公開

研 究 終 了 報 告 書

「材料多様体のマルチスケールメカニクス」

研究期間: 2019 年 10 月～2023 年 3 月
研 究 者: 垂水 竜一

1. 研究のねらい

固体材料が持つ力学特性と機能特性は、材料の構成単位となる原子・分子の空間スケール（ナノスケール）にその物理的起源を持つ。そのため、ナノスケールにおける材料の力学・機能特性を先駆的に理解し、得られた知見を体系化して新しい学理「ナノ材料力学」を構築することは、現代の社会的要請に応え得る効率的な材料設計指針として注目されている。ナノスケールにおける材料力学研究で中心となるはサイズ効果である。サイズ効果は、本質的には表面効果の一種であるが、固体材料の力学・機能特性には複雑なマルチフィジックス現象として現れる場合が多く、その理解は十分進んでいない。すなわち、ナノ材料力学はそれ自身が未踏の研究フロンティアを構成している。これを系統的に整理して新しい学理へ昇華させるためには、ナノスケールに適した材料力学理論を構築して現象を予測する演繹的研究と、ナノスケールの力学実験から現象の本質を探る帰納的研究の、双方の視点を持った研究推進が必須である。本研究では前者の視点に立ち、ナノスケールに適した新しい材料力学理論の構築を研究目標とする。

新しい材料力学理論を構築する際の基本方針は「数学」の導入である。とりわけ、解析対象を数学的に抽象化する多様体論と、そこに形に関する情報を与える微分幾何学は必要不可欠である。これらを数学的基盤として、本研究ではナノスケールの固体材料を「材料多様体」として定義する。これは、ナノスケールにおける材料の力学・機能特性を定式化するための基本的枠組みであり、様々な解析へ自然に応用することができる。本研究では、解析対象として格子欠陥（転位と回位）を選定する。格子欠陥は、固体材料のマクロ強度を直接支配することが知られているが、従来の格子欠陥理論には多くの近似が課されており、ナノスケールの材料力学解析へ応用することができない。そこで本研究では、転位と回位を含むナノスケール材料を、捩率と曲率を備えた材料多様体（リーマン・カルタン多様体）として表現し、これを大規模有限要素解析へ実装することで、格子欠陥のマルチスケール力学特性を明らかにする。また、従来の格子欠陥論を微分幾何学に基づいて再解釈する。

2. 研究成果

（1）概要

本研究では、ナノスケール材料内部に存在する格子欠陥を解析対象として、(i)リーマン・カルタン多様体を用いた格子欠陥の数学的な定式化、(ii)構築した理論の有限要素解析（アイソジオメトリック解析）への実装、(iii)格子欠陥の力学場とそのサイズ依存性解析、および(iv)微分幾何学に基づく転位と回位の力学的等価性、について研究を行なった。これらの研究成果のうち、(i)から(iii)は当初研究計画に基づくもので、全ての研究目標を達成することができた。一方、(iv)は研究遂行に伴って新たに設定した課題である。当初計画には含まれなかったものの、その学術的重要性の優先的に取り組み、これも解決に至っている。

以下では各研究成果の概要について説明する。(i)では半世紀以上前に提案された Kondo 理論を現代的に再定式化した。この理論は転位密度テンソルと捩率形式を同一視するが、本研究では捩率形式に対する Cartan の第一構造方程式を解く方法を新規開発した。これによって、任意の転位分布を持つナノ材料を Riemann-Cartan 多様体として数学的に表現することを可能とした。(ii)はこの理論の数値計算への実装である。本研究では、数値計算に反復法を用いるが、その収束計算時にシューア補行列を用いた前処理法を適用することで、1 億自由度を超える大規模問題の非線形力学解析を可能とした。一方、これと有限要素法の不均一メッシュ分割を組み合わせることで、約 1 nm から約 1 μm に至る 3 オーダーのマルチスケール解析を実現した。(iii)は構築した理論と数値解析を用いることで、ナノ材料中の格子欠陥の力学場を解析したものである。その結果、ナノ材料中の刃状転位とらせん転位の非線形応力場と塑性力学場を初めて明らかにするとともに、それが Eshelby Twist と呼ばれる既知の実験結果と定性的に一致すること、またらせん転位に関する新しいトポロジカル欠陥が理論的に予測できることを明らかとしている。さらに、これらの結果と Riemann-Cartan 多様体の数学的な性質から、(iv)転位と回位は本質的に等価な存在であることを、理論と実際の計算例の双方から示している。また、ホロノミーを用いた回位の Frank ベクトル評価法も新たに考案た。以上の成果は、微分幾何学による格子欠陥論の再構築と呼べるものである。

