

マテリアルスインフォマティクスによる 熱機能材料開発

塩見淳一郎

東京大学大学院工学系研究科
(兼)物質材料研究機構(MI²¹)

固体の熱伝導率制御へのニーズ

高熱伝導率

6桁(1kW/mK~1mW/mK)を自在に操りたい

低熱伝導率

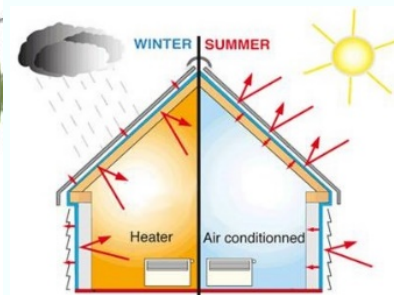
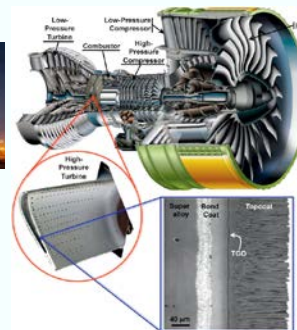
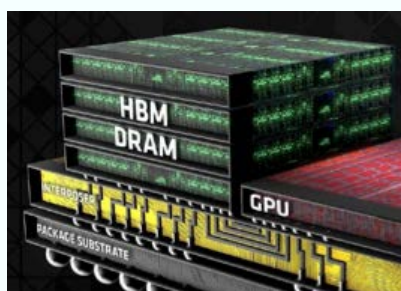
熱交換器

電子デバイス

環境発電

熱遮蔽

断熱



ナノ構造

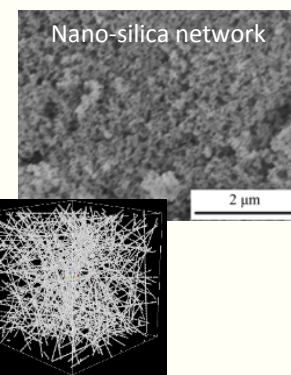
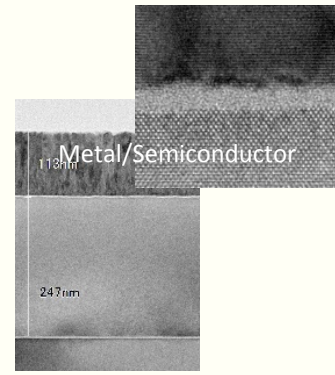
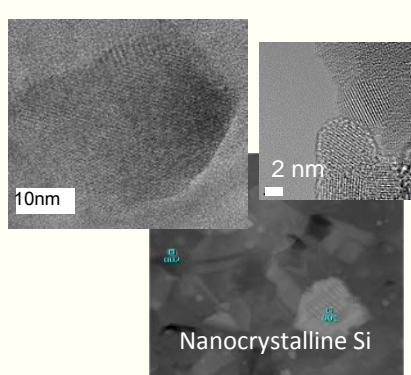
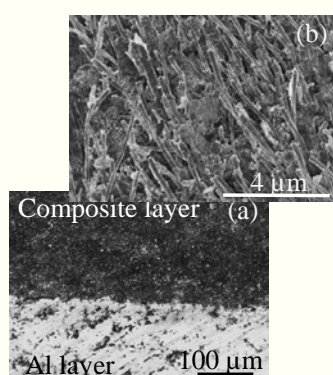
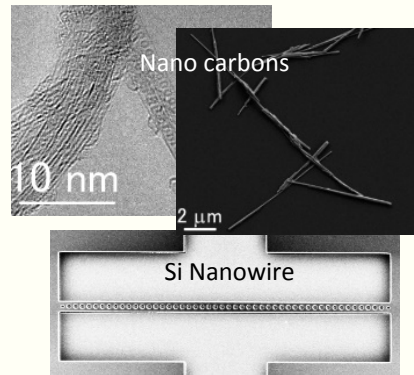
ナノチューブ・ワイヤ

