



# プロセスインフォマティクス 総合プラットフォームの構築



R-1

アピール  
ポイント

プロセス最適化を支援するサイバーフィジカル協奏プラットフォーム【技術シーズ：統合型プロセスシミュレータ】

## 背景・課題

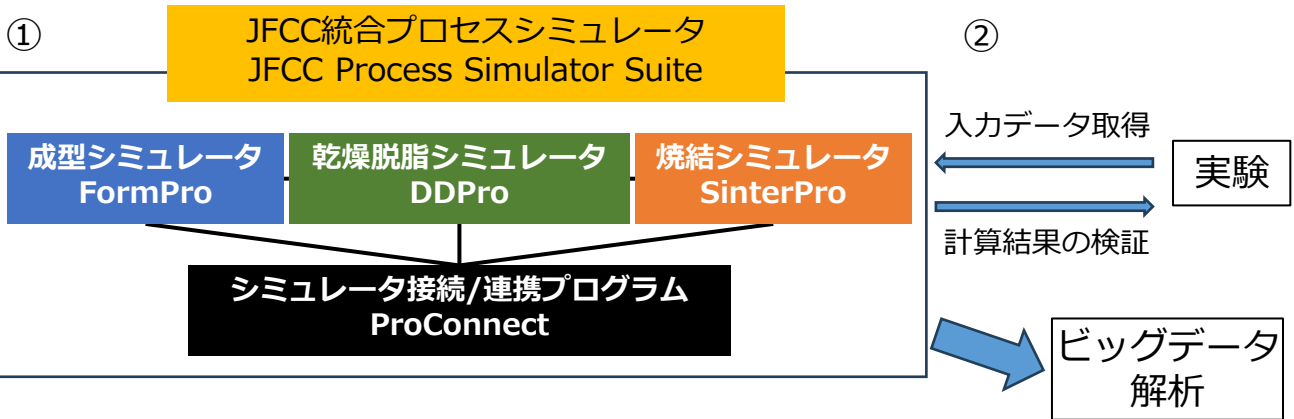
- セラミックス部材の製造では、多数の条件最適化が必要
- 製造時のエネルギー消費や環境負荷の低減のためのプロセス全体最適化には、プロセスインフォマティクス（PI）の活用が有効
- インフォマティクスに必要なデータの蓄積＝ビッグデータの創出が課題

## 解決手段

- 各要素プロセスに対応したシミュレーション技術の開発と統合化
- 統計学や情報科学を用いた新たなプロセス最適化技術の創出
- 実験と計算機シミュレーションを活用したプロセスビッグデータの迅速構築

## 成果・新規性

- ①焼結シミュレータSinterPro、乾燥脱脂シミュレータDDPro、成形シミュレータFormPro、シミュレータ連結プログラムProConnectを含む統合型シミュレータ**JFCC Process Simulator Suite**を開発
- ②データ取得／検証実験装置群、統合型シミュレータ、ビッグデータ解析プログラムからなる**プロセスインフォマティクス総合プラットフォーム**を構築



## 期待される市場・応用

- 先進セラミックス部材
- 金属や樹脂などの粉体を原料とする部材／複合部材
- 製造プロセス解析

## 発表文献

木村、寺坂, セラミックス, 58 (2023) , 680-683.  
松田、木村, セラミックス, 59 (2024) , 255-257. ほか

謝 辞：本研究は、NEDO委託業務「次世代ファインセラミックス製造プロセスの基盤構築・応用開発」（JPNP22005）の一環として実施されたものである。

担当者：木村禎一、村田秀信、寺坂宗太、植松昌子、野村浩、木下陽日紀 ほか

共同研究者：（東京大学/JFCC）幾原雄一、（東京大学）栃木栄太、近藤隼、（東北大学）久保正樹



# シミュレーションとその場観察による鋳込み成形中の粒子挙動解析

9



R-2

## アピール ポイント

スラリー中の粒子挙動をシミュレーションで再現可能  
【技術シーズ：スラリー内部構造のその場観察技術】

## 背景・課題

- ・ 計算科学を活用したプロセス開発の効率化・高度化を目指す。
- ・ 流体と粒子の連成計算による湿式成形（鋳込み成形）シミュレータを開発
- ・ 現実の粒子挙動のシミュレーションによる再現性を検証

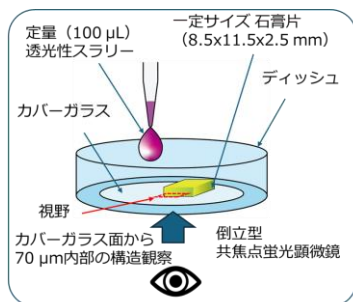
## 解決手段

- ・ 内部構造のその場観察が可能な透光性のモデル系スラリーを調製
- ・ 鋳込成形中のスラリー内部の粒子挙動を顕微鏡下でその場観察
- ・ DEM-CFD法で鋳込み成形シミュレーションを実施し、結果を観察実験と比較

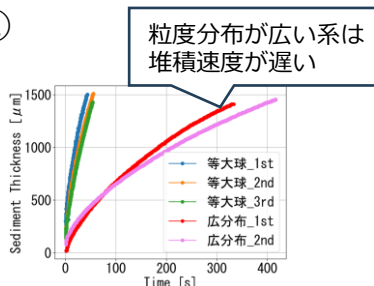
## 成果・新規性

- ① 鋳込み成形中の良分散性スラリー内部の粒子堆積挙動がその場観察できた。
- ② 原料粒子の粒度分布により粒子の堆積速度が変化した。
- ③ スラリー中の粒子堆積挙動を再現可能なシミュレーションモデルを構築

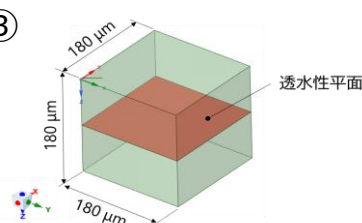
①



②

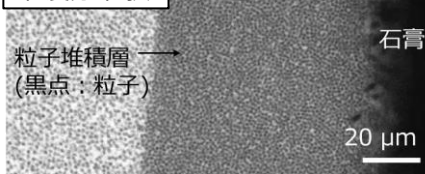


③

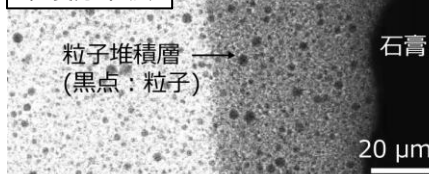


### 堆積の様子

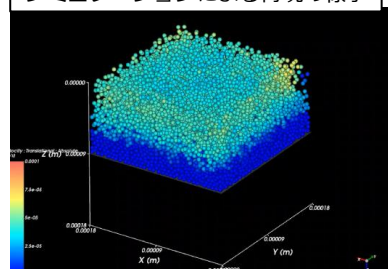
#### 粒度分布 狭



#### 粒度分布 広



### シミュレーションによる再現の様子



## 期待される市場・応用

- ・ 成形プロセス開発

## 発表文献

植松昌子, 金属 vol.95, No.3, pp202-207(2025).

謝 辞：本研究は、NEDO委託業務「次世代ファインセラミックス製造プロセスの基盤構築・応用開発」（JPNP22005）の一環として実施されたものである。

担当者：植松昌子、村田秀信、寺坂宗太、木村禎一



# シート成形中の粒子挙動の DEM-CFDシミュレーションの開発

9



R-3

## アピール ポイント

流れの中の粒子凝集構造を予測  
【技術シーズ：離散要素法／流体計算】

## 背景・課題

- ・セラミックス湿式成形ではスラリー中の粒子の分散・凝集状態の制御が重要
- ・成形中の粒子状態を直接的に観察することは困難
- ・スラリー中の粒子構造を可視化するシミュレーションの開発が課題

## 解決手段

- ・流体と粒子の運動を同時に計算可能なシミュレーションによる解析
- ・接触していない粒子間に働く相互作用力の導入

## 成果・優位性

- ① 引力・斥力をそれぞれ設定可能な粒子間相互作用力の導入
- ② 数千～数万粒子の大規模3次元DEM-CFDシミュレーション
- ③ 空間解析による分散・凝集構造の数値化  
→シート成形時の粒子凝集構造の解析手法としての有用性を確認

①

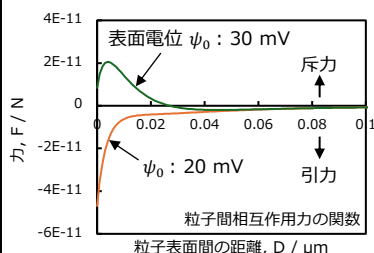
「van der Waals力（引力）」

$$: F_{p,vdw} = -\frac{A}{6D^2} \left( \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right)$$

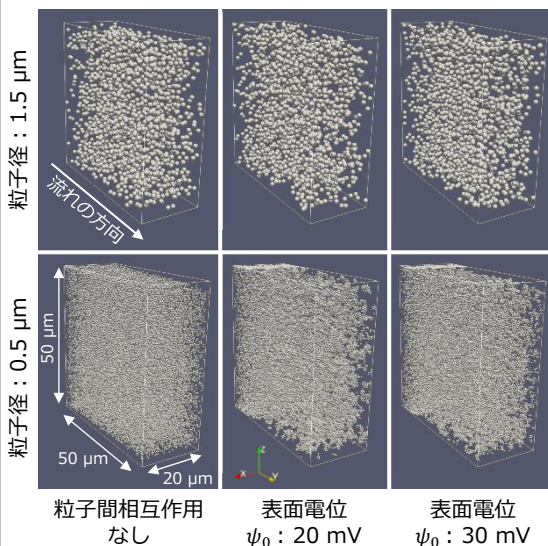
「電気二重層相互作用（斥力）」

$$: F_{p,edl} = \kappa \left( \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right) Z e^{-\kappa D}$$

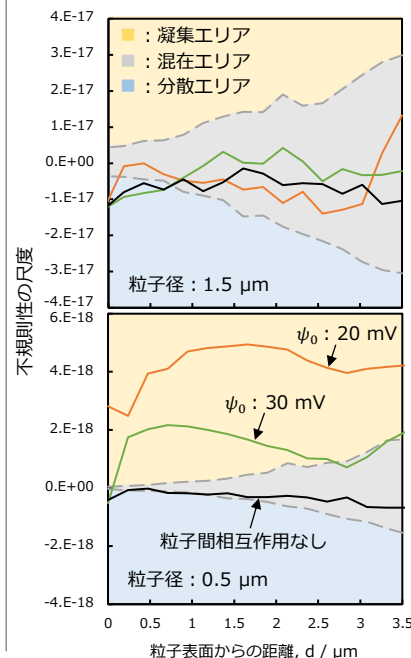
A [J] : Hamaker定数、 $\kappa$  [1/m] : Debye長の逆数  
Z [J/m] : 相互作用定数、D [m] : 粒子間距離  
R [m] : 粒子半径



②



③



## 期待される市場・応用

- ・積層コンデンサ、電極
- ・医療用部材、シャフト、パイプ
- ・半導体製造装置、衛生陶器

謝 辞：本研究は、NEDO委託業務「次世代ファインセラミックス製造プロセスの基盤構築・応用開発」（JPNP22005）の一環として実施されたものである。

担当者：寺坂宗太、植松昌子、木村禎一



# 焼結後組織を予測可能な シミュレーションデータベース構築

9



R-4

## アピール ポイント

複数の材料系にて焼結後の組織を高精度に予測  
【技術シーズ：焼結シミュレーション】

## 背景・課題

- ・ SinterProを用いた焼結シミュレーションを行う際、材料ごとに異なるシミュレーションパラメータが必要になり、導出に手間と時間を要する。
- ・ 焼結シミュレーションを行う上で必要なデータを材料ごとに蓄積し、パラメータデータベースを構築する。

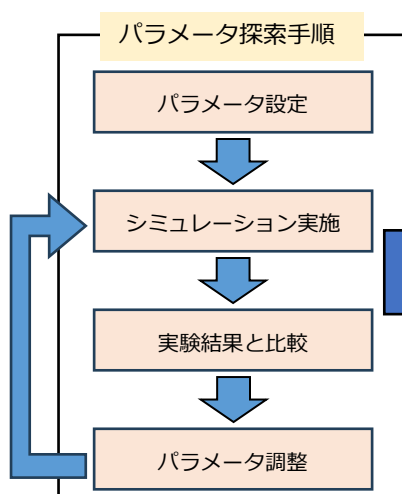
## 解決手段

- ・ アルミナとジルコニア（8mol%YSZ）で焼結実験を行った結果をもとに、焼結過程の組織変化をシミュレーションで再現するためのパラメータを探索
- ・ 導出したパラメータを用いて種々の焼結条件でのシミュレーション予測を行い、実験結果と比較することで焼結組織の予測精度を確認し、データベースへ収録

## 成果・優位性

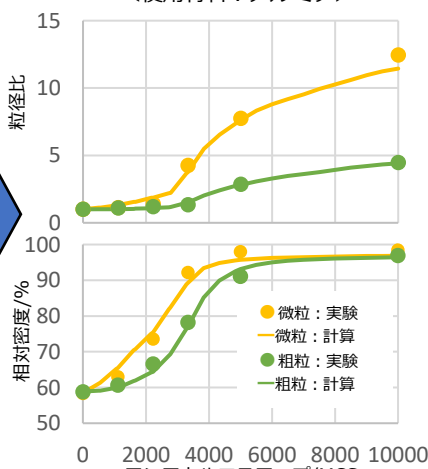
- ① アルミナやジルコニアを使った焼結実験結果をもとに、焼結過程の粒成長・緻密化挙動を再現できる各材料系のシミュレーションパラメータを導出
- ② 求めたパラメータによって種々の焼結条件での組織を高精度に予測可能  
→2種の材料系での焼結シミュレーションデータベースを構築

①



導出パラメータによる  
計算結果と実験結果の比較

<使用材料：アルミナ>

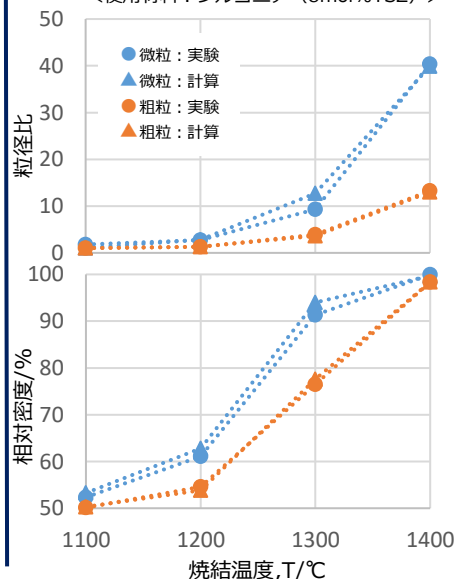


※モンテカルロステップは時間に対応

実験結果を再現できるパラメータを選定

②

実験結果と予測との比較例  
焼結温度を変えたときの組織変化予測  
<使用材料：ジルコニア（8mol%YSZ）>



## 期待される市場・応用

・ セラミックス、金属等の焼結部材

謝 辞：本研究の一部は、NEDO委託業務「次世代ファインセラミックス製造プロセスの基盤構築・応用開発」（JPNP22005）で実施されたものである。

担当者：木下陽日紀、野村浩、寺坂宗太、木村禎一



# ソフトモードインフォマティクス による巨大誘電率材料の探索 2

9



R-5

アピール  
ポイント

準安定材料を含む広大な材料空間から新材料を探索  
【技術シーズ：マテリアルズインフォマティクス（MI）】

## 背景・課題

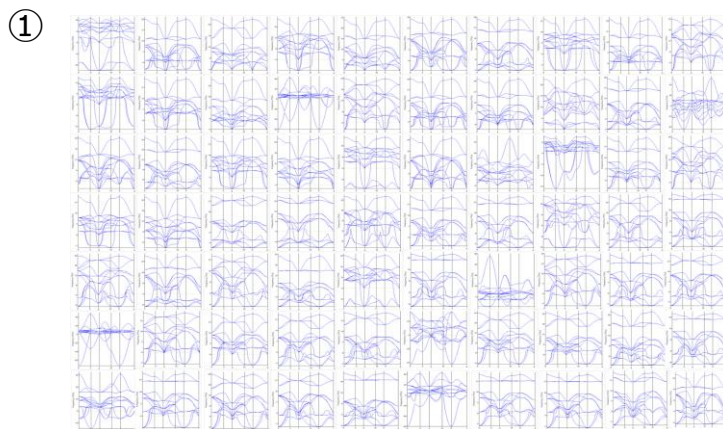
- ・現在、チタン酸バリウムは積層セラミックスコンデンサ（MLCC）に広く用いられているが、その誘電率を超える材料は、発見から80年以上見つからない。
- ・チタン酸バリウムを凌駕する巨大誘電率材料を探索する。