(2)詳細

研究テーマ A 「Riemann-Cartan 多様体上の格子欠陥理論の再構築」

はじめに、本研究で再構築した微分幾何学に基づく格子欠陥理論の数学的特徴について説明する。まず、解析対象とする任意の転位密度の空間分布を次式で表す：$\alpha = fb^i(\partial/\partial x^i)\otimes n^j\delta_{jk}dx^k$。ここで、$f$は転位密度の動径分布関数、$b^i$は Burgers ベクトル、$n^j$は転位線方向を表している。従来の格子欠陥理論では、fには不連続な Dirac デルタ関数が用いられており、それに起因して転位線の直上で力学場が発散するという問題があった。これに対して、本研究では解析基盤を Riemann-Cartan 多様体上へ拡張したことで、fを連続関数に置き換えることができ、これによって力学場の発散問題を原理的に解決できた。一方、Cartan の第一構造方程式は次のように表される：$\tau = d\vartheta^i = d((F_p)^i_j dx^j)$。ここで、$(F_p)^i_j$は転位の作る塑性変形勾配である。Kondo 理論によると、転位密度テンソルαと捩率形式τは Hodge 双対の関係にあるため、与えられた転位密度に対する構造方程式を解くことで Riemann-Cartan 多様体が構成され、その解$(F_p)^i_j$からリーマン計量が求められる。また、Cartan の第一構造方程式の解析には Helmholtz 分解を適用することで、安定した数値解析を可能とした。

次に、この多様体をユークリッド空間へ埋め込む。この際の埋め込み写像は弾性変形を表すことから、ここでは多様体上の超弾性体に対する変分原理を用いる。このとき、応力の平衡方程式(弱形式)は次のように表される。

$$\int_{\mathcal{M}} C^{ijkl}[\vartheta]\delta_{mn}\frac{\partial h^m}{\partial x^i}\frac{\partial y^n}{\partial x^j}E_{kl}[y,\vartheta]\upsilon[\vartheta] = 0$$

ここで、$E_{kl}[y,\vartheta]$は Green-Lagrange ひずみ、hはテスト関数、υは体積要素を表している。これを埋め込み写像yについて解くと、転位による弾・塑性力学場が決定される。なお、Riemann 計量は上式中のひずみ$E_{kl}[y,\vartheta]$の中に含まれており、これが弾性変形の発生源となるため、

平衡方程式に外力項は含まれていない。
このように、本研究では格子欠陥によってナノ材料内部に生じる力学場の解析を、塑性変形（Cartan の第一構造方程式）と弾性変形（応力の平衡方程式）の二段階に分けて実施する。また、両方程式ともに境界値問題として解析しているため、ナノ力学の最大の特徴であるサイズ効果（表面効果）の影響を塑性と弾性の双方に取り入れることができる [5(3)-①]。

研究テーマ B 「直線状らせん転位と刃状転位の力学解析」

次に、上記の理論を用いて直線状のらせん転位と刃状転位に対して行った有限要素解析結果について説明する。Fig. 1 はらせん転位と刃状転位の周辺に形成される塑性変形勾配の解析結果である。いずれも等高線は転位芯の近傍に集中し、その形状は円形となるが、表面近傍では等高面が表面に直交するため分布が大きく乱れている。この結果は、ナノ材料の表面が格子欠陥の塑性変形に極めて大きな影響を与えることを意味している。

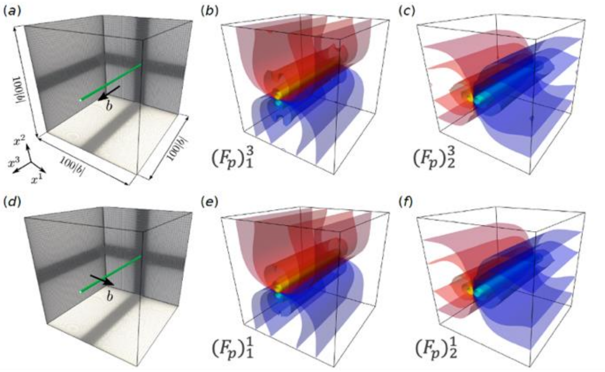

Fig. 1: Plastic deformation gradients around a screw and an edge dislocation.

