

機能材料の微視構造設計法と 発見したデジタル複合構造

上辻靖智

工学部 機械工学科
機能材料工学研究室

- 電気磁気複合材料について
- 複合材料のマルチスケールシミュレーション法 **微視構造設計法**
- マルチスケールシミュレーションの適用
 - ✓ 電気磁気セラミック複合材料
 - ✓ 電気磁気高分子基複合材料
 - ✓ まとめ
- 期待される用途, 実用化に向けた課題など

発見したデジタル複合構造

※ Web資料には含まれないデータがあります.

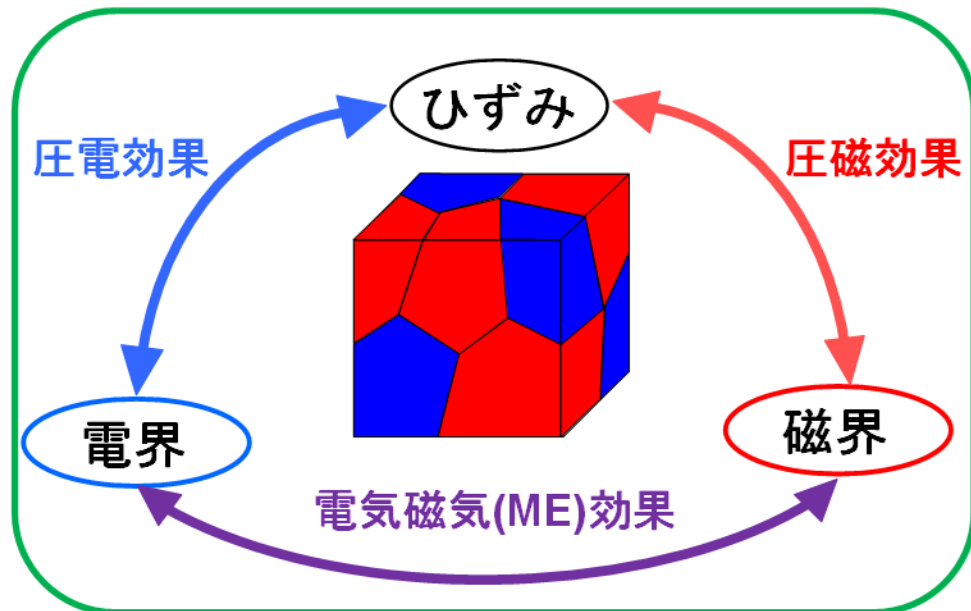
強誘電体 (圧電材料)

+

強磁性体 (圧磁材料)

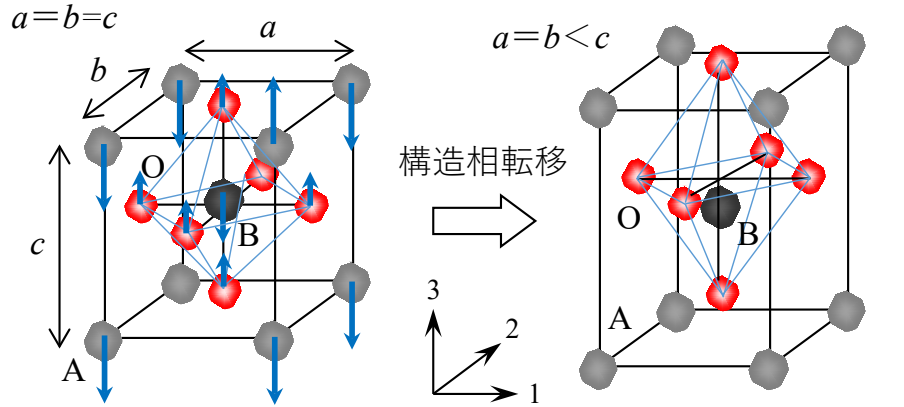
||

電気磁気複合材料



電気磁気複合材料の用途

- 不揮発性メモリ
- 磁気センサ
- 触覚センサ
- 電気磁気布
- ドラッグデリバリーナノロボット
- 環境発電



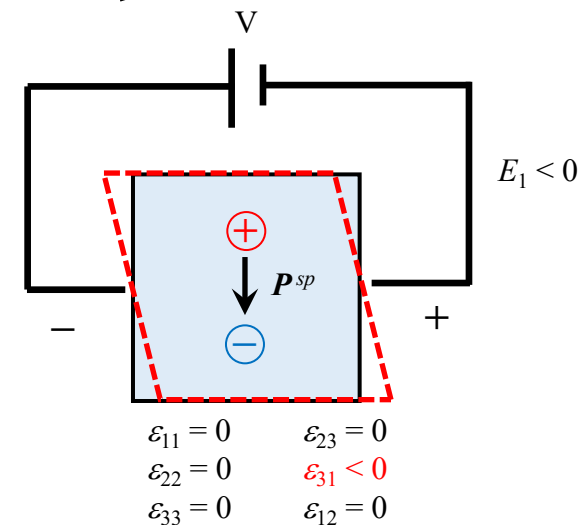
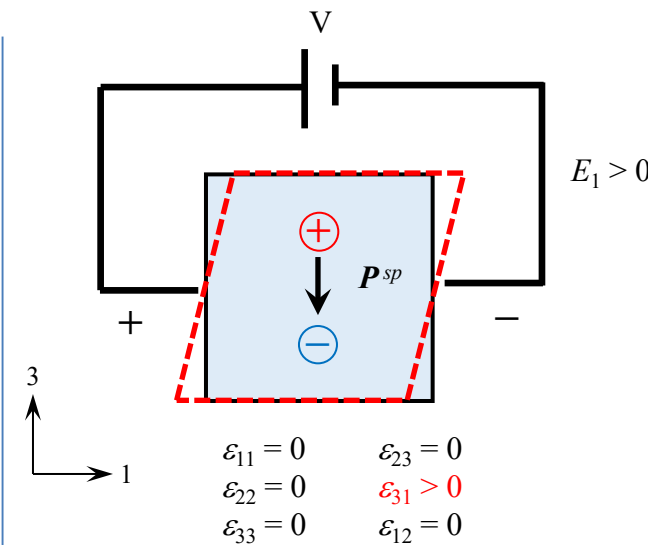
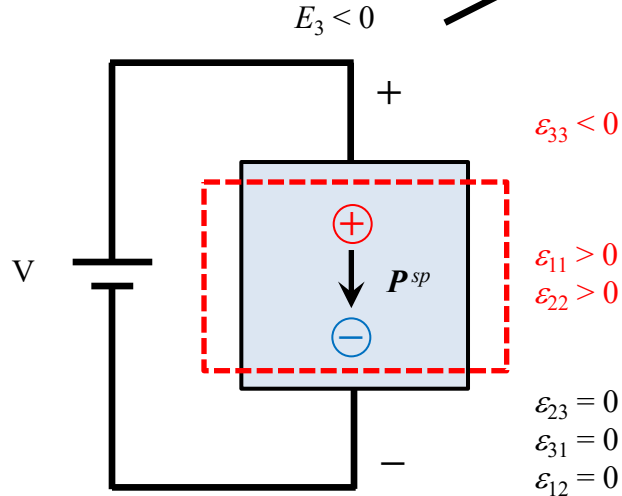
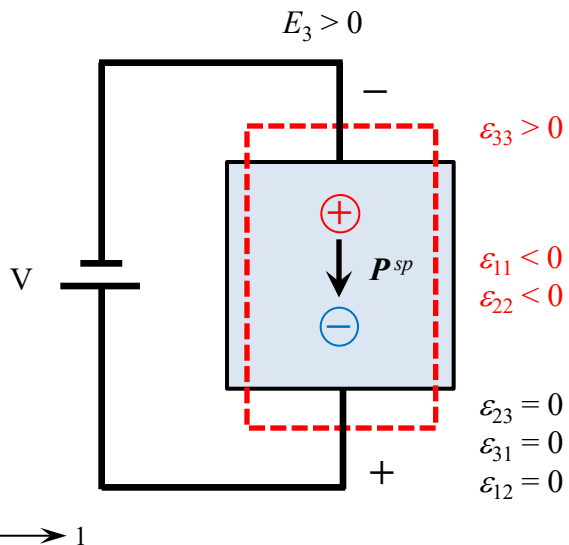
立方晶構造（無極性）

正方晶構造（有極性）

ペロブスカイト型結晶構造（正方晶）

圧電ひずみ定数：単位ひずみあたりに生じる電界
単位電界あたりに生じるひずみ

$$\begin{bmatrix}
 0 & 0 & 0 & 0 & d_{131} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & d_{223} & 0 & 0 \\
 d_{311} & d_{322} & d_{333} & 0 & 0 & 0
 \end{bmatrix}$$

