

Q4. 結晶の構造や特性を理解するために、結晶学や固体電子論を学びます。しかし、「並進対称性」を前提とした「結晶学」や「(ブロッホの定理に基づく) 固体電子論」は、厳密には、実在する「有限サイズで不純物や結晶欠陥を含む結晶」の構造や特性を再現したり予測することはできません。この意味で、実験結果と理論（および、それに基づく計算結果）を突き合わせる際には注意が必要となります。

例えば、産業レベルでの半導体結晶における電子物性に関しては、ごく微量の不純物の添加の範囲内では、結晶の構造は保たれたままで「結晶学」と「固体電子論」を適切に拡張することで定量的に特性に関する実験結果を再現できる。しかし、不純物の添加量が増えると、もはや「結晶学」や「固体電子論」で実験結果を再現することは不可能となる。ご質問の粒界（多結晶における結晶粒間の境界）への微小量の不純物添加の機械強度や電気特性への影響に関しては、粒界での原子配列が、そもそも結晶とは異なるために、「結晶学」や「固体電子論」の修正では説明することはできない。しかし、これらは、粒界の構造・特性を理解するための基礎であり、また以下のように役立っています。

1980年代あたりから、透過電子顕微鏡法によって粒界での原子配列の二次元投影が可能となり、この観察と理論解析（当時は、古典力学的な原子間力ポテンシャルや連続体力学）を連携させる粒界の原子スケール解析手法が確立された。その後、透過電子顕微鏡法の解像度や元素識別能が向上して、一方で計算機を利用した電子論が発展して、粒界での機械特性や電気特性の解析に向けて研究が進められている。例えば「(1) 微量添加物を含む粒界とその近傍の結晶を含むコアの部分を取り出して単位胞 (Super cell) とした仮想的な結晶に「固体電子論」を適用して特性を説明する。(2) コアの周囲に大きく広がる結晶について、コアとの間に適切な境界条件を設定した上で、連続体力学を適用して、結晶歪みの再現や粒界の安定性を説明する。さらに、応力下での粒界での機械特性を (1) と (2) を組み合わせて計算機シミュレーションで評価する研究も行われている。」
(竹田 精治)