

特別セッション | 特別セッション (OS-07: 形態と機能の材料力学)

2026年5月16日(土) 10:35 ~ 11:50 | F会場(環境棟: 7階講義室)

OS-07 (2)

座長: 雷 霄雯(東京科学大学)

10:35 ~ 10:50

[16006] 薄膜リンクル平坦化現象における濡れ性と膜厚の影響

*上野 誠太¹、永島 壮¹、兒嶋 佑太¹、奥村 大¹ (1. 名古屋大学)

10:50 ~ 11:05

[16007] エラストマー上における銀ナノワイヤの座屈

*村田 瞭介¹、永島 壮¹、兒嶋 佑太¹、奥村 大¹ (1. 名古屋大学)

11:05 ~ 11:20

[16008] Sobolev学習MLPによるノンレシプロカルゲルのサロゲートモデルの構築と実装

*兒嶋 佑太¹、余語 勇哉¹、稲前 有人¹、永島 壮¹、奥村 大¹ (1. 名古屋大学)

11:20 ~ 11:35

[16009] 情報幾何学を用いた高分子のアフィンネットワークモデルの変形過程の解析

*西川 皐太¹、小林 舜典¹、畝山 多加志²、垂水 竜一¹ (1. 大阪大学、2. 名古屋大学)

11:35 ~ 11:50

[16010] 力学的に等価な結晶欠陥配置の形態解析

*小林 舜典¹、垂水 竜一¹ (1. 大阪大学)

薄膜リクル平坦化現象における濡れ性と膜厚の影響 Effects of wettability and thickness on droplet-induced wrinkle flattening

上野 誠太 (名大・工) 永島 壮 (名大・工) 児嶋 佑太 (名大・工) 奥村 大 (名大・工)

Seita UENO, Nagoya University
So NAGASHIMA, Nagoya University
Yuta KOJIMA, Nagoya University
Dai OKUMURA, Nagoya University
E-mail: so.nagashima@nagoya-u.jp

It has recently been reported that wrinkles on bilayers consisting of a soft substrate and a metal thin film become flattened upon contact with water droplets. Although previous studies have suggested that surface wettability is a factor governing this phenomenon, the underlying mechanism remains unclear. In this study, we investigate the effects of wettability and film thickness on wrinkle flattening through in situ microscopic observations using thin metal films formed on elastomer substrates.

1. 緒言

軟質基板と硬質薄膜から成る二層構造体に対し、臨界値を超える面内圧縮応力が作用すると、薄膜の座屈が生じ、リクルをはじめとしたしわパターンが形成される。この現象は表面不安定と呼ばれ、フレキシブル・ストレッチャブルセンサの開発¹⁾をはじめとした工学的応用への展開が期待されている。

このような状況の中、水滴との接触により生じるリクル平坦化現象が報告された²⁾。薄膜表面の濡れ性、膜厚、膜と基板の弾性率比、および圧縮ひずみが現象の影響因子であることが明らかにされたが³⁾、実現象における詳細は依然として不明である。一方、硬質薄膜として広範に用いられる白金 (Pt) は、成膜完了時点からの経過時間に応じて濡れ性が変化することが報告されている⁴⁾。

そこで本研究は、汎用エラストマーであるポリジメチルシロキサン (PDMS) と Pt 薄膜から成る二層構造体を用い、リクル平坦化現象に及ぼす濡れ性および膜厚の影響を実験により調査することを目的とした。

2. 実験方法

まず、Pt 薄膜の濡れ性を評価した。シリコンウェハ基板にイオンスパッタ装置 (JEC-3000FC, JEOL) を用いて Pt を成膜し、成膜完了後、所定の時点で薄膜上に水滴を静置し、その静的接触角を測定した。以上により、接触角の経時変化を評価した。次に、PDMS 基板の表面に Pt を成膜した試料を用いてリクル平坦化実験を行った。まず、シリコンボッティング材 (Sylgard 184, Dow) を用いて PDMS 基板を作製した。主剤と架橋剤の重量混合比を 40:1 とし、硬化温度を 90℃、硬化時間を 2 時間とした。次に、作製した PDMS 基板に対して単軸方向に引張の予ひずみを付与し、様々な厚さの Pt を成膜した。成膜完了後、基板の予ひずみを除去することにより薄膜の圧縮変形を誘発した。上述の接触角測定結果に基づき、所定の時点で水滴 (0.7 μL) を圧縮変形した薄膜上に静置し、表面形状をレーザ顕微鏡 (VK-X3000, Keyence) で観察した。以上により、リクル平坦化に及ぼす濡れ性および膜厚の影響を調べた。

3. 実験結果と考察

シリコンウェハ上に成膜した Pt 薄膜について濡れ性を評価した結果、時間経過に伴う膜表面の疎水化が確認された。接触角の経時変化評価結果に基づき、成膜完了時から 5 分後に PDMS 基板上の Pt 薄膜に水滴を静置した場合のレ

