



特集記事・4

21世紀 鉄はここまで使える

デザイン・マテリアル：均質化法を用いた鉄や材料特性の設計

Designed Materials: Application of the Homogenization Method to Steels and Composites

菊池 昇

ミシガン大学 機械工学科 教授

Noboru Kikuchi

関口美奈子

東京大学 大学院工学系研究科

Minako Sekiguchi

1 はじめに

鉄などに代表される既存の材料にメゾ・マイクロスケールの構造を埋め込むことによって、新しい機能や材料・材質特性を設計するというデザイン・マテリアル (Designed Materials) の概念が急速に欧米を中心に形成されてきた¹⁾。これはデンマーク工科大学の Sigmund²⁾ やミシガン大学の Fonseca 等³⁾ の研究に端を発し、既存の材料を用い、既存の材料に無い特性や、構造体を形成した時に初めて出来る機能を埋め込んだ材料を新しく創り出す方法である。このデザイン・マテリアルという材料設計法が紹介されるまでは、新素材の研究といえば、新しい合金や複合材の開発が主なものであり、成果に比べ開発費用が膨大になるという特徴を持っていた。こうした材料研究を補完するため、材料分野以外の成果を材料設計や開発に持ち込んで、新素材のような大きな成功を狙わず、必要とされる機能や特性を材料の中に微視的な構造を作りこむことで段階的に発現させるというのが、ここで紹介する新しい考え方である⁴⁾。言い換えれば、材料と機械系の構造研究を合わせることで、新しい材料開発を試みるのがデザイン・マテリアルという方法であると言って良い。

2 材料特性とは

鉄の弾塑性特性や強度などを高める材料開発が20世紀を彩ったが、基本的には存在しているものを材料試験することによって特性を測定し、それらの特性に基づいた材料の応用を考えるのが一般的であった。デザイン・マテリアルは、むしろ応用分野で要求される特性を、既存する材料を組み合わせることで創り出そうという考えで、やはり20世紀の材料開発で長足の進歩を遂げた合金や複合材開発の考え方を敷衍(ふえん)したものである。この観点を明らかにするため、材

料特性とは何かを、ポアソン比に焦点を当てて考えてみよう。

図1に、均質化法を用いた材料設計法により求めた負のポアソン比を持つ多孔質体の微視構造を示す。この多孔質板は、上下に圧縮力をかけ、板を上下に縮ませると、板の側面も縮む特性を持つ。普通の場合であれば正のポアソン比を持つので、圧縮力を上下方向にかけると、側面は膨張する。それは何故これが通常の板と異なった変形をするのか。微視構造の基本構成を示すユニット・セル(図2)を使って、この特性を説明する。

図2に示すように下面から力が加わると、鍵十字型のメカニズムが反時計回りに回転し、左側面の棒部材をメカニズム側に引っ張り込む力が生じるため、負のポアソン効果をこの微小な構造体は持つことが解る。言い換えれば、負のポアソン比は、指定した方向に力が加わったとき、指定された部分が指定され

