

## 科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 27 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2011～2012

課題番号：23656084

研究課題名（和文） ナノ構造体の力学的・機能的破壊クライテリオンの創出

研究課題名（英文） Development of Criterion for Mechanical and Functional Fractures in Nano-Structures

研究代表者

嶋田 隆広 (SHIMADA TAKAHIRO)

京都大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号：20534259

研究成果の概要（和文）：

本研究では、原子構造体の力学的破壊のみならず機能的不安定性を支配するクライテリオンを開発した。これを強誘電体・磁性体に適用し、クライテリオンとしての有効性を実証した。さらに、本手法により破壊や機能不安定性の起点を特定できることを示した。ナノ構造体では変形と機能が密接に連動する（マルチフィジックス特性）ことが特徴であり、本研究ではナノ構造体のマルチフィジックス特性とその原理を明らかにしている。

研究成果の概要（英文）：

In this study, I developed the criterion to describe the mechanical fractures as well as functional instabilities of atomic components . We validated the proposed method as criterion by applying the method to ferroelectric and magnetic systems. In addition, the method describes the origin of fractures and functional instabilities in the atomic components. I further elucidated the multi-physics properties (the coupling effect between mechanical deformation and functionalities) in nano-structured materials.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	3,000,000	900,000	3,900,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学 ・ 機械材料・材料力学

キーワード：ナノ構造体、破壊クライテリオン、マルチフィジックス、分子動力学、第一原理解析

## 1. 研究開始当初の背景

カーボンナノチューブ(CNT)や原子鎖等に代表されるように、近年では原子レベルで形状を付与した構造体が注目を集めている。これらの原子構造体は個々の原子の離散性に起因した特有の変形・破壊挙動を示すため、もはや従来の連続体近似に基づく破壊力学概念を適用することは不可能である。一方、ナノ構造体では精緻な原子配列によって機能を引き出している場合が多い。例えば、強誘電体では表面での局所的な原子配列の再構成が強誘電特性を著しく変化させる。また、

鉄などの磁性体では原子配列に変化がない場合にも、磁気秩序の急変(磁気相転移など)によって機能を失う場合がある。すなわち、原子構造体では、構造のみならず機能を含めた破壊を考えることが必要不可欠である。ところが、構造・機能の両側面から破壊を記述する統一的なクライテリオンは提案されておらず、その研究例も皆無である。

研究代表者は、原子構造体の力学的破壊発生を厳密に評価できるクライテリオンを独自に開発している。この手法では、原子構造体の持ち得る全原子の構造的自由度を考慮

することで厳密な評価を可能としている。他方で、申請者は、ナノ構造体の力学的変形特性と機能(強誘電特性や磁気特性、半導体性能)の相互作用(マルチフィジックス原理)を原子・電子レベルから解明する研究に従事しており、材料機能は主として電子状態に支配されることを強く認識するに至った。これらの研究を実施する過程で、原子構造のみならず電子的な自由度を全て考慮し、申請者独自の手法を進化・発展させることで、構造的・機能的破壊を支配するクライテリオンを創出できることに思い至った。

## 2. 研究の目的

本研究では、

- (1) 研究代表者が独自に開発している破壊発生評価手法を拡張・定式化し、原子構造体の力学的・機能的破壊を支配するクライテリオンを創出すること、
- (2) 様々な機能性材料の破壊や機能喪失現象に適用することでクライテリオンとしての厳密性・一般性を実証すること、
- (3) 力学特性と電気特性が緊密に相互作用するナノレベルの不安定現象を評価すること、を研究目的とする。

## 3. 研究の方法

まず、申請者の有する力学的不安定性クライテリオンを基礎とし、電荷やスピンなど電子的な自由度を考慮して拡張を行い、強誘電体や磁性体の力学的・機能的不安定性を支配するクライテリオンを理論的に確立する。さらに、提案するクライテリオンを現有プログラムへ実装し、この数値計算を実施可能にする計算装置を構築する。

