

平成 29 年 6 月 7 日現在

機関番号：13501

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2016

課題番号：25390147

研究課題名(和文)生物機能形態を範とする柔剛混在型スマート材料の数理設計

研究課題名(英文)Bio-inspired design of flexible and high-stiffness smart composites

研究代表者

島 弘幸 (SHIMA, Hiroyuki)

山梨大学・総合研究部・准教授

研究者番号：40312392

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：本研究課題では、力学的に柔軟な構造と剛性を有する構造を積層させた「柔剛混在型」複合材料について、植物模倣科学ならびにナノ構造物性科学の両観点からその数理設計と物性推算を行った。植物模倣科学のテーマにおいては、自然由来の柔剛混在型複合材料である「竹」を主な考察対象として、その機能美を模倣した傾斜機能型・強化シエル材料の最適デザイン理論を展開した。またナノ構造物性のテーマにおいては、sp<sup>2</sup>型のナノ炭素材料(炭素ナノコイル・炭素ナノチューブ等)について、弱い分子間力と強い共有結合の複合化に起因する特異な弾塑性変形モードの解明ならびにその変形過程が誘発する新規な形態由来量子機能の探索を行った。

研究成果の概要(英文)：In this project, I have conducted the optimal design of novel composite materials endowed with mechanical flexibility and high-stiffness, from both viewpoints of plant-mimetic science and nano-structure physics. The composite material was assumed to be composed of a flexible host medium and reinforcing fibers embedded in the medium, being typified by "bamboo", a fascinating tropical plant native to East and Southeast Asia. The results shed light on novel plant-mimetic design of structurally optimized composite with high-strength and lightweight properties. I also have considered the geometry-properties relations in sp<sup>2</sup>-based nanocarbons (carbon nanocoils, carbon nanotubes, etc), which is possibly caused by the combination of soft intermolecular bonds and strong covalent bonds in constitute carbon atoms. I found that a unique elasto-plastic deformation mode leads to quantum mechanical responses and thus holds promise for developing bio-inspired quantum devices based on sp<sup>2</sup> nanocarbons.

研究分野：ナノ構造物性、数理科学、計算科学

キーワード：生物模倣科学 生物規範工学 傾斜機能材料 形状物性相関 構造力学 竹の科学 ナノ炭素材料 ナノ構造物性

### 1. 研究開始当初の背景

スマート材料とは、外部からの刺激や周囲の環境の変化を自ら感知して、能動的な応答を示す機能性材料を意味する用語である。数ある機能性材料の中でも、動物や植物の「カタチ」または「動き」を模倣した新規スマート材料の開発は、材料力学・エネルギー・環境などの各分野において需要が極めて高い。その理由の一つは、動植物が進化の過程で獲得した、「柔」と「剛」の積層に基づく機能美にある。すなわち動植物の多くは、力学的に柔らかい母材と堅い素材を積層・複合化して各種の器官を作り出すことで、その多彩な変形過程と異方的な力学特性を実現し、生存競争を有利に進めているといえる。こうした動植物が生来的に備えている形態と機能を模倣して、柔剛混在型・複合材料の理論設計を進めることが出来れば、その成果は動植物の機能美を範とする新しい材料開発アプローチに繋がる期待があることに加え、昨今の進展が著しい生物規範工学分野の発展にも資すると考え、本研究課題を立案・申請した。

### 2. 研究の目的

本申請課題の目的は、動植物が生来備える機能形態を模倣して、先進的な機能性スマート材料をデザインすることとした。力学的に「柔らかい」素材と「堅い」素材を積層・複合化し、その組み合わせの妙によって発現する多彩な変形過程と物性変化を活用した新規機能性材料の設計開発を試みた。

