



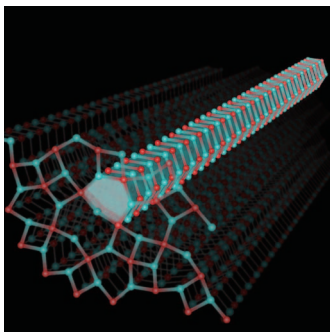
セラミックスの新構造を発見 ～一次元規則結晶～

東北大学材料科学高等研究所の幾原雄一教授（東京大学教授、JFCC 主管研究員、京都大学拠点教授併任）らは、原子分解能・走査透過型電子顕微鏡法 (STEM) と第一原理計算を駆使し、一次元の周期性と二次元の無秩序性が共存する新しい原子構造を発見した¹⁾。

固体物質を構成する原子構造は、結晶とアモルファスに分類されてきた。周期性を有する結晶であっても、多結晶体では隣接する結晶粒同士の方位関係によって多様な原子構造が実現される。すなわち、結晶界面はバルク結晶に挟まれた二次元の束縛領域であり、結晶界面や粒界三重点の近傍は三次元の束縛領域と見做せる。そのような束縛領域に形成される原子構造はバルクとは異なり、特異な機能特性を発現する可能性がある。

本研究では、球面収差補正 STEM を用いて、MgO 薄膜（スパッター法により作製）の結晶

界面や粒界三重点の近傍を詳細に観察したところ、ランダム性を有する特異な原子配列を発見した。本薄膜は数 nm サイズの粒径を持つ結晶粒からなる多結晶体であるが、[001] 軸方位に規則配列した原子カラムが結晶界面において特異な多角柱を形成し、それらが無秩序に空間を埋めることでバルク結晶とは異なる構造を形成したものと考えられる（図参照）。このような特異構造は他のセラミックスの結晶界面近傍でも確認され、「一次元規則結晶」と名付けられた。さらに第一原理計算により、このような構造も安定して存在しうることが示された。また、MgO バルク結晶のバンド



ギャップが 6.5 eV であるのに対して、一次元規則結晶では 3.0 eV と算出され、ワイドバンドギャップ半導体への応用も期待される。モノクロメーター搭載 STEM を用いた電子エネルギー損失分光法 (EELS) により精密計測を行ったところ、理論計算と整合する結果が得られた。

今回の発見で、三次元束縛領域に原子多角柱を無秩序に配列することで、多様な準安定原子配列が実現でき、結晶界面で可能となってきた機能特性の制御を三次元領域にも拡張できる可能性が開かれた。今後、特異な機能を有する一次元規則結晶デバイスの開発へと期待が広がる。本研究は、科学研究費補助金・特別推進研究 (JP17H06094) および文部科学省によるナノテクノロジーハブ拠点、ナノテクノロジープラットフォーム事業として実施された。

文献

1) D. Yin, C. Chen, M. Saito, K. Inoue and Y. Ikuhara, *Nature Materials*, **18**, 19-23 (2019).

(東北大学材料科学高等研究所 研究員 井上和俊
連絡先 〒 980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1
E-mail: kinoue@wpi-airm.tohoku.ac.jp)
URL <http://www.wpi-airm.tohoku.ac.jp/~xikuhara/index.html>

[2019年3月11日]