## 解決手段

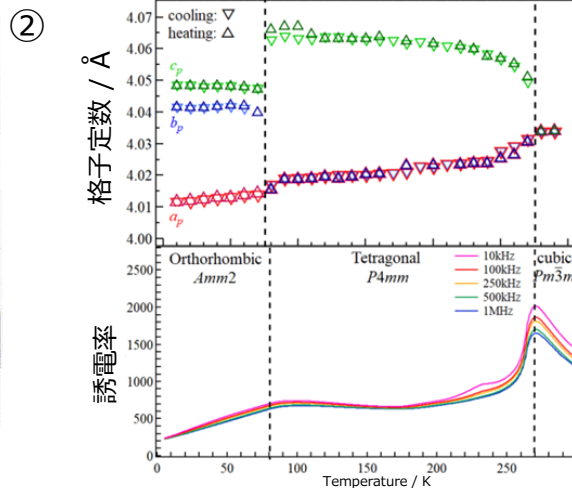
- ・ソフトモードインフォマティクス（ソフトモードに着目したMI）によりこれまで合成されていない準安定未知物質を含む広大な材料空間にて候補材料を探索
- ・非平衡合成プロセスにより、従来合成されていない巨大誘電率材料を開発

## 成果・新規性

- ①ソフトモードインフォマティクスにより巨大誘電率材料の候補材料を導出
- ②薄膜、高圧など非平衡合成プロセスにより候補材料の合成に成功  
準安定構造 $\text{RbTaO}_3$ 多結晶サンプルにて室温以下で非常に高い誘電率を確認  
→候補材料への巨大誘電率発現メカニズムの組み込みに成功



網羅的フォノン計算によるソフトモードイン  
フォマティクスデータベース構築



候補材料 $\text{RbTaO}_3$ 多結晶の格子定数と  
誘電率の温度依存性 強誘電体相転移  
と巨大誘電率を確認

## 期待される市場・応用

- ・積層セラミックスコンデンサなどの誘電体材料等

## 発表文献

H. Moriwake et al., *Advanced Intelligent Discovery*, 0:e202500141 (2025)  
K. Murase et al., *Dalton Trans.*, **54**, 2252-2253 (2025)

謝 辞：本研究は、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度JPJ004596「高速放電技術のための新規コンデンサ材料の探索」により実施されたものである。

担当者：森分博紀、横井里江、設樂一希、田口綾子、加藤丈晴、仲山啓、増田達也、松本聖子、高橋孝佑  
共同研究者：（芝浦工業大学）山本文子、（防衛大学校）濱寄容丞、江原祥隆、（熊本大学）佐藤幸生  
（東京科学大学）伊藤満、安井伸太郎、（東北大学）細野新、（富山大学）永沼博



# 第一原理計算に基づく ウルツ鉱型強誘電体の材料設計指針

9



R-6

## アピール ポイント

材料探索のための計算自動化、機能特性の支配因子の抽出  
【技術シーズ：強誘電特性の第一原理計算／支配因子解析】

## 背景・課題

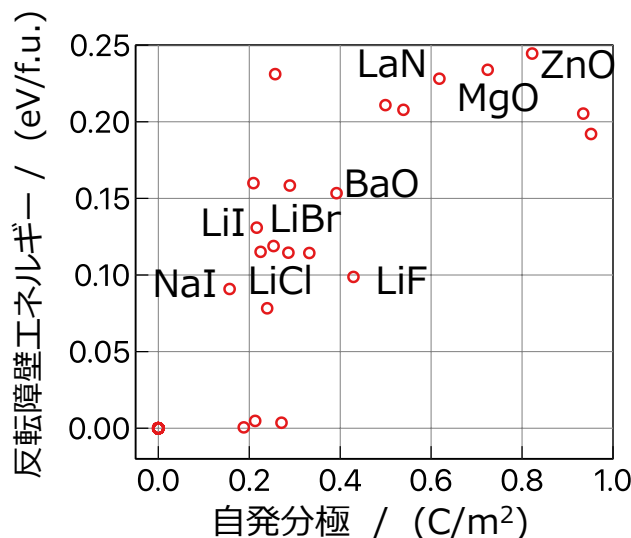
- ・ウルツ鉱型強誘電体は抗電界が高く、実用的な抗電界を有する新材料が期待
- ・ウルツ鉱型強誘電体の材料探索と、データ科学に基づく材料設計指針が必要

## 解決手段

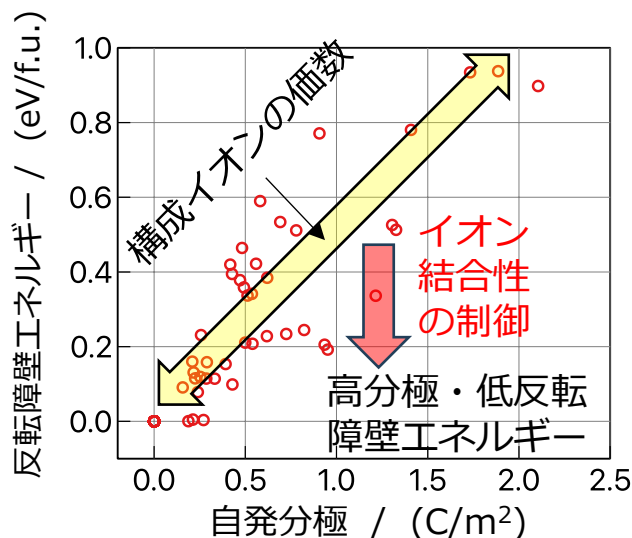
- ・第一原理計算の自動化による強誘電特性評価と材料探索
- ・形式電荷や電気陰性度などの組成記述子による特性の支配因子解析

## 成果・新規性

- ①第一原理計算により実用的な抗電界が期待できるウルツ鉱型材料として、Liハロゲン化物やBaO、NaI、MgOを見出した。
- ②構成イオンの価数による自発分極と反転障壁エネルギーの強い線形相関  
一方、イオン結合性の制御により、高分極と低反転障壁の両立可能性が示唆



①実用化が期待できる、低反転障壁領域(< 0.25 eV/f.u.)の化合物



②支配因子解析から得られた特性分布の説明

## 期待される市場・応用

- ・新規強誘電体材料、強誘電体メモリ、セラミックスコンデンサ

謝辞：本研究の一部は、文部科学省データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト事業（JPMXP1122683430）、「富岳」成果創出加速プログラム（JPMXP1020230327）の一環として実施されたものである。また、「富岳」の計算資源の提供を受けて実施された（課題番号：hp240223）。

担当者：設楽一希、横井里江、田口綾子、森分博紀



# ペロブスカイト型窒化物 $\text{LaWN}_3$ 薄膜の結晶構造と誘電特性の評価

9



R-7

## アピール ポイント

エピタキシャル成長した $\text{LaWN}_3$ の強誘電特性を初めて解析  
【技術シーズ：新規窒化物／強誘電体材料】

## 背景・課題

- ・チタン酸バリウムを超える巨大誘電率材料が80年間以上発見されていない。
- ・ペロブスカイト型窒化物は合成例が限られ、誘電特性の評価例が少ないため酸化物に比べて物性が明らかになっていない。

## 解決手段

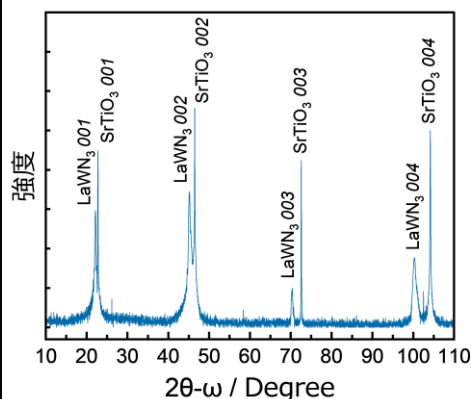
- ・クラスター成膜装置を用いたRFスパッタリング法による合成
- ・酸化物以外に探索範囲を拡大する準備段階として、導入した設備を用いてモデル材料として強誘電性の可能性を指摘されている $\text{LaWN}_3$ を合成

## 成果・新規性

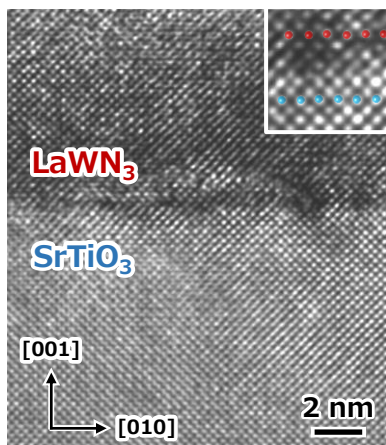
- ①X線回折（XRD）からペロブスカイト型構造に対応した（00 $l$ ）反射を検出
- ②透過型電子顕微鏡（TEM）から $\text{LaWN}_3$ 薄膜のエピタキシャル成長を確認
- ③圧電応答顕微鏡（PFM）により局所的な強誘電特性を確認

- ①  $\text{SrTiO}_3$ 基板上に堆積した $\text{LaWN}_3$ 薄膜のX線回折

$\text{LaWN}_3$ の格子定数  
 $a = 3.993 \text{ \AA}$ 、 $c = 4.015 \text{ \AA}$

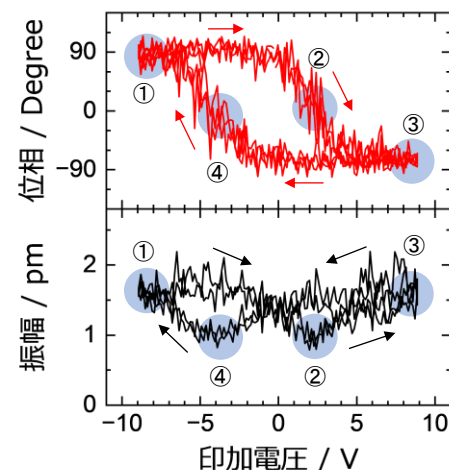


- ②  $\text{LaWN}_3$ 薄膜の断面TEM像



- ③ Pt電極上での $\text{LaWN}_3$ 薄膜の  
位相反転と振幅応答

位相：180°反転ヒステリシス  
振幅：バタフライカーブの観測  
により強誘電性を確認



## 期待される市場・応用

- ・強誘電体、半導体、電子材料

## 発表文献

第73回応用物理学会春季講演会 講演予稿集 06-218

謝 辞：本研究は、防衛装備庁が実施する安全保障技術研究推進制度JPJ004596の支援を受けて実施されたものである。

担当者：増田達也、加藤丈晴、森分博紀

共同研究者：（防衛大学校）濱寄容丞、江原祥隆、（東京科学大学）安井伸太郎、伊藤満



# 強誘電性ペロブスカイト型 窒化物の理論的解析

7



R-8

## アピール ポイント

### 新奇な高性能強誘電体の基本物性の予測

【技術シーズ：第一原理計算、フォノン（格子振動）計算】

## 背景・課題

- ・強誘電性窒化物は、不揮発性、高出力、高耐熱性、多機能な電子デバイスの開発に新たな可能性をもたらす。
- ・理論計算によってLaWN<sub>3</sub>の強誘電性が予測されてきた一方で、La以外の希土類タングステン窒化物の構造と特性は依然として不明である。

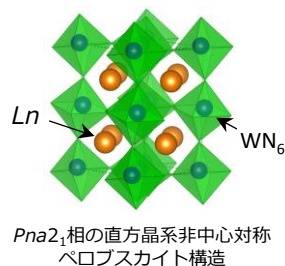
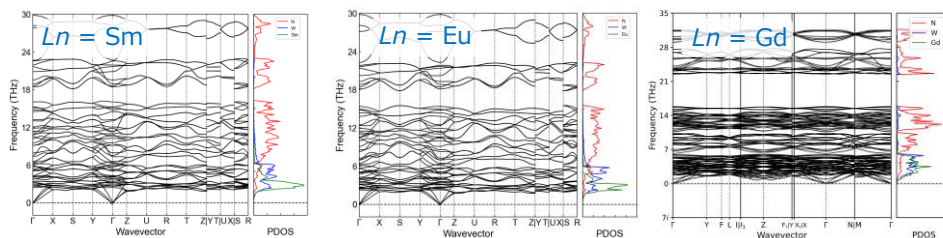
## 解決手段

- ・新しい交換相関汎関数（meta-GGA r<sup>2</sup>SCAN法）を用いた第一原理計算によってLnWN<sub>3</sub>（Ln＝希土類元素）の相安定性を高精度に検討
- ・格子エネルギーおよびフォノン分散の解析により、基底状態を解明
- ・電子のバンド構造、状態密度等により電気的特性（バンドギャップ）を検討

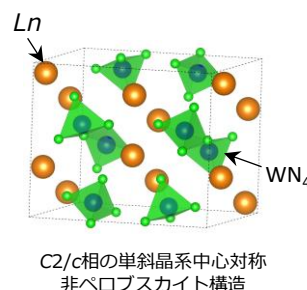
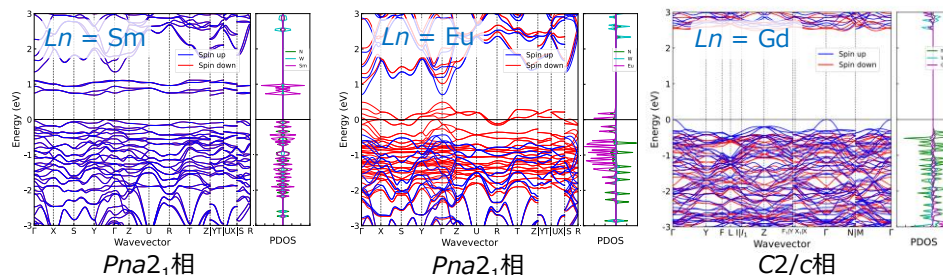
## 成果・新規性

- ①LaWN<sub>3</sub>と同様に、Nd～Eu系希土類タングステン窒化物は、非中心対称ペロブスカイト型構造が最も安定になるため、強誘電性を示す可能性がある。
- ②一方、Euより小さな希土類の際、非ペロブスカイト構造が最も安定になる。

### フォノン分散図



### バンド構造



## 期待される市場・応用

- ・先進電子部品（小型圧電素子、マイクロスイッチ、不揮発性メモリ等）
- ・量子技術（量子光学デバイス等）

## 発表文献

Y. Fang, C. A. J. Fisher et al., Phys. Rev. B 95 (2017), 014111.

謝 辞：本研究は、JSPS科研費（JP23K04390）の支援により実施されたものである。

担当者：Craig Fisher、小川貴史、森分博紀



# プラズモン共鳴による 太陽光から高温熱源への高効率変換



R-9

## アピール ポイント

半導体+金属粒子で世界最高レベルの光→熱変換効率を達成  
【技術シーズ：スパッタ成膜ナノ組織制御／光物性評価】

## 背景・課題

- ・ 太陽光から高温熱源を創出できれば再生可能な熱エネルギーの利活用が広がる。
- ・ 従来の太陽光吸収膜では200℃以上で変換効率が低下し、高温熱源を創れない。
- ・ 高温での変換効率向上には「太陽光:高吸収」と「赤外光:低吸収=低放射」を両立するcut-off吸収の最適化が必要。

