

令和 6 年 6 月 12 日現在

機関番号：13903

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2023

課題番号：20K05060

研究課題名（和文）Ru基ホイスラー化合物の擬ギャップ電子構造制御による熱電性能の向上

研究課題名（英文）Pseudogap Engineering of Ru-based Thermoelectric Heusler Compounds

研究代表者

西野 洋一（Nishino, Yoichi）

名古屋工業大学・工学（系）研究科（研究院）・研究員

研究者番号：50198488

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：擬ギャップ系ホイスラー化合物Ru₂TiSiはp型でゼーベック係数は700 Kで185 μV/Kを示し、出力因子は830 Kで4.4 mW/mK²に達した。一方、Ta置換したRu₂Ti_{1-x}TaxSiはn型となり、x=0.03のゼーベック係数は680 Kで-155 μV/Kを示す。Ru₂TiSiの熱伝導率は300 Kで約20 W/mKであるが、Ta置換によりx=0.20で4.5 W/mKまで低下した。p型Ru₂TiSiの無次元性能指数は1000 KでZT=0.42、n型x=0.20合金では900 KでZT=0.42に向上し、バルクのホイスラー化合物熱電材料において最高性能を実現した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

車載用熱電材料としてFe₂VAlのような擬ギャップ系ホイスラー化合物が有望と考えて研究開発を行ってきたが、より高温の廃熱を有効利用するためには熱電性能のピーク温度の向上が不可欠である。Ru基ホイスラー化合物では、Fe₂VAl系と比較して擬ギャップのエネルギー幅が広いこと熱電性能のピークがより高温側に出現するだけでなく、重元素を含む化合物のため熱伝導率の低減も可能である。高性能の熱電材料を自動車やオートバイなどの移動体における熱電発電に応用することにより、温室効果ガスの削減に貢献できる。

研究成果の概要（英文）：The Ru₂TiSi Heusler compound can be classified as a semimetal with a deep pseudogap at the Fermi level. We investigate the electrical and thermal transport properties of Ru₂Ti_{1-x}TaxSi (x=0-0.20) and evaluate their thermoelectric performance up to a temperature of 1000 K. The pristine Ru₂TiSi displays a p-type Seebeck coefficient that peaks at S = 185 μV/K around 700 K. Notably, the power factor for Ru₂TiSi reaches a value of 4.4 mW/mK² at 830 K. Partial substitution of Ta results in n-type thermoelectric conduction with S = -155 μV/K at 680 K for x=0.03. The thermal conductivity of Ru₂TiSi is approximately 20 W/mK at 300 K, but the substitution of Ta reduces to 4.5 W/mK for x=0.20. Through thermoelectric measurements on the sintered alloys, we determined the dimensionless figure of merit, ZT, to be 0.42 for p-type Ru₂TiSi at 1000 K and 0.42 for n-type Ru₂Ti_{0.80}Ta_{0.20}Si at 900 K, both of which are some of the highest values ever achieved for bulk thermoelectric Heusler compounds.

研究分野：材料物性工学

キーワード：ホイスラー合金 熱電変換材料 擬ギャップ ゼーベック効果 電子構造 元素置換 非化学量論組成 熱伝導率

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 熱を電気に変換できる熱電発電は、エネルギー問題と地球温暖化問題を緩和する技術として注目を集めている。しかしながら、現時点において熱電発電は変換効率が低いうえに熱電材料に環境負荷元素が使われているため、大規模な実用化には至っていない。環境にやさしい材料を用いて高性能な熱電発電素子を開発することで熱電発電を実用化することは、21世紀の材料研究者に課せられた最も重要な課題の一つである。熱電発電素子に用いられる材料の開発研究はこれまで活発に行われてきたが、現状では注目すべき技術革新は得られていない。

(2) 熱電材料の開発において技術革新が遅々として進まないことは、単純に無次元性能指数 ZT の向上を目指す傾向があることに一因があると考えている。ここで、性能指数は $Z=S^2/\rho\kappa$ と表され、 S はゼーベック係数、 ρ は電気抵抗率、 κ は熱伝導率である。つまり、既存の材料を凌駕する熱電性能を追究することだけでなく、実際の廃熱の利用方法まで考慮してモジュール化にも適した材料を開発する必要がある。たとえば、自動車の廃熱を利用する場合、廃熱温度だけで性能が良い材料では不十分であり、高温から低温熱浴まで幅広い温度範囲での性能が求められる。また、同じ温度差を与えた場合には、出力因子 $P=S^2/\rho$ が高い方がより大きな電力を発生できることを意味しており、自動車のように持続的に廃熱が発生する環境で利用するうえでは、 ZT の高い材料でなくても、むしろ出力因子 P が高い材料の方が有利である。以上の観点から、車載用熱電材料として Fe_2VAI のような擬ギャップ系ホイスラー化合物が有望と考えて研究開発を行ってきたが [1]、より高温の廃熱を有効利用するためには熱電性能のピーク温度の向上が不可欠である。そのためには、 Fe_2VAI について擬ギャップのエネルギー幅が広がるように電子構造を改造するか、もしくは、もともと擬ギャップ幅の広い材料系を新規に探索して材料開発する必要がある。

