

令和 5 年 6 月 2 日現在

機関番号：13302

研究種目：若手研究

研究期間：2020～2022

課題番号：20K15021

研究課題名（和文）Ag-Pクラスター構造を有するリン化物熱電材料のフォノン輸送メカニズムの解明

研究課題名（英文）Study of phonon transport mechanism of phosphide thermoelectric materials with Ag-P cluster structure

研究代表者

宮田 全展（Miyata, Masanobu）

北陸先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・講師

研究者番号：60815736

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、 $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ 等のAg(銀)-P(リン)化物のフォノン輸送メカニズムを、実験と理論計算を協奏的に駆使することで詳細に明らかにし、低い格子熱伝導率の材料設計指針の確立を目指した。

Ag-P化物 $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$, Ag_3SnP_7 , AgP_2 は、いずれも、結晶中のAg原子が大きなフォノンの非調和性を示すことで、強いフォノン-フォノン散乱を引き起こし、室温で極めて低い格子熱伝導率を示すことを、実験と理論の両面から明らかにした。

本研究結果により、熱電変換のみならずフォノンエンジニアリングの観点から、Ag-P化物という新たな候補物質群の提案に成功した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究結果は、低い格子熱伝導率を示すAg-P化物のフォノン輸送メカニズムを、実験及び高次の非調和フォノンの寄与を考慮した理論計算の協奏的アプローチにより明らかにしたものであり、Ag-P化物以外にも適用範囲を広げられる可能性を秘めた学術的意義の高い成果である。

また、熱電変換材料やフォノンエンジニアリングの観点においても、重要な成果であり、昨今の社会情勢において重要な役割を担う再生可能エネルギーの分野の発展の一助につながり、社会的にも大きな意義を持つ。

研究成果の概要（英文）：In this study, the phonon transport mechanism of Ag-P compounds such as $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ was clarified in detail by making full use of experimental and theoretical calculations in a concerted manner, aiming to establish a material design guideline for low lattice thermal conductivity.

The Ag-P compounds $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$, Ag_3SnP_7 , and AgP_2 all exhibit extremely low lattice thermal conductivity at room temperature due to strong phonon-phonon scattering caused by the large phonon anharmonicity of the Ag atoms in the crystal, as revealed both experimentally and theoretically.

The results of this study have successfully proposed a new candidate material group of Ag-P compounds from the viewpoint of not only thermoelectric conversion but also phonon engineering.

研究分野：熱電変換

キーワード：フォノン輸送 非調和性 リン化物 実験 第一原理計算

1. 研究開始当初の背景

一次産業エネルギーの内、約 66%が未利用排熱として無駄に捨てられており、それら未利用排熱の大部分は、タービンを用いたエネルギー回生技術を適用できない 150 以下の低温排熱である。こうした低温排熱からエネルギーを回生する技術として、温度差があれば熱エネルギーを電気エネルギーに直接相互に変換できる熱電発電技術が注目を集めており、「新しい再生可能エネルギーすなわち廃熱を利用したエナジー・ハーベスティング」への応用が期待されている。熱電材料は、無次元性能指数 $ZT(=S^2 \sigma / \kappa T)$ (S : ゼーベック係数, σ : 電気伝導率, κ : 熱伝導率, T : 絶対温度) で評価され、代表的な熱電材料 Bi₂Te₃ は、およそ $ZT=1$ と比較的高い値を示すが、希少元素 Te を含むため熱電発電が広く普及するうえで Te の枯渇が問題となるため、地殻埋蔵量が多く安価で安全な元素で構成された環境調和型熱電材料の開発が求められている。

近年では計算機による第一原理計算や機械学習を用いた材料探索手法によって新規熱電材料の研究が精力的に行われている。中でも実験による材料探索手法ではほとんど研究がなされていなかったリン P を主成分としたリン化合物が注目され始めている。**リン化合物は、軽元素である P を主成分とするため、一般に固体中のフォノンの群速度が速く、格子熱伝導率が高い傾向があるため、熱電材料としての応用において問題**となっている Ag-P クラスター構造を含む Ag₆Ge₁₀P₁₂ が、低い格子熱伝導率であるため比較的高い熱電性能を示すことが Nuss らによって報告され、注目を集めている。理論計算より Ag₆Ge₁₀P₁₂ 中の Ag 原子のフォノンモードが低い格子熱伝導率の起源である可能性が報告されているが、詳細なフォノン輸送のメカニズムはわかっていない。

