

令和元年6月5日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16H04489

研究課題名(和文) 半導体準結晶の探索と高性能熱電材料・熱整流材料の創製

研究課題名(英文) Search for Semiconducting Quasicrystal and High-performance Thermoelectric/Thermal-rectification Materials

研究代表者

木村 薫 (Kimura, Kaoru)

東京大学・大学院新領域創成科学研究科・教授

研究者番号：30169924

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,500,000円

研究成果の概要(和文)：アルミ系正20面体準結晶の前駆物質であるAl-Ir近似結晶は半金属的バンド構造を持つ。伝導帯の下端がIrのd軌道で、価電子帯の上端がAlが8個とIrが1個のクラスターのp様軌道であることを明らかにした。バンドギャップを開くため、d軌道エネルギーがIrより高いRuで置換し、sp軌道エネルギーがAlより低いSiでAlの一部を置換した構造で、予想通り半導体的バンド構造を実現した。

予想を実験で確かめるため、計算組成近傍で単相を作製し、熱電性能(ゼーベック係数、電気伝導率、熱伝導率)の測定から、アルミ系近似結晶で、世界で初めて、実験的に半導体の創製に成功したことを確かめた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

準結晶は、結晶、アモルファスと並ぶ固体構造の概念として確立した。しかし、固体物理学における基本的な分類において、原子スケールの準結晶は金属しか見つかっておらず、半導体や絶縁体が存在するかどうかは、固体物理学の基本的な問題の一つになっている。

廃熱から電気エネルギーを取り出すことのできる熱電発電は非常に魅力的である。熱電性能の高い物質として、結晶で最も対称性の高い立方晶で、マルチポケット半導体が注目されている。正20面体準結晶は、立方晶より2.5倍高い対称性を持っており、半導体が実現できれば、熱電性能も2.5倍高くなる可能性がある。

今回の研究成果は、半導体準結晶実現の突破口となるものである。

研究成果の概要(英文)： Al-Ir approximant crystal, which is a precursor of the aluminum-based icosahedral quasicrystal, have a semimetallic band structure. We found that the bottom of the conduction band is the d orbital of Ir, and the top of the valence band is the p-like orbital of the cluster with eight Al and one Ir. In order to open the band gap, Ir is replaced by Ru with higher d orbital energy than Ir and Al is partially replaced by Si with lower sp orbital energy than Al. As a result, the semiconductor band structure was realized as expected.

In order to confirm the prediction by experiment, a single phase is prepared in the vicinity of the calculated composition. From the measurements of thermoelectric properties (Seebeck coefficient, electrical conductivity, thermal conductivity), it was experimentally confirmed to be a semiconductor for the first time in the aluminum-based approximant crystals.

研究分野：金属物性

キーワード：準結晶 近似結晶 半導体 バンドエンジニアリング 熱電変換材料

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19、CK - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

「準結晶」は、1984年に最初の物質が発見され、その後の27年間に100種類以上の物質で見つかり、「結晶」、「アモルファス」と並び固体構造の概念として確立し、2011年にノーベル化学賞に輝いた。しかし、これまで見つかった「準結晶」は、すべて「金属」である。半導体超格子やフォトニック構造として人工的な準周期構造が作られ、最近、「絶縁体」であるポリマーやメソポーラスシリカで準結晶が見つかったが、これらの準周期のスケールは原子スケールより1桁か2桁大きい。したがって、「半導体」や「絶縁体」の原子スケールの「準結晶」は見つかっておらず、これらが存在するかどうかは、固体物理学の基本的な問題の一つになっている[1]。一般に、「金属」から「半導体」、「絶縁体」に向かうためには、「金属結合」から「共有結合」や「イオン結合」の割合を増やす必要がある。

アルミ (Al) - 遷移金属 (TM) 系正 20 面体「準結晶」では、Al の正 20 面体クラスターと遷移金属の間の比較的強い「共有結合」と、正 20 面体の高い対称性によりヒュームロザリー機構が有効に働くことから、フェルミ・エネルギー ( $\epsilon_F$ ) が電子状態密度の深い擬ギャップの中にあり、一部のものは「半導体」に近づいている[2]。また、ボロン (B) は、強い「共有結合」を作り、正 20 面体や正 5 角形といった周期性と共存できない対称性を持った構造単位を持ち、一部のものは「準結晶」の近似結晶と考えられる。そして、正 20 面体を構造単位とするものは、すべて「半導体」である。以上から、Al 系と B 系が、「半導体準結晶」の有力な候補と考えられる。

