

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 30 年 6 月 11 日現在

機関番号：14401

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2017

課題番号：15K13835

研究課題名(和文) 曲面上のトポロジカル欠陥の輸送現象学を基礎とするナノ構造の形態形成論の研究

研究課題名(英文) Morphology of nanostructure based on transport phenomena of topological defects on curved surface

研究代表者

中谷 彰宏 (Nakatani, Akihiro)

大阪大学・工学研究科・教授

研究者番号：50252606

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円

研究成果の概要(和文)：格子欠陥に対する計算力学モデルが有限変形理論の枠組みの中で定式化されている。2次元ナノカーボン構造のStone-Wales欠陥からの5-7欠陥対の生成と運動の分子動力学シミュレーションが行われ格子欠陥モデルが発展させられている。トポロジカル欠陥の局所安定構造解析を行った後、局所安定状態から別の安定状態への最小エネルギー経路の遷移エネルギーをNudged Elastic Band法を用いて評価している。一連の研究で、構造変化・変形のプロセスにおけるトポロジカル欠陥のダイナミクス(生成・運動・消滅)の設計方法が輸送現象学の観点から定式化されている。

研究成果の概要(英文)：A model of computational mechanics for lattice defects is formulated based on finite deformation theory. Nucleation and motion of a pair of pentagon-heptagon defects from a Stone-Wales defects in a two-dimensional nano-carbon structure is analysed using molecular dynamics simulation, and a lattice defect model is improved. Local stability of the structure of topological defects is studied, and the transition energy on a minimum energy path from a stable state to another stable state is evaluated by using nudged elastic band method. According to the series of studies, how to design the dynamics of topological defects in a processes of deformation and structural changes (i.e. nucleation, motion and annihilation) is formulated in a viewpoint of transport phenomena.

研究分野：変形体力学

キーワード：トポロジカル欠陥 ナノ構造 形態形成論 分子動力学 連続体力学 曲率

1. 研究開始当初の背景

材料のマクロな力学特性や変形挙動は、ミクロな原子レベルの構造やその変化を起源としているが、原子一個の運動を注視するだけではそのメカニズムに肉薄できないことは明らかである。その微視的な素過程は、マクロに規定される境界条件と(時間的・空間的にスケールを越えて)相互作用する原子の集団的な(コヒーレントな)運動のパターン(あるいは変形モード)によって特徴づけられる。このようなパターンは、空孔の移動、転位(Dislocation)の運動など、さまざまな格子欠陥構造の時間発展として研究されてきた。そして、粒界すべり、き裂進展などのメゾ・マクロ現象も、格子欠陥を一般化したトポロジカル欠陥の時間発展とみなすことができる。応募者は変形体の微視的なトポロジカル欠陥構造の時間発展の計算材料力学モデルの定式化にいち早く注目し、マルチスケールモデルによる材料の変形・破壊機構の研究に取り組んできた。そのような中、近年、回位(あるいは転傾、Disclination)とよばれる回転性の高次のトポロジカル欠陥が注目されている。回位が提案されたのは転位と同時期(20世紀初頭)であるが、長らく材料科学の分野では転位論をベースにした理論のみが展開されてきた。しかしながら、今年になって、マンツルの変形挙動との関わりが報告され、材料科学のみならず地球科学の分野で新しい材料強度学を記述する可能性から一躍注目を集めている。

転位論は塑性変形の素過程を記述するものとして変形体の力学の一翼を担って発展してきたが、応募者は、トポロジカル欠陥の自発的挙動や自己組織化のメカニズムの観点から探究し、得られる知見を用いてトポロジカル欠陥群の運動や配置を制御できれば、逆に、材料の形状をボトムアップに設計する方法論が構築できることに気づいた。そのためには、ゆがめられた曲面を正確に扱う有限変形(大変形)理論に基づくトポロジカル欠陥の輸送現象学の確立が不可欠であるという着想に至った。

