The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

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

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

博士学位論文

相転移する力学メタマテリアルに関する研究

鐘ヶ江　壮介

2024 年 1 月

大阪大学大学院工学研究科

目次

第1章　序論 5
1.1. メタマテリアル 5
1.1.1. 結晶性材料とメタマテリアル 5
1.1.2. 力学メタマテリアル 5
1.1.3. 変形するラティスの力学特性 7
1.2. 力学メタマテリアル設計指針としての力学特性の科学 7
1.2.1. 機能性発現の素過程としてのマルテンサイト変態 7
1.2.2. 双晶変形理論に基づくせん断型双安定性（bistability） 10
1.2.3. 形状記憶効果機構に基づく熱誘起相転移による機能発現 12
1.3. 相転移するメタマテリアル 13
1.3.1. Phase Transforming Cellular Material（PXCM） 13
1.3.2. 相転移の駆動力としてのバイメタル 20
1.3.3. 機械学習を用いたメタマテリアル設計 24
1.4. 本研究の目的 31
1.5. 本論文の構成 31
参考文献 32
第2章　原子模倣による PXCM の多軸化 41
2.1. 緒言 41
2.2. 多軸 PXCM の設計 41
2.2.1. 多軸 PXCM の設計コンセプト 41
2.2.2. 多軸 PXCM の設計パラメータ 46
2.2.3. 梁と球の位置関係と梁同士の接触を防ぐ設計 48
2.2.4. 多軸 PXCM の相対密度 49
2.3. 方法 50
2.3.1. 有限要素法（FEM）シミュレーション 50
2.3.2. 実験による実証 54

2.4. 結果と考察 55
2.4.1. FEM シミュレーションによる多軸 PXCM の変形挙動の解析 55
2.4.2. 所望の力学特性を得るための設計パラメータ予測と実験検証 64
2.4.3. 圧縮試験による変形挙動の評価 66
2.4.4. 多軸 PXCM と他の PXCM との比較 70
2.5. 小括 71
参考文献 72
第3章 原子模倣メタマテリアルのための新規大変形シミュレーション手法の開発 75
3.1. 緒言 75
3.2. 方法 75
3.2.1. 3 次元 FEM モデル 75
3.2.2. ひずみ制御法による単位格子モデルの変形シミュレーション 80
3.2.3. 境界条件設定・代表体積要素 81
3.2.4. 様々な方向への変形 83
3.2.4.1. 圧縮変形 83
3.2.4.2. せん断変形 84
3.2.5. 弾性係数テンソルの計算 85
3.2.6. 弾性異方性の可視化 88
3.3. 結果と考察 93
3.3.1. FCC およびダイヤモンド構造メタマテリアルの圧縮 93
3.3.1.1. <100>方向への圧縮 93
3.3.1.2. <110>方向への圧縮 95
3.3.1.3. <111>方向への圧縮 97
3.3.1.4. <112>方向への圧縮 99
3.3.1.5. 梁の配向性とメタマテリアルの異方性 101
3.3.2. 多軸 PXCM の圧縮 103

3.3.2.1. <100>方向への圧縮 104
3.3.2.2. <110>方向への圧縮 106
3.3.2.3. <111>方向への圧縮 108
3.3.2.4. <112>方向への圧縮 111
3.3.2.5. 多軸 PXCM の変形挙動の異方性 113
3.3.3. 実験における変形との比較 117
3.4. 小括 121
参考文献 122
第4章 マルテンサイト変態を模倣するせん断 PXCM 125
4.1. 緒言 125
4.2. マルテンサイト相変態メタマテリアル（MPXM）の設計 125
4.3. 変形挙動の解析方法 128
4.4. 結果 132
4.4.1. 解析結果 132
4.4.2. 実験結果 135
4.5. 考察 135
4.5.1. MPXM の周期性による打ち切り効果 135
4.5.2. 実際のマルテンサイト変態との類似点と相違点 139
4.6. 小括 141
参考文献 141
第5章 熱誘起相転移メタマテリアルの創製 145
5.1. 緒言 145
5.2. 熱誘起 PXCM の設計 145
5.2.1. 設計コンセプト 145
5.2.2. 設計寸法 148
5.3. 方法 150
5.3.1. FEM シミュレーション 150

5.3.1.1. たわんだ梁を変形するシミュレーション 151
5.3.1.2. 温度変化によるバイメタル梁の変形 152
5.3.1.3. 一定温度下における強制変位によるバイメタルの変形 153
5.3.1.4. 熱誘起 PXCM の特性制御のための応力-温度状態図の作成 153
5.3.2. 実験方法 153
5.3.2.1. 加熱冷却実験による熱誘起相転移の実証実験 153
5.3.2.2. 2 次元に配列した熱誘起相転移メタマテリアルの変形 154
5.4. 結果 154
5.4.1. FEM シミュレーションの結果 154
5.4.1.1. 温度変化によるバイメタル梁の変形 154
5.4.1.2. 室温における強制変位によるバイメタル梁の変形 156
5.4.1.3. 環境温度を種々に変えた強制変位によるバイメタル梁の変形 158
5.4.1.4. 熱誘起 PXCM の応力-温度状態図の作成 163
5.4.2. 実験結果 166
5.4.2.1. 加熱冷却実験による熱誘起相転移の実証実験 166
5.4.2.2. 2 次元に配列した熱誘起 PXCM の加熱実験 168
5.5. 考察 171
5.5.1. 様々な設計パラメータにおける状態図 171
5.5.2. 温度-ひずみ状態図と各の体積率 174
5.5.3. 実際の材料との比較 175
5.6. 小括 175
参考文献 176
第6章　総括 178
謝辞 180
原著論文目録 181

第1章　序論

1.1.　メタマテリアル

1.1.1.　結晶性材料とメタマテリアル

材料の特性には，力学特性，電気的特性，光学特性，磁気特性，熱的特性などがある．これらの材料特性は，材料を構成する原子の配列とそれらの原子の電子状態に由来する．この原子配列や電子状態は，原子レベルやそれ以下のスケールでの「構造」であると言える．つまり，材料内部の微小な構造によって，材料の巨視的な性質が決定づけられる．もし，それらの構造を自在に制御することができれば，任意の特性を生み出すことが可能と考えられる．しかし，原子配列や電子状態といった極小の構造を直接的に制御することは極めて困難であり，間接的に自在にコントロールすることは至難の技である．そのため，元素の組み合わせと温度，圧力の条件から得られる構造との関係をデータとして蓄積して，それらの中から所望の特性を示す原子配列を探索するのが一般的な材料設計であると言える．

一方，直接制御可能なスケールで構造を作り込み，既存物質では実現不可能な特性を発現させる材料をメタマテリアル[1–3]という．メタマテリアルは，様々な特性を制御する目的で開発されており，制御する特性に応じて力学メタマテリアル（Mechanical Metamaterial）[4,5]，電磁メタマテリアル（Electromagnetic Metamaterial）[6,7]，光学メタマテリアル（Optical Metamaterial）[8–11]，熱メタマテリアル（Thermal Metamaterial）[12,13]，音響メタマテリアル（Acoustic Metamaterial）[14,15]などと呼ばれる．

1.1.2.　力学メタマテリアル

力学特性を制御し幅広い用途で利用するため，様々な材料が開発されてきた．材料の組成や組織にとどまらず，μm オーダーや mm オーダーの空隙を制御した多孔質材料の開発が盛んに行われてきた[16]．多孔質材料や複合材料は軽くて強度が高いなど従来のトレードオフを克服する材料として注目されてきた[17]．Additive Manufacturing（AM）技術の発展により，これらの多孔質材料の開発はさらに発展し微小なスケールの構造を詳細に作り込むことでこれまでの材料になかった力学特性を発現する材料が製造されるようになり[3,18]，これが力学メタマテリアルと呼ばれるようになった．

力学メタマテリアルの構造は主に梁で構成されたラティス（lattice）[19–22]と面で構成されるシェル（shell）[23–25]，その他のフォーム（foam）[26,27]に分けられる（Fig. 1-1）．一般的には，ラティスとシェルとでは，シェルの方が高い比強度を持つ[28]．変形機構を組み込んだ力学メタマテリアルとして折り紙構造や切り紙構

造を基調としたメタマテリアルも盛んに開発されている[29,30].

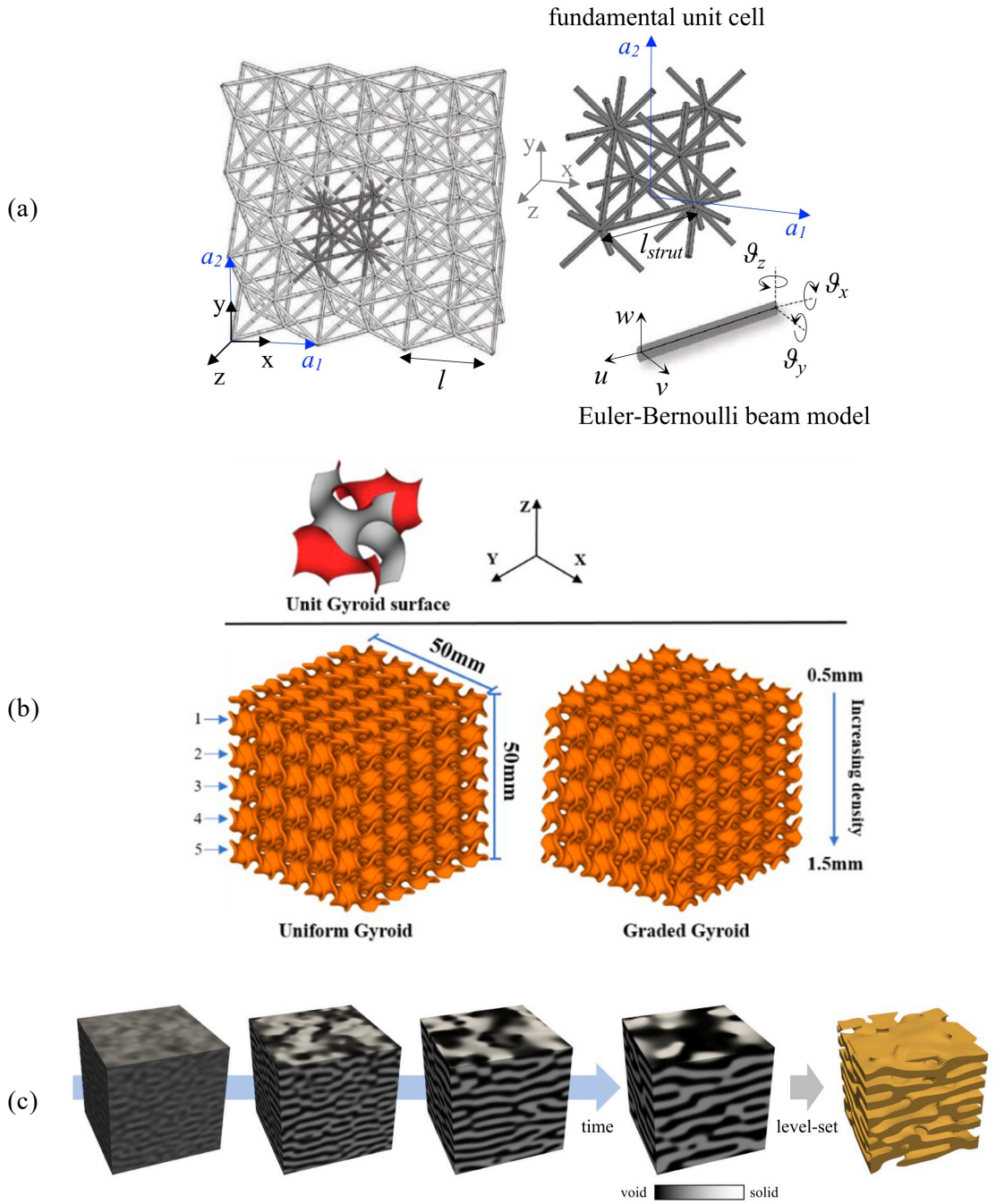


Fig. 1-1. Example of cell design of (a) lattice structures (after Aguzzi et al. [22]), (b) shell structures (after Yu et al. [25]) and (c) other foam structures (after Kumar [26]).

ラティスはメタ原子の設計により特異な弾性特性を発現させることができる. メタ原子とは周期構造であるメタマテリアルの単位構造であり, 結晶性材料の構造の

単位である原子になぞらえてそう呼ばれる．弾性特性の制御の例として有名なものに，ポアソン比が制御されたメタマテリアルがある．ポアソン比 ν は式(1-1) で表せる．

$$\nu = -\frac{\varepsilon_{\mathrm{T}}}{\varepsilon_1} \tag{1-1}$$

ここで，ε_1 は与えられた荷重の方向へのひずみ，ε_{T} は荷重軸に対して垂直な方向へのひずみである．通常の材料のポアソン比 ν は $0<\nu<0.5$ である．負のポアソン比を示すよう設計されたメタマテリアルを Auxetic メタマテリアルという．これまでに，様々な Auxetic メタマテリアルが開発されてきた[31–34]．Auxetic メタマテリアルは，局所的な荷重に対して，ひずみが発生した部分に材料が集まり密度が増加するため，押し込みに対する抗力が大きくなる．Auxetic メタマテリアルの板を湾曲させたとき，湾曲させる内側は板の面内方向に縮み，外側は板の面内方向に膨らみ，結果的に球面状に曲がる．また，他の力学メタマテリアルの例として，Pentamode Lattice がある．Pentamode Lattice では，体積弾性係数に対して横弾性係数が極端に小さいために，横波が伝わりにくく Cloaking 性に優れていると注目されている[35–37]．

1.1.3. 変形するラティスの力学特性

ラティス構造中の梁の変形モードによって，ラティス構造の剛性が変化することが Gibson と Ashby によって報告されている[38]．具体的には，$\bar{\rho}$を相対密度とすると強度は，梁が伸縮変形する場合$\bar{\rho}$に比例し，梁が曲げ変形するときは$\bar{\rho}^{1.5}$に比例する．ここで，相対密度は 0~1 の値であるため，梁が伸縮変形するラティスの方が梁が曲げ変形するラティスより高い強度を持つ．また，3D ラティスの場合，配位数が 12 以上の場合に梁は伸縮変形が支配的となり，配位数が 12 より小さい場合は梁は曲げ変形が支配的となることも報告されている[39]．例えば，BCC 構造およびダイヤモンド構造のラティスは配位数がそれぞれ 8 および 4 であるため，梁は曲げ変形し易く，FCC 構造のラティスは配位数が 12 であるため梁は伸縮変形し易い．このことは強度や剛性の高める指針となるだけでなく，変形しても破壊しにくい力学メタマテリアルを設計する上での重要な指標となる．

1.2. 力学メタマテリアル設計指針としての力学特性の科学

1.2.1. 機能性発現の素過程としてのマルテンサイト変態

相変態は，結晶性材料がいくつかの機能的な材料特性を発現するための重要な要因である．特にマルテンサイト変態は，鋼の焼入れ硬化[40,41]，形状記憶効果[42–

44], 超弾性[43,45,46]などの機能特性と密接な関係がある. マルテンサイト変態は, 原子同士の相対位置の変位が 1 原子間距離よりも小さい. すなわち, 拡散を伴わないせん断変位型相変態である. このことは, メタ原子の位置変化できる距離が制限されるメタマテリアルの構造設計にて, マルテンサイト変態を参照した設計が可能であることを示唆する.

マルテンサイト変態は結晶構造によって分類され, 主に BCC−長周期積層構造変態[47–50], FCC−FCT 変態[51,52], FCC−BCC /BCT 変態[53–55], FCC−HCP 変態[56][57]が挙げられる. そのほかにも形状記憶合金として有名な合金であるニチノール合金は上記とは異なるマルテンサイト変態を示す.

マルテンサイト変態の具体的な例を説明する. Ni-Al 合金 のマルテンサイト変態は母相を BCC 規則構造とした BCC-長周期積層構造変態である. ここでいう BCC は BCC 型の規則構造である *B*2 型や $D0_3$ 型, $L2_1$ 型の結晶構造を指す. Ni-Al 合金の母相は Fig. 1-2 に示す *B*2 型の結晶構造である. これら BCC 構造は基本的に粗な構造で母相から温度を十分に下げると, 格子振動が減少して体積が減少し, より密な構造で安定化する. このマルテンサイト変態について母相とマルテンサイト相の結晶構造を最密面の変化で比較する. 母相は 3 つの隣接する原子のなす角が 70.32°を示し正三角形ではないので最密充填ではない (Fig. 1-3a). 一方, マルテンサイト相では, その角度は 60°となり最密充填である (Fig. 1-3b). この最密面の違いによって積層方法も異なる. 母相では, 半周期ずれた位置で, A_1 の位置と B_1 の位置に交互に積層する. 一方, マルテンサイト相では互い 1/3 周期ずれた A, B, C の 3 箇所のいずれかに積層する. 積層する順序や周期性によってマルテンサイト相は 2H や 9R のような長期積層構造を示す (Fig. 1-4).

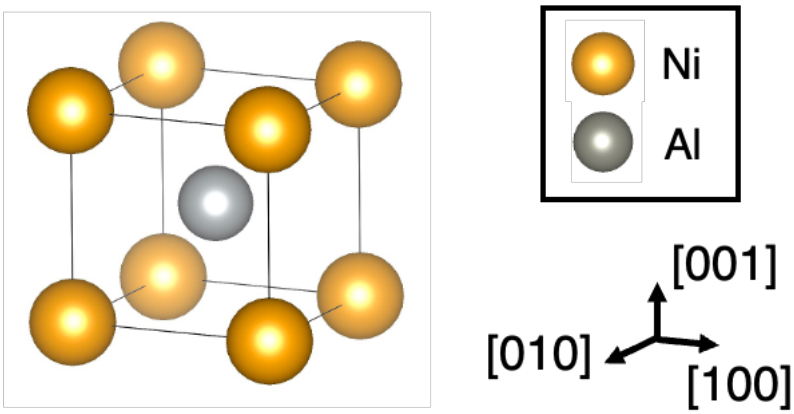
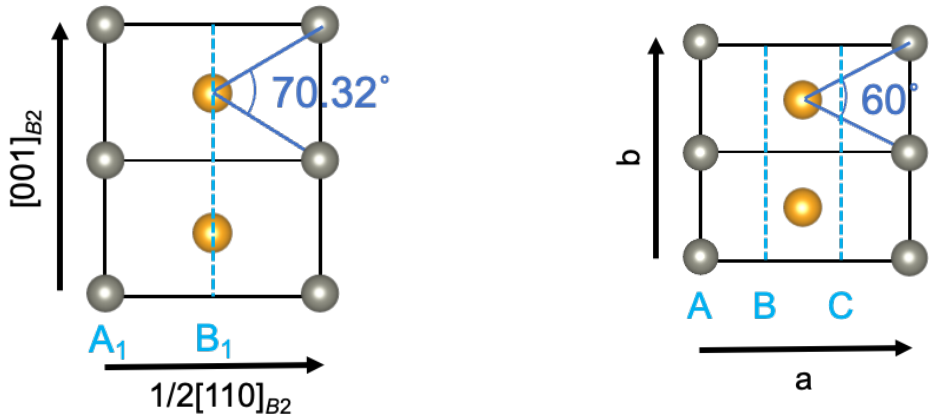
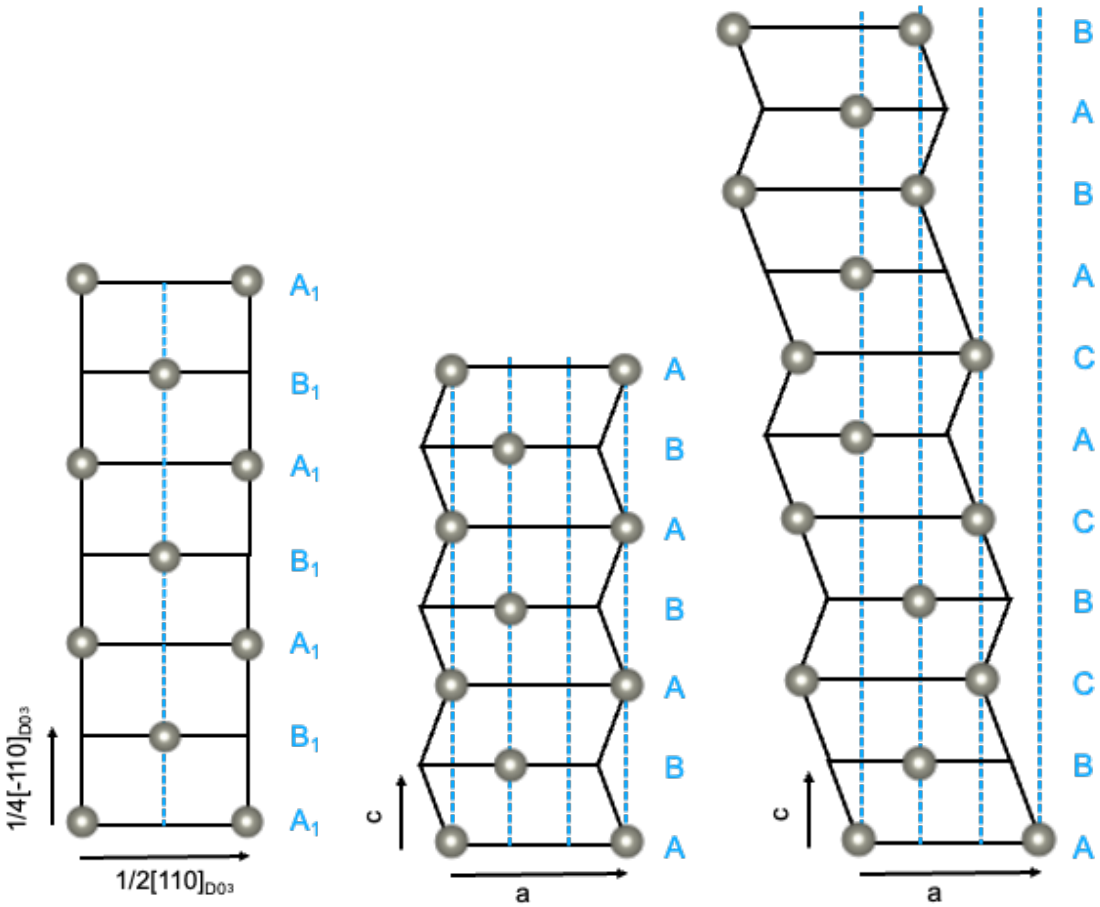


Fig. 1-2. Schmetic illustration of a unit cell of Ni-Al alloy with crystal structure of *B*2.



(a) (b)

Fig. 1-3. Schematic illustrations of atomic arrangements in (a) matrix and (b) martensitic phase of Ni-Al.



(a) (b) (c)

Fig. 1-4. Schematic illustrations of atomic arrangements in (a) matrix, (b) 2H and (c) 9R martensitic phase.

1.2.2. 双晶変形理論に基づくせん断型双安定性（bistability）

双晶変形は，双晶誘起塑性（twin induced plasticity: TWIP）や後述の形状記憶合金の変形機構としても重要な役割を果たすとともに，マルテンサイトと同様に原子間の相対位置変化が 1 原子間距離以下であり，メタマテリアルの設計の参考にし易い変形機構である．そこでここでは，双晶変形の理論について概説する[58].

Fig. 1-5 の単位球の上半球を下半球に対してせん断させ双晶になるときの無歪面について注目して双晶変形の機構について考える．Fig. 1-5 の単位球を xy 平面より上の半球を x 軸方向に s だけせん断させると Fig. 1-5 中の半楕円球のようになる．Fig. 1-5a に示すように，xy 平面および x 軸方向をそれぞれ K_1 面および η_1 方向と呼ぶ．xz 面はせん断面（plane of shear）という．この変形の過程において Fig. 1-5a1 に示す 2 面が無歪面となる．K_1 面は xy 平面と並行な面で，変形前後で面内のひずみは生じない．K_2 面はせん断変形後に K_2'面となり，せん断の前後で回転対称な関係性にある．K_2 面および K_2'面と plane of shear の交線をそれぞれ η_2 方向および η_2' 方向という．K_1 面と K_2'面のなす角を 2φ とすると，シアー量 s は式(1-2)で表される．

$$s = \frac{2}{\tan 2\varphi} \tag{1-2}$$

これらの K_1 面，η_1 方向，K_2 面，η_2 方向，シアー量 s の 5 つの要素をまとめて双晶要素という．

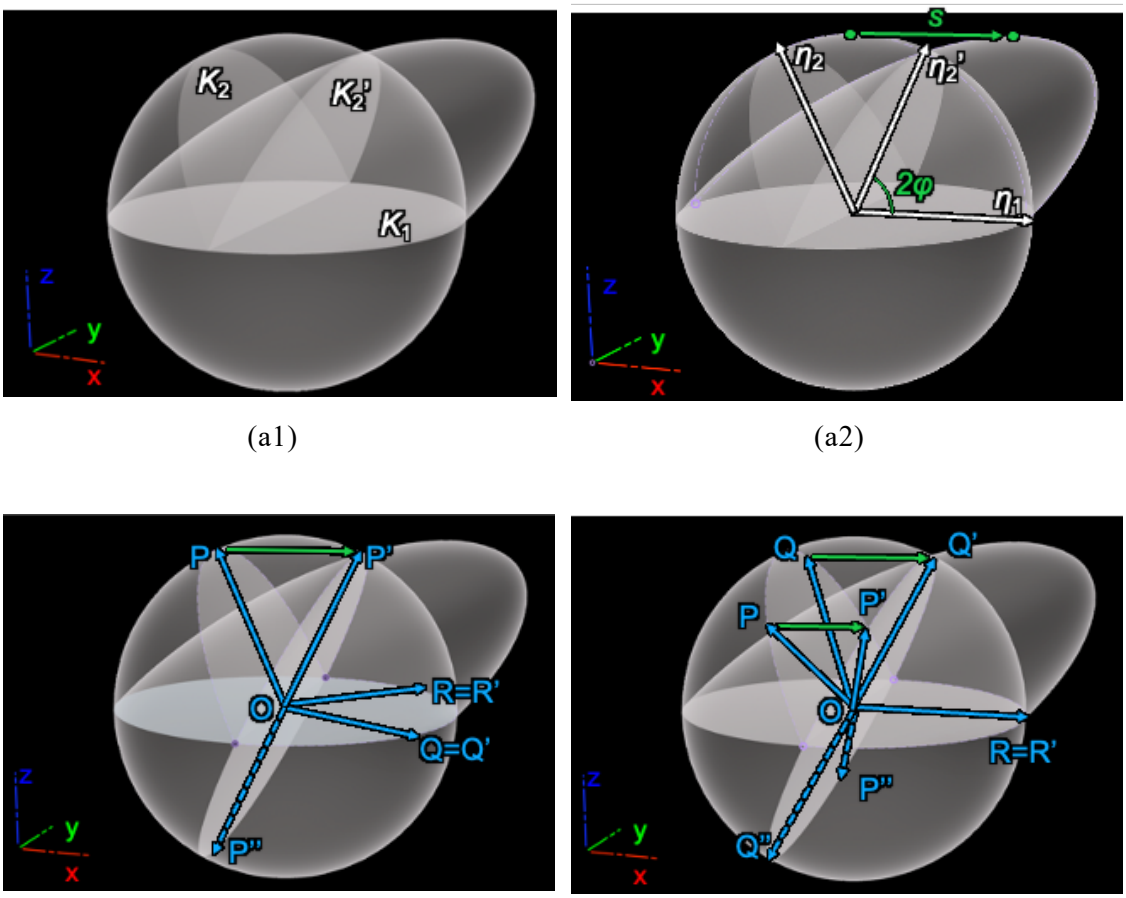
このせん断変形が双晶変形であるとき，せん断により格子が再現される．すなわち，同一平面上にない 3 つの格子ベクトルを選び，それらの大きさとそれらがなす角がせん断の前後で保存されるとき，このせん断の結果生じる格子は双晶であると言える．3 つの格子ベクトルの大きさが変わらないためには，これらの格子ベクトルは無歪面 K_1 または K_2 上になければならない．したがって，(i) 2 つの格子ベクトルが K_1 面上にあり 3 つ目の格子ベクトルが K_2 面上にある場合（Fig. 1-5b）と，(ii) 2 つの格子ベクトルが K_2 面上にあり 3 つ目の格子ベクトルが K_1 面上にある場合（Fig. 1-5c）の 2 つ通りの双晶が存在する．それぞれの場合における双晶要素は以下のようになる．

(i) Fig. 1-5b に示すように K_1 面上に OR と OQ の 2 つの格子ベクトルがあるとき，K_1 面の法線ベクトルは OR と OQ の外積で求められ，K_1 面は有理指数で表される．せん断の前後で 3 つの格子ベクトルのなす角が保存されると，∠POQ = ∠P''OQ'，∠POR = ∠P''OR'，∠QOR = ∠Q'OR'が同時に成り立つ．この角度の条件を満たすためには 3 つ目の格子ベクトル OP は η_2 と一致しなければならない．したがって，η_2 は有理指数で示される．このように K_1, η_2 が有理指数で示され，K_2, η_1 が無理指数で表される双晶を Type I 双晶という．

このとき，元の結晶と双晶との間には K_1 面について鏡映対称な関係を持つ．

(ii) Fig. 1-5c に示すように K_2 面上に 2 つの格子ベクトル OP と OQ があるとき，K_2 面は有理指数で表される．せん断の前後で 3 つの格子ベクトルのなす角が保存されると∠POQ＝∠P''OQ''，∠POR＝∠P''OR'，∠QOR＝∠Q''OR'が同時に成り立つ．この角度の条件を満たすためには 3 つ目の格子ベクトル OR は η_1 と一致しなければならない．したがって，η_1 は有理指数で示される．このように K_2, η_1 が有理指数で示され，K_1, η_2 が無理指数で表される双晶を Type II 双晶という．このとき，元の結晶と双晶は η_1 について 2 回回転対称な関係を持つ．

また，K_1, K_2, η_1, η_2 の全てが有理指数で示される双晶を複合双晶という．複合双晶に置いて元の結晶と双晶との間には K_1 面について鏡映対称な関係と η_1 について 2 回回転対称な関係と両方の対称性を持つ．このような対称性は，双晶変形を模倣した力学メタマテリアルの設計において重要である．



(a1) (a2)

(b) (c)

Fig. 1-5. Schematic illustrations of geometry of twin deformation. (a) defination of twinning elements (b) Type I twin and (c) Type II twin.

1.2.3. 形状記憶効果機構に基づく熱誘起相転移による機能発現

超弾性や形状記憶特性[42–44,59]は，一般に特定の元素を組み合わせてせん断変形による相変態で可逆的に変換可能な相の安定性を制御することで発現する現象である．これをメタマテリアルの設計により，任意の元素で構成される部材で発現できれば，その意義は大きい．

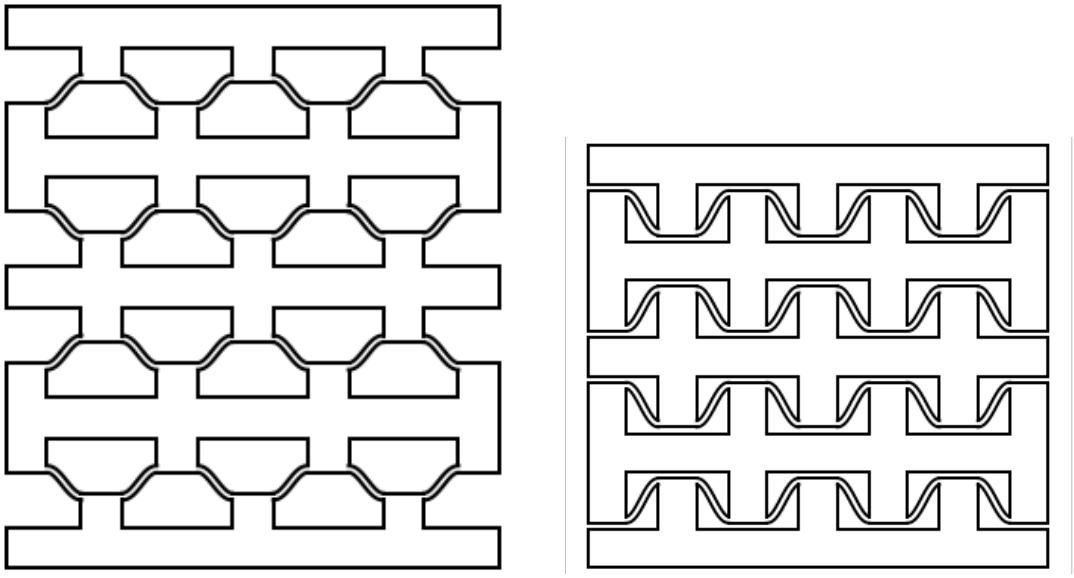
代表的な形状記憶材料として知られる TiNi 合金における形状記憶効果や超弾性の発現は，*B*2 構造，*B*19 構造，*B*19’構造間の熱弾性マルテンサイト変態に由来する[60,61]．マルテンサイト変態とは，ある結晶構造すなわち周期的な原子配列をもつ母相に，加熱や冷却などで温度変化を与えたり，荷重を加えたりすることによって，１原子サイズ以下の距離だけ原子配列が一様に変位して，母相とは異なる結晶構造を持つマルテンサイト相に相変態することである．TiNi 合金の場合，冷却中に形成されたマルテンサイト相には，外形状を保って内部の結晶構造のみを変化させるために，鏡映対称の結晶（双晶と呼ばれる）を交互に積み重ねた双晶組織が形成される[62]．その双晶組織が導入された状態に荷重を加えて変形させる際，交互に重なっていた鏡面対象の結晶のうちの一方がもう一方の結晶に方位を揃えるように原子配列を変化させる，つまり双晶変形が生じる場合がある．その一方向に揃ったマルテンサイト相を加熱して，母相が安定な温度にまで昇温すると，結晶構造がもとに戻ると同時に外形状も元に戻る．これが形状記憶特性の起源である．一方，母相が安定な温度で応力を加えるとマルテンサイト変態が生じる場合がある．これを応力誘起マルテンサイト変態という[44,63]．このマルテンサイト相は除荷すると母相に戻り形状が回復することがある．この特性は超弾性と呼ばれ，TiNi 合金等で，マルテンサイト変態温度以上の温度で応力誘起マルテンサイト変態することで発現する．

TiNi 合金と同じメカニズムにより形状記憶特性を示す材料を開発する場合，その材料そのものが熱弾性マルテンサイト変態を示すことが必要となる．これに対して，3D プリンターにより操作可能なサイズの格子構造を制御することで TiNi 合金中の結晶構造転移のような構造変化を発現するメタマテリアルを創製できれば，マルテンサイト変態を示さない結晶性材料であっても形状記憶特性を発現させられる可能性がある．これにより，Ti や Ni 等の希少金属を用いずに TiNi 合金が示すような形状記憶特性を発現させ，形状記憶特性の発現温度を合金組成ではなくマクロ格子構造の設計により制御し，格子構造の最適化で軽量化が可能なメタマテリアルを創製できることが期待される．

1.3. 相転移するメタマテリアル

1.3.1. Phase Tranforming Cellular Material（PXCM）

メタ原子の配列によって構成されるラティスの構造変化によって安定状態間を遷移し，結晶性材料の相変態から着想したメタマテリアルは，2015 年に Restrepo らによって発表された[64]．このメタマテリアルは Phase Transforming Cellular Material（PXCM）と名付けられた．本論文では，結晶性材料とメタマテリアルとで微小構造変化を明確に区別するため，結晶性材料中の原子の相対位置変化を相変態，メタマテリアル中のメタ原子の安定状態変化を相転移と呼ぶこととする．なお，PXCM のように変形することまで考慮に入れて 3 次元的に詳細な設計を行うことは 4D printing と呼ばれる[65–67]．相転移を示すメタマテリアル（すなわち PXCM）は，加えられた引張や圧縮の荷重に応じて，一方向に伸縮変形する[68–70]．この変形は，メタマテリアルにおける応力誘起無拡散相転移の一種であると言える．ただし，変形はせん断変形ではない．PXCM は，この相変態を発現させるため，基本となるハニカム構造にサインカーブ状の梁[71]を組み込んだ構造を持つ．PXCM の一例を Fig. 1-6 に示す．エラストマーを用いて作製した通常のハニカム構造を圧縮すると，梁が湾曲することで応力がひずみに対して線形的に上昇し，一定の応力に到達すると格子が崩れ始めるが，エラストマーであるために弾性座屈し除荷すると元の形状に復元する[72,73]．しかし，Fig. 1-6a の構造を上下方向に圧縮すると凸型の梁が凹型となるように変形しその形状で安定となり，元の最安定な形状のほかにもう一つの Fig. 1-6b に示す準安定な構造となることができる．ここで，もう一つの準安定な状態とは元の形状に戻ろうとする反力が元の状態に遷移する方向とは逆方向に働いている状態のことをいう．このような 2 つの安定な状態を有することを bistable であるといい，bistable であることを bistability を有するともいう．また，2 つの安定状態の間を遷移する過程で急速に梁の曲率が反転することを飛び移り座屈（snap-through）という．



(a) (b)

Fig. 1-6. Illustration of Phase Transforming Cellular Material (PXCM). (a) Initial state and (b) compressed metastable state.

Restrepo らの考察した PXCM は，ハニカム構造にサインカーブ状の曲り梁[74–76]を組み込んだもので，その単位格子を Fig. 1-7 に示す．これは，曲り梁を含む構造を反転させて 2 つ繋げたものである．Fig. 1-7 のように水平に x 軸，垂直に y 軸をおくと曲り梁の形状は次の式(1-3) によって表される．

$$y = \frac{A}{2}\left\{1 - \cos\left(2\pi\frac{x}{\lambda}\right)\right\} \tag{1-3}$$

ここで，A は曲り梁の谷と山の高低差，λは単位格子の幅である．また，曲り梁の厚さを t，水平方向の梁の厚さをt_h，垂直方向の梁の厚さをt_vとする．これらの直線的な梁は変態中に曲り梁の両端の幅が広がるのを防ぐなど形状を維持するためのものである．繰り返しの個数は水平方向にn_h，垂直方向にn_vとする．全体の長さを l，幅を w，高さを b とする．

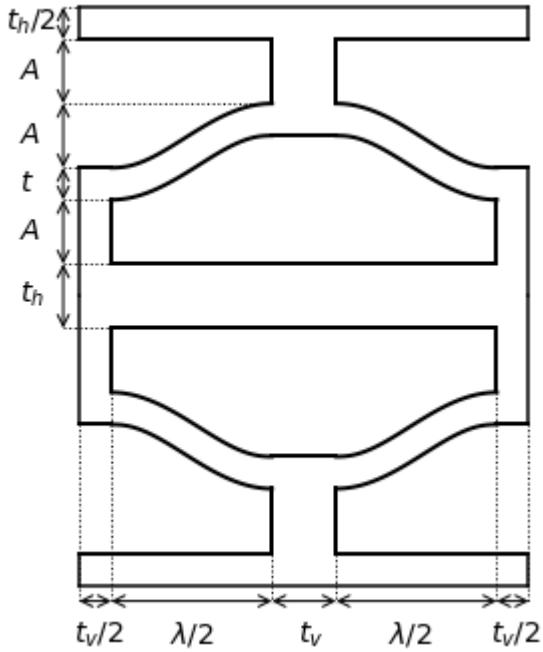


Fig. 1-7. Geometry of an unit cell of PXCM.

この PXCM の構造の中のある一つの曲り梁に着目し，変形の途中におけるその中点の変位を d，その中点に作用する力を f とする．f と d の関係を表す関数を求めるために曲り梁について波の重ね合わせの原理を用いたモード解析[71]を行うと，f と d の関係を表す関数は無次元パラメータ $Q = A / t$ に依存する関係式で表される．ただし，高次のモードは無視する．このモード解析では，式(1-4)で表されるモードの重ね合わせにより梁が変形する様子を表すことができる．ただし，モード j における振幅をA_j，位置 x における振幅を$w_j(x)$とする．

$$w(x) = \sum_{j=1}^{\infty} A_j w_j(x) \tag{1-4}$$

ここで，j が奇数であるとき，

$$\left.\begin{aligned} w_j(x) &= A \cdot \left\{1 - \cos\left(N_j \cdot \frac{x}{\lambda}\right)\right\} \\ N_j &= (j+1)\pi \end{aligned}\right\} \text{(where } j = 1, 3, 5, \ldots) \tag{1-5}$$

である．また，j が偶数であるとき，

$$\left.\begin{aligned} w_j(\mathrm{x}) &= A \cdot \left\{1 - 2 \cdot \frac{x}{\lambda} - \cos\left(N_j \cdot \frac{x}{\lambda}\right) + \frac{2\sin\left(N_j \cdot \frac{x}{\lambda}\right)}{N_j}\right\} \\ N_j &= 2.86\pi, 4.92\pi, \ldots \end{aligned}\right\} \text{(where } j = 2, 4, 6, \ldots) \tag{1-6}$$

である．この式(1-5)，(1-6) は各モードの形状を示す式である．これらのうちモード 1, 2, 3 を Fig. 1-8 に示す．初期形状をモード 1 と同じ形状とし$x/\lambda = 0.5$の梁に y 軸の負の方向に力 f をかける．このときの曲げエネルギー，圧縮エネルギー，駆動力によるエネルギーの関係から，$j \neq 1, 5, 9, 13, \ldots$の場合のみ$A_j$が有限の値を持ち，$j \neq 1, 5, 9, 13, \ldots$の場合，最も低次のモード以外は$A_j = 0$となりそのモードのみが任意の振幅を持つことができる．また，低次のモードが出現しないように力学的に抑制する振幅を 0 にすると次点で低次なモードのみが任意の振幅を持つことができる．モード 2 は梁の中点の傾きを固定することで容易に抑制できるが，その他のモードを抑制するのは困難である．つまり，モード 2 を抑制しない状態のとき，

$$A_j = 0, \qquad j \neq 1, 2, 5, 9, 13, \ldots \tag{1-7}$$

となり，モード 2 を抑制している状態のとき，

$$A_j = 0, \qquad j \neq 1, 3, 5, 9, 13, \ldots \tag{1-8}$$

となる．また，モード 5 以上の高次のモードはより高い精度の計算のためには必要だが，梁の挙動の概要を計算するためなら省略可能である．これらの高次のモードを省略すると，曲げエネルギー，圧縮エネルギー，駆動力によるエネルギーの関係よりモードの組み合わせは次の 3 つとなる．モード 1 のみ，モード 1 とモード 2 のみ，モード 1 とモード 3 のみ．それぞれの組み合わせについて，中点が変位 d にあるときに梁の中点に y 軸の負の向きに加えられた力f_1，$f_{1\&2}$，$f_{1\&3}$を表す式はそれぞれ以下の式(1-9) ~ (1-11)のようになる．ただし，弾性率を E とする．

$$f_1 = \frac{\pi^4 EAbt^3}{24\lambda^3} \cdot Q^2 \cdot \frac{d}{A} \cdot \left\{6 + \frac{4}{Q^2} + 3 \cdot \left(\frac{d}{A}\right)^2 - 9 \cdot \frac{d}{A}\right\} \tag{1-9}$$

$$f_{1\&2} = \frac{\pi^4 EAbt^3}{24\lambda^3} \cdot \left(8.36 - 4.46 \cdot \frac{d}{A}\right) \tag{1-10}$$

$$f_{1\&3} = \frac{\pi^4 EAbt^3}{24\lambda^3} \cdot \left(16 - 12 \cdot \frac{d}{A}\right) \tag{1-11}$$

これらをグラフに示したものを Fig. 1-9 に示す．3 つの関数はすべて $d/A = 1$ にて 1 点で交わる．f_1の曲線は常に $d/A = 0$ で f は 0 となり，無次元パラメータ Q の値が大きくなるほど極大値が大きくなり極小値が小さくなる．$f_{1\&2}$および$f_{1\&3}$のグラフは直線であり，Q の値の大きさには依存しない．$Q \leq 1.67$ のとき，f_1と$f_{1\&2}$のグラフは交点を 1 つだけ持ち，$Q > 1.67$ の場合，f_1と$f_{1\&2}$の交点は 3 つになる．これらの交点を d/A の小さい方から c_1, c_2, c_3 とする．また，$Q \leq 2.31$ の場合，f_1と$f_{1\&3}$のグラフの交点は 1 つだけであり，$Q > 2.31$ の場合，f_1と$f_{1\&3}$の交点は 3 つになる．これらの交点を d/A の小さい方からc_1', c_2', c_3'とする．

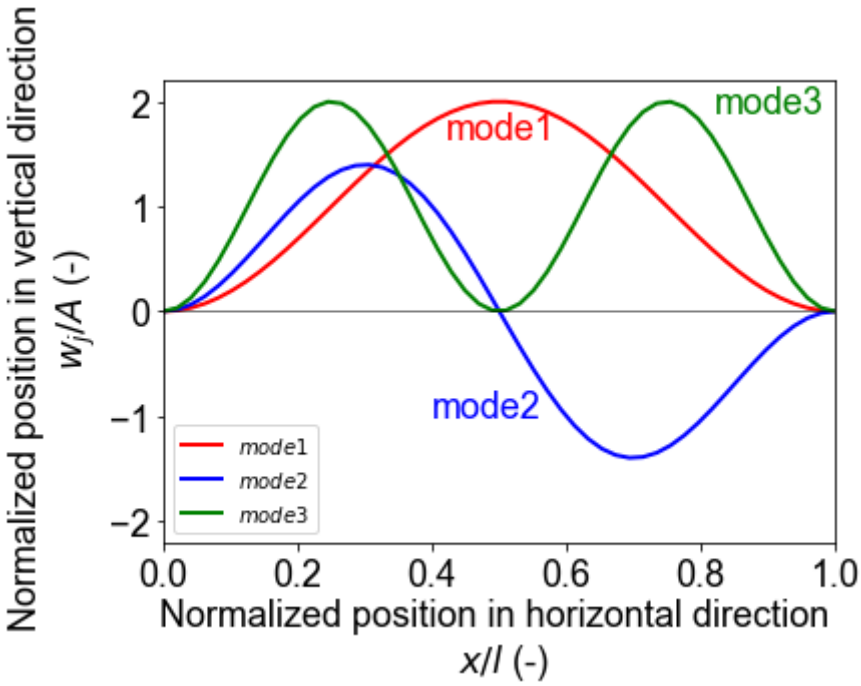


Fig. 1-8. Shapes of mode 1, 2, 3 for mode analysis.

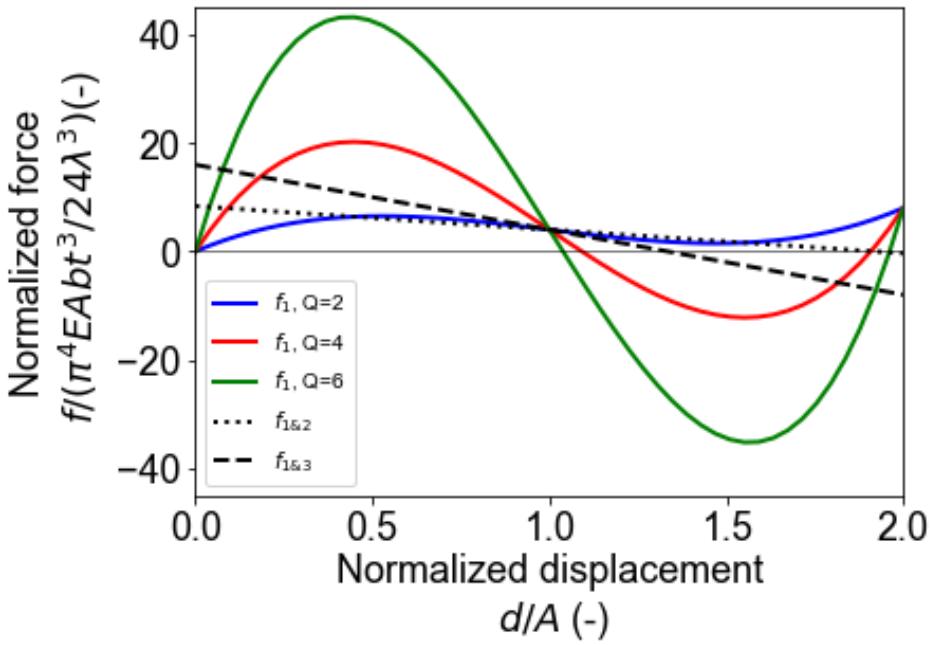


Fig. 1-9. Normalized force-displacement curve of the curved beam, for each of the three combinations of mode superposition.

実際の梁の挙動では，$f_{1\&2}$および$f_{1\&3}$は梁に力を加えていき飛び移り座屈することで初めて現れる．モード 2 を抑制していないときの梁の力-変位曲線は Fig. 1-10

に示す実線のようになる．このグラフはc_1とc_3の間では式(1-10)に従い，c_1とc_3の外側では式(1-9)に従う．モード 2 を抑制しているときの梁の力-変位曲線は Fig. 1-11 に示す実線のようになる．このグラフは$c_1{}'$と$c_3{}'$の間では式(1-11)に従い，$c_1{}'$と$c_3{}'$の外側では式(1-9)に従う．

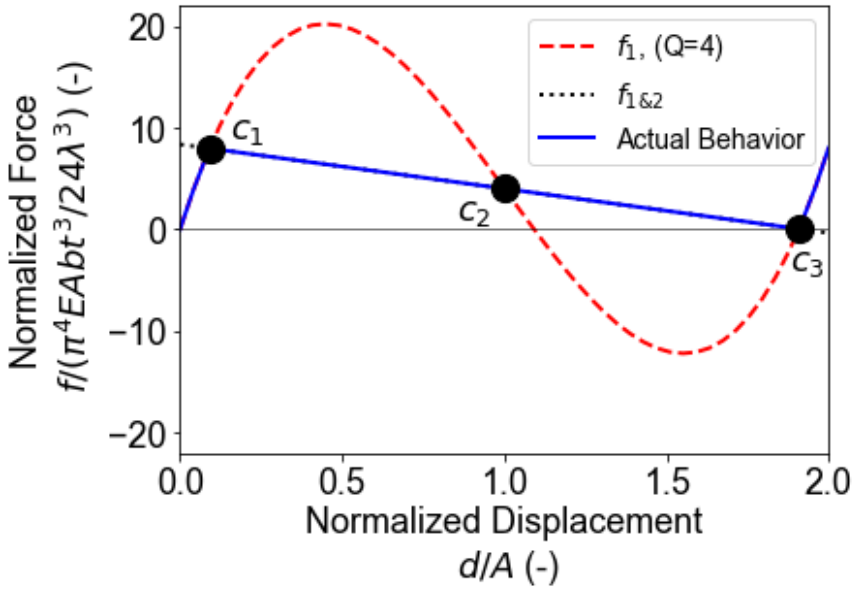


Fig. 1-10. Normalized force-displacement curve of the curved beam when mode 2 is not constrained.

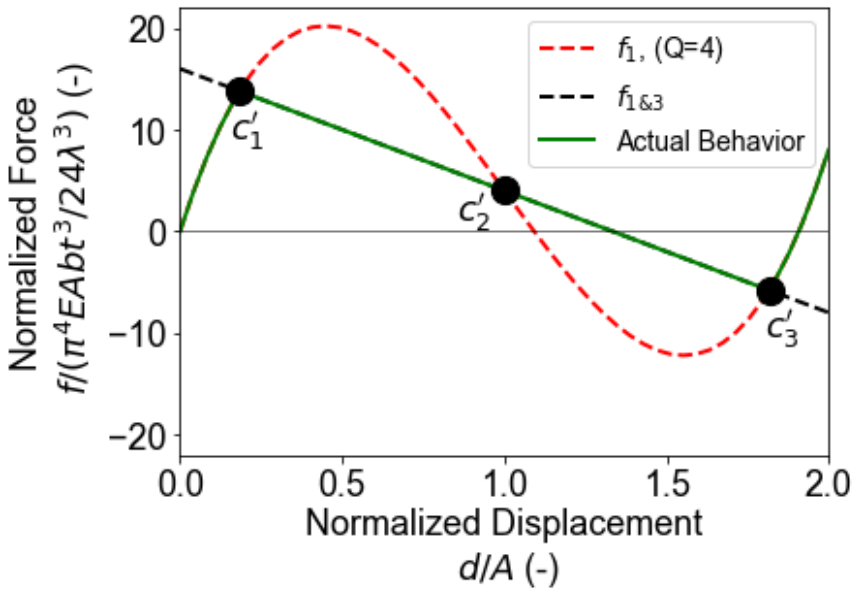
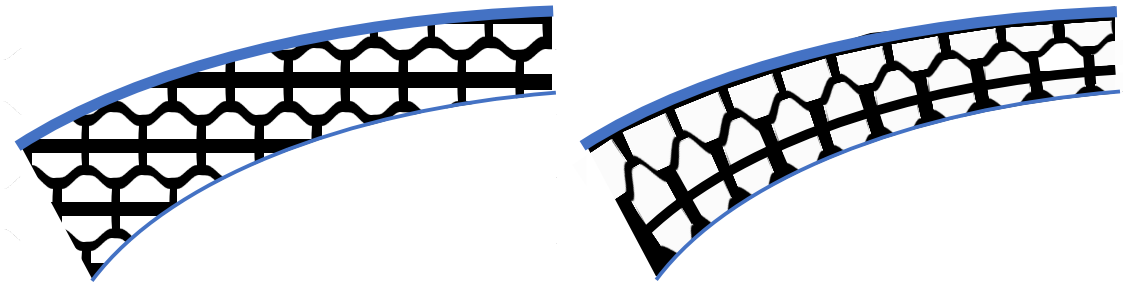


Fig. 1-11. Normalized force-displacement curve of the curved beam when mode 2 is constrained.

これらのグラフには f の値が負になる領域が存在する．力 f は梁の中点に荷重を加えたときの反力に等しいと言え，y 軸の正の方向に働く力である．これが負の方向に働くと，梁の中点は y 軸の負の方向に自発的に進もうとするため，初期形状とは異なる形で安定となる．つまり，f が負になる領域が存在すると bistable になる．式(1-9)が横軸と $d/A = 0$ 以外の点で交点を持つとき $Q = 2.31$ となるため，$0 \leq d/A \leq 2$ の範囲で f が負となる領域をもつための条件は $Q > 2.31$ である．

以上のことから正弦波状の曲がり梁が bistable な特性をもつための条件は無次元パラメータ Q が $Q > 2.31$ かつモード 2 の変形が力学的に抑制されている状態であることである．モード 2 の変形を力学的に抑制する方法として，最も容易な方法は，梁の中点の傾きが変わらないように固定しながら力を加えるという方法が挙げられる[74].

このような変形メカニズムを持つ PXCM は，2 つの安定な状態を持ち，応力を加えることで 1 つの相から別の相へと変化する．変形初期には一定の剛性を保ちながら，臨界荷重に達すると大きく変形して大きい衝撃を吸収することができる．2 相間を繰り返し遷移できることから，衝撃吸収材として繰り返し使用することができる [70,77,78]. 様々な種類の PXCM がこれまでに提案されてきたが[68,69,79–81]，ほとんどの PXCM では一方向の荷重に対して力学的挙動を制御するように設計されている[71,82]．そのため，そのほとんどは一方向にのみ双安定性を示し，荷重が一方向ではない複雑な形状には適用できない. 衝撃吸収用途の応用拡大が期待される PXCM は，人体や自動車などの曲面形状への適応が課題となる．従来の PXCM では荷重軸が理想の荷重軸から 5°変位すると bistable ではなくなるため[83]，曲面的な形状に適用するために工夫が必要であり，格子構造を曲面に対して等角な写像を作り適合させる conformal mapping や，より多くの方向に飛び移り座屈するように変形の自由度がより高い構造を設計することなどが考えられる．Bistable 構造の特性は単位格子内の各設計パラメータに大きく依存する．例えば，PXCM ではサインカーブ状の梁の波長が大きくなるほど剛性や強度は下がる．双安定構造に conformal mapping を適用する場合，Fig. 1-12 に示すように曲面の外側の格子の振幅の方が内側の格子の振幅より大きくなる．結果的に外側が柔らかく，内側が硬くなり，防具などで求められる特性とは異なってしまう．そのため，conformal mapping による PXCM の曲面適応は困難である．一方で，複数の方向で bistability を示す PXCM はいくつか提案されている [84–88]．複数の方向で bistability を示す PXCM は，曲面構造への応用がさらに拡大することが期待されている．



(a) (b)

Fig. 1-12. Schematic of PXCM adapted to curved shell (a) with uniform lattice and (b) with conformal lattice.

本研究では，さらに bistability を発現する方位を広くすることを目的として，結晶性材料の原子配列変化の特徴からヒントを得て，PXCM を開発する．

1.3.2. 相転移の駆動力としてのバイメタル

バイメタルとは 2 種類の金属を貼り合わせたクラッド材のことである．バイメタルを構成する材料としてインバー合金と銅合金などの熱膨張率に差がある金属を使用することで，温度変化により二つの材料の間で長さに差が生じ内部応力が発生することで湾曲するという性質を持つ．Fig. 1-13 に示すように低膨張側の厚さを t_1，発生する応力を P_1 とし高膨張側の厚さを t_2，発生する応力を P_2 とすると発生する応力 P と全体の厚さ t は次のように表される．

$$t_1 + t_2 = t \tag{1-12}$$

$$P_1 = P_2 = P \tag{1-13}$$

発生する曲げモーメントはそれぞれ

$$M_1 = \frac{t_1}{2} P_1 \tag{1-14}$$

$$M_2 = \frac{t_2}{2} P_2 \tag{1-15}$$

となる．よってモーメントの合計は

$$M_1 + M_2 = \frac{t_1}{2} P_1 + \frac{t_2}{2} P_2 = \frac{tP}{2} \tag{1-16}$$

となる．バイメタルが T_0 でまっすぐの状態から T_1 で曲率半径 r，中心角 θ に湾曲するとき曲率とモーメントの関係から r は次の式を満たす．

$$\frac{1}{r} = \frac{M}{EI} \tag{1-17}$$

$$\frac{E_1 I_1}{r} + \frac{E_2 I_2}{r} = \frac{tP}{2} \tag{1-18}$$

板の伸びは熱膨張分の伸びと発生した応力による伸び，さらに湾曲したときの伸びの和であり，接着面の伸びが等しいことから次の式が成り立つ．

$$\alpha_1(T_1 - T_0)L + \frac{P_1 L}{E_1 t_1} + \frac{t_1 \theta}{2} = \alpha_2(T_1 - T_0)L - \frac{P_2 L}{E_2 t_2} - \frac{t_2 \theta}{2} \tag{1-19}$$

単位長さで考えると式(1-19)は次のように変形でき，

$$\alpha_1(T_1 - T_0) + \frac{P_1}{E_1 t_1} + \frac{t_1}{2r} = \alpha_2(T_1 - T_0) - \frac{P_2}{E_2 t_2} - \frac{t_2}{2r} \tag{1-20}$$

これを整理して，

$$\frac{1}{r} = \frac{(\alpha_2 - \alpha_1)(T_1 - T_0)}{\frac{t}{2} + \frac{2(E_1 I_1 + E_2 I_2)}{t}\left(\frac{1}{E_1 t_1} + \frac{1}{E_2 t_2}\right)} \tag{1-21}$$

となる．ここでバイメタルの断面を幅 1 の長方形とすると，その断面 2 次モーメントは，

$$I_1 = \frac{t_1^3}{12} \tag{1-22}$$

$$I_2 = \frac{t_2^3}{12} \tag{1-23}$$

と表される．これを式(1-21)に代入して，

$$\frac{1}{r} = \frac{6(\alpha_1 - \alpha_2)(T_1 - T_0)(t_1 + t_2)t_1 t_2 E_1 E_2}{3(t_1 + t_2)^2 t_1 t_2 E_1 E_2 + (E_1 t_1 + E_2 t_2)(h_1^3 E_1 + h_2^3 E_2)} \tag{1-24}$$

縦弾性係数比$m = \frac{E_2}{E_1}$，板厚比$n = \frac{t_2}{t_1}$とすると，

$$\frac{1}{r} = \frac{6(\alpha_2 - \alpha_1)(T_1 - T_0)mn(n+1)^2}{t(4mn^3 + 4mn + 6mn^2 + m^2 n^4 + 1)} \tag{1-25}$$

と表せる．ここで，湾曲係数 K を

$$\frac{6(\alpha_1 - \alpha_2)mn(n+1)^2}{(4mn^3 + 4mn + 6mn^2 + m^2 n^4 + 1)} = 2K \tag{1-26}$$

とする．湾曲係数 K は，温度変化による湾曲は湾曲係数 K を用いて表される．両端が自由のバイメタル板が Fig. 1-14 のように曲率 r_1 から r_2 に変化する場合式(1-25)，(1-26)から次の式が求まる．

$$\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} = \frac{2K(T_1 - T_0)}{t} \tag{1-27}$$

バイメタル板のたわみδについて，方べきの定理より$\delta(2r - \delta) = (\frac{L}{2})^2$，$\delta$ が r に比べ

てはるかに小さいため

$$\begin{aligned}\delta_2 &= \frac{L^2}{8r_2} \\ &= \frac{L^2}{8}\left(\frac{2K(T_1-T_0)}{t}-\frac{1}{r_1}\right) \\ &= \frac{L^2}{4}\frac{K(T_1-T_0)}{t}-\delta_1\end{aligned} \tag{1-28}$$

また，バイメタル板が湾曲した状態で固定するような Fig. 1-15 のような系を考える．湾曲したときの長さとまっすぐなときの長さの差を λ とすると λ は次の式で表される．

$$\lambda = \frac{1}{2}\int_0^l \left(\frac{dy}{dx}\right)^2 dx \tag{1-29}$$

初期状態では正弦波で近似できるので，

$$y = \delta_0 \sin\frac{\pi x}{L} \tag{1-30}$$

となり，これを式(1-29)に代入すると，

$$\lambda = \frac{\delta_0^2\pi^2}{4L} \tag{1-31}$$

となる．ここで，加熱によってたわみが δ_0 から δ_1 に変化したときの長さの変化は

$$\frac{\delta_0^2\pi^2}{4L}-\frac{\delta_1^2\pi^2}{4L} \tag{1-32}$$

である．このときに発生する荷重は$\delta = \frac{PL}{AE}$より

$$P = \left(\frac{\delta_0^2\pi^2}{4L}-\frac{\delta_1^2\pi^2}{4L}\right)\frac{EA}{L} = \frac{EA\pi^2}{4L^2}\delta_0^2\left(1-\frac{\delta_1^2}{\delta_0^2}\right) \tag{1-33}$$

$$\frac{PL^2}{EI\pi^2} = \frac{3\delta_0^2}{t^2}\left(1-\frac{\delta_1^2}{\delta_0^2}\right) \tag{1-34}$$

と表せる．次に，たわみが δ_1 から δ_2 に変化するとき Y 方向の変位は

$$y + \delta_2 \sin\frac{\pi x}{L} \tag{1-35}$$

と表せ，曲げモーメントは，

$$EI\frac{d^2}{dx^2}\left(\sin\frac{\pi x}{L}\right) = -Py \tag{1-36}$$

$$\frac{d^2y}{dx^2}+\frac{P}{EI}y = \frac{\delta\pi^2}{L^2}\sin\frac{\pi x}{L} \tag{1-37}$$

と表せる．ここで，

$$\frac{P}{EI} = k^2 \tag{1-38}$$

とすると式(1-37)より

$$y = A\sin kx + B\cos kx + \frac{\delta_2}{\frac{k^2L^2}{\pi^2} - 1} sin\frac{\pi x}{L} \tag{1-39}$$

$\frac{kl}{\pi}$が整数の場合 $A=B=0$，よって

$$\delta_1 = \frac{\delta_2}{\frac{k^2L^2}{\pi^2} - 1} \tag{1-40}$$

すなわち

$$\frac{PL^2}{EI\pi^2} = \frac{\delta_2}{\delta_1} + 1 \tag{1-41}$$

式(1-28)より

$$\frac{PL^2}{EI\pi^2} = \left(\frac{1}{4}\frac{KL^2}{t\delta_0}(T_1 - T_0) - 1\right)\frac{\delta_0}{\delta_1} + 1 \tag{1-42}$$

この式からある温度においてバイメタル板を上に凸の状態で保持するために必要な力が求められる．式(1-42)から求まる P が式(1-34)から求まる P よりも常に大きい場合，板は上に凸の状態で保持する力が足りず，飛び移り座屈が生じる[89].

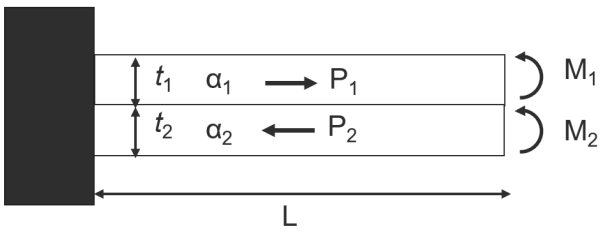


Fig. 1-13. Schematic illustration showing the factors determining the curving property of bimetal cantilever.

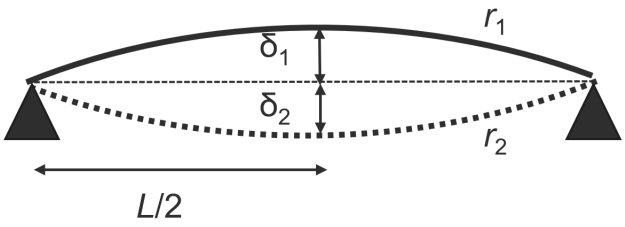


Fig. 1-14. Deflection of a simply supported bimetal plate.

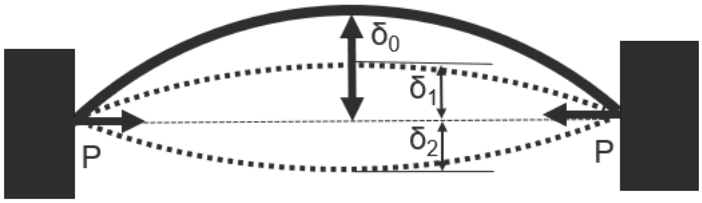


Fig. 1-15. Deflection curve of a bimetal plate with constriction from walls.

