

JCCG48 ナノエピ分科会シンポジウム
多様な安定相の結晶成長技術と応用
2019.10.30 @ 大阪大学

シンポジウムの開催にあたって

佐藤勝昭

(国研) 科学技術振興機構 (JST) 研究開発戦略センター(CRDS)

特任フェロー

東京農工大学名誉教授

はじめに

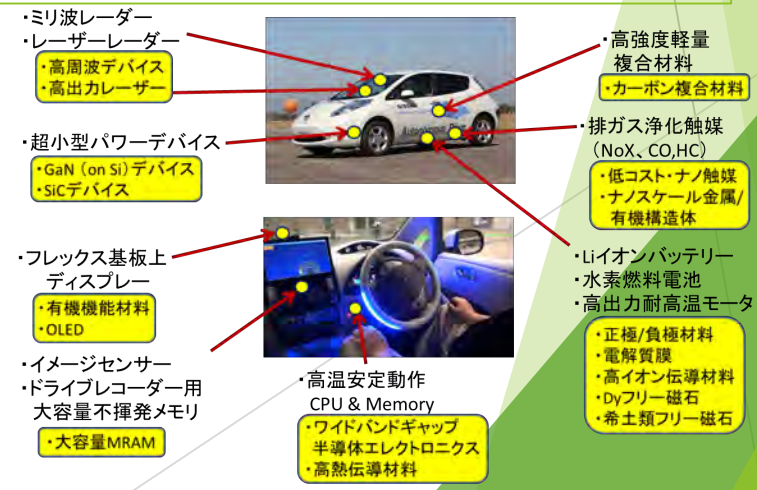
- ▶ 本シンポジウムはJST-CRDSの戦略プロポーザル「未来材料開拓イニシアチブ～多様な安定相のエンジニアリング」(2019年7月)を受けて、寒川義裕先生のイニシアチブで開催の運びとなりました。寒川先生および日本結晶成長学会関係各位に感謝します。
- ▶ 本プロポーザルは、材料創製の探索範囲をこれまで人類が扱ってこなかった未開拓の領域まで大きく拡大することで、高性能・高機能化、複数機能の共存、相反する機能の両立などの材料に対する高度化した要求に応えうる未来材料を創製するための研究開発戦略です。
- ▶ CRDSでは2018年12月に「多様な安定相からの高機能材料創製」ワークショップを開催するなど、多くの有識者からのご意見を頂戴して、このプロポーザルをまとめました。
- ▶ 本提言を政策に反映させるために、学協会のご支援をお願いしています。

1. 提案を実施する意義

社会の様々なニーズ（エネルギーマネージメント、モビリティ、IoT推進、環境負荷低減など）に対応する多様な新機能・高機能材料の要求

- 再生可能エネルギー大量導入時代の電力ネットワーク
 - ▶ 高効率の**太陽電池**（シリコン、CIGS、ペロブスカイト）
 - ▶ 電力の安定供給に向けた**大容量蓄電池**
 - ▶ 高効率な電圧変換を可能とする**パワー半導体**
- 快適なモビリティ
 - ▶ 力強い走りに向けた**小型高効率モーター**（強力な磁石）
 - ▶ 低燃費に向けた**超軽量素材**（軽量高強度鋼板）
 - ▶ **燃料電池**、**軽量・大容量蓄電池**、**高効率パワー半導体**

- IoT推進
 - ▶ エネルギーハーベスティング（**熱電変換デバイス**）
 - ▶ 大量情報収集する**高感度センサー**
- 環境負荷低減
 - ▶ 排気ガスの清浄化（**触媒**）
 - ▶ 高効率ガスタービン（**高温用ブレード素材**）
 - ▶ **有害な元素の代替**、**希少金属代替**



高機能材料開発に対する要求

- ◆材料に対する**複数の機能、相反する特性の両立**などの高度な要求
- ◆複雑な元素組成、結晶構造、結晶相の利用により所望の機能・特性を実現する材料創製への流れ