2. 研究の目的

本研究課題は、曲面上の不連続変位で特徴づけられる高次トポロジカル欠陥の時間発展により、ナノ構造体の形態形成を取り扱う学問を構築することを目的とする。具体的には、ナノ構造の形状変化に着目し、幾何学的な観点からトポロジカル欠陥の階層関係に注目して分類し、その運動学を一般化された曲面上の有限変形理論として確立する。さらに、その微視的構造を作り出すために必要な駆動力に関する理論の定式化を行い、流入・流出・生成・消滅といった輸送現象学を状態間遷移の不安定性論から構築する。提案理論を用いて、ナノ構造の変形とトポロジカル欠陥の配置の変化との関係をシミュレーションによって明らかにし、トポロジカル欠陥自

己組織化といった自発的な現象を利用して、従来のトップダウン的な加工と相補的な役割を持ったボトムアップアプローチによるナノ構造の形態設計・創成の方法論を構築する。

3. 研究の方法

曲面上の不連続変位に基礎をおく高次トポロジカル欠陥の時間発展により、ナノ構造体の形態形成を取り扱う学問を構築することを目的として、トポロジカル欠陥のダイナミクスを利用したナノ構造体の形態形成の方法論を確立する。研究の方法として、(1)定式化とマイクロダイナミクスシミュレーション、(2)ナノスケール材料の形状変化の解析、(3)低次元ナノ構造からの3次元形状の創成のプロセスをトポロジカル欠陥の構造変化から設計するための基本原理の確立の順に研究を進める。

個々の研究では理論の定式化とシミュレーションによる検証のサイクルを繰り返し双方にフィードバックしつつ研究を進める。

分子シミュレーションにはLAMMPSを用い、格子欠陥モデルによる構造変化とエネルギー評価、および、原子構造データからの曲率評価については、新たに計算コードを開発して解析する。なお(1)、(2)、(3)の項目をそれぞれ平成27年度、28年度、29年度に実施し、最終年度に研究を総括する。

4. 研究成果

(1) 定式化とマイクロダイナミクスシミュレーション

① 不連続変位に着目するトポロジカル欠陥の有限変形理論の定式化

連続体力学における基準配置(初期構造)から現配置(変形後の構造)への数学的な微分幾何学的構造、多様体構造を厳密に記述する有限変形理論の枠組みを基礎とするトポロジカル欠陥理論を定式化した。超弾性体に対して不連続変位をペナルティ法によって記述する定式化とシミュレーションを拡張し、非線形固有ひずみ(非線形 eigen ひずみ)を取り入れたいわば非線形マイクロメカニクスシミュレーション手法を確立した。

② カーボンナノチューブ内の格子欠陥の力学解析

トポロジカル欠陥の集団挙動による形態形成について基礎的な知見を得るためのナノ構造材料の計算機実験として、パイエルス・ナバローモデルを用いてカーボンナノチューブ内の5-7欠陥対の力学問題を解いた。具体的には欠陥に働くPeach-Koehler力と局所安定配置のエネルギーを評価した。

(2) ナノスケール材料の形状変化の解析

① トポロジカル欠陥の安定性と等価原理の確立

キルク変形の格子欠陥モデルによる解析において、転位列と回位の双極子の長距離弾

性場の等価性について力学モデルを用いた解析的検証を踏まえて、個々の欠陥がつくる応力場の遮閉と数値計算により等価モデルの構築の方法論を一般化した。

②カーボンナノチューブの5-7欠陥の分子動力学解析

Stone-Wales 欠陥からの5-7欠陥対の生成と運動の分子動力学シミュレーションを行った。さらに粗視化モデルであるパイエルス・ナバローモデルを用いた解析を実施し、トポロジカル欠陥の局所安定構造解析を行い、さまざまな欠陥の配置に対する形成エネルギーを評価した。その後、トポロジカル欠陥の局所安定状態から別の安定状態への遷移を理論的に検証するために、NEB 法 (Nudged Elastic Band 法) を用いて局所安定構造間の鞍点解析と最小エネルギー経路の探索を行った。具体的に、様々な欠陥配置から別の配置への変形のプロセスの可能性に対して、活性化エネルギーと生成エネルギーを調べるとともに、トポロジカル欠陥のダイナミクス (生成・消滅・運動) のためのエネルギー地形を調査し、それらをグラフ理論により整理することに成功した (図 1)。

