

新



# 研究室紹介

## 東京大学総合研究機構 結晶界面工学研究室

### 研究体制と研究テーマ

東京大学大学院工学系研究科総合研究機構の結晶界面工学研究室（幾原・柴田研究室）は東京都文京区の浅野キャンパスにあり、スタッフ5名（教授2名，助教3名），主任研究員3名（准教授クラス），博士研究員5名，学術支援専門職員2名，秘書2名，博士課程2名（4月より4名），修士課程6名，学部4年生3名の計28名が在籍しています。体制としては工学系に所属していますが，組織的としては研究所に近いスタイルをとっています（総合研究機構内にはナノ工学研究センター（幾原教授担当），先端ナノ計測センター（柴田教授担当）の二つのセンターが設置されています）。

当研究室では，主にセラミック材料を対象に，最先端透過電子顕微鏡法と理論計算を高度に融合して，材料機能の根元の解明，新しい材料設計指針の確立，さらにこれらに基づいた新機能材料の創出に関する研究を進めています。セラミック材料の力学特性や電気特性は結晶粒界や界面の原子・電子構造と密接に関連しています。そこで，これら界面の原子・電子構造を定量的に解析することによりその機能発現メカニズムを明らかにし，結晶界面を高度に制御した新規材料創成を目指した研究にも取り組んでいます。当研究室の主なテーマは，①原子直視型透過型電子顕微鏡法による結晶界面の原子・電子スケール構造解析，②ナノ計測と第一原理計算の融合による機能発現メカニズムの解明，③新たな結像原理に基づく新規電子顕微鏡法の開発（ABF，DPC等），④TEMその場計測観察技術の開発と応用，⑤結晶転位・界面を高度に制御した新機能材料の創成等があげられます。

### 研究環境

セラミックスの焼結体にはさまざまな構造や特性を有する結晶粒界が無数に含まれており，巨視的な物性計測から個別の結晶粒界の振る舞いを理解することは極めて困難です。当研究室では，個々の‘粒界性格’が特性に及ぼすメカニズムを明らかにするために，結晶方位と粒界面を高度に制御した双結晶を系統的に作製しています。特定の方角関係を有する二つの単結晶を接合するために，高温での雰囲気制御が可能な熱拡散接合炉を用いて双結晶を作製します。

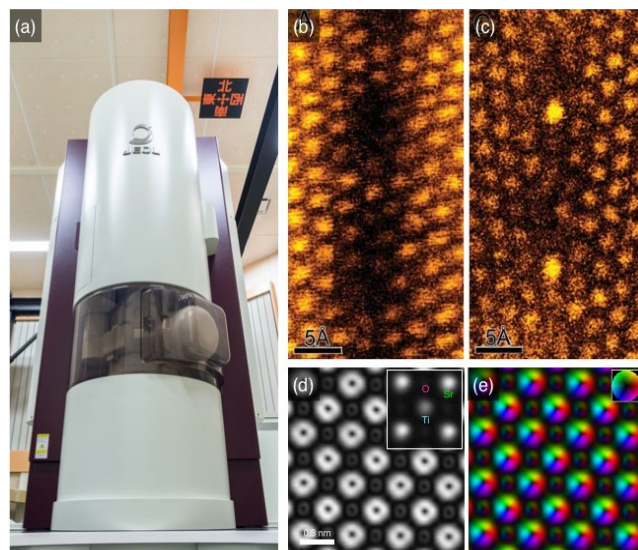


図1 (a) 世界最高分解能の300kV 走査透過型電子顕微鏡，(b) Y無添加および(c) Y添加した $\Sigma 31 \text{ Al}_2\text{O}_3$  [0001] 傾角粒界の環状暗視野STEM像 (Science 331 212 (2006)). 分割型検出器を用いた微分位相コントラスト法による $\text{SrTiO}_3$ の(d) 原子電場強度像（埋込みは環状暗視野像），(e) 電場ベクトル像 (Nature Comms. 8 15631 (2017)).

得られた双結晶の微細構造解析は，（走査）透過型電子顕微鏡（S/TEM，図1(a)）により観察を行います。当研究室にはさまざまな最先端研究設備が完備されていますが，その中でも透過電子顕微鏡については，機能別に17台のS/TEM（収差補正装置6台を含む）が総合研究機構の地下に配備されており，世界最大の電子顕微鏡センターを構築しています。これらのS/TEMはさまざまな目的に応じた特殊仕様になっており，①世界最高分解能40.5 pmを有するSTEM，②原子分解能での超高感度X線分光分析，③転位等の格子欠陥の振る舞いをリアルタイムで観察可能なその場観察TEM，④本研究室で開発された原子スケールでの電場・磁場を観察する分割型検出器を有するSTEM等が配備されています。また，総合研究機構には東大—日本電子産学連携室が設置されており，共同研究による新たな周辺装置開発の基盤となるとともに，機構内の電子顕微鏡群の維持管理に大きく貢献しています。また材料物性の評価には，イオン伝導計測装置，ナノインデンテーション，原子間力顕微鏡法による電子物性計測