ーザ顕微鏡画像を Fig. 1 に示す。固気液三相接触線の近傍においてリクルの平坦化が観察された。また、成膜からの時間経過によって膜表面が疎水化するにつれ、平坦化距離が減少することがわかった。さらに、接触角が一定の場合、膜厚が増大するほど、平坦化が抑制されやすい傾向が明らかになった。

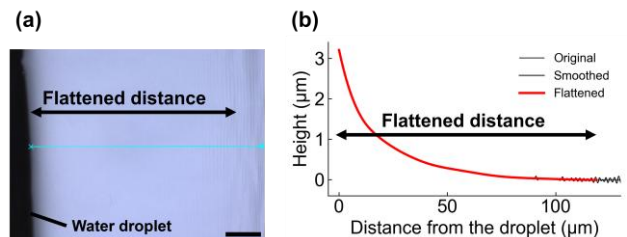


Fig. 1 Microscope image (a) and line profiles (b) of wrinkles flattened by a water droplet. Scale bar: 20 μm .

4. 結言

Pt 薄膜と PDMS 基板から成る二層構造体において、表面の疎水化および膜厚の増大により、水滴に駆動されるリクル平坦化現象を抑制できることを明らかにした。本研究で獲得した知見は、水滴接触環境におけるリクルを活用した機能性表面の開発に結びつくことが期待される。

謝辞 本研究は、JSPS 科研費 (JP25H00706) および JST 創発的研究支援事業 (JPMJFR222K) の支援を受けて実施された。ここに記して謝意を表す。

参考文献

- 1) G. Lee, M. Zarei, Q. Wei, Y. Zhu and S.G. Lee: Surface wrinkling for flexible and stretchable sensors, *Small*, 18, 2203491, 2022.
- 2) S. Nagashima and A. Nakatani: Capillary-induced wrinkle-to-fold transitions under biaxial compression, *Langmuir*, 37, pp. 5282–5289, 2021.
- 3) S. Nagashima, R. Okamoto, S. Matsubara and D. Okumura: Soft wetting of film-substrate bilayers: Wrinkle flattening near the three-phase contact line, *International Journal of Multiphase Flow*, 191, 105324, 2025.
- 4) Z. Li, P. Beck, D.A.A. Ohlberg, D.R. Stewart and R.S. Williams: Surface properties of platinum thin films as a function of plasma treatment conditions, *Surface Science*, 529, pp. 410–418, 2003.

エラストマー上における銀ナノワイヤの座屈 Buckling of silver nanowires on elastomer substrates

村田 瞭介 (名大・工) 永島 壮 (名大・工) 児嶋 佑太 (名大・工) 奥村 大 (名大・工)

Ryousuke MURATA, Nagoya University

So NAGASHIMA, Nagoya University

Yuta Kojima, Nagoya University

Dai Okumura, Nagoya University

E-mail: so.nagashima@nagoya-u.jp

Silver nanowires, which have excellent electrical conductivity and optical transparency, are widely used in stretchable electronic devices. Although they are known to buckle under compression, the underlying mechanism remains unclear. In this study, we investigate the buckling behavior of silver nanowires on elastomer substrates through in situ atomic force microscopy observations. Silver nanowires with various diameters were examined on polydimethylsiloxane (PDMS) substrates with different elastic moduli. The results show that the wavelength and amplitude of the buckled nanowires depend on the nanowire diameter, compressive strain, and the elastic modulus of the PDMS substrate.

1. 緒言

近年、ナノワイヤを用いた機能性デバイスの研究開発が推進されている。特に、銀ナノワイヤは、その優れた導電性や光透過性から、伸縮性透明デバイスの構成材料として利用されている¹⁾。一方、デバイスの変形に伴い、銀ナノワイヤの圧縮変形や座屈が生じるが、その制御メカニズムについては、依然として未解明な点が存在する。

そこで本研究では、エラストマー基板上に配置した銀ナノワイヤの座屈挙動を顕微鏡その場観察実験により調査した。特に、基板の弾性率およびナノワイヤの直径が座屈に及ぼす影響を明らかにすることを目的とした。

2. 実験方法

本研究では、ポリジメチルシロキサン (PDMS) を基板として使用した。基板の弾性率を変化させるために、PDMS 作製時の主剤と架橋剤の重量混合比を 10:1, 20:1, 40:1 とした。銀ナノワイヤは、直径が 25 nm および 45 nm のものを使用した。単軸方向に引張予ひずみを付与した PDMS 基板に銀ナノワイヤを静置したのち、予ひずみを段階的に除去した。以上により、銀ナノワイヤに圧縮ひずみを付与し、圧縮変形および座屈を誘起した。レーザー顕微鏡および原子間力顕微鏡を用いたその場観察により、変形過程を定量的に評価した。

