

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 13 日現在

機関番号：13401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26870348

研究課題名(和文)カーボンナノチューブの構造に着目した曲率を有する低次元材料の格子欠陥挙動の解明

研究課題名(英文) Behavior of lattice defects in curved low-dimensional materials based on the analysis of the structure of carbon nanotubes

研究代表者

LEI XIAOWEN (LEI, XIAOWEN)

福井大学・学術研究院工学系部門・講師

研究者番号：50726148

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：曲率を有する低次元材料の格子欠陥挙動を研究する目的で、カーボンナノチューブ(CNTs)を用いた原子レベルの計算を行った。Stone-Wales(SW)欠陥から分解してできるPentagon-Heptagon(5-7)欠陥対の解析を通じて、欠陥構造の安定性、運動に対するエネルギー障壁を調べ、材料創成の新プロセスや新機能発現に結びつく基礎的知見を得ることを目的とした。CNTsの5-7欠陥対の安定性や配置間の最小エネルギー経路を考察した。その結果、SW欠陥および5-7欠陥対の局所安定配置とそのエネルギーを評価した。理論結果は、欠陥構造の配置を設計法に対する役に立つ情報を与えてくれると期待できる。

研究成果の概要(英文)：The analysis of the structure of carbon nanotubes (CNTs) at atomic level has been carried out to study the behavior of lattice defects in curved low-dimensional materials. The energy landscape over configurational change of defects in CNT is built using the Peierls-Nabarro dislocation model. Based on the theoretical model, the configurational energy is estimated by relative displacement. The equilibrium configurations are obtained using the conjugate-gradient method, and the saddle point on the minimum-energy path, is estimated using the nudged elastic-band method. The total energy does not only depend on the mean value of the relative displacement, but also on the complexity of the configurations of the defects. The results provide fundamental information related to the stability of the thermal activation of defects in CNT. The theoretical results will give us useful information for designing the configuration of the defect structure.

研究分野：ナノ力学

キーワード：carbon nanotube low-dimensional lattice defect

1. 研究開始当初の背景

理想的なカーボンナノチューブ (Carbon nanotube; CNT) は、炭素原子の六員環が二次元的に平面に規則的に並んだグラフェンシート (Graphene sheet; GS) を円筒状に丸めてできる構造とみなすことができる。このような低次元材料 (厚さなど特定の方向の長さ寸法が他の方向に比べて著しく小さく、二次元あるいは一次元とみなせるような材料) はバルク材料とは異なる新奇な特性を発現する可能性から注目を集めている。CNT は 1991 年に飯島によってその発見がなされて以降、様々な視点から膨大な数の研究がなされている。代表者はこれまでに欠陥を含まない CNT 構造に対する連続体モデルを構築し、動的解析の結果を実験および原子シミュレーションと比較して、その有効性を明らかにしている。本研究課題では、この研究成果を踏まえ CNT の格子欠陥理論を発展させる。

CNT の格子欠陥について、国外に目を向けると、Rice 大学の Yakobson らによる先駆的研究がある。特に、Stone-Wales (SW) 欠陥は、CNT の非弾性変形の機構に密接に関わっていることがわかっており、国内外で活発に研究が行われている。SW 欠陥は、五員環と七員環からなる Pentagon-heptagon (5-7) 欠陥の双極子構造であり、面对称構造を持っているので、ある SW 欠陥から発生する 5-7 欠陥のパターンは 2 通りとなる。SW 欠陥において双極子を構成する 5-7 欠陥どうしが離れる方向に運動すると、欠陥の間に位置する炭素原子間の結合の切断と再結合が生じて、相対すべりが実現され、最終的に末端まですべりが完了すると CNT のカイラリティが変化する。変形体力学の視点からは、5-7 欠陥は、転位 (dislocation) とみなすことができる。