機能材料	機能に対する要求	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	LiSnSiPS
蓄電池正極材料	高Li吸蔵・放出特性と安全性の両立	LiMnNiCoO
太陽電池	高い変換効率と長期信頼性の共存	CIGS、 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (ペロブスカイト)
構造材料	軽量化と高強度、高強度・強靱性の両立	CoCrFeMnNi (ハイエントロピー合金)
熱電変換材料	高電気伝導度と低熱伝導の両立	PbNaGeTe、SrTiO ₂ /SrO積層構造
磁石材料	高保磁力と高飽和磁化の両立	NdLaCeFeB
ワイドギャップ半導体	高耐圧と高速動作 (高周波動作) の両立	$\alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (準安定相)
蛍光体	多様な発光波長と高輝度の共存	(Ca,Y)- α - SiAlON:Eu
触媒	高い触媒機能と耐熱性、低コストの共存	PdRu
水・ガス分離膜	高い物質選別性と高処理能力の両立	ゼオライト、MOF

新たな高機能／新機能材料の創製とデバイスへの展開

(複数の機能の共存、相反する機能の両立など)

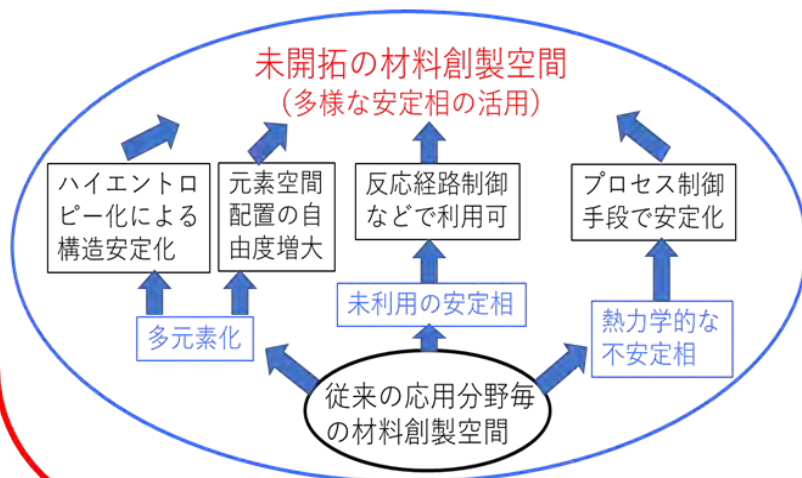
材料創製のパラダイムシフト



新たな指針・コンセプトの創出

未来材料開拓イニシアチブ (多様な安定相のエンジニアリング)

- ◆ 材料探索範囲の拡大
- ◆ 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
- ◆ プロセス制御手段の利用による目的安定相の実現