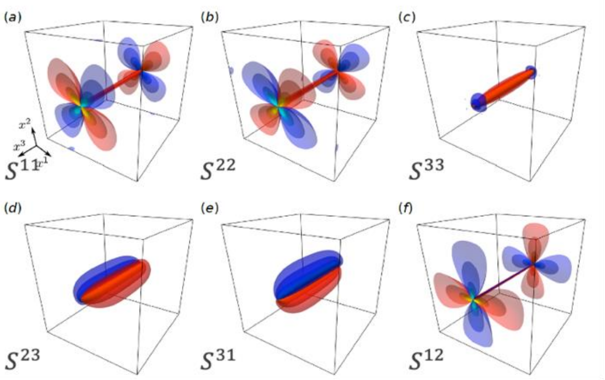

Fig. 2: Elastic stress fields around a screw dislocation.

Fig. 2 に塑性変形勾配によって生じる弾性応力場の解析結果を示す。従来の格子欠陥理論では、らせん転位の近傍に形成される非ゼロの応力は二つのせん断成分（ここではS^{23}とS^{31}）に限られるが、本解析結果にはこれらを含めて全ての応力成分が現れている。このうち、S^{11}、S^{22}、S^{12}は転位線が外部へ抜ける表面に集中しており、弾性的な表面効果により生じたものと考えられる。これに対して、S^{33}は材料内部の転位線に沿って発生していることから、非線形効果によって生じたものと考えられる。このように、本解析では転位の力学場を塑性と弾性に分離して解析できるだけでなく、それぞれに対する表面効果（サイズ効果）、および非線形力学効果を定量的に解析することができる。また、従来理論の最大の問題であった転位線直上における力学場の発散は生じていない。さらに、線形近似が有効となる転位線から遠方では、本解析結果は従来の格子欠陥論による理論解析と定量的に一致している。無論、本質的に同様の結果は刃状転位に対する応力場解析においても得られている。このように本研究では、塑性変形と弾性変形の分解、表面効果、非線形効果、力学場の特異性解消、という多くの観点から、従来の格子欠陥理論を凌ぐ一般化理論の構築と数値解析の基盤を確立することができた[5(1)-①, 5(1)-②,

5(3)-①]。また、こうして得られた非特異応力場と原子拡散に関する確率微分方程式を組み合わせることで、転位線周囲に形成される溶質原子の集積（コットレル雰囲気）過程を実時間スケールで定量解析することにも成功した [5(1)-③]。

研究テーマ C 「格子欠陥力学場のサイズ効果」

直線状の格子欠陥に対する解析法が確立したことから、この方法を用いて格子欠陥力学場のサイズ依存性解析を行った。ここで解析対象としたのは、らせん転位による Eshelby Twist である。らせん転位は転位芯の近傍にねじり変形を伴った力学場を作ることが知られている。通常、バルク材料中のらせん転位が作るねじり変形場は無視できるほど小さいが、ナノ材料ではこうした変形が無視できず、材料の縮小に伴って比ねじれ角が増加するサイズ効果が発現する。こうしたねじり変形の発現は、実験的にその存在が確認されていたものの、これを定量的に説明できる理論・数値解析法は存在しなかった。そこで本研究では、新たに構築した理論を用いてらせん転位の Eshelby Twist について解析を行った。その結果、Fig. 3 に示すように材料のスケールダウン（左から右に向かって 2 桁減少）に伴って、ねじり角が約 70 度増加することを明らかとした。このように、ナノスケールの材料中では格子欠陥自身の変形場が無視できず、そこに典型的なサイズ効果が発現することを理論的に明らかにした。

