

【ナノテクノロジー・材料分野】

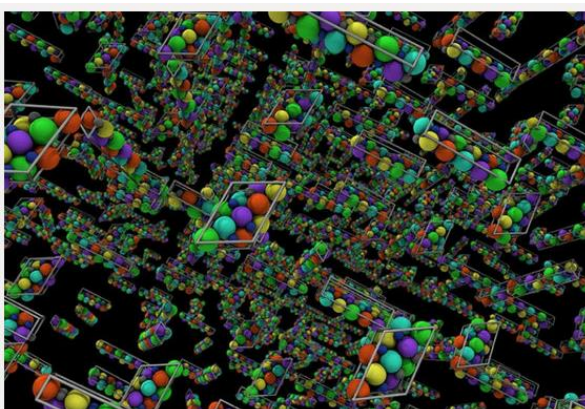
仮訳

## 過酷な環境を耐える数百種類のセラミクスを発見する計算的手法

(米国)

2024年1月3日

By Ken Kingery



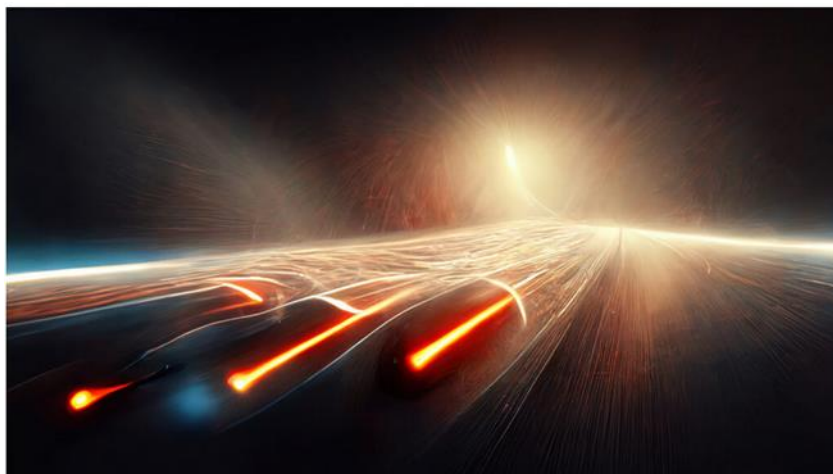
新しい計算的手法が、溶岩床でも作動する電子機器のような、産業界を揺るがす可能性のある幅広い特性を持つ、何百種類もの新しいセラミック材料を提示する

溶岩の中にスマートフォンを落としてしまうのではないかと、根強い不安を抱えている人への朗報である。

デューク大学の材料科学者が率いる研究チームが、華氏数千度を超える溶岩の温度下でもデバイスの作動を可能にさせる、熱・電気耐性の極めて高い新しい種類の材料を迅速に発見する方法を開発した。

鋼鉄よりも硬く、化学的な腐食環境下でも安定するこれらの材料は、新しい耐摩耗性・耐腐食性のコーティング剤、熱電素子、電池、触媒、耐放射線性のデバイスの基礎を形成する可能性も考えられる。

このような材料、すなわち遷移金属炭窒化物・ホウ化物で構成するセラミクスの製造方法は、無秩序エンタルピー・エントロピー記述子 (DEED: Disordered Enthalpy Entropy Descriptor) と呼ばれる新しい計算的手法を通じて発見された。この手法は、最初の実証実験において 900 種類の高性能材料の合成可能性を予測した。そのうちの 17 種類について研究室で試験を実施し、製造に成功した。



熱に強いエレクトロニクスの使用先の一つは航空産業

ペンシルベニア州立大学、ミズーリ科学技術大学、ノースカロライナ州立大学、ニューヨーク州立大学バッファロー校の共同研究者らによるこの研究の成果は、[Nature 誌 1 月 3 日号オンライン版](#)に掲載されている。

デューク大学の Edmund T.Pratt Jr.School の Mechanical Engineering and Materials Science の特別教授である [Stefano Curtarolo 氏](#)は次のように説明する。「合成可能な組成を迅速に発見できるようになれば、研究者らは産業界に革新をもたらすような特性の最適化に集中できるようになります」。

Curtarolo 氏のグループは [Duke Automatic-FLOW for Materials Database \(AFLOW\)](#) を維持・管理している。AFLOW は材料特性データの巨大な貯蔵庫であり、材料最適化のための多くのオンラインツールにリンクしている。この豊富な情報により、複雑な原子動力学をシミュレートしたり、研究室でそれらを作ったりしなくても、未知の混合物の特性がアルゴリズムを通じて正確に予測できるようになる。



“私たちが作りたいセラミクスではなく、私たちが作れる可能性のある、様々な原料の何十万もの組み合わせに含まれるエネルギーを計算する必要がありました。これは途方もなく大変な仕事でした”

**Stefano Curtarolo**

Edmund T. Pratt Jr. School Distinguished Professor of  
Mechanical Engineering and Materials Science

