審査の結果の要旨

氏 名 高 嬉淵

本論文は" Modeling of thermally induced vibration of carbon nanotubes (カーボンナノチューブの熱励起振動のモデリング)"と題し、ナノテクノロジーの中心的素材であるカーボンナノチューブ(Carbon Nanotube, CNT)の特異な非線形振動に関して、分子動力学法とビームの連続体力学の近似解を比較することで、議論したものであり、全5章よりなる.

第1章は、"Introduction (序論)"であり、カーボンナノチューブの力学特性や振動解析、ビームによる連続体力学、分子動力学などの最近の研究動向について議論し、論文の構成を述べている.

第2章は、"MD simulation (分子動力学法シミュレーション)"である。カンチレバーおよび架橋構造に配置したカーボンナノチューブの機械的振動特性について分子動力学法シミュレーションから検討している。一端をファントム法で固定した一定温度の単層カーボンナノチューブの分子動力学法によって、熱励起のふれまわり(whirling motion)と平面内の曲げ振動(planer bending)とが繰り返す非線形振動の存在を明らかとしている。また固定端を加振する強制振動においても同様の非線形振動を観察している。また、このような非線形振動の周波数解析によって、振動スペクトルのブロード化とピーク分離を示している。さらに、両端支持の架橋構造においても同様の非線形振動の存在を示している。

第3章は、"Theoretical analysis based on continuum frame works(連続体力学による理論解析)"である。第2章の分子動力学法による非線形振動挙動を連続体のビーム動力学方程式の近似解と比較することで、分子動力学の特性を再現できる連続体近似解の導出と物理パラメータの同定に成功している。カンチレバーおよび架橋構造の両者ともにガラーキン法による一次の振動でふれまわりと平面内の振動が繰り返す挙動を再現できる。また、これによって、実験的に報告されている振動特性の測定結果の2例に非線形振動成分が加わっていること

を明らかとしている.

第4章は、"Modeling thermal-mechanical motion into CGMD (粗視化分子動力学 への熱励起力学運動モデルの導入)"であり、粗視化分子動力学によって、非線形振動を再現可能な定式化を試みている。2つの単層カーボンナノチューブが衝突する運動を例題として分子動力学による非線形振動緩和を表現するモデル化を試みている。

第5章は"Summaries and discussions (結論)"であり、上記の研究結果をまとめたものである.

以上要するに本論文は、カーボンナノチューブにおける熱励起のふれまわりと平面内の曲げ振動とが繰り返す非線形振動非線形振動に関して、分子動力学法解析と連続体力学の近似解とを比較して解明したものである。本論文は極めて高精度なセンサーなどのカーボンナノチューブデバイスの力学特性に関する新たな知見を与えており、ナノ材料工学及び分子熱工学の発展に寄与するものだと考えられる。

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.