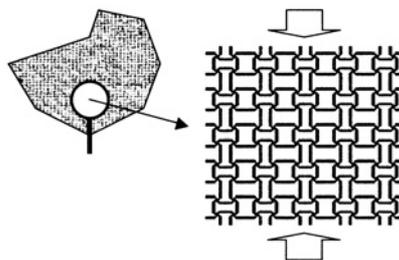


図1 負のポアソン比を持つ材料

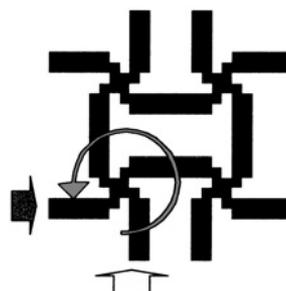


図2 微小な構造(機械)特性がマクロ材料特性となる仕組み

た方向に指定された量だけ運動する機能を持った非常に小さなサイズの構造体の寄せ集めで創り出すことが出来る。

3 均質化法による材料特性の計算法

実験室における材料試験ではなく、計算機を使って複雑な微視構造をもつ複合材の力学特性を計算力学手法で求めることが、均質化法を使うことによって可能である。均質化法は1970年代フランスやイタリア、ロシア(旧ソ連邦)などの数学者によって形成された数学手法⁵⁾で、複合材などの周期構造を持った物体の材料特性(構成方程式)を、複合材を特徴付けるユニット・セル(代表体積要素)の幾何形状と複合材の構成材料の力学特性から計算することが出来る。均質化法が紹介されるまでは、経験則や力学の特殊解を用いた方法で材料の混合則を導いて来たが、均質化法は材料の力学特性だけではなく、熱、電気特性など、他の性質に対して適用できる一般的な方法である。図3は三次元的に編みこまれたファイバーでマトリックスを強化し、剛性や強度を向上させるための複合材のユニット・セルを示す。

このユニット・セルでのファイバーとマトリックスの力学特性が解ると、変位場をユニット・セルの実寸法 ϵ に関する漸近展開を施して得られるユニット・セル上で定義される問題とマクロ構造での問題(線形力学を仮定すればこれらの問題は非連成、非線形力学を前提にすれば連成)を解くことによって、マクロ構造物で使用される構成方程式(材料係数)やマクロ構造物でのマクロ的な歪みを与えられたときのマトリックスやファイバーでの真の応力分布を計算する局所化プロセスなどを得ることが出来る。詳しくは均質化法の数学理論や工学分野での応用などに関する文献⁵⁾を参照されたい。

図4には均質化法で求めたマトリックスと3次的に編みこまれたファイバーでの応力分布が示されている。このように複合材での平均的なマクロ応力だけではなく、複合材で作

られた任意の点でのマトリックスやファイバーでの応力分布が求められるのであれば、複合材としての強度などをマイクロ・レベルでの破壊なども含めて論じることが出来る。

4 材料設計の一手法

前章では任意の微視的な構造を持つ複合材の熱力学特性を均質化法の理論に従って求めることが出来ることを示した。これを工学的に解釈すると、ユニット・セルの中にどのように複雑な任意の微視構造であれ、何かしらの構造を幾つかの熱力学特性の解っている既存の材料を用いて作れば、その微視構造におけるマクロ的な熱力学特性を均質化法によって計算可能になる。従って、その逆問題を考えることで、望む熱力学特性が得られるような微視構造を、与えられた幾つかの材料を組み合わせることで創ることが出来る。これがデザイン・マテリアルを可能にする均質化法を用いた材料設計法である⁶⁾。

この手法を使い、熱伝導率の異なる2つの材料を同量だけ混合することで、異なる熱伝導率を持つ微視構造を設計しよう。得られる混合物の熱伝導率は物理則から制限されるが、この制限範囲の中で、任意の熱伝導率をもつ微視構造を、図5に示すように均質化法を使って求めることが出来る。ここでは3倍の熱伝導率を持つ材料との混合を考えている。

ここでは設計例として平面問題を掲げているが、三次元的な微視構造の設計も可能であり、図6にその結果を示す。三次元的な微視構造は数学的にその構造を均質化法の逆問題を解くことで得られるが、その現実的な製造となると大きな問題を含む。一方平面問題としてられる微視構造は微細レーザー加工や、インクジェットによる印刷技術の応用により、任意の微視構造を創り出すことが可能である

ここでは熱伝導率の設計例を示したが、電気特性や湿潤性などを特徴付ける支配方程式が熱伝導方程式と類似することに着目すれば、デザイン領域を大きく広げることが可能である。実際、米国連邦政府内のDARPAが、これに注目し材料の電気特性を設計するMETAMATERIALのプロジェクトを推進している¹⁾。

