

令和 5 年 5 月 24 日現在

機関番号：13401

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K04174

研究課題名（和文）格子欠陥の階層性に着目した低次元ナノ炭素材料の微分幾何学と力学機能の融合設計論

研究課題名（英文）Design Methodology of Differential Geometry and Mechanical Function on Low-Dimensional Carbon Nano Materials Considering Hierarchy of Lattice Defects

研究代表者

LEI XIAOWEN (LEI, XIAOWEN)

福井大学・学術研究院工学系部門・准教授

研究者番号：50726148

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,800,000円

研究成果の概要（和文）：格子欠陥の配置や構造によって、炭素原子間の距離やエネルギー状態が変化し、低次元炭素材料の物性が変わることを機能として利用できる。理想的な炭素材料の格子構造は六員環で構成され、格子欠陥ではこれが五員環や七員環の組み合わせで表現され、格子欠陥の階層性がある。本研究では、格子欠陥を有する低次元ナノ炭素材料の力学機能曲面設計論の確立とその階層性の解明により、数学との双対性に基礎を置く格子の曲率を基本とした変形力学理論の構築を目的とした。さらに、低次元ナノ炭素材料の材料特性を改良する新たな形状付与技術を明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

格子理論の数理モデルを用いて、ナノ積層構造を有するグラファイトに曲面設計論に応用できる。さらに、層内の格子欠陥だけではなく、層間欠陥を含めた積層構造体のリップロケーションやキック変形を評価する。構築した数理モデルは、ミクロのグラファイトにとどまらず、積層セラミックス、炭素繊維強化プラスチック、層状合金、地層などマクロの積層構造体に研究対象を拡張することで、マルチスケールの積層構造体に普遍的な強化原理・格子制御原理の構築につながると予測され、数学と力学により材料工学で材料強化に貢献すると確認している。

研究成果の概要（英文）：Depending on the arrangement and structure of lattice defects, the distance between carbon atoms and their energy states change, which can be used as a function of the physical properties of low-dimensional carbon materials. The lattice structure of ideal carbon materials consists of six-membered rings, and in lattice defects, this is expressed as a combination of five- and seven-membered rings, resulting in a hierarchy of lattice defects. The purpose of this study is to establish a mechanics-functional surface design theory for low-dimensional nanocarbon materials with lattice defects and to elucidate their hierarchical nature in order to construct a deformation mechanics theory based on the curvature of the lattice, which has its basis in duality with mathematics. Furthermore, we have identified a new shape imparting technique to improve the material properties of low-dimensional nanocarbon materials.

研究分野：材料力学

キーワード：格子欠陥 階層性 微分幾何学 力学機能

1. 研究開始当初の背景

低次元炭素材料にしばしば存在する格子欠陥は、一般にナノ材料の電気特性・光学特性・機械特性を悪化させる。しかし、格子欠陥の種類や配置によって、炭素原子間の距離やエネルギー状態が変化し、低次元炭素材料の物性が変化することを機能として利用できる。理想的な炭素材料の格子構造は六員環で構成され、格子欠陥ではこれが五員環や七員環の組み合わせで表現され、格子欠陥の階層性がある。

