

熱電特性グラフデータの収集による実験値マテリアルズインフォマティクス

Experimental materials informatics by curation of thermoelectric properties on literature

東大院新領域¹, 物材機構², 理研³ ◦桂 ゆかり^{1,2,3, (M2)}小谷 拓史¹,

熊谷 将也³, 郡司 咲子², 今井庸二², 木村薫¹

Univ. of Tokyo¹, NIMS², RIKEN³ ◦Yukari Katsura^{1,2,3, (M2)}Takushi Kodani¹,

Masaya Kumagai³, Sakiko Gunji², Yoji Imai², Kaoru Kimura¹

E-mail: katsura@phys.mm.t.u-tokyo.ac.jp

【緒言】 優れた熱電変換材料とは、高い無次元性能指数 $zT = S^2 \sigma T / (\kappa_{el} + \kappa_{ph})$ 、すなわち高いゼーベック係数 S 、高い電気伝導率 σ 、低い電子・フォノン熱伝導率 κ_{el} , κ_{ph} を示す材料だと言われている (T は温度)。 zT が 1~2 以上で、希少元素や毒性元素を含まない新規熱電変換材料が求められている。

熱電変換材料探索の難しさは、 S , σ , κ , zT の試料間個体差が非常に大きいことにある。母物質の多くは化合物半導体であり、キャリアドープ量 n の増加に伴って S が何桁も減少、 σ , κ_{el} が何桁も増加して、 zT は縮退半導体の領域 ($n \sim 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 前後) で最大化する傾向がある。狭いギャップはキャリアドープを容易にする一方、高温での S の低下につながる。元素置換などで構造を不規則化すれば κ_{ph} も数分の 1 に低減できるが、同時に電子散乱も引き起こして σ の低下につながってしまう。このため意図した通り zT を改善することが非常に難しいのが、実験的探索の現状である。

近年、有望な熱電材料母物質の選定のため、第一原理計算と機械学習による材料インフォマティクスが急速に発展している。だが第一原理計算と既存の実験値データベースだけでは、電子やフォノンの散乱に関する情報などが不十分である。そこで本研究では、熱電変換材料に関する過去の論文から熱電特性の実験データを網羅的に収集することで、材料インフォマティクスに利用できる大規模な熱電特性の実験値データベースの構築に取り組んだ。

【方法】 キーワード "thermoelectric" で検索して得た 48,585 本の論文書誌情報から、物質名に関連するタイトルを持つ 14,835 本の論文の PDF ファイルを収集した。ここから PbTe 系熱電変換材料 (Pb,Sn,Ge)-(S,Se,Te)系バルク) に関する 123 件の論文を選定し、熱電特性の温度依存性のグラフ画像を切り出してトレースすることで、453 試料の $S(T)$, $\sigma(T)$, $\kappa(T)$ のデータを抽出した。

【結果と考察】 事前に予想した通り、一口に PbTe 系材料と言っても作製条件によって熱電特性のばらつきは非常に大きく、この特性を 1 ~ 数試料に代表させるのは困難であることがわかった。また、試料組成の取得には高い読解力が要求され、自動読取による機械的なデータ収集は困難であると予想された。このデータを用いて、特徴の探索や機械学習にも取り組んでいる。

【今後の展開】 現在本プロジェクトでは、同様のデータ収集作業をオンラインで簡便に実行できる Web システム "Starry data" の開発にも取り組んでいる [1]。これを用いて全国の専門家の協力を得ることにより、大規模なデータ収集活動を行う方法の提案と、日本熱電学会におけるデータ収集の取り組み [2] についても併せて紹介する。

[1] 桂ゆかり他, 粉体および粉末冶金, 64, 8 (2017). [2] 桂ゆかり, 日本熱電学会誌 12, 3, 16-22 (2016).