模倣対象として特に注目した系のひとつは、「竹」である。竹は古くからアジア一帯に広く自生する熱帯性植物であり、日本でも北海道と東北の一部を除くすべての地域で全国的に分布している。他の植物と比べて、竹の成長は著しく早く、たった1日で1メートル伸びることも珍しくない。この際立って速い成長速度の理由は、竹の中空性にある。すなわち、光合成産物を稈内部へ充填させる必要がないため、竹は少ない材料で素早く成長できる。加えて、稈の中空性が不可避的に引き起こす力学的な脆弱性を補うべく、竹は多数の節を形成し、稈全体の強度を高める。さらに竹の断面内部には、長手方向に貫く維管束鞘(=繊維)が存在する。この繊維は弾性が高く非常に丈夫で、その引張り強度は鉄鋼材料に匹



図 1. 竹の節(左)と、断面内部における維管束鞘の傾斜分布(右)。

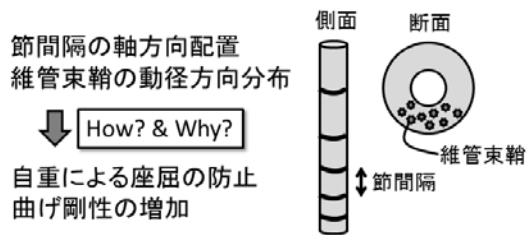


図 2. 竹模倣型・FGM 強度材料デザインの概要。

敵する。この繊維が、竹断面の内側では疎に、表皮近くでは密に分布することで、断面に作用する曲げ応力を効果的に分散する。こうした事実をもとに本テーマでは、竹が進化の過程で獲得した「最少材料・最大強度」の設計原理を模倣して、軽量・高強度型の傾斜機能材料(FGM: Functionally Graded Material)をデザインすることを試みた。竹の構造に倣い、リング補剛部の間隔と補強繊維の動径方向分布を最適化することで、軽量性と剛性を併せ持つ自然模倣型の大規模 FGM 強度部材をデザインすることをマクロ系材料の研究テーマとした。

次にナノ構造材料に関するテーマとして、sp<sup>2</sup> 型のナノ炭素材料を考察対象とし、その特異な形状物性相関の解明を目的に挙げた。同材料は、グラフェン面内での非常に強固な原子結合と、隣接グラフェン面間の比較的弱い分子間力が混在した、ナノスケールの柔剛混在型複合材料といえる。そこで本テーマでは、炭素ナノコイルの合成実験と原子構造解析を通して、コイル径・コイルピッチを制御した高品質ナノコイルの製造過程と必要条件の整理・総括を図った。加えて、炭素ナノチューブの塑性変形に関する大規模数値シミュレーションを実施し、動径方向・軸方向からの圧縮力に対する非線形力学応答と座屈モードを詳細に調べることを目的とした。

### 3. 研究の方法

植物模倣材料開発の研究テーマ実施においては、竹が生来的に獲得する最適円筒構造の自己形成メカニズム解明を図った。竹が有する高い力学的強度と柔軟性は、横架材の役目を果たす「節」の存在と、竹稈内側に存在する維管束鞘の傾斜分布に起因すると予測される。よって竹の厚さと節間隔に基づく力学機能発現メカニズムを模倣することで、中空円筒構造の最適補剛理論を提案できるとの着想から、観察・理論・実験を跨ぐ複合型研究を実施した。具体的には、長野県中野市および九州各地で自生する様々な種の竹(モウソウチク・マダケ・ハチクなど)の形態を実地調査し、根本から先端に至るまでの節間長・稈直径・肉厚の長手方向変化を調べた。さらに、胸高・根本

における節間長と稈直径を延べ 100 本以上の竹に対して測定し、各量間の相関有無を調べた。データ解析段階では、構造力学理論から導出される特性指数に注目し、曲げ変形に対する補剛効果と断面扁平抑制効果の度合いを定量化した。この実測データを基に、弾塑性理論を用いた薄肉円筒構造の近似モデルを構築し、引っ張り剛性・曲げ剛性に対する節および内部繊維の影響を定量的に推算した。

