

令和 5 年 6 月 6 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2021～2022

課題番号：21K18674

研究課題名（和文）イモータル材料力学の創成

研究課題名（英文）Mechanics of immortal materials

研究代表者

平方 寛之（Hirakata, Hiroyuki）

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：40362454

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 5,000,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、グラフェンなどの原子層材料が弱いファンデルワールス相互作用で積層した多層原子層材料の変形と破壊の特性を解明するため、独自のナノ・マイクロ力学実験と離散性を考慮した力学解析を行った。その結果、多層原子層材料は、非線形かつ可逆的な曲げ変形能（自己復元性）を有すること、および、き裂の特異応力場の消失による高じん性（不破壊性）を示すことを明らかにするとともに、それらの発現機構を解明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

「材料は必ず破壊する」という従来の概念を覆し、壊れない材料を実現することは材料力学研究の究極の目標である。本研究は、高強度の原子層材料をゆるやかな相互作用で積層させた多層原子層材料に着目して、その特異な非線形可逆変形と破壊しにくい性質の力学的起源を明らかにしたものであり、高強度でありながら破壊しない材料（イモータル材料）を実現する学術的基盤を確立するものである。

研究成果の概要（英文）：In this study, to elucidate the deformation and fracture characteristics of van der Waals-layered materials such as graphite, we performed nano/micro mechanical experiments and analyses considering discrete interlayer slips. The results revealed that the van der Waals-layered materials have nonlinear and reversible bending deformability (self-restoring property) and exhibit high fracture toughness due to the disappearance of the crack singular stress field.

研究分野：機械工学

キーワード：ナノマイクロ材料力学 原子層材料

### 1. 研究開始当初の背景

材料は固有の力学特性を有し、例えば、共有結合性のセラミックスは高強度であるが、欠陥に敏感でありじん性に乏しい。一方、金属材料は延性に富み大変形を許容するが、除荷しても永久変形が残る。すなわち、材料固有の力学特性(強度と変形能)にはトレードオフがあり、打ち破ることができない物理的制約があると信じられてきた。研究代表者は、高強度の原子層材料をゆるやかな相互作用で積層させた多層原子層材料は、破壊することなく巨大な曲げ変形を許容すること、さらに、大きなヒステリシスを伴いながらも、除荷により完全に形状が復元する類を見ない力学特性を示すことを明らかにした。原子層材料は究極に薄い材料であり、一原子層または数原子層から構成される層状の結晶である。面内方向に共有結合やイオン結合などで強く結合しており、高い弾性率と強度を有する。原子層材料を積層させた多層原子層材料は、層間に結合を持たずファンデルワールス力などの弱い相互作用で吸着している。上記の特異な力学特性は、素材(元素種)によらず発現するため、この構造の特殊性に起因する力学現象によると考えらるが、その詳細なメカニズムは未解明であった。

### 2. 研究の目的

本研究では、多層原子層材料が大変形に対して「なぜ壊れないのか(不破壊性)」および「なぜ復元するのか(自己復元性)」を明らかにして、その背後にある普遍的な力学法則の解明を通じて、高強度でありながら破壊しない材料(イモータル材料)を実現する学術的基盤を確立することを目的とする。

### 3. 研究の方法

#### (1) サブミクロングラファイトの曲げ変形と自己復元

代表的な多層二次元材料である高配向性熱分解グラファイト(HOPG: Highly Oriented Pyrolytic Graphite)を対象とし、面外負荷に対する曲げ変形特性と自己復元性を解明することを目的とする。その解明のため、HOPGから集束イオンビーム(FIB: Focused Ion Beam)により加工したサブミクロン寸法の片持ちはり試験片を作製して、in situ TEM(Transition Electron Microscope)観察曲げ試験を行った。片持ちはりの曲げ試験は、せん断と曲げが同時に作用する典型的な面外負荷モードである。

