

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 27 年 6 月 9 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2012～2014

課題番号：24360262

研究課題名(和文) 13族-遷移金属系準結晶・結晶におけるクラスター機能設計による熱電変換材料の開発

研究課題名(英文) A development of thermoelectric materials by the cluster function design for quasicrystal and crystal constructed from 13 group and transition metal elements

研究代表者

木村 薫 (Kimura, Kaoru)

東京大学・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) 13,600,000円

研究成果の概要(和文)：世の中で大量に捨てられている廃熱から電気エネルギーを取り出せる熱電発電用の高性能熱電材料を開発するための基礎研究を行った。複雑な構造を持つ固体の熱電性能を向上させる設計指針を得るために、構造単位となっているクラスター(原子集団)の構造と電子状態から、固体の電子構造を理解し、熱電特性を制御する方法を確立することを試みた。今後、高い性能を持つ電子構造の起源を理解でき、高性能材料を開発できる見通しを立てることができた。

研究成果の概要(英文)：A basic research has been done for development of high-performance thermoelectric materials used for thermoelectric power generation, which can produce electric power from a huge amount of waste heat in the world. To get a guiding principle increasing thermoelectric performance of structurally complex materials, it has been tried to establish how to understand the electronic structure and to control the thermoelectric properties of the solids from the structure and electronic states of the clusters, which are the structural units of them. The vision to understand the origin of high-performance electronic structure and to develop the high-performance materials could be obtained.

研究分野：金属物性

キーワード：熱電変換材料 クラスター 化学結合 準結晶 バンド構造 第一原理計算 分子軌道計算 半導体

## 1. 研究開始当初の背景

人間がエネルギーを使うと必ず廃熱が発生し、世界中で使われている1次エネルギーの約7割が廃熱として捨てられている。この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、大変魅力的な発電方法である。ただし、その効率が低いために、現状では限られた用途にしか使われていない。効率を決めているのは、熱電変換材料の無次元熱電性能指数  $ZT$  であり、 $ZT = S^2 \sigma / \kappa$  と表わされる。 $S$  は Seebeck 係数(熱起電力)、 $\sigma$  は電気伝導率、 $\kappa$  は熱伝導率、 $T$  は温度である。高い  $ZT$  を得るためには  $S$  と  $\sigma$  が大きく、 $\kappa$  は小さい方が望ましい。 $\sigma$  は電子熱伝導率  $\sigma_e$  と格子熱伝導率  $\sigma_l$  の和である。

我々は一貫して、熱電性能向上の設計指針を構築することを目指して研究してきた[1]。他のグループによる代表的な設計指針としては、次のようなものがある。「phonon glass electron crystal (PGEC)」が提唱され[2]、ラットリング効果によって  $\sigma_e$  は大きいまま  $\sigma_l$  を小さくすることで、スクッテルダイトやクラスレート等の熱電性能の向上に成功している。「擬ギャップ」[3]や「広いバンドと狭いバンドの重畳」[4]が、理論的に高い熱電性能を示す電子構造として提唱され、数値計算で定量的に確かめられている[5]。擬ギャップ内にフェルミ準位 ( $E_F$ ) が位置すると  $S$  が大きくなる。一方、 $E_F$  が幅の広い(有効質量の小さい)バンドに位置すると  $\sigma_e$  が大きく、近くに幅の狭い(有効質量の大きい)バンドが位置すると  $S$  も大きくなる。

この設計指針は高い熱電性能の実現に成功しており、籠状構造内の広い空間に重い元素が配置しているという構造上の特徴も明らかになっているが、 $\sigma_l$  のみの制御で、 $S$  については全く関知していない。この設計指針は Al 系準結晶において実現しており、

$\sigma_e$  は  $\text{Ga}_2\text{Ru}$  において実現しており、我々が  $ZT = 0.5$  の比較的高い性能指数を持つことを実証しているが、このような状態密度を持つ構造上の起源は明らかになっていなかった。