3. 実験結果および考察

いずれの実験条件においても、圧縮過程で銀ナノワイヤの座屈が観察された。一方、その幾何形状や寸法は、基板の弾性率、銀ナノワイヤの直径、および圧縮ひずみに応じて様々に変化した。座屈した銀ナノワイヤの代表的な原子間力顕微鏡画像を Fig. 1 に示す。重量混合比 10:1 (弾性率約 2 MPa) の PDMS 基板を使用し、銀ナノワイヤの直径は約 45 nm、圧縮ひずみは 0.21 である。局所的に鋭利な先端を有した正弦波状の座屈形状が観察された。一方、重量混合比 40:1 (弾性率約 0.04 MPa) の PDMS 基板上では、銀ナノワイヤは正弦波状の座屈形状を保持したまま、圧縮ひずみの増大に伴う振幅の増大を示し、鋭利な先端形状は発生しなかった。以上の重量混合比の違いによる座屈形状の変化は、銀ナノワイヤの密着強度の差異に起因すると考えられる。PDMS においては、重量混合比の低減により、表面の未架橋鎖が減少し、他の固体材料との密着強度が低下する²⁾。そのため、重量混合比 10:1 では、圧縮過程で銀ナノワイヤのはく離が局所的に生じ得る。その結果、面内変形から面外変形への遷移、ならびにねじれが発生し、鋭利な先端形状が出現したと考えられる。レーザー顕微鏡により正弦波状銀ナノワイヤの波長と振幅を測定した結果、PDMS の弾性率が低下し、銀ナノワイヤの直径が増大するほど、波長と振幅が増大した。さらに、圧縮ひずみの増大に伴い、振幅が増大した一方、波長は顕著な変化は見られなかった。以上により、基板の弾性率およびナノワイヤの直径が銀ナノワイヤの座屈に及ぼす影響を明らかにした。

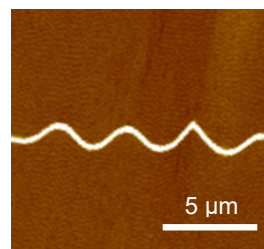


Fig. 1 Atomic force microscope image of a buckled silver nanowire on a PDMS substrate.

4. 結言

顕微鏡その場観察実験により、PDMS 基板上における銀ナノワイヤの座屈挙動を調査した。その結果、基板の弾性率、ナノワイヤの直径、および圧縮ひずみが、座屈現象の影響因子であることを明らかにした。これらの因子を調節することにより、座屈の抑制あるいは積極的活用が可能となる。

謝辞 本研究は、JST 創発的研究支援事業 (JPMJFR222K) の支援を受けて実施された。ここに記して謝意を表す。

参考文献

- 1) B. S. Kim, H. Kwon, H. J. Kwon, J. B. Pyo, J. Oh, S. Y. Hong, J. H. Park, K. Char, J. S. Ha, J. G. Son and S.-S. Lee: Buckling instability control of 1D nanowire networks for a large-area stretchable and transparent electrode, *Advanced Functional Materials*, 30, 1910214, 2020.
- 2) Y. Yu, D. Sanchez and N. Lu: Work of adhesion/separation between soft elastomers of different mixing ratios, *Journal of Materials Research*, 30, pp. 2702–2712, 2015.

Sobolev 学習 MLP によるノンレシプロカルゲルのサロゲートモデルの構築と実装

Construction and Implementation of a Surrogate Model for Non-reciprocal Gels Using Sobolev-trained MLP

児嶋 佑太 (名古屋大) 余語 勇哉 (名古屋大) 稲前 有人 (名古屋大) 永島 壮 (名古屋大)
奥村 大 (名古屋大)

Yuta KOJIMA, Nagoya University Yuya YOGO, Nagoya University Yuto INAMAE, Nagoya University So
NAGASHIMA, Nagoya University Dai OKUMURA, Nagoya University
E-mail: yuta.kojima@nagoya-u.jp

This study aims to construct and implement a multiscale surrogate model capable of reproducing the highly nonlinear behavior of non-reciprocal materials by linking the microscopic buckling behavior of nanosheets with the macroscopic mechanical response. Specifically, we construct a Multi-layer Perceptron (MLP) incorporating Sobolev training, which simultaneously learns stress values and tangent stiffness. The MLP model predicts the true stress and tangent stiffness from the logarithmic strain of the unit cell. This approach enables the model to learn the complex tangent stiffness tensor characteristic of non-reciprocal materials. In this paper, we detail the construction methodology of the proposed model and demonstrate its prediction accuracy and effectiveness through validation experiments targeting nanosheet-embedded gels.

