

(研究成果公表掲載依頼用リリース文)

1. タイトル:

「究極の原子構造観察 セラミックス中の添加原子の直接観察に成功」
～セラミックスの強化メカニズムの解明と材料開発の新たなブレークルー～

2. 発表概要:

東京大学大学院工学系・総合研究機構(幾原雄一教授グループ)は、セラミックス中の添加原子(ドーパント)一個一個の直接観察に成功し、添加原子の強化メカニズムを世界に先駆けて解明した。この成功により、これまで不明であったセラミックスの種々の特性発現機構が明らかになり、高機能セラミックスの開発に拍車がかかるものと期待されている。本研究の成果は、1月13日(金)付の米国科学雑誌「サイエンス」で発表される。

3. 発表内容:(詳しい発表内容を記載ください。)

セラミックスに微量の添加材(ドーパント)を加えるとその特性(硬さ、強さや電気特性など)を大きく変えることができるが、そのメカニズムについては不明であった。これまでのセラミックス材料や新素材の開発は、膨大なデータに基づいた経験則によって主に行われてきた。今回、最新の原子直視型走査透過電子顕微鏡(STEM, Scanning Transmission Electron Microscope)を用いることで、セラミックス中に添加した微量添加(ドーパント)原子一個一個の直接観察に成功した。この結果を基に理論計算を行うことにより、ドーパント原子のメカニズムがはじめて明らかとなった。すなわち、材料のどの位置にドーパント元素が入り込み、どのような作用を及ぼすかを明らかにしたことにより、材料の機能に合わせて原子スケールから添加材(ドーパント)の種類や量を決定する新しい材料設計指針の構築が期待され、材料開発の分野に革命を起こす可能性がある。

4. 発表雑誌:

サイエンス(Science)、電子版、1月13日号

5. 注意事項:

Scienceの規定により、マスコミ解禁時間:平成17年1月13日(金)午前2時(日本時間)

6. 問い合わせ先:

幾原 雄一(イクハラ ユウイチ)教授
あるいは柴田 直哉(シバタ ナオヤ)助手

東京大学工学部総合研究機構

〒113-8656 東京都文京区弥生 2-11-16

TEL: 03-5841-7688 (幾原), FAX: 03-5841-7694

TEL: 03-5871-7756 (柴田)

E-mail: ikuhara@sigma.t.u-tokyo.ac.jp

インタビューおよび電話は、11日(水)は幾原雄一教授が終日対応する。

12日(木)は午前中は幾原教授が、午後は柴田直哉助手が終日対応する。

7. 用語解説:

セラミックス: 炭化物、酸化物、窒化物、ホウ化物などを焼き固めた材料、新素材として注目されている

アルミナ: 金属アルミニウムの酸化物(Al_2O_3)のこと、アルミナセラミックスは主に構造用セラミック材料として広く実用に用いられている

粒界: 一般的なセラミック材料は、結晶方位が揃った領域(結晶粒、おおよそ数ミクロン程度の大きさ)の集合でできている(多結晶体という)。粒界とは、この結晶方位が揃った領域どうしが接合している個所のことをいう。結晶方位のことなる状態で接合しているので、一般には、粒界での原子構造は乱れている。

添加原子(ドーパント): 実用材料では通常強度や機能を向上させる目的で主たる物質に異種元素を添加する。これをドーパントと呼ぶ。

クリープ: 材料に高温で一定の応力(単位面積あたりの荷重)をかけたときに生じる変形挙動のことをクリープと呼ぶ。

原子直視型走査透過電子顕微鏡: 0.1ナノメートル(1オングストローム)以下程度まで細く収束させた電子線を試料上で走査し、試料により透過散乱された電子線の強度で、試料中の原子位置を直接観察する装置

第一原理計算 原子の配列やその間の電子軌道などを、経験的なパラメーターを用いることなく、純粹に理論にしたがって算出する計算手法

8. 添付資料:

