

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 5 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24560825

研究課題名(和文)バルクナノ界面と空孔を内包する層状酸化物熱電材料の物性面からの新規材料設計

研究課題名(英文)Property-based Novel Materials Design of Layered Thermoelectric Oxides with Bulk Nano-Interfaces

研究代表者

吉矢 真人 (Yoshiya, Masato)

大阪大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：00399601

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,100,000円

研究成果の概要(和文)：材料計算科学的手法を駆使することで、熱電特性を決定する電子特性と熱的特性の起源、そして同時に層状構造の熱力学的安定性の起源を明らかにした。NaxCoO₂系化合物では層間距離が熱力学的安定性と共に電子特性と熱特性を大きく左右することが明らかになった。また、Ca₃Co₄O₉系類似化合物では静的構造ミスフィットのみならず界面を跨いだ原子振動の動的干渉が熱伝導抑制を可能にしていることが明らかとなった。更にTi_nO_{2n-1}系化合物では層間相互作用が強いものの電子特性と熱特性を担う層が異なることが明らかとなった。これらの理解に基づき新規材料設計指針を提案し、理論計算によりその有効性を実証した。

研究成果の概要(英文)：Origins of electronic and thermal properties that thermoelectric energy conversion efficiency have been revealed by computational experiments, in addition to mechanism behind stabilization of the layered structure. It has been revealed that, in NaxCoO₂ and related materials, interlayer distance significantly affects both electronic and thermal properties and thermodynamic stability, and, in Ca₃Co₄O₉ and its sister materials, dynamic interference of atomic vibrations across interfaces suppresses thermal conduction in CoO₂ layer which carries most of heat in the material. In addition, each layer in Ti_nO_{2n-1} and its sister materials plays different role with TiO₂ layers dominating heat transport while Ti₂O₃ layers govern electronic properties. Based on those in-depth understandings, new strategies to control electronic and thermal properties by fully utilizing their layered structure, thereby improving thermoelectric conversion, have been obtained.

研究分野：計算材料物理学

キーワード：熱電変換 層状構造 熱伝導 第一原理計算 分子動力学法 電子伝導 酸化物熱電材料

1. 研究開始当初の背景

工場や自動車からの排熱のエネルギー再利用やユビキタス発電を可能にする熱電変換材料は、可動部分がないためにメンテナンスコストがかからないものの、材料コストや製造コストが実用化の妨げとなっている。個別に様々な材料系がすでに発見されているものの、エネルギー変換効率向上のための具体的指針は概念段階にとどまっている。様々なナノ構造を有する非常に優れた熱電変換材料が論文を賑わしているが、高度かつ特殊なナノ構造制御は必ずしも学術的理解や実用化に繋がっていない。

その中でわが国では層状酸化物熱電変換材料が相次いで発見され、その優れた特性に注目が集まり、多くの理論的・実験的研究がなされてきた。しかしながら、熱電変換特性を決める電子的特性については他分野材料で得られた知識の応用から非常に良く進んでいるものの、熱電変換特性を決めるもう一方の熱的特性については理解が極めて乏しい。それゆえ、多くの場合は相関がある電子的特性と熱的特性の独立制御に至っては特性向上の方針すら上述の概念レベルを出ていないのがこれまでの状況と言える。

その一方で、粒界・表面など界面の精力的研究からは、界面起源の物性発現機構が明らかにされ、また界面近傍では材料のバルク状態や特性から大きく逸脱した状態を熱力学的に安定し獲得することが明らかになりつつあり、界面の積極利用を通じた新しい材料設計が試みられつつある。

2. 研究の目的

本申請課題の目的は、熱力学的に安定な結晶構造中に、異相界面とも言えるナノ界面を内包した結晶構造を有する層状熱電変換材料を例として採りあげ、面欠陥と点欠陥に特に注目し、熱電変換特性電子的特性や熱気特性の起源を明らかにすることで物性面からの新規熱電変換材料設計指針を可能にすることである。

