

令和 5 年 5 月 7 日現在

機関番号：13901

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2021～2022

課題番号：21K20484

研究課題名（和文）無機半導体結晶の変形挙動における光環境効果と転位物性の解明

研究課題名（英文）Effect of light irradiation on RT plastic deformation of inorganic single crystals

研究代表者

小椋 優 (OGURA, Yu)

名古屋大学・工学研究科・助教

研究者番号：70908152

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 2,400,000円

研究成果の概要（和文）：無機結晶中の転位（線状の結晶格子欠陥）は、特異な原子・電子構造を有し、光励起されたキャリアと相互作用を生じうる。その結果、光照射により変形特性が変化する場合がある。本研究では、主に酸化マグネシウム（MgO）結晶について、光環境制御下における室温変形試験を実施した。酸化マグネシウム（MgO）結晶において、光照射による変形応力の増加（光塑性効果）が生じることを初めて明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

光塑性効果に関する研究は、これまで主にII-VI族化合物半導体を対象に行われてきた。本研究は、光塑性効果がII-VI族化合物半導体以外の材料においても生じる可能性を示唆している。本研究を足掛かりとして、より広範な材料に適用可能な基礎学理が構築されることによって、光を利用した新奇材料加工・材料製造技術の創成が期待できる。

研究成果の概要（英文）：Dislocations in inorganic single crystals have characteristic atomic and electronic structures at their cores, and consequently can interact with photo-excited carriers. Due to the interaction, the plastic deformation behavior can be affected by light irradiation. In this study, magnesium oxide (MgO) single crystals were deformed at room temperature under controlled light conditions. Then, it was revealed that MgO crystals exhibit positive photoplastic effect, increase in flow stress by light irradiation.

研究分野：材料工学

キーワード：転位

### 1. 研究開始当初の背景

II-VI 族化合物半導体結晶において、光照射によって変形応力や硬さが増加する現象(光塑性効果[1])が知られている。また、II-VI 族化合物半導体の 1 つである硫化亜鉛 (ZnS) 結晶の可塑性が光環境に大きく依存し、光のない暗闇環境下であれば室温でも延性的な挙動を示すことが明らかになった[2]。結晶性材料の塑性変形は、線状の結晶格子欠陥である「転位(図 1 参照)」の運動によって生じる。第一原理に基づいた理論解析によると、II-VI 族化合物半導体中の転位はキャリアと相互作用することでその運動性を失い、その結果として光塑性効果が生じうると考えられる[3]。このような転位機能は、母材とは異なる転位周辺の特異な原子・電子構造に起因する。そのため、II-VI 族化合物半導体以外の材料においても変形特性における光環境効果が生じうると考えられるが、これまでの関連研究は主に II-VI 族化合物半導体を対象に行われており、その他の材料については不明であった。

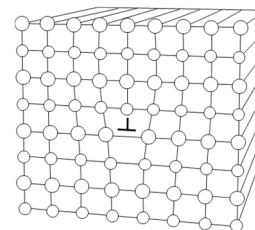


図 1. 転位の模式図.

### 2. 研究の目的

転位は母材と異なる特異な原子・電子構造を有することから、光励起されたキャリアと相互作用を生じうる。その結果、光照射によって変形特性が変化する可能性がある。そこで本研究では、主に酸化マグネシウム (MgO) 単結晶について、光環境制御下における機械的変形試験を実施し、光照射が変形特性に及ぼす影響について調査した。

### 3. 研究の方法

図 2 に示す単結晶試料に対して、一軸圧縮の室温変形試験を実施した。[001] 圧縮軸に対して、すべり系 {110}<110> が活動する。室内光の影響を除外するために試験機を暗幕で覆い、適宜、サンプルに光を照射することにより光環境制御を行った。なお、使用した光の波長は 250-385 nm である。

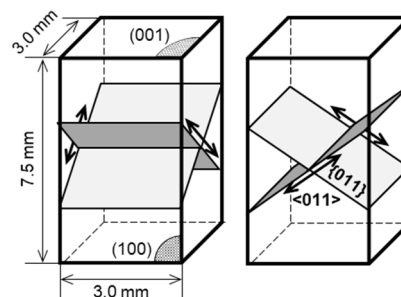


図 2. 単結晶試料の模式図.

### 4. 研究成果

図 3 に、光環境制御下の変形試験にて得られた応力-ひずみ曲線を示す。なお、色付けされた領域にて試料に光を照射している。光照射により変形応力が速やかに増加することがわかった。さらに、光照射を停止させると、変形応力は速やかに低下している。このようにして、光照射が酸化マグネシウム (MgO) の変形特性に影響を及ぼすことが明らかとなった。

変形後の結晶について、電子顕微鏡を用いた内部組織観察を行ったところ、結晶中に多数の転位形成がみとめられた。そのため、図 3 で示した塑性変形は、転位のすべり運動により生じていると考えられる。第一原理に基づいた理論計算によると、酸化マグネシウム (MgO) 中の転位は、母材よりも小さなバンドギャップを有することがわかった。そうした特異な電子構造を持つことから、酸化マグネシウム (MgO) 中の転位は光励起されたキャリアと相互作用することが推察される。その結果として、転位の運動性が低下し、変形応力が増加したと考えられる。

また、変形後の結晶について光吸収特性評価を行ったところ、光学的バンドギャップの低下がみられた。これは、転位における小さなバンドギャップを示唆する実験的な結果である。塑性変形による転位の導入により、結晶の基礎物性が変化することがわかった。

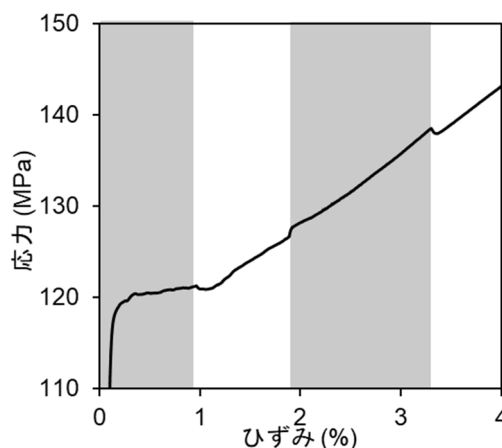


図 3. 応力 ひずみ曲線.

### 参考

- [1] Y. A. Osip'yan, V. F. Petrenko, A. V. Zaretskii, R. W. Whitworth, Properties of II-VI semiconductors associated with moving dislocations, *Advances in Physics* 35 (1986).

- [2] Y.Oshima, A. Nakamura, K. Matsunaga, Extraordinary plasticity of an inorganic semiconductor in darkness, *Science* 360 (2018).
- [3] S. Hoshino, Y. Oshima, T. Yokoi, A. Nakamura, K. Matsunaga, DFT calculations of carrier-trapping effects on atomic structures of 30° partial dislocation cores in zincblende II-VI group zinc compounds, *Physical Review Materials* 7 (2023).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Kitou Shunsuke, Oshima Yu, Nakamura Atsutomo, Matsunaga Katsuyuki, Sawa Hiroshi	4. 巻 247
2. 論文標題 Room-temperature plastic deformation modes of cubic ZnS crystals	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 118738 ~ 118738
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.actamat.2023.118738	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計2件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 大島優, 鬼頭俊介, 中村篤智, 横井達矢, 澤博, 松永克志
2. 発表標題 閃亜鉛鉱型ZnS単結晶における室温塑性変形機構
3. 学会等名 日本金属学会 2022年秋期大会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 大島優
2. 発表標題 ZnS結晶の塑性変形挙動における光環境効果
3. 学会等名 第15回物性科学領域横断研究会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------