Al-TM 系正 20 面体「準結晶」は、深い擬ギャップ中に  $\epsilon_F$  があるため、比較的大きなゼーベック係数 ( $S$ ) と高い電気伝導率 ( $\sigma$ ) を併せ持っている。さらに、複雑な結晶構造のため、格子熱伝導率 ( $\kappa_l$ ) が非常に低い。このため比較的大きな無次元熱電性能指数

( $ZT = \frac{S^2\sigma}{\kappa_e + \kappa_l}$ ) を持っている。ここで、 $\kappa_e$  は電子熱伝導率である。しかし、 $ZT$  の最大

値は、現状では 0.26 であり、実用化の目安である 1.0 には届いていない[2]。一方、同様の元素の組合せである  $Al_2Ru$  や  $Ga_2Ru$  は、0.3eV 程度の真ギャップを持つ狭ギャップ半導体である。そのため、 $ZT$  の最大値は 0.5 と、より大きな値を持っている[3]。 $S$  は、電子とホール

の両方のキャリアが存在する場合には、 $S = \frac{S_h\sigma_h + S_e\sigma_e}{\sigma_h + \sigma_e}$ 、と書けるが、 $S$  の符号が逆なので打ち

消し合う。一般に、低温では一方のキャリアが支配的でも、温度が高くなって熱励起されるキャリアの数は両キャリアで同じであるため、 $S$  は高温で必ず減少する。真ギャップの方が擬ギャップより、この温度が高いので、約 2 倍大きくなっている。一方、 $\kappa_l$  は複雑な構造を持つ「準結晶」の方が圧倒的に小さい。したがって、「準結晶」の擬ギャップを広げて真ギャップにすることができれば、つまり「半導体準結晶」が実現すれば、大きな  $S$  と低い  $\kappa$  が共存して、 $ZT$  が 1.0 を越えることが期待できる。

### 2. 研究の目的

Al 系、B 系や新しい系において、その存在の有無が固体物理学の基本的な問題の一つになっている「半導体準結晶」を探索し、実現する。さらに、「半導体準結晶」を利用して、高性能な熱電材料を創製する。

### 3. 研究の方法

#### 1) Al 系正 20 面体準結晶の探索と熱電物性の評価

第一原理計算によって、Al-Ir 系近似結晶 ( $Al_{2.75}Ir$ ) が半導体となる可能性が指摘された[4]。Al-Ir 系近似結晶は、Ir の正 20 面体クラスターが構造単位となっており、そのクラスター内部には Al を平均 9-10 個含む (図 1)。特に、クラスター内部の Al の数が 10 個となると、0.04 eV 程度のバンドギャップをもつ半導体になると予想されている。そこで、本研究では、半導体化が期待される Al-Ir 系近似結晶を基に、熱電特性を実験と第一原理計算により評価することで、半導体化の条件を探索し、熱電特性を最適化した。

原料粉末を圧粉し、アーク溶解により母合金を作製した。母合金を粉砕し、通電焼結や高圧合成により多結晶の焼結体を作製し、物性測定を行った。試料作製の際には、仕込み組成、熱処理条件を系統的に変化させたほか、他元素ドーピングや高圧下での合成を行った。また、第一原理計算により、近似結晶のバンド構造や熱電特性を計算した。

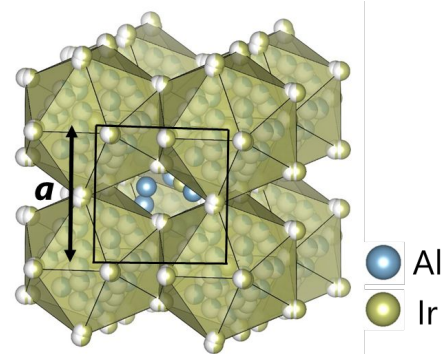


図 1 Al-Ir 系近似結晶の結晶構造

#### 2) B 系正 20 面体準結晶の探索

B 系は Al 系正 20 面体準結晶と同じ正 20 面体クラスターを構造単位とした強い共有結合を

持つ半導体であり、「半導体準結晶」の有力な候補である。純 B の過冷却液体の粘性が、温度の低下と共に急激に増大すること[5]、その原因が正 20 面体クラスターの一部である五角錐クラスターの形成であることを明らかにしてきた。さらに、ボロンが液体状態でも共有結合性を失わないことも明らかにした[6]。ボロンの過冷却液体から急冷することにより、準安定相として「半導体準結晶」が得られることが期待できる。なぜなら、Al 系正 20 面体準結晶は、安定相としても得られているが、より多くの組成で、液体急冷による準安定相で得られている。

