キンク変形を応用した炭素繊維強化積層構造体の曲げモーメント織込型プレストレス構造設計に関する研究

Structural design of carbon fiber reinforced layered solid with pre-stress of bending moment induced by kink deformation

研究代表者　福井大学　講師　雷　霄雯

共同研究者　大阪大学　教授　中谷　彰宏

Xiao-Wen Lei, Akihiro Nakatani

Kink deformation of layered solid, related mechanical properties, and how to design them are studied. Firstly, computational simulations of compression test of graphite are carried out, and the criteria of kink banding and deformation modes depending on the dimensions of specimen are investigated. Secondly, the kink deformation is discussed from a viewpoint of an instability theory. Thirdly, a new proposed method based on Monte Carlo method on a cellular automaton model is examined to clarify the deformation of layered solid. The series of studies have given us the fundamental knowledge for design a pre-stress layered composite structure.

要旨

高い強度と軽さを併せ持つ炭素繊維強化プラスチック材料（CFRP）は，橋梁・飛行機・自動車など大型構造物からスポーツ道具・生活用品などの様々な用途に利用が広がっている複合材料である．本研究では CFRP 積層構造体の板要素および構成するファイバーに外力を負荷した時に生じるキンク変形を積極的に利用して，残留応力分布の一般化力に相当する曲げモーメントを構造の中に織り込んだ新しいタイプのスマート構造のプレストレス設計に関する基礎研究を行う．従来の軸力型のプレストレス設計に対して，異方性の制御，新しい構造モニタリングに応用できると期待される．

1．まえがき

キンク変形は，繊維や薄膜に接線方向の圧縮負荷が加えられたときに生じる横断面方向への変位を伴う折れ曲がり変形を基本とし，それらが集まった構造である束（バンドル）や積層構造において，変形異方性に由来して現れる特別な変形モードである．キンク変形は長周期積層（LPSO）構造相を有するマグネシウム合金，MAX 相セラミックスなどの層状材料から地層に至るまで様々なスケールにおいて観察される普遍的な変形様式でもある．これまでの研究で，LPSO 相 Mg 合金の強化，MAX 相セラミックスの延性・靭性の向上など，キンク変形が力学特性の改善に密接に関係していることが明らかとなってきたが，炭素繊維強化プラスチック（Carbon Fiber Reinforced Plastics）積層構造材（以下，CFRP と呼ぶ）では機能損傷や破壊に結びつく抑制すべき変形機構というのが一般的常識とされてきた(1)(2)．しかしながら，キンクの幾何構造と力学特性の関係を明らかにし，この不安定変形を積極的に利用することによって，衝撃エネルギーの吸収能や安全性を高め材料特性の向上をもたらすと同時に機能性を付与することが期待できる．一方，久多良木ら(3)は，CFRP を製造する際に引張の予荷重を加えることで引張強度が向上することを報告している．積層構造に予圧縮荷重を加えることでキンク変形を発生させ力学特性の変化を利用した新奇の機能構造を創成できる可能性がある．

本研究ではその第一歩として，まず CFRP の構造の特徴を表す計算力学モデルとしてグラフェンシート（Graphene sheet: GS）の積層構造モデルを作成し，分子動力学法を用いて，圧縮の荷重を加えたとき，キンク変形解析と力学特性評価を行う．次に，積層構造モデルのキンク変形を構造安定性理論の観点から考察する．最後にキンク変形を利用する材料構造の設計に応用可能なセルオートマトンとひずみエネルギーに基礎をおくモンテカルロ法を用いた新しい方法論について論じる．

2．グラファイトの圧縮解析

本章ではシミュレーションによって積層構造の力学特性評価を行う方法論について考察した成果[2]を報告する．

2．1　解析モデルと解析方法

解析モデルは原子間相互作用が AIREBO (The Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond-Order) ポテンシャル[4]で表現される GS の積層体であるグラファイトを用いる．本研究で構築した解析モデルを図１, 図２に示す. モデルは x 方向の寸法を x=39.352Å, 89.772Å，119.286Å の 3 パターンに設定し，y，z 方向の寸法は y=58.220Å，z=97.150Å で一定とし，2 層間隔で変化して積層する ABAB…型の 30 層モデルとする．原子数は GS あたり 924 個とし，グラファイトは 27720 個になる．層間相互作用はファンデルワールス力で特徴付けられる．

