

# 栃木研究室

## ミクロレベルでの変形／破壊現象の直接観察



基礎系部門

革新的シミュレーション研究センター、マイクロナノ学際研究センター

ナノスケール材料強度学

工学系研究科 機械工学専攻

<https://sites.google.com/g.ecc.u-tokyo.ac.jp/nanoscale-strength>

### 原子分解能TEMその場機械試験システムの開発と応用研究

結晶性材料の変形・破壊の起源は原子レベルの変位や結合の破断と言えます。透過型電子顕微鏡（TEM）は物質の微細構造・原子構造を直接観察する解析ツールとして広く活用されており、結晶の変形・破壊現象の解析にはTEM内にて試料に荷重負荷を行うその場TEM機械試験法が適用されます。従来の機械試験用試料ホルダーは試料の方位制御や荷重荷重精度に限界があり、とりわけ原子レベルでのその場機械試験は困難でした。

当研究室では、MEMS技術を活用した新規TEM用駆動デバイスおよび制御システムの開発とそれを活用したその場観察研究を進めています。図1は順に、TEM用駆動デバイス、荷重負荷中に撮影した原子分解能走査型TEM像（試料：SrTiO<sub>3</sub>）、実験像に基づいたひずみ解析結果を示しています。本システムにより、荷重負荷下においても原子像が明瞭に捉えられていることがわかります。また、ノッチ部に応力集中が起き強い引張りひずみが生じていることが可視化されています。

- T. Sato, E. Tochigi, T. Mizoguchi, Y. Ikuhara, H. Fujita, *Microelectro. Eng.* **164**, 43 (2016).
- E. Tochigi, T. Sato, N. Shibata, H. Fujita, Y. Ikuhara, *Microsc. Microanal.* **25**, S2, 770 (2019).
- E. Tochigi, T. Sato, N. Shibata, H. Fujita, Y. Ikuhara, *Microsc. Microanal.* **26**, S2, 1838 (2020).