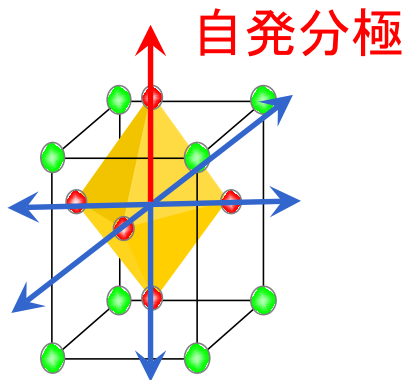


面外方向に電界を印加 ⇒ 伸縮変形

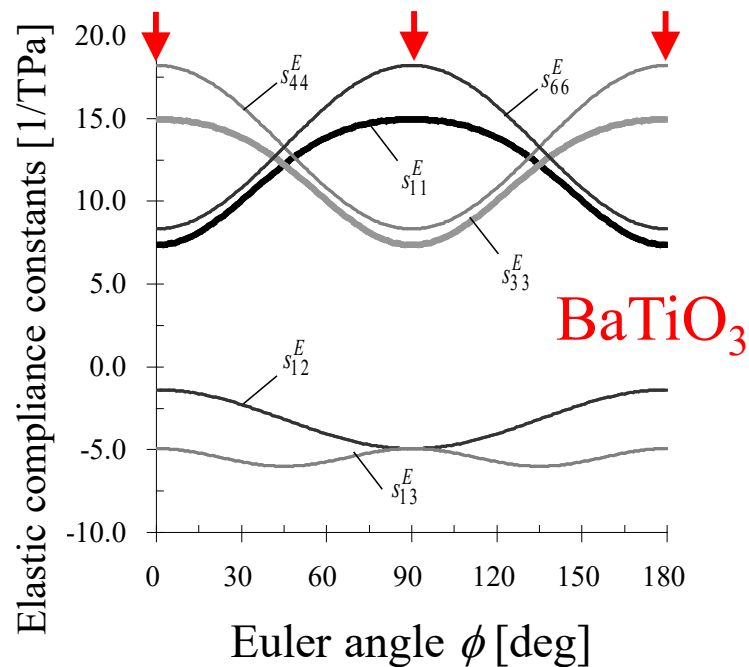
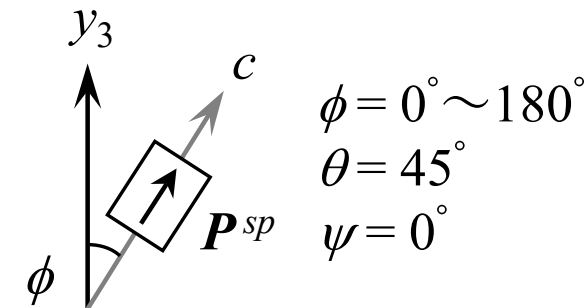
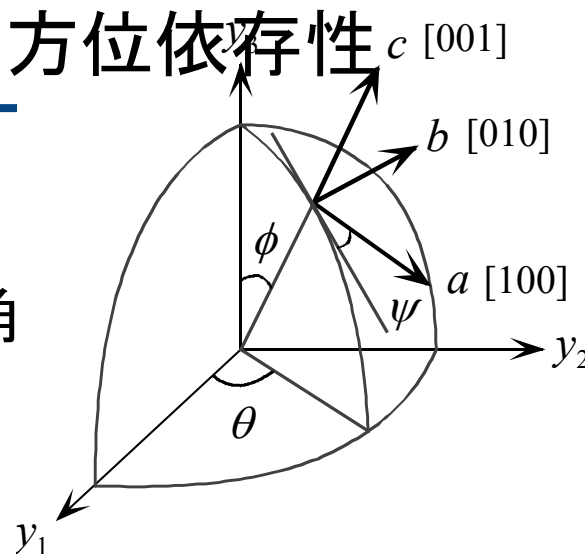
面内方向に電界を印加 ⇒ せん断変形

結晶構造

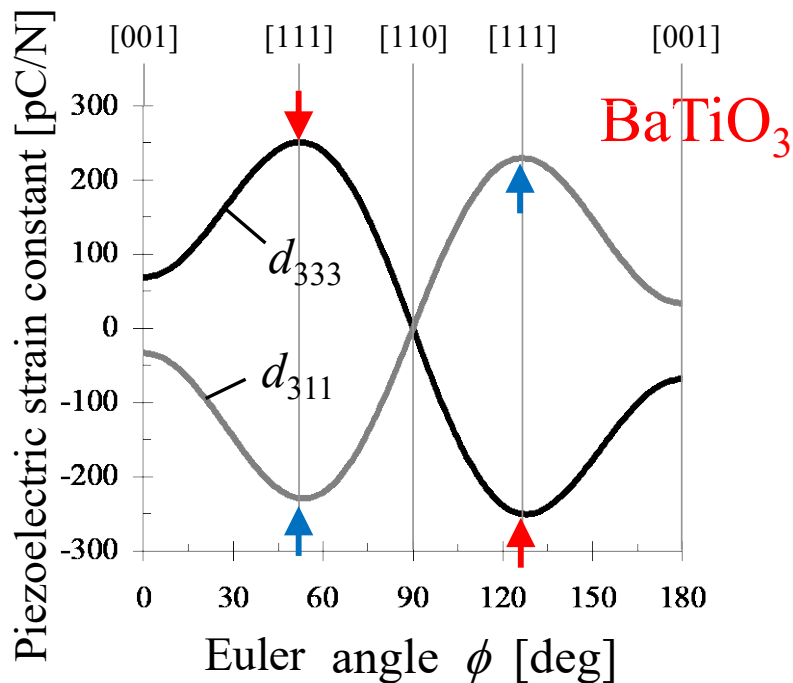
ペロブスカイト型
(正方晶)



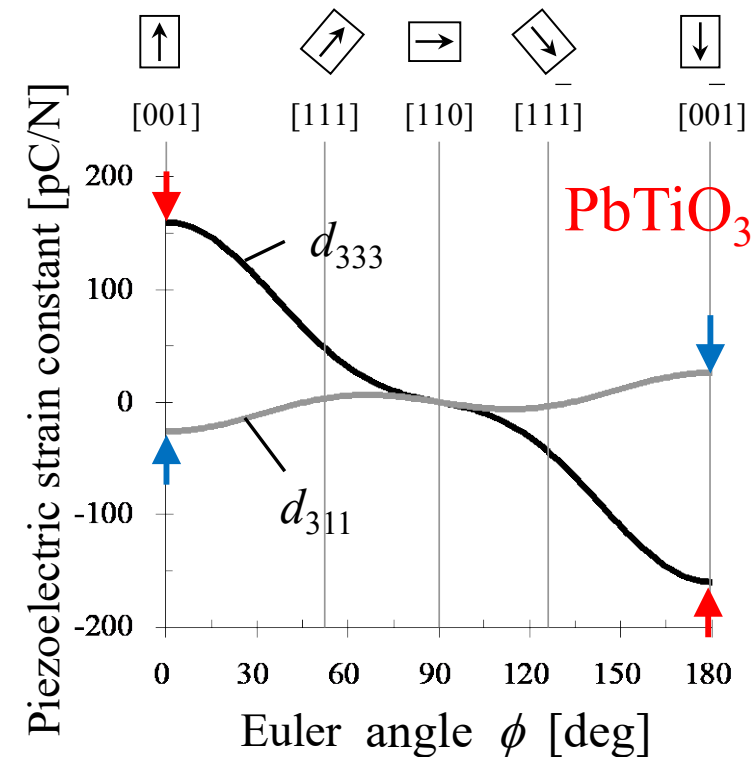
オイラー角
(ϕ, θ, ψ)



