

# 科学研究費助成事業（基盤研究（S））公表用資料 〔令和4（2022）年度 中間評価用〕

令和4年3月31日現在

研究期間：2020年度～2024年度  
課題番号：20H05653  
研究課題名：Anomalous 電子によるリライタブル材料強度のナノ力学

研究代表者氏名（ローマ字）：平方 寛之（HIRAKATA Hiroyuki）  
所属研究機関・部局・職：京都大学・大学院工学研究科・教授  
研究者番号：40362454

## 研究の概要：

材料に本来存在している電子に加えて、余剰な電子／ホール（Anomalous 電子）を注入することにより、材料の本質的な強度が大きく変化する。本研究では、Anomalous 電子が原子間結合に干渉することで多様な材料の強度・機械的特性を書き換える根源的なメカニズムを解明して、普遍的な学理を構築する。これにより、電子によって自在に強度・変形特性を設計する新しい学術分野を開拓することを目指している。

研究分野：機械工学、材料力学、材料強度学

キーワード：材料強度、Anomalous 電子、ナノマイクロ材料力学、ナノ力学実験、第一原理解析

## 1. 研究開始当初の背景

材料の機械的特性や強度は材料ごとに固有のもの、すなわち素材や組織によって決まる材料定数であり、本質的には変えることができないものと信じられてきた。ところが、研究代表者らは、すべての材料機能発現の根幹である電子に着目し、本来材料が自然に持ち得る電子とは異なる余剰な電子／ホール（Anomalous 電子）を意図的かつ強制的に注入することで、材料強度が向上し、脆性材料が大きな塑性変形能を獲得するなど、機械的特性が変化することを発見した。

## 2. 研究の目的

本研究では、Anomalous 電子が原子間結合に干渉することで多様な材料の強度・機械的特性を書き換える根源的なメカニズムを解明して、普遍的な学理を構築することを目的とする。

## 3. 研究の方法

電子量を制御した微小体積試験体への強度実験と量子論的（第一原理）解析により、Anomalous 電子による強度変化特性を解明する。さらに、その特異な電子状態を評価し、「電子応力」を抽出する独自理論により、電子的強化機構と法則を解明する。

## 4. これまでの成果

### ZnO のせん断強度に及ぼす Anomalous 電子の影響

材料の理想的な結合強度を評価するため、平滑な表面に対する局所負荷実験を実施した。平滑表面に対する球圧子局所負荷により材料内部に高いせん断応力を負荷でき、せん断変形に対する結合強度に対応する理想的なせん断強度の評価が可能である。開発した実験システムを用いて、半導体材料である ZnO 単結晶を対象として、せん断強度に及ぼす Anomalous 電子の影響を評価した。電子線照射によってホールを注入するとせん断強度が最大 24%低下すること、照射を停止するともとの水準に回復することを明らかにした。また、電子線照射条件により注入量を定量的に制御した評価実験を行い、Anomalous 電子注入量（ホール濃度）と強度変化の関係を検討した。ホール濃度の増大に伴い強度変化量が増大すること、および強度変化には限界があることを明らかにした。この傾向は、第一原理解析による理論解析結果と定性的に整合した。本研究により、Anomalous 電子による強度変化は連続的かつ可逆的であることを明らかにした。