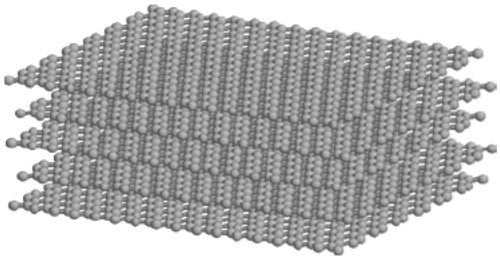


図１ GS の積層構造体としてのグラファイトの原子モデル

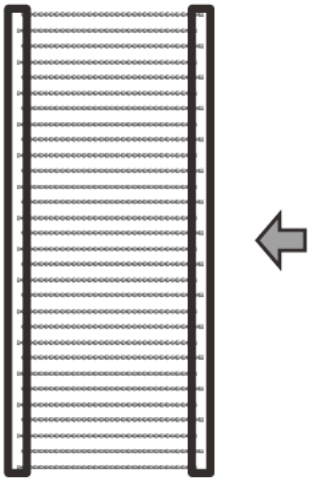


図２　グラファイトの計算機圧縮試験

解析には分子動力学シミュレータ LAMMPS（Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator）を用いる．炭素の原子間相互作用を計算するために炭素間カットオフ距離 r_{cut} は 1.95Å とし，タイムステップ Δt =1fs で計算を行う．圧縮解析は図２に示すように，変位速度 v=±0.1ps^{-1} で圧縮変位を与える．

２．２ 解析結果及び考察

２．２．１ 変形形状

位置 x=39.352Å の解析時間毎の圧縮の様子を図３に示す．図３ (a)～(c)はそれぞれ時間 t=0ps，20ps，30ps のときの圧縮の様子である．

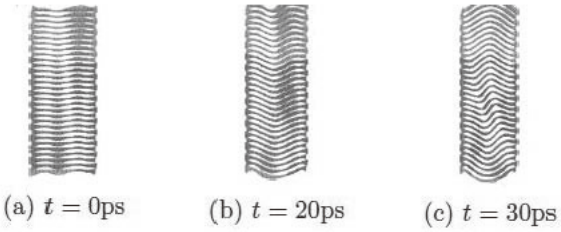
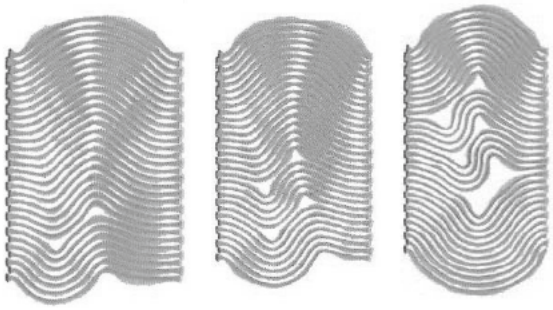


図３　グラファイトの圧縮変形



(a) ε=0.10　(b) ε=0.12　(c) ε=0.17

図４　層間はく離と各層のキンク変形

解析結果の一例として，グラファイトの試料寸法は x 方向が l_x=90Å，y 方向が l_y=60Å で，層数 30 のものを図４に示す．グラファイト両端の境界条件として，x 方向は変位速度 0.1Å/ps で圧縮し，y 方向および z 方向は変位拘束している．ここでは折れ曲がった変形のうち，z 方向に大きくたわんでいる変形を剥離，それ以外の折れ曲がりをキンク変形と定義する．

ひずみが 0.10 のときに下層の一部にて剥離が発生する．またひずみが 0.12 の時点では折れ曲がりのキンク変形が発生する．ひずみが 0.17 のときには剥離およびキンク変形の大きさが成長していることが確認できる．

２．２．２ キンク変形と層間剥離の幾何学的特徴

変形を定量的に評価するにあたって，図５に示すように各層の折れ曲がり度合の角度を測定する．結果を表１に示す．さらに一例として試料の x 方向長さが l_x=90Å，y 方向長さが l_y=60Å で，層数 30 のものの層ごとの角度を図６に示す．このグラフから角度

が小さい箇所は折れ曲がり角がシャープな剥離層であることが確認できる．また全体層数が異なるものでそれぞれ角度の測定を行った結果，層数が増えるにつれて平均角度も上昇していることを確認している．

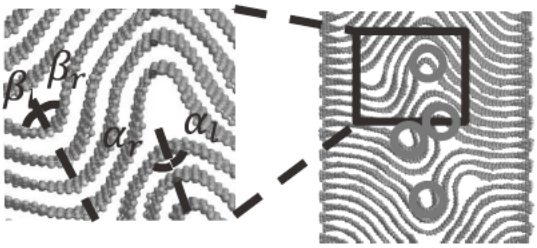


図５　層間はく離と各層のキンク変形

表１　キンク変形および層間剥離の幾何学的特徴

全体層数		30	40	50	60
キンク層数		8	14	18	24
平均角度［deg］	$\alpha(\alpha_l+\alpha_r)$	61.67	61.93	63.34	65.95
	$\beta(\beta_l+\beta_r)$	59.31	60.73	62.27	64.54

