

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 材料多様体のマルチスケールメカニクス

2. 個人研究者名

垂水 竜一（大阪大学大学院基礎工学研究科 教授）

3. 事後評価結果

連続体力学をベースに、多様体論と微分幾何学を駆使して、ナノスケールの構造を有する固体材料の力学を主とする物理特性を定式化するための基本的枠組みを構築することを目的としている。特に本研究では、結晶材料中の格子欠陥（転位や回位）を対象とした定式化に注力し、大規模数値シミュレーションによって、ナノスケールの力学特性を詳細に解析した。また、ナノ材料への適用も行った。

リーマン・カルタン多様体を用いた格子欠陥の数学的定式化に成功した。ナノスケールにおける力学理論の基盤となるものであり、その導出を高く評価する。また、数値シミュレーションへの適用を達成し、らせん転位芯近傍および刃状芯転位近傍の応力場の詳細を明らかにした。これによって、従来の解析で困難であった転位芯近傍の応力特異性の問題を解消して、ナノスケールの力学問題に対する有効性を示した。さらに、転位と回位の等価性など、基本的枠組みに基づく解析の発展性を示したことも高く評価できる。

上記定式化によって、表面の影響を組み込むことができるようになった。これは、ナノ構造体に影響が大きい形状の影響を含めた解析が可能な方法を意味しており、その成果を高く評価する。この方法に基づいて、らせん転位を含むナノワイヤーの数値シミュレーションを行って、新しいトポロジカル格子欠陥を発見している。

今後の展開と期待

基本的枠組みは完成しているので、ナノスケールで生起する力学を中心とした現象への積極的な適用によって、そのメカニズム・メカニクスへの深い理解が進展すると大いに期待している。特にナノスケールでは、形状（外部構造）と格子欠陥（内部構造）の相互作用が強く表れると考えられるため、強力な解析基盤となる。

また、ナノ力学の全体像の中では、第一原理をベースとした力学解析との関連性や接続性についての考察も重要な課題であり、その展開を大いに期待している。さらに、連続体をベースにしていることからマルチフィジックスに関する要素も取り入れることができる可能性を有している。

さきがけ「ナノ力学」チームの解析に関する自主研究会の中心であり、リーダーシップおよび企画力に優れている。卓抜した見通しと解析能力を有しており、研究の発展を望むとともに、ナノ力学分野を開拓・牽引していくことを強く期待する。