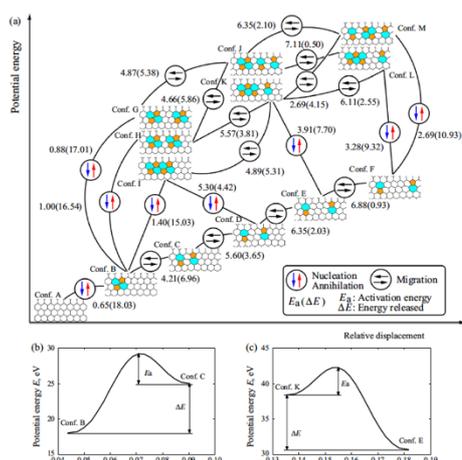


図 1 カーボンナノチューブの格子欠陥の相互作用によるエネルギー地形の解析

(3) 低次元ナノ構造からの3次元形状の創成のプロセスをトポロジカル欠陥の構造変化から設計するための基本原理の確立

①周期配列構造体の面外変形のシミュレーションと理論解析

マイクロラックが周期的に配列した構造体の面内変形から面外変形へのシミュレーションによる検討を行った。この現象は、本質的に分岐現象であることを明らかにし、具体的な臨界荷重を評価した。また千鳥格子状に硬質相が配列した構造モデルの破壊パターンの局在現象を解析し、局所・大域の不安定性の関係を論じた。

②トポロジカル欠陥のダイナミクスを利用したナノ構造体の形態形成の可能性

グラフェンシートに、5員環、7員環などを基本とする転位・回位 (転傾) とその複合体構造といったトポロジカル欠陥を付与し

た構造に対して、欠陥配置の違いによるポテンシャルエネルギーの変化を原子モデルを用いて解析し、トポロジカル欠陥構造の時間発展の基礎となる配置力 (configurational force) の解析を行った。同時に、2次元材料のトポロジカル欠陥が有する固有の曲率を評価し、固有曲率を塑性曲率、そこからの曲率の変化を弾性曲率としてモデル化する理論を構築し、トポロジカル欠陥のダイナミクスを利用したナノ構造体の形態形成の可能性を示した (図 2)。

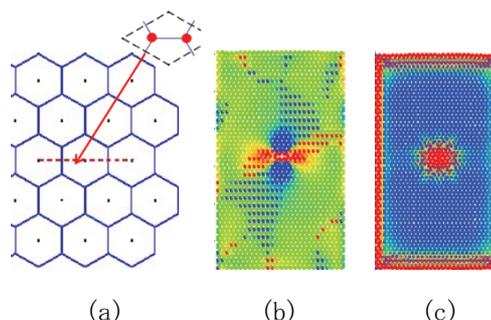


図 2 二次元材料への侵入型原子により生じるトポロジカル欠陥と曲面の形成: (a) モデル、(b) 曲率分布、(c) サイトポテンシャルエネルギー分布

以上のように、本研究課題では、マクロ加工からの単なるスケールダウンに依らない方法で、トポロジカル欠陥の配置の変化をコントロールすることを目指した挑戦的で萌芽的な知見を見出した。研究の過程で獲得された知見のひとつひとつが、今後は分野の垣根を越えて力学現象解析の分野に新しい視点をもたらし、学術上の突破口を切り拓く知見につながると期待される。

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 8 件)

