

審査の結果の要旨

氏名 佐藤 誠修

ナノ構造体が特異な力学挙動や物性を示すことが実験的理論的に明らかにされつつあり、こうした特性を活かした新規ナノデバイス創製が注目されている。ナノ構造体が荷重を受けるとき、マクロな構造体に類似した座屈現象が生じる場合、原子間結合の断裂に起因するへき開やすべりが生じる場合、相転移を起こす場合など様々な挙動を示すが、これらは外力に対する系の構造安定性問題とみなすことができる。本研究では、1次元ナノ構造体に注目し、低次元ナノ材料に特有な変形・破壊、物性急変（相転移）を「系の構造不安定現象」ととらえ、そのメカニズムを明らかにすることを目的とし、原子モデルによる解析を行った。

第1章は緒論であり、上述の研究背景および目的について述べた。

第2章では、解析に用いた方法、すなわち分子動力学法、強結合近似による電子構造計算法、原子レベル構造不安定性解析法について説明した。

第3章では圧縮を受けるナノチューブ（NT）の座屈現象について検討した。まず単層CNT（カーボンナノチューブ）の軸方向圧縮については、CNTのサイズ（径、長さ）に対して不安定モードが変化し、オイラー型座屈（S字変形）、キルク型座屈（Z字）、フィン型座屈（I字）が発現することを示した。オイラー型座屈は軸方向に波数を持つモードの不安定化、それ以外は系方向に波数を持つモードの不安定化によって生じることを明らかにし、発現する座屈タイプはCNTのアスペクト比によって決まることを示した。こうした傾向はマクロの円筒型構造体に対して連続体力学によって導かれる結果と定性的に一致しているが、カイラル型CNTでは螺旋状の原子配列に起因する螺旋状不安定モードが座屈の前駆現象として現れることを示した。本研究の原子モデルによる不安定モードと連続体Flüggeモデルとの比較により、連続体モデルでCNTの座屈を定量的に評価するための材料物性値を与えた。

さらに、単層CNTの軸方向圧縮座屈に伴う物性変化の一例として、電子のバンドギャップの変化を強結合近似で求めた。座屈変形に伴ってバンドギャップが大きく変化（減少）するが、その減少量が座屈による応力減少量と相関する

場合（オイラー型・I型座屈）と、両者の相関が弱い場合（Z型座屈）に分類できることを明らかにした。

第4章では軸方向に引張りを受ける SiC ナノワイヤの機械的不安定性について検討した。側面中央部やエッジ部など特徴的なサイトに原子空孔を導入（SiあるいはC原子を取り除く）し、構造不安定化に及ぼす影響を調べた。欠陥導入位置によって、引張り時にへき開の破壊が生じる場合とすべりを伴う変形が生じる場合が現れた。これは変形直前に欠陥近傍に局在化する不安定モードベクトルの形状によって説明することができる。また、温度を変化させて同様の引張り解析を行うと、温度上昇に伴いすべりが起こりにくくなりへき開が生じやすくなるという、マクロ材料とは異なる特異な傾向が現れたが、これについても不安定モードベクトルの形状変化により説明できることが示された。

第5章ではペロブスカイト構造の一種である PbTiO_3 （チタン酸鉛）のナノワイヤに軸方向引張り・圧縮ひずみを与え、その際の電気分極構造の変化について検討した。この問題に取り組むための準備として、 PbTiO_3 の分極特性を取扱うことのできる電気双極子型モデルを用いてポテンシャル構築を行った。これにより従来法では困難であった PbTiO_3 ナノワイヤの解析が可能となった。さらに原子レベル構造不安定解析法を拡張し、電気双極子の自由度まで Hessian 行列に含めた表現を考えることで、電気分極構造の不安定変化（機能的不安定性）の厳密な評価を可能とした。分極構造が初期状態での軸方向強誘電構造から、圧縮ひずみによって軸を中心とする渦状に相転移する現象は第一原理計算によって既に指摘されているが、この相転移を原子モデル解析で再現することに成功した。状態は圧縮ひずみによって軸方向分極相・渦状分極相とそれらの遷移相の3つの領域に分類され、その境界において不安定モードのソフト化が生じることで相転移がもたらされることが明らかとなった。

第6章は結論であり、研究成果の総括と今後の展望について述べた。すなわち、1次元ナノ構造で起こる座屈、破壊、分極相転移は原子（分極相転移の際は電子も含む）の構造不安定性によるものであると統一的にとらえることができ、原子・電子の自由度に対して記述された Hessian 行列の固有値問題として取扱えることを示した。さらに、構造不安定に至る過程の固有値や不安定モード形状の変化を明らかにすることで、ナノ構造に特有な変形・破壊挙動のメカニズムを説明できることも示した。こうした成果はナノ構造体の力学挙動および物性に対する理解を深化させるものであり学術的独創性が十分に認められる。また、座屈やひずみ負荷に伴って生じる物性変化についての成果は、マルチフィジックス現象を利用した新規ナノデバイス創製の可能性を示すものであり、本研究は応用物理学的見地からも意義深いものである。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。