2. 研究の目的

本研究の目的は

1. リン化合物中の Ag-P クラスター構造による格子熱伝導率低減のメカニズム

2. Ag-P クラスター構造のマテリアルデザインによる熱電性能向上の設計指針

を実験と理論の両面からのアプローチにより明らかにすることである。Ag-P 化合物中の Ag-P クラスター構造の違いによるフォノン物性の変化および格子熱伝導率低減のメカニズムを明らかにし、得られた知見をもとに新規リン化合物熱電材料の設計指針を第一原理計算と実験の両面から確立することとする。

一般に格子熱伝導率の低減には、ナノ構造化によるフォノン散乱の増大、重元素置換による音速の低減、大きな単位胞の形成による比熱の低減効果等を利用する人が多い。格子熱伝導率が低い結晶構造などは機械学習による研究はされているものの、なぜ低い格子熱伝導率を示すのかそのメカニズムについてはわかっていない。リン化合物中の Ag-P クラスター構造による格子熱伝導率低減のメカニズムを明らかにすることができれば、環境調和型熱電材料の創製につながるだけでなく、クラスター構造制御による格子熱伝導率の制御という新たな材料設計指針の確立につながり、熱電変換材料のみならず熱伝導率の制御が重要となる熱整流ダイオードなどの熱マネジメントの分野の発展への波及効果を期待できる。

3. 研究の方法

本研究では、Ag₃P₆Si₃Sn₂(Ag₆Si₆Sn₄P₁₂ と表記する場合がある)をはじめとする Ag-P 化合物のフォノン物性について実験と理論の両面から協奏的に明らかにする。

実験では、候補となる Ag-P 化合物の多結晶または単結晶を化学気相輸送法等の合成方法を駆使して合成を行う。合成した試料の構造解析を、粉末 X 線回折法により詳細に解析し、組成評価はエネルギー分散型 X 線分光器付きの走査型電子顕微鏡 SEM-EDS により行う。試料の電子・フォノン物性(電気抵抗率、ゼーベック係数、熱伝導率、Hall 係数、Hall 移動度)は物理特性測定装置 PPMS および高温熱電特性評価装置 RZ2001i を用いて評価する。

理論計算では、第一原理計算コード OpenMX を用いて、Ag-P 化合物の電子状態、トータルエネルギー、力を計算する。得られた力とトータルエネルギーの関係から、フォノン輸送計算コード ALAMODE を用いて、力定数およびフォノン物性(分散関係、フォノンの群速度、格子比熱、格子熱伝導率、フォノンの lifetime)の計算を行う。

上記の実験結果と計算結果を比較することで、Ag-P 化合物のフォノン輸送メカニズムを詳細に明らかにし、Ag-P クラスター構造がフォノン輸送に及ぼす影響、および Ag-P 化合物熱電材料の材料設計指針を確立する。

4. 研究成果

4 - 1 P 鎖状構造を有する Ag-P 化合物 Ag₃SnP₇ のフォノン輸送メカニズムの解明

本研究では、図 1 に示す P 鎖状構造を有する Ag₃SnP₇ に注目した。Ag₃SnP₇ は、b 軸方向に伸びた P₇ の鎖状構造を有し、Sn, Ag 原子が鎖と鎖の間に配置されたユニークな結晶構造を持つ。このような複雑な結晶構造を有する物質では、低い格子熱伝導率を示す可能性があり、実験と理論の両面からフォノン輸送メカニズムを解明することは、Ag-P 化合物熱電材料の材料設計指針の確

