

Title	相転移する力学メタマテリアルに関する研究
Author(s)	鐘ヶ江, 壮介
Citation	大阪大学, 2024, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/96064">https://doi.org/10.18910/96064</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

## 論文内容の要旨

氏名 ( 鐘ヶ江 壮介 )

論文題名 相転移する力学メタマテリアルに関する研究

材料の構造と特性の関係の理解とそれに基づく構造の制御は、新材料創成の基礎となる。一方、Additive Manufacturing (AM) 技術の発達により、サブミリからメートルレベルの構造制御が容易となった。AM技術と材料科学で得られてきた原子レベルの構造と特性の関係に関する知見を融合した格子構造の設計により、その物質が本来有さない特性を発現させることが、新しいメタマテリアル創成手法として期待される。本研究では、相転移するメタマテリアルを設計するための方策を考案し、その方策に基づいた力学メタマテリアルを設計、製造、評価することで、新しい力学メタマテリアル開発の学術的な基盤を構築した。本論文はそれらの研究成果をまとめたものであり、以下の6章で構成されている。

**第1章**では、力学メタマテリアルの研究動向を述べ、結晶性材料で生じるマルテンサイト変態の概要、マルテンサイト変態をメタマテリアルで模倣するための方策について述べた。

**第2章**では、FCC構造に基づいて $\langle 111 \rangle$ 方向への圧縮変形により擬似的に相転移する新規な多軸PXCMを開発した。多軸PXCMの $\langle 111 \rangle$ 方向の力学特性を有限要素法 (FEM) シミュレーションによって調べ、設計パラメータ、特に梁の曲がり度合いが多軸PXCMのbistabilityを決定する上で支配的な役割を果たすことがわかった。機械学習技術の一つであるInverse Designを適用することで、相転移メタマテリアルに望ましい力学特性を発現する設計パラメータを予測することが可能となった。力学特性を制御可能な多方向に変形する相転移メタマテリアルとしての多軸PXCMの可能性を実証した。

**第3章**では、相転移するメタマテリアルの変形挙動を解析する三次元FEMシミュレーション手法の開発を行った。第2章で設計したメタマテリアルを例として、3次元有限要素法 (FEM) シミュレーションを行い、変形の異方性を解析した。多軸PXCMは、 $\langle 111 \rangle$ 方向にbistabilityを示すよう設計されたが、三次元FEMシミュレーションから他の方向にもbistabilityを示す可能性が示唆された。また、多軸PXCMは $\langle 111 \rangle$ 方向に相転移する際に、変形中の弾性ひずみエネルギーが小さくなるよう $\langle 112 \rangle$ 方向に変形経路を変更して相転移することを見出した。これは結晶性材料の転位における部分転位と類似する。メタマテリアルに見られた現象と実際の結晶性材料に見られる現象には多くの類似点が見られるとともに、特有の現象も多く見出された。

**第4章**では、形状記憶効果や超弾性を発現するメタマテリアルの開発を目的として、マルテンサイト相変態を模倣する新しい力学メタマテリアルである (Martensitic Phase Transforming Metamaterial: MPXM) を設計した。MPXMはせん断変形によって2つの安定な状態間を可逆的に遷移した。マルテンサイト相変態のせん断変形過程におけるせん断ひずみに伴う弾性ひずみエネルギー変化を定式化した。本研究の成果は、熱誘起マルテンサイト変態、形状記憶効果、超弾性を示すメタマテリアルなど、新しい力学メタマテリアルの開発の開拓につながると期待される。これにより、技術革新や応用の可能性が開かれ、様々な領域における設計や機能性へのアプローチに革命をもたらす可能性があることを示した。

**第5章**では、荷重と温度に応じて状態が変化する熱誘起相転移メタマテリアルについて、FEMシミュレーションを用いて種々の荷重や温度について弾性ひずみエネルギー変化を計算し、熱誘起PXCMが安定して存在する状態を計算し、安定状態が切り替わる境界条件を計算することで熱誘起PXCMの状態図を作成した。相転移するメタマテリアルの状態図を作成することでメタマテリアルの特性制御を容易にする。本研究では、温度と応力を軸として、熱誘起相転移メタマテリアルの状態図を作成した。さらにメタマテリアルの可能性拡大すべく、音波の振動数や磁場の強さなどを軸とした状態図への展開を提案した。

**第6章**では、本論文を総括した。本研究では、相転移するメタマテリアルの設計指針として弾性ひずみエネルギー変化を求めることで設計が容易になることを見出した。材料科学の知見の応用によるメタマテリアルの発展に対する期待を述べて、本論文の締め括りとした。

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( 鐘ヶ江 壮介)		
論文審査担当者	(職)	氏 名
	主 査 教授	小泉 雄一郎
	副 査 教授	宇都宮 裕
	副 査 教授	安田 弘行