#### 4. 研究成果

##### 1) Al 系正 20 面体準結晶の探索と熱電物性の評価

**【1】仕込み組成・熱処理条件** 半導体が期待される組成  $\text{Al}_{73.3}\text{Ir}_{26.7}$  において、Al-Ir 系近似結晶を作製し、物性測定を行ったところ、半導体的な電気特性は得られず、金属的な熱電特性を示した。 $S$  の実験値を第一原理計算による計算値と比較してキャリア濃度を見積もったところ、クラスター内部の Al の原子欠損によるキャリア(正孔)過剰が金属化の原因であると分かった(図 2)。これに鑑み、仕込み組成の Al の量を増やしたが、直ちに Al リッチ側の隣接相の  $\text{Al}_3\text{Ir}$  が生成してしまい、仕込み組成・熱処理条件による改善は見られず、 $zT=0.05$  にとどまった。また、Al-Cu-Ir 系でも半導体化が期待されていたので、仕込み組成  $\text{Al}_{73.3-x}\text{Cu}_x\text{Ir}_{26.7}$  ( $x=0-7$ ) で Cu を系統的に固溶させた試料を作製した。格子定数の Cu 濃度  $x$  依存性を評価したところ、Cu の原子半径が Al よりも小さいにもかかわらず、 $x$  の増加に伴って格子定数が増大する傾向を示した。単位胞当たりの原子数を計算したところ、この原因が欠損した Al の空孔に Cu が侵入型固溶するためであると示唆された。Cu 等の遷移金属元素がアルミサイトに侵入型固溶する現象は特異的であり、これは系の電子的安定化と関係していると考えられる。また、熱電特性としては、 $S$  の増大と  $\kappa_{\text{ph}}$  の低減の相乗効果により、 $x=3$  において  $zT=0.08$  が得られたものの、半導体は得られなかった。そこで、**【2】高圧合成と【3】Ir サイトの Rh 置換による Al 原子の欠損抑制、【4】Al, Ir サイトの Si, Ru 置換によるバンドギャップの制御を試みた。**

**【2】高圧合成による欠損抑制** 高圧下で物質が密な構造を持つ傾向を利用して、4 GPa での高圧合成によって、Al 欠損の抑制を試みた。半導体化には至らなかったものの、 $S$  は通電焼結試料(SPS)での  $40 \mu\text{V K}^{-1}$  から高圧合成試料(HPS)での  $60 \mu\text{V K}^{-1}$  まで増大し、高圧合成が Al 原子の欠損を抑制するのに有効であることが示唆された。結果として、高圧合成試料において、850 K で  $zT=0.14$  を得ることに成功した。

**【3】Ir サイトの Rh 置換による欠損制御** Ir を同族の Rh に置換した Al-Rh 系近似結晶では、Al 原子の欠損がほとんど見られないことが分かった。しかし、Al-Rh 系近似結晶のバンド構造を計算すると、バンドギャップが閉じてしまい、半金属的なバンド構造を有することが分かった。この結果を利用して、Rh と Ir の組成比を系統的に変えた仕込み組成  $\text{Al}_{22}(\text{Rh}_x\text{Ir}_{1-x})_8$  ( $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ) の試料を作製し、欠損の抑制とバンドギャップのふるまいを熱電特性から考察した。その結果、 $S$  は、 $x=0.25$  では欠損が抑制されて  $S$  が増大し、さらに  $x$  を増やすと、欠損が抑制される一方で、ギャップが閉じてしまい  $S$  が減少したと考えられる傾向を示した。結果として、 $x=0.25$  のときに 900 K で  $zT=0.14$  が得られた。

**【4】Al, Ir サイトの Si, Ru 置換によるギャップ制御** 上記の二通りの方法で、Al の欠損の抑制に成功したが、欠損の抑制が不十分であったり、ギャップが閉じてしまったりといった問題があった。また、Al-Ir 系近似結晶で期待されているギャップは  $0.04 \text{ eV}$  程度であり、熱電材料として適しているギャップの値  $\sim 6k_B T$  (室温なら  $\sim 0.16 \text{ eV}$ ) と比べると不十分である。これらの課題を解決するために、第一原理計算による軌道エネルギーの解析を行っ