1. はじめに

近年、外部環境に応じて特異な応答を示すスマートマテリアルの開発が進む中で、金属ナノシートをゲル内部に配向させた相反性崩壊材料であるノンレシプロカルゲルが注目されている(1,2)。ノンレシプロカルゲルは、ナノシートの配向方向への引張負荷に対しては高い剛性を示す一方で、圧縮負荷に対してはシートの座屈により剛性が著しく低下し、母材であるゲル支配の柔軟な剛性を示す。そのため、ソフトロボットや次世代アクチュエータへの応用が期待される一方で、その挙動を正確に記述する数値モデルの構築は極めて困難であり、デバイス設計におけるボトルネックとなっている。

有限要素法 (Finite element method; FEM) を用いてノンレシプロカルゲルの解析を行う研究も行われている。例えば、増分形式の応力-ひずみ関係を Abaqus(3) のユーザー材料サブルーチンで実装する研究(4)が行われている。しかしながら、除荷後に変形が残留するという課題がある。加えては、ミクロ構造におけるナノシートの座屈を考慮した解析は行われていない。

そこで本研究では、ミクロなナノシートの座屈挙動とマクロな力学応答を結びつけることで、相反性崩壊材料の高度な非線形挙動を再現可能なマルチスケールサロゲートモデルの構築と実装を目的とする。具体的には、応力値とその接線剛性を同時に学習させる Sobolev 学習を導入した Multi-layer perceptron (MLP) を構成する。MLP モデルはユニットセルの対数ひずみから真応力および、接線剛性を予測する。これにより相反性破壊材料特有の複雑な接線剛性テンソルを学習させる。本稿では、提案モデルの構築手法を詳述するとともに、ナノシート含有ゲルを対象とした検証実験を通じて、その予測精度と有効性を明らかにする。

2. 方法

2. 1. データセット作成

本研究では、ナノシート含有ゲルの非線形力学挙動をサロゲートモデル化するため、入力に対数ひずみ (3 成分)、出力に真応力 (3 成分) を用いる。さらに、構成則の数値計算における収束安定性を保証するため、応力のひずみ微分である接線剛性 (3×3 成分) も教師データとして使用した。今回使用した損失関数は $L = MSE_{\sigma} + \lambda \cdot MSE_C$ である。

学習データを作成する際、 $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{12}$ をそれぞれ 0 に近づくにつれて密度が高くなるように傾斜をかけて 21 通り、計 9261 通りのひずみと応力を抽出し、その値を使って接線剛性を作成した。

2. 2. データセット作成

サロゲートモデルの構築には、応力とその接線剛性を同時に学習する Sobolev MLP を用いた。Fig. 1 にモデルの概略図を示す。モデル構造は、入力層 (3 ノード)、3 層の隠れ層 (各 64 ノード)、出力層 (3 ノード) からなる全結合型ニューラルネットワークである。活性化関数には、滑らかな微分特性を持つ SiLU (Sigmoid Linear Unit) 関数を採用した。損失関数 $\mathcal{L}$ には、応力の平均二乗誤差 (MSE) に加え、接線剛性の MSE を重み付けして加算した定義を用い、 $\lambda = 0.05$ と設定した。

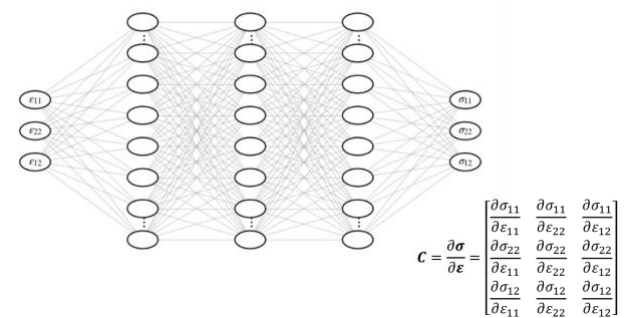


Fig. 1 Architecture of Sobolev MLP with Jacobian training.

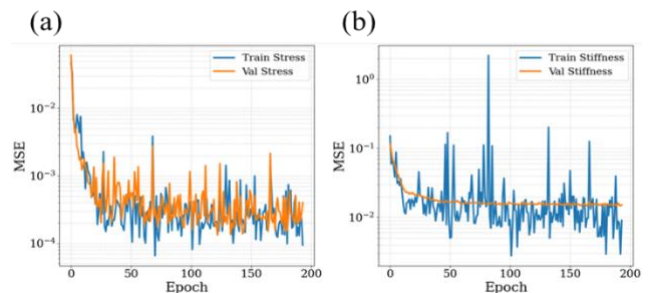


Fig. 2 Learning curves for stress and stiffness errors.

(a) Mean squared error of stress and (b) stiffness.

