

2024 年度
創発的研究支援事業 年次報告書【公開版】

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	2024 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日

研究成果の概要

結晶同士の界面である粒界近傍の原子構造は、マクロレベルの機能特性に多大な影響を及ぼすことが知られている。粒界では結晶方位関係に応じた整合性が重要であり、対応格子理論により分類されてきた。粒界近傍の原子構造は、接合された 2 つの結晶粒の方位関係によって決まるため、方位関係が連続的に変化すれば、粒界構造も連続的に変化することが期待される。しかしながら、複数の実験や理論的研究により、粒界エネルギーは特定の低エネルギー構造に対応する方位関係のときにカスプ(尖点)を取ることが示されている。傾角粒界では複数の深いカスプが存在し、振り粒界にはあまり存在しないことも知られている。本研究では、粒界近傍に形成される原子多面体の構造を詳しく検討し、粒界エネルギーにカスプが存在する原因は、粒界構造の不連続性による帰結であることが分かった。すなわち、粒界構造を構成する各原子多面体には固有の定義域が存在し、それらは固有の条件を満たす特定の方位でのみ定義されることと、ある多面体構造が別の多面体構造に切り替わる方位においてカスプを生じることが分かった。特に傾角粒界ではこの傾向が強く、広い定義域を有する多面体が別の多面体に切り替わる境目の方位において深いカスプを取る傾向がある。また、カスプの両側で粒界エネルギー曲線が非対称であることも説明できる。このような粒界原子構造の不連続性が、粒界エネルギーの方位依存性が示す特徴的な曲線を形作り、カスプ近傍での偏析挙動や機能特性変化に顕著な影響を与えていると推察される。