

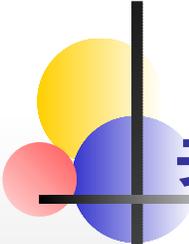
# 弾性体および弾性体中の転位線の 形態に関する考察

## *Morphology of Elastic body and of Dislocation Curve in Elastic body*

by

中谷彰宏 (阪大)

Akihiro NAKATANI



# 異なる視点からの形態と強度

- **形態と強度は切っても切れない**

ミクロでは、形態そのものは機能・強度と密接に関係する。

- **リポソーム (ある人工膜) の構造**

- 生物物理学分野でなされている膨大な先駆的研究への挑戦
- 従来の機械工学 (固体力学・破壊力学) の方法論, マルチスケールモデリングを応用できないか?  
⇒ 異なる視点から見えてくるものへの期待 ...  
(まずは, 1D から)

- **転位線の形態**

- 格子欠陥は, 従来の連続体力学では特異点となる厄介物だが...
- 特異点そのものを敢えて直視する「欠陥動力学」  
(ひとつの逆転の発想)
- 母媒体に比べ欠陥の占める割合が少ない時に有効  
(アモルファスでは欠陥だらけでダメ)



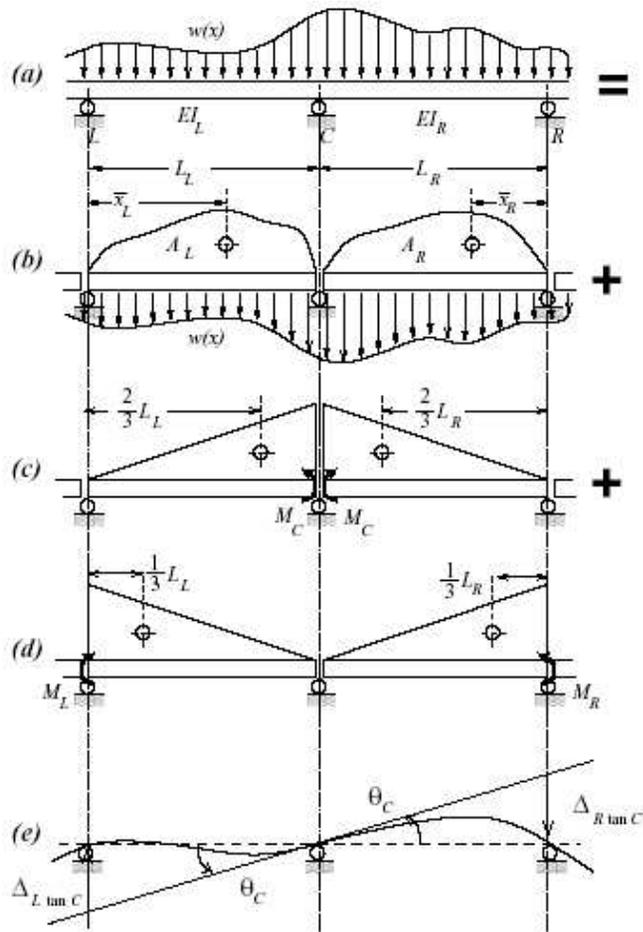
# お題

安直な表題をつけてしまったが， ...

- 一. 異なる視点から見えるもの.
- 一. 弾性線 (エラスティカ).
- 一. 弾性体中の転位線.