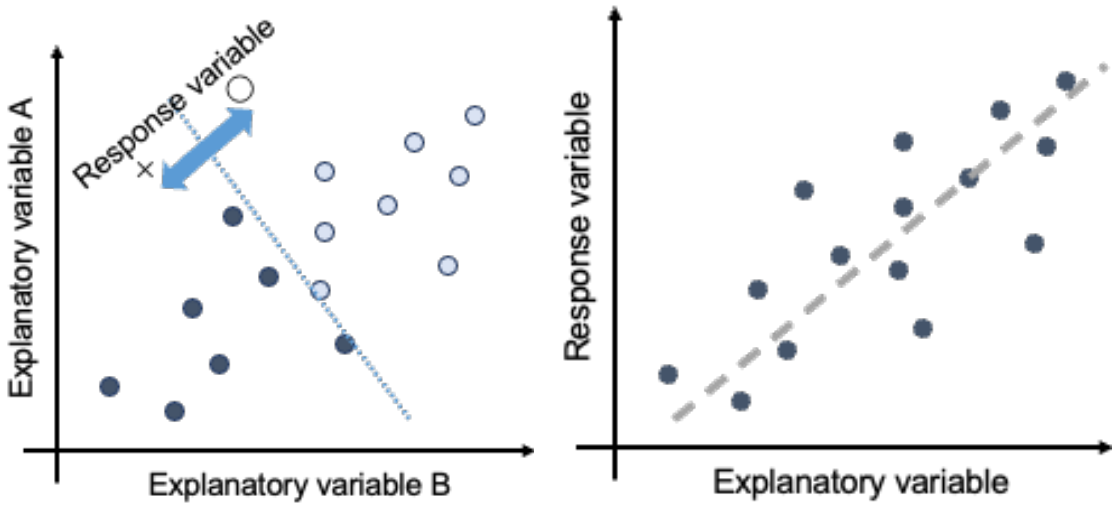
1.3.3. 機械学習によるメタマテリアルの設計最適化

1.3.3.1. 機械学習

機械学習は，対象とする事象に関する特徴量をデータとして学習させることで，事象の傾向を取得し規則を発見し新しいデータに対して推論することが可能である．ニューラルネットワークを用いた機械学習では特徴量は説明変数と目的変数に分けられる．説明変数は，他の変数の原因となる変数でその事象が起こる際の背景となる変数である．目的変数は，説明変数を受けた結果定まる変数である．機械学習では，様々な値の説明変数を受けた結果，目的変数がどのように変化するかを学習する．

目的変数の性質によって機械学習は分類と回帰の 2 種類に分けられる．分類では，Fig. 1-16 (a) に示すように目的変数が条件に当てはまるかどうかなどを定性的な指標とし，どの説明変数の組み合わせでどの定性的な特徴を持つかを判別する．これによって，例えば，過去に訪れた飲食店の情報をもとに新しいレストランを気に入るか気に入らないかを予測することができる．また，回帰では，Fig. 1-16 (b) に示すように目的変数を定量的な指標とし，説明変数から目的関数を予測可能にする．このことによって，例えば，過去に訪れた飲食店の情報をもとに新しいレストランに今後何回訪れるかを予測することができる．本研究では，これを例えば種々

の設計パラメータを説明変数とし，目的変数を bistability 発現の有無として，特性発現のためのメタマテリアル設計に活用する．



(a) (b)

Fig. 1-16. Schematic of (a) classification and (b) regression.

1.3.3.2. パーセプトロンとニューラルネットワーク

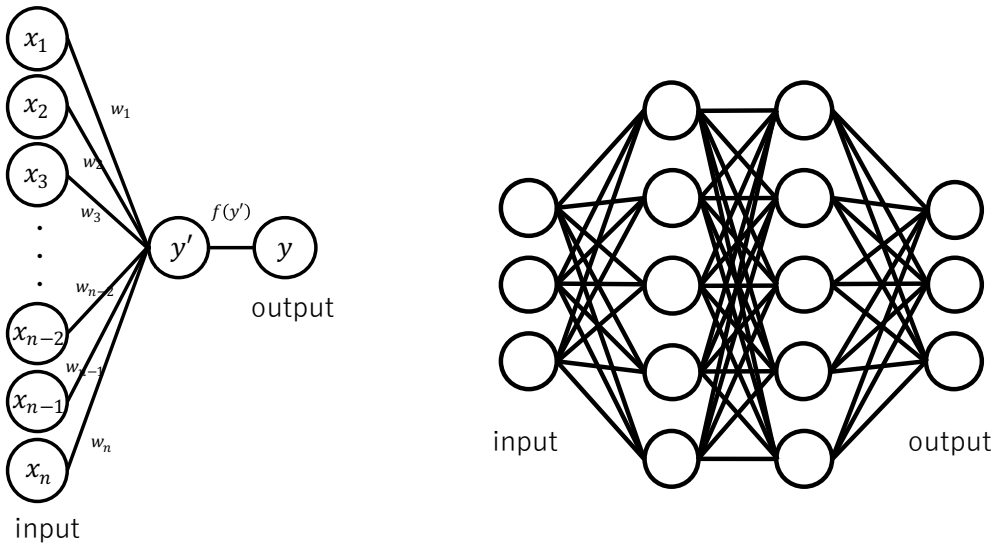
一般的な機械学習のモデルとしてニューラルネットワークが用いられる．最も単純な構造のニューラルネットワークはパーセプトロンと言われ，Fig. 1-17 (a) に示すような模式図で表される．パーセプトロンは，n 個の説明変数$\boldsymbol{x} = (x_1, \dots, x_n)$に対し 1 個の目的変数$y$を得るため，2 段階の計算を行う．1 段階目では，式(1-43)を用い説明変数$\boldsymbol{x}$におもみ$\boldsymbol{w} = (w_1, \dots . w_n)$とバイアス$b$によって$y'$を得る加重総和の計算を行う．

$$y' = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w} + b = \sum_{i=1}^{n} w_i x_i + b \tag{1-43}$$

2 段階目では，活性化関数を用いることでy'を評価など次のステップで活用しやすい形に変換する．

このパーセプトロンの目的変数の数を増やす，または目的変数を次の層の説明変数として利用しパーセプトロンを多層化することで構造を複雑化した機械学習モデルの総称をニューラルネットワークといい，Fig. 1-17 (b)に示すような模式図で表される．ここで，ニューラルネットワークの各層に円で表される基本ユニットをノードといい，データの受け渡しが行われる．また，ニューラルネットワークの説明変数のノードを入力層，目的変数のノードを出力層，その他の中間のノードを隠れ層という．各層間にてパーセプトロンと同様の計算を行い，各層ごとに活性化関

数を決める．これにより説明変数と目的変数の関係性の複雑さに関わらず，説明変数に応じた目的変数の予測が可能となる．本研究ではメタ原子の設計パラメータからメタマテリアルの力学的機能性を予測することに活用できる．



(a) (b)

Fig. 1-17. Schematic of (a) perceptron and (b) neural network.

1.3.3.3. 勾配降下法

パーセプトロンやニューラルネットワークでは，説明変数を入力し，目的変数の予測値が出力される．この予測値が目的関数の正解値に近づくように各層のおもみやバイアスといったパラメータを最適化する必要がある．これらのおもみやバイアスを最適化プロセスは誤差関数を最小化するように更新されるが，この更新には２つのステップがある．誤差関数に対するおもみの感度を計算するステップと感度に基づいておもみを更新するステップである．感度を算出する計算方法を学習アルゴリズム，おもみを更新する計算方法を最適化アルゴリズムという．学習アルゴリズムの代表的な手法は出力変数側のノードから順々に感度を計算していく Backpropagation または誤差逆伝播法である．ほとんどのニューラルネットワークの学習アルゴリズムとしてこの Backpropagation が用いられる．

最適化アルゴリズムの代表的な手法は，勾配降下（gradient descent）法である．勾配降下法は，予測値と正解値の差を誤差関数で表し，誤差関数を最小化するようにパラメータを繰り返し調整する最適化手法である．勾配降下法を用いた単層パーセプトロンの学習行程を例に挙げる．説明変数$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$，目的変数$\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$のデー

タセットを用いて単層パーセプトロンの学習を行う．このパーセプトロンのおもみを$\boldsymbol{w} = \begin{bmatrix} w_{11} & \cdots & w_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1m} & \cdots & w_{nm} \end{bmatrix}$，バイアスを$\boldsymbol{b} = [b_1 \quad \cdots \quad b_n]$とすると，パーセプトロンの入力値およびおもみとバイアスのパラメータは式(1-44)のようにまとめて表せる．

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} 1 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}, \boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} w_{10} & \cdots & w_{n0} \\ w_{11} & \cdots & w_{n1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1m} & \cdots & w_{nm} \end{bmatrix} \tag{1-44}$$

このとき，加重総和計算の結果y'は式(1-45)のように表せる．

$$\boldsymbol{y}' = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} b_1 + w_{11}x_{11} + \cdots + w_{1m}x_m \\ \vdots \\ b_n + w_{n1}x_{n1} + \cdots + w_{nm}x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1' \\ \vdots \\ y_n' \end{bmatrix} \tag{1-45}$$

パーセプトロンの活性化関数をfとすると，パーセプトロンの出力値である予測値$\boldsymbol{y}$は，

$$\boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{y}') = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \tag{1-46}$$

と表せる．この予測値$\boldsymbol{y}$と正解値$\boldsymbol{a}$との誤差を損失関数Cとして評価する．コスト関数には式(1-47)の平均絶対誤差（mean-absolute error, MAE）や式(1-48)の平均二乗誤差（mean-squared error, MSE）が挙げられる．

$$\mathrm{MAE} = \frac{\sum_{i=1}^{n} |y_i - \hat{y}_i|}{n} \tag{1-47}$$

$$\mathrm{MSE} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n} \tag{1-48}$$

MSE は MAE に対して，外れ誤差が大きいほど損失関数が大きくなる．本研究では，損失関数Cに MSE を用いた．するとCは式(1-49)のように表される．

$$C = \frac{\sum_{i=1}^{n} (a_i - y_i)^2}{n} \tag{1-49}$$

勾配降下法では，このコスト関数に対する各パラメータの感度を計算することで，各パラメータの調整量を決定する．

$$\frac{\partial C}{\partial \boldsymbol{W}} = \frac{\partial C}{\partial \boldsymbol{y}} \frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{y}'} \frac{\partial \boldsymbol{y}'}{\partial \boldsymbol{W}} \tag{1-51}$$

を用いて各パラメータを調整する．

$$\boldsymbol{W} = \boldsymbol{W} - \mu \frac{\partial C}{\partial \boldsymbol{W}} \tag{1-52}$$

ここで，μ は学習率であり，パーセプトロンの学習の進みやすさを決定する定数である．学習率が小さすぎるとコスト関数を最小化するまでに計算を繰り返す回数が増えてしまい，学習率が大きすぎるとコスト関数の最小値付近で何度も最小値を

通り過ぎてしまう．これらの計算を何度も繰り返すことでコスト関数を最小化し，最適なパラメータを得るアルゴリズムを勾配降下法という．

1.3.3.4. 活性化関数

活性化関数には，線形関数，ロジスティック関数，ReLU などがよく用いられる．式(1-53)の線形関数は，Fig. 1-18 (a)のように表され，主に回帰の出力層の導出に用いられる．

$$f(x) = x \tag{1-53}$$

式(1-54)のロジスティック関数は，Fig. 1-18 (b)のように表されるような S 字型曲線で，あらゆる数字を 0 から 1 までの数字に圧縮することができるため，主に隠れ層の導出や分類の出力層の導出に用いられる．

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \tag{1-54}$$

式(1-55)の rectified linear unit (ReLU) は，Fig. 1-18 (c)のように表されるような関数で，$x > 0$のとき傾きが常に 1 で，勾配消失による学習の停滞を防ぎやすく，ニューラルネットワークの隠れ層の活性化関数として用いられる．

$$f(x) = \max(0, x) \tag{1-55}$$

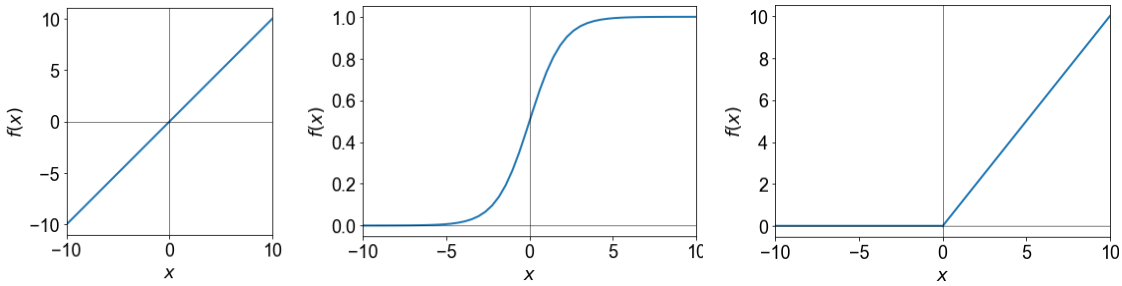


Fig. 1-18. Plots of activation functions. (a) linear function. (b) logistic function. (c) Rectified linear unit (ReLU).

1.3.3.5. 交差検証（cross validation）

機械学習では，特定のデータに対して過学習（over fit）することで，未知のデータに対する予測の確度が下がってしまうことがしばしば問題視される．過学習を防ぎ，より正確に学習するためには，より多くのデータに対して学習する必要がある．材料開発や格子構造の設計では実験やシミュレーションによってデータを得られるが，それぞれの実験やシミュレーションで一度に得られるデータの量は限られて

いる．データ量が少ない場合でも，確度の高い学習を行う方法として交差検証（cross validation）がある．一般的な機械学習では，データを学習用データと検証用データに分け，学習用データを用いて学習し，検証用データを用いて学習精度を検証する．その場合は，全体のデータの 1 割ほどのデータを検証用データとして用いる．一方，交差検証では，全体のデータを複数のブロックに分割し，検証用データとして順々にブロックを変え，残りのブロックを学習用データとして用いる．本論文では，少ない実験およびシミュレーションデータ量で確度の高い学習を行うために，交差検証による機械学習の成果を示す．

1.3.3.6. 機械学習のハイパーパラメータ最適化

層の数や各層に含まれるノードの数，活性化関数などのニューラルネットワークを構成する要素はハイパーパラメータと呼ばれる．より正確な学習や予測のためには，最適なハイパーパラメータを設定する必要がある．ニューラルネットワークモデルでは，ハイパーパラメータとして，層の数，各層に含まれるノードの数，学習率，交差検証の分割数，最適化手法，活性化関数がある．それぞれのハイパーパラメータを様々に変化させ，モデルの予測精度が最大となる組み合わせを探索することでハイパーパラメータを最適化する．

本研究では，最適化手法には，勾配降下法を用い，活性化関数には，隠れ層は ReLU 関数，出力層は線形関数を用いた．隠れ層の数を 1, 2, 3, 4, 5 層，1 層あたりのノードの数を 10, 50, 100, 250, 500, 1000 個，学習率を 0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1, 交差検証の分割数を 5, 10, 15, 20, 25 区分とした 1050 通りの組み合わせを用いて学習を実行し，これらの中から損失関数を最小化しうる最適な組み合わせを探索する．

1.3.3.7. ロジスティック回帰による Bistability の分類

ロジスティック回帰とは，単層のパーセプトロンにて，活性化関数にロジスティック関数を用いることで，定性的な目的変数に対してどんな説明変数の組み合わせがどのような特性となるかを判別する分類の手法の一つである．式(1-56)にロジスティック関数を示す．

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \tag{1-56}$$

多軸双安定構造の FEM によるシミュレーション結果が bistable となるか否か分類するために，設計パラメータ a，R，φ および k を説明変数としたロジスティック回帰を行う．

1.3.3.8. Inverse Design

構造の設計パラメータなどの説明変数からその構造が示す力学的特性などの目的変数を予測することを順問題の回帰という. 逆に目的変数から説明変数を予測することを逆問題の回帰という. 逆問題は理想となる目的変数を満たすような設計変数を探索する際などに重要となる. しかし, 目的変数は説明変数に従属な変数なので, 単純なニューラルネットワークを用いた回帰では, 重解などの考慮ができないため確度の高い回帰ができない. このような解くために必要な情報がすべて与えられていない問題を不良設定問題（ill-posed problem）[90]という. このような不良設定問題を解くためには, 目的変数から説明変数を予測するニューラルネットワークに加えて, このニューラルネットワークで得られた予測値が正しいことを確かめる操作を付け加える必要がある. このような機械学習モデルに Inverse design がある. Inverse design の機械学習モデルを Fig. 1-19 に示す. Inverse design では, 予め順問題について学習させたニューラルネットワーク f-NN（forward neural network）を逆問題のニューラルネットワークモデル i-NN（inverse neural network）の確認に用いる. Inverse design の学習は以下の手順で進める. 初期値をランダムに設定した i-NN を用いて目的変数から説明変数を予測する. 学習済みの f-NN を用いて予測された説明変数から目的変数を再構築する. この再構築された目的変数が最初に i-NN と入力された目的変数との誤差を損失関数から計算し, i-NN のパラメータの感度から i-NN のパラメータを更新する. 以上の手順で i-NN を最適化することで, 重解が考慮された説明変数を予測することができるようになる.

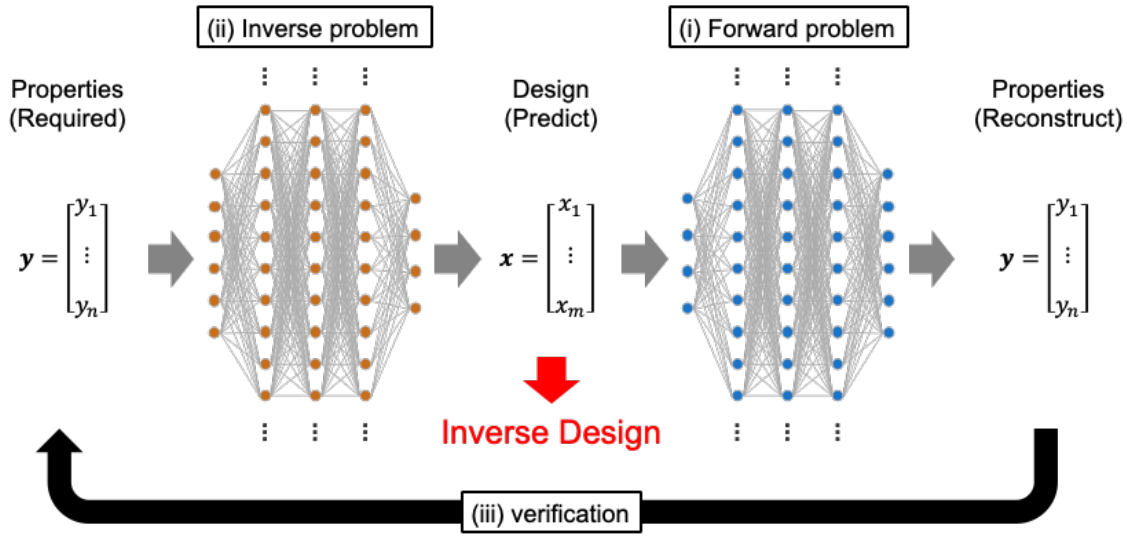


Fig. 1-19. Schematic illustration of the Inverse design process.

1.4. 本研究の目的

本研究では, 相転移する結晶性材料が機能性を発現することに基づいた力学メタマテリアルの設計を提案する. 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，その考案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することを目的とする. 具体的には, 現存の相転移するメタマテリアルの特性を制御するための機械学習による設計変数からの特性予測，さらに求める特性から設計変数を導出するための Inverse Design の実装，さらに，形状記憶合金や超弾性合金で発現するマルテンサイト変態や双晶変形における原子配列変化に基づいた新しい相転移するメタマテリアルの設計とそのコンセプトの実証を行う.

1.5. 本論文の構成

本論文は第 1 章から第 6 章までの 6 章で構成されており，各章の概略は以下のとおりである.

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記述した. 特性を制御するために用いる機械学習手法についても概説した.

第 2 章では，結晶構造の対称性に着目し，原子を模擬した球と原子間結合を模擬した梁から構成される格子構造として設計し, それを弾性変形能の高いエラストマーを素材として 3D プリントしてその特性を評価することで，メタマテリアルの新しい設計・創製の指針を示す.

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シミュレーション手法の開発を行う．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．真直梁と球で構成される FCC およびダイヤモンド構造の変形挙動を比較する.

第 4 章では，せん断による原子配列の変化に着目し，メタマテリアルの設計を探る．メタマテリアル設計の基本指針として，せん断変形により準安定状態が現れる双安定構造を持つ 2 次元格子構造の設計上の制約を調べた結果を示す.

第 5 章では，荷重と温度に応じて状態が変化する熱誘起 PXCM 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，相転移メタマテリアルの特性制御の指針を示す.

第 6 章では，本研究で得られた知見を総括する.

参考文献

[1] Y. Liu, X. Zhang, Metamaterials: A new frontier of science and technology, Chem. Soc. Rev. 40 (2011) 2494–2507. https://doi.org/10.1039/c0cs00184h.

[2] M. Kadic, G.W. Milton, M. van Hecke, M. Wegener, 3D metamaterials, Nat. Rev. Phys. 1 (2019) 198–210. https://doi.org/10.1038/s42254-018-0018-y.

[3] M. Askari, D.A. Hutchins, P.J. Thomas, L. Astolfi, R.L. Watson, M. Abdi, M. Ricci, S. Laureti, L. Nie, S. Freear, R. Wildman, C. Tuck, M. Clarke, E. Woods, A.T. Clare, Additive manufacturing of metamaterials: A review, Addit. Manuf. 36 (2020) 101562. https://doi.org/10.1016/j.addma.2020.101562.

[4] J.U. Surjadi, L. Gao, H. Du, X. Li, X. Xiong, N.X. Fang, Y. Lu, Mechanical Metamaterials and Their Engineering Applications, Adv. Eng. Mater. 21 (2019) 1–37. https://doi.org/10.1002/adem.201800864.

[5] P. Jiao, J. Mueller, J.R. Raney, X.R. Zheng, A.H. Alavi, Mechanical metamaterials and beyond, Nat. Commun. 14 (2023) 6004. https://doi.org/10.1038/s41467-023-41679-8.

[6] S. Jahani, Z. Jacob, All-dielectric metamaterials, Nat. Nanotechnol. 11 (2016) 23–36. https://doi.org/10.1038/nnano.2015.304.

[7] S.G.C. Carrillo, L. Trimby, Y.Y. Au, V.K. Nagareddy, G. Rodriguez-Hernandez, P. Hosseini, C. Ríos, H. Bhaskaran, C.D. Wright, A Nonvolatile Phase-Change Metamaterial Color Display, Adv. Opt. Mater. 7 (2019). https://doi.org/10.1002/adom.201801782.

[8] J. Valentine, S. Zhang, T. Zentgraf, E. Ulin-avila, D.A. Genov, G. Bartal, Three-dimensional optical metamaterial with a negative refractive index, 455 (2008). https://doi.org/10.1038/nature07247.

[9] A. da Silva Ferreira, G.N. Malheiros-Silveira, H.E. Hernandez-Figueroa, Computing Optical Properties of Photonic Crystals by Using Multilayer Perceptron and Extreme Learning Machine, J. Light. Technol. 36 (2018) 4066–4073. https://doi.org/10.1109/JLT.2018.2856364.

[10] R.A. Shelby, D.R. Smith, S. Schultz, Experimental Verification of a Negative Index of Refraction, Science (80-.). 292 (2001) 77–79. https://doi.org/10.1126/science.1058847.

[11] G. Zhao, S. Bi, Design and verification of double band negative refraction metamaterial, Chem. Phys. Lett. 725 (2019) 92–96. https://doi.org/10.1016/j.cplett.2019.04.020.

[12] S. Liu, Y. Li, Thermal Expansion of Hybrid Chiral Mechanical Metamaterial with Patterned Bi-Strips, Adv. Eng. Mater. 25 (2023) 2300478. https://doi.org/10.1002/adem.202300478.

[13] A. Takezawa, M. Kobashi, M. Kitamura, Porous composite with negative thermal expansion obtained by photopolymer additive manufacturing, APL Mater. 3 (2015) 076103. https://doi.org/10.1063/1.4926759.

[14] S.A. Cummer, J. Christensen, A. Alù, Controlling sound with acoustic metamaterials, Nat. Rev. Mater. 1 (2016). https://doi.org/10.1038/natrevmats.2016.1.

[15] A. Bacigalupo, G. Gnecco, M. Lepidi, L. Gambarotta, Machine-Learning Techniques for the Optimal Design of Acoustic Metamaterials, J. Optim. Theory Appl. (2019). https://doi.org/10.1007/s10957-019-01614-8.

[16] N.A. Fleck, V.S. Deshpande, M.F. Ashby, Micro-architectured materials: Past, present and future, Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci. 466 (2010) 2495–2516. https://doi.org/10.1098/rspa.2010.0215.

[17] M.F. Ashby, Hybrids to fill holes in material property space, Philos. Mag. 85 (2005) 3235–3257. https://doi.org/10.1080/14786430500079892.

[18] R. Su, J. Chen, X. Zhang, W. Wang, Y. Li, R. He, D. Fang, 3D-Printed Micro/Nano-Scaled Mechanical Metamaterials: Fundamentals, Technologies, Progress, Applications, and Challenges, Small. 19 (2023) 2206391. https://doi.org/10.1002/smll.202206391.

[19] M.. Ashby, The properties of foams and lattices, Philos. Trans. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci. 364 (2006) 15–30. https://doi.org/10.1098/rsta.2005.1678.

[20] A. Vigliotti, D. Pasini, Stiffness and strength of tridimensional periodic lattices, Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 229–232 (2012) 27–43. https://doi.org/10.1016/j.cma.2012.03.018.

[21] L. Dong, V. Deshpande, H. Wadley, Mechanical response of Ti-6Al-4V octet-truss lattice structures, Int. J. Solids Struct. 60 (2015) 107–124. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2015.02.020.

[22] G. Aguzzi, C. Kanellopoulos, R. Wiltshaw, R. V. Craster, E.N. Chatzi, A. Colombi, Octet lattice-based plate for elastic wave control, Sci. Rep. 12 (2022) 1–14. https://doi.org/10.1038/s41598-022-04900-0.

[23] R.K. Abu Al-Rub, D. Lee, K.A. Khan, A.N. Palazotto, Effective Anisotropic Elastic and Plastic Yield Properties of Periodic Foams Derived from Triply Periodic Schoen's I-WP Minimal Surface, J. Eng. Mech. 146 (2020) 1–19. https://doi.org/10.1061/(ASCE)EM.1943-7889.0001759.

[24] C. Bonatti, D. Mohr, Smooth-shell metamaterials of cubic symmetry: Anisotropic elasticity, yield strength and specific energy absorption, Acta Mater. 164 (2019) 301–321. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.10.034.

[25] S. Yu, J. Sun, J. Bai, Investigation of functionally graded TPMS structures fabricated by additive manufacturing, Mater. Des. 182 (2019) 108021. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108021.

[26] S. Kumar, S. Tan, L. Zheng, D.M. Kochmann, Inverse-designed spinodoid metamaterials, Npj Comput. Mater. 6 (2020) 1–10. https://doi.org/10.1038/s41524-020-0341-6.

[27] S. Khaleghi, F.N. Dehnavi, M. Baghani, M. Safdari, K. Wang, M. Baniassadi, On the directional elastic modulus of the TPMS structures and a novel hybridization method to control anisotropy, Mater. Des. 210 (2021) 110074. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2021.110074.

[28] J.B. Berger, H.N.G. Wadley, R.M. Mcmeeking, Mechanical metamaterials at the theoretical limit of isotropic elastic stiffness, Nat. Publ. Gr. 543 (2017) 533–537. https://doi.org/10.1038/nature21075.

[29] Z. Zhai, L. Wu, H. Jiang, Mechanical metamaterials based on origami and kirigami, Appl. Phys. Rev. 8 (2021). https://doi.org/10.1063/5.0051088.

[30] B. Li, Z. Huang, Y. Lin, X. Kang, Y. Li, Mechanical properties of novel folded kirigami metamaterials under quasi-static compression, Smart Mater. Struct. 31 (2022). https://doi.org/10.1088/1361-665X/ac68b4.

[31] X. Ren, R. Das, P. Tran, T.D. Ngo, Y.M. Xie, Auxetic metamaterials and structures: a review, Smart Mater. Struct. 27 (2018) 023001. https://doi.org/10.1088/1361-665X/aaa61c.

[32] H. Yang, L. Ma, Design and characterization of axisymmetric auxetic metamaterials, Compos. Struct. 249 (2020) 112560. https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2020.112560.

[33] J.K. Wilt, C. Yang, G.X. Gu, Accelerating Auxetic Metamaterial Design with Deep Learning, Adv. Eng. Mater. 22 (2020) 1901266. https://doi.org/10.1002/adem.201901266.

[34] C. Yuan, X. Mu, C.K. Dunn, J. Haidar, T. Wang, H. Jerry Qi, Thermomechanically Triggered Two-Stage Pattern Switching of 2D Lattices for Adaptive Structures, Adv. Funct. Mater. 1705727 (2018) 1–9. https://doi.org/10.1002/adfm.201705727.

[35] T. Bückmann, M. Thiel, M. Kadic, R. Schittny, M. Wegener, An elasto-mechanical unfeelability cloak made of pentamode metamaterials, Nat. Commun. 5 (2014) 4130. https://doi.org/10.1038/ncomms5130.

[36] M. Kadic, T. Bückmann, N. Stenger, M. Thiel, M. Wegener, On the practicability of pentamode mechanical metamaterials, Appl. Phys. Lett. 100 (2012) 191901. https://doi.org/10.1063/1.4709436.

[37] Q. Li, M. Zhang, Composite hexagonal pentamode acoustic metamaterials with tailored properties, J. Phys. Condens. Matter. 32 (2020) 475701. https://doi.org/10.1088/1361-648X/abaf13.

[38] L.J. Gibson, M.F. Ashby, Cellular Solids, Cambridge University Press, 1997. https://doi.org/10.1017/CBO9781139878326.

[39] V.S. Deshpande, M.F. Ashby, N.A. Fleck, Foam topology: Bending versus stretching dominated architectures, Acta Mater. 49 (2001) 1035–1040. https://doi.org/10.1016/S1359-6454(00)00379-7.

[40] E. de Moor, S. Lacroix, A.J. Clarke, J. Penning, J.G. Speer, Effect of retained austenite stabilized via quench and partitioning on the strain hardening of martensitic steels, Metall. Mater. Trans. A Phys. Metall. Mater. Sci. 39 (2008) 2586–2595. https://doi.org/10.1007/s11661-008-9609-z.

[41] D. V. Edmonds, K. He, F.C. Rizzo, B.C. De Cooman, D.K. Matlock, J.G. Speer, Quenching and partitioning martensite-A novel steel heat treatment, Mater. Sci. Eng. A. 438–440 (2006) 25–34. https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.02.133.

[42] K. Bhattacharya, R.D. James, The Material Is the Machine, Science (80-.). 307 (2005) 53–54. https://doi.org/10.1126/science.1100892.

[43] K. Otsuka, X. Ren, Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys, Prog. Mater. Sci. 50 (2005) 511–678. https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2004.10.001.

[44] X. Yang, L. Ma, J. Shang, Martensitic transformation of Ti50(Ni50−xCux) and Ni50(Ti50−xZrx) shape-memory alloys, Sci. Rep. 9 (2019) 3221. https://doi.org/10.1038/s41598-019-40100-z.

[45] J. Mohd Jani, M. Leary, A. Subic, M.A. Gibson, A review of shape memory alloy research, applications and opportunities, Mater. Des. 56 (2014) 1078–1113. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2013.11.084.

[46] T. Baxevanis, C.M. Landis, D.C. Lagoudas, On the fracture toughness of pseudoelastic shape memory alloys, J. Appl. Mech. Trans. ASME. 81 (2014) 1–8. https://doi.org/10.1115/1.4025139.

[47] K. Otsuka, T. Ohba, M. Tokonami, C.M. Wayman, New description of long period stacking order structures of martensites in β-phase alloys, Scr. Metall. Mater. 29 (1993) 1359–1364. https://doi.org/10.1016/0956-716X(93)90139-J.

[48] R. Monzen, M.L. Jenkins, A.R. Sutton, The bcc-to-9R martensitic transformation of Cu precipitates and the relaxation process of elastic strains in an Fe-Cu alloy, Philos. Mag. A Phys. Condens. Matter, Struct. Defects Mech. Prop. 80 (2000) 711–723. https://doi.org/10.1080/01418610008212077.

[49] Y. Zhang, L. Xu, L. Zhao, D. Lin, M. Liu, X. Qi, Y. Han, Process-microstructure-properties of CuAlNi shape memory alloys fabricated by laser powder bed fusion, J. Mater. Sci. Technol. 152 (2023) 1–15. https://doi.org/10.1016/j.jmst.2022.12.037.

[50] J. Pons, R. Santamarta, V.A. Chernenko, E. Cesari, Long-period martensitic structures of Ni-Mn-Ga alloys studied by high-resolution transmission electron microscopy, J. Appl. Phys. 97 (2005). https://doi.org/10.1063/1.1861137.

[51] S. Shi, C. Liu, J.F. Wan, Y.H. Rong, J.H. Zhang, Thermodynamics of fcc-fct martensitic transformation in Mn-X(X = Cu,Fe) alloys, Mater. Des. 92 (2016) 960–970. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2015.12.093.

[52] D. Wang, Q. Tian, X. Liu, Z. Ren, F. Yin, P. Ji, Microstructure characterisation of directionally solidified MnNi damping alloy under strong magnetic field, Mater. Sci. Technol. (United Kingdom). 39 (2023) 2018–2027. https://doi.org/10.1080/02670836.2023.2187524.

[53] C. Cayron, F. Barcelo, Y. de Carlan, The mechanisms of the fcc-bcc martensitic transformation revealed by pole figures, Acta Mater. 58 (2010) 1395–1402. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.10.046.

[54] T.W. Liu, X.L. Wu, Martensitic transformation pathways and crystallographic orientation relationships in steel, J. Mater. Sci. Technol. 174 (2024) 74–84. https://doi.org/10.1016/j.jmst.2023.06.060.

[55] X.S. Yang, S. Sun, H.H. Ruan, S.Q. Shi, T.Y. Zhang, Shear and shuffling accomplishing polymorphic fcc $\gamma \rightarrow$ hcp $\varepsilon \rightarrow$ bct α martensitic phase transformation, Acta Mater. 136 (2017) 347–354. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.07.016.

[56] L.M. Guerrero, P. La Roca, F. Malamud, A. Baruj, M. Sade, Composition effects on the fcc-hcp martensitic transformation and on the magnetic ordering of the fcc structure in Fe-Mn-Cr alloys, Mater. Des. 116 (2017) 127–135. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.12.003.

[57] T. Mitsunobu, Y. Koizumi, B.-S. Lee, K. Yamanaka, H. Matsumoto, Y. Li, A. Chiba, Role of strain-induced martensitic transformation on extrusion and intrusion formation during fatigue deformation of biomedical Co–Cr–Mo–N alloys, Acta Mater. 81 (2014) 377–385. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.08.039.

[58] 大塚和弘, 合金のマルテンサイト変態と形状記憶効果, 内田老鶴圃, 2012.

[59] K. Saitoh, T. Sato, N. Shinke, Atomic Dynamics and Energetics of Martensitic Transformation in Nickel–Titanium Shape Memory Alloy, Mater. Trans. 47 (2006) 742–749. https://doi.org/10.2320/matertrans.47.742.

[60] K. Otsuka, X. Ren, Physical metallurgy of Ti – Ni-based shape memory alloys, Prog. Mater. Sci. 50 (2005) 511–678. https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2004.10.001.

[61] K. Saitoh, T. Sato, N. Shinke, Atomic Dynamics and Energetics of Martensitic Transformation in Nickel-Titanium Shape Memory Alloy, Mater. Trans. 47 (2006) 742–749. https://doi.org/10.2320/matertrans.47.742.

[62] K. Bhattacharya, R.D. James, The Material Is the Machine, Science (80-.). 307 (2005) 53–54. https://doi.org/10.1126/science.1100892.

[63] N. Hatcher, O.Y. Kontsevoi, A.J. Freeman, Martensitic transformation path of NiTi, Phys. Rev. B. 79 (2009) 020202. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.020202.

[64] D. Restrepo, N.D. Mankame, P.D. Zavattieri, Phase transforming cellular materials, Extrem. Mech. Lett. 4 (2015) 52–60. https://doi.org/10.1016/j.eml.2015.08.001.

[65] S. Tibbits, 4D printing: Multi-material shape change, Archit. Des. 84 (2014) 116–121. https://doi.org/10.1002/ad.1710.

[66] M. Bodaghi, W.H. Liao, 4D printed tunable mechanical metamaterials with shape memory operations, Smart Mater. Struct. 28 (2019). https://doi.org/10.1088/1361-665X/ab0b6b.

[67] W. Hu, Z. Ren, Z. Wan, D. Qi, X. Cao, Z. Li, W. Wu, R. Tao, Y. Li, Deformation behavior and band gap switching function of 4D printed multi-stable metamaterials, Mater. Des. 200 (2021) 109481. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2021.109481.

[68] D.M. Correa, C.C. Seepersad, M.R. Haberman, Mechanical design of negative stiffness honeycomb materials, Integr. Mater. Manuf. Innov. 4 (2015) 165–175. https://doi.org/10.1186/s40192-015-0038-8.

[69] D.A. Debeau, C.C. Seepersad, M.R. Haberman, Impact behavior of negative stiffness honeycomb materials, J. Mater. Res. 33 (2018) 290–299. https://doi.org/10.1557/jmr.2018.7.

[70] D.M. Correa, T. Klatt, S. Cortes, M. Haberman, D. Kovar, C. Seepersad, Negative stiffness honeycombs for recoverable shock isolation, Rapid Prototyp. J. 21 (2015) 193–200. https://doi.org/10.1108/RPJ-12-2014-0182.

[71] J. Qiu, J.H. Lang, A.H. Slocum, A Curved-Beam Bistable Mechanism, J. Microelectromechanical Syst. 13 (2004) 137–146. https://doi.org/10.1109/JMEMS.2004.825308.

[72] L.J. Gibson, M.F. Ashby, B.A. Harley, Cellular Materials in Nature and Medicine, Cambridge University Press, 2010. https://books.google.co.jp/books?id=AKxiS4AKpyEC.

[73] L.J. Gibson, M.F. Ashby, Cellular Solids, Cambridge University Press, 1997. https://doi.org/10.1017/CBO9781139878326.

[74] J. Qiu, J.H. Lang, A.H. Slocum, A curved-beam bistable mechanism, J. Microelectromechanical Syst. 13 (2004) 137–146. https://doi.org/10.1109/JMEMS.2004.825308.

[75] B. Camescasse, A. Fernandes, J. Pouget, Bistable buckled beam and force actuation: Experimental validations, Int. J. Solids Struct. 51 (2014) 1750–1757. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2014.01.017.

[76] B. Camescasse, A. Fernandes, J. Pouget, Bistable buckled beam: Elastica modeling and analysis of static actuation, Int. J. Solids Struct. 50 (2013) 2881–2893. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2013.05.005.

[77] C.S. Ha, R.S. Lakes, M.E. Plesha, Design, fabrication, and analysis of lattice exhibiting energy absorption via snap-through behavior, Mater. Des. 141 (2018) 426–437. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.12.050.

[78] T. Frenzel, C. Findeisen, M. Kadic, P. Gumbsch, M. Wegener, Tailored Buckling Microlattices as Reusable Light-Weight Shock Absorbers, Adv. Mater. 28 (2016) 5865–5870. https://doi.org/10.1002/adma.201600610.

[79] D.M. Correa, C.C. Seepersad, M.R. Haberman, Mechanical design of negative stiffness honeycomb materials, Integr. Mater. Manuf. Innov. 4 (2015) 10. https://doi.org/10.1186/s40192-015-0038-8.

[80] D.M. Correa, T. Klatt, S. Cortes, M. Haberman, D. Kovar, C. Seepersad, Negative stiffness honeycombs for recoverable shock isolation, Rapid Prototyp. J. 21 (2015) 193–200. https://doi.org/10.1108/RPJ-12-2014-0182.

[81] F. Pan, Y. Li, Z. Li, J. Yang, B. Liu, Y. Chen, 3D Pixel Mechanical Metamaterials, Adv. Mater. 31 (2019) 1900548. https://doi.org/10.1002/adma.201900548.

[82] B. Camescasse, A. Fernandes, J. Pouget, Bistable buckled beam: Elastica modeling and analysis of static actuation, Int. J. Solids Struct. 50 (2013) 2881–2893. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2013.05.005.

[83] Y. Zhang, D. Restrepo, M. Velay-Lizancos, N.D. Mankame, P.D. Zavattieri, Energy dissipation in functionally two-dimensional phase transforming cellular materials, Sci. Rep. 9 (2019) 12581. https://doi.org/10.1038/s41598-019-48581-8.

[84] H. Yang, L. Ma, Angle-Dependent Transitions Between Structural Bistability and Multistability, Adv. Eng. Mater. 22 (2020) 1900871. https://doi.org/10.1002/adem.201900871.

[85] X. Tan, B. Wang, S. Zhu, S. Chen, K. Yao, P. Xu, L. Wu, Y. Sun, Novel multidirectional negative stiffness mechanical metamaterials, Smart Mater. Struct. 29 (2020) 015037. https://doi.org/10.1088/1361-665X/ab47d9.

[86] H. Yang, L. Ma, 1D to 3D multi-stable architected materials with zero Poisson's ratio and controllable thermal expansion, Mater. Des. 188 (2020) 108430. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108430.

[87] C. Ren, D. Yang, H. Qin, Mechanical Performance of Multidirectional Buckling-Based Negative Stiffness Metamaterials: An Analytical and Numerical Study, Materials (Basel). 11 (2018) 1078. https://doi.org/10.3390/ma11071078.

[88] C.S. Ha, R.S. Lakes, M.E. Plesha, Cubic negative stiffness lattice structure for energy absorption : Numerical and experimental studies International Journal of Solids and Structures Cubic negative stiffness lattice structure for energy absorption : Numerical and experimental studies, Int. J. Solids Struct. 178–179 (2019) 127–135. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2019.06.024.

[89] S. Timoshenko, Analysis of Bi-Metal Thermostats, J. Opt. Soc. Am. 11 (1925) 233. https://doi.org/10.1364/JOSA.11.000233.

[90] S.I. Kabanikhin, Definitions and examples of inverse and ill-posed problems, J. Inverse Ill-Posed Probl. 16 (2008) 317–357. https://doi.org/10.1515/JIIP.2008.019.

第2章　原子模倣による PXCM の多軸化

2.1.　緒言

結晶性材料には，相転移に起因した力学特性を発現する材料が多く存在する．例えば TiNi 合金では，熱弾性マルテンサイト変態に由来して形状記憶効果や超弾性を発現する[1,2]．最近では，メタマテリアルの分野においても相転移に起因した特異な力学特性を，メタ原子を作り込み配列させることで発現させる研究が盛んに行われている[3–5]．その中でも特に，相転移するメタマテリアルとして Phase Transforming Cellular Material（PXCM）[6]が注目を集めている．PXCM は，ハニカム構造を構成する梁の一部としてサインカーブ状の曲り梁を組み込んだ構造をもち，その曲がり梁が飛び移り座屈を示すことで，PXCM の構造が分断や再結合を伴わずに形状を変化させる．飛び移り座屈する際には荷重を制限して変形するため，大きな衝撃を吸収することができる[7,8]．これらの特性を利用して，アルミニウムを用いて作製された PXCM を移動式滑走路へ応用する研究が現在では進められており[9]，今後は自動車のバンパーやスポーツの防具などへの応用が期待される．これらの展望へ向けて，曲面に適用し様々な方向からの衝撃を吸収するよう改善が求められる．この課題に対して，曲面に対して素直な方向に相変態的に変形する構造を作るためには，一方向に対応した構造を適切な向きに投影することで曲面の曲率や複雑さに適応させる Conformal 化を用いる方法[10]と，基本構造自体がより多くの方向に相変態的に変形できる構造に設計する方法[11,12]が挙げられる．Conformal 化によって複雑な形状に適応させる場合，構造の絶対的な長さや太さなどの設計ジオメトリは一部位ごとによって変化する．これは相変態的な変形の特性を最適化するにあたって大きな制約となる．また，複数の方向の荷重に対応し bistability を示す PXCM はいくつか提案されている [11,13–16]．しかしながら，これらのメタ原子では bistability のメカニズムとして飛び移り座屈する曲り梁[17]を組み込んでおり，このメカニズムでは荷重軸が理想の荷重軸から 5°程度傾斜すると bistable ではなくなる[8]．

本章では，結晶構造の対称性に着目し，原子を模擬した球と原子間結合を模擬した梁から構成される格子構造として設計し，それを弾性変形能の高いエラストマーを素材として 3D プリントしてその特性を評価することで，メタマテリアルの新しい設計・創製の指針を示すことを目的とした．

2.2.　多軸 PXCM の設計

2.2.1.　多軸 PXCM の設計コンセプト

PXCM はハニカム構造をベースにサインカーブが組み込まれた Fig. 2-1 に示す格

子構造体である．まず，PXCM を一方向だけではなく，さらに直交するような別の方向にも bistability を示すように設計を改めた．直交する方向に飛び移り座屈が可能となるように横梁を除去し，縦梁を 2 本のサインカーブ状の梁に置き換えた．Fig. 2-2 に示すような四芒星形の構造となった．PXCM では，サインカーブが大きく変形し，縦梁と横梁がサインカーブを挟み込むことにより 飛び移り座屈が可能となり，縦梁および横梁の剛性が高くなることで bistability を示す．四芒星形の構造では上記の挟み込むような機構が存在しないため飛び移り座屈が生じず bistable とならない. この四芒星形の構造をもとに挟み込むような機構を導入する必要がある．そこで，様々な形を探索した．しかし，大変形に伴う梁同士の接触を避けながら挟み込み機構を成立させることは, 平面的な四芒星形をベースとした飛び移り座屈可能な構造では設計困難である．そこで，特定方向に大変形し，他の方向に剛性な立体的な構造を探索した．文献[11,12]では，<100>の 3 方向に bistable な構造が提案されている．この構造では直交する 3 方向に bistability を示すことができる．しかしながら，この構造では球面のような面に適用する場合，Fig. 2-3 に示すように bistablity を発現する部分が限定されてしまう．

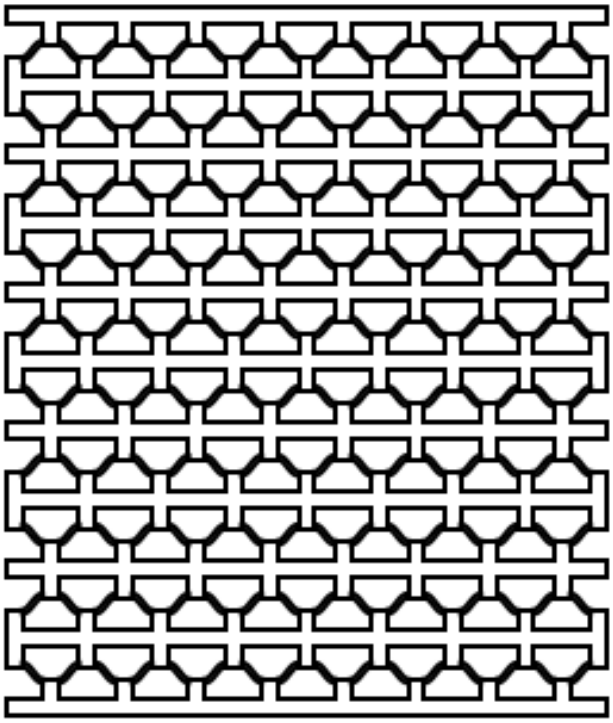


Fig. 2-1. Schematic of a conventional PXCM.

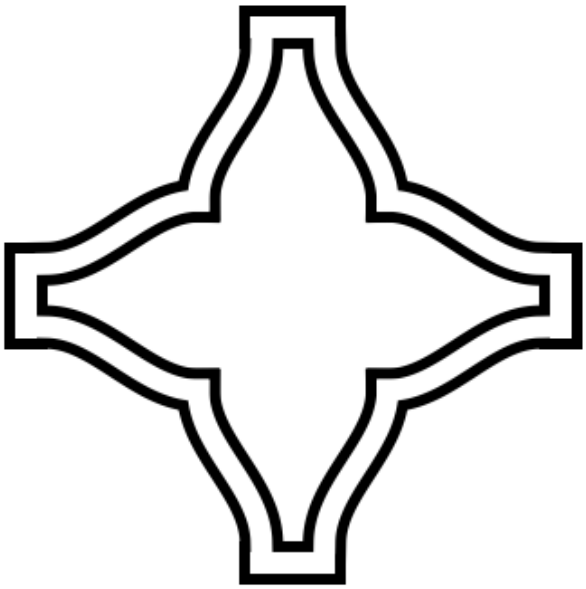


Fig. 2-2. Schematic of a hypothetical four-pointed star shaped bi-directional bistable mechanism.

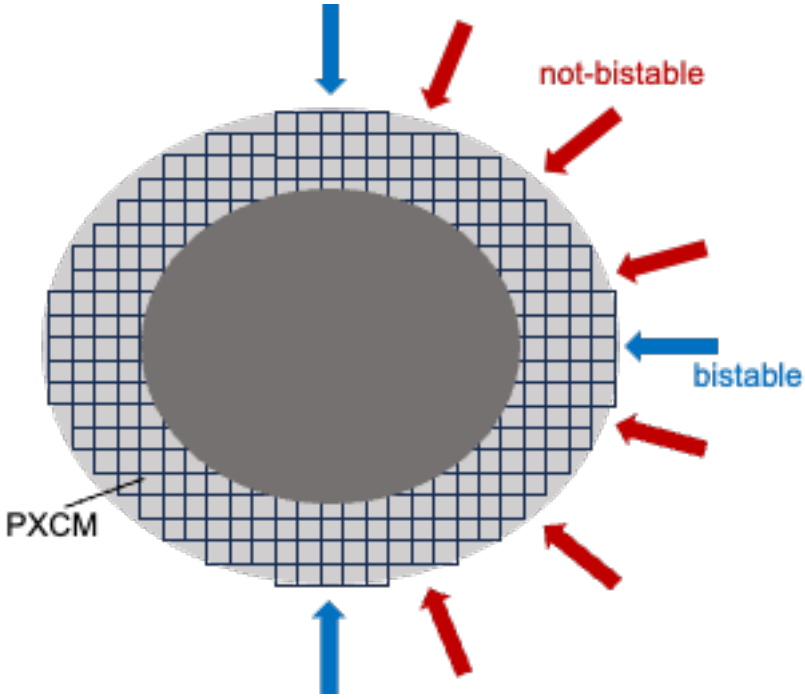


Fig. 2-3. Schematic illustration of PXCM as shock absorber. Conventional PXCM are bistable only in orthogonal directions.

立体的な繰り返し構造として，物質の結晶構造に着目した．その中で，単純かつ頻繁に見られる形状として四面体に着目した．四芒星形の構造の 2 本のサインカ

ーブを一つの梁に見立てて四面体の辺とすると，Fig. 2-4 に示すような 4 つの異なる方向に bistable となる四面体状の構造となった．この四面体状の構造を立方晶ダイヤモンド構造のように並べていくと，Fig. 2-5 に示すような立方晶系のメタ原子を持つメタマテリアルとなり，球の配列の対称性は面心立方晶（FCC）と同様な *Fm*-3*m* となり，梁の向きを含めた構造全体の対称性は ZnS 型構造と同じになった．この構造は，正四面体構造が反対側の底面に向かうように変形することにより，FCC 構造の 4 つの 3 回回転軸，すなわち<111>方向に対して多軸双安定性を示すことが期待される．

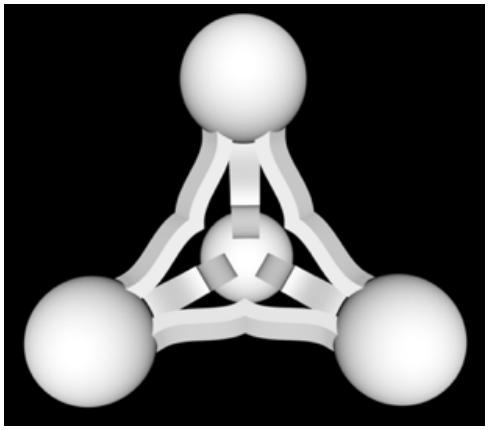


Fig. 2-4. CAD model of a tetrahedral structure of Multi-axis PXCM.

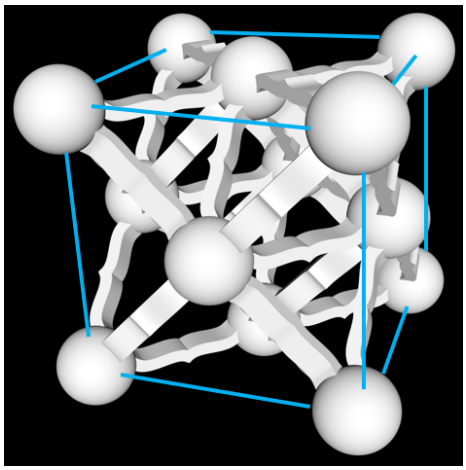


Fig. 2-5. CAD model of a cubic unit cell of Multi-axis PXCM.

正四面体の頂点に球をおき，それらを結ぶ辺にあたる部分を 2 つの正弦波状の梁を組み合わせたものとする．Fig. 2-6 に 1 つの梁の模式図を示す．正四面体の頂点と重心を結ぶ直線を一点鎖線で，正四面体の辺の中央と重心を結ぶ直線を破線で示す．ここで一点鎖線と破線はそれぞれ立方晶系における<111>方向と<100>方向を指す．Fig. 2-6 に示すように正弦波状の曲り梁がある球から出て破線上で他の曲り

梁と結合する．曲り梁の端部は，曲り梁が出ている球の一点鎖線と平行である．この梁を四面体の辺に設ける．Fig. 2-5 に示す立方晶系単位構造は，Fig. 2-7a に示すように四面体構造が 2 種類に分けられる．Fig. 2-4 に示すような梁の突起が四面体の重心に対して内向きである四面体と Fig. 2-8 に示すような梁の突起が外向きである四面体の 2 種類を FCC の四面体位置とみなして配列する．梁の突起が内向きの四面体構造が Fig. 2-8a の赤で示した四面体位置に，梁の突起が外向きの四面体構造が Fig. 2-7a の赤で示した四面体位置にそれぞれ対応する．この構造は<111>方向（Fig. 2-8b 矢印）への圧縮変形において PXCM の変形で見られた転位のように変形する．この構造にて，bistable となる条件を解明し，これを制御することでより汎用性の高い超弾性および形状記憶特性のメタマテリアルの創製が可能であると考えられる．

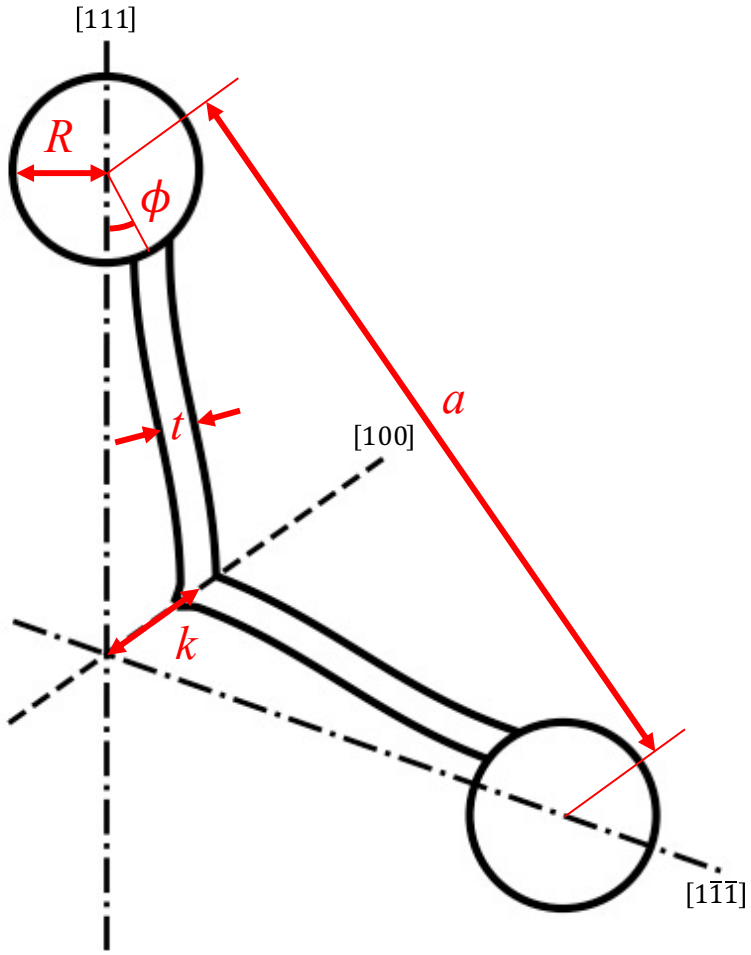
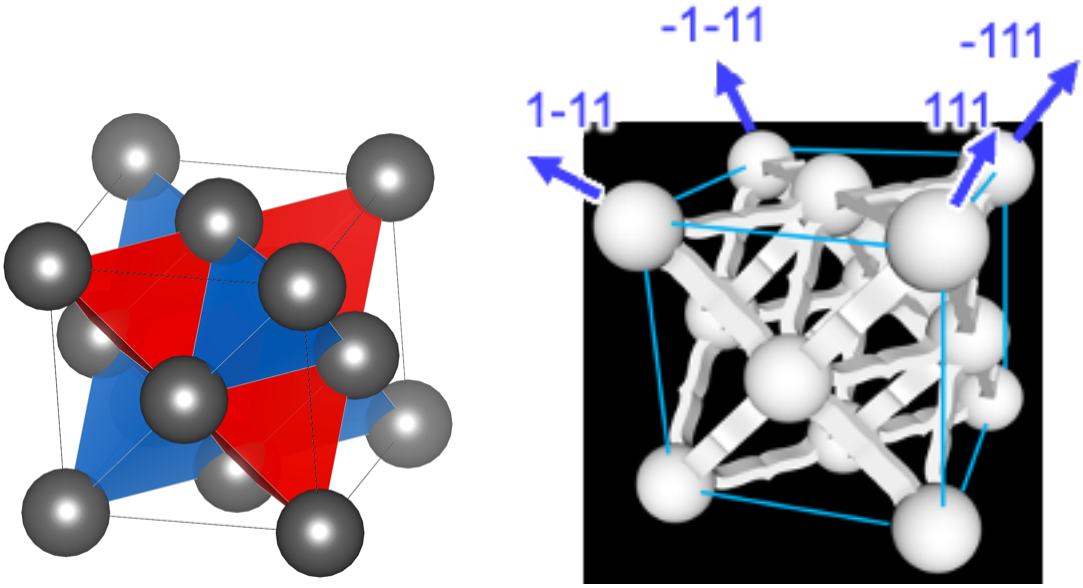


Fig. 2-6. Schemetic of a beam of Multi-axis PXCM. Dash-dot lines represent lines connecting the vertices of a tetrahedron and its center of gravity. Dashed line represents the prependicular bisector of two vertices of a tetrahedron.



(a) (b)

Fig. 2-7. (a) Schematic of FCC unit cell with red tetrahedra which has beams bent toward the centroid and blue tetrahedra which has beams bent against the centroid. (b) CAD model of unit cell of multistable bistable structure. Arrows show the direction of multiaxis bistable structure exhibiting bistability, which are <111> direction of FCC structure

Fig. 2-8. CAD model of a tetrahedral structure of Multi-axis PXCM with beams faceing the opposite direction compared to Fig. 2-4.

2.2.2. 多軸 PXCM の設計パラメータ

多軸双安定構造の梁の模式図を Fig. 2-6 に示す．Fig. 2-6 に示す 2 つの円は 2 つの隣接する球の断面であり，それらの球の中心と四面体の重心を結ぶ直線を一点鎖線で示す．また，2 つの円の垂直二等分線を破線で示す．ここで，球の半径を

Rとし，隣接する球同士の距離をaとした．

球の中心を原点とし，一点鎖線の四面体重心方向に x 軸，それに垂直な方向に y 軸をとるとき，梁は式(2-1)で表されるものとした．

$$y = \frac{h}{2}\left\{1 - \cos\left(\frac{2\pi}{\lambda}(x - R\cos\phi)\right)\right\} + R\sin\phi \tag{2-1}$$

ただし，hは梁の振幅，λは梁の波長，ϕは梁と球との位置関係を決定する角度で本論文では球と梁との接触角とする．ここで，2 つの球からそれぞれ式(2-1)の梁は，垂直二等分線上で結合する．この梁の結合する点と四面体重心との距離をkとすると，梁の振幅h，梁の波長λはそれぞれ式(2-2), (2-3)で表せる．

$$h = \sqrt{\frac{2}{3}}k - R\sin\phi \tag{2-2}$$

$$\lambda = \frac{\sqrt{6}}{4}a - \frac{\sqrt{3}}{3}k - R\cos\phi \tag{2-3}$$

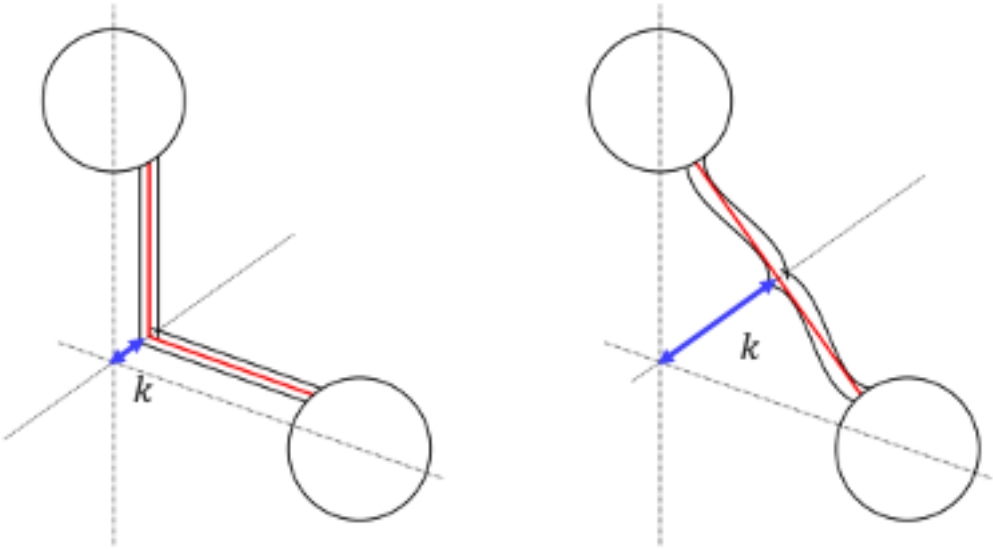
梁の形を決定するパラメータとしてk_rを定義する．Fig. 2-9a に示すように$h = 0$となるとき，すなわち，$k = k_1 = \sqrt{\frac{3}{2}}R\sin\phi$のとき$k_r = 0$，Fig. 2-9b に示すように両端の球と梁とのそれぞれの接点および 2 つのサインカーブ状の梁の結合点の 3 点が一直線上に並ぶとき，すなわち，$k = k_2 = \frac{a}{2\sqrt{2}} - R\left(\sqrt{\frac{1}{3}}cos\,\phi - \sqrt{\frac{2}{3}}\sin\phi\right)$のとき$k_r = 1$となる．

$$k_r = \frac{k - k_1}{k_2 - k_1} \tag{2-4}$$

2 本のサインカーブ状の梁をまとめて 1 本の梁とみなすと，k_rの値が 1 に近いほど真っ直ぐな形状を指すこととなる．

また，梁の全長は式 (2-5) のようになる．

$$l = \frac{\lambda}{\pi}\int_0^{2\pi}\sqrt{1 + \left(\frac{\pi h}{\lambda}\right)^2 \sin^2\theta}\,d\theta \tag{2-5}$$



(a) (b)

Fig. 2-9. Schematic of a beam of multiaxis bistble structure. (a) the sinusoidal beams are straight. (b) the center of beam and joint of spheres and beam line up in a straight line.

2.2.3. 梁と球の位置関係と梁同士の接触を防ぐ設計

四面体構造のいずれかの頂点を押し込み bistable となるためには，梁が接触せずに大変形する必要がある．また，梁の厚み t に対して十分大きな梁の横幅 w を持って設計しなければ，所定の変形とは異なる向きに変形してしまう．これらの条件を満たすため，本研究では，変形中に接触せず梁の横幅 w が最大となるよう設計し，四面体重心からみた球は Fig. 2-10 のように設計した．四面体構造の頂点を押し込むと梁は四面体重心の方向にたわむ．梁が一方向にのみたわむとすると，Fig. 2-10 中の青い長方形で示した梁は長方形の短辺と並行な破線に沿って変形する．梁の横幅 w を最大とするとき，この破線は他の長方形の頂点に接する．よって，梁の横幅 w は式(2-6)で表せる．

$$w = \frac{2}{\sqrt{3}}\left(R\sin\phi - \frac{t}{2}\right) \tag{2-6}$$

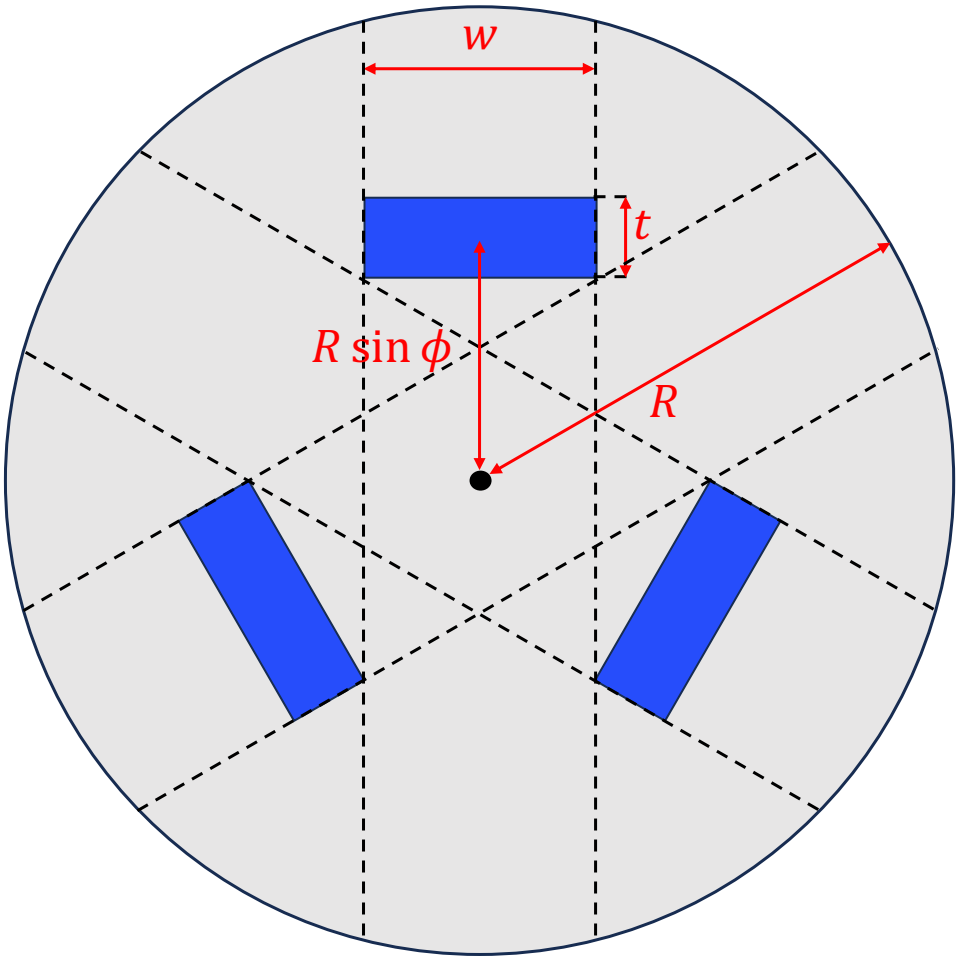


Fig. 2-10. Schematic of sphere and beams viewed from the center of gravity of tetrahedra. The blue rectangle represents the cross section of beams at the bondings with sphere.