これらに対して、我々は  $\sigma_e$ 、 $\sigma_l$  とは本質的に異なり構造上の特徴による設計指針として、「重く強固なクラスターが弱く結合した固体 (WBRHCs)」を提唱し[1]、Al 系正 20 面体準結晶において有効に機能することを証明してきた。

他方で、我々は Al 系正 20 面体準結晶における擬ギャップの起源の1つである共有結合性がより強い B 系で、正 10 角形準結晶や新たな近似結晶を発見していた。

## 2. 研究の目的

13 族元素と遷移金属元素の共有結合により、擬ギャップや狭ギャップを持つ物質群は熱電変換材料として有望である。まず、我々が提案した熱電性能向上の設計指針「重く強固なクラスターが弱く結合した固体」を実証してきた Al 系正 20 面体クラスター固体の熱

電性能をさらに向上させるため、半導体化を試みる。また、別の設計指針「広いバンドと狭いバンドの重畳」を我々が実現した  $\text{Ga}_2\text{Ru}$  の最適ドーピング特性とこの電子構造の起源となるクラスター構造を明らかにする。また、我々が発見して「擬ギャップ」を持つことを確かめた正 10 角形クラスターを持つ B Ti Ru 系準結晶と近似結晶の熱電特性を明らかにする。さらに、熱電性能が高くなる半導体化(狭ギャップ化)に、どのようなクラスター構造が必要かを、上記のクラスターや物質群を例にして解明する。

## 3. 研究の方法

(1) 半導体化のためには、金属結合を共有結合に転換して行く必要がある。そこで、クラスターの結合が金属結合であるか共有結合であるかを判定する方法を開発する。同時に、クラスターの安定性の起源を明らかにする。

(2) 我々が提唱した「重く強固なクラスターが弱く結合した固体 (WBRHCs)」の有効性を実証してきた Al 系正 20 面体クラスター固体において、その延長として半導体化を目指す。

(3) 我々が「広いバンドと狭いバンドの重畳」の有効性を実証してきた  $\text{Ga}_2\text{Ru}$  へのホールまたは電子ドーピングにおける最適元素とドーピング濃度を明らかにする。また、この電子構造の起源となる構造(クラスター構造)の特徴を明らかにする。

(4) 近似結晶が「擬ギャップ」を持つことを状態密度計算で確かめた B 系近似結晶のゼーベック係数の計算による予測と実験により、熱電性能が高い構造(正 10 角形クラスターの配列)と組成を明らかにする。

## 4. 研究成果

(1) 第一原理分子軌道計算により、金属結合クラスターである  $\text{Al}_{13}$  (正 20 面体) と  $\text{Si}_{10}$  のクラスター軌道は、Wood-Saxon モデルと一致したが、共有結合クラスターである  $\text{B}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$ 、 $\text{Al}_{12}\text{H}_{12}^{2-}$  (共に正 20 面体) と  $\text{Si}_{10}\text{H}_{16}$  は、一致しなかった。また、安定なクラスターは HOMO 軌道が結合性であったが、不安定なクラスターは HOMO 軌道が反結合性であった。以上から、Wood-Saxon モデルを用いることで金属結合を判定でき、クラスター構造の安定性が、HOMO 軌道の結合性、反結合性に起因することが分かった。

(2) 実在する近似結晶を対象にバンド計算による探索を行ったところ、Al-Cu-Ir 系の  $\text{C}_2$  相が半金属的なバンドギャップを有することを見出した。そして、 $\text{C}_2$  相の Al の一部を Si で置換したモデル等、幾つかの元素置換モデルにおいて半導体化の可能性を見出した。残念ながら実験的には現在までに半導体化に成功していないが、少なくとも計算上は半導体となる具体例が得られたことは意義深い。これらのモデルを詳細に解析することで、半導体探索のより具体的な指針が得られる

と考えられる。多くの近似結晶では特徴的なクラスターをその構造中に見出すことができる。そこでクラスターの分子軌道を基底として解析を行うことで、クラスターの構造、クラスターの配置等と、バンド構造との関連性を明らかにできると期待できる。我々は、解析の道具として、バンド構造の表現に有用な分子軌道を抽出する手法を開発した。この方法は、軌道の混成を最大限に考慮し、かつ部分状態密度のピーク構造を際立たせる様な条件下で分子軌道を決定するものである。Al-Cu-Ir 系  $C_2$  相のマッカイクラスターに対し本手法を適用し、分子軌道を抽出した結果を用いて議論した。