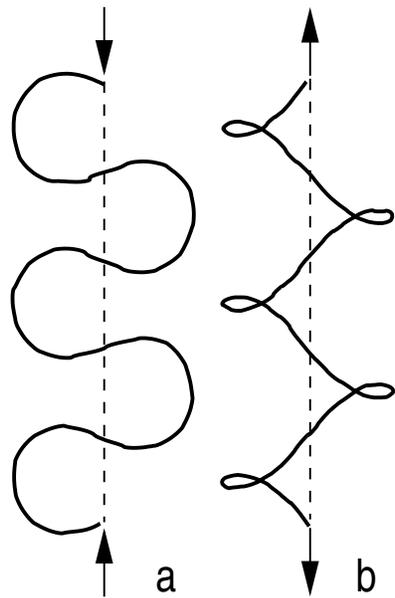
はたして三題噺はまとまるのか？

# 三連モーメントの定理とスプライン

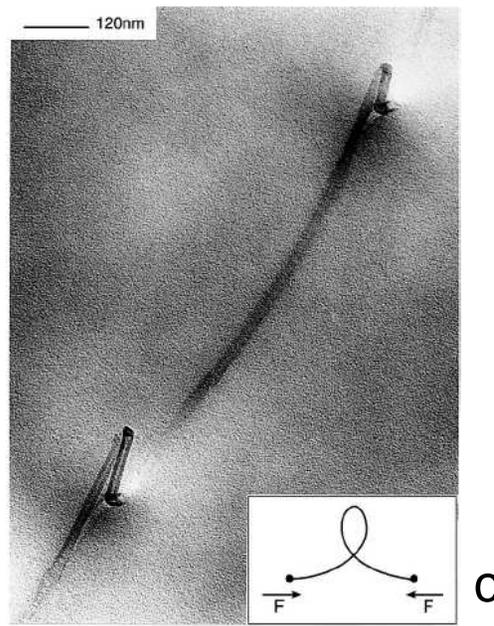


- はりのたわみはスプライン関数
- 「自由曲線」 $\Rightarrow$ 「自然な曲線」 $\Rightarrow$ 「無駄がない」 $\Rightarrow$ 「美しい」
- 「支点」無理に通る点， $\Rightarrow$ 不自然さを生む要因に？
- ベジエ曲線 ... B スプライン，有理 B スプライン  
 $\Rightarrow$  CAD/CG の分野の常識
- 力学解析，有限要素法に使えないのか  
(もう使われている)
- スプラインを使ったリバーエンジニアリング  
部品から図面を起こすなど
- 自然な曲線としてのスプラインは意味があった