## 解決手段

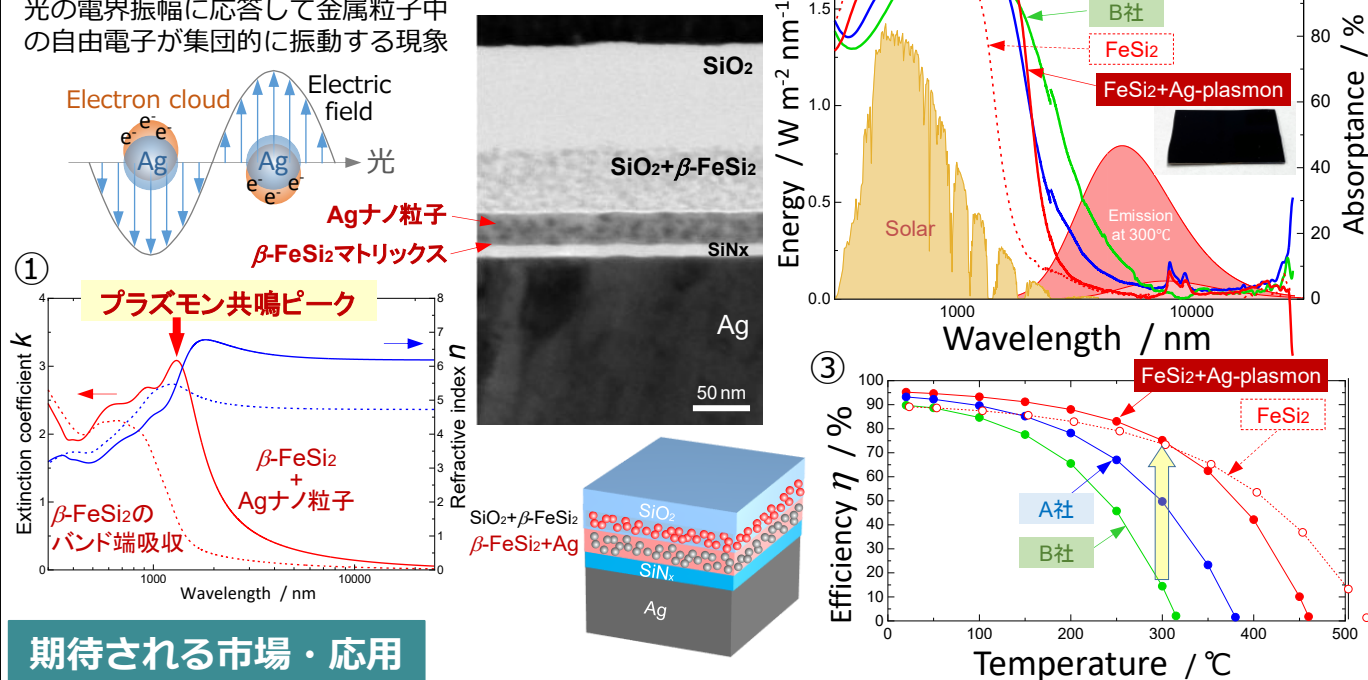
- ・ 従来膜の光吸収(酸窒化物のd-d遷移)とは異なる新たな光吸収原理を導入  
⇒ 半導体のバンド端吸収+金属ナノ粒子のプラズモン共鳴吸収

## 成果・優位性

- ①半導体 $\beta$ -FeSi<sub>2</sub>中に分散したAgナノ粒子による「プラズモン共鳴」を制御
- ②太陽光-赤外光の境界に消衰係数 $k$ ピークを発現させ理想的cut-off吸収を実現
- ③高温域での変換効率を大きく向上 (300℃で15%→75%へ増加)

### プラズモン

光の電界振幅に応答して金属粒子中の自由電子が集団的に振動する現象



## 期待される市場・応用

- ・ 太陽熱エネルギー利用機器 (蒸気利用・ソーラクーリング等)
- ・ プラズモン共鳴応用デバイス (高い赤外屈折率、電場増強効果など)

## 発表文献

Y. Okuhara et al., ACS Appl. Opt. Mater. 2 (2024), 1600–1609.

謝 辞：本成果はNEDO（国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構）の委託業務JPNP24010「再生可能エネルギー熱の面的利用システム構築に向けた技術開発」で実施されたものである。

担当者：奥原芳樹、上出龍星



# $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の貫通転位の 高速・非破壊・三次元観察実証



R-10

## アピール ポイント

ウエハの表面欠陥と結晶欠陥を同時に検出する検査技術  
【技術シーズ：位相差顕微鏡※／欠陥解析】

## 背景・課題

※屈折率差をコントラストとして観察可能な光学顕微鏡

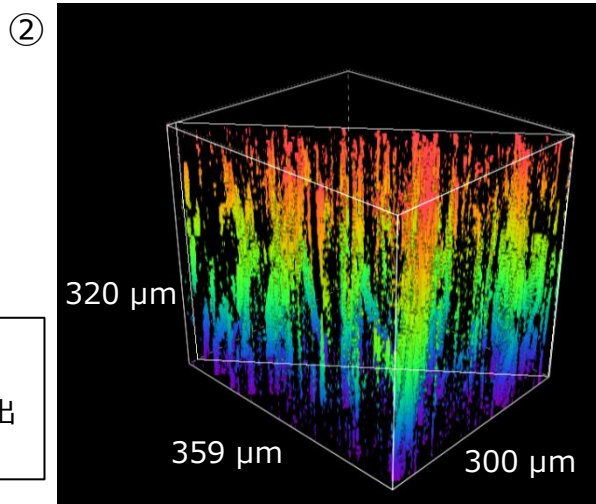
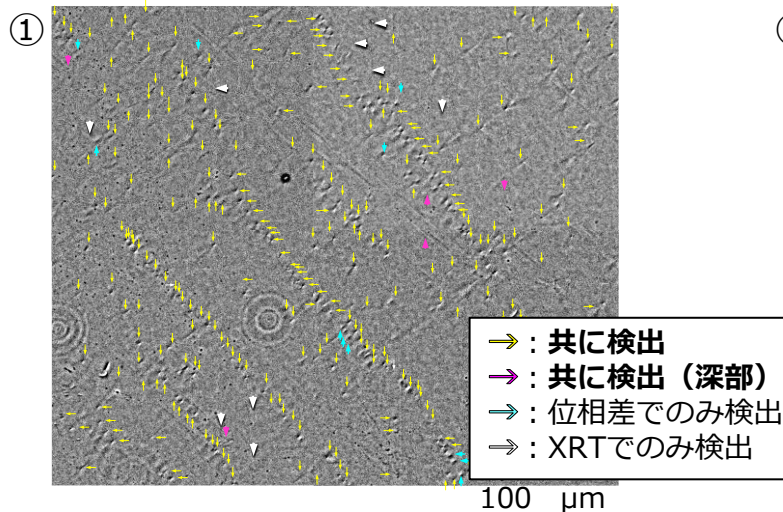
- ・ワイドバンドギャップ半導体パワーデバイスの高信頼化が問題
- ・ウエハに残存する表面欠陥と結晶欠陥はデバイス信頼性低下の原因の1つと考えられ、そのウエハ全面分布を評価可能な検査装置開発が課題

## 解決手段

- ・高速観察が可能で、表面欠陥の検出が得意な位相差顕微鏡で $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の結晶欠陥の検出も可能なことを検証
- ・位相差顕微鏡でウエハの表面から裏面に至る転位分布の観察の実証

## 成果・優位性

- ① X線トポグラフィー(XRT)で転位位置を同定した $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>を位相差顕微鏡観察し、同定した貫通転位の96%以上が検出されていることを検証
- ② 位相差顕微鏡で $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>を表面から裏面まで観察し、転位の三次元分布を再構成



## 期待される市場・応用

- ・ワイドバンドギャップ半導体、パワーデバイス
- ・半導体検査機器

## 発表文献

Y. Ishikawa et al., APL Mater. **14**(2026), 021104-1 – 021104-6.

謝 辞：本研究は、NEDO(国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構)の委託業務(JPNP22007)の支援を受けたものである。

担当者：石川由加里、勝部大樹、佐藤功二

共同研究者：(三重大学) 姚永昭、(ノベルクリスタルテクノロジー) 佐々木公平



# $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>のすべり面解析



R-11

アピール  
ポイント

結晶面の結合強度を結晶化学的に解析  
【技術シーズ：結晶欠陥構造と性質の解析】

## 背景・課題

- ・半導体デバイスの性能と信頼性には、欠陥制御が必須
- ・ $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>は従来の半導体結晶と全く結晶構造が異なるため、転位・積層欠陥を基礎づける「すべり系」は未解明
- ・厳密な理論的による導出が困難なすべり系の直感的理解を目指す。

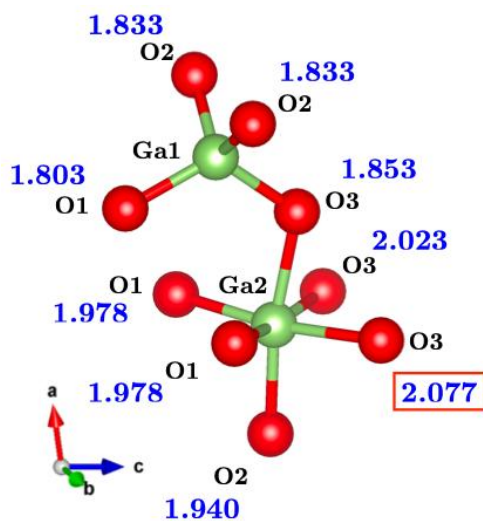
## 解決手段

- ・結晶構造から原子結合の異方性に着目
- ・結晶構造が成り立つ経験的一般原理（ポーリングの法則）に基づく原子間結合強度の異方性を評価

## 成果・優位性

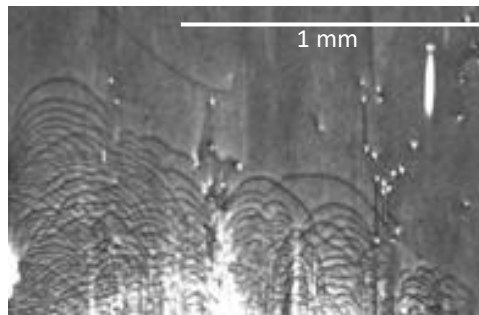
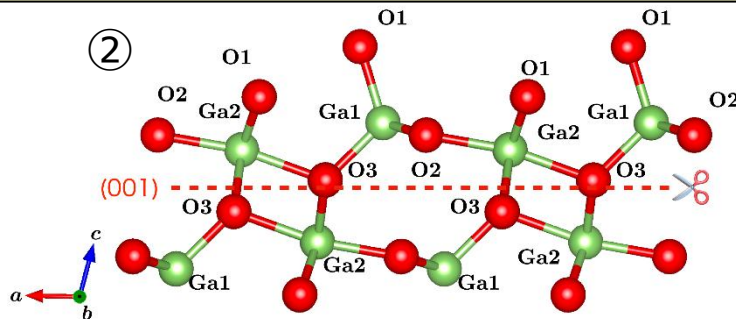
- ①歪んだGa-Oの多面体の原子間距離から、ポーリングの法則により、結合電荷に基づく化学結合強度の面異方性を評価。
- ②すべり面として活動することが観察されている(001)面は、結合力の最も弱い面である。

①



Ga-O間距離 (Å)

②



(001)面方位と転位ループ (X線トポグラフ)

## 期待される市場・応用

- ・パワーエレクトロニクス、結晶欠陥解析

謝 辞：本研究は、NEDOの委託業務JPNP22007の支援を受けて実施されたものである。

担当者：山口博隆、勝部大樹、石川由加里

共同研究者：（三重大学）姚永昭



# STEM明視野・暗視野法を用いた 半導体材料の転位構造評価

9



R-12

## アピール ポイント

**STEMを用いて転位構造の違いを正確に可視化**  
【技術シーズ：STEM明視野・暗視野法】

## 背景・課題

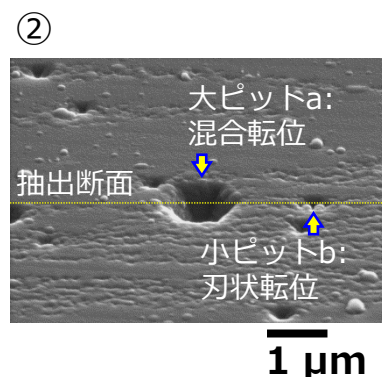
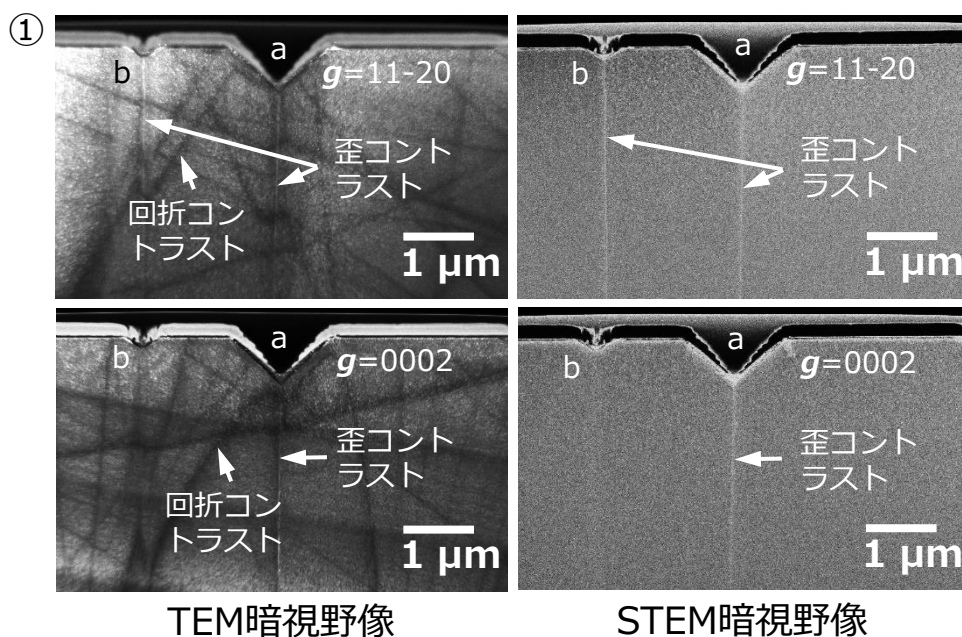
- ・一般に転位構造解析にはTEM明視野・暗視野法が用いられており、平行電子線を用いて所望の回折波を励起することで、二波条件が選択可能
- ・しかし、ひずみコントラストの他に偽像が重畳することにより、像解釈が単純ではなくなるため、これを解決する手法が必要

## 解決手段

- ・原理的に偽像の重畳しにくいSTEM法を窒化ガリウム結晶に適用
- ・収束角の極端に小さい電子線を用いて、TEMとほぼ同等の二波条件を再現
- ・種々の二波励起条件における明視野・暗視野像から格子変位の方向を推定

## 成果・優位性

- ①TEM明視野・暗視野像に対応した解釈の容易なSTEM明視野・暗視野像を取得  
→偽像の重畳を抑え転位周辺の歪コントラストのみを観察
- ②エッチピットサイズと転位種との相関を確認  
→転位構造解析にSTEM明視野・暗視野法も有効であることを検証