立において重要である。

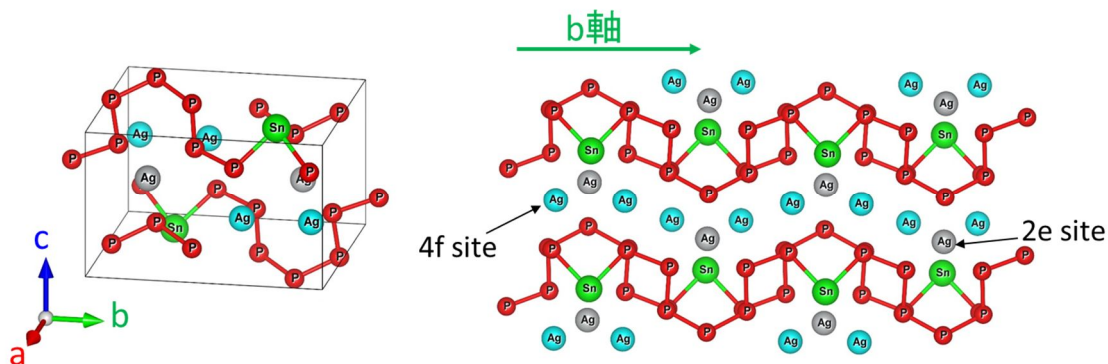


図 1 P 鎖状構造を有する Ag_3SnP_7 の結晶構造

実験では、石英管を用いた通常の溶融法では、未反応の P が析出し、大気中で燃焼してしまう問題が生じた。本研究では、輸送材としてヨウ素 I_2 を添加し、化学気相輸送法を用いることで、安定的に Ag_3SnP_7 の多結晶粉末試料を合成することに成功した。得られた多結晶粉末試料を、ホットプレス法を用いて高温・高圧で焼結することで、高密度焼結体 Ag_3SnP_7 試料を得た。合成により得られた Ag_3SnP_7 は、室温で約 $1.5 \text{ WK}^{-1}\text{m}^{-1}$ と極めて低い格子熱伝導率を示し、フォノン-フォノン散乱が支配的であることが分かった。

Ag_3SnP_7 の低い格子熱伝導率の起源を詳細に明らかにするため、第一原理計算コード OpenMX とフォノン輸送計算コード ALAMODE を用いて、フォノンの 4 次の非調和項まで考慮した高精度なフォノン輸送計算を実施し、実験結果と比較した。

図 2 に理論計算より得られた Ag_3SnP_7 の累積格子熱伝導率と実験値を比較したものを示す。黒がフォノンの 3 次の非調和項までを考慮して得られた累積格子熱伝導率、赤がフォノンの 4 次の非調和項までを考慮して得られた累積格子熱伝導率である。累積格子熱伝導率の飽和値は、単結晶の Ag_3SnP_7 の格子熱伝導率の理論予測に対応する。フォノンの 3 次の非調和項までを考慮した単結晶 Ag_3SnP_7 の格子熱伝導率の理論値は、実験値を大きく下回り、矛盾する。一方で、フォノンの 4 次の非調和項まで考慮することで、実験値の格子熱伝導率を良く再現する。

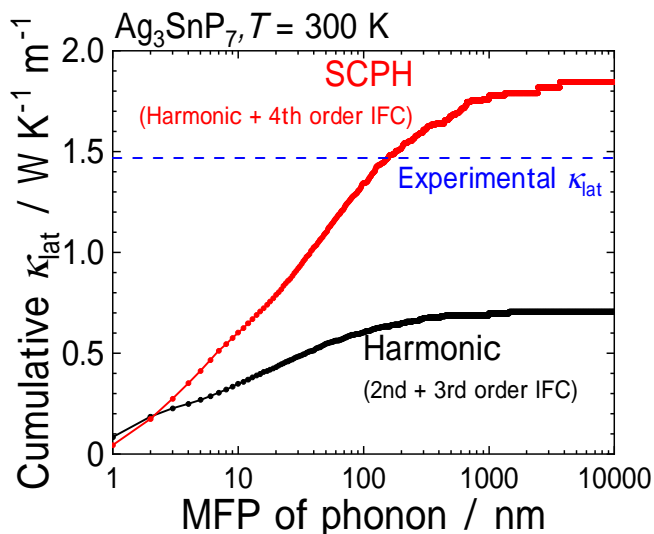


図 2 Ag_3SnP_7 の累積格子熱伝導率と実験の格子熱伝導率の比較

以上の実験と理論計算の比較から Ag-P 化合物 Ag_3SnP_7 の低い格子熱伝導率を示すメカニズムにおいて、フォノンの 4 次の非調和項が極めて重要であることを、世界に先駆けて明らかにした。本研究成果は、文献にまとめられ、ジャーナルの Editor's pick にノミネートされた。

4 - 2 二元系 Ag-P 化合物 AgP_2 の電子・フォノン輸送メカニズムの解明

続いて、 Ag_3SnP_7 よりも比較的単純な組成である二元系 Ag-P 化合物 AgP_2 について、実験と理論計算を協奏的に駆使することで、電子・フォノン輸送特性を詳細に明らかにした。