材料設計、プロセス設計、計測、データ科学に跨がる統合的研究の推進

機能と材料
の設計

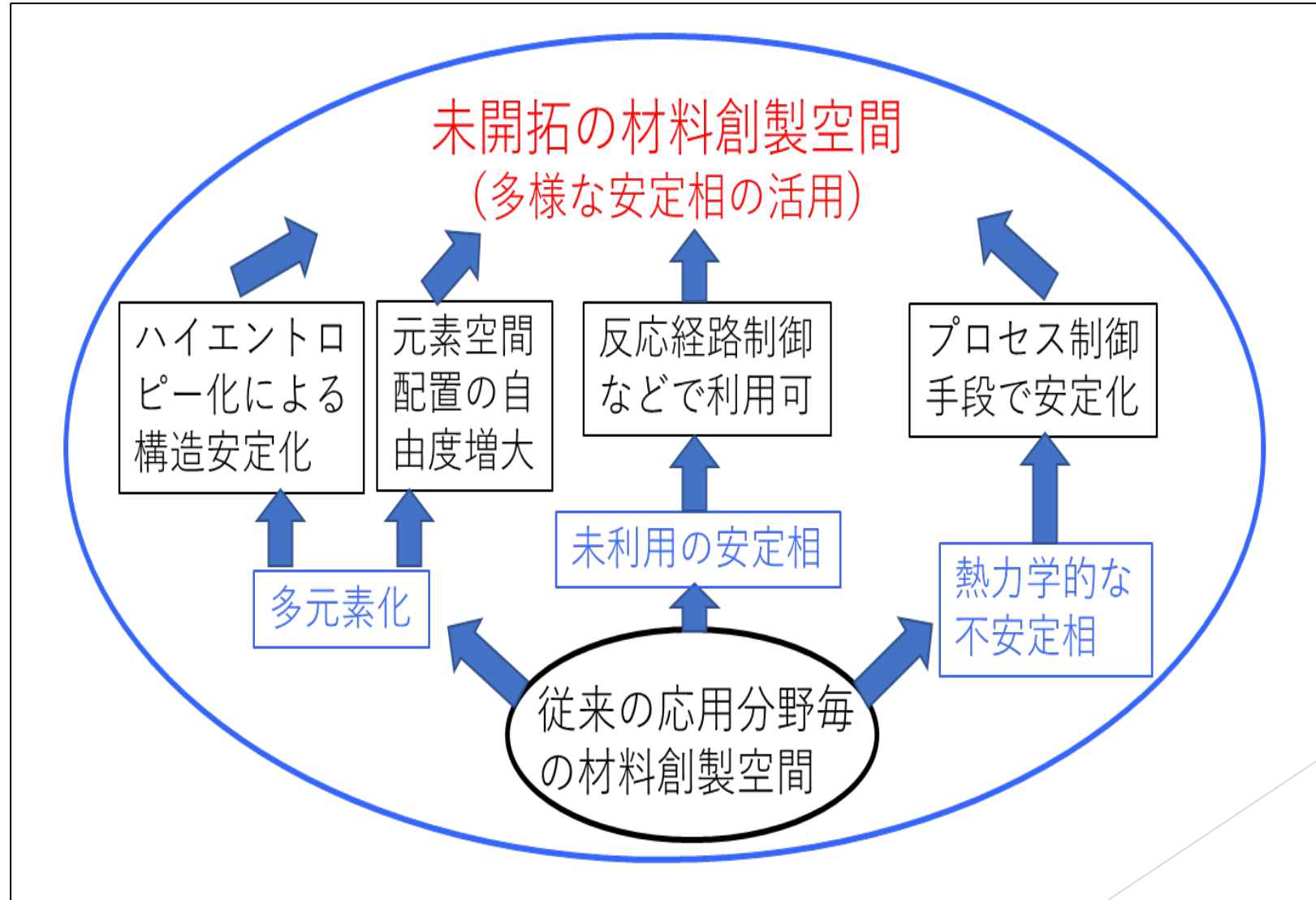
作製プロセスの設計

その場・動作中
の計測・分析

データ科学 (ビッグデータ解析、機械学習、バイズ推定など)

ハイスループット実験 (コンビナトリアル、ロボット科学者など)

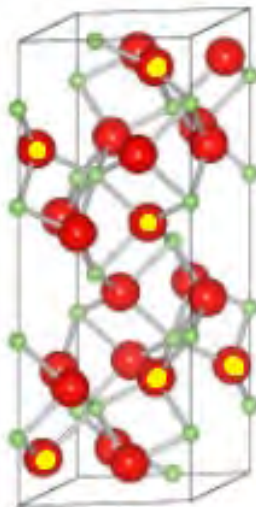
材料探索範囲の拡大



2. 具体的な研究開発課題

2-1. 材料の特性・機能や作製プロセス中における構成元素、結合状態、エントロピー、歪みなどの役割・効果の明確化と目的の機能を発揮する結晶相の設計手法の構築

- 材料の基本的な特性・機能を決定する特定の結晶相における構成元素、結合状態などの役割の明確化（ハイスループット実験の活用、ビッグデータ解析などのデータ科学の利用）
- 作製プロセス中における、添加元素、エントロピー（ハイエントロピー効果）、歪みなどの反応経路に関する役割の明確化
- 新たな結晶相の設計に関わる主要因子の抽出と設計手法の構築

