

IoT デバイス用自立電源に向けた Al-Fe-Si 系熱電材料の基礎研究： 実験・計算科学・機械学習の協働

Research on Al-Fe-Si Thermoelectric Material toward Autonomous Power Supply:
Experiment, Theoretical Calculation, and Machine Learning Prediction

物材機構/エネルギー・環境材料研究拠点¹, 物材機構/MaDIS², 東大新領域³

高際 良樹^{1,2}, 磯田 幸宏¹, 後藤真宏^{1,2}, 篠原嘉一^{1,2}, Zhufeng Hou², 徐 一斌², 津田 宏治^{2,3}

NIMS/G-GREEN¹, NIMS/MaDIS², UTokyo³ Yoshiki Takagiwa^{1,2}, Yukihiro Isoda¹,

Masahiro Goto^{1,2}, Yoshikazu Shinohara^{1,2}, Zhufeng Hou², Yibin Xu², and Koji Tsuda^{2,3}

E-mail: TAKAGIWA.Yoshiki@nims.go.jp

超スマート社会の実現や IoT 社会を下支えする「地産地消型」自立電源技術の創出が求められており、とりわけ、1 兆個とも言われている各種センサーの駆動に必要な電力の確保が解決すべき課題として残されている。我々は、実験・計算科学・機械学習を相補的に組み合わせた統合的材料研究開発の一試行として、大規模な社会実装に資する「低コストかつ無害の」Al-Fe-Si 系熱電材料[1,2]を基盤とした研究開発を遂行している。

本研究では、材料開発のスピードを大幅に加速するために、第一原理計算を用いた材料スクリーニングを行い[1,2]、理論モデルを用いた電子系およびフォノン系に関する特性予測に基づき候補材料を選定した。候補材料に対する最適な合成プロセスの確立や特性の最大化を行い、理論モデルとの相違を検証し、性能向上への指針を構築する。さらに、近年、革新的機能性材料の創出に向けて、マテリアルズ・インフォマティクスを用いた取り組みが数多く進められている中で、我々は、ベイズ最適化を用いることにより、Al-Fe-Si 系熱電材料の出力特性を最大化させることに初めて成功した[3]。

講演では、Al-Fe-Si 系熱電材料における材料基礎研究として、第一原理計算・実験・機械学習を相補的に用いた IoT デバイス用自立電源の確立に向けた研究展開を中心に、他の材料系とも比較を行いながら現状と課題について議論したい。

【文献】

[1] Y. Takagiwa, Y. Isoda, M. Goto, and Y. Shinohara, *J. Therm. Anal. Calorim.* **131**, 281-287 (2018).

[2] Y. Takagiwa, Y. Isoda, M. Goto, and Y. Shinohara, *J. Phys. Chem. Solids* **118**, 95-98 (2018).

[3] Z. Hou[†], Y. Takagiwa[†], Y. Shinohara, Y. Xu, and K. Tsuda, *submitted* (2018).

[†] These authors contributed equally to this manuscript.

【謝辞】

本研究の一部は、科学研究費補助金[基盤研究(B)：課題番号 17H03421]および科学技術振興機構(JST) 事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²I : “Materials research by Information Integration” Initiative)」の支援によるものである。ここに謝意を表する。