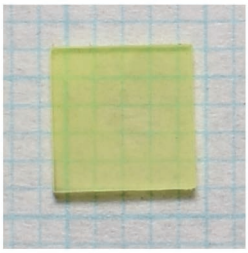
トピックス

透明セラミックス厚膜の高効率製造

産業用や医療用の非破壊検査装置の高機能化に向けたキーマテリアルとして，マイクロメートル厚のシンチレータ結晶がある．従来は，2000° C 以上の超高温の原料融液から育成した大型の単結晶インゴットを，切断・研磨することで薄片化してきたが，製造コストや材料廃棄物の発生が課題であった．

横浜国立大学の伊藤暁彦 准教授らの研究グループは，化学気相析出法を用い，原料ガスから 1 ～ 25 マイクロメートル厚の透明なシンチレータ結晶を低温かつ高速にオンデマンド製造できる技術を確立した．Ce^{3+} イオンを微量添加した $Lu_3Al_5O_{12}$ (Ce:LuAG) シンチレータ結晶を製造したところ，所要時間はわずか 1 ～ 30 分であった．α 線照射に対するシンチレーション発光収率の膜厚依存性を調べたところ，15 マイクロメートル厚の結晶が最も高い発光収率 (31000 photons per 5.5 MeV) を示し，これはシミュレーション結果と一致した．この発光収率は，市販の 1 mm 厚 Ce:LuAG 単結晶の 1.5 倍であり，本技術により高品質シンチレータ結晶の製造が可能であることを示唆している．この結晶をシンチレーションスクリーンとして用いた X 線撮像試験を行い，メモリーカード内部の電子回路の明瞭な透過像を得ることができた．

本技術は，これまで製造に月単位の納期を要していたマイクロメートル厚のシンチレータ結晶の製造コストを大幅に短縮する技術である．対象材料はシンチレーション結晶に限定されず，様々な機能性セラミックス結晶に適用することが可能である．本研究成果および本技術解説は，Scientific Reports 誌 (doi: 10.1038/s41598-022-23839-w) および Japanese Journal of Applied Physics 誌 (doi: 10.35848/1347-4065/aca249) にそれぞれ掲載された．



横浜国立大学大学院環境情報研究院 伊藤暁彦
〒 240-8501 横浜市保土ケ谷区常盤台 79-7
E-mail：ito-akihiko-xr@ynu.ac.jp
URL：https://itonium.net/ynu/

[2023 年 1 月 20 日]

半導体材料 3C-SiC が 高い熱伝導率を示すことを初めて実証

シリコン（Si）原子と炭素（C）原子が相互に規則的に配列した炭化ケイ素（SiC）は，Si を上回る絶縁性，耐熱性，熱伝導性を有し，電車に搭載されるなど次世代のパワーデバイス用材料として実用化が進んでいる．SiC には六方晶（4H, 6H 等），立方晶（3C）等，原子配列の異なる複数種類の結晶形（ポリタイプ）が存在し，4H-SiC, 6H-SiC を中心にパワーデバイスの研究開発・実用化が行われてきた．3C-SiC はこれらに比べて結晶構造が単純なため熱伝導率は高いと期待されるが，海外で作製された 3C-SiC の熱伝導率の報告値（90 W/m·K）は，六方晶（6H-SiC の熱伝導率測定値 320 W/m·K）よりも低い値にとどまっていた．

最近，大阪公立大学，アメリカイリノイ大学，エア・ウォーター株式会社，東北大学金属材料研究所，アメリカジョージア工科大学の研究グループは，半導体材料 3C-SiC が理論値に相当する高い熱伝導率を示すことを，熱伝導率の評価と原子レベルの解析から初めて実証した．エア・ウォーター株式会社が開発した 3C-SiC 結晶を時間領域サーモリフレクタ法を用いて熱伝導率評価した．自立基板においては，500 W/m·K を超える等方性の高い熱伝導率が得られた（**図**）．この値は，大口径材料の中ではダイヤモンドに次ぐ 2 番目に高い熱伝導率であり，放熱材料として使われる銅や銀の熱伝導率（室温で 400 W/m·K 程度）を上回っている．高い熱伝導率を示す理由を調べるために原子レベルの解析を行ったところ，この 3C-SiC 結晶は不純物をほとんど含まず純度が高いこと，また，結晶内の原子が規則的に配列し，単結晶としての品質が非常に高いことが明らかになった．本研究成果は，Nature Communications 誌に掲載されている (https://doi.org/10.1038/s41467-022-34943-w).

