

研究課題別 事後評価結果

1. 研究課題名: 欠陥誘起ナノドメインによる新規リラクサ強誘電体の開発

2. 研究代表者: 野口 祐二 (東京大学 先端科学技術研究センター 准教授)

3. 研究概要:

本研究は、3次元構造を持つペロブスカイト型強誘電体に、1次元・2次元的な欠陥(欠陥複合体)を導入することにより、従来に無い材料設計指針を提案し、新規な次元融合リラクサ強誘電体を開発することを目的としている。強誘電体において、欠陥複合体は自由エネルギーの不均一性をもたらす、ナノドメインを誘起する活性中心として働く。すなわち欠陥誘起ドメインは外部電場に敏感に応答するため、巨大な誘電性・圧電性の発現が期待出来る。そこでこの欠陥誘起ナノドメインを積極的に利用した材料設計により、①実用レベルの非鉛強誘電体セラミックスの開発、②医療用高性能強誘電体単結晶の開発を目指した。

現在までに得られた成果を以下にまとめる。

3-1. 1次元欠陥複合体導入により、 BiFeO_3 結晶の分極反転に成功。

ペロブスカイト型強誘電体の中で最も大きな自発分極(P_s)と高いキュリー温度($T_c=850^\circ\text{C}$)を併せ持つ BiFeO_3 を選択し、第1原理バンド計算により欠陥複合体を設計した。一般に従来の結晶では内部に多くの格子欠陥が存在するため、欠陥複合体の機能が生かされない。そこで Bi や酸素空孔の少ない高品質な結晶を育成することから始め、次に酸素分圧を固定し様々な欠陥複合体を導入し、特性を評価した。その結果、 Zn^{2+} と Mn^{4+} 欠陥複合体を導入した結晶において、バルク結晶としては世界最高の大きな残留分極($P_r=84 \mu\text{C}/\text{cm}^2$)が得られた。欠陥複合体によるナノドメイン制御が、強誘電体の材料開発に有効であることを単結晶の研究で初めて実証した。

3-2. 3-1で得られた欠陥制御指針を BiFeO_3 系セラミックスに適用することで、チタン酸ジルコン酸鉛(PZT)を凌駕する非鉛系圧電セラミックスの生成に成功。

原料として粒子径 100nm の活性粉末を用いることで、相対密度 95%以上の高密度セラミックスが得られ、次に、欠陥複合体($\text{K}^+\cdot\text{Ti}^{4+}$)を導入した結果、PZT セラミックスを凌駕する良好な圧電歪み特性($d_{33}'=324\text{pm}/\text{V}$)が得られた。この系における欠陥制御を進めることで、高温領域(300°C 前後)でも機能する圧電セラミックスが得られることが期待される(特許出願)。

このような欠陥誘起分極反転法は新規でかつ有用な圧電材料の設計指針となり、材料開発の上で応用も広く、今回開発された BiFeO_3 系のセラミックスは、現行の PZT が適用できない原子力発電の高温部材の超音波診断や自動車の燃料噴射インジェクター等にも応用が可能である。

4. 事後評価結果

4-1. 外部発表(論文、口頭発表等)、特許、研究を通じての新たな知見の取得等の研究成果の状況

発表論文: (邦文) 5件 / (英文) 49件

口頭発表: (国内) 106件 / (海外) 31件

特許出願: (国内) 2件 / (海外) 0件

本研究は、3次元構造の中に1,2次元欠陥構造を入れるという従来に無い材料設計指針を確立し、次に具体的な材料としてPZTに代わる非鉛系の BiFeO_3 に欠陥誘起法を導入、結果として高温でも作動可能な圧電セラミックスを開発した。少数精鋭型チームでの研究として、実用レベルの新規強誘電体を開発したことを評価する。ただし多くの論文の提出がある中、特許出願が少なく、今後企業を巻き込んで開発を行うには不安が残る。早急に特許戦略作りが必要と考える。若い研究者が目標を決めて思う存分仕事が出来たことはサポート部隊も含めて模範的な成果である。

4-2. 成果の科学技術への貢献

本研究はさきがけの成果をもとにしたもので、少人数・短期間での目標課題への挑戦であったが、 BiFeO_3 や PbTiO_3 の分極反転を可能にし、新たな非鉛系材料として可能性のある物質を見出した。これらの材料に関する研究が進展し、特性・品質・安全性が要求スペックに入れば、医療用の超音波診断装置のプロープに利用出来る。現在、PZTセラミックスを用いた超音波プロープが幅広く利用されているが、特性向上が求められており、超音波プロープの感度向上と広帯域化により高性能診断装置の開発に成功すれば、早期のガン発見、臓器の簡便な診断や病気予防に貢献出来る。

本研究で提案された新規な材料設計は、誘電材料だけでなく他の機能性ペロブスカイトにも適用出来ることから、我が国の電子材料開発の基幹技術にまで発展する可能性がある。その意味でバルクではなく薄膜デバイスの開発にも期待したい。

4-3. その他特記事項

格子欠陥を積極的に利用する欠陥誘導ナノドメインの新規強誘電体を開発し、非鉛強誘電体セラミックスで成果を得、研究代表者はこの世界では若きリーダーになってきた。コンセプトの斬新性と実証力からSORST期間中でも種々の学会から研究奨励賞やポスター発表賞等数多くの賞を受けた。最近では国内のみならず外国からもヤングリサーチャーとして表彰を受けていることは、上記のことを良く裏付けている。