界面構造

ナノ結晶

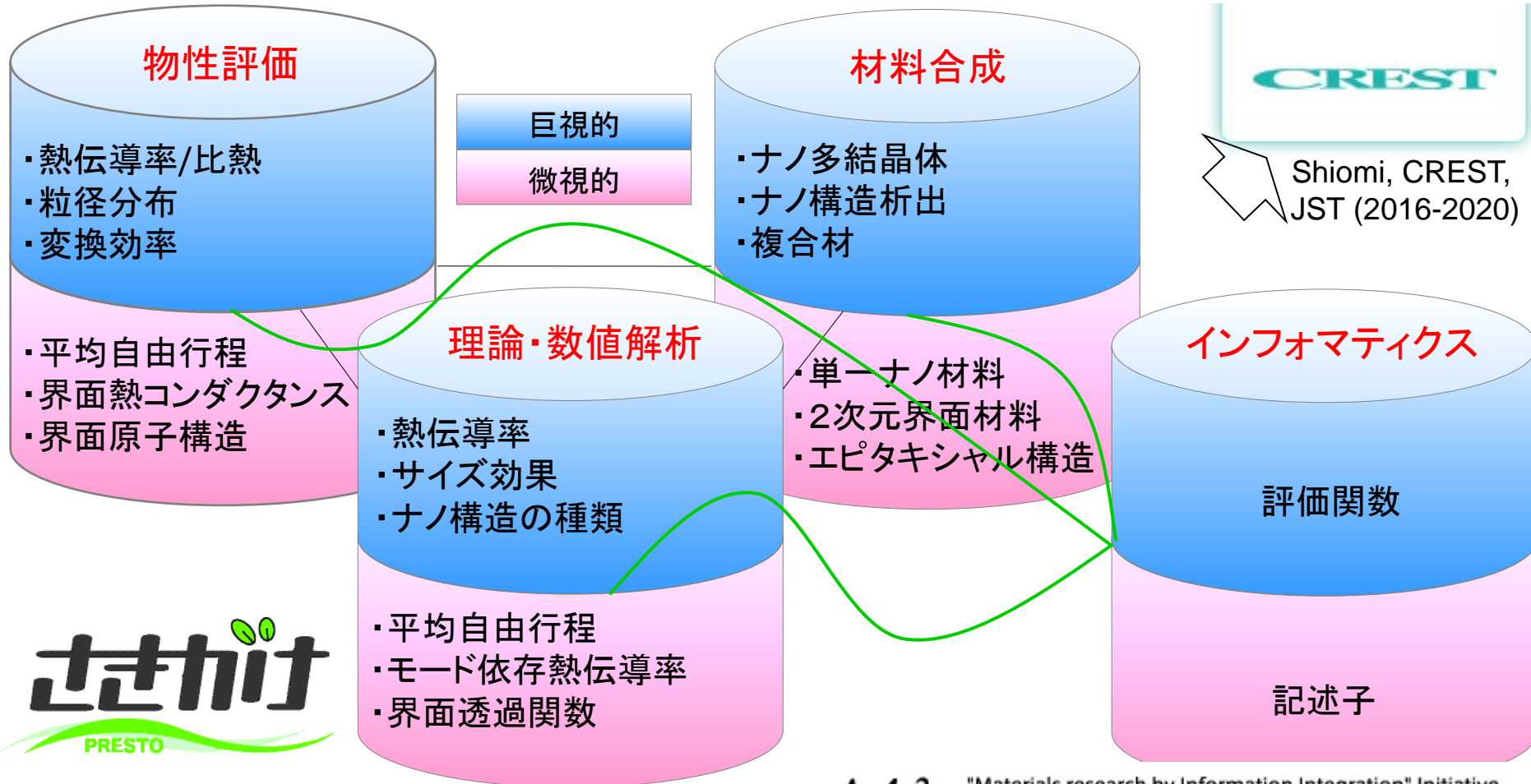
多層構造

エアロゲル



フォノンエンジニアリング・プラットフォーム

経験的に材料を開発するのではなく、計算や計測から得られる原理原則にもとづいて材料を設計・開発する。

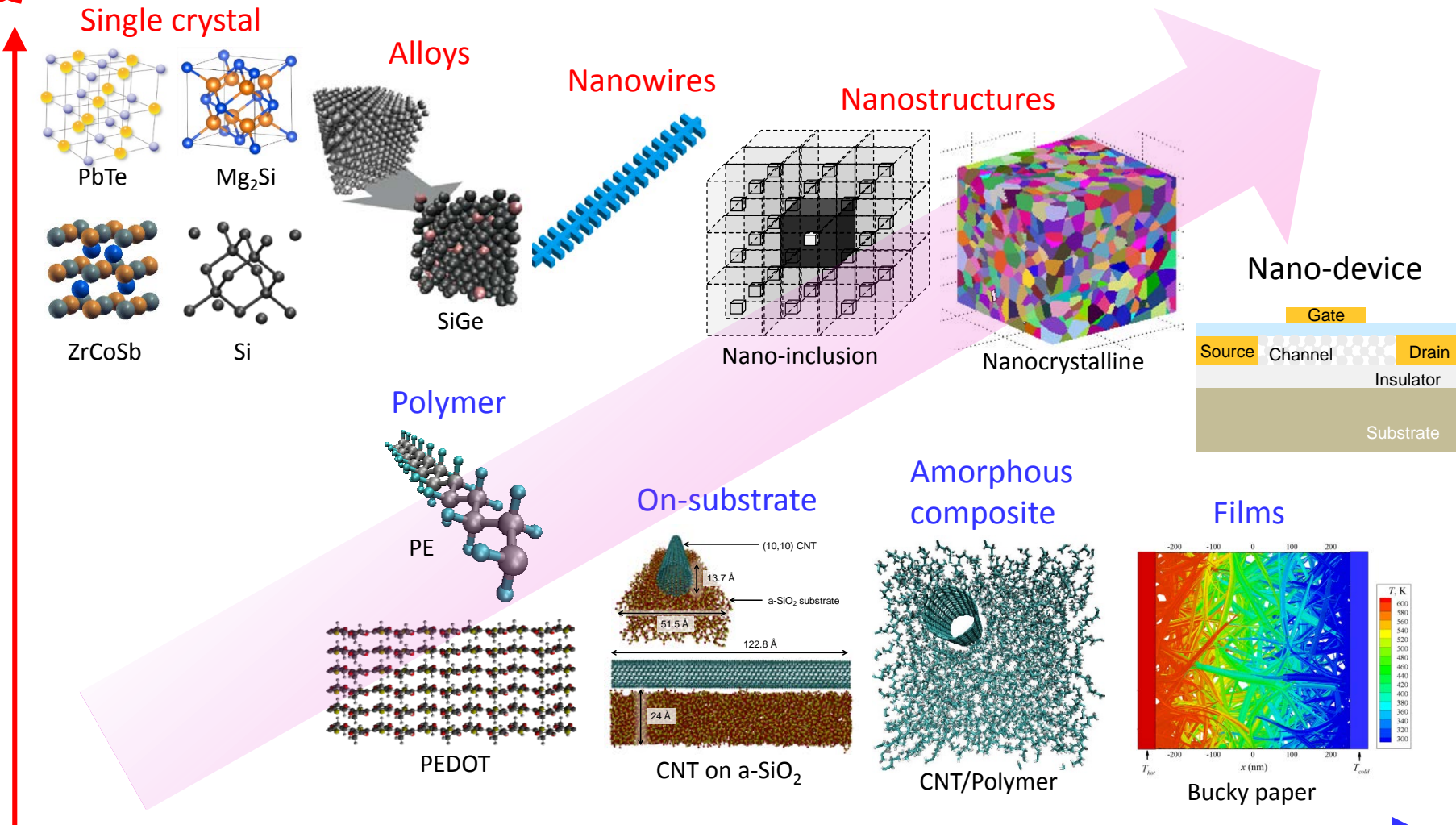


Shiomi, PRESTO, JST (2011-2014)

Mi²i "Materials research by Information Integration" Initiative