3. 研究の方法

本研究では、広く実験的・理論的研究がなされている代表的な層状酸化物熱電変換材料を採りあげ、計算材料科学的手法を駆使した。それにより、熱電変換特性を決定する特性、特に理解が乏しい熱的特性により強い焦点を当てることで特性の起源を明らかにし、更なる熱電変換特性の向上の立案を可能にした。それとともに、既知の材料が存在する熱力学的要因を明らかにすることを通じて新規材料が安定に存在し、安価に合成可能であることを示した。

電子的特性については第一原理計算法を用い、ゼーベック係数や電子伝導度の絶対値の理論予測を行うよりも、それら物性値の起源となる電子状態の変化により注目することで、電子的特性が熱的特性向上により損なわれないか或は更なる向上の見込みがあるかを定量評価した。第一原理計算は PAW 法

を用いた擬ポテンシャル法を用い、交換相関相互作用項には一般化勾配近似及びハバードモデルに基づいた GGA+U 法、加えて d 電子の取り扱いをさらに検討するために HSE06 法などの各種 hybrid functional 法を併せて補助的に用いた。

熱的特性、特に熱伝導度の評価には研究代表者が過去に独自開発した摂動分子動力学法を用いた。この方法は研究代表者らが既報の古典力場と併せる形で作成した古典力場を用いて、運動方程式を摂動分だけ修正して分子動力学法計算を行うことで、熱伝導度を既存の Green-Kubo の式のように自己相関関数の形ではなくアンサンブル平均の形で評価することを可能にする。これにより実空間にて結晶構造中のどの部分にて熱流束が生じているのかを曖昧さなく定量評価が可能になる。併せて格子動力学法によりフォノンバンド構造や比熱を計算することで平均自由工程の評価も可能になる。本研究では、摂動分子動力学法で用いた古典力場を用いた格子動力学計算と、電子特性評価に用いた第一原理計算と合わせた格子動力学計算を併用することで、熱伝導支配機構解明に取り組んだ。

既知の層状構造酸化物が存在する理由や計算機実験・解析により提案された新規材料が現実的に存在し得るかを明確にするため、第一原理計算と合わせた格子動力学計算により自由エネルギー評価を行った。相分解前後、構造相変態前後の状態についても自由エネルギー評価を行うことで、層状構造の安定化の為に必要条件を明らかにした。

対象とした層状酸化物熱電材料の中心となる既知の材料系として、Terasaki らにより見出された Na_xCoO_2 系、Funahashi らにより見出された $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ 系、Harada らにより見出された $\text{Ti}_n\text{O}_{2n-1}$ 系材料を採りあげた。 Na_xCoO_2 は Na 層と CoO_2 層が交互に積層した構造を有し、 $x \sim 2/3$ 程度で熱電特性が最適となることが知られている。そこで、モデルを単純化するために $x = 0.5$ 及び他の x の値のモデルを作成し、 $x = 1.0$ のモデルと併せて用いることで、Na 層に導入される原子空孔と層界面の相互作用による物性への影響を明らかにした。加えて Na を他の様々な陽イオンに置換させることで物性への影響や熱力学安定性の系統的評価を行った。 $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ は岩塩型 Ca_2CoO_3 層と CoO_2 層が交互に積層しているが、格子ミスフィットの影響でモデル化が難しい。本研究では Rébora により提案された有理数モデルを用いた。加えて Ca を他の様々な陽イオンに置換させたり意図的に質量を変えることで物性への影響の系統的評価を行った。最後に $\text{Ti}_n\text{O}_{2n-1}$ 系材料では TiO_2 構造にシア界面が導入されることで、シア界面近傍の Ti が +3 価となり Ti_2O_3 層を形成し TiO_2 層と交互に積層する構造を有する。本研究ではシア界面近傍に点欠陥が存在する Magnéli 構造と本研究で見出した点欠陥が存在しない

い coherent モデルの双方を用い、 n の値、すなわち Ti_2O_3 層に対する TiO_2 層の厚みを様々に変えて、物性の起源の定量評価を通じた説明を行い、新規材料の可能性を定量評価した。

