

## イントロダクション

### Introduction

農工大<sup>1</sup>, 科学技術新興機構<sup>2</sup> ○佐藤 勝昭<sup>1,2</sup>

TUAT<sup>1</sup>, JST<sup>2</sup>, ○Katsuaki Sato<sup>1,2</sup>

E-mail: [Katsuaki.sato@nifty.com](mailto:Katsuaki.sato@nifty.com)

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」<sup>1</sup>(2019年7月)を受けて、多元化合物・太陽電池研究会と結晶工学分科会のイニシアチブで開催の運びとなりました。

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ます。特に、近年、強度が強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ました。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に例示)、材料開発が継続されてきましたが、それぞれで限界に近づいています。

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ました。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りません。このため、本プロポーザルでは、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を通じて、新規材料の創成をめざしています<sup>2</sup>。

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	$\alpha$ -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)

<sup>1</sup> <https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2019/SP/CRDS-FY2019-SP-02.pdf>

<sup>2</sup> 馬場寿夫他: Crystal Letters No. 111 pp. 33-36 (2019)