

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 25 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K06420

研究課題名(和文)幾何学的手法に基づくランダム粒界構造の解明

研究課題名(英文)Study of random grain boundary structures by geometrical approach

研究代表者

井上 和俊 (Kazutoshi, Inoue)

東北大学・材料科学高等研究所・助教

研究者番号：60743036

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円

研究成果の概要(和文)：対称傾角粒界の構造と有理数の一対一対応を用いて粒界最安定構造を系統的に解析した。また、傾角粒界に存在する階層構造をファレイ数列によって記述した。これにより、指数の大きな傾角粒界であってもファレイ数列を用いることで構造ユニットの配列を精度よく推定することが出来る。このとき、転位間隔は原子の離散性を反映して準周期の一部を実現する。参照構造は粒界エネルギーだけでは決定することができず、現状としては実験および理論計算により適切に特定しなければならない。今後、参照構造の決定条件および粒界最安定原子構造を決定する根源的な理論の構築が望まれる。

研究成果の概要(英文)：Atomic structure of symmetrical tilt GBs are analyzed from mathematical perspective. The structures of symmetrical tilt GBs can be described by a part of quasi-periodical arrangements of structural units as a realization of the lowest energy structure. Then, reference structures can linearly interpolate intermediate GBs. The major structures were well predicted by a simple decomposition formula of symmetrical tilt GBs with an algorithm due to the Farey sequence. The arrangement of structural units can be derived so as to maximize the separation of minority units which can be applicable to other GBs. The fundamental theory is necessary to be established for determining the reference structures and the stable atomic arrangements of grain boundaries.

研究分野：粒界幾何学

キーワード：傾角粒界 バイクリスタル 構造ユニット 転位

1. 研究開始当初の背景

材料科学において金属・セラミックス等の機能材料は多結晶体として用いられ、内部に存在する格子欠陥が機能特性に多大な影響を及ぼしている。近年の実験および理論計算手法の進展は目覚ましく、収差補正走査透過型電子顕微鏡 (STEM) による粒界原子構造の直接観察、および第一原理計算による機能特性の探求が盛んに行われている。格子欠陥は特有のナノ空間を有するため、それに起因した物性発現も注目されてきている。しかしながら欠陥構造と材料の機能特性との関係は極めて複雑であるため、上記に加えて数学的手法による解析法の確立が求められている。構造-機能相関の解析を行うにあたり、双結晶などのモデル材料を用いて欠陥に起因する諸現象を詳細に検討する手法が有効である。特に対称傾角粒界の原子構造は構造ユニットと呼ばれる多面体の配列で記述できる。このような粒界特有の多面体配列の背後に存在する数理構造を明らかにすることで、不純物偏析、相変態等の現象を根源的に理解することができると考えられる。

2. 研究の目的

物質・材料は特有の結晶構造を有し種々の格子欠陥が知られているが、本研究では、特に2次元欠陥である粒界を扱った。個々の粒界と機能特性の相関は、方位・粒界面等で決定される粒界性格に大きく依存する。従って欠陥に起因する諸現象を本質的に理解するためには、粒界性格を制御した双結晶などのモデル材料を用いた研究が有効である。小傾角粒界には刃状転位列が形成される一方、大傾角粒界には粒界転位が導入され、転位間相互作用を最小化するためにそれらが周期的に配列すると考えられてきた。巨視的には転位間距離は等間隔であるとして差し支えないが、粒界の原子構造は傾角に応じた幾何学的制約と原子の離散性を反映するため、特定の傾角を除いて原子レベルの転位間隔は一定にはなり得ない。原子レベルで粒界構造を解析し次世代材料へ応用するためには、数学的手法は極めて有効である。特に、粒界の最安定原子配列と有理数の分布には密接な関係があり、幾何学的手法および整数論的手法に基づく有理数分布の解析を用いて、粒界周期構造を系統的に予測することが可能である。本研究では、STEMによる原子構造解析に加えて、粒界の最安定原子配列決定条件を数学的視点により解明することが目的である。

