2024 年度

創発的研究支援事業　年次報告書【公開版】

研究担当者	藤井　進
研究機関名	九州大学
所属部署名	大学院工学研究院材料工学部門
役職名	准教授
研究課題名	格子欠陥のインフォマティクスによる熱電特性制御
研究実施期間	2024 年 10 月 1 日～2025 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本プロジェクトでは、無機固体材料中に含まれる格子欠陥（点欠陥、粒界、析出物等）を一気通貫で解析する計算的基盤技術を開発する。それを基に、微視的な格子欠陥から巨視的材料機能を予測する「格子欠陥のインフォマティクス」を展開する。熱電変換材料を応用先に想定し、PbTe を軸に基盤技術を開発しながら、様々な機能性材料に開発手法を適用する。

点欠陥においては、第一原理計算による最適なドーパント選択を目的として、点欠陥モデリング、形成エネルギー計算、点欠陥およびキャリア濃度の推定を行った。その際、既存のソフトウェア（pydefect と pydecs）を活用し、それらを半自動的に実行できるようにした。結果として、PbTe の多数キャリアと内因性欠陥濃度を再現する計算条件を特定し、代表的な複数のドーパントの形成エネルギーを算出した。現在、他のドーパントでの計算を進めている他、形成エネルギーおよび状態図に対して格子振動の影響（有限温度効果）を取り入れることを検討している。さらに、機械学習原子間ポテンシャル（MLIP）を用いた分子動力学計算により欠陥近傍でのフォノン熱伝導現象を解析し、フォノン散乱が顕著な欠陥種の特定を進めている。

粒界においては、20 種以上の PbTe 対称傾角粒界の作製が完了した。粒界でも MLIP を用いた格子熱伝導計算を行い、粒界構造によってエネルギー、熱抵抗が大きく異なることを解明した。この際、熱伝導計算に適したモデル生成および計算の実行を半自動化した。現在、対称傾角粒界に限らない、汎用的かつ自動的な粒界モデリングソフトウェアの開発に取り組んでいる。

上記のモデリングもしくは計算手法を別の熱電変換材料や固体電解質に適用し、4 報の論文を投稿、2 報が受理された（1 報は国際共同研究）。