4. 研究成果

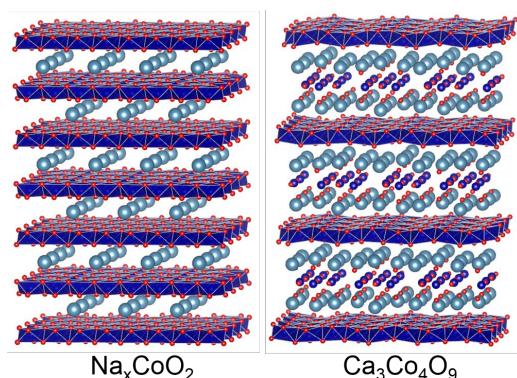


図1 Na_xCoO_2 及び $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ の結晶構造

Na_xCoO_2 を基にした A_xCoO_2 の熱伝導評価を行った結果、A 層に原子空孔が存在する場合もしない場合もいずれも図1に CoO_2 層内熱伝導が全体の熱伝導を支配しており、いずれの A の場合でも原子空孔が存在することによりその傾向が劇的に大きくなることが分かった。しかしながら、A の種類が変化するとその程度は大きく変わり、様々な潜在的要因を個別に計算機実験にて影響を評価した結果、A のイオン半径により大きく変化する層間距離が原子空孔による熱伝導度の低下の度合いを大きく変えており、A のイオン半径が大きいほど熱伝導の2次元性が増加し原子空孔の存在による熱伝導度低下機構が非効率になる一方で A のイオン半径が小さいほど相関相互作用が増加し熱伝導度が原子空孔により大きく抑制され、熱電変換効率の向上につながっていることを明らかにした。更に、同程度のイオン半径を有するがゆえにそう垂直方向の格子定数がほぼ同じになる Na^+ と Ca^{2+} の場合を比較した結果、空孔量よりも価数の増加によるクーロン相互作用を介した相関相互作用の局所的増加が CoO_2 層の原子配置にひずみをもたらし、熱伝導度を低下させることが明らかとなった。一方で A 層はイオン性が非常に強いので電子状態の変化には大きな変化が見られず、熱伝導度の低下が熱電変換特性向上につながっていることが分かった。これらのことから、この系の層状熱電変換材料では、層間での原子結合を2次元的なものから3次元的なものに少し近づけることで層間相互作用を増加させることで、隣接層に導入した点欠陥が熱伝導層での熱伝導抑制を実現させ、熱電変換特性向上につながるという新規材料設計指針が物性面から示された。

一方、この A_xCoO_2 の構造安定性を評価するため構成元素の2元酸化物と3次元構造と合わせて自由エネルギー評価を行った結果、層間距離が大きくなると共に層状安定化する

が、層間距離が小さくなると共に不安定化し、3次元構造を取ることが明らかとなった。相安定性(相分解)に関しては主として2元酸化物の安定性により決まっていることが明らかとなった。また後述する $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ 系とは異なり、層間相互作用の安定性への影響は比較的小さいことが分かった。

これらのことから、更なる熱電変換特性向上のための新規材料設計の為に、層間距離をある程度大きくなるようにすることで構造安定性を確保しながら、物性面からは層間距離が出来るだけ小さい方が良いことが明らかとなった。従って、点欠陥種の変更や不純物元素置換などがこの材料系では熱電変換効率向上に良いことが明らかとなった。実際、A 層に不純物を部分的に置換固溶させた際の計算機実験による熱伝導への影響の定量評価によれば、A 層の寄与は元来小さいので大勢には影響ないものの、隣接する CoO_2 層の熱伝導度に大きく影響し、更なる熱伝導抑制、そして熱電特性向上に繋がること示された。

図1に示すように CoO_2 層を有する点では Na_xCoO_2 と類似するものの隣接層が岩塩構造層である $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ では、両層の結晶格子の違い、すなわち一方が三角格子であるに対し他方が四角格子である事に加え、両層独立の最適格子定数の違いから、界面にてミスフィットを生じ、図に示すように岩塩層も CoO_2 層もわずかに歪む。従来はこの静的構造におけるミスフィットが低熱伝導そして優れた熱電特性の起源とされてきたが、それでは説明できない現象もあることから、本研究では熱伝導機構解明に取り組んだ。