2.2.4. 多軸 PXCM の相対密度

多軸双安定構造の相対密度を導出する．Fig. 2-11a に FCC 構造内に含まれる菱面体晶格子に相当する菱面体を示す．また，菱面体に対応する多軸双安定構造の CAD モデルおよび菱面体と多軸双安定構造を合わせた図をそれぞれ Fig. 2-11b および Fig. 2-11c に示す．この菱面体の体積は式(2-7)で表される．

$$V_{cell} = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2 \cdot \sqrt{\frac{2}{3}}a = \frac{\sqrt{2}}{2}a^3 \tag{2-7}$$

菱面体内に含まれる球の数は 1 つである．球の体積は式(2-8)で表される．

$$V_{\mathrm{sphere}} = \frac{4}{3}\pi R^3 \tag{2-8}$$

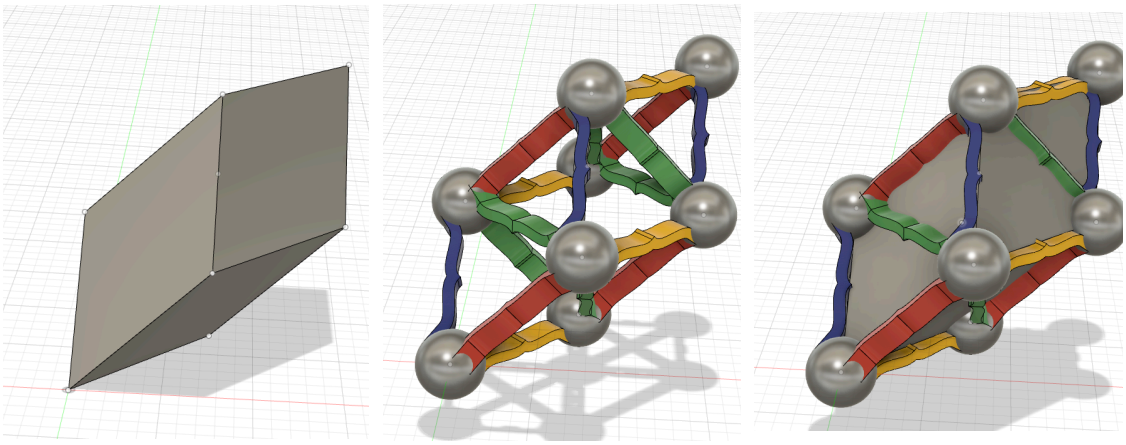
菱面体の面上に位置する梁は対面上の梁と合わせて 1 つ，菱面体の辺上に位置す

る梁は互いに並行な 4 つの辺上に位置する梁を合わせて 1 つと数えられる．ここで，菱面体の面の数は 6，辺の数は 12 であることから，菱面体内に含まれる梁の数は合計 6 である．梁 1 つあたりの体積は式(2-9)で表される．

$$V_{\mathrm{beam}} = twl \tag{2-9}$$

以上より，多軸双安定構造の相対密度 ρ は式(2-10)のようになる．

$$\rho = \frac{V_{\mathrm{sphere}} + 6V_{\mathrm{beam}}}{V_{\mathrm{cell}}} \tag{2-10}$$



(a) (b) (c)

Fig. 2-11. (a) CAD model of rhombohedron which is equivalent to rhombohedral element structure of FCC structure. (b) CAD model of rhombohedral element structure of multiaxis bistable structure. (c) Comparison of rhombohedron and element structure of multiaxis bistable structure.

2.3. 方法

2.3.1. 有限要素法（FEM）シミュレーション

本研究にて設計した多軸双安定構造は FCC 状に並んだ球と隣り合う球同士を結ぶ梁から構成される．この多軸双安定構造における一つの梁とその両端の球について，多軸双安定構造を圧縮変形させるときの変形挙動を有限要素法（FEM）によるシミュレーションで計算した．FEM シミュレーションには，ソルバとして COMSOL Multiphysics（COMSOL 社，スウェーデン）を使用し，材料特性としてはヤング率を 10 MPa，ポアソン比を 0.3，密度を 950 kg/m^3 とした．このシミュレーションのモデル図を Fig. 2-12 に示す．多軸 PXCM の<111>方向への圧縮を計算するため，Sphere B を完全拘束し，Sphere A が四面体の垂線に沿うように変位させる計算を行った．このときの Sphere A を動かした変位dと Sphere A を動かすのに必要な荷重fを記録し，荷重変位曲線として記録した．変位dと荷重fから，多軸双安定構造の見

かけ上のひずみεと見かけ上の応力σはそれぞれ式(2-11), (2-12)として表される．

$$\varepsilon = \frac{d}{\sqrt{\frac{2}{3}}a} \tag{2-11}$$

$$\sigma = \frac{3f}{\frac{\sqrt{3}}{4}\pi R^2 \times 2} \tag{2-12}$$

Sphere A を垂直な破線に沿って移動させることで，<111>方向への圧縮したときの変形を再現した．Sphere A の変位を 0.01 mm ずつ変化させ，見かけ上のひずみが 1.5 となるまで計算した．

このシミュレーションモデルは，変形に関与する梁のみを対象としており，メタマテリアル全体の挙動を示すものではない．これは，この部分的なシミュレーションモデルの境界条件が理想的に対称であることを前提としており，実際は対称性から多少のずれが生じるはずである．それでも，このモデルは AM-PXCM の<111>方向の理想的な変形を表している．より実際の変形に近いシミュレーション条件を設定するためには，<111>方向に垂直な梁を考慮する必要がある．<111>に垂直な梁は，球体が(111)の平面内方向に移動する際の抵抗として働く．

この FEM シミュレーションから描かれる応力-ひずみ曲線から以下の 5 つの力学的特性を抽出した． $\varepsilon = 0$における応力-ひずみ曲線の傾きを多軸 PXCM の<111>方向における見かけ上のヤング率をEとした．多軸双安定構造では，飛び移り座屈が生じるので，応力ひずみ曲線に極大と極小が生じる．極大におけるひずみと応力をそれぞれ$\varepsilon_{\mathrm{max}}$，$\sigma_{\mathrm{max}}$，極小におけるひずみと応力をそれぞれ$\varepsilon_{\mathrm{min}}$，$\sigma_{\mathrm{min}}$とした．この FEM シミュレーションを Table 2-1 に示す設計パラメータ合計 1,225 種類の組み合わせについて行った．

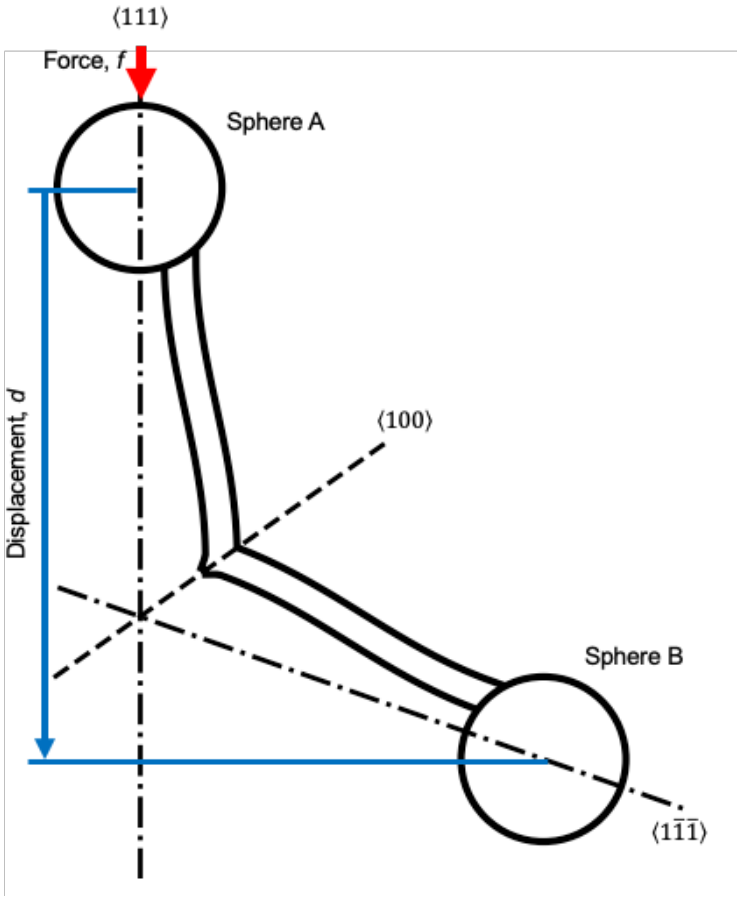


Fig. 2-12. Schematic of FEM model of representive elemental beam of AM-PXCM for deforming AM-PXCM in <111> directions.

Table 2-1. List of values for each design parameter.

Design parameter	value
R/t	4, 5, 6, 7, 8
a/R	6, 7, 8, 9, 10, 11, 12
ϕ	15˚, 22.5˚, 30˚, 37.5˚, 45˚
k_r	1/8, 1/4, 3/8, 1/2, 5/8, 3/4, 7/8

飛び移り座屈が発生すると，1 つの応力に対して 2 つの変位が存在するため，変位と応力の関係は非線形であり，逆問題を解く解析モデルの作成は困難である．このような多軸 PXCM に関して求める力学特性に対してそれを満たす設計パラメータを計算するため，ニューラルネットワーク（NN）に基づいた機械学習技術とし

て Inverse Design を導入した[18–20]．機械学習ライブラリとして Tensorflow（GOOGLE 社，アメリカ合衆国）を用い Inverse Design の機械学習モデルを作成した．Inverse Design の概略図を Fig. 2-13 に示す．Inverse Design は 2 つのニューラルネットワーク，すなわち forward neural network（f-NN）と inverse neural network（i-NN）で構成される．f-NN は設計パラメータから力学特性を求める順問題を予測するために事前に学習させる．i-NN は Inverse Design の主要部分であり，i-NN は力学特性から設計パラメータを求める逆問題を予測するために学習が行われ，逆計算して予測する．f-NN は，非線形問題の逆算などの不良設定問題において，i-NN による予測の確からしさを高める上で極めて重要な役割を果たす．

本研究では，最適化手法には，勾配降下法を用いた．活性化関数は，隠れ層には ReLU 関数，出力層には線形関数を用いた．隠れ層の数を 1, 2, 3, 4, 5 層，1 層あたりのノードの数を 10, 50, 100, 250, 500, 1000 個，学習率を 0.001, 0.005, 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1，交差検証の分割数を 5, 10, 15, 20, 25 区分とした 1050 通りの組み合わせを用いて学習を実行し，これらの中から損失関数を最小化しうる最適な組み合わせを探索した．その結果，Table 2-2 に示すハイパーパラメータが損失関数を最小化した．これらのニューラルネットワークを用いて，1225 通りの多軸 PXCM に関する FEM シミュレーション結果のデータセットに対して学習を行なった．

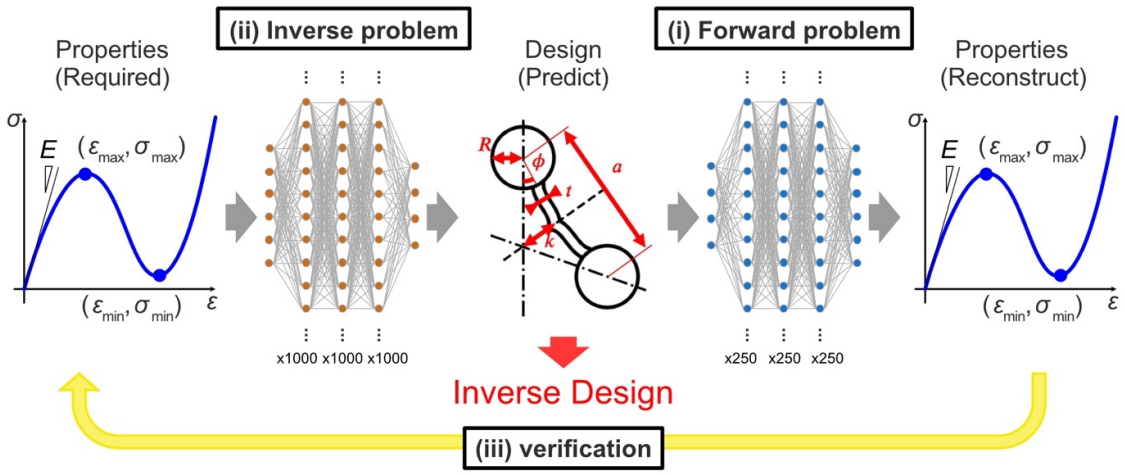


Fig. 2-13. Schematic of the inverse design process. The neural network for the inverse problems takes a queried mechanical property as input and output design parameters. The predicted design parameters are fed to the neural network for the forward problem to reconstruct mechanical properties and verify the predictions of the inverse problem. Both NN models consist of three hidden layers with the indicated number of nodes.

Table 2-2. Hyperparameters for each neural network in the Inverse design process.

	Number of hidden layers	Number of nodes in hidden layer	Learning rate	Number of batches	Epochs
f-NN	3	250	0.001	20	100
i-NN	3	1000	0.005	20	100

Inverse Design において，i-NN を学習させるプロセスは次のとおりである．

(1) データをランダムに並び替え，正規化した上で，複数のバッチに分割する．1 つのバッチを検証用データ，残りのバッチを学習用バッチとする．
(2) i-NN にランダムな初期おもみを与える．
(3) 入力変数を目的変数とし，i-NN を用いて説明変数を出力し，逆問題の予測を行う．
(4) 予測された説明変数を事前学習させた f-NN に入力し，目的変数を出力し再構築する．
(5) 最初に入力した目的変数と再構築した目的変数がどの程度一致するか損失関数と決定係数で評価する．
(6) 損失関数を元に i-NN のおもみを勾配降下法などの最適化手法で更新する．
(7) (3)~(6)を既定のエポック数だけ繰り返す．
(8) 検証用バッチを順々に入れ替え，(3)~(7)をすべてのバッチで検証するまで繰り返す．
(9) 最終的な i-NN を Inverse Design とし，そのときの決定係数を持って Inverse Design の精度とする．

2.3.2. 実験による検証

多軸 PXCM は立体的で入り組んだ複雑な構造である．そのため，切削加工ではなく付加製造（Additive Manufacturing：AM）を用いて造形する必要がある．さらに，格子構造であるため，オーバーハング部位を多く含む．これらのことから，粉末床溶融結合（Powder Bed Fusion：PBF）法の一種である選択的レーザー焼結（Selective Laser Sintering：SLS）法で造形することとした．

設計した多軸 PXCM を PBF-SLS 方式の AM 装置（Sinterit Lisa）および熱可塑性

ポリウレタン（Thermo-Plastic Urethan: TPU，Flexa Bright）を用いて作製した．この粉末を利用したバルク体の力学特性はヤング率を 10 MPa，ポアソン比が 0.39，密度 950 kg/m^3 である．積層ピッチは 0.15 mm，レーザーパワーratio は 1.0 とした．梁の厚さを $t = 1$ mm とし，Table 2-3 に示す設計パラメータを用いて，monostable と bistable にそれぞれなると期待される 2 つの多軸 PXCM を作製した．

Table 2-3. Design parameter sets of atom-mimetic cube-diagonally multi-axed phase-transforming cellular material.

Design parameter	Parameter set A	Parameter set B
R/t	4	4
a/R	6	6
ϕ	45°	45°
k_r	7/8	1/2

作製した造形物の圧縮変位と荷重の関係を，インストロン型材料試験機（島津 AG-IS 500N）と電子天秤（島津 AUX220）を用いて調べた．準安定相が安定な変位になると多軸 PXCM は試験機から離れ，試料にかかる力が測定できないため，試料の上下をアルミニウム板に接着剤で固定し，アルミニウム板を治具にねじ止めした．圧縮速度は一定の 0.5 mm/s とした．変位が 16 mm に達し，すべての曲り梁を変形させた後に，圧縮時と同じ速度で逆方向に元の位置まで変位させた．圧縮・除荷過程の試料をビデオカメラにて撮影し，変形および形状回復挙動を観察した．多軸双安定格子構造の圧縮変形における電子天秤で測定した荷重 f，格子構造体の外形状の水平断面積 S，変形開始時からのクロスヘッドの変位量 d，初期状態での試料の高さ h_0 を用いて，構造全体の見かけの応力 $\sigma_{\mathrm{app}} = f / S$ および見かけのひずみ $\varepsilon_{\mathrm{app}} = d/h_0$ を定義して，応力-ひずみ応答を評価した．

2.4. 結果と考察

2.4.1. FEM シミュレーションによる多軸 PXCM の変形挙動の解析

FEM シミュレーションの結果から，多軸 PXCM は 2 種類に分類できた：(i) monostable PXCM と(ii) bistable PXCM.

Fig. 2-14a にパラメータセット A（すなわち，$t = 1$ mm, $R = 4$ mm, $a = 24$ mm, $\phi = 45°$, $k_r = 7/8$）で設計した多軸 PXCM の梁の変形挙動を FEM シミュレーションした

結果を，Fig. 2-14b に，パラメータセット B（すなわち，t = 1 mm, R = 4 mm, a = 24 mm, ϕ = 45°, k_r = 1/2）で設計した多軸 PXCM の梁の変形挙動を FEM シミュレーションした結果をそれぞれ示す．Fig. 2-14a1 および Fig. 2-14b1 はそれぞれのモデルの初期状態を示し，Fig. 2-14a2 ~ Fig. 2-14a5 および Fig. 2-14b2 ~ Fig. 2-14b5 はそれぞれのモデルの変形過程を示し，Fig. 2-14a6 および Fig. 2-14b6 はそれぞれのモデルの力-変位曲線の結果を示す．Fig. 2-14a2 ~ Fig. 2-14a5 および Fig. 2-14b2 ~ Fig. 2-14b5 中のカラーマップは von Mises 応力の大きさを示す．カーラーマップの分布からすべての変形過程でたわんだ梁の外側大きな von Mises 応力が生じた．

Fig. 2-14b6 では，力-変位曲線の極小値は正の値を取ったが，Fig. 2-14a6 では極小値は負の値を示した．つまり，FEM シミュレーションの結果からパラメータセット B は monostable となったが，パラメータセット A は bistable となった．なお，力-変位曲線の傾きが正かつ力が 0 となるところで安定相が形成されるので，およそ Fig. 2-14a5 の状態で準安定となると言える．正確な準安定相の状態をシミュレーションにより求めるためには以下の 2 つの計算が必要となる．

(i) (111)面内方向の梁の影響を考慮したシミュレーション．

(ii) 準安定相で荷重や変位の拘束を取り除いた緩和計算．

本研究では，対称性によるモデルの簡略化と(111)面内方向の梁を剛体と近似した上で計算を行った．(i)のシミュレーションは 3 次元に拡張したモデルを作成し，拘束条件や対称性による近似を減らしていくことで実現可能となる．

FEM シミュレーションの変位制御法では，変位を与えたときに弾性ひずみエネルギーの最小化計算を行い各変位で定常解析を行った．変位条件を取り除いた上で最小化計算を行うと，必然的に初期状態の弾性ひずみエネルギーが 0 の状態を解として算出する．そのため，最小値ではないエネルギー的極小値を解として算出することは困難である．(ii)の緩和計算を実現するためには，FEM 以外の手法を検討するか FEM において時間依存の計算を行う必要があると考えられる．

パラメータセット A において Fig. 2-14a2 で示した変形初期では梁が上方にたわんだのに対して，パラメータセット B において Fig. 2-14b2 で示した変形初期では梁が下方にたわんだ．これは，梁の初期状態において，梁と 2 つの球の結合点を結んだ直線と梁自体の重心との位置関係が影響していると考えられる．変形が進むと Fig. 2-14a4, Fig. 2-14a5 でも Fig. 2-14b4, Fig. 2-14b5 でも梁は下方にたわんだ状態となった．これはサインカーブの向きとサインカーブ同士が結合する点での向きが影響していると考えられる．

Fig. 2-14b2 で見られるように極大値に到達する前では，梁の軸方向への圧縮変形を主な変形モードとし，Fig. 2-14a2 ~ Fig. 2-14a5 および Fig. 2-14b3 ~ Fig. 2-14b5 で見られるように極大値以降では梁の曲げによる変形が主であると見られる．このことから，多軸 PXCM の初期安定相の限界強度を向上する方法として，トポロジー

最適化計算が強力であると考えられる．トポロジー最適化計算[21–23]は，設計パラメータに応じて von Mises 応力が大きくなりやすい部分の梁の厚さを分厚くするなどたわみにくい設計を求める計算である．これを用いて，曲り梁が飛び移り座屈する限界強度を向上させられると期待できる．ただし，トポロジー最適化によって von Mises 応力が大きい部分を太らせると，次第にまっすぐな梁となり，bistability を示さなくなると考えられる．飛び移り座屈の限界強度やヤング率を高めながら bistability を示すような設計を求めるためには，bistabilty の度合いを示すパラメータを用いて多目的変数の最適化計算[24,25]を行う必要がある．ここでは，bistability の評価方法について，bistability が切り替わる設計パラメータの閾を探索する方法と変形に伴う弾性ひずみエネルギーの変化から bistability を定量化する方法の 2 種類の方法で議論する．

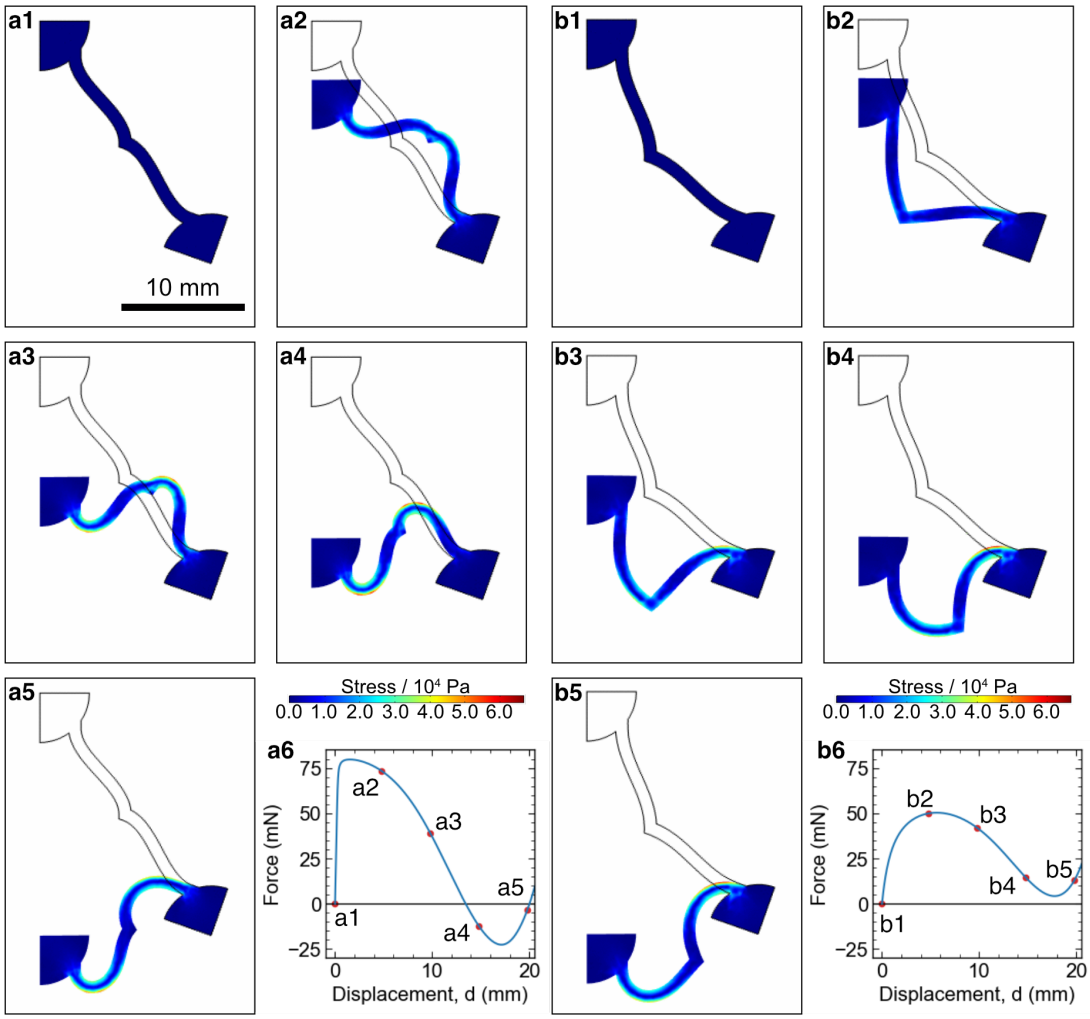


Fig. 2-14. (a1-5) Deformation behavior of a beam in a bistable AM-PXCM. (a6) Force-displacement relationship of a beam in a bistable AM-PXCM. (b1-5) Deformation behavior of a beam in a monostable AM-PXCM. (b6) Force-displacement relationship of a beam in a monostable AM-PXCM.

Fig. 2-15 に球同士の距離a，球面と梁の接触角ϕ，四面体重心と梁中心との距離kをそれぞれ軸としてすべての設計パラメータセットの 3 次元プロットを示す．Fig. 2-15a ~ Fig. 2-15e はそれぞれ $R = 4 \sim 9$ mm のパラメータセットをプロットした．このプロットでは monostable となったものを青色，bistable となったものを赤色で示した．さらに，これらのプロットで青色と赤色との境界が平面的であることから，線形的な分類回帰を行った. 本研究では線形分類回帰としてロジスティック回帰を行った．このロジスティック回帰では，FEM シミュレーション結果に対して bistability について monostable を 0，bistable を 1 に二値化し，単純パーセプトロンの活性化関数を式(2-13)とすることで分類した．

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \tag{2-13}$$

球の半径R，球同士の距離a，球面と梁の接触角ϕ，四面体重心と梁中心との距離kを様々に組み合わせの格子構造をロジスティック回帰により bistable か否かによって分類するため，入力値を式(2-14) とし，それぞれの設計パラメータを正規化し，ロジスティック回帰を行った．

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} R \\ a \\ \phi \\ k \end{bmatrix} \tag{2-14}$$

$\boldsymbol{X}$ を標準化し，式(2-15)で表されるパーセプトロンに代入した．

$$Y = f\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W} + b\right) \tag{2-15}$$

ここで，Y は bistability を表す目的変数で，$Y = 1$ のとき bistable で，$Y = 0$ のとき monostable を表す．また，$\boldsymbol{W}$ はパーセプトロンのおもみ，b はパーセプトロンのバイアスを示す．ランダムに選出した 50 のパラメータセットを検証用データとし，残りの 1175 の学習用データについてパーセプトロンの学習を行うと，パーセプトロンのおもみおよびバイアスは式(2-16)となった．このときの評価データでの正解率は 96% (48/50)であった．

$$\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} -0.50 \\ -6.60 \\ -1.62 \\ 9.58 \end{bmatrix}, b = -1.61 \tag{2-16}$$

このロジスティック回帰において，目的変数の正解値yは bistable となるとき$y = 1$で，bistable とならないとき$y = 0$である．つまり，予測値$\hat{y}$が$\hat{y} \geq 0.5$のとき bistable になると判別され，$\hat{y} < 0.5$のとき，monostable になると判別される．すなわち，多軸 PXCM が bistable になるときの条件は式(2-17)で表される．

$$f\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W} + b\right) \geq 0.5 \tag{2-17}$$

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W} + b \geq 0 \tag{2-18}$$

$$-0.50R^* - 6.60a^* - 1.62\phi^* + 9.58\,k^* \geq 1.61 \tag{2-19}$$

ここで，x^*は正規化された設計パラメータ x を表す．式(2-19)において各設計パラメータが正規化されていることから，各設計変数についている係数は各変数の bistable のなりやすさへの寄与の大きさを表す．bistablity は係数の絶対値の大きい四面体重心と梁中心との距離kおよび球同士の距離aに大きく依存することがわかる．また，正に大きな値の係数を持つ四面体重心と梁中心との距離kは大きいほど bistable になり易く，負に大きな値の係数を持つ球同士の距離aは小さいほど bistable になり易いことを意味する．式(2-19)について正規化された変数を元に戻すと，式(2-20)のようになる．

$$-0.35\,R - 0.37\,a - 0.15\,\phi + 1.79\,k \geq -4.91 \tag{2-20}$$

式(2-20)は境界面の回帰式を表し，境界面を 3D プロットしたデータと合わせて Fig. 2-15 に青の平面として示す．ロジスティック回帰により設計パラメータと bistability との関係を定量的に評価できた．

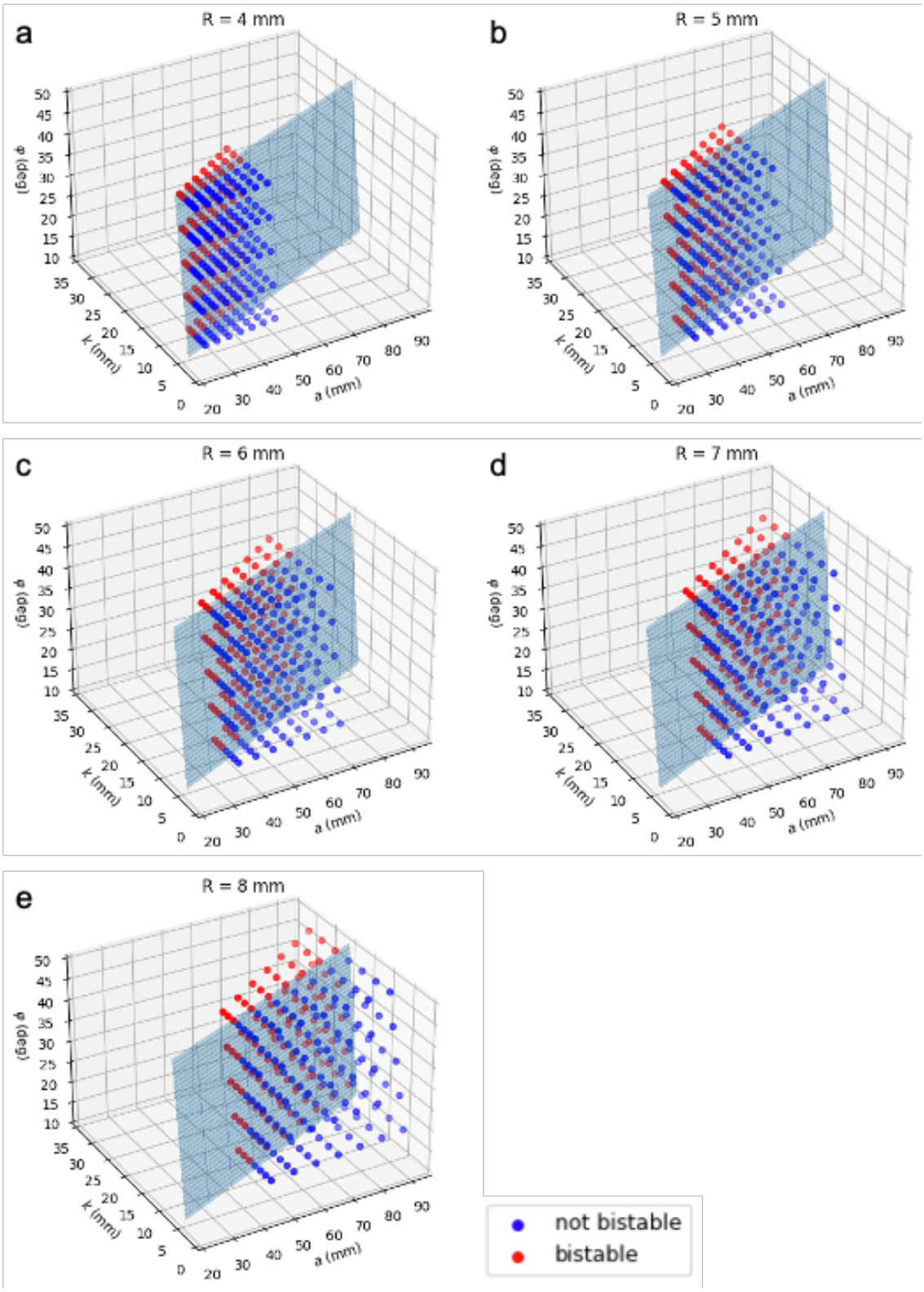


Fig. 2-15. 3D plots of bistability and boundary plane calculated by logistic regression. (a) R = 4 mm, (b) R = 5 mm, (c) R = 6 mm, (d) R = 7 mm and (e) R = 8 mm.

Fig. 2-16 に各力学的特性へのそれぞれの設計パラメータの寄与を示す. 横軸を各設計パラメータR, a, ϕ, k，縦軸を見かけのヤング率E，極大におけるひずみ$\varepsilon_{\max}$，極大における応力$\sigma_{\max}$，極小におけるひずみ$\varepsilon_{\min}$，極小における応力$\sigma_{\min}$，相対密度ρとした.

球の半径R，球同士の距離a，四面体重心と梁中心との距離kが増加すると弾性率と極大における応力，相対密度は共に減少し，極小における応力は 0 kPa に収束した．球同士の距離aが大きくなると，構造内に球や梁の占める体積が相対的に減少するため，球同士の距離 a と相対密度は負の相関をもつ．また，球同士の距離 a が大きくなるにつれ四面体重心と梁中心との距離kが大きくなった．すると梁はより真っ直ぐになり梁の長さが増加した. このことにより, 相対密度は減少した. また，梁の長さが増加すると，梁はたわみやすくなり，多軸双安定構造の弾性率や極大における応力は減少した．弾性率や極大における応力が減少した，すなわち，構造の剛性が低下すると，極小における応力の絶対値は減少し，極小における応力は 0 に収束した.

四面体重心と梁中心との距離kが増加することで極大におけるひずみは球同士の距離aと弱い正の相関, 四面体重心と梁中心との距離kと負の相関を持つ. 球面と梁との接触角ϕの寄与は小さい. k_rが大きいほど, 梁は巨視的に真っ直ぐに近くなり，たわみにくくなる．このことにより，k_rが 1 に近いほど弾性率は増加する．また，k_rが大きくなっても梁の長さは変化しないので, 相対密度には大きな変化が見られなかった.

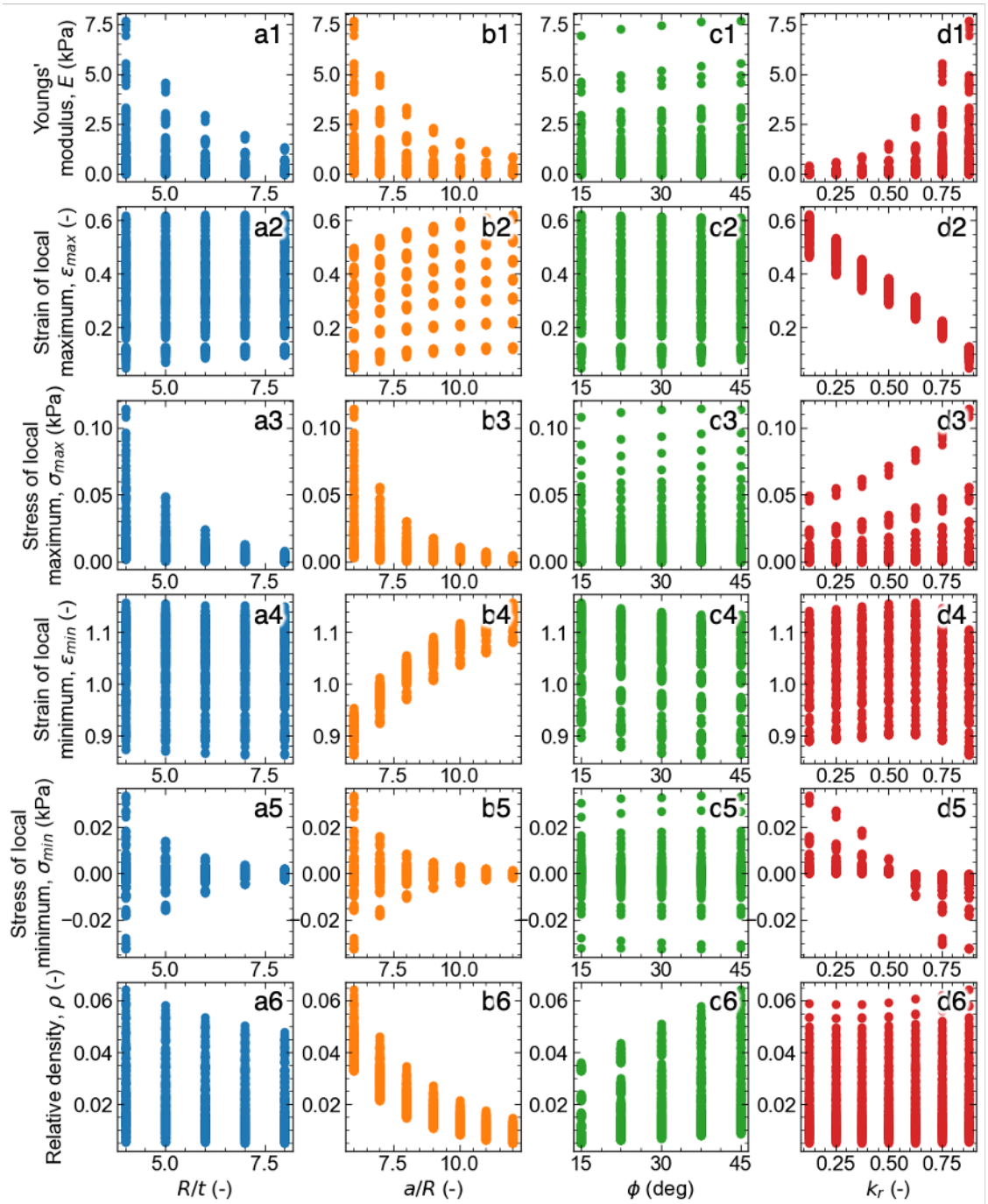


Fig. 2-16. Relation between mechanical properties of MA-PXCM and design parameters evaluated by FEM simulation: effect of (a) R/t, (b) a/R, (c) ϕ and (d) k_r.

極小における応力は極大における応力から大きな影響を受けると考えられる．純粋に bistability がどの程度か評価するため，極小における応力と極大における応力との比によって bistability を評価する．Fig. 2-17 に，極小点応力と極大点応力との比に対する各設計パラメータ $R/t, a, \phi, k_r$ の寄与を示す．Fig. 2-17 から，$R/t, a, \phi$は

bistability に大きく影響せず，梁の曲がり方を決定するk_rが bistability に対して大きく作用することがわかる．このグラフから bistability の閾値は k_r≒0. 52 となった．$\sigma_{min}/\sigma_{max}$ が負の値で絶対値が大きいと，安定状態と準安定状態の間のエネルギー障壁が大きくなる．したがって，$\sigma_{min}/\sigma_{max}$ による評価方法では準安定相が最も安定となる条件は評価した k_r の中では $k_r = 0.75$ である．

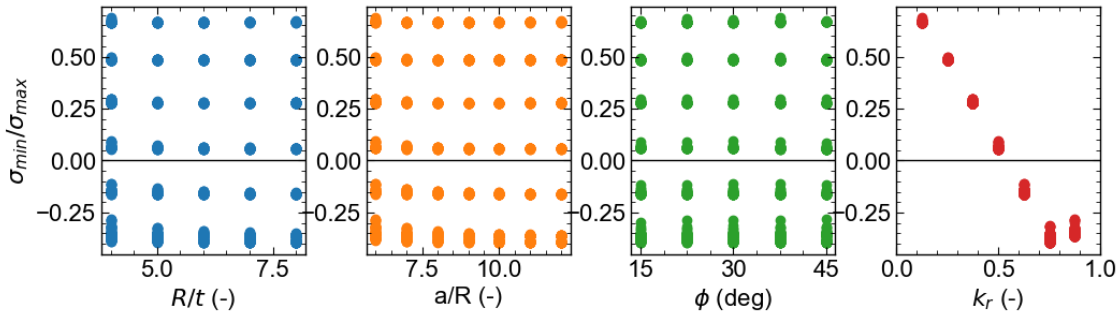
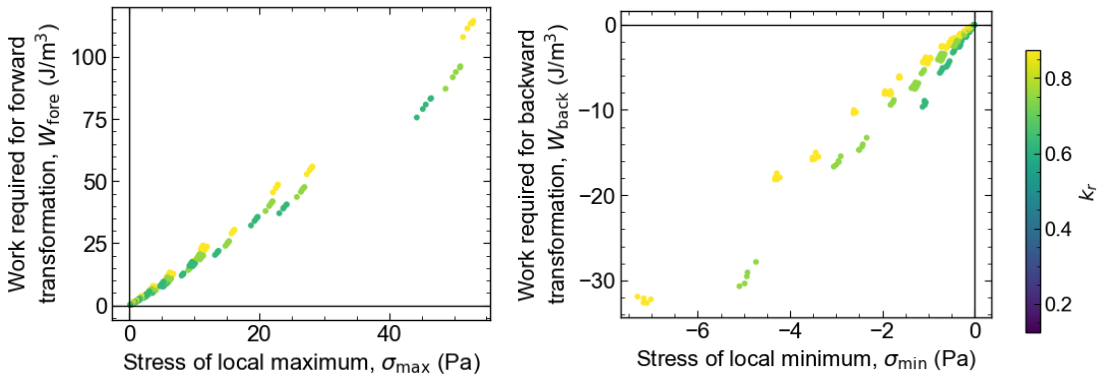


Fig. 2-17. Dependence of the ratio of minima stress to maxima stress on the design parameters on (a) *R/t*, (b) *a/R*, (c) ϕ, and (d) k_r.

準安定相の安定性を評価するため，変形に必要な仕事（弾性ひずみエネルギーの変化）について考える．変形に必要な仕事は応力ひずみ曲線において応力をひずみについて積分することで求められる．monostable となったパラメータセットでは仕事とひずみとの関係は線形となるが，bistable となったパラメータセットでは仕事は原点以外で極小値を持ち，この極小値が準安定相である．また，同時に原点と極小値の間に極大値を持ち，この極大値が安定相と準安定相との間のエネルギー障壁である．つまり，極大値が初期の安定相から準安定相へと相変態する順変態に必要な仕事であり，極大値と極小値との差が準安定相から安定相へと相変態する逆変態に必要な仕事である．

仕事と応力を比較することで，bistability の尺度として評価した．Fig. 2-18a のように，変形前の安定相の安定性を示す指標として，最大応力 σ_{max} と順変態に必要な仕事 W_{fore} との相関を調べた．また，Fig. 2-18b のように，最小応力 σ_{min} と逆変態に必要な仕事 W_{back} の関係を調べた．一般的には，応力が高いほど変態に必要な仕事は大きくなるが，Fig. 2-18a に示すように σ_{max} の値がほぼ同じであっても，k_r の値が大きい構造ほど大きな W_{fore} を示した．このことは，k_r が大きい構造ほど初期安定相で安定していることを示唆している．さらに，Fig. 2-18b で示すように，σ_{min} が小さいほど，逆変態により大きな仕事が必要である．しかし，σ_{min} の値がほぼ同じであっても，逆変態に必要な仕事が大きくなる構造があることがわかった．大きな k_r を持つ構造は同じ σ_{min} に対してより小さい仕事で逆変態できるが，小さな k_r を持つ構造は同じ σ_{min} に対してより大きな仕事が必要となる．すなわち，梁の形状がど

ちらかといえば直線的であれば bistability は高くなり，梁の形状が曲がっていれば bistability は低くなる．言い換えると，梁が曲がっていれば，変形のために同じ仕事量に必要な力は小さくなり，変態が起こるまでに必要な変位は大きくなる．梁がまっすぐなとき，変形に必要な仕事が同じであれば，変形に必要な力は大きくなり，変形が起こるまでの変位も大きくなる．以上より，与えられる力と変位に応じて，設計パラメータを調整し bistability を制御することが可能となる．



(a) (b)

Fig. 2-18. Comparison between work required for transformation and stress where the transformation occurs. (a) Comparison on the forward transformation and (b) comparison on the reverse transformation.

2.4.2. 所望の力学特性を得るための設計パラメータの予測と実験検証

多軸 PXCM の設計パラメータを制御して利用用途に合わせた力学特性を取得するため，大きな設計パラメータ空間の中から適切な設計パラメータを選択する手法として Inverse Design[19]を用いた．Fig. 2-19 に学習後の f-NN（Fig. 2-19a-f）と i-NN（Fig. 2-19g-j）を用いて得られた予測値と真の値の相関を示す．

f-NN による予測の結果，見かけのヤング率（Fig. 2-19a），極大におけるひずみ（Fig. 2-19b），極大における応力（Fig. 2-19c），極小におけるひずみ（Fig. 2-19d），極小における応力（Fig. 2-19e），相対密度（Fig. 2-19f）の決定係数はそれぞれ 0.99998，0.99996，0.99999，0.99999，1.00000，1.00000 となった．f-NN による予測はいずれの力学特性についても 0.1%以下の誤差範囲で十分に高い精度で予測できた．

また，i-NN による予測の結果，R（Fig. 2-19g），a（Fig. 2-19h），ϕ（Fig. 2-19i），k_r（Fig. 2-19j）の決定係数はそれぞれ 0.99382，0.99545，0.98944，0.99991 となった．i-NN によるいずれの設計パラメータの予測についても f-NN によるいずれの力学特性についての予測よりも精度が劣る結果となった．これは，設計パラメータの予測が非線形関数の逆算で不良設定問題の予測であることが起因していると考

えられる．R，a，k_rの 3 つの設計パラメータの予測値は真の値と良い一致を示したが，設計パラメータϕの予測値と真の値の相関は高くない．これは，ϕが力学特性に対して大きな影響を与えないことを示唆している．設計パラメーターの予測の中で，k_rは R^2 = 0.99991 と特に高い値を示し，多軸 PXCM の設計において k_rが特に重要であることを示唆している．前項 2.4.1.項で述べたように k_rは bistability と大きな相関を持ち，見かけのヤング率にも寄与している．この k_rのように力学特性に大きな寄与を示す設計パラメータの探索や bistability のように設計パラメータに大きく影響を受ける力学特性を探索することで，より確度の高い Inverse Design が可能になると期待される．

多軸 PXCM の設計パラメータを決定する際，FEM シミュレーションだけを用いて見かけ上のヤング率と bistability，相対密度の要件を同時に満たすような設計パラメータの組み合わせを探索するためには Inverse Design を利用すれば良い．本研究では，設計パラメータを 4 種と力学特性を 6 種と，比較的少ない数のパラメータを用いて Inverse Design を活用した．今後は，メタマテリアルを多結晶化する設計パラメータや設計パラメータに空間的勾配を設けるなど設計パラメータの要素を増やしたり，3 次元空間における力学特性の異方性や安定相および準安定相における振動特性など制御する力学特性を増やしたりしたとしても，複数の要件を同時に満たすような設計を決定し易くなる．

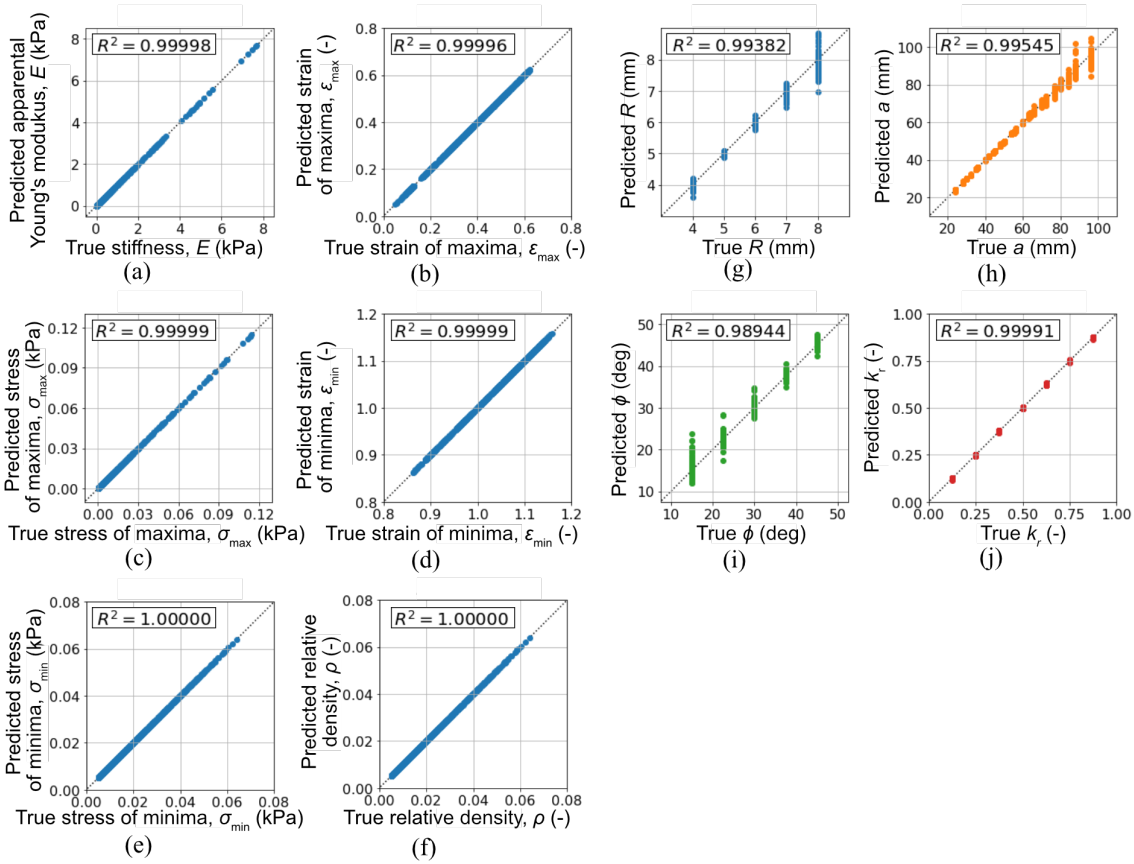


Fig. 2-19. (a)-(f) Reconstructed vs. true mechanical properties (a) Apparental Young's modulus, (b) stress of maxima, (c) strain of the maxima, (d) stress of minima, (e) strain of the minima, and (f) relative density. (g)-(j) Predicted vs. true design parameters (g) R, (h) a, (i) ϕ, and (j) k_r.

2.4.3. 圧縮試験による変形挙動の評価

SLS 方式の 3D プリンタを用いて bistable となる多軸 PXCM と monostable となる多軸 PXCM を造形し，それぞれについて変形挙動を圧縮試験により評価した．

Table 2-3 のパラメータセット A の多軸 PXCM の梁設計の概略図を Fig. 2-20a1 に，造形した試料の 3D-CAD モデルを Fig. 2-20a2 にそれぞれ示す．このモデルでは 24 本の梁が変形する．造形したセット A の多軸 PXCM について圧縮・除荷試験を行った結果の荷重変位曲線を Fig. 2-20a3 に示し，試験中の変形の様子を Fig. 2-20a4 ~ Fig. 2-20a12 に示す．Fig. 2-20a3 の荷重変位曲線では，圧縮過程にて変位が 12.6 ~ 15.2 mm の範囲で，除荷過程にて変位が 15.7 ~ 11.5 mm の範囲で荷重が負の値を示す領域が現れた．つまり，このパラメータセット A の多軸 PXCM では準安定相が存在し，除荷して元の状態に戻すために引張荷重が必要だということがわかった．また同様に，Table 2-3 のパラメータセット B の多軸 PXCM の梁設計の概略

図を Fig. 2-20b1 に, 造形した試料の 3D-CAD モデルを Fig. 2-20b2 にそれぞれ示す. 造形したセット B の多軸 PXCM について圧縮・除荷試験を行った結果の荷重変位曲線を Fig. 2-20b3 に示し，試験中の変形の様子を Fig. 2-20b4 ~ Fig. 2-20b12 に示す．Fig. 2-20b3 に示す荷重変位曲線では除荷過程の最後でのみ負の荷重を示した．つまり，このパラメータセット B の多軸 PXCM は準安定相を持たない．

Fig. 2-20a4 ~ Fig. 2-20a8 および Fig. 2-20b4 ~ Fig. 2-20b8 に示す圧縮過程の変形の様子と Fig. 2-20a8 ~ Fig. 2-20a12 および Fig. 2-20b8 ~ Fig. 2-20b12 に示す除荷過程の変形の様子とをそれぞれ比較すると, 同じ変位における梁の形状に大きな差異は見られなかった．また，これらの変形の様子は 2.4.1.項で述べた Fig. 2-14 に示した FEM シミュレーション結果の変形の様子ともよく一致している．

Fig. 2-20a3 および Fig. 2-20b3 の実験の圧縮過程にて変位 15 mm 付近で荷重が急激に上昇しており，この変位で(111)面内方向の梁同士が接触した．設計の意図通りに変形する梁は他の梁に干渉されなかった．(111)面内方向の梁同士が接触したことによって，Fig. 2-14a5 および Fig. 2-14b5 の梁の形状は実験では現れなかった．

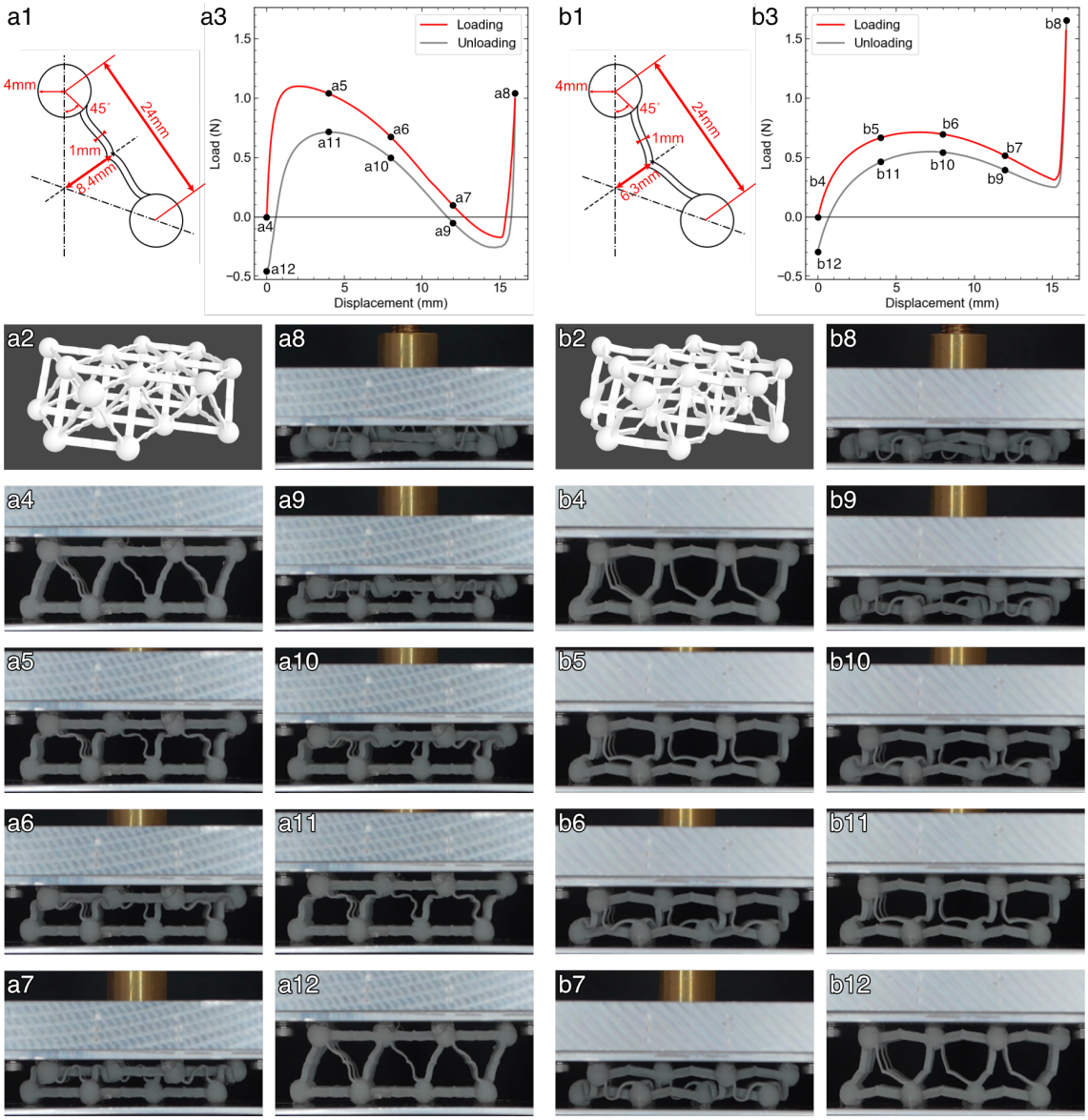


Fig. 2-20. (a1) Schematic of a beam of AM-PXCM with parameter set A. (a2) 3D-CAD model of AM-PXCM with design parameter set A. (a3) Force-displacement relationship of compression-tensile test for AM-PXCM with parameter set A. (a4)-(a12) Deformation behavior of a 3D printed AM-PXCM with parameter set A. (b1) Schematic of a beam of AM-PXCM with parameter set B. (b2) 3D-CAD model of AM-PXCM with parameter set B. (b3) Force-displacement relationship of compression-tensile test for AM-PXCM with parameter set B. (b4)-(b12) Deformation behavior of a 3D printed AM-PXCM with parameter set B.

Fig. 2-14a6 および Fig. 2-14b6 の FEM シミュレーションと Fig. 2-20a3 および Fig. 2-20b3 の圧縮試験とそれぞれ比較して Fig. 2-21a および Fig. 2-21b にプロットした．ただし，FEM シミュレーションでは梁 1 本で計算しているのに対して，実験では試料中の 24 本の梁が変形したので，Fig. 2-21 では FEM シミュレーションの結果を 24 倍にして示した．比較すると，前述の通り，bistability は FEM シミュレーションによってよく再現できていることがわかったが，荷重変位曲線の絶対値はシミュレーション結果が実験の約 2 倍の大きさとなった．この違いの要因として，3D プリンタの造形精度による造形不良が生じて実験結果の精度が低いことが考えられる．FEM シミュレーションでは梁の断面が長方形であるとして計算を行った．しかし，造形した試料は長方形の角が丸い状態となった．この造形精度の問題を検証するため，仮に造形した試料の断面が楕円形である仮定として FEM シミュレーションの結果を補正する．FEM シミュレーションの結果に楕円の断面二次モーメントと長方形の断面二次モーメントの比をかけることで補正する．楕円の断面二次モーメントと長方形の断面二次モーメントはそれぞれ$\pi wt^3/64$と$wt^3/12$である．よって，これらの比は$3\pi/16$である．この楕円の補正を FEM シミュレーションの結果にかけた荷重変位曲線を Fig. 2-21 に追加して Fig. 2-22 にプロットした．結果的に完全な一致とはならなかったが，荷重の極大値などは非常に近い値となった．このことから，SLS 方式で造形した梁構造の断面は長方形ではなく楕円に近い形状で計算すると良いと示唆された．また，さらに良い一致のためには，多軸 PXCM の変形には大きなひずみが伴うので，材料の弾性非線形性を考慮する必要がある．

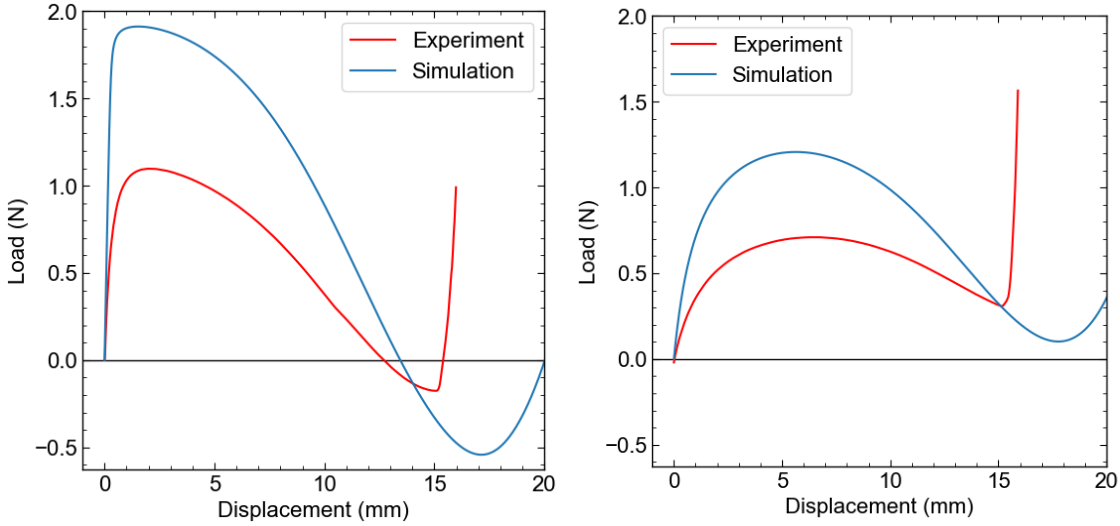
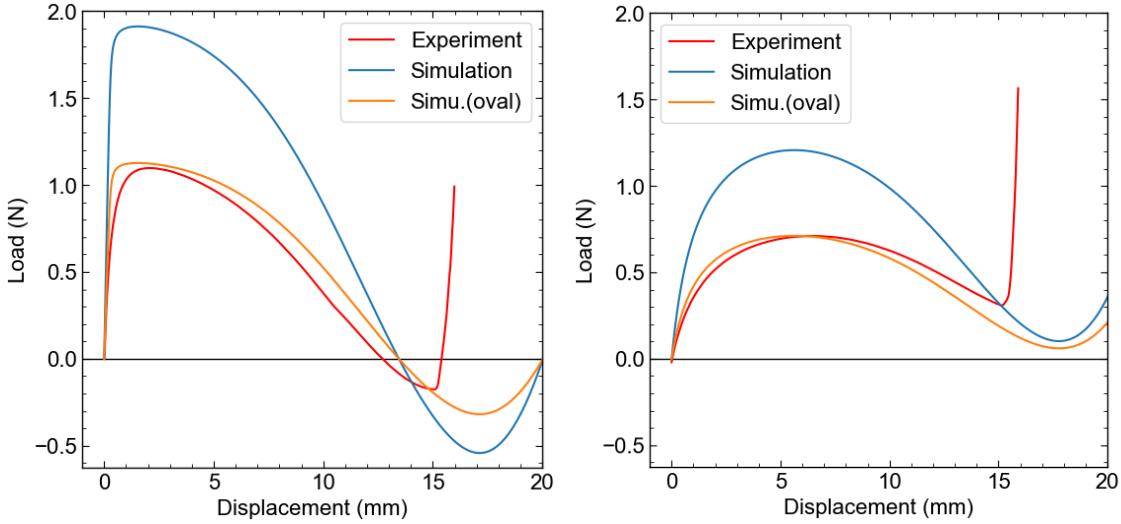


Fig. 2-21. (a) Comparson of compression test and FEM simulation for AM-PXCM with design parameter set A. (b) Comparson of compression test and FEM simulation for AM-PXCM with design parameter set B.



(a) (b)

Fig. 2-22. Comparson of compression test, FEM simulation and FEM simulation with oval-shape cross section for AM-PXCM (a) with design parameter set A and (b) with design parameter set B.

2.4.4. 多軸 PXCM と他の PXCM との比較

本研究で設計した多軸 PXCM と他の多方向に bistability を示すメタマテリアルとの最も顕著な違いは, bistability を示す方向の数である. 他のメタマテリアルは, 多いもので直交 3 方向に bistability を示す[11,14,16,26]. 本研究で創製した多軸 PXCM は 4 つの立方対角線方向に bistability を示す.

もう一つの大きな違いは, 準安定相となるひずみである. 他のメタマテリアルでは, 立方体フレームとその立方体フレームの各面に湾曲した bistable beam を持つものがほとんどである. その場合, 構造が準安定相に達するまでの変形量は, bistable beam の振幅のみであり, 準安定相でのひずみは約 30%以下となる[11,14,16,26]. これに対して, 多軸 PXCM は, Fig. 2-23a に示すような四面体の頂点にある 1 つのメタ原子の中央に入り込み偏平な三角形状になって Fig. 2-23b に示すような準安定相になる. そのときのひずみは約 80～90%である.

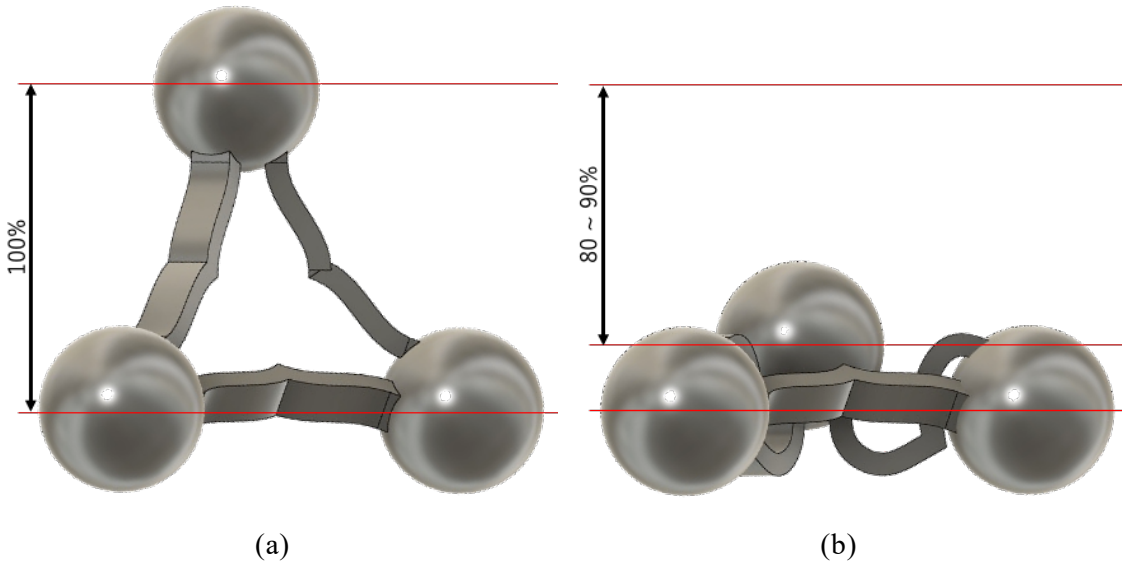


Fig. 2-23. 3D-CAD model of AM-PXCM at (a) initial stable state and (b) metastable state.