2. 研究の目的

二次元材料としてのカーボンナノチューブ (Carbon nanotube; CNT) の円筒形状に特有の周方向の周期性と曲率に着目し、グラフェンシート (Graphene sheet; GS) との比較により、曲率を有する低次元材料の格子欠陥理論の構築に向けた基礎的研究を行う。具体的には、Stone-Wales (SW) 欠陥から分解してできる Pentagon-heptagon (5-7) 欠陥対の解析を通じて、欠陥構造の安定性、運動に対するエネルギー障壁を調べ、原子モデルを用いた基礎的解析と連続体モデルを用いて、曲面上の格子欠陥論を構築し、材料創成の新プロセスや新機能発現に結びつく基礎的知見を得ることを目的とする。

3. 研究の方法

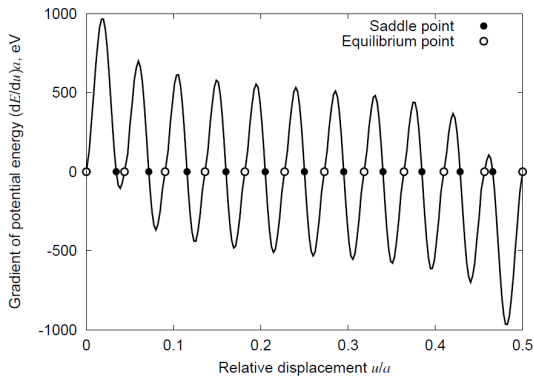
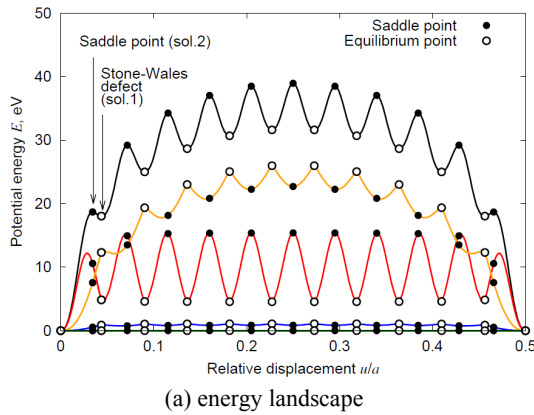
低次元材料の新しい格子欠陥理論を構築することを目的として、カーボンナノチューブ (CNT) とその展開面であるグラフェンシート (GS) 上の Stone-Wales (SW) 欠陥から分解してできる Pentagon-heptagon (5-7) 欠陥対

の運動について解析する。原子レベルの解析モデルと、連続体モデルを確立し、曲面上を運動する転位の理論計算と計算機シミュレーションを実施する。相互作用による一般化力、運動に対する抵抗を評価し、周期性に起因する自由行程距離の影響と、曲率の有無による格子欠陥の挙動の違いについて検討する。低次元材料に特有の格子欠陥挙動の曲率依存性から、ナノコンなどの固有の曲率変化を有する材料中の格子欠陥の運動とそれに伴う構造変化や形状変化を応用し、材料創成の新プロセスや新機能発現に結びつく基礎的知見の獲得を目指す。

4. 研究成果

図 1(a) に平均相対変位の関数として表現したエネルギーの地形を示す。また、図 1(b) に、Configurational force に対応した一般化力を示している。図 1(a) において、エネルギーの寄与に応じてそれぞれ黒、赤、黄、青線で示している。図および、関連して行ったエネルギー極小点探索と最小エネルギー経路探索解析の結果から、格子間の相対変位で記述されたエネルギー面に対して、平衡条件を満たすさまざまな異なる解が存在することがわかる。それらの中には、安定な釣り合い状態だけでなく、不安定な釣り合い状態を示すものが存在する。また隣接する二つの安定な釣り合い状態 (エネルギー極小配置) の間には一般化積層欠陥エネルギーの寄与が支配的な比較的大きな Peierls-Nabarro 障壁が生じ、5-7 欠陥対は各格子サイトである程度熱的にも安定して存在できることがわかる。図 1(b) から、大域的には 5-7 欠陥対は正負の刃状転位対と同様に互いに引力が働くため、対消滅する方向に力が作用することが古典弾性論の結論として導かれるが、局所に格子ごとに釣り合い配置が存在することがわかる。Wang らが得ている SW 欠陥に対する Solution 1、2 という二つの解の物理的意味について考察する。エネルギー地形では図 1(a) 中の Saddle point (sol. 1)、Stone-Wales defect (sol. 2) に対応することがわかる。次に Nudged elastic band 法 (NEB) 法で図 1(a) に得られた隣接するエネルギー極小配置に対して、最小エネルギー経路を求め、さまざまな安定配置間の状態の変化は、移動、生成、消滅の過程に分類され、それらをまとめると図 2 のようにグラフにより整理される。

