

2023 年度年次報告書
力学機能のナノエンジニアリング
2021 年度採択研究代表者

雷 霄雯

東京工業大学 物質理工学院
准教授

幾何学と力学融合に基づく回位制御による材料機能設計

研究成果の概要

本年度は、Eshelby が提唱し、R.deWit が進展させた平面の転位と回位の理論により、くさび形回位双極子と刃状転位配列の平面上の等価性の解析的検証に成功した。エネルギー運動量テンソルによる表現と応力とすべりベクトル(バーガースベクトルに対応)による表現が転位の Peach-Koehler 力の考察結果と一致することより、局所の力学場の情報に対して回位(フランクベクトルに対応)の Mathisson-Papapetrou 力を評価するには偶応力の評価が必要になるが、転位との類似性を利用することにより回位に作用する一般化力を評価できる可能性が示された。また、転位配列が離散的、回位双極子が連続的であるという相違点を除いた両者の応力場等価性を検証し、ひずみエネルギーや相互作用エネルギーなどを用いて力学的に考察した。転位配列の転位の個数を変化させて転位配列との力学場を比較したところ、転位密度が高いほど両者の力学場の差が小さいことが判明した。また、両者の力学的な等価性は転位配列の転位のバーガースベクトルの方向と配置に依存することが示された。

さらに、構築した離散構造の曲率計算をナノ積層構造体に応用した。具体的には、連続体板理論により、ある条件の積層構造体の変形を汎用的に評価する理論を得るとともに、正弦波状の薄板に類似した特定の条件下でグラファイト積層構造体について、微視的シミュレーションと巨視的理論の効果的な融合理論を構築した。グラファイト層で生成したリップロケーションの形態は、等方性材料からなる正弦波板状であると考えられ、正弦波板モデルにより表せる。理論計算の値と分子動力学法から得られたたわみ値とを比較することにより、弾性主軸方向の曲げ剛性は 6 層グラフェンの場合に非常に整合性があることが分かった。微視的シミュレーションと巨視的理論の組み合わせは、あらゆる研究分野において積層固体の変形に対する新しいアプローチとなることが明らかになった。

【代表的な原著論文情報】

- 1) 雷霄雯, 格子欠陥との出会い, 材料, 2023, 72(6) 481.
- 2) 雷霄雯, 低次元ナノ炭素材料における格子欠陥の数理解析, 材料, 2023, 72(8) 568-573.
- 3) Mengying Li, Xiao-Wen Lei*, Tong Lu, Toshiyuki Fujii, Deformation mechanism of rippllocation in silicon-graphite composites, Materials Today Communications, 2024, 38, 107794.
- 4) Mengying Li, Xiao-Wen Lei*, Toshiyuki Fujii, Deformation mechanism and minimum energy path in Silicon-graphite composites with lattice defects, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2024, 162, 115978.