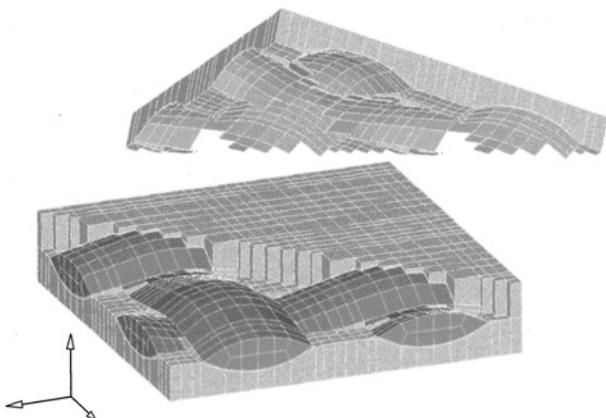


図3 3次的に編みこまれたファイバーで強化されたマトリックス

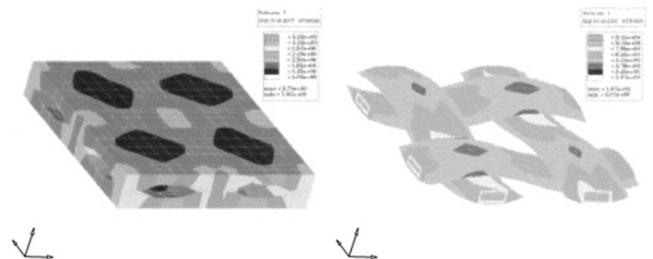


図4 マクロ構造物の任意点での真の応力場

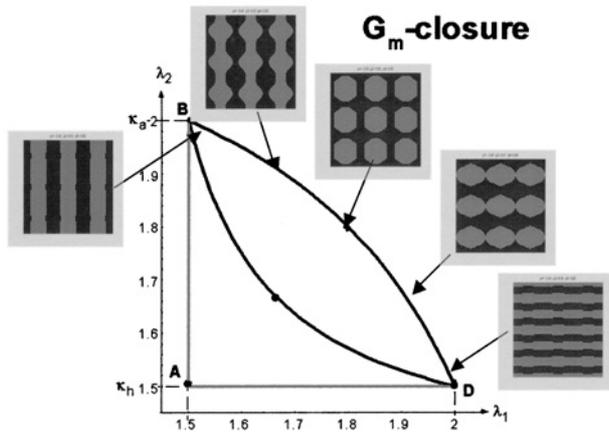


図5 異なる熱伝導率を持つ微視構造 (上限・下限値と共に)

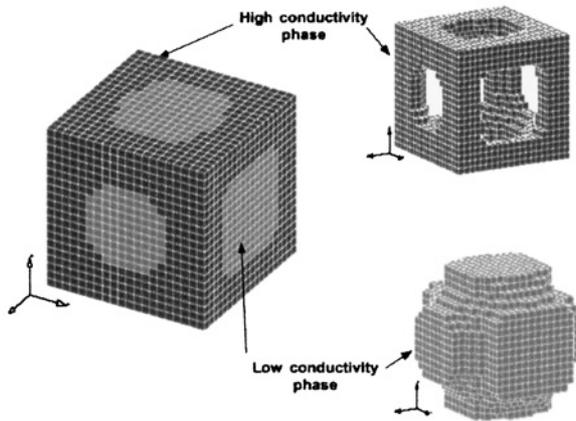


図6 熱伝導率の設計で得られた三次元的な微視構造

5 熱と力学特性をデザインする

材料特性は単に力学的なものや熱に関するものだけではなく、電気、磁場、湿潤なども含まれる。従って、これらの性質を組み合わせた材料設計も重要になる。図7には熱伝導率と弾性係数マトリックスの両方を設計した例を示す。構成材料として2つの異なる材料 (弾性係数が10GPa、ポアソン比が0.3、熱伝導率が3と言う黒の色で示された材料と、弾性係数が1GPa、ポアソン比が0.3、熱伝導率が1という灰色で示された材料) を使い、黒の材料割合を40%で、設計している。ここで使った材料は現実に存在するものではなく、設計法の有効さを示すため適当に考え出したものである。設計条件として、せん断係数が0.88GPa、水平・垂直方向の熱伝導率が共に1.6、水平方向の弾性係数が1.0GPa以上、更に両方向に対称であることが与えられている。これらの条件を満たす微視構造を最適化問題に置き換え、その数学的な問題を解くことにより、図7に示した弾性係数マトリックスと熱伝導マトリックスを求めている。