# エラスティカ



エラスティカ

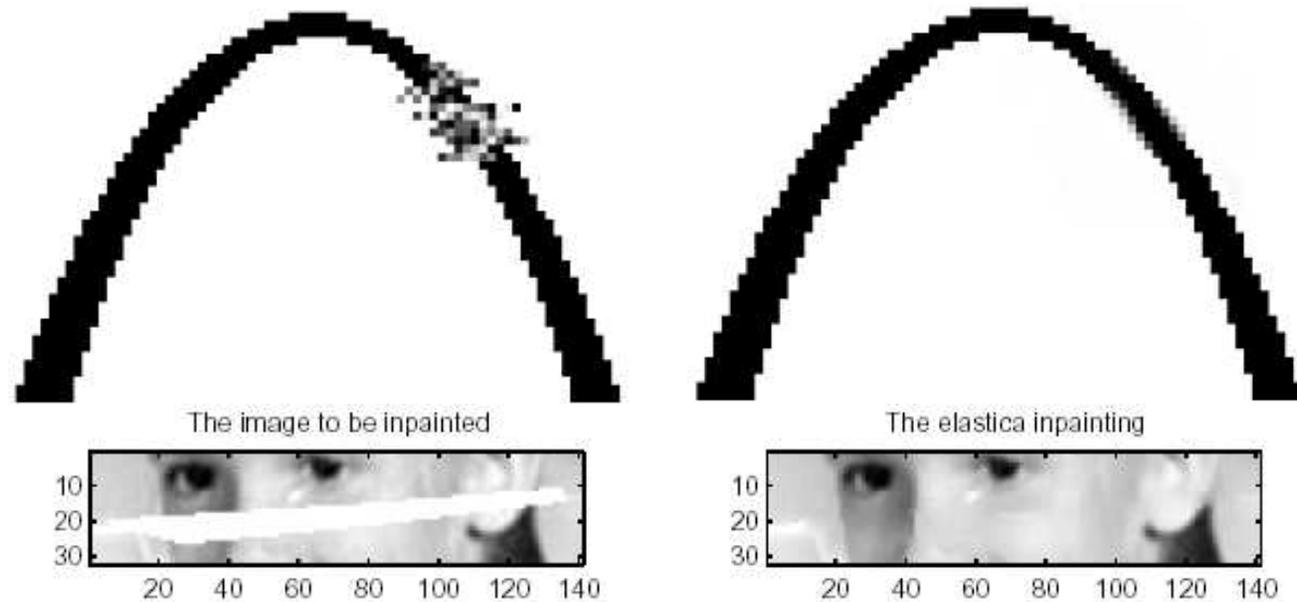


CN チューブの圧縮

- 両端のみでコントロールされる自由曲線
- 微小ひずみ, 有限変位
- 変位で表現するのではなく曲率で表現すべき  
原子が感じるのは近傍の情報
- 局所ルール of 時間発展で変形を記述できるのでは
- B スプラインは, 局所の変化に対し全体は影響を受けない

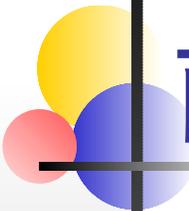
- 問題自身は古典的だが, ナノテク他応用例は常にあり続ける.
- スプライン同様リバーエンジニアリングへ応用される.
- 非線形スプラインと解釈される.