2.5. 小括

本研究では，FCC 構造に基づいて<111>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 の力学特性を 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．SLS 方式の AM 装置で熱可塑性ポリウレタンを用いて多軸 PXCM を作製し圧縮試験を行い，FEM シミュレーションの精度を検証した．実験結果と FEM シミュレーション結果は，bistability の観点でよく一致し，その他の力学特性に関しても SLS によって造形した梁断面が楕円形であると近似するとほぼ一致し，本研究のアプローチの有効性が確認された．

本研究は，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．梁の厚さ，球体の半径，隣り合う球体間の距離，梁の方向と球体表面の角度，梁の中心と四面体の中心との距離（すなわち梁の真直度）などの設計パラメータを制御することによって，見かけのヤング率，応力-ひずみ関係，材料の bistability を調整できることが実証された．Inverse Design は，最適な設計パラメータを予測するための強力なツールであり，所望の力学特性を有する多軸 PXCM を効率的に設計できる．

本研究は，力学メタマテリアルの進歩に貢献し，その応用の可能性を広げるものである．多方向に変形する相転移メタマテリアルの設計と作製が可能になることで，

衝撃吸収材，エネルギー吸収，フレキシブル構造などの分野で新たな可能性が開ける．さらに，本研究で得られた知見は，他の結晶構造に基づく相転移メタマテリアルの開発にも応用でき，幅広い特性を持つメタマテリアルの設計の指針となると期待される．

参考文献

[1] K. Otsuka, X. Ren, Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys, Prog. Mater. Sci. 50 (2005) 511–678. https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2004.10.001.

[2] X. Yang, L. Ma, J. Shang, Martensitic transformation of Ti50(Ni50−xCux) and Ni50(Ti50−xZrx) shape-memory alloys, Sci. Rep. 9 (2019) 3221. https://doi.org/10.1038/s41598-019-40100-z.

[3] C. Cayron, F. Barcelo, Y. de Carlan, The mechanisms of the fcc-bcc martensitic transformation revealed by pole figures, Acta Mater. 58 (2010) 1395–1402. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2009.10.046.

[4] C.T. Sun, R.S. Vaidya, Prediction of composite properties from a representative volume element, Compos. Sci. Technol. 56 (1996) 171–179. https://doi.org/10.1016/0266-3538(95)00141-7.

[5] J. Liu, J. Chang, J. Yu, W. Zhang, S. Huang, Machine learning-based optimization design of bistable curved shell structures with variable thickness, Structures. 52 (2023) 175–186. https://doi.org/10.1016/j.istruc.2023.03.124.

[6] D. Restrepo, N.D. Mankame, P.D. Zavattieri, Phase transforming cellular materials, Extrem. Mech. Lett. 4 (2015) 52–60. https://doi.org/10.1016/j.eml.2015.08.001.

[7] D.A. Debeau, C.C. Seepersad, M.R. Haberman, Impact behavior of negative stiffness honeycomb materials, J. Mater. Res. 33 (2018) 290–299. https://doi.org/10.1557/jmr.2018.7.

[8] Y. Zhang, D. Restrepo, M. Velay-Lizancos, N.D. Mankame, P.D. Zavattieri, Energy dissipation in functionally two-dimensional phase transforming cellular materials, Sci. Rep. 9 (2019) 12581. https://doi.org/10.1038/s41598-019-48581-8.

[9] K.W. Hector, THE ROLE OF ENERGY DISSIPATION, SUPERELASTICITY, AND SHAPE MEMORY EFFECTS IN ARCHITECTED MATERIALS FOR ENGINEERING APPLICATIONS, Purdue University Graduate School, 2022. https://doi.org/10.25394/PGS.21330642.v1.

[10] J. Nguyen, S. Park, D.W. Rosen, L. Folgar, J. Williams, Conformal Lattice Structure Design and Fabrication, in: 2012 Int. Solid Free. Fabr. Symp., 2012: pp. 138–161. http://dx.doi.org/10.26153/tsw/15339.

[11] H. Yang, L. Ma, 1D to 3D multi-stable architected materials with zero Poisson's ratio and controllable thermal expansion, Mater. Des. 188 (2020) 108430. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108430.

[12] C.S. Ha, R.S. Lakes, M.E. Plesha, Cubic negative stiffness lattice structure for energy absorption: Numerical and experimental studies, Int. J. Solids Struct. 178–179 (2019) 127–135. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2019.06.024.

[13] H. Yang, L. Ma, Angle-Dependent Transitions Between Structural Bistability and Multistability, Adv. Eng. Mater. 22 (2020) 1900871. https://doi.org/10.1002/adem.201900871.

[14] X. Tan, B. Wang, S. Zhu, S. Chen, K. Yao, P. Xu, L. Wu, Y. Sun, Novel multidirectional negative stiffness mechanical metamaterials, Smart Mater. Struct. 29 (2020) 015037. https://doi.org/10.1088/1361-665X/ab47d9.

[15] C. Ren, D. Yang, H. Qin, Mechanical Performance of Multidirectional Buckling-Based Negative Stiffness Metamaterials: An Analytical and Numerical Study, Materials (Basel). 11 (2018) 1078. https://doi.org/10.3390/ma11071078.

[16] C.S. Ha, R.S. Lakes, M.E. Plesha, Cubic negative stiffness lattice structure for energy absorption : Numerical and experimental studies International Journal of Solids and Structures Cubic negative stiffness lattice structure for energy absorption : Numerical and experimental studies, Int. J. Solids Struct. 178–179 (2019) 127–135. https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2019.06.024.

[17] J. Qiu, J.H. Lang, A.H. Slocum, A Curved-Beam Bistable Mechanism, J. Microelectromechanical Syst. 13 (2004) 137–146. https://doi.org/10.1109/JMEMS.2004.825308.

[18] G. Oliveri, J.T.B. Overvelde, Inverse Design of Mechanical Metamaterials That Undergo Buckling, Adv. Funct. Mater. 30 (2020) 1909033. https://doi.org/10.1002/adfm.201909033.

[19] S. Kumar, S. Tan, L. Zheng, D.M. Kochmann, Inverse-designed spinodoid metamaterials, Npj Comput. Mater. 6 (2020) 1–10. https://doi.org/10.1038/s41524-020-0341-6.

[20] B. Kim, S. Lee, J. Kim, Inverse design of porous materials using artificial neural networks, Sci. Adv. 6 (2020) 1–8. https://doi.org/10.1126/sciadv.aax9324.

[21] R.E. Christiansen, O. Sigmund, Compact 200 line MATLAB code for inverse design in photonics by topology optimization: tutorial: erratum, J. Opt. Soc. Am. B. 38 (2021) 1822. https://doi.org/10.1364/josab.427899.

[22] P. Geoffroy-donders, G. Allaire, O. Pantz, 3-d topology optimization of modulated and oriented periodic microstructures by the homogenization method, J. Comput. Phys. 401 (2020) 108994. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.108994.

[23] W. Chen, X. Huang, Topological design of 3D chiral metamaterials based on couple-stress homogenization, J. Mech. Phys. Solids. 131 (2019) 372–386. https://doi.org/10.1016/j.jmps.2019.07.014.

[24] M.F. Ashby, Multi-objective optimization in material design and selection, Acta Mater. 48 (2000) 359–369. https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00304-3.

[25] K. Kappe, K. Hoschke, W. Riedel, S. Hiermaier, Multi-objective optimization of additive manufactured functionally graded lattice structures under impact, Int. J. Impact Eng. 183 (2024) 104789. https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2023.104789.

[26] F. Pan, Y. Li, Z. Li, J. Yang, B. Liu, Y. Chen, 3D Pixel Mechanical Metamaterials, Adv. Mater. 31 (2019) 1900548. https://doi.org/10.1002/adma.201900548.

第3章　原子模倣メタマテリアルのための新規大変形シミュレーション手法の開発

3.1.　緒言

第 2 章で設計した多軸 PXCM について 1 本の梁を要素構造とし，その他の(111)面の面内方向を向く梁を全て剛体と仮定して，大変形挙動を計算した．変形が顕著な梁だけではなく，メタマテリアル全体としての変形挙動を調べるため，有限要素法シミュレーションの 3 次元モデルを作成し，PXCM の大変形をシミュレーションについて検討する必要がある．

さらに，第 2 章の多軸 PXCM についての解析では，変形する方向についても<111>方向だけと限定的なシミュレーションを行った．しかし，実際にメタマテリアルを利用するとき，限定的なひずみだけでなく複雑なひずみや様々な方向のひずみが生じる．一般の変形に対してひずみ制御法で変形挙動を予測する FEM シミュレーションモデルを開発することが求められる．

本章では，相転移メタマテリアルの大変形挙動の計算手法を確立することを目的として，FCC メタマテリアルおよびダイヤモンド構造メタマテリアル，多軸 PXCM について<111>方向だけでなく，<100>, <110>, <112>方向の圧縮変形のシミュレーションを行い，変形挙動の異方性を解析した．

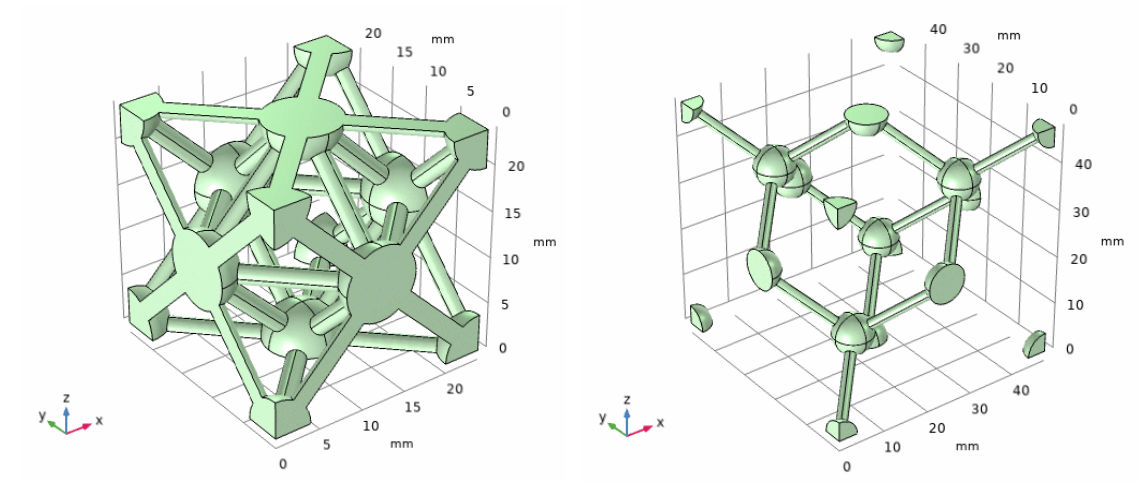
3.2.　方法

3.2.1.　3 次元 FEM モデル

多軸 PXCM の異方的な変形挙動を解析する計算手法を開発する．多軸 PXCM の立方単位構造を代表体積要素[1–3]として，本研究では多軸 PXCM の変形挙動を解析した．この計算手法の妥当性を検証するため，同じ対称性を持つ単位格子について計算した結果を比較した．多軸 PXCM の球の配置は面心立方格子に並んでおり梁は面心立方格子の第一近接の方向に存在する．また，多軸 PXCM の対称性は ZnS 型構造と等しい．ダイヤモンド構造は ZnS 型構造と同様の原子配置をもち．第一近接の配置は同じである．本研究では，面心立方構造とダイヤモンド構造のメタマテリアルの立方単位構造を多軸 PXCM の比較対象とした．

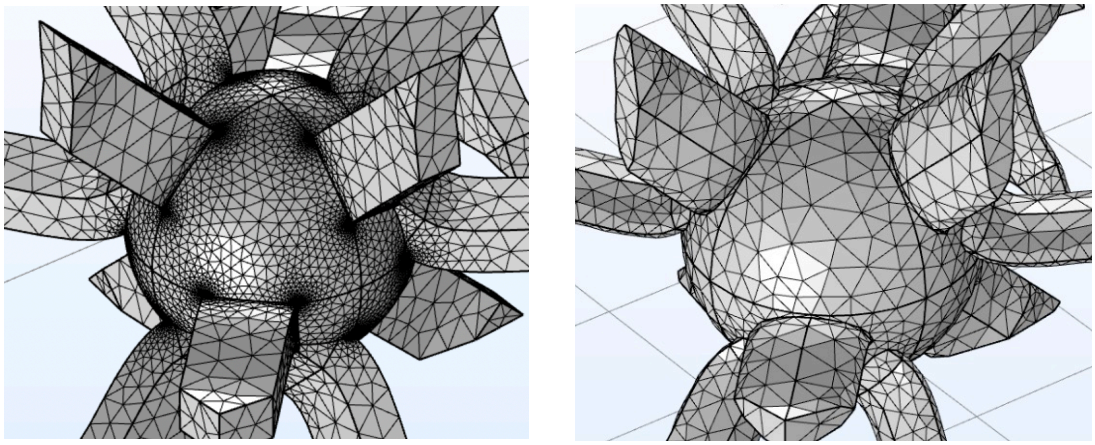
面心立方構造メタマテリアルとダイヤモンド構造メタマテリアルの単位格子構造の FEM モデルを Fig. 3-1 に示す．これらのメタマテリアルは，それぞれ面心立方構造とダイヤモンド構造について原子位置に球を配置し第一近接結合にあたる部分に円柱梁を配置したものとした．ここで，FEM モデルは四面体メッシュでメッシュ化される．このとき，梁の断面形状が多角形だと Fig. 3-2a に示す例のように角と球面の整合性を維持するために非常に細かいメッシュが生成される．一方で，

梁の断面形状を円や楕円のような角と直線のない形状にすると，Fig. 3-2b に示すように比較的均等なメッシュが生成される．本シミュレーションでは大きなひずみを含む計算を実行し，メッシュ寸法よりも大きなひずみステップが生じた場合，メッシュのノード同士の位置関係が逆転してしまうなどトポロジー上の不具合が生じ正しく計算できない．よって，本シミュレーションでは梁断面を円形状とした．



(a) (b)

Fig. 3-1. Finite element method model of unit cell structure of (a) face-centered cubic metamaterial and (b) diamond structure metamaterial.



(a) (b)

Fig. 3-2. Snapshot of meshes of finite element method model with (a) beams with polygonal-shaped cross section and (b) beams with curved-shaped cross section.

多軸 PXCM の梁断面の形状も同様に，角や直線が含まれない楕円形状とした．このとき，Fig. 2-9 に示した多軸 PXCM の球と梁の結合の関係図は Fig. 3-3 のように梁断面を楕円形状に変更した．また，2.4.3.項で述べたように SLS で造形した多

軸 PXCM は楕円形状の断面を仮定した場合に実験結果とシミュレーション結果の力学特性で一致が見られたので, 楕円形状で設計することでより高い再現性が期待できる.

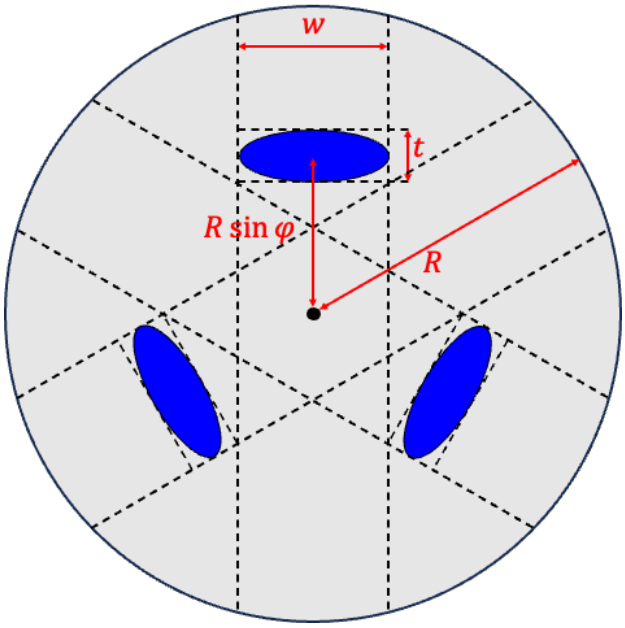


Fig. 3-3. Schematic of sphere and beams viewed from the center of gravity of tetrahedra. The blue ellipses represents the bonding area of sphere and beams.

FEM モデルの作成は Computer Aided Design（CAD）によって行われる[4,5]. CAD によって単位格子構造を設計する際, 球と梁を単位格子構造に必要な数作成したのち，単位格子構造の枠組みとなる立方体との共通部分だけを残す．ここで，球と梁を結合する計算や立方体と共通部分だけを残す計算をブーリアン演算または集合演算という．ブーリアンとは真理値と言われる“True”と“False”の 2 値をとるデータ型を指し，CAD におけるブーリアン演算では立体の内部を“True”とし立体の外部を“False”として，複数の立体が存在するときに and（論理積）, or（論理和）, not（論理差）の演算を行う．ブーリアン演算を駆使することで複雑な構造を容易に設計することができる．3 次元空間で面は式(3-1)のような方程式で表される．

$$F(x,y,z)=0 \tag{3-1}$$

このような面の組み合わせで立体物が表される. 式(3-1)が立体の表面を表すとき, 式(3-2)を満たす位置座標(x,y,z)はこの立体の内部に位置する.

$$F(x,y,z)<0 \tag{3-2}$$

例えば，原点を中心とした半径 3 の球は式(3-3)で表され，重心を原点とした 1 辺の長さが 2 の立方体は式(3-4)で表される．

$$F(x,y,z)=\sqrt{x^2+y^2+z^2}-3 \tag{3-3}$$

$$F(x,y,z) = \max(|x|-1, |y|-1, |z|-1) \tag{3-4}$$

式(3-4)にもあるように，論理積（and）は最大値演算子（max）で表現される．つまり，式(3-4)では，$x=\pm1$ の 2 つの平面に挟まれた無限に広い板と $y=\pm1$ の 2 つの平面に挟まれた無限に広い板，$z=\pm1$ の 2 つの平面に挟まれた無限に広い板の 3 つの共通部分を抜き出して得られる立体を表す．一方で，最小値演算子（min）を用いると，式(3-5)において，最小値演算子の引数となった立体（F_1, F_2, F_3, …）のいずれかにおいて負の値をとる場合に最小値演算子の戻り値が負になるため，論理和（or）は最小値演算子によって計算される．

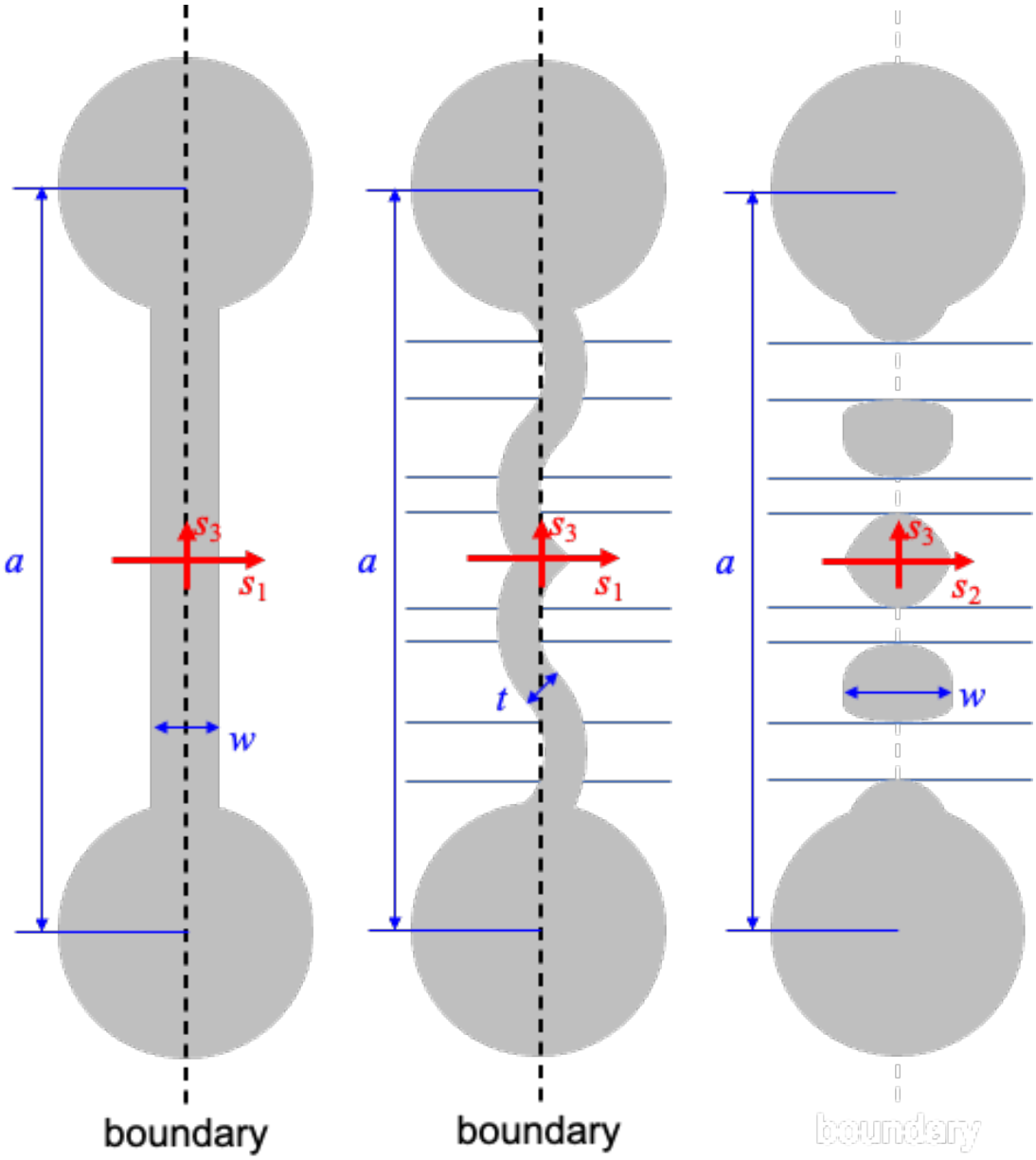
$$\min(F_1, F_2, F_3, \dots) \tag{3-5}$$

論理差（not）は，立体 A から立体 B を差し引くとき式(3-6)のように差し引く立体の表現関数の符号を変えることで計算する．

$$\max(\mathrm{A}, -\mathrm{B}) \tag{3-6}$$

これらのような表現関数で立体を表し，ブーリアン演算を繰り返し CAD 状でモデルを設計する．

Fig. 3-4 に梁の形状と単位格子の境界面の模式図を示す．Fig. 3-4a に示した FCC メタマテリアルの単位格子境界面にある梁は，単位格子の境界面と交差する面要素が 1 箇所のみで交差し，単純な条件式でブーリアン演算を行うことができる．しかし，多軸 PXCM の設計パラメータによっては Fig. 3-4b のように 1 つの曲面が境界面を複数回出入りすることがある．このとき，境界面上の多軸 PXCM の梁の断面は Fig. 3-4c のような形をとる．ここに示すように断面はいくつもの部分に分かれる．これらの断面に対して，立体の内部であるかの判定を同時に行う必要があり，この計算過程で計算不良を起こしやすい．この計算不良が生じにくいように本研究では，球の位置を周期境界の境界面から変位させ，単位構造を x, y, z 軸方向に 1/4 周期ずらした形状とした．その結果得られる多軸 PXCM の単位格子構造を Fig. 3-5 に示す．1/4 周期ずつ変位させたしたことで，単位格子の各辺に多軸 PXCM の梁の中央が乗るような形となった．単位格子の辺上に梁の中央が乗ると，梁の中央部分で 2 種の周期境界面が交差することとなり梁は 4 つに区切られるようになる．単位格子の辺に見られる細かな浮島のような部材は，このように区切られた梁の一部である．細かい浮島のように区切られたが，これによって，どの立体表面にも過度に浅い角度を持つ面要素が見られなくなり，結果的により均等なメッシュが生成しやすくなった．



(a) (b) (c)

Fig. 3-4. Schematic of beams on the periodic boundary. (a) cylindrical beam, (b) beam of multi-axis PXCM, (c) cross section of beam of multi-axis PXCM and periodic boundary of cubic unit cell.

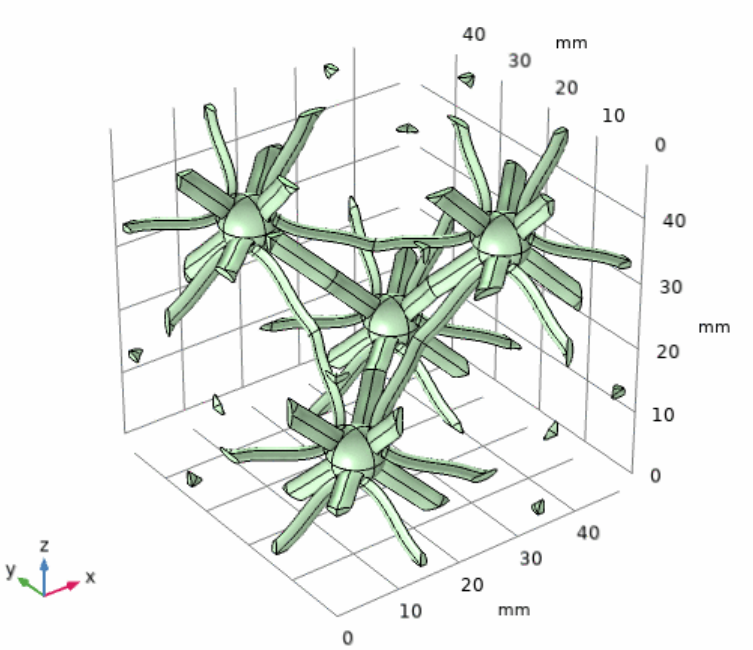


Fig. 3-5. Finite element method model of unit cell structure of multi-axis PXCM.

3.2.2. ひずみ制御法による単位格子モデルの変形シミュレーション

飛び移り座屈が生じるときの荷重–変位曲線のグラフを Fig. 3-6 に青い実線で示す．初期状態から圧縮変形すると，始めは変位が増すに連れて荷重は急峻に増加するが，飛び移り座屈が生じるところで荷重が減少し始める．一般的な FEM シミュレーションでは，与えられた荷重から生じる変位を計算し変形の様子を導出する．しかし，この荷重制御法による一般的な FEM シミュレーションは荷重が単調増加する場合にのみ有効である．飛び移り座屈を荷重制御法により観測するとき，荷重変位曲線は Fig. 3-6 のオレンジ色の破線のような挙動となる．しかし，FEM シミュレーションでは拘束条件下で荷重を増加させる計算を行ったとき，弾性ひずみエネルギーが極小値をとるような変位を探索するが，前ステップの変位から大きく飛躍した変異を計算する際，幾何学的に起こり得ない変位の結果を出力したり，そもそも計算が収束しなかったりするため，飛び移り座屈が生じた後の変位を計算することができない．そのため，FEM シミュレーションで飛び移り座屈が生じる変形を計算するとき，変位制御法（displacement control method）[6]を用いる．変位制御法は，少しずつ変位を増しながら，その変位での必要な荷重を計算する．これによって，Fig. 3-6 の青い実線で示される荷重–変位曲線を導出することができる．本研究では，単位格子にひずみを与え，そのときの全弾性エネルギーを最小化するような応力を計算した．

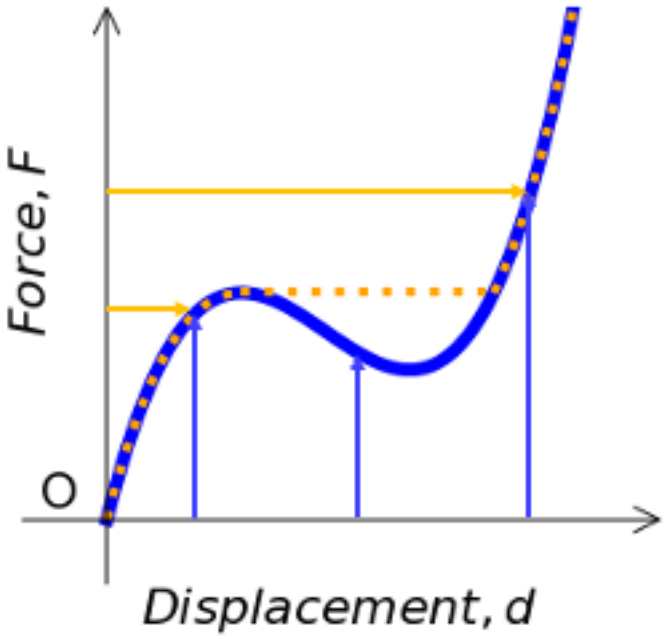


Fig. 3-6. Force-displacement curve of snap-through buckling behavior. Blue solid line by displacement control method and orange dotted line by force control method.

3.2.3. 境界条件設定・代表体積要素

3.2.1.項で作成したメタマテリアル構造について，3.2.2.項で述べたひずみ制御法を用いて変形特性を調べるため, メタマテリアルの単位格子構造を代表体積要素として周期境界条件を適用したシミュレーションをセットアップした. 代表体積要素[1,3,7]を Fig. 3-7 に示したような 1 辺の長さ L の立方体として，ひずみ制御法によって計算した.

この代表体積要素では，$x = 0, y = 0, z = 0$ で表される原点 O を通る 3 面をそれぞれ X_O 面，Y_O 面，Z_O 面とし，それらの対面の $x = L, y = L, z = L$ で表される 3 面をそれぞれ X_L 面，Y_L 面，Z_L 面とした．単位格子構造の X_O 面と X_L 面，Y_O 面と Y_L 面，Z_O 面と Z_L 面はそれぞれ完全に一致する面をもつ．これらの一致する面同士でメッシュも完全に一致する必要がある．まず，X_O 面，Y_O 面，Z_O 面だけにメッシュを生成した．次にそれぞれのメッシュを X_L 面，Y_L 面，Z_L 面へ各々複製することで，対面同士でメッシュが一致するようにした．さらに. 境界面上のメッシュを作成した後に他の部材のメッシュや立体内部のメッシュを生成することで, 対面同士でメッシュとノードを共有するようにした.

ひずみ制御法を実施するため代表体積要素に式(3-11)に示すひずみ場 $\boldsymbol{\varepsilon}$ を与えた.

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \tag{3-11}$$

このひずみから X_L 面，Y_L 面，Z_L 面にそれぞれ式(3-12)で表せる変位ベクトル $\boldsymbol{d}_x$, $\boldsymbol{d}_y$, $\boldsymbol{d}_z$ を与えると，代表体積要素にひずみ場 $\boldsymbol{\varepsilon}$ を与えることになる．

$$\boldsymbol{d}_i = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xi}/L \\ \varepsilon_{yi}/L \\ \varepsilon_{zi}/L \end{bmatrix}, (i = x, y, z) \tag{3-12}$$

このひずみ制御法を実現しながら，代表体積要素が x, y, z 軸方向にそれぞれ周期境界条件を持つためには対面の対応するノード同士で変位が連動しなければならない．向かい合う境界面の組み合わせについて，$i = 0$ $(i = x,y,z)$の面上のあるノードに関する変位を $\boldsymbol{u}_i$ とし，そのノードに対応する $i = L$ $(i = x,y,z)$の面上のノードに関する変位を $\boldsymbol{u}_i'$ としたとき，この 2 つの変位は常に式(3-13)の関係性を持つ．

$$u_i' = u_i + d_i, (i = x, y, z) \tag{3-13}$$

FEM シミュレーションを実行する際に，基準がなければ単位格子構造が FEM シミュレーションの空間内でランダムな位置を取ってしまうことになるので，変形の基準を設けなければならない．球の中心が格子点にある単位格子構造モデルでは原点 O を固定し，1/4 周期ずらしたモデルでは$(x,y,z) = (1/4,1/4,1/4)$の点を固定した．

以上の拘束条件を設定した上で，ひずみ場 $\boldsymbol{\varepsilon}$ を少しずつ変え，そのひずみ場で弾性ひずみエネルギーを最小化するような応力場 $\boldsymbol{\sigma}$ を計算した．

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \tag{3-14}$$

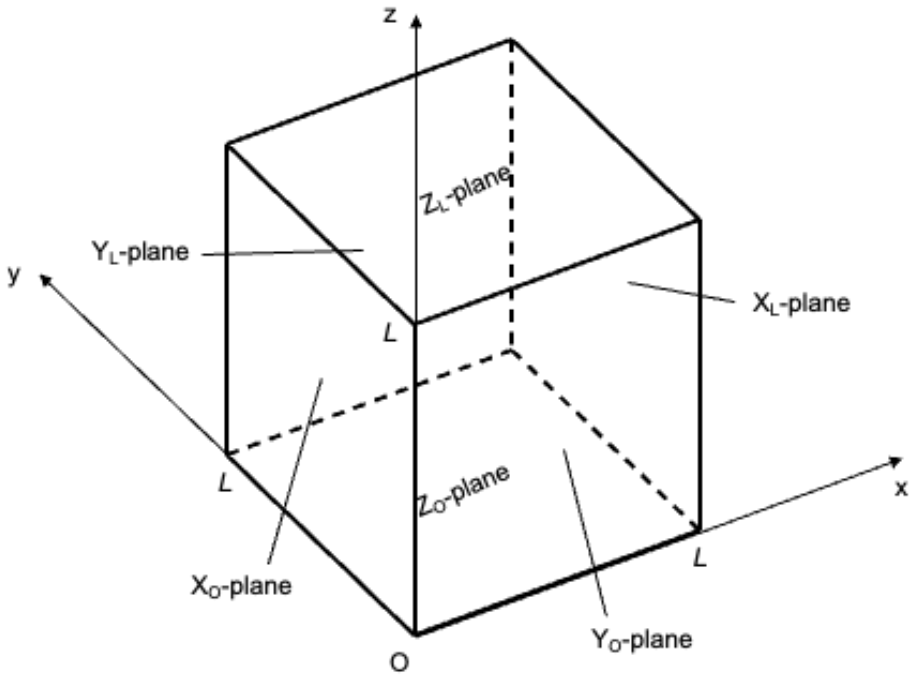


Fig. 3-7. Schematic illustration of relative volume element.

3.2.4. 様々な方向への変形

ひずみ場 $\boldsymbol{\varepsilon}$ を適切なテンソルにすることで，様々な変形を再現することができる．本研究では，メタマテリアルについて圧縮変形とせん断変形の変形挙動を計算するシミュレーションを行った．

3.2.4.1. 圧縮変形

メタマテリアルの種々の方向への圧縮変形挙動を調べるため，<100>，<110>, <111>, <112>の 4 つの方向にひずみを少しずつ増加させて応力ひずみの関係を解析した．ひずみの絶対量を e とすると，<100>方向へ一軸に変形するひずみ場 $\boldsymbol{\varepsilon}_{100}$ は式(3-15)で表せる．ただし，圧縮変形とするため $e<0$ である．

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{100}=\begin{bmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{3-15}$$

<110>, <111>, <112>方向のうち$[\bar{1}10], [111], [11\bar{2}]$方向は互いに直交するので，直交行列 $\boldsymbol{R}$ を

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{6} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{3} & -\frac{\sqrt{6}}{3} \end{bmatrix} \tag{3-16}$$

とすると，<110>, <111>, <112>方向へ圧縮するひずみ場 $\boldsymbol{\varepsilon}_{110}$, $\boldsymbol{\varepsilon}_{111}$, $\boldsymbol{\varepsilon}_{112}$ はそれぞれ式(3-17)~(3-19)で表せる．

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{110}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\boldsymbol{R} \tag{3-17}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{111}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & e & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}\boldsymbol{R} \tag{3-18}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{112}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e \end{bmatrix}\boldsymbol{R} \tag{3-19}$$

これらのひずみ条件下で弾性ひずみエネルギーを最小化する応力場 $\boldsymbol{\sigma}$ からそれぞれの圧縮ひずみの方向に対応した応力を式(3-20)~(3-23)で求めた．

$$\boldsymbol{\sigma}_{100}=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{\sigma}\cdot\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3-20}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{110}=\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{R}\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\cdot\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3-21}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{111} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{R}\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3-22}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_{112} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{R}\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} \cdot \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{3-23}$$

3.2.4.2. せん断変形

せん断変形には，単純せん断（simple shear）と純粋せん断（pure shear）がある．正方形に対して y 軸に垂直な面を平行移動させ，単純せん断させた様子を Fig. 3-8a に示す. また一方で, 正方形に対して角度を変化させ, 純粋せん断させた様子を Fig. 3-8b に示す. これらのせん断変形をひずみテンソルで表すと単純せん断は式(3-24), 純粋せん断は式(3-25)で表せる．純粋せん断は伸縮変形成分を取り除いた変形の特徴を表す.

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{12} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{3-24}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} 0 & \varepsilon_{12} & 0 \\ \varepsilon_{12} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{3-25}$$

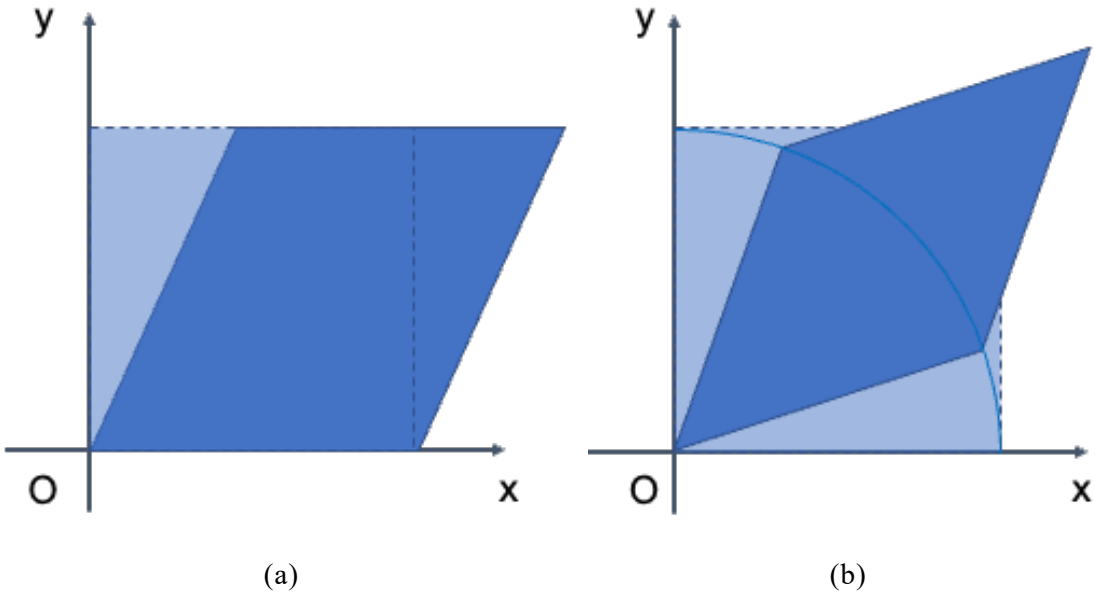


Fig. 3-8. Schematic of (a) simple shear and (b) pure shear.

3.2.5. 弾性係数テンソルの計算

応力とひずみの関係性は式(3-26)および式(3-27)で表される一般化 Hooke の法則が成り立つ．ここで，応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}$ およびひずみテンソル $\boldsymbol{\varepsilon}$ はそれぞれ式(3-14)および式(3-11)で示した 3×3 の計 9 成分のテンソルであり，弾性特性を表すテンソルとして式(3-26)の弾性係数テンソル $\boldsymbol{C}$ と式(3-27)の弾性コンプライアンス係数テンソル $\boldsymbol{S}$ がしばしば用いられる．これらのテンソル $\boldsymbol{C}$ および $\boldsymbol{S}$ はともに 3×3×3×3 の計 81 成分のテンソルである．

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{\varepsilon} \tag{3-26}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{S}\boldsymbol{\sigma} \tag{3-27}$$

これらの 3×3×3×3 の計 81 成分は，総和規約により，式(3-28)および式(3-29)のように表せる．

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} \tag{3-28}$$

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl}\sigma_{kl} \tag{3-29}$$

Voigt によって，この応力とひずみの関係性から回転や加速度を取り除いた上で，より把握に便利な表記方法が導入された．式(3-11)に示した応力テンソル σ_{ij} は対称テンソルとなるとき，すなわち $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ $(i \neq j)$ のとき，応力は釣り合い物体の加速度は 0 である．このときの応力テンソルは式(3-30)に示す 6 成分に集約される．

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \tag{3-30}$$

また，式(3-13)に示したひずみテンソルは $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ $(i \neq j)$となる対称テンソルと $\varepsilon_{ij} = -\varepsilon_{ji}$ $(i \neq j)$となる反対称テンソルに分けられる．対称テンソルは材料の変形を表し，対角成分が 0 の反対称テンソルは材料の回転を表す．変形を表す対称テンソルは 6 成分に集約され，このときのひずみテンソルは式(3-31)のようになる．

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \tag{3-31}$$

弾性ひずみエネルギー密度 U の微小変化 $\mathrm{d}U$ について考えると，断熱条件下で式(3-32)のように表せる．

$$\mathrm{d}U = \sigma_{ij}\mathrm{d}\varepsilon_{ij} = \left(C_{ijkl}\varepsilon_{kl}\right)\mathrm{d}\varepsilon_{kl} \tag{3-32}$$

つまり，弾性ひずみエネルギー密度をひずみで微分すると，応力が式(3-33)のように表せ，応力をまたひずみで微分すると弾性係数が式(3-34)のように表せる．

$$\frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl} \tag{3-33}$$

$$\frac{\partial}{\partial \varepsilon_{ij}}\left(\frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{kl}}\right) = C_{ijkl} \tag{3-34}$$

これらの式は ij と kl を入れ替えても成り立つので式(3-35)が成り立つことから

弾性係数テンソルは式(3-36)のような成分の対称性を持つ．

$$\frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon_{ij}\partial \varepsilon_{kl}} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{ij}}\left(\frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{kl}}\right) = \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{kl}}\left(\frac{\partial U}{\partial \varepsilon_{ij}}\right) = C_{ijkl} \tag{3-35}$$

$$C_{ijkl} = C_{klij} \tag{3-36}$$

この対称性は弾性コンプライアンス係数テンソルも同様である．

これまでに述べた応力，ひずみ，弾性係数テンソル，弾性コンプライアンス係数テンソルの成分の対称性をまとめると式(3-37)および式(3-38)となる．

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij} \tag{3-37}$$

$$S_{ijkl} = S_{jikl} = S_{ijlk} = S_{klij} \tag{3-38}$$

つまり，これらの成分の対称性を考慮すると，弾性係数テンソルおよび弾性コンプライアンス係数テンソルの成分の数は 81 個から 21 個に集約される．Voigt は，6 成分の応力テンソルとひずみテンソルについてそれぞれ式(3-39)と式(3-40)のような成分の置き換え，2 階 3 次テンソルを 1 階 6 次テンソルとして表した．

$$\sigma_1 = \sigma_{xx}, \sigma_2 = \sigma_{yy}, \sigma_3 = \sigma_{zz}, \sigma_4 = \sigma_{yz}, \sigma_5 = \sigma_{zx}, \sigma_6 = \sigma_{xy} \tag{3-39}$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_{xx}, \varepsilon_2 = \varepsilon_{yy}, \varepsilon_3 = \varepsilon_{zz}, \varepsilon_4 = 2\varepsilon_{yz}, \varepsilon_5 = 2\varepsilon_{zx}, \varepsilon_6 = 2\varepsilon_{xy} \tag{3-40}$$

これに応じて弾性係数テンソルと弾性コンプライアンス係数テンソルはそれぞれ式(3-41)と式(3-42)のように表せる．この形式で表すことを Voigt 記法という．

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{xxxx} & C_{xxyy} & C_{xxzz} & C_{xxyz} & C_{xxzx} & C_{xxxy} \\ & C_{yyyy} & C_{yyzz} & C_{yyyz} & C_{yyzx} & C_{yyxy} \\ & & C_{zzzz} & C_{zzyz} & C_{zzzx} & C_{zzxy} \\ & & & C_{yzyz} & C_{yzzx} & C_{yzxy} \\ & Sym. & & & C_{zxzx} & C_{zxxy} \\ & & & & & C_{xyxy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{bmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ & Sym. & & & C_{55} & C_{56} \\ & & & & & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \tag{3-41}$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ 2\varepsilon_{yz} \\ 2\varepsilon_{zx} \\ 2\varepsilon_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{xxxx} & S_{xxyy} & S_{xxzz} & 2S_{xxyz} & 2S_{xxzx} & 2S_{xxxy} \\ & S_{yyyy} & S_{yyzz} & 2S_{yyyz} & 2S_{yyzx} & 2S_{yyxy} \\ & & S_{zzzz} & 2S_{zzyz} & 2S_{zzzx} & 2S_{zzxy} \\ & & & 4S_{yzyz} & 4S_{yzzx} & 4S_{yzxy} \\ & Sym. & & & 4S_{zxzx} & 4S_{zxxy} \\ & & & & & 4S_{xyxy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \\ \sigma_{xy} \end{bmatrix} \tag{3-42}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & S_{14} & S_{15} & S_{16} \\ & S_{22} & S_{23} & S_{24} & S_{25} & S_{26} \\ & & S_{33} & S_{34} & S_{35} & S_{36} \\ & & & S_{44} & S_{45} & S_{46} \\ & Sym. & & & S_{55} & S_{56} \\ & & & & & S_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix}$$

Voigt 記法を総和規約で表すと，式(3-43)と式(3-44)のようになる．

$$\sigma_i = C_{ij}\varepsilon_j \tag{3-43}$$

$$\varepsilon_i = S_{ij}\sigma_j \tag{3-44}$$

また，多軸 PXCM や fcc メタマテリアル，ダイヤモンド構造メタマテリアルは立方晶の対称性をもつ. 立方晶系であるとき, <111>方向に 4 つの 3 回回転軸を持つ. すなわち，x 軸と y 軸と z 軸は等価となる．よって，弾性係数テンソルと弾性コンプライアンス係数テンソルはそれぞれ式(3-45)と式(3-46)のように表せ, 独立な成分は 3 つとなる．

$$C_{ij} = \begin{bmatrix} C_1 & C_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\ & C_1 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\ & & C_1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_4 & 0 & 0 \\ & Sym. & & & C_4 & 0 \\ & & & & & C_4 \end{bmatrix} \tag{3-45}$$

$$S_{ij} = \begin{bmatrix} S_1 & S_2 & S_2 & 0 & 0 & 0 \\ & S_1 & S_2 & 0 & 0 & 0 \\ & & S_1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & S_4 & 0 & 0 \\ & Sym. & & & S_4 & 0 \\ & & & & & S_4 \end{bmatrix} \tag{3-46}$$

これらの成分は，弾性特性を表す一般的な物性値として縦弾性係数 E，横弾性係数 G，ポアソン比 ν を用いて式(3-47)と式(3-48)のように表せる．ただし，圧縮性材料（$-1 < \nu < 1/2$）であるとする．

$$C_1 = \frac{(1-\nu)E}{(1+\nu)(1-2\nu)}, C_2 = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}, C_4 = G \tag{3-47}$$

$$S_1 = \frac{1}{E}, S_2 = -\frac{\nu}{E}, S_4 = \frac{1}{G} \tag{3-48}$$

この立方晶系の等方性条件は式(3-49)である．

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \Leftrightarrow C_4 = \frac{C_1 - C_2}{2} \Leftrightarrow S_4 = 2(S_1 - S_2) \tag{3-49}$$

異方性の度合いを表すパラメータとして，式(3-50)に示す Zener 比 A_Z がしばしば用いられる[8,9]．Zener 比は $A_Z = 1$ のとき等方性を示し，$\log_{10} A_Z$ の絶対値が大きくなるほど異方的になる．

$$A_Z = \frac{2G}{E}(1+\nu) = \frac{2C_4}{C_1 - C_2} = \frac{2(S_1 - S_2)}{S_4} \tag{3-50}$$

縦弾性係数 E，横弾性係数 G，ポアソン比 ν の物性値をシミュレーションから求めるためには，3 つの連立方程式を解けば良い．2 種のひずみ制御に対して式(3-51)の 3 つの方程式が成立し，これを連立方程式として解くことで代表体積要素の弾性異方性を求めることができる．

$$\begin{cases} \sigma_1 = C_1\varepsilon_1 \\ \sigma_2 = C_2\varepsilon_1 \\ \sigma_4 = C_4\varepsilon_4 \end{cases} \tag{3-51}$$

3.2.6. 弾性異方性の可視化

弾性係数テンソルや弾性コンプライアンス係数テンソルは弾性異方性を表すが，テンソルを見ただけではヤング率の異方性やポアソン比の異方性を直感的に把握することはできない．そこで，弾性コンプライアンス係数テンソルを元にヤング率，体積弾性率，ポアソン比，せん断弾性率の異方性を可視化した[10–12]．

代表体積要素の任意の単位ベクトル $\mathbf{d}$ の向きの力学特性を求める．求める力学特性はヤング率 $E(\mathbf{d})$，体積弾性率 $K(\mathbf{d})$，ポアソン比 $\nu(\mathbf{d},\mathbf{n})$，せん断弾性率 $G(\mathbf{d},\mathbf{n})$とする．ただし，$\mathbf{n}$ はベクトル $\mathbf{d}$ に垂直な任意の単位ベクトルである．4 階の弾性コンプライアンス係数テンソルを $\boldsymbol{S}$ に対して，これらの力学特性はそれぞれ式(3-52)～式(3-55)のように表せる．

$$E(\mathbf{d}) = [(\mathbf{d}\otimes\mathbf{d})\cdot\boldsymbol{S}\cdot(\mathbf{d}\otimes\mathbf{d})]^{-1} \tag{3-52}$$

$$K(\mathbf{d}) = \frac{1}{3}\left[\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}\cdot\boldsymbol{S}\cdot(\mathbf{d}\otimes\mathbf{d})\right]^{-1} \tag{3-53}$$

$$-\frac{\nu(\mathbf{d},\mathbf{n})}{E(\mathbf{d})} = (\mathbf{d}\otimes\mathbf{d})\cdot\boldsymbol{S}\cdot(\mathbf{n}\otimes\mathbf{n}) \tag{3-54}$$

$$G(\mathbf{d},\mathbf{n}) = \frac{1}{2}\left[\frac{\sqrt{2}}{2}(\mathbf{d}\otimes\mathbf{n}+\mathbf{n}\otimes\mathbf{d})\cdot\boldsymbol{S}\cdot(\mathbf{d}\otimes\mathbf{n}+\mathbf{n}\otimes\mathbf{d})\frac{\sqrt{2}}{2}\right]^{-1} \tag{3-55}$$

4 階の弾性コンプライアンス係数テンソルから，これらの式を用いて任意の方向の力学特性を算出することは可能だが，4 階の弾性コンプライアンス係数テンソルでは応力ひずみ関係を算出することが難しいので，弾性コンプライアンス係数テンソルを 2 階のテンソルに落とし込む．前述した Voigt 記法は応力テンソルとひずみテンソルが分かりやすいように作られた記法で最も一般に普及し，ほとんどの書籍や市販の有限要素法ソフトウェアに用いられる．しかし，Voigt 記法を用いて異方性を考える場合，弾性係数テンソルや弾性コンプライアンス係数テンソルからは不

変量，固有値，固有ベクトルを算出できない．この問題を克服したテンソルの記法として，Mandel 記法が導入された．Mandel 記法では，一般化 Hooke の法則を式(3-56)および式(3-57)のように記述する[13].

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sqrt{2}\sigma_{yz} \\ \sqrt{2}\sigma_{zx} \\ \sqrt{2}\sigma_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{xxxx} & C_{xxyy} & C_{xxzz} & \sqrt{2}C_{xxyz} & \sqrt{2}C_{xxzx} & \sqrt{2}C_{xxxy} \\ & C_{yyyy} & C_{yyzz} & \sqrt{2}C_{yyyz} & \sqrt{2}C_{yyzx} & \sqrt{2}C_{yyxy} \\ & & C_{zzzz} & \sqrt{2}C_{zzyz} & \sqrt{2}C_{zzzx} & \sqrt{2}C_{zzxy} \\ & & & 2C_{yzyz} & 2C_{yzzx} & 2C_{yzxy} \\ & Sym. & & & 2C_{zxzx} & 2C_{zxxy} \\ & & & & & 2C_{xyxy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{yz} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{zx} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \tag{3-56}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_3 \\ \hat{\sigma}_4 \\ \hat{\sigma}_5 \\ \hat{\sigma}_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{C}_{11} & \hat{C}_{12} & \hat{C}_{13} & \hat{C}_{14} & \hat{C}_{15} & \hat{C}_{16} \\ & \hat{C}_{22} & \hat{C}_{23} & \hat{C}_{24} & \hat{C}_{25} & \hat{C}_{26} \\ & & \hat{C}_{33} & \hat{C}_{34} & \hat{C}_{35} & \hat{C}_{36} \\ & & & \hat{C}_{44} & \hat{C}_{45} & \hat{C}_{46} \\ & Sym. & & & \hat{C}_{55} & \hat{C}_{56} \\ & & & & & \hat{C}_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\varepsilon}_1 \\ \hat{\varepsilon}_2 \\ \hat{\varepsilon}_3 \\ \hat{\varepsilon}_4 \\ \hat{\varepsilon}_5 \\ \hat{\varepsilon}_6 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{yz} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{zx} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{xy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{xxxx} & S_{xxyy} & S_{xxzz} & \sqrt{2}S_{xxyz} & \sqrt{2}S_{xxzx} & \sqrt{2}S_{xxxy} \\ & S_{yyyy} & S_{yyzz} & \sqrt{2}S_{yyyz} & \sqrt{2}S_{yyzx} & \sqrt{2}S_{yyxy} \\ & & S_{zzzz} & \sqrt{2}S_{zzyz} & \sqrt{2}S_{zzzx} & \sqrt{2}S_{zzxy} \\ & & & 2S_{yzyz} & 2S_{yzzx} & 2S_{yzxy} \\ & Sym. & & & 2S_{zxzx} & 2S_{zxxy} \\ & & & & & 2S_{xyxy} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sqrt{2}\sigma_{yz} \\ \sqrt{2}\sigma_{zx} \\ \sqrt{2}\sigma_{xy} \end{bmatrix} \tag{3-57}$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} \hat{\varepsilon}_1 \\ \hat{\varepsilon}_2 \\ \hat{\varepsilon}_3 \\ \hat{\varepsilon}_4 \\ \hat{\varepsilon}_5 \\ \hat{\varepsilon}_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{S}_{11} & \hat{S}_{12} & \hat{S}_{13} & \hat{S}_{14} & \hat{S}_{15} & \hat{S}_{16} \\ & \hat{S}_{22} & \hat{S}_{23} & \hat{S}_{24} & \hat{S}_{25} & \hat{S}_{26} \\ & & \hat{S}_{33} & \hat{S}_{34} & \hat{S}_{35} & \hat{S}_{36} \\ & & & \hat{S}_{44} & \hat{S}_{45} & \hat{S}_{46} \\ & Sym. & & & \hat{S}_{55} & \hat{S}_{56} \\ & & & & & \hat{S}_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}_1 \\ \hat{\sigma}_2 \\ \hat{\sigma}_3 \\ \hat{\sigma}_4 \\ \hat{\sigma}_5 \\ \hat{\sigma}_6 \end{bmatrix}$$

Voigt 記法を用いて任意の向きの力学特性を式(3-52)～式(3-55)のように表したが，これを Mandel 記法で表すためにはこれらの式で方向を表すテンソルを式(3-58)～式(3-61)のようにおく．

$$\mathbf{d}\otimes\mathbf{d} = \begin{bmatrix} \mathrm{d}_x^2 & \mathrm{d}_x\mathrm{d}_y & \mathrm{d}_x\mathrm{d}_z \\ & \mathrm{d}_y^2 & \mathrm{d}_y\mathrm{d}_z \\ Sym. & & \mathrm{d}_z^2 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \hat{\mathrm{d}} = \begin{bmatrix} \mathrm{d}_x^2 \\ \mathrm{d}_y^2 \\ \mathrm{d}_z^2 \\ \sqrt{2}\mathrm{d}_y\mathrm{d}_z \\ \sqrt{2}\mathrm{d}_z\mathrm{d}_x \\ \sqrt{2}\mathrm{d}_x\mathrm{d}_y \end{bmatrix} \tag{3-58}$$

$$\mathbf{n}\otimes\mathbf{n} = \begin{bmatrix} \mathrm{n}_x^2 & \mathrm{n}_x\mathrm{n}_y & \mathrm{n}_x\mathrm{n}_z \\ & \mathrm{n}_y^2 & \mathrm{n}_y\mathrm{n}_z \\ Sym. & & \mathrm{n}_z^2 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \hat{\mathbf{n}} = \begin{bmatrix} \mathrm{n}_x^2 \\ \mathrm{n}_y^2 \\ \mathrm{n}_z^2 \\ \sqrt{2}\mathrm{n}_y\mathrm{n}_z \\ \sqrt{2}\mathrm{n}_z\mathrm{n}_x \\ \sqrt{2}\mathrm{n}_x\mathrm{n}_y \end{bmatrix} \tag{3-59}$$

$$\frac{\sqrt{2}}{2}(\mathbf{d}\otimes\mathbf{n}+\mathbf{n}\otimes\mathbf{d}) = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{bmatrix} \mathrm{d}_x\mathrm{n}_x+\mathrm{n}_x\mathrm{d}_x & \mathrm{d}_x\mathrm{n}_y+\mathrm{n}_x\mathrm{d}_y & \mathrm{d}_x\mathrm{n}_z+\mathrm{n}_x\mathrm{d}_z \\ & \mathrm{d}_y\mathrm{n}_y+\mathrm{n}_y\mathrm{d}_y & \mathrm{d}_y\mathrm{n}_z+\mathrm{n}_y\mathrm{d}_z \\ Sym. & & \mathrm{d}_z\mathrm{n}_z+\mathrm{n}_z\mathrm{d}_z \end{bmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \hat{\mathbf{m}} = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{bmatrix} 2\mathrm{d}_x\mathrm{n}_x \\ 2\mathrm{d}_y\mathrm{n}_y \\ 2\mathrm{d}_z\mathrm{n}_z \\ \sqrt{2}(\mathrm{d}_y\mathrm{n}_z+\mathrm{n}_y\mathrm{d}_z) \\ \sqrt{2}(\mathrm{d}_z\mathrm{n}_x+\mathrm{n}_z\mathrm{d}_x) \\ \sqrt{2}(\mathrm{d}_x\mathrm{n}_y+\mathrm{n}_x\mathrm{d}_y) \end{bmatrix} \tag{3-60}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \hat{\mathbf{I}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3-61}$$

すると，任意の方向におけるヤング率 $E(\mathbf{d})$，体積弾性率 $K(\mathbf{d})$，ポアソン比 $\nu(\mathbf{d},\mathbf{n})$，せん断弾性率 $G(\mathbf{d},\mathbf{n})$は式(3-62)～式(3-65)で求められる．

$$E(\mathbf{d}) = \left[\hat{\mathbf{d}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\mathbf{d}}\right]^{-1} \tag{3-62}$$

$$K(\mathbf{d}) = \frac{1}{3}\left[\hat{\mathbf{I}}\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\mathbf{d}}\right]^{-1} \tag{3-63}$$

$$-\frac{\nu(\mathbf{d},\mathbf{n})}{E(\mathbf{d})} = \hat{\mathbf{d}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\mathbf{n}} \tag{3-64}$$

$$G(\mathbf{d},\mathbf{n}) = \frac{1}{2}\left[\hat{\mathbf{m}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\mathbf{m}}\right]^{-1} \tag{3-65}$$

また，Mandel 記法による弾性コンプライアンス係数テンソルは，代表体積要素の見かけの縦弾性率を E，見かけの横弾性率を G，見かけのポアソン比を ν とすると，式(3-46)および式(3-48)より，式(3-66)で表せる．

$$
\hat{\boldsymbol{S}} = \begin{bmatrix} \hat{S}_1 & \hat{S}_2 & \hat{S}_2 & 0 & 0 & 0 \\ & \hat{S}_1 & \hat{S}_2 & 0 & 0 & 0 \\ & & \hat{S}_1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & \hat{S}_4 & 0 & 0 \\ & Sym. & & & \hat{S}_4 & 0 \\ & & & & & \hat{S}_4 \end{bmatrix}
$$

$$
= \begin{bmatrix} 1/E & -\nu/E & -\nu/E & 0 & 0 & 0 \\ & 1/E & -\nu/E & 0 & 0 & 0 \\ & & 1/E & 0 & 0 & 0 \\ & & & 1/2G & 0 & 0 \\ & Sym. & & & 1/2G & 0 \\ & & & & & 1/2G \end{bmatrix} \tag{3-66}
$$

本研究では各メタマテリアルの代表体積要素に対して<100>, <110>, <111>, <112>方向にそれぞれ圧縮するようにひずみを与えた．<100>, <110>, <111>, <112>方向のそれぞれの単位ベクトルは式(3-67)で表せ，Mandel 記法で方向テンソルは式(3-68)のようになる．

$$
\mathbf{d}_{100} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{d}_{110} = \begin{bmatrix} \sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{d}_{111} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/3 \\ \sqrt{3}/3 \\ \sqrt{3}/3 \end{bmatrix}, \mathbf{d}_{112} = \begin{bmatrix} \sqrt{6}/6 \\ \sqrt{6}/6 \\ \sqrt{6}/3 \end{bmatrix} \tag{3-67}
$$

$$
\hat{\mathbf{d}}_{100} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \hat{\mathbf{d}}_{110} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ 1/2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \sqrt{2}/2 \end{bmatrix}, \hat{\mathbf{d}}_{111} = \begin{bmatrix} 1/3 \\ 1/3 \\ 1/3 \\ \sqrt{2}/3 \\ \sqrt{2}/3 \\ \sqrt{2}/3 \end{bmatrix}, \hat{\mathbf{d}}_{112} = \begin{bmatrix} 1/6 \\ 1/6 \\ 2/3 \\ \sqrt{2}/3 \\ \sqrt{2}/3 \\ \sqrt{2}/6 \end{bmatrix} \tag{3-68}
$$

よって，見かけの縦弾性率を E，見かけの横弾性率を G，見かけのポアソン比を ν とすると，式(3-62)より各方向へヤング率は式(3-69)のようになる．

$$
E(\mathbf{d}_{100}) = \left[\hat{\mathbf{d}}_{100}{}^{\mathrm{T}} \hat{\boldsymbol{S}} \hat{\mathbf{d}}_{100}\right]^{-1} = \frac{1}{\hat{S}_1} = E \tag{3-69a}
$$

$$
E(\mathbf{d}_{110}) = \left[\hat{\mathbf{d}}_{110}{}^{\mathrm{T}} \hat{\boldsymbol{S}} \hat{\mathbf{d}}_{110}\right]^{-1} = \left[\frac{1}{2}\hat{S}_1 + \frac{1}{2}\hat{S}_2 + \frac{1}{2}\hat{S}_4\right]^{-1} = \left[\frac{1}{2E} - \frac{\nu}{2E} + \frac{1}{4G}\right]^{-1} \tag{3-69b}
$$

$$
E(\mathbf{d}_{111}) = \left[\hat{\mathbf{d}}_{111}{}^{\mathrm{T}} \hat{\boldsymbol{S}} \hat{\mathbf{d}}_{111}\right]^{-1} = \left[\frac{1}{3}\hat{S}_1 + \frac{2}{3}\hat{S}_2 + \frac{2}{3}\hat{S}_4\right]^{-1} = \left[\frac{1}{3E} - \frac{2\nu}{3E} + \frac{1}{3G}\right]^{-1} \tag{3-69c}
$$

$$
E(\mathbf{d}_{112}) = \left[\hat{\mathbf{d}}_{112}{}^{\mathrm{T}} \hat{\boldsymbol{S}} \hat{\mathbf{d}}_{112}\right]^{-1} = \left[\frac{1}{2}\hat{S}_1 + \frac{1}{2}\hat{S}_2 + \frac{1}{2}\hat{S}_4\right]^{-1} = \left[\frac{1}{2E} - \frac{\nu}{2E} + \frac{1}{4G}\right]^{-1} \tag{3-69d}
$$

式(3-69)より見かけの縦弾性率を E，見かけの横弾性率を G，見かけのポアソン比を ν は式(3-70)のような関係性を持つ．

$$
\hat{S}_1 = \frac{1}{E} = \frac{1}{E(\mathrm{d}_{100})} \tag{3-70a}
$$

$$\hat{S}_2 + \hat{S}_4 = -\frac{\nu}{E} + \frac{1}{2G} = \frac{1}{2E(\mathbf{d}_{110})} - \frac{1}{2E(\mathbf{d}_{100})} = \frac{3}{2E(\mathbf{d}_{111})} - \frac{1}{2E(\mathbf{d}_{100})} \tag{3-70b}$$

一方で，代表体積要素が立方晶系の対称性を持つとすると，式(3-62)と式(3-66)より任意の単位ベクトル **d** のヤング率は式(3-71)となる．

$$\begin{aligned}\frac{1}{E(\mathbf{d})} &= \hat{\mathbf{d}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{S}}\hat{\mathbf{d}} = \left(\mathrm{d_x^4} + \mathrm{d_y^4} + \mathrm{d_z^4}\right)\hat{S}_1 + 2\left(\mathrm{d_x^2d_y^2} + \mathrm{d_y^2d_z^2} + \mathrm{d_z^2d_x^2}\right)\left(\hat{S}_2 + \hat{S}_4\right) \\ &= \left(\mathrm{d_x^4} + \mathrm{d_y^4} + \mathrm{d_z^4}\right)\frac{1}{E} + 2\left(\mathrm{d_x^2d_y^2} + \mathrm{d_y^2d_z^2} + \mathrm{d_z^2d_x^2}\right)\left(-\frac{\nu}{E} + \frac{1}{2G}\right)\end{aligned} \tag{3-71}$$

よって，ヤング率の異方性を求めるとき，式(3-70)に示したように<100>方向のヤング率とその他一方向のヤング率がわかれば式(3-71)よりその他すべての方向のヤング率も自ずと計算できる．

なお，**d** が単位ベクトルであるため，式(3-71)は Zener 比を用いて式(3-72)のように式変形することができる．

$$\begin{aligned}\frac{1}{E(\mathbf{d})} &= \left(\mathrm{d_x^2} + \mathrm{d_y^2} + \mathrm{d_z^2}\right)^2\frac{1}{E} + 2\left(\mathrm{d_x^2d_y^2} + \mathrm{d_y^2d_z^2} + \mathrm{d_z^2d_x^2}\right)\left(-\frac{1+\nu}{E} + \frac{1}{2G}\right) \\ &= \frac{1}{E} + \frac{2}{E}\left(\mathrm{d_x^2d_y^2} + \mathrm{d_y^2d_z^2} + \mathrm{d_z^2d_x^2}\right)(1+\nu)\left(\frac{1}{A_Z} - 1\right)\end{aligned} \tag{3-72}$$

式(3-49)の等方性条件を満たすとき $A_Z = 1$ より，右辺第 2 項は 0 となり，全ての方向に E のヤング率をもつ．また，右辺第 2 項は $\mathrm{d_x}, \mathrm{d_y}, \mathrm{d_z}$ の方位のみによる依存する因子と代表体積要素の見かけのポアソン比，Zener 比による物性値に依存する因子に分けることができる．方位の因子 $\mathrm{d_x^2d_y^2} + \mathrm{d_y^2d_z^2} + \mathrm{d_z^2d_x^2}$ は，<111>方向に最大値，<100>方向に最小値をとり，ポアソン比が $\nu > -1$，Zener 比が $A_Z > 1$ の場合，ヤング率は<111>方向に最大値，<100>方向に最小値をとることを意味する．逆に Zener 比が $A_Z < 1$ の場合，ヤング率は<100>方向に最大値，<111>方向に最小値をとることを意味する．

これらの式を用いてヤング率 $E(\mathbf{d})$，体積弾性率 $K(\mathbf{d})$，ポアソン比 $\nu(\mathbf{d},\mathbf{n})$，せん断弾性率 $G(\mathbf{d},\mathbf{n})$を任意の単位ベクトル **d** について計算し，**d** の向きのそれぞれの大きさを中心からの距離として，異方性曲面をプロットした．ただし，ポアソン比およびせん断弾性率はベクトル **d** に対して 2 次元の成分を持つので，ここでは，ベクトル **d** に対して 2 次元成分の最大値，最小値，平均値をもってポアソン比およびせん断弾性率の評価値とした．

3.3. 結果と考察

3.3.1. FCC およびダイヤモンド構造の圧縮

3.3.1.1. <100>方向への圧縮変形

FCC メタマテリアルおよびダイヤモンド構造メタマテリアルを[100]方向に圧縮したときの変形の様子を Fig. 3-9 に示す．Fig. 3-1 の初期状態から[100]方向に圧縮ひずみを加え，ひずみが 1.8%, 3.6%, 5.4%のときの変形の様子を示す．

FCC メタマテリアルの変形では，(100)面上の梁に歪みは発生しなかったが，他の方向の梁には梁全体にひずみが発生した．このひずみは球との結合部近傍で大きくなった．Fig. 3-9a1 に示すひずみ 1.8%の変形初期では，梁の伸縮方向へのひずみで変形した．単位格子の境界面上の応力分布で，(100)面上にない変形した梁の球との結合部付近で[100]方向に近い方の曲面でより大きな応力が発生した．これは，<011>方向の梁に軸方向に対して 45°の方向に荷重がかかることによりせん断的な応力が発生していると考えられる．さらに，球の内部では[100]方向の球と梁との結合部間に応力が発生した．この変形が Fig. 3-9a2 でひずみ 3.6%となると，<011>方向の梁は座屈し S 字に変形した．Fig. 3-9a3 でひずみ 5.4%へと進むと，梁形状がより大きく曲がり Mises 応力の最大値は 2 倍以上に大きく跳ね上がった．これは梁の座屈後，梁の曲げ変形が主な変形モードとなったと示唆される．(100)面内方向の梁や球内部の応力分布が変形を通して大きく変化しなかったことから，球に回転が生じなかったと示唆される．

一方で，ダイヤモンド構造メタマテリアルの変形では，Fig. 3-9b1 に示すひずみ 1.8%の変形初期では，全ての梁が荷重軸方向に対して同じ 55°の傾斜を持つにもかかわらず，全ての梁が同じ変形をしなかった．ねじれ変形した梁やあまり変形しなかった梁が見られた．このように梁によって変形機構が異なったのは球に回転が生じたためと考えられる．Y_0 面の境界面の面心位置にある球は Z_L 面の境界面の面心位置にある球よりも大きく変位した．圧縮変形が進み，Fig. 3-9b2 でひずみ 3.6%となると，梁の曲げ変形が見られた．ここで，各梁に座屈が生じた．さらに変形が進み，Fig. 3-9b3 でひずみ 5.4%となると曲げ変形がより大きくなった．ダイヤモンド構造メタマテリアルでは FCC メタマテリアルと異なり Mises 応力が急峻に増加することはなかった．このことは，球が回転することによって局所的な応力が上がることを防いだと考えられる．

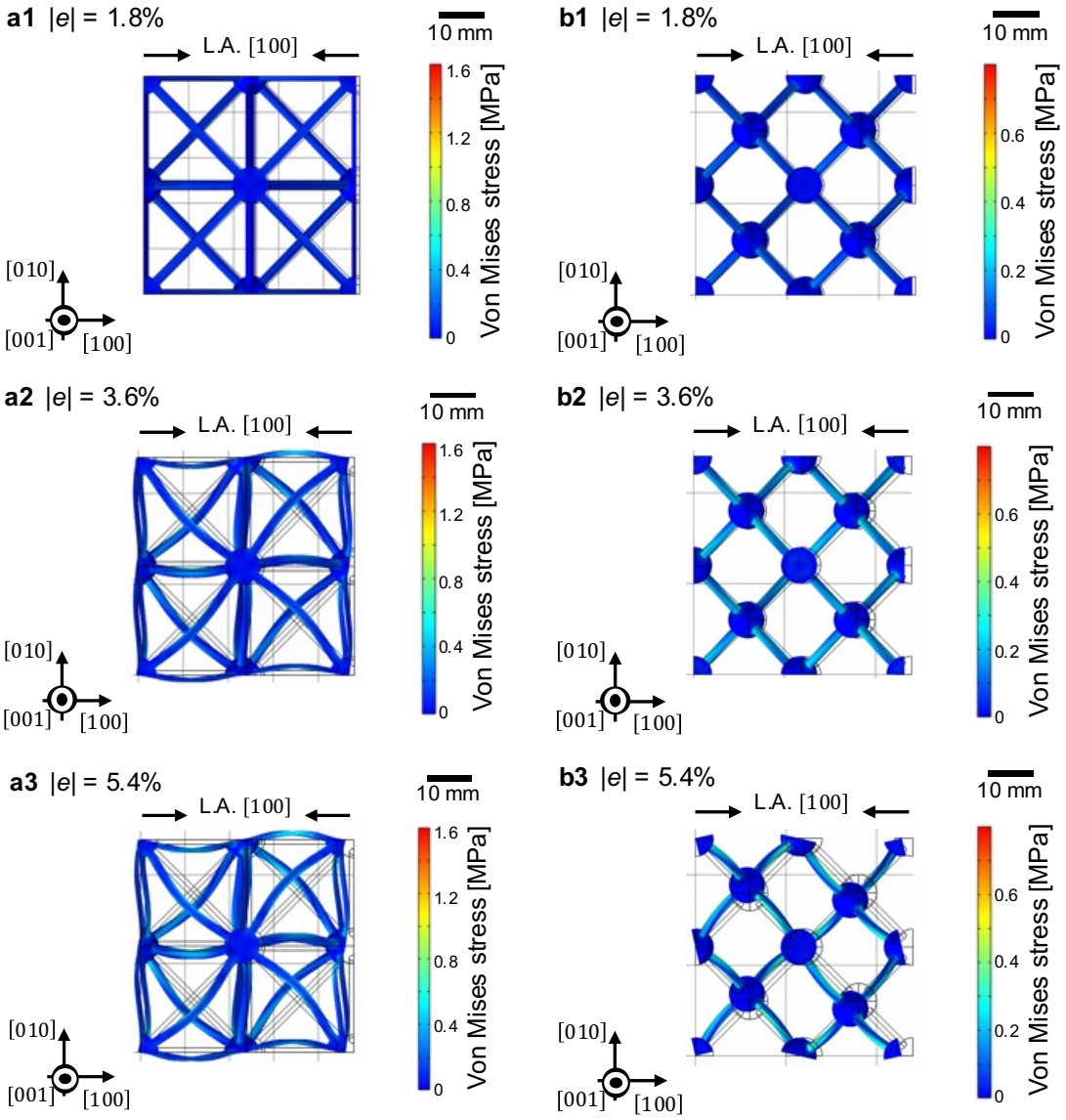


Fig. 3-9. Result of FEM simulation compressive deformation with 1.8%, 3.6%, 5.4% strain applied in [100] direction. (a) FCC metamaterial and (b) diamond structure metamaterial.

