

## 未来材料探索イニシアチブ —多様な安定相のエンジニアリング—

科学技術振興機構 (JST)

馬場寿夫, 小名木伸晃, 佐藤勝昭, 宮下哲, 永野 智己,  
小林恵, 杉浦晃一, 丹羽洋, 八木岡しおり, 曾根純一

JST 研究開発戦略センター (CRDS) では、昨年来、多様な安定相からの高機能材料の創成につき、ワークショップの開催<sup>1</sup>やインタビューなど、有識者の協力を得て調査分析を進めてきた。このほど、これらを踏まえて「未来材料探索イニシアチブ—多様な安定相のエンジニアリング—」という戦略プロポーザル<sup>2</sup>をまとめ、関係省庁や関係業界・学会などに呼びかけている。この小文では、このプロポーザルを出すに至った背景、具体的な研究開発の課題と推進方法について紹介する。

### 1. プロポーザル提案の背景

エネルギー、環境、モビリティ、IoT などに関する様々な社会的問題の解決のために、新しい機能や高度の機能をもつ材料の開発が期待されている。特に、近年、強度が高く高い靱性をもつ構造材料、導電性が高く熱伝導率が低い熱電材料、飽和磁化が高くかつ保磁力が大きい永久磁石材料などのように、複数の機能の共存、あるいは、相反する機能の両立など、これまで以上に高度な機能が要求されるようになってきた。

このような機能材料開発に対する高度な要求に対し、これまでそれぞれの応用分野で様々な試行錯誤が行われた結果、多くの高機能材料が発見され (表 1 にいくつかを例示)、材料開発が継続されてきたが、それぞれで限界に近づいている。

表 1 高機能材料開発に対する要求の例

機能材料	機能に対する要求	従来材料例	現在開発中の材料例
蓄電池固体電解質	高速 Li イオン伝導と広い電位窓の共存	LiPS	LiSnSiPS
蓄電池正極材料	高 Li 吸蔵・放出特性と安全性の両立	LiCoO	LiMnNiCoO
太陽電池	高い変換効率と長期信頼性の共存	Si, GaAs	CIGS, CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub>
構造材料	軽量化・高強度の両立、高強度・強靱性の両立	ハイテン、	CoCrFeMnNi
熱電変換材料	高電気伝導度と低熱伝導の両立	BiTe, PbTe	PbNaGeTe
磁石材料	高保磁力と高飽和磁化の両立	NdFeB:Dy	NdLaCeFeB
WG半導体	高耐圧と高速動作 (高周波動作) の両立	SiC, GaN	$\alpha$ -Ga <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
蛍光体	多様な発光波長と高輝度の共存	YAG	(Ca,Y)- $\alpha$ -SiAlON:Eu
触媒	高い触媒機能と耐熱性、低コストの共存	Pt, Rh	PdRu, PdRuM
水・ガス分離膜	高い物質選別性と高処理能力の両立	酢酸セルロース	ゼオライト、金属有機構造体 (MOF)
有機半導体	高移動度と塗布 (大面積化) の両立	ペンタセン (低分子)	PBTTT (高分子)

ここ数年、マテリアルズ・インフォマティクスを用いた新材料探索が急速に進展し、未知の可能性を秘めている複雑な組成の材料が候補としてあげられるようになってきた。しかし、せっかくの候補材料も安定に作製できるかどうかはわからない。このため、作製プロセスの制御や、基板と材料の界面や結晶粒界間に働く応力の利用などを通じて、準安定相を含む多様な安定相までを対象とすることで、新規材料の創成をめざすものである。図1に本プロポーザルの研究開発の概略を示す。

