

面心立方構造, 体心立方構造, およびダイヤモンド構造を有する 原子模倣メタ材料の弾性異方性

Elastic anisotropy of atom-mimetic metamaterials

with face-centered cubic, body-centered cubic, and diamond structures

細田 昌希¹, 鐘ヶ江 壮介¹, 奥川 将行¹, 尾方 成信², 小泉 雄一郎¹

Masaki HOSODA¹, Sosuke KANEGAE¹, Masayuki OKUGAWA¹, Shigenobu OGATA², Yuichiro KOIZUMI¹

¹大阪大学大学院工学研究科, ²大阪大学大学院基礎工学研究科

¹Graduate School of Engineering, Osaka University ² Graduate School of Engineering Science, Osaka University

【要約】

実在金属材料では, 同じ結晶対称性であってもその弾性異方性が大きく異なることが知られている. その弾性異方性の発現機構が明らかとなれば, メタ材料設計の新たな指針になると期待される. 本研究では, 実在物質と格子構造体の構造対称性と弾性異方特性の関係を明らかとすることを目的とし, 格子構造体の弾性異方性を有限要素法(FEM)により調べ, 実在金属の弾性異方特性を第一原理計算結果データベース(Materials Project)を用いて調べた. 結果として, 面心立方(FCC)型格子構造体は体心立方(BCC)金属のような弾性異方性を示した. 一方, BCC型格子構造体はFCC金属のような弾性異方性を示した. これらの関係から, 弾性異方性は, 材料の弾性変形時の局所的な内部エネルギー変化の大きさによって決まると推測される.

キーワード: 面心立方構造, 体心立方構造, ダイヤモンド立方構造, 弾性異方性, 格子構造体, メタ材料

【Abstract】

It is known that the elastic anisotropy of real metallic materials varies greatly even if they have the same crystalline symmetry. Elucidation of the mechanism of elastic anisotropy is expected to provide a new guideline for designing metamaterials. In this study, we aim to clarify the relationship between the structural symmetry and elastic anisotropy of real materials and lattice structures. As a result, face-centered cubic FCC-type lattice structures exhibit elastic anisotropy like body-centered cubic BCC metals. On the other hand, BCC-type lattice structures exhibit elastic anisotropy like FCC metals. From these relationships, it is inferred that elastic anisotropy is determined by the magnitude of the local internal energy change during elastic deformation of the material.

Keywords: face-centered cubic structure, body-centered cubic structure, diamond cubic structure, elastic anisotropy, lattice structure, metamaterial

1. 背景・目的

材料の構造と特性の関係の理解とそれに基づく構造の制御は, 新材料創成の基礎となっている. 一方, 3Dプリンタ技術の発達により, サブミクロレベルからメートルレベルでの構造の制御が可能となった. 3Dプリンタ技術と, これまでの物質科学や材料科学で得られてきた原子レベルの構造と特性に関する知見を融合した格子構造の設計により, その物質が本来有さない特性を発現させることが, 新しいメタ材料創成手法として期待される[1-3]. 本研究では, その基礎として, 結晶性材料の電子構造と弾性特性の関係を元に, 材料のマクロな形状の制御で弾性特性を制御することを試みる. これにより, 特定の元素組成でしか発現し得なかった力学的機能特性を, 他の元素で発現させることが可能と期待される.

結晶性材料の力学特性, 特に基本的な弾性特性とその異方性は, 結晶構造と原子間結合に支配されると考えられる. しかしながら, 結晶構造と原子間結合の組み合わせと力学特性とその異方性との関係は未解

明である. アルミニウム(Al)と銅(Cu)はともに面心立方(FCC)構造を安定構造とするが, これらの弾性異方性は大きく異なる[4]. この違いを再現するメタ材料の設計は, 原子間結合を模倣した力学機能発現の材料設計を可能とすると期待される.

これまでに, 第1近接結合のBall-StickモデルでFCC構造とBCC構造の格子構造体を作製して実験によって弾性異方性を評価した[5]. その結果, 第1近接結合のみのFCC格子構造体はBCC金属の代表であるCrの特性に近い値を示した. 一方で, BCC格子構造体はFCC金属の代表であるCuの特性に近い特性を示した. このことから, FCC格子構造体はBCC金属のような, BCC格子構造体はFCC金属のような弾性異方性を示すことが示唆された.