情報統合型物質・材料開発イニシアティブ

熱輸送計算技術の発展

精度



複雑性

アウトライン

2通りのマテリアルズ・インフォマティクス

1. 単結晶材料の探索

(既存の材料の中から熱機能が優れたものを探す)

2. ナノ構造の最適設計

(新規構造を創成する)

アウトライン

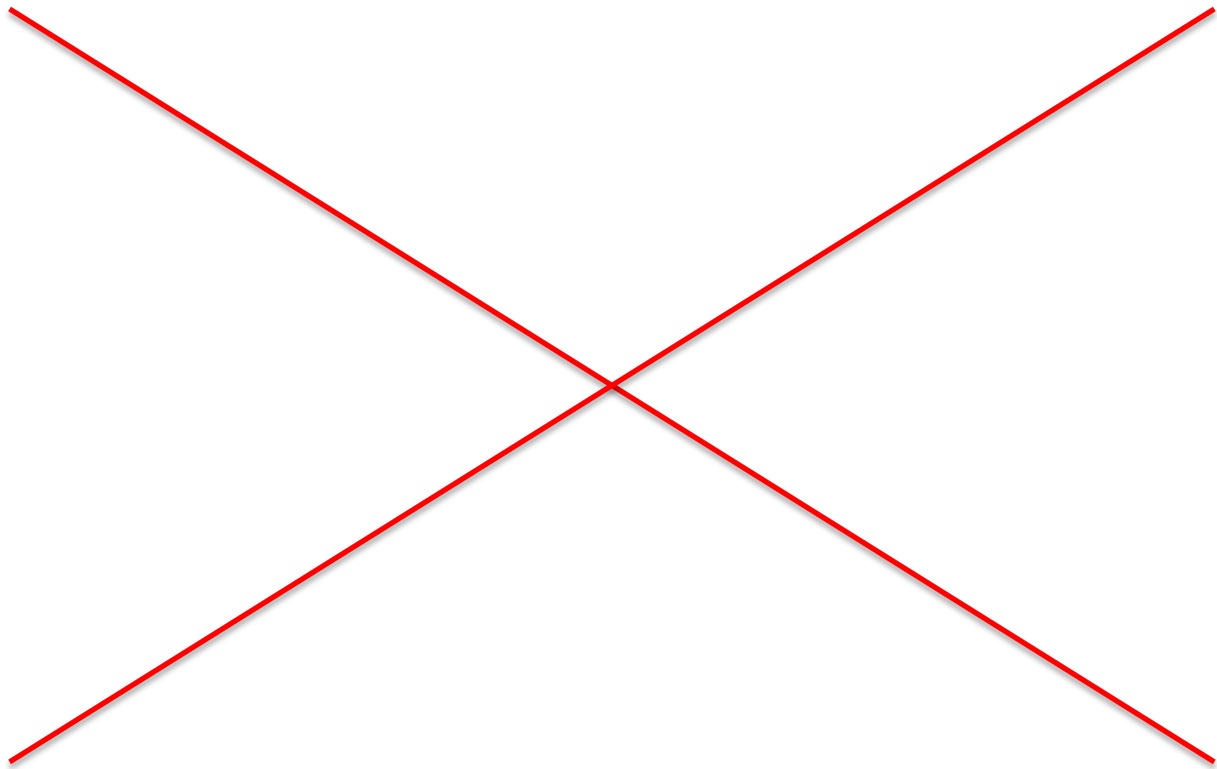
2通りのマテリアルズ・インフォマティクス

1. 単結晶材料の探索

(既存の材料の中から熱機能が優れたものを探す)

2. ナノ構造の最適設計

(新規構造を創成する)