上記で開発したプログラムならびに計算装置を用い、本クライテリオンを強誘電体/磁性体の機能喪失現象に対して適用し、その妥当性・一般性を実証する。

クライテリオンとしての有効性を確認した後、ナノ構造体中への適用を行うことで、ナノレベルの機能的不安定メカニズムを解明する。

## 4. 研究成果

平成 23 年度は、外力ならびに外部電場による仕事を含めた原子系の全エネルギーに対する自由度に関する二階微分から成るヘッセ行列  $H$  の定式化に成功し、その最小固有値の正值性から対象とする系の電气的機能・力学的な不安定性を厳密に評価するクライテリオンを開発した。続いて、開発した機能的・力学的破壊クライテリオン評価のための並列計算環境を構築した。

上記で開発に成功したクライテリオンを外部電場負荷下の強誘電体(ドメイン壁を内包する)に適用した。図 1 は、印加する外部

電場と不安定性の支配パラメータである最小固有値を示す。無電場下では、最小固有値は正の値であることから、系は安定であることが分かる。一方、外部電場を増加させるにつれ、最小固有値は減少している。最終的に、電場が 4.225 MV/cm に達した際に、最小固有値がクライテリオンである 0 (臨界) に達した。この時、系のドメイン壁が不連続的に移動を開始したことから、強誘電分極構造が不安定となったと判断できる。すなわち、本研究で提案するクライテリオンによって、強誘電特性の不安定現象を記述することに成功した。

また、提案する手法では、最小固有値に対応する固有ベクトルを解析することで、機能不安定現象のモード(機能不安定性の起点)を特定することができる。図 2 は、図 1 で最小固有値が 0 となるものの固有ベクトルを解析し、ドメイン壁(Domain Wall; DW)原子構造部における不安定モードを可視化したものである。図中の破線で示す DW 部の右隣接原子面部で、陽イオンと陰イオンが相対的にその位置を組み替える挙動を示していることが分かる。この挙動はドメインスイッチング時に特徴的にみられるものであることから、本クライテリオンによって、ドメイン

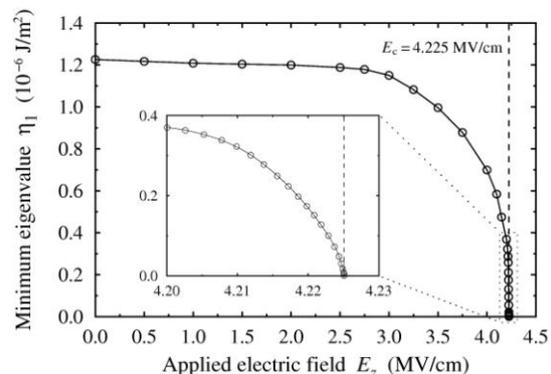


図 1. ドメイン壁を有する強誘電体  $\text{PbTiO}_3$  モデルに対する提案手法のクライテリオン(最小固有値: 縦軸)と外部電場(横軸)との関係

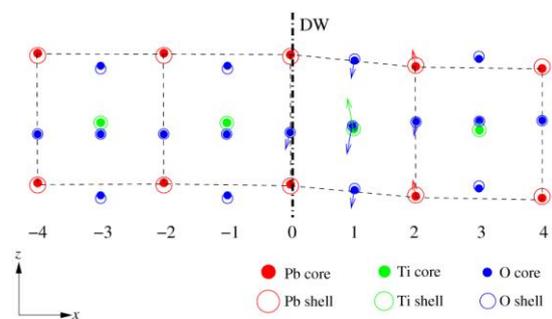


図 2. 提案手法に基づくドメイン壁部におけ

る不安定モード（機能喪失モード）

スイッチングの起点、すなわち、機能喪失モードを評価可能であることが明らかになった。これらの成果は、査読付き学術誌「材料」に掲載されている。

平成 24 年度は、磁気モーメント（電子のスピン）に関する自由度を考慮し、外部磁場に対する仕事をハミルトニアンに組み入れた。同時に、系の全エネルギーに対する自由度（原子座標・磁気モーメント成分）に関する二階微分から成るヘッセ行列  $H$  の定式化に成功し、その最小固有値の正值性から対象とする系の磁氣的機能・力学的な不安定性を厳密に評価するクライテリオンを開発した。本理論式を用いて、現有プログラムの改造を行い、計算装置に実装することで、磁気・力学不安定性クライテリオンの評価を可能にした。