次ページ以降参照

究極の原子構造観察—セラミックス中の添加原子を直接観察

セラミックス材料開発の革新へ

1月13日(金)付の米国科学雑誌「サイエンス誌」で発表

東京大学大学院工学研究科総合研究機構

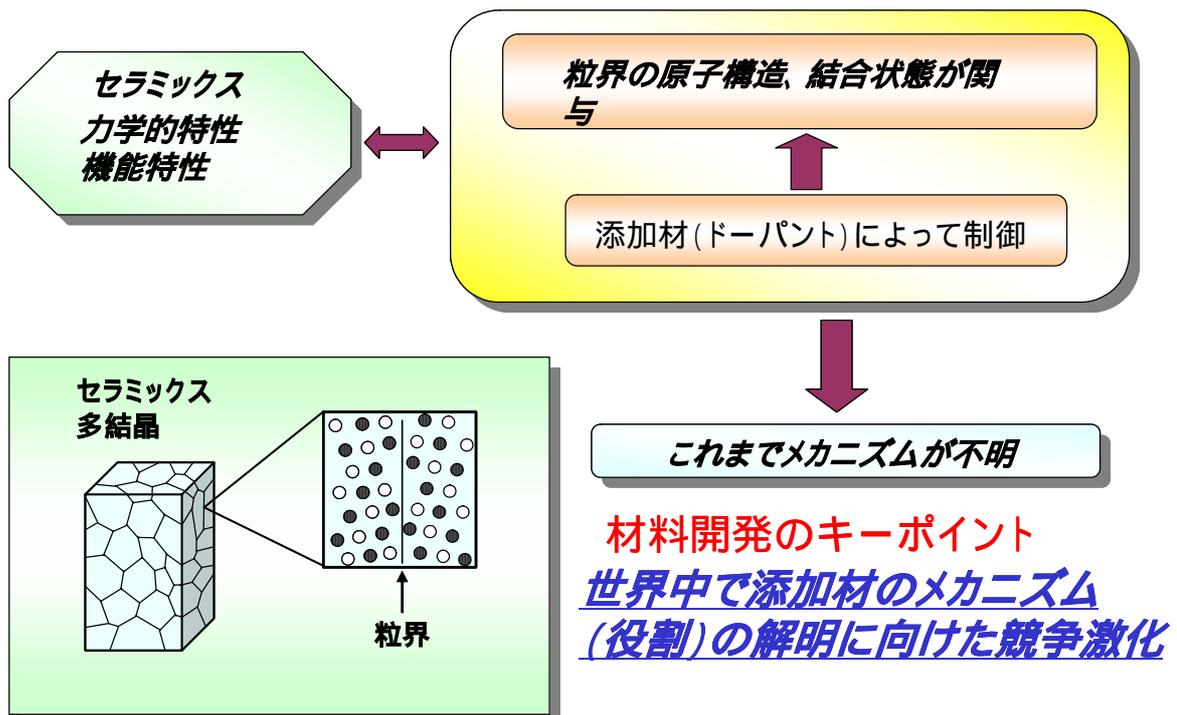
幾原雄一教授グループ

メンバー

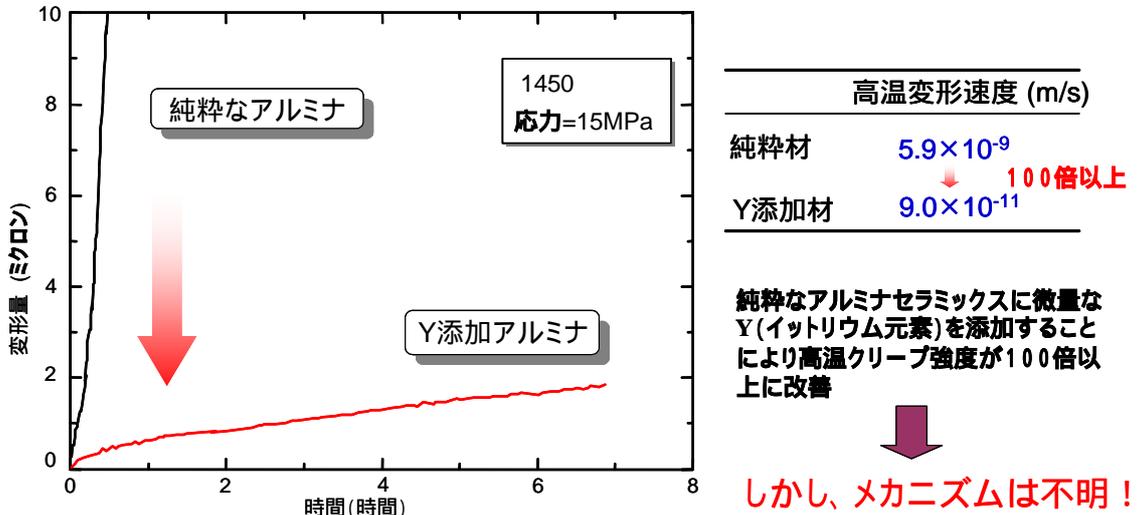
東京大学:J.P.Buban, 松永克志, 柴田直哉, 山本剛久

ミシガン州大学:J.Chen, W.Y.Ching

Introduction



アルミナセラミックスの高温強度(1450)-クリープ曲線*