面内方向の熱伝導に関して図1からも見て取れるように、 CoO_2 層の断面積は岩塩層に比べて非常に小さい。それにもかかわらず、この材料系においては CoO_2 層が全体の熱伝導に対して支配的であり、この CoO_2 層の熱伝導を制御することが全体の熱伝導そして熱電特性を向上させ得ることが明らかとなった。

様々な計算機実験から、この材料系の枠内では必ずしもミスフィットの程度あるいは構造のひずみの程度が大きいほど熱伝導が抑制されるわけではなく、ミスフィットが小さい場合は両層での原子振動がより大きくカップリングを起こし、それにより熱伝導度を上げるが、ミスフィットが $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ 程度にまで大きくなることで層間相互作用を通じた原子振動の動的干渉が生じ、熱伝導抑制が実現していることが明らかとなった。電子的特性は CoO_2 層内の強い共有結合に加え、岩塩層と CoO_2 層が電子状態的に大きく異なることから、 CoO_2 層が主として電子特性を決定していることが分かった。

更に計算機実験を進めた結果、物性面からは、イオン半径が小さくそして重いイオンを置換させることが熱伝導度の更なる抑制に繋がること示された。この点欠陥制御と言

う観点からは A_xCoO_2 に比べてこの材料系では自由度が大きいことから、様々な可能性がある。本研究では $Ca_3Co_4O_9$ の岩塩層に不純物を置換固溶させた場合に、隣接層である CoO_2 層の熱伝導、そして全体の熱伝導が抑制されることが計算により実証された。

熱力学的観点からこの $Ca_3Co_4O_9$ の層状構造が実現されているメカニズムを検証した。その結果、 Ca_xCoO_2 と比べてより強い層間相互作用がこのミスフィット層状構造を実現し、かつ相分解や3次元構造に対して熱力学的に安定に存在せしめていることが明らかとなった。

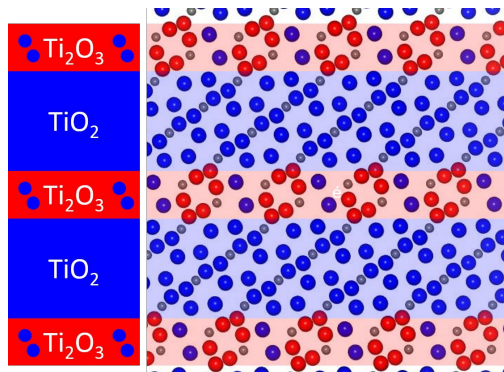


図2 Ti_nO_{2n-1} の結晶構造

上述の A_xCoO_2 系や $Ca_3Co_4O_9$ 系では電子伝導層と熱伝導層が同一の層であったのに対し、図2に示す Ti_nO_{2n-1} 系中での電子特性と熱的特性は、異なる層が担っていることが電子状態計算と熱伝導計算により明らかとなった。 Ti_2O_3 層中ではTiイオンの形式電荷が+3であるため、Ti-3dを主成分とした軌道がフェルミ準位付近では支配的となりゼーベック係数と電子伝導度を決定する一方で、より結晶構造にひずみが少なく対称性の良い TiO_2 層が全体の熱伝導を支配することが明らかとなった。

また赤色と青色で区別して図2に併せて示している酸素イオンの配位欠損が点欠陥となり、層界面との相互作用によりマクロな層構造とは大きく異なるナノ層状構造特有の電子特性や熱特性の発現を可能にしていることも明らかとなった。すなわち、 Ti_2O_3 層中の酸素の配位欠損はフェルミレベル近傍に欠損に起因する新たな順位を形成することで電子特性修正に寄与し、同時に酸素の配位欠損は Ti_2O_3 面内の熱伝導を抑制する役目を果たす。その一方で、 Ti_2O_3 層内の配位欠損は TiO_2 層にとっては正常配位であるため、層垂直方向への熱伝導を促し材料中での均一熱伝導を可能にすると考えられる。更に、 Ti_2O_3 層と TiO_2 層は電子特性と言う観点からは極めて異なる層であるが、フォノン状態密度から判断すれば、両層は熱的特性と言う観点からは非常に似通っている層である。このこともこの材料系が前述の材料系と大きく異なる点である。