上記で開発に成功したクライテリオンを外部磁場負荷下の磁性体（強磁性相の鉄バルク材）に適用した。図 3 は、印加した外部磁場と磁気不安定性の支配パラメータである最小固有値を示す。無磁場下では、最小固有値は正の値であることから、系は安定であることが分かる。一方、外部磁場を増加させるにつれ、最小固有値は減少している。最終的に、磁場が  $1.3325418 \times 10^4$  A/m に達した際に、最小固有値がクライテリオンである 0（臨界）に達した。この時、系の磁気モーメントがある容易化軸（ $z$  軸）から別の容易化軸（ $x$  軸）へ回転した（磁化反転現象）ことから、磁気構造が不安定となったと判断できる。すなわち、本研究で提案するクライテリオンによって、磁気特性の不安定現象を記述することに成功した。

また、提案する手法では、強誘電体適用時と同様に、最小固有値に対応する固有ベクトルを解析することで、機能不安定現象のモード（機能不安定性の起点）を特定することができる。図 4 は、図 3 で最小固有値が 0 となるものの固有ベクトルを解析し、鉄バルク材の原子構造に対して不安定モードを可視化したものである。図中の黒矢印で示す磁気モーメントが図中赤矢印に示す方向に回転するモードが見受けられる。すなわち、このモードは磁気モーメントが  $z$  方向から  $x$  方向へ回転するモードを示している。この挙動は上述の磁化反転時に特徴的にみられるものであることから、磁性体についても本クライテリオンによって、磁化反転の起点、すなわち、機能喪失モードを評価可能であることが明らかになった。