3. 研究の方法

本研究では、モデル材料として酸化マグネシウム (MgO) およびイットリア安定化立方晶ジルコニア (YSZ) を用い、固相接合法によりバイクリスタルを作成した。粒界の長周期構造を観察するため、格子整合性が良い対応粒界の方位関係からずれた近似対応粒界を作成した。2つの結晶ブロックの等価な低指数面を、共通の回転軸周りに互いに角度 θ ずつ対称に傾けて接合できるよう切断し、鏡面研磨加工・洗浄後、高温 (1500 °C で 10 時間) で接合した。粒界の観察のために薄片化を行い、微細構造解析には収差補正装置搭載の走査透過電子顕微鏡 (加速電圧:200kV) を用いた。

4. 研究成果

2つの結晶を仮想的に重ねると、特定の角度で格子点同士的一致が生じる。このとき一致した格子点同士がまた結晶格子をなすとき、それを対応格子と呼ぶ。基本格子に対する対応格子の単位胞の体積比は整数指標として用いられ、 Σ を用いて表される。また、2つの結晶粒が対応方位関係にあるとき、その界面を対応粒界と呼ぶ。対応格子が存在するためには、基本格子における鏡映対称面の存在に加えて、ある種の「有理数条件」が必須である。有理数は実数の中で稠密に存在するため、対応方位は離散的でありながら無数に存在する。従来、 Σ 値の比較的小さい低エネルギー粒界については、実験および理論計算によって多数の研究がなされてきたが、 Σ の大きい対応粒界や非整合粒界も含めた無数の粒界を網羅するためには、一般粒界についての統一的な理論研究が必要である。こうした背景の下、1960年代に、2つの格子の一致の良さを定量化すべく O 格子理論が提唱された。対応格子理論では2つの結晶格子が特定の幾何学的関係で交わる必要があるのに対し、O 格子理論では任意の方位関係を扱うことができる。さて、O 格子点は次の方程式によって求められる：

$$\mathbf{a} = (\mathbf{I} - \mathbf{A}^{-1})^{-1} \mathbf{t}. \quad (1)$$

ここで \mathbf{I} は恒等変換、 \mathbf{A} は2つの格子の方位関係を結ぶ一次変換である。基本格子の格子ベクトル \mathbf{t} に対して \mathbf{a} が1つ定まり、そのような \mathbf{a} の集合によって O 格子が得られる。先行研究により、1980年代に一般の粒界構造は低指数対応粒界に現れる構造によって記述されることと、粒界構造ユニット配列に階層構造が存在することについても指摘がある。本研究では、一次変換を適切に選ぶことによって O 格子が粒界構造の周期を表す指標となることを見出し、粒界面上の O 格子点の周期と粒界構造ユニットの周期に対応が存在することを示した。それに基づき、有理数の分布と対称傾角粒界の周期性の関係を導出した [論文 10(下記発表論文参照)]。

一方、2つの格子が対応方位関係にあるとき、対になる概念として DSC(displacement-shift complete/displacements which are symmetry conserving) 格子がある。DSC 格子とは2つの格子の全ての格子点を含む最も疎な格子、すなわちそのような格子の中で単位胞の体積が最大になるものとして定義される。あるいは、一方の格子を変位させた際に、対応格子の格子パターンを保存する平行移動の全体としても特徴づけられる。DSC 格子の基本格子に対する単位胞の体積比は、対応格子の場合の逆数 $1/\Sigma$ で与えられる。粒界転位 (あるいは DSC 転位) は格子パターンを保つ変位によって導入される場合に最安定であると考えられ、そのバーガーズベクトルも DSC 格子に基づいて定義される。

例として、図 1 に傾角 35.3° の MgO[001] 対称傾角粒界の高角環状暗視野 (HAADF)-STEM 像を示す。傾角 35.3° の粒界では、傾角 36.87° の $\Sigma 5$ (310) 対応方位からのずれが小さいため、 $\Sigma 5$ (310) 構造ユニットが主であり、 $\Sigma 5$ 対応方位からのずれを補償するため、 $\Sigma 17$ (410) 対応方位に現れる構造ユニットが周期的に出現することが観察された。傾角 35.3° の対応方位は、 $\Sigma 5$ (310) 対応方位 (36.87°) と $\Sigma 17$ (410) 対応方位 (28.07°) の間に存在し、粒界構造はそれらの低指数対応粒