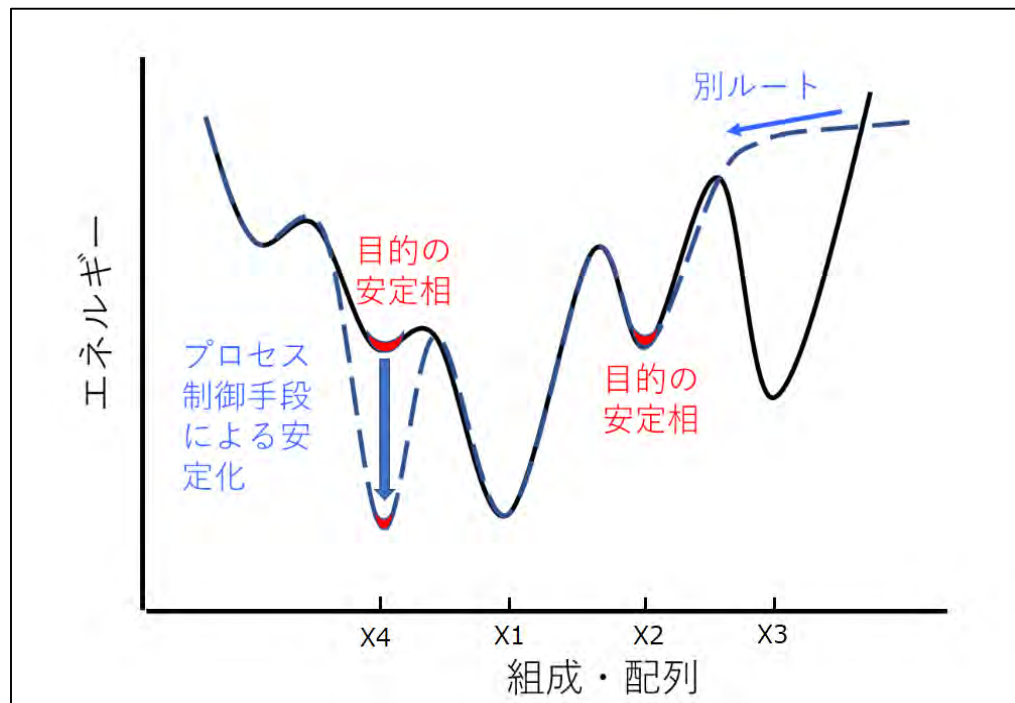


- 元素（質量、イオン半径、電気陰性度、骨格形成、表面反応など）
- 結合状態（共有結合、イオン結合、原子価など）
- エントロピー（元素の種類の数、混合割合など）
- 歪み（ケミカルプレッシャー、外場など）