GaN基板表面の  
エッチピット像

## 期待される市場・応用

- ・パワー半導体の単結晶・デバイス

謝 辞：本研究は、科研費（25K08499）の支援を受けて実施されたものである。

担当者：菅原義弘、石川由加里

共同研究者：（三重大学・JFCC）姚永昭、（京都工芸繊維大学）一色俊之、（山口大学）岡田成仁、  
（山口大学・CNV技研）只友一行



# 格子欠陥による炭化物セラミックスの 室温変形能の向上



R-13

## アピール ポイント

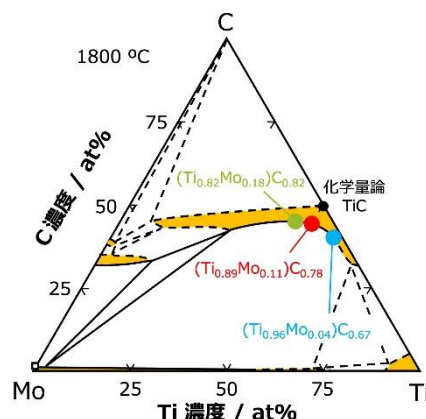
**TiCの格子欠陥により「変形するセラミックス」を開発**  
【技術シーズ：非化学量論性を利用した欠陥制御】

## 背景・課題

- 炭化物セラミックスは超高温環境に耐える構造材料として期待
- 実用上重要な信頼性の確保のためには靱性（壊れにくさ）の向上が重要
- セラミックスの塑性変形能を向上させることにより、靱性の向上を目指す。

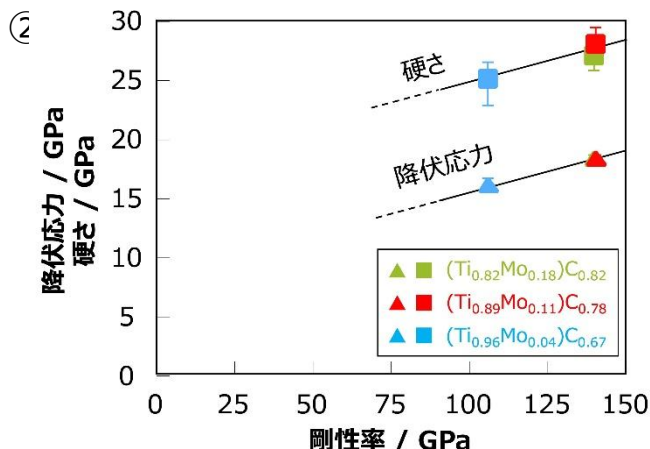
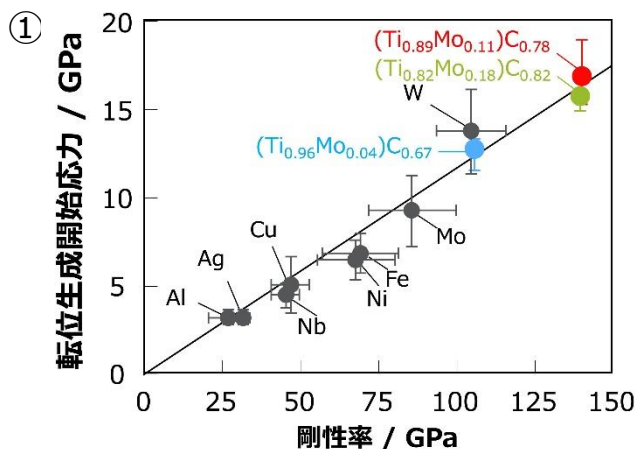
## 解決手段

- Mo-Ti-C三元系のTiCは金属相と平衡させると、TiサイトにMoを置換、Cサイトに空孔を形成する格子欠陥が導入された(Ti,Mo)C<sub>x</sub>となる。
- 格子欠陥は変形に必要な応力に影響する剛性率を低下させ、塑性変形能を向上させる。
- (Ti,Mo)C<sub>x</sub>の変形挙動をマイクロピラー圧縮試験およびナノインデンテーション試験を用いて評価



## 成果・新規性

- ①塑性変形初期における(Ti,Mo)C<sub>x</sub>の転位生成開始応力（塑性変形開始応力）は剛性率に比例しており、その傾向は種々の金属と一致
- ②剛性率の低下に伴って(Ti,Mo)C<sub>x</sub>の強度は低下したため、(Ti,Mo)C<sub>x</sub>の変形は金属と同様に転位に影響されていること、格子欠陥に伴う剛性率の低下によって(Ti,Mo)C<sub>x</sub>の変形能が改善されること、が示された。



## 期待される市場・応用

・ 航空宇宙材料、サーメット

## 発表文献

S. Ida et al., Journal of the Ceramics Society of Japan 134(2026), 110-115.

謝 辞：本研究は科研費若手研究（JP24K17526）、NIMS連携拠点推進制度により実施されたものである。

担当者：井田駿太郎、木村禎一

共同研究者：（物質・材料研究機構）仲川枝里、Florian Tropper、大村孝仁、（東北大学）吉見享祐



# 環境遮蔽コーティングの高温溶融物腐食における組織制御の重要性

9



R-14

## アピール ポイント

コーティングの微細組織由来の保護膜をその場形成  
【技術シーズ：結晶配向YbAGドメインの創成】

## 背景・課題

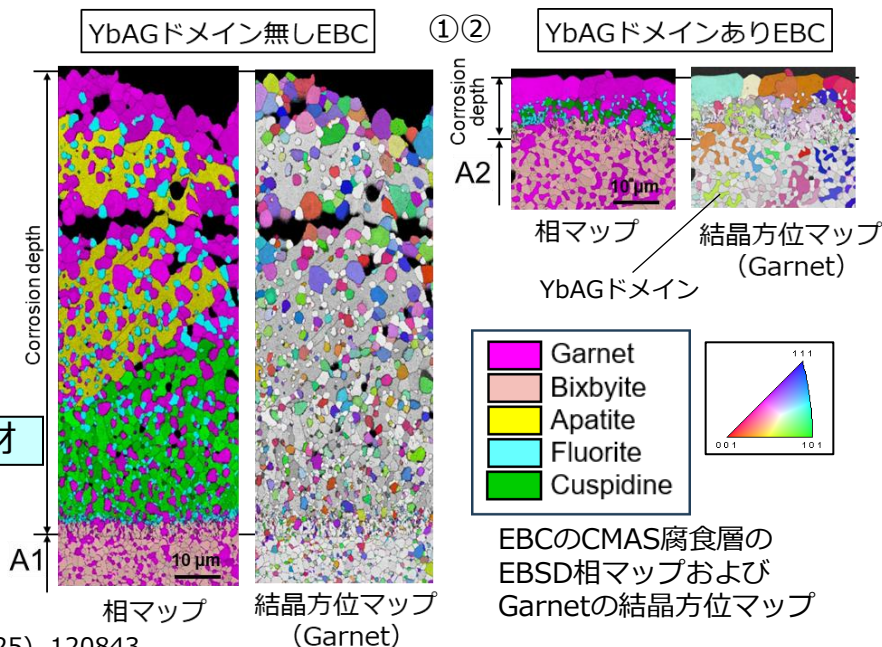
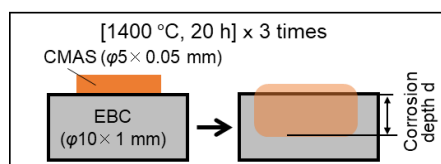
- ・ 航空機エンジン用部材の環境遮蔽コーティング（EBC）には、火山灰や砂などに由来するCa-Mg-Fe-Al-Si-O系溶融物（CMAS）に対する耐食性が必要
- ・ コーティングの組織制御により、過剰なCMASに対しても著しい耐食性を発現する手法を開発

## 解決手段

- ・  $\text{Yb}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  (YbAG)-Garnetと $(\text{Yb},\text{Hf})_2\text{O}_3$ -Bixbyiteからなる2相-EBCに対し、YbAG相を結晶配向の揃ったドメイン構造にすることで、保護膜をその場形成

## 成果・新規性

- ①結晶配向した $\text{Yb}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  (YbAG) ドメインを有するEBCは、ドメインが無い場合に比べて、CMASに対して著しく耐食性に優れる。
- ②YbAGドメインを有する場合は、CMASとの反応により最表面に保護膜効果を有する緻密なCMAS固溶Garnet層をその場形成する（EBC中のYbAGドメインが核生成サイトとして作用）。CMAS残渣によるさらなる腐食は、この層の粒界を介した固相拡散により進行するため、EBC中のYbAGドメインを大きくすることで、CMAS固溶Garnet層の結晶粒径が大きくなり耐食性がさらに向上。



## 期待される市場・応用

- ・ 耐熱部材、溶融物接触部材

## 発表文献

S. Kitaoka et al., Acta Materialia 288(2025), 120843.

謝 辞：本研究の一部は、NEDO助成事業「次世代複合材創製・成形技術開発プロジェクト」（JPNP20010）、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度JPJ004596「光学特性を制御した革新的遮熱・環境遮蔽システムの基盤構築」の支援を受けて実施したものである。

担当者：伊藤大志、田中誠、橋本壮真、川島直樹、横江大作、加藤丈晴、小川貴史、北岡諭

共同研究者：（株）IHI 山崎直樹、土井康平、中村武志



# 燃焼ガスの輻射条件に適した 遮熱コーティングの光学特性設計

9



R-15

アピール  
ポイント燃焼ガスの輻射条件に対応した遮熱層の光学設計指針  
【技術シーズ：伝熱解析／電子ビームPVD】

## 背景・課題

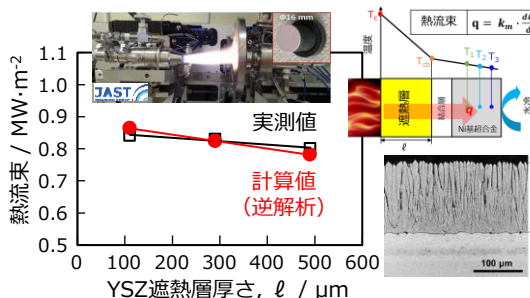
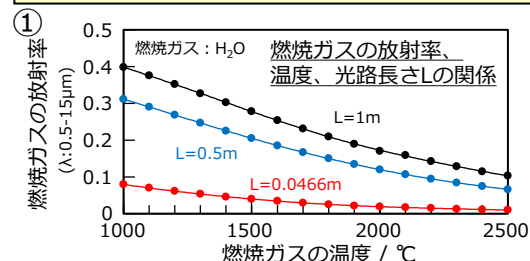
- 航空機エンジン等の高温の燃焼ガスに曝される遮熱コーティングにおいて、その遮熱性能は燃焼ガス中の輻射熱の影響を受けると考えられるため、燃焼ガスの輻射条件に対する遮熱層の最適な光学特性を明らかにする。

## 解決手段

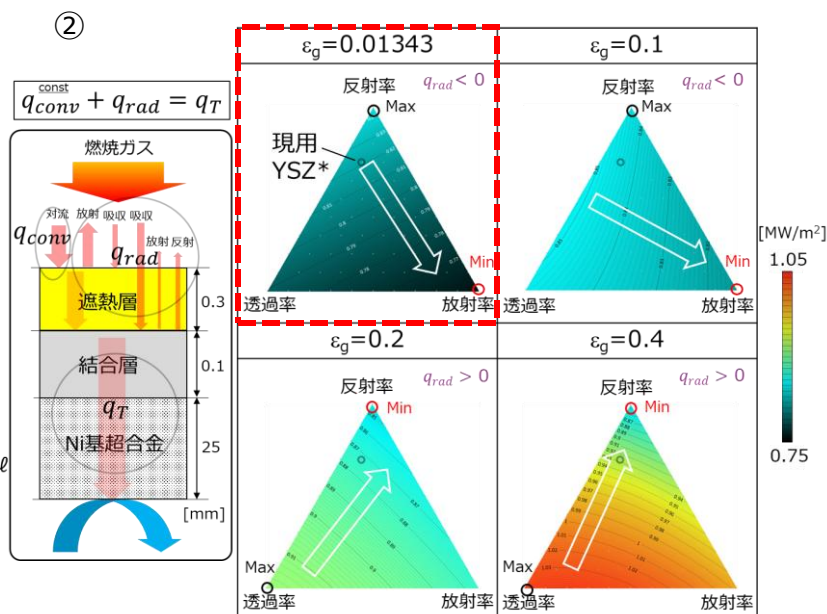
- 燃焼ガスからの対流伝熱に加えて輻射伝熱をも考慮した伝熱モデルを使用
- 遮熱層厚さの異なる電子ビームPVD-YSZ遮熱システムについて、水素燃焼バーナー加熱試験によりシステム内の熱流束を実測し、その結果に基づく逆解析によって、燃焼ガス温度および熱伝達係数（遮熱層表面側、基板裏面側）を決定
- 遮熱層の光学特性（反射・透過・放射）と熱流束の関係を三角図により表現

## 成果・新規性

- 燃焼ガスの放射率は温度と光路長さに強く依存
- 遮熱層の最適な光学特性は輻射伝熱が寄与する熱流束 $q_{rad}$ の大きさに依存  
 $q_{rad} < 0$  の場合：高放射率       $q_{rad} > 0$  の場合：高反射率  
→遮熱コーティングの新たな設計指針を提案



水素燃焼バーナー加熱試験による燃焼ガス温度と熱伝達係数の決定



## 期待される市場・応用

- 航空機エンジン、宇宙機器、耐熱部材

謝 辞：本研究は、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度JPJ004596「光学特性を制御した革新的遮熱・環境遮蔽システムの基盤構築」により実施されたものである。

担当者：田中誠、小川貴史、山口哲央、橋本壮真、川島直樹、北岡諭

共同研究者：（航空宇宙技術振興財団）鈴木拓明、竹内健一、柴田晴雄、川崎亮



# ダブル電子ビームPVDによる $\text{Yb}_2\text{TiO}_5$ 厚膜形成技術の開発



R-16

## アピール ポイント

成膜面のレーザー加熱と基板裏面冷却を併用した厚膜形成  
【技術シーズ：ダブル電子ビーム(EB)-PVD】

## 背景・課題

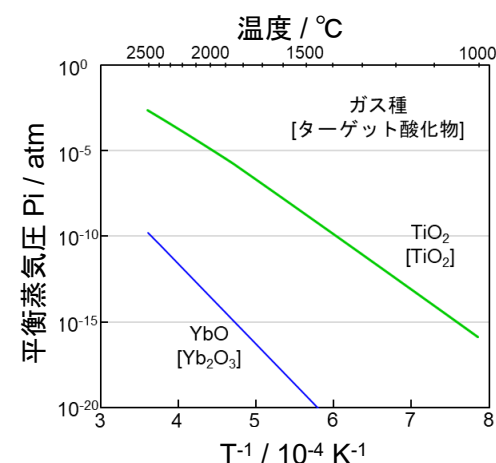
- ・次世代遮熱コーティング候補材である超低熱伝導の $\text{Yb}_2\text{TiO}_5$ は、構成酸化物の蒸気圧差が大きく、単一ターゲットへの電子ビーム照射では膜組成の制御が困難。
- ・耐熱サイクル性に有効な縦割れ構造（セグメント）をシャドウイング効果で形成するには、成膜時の基板回転が必要である。
- ・成膜面のレーザー加熱による結晶化ではNi基超合金基板全体も加熱されるため、成膜後の冷却過程で膜中に圧縮応力が生じてバックリング破壊を起こし、遮熱性の向上に有効な厚膜形成が難しい。（熱膨張係数： $\text{Yb}_2\text{TiO}_5 < \text{Ni基超合金}$ ）