3.3.1.2. <110>方向への圧縮変形

FCC メタマテリアルおよびダイヤモンド構造メタマテリアルを$[\bar{1}10]$方向に圧縮したときの変形の様子を Fig. 3-10 に示す．Fig. 3-1 の初期状態から$[\bar{1}10]$方向に圧縮ひずみを加え，ひずみが 1.8%, 3.6%, 5.4%のときの変形の様子を示す．

FCC メタマテリアルの変形では，荷重軸方向と同じ$[\bar{1}10]$方向に梁があり，単位格子構造の端から端にわたってこの梁が連なっている．Fig. 3-10a1 に示すひずみ 1.8%の変形初期では，荷重軸と同じ方向の梁に応力が発生した．このひずみは梁の内部では一様な応力分布となったが，梁と球との結合部の曲率の大きい部分で応力

が集中した．また，他の梁ではほとんど応力が生じなかった．変形が進み，Fig. 3-10a2 でひずみ 3.6%となると，[$\bar{1}$10]方向の梁は座屈し S 字に変形した．座屈によって S 字に変形したのに伴い，球が回転し，隣り合う球同士の回転の向きに応じて[$\bar{1}$10]方向以外の梁がわずかにたわんだ．このとき，Mises 応力は 2.5 倍ほどに増加した．Fig. 3-10a3 でひずみ 5.4%へと進むと，Fig. 3-10a2 と同じ変形機構でより大きく曲がった．この曲げ変形に伴い，球の回転も大きくなった．

一方で，ダイヤモンド構造メタマテリアルでは，荷重軸の[$\bar{1}$10]方向と垂直な方向の梁と荷重軸と 35°の傾斜をもつ梁がある．荷重軸に垂直な梁は変形初期ではあまり変形しないと予想されたが，この予想に反して荷重軸に垂直な梁にも応力が発生した．Fig. 3-10b1 に示すひずみ 1.8%の変形初期では，荷重軸に対して傾斜 35°の梁は曲げ変形を主な変形モードとし，荷重軸に対して垂直な梁ではねじれが生じた．Fig. 3-10b2 でひずみ 3.6%，Fig. 3-10a3 でひずみ 5.4%とひずみがだんだん大きくなると，荷重軸に対して傾斜 35°の梁にもねじれ変形が見られ，荷重軸に垂直な梁に曲げ変形が見られた．これらの梁の変形から，ひずみが大きくなると球の回転が大きくなったことが示唆される．

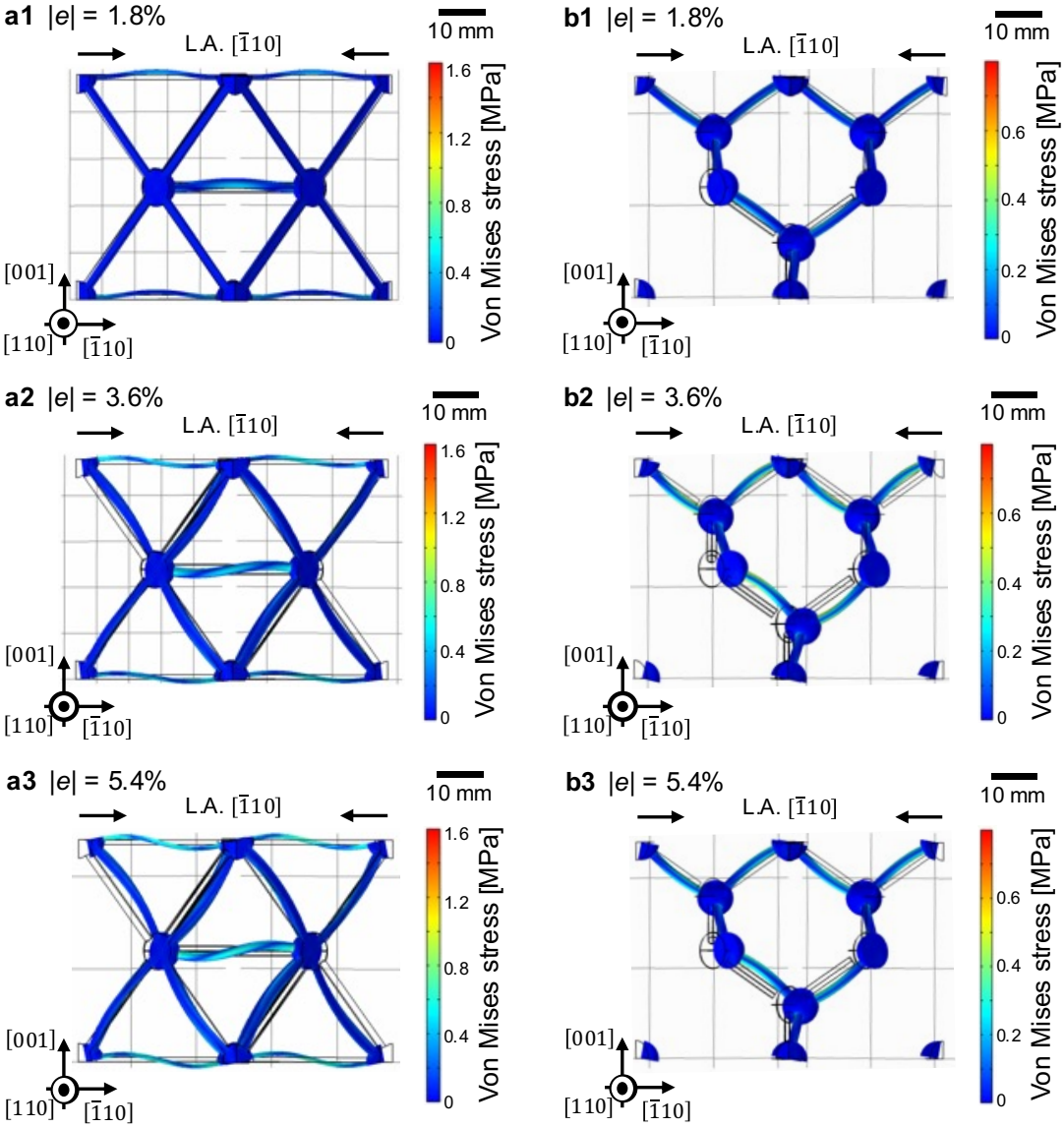


Fig. 3-10. Result of FEM simulation compressive deformation with 1.8%, 3.6%, 5.4% strain applied in [$\bar{1}$10] direction. (a) FCC metamaterial and (b) diamond structure metamaterial.

3.3.1.3. <111>方向への圧縮変形

FCC メタマテリアルおよびダイヤモンド構造メタマテリアルを[111]方向に圧縮したときの変形の様子を Fig. 3-11 に示す．Fig. 3-1 の初期状態から[111]方向に圧縮ひずみを加え，ひずみが 1.8%, 3.6%, 5.4%のときの変形の様子を示す．

FCC メタマテリアルの変形では，荷重軸の[111]方向に対して垂直な方向の梁と荷重軸に対して$\cos^{-1}\sqrt{2/3}$ (≒35.3°)の傾斜を持つ梁が存在する．Fig. 3-11a1 に示すひずみ 1.8%の変形初期では，荷重軸と垂直な梁には応力変化はほとんど見られず，

荷重軸と傾斜をもった梁に応力が生じた．球の回転が見られないことから，このときの荷重軸に対して傾斜を持った梁は，梁が縮む変形を主な変形モードとしていることが示唆される．変形が進み，Fig. 3-11a2 でひずみ 3.6%となると，荷重軸に対して傾斜を持つ梁の応力が梁表面の荷重軸方向に近い側の面により大きく集中し，その反対側では応力があまり変わらなかった．この応力変化が座屈の兆候であると考えられる．さらに変形が進み Fig. 3-11a3 でひずみ 5.4%へと進むと，荷重軸に対して傾斜を持つ梁がわずかに S 字に座屈した．座屈したのに応じて，球が回転し荷重軸に垂直な梁にたわみ変形が生じた．

一方で，ダイヤモンド構造メタマテリアルでは，荷重軸の[111]方向と同じ方向の梁と荷重軸に対して$\cos^{-1}(1/3)$ (≒70.5°)の傾斜を持つ梁がある．Fig. 3-11b1 に示すひずみ 1.8%の変形初期では，荷重軸と同じ方向の梁で一様な応力が発生した．荷重軸に対して傾斜を持つ梁では，梁の軸方向よりも荷重軸に対して浅い角度で応力が集中した．変形が進行し，Fig. 3-11b2 でひずみ 3.6%となると，荷重軸に対して傾斜を持つ梁は座屈した．このとき，応力は球と梁との結合部付近に集中した．さらに Fig. 3-11a3 でひずみ 5.4%となると，座屈した梁が大きくたわみ球が回転した．

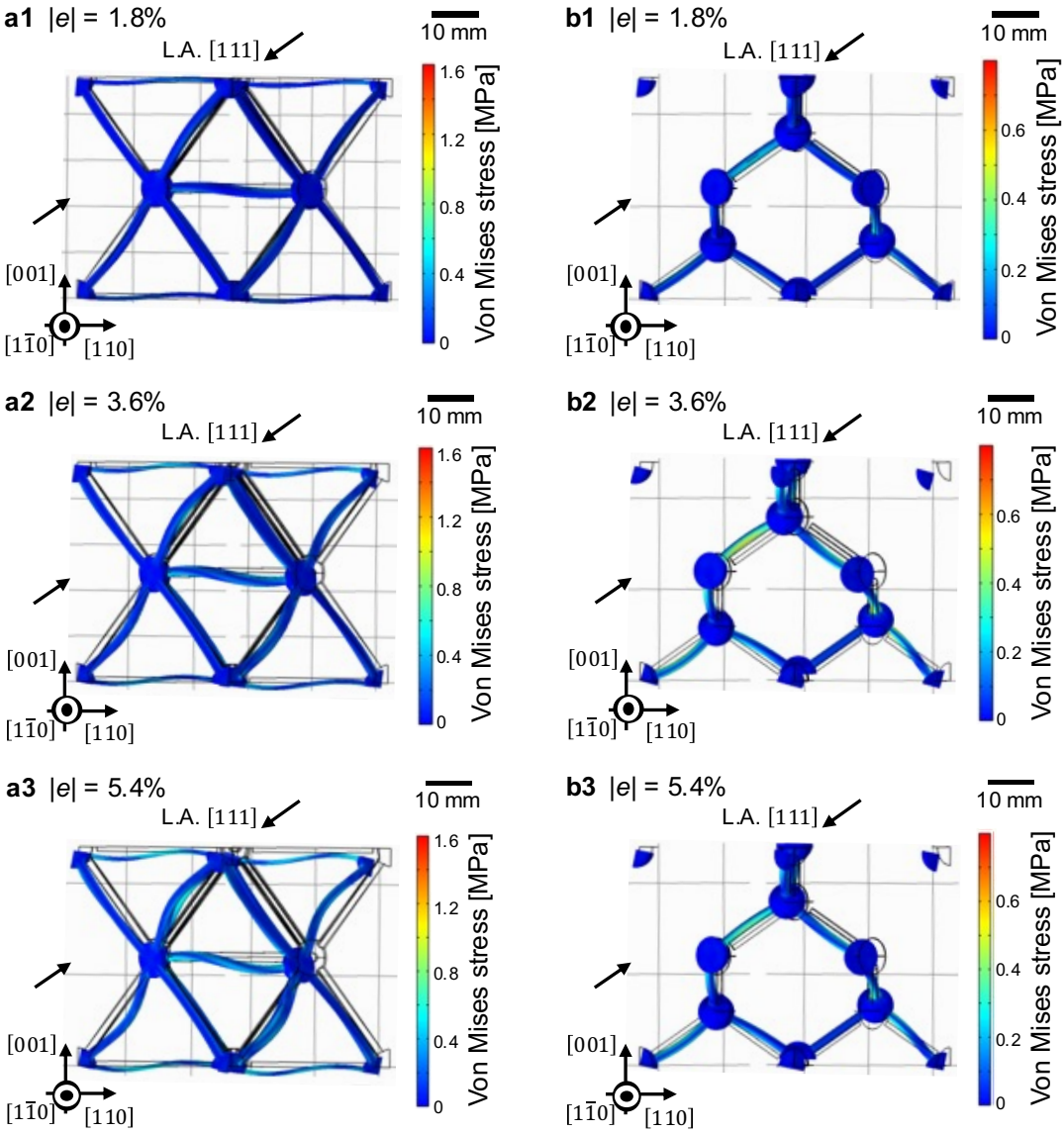


Fig. 3-11. Result of FEM simulation compressive deformation with 1.8%, 3.6%, 5.4% strain applied in [111] direction viewed from [1$\bar{1}$0] direction. (a) FCC metamaterial and (b) diamond structure metamaterial.

3.3.1.4. <112>方向への圧縮変形

FCC メタマテリアルおよびダイヤモンド構造メタマテリアルを[11$\bar{2}$]方向に圧縮したときの変形の様子を Fig. 3-12 に示す．Fig. 3-1 の初期状態から[11$\bar{2}$]方向に圧縮ひずみを加え，ひずみが 1.8%, 3.6%, 5.4%のときの変形の様子を示す．

FCC メタマテリアルの変形では，荷重軸方向の[11$\bar{2}$]方向は(111)面の三角形の高さ方向である．梁はこの荷重軸との傾斜によって 4 種類に分類できる．(111)面内の梁に荷重軸に対して傾斜 30°の梁と荷重軸に対して垂直な梁があり，(111)面以外の

梁に荷重軸に対して$\cos^{-1}\sqrt{1/3}$ (≒70.5°)の傾斜を持つ梁と荷重軸に対して$\cos^{-1}(\sqrt{3}/6)$ (≒73.2°)の梁がある．Fig. 3-12a1 に示すひずみ 1.8%の変形初期では，(111)面内の傾斜 30°の梁に応力が発生し梁内部に一様に応力が発生した．荷重軸に対して垂直な梁と荷重軸に対して$\cos^{-1}(\sqrt{3}/6)$ (≒73.2°)の梁，すなわち荷重軸に対して$\sin^{-1}(2\sqrt{2}/3)$ (≒70.5°)の傾斜を持つ$(11\bar{1})$面内の梁は応力がほとんど生じなかった．残る荷重軸に対して$\cos^{-1}\sqrt{1/3}$ (≒70.5°)の傾斜を持つ梁は荷重軸に対して30°の傾斜を持つ梁の半分程度の応力が発生した．変形が進み，Fig. 3-11a2 でひずみ 3.6%となると，荷重軸に対して 30°の傾斜を持つ梁だけが座屈した．この座屈に伴って他の梁にも応力が発生したのが見られた．さらに変形が進み Fig. 3-12a3 でひずみ 5.4%へと進むと，荷重軸に対して傾斜を持つ梁がわずかにS字に座屈した．

一方で，ダイヤモンド構造メタマテリアルでは，荷重軸の$[11\bar{2}]$方向に対して，直交する[111]方向の梁と傾斜$\cos^{-1}(2\sqrt{2}/3)$ (≒19.5°)を持つ$[11\bar{1}]$方向の梁，傾斜$\cos^{-1}(\sqrt{2}/3)$ (≒61.9°)を持つ$[\bar{1}11]$方向と$[1\bar{1}1]$方向の梁がある．Fig. 3-12b1 に示すひずみ 1.8%の変形初期では，$[\bar{1}11]$方向と$[1\bar{1}1]$方向の梁が最初にたわみ，$[11\bar{1}]$方向の梁に大きく応力が生じた．Fig. 3-12b2 でひずみ 3.6%，Fig. 3-12a3 でひずみ 5.4%とひずみが大きくなると，$[\bar{1}11]$方向と$[1\bar{1}1]$方向の梁のたわみがますます大きくなり，[111]方向と$[11\bar{1}]$方向の梁も球の回転に合わせてたわんだ．

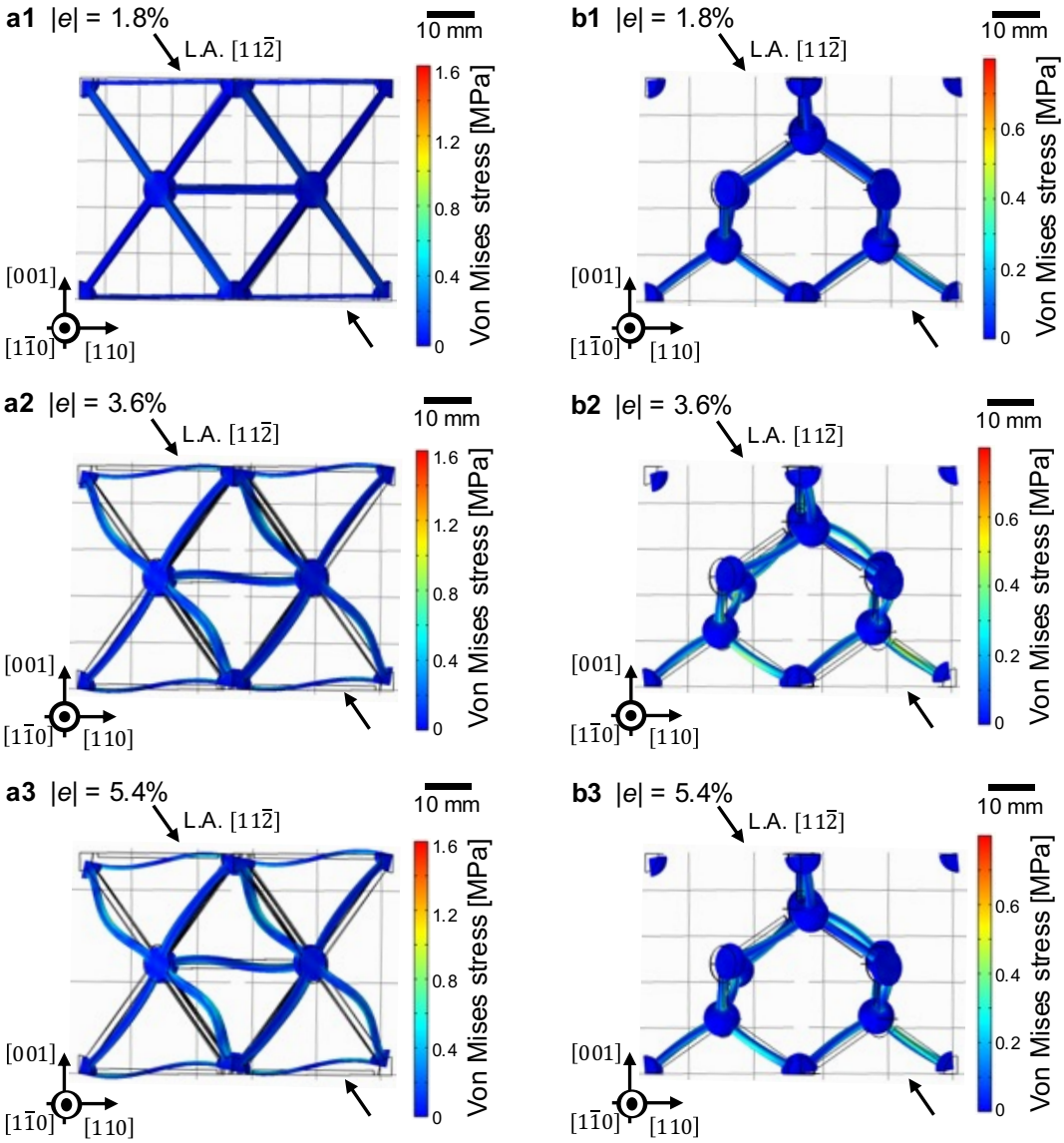


Fig. 3-12. Result of FEM simulation compressive deformation with 1.8%, 3.6%, 5.4% strain applied in [11$\bar{2}$] directionviewed viewed from [1$\bar{1}$0] direction. (a) FCC metamaterial and (b) diamond structure metamaterial.

3.3.1.5. 梁の配向性とメタマテリアルの異方性

FEM シミュレーションにより，<100>, <110>, <111>, <112>方向に FCC メタマテリアルを圧縮したときの応力ひずみ曲線を Fig. 3-13a に，ダイヤモンド構造メタマテリアルを圧縮したときの応力ひずみ曲線を Fig. 3-13b に示す．どの方向への圧縮でも，変形初期では大きな傾きで増加し，ひずみ 4%近傍で傾きが小さくなった．この傾きが変わるところで，梁が座屈し，梁の変形モードが軸方向の圧縮変形から曲げ変形へと遷移したと考えられる．

FCC メタマテリアルでもダイヤモンド構造メタマテリアルでも<111>方向に最も高い剛性を示し，<100>方向に最も低い剛性を示した．<110>方向と<112>方向のヤング率は同等となった．式(3-69b)と式(3-69d)に示したようにこれらの方向のヤング率は立方晶系の対称性を持つ物体で<110>方向と<112>方向のヤング率は等しくなる．これらの見かけのヤング率の異方性の理論式から<110>方向と<112>方向とで見かけのヤング率は等しくなり，これの傾向は FEM シミュレーションモデルで再現できた．また，弾性コンプライアンス係数テンソルの成分の関係式は，FCC メタマテリアルおよびダイヤモンド構造メタマテリアルでそれぞれ式(3-74)および式(3-75)のような結果となった．

$$\hat{S}_1 = 0.60\ [\mathrm{MPa}^{-1}] \tag{3-74a}$$

$$\hat{S}_2 + \hat{S}_4 = 0.75\ [\mathrm{MPa}^{-1}] \tag{3-74b}$$

$$\hat{S}_1 = 1.66\ [\mathrm{MPa}^{-1}] \tag{3-75a}$$

$$\hat{S}_2 + \hat{S}_4 = 3.05\ [\mathrm{MPa}^{-1}] \tag{3-75b}$$

これらの成分の関係式に基づき **d** を全方位について計算し，その値を原点からの距離としてプロットしたヤング率の異方性曲面を Fig. 3-14 に示す．FCC の純物質は Zener 比が $A_Z > 1$ であり[14]，<111>方向に最大のヤング率と<100>方向に最小のヤング率をもつ．FCC メタマテリアルもダイヤモンド構造メタマテリアルもこの純物質の弾性異方性と同様に<111>方向に最大のヤング率と<100>方向に最小のヤング率を示した．これは立方対称性を持つ結晶性材料の多くが示す弾性異方性と類似している．

また，どちらの構造においても応力-ひずみ曲線は一定の傾きで応力が増加したのち，降伏点となり座屈し，応力-ひずみ曲線の傾きは小さくなった．傾きが変化する前後で変形の様子を観察すると，傾きが一定で急な初期段階では梁が圧縮する伸縮変形モードが認められた．傾きが緩やかになった第二段階では梁が座屈し曲げ変形モードが認められた．

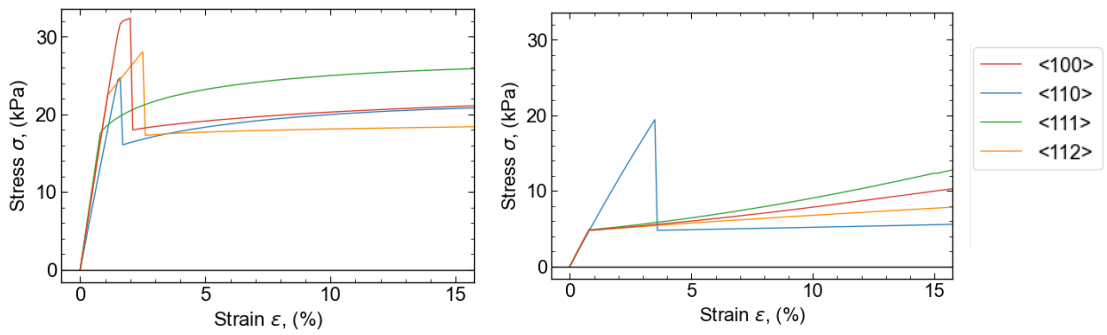
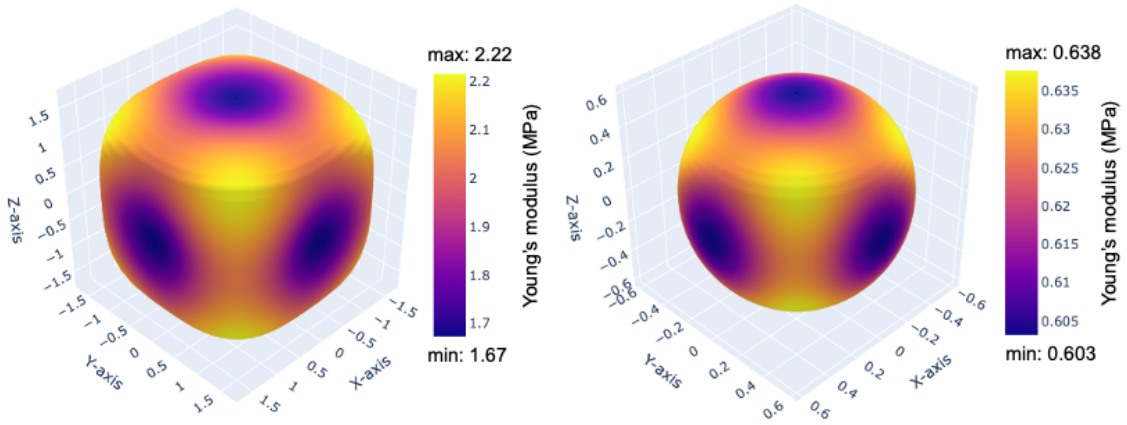


Fig. 3-13. Stress-Strain relationship of compressive deformation in each direction ([100], [$\bar{1}$10], [111], [11$\bar{2}$]). (a) FCC metamaterial and (b) diamond structure metamaterial.



(a) (b)

Fig. 3-14. Anisotropy surface of apparental Young's modulus. (a) FCC metamaterial and (b) diamond structure metamaterial.

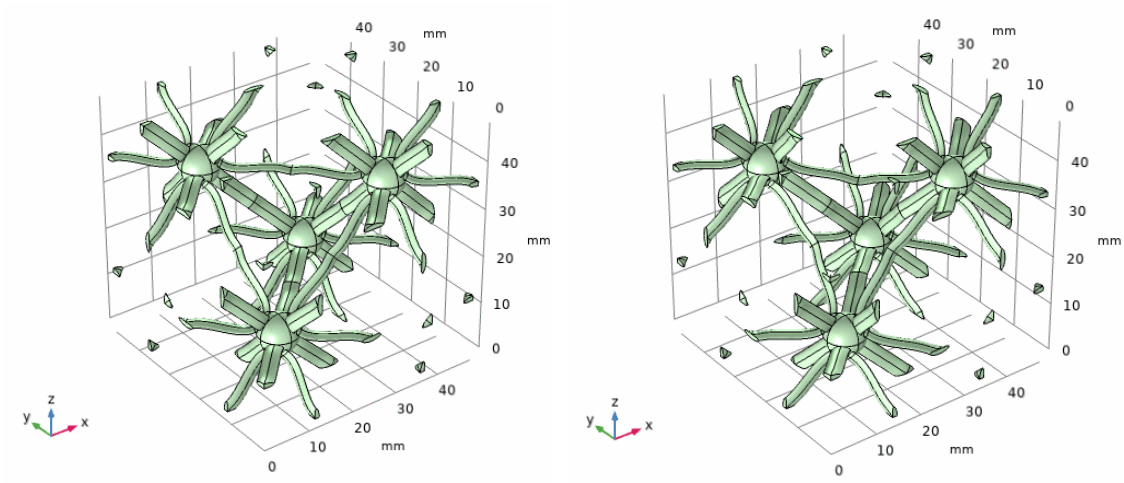
3.3.2. 多軸 PXCM の圧縮

FCC メタマテリアルとダイヤモンド構造メタマテリアルと同様に多軸 PXCM についても<100>, <110>, <111>, <112>方向に圧縮するシミュレーションを行った．ただし, 多軸 PXCM は梁がサインカーブ状に湾曲しているため単位格子構造を 1/4 周期分 x, y, z 方向にそれぞれ変位させた単位格子構造とした．

3.2.1.項で述べたように大変形シミュレーションを行うためにはメッシュの設定に注意を払う必要がある. メッシュが大きすぎると正確に形状を再現したシミュレーションができず, メッシュが小さすぎるとメッシュのノード同士の位置関係が逆転しやすくなる．本 FEM シミュレーションで Table 2-3 に示した設計パラメータを用いると，単位格子の格子定数に対して球の半径が大きく梁の長さが短い．その結果，多軸 PXCM の大変形に伴う梁のたわみが大きくなり，メッシュの設定が困難となった．本 FEM シミュレーションでは，メッシュが設定しやすく十分に大変形シミュレーションが可能な設計パラメータとして Table 3-1 に示したパラメータセットを用いて多軸 PXCM の FEM モデルを作成した．<111>方向に bistable になるよう Table 3-1 に示したパラメータセット A で設計した多軸 PXCM として Fig. 3-16a に示すモデルを用い，<111>方向に monostable になるよう Table 3-1 に示したパラメータセット B で設計した多軸 PXCM として Fig. 3-16b に示すモデルを用いた．

Table 3-1. Design parameter sets of atom-mimetic cube-diagonally multi-axed phase-transforming cellular material.

Design parameter	Parameter set A	Parameter set B
R/t	4	4
a/R	12	12
ϕ	45°	45°
k_r	7/8	1/2



(a) (b)

Fig. 3-16. Initial state of finite element method model of unit cell structure of multi-axis PXCM. (a) bistable AM-PXCM with design parameters of parametaer set A and (b) monostable AM-PXCM with design parameters of parametaer set B.

3.3.2.1. <100>方向への圧縮変形

多軸 PXCM を[100]方向に圧縮したときの変形の様子を Fig. 3-17 に示す．Fig. 3-16 の初期状態から[100]方向に圧縮ひずみを加え，ひずみが 5%, 15%, 25%のときの変形の様子を示す．多軸 PXCM は圧縮方向の[100]方向に対して直交する(100)面上の梁と，それ以外の変形方向に対して 45°の傾斜を持つ梁の 2 種類がある．

多軸 PXCM の[100]方向に圧縮変形したとき，変形初期のひずみ 5%において，FCC メタマテリアルの[100]方向への圧縮変形と同様に(100)面上の梁に応力は発生しなかった．他の方向の梁には，FCC メタマテリアル同様に球同士が近づく方向に変形が生じた．FCC メタマテリアルでは梁の軸方向に圧縮変形が生じたとき梁全体に応力が生じたが，多軸 PXCM では梁の曲率に応じて応力集中が生じた．Fig. 3-

17a1 に示すパラメータセット A の多軸 PXCM では，梁が大きく曲がった部分の内側に大きな応力が集中した．一方で Fig. 3-17b1 に示すパラメータセット B の多軸 PXCM では，梁と球との結合部と梁の 2 つのサインカーブが結合する部分に応力が集中した．第 2 章で述べたように，パラメータセット A と B とでは梁の軸方向の荷重がかかった際にたわむ向きが異なる．梁の 2 つのサインカーブが結合する部分でパラメータセット A はくの字の谷の方へたわみ，パラメータセット B はくの字の山の方へたわむ. このたわむ向きによって梁への応力集中が異なると考えられる．また，パラメータセット A のサインカーブはパラメータセット B のサインカーブよりも曲率が大きく, 曲率が大きい構造は応力が集中しやすいことを受けて，パラメータセット A は応力集中が大きいと考えられる．

Fig. 3-17a2 に示すひずみ 15%，Fig. 3-17a3 に示すひずみ 25%と変形が進むと，パラメータセット A は梁のたわみが大きくなり，応力の集中は緩和された．変形初期では，サインカーブの曲がった内側に応力が集中したが，たわみが大きくなると, サインカーブの設計の曲がり方に合わせてたわむことで応力集中が緩和されたと考えられる．一方で，パラメータセット B では，Fig. 3-17b2 に示すひずみ 15%，Fig. 3-17b3 に示すひずみ 25%において，梁の形状が大きく曲がったが，応力分布の様子は変化しなかった. これは梁がたわむ向きがサインカーブの初期の曲がり方に逆らう方向に曲がるため，結合部に応力が集中したと考えられる．

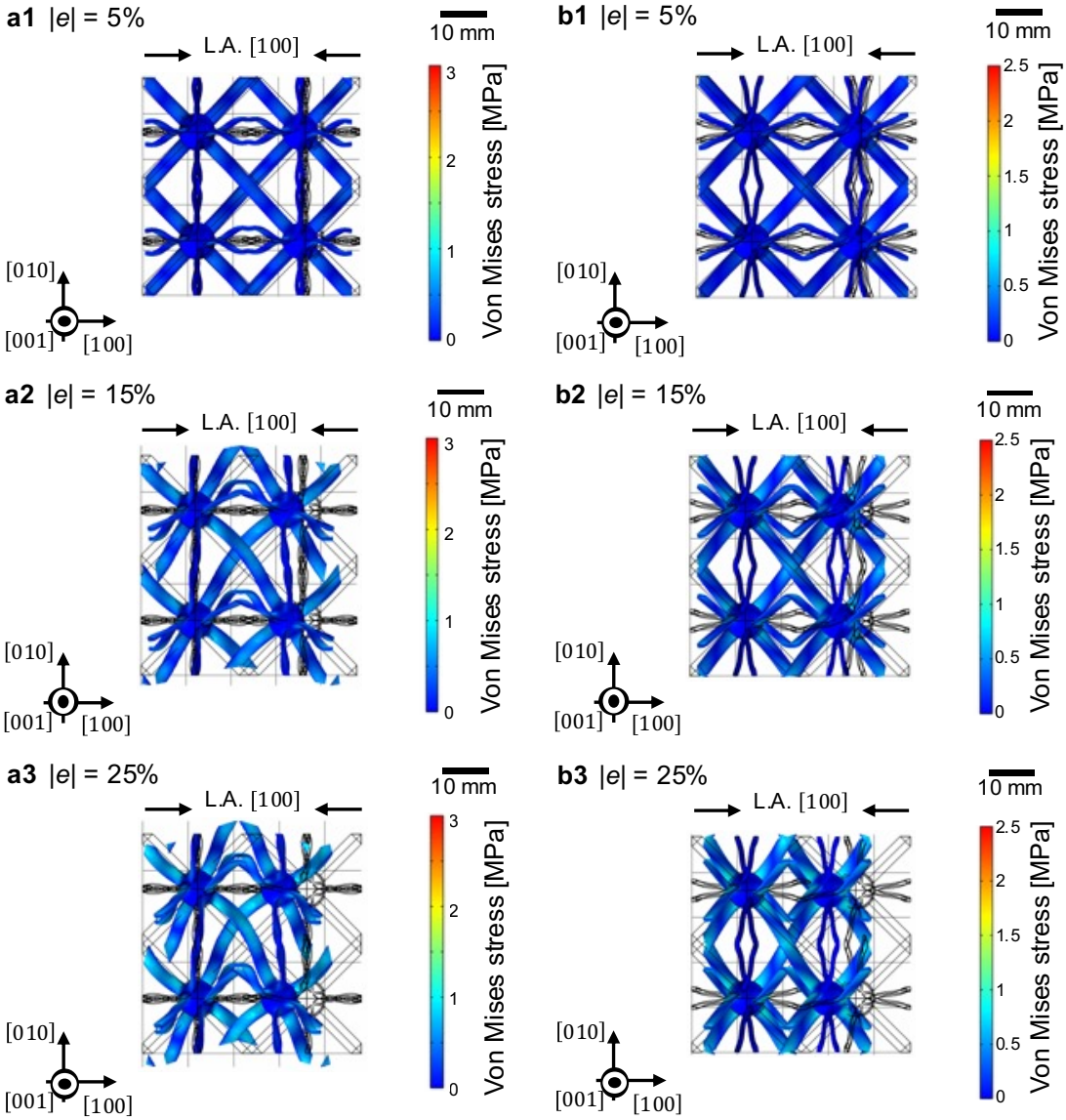


Fig. 3-17. Result of FEM simulation compressive deformation with 5%, 15%, 25% strain applied in [100] direction. (a) bistable AM-PXCM with design parameters of parametaer set A and (b) monostable AM-PXCM with design parameters of parametaer set B.

3.3.2.2. <110>方向への圧縮変形

多軸 PXCM を[$\bar{1}$10]方向に圧縮したときの変形の様子を Fig. 3-18 に示す．Fig. 3-16 の初期状態から[$\bar{1}$10]方向に圧縮ひずみを加え，ひずみが 5%, 15%, 25%のときの変形の様子を示す．多軸 PXCM は圧縮方向の[$\bar{1}$10]方向に対して，同じ方向の梁と直交する方向の梁とそれ以外の変形方向に対して 60°の傾斜を持つ梁の 3 種類がある．

[$\bar{1}$10]方向の圧縮ひずみでは，Fig. 3-18a に示すパラメータセット A の構造も Fig.

3-18b に示すパラメータセット B の構造も荷重軸と同じ[$\bar{1}$10]方向の梁が大きく変形した．荷重軸に対して直交する[110]方向の梁には応力が発生しなかった．荷重軸に対して傾斜 60°の梁には少し応力が発生した．これは[$\bar{1}$10]方向の梁が大きくたわむのに伴い，少し曲げ変形した．[$\bar{1}$10]方向の梁は，梁の軸方向に荷重がかかり[100]方向に圧縮変形させたときの梁の変形と同様にたわんだ．変形が進行し，Fig. 3-18a3 と Fig. 3-18b3 に示すようにひずみが 25%となるとパラメータセット A でもパラメータセット B でも球が回転し，[$\bar{1}$10]方向の梁は第 2 章で 2 次元の FEM シミュレーションで求めた Fig. 2-13a3 および Fig. 2-13b3 のような非対称的な形状に曲がった．これによって，多軸 PXCM が<111>方向に圧縮したところに準安定相が存在しており，<110>方向に圧縮したときも準安定相のときの梁形状に近づくように梁が変形したことが示唆された．

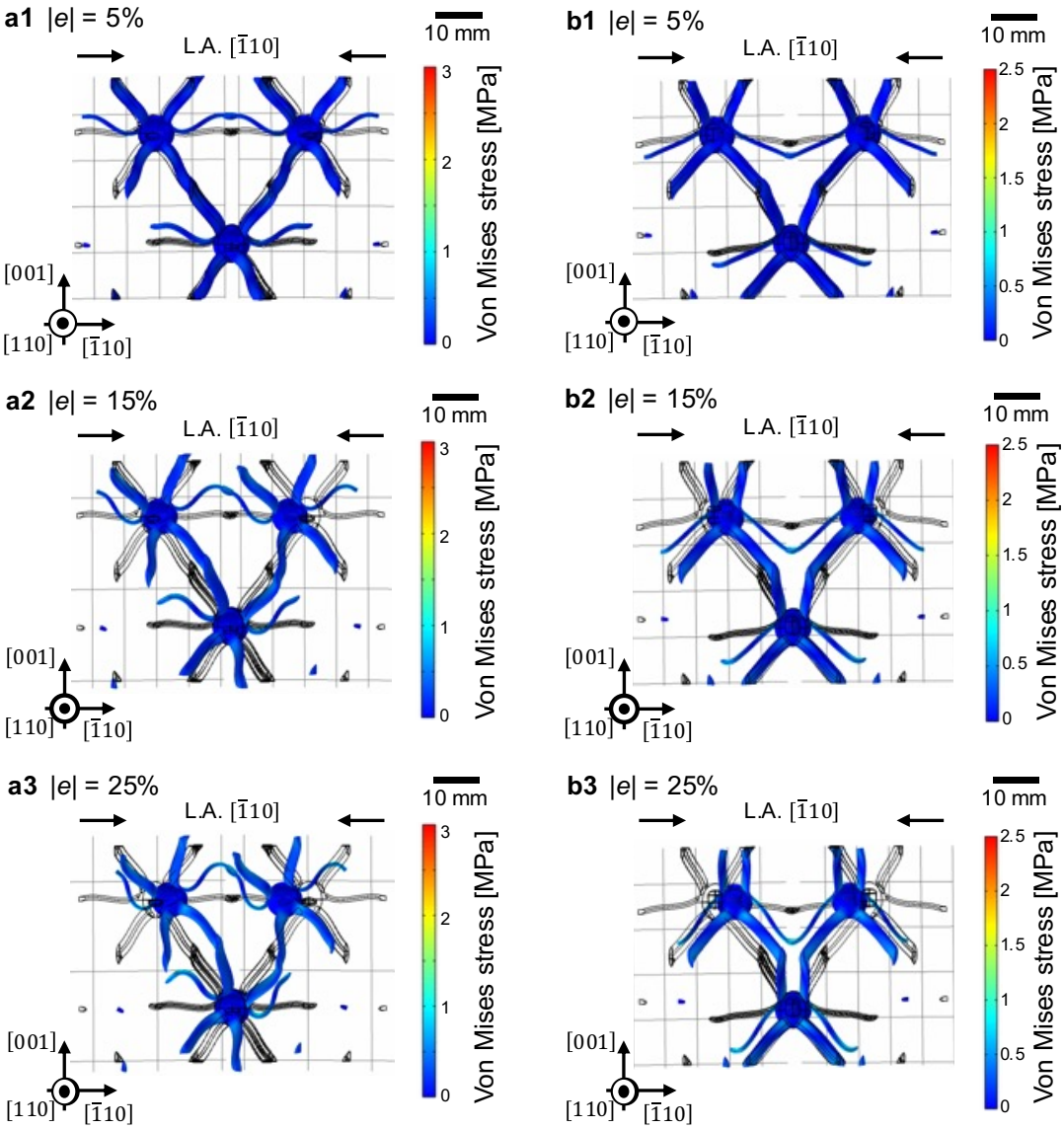


Fig. 3-18. Result of FEM simulation compressive deformation with 5%, 15%, 25% strain applied in [$\bar{1}$10] direction. (a) bistable AM-PXCM with design parameters of parametaer set A and (b) monostable AM-PXCM with design parameters of parametaer set B.

3.3.2.3. <111>方向への圧縮変形

多軸 PXCM を[111]方向に圧縮したときの変形の様子を Fig. 3-19 に示す．Fig. 3-16 の初期状態から[111]方向に圧縮ひずみを加え，ひずみが 5%, 15%, 25%のときの変形の様子を示す．多軸 PXCM は圧縮方向の[111]方向に対して直交する(111)面上の梁と，それ以外の変形方向に対して$\cos^{-1}\sqrt{2/3}$ (≒35.3°)の傾斜を持つ梁の 2 種類がある．

パラメータセット A の構造でもパラメータセット B の構造でも[111]方向に圧縮

すると，(111)面内の梁は大きく変形しなかった．荷重軸に対して$\cos^{-1}\sqrt{2/3}$ (≒35.3°)の傾斜を持つ梁の，Fig. 3-19a に示すパラメータセット A の構造の梁変形と Fig. 3-19b に示すパラメータセット B の構造の梁変形はそれぞれ第 2 章の 2 次元 FEM シミュレーションで求めた Fig. 2-13a および Fig. 2-13b の梁変形に非常に近いものであった．

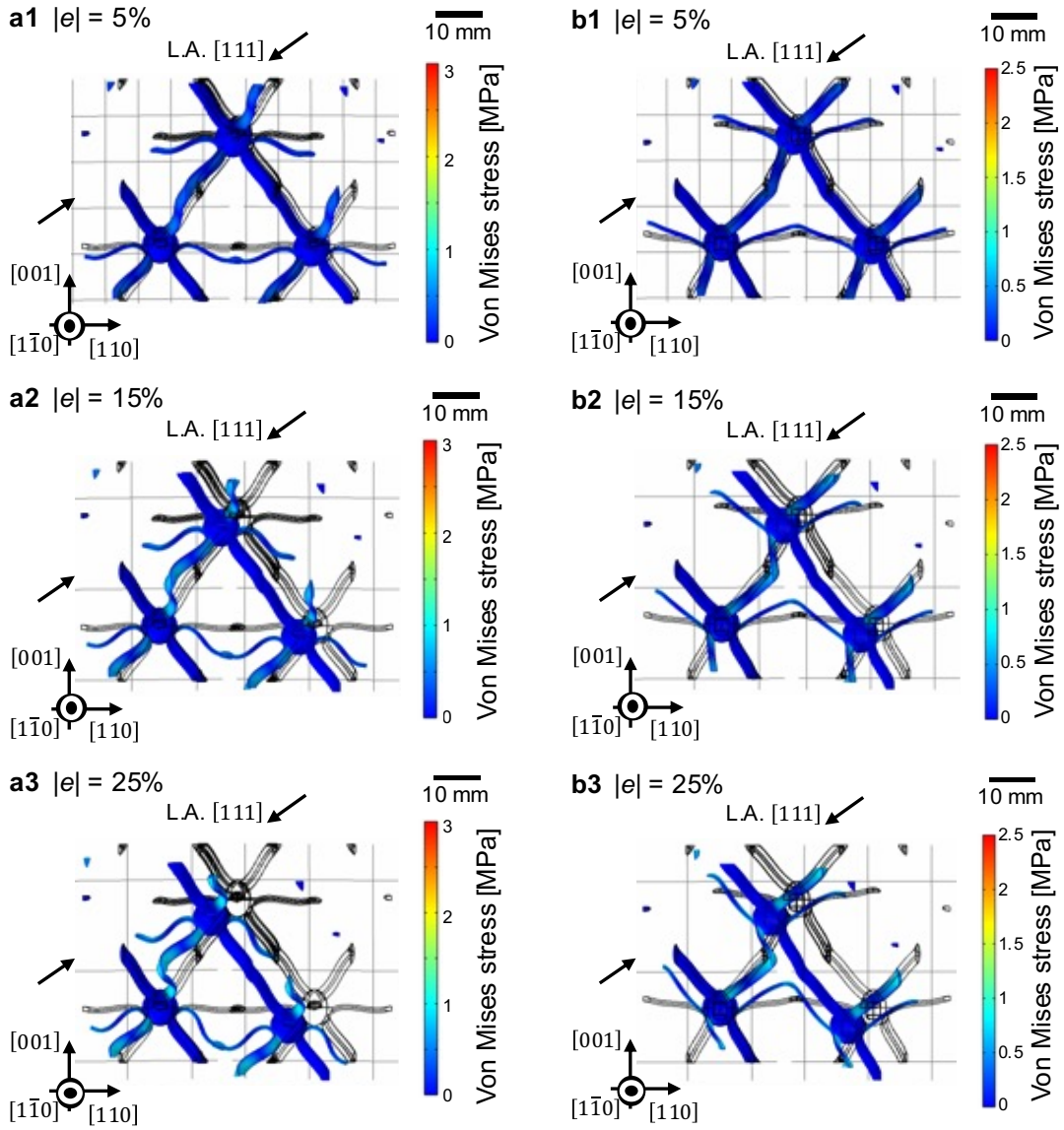


Fig. 3-19. Result of FEM simulation compressive deformation with 5%, 15%, 25% strain applied in [111] direction. (a) bistable AM-PXCM with design parameters of parametaer set A and (b) monostable AM-PXCM with design parameters of parametaer set B.

さらに，見かけのひずみを大きくし 50%, 75%, 100%としたときの様子を Fig. 3-20 に示す．なお，ひずみが 90%以上となると，(111)面の梁が隣り合う(111)面の梁

と接触するので実際には，見かけのひずみが 90%以上になることはない．これらの変形の様子は，第 2 章の 2 次元 FEM シミュレーションの結果にそれぞれ対応し，Fig. 3-20(a1)~(a3)がそれぞれ Fig. 2-13(a3)~(a5)と同じひずみ条件，Fig. 3-20(b1)~(b3)がそれぞれ Fig. 2-13(b3)~(b5)と同じひずみ条件となっている．25%と 50%のひずみまでは 2 次元のシミュレーションと 3 次元のシミュレーションとで同様の応力分布を再現したが，75%のひずみでは 3 次元のシミュレーションで応力集中がさらに顕著なものとなった．これは，3 次元のシミュレーションで用いた FEM モデルの梁の断面形状を楕円としたことによると考えられる．梁の断面形状によって異なる応力集中が生じると考えられる．応力は表面形状の曲率が大きい部分で生じやすいので，楕円断面では楕円の長径と短径の方向に生じやすく，長方形断面では長方形の頂点付近で応力が生じやすい．<111>方向に変形させたとき，楕円断面では短径方向に梁がたわみ，長方形断面では長方形の短い辺の方向に梁がたわむ．このとき，楕円断面では曲面の嶺のような部分に応力が集中しやすいのに対して，長方形断面では梁を横切る方向において応力は集中しにくい．このように 2 次元シミュレーションと 3 次元シミュレーションとの間に応力集中に差異が生じたと考えられる．なお，3 次元シミュレーションでこの差異を生じさせないためには，梁断面形状を変えるのではなく球の形状を変えることで応力集中を再現できる可能性がある．例えば球の代わりに切頂四面体を用いることで球の部分に曲面が存在しないようにして，長方形の断面との間の結合部分でメッシュの整合性を取りやすい上に，2 次元シミュレーションの応力集中を再現しやすい．しかし，構造の梁などの部材に角が多く存在することとなるので，<111>方向以外に圧縮変形した際に角に応力集中しやすくなるので，本シミュレーションよりも大きな局所応力が生じ破断しやすいメタマテリアルとなる．これらのことから，本研究で設計した楕円の梁断面形状を持つ多軸 PXCM は，破断しにくい上に FEM シミュレーションで再現しやすいと言える．

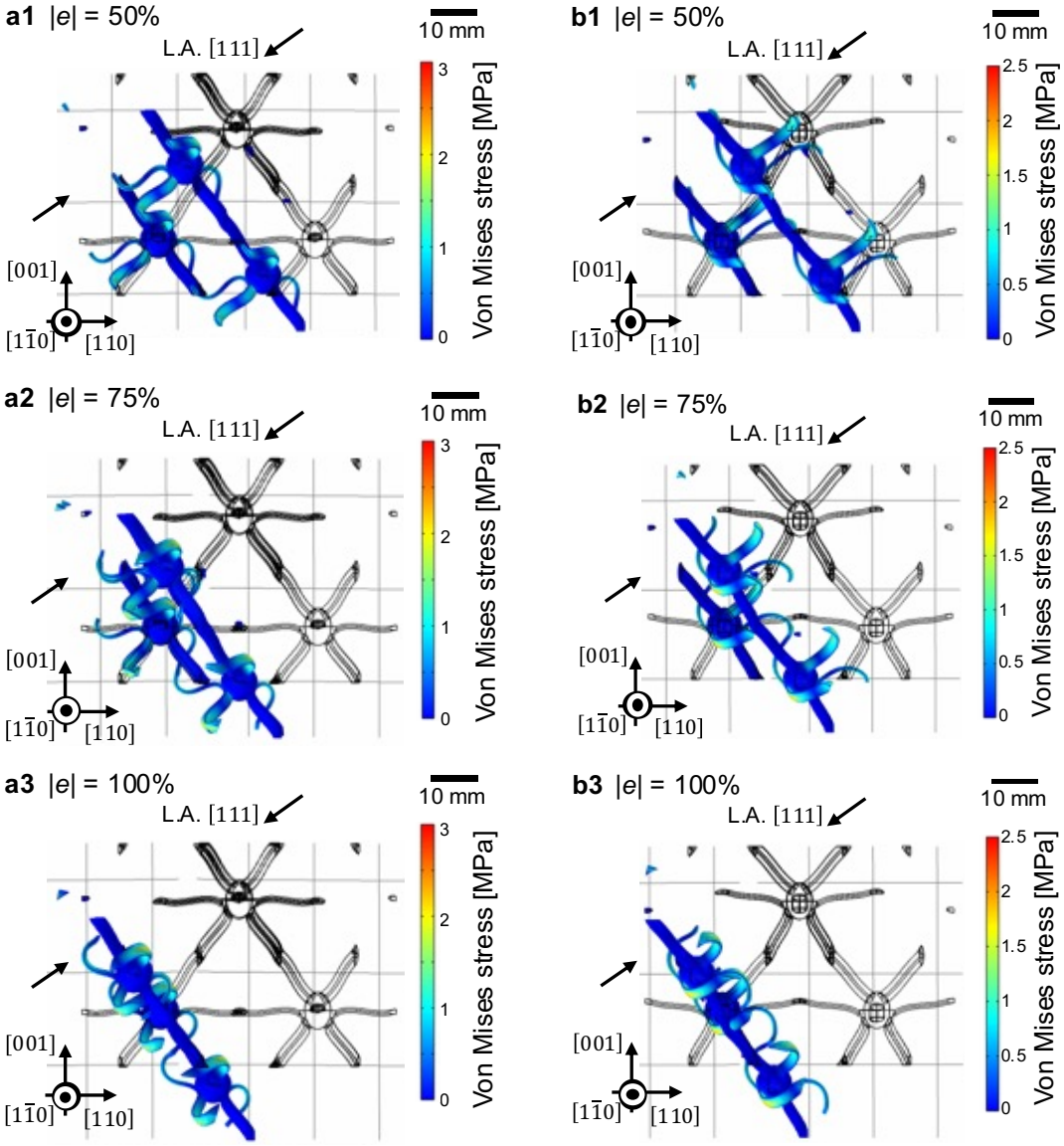


Fig. 3-20. Result of FEM simulation compressive deformation with large apperental strain (50%, 75%, 100%) in [111] direction viewed from [1$\bar{1}$0] direction. (a) bistable AM-PXCM with design parameters of parametaer set A and (b) monostable AM-PXCM with design parameters of parametaer set B.

3.3.2.4. <112>方向への圧縮変形

多軸 PXCM を[11$\bar{2}$]方向に圧縮したときの変形の様子を Fig. 3-20 に示す．Fig. 3-16 の初期状態から[11$\bar{2}$]方向に圧縮ひずみを加え，ひずみが 5%, 15%, 25%のときの変形の様子を示す．多軸 PXCM の梁は，圧縮方向の[11$\bar{2}$]方向との傾斜によって 4 種類に分類できる． (111)面内の梁に荷重軸に対して傾斜 30°の梁と荷重軸に対して垂直な梁があり，(111)面以外の梁に荷重軸に対して$\cos^{-1}\sqrt{1/3}$ (≒70.5°)の傾斜

を持つ梁と荷重軸に対して$\cos^{-1}\left(\sqrt{3}/6\right)$ (≒73.2°)の梁の合計 4 種類の梁がある．

多軸 PXCM を[11$\bar{2}$]方向に圧縮変形すると, FCC メタマテリアルの変形と同様に，荷重軸に対して直交する梁と荷重軸に対して$\cos^{-1}\left(\sqrt{3}/6\right)$ (≒73.2°)の梁，すなわち荷重軸に対して$\sin^{-1}\left(2\sqrt{2}/3\right)$ (≒70.5°)の傾斜を持つ(11$\bar{1}$)面内の梁は応力がほとんど生じなかった．他の 2 種の梁の変形について，荷重軸に対して 30°の傾斜を持つ梁は，梁の軸方向に荷重を加えたときと同様に変形した．荷重軸に対して$\cos^{-1}\sqrt{1/3}$ (≒70.5°)の傾斜を持つ梁は，曲がるように変形した．これら 2 種の梁は<111>方向に圧縮変形したときの荷重軸に対して$\cos^{-1}\sqrt{2/3}$ (≒35.3°)の傾斜を持つ梁のように変形したことから，十分に<112>方向に圧縮したのち除荷すると，<111>方向の準安定相へ遷移するように変形することが期待できる．

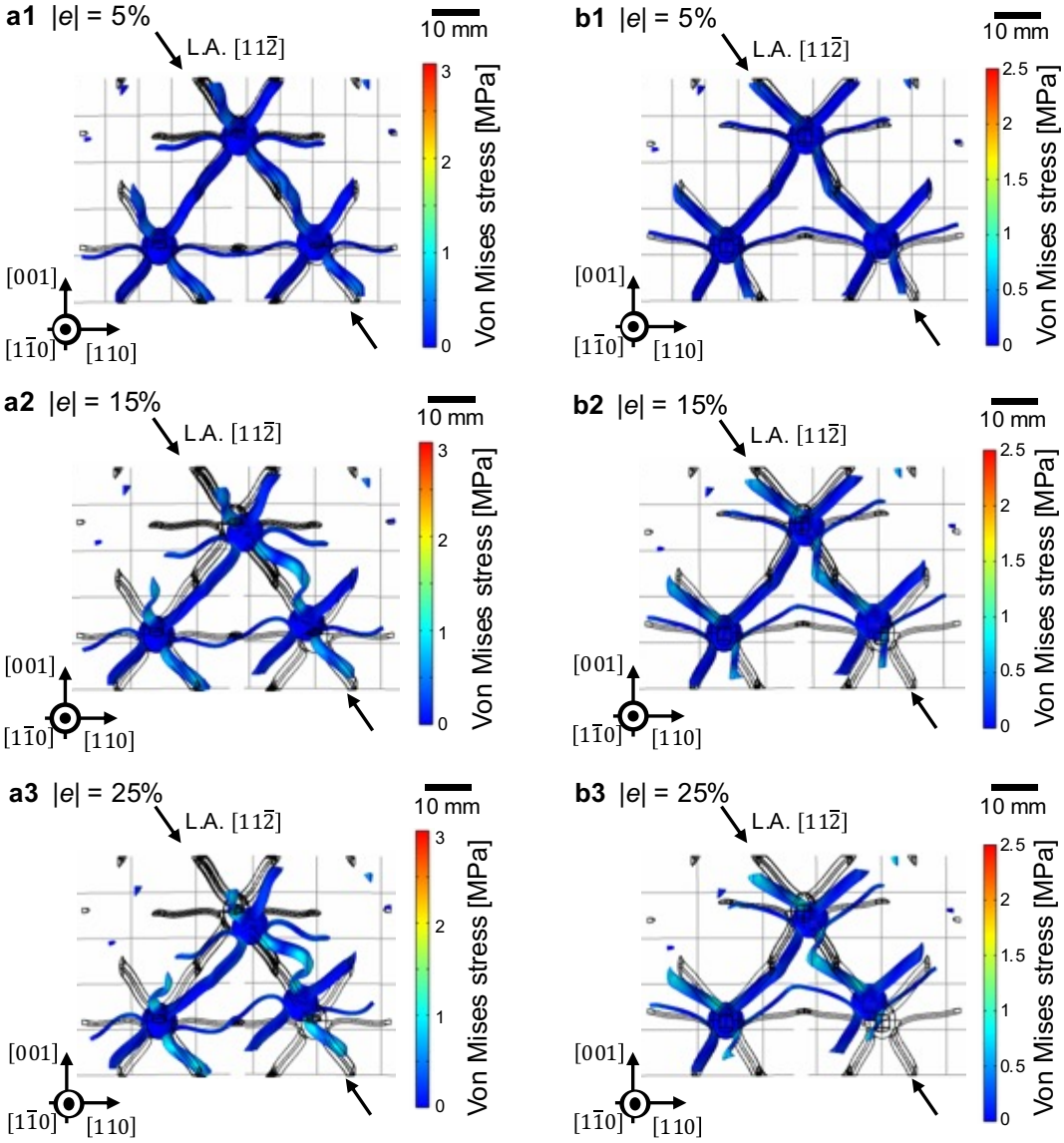


Fig. 3-20. Result of FEM simulation compressive deformation with 5%, 15%, 25% strain applied in [11$\bar{2}$] direction viewed from [1$\bar{1}$0] direction. (a) bistable AM-PXCM with design parameters of parametaer set A and (b) monostable AM-PXCM with design parameters of parametaer set B.