## 論文審査の結果の要旨

構造と特性の関係の理解は、構造制御による新材料創製の基礎となる。一方、Additive Manufacturing (AM) 技術の発達により、サブミリメートルからメートルレベルの自在な構造制御が可能となった。材料科学で築かれてきた構造と特性の関係に関する知見に基づく格子構造の設計と AM 技術の組み合わせにより、本来その物質が有さない特性を発現させることは、新しいメタマテリアルの創成手法となると期待される。本研究では、相転移するセルラー材料 (Phase Transforming Cellular Material: PXCM) と呼ばれる力学メタマテリアルの設計方策を考案し、その方策に基づく力学メタマテリアルの設計、製造、評価、解析を行い、新規力学メタマテリアルを創成するための学術的基盤を構築している。本論文はそれらの研究成果をまとめたものであり、以下の 6 章で構成されている。

第 1 章では、力学メタマテリアルの研究動向を俯瞰するとともに、材料科学の立場からの力学メタマテリアル創成の可能性として、機能発現の素過程となるマルテンサイト変態 (転移) の概要を説明している。また、既往研究として、一軸方向への荷重で相転移する PXCM を紹介している。加えて、設計パラメータから特性を予測する機械学習モデル、所望の特性から設計パラメータを導出する Inverse Design、さらに温度変化で相転移する熱誘起 PXCM の可能性を示し、本論文の構成を説明している。

第 2 章では、面心立方構造の結晶対称性を利用して 4 つの  $\langle 111 \rangle$  方向への圧縮変形により相転移する多軸 PXCM を提案するとともに、計算による特性予測と実験的検証の結果を示している。多軸 PXCM の  $\langle 111 \rangle$  方向の荷重での変形を、2 次元有限要素法 (FEM) によるシミュレーションで評価し、各設計パラメータの寄与を調べ、特に梁の曲がりが多軸 PXCM の bistability (双安定性) を支配することを示している。さらに、Inverse Design を多軸 PXCM にも適用し、所望の力学特性を発現する設計パラメータの予測とその実験的検証結果を示し、予測精度向上の指針を示している。

第 3 章では、多軸 PXCM の大変形挙動の異方性を解析可能な 3 次元 FEM による新規シミュレーション手法を開発するとともに、実験により検証した結果について記述している。第 2 章で 2 次元 FEM により限定的な条件で解析した多軸 PXCM の変形を、より自由度の高い条件で評価すべく、周期境界条件を適用して計算コストを抑えた 3 次元 FEM モデルを構築し、PXCM の相転移を担う大変形挙動を、複数の荷重軸にて解析している。その結果に基づいて、多軸 PXCM の変形と実際の結晶性材料の変形との間の類似性ならびに、多軸 PXCM の変形の特異性について議論している。

第 4 章では、形状記憶効果や超弾性を発現するメタマテリアルの開発を志向して、マルテンサイト変態を模倣する新しい力学メタマテリアルである Martensitic Phase Transforming Metamaterial (MPXM) の設計とその実験的検証の結果を示している。せん断にともなう短梁の引張と長梁の圧縮によって 2 つの安定状態を創出し、各状態間を可逆的に遷移させる MPXM の設計に成功している。また、MPXM のせん断に伴う弾性ひずみエネルギー変化を定式化することで、設計パラメータと力学特性の関係を定量化している。この成果は、マルテンサイトに由来する形状記憶効果や超弾性を発現する新規力学メタマテリアルの開拓の基礎となり、様々な応用に繋がる可能性があることを示している。

第 5 章では、温度変化により曲率が変化するバイメタル梁を PXCM に組み込むことで、温度変化にともなう相転移を発現する熱誘起 PXCM を提案するとともに、その計算による特性予測と実験による検証を行った結果を示している。FEM シミュレーションを用いて、種々の荷重や温度での弾性ひずみエネルギーを計算することで、熱誘起 PXCM が取り得る各状態 (相) が安定して存在する領域を温度-応力空間で示すことで熱誘起 PXCM の温度-応力状態図を作成し、これが PXCM の特性の指標となることを示している。さらに、温度-ひずみ状態図を作成し、二元系合金の温度-組成状態図の溶質濃度にひずみを対応させた解析により、与えられたひずみに対して相分率を示すことにも成功している。

第 6 章では、本研究を総括するとともに、材料科学の知見の応用による力学メタマテリアルの発展に対する展望を述べて本論文を締め括っている。

以上のように、本論文は、材料科学における構造と特性の関係の視点から、相転移する力学メタマテリアルを設計し、その変形挙動と相転移挙動の関係を、実験、計算科学、データ科学的手法により検証するとともに、力学特性制御の指針ならびに今後の力学メタマテリアル開発の可能性を示しており、材料工学の発展に寄与するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。