

Title	ピコ秒超音波計測と密度汎関数法によるナノ構造材料の異常弾性の研究
Author(s)	谷垣, 健一
Citation	大阪大学, 2011, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/58261">https://hdl.handle.net/11094/58261</a>
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">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</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	たに 谷 垣 健 一
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第 24615 号
学位授与年月日	平成23年3月25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	ピコ秒超音波計測と密度汎関数法によるナノ構造材料の異常弾性の研究
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 萩 博次

### 論文内容の要旨

近年の微細化技術, MEMS・NEMS関連技術の著しい発展にともない, nmオーダーの構造を持つ材料の機械的性質を精密に把握する事が必要とされている。本研究ではピコ秒超音波法を用いてナノ構造物の弾性定数を精密に計測し, 通常のバルク体ではこれまでに観測されたことのない異常な弾性特性を示す複数の例を明らかにした。また, マイクロメカニクス計算に代表される従来の弾性定数解析法では, nmオーダーの微視的組織が巨視的な弾性定数に及ぼす影響を説明することは不可能である。そこで本研究では, 密度汎関数理論に基づく電子状態計算を用いた弾性定数算出法と巨視的の平均化手法を組み合わせることにより, ナノ構造が全体の弾性特性に及ぼす影響に対する理論的解析手法を提案した。

#### 1. CVDナノ結晶ダイヤモンド薄膜のポアソン比異常増加

CVD原料ガス中に微量の $N_2$ ガスを添加することにより, 結晶粒径がnmオーダーのナノ結晶ダイヤモンド薄膜が作製される。超音波計測により, 結晶粒の微細化にともなってヤング率や剛性率はわずかに低下(～20%)するが, ポアソン比が非常に大きく増加(～150%)する事を見出した。この現象は従来の解析法では, 結晶粒界に高アスペクト比(1:1000)の扁平な単結晶グラファイトが存在することで説明が可能であるが, 厚さがpmオーダーの単結晶が存在するという結論は現実的とは言えない。そこでこの現象を説明可能な原子スケールモデルとして積層欠陥ダイヤモンド構造を提案し, 密度汎関数法によりこの構造がダイヤモンドの巨視的なポアソン比を大きく増加させる事を示した。

#### 2. グラファイトを出発物質としたナノ多結晶ダイヤモンド焼結体の超高弾性

グラファイトから直接変換によって作製されたナノ多結晶ダイヤモンドは, 天然ダイヤモンドを上回る硬度を示すなど特異な性質を持つことが知られている。そこでこの試料の弾性定数を超音波計測により精密に計測した結果, 無欠陥単結晶ダイヤモンドから推定される多結晶体の弾性定数を上回る超高弾性を示す事を発見した。弾性定数は応力集中によりわずかな欠陥にも敏感に反応し, その値を大きく下げる。したがって不完全結合部を多く含むナノ多結晶体の弾性定数が増加する事は極めて異例である。ダイヤモンドは天然物質中最大の弾性定数を持つことから, 不純物の析出ではこの現象は説明できない。そこでこのナノ多結晶体の超高弾性に対し密度汎関数法による理論解析を行った結果, (111)双晶ダイヤモンド構造の導入により多結晶ダイヤモンドの巨視的な弾性定数が増加することを示した。

### 3. 低温域におけるPd薄膜の弾性定数の異常な温度依存性

密度汎関数法では絶対零度における物性値しか計算することができない。そこで実験と理論計算のさらなる融合を目指し、極低温ピコ秒超音波計測装置を開発した。これにより薄膜試料を液体ヘリウム温度まで冷却して弾性定数を計測する事がはじめて可能となり、Pd薄膜の弾性定数の低温域における温度依存性がバルク体とは異なる挙動を示す事を明らかにした。

## 論文審査の結果の要旨

本研究ではピコ秒超音波法を用いてナノ構造物の弾性定数を精密に計測し、通常のバルク材ではこれまでに観測されたことのない異常な弾性特性を示す複数の例を明らかにした。さらに、密度汎関数理論に基づく電子状態計算を用いた弾性定数算出法と巨視的平均化手法を組み合わせることにより、ナノ構造が全体の弾性特性に及ぼす影響に対する理論的解析手法を提案した。

CVDナノ結晶ダイヤモンド薄膜において、結晶粒の微細化にともなってヤング率や剛性率はわずかに低下(~20%)するが、ボアソン比が非常に大きく増加(~150%)する現象を超音波計測によって見出した。これを説明しうる原子スケールモデルとして積層欠陥ダイヤモンド構造を提案し、密度汎関数法によりこの構造がダイヤモンドの巨視的なボアソン比を大きく増加させることを示した。また、グラファイトを出発物質としたナノ多結晶ダイヤモンド焼結体は、天然ダイヤモンドを上回る硬度を示すなど特異な性質を示すが、この材料の弾性定数を超音波計測により計測した結果、無欠陥単結晶ダイヤモンドから推定される多結晶体の弾性定数を上回る超高弾性を示すことを見出した。不完全結合部を多く含むナノ多結晶体の弾性定数が増加することは極めて異例である。このナノ多結晶体の超高弾性に対し密度汎関数法による理論解析を行った結果、(111)双晶ダイヤモンド構造の導入により多結晶ダイヤモンドの巨視的な弾性定数が増加することを示した。

密度汎関数法では絶対零度における物性値以外を計算することができない。そこで実験と理論計算のさらなる融合を目指し、極低温ピコ秒超音波計測装置を開発した。これにより薄膜試料を液体ヘリウム温度まで冷却して弾性定数を計測することがはじめて可能となり、低温域におけるPd薄膜の弾性定数の温度依存性がバルク体とは異なる挙動を示すことを明らかにした。

以上のように、先進的な超音波計測と密度汎関数法を組み合わせた手法による研究成果は学術的な意義が大きく、博士(工学)の学位論文として十分価値のあるものと認める。