界に現れる構造ユニットによって構成されている。このように一般の粒界構造が、低指数対応粒界に現れる構造ユニットの配列によって記述出来るとき、そのような低指数対応粒界のことを参照構造という。図1のHAADF-STEM像では、大多数のB = $\Sigma 5$ (310) 構造ユニット配列の間に、A = $\Sigma 17$ (410) 構造ユニットが周期的に導入されることで $\Sigma 5$ 対応方位からのずれを補償していた。その比は1:6(A+6B)であり、構造ユニット配列の周期は7である。

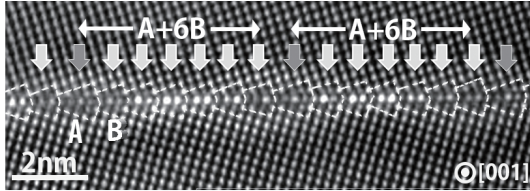


図1 傾角35.3°のMgO[001]粒界のHAADF-STEM像。傾角36.87°の $\Sigma 5$ (310) 対応方位からのずれを緩和するため、B = $\Sigma 5$ (310) ユニットの大部分を占める中にA = $\Sigma 17$ (410) ユニットの周期的に存在する。

一般に、傾角 2θ の立方晶[001]対称傾角粒界において、 $\tan \theta$ が有理数 p/q ($q \geq p \geq 0$)となるときに $(qp0)$ 対応粒界が存在する。傾角 $2\theta = 35.3^\circ$ のときは $\tan \theta \approx 7/22$ と近似されるため、理論的には $\Sigma 533$ (2270) 対応粒界である。図1より、粒界構造は6つの $\Sigma 5$ (310) 構造ユニットと1つの $\Sigma 17$ (410) 構造ユニットで表されると考えられ、面指数(逆格子ベクトル)の分解としては $(2270) = (410) + 6(310)$ と表される。

上記解析を一般化すると、立方晶[001]対称傾角粒界の数理構造は次のようにまとめられる。 p, q, p_1, q_1, p_2, q_2 は、 $p \leq q, p_1 \leq q_1, p_2 \leq q_2$ を満たす非負の整数とし、 $(p, q), (p_1, q_1), (p_2, q_2)$ の対はそれぞれ互いに素であると仮定する。 $(qp0)$ 面の参照構造を $(q_1 p_1 0)$ および $(q_2 p_2 0)$ に選んだとすると、 $(qp0)$ 面が2つの参照構造の間にあるという条件は、不等式

$$p_1/q_1 < p/q < p_2/q_2 \quad (4)$$

で与えられる。このとき $(qp0)$ 対応粒界が2つの参照構造によって

$$(qp0) = n_1 (q_1 p_1 0) + n_2 (q_2 p_2 0) \quad (5)$$

と構成されるならば、係数 n_1, n_2 が正の整数として一意に定まるための必要十分条件は、

$$\det \begin{pmatrix} q_1 & q_2 \\ p_1 & p_2 \end{pmatrix} = 1 \quad (6)$$

という条件で与えられる。このとき $n_1 + n_2 = p$ が成立する。しかしながら、2種類の構造ユニットの配列は傾角に依存し、非常に多くの組合せが考えられる。Suttonらは、一般の粒界構造は2つの参照構造の整数係数線形和 $n_1 A + n_2 B$ によって記述されることに加え、傾角の変化に応じて2つの参照構造の間をできる限り連続に変化するべきであることを提唱し、それらの配列方法を決定するアルゴリズムを導入した。一方我々は、別の見地から2種類の構造ユニットの配列を与えるアルゴリズムを提唱した。先の説明から、 $(qp0)$ 対応方位の構造ユニットの周期は p である。ここで p, q は先の条件を満たす整数であり、傾角 2θ の $(qp0)$ 対応粒界に対して $\tan \theta = p/q$ が成り立つ。一方、傾角の順に対応する p を並べ、9以下のものを抜き出すと次の29項からなる数列 $\{p_n\}_{n=1}^{29}$ が周期的に現