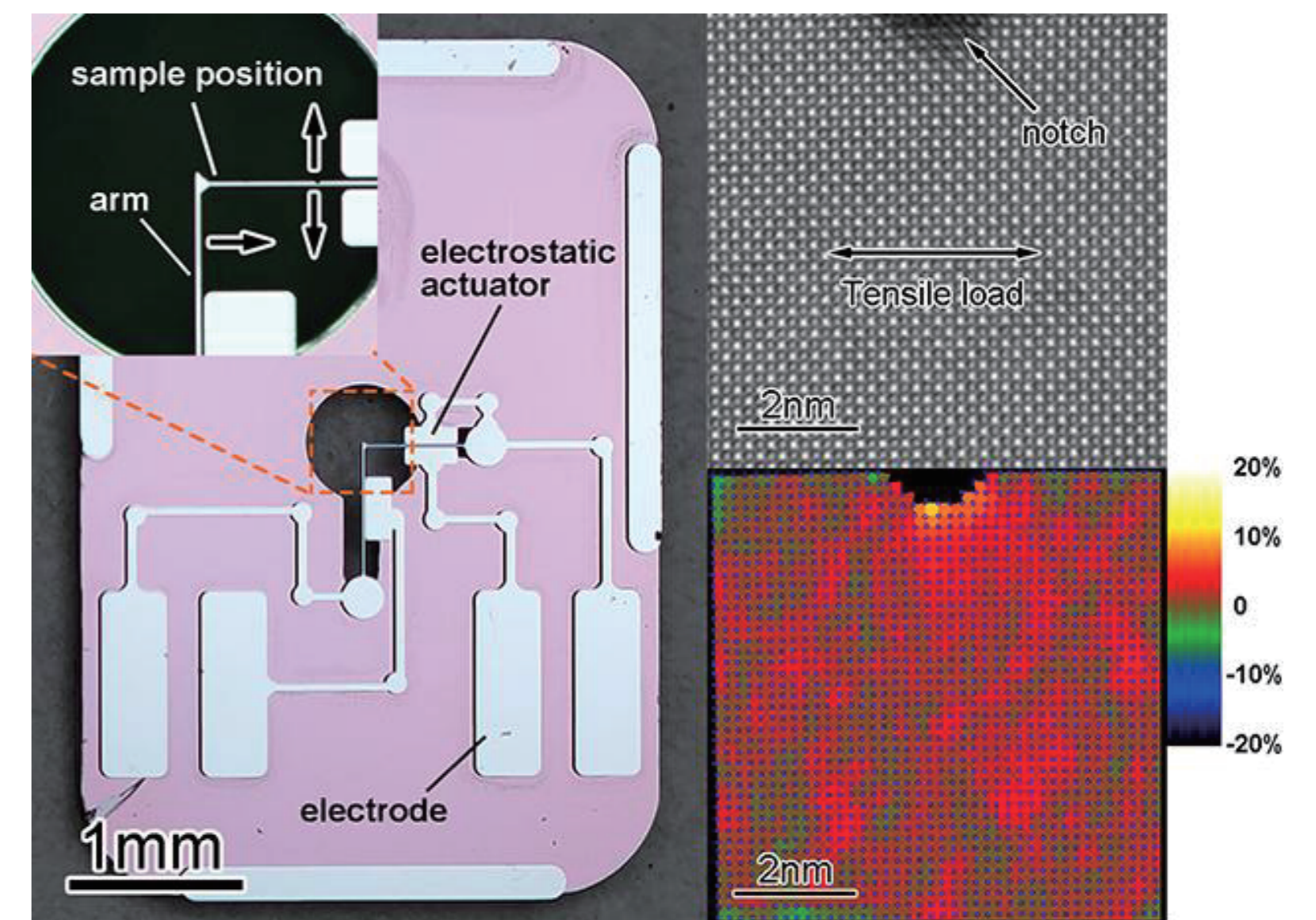


図1. 荷重負荷MEMSデバイスを用いた原子分解能TEMその場機械試験

### 変形双晶の動的形成過程の観察と原子挙動の解析

結晶性材料の代表的な変形モードの一つに変形双晶があります。変形双晶は荷重負荷により結晶内部に鏡面対称もしくは二回対称の組織が形成するものですが、その詳細なメカニズムは未だ不明な点が多いのが現状です。当研究室では、変形双晶の形成メカニズムをその場TEM荷重負荷試験、原子分解能観察、理論計算を用いて総合的に解析しています。

図2は順に、その場インデントレーション試験中に撮影した双晶のTEM像（試料： $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>）、界面ステップの走査型TEM像、第一原理分子動力学計算による界面ステップの移動に関わる原子シミュレーションを示しています。 $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>における菱面双晶は界面ステップの移動によって成長・収縮し、その移動はAl原子2個、O原子3個からなる原子グループが協調的に順次変位（シャッフリング）することにより進行することが分かりました。このような変形現象の素過程を明らかにすることは、物質がどのように変形するかというごく単純な疑問に答えるものです。

- E. Tochigi, B. Miao, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, *Acta Mater.* **216**, 117137, (2021).