# 画像修復と表面修復(1)

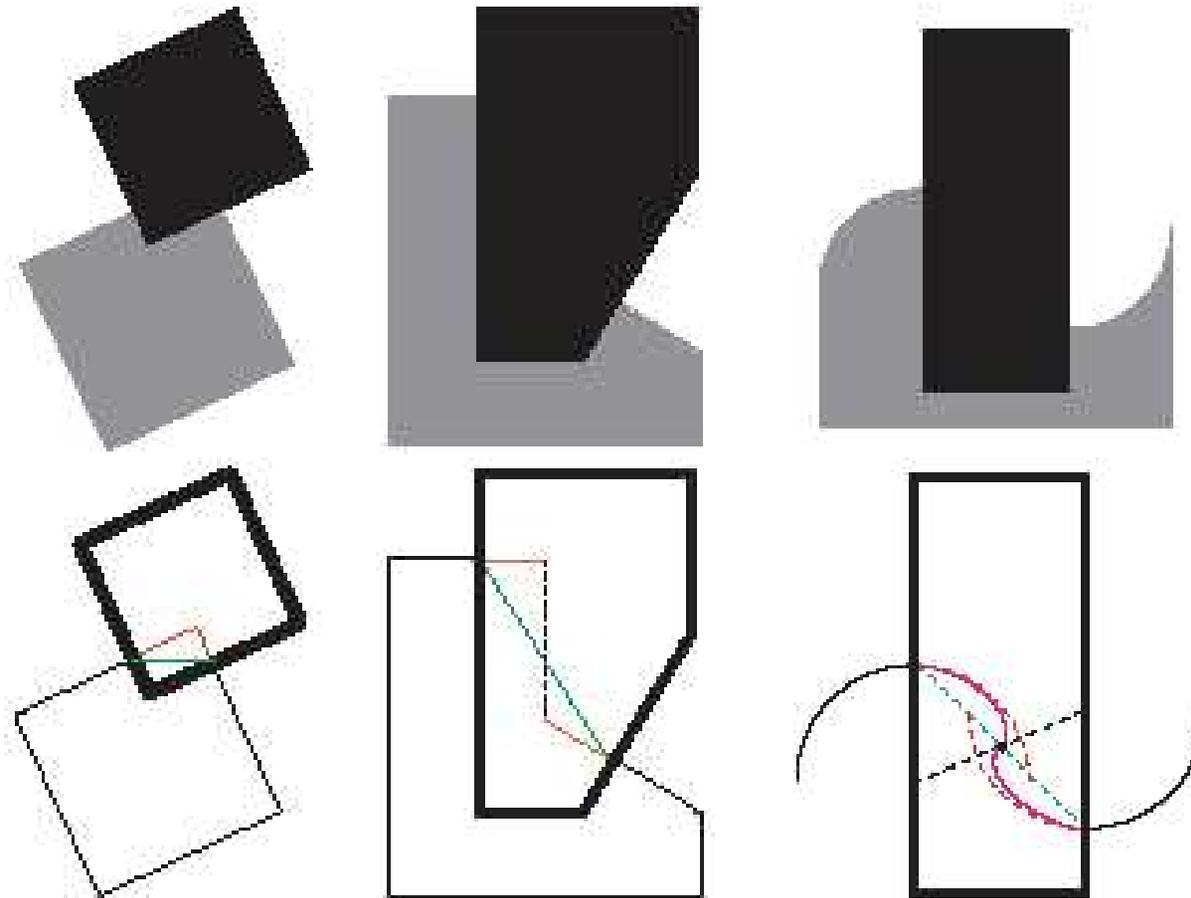


Elastica inpainting

- エラスティカ本来の弾性体の力学や変形と全く異なる分野で変分学的アイデアが使われている。
- まさに「異なる視点」からの「リバースエンジニアリング」



# 画像修復と表面修復 (2)

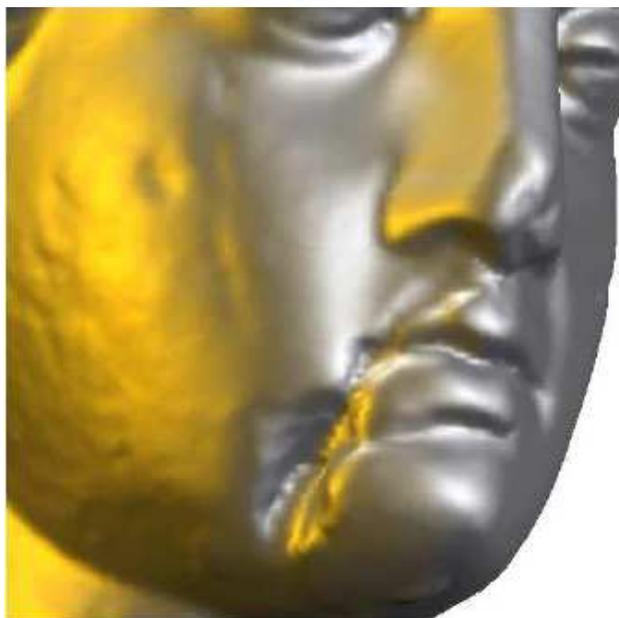


Contour interpolation by vector-field combination

# 画像修復と表面修復 (3)

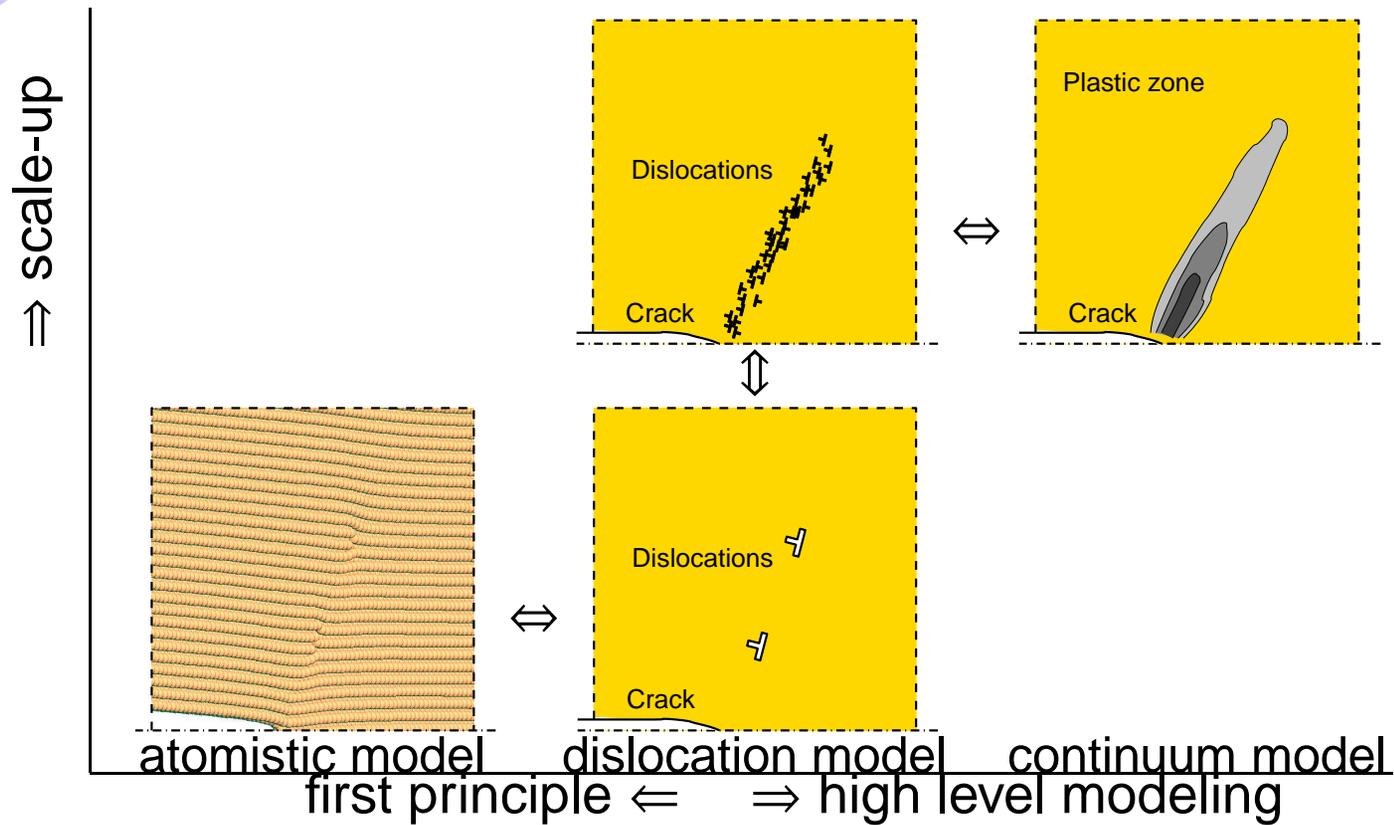


Navier-Stokes inpainting

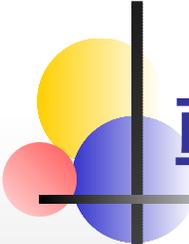


Surface restoration by FEM

# 転位線のモデル「異なる視点...」



- 転位線：すべり変形の前後の境界に存在する結晶材料中の格子欠陥。電子顕微鏡で捉えられるので実体があるとも言えるし，原子レベルで見ると良くわからなくなるので実体がないとも言える。
- 変形体の問題を扱う人のものの見方の問題。様々な幾何構造を物体内部に考えることができ，得られる知見を必要な情報に変換すれば良いはず。



# 転位線のモデル

- 原子モデル (ミクロスコピックな観点)

- 中間領域での方法 (メゾスコピックな観点)

- 離散転位動力学シミュレーション

個々の転位の運動を考慮した方法

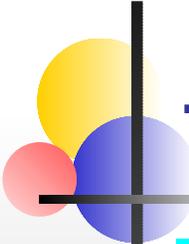
- 空間的には，原子レベルの解像度を有している。

- 連続体モデルでは得られない様々な知見をもたらす。

- × 取り扱う系の寸法が大きくなると，転位間の近接相互作用や反応の組み合わせの数が膨大となり，それらの局所ルールの計算量が飛躍的に増大する

- フェーズフィールド 転位動力学シミュレーション

系の自由エネルギーを連続な秩序パラメータの汎関数として記述し，変分原理によって場の時間発展式を導出し，ある与えられた初期条件と境界条件のもとで，この方程式を数値的に解く方法．結晶成長，相変態，などに応用されている．有効な方法となりうるのか？