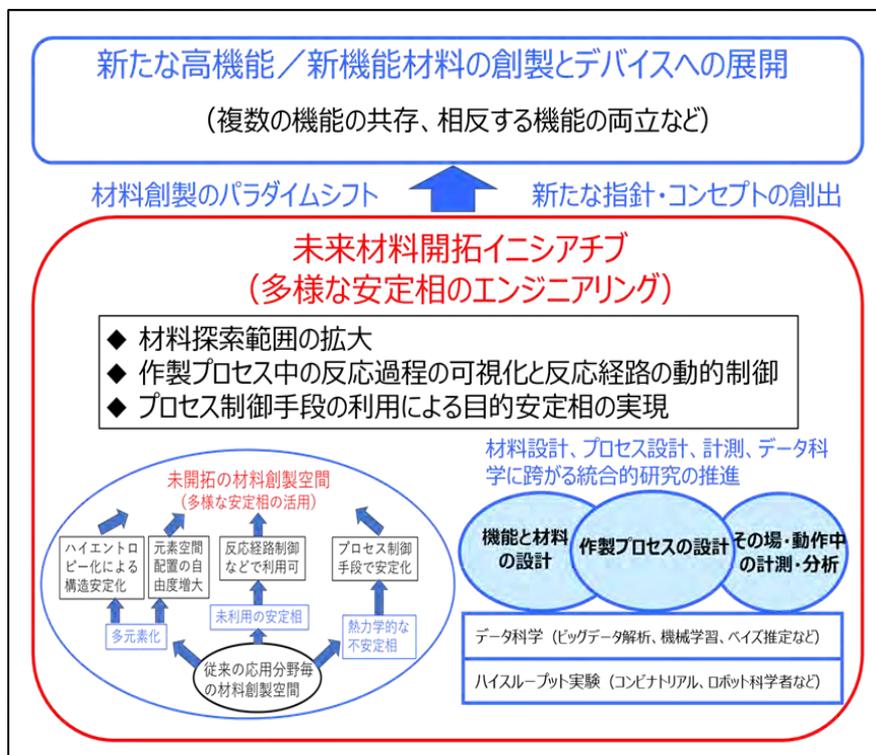


図1 プロポーザルの概略

## 2. 取り組むべき研究開発課題

### 2.1 材料探索範囲の拡大

材料の基本的な特性・機能に大きな影響を与える構成元素、結合状態などの主要因子の役割、さらには複数の元素間の役割分担、添加元素の補完的役割などの明確化が必要である。このような各要素の役割を明確にするためには、理論計算やマテリアルズ・インフォマティクスの利用とともに、ハイスループット実験やデータ科学の活用が重要である。また、作製プロセス中における、原料、前駆体、添加元素、多元素化によるエントロピーの増大、歪みなどの反応経路に関わる役割の明確化も重要である。

これらで得られた各種のデータや機械学習などで分析した結果は、応用分野を越えて活用できるようにデータベース化して共有し、得られた結果を研究者が論理的に理解し、モデル化してシミュレーション等に利用できる形にするために、主要因子を抽出してその役割や効果を学理として体系化していくことが重要である。

さらに、応用分野を横断して新たな安定相を探索・設計する新たな指針を構築していくことが望まれる。

探索方向のひとつが**多元素化**である。これによって、元素の空間配置の自由度を増大させ複雑な組成・構造を生み出すことが可能になる。多種類の元素を含むことは、配置のエントロピーの増大をもたらし、ギブスの自由エネルギーが低下することを通じて比較的低温での作製が可能になる。北川によれば、PdRuナノ合金の触媒活性の高温での安定化に第3元素の添加が寄与することなどが、ハイエントロピーの効果であるという。

## 2.2 作製プロセス中の反応過程の可視化と反応経路の動的制御

多元素を含むことで状態図は多次元化し、図2に示すように多様な安定相が出現する。目的の安定相を自在に作製するには、反応生成物、雰囲気、相変化などをその場での観測・計測（オペランド計測）で可視化し状況を把握することが重要である。このようなオペランド計測を可能とするプロセス装置の開発、反応生成物や反応雰囲気を検出できるその場観測装置、安定相のダイナミックな変化をトレースできる測定技術の開発が必要である。また、オペランド計測での可視化が難しい部分については、反応の理論計算や、これまでに蓄積されたプロセス関連のデータから反応機構を推定して補完することが望まれる。

これらの技術および測定データを基に、様々な条件下での反応過程と安定相のダイナミックな変化を科学的に理解し、反応過程と安定相変化を統合して扱う新たな学理として整理していくことが重要である。さらに、反応過程の途中で他の安定相が優先的に出現する傾向が強い場合などでも、目的の安定相を得るための反応経路を探索し、精密な制御手法の開発を行う必要がある。

