

# トピックス

マテリアルズインフォマティクスにより  
巨大誘電率材料の合成に成功  
～積層セラミックスコンデンサの  
新材料開発に道～

現在、スマートフォンやパソコンなど、あらゆる電子機器に積層セラミックコンデンサ(MLCC)が使用されている。MLCCの誘電体材料には、ペロブスカイト型結晶構造を有するチタン酸バリウム(BaTiO<sub>3</sub>)が用いられている。このBaTiO<sub>3</sub>は室温付近で約4000の巨大な誘電率を示し、MLCCの小型化と大容量化を支える中核材料である。発見から80年を経た現在も、BaTiO<sub>3</sub>を超える巨大誘電率材料は見つかっていない。著者らはその一因として、従来の材料探索が安定相のみを対象とした合成実験に依存していたことを指摘している。通常の合成法では準安定な材料を得ることが難しく、探索空間が限定されていたと考えられる。

この課題を克服するため、著者らはJFCCおよび芝浦工業大学との共同研究により、従来の実験的手法では探索が困難であった準安定材

料をも含む広大な材料空間を対象とした、新しい巨大誘電率材料探索スキーム(図1)を構築した。第一原理計算に基づくフォノン解析を行い、マテリアルズ・インフォマティクスによって高誘電率材料候補を効率的に抽出することに成功したのである。得られた複数の候補のうち、非平衡合成プロセスを適用して高压合成を行った結果、準安定なペロブスカイト型RbNbO<sub>3</sub>の合成に成功した。

得られた単結晶の品質は現時点では十分とはいえないが、室温において誘電率800~1000程度を確認している。この結果は、第一原理計算を基盤とするマテリアルズ・インフォマティクスが新規巨大誘電率材料探索に極めて有効であることを示している。今後、結晶品質の向上とプロセス最適化を進めることで、BaTiO<sub>3</sub>を凌駕する次世代高誘電率材料の創出が現実のものとなる可能性が高い。

(掲載誌: Advanced Intelligent Discovery, DOI: 10.1002/aidi.202500141)

[著者連絡先等]

〒456-8587 名古屋市熱田区六野二丁目4番1号

一般財団法人ファインセラミックスセンター  
ナノ構造研究所 計算材料グループ長 主幹研究員

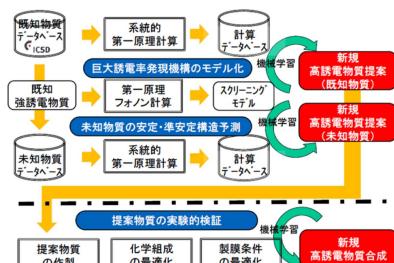


図1 本研究における巨大誘電率材料探索スキーム。

結晶構造データベースから第一原理計算により計算データベースを作成し機械学習などを活用したマテリアルズインフォマティクスにより、巨大誘電率候補材料を導出。導出した候補材料を非平衡プロセス等を活用し、巨大誘電率候補材料を合成・開発する。

森分博紀

E-mail: moriwake@jfcc.or.jp

[2025年11月15日]

## セラミックスにおける新拡散メカニズムを発見 ～セラミックスの焼結メカニズムの解明と新たな粒界設計指針の構築～

東京大学の幾原雄一特別教授(兼: 東北大学WPI-AIMR教授・JFCC客員主管研究員)、柴田直哉教授、フウビン特任准教授、二塚俊洋特任研究員らの研究グループは、原子分解能電子顕微鏡法と第一原理計算を組み合わせることで、添加元素が結晶粒界を拡散する際に生じる新たなメカニズムを発見した。

セラミックスの焼結過程では、添加元素が粒界に偏析しながら拡散することが知られている。しかし、拡散が粒界中のどの原子位置を経由して進むのか、またその過程で粒界構造がどのように変化するのかは、これまで十分に理解されていなかった。本研究では、Tiを添加したアルミニナ粒界を対象とし、最先端STEM(走査透過電子顕微鏡)法とEDX(エネルギー分散型X線分光)による原子分解能組成分析を組み合わせて、拡散中の先端領域の原子構造を詳細に観察した。

その結果、Tiの拡散に伴い、粒界構造が「非

対称構造」から「対称構造」へと転移する現象を確認した。アルミニナの粒界をTi原子が拡散し、図に示すように、(a)から(e)へと構造が変化する。表面近傍ではTiが高濃度で偏析し粒界は対称構造を示す一方、深さ約1μmより内部ではTi濃度が低下し、元来の非対称構造が維持されていた。さらに拡散速度を比較したところ、対称構造におけるTiの拡散速度は、非対称構造の10倍以上に達することが判明した。すなわち、粒界が対称構造に転移した瞬間に拡散が急激に加速される「二段階拡散現象」が存在することが初めて示された。この構造転移と拡散挙動は第一原理計算でも合理的に説明され、実験結果とよく一致した。

本成果は、セラミックス焼結における拡散機構の本質的理解を進展させ、焼結条件の最適化や微細構造設計に新たな指針を提供するものであり、次世代材料開発に大きく貢献することが期待される。本成果は、2025年11月7日に以下のNature Communicationsの誌上で発表された。

Chuchu Yang, Bin Feng, Toshihiro Futazuka, Naoya Shibata, Yuichi Ikuhara, Nature Communications, DOI: 10.1038/s41467-025-65745-5

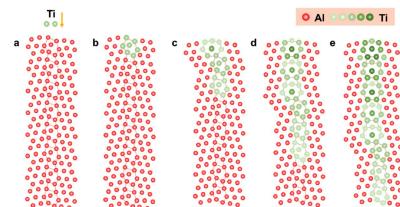


図 本研究で提案される粒界二段階拡散現象の模式図

[著者連絡先等]  
〒113-8566 東京都文京区弥生2-11-16  
東京大学大学院工学系研究科総合研究機構  
特任准教授 フウビン

E-mail: feng@sigma.t.u-tokyo.ac.jp  
URL: https://www.t.u-tokyo.ac.jp/press/pr2025-11-07-002

[2025年12月1日]