(3)  $Ga_2Ru$  において、リジッド・バンドを仮定したドーピングにより価電子数を変化させた時の 800K での無次元熱電性能指数を計算した。非ドーピングでの無次元熱電性能指数は 0.5 付近で実験を再現しており、このとき格子熱伝導率は理論的最小値の数倍となっているが、ドーピング後は最小値になると仮定した。ホールドーピング、電子ドーピング共に無次元熱電性能指数の向上が期待され、特に電子ドーピングでは  $ZT=2.0$  を越える可能性があった。Ru を価電子数が 1 多い Co、Rh、Ir および 2 多い Ni、Pd で置換することにより、電子ドーピングを試みた。ゼーベック係数の絶対値のキャリア密度依存性は、非ドーピング・ホールドーピングと電子ドーピングで異なる傾向を示し、電子ドーピングの方が有効質量が大きいために示唆された。価電子数が 2 多い Ni や Pd の方が d 軌道のエネルギーが深く、ドーピング電子密度が小さくなってしまった。価電子数が 1 多い Co、Rh や Ir の方がドーピング電子密度は大きかったが、置換組成から予想されるよりは一桁以上小さかった。Ir 置換の場合に、n 型で最大の性能指数 0.31 が得られた。これは、これまでに報告されたこの種の化合物において n 型では最大の値である。非ドーピング (p 型) より性能指数が小さいのは、移動度が一桁以上小さいためである。格子熱伝導率は、ドーピング効果により低下した。

(4) 我々が発見して「擬ギャップ」を持つことを確かめた正 10 角形クラスターを持つ B-Ti-Ru 系近似結晶の熱電特性を明らかにした。相では、平均価電子数を変化させることで、擬ギャップ内でフェルミエネルギーをシフトさせ、電気伝導率とゼーベック係数を制御することに成功した。相と相は、相と異なり、フリップサイト、Ru と Ti の混合サイト、大きな格子定数を持ち、熱伝導率が低下することが予想されたが、実際には低下せず、熱電性能指数は工場しなかった。この研究の過程で、第 2 相として存在した  $Ti_{10}Ru_{19}B_8$  結晶の単相を作製し、熱電物性を評価したところ、 $ZT=0.1$  という比較的大きい値を得た。ドーピングによる性能向上を試みるため、Ru の一部を Cr から Cu までの 3d 遷移金属で置換したが、純粋なキャリア・ドーピングにはならず、3d 準位がフェルミエネルギー

一付近に位置してしまい、電気伝導率が低下して、性能向上には至らなかった。

#### <引用文献>

- [1] K. Kimura, J. T. Okada, H. Kim, T. Hamamatsu, T. Nagata and K. Kimura, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, 886, 0886-F06-10.1-11 (2006). (招待講演)
- [2] G.A. Slack, "CRC Handbook of Thermoelectrics, ed. by D. M. Rowe, Chemical Rubber, Boca Ratio FL, Chap 34, pp. 407 (1995).
- [3] G. D. Mahan and J. O. Sofo, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 93, 7436, (1996)
- [4] J.S. Tse and D.D. Klug: *Thermoelectrics Handbook, Macro to Nano*, ed. By D.M. Rowe 8-1-27 (2006).
- [5] T. Takeuchi, *Mater. Trans.* 50, 2359 (2009).

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

#### [雑誌論文](計 14 件)

Y. Takagiwa, T. Yoshida, D. Yanagihara, and K. Kimura, Thermoelectric Properties of Pseudogap  $Ti_{10}Ru_{19}B_8$  and  $Ti_9TM_2Ru_{18}B_8$  (TM: Cr-Cu) Compounds, *Journal of Electronic Materials*, 査読有, **44**, 1483 (2015).

