安全保障技術研究推進制度　令和５年度採択大規模研究課題　中間評価結果

1.　評価対象研究課題

（１）研究課題名：高速放電技術のための新規コンデンサ材料の探索

（２）研究代表者：ファインセラミックスセンター　森分　博紀

（３）研究期間　：令和５年度～令和９年度（予定）

2.　中間評価の実施概要

日時　　：令和７年１１月１０日

場所　　：ＴＫＰ新橋カンファレンスセンター

評価委員：長岡技術科学大学　名誉教授、特任教授
　井原　郁夫
東京科学大学　工学院　電気電子系　教授
　梶川　浩太郎
情報通信研究機構　主席研究員
　門脇　直人
慶應義塾大学　名誉教授
　神成　文彦
大阪大学　大学院工学研究科　教授
　近藤　正彦
東京農工大学　名誉教授
　佐藤　勝昭
国立健康危機管理研究機構　国立感染症研究所　客員研究員
防衛医科大学校　名誉教授
　四ノ宮　成祥
科学技術振興機構　研究開発戦略センター　戦略総括監
　中山　智弘
量子科学技術研究開発機構　高崎量子技術基盤研究所
　先端機能材料研究部長
　八巻　徹也
情報通信研究機構　電磁波研究所　総括研究員
　山本　真之

（委員長以外は五十音順・敬称略）

3.　研究の進捗状況

研究の概要

発見から 80 年を超えた現在まで、チタン酸バリウム[*1] を凌駕する高誘電率コンデンサ材料は開発されていない。それは、試行錯誤的な実験による探索に限界があったためと考えられる。本研究では、チタン酸バリウムを凌駕する高誘電率コンデンサ材料を開発するという明確な意志のもと、提案者が得意とする第一原理計算[*2] の様々な手法と、新しく活用できるようになったデータ科学技術を駆使して、広い探索空間の中から、的確に候補材料を探索し、合成実証することを目指す。

第一原理計算の誘電体材料の研究への応用には 40 年近い歴史があるが、その殆どは、実験的に強誘電性を示すことが分かった物質に限定して、詳しく解析することを目的とするものであり、計算が先導して新規誘電材料を探索した研究例は極めて少ない。その理由として、①巨大誘電率発現機構の汎用的なモデルが不明であったこと、②網羅的な第一原理計算を実施するための計算コストが高かったこと、③合理的に計算対象を絞りこむ技術が存在しなかったことが挙げられる。本提案では、これらの課題を解決することを通して、コンデンサ材料開発のみならず、幅広い機能材料の開発にブレークスルーを導くことを目的としている。

本研究では、第一原理計算が先導し、先端的データ科学技術を応用して、新規コンデンサ材料の探索・提案に成果を上げることが最終目標である。優れた性能を示す新規材料を発見することだけが目標ではなく、発見に至る一連のプロセスを提示することも同様に重要な目標となる。

その要素課題は、(1) 巨大誘電率発現機構のモデル化、(2) 新規高誘電物質の提案（既知物質）、(3) 新規高誘電物質の提案（未知物質）、(4) 提案物質の実験的検証の４つのステージに分けられる。これらを通して発見から 80 年を超えた現在まで、開発されていないチタン酸バリウムを凌駕する高誘電率コンデンサ材料の提案・開発を目指す。

進捗状況

①マテリアルズインフォマティクス[*3] により複数の巨大誘電率候補材料の導出

②複数の巨大誘電率候補材料の合成に成功

③従来合成されていなかった準安定相ペロブスカイト型 $RbNbO_3$ の高密度に欠陥を含有する単結晶サンプルにて誘電率 1000（室温）を確認

4.　中間評価の評点

A　進捗は順調であり、研究計画に沿って進めてよい。

5. 総合コメント

マテリアルズインフォマティクスを駆使し、複数の巨大誘電率候補材料の合成に成功し、単結晶サンプルにて誘電率 1000 を確認している点は評価できる。

中間評価時点では高い誘電率が確認できているが、目標である既存の材料を凌駕する材料の実現は、現アプローチを続けた場合には達成困難と思われる。目標達成に向けた具体的な道筋を示し、その計画に沿って進めることが不可欠である。

今後、新たに導入した成膜システムを稼働させ、材料探索を加速するとのことであるが、中間時点としては進捗が遅れ気味である。継続して蓄積された基礎的な知見も活用し、ここからの成果を期待したい。また、研究に従事する人員を増やして、研究を加速していただきたい。

6. 主な個別コメント

- 最終目標を達成できるかどうかは楽観できない。計画を練り直すのも一考かと思われる。
- 高誘電率となる理論を導いていただきたい。
- 計算とコンビナトリアルの融合について、一つのモデルを作っていただきたい。これに自動実験を組み合せることを検討していただきたい。

---

*1 チタン酸バリウム：ペロブスカイト型結晶構造を有し、室温付近で４０００程度の巨大誘電率を示す。この巨大誘電率を用いて積層セラミックコンデンサ材料として用いられている。

*2 第一原理計算：「第一原理計算（first-principles calculation)」とは、実験をする代わりにコンピュータの中で物質の性質を量子力学から直接計算する方法。“first-principles”とは文字通り、最初の原理＝物理の基本法則（第一原理）だけを使うということを示しており、実験データや経験式を使わずに、理論だけで物質の構造や性質を導き出す。

*3 マテリアルズインフォマティクス：材料開発に第一原理計算、データ科学や人工知能（AI）を活用して、効率的に新材料を発見・設計する方法。