3.3.2.5. 多軸 PXCM の変形挙動の異方性

多軸 PXCM を<100>, <110>, <111>, <112>方向に圧縮したときの応力ひずみ曲線を Fig. 3-21 に示す．パラメータセット A の構造でもパラメータセット B の構造でも Fig. 3-21 に示すように<100>, <110>, <111>, <112>方向のどの方向に圧縮したときも座屈した．

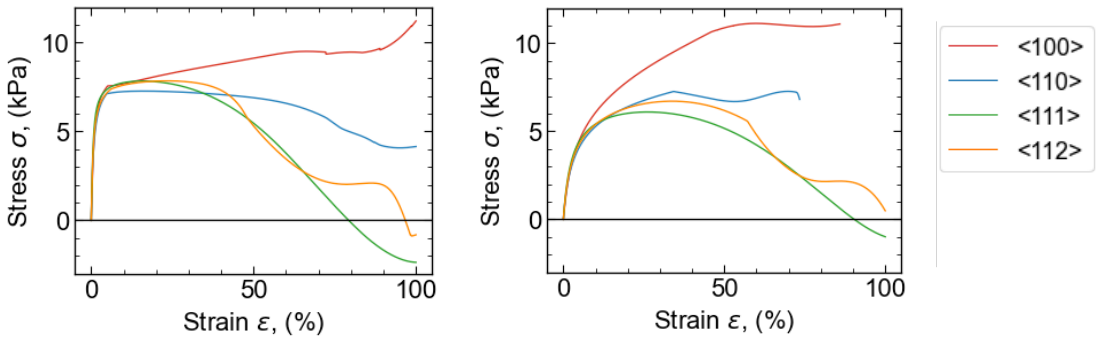


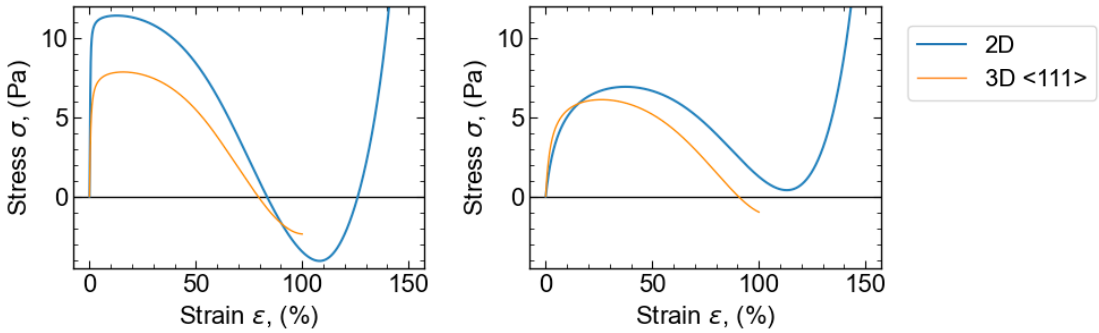
Fig. 3-21. Stress-Strain relationship of compressive deformation in each direction ([100], [$\bar{1}$10], [111], [11$\bar{2}$]). (a) bistable AM-PXCM and (b) monostable AM-PXCM.

[100]方向に圧縮したとき，変形初期では Fig. 3-17a2 および Fig. 3-17b2 で見られたように梁の中心部が大きくたわむように座屈した．変形がさらに進むと，パラメータセット A ではひずみ 70%で，パラメータセット B ではひずみ 54%で，すでに座屈し大きくたわんだ梁が捻れるように再度座屈した．これによって，応力ひずみ曲線は極大値を示したと考えられる．

[$\bar{1}$10]方向に圧縮したとき，パラメータセット A では変形初期から梁の中央部分がたわみ，($\bar{1}$10)面に対して鏡映対称な形状で変形した．ひずみが 6%に到達すると荷重軸方向以外の梁も座屈し，球が回転し，非対称的な形状で変形するようになった．ここで応力ひずみ曲線の傾きは急激に変化し，なだらかになった．そして，ひずみ 70%付近で座屈した梁と球が接触した．本シミュレーションでは計算コストを軽減するため接触判定を設けておらず，物体と物体が貫通するように計算が進行したが，実際には接触するときに応力が急峻に増加すると考えられる．その後，物体間の摩擦によって挙動は変化するが[$\bar{1}$10]方向の変形から[$\bar{1}$1$\bar{1}$]方向の変形へと遷移するように応力が働くと考えられる．一方で，パラメータセット B の構造では，変形初期ではパラメータセット A のときと同様に梁の中央がたわむように座屈し，($\bar{1}$10)面に対して鏡映対称な形状で変形したが，たわむ向きが逆向きであった．ひずみが 35%に到達すると球が回転するように変形し始め，応力ひずみ曲線の傾きは不連続的に変化し応力が減少し始めた．ひずみが 70%になるとパラメータセット A のときと同様に座屈した梁と球が接触した．

[111]方向に圧縮したときの応力ひずみ曲線を本結果と第 2 章の 2 次元シミュレーションの結果とを Fig. 3-22 にて比較した．3 次元シミュレーションでは，パラメータセット A の構造ではひずみが 78%で弾性ひずみエネルギーが極大値をとり，パラメータセット B の構造ではひずみが 90%で弾性ひずみエネルギーが極大値をとった．パラメータセット A の構造は<111>方向の bistability が Fig. 2-13a6 に示し

た 2 次元シミュレーションと Fig. 2-19a3 に示した実験結果と一致した．一方で，パラメータセット B の構造は実験ではひずみ約 90%で梁が接触し bistable にならない．3 次元のシミュレーションと 2 次元のシミュレーションとで応力が負になるかならないか差異があった．この差異は 2 次元シミュレーションで考慮に入れていなかった(111)面内の梁の変形や球の回転によって飛び移り座屈する梁の応力集中が緩和され，初期形状に戻ろうとする反力が小さくなったことで，3 次元シミュレーションでは準安定相の弾性ひずみエネルギーが小さくなったことに起因すると考えられる．



(a) (b)

Fig. 3-22. Comparison of Stress-Strain relationship between 2D simulation and 3D simulation of compressive deformation in <111> direction. (a) AM-PXCM with parameter set A (See Table 3-1) and (b) AM-PXCM with parameter set B (See Table 3-1).

[11$\bar{2}$]方向に圧縮したとき，パラメータセット A では，変形初期から(111)面上の梁の中央部分がたわむように座屈し（Fig. 3-23），それに伴い[110]方向の梁がたわんだ（Fig. 3-23）．ひずみ 8%からそれまでほとんど変形していなかった(11$\bar{1}$)面上の梁も座屈し始めた．37%付近から(111)面上の梁が捻れるように変形しはじめ，このとき応力ひずみ曲線が減少し始めた．ひずみが 48%に到達すると，捻れた(111)面上の梁が[$\bar{1}$10]方向の梁に接触した．これまでの他の方向に圧縮したときの梁の接触とは異なり，ここでは，たわんだ梁の中央部分が梁のねじれによって[$\bar{1}\bar{1}\bar{1}$]方向に変位することで接触した．つまり，たわんだ梁のねじれを[$\bar{1}$10]方向の梁が妨げることになる．このまま変形が進行した場合，ねじれによって緩和していた弾性ひずみエネルギーが緩和されずに生じるため，応力はシミュレーション結果ほど下がらず，徐々に増加すると考えられる．

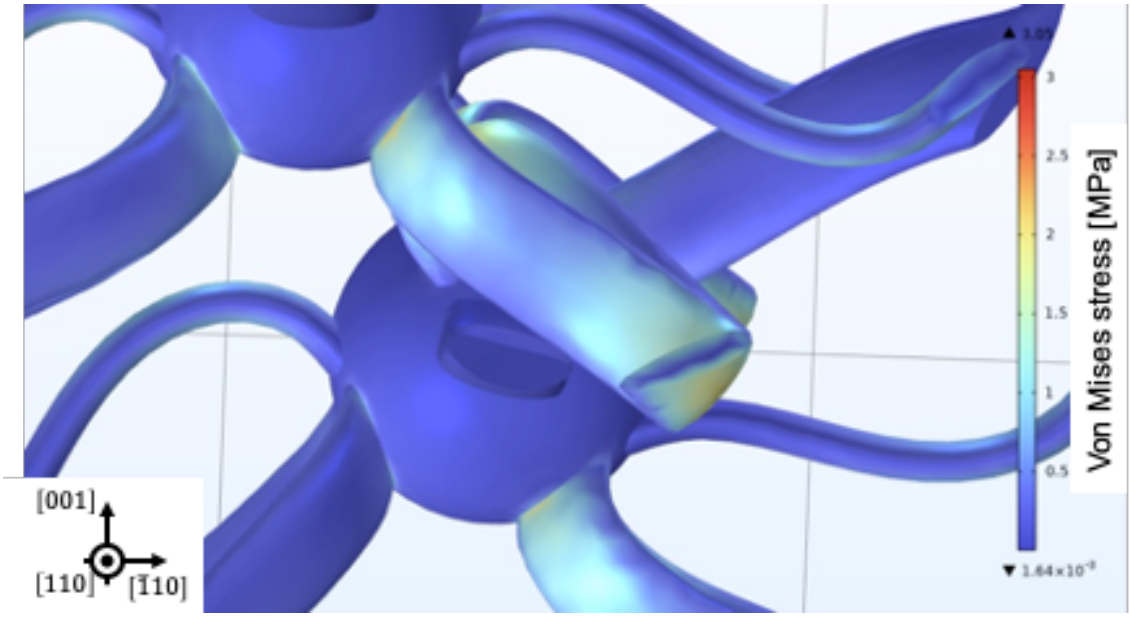


Fig. 3-23. Snapshot of deforming MA-PXCM with design parameters of parameter set A under 48% compressive strain in [11$\bar{2}$] direction, viewed in [$\bar{1}$10] direction.

4 方向の圧縮シミュレーションの結果から，弾性コンプライアンス係数テンソルの成分の関係式は，設計パラメータセット A および設計パラメータセット B でそれぞれ式(3-76)および式(3-77)のような結果となった．

$$\hat{S}_1 = 1.34\ [\mathrm{MPa}^{-1}] \tag{3-76a}$$

$$\hat{S}_2 + \hat{S}_4 = 1.76\ [\mathrm{MPa}^{-1}] \tag{3-76b}$$

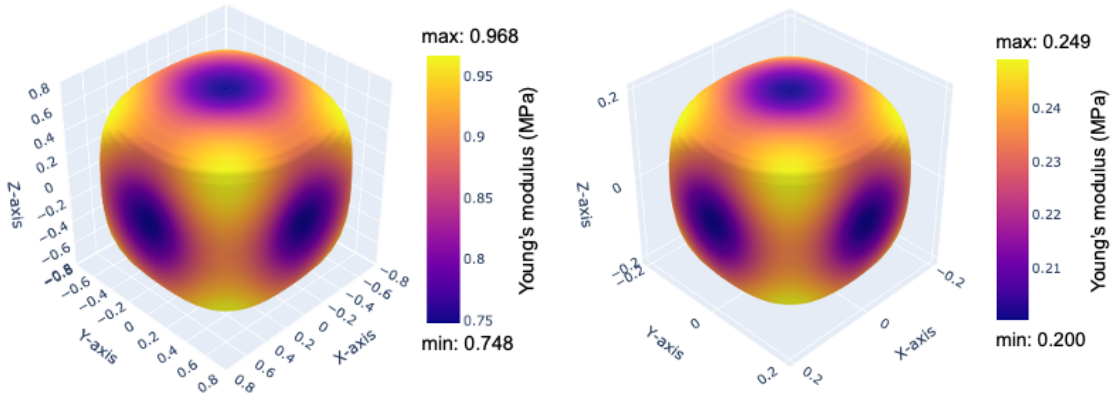
$$\hat{S}_1 = 4.99\ [\mathrm{MPa}^{-1}] \tag{3-77a}$$

$$\hat{S}_2 + \hat{S}_4 = 7.04\ [\mathrm{MPa}^{-1}] \tag{3-77b}$$

これらの成分の関係式に基づき多軸 PXCM のヤング率の異方性曲面の計算結果を Fig. 3-24 に示す．Fig. 3-14 に示した円柱梁の FCC メタマテリアルやダイヤモンド構造メタマテリアルでは，弾性域で梁の伸縮変形が支配的となった FCC メタマテリアルのヤング率は，最大となった<111>方向で 2.22 MPa となり，最小となった<100>方向で 1.67 MPa となった．弾性域で梁の曲げ変形が支配的となったダイヤモンド構造メタマテリアルのヤング率は最大となった<111>方向で 0.638 MPa となり，最小となった<100>方向で 0.603 MPa となった．一方で，多軸 PXCM では，パラメータセット A のヤング率は最大となった<111>方向で 0.968 MPa となり，最小となった<100>方向で 0.748 MPa となり，パラメータセット B のヤング率は最大となった<111>方向で 0.249 MPa となり，最小となった<100>方向で 0.200 MPa なった．パラメータセット A とパラメータセット B はともにダイヤモンド構造メタマテリアルと同様に梁の曲げ変形が支配的となった．しかし，曲がり梁がたわむ向きが曲がり梁のサインカーブの曲率に準ずる向きにたわんだため，パラメータセット

A の構造は，サインカーブの曲率が小さくなる方向にたわんだパラメータセット B の構造よりも 3 倍ほどヤング率が大きくなった．

多軸 PXCM の 3 次元 FEM の結果から変形初期における梁の変形では，梁の中央部分がたわむように変形した．あらゆる方向の圧縮変形においてこの中央部分がたわむ変形が支配的であると言える．方向による変形の違いは主に変形した梁の本数だった．多軸 PXCM の梁をその方向ごとに分類すると 6 種類に分けられる．<111>方向圧縮では同時に 3 種，<100>方向圧縮および<112>方向圧縮では 2 種，<110>方向圧縮では 1 種の梁が変形した．不思議なことにヤング率が最も小さい<100>方向圧縮よりも<110>方向圧縮の方が変形した梁の本数が少ない．これは梁がたわんだ向きが影響すると考えられる．それぞれの変形した梁方向と荷重軸との間の角度は，<100>方向圧縮で 45°，<110>方向圧縮で 0°，<111>方向圧縮で 35°，<112>方向圧縮で 30°だった．このことから，<100>方向圧縮の場合が最も梁にかかるモーメントが小さく，結果的に小さいヤング率となったと考えられる．



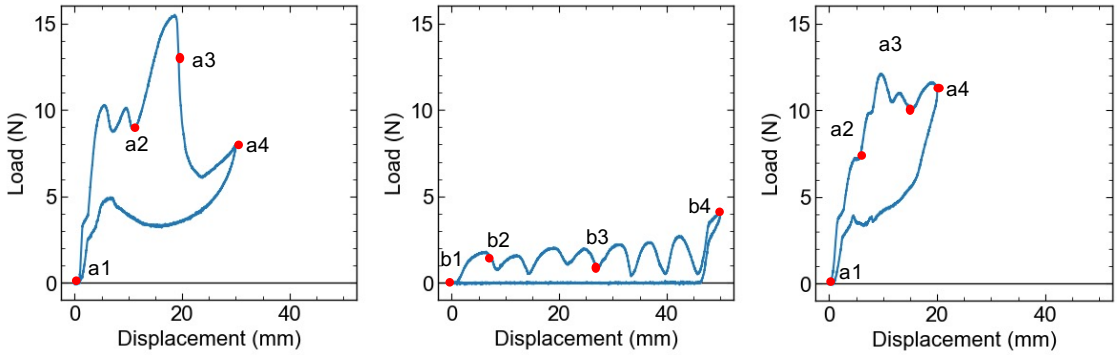
(a) (b)

Fig. 3-24. Anisotropy surface of apparental Young's modulus. (a) bistable MA-PXCM and (b) monostable MA-PXCM.

3.3.3. 実験結果との比較

より多くの周期数で多軸 PXCM を作製し，圧縮実験を行うため設計パラメータを t = 0.7 mm, R = 1.7 mm, a = 10 mm, ϕ = 45°, k_r = 7/8 とし，SLS 式の AM で造形した．このとき，多軸 PXCM の向きを$(1\bar{1}0)$面，(111)面，$(11\bar{2})$面を切り出すようにした．造形は[111]方向を積層方向として造形した．それぞれの面に圧縮試験を行った結果を Fig. 3-25 に示す．$(1\bar{1}0)$面および$(11\bar{2})$面には 30 mm の変位間で圧縮したのちに除荷した．(111)面には 50 mm の変位まで圧縮したのちに除荷した．これらの変

形中の様子を Fig. 3-25 中の番号に対応させて Fig. 3-25 に示した．Fig. 3-25 の荷重変位曲線のように除荷過程で<111>方向のみ荷重が 0 N と記録されたが，これは多軸 PXCM が圧縮後の形状で安定化し，治具から離れたために測定不能となった．<111>方向以外の方向では，bistable とならず，元の形状に復元した．



(a) (b) (c)

Fig. 3-25. Load-displacement curve of MA-PXCM with design parameter of t = 0.7 mm, R = 1.7 mm, a = 10 mm, ϕ = 45˚, k_r = 7⁄8) (a) [1$\bar{1}$0] direction, (b) [111] direction and (c) [11$\bar{2}$] direction.

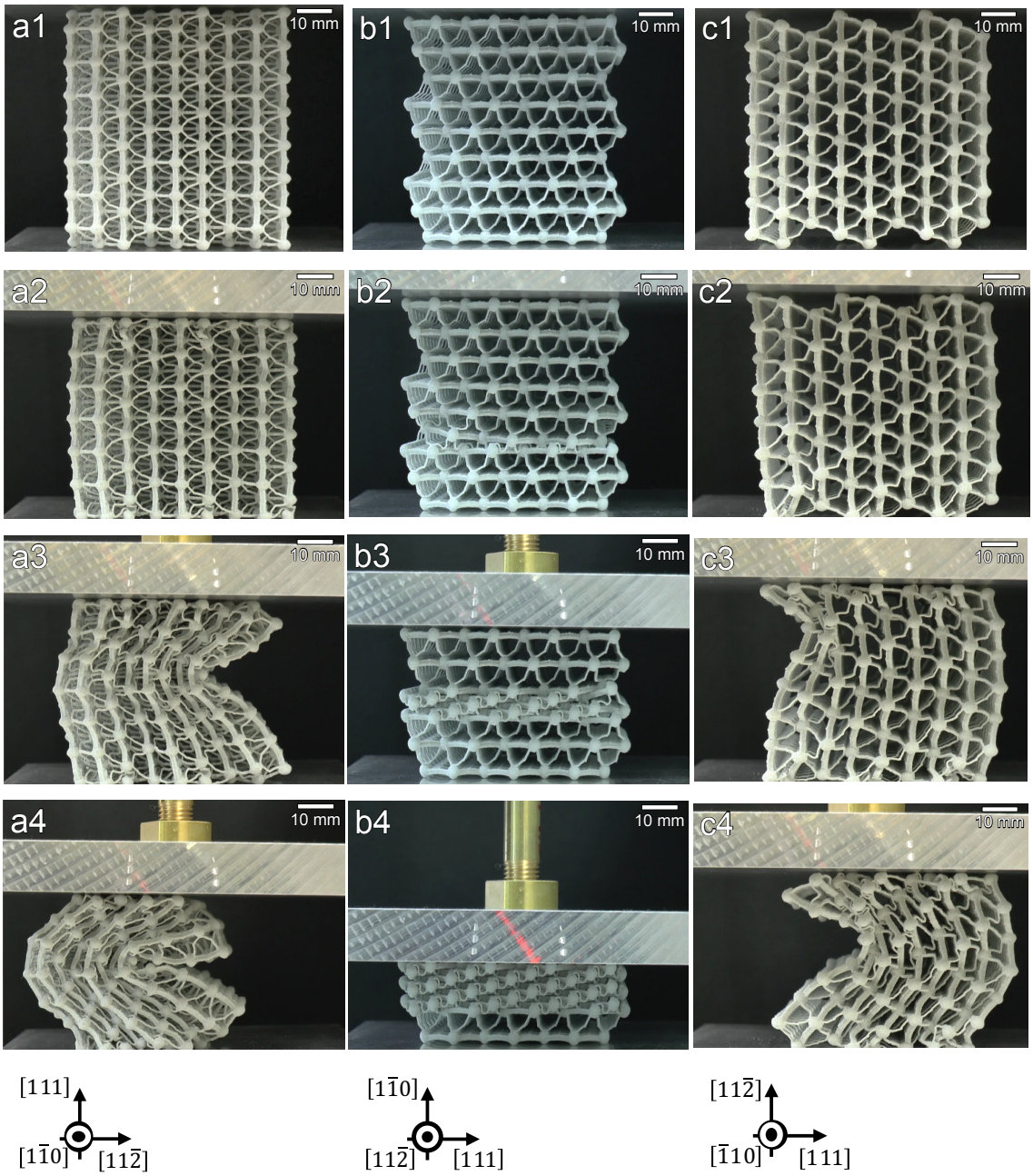


Fig. 3-26. Snapshot of compression test of AM-PXCM with design parameter of t = 0.7 mm, R = 1.7 mm, a = 10 mm, ϕ = 45°, k_r = 7/8) compressed in (a) [1$\bar{1}$0] direction, (b) [111] direction and (c) [11$\bar{2}$] direction. Deformed to (a1) 0 %, (a2) 15.5 %, (a3) 26.7 %, (a4) 42.2 %, (b1) 0 %, (b2) 9.6 %, (b3) 23.3 %, (b4) 68.5 %, (c1) 0 %, (c2) 7.7 %, (c3) 19.3 %, (c4) 25.7 %

[111]方向の圧縮では，Fig. 3-26b2 のように(111)面外方向の梁の数が少ない層から変形し始めた．次に，最初に変形し始めた層の隣の層から変形し，すでに準安定相が形成されているところから準安定相の領域が増えるように相転移が生じた．こ

れは当初から期待していた挙動であり，この相転移によって荷重を 1/3 以下に抑えることができる．圧縮した後除荷すると，Fig. 3-27 に示すように上下 1 層ずつを残して全て準安定相で安定化した．また，変形の過程で 1 層が変形する過程を細かく観察すると，真っ直ぐに<111>方向に変形していないことがわかった．Fig. 3-26b2 を拡大した図を Fig. 3-28 に示す．層が変形し相転移する際，層の端から順番に変形した．変形の途中で(111)面の梁が斜めに傾き変形した．多軸 PXCM の弾性異方性の解析結果から<111>方向のヤング率が最も大きいことがわかった．Fig. 3-28 から<111>方向よりもヤング率の低い<112>方向に変形したのちに，<111>方向の準安定相に戻ったと考えられる．初期の最安定相から<111>方向の先にある準安定相まで変形する経路選択において，ヤング率の高い<111>方向に真っ直ぐ変形するよりも，ヤング率の低い<112>方向へ迂回した方がより低い弾性ひずみエネルギーで相転移できることが示唆される．この経路の迂回は，結晶性材料の転位における部分転位のような役割を果たすと言える．

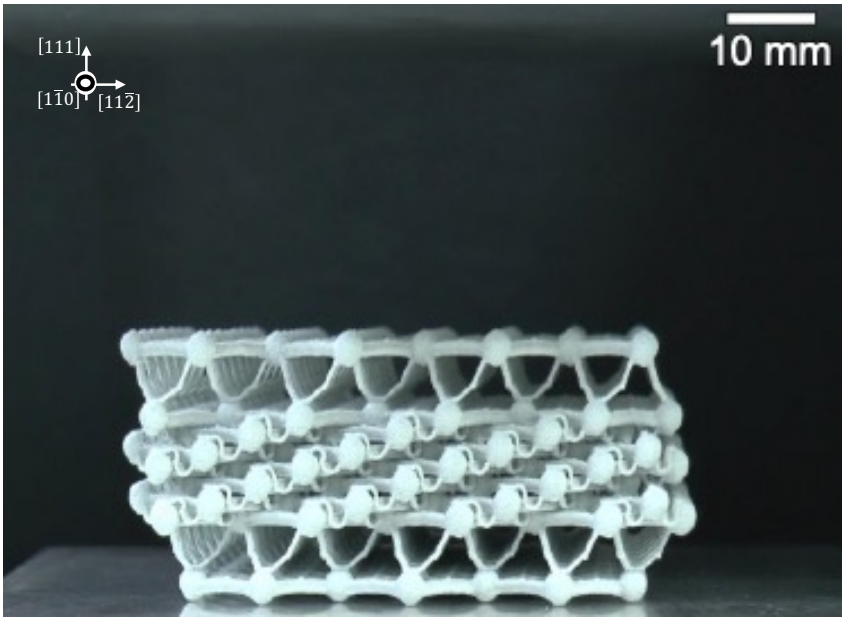


Fig. 3-27. Snapshot of AM-PXCM with design parameter of t = 0.7 mm, R = 1.7 mm, a = 10 mm, ϕ = 45˚, k_r = 7⁄8) sfter unloading compression in [111] direction.

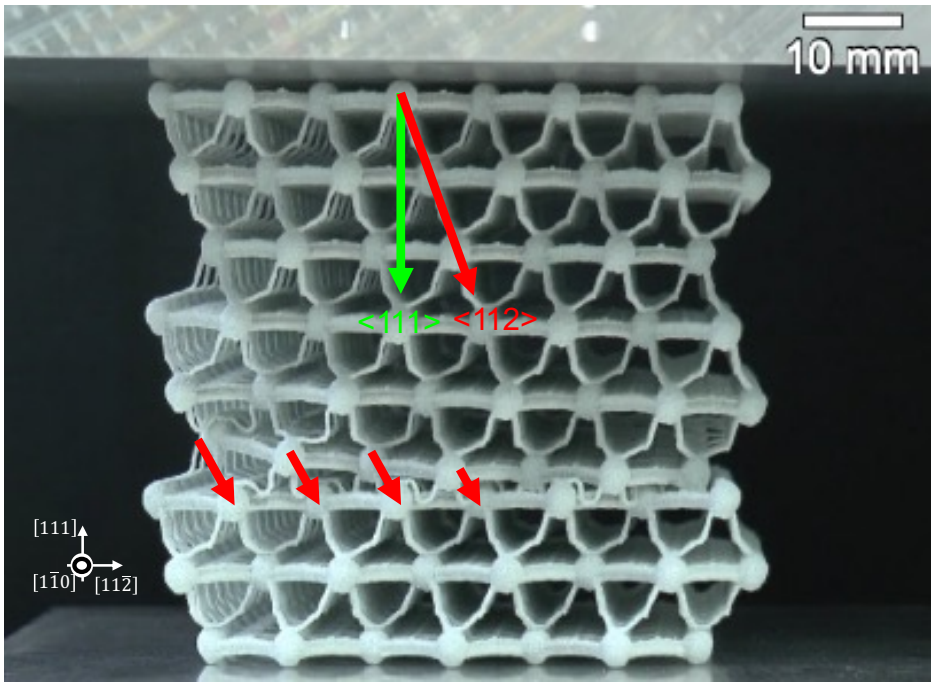


Fig. 3-28. Snapshot of AM-PXCM with design parameter of t = 0.7 mm, R = 1.7 mm, a = 10 mm, ϕ = 45˚, k_r = 7⁄8) after unloading compression in [111] direction.

(1$\bar{1}$0)面および(11$\bar{2}$)面は球が最密充填ではなく，梁が一方向にのみ存在していないため，Fig. 3-26a2 および Fig. 3-26c2 に示した[1$\bar{1}$0]方向圧縮および[11$\bar{2}$]方向圧縮の初期段階では境界面の凹凸の部分が潰れるように変形した．[1$\bar{1}$0]方向圧縮ではその後，圧縮方向と直交する方向に膨張した（Fig. 3-26a2）．その後変形が進むと，Fig. 3-26a3 および Fig. 3-26c3 に示すように[1$\bar{1}$0]方向圧縮および[11$\bar{2}$]方向圧縮の両方で多軸 PXCM 全体の端にある(111)面のメタ原子層が座屈するように変形した．このメタ原子層の座屈は端から反対側の端のメタ原子層まで伝播し，最終的に Fig. 3-26a4 および Fig. 3-26c4 に示すように多軸 PXCM が全体的に<111>方向に縮みながら折れ曲がるように変形した．この折れ曲がるような変形によって形成された状態は，長周期積層（long-period stacking ordered: LPSO）構造[15–17]などに見られるキンク帯（kink band）と類似する．しかし，Fig. 3-26a3 および Fig. 3-26c3 に見られるように座屈の起点を中心に多軸 PXCM の構造が安定相ではなく<111>方向に収縮し準安定層の領域が形成されていることが観察された．これは，キンク変形に類似するが，詳細な変形メカニズムを観察すると，力学メタマテリアル独自の変形機構である．

3.4. 小括

相転移を発現するメタマテリアル，多軸 PXCM について 3 次元 FEM シミュレー

ションを実施し, 多軸PXCMの変形挙動の異方性についての解析手法を開発した. 多軸 PXCM の代表体積要素について周期境界条件を設定し，任意のひずみ場を与えるひずみ制御法の導入により FCC メタマテリアルおよびダイヤモンド構造メタマテリアル, 多軸 PXCM の変形挙動を解析した. <100>方向および<110>方向, <111>方向, <112>方向に各メタマテリアルを圧縮する FEM シミュレーションを行い, 以下の知見を得た.

i. FEM シミュレーション結果から荷重軸の方向とメタマテリアル中の梁の方向の関係性によってメタマテリアル全体が示す力学特性が変わることがわかった.
ii. FCC およびダイヤモンド構造メタマテリアルについて小さいひずみでは, 応力ひずみ曲線は一定の傾きを持ち，梁は伸縮するように変形した．ひずみが大きくなると曲げ変形するようになった．弾性異方性としては，<111>方向に最も硬く，<100>に最も柔らかい結果となった.
iii. 多軸 PXCM について，弾性異方性は他のメタマテリアルと同様に<111>方向に最も硬く，<100>に最も柔らかい結果となった．<111>方向圧縮すると，飛び移り座屈が確認され，準安定相の発現が示唆された．また，<110>方向圧縮および<112>方向圧縮を経て，この準安定相へと遷移する可能性がある.

また，多軸 PXCM を{110}面，{111}面，{112}面が表面となるようにして SLS 方式 AM 装置で作製し，圧縮試験を行った．圧縮試験の結果，以下の知見を得た.

i. <111>方向圧縮を行うと，飛び移り座屈し準安定相で安定化した．この飛び移り座屈の過程にて, 直接<111>方向に変形せず<112>方向に寄ってから準安定相に遷移したことが確認された．これは，結晶性材料の部分転位に類似した現象である.
ii. <110>方向圧縮および<112>方向圧縮を行うと，荷重軸に並行な{111}面が大きく折れ曲がるように変形した．この変形によってできた形状は，長周期積層（LPSO）構造などに見られるキンク帯と類似するが, 相転移を伴うという点で異なる.

以上のことから, 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力学メタマテリアル特有の変形機構を示した. これまで材料科学で培われてきた知見がメタマテリアル開発の可能性を大きく広げる.

参考文献

[1] Z. Xia, Y. Zhang, F. Ellyin, A unified periodical boundary conditions for representative volume elements of composites and applications, Int. J. Solids Struct. 40 (2003) 1907–1921. https://doi.org/10.1016/S0020-7683(03)00024-6.

[2] A. Vidyasagar, S. Krödel, D.M. Kochmann, Microstructural patterns with tunable mechanical anisotropy obtained by simulating anisotropic spinodal decomposition, Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci. 474 (2018) 20180535. https://doi.org/10.1098/rspa.2018.0535.

[3] C.T. Sun, R.S. Vaidya, Prediction of composite properties from a representative volume element, Compos. Sci. Technol. 56 (1996) 171–179. https://doi.org/10.1016/0266-3538(95)00141-7.

[4] N. Iyer, S. Jayanti, K. Lou, Y. Kalyanaraman, K. Ramani, Three-dimensional shape searching: State-of-the-art review and future trends, CAD Comput. Aided Des. 37 (2005) 509–530. https://doi.org/10.1016/j.cad.2004.07.002.

[5] P. Yang, X. Qian, Direct boolean intersection between acquired and designed geometry, CAD Comput. Aided Des. 41 (2009) 81–94. https://doi.org/10.1016/j.cad.2008.12.006.

[6] H. Thai, S. Kim, Large deflection inelastic analysis of space trusses using generalized displacement control method, J. Constr. Steel Res. 65 (2009) 1987–1994. https://doi.org/10.1016/j.jcsr.2009.06.012.

[7] R.K. Abu Al-Rub, D. Lee, K.A. Khan, A.N. Palazotto, Effective Anisotropic Elastic and Plastic Yield Properties of Periodic Foams Derived from Triply Periodic Schoen's I-WP Minimal Surface, J. Eng. Mech. 146 (2020) 1–19. https://doi.org/10.1061/(ASCE)EM.1943-7889.0001759.

[8] C. Zener, Contributions to the Theory of Beta-Phase Alloys, Phys. Rev. 71 (1947) 846–851. https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.846.

[9] H. Ledbetter, A. Migliori, A general elastic-anisotropy measure, J. Appl. Phys. 100 (2006). https://doi.org/10.1063/1.2338835.

[10] J. Nordmann, M. Aßmus, H. Altenbach, Visualising elastic anisotropy: theoretical background and computational implementation, Contin. Mech. Thermodyn. 30 (2018) 689–708. https://doi.org/10.1007/s00161-018-0635-9.

[11] T. Böhlke, C. Brüggemann, Graphical representation of the generalized Hooke's law, Tech. Mech. 21 (2001) 145–158.

[12] A.G. Neeman, R. Brannon, B. Jeremi, A. Van Gelder, A. Pang, Decomposition and Visualization of Fourth-Order Elastic-Plastic Tensors, IEEE/ EG Symp. Vol.

Point-Based Graph. (2008). http://diglib.eg.org/handle/10.2312/VG.VG-PBG08.121-128.

[13] M.M. Mehrabadi, S.C. Cowin, Eigentensors of linear anisotropic elastic materials, Q. J. Mech. Appl. Math. 44 (1991) 331. https://doi.org/10.1093/qjmam/44.2.331.

[14] C.M. Kube, Elastic anisotropy of crystals, AIP Adv. 6 (2016). https://doi.org/10.1063/1.4962996.

[15] X.H. Shao, Z.Q. Yang, X.L. Ma, Strengthening and toughening mechanisms in Mg-Zn-Y alloy with a long period stacking ordered structure, Acta Mater. 58 (2010) 4760–4771. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2010.05.012.

[16] M.S. Geshani, P. Mahmoud Kalayeh, A.H. Asadi, H. Mirzadeh, M. Malekan, M. Emamy, A review of Mg alloys containing long-period stacking ordered (LPSO) structures with insight into the application of friction stir processing, J. Mater. Res. Technol. 24 (2023) 4945–4966. https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.04.105.

[17] Y. Kawamura, M. Yamasaki, Formation and mechanical properties of Mg97Zn1RE 2 alloys with long-period stacking ordered structure, Mater. Trans. 48 (2007) 2986–2992. https://doi.org/10.2320/matertrans.MER2007142.

第4章　マルテンサイト変態を模倣するせん断 PXCM

4.1.　緒言

第 1 章で, 原子の基本構造と物性の関係の解析に基づいてメタマテリアルを設計することで, earth-abundant で ubiquitous なありふれた元素を使い, これまで希少元素を含む材料でしか実現できなかった特異な材料特性を発現することの可能性について述べた. また, マルテンサイト変態は, 焼き入れ硬化[1–3], 形状記憶効果[4–6], 超弾性[5,7,8]などの力学的機能性を発現する要因であることについて言及した. ここでは, マルテンサイト変態の素過程であるせん断による原子配列変化に着目してメタマテリアルを設計することによる, 形状記憶効果発現の可能性に注目する.

従来の相転移メタマテリアル（PXCM）は, 引張や圧縮の印加荷重に応じて一方向に伸縮変形し, 準安定状態へ遷移する[9–12]. この巨視的な相転移は, 無拡散相転移の一種であると言える. 第 2 章および第 3 章では, 引張・圧縮荷重に応じて, 立方晶の<111>方向という等価な 4 方向に伸縮変形する相変態を示す多軸 PXCM を開発した. この多軸 PXCM は, 面心立方晶の結晶対称性に着目し, 4 つの<111>方向を荷重軸として設計された. これは, 原子の構造と挙動を新しいメタマテリアルの開発の指針として用いる「原子模倣」の概念を初めて実証したものである.

しかし, これまでに開発された PXCM で達成された相転移は, 変位型相転移（displacive phase transition）ではあるが, せん断変形ではないのでマルテンサイト相転移ではない. 相転移するメタマテリアルは数多く開発されている[13,14]が, せん断変形によって相変態を再現するメタマテリアルはまだ開発されていない. マルテンサイト相転移を示す新規な PXCM の創製は, より機能的な PXCM の開発に大きな展開と発展をもたらす可能性がある.

本章では, せん断による原子配列の変化に着目し, マルテンサイト相変態メタマテリアル（Martensitic Phase Transforming Metamateriarl; MPXM）の設計を開発する. MPXM の基本指針として, せん断変形により準安定状態が現れる bistable 構造を持つ 2 次元格子構造体の設計と bistability を示すための設計の制約を調べた.

4.2.　マルテンサイト相変態メタマテリアル（MPXM）の設計

先述したようにマルテンサイト変態や双晶変形はせん断的に変形する. 本研究では Alqasimi らの双安定機構[15]を応用してメタマテリアルを設計する. この Alqasimi らの双安定機構は, Fig. 4-1 に示すように, 各頂点を自由回転するヒンジとした平行四辺形リンケージに拘束バーを追加することで bistability を付加した幾何学構造である. 平行四辺形リンケージは, Fig. 4-1 中に平行四辺形 ABDC として表され, 平行四辺形の底辺同士は常に互いに平行な状態で回転移動する. 平行四

辺形 ABDC の辺 AB の長さを W，辺 AC の長さを L とする．平行四辺形 ABDC の辺 CD を持つ三角形 P'CD は，平行四辺形 ABDC の辺 AB を持つ三角形 OAB と合同であるとする．これらの三角形の頂点 P と Q を両端で回転が自由な梁で結合し，この線分 PQ の長さを l とする．

このとき，平行四辺形 ABDC の連結の各節点が自由に回転するので，点 P は点 O を中心に，半径 L の円上を梁 PQ がなければ移動できる．また，平行四辺形 ABDC の辺 BA を 1 辺とする三角形 OBA は三角形 QAB と合同である．点 Q と点 P が長さ l の棒で結合され，節点が自由に回転できるので，点 P は点 Q を中心とする半径 l の円上を動きうる．この平行四辺形リンク機構では，点 P はこれら 2 つの円上に同時にあるとき．すなわち，2 つの円の交点 P または点 P'に存在するとき，構造は安定化する．言い換えると，この平行四辺形リンク機構は，平行四辺形 ABDC 状態と平行四辺形 ABD'C'状態の 2 つの状態で安定する bistable 構造である．

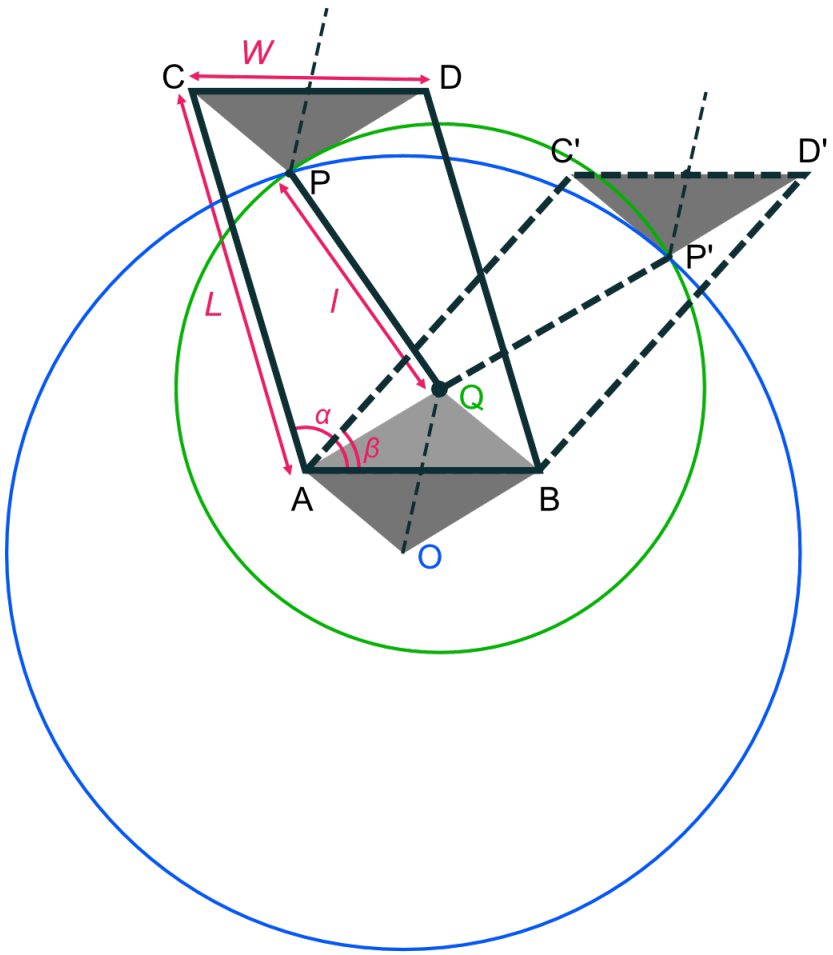


Fig. 4-1. Bistable element of bar-constrained quadrilateral linkage [15]. The bistable element is stabilized in two states: the parallelogram ABDC state and the parallelogram ABD'C' state.

この構造をメタマテリアルとして３Ｄプリンタで作製するためには，シームレスな構造として設計する必要がある．したがって，上記で想定した自由回転ヒンジを設計に組み込むことはできない．本研究では，自由回転ヒンジの代わりに，Fig. 4-2 に示す弾性ヒンジ[16–18]として設計した．この弾性ヒンジは，矩形の梁の一部を円弧状にくりぬいて，その部分で曲げ易くしたものである．弾性ヒンジの弾性特性の評価に，式(4-1)に示す Schotborgh ら[19]の近似式を用いた．この近似式により，弾性ヒンジの曲げに対する剛性は，法線方向（ND）周りのたわみ角 α_{ND} と ND 周りのモーメント M_{ND} の比で表され，ヤング率 E，梁の太さ b，弾性ヒンジのくびれの厚さ t_{hinge}，円弧の半径 R から求められる．なお，これらの記号は，文献[9]中の記号に準えて表記している．

$$\frac{M_{\mathrm{ND}}}{\alpha_{\mathrm{ND}}} = \frac{Ebt_{\mathrm{hinge}}^2}{12}\left[-0.0089 + 1.3556\sqrt{\frac{t_{\mathrm{hinge}}}{2R}} - 0.5227\left(\sqrt{\frac{t_{\mathrm{hinge}}}{2R}}\right)^2\right] \tag{4-1}$$

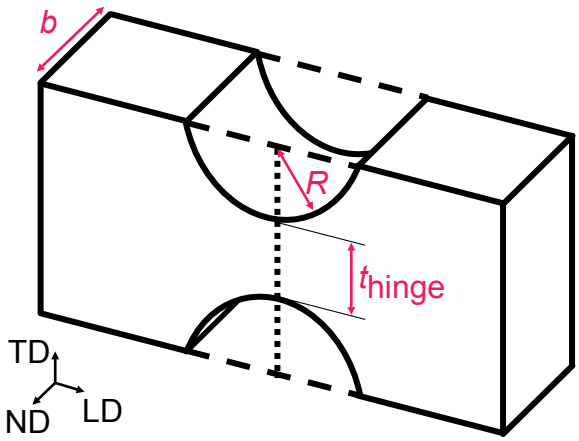


Fig. 4-2. Schematic of flexure hinge. Each side of the beam has circular arcs to make it bend easily. The radius of the arc is R, the thickness of the neck of the flexure hinge is t_{hinge}, and the width of the beam is b.

AM 造形可能で２次元周期性を持つような構造を Fig. 4-3 に示すように設計した．Fig. 4-3 中の赤線は，Alqasimi らの双安定構造[15]を表している．赤い破線は辺 AB (CD) の中点と頂点 Q (P’) を結んでいる．Fig. 4-3 に示すように，Alqasimi らの双安定構造[15]のヒンジ部に Schotborgh ら[19]の Flexure ヒンジ[19]を用いて２次元周期構造を設計し，これを Martensitic Phase Transforming Metamaterial（MPXM）とした．この設計において，平行四辺形の辺 AC と BD を「長梁」、棒 P’Q を「短梁」と定義する．

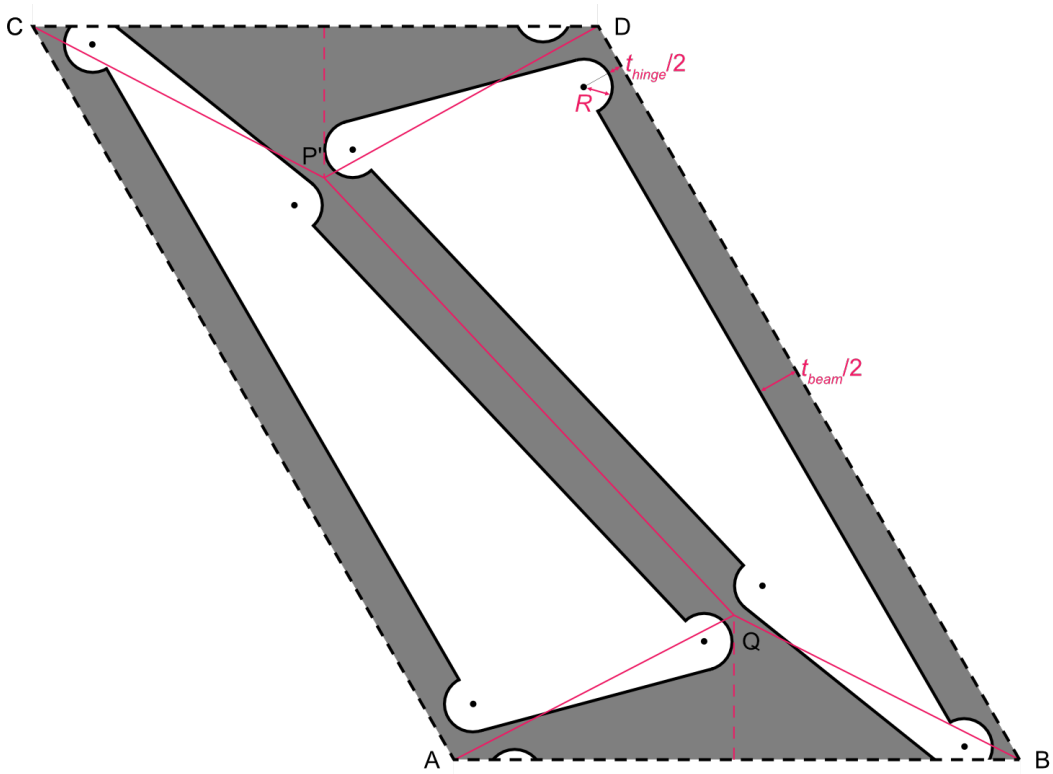


Fig. 4-3. The unit cell of Martensitic Phase Transforming Metamaterial (MPXM).

4.3. 変形挙動の解析方法

せん断変形について解析し，MPXM が bistable となる条件について考える．

まず，MPXM が初期形状からせん断変形するときの各寸法変化について調べた．全ての変形を同時に考えることは難しいので，最初は長梁が剛体であると仮定して長梁の角度変化に対する短梁の変化について考える．Fig. 4-4a に長梁 AC が点 A を中心に$\Delta\theta$だけ回転したときの Alqasimi らの双安定構造を示す．このときの短梁の長さ変化Δlと点 Q の周りの回転量$\Delta\varphi$を求める．三角形 P'AB と三角形 QBA の部分が剛体であると仮定すると，Fig. 4-4b のように変形する要素とその関係性を抽出することができる．平行四辺形の角度がαからβに変化するとき，短梁の長さの変化Δlと短梁の角度変化$\Delta\varphi$は，長梁の角度変化$\Delta\theta$の関数として表せる．長梁の端点 z は，もう一方の端点 O の周りを回転する．一方で，線分 O'-z は，短梁の角度と長さを表す．点 z を点 O の周りに$\Delta\theta$だけ回転させたものを点 w とする．Fig. 4-4b の各点の関係性から，Alqasimi らの双安定構造[15]の変形過程における梁の長さ変化と角度変化の関係を導くことができる．点 O を原点とし，点 O から点 z への方向を実軸の正方向とした複素平面をおき，各点を複素表示で記述する．点 O, O', z, w の位置は式(4-2)で表される．

$$\mathbf{O} = (0,0) = 0 + 0i = 0 \tag{4-2a}$$

$$\mathbf{O}' = \left(2h\cos\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right), 2h\sin\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right)\right) = 2h\left\{\cos\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right) + i\sin\left(\frac{\beta-\alpha}{2}\right)\right\}$$
$$= 2he^{i\frac{\beta-\alpha}{2}} \tag{4-2b}$$

$$\mathbf{z} = (L,0) = L + 0i = L \tag{4-2c}$$

$$\mathrm{w} = (L\cos\Delta\theta, L\sin\Delta\theta) = L\cos\Delta\theta + iL\sin\Delta\theta = Le^{i\Delta\theta} \tag{4-2d}$$

式(4-2)では，理解しやすいよう，点の位置を従来の直交座標で表現した後に複素平面でも表現している．初期状態の短梁の長さは式(4-3)で表される．

$$l = |\mathbf{z} - \mathbf{O}'| = \sqrt{L^2 + 4h^2 - 2hL\cos\frac{\beta-\alpha}{2}} \tag{4-3}$$

長梁の角度変化が$\Delta\theta$のときの短梁の長さ変化は式(4-4)のようになる．

$$l' = |\mathbf{w} - \mathbf{O}'| = \sqrt{L^2 + 4h^2 - 2hL\cos\left(\Delta\theta - \frac{\beta-\alpha}{2}\right)} \tag{4-4}$$

以上より，短梁の長さ変化は式(4-5)となる．

$$\Delta l = l' - l$$
$$= \sqrt{L^2 + 4h^2 - 2hL\cos\left(\Delta\theta - \frac{\beta-\alpha}{2}\right)} - \sqrt{L^2 + 4h^2 - 2hL\cos\frac{\beta-\alpha}{2}} \tag{4-5}$$

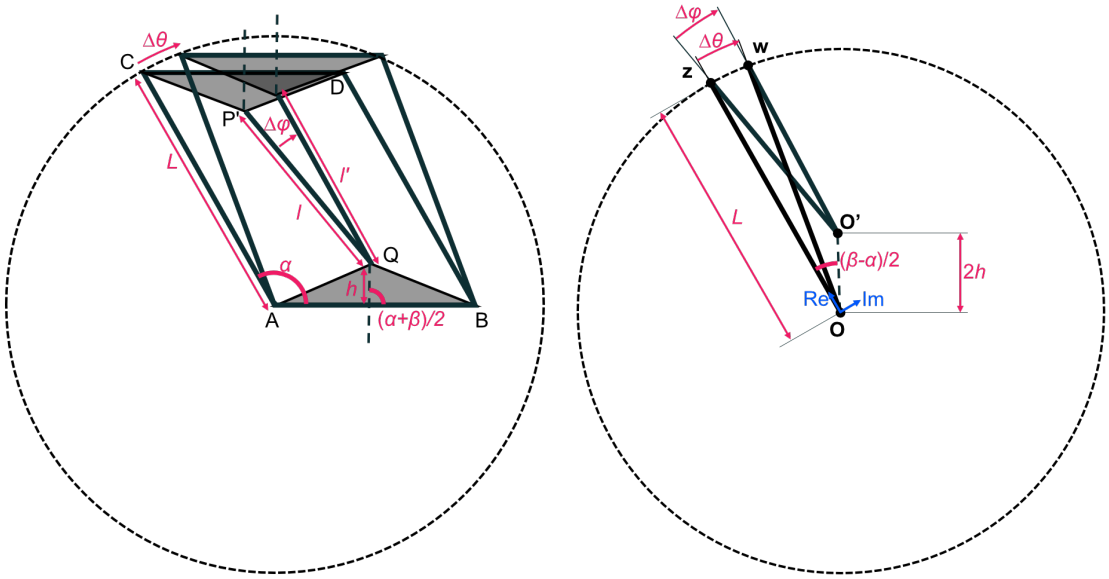
点 z を始点として点 O を中心に円弧上を移動する点 w の軌道を点 O'から見た軌道は式(4-6)で表せる．

$$\frac{l'}{l}e^{i\Delta\varphi} = \frac{\mathbf{w} - \mathbf{O}'}{\mathbf{z} - \mathbf{O}'} = \frac{Le^{i\Delta\theta} - 2he^{i\frac{\beta-\alpha}{2}}}{L - 2he^{i\frac{\beta-\alpha}{2}}} \tag{4-6}$$

すると，短梁の角度変化$\Delta\varphi$は式(4-7)となる．

$$\Delta\varphi = \arg\left(\frac{Le^{i\Delta\theta} - 2he^{i\frac{\beta-\alpha}{2}}}{L - 2he^{i\frac{\beta-\alpha}{2}}}\right) \tag{4-7}$$

式(4-5)および式(4-7)の 2 つの式によって，長梁の変化と短梁の変化を連動して表すことができる．



(a) (b)

Fig. 4-4. Schematic showing the deformation which occurs accordingly to long beam rotate $\Delta\theta$ around A: (a) whole unit cell, and (b) principal parts extracted from unit cell.

次に，長梁と短梁にヤング率 E を与え，MPXM のせん断変形に伴う弾性ひずみエネルギー変化を求める．本研究では，全弾性ひずみエネルギー変化 U を梁の伸縮による弾性ひずみエネルギー変化 U_a と弾性ヒンジの曲げによる弾性ひずみエネルギー変化 U_b の和として考える．

Fig. 4-5 に，各梁の曲げと回転を省略した梁の伸縮変形のみを抽出した模式図を示す．MPXM では，長梁と短梁が交互に配置されている．長梁を基準として考えるため，長梁の下端を固定した．長梁と短梁が連動して変形するよう，長梁と短梁の上端はすべて水平な剛体バーで連結した．Fig. 4-4a で MPXM 全体をせん断し，長梁を$\Delta\theta$ だけ回転させると，式(4-5)に示すように短梁はΔl だけ伸びる．すなわち，Fig. 4-5 では，短梁は下端でΔl だけ下方に引っ張られる．Fig. 4-4a では、長い梁は剛体であると仮定したが，実際には長梁は剛体ではないので Fig. 4-5 の δ の変位で水平剛体バーが釣り合う．

ここで，梁のヤング率を E，梁の太さを b，梁の厚さを t_{beam} とすると，この系の釣り合いの式は式(4-8)となる．

$$Ebt_{\mathrm{beam}}\left(-\frac{\delta}{L}+\frac{\Delta l-\delta}{l}\right)=0 \tag{4-8}$$

このように短梁がΔl だけ伸びると，剛体バーは下方に δ だけ変位したところで安定する．よって，剛体バーの変位 δ は式(4-9)となる．

$$\delta = \frac{L\Delta l}{L + l} \tag{4-9}$$

長梁と短梁のひずみはそれぞれ δ/L と$(\Delta l\text{-}\delta)/l$ なので，MPXM の単位格子あたりの梁の伸縮による弾性ひずみエネルギーU_a の変化は式(4-10)で表せる．

$$U_\mathrm{a} = \frac{Ebt_\mathrm{beam}}{2}\left\{\frac{\delta^2}{L} + \frac{(\Delta l - \delta)^2}{l}\right\} = \frac{Ebt_\mathrm{beam}\Delta l^2}{2(L + l)} \tag{4-10}$$

また，弾性ヒンジは各梁の両端にあるので，式(4-1)を用いて単位格子あたりの弾性ヒンジの曲げによる弾性ひずみエネルギーU_b の変化は式(4-11)で表せる．

$$\begin{aligned} U_\mathrm{b} &= 2\int_0^{\Delta\theta} M_\mathrm{ND}\mathrm{d}\alpha_\mathrm{ND} + 2\int_0^{\Delta\varphi} M_\mathrm{ND}\mathrm{d}\alpha_\mathrm{ND} \\ &= \frac{Ebt_\mathrm{hinge}^2}{12}\left[-0.0089 + 1.3556\sqrt{\frac{t_\mathrm{hinge}}{2R}} - 0.5227\left(\sqrt{\frac{t_\mathrm{hinge}}{2R}}\right)^2\right](\Delta\theta^2 + \Delta\varphi^2) \end{aligned} \tag{4-11}$$

さらに，せん断変形による単位格子あたりの全弾性ひずみエネルギーU の変化は式(4-12)で表せる．

$$U = U_a + U_b \tag{4-12}$$

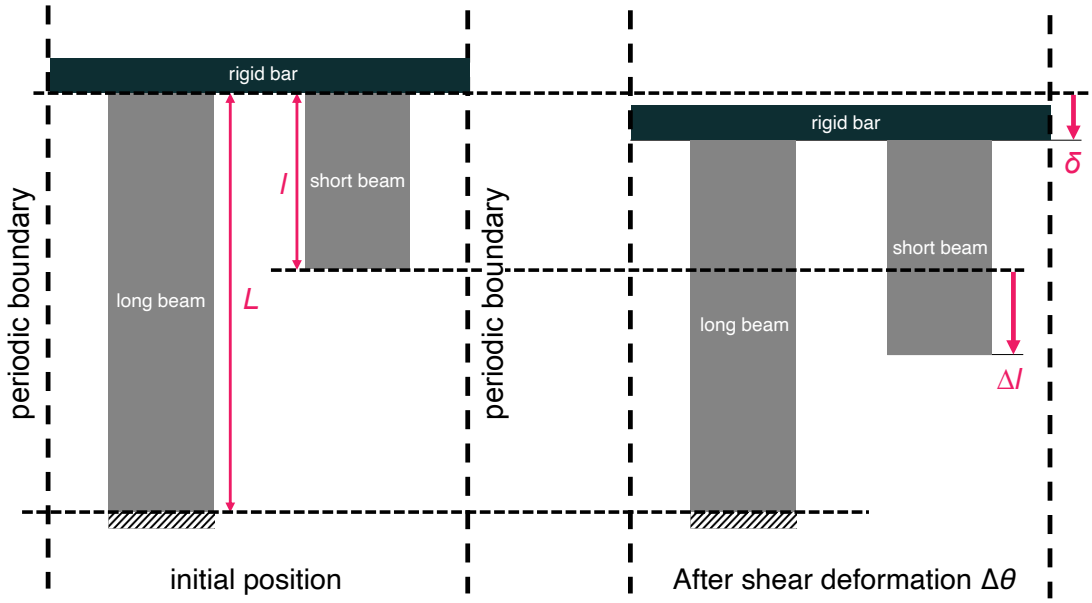


Fig. 4-5. Schematic illustrating the stretching deformation of long beam and short beam excluding the bending and rotating of beams. Long beams and short beams are aligned alternately under periodic boundary conditions. Long beams were fixed at the bottom ends. Long beams and short beams are all connected with a rigid bar at the top ends. Short beams are pulled downwards by Δl at the bottom ends due to shear deformation associated with the change in the angle $\Delta\theta$. The rigid bar is balanced at a displacement of δ.

設計した MPXM を，ヤング率 9.4 MPa の熱可塑性ポリウレタン（TPU）を用いて，材料押出（MEX）型 AM 装置（Raise3D Pro2）により作製した．MPXM を変形させるための荷重は，本研究では最初の試みとして手作業で加えた．また，引張試験器と滑車による変形試験も行った．

4.4. 結果

4.4.1. 解析結果

Fig. 4-6 に，角度変化 $\Delta\theta$ のせん断変形によって生じる単位格子あたりの弾性ひずみエネルギー変化を計算した結果を示す．Fig. 4-6(a)-(c)は，それぞれ式(4-10)-(4-12)によって計算され，設計パラメータは $L = 20$ mm，$\alpha = 120°$，$\beta = 75°$，$b = 20$ mm，$t_{\mathrm{beam}} = 3$ mm，$t_{\mathrm{hinge}} = 1$ mm，$R = 1$ mm，$E = 9.4$ MPa とし，$h = 3$ mm と $h = 6$ mm の MPXM を比較した．

Fig. 4-6a に，梁の伸縮変形に伴う弾性ひずみエネルギー変化 U_a を示す．このエネルギー曲線は等価な 2 つの極小値を持つ w の形を示した．つまり，Alqasimi らの双安定機構はこれらの角度変化 $\Delta\theta$ にて安定化する．この 2 つの安定相の間にエネルギー障壁がある．h が大きいとき，すなわち，長梁の長さ L と短梁の長さ l との差が大きいとき，このエネルギー障壁は大きくなった．

Fig. 4-6b に，弾性ヒンジの曲げによる弾性ひずみエネルギー変化 U_b を示す．角度変化 $\Delta\theta$ の絶対値が大きくなると弾性ヒンジの曲げ変形による弾性ひずみエネルギーが大きくなった．h が大きいとき，すなわち，長梁の長さ L と短梁の長さ l との差が大きいとき，短梁の両端の弾性ヒンジのたわみ角は大きく増加する．したがって，弾性ヒンジの曲げによる弾性ひずみエネルギー変化がより急峻に増加した．

Fig. 4-6c に，梁の伸縮による弾性ひずみエネルギー変化 U_{a} と弾性ヒンジの曲げによる弾性ひずみエネルギー変化 U_{b} の和である全弾性ひずみエネルギー変化 U を示す．h が十分大きいとき，長梁と短梁の長さの差が大きくなり，Alqasimi らの双安定機構における初期安定相と準安定相の間のエネルギー障壁が大きくなり，MPXM で準安定相が出現した．一方で，h が小さいと、梁の伸縮によるエネルギー障壁が小さくなり，曲げによる弾性ひずみエネルギーによって全弾性ひずみエネルギーの障壁が覆い隠され，全弾性ひずみエネルギーの極小値が消滅し準安定相の出現が妨げられる．

以上より，h が大きく，長梁の長さ L と短梁の長さ l との差が大きいとき，エネルギー障壁が全弾性ひずみエネルギーに現れやすく，準安定相を形成しやすい．しかし，設計要件に制約があるため，エネルギー障壁の大きさには限界がある．

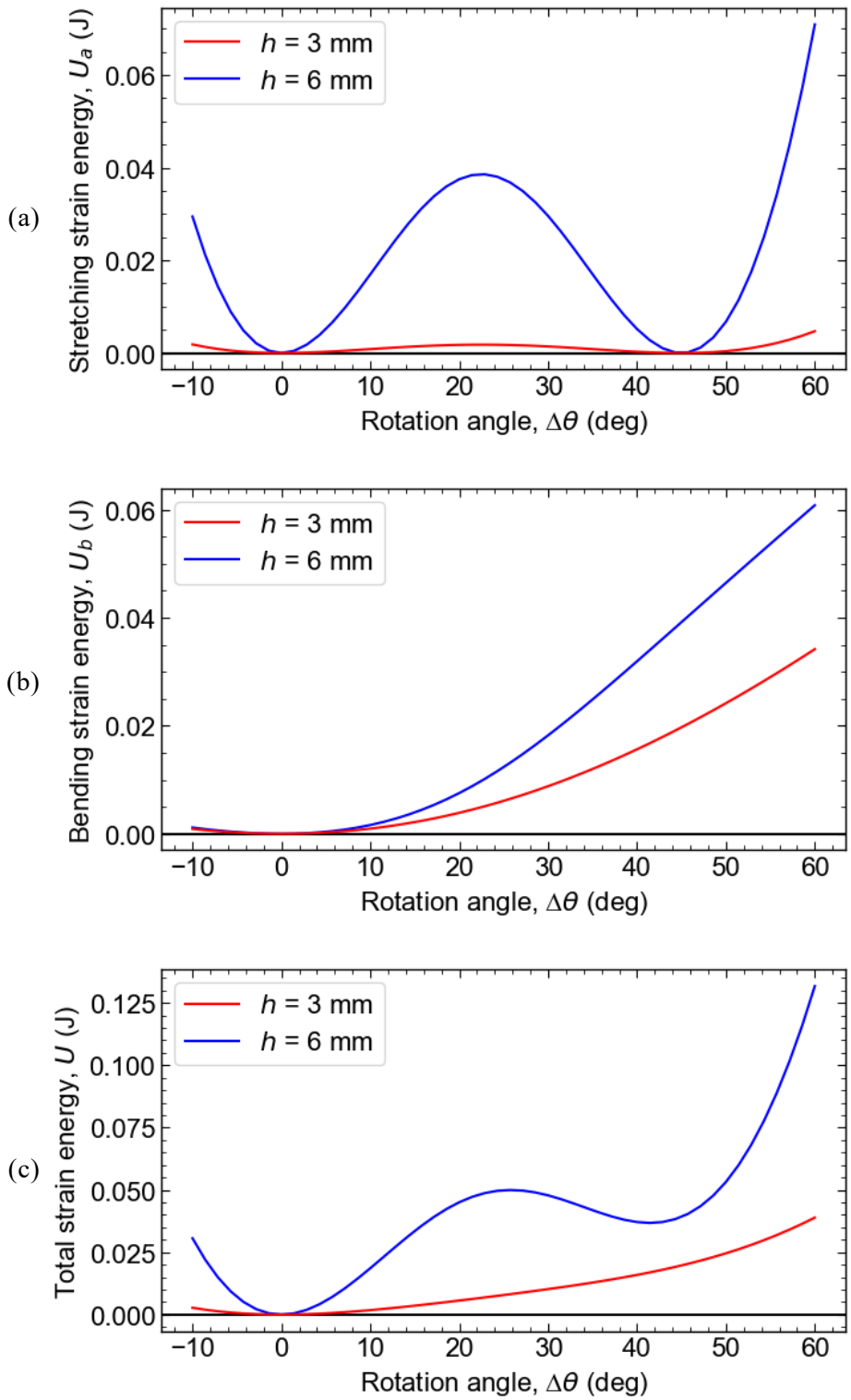


Fig. 4-6. Elastic strain energy per unit cell induced by shear deformation $\Delta\theta$. (a) Elastic strain energy of stretching deformation of the beams, (b) elastic strain energy of bending deformation of the flexure hinges, and (c) total Elastic strain energy.

