

2023 年度年次報告書

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

桂 ゆかり

物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター

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 (産業技術総合研究所 極限機能材料研究部門 主任研究員)

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 G では Starrydata Web システムの改良に取り組み、企業共同研究によって論文からのデータベース構築研究を推進した。ドロネー四面体分割に基づく結晶構造分類に基づき、第一原理計算によって高出力因子フェルミ面を持つ安定な半導体合金をリストアップして、試料合成と熱電特性測定を行った。結晶構造シミュレータの改良によって触媒表面シミュレーション機能を追加した。

秋山 G では、この結晶構造シミュレータの最終年度での公開に向けて、内部機能の改善、使用手順のドキュメント制作、富山大学内への Web サーバーの設置を行った。

森戸 G では、ハイスループット合成によってホイスラー合金 20 種類の合成に成功した。Fe₂TiSn 合金系において、機械学習型状態図システム AiPHAD を活用することによりホイスラー相の安定組成および安定温度領域を明らかにした。Mg 系の新規ダブルハーフホイスラー合金の合成に成功し、ZT=0.3 を得た。

藤岡 G では、桂 G により提案されたフルホイスラー熱電材料として、Fe₂TiSi のホイスラー相をバルク体として合成することに成功した。また、NaAlB₁₄ は機械学習から高い熱電特性を示すことが予測されており、Na を除去することで電子物性の調整を進めてきた。ここでは、多結晶体から Na の拡散除去が進行するメカニズムについて調査を行い、粒子間の良好な化学的結合を促す前処理と、Na 除去に伴う体積減少に応じて物理的な接触を担保する外部からの圧力印加の両者が重要であることを示した。

菅原 G では、本研究で得られる微小なサイズ(1~2mm 角程度)の新規物質から正確な熱電特性を測定するため、小型熱電変換デバイスの特性測定システムの改造に取り組んだ。だが今年度の測定では、発電特性の測定値にまだ大きなばらつきが観察され、チップの上下間にかかる温度差が安定していない可能性が示唆された。このため来年度での搭載を目標に、測定時間中にサンプルに常に等価な温度差を加える機構を設計した。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “93 at.% of Na extraction from a Na₂₄Si₁₃₆ single crystal via anisotropic ion diffusion control method”, Journal of Solid State Chemistry, vol.324, pp.124082-124082, 2023
- 2) “Effect of intergranular connectivity of NaAlB₁₄ on Na⁺ extraction”, Solid State Sciences, vol.144, pp.107308-107308, 2023
- 3) “Alkali Mono-Pnictides: A New Class of Photovoltaic Materials by Element Mutation”, PRX Energy, vol.2, No.4, pp.043002-043002, 2023