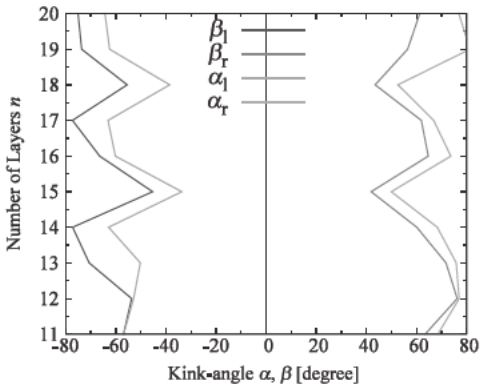
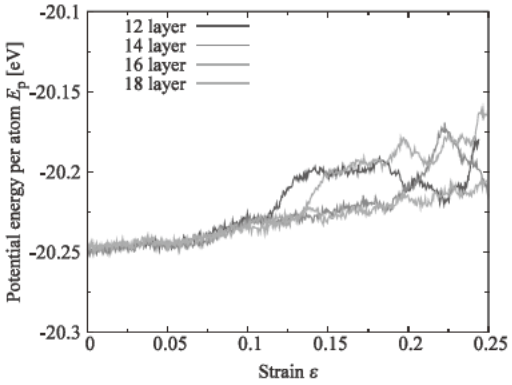


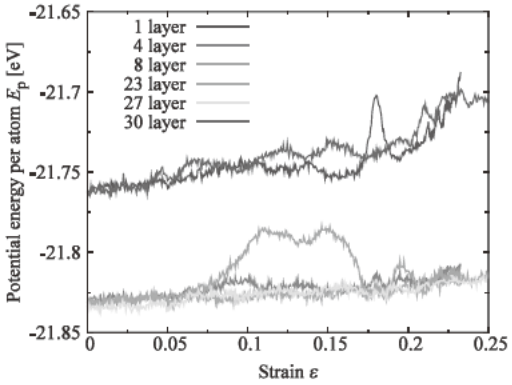
図６　層間はく離と角度

２．２．３ 層ごとのポテンシャルエネルギーのひずみとの関係

図７は層ごとの原子１個あたりの平均ポテンシャルエネルギーがひずみ量によってどのように変化するかを示した線図である．このエネルギー線図からキンクや剥離が発生している中央層付近の方が高いエネルギーを有していることがわかる．また，中央層のエネルギー変化をみるとひずみが 0.12 付近で急激に上昇している．このことから，キンク変形よる局所的なポテンシャルエネルギーの上昇が確認できる．



(a) 中央層



（b）上下層

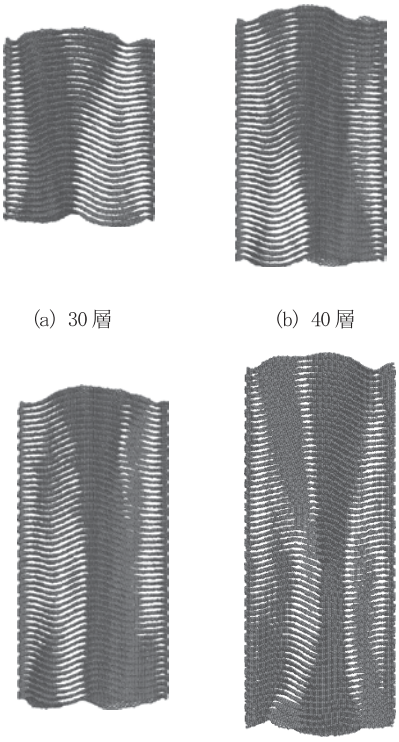
図７　ポテンシャルエネルギーのひずみとの関係

２．２．４　試験片の幾何のキンク変形への影響

図８は試料寸法の x 方向長さを l_x=90Å で固定し，層数を 30 から 60 層まで変化させたモデルに対して解析の結果得られた変形形状を示している．また図９はそれぞれのモデルの応力ひずみ線図を示している．

図８から，層ごとに面外変形箇所が異なり，全体としても座屈モードの異なる面外変形が確認される．つまり，変形機構は層数の影響（x 方向長さ l_x が一定の下での y 方向長さを l_y の影響）を強く受けており，層数が異なるとモードが異なる面外変形が現れることが分かる．また図９から，いずれの条件でもヤング率は E=750GPa で一定であり，グラファイトを用いた先行研究のヤング率とほぼ合致する．またキンク変形の発生応力は層数の影響を受けて変化し，層数が

