

Starrydata の熱電特性データの Inverse Jonker プロット

Inverse Jonker Plots of Thermoelectric Materials Data on Starrydata

物材機構¹, 東大新領域², 理研³, さくらインターネット(株)⁴

◦桂 ゆかり^{1,2,3}, 熊谷 将也^{3,4}, 小谷 拓史², 木村 薫², 津田宏治^{1,2,3}

◦Yukari Katsura^{1,2,3}, Masaya Kumagai^{3,4}, Takushi Kodani^{1,2}, Kaoru Kimura^{1,2,3}, Koji Tsuda^{1,2,3}

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

【緒言】近年、データ科学を材料科学に活用する試みとして、Materials Informatics (MI)の研究が発展している。我々は、論文中のグラフ画像から大規模実験データを効率的に集められる独自の論文データ収集 Web システム Starrydata を開発してきた。本 Web システムとデータは <https://www.starrydata2.org> において公開しており、営利・非営利を問わず、論文[1]の引用だけで無償で利用できる。これまで、研究業務員と外部ユーザーの力を借りて、6000 本以上の論文から 30,000 試料、90,000 本以上のカーブのデータを収集しており、現在は、熱電材料と磁性材料、準結晶関連物質についてデータ収集を進めている。

そこで本研究では、本システムで集めた熱電材料のデータの解析によって、熱電特性の材料系依存性を比較した結果を報告する。

【方法】Starrydata 上で集めた熱電特性の温度依存性データについて、多項式フィッティングからキリの良い温度での熱電特性(ゼーベック係数 S , 電気伝導率 σ , 熱伝導率 κ , 無次元性能指数 ZT)の値を内挿した。化学組成を構成元素の比率を表す組成ベクトルに変換し、母物質の組成ベクトルとの距離の小さな試料を抽出することで、材料系ごとに分類した。各材料系について、 $\log \sigma$ を S の関数として表現した inverse Jonker plot を作成し、この傾きや切片、 S の分布幅を材料系ごとに比較した。また、 ZT を S の関数として表現して、 ZT を最大化する S の値を推定した。

【結果と考察】Inverse Jonker plot を見ると、多くの材料系において直線上のデータの分布が観察され、その途中に高い ZT が発現する S の領域があることがわかった。特に、PbTe 系や Skutterudite など熱電材料として広く使われている材料系では S の分布幅が広く、これにより高い ZT の領域をカバーできていると観察された。一方で、 Mn_4Si_7 系や Co 酸化物のように、 S の分布幅が狭い材料系もあった。これは、何らかのキャリア濃度調整機構が材料に内在する効果なのではないかと考えられる。傾きは自由電子モデルに基づく理論値とはずれる材料系が多く、電子構造の特徴に起因すると考えられた。 ZT を S の関数として表すと、p 型と n 型の双方に ZT のピークが観察された。このときの S は $\pm 200 \sim 300 \mu\text{V/K}$ 程度であり、格子熱伝導率が低い材料の方が大きな S でピークを迎え、高い ZT を示すことが観察された。

【結論】Starrydata の大規模熱電特性データから inverse Jonker plot を作成することにより、各材料系の特徴と ZT の最大値、それを与える S の値を概算することに成功した。

【参考文献】 [1] Y. Katsura, M. Kumagai, T. Kodani *et al.*, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **20**, 511 (2019).

【謝辞】 本研究は自動車用内燃機関技術研究組合 (AICE), 科研費, JST-CREST の支援を受けた。