れる:

$$1, \underline{9}, 8, 7, 6, 5, \underline{9}, 4, \underline{7}, 3, 8, 5, 7, \underline{9}, 2,$$

$$\underline{9}, 7, 5, \underline{8}, 3, \underline{7}, 4, \underline{9}, 5, 6, 7, 8, \underline{9}, 1. \quad (7)$$

両端の $p_1 = p_{29} = 1$ はそれぞれ、 $\Sigma 17$ (410) 対応方位(28.07°) および $\Sigma 5$ (310) 対応方位(36.87°)の周期1(すなわち単一の構造ユニットで記述できること)に対応する。このとき、 $p_6 = 5$ は傾角 $2\theta_1 = 29.49^\circ$ の(1950)対応粒界($\tan \theta_1 = 5/19$)、 $p_8 = 4$ は傾角 $2\theta_2 = 29.86^\circ$ の(1540)対応粒界($\tan \theta_2 = 4/15$)にそれぞれ対応する。ところで $p_7 = 9$ は、 $p_7 = p_6 + p_8 (= 5 + 4)$ を満たすため、2つの周期 $p_6 = 5$ と $p_8 = 4$ の結合によって、 $p_7 = 9$ の長周期構造が形成されると考えられる。ここで $p_7 = 9$ は傾角 $2\theta = 29.65^\circ$ の(3490) = (1950) + (1540) 対応粒界($\tan \theta = 9/34, \theta_1 < \theta < \theta_2$)に対応する。A = (410)、B = (310)として、(1950)および(1540)対応粒界における構造ユニット配列がそれぞれ4A + B、3A + Bと記述されるとすれば、(3490)対応方位の構造は(4A + B) + (3A + B)を1周期とする長周期構造を持つと考えられる。この場合、数の少ないBユニットにDSC転位が導入され、それらは出来るだけ離れて配置される。このときBユニットの間にAユニットが3個ないし4個存在するため、DSC転位は等間隔には並ばない。式(5)の帰結として、 $n_1=1$ あるいは $n_2=1$ であるような傾角のときは、粒界面上に転位は等間隔に並ぶが、それ以外の場合は原子レベルで見れば等間隔とはなり得ない。これは小傾角粒界の刃状転位配列に関しても同様である。このような数学的に厳密な解析は、粒界や転位の原子構造をより詳細に議論する際に有効になるものと思われる。ところで式(7)の太字下線部分は

$$p_n = p_{n-1} + p_{n+1} \quad (8)$$

を満たし、短周期構造の結合によって長周期構造が形成されることを表現している。式(8)は、フィボナッチ数列の漸化式と同一のものであり、対称傾角粒界の構造にも準周期的な秩序が存在すると予想される。我々は、式(8)の数列 $\{p_n\}$ は、第9世代ファレイ数列 F_9 に現れる分母と一致することを見出した[論文9]。ここで、第 n 世代のファレイ数列 F_n とは、0と1の間にある既約分数のうち、分母が n 以下のものを昇順に並べたものである。ファレイ数列は様々な物理現象に登場することが知られている。ここで、分母同士・分子同士を足して得られる分数(中間数)を生成する演算 \boxplus を新たに導入する:

$$a/b \boxplus c/d = (a+c)/(b+d). \quad (9)$$

また、同一分数の和 $a/b \boxplus a/b$ は、 $2(a/b)$ のように表すことにする。図2は、各世代のファレイ数列間の関係を表している。第1世代のファレイ数列 F_1 として仮想的な分数 $0/1, 1/1$ を用意すると、式(9)で定義した演算を隣接項に施すことにより、次世代のファレイ数列を逐次的に得ることが出来る。このような二分木をファレイ図と呼ぶ。特に $a/b < c/d$ のとき、 $a/b < a/b \boxplus c/d < c/d$ を満たす。また粒界周期性との対応から、この演算において

