

| | |
|--|---|
| 日本－タイーインドネシア 国際共同研究 「材料（マテリアルズ・インフォマティクス）」 2022 年度 年次報告書 | |
| 研究課題名（和文） | 原子層・トポロジカル物質における高性能熱電材料のデータ駆動型計算デザイン |
| 研究課題名（英文） | Data-driven computational design of high-performance thermoelectrics in atomic layers and topological materials |
| 日本側研究代表者氏名 | 石井 史之 |
| 所属・役職 | 金沢大学・ナノマテリアル 研究所・教授 |
| 研究期間 | 2022 年 4 月 1 日 ～ 2025 年 3 月 31 日 |

1. 日本側の研究実施体制

| 氏名 | 所属機関・部局・役職 | 役割 |
|-------|--------------------|---|
| 石井 史之 | 金沢大学・ナノマテリアル研究所・教授 | 研究統括と研究実施 ・ハイスループット計算コードの開発 とハイスループット計算 ・データベースの開発 |

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

ハイスループット計算を既存の層状物質の単層系について実施し、原子置換等により電子状態、輸送特性の変化について調べる。タイグループの実験を実施している薄膜材料について計算を実施し、共同研究を進める。

開発に参画している密度汎関数法に基づく第一原理計算パッケージ OpenMX (<http://www.openmx-square.org>) を用いたハイスループット計算システムと結果を蓄積するデータベースを Python+SQL で開発する。計算結果はそのままデータベースとして保存され、検索可能で、複数の計算結果でソートが可能とし、実験グループとの情報共有を密にし、デバイス作成までの到達可能性の高い物質系に焦点を絞り、計算データを蓄積する。ハイスループット計算の達成目標として3年間で計算する候補物質 5,000 中の 1/5 の 1,000 物質を目安とする。

3. 日本側研究チームの実施概要

ハイスループット計算を用いて高性能磁気熱電材料をデータ駆動により計算デザインするために、異常ホール効果、異常ネルンスト効果を効率的に高速に計算する法である局所ベリリー位相法の開発を行った。既存の異常ホール効果を計算する公開されたプログラムである Wannier90 に含まれる postw90 と比較して高速に計算することに成功した[Phys. Rev. B **107**, 024404 (2023)]。上述の手法を用いてハイスループット計算を実施するために、実験で発見されている安定な強磁性層状物質を中心に候補物質をリストアップした。具体的には CrI_3 , CrGeTe_3 , Fe_3GeTe_2 , VSe_2 のハロゲン化物とカルコゲン化物である。これらの物質の遷移金属を他の遷移金属(3d,4d,5d)に置き換えた単層の物質のハイスループット計算(構造最適化を含む)を実施した。我々の研究グループで開発に参画している密度汎関数法に基づく第一原理計算パッケージ OpenMX(<http://www.openmx-square.org>) を用いたハイスループット計算システムと結果を蓄積するデータベースを Python+SQL で開発し、上記のリストアップした単層強磁性体に適用した。ハイスループット計算のサンプル数として、達成目標として設定した 3 年間で計算する候補物質の 1/5 程度、約 1,000 物質の計算を実行した。

インドネシアのグループ(BRIN グループ)と日本グループが得意とする磁性材料に関する研究交流による共同研究がスタートしている。具体的には遷移金属ハライド物質である MBr_3 (M: 遷移金属)に大きな異常ネルンスト効果が期待できることが明らかになりつつある。

タイの実験グループとの共同研究としては、強磁性ハーフホイスラー化合物の異常ネルンスト効果について実験測定結果を、第一原理電子状態計算により解析する研究を実施した。理論計算によると、他の異常ネルンスト係数を示す物質と比べて 6 倍程度大きいことが明らかになっており、今後さらに実験と計算との比較を進め、論文としてまとめる予定である。また、国内の他のグループとの共同研究も開始した。これらの研究を、計画していた「既存の強磁性体の超薄膜のハイスループット計算」研究へと繋げる。バルク磁性体のキュリー温度の高い順に計算を行い、過去に他の理論グループと共同研究として実施した 1,400 物質 [Nature **581**, 53 (2020)]の中から、実存するキュリー温度が高い物質について、局所ベリリー位相法を用いて再計算しており、超薄膜計算に向けて準備をしている。クラーク数の高い鉄シリサイド化合物である、 Fe_2Si のバルク(六方晶)と月の隕石に含まれる Hapkeite 構造をモデル化した人工超格子の計算を実施し、バルクよりも高い異常ネルンスト効果を発見した [Jpn. J. Appl. Phys. **62**, SD1019 (2023)]。また、ファンデルワールス層状物質である MnBi_2Te_4 について、ゼーベック効果由来の巨大な異常ネルンスト効果を予言した [Appl. Phys. Express, 16 043003 (2023)]。