## 解決手段

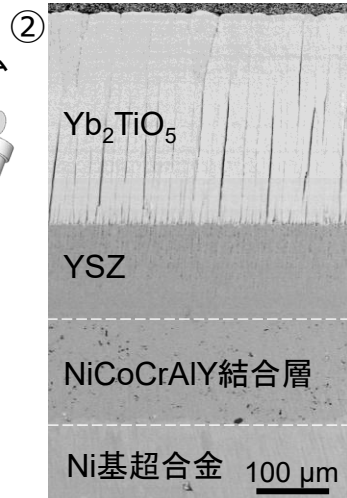
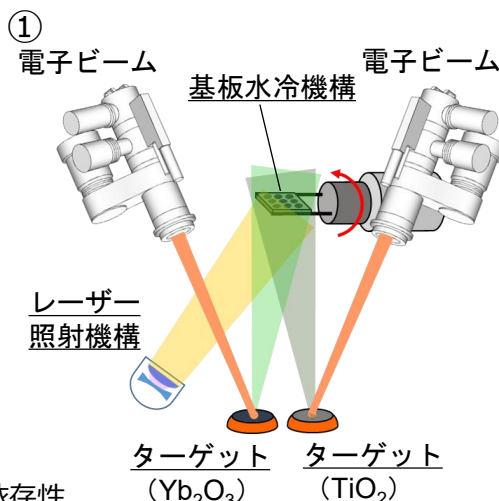
- ・ターゲットを $\text{Yb}_2\text{O}_3$ と $\text{TiO}_2$ に分けて、各ターゲットを2本の電子ビームにより異なる出力で照射することで、蒸気圧を調整し膜組成を任意制御
- ・回転する基板裏面を直接水冷することで、成膜面をレーザー加熱しても基板全体が加熱されないため、成膜後の膜のバックリング破壊が抑制

## 成果・優位性

- ①成膜面のレーザー加熱、基板回転と基板水冷を併用したダブルEB-PVDシステムを開発
- ②次世代遮熱コーティング候補材の $\text{Yb}_2\text{TiO}_5$ 厚膜形成に成功（従来の10倍以上）



ターゲット酸化物の平衡蒸気圧の温度依存性



セグメント構造を有する  
 $\text{Yb}_2\text{TiO}_5/\text{YSZ}$ 遮熱システム

## 期待される市場・応用

- ・航空機エンジン、宇宙機器、耐熱部材

## 発表文献

K. Asai et al., J. Solid State Chem. 287(2020), 121328.

謝辞：本研究は、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度JPJ004596「光学特性を制御した革新的遮熱・環境遮蔽システムの基盤構築」により実施されたものである。

担当者：山口哲央、橋本壮真、田中誠、川島直樹、横江大作、北岡諭



# 日本画用天然岩絵具の分析と人工合成

12 つくる責任 つかう責任



R-17

## アピールポイント

天然マラカイト岩絵具と同じ色を再現  
【技術シーズ：水熱ホットプレス法／塩濃度勾配法】

## 背景・課題

- ・天然マラカイト鉱石の資源枯渇および価格高騰の懸念
- ・岩絵具は原料鉱石を $\mu\text{m}$ ～ $\text{mm}$ の様々な大きさに粉碎・分級して使用
- ・従来の合成マラカイト( $\text{Cu}_2(\text{CO}_3)(\text{OH})_2$ )は天然マラカイトと色が異なる。
- ・天然マラカイトの色を再現した大きな合成マラカイト粒子の作製方法の確立

## 解決手段

- ・ $\text{mm}$ 以上の大きさの合成マラカイト粒子の作製手法の構築
- ・異種元素添加による合成マラカイトの色の調整

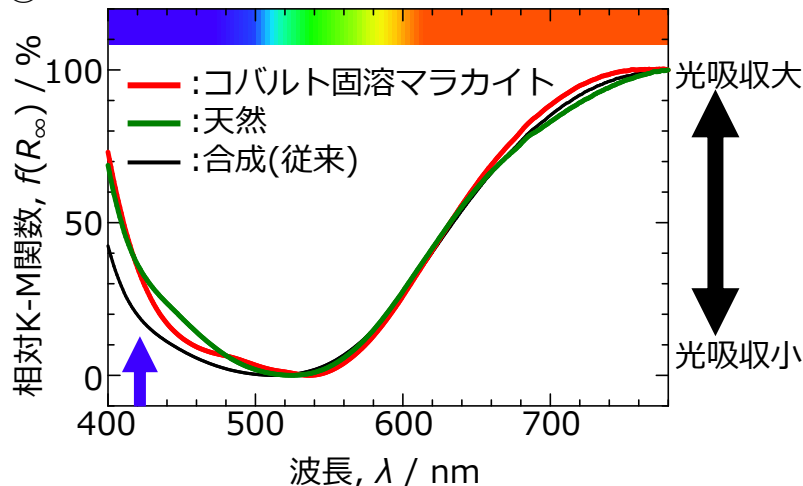
## 成果・新規性

- ①  $1\text{ cm}$ 以上の大きさの合成マラカイト粒子を作る技術の構築
- ② 天然マラカイトの色を再現したコバルト固溶マラカイトを開発

①

天然マラカイトと $\text{cm}$ 級合成マラカイト

②



天然マラカイトと合成マラカイトの紫外可視光拡散反射スペクトル

## 期待される市場・応用

- ・日本画・彫刻・文化財の保存修復・考古学

## 発表文献

田中、中平、村田、稲田、公益社団法人日本セラミックス協会 第37回秋季シンポジウム講演予稿集、2G14 (2024).  
NHK Eテレ サイエンスZERO 色彩の科学へようこそ！“緑”は生命のシンボル！？  
2025/9/28(日)放送

謝辞：本研究は、JSPS科研費（JP23K00199）の助成を受けて実施されたものである。

担当者：村田秀信

共同研究者：（女子美術大学）稲田亜紀子



# サブナノ制御アモルファス ネットワーク細孔構造の直接評価



R-18

## アピール ポイント

**0.5 nm未満の平均貫通細孔径の直接評価が可能**  
【技術シーズ：ガス分離膜／X線小角散乱】

## 背景・課題

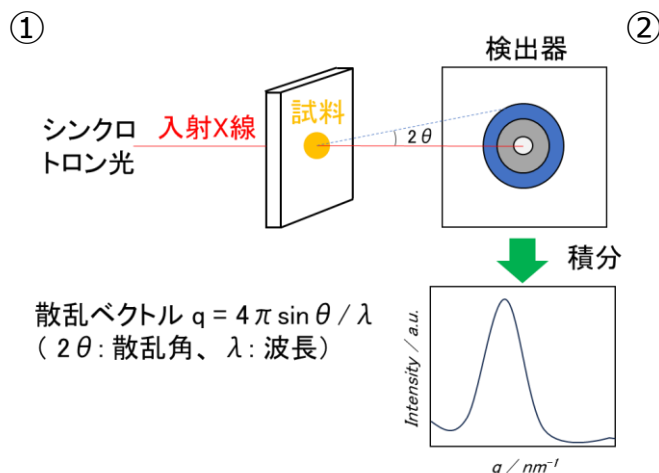
- ・無機ガスの分子サイズは0.26~0.55 nmであり、サブナノサイズの細孔径制御を必要とするが、0.5 nm未満の貫通細孔径を直接測定する手段がない。
- ・ガス透過モデル、種々のガス透過率による細孔構造の評価は多くの測定データを必要とし、CO<sub>2</sub>等はガス吸着の影響を受けやすい。

## 解決手段

- ・X線小角散乱法により、ガス分離機能を有する分離活性層細孔構造を直接評価
- ・円筒形状の分離活性層を粉末化、同一厚さのサンプルを測定

## 成果・新規性

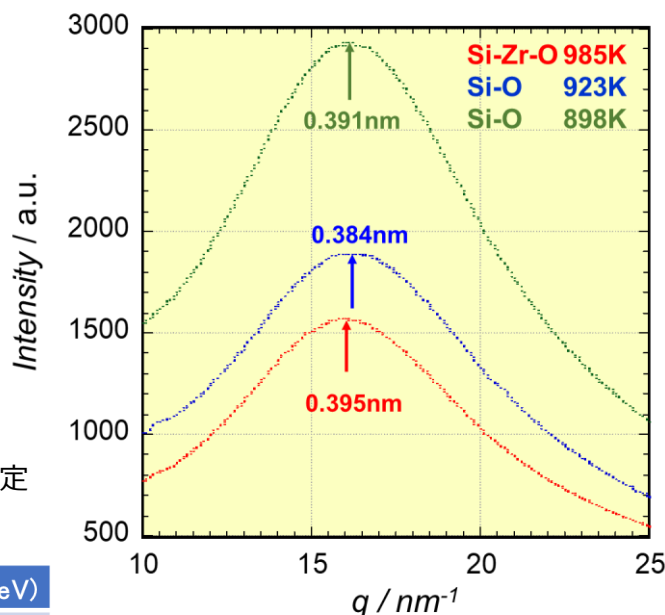
- ①シンクロトロン光の利用により極めて短い時間（10分）で測定
- ②膜組成、合成温度によるアモルファスネットワークの細孔径変化を検出



シンクロトロン光を利用したX線小角散乱による測定

各波長におけるqおよびDレンジ

| 波長                       | 1.5 Å (8.2 KeV) | 0.92 Å (13.5 keV) |
|--------------------------|-----------------|-------------------|
| Qレンジ (nm <sup>-1</sup> ) | 1.2~25.8        | 2.1~38.0          |
| Dレンジ (nm)                | 0.24~5.2        | 0.2~2.9           |



分離活性層アモルファス細孔構造評価結果

## 期待される市場・応用

- ・ガス分離膜、多孔質材料の細孔径評価

謝辞：本研究は、NEDO委託業務「先導研究プログラム／不燃性ガス田における高効率ヘリウム膜分離回収技術の開発」（JPNP14004）にて実施されたものである。実験は科学技術交流財団シンクロトロン光センターのBL8S3（実験番号：202504029）で行った。

担当者：永野孝幸



# 全固体電池内部の Liイオン移動を高速観察



R-19

アピール  
ポイント

動作中の電池内部のLiの動きをナノスケールで可視化  
【技術シーズ：オペランド解析】

## 背景・課題

- ・全固体電池は、現行のLiイオン電池を上回る安全性・エネルギー密度に期待
- ・全固体電池用部材として、 $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  負極が高耐久かつ高出力材料として有望
- ・充電時間の短縮には、より高出力に動作する電極材料が必要
- ・ $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  のLi伝導/相転移メカニズムを解明し、高出力材料の設計指針を得る。

## 解決手段

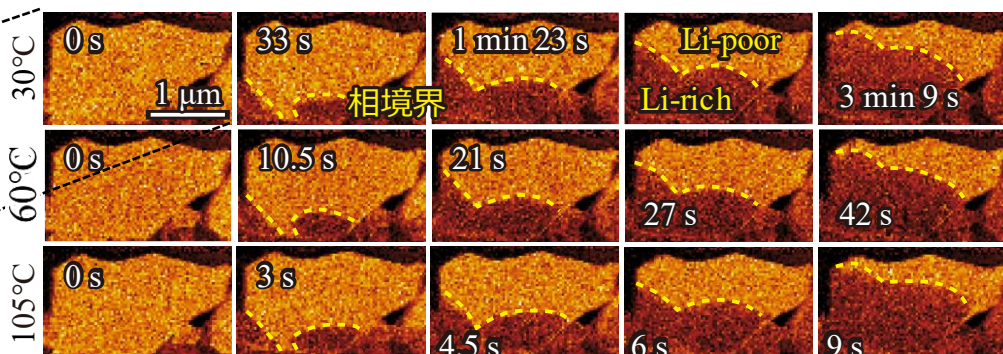
- ・オペランド透過電子顕微鏡法と電子エネルギー損失分光法を用い、動作中の全固体電池内部のLiの動きを、ナノスケールかつ時間分解能1.5秒で実空間観察
- ・ $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12} \rightleftharpoons \text{Li}_7\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  の相境界のダイナミクスを定量評価

## 成果・優位性

- ①全固体リチウムイオン電池内部の電気化学反応をナノスケールで可視化
- ②二相内のイオン拡散速度の温度依存性から活性化エネルギー ( $E_a$ ) を決定  
→  $E_a$  in  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  : 0.49 eV,  $E_a$  in  $\text{Li}_7\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  : 0.59 eV  
→ 充電と放電で反応時間が異なる起源を解明



透過電子顕微鏡像



Li脱離時の相境界の移動(高温ほど相境界の移動が速い)

オペランド解析により電池内の相境界移動の観察に成功

## 期待される市場・応用

・全固体Li電池

## 発表文献

Y. Nomura et al., *J. Mater. Chem. A* 11(2023), 23243–23248.  
Y. Nomura et al., *ACS Energy Lett.* 10(2025), 1404–1410.

謝 辞：本研究は、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度JPJ004596、JSPS科研費（23K13837、23H00241、23H01858）、JST革新的GX技術創出事業（GteX、JPMJGX23S2）、風戸研究奨励会の助成を受けて実施されたものである。

担当者：野村優貴、山本和生、平山司

共同研究者：（NIMS）桑田直明



# LiCoO<sub>2</sub>からの非平衡Li脱離過程の実空間解析



R-20

アピール  
ポイント

**Li脱離領域の異方的な形状及び成長を発見**  
【技術シーズ：走査透過電子顕微鏡法／in situ観察】

## 背景・課題

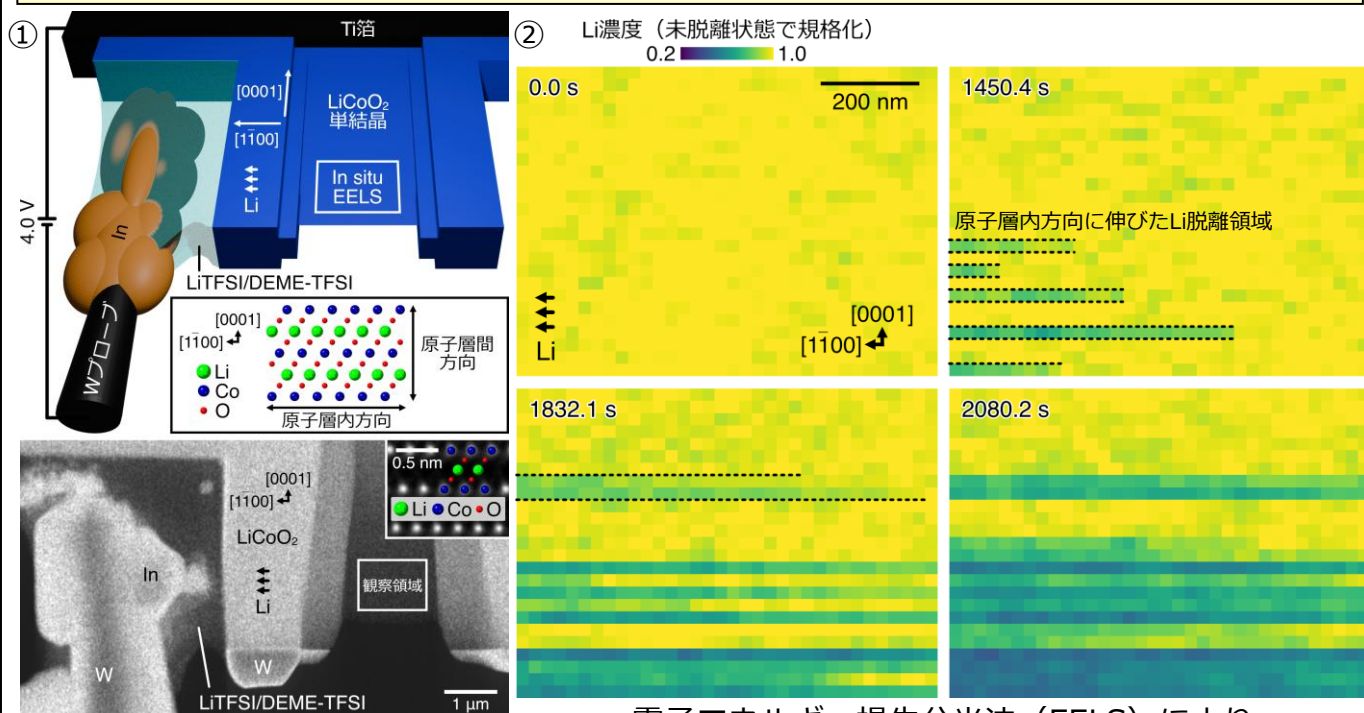
- ・ LiCoO<sub>2</sub>はLiイオン電池の代表的な正極材料
- ・ Li脱離速度を上げると平衡からの逸脱が大きくなり、Li分布の不均一さが増大
- ・ 詳細の解明には走査透過電子顕微鏡法（STEM）によるin situ観察が有望だが、結晶構造に由来する異方性を捉えるには原子層に平行な方向からの観察が必要  
→ 再現性良く観察方向を制御できるin situ STEM観察手法の確立が必要

