

【基盤研究（S）】

ナノダイナミクス観察に基づいた材料強度発現メカニズムの基盤的学理開拓



研究代表者 東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・教授

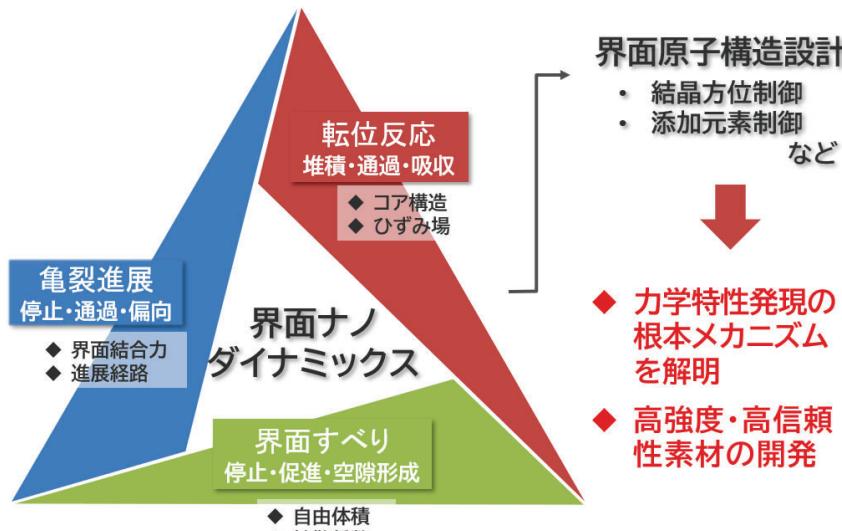
幾原 雄一（いくはら ゆういち） 研究者番号: 70192474

研究課題 情報 課題番号: 22H04960 研究期間: 2022年度～2026年度
キーワード: 強度特性、格子欠陥、TEM/STEM、その場観察、機械試験

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

結晶性材料は力学的負荷の増大に伴い変形が生じ破壊に至る。この際、結晶の内部では転位や双晶、亀裂といった構造欠陥の形成と成長が生じていることが知られている。つまり、結晶性材料の変形・破壊現象は構造欠陥の挙動に支配されていると言える。また、重要な材料強度の発現メカニズムとして、転位や双晶、亀裂の進行が材料内部に含まれる粒界・界面により妨げられる現象が挙げられる。従って、材料の強度特性を理解するためには荷重負荷に伴う構造欠陥と界面との相互作用を深く探求することが必須である。しかし、上記の相互作用は原子レベルにて動的に生じているものでありその解析は極めて困難であるため、多様な構造欠陥がどのように形成され、どういった力学的相互作用を生じるのかということについてはそのほとんどが未解明であると言える。そこで本研究では、新規機械試験システムの開発および原子分解能透過型電子顕微鏡(TEM)内その場機械試験、原子レベル理論計算などの解析手法を駆使して、結晶性材料中の構造欠陥—界面の動的な力学的相互作用（転位反応、亀裂進展、界面すべり）に関わる界面ナノダイナミクスを明らかとし、界面原子構造設計指針を構築することを目的とする。



●本研究の学術的独自性と創造性

本研究では、その場TEM機械試験により構造欠陥—界面の力学的相互作用を原子レベルの動的観察に基づいて探究する点が最大の特色である。MEMSデバイスを用いた原子分解能その場機械試験法は代表研究者グループの独自の技術であり、世界的にも高い技術的優位性を有している。本実験技術をベースに新規実験システムの開発と応用研究を推進することにより、材料強度特性に関する極めて先進的な研究成果を得ることを目指す。

●本研究の着想に至った経緯、関連する国内外の研究動向と本研究の位置づけ

代表研究者が推進した科学研究費助成事業 特別推進研究「原子・イオンダイナミックスの超高分解能直接観察に基づく新材料創成」(H29～R3年度)において、先端TEMによる原子ダイナミクス観察手法が確立したことを踏まえ、その発展研究として本研究を計画している。

