

Title	材料特性評価のための非経験的分子動力学法の基礎的研究
Author(s)	尾方, 成信
Citation	
Issue Date	
Text Version	ETD
URL	<a href="https://doi.org/10.11501/3151084">https://doi.org/10.11501/3151084</a>
DOI	10.11501/3151084
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/repo/ouka/all/>

氏名	お 尾 方 成 信
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学位記番号	第 1 4 1 0 8 号
学位授与年月日	平成10年7月28日
学位授与の要件	学位規則第4条第2項該当
学位論文名	材料特性評価のための非経験的分子動力学法の基礎的研究
論文審査委員	(主査) 教授 北川 浩 (副査) 教授 久保 司郎    教授 広瀬喜久治    教授 菅沼 克昭 教授 大中 逸雄    教授 黄地 尚義    教授 浅田 稔 教授 南埜 宜俊

## 論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、物質を構成する電子・原子を直接的に取扱う分子動力学シミュレーションにより、材料の特性を非経験的に評価するための方法について検討を加え、それを用いて、実験を始めとする経験的な手法では取扱いが困難で、局所的原子構造や原子の運動が問題となる界面近傍の力学的特性や格子欠陥の熱的特性に対する依存性を評価した結果をまとめたものであり、8章から構成されている。

第1章では、材料評価のための数値シミュレーションの現状と展望について述べ、本研究の位置付けを明らかにしている。

第2章では、各種アンサンブルの実現方法、数値積分法などの非経験的分子動力学法を実行する際の基本的事項について検討を加えている。

第3章、第4章では非経験的な分子動力学計算を適用する前段階として、本論文で用いているいくつかの原子間相互作用に関する理論並びにその有効性について検討している。

第3章では、(1)3体、(2)原子埋込み法 (EAM)、(3)修正された原子埋込み法 (MEAM)、(4)有効媒質法 (EMT) ポテンシャルの有効性と、それぞれのポテンシャルの持つ問題点とその精度を明らかにしている。

第4章では、原子間相互作用についての関数形を仮定することなく、分子動力学計算を行いながら逐次量子力学理論に基づき電子状態を評価することで原子間の相互作用を決定する、第一原理分子動力学法の理論的基礎と解析の高速化手法について検討を加えている。

第5章では、分子動力学計算を用いて窒化アルミニウムの熱伝導率特性を調べている。シミュレーションにより求まる熱伝導率が実験値と良く一致することを示し、欠陥が存在する場合や異なる結晶相が存在する場合の熱伝導率の低下の原因について検討している。

第6章では、第一原理分子動力学法を用いてアルミニウムの  $\Sigma=5$  対称傾角粒界、ねじれ粒界の原子・電子構造並びに粒界エネルギーを決定し、さらに、粒界に不純物としてシリコンが存在する場合の粒界原子・電子構造と粒界部の弾性特性を調べ、シリコンの粒界への影響を明らかにしている。

第7章では、窒化アルミニウムとアルミニウムとの界面の原子・電子構造を、第一原理分子動力学法を用いて決定している。さらに、窒化アルミニウム/アルミニウム界面モデルの単軸引張りシミュレーションを第一原理的に実行し、その応力-ひずみ曲線を求めるとともに界面強度について検討を加えている。

第8章では、得られた結果を総括すると共に、今後に残された問題点について論じている。

## 論文審査の結果の要旨

原子・電子レベル構造を追究することにより材料特性を評価し、制御することが求められるようになってきている昨今、実験に替わって先験的な評価が可能である第一原理に基づく計算機シミュレーションに大きな期待が寄せられている。しかしながらこうした材料評価シミュレーション法は、量子力学理論に基づいて組み立てられており、解析理論としての完結性は極めて高いものの、現実的に意味のある規模の原子系に対して適用するには、計算量があまりに膨大となってしまうことなど、基本的に克服すべき問題を多く残している。本論文は、この大きな可能性を持つ解析法に実用性を与えることを目的として行われた基礎的研究をまとめたものである。非経験的に原子・電子レベルから材料特性を評価するための、密度汎関数法を基本とする分子動力学法の精度、効率、そしてその先験性について検討を加えた上で、これを用いていくつかの実際的な問題に対する解析を実行し、その結果として、対象とした材料である窒化アルミニウム、アルミニウム、およびそれらより構成される複合材の材料特性の予測を行って、非経験的分子動力学法の有効性を明らかにしている。得られている主な成果をまとめると以下のようになる。

(1)従来から提案されている非経験的ならびに半経験的原子間ポテンシャルを用いた分子動力学法と、逐次電子状態を求めながら解析を進める第一原理分子動力学計算法との有効性を比較検討し、それぞれの手法の精度、効率について明らかにしている。また、後者に関してより効率良く計算を実行するためのアルゴリズムを考案し、その有用性を実証している。

(2)窒化アルミニウムの熱伝導特性を、非経験的に組み立てた原子間ポテンシャルを用いる分子動力学法により評価して、得られた結果が実験値と良く一致することから非経験的材料評価法の有効性を示している。さらにこの解析を発展させて、結晶格子に欠陥がある場合や異なる結晶相を取る場合に熱伝導特性が極端に劣化する原因を明らかにしている。

(3) $\Sigma=5$ アルミニウム粒界に対して、第一原理分子動力学法を用いた解析により原子・電子構造と力学特性を明らかにしている。また、粒界部に不純物としてシリコン原子が存在する場合について同様な解析を行い、シリコン原子が粒界をぜい化させる原因を原子・電子レベルから明らかにしている。

(4)アルミニウム/窒化アルミニウム界面について第一原理分子動力学法による解析を行って、その原子・電子構造と力学特性を明らかにするとともに、界面に引張り荷重を付加することにより界面破壊現象の予測的解析を行い、破壊時の原子・電子構造の変化を明らかにしている。

以上のように、本論文は非経験的分子動力学法について基礎的な検討を加え、精度の良い解を効率的に得るための方法論を追究すると共に、その成果を踏まえたシミュレーションにより、アルミニウム、窒化アルミニウムおよびそれらから構成される材料の特性の予測を行い、非経験的材料評価法に関して有用な知見を得ており、その成果は材料工学の発展に寄与するところが大きい。よって、本論文は博士論文として価値あるものと認める。