図8には熱伝導率ではなく、熱膨張係数と力学特性を同時

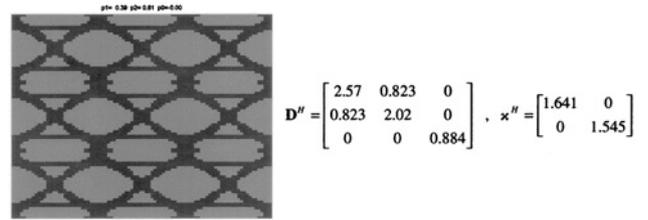


図7 熱伝導率と力学特性 (弾性係数) の両方を設計した例

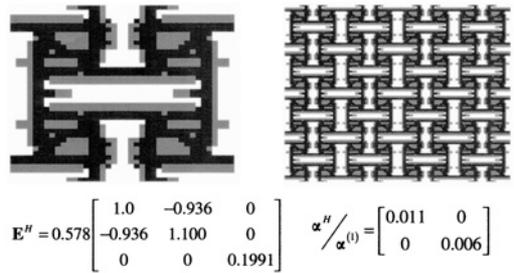


図8 熱膨張率と力学特性の両方を設計した例

に設計した例を示す。ここでは黒 (ウッド・セラミック、弾性係数7.5GPa、ポアソン比0.3、熱膨張率 2μ)、灰色 (エポキシ、弾性係数6.0GPa、ポアソン比0.3、熱膨張率 45μ)、そして空隙の3つの材料を組み合わせている。

この例では、得られたポアソン比が -0.936 、熱膨張率はももとの1.1%であるから、熱膨張率はほぼゼロであると言って良い。すなわち、この設計された板を使うと、温度差が大きくても熱変形はほとんど無視でき、更にポアソン比が負であるため、板の上下方向に圧縮力がかかると板の左右は縮む。そして、引っ張り力がかけられると左右は膨張することになる。明らかにこのような板材は、人為的にしか作れない。また、このような板は黒と灰色の材料で作られた板を微細レーザー加工することで創ることが出来る。設計例のようなパターンにそれぞれを切り取り、それらをはめ込んで接合させると、熱膨張率がゼロ、ポアソン比が大きく負となる、通常あり得ない「材料」になる。言い換えれば、材料に機械加工を取り入れることで、自然界には存在しにくい材料特性を創り出すことが可能になる。

さて、次に負の熱膨張率を持つ材料を創る。このために、熱膨張率が大きく違う2つの材料と微視的な熱変形を受け入れることの出来る空隙を組み合わせることを考える。黒の材料は、前に用いたウッド・セラミック、灰色はポリミド (弾性係数4.9GPa、ポアソン比0.3、熱膨張率 90μ) を仮定すると、図9に示すような微視構造が形成され、 -52.7μ の負の熱膨張率が得られる。これらの材料によるプロトタイプを創り出すことは非常に難しく、設計された微視構造を元に、製造しやすいように微視構造の幾何を変えている。またウッド・セラミックとポリミドの複合材形成が難しいため、ウッ