1. 非可換性 ($p \boxplus q \boxplus r \neq q \boxplus p \boxplus r$),
 2. 巡回置換を許容 ($p \boxplus q \boxplus r = r \boxplus p \boxplus q$, 特に $p \boxplus q = q \boxplus p$)
- の2点を仮定する。さらに、ファレイ数列の隣接項の分子・分母を並べて 2×2 行列をつくると行列式が1になる。これは、式(6)において見ら

れた条件でもある。したがって、式 (5) の参照構造の選定基準として、ファレイ数列の隣り合う分数に対応する対応粒界を選べばよいことが分かる。また、低指数粒界面に対応する分数は、ファレイ数列 F_n の n が小さい世代 (図 2 の上の方) にはじめて現れることに注意する。逆に、任意の分数はファレイ数列における演算 \oplus の履歴を記憶しており、その履歴を遡ることで、参照構造がどのように配列するかを特定することができる。実際、任意の既約分数に対して連分数表示を行うことで、その分数のファレイ数列における「親」を特定する公式が知られている。上記手法は他の対

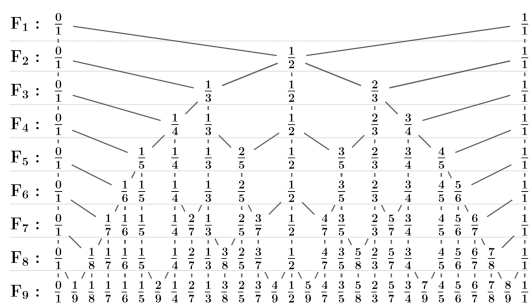


図 2 第 1 世代から第 9 世代までのファレイ数列により構成される二分木 (ファレイ図)

称傾角粒界の構造予測においても有効である。図 3 に傾角 25.2° の $\text{MgO}[001]$, および傾角 60° の $\text{YSZ}[\bar{1}\bar{1}0]$ 対称傾角粒界の HAADF-STEM 像を示す。まず前者は、 $2\theta = 25.2^\circ$ より $\tan\theta \approx 17/76$ と近似される。 25.2° は $A = \Sigma 13(510) (22.62^\circ)$ および $B = \Sigma 17(410) (28.07^\circ)$ 対応方位の間にあるので、これら 2 種類の構造ユニットで記述できると考えられる。上述の手法により近似分数は $17/76 = 8(1/5 \oplus 1/4) \oplus 1/4$ によって構成され、面指数としては $(76\ 17\ 0) = 8((510) + (410)) + (410)$ と分解する。従って、大部分は $A = \Sigma 13(510)$ および $B = \Sigma 17(410)$ 構造ユニットが交互に並び、 $B = \Sigma 17(410)$ が余分に加わると予測される。実際に図 3(a) の STEM 像からも、破線円部のように B ユニットが余分に加わる配列を確認することができる [論文 6]。一方後者において、 $\sqrt{2}\tan\theta$ が有理数 p/q となるとき、 (qqp) 対応粒界が存在する。ここで $2\theta = 60^\circ$ より、 $\sqrt{2}\tan\theta = \sqrt{2}/3 \approx 9/11$ と近似されるため、 $(11\ 11\ 9)$ 対応粒界が対応する。また、この粒界は $\Sigma 9(221) (\theta_1 = 38.94^\circ, \sqrt{2}\tan\theta_1 = 1/2)$ と $\Sigma 3(111) (\theta_2 = 70.53^\circ, \sqrt{2}\tan\theta_2 = 1/1)$ に現れる構造ユニットで記述されることが考えられる。従って、 $9/11 = \{3(1/1) \oplus 1/2\} \oplus \{4(1/1) \oplus 1/2\}$ より、面指数としては $(11\ 11\ 9) = 4(111) + (221)$ と分解し、 $\Sigma 9(221)$ 構造ユニットの間に $\Sigma 3(111)$ 構造ユニットが 3 個ないし 4 個存在すると予測される [論文 5]。