図 3 に二元系 Ag-P 化合物 AgP_2 の結晶構造を示す。 AgP_2 は、結晶中に Ag 原子に P 原子が 4 面体配位した Ag-P クラスター構造を持つ。また Ag-P クラスター構造は正四面体ではなく、やや歪んだ構造をとる。

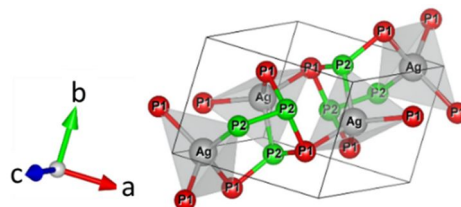


図 3 AgP_2 の結晶構造

実験では、 AgP_2 は、石英管を用いた通常の溶融法では未反応の P が析出し、大気中で燃焼してしまうという問題点があった。そこで輸送材としてヨウ素 I_2 を用いた化学気相輸送法を利用することで、 Ag_3SnP_7 と同様に、安定して多結晶 AgP_2 を合成する

手法を確立した。得られた多結晶 AgP_2 は、低温で電気抵抗率が指数関数的に増大する真性半導体で、 $51 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ もの高い Hall 移動度を示すことを明らかにした。また、同時に、室温では、約 $1.2 \text{ WK}^{-1}\text{m}^{-1}$ もの極めて低い格子熱伝導率を示し、熱電材料として良好な電子・フォノン物性を両立することを実験から明らかにした。

AgP_2 の高い Hall 移動度と極めて低い格子熱伝導率の起源を詳細に明らかにするため、第一原理電子輸送計算および、フォノン輸送計算を行った。理論計算と実験の比較より、 AgP_2 は、キャリアの緩和時間が 3.3 fs と比較的長く (Si の単結晶が 300 K で 10 fs)、かつ有効質量が自由電子の約 0.11 倍軽い為、高い Hall 移動度を示すことを明らかにした。

図 4 に理論計算から得られた AgP_2 のフォノンの分散関係 (左) と、 AgP_2 中の Ag, P の格子振動の平均二乗変位の温度依存性 (右) を示す。 AgP_2 のフォノンの分散関係は、各フォノンモードのモードグリユナイゼンパラメータでカラーマップされており、赤い分枝は非調和性の高いフォノンモードであることを意味する。 AgP_2 は、約 60 cm^{-1} の低い周波数領域から、モードグリユナイゼンパラメータ が大きな光学フォノンモードが生じ、このフォノンモードは AgP_2 中の Ag 原子由来のものであることが分かった。 AgP_2 中の Ag, P の格子振動の平均二乗変位の温度依存性に注目すると、Ag 原子は P 原子と比較して約 1.6 - 1.7 倍もの大きな振幅振動を示す。

以上のことから、 AgP_2 中の Ag 原子は大きな非調和振動を示すことが明らかになった。

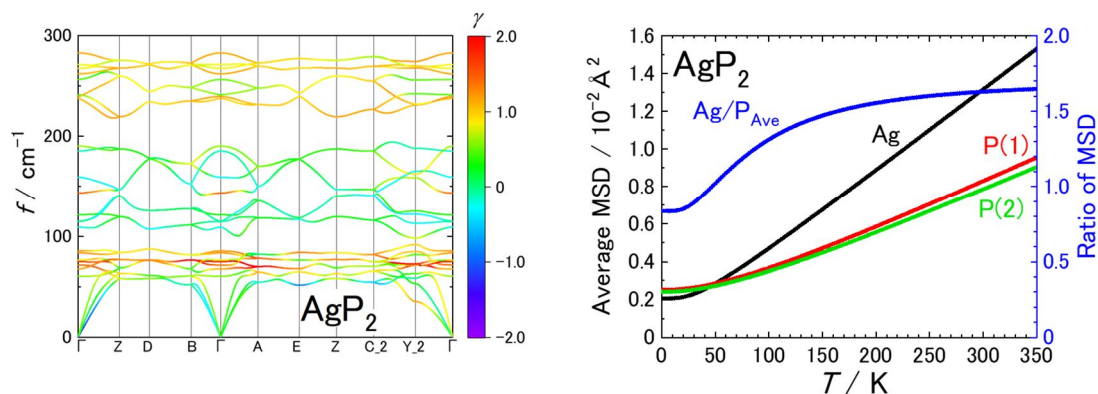


図 4 AgP_2 のフォノンの分散関係 Ag, P の格子振動の平均二乗変位の温度依存性

上記の AgP_2 中の Ag 原子の非調和性を考慮して計算した格子熱伝導率と、 AgP_2 の実験値の格子熱伝導率の温度依存性を図 5 に示す。約 300 nm の結晶子を導入した AgP_2 の格子熱伝導率は、 AgP_2 多結晶の実験値を全温度領域でほぼ定量的に再現した。