2. 研究の目的

(1) Fe_2VAI は典型的な擬ギャップ系であるが、最近になって Fe を同族元素の Ru で置き換えた Ru 基ホイスラー化合物が注目されている。 Ru_2VAI のバンド計算によると、擬ギャップのエネルギー幅は Fe_2VAI よりも広く、しかもフェルミ準位近傍の状態密度の立ち上がりも急峻になっている [2]。このため、ゼーベック係数が Fe_2VAI よりも大幅に増大し、さらにゼーベック係数のピークがより高温側に出現することが期待される。また、 Ru や Ta のような重元素で構成される合金では熱伝導率の低減が可能となり、 ZT の向上も期待できる。 Ru 基ホイスラー化合物に注目して、擬ギャップ工学による材料設計の有効性を実証し、擬ギャップ電子構造制御による熱電材料設計法の確立を目指す。

(2) 擬ギャップ工学の手法によれば、置換元素のサイト選択性を利用するので、規則構造への影響を最小限に抑えて擬ギャップ構造を巧みに制御できることが最も重要であり、従来の Bi_2Te_3 系と比べて高強度でしかも出力因子の高い熱電材料を開発することができる。とくに Ru 基ホイスラー化合物では、ゼーベック係数の増大とピーク温度の上昇を同時に実現する熱電材料が創製できるはずである。 Fe_2VAI 系熱電材料と比較してより高温域での熱電性能の向上を追究して、移動体の廃熱回収に最適な熱電材料を開発することを目的とする。

3. 研究の方法

(1) Ru 基ホイスラー化合物において価電子濃度 $\text{VEC}=6.0$ となる材料群は擬ギャップ系であるが、バンド計算により Ru_2TiSi 、 Ru_2TiGe において巨大なゼーベック係数が予測されている [3]。そこで、これらの合金について第四元素置換を利用して擬ギャップ内のフェルミ準位を最適化して熱電性能の向上を追究し、擬ギャップ工学による熱電材料設計の有効性を検証する。また、元素置換により $\text{VEC}=6.0$ より大きくなる合金では n 型、小さくなる合金では p 型になることを確認する。とくに、 Ta 、 Nb 置換では、ゼーベック係数の増大と同時に重元素置換による熱伝導率の低減を図ることが可能である。一方、非化学量論組成の合金をベースとすることで擬ギャップ電子構造を制御し、さらに第四元素置換によりフェルミ準位を最適化することで熱電性能の飛躍的な向上を目指す。

(2) Ru 基ホイスラー化合物の熱電特性の評価は従来は室温以下の温度域のみに限られていた。しかし、 Fe_2VAI と比較して擬ギャップのエネルギー幅は広がっている可能性があることから、本研究では室温以上 1000 K までの温度範囲で、ゼーベック係数、電気抵抗率、熱伝導率を系統的に測定する。また、室温においてホール係数の測定も行い、多数キャリアの種類やキャリア密度の評価を行って、ゼーベック係数の増大機構を解明する。さらに、バンド計算や高分解能光電子分光実験により、ゼーベック係数はフェルミ準位における擬ギャップ構造だけで決まると言っ

4. 研究成果

(1) $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ におけるゼーベック係数の温度依存性を図 1 に示す。 Ru_2TiSi ($x=0$) のゼーベック係数 S は 300 K で $130 \mu\text{V/K}$ であり、温度上昇とともに S も上昇し、700 K 付近で $185 \mu\text{V/K}$ のピークに達した。全温度範囲で S が正符号であることから、電荷キャリアは正孔が支配的であり、これは Ru_2TiSi の理論計算と一致する [3]。しかし、Ta 置換すると S の符号は負となり、 $x=0.03$ では 680 K で $-155 \mu\text{V/K}$ まで増大した。これは、Ta 置換により電子が多数キャリアになったことを示している。また、光電子分光測定により、Ta 組成の増加とともに価電子帯光電子スペクトルは全体に高束縛エネルギー側にシフトすることが確認されたことから、Ta 置換によりフェルミ準位のみが剛体バンド的にシフトしている。Ta 組成 x が増加すると、ピーク温度は $x=0.03$ の 680 K から $x=0.20$ の 900 K まで上昇したが、 S のピーク値はほぼ一定である。

