

α - Al_2O_3 Σ 13粒界における2種類の安定構造の原子分解能観察

東京大学大学院工学系研究科 石原佐季 栃木栄太 石川 亮 柴田直哉 幾原雄一

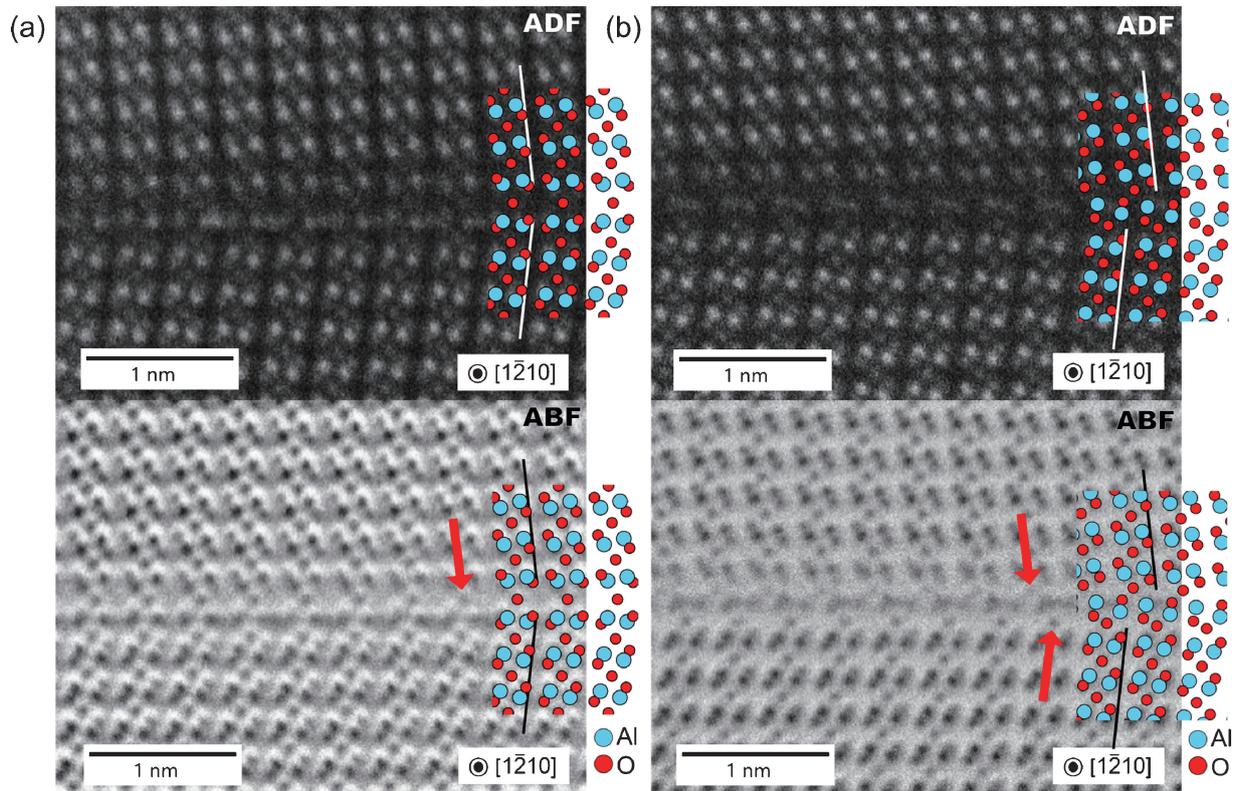


Fig. 1 α - Al_2O_3 $[\bar{1}210](10\bar{1}4)$ Σ 13双結晶中で観察された二種類の原子構造(a), (b)のADF-STEM像(上段)およびABF-STEM像(下段). 図中に示された構造モデルは第一原理計算によって得られた, (a)準安定構造, (b)最安定構造を示している. ABF-STEM像では粒界近傍の酸素原子カラム(赤矢印)が明瞭に観察できる.

α - Al_2O_3 の多結晶体は高温構造材料として幅広く用いられている. 多結晶体の諸特性は, 粒界構造に大きく影響を受けるため, 粒界の原子構造を支配する主要因子を明らかにすることが特性の理解に極めて重要である. 本研究では粒界形成時のガス雰囲気と粒界原子構造の相関を検討するため, 97%Ar+3% H_2 雰囲気中で熱拡散接合により α - Al_2O_3 Σ 13 $[\bar{1}210](10\bar{1}4)$ 双結晶を作製し, 収差補正 STEM (Scanning transmission electron microscopy, 走査透過型電子顕微鏡法)により観察を行った. Fig. 1は粒界領域から得られた原子分解能 ADF/ABF (Annular dark-field/Annular bright field, 環状暗視野/明視野)-STEM像である. 本実験では, 同一の双結晶中で Fig. 1(a)および(b)の二種類の粒界原子構造が観察された. Fig. 1(a)の構造では, Al原子が粒界を中心に鏡対称に配列しているのに対して, (b)の構造では, Al原子は鏡対称位置から半周期ずれた位置に配列していることが分かる. これらの実験像を理論計算から予想される

安定な粒界構造と比較した. 第一原理計算で得られた構造モデルを Fig. 1中に示している. Fig. 1(a)に示した構造は, 第一原理計算で二番目にエネルギーが低いと予測されている準安定構造, (b)は最安定構造と良く一致していることが確認された. また, (a)に示した構造は大気中で作製した Σ 13粒界の原子構造と類似している⁽¹⁾. 一方, (b)はこれまでに報告されていない構造であり, 本実験条件により安定化された構造であると考えられる. 本実験結果から, 多結晶体の焼結時のガス雰囲気が粒界の原子構造に影響を与えることが示唆される.

文 献

- (1) S. Azuma, N. Shibata, S. D. Finslay, T. Mizoguchi, T. Yamamoto and Y. Ikuhara: *Philos. Mag. Lett.*, **90**(2010), 539–546.

(2018年7月26日受理)[doi:10.2320/materia.58.91]

Atomic Scale Observation of Two Kinds of Stable Structures in α - Al_2O_3 Σ 13 Grain Boundary; Saki Ishihara, Eita Tochigi, Ryo Ishikawa, Naoya Shibata and Yuichi Ikuhara

Keywords: STEM (scanning transmission electron microscopy), alumina (α - Al_2O_3), grain boundary

TEM specimen preparation: Mechanical grinding, ion milling

TEM utilized: ARM-300F (300 kV, JEOL)