

A1-10

化学反応を利用した低温セラミック製造技術と AI 活用によるプロセス開発の高速化

山口祐貴（産総研 極限機能材料研究部門）

2050年のカーボンニュートラルの実現に向けて、工業製品の環境低負荷な製造プロセス開発も重要となっている。エネルギーデバイスや電子部品に多く使用されるセラミックス製品は、一般的に1000℃以上の高温で焼成することによって製造しており、製造時に多量のエネルギーを消費している。そこで近年では室温近傍の低い温度でセラミックスを製造可能なプロセスが注目を集めている。

本研究では普遍的な化学反応の一つである中和（酸・塩基）反応を用いたセラミックス合成と、この反応を利用したセラミックスのバルク体製造プロセスを開発した。本研究で開発した室温近傍での結晶性セラミックスナノ粒子合成は、式(1)示す反応を用いている。



式中に示した水酸化バリウムは塩基性物質であり、水和した非晶質ジルコニウム酸化物（粉末と乾式でよく混合し室温近傍で長時間静置するだけで、結晶性のジルコン酸バリウムが合成でき、中和反応後の塩として複合酸化物の結晶が得られるのである¹⁾。中和反応によって得られた複合酸化物はイオン結晶のように振る舞い、構成する元素のイオン半径比と結晶構造が安定であれば、低温で合成することが可能となる^{2,3)}。複合酸化物の構造と元素の組み合わせを適切に選択することで室温付近にて合成可能な新しいセラミックスの低温合成プロセスの開発に成功した。さらにこの中和反応をバルクセラミックス製造に応用することを検討した。図に示すようなセラミックス粒子の接合を中和反応によって行うことで、高密度なセラミックスを室温近傍で製造した⁴⁾。

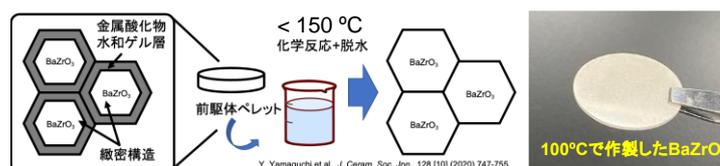


図 ジルコン酸バリウムセラミックスの低温製造

新しいプロセスの最適化を行うためには、検討すべきプロセスの項目が多数あり、目的とする構造を得るまでに多くのパラメーター調整と検討が必要になる。そこで本研究ではこのようなパラメーターの調整を、AI（機械学習）を活用することで高速に最適化することを試みた。低温のバルク体製造プロセス開発の初期では、相対密度が60%程度であったのに対して、AIによるパラメーター最適化しプロセスを改善することで、相対密度90%以上を達成でき、製造パラメーターのみで、実際に作ることなく密度を予測することが可能となった。このようなプロセス・インフォマティクス研究をさらに加速することで、新しいプロセスがより高速に社会実装可能となる。

- 1) Y. Yamaguchi, Y. Kanamaru, M. Fukushima, K. Fujimoto, S. Ito, *J. Am. Ceram. Soc.* **2015**, 98, 3054.
- 2) Y. Yamaguchi, M. Fukushima, K. Fujimoto, S. Ito, *Chem. Lett.* **2016**, 45, 226.
- 3) Y. Yamaguchi, K. Hamamoto, N. Hamao, H. Shimada, H. Sumi, K. Nomura, Y. Fujishiro, *Ceram. Int.* **2019**, 45, 24936.
- 4) Y. Yamaguchi, *J. Ceram. Soc. Jpn.* **2020**, 128, 747.

PROFILE

山口 祐貴（国立研究開発法人産業技術総合研究所 材料・化学領域 極限機能材料研究部門 主任研究員）

2013年 東京理科大学 基礎工学研究科 材料工学専攻 博士後期過程修了。博士（工学）。同年4月より東京理科大学 理工学部 工業化学科 助教に着任。2016年より現職。セラミックス材料化学を専門に研究を進めており、セラミック電気化学デバイスに用いる材料や部材の低温合成、低温製造プロセスの開発をおこなっている。2019年に日本セラミックス協会進歩賞、愛知県第15回わかしゃち奨励賞を受賞。酸塩基反応を利用した低温セラミックス製造技術を、機械学習等のインフォマティクスの活用によって、産業技術として迅速な橋渡しを実現するべく、研究を進めている。