

結晶の欠陥を逆利用し、電気機能をデザイン

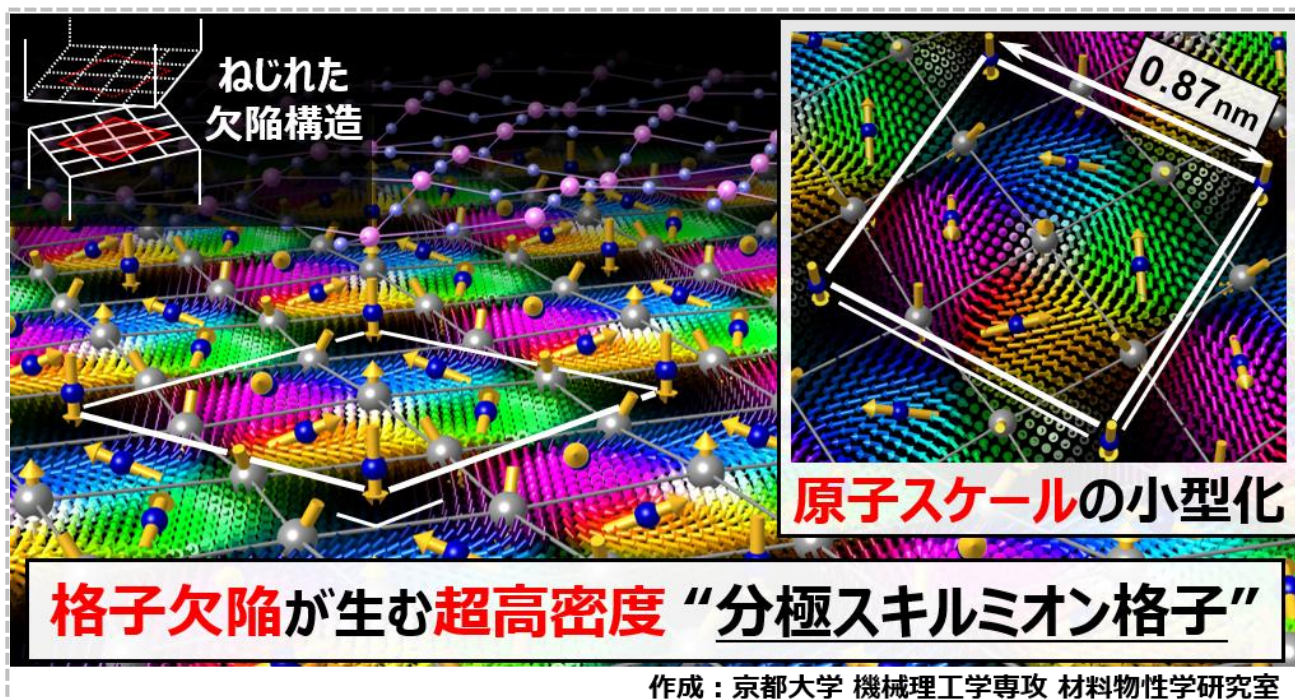
—原子スケールの“渦”を超高密度に創出—

概要

京都大学大学院工学研究科 嶋田隆広 教授、見波将 同助教、笠井恒汰 同博士課程学生（研究当時、現：大阪大学大学院基礎工学研究科 特別研究員）、河野真弥 同修士課程学生らの研究グループは、材料中の格子欠陥^{注1}を用いて、電気分極^{注2}の渦状構造「分極スキルミオン^{注3}」を従来限界の 100 倍という超高密度で集積できることを発見しました。

強誘電体材料中では、原子のずれによって電気的な偏りである電気分極が生じます。分極の渦状構造である分極スキルミオンは、次世代の圧電・情報デバイスに繋がる新機能を生み出す点で注目されています。これまで分極スキルミオンの小型・高密度化は材料を薄くすることで進められてきましたが、その方法には小型化の限界がありました。本研究では、従来は材料特性を劣化させる要因として考えられてきた格子欠陥を逆利用し、わずか原子数個分サイズの分極スキルミオンを従来限界の 100 倍の超高密度で集積できることを実証しました。本成果は、格子欠陥を「避けるもの」から「新機能デザインの場合」へ転換し、次世代デバイス設計に新しい道筋を示すものです。今後は様々な格子欠陥へ展開し、極小スキルミオンと機能の自在な設計を目指します。

本研究成果は、2026 年 9 月 3 日に国際学術誌「*Advanced Functional Materials*」にオンライン掲載されました。



1. 背景

強誘電体では、原子がわずかにずれることで電氣的な偏り（分極）が生じます。近年、分極による渦状の構造である分極スキルミオンが発見され、その特徴的な構造によって次世代の圧電・情報デバイスにつながる新奇機能が発現することが期待されています。さらに、格子状に整列することでこれらを高密度に集積することができます。このような背景から、より高性能な機能を実現するためにスキルミオンの小型化・高密度化が要求されます。これまでのスキルミオンの小型化は、材料を薄膜化することによって実現されてきましたが、この方法では小型化に限界が現れることが報告されており、その限界を超えて小さなスキルミオンを創ることは不可能とされてきました。