この方法は他の物質・粒界に対しても適用可能であり、粒界に関する先行研究の解析結果についてもその全てを系統的に説明することが可能である。本研究では、対称傾角粒界の構造と有理数の一対一対応を用いて粒界最安定構造を系統的に解析した。また、傾角粒界に存在する階層構造をファレイ数列によって記述した。これにより、 Σ 値の大きな傾角粒界であってもファレイ数列を用いることで構造ユニットの配列を精度よく推定することが出来る。このとき、転位間隔は原子の離散性を反映して準周期の一部を実現する。他の配列が観察さ

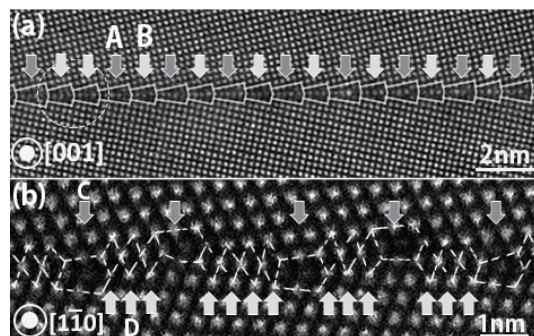


図 3 (a) 傾角 25.2° の $\text{MgO}[001]$ 対称傾角粒界の HAADF-STEM 像。 $A = \Sigma 13(510) (22.62^\circ)$ および $B = \Sigma 17(410) (28.07^\circ)$ 構造ユニットが交互に並び、破線円部に B ユニットが余分に加わる。(b) 傾角 60° 立方晶ジルコニア $[\bar{1}\bar{1}0]$ 対称傾角粒界の HAADF-STEM 像。 $C = \Sigma 9(221) (38.94^\circ)$ 構造ユニットの間に $D = \Sigma 3(111) (70.53^\circ)$ 構造ユニットが 3 個ないし 4 個存在する。

れないのは、歪場を最小化する構造ユニット配列が実現されているためだと考えられるが、比較的粒界エネルギーの高い配位が参照構造として選択される場合もある。参照構造は粒界エネルギーだけでは決定することができず、現状としては実験および理論計算により適切に特定しなければならない。今後の研究で、参照構造の決定条件および粒界最安定原子構造の決定に関わる根源的な理論を構築していく必要がある。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 10 件)

- 1 Kobayashi, Shunsuke; Inoue, Kazutoshi; Kato, Takeharu; Ikuhara, Yuichi; Yamamoto, Takahisa: "Multiphase nanodomains in a strained BaTiO_3 film on a GdScO_3 substrate", J. Appl. Phys., 064102, (2018), DOI:10.1063/1.5012545
- 2 Chen, Chunlin; Li, Hongping; Seki, Takehito; Yin, Deqiang; Sanchez-Santolino, Gabriel; Inoue, Kazutoshi; Shibata, Naoya and Ikuhara, Yuichi: "Direct Determination of Atomic Structure and Magnetic Coupling of Magnetite Twin Boundaries", ACS Nano, 2018, 12 (3), pp 2662–2668. DOI:10.1021/acsnano.7b08802
- 3 Chen, Chunlin; Yin, Deqiang; Inoue, Kazutoshi; Lichtenberg, Frank; Ma, Xiuliang; Ikuhara, Yuichi; Bednorz, Johannes Georg: "Atomic-Scale Origin of the Quasi-One-Dimensional Metallic Conductivity in Strontium Niobates with Perovskite-Related Layered Structures", 2017, 11 (12), pp 12519–12525. DOI:10.1021/acsnano.7b06619
- 4 Inoue, Kazutoshi; Motoko, Kotani; Ikuhara, Yuichi: "Structure of Tilt Grain Boundaries from Mathematical Perspective", Mathematics in Interface, Dislocation and Structure of Crystals, August 28-30, 2017, Fukuoka, 九州大学マス・フォアインダストリ研究所レクチャーノート Vol. 77 pp. 89-100, (2018)
- 5 Inoue, Kazutoshi; Feng, Bin; Shibata, Naoya;