K. Kitahara, Y. Takagiwa, and K. Kimura, Semimetallic Band Structure and Cluster-Based Description of a Cubic Quasicrystalline Approximant in the Al-Cu-Ir System, *Journal of the Physical Society of Japan*, 査読有, **84**, 014703 (2015).

Y. Takagiwa, Y. Miyazaki, T. Yoshida, D. Yanagihara, S. Ueda, K. Kitahara, and K. Kimura Thermoelectric properties of ( $\alpha$ -,  $\delta$ -,  $\zeta$ -) Ti-Ru-B approximants for the decagonal quasicrystal, *Solid State Sciences*, 査読有, (2015) in press.

Y. Takagiwa, T. Kamimura, J. T. Okada, and K. Kimura, Thermoelectric properties of Al-Ga-Pd-Re icosahedral quasicrystals, *Materials Transactions*, 査読有, **55**, 1226 (2014).

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*, 査読有, **15**, 044802 (2014).

#### [Review paper]

Y. Takagiwa, Y. Matsuura, and K. Kimura, Effect of carrier-doping on the thermoelectric properties of narrow-bandgap (Fe,Ru)Ga<sub>3</sub> intermetallic compounds, *Journal of Electronic Materials*,

査読有, **43**, 2206 (2014).

S. Koshiya, M. Terauchi, Y. Takagiwa, K. Yamada, I. Kanazawa, and K. Kimura, Chemical shifts of metallic and non-metallic Al-Re-Si approximant crystals studied by EELS and SXES, *Philosophical Magazine*, 査読有, **94**, 1711 (2014).

N. Sato, Y. Matsuura, K. Kitahara, Y. Takagiwa, and K. Kimura, Thermoelectric figure of merit enhancement of intermetallic compound RuGa<sub>2</sub> by ball-milling, *Journal of Alloys and Compounds*, 査読有, **585**, 455 (2014).

高際良樹, 木村薫, 狭バンドギャップ金属間化合物, *工業材料*, 査読有, **62**, 26 (2014).

Y. Takagiwa, K. Kitahara, and K. Kimura, Effects of Transition Metal (TM: Co, Rh, Ni and Pd) Substitution for Ru on Thermoelectric Properties for Intermetallic Compound RuGa<sub>2</sub>, *Materials Transactions*, 査読有, **54**, 953 (2013).

高際良樹, 木村薫, ガリウム系狭バンド熱電材料, *金属*, 査読無, **83**, 830 (2013).

Y. Takagiwa, K. Kitahara, and K. Kimura, Effect of electron doping on thermoelectric properties for narrow-bandgap intermetallic compound RuGa<sub>2</sub>, *Journal of Applied Physics*, 査読有, **113**, 023713 (2013).

Y. Takagiwa, K. Kitahara, Y. Matsubayashi, and K. Kimura, Thermoelectric properties of FeGa<sub>3</sub>-type narrow-bandgap intermetallic compounds Ru(Ga,In)<sub>3</sub>: experimental and calculational studies, *Journal of Applied Physics*, 査読有, **111**, 123707 (2012).

K. Yamada, M. Saito, H. Suzuki, I. Kanazawa, Y. Takagiwa, and K. Kimura, Structural vacancies of Al-based quasicrystals and anomalous transport property: Positron annihilation studies, *Physics Procedia*, 査読有, **35**, 51 (2012).

[学会発表](計 37 件)

北原功一, 高際良樹, 木村薫  
ある種の 13 族元素遷移金属間化合物の電子構造の原子クラスターに基づく統一的記述、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス(東京都新宿区)、2015 年 3 月 22 日

高際良樹, 北原功一, 木村薫  
13 族 遷移金属からなる金属間化合物の熱電特性、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス(東京都新宿区)、2015 年 3 月 22 日

佐々木友彰, 斉藤誠, 金沢育三, 高際良樹, 木村薫

Al-Pd-Mn 準結晶の Mn-Fe 置換による熱電物性への影響、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパ

