

学 位 審 査 報 告 書

(ふ り が な) 氏 名	さいとう くによす 齊藤 国靖
学位 (専攻分野)	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	理 博 第 号
学位授与の日付	平成 年 月 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当
研 究 科 ・ 専 攻	理学研究科物理学・宇宙物理学専攻
(学位論文題目) Studies of Nanoclusters' Collision -Depositions on a Crystalline Surface and Graphene, and Negative Restitution Coefficient of Nanoclusters- (ナノクラスター衝突の研究-結晶表面およびグラフェンに対する衝突とナノクラスターの負の跳ね返り係数-)	
論 文 調 査 委 員	(主査) 早川尚男 教授 太田隆夫 教授 小貫明 教授

(続紙 1)

京都大学	博士（理学）	氏名	齊藤国靖
論文題目	Studies of Nanoclusters' Collision –Depositions on a Crystalline Surface and Graphene, and Negative Restitution Coefficient of Nanoclusters– (ナノクラスター衝突の研究-結晶表面およびグラフェンに対する衝突とナノクラスターの負の跳ね返り係数-)		
（論文内容の要旨） 本論文ではナノスケールのクラスター（ナノクラスター）の衝突に伴う物性を主として分子動力学シミュレーションによって調べたものである。本論文は 5 章と 4 つの Appendix から成るが、その主要部である 2-4 章はそれぞれ欧文学術雑誌に発表されたものであり、特に第 4 章に対応する研究内容は Physical Review Letters の editors' suggestion に選ばれた世界的にも注目された研究内容である。 本論文の第 1 章はナノサイエンス、特にナノクラスターの良く書かれた導入及びレビューであり、この分野の現状と種々のナノクラスターの特性等が手際良くまとめられている。 第 2 章は Progress of Theoretical Physics に発表した論文に基づいて、LJ ポテンシャルに拘束されたアモルファスクラスターが非常に硬い固体表面に衝突した際に生じる吸着液滴から単層膜への転移、更に単層膜のフラクタルパターンの成長等を主として数値的に調べ、吸着原子数が衝突速度にどう依存するかについては簡単な理論を提出してその正当性を数値的に確かめている。固体をシミュレートする際に LJ ポテンシャルに加えて線形バネで拘束したことでやや人工的な物質モデルであるという批判があったが、解析で得られた知見はナノクラスターと硬い基盤の衝突で普遍的に観測される性質であると思われ注目を集めた。 第 3 章はアルゴンクラスターとグラフェンの衝突を数値的に調べ、主として弾性波の伝播とそれに伴う変形、その弾性変形以外の部分に現れるグラフェンの温度上昇等を報告した。その結果は、クラスターが衝突してから 3psec 程度の間のグラフェンの変形は線形弾性論でかなり定量的に記述できることと、弾性論に基づくグラフェンの厚みの推定は非常に薄いものになることを結論づけた。また衝突に伴うグラフェンの温度上昇は最小散逸原理の 4 重極で定性的に説明できることも報告している。この結果は Physical Review B に出版されて、グラフェン業界でも力学的性質を系統的に調べた稀有の論文として一定の注目を集め、グラフェン関係の招待論文の依頼も舞い込んでいる。 第 4 章はナノクラスター同士の衝突を 2 つのモデル、水素を表面にコーティングした Si クラスター同士の衝突と LJ クラスターであるが異クラスター原子間では引力を弱くした現象論モデルに基づくクラスター同士の衝突を論じた。どちらの場合もインパクトパラメータがゼロでない場合にはクラスター間の引力によって接触の際の共通法線が回転し、従来の定義で観測すると跳ね返り係数が負になる現象が観測された。そこで申請者は共通法線の回転を考慮した適切な跳ね返り係数を提案すると共に弾性論と回転系での慣性力効果の組み合わせによって理論によって定量的にシミュレーション結果を再現することを成功した。既に述べた通り本研究は世界的に注目を集めたものとなっている。 Appendix では公表論文で省かれた Si クラスターに用いた Tersoff ポテンシャル、グラフェンに用いた Brenner ポテンシャル、4 章で簡単化のために省いたスピン効果の詳細、弾性定数や表面張力の決定法等について詳細に説明している。これらの Appendix と 173 件の引用文献は後進への貴重な資料となり得ると思われる。			

(論文審査の結果の要旨)

申請者の学位論文の主要部は公表論文として既に 3 つの英文学術雑誌の出版されていたため、公聴会において申請者は第 2 章、第 3 章の内容は簡単に紹介するに留め、第 4 章の内容について詳しく説明した。しかしながら審査委員からの質問の多くは、申請者の関連分野の理解を確かめる意味もあり、第 1 章に対応する導入部や簡単に触れた第 2 章、第 3 章についてのものが比較的多かった。

導入部で申請者がアルゴンクラスターのサイズの増加につれてアイコサヘドラ構造からデカヘドラ構造を経て fcc 構造に変化する良く知られた数値計算の例を紹介した際に実験的にはデカヘドラ構造は観測されていない旨のコメントが審査委員からあった。この指摘は実験と数値計算のギャップを意識させる貴重なものであった。また学位論文の第 1 章には公聴会の発表スライドに用いた図表を使うとより改善する旨の指摘があった。

また固体基盤との衝突に伴う吸着に関してはフラクタルパターンの解析をしたのかという質問がなされ、申請者はサイズが足りずフラクタル次元の解析は諦め、三角関数のどのモードが卓越するかを調べたかに留まったと回答した。グラフェンとの衝突に関しては、温度の定義とその実測法について質問があり、弾性波が卓越するのではないかという疑問も呈された。申請者は局所的に弾性変形を差し引いた原子の運動エネルギーから温度を定義したので、問題はないと適切に回答した。また本論文で用いた弾性論は曲げ弾性を用いた方程式を使っているので、単層のグラフェンにそのまま適用して非常に小さな厚みと結論付けるのは誤解を招くのではないかという指摘がされて、申請者はその指摘に同意した。

メインの第 4 章については Tresoff ポテンシャルの 3 体力の効果について質問があり、剛性に寄与している以外に 2 体力の LJ 系と定性的な差はない旨の回答が申請者からあった。また弾性論に基づく準静的理論での記述が成功したことでナノクラスターの特徴が何処に現れたのかという質問があったが、それに対してナノクラスターではクラスターの表面張力が支配的であり、全ての系で必ず負の跳ね返り係数が観測されるのに対して、(セミ) マクロ系では人工的に表面効果を強調しないと類似の現象が観測されない旨の回答が申請者からあった。また審査委員の一人から本研究では平均量を論じたが、ゆらぎを解析するとより小さなサイズのクラスターの特性がはっきりするというコメントがあった。更に第 4 章が 4 人の共著論文になっていることと関連して申請者の役割について質問があり、主査から元は第 2 著者が理論、申請者がシミュレーションという役割分担があったが、第 2 著者の理論がうまくいかず、結局申請者が理論とシミュレーションの全てをほぼ独力で完成した旨の事情説明があった。

以上、申請者は審査委員の質問に概ね適切に回答し、学位論文の内容についても問題は見当たらず、学位論文に書かれた内容及びその周辺分野の理解に対する審査をパスし、理学博士に相応しいと認める。

よって、本論文は博士 (理学) の学位論文として価値あるものと認める。また、平成 22 年 12 月 27 日論文内容とそれに関連した事項について試問を行った。その結果、合格と認めた。