Materials Informatics による熱電変換材料の世界の俯瞰

（物材機構 [1]・理研 [2]）○桂ゆかり [1,2]
Overviewing the world of thermoelectric materials by materials informatics ([1]*National Institute for Materials Science, Japan*, [2]*RIKEN*)　○Yukari Katsura[1,2]

The real value of materials informatics lies in the development of technologies by using large data sets. This reproduces long-held intuitions of researchers, and draws inspirations from them. The Starrydata project we launched in 2015 used our proprietary Starrydata2 web system[1] to manually extract experimental data from the graphs in the paper. The costs for these data collectors were obtained from the project research funds and from joint research funds with companies that want to use open data. By releasing this data set as open data, it is being used to discover new concepts and develop data-driven property prediction techniques in the form of citations in papers by researchers around the world.

Thermoelectric conversion materials are capable of interconverting heat and electricity. High dimensionless figure of merit $ZT = S^2\sigma T$ (S: Seebeck coefficient [V/K], σ: electrical resistivity [S/m], T: temperature [K]) results in high power generation/cooling efficienciesS. Since the thermoelectric properties comprising ZT vary greatly depending on the carrier concentration and microstructure, it is difficult to select the promising base material by looking only at the ZT of a few samples. Therefore, in this presentation, we attempted to visualize the dependence of thermoelectric properties on the parent material by analyzing this data independently and to provide a bird's-eye view of the world of thermoelectric materials.

Keywords : Materials informatics; Database; Literature data mining; Thermoelectric materials

　Materials Informatics の真価は、大規模データを活用することで研究者の長年の勘を再現したり、研究者のインスピレーションを引き出すことにある。我々が 2015 年に立ち上げた Starrydata プロジェクトでは、独自開発の Starrydata2 web システム [1]を用いて、論文中のグラフから人の手によって実験データを抽出した。このデータ収集者らの人件費は、プロジェクト研究費やオープンデータを使用したい企業との共同研究費から得ている。このデータセットをオープンデータとして公開することで、世界の研究者の論文に引用される形で、新たなコンセプトの発見や、データ駆動型特性予測技術の開発に利用されている。

　熱電変換材料は熱と電気を相互変換できる材料であり、無次元性能指数 $ZT = S^2\sigma T$（S: ゼーベック係数[V/K], σ: 電気抵抗率[S/m], T: 温度[K]）が大きいほど発電効率および冷却効率が高くなる。だが ZT を構成する熱電特性はキャリア濃度や微細組織に大きく依存してばらつくため、少数試料の ZT だけを見ても、本質的に有望な母物質がどれか判断することは難しかった。そこで本講演ではこのデータを独自に解析することで、熱電特性の母物質依存性を可視化して、熱電材料の世界の俯瞰を試みた。

1) Data-driven analysis of electron relaxation times in PbTe-type thermoelectric materials, Y. Katsura, M. Kumagai, T. Kodani, M. Kaneshige, Y. Ando, S. Gunji, Y. Imai, H. Ouchi, K. Tobita, K. Kimura, K. Tsuda, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2019**, *20*, 511-520.