(2) 図 2 は $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ の電気抵抗率 ρ の温度依存性である。 Ru_2TiSi ($x=0$) の抵抗率は比較的 low くて、630 K 以下で緩やかな正の傾向を示し、温度が高くなると減少する。Ta 置換すると、 $x=0.03$ の抵抗率は室温付近では $x=0$ の抵抗率とほぼ同じであるが、温度上昇とともに著しく増加し、830 K で $26 \mu\Omega\text{m}$ のブロードな極大を形成した。Ta 置換によりフェルミ準位は伝導帯側へシフトするため、Ta 組成 x が増加するとピーク温度は徐々に上昇し、最大抵抗率は低下する。とくに、 $x=0.20$ の抵抗率は室温で $4.2 \mu\Omega\text{m}$ まで低下し、1000 K まで正の温度依存性を示す。

(3) $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ におけるホール係数 R_H を表 1 に示す。 Ru_2TiSi ($x=0$) の R_H は正であり、正のゼーベック係数に対応している。しかし、Ta 置換 ($x=0.03, 0.12$) すると負になり、多数キャリアが電子であることを示している。表 1 に示した R_H の大きさは $10^{-8} \text{m}^3/\text{C}$ のオーダーであり、典型的な金属よりも $10^2 \sim 10^3$ 倍大きく、Sb のような半金属に匹敵する。1 種類の自由電荷キャリアと仮定すると、 Ru_2TiSi のキャリア濃度は $n_H = 0.91 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$ となる。 Fe_2VAl の R_H も正であるが、キャリア濃度 n_H は 300 K で $4 \sim 5 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$ であることから [1,4,5]、 Ru_2TiSi の n_H は Fe_2VAl の 20% に過ぎない。さらに、 Ru_2TiGe の n_H は 300 K で $3.3 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$ であることから [6]、 Ru_2TiSi のゼーベック係数が Ru_2TiGe や他の Ru 系化合物に比べて大きいのは、キャリア濃度が比較的低いためと考えられる。さらに、 $|R_H/\rho|$ はホール移動度 μ_H に相当し、 Ru_2TiSi では $97.9 \text{cm}^2/\text{Vs}$ となる。したがって、移動度は Fe_2VAl ($\mu_H = 18 \sim 25 \text{cm}^2/\text{Vs}$) [4,5] の 4~5 倍高い。この μ_H の違いは、擬ギャップ幅の違いから生じている可能性がある。 Fe_2VAl は 0.1~0.2 eV の狭い擬ギャップを有するため、大きな有効質量を示し、そのため移動度が低くなるが、 Ru_2TiSi は強い混成 [2] によって広い擬ギャップを示すので、有効質量は相対的に小さくなり、移動度は Fe_2VAl よりも高くなる。このため、 Ru_2TiSi の電気伝導度は Fe_2VAl と比べて高くなっている。

Ta 置換すると、キャリア濃度 n_H は $10^{20} \sim 10^{21} \text{cm}^{-3}$ となる。 $x \geq 0.03$ の合金における負のゼーベック係数は、電子ドーピングにより p 型から n 型に変化することを裏付けている。置換された Ta 原子は、一般的にキャリア輸送の障害になるため、 x の増加によりキャリア散乱が促進され、移動度 μ_H が低下する。したがって、 $x=0.03$ 合金の抵抗率の増加は、 μ_H の減少に起因している。 $x > 0.06$ でも μ_H は減少するが、主に n_H の大幅な増加によって抵抗率は減少している。

