

2022 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	井上 和俊
研究機関名	東北大学
所属部署名	材料科学高等研究所
役職名	准教授
研究課題名	マルチスケール粒界理論の構築による新材料開拓
研究実施期間	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

### 研究成果の概要

金属や酸化物等の固体材料は、多くの場合多結晶体として用いられる。そのため材料内部には無数の格子欠陥が存在し、中でも粒界は巨視的レベルに発現する機能特性に多大な影響がある。整合粒界は従来整数指標によって分類されており、傾角粒界の原子構造は電子顕微鏡像上に二次元構造ユニットを描いて検討されてきた。しかしながら、粒界特有の諸現象を根源的に理解するためには粒界三次元構造の解明が重要であり、粒界多面体に着目した三次元的記述が本質的であると考えられる。

本研究では、面心立方金属の非対称傾角粒界を構成する多面体配列について幾何学的に要請される構造と配列を定量的に明らかにした。非対称傾角粒界近傍を充填する多面体は、結晶構造を歪ませた多面体と、粒界特有の多面体とに大別され、粒界多面体は特定の短周期対称傾角粒界に出現する多面体により特徴づけられることが分かった。また、粒界近傍に存在する粒界多面体の配列には、粒界周期を反映した整数論的階層性が存在し、この性質を用いた効率的な構造予測が可能であることを示した。また、振り粒界にも特徴的な多面体配列が存在する。このような多面体を最大径のボイド球と対応づけると、粒界近傍のボイド球同士は重なり合いクラスターを形成する。粒界モデルにおける最大のボイドクラスターの体積と粒界エネルギーを比較することで、それらが相関することが示された。