

2023 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	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

研究成果の概要

粒界や界面近傍のナノスケール原子構造は、マクロに発現する機能特性に多大な影響を及ぼすことが知られている。粒界は古くに格子整合理論が確立され、同一結晶同士の整合指標は「 Σ 値」として粒界の幾何学的分類に用いられてきた。一方、異種界面・非整合界面や一般粒界の構造予測や理論計算へ向けた周期境界条件を満たすようなモデリングを効率的に行うためには、界面における非整合による影響を最小化する必要がある。本研究では、任意の格子定数を有する物質同士の界面における整合を系統的に議論し、整数論に基づくモデル構築法を提案した。この手法は、金属・イオン結合性物質同士の界面近傍の原子構造予測と密接に関連しており、実際に走査透過型電子顕微鏡観察および第一原理計算によって予測の正当性を確認した。

さらに、各モデルを特徴づける格子整合指標を提案した。この指標は、同一結晶同士の整合のときは先述の Σ 値に帰着し、格子定数比が $m:n$ のときは $mn\Sigma$ となるような自然な拡張である。すなわち、既存の対応格子理論を格子定数の異なる物質同士の整合理論へと拡張した。これに基づき、任意の格子定数比の異種界面・非整合界面に対して系統的に整合・非整合を議論することが出来るようになり、効率的な候補物質の提案による材料探索への貢献が期待される。