クリープ曲線* セラミックに応力をかけた時に生じる変形量を測定したもの

強化メカニズムを解明するためには、
Y(イットリウム)の原子位置を直接観察することが必要!

しかし、

これまでには技術的にその観察が不可能とされていた。

本研究でのブレークスルー

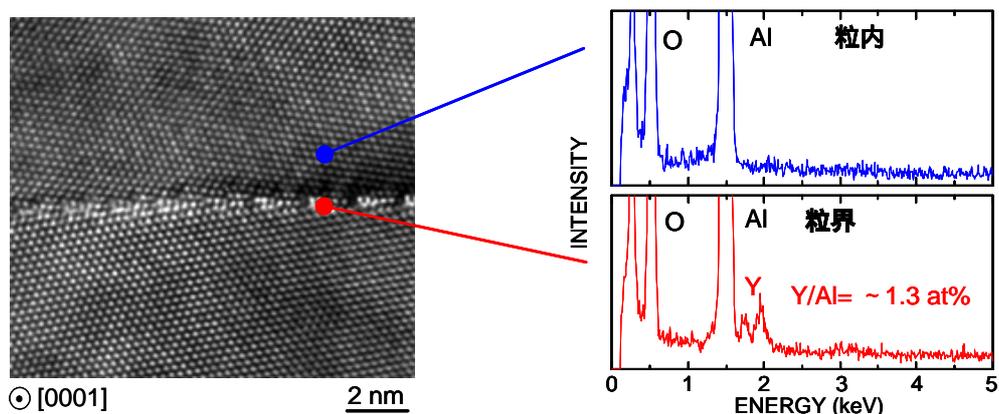
以下の2点の技術で一挙に解決へ

1. 試料作製技術の開発(粒界方位制御試料の作製)
2. 最新鋭原子直視型走査透過型電子顕微鏡による観察

試料作製技術の開発 (粒界方位制御試料の作製)



粒界の局所化学組成分析(エネルギー分散型X線分光)法でY原子の添加を確認



原子直視型走査透過電子顕微鏡 (STEM)