2. 研究手法・成果

本研究では、これまでの限界を超える小さな分極スキルミオンを創り出す手法として、材料の中に存在する格子欠陥に注目し解析を行いました。チタン酸ストロンチウム^{注4}結晶中に存在するねじり粒界欠陥^{注5}を対象として、量子力学に基づく第一原理計算^{注6}を用いて欠陥部分に生じる分極を評価しました。その結果、これまでの小型化限界と比べて1桁小さな原子スケール（0.87 nm）で分極スキルミオンが発現することを明らかにしました。さらに、このスキルミオンは格子状に整列し、従来の100倍の集積密度を達成しました。また、ねじり粒界欠陥のねじり角度を変えるなど、欠陥の構造を変えると発現する分極の構造が多様に制御できることも分かりました。さらに、電場による制御も可能であることを示しました。このように本研究では、格子欠陥を利用することで、分極スキルミオンをはじめとする多様な渦状構造をこれまでの限界を超える小型・高密度な状態で発現・制御できることを明らかにしました。

3. 波及効果、今後の予定

本研究成果は、①欠陥は避けるものではなく機能を生み出す資源になりうる、②分極スキルミオンは原子スケールまで小型化できる、という二つの意味でこれまでの常識を覆すものです。これらの成果は、分極スキルミオンを利用したデバイス設計や、欠陥を積極的に活用する新たな材料設計の可能性を広げるものです。例えば、超高密度の情報ストレージや、材料内部に新たな機能を組み込んだ機能材料の実現につながるものが期待されます。今後は格子欠陥と発現する分極場との関係性や、それらの特性についてさらに詳細に検討し、極小分極スキルミオンとその機能の自在な設計を目指します。

4. 研究プロジェクトについて

本研究は、科学研究費助成事業（JSPS KAKENHI）（助成金番号：JP20H05653、JP22K14587、JP23H00159、JP25K22056、26KJ0210）、科学技術振興機構（JST）創発的研究支援事業（FOREST）（助成金番号：JPMJFR222H）、科学技術振興機構（JST）国家戦略分野の若手研究者及び博士後期課程学生の育成事業（BOOST）（助成金番号：JPMJBS2407）、日本学術振興会（JST）次世代研究者挑戦的研究プログラム（SPRING）（助成金番号：JPMJSP2110）、みずほ学術振興財団、村田学術振興・教育財団の支援により実施されました。また、本研究での解析の一部は東京大学物性研究所 Supercomputer Center の設備を用いて行われました。

<用語解説>

注1 格子欠陥

本来規則正しく配列している結晶格子に対して、一部の原子がなくなっていたり、余分に原子が入り込んでいたり、ある面を境に両側の結晶がねじれてずれていたりと、配列を崩す原因となる構造的因子のこと

です。従来は、規則正しい結晶を用いた機能を阻害するものとして、排除の対象となってきました。

注 2 電気分極（分極）

誘電体材料内で正の電荷と負の電荷の中心がずれることによって生じる、電氣的な偏りを表す量で、大きさと向きを持ちます。

注 3 分極スキルミオン

電気分極が作る特殊な渦状の秩序です。中心では分極がある方向を向き、周辺部ではその反対方向を向いています。その間では向きが少しずつ滑らかに変化しながら渦のような配置を作ります。この秩序の中には、あらゆる方向を向いた分極が含まれており、分極の向きを球の表面に対応させると、球面全体を一度なぞるような幾何学的特徴を持っています。

注 4 チタン酸ストロンチウム

化学式 SrTiO_3 （略称 STO）で表される酸化物材料で、立方体の結晶構造（ペロブスカイト構造）を持つ代表的な材料です。通常は自発的な分極を持ちませんが、変形や外部からの刺激によって分極が生じることが知られています。

注 5 ねじり粒界欠陥

向きが異なる二つの結晶が接する境界にできる欠陥です。境界面をはさんで両側の結晶が互いにねじれた状態になっており、そのねじれ角度によって粒界の構造が決まります。本研究で扱った 36.87° のねじれ角度を持つねじり粒界は、特に安定な構造として知られています。

注 6 第一原理計算

量子力学の法則に基づいて、物質中の電子の振る舞いをコンピューターで計算する手法です。実験データに頼らず、原子の種類や配置から物質の性質を高精度に予測できることが特徴です。本研究では、密度汎関数理論という代表的な第一原理計算手法を用いて、物質の電子状態や分極構造を調べました。

<論文タイトルと著者>

タイトル：Ultrahigh-Density Atomic-Scale Polar Skyrmion Lattice in SrTiO_3 via Twist Grain Boundary Engineering（チタン酸ストロンチウム内のねじり粒界による原子スケール・超高密度スキルミオン格子の創出）

著 者：河野 真弥，笠井 恒汰，池田 善孝，徐 涛，見波 将，嶋田 隆広

掲 載 誌： *Advanced Functional Materials* DOI：10.1002/adfm.78177