ナノ材料の研究テーマでは主に、各種の果実・野菜が自己組織する畝状隆起形状を模倣したナノデバイス設計を推進した。具体的には、曲面型ナノ炭素材料に外圧を加えた際の、弾性座屈と塑性変形プロセスを、理論・数値計算の両面から推算した。理論解析においては、連続体弾性シェル近似に基づく安定性評価を行い、多層グラフェン構造に内在する炭素原子間の「強い」共有結合と、隣接炭素シート間の「弱い」分子間力の競合が、炭素シートの畝状座屈を誘発する理論背景を明らかにした。また数値計算シミュレーションでは、外圧下におけるナノ炭素シートの原子配置と電子状態を、独自の分子動力学計算コードにより解析し、畝状座屈状態におけるシート内炭素原子の立体配置と電子状態を算出した。これらの内容に加えてナノ材料のテーマ研究ではさらに、コイル形状の力学特性を活用した電磁遮蔽材料の設計を行った。コイル形状をもつ構造体は、ツル性植物・巻貝に始まり、生命体を構成する DNA 分子・蛋白質に至るまで、私たちの周りに普遍的に存在する。そこで、導電性をもつ炭素ナノコイルの誘電損失と、コイル径ならびにコイルピッチとの相関関係を記述する基礎理論を整備し、同材料の電磁波吸収特性を評価するための基礎方程式の構築を試みた。

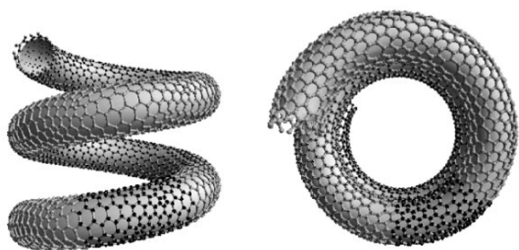


図 3. 炭素ナノコイルの原子構造イメージ [I. Milošević, et al. Phys. Stat. Solidi B (2012)].

#### 4. 研究成果

野生の竹が示す特異な中空円筒構造に注目し、竹の節間板と竹稈内部を軸方向に貫く繊維(維管束鞘)がどのような機能をもつかを、構造力学・植物生理学の両視点から解明した。その結果、竹は横風等の外力による変形・座屈を防ぐべく、上下に隣り合う節同士の間隔を自律的に最適化していることを初めて定量的に検証することができた。すなわち竹の曲げ剛性の物理的起源は、地表からの高さに応

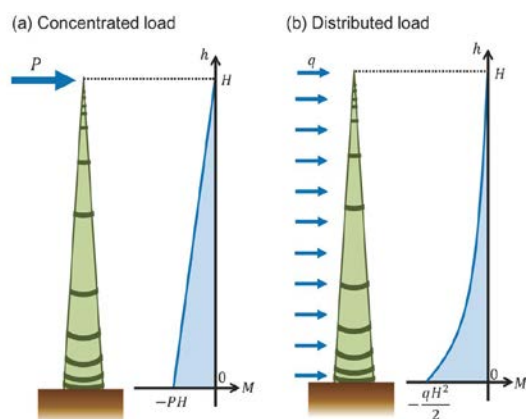


図 4. 竹の節の不均一分布と、横風による曲げモーメント分布の関係。(左)先端へ荷重が集中した場合。(右)竹稈全体に均一な荷重を加えた場合。

じて合理的に変化している点であることがわかった。すなわち根本付近では節間隔を狭めて自重による座屈を防ぎ、中央部では節間隔を広くとって横風や雪の重みに対する変形を許し、先端付近では節から伸びる枝の重みを支える役割を節が果たすのみであるとわかった。具体的には、下記で定義される力学パラメータを新たに導入し、自重や横風に対する竹稈の抵抗力を評価した。

$$\Omega \equiv \left( \frac{E_{\perp}}{E_{\parallel}} \right)^{\frac{1}{4}} \cdot \left( \frac{\ell^2 w}{r^3} \right)^{\frac{1}{2}}$$