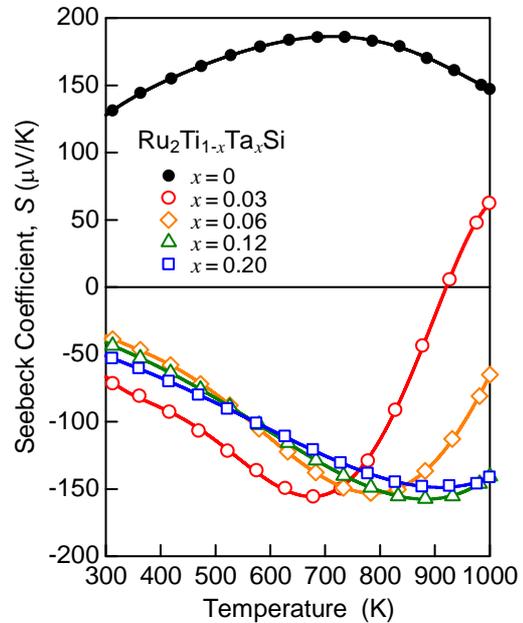


図 1. $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ のゼーベック係数の温度依存性

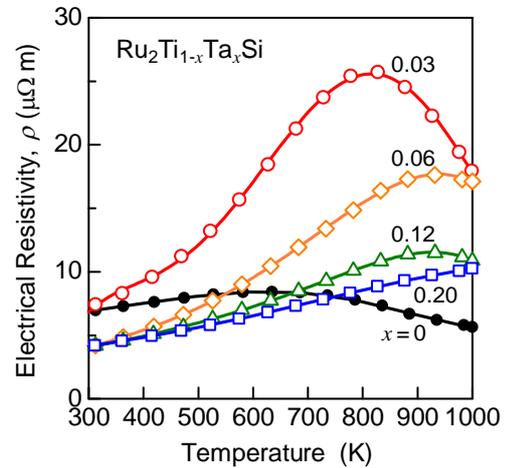


図 2. $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ の電気抵抗率の温度依存性

表 1. $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ のホール係数 R_H , キャリア濃度 n_H , ホール移動度 μ_H

	$R_H (10^{-8} \text{m}^3/\text{C})$	$n_H (10^{20} \text{cm}^{-3})$	$\mu_H (\text{cm}^2/\text{Vs})$
Ru_2TiSi	6.83	0.91	97.9
$\text{Ru}_2\text{Ti}_{0.97}\text{Ta}_{0.03}\text{Si}$	-1.68	3.72	22.6
$\text{Ru}_2\text{Ti}_{0.88}\text{Ta}_{0.12}\text{Si}$	-0.41	15.3	9.7

(4) 熱電材料の性能は出力因子 $P = S^2/\rho$ により評価される。図 3 は, $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ の P の温度依存性である。 p 型 Ru_2TiSi ($x=0$) の場合, 出力因子は 300 K で $P = 2.4 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$ であるが, 温度上昇とともに増加し, 830 K で $P = 4.4 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$ に達する。このような高い出力因子は, 正孔の高い移動度 μ_H に起因すると考えられる。とくに Fe_2VAl 基化合物の場合とは異なり, 非化学量論組成や元素置換を行わなくても P が高いことは注目に値する。一方, n 型 $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ ($0.03 < x < 0.20$) では出力因子は温度上昇とともに徐々に増加し, x が増加するにつれて高温側にシフトするブロードなピークを形成する。 $x=0.20$ 合金では, 880 K で $P = 2.4 \times 10^{-3} \text{ W/mK}^2$ に達する。

(5) 無次元性能指数 $ZT = PT/\kappa$ を評価するために, $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ の焼結合金を作製した。図 4 に示すように, Ru_2TiSi ($x=0$) の熱伝導率 κ は 300 K で約 20 W/mK であるが, 温度上昇とともに低下し, 800 K で 11 W/mK に達した。Ta 置換により熱伝導率はさらに低減しており, $x=0.20$ 合金では, 格子成分の減少のため, κ は 300 K で 4.5 W/mK まで減少する。これは, 重元素である Ta 置換によるフォノン散乱に起因する。ここで注目すべき点は, Ta 置換は格子熱伝導率の大幅な低減だけでなく, 電子ドーピングによるフェルミ準位の制御にも有効であることである。

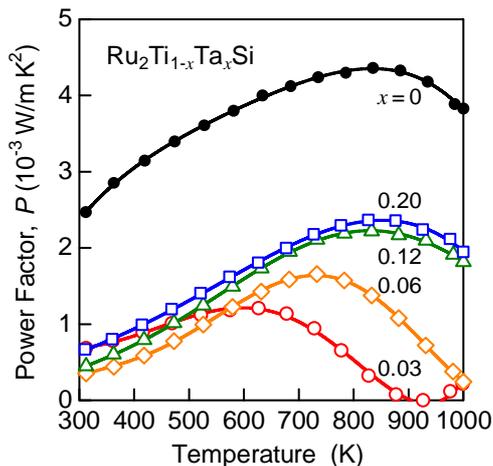


図 3. $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ の出力因子の温度依存性

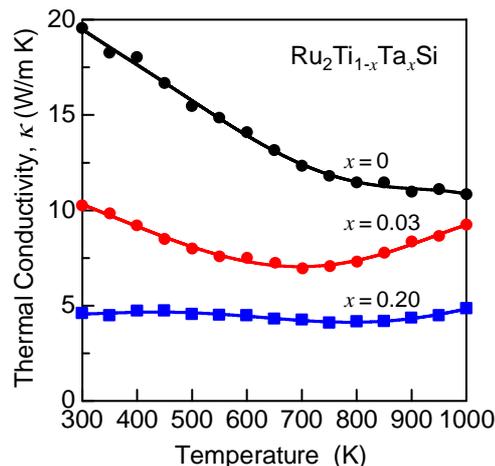
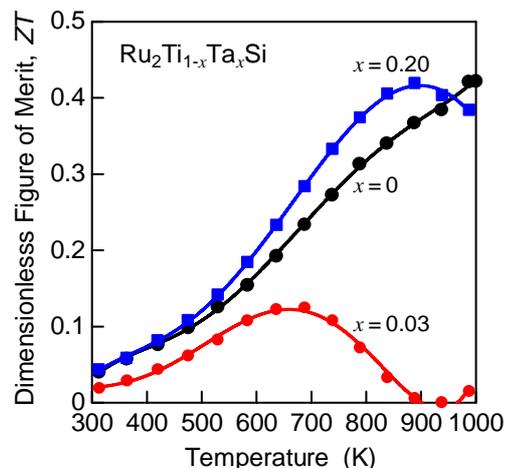