増加するほど最大圧縮応力が上昇する傾向がみられた．また大きなひずみ域での応力値の変化はモードの違いによってモデルに大きく依存して変化することがわかる．



(a) 30 層　(b) 40 層

(c) 50 層　(d) 60 層

図８　キンク変形（層数の影響）

図１０は y 方向長さを l_y=60 Å，層数を 30 に固定して，試料寸法が x 方向長さを基本となる形状の l_x=90 から l_x=40, 120Å に変更したモデルの解析で得られた変形形状を表している．ここで，l_x=40 Å については図１０(a)から(d), 120Å については図１０(e)から(h)に結果を示している．また図１１はそれぞれのモデルの応力ひずみ線図を示している．

図１０において同一ひずみ時の全体層数ごとの変形の様子をみると，層ごとに面外変形箇所が異なり，座屈モードの異なる面外変形が確認される．つまり，変形機構は寸法（x 方向長さ l_x と y 方向長さを l_y の関係）によって変化することがわかる．また図１１から，いずれの条件でもヤング率は E=750GPa で一定であり，グラファイトを用いた先行研究のヤング率とほぼ合致する．キンク変形の発生応力は試験片寸法に関係して変化しており，x 方向長さ l_x が小さいほど最大圧縮応力が上昇する傾向がみられた．また大きなひずみ域での応力値の変化はモードの違いによってモデルに大きく依存して変化することが明らかになった．

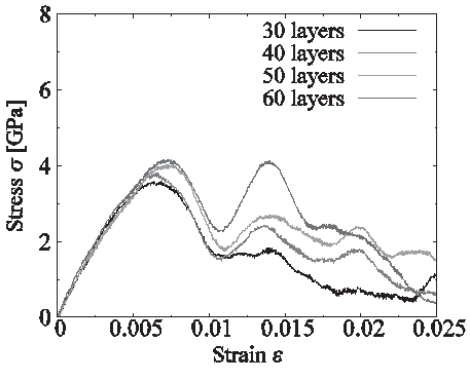
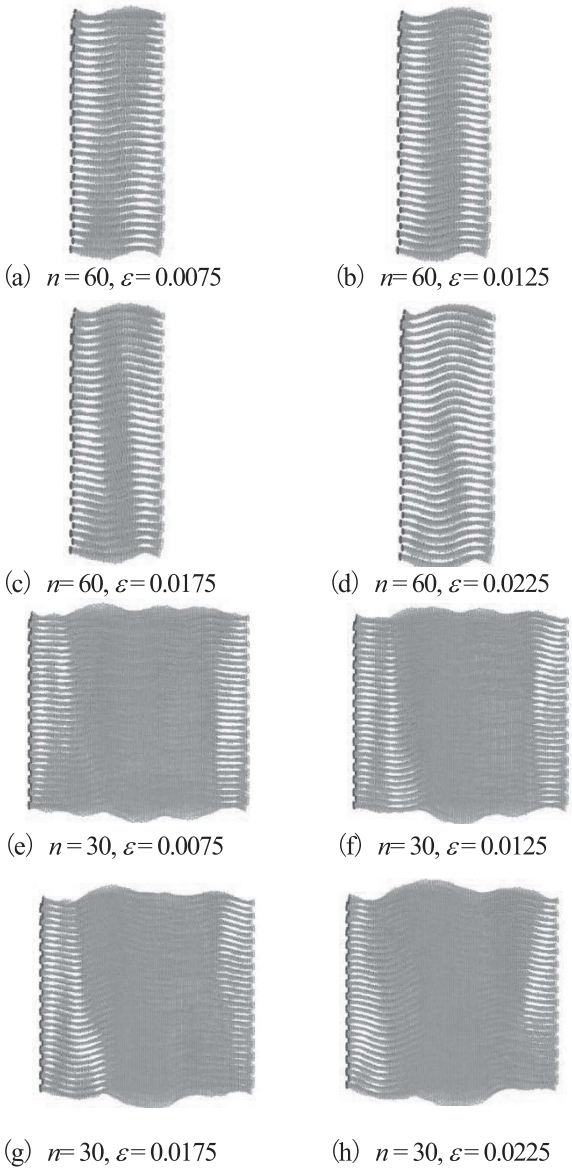


