

Title	SiO ₂ 結晶の弾性特性に関する原子論的研究
Author(s)	君塚, 肇
Citation	大阪大学, 2006, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/48557
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、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

氏名	君塚 肇
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第 20689 号
学位授与年月日	平成 18 年 9 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	SiO₂ 結晶の弾性特性に関する原子論的研究
論文審査委員	(主査) 助教授 尾方 成信 (副査) 教授 澁谷 陽二 教授 久保 司郎 教授 中谷 彰宏 教授 平尾 雅彦 (基礎工学研究科)

論文内容の要旨

本論文では、高圧下および高温下における SiO₂ 結晶の弾性特性、特に負のポアソン比の発現に係わる微視的変形機構を原子シミュレーション手法である第一原理密度汎関数法および古典分子動力学法を用いて評価した。

第 1 章は序論として研究の目的・背景を記述した後、SiO₂ 相に関する一般とその用途および重要性について述べた。また負のポアソン比の発現を着眼点とした固体の弾性特性と原子シミュレーションの適用に関して記述した。

第 2 章では、第一原理密度汎関数法および古典分子動力学法に基づく原子シミュレーションを使用した固体の弾性特性の評価手法に関して述べた。

第 3 章では、SiO₂ 結晶の体積変化に伴う微視的構造変化と負のポアソン比を主とする弾性特性との関連についての原子シミュレーションの結果を報告した。ここで負のポアソン比を発現する代表的な結晶モデルである石英およびクリストバライトを対象として、第一原理密度汎関数法を用いて弾性定数の独立成分を求めることにより、結晶内部の変形機構と負のポアソン比の発現の関連を明らかにした。

第 4 章では、石英の高圧下における弾性定数の独立成分全てを第一原理密度汎関数法計算により求め、それらの圧力依存性の妥当性について検証した結果を報告した。

第 5 章では、石英における低温型-高温型相転移に伴う構造変化と高温下弾性に関する古典分子動力学計算の結果を報告した。ここでは石英における特徴的な弾性定数の温度依存性を系統的に記述するため、相転移領域を含む 300~1200 K の温度領域の断熱弾性定数を平衡分子動力学法により計算して高温下弾性の発現機構を調査した。

第 6 章では、クリストバライトにおける低温型-高温型相転移に伴う構造変化と高温下弾性に関する古典分子動力学計算の結果を報告した。ここでは相転移領域を含む 300~1800 K の温度領域の断熱弾性定数を平衡分子動力学法を用いて計算することにより、弾性定数の温度依存性を支配する要因を調査した。

第 7 章では、シリカガラスに関する 3 次元網目構造の特性と弾性特性の関連に関する古典分子動力学計算の結果を報告した。ここではシリカガラス系のネットワーク構造における中距離秩序構造を原子論的に検出し、更にその構造における弾性定数を計算することにより内部構造と弾性特性との間の特徴づけを行った。

第 8 章では、本論文の結論としてまとめを述べた。

論文審査の結果の要旨

本論文は、主要な SiO_2 相である石英、クリストバライト、シリカガラスを対象として第一原理密度汎関数法および古典分子動力学法に基づく原子シミュレーションを実施することにより、各相に特徴的な弾性特性の発現に係わる微視的機構を検証している。特に実験的知見に乏しい高圧下弾性および高温下弾性に関する情報を得るため、弾性定数の独立成分全てを圧力、温度の関数として求めることにより、各 SiO_2 相における動的構造と弾性挙動の関係を詳細に評価している。

その主な成果は以下である。

- (1) 石英およびクリストバライトを対象として体積変形に伴う微視的構造変化を第一原理密度汎関数法により評価し、その変形機構が SiO_4 構造単位の回転挙動に支配されていることを確認している。また各体積条件における弾性定数を評価し、石英およびクリストバライトは体積膨張の進行と共に、負のポアソン比を発現する挙動が顕著に強化されることを明らかにしている。
- (2) 石英の高圧下における弾性定数の独立成分全てを第一原理密度汎関数法計算により求め、それらの圧力依存性の妥当性について検証している。
- (3) 古典分子動力学法を用いて石英の弾性定数を相転移点を含む $300\sim 1200\text{ K}$ の温度領域について求め、相転移に伴う構造変化と弾性挙動との関連性を示している。
- (4) クリストバライトについて相転移領域を含む $300\sim 1800\text{ K}$ の温度領域の断熱弾性定数を、平衡分子動力学法により内部応力テンソルのゆらぎの式を用いて評価している。その結果、クリストバライトはこの幅広い温度領域全体において負のポアソン比を示し、また低温相と高温相の間ではその機構が異なることを見出している。
- (5) 古典分子動力学法によりシリカガラスの3次元網目構造を構築し、不規則ネットワーク構造における中距離秩序構造を原子論的に検出している。その結果系の規模に係わらず環状構造の分布はほぼ一定であり、 SiO_2 におけるガラス構造を特徴付けるものであることを確認している。

以上のように、本論文は SiO_2 結晶に認められる負のポアソン比の発現機構に関して原子論的な立場から詳細に検証し、その弾性的異方性に関する温度依存性および圧力依存性について微視的レベルから解明したものであり、その学術的な価値は高い。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。