等を用いています。得られた実験結果を第一原理計算と相補的に解釈し、材料機能発現の本質理解に基づいた新たな材料創成を目指しています。各装置はそれぞれの専門家が管理しており、研究室メンバーは担当者と密接な連携を図ることにより、研究環境を最大限に活かした実験や理論計算を行っています。また、幾原教授および柴田教授が(財)ファインセラミックスセンター(JFCC)を兼務していることもあり、JFCCとの共同研究も積極的に進めています。JFCC ナノ構造研究所にはホログラフィーや環境電顕等ユニークな TEM 群が多数設置されており、東京大学との相補的な連携研究を行っています。また、海外の大学や研究所からの教員や研究者の来訪も多く、共同研究を多数実施していることもあり、国際色の豊かな研究室となっています。現在当研究室では、特別推進研究、新学術領域研究、JST 先端機器計測、NEDO-RISING2 プロジェクト(JFCC と共同)、ナノテクノロジープラットホーム事業等の大型プロジェクトを中心に研究を進めています。

#### 研究例

代表的なセラミックスであるアルミナ ( $\alpha$ - $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) の高温クリープ特性は添加元素により大きく変化します。イットリウム (Y) を添加したアルミナでは高温クリープ特性が大幅に改善されることが報告されていますが、詳細なメカニズムは不明でした。近年の電子顕微鏡の急激な進展により、図 1(b), (c) に示す環状暗視野 STEM 像から、添加した Y は粒界の特定の原子サイトに偏析していることが直接観察できます。実験像に基づいた理論計算の結果、偏析した Y と隣接する Al との間に形成された共有結合性が高温クリープ特性の大幅な向上に寄与していることが明らかになりました。このような粒界構造研究に加え、本研究室では新しい顕微鏡法の開発も行っています。機能性材料では水素、リチウム、酸素等の軽元素が中心的な役割を果たしており、これらの軽元素の可視化を実現するため、本研究室では、JFCC、日本電子と共同で、世界に先駆けて環状明視野法を開発し軽元素の可視化に初めて成功しました。さらに近年では、図 1(d), (e) に示すように、明視野領域を方位角方向に分割した検出器を独自に開発することで、原子内部の電場の可視化が実現しており、本分野を国際的にもリードしています。

#### 人材育成～徹底的に材料科学の本質を理解する～

当研究室では、学部生・大学院生は必ず助教、ポスドク、あるいは博士学生とペアを組んだ研究体制をとり、研究・教育の深化・活性化を図っています。毎週の進捗報告会は必ず全教員参加のもとで行い(学内外会議で超多忙な教授陣もこの報告会を最優先としています)、学生の研究内容や今後の展開について徹底した教育指導を行っています。1人の発表時間はおよそ1時間ですが、全員の納得が得られるまで議論が続くため、大幅に時間を超える場合もあります。その他の研究行事としては、毎年夏に神奈川県湘南国際村センター

において2泊3日の「葉山ゼミ」と呼んでいる合宿研究会を行っています(図2)。ここでは、各自の研究テーマに関連した総説論文を熟読し、ゼミ形式でそれを紹介し過去の研究における問題点を明らかにし、各自の今後の研究内容の糧とすることを目的としています。また、海外からは毎年10名を超える著名な研究者が訪問(内数名は1～3ヶ月の滞在)されるため、海外研究者との個別議論を通して、英語での研究報告やコミュニケーション能力が自然と養われます。さらに修士以上の学生には年に1、2度の国際学会における発表に加え、国際専門誌への論文投稿を推奨しています。博士人材育成という観点からは、東京大学としてほぼすべての博士課程学生(修士学生の博士課程進学希望者も含む)に、学振研究員相当の経済的なサポートが行われています。このような教育方針により、国際的に通用する研究者の育成に徹底的に力を入れています。

#### 卒業生・博士研究員の進路

学部生はほぼ全員が修士課程へ進学しますが、修士卒の学生は博士課程への進学あるいは民間企業に就職しています。博士卒や博士研究員は大学や公的研究機関等のアカデミアの世界で活躍しています。これまでに東京大学、東北大学、東京工業大学、名古屋大学、九州大学、京都大学、大阪大学、JFCC、物質・材料研究機構を中心に教授6名、准教授4名、講師1名、助教6名、国研・財団研究員3名と教育・研究機関に多くの人材を輩出しています。



図2 毎年夏に開催される葉山合宿ゼミでの研究室集合写真(2017年9月)。

#### おわりに

本稿では当研究室の研究環境や研究内容について紹介させて頂きました。発足から20年近く経過したこともあり成熟しつつある研究室ですが、新しい視点を持った学生や博士研究員との研究を通して、今後とも材料の本質的理解を目指した最先端研究に取り組んでいきたいと思っております。研究室のより詳細な動向については <http://interface.t.u-tokyo.ac.jp/> をご参照ください。

(文責 研究室 助教 石川 亮)