このようにこの層状酸化物材料系にて熱電特性を決定する電子特性と熱的特性の発

現機構が明らかとなったため、更なる熱電特性向上のための材料設計が可能になった。一般に不純物添加を行えば熱伝導を抑制すると共に電子伝導も阻害するため熱電変換材料としてはこの単純な方策は必ずしも有効ではないが、この材料系では電子特性と熱特性を別の層が担いながら大きな層間相互作用によりナノ界面特有の特性が発現しているため、前述の材料系とは異なり、伝導層への直接不純物添加が有効である可能性がある。

そこで本研究では初めに古典力場を使い、添加不純物が Ti_2O_3 層と TiO_2 層のいずれにて安定化されるかの評価を行った。その中で TiO_2 層に安定に存在し、電子特性には影響せず TiO_2 層が支配する熱伝導のみを抑制する元素を選び予備評価を行った。その結果、単純な TiO_2 層でのTi置換元素の添加により、熱電変換性能指数を向上させることが出来ることを確認した。

本研究で用いた古典力場は結晶構造の微小な変化や電子状態の変化に追従できないため、様々な欠陥反応式を考慮した上で、更に第一原理計算により添加不純物の安定化位置並びに置換エネルギーの評価を行った。層状構造での計算に先立ち、ルチル相 TiO_2 とコランダム相 Ti_2O_3 への置換固溶の定量評価を行ったが、必ずしもこれらバルク相に見られた傾向と層状構造にて見られた傾向は一致しなかった。それはナノ界面を層状構造は有するため、原子間距離がバルク相中のものから変化し、それが異なる現象を現出せしめていることが分かった。結果として様々な添加物候補がリストアップされたが、ルチル相 TiO_2 バルク試料中でも安定に存在し得ることが知られている複合欠陥が層状構造中でも熱力学的に安定に存在し得ることが確認され、 TiO_2 層支配の全熱伝導度を半分程度に抑制することで熱電性能指数を2倍程度向上させ得ることを実証した。

以上、3種のナノ界面を内包する層状酸化物熱電変換材料の特性発現機構解明並びにそれに基づいた物性面からの材料設計指針の策定を行った。その結果、原子の並びである層状構造だけでなく、界面を跨いだ原子間結合を介した層間相互作用が電子特性や熱特性に与える影響を正確に理解した上で、独立ではない各層支配の特性向上を図ることが重要であり、そのためには適切な点欠陥導入が有効であり、この機構が働くためには結合の面から、或は物性の面から層状構造材料が2次元性と3次元性との中間状態であることが不可欠であることが明らかにされた。

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 6件)

(1) D. Kanayama, A. Yumura, S. Fujii, T. Yokoi, Y. Miyauchi, and M. Yoshiya, "Suppression of Thermal Conduction without Deteriorating

Electronic Properties of Magnéli Phase Titanium Oxides by Doping Impurities", AMTC Lett., 査読有, 4 (2014) 118-119. <http://www.congre.co.jp/amtc4/en/papers.html>

(2) S. Fujii, A. Yumura, Y. Miyauchi, M. Tada, **M. Yoshiya**, H. Yasuda, "Analysis of Relationship between Dynamic Interlayer Interactions and Phonon Thermal Conduction in $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ ", AMTC Lett., 査読有, 4 (2014) 112-113. <http://www.congre.co.jp/amtc4/en/papers.html>

(3) S. Fujii, **M. Yoshiya**, A. Yumura, Y. Miyauchi, M. Tada and H. Yasuda, "Impact of dynamic interlayer interactions on thermal conductivity of $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ ", J. Electron. Mater., 査読有, 43 [6] (2014) 1905-1915 DOI: 10.1007/s11664-013-2902-7.

