

J-PARCでの白色中性子ホログラフィーの開発とそれによる機能性材料でのドーパント周りの局所原子像イメージング

物性物理学およびその関連分野



研究者所属・職名 : 大学院理工学研究科・教授

ふりがな おおやま けんじ

氏名 : 大山 研司

主な採択課題 :

- [基盤研究\(B\)「新しい原子イメージング法を用いたカゴ状構造内ドーパントの孤立振動の定量評価」\(2021-2024\)](#)
- [新学術領域研究\(研究領域提案型\)「水素吸蔵物質での水素位置確定法:粉末中性子ホログラフィーの実現」\(2019-2020\)](#)
- [基盤研究\(C\)「エネルギー解析白色中性子ホログラフィー法の開発とドーパ系機能性材料への応用」\(2017-2019\)](#)

分野 : 材料科学、物性物理学

キーワード : 半導体、ドーパント、局所原子構造、中性子、J-PARC、ホログラフィー

課題

●なぜこの研究をおこなったのか? (研究の背景・目的)

スマホなどのエレクトロニクスを支える半導体材料では、微量の異種元素を添加(ドーパ)することでその性能を制御している。当然、その性能発現には、添加元素(ドーパント)周囲の環境はドーパによりどう変化したのか、が重要であることは容易に想像できる。しかし従来の回折装置や電子顕微鏡ではドーパントからみた原子構造の観測は困難であったため、ドーパが格子に与える影響の理解は、その重要性にもかかわらず不十分であった。この課題を突破する方法が、原子分解能ホログラフィー(以下ホログラフィー)である。この手法は、特定のドーパントの周囲約2 nmの原子を3次元的に可視化できる(図1)のが特徴で、日本では蛍光X線、光電子を用いたドーパ効果の研究が活発に行われており、この分野で世界をリードしている。しかし、現在の機能性材料では水素、ホウ素などの軽元素が重要だが、X線や電子線では材料中の軽元素観測は困難なため、軽元素感度の高い中性子でのホログラフィーを実用化する必要があり、我々はそれに挑戦した。

●研究するにあたっての苦労や工夫(研究の手法)

中性子ホログラフィーは2001年に欧州グループによりデモ実験が成功していたが、その精度は実際の材料研究には不十分であった。この原因は一つの波長の中性子のみでしか測定できないことである。我々は独自のアイデアにより、大強度陽子加速器施設J-PARC(茨城県東海村)の世界最強の白色中性子線を用いれば、130波長もの中性子線で測定することが可能であることに着目し、原子像の精度を劇的に高めることに成功した。これにより、実際の材料研究への扉を開いた。

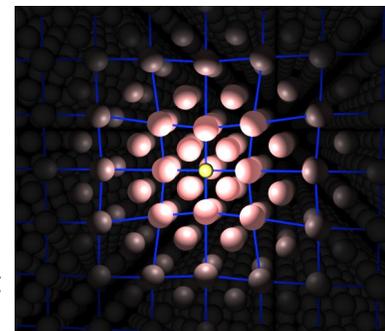


図1 ホログラフィーで観測したドーパント(中央黄色)周囲の局所原子像のイメージ図

J-PARCでの白色中性子ホログラフィーの開発とそれによる機能性材料でのドーパント周りの局所原子像イメージング

物性物理学およびその関連分野

研究成果

●どんな成果がでたか？どんな発見があったか？

本研究での白色中性子ホログラフィーの実現により、これまで不可能であったホウ素(B)周りの原子構造あるいはドーパント周りの軽元素構造を3次元で可視化することが可能になった。すでに代表的半導体BドーパSi、安全安価な熱電材料BドーパMg₂X(X=Si, Sn)、白色LED材料BドーパSiCなど様々な機能性材料で成果をあげている。図2はBをわずか0.26%ドーパしたSiでのB周りの原子構造である。図1から大部分のBは確かにSi位置にはいっていることが直接確認された。Bは機能性材料では重要なドーパントとして広く使われていることから、Bドーパが母物質に与える影響を直接可視化できるようになったことで、材料科学にこれまでにない新しい視点加わったことになる。これは今後の材料科学の発展に重要な意味をもつ。

また、基礎研究でも特筆すべき成果があった。希土類ほう化物RB₆(R:希土類)は様々な特異な物性を示すため40年以上にわたり多くの研究がなされ、今日でも物性物理学の中心物質である。構造としての特徴は1個の希土類をBがカゴ状に取り囲んでいることである。我々はYbB₆とLaB₆にSmをドーパしたときのSmまわりのBカゴを可視化し、SmドーパによりSmのすぐとなりのBは位置が揺らぐが、それ以上離れたBは揺らいでいないことを示した。これはSmとYb,Laの直径が異なり、Sm周りだけ構造に歪みが生じたことを意味する。この観測は白色中性子ホログラフィー以外では不可能ないし困難である。RB₆に限らず、多くの研究対象物質では異種元素ドーパにより特異な物性が生じることから、この観測は物性物理学全体に大きな意味をもつ。

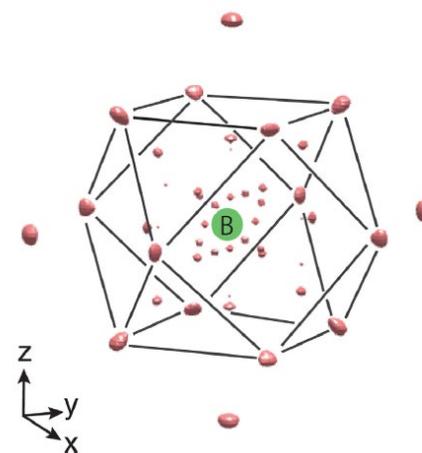


図2 0.26% BドーパSiでのB周りのSi像

今後の展望

●今後の展望・期待される効果

科研費でのご支援により、白色中性子ホログラフィーでの材料研究は期待以上の成果をあげているが、一方で、ドーパントとして対象となるのはホウ素など特に中性子を強く吸収する元素のみであり、今後さらに広範囲の物質でドーパ効果を理解していく必要がある。そのための展望として、各元素を区別する能力を高めるため装置改良をすすめている。すでに銅などこれまで困難であった元素でもデータが得られつつあり、材料科学へのさらなる貢献が期待できる。さらに世界初となる挑戦として、磁性材料を対象にする磁気ホログラフィー(図3)、水素化合物を対象とする粉末中性子ホログラフィーの実現にも取り組んでいる。



図3 偏極中性子実験