弾性スティフネス定数

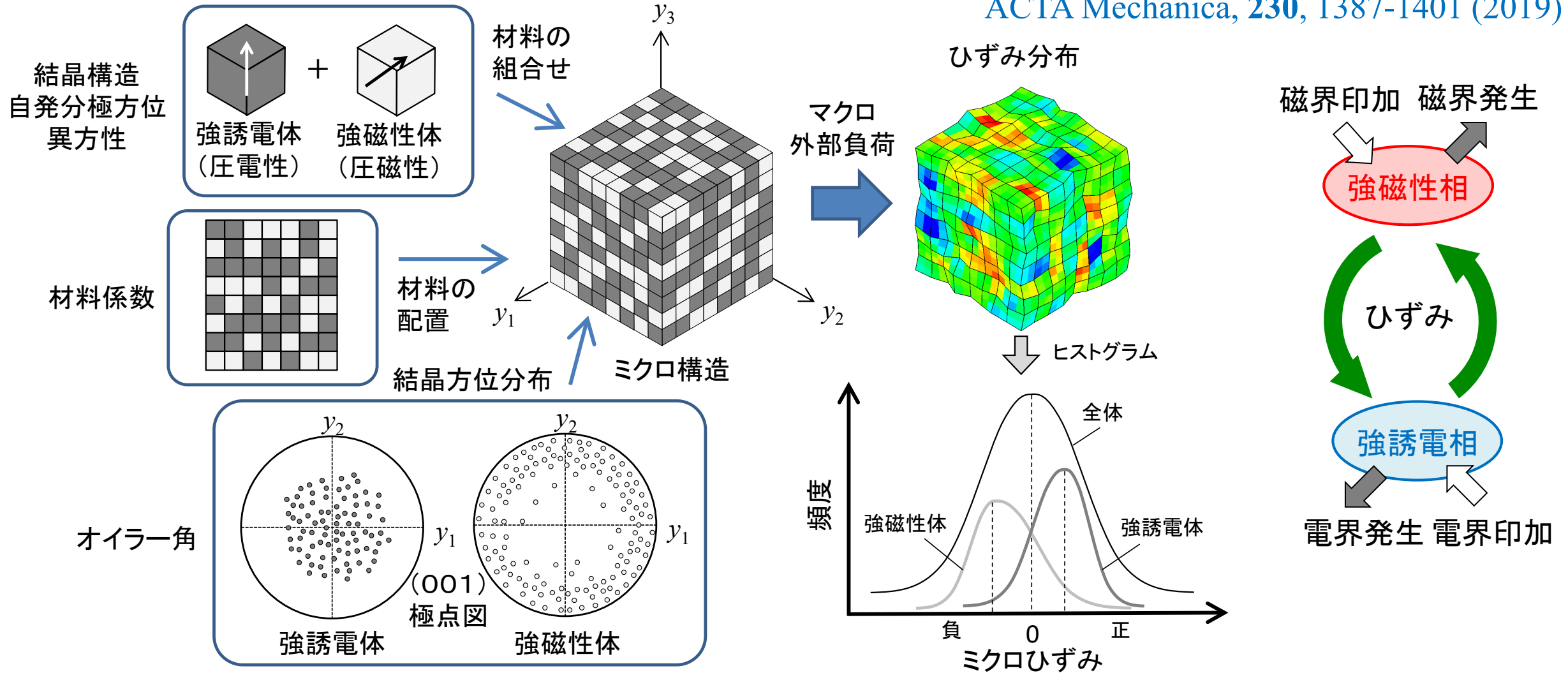


圧電ひずみ定数

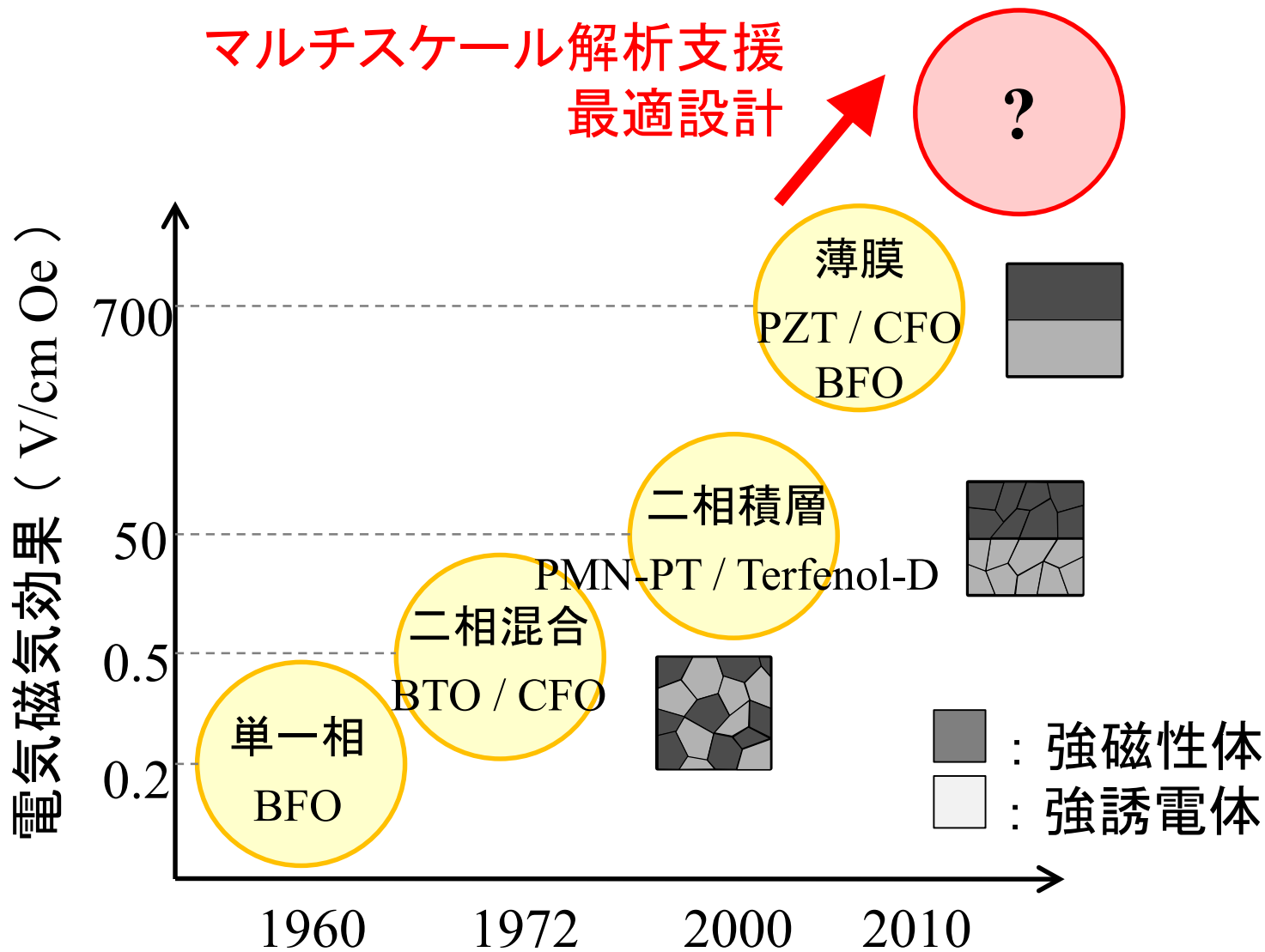


Comput. Mater. Sci., **158**, 159-169 (2019)

ACTA Mechanica, **230**, 1387-1401 (2019)



マクロ構造に磁界を印加した場合のマイクロ構造内のひずみ伝達



○ 材料の組合せ

○ ミクロ複合構造

- ランダム多結晶体
- 積層構造
- 均一配向薄膜
- 繊維配列構造

○ ミクロ複合構造の最適化



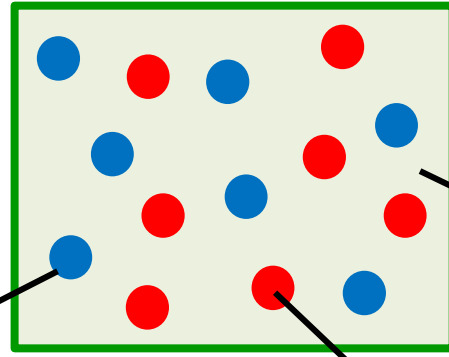
周期分極反転構造

Comput. Mater. Sci., 172, 109365 (2020)

Compos. Struct. 290. 115500 (2022)

J. Mater. Sci., 58, 3625–3640 (2023)

ハイブリッド粒子分散
高分子基複合材料



圧電粒子

圧磁(磁歪)粒子

母材

- ・ 材料の組み合わせ, 含有率
- ・ 圧電および圧磁粒子の微細化

圧電材料

圧磁(磁歪)材料

高分子

単晶: BaTiO₃(BTO), PbTiO₃, LiNbO₃

混晶: Pb(Zr,Ti)O₃ (PZT)

二元系混晶:

Pb(Ni_{1/3}Nb_{2/3})O₃-PbTiO₃

Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-Pb(Zr,Ti)O₃

三元系混晶:

Pb(Ni_{1/3}Nb_{2/3})O₃-Pb(In_{1/2}Nb_{1/2})O₃-PbTiO₃

Pb(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-Pb(In_{1/2}Nb_{1/2})O₃-PbTiO₃

セラミック:

CoFe₂O₃ (CFO), NiFe₂O₃

合金:

Fe-Co, Fe-Ga,

Tb_{0.27}Dy_{0.73}Fe_{1.9} (Terfenol-D)

熱硬化性高分子: エポキシ, アクリル, PU

熱可塑性高分子: PP, PE, ABS

生分解性高分子: PLA, PVA, PGA

光硬化性高分子: PDMS

圧電ポリマー:

単重合体 PVDE

二重合体 P(VDF-TrFE)

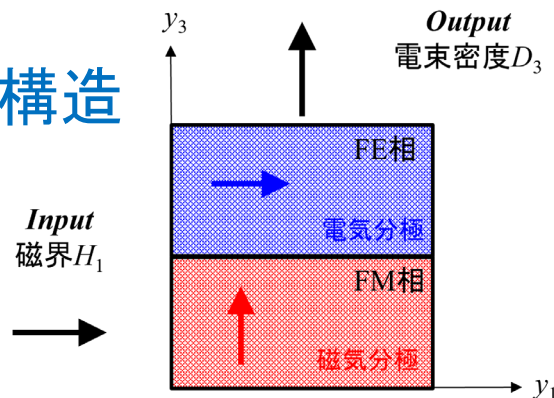
三重合体 P(VDF-TrFE-CFE)

