

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

2022 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

研究成果の概要

昨年度に導出した一般曲線座標系密充填理論によって、今年度は格子欠陥を導入したグラフェンシート(GS)の平均曲率とガウス曲率の評価が可能になった。具体的な方法は、着目原子の近傍 3 原子がつくる平面を接平面とみなして計算を行い、着目原子から接平面に下ろした垂線の足がその 3 原子の内側にあるか、または縁上もしくはその外側にはみ出しているかどうかを判断基準として、内部と自由縁の原子との区別を自動的に行うようにしている。その結果、5 員環や 7 員環などの欠陥であれば、対応できるようになっている。接平面を求める前処理によって得られた法線とその接平面を基本として、最小二乗法により曲面を近似し、さらに法線ベクトルを微修正した比較的精度が高い式によって離散曲面の平均曲率を計算した。格子欠陥(特異点)付近の曲率の振る舞いにより離散曲面の挙動を調べ、原子遷移による離散極小曲面形状の設計とポテンシャルエネルギー最適化の評価の手法を開発した。それにより、自発曲率から回位の発生や配置または種類(符号と大きさ)を予測することも可能になると考えられる。

さらに、分子動力学シミュレーションで計算したポテンシャルエネルギーと微分幾何学で計算した平均曲率の関係を考察した。例として、くさび回位を導入したドーム型 GS モデルについて計算した。計算結果について、ポテンシャルエネルギーと平均曲率の関係を示す近似曲線は放物線であり、物理的な意味が曖昧で、評価しにくい状況であるが、ポテンシャルエネルギーと平均曲率の 2 乗値の関係を調査すると、線形の関係が見られた。格子欠陥近傍以外の平均曲率はほぼ 0 であり、自由表面を含めて考察したため、ポテンシャルエネルギーのばらつきが存在したことが分かった。

【代表的な原著論文情報】

- 1) Mengying Li, Xiao-Wen Lei*, “Molecular dynamics studies on mechanical properties and deformation mechanism of graphene/aluminum composites”, Computational Materials Science, 211, (2022), 111487.
- 2) Mengying Li, Peng-Fei Xu, Jin-Xing Shi, Xiao-Wen Lei*, “Deformation mechanism of ripplation in multilayer graphene”, Computational Materials Science, 224, (2023), 112180.