アウトライン

2通りのマテリアルズ・インフォマティクス

1. 単結晶材料の探索

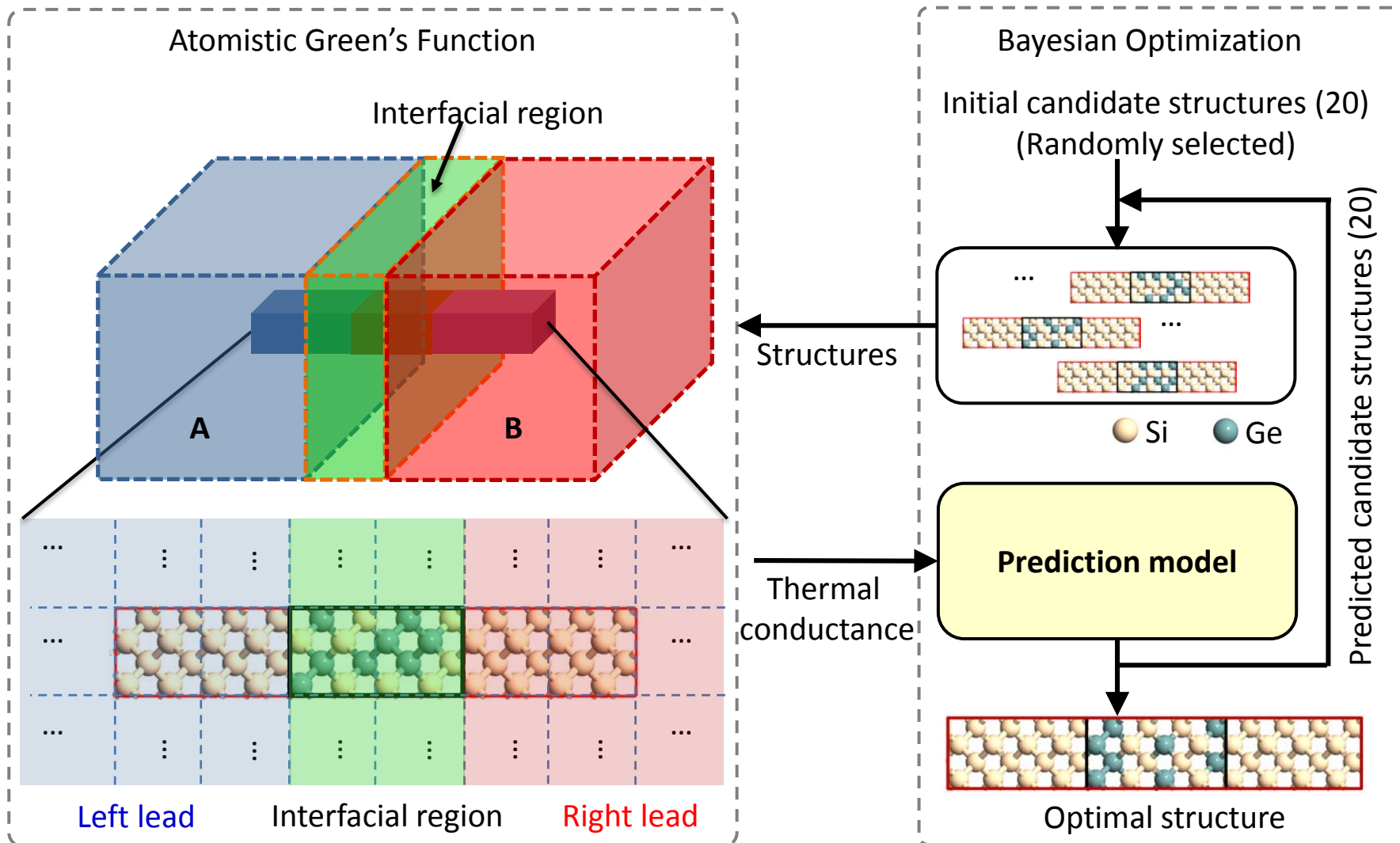
(既存の材料の中から熱機能が優れたものを探す)

2. ナノ構造の最適設計

(新規構造を創成する)

機械学習 × 熱輸送計算 (詳細)

Ju et al, Physical Review X 7, 021024 (2017)



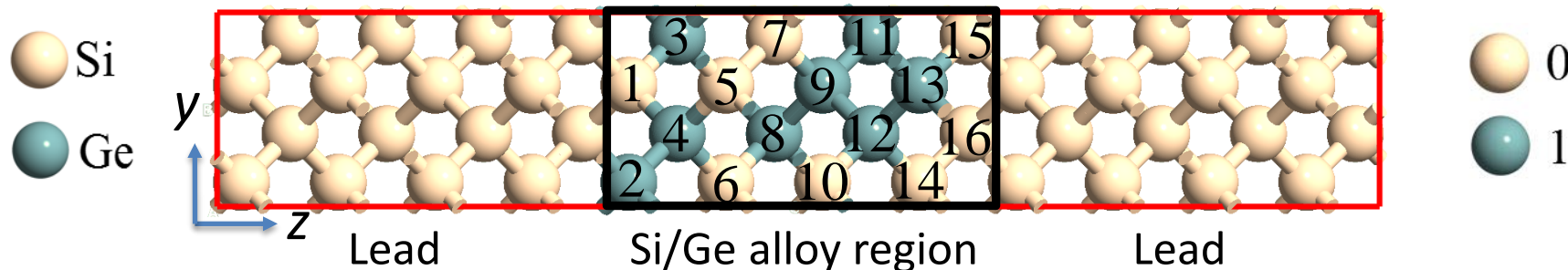
Ju et al, Physical Review X 7, 021024 (2017)

例：界面（薄膜）複合結晶構造の最適化

Dr. Shenghong Ju



例題：Si単結晶中の8層の50%をGe原子で置換することを考える。
熱伝導を「最小」または「最大」にする配置は何か？



Descriptors: $C_{16}^8 = 12,870$

Case	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
2	1	1	1	1	1	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0
3	1	1	1	1	1	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0
...