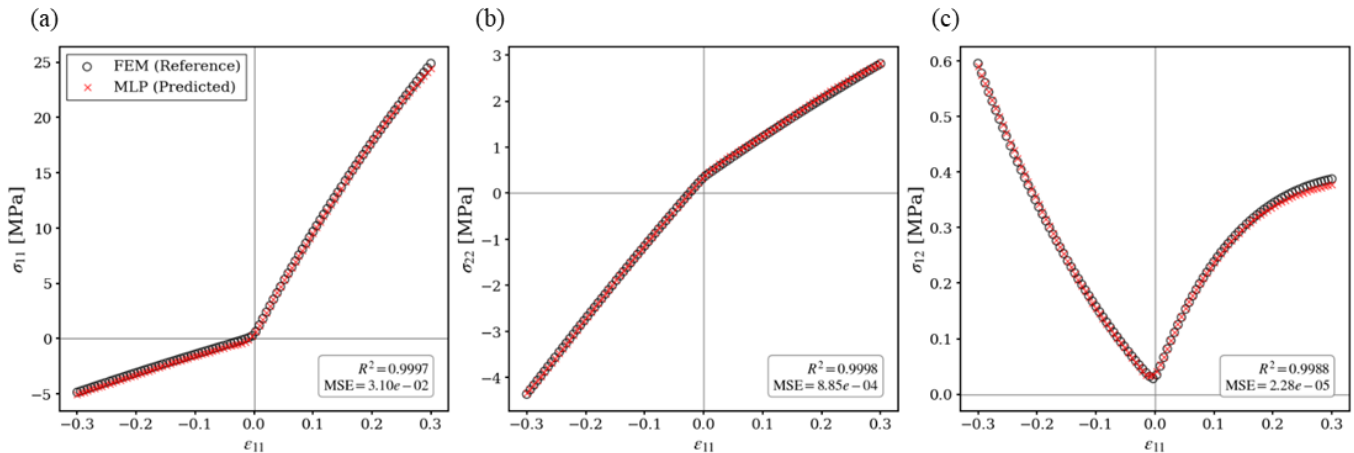


Fig. 3 Prediction accuracy for a specific loading path ($\varepsilon_{22} = 0.03$, $\varepsilon_{12} = 0.16$). (a) σ_{11} , (b) σ_{22} , (c) σ_{12} .

3. 結果

構築した Sobolev MLP の学習曲線 (損失関数の推移) を Fig. 2 に示す. 学習の進行に伴い, 応力誤差だけでなく, 接線剛性の誤差も同時に低減していることが確認できる. これは, SiLU 関数を用いた滑らかなモデル表現と, Sobolev 学習による微分制約が有効に機能していることを示している.

構築したモデルの汎化性能を検証するため, 学習に使用していない未知の変形モードに対する予測を行った. 検証条件として, 入力ひずみベクトル $\varepsilon = [\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{12}]$ において, $\varepsilon_{22} = 0.03$, $\varepsilon_{12} = 0.16$ に固定し, ε_{11} を -0.3 から 0.3 の範囲で推移させた際の応力応答を計算した. Fig. 3 に FEM と MLP による予測値の比較を示す. (a)は σ_{11} , (b)は σ_{22} , (c)は σ_{12} である. 図より, 赤色の予測プロットは青色の実験値を極めて正確にトレースしていることがわかる. 特に, $\varepsilon_{11} = 0$ 付近で見られる応力勾配の急激な変化や, 複合的な応力状態における挙動を正しく再現できている. 定量的な評価指標である決定係数 R^2 は, 全ての応力成分において 0.999 以上であった. これは, Sobolev 学習によって応力値だけでなく接線剛性を直接学習させたことで, 局所的な非線形挙動の再現性が大幅に向上したためと考えられる.

4. 結言

本研究では, 相反性崩壊材料であるノンレシプロカルゲルの複雑な非線形挙動を記述するため, Sobolev 学習を導入した MLP によるサロゲートモデル構築手法を提案した. 本手法の最大の特徴は, ひずみから応力に加えて接線剛性を明示的に予測させる点である. 既存研究では考慮されていないミクロなナノシートの座屈挙動とマクロな力学応答を結びつけることができた. 検証実験の結果, 提案モデルは未学習の変形モードに対して $R^2 > 0.999$ もの精度を達成し, 物理的に妥当な接線剛性の推移を再現できることが確認された. これは, データ駆動型アプローチが, 複雑な新奇材料の構成則モデリングにおいて極めて有効であることを示している. 今後は, 本モデルを汎用有限要素法ソルバーへ実装し, 大規模な構造解析へと適用を展開する予定である.

参考文献

- (1) 布施卓馬, 松原成志朗, 永島壮, 奥村大, 「均質化解析によるノンレシプロカルゲルの引張・圧縮非対称性評価」, 計算数理工学論文集, Vol. 23, 19-231124, (2023).
- (2) H. Kim, I. Jeong, H. Cho, M. Cho, "Surrogate Model Based on Data-Driven Model Reduction for Inelastic Behavior of Composite Microstructure", International Journal of Aeronautical and Space Sciences, Vol. 24, 732-752, (2023).
- (3) Abaqus 6.14 User Documentation, 2014, Dassault Systems SIMULIA Corporation.
- (4) 野々垣翔真, 松原成志朗, 永島壮, 奥村大, 「ノンレシプロカルゲルの円筒押込み大変形解析」, 計算数理工学論文集, Vol. 23, 17-231124, (2023).