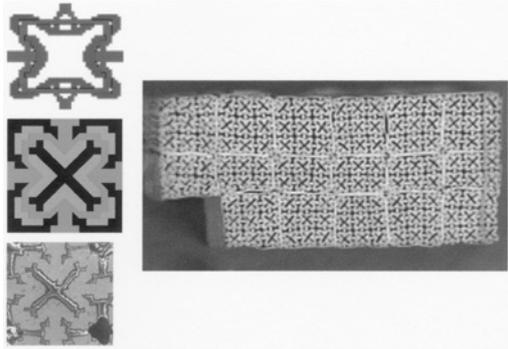


図9 負の熱膨張率を持つ材料設計とそのプロトタイプ

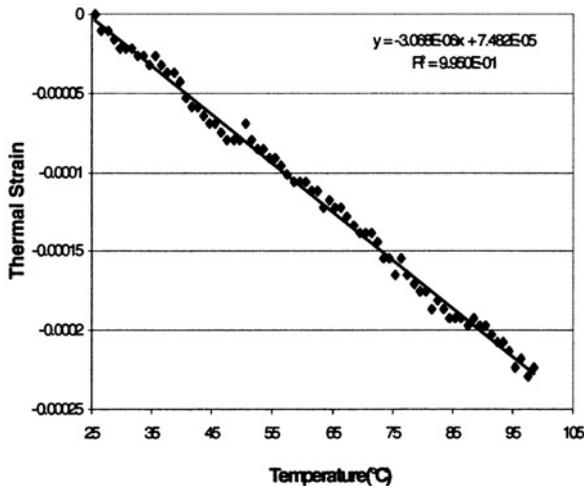


図10 プロトタイプを用いた熱膨張係数の測定（負の値を検証）

ド・セラミックの代わりにはNi/Fe：36/64混合、ポリミドの変わりにNi/Fe：50/50混合のパウダーを用いて図9の左2番目の図に示す微視構造を用い、Halloranが開発した同軸引き抜き法を用いて、図9の左下の図に示すプロトタイプ創り出した⁷⁾。図9の右図は、出来上がったプロトタイプで、これを用いて熱膨張率を測定すると、 -3.6μ という負の値を持つことが解る(図10)。

図9に示したプロトタイプはニッケル・フェライトのパウダーとステレオ・リソグラフィー、更には同軸引き抜き法などを用いて創っているため、微視構造の大きさが比較的大きなものになる。これでは材料特性というよりは、メソスケールの構造特性になってしまう。従って、材料特性にするためには、レーザーなどの微細加工技術を用いて、微視構造を真の意味でスケールダウンする必要がある。こうした微細加工技術と上の設計法を組み合わせると、材料の中に望まれる機能を入れ込むことが可能になり、大きな発展が望まれる。

6 おわりに

ここでは材料の微視構造にデザインされた構造を埋め込む

ことで、既存の材料には無い材料特性を創り出す均質化法を用いた材料設計法を紹介した。これは、デザイン・マテリアルもしくはメタ・マテリアルと呼ばれる新しい材料開発法の一つとして、近年米国を中心に大きく取り上げられるようになった。更に、レーザーなどの微細加工技術と組み合わせることで、単にコンピュータ上での設計に留まることなく、新素材生産にも結び付く可能性が大きい。

謝辞 共同研究者のBing-Chung Chen博士(ロックウェル社)、また計算を実行したC. Y. Lin(ミシガン大学)、プロトタイプを開発したJohn Halloran教授(ミシガン大学)、この研究をサポートして下さった積水化学(株)に感謝の意を表す。

参考文献

- 1) <http://www.arpa.mil/dso/future/metamaterials/index.html>
- 2) Sigmund, O.: Materials with prescribed constitutive parameters: an inverse homogenization problem, *International Journal of Solids and Structures*, 31 (17), (1994), 2313.
- 3) Silva, E. C. N., Nishiwaki, S., Fonseca, J. S. O., and Kikuchi, N.: Optimization methods applied to material and flexensional actuator design using the homogenization method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 172 (1999), 241.
- 4) 菊池 昇, 関口美奈子: これまでに存在しなかったあたらしいものを創るCAEは可能か: 構造設計から材料設計へ, *KAST Report MAR-2000*, 11 (2000) 2, 3.
- 5) Sanchez-Palencia, E.: *Nonhomogeneous Media and Vibration Theory*, *Lecture Notes in Physics* 127, (1980)
- 6) Chen, B.C., Silva, E.C.N., and Kikuchi, N.: Advances in computational design and optimization with application to MEMS, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 52, (2001) 1-2, 23.
- 7) Charles Van Hoy, Andrew Barda, Michelle Griffith, and John W. Halloran: <http://msewww.engin.umich.edu:81/people/halloran/pdf/Microfabrication%20of%20Ceramics%20by%20Coextrusion.pdf>, *Journal of the American Ceramic Society*, 81 (1998), 152.

(2001年9月5日受付)