本研究では, 上記の格子構造体と実在物質の弾性特性の対応関係を, より多量の構造体と物質に対して調査し, 一般性を検証することを目的とした. そのため, 詳細については次項の方法に示すが, 格子構造体に対しては有限要素法を用い, 実在物質に対しては化合

物を含めて物質および材料の第一原理計算結果のデータベース Materials Project[6]を用い、その弾性特性を計算、調査することで、より多量のデータを取得した。

2. 方法

格子構造体の 3D-CAD で Ball-Stick モデルを作製した。図 1 に設計した格子構造モデルを示す。格子構造の対称性は、FCC, BCC およびダイヤモンド構造の 3 つとした。それぞれの対称性を持つ物質を FCC-Lattice, BCC-Lattice, DIA.-Lattice と呼ぶこととする。第 1 近接結合原子間のみには円柱梁を設置した。球半径/格子定数の比および円柱梁半径/球半径の比をそれぞれ 1/3 ~ 1/15 および 1/1 ~ 1/4 の範囲で変化させ、計 624 条件のモデルを作製した。作成した格子構造モデルにて一軸圧縮と純粋剪断の FEM シミュレーションを行い、縦弾性率 E (Young 率), 横弾性率 (せん断弾性率) G , およびポアソン比 ν を計算した。得られた弾性特性から式 (1) を用いて弾性異方性としてゼナー比 A_z を評価した。

$$A_z = \frac{2(1 + \nu)}{E} G \quad (1)$$

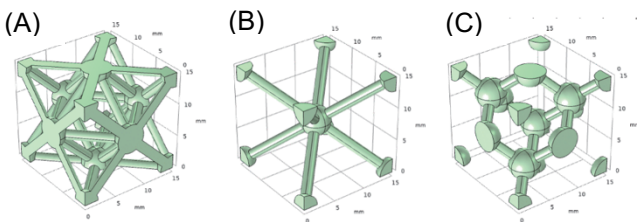


図 1. 3D-CAD で設計した格子構造モデル (A) FCC-Lattice, (B) BCC-Lattice, (C) DIA.-Lattice.

結晶性材料の弾性異方特性は、第一原理計算データベース Materials Project [6]を用いて調べた。0 K において立方晶対称の結晶構造が安定となる物質のうち、安定構造の空間群が $Fm\bar{3}m$, $Im\bar{3}m$, $Fd\bar{3}m$ に分類される物質を抽出した。それぞれの対称性を持つ物質を FCC-Matter, BCC-Matter, DIA.-Matter と呼ぶこととする。各物質の弾性係数 s_{11}, s_{12}, s_{44} から、式 2 ~ 式 5 を用いて A_z を計算した。格子構造体と実在物質の A_z を比較し、構造対称性との関係を調べた。

$$E = \frac{1}{s_{11}} \quad (2)$$

$$G = \frac{1}{s_{44}} \quad (3)$$

$$\nu = -\frac{s_{12}}{s_{11}} \quad (4)$$

$$A_z = \frac{2(1 + \nu)}{E} G = \frac{2(s_{11} - s_{12})}{s_{44}} \quad (5)$$

3. 結果

格子構造体の異方性プロットを図 2(A) に示す。また、特徴的な構造体の可視化像を図 2(B1-C4) に示す。全ての構造において、 $A_z > 1$, $\nu > 0$ となった。また、円柱梁が細くなるにつれて、 ν は大きくなった。 ν が 0.2 以下の場合には、どの結晶構造でも ν が大きくなるにつれて同様の線形の関係で A_z が増加した。FCC-Lattice と Dia.-Lattice は、 ν が以上の場合でも同様の線形の関係で A_z が増加した。一方、BCC-Lattice では、 ν の増加に対する A_z の増加量がより大きく、 ν が 0.5 に漸近するに従ってより急峻に A_z が増加し、最大で $A_z = 676$ に達した。結果として、BCC-Lattice には $A_z > 10$ となるような、弾性異方性が高い構造が多数存在することが示された。一方、FCC-Lattice および DIA.-Lattice は $A_z < 10$ の低い弾性異方性のみを示した。DIA.-Lattice は FCC-Lattice と比較して高 ν を持つ構造が多い。