観察原理図

局所領域の原子構造を直視

対物絞り

電子プローブ $< 1 \text{ \AA}$

試料

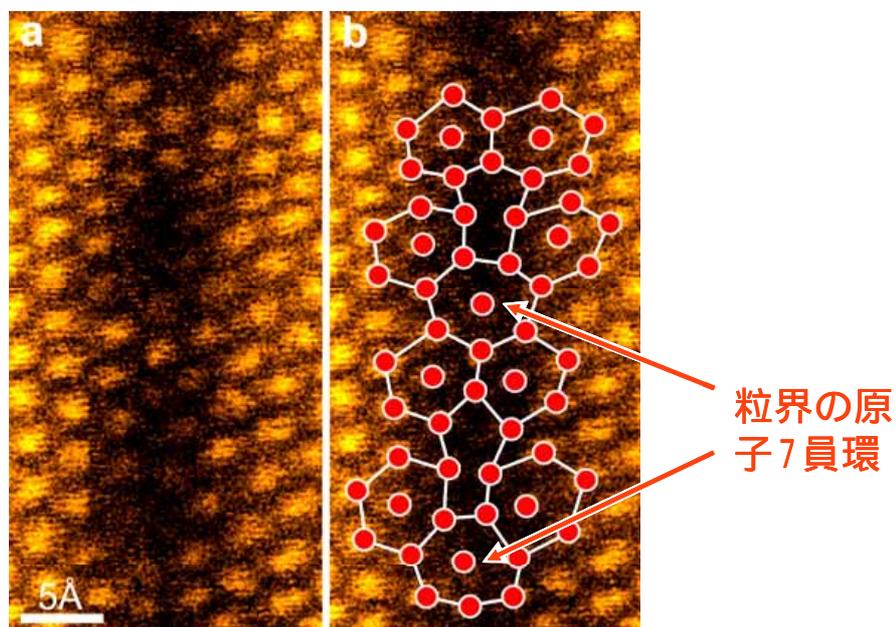
環状検出器 (ADF)

原子構造像

STEMシステムの概観

原子番号Zの2乗に比例した明るさで
原子が一個一個観察可能！

アルミナセラミックス粒界の原子直視型走査透過電子顕微鏡像

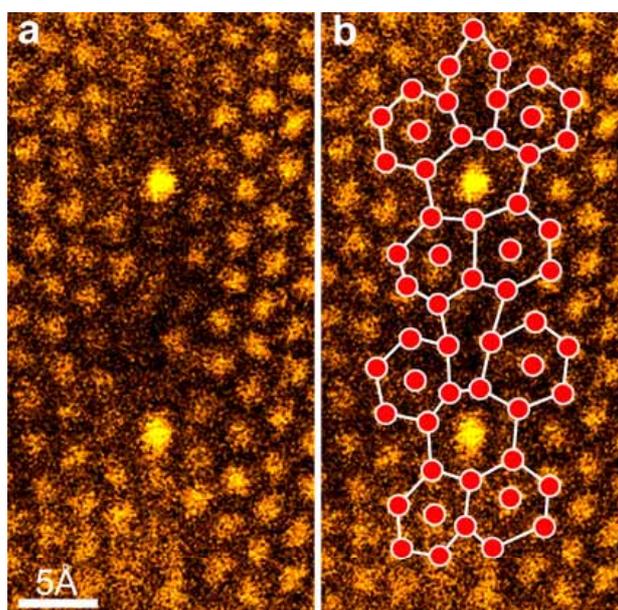


純粋なアルミナ粒界の原子直視型走査透過電子顕微鏡像。
明るい点はアルミニウム原子に対応する。粒界にはアルミニウム原子で囲まれた7員環が存在することが明確に分かる。

Y(イットリウム)を添加したアルミナセラミックス粒界の
原子直視型走査透過電子顕微鏡像

今回の発見
(サイエンスに掲載！)