セラミック複合材料と比べ, 高分子との複合化による機能特性低下が課題

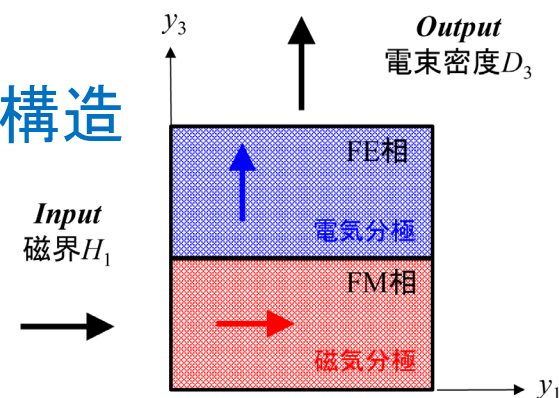
横電気磁気定数

$$a_{31} = \frac{D_3}{H_1}$$

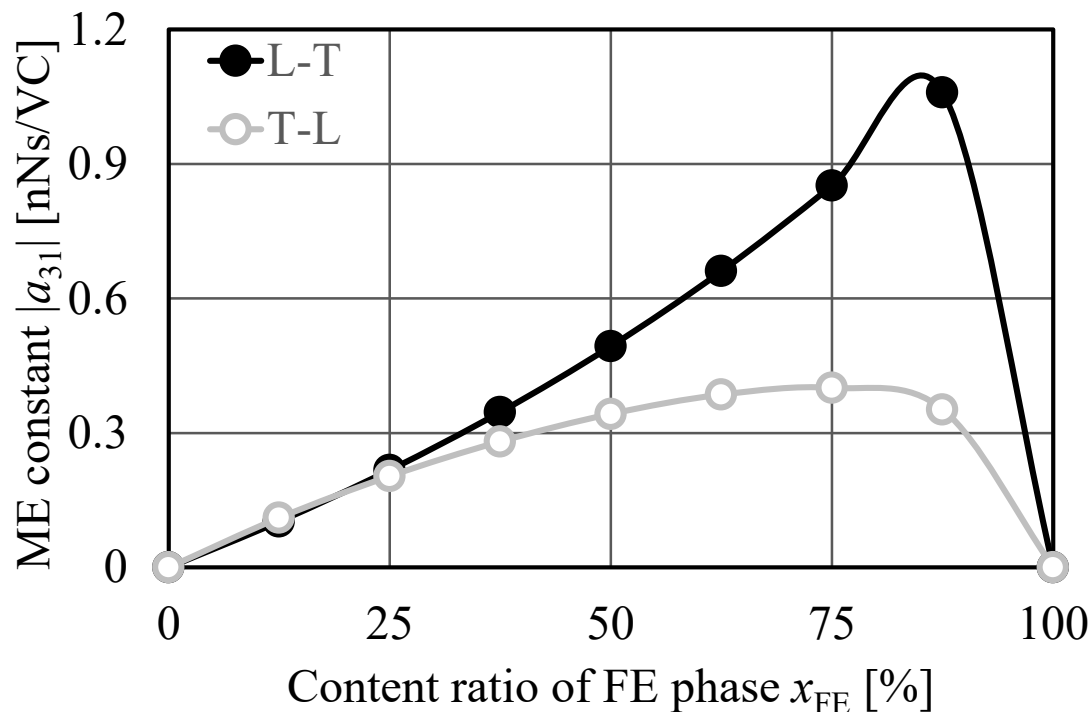
L-T 構造



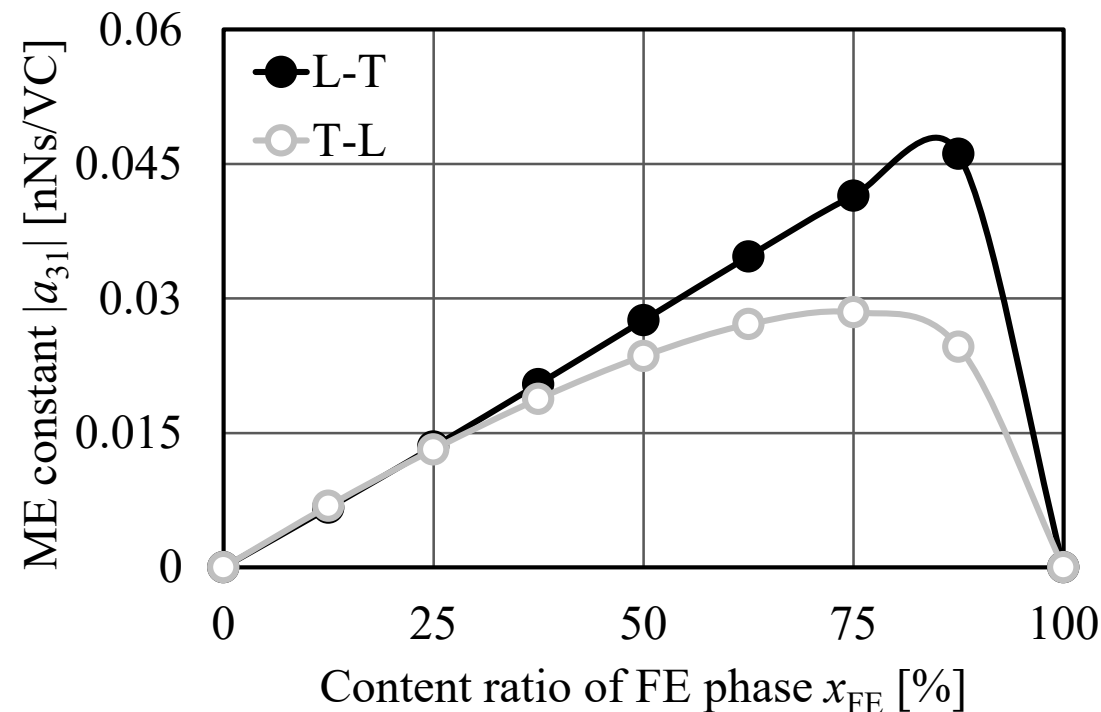
T-L 構造



セラミック複合材料 BTO/CFO



粒子分散高分子基複合材料 BTO/CFO/PP

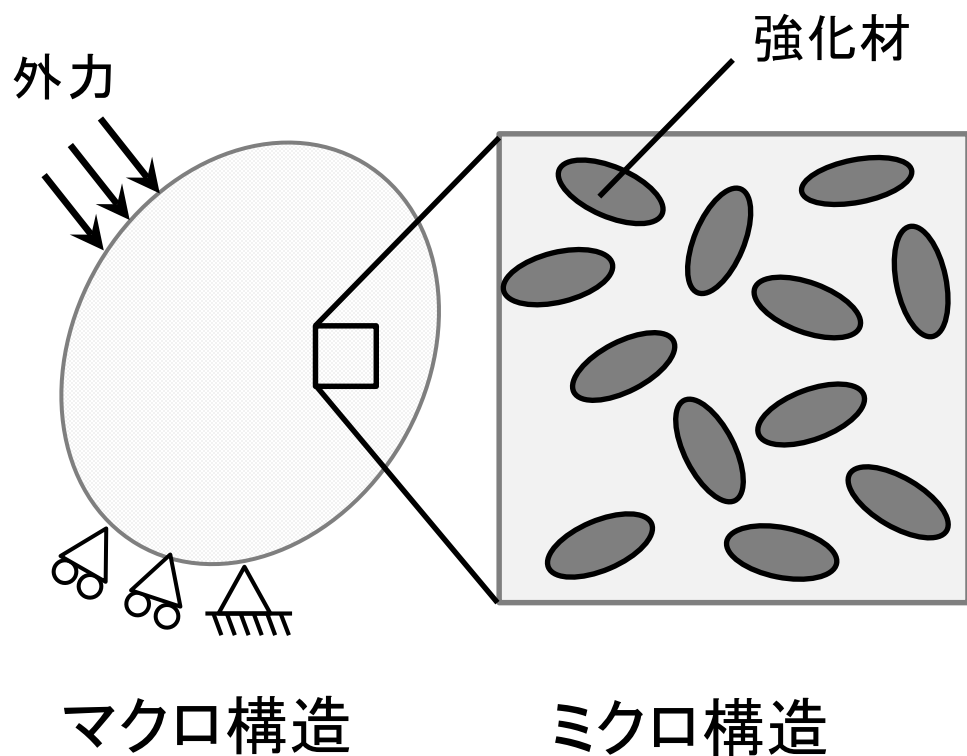




電気磁気強連成問題のマルチスケール解析法



- スケールの異なる階層構造のモデル化を実現.
- 場の変数を漸近展開式で表現, マクロ構造とミクロ構造に対して**数学的に整合した支配方程式**を導出可能.
- 様々な問題に適用できる汎用性を有する.
- 有限要素法との親和性が高く, 汎用の数値解析法によって近似解を得ることが可能.



