

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

2020 年度 実績報告書

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

§ 1. 研究成果の概要

本研究では今年度、独自の Materials Informatics ツール群を開発し、それらを使った大規模新物質探索実験に取り組んだ。機械学習によって作成した化合物探索マップを約 2000 試料の大規模合成実験や結晶成長フラックスの選定、デバイス用バリア金属の選定に活用した。大規模論文データの機械学習によって熱電特性傾向を解析し、電子ラボノートの開発によって実験室の高度データ管理を実現した。カゴ状構造を持つ熱電材料候補物質として、独自の合成技術とイオン制御技術を用いて Na 脱離 Si クラスレート単結晶と Na 脱離 NaAlB_4 の合成に成功した。また、新規 1 次元化合物 Ag_xZrTe_3 の合成に成功し、臨界温度 7.5 K の超伝導と熱電材料化に向けたキャリア量制御にも成功した。

§ 2. 研究実施体制

(1) 桂グループ

- ① 研究代表者: 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)
- ② 研究項目
 - ・マテリアルズ・インフォマティクスによる新物質候補の提案
 - ・結晶構造シミュレータの開発
 - ・ハイスループット合成による新物質探索
 - ・革新的材料候補の選定と検討
 - ・新規応用デバイスの創成

(2) 秋山グループ

- ① 主たる共同研究者: 秋山 正和 (明治大学 先端数理科学インスティテュート、特任准教授)
- ② 研究項目
 - ・四面体の分類に関する数理的研究
 - ・結晶構造シミュレータの開発に関して
 - ・等物性面の推定方法の研究

(3) 森戸グループ

- ① 主たる共同研究者: 森戸 春彦 (東北大学 金属材料研究所、准教授)
- ② 研究項目
 - ・固相反応法を用いた新規多元系化合物の探索
 - ・Na フラックス法を用いた新規物質探索

(4) 藤岡グループ

① 主たる共同研究者:藤岡 正弥 (北海道大学 電子科学研究所、助教)

② 研究項目

- ・高圧合成を利用したナノフレームワーク化合物の合成
- ・ NaAlB_{14} および $\text{Na}_{24}\text{Si}_{136}$ のキャリアチューニング

(5) 菅原グループ

① 主たる共同研究者:菅原 徹 (大阪大学 産業技術研究所、准教授)

② 研究項目

- ・特殊材料への電極形成技術の確立
- ・バリアメタル候補化合物の提案
- ・TLM 法によるハイスループット接合評価技術の確立

【代表的な原著論文】

[1] Haruhiko Morito, Syouta Shibano, Takahiro Yamada, Takuji Ikeda, Masami Terauchi, Rodion V. Belosludov, Hisanori Yamane, ‘Synthesis and electrical conductivity of Na_3B_{20} ’, Solid State Sciences, 102 (2020) 106166.

[2] Z. Khurelbaatar, M. Fujioka, T. Shibuya, S. Demura, S. Adachi, Y. Takano, M. Jeem, M. Ono, H. Kaiju and J. Nishii, ‘Discovery of Ag_xTaS_2 superconductor with stage-3 structure’, 2D Materials, 8 (2020) 015007.

[3] Tohru Sugahara, Leila Alipour, Yukiko Hirose, Yusufu Ekubaru, Jun-ichi Nakamura, Hironobu Ono, Nobuyuki Harada, and Katsuaki Suganuma, ‘Formation of Metal–Organic Decomposition Derived Nanocrystalline Structure Titanium Dioxide by Heat Sintering and Photosintering Methods for Advanced Coating Process, and Its Volatile Organic Compounds’ Gas-Sensing Properties’, ACS Appl. Electron. Mater., 2 (2020) 1670–1678.