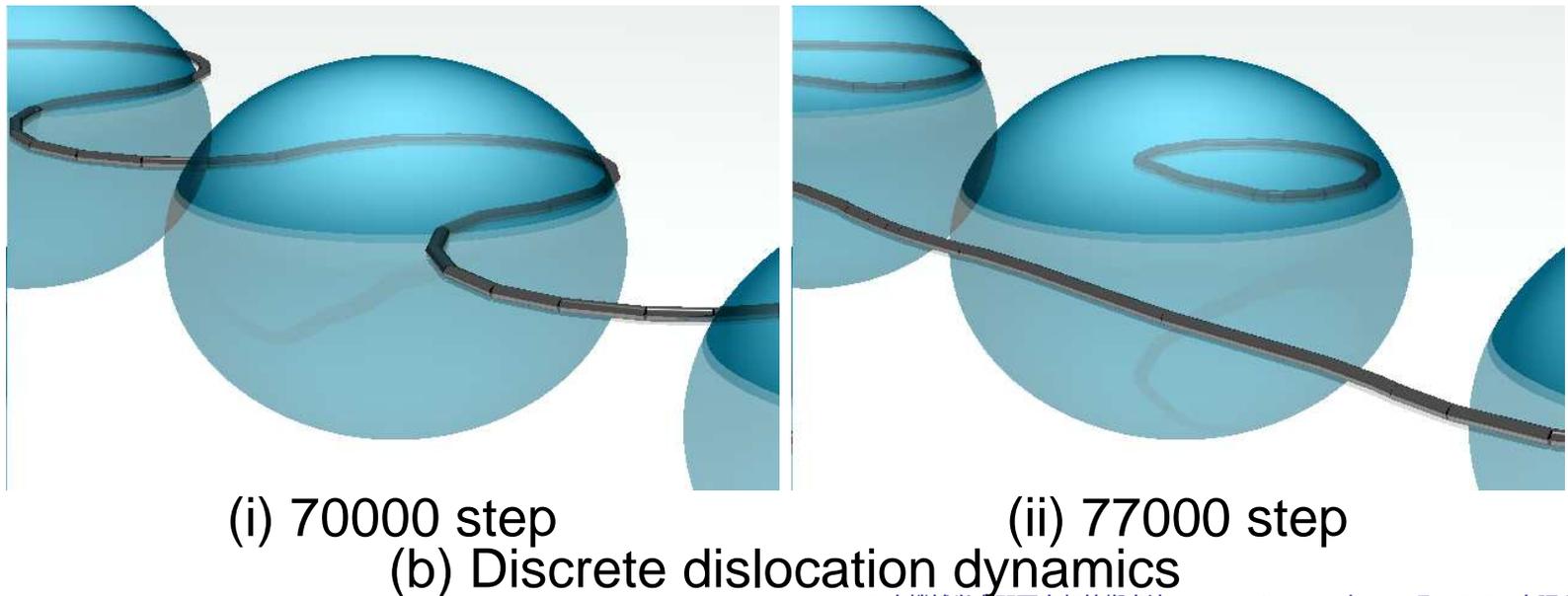
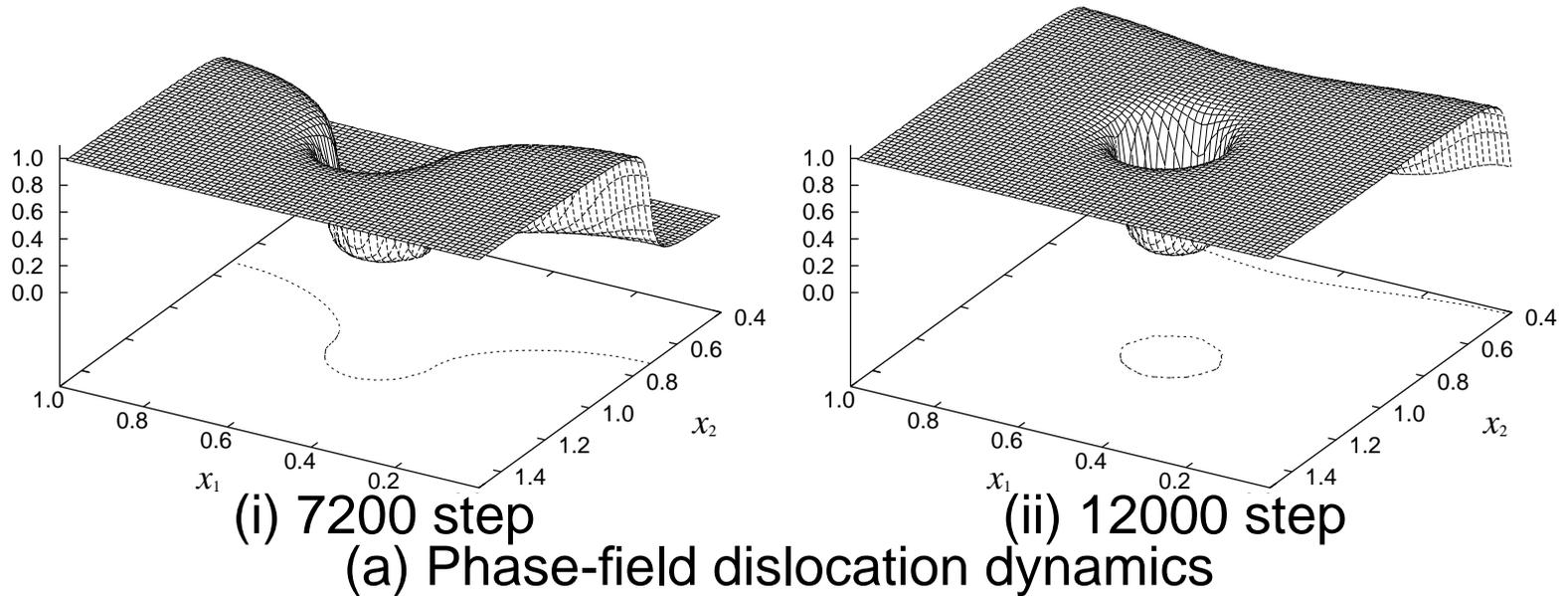


