

mdspass2 チュートリアル (Part 2)

2016年11月

生産技術研究所 梅野

※バイナリは 201506xx 版を使用

1. カーボンナノチューブ(CNT)の構造作成

1. Control パネルの下の方にある、File control and config creation エリアがロールアウトしていなければ、クリックしてロールアウトしてください。Create Config をクリックして、Create config パネルをポップアップアップさせます。
2. まず、CNT の構造を作成します。Atom エリアに C とタイプしてリターンキーを押します。その下の Potential は、Brenner を選択します。その下のラジオボタンは、Nanotube を選択してください。パネル上方の右側の# of rep in x/y/z 入力欄、それぞれ 1, 1, 20 と入力してください。これで、z 方向 (CNT の軸方向) にユニットセル10 個分の長さを持ったナノチューブ構造が作成されることになります。
3. その下の m of (m, n) と n of (m, n) 欄には、CNT のカイラルベクトルを入力します (カイラルベクトルについては図 1 を参照してください)。ここでは細いジグザグ型 CNT を作成することにします。m=8, n=0 としてください。
4. その下の NT cell size (x/y) 欄は、軸と垂直方向のセルサイズをいくつにするかを Å 単位で指定します。ナノチューブの直径よりある程度大きければ問題ないので、例えば 50 を入力してください。(x, y 方向には周期境界条件を課さないので、ナノチューブ直径より小さい値でない限り問題は生じません。) なお、Nanotube 構造を指定しているため、最近接原子間距離がグラフェンの実験値 0.142nm となるように構造が作成されるようになっています。従って、Lattice const. 入力欄は無視してください。

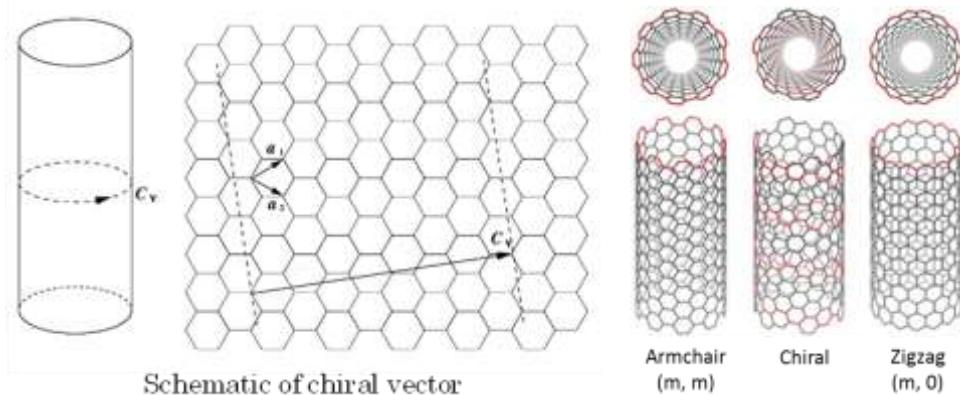


図 1 : CNT の構造を示すカイラルベクトル。 (m, n) の形で示され、 $C_v = ma_1 + na_2$ である。

5. パネルの一番下、Create をクリックしてください。MD viewer ウィンドウに構造が現れたら、Create config パネルの下の Close をクリックしてください。

2. CNT の圧縮解析

1. [周期境界条件の設定] 上記で CNT の構造ができているとします。Control パネルで、PBC x および PBC y のチェックを外し、PBC z にチェックを入れてください。
z 方向 (CNT の軸方向) のみに周期境界条件が課されます。
2. [描画条件の設定] Set param ボタンを押して Set parameters パネルを開きます。Setup for drawing をロールアウトし、Draw bond にチェックを入れ、Bond length 欄に 1.6 を入力します (値が大きいと第 2 近接原子間も接続されてしまい、見にくくなるし描画も遅くなります)。Draw Force のチェックは外しておいた方が見やすいでしょう。Sphere radius や Sphere segment は適当で良いですが、それぞれ 4, 8あたりが適当と思われます。さらに Atom color をロールアウトし、Energy にチェック、Autorange にもチェックを入れます。
3. [解析条件の設定] Relax algo は GLOC にしておきます。Deformation settings をロールアウトし、ex, ey, ez の値がゼロとなっていることを確認します。Close ボタンを押し、Set parameters パネルを閉じます。
4. [初期構造緩和] Algorithm を Relaxation (atom) にし、MD on/off を押して緩和計算を実行します。100 ステップほど行えばよいと思います。
5. [有限温度での圧縮解析] Temp set の欄に、設定温度 (例えば 100) を入力します。単位は K です。温度一定解析の MD 計算モードとするため、Algorithm を NVT にします (なお、この際に設定温度に応じた初期速度が、ボルツマン分布となるように乱数を用いてランダムに与えられます)。MD 計算の時間ステップ dt は 1.0 としておきます (単位は $fs = 10^{-15} s$)。Set param を押してパネルを開き、Deformation settings をロールアウトして ez に負の値 (例えば -0.02) を入力します (z 方向ひずみ速度)。Repeat Lz のチェックは外しておきます。Close を押してパネルを閉じます。
6. MD on/off を押し、圧縮 MD 計算を開始します。ある程度圧縮が進むと、CNT が S 字状に屈曲し、さらに進むと「く」の字に折れ曲がるので、MD on/off を押して一度 MD 計算をストップしてみます。このような屈曲、折れ曲がりは不安定変形であり、座屈と呼ばれます。
7. なお、Reset ボタンを押すと、構造作成をした直後の状態に戻ります。圧縮 MD を失敗した場合、計算条件を少し変更してみたい場合に利用してください。