CYBERNET

ANSYS Multiscale.Sim

<線形>

弾性解析

伝熱解析

電流解析

電場解析

磁場解析

<非線形>

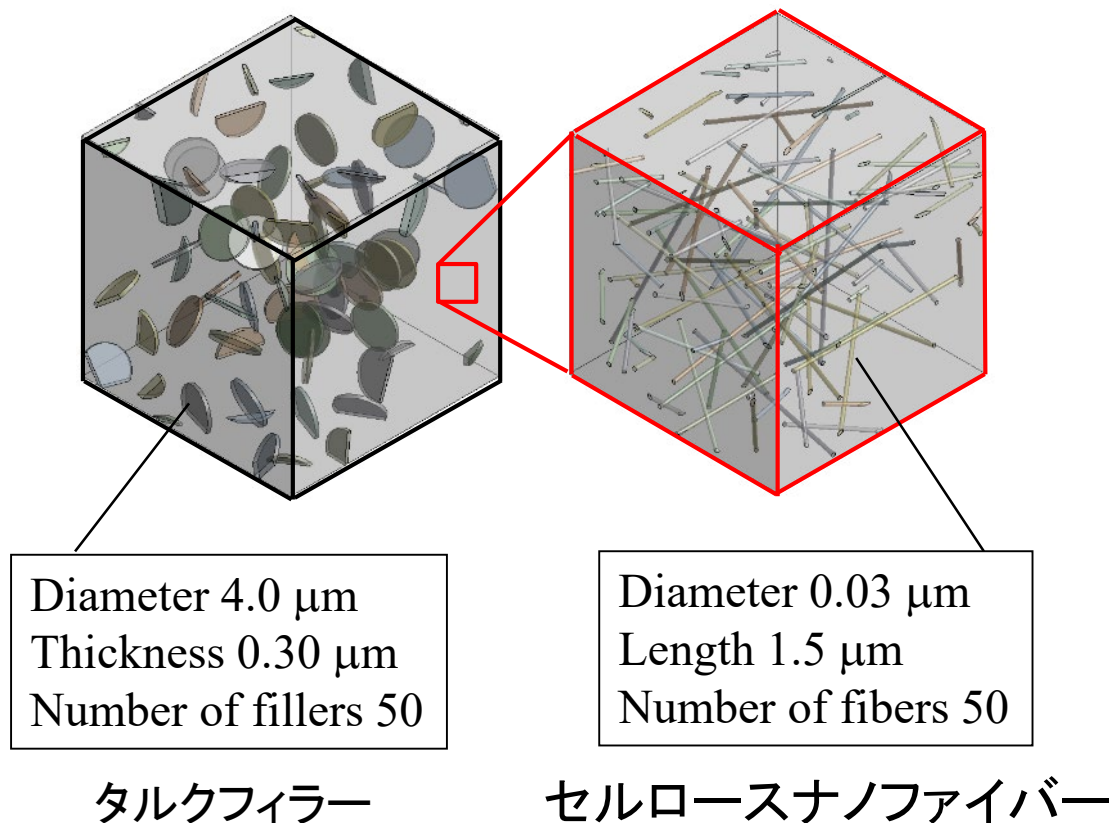
弾塑性解析

クリープ解析

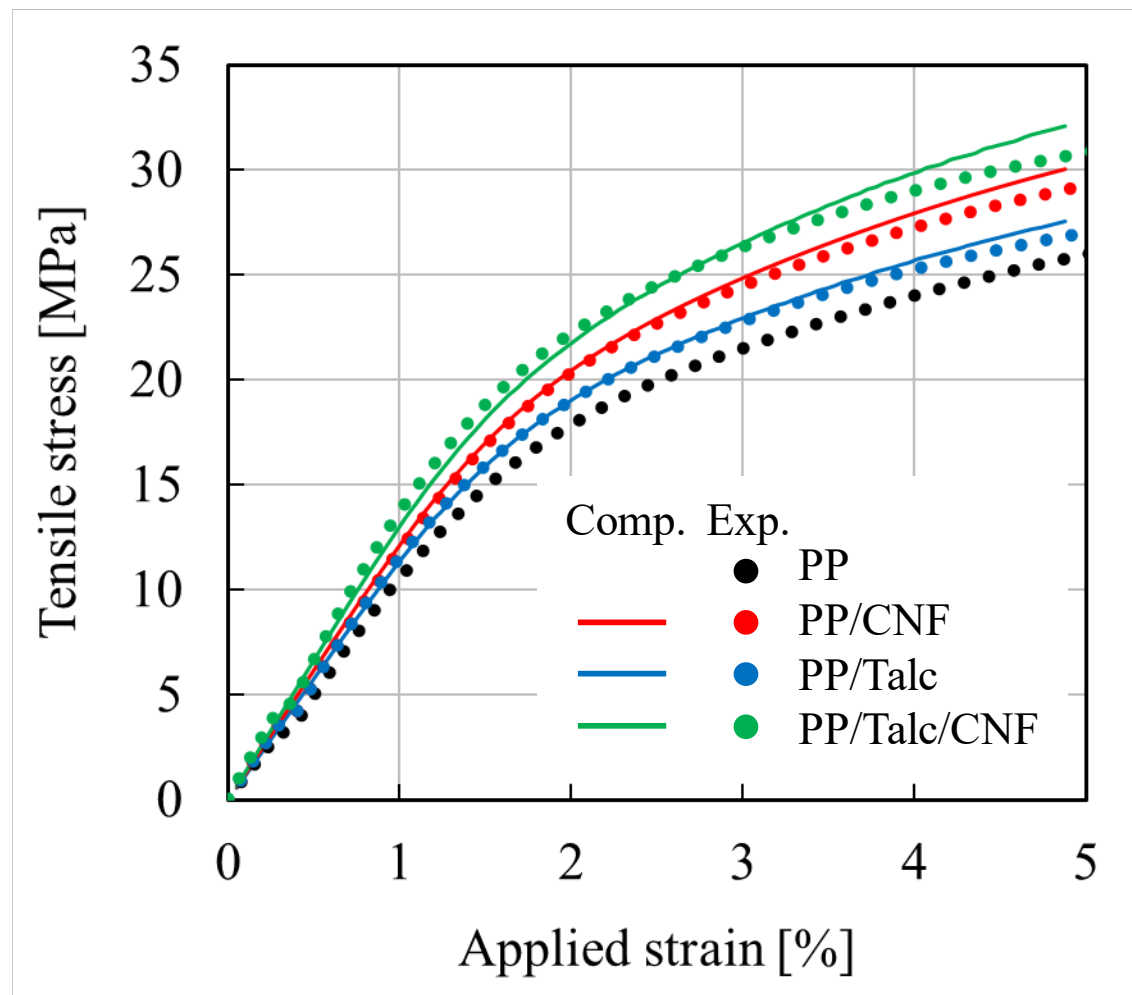
超弾性解析

粘弾性解析

タルクフィラーとセルロースナノファイバーによる
ハイブリッド強化プラスチック複合材料のモデリング例



Composites B, 266, 110971 (2023)



変位 u_i

ひずみ $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$

電位 ϕ

電界 $E_i = -\frac{\partial \phi}{\partial x_i}$

磁位 ψ

磁界 $H_i = -\frac{\partial \psi}{\partial x_i}$

構成則

応力 $\sigma_{ij} = C_{ijmn} \varepsilon_{mn} - \underbrace{e_{nij} E_n}_{\text{圧電効果}} - \underbrace{q_{nij} H_n}_{\text{圧磁効果}}$

電束密度 $D_i = \underbrace{e_{imn} \varepsilon_{mn}}_{\text{圧電効果}} + \epsilon_{in} E_n + \underbrace{a_{in} H_n}_{\text{電気磁気効果}}$

磁束密度 $B_i = \underbrace{q_{imn} \varepsilon_{mn}}_{\text{圧磁効果}} + \underbrace{a_{in} E_n}_{\text{電気磁気効果}} + \mu_{in} H_n$

材料定数

C_{ijmn} : 弾性スティフネス

ϵ_{in} : 誘電率

μ_{in} : 透磁率

e_{nij} : 圧電応力定数

q_{imn} : 圧磁応力定数

a_{in} : 電気磁気定数

電気磁気効果

スケール比

$$\mathbf{y} = \frac{1}{\lambda} \mathbf{x}$$

Acta Mechanica, 228, 2879-2893 (2016)

Acta Mechanica, 230, 1387-1401 (2017)

材料, 68, 697-70 (2019)

Comput. Mater. Sci., 172, 109365 (2020)

漸近展開式

マクロ平均

ミクロ擾乱

$$\text{変位 } u_i^\lambda = u_i^0(\mathbf{x}) + \lambda u_i^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots$$

$$\text{電位 } \phi^\lambda = \phi^0(\mathbf{x}) + \lambda \phi^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots$$

$$\text{磁位 } \psi^\lambda = \psi^0(\mathbf{x}) + \lambda \psi^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \dots$$

ミクロ擾乱

マクロひずみ

マクロ電界

マクロ磁界

$$u_i^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = {}^{u\varepsilon} \chi_i^{mn}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \varepsilon_{mn}^0(\mathbf{x}) - {}^{uE} \chi_i^n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) E_n^0(\mathbf{x}) - {}^{uH} \chi_i^n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) H_n^0(\mathbf{x})$$

$$\phi^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = {}^{\phi\varepsilon} \chi_i^{mn}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \varepsilon_{mn}^0(\mathbf{x}) - {}^{\phi E} \chi_i^n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) E_n^0(\mathbf{x}) - {}^{\phi H} \chi_i^n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) H_n^0(\mathbf{x})$$

$$\psi^1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = {}^{\psi\varepsilon} \chi_i^{mn}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \varepsilon_{mn}^0(\mathbf{x}) - {}^{\psi E} \chi_i^n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) E_n^0(\mathbf{x}) - {}^{\psi H} \chi_i^n(\mathbf{x}, \mathbf{y}) H_n^0(\mathbf{x})$$