「すべての高エントロピーカーバイドが比較的均一なエンタルピーを備えており、この点の懸念はありませんでした」と Curtarolo 氏は言う。「しかし、他の遷移金属を用いた新しいセラミクス組成の予測には、このエンタルピーを考慮する必要がありました」。

このエントロピーとエンタルピーの概念をよりよく理解するにあたり、10歳の少年が膨大な数のレゴブロックで犬小屋を作ろうとしているところを想像してほしい。レゴブロックの種類が限られているとしても、デザインの可能性は数多く存在する。

“合成の最終段階はスパークプラズマ焼結と呼ばれ、研究室では一般的な、材料科学の新興技術です”

**William Fahrenheit**

Curators' Distinguished Professor of Ceramic Engineering at Missouri S&T

簡単に言えば、エンタルピーとはそれぞれのデザインの頑丈さの尺度で、エントロピーとは同じような強度を持ったデザインの種類の尺度である。前者は説明書に載っているような規則的な構成を促進し、後者はさらにややこしくなる犬小屋構築の作業に10歳の少年がさらに多くの時間とエネルギーを費やすことで現れてくる不可避の無秩序性を捉えている。どちらも最終製品に吸収されることになるエネルギー量と熱量の尺度である。

「エンタルピーとエントロピーの両方を高速で定量化するためには、私たちが作りたいセラミクスではなく、私たちが作れる可能性のある、様々な原料の何十万もの組み合わせに含まれるエネルギーを計算する必要がありました」と Curtarolo 氏は言う。「これは途方もなく大変な仕事でした」。

DEED は、安定した不規則なセラミクスの新しいレシピを予測するだけでなく、それらの固有の特性を発見するためのさらなる分析を導くにも役立つ。多岐にわたる用途に最適なセラミクスを見つけるためには、研究者らはそれらの特性発見の計算を洗練させ、研究所で物理的な試験を実施する必要がある。

“スパークプラズマ焼結、つまり場支援焼結技術 (FAST) は、産業界ではまだ一般的な技術ではありません。しかし、現在のセラミックメーカーは、現行のプロセスや設備に若干の調節を加えることで、これらのような材料の製造に軸足を移すことができます”

**Doug Wolfe**

Professor of Materials Science and Engineering and Associate Vice President for Research at Penn State

State

DEED は、熱間圧接と呼ばれる製造方法に合わせたものである。この方法では、粉末状の構成要素の化合物を真空中で数時間にわたって加圧しながら 4000Tまで加熱する。すべての準備、反応、冷却のプロセス全体には 8 時間以上がかかる。

「合成の最終段階はスパークプラズマ焼結と呼ばれ、研究室では一般的な材料科学の新興技術です」とミズーリ S&T セラミクスエンジニアリングの特別教授である William Fahrenholtz 氏は説明する。

完成したセラミクスは金属的な外観をもち、濃灰色または黒色である。ステンレス鋼のような金属合金のような材質で、それと同等の密度をもつが外観はかなりの暗色である。金属質には見えるものの、従来のセラミクスのように硬くて脆い。

研究グループは、今後他の研究者らが DEED を活用して多様な用途の新しいセラミクス材料の合成・試験を実施することを期待している。信じられないほど多くの潜在的な特性と用途を考えると、それらのいくつかが商業生産へと進展するのは時間の問題だと彼らは考えている。

「スパークプラズマ焼結、つまり場支援焼結技術 (FAST) は、産業界ではまだ一般的な技術ではありません」とペンシルベニア州立大学の材料科学・エンジニアリングの教授であり、アソシエイト・バイスプレジデントの [Doug Wolfe 氏](#) は付け加える。「しかし、現在のセラミックメーカーは、現行のプロセスや設備に若干の調節を加えることで、これらのような材料の製造に軸足を移すことができます」。

本研究は主に、Curtarolo (N00014-21-1-2515, N00014-23-1-2615)と国防総省ハイパフォーマンスコンピューティング近代化プログラム (HPC-Frontier) が主導する米国国防総省の Multidisciplinary University Research Initiative (MURI) コンペティションを通じて、5 年間で 750 万ドルの助成金を受けている。

「高エントロピーセラミックス発見のための無秩序エンタルピー-エントロピー記述子」 Simon Divilov, Hagen Eckert, David Hicks, Corey Oses, Cormac Toher, Rico Friedrich, Marco Esters, Michael J.Mehl, Adam C.Zettel, Yoav Lederer, Eva Zurek, Jon-Paul Maria, Donald W.Brenner, Xiomara Campilongo, Suzana Filipovic, William G.Fahrenheitz, Gaillin J.Ryan, Christopher M.DeSalle, Ryan J.Creales, Douglas E.Wolfe, Arrigo Calzolari and Stefano Curtarolo. Nature, 2023.DOI:[10.1038/s41586-023-06786-y](https://doi.org/10.1038/s41586-023-06786-y)

訳：NEDO（担当 技術戦略研究センター）

出典：本資料は、米デューク大学 Pratt School of Engineering の記事 “Computational Method Discovers Hundreds of New Ceramics for Extreme Environments” (<https://pratt.duke.edu/news/deed-ceramics/>) を翻訳したものである。

(Reprinted with permission of Duke University)