The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	局所環境依存性を考慮した不均質原子構造体の変形挙動に関する研究
Author(s)	釘宮, 哲也
Citation	大阪大学, 2001, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/43441
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

【5】

氏　　名	釘宮哲也（くぎみや てつや）
博士の専攻分野の名称	博　士（工　学）
学位記番号	第　16409　号
学位授与年月日	平成13年4月27日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科機械システム工学専攻
学位論文名	**局所環境依存性を考慮した不均質原子構造体の変形挙動に関する研究**
論文審査委員	（主査） 教　授　澁谷　陽二 （副査） 教　授　北川　浩　　教　授　奈賀　正明　　助教授　島田　尚一

論文内容の要旨

本論文では、不均質原子構造を有する共有結合性材料に対する局所環境依存型の原子間ポテンシャルとしてTight-binding法を取り上げ、そのポテンシャルに基づく実用的な第一原理分子動力学法の開発とともに、材料の不均質構造が本質的な問題の解明を目的としており、内容構成は以下の6章からなっている。

第1章は緒論であり、本研究の目的について述べている。

第2章では、原子間相互作用の記述法として、Tersoff型ポテンシャルの概要およびTight-binding法に基づく電子系の計算手法の理論を述べている。さらに、局所環境依存型のTight-bindingポテンシャルの概説および相互作用力の定式化を行っている。

第3章では、Tight-binding分子動力学計算を、より大規模、高速に実行するために演算量を系の線形スケールとするOrder (N) 法であるDensity-Matrix法を用いた計算手法について述べている。直接対角化する手法と比較して、著しく高速化され、実用的な解析を行う上で十分な解析精度の得られていることを明らかにしている。

第4章では、Tersoff型ポテンシャルを用いたDLCの単軸引張り変形解析を行っている。その結果、主としてsp^3原子とsp^2原子間の結合の消滅・生成をともなう結合形態の変化によりマクロな変形が進行していることを明らかにしている。また、2原子間のBonding効果が全体の変形に対して支配的でなく、3原子間のBendingと4原子間のTorsionが支配的であることを明らかにしている。

第5章では、Order (N) Tight-binding分子動力学法を用いたDLCモデルの初期配置の生成、単軸引張り変形解析を行っている。その結果、DLCモデル生成におけるsp^3比率の実験値との良好な一致から、不均質構造に対してTight-binding法が有効であることを明らかにしている。また、DLCの変形機構において、Tersoff型ポテンシャルでは考慮されていないTorsionによる変形抵抗の影響を明らかにし、その寄与分がDLCの変形機構に大きく影響を与えていることを明らかにしている。

第6章では、シリコンのき裂先端場に対して、Tersoffポテンシャルおよび Tight-binding法による解析を行い、第一原理計算結果との比較を行っている。その結果、Tight-binding法がき裂先端場近傍の不均質構造を反映した相互作用を記述できることを明らかにしている。さらに、き裂面に生じる表面再配列の配向が、き裂先端原子間距離の変化において異方性を発現する一因であることを明らかにし、相互作用力の評価における局所環境依存性の必要性を示している。

第7章は結論であり、本研究で得られた結果をまとめている。

論文審査の結果の要旨

本論文では、不均質原子構造を有する共有結合性材料に対する局所環境依存型の原子間ポテンシャルとしてTight-binding法を取り上げ、そのポテンシャルに基づく実用的な第一原理分子動力学法の開発とともに、材料の不均質構造が本質的な問題の解明を行ったものであり、得られた結果を要約すると以下の通りである。

(1) Density-Matrix法によるOrder (N) Tight-binding分子動力学計算プログラムを開発し、実用的な解析を行う上で有効な手法であることを示している。

(2)従来の経験的3体間ポテンシャルであるTersoff型ポテンシャルを用いたDLCの単軸引張り変形解析を行い、局所的な結合形態を詳細に調べている。その結果、主としてsp^3原子とsp^2原子間の結合の消滅・生成をともなう結合形態の変化によりマクロな変形が進行していることを明らかにしている。また、2原子間のBonding効果が全体の変形に対して支配的でなく、3原子間のBendingと4原子間のTorsionが支配的であることを明らかにしている。

(3) Order (N) Tight-binding分子動力学法を用いたDLCモデルの初期配置の生成および単軸引張り変形解析を行っている。その結果、DLCモデル生成におけるsp^3比率の実験値との良好な一致を得ており、不均質構造に対してTight-binding法が有効であることを明らかにしている。また、DLCの変形機構において、Tersoff型ポテンシャルでは考慮されていないTorsionによる変形抵抗の影響を明らかにし、その寄与分がDLCの変形機構に大きく影響を与えていることを明らかにしている。初期から不均質構造を有する材料の変形機構に関する重要な知見を得ている。

(4)シリコンのき裂先端場に対して、TersoffポテンシャルおよびTight-binding法による解析を行い、第一原理計算結果との比較を行っている。その結果、Tight-binding法がき裂先端場近傍の不均質構造を反映した相互作用を記述できることを明らかにしている。さらに、き裂面に生じる表面再配列の配向が、き裂先端原子間距離の変化において異方性を発現する一因であることを明らかにし、き裂先端近傍における局所環境依存性に関する新しい知見を得ている。

以上のように、本論文は局所環境依存型のTight-bindingポテンシャルを用いた相互作用が不均質原子構造を首尾よく記述することが可能であることを示すとともに、構造の不均質性が本質的となる問題の解明を行っている。これらのことは、これまでにない新しい成果であり、原子系からの材料の強度評価における新たな指針となるものであり、機械工学、特に材料力学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。