

令和 2 年 6 月 8 日現在

機関番号：13401

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K14145

研究課題名(和文) 格子欠陥ダイナミクスを利用した低次元ナノ炭素材料の自発曲率形成機構の解明

研究課題名(英文) 123

研究代表者

LEI XIAOWEN (LEI, XIAOWEN)

福井大学・学術研究院工学系部門・准教授

研究者番号：50726148

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：三次元構造体で線欠陥として定義される転位や回位では、特異線の周囲に特異応力場が形成される。一方、二次元構造体に欠陥を導入すると、欠陥の周囲の応力場は曲率を変化させる駆動力として作用し、応力場の緩和と形状変化が生じる。このメカニズムを積極的に利用すれば低次元材料の形態制御が可能になると考えられる。グラフェンシートやカーボンナノチューブなどの可展面に六員環の周期的配列が写像された低次元ナノ炭素構造体の完全結晶に、欠陥を導入することによって形成される面外変形メカニズムを自発曲率の変化として理解し、欠陥の生成・消滅・移動による面外変形の制御と、ナノ構造体の形態制御の設計原理の獲得を目的とする。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ナノ低次元材料に現れる原子結合の切断やくい違いを伴う再結合などの格子欠陥の生成・消滅・運動といったダイナミクスは、同時に顕著な曲率の変化をもたらす点に特徴がある。ナノ低次元材料の変形理論の構築は、その構造健全性や不安定現象を利用した形態形成のメカニズムの普遍的知見の獲得に結びついている。さらにはナノスケールの構造にとどまらず、微細構造を有する構造体の曲率変化によるアダプティブな応答を利用したスマート構造化、およびトポロジー最適化などに結びつく可能性がある。その基礎となる幾何学は微分幾何学を基礎とする応用数学の発展に寄与するなど、多くの異分野への波及効果が期待できる。

研究成果の概要(英文)：In a three-dimensional structure, a singular stress field is formed around dislocation or disclination defined as a line defect. On the other hand, when a defect is introduced into the two-dimensional structure, the stress field around the defect acts as a driving force for changing the curvature, and the stress field is relaxed and the shape is changed. It is considered that the configuration of low-dimensional materials can be controlled by positively utilizing this mechanism. The out-of-plane deformation mechanism formed by introducing defects into the perfect crystal of a low-dimensional nanocarbon structure in a periodic array of six-membered such as a graphene sheet or a carbon nanotube is considered to be a change of spontaneous curvature. And the purpose is to understand the change and control the out-of-plane deformation due to the generation, disappearance, and movement of defects, and to acquire the design principle of morphology control of nanostructures.

研究分野：計算材料力学

キーワード：低次元ナノ炭素材料 転位 回位 自発曲率 曲面設計論

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

カーボンナノチューブ(Carbon Nanotube; CNT)は、模式的にはグラフェンシート(Graphene Sheet;GS)をカイラルベクトルと呼ばれる方向を基準として、有限サイズに切断し、巻き、継ぎ目のない構造に作成したものと理解することができる。GSは六員環の炭素原子一層からなる構造であり、曲げに対する剛性は十分に小さく、弾性エネルギーが非常に小さい変形でさまざまな直径の管状に巻くことができるため、CNTは自然界に安定して存在するナノカーボン材料である。ここではこのように面内変形(引張圧縮剛性)に対して面外変形(曲げ剛性)がきわめて小さい材料をここでは力学的低次元材料、あるいは低次元材料と呼ぶ。GSやCNTなどのナノ炭素材料は、六員環からなる低次元材料である。

### 2. 研究の目的

三次元構造体で線欠陥として定義される転位や回位(転傾)では、欠陥の芯となる特異線の周囲に特異応力場が形成される。一方、二次元構造体に欠陥を導入すると、欠陥の周囲の応力場は曲率を変化させる駆動力として作用し、応力場の緩和と形状変化が生じる。このメカニズムを積極的に利用すれば低次元材料の形態制御が可能になると考えられる。本研究では、グラフェンシートやカーボンナノチューブなどの可展面に六員環の周期的配列が写像された低次元ナノ炭素構造体の完全結晶に、欠陥を導入することによって形成される面外変形メカニズムを自発曲率の変化として理解し、欠陥の生成・消滅および移動による面外変形の制御と、ナノ構造体の形態制御の設計原理の獲得を目的とする。

### 3. 研究の方法

低次元ナノ炭素構造体の欠陥が創る固有の自発曲率が原因となって発生する三次元的な形態(曲面)についての設計原理の獲得を目的として、Stone-Wales欠陥、pentagon-heptagon欠陥さらにはその複合欠陥を導入したグラフェンシートやカーボンナノチューブの原子シミュレーションによる計算機実験を行う。静力学的な安定構造について対応する連続体シェル理論を用いた粗視化モデルの構築を行う。さらにナノ構造体と相似な力学特性を有するプロトタイプを実際に作成し、その変形特性を助として構造安定論による解析を行った。そして、欠陥の生成・消滅・移動によって、所定の欠陥配置を構成する可能性を調べ、ナノ機能曲面設計論の礎となる理論を構築する。