- Kotani, Motoko; Ikuhara, Yuichi: “Structure of <110>-tilt boundaries in cubic zirconia”, *J. Mater. Sci.*, 52[8], 4278-4287, (2017), DOI:10.1007/s10853-016-0682-1
- 6 Inoue, Kazutoshi; Saito, Mitsuhiro; Chen, Chunlin; Kotani, Motoko; Ikuhara, Yuichi: “Mathematical analysis and STEM observations of arrangement of structural units in <001> symmetrical tilt grain boundaries”, *Microscopy*, 65[6], 479-487, (2016), DOI:10.1093/jmicro/dfw034
- 7 Inoue, Kazutoshi; Saito, Mitsuhiro; Chen, Chunlin; Kotani, Motoko; Ikuhara, Yuichi: “Mathematical Analysis and STEM observations of Symmetrical Tilt Grain Boundaries”, *AMTC Letters* 5, 200-201, (2016).
- 8 Ishikawa, Ryo; Lugg, Nathan R.; Inoue, Kazutoshi; Sawada, Hidetaka; Taniguchi, Takashi; Shibata, Naoya; Ikuhara, Yuichi: “Interfacial Atomic Structure of Twisted Few-Layer Graphene”, *Sci. Rep.*, 6, 21273 (2016), DOI:10.1038/srep21273
- 9 Inoue, Kazutoshi; Saito, Mitsuhiro; Wang, Zhongchang; Kotani, Motoko; Ikuhara, Yuichi: “The Decomposition Formula of <001> Symmetrical Tilt Grain Boundaries”, *Mater. Trans.*, 56[12], 1945-1952, (2015), DOI:10.2320/matertrans.M2015277
- 10 Inoue, Kazutoshi; Saito, Mitsuhiro; Wang, Zhongchang; Kotani, Motoko; Ikuhara, Yuichi: “On the Periodicity of <001> Symmetrical Tilt Grain Boundaries”, *Mater. Trans.*, 56[3], 281-287, (2015), DOI:10.2320/matertrans.M2014394
- [学会発表] (計 19 件)
[招待講演 (国際)]
- 1 K. Inoue, M. Kotani, Y. Ikuhara: “Structure of Tilt Grain Boundaries from Mathematical Perspective”, *Mathematics in Interface, Dislocation and Structure of Crystals*, Nishi-Jin Plaza, Fukuoka, August 28-30, 2017.
- 2 K. Inoue, B. Feng, N. Shibata, M. Kotani and Y. Ikuhara, “Structure of Grain Boundaries in Ceramic Materials from Mathematical Perspective”, *Russia-Japan Workshop on Advanced Materials*, Mielpark Kyoto, Kyoto, December 8th, 2016.
- [一般講演 (国際)]
- 3 K. Inoue, M. Saito, C. L. Chen, M. Kotani, Y. Ikuhara, “Grain Boundary Geometry and STEM Observations”, 23rd International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials (ISMANAM2016), Nara Kasugano International Forum, Nara, July, 4th, 2016.
- 4 K. Inoue, M. Saito, M. Kotani, Y. Ikuhara, “The Decomposition Formula of Symmetrical Tilt Grain Boundaries”, A3 mini-Workshop on Soft Matter, Beihang University, Beijing, March, 24th, 2016.
- [ポスター講演 (国際)]
- 5 K. Inoue, M. Saito, C. L. Chen, M. Kotani, Y. Ikuhara, “Structures of grain boundaries and atomic-scale observation”, *AIMR International Symposium 2017*, Sendai, Feb. 13th – 15th, 2017.
- 6 K. Inoue, M. Saito, M. Kotani, Y. Ikuhara, “Mathematical Analysis and STEM observations of Symmetrical Tilt Grain Boundaries”, XV International Conference on Intergranular and Interphase Boundaries in Materials (iib2016), National University of Science and Technology MISiS, Moscow, Russia, May, 23rd–27th, 2016.
- 7 K. Inoue, M. Saito, C. L. Chen, M. Kotani, Y. Ikuhara, “Mathematical Analysis and STEM observations of Symmetrical Tilt Grain Boundaries”, The 5th International Symposium on Advanced Microscopy and Theoretical Calculations (AMTC5), Wink Aichi, Nagoya, May, 11th-13th, 2016.
- 8 K. Inoue, M. Saito, Z. Wang, M. Kotani, Y. Ikuhara, “The Mathematical Structure of Symmetrical Tilt Grain Boundaries”, *AIMR International Symposium 2016*, Sendai, Feb. 22th – 24th, 2016.
- 9 K. Inoue, M. Saito, Z. Wang, M. Kotani, Y. Ikuhara, “On the Decomposition of Symmetrical Tilt Grain Boundaries”, *AIMR International Symposium 2015*, Sendai, Feb. 17th – 19th, 2015
- [招待講演 (国内)]
- 10 井上和俊, 小谷元子, 幾原雄一, “整数論的手法による粒界原子構造予測”, 日本物理学会第 73 回年次大会, 東京理科大, 2018 年 3 月 22-25 日.
- 11 井上和俊, 盧智英, 小谷元子, 幾原雄一, “対称傾角粒界の数理と STEM 観察”, 日本金属学会 2017 年春期講演大会, 首都大学東京, 2017 年 3 月 17 日.
- 12 井上和俊, 齋藤光浩, 王中長, 小谷元子, 幾原雄一, “対称傾角粒界の HRTEM 観察と分解公式について”, 日本顕微鏡学会第 71 回学術講演会, 京都国際会館, 2015 年 5 月 14 日.
- [一般講演 (国内)]
- 13 井上和俊, 齋藤光浩, 小谷元子, 幾原雄一, “粒界構造ユニットモデル再考” 日本金属学会春期講演大会, 千葉工業大学, 2018 年 3 月 21 日.
- 14 井上和俊, 尹徳強, 齋藤光浩, 小谷元子, 幾原雄一, “粒界構造ユニットにおける選択的偏析現象”, 日本金属学会秋期講演大会, 北海道大学, 札幌, 2017 年 9 月 7 日.
- 15 井上和俊, Feng Bin, 柴田直哉, 小谷元子, 幾原雄一, “イットリア安定化ジルコニア粒界構造の数学的予測と STEM 観察”, 日本金属学会秋期講演大会, 大阪大学, 2016 年 9 月 21 日.
- 16 井上和俊, 齋藤光浩, 王中長, 小谷元子, 幾原雄一, “粒界幾何学と原子分解能 STEM 観察”, 日本顕微鏡学会第 72 回学術講演会, 仙台国際センター, 仙台, 2016 年 6 月 14 日.
- 17 井上和俊, 齋藤光浩, 王中長, 小谷元子, 幾原雄一, “対称傾角粒界の分解則について”, 日本金属学会秋期講演大会, 九州大学, 2015 年 9 月 26 日.

