



## 常温から 400℃対応までの 熱電変換材料を開発

物質・材料研究機構 (NIMS) の高際良樹主任  
研究員と Zhufeng Hou 特別研究員らは、東京  
大学の津田宏治教授とともに、機械学習 (ベ  
イズ最適化) を用いて、アルミニウム、鉄、  
シリコンという汎用元素のみでできた熱電変  
換材料を創製し、室温から 400℃まで対応が可  
能な新たな組成を見いだした。

IoT 社会を支える膨大なセンサやウェアラ  
ブルデバイス用の小型自立電源として、熱を  
電気に直接変換できる熱電材料が注目されて  
いる。わずかな温度差でも発電できること、  
小型化が容易であること、メンテナンスフリー

であること等の優れた特徴を有している。一  
方で、資源量の少ない高価な元素や毒性元素  
の使用が問題視されており、また、使用でき  
る温度域が狭く使用環境ごとに材料を変えな  
ければならない等の課題があり、大規模な普  
及にはこれまで至っていなかった。NIMSでは、  
熱電材料の本格的な普及を目指し、無害かつ  
資源的制約の少ない元素を用いた材料研究開  
発に注力しており、室温から 200℃までの温度  
域で使用ができるアルミニウム、鉄、シリコ  
ンのみからなる新材料開発に近年成功してい  
た。より広範な応用に向けて、使用温度域を  
拡張させることと中温域での性能向上が課題  
として残されていた。

今回、数限られた実験データ (組成、出力  
性能、温度) を学習させた結果、これまでの  
実験では探索範囲外であった組成が中温  
域 (200℃～400℃) での出力特性を向上させ  
るという結果が導かれた。実際に予測された  
組成で材料を合成したところ、従来と比較し  
て 40% も出力性能を向上させることに成功し

た。また、その近傍の組成では出力性能が減  
少したことから、最適な組成を発見したこと  
になる。本材料を用いると、100℃の温度差で  
35mW/cm<sup>2</sup>の出力が得られる。

特筆すべきは、実験では探索外であった組  
成を機械学習が予測したことで、性能向上化  
への新たな道筋を見いだした点にある。今回  
見いだされた組成は、主相の半導体的な特性  
を示す主相とは異なる金属的な特性を示す第  
二相がわずかに析出する組成領域であった。  
現状では、機械学習からはなぜ性能が上がる  
のかを理由づけることは困難であるが、今後  
の詳細な解析により、そのメカニズムを解明  
することができれば、一層の性能向上に資す  
る指針を示すことができる。

(国立研究開発法人物質・材料研究機構  
主任研究員 高際良樹  
連絡先 〒 305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1  
E-mail: TAKAGIWA.Yoshiki@nims.go.jp)  
[2019年3月28日]