(4) A. Yumura, M. Tada, K. Nakano, **M. Yoshiya**, H. Yasuda, "Stability of layered alkali-metal oxides $\text{A}_{0.5}\text{CoO}_2$ and $\text{A}_{0.5}\text{FeO}_2$ (A=Li, Na, K, Mg, Ca, Sr)", AMTC Lett., 査読有, 3 (2012) 136-137. <http://www.congre.co.jp/amtc4/en/papers03.html>

(5) M. Tada, Y. Miyauchi, **M. Yoshiya**, and H. Yasuda, "Effect of Coulombic Interaction between Layers on Lattice Thermal Conductivity in Na_xCoO_2 ", AMTC Lett., 査読有, 3 (2012) 236-237. <http://www.congre.co.jp/amtc4/en/papers03.html>

(6) Y. Miyauchi, M. Tada, **M. Yoshiya**, S. Harada, K. Tanaka, H. Yasuda, H. Inui "Anisotropy of Lattice Thermal Conduction in TiO_{2-x} with High Density of Planar Defects by Atomistic Simulations", AMTC Lett., 査読有, 3 (2012) 242-243. <http://www.congre.co.jp/amtc4/en/papers03.html> [学会発表] (計39件)

(1)招待講演: **吉矢真人**, 藤井進, 金山大祐, 宮内洋平, 多田昌浩, 柳樂知也, 安田秀幸, 「層状酸化物熱電材料における2.5次元性が及ぼす熱伝導への影響」, 日本化学会・中長期企画講演シンポジウム「低次元ナノ熱電変換材料の新潮流」, 2015/3/26-29, 日本大学船橋キャンパス(千葉県船橋市).

(2)招待講演: **吉矢真人**, 藤井進, 宮内洋平, 多田昌浩, 柳樂知也, 安田秀幸, 「摂動分子動力学法による複雑結晶構造酸化物の格子熱伝導の数値解析」, 応用物理学会・特別シンポジウム『フォノンエンジニアリング』, 3/11-14/2015, 東海大学湘南キャンパス(神奈川県平塚市).

(3) **吉矢真人**, 宮内洋平, 金山大祐, 藤井進, 横井達矢, 多田昌浩, 柳樂知也, 安田秀幸, 「面欠陥内包Magnéli相 $\text{Ti}_n\text{O}_{2-n}$ の熱伝導機構の解明」, 粉体粉末冶金学会平成26年度秋季大会, 2014/10/29-31, 大阪大学コンベンションセンター(大阪府吹田市).

(4)藤井進, 祐村渥人, 宮内洋平, 多田昌浩, **吉矢真人**, 安田秀幸, 「原子レベル計算による層状Co酸化物 $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ のフォノン熱伝導機構解明の試み」, 粉体粉末冶金学会平成26年度秋季大会, 2014/10/29-31, 大阪大学コン

ベンションセンター(大阪府吹田市).

(5)金山大祐, 藤井進, 祐村渥人, 横井達矢, 宮内洋平, **吉矢真人**, 「熱電変換材料 $\text{Ti}_n\text{O}_{2-n-1}$ への不純物添加による変換性能向上の試み」, 粉体粉末冶金学会平成26年度秋季大会, 2014/10/29-31, 大阪大学コンベンションセンター(大阪府吹田市).

(6)**吉矢真人**, 金山大祐, 宮内洋平, 藤井進, 柳樂知也, 安田秀幸, 「Magnéli相 $\text{Ti}_n\text{O}_{2-n-1}$ の層状構造と熱伝導特性の相関及び向上の試み」, 第11回日本熱電学会学術講演会(TSJ2014), 2014/09/29-30, (独)物質・材料研究機構・千現地区(茨城県つくば市).

(7)藤井進, 祐村渥人, 宮内洋平, 多田昌浩, **吉矢真人**, 安田秀幸, 「原子レベル計算を用いたバルクナノ界面を有する層状Co酸化物のフォノン熱伝導メカニズムの解析」, 第11回日本熱電学会学術講演会(TSJ2014), 2014/09/29-30, (独)物質・材料研究機構・千現地区(茨城県つくば市).

(8)金山大祐, 藤井進, 祐村渥人, 横井達矢, 宮内洋平, **吉矢真人**, 「Ti-O系熱電変換材料における不純物添加による変換性能向上への試み」, 日本金属学会2014年秋季講演大会, 2014/09/24-26, 名古屋大学(愛知県名古屋市).