#### (2) 多層原子層材料 $\text{MoTe}_2$ の特異性消失による不破壊性

破壊は局所が支配する現象であり、材料内部の欠陥による局所力学場、例えば切欠き底の応力集中やき裂先端に生じる特異応力場によりもたらされる。ここで、多層原子層材料の材料強度を考えると、結合を有するため高負荷に耐えうる面内方向負荷に対する強度が重要となる。多層原子層材料の構造異方性を考慮すると、典型的なき裂として、面内き裂(図1(a))と面外き裂(図1(b))に分類できる。このため、マイクロスケールの面内き裂および面外き裂に対する破壊じん性試験を実施した。供試材として、多層原子層材料の一種である  $\text{MoTe}_2$  を用いた。これら面内き裂と面外き裂に対する破壊じん性を比較することにより、本材料の面外き裂に対する高じん性を実証する。

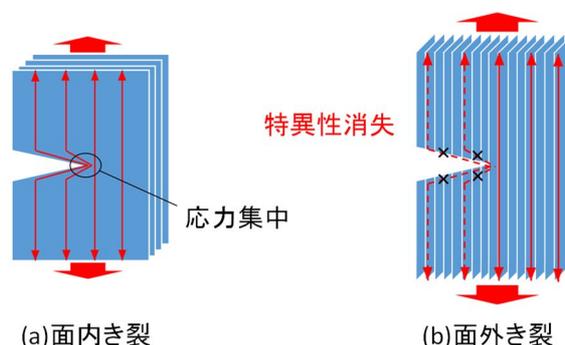


図1 多層原子層材料における面内き裂と面外き裂

#### 4. 研究成果

##### (1) サブミクロングラファイトの曲げ変形と自己復元

###### 曲げ変形特性

図2は、HOPG から FIB により加工したサブミクロン片持ちはりの典型的な曲げ変形特性を示す。荷重  $P$  - 変位  $d$  関係は非線形となり破壊することなく大きな曲げ変形を許容した。除荷により、ヒステリシスループを形成して、変形の大半が復元した。また、この変形は可逆的であり、同一試験片に対する繰り返し負荷によって同様の  $P$ - $d$  関係を示した。大きな曲げ変形は層間すべりを伴って生じた。

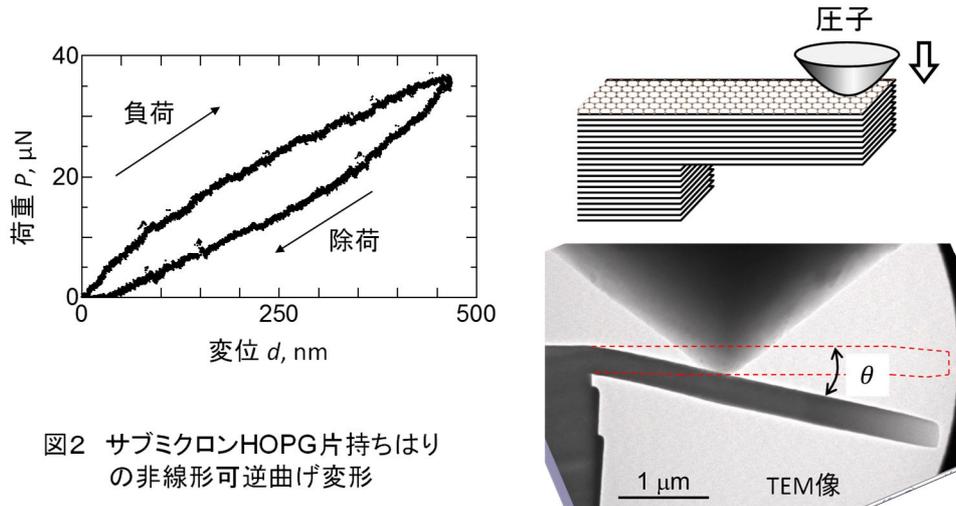


図2 サブミクロンHOPG片持ちはりの非線形可逆曲げ変形

###### 自己復元性

非線形変形の自己復元性を定量的に検討するため、in situ TEM 観察像を基にたわみ角を評価した。最大変位時のたわみ角度を  $\theta_{\text{max}}$ 、除荷後のたわみ角度を  $\theta_{\text{res}}$  として、形状の自己復元性の尺度として変形回復度  $R$  を  $R = (\theta_{\text{max}} - \theta_{\text{res}}) / \theta_{\text{max}}$  で定義した。 $R$  が大きいほど除荷により大きく復元することを意味し、 $R = 1$  は完全な復元を表す。図3は、 $R$  と  $\theta_{\text{max}}$  の関係を示す。図には寸法の異なる複数の試験片に対する結果を併せて示した。試験片寸法によらず  $R$  と  $\theta_{\text{max}}$  の関係はおおむね同じ直線帯状の領域に存在した。 $\theta_{\text{max}}$  の増大に伴い変形回復度  $R$  はおおむね線形に減少したが、例えば  $\theta_{\text{max}} = 20^\circ$  に対して  $R = 0.77$  となり、除荷により大きく形状が自己復元することがわかった。本材は大きな非線形変形を示すにもかかわらず、除荷により変形が大きく回復する自己復元性を示した。