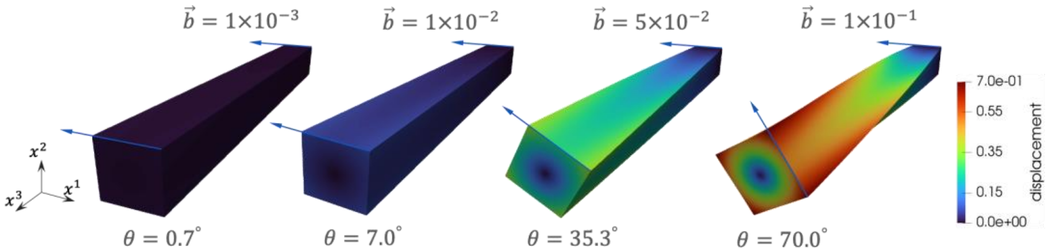

Fig. 3: Realization of Eshelby twist due to a screw dislocation in nanowire materials.

研究テーマ D 「新しいトポロジカル格子欠陥」

ナノワイヤー中のらせん転位はねじり変形を生み出すが、らせん転位を含むナノワイヤーの両端を接続することによって、閉じたナノワイヤーループを構成することができる。このようなナノ構造体はこれまで実験的に見出されていないが、その力学特性については本理論で先行的に解析することができる。そこで本研究では、ループ状のナノワイヤーの中心にらせん転位を導入し、そのねじり変形に対する力学的安定性について解析した。その結果、Fig. 4 に示すように、この構造が安定状態として存在できること、また 1 週あたりの回転角が格子欠陥を特徴付けるトポロジカル不変量と考えられることを明らかとした。これは、らせん転位成分のみを有したらせん転位ループである。この結果は、ナノ材料の世界ではバルク材料中とは異なる格子欠陥が存在することを意味している。

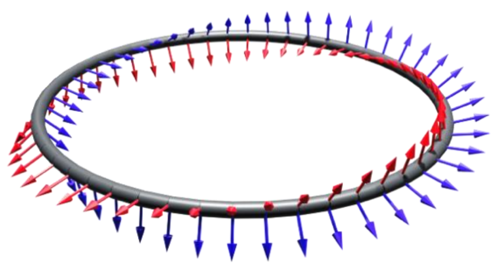

Fig. 4: A topological defect by screw dislocation.

研究テーマ E 「格子欠陥のマルチスケール力学解析」

ナノ材料中の格子欠陥は特異力学場を形成することを明らかにしたが、一方で、格子欠陥が材料のマクロ強度に与える影響について検討することも重要である。そこで本研究では、有限要素法の不均一メッシュ分割と、1 億自由度を超える大規模並列計算を組み合わせることで、転位の応力ばのマルチスケール解析を試みた。Fig. 5 に解析結果の一例を示す。ここではメッシュ分割精度を 7 段階に調節することで、転位芯近傍の応力場解析に対しては十分な解析精度を保ちながらも、解析空間スケールを Burgers ベクトルの 1,000 倍まで拡張することに成功した。転位遠方のメッシュ密度を下げれば、更なる解析空間の拡大は容易に可能である。このように、本理論の連続体力学としての利点を活用することで、空間スケールが Burgers ベクトルの 1,000 倍を超える、転移のマルチスケール力学解析が可能である。

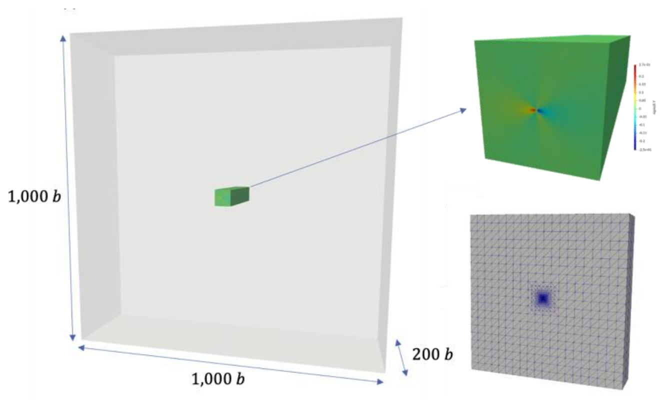

Fig. 5: Multiscale analysis for dislocation stress field.