情報幾何学を用いた高分子のアフィンネットワークモデルの変形過程の解析 Information Geometric Analysis of Deformation of Polymers using Affine Network Model

西川 皐太 (大阪大・基礎工) 小林 舜典 (大阪大・基礎工)
畠山 多加志 (名古屋大・工) 垂水 竜一 (大阪大・基礎工)

Kota NISHIKAWA, The University of Osaka
Shunsuke KOBAYASHI, The University of Osaka
Takashi UNEYAMA, Nagoya University
Ryuichi TARUMI, The University of Osaka
E-mail: nishikawa.kota.91u@ecs.osaka-u.ac.jp

Elucidating the mechanical properties of polymeric materials is crucial for developing high-performance materials. However, the affine network model, which describes material deformation through the probability density function of polymer chains, has not fully utilized this statistical information. In this analysis, the probability density function representing the state of polymer chains is regarded as information denoting the microscopic state of the system. Additionally, Wasserstein information geometry, which measures the transport cost of probability distributions, is introduced onto the statistical manifold formed by these probability density functions. For the relaxation deformation process of elastomers, the geodesic, representing the shortest path of information, is compared with the steepest descent curve of the free energy. The results reveal a clear discrepancy between the two paths, indicating that the spontaneous relaxation process does not necessarily follow the transport-theoretically optimal route. By evaluating the contribution of thermodynamic forces resisting path constraints during deformation, based on the difference between this informational shortest path and the mechanical path, this study aims to clarify the relationship between information and mechanics in the deformation process.

1. 緒言

高分子材料であるエラストマーの力学特性の解明は、高性能な材料を設計・開発する上で極めて重要である。ゴムなどのエラストマーはエントロピー弾性による巨大な弾性変形が特徴的であり、この変形挙動を記述する代表的な統計モデルの一つにアフィンネットワークモデルがある¹⁾。このモデルでは、高分子鎖の状態がガウス分布という確率密度関数(PDF)で表現されるため、これを系のミクロな状態を示す「情報」として捉えることができる。従来のエラストマーの研究においては、このモデルを用いることで、自由エネルギーや応力などのマクロな力学量が統計力学的に解析されてきた²⁾。しかしながら、ミクロな高分子鎖の分布変化を示す情報の発展過程と力学の関係はこれまでに十分解析されていない。そこで本研究では、連続体の変形に情報幾何学の視点を取り入れ、変形過程におけるPDFの変化を統計多様体における測地線上の遷移として記述することで、エントロピー弾性における「情報」と「力学」の関係性を明らかにすることを目的とする。

2. 解析手法

本研究では、ゴム状高分子材料の微視的構造を記述するアフィンネットワークモデルを対象に、非圧縮条件下における二軸変形の解析を情報幾何学の観点で行う。このモデルにおいて、高分子鎖の末端間ベクトル $\mathbf{r}$ の分布は、無変形状態では等方的なガウス分布として表現される。ここにマクロな変形として変形勾配 $\mathbf{F} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, 1/(\lambda_1\lambda_2))$ が与えられたとき、アフィン変形の仮定を通して、分布は二軸変形の主ストレッチ λ_1, λ_2 に依存した非等方的なガウス分布へと変化する。この現状態における確率密度関数 $P(\mathbf{r}'|\mathbf{F})$ は以下のように表される。

$$P(\mathbf{r}'|\mathbf{F}) = \left(\frac{3}{2\pi Nb^2}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left\{-\frac{3}{2Nb^2}\left(\frac{x^2}{\lambda_1^2} + \frac{y^2}{\lambda_2^2} + \lambda_1^2\lambda_2^2 z^2\right)\right\} \quad (1)$$

これにより、変形状態の集合は変形パラメータを座標とする統計多様体 $\mathcal{M} = \{(\lambda_1, \lambda_2) \in \mathbb{R}^2 | \lambda_1 > 0, \lambda_2 > 0\}$ を構成する。本研究では、任意のアフィン変形状態から自由エネルギー最小状態である安定点へと至る緩和変形過程を対象に、以下の二つの異なる視点から変形経路を比較する。まず、力学的な視点である。熱力学第二法則に基づき、系はHelmholtzの自由エネルギー F が最も急激に減少する方向へと自発的に推移するため、この緩和過程の経路は次式に示す最急降下曲線として求めることができる。

$$\frac{d\lambda^i}{ds} = -\delta_{ij} \frac{\partial F}{\partial \lambda^j} \quad (2)$$

次に情報幾何学的な視点として、統計多様体 $\mathcal{M}$ 上にWasserstein情報幾何学を導入する。これは、PDFの形状変化に伴う最小輸送コストを表すWasserstein距離を距離とする幾何学である。このWasserstein距離から導かれるOtto計量に基づき、輸送コストを最小化する変形経路として測地線を導出することができる。情報の最短経路である測地線は、Otto計量から導かれるLevi-Civita接続 Γ_{ij}^k を用いることで、以下の測地線方程式の解として記述される。

$$\frac{d^2\lambda^k}{ds^2} + \Gamma_{ij}^k \frac{d\lambda^i}{ds} \frac{d\lambda^j}{ds} = 0 \quad (3)$$