ここで  $E_{\parallel}$  と  $E_{\perp}$  はそれぞれ、竹の長手方向および断面方向に対するヤング率を意味する。 $\ell$  は隣接する節同士の間隔、 $w$  は竹の肉厚、 $r$  は竹の断面半径である。国内の様座な竹林で得た実測データをもとに、力学理論を用いて竹稈の機能美の物理起源を解明した本成果は、**米国物理学会の発行する Physical Review E 誌に、注目論文(Editor's' Suggestion)として掲載された。**

さらに本テーマでは、竹断面で観測される竹繊維の傾斜分布が、竹稈全体の曲げ剛性を著しく高めることを理論的に示すことができた。具体的には、中空円筒内部の強化繊維をどのように傾斜分布させれば、構造全体の曲げ剛性を最大化できるかを理論的に解明した。その結果、次のことが明らかとなった。i) 断面を貫く繊維の総数が少ない場合は、繊維密度を内側から外側へ向かって一次関数に従い(直線的に)増加させることで、その断面位置における竹の曲げ剛性を最大にできる。ii) 断面を貫く繊維の総数が多い場合は、繊維密度を内側から外側へ向かって二次関数に従い増やすことで、竹全体の曲げ剛性を最大にできる。最も興味深い成果は、野生の竹が非常に高い精度で、上記 i) ii) に示す理想型とほぼ同じ繊維分布を示しているという点である。



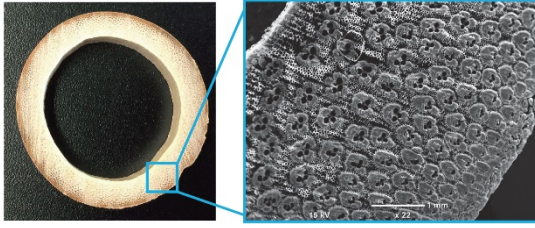


図 5. 竹断面における強化繊維(維管束鞘)の傾斜分布。

竹断面を貫く繊維の総数は、竹の根本と先端で大きく異なることがわかっている。根本の近くでは繊維の総数は多いため、二次関数形の傾斜分布が理想的である。一方先端の近くでは繊維の総数が少ないため、一次関数の傾斜分布をとることで曲げ剛性は最大となる。野生の竹から得られた測定データは、この理論的なシナリオと完全に一致した。すなわち竹の根本から先端に向かって、竹繊維の傾斜分布は二次関数形から一次関数形へ推移していくことがわかった。さらにその傾斜分布の曲線グラフは、理論予測と定量的にほぼ一致した。この成果は、竹が「最少材料・最大強度」の理念を実現した最高性能の傾斜機能材料であることを意味するとともに、本研究で提唱した力学理論が、中空円筒一般に対してその曲げ剛性を最大化するための最適傾斜分布を提供することを示すものである。**この成果は、日刊工業新聞(2017年5月9日・朝刊)を始めとする多数のメディアで紹介された。**

ナノ炭素ベースの物性推算研究においては、多層カーボンナノチューブに高静水圧または軸圧縮力を加えた際の座屈挙動を、おもに分子動力学シミュレーションを用いて調べた。その結果、マクロな円筒シェルモデルとは異なる多数の不安定モードが内在し、その起源がナノスケール特有の離散的な分子構造に由来すること、およびその変形挙動が金属半導体転移を示す兆候を見出した。さらにらせん構造を示す特異なナノ材料である炭素ナノコイルについて、その力学特性と電気伝導特性を