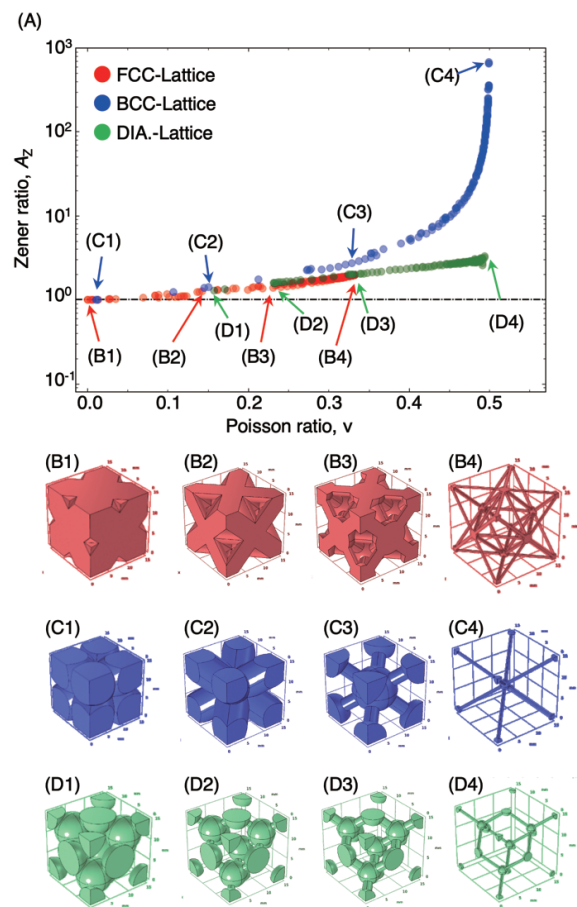


図 2. (A) 格子構造体の弾性異方性プロット, (B) FCC-Lattice のユニットセルの概形, (C) BCC-Lattice のユニットセルの概形, (D) DIA.-Lattice のユニットセルの概形.

図3に実在物質の異方性プロットを示す。格子構造体とは異なり、 $A_z < 1$ となる物質が存在する。どの構造でも $\nu = 0.4$ 以下では、 ν と A_z が線形の関係をもつ傾向が見られた。一方、FCC-Matter でのみ、 ν が 0.5 に漸近するに従ってより急峻に A_z が増加し、最大で $A_z = 676$ を取った。結果として、FCC-Matter には $A_z > 10$ となるような、弾性異方性が高い構造が多数存在する。一方、BCC-Matter および DIA.-Lattice は $A_z < 10$ の低い弾性異方性のみを示した。

4. 考察

格子構造体と実在物質における ν と A_z の関係は、FCC-Matter は BCC-Lattice と、BCC-Matter は FCC-Lattice と、DIA.-Matter は DIA.-Lattice と類似することが示唆された。メタマテリアルと結晶性材料の弾性異方性の対応関係は、弾性変形時のエネルギー変化が大きい場所が両者で対応していることが理由であると考えている [1]。メタマテリアルの弾性係数は弾性変形にともなう格子エネルギー変化によって決定される。一方、結晶性材料の弾性係数は弾性変形にともなう電子のエネ

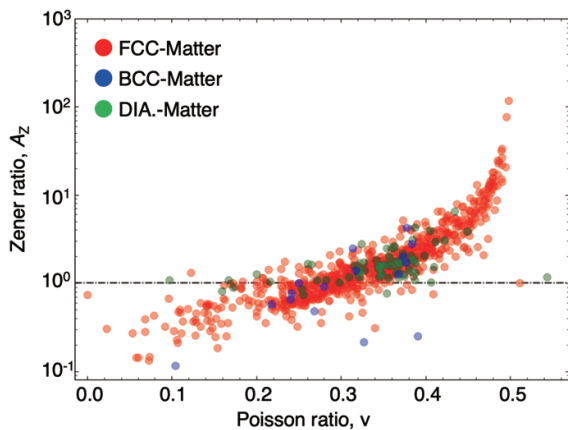


図 3. Materials Project データベースの第一原理計算結果データに基づく実在物質の弾性異方性プロット。

ルギー変化によって決定される。これらの変形機序を考えると、弾性変形にともなう局所的なエネルギー分布が同様であると、その弾性異方性も類似となることが推察される。

5. 展望

図4に、BCC-Lattice および FCC-Matter の弾性異方性を比較して示すとともに、特徴的な弾性異方性を持った格子構造体の単位胞および実在金属の Fermi 面も併せて示す。

BCC-Lattice および FCC-Matter の弾性異方性(図4(A))を比較すると、BCC-Lattice は1つの曲線状にプロットされるのに対し、FCC-Matter には弾性異方性のバラつきが見られる。これらの分布の違いとして、FCC-Matter を構成する原子の局所的な結合力の差であると