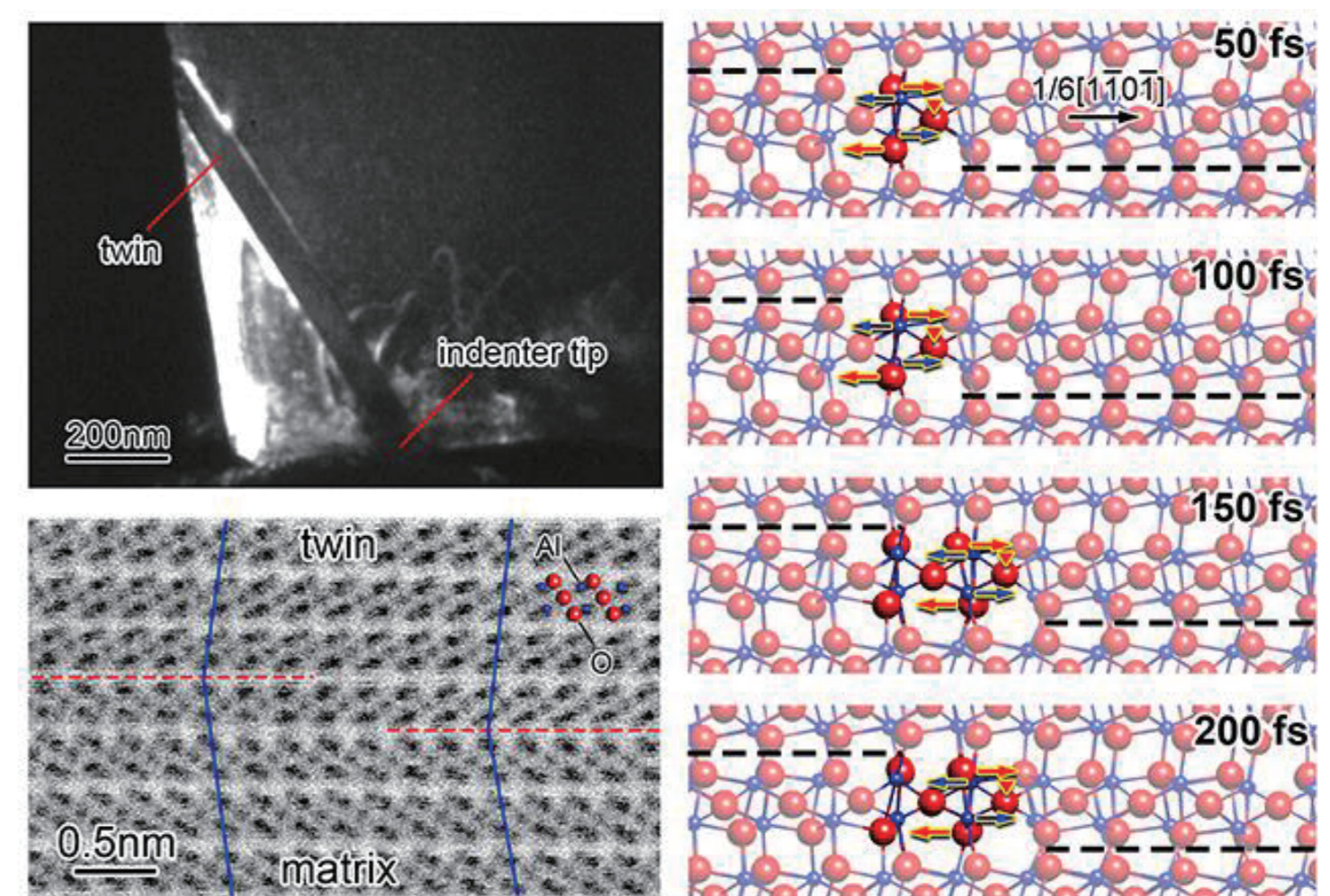


図2.  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>における双晶の成長挙動観察、界面原子構造、原子レベルシミュレーション

### 結晶格子欠陥の構造解析

結晶性材料は転位、双晶、粒界といった種々の欠陥構造を内包しており、力学的特性をはじめとする諸特性に様々な影響を与えています。当研究室では、格子欠陥の微細構造に着目し、ナノ～原子スケールにて解析を進めています。

図3はTEMによって撮影した実験像であり、順に $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の小角粒界に生じたらせん転位ネットワーク、 $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>中の底面転位のコア構造、4H-SiC中の積層欠陥構造に対応しています。このような構造情報に基づいて、構造モデルの構築や理論計算によるシミュレーションを実施することで、物質の変形メカニズムや力学挙動、局所物性の理解が進みます。

- E. Tochigi, H. Matsuhata, Y. Ikuhara, *J. Am. Ceram. Soc.* **109**, e70269 (2026).
- E. Tochigi, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, *Crystals* **8**, 133-1-14 (2018).
- E. Tochigi, T. Mizoguchi, E. Okunishi, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, *J. Mater. Sci.* **53**, 8049 (2018).
- E. Tochigi, Y. Kezuka, A. Nakamura, A. Nakamura, N. Shibata, Y. Ikuhara, *Nano Lett.* **17**, 2908 (2017).
- E. Tochigi, H. Matsuhata, H. Yamaguchi, T. Sekiguchi, H. Okumura, Y. Ikuhara, *Philos. Mag.* **97**, 657(2017).

