

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書

井上 和俊

科学技術振興機構
さきがけ研究者

離散・位相幾何学的手法による界面構造予測と粒界指標の確立

§1. 研究成果の概要

機能性材料として用いられる金属・酸化物の殆どは多数の結晶粒からなる多結晶体であり、格子欠陥が機能特性に多大な影響を及ぼすことが知られている。特に、二次元欠陥である粒界構造と機能特性との関係は複雑だが、対称傾角粒界の場合は構造ユニットと呼ばれる原子多面体の配列で記述できる。その傾角依存性は整数論的手法を用いて統一的に記述することができ、粒界構造ユニットの配列を予測することが可能である。原子分解能走査透過型電子顕微鏡法 (STEM) による直接観察により、実験的にも予測通りの構造ユニット配列が観察されている。

従来、電子顕微鏡像は原子構造の二次元投影であり、構造解釈の比較的易しい傾角粒界の研究が主として行われてきた。しかしながら、粒界特有の現象を根源的に理解するためには、幾何学的な手法により粒界最安定構造の背後に存在する数理構造を明らかにすることが重要と考えられる。本研究では、立方晶傾角・振り粒界のモデルを作成し、第一原理計算および古典分子動力学法を用いて求めた最安定構造に存在する四面体分布を解析した。傾角粒界では2種類の参照構造によりそれらの間の構造が記述できるが、振り粒界の四面体分布についても同様の性質が示唆された。また、最安定構造と原子多面体分布との相関を解析するため、系統的にモデルを変形し、粒界エネルギーとの相関を考察した。さらに、粒界構造を記述する三次元構造ユニットモデルについても検討を行った。今後、傾角・振り粒界の解析を足掛かりに、ランダム粒界の構造解析へと発展させる予定である。

§2. 研究実施体制

- ① 研究者：井上 和俊（科学技術振興機構 さきがけ研究者）
- ② 研究項目
 - ・粒界最安定構造の背後に存在する数理構造の特定および構造指標の導出
 - ・粒界構造多面体と物性との相関
 - ・整数論を用いたランダム粒界の分類