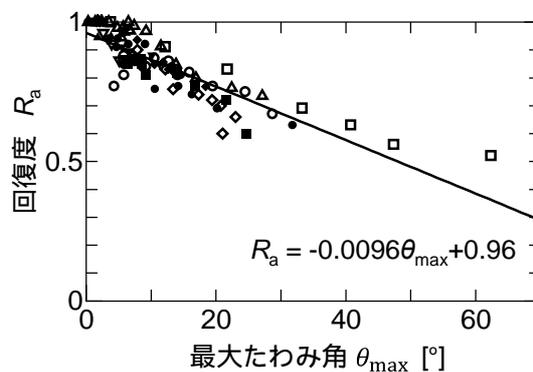


図3 曲げ変形の自己復元性

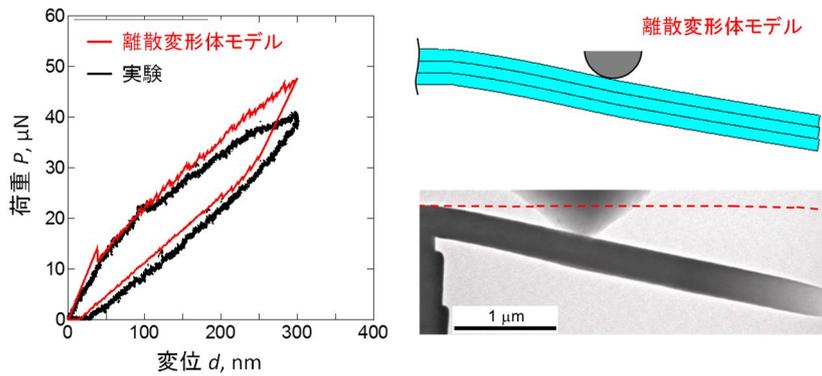


図4 離散変形体モデルによる変形解析

### 自己復元のメカニズム

多層原子層材料の非線形変形は局所的な層間すべりを伴うため、離散的な層間すべりを考慮した力学モデルを構築した。多層原子層材料を、相互作用する離散的な変形体の積層体(離散変形体モデル)としてモデル化し、層間相互作用を表すモデルとして局所化した層間すべりを再現する結合力モデルを用いた。図4は、本モデルを用いた解析結果を、対応する実験結果とともに示す。本モデルは、大きなヒステリシスループを描く非線形可逆変形を良く再現した。変形の進行に伴い、層間すべりによるエネルギー散逸が生じて非線形性を示した。除荷過程では、層間にはく離方向の垂直応力が作用することで、層間すべりに対する抵抗力が低下した。このため、変形体層の弾性ひずみエネルギーにより形状が概ね復元した。また、繰返し負荷に対して層間相互作用の低下と回復を繰返すため、エネルギー散逸を伴う非線形変形であるにも関わらず可逆的な特性を示した。

### (2) 多層原子層材料 $\text{MoTe}_2$ の特異性消失による不破壊性

#### 面内き裂

マイクロスケールの片持ちはり型シェブロン切欠き試験により、面内き裂に対する破壊じん性を評価した。図5は、試験方法とき裂進展試験のTEM像を示す。意図した通り、き裂はシェブロン切欠きに沿って進展し破壊に至った。寸法の異なる複数の試験片に対する評価試験から、面内き裂の破壊じん性は  $K_{C1} = 0.82\text{-}1.07 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$  となった。