### 4. 研究成果

#### 【平成29年度：欠陥を有する低次元ナノ炭素構造体の自発曲率の解析】

ボルテラの切断(Volterra's cut)と呼ばれる不連続変位場を有する構造からつくられる転位や回位構造とシェル理論を用いて、三次元曲面の形態を予測できる連続体モデルを構築した。そして、ナノ構造体と相似な力学特性を有する連続体モデルを用いて、面外変位とその二次こう配としての曲率分布を評価した(図1)。

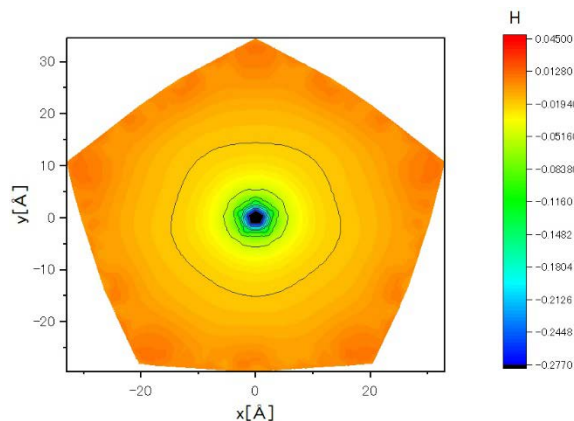


図1 平均曲率

**【平成 30 年度：ナノ構造体と相似な力学特性を有するプロトタイプの造形と構造安定解析】**

応力フリーの状態では固有の曲率を有する薄肉構造体を実際に整形し、その実際の変形特性を助として飛び移りや屈服といった座屈を拡張した構造安定論（広義の座屈理論）による解析を連続体モデルベースで行った。得られた解析結果から複数の欠陥が弾性的に相互作用問題を考えた。低次元材料では面外変形によって、上に凸、下に凸といった解の唯一性が破綻するだけでなく、幾何学的な非線形性が本質的に重要になるためたんなる重ね合わせでは評価できない可能性がある。曲げ変形を考慮したグリーン関数を考察し、近似的にエネルギーを極小化する方法について定式化を行った。

**【平成 31 年度：欠陥の生成・消滅、移動による欠陥配置の構成とナノ機能曲面設計基礎論の構築】**

欠陥の生成・消滅、移動によって、所定の欠陥配置を構成する可能性を調べ、ナノ機能曲面設計論の礎となる理論を構築した。すべりや上昇といった結晶学的な欠陥の移動がナノ炭素構造でも観察されているので、その欠陥の移動に伴う曲面構造の変化を原子シミュレーションによって解析した。設備備品として導入する大容量構造データ記憶装置に、大量の基本解析データを保存し、欠陥の相互作用のポスト処理、可視化などのために用いる。生成・消滅・移動により動的に構成される欠陥配置を平成 29 年度の静的な結果と比較し、自発曲率に基づくナノ機能曲面設計論の礎となる理論を構築している。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Jin-Xing Shi, Keiichiro Ohmura, Masatoshi Shimoda, Xiao-Wen Lei	4. 巻 116
2. 論文標題 A consistent methodology for optimal shape design of graphene sheets to maximize their fundamental frequencies considering topological defects	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Mechanics and Physics of Solids	6. 最初と最後の頁 117-134
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jmps.2018.03.027	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Xiao-Wen Lei、中谷彰宏、土井祐介、松永慎太郎	4. 巻 67
2. 論文標題 面外変形を起こすキリガミ周期構造体の分岐解析	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 材料	6. 最初と最後の頁 202-207
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2472/jsms.67.202	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Jin-XingShi, Keiichiro Ohmura, MasatoshiShimoda, Xiao-Wen Lei	4. 巻 116
2. 論文標題 A consistent methodology for optimal shape design of graphene sheets to maximize their fundamental frequencies considering topological defects	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of the Mechanics and Physics of Solids	6. 最初と最後の頁 117-134
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） /10.1016/j.jmps.2018.03.027	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Xiao-Wen Lei、清水俊吾	4. 巻 69
2. 論文標題 格子欠陥を考慮したナノ積層構造を有するグラファイトのキック変形解析	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 材料	6. 最初と最後の頁 126-133
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2472/jsms.69.126	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計23件（うち招待講演 3件 / うち国際学会 9件）

