

氏名	岳 强 (YUE QIANG)		
授与した学位	博 士		
専攻分野の名称	理 学		
学位授与番号	博甲第	7043	号
学位授与の日付	2024年 3月 25日		
学位授与の要件	自然科学研究科 学際基礎科学専攻 (学位規則第4条第1項該当)		
学位論文の題目	非晶質炭素膜の成長プロセス、構造および物性に関するシミュレーション研究		
論文審査委員	教授 池田直	教授 市岡優典	教授 横谷尚睦
<b>学位論文内容の要旨</b>			
<p>非晶質炭素は炭素の同素体であり、内部構造に3種類の <math>sp</math> 混成状態 (<math>sp^1</math>、<math>sp^2</math>、<math>sp^3</math> 混成状態) を含む。非晶質炭素膜は硬度や耐腐食性などに優れた性能を示すことで知られるが、その一方で、成長プロセスなどの基礎的側面では未知な点が多い。また、ホウ素ドープ非晶質炭素膜では、内部の <math>sp^3</math> 量や導電性などの実験結果が研究グループによって異なるという現状がある。この膜における基礎物性の本質についてはまだ分かっていない。本論文では、コンピューター・シミュレーションを使用して非晶質炭素体の成長プロセス、構造および特性を調べ、シミュレーションの立場から非晶質炭素膜の基礎特性を明らかにした。本論文の内容と結果を以下に示す。</p>			
<p>1. <math>Al_2O_3</math> 基板上における非晶質炭素膜の成長プロセスに関する分子動力学シミュレーション</p> <p>2. 古典的な分子動力学法を使用して、サファイア基板表面上における非晶質炭素膜の成長プロセスを調べた。その結果、基板と膜の界面では両者が混ざりあった中間層が形成され、その上の純炭素層では密度が最初減少したのち増加に転じ、その後一定になることを明らかにした。本研究結果は、酸化物基板上での計算において、使用した ReaxFF ポテンシャル [1] の有効性も示した。</p> <p>3. ホウ素ドープ四面体非晶質炭素体の特性に関する第一原理計算</p> <p>第一原理分子動力学法を用いて、液体急冷法によりホウ素を 0-6% ドープした四面体非晶質炭素体 (ta-C) の物性を調べた。その結果、電子状態密度の結果から、系は <math>p</math> 型半導体的になることを明らかにした。本研究は、計算科学の立場からホウ素ドープ ta-C に関する本質的な特性を示した。</p> <p>4. Q-carbon の磁性に関する第一原理計算</p> <p>新しい炭素の同素体 Q-carbon [2] の示す強磁性の起源を、磁気モーメントを固定したスピン分極計算により調べた、その結果、密度が <math>5.63 \text{ g/cm}^3</math> のシステムで Q-carbon の特性を再現し、さらに、強磁性の起源には2種類の <math>sp^2</math> 原子における <math>p</math> 軌道の対電子が寄与していることを明らかにした。本研究結果は、強磁性体 Q-carbon の存在をシミュレーションの立場からも明示した。</p>			
<p>[1] S. Hong, A.C.T. van Duin, J. Phys. Chem. C. <b>120</b>, 9464 (2016).</p> <p>[2] J. Narayan, A. Bhaumik, J. Appl. Phys. <b>118</b>, 215303 (2015).</p>			

## 論文審査結果の要旨

YUE QIANG 氏は博士論文において、非晶質構造をなす炭素化合物を取り上げ、プラズマ化した炭素の堆積過程を分子動力学シミュレーションにより解析した。また、第一原理分子動力学シミュレーションより炭素四面体構造を基本とするアモルファスカーボンにおけるホウ素ドーピングが物性に果たす役割を解析した。さらに近年 Q カーボンと呼ばれ脚光を浴びているアモルファス炭素物質において、 $sp^2$  と  $sp^3$  結合軌道形成の共存状態形成のモデルを提案し、それに対する第一原理計算から炭素 p 軌道が示す磁性の出現について考察を行った。

プラズマ化した炭素の堆積過程のシミュレーションにおいては、古典分子動力学計算ソフトウェアである LAMMPS を用いている。最初に計算のための力場として ReaxFF ポテンシャルの有用性を示し、次に堆積粒子の温度が一定となるモデルを設定することで、サファイア基板上に堆積する炭素の密度や原子配置などの時間変化を追跡することに成功している。結果として、炭素の堆積構造には4種類の堆積層が存在すること、その堆積物の動径分布関数解析からダイヤモンド構造に類似した領域が出現することを明らかにした。また、第一原理分子動力学シミュレーションを四面体構造アモルファスカーボンに適用し、急冷過程をシミュレーションに加えることで、ボロンドープに伴う炭素  $sp^3$  構造が出現する様子を再現した。さらに近年 Q カーボンと呼ばれているアモルファス炭素物質において、高密度アモルファス炭素状態を設定し急冷過程を導入することで、その形成を再現した。この構造において、結合に寄与しない  $sp^2$  軌道に現れる不対電子が磁性の起源となる結果を導いている。

これらは未知であった炭素素材の合成過程の理解を進める結果と言える重要で新規な知見である。また今後の炭素材料に携わる研究者に、重要な基礎情報を提供しているものと考えられる。以上より、最終試験は合格と判断する。