図 4. $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ の熱伝導率の温度依存性

(6) $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ の無次元性能指数 ZT の温度依存性を図 5 に示す。室温では $x=0$ および 0.20 の ZT は 0.04 と低く, これは 390 K における Ru_2TiGe の $ZT = 0.025$ [6] に匹敵する。 p 型 Ru_2TiSi ($x=0$) では, 温度が上昇するにつれて ZT は大幅に増加し, 1000 K で $ZT = 0.42$ に達する。Ta 置換により, n 型の $x = 0.03$ 合金は 700 K 付近で $ZT = 0.13$ のピークを示したが, $x=0.20$ 合金は 900 K 付近で $ZT = 0.42$ という最大値に達した。ここで得られた ZT は, バルクのホイスラー化合物熱電材料の中では最高性能である [7]。

図 5. $\text{Ru}_2\text{Ti}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Si}$ の無次元性能指数の温度依存性



< 引用文献 >

- [1] Y. Nishino, S. Deguchi, U. Mizutani, Thermal and transport properties of the Heusler-type $\text{Fe}_2\text{VAl}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($0 \leq x \leq 0.20$) alloys: Effect of doping on lattice thermal conductivity, electrical resistivity, and Seebeck coefficient, *Phys. Rev. B* **74**, 115115 (2006).
- [2] H. Miyazaki, S. Kimura, K. Onishi, T. Hihara, M. Yoshimura, H. Ishii, M. Mikami, Y. Nishino, Relation between electronic structure and thermoelectric properties of Heusler-type Ru_2VAl compounds, *Crystals* **12**, 1403 (2022).
- [3] S. Krishnaveni, M. Sundareswari, Band gap engineering in ruthenium-based Heusler alloys for thermoelectric applications, *Int. J. Energy Res.* **42**, 764-775 (2017).
- [4] F. Garmroudi, et al. Boosting the thermoelectric performance of Fe_2VAl -type Heusler compounds by band engineering. *Phys. Rev. B* **103**, 085202 (2021).
- [5] A. Diack-Rasselio, et al., Influence of self-substitution on the thermoelectric Fe_2VAl Heusler alloy, *J. Alloy. Compd.* **920**, 166037 (2022).
- [6] S. Mondal, K. Ghosh, R. Ranganathan, E. Alleno, C. Mazumdar, Thermoelectric properties of Ru_2TiGe Heusler phase, *J. Alloy. Compd.* **961**, 171050 (2023).
- [7] T. Fujimoto, M. Mikami, H. Miyazaki, Y. Nishino, Enhanced thermoelectric performance of Ru_2TiSi Heusler compounds with Ta substitution, *J. Alloy. Compd.* **969**, 172345 (2023).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計13件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Mikami Masashi, Ogasawara Kosuke, Miyazaki Hidetoshi, Nishino Yoichi	4. 巻 65
2. 論文標題 Microstructures and Thermoelectric Properties of Heusler Fe ₂ VAl Alloys Containing Oxide Nanoparticles	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 MATERIALS TRANSACTIONS	6. 最初と最後の頁 608 ~ 615
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.MT-E2023003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Sato H., Miyazaki H., Nishino Y., Mizutani U.	4. 巻 45
2. 論文標題 Quantitative Evaluation of Seebeck Coefficient using Linearized Boltzmann Transport Equation for Fe ₂ VAl-Based Compounds	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 Journal of Phase Equilibria and Diffusion	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11669-024-01086-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fujimoto Takuya, Mikami Masashi, Miyazaki Hidetoshi, Nishino Yoichi	4. 巻 969
2. 論文標題 Enhanced thermoelectric performance of Ru ₂ TiSi Heusler compounds with Ta substitution	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Alloys and Compounds	6. 最初と最後の頁 172345/1 ~ 6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jallcom.2023.172345	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Miyazaki Hidetoshi, Kimura Shin-ichi, Onishi Kensuke, Hihara Takehiko, Yoshimura Masato, Ishii Hirofumi, Mikami Masashi, Nishino Yoichi	4. 巻 12
2. 論文標題 Relation between Electronic Structure and Thermoelectric Properties of Heusler-Type Ru ₂ VAl Compounds	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Crystals	6. 最初と最後の頁 1403/1 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/cryst12101403	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Takahashi Kouki, Miyazaki Hidetoshi, Kimura Koji, Ozkendir Osman Murat, Nishino Yoichi, Hayashi Kouichi	4. 巻 259
2. 論文標題 Local Structure of Heusler Type Fe ₂ V _{1-x} TaxAl Thermoelectric Materials Studied by X Ray Absorption Fine Structure Spectroscopy	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2100602/1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100602	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Masuda Izumi, Miyazaki Hidetoshi, Yoshimura Masato, Ishii Hirofumi, Nishino Yoichi	4. 巻 259
2. 論文標題 Synthesis and Electronic Characterization of Weyl Semimetal TaSb ₂ Polycrystalline Material	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2100571/1~7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100571	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Asai Monami, Miyazaki Hidetoshi, Watanabe Kosuke, Yasui Akira, Takagi Yasumasa, Nishino Yoichi	4. 巻 259
2. 論文標題 Hard X-Ray Photoemission Study of Heusler-Type Fe ₂ -xRexVAI Thermoelectric Compounds	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 physica status solidi (b)	6. 最初と最後の頁 2100567/1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssb.202100567	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Soda Kazuo, Ikedo Wataru, Hayashi Toshimitsu, Shirakawa Taiki, Miyazaki Hidetoshi, Nishino Yoichi	4. 巻 91
2. 論文標題 Hard X-Ray Photoemission Study on Bulk Electronic Structure of Heusler-Type Fe ₂ -xV _{1+x} Al Alloys	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 064713/1~6.
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.91.064713	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Mikami Masashi, Miyazaki Hidetoshi, Nishino Yoichi	4. 巻 42
2. 論文標題 Suppressed atomic diffusion in flash sintering of bismuth telluride	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of the European Ceramic Society	6. 最初と最後の頁 4233 ~ 4238
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jeurceramsoc.2022.03.036	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Fukuta Kodai, Tsuchiya Koichi, Miyazaki Hidetoshi, Nishino Yoichi	4. 巻 128
2. 論文標題 Improving thermoelectric performance of Fe ₂ VAl-based Heusler compounds via high-pressure torsion	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Physics A	6. 最初と最後の頁 184/1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s00339-022-05329-y	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Miyazaki Hidetoshi, Tamura Tomoyuki, Mikami Masashi, Watanabe Kosuke, Ide Naoki, Ozkendir Osman Murat, Nishino Yoichi	4. 巻 11
2. 論文標題 Machine learning based prediction of lattice thermal conductivity for half-Heusler compounds using atomic information	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 13410/1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-021-92030-4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Miyazaki Hidetoshi, Ozkendir Osman Murat, Gunaydin Selen, Watanabe Kosuke, Soda Kazuo, Nishino Yoichi	4. 巻 10
2. 論文標題 Probing local distortion around structural defects in half-Heusler thermoelectric NiZrSn alloy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 19820/1 ~ 8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-76554-9	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 MIKAMI Masashi、KINEMUCHI Yoshiaki、KUBO Kazuya、UCHIYAMA Naoki、MIYAZAKI Hidetoshi、NISHINO Yoichi	4. 巻 67
2. 論文標題 Rapid Fabrication of Thermoelectric Compounds by Flash Sintering	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the Japan Society of Powder and Powder Metallurgy	6. 最初と最後の頁 478 ~ 483
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2497/jjspm.67.478	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計32件 (うち招待講演 4件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 宮崎秀俊, 佐藤洋一, 西野洋一, 水谷宇一郎
2. 発表標題 四面体法を用いたゼーベック係数計算コードの開発: LBT-TETRA code
3. 学会等名 日本金属学会2024年春季(第174回)講演大会
4. 発表年 2024年