結晶性材料の変形や破壊は構造欠陥の生成・成長にあることから、その場TEM機械試験は古くから行われており、現在でも世界各国の研究グループが広範に推進している。しかし、その多くはナローレベルの動的観察であり、原子分解能での観察例は少なく、また報告例もナノワイヤーや2次元物質といった特殊なものである。当研究グループは世界でも有数の原子分解能観察技術を有し、バルク試料から試験片を作製する技術、極めて安定的に荷重を負荷できる技術を確立している。以上より、本研究を遂行できるのは当グループのみであり、世界に先駆けて材料強度発現の学理基盤の構築を目指すものである。

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●新規その場機械試験システムの開発

構造欠陥の挙動は負荷荷重のみではなく、変形速度（ひずみ速度）に依存することが知られている。広範な力学現象の解明にはひずみ速度を高精度に制御できるデバイスが必須である。そこで、現行のMEMS荷重負荷デバイスの設計を踏まえて、荷重負荷速度制御機構、変位計測機構を組込んだ高精度荷重負荷デバイスを設計・製造する。各デバイスは動作試験・性能評価を行い、設計プロセスにフィードバックし、最適な荷重負荷デバイスの実現を目指す。また、各デバイスを搭載し制御するTEMホルダーおよび制御装置の開発を行う。TEMに搭載可能なレーザー照射機構を導入することにより、試料の温度制御を可能とするシステムを構築する（図2）。温度計測用MEMSデバイスを用い、レーザー出力や繰返し周波数等のレーザーパラメータと温度との相関を明らかとし、高度な温度制御システムの確立を図る。このことにより、試料の高温保持や瞬間加熱が可能となり、高温における力学現象へと実験対象が拡張される。

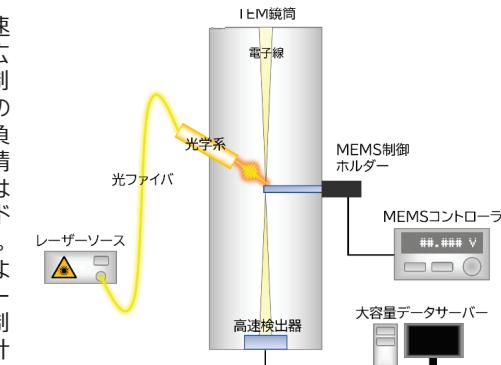
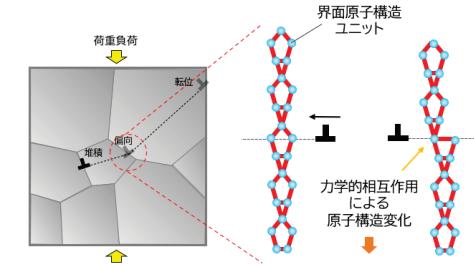


図2. 新規その場機械試験実験システムの概要

●構造欠陥の動的相互作用の解析

界面を含む試料を用いて原子分解能TEM内その場機械試験を実施することにより、荷重負荷により導入される転位、双晶、亀裂と界面との相互作用を原子レベルで観察する（図3）。方位関係の異なる界面に対し系統的に実験を実施することにより、構造欠陥の交錯に伴う各界面の構造変化過程を明らかとする。得られた結果は材料設計にフィードバックするとともに、適宜理論計算による解析を行い、界面強化指針の確立を図る。



●構造欠陥ナノダイナミクスの実環境観察

新規その場機械試験システムの開発の進捗に応じて、負荷荷重、温度、ひずみ速度等を高度に制御したその場観察実験を実施する。実環境に即した条件において界面ナノダイナミクスを高精度に観察するとともに理論解析を進めることにより、実用材料における材料強度発現メカニズムの本質を探求、高強度・高信頼性材料の設計指針の確立を目指す。