

企画にあたって

松永克志* 溝口照康**

現代社会が抱える地球規模のエネルギー・環境問題等を解決し、豊かな未来に繋がる持続的社會を構築するためには、材料科学による新しい原理の発見や、新原理に基づく高性能材料の開発が必要不可欠である。従来の材料科学研究の多くは、平衡状態図や自由エネルギー、結晶構造等の経験的データベースに基づき、材料内部のバルク領域の平均的構造と巨視的特性を主たる研究対象としていた。これに対し、今後期待される材料特性の飛躍的向上や新材料機能付与のためには、既存の原理や方法論に捉われない、新しい観点からの材料科学の構築が望まれる。

本特集の主題となる結晶欠陥は、長年に亘り陰に陽に、材料特性において重要な役割を果たしてきた。例えば、金属材料における異種元素による固溶硬化や材料組織微細化による高強度化、半導体材料のドーピングや薄膜デバイス化などが挙げられる。これらの材料特性発現に深く関わる、点欠陥や転位、粒界・界面の原子レベル構造や応力・ひずみ場、化学結合状態については、それぞれ結晶学、弾性論、電子論に基づく一通りの解釈が行われてきた。ただし殆どの場合、結晶構造が比較的単純な純物質における結晶欠陥を対象としていた。しかし先進材料の多くは、多元系であるとともに複雑な結晶構造を持つため、そこでの結晶欠陥については、既存の理論や概念の適用性どころか、その原子レベル構造さえも不明でないのが実情である。この点、幸いにも、近年のナノ計測や計算科学の発展は目覚ましく、結晶欠陥に特有な原子配列やその構成元素種などに関する定量的な構造情報を獲得できるようになってきた。これを実現するための最先端の走査型透過電子顕微鏡法や第一原理計算、マテリアルズ・インフォマティクス法などは、結晶欠陥研究に新たな展開をもたらしつつある。

また、これまでの材料科学における結晶欠陥研究の多く

が、発現した材料特性や観測された現象のミクロレベルからの解釈を目的としている点も指摘したい。一般に材料特性が結晶構造に強く依存することから推察されるように、バルクと異なる原子配列を有する結晶欠陥は、特異な物性・特性を持つ可能性を秘めている。したがって、結晶欠陥の素性を系統的に解明するとともに、その知見を積極的に活用した材料開発への期待も大きく膨らむ。

以上のように、先進材料における結晶欠陥研究とその発展可能性は魅力あるものといえるが、一方で、結晶欠陥研究を材料開発に結実させるためにクリアすべき点が残されている。それは、原子レベル構造の解明に留まらず、結晶欠陥に局在する電子を含めた量子状態にまで踏み込んだ研究が必要な点である。なぜなら、結晶欠陥に由来する物性・特性は、欠陥特有の原子レベル構造をコアとして、そこに局在した電子状態が応力やフォトン、フォノン等の外部刺激と相互作用し、様々な励起状態に至る結果として発現するからである。このような結晶欠陥コアにおける様々な量子とそれらの相互作用によって形成される局在場(ここでは量子場とよぶ)こそが、材料物性・特性に直結している。結晶欠陥の持つ量子場にまで踏み込んで、結晶欠陥の素性を解明することこそが、新しい材料学理となるだけでなく、結晶欠陥を高度に制御・活用した超高性能材料の開発にも繋がると期待できる。我々は、特有な原子レベル構造とそこに局在する量子場からなる結晶欠陥を「機能コア」と再定義し、これに基づいた新しい材料科学を提唱している(図1参照)。

本特集では、「結晶欠陥に形成される機能コア研究の最前線」と題して、「機能コア」に関わる研究開発において第一線で活躍されておられる方々に執筆をお願いした。本会会員の皆様にも、機能コアという、我々の提唱する概念の重要性をご理解いただく一助になれば幸いである。最後に本特集を

* 名古屋大学大学院工学研究科；教授(〒464-8603 名古屋市千種区不老町)

** 東京大学生産技術研究所；教授

Preface to Special Issue on Frontiers in Scientific Research on Crystal Defect Cores; Katsuyuki Matsunaga* and Teruyasu Mizoguchi** (*Nagoya University, Nagoya. **The University of Tokyo, Tokyo)

Keywords: crystal defect, atomic structure, electronic structure, chemical bonding state, first principles calculation, informatics, scanning transmission electron microscopy

2022年8月10日受理[doi:10.2320/materia.61.627]