Y原子がより明るい点
として直接観察される。



アルミナセラミックスの粒界に形成された原子7員環の中央にY原子が入っていることが
明確に観察される。

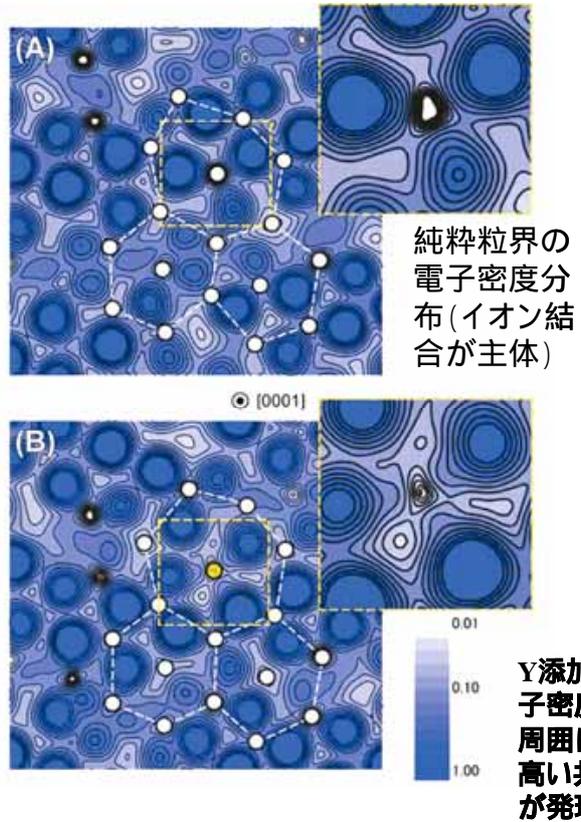
原子直視型走査透過電子顕微鏡像の観察結果を基に理論計算(第一原理計算)を実施
ミズリーカンザスシティ大学
スーパーコンピューター



