

第2章では、vdW積層材料の曲げ変形特性と自己復元特性を実験的に明らかにすることを目的とし、サブミクロンサイズのHOPG片持ちはり試験片を用いて曲げ変形実験を行った。その結果、負荷-除荷曲線は非線形、かつ可逆的であり、大きなヒステリシスループを示すことを明らかにした。複数回の繰返し試験において同様な負荷-除荷曲線が得られ、機械的特性は劣化しなかった。変形が大きくなるに伴い塑性変形が生じ自己復元性は失われるが、片持ちはり試験片のたわみ角が 62° まで変形しても、明確な破壊は観察されなかった。変形の非線形性は、高いせん断応力領域での層間すべりの発生と伝播による剛性の低下に起因すると考えられる。このようにvdW積層材料は大きな面外曲げ変形を破壊することなく許容でき、この変形は可逆的であることが示された。すなわち、本材は繰返し負荷に対して高い耐久性を発揮することができる。

第3章では、vdW積層材料における離散的な層間すべりを考慮することにより、非線形かつ可逆的な曲げ変形を普遍的に再現する力学モデルを開発した。vdW積層材料を、相互作用する連続体変形層の積層体（半離散変形層モデル）としてモデル化し、層間相互作用を局所的な層間すべりを再現する凝集力モデル（CZM）を用いてモデル化した。開発したモデルを用いた有限要素法（FEM）解析により、HOPGおよび MoTe_2 片持ちはりの曲げ変形解析を行い、実験結果との対照により本モデルの妥当性と変形メカニズムを議論した。その結果、再結合を考慮したCZMを備えた半離散変形層モデルにより、サブミクロンHOPG片持ちはりの曲げ変形特性、すなわち、ヒステリシスループを伴う非線形可逆変形を正確に再現できることを示した。本モデルにより、負荷過程と除荷過程ともに、再結合を伴う層間すべりにより非線形変形とエネルギー散逸が生じ、各変形層に蓄積された弾性力によって除荷時に変形が復元するメカニズムを明らかにした。さらに、再結合を考慮しないCZMを備えた半離散変形層モデルにより、マイクロ MoTe_2 片持ちはりの曲げ変形特性、すなわち、負荷過程の断続的な剛性低下と除荷過程の変形の復元をよく再現することを示した。これらの結果は、本研究で開発した半離散変形層モデルは、vdW積層材料の曲げ変形に対して普遍的に適用できることを示している。

第4章では、vdW積層材料の破壊機構を解明し、構造の離散性に起因する特異応力場の消失による高い破壊じん性を実証することを目的として、マイクロサイズの MoTe_2 の面内および面外き裂に対する破壊じん性試験を実施した。その結果、本材の面内き裂破壊じん性は、 $0.82\sim 1.07 \text{ MPa m}^{1/2}$ と評価された。一方、面外き裂の破壊じん性試験では、き裂先端から生じる層間すべりによりき裂先端が鈍化し、その後き裂が進展を開始した。離散的な層間すべりを考慮しない面外き裂の「見かけの」破壊じん性は、 $1.8 \text{ MPa m}^{1/2}$ と評価され、これは面内き裂の破壊じん性の約2倍であった。さらに、第3章で開発した半離散変形層モデルを用いて層間すべりを考慮した変形解析を行い、実験と同様にき裂先端が層間すべりによって鈍化し、特異応力場が消失することを明らかにした。本実験・解析結果は、vdW積層材料 MoTe_2 において、構造の離散性に起因する特異応力場の消失により面外き裂に対して高い破壊じん性を示すことを実証している。

第5章は結論であり、本論文で得られた成果について要約するとともに将来展望を述べている。

(論文審査の結果の要旨)

本論文は、ファンデルワールス (vdW) 積層材料の曲げ変形と破壊の力学的特徴を明らかにすることを目的として、面外方向の負荷に対する曲げ変形実験および破壊じん性実験を行うとともに、層間すべりに起因する離散的な変形挙動に着目した力学モデルを構築して、変形と破壊の機構と力学について研究した成果をまとめたものであり、得られた主な成果は次のとおりである。

1. サブミクロンサイズの高配向パイログラファイト (HOPG) 片持ちはり試験片に対する曲げ変形実験を行った。その結果、負荷-除荷曲線は非線形であり、大きなヒステリシスループを示すものの除荷により変形の大半が自己復元することを明らかにした。さらに、本材料は破壊することなく大きな面外曲げ変形を許容し、繰返し負荷に対して高い耐久性を発揮することを示した。

2. vdW 積層材料の離散的な層間すべりを再現するため、vdW 積層材料を相互作用する連続体変形層の積層体 (半離散変形層モデル) としてモデル化した。本モデルに基づいて、HOPG および MoTe_2 片持ちはりの曲げ変形解析を行い、実験結果との対照により妥当性と変形機構を議論した。その結果、本モデルは、サブミクロン HOPG およびマイクロ MoTe_2 の非線形曲げ変形を正確に再現できることを示した。さらに、層間すべりによるエネルギー散逸と各変形層の弾性力による変形の復元が、ヒステリシスループと自己復元を伴う非線形曲げ変形の機構であることを明らかにした。

3. マイクロ MoTe_2 試験片の面内き裂および面外き裂に対する破壊じん性試験および半離散変形層モデルを用いた変形解析を実施した。その結果、面外き裂の破壊じん性は、面内き裂の破壊じん性の約 2 倍であることを示した。さらに、面外き裂先端が層間すべりによって鈍化し、特異応力場が消失することが、高い破壊じん性の主要因であることを明らかにした。本実験と解析により、vdW 積層材料においては、構造の離散性に起因する特異応力場の消失により面外き裂に対して高い破壊じん性を示すことを実証した。

本論文は、vdW 積層構造の曲げ変形と破壊の力学的特徴を実験と力学解析により解明したものであり、学術上、實際上寄与するところが少なくない。よって、本論文は博士 (工学) の学位論文として価値あるものと認める。また、令和 6 年 6 月 21 日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。