2. 具体的な研究開発課題

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

- 作製プロセス中の反応生成物、雰囲気、結晶相変化などの
その場観測によるプロセスの可視化

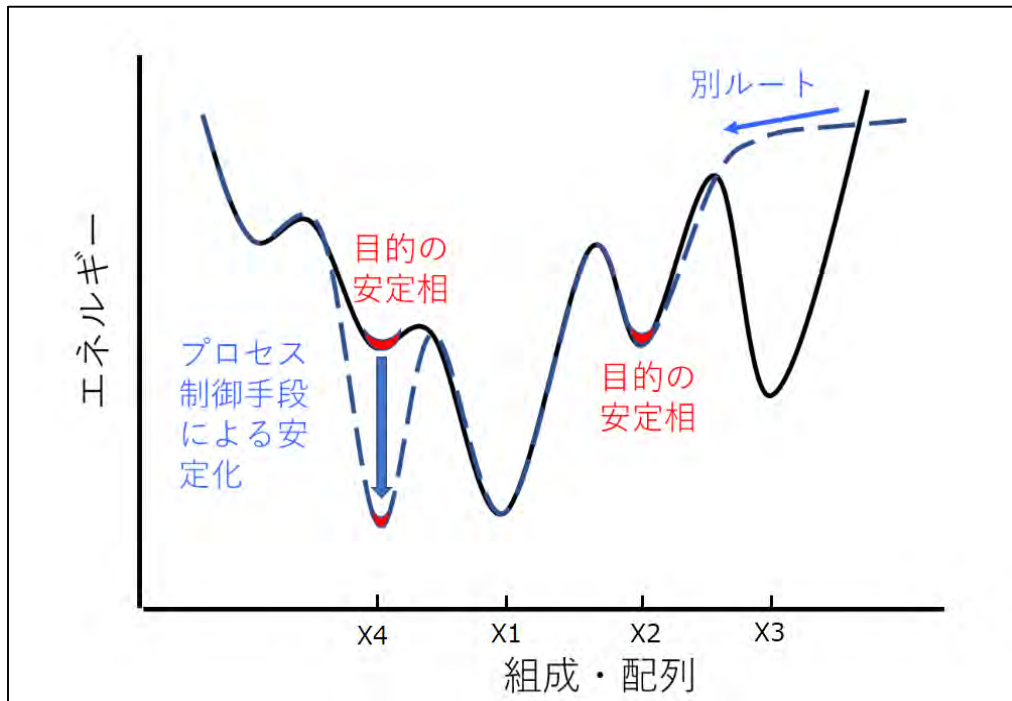


安定相の元素組成や配列と安定性との関係を示す概念図を図に示す。この図では、横軸の真ん中辺り (X1) に、エネルギーが最小となる最安定相が存在するとしており、その左右には複数の安定相 (準安定相) があると仮定している。今、目的の機能を持つ安定相が最安定相の右隣 (X2) にあるとし、実線の右上の点から反応を進めていくと仮定すると、すぐに深いポテンシャル障壁を持つ右端の安定相 (X3) に陥ることになり、その左側の目的の安定相に移ることは難しく、目的の安定相を得ることはできない。このため、点線のように反応の出発点を変えることで、一つの反応過程を経るのではなく、ダイナミックに複数の反応過程を経るなどして、別の反応ルートを経る必要がある。

2. 具体的な研究開発課題

2-3. 外場の利用による結晶相安定化手法の構築

- ▶ 動的な反応過程の理解に基づく反応経路の制御手法の開発
- ▶ 特定の結晶相の安定化を促進する結晶基板、添加元素、圧力変化などの外場効果の定量的評価と学理としての体系化
- ▶ 目的の機能を有する結晶相の安定化手法の開発



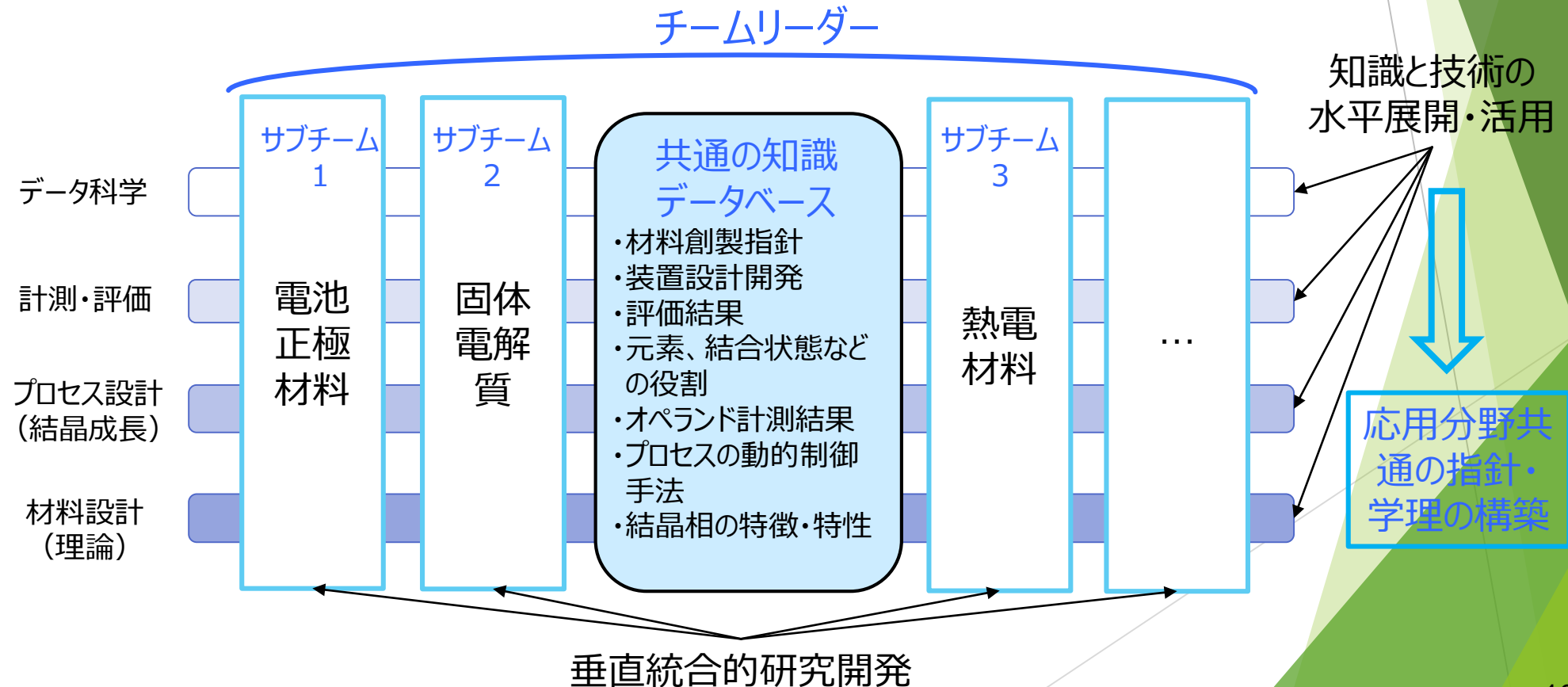
安定相の中には、特性・機能が魅力的であっても、熱平衡状態では他の安定相とのエネルギーバリアが低く、使用環境では不安定になるものも存在する。例えば、図の最安定相の左側にある安定相 (X4) のような場合には、最安定相との間のエネルギーバリアが低くなっている。このような安定相に対しては、反応経路の動的制御だけでは、たとえ材料ができたとしても実際に使うことができない。このため、目的の安定相をさらに安定化させる (エネルギーバリアを高くする) 手法の構築も必要である。