ス(東京都新宿区)、2015 年 3 月 22 日  
山村仁, 山崎翔平, 大石佑治, 内田紀行, 木村薫, 金山敏彦

水素化アルミ及びボロンの正 20 面体および平面クラスターに関する研究、日本物理学会第 70 回年次大会、早稲田大学早稲田キャンパス(東京都新宿区)、2015 年 3 月 22 日

高際良樹, 吉田拓也, 木村薫  
Ti-Ru-B 系近似結晶の関連物質 Ti<sub>10</sub>Ru<sub>19</sub>B<sub>8</sub> 及び Ti<sub>9</sub>TM<sub>2</sub>Ru<sub>18</sub>B<sub>8</sub>(TM: Cr-Cu)の熱電特性、日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大学春日井キャンパス(愛知県春日井市)2014 年 9 月 7 日-10 日

Y. Takagiwa, E. Imai, T. Yoshida, D. Yanagihara, I. Kanazawa and K. Kimura

Thermoelectric Properties of Complex Structure Borides: Cu-doped boron and ternary Ti<sub>10</sub>Ru<sub>19</sub>B<sub>8</sub> Compounds, International Conference on Thermoelectrics - ICT2014, Nashville, Tennessee(USA), 2014 年 7 月 6 日-10 日

N. Sato, K. Kitahara, Y. Takagiwa, A. Kuwabara, N. Uchida and K. Kimura  
Reduced grain size effect of thermoelectric property and phonon dispersion of RuGa<sub>2</sub>, International Conference on Thermoelectrics - ICT2014, Nashville, Tennessee(USA), 2014 年 7 月 8 日-9 日

佐藤 直大, 北原 功一, 高際良樹, 木村薫

RuGa<sub>2</sub> の遷移金属ドーブにおける自己補償の検討、日本金属学会 2014 年春季(第 154 回)講演大会、東京工業大学大岡山キャンパス(東京都目黒区)、2014 年 3 月 23 日

星野 建, 加藤 克佳, 北原 功一, 高際良樹, 木村薫

AlCuRu 準結晶の元素置換による熱電物性への影響、日本金属学会 2014 年春季(第 154 回)講演大会、東京工業大学大岡山キャンパス(東京都目黒区)、2014 年 3 月 23 日

Y. Takagiwa, N. Sato, K. Kitahara, K. Kato, M. Takata, and K. Kimura

Narrow bandgap intermetallic compound RuGa<sub>2</sub>: chemical bonding nature, thermoelectric properties and their calculations, TMS2014, サンディエゴ(米国) 2014 年 02 月 16 日~2014 年 02 月 20 日

北原功一, 高際良樹, 木村薫  
半金属および半導体的バンドギャップを有する Al 基 C2 相近似結晶の電子状態の解析、日本物理学会 第 68 回年次大会、広島大学 東広島キャンパス(広島

県東広島市) 2013年3月29日  
柳原大輔, 上田駿, 吉田拓也, 宮崎吉宣,  
高際良樹, 木村薫

-BTiRu、-BTiRu、-BTiRu 近似結  
晶の熱電物性、日本物理学会 第 68 回  
年次大会、広島大学 東広島キャンパス  
(広島県東広島市) 2013年3月29日  
木村薫、曾我公平、兵藤宏、高際良樹、  
桐原和大、高田昌樹

ボロン系正 20 面体クラスター固体とアル  
ミ系正 20 面体準結晶の学融合-結合転  
換と自己補償-、第 9 回日本ホウ素・ホ  
ウ化物研究会、独立行政法人物質・材料  
研究機構 (茨城県つくば市) 2013年  
12月14日

山村仁、福里俊、大石佑治、内田紀行、  
木村薫、金山敏彦

水素化ボロン及びアルミの正 20 面体及  
び平面クラスターの研究、第 9 回日本ホ  
ウ素・ホウ化物研究会、独立行政法人物  
質・材料研究機構 (茨城県つくば市)  
2013年12月14日

木村薫

ボロンおよびアルミの孤立クラスター  
の創製と結合転換、第 18 回準結晶研究  
会、東京理科大学葛飾キャンパス(東京  
都葛飾区) 2013年12月16日~2013  
年12月18日