1. 発表者名 Akihiro Nakatani, Xiao-Wen Lei
2. 発表標題 Disclination dipole model of kink deformation in layered solid
3. 学会等名 The 9th Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, Tomoya Taniguchi
2. 発表標題 Elastic field of lattice defects in low-dimensional nano-carbon materials
3. 学会等名 The 9th Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Ako Kihara, Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani
2. 発表標題 Geometry of curved surface and energetics in graphene with defects
3. 学会等名 The 9th Multiscale Materials Modeling (MMM2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani
2. 発表標題 Kink deformation of layered solid surrounded by elastic media
3. 学会等名 The 5th Asian Symposium on Material and Processing 2018(ASMP2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 袋井賢、Xiao-Wen LEI、中谷彰宏
2. 発表標題 ナノスケール質量センサーへの応用を目指したグラフェンシートの振動特性に関する分子動力学解析
3. 学会等名 日本機械学会第31回計算力学講演会 (CMD2018)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Xiao-Wen LEI、木原愛湖、中谷彰宏
2. 発表標題 低次元ナノ炭素構造の格子欠陥に起因する曲面の幾何学とエネルギー論
3. 学会等名 日本機械学会第31回計算力学講演会 (CMD2018)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Xiao-Wen LEI
2. 発表標題 ナノ炭素材料の分子動力学解析と新しい複合材料の可能性
3. 学会等名 先端材料・技術入門講座2018(1)～福井大学における複合材料開発の研究動向～(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Xiao-Wen LEI、木原愛湖、中谷彰宏
2. 発表標題 格子欠陥を考慮した低次元ナノ炭素材料の変形とエネルギーの解析
3. 学会等名 日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 藤林稔平、Xiao-Wen LEI、中谷彰宏
2. 発表標題 ダイヤモンドナノスレッドを素線とする組紐カーボンファイバーの分子動力学解析
3. 学会等名 日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 清水俊吾、Xiao-Wen LEI、中谷彰宏
2. 発表標題 制御した格子欠陥を配置した積層グラフェンの変形解析
3. 学会等名 日本機械学会M&M2018材料力学カンファレンス
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Tomoya Taniguchi, Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani
2. 発表標題 The effect of stone-wales defect on the structural stability in single-walled carbon nanotubes
3. 学会等名 2nd International Joint Conference on Advanced Engineering and Technology & International Symposium on Advanced Mechanical and Power Engineering 2017 (IJCAET & ISAMPE 2017) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 野呂優太、Xiao-Wen LEI、土井祐介、中谷彰宏
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 谷口智哉、Xiao-Wen LEI、中谷彰宏
2. 発表標題 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
3. 学会等名 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)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 中谷彰宏、Xiao-Wen LEI
2. 発表標題 格子欠陥論に基づくキンク境界の応力場の解析
3. 学会等名 晶の界面、転位、構造の数理 (Mathematics in Interface, Dislocation and Structure of Crystals) (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 清水俊吾、Xiao-Wen LEI、中谷彰宏
2. 発表標題 プレストレス設計への応用を目指した積層体のマイクロ座屈変形解析
3. 学会等名 日本機械学会第30回計算力学講演会 (CMD2017)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 鈴木脩、Xiao-Wen LEI、永島壮、土井祐介、中谷彰宏
2. 発表標題 格子欠陥付与による二次元材料の曲面形成メカニズムの解明
3. 学会等名 日本機械学会関西支部第93期定時総会講演会
4. 発表年 2017年



1. 発表者名 Ako Kihara and Xiao-Wen Lei
2. 発表標題 Deformation analysis of low-dimensional nanocarbon materials forcing hierarchy of lattice defects
3. 学会等名 2019 International Symposium on Advanced Mechanical and Power Engineering (ISAMPE2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kazuki Bando and Xiao-Wen Lei
2. 発表標題 Mechanical properties analysis of diamond nanothreads with lattice defects by molecular dynamics method
3. 学会等名 2019 International Symposium on Advanced Mechanical and Power Engineering (ISAMPE2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Ako Kihara, Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani
2. 発表標題 Deformation analysis of graphene sheet with lattice defects
3. 学会等名 Japan-China Bilateral Symposium on Technology 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani, Jungo Shimizu
2. 発表標題 Deformation of compressed laminated graphite with lattice defects
3. 学会等名 13th International Conference on Mechanical Behaviour of Materials (ICM13) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Xiao-Wen LEI、清水俊吾、谷口智哉、木原愛湖、中谷彰宏
2. 発表標題 格子欠陥を有するナノ炭素材料の幾何学的特性に関する解析
3. 学会等名 日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 木原 愛湖、Xiao-Wen LEI、中谷 彰宏
2. 発表標題 格子欠陥の階層性に着目した低次元ナノ炭素材料の変形解析
3. 学会等名 日本機械学会M&M2019材料力学カンファレンス
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Xiao-Wen LEI、清水俊吾、中谷彰宏
2. 発表標題 格子欠陥を有するグラファイトのナノ積層構造の変形解析
3. 学会等名 日本機械学会第32回計算力学講演会 (CMD2019)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

福井大学 学術研究院工学系機械工学講座 ナノ機能設計学 雷研究室  
[http://mech.u-fukui.ac.jp/~nano\\_lab/](http://mech.u-fukui.ac.jp/~nano_lab/)

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----