

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Theoretical Analysis of Deformation Mechanisms in Graphite Layered Composites
著者(和文)	LIMENGYING
Author(English)	MENGYING LI
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第12726号, 授与年月日:2024年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:LEI XIAOWEN,藤居 俊之,史 蹟,稲邑 朋也,村石 信二
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第12726号, Conferred date:2024/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	論文要旨
Type(English)	Summary

論文要旨

THESIS SUMMARY

系・コース： Department of, Graduate major in	材料 材料	系 コース	申請学位（専攻分野）： Academic Degree Requested	博士 Doctor of	(工学)
学生氏名： Student's Name	LI MENG YING		審査員主査： Chief Examiner	雷 霄雯	

要旨（和文 2000 字程度）

Thesis Summary (approx. 2000 Japanese Characters)

本論文は「グラファイト積層複合材料の変形機構の理論解析 (Theoretical Analysis of Deformation Mechanisms in Graphite Layered Composites)」と題し、5章から構成されている。

第1章「General Introduction」では、積層構造体に関する実験研究と理論研究の現状を詳述し、マルチスケール積層構造体において数理理論を用いて変形機構を普遍的に表現することは困難であり、材料機能設計に必要な有効な理論の体系化に向けた研究は大きく立ち遅れていること、さらに積層複合材料の既存理論は、面外変形が発生する現象を見落としていることが多く、層間の相互作用を効果的に反映できていないことを指摘し、積層構造体の力学モデルの構築および積層構造体の変形機構の解明という本研究の目的と意義を述べている。

第2章「Molecular Dynamics Studies on Mechanical Properties and Deformation Mechanism of Graphene/Aluminum Composites」では、分子動力学シミュレーションを用いて、引張荷重および圧縮荷重下におけるグラファイト/アルミニウムの力学的応答と微視的な構造の変形を考察し、これら2種類の荷重下における力学的応答の違いに寄与する微視的変形機構を明らかにしている。圧縮条件下のアルミニウム母相に現れる格子欠陥を調べると同時に、グラファイトの層数が複合材料のヤング率に与える影響を説明している。グラファイトの存在が界面での転位の伝播を効果的に阻止し、複合材料の力学特性を向上させることを明らかにしている。そして、グラファイトが優れた強化材として機能し、アルミニウムと組み合わせた場合にヤング率を大幅に向上させることを実証している。さらに、圧縮されたグラファイト曲面の平均曲率とガウス曲率を考察し、幾何学的手法を用いて複合材料内のグラフェン各層の変形機構を議論している。結晶構造曲面の曲率を計算するために、各原子座標に基づく新しいアプローチを適用し、3次元空間における積層構造体の変形メカニズムの評価方法を構築している。分子動力学シミュレーションと微分幾何学的手法を組み合わせることで、アルミニウム母相へのグラファイト添加による強化機構と変形機構を解明している。

第3章「Characterizing the Deformation Mechanism of Ripplcation in Silicon-Graphite Composites: A Molecular Dynamics Simulation Study Incorporating Helfrich Energy and Orthotropic Plate Theory」では、分子動力学法を用いて、荷重下で形成されるサンドイッチ構造グラファイト/シリカ複合材料のリップロケーションとその境界の変化に対して解析を行い、リップロケーションは完全に可逆的な弾性変形であることを解明し、ある条件まで圧縮すると同符号のリップロケーション境界が統合することを明らかにしている。そして、グラファイト層数と寸法がリップロケーション変形へ与える影響を詳細に考察し、グラファイトの層数が多いほど、また幅が広いほど、形成されるリップロケーションの数が少なくなり、同符号のリップロケーション同士が引き合いやすくなることを見出している。また、微分幾何学による平均曲率とガウス曲率を用いて、曲面の折れ曲がり具合を評価できるHelfrich エネルギーを考察し、積層構造体の曲面変形機構を解明している。さらに、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グラファイト積層構造体を特定の条件下で、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ている。