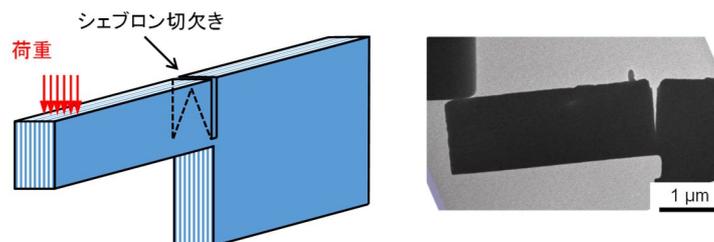


図5 マイクロ $\text{MoTe}_2$ の面内き裂破壊じん性試験

#### 面外き裂

面外き裂では離散性に起因する特異応力場消失(図1(b))により高じん性が期待されるため、破壊じん性試験には幅方向に一樣な面外切欠きを有する片持ちり曲げ試験を採用した。切欠き底からき裂が発生しても、き裂を停止できることを想定した。図6は、試験方法と典型的な試験結果を示す。一回目の負荷により、切欠き底に面外き裂が発生し、下方約1100 nm 進展して停止した。本試験により鋭い予き裂を導入できた。二回目の負荷試験では、予き裂が面外方向に進展し、切欠き底から下方約2000 nm で停止した。このとき、き裂先端から片持ちり自由端方向に層間すべりと想定される損傷が生じていた。本試験では、予き裂からのき裂進展試験に成功した。本材の面外き裂の破壊じん性は  $K_{C0} = 1.8 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$  となり、面内き裂よりも高じん性であった。

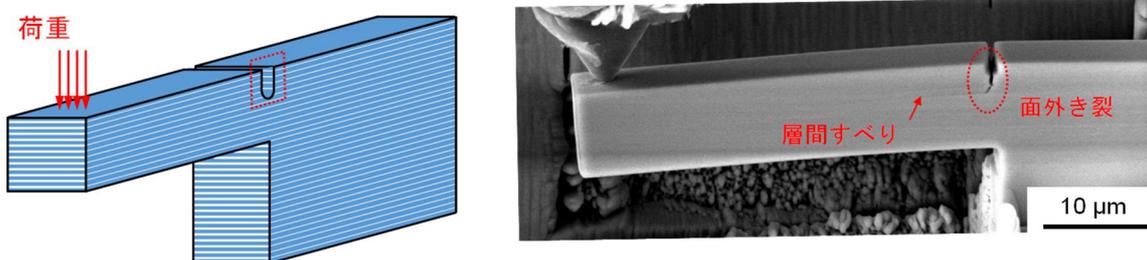


図6 マイクロMoTe<sub>2</sub>の面外き裂破壊じん性試験

### 多層原子層材料の高じん性（不破壊性）

面外き裂試験では、き裂先端に局所化した層間すべりを生じたため、離散変形体モデルを用いた力学解析を行った。図7はき裂進展開始時の変形形状と応力分布を示す。面外き裂先端は、層間すべりにより鈍化した。これは実験結果と良く整合した。このため、き裂の特異応力場が消失した。一方、面内き裂では、き裂先端に特異応力場が生じており、これにより破壊がもたらされた。面外き裂では特異応力場が消失したため、特異場応力場の強さで強度を評価する破壊力学は破綻する。しかし、き裂進展開始時の面外き裂の応力場は、面内き裂き裂に比べて広い領域で高い応力となっており、より高じん性であることが分かった。