以上のように、曲率を有する低次元ナノカーボン材料の格子欠陥のダイナミクスに有用な基礎理論を提示することができた。今後は、本研究課題で養ったアプローチを拡張し、欠陥と三次元形状の関わりなどを考慮することができれば理論の精緻化に結びつくことが期待できる。



(a) energy landscape
(b) configurational force
Fig.1 Energy landscape and configurational force

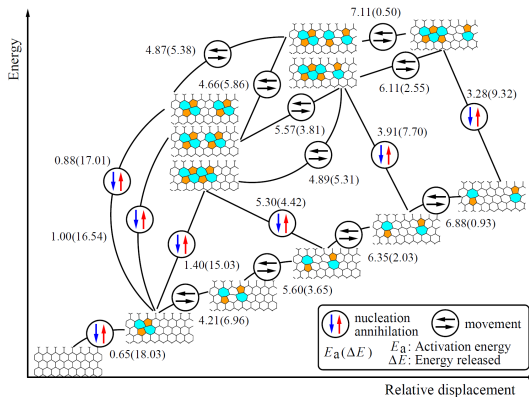


Fig.2 A schematic illustration of energy graph for CNTs with different transition and annihilation defects

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 4 件)

1. Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, Local equilibrium configurations and minimum energy path of carbon nanotubes with Stone-Wales defects and their related pentagon-heptagon lattice defects. *Computational Materials Science*, 2017; 133: 194-199. (査読有り)
2. 中谷彰宏, 雷 霄雯, シンクロ型LPSO構造の新展開—ミルフィーユ構造の変形機

構と力学特性—, 金属, 第86巻, 第6号 (2016), pp. 486-492. (査読なし)

3. Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, Analysis of kink deformation and delamination behavior in layered ceramics. *Journal of the European Ceramic Society*, 2016; 36: 2311-2317. (査読有り)
4. Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, A deformation mechanism for ridge-shaped kink structure in layered solids. *The American Society of Mechanical Engineers (ASME) Journal of Applied Mechanics*, 2015; 82: 071016-1-6. (査読有り)

[学会発表](計 56 件)

1. 倉 和海, LEI Xiao-Wen, 中谷彰宏, 分子動力学シミュレーションによるグラファイトの圧縮変形メカニズムの研究, マルチスケール材料力学シンポジウム (第 22 回分子動力学シンポジウム・第 10 回マイクロマテリアルシンポジウム), 2017. 5. 26.
2. 谷口智哉, LEI Xiao-Wen, 中谷彰宏, 格子欠陥を有するナノカーボン材料の構造とエネルギー解析, マルチスケール材料力学シンポジウム (第 22 回分子動力学シンポジウム・第 10 回マイクロマテリアルシンポジウム), 2017. 5. 26.
3. 藤林粹平, LEI Xiao-Wen, 中谷彰宏, 分子動力学シミュレーションによるダイヤモンドナノスレッドの力学特性評価, マルチスケール材料力学シンポジウム (第 22 回分子動力学シンポジウム・第 10 回マイクロマテリアルシンポジウム), 2017. 5. 26.
4. 野呂優太, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 曲率を表現するセル・オートマトンを用いた変形シミュレーション, マルチスケール材料力学シンポジウム (第 22 回分子動力学シンポジウム・第 10 回マイクロマテリアルシンポジウム), 2017. 5. 26.
5. 谷口敬俊, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 材料非線形性による表面波の構造変化の分子動力学解析, 日本機械学会関西支部第 92 期定時総会講演会, 大阪大学, 2017. 3. 13-14.
6. 河原永也, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 原子モデルを用いた低ナノ炭素材料の格子欠陥構造の相互作用の解析, 日本機械学会関西支部第 92 期定時総会講演会, 大阪大学, 2017. 3. 13-14.
7. 野呂優太, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, ひずみエネルギーの解放により駆動されるセルオートマトンを用いた変形パターン解析, 日本機械学会関西支部第 92 期定時総会講演会大阪大学, 2017. 3. 13-14.
8. 矢野太一, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 質量流束によって成長する固体