図９　応力ひずみ関係（層数の影響）



(a) n = 60, ε = 0.0075　(b) n= 60, ε = 0.0125

(c) n= 60, ε = 0.0175　(d) n = 60, ε = 0.0225

(e) n = 30, ε = 0.0075　(f) n= 30, ε = 0.0125

(g) n= 30, ε = 0.0175　(h) n = 30, ε = 0.0225

図１０　キンク変形（試料寸法による違い）

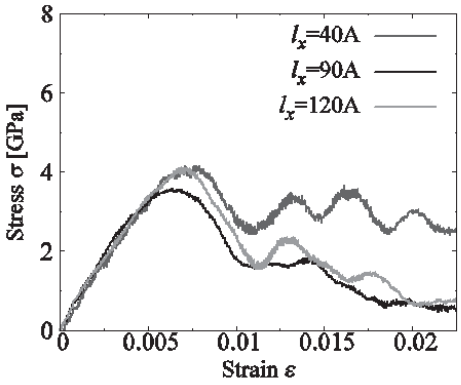
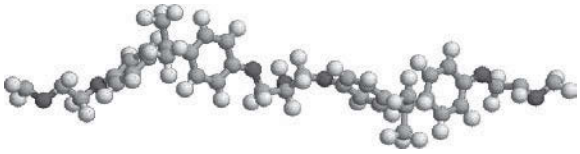


図１１　応力ひずみ関係（試験片寸法による違い）

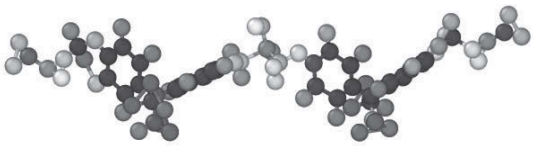
２．３　層間相互作用制御の今後の展望

我々のこれまでの研究結果および後述する変形理論では層間の相互作用がキンクの発生応力やその後の変形機構に影響することがわかっている．

ここでは炭素構造の強化層とエポキシ樹脂からなる構造で強化層と母材層からなる積層構造を作成する場合の層間相互作用の制御可能性に考察する．その第一歩としてエポキシ樹脂の構造緩和を行った．図１２に緩和前後の原子配置を示す．さらに精緻な解析を行うことによって，図１３に示すようなモデルを用いて CFRP の力学的な特徴をモデル化でき，このようなモデルを用いてキンク変形による曲げモーメントによって発生する曲げ応力を織り込んだプレストレス設計の可能性を探ることができると考えられる．



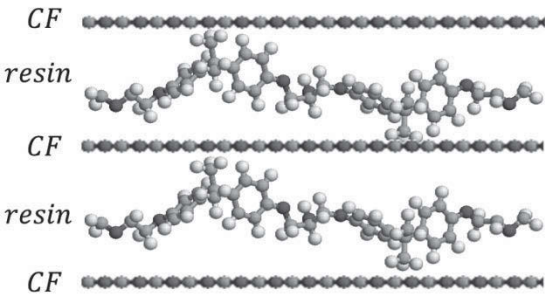
(a) エポキシ樹脂の初期原子配置



(b) エポキシ樹脂の緩和後原子配置

図１２　エポキシ樹脂の原子構造

(a)　CFRP の組織



(b)　CFRP の構造

図１３　CFRP の原子構造

３．不安定現象としてみたキンク変形論

キンク変形を理論的に取り扱うことができれば設計論を大いに発展させることが可能になる．本章では理論を発展させる取り組みを行った成果について報告する．

キンク変形の開始は基本つり合い経路上の一様な変形様式がある負荷レベルあるいは変形量レベルを境に折れ曲がり変形に遷移する不安定化現象ととらえることができる．キンク変形は，あるエネルギーの安定状態（凸性を有する状態）から別の安定状態へと遷移する現象であり，エネルギー地形上のサドル点を通過する状態の遷移，いわゆる非凸性に関連する不安定現象ということができる．このようなミクロ不安定現象は直ちにマクロ的な不安定現象に結びつくわけではなく，制御し利用すると，成形・加工，力学特性の向上に結びつけることができる[1].

このような不安定性は外部負荷に対する内部応答にともなって生じ，本質的に境界値問題の中での議論が不可欠であるが，微視的変形組織がマクロな境界条件に鈍感で，普遍的に観察されるような場合には，変形帯を統計的に十分に含むような代表体積要素（representative volume element; RVE）の固有な材料特性（intrinsic material property）とみなすことができる．物体点が RVE の特性によって記述される連続体モデルを考えるとき，物体点ごとに定義され局所的な条件に関連付けられた局所条件によって導かれる不安定性は材料不安定性（material instability）とよば

れ，その条件は境界条件に依存しない．RVE の増分的な力学応答もちろんRVE内の微視構造のシステムとしての変形機構や不安定性が，RVE の力学応答と不安定性を記述するので，現象論によらない理解のためには，RVE 内部構造の時間発展を陽に考慮した階層科学に立脚したマルチスケール解析が重要となる．ここでは，材料不安定性に着目した積層構造体のキンク変形メカニズムについて概観する．