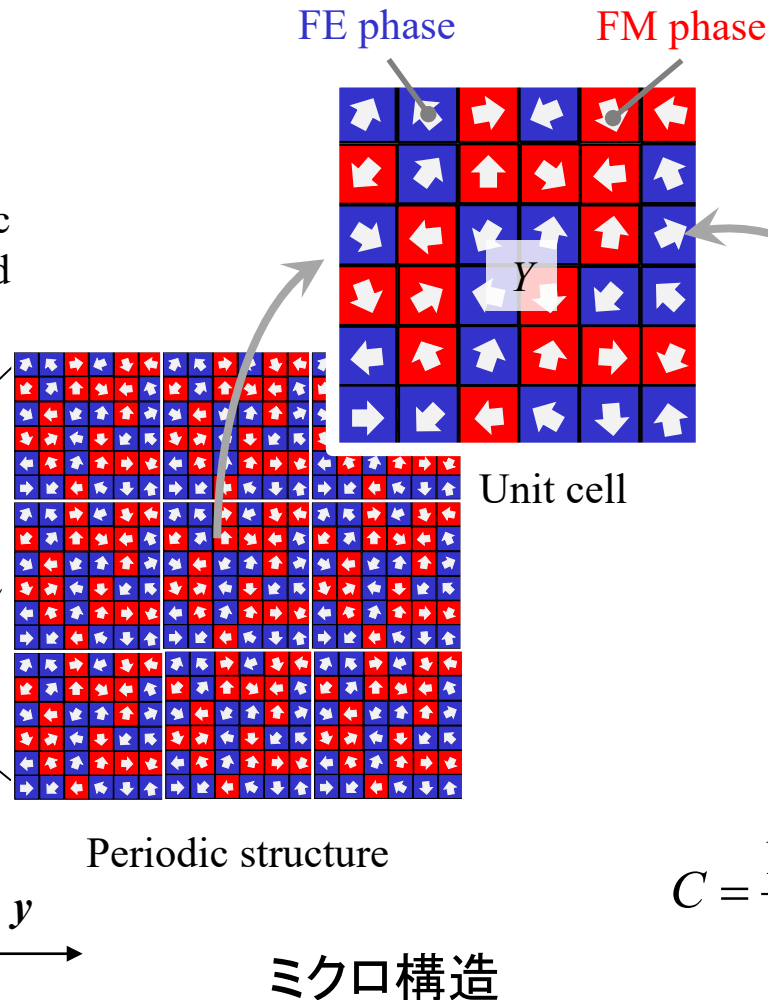
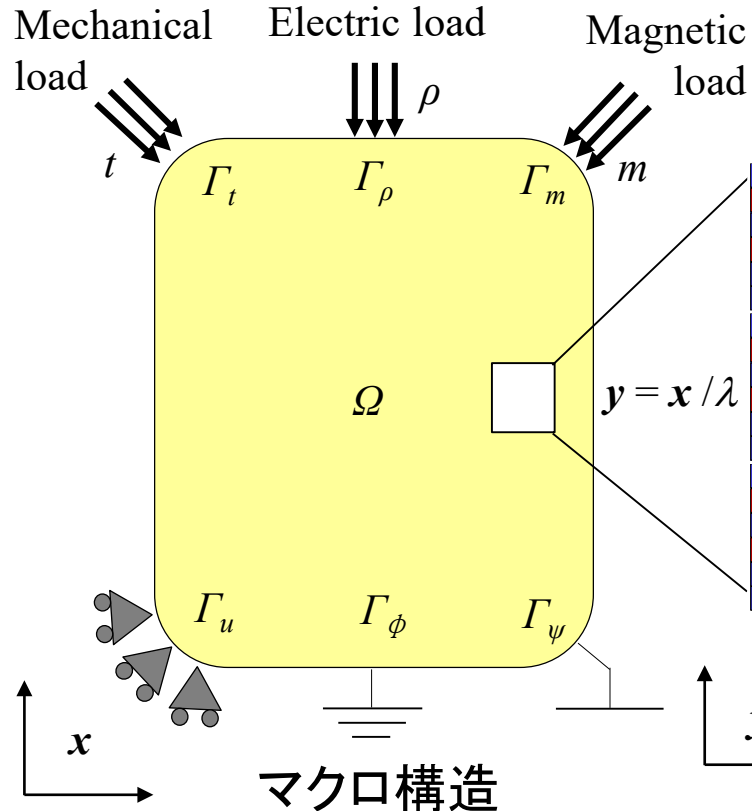


電気磁気セラミック複合材料



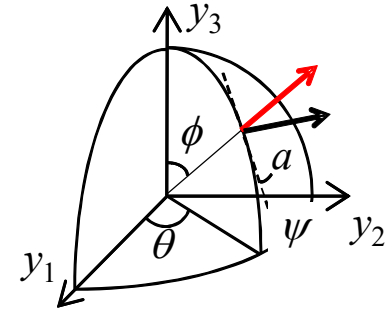
目的関数

Macro homogenized *macro* ME coefficient a_{ij}



設計変数

Euler angle (ϕ, θ, ψ)



FM phase FE phase

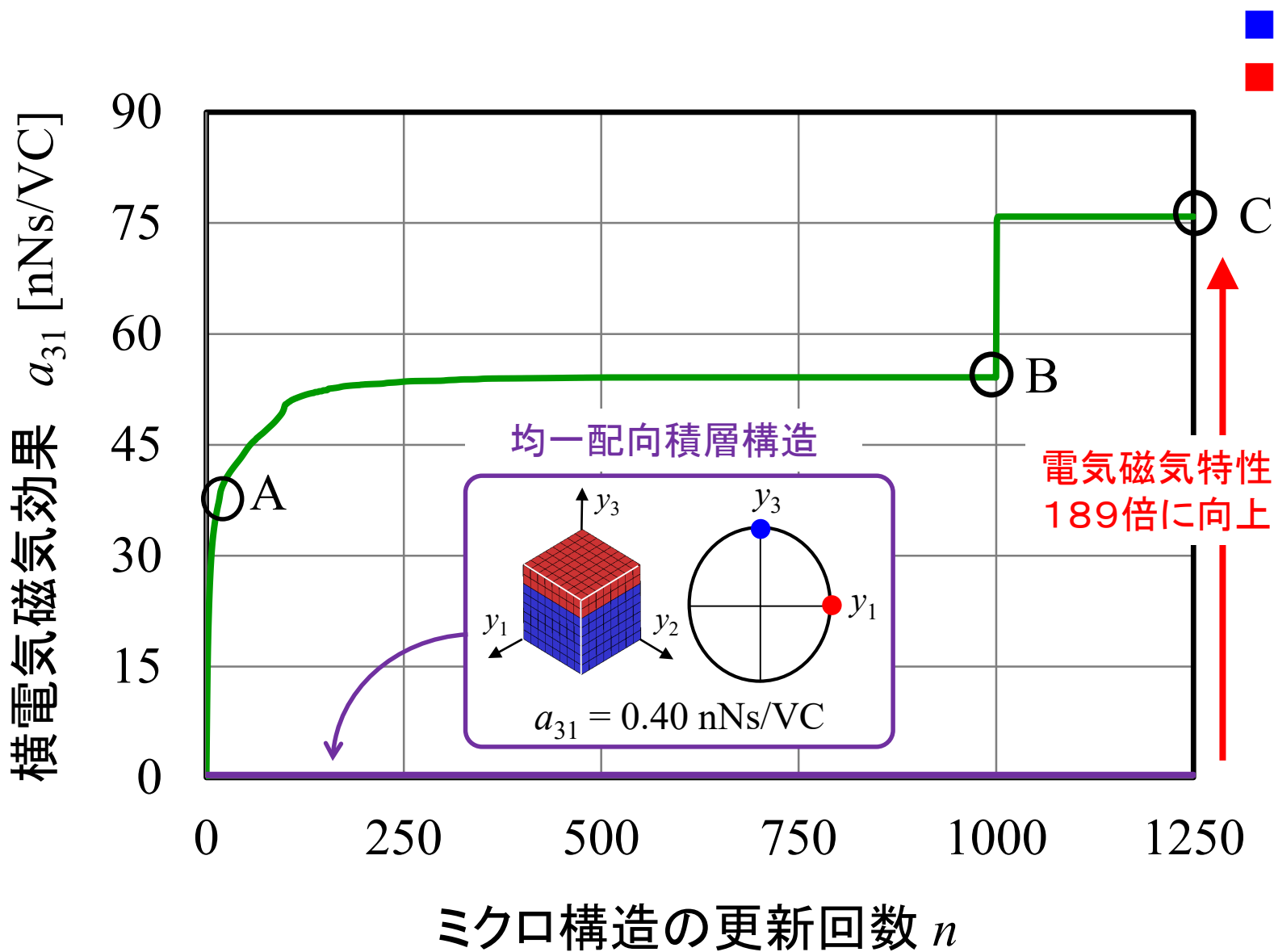


0.0 1.0

Material indicator ξ

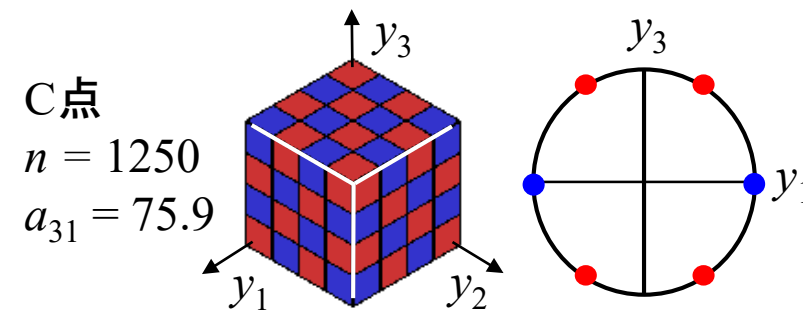
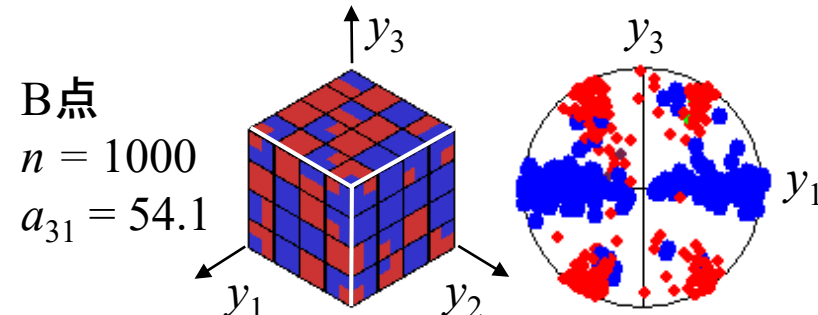
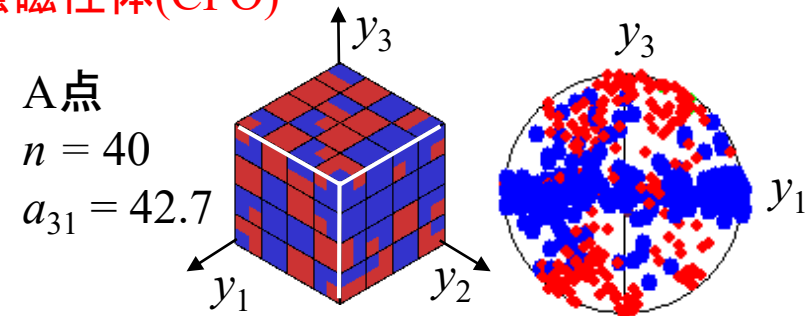
$$C = \frac{1 + \cos(\pi\xi)}{2} C^{fm} + \frac{1 + \cos\{\pi(\xi + 1)\}}{2} C^{fe}$$