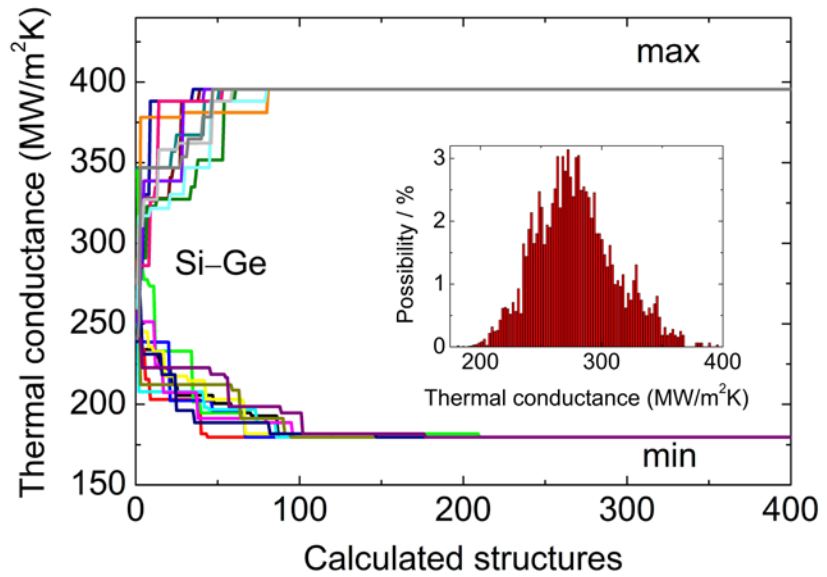
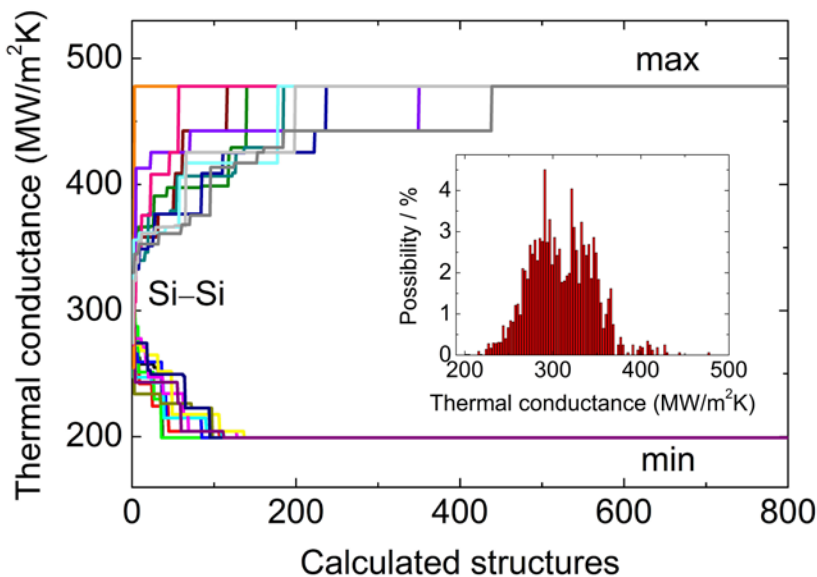
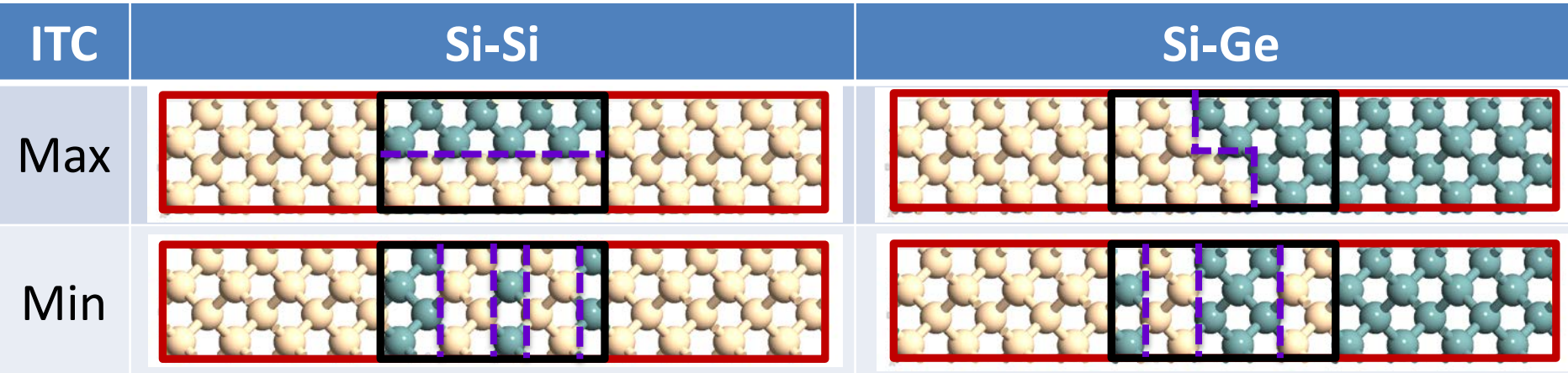
Calculator: Atomistic Green's Function (AGF): Phonon transmission