Bigoni[5]によれば材料安定性は，物体点の構成関係作用素（一般化された力定数行列）について，(1)正定値性，(2)非特異性，(3)強楕円性，(4)楕円性，(5)フラッターに分類され，したがって，一種のマルチスケール解析でRVE内のミクロシミュレーションから構成関係作用素を計算力学的に獲得することができれば，マクロ的にはその条件によって不安定化条件を議論することができる．

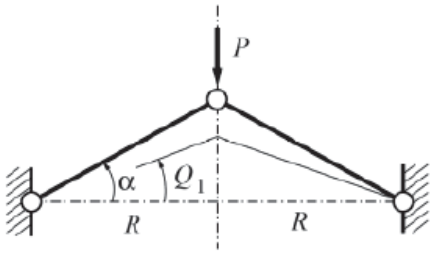
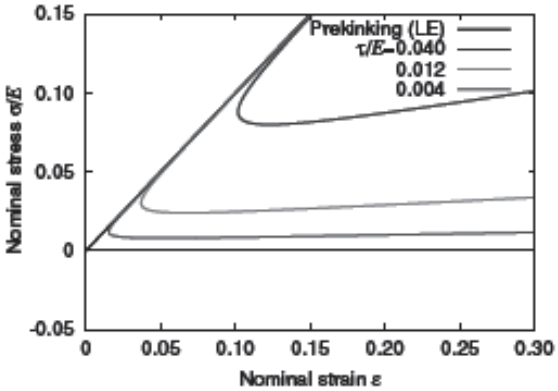


図１４　von Mises のトラス

一方，Petrik と Bigoni は，任意の幾何学的な速度場 $\boldsymbol{w}$ に対して $\nabla\boldsymbol{w}\cdot\boldsymbol{C}(\nabla\boldsymbol{w})$ の体積積分の符号によって定義される Hill の意味での安定性基準に対して，有限な摂動 $\boldsymbol{w}$ を考えることにより不安定化の問題が取り扱えることを示している．この考え方を用いれば構成関係作用素を陽に導出することなく直接マルチスケール解析によって問題を取り扱える可能性がある．

von Mises のトラス[6]を例に考える（図 14）．変位制御下では変形量 q に対する力 P を与える関係 $P(q)$ は一意に定まるが，力制御下では力 P に対して変形量 q を与える関係 $q(P)$ が一意に定まらず飛び移り（snap-through）が生じ，負荷経路依存性が生まれる．実際にはこの飛び移り点の条件は多くの場合過大評価する．Maxwell は，熱と仕事の同値性から等面積の規則（equal area rule，後に Maxwell's condition，Maxwell's convention と呼ばれる)によって遷移点が決まることを提案している[7][8]．Maxwell のアイデアによれば状態遷移の前後の自由エネルギー差が不安定化の基準を与える．一方，Bažant らは動力学的な飛び移りは逆に Maxwell の条件よりも大きな値を示すことを報告



している[9]．

図１５　キンク変形の荷重変位関係

von Mises のトラスの荷重作用点にばねを導入すると，力 P と力を作用する点の変位 q_2 の関係は，$P(q_2)$ と $q_2(P)$ は，ともに一価ではなくなる．このような状況では飛び降り(snap-down)と呼ばれる現象が生じる．この場合にも Maxwell の条件を考えることが可能であり，Hunt らはこの条件を用いてキンク変形の発生条件を導いている[10]．図 15 はキンク変形の発生前後の荷重変位曲線の理論解を示している．RVE 内の構造解析に LPSO 相の構造変化に対するエネルギー論的な情報を反映させると定量的な評価が可能になると考えられる．

本章では材料不安定性の観点からキンク変形をとらえるための基礎理論を概観した．別途実施しているばね質点モデルによるシミュレーション，回位モデルによる粗視化理論とあわせて，RVE 内部構造の時間発展を陽に考慮した階層科学に立脚したマルチスケール解析を用いることにより現象の理解が進むとともにキンク変形を利用した複合材料設計への応用が期待される．