## 解決手段

- ・ 集束イオンビーム加工により観察方向が制御されたLiCoO<sub>2</sub>試料を作製  
→ 電子顕微鏡内でLi脱離反応を起こしてin situ STEM観察

## 成果・新規性

- ①観察方向を制御したLi脱離反応のin situ STEM観察手法を構築
- ②Li脱離領域の異方的な形状及び成長を発見



(上) 実験構成の模式図と  
(下) 環状暗視野STEM像

電子エネルギー損失分光法（EELS）により  
可視化されたLi脱離領域の異方的な形状及び成長

## 期待される市場・応用

・ Liイオン電池

謝辞：本研究は、JSTさきがけ（JPMJPR23J9）、JSPS科研費（JP23K13567、JP23H00241、JP26K01225）、風戸研究奨励会、日本板硝子材料工学助成会、東海産業技術振興財団、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度（JPJ004596）の支援を受けて実施されたものである。

担当者：仲山啓、山本和生、小林俊介



# オペランド透過電子顕微鏡による 負極材料のLi拡散挙動の可視化



R-21

アピール  
ポイント

充放電中のコアシェル構造を発見  
【技術シーズ：透過電子顕微鏡／オペランド計測】

## 背景・課題

- ・全固体電池の高性能化に高容量な負極材料が必要とされている。
- ・ $\text{TiNb}_2\text{O}_7$ はTiとNbの酸化還元に由来した高容量性を示すが、Li拡散挙動は不明
- ・充放電中のLi拡散挙動を明らかにし、さらなる充放電特性の向上が必要となる。

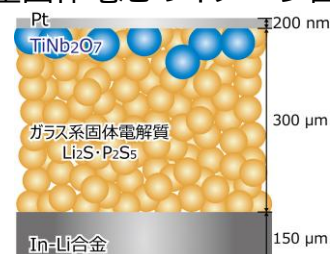
## 解決手段

- ・ナノスケールでリチウム分布を可視化するオペランド透過電子顕微鏡法を適用
- ・透過電子顕微鏡内で充放電させることで、リチウム拡散挙動をその場観察

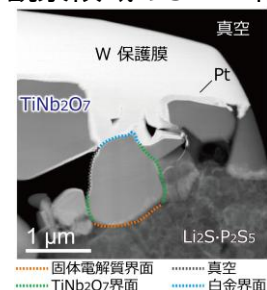
## 成果・新規性

- ①充放電中にリチウム濃度差によるコアシェル構造を形成
- ②コア領域のリチウム拡散性が遅いことを解明  
→ 高レート動作時の律速反応と推測

### 全固体電池のイメージ図



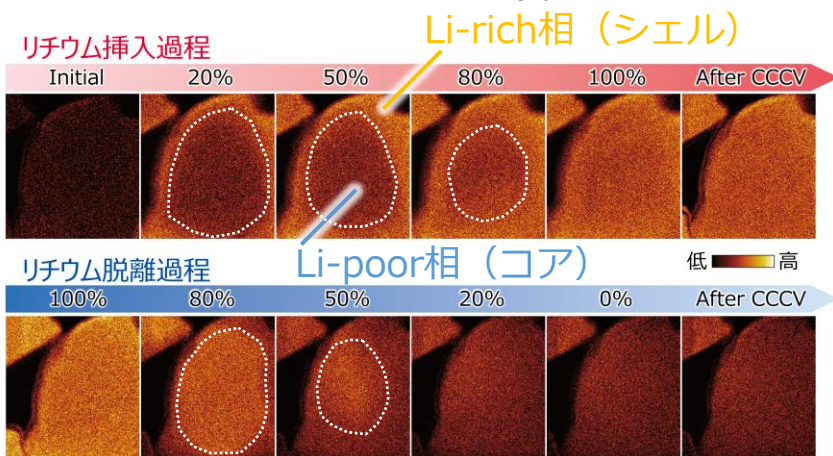
### 観察領域のSTEM像



①②



### 充放電中のリチウム濃度変化



リチウム挿入／脱離の双方でコアシェル構造を形成

小粒径化などにより、充放電反応の高速化が期待

## 期待される市場・応用

- ・全固体電池、 $\text{TiNb}_2\text{O}_7$ 系電池

## 発表文献

平岡 他、第66回電池討論会、1B01 (2025) .

謝 辞：本研究の一部は、JST革新的GX技術創出事業 (GteX、JPMJGX23S2)、日本学術振興会 (JSPS) 科学研究費助成事業(24K23112)のご支援を受けたものです。透過電子顕微鏡は、防衛装備庁安全保障技術研究推進制度 (JPJ004596)によって導入された設備を使用しました。

担当者：平岡紘次、野村優貴、高橋誠治、山本和生



# Pt<sub>3</sub>Co合金の加熱その場観察による 規則相形成過程の解明



R-22

## アピール ポイント

Pt<sub>3</sub>Co規則相の急速成長・ドメインの成長を原子分解能で  
可視化【技術シーズ：透過電子顕微鏡／加熱その場計測】

## 背景・課題

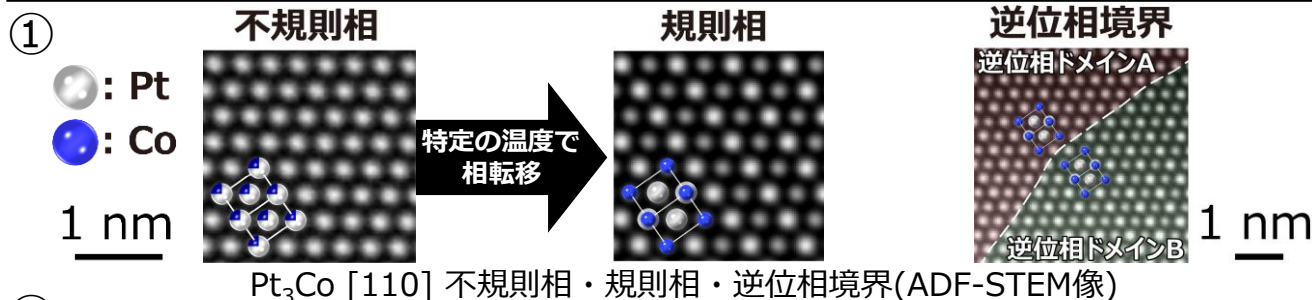
- ・ Pt<sub>3</sub>Co合金は、高い触媒性能を有し、さらに高価なPtの使用量削減が可能な触媒として、固体高分子形燃料電池カソードへの実用化が期待
- ・ Pt<sub>3</sub>Co合金は、PtとCoが規則的に配列をした結晶相（規則相）を形成させると触媒性能が向上、規則相形成が不十分だと性能を引き出せない。
- ・ 触媒性能向上に資する、高度な規則化のための熱処理条件の設計には、詳細な規則相形成過程の把握が不可欠

## 解決手段

- ・ 透過電子顕微鏡加熱その場観察によるPt<sub>3</sub>Co規則相形成過程の直接可視化

## 成果・新規性

- ①加熱時のPt<sub>3</sub>Co規則化過程を原子分解能レベルで観察に成功
- ②規則相が核生成した直後、急速に成長し、逆位相ドメイン境界を形成し大きなドメインへと成長することを解明



Pt<sub>3</sub>Co単結晶[110] 加熱場中の規則相形成の時間発展（ADF-STEM像）

→微小な規則相の急速な成長、逆位相境界の形成、ドメインの統合と粗大化がADF-STEMで観察できている

## 期待される市場・応用

・ 固体高分子形燃料電池 ・ 合金材料 ・ 触媒材料

謝 辞：本研究はJSPS科研費（JP22H04914, JP23H00241）の助成、また、ATLA安全保障技術研究推進制度（JPJ004596）により導入した装置を利用して行われたものである。

担当者：伊藤大智、桑原彰秀、小林俊介



# ハイスループット第一原理計算によるフッ化物固体電解質の探索

## アピール ポイント

室温動作固体電解質となり得るフッ化物結晶を15種類発見  
【技術シーズ：半自動ハイスループット第一原理計算】

## 背景・課題

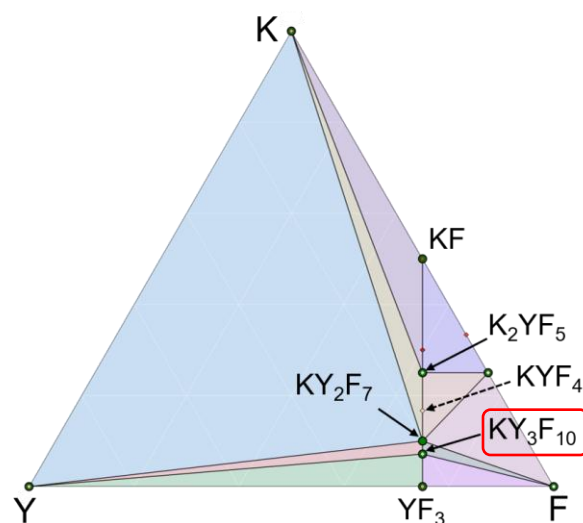
- ・フッ化物イオン二次電池は次世代二次電池の有力候補の一つ
- ・全固体電池化には耐還元性とフッ化物イオン伝導性に優れた固体電解質の開発が不可欠だが、それらの条件を満たすフッ化物固体電解質が見つかっていない。

## 解決手段

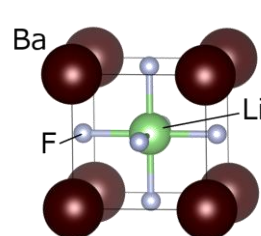
- ・無機結晶構造データベース上のフッ化物に対する網羅的ハイスループット第一原理計算を実施し、イオン伝導体としての研究報告の有無に関わらず物性評価
- ・フッ化物二次電池の固体電解質としてのスクリーニングを実施

## 成果・新規性

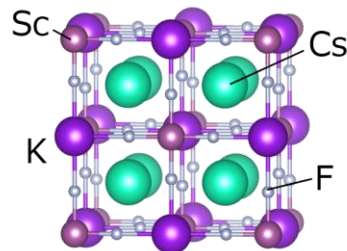
- ・ICSDデータベースから放射性元素や部分占有d軌道の遷移金属イオンを含む化合物等を除外した立方晶系フッ化物205種類に対して半自動化ハイスループット第一原理計算を実施。計算状態図から111種類の安定相が確認され、分解電位が $\text{CeF}_3$ の-2.11 Vよりも低電位の化合物を15種類発見した。



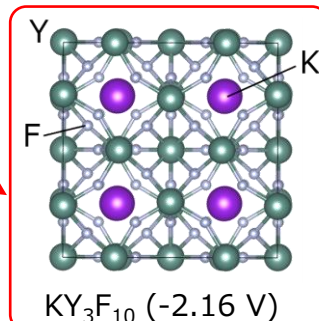
本研究で得られた計算状態図の一例  
K-Y-F三元系状態図



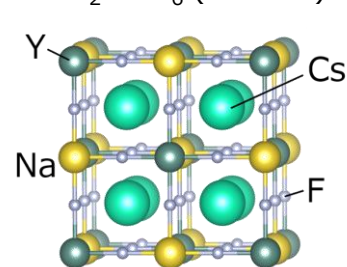
$\text{BaLiF}_3$  (-2.42 V)



$\text{Cs}_2\text{KScF}_6$  (-2.14 V)



$\text{KY}_3\text{F}_{10}$  (-2.16 V)



$\text{Cs}_2\text{NaYF}_6$  (-2.14 V)

分解電位の計算値が $\text{CeF}_3$ よりも低くなった  
ペロブスカイト構造、蛍石型構造を有する化合物の例

## 期待される市場・応用

### ・全固体フッ化物イオン二次電池

謝 辞：本研究は、NEDO委託業務「電気自動車用革新型蓄電池開発」（JPNP21006）において実施された。文部科学省スーパーコンピュータ「富岳」成果創出加速プログラム「物理-化学連携による持続的成長に向けた高機能・長寿命材料の探索・制御」（JPMXP1020230325）の支援を受け、スーパーコンピュータ「富岳」の計算資源の提供を受けた（hp240224）。

担当者：桑原彰秀、小川貴史、森分博紀



# フッ化物電池における Cu単結晶電極のフッ化反応解析



R-24

## アピール ポイント

**Cu/CuF<sub>2</sub>界面は原子レベルで接合していることを解明**  
【技術シーズ：透過電子顕微鏡法】

## 背景・課題

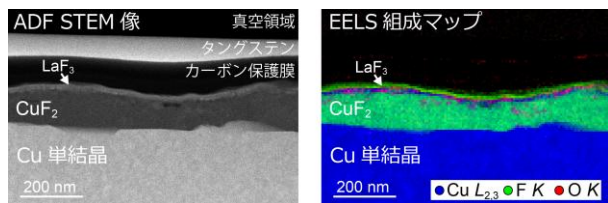
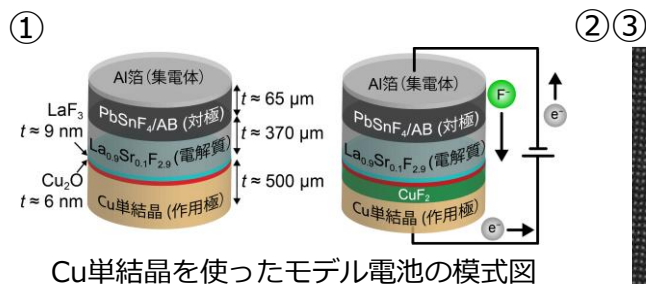
- ・フッ化物電池は高エネルギー密度が期待できる次世代蓄電池として注目
- ・電極金属は充電中に100～200%の体積膨張を伴いフッ化反応が進行
- ・大きな体積膨張を伴うフッ化反応機構の理解には、反応進行の場となる電極金属/フッ化物界面の状態把握が不可欠であるが、その詳細は未解明

## 解決手段

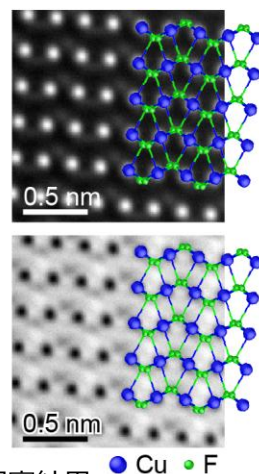
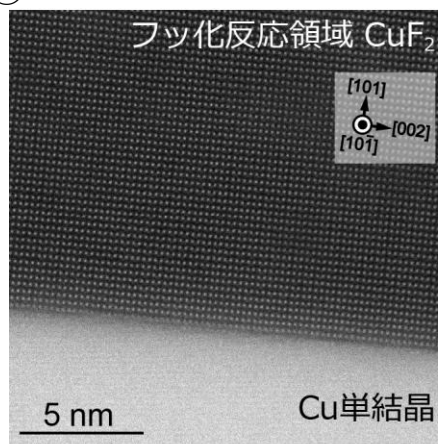
- ・電極金属/フッ化物界面を直接観察可能なモデル電池を構築
- ・透過電子顕微鏡法により充電後のモデル電池界面を原子分解能レベルで観察

## 成果・新規性

- ① Cu単結晶を用いたモデル電池を構築し、充電（フッ化反応）によりCuF<sub>2</sub>形成
- ② CuとCuF<sub>2</sub>の界面状態を原子分解能で観察に成功
- ③ フッ化反応に伴う体積膨張変化を緩和するための中間相や転位ではなく、原子レベルでCuとCuF<sub>2</sub>が接合していることを解明