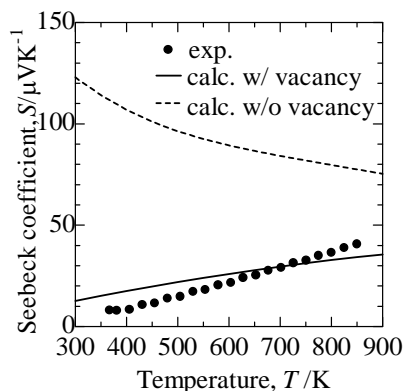


図2 Al-Ir系近似結晶のゼーベック係数  $S$ : 実験値(黒丸)と欠損有り(実線)と無し(点線)での計算値。

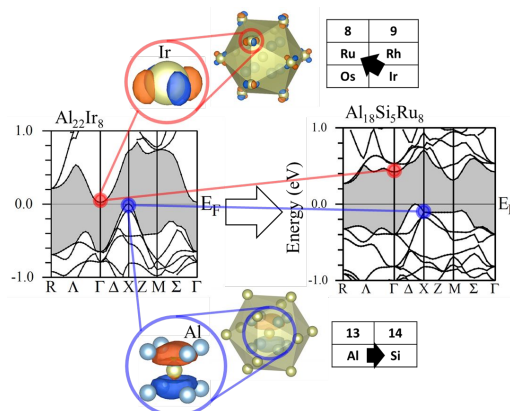


図3  $\text{Al}_{22}\text{Ir}_8$  と  $\text{Al}_{18}\text{Si}_5\text{Ru}_8$  近似結晶のバンド構造と伝導帯下端と価電子帯上端の電子軌道。Ir の Ru 置換と Al の Si 置換によるバンドエンジニアリングにより、バンドギャップを開くことに成功した。

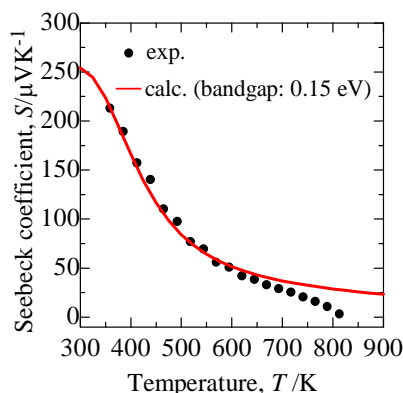


図4  $\text{Al}_{67.6}\text{Si}_{8.9}\text{Ru}_{23.5}$  のゼーベック係数  $S$ : 実験値(黒丸)と計算値(赤線)。

た。その結果、伝導帯の下端は、正 20 面体クラスターの頂点サイトの Ir の d 軌道であり、価電子帯の上端は正 20 面体クラスター内の Al 8 個と Ir 1 個からなるクラスターの p 様軌道であることが分かった。そこで、バンドギャップを大きくするためには、Ir を d 軌道のエネルギーがより高い Ru で、Al を sp 軌道のエネルギーが低い Si で置換するのが有効であると予測した。これから、半導体候補物質 Al-Si-Ru 系近似結晶を提案し、 $\text{Al}_{18}\text{Si}_5\text{Ru}_8$  ( $\text{Al}_{58.1}\text{Si}_{16.1}\text{Ru}_{25.8}$ ) モデルがバンドギャップ 0.26 eV の半導体となることをバンド計算により見出した (図 3)。

実験的には、これまでに Al-Si-Ru 系における化合物や状態図の報告はされておらず、近似結晶が存在するかは未知であった。そこで、系統的に組成や温度条件を変えて近似結晶相の探索を行った。その結果、仕込み組成  $\text{Al}_{67.6}\text{Si}_{18.9}\text{Ru}_{23.5}$  において近似結晶の単相試料が得られた。物性測定の結果、 $\sigma$  と  $S$  は真性領域における半導体的な温度依存性を示すことが分かった。特に、 $S$  は 350 K で  $200 \mu\text{V K}^{-1}$  以上の実用材料に匹敵する大きな値を示し、第一原理計算との比較から、0.15 eV のバンドギャップを持つ半導体であると考えられる (図 4)。