Evaluator: Interfacial Thermal Conductance (ITC)

Optimization method: Common Bayesian Optimization (COMBO)

最適化効率

Ju et al, Physical Review X 7, 021024 (2017)

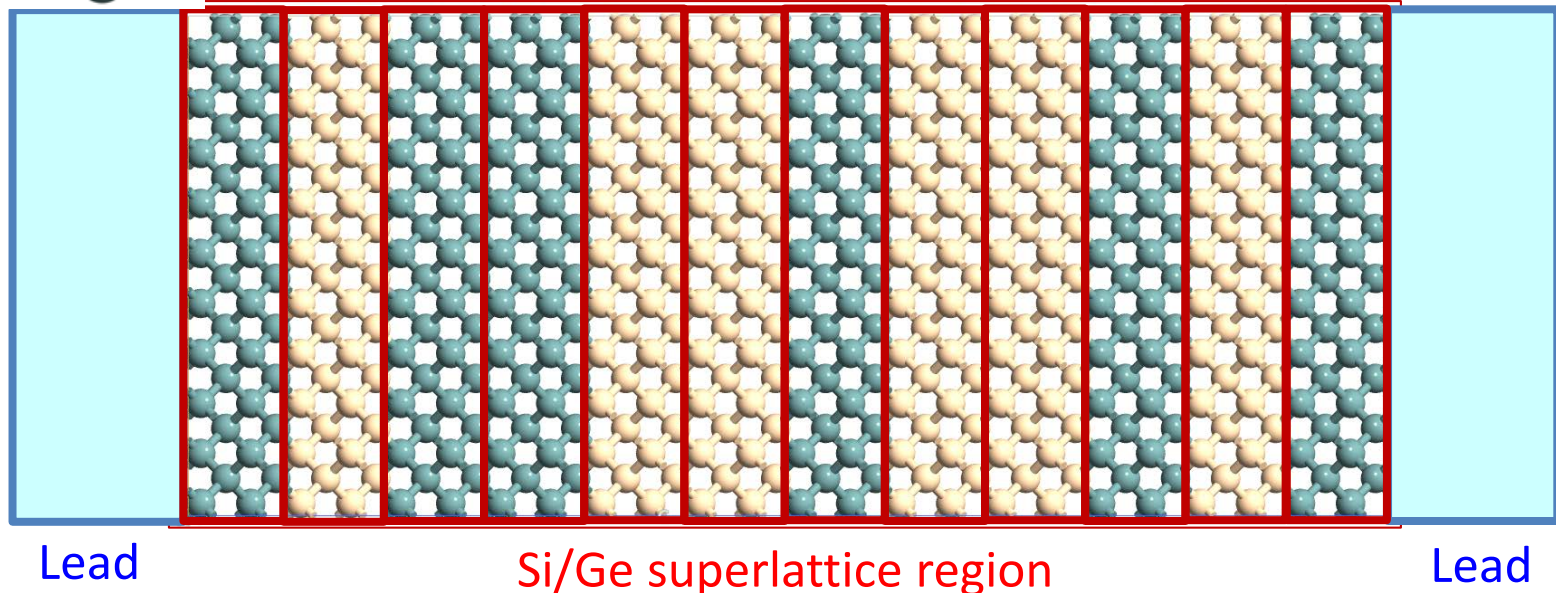


Optimal structures were obtained by calculating only 3.4% of all candidates.

熱伝導が最低となる超格子構造の設計

Problem: Arrange superlattice structure to realize minimal thermal conductance

● Si ● Ge



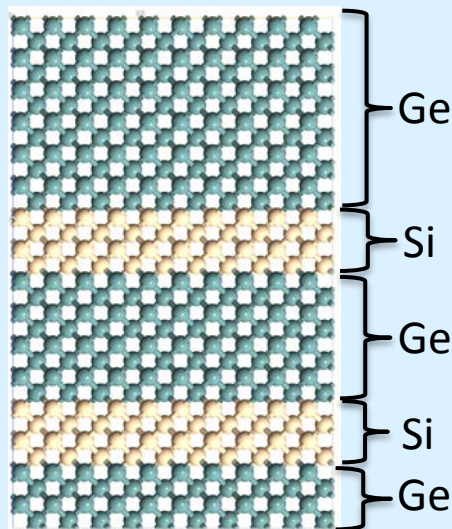
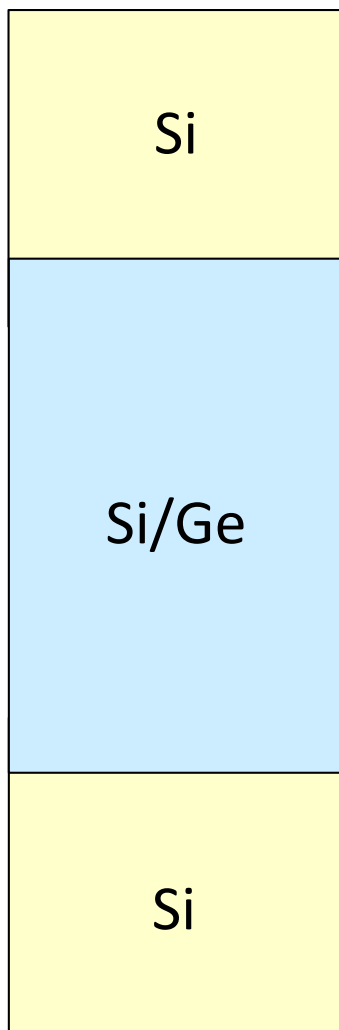
Descriptors: ● 0 ● 1

Case	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0
2	1	1	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0
3	1	1	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0
...