以上のことから AgP_2 が 結晶中の Ag 原子の大きな非調和振動により、強いフォノン-フォノン散乱を引き起こすことで極めて低い格子熱伝導率を示すメカニズムを明らかにした。また、類似結晶について、フォノン輸送特性の比較を行い、 AgP_2 中の Ag-P クラスタ構造の結合の異方性が大きいことが、低い格子熱伝導率において極めて重要である知見を得た。これにより、「Ag 原子が異方的な結合をもつ Ag-P 化合物は、Ag の非調和振動により低い格子熱伝導率を示す」という、新たな材料設計指針を提案することに成功した。

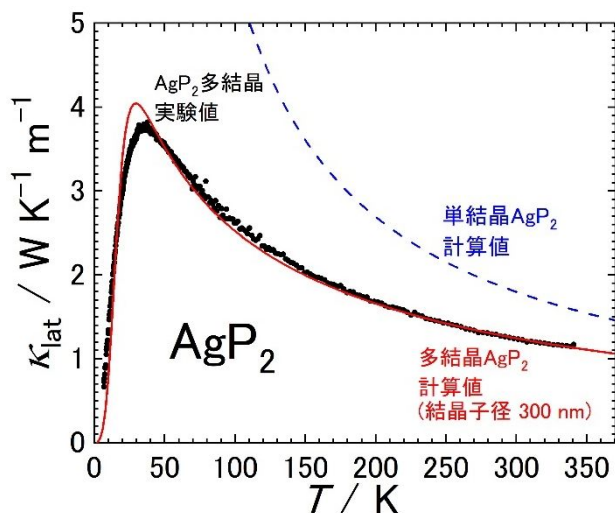


図 5 AgP_2 の格子熱伝導率の実験値と計算値の比較

本研究成果は、引用文献 および

第 19 回日本熱電学会学術講演会で発表し、同学会で優秀講演賞を受賞した。

4 - 3 テトラヘドライト like な結晶構造を有する $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ と $\text{Ag}_6\text{Ge}_{10}\text{P}_{12}$ の非調和フォノン物性

本研究では、高性能硫化物熱電材料として知られるテトラヘドライト $\text{Cu}_{12}\text{Sb}_4\text{S}_{13}$ と結晶構造が酷似した Ag-P 化合物 $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ ($\text{Ag}_6\text{Si}_6\text{Sn}_4\text{P}_{12}$ と表記する場合もある) と、同じ結晶構造で Nuss らが報告した低い格子熱伝導率を示す Ag-P 化合物 $\text{Ag}_6\text{Ge}_{10}\text{P}_{12}$ のフォノン輸送特性を、フォノンの 4 次の非調和項を考慮したフォノン輸送計算から比較を行った。差電子密度の解析より、 $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$

の Sn (8c サイト) はローンペア(孤立電子対)を持たず, $\text{Ag}_6\text{Ge}_{10}\text{P}_{12}$ の Ge(8c サイト)はテトラヘドライトと同じくローンペアを持つという対照的な特徴が明らかになった.

図 6 に Ag-P 化合物 $\text{Ag}_6\text{Ge}_{10}\text{P}_{12}$ と $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ ($\text{Ag}_6\text{Si}_6\text{Sn}_4\text{P}_{12}$) のフォノンの状態密度を示す. 点線は調和近似から得られたフォノンの状態密度であり, 灰色および色線はフォノンの 4 次の非調和項を繰り込んで得られたフォノンの状態密度である. ローンペアを持つ $\text{Ag}_6\text{Ge}_{10}\text{P}_{12}$ は, 4 次の非調和項を考慮することで, フォノンの状態密度が高周波数側にシフトするのに対し, ローンペアを持たない $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ ($\text{Ag}_6\text{Si}_6\text{Sn}_4\text{P}_{12}$) のフォノンの状態密度は, 逆に低周波数側にシフトするという対照的なフォノン物性を示すことが明らかになった.