- の残留応力場の形成解析, 日本機械学会関西支部平成 28 年度学生員卒業研究発表講演会, 大阪大学, 2017. 3. 11.
9. Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei, Mechanism of formation of kink banding structure in LPSO-Mg, The 3rd International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Its Related Materials (LPSO2016), Japan, Dec. 2016.
 10. Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, Complex energy landscapes of carbon nanotubes with defects, 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2016), Canada, Aug. 2016.
 11. Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei, Analysis of criterion for kink banding in layered solids, 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM2016), Canada, Aug. 2016.
 12. Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei, Instability behavior of layered structure with kink deformation in LPSO-Mg, 9th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Process (PRICM9), Japan, Aug. 2016.
 13. Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei, Simulation of buckling and delamination in layered solids using cohesive particle model, The 12th World Congress on Computational Mechanics and The 6th AsiaPacific Congress on Computational Mechanics (WCCM XII & APCOM VI), Korea, Jul. 2016.
 14. 中谷彰宏, LEI Xiao-Wen, 松永慎太郎, 土井祐介, 引張荷重下のキリガミ構造体の面外変形の分岐解析, 日本機械学会 M&M2016 材料力学カンファレンス, 名古屋大学, 2016. 10. 8-10.
 15. LEI Xiao-Wen, 中谷彰宏, 格子欠陥を有するナノ炭素材料のエネルギー地形と構造安定性に関する研究, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会 (CMD2016), 名古屋大学, 2016. 9. 22-24.
 16. 中谷彰宏, LEI Xiao-Wen, 小川隆樹, 微視的局所不安定変形で記述されるマルチスケール力学特性, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会 (CMD2016), 名古屋大学, 2016. 9. 22-24.
 17. 鈴木脩, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 格子欠陥付与により発現する二次元材料のアイソメトリック変形の解析, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会 (CMD2016), 名古屋大学, 2016.9.22-24.
 18. 中谷彰宏, LEI Xiao-Wen, シンク口型 LPSO 構造の新展開 ~ミルフィーユ材料のキंक強化~, 日本金属学会 2016 年秋期 (第 159 回) 講演大会, 大阪大学, 2016. 9. 21 -23.
 19. 中谷彰宏, 雷雲雯, 材料不安定性に着目した LPSO-Mg のキंक変形メカニズムの研究, 軽金属学会第 130 回春期大会, 大阪大学, 2016. 5. 28.
 20. 石丸知英, 原田悠之介, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 二次元カットパターン構造の一般化連続体力学に基づく解析, マルチスケール材料力学シンポジウム (第 21 回分子動力学シンポジウム・第 9 回マイクロマテリアルシンポジウム), 富山大学, 2016. 5. 27.
 21. 鈴木脩, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 二次元材料のトポロジカル欠陥により形成される曲面構造の考察, マルチスケール材料力学シンポジウム (第 21 回分子動力学シンポジウム・第 9 回マイクロマテリアルシンポジウム), 富山大学, 2016. 5. 27.
 22. 孫光輝, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, カーボンナノチューブにおける非線形局在モードの 3 次元構造の解析, マルチスケール材料力学シンポジウム (第 21 回分子動力学シンポジウム・第 9 回マイクロマテリアルシンポジウム), 富山大学, 2016. 5. 27.
 23. 松永慎太郎, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 面外変形により伸長するキリガミ構造体の力学シミュレーション, 日本機械学会関西支部第 91 期定時総会講演会, 大阪電気通信大学, 2016. 3. 11-12.
 24. 東山直樹, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 局所振動子を有するメタマテリアルに基づいた準一次元非線形格子モデルの動力学特性, 日本機械学会関西支部第 91 期定時総会講演会, 大阪電気通信大学, 2016. 3. 11-12.
 25. 松岡興二, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 基準配置上で拘束を有する膜構造体のエネルギー最小化原理に基づく形態解析, 日本機械学会関西支部第 91 期定時総会講演会, 大阪電気通信大学, 2016. 3. 11-12.
 26. 里井直博, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 双安定格子モデルを用いた非線形ダイナミクスの励起と状態遷移過程に関する研究, 日本機械学会関西支部平成 27 年度学生員卒業研究発表講演会, 大阪電気通信大学, 2016. 3. 10.
 27. 安藤孔助, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, タワー型テンセグリティの形態に関する力学解析, 日本機械学会関西支部平成 27 年度学生員卒業研究発表講演会, 大阪電気通信大学, 2016. 3. 10.
 28. 原田悠之介, LEI Xiao-Wen, 土井祐介, 中谷彰宏, 微視的内部構造を有する固体の二次元弾性特性に関する研究, 日本機械学会関西支部平成 27 年度学生員卒業研究発表講演会, 大阪電気通信大学, 2016. 3. 10.
 29. Tatsuya Morikawa, Shigeki Higuchi, Ryosuke Noguchi, Kenji Higashida, Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani,