４．セル・オートマトンモデル

本章では，積層構造体のキンク変形を解析するための新しい計算力学モデルを構築した成果[3]について報告する．

ディスクリネーションの考え方を基に積層構造を二次元の格子状セルオートマトンによって表現する．まず各層の中心線を曲線の帯と考え，それをセル（曲線素）で長さ方向に離散化する．図16にモデルの概略を示す．層構造における層の曲率を，セル・オートマトンにおけるセルの状態として記述する．これらのセルのうち折れ曲りのない線素を「0」，折れ曲がっている線素を曲率，に対応した整数「-1」，「1」，「2」...などで符号化する．このように状態を物理パラメータで定義することによって，各層ごとにセル・オートマトンによるセル状態と，ある基準となる一点（ここでは左端の点をとる）の座標$(x^{\mathrm{P}}, y^{\mathrm{P}})$ と線素の傾きθ^{P}の値を規定することで，構造の非弾性配置が一意に決定される．この決定された構造に対してエネルギーを記述することにより，そのこう配を駆動力とするセル系の状態の発展を考える．各セルの状態から形状が決まることで系全体のポテンシャルエルギーを計算することができる．具体的には，層の折れ曲りによる弾性ひずみエネルギーW_{b}，隣接層間の結合エネルギーW_{IL}，圧縮による弾性ひずみエネルギーW_{c}，外力のポテンシャルW_{ext}の和で表す．ここでは，層間の相互作用には V_0 によって強さが規定されるレナードジョーンズポテンシャルを用いる．

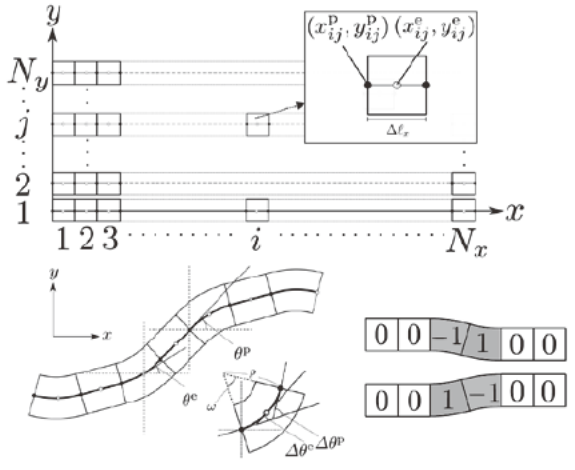


図１６ 層構造体のモデル・曲率による曲げ状態の表現・オルソ形キンク

折れ曲りによるエネルギーの解放を定量的に表現することにより，原理的には配置力（configurational force）を評価することができるが，ここでは駆動力を陽に評価するかわりに，状態の遷移に対応するエネルギー変化に対してモンテカルロ法による状態発展を考える．

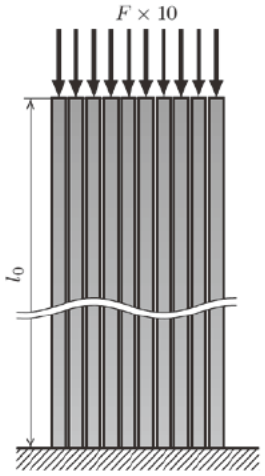


図１７ 層構造の圧縮モデル

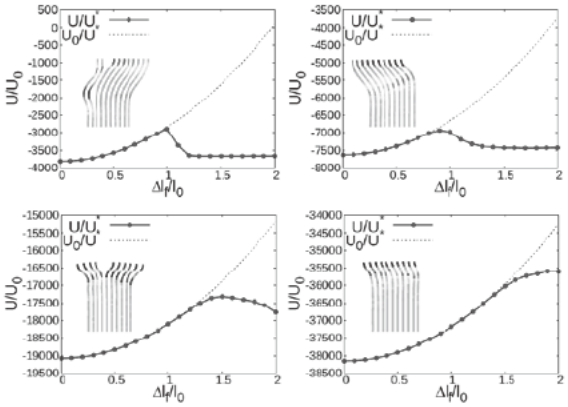


図１８ 総ポテンシャルエネルギーと公称圧縮ひずみの関係（異なる相互作用 V_0/U^*= 1, 2, 5, 10 に対して典型的な座屈パターンを曲率のグラデーションとともに表示）

その中で重点サンプリング法のうちカノニカル分布に従って乱数を発生させるメトロポリスの重点サンプリング法を用いる．状態変化は「移動」と「変化」のどちらかを基本過程とする．「移動」は，あるセルの状態を隣のセルの状態を隣のセルの状替える遷移であり，「変化」はあるセルの状態に-1 を作用させ，隣接セルの状態に+1 を作用させ「オルソ型キンク変形」の生成・増加・減少・消滅に対応する．

図17 に解析モデル，図18 に相互作用の強さに相当する V_0/U^* を変化させシミュレーションを行った結果を示す（U^* は無次元化のための定数）．V_0の値によって単軸圧縮変形からの変形モードの遷移の臨界ひずみエネルギーとその後のエネルギー解放過程やキンク変形形態に違いが現れることがわかる．