C: 材料定数, CFE:



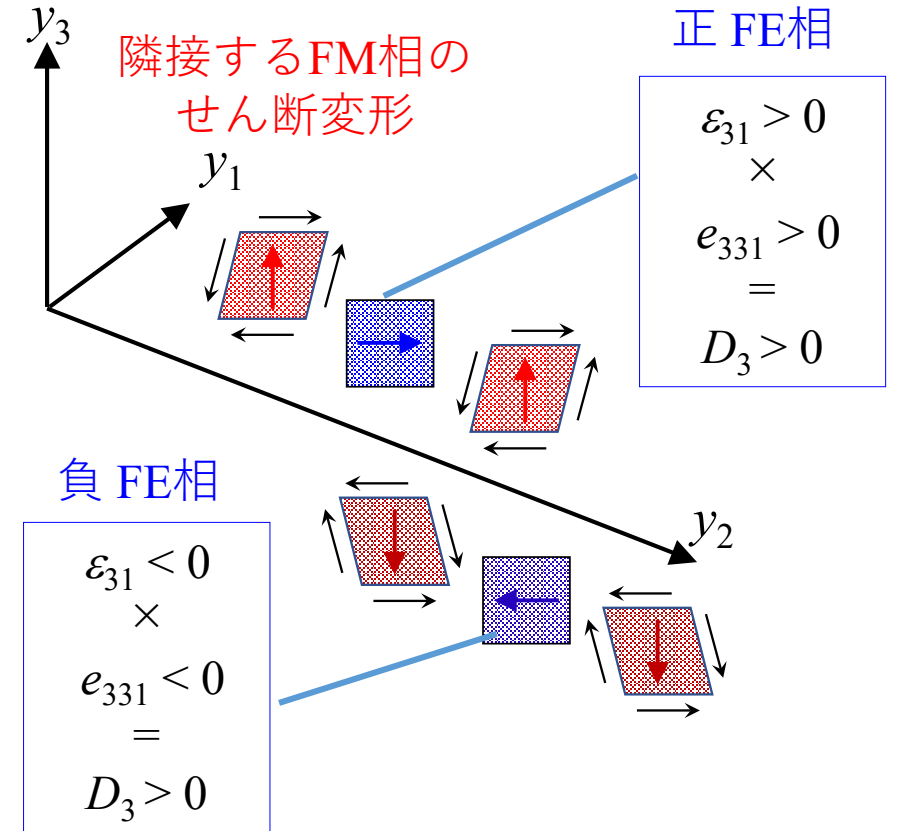
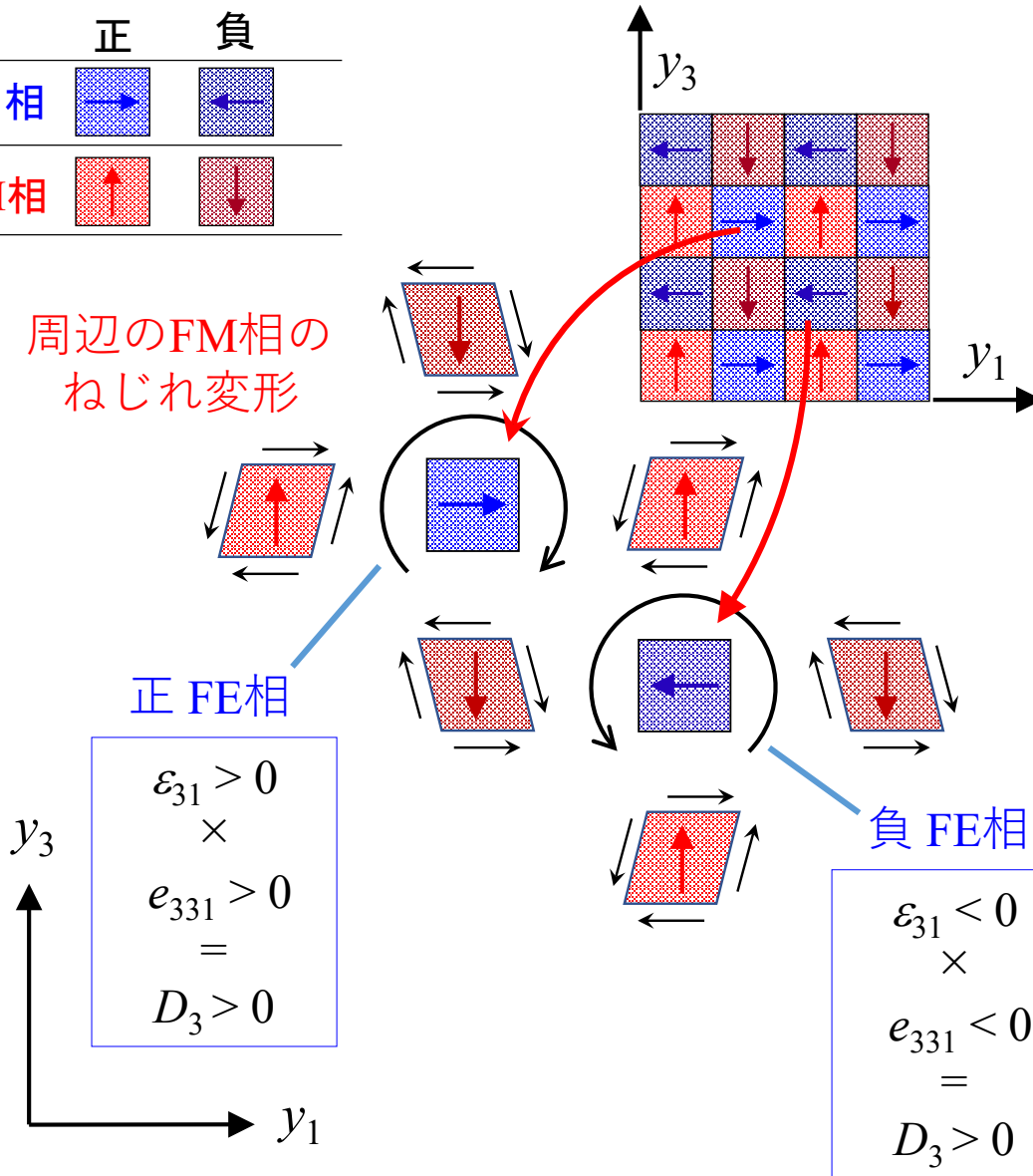
■ 強誘電体(BTO)

■ 強磁性体(CFO)

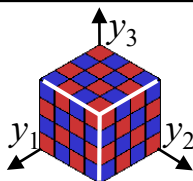
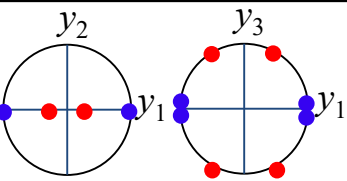
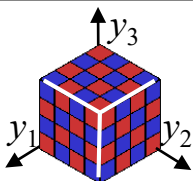
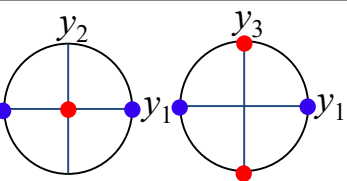
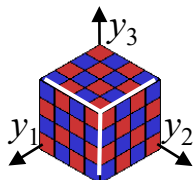
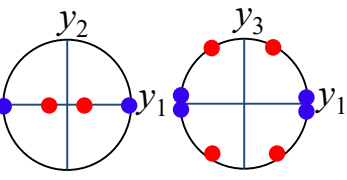
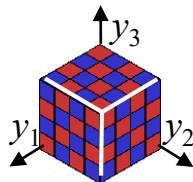
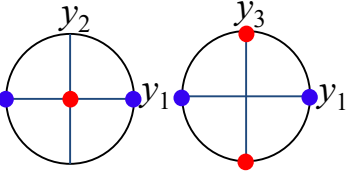