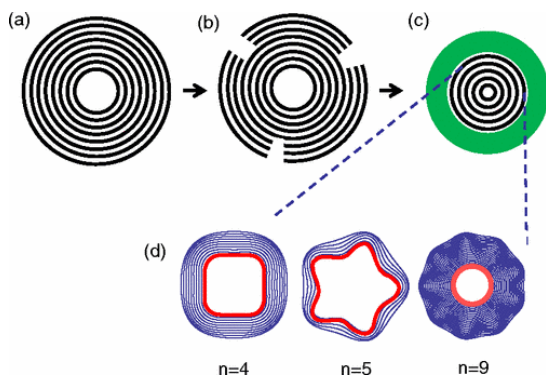


図 6. 高エネルギービーム照射下における多層炭素ナノチューブの表面欠損とそれに伴う断面波状変形概念図。

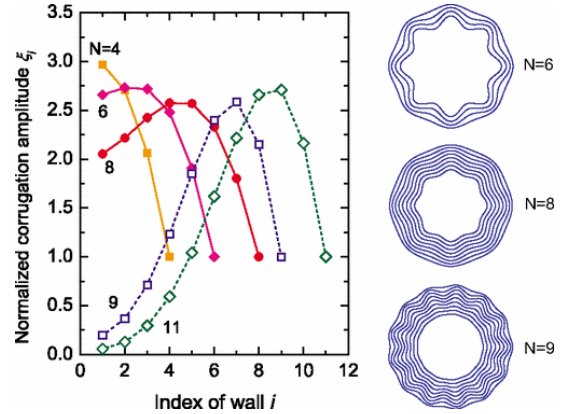


図 7. 静水圧下における多層炭素ナノチューブの断面波状変形モード解析結果。

理論・実験の両面から精査し、らせん構造に由来する幾何物性相関の度合いを考察した。加えて、らせん状ナノカーボン繊維の伸張・圧縮過程をリアルタイムで実測し、その変形に基づく電磁応答変化を電磁波遮蔽素材に応用するという生体模倣ベースの理論解析を実施し、遮蔽効果の推算に必要な基礎理論を整備した。その結果、炭素ナノコイルの電気抵抗率が、コイルのらせんピッチ・コイル径などの幾何学的特徴量に依存して系統的に変化する点、およびその温度依存性が非晶質系で広く観測される Mott-Davis 則によく従うことがわかった。それと並行して、コイルの巨視的な伸び・曲げ・捻りに起因する分子レベルでの構造変化(隣接原子間距離の変化)と、物質の導電性・誘電性との相関関係を独自の数理モデルを用いて解析し、変形が加わった際の応力分布と電磁応答特性変化を数値的に解析した。この解析を通して、電気機械デバイス(=機械的変形による電気特性変化を活用した機能素子)としての応用可能性を吟味した。さらに本研究に遂行においては、垂直配向 CMC を直接合成するための実験手法という、当初の予定にはなかった新しい研究着想を得ることができた。具体的には、基板上に石英微粒子を配列し、微粒子間の隙間から CMC を自立配向成長させるというものである。垂直配向 CMC やそのアレイ構造は当該分野においてこれまで先行研究例がなく、その学術的な意義は極めて大きい。さらに合成した CMC 垂直アレイをエラストマー母材に埋め込み、電磁シールド材料の試作とその性能評価を行うことを視野に入れ、形状パラメータ(長さ・コイル径・数密度など)の異なる様々な試作品に対して GHz 領域の電磁波を入射させ、その電磁吸収能と周波数帯域との相関関係をプロットする。さらに、エラストマーに外力を与えて内部の CMC を変形させ、この変形に伴うインダクタンス変化と電磁波吸収能変化の系統的な測定・解析を試行することができた。

**以上の成果は、30 件にわたる海外学術専門誌(すべて査読付)に原著論文として掲載したほ**

か、63 件にわたる国際会議および全国規模の研究会で発表済みである(うち 18 件は招待講演)。

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 30 件) (すべて査読あり)

1. A. Inoue, S. Tochihara, M. Sato and H. Shima: Universal node distribution in three bamboo species (*Phyllostachys* spp.), *Trees* (2017) in press. DOI: 10.1007/s00468-017-1546-2

2. M. Sato, A. Inoue and H. Shima: Bamboo-inspired optimal design of functionally graded hollow cylinders, *PLOS ONE* 12, e0175029 (2017) DOI: 10.1371/journal.pone.0175029

3. Y. Suda and H. Shima: High-purity synthesis of helical carbon nanofibers and application for energy devices, *Metal Powder Report* 71 (2016) Available online DOI: 10.1016/j.mprp.2016.06.005

