



Title	フォノン計測および第一原理計算による薄膜ナノ構造の弾性特性に関する研究
Author(s)	多根井, 寛志
Citation	大阪大学, 2009, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/49616
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

氏 名	多 根 井 寛 志
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 2 3 0 0 9 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 21 年 3 月 24 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 基礎工学研究科機能創成専攻
学 位 論 文 名	フォノン計測および第一原理計算による薄膜ナノ構造の弾性特性に関する研究
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 平尾 雅彦 (副査) 教 授 小林 秀敏 教 授 尾方 成信 准教授 草部 浩一 准教授 荻 博次

論 文 内 容 の 要 旨

本研究では，薄膜のナノ構造と弾性特性に対してフォノン計測と第一原理計算の両面からアプローチし，両者の関係を明らかにすることを目的とする．

第1章では，薄膜の弾性特性の測定意義について述べ，本研究の目的と論文の構成について述べた．

第2章では，独自に開発したフォノン計測法について述べた．極短パルス光を用いたピコ秒超音波法によって，厚さ方向の弾性定数を非接触に測定することができる．また，共鳴超音波スペクトロスコピー（Resonant ultrasound spectroscopy: RUS）法によって，薄膜の面内方向の弾性定数を決定することができる．ピコ秒超音波法およびRUS法によって，薄膜の異方性弾性定数を決定することに成功した．

第3章では，ナノ結晶ダイヤモンド（Nanocrystalline diamond: NCD）薄膜の弾性異常と微細構造との関係について述べた．ブリルアン振動法およびRUS法によって，N₂流量を変えながら作製したNCD薄膜の弾性定数を測定した結果，N₂流量の増加とともにポアソン比が数百パーセントも増加した．本研究では，この異常弾性を説明する構造として，第一原理計算を用いてダイヤモンドの層構造中に積層欠陥を含むモデルを構築した．これにより，NCD薄膜におけるnon-*sp*³結合領域がNCDの弾性に支配的であることを示した．

第4章では，金属ナノ薄膜のフォノン物性について述べた．PtおよびPd薄膜を超高真空マグネトロンスパッタリング法によって作製し，音響フォノン共鳴法によってフォノン振動を観測した．また，数原子層が十分に厚い真空層で挟まれたスラブモデルを構築し，第一原理計算によって波数を面内方向に展開したときのΓ点におけるフォノン振動数を計算した．実験結果と計算結果が示す傾向は非常によく一致しており，これによって実験で観測される振動がΓ点におけるフォノン振動であることを示した．

第5章では，得られた結果をまとめ，これを結言として述べた．

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

本論文では，薄膜のナノ構造と弾性特性に対してフォノン計測と第一原理計算の両面からアプローチし，両者の関係を明らかにすることを目的としている．

第 1 章では，薄膜の弾性特性の測定意義および研究の目的と論文の構成について記述している．

第 2 章では，独自に開発したフォノン計測法について記述している．極短パルス光を用いたピコ秒超音波法では，

厚さ方向の弾性定数を非接触に測定することができ，また，共鳴超音波スペクトロスコピー（Resonant ultrasound spectroscopy: RUS）法では薄膜の面内方向の弾性定数を決定できることを説明している．これらピコ秒超音波法およびRUS法により薄膜の異方性弾性定数を決定することに成功している．

第 3 章では，ナノ結晶ダイヤモンド（Nanocrystalline diamond: NCD）薄膜の弾性異常と微細構造との関係について記述している．N₂流量を変えながら作製したNCD薄膜の弾性定数を，ブリルアン振動法およびRUS法によって測定した結果，N₂流量の増加とともにポアソン比が数百パーセントも増加した．本研究では，この異常弾性を説明するために，第一原理計算を用いてダイヤモンドの層構造中に積層欠陥を含むモデルを構築した．これにより，NCD薄膜におけるnon-*sp*³結合領域がNCDの弾性異常に支配的であることを明らかにした．

第 4 章では，金属ナノ薄膜のフォノン物性について記述している．PtおよびPd薄膜を超高真空マグネトロンスパッタリング法によって作製し，音響フォノン共鳴法によってフォノン振動を観測した．また，数原子からなる層が十分に厚い真空層ではさまれたスラブモデルを構築し，第一原理計算によって波数を面内方向に展開したときのΓ点におけるフォノン振動数を計算した．実験結果と計算結果が示す傾向は非常によく一致しており，これによって実験で観測される振動がΓ点におけるフォノン振動であることを示した．

第 5 章では，得られた結果をまとめ，これを結言としてまとめている．

以上のように，本論文では綿密な音響測定と第一原理計算論に基づいて，2つの工業的に重要な薄膜の弾性特性を説明するモデルを確立している．薄膜の構造と機能に関する研究に新しい指針を提案するものであり，博士（工学）の学位論文として価値のあるものと認める．