【ポスター講演 (国内)】

- 18 井上和俊, 斎藤光浩, 王中長, 小谷元子, 幾原雄一, “粒界幾何学と原子分解能 STEM 観察”, 日本顕微鏡学会第 73 回学術講演会, 札幌コンベンションセンター, 札幌, 2017 年 5 月 30 日-6 月 1 日.
- 19 井上和俊, 尹徳強, 斎藤光浩, 陳春林, 小谷元子, 幾原雄一, “Selective segregation at grain-boundary structural units in MgO”, 東京大学, 2017 年 4 月 3 - 4 日

〔図書〕 (計 0 件)

〔産業財産権〕

- 出願状況 (計 0 件)
- 取得状況 (計 0 件)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

井上 和俊 (INOUE, Kazutoshi)
東北大学・材料科学高等研究所・助教
研究者番号:60743036

(2) 研究分担者

斎藤 光浩 (SAITO, Mitsuhiro)
東京大学・大学院工学系研究科総合研究機構・研究員
研究者番号:00510546

王 中長 (WANG, Zhongchang)
東北大学・材料科学高等研究所・准教授
研究者番号:20510548

(3) 連携研究者

幾原 雄一 (IKUHARA, Yuichi)
東京大学・工学系研究科総合研究機構・教授
東北大学・材料科学高等研究所・教授
研究者番号:70192474

小谷 元子 (KOTANI, Motoko)
東北大学・大学院理学研究科・教授
研究者番号:50230024