充電（フッ化反応）後の電子顕微鏡観察結果



Cu/CuF<sub>2</sub>界面の高分解能観察結果  
中間相や転位はなく原子レベルで接合

## 期待される市場・応用

- ・フッ化物電池

## 発表文献

S. Kobayashi et al., J. Mater. Chem. A 13(2025), 40731-40740.

謝辞：本研究は、NEDO委託事業「電気自動車用革新型蓄電池開発（RISING3）」（JPNP21006）の一環として実施されたものである。

担当者：小林俊介、黄馨慧、横江大作、小川貴史、桑原彰秀

共同研究者：（東京大学/JFCC）幾原雄一、（京都大学）佐藤和之、安部武志



# STEM-EELSを用いた電解 $\text{MnO}_x$ の 局所酸化状態分布解析



R-25

## アピール ポイント

マンガン酸化物の見えない不均一性を可視化  
【技術シーズ：微構造解析／酸化状態分布解析】

## 背景・課題

- ・ Zn- $\text{MnO}_2$ 二次電池では、高速充電時のサイクル性能低下が実用上の課題
- ・ 正極反応（理想的には $\text{Mn}^{2+} + 2\text{e}^- \rightleftharpoons \text{MnO}_2$ ）および劣化機構が未解明
- ・ 電池性能低下に関与しうる電析物組成因子を抽出する必要性

## 解決手段

- ・ 性能低下に関与する電析条件（充電電流密度・プロトン濃度）を系統的に比較
- ・ 各条件で合成された電析物の局所組成分布を解析
- ・ STEM-EELS（電子エネルギー損失分光）によるMn価数の空間分布を可視化

## 成果・新規性

- ① スペクトルの成分分離により、電析物中の $\text{Mn}^{2+}/\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$ を定量的に識別
- ② 電析物粒子内部の組成が不均一であることを可視化
- ③ 高速充電条件ほど低Mn価数相が増加＝理論比容量低下を示唆

### 電析条件

WE : GC平板  
(0.5  $\text{cm}^2$ )

CE : Zn板

RE : Ag/AgCl

電解液 : 1 M

$\text{MnSO}_4 + \text{ZnSO}_4$

pH : 1, 2, 4.2

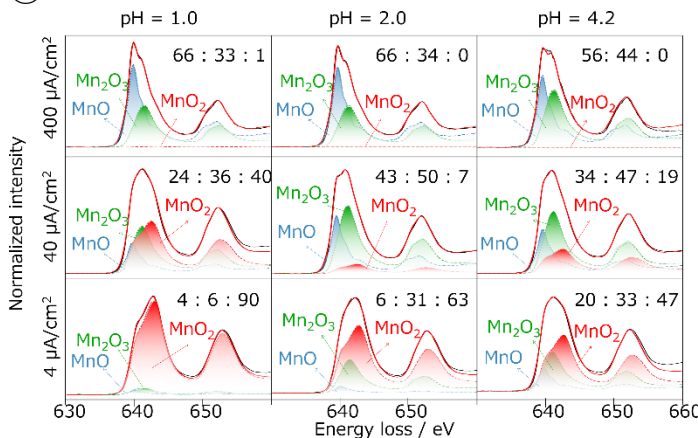
定電流 : 4, 40,

400  $\mu\text{A}/\text{cm}^2$

電析量 :

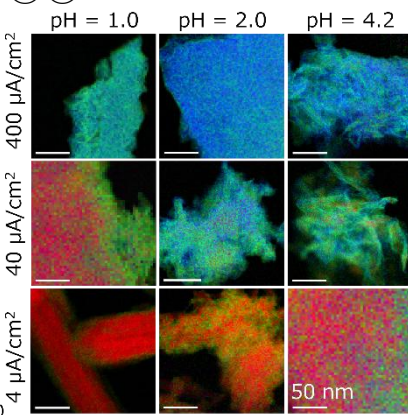
1  $\text{mAh}/\text{cm}^2$

①



各電析物のSTEM-EELSとスペクトル分離解析結果

②③



各電析物の組成分布

## 期待される市場・応用

- ・ 二次電池
- ・ 酸化状態分布解析

謝 辞：本研究は、NEDO「電気自動車用革新型蓄電池開発（RISING3）」（JPNP21006）によって実施されたものである。

担当者：佐々木祐生、吉田要、桑原彰秀

共同研究者：（JFCC／東京大学）幾原雄一



# マルチスケールその場観察による 亜鉛電析形態変化の機構解明



R-26

## アピール ポイント

亜鉛デンドライト形成メカニズムを解明  
【技術シーズ：液中電気化学その場観察】

## 背景・課題

- ・ポストリチウムイオン電池として亜鉛負極二次電池の開発が進行
- ・充電時における亜鉛負極上でのデンドライト（樹状）金属の形成が問題
- ・デンドライト抑制において形成機構の解明が重要

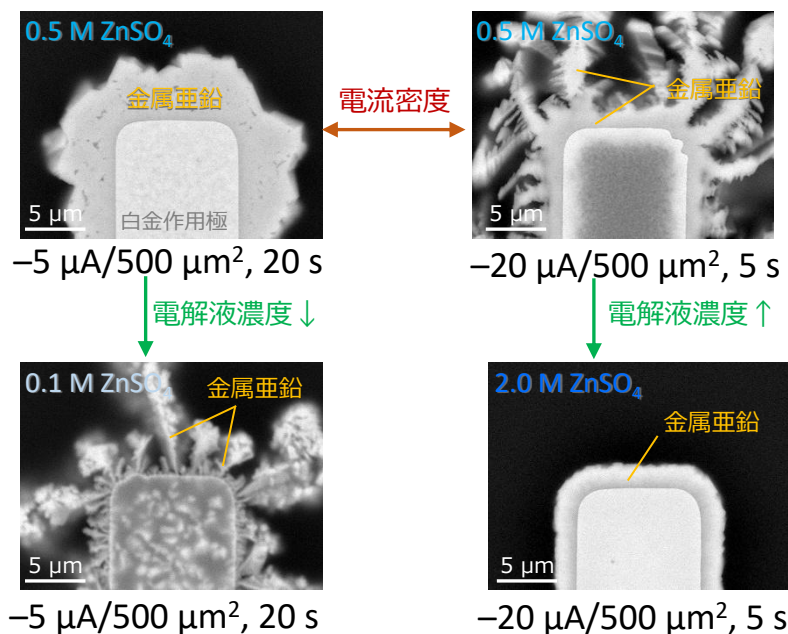
## 解決手段

- ・充電（電析）過程における亜鉛金属形成過程その場観察
- ・反応条件と亜鉛形態変化との相関に基づく形成機構解明

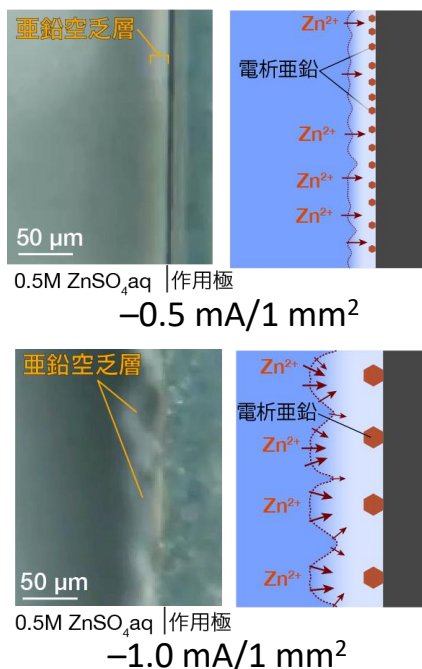
## 成果・優位性

- ①顕微鏡群（SEM、TEM、OM）によるマルチスケールの電析過程観察
- ②個々の反応条件パラメーター（電流密度、電解液濃度）と亜鉛電析形態変化の相関を解明

### 定電流電析形態の比較（液中電気化学SEM）



### カチオン拡散層の形状（光学顕微鏡）



## 期待される市場・応用

- ・亜鉛負極二次電池・電解メッキ

## 発表文献

K. Yoshida et al., ACS Appl. Mater. Interfaces 18 (2026), 21987-21997.  
DOI: 10.1021/acsami.6c01013

謝 辞：本研究は、NEDO委託業務「電気自動車用革新型蓄電池開発（RISING3）」（JPNP21006）の一環として実施されたものである。

担当者：吉田要、佐々木祐生、桑原彰秀

共同研究者：（東京大学/JFCC）幾原雄一



# ルチル型TiO<sub>2</sub>(001)表面の 階段格子構造の電子物性計測



R-27

アピール  
ポイント

階段格子構造は周囲よりバンドギャップが小さいことを解明  
【技術シーズ：原子間力顕微鏡／走査トンネル顕微鏡】

## 背景・課題

- ・光触媒材料であるルチル型TiO<sub>2</sub>は、(001)面において加熱処理により可視光応答性を示す。また、表面に階段格子構造を形成する。
- ・階段格子構造と可視光応答性に寄与する電子物性の関係は不明
- ・構造と電子物性の関係の理解により、高効率な表面設計の指針が構築できる。

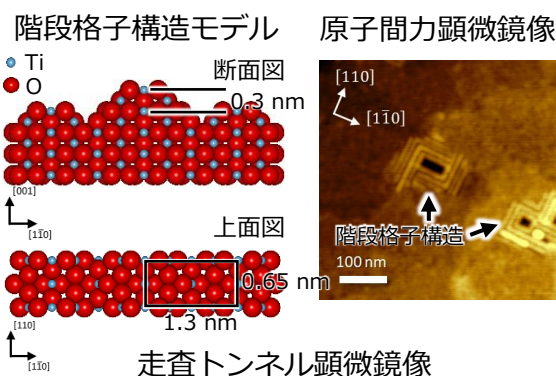
## 解決手段

- ・階段格子構造形成後の表面構造と仕事関数をナノスケールで計測
- ・階段格子構造の電子状態の原子スケール計測

## 成果・新規性

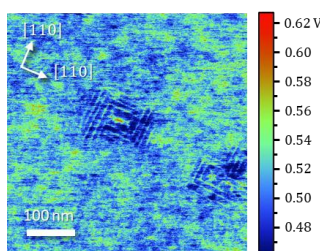
- ①階段格子構造において、仕事関数の変化を観測
- ②階段格子構造において、バンドギャップが小さくなっていることを解明

### 表面構造観察

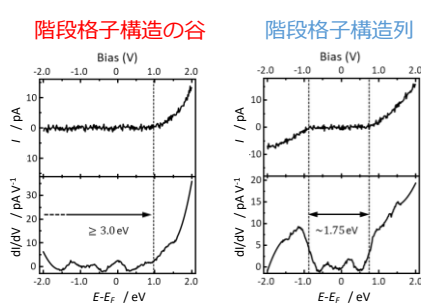


### 電子物性評価

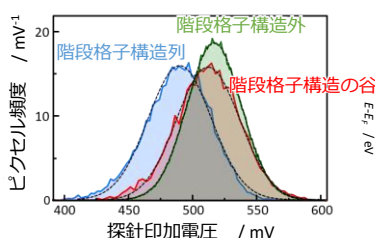
#### ① 仕事関数マッピング



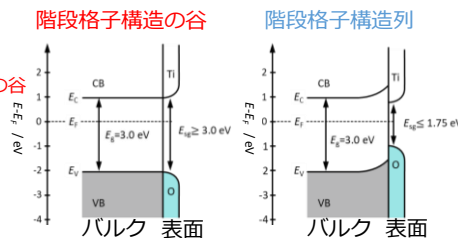
#### ② トンネル電流-バイアス電圧曲線



#### 仕事関数のヒストグラム



#### バンド構造の模式図



## 期待される市場・応用

・光触媒

## 発表文献

E. Inami, S. Koga, L. Hou, F. Li, D. Katsube, M. Abe, Appl. Surf. Sci. Adv. 27(2025), 100777.

謝辞：本研究は、JSPS科研費（20H06297、21K14534、24K01354、24K21716）の助成を受けて実施されたものである。

担当者：勝部大樹

共同研究者：（高知工科大学）古賀清河、稲見栄一、（大阪大学）Linfeng Hou、Fengxuan Li、阿部真之



# 曲げ応力で特性劣化した超伝導線材 の磁気顕微鏡／SEM複合評価

9



R-28

アピール  
ポイント

曲げ応力を印加した超伝導線材部位の劣化原因を解明  
【技術シーズ：走査電子顕微鏡／FIB】

## 背景・課題

- ・高温酸化物超伝導線材は、高磁場化性能が求められるMRI、粒子加速器、核融合装置等に用いる超伝導コイルへの応用が期待されている。
- ・しかし局所的に特性劣化がしばしば発生することが知られており、コイル設計のため、その劣化要因の解明が重要である。

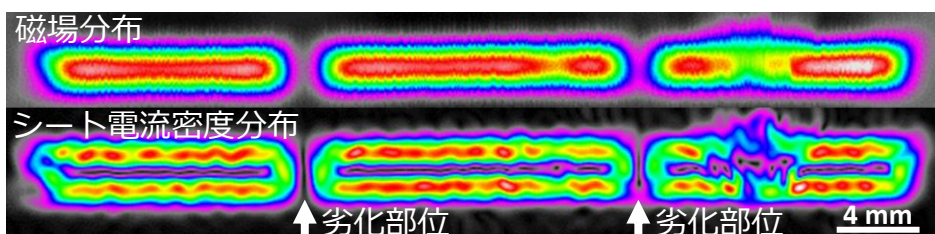
## 解決手段

- ・高温超伝導線材に曲げ応力を印加し、電磁気的な評価から劣化部位を特定
- ・劣化部位について超伝導層表面SEM観察および断面観察を実施

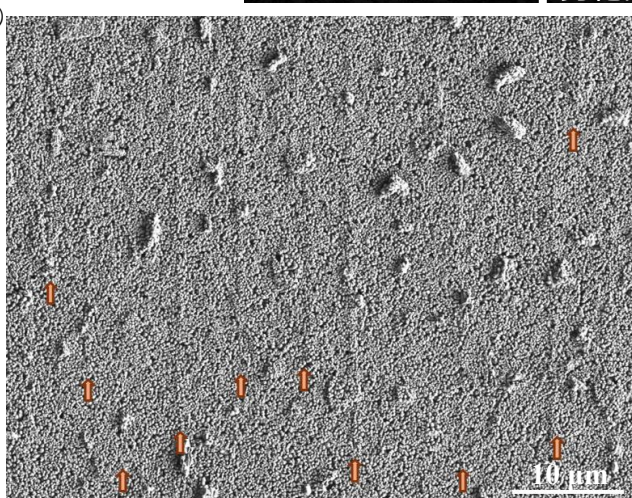
## 成果・優位性

- ①磁気顕微鏡で $\text{REBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ (REBCO, RE; Y, Gd)超伝導層の劣化部位を特定
- ②劣化部位には、REBCO超伝導層に周期的なクラック（矢印）が形成
- ③クラック（矢印）はREBCO超伝導層表面からHastelloy<sup>TM</sup>基板近傍まで到達

①  
磁気顕微鏡像

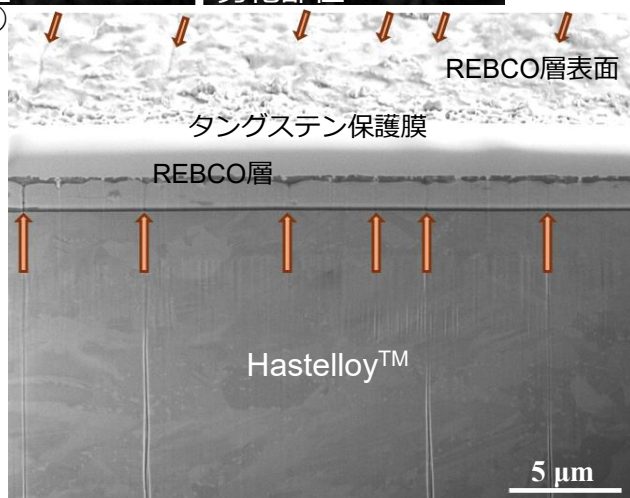


②



REBCO超伝導層の表面SEM像

③



REBCO超伝導層の断面SEM像

## 期待される市場・応用

- ・高温酸化物超伝導線材、超伝導コイル、超伝導機器

謝 辞：本研究は、JST Moonshot R&D (JPMJMS24A2) の支援により実施されたものである。

担当者：加藤丈晴、有賀純子、横江大作、水田安俊

共同研究者：（九州大学）呉澤宇、木須隆暢



# 化学溶液法によるジルコニア 薄膜の作製と微細構造解析



R-29

アピール  
ポイント

耐水熱特性の優れた正方晶YSZ膜を作製  
【技術シーズ：化学溶液法／ナノ構造解析】

## 背景・課題

- ・  $\text{Y}_2\text{O}_3$ 安定化正方晶 $\text{ZrO}_2$  (T-YSZ) 多結晶体は、水熱中において正方晶 (T相) から単斜晶 (M相) に変化することで体積膨張が観測され機械的特性が低下するため、耐水熱特性に優れたT-YSZの開発が重要

