

Starrydata の大規模熱電特性データの Inverse Jonker plot 解析

Inverse Jonker plot analysis of the large-scale thermoelectric properties data on Starrydata

東大新領域¹, 物材機構², 理研³, さくらインターネット(株)⁴, 京大原研⁵

○(B) 畢 書雨¹, 桂 ゆかり^{1,2,3}, 熊谷 将也^{4,5}, 木村 薫¹

The Univ. of Tokyo¹, NIMS², RIKEN³, SAKURA Internet Inc.⁴, Kyoto Univ.⁵,

°Sho Bi¹, Yukari Katsura^{1,2,3}, Masaya Kumagai^{4,5}, Kaoru Kimura¹

E-mail: anothersky0320@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

研究背景

エネルギー問題を抱える現代において、排熱を利用して温度差から電気を生み出せる熱電材料の活用が期待されている。熱電性能の向上には、相互に密接に関係した複数のパラメータを調節する必要があるが、それらを実現する最適な組成を発見することは容易ではない。我々は、これまでに出版された論文中のグラフ画像から実験データを取得し、大規模データベース Starrydata を開発した[1]。ここに収録された大量の熱電材料の実験データを分析することで、熱電材料の化合物系同士を大局的な観点から比較できるようになった。ゼーベック係数 S と電気伝導率 σ の対数を縦軸と横軸にとった Jonker plot を PbTe 系熱電材料について作成すると、化合物系ごとにまとまって分布していることがわかった。そこで、他の材料系についても同様のプロットを作成することで、各材料系の特徴が解明できると期待できる。

方法

Starrydata (<https://www.starrydata2.org>) に収録された実験データのうち、化学組成式と熱電特性データが含まれている 30,000 試料以上のデータを取得した。この組成式の総和が 1 となるように 100 次元の組成ベクトルに変換し、DBSCAN 法[2]によるクラスタリングを行うことにより複数の化合物群に分類した。これらについて多項式フィッティングを行い、100 K 間隔で内挿したデータ点の集合について、横軸を S 、縦軸を σ とした Inverse Jonker plot を作成することで、材料系ごとの熱電特性分布の違いを考察した。

結果と考察

先行研究から、多くの試料の分布が一次直線で近似できることが推測された。一部の試料では曲線状になったが、これは熱励起によるバイポーラ伝導によるものだと考えられた。そこでこれらの試料を除いて、各試料のデータ点は $\log \sigma = aS + b$ の式で直線近似した。これらについて、材料系ごとに傾き a と切片 b の分布を示した例を Fig.1 に示すが、いずれも直線状に分布していることがわかった。これら a, b のパラメータの分布が、各材料系の熱電材料としての特徴を示しているのだと考えられる。

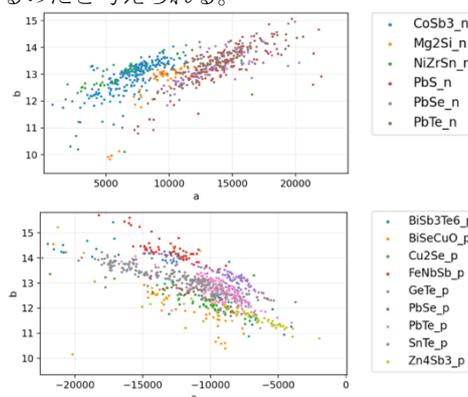


Fig. 1. Slope a and y -intercept b in Inverse Jonker plot. The parent compounds of the samples are displayed in different colors.

まとめ

Starrydata 上の大規模熱電特性データの Inverse Jonker plot の切片と傾きの分布の材料系依存性について考察した。今後はこの情報と電子構造の関係を調査することで、有望な新規熱電材料の発見につなげることを目指す。

参考文献

- [1] Y. Katsura, M. Kumagai, T. Kodani et al., Sci. Technol. Adv. Mater. 20, 511 (2019).
 [1] M. Ester, H. Kriegel, J. Sander, X. Xu et al., AAAI Press. KDD-96, 226-231 (1996).