考えている。

また、格子構造体の単位胞(図4(B1-B4))および実在金属の Fermi 面(図4(C1-C4))を比較する。MnSiRh₂ の Up-spin と ScB₁₂ の Fermi 面は、 $\langle 111 \rangle$ 方向にネックが存在することが見受けられる。この Fermi 面のネック方向が格子構造体の梁を配置している方向と対応していることから、弾性異方性の対応関係が現れているのではないかと考えられる。

一方、NdMg₃ の Fermi 面はブリュアンゾーン境界で複雑に交差している。このことが BCC-Lattice との対応関係とは遠い弾性異方性を示す一つの理由ではないかと考えられる。

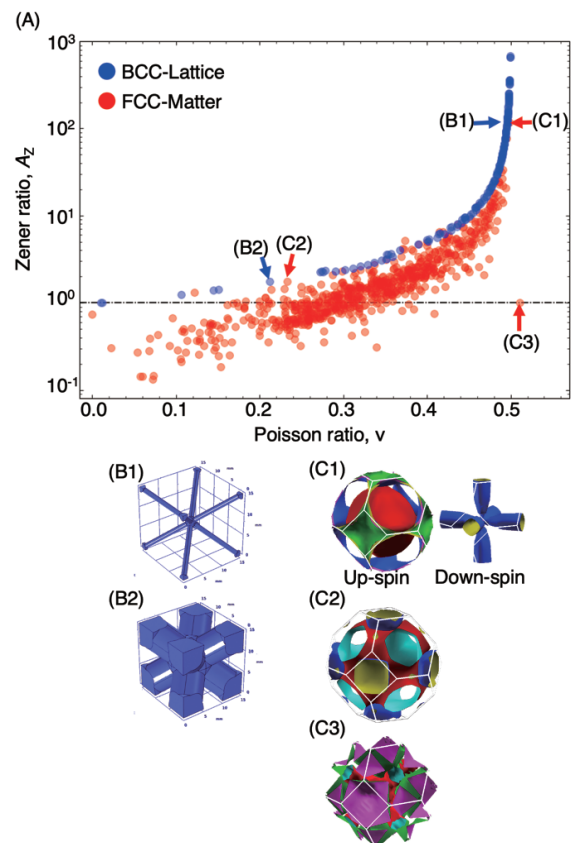


図 4. (A) BCC-Lattice と FCC-Matter の弾性異方性の対応関係、(B) BCC-Lattice の単位胞、(C1) MnSiRh₂、(C2) ScB₁₂、(C3) NdMg₃ の Fermi 面。

今後は、弾性変形時のエネルギー分布の変化と弾性変形時の Fermi 面の変化を調べ、弾性異方性の発現機構の解明を目的に研究を進めて行く。弾性変形時の Fermi 面を比較することで、どのような電子構造がこの弾性異方性の分散に寄与しているのかを確認し、その構造を格子構造として応用することで BCC-Lattice の弾性異方性制御に活用できると期待される。

さらには、本研究の成果は、形状記憶合金や超弾性合金の相転移における電子構造の変化と弾性異方性の変化との関係から応力誘起相転移や熱誘起相転移を発現する形状記憶メタマテリアルや超弾性メタマテリアルや力学的メタマテリアル[7]の 3D プリント、すなわち

4Dプリントのための構造設計を示すための発展することが期待される。

参考文献

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.
2. 小泉雄一郎, 鐘ヶ江壮介, 藤田武志, 粉末床熔融結合型金属付加製造による材料組織制御と格子構造体の創製, *セラミックス*, 55 (2020) 10–14.
3. 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, 27, (2022), 2–6.
4. S. Ogata, J.Li, S.Yip, Ideal Pure Shear Strength of Aluminum and Copper, *Science* 298 (2002) 807.
5. 細田昌希, 鐘ヶ江壮介, 奥川将行, 尾方成信, 小泉雄一郎, “面心立方構造、体心立方構造、およびダイヤモンド構造を有する格子構造体と結晶性材料の弾性異方性, 日本金属学会 2023 年秋期(第 173 回)講演大会, 講演番号 P52【優秀ポスター賞】.
6. A. Jain, S. P. Ong, G. Hautier, W. Chen, W. D. Richards, S. Dacek, S. Cholia, D. Gunter, D. Skinner, G. Ceder, and K. A. Persson, Commentary: The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation, *APL Materials*, 1 (2013) 011002.
7. H. Nagayama, S. Kanegae, M. Hosoda, M. Okugawa, Y. Koizumi, Thermally induced phase transforming cellular lattice driven by bimetal beams, *MRS Adv.*, 7 (2022) 701–705.