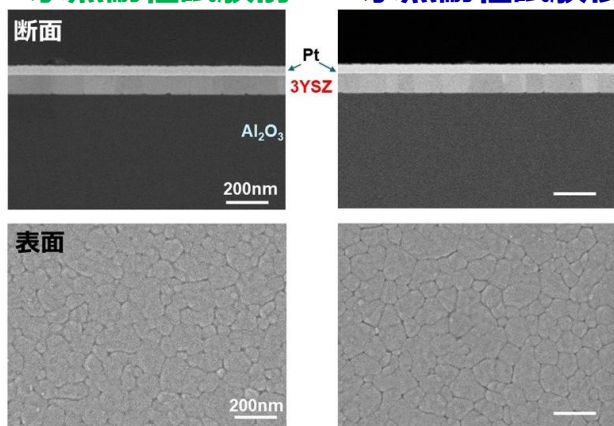
## 解決手段

- ・ 化学溶液法を用いて組成均一なT-YSZ前駆体溶液を調製し、溶媒留去後、得られた前駆体について、示差熱-熱重量測定により熱処理条件を検討
- ・ T-YSZ前駆体溶液を $\text{Al}_2\text{O}_3$ 単結晶基板上に成膜、熱処理することにより作製したYSZ膜についてX線回折、電子顕微鏡による構造評価および耐水熱特性評価

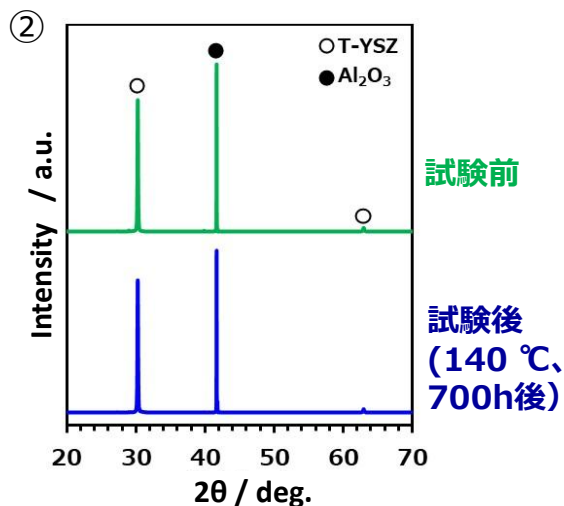
## 成果・新規性

- ①化学溶液法を用いて1100 °Cで緻密なT-YSZ膜を作製
- ②T-YSZ配向膜は水熱浸漬試験の結果、M相に変化することなく耐水熱性が安定→微細構造解析により、膜内部の組成均一性が耐水熱安定性の要因と考えられる

### ① 水熱耐性試験前 水熱耐性試験後



水熱耐性試験前後の走査電子顕微鏡像



水熱耐性試験前後のYSZ膜の  
X線回折パターン

## 期待される市場・応用

・ 構造用セラミックス、生体用セラミックス、セラミックスコーティング

謝 辞：本研究は、東京大学「次世代ジルコニア創出社会連携講座」との共同研究により実施されたものである。

担当者：幾原裕美、桑原彰秀

共同研究者：(東京大学) 馮斌、松井光二 (東京大学/JFCC) 幾原雄一  
(東ソー) 川村謙太、神宮寺海音、細井浩平、永山仁士



# STEM-EELSによるエポキシ ／アルミナ接着界面の化学解析



R-30

## アピール ポイント

接着界面における化学結合をナノスケールで直接実証  
【技術シーズ：走査透過電子顕微鏡観察／界面解析】

## 背景・課題

- ・接着接合は軽量化・高強度化に不可欠な技術
- ・接着特性は界面の化学状態に強く依存するが理解が不十分
- ・界面化学結合のナノスケール評価手法の確立が必要

## 解決手段

- ・原子レベルで平坦なアルミナ基板によるモデル界面設計
- ・水蒸気プラズマ処理による表面化学状態制御
- ・走査透過電子顕微鏡・電子エネルギー損失分光（STEM-EELS）によるナノスケール元素分布・化学状態同時解析

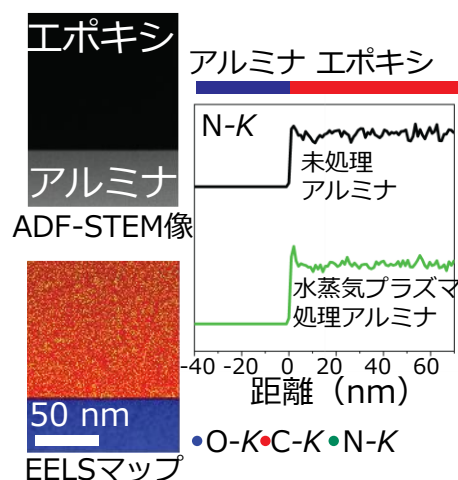
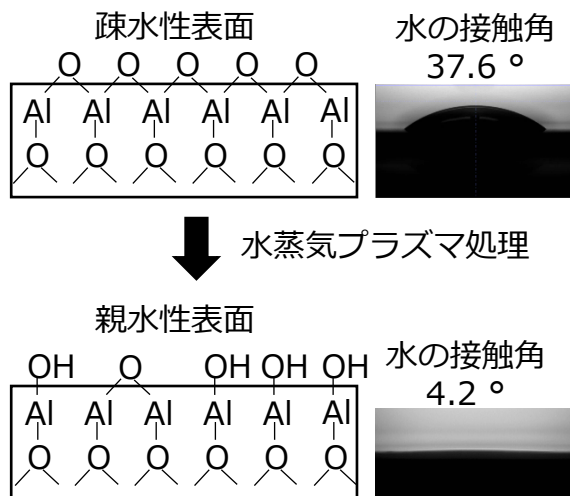
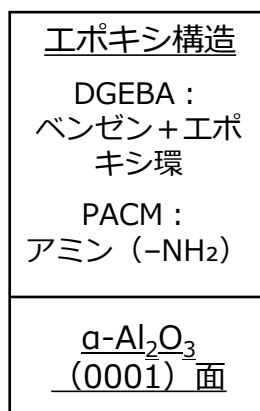
## 成果・優位性

- ①エポキシ樹脂（DGEBA・PACM）とアルミナからなるモデル界面構造を構築
- ②水蒸気プラズマ処理によるアルミナ表面の化学状態変化を確認
- ③界面近傍における窒素濃化を可視化し界面反応を実証

### ①界面模式図

### ②表面構造模式図（-OH導入）

### ③EELSマップ＋窒素分布



## 期待される市場・応用

- ・航空・自動車用複合材料

## 発表文献

H.-H. Huang et al., Micron, 180 (2024) 103623

K. Yoshida et al., Microscopy, online (2026) DOI: 10.1093/jmicro/dfag015

謝 辞：本研究はCREST「原子分解能によるソフト／ハード界面の接着・破壊機構の解明」、JSPS科研費（JP23K13669）で実施されたものである。

担当者：黄馨慧、吉田要

共同研究者：（東北大学）宮田智衆、佐藤庸平、陣内浩司、水上雅史、森直



# 機械学習MDを用いたアンモニウムイオン包接結晶中の分子回転の評価



R-31

## アピールポイント

結晶中の分子回転の温度依存性を解明  
【技術シーズ：機械学習分子動力学計算】

## 背景・課題

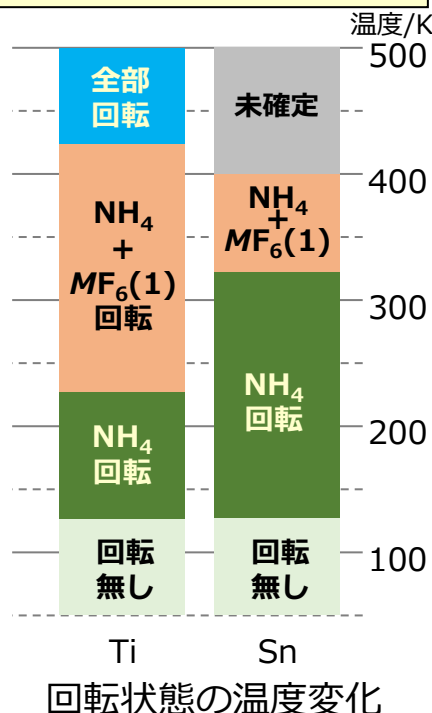
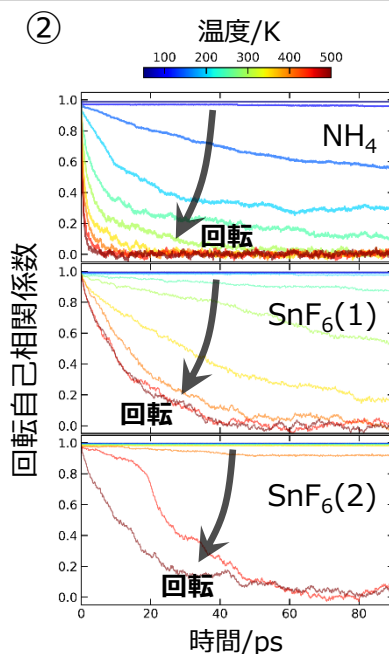
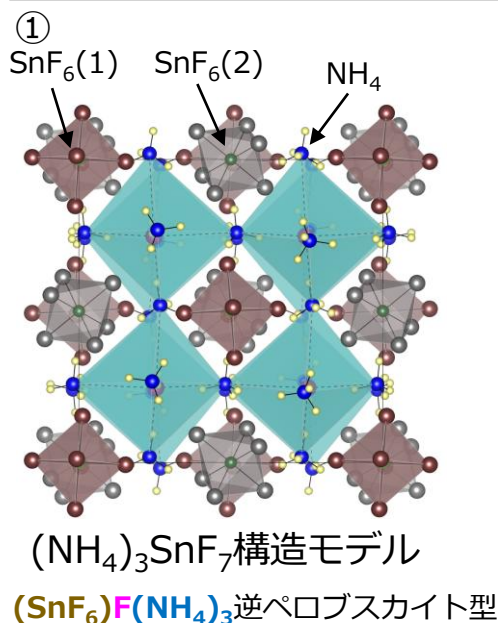
- ・アンモニウムイオンを固体中に安定に保持できる無機結晶は、水素キャリアや新奇な電気化学デバイスへの応用が期待される次世代エネルギー材料
- ・結晶中のアンモニウムイオン ( $\text{NH}_4^+$ ) の回転は構造安定性や材料物性に大きく影響すると考えられるが、これらを対象とした理論研究は未だ限定的であり、基礎的な計算手法の確立が必要

## 解決手段

- ・アンモニウムイオン包接結晶  $(\text{NH}_4)_3\text{MF}_7$  ( $M = \text{Ti}, \text{Sn}$ ) について、機械学習ポテンシャルを用いた分子動力学計算を異なる温度条件で実施
- ・分子回転の程度を表す指標を各温度で算出し、分子回転の温度依存性を解析

## 成果・新規性

- ①第一原理計算に基づき信頼性の高い機械学習ポテンシャルを構築
- ②温度上昇に伴い、 $\text{NH}_4$ 四面体および $\text{MF}_6$ 八面体の分子回転がそれぞれ異なる温度で出現し、その回転挙動が $M$ 元素によって変化することを解明



## 期待される市場・応用

- ・水素輸送、電気化学デバイス

謝辞：本研究は、JSPS科研費（JP22H05146）の一環として実施されたものである。

担当者：小川貴史、桑原彰秀



# リン酸八カルシウムの プロトン伝導のシミュレーション

7



R-32

アピール  
ポイント

水和層の欠陥導入モデル比較によるプロトン伝導の検討  
【技術シーズ：第一原理計算、分子動力学】

## 背景・課題

- ・リン酸八カルシウム( $\text{Ca}_8(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ )は骨関連材料として水和層中の水分子配向に関する研究例はあるが、プロトン伝導特性については不明
- ・水和層におけるプロトン・水分子挙動を様々な温度領域で欠陥状態を考慮しながら比較し、リン酸八カルシウムのプロトン伝導機構との関係を明らかにする。

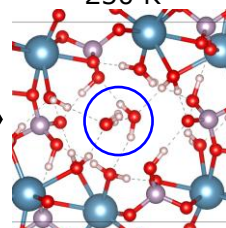
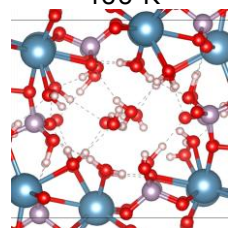
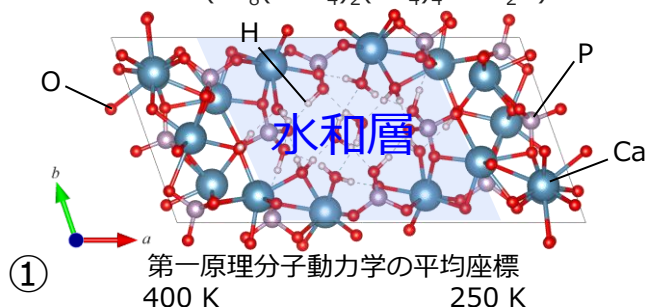
## 解決手段

- ・水和層中の水分子挙動が重要であるため、第一原理分子動力学を実施
- ・脱水反応および欠陥の影響を調べるため、水分子欠陥、水素欠陥、ヒドロニウムイオンなどを導入
- ・十分な原子数・時間スケールを確保するため、第一原理分子動力学データを用いて機械学習ポテンシャルを構築し、分子動力学を実施

## 成果・新規性

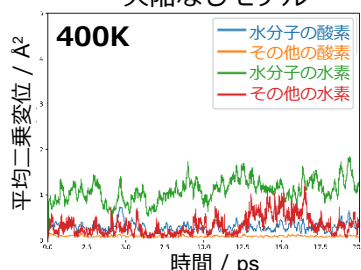
- ①250K付近では水和層中の水分子配向に規則性が現れ、 $P\bar{1}$ 対称の構造を示した。一方、高温域では、水素の動きが大きくなる傾向が見られた。
- ②水分子欠陥、水素欠陥、ヒドロニウムイオンなどを導入して比較した結果、水素欠陥を有するモデルのみ、高温において長距離拡散挙動を示した。

リン酸八カルシウム( $\text{Ca}_8(\text{HPO}_4)_2(\text{PO}_4)_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ )の結晶構造

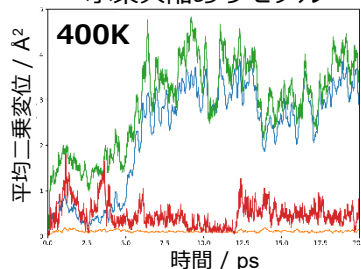


規則的に配置する水和層の水分子

② 水和層中の水素・酸素の平均二乗変位  
欠陥なしモデル



水素欠陥ありモデル



## 期待される市場・応用

・機能性イオン伝導材料（バイオセンサー、バイオデバイス等）

謝 辞：本研究は、JSPS科研費 学術変革領域（A）「計算科学による超セラミックスの設計と物性機能解明」（22H05146）で実施されたものである。

担当者：イ・ギョンソ、小川貴史、桑原彰秀