

## 【基盤研究(S)】 大区分C



### 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

京都大学・大学院工学研究科・教授

ひらかた ひろゆき

平方 寛之

研究課題番号： 20H05653 研究者番号：40362454

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

#### 【研究の背景・目的】

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、材料の本質的な強度を大きく変化させることを発見した（図1）。

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。このため、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。

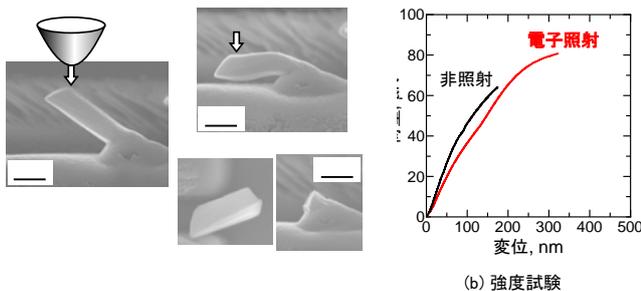


図1 電子が機械的特性に及ぼす影響

#### 【研究の方法】

塑性変形や破壊の素過程は究極的には原子間結合の切断にある。原子間結合強度を直接反映した理想的な強度を評価するため、研究代表者らが行ってきたナノマイクロ構造体に対する強度実験を発展させて、欠陥を極力排除した微小試験体に対する強度実験方法を開発する。さらに、材料中の Anomalous 電子を制御（注入・保持・吸引）する方法を確立する。これらの方法により、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、材料強度に及ぼす Anomalous 電子の影響を実証・解明する。

Anomalous 電子による原子間結合状態の遷移とこれに伴う変形機構・破壊モード変化を量子力学的に解析するため、Anomalous 電子注入材の第一原理強度解析を行う。共有結合やイオン結合などの典型材料

に対する解析と個々の電子（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。

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。

#### 【期待される成果と意義】

・究極的に微小な粒子である電子/ホールによって巨視的な材料強度を変えうる現象に着目して、この Anomalous (変則的) な現象の機構と法則を解明すること。

・動的な粒子である電子をコントロールすることで、自在に材料強度を書き換えるリライタブル性を提案すること。すなわち、材料を「作る」から機能を「描く」へ材料強度設計に概念的革新をもたらす。

・Anomalous 電子が材料強度に及ぼす影響を解明するための基盤評価技術、すなわち、電子/ホールの注入・評価技術、強度実験方法、電子解析技術、および電子応力理論の概念を確立すること。

・Anomalous 電子の効果は力学特性にとどまらず、電気・磁気特性およびそれらのマルチフィジクス特性に及ぶため、学際的な波及効果を有すること。

これらの実現により、Anomalous 電子による多岐に渡る材料機能設計・創出の新しい学術分野を創ることが期待できる。

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

・ Hiroyuki Hirakata, Kenta Konishi, Toshiyuki Kondo, Kohji Minoshima, Electron-beam enhanced creep deformation of amorphous silicon nano-cantilever, *Journal of Applied Physics*, Vol. **126**, 105102, 2019.

・ Hiroyuki Hirakata, Kyohei Sano, Takahiro Shimada, Electron-beam irradiation alters bond strength in zinc oxide single crystal, *Applied Physics Letters*, Vol. **116**, 111902, 2020.

#### 【研究期間と研究経費】

令和2年度～6年度 154,800千円

#### 【ホームページ等】

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