結晶相の動的制御のイメージ図

3. 研究開発の推進方法

3-1. 材料設計、プロセス設計、計測、データ科学に跨がる統合的研究推進

- ・類似の材料系（組成、結晶構造、結晶相など）を基に、**応用分野共通の指針・学理の構築を強力に推進するリーダーの下で技術レイヤーに跨がる研究チーム**を構成
- ・応用領域毎に目的の機能を明確にしたサブチームでの研究を推進
- ・得られた実験データ、解析結果、様々な知見をチーム全体で共有



3. 研究開発の推進方法

3-2. 装置・成長手法共有による効率的な材料開発、人材育成可能な研究拠点の構築

- ・その場観測装置、オペランド計測装置の開発
- ・独自のその場観測装置を組み込んだ結晶成長装置の構築
- ・各種結晶成長装置の共用利用とデータ蓄積
- ・データ分析結果を利用した材料・プロセス設計手法の構築と共有化
- ・産学官の連携促進、広い視野を持つ人材の育成

3-3. 時間軸

- 理論計算、シミュレーション、材料設計、プロセス、計測、データ科学に跨り、材料設計と作製プロセスを一体的に考える新たなコミュニティの形成（1～5年）
- プロジェクト化による支援
 - ・新規安定相の探索、反応過程の可視化・制御、安定化手法検討、機能性の起源の明確化と知見の共有化、コンセプトの実証（POC）（3～5年、文科省・JST）
 - ・新規の材料設計手法構築、計測・結晶装置開発、プロセス開発（5年、内閣府・経産省・NEDO）
 - ・共有化された知見に基づく学理の構築、共通の材料設計・プロセス設計指針の構築（5～10年、文科省・JST）

このシンポジウムの構成

番号	タイトル	発表者	所属
	シンポジウムの開催にあたって	佐藤勝昭	JST
30p-C05	非平衡合成法によるハイエントロピー合金ナノ粒子の作製と応用展開	北川宏	京大
30p-C06	溶液プロセッシングを用いたナノサイズ電極材料の低温合成と機能開拓	本間格	東北大
30p-C07	AI/Robotを用いた多様な安定相の探索技術	一杉太郎	東工大
30p-C09	スパッタ堆積AINの高温固相成長とその基板上へのAlGaIn成長	三宅秀人, 上杉謙次郎, Shiyu Xiao, 正直花奈子	三重大
30p-C08	非平衡性制御による結晶成長の可能性	藤岡洋, 上野浩平, 小林篤	東大, JST-ACCEL
30p-C10	未来材料開拓に向けた相界面制御	寒川義裕	九大, 名大