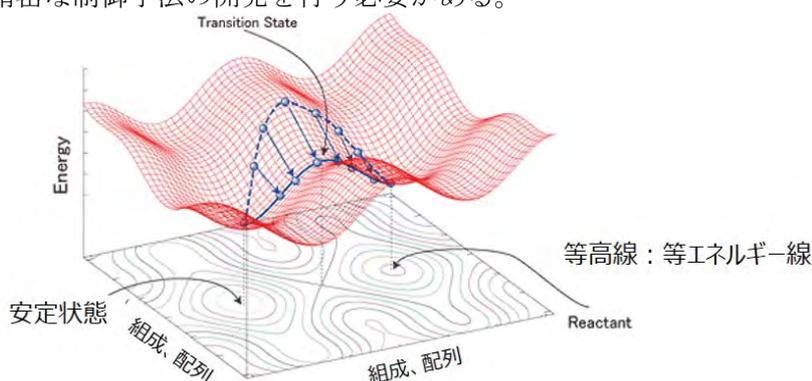


図2 多次元化による新たな安定相の出現

## 2.3 プロセス制御手段の利用による目的安定相の実現

安定相の中には、熱平衡状態では他の安定相とのエネルギーバリアが低く、使用環境では不安定になるものも存在するため、目的の安定相をさらに安定化させる手法の構築も必要である。特定の結晶面を持つ結晶基板によりエピタキシャル成長の原子配列を強制的に揃えたり、高温・高圧の状態から急激に温度や圧力を下げたりするなど、このようなプロセス制御手段を活用して目的の安定相を実現することも重要である。

例えば、ダイヤモンド単結晶は高温・高圧条件下でのみ作製される準安定構造であるが、ダイヤモンド薄膜は高圧の代わりに、基板との界面での格子不整合による応力によって安定化する。また、ミスTVD法を使うことで準安定相の $\alpha$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>が安定化されるという実験例もプロセス制御による安定化の例に挙げられる。

### 3. 研究開発の推進方策

#### 3.1 反応経路設計・計測・評価にわたる総合的な研究開発が必要

上に述べた研究開発を推進していくためには、材料設計から作製プロセス設計（反応経路設計）、オペランド計測、特性評価、データ科学などの統合的な研究開発を行う必要がある。特に、応用分野を横串的に見て、新たな材料設計・プロセス設計の指針を得ることが重要であり、これを強く意識して全体をまとめるリーダーの下で、研究を推進していくことが望まれる。このような研究は、関係する研究機関に跨がるネットワーク的な体制でも可能であるが、計測装置や作製プロセス装置などの開発や、多様な分野に跨がる人材の育成、効率的な研究開発を行う観点では、研究拠点の構築が望まれる。

#### 3.2 新たなコミュニティの形成

大学や国研における様々な基礎分野の研究者に加え、応用分野の様々な課題を知る産業界の研究者・技術者も参加することで、学術的な研究と応用に向けた研究の両方を知る人材の育成が期待される。未開拓の材料への探索範囲拡大や多様な安定相を動的制御して新機能材料を創製するという考え方は世界的に見てもまだ断片的な活動しかなく、我が国において早急にこの研究領域を立ち上げていくことが重要である。このためには、材料設計、プロセス設計、計測、データ科学などに跨がる新たなコミュニティの形成とともに、この研究開発を加速する施策の早期実施が必要である。

### 4. おわりに

高度な機能をもつ未開拓な材料を、多様な安定相のエンジニアリングの観点から探索することの重要性を述べた。結晶工学の探索空間を飛躍的に拡大するもとと革新している。材料探索に関わる研究者各位のご理解とご支援により、戦略目標などの政策として実現することを期待している。

詳細は、令和元年度戦略プロポーザル「未来材料探索イニシアチブー多様な安定相のエンジニアリングー」(pdf 2.5MB)を参照されたい。JST研究開発戦略センターホームページからダウンロードできる。

連絡責任者：佐藤勝昭

国立研究開発法人 科学技術振興機構 研究開発戦略センター 特任フェロー

102-0076 東京都千代田区五番町7 K's五番町

E-mail: Katsuaki.sato@nifty.com

---

<sup>1</sup> 科学技術未来戦略ワークショップ「多様な安定相からの高機能材料の創製」2018年12月16日開催 (CRDS-FY2018-WR-11)

<sup>2</sup> 戦略プロポーザル「未来材料探索イニシアチブー多様な安定相のエンジニアリング」2019年7月 (CRDS-FY2019-SP-02)