北原功一

半金属および半導体的バンドギャップ  
を有する近似結晶のバンド構造から導  
かれた分子軌道描像、第 18 回準結晶研  
究会、東京理科大学葛飾キャンパス(東  
京都葛飾区) 2013年12月16日~2013  
年12月18日

梶川武信、木村 薫、海部宏昌、山本 淳、  
小菅厚子、酒井章裕

日本熱電学会設立 10 周年記念パネル  
ディスカッション「日本熱電学会 10 年  
の歩みと熱電の未来」、第十回日本熱電  
学会学術講演会 (TSJ2013)、名古屋大  
学東山キャンパス豊田講堂 (愛知県名古  
屋市) 2013年09月08日~2013年09  
月09日

Y. Matsuura, K. Kitahara, Y.  
Takagiwa, K. Kimura

Carrier-doping effect on  
thermoelectric properties of  
narrow-bandgap(Fe, Ru)Ga<sub>3</sub>  
intermetallic compounds, ICT2013, 神  
戸国際会議場 (兵庫県神戸市) 2013年  
06月30日~2013年07月04日

D. Yanagihara, S. Ueda, T. Yoshida, Y.  
Miyazaki, Y. Takagiwa, K. Kimura

Thermoelectric properties of -BTiRu  
and -BTiRu approximant crystals,  
ICT2013, 神戸国際会議場 (兵庫県神戸  
市) 2013年06月30日~2013年07  
月04日

K. Kitahara, Y. Takagiwa, K. Kimura

Thermoelectric properties of  
icosahedral quasicrystals and cubic  
approximant crystals in Al-Cu-Ru  
system, ICT2013, 神戸国際会議場 (兵  
庫県神戸市) 2013年06月30日~2013  
年07月04日

21 Y. Takagiwa, K. Kitahara, K. Kato, M.  
Takata, K. Kimura

Structure, chemical bonding,  
thermoelectric properties and their  
doping effects for narrow-bandgap  
intermetallic compounds RuGa<sub>2</sub>、  
ICT2013, 神戸国際会議場 (兵庫県神戸  
市) 2013年06月30日~2013年07  
月04日

22 S. Koshiya, M. Terauchi, Y. Takagiwa,  
K. Yamada, I. Kanazawa, K. Kimura

High energy resolution EELS and  
SXES studies of characteristic  
chemical shifts of AlReSi approximant  
crystalline alloys, ISIC17, 仙台国際セ  
ンター (宮城県仙台市) 2013年05  
月12日~2013年05月16日

23 Y. Takagiwa, K. Yamada, H. Suzuki, I.  
Kanazawa, K. Kato, M. Takata, and K.  
Kimura

1/1-AlReSi approximant crystal:  
Electric properties, vacancy  
concentration, and chemical bonding,  
ICQ12, クラクフ (ポーランド) 2013  
年09月01日~2013年09月06日

24 K. Kitahara, Y. Takagiwa, K. Kimura

Molecular orbital picture extracted f  
rom the band structure of a realistic  
approximant crystal with semimetallic  
or semiconducting bandgap, ICQ12,  
クラクフ (ポーランド) 2013年09  
月01日~2013年09月06日

25 K. Kimura, Y. Oishi, S. Fukuzato, H.  
Yamamura, N. Uchida, T. Kanayama

Formation and bonding of bare and  
hydrogenated B-and Al-icosahedral or  
planar clusters, ICQ12, クラクフ (ポ  
ーランド) 2013年09月01日~2013  
年09月06日

26 星野建, 加藤克佳, 北原功一, 高際良樹,  
木村薫

AlCuRu 準結晶の元素置換による熱電物  
性への影響、日本物理学会 2013 年秋期  
講演大会、徳島大学 常三島キャンパス  
(徳島県徳島市) 2013年9月26日

27 山村仁, 福里俊, 大石佑治, 内田紀行,  
木村薫, 金山敏彦

水素化アルミ及びボロンの正 20 面体お  
よび平面クラスターに関する研究、日本  
物理学会 2013 年秋期講演大会、徳島  
大学 常三島キャンパス (徳島県徳島市)  
2013年9月26日