2. 研究の目的

本研究では、格子欠陥の階層性に着目した低次元ナノ炭素材料の微分幾何学を確立し、力学機能発現機構を解明し、数学的なモデルと力学理論の融合設計論の確立を目的とする。

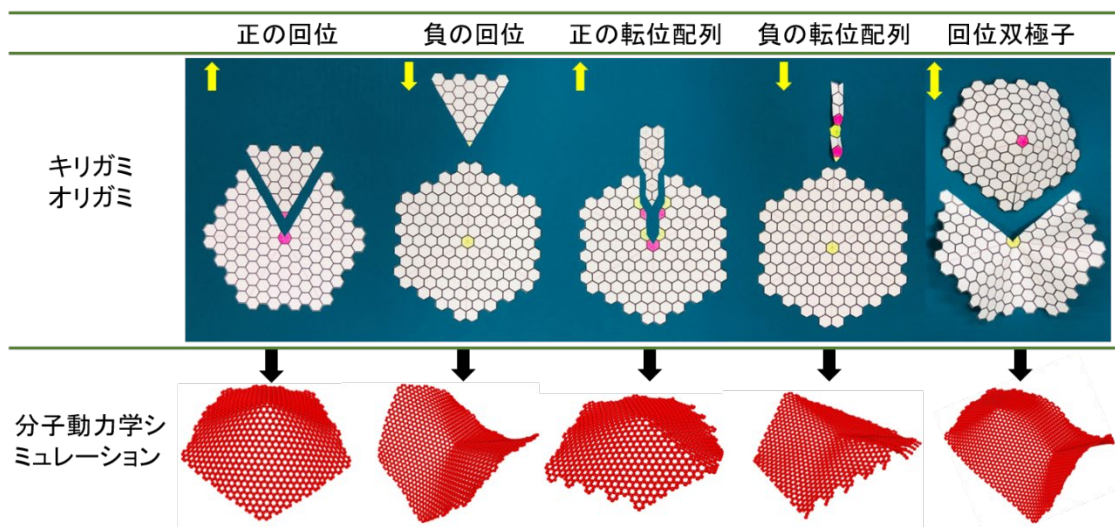
- グラフェンシート (Graphene sheet : GS) やカーボンナノチューブ (Carbon nanotube : CNT) などの可展面に六員環の周期的配列が写像された低次元ナノ炭素構造体の完全結晶に、格子欠陥を階層的に導入することによって形成される構造を安定解析し、面外変形のメカニズムを自発曲率の変化として理解する。
- ナノ構造に特有の格子欠陥の機能曲面設計論を構築し、格子欠陥を幾何学的に表現化する。
- 転位配列と回位双極子の等価性を論じ、ナノ積層構造を有するグラファイトに曲面設計論を応用し、さらに、グラファイトにとどまらず、積層セラミックス、炭素繊維強化プラスチック、層状合金、地層など積層構造を有する材料に研究対象を拡大することで、積層構造に普遍的な強化原理・格子制御の指導原理の構築と予測をする。

3. 研究の方法

力学的な観点では、Eshelby 薄板転位論をスタートとし、格子のエネルギー論による転位配列と回位双極子の等価性を新しい発想で解明する。幾何学的な観点では、面外変形が起こった構造を曲面と近似し、格子欠陥は曲面内の特異点とみなす。曲面上の特異点の近傍での主曲率の挙動 (折れ曲がりの強さの方向依存性に対応) や離散曲面に対する各種の曲率及び幾何的公式の構築 (折れ曲がりの微視的性質を数学的に表現し解析することに対応) その他の数学における未解明問題を研究して材料科学に応用しようとするもので、従来の研究とは全く異なる視点と新しい方法を提供した。その上で、力学で証明できる転位配列と回位双極子の等価性および微分幾何学で得られた曲率により、階層的な格子欠陥を表現した。材料科学から派生した格子欠陥構造の数理理論への昇華とフィードバックを行った。

4. 研究成果

【2020年度】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、まず低次元ナノ炭素構造体に五員環と七員環からなる正と負の完全回位と不完全回位 (転位配列) を紙模型より原子モデルを構築した (図1)。具体的には、理想的な平面上のGSを一部に原子除去、原子付加で正と負の回位と転位配列を導入する。共役こう配法を用いて、原子構造の初期配置構造を安定化する。同法で、格子欠陥を階層的に導入することによる自発曲率を形成し、様々特徴的な面外変形が発生し、周期的な構造が見られた。



【2021年度】前年度に考案した転位配列と回位双極子の原子モデルを用いて、分子動力学法より構造全体の応力とエネルギーを定量的に考察した。Eshelby 格子理論でエネルギーとその二次こう配を応力分布、configuration 力の等価性を証明し、近似的に連続体力学理論の定式化を行った。一方、微分幾何学で得られた曲率とサイトポテンシャルエネルギー、サイト応力の関係