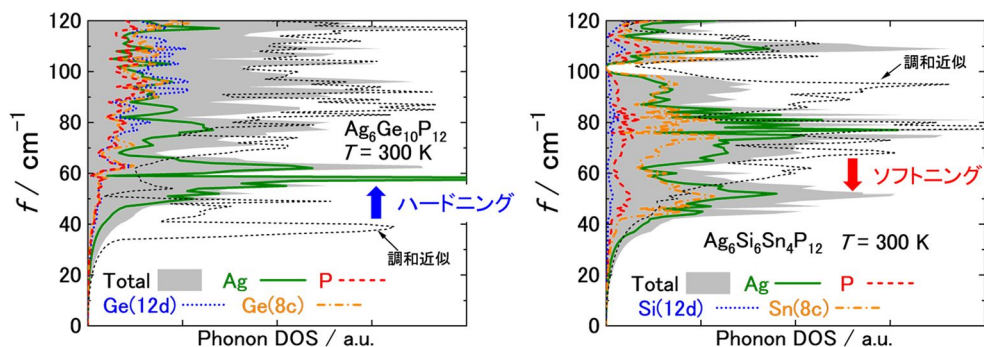


図 6 $\text{Ag}_6\text{Ge}_{10}\text{P}_{12}$ と $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ ($\text{Ag}_6\text{Si}_6\text{Sn}_4\text{P}_{12}$) のフォノンの状態密度

上記のフォノン特性を考慮した $\text{Ag}_6\text{Ge}_{10}\text{P}_{12}$ と $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ ($\text{Ag}_6\text{Si}_6\text{Sn}_4\text{P}_{12}$) の累積格子熱伝導率の計算結果を図 7 に示す. 赤は, 4 次の非調和項を考慮した累積格子熱伝導率の計算値である. 4 次の非調和項を考慮した計算結果は, フォノンの状態密度と同様に両物質で対称的である. $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ ($\text{Ag}_6\text{Si}_6\text{Sn}_4\text{P}_{12}$) の格子熱伝導率の予測値は, 300 K で約 $0.6 \text{ W K}^{-1} \text{ m}^{-1}$ と, 既報の $\text{Ag}_6\text{Ge}_{10}\text{P}_{12}$ の格子熱伝導率を下回る極めて低い値を示すことが理論的に明らかになった. このように, $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ ($\text{Ag}_6\text{Si}_6\text{Sn}_4\text{P}_{12}$) のローンペアの有無が, フォノン物性に重要な影響を与える可能性を示した. 以上の研究成果は, 引用文献 として刊行された.

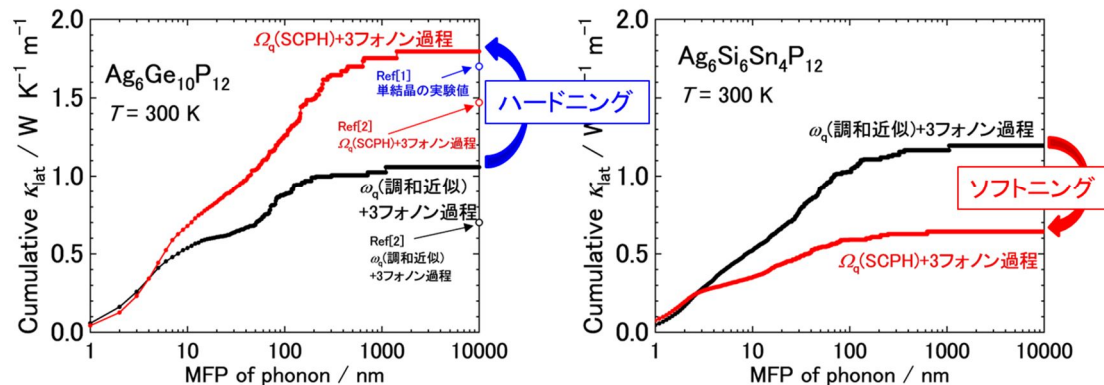


図 7 $\text{Ag}_6\text{Ge}_{10}\text{P}_{12}$ と $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ ($\text{Ag}_6\text{Si}_6\text{Sn}_4\text{P}_{12}$) の累積格子熱伝導率

現在, $\text{Ag}_3\text{P}_6\text{Si}_3\text{Sn}_2$ ($\text{Ag}_6\text{Si}_6\text{Sn}_4\text{P}_{12}$) の単結晶の作製に成功しており, 格子熱伝導率の実験値が, 本研究の理論計算の結果とよく一致することが明らかになっており, 現在, 英文論文を執筆中である.

