

磁性熱電変換材料のコンビナトリアル探索基盤の構築

Development of combinatorial research platform for magneto-thermoelectric materials

NEC IoT デバイス研¹, JST さきがけ², 東北大 AIMR³, 金研⁴, 日本原研⁵

○石田 真彦¹, 岩崎 悠真^{1,2}, 澤田 亮人¹, 染谷 浩子¹, 桐原 明宏¹, 寺島 浩一¹,

萬 伸一¹, 齊藤 英治^{3,4,5}

NEC Corp.¹, PRESTO, JST², AIMR-³, IMR-Tohoku Univ.⁴, JAEA⁵,

○Masahiko Ishida¹, Yuma Iwasaki^{1,2}, Ryohto Sawada¹, Hiroko Someya¹, Akihiro Kirihara¹,

Koichi Terashima¹, Shinichi Yorozu¹, Eiji Saitoh^{3,4,5}

E-mail: ishida@ah.jp.nec.com

スピンゼーバック効果や異常ネルンスト効果など、磁性に関わる熱電効果を持つ新しい材料の開発を目的に、コンビナトリアル型の探索プロセス構築を進めている。

プロセスの概要は以下の通りである。まず基板上に組成を連続的に変化させた薄膜材料を成膜し、自動評価システムによって一括して特性評価を行う。さらに得られた作成した薄膜材料の組成変化に応じた第一原理物性シミュレーションから、多種多様な物性パラメータセットを準備し、実験データと組み合わせて機械学習による多次元回帰分析を行う。分析の結果、熱電変換係数など目的の物性に有意な相関のある物性パラメータの抽出が出来れば、材料候補の絞り込みや、意図的な材料設計に活用することが可能となる。

一連の作業を完結する上で鍵となるプロセスは、組成分散薄膜の作成と、その評価手法の確立にあると言える。講演では、3 元のコスパッタ装置を用いた薄膜作成の試み(図 1)と、セミオートプローバを使った熱電変換係数の評価システム構築(図 2)に関して、我々の取り組みを紹介する。材料探索に特化した機械学習の必要性などについても議論する予定である。

(本研究は JST , ERATO の支援を受けています)

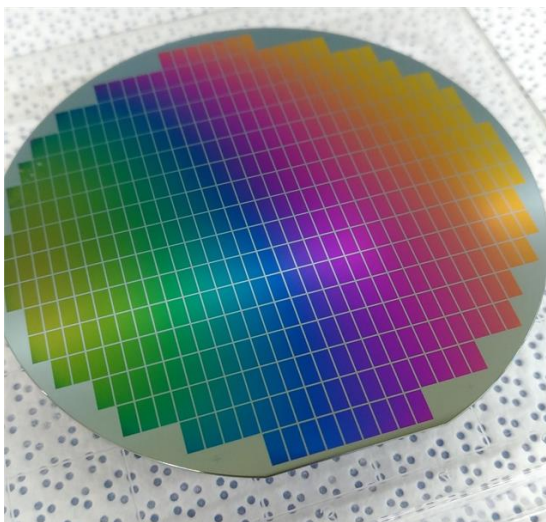


図 1 組成分散膜の作成例

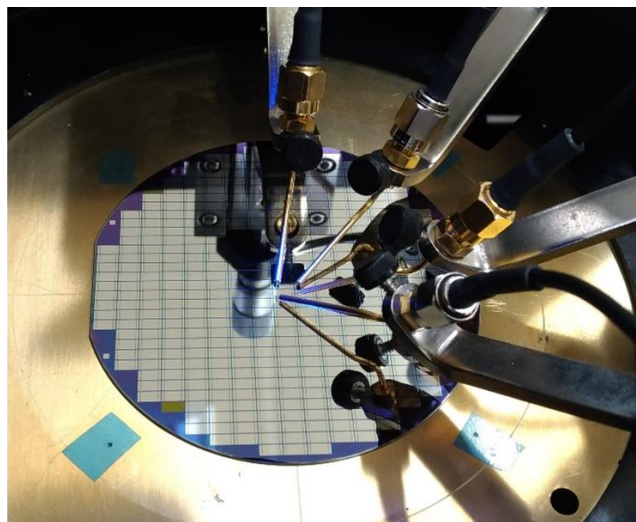


図 2 セミオートプローブシステム