をプロットし、最小二乗法による近似曲線で示した (図 2)。

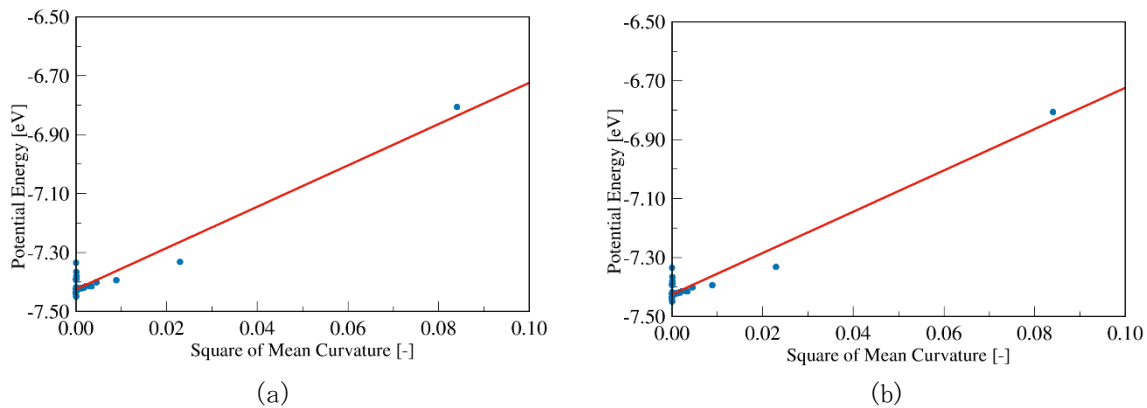
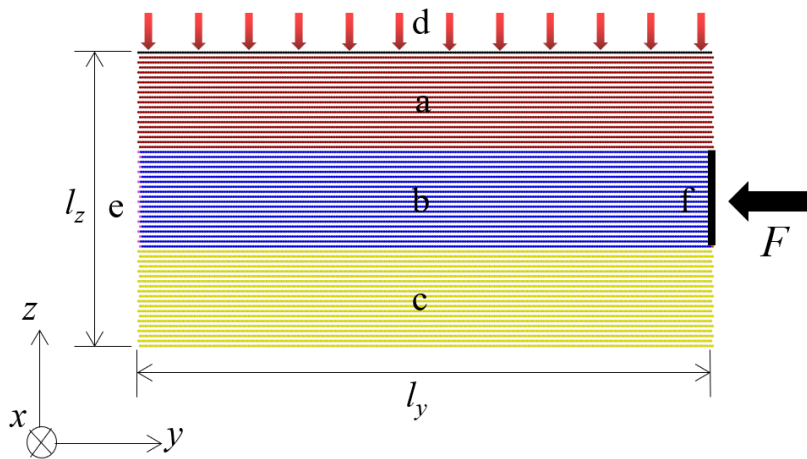
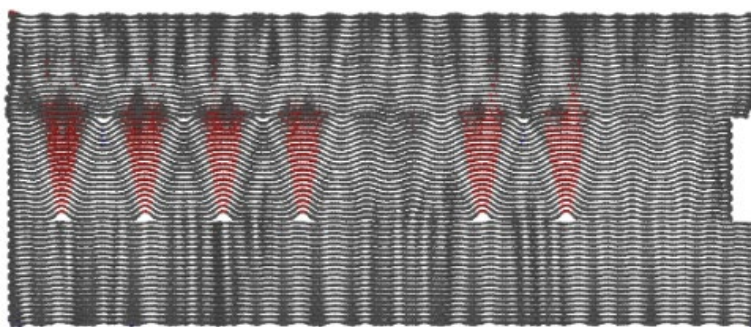


図 2 ポテンシャルエネルギーと平均曲率の関係 (a) 正の回位 (b) 負の回位

【2022年度】格子理論の数理モデルを用いて、ナノ積層構造を有するグラファイトに曲面設計論を応用した。層内の格子欠陥だけではなく、層間欠陥を含めて、積層構造体にリップロケーション変形の考察を行った (図 3)。