本研究では、式(3)を始終点を固定する境界値問題として定式化し、有限要素法を用いて数値解析を行う。

3. 解析結果

Fig.1に、パラメータ空間 (λ_1, λ_2) における力学的な経路である最急降下曲線とWasserstein情報幾何学から得られた測地線を示す。Fig.1より、力学的な経路と情報の最短経路は、一致しないことが明らかとなった。これは、エラストマーの自然な緩和変形過程が、輸送論的に最も効率の良い変形ではないことを示している。これらの幾何学的な乖離を定量的に評価するため、力学的な最急降下曲線に対して、易動度 L^{ij} と外力 f_j を含む以下の式に拡張した。

$$\frac{d\lambda^i}{ds} = -L_{ij} \left(\frac{\partial F}{\partial \lambda^j} - f_j \right) \quad (4)$$

本条件の下で，変形経路全体のエネルギー散逸を最小化する最小散逸経路の方程式を導出すると，測地線方程式と一致した．特に，易動度を Otto 計量の逆行列とすることで，Wasserstein 情報幾何学の測地線を外力付与下における最小散逸経路という物理モデルとして捉えることが可能である．これにより，情報の最短経路を実現するために必要な易動度の分布や外力の定量化が可能となった．これより求まる仮想的な外力は測地線の接線方向と法線方向にそれぞれ分解できる．このとき，仮想的な外力の法線方向成分は，Wasserstein 情報幾何学における測地線の変形経路を維持するために必要な抵抗力として評価することができると考えられる．

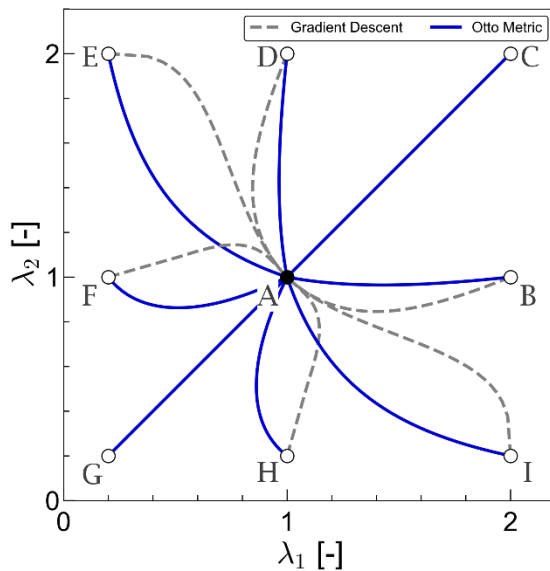


Fig. 1 Relaxation deformation process in deformation parameter space

参考文献

- 1) Boyce M.C. and Arruda E.M., Constitutive Models of Rubber Elasticity, Rubber Chemistry and Technology, 73(3), 504-523 (2000).
- 2) Treloar L.R.G., The Physics of Rubber Elasticity, Oxford University Press (1975)

力学的に等価な結晶欠陥配置の形態解析 Morphological Analysis of Mechanically Equivalent Crystalline Defect Configurations

小林 舜典 (大阪大・基礎工) 垂水 竜一 (大阪大・基礎工)
Shunsuke KOBAYASHI, The University of Osaka
Ryuichi TARUMI, The University of Osaka
E-mail: kobayashi.shunsuke.es@osaka-u.ac.jp

Line defects in crystals are classified into translational-type dislocations and rotational-type disclinations. It is known that there exist special configurations in which these two kinds of defects exhibit equivalent elastic fields in their vicinity. To clarify the characteristics of such mechanically equivalent configurations, this study carried out a kinematic analysis using differential geometry. As a result, it was found that for a single wedge disclination, two different edge-dislocation configurations can exist. These two types of edge-dislocation configurations are considered to represent the difference between partial and perfect disclinations.

1. 諸言

結晶中の線欠陥は並進・回転対称性の破れに対応する転位と回位に分類することができる。一方、質的に異なるこれらの線欠陥に対して、欠陥近傍の応力・ひずみ場が等しくなる空間配置が存在することが知られている。こうした弾性場が等価となる欠陥配置の代表例として、刃状転位列とくさび型回位対が挙げられる¹⁾。最近、我々の研究グループでは微分幾何学を基礎とした結晶欠陥の連続体力学理論を用いることで、転位列を回位対へと変換する操作を定義することができ、これを通して両者の弾性場の等価性の起源が、塑性変形の場合の等価性にまで遡ることができることを明らかにした²⁾。この同一視は、数学的にはアフィン接続と呼ばれる構造を置換する操作に還元される。しかしながら、この変換操作に対する逆操作、すなわち与えられた回位と等価な転位配置がどのような特徴を持つかは明らかにされておらず、これら二種類の欠陥配置の間の同一視がどこまで可能かは不明である。こうした背景を踏まえて、本研究では転位と回位の変換・逆変換を行い、力学的に等価な転位・回位配置の特徴を明らかにすることを目的とする。