4. 佐藤太裕, 谷垣俊行, 佐藤諭佳, 島 弘幸, 井上昭夫: 竹の節・組織構造が織り成す円筒体としての合理的な構造特性の理論的解明, *土木学会論文集 A2(応用力学)*, Vol. 72, No. 2, pp.I\_25-I\_34 (2016) DOI: 10.2208/jscejam.72.I\_25

5. M. Sato, Y. Yachi, I. Koike, H. Shima and Y. Umeno: Cross-sectional deformation in multi-walled carbon nanotubes under hydrostatic pressure, *Solid State Phenomena* 258, pp.65-68 (2016) DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.258.65

6. Y. Umeno, Masanobu Sato, H. Shima and Motohiro Sato: Atomistic modeling analysis of buckling behavior of compressed carbon nanotubes, *Solid State Phenomena* 258, pp.61-64 (2016) DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.258.61

7. H. Yoshioka, H. Shima, Y. Noda, S. Ono and K. Ohno: Tomonaga-Luttinger liquid theory for metallic fullurene polymers, *Physical Review B* 93, 165431 (2016) DOI: 10.1103/PhysRevB.93.165431

8. Y. Nakamura, Y. Suda, R. Kunimoto, T. Iida, H. Takikawa, H. Ue and H. Shima: Precise measurement of single carbon nanocoils using focused ion beam technique, *Applied Physics Letters* 108, 153108 (2016) DOI: 10.1063/1.4945724

9. H. Shima, M. Sato and A. Inoue: Self-adaptive

formation of uneven node spacings in a wild bamboo, *Physical Review E* 93, 022406 (2016) [= Featured as Editor's Suggestion] DOI: 10.1103/PhysRevE.93.022406

10. T. Yonemura, Y. Suda, H. Shima, H. Tanoue, H. Takikawa, H. Ue, K. Shimizu and Y. Umeda: Real-time deformation of carbon nanocoils under axial loading, *Carbon* 83, pp.183-187 (2015) DOI: 10.1016/j.carbon.2014.11.034

11. H. Shima, Y. Umeno and M. Sato: Molecular dynamics study of radial corrugation in carbon nanotubes, *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, 22, pp.423-427 (2015) DOI: 10.1080/15376494.2012.761303

12. 小池育代, 草野彩子, 佐藤太裕, 梅野宜崇, 島 弘幸: 分子動力学法を用いた多層カーボンナノチューブの波状変形挙動解析, *土木学会論文集 A2(応用力学)* Vol.70, No.2, pp.I25-I32 (2014) DOI: 10.2208/jscejam.70.I\_25

13. Y. Umeno, I. Koike, A. Kusano, H. Shima and M. Sato: Atomistic origin of radial corrugation in a few-walled carbon nanotubes: A molecular dynamics study, *Physica E* 65, pp.135-140 (2014) DOI: 10.1016/j.physe.2014.09.010

14. H. Taira and H. Shima: Optical conductivity of semiconductor crystals with a screw dislocation, *Solid State Communications* 177, pp.61-64 (2014) DOI: 10.1016/j.ssc.2013.10.002

15. S. J. Park, H. Shima and M. Sato: Kaleidoscopic mode change in cross-sectional deformation of reinforced carbon nanotubes, *International Journal of Modern Physics B* 27, 1350179 (2013) DOI: 10.1142/S0217979213501798

16. M. Sato, H. Taira, T. Ikeda and H. Shima: Embedding effect on mechanical stability of pressurized carbon nanotubes, *Journal of Nanomaterials*, 2013, 767249 (2013) DOI: 10.1155/2013/767249

[学会発表] (計 63 件) (うち招待講演 18 件)

1. H. Shima: “Physics of Nanocarbon Materials with Complex Geometry”, Joint Seminar on the Application of Nano materials in Civil Engineering (招待講演) 2016/12/19-12/21, Chosun University, Gwangju, South Korea

2. H. Shima, M. Sato, and A. Inoue: “Unveil the bamboo wisdom: Plant-mimetic design toward less-material and high-strength structure”, The 2016 World Congress on Advances in Civil,