(a)



(b)

図 3 グラファイト中のリップロケーション (a) 解析モデル (b) 変形

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 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 Xiao-Wen Lei, Shungo Shimizu, Jin-Xing Shi	4. 巻 12
2. 論文標題 The theoretical study of kink deformation in graphite based on differential geometric method	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nanomaterials	6. 最初と最後の頁 903
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/nano12060903	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Yoshitada Tomioka, Toshiaki Natsuki, Jin-Xing Shi, Xiao-Wen Lei	4. 巻 12
2. 論文標題 Theoretical evaluation of impact characteristics of wavy graphene sheets with disclinations formed by origami and kirigami	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nanomaterials	6. 最初と最後の頁 436
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/nano12030436	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Shi Jin-Xing, Lei Xiao-Wen, Natsuki Toshiaki	4. 巻 21
2. 論文標題 Review on Carbon Nanomaterials-Based Nano-Mass and Nano-Force Sensors by Theoretical Analysis of Vibration Behavior	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Sensors	6. 最初と最後の頁 1907(1-20)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/s21051907	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Li Mengying, Lei Xiao-Wen	4. 巻 211
2. 論文標題 Molecular dynamics studies on mechanical properties and deformation mechanism of graphene/aluminum composites	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 111487 ~ 111487
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.commatsci.2022.111487	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12件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 7件）

1. 発表者名 Xiao-Wen Lei
2. 発表標題 Deformation mechanism of nano layered solid
3. 学会等名 2021 China-Japan Academic and Technical Exchange Conference on Composite Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Xiao-Wen Lei, Ako Kihara, Yoshitada Tomioka
2. 発表標題 Analysis of mechanical and geometric properties of hierarchical lattice defects in low-dimensional carbon nano-materials
3. 学会等名 The 25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (25th ICTAM) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 徐鵬飛、LEI XIAOWEN
2. 発表標題 積層構造体におけるリップロケーションの変形メカニズム解析
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 Peng-Fei Xu, Yuichi Kojima, Xiao-Wen Lei
2. 発表標題 Research on the deformation mechanism of ripplocation in layered solids
3. 学会等名 The 14th World Congress in Computational Mechanics and ECCOMAS Congress (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Xiao-Wen Lei, Ako Kihara, Tomoya Taniguchi, Shungo Shimizu
2. 発表標題 Hierarchy of lattice defects based on fusion of differential geometry and mechanical function
3. 学会等名 Webinar on Materials Science, Engineering and Technology (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yoshitada Tomioka, Xiao-Wen Lei
2. 発表標題 Geometrical and energetic analysis of curved surfaces due to disclination in graphene sheet
3. 学会等名 The 11th International Conference on Computational Method (ICCM2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Xiao-Wen Lei
2. 発表標題 Configurational force of lattice defects
3. 学会等名 The 11th International Conference on Computational Method (ICCM2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 阪東和輝、Xiao-Wen LEI
2. 発表標題 格子欠陥によるダイヤモンドナノスレッドの振動特性制御
3. 学会等名 第6回材料WEEK若手学生研究発表会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Mengying Li, Xiao-Wen Lei
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation on Mechanical properties and deformation mechanism of graphene / aluminum composites
3. 学会等名 15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 永井敦士、LEI Xiao-Wen
2. 発表標題 転位配列を有するカーボンナノチューブの変形メカニズムの解明
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 倉谷愛之介、LEI Xiao-Wen
2. 発表標題 グラフェンシートにおける回位双極子と転位配列の等価性の探求
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 LEI Xiao-Wen
2. 発表標題 低次元ナノ炭素材料の変形特性解析
3. 学会等名 材料フォーラム福井2022 (招待講演)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

ナノ機能設計学研究室  
[http://mech.u-fukui.ac.jp/~nano\\_lab/](http://mech.u-fukui.ac.jp/~nano_lab/)

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
--	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------