1. 発表者名 長瀬未都, 宮崎秀俊, 西野洋一, K. Mahalingam, 桜庭裕弥
2. 発表標題 ホイスラー型Co ₂ MnGa化合物多結晶体の異常ネルンスト効果
3. 学会等名 第20回日本熱電学会学術講演会 (TSJ2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮崎秀俊, 北川翔太, 南 佳澄, 三上祐史, 西野洋一
2. 発表標題 ホイスラー型Ru ₂ TiSi化合物の電子構造と熱電変換特性
3. 学会等名 第20回日本熱電学会学術講演会 (TSJ2023)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮崎秀俊, 増田和泉, 西野洋一
2. 発表標題 固相反応法により作製したTaSb ₂ 化合物の熱電特性における元素置換効果
3. 学会等名 日本金属学会2023年秋期(第173回)講演大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 木村耕治, 筒井智嗣, 宮崎秀俊, 中神秀麻, 西野洋一, 林 好一
2. 発表標題 X線非弾性散乱によるTiおよびTaドーパFe ₂ VAl熱電材料のフォノン解析
3. 学会等名 日本物理学会第78回年次大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 M. Mikami, H. Miyazaki, Y. Nishino
2. 発表標題 Rapid Densification of Thermoelectric Telluride Compounds by Flash Sintering
3. 学会等名 International Conference on Sintering 2023 (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 M. Mikami, H. Miyazaki, Y. Nishino
2. 発表標題 Microstructure and Thermoelectric Properties of Telluride Compounds prepared by Flash Sintering
3. 学会等名 International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC 2023) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 K. Kimura, S. Tsutsui, H. Miyazaki, Y. Nishino, K. Hayashi
2. 発表標題 Phonon Dispersions of Ta- and Ti-doped Fe ₂ VAl Heusler-type Thermoelectric Materials studied by Inelastic X-ray Scattering
3. 学会等名 2023 European Materials Research Society Spring Meeting and Exhibit (E-MRS) (国際学会)
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮崎秀俊, 木村真一, 大西健介, 日原岳彦, 吉村政人, 石井啓文, 三上祐史, 西野洋一
2. 発表標題 ホイスラー型Ru ₂ VAl化合物の電子構造と熱電特性
3. 学会等名 日本金属学会2023年春季(第172回)講演大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 長瀬未都, 宮崎秀俊, 西野洋一, Krishnan Mahalingam, 桜庭裕弥
2. 発表標題 ホイスラー型Co ₂ MnGa熱電変換化合物の合成と結晶構造および電子構造評価
3. 学会等名 日本金属学会2023年春季(第172回)講演大会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 Yoichi Nishino
2. 発表標題 Pseudogap Engineering of Fe ₂ VAl Thermoelectric Heusler Compounds
3. 学会等名 Mizutani International Symposium on Science of Intelligent & Sustainable Advanced Materials (SIPS 2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三上祐史, 小笠原孝介, 宮田智康, 宮崎秀俊, 西野洋一
2. 発表標題 異種材料複合化によるFe ₂ VAl合金の組織微細化と熱電特性への影響
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮崎秀俊, 浅井萌苗実, 西野洋一
2. 発表標題 Re-Ti共置換によるホイスラー型Fe ₂ VAl合金の熱電特性向上
3. 学会等名 日本金属学会2022年秋期(第171回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三上祐史, 宮崎秀俊, 西野洋一
2. 発表標題 Bi ₂ Te ₃ のフラッシュ焼結における抑制された加熱効果の影響
3. 学会等名 第19回日本熱電学会学術講演会(TSJ2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高橋昂暉, 宮崎秀俊, 木村耕治, 西野洋一, 林 好一
2. 発表標題 X線吸収端微細構造法によるホイスラー型Fe ₂ V _{1-x} TaxAl熱電変換材料の熱伝導率低減機構の解明
3. 学会等名 第19回日本熱電学会学術講演会(TSJ2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮崎秀俊, 関田好希, 渡邊厚介, 桜庭裕弥, 西野洋一
2. 発表標題 ホイスラー型 $\text{Co}_2\text{MnSi}_{1-x}\text{Al}_x$ 化合物の電子構造と相安定性に関する研究
3. 学会等名 第19回日本熱電学会学術講演会 (TSJ2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 H. Miyazaki, Y. Sekita, K. Watanabe, A. Yasui, Y. Takagi, Y. Sakuraba, Y. Nishino
