

力学機能のナノエンジニアリング
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

雷 霄雯

福井大学 学術研究院工学系部門
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

§ 1. 研究成果の概要

格子欠陥の導入により発生する面外変形は二次元原子薄膜に現れるユニークな性質である。二次元弾性論に基づく従来の転位論では評価できなかった面外変形に対する力学を構築するために、二次元原子薄膜(低次元ナノ炭素の単原子結晶 GS)構造体に五員環と七員環からなる正と負の完全回位を紙模型より原子モデルに導入した。準備研究では、キリガミ技術を用いて、理想的な平面上の GS の一部に原子除去/付加で正/負の孤立回位を導入し、大規模分子動力学シミュレーションで構造解析を行い、回位の自発的な変形には幾何学との密接関係が存在し、変形能を有することを明らかにした。格子欠陥を駆動力として自発的な構造を形成に利用し、異なるフランクベクトルを有する孤立回位と回位双極子と転位配列をそれぞれに導入することにより様々な特徴的二次元原子薄膜の離散曲面を設計した。

一方、一般曲線座標系密充填理論の構築によって、格子欠陥の配置と構造不安定による変化を積極的に活用する技術の確立が可能になった。離散構造は連続体を評価する幾何学での表現は容易ではなく、独創的な考察手法では、微分幾何学で定義される第一基本形式と第二基本形式を用いて、主曲率(principal curvatures)を曲面の幾何学的な特徴の代表として、近似曲面の自発曲率を平均曲率とガウス曲率に分けて曲面の折れ曲がり具合を考察した。離散幾何学の変分原理におけるポテンシャルエネルギーと平均曲率は関係があること、およびガウス曲率はほぼ 0 である準可展面が製造可能な形状設計になることが明らかにした。回位コアは顕著な特異性が現れ、回位の特性を代表するフランクベクトルの符号と大きさは変形機構と回位場の周期性に大きい影響があり、原子の位置は曲率分布の等高線の変曲点であった。特異点附近の曲率の振る舞いにより、特異点を直観的に表現できる特異曲率を用いて離散曲面の挙動を調べた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Xiao-Wen Lei*, Shungo Shimizu, Jin-Xing Shi, “The theoretical study of kink deformation in graphite based on differential geometric method”, *Nanomaterials*, vol. 12, No. 6, pp. 903 (1-18), 2022
- 2) Yoshitada Tomioka, Toshiaki Natsuki, Jin-Xing Shi, Xiao-Wen Lei*, “Theoretical evaluation of impact characteristics of wavy graphene sheets with disclinations formed by origami and kirigami”, *Nanomaterials* , vol. 12, No. 3, 436 (1-15), 2022