準安定相が現れ bistable となる条件を探索するため，h を変えて角度変化 $\Delta\theta$ に対する全弾性ひずみエネルギーU を計算し Fig. 4-7a に示した．この全弾性ひずみエネルギーについて前進差分法を用いて微分した全弾性ひずみエネルギーの変化率 $\mathrm{d}U/\mathrm{d}\Delta\theta$ を Fig. 4-7b に示した．全弾性ひずみエネルギーの変化率 $\mathrm{d}U/\mathrm{d}\Delta\theta$ が角度変化 $\Delta\theta$ に伴い負の値から正の値に切り替わるところで全弾性ひずみエネルギーU は極小値をとる．Fig. 4-7a に示すように，h が大きくなると，極小値が二つできた．二つの極小値は，$\Delta\theta = 0^\circ$ のときの初期状態の安定相と $\Delta\theta \approx 45^\circ$ のときのせん断変形後の準安定相である．また，h が小さいとき，$\Delta\theta > 0$ で全弾性ひずみエネルギーは単調増加する．Fig. 4-7b より，MPXM が bistablity が切り替わる閾値は $4.0 < h < 4.5$ であった．

また，Fig. 4-7b に示す全弾性ひずみエネルギーの変化率 $\mathrm{d}U/\mathrm{d}\Delta\theta$ は，MPXM に純せん断ひずみ $\Delta\theta$ を与えたときのせん断応力に相当する．変化率 $\mathrm{d}U/\mathrm{d}\Delta\theta$ が正のとき，MPXM はせん断ひずみ $\Delta\theta$ が減少する向きに抗力を作用し，変化率 $\mathrm{d}U/\mathrm{d}\Delta\theta$ が負の値を示すとき，MPXM はせん断ひずみ $\Delta\theta$ が増加する向きに抗力を作用する．さらに，Fig. 4-7b にて MPXM の安定相および準安定相をとるときの変化率 $\mathrm{d}U/\mathrm{d}\Delta\theta$ の傾きがそれぞれの相における見かけのせん断弾性率を示唆している．

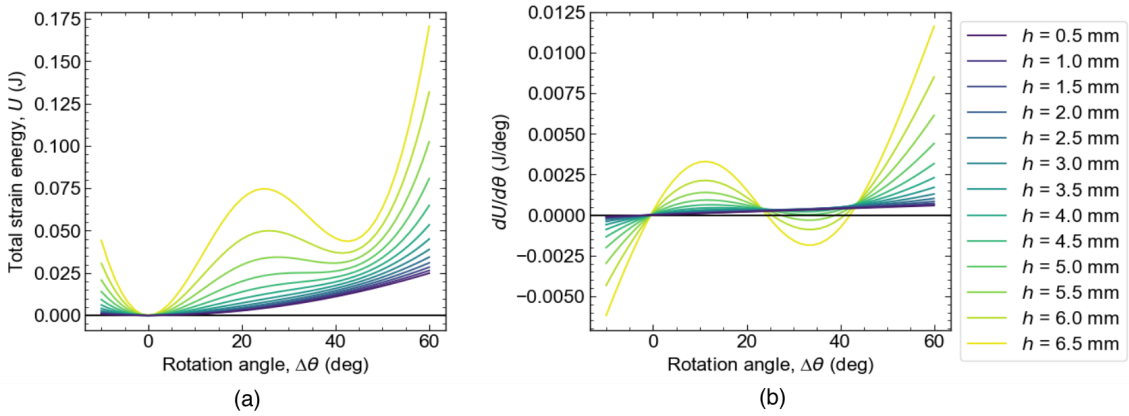


Fig. 4-7. Total elastic strain energy landscapes with respect to rotation angle ($\Delta\theta$) for various values of h. (a) Total elastic strain energy plotted against $\Delta\theta$ and (b) the slope ($\mathrm{d}U/\mathrm{d}\Delta\theta$) of total elastic strain energy as a function of $\Delta\theta$.

4.4.2. 実験結果

MPXM の単位格子を W 方向に 6 周期，L 方向に 4 周期配列させたものを AM により造形した．Fig. 4-8 に造形した MPXM をせん断変形させたときの様子を示す．AM 造形したままの MPXM を Fig. 4-8a に示す．せん断ひずみを加えたところ，Fig. 4-8b に示すように，初期状態から一段ずつ準安定相で安定化した．十分なせん断ひずみを加えると，Fig. 4-8c のように MPXM 全体が準安定相へ変形し安定化した．

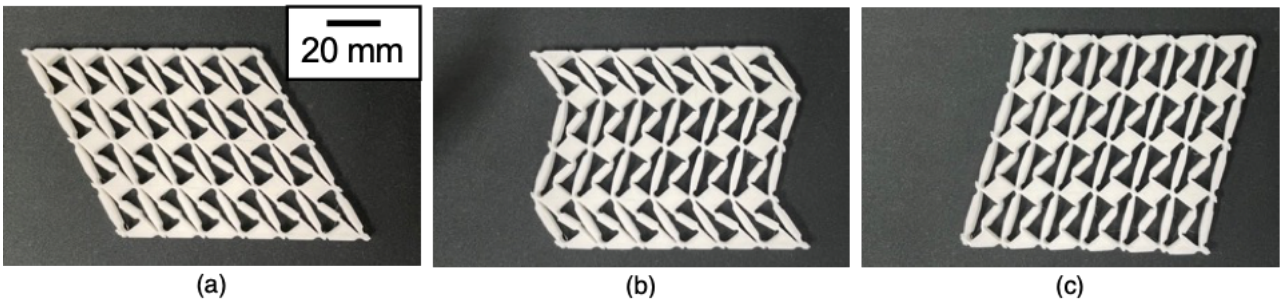


Fig. 4-8. Snapshots of 3D-printed Martensitic Phase Transforming Metamaterial. (a) In the initial state, (b) the middle two rows transitioned to the metastable state in response to shear deformation, and (c) the whole structure transitioned to the metastable state in response to shear deformation.

4.5. 考察

4.5.1. MPXM の周期性による打ち切り効果

前述した MPXM の解析は MPXM を無限周期と仮定したものである．しかし，実際の MPXM は有限周期で造形される．ここでは，周期数による bistablity の打ち切り効果を調べる．Fig. 4-9a に MPXM が 1 周期のみの状態を想定して，Fig. 4-5 のような回転成分と曲げ成分を取り除いた模式図を示す．MPXM が 1 周期だけのとき，短梁の下端を下方にΔl だけ引張り，剛体バーが δ だけ変位するときの釣り合いの式は式(4-13)となり，剛体バーが安定化する変位は式(4-14)となる．

$$Ebt_{\mathrm{beam}}\left(-\frac{\delta}{L}\cdot 2+\frac{\Delta l-\delta}{l}\right)=0 \tag{4-13}$$

$$\delta=\frac{L}{L+2l}\Delta l \tag{4-14}$$

MPXM が N 周期のときの回転成分と曲げ成分を取り除いた模式図を Fig. 4-9b に示す．このとき，式(4-13)の釣り合いのしきは式(4-15)のようになり，N 周期で剛体バーは式(4-16)の変位で安定化する．

$$Ebt_{\mathrm{beam}}\left\{-\frac{\delta}{L}\cdot(N+1)+\frac{\Delta l-\delta}{l}\cdot N\right\}=0 \tag{4-15}$$

$$\delta=\frac{NL}{NL+(N+1)l}\Delta l \tag{4-16}$$

すると，この系は N 周期で 1 段の構造である．偏角$\Delta\theta$ が生じたときの MPXM の 1 段あたりの梁の伸縮による弾性ひずみエネルギー$U_{\mathrm{a}}{}^{N}$は，式(4-17)のように表せる．

$$U_{\mathrm{a}}^{N}=\frac{Ebt_{\mathrm{beam}}}{2}\left\{\frac{\delta^2}{L}\cdot(N+1)+\frac{(\Delta l-\delta)^2}{l}\cdot N\right\}=\frac{Ebt_{beam}}{2}\cdot\frac{N(N+1)}{NL+(N+1)l}\Delta l^2 \tag{4-17}$$

また，弾性ヒンジは各梁の両端にあるので，式(4-1)を用いて 1 段あたりの弾性ヒンジの曲げによる弾性ひずみエネルギー$U_{\mathrm{b}}{}^{N}$は式(4-18)で表せる．

$$\begin{aligned}U_{\mathrm{b}}^{N}&=2(N+1)\int_0^{\Delta\theta}M_{\mathrm{ND}}\mathrm{d}\alpha_{\mathrm{ND}}+2N\int_0^{\Delta\varphi}M_{\mathrm{ND}}\mathrm{d}\alpha_{\mathrm{ND}}\\&=\frac{Ebt_{\mathrm{hinge}}^2}{12}\left[-0.0089+1.3556\sqrt{\frac{t_{\mathrm{hinge}}}{2R}}-0.5227\left(\sqrt{\frac{t_{\mathrm{hinge}}}{2R}}\right)^2\right]\{(N+1)\Delta\theta^2\\&\qquad+N\Delta\varphi^2\}\end{aligned} \tag{4-18}$$

さらに，せん断変形による 1 段あたりの全弾性ひずみエネルギーU^Nは式(4-19)で表せる．

$$U^N=U_{\mathrm{a}}^{N}+U_{\mathrm{b}}^{N} \tag{4-19}$$

式(4-17)～式(4-19)の弾性ひずみエネルギーについて周期数 N を 1~10 周期としたときのグラフを Fig. 4-10a に示す．このグラフでは，どの偏角でも周期数を増やすと弾性ひずみエネルギーは増加した．また，変形する梁の数が増えたため弾性ひずみエネルギーも増加した．そこで Fig. 4-10a の弾性ひずみエネルギーを周期数で除算したものを Fig. 4-10b に示す．すると，1 周期のとき弾性ひずみエネルギーは全てのせん断ひずみで最も大きく，周期数が大きくなるほど小さくなった．

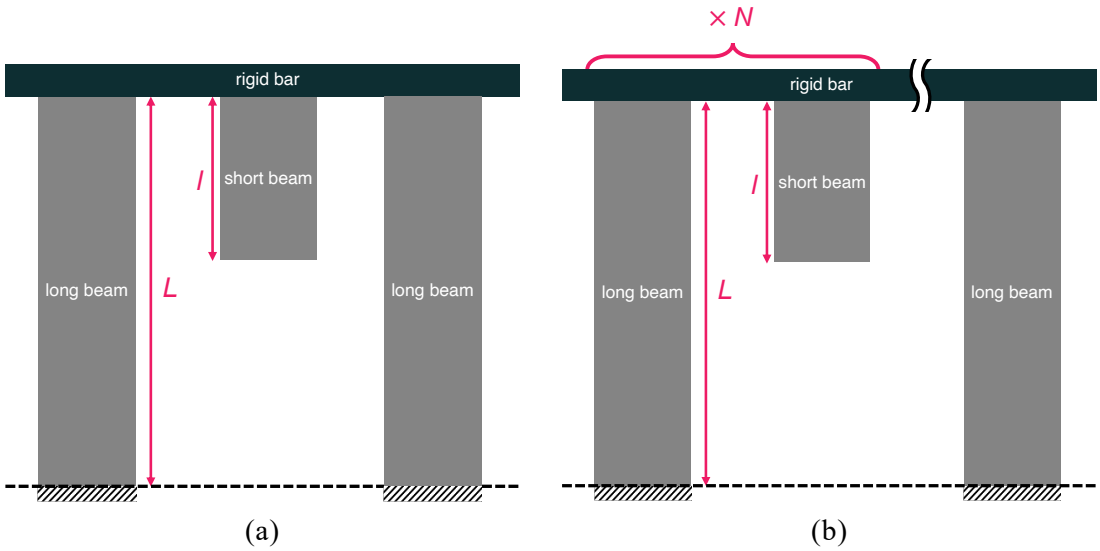


Fig. 4-9. Schematic illustrating the stretching deforming long beam and short beam excluding the bending and rotating of beams. Long beams and short beams are aligned alternately for (a) 1 period and (b) *N* periods.

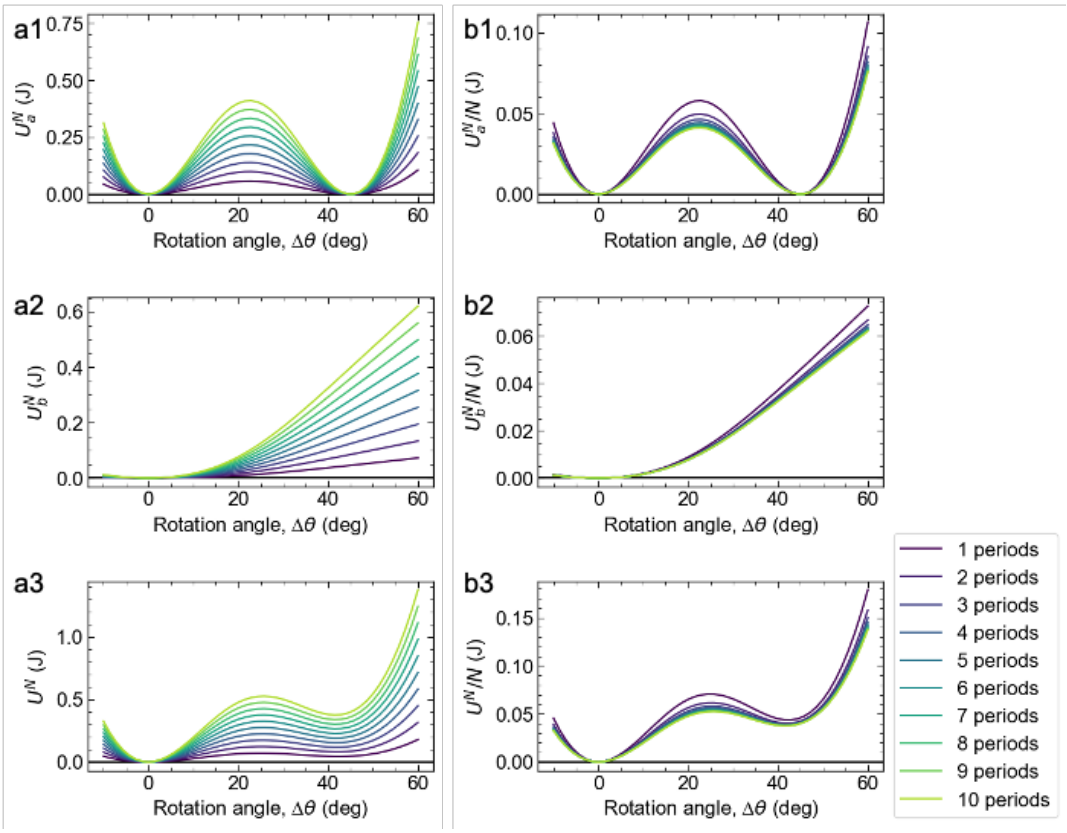


Fig. 4-10. (a) Elastic strain energy per row induced by shear deformation $\Delta\theta$. (b) Elastic strain energy per row divided by the number of cells in a row induced by shear deformation $\Delta\theta$.

周期数の増加による弾性ひずみエネルギーの収束を調べるため，周期数を 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 10, 100, 1000, ∞となるときのせん断ひずみ$\Delta\theta$による弾性ひずみエネルギーを求め Fig. 4-11a に示す．ただし，∞周期の MPXM は周期境界条件を与えて計算したものと同じであるとして，式(4-10)-(4-12)を用いて弾性ひずみエネルギーを求めた．この弾性ひずみエネルギーが 1 周期と比較して何%の大きさかを Fig. 4-12b に示した．このグラフから周期数を大きくすると弾性ひずみエネルギーは周期境界条件へと収束した．周期境界条件との差は 6 周期で周期境界条件の 10%以下の差，100 周期で周期境界条件の 1%以下，1000 周期で周期境界条件の 0.1%以下となった．

周期数を増やすと，梁の伸縮による弾性ひずみエネルギーは，せん断ひずみによらず一律で減少し，1 周期の 66.7%の弾性ひずみエネルギーまで減少した．弾性ヒンジの曲げによる弾性ひずみエネルギーは，せん断ひずみが 30°付近で周期数の増加による弾性ひずみエネルギーの減少量が最も小さかった．全弾性ひずみエネルギーは，せん断ひずみが 45°付近で弾性ひずみエネルギーの減少率が最も小さかった．つまり，周期数を増加しても単位格子あたりの準安定相における弾性ひずみエネルギーの変化量は小さいが，エネルギー障壁における弾性ひずみエネルギーの減少量は大きい．よって，MPXM の周期数を増やすと，MPXM の単位格子構造の場合より安定相と準安定相との間を遷移しやすくなる．

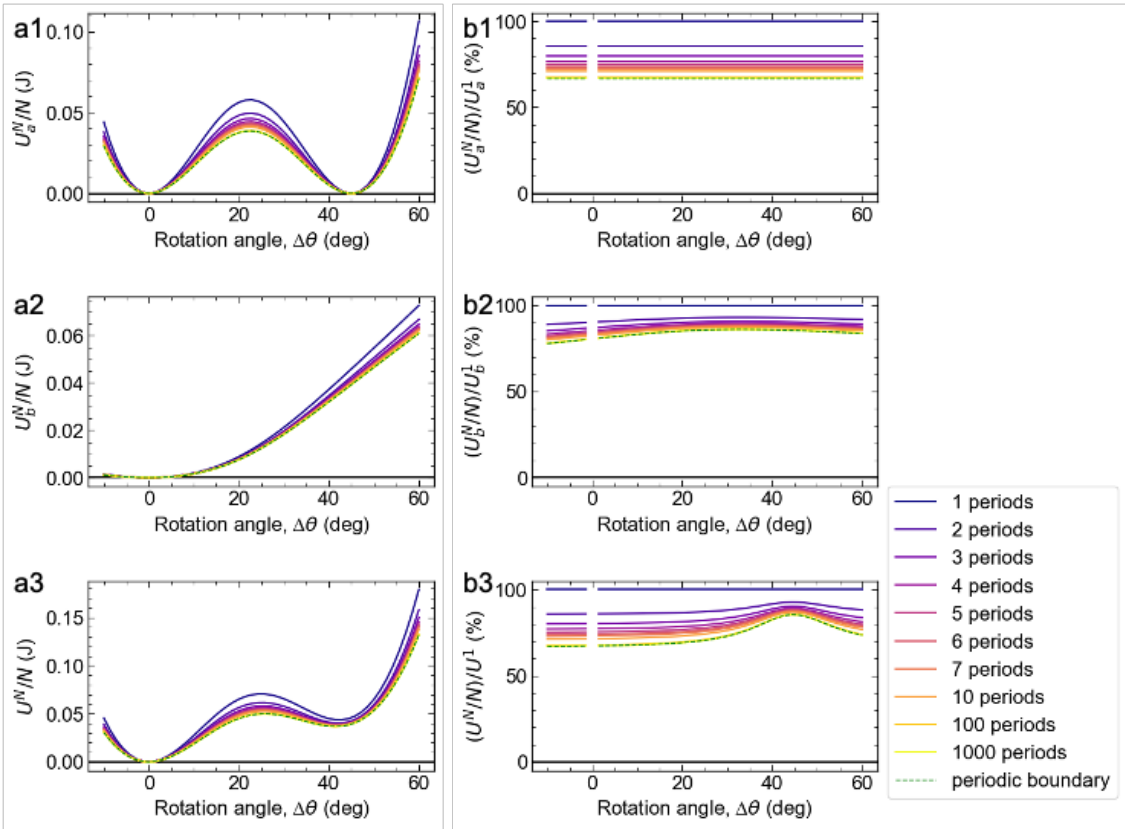


Fig. 4-11. (a) Change of elastic strain energy, induced by shear deformation $\Delta\theta$, due to periods. (b) Change rate of elastic strain energy, induced by shear deformation $\Delta\theta$, due to periods.

4.5.2. 実際のマルテンサイト相変態との類似点と相違点

金属材料のマルテンサイト変態にはいくつかの種類がある．ここでは，開発したメタマテリアルのマルテンサイト変態について，実際のマルテンサイトとの類似点や相違点を比較しながら考察し，今後の研究の展開の可能性を探る．マルテンサイト変態には，応力誘起マルテンサイト変態（stress induced martensite ; Strs-IMT），ひずみ誘起マルテンサイト変態（strain induced martensite transformation ; Strn-IMT），変形誘起マルテンサイト変態（deformation induced martensite transformation ; DIMT）と呼ばれるものがある．ひずみ誘起マルテンサイト変態については，Co-Cr-Mo 合金の変形に関する論文で報告されている[20–22].

もちろんこれら以外に温度変化による熱誘起マルテンサイト変態があるが，ここでは力学的な応力やひずみによるマルテンサイトに絞り議論する．度々，ひずみ誘起マルテンサイトと応力誘起マルテンサイトを加工誘起マルテンサイトと総称することがある．ひずみ誘起マルテンサイトと応力誘起マルテンサイトを判別することは困難である．

しかし，ひずみは応力によって生じるため，ひずみ誘起マルテンサイトも応力誘起マルテンサイトに分類されるべきだという意見もある．応力は原因でひずみや変形は現象であるとはいえ，ひずみ誘起マルテンサイトは応力誘起マルテンサイトと区別されるべきであると考える．ひずみ誘起マルテンサイトを示す材料には Fe-Mn 合金や Co-Cr-Mo 合金などがある[20–22]．例えば，Co-Cr-Mo 合金では、熱処理によって形成される準安定な FCC 相は，本研究のメタマテリアルとは異なり，変形中に層ごとの厚みは増えず，熱的に安定な HCP 相に遷移しない．その代わりに，FCC 相中の不連続かつ異なる場所の最小の原子積層から，最小の層の数の HCP 相が形成される．変形後，これらの層は結合し，より大きな HCP 領域を形成する．このような HCP 相では，HCP 相の(0001)面の ABAB 型積層などの積層周期に位相差があるところで積層欠陥が残る．さらに，すでに形成された HCP 相中に準安定な FCC 相が残ったとしても，HCP 相の底面すべりに起因する変形が同時に進行するため，与えられたひずみに対するマルテンサイト相の体積分率の増加は小さくなる．つまり，マルテンサイト相の体積率を増加させるためには多くのひずみが必要である．これに対し，本研究で創製した MPXM は，変形量と相転移した領域の量が比例する．力を受けた結果変形する量と変態の量が比例することから，その挙動は，応力誘起マルテンサイト相変態の挙動に近い．

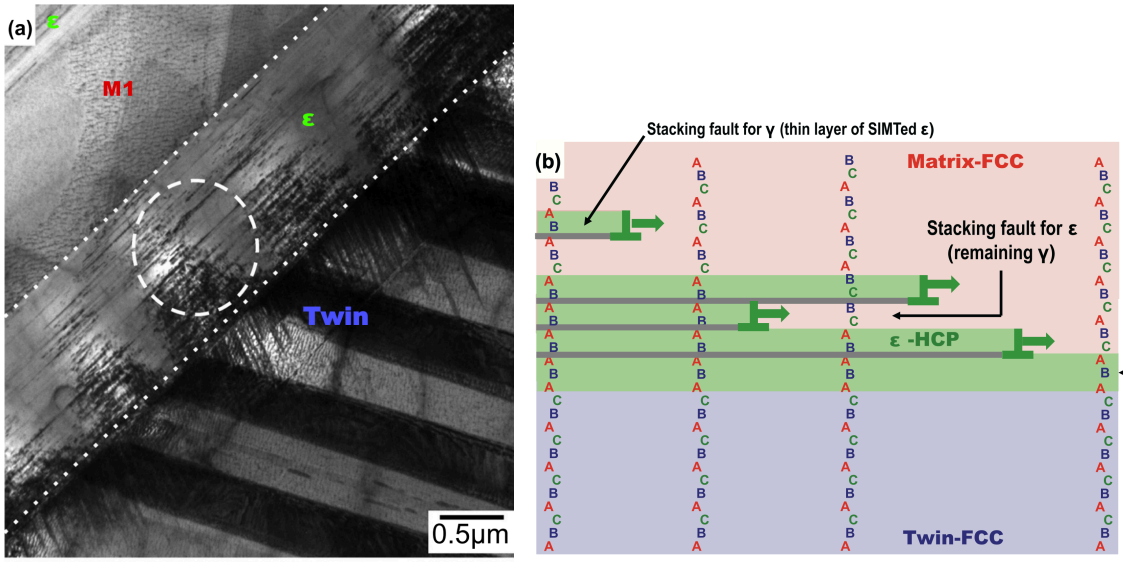


Fig. 4-12. Strain induced martensite (Strn-IM) of the Co-Cr-Mo alloy. (a) Transmission Electron Microscope (TEM) image of ε-hcp phase formed by Strn-IMT of fcc-phase of metastable matrix. (b) schematic illustration showing the change in the stacking of atomic layer on close-packed planes, i.e., {111} -plane of fcc-phase and dn (0001)-plane of hcp-phase. (Reproduced with permission from Elsevier.)

4.6. 小括

本研究では，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示す新しい力学メタマテリアルを設計した．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．その結果，以下の知見を得た．

i. 設計したメタマテリアルは，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することができる．この状態変化は，層ごとのせん断変形を繰り返すことによって構造変化する．この変形は，実際の材料のマルテンサイト変態に伴う原子配列の変化に類似する．

ii. 2 つの安定相間の遷移を支配するエネルギー変化は，短梁の引張変形，長梁の圧縮変形，弾性ヒンジの曲げによって生じる．メタマテリアルのエネルギー変化は，せん断ひずみの関数として解析的に定式化される．

iii. この力学メタマテリアルは，梁の連結部にシームレスな弾性ヒンジを利用して設計することで，TPU を用いた MEX 型 AM によって作製できる．力学メタマテリアルの変形挙動は，実際の応力誘起マルテンサイト相変態の変形挙動に類似している．

iv. 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．

参考文献

[1] E. de Moor, S. Lacroix, A.J. Clarke, J. Penning, J.G. Speer, Effect of retained austenite stabilized via quench and partitioning on the strain hardening of martensitic steels, Metall. Mater. Trans. A Phys. Metall. Mater. Sci. 39 (2008) 2586–2595. https://doi.org/10.1007/s11661-008-9609-z.

[2] D. V. Edmonds, K. He, F.C. Rizzo, B.C. De Cooman, D.K. Matlock, J.G. Speer, Quenching and partitioning martensite-A novel steel heat treatment, Mater. Sci. Eng. A. 438–440 (2006) 25–34. https://doi.org/10.1016/j.msea.2006.02.133.

[3] M. Soleimani, A. Kalhor, H. Mirzadeh, Transformation-induced plasticity (TRIP) in advanced steels: A review, Mater. Sci. Eng. A. 795 (2020) 140023. https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.140023.

[4] J.M. McCracken, B.R. Donovan, T.J. White, Materials as Machines, Adv. Mater. 32 (2020) 1–48. https://doi.org/10.1002/adma.201906564.

[5] K. Otsuka, X. Ren, Physical metallurgy of Ti–Ni-based shape memory alloys, Prog. Mater. Sci. 50 (2005) 511–678. https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2004.10.001.

[6] X. Yang, L. Ma, J. Shang, Martensitic transformation of Ti50(Ni50−xCux) and Ni50(Ti50−xZrx) shape-memory alloys, Sci. Rep. 9 (2019) 3221. https://doi.org/10.1038/s41598-019-40100-z.

[7] J. Mohd Jani, M. Leary, A. Subic, M.A. Gibson, A review of shape memory alloy research, applications and opportunities, Mater. Des. 56 (2014) 1078–1113. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2013.11.084.

[8] T. Baxevanis, C.M. Landis, D.C. Lagoudas, On the fracture toughness of pseudoelastic shape memory alloys, J. Appl. Mech. Trans. ASME. 81 (2014) 1–8. https://doi.org/10.1115/1.4025139.

[9] D. Restrepo, N.D. Mankame, P.D. Zavattieri, Phase transforming cellular materials, Extrem. Mech. Lett. 4 (2015) 52–60. https://doi.org/10.1016/j.eml.2015.08.001.

[10] D.M. Correa, C.C. Seepersad, M.R. Haberman, Mechanical design of negative stiffness honeycomb materials, Integr. Mater. Manuf. Innov. 4 (2015) 165–175. https://doi.org/10.1186/s40192-015-0038-8.

[11] D.A. Debeau, C.C. Seepersad, M.R. Haberman, Impact behavior of negative stiffness honeycomb materials, J. Mater. Res. 33 (2018) 290–299. https://doi.org/10.1557/jmr.2018.7.

[12] D.M. Correa, T. Klatt, S. Cortes, M. Haberman, D. Kovar, C. Seepersad, Negative stiffness honeycombs for recoverable shock isolation, Rapid Prototyp. J. 21 (2015) 193–200. https://doi.org/10.1108/RPJ-12-2014-0182.

[13] Z. Hu, Z. Wei, K. Wang, Y. Chen, R. Zhu, G. Huang, G. Hu, Engineering zero modes in transformable mechanical metamaterials, Nat. Commun. 14 (2023) 1–9. https://doi.org/10.1038/s41467-023-36975-2.

[14] J. Ou, Z. Ma, J. Peters, S. Dai, N. Vlavianos, H. Ishii, KinetiX - designing auxetic-inspired deformable material structures, Comput. Graph. 75 (2018) 72–81. https://doi.org/10.1016/j.cag.2018.06.003.

[15] A. Alqasimi, Design Of Shape Morphing Structures Using Bistable Elements, PhD Dissertation, University of South Florida, Tampa, Florida, n.d. http://scholarcommons.usf.edu/etd/5897.

[16] M. Ling, L.L. Howell, J. Cao, G. Chen, Kinetostatic and Dynamic Modeling of Flexure-Based Compliant Mechanisms: A Survey, Appl. Mech. Rev. 72 (2020) 030802. https://doi.org/10.1115/1.4045679.

[17] Y.K. Yong, T.-F. Lu, D.C. Handley, Review of circular flexure hinge design equations and derivation of empirical formulations, Precis. Eng. 32 (2008) 63–70. https://doi.org/10.1016/j.precisioneng.2007.05.002.

[18] C. Li, N. Wang, B. Chen, G. Shang, X. Zhang, W. Chen, Spatial compliance modeling and optimization of a translational joint using corrugated flexure units, Mech. Mach. Theory. 176 (2022) 104962. https://doi.org/10.1016/j.mechmachtheory.2022.104962.

[19] W.O. Schotborgh, F.G.M. Kokkeler, H. Tragter, F.J.A.M. Van Houten, Dimensionless design graphs for flexure elements and a comparison between three flexure elements, Precis. Eng. 29 (2005) 41–47. https://doi.org/10.1016/j.precisioneng.2004.04.003.

[20] T. Mitsunobu, Y. Koizumi, B.-S. Lee, K. Yamanaka, H. Matsumoto, Y. Li, A. Chiba, Role of strain-induced martensitic transformation on extrusion and intrusion formation during fatigue deformation of biomedical Co–Cr–Mo–N alloys, Acta Mater. 81 (2014) 377–385. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.08.039.

[21] Y. Koizumi, S. Suzuki, K. Yamanaka, B.-S. Lee, K. Sato, Y. Li, S. Kurosu, H. Matsumoto, A. Chiba, Strain-induced martensitic transformation near twin boundaries in a biomedical Co–Cr–Mo alloy with negative stacking fault energy, Acta Mater. 61 (2013) 1648–1661. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.11.041.

[22] T. Mitsunobu, Y. Koizumi, B.-S. Lee, A. Chiba, Asymmetric slip trace formation in tension/compression cyclic deformation of biomedical Co–Cr–Mo–N alloy with negative stacking fault energy, Scr. Mater. 74 (2014) 52–55. https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2013.10.015.

第5章　熱誘起相転移メタマテリアルの創製

5.1.　緒言

これまで開発されてきた PXCM は，変形し相転移することで，衝撃を吸収した後も，原形に復帰して再度利用できる，すなわち繰り返し使用可能な衝撃吸収材として応用が進められている[1,2]．圧縮変形により相転移した PXCM の形状は，外部から引張荷重を加えることで元の形状に戻すことが可能である[3,4]．しかしながら，外部からの荷重を加えることは困難な場合もあり，外力による形状回復の必要性は応用の範囲を制限する．環境の変化による形状回復が生じるようにすることなどにより利便性を高め，更なる応用が広がる．そのためには，引張荷重以外の条件で元の形状に回復する機構を組み込む必要がある．本章では，温度条件によって相転移を起こす PXCM の開発のため，PXCM の一部に温度変化によって変形するような部材を設計に組み込んだ．

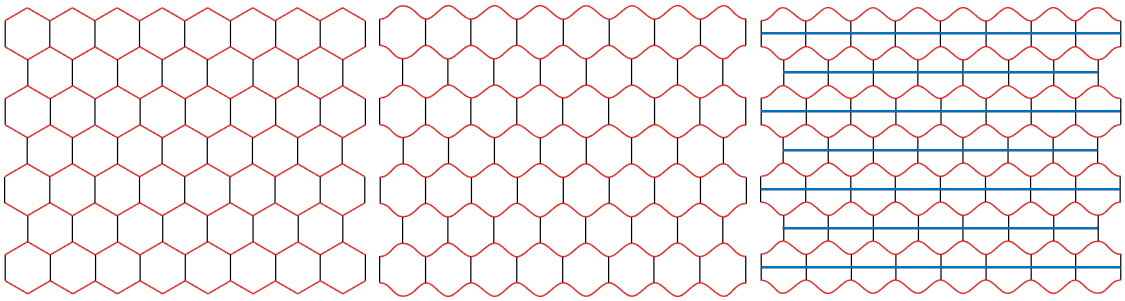
5.2.　熱誘起 PXCM の設計

5.2.1.　設計コンセプト

温度によって状態を遷移するメタマテリアルを設計する．双安定機構に，状態を切り替える，すなわち，エネルギー障壁を超えるための駆動力を発生する要素を組み込むことを考える．ここでは，温度変化で状態遷移するように，温度変化によって変形するような部材を利用することとした．このような部材として，熱膨張率の差が大きい 2 種のシート材を貼り合わせたバイメタル材がある[5,6]．2 種の熱膨張率の異なる材料による AM 造形の研究は盛んに行われている[7,8]が，現在の AM 技術では PXCM が相転移を示すほど熱応力を生じさせることは困難である．本研究では，温度によって状態が切り替わるメタマテリアル，すなわち熱誘起相転移メタマテリアルのコンセプトの実証のため，AM 技術での作製やシームレスな設計ではなく，複数部材を組み立てる構造として設計した．

単純な相転移メタマテリアルの構造としてオリジナルの PXCM[4]にバイメタルを組み込む設計を行った．PXCM は，曲り梁の双安定機構（Curved-Beam Bistable Mechanism）[9]をハニカム構造に組み込むように設計された．Fig. 5-1a のようなハニカム構造が上下方向に bistable となるように赤線部分をサインカーブで置き換えたものを Fig. 5-1b に示す．この構造のままでは上下方向に圧縮したとき，水平方向に膨らみ通常のハニカム構造同様に bistable とはならない．このサインカーブが bistable となるためには，Curved-Beam Bistable Mechanism[9]と同様な拘束条件を与える必要がある．そのため，PXCM は Fig. 5-1c の青線で示すような水平方向のはりを加え，水平方向に広がらないように設計された．本研究では，バイメタルを Fig.

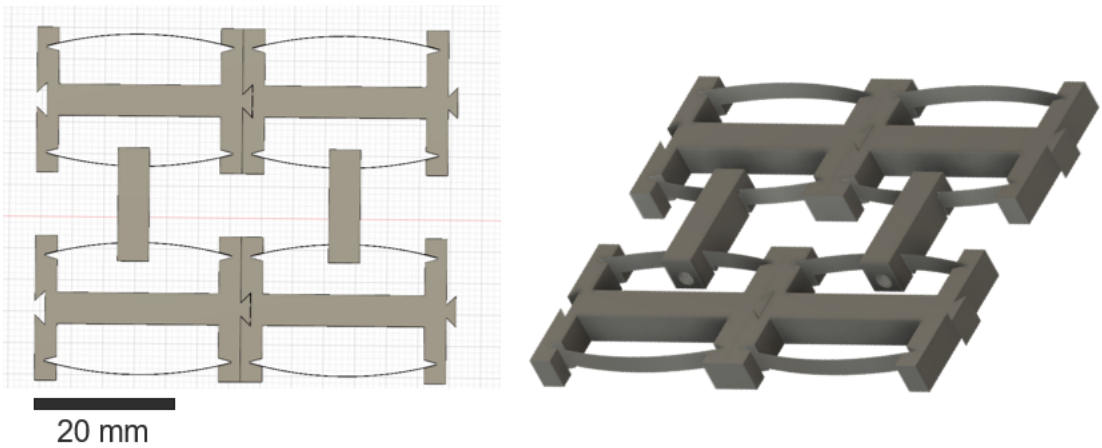
5-1c の赤曲線部分に組み込んだ設計とする．



(a) (b) (c)

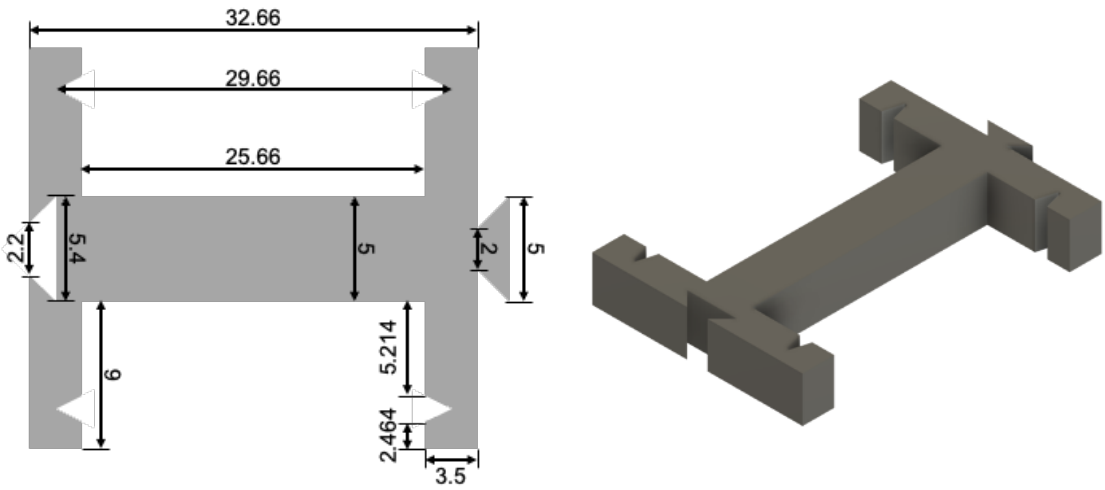
Fig. 5-1. Design concept of the original PXCM. (a) Honeycomb structure with red line beam to replace with Curved-Beam Bistable Mechanism. (b) Red lines in (a) replaced with sinusoidal curves (c) Schematic of PXCM.

真っ直ぐなバイメタル板をそれよりも幅の狭い隙間に差し込むことで Fig. 5-2 に示すように座屈させる梁を設計した．この構造は切れ込みの大きさや梁の幅を変更することでバイメタル板を任意の形状に座屈させておくことが可能になる．この構造は，H 型梁，I 型梁，バイメタル梁の 3 つの部品で構成される．H 型梁の設計を Fig. 5-3 に示す．この構造は水平構造に連結できるように凹凸があり，はめ込むことで Fig. 5-2 のように水平方向に連結することができる．さらに，H 型梁にはノッチを作り，ここにバイメタル板をはめ込む．はめ込まれたバイメタル梁を垂直方向に連結するため，Fig. 5-4 に示すような I 型梁にバイメタル板を噛ませる．I 型梁には細い溝があり，ここにバイメタル板を挿入することができる．この溝でバイメタル板を固定するために I 型梁の両端にネジ穴を設けた．ここにネジを入れ締めると，バイメタル板を I 型梁に抑え付け固定することができる．これらを組み合わせることで，熱誘起 PXCM を組み立てることができる．バイメタル梁を高熱膨張率側が H 型梁に近いように挿入する．熱誘起 PXCM の単位格子の設計図を Fig. 5-5a に示す．高熱膨張率側が凸となる状態を Fig. 5-5b に示す α 相とし，低熱膨張率側が凸となる状態を Fig. 5-5c に示す β 相とする．



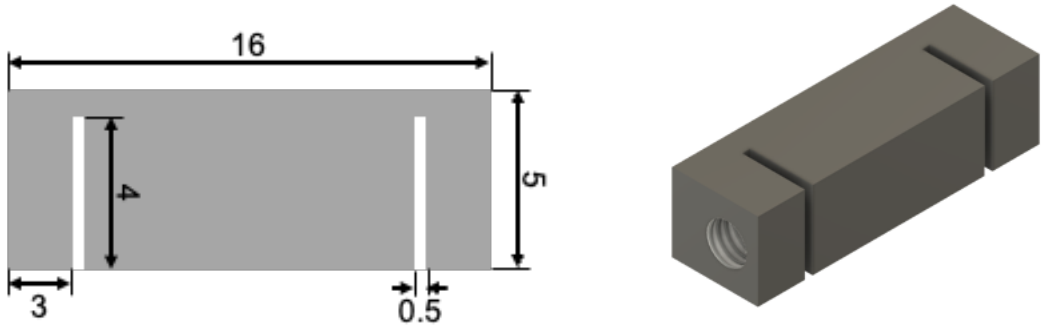
(a) (b)

Fig. 5-2. (a) 2D CAD model, (b) 3D CAD model of shape memory PXCM which exhibits thermo-elastic martensitic phase transformation utilizing buckling bimetal.



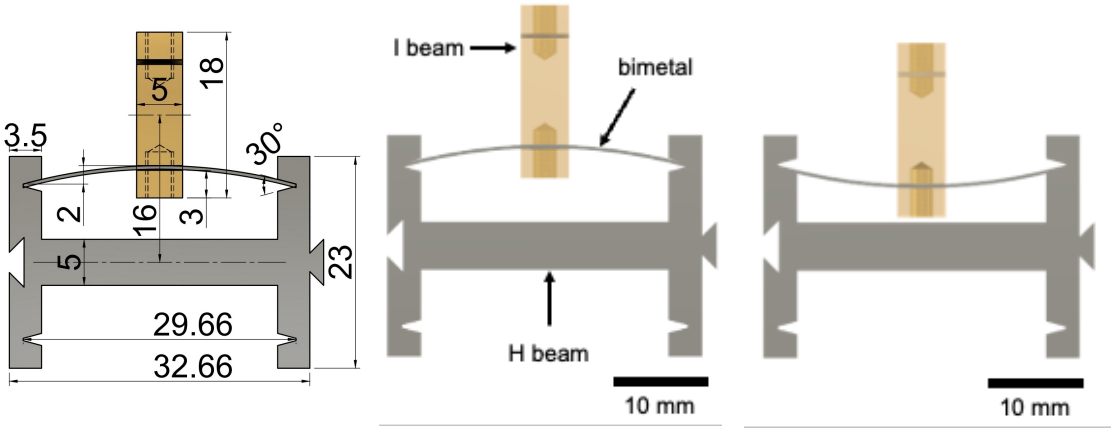
(a) (b)

Fig. 5-3. (a) 2D CAD model, (b) 3D CAD model of buckling-bimetal holding unit for Thermal Induced PXCM which exhibits thermo-elastic martensitic phase transformation.



(a) (b)

Fig. 5-4. (a) 2D CAD model, (b) 3D CAD model of buckling-bimetal holding unit for Thermal Induced PXCM which exhibits thermo-elastic martensitic phase transformation.



(a) (b) (c)

Fig. 5-5. (a) Blueprint design of elemental structure of Thermal Induced PXCM (b) shematic of Thermal Induced PXCM in α phase and (c) Schematic of Thermal Induced PXCM in β phase.

5.2.2. 設計寸法

熱誘起 PXCM が実現するための設計条件を決定する．まず，H 型梁の溝にバイメタル板を挿入し，たわませて双安定機構にするためのバイメタル板のたわみ方と H 型梁の寸法について考える．

長さ L のバイメタル梁をΔL だけ長軸方向に圧縮したときのたわみを δ とし，このときの様子の模式図を Fig. 5-6 に示す．この時のたわみ δ とバイメタル梁の押し込みΔL の関係を以下で導出する．梁が円弧状に湾曲すると仮定すると，その円弧の半径 r と中心角 θ の関係は式(5-1)のようになる．

$$r\theta = L \tag{5-1}$$

円弧の中点を C とし，線分 AB に点 C から垂線をおろしたところの点を P とする．このとき，線分 AP と PB の長さは等しく，線分 AB の長さが式(5-2)のように求められる．

$$\mathrm{AB} = 2\mathrm{AP} = 2r\sin\frac{\theta}{2} = L - \Delta L \tag{5-2}$$

円弧の中心角 θ とバイメタル梁の押し込みΔL との関係は式(5-3)のようになる．

$$\frac{2}{\theta}\sin\frac{\theta}{2} = \frac{L - \Delta L}{2L} \tag{5-3}$$

式(5-1)と式(5-2)より，バイメタル梁の押し込み変位ΔL は式(5-4)のようになる．

$$\Delta L = L - 2r\sin\frac{\theta}{2} = L\left(1 - \frac{2}{\theta}\sin\frac{\theta}{2}\right) \tag{5-4}$$

また，たわみδの長さは式(5-5)のようになる．

$$\delta = \mathrm{CO} - \mathrm{PO} = r\left(1 - \cos\frac{\theta}{2}\right) = \frac{L}{\theta}\left(1 - \cos\frac{\theta}{2}\right) \tag{5-5}$$

本研究では，長さが L = 30 mm のバイメタル板を用いて，たわみが δ = 2 mm となるように設計するためノッチ間隔を L - ΔL = 29.66 mm とした．

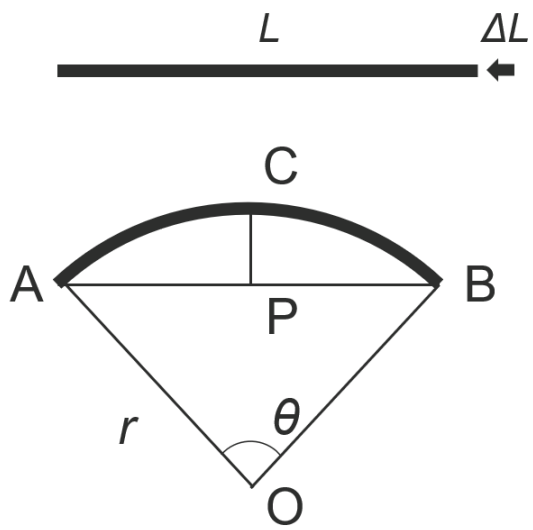


Fig. 5-6. Illustration of when a straight beam is deflected into an arc. The radius of the arc AB is r and the central angle θ.

バイメタルのたわみが大きくなれば熱誘起 PXCM が熱によりさらに大きく変形すると見込めるため，バイメタルをロール型圧延機によって圧延し，バイメタルが湾曲しやすくした．厚さ 0.25 mm のバイメタルを圧延し，厚さを 0.158±0.013 mm

とした．バイメタルの 2 種の合金の厚さはいずれも 0.079±0.007 mm となった．圧延後のバイメタルはシアーを用いて幅 3 mm，長さ 30 mm にカットした．

H 型梁, I 型梁は放電加工を用いて作製した．各梁を構成する材料には SUS316L ステンレス鋼を使用した．30 mm のバイメタル板をスリットに挟みねじで固定した後，H 型の梁にバイメタル板を差し込んだ．バイメタル板には電気用バイメタル I 種 TM1（JIS2530:2006）を使用した．本バイメタルでは，高熱膨張率側に Mn-18 mass%Cu-10 mass% Ni 合金，低熱膨張率側に Fe-36 mass% Ni インバー合金が使用されている．本研究で用いたバイメタルの材料特性と同バイメタルの構成材料の材料特性をそれぞれ，Table 5-1，Table 5-2 に示す．同じ温度変化に対する湾曲の大きさは，湾曲係数が大きいほど大きくなる．本研究では，熱誘起相転移の発現の実証を目的として，JIS 規格（JIS2530:2006）に定められているバイメタルの中で最大の湾曲係数（14.0 ~ 20.5×10^{-6} /K）を有する TM1 のバイメタルを使用した．

Table 5-1. Characteristics of bimetal used in this study.

Paramters	Value
Curvature coefficient	20.5×10^{-6} /K
Proportional temperature	-20 ~ 200 ˚C
Allowable temperature	-70 ~ 260 ˚C
Elastic modulus	138 GPa
Volume resistivity	112.2 μΩ•cm
Density	7.75 g/cm^3

Table 5-2. Characteristics of metals used for bimetal.

	Young's modulus (GPa)	Poisson's ratio	Coeffient of thermal expansion (10^{-6} /K)	Density (g/cm^3)
MnCuNi	124	0.4	29.34	7.19
FeNi	137	0.3	3.96	8.2

5.3. 方法

5.3.1. FEM シミュレーションによる熱誘起 PXCM の変形挙動予測

熱誘起 PXCM の変形を予測するため，バイメタル梁の変形について FEM シミュレーションを行った．FEM シミュレーションには COMSOL Multiphysics 5.5（COMSOL 社，スウェーデン）を用いた．熱誘起 PXCM では，真っ直ぐなバイメ

タル板をたわませて残留応力のある状態で温度や荷重を変える．あらゆる温度条件や荷重条件におけるバイメタル梁の変形を予測するため，以下の手順で FEM シミュレーションを行った．

(1) 真っ直ぐなバイメタル板を縮ませるように変位を与え，たわんだ状態にする事前シミュレーション．このたわんだ状態をバイメタル梁とし，今後のシミュレーションはこのバイメタル梁について実施する．

(2) 荷重を加えず温度変化だけを与えたシミュレーション．

(3) 温度を一定とし，様々な温度下で変位制御法による変形シミュレーション．

それぞれの詳細を以下に示す．

5.3.1.1. たわませた梁を変形するシミュレーション

真っ直ぐなバイメタル板を Fig. 5-7 のように FEM モデルを作成した．このバイメタル板は長さ L を 30 mm，厚さ t を 0.15 mm，幅（奥行き）b を 3 mm とした．梁の上半分を高熱膨張率の Mn-Cu-Ni 合金とし，梁の下半分を低熱膨張率の Fe-Ni 合金とした．梁の左端を回転自由のまま位置座標を固定し，梁がたわむように右端を x 軸の負の向きにΔL だけ変位させ，$(x,y) = (L\text{-}\Delta L,0)$の位置で回転自由で固定した．x 軸に対して完全に対称だとたわまずバイメタル板は x 軸方向に縮むだけとなる．この完全対称性を防ぎ y 軸の正の方向にたわませるため，バイメタル板全体を y 軸の正の方向に無限小だけ変位させて計算を行った．この非対称性をモデルに組み込むと，バイメタル梁は破線のように y 軸の正の方向に δ だけたわみ，α 相の状態となる．本研究では $\delta = 2$ mm とするために$\Delta L = 0.034$ mm とした．この事前シミュレーションによるバイメタル梁の模式図を Fig. 5-8 に示す．この残留応力を加えた状態のバイメタル梁の中点を C とし，点 C の y 座標 d，弾性ひずみエネルギーW を記録する．ただし，この事前シミュレーションは室温で実行した．

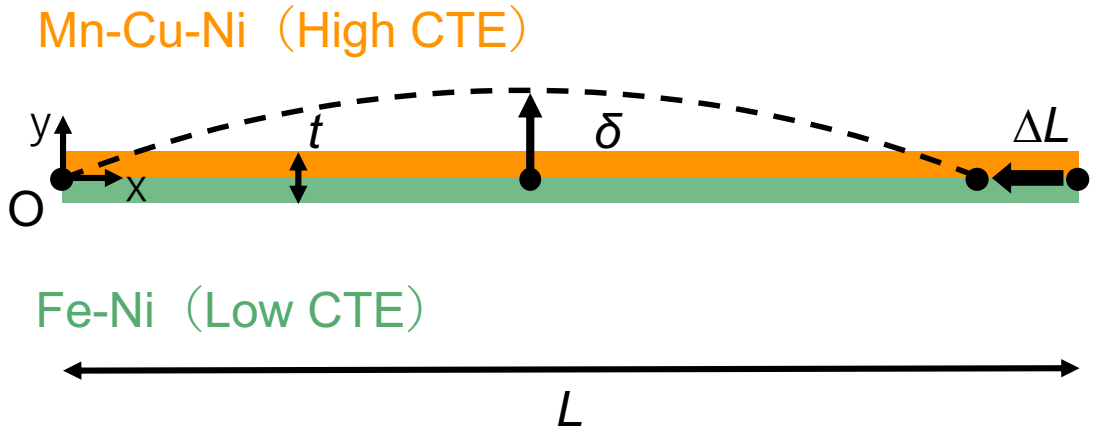


Fig. 5-7. Model of a bimetal constructed by finite element analysis. One end of a straight beam was fixed, and the other was compressed. Imposed displacements were applied to the center of the beam.

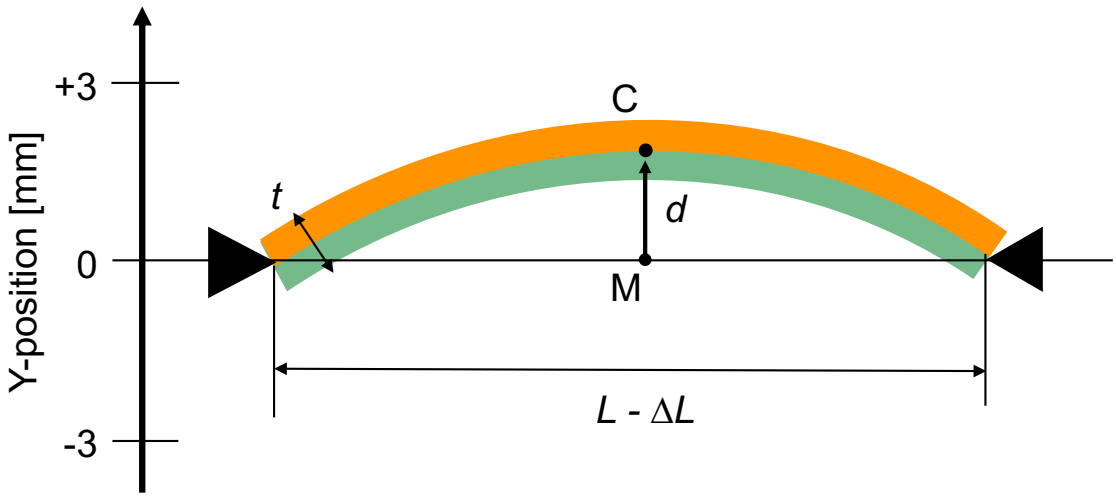


Fig. 5-8. Schematic of the FEM model of a bimetal beam residual stress. The ends of the arc-shaped beam were fixed.

5.3.1.2. 温度変化によるバイメタル梁の変形

点 C における拘束や荷重のない状態で，環境温度 T を変えたときのバイメタル梁の形状をシミュレーションした．室温のときに Fig. 5-8 において d = 2 mm となる．このモデルにおいて，環境温度 T を 0 K から 670 K まで 5 K 刻みで変化させ，熱膨張によって，弾性ひずみエネルギーW が最小となるような状態を計算した．このときの環境温度と y 座標との相関を計算した．

5.3.1.3. 一定温度下における強制変位によるバイメタル梁の変形

環境温度 T を一定としたとき，Fig. 5-8 において点 C に強制変位 d を与え，弾性ひずみエネルギー W が最小となるような状態を計算した．環境温度 T を 0 K から 670 K まで 5K 間隔で変化させた計 135 水準で設定した．各環境温度で点 C の y 座標を-3 mm から 3 mm まで 0.01 mm 刻みで位置座標を変位させた．各変位で弾性ひずみエネルギー W が最小となる状態を計算し，環境温度 T および変位 d と弾性ひずみエネルギー W の相関を評価した．

5.3.1.4. 熱誘起 PXCM の特性制御のための応力-温度状態図の作成

バイメタル梁の環境条件と形状変化の相関を整理し，熱誘起 PXCM の特性を制御するため，バイメタル梁の FEM シミュレーション結果を元に応力-温度状態図を作成する．各環境温度における弾性ひずみエネルギー W と y 座標変位 d との関係では，弾性ひずみエネルギー W の極小値が 1 つまたは 2 つ存在する．ここで，極小値が $d > 0$ で存在するとき熱誘起 PXCM は α 相で安定化し，極小値が $d < 0$ で存在するとき熱誘起 PXCM は β 相で安定化する．

変位 d を熱誘起 PXCM の単位格子の y 方向の長さで除算したものを熱誘起 PXCM の見かけのひずみ ε とする．弾性ひずみエネルギーを見かけのひずみについて微分すると，熱弾性 PXCM の見かけの応力となる．各環境温度で応力ひずみ曲線を見ると，3 次関数的なグラフとなり応力の極大値と極小値が現れる．α 相で安定となるとき，β 相から α 相へ遷移する際の応力は応力ひずみ曲線の極大値と等しくなる．また，β 相で安定となるとき，α 相から β 相へ遷移する際の応力は応力ひずみ曲線の極大値と等しくなる．このことから，各環境温度で相が遷移する応力を記録する，熱誘起 PXCM の温度-応力状態図を作成することができる．

5.3.2. 実験方法

5.3.2.1. 加熱冷却実験による熱誘起相転移の実証実験

冷却実験では，圧延後のバイメタル板を H 型の梁に差し込み I 型の梁を取り付けた状態で液体窒素によって常温から冷却し，その様子を観察した．バイメタル板には熱電対を取り付け 1 秒間隔で温度を測定し，熱誘起 PXCM の様子を撮影した．バイメタル板に直接液体窒素がかかると冷却速度が速すぎて測定を正しく行うことができないため，液体窒素を注ぐための金属バットのなかにステンレスの板を置き，その上に試料を置いて実験を行った．また，冷却中に位置がずれないように H 型の梁とステンレスの板を瞬間接着剤で固定した．液体窒素はすぐに気化するため適宜注ぎながら実験を行った．ユニットセルの変位を測定するために試料の一部に

正方形のカラーテープを張り，画像データから適した色のマスク画像を制作し，カラーテープの位置情報を取得した．

加熱実験では，冷却実験と同様の熱誘起 PXCM をホットプレート上に置き，ホットプレートの温度を徐々に上昇させながら，同様に撮影を行った．ただし，環境温度をなるべく均一に保つため，ホットプレートの周囲を断熱材で囲い，透明なガラス板越しに撮影した．

5.3.2.2. 2 次元に配列した熱誘起相転移メタマテリアルの変形

熱誘起 PXCM の単位格子を水平方向に 4 つ，垂直方向に 8 つ連結させ加熱実験を行った．加熱実験では，連結させた熱誘起 PXCM を断熱材で囲ったホットプレートの上に乗せ，温度を室温から上昇させた．加熱実験中の変位を画像解析により測定することで連結された熱誘起 PXCM の変形挙動を調査した．ホットプレートの上にガラスを乗せ，その上に作製した構造体を乗せ，加熱しながら構造体の変形の様子を観察した．ハイスピードカメラで撮影し，データロガーGL220 と K 型熱電対を用いて温度を測定した．熱電対は左右のバイメタルにスポット溶接し，10 箇所の温度を測定してその平均値を全体の温度とした．変形の基準として熱誘起 PXCM の最下行の H 型梁を接着剤でガラスに固定した．熱誘起 PXCM は全体を β 相の状態とし，加熱し α 相に相転移するように配置した．

5.4. 結果

5.4.1. FEM シミュレーション結果

5.4.1.1. 温度変化によるバイメタル梁の変形

熱誘起 PXCM の飛び移り座屈によって発生した変位は 4.2 mm であり，これは 27%の見かけのひずみに相当する．熱誘起 PXCM は，302 K の温度ヒステリシスでひずみを発生・回復した．Fig. 5-9a に，FEM シミュレーションの結果から推定した温度に対する梁中心の変位を示す．室温から冷却する FEM シミュレーションでは，冷却により-105℃で飛び移り座屈が生じ，熱誘起 PXCM はバイメタル梁が上に凸の状態の α 相（Fig. 5-9b1）から下に凸の状態の β 相（Fig. 5-9b2）に変化した．室温から加熱する FEM シミュレーションでは，135℃で飛び移り座屈が発生し，熱誘起 PXCM はバイメタル梁が下に凸の状態の β 相（Fig. 5-9c1）から上に凸の状態の α 相（Fig. 5-8c2）に変化した．

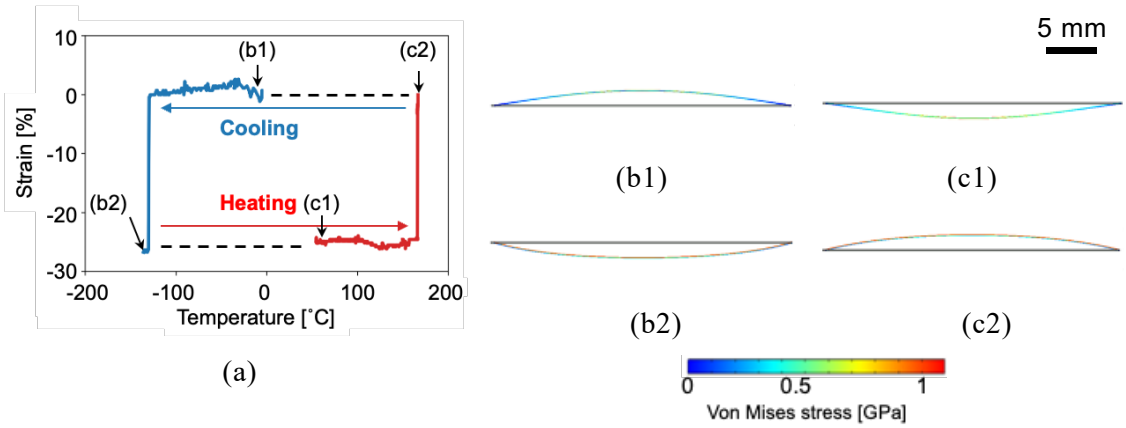


Fig. 5-8. (a) Temperature-strain curve of a TI-PXCM unit cell during heating and cooling, obtained by finite element analysis (b1) TI-PXCM stable in α phase at 0 °C (b2) TI-PXCM at -105 °C changes to β phase by cooling (c1) TI-PXCM stable in β phase at 50 °C (c2) TI-PXCM at 141 °C changes to α phase by heating.

この加熱冷却シミュレーションを，室温からではなく，高温（673 K）から低温（0 K）へ，低温（0 K）から高温（673 K）へ連続的に計算した結果を Fig. 5-10 に示す．このグラフから，環境温度が 0 K から 180 K までの間では熱誘起 PXCM は β 相のみで安定な monostable となり，180 K から 450 K までの間では，α 相と β 相の両方で安定化する bistability を示し，450 K 以上では α 相のみで安定な monostable となることを意味する．また，α 相では温度変化に対するひずみの変化量は小さく正の傾きをもつので，熱誘起 PXCM の見かけの熱膨張率は小さい正の値をもつ．一方で，β 相では温度変化に対するひずみの変化量は大きな負の傾きをもつので，熱誘起 PXCM の見かけの熱膨張率は大きな負の値を持つ．

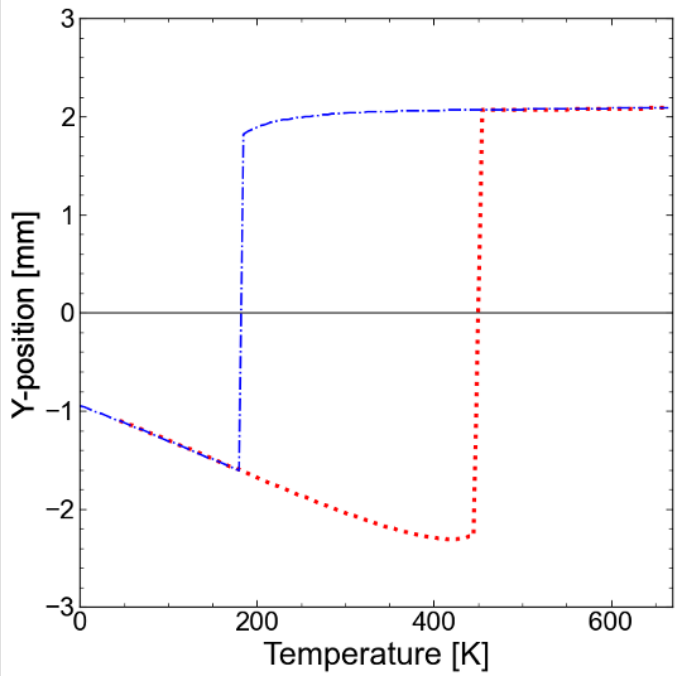


Fig. 5-10. Relationship between temperature and displacement when an unloaded bimetal is subjected to temperature changes. The red dotted line shows displacement during heating and the blue dash-dot line shows displacement during cooling.

5.4.1.2. 室温における強制変位によるバイメタル梁の変形

環境温度を室温とし，Fig. 5-8 に示すバイメタル梁の中点 C について，y 座標を +2.0 mm から-2.0 mm まで変位させた FEM シミュレーションの結果を Fig. 5-11 に示す．Fig. 5-11a に示す y = +2.0 mm の α 相の状態と Fig. 5-11e に示す y = -2.0 mm の β 相の状態では，バイメタル梁の両端の中点 M を原点と見ると，梁の形状は偶関数の形を取っている．一方で，Fig. 5-11c に示す y = 0.0 mm の α 相と β 相とのちょうど間の状態では，点 M を原点と見ると，梁形状は奇関数の形を取る．Fig. 5-11b と Fig. 5-11d では，偶関数と奇関数の形状を足し合わせた形をしている．Qiu ら[9]が明らかとしたように，このような湾曲した両持ち梁の変形では，偶関数形状を基本として，特定の条件下で奇関数形状が現れ弾性ひずみエネルギーを下げる．Qiu ら[9]によると初期形状の振幅 δ と梁の厚さ t との比が $\delta/t > 2.3$ となるとき，奇関数形状が現れる．実際，本シミュレーションでは $\delta = 2$ mm，$t = 0.15$ mm だったので，$\delta/t = 11.11$ なので，Qiu ら[9]の解析結果と一致した．また，この変形シミュレーション中の弾性ひずみエネルギーの変化を Fig. 5-12 に示す．この弾性ひずみエネルギー変化は y = 0 mm で対称な形を取った．これはバイメタル梁が真っ直ぐな状態で最も安定であることに起因すると考えられる．2 つの極小値は等価で，これらの極小値で安定な状態となる．

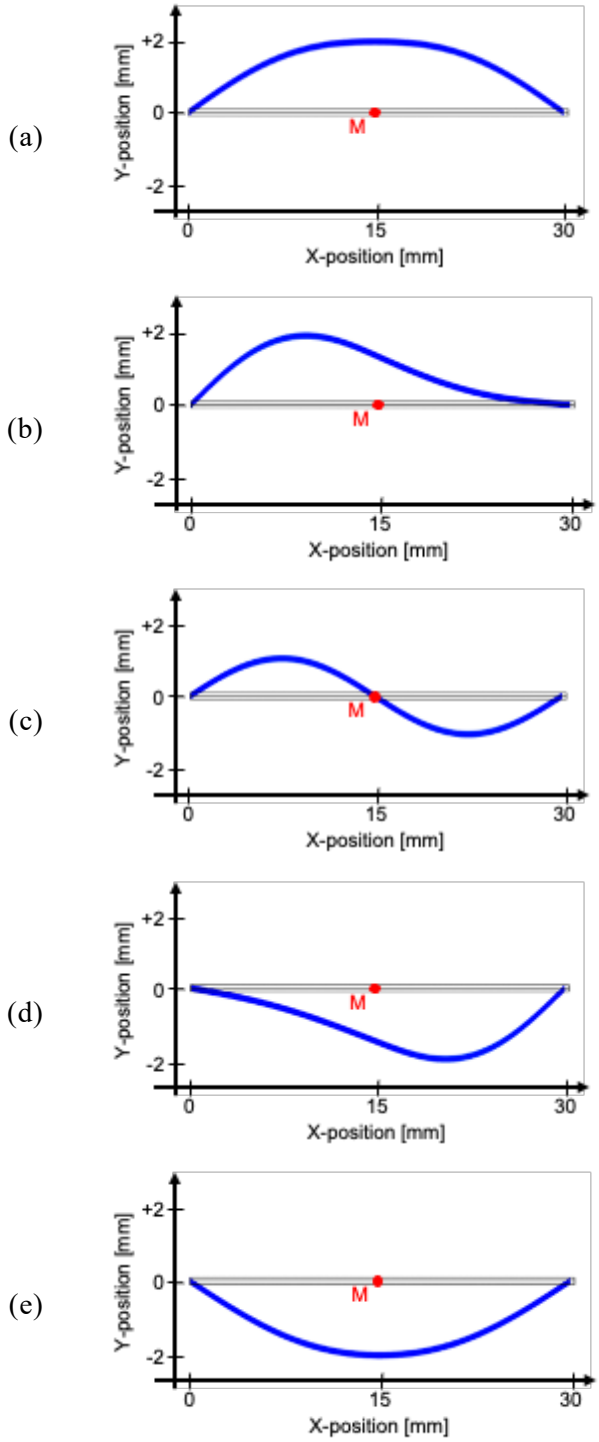


Fig. 5-11. Result of deformation analysis of bimetal beam under room temperture at y-position at (a) y = 2.0 mm, (b) y = 1.0 mm, (c) y = 0.0 mm, (d) y = -1.0 mm and (e) y = -2.0 mm.