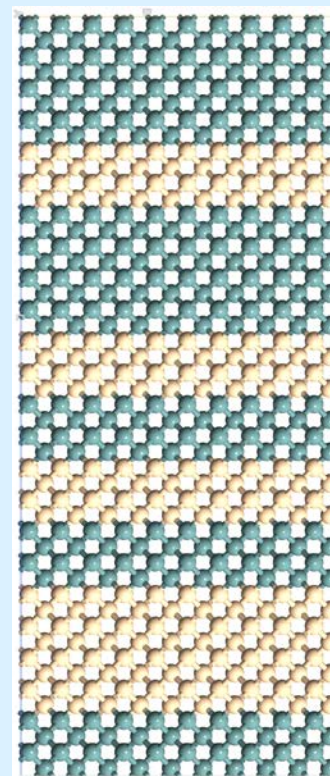
熱伝導が最低となる超格子構造

Ju et al, Physical Review X 7, 021024 (2017)

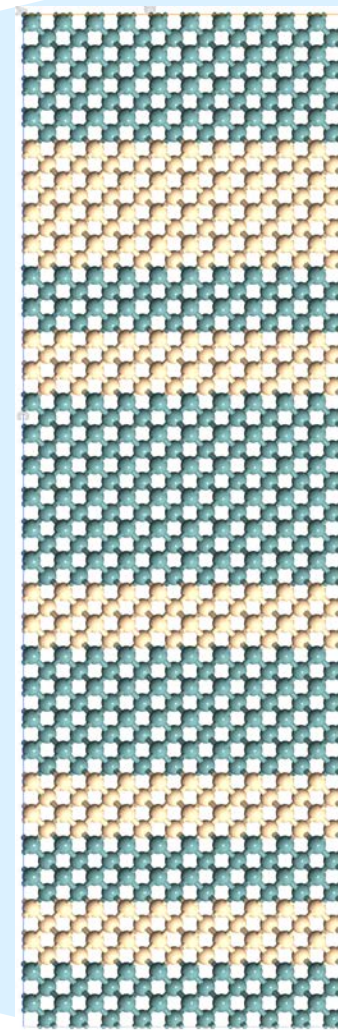
目的: 熱伝導度を最小にする



Thickness: 4.35nm



Thickness: 6.52nm



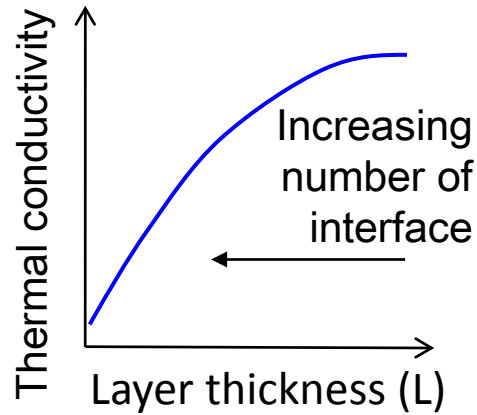
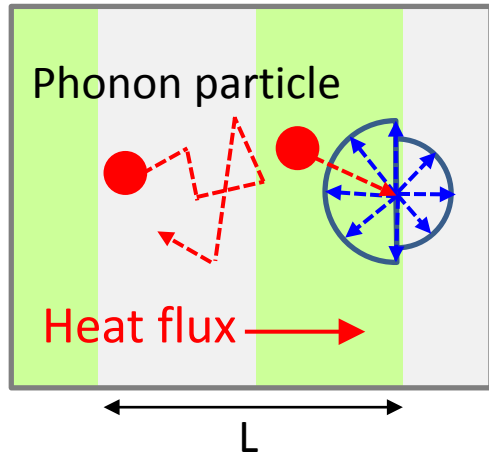
Thickness: 8.69 nm

非直感的な構造!

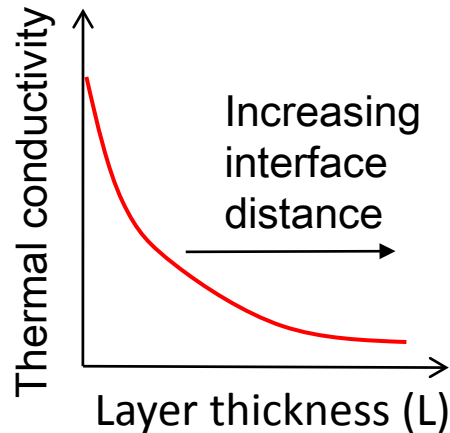
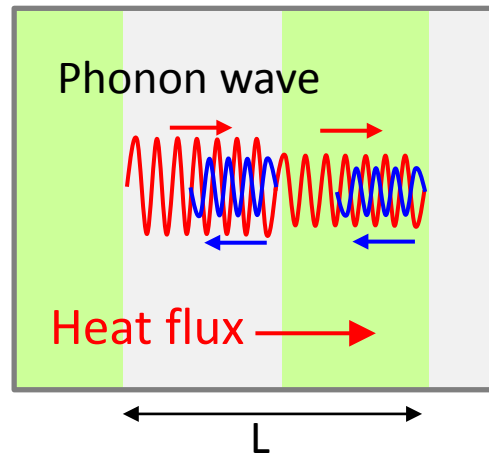
基盤となるメカニズム