(9)藤井進, 祐村渥人, 宮内洋平, 多田昌浩, 吉矢真人, 安田秀幸, 「層状Co酸化物におけるバルクナノ界面が格子熱伝導に及ぼす影響」, 日本金属学会2014年秋季講演大会, 2014/09/24-26, 名古屋大学(愛知県名古屋市).

(10)招待講演: **吉矢真人**, 藤井進, 祐村渥人, 宮内洋平, 多田昌浩, 金山大祐, 横井達矢, 柳樂知也, 安田秀幸, 「層状酸化物熱電変換材料の熱伝導及び構造安定性へ与える層間相互作用の影響」, 日本セラミックス協会第27回秋季シンポジウム, 2014/09/09-11, 鹿児島大学(鹿児島県鹿児島市).

(11)S. Fujii, A. Yumura, Y. Miyauchi, M. Tada, **M. Yoshiya**, H. Yasuda, "Relationship between Two-Dimensional Thermal Conduction and Dynamic Interlayer Interactions in a Layered Cobalt Oxide $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ ", International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials 2014 (IUMRS-ICEM 2014), June/10-14/2014, TWTC Nangang Exhibition Hall, Taipei, Taiwan.

(12)**吉矢真人**, 藤井進, 多田昌浩, 宮内洋平, 安田秀幸, 「摂動分子動力学法による層状酸化物熱電材料における熱伝導機構の解明」, 第19回分子動力学シンポジウム, 2014/05/16, 福岡大学(福岡県福岡市).

(13)藤井進, 祐村渥人, 宮内洋平, 多田昌浩, **吉矢真人**, 安田秀幸, 「層状酸化物熱電変換材料 $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ の格子熱伝導と層間相互作用の相関評価」, 日本金属学会2014年春期講演大会, 2014/03/21-23, 東京工業大学(東京都目黒区).

(14)招待講演: **Masato Yoshiya**, "Impact of Interlayer Interaction on Thermal Conduction in Layered Thermoelectric Oxides", The 38th

International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites (ICACC2014), Jan/26-31/2014, Hilton Daytona Beach Resort and Ocean Center, Daytona Beach, Florida, USA.

(15)藤井進, 祐村渥人, 宮内洋平, 多田昌浩, **吉矢真人**, 安田秀幸, 「層状コバルト酸化物 $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ における層間相互作用とフォノン熱伝導の関連性評価」, 第23回日本MRS年次大会, 2013/12/9-11, 横浜市開港記念館(神奈川県横浜市).

(16)祐村渥人, 藤井進, **吉矢真人**, 柳楽知也, 安田秀幸, 「第一原理計算による2.5次元層状酸化物の構造安定性と物性の系統的解析」, 第23回日本MRS年次大会, 2013/12/9-11, 横浜市開港記念館(神奈川県横浜市).

(17)**吉矢真人**, 宮内洋平, 金山大祐, 横井達也, 原田俊太, 田中克志, 乾晴行, 安田秀幸, 「n型熱電変換材料 TiO_{2-x} における面欠陥上の結合欠損が熱的・電子的特性に及ぼす影響」, 日本金属学会2013年秋季大会, 2013/09/17-19, 金沢大学(石川県金沢市).

(18)祐村渥人, 藤井進, **吉矢真人**, 柳楽知也, 安田秀幸, 「2.5-D層状酸化物における構造安定性と材料特性の定量評価」, 日本金属学会2013年秋季大会, 2013/09/17-19, 金沢大学(石川県金沢市).

(19)**M. Yoshiya**, Y. Miyauchi, T. Yokoi, S. Harada, K. Tanaka, H. Yasuda, H. Inui, "Strategy to improve thermoelectric properties Magnéli phase TiO_{2-x} based on computational analyses", The 32nd International Conference on Thermoelectrics (ICT2013), June/30-July/4/2013, Kobe International Conference Center, Kobe, Japan.

