

数理的手法による電子顕微鏡像の解析と構造予測

東北大学原子分子材料科学高等研究機構 井上 和俊 陳 春林 小谷 元子
 東京大学大学院工学系研究科総合研究機構 齋藤 光浩 幾原 雄一

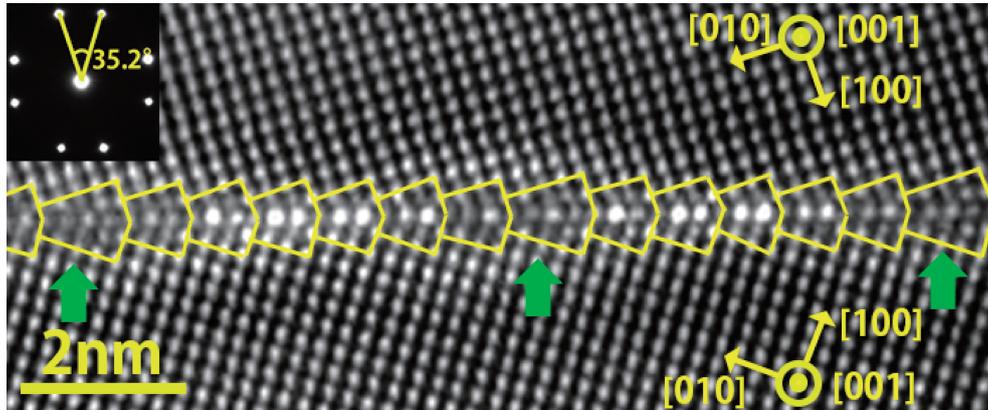


Fig. 1 傾角35.2°のMgO 対称傾角粒界のHAADF像(JEM-ARM200F, 200 kV). (オンラインカラー)

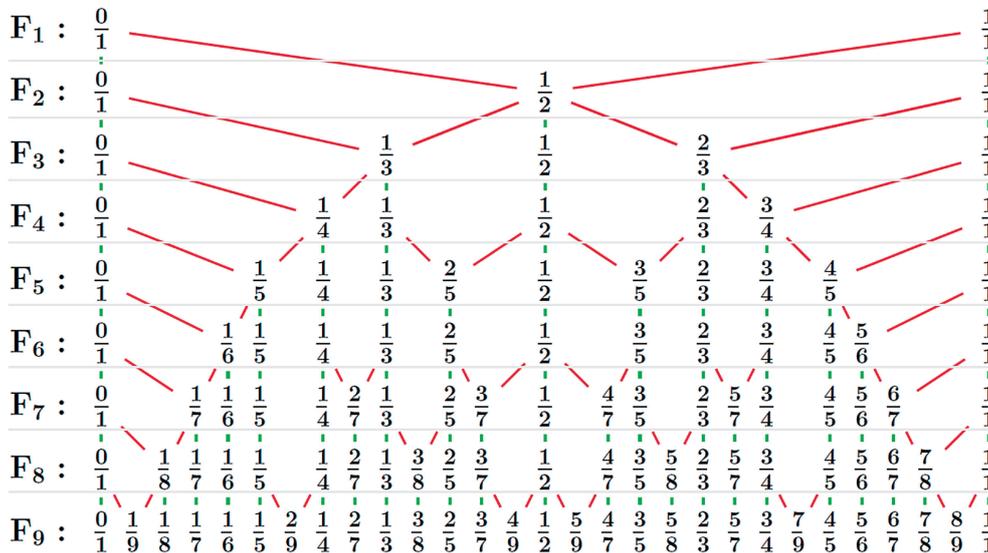


Fig. 2 既約分数を昇順に並べてできるファレイ数列がなす二分木. (オンラインカラー)

金属やセラミックス材料は一般に多結晶体であり、粒界構造と機能物性には深い関係がある。傾角粒界はしばしば構造ユニットと呼ばれる多面体の配列で構成され、粒界転位の導入により不整合が局在化する。粒界転位は相互作用を極小化するため平均的に配列することから、構造ユニット列は準周期の一部を実現する。**Fig. 1**は傾角35.2°をもつMgO<001>対称傾角粒界の高角環状暗視野像(JEM-ARM200F, 200 kV)であるが、 $\Sigma 5$ (310)ユニットが大部分を占める中、粒界転位として $\Sigma 17$ (410)ユニット(**Fig. 1**矢印部)が導入される。

一方、既約分数からなるファレイ数列は、分母同士・分子同士を加算する演算($a/b \oplus c/d = (a+c)/(b+d)$)により各世代が結ばれ、二分木をなす(**Fig. 2**)。分数 p/q を $(q \ p \ 0)$ 粒界面に対応させると、ファ

レイ数列における分数の構成から粒界構造ユニットの配列を任意の精度で予測することができる。例えば**Fig. 1**の粒界面は(41 13 0)面と近似でき、**Fig. 2**の下方に存在する13/41は、 $A = (310)$ 、 $B = (410)$ ユニットに対応する1/3と1/4の和で構成されている。二分木を下から上へ遡る手法により、5個と6個の(310)ユニット列の間に(410)ユニットが1つずつ挿入されることが予測される(AAAAAB.AAAAAAB)。原子分解能走査透過電子顕微鏡によって予測通りの構造が観察された⁽¹⁾。

文 献

- (1) K. Inoue, M. Saito, C. Chen, M. Kotani and Y. Ikuhara: *Microscopy*, (2016), doi:10.1093/jmicro/dfw034.
 (2016年7月25日受理)[doi:10.2320/materia.55.582]

Mathematical Analysis of Tilt Boundaries and STEM Observations; Kazutoshi Inoue*, Mitsuhiro Saito**, Chunlin Chen*, Motoko Kotani* and Yuichi Ikuhara*** (*Advanced Institute for Materials Research, Tohoku University, Sendai. **Institute of Engineering Innovation, The University of Tokyo, Tokyo)

Keywords: STEM (scanning transmission electron microscopy), HAADF (high-angle annular dark field), grain boundary, structural unit
 TEM specimen preparation: ion milling (PIPS691, Gatan, Ltd.) TEM utilized: JEM-ARM200F (200 kV, JEOL Ltd.)