## 2) B 系正 20 面体準結晶の探索

正 20 面体クラスターの一部が生成した過冷却液体からの急冷を目的として、冷却時の核生成を遅らせるために静電浮遊法を用いた。図 5 に本研究で用いた静電浮遊および過冷却液体急冷装置の模式図を示す。この装置は真空チャンバー ( $10^{-5}$  Pa) の中に置かれている。加熱用レーザーにより試料を加熱しチャージアップさせ、垂直方向に電場を印加することにより試料を浮遊させる。試料の位置は 2 組の位置検出用レーザーによって検出される。水平および垂直方向の電場の大きさを PID 制御によりコントロールし、試料を空中に静止させた。試料の温度は放射温度計により測定した。急冷装置は静電浮遊装置の真下にあり、電場の印加をやめ落下させた試料を Cu ハンマーによって左右から挟むことにより急冷を行った。

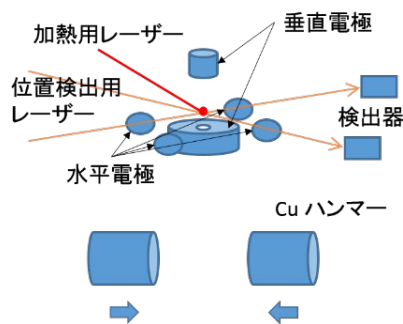


図 5 静電浮遊、液体急冷装置

試料はβ菱面体晶ボロンのチャンクを原料とし、これを 20 g 程度となるように砕き、アーク溶解によって直径 2 mm 程度の球状試料を作製した。この試料を静電浮遊させ過冷却液体急冷を行い、直径 10 mm、厚さ 30–50 μm 程度の薄片状試料を得た。

図 6 に急冷を行った際の温度変化のグラフを示す。試料を落下させてから急冷を行うまでの時間を考えると、およそ 64 K 過冷却した状態で急冷を行ったことが分かった。

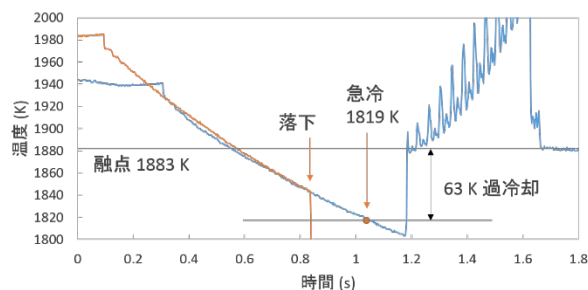


図 6 急冷時の温度変化

図 8 に急冷した試料の XRD パターンを示す。急冷したホウ素にはβ菱面体晶だけでなくα正方晶も含まれていることが明らかとなった。このα正方晶は今までナノベルトとしてしか生成されておらず、準安定構造が過冷却液体急冷によって生成したといえる。生成したα正方晶ホウ素の格子定数は  $a = 8.90 \text{ \AA}$ ,  $c = 5.16 \text{ \AA}$  であった。a については報告されている値の範囲の中にあっただが、c は今まで報告されたどの値よりも 1–2 % 程度大きかった。エネルギー計算によるとβタイプ準結晶はα正方晶よりも安定であるが、今回の実験では準結晶を発見することはできなかった。また、XRD および TEM 観察では、それぞれ既知の構造では説明できないピークおよび回折パターンを得た。これらがどのような構造によるものかは分かっておらず、今後の課題である。

## < 引用文献 >

- [1] 木村 薫, 小特集「準結晶の新展開 - 多様な物質分野との学融合 - 」はじめに、固体物理 Vol. 48(7), 301 (2013). (小特集企画)
- [2] Y. Takagiwa, and K. Kimura, "Metallic-covalent bonding conversion and thermoelectric properties of Al-based icosahedral quasicrystals and approximants", Science and Technology of Advanced Materials, 15, 044802 (12pp) (2014). (依頼論文、Review)
- [3] Y. Takagiwa, K. Kitahara, and K. Kimura, "Effect of electron doping on thermoelectric properties for narrow-bandgap intermetallic compound  $\text{RuGa}_2$ ", Journal of Applied Physics 113, 023713 (2013).
- [4] M. Mihalkovic and C. L. Henley, "Caged clusters in  $\text{Al}_{11}\text{Ir}_4$ : Structural transition and insulating phase", Physical Review B 88, 064201 (2013).
- [5] J.T. Okada, T. Ishikawa, Y. Watanabe, P.-F. Paradis, Y. Watanabe, and K. Kimura, "Viscosity of liquid boron", Physical Review B 81, 140201 (2010).