Ju et al, Physical Review X 7, 021024 (2017)

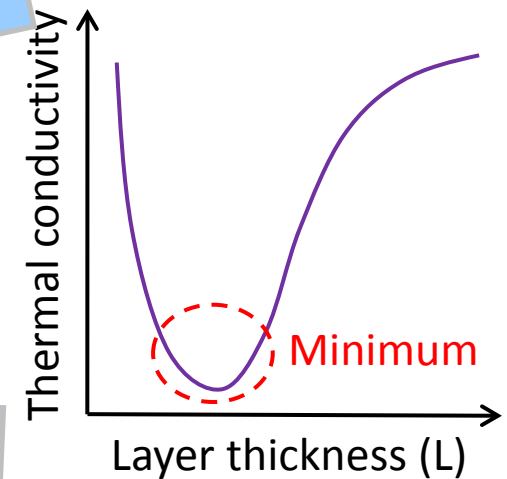
Particle picture



Wave picture

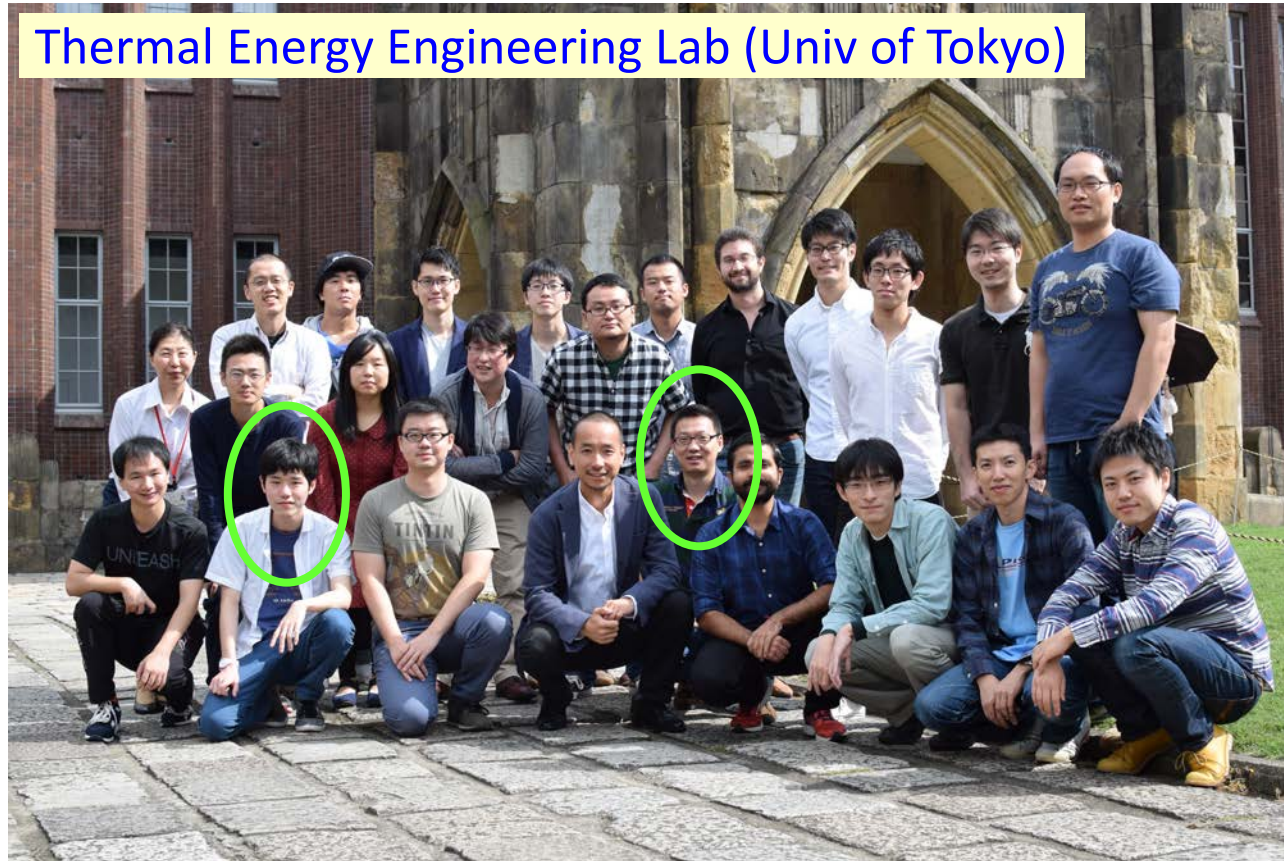


Particle + wave



謝辞

Thermal Energy Engineering Lab (Univ of Tokyo)



Collaborators

Koji Tsuda (UTokyo), Ryo Yoshida (ISM),
Kenta Hongo (JAIST), Terumasa Tadano,
Zhufeng Hou (NIMS)

