

低格子熱伝導率材料の探索

101化合物についての
格子熱伝導率の第一原理計算



記述子 (36種)
体積, 密度, 元素識別変数

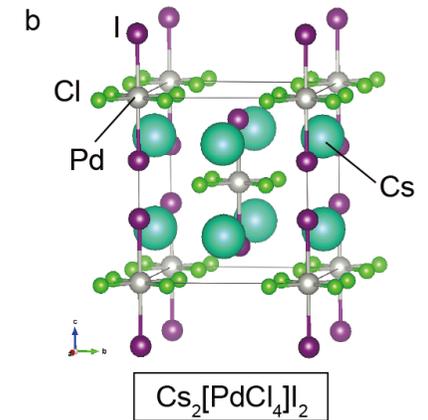
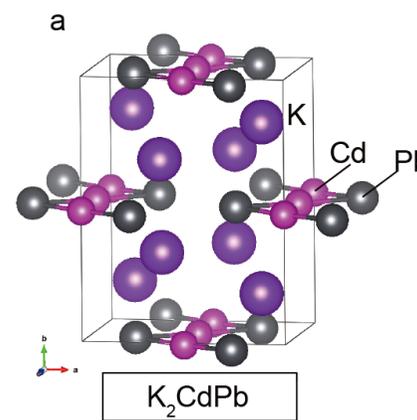
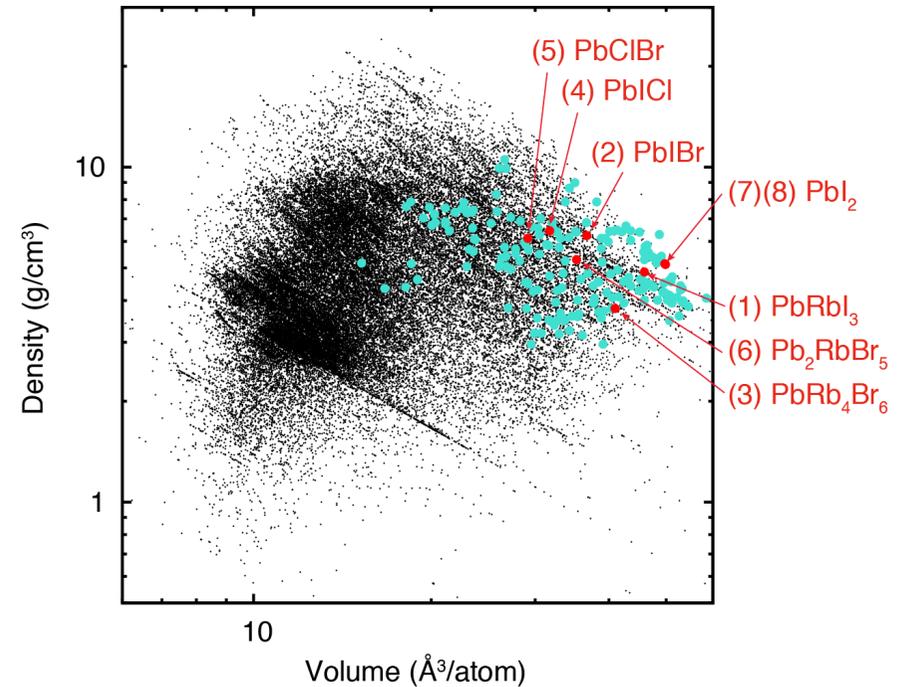
ガウシアンプロセス



バーチャルスクリーニング:
ICSDに含まれる54,000以上の化合物

ranking	Z-score	compound	LTC (W/m·K)	Band Gap (eV)
		formula		
1	1.90	PbRbI ₃	0.1	2.46
2	1.76	PbIBr	0.13	2.56
3	1.56	PbRb ₄ Br ₆	0.08	3.9
4	1.56	PbICl	0.18	2.72
5	1.56	PbClBr	0.09	3.44
7	1.44	PbI ₂	0.29	2.42
8	1.43	PbI ₂	0.29	2.45
121	0.39	K ₂ CdPb	0.45	0.18
144	0.29	Cs ₂ [PdCl ₄]I ₂	0.31	0.88

A. Seko, A. Togo, H. Hayashi, L. Chaput, K. Tsuda
and I. Tanaka, Phys. Rev. Lett. 115, 205901 (2015)



プレスリリース: 日刊工業新聞

京大 世古, 林, 田中, 東大 津田による共同研究