

ホイスラー合金  $\text{Fe}_2\text{VAI}$  における格子熱伝導度を抑制するフォノン分枝の不純物依存性  
Impurity Dependence of Phonon Branches Connected with Thermal Insulation  
in a Heusler Alloy System  $\text{Fe}_2\text{VAI}$

JASRI<sup>1</sup>, 茨大院理工<sup>2</sup>, 名工大院<sup>3</sup>

○筒井 智嗣<sup>1,2</sup>, 木村 耕治<sup>3</sup>, 宮崎 秀俊<sup>3</sup>, 西野 洋一<sup>3</sup>, 林 好一<sup>3</sup>

JASRI<sup>1</sup>, Ibaraki Univ.<sup>2</sup>, Nagoya Inst. Tech.<sup>3</sup>

◎Satoshi Tsutsui<sup>1,2</sup>, Koji Kimura<sup>3</sup>, Hidetoshi Miyazaki<sup>3</sup>, Yoichi Nishino<sup>3</sup>, Koichi Hayashi<sup>3</sup>

E-mail: satoshi@spring8.or.jp

熱電材料はゼーベック係数と電気伝導度、熱伝導度を用いた性能指数でその機能が評価できることが知られている。電子の担う電気伝導度と熱伝導度が Wiedeman-Frantz 則に従う仮定の下で[1]、格子熱伝導度の抑制は性能指数の向上という観点で重要とされる。ホイスラー合金  $\text{Fe}_2\text{VAI}$  はユビキタスな元素で構成され、熱電材料として期待される母物質として知られる。この  $\text{Fe}_2\text{VAI}$  では、元素置換において劇的に格子熱伝導度が低下することが知られているが[2-4]、その機構については明らかにされてこなかった。近年、我々は V を Ta および Ti で置換した  $\text{Fe}_2\text{VAI}$  の単結晶試料の作製に成功し、そのフォノン分散から熱伝導抑制機構に関する知見を得たので報告する[3, 4]。

我々は  $\text{Fe}_2\text{VAI}$  の V サイトを Ta もしくは Ti に置換した単結晶試料において、放射光 X 線を用いたフォノン分散を調べられる X 線非弾性散乱を SPring-8 の BL35XU で行った。Ta および Ti における格子熱伝導度の抑制は数%という置換量で 10%オーダーの減少を示すという観点では、両者の振る舞いは似通っている。しかしながら、X 線非弾性散乱で得られたフォノン分散は Ta と Ti の置換で大きく異なることが明らかとなった。V を Ta 置換した  $\text{Fe}_2\text{VAI}$  では母物質である  $\text{Fe}_2\text{VAI}$  のフォノン分散に加えて置換した Ta 元素由来のフォノン分枝が新たに観測された[3]。一方、V を Ti で置換した  $\text{Fe}_2\text{VAI}$  ではゾーン境界 X 点に向かってあるフォノン分枝でエネルギーが減少する振舞いが観測された[4]。Ta は V の同族元素であり、Ti は V の同周期の元素であることを考慮すると、置換元素によるフォノン分枝の違いは、置換元素の質量数の違いだけではなく、電子構造にも起因していることが予測される。本研究では、光電子分光も行って、元素置換による電子状態の変化も確認することができた。講演では、フォノン分散の置換効果と置換元素によるフォノン分散と電子状態の変化との相関について議論する。

[1] R. Franz and G. Wiedemann, *Ann. Phys.* **165** (1853), 497.

[2] Y. Nishino, S. Deguchi, U. Mizutani, *Phys. Rev. B* **74** (2006) 115115.

[3] K. Kimura *et al.*, *Phys. Rev. B* **101** (2020), 024302.

[4] K. Kimura *et al.*, *Acta Mater.* **281** (2024), 120439.