(20)A. Yumura, **M. Yoshiya**, H. Yasuda, T. Nagira, S. Fujii, "Systematic study on the stability of layered cobalt oxides A_xCoO_2 ", The 32nd International Conference on Thermoelectrics (ICT2013), June/30-July/4/2013, Kobe International Conference Center, Kobe, Japan.

(21) S. Fujii, A. Yumura, Y. Miyauchi, M. Tada, **M. Yoshiya**, H. Yasuda, "Effect of dynamic interlayer interaction on phonon thermal conduction in a layered cobalt oxide $\text{Ca}_3\text{Co}_4\text{O}_9$ ", The 32nd International Conference on Thermoelectrics (ICT2013), June/30-July/4/2013, Kobe International Conference Center, Kobe, Japan.

(22)**招待講演**: **M. Yoshiya**, Y. Miyauchi, M. Tada, S. Fujii, H. Yasuda, "Heat Transport in Nano-Layered Oxides with Homo- or Hetero Interfaces", 10th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology, June/02-07/2013, Hotel Del Coronado, San diego, USA.

(23)A. Yumura, **M. Yoshiya**, H. Yasuda, T. Nagira, S. Fujii "Stability of a Class of 2.5-Dimensional Oxides and Their Properties", 10th Pacific Rim Conference on Ceramic and

Glass Technology, June/02-07/2013, Hotel Del Coronado, San diego, USA.

(24)**M. Yoshiya**, Y. Miyauchi, T. Yokoi, S. Harada, K. Tanaka, H. Inui, H. Yasuda, "Possible Origins of Remarkable Thermoelectric Properties of Defect-Containing Magnéli Phase $\text{Ti}_n\text{O}_{2n-1}$ ", 16th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-16), Oct./28-30/2013, Jihua Resort & Convention Center VIP building, Beijing, China.

(25)祐村渥人, **吉矢真人**, 安田秀幸, 「バルクナノ界面を有する層状酸化物 A_xMO_2 の構造安定性の定量評価」, 日本金属学会2013年春季大会, 2013/03/27-29, 東京理科大学神楽坂キャンパス(東京都新宿区).

(26)藤井進, 祐村渥人, 宮内洋平, 多田昌浩, **吉矢真人**, 安田秀幸, 「層状Co酸化物熱電材料の格子熱伝導度と微視的構造の相関評価」, 日本金属学会2013年春季大会, 2013/03/27-29, 東京理科大学神楽坂キャンパス(東京都新宿区).

(27)**基調講演**: **吉矢真人**, 「熱伝導度の理論の狭間にて: 酸化物を例にとった熱伝導支配因子解明の試み」, 日本金属学会2013年春季大会, 2013/03/27-29, 東京理科大学神楽坂キャンパス(東京都新宿区).

(28)**招待講演**: **M. Yoshiya**, M. Tada, Y. Miyauchi, S. Fujii, H. Yasuda, "Mechanisms behind Thermal Conduction in Nanolayered Thermoelectric Oxides", Asian Consortium for Computational Materials Science - Working Group Meeting on Computational Design of Materials for Energy Conversion and Storage (ACCMS-WGM 2013), Jan./16-18/2013, National Taiwan University of Science and Technology, Taipei, Taiwan.

(29)Y. Miyauchi, M. Tada, **M. Yoshiya**, S. Harada, K. Tanaka, H. Yasuda, H. Inui, "Mechanisms behind low lattice thermal conduction of high density of planar defects containing TiO_{2-x} by atomistic simulations" International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials 2012 (IUMRS-ICEM2012), Sep/23-28/2012, Pacifico Yokohama, Yokohama, Japan.

(30)宮内洋平, 多田昌浩, **吉矢真人**, 原田俊太, 田中克志, 安田秀幸, 乾晴行, 「原子レベル計算を用いた $\text{TiO}_2/\text{Ti}_2\text{O}_3$ 積層構造を有する TiO_{2-x} の面欠陥近傍における格子熱伝導解析」, 第九回日本熱電学会学術講演会(TSJ2012), 2012/8/27-28, 東京工業大学東工大蔵前会館(東京都目黒区).

他9件

6. 研究組織

(1)研究代表者

吉矢 真人 (Masato Yoshiya)

大阪大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 00399601