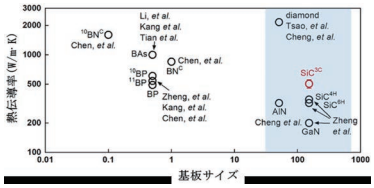


図 3C-SiC の熱伝導率と他の半導体材料との比較

大阪公立大学大学院工学研究科
准教授　梁剣波
連絡先：〒 558-8585 大阪市住吉区杉本 3-3-138
E-mail: liang@omu.ac.jp
URL: https://kyoiku-kenkyudb.omu.ac.jp/html/100000026_ja.html

[2023 年 1 月 26 日]

新型プロトン伝導体を発見し，高いプロトン伝導度のメカニズムを解明

プロトン伝導体は，プロトン（H^+）が伝導する物質であり，水素ポンプや燃料電池など幅広い応用分野のあるクリーンエネルギー材料として期待されている．しかし，これまで中低温域（300 ～ 600℃）で高いプロトン伝導度を示し，安定・安価な材料の報告は少ない．従来の候補材料であったペロブスカイト型プロトン伝導体では，高い伝導度を実現するために化学置換が必要であり，安定かつ高純度な試料の合成が困難なこともあった．一方，六方ペロブスカイト関連酸化物は，化学置換を行うことなく高いプロトン伝導度を示す新材料として注目されているが，その伝導メカニズムは知られていなかった．

東京工業大学 理学院 化学系の村上泰斗特任助教（研究当時），八島正知教授，および豪州原子力科学技術機構（ANSTO）の Maxim Avdeev 博士らの研究グループは，六方ペロブスカイト関連酸化物 β-Ba_2ScAlO_5 が新型のプロトン伝導体であることを見出した．さらに，第一原理分子動力学シミュレーションを行い，この新材料のプロトン伝導メカニズムを解明した．

今回の研究では，六方ペロブスカイト関連酸化物である β-Ba_2ScAlO_5 と α-$Ba_2Sc_{0.83}Al_{1.17}O_5$，ならびに六方ペロブスカイト関連酸化物と類似の結晶構造を持つ $BaAl_2O_4$ のプロトン伝導性を調べた．これらはいずれも本質的な酸素欠損層を結晶構造中に含む．中でも β-Ba_2ScAlO_5 は化学置換なしの状態で，中低温域において $BaCeO_3$ 固溶体に匹敵する最高クラスのプロトン伝導度を示すことが分かった．一方，α-$Ba_2Sc_{0.83}Al_{1.17}O_5$ と $BaAl_2O_4$ は，β-Ba_2ScAlO_5 よりも著しく低い伝導度を示した．このことから，本質的な酸素欠損層が存在するだけでは高い伝導度を示さないことが明らかになった．

第一原理分子力学シミュレーションを行ったところ，β-Ba_2ScAlO_5 ではプロトンが結晶構造全体を動き回るのに対し，$BaAl_2O_4$ ではプロトンが酸素欠損層に局在していることが分かった．これは，酸素欠損層の他に最密充填層（ScO_6 八面体層）が存在する β-Ba_2ScAlO_5 では，プロトンが最密充填層内を大きく移動するが，最密充填層を持たない $BaAl_2O_4$ ではプロトンが移動できないためと考えられる．すなわち，β-Ba_2ScAlO_5 における高いプロトン伝導度は，プロトン伝導が起こる最密充填層と水和が起こる本質的な酸素欠損層の両方が存在するために発現することが明らかになった．本成果は，プロトン伝導性六方ペロブスカイト関連酸化物を設計する指針になると考えられる．

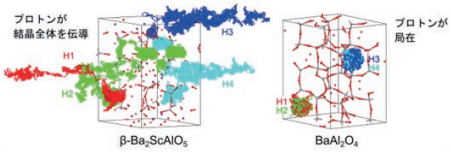


図 第一原理分子動力学法によって計算した β-Ba_2ScAlO_5 および $BaAl_2O_4$ におけるプロトンの軌跡
© Wiley (2022)

東京工業大学　教授　八島正知
連絡先 〒 152-8551 東京都目黒区大岡山 2-12-1-W4-17，E-mail: yashima@cms.titech.ac.jp
HP: http://www.chemistry.titech.ac.jp/~yashima/

[2023 年 2 月 1 日]