2. 発表標題 Electronic structure of thermoelectric Heusler-type $\text{Co}_2\text{MnSi}_{1-x}\text{Al}_x$ compounds
3. 学会等名 The 9th International Conference on Hard X-ray Photoelectron Spectroscopy (HAXPES 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 増田和泉, 宮崎秀俊, 吉村政人, 石井啓文, 西野洋一
2. 発表標題 多結晶Wyle半金属 TaSb_2 の合成と電子構造および熱電特性評価
3. 学会等名 日本金属学会2022年春季(第170回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 高橋昂暉, 宮崎秀俊, 木村耕治, 西野洋一, 林 好一
2. 発表標題 X線吸収端微細構造法によるホイスラー型 $\text{Fe}_2\text{V}_{1-x}\text{Ta}_x\text{Al}$ 熱電変換材料の局所構造解析
3. 学会等名 日本金属学会2022年春季(第170回)講演大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮崎秀俊, 田村友幸, 三上祐史, 渡邊厚介, 井手直樹, O. M. Ozkendir, 西野洋一
2. 発表標題 機械学習によるハーフホイスラー化合物の熱伝導率予測
3. 学会等名 第18回日本熱電学会学術講演会 (TSJ2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋昂暉, 宮崎秀俊, 木村耕治, 西野洋一, 林 好一
2. 発表標題 X線吸収端微細構造法によるホイスラー型 $\text{Fe}_2\text{V}_1\text{-xMxAl}$ (M = Ti, Ta) 化合物の局所構造解析
3. 学会等名 第18回日本熱電学会学術講演会 (TSJ2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮崎秀俊, O. M. Ozkendir, S. Gunaydin, 渡邊厚介, 曾田一雄, 西野洋一
2. 発表標題 X線吸収微細構造法を用いたハーフホイスラー型 NiZrSn熱電変換材料の局所構造解析
3. 学会等名 ナノ学会第19回大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Mikami, Y. Kinemuchi, K. Kubo, N. Uchiyama, H. Miyazaki, Y. Nishino
2. 発表標題 Rapid Densification of Thermoelectric Compounds by Flash Sintering
3. 学会等名 International Conference on Processing & Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC 2021 (招待講演) (国際学会))
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 西野洋一
2. 発表標題 排熱発電を目指すホイスラー化合物熱電材料
3. 学会等名 第43回排熱発電コンソーシアム(招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮崎秀俊, Osman Murat Ozken dir, Selen Gunaydin, 渡邊厚介, 曾田一雄, 西野洋一
2. 発表標題 X線吸収微細構造法によるハーフホイスラー型NiZrSn熱電変換材料の局所結晶構造評価
3. 学会等名 日本金属学会2021年春期(第168回)講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡邊厚介, 加藤直人, 宮崎秀俊, 井手直樹, 玉岡悟司, 西野洋一
2. 発表標題 窒化処理したFe ₂ VAl系合金の熱電特性と微細構造
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期(第167回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 宮崎秀俊, 浅井萌苗実, 渡邊厚介, 保井晃, 高木康多, 西野洋一
2. 発表標題 ホイスラー型Fe ₂ -xRexVAl化合物の熱電特性と電子構造
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期(第167回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山本輝帆, 井手直樹, 西野洋一
2. 発表標題 Fe ₂ VAl系合金の力学特性に及ぼすV/Al非化学量論組成の効果
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期(第167回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 福田晃大, 土谷浩一, 宮崎秀俊, 西野洋一
2. 発表標題 高圧ねじり加工を施したFe ₂ V _{0.98} Ta _{0.10} Al _{0.92} 合金の熱電特性に及ぼす熱処理の影響
3. 学会等名 日本金属学会2020年秋期(第167回)講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 浅井萌苗実, 宮崎秀俊, 渡邊厚介, 西野洋一
2. 発表標題 ホイスラー型Fe ₂ V _{1+x} Al _{1-x} 系合金のp型熱電特性に及ぼすTi-Re共置換効果
3. 学会等名 第17回日本熱電学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 加藤直人, 渡邊厚介, 宮崎秀俊, 井手直樹, 玉岡悟司, 西野洋一
2. 発表標題 Fe ₂ VAl系熱電材料への窒化物界面導入プロセス条件の探索
3. 学会等名 第17回日本熱電学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 宮崎秀俊, 関田好希, 渡邊厚介, 桜庭裕弥, 西野洋一
2. 発表標題 ホイスラー型Co ₂ MnSi _{1-x} Al _x 化合物の熱電特性と電子構造
3. 学会等名 第17回日本熱電学会学術講演会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計2件

