

審査の結果の要旨

氏名 謝耀枢

界面の構造は材料物性に決定的な役割を果たしており、その構造を決定することは材料科学における重要なテーマのひとつである。近年では FCC や BCC 金属において界面が相挙動を示すことが示されており、その研究も盛んにおこなわれている。以上の背景から、本論文では、任意方位の 2 つの結晶から Coincidence Site Lattice (CSL) 界面もしくは近似 CSL 界面を容易に作成できるコードを開発し、同コードを活用してダイヤモンド型化合物界面の相挙動を調べることが目的としている。本博士論文は以下の 8 章で構成されている。

第 1 章では、研究背景と既存手法の問題点、さらにそれを踏まえた本論文の目的を述べている。具体的には、界面モデリングの難しさと計算コストの高さを解決するために、界面モデリングコードの開発と Cell of Non-Identical Displacement (CNID) を計算するコードの開発が有効であると述べている。さらに、界面の相挙動は FCC や BCC 金属においてのみ報告されており、ダイヤモンド型化合物における界面の相挙動は調べられていないと述べられている。

第 2 章では、開発した界面モデリングコードの数学的な処理とアルゴリズム、さらにその応用を示している。本コードにより任意の 2 つの結晶の界面モデルの生成と、その CNID を計算できると説明している。また、CNID により剛体変位の計算コストが大幅に削減できることも示し、同コードを用いた種々の例も示している。

第 3 章では、シリコン、ゲルマニウム、ダイヤモンドのダイヤモンド型化合物における計算結果について示している。界面における相挙動を明らかにすることを目的として、界面の原子密度を変えた計算を系統的に行っている。FCC 金属では同計算により界面の相挙動が観察されていたものの、シリコンでは界面エネルギーの減少がみられず、FCC 金属とは異なる挙動を示すことを明らかにしている。さらに、界面構造の解析から、同挙動が界面における空孔や格子間原子の形成挙動と関係していると指摘している。

第 4 章では、第 3 章で探索した準安定界面の中で、結合欠損を有する界面と有さない界面など 3 つの界面に注目し、同準安定界面の原子構造とエネルギーを第一原理計算により確かめ、それらの構造が妥当であることを示している。

第 5 章では、第 4 章で得た界面の準安定構造について、Quasi-Harmonic 近似により界面の自由エネルギーを算出している。温度を上げたシミュレーションを実施し、準安定構造の一部が安定構造に転移したり、融点前の融解（プレメルト）したりする可能性を示している。

第 6 章では、第 5 章で明らかにした界面構造転移に注目し、同転移が界面における構造ユニットの原子位置をわずかに変えるだけで生じることを明らかにし、さらに同転移を ISING モデルにより解析している。その結果、核生成と成長を繰り返して転移が進行するメカニズムを提案し、それを分子動力学計算で確かめている。

第 7 章では、第 6 章で調べた構造ユニットの違いにより電子構造がどのように変化するかを第一原理計算により調べている。その結果、局所的な構造転移に伴い電子構造が大きく変化することを明らかにしている。さらに、同構造転移は比較的低温で生じ、実材料で存在している可能性を指摘している。

第 8 章では、本博士論文の総括的な結論を述べ、今後の応用や発展性などについて述べている。

以上のように、本論文では界面シミュレーションを効率的に行うための有効なコードを開発している。特に CNID を計算するコードの開発により、界面構造を決定するための計算コストを大幅に削減することが可能となった。また、FCC や BCC 金属で報告されてきた界面の相挙動をダイヤモンド型化合物で調べ、シリコンでは界面エネルギーの減少がみられず、FCC 金属とは異なる挙動を示すことを明らかにしている。さらに、界面構造の解析から、同挙動が界面における空孔や格子間原子の形成挙動と関連していると指摘している。また、界面の準安定構造と最安定構造の構造転移挙動を調べ、実材料に存在し得る新しい構造として提案している。

これらの成果は、材料の界面を研究するうえで役立つとともに、高温下における界面の構造変化を理解する上でも重要であり、マテリアル工学の発展に大きく貢献するものである。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。