- [6] J.T. Okada, P.H.-L. Sit, Y. Watanabe, B. Barbiellini, T. Ishikawa, Y.J. Wang, M. Itou, Y. Sakurai, A. Bansil, R. Ishikawa, M. Hamaishi, P.-F. Paradis, K. Kimura, T. Ishikawa, and S. Nanao, "Visualizing the Mixed Bonding Properties of Liquid Boron with High-Resolution X-Ray Compton Scattering", *Physical Review Letters*, **114**, 177401 (2015).

## 5 . 主な発表論文等

### [雑誌論文](計6件)

- Y. Iwasaki, K. Kitahara and K. Kimura, "Experimental realization of a semiconducting quasicrystalline approximant in Al-Si-Ru system by band engineering", *Physical Review Materials (Rapid Communication)*, 査読有, (2019) in press.
- Y. Iwasaki, K. Kitahara and K. Kimura, "Anomalous Effects of Cu-doping on Structural and Thermoelectric Properties of the Al-Ir Cubic Quasicrystalline Approximant", *Journal of Alloys and Compounds*, 査読有, **763**, 78 (2018). 10.1016/j.jallcom.2018.05.199  
北原功一, 高際良樹, 木村薫, 「Al-Cu-Ir 系近似結晶の熱電特性」, *日本金属学会誌*, 査読有, **82**, 188 (2018) . 10.2320/jinstmet.J2017055
- K. Tobita, N. Sato, Y. Katsura, K.Kitahara, D. Nishio-Hamane, H. Gotou and K. Kimura, "High-pressure synthesis of tetragonal iron aluminide FeAl<sub>2</sub>", *Scripta Materialia*, 査読有, **141**, 107 (2017). 10.1016/j.scriptamat.2017.08.002
- K. Kitahara and K. Kimura, "Local cluster networks and the number of valence states in aluminium-transition metal face-centred icosahedral quasicrystals", *Zeitschrift fuer Kristallographie*, 査読有, **232**, 507 (2017). 10.1515/zkri-2016-2035
- K. Kitahara, Y. Takagiwa, and K. Kimura, "Unified cluster-based description of valence bands in AlIr, RuAl<sub>2</sub>, RuGa<sub>3</sub> and Al-TM quasicrystalline approximants", *Journal of Physics: Conference Series*, 査読有, **809**, 012014 (2017). 10.1088/1742-6596/809/1/012014

### [学会発表](計25件)

- 岩崎祐昂、北原功一、木村薫、「電子構造制御による Al 基近似結晶半導体の探索」, 日本物理学会 第 74 回年次大会、2019 年
- 高橋昂宏、滝沢健太、北原功一、桂ゆかり、岡田純平、木村薫、「第一原理計算と静電浮遊液体急冷法によるボロンリッチ準結晶の探索」, 第 13 回 日本ホウ素・ホウ化物研究会、2019 年
- 岩崎祐昂、北原功一、木村薫、「電子構造制御による Al 基近似結晶半導体の探索」, 第 23 回準結晶研究会、2018 年
- 北原功一、高際良樹、木村薫、「Al-Cu-Ir 系近似結晶の熱電特性」, 第 23 回準結晶研究会、2018 年
- 飛田一樹、佐藤直大、桂ゆかり、北原功一、浜根大輔、後藤弘匡、木村薫、「正方晶 FeAl<sub>2</sub> の熱的安定性と熱電物性」, 第 15 回 日本熱電学会学術講演会、2018 年
- 岩崎祐昂、北原功一、木村薫、「Al-TM (TM=Rh,Ir)系近似結晶の合金化による熱電特性向上と電子構造制御」, 日本物理学会 2018 年秋季大会、2018 年
- 北原功一、木村薫、「Al-Cu-Li 系 1/1 近似結晶の価電子状態数の起源」, 日本物理学会 2018 年秋季大会、2018 年
- K. Kitahara and K. Kimura, "Electron counting in 1/1 approximant of Al-Cu-Li quasicrystal", 9th Conference on Aperiodic Crystals (Aperiodic 2018) (2018).
- Y. Iwasaki, K. Kitahara, K. Kimura, "Thermoelectric Properties and Search for condition of insulator transition in Al-Ir based quasicrystalline approximants", The 37th International Conference & The 16th European Conference on Thermoelectrics (ICT/ECT 2018) (2018).
- K. Tobita, N. Sato, Y. Katsura, K. Kitahara, D. N.-Hamane, H. Gotou and K. Kimura, "High-pressure synthesis of tetragonal iron aluminide FeAl<sub>2</sub>", The 37th International Conference & The 16th European Conference on Thermoelectrics (ICT/ECT 2018) (2018).
- 岩崎祐昂、北原功一、木村薫、「Al-Ir 系 1/0 近似結晶の構造・電子物性における Cu 元素固溶効果」, 日本物理学会 第 73 回年次大会、2018 年
- 北原功一、「6 次元準結晶モデルのバンド数と半導体準結晶の可能性」, 日本物理学会 第 73 回年次大会、2018 年
- 岩崎祐昂、北原功一、木村薫、「Al-Ir 系近似結晶の熱電特性と絶縁化条件の探索」, 日本金属学会 2018 年春期(第 162 回)講演大会、2018 年
- 飛田一樹、佐藤直大、桂ゆかり、北原功一、浜根大輔、後藤弘匡、木村薫、「正方晶 FeAl<sub>2</sub> の高温高圧合成と熱電材料としての可能性」, 第 58 回高圧討論会、2017 年
- 飛田一樹、佐藤直大、桂ゆかり、北原功一、浜根大輔、後藤弘匡、木村薫 「正方晶 FeAl<sub>2</sub>