2. 解析方法

幾何学的な格子欠陥論においては、欠陥を含む結晶の仮想的な塑性変形状態を Riemann–Cartan 多様体 $(\mathcal{M}, g, \nabla)$ を用いて記述する。これは、内積と平行性を Riemann 計量 g 、およびアフィン接続 ∇ を用いて一般化した空間である。このとき、格子欠陥の空間分布はアフィン接続 ∇ を用いて定義される振率 2-形式 τ^α 、および曲率 2-形式 Ω_β^α を用いて表現することができる。特に転位は Weitzenböck 接続 ∇^W 、回位は Levi-Civita 接続 ∇^L を用いて表すことができる。これらが存在するとき、Riemann–Cartan 多様体は次式で表される Cartan の第一・第二構造方程式を満足するようにして決定することができる。

$$\tau^\alpha = d\vartheta^\alpha + \omega_\beta^\alpha \wedge \vartheta^\beta \quad (1)$$

$$\Omega_\beta^\alpha = d\omega_\beta^\alpha + \omega_\gamma^\alpha \wedge \omega_\beta^\gamma \quad (2)$$

ただし ϑ^α は $g = \delta_{\alpha\beta}\vartheta^\alpha \otimes \vartheta^\beta$ を満足する Riemann–Cartan 多様体の正規直交基底であり、 ω_γ^α はアフィン接続に関する接続 1-形式である。特に、Weitzenböck 接続では $\omega_\beta^\alpha = 0$ と置くことができる。

これらの方程式に対して、転位のみが存在する条件 $(\tau^\alpha \neq 0)$ の下で式(1)を解き、これによって得られた Riemann 計量 g から Levi-Civita 接続の接続 1-形式 ω_β^α を決め、式(2)に代入することで与えられた転位 τ^α に対応する回

位の空間分布を決定することができる。通常、物体に発生するひずみ・応力場は Riemann 計量 g にのみ依存することから、この接続の置換操作の過程では弾性場は不変に保たれる。したがって、この操作によって等価な弾性場を持つ転位と回位の対を算出することができる。また、これと逆の置換操作として、はじめに回位の空間分布を与え、そこで得られた正規直交基底 ϑ^α および Weitzenböck 接続の接続係数 $\omega_\beta^\alpha = 0$ を式(1)に代入することで、与えられた回位に対応して等価な転位配置を算出することができる。

3. 解析結果と考察

等間隔で並ぶ転位列を表す振率 2-形式は $\tau^2 = \Omega\delta(y)H(x)$ と表すことができる。ただし、 Ω は転位列に沿った単位長さあたりの Burgers ベクトルの大きさであり、 δ は Dirac デルタ、 H は Heaviside 関数である。順方向の接続の変換によりこれに対応するくさび回位は $\Omega_2^1 = \Omega\delta(x)\delta(y)$ と表すことができる。これは、転位列の終端部 $(x, y) = (0, 0)$ にくさび回位が局在化する様子を表している²⁾。次に $\Omega_2^1 = \Omega\delta(x)\delta(y)$ のくさび回位に対して式(1)–(2)を解くと、Levi-Civita 接続の接続 1-形式は $\omega_2^1 = \frac{\Omega}{2\pi r^2}(-ydx + xdy)$ となる。これを用いて式(1)を解くと $(\vartheta^1, \vartheta^2) = (dx, dy) + \omega_2^1(-y, x)$ となる。これに対して Weitzenböck 接続の下で式(1)に代入すると、振率 2 形式は次式のように表すことができる。

$$\tau^1 = \frac{-\Omega y}{2\pi r^2} dx \wedge dy \quad (3)$$

$$\tau^2 = \frac{\Omega x}{2\pi r^2} dx \wedge dy \quad (4)$$

上式は、周方向に Burgers ベクトルをもつ刃状転位の連続分布を表しており、刃状転位列とは異なる配置を示している。したがって、くさび回位には、力学的に等価な刃状転位配置が少なくとも二種類存在すると考えられる。

ここで得られた二種類の刃状転位配置は、解析領域のトポロジーに依存して決定されたものと考えられる。第一・第二の例では、それぞれ初期に与えた欠陥配置に対応して、それぞれ $x = 0, y > 0$ の半直線、 $(x, y) = (0, 0)$ の原点に特異点が存在する。特に式(3)–(4)で得られた転位配置は初期に与えたくさび回位と同一の特異点を有しており、初期配置の特異点が転位配置に影響していることを示唆している。また、トポロジーの異なる二種類の結果は、不完全・完全くさび回位の区別が可能であることを示唆している。

参考文献

- 1) L.C.M. Li, Surface Science, 31, pp. 1226 (1972).
- 2) S. Kobayashi, K. Takemasa and R. Tarumi, Royal Society Open Science, 12, 242213 (2025).