多層原子層材料は、層間すべりを伴う大きな変形能を有し、切欠きやき裂による応力集中や特異応力場が生じにくいいため、破壊しにくい性質（不破壊性）を有する。

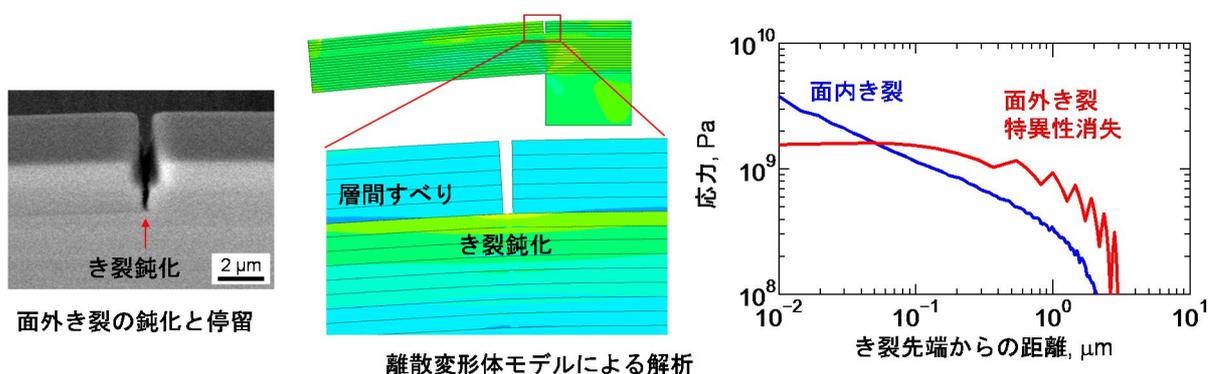


図7 多層原子層材料の特異応力場消失による高じん性(不破壊性)

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Wang P., Wang K. F., Wang B. L., Xi L., Sano K., Shimada T., Hirakata H., Fang D. N.	4. 巻 62
2. 論文標題 Interlaminar Fracture Toughness Measurement of Multilayered 2D Thermoelectric Materials Bi <sub>2</sub> Te <sub>3</sub> by a Tapered Cantilever Bending Experiment	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Experimental Mechanics	6. 最初と最後の頁 165 ~ 180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1007/s11340-021-00761-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Hirakata Hiroyuki, Fukuda Yasuyuki, Shimada Takahiro	4. 巻 55
2. 論文標題 Flexoelectric properties of multilayer two-dimensional material MoS <sub>2</sub>	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of Physics D: Applied Physics	6. 最初と最後の頁 125302 ~ 125302
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/1361-6463/ac4367	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Akiyoshi Masao, Koike Shunya, Shimada Takahiro, Hirakata Hiroyuki	4. 巻 241
2. 論文標題 Bending deformation and self-restoration of submicron-sized graphite cantilevers	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Acta Materialia	6. 最初と最後の頁 118381 ~ 118381
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.actamat.2022.118381	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hirakata Hiroyuki, Akiyoshi Masao, Masuda Ryoichi, Shimada Takahiro	4. 巻 277
2. 論文標題 High fracture toughness in van der Waals-layered MoTe <sub>2</sub> : Disappearance of stress singularity	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Engineering Fracture Mechanics	6. 最初と最後の頁 108974 ~ 108974
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.engfracmech.2022.108974	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計7件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 増田諒一, 嶋田隆広, 平方寛之
2. 発表標題 原子層積層構造における特異応力場消失による不破壊性
3. 学会等名 日本材料学会第20回破壊力学シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 高橋秀文, 福田恭之, 嶋田隆広, 平方寛之
2. 発表標題 二次元材料MoS <sub>2</sub> の面外電気 - 機械応答特性
3. 学会等名 日本材料学会第6回材料WEEK「材料シンポジウム」ワークショップ
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 秋吉雅夫, 小池駿矢, 嶋田隆広, 平方寛之
2. 発表標題 多層グラフェンの巨大曲げ変形と自己復元性
3. 学会等名 日本材料学会第6回材料WEEK「材料シンポジウム」ワークショップ
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小池駿矢, 秋吉雅夫, 上垣慎, 嶋田隆広, 平方寛之
2. 発表標題 原子層積層構造がもたらす多層グラフェンの巨大曲げ変形と自己復元性
3. 学会等名 日本機械学会M&M2021材料力学カンファレンス
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 秋吉雅夫, 小池駿矢, 嶋田隆広, 平方寛之
2. 発表標題 多層グラフェンの曲げ変形における自己復元性
3. 学会等名 日本機械学会2021年度年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 平方寛之, 増田諒一, 秋吉雅夫, 嶋田隆広
2. 発表標題 van der Waals 積層構造体MoTe2における特異応力場消失による高じん性
3. 学会等名 日本機械学会第35回計算力学講演会(CMD2022)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 秋吉雅夫, 嶋田隆広, 平方寛之
2. 発表標題 van der Waals積層構造体の曲げ変形特性に関する結合力モデル解析
3. 学会等名 日本機械学会第35回計算力学講演会(CMD2022)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

京都大学固体力学研究室  
<https://msr.me.kyoto-u.ac.jp/>  
 京都大学材料物性学研究室  
<https://material.me.kyoto-u.ac.jp/>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	嶋田 隆広  (Shimada Takahiro)  (20534259)	京都大学・工学研究科・教授     (14301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関