

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2019年度採択研究代表者

2022年度
年次報告書

桂 ゆかり

物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門
主任研究員

新規結晶の大規模探索に基づく革新的機能材料の開発

主たる共同研究者:

秋山 正和 (富山大学 学術研究部理学系 准教授)
菅原 徹 (京都工芸繊維大学 材料化学系 教授)
藤岡 正弥 (北海道大学 電子科学研究所 助教)
森戸 春彦 (東北大学 金属材料研究所 准教授)

研究成果の概要

桂グループでは論文データ収集システム *Starrydata* に搭載する自動データ抽出アプリ *StarryDigitizer* を開発し、物性概念の構造化を進めた。秋山グループと共同で結晶構造のドロネー四面体分割データの解析から四面体の形状分布と化学結合の関係を見出し、新しい無機化学の概念として論文執筆に取り組んだ。論文から収集した大規模実験データとドロネー四面体の解析と第一原理計算から、新規熱電材料候補の選定を行った。結晶構造シミュレータのデータベース連携と、周期性手動判定機能、複数原子の一括操作機能を実装して、企業連携を開始した。

森戸グループでは、新物質探索マップに基づき遷移金属と三元系化合物において 1269 試料を合成し、NiAs 型構造 Sb 系合金や Co_{1.75}Ge 型構造磁性合金などの新規固溶体系化合物を発見した。NaZn₁₃ 型構造の新規物質である Sr(Zn/Cu)₁₃ 合金を発見し、異常分散 X 線回折測定により結晶構造を明らかにした。大場チーム田村グループとの共同研究を進め、Co-Al-Ge 三元系において機械学習型状態図を作成し、新規相の生成組成領域と結晶構造を明らかにした。

藤岡グループでは、ZrTe₃ が Ag イオンの導入により擬アモルファス状態から一次元八面体状の結晶構造に変化することを明らかにした。NaAlB₁₄ からの Na イオン除去に伴い開発した高圧拡散制御によって多結晶 NaAlB₁₄ からほぼ完全に Na を除去した AlB₁₄ の純安定物質の合成に成功した。高圧下でのイオン拡散法を用いることで、緻密な焼結状態を保持したまま BaTiO₃ を水素化し、室温で $ZT = 0.1$ 程度の特性が見積もられた。

菅原グループでは、電極-半導体の界面抵抗を高速かつ精密に測定する拡張 TLM 装置の開発により、熱電半導体(Bi-Te)/金属メタライズ(Ti/Ag)間の接触抵抗値の高速精密測定に成功した。この熱電半導体に対して反応性の低いバリア金属(Cr, V, Ti)を選定し、従来材料(Ni)を上回る安定性を見出した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) M. Fujioka, M. Jeem, K. Sato, M. Tanaka, K. Morita, T. Shibuya, K. Takahashi, S. Iwasaki, A. Miura, M. Nagao, S. Demura, H. Sakata, M. Ono, H. Kaiju, J. Nishii, "Intercalation on Transition Metal Trichalcogenides via a Quasi-Amorphous Phase with 1D Order", *Advanced Functional Materials* **33**, 2208702 (2022).
- 2) M. Tanaka, N. Kataoka, H. Kobayashi, M. Fujioka, M. Oda, A. Yamamoto, K. Terashima, J. Nishii, H. Tanaka, T. Yokoya, "Modification of the synthesis of layered titanium chloride nitride", *Materials Research Bulletin* **153**, 111896 (2022).
- 3) H. Morito, K. Futami, K. Fujiwara, "Effect of Na-Sn Flux on the Growth of Type I Na₈Si₄₆ Clathrate Crystals", *Crystals* **12**, 837 (2022).
- 4) R. Tamura, G. Deffrennes, K. Han, T. Abe, H. Morito, Y. Nakamura, M. Naito, R. Katsube, Y. Nose, K. Terayama, "Machine-Learning-Based phase diagram construction for high-throughput batch experiments", *Science and Technology of Advanced Materials: Methods* **2** [1], 153-161 (2022).
- 5) M. Fujioka, M. Hoshino, S. Iwasaki, H. Morito, M. Kumagai, Y. Katsura, K. Zagazusem, M. Ono, J. Nishii, "High-Pressure Diffusion Control: Na Extraction from NaAlB₁₄", *Chemistry of*

Materials **35**, 3008-3014 (2022).