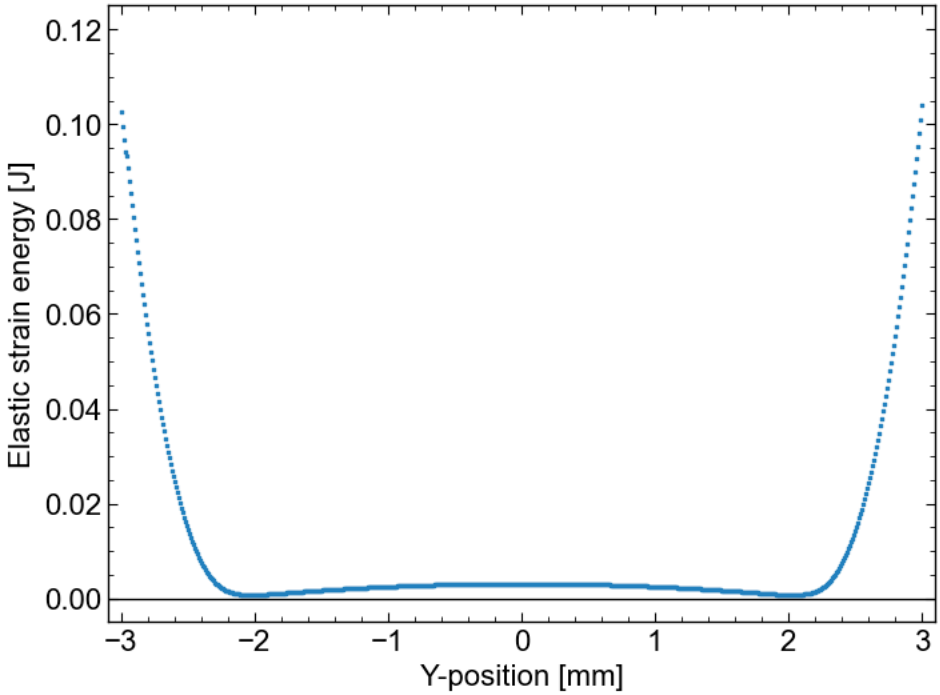


Fig. 5-12. Elastic strain energy change due to Y-displacement on point C of bimetal beam.

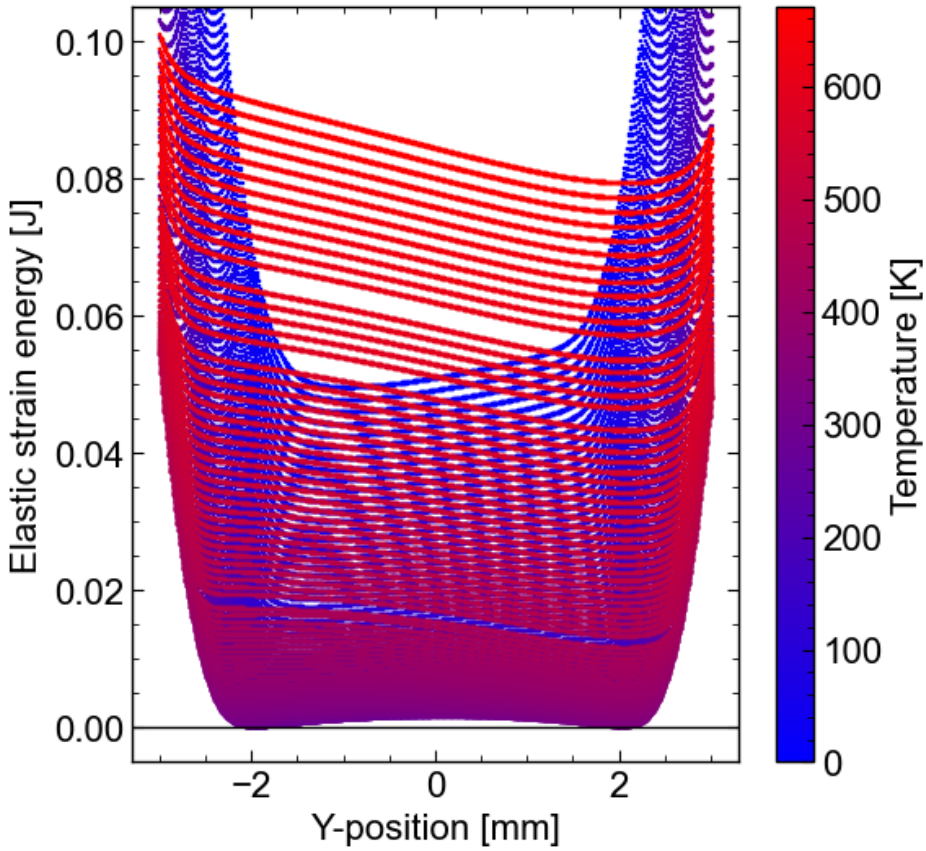
5.4.1.3. 環境温度を種々に変えた強制変位によるバイメタル梁の変形

環境温度を 0～670 K まで 5 K ずつ変えた合計 135 水準の環境温度について，Fig. 5-11 のような変形シミュレーションを行った．各温度でバイメタル梁に強制変位を与えた結果を Fig. 5-13 に示す．Fig. 5-13a に全 135 通りの FEM シミュレーションの結果を示し，Fig. 5-13b に室温（293.15 K）以上の FEM シミュレーション結果を，Fig. 5-13c に室温以下の FEM シミュレーション結果をそれぞれ示した．室温では，Fig. 5-12 に示したように等価な 2 つの極小値を持ち，α 相と β 相で等しく安定となる．環境温度から温度を変化させると，温度が室温から離れるほど弾性ひずみエネルギーは大きくなった．Fig. 5-13b に示すように室温から温度を下げていくと，2 つの極小値のうち，α 相の極小値の方が弾性ひずみエネルギーが急峻に大きくなり，β 相が安定相，α 相が準安定相となった．このとき，2 つの極小値の間の変位量は温度が低いほど小さくなった．さらに温度を下げると，α 相の極小値は消滅し，熱誘起 PXCM は β 相で monostable となった．一方で，室温から加熱し温度が上昇すると，Fig. 5-13c に示すように，2 つの極小値のうち β 相の極小値の方が弾性ひずみエネルギーがより急峻に大きくなり，α 相が安定相，β 相が準安定相となった．このとき，2 つの極小値の間の変位量は温度が高いほど大きくなった．さらに温度を上げると，β 相の極小値は消滅し，熱誘起 PXCM は α 相で monostable となった．

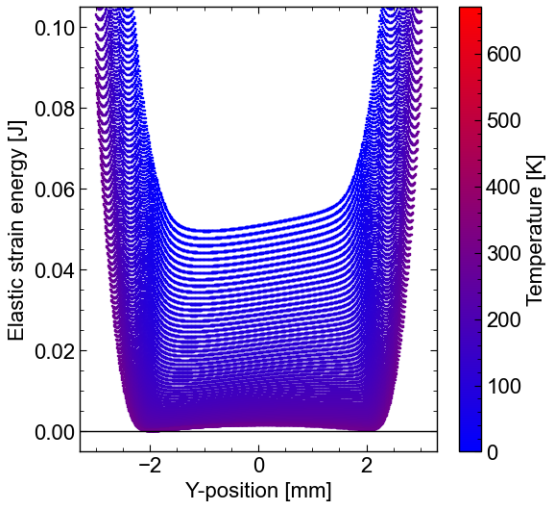
Bistable であるときに温度が低いほど 2 つの極小値の間の変位量が小さくなり，

温度が高いほど 2 つの極小値の間の変位量が大きくなるのは，熱膨張によって，バイメタル梁自体の長さ L が変わるためであると考えられる．つまり，Fig. 5-7 中の δ が温度に依存して変化することとなる．

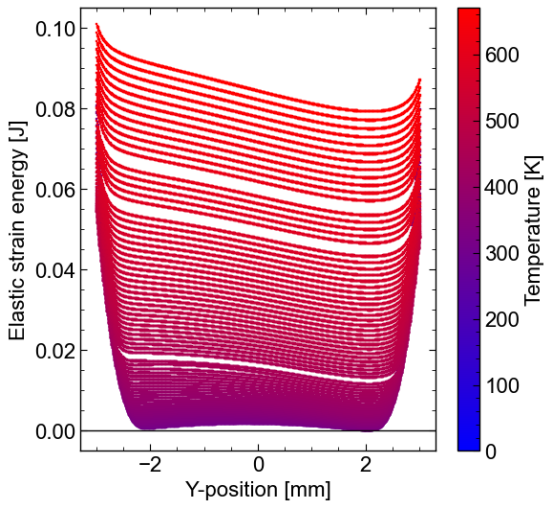
熱誘起 PXCM の弾性ひずみエネルギーと y 座標の関係について，弾性ひずみエネルギーの極小値は熱誘起 PXCM が安定化する y 座標の位置を示しており，荷重を取り除いた場合，弾性ひずみエネルギー曲線の傾斜を下るように状態が変化し，いずれかの極小値の y 座標で安定化すると考えられる. 弾性ひずみエネルギー曲線の傾斜を下ろうと状態が変化する際, バイメタル梁で傾斜を下る方向に y 軸抗力が発生する．また，その y 座標を維持するためには内部応力に反する荷重を与える必要がある．弾性ひずみエネルギー曲線を y 座標変位で微分することで，この荷重を求めバイメタル梁の荷重-変位曲線を得ることができる．なお，荷重-変位曲線を求めることで，弾性ひずみエネルギーが極小値を取るか否かを明確化できる．



(a)



(b)

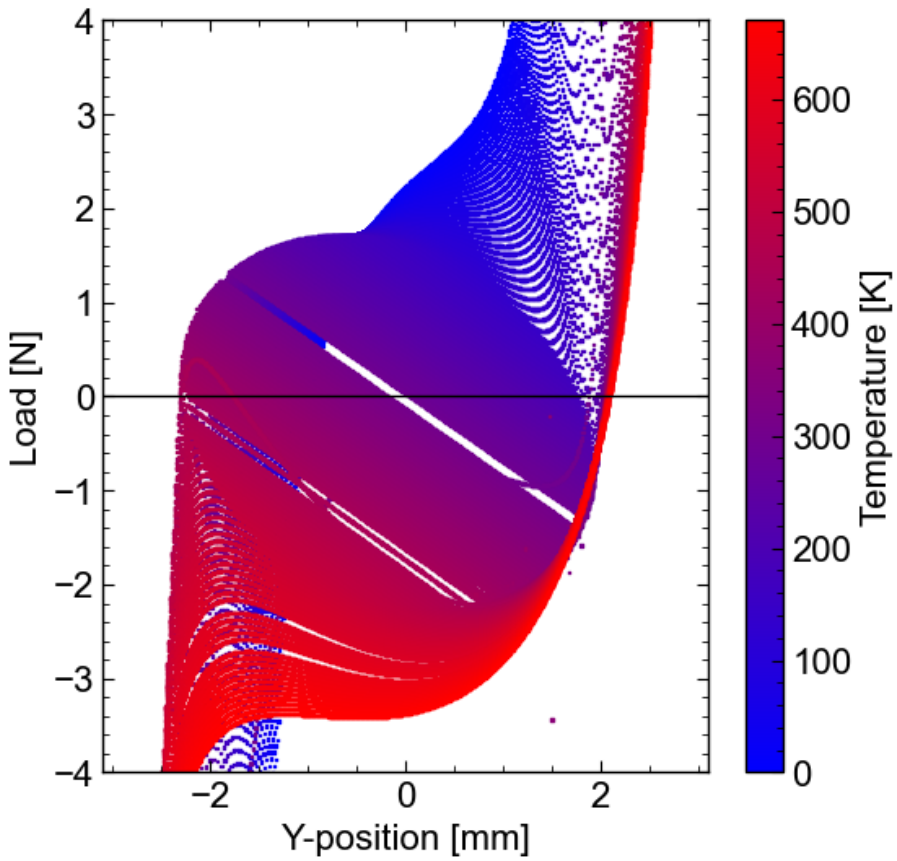


(c)

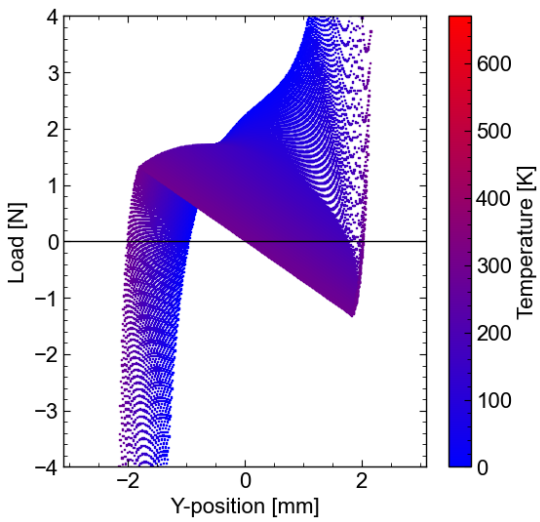
Fig. 5-13. (a) Elastic strain energy displacement curves from a displacement-controlled finite element analysis of straight bimetal. The environmental temperature was heated from 0 K to 670 K in 5 K increments, (b) $T < 293.15$ K, (c) $T > 293.15$ K.

Fig. 5-14 に，弾性ひずみエネルギーを変位で微分した荷重-変位曲線を示す．この微分は点 C における y 軸の負の方向に発生する抗力に等しい．この抗力は，環境温度下でその y 座標変位にするために必要な荷重とも言える．このグラフはどの環境温度でも 3 次関数的な形状を示した．環境温度が室温から大きく離れると，荷重-変位曲線は単調増加のグラフとなるが，70 K 以上の環境温度では，荷重の極大値と極小値が現れる．さらに，140 ~ 520 K では，荷重-変位曲線の傾きが負の値で一定となる領域が現れた．この負の傾きは Fig. 5-11(b-d)で見られたような奇数関数状の梁変形が現れたことを意味する．言い換えると，温度が極めて室温から離れると，熱によるひずみが大きくなり，バイメタル梁の軸方向座屈で弾性ひずみエネルギーを和らげにくくなると考えられる．

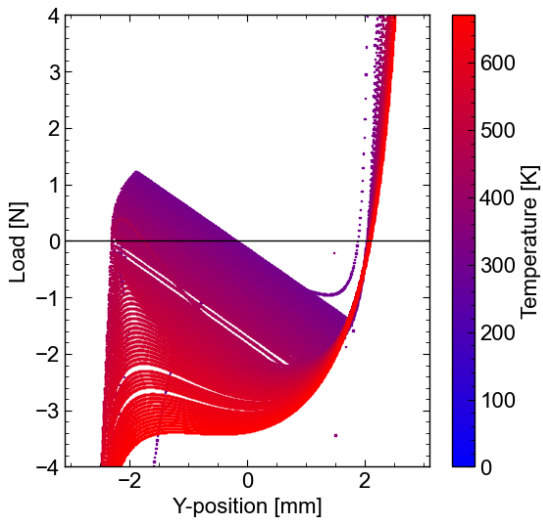
荷重-変位曲線が単調増加ではない 70 K 以上の環境温度において，y 座標が $y < -2.5$ mm の β 相の状態から徐々に荷重を増加させると，徐々に正の y 座標変位が発生し，荷重-変位曲線の極大値のところで飛び移り座屈を生じ，一気に α 相へと遷移する．逆に，y 座標が $y > 2.5$ mm の α 相の状態から徐々に荷重を減少させると，徐々に負の y 座標変位が発生し，荷重-変位曲線の極小値のところで飛び移り座屈を生じ，一気に β 相へと遷移する．



(a)



(b)



(c)

Fig. 5-14. (a) Load-displacement curves from a displacement-controlled finite element analysis of straight bimetal. The load was obtained by differentiating the elastic strain energy. (b) $T < 293.15$ K, (c) $T > 293.15$ K.

5.4.1.4. 熱誘起 PXCM の温度-応力状態図の作成

バイメタル梁の状態を環境温度と与える荷重で制御するため，Fig. 5-14 の荷重-変位曲線から，荷重温度状態図を作成する．荷重-変位曲線の極大値および極小値がそれぞれ，α 相および β 相への遷移荷重を示すことを述べた．各温度における遷移荷重をまとめてプロットすることにより荷重-変位状態図を作成する．

各温度における荷重-変位曲線について極大・極小値を温度に対してプロットした結果を Fig. 5-15 に示す． 赤い点が極大値で青い点が極小値である．このグラフは任意の温度で任意の荷重を熱誘起 PXCM にかけたときの安定相を示す状態図となる．赤い線より高温・高荷重の領域では熱誘起 PXCM は α 相で安定し，青い線より低温・低荷重の領域では β 相で安定化する．赤い線と青い線で囲まれた領域では，熱誘起 PXCM はどちらの相でもエネルギー的極小値を持ち安定的に存在することができ，この領域内で熱誘起 PXCM は bistable となる．仮に bistable 領域の外側の温度および荷重から bistable 領域内の温度および荷重条件へと環境が変化した場合，熱誘起 PXCM は環境変化前の相を維持し，α 相と β 相が共存することはない．

この状態図において，同じ荷重で α 相-bistable 間を遷移する温度（赤線）と β 相-bistable 間を遷移する温度（青線）の差はヒステリシスループの大きさを示す．状態図から荷重の絶対値が大きくなるとヒステリシスループの大きさは減少していくことがわかる．

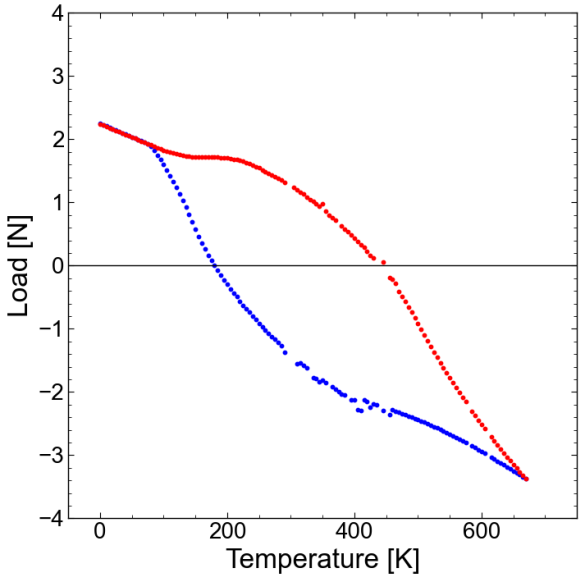


Fig. 5-15. Load-Temperature phase diagram of TI-PXCM. The red line shows the load required for transition from β phase to α phase, and the blue line shows the load required for the transition from the α phase to the β phase.

これまで用いてきた荷重-変位曲線はバイメタル梁の状態制御に向けて作られたものである．熱誘起 PXCM において，単位格子構造を配列した 2 次元メタマテリアルにおいて，状態制御を行うため，バイメタル梁の変位と荷重をそれぞれ熱誘起 PXCM のひずみと応力に変換して考える．

熱誘起 PXCM において，バイメタル梁は単位格子中に 2 つ存在する．バイメタル梁の変形から熱誘起 PXCM の見かけのひずみおよび見かけの応力を計算するため，熱誘起 PXCM の代表寸法を Fig. 5-16 の赤線のようにとる．代表要素の高さを 14 mm，幅を 32.66 mm とした．奥行きはバイメタル梁の幅と同様の 3 mm とした．

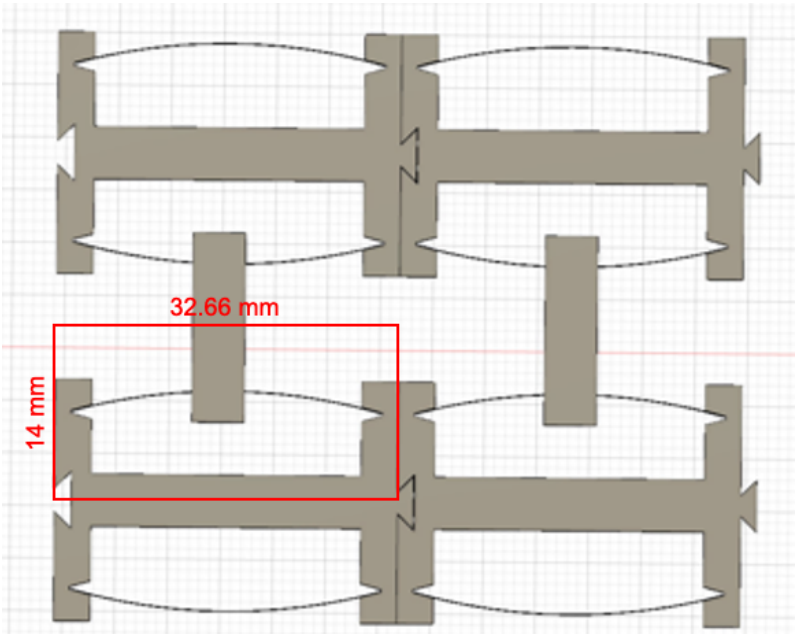


Fig. 5-16. Schematic of TI-PXCM consisting of I-shaped beam and H-shaped beam. The red rectangale represents the representative dimensions.

Fig. 5-13 の弾性ひずみエネルギーと y 座標の関係について y 座標を代表要素の高さで除算することで熱誘起 PXCM の見かけのひずみを計算し，この結果を Fig. 5-17a に示す．熱誘起 PXCM の見かけの応力は，バイメタル梁にかかる荷重を代表要素の断面，すなわち幅と奥行きの積で除算することで求められる．見かけの応力の計算結果を Fig. 5-17b に示す．これらを用いて作成した応力温度状態図を Fig. 5-17c に示す．

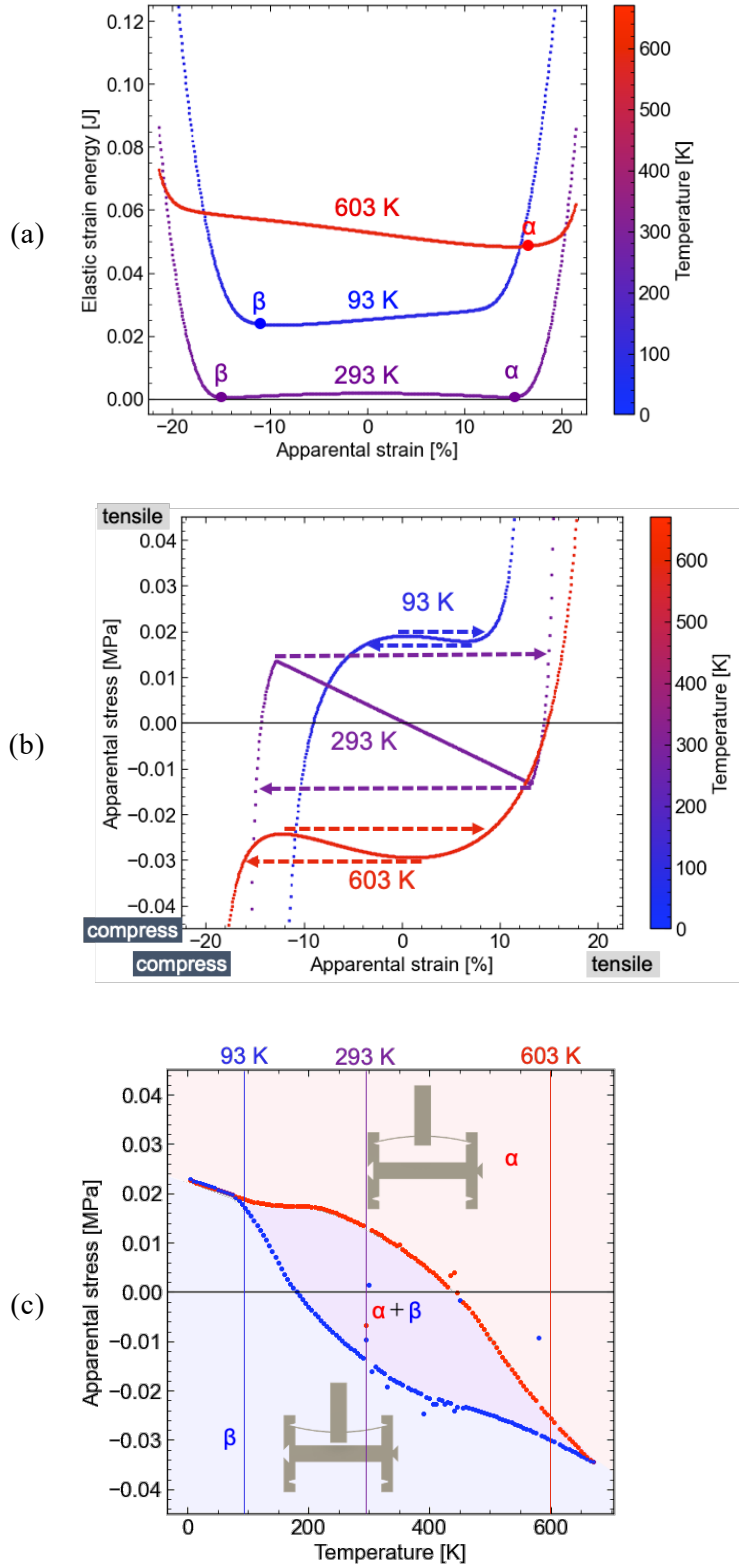


Fig. 5-17. (a) Relationship between elastic strain energy and apparental strain of TI-PXCM. (b) Relationship between apparental stress and apparental strain of TI-PXCM. (c) Stress-temperature phase diagram of TI-PXCM.

5.4.2. 実験結果

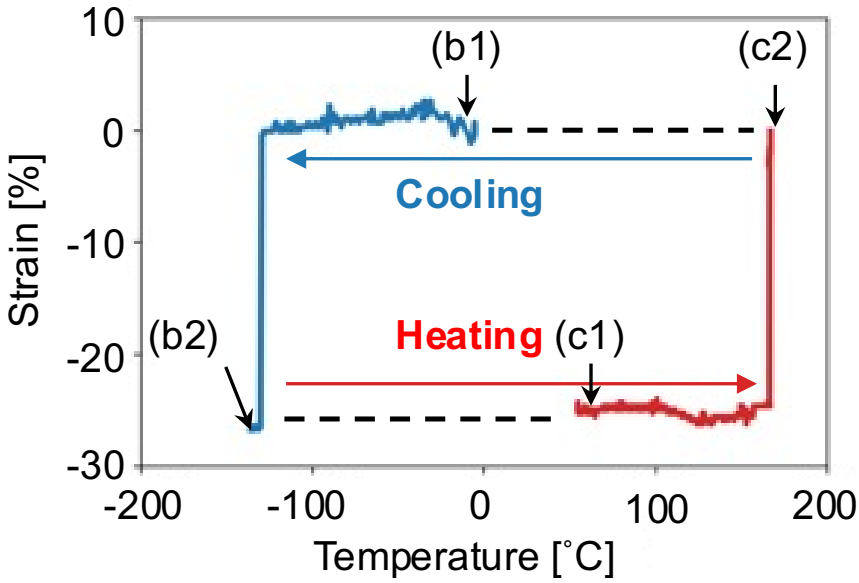
5.4.2.1. 加熱冷却実験による熱誘起相転移の実証実験

加熱・冷却実験における熱誘起 PXCM の要素構造のひずみと温度の関係を Fig. 5-18a に示す．真っ直ぐなバイメタル梁を座屈させた梁は，加熱と冷却によって発生する熱応力が座屈荷重を超えると，反対方向に飛び移り座屈した．本研究では，バイメタル梁を上が高熱膨張，下が低熱膨張となるように熱誘起 PXCM を作成した．室温ではバイメタル梁の長さは一定なので，バイメタル梁の形状は，同じ振幅で上（高熱膨張率側）に凸になったり，下（低熱膨張率側）に凸になったりした．

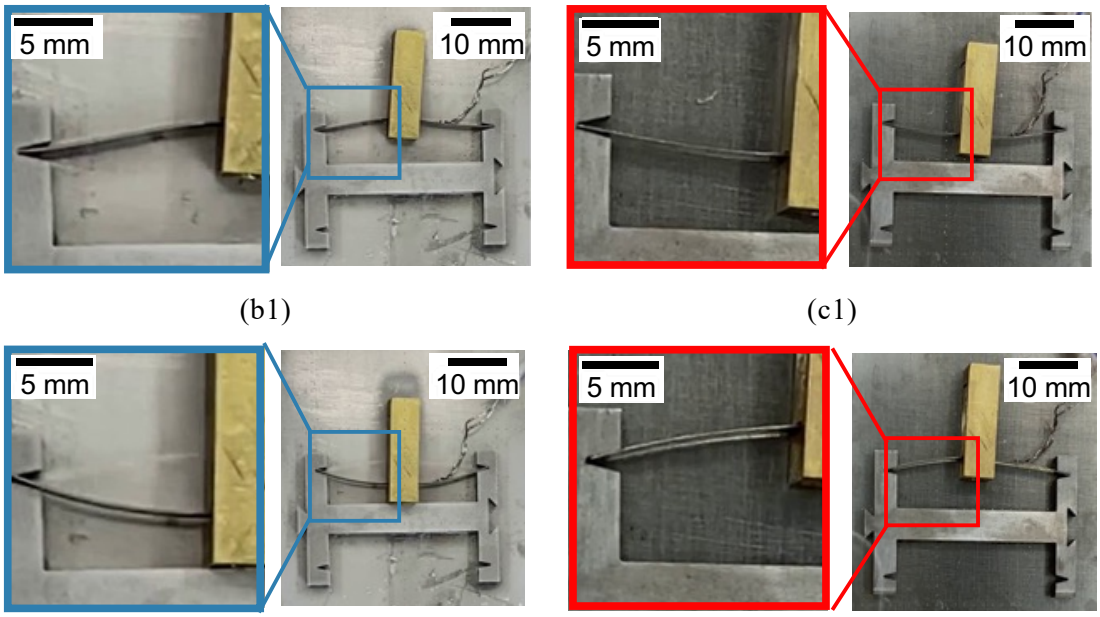
高熱膨張率側に凸の状態すなわち α 相(Fig. 5-18b1)の熱誘起 PXCM について，室温から冷却すると，約 138 K でスナップスルーが起こり，低熱膨張率側に凸の状態すなわち β 相(Fig. 5-18b2)に急速に遷移した．高熱膨張を上にした真っ直ぐなバイメタル板は, 冷却すると高熱膨張率側が低熱膨張率側に比べてより大きく縮むため, 温度変化によって β 相へと遷移する方向に熱応力が生じたと考えられる．バイメタルを変形させた温度から室温まで加熱し温度を戻してもバイメタル梁は真っ直ぐな状態に戻るだけで，β 相へ遷移する熱応力が和らぐだけで，α 相へ遷移する熱応力は生じないため，温度を元に戻しても α 相へと戻ることはない．

また，低熱膨張率側に凸な β 相(Fig. 5-18c1)の熱誘起 PXCM をホットプレートで加熱すると，約 440 K でから α 相(Fig. 5-18c2)に急峻に変化した．高熱膨張率側を上にした真っ直ぐなバイメタル板は, 加熱すると高熱膨張率側が低熱膨張率側に比べて大きく伸びるため，温度変化によって α 相へと遷移する方向に熱応力が生じたと考えられる．温度を高温から室温に戻しても熱応力は和らぐだけで β 相へ遷移する熱応力は生じないので，温度を室温に戻しても熱誘起 PXCM は β 相には戻らない．

FEM シミュレーションによって，荷重を与えない温度変化のみによるバイメタル梁の変形を Fig. 5-10 に示した. 実験による α 相から β 相への相転移温度は約 138 K だったのに対して，FEM シミュレーションによる α 相から β 相への相転移温度は約 180 K だった．実験結果とシミュレーション結果との間に 30 K ほどの差があった．一方で，β 相から α 相への相転移温度は，実験で約 440 K，FEM シミュレーションで約 450 K だった．β 相から α 相への相転移温度の実験とシミュレーションとの差は 10 K であったのに対して，α 相から β 相への相転移温度は実験とシミュレーションとで 42 K と大きかった．冷却における実験とシミュレーションとの差異の原因として，実験環境が挙げられる．冷却時には液体窒素で周囲の空間を冷却したが, その際に空気中の水分が固化し実験台の表面を覆うように霜が降りた様子が観察された．これによって，バイメタルの変形が妨げられ，相転移に必要な熱応力が大きくなり相転移する温度が下がったと考えられる．



(a)



(b1) (c1)

(b2) (c2)

Fig. 5-18. (a) Experimentally measured temperature-strain curve of a TI-PXCM unit cell during heating and cooling. The TI-PXCM expanded rapidly at 440 K and instantly shrank at 138 K as the bimetal buckled. The strain generated was 27% and the temperature hysteresis was 302 K. (b1) TI-PXCM stable in α phase at 273 K (b2) TI-PXCM at 138 K changes to β phase by cooling (c1) TI-PXCM stable in β phase at 323 K (c2) TI-PXCM at 440 K changes to α phase by heating

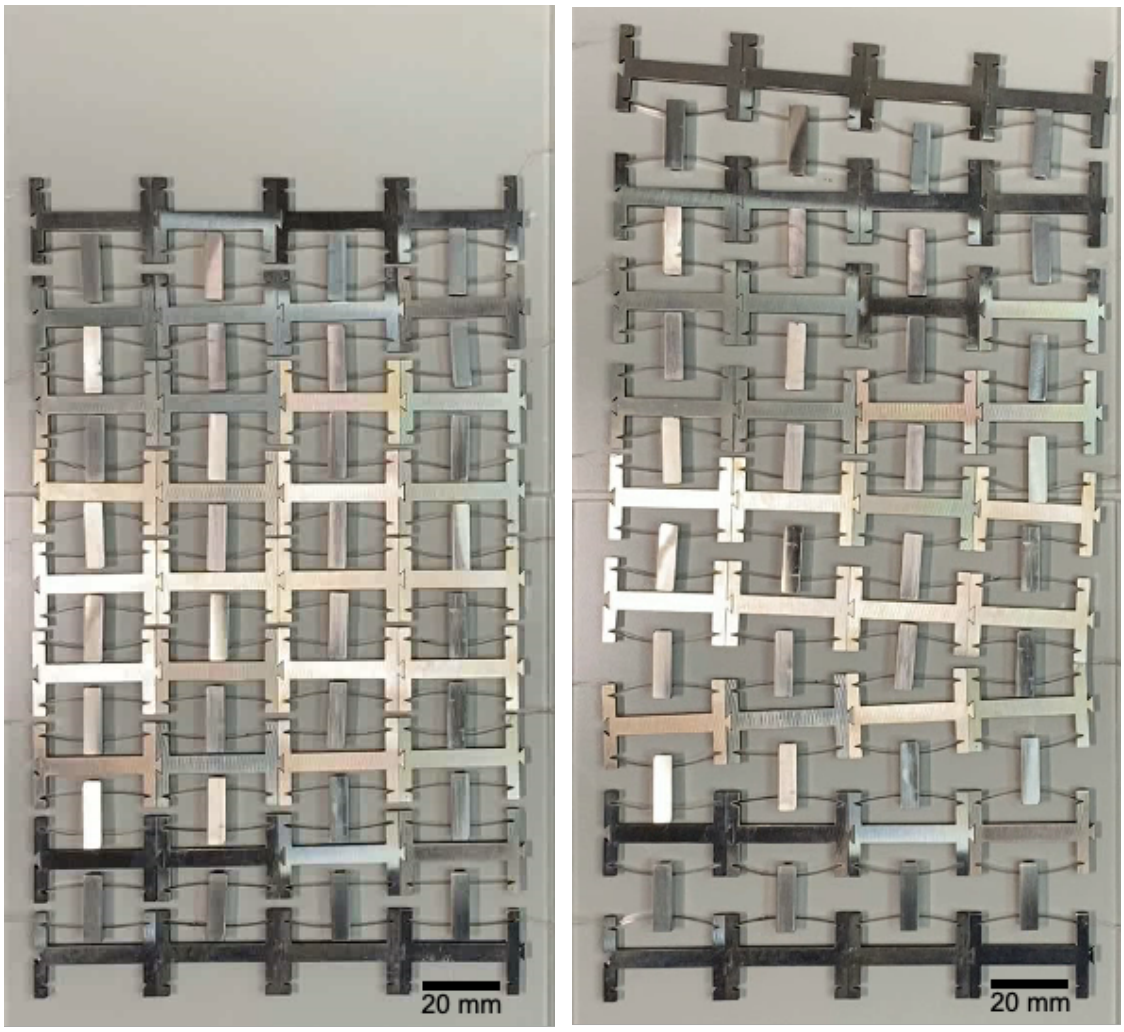
また，本研究の FEM シミュレーションではすべての温度で同じヤング率を用いた．ヤング率を温度に関する関数としてシミュレーションを行い，MnCuNi とインバー合金とで異なる温度依存性を考慮することで，より高い温度ヒステリシスの一致が期待される．

5.4.2.2. 2 次元に配列した熱誘起 PXCM の加熱実験

熱誘起 PXCM の単位格子を水平方向に 4 つ，垂直方向に 8 つ連結させた構造体を Fig. 5-19 に示す．この構造体について加熱実験を行った結果を Fig. 5-20 に示す．熱誘起 PXCM は段階的に変形し，約 100℃で変形が始まり，約 160℃で終了した．連結した熱誘起 PXCM の相転移温度が単位格子の相変態温度より低いのは，バイメタルの長さの違いによるものと考えられる．熱誘起 PXCM は最終的に 38 mm 伸長した．これは 19%の見かけのひずみに相当する．配列した熱誘起 PXCM の見かけのひずみが単位格子のひずみより小さかったのは，最高温度に達しても飛び移り座屈しない梁が存在したためである．

理想的には，β 相から α 相への相転移温度ですべての単位格子が同時多発的に飛び移り座屈することだが，実際には横方向に連結した熱誘起 PXCM が端から飛び移り座屈することで斜めに変形した．斜めに変改した熱誘起 PXCM は，バイメタル梁が奇数関数形状に変形することで変形過程における弾性ひずみエネルギーが減少すると述べた．しかし，弾性ひずみエネルギーが減少するとともに，飛び移り座屈が完了するための内部応力も小さくなる．加えて，H 型梁とホットプレートの間の摩擦によって，飛び移り座屈が完遂しなかったと考えられる．

飛び移り座屈による変形は基本的に層ごとに起こり，横方向に連結された梁のどれかが変形し始めると，同じ列の他の梁も影響を受けて変形し始めた．変形は他の層にも影響し，特に斜めに変形すると，変形開始した層の上下の層も同時に変形した．連結されたセルの影響による連続的な相転移は，多数のセルの存在による慣性力と摩擦力の増加によって防止された可能性がある．各温度でバイメタルの飛び移り座屈に必要な荷重を解析的に求めた結果を Fig. 5-21a に示す．室温では，バイメタルは約 1N の荷重を加えることで飛び移り座屈し，熱誘起 PXCM が β 相から α 相へ相転移する．β 相から α 相へ飛び移り座屈するために必要な荷重を Fig. 5-21b に示す．変形に必要な荷重は，温度が高くなるにつれて減少する．飛び移り座屈は，変形に必要な荷重以上の外力が加わった場合や，加熱により荷重がゼロ以下になった場合に発生する．多数のセルを組み合わせると，温度と荷重の分布に偏りが生じる．したがって，飛び移り座屈はメタマテリアル全体で同時には生じずに，層ごとに段階的に発生したと考えられる．



(a) (b)

Fig. 5-19. Lattice structure with multiple TI-PXCMs connected. The lattice structure has 8 vertical and 4 horizontal cells. Initially, all cells are in β phase.

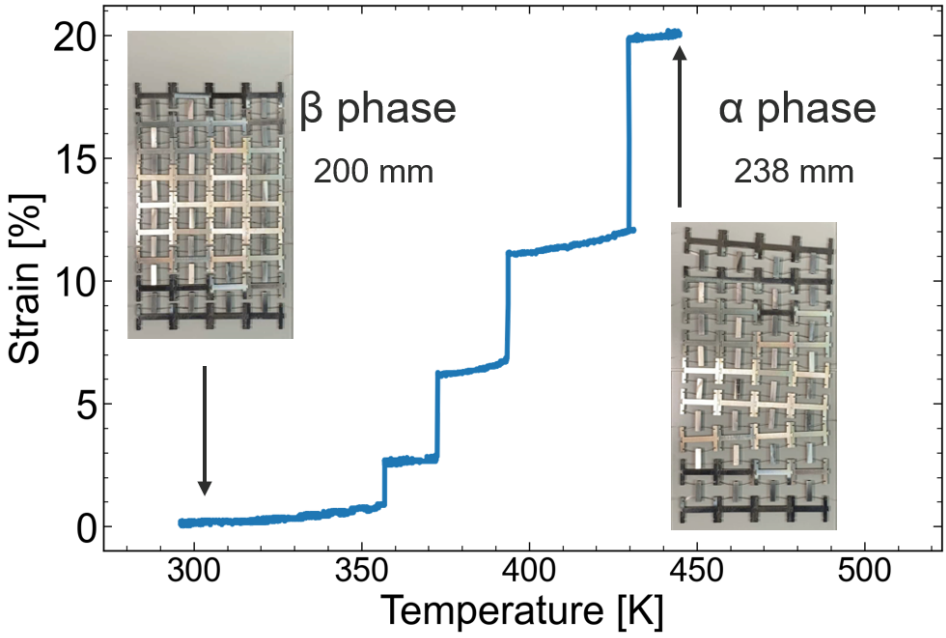
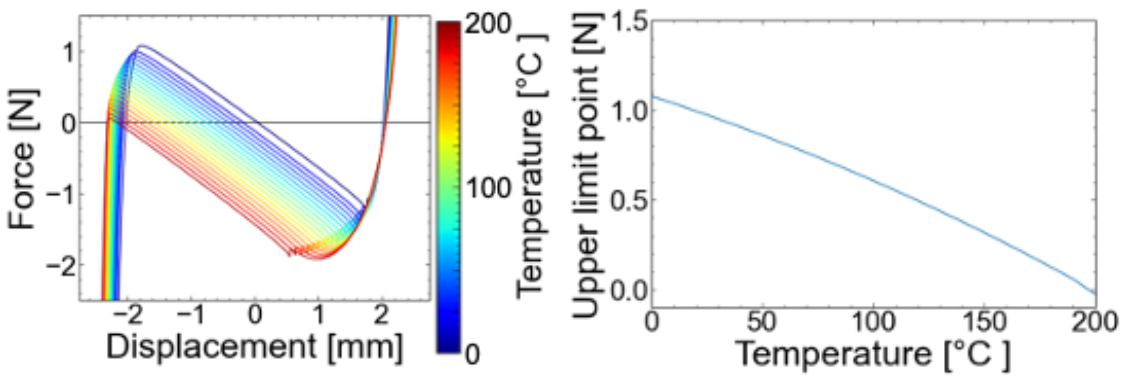


Fig. 5-20. Relationship between temperature and strain when a lattice structure with multiple TI-PXCMs connected to it is heated from room temperature. The lattice structure is 200 mm long at room temperature in the β phase, but after heating, the lattice structure undergoes a phase transition to the α phase, and the total length becomes 238 mm.



(a) (b)

Fig. 5-21. (a) Force-displacement curves for each temperature in the unit cell of TI-PXCM (b) Upper limit point as function of temperature in the unit cell of TI-PXCM.

5.5. 考察

5.5.1. 様々な設計パラメータにおける状態図

5.4.1.4 目で熱誘起 PXCM の応力温度状態図を作成した．この温度状態図は，熱誘起 PXCM の特性を表す指標となる．設計パラメータを調整することで状態図を制御するため，設計パラメータを変更したときの状態図の変化を調べ，特性とパラメータの関係性の傾向から熱誘起 PXCM の設計指針を立てる．前述した FEM シミュレーションおよび実験で用いた設計パラメータ（厚さ t = 0.15 mm，幅 w = 3 mm，長さ L = 30 mm）を基準設計とし，パラメータを変更した FEM シミュレーション結果と比較する．変更後の設計パラメータには Table 5-3 に示す組み合わせを用いる．

Table 5-3. Design parameter sets of bimetal beam to examine the relationship between design parameters and phase diagram.

Parameter set	Beam thickness, t [mm]	Beam width, w [mm]	Beam length, L [mm]
Standard	0.15	3	30
A	0.19	3	30
B	0.15	6	30
C	0.30	6	60

設計 A では，基準設計からバイメタル梁の厚さ t を大きくし t = 0.19 mm とした．この設計 A で FEM シミュレーション結果から応力温度状態図を作成した結果を Fig. 5-22 に示す．バイメタル梁の厚さを厚くすると，応力を加えず温度変化のみによる変形では基本設計の相転移温度とほとんど変わらないことがわかった．一方，同じ温度における相転移に必要な応力は総じて絶対値が上昇した．熱特性はバイメタル梁の厚さを厚くしてもあまり変わらないが，力学特性は各相で強度が強くなった．

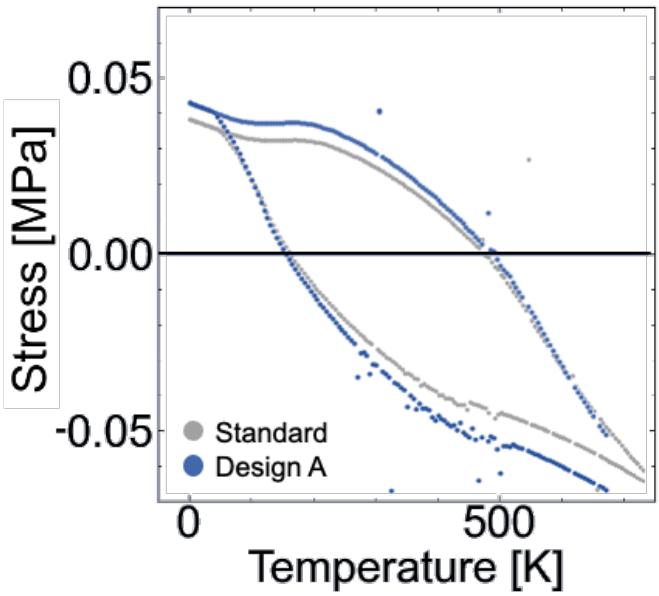


Fig. 5-22. Stress-temperature phase diagram of TI-PXCM with design parameter set A in Table 5-3.

設計 B では，基準設計からバイメタル梁の幅 w を 2 倍の $w = 6$ mm とした．この設計 B で FEM シミュレーション結果から応力温度状態図を作成した結果を Fig. 5-23 に示す．この状態図の変化から，バイメタル梁の幅を変えても応力温度状態図は，熱的にも応力的にもほとんど変わらなかった．本研究で用いた FEM シミュレーションが 2 次元シミュレーションであり，平面応力計算した結果を用いている．弾性ひずみエネルギーは，平面的な計算で求めた弾性ひずみエネルギーに奥行きを積算したものを結果としている．このため，弾性ひずみエネルギーを微分し，熱誘起 PXCM の横幅 L と奥行き w の積で求められる断面積で除算して求められる．したがって，バイメタルの幅（熱誘起 PXCM の奥行き）だけを変更しても応力温度状態図は変化しない．しかし，実際にバイメタル梁の幅が極端に大きいと，バイメタル梁の曲がり方はより複雑になり，円弧状ではなく球面状に曲がると考えられる．このとき，相転移に必要な応力は梁形状により大きくなると考えられる．本研究で作成した応力温度状態図はバイメタル梁の幅がバイメタル梁の長さに対して十分に狭い時に有効である．

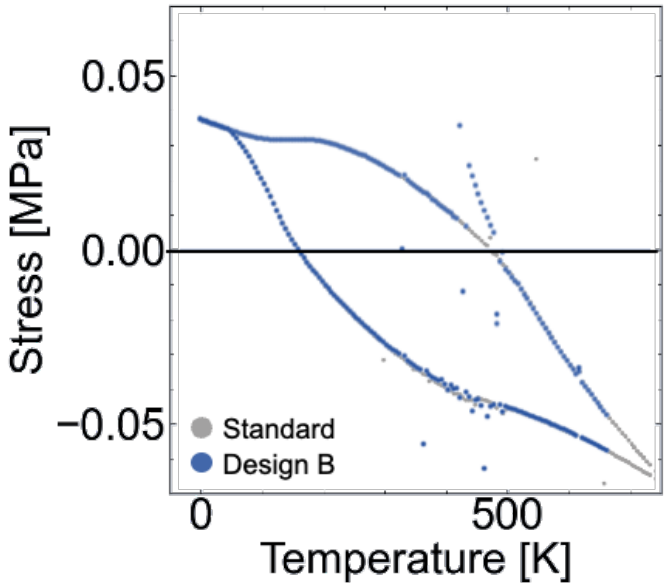
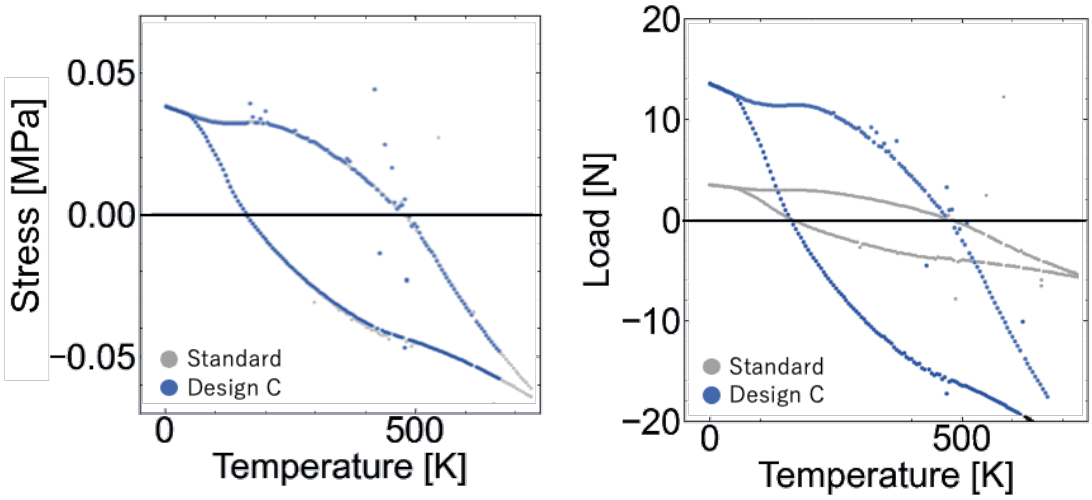


Fig. 5-23. Stress-temperature phase diagram of TI-PXCM with design parameter set B in Table 5-3.

設計 C では，基準設計からバイメタル梁のアスペクト比を 2 倍とした．この設計 C で FEM シミュレーションした結果から作成した応力温度状態図を Fig. 5-24a に示す．アスペクト比を 2 倍に大きくしても，バイメタル梁の幅を 2 倍に大きくしたときと同様に応力温度状態図に変化は見られなかった．基本設計と設計 C との状態図を比較するため，応力を荷重に変換した状態図を Fig. 5-24b に示す．荷重温度状態図では，基本設計に比べて設計 C の相転移に必要な荷重は約 4 倍に大きくなっていた．これはバイメタル梁のアスペクト比を 2 倍に大きくすると，熱誘起 PXCM の断面積が約 4 倍に大きくなるからである．

これらの状態図の変化からバイメタルの寸法変化によって，相転移応力の制御や相転移温度・応力を維持したまま耐荷重を制御できることが示された．



(a) (b)

Fig. 5-24. Phase diagram of TI-PXCM with design parameter set C in Table 5-3. (a) Stress-temperature phase diagram. (b) Load-temperature phase diagram.

5.5.2. 温度-ひずみ状態図と各相の体積率

2 元系合金の温度-組成状態図では，各相は溶質モル濃度によって異なる．一方で，熱誘起 PXCM では α 相と β 相は格子定数の長さによって判別される．そこで，縦軸を温度，横軸をひずみとして状態図を Fig. 5-25 に示すように作成した．Fig. 5-25 の赤青の色は応力を表す．赤の領域のある点ではその温度とひずみを維持するとき圧縮応力が必要となる．赤い領域から拘束を取り除くと図の右方向へと移動する．また，エネルギー的に極小値をとるところを黒で表す．右の黒い線上では α 相が無応力状態で安定に存在し，左の黒い線では β 相が無応力で安定に存在する．熱誘起 PXCM が bistable となる温度で，無限に連結した熱誘起 PXCM の状態を考える．例えば室温で連結させた熱誘起 PXCM を全体の歪みが 0%となるように拘束すると，各単位格子は α 相と β 相に別れる．全体の歪みが 0%となるためには，各相の体積率は，合金の状態図における交換則のようにして求めることができる．このように熱誘起 PXCM においては温度~ひずみ状態図を作成することで各相の体積率を求めることができる．

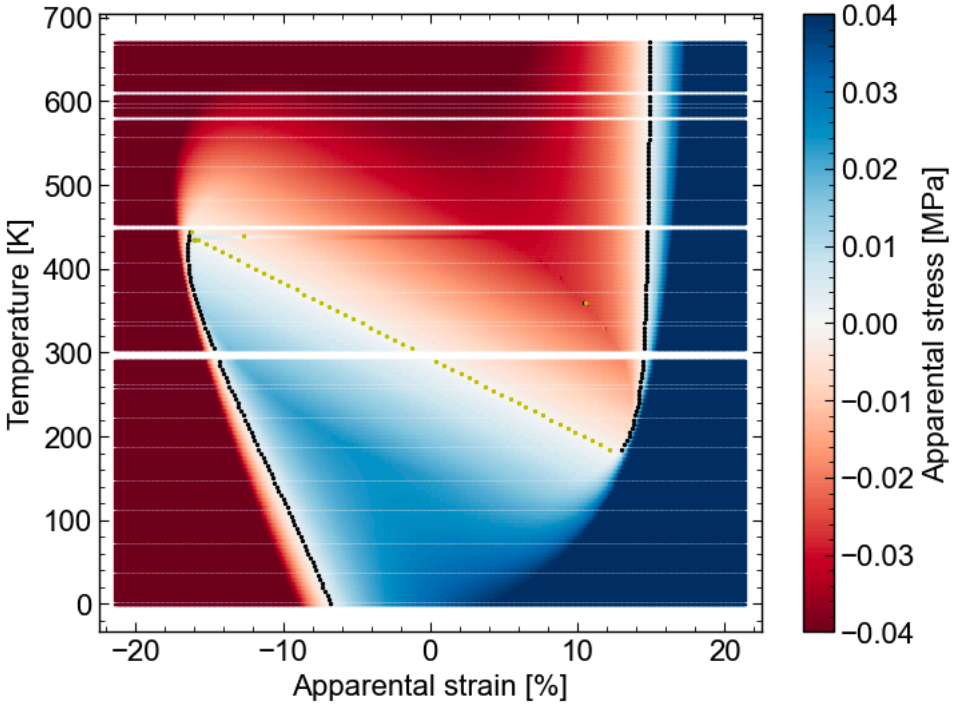


Fig. 5-25. Temperature-strain phase diagram of TI-PXCM.

5.5.3. 実際の材料との比較

FEM シミュレーションや加熱冷却実験の結果から熱誘起 PXCM の相転移により発生するひずみは約 28%だった．このひずみは，典型的な形状記憶合金が形状回復の際に示すひずみ 8%[10]のほぼ 3 倍で，熱誘起 PXCM の相転移によるひずみはかなり大きなひずみである．この大きなひずみは，スズ（Sn）の同素変態によって発生するひずみ[11]に近い．Sn は室温では体心正方晶（bct）の β-Sn で安定である．冷却されると，13.2 ˚C 以下の温度でダイヤモンド構造を持つ α-Sn に相変態する．この変態は大きな一軸膨張を伴い，材料自体が膨張に耐えられず崩壊する．これをスズペストと呼ぶ．一方，今回作製した熱誘起 PXCM は，スズの同素変態と同程度の大きなひずみを生じても崩壊することなく繰り返し変形し，形状を回復することができる．

5.6. 小括

本研究では，PXCM にバイメタルを組み込むことで，熱誘起相転移を発現するメタマテリアルの作製に成功し，温度変化に伴う変形挙動を解析した結果，以下の知見を得た．

i. 作製した熱誘起 PXCM は，302K の温度ヒステリシスで 27%のひずみを発

生・回復できる．

ii. バイメタル板を座屈させ，両端の位置を固定したまま温度を変化させると，バイメタルは両端から軸方向の圧縮力を受け，バイメタルを曲げる力を受ける．温度変化がしきい値を超えると，バイメタルの曲げ力が両端から受ける圧縮力を上回るため，バイメタル板は飛び移り座屈を起こし，初期状態とは逆方向にたわむ．また，板が飛び移り座屈する温度は加熱時と冷却時で異なり，温度-変位曲線はヒステリシスを示すことがわかった．

iii. 熱誘起 PXCM を平面的に連結すると複数のバイメタルを有し，それらのバイメタル間で飛び移り座屈が発生する温度は異なるが，1 枚の板が座屈すると周囲の板も連鎖的に座屈することがわかった．

iv. 熱誘起 PXCM の実用化に向けては，他のメタ原子を持つ PXCM への応用やコンフォーマルマッピング技術を用いた変形異方性制御，力学特性制御が必要である．

参考文献

[1] D.A. Debeau, C.C. Seepersad, M.R. Haberman, Impact behavior of negative stiffness honeycomb materials, J. Mater. Res. 33 (2018) 290–299. https://doi.org/10.1557/jmr.2018.7.

[2] W. Pollalis, P. Shah, Y. Zhang, N. Mankame, P. Zavattieri, S. Pujol, Dynamic response of a Single-Degree-of-Freedom system containing Phase Transforming Cellular Materials, Eng. Struct. 275 (2023) 115205. https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2022.115205.

[3] K.W. Hector, D. Restrepo, C.T. Bonilla, L.G. Hector, N. Mankame, P.D. Zavattieri, Mechanics of chiral honeycomb architectures with phase transformations, J. Appl. Mech. Trans. ASME. 86 (2019) 1–15. https://doi.org/10.1115/1.4044024.

[4] D. Restrepo, N.D. Mankame, P.D. Zavattieri, Phase transforming cellular materials, Extrem. Mech. Lett. 4 (2015) 52–60. https://doi.org/10.1016/j.eml.2015.08.001.

[5] S. Timoshenko, Analysis of Bi-Metal Thermostats, J. Opt. Soc. Am. 11 (1925) 233. https://doi.org/10.1364/JOSA.11.000233.

[6] G. Čepon, B. Starc, B. Zupančič, M. Boltežar, Coupled thermo-structural analysis of a bimetallic strip using the absolute nodal coordinate formulation, Multibody Syst. Dyn. 41 (2017) 391–402. https://doi.org/10.1007/s11044-017-9574-7.

[7] A. Takezawa, M. Kobashi, M. Kitamura, Porous composite with negative thermal expansion obtained by photopolymer additive manufacturing, APL Mater. 3 (2015) 076103. https://doi.org/10.1063/1.4926759.

[8] X. Xiao, J. Chen, K. Wang, Y. Yu, K. Wei, Multimaterial Additively Manufactured Metamaterials Functionalized with Customizable Thermal Expansion in Multiple Directions, ACS Appl. Mater. Interfaces. (2023). https://doi.org/10.1021/acsami.3c08134.

[9] J. Qiu, J.H. Lang, A.H. Slocum, A Curved-Beam Bistable Mechanism, J. Microelectromechanical Syst. 13 (2004) 137–146. https://doi.org/10.1109/JMEMS.2004.825308.

[10] H. Tobushi, K. Tanaka, T. Hori, T. Sawada, T. Hattori, Pseudoelasticity of TiNi Shape Memory Alloy : Dependence on Maximum Strain and Temperature, JSME Int. Journal. Ser. A, Mech. Mater. Eng. 36 (1993) 314–318. https://doi.org/10.1299/jsmea1993.36.3_314.

[11] N.D. Burns, A Tin Pest Failure, J. Fail. Anal. Prev. 9 (2009) 461–465. https://doi.org/10.1007/s11668-009-9280-8.

第6章　総括

本研究では, 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格子構造の設計に応用し，その物質が本来有さない特性を発現させる，新しいメタマテリア創製手法の確立を目指した. 原子の振る舞いを模倣した格子構造制御による機能化の試みとして, 超弾性や形状記憶特性を示すと期待される格子構造の設計，新しい設計指針の獲得に成功した．以下に，本研究により得られた成果を総括する．

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<111>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<111>方向の力学特性を 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 FCC メタマテリアルやダイヤモンド構造と類似した弾性異方性を示すが，大変形挙動は梁の変形や梁の座屈挙動が異なった．多軸 PXCM は，<111>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<111>方向にスナップスルーする際に，変形中の弾性ひずみエネルギーが小さくなるよう<112>方向に変形経路を変更してスナップスルーすることがわかった. これは結晶性材料の転位における部分転位とよく類似する．また，<111>方向に直交する方向に圧縮すると, (111)面が大きく曲がるように全体が変形した．これは LPSO 構造などに見られるキンク変形とよく類似した. 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た．これらの研究成果より，これまで材料科学で培われてきた知見がメタマテリアル開発の可能性を大きく広げると期待される.

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 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.

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, 熱誘起相転移メタマテリアルの状態図を作製したため温度と応力の状態図を作成したが, これは音などの振動数や磁場の強さなどのパラメータにも応用でき, メタマテリアルの応用の拡大に貢献すると期待される.

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を期待して, 本研究の総括とする.

謝辞

本研究の遂行ならびに本論文の作成にあたり，大変お忙しい中，大阪大学大学院工学研究科 教授 小泉 雄一郎 博士には終始懇切なご指導とご鞭撻を賜りました．研究手法だけでなく研究者としての物の見方や考え方など様々なことを教えていただきました．深謝の意を表し，心より御礼申し上げます．

本論文の副査としてご査読いただき，貴重なご指導を賜りました大阪大学大学院工学研究科 教授 宇都宮 裕 博士，教授 安田 弘行 博士に心より感謝の意を表します．

本研究を遂行するにあたり，早稲田大学理工学術院 教授 竹澤 晃弘 博士には，有限要素法シミュレーションにおいて多大なご助言を賜りました．深く御礼申し上げます．

慶應義塾大学環境情報学部 教授 田中 浩也 博士には，4D プリントの観点からメタマテリアルに関する議論をさせていただき，有益なご助言を賜りました．深く感謝申し上げます．

株式会社ブリヂストン 先端材料部門 真下 成彦 博士には，本研究の考察および社会実装にあたり非常に価値の高い議論をさせていただきました．心より感謝申し上げます．

大阪大学大学院工学研究科 教授 澁谷 陽二 博士には，メタマテリアルの異方性評価に関する議論を通して非常に有益なご助言を賜りました．心より感謝申し上げます．

本研究の遂行にあたりメタマテリアルの造形実験ならびに材料試験，シミュレーションのご支援を賜りました助教 奥川 将行 博士，特任研究員 川端 弘俊 博士，永山 隼 氏，細田 昌希 氏，星野 元彦 氏に深く御礼申し上げます．助教 小西 宏和 博士，特任助教 柳 玉恒 博士には研究室コロキウムにおける活発な議論を通して様々な視点からの実験データの見方を学ばせていただきました．深く感謝します．そして異なる研究でありながらも熱心に議論を交わした磯野 佑輔 氏（現 日本総合研究所），齋藤 賢士 氏（現 日立造船），前田 拓海 氏（現 パナソニック），渡辺 まどか 氏（現 キャノン）をはじめとする小泉研究室の諸兄姉に厚く御礼申し上げます．

最後に，長い学生生活を支え，いつも応援してくれた両親，弟，妹，祖父母に心から感謝を申し上げます．ありがとうございました．

本研究に関する成果

発表論文

1. 鐘ヶ江壮介, 奥川将行, 小泉雄一郎, 3Dプリントを活用した形状記憶・衝撃吸収メタマテリアル開発. Journal of 4D and Functional Fabrication 1 (2020) 1-8, doi:10.34498/4dff.1.1
2. H. Nagayama, **S. Kanegae**, M. Hosoda, M. Okugawa, Y. Koizumi, Thermally Induced Phase Transforming Cellular Lattice Driven by Bimetal Beams. Material Research Society Advances 7 (2022) 701–705, doi:10.1557/s43580-022-00334-y
3. **S. Kanegae**, M. Okugawa, Y. Koizumi, Martensitic Phase-Transforming Metamaterial: Concept and Model, Materials 16 (2023) 6854. doi:10.3390/ma16216854
4. **S. Kanegae**, M. Okugawa, Y. Koizumi, Atom-Mimetic Cube-Diagonally Multi-Axed Phase-Transforming Cellular Material for Multi-Axial Bistable Metamaterial, Virtual and Physcal Prototying (2023) Submitted (Major revision).

講演会・会議論文

1. 鐘ヶ江壮介, 奥川将行, 小泉雄一郎, 代表体積要素モデルを用いた有限要素法による多軸双安定構造の大変形挙動解析. 計算工学講演会論文集 27 (2022) B-08-03 (4 pages).

その他の業績

1. 鐘ヶ江壮介, 加藤瑞葵, 小泉雄一郎, 3D プリントを活用した軽量･形状記憶･衝撃吸収材料の開発, New Paradigm over 3D Technology ~(4DFF2019), 2019 /10/10.
2. 鐘ヶ江壮介, 永山隼, 奥川将行, 小泉雄一郎, 原子配列を模倣した多軸 bistable 格子構造メタマテリアルの設計と機械学習による力学特性最適化, 2021 年度スマート・アディティブ・マニュファクチャリング研究発表会, 2021/ 7/15.
3. **S. Kanegae**, M. Okugawa, Y. Koizumi, Geometric Design, and Inverse Design of Multi-Axial Bistable Lattice Mechanical Metamaterial Inspired by Atomic Arrangement of Crystals, MRS 2022 Spring Meeting, May 2, 2022.
4. 鐘ヶ江壮介, 奥川将行, 小泉雄一郎, 代表体積要素モデルを用いた有限要素法による多軸双安定構造の大変形挙動解析, 日本計算工学会第 27 回計算工学講演会, 2022/6/2.
5. **S. Kanegae**, M. Okugawa, Y. Koizumi, Evaluating Bistsbility of Phase Transforming Cellular Materials with Finite Element Analysis, 15th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-XV) 31 July – 5 August 2022.
6. 鐘ヶ江壮介, 奥川将行, 細田昌樹, 永山隼, 小泉雄一郎, 尾方成信, 原子の振る

舞いに学ぶ 4D メタマテリアルの創成, Conference on 4D and Functional Fabrication 2022 4DFF Award, 2022/10/14，(最優秀発表賞)

7. 鐘ヶ江壮介，奥川将行，小泉雄一郎，マルテンサイト変態を模倣したセル格子材料，日本金属学会 2022 年秋期(第 171 回)講演大会，2022/9/20,（優秀ポスター賞）
8. 鐘ヶ江壮介，永山隼，奥川将行,小泉雄一郎,熱誘起相変態するメタマテリアルの状態図,日本金属学会 2023 年春期(第 172 回)講演大会，2023/3/7