1. 著者名 Yoichi Nishino	4. 発行年 2021年
2. 出版社 Elsevier	5. 総ページ数 731
3. 書名 Thermoelectric Energy Conversion	

1. 著者名 三上祐史, 内山直樹, 西野洋一	4. 発行年 2020年
2. 出版社 (株) 技術情報協会	5. 総ページ数 649
3. 書名 次世代自動車の熱マネジメント	

〔出願〕 計2件

産業財産権の名称 ミリングポット冷却容器、それを用いた遊星型ボールミル装置及びクライオミリング方法	発明者 宮崎秀俊, 宮崎怜雄 奈, 日原岳彦, 西野 洋一	権利者 名古屋工業大学 長
産業財産権の種類、番号 特許、特願2021-73764	出願年 2021年	国内・外国の別 国内
産業財産権の名称 熱電変換材料	発明者 西野洋一、宮崎秀 俊、藤本拓也	権利者 名古屋工業大学
産業財産権の種類、番号 特許、特願2021-044814	出願年 2021年	国内・外国の別 国内

〔取得〕 計0件

〔その他〕

名古屋工業大学 エネルギー材料設計研究室ホームページ
http://enemat.web.nitech.ac.jp/

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	宮崎 秀俊 (Miyazaki Hidetoshi) (10548960)	名古屋工業大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授 (13903)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------