

## MI を活用して極小の熱伝導率を持つ無機材料を実現

～データ科学と実験の融合による新しい材料開発方法の道しるべ～

配布日時：平成30年7月4日14時

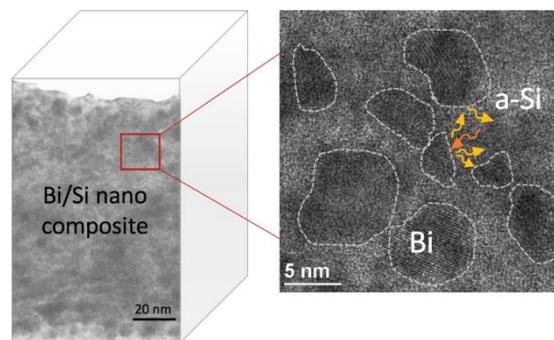
国立研究開発法人 物質・材料研究機構

### 概要

1. 物質・材料研究機構（以下、NIMS）は、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）を活用し、世界最小の熱伝導率を有する無機複合薄膜材料の開発に成功しました。データ科学で予測された材料を実験で合成することで、短期間で高性能な新規断熱材料の発見につながりました。MIの有用性を実証した先駆的な事例として、今後の新規材料開発の指針となることが期待されます。

2. 断熱材料は、エネルギー有効利用の観点から、建築や電子機器、発電プラント、航空機など、日常生活から工業活動まで幅広く利用されています。最近では、自動車エンジンの熱損失を低減する燃焼室側壁やピストンへの断熱コーティングなど、さらなる高性能な断熱薄膜材料の開発が期待されています。このような断熱材料の実現のためには、膨大な候補物質の中から、熱伝導を低減する材料の組み合わせを見出し、その界面構造をナノレベルで制御した合成を効率よく行うことが求められていました。

3. 今回、NIMSの研究チームは、アンサンブル回帰木<sup>(1)</sup>と呼ばれる機械学習手法を用いて、2000種以上におよぶ材料の組み合わせから、熱伝導率が低くなる組み合わせを予測しました。さらに、NIMSで独自に開発した、構造を変えながら複数の薄膜を全自動で作製できる装置を利用し、予測された材料の組み合わせのナノ構造を変化させて熱伝導率との相関を網羅的に探索しました。その結果、アモルファスシリコン中にビスマスの微結晶を散りばめた構造が、最高の断熱特性を有することを発見しました（図参照）。この材料は、無機複合薄膜材料では世界最小の熱伝導率（熱伝導率0.16 W/mK）を示すものとなりました。



図：高性能な断熱特性を有する Bi/Si 複合材料の構造断面 TEM イメージ

4. 今回の結果は、MIを活用することで、極めて効率よく新規機能性材料の探索、あるいは、既存材料の高性能化を行うことを実証した先駆的な事例です。今後は、断熱材料のさらなる高性能化をはじめとして、エネルギーに関連する様々な材料開発分野への応用を目指します。

5. 本研究は、NIMS 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点 データプラットフォーム 徐一斌 プラットフォーム長、同拠点 伝熱制御・熱電材料グループ Yen-Ju Wu ポスドク研究員、佐々木 道子 特別研究員、Fang Lei NIMS エンジニアとエネルギー・環境材料研究拠点 熱電材料グループ 後藤 真宏 主席研究員によって行なわれました。また、本研究は、主に科学技術振興機構（JST）のイノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ（MI<sup>2</sup>I）」の一環として行なわれました。

6. 本研究成果は、2018年7月3日（現地時間）に、「ACS Applied Nano Materials」誌に掲載されます。

## 研究の背景

断熱材料は、建築や電子機器、発電プラント、航空機など、日常生活から工業活動まで幅広く利用されており、エネルギーの有効活用により、省エネルギー社会を構築するための基盤材料です。最近では、部品表面に直接複数の機能性を有するコーティングを施すなど、一定の耐熱性と強度を有し、さらには、電気や光など他の特性も同時に併せ持つ機能性熱遮蔽材料の需要が増えつつあります。例えば、自動車エンジンの冷却で失う熱損失を低減するために、燃焼室側壁やピストンへの断熱コーティングの開発が進んでおり、また、高性能熱電材料としては、低熱伝導率で、かつ高電気伝導率と高ゼーベック係数を合わせ持つ材料が必要となるなど、断熱材料の要求は多くなっています。それらのニーズを満たすために、原子レベルあるいはナノレベルでの材料化学組成、結晶構造、ナノ・ミクロン構造の設計と制御が必要でした。

## 研究成果の内容

今回、本研究グループは、材料データベースと機械学習を組み合わせることにより、物理的、化学的、または材料的な要因を考慮した界面熱抵抗<sup>(2)</sup>を高精度に予測できるアンサンブル回帰木モデルを構築しました。このモデルを利用して、界面熱抵抗が大きく、具体的に作製が可能な材料の組み合わせ（シリコンとビスマス）を選択しました。

この予測された材料種をターゲットに、ナノ構造を徐々に変化させた複数のサンプルを作製し、その熱伝導率評価を評価したところ、無機複合薄膜材料において世界最小の熱伝導率を有する材料の合成に成功しました。サンプル作製には、徐々に成膜パラメータを変化させた薄膜材料の作製が全自動で可能なNIMS独自開発のコンビナトリアル・スパッタコーティング装置を利用することで、効率的な材料探索を実現しました。また、NIMSにて開発した $\omega$ 方式の熱伝導評価装置により、薄膜の熱伝導率を高精度に測定することが可能となりました。作製したサンプルの断面を透過型電子顕微鏡で詳細に観察したところ、アモルファスシリコン中にビスマスの微結晶を散りばめた構造（図参照）が、無機複合薄膜として最小の熱伝導率（熱伝導率 0.16 W/mK）を実現したことを見出しました。

## 今後の展開

本研究では、マテリアルズ・インフォマティクスを活用することで、極めて効率よく新規機能性材料の探索、あるいは、既存材料の高性能化を行うことができることを示しました。今後は、断熱材料のさらなる高性能化はもちろんのことながら、放熱材料、熱電材料などの熱関連材料の開発や、その他、エネルギーに関連するトライボマテリアル、太陽電池など、様々な材料開発分野への応用を目指します。

## 掲載論文

題目：Electrically Conductive Thermally Insulating Bi-Si Nanocomposites by Interface Design for Thermal Management

著者：Yen-Ju Wu, Michiko Sasaki, Masahiro Goto, Lie Fang, Yibin Xu

雑誌：ACS Applied Nano Materials

掲載日時：2018年7月3日（現地時間）

## 用語解説

- (1) アンサンブル回帰木：機械学習で用いられる予測モデルの一つ。
- (2) 界面熱抵抗：材料界面で生じる熱伝導を妨げる熱抵抗のこと。

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門 情報統合型物質・材料研究拠点  
データプラットフォーム

プラットフォーム長 徐 一斌 (しゅう いーびん)

TEL : 029-859-2258, FAX : 029-859-2201

E-mail: Xu.Yibin@nims.go.jp

(報道・広報に関すること)

国立研究開発法人 物質・材料研究機構 経営企画部門 広報室

〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1

TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017

E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp

(補助事業に関する問い合わせ先)

国立研究開発法人 科学技術振興機構

イノベーション拠点推進部 COI グループ

E-mail: ihub@jst.go.jp

URL: <http://www.jst.go.jp/ihub/>