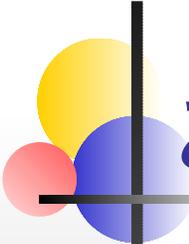
# フェーズフィールド法

**特長** 相界面の運動を秩序パラメータの時間発展におきかえることにより：

- 計算時に界面での熱力学的平衡条件を陽に与える必要がない (予めエネルギー表現として記述しておく必要はある)。
- 移動境界にともなう煩雑さを避けることができる。 (オイラー的に取り扱うことによる利点)。
- 転位間近接相互作用の局所ルールを陽に考慮する必要がない。
- 転位運動を秩序パラメータの時間発展としてオイラー的に追跡するため、転位線の移動に伴う、要素の変形やトポロジ的な変化に対応した再分割といった煩雑さを避けることができる。
- 導かれる反応拡散方程式は、解析モデルの分解能を変化させることにより個々の転位線を離散的に区別できるミクロ領域から、連続的な転位密度分布や転位のパターン形成といったマクロ領域まで、シームレスに成り立つ可能性があり、原子レベルのシミュレーションとマクロな連続体解析との架け橋となる可能性を持つ。
- △ パラメータの中には、必ずしも従来広く用いられている物理量や性質との対応づけが難しいものがあり、適用に難しさを有している。

# 球状介在物まわりの転位線挙動





# おわりに (ひとつの感想文)

- つれづれなるままに，異なる視点で見えて来るものとして，エラスティカ問題と，転位線について述べた．
- 浅学を暴露したに過ぎないかもしれないが，講演準備にあたっていろいろと勉強になった．
- 今後，これらの問題をじっくり考えていきたいと思う．

*a*

---

<sup>a</sup> 【謝辞】本発表を勧めていただいた阪府大 中谷敬子 博士に謝意を表します．紹介した転位動力学シミュレーションについては，阪大大学院 小篠豊彦君，政家利彦君，北川 浩 先生との研究の結果であり，また，阪大大学院の小林佳広君には，エラスティカ関連の文献の調査に協力いただいた．記し謝意を表します．