の高温高压合成と熱電変換材料としての可能性」, 第 14 回日本熱電学会 学術講演会、2017 年

K. Takizawa, J. T. Okada, K. Kitahara, Y. Katsura, K. Yamashita, E. Abe, S. Uda, K. Kimura, "Search for quasicrystalline boron by electrostatic floating and liquid quenching method", The 19th International Symposium on Boron, Borides and related Materials (ISBB2017) (2017).

J. T. Okada, P. H. -L. Sit, T. Ishikawa, B. Barbiellini, P.-F. Paradis, M. Itou, Y. Sakurai, K. Kimura, A. Bansil and S. Uda, "Covalent bonding characteristics of liquid boron", The 19th International Symposium on Boron, Borides and related Materials (ISBB2017) (2017).

K. Tobita, N. Sato, H. Gotou, D. Nishio-Hamane, K. Kitahara, Y. Katsura, K. Kimura, "High pressure synthesis of novel tetragonal iron aluminide FeAl<sub>2</sub>", Thermoelectric materials for sustainable development – ACT2017 (AAT) (2017).

北原功一、木村薫、「アルミニウムと遷移金属から成る面心型正二十面体準結晶中の局所クラスタ配列と価電子状態数」, 日本物理学会 第 72 回年次大会、2017 年

飛田一樹、佐藤直大、後藤弘匡、浜根大輔、北原功一、桂ゆかり、木村薫、「FeAl<sub>2</sub> 正方晶の高温高压合成」, 日本金属学会 2017 年春期 (第 160 回) 講演大会、2017 年

⑳ 滝沢健太、岡田純平、北原功一、桂ゆかり、山下賢哉、阿部英司、木村薫、「静電浮遊法を用いた過冷却液体急冷による準結晶ボロンの探索」, 第 11 回日本ホウ素・ホウ化物研究会、2017 年

㉑ K. Kitahara, Y. Takagiwa and K. Kimura, "Unified cluster-based description of valence bands in AlIr, RuAl<sub>2</sub>, RuGa<sub>3</sub> and Al-TM quasicrystalline approximants", 13<sup>th</sup> International Conference on Quasicrystals (ICQ13) (2016).

㉒ K. Kimura, J. T. Okada, Y. Takagiwa and K. Kitahara, "Search for Semiconducting Quasicrystal and High-performance Thermoelectric Material", 13<sup>th</sup> International Conference on Quasicrystals (ICQ13) (2016).

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等

<http://www.phys.mm.t.u-tokyo.ac.jp/index.html>

## 6 . 研究組織

### (1) 研究分担者

なし

### (2) 研究協力者

研究協力者氏名：岡田 純平、桂 ゆかり、北原 功一、飛田 一樹

ローマ字氏名：Okada Junpei, Katsura Yukari, Kitahara Kouichi, Tobita Kazauki

研究協力者氏名：滝沢 健太、岩崎 祐昂、高橋 昂宏

ローマ字氏名：Takizawa Kenta, Iwasaki Yutaka, Takahashi Takahiro