- Distribution of plastic strain around kink bands in LPSO Mg alloy, The 10th International Conference on Magnesium Alloys and Their Applications (Mg2015), Korea, Oct. 2015.
30. Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, Microdynamics modeling for kink deformation and delamination in multilayered solid, 6th International Conference on Computational Methods (ICCM2015), New Zealand, Jul. 2015.
 31. Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, A continuum mechanics analysis of lattice defects in carbon nanotube, 9th European Solid Mechanics Conference (ESMC2015), Spain, Jul. 2015.
 32. Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei, Deformation of ridge-shape kink structure as material instability, 9th European Solid Mechanics Conference (ESMC2015), Spain, Jul. 2015.
 33. Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, Analysis of kink deformation behavior in multilayered solid considering debonding, Modelling and Simulation Meet Innovation in Ceramics Technology (CERMODEL2015), Italy, Jul. 2015.
 34. Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei, Analysis of kink deformation in layered structures using lattice defect model, Modelling and Simulation Meet Innovation in Ceramics Technology (CERMODEL2015), Italy, Jul. 2015.
 35. Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei, Mathematical foundation of kink deformation in layered solids, The International Conference "Advanced Materials Week-2015" (AMW 2015), Russia, Jun. 2015.
 36. 孫光輝、LEI Xiao-Wen、土井祐介、中谷彰宏、カーボンナノチューブにおける非線形エネルギー局在モードの3次元振動解析, 日本機械学会関西支部平成 27 年度学生員卒業研究発表講演会, 大阪電気通信大学, 2016. 3. 10.
 37. 鈴木脩、LEI Xiao-Wen、土井祐介、中谷彰宏、トポロジカル欠陥構造の配置に注目した曲面の形態に関する研究, 日本機械学会関西支部平成 27 年度学生員卒業研究発表講演会, 大阪電気通信大学 2016.3.10.
 38. 中谷彰宏、LEI Xiao-Wen, 回位理論によるキック変形の形成機構, 日本機械学会第 28 回計算力学講演会 (CMD2015), 横浜国立大学, 2015.10.10-12.
 39. LEI Xiao-Wen、中谷彰宏, ナノ構造炭層材料の欠陥構造変化の最小エネルギー経路に関する解析, 日本機械学会第 28 回計算力学講演会 (CMD2015), 横浜国立大学, 2015.10.10-12.
 40. LEI Xiao-Wen、中谷彰宏, アコーディオンキックモデルを用いたキック変形帯の形成と強化機構の解析, 日本金属学会 2015 年講演秋期大会 (第 157 回), 九州大学, 2015.9.16-18.
 41. 中谷彰宏、LEI Xiao-Wen, 積層構造体のリッジ形キック変形帯の形成機構, 日本金属学会 2015 年講演秋期大会 (第 157 回), 九州大学, 2015.9.16-18.
 42. 中谷彰宏、LEI Xiao-Wen, 回位双極子を用いたキック変形理論と応力解析, 日本機械学会 2015 年度年次大会, 北海道大学, 2015.9.13-16.
 43. LEI Xiao-Wen、河原永也、中谷彰宏, 格子力学モデルを用いたカーボンナノチューブの 5 - 7 欠陥対の相互作用に関する検討, 日本機械学会 2015 年度年次大会, 北海道大学, 2015.9.13-16.
 44. 河原永也、LEI Xiao-Wen、土井祐介、中谷彰宏, カーボンナノチューブの欠陥対の安定性解析, 日本材料学会第 20 回分子動力学シンポジウム講演, 山形大学, 2015.5.22.
 45. 谷口敬俊、LEI Xiao-Wen、土井祐介、中谷彰宏, 微細な幾何パターンを有する表面間の摺動特性解析, 日本機械学会関西学生会平成 26 年度学生員卒業研究発表講演会, 京都大学, 2015. 3. 14.
 46. 河原永也、LEI Xiao-Wen、土井祐介、中谷彰宏, 外力を受けるカーボンナノチューブの欠陥対構造の力学解析, 日本機械学会関西学生会平成 26 年度学生員卒業研究発表講演会, 京都大学, 2015. 3. 14.
 47. 野呂優太、LEI Xiao-Wen、土井祐介、中谷彰宏, 揺動スライダ機構群の協調運動による物体輸送実験, 日本機械学会関西学生会平成 26 年度学生員卒業研究発表講演会, 京都大学, 2015. 3. 14.
 48. Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, Stress analysis of ridge-shaped kink structure in mg alloy with LPSO structure based on linear elasticity, International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Its Related Materials 2014 (LPSO2014), Japan, Oct. 2014.
 49. Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei, Lattice defect model of kink deformation and configurational force, 5th International Conference on Computational Methods (ICCM2014), UK, Jul. 2014.
 50. Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei, Analysis of kink deformation using disclination model, 11th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XI), Spain, Jul. 2014.
 51. LEI Xiao-Wen、中谷彰宏, 低次元カーボン材料のための格子欠陥論に関する基礎的研究, 日本機械学会第 27 回計算力学講演会 (CMD2014), 岩手大学, 2014. 11. 22-24.