28 高際良樹, 山田浩平, 鈴木寛之, 佐々  
木友彰, 金沢育三, 加藤健一, 高田昌樹,

- 木村薫  
1/1-AlReSi 近似結晶の電気物性の組織改善効果、空孔濃度及び化学結合性、日本物理学会 2013 年秋期講演大会、徳島大学 常三島キャンパス(徳島県徳島市)、2013 年 9 月 26 日
- 29 佐藤 直大, 松浦 裕介, 北原 功一, 高際良樹, 木村薫  
金属間化合物 RuGa<sub>2</sub> の結晶粒微細化による熱電性能向上、日本金属学会 2013 年秋期講演大会、金沢大学 角間キャンパス(石川県金沢市)、2013 年 9 月 18 日
- 30 松浦 裕介, 北原 功一, 木村薫  
キャリアドーピングが FeGa<sub>3</sub> の熱電物性に与える影響に関する研究  
日本金属学会 2012 年秋期(第 151 回)大会、愛媛大学(愛媛県松山市)、2012 年 9 月 19 日
- 31 越谷翔悟, 寺内正己, 高際良樹, 山田浩平, 金沢育三, 木村薫  
EELS および SXES による Al-Re-Si 近似結晶化合物の電子構造の研究  
日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大(神奈川県横浜市)、2012 年 9 月 20 日
- 32 K. Kimura  
Search for Quasicrystalline Semiconductor and Development of High Performance Thermoelectric Material  
IUMRS-ICEM2012、パシフィコ横浜会議センター(神奈川県横浜市)、2012 年 9 月 26 日
- 33 K. Kitahara, Y. Takagiwa, K. Kimura  
Thermoelectric Properties of Icosahedral Quasicrystals and Cubic Approximant Crystals in Al - Cu-Ru System, IUMRS-ICEM2012, パシフィコ横浜会議センター(神奈川県横浜市)、2012 年 9 月 26 日
- 34 D. Yanagihara, T. Yoshida, Y. Miyazaki, Y. Takagiwa, K. Kimura  
Thermoelectric Properties of -BTiRu and -BTiRu Approximant Crystals, IUMRS-ICEM2012, パシフィコ横浜会議センター(神奈川県横浜市)、2012 年 9 月 26 日
- 35 Y. Matsuura, Y. Takagiwa, K. Kimura  
Carrier-Doping Effect on Thermoelectric Properties of Narrow-Bandgap(Ru, Fe)Ga<sub>3</sub> Intermetallic Compounds, IUMRS-ICEM2012、パシフィコ横浜会議センター(神奈川県横浜市)、2012 年 9 月 26 日
- 36 K. Kimura, Y. Miyazaki, H. Hyodo, Y. Takagiwa, J. T. Okada, E. Abe, K. Kirihara, K. Soga, Y. Yokoyama, K. Kato and M. Takata,

- Self-compensation, Bonding-distribution and Thermoelectric Properties of B-based and Al-based Icosahedral and Decagonal Cluster Solids as Structurally Complex Materials, 2012 MRS FALL MEETING, Boston(USA), 2012 年 11 月 27 日
- 37 Y. Takagiwa, K. Kitahara, K. Kato, M. Takata, K. Kimura  
Structure, Chemical Bonding, and Thermoelectric Properties of Narrow-bandgap Intermetallic Compounds TM(Al,Ga)<sub>2</sub> and TM(Ga,In)<sub>3</sub> (TM:Fe,Ru): Computational and Experimental Studies, 2012 MRS FALL MEETING, Boston(USA), 2012 年 11 月 29 日

〔図書〕(計 1 件)  
竹内伸、枝川圭一、蔡安邦、木村薫  
朝倉書店、準結晶の物理、69-86, 100, 111-114 (2012).

〔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/>

6. 研究組織
- (1)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
- (2)研究分担者 なし
- (3)連携研究者 高際良樹(TAKAGIWA YOSHIKI)  
東京大学・大学院新領域創成科学研究科・助教  
研究者番号：90549594