研究テーマ F 「転位と回位の等価性」

本研究で導入した Riemann-Cartan 多様体は二種類の接続（Weitzenbock 接続と Levi-Civita 接続）を持つことが知られている。これらは転位（捩率）と回位（曲率）に相当するが、リーマン計量を固定して接続を交換することで、一つの力学場を転位と回位の双方で表現することができる。この意味で転位と回位は力学的に等価であり、両者は自由に取り替え可能である。実際、Fig. 6 に示す刃状転位密度の分布に対して、転位密度から得られる捩率を曲率に変換した結果を示す。得られた曲率分布から回位の強度を定量評価するため、本研究では新しい Frank ベクトルの評価方法を考案した。これは、微分幾何学のホロノミー解析に基づく方法で、モデル内の閉曲線 c に対して、次式で表されるベクトルの並行移動を行い、その角度変化から Frank ベクトルを決定する：$X^i/\partial t + \Gamma^i_{jk}\dot{c}^j X^k = 0$。検証の結果、直線状の刃状転位列終端の Frank ベクトルは、傾角粒界理論から予測される回転角と完全に一致した。これにより、回位を用いた格子欠陥力学解析の基盤が確立された。

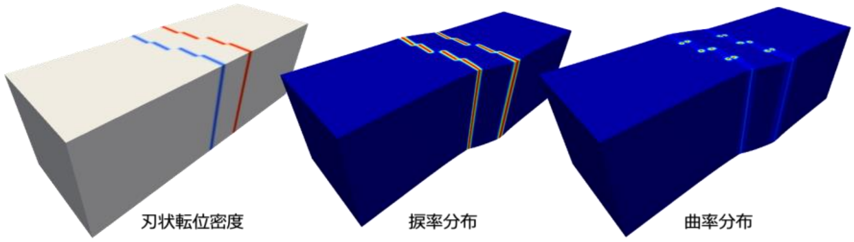

Fig. 6: Realization of Eshelby twist due to a screw dislocation in nanowire materials.

3. 今後の展開

本研究で構築した微分幾何学に基づく格子欠陥理論は、転位芯における力学場の発散問題を解決するとともに、サイズ効果解析、非線形力学解析、マルチスケール解析、および転位と回位の双方向からの解析など、ユークリッド空間内に限定された従来の格子欠陥理論と比較すると、解析できる力学現象は飛躍的に広がっている。その反面、この新しい理論の理解には理・工系の学部・大学院教育では取り扱わない数学の専門知識が必要であり、その点に関する導入障壁は極めて高い。そのため、本研究の成果が材料力学および材料科学分野へ広く浸透するためには、数十年程度の時間が必要になると考えられる。しかしながら、本理論の有用性を示す学術研究成果を積極的に発信することで、理論への関心が高まり、その浸透は大きく加速可能と考えられる。

そのため、さきがけ研究終了後から 5 年程度の間は、本理論に基づく応用研究を積極的に展開する予定である。具体的には、実験（主に TEM 観察）やシミュレーション（主に第一原理計算や分子動力学計算）との連携を検討している。これまで、格子欠陥の力学解析は主に実験とシミュレーションを中心に進められてきたが、ここに理論解析を加えることで、ナノ材料力学の新しい研究展開を積極的に生み出すことが重要と考えられる。

4. 自己評価

本研究では、研究当初に設定した理論・数値計算に関する全ての研究目標を達成することができた。その結果、様々な転位配置や空間スケールにおいて、格子欠陥のマルチスケール力学解析を実現している。こうした研究成果の中でも、とりわけ理論の数学的基盤となる Riemann-Cartan 多様体の構築に成功した点は、本研究における最大の成果と考えられる。また、この理論を基盤とした格子欠陥のナノ力学解析では、Eshelby Twist やそれを応用したトポロジカル格子欠陥に代表されるように、研究開始時には予想もしていなかった多様な格子欠陥の存在を示すことに成功した。こうした当初研究計画に加えて、研究途中で新たに着手した転位と回位の等価性に関する解析にも特筆に値する。これは、Riemann-Cartan 多様体に備えられた数学的特徴を利用したもので、微分幾何学に基づく独自の着眼点がアイデアの背景となっている。本解析によって、従来の格子欠陥力学解析に回位という新しい視点を導入することができた。またこの成果は、1 世紀以上前に Volterra によって行われた格子欠陥の現象論的な分類を、微分幾何学的な立場から再検討する必要があることを指摘している。