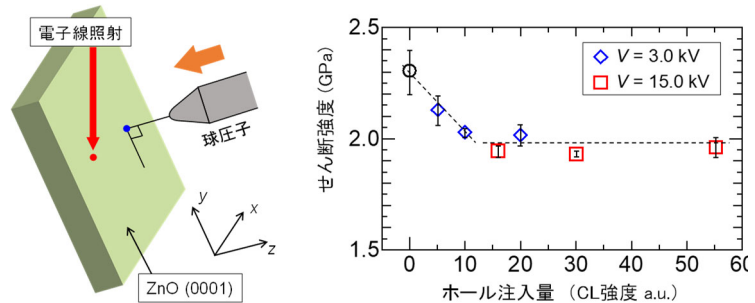


図1 ZnO のせん断強度に及ぼす Anomalous 電子の影響

## Si の引張強度に及ぼす Anomalous 電子の影響

原子間結合の引張強度に及ぼす Anomalous 電子の影響を解明するため、典型的な共有結合性材料であり脆性的な破壊を生じる Si 単結晶を対象として、破壊じん性試験を行った。Si などの脆性材料では、破壊じん性がき裂先端の一本の結合の引張強度に対応する。開発した実験システムにより三角錐圧子による破壊じん性試験を行った。本手法では、発生したき裂が内部に安定進展したのち不安定破壊に至り、この不安定破壊に対する抵抗として破壊じん性を評価する。このため、加工層（欠陥）の影響を排除した理想的な強度試験を実施できる。電子線照射によるホール注入により、破壊じん性（原子間結合の引張強度）が約 10% 増大することを明らかにした。本試験により Anomalous 電子による結合強度の強化を実験的に実証した。

## Anomalous 電子（余剰電子/ホール）注入材に対する第一原理解析

電子注入材に対する第一原理強度解析により、共有結合性材料である Si の理想引張強度（原子間結合強度）は、実験的に実現可能な余剰電子/ホールの注入により 3～5 割と大きく変化することを明らかにした。引張強度は、余剰電子のドーピングに伴い単調に低下し、ホールのドーピングにより単調に増大した。せん断強度は、余剰電子ドーピングに伴い単調に向上し、ホールドーピングに伴い単調に低下した。この傾向は、実験結果と整合しており、Anomalous 電子による強度変化が実験と理論解析により実証された。この Si の結合強度変化機構は、Si が有する電子状態・バンド構造と余剰電子/ホールが占有する軌道の特徴から説明でき、これらの特徴は同じ共有結合性材料である C や Ge においても同様であることを示した。

さらに、典型的なイオン結合性材料である MgO の引張強度、金属結合性材料である Cu や Al のせん断強度に対する Anomalous 電子による強度変化特性を明らかにした。これらの強化機構は、結合形態と変形モードによって体系化できることを明らかにした。

## 電子応力理論の構築

Anomalous 電子の影響を統一的に理解するために、量子力学を基礎として電子論まで拡張した応力概念（電子応力）を提案し、これに基づいて結合の力学状態を直接的かつ陽に反映した応力の解析法（第一原理電子応力解析法）を開発した。これにより、結合強度変化の起源について電子の根源的な観点から統一的に理解することを可能にした。

## 5. 今後の計画

(1) 電子を制御した微小試験体に対する各種強度実験を行い、Anomalous 電子と強度変化の関係を解明する。とくに絶縁体材料に対して Anomalous 電子をコントロールすることで材料強度を書き換えるリライタブル性を評価・実証する。さらに、多様な変形・破壊現象（疲労・クリープ）に展開するとともに、マルチフィジックス特性（強誘電・圧電特性）を評価する。

(2) Anomalous 電子注入材の第一原理強度解析を行い、共有結合、イオン結合、金属結合の典型材料の強度変化特性を解明する。個々の電子（軌道）が受け持つ応力を分解・抽出する独自理論（電子応力理論）により、Anomalous 電子による強化特性を体系化する。

(3) 実験・解析によって得た Anomalous 電子材の強度特性とその電子応力状態解析結果をもとに、強化機構を解明するとともに、Anomalous 電子材の強度に関する力学モデルを構築する。

## 6. これまでの発表論文等（受賞等も含む）

国際学術論文（査読有）

“Reversible control of intrinsic shear strength of a ZnO single crystal through electron-beam-induced hole state”

Hiroyuki Hirakata, Kyohei Sano, Takahiro Shimada

Journal of Materials Research, Vol. 36, pp. 4438-4448, (2021)

<https://doi.org/10.1557/s43578-021-00399-9>

外、国際学術論文（査読有）11 件

学会・国際会議発表 12 件

## 7. ホームページ等

<http://msr.me.kyoto-u.ac.jp/>