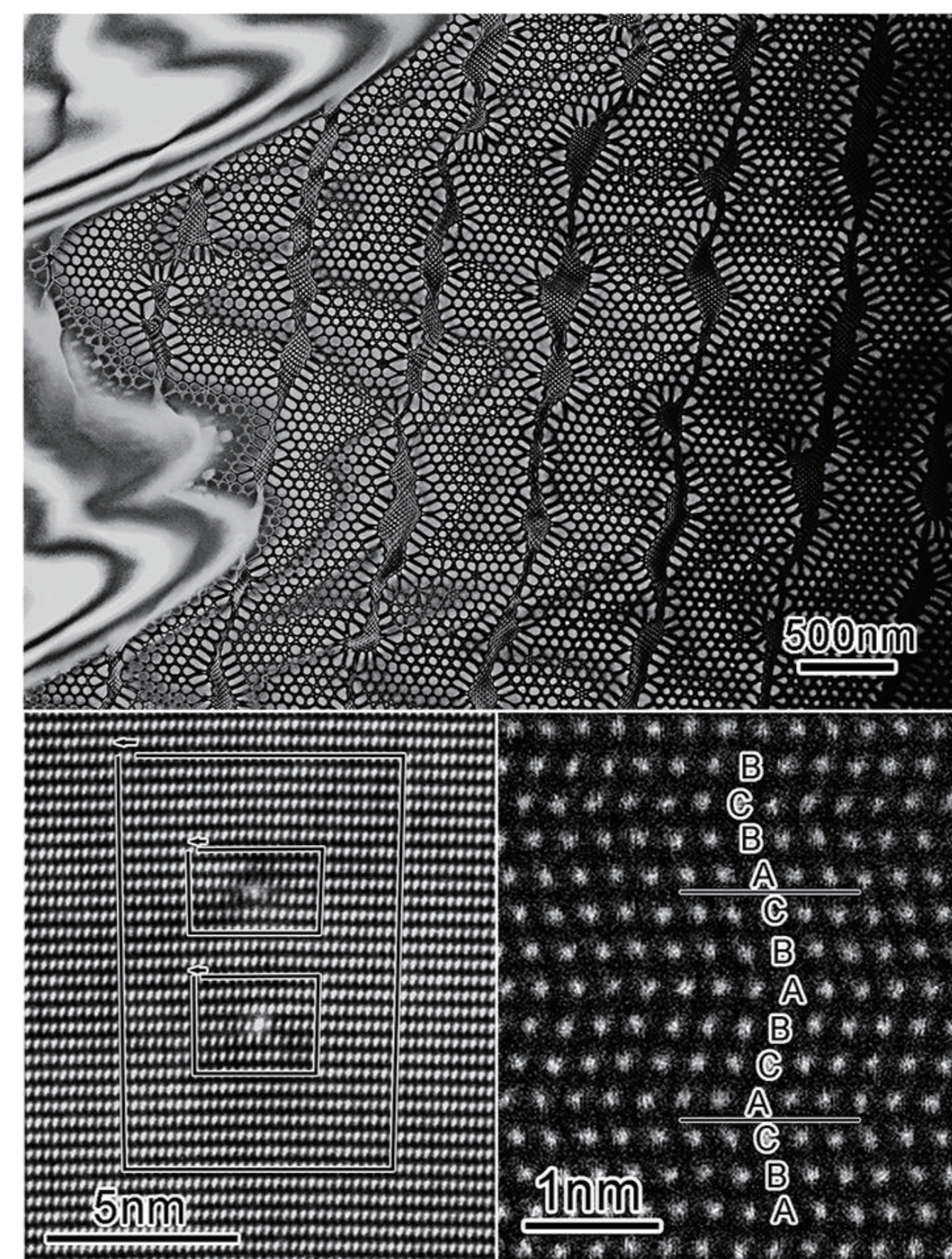


図3. らせん転位ネットワーク( $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)、転位のコア構造( $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)、積層欠陥構造(4H-SiC)