このように、本研究ではナノ材料力学に関する理論研究を追求することによって、新しい数学基盤を構築し、その延長線上に新しい力学現象を見出すとともに、既存の学術基盤の問題点を数理

的立場から指摘することができた。これらはいずれも、当該分野において大きな学術的貢献と考えられる。また、これらの研究成果は国際的に見ても卓越したものであり、今後はナノ材料・格子欠陥力学分野において、我が国のプレゼンスの向上に貢献できると期待される。

5. 主な研究成果リスト

（1）代表的な論文（原著論文）発表

研究期間累積件数：6件

1. 小林舜典、垂水竜一 Weitzenböck 多様体によるらせん転位のモデル化と数値解析 機械学会論文集、Vol. 87、No. 894、p. 20-00409.
Riemann-Cartan 多様体を用いて格子欠陥の力学解析を行なった最初の研究成果である。Cartan の第一構造方程式の解析にホモトピー演算子を用いることで、初めて格子欠陥の数学的な表現に成功した。また転位周辺の応力場解析も行い、転位芯での応力発散が解消できること、非線形効果によりらせん転位の周辺に静水圧応力場が現れること、線形近似が有効な転位芯の遠方では従来の Volterra 転位論の解析解に一致することを示している。この論文は、後に機械学会論文賞受賞した。
2. 小林舜典、垂水竜一 Weitzenböck 多様体による刃状転位のモデル化と数値解析 機械学会論文集、Vol. 87、No. 896、p. 21-00031.
Riemann-Cartan 多様体を用いて格子欠陥の力学解析を行なった研究成果の第二弾で、こちらは刃状転位を解析対象とした。転位芯における応力特異性の解消や、遠方での Volterra 転位論との一致はらせん転位の場合と同じだが、刃状転位周辺の静水圧応力場は正負で非対称な分布となること、またこれが非線形効果によることを明らかとした。
3. 谷山 真希, 小林 舜典, 垂水 竜一 Fokker-Planck 方程式を用いた Cottrell 雰囲気形成過程の数値解析 日本機械学会論文集、Vol. 88、No. 910 号、p.22-00077.
微分幾何学で得られた刃状転位の応力場は転位芯においても発散しない。この応力場と確率微分方程式を組み合わせることで、転位芯の近傍で生じる溶質原子の異方的拡散現象と、その後の転位芯への溶質原子の固着（コットレル雰囲気の形成）の定量解析を行なった。この解析は、連続体力学を基本としていることから時間の加速が容易であり、実時間スケールでの拡散現象解析を実現した。

（2）特許出願

該当ありません。

（3）その他の成果（主要な学会発表、受賞、著作物、プレスリリース等）

① arXiv:2205.02443 （著作物）
Shunsuke Kobayashi and Ryuichi Tarumi
Geometrical Modelling and Numerical Analysis of Dislocaion Mechanics

https://arxiv.org/abs/2205.02443

② 日本機械学会賞（論文）
小林舜典, 垂水竜一
Weitzenböck 多様体によるらせん転位のモデル化と数値解析
日本機械学会論文集第 87 巻 894 号（2021 年 2 月掲載）, 20-00409

③ 第二回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム（2022 年 5 月 29 日） 招待講演
垂水竜一
微分幾何学を用いた格子欠陥のナノ力学解析

④ 日本金属学会 2022 年秋季講演大会（9 月 23 日） 基調講演
垂水竜一
微分幾何学に基づくキンク変形解析の現状と今後の課題

⑤ MIMS 現象数理学研究拠点 共同研究集会
「幾何学・連続体力学・情報科学の交差領域の探索」（2020 年 12 月 5 日） 招待講演
垂水竜一
微分幾何学を用いた格子欠陥のモデリングと解析