このようにエネルギーの解放により駆動されるセル・オートマトンモデルを構築し，基本的な座屈問題の解析により手法の有効性を確認した．また積層構造の圧縮変形解析への適用により層間相互作用が変形パターンに与える影響を評価することができた．

５．まとめ

圧縮の予荷重によってグラファイト積層構造体にキンク変形が発生し，その変形機構や剥離度合は圧縮方向長さ・層数による影響が大きい．グラファイト積層構造体の層数の増加，圧縮方向長さの減少に伴い最大圧縮応力が上昇する傾向がみられた．また，中央層付近においてキンク変形の発生によってポテンシャルエネルギーの増加がみられた．

キンク変形の開始は基本つり合い経路上の一様な変形様式がある負荷レベルあるいは変形量レベルを境に折れ曲がり変形に遷移する不安定化現象ととらえることができる．キンク変形だけでなく，転位運動，双晶変形，き裂進展などの非弾性的な力学現象は，普くすべて，あるエネルギーの安定状態（凸性を有する状態）から別の安定状態へと遷移する現象であり，エネルギー地形上のサドル点を通過する状態の遷移，いわゆる非凸性に関連する不安定現象ということができる．このようなミクロ不安定現象は直ちにマクロ的な不安定現象に結びつくわけではなく，制御コントロールし利用すると，成形・加工，力学特性の向上に結びつけることができる．

層間すべりと層間はく離に注目し，キンク変形メカニズムの理解を試みた．幾何学的な条件を満足するばね質点モデルを用いたシミュレーションの結果は，理論解析と定性的によく符合することが明らかになった．また固有の性質と外的な要因の両面からの力学解析の重要性を指摘した．ここで述べた考え方は曲げモーメント織り込み型のプレストレス複合材料設計という新しい機能構造材料の設計の指針に応用できるものである．キンク変形はナノ材料から地球惑星科学が取り扱うようなマクロ構造に至る広いスケール範囲で現れる性質であり学術的にも興味深い．新しい力学理論を展開するには，数理構造の数学的理解が必要であり基礎科学的な分野の研究者との連携が重要になると思われる．本研究で得られた成果を生かして，今後は付加製造技術など新しいものづくりの方法論を組み合わせることによって実用構造化に向けた取り組みを進めたいと考えている．

発表論文

[1] 雷 霄雯，中谷彰宏，土井祐介，松永慎太郎，面外変形を起こすキリガミ周期構造体の分岐解析，材料，第 67 巻，第 2 号，202-207 ページ，平成 30 年 2 月．

[2] 清水 俊吾，LEI Xiao-Wen，中谷 彰宏，プレストレス設計への応用を目指した積層体のマイクロ座屈変形解析，第 30 回 計算力学講演会論文集，2017.30 巻（2017）

[3] 野呂優太，Xiao-Wen Lei，土井祐介，中谷彰宏，曲率を表現するセル・オートマトンを用いた変形シミュレーション，マルチスケール材料力学シンポジウム（第 22 回分子動力学シンポジウム・第 10 回マイクロマテリアルシンポジウム）論文集（2017），USB.

参考文献

（1） X.-W. Lei, A. Nakatani, Analysis of kink deformation and delamination behavior in layered ceramics. Journal of the European Ceramic Society, 2016;36: 2311-2317.

（2） 中谷彰宏，雷 霄雯， シンクロ型 LPSO 構造の新展開―ミルフィーユ構造の変形機構と力学特性― ，金属，第 86 巻，第 6 号（2016），pp. 486-492.

（3） 久多良木一馬，ほか 3 名，CFRP の引張強度に及ぼす予荷重効果，(2007)，日本金属学会誌，第 71 巻， 第 8 号，598-602.

（4） S. J. Stuart, A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, Journal of Geology, 112, 14, (2000), 6472-6486.

（5） D. Bigoni, Nonlinear Solid Mechanics Bifurcation Theory and Material Instability, Cambridge University Press, 2012.

（6） Z. P. Bažant and L. Gedolin, Stability of Structures Elastic, Inelastic, Fracture and Damage Theories, World Scientific, 2010.

（7） J. C. Maxwell, On the Dynamical Evidence of the Molecular Constitution of Bodies, Nature, (1875), pp.357-358.

（8） T. ポストン，I. スチュワート，カタストロフィー理論とその応用／応用編，サイエンス社，1982.

（9） Z. P. Bažant and M. Verdure, Mechanics of Progressive Collapse, Learning 2311-2317.

（１０） G. W. Hunt, M. A. Peletier and M. A. Wadee, The Maxwell stability criterion in pseudo-energy models of kink banding, Journal of Structural Geology, 22 (2000), pp.669-681.