これらの成果を基に、ナノ構造を有する磁性体の不安定現象についてのアプローチを

行った。その一例として、鉄ナノ構造体である鉄単層膜（モノレイヤー）は、基板となる

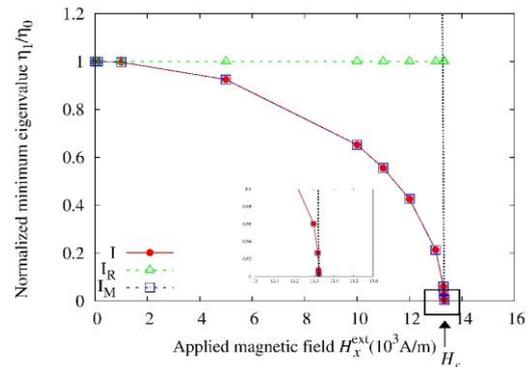


図 3. 強磁性体である鉄バルク材モデルに対する提案手法のクライテリオン（最小固有値：縦軸）と外部磁場（横軸）との関係

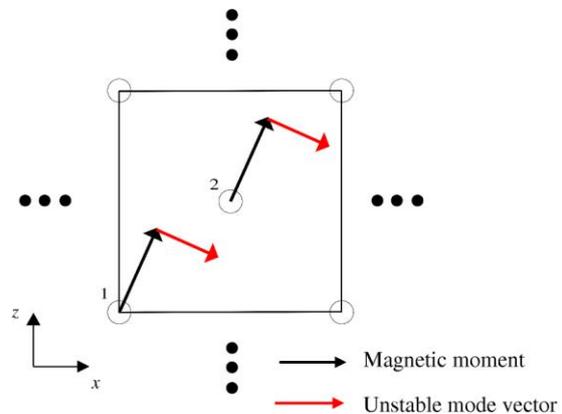


図 4. 提案手法に基づく鉄バルク材における不安定モード（機能喪失モード）

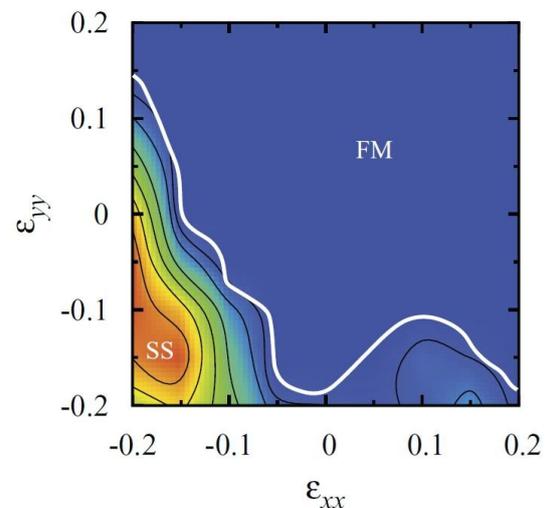


図 5. 鉄単層膜（モノレイヤー）の磁気位相の面内負荷ひずみに対する相転移マップ

材料との格子定数のミスマッチにより大きな面内ひずみを受けることが知られる。図 5 は、面内ひずみに対する鉄モノレイヤーの磁気位相変化(磁気的不安定性)を評価したものである。引張りひずみ下(正值領域)では、バルク材と同様に強磁性相(FM)が安定であるが、圧縮ひずみ下(負値領域)ではある臨界ひずみ線に沿ってFM相からスピンスパイラル相(SS)へ相転移が生じることが明らかになった。スピンスパイラル相は、磁気モーメントが平行でないノンコリニア磁性の代表的なものであり、スピントロニクスなど次世代磁気デバイスへの応用が期待されている。本成果は、海外学術誌「Physical Review B」に掲載されている。このように、ナノ構造体では負荷ひずみと機能が密接に連動しており(マルチフィジックス特性)、本手法によって元来の特性を保つ臨界値を予測することだけでなく、ナノ構造体特有の新しい機能性発現を予見できる。

#### 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 5 件)

(1) 嶋田 隆広、阪本 博、北村 隆行、「原子構造体のマルチフィジックス不安定性クライテリオン<sup>1</sup>の提案と強誘電体のドメインスイッチングへの適用」、材料、査読有、第 61 巻、pp.155-161、(2012)

DOI: 10.2472/jsms.61.155

(2) Yabin Yan, Tadahiro Kondo, Takahiro Shimada, Takashi Sumigawa, Takayuki Kitamura, “Criterion of Mechanical Instabilities for Dislocation Structures”, Materials Science and Engineering A, 査読有, Vol. 534, pp. 681-687 (2012)

DOI: 10.1016/j.msea.2011.12.027

(3) Takahiro Shimada, Junichi Okuno, Takayuki Kitamura, “Ab initio study of spin-spiral noncollinear magnetism in a free-standing Fe(110) monolayer under in-plane strain”, Physical Review B, 査読有, Vol. 85, Issue 13, Article number 134440 (7 pp) (2012)

DOI: 10.1103/PhysRevB.85.134440

(4) Takahiro Shimada, Junichi Okuno, Yoshiyuki Ishii, Takayuki Kitamura, “First-principles study of nanometer-sharp domain walls in ferromagnetic Fe monolayers under in-plane strain”, Journal of Physics: Condensed Matter, 査読有, Vol. 24, Issue

9, Article number 095303 (8 pp) (2012)

DOI: 10.1088/0953-8984/24/9/095303

(5) Takahiro Shimada, Xiaoyuan Wang, Takayuki Kitamura, “Multi-physics analysis of nano-structured ferroelectrics by first-principles simulations”, Acta Mechanica, 査読有, 掲載決定済(巻号等未定), (2013)

DOI: 10.1007/s00707-013-0873-7

[学会発表] (計 4 件)

(1) Takahiro Shimada, Noncollinear magnetic spin-spiral wave excitation in epitaxial Fe(110) monolayer from first-principles, International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials 2012 (IUMRS-ICEM2012), 2012.09.23-2012.09.28, Yokohama, Japan

(2) 嶋田 隆広、外部電場下における強誘電体の不安定性クライテリオン、日本機械学会第 24 回計算力学講演会、2011.10.08、岡山大学

(3) 嶋田 隆広、原子構造体の磁気不安定性クライテリオン<sup>1</sup>の開発とその適用、日本機械学会 M&M2011 材料力学カンファレンス、2011.07.18、九州工業大学

(4) 奥野 潤一、鉄モノレイヤーのスピンスパイラル磁気構造に関する第一原理マルチフィジックス解析、第 17 回分子動力学シンポジウム、2011.06.05、東京大学

[図書] (計 1 件)

(1) Takayuki Kitamura, Hiroyuki Hirakata, Takashi Sumigawa, Takahiro Shimada, Pan Stanford Publishing Pte. Ltd., “Fracture Nanomechanics”, pp.1-297, (2011)

[その他]

ホームページ:

<http://kitamura-lab.pl.bindsite.jp/kyoto-u/index.html>

<http://kyouindb.iimc.kyoto-u.ac.jp/j/gT3rQ>

#### 6. 研究組織

(1) 研究代表者

嶋田 隆広 (SHIMADA TAKAHIRO)

京都大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号: 20534259

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし