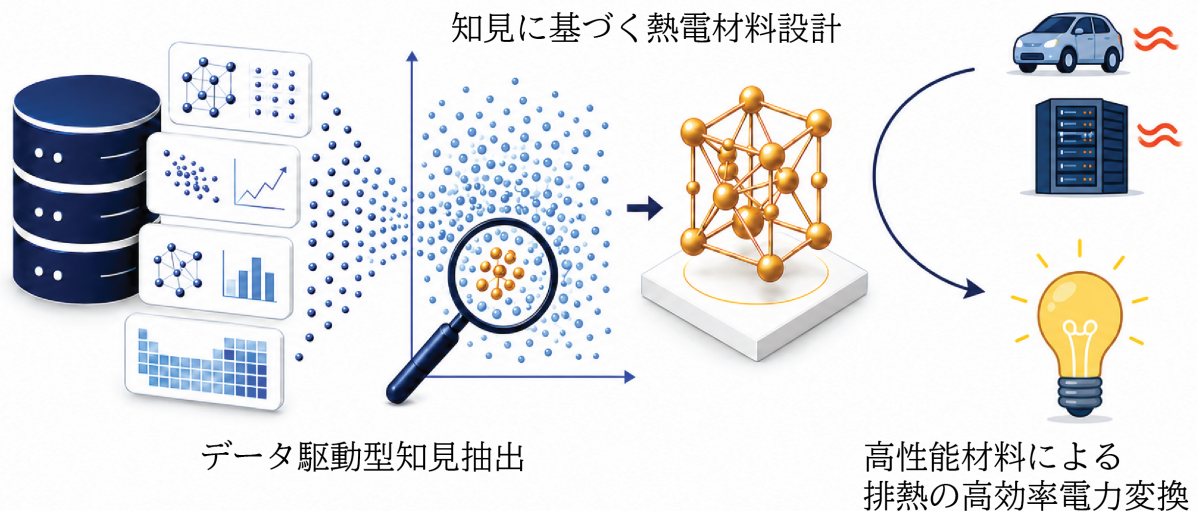


排熱から電気を生み出す熱電材料の"黄金比"を AI が発見 —熱の運ばれ方"50-50"が高性能の目印、自律的材料開発実現への一歩—

概要

京都大学複合原子力科学研究所 孫一帆 助教、黒崎健 同教授、米国ノースウェスタン大学 Chris Wolverton 教授、Zhi Li 同研究員、大阪大学大学院工学研究科 大石佑治 教授、今村哲也 同修士課程学生（研究当時）らの研究グループは、データ解析と機械学習（注 1）により、高性能な熱電材料（注 2）では熱のほぼ半分を原子の振動が、残り半分を電気を運ぶ粒子が担っているという傾向を突き止めました。熱電材料は排熱を電気に変える省エネ技術ですが、有望な材料の絞り込みはこれまで膨大な試行錯誤に頼ってきました。本研究では、約 7 万件の実験データを AI に学習させることで、30 年来、熱電材料分野の中核をなしてきた設計思想「フォノン・グラス・エレクトロニック・クリスタル」（注 3）をデータで定量化することに成功しました。この配分と熱伝導率を予測する機械学習モデルを約 10 万種の化合物に適用して熱を伝えにくい 2,522 の候補材料を特定し、性能を高める元素選びの指針を示しました。本研究成果は、2026 年 7 月 15 日にエルゼビア社が刊行する国際学術誌「*Materials Today Physics*」にオンライン掲載されました。



膨大な実験データからデータ解析で高性能材料の「目印」を抽出し、新しい熱電材料の設計につなげる。自動車やデータセンターなどの排熱の高効率な電力変換を目指す。（作成：孫一帆／画像生成：ChatGPT 5.6 Sol を使用）

1. 背景

私たちが石油やガスなどから取り出すエネルギーは、半分以上が有効に使われないまま失われ、その多くが最終的に熱として環境中に捨てられています。熱電材料は、温度差を電気に直接変換できる材料であり、自動車や工場、最近ではデータセンターなどから排出される膨大な未利用熱（排熱）を電気として回収できるため、省エネルギー・脱炭素社会の実現に貢献する技術として世界的に注目されています。

熱電材料の性能は「ZT」（注 4）と呼ばれる指標で評価されます。ZT を高めるには、電気をよく通しながらも熱は伝えにくいという相反する状況が、物質内で実現する必要があります。この理想像は約 30 年前に「フォノンガラス・エレクトロニックリスタル（PGEC）」ーガラスのように熱を伝えにくく、結晶のように電気をよく通す材料ーという概念として提唱され、材料開発の指針となってきました。しかし、この概念はあくまで定性的なもので、「どこまで近づけばよいのか」を測る具体的な物差しはありませんでした。そのため、熱電材料の探索は熱伝導率の低さなどの目安に頼らざるを得ず、有望な材料を見逃したり、性能を引き出すまでの最適化に長い年月を要したりすることが課題でした。

2. 研究手法・成果

研究グループは、まず、世界中の論文から熱や電気の輸送特性に関する実験データを集めたデータベース「Starrydata」（注 5）を精査し、信頼性の高い約 7 万 2 千件のデータセットを構築しました。各データについて、材料中で熱を運ぶ 2 つの担い手ー結晶格子の振動（フォノン）と、電気を運ぶ粒子（キャリア）ーの寄与を分割して解析したところ、性能の高い材料ほど、全体の熱のうち格子が運ぶ割合がおおよそ 0.5、つまり両者がほぼ半々（50-50）になる傾向があることが分かりました。すなわち、PGEC 概念が示す「フォノンとキャリアのバランス」を、実測データに基づく経験的な設計指標として定量化することに成功しました。

次に、化学組成と温度からこの割合と熱伝導率を予測する 2 つの機械学習モデルを構築しました。このモデルで約 10 万 5 千種の無機化合物をふるいにかけ、熱伝導率が極めて低い 2,522 種の候補材料を特定しました。さらに、候補材料の一つである硫化銀ビスマス为例に、どの元素を添加すれば低い熱伝導率を保ったまま熱の配分を半々に近づけられるかという、性能向上の具体的な方針までモデルが提示できることを示しました。

3. 波及効果、今後の予定

新しい材料を「見つける」段階と、見つけた材料を「磨き上げる」段階は、これまで別々に進められてきました。本研究は、この 2 つを「熱の配分」という共通の物差しでつなぐものです。材料の発見だけでなく、性能最適化の試行錯誤を大幅に減らし、自動車やデータセンターの排熱利用、IoT センサーの自立電源、宇宙探査機の電源など、熱電変換技術が担う幅広い応用分野の発展を加速することが期待されます。

今回のモデルは化学組成と温度のみから予測を行うため、結晶構造などの影響を扱える次世代モデルの開発も進めています。その上で、本研究の最大の意義は、熱電材料開発に「どこまで最適化すればよいか」という明確な道しるべを与えた点にあります。従来のデータ駆動探索は、有望な材料を提示することはできても、その先の改良をどこへ向けて進めればよいかまでは示せませんでした。明快な目標値を得た AI が、探索から性能最適化までを一貫して担う「自律的材料開発」の実現を、研究グループは目指しています。

4. 研究プロジェクトについて

本研究の一部は、文部科学省「原子力システム研究開発事業」(JPMXD0220354330、JPMXD0222682541)の支援を受けて実施されました。また、Zhi Li 氏と Chris Wolverton 教授は、U.S. Department of Energy Office of Science Basic Energy Sciences (DE-SC0024256)の支援を受けています。

<用語解説>

(注 1) 機械学習：コンピュータが大量のデータから規則性を自動的に学習し、未知の対象について予測を行う手法。人工知能 (AI) の中核技術の一つ。

(注 2) 熱電材料：材料の両端の温度差を電圧 (電気) に変換できる材料。可動部なしで排熱から直接発電できるため、廃熱回収や宇宙探査機の電源などに利用される。

(注 3) フォノンガラス・エレクトロンクリスタル (PGEC)：「ガラスのように熱を伝えにくく、結晶のように電気をよく通す」という理想的な熱電材料の姿を表す概念。1990 年代半ばに提唱され、熱電材料開発の定性的な指針となってきた。

(注 4) ZT (無次元性能指数)：熱電材料の変換性能を表す指標。ゼーベック係数、電気伝導率、熱伝導率と絶対温度から計算され、値が大きいほど高性能。実用化の目安は $ZT \geq 1$ 程度とされる。

(注 5) Starrydata：世界中の論文に掲載された熱電材料などの実験データを収集・公開しているオープンデータベース。日本の研究グループが構築・運営している。

<研究者のコメント>

約 7 万件のデータを一枚のグラフに描いたとき、驚くほどシンプルで美しいパターンが浮かび上がってきました。その一点一点は、世界中の研究者が積み重ねてきた実験の記録です。膨大なデータの中から知見をすくい上げるデータ解析の魅力を改めて実感した瞬間でした。今後も AI とともにデータの探索を続け、先人たちが残した知恵を掘り起こし、新しい材料の開発につなげていきたいと考えています。(孫一帆)

<論文タイトルと著者>

タイトル：Lattice-to-Total Thermal Conductivity Ratio: A Phonon-Glass Electron-Crystal Descriptor for Data-Driven Thermoelectric Design (格子熱伝導率と全熱伝導率の比：データ駆動型熱電材料設計のための「フォノンガラス・エレクトロンクリスタル」記述子)

著 者：Yifan Sun, Zhi Li, Tetsuya Imamura, Yuji Ohishi, Chris Wolverton, Ken Kurosaki

掲 載 誌：Materials Today Physics DOI：[10.1016/j.mtphys.2026.102166](https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2026.102166)