

井上 和俊

東北大学材料科学高等研究所／科学技術振興機構
講師／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

機能材料として用いられる金属・酸化物の殆どは多結晶体であり、転位や粒界などの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、粒界は多様な原子配置を許容するため最安定構造を決定するためには多大なコストを要する。そのため、比較的観察・計算が容易な傾角粒界であっても、多くの場合 3 次元構造の解析は行われてこなかった。傾角粒界の 2 次元構造ユニット配列は整数論的手法を用いて統一的に記述できるが、近年の原子分解能走査透過型電子顕微鏡および理論計算の目覚ましい進展に伴い、3次元構造を特定する根源的な理解が求められている。2019 年度は面心立方格子および六方晶酸化物傾角粒界の 3 次元多面体配列についての検討をまとめ、論文を執筆した。面心立方格子は、最近接原子同士をつなげば二種類の多面体(正四面体と正八面体)によって充填される。一方、粒界近傍を充填する場合、母結晶の多面体に原子を追加・削除するなどして歪ませた多面体の他に、粒界構造に起因した多面体が存在する。粒界構造由来の多面体は、傾角に関わらず四角面三冠三角柱(capped trigonal prism, CTP)に類似した構造を有している。六方晶酸化物の陽イオンサイトも同様に正四面体と正八面体を形成し、粒界由来の構造として傾角に依らず CTP に類似した多面体が粒界近傍を充填していることが明らかになった。双方の多面体配列の傾角依存性には、粒界周期を反映した階層性が存在することが分かり、整数論的手法を用いた系統的な構造予測が可能であることが示された。