第4章「Deformation Mechanism and Minimum Energy Path in Silicon-Graphite Composites with Lattice Defects」では、グラファイトに格子欠陥を導入することより、グラファイト/シリコン複合材料に面外変形と応力集中が発生し、それに伴いヤング率の低下をもたらすことを明らかにしている。また、格子欠陥を有するグラファイトの層間相互作用と変形は、格子欠陥の種類、数、角度に依存することも見出している。そして、Nudged Elastic Band 法を用いて、様々な転位対の最小エネルギー形成経

路を計算し、各配置の転位対移動に必要な形成エネルギーと活性化エネルギーが異なることを明らかにし、グラファイトにおける格子欠陥の存在により、複相材料にキンク変形とリップロケーションが発生すると結論している。

第5章「General Conclusion」では、本論文で得られた結果を総括し、様々な積層構造体を有するグラファイト複合材料に対して、分子動力学、微分幾何学と連続体板理論を初めて融合することで明らかになった、スケールに依存しない積層構造体の変形機構の意義を述べている。また、この研究分野の未解決課題を指摘すると共に、今後期待される研究の発展性を具体的に提示している。

以上を要するに、本論文は分子動力学法シミュレーション、微分幾何学の平均曲率とガウス曲率を用いて計算した Helfrich エネルギー、および連続体板理論を組み合わせることで、グラファイト積層複合材料の変形機構を解明しており、微視的変形と巨視的理論を効果的に統合していることから、工業上、工学上、貢献するところが大きい。よって、本論文は博士（工学）の学位論文として十分な価値があるものと認められる。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

(博士課程)

Doctoral Program

論文要旨

THESIS SUMMARY

系・コース： Department of, Graduate major in	材料 材料	系 コース	申請学位 (専攻分野) : 博士 (工学)
学生氏名： Student's Name	LI MENG YING		審査員主査： Chief Examiner
			雷 霄雲

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words)

Using molecular dynamics (MD), this thesis explores mechanical response of graphene/aluminum under tension and compression, revealing microevolution mechanisms. It examines changes in aluminum lattice and effects of graphene layer on Young's modulus, while observing atomic structural changes during fracture. By merging methods from differential geometry, the thesis calculates external deformation, elucidating graphene's reinforcement and deformation mechanisms, thus guiding composite design. Additionally, it studies restrictive compression simulations for graphene/silicon composites, investigating ripplocation microstructural evolution. Through the integration of Corrugated Plates theory, the thesis links microscopic and macroscopic deformation. Moreover, it explores the influence various graphene defects on ripplocation deformation, explaining interlayer deformation.

The specific research objectives include:

1. Controlling graphene layer thickness in graphene/aluminum composites, we analyze their mechanical response under uniaxial tension and compression. The thesis investigates phase transitions and load distribution, clarifying plastic deformation and fracture mechanisms. Results show the addition of graphene notably boosts the yield strength of aluminum composites under tension by hindering dislocation movement. Moreover, kink and bulging deformations are observed under compression. Mean and Gaussian curvatures are calculated to quantitatively analyze material deformation.
2. By adjusting graphene size/thickness in graphene/silicon composites, we investigate ripplocation deformation under confined compression. The results indicate that ripplocations form before kink deformation during brief elastic deformation, as observed through simulations. Ripplocation bands integrate, indicating fully recoverable elastic deformation. Increasing graphene layers reduces compression stress, highlighting its significance in mechanical stimuli response. Microscopic simulation aligns with corrugated theory, offering a new approach to study layered solids. Differential geometry describes graphene's deformation during compression-induced flexure.
3. Regulating defects in graphene/silicon composites, we explore the ripplocation deformation mechanism under confined compression using the Nudged Elastic Band (NEB) method. The thesis elucidates transition states of graphene defects and their impact on ripplocation deformation. NEB calculations reveal three dislocation transition states, all corresponding to the 9th state. Under compression, kink deformation occurs at defect locations, hindering fusion states of ripplocation due to barriers.

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note: Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1 copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).