最適化に伴うマイクロ構造変化

	正	負
FE 相		
FM 相		



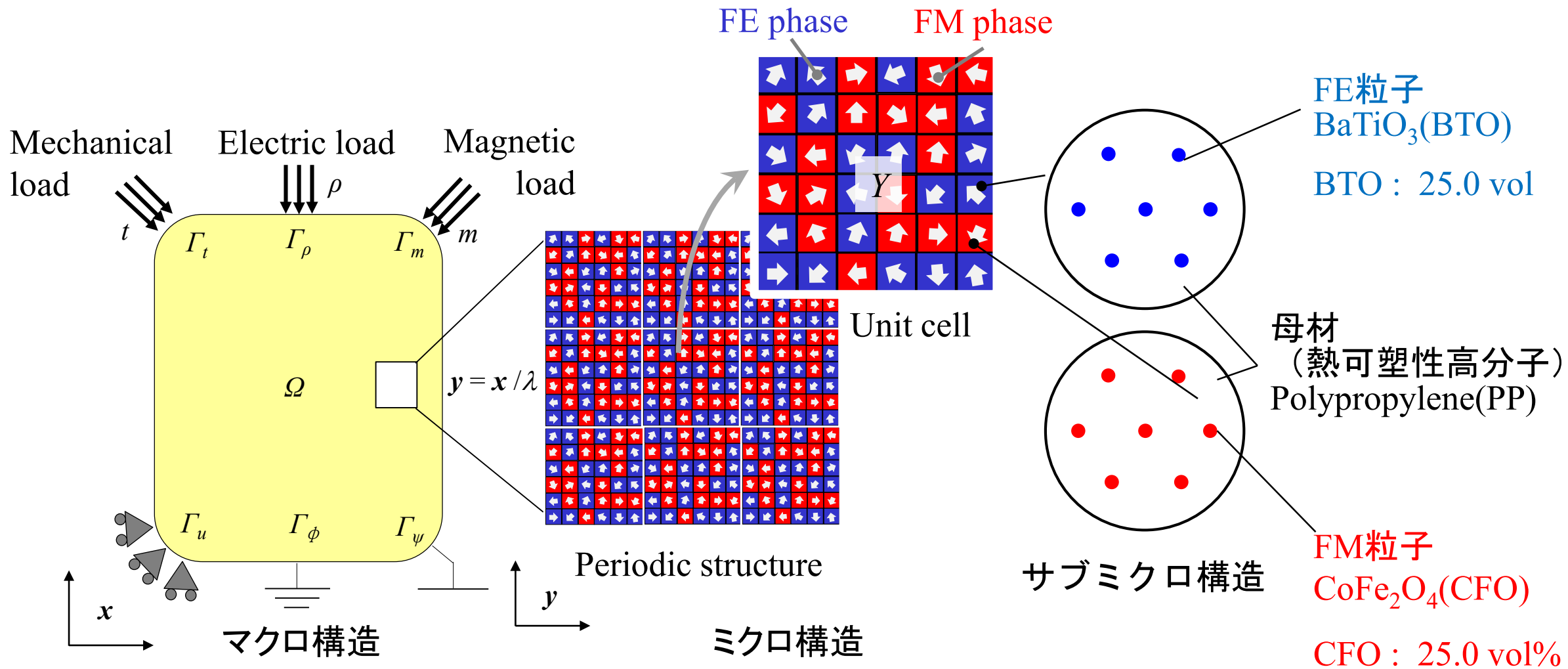
特願2021-145738
Compos. Struct. 290. 115500 (2022)
J. Mater. Sci., 58, 3625–3640 (2023)

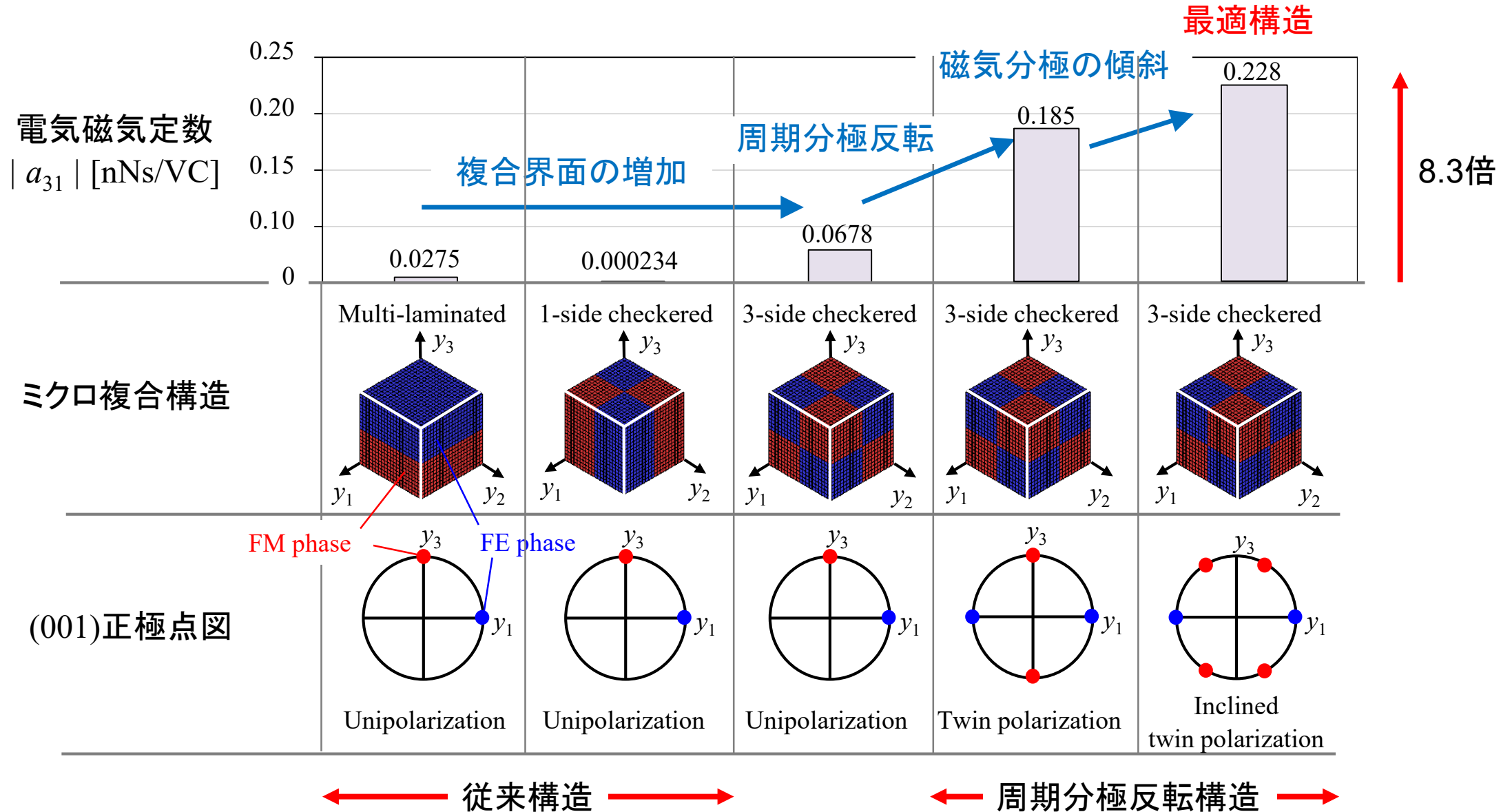
Material		Optimized structure				Uniformly oriented lamination structure	Increase rate of ME coefficient Δa_{31} [%]
FE	FM	Phase configuration	Pole figures (001)	Connectivity FE content [%]	ME coefficient a_{31} [nNs/VC]	ME coefficient a_{31} [nNs/VC]	
BTO	CFO			0-0 50.0	75.9	1.39	+5347
	TFD			0-0 50.0	122.8	27.1	+353
PZT8	CFO			0-0 50.0	47.0	2.65	+1676
	TFD			0-0 50.0	79.4	19.3	+311



電気磁気粒子分散高分子基複合材料







プリンタブル・フレキシブルデバイスへの応用を目指して、
圧電および圧磁粒子分散高分子基複合材料の電気磁気特性を調査した。

- ・粒子がランダムに分散したサブマイクロ構造から、圧電相および圧磁相のマイクロ複合構造、マクロ均質体構造に至るマルチスケールシミュレーションを構築した。
- ・複合セラミックと比較して、高分子との複合化により、横電気磁気特性は20分の1以下に低下する。
- ・セラミック複合材料のマルチスケール最適化によって発見した周期分極反転構造は、高分子基複合材料にも効果的であり、横電気磁気特性を8倍以上に向上した。

マルチスケール解析法, 微視構造設計法

- 汎用有限要素解析ソフトウェアへの移植
- 異なる機能材料への応用
- 新たな材料特性を目的関数とした最適設計

発見したデジタル構造

- 類似材料への適用.
- 母材高分子の選定, 添加剤の効果も期待あり.
- 様々な創製方法への応用.
- 新たな高性能環境発電デバイスの開発

マルチスケール解析法, 微視構造設計法

- 汎用ソルバーを導入した高速化
- 汎用プリポストとのデータ変換ルーチンの構築

発見したデジタル構造

- 実証実験の強化
- 最適な創製方法の選定
- 材料品質, 信頼性の向上
- 様々なデバイスに適用した場合の性能データ収集

- 発明の名称 : マルチフェロイック材料の
微視構造の最適化方法、
およびマルチフェロイック
材料構造体
- 出願番号 : 特願2021-145738
- 出願人 : 学校法人常翔学園
- 発明者 : 上辻靖智、和田剛、佐野史弥

大阪工業大学

学長室 研究支援社会連携推進課

T E L 06-6954-4140

e-mail oit.kenkyu@josho.ac.jp