以上, 大きな 3 つの研究成果を主として, 本研究により, 複数の物質について Ag-P クラスタ構造が及ぼすフォノン輸送メカニズムを実験・理論の両面から, 多角的に明らかにすることに成功し, Ag-P 化合物という新たな熱電材料の分野の先駆けとなった.

< 引用文献 >

Jürgen Nuss *et al.*, Chemistry of Materials **29**, 16, 6956(2017).
M. Miyata, Journal of Applied Physics **130**, 035104 (2021). [Editor 's pick]
M. Miyata et al., Materials Research Express, **9**, 5, 055901 (2022).
M. Miyata et al., Computational Materials Science **227**, 112258 (2023).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計3件（うち査読付論文 3件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Miyata Masanobu	4. 巻 130
2. 論文標題 Anharmonic vibration of Ag atom in low lattice thermal conductivity chain structure phosphide Ag ₃ SnP ₇	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 035104 ~ 035104
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1063/5.0056172	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 Miyata Masanobu, Koyano Mikio	4. 巻 9
2. 論文標題 Transport properties of binary phosphide AgP ₂ denoting high Hall mobility and low lattice thermal conductivity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Materials Research Express	6. 最初と最後の頁 055901 ~ 055901
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1088/2053-1591/ac6ccc	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 Miyata Masanobu, Koyano Mikio	4. 巻 227
2. 論文標題 Anharmonic and glass-like phonon transport in the Tetrahedrite-manner Ag ₆ Si ₆ Sn ₄ P ₁₂	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 112258 ~ 112258
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.commatsci.2023.112258	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 -

〔学会発表〕 計11件（うち招待講演 1件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 宮田 全展、小矢野 幹夫
2. 発表標題 低い格子熱伝導率と高いホール移動度を示すAg-P化合物の輸送特性
3. 学会等名 第18回 日本熱電学会学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 水野真衣、宮田全展、小矢野幹夫
2. 発表標題 添加剤を用いた遷移金属リン化物NiSi _{3-x} In _x P ₄ 系の合成と電子輸送特性
3. 学会等名 第18回 日本熱電学会学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮田 全展, 小矢野 幹夫
2. 発表標題 自己無撞着フォノン計算を用いたAg-P化合物の非調和フォノンの解析
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Masanobu Miyata and Mikio Koyano
2. 発表標題 Thermoelectric properties of composite phosphide Cu ₂ P and Cu ₃ P
3. 学会等名 The 8th Asian Conference on Crystal Growth and Crystal Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 阿部大介, 宮田 全展, 小矢野 幹夫
2. 発表標題 自己フラックス法によるAg ₃ P ₆ Si ₃ Sn ₂ 単結晶の合成と電子物性
3. 学会等名 第81回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 阿部 大介, 宮田 全展, 小矢野 幹夫
2. 発表標題 自己フラックス法により合成した単結晶Ag ₃ P ₆ Si ₃ Sn ₂ のAg欠損の第一原理解析
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 宮田 全展, 小矢野 幹夫
2. 発表標題 鎖状構造を有するリン化物の合成と非調和フォノン計算
3. 学会等名 第68回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮田 全展, 小矢野 幹夫
2. 発表標題 ボールミル装置を用いたNiSi ₃ P ₄ の合成とフォノン輸送特性の解析
3. 学会等名 第83回 応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮田 全展, 小矢野 幹夫
2. 発表標題 二元系リン化物AgP ₂ の電子・フォノン物性とAg原子の大きな非調和フォノン散乱
3. 学会等名 第19回 日本熱電学会学術講演会(優秀講演賞)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 宮田 全展
2. 発表標題 実験と第一原理電子・フォノン輸送計算の協奏による新規熱電材料探索のDX
3. 学会等名 サステナブルイノベーション研究領域シンポジウム「デジタルトランスフォーメーション（DX）の現状とサステナブルイノベーションへの展開」
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 宮田 全展, 阿部 大介, 小矢野 幹夫
2. 発表標題 ローンペアを持たない Ag-P 化物 Ag ₆ Si ₆ Sn ₄ P ₁₂ の非調和フォノン
3. 学会等名 第70回応用物理学会 春季学術講演会
4. 発表年 2023年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 森 孝雄, 塩見 淳一郎 監修	4. 発行年 2021年
2. 出版社 株式会社 シーエムシー・リサーチ	5. 総ページ数 214
3. 書名 計算科学を活用した熱電変換材料の研究開発動向	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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
---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------