

氏 名	うめ の よし たか 梅 野 宜 崇
学位(専攻分野)	博 士 (工 学)
学位記番号	論 工 博 第 3624 号
学位授与の日付	平成 14 年 1 月 23 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 2 項 該 当
学位論文題目	第一原理解析に基づく材料強度に関する研究

論文調査委員 (主 査) 教授 北 村 隆 行 教授 島 進 教授 足 立 裕 彦

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、材料のナノメートルオーダーの微小部分における強度特性を原子シミュレーションによって明らかにすることを目的として、第一原理解析を用いてアルミニウムおよびシリコンの変形・破壊特性について力学的に検討した結果をまとめたものであって、8章がらなっている。

第1章は緒論であり、今まで行われてきた原子シミュレーションによる材料強度に関する研究を整理して述べるとともに、第一原理解析に基づいて行った本研究の目的と位置づけについて述べている。

第2章では、本研究で用いる解析法について記述している。まず、平面波基底ノルム保存擬ポテンシャル法による第一原理解析について説明している。また、複雑な系の変形下の挙動を解析する際に必要となる、収束法やアルゴリズムなどの工夫による計算の効率化、および、並列計算機を使用した計算の高速化についても述べている。

第3章では、ナノメートルオーダーの微小部分に対する原子系での局所応力や弾性係数に関する定義について吟味するとともに、その評価法について議論している。また、不均質ひずみが現われる円孔を有する板の引張りシミュレーションを行い、それらの物理的意味や連続体力学における定義や評価法との整合性について考察している。

第4章では、理想結晶の均一引張り・せん断変形の第一原理解析を行い、基本的な材料強度特性として変形挙動および破壊強度(理想強度)を解析している。金属としてアルミニウムを取り上げ、単結晶バルク材とナノ構造体としての原子鎖を対象に、理想強度を評価した。さらに、複雑な結晶構造(ダイヤモンド構造)を有するシリコン単結晶のせん断強度について検討した。とくに、シリコンにおいて負荷に起因して内部変位が発生する過程を詳細に解析し、変形・破壊強度がその影響を強く受けることを解明している。また、横断面変位拘束の強度に及ぼす影響も定量的に評価している。

第5章では、大規模な系の原子シミュレーションを行う際に用いられる原子間ポテンシャル関数(有効媒質法(EMT)ポテンシャルと Tersoff ポテンシャル)の信頼性と適用限界について、第一原理解析に基づいて検証を行っている。とくに、ポテンシャルの作成時には考慮されていない高ひずみや破壊の効果について検討している。また、アルミニウムに関しては、原子配列が乱れている粒界や原子鎖に対するポテンシャル関数の有効性について明らかにしている。

第6章では、アルミニウムの不均質部位の力学特性について検討している。第一原理解析によって $\Sigma 9$ 傾角粒界の構造および粒界エネルギーを求めるとともに、さらにその引張り強度について調べている。また、第5章で信頼性を確認した EMT ポテンシャルを用いたシミュレーションによって、 $\Sigma 5$ 傾角粒界の局所材料強度特性を原子レベルから考察するとともに、 $\Sigma 5$ 粒界が(001)表面と会合する部分の構造とその強度特性について明らかにしている。

第7章では、Si/SiO₂異材界面を対象として、分子動力学を行う際に重要となる原子間力を再現する原子間ポテンシャル関数を、第一原理解析に基づいて構築する方法を提案し、その有効性を確認している。また、シリコン表面上のアルミニウム原子堆積の第一原理解析を行うとともに、その付着強度および破壊形態について検討している。

第8章は結論であり、本論文で得られた成果について総括するとともに、今後の課題と発展性について述べている。

論文審査の結果の要旨

本論文は、材料の微小部分における強度特性を明らかにするため、平面波を基底とする第一原理解析によってその変形・破壊特性について力学的に検討した結果をまとめたものであり、得られた主な成果は以下のとおりである。

- 1) ナノメートルオーダーの微小部分に対する応力と弾性係数の定義、および、その評価法を明らかにした。とくに、それらの物理的意味や従来の連続体力学における定義・評価法との整合性を明確にした。また、微小円孔近傍の応力集中部に対するシミュレーションより、その有効性を示した。
- 2) 理想結晶（アルミニウムおよびシリコン）の均一引張り・せん断変形のノルム保存型擬ポテンシャル法に基づく第一原理解析を行い、基本的な材料強度特性として変形挙動および破壊強度（理想強度）を明らかにした。とくに、シリコンにおいて負荷に起因して内部変位が発生する過程を詳細に解析し、それが変形・破壊強度に強く影響することを解明した。また、横断面変位拘束の強度に及ぼす影響も定量的に評価した。
- 3) 簡易解析に用いられる原子間ポテンシャル関数（有効媒質法ポテンシャルと Tersoff ポテンシャルの不均一部（粒界面））を有する構造体シミュレーションに対する信頼性、および、その適用限界を、第一原理解析に基づいて示した。さらに、それらの強変形時および破壊時における有効性を評価した。
- 4) アルミニウムの結晶粒界を有する構造体に対する引張り解析を行い、不均一構造部の局所材料強度特性評価方法を提案した。また、不均一部分では局所的な応力分布が現れることを見出すとともに、変形・破壊特性に及ぼす影響を解明した。さらに、これを発展させて、粒界一表面会合部の構造および局所強度特性を評価した。
- 5) 異種材料界面（Si/SiO₂ と Al/Si）に対する強度評価を行った。第一原理によって異材界面における原子間力を解析し、それを再現する原子間ポテンシャル関数の構築法を提案するとともに、その有効性を示した。また、シリコン基板上に付着したアルミニウム原子の引き剥がし強度を明らかにした。

以上、要するに本論文は、ナノメートルオーダーの微小部分の材料強度評価について新たな知見を与えるものであり、学術上、実際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成13年11月21日、論文内容とそれに関連した試問を行った結果、合格と認めた。