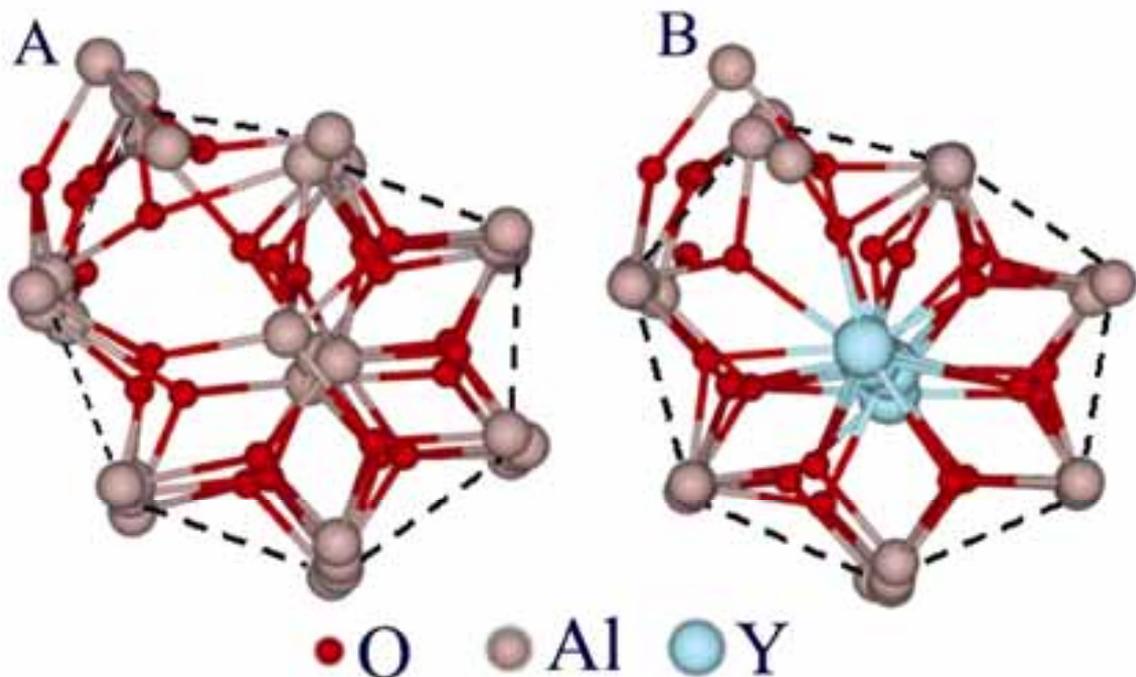
原子7員環中のY原子の周囲に結合力の大きな共有結合性が出現



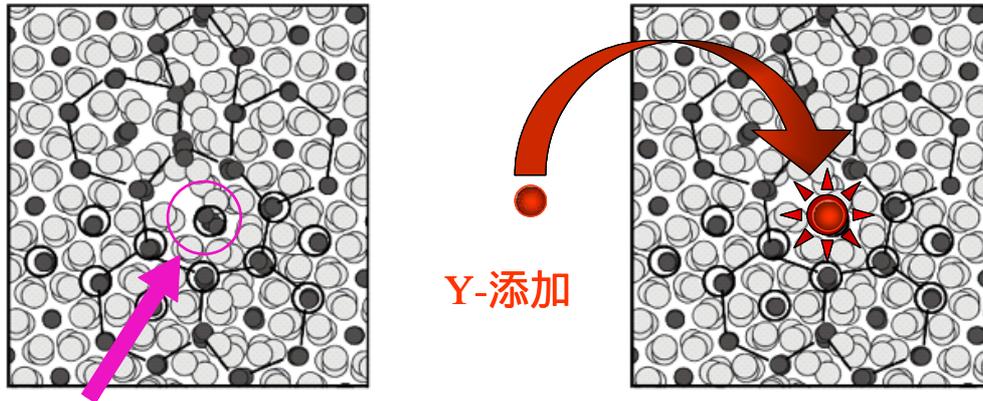
原子レベルでのセラミックスの強化メカニズムを世界に先駆けて解明!



7員環中の原子の配列状態(第一原理計算による)



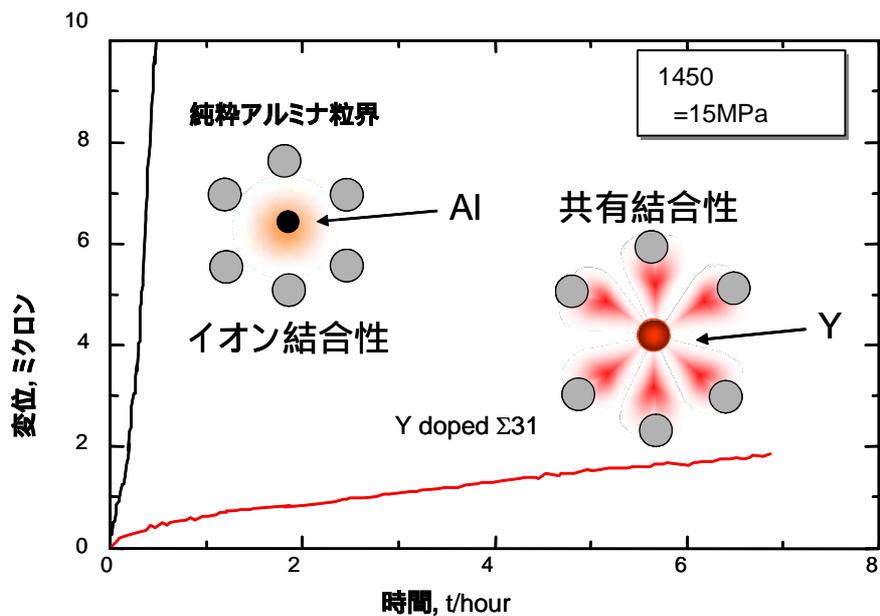
粒界強化の原子メカニズム



原子7員環中
にスペース

Yイオンが粒界原子7員環中に入って、粒界の結合力を大幅に向上する。

高温強度強化のメカニズム



原子7員環に入ったYイオンは周囲の酸素と共有結合を形成し、高温強度を大きく強化する。

何が技術革新のブレークスルーか？

- (1) セラミックスの強度におよぼす強化メカニズムを原子レベルではじめて解明
～究極のセラミックス強化法～
- (2) 材料の信頼性向上に道を拓いた
～強度劣化を抑制する原子のメカニズムを解明～
- (3) メカニズムの解明により、Y(イットリウム)以外の最適添加原子(ドーパント)の種類および添加量を予測することが可能
～新たな新素材開発へ向けた展開、その活性化を実現～
- (4) 現在停滞しているセラミックスの技術革新を一挙にブレークスルーする可能性