1. 雷 霄雯、中谷彰宏、土井祐介、松永慎太郎、面外変形を起こすキリガミ周期構造体の分岐解析, 材料, 第 67 巻, 第 2 号, 202-207, (2017) (査読あり).
2. 機械工学年鑑 2017 3. 計算力学 3・1 計算固体力学, 中谷彰宏, 日本機械学会誌, 118-1161, 451-452 (2017) (査読なし).
3. Local equilibrium configurations and minimum energy path of carbon nanotubes with Stone-Wales defects and their related pentagon-heptagon lattice defects, X.-W. Lei, A. Nakatani, Comput. Mater. Sci., 133, 194-199, (2017) (査読あり).
4. Nonlinear dynamics of a model of acoustic metamaterials with local resonators, N. Higashiyama, Y. Doi, A. Nakatani, NOLTA, IEICE, 8, 129-145 (2017) (査読あり).
5. Analysis of kink deformation and delamination behavior in layered ceramics, X.-W. Lei, A. Nakatani, J. Eur. Ceram. Soc., 36, 2311-2317,

(2016) (査読あり).

6. Structure and stability of discrete breather in zigzag and armchair carbon nanotubes, Y. Doi, A. Nakatani, Lett. Mater., 6, 49-53, (2016) (査読あり).
7. 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—, 中谷彰宏, X.-W. Lei, 金属, 86-6, 486-492, (2016) (査読なし).
8. A deformation mechanism for ridge-shaped kink structure in layered solids”, X.-W. Lei, A. Nakatani, Trans. ASME, J. Appl. Mech., 82, 071016(1-6), (2015) (査読あり).

[学会発表] (計 10 件)

1. 格子欠陥論に基づくキンク境界の応力場の解析”, 中谷彰宏, X.-W. Lei, 結晶の界面、転位、構造の数理, Sep. 2017, 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 (福岡市) .
2. Mechanism of kink deformation in layered solid as instability phenomenon, A. Nakatani, X.-W. Lei, The 3rd International Workshop on the Structure and Mechanisms of Plasticity of Advanced Magnesium Alloy and Related Materials, Sep. 2017, Russia.
3. 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”, X.-W. Lei, 中谷彰宏, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会 (CMD2016) , Sep. 2016, 名古屋大学 (名古屋市) .
4. 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, 中谷彰宏, X.-W. Lei, 小川隆樹, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会 (CMD2016) , Sep. 2016, 名古屋大学 (名古屋市) .
5. 不安定性理論を基礎とするキリガミ周期構造体の変形解析, 中谷彰宏, X.-W. Lei, 松永慎太郎, 土井祐介, 日本機械学会第 29 回計算力学講演会 (CMD2016) , Sep. 2016, 名古屋大学 (名古屋市) .
6. Simulation of buckling and delamination in layered solids using cohesive particle model, A. Nakatani, X.-W. Lei, 12th World Congress on Computational Mechanics (WCCM XII) and 6th Asia-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM VI), Jul. 2016, Seoul, Korea.
7. 材料不安定性に着目した LPSO-Mg のキンク変形メカニズムの研究, 中谷彰宏, X.-W. Lei, 軽金属学会第 130 回春期大会, May 2016, 大阪大学 (吹田市) .
8. Dynamics of discrete breathers in carbon nanotube, Y. Doi, A. Nakatani, 2015, International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications (NOLTA 2015), Hong Kong, Dec. 2015.
9. 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, X.-W. Lei, 中谷彰宏, 日本機械学会第 28 回計算力学

講演会 (CMD2016) , Oct. 2015, 横浜国立大学 (横浜市) .

10. Deformation of ridge-shape kink structure as material instability, A. Nakatani, X.-W. Lei, 9th European Solid Mechanics Conference, Jul. 2015, Madrid, Spain.

[図書] (計 2 件)

1. キンク変形の物理, 中谷彰宏 (金属学会セミナーテキスト 材料の力学特性向上を目指して—最近の実験・計算手法の進展に基づく本質的な理解—, 小山敏幸, 藤居俊之, 廣澤渉一編・他 8 名著), 日本金属学会発行・丸善出版発売 (2018)
2. 材料力学, 渋谷陽二, 中谷彰宏, コロナ社 (2017)

[その他]

ホームページ等

<http://www.md.ams.eng.osaka-u.ac.jp/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

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

(2) 研究協力者

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