

MERIT 長期海外派遣報告書

新領域創成科学研究科 物質系専攻 博士課程3年

木村(薫)研究室 佐藤直大

派遣期間：2017/6/4～2017/7/22

概要

フランス、イゼール県グルノーブルにある CEA Grenoble (フランス原子力・代替エネルギー庁)の Natalio Mingo 博士率いる材料物性理論グループ (以下、Mingo グループ)に滞在して研究活動を行った。本報告書では滞在中の研究内容の概略や生活について報告する。

渡航背景

Mingo グループは第一原理計算に基づいて非調和フォノン物性を計算するソフトウェアパッケージ ShengBTE およびその後継の almaBTE を開発しており、計算科学による熱電材料などの熱物性研究において世界を牽引し続けている。Mingo 博士およびグループのメンバーとは面識がなかったものの、こちらが実験で扱っていた材料の類似の系についてメールでやりとりをした経験があり、滞在を希望する旨の相談をしたところ、快く受け入れていただいた。

研究内容

本渡航では第一原理計算に基づいた非調和フォノン物性の計算方法について学ぶこと、および我々が興味を持っているいくつかの熱電材料について計算を行い、実験で明らかになっている低熱伝導率の起源を明らかにすることや高性能化への設計指針を得ることを目的とした。

滞在初期には、こちらが興味を持っている幾つかの物質について、計算可能性や大まかな計算の筋道を Mingo 博士とポストクの Ankita Katre 博士と議論し、単位胞中の原子数が比較的少なく短時間で計算が終了することが期待される層状カルコゲナイドから計算をスタートし、全体のプロセスに習熟したのちにより複雑な物質や欠陥を含む構造の計算に移行することにした。必要なソフトのインストールや具体的な計算方法については Katre 博士に教えていただいた。以下に、滞在中の計算結果の概略を物質ごとに示す。

層状構造を有する In_2Te_5 は価電子帯で高いバンド縮重度を有しており、かつ格子熱伝導率が 0.5 W/m K 以下ときわめて低いため、高い熱電特性が期待される。今回行った計算により、 In_2Te_5 は van der Waals 力で弱く結合している層間方向において特に低い格子熱伝導率を示し、Te が平面状に結合している a 軸方向では層間方向の約 6 倍の格子熱伝導率を示すという顕著な熱伝導率の異方性が明らかになった。

CuTaS_3 は b 軸方向に CuS_4 四面体と TaS_6 八面体が無限鎖を形成し、その間隙に大きく空いたトンネルが存在するという擬 1 次元構造を有しており、多結晶試料は 1 W/m K 程度の

低い熱伝導率を示す。今回行った計算により、 CuTaS_3 はフォノン分散関係に顕著な異方性を有しており、トンネルを形成する b 軸方向においては、音響フォノンだけでなく光学フォノンも大きな群速度を有することが明らかになった。更に、トンネルがアルカリ金属やアルカリ土類金属のカチオンで充填された類似の結晶構造を有する物質との比較により、 CuTaS_3 の空いたトンネルに第 4 元素を充填することによってトンネル方向のフォノン群速度を低減できる可能性が示唆された。

滞在中の生活

イゼール県グルノーブルはアルプス山脈とローヌ川に囲まれたローヌ・アルプ地方に位置し、ハイキングコースが多く存在するほか、バステューユ城塞などの文化財も残る美しい街である。MINATEC というヨーロッパ随一の規模を誇る研究施設群のキャンパスが存在し、放射光・中性子施設をも擁するため、世界中から研究者が訪れる街でもある。2013 年から茨城県つくば市と姉妹都市になっているため、筑波大学などから滞在している日本人研究者が多く、しばしば交流する機会があった。

CEA の研究者たちの生活は所謂ヨーロッパ型で、Mingo グループでは遅くとも朝 9 時には全員が揃い、午後 5 時頃には帰り始めるというスタイルだった。最も驚いたのは、基本的に紙媒体やプレゼンなどの進捗報告はしないということだった。その代わりに行われていたのがスクラム・ミーティングといって、毎朝 10 時頃にメンバー全員が集合して立ったまま輪になり、昨日は何をしたのか、今日は何をする予定かを 1 分未満で手短かに話していくというもので、途中でディスカッションになることがあっても 15 分程度でミーティングは終了した。その程度のミーティングであっても Mingo 博士は全体の進捗状況を適切に把握しており、メンバーができるだけ自分の時間を研究そのもの以外に割くことがないように配慮していた。様々な雑事に時間を割きがちな日本人研究者が特に見習うべきスタイルだと感心した。

謝辞

今回の渡航に際してお世話になったすべての方に感謝申し上げます。第一に、Natalio Mingo 博士には、面識のない私の受け入れを快諾していただき、研究の相談から日常生活に至るまで細やかにサポートしていただきました。Ankita Katre 博士をはじめとしてグループのメンバーには計算機の扱いに不慣れな私に様々なことを教えていただきました。最後に、今回の派遣の機会を与えてくださった MERIT プログラムの皆様、および本派遣に快く許可を下された指導教員の木村薫先生、副指導教員の幾原雄一先生に感謝申し上げます。