Environmental and Materials Research (ACEM16)  
(招待講演) 2016/8/28-9/1, International  
Convention Center Jeju, Jeju Island, South Korea

3. 島 弘幸: “低次元量子物性における幾何形状効果”, 日本化学会 第96春季年会 (招待講演) 2016/3/24-3/27, 同志社大学 京田辺キャンパス (京都府京田辺市)

4. 島 弘幸: “スポーツ物理学と森林物理学: 学際研究の展開例”, 大阪大学未来研究イニシアティブ分子技術グループセミナー「分子技術と理論計算・データ科学」(招待講演) 2016/3/14-3/15, 大阪大学 基礎工学部 (大阪府豊中市)

5. H. Shima: “Geometric curvature effect on quantum mechanics”, MRS Fall Meeting 2015 (招待講演) 2015/11/29-12/4, Boston, Massachusetts, USA

6. H. Shima and Y. Suda: “Geometry, Mechanics, and Electronics of Carbon Nanocoils, Collaborative Conference on 3D and Materials Research (CC3DMR2015) (招待講演) 2015/6/15-6/19, BEXCO, Busan, Korea

7. H. Shima: “Physics of curved quantum cylinders, The International Conference on Small Science (ICSS 2013) (招待講演) 2013/12/15-12/18, Red Rock Casino, Las Vegas, USA

8. H. Shima and Y. Suda: “Synthesis of helical carbon nanofibers and their energy application, 8th International Conference on Processing and Manufacturing of Advanced Materials (THERMEC’ 2013) (招待講演) 2013/12/2-12/6, Hotel Rio, Las Vegas, USA

9. H. Shima: “Geometry-Property Relation in Condensed Matter Physics”, Expository Quantum Lecture Series 2013 (EQuaLS 2013) (招待講演) 2013/11/22-11/24, Universiti Putra Malaysia, Selangor, Malaysia

10. H. Shima: “Morphological impact on nanocarbon physics”, Collaborative Conference on 3D & Materials Research 2013 (CC3DMR 2013) (招待講演) 2013/6/24-6/28, Ramada Jeju, Korea

11. H. Shima: “Nanocarbon materials with curved geometry”, 2nd International Congress on Advanced Materials (AM2013) (招待講演) 2013/5/16-5/19, Jiangsu University, Zhenjiang, China

[図書] (計 4 件)

1. H. Shima and J. Onoe: Topology-induced geometry and properties of carbon nanomaterials,

A single chapter in Book “Role of Topology in Material Sciences”, (Springer-Verlag, Germany, 2017)

2. H. Shima: Functional Analysis for Physics and Engineering: An Introduction, 180 pages (CRC Press, USA, 2015) [ISBN: 978-148222301-9]

3. H. Shima and Y. Suda: Mechanics of Helical Carbon Nanomaterials, Chapter 3 in Book: “Advanced Computational Nanomechanics”, (Wiley, USA, 2015) [ISBN: 978-111906893-8]

4. H. Shima: Geometry-property relation in corrugated nanocarbon cylinders, Chapter 6 in Book: “Modeling of Carbon Nanotubes, Graphene and Their Composites”, (Springer-Verlag, Germany, 2014) [ISBN 978-331901200-1]

[その他]

研究代表者ホームページ:

<http://www.ccn.yamanashi.ac.jp/~hshima/HShima-jp.html>

日刊工業新聞 2017年5月9日朝刊

<https://www.nikkan.co.jp/articles/view/0427145>

日本の研究.com 2017/05/08

<https://research-er.jp/articles/view/58159>

マイナビニュース 2016/02/13

<http://news.mynavi.jp/news/2016/02/13/058/>

山梨日日新聞 2014年2月21日朝刊

マイナビニュース 2014/02/21

<http://news.mynavi.jp/news/2014/02/21/475/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

島 弘幸 (SHIMA, Hiroyuki)

山梨大学・総合研究部・准教授

研究者番号: 40312392