3. 座屈後の状態の観察

1. MD を停止した状態で、Control パネルの視点コントローラ (Rotation, Objects XY,

Objects Z) を操作して色々な角度から原子構造を観察してください。折れ曲がった部分の一部の原子の色が変わっており、エネルギーが高くなっていることがわかります。

2. また、ボンドの組み換えが生じることで 6 員環が 5 員環や 7 員環に変化している箇所もあるかもしれませんので探してみてください。
3. 視点を操作させすぎて元に戻せなくなったときは、MD viewer 画面上をクリックして ”r” キーを押せば、視点が最初の状態に戻ります。

4. 圧縮座屈後の引張り

1. Set param を押してパネルを開き、Deformation settings 内の ez を正の値にします（例えば 0.02）。Repeat Lz のチェックが外れていることを再度確認してください。（チェックが入っていると、セルの z 方向長さが Lz(min)と Lz(max)の間に収まるように強制的に ez の符号が逆転されてしまいます）
2. Close を押してパネルを閉じ、MD on/off を押して引張り MD 解析を開始します。折れ曲がっていた箇所が徐々に引き伸ばされ、元の CNT 構造に戻っていくはずです。5 員環や 7 員環を形成するようにボンドの組み換えが起こっていた箇所も、元通りの 6 員環に戻るはずです（戻らないこともあるかもしれません）。CNT はこのように、非常に強い変形を与えてボンドの組み換えによってひずみを吸収し、除荷すると元に戻るという高い柔軟性を持った特殊な材料であることが分かります。

5. 様々な構造での座屈解析

1. 上記 1 ~ 3 までのプロセスで、CNT の構造を変えてみて、どのような座屈が起こるか試してみてください。カイラルベクトル(m,n)を例えれば(20,0)などとすると大径の CNT 構造となります。
※円筒構造の座屈問題では、径が太くなる（アスペクト比が小さくなる）と、上記のような S 字状座屈（材料力学で言うところのオイラー座屈）でなく、ドラム缶がつぶれるような座屈変形（提灯型座屈やダイヤモンド型座屈と呼ばれる）が生じることが知られています。
2. 有限温度 MD でなく、温度ゼロでの座屈をするとどうなるかも試してください。Algorithm を Relaxation にしたままで圧縮計算を開始すると、温度ゼロでの解析となります。細長い CNT でも、オイラー座屈が起らなくなることがあります。
※温度揺らぎがない場合、構造不安定点に達しても座屈が起らないことがあります（不安定平衡、図 2 を参照）。

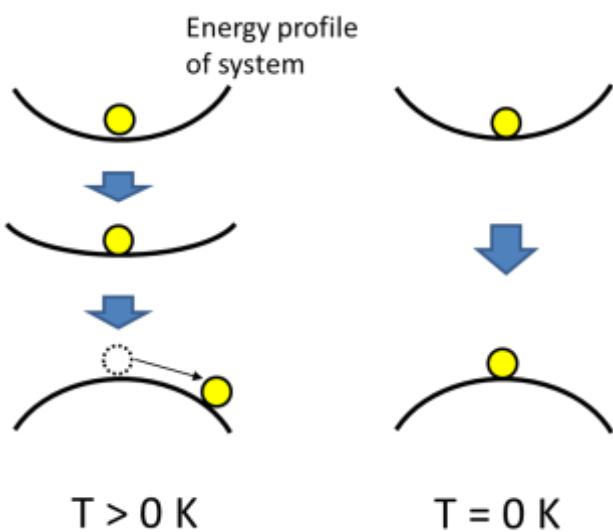


図 2：構造不安定化と不安定平衡のイメージ。