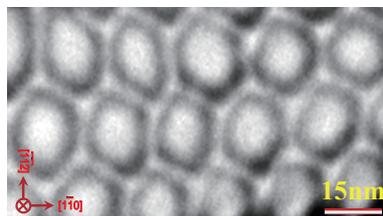


## ダイヤモンドと立方晶窒化ホウ素の 界面構造を解明 ～ハチの巣状格子欠陥の形成～

東北大学原子分子材料科学高等研究機構 (AIMR)、東京大学工学系総合研究機構、物質・材料研究機構 (NIMS) およびファインセラミックスセンター (JFCC) の研究グループは、最先端の収差補正機を搭載した超高分解能走査透過型電子顕微鏡と第一原理計算手法を駆使し、最も硬い物質として知られるダイヤモンドと、ダイヤモンドの次に硬い立方晶窒化ホウ素同士の接合界面の原子構造、結合メカニズムを、原子レベルで決定することに初めて成功した。本研究では、c-BN/ダイヤモンド界面を直接観察するために、ダイヤモンド種結晶上に、高温高圧下でc-BNの単結晶を成長させる（温度勾配法によるヘテロエピタキシャル成長）というNIMS独自の方法でc-BN/ダイヤモンド接合体を作製した。この接合体の界面を超高分解能走査透過型電子顕微鏡法により観察を行った結

果、ダイヤモンドの炭素原子とc-BNのホウ素原子が直接結合している様子が観察された。この構造はエネルギー的にも安定であることが、密度汎関数法に基づく第一原理計算により確認されている。

金属や半導体のヘテロエピタキシーな界面においては網目状のミスフィット転位が形成されることが知られているが、多くの場合は完全転位で構成される。一方、今回のc-BN/ダイヤモンド界面においては、一本の転位が六角網目状を形成しているのではなく、六角形状の転位ループがハチの巣状に界面を埋め尽くしている構造をとることがわかった（図）。本結果は、完全転位が分解し、二つの部分転位が形成されることで、孤立した六角形状の転位ループが形成されたことを示唆している。このような特殊



な構造は、共有結合性物質同士のヘテロ界面に特有であり、転位のエネルギー、積層欠陥エネルギー、界面結合力のバランスによって形成されるものと考えられている。また、本界面における電子状態を第一原理計算で系統的に計算した結果、c-BNやダイヤモンド単体では持ちえない1次元電気伝導性が発現しうることが予測されている。

本成果は、英国科学誌

[Nature Communications (ネイチャー・コミュニケーションズ) DOI: 10.1038/ncomms7327 (2015) で発表された。また、本研究は文部科学省による構造材料元素戦略研究拠点 (ESISM) 事業および科学研究費補助金・新学術領域研究”ナノ構造情報のフロンティア開拓-材料科学の新展開”の一環として実施された。(東京大学大学院工学系研究科総合研究機構 ナノ工学研究センター長 教授 幾原雄一 連絡先: 〒113-8656 東京都文京区弥生 2-11-16 E-mail: ikuhara@sigma.t.u-tokyo.ac.jp) URL: <http://interface.t.u-tokyo.ac.jp/japanese/index.html>

[2015年8月15日]