52. LEI Xiao-Wen、中谷彰宏、リッジ形キンク構造の漸近応力場と境界値問題の解析、日本機械学会第 27 回計算力学講演会(CMD2014)、岩手大学、2014. 11. 22-24.
53. LEI Xiao-Wen、中谷彰宏、グラフェンシート格子欠陥対に関する連続力学モデリング、第 58 回日本学術会議材料工学連合講演会、京都テルサ、2014. 10. 27-28.
54. 中谷彰宏、LEI Xiao-Wen、回位と連続分布転位によるキンク変形のモデリング、第 58 回日本学術会議材料工学連合講演会、京都テルサ、2014. 10. 27-28.
55. LEI Xiao-Wen、中谷彰宏、ディスクリネーション理論に基づいたリッジ形キンク構造の漸近応力場、第 63 回理論応用力学講演会、東京工業大学、2014. 9. 26-28.
56. 松永慎太郎、LEI Xiao-Wen、土井祐介、中谷彰宏、分子動力学法による HCP 金属の変形双晶の発生と成長のシミュレーション、第 19 回分子動力学シンポジウム講演、福岡大学、2014. 5. 26.

〔その他〕

ホームページ等

http://mech.u-fukui.ac.jp/~nano_lab/index.html

6. 研究組織

(1)研究代表者

雷 霄雯 (LEI Xiao-Wen)

福井大学・学術研究院工学系部門・講師

研究者番号：50726148

(2)研究協力者

中谷 彰宏 (NAKATANI Akihiro)

大阪大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：50252606