



## Ni 基ハーフホイスラー化合物の局所結晶構造の解明

宮崎 秀俊, 金高 源士  
名古屋工業大学

キーワード：キーワード：硬 X 線 XAFS, ハーフホイスラー化合物, 電子状態

### 1. 背景と研究目的

Ni 基ハーフホイスラー化合物は、600 K 以上で高い熱電特性を示すため次世代熱電変換材料として注目を集めている。ハーフホイスラー化合物は、C1b 構造を有するが、空孔サイトに侵入型の原子欠陥が存在していることがこれまでの X 線回折測定により示唆されており[1]、X 線吸収端微細構造(XAFS)測定により、原子欠陥周辺の局所構造に歪があることが分かっている[2]。この原子欠陥および歪の存在が Ni 基ハーフホイスラー化合物における高い熱電変換特性の起源と考えられているが、いまだ明確な証拠は存在しない。そこで、本研究では、様々な Ni 基ハーフホイスラー化合物において、XAFS 測定を用いた局所構造評価を行い、Ni 基ハーフホイスラー化合物の高い熱電変換特性の起源の解明を試みた。

### 2. 実験内容

アーク溶解法によって作製したハーフホイスラー化合物 ZrNiSn、TiNiSn、HfNiSn について、あいちシンクロトロン光センターBL5S1 において Ni-K 吸収端における硬 X 線 XAFS 測定を室温で透過法によって行った。また、エネルギー校正用の参照試料として Ni 薄片も同条件で測定を行った。

### 3. 結果および考察

Fig. 1 に本実験で得られたハーフホイスラー化合物 ZrNiSn、TiNiSn、HfNiSn の Ni-K 吸収端における硬 X 線 XAFS 測定の結果を示す。吸収端におけるプレッジピークは ZrNiSn および HfNiSn において顕著に観測されており、Ni 周辺の電子状態が不安定であることを示唆している。この結果は、ZrNiSn および HfNiSn は TiNiSn と比較して Ni 周辺原子との結合が弱いことを示しており、Ni 周辺の格子歪の発生のしやすさに違いがあることを示唆している。今後は、第一原理計算により原子欠陥が存在する際の安定な結晶構造を考慮し、解析を進めることにより、XAFS によるハーフホイスラー化合物の局所構造評価を更に進める。

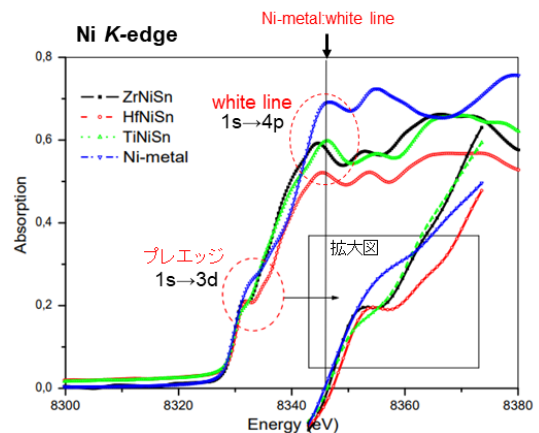


Fig. 1 ハーフホイスラー化合物 ZrNiSn、TiNiSn、HfNiSn の Ni-K 吸収端における硬 X 線 XAFS 測定の結果

### 4. 参考文献

1. H. Miyazaki *et al.*, Materials Transactions **55**, 1209-1214 (2014).
2. H. Miyazaki *et al.*, Scientific Reports **10**, 19820 (2020).