面外変形を起こすキリガミ周期構造体の分岐解析†

雷 霄雯* 中谷 彰宏** 土井 祐介** 松永 慎太郎***

Bifurcation Analysis of Periodic Kirigami Structure with Out-Plane Deformation

by

Xiao-Wen LEI*, Akihiro NAKATANI**, Yusuke DOI** and Shintaro MATSUNAGA***

Kirigami is a traditional art of papercraft, which makes 3 dimensional structure from 2 dimensional sheet. Recent years, the mathematical foundations of kirigami and origami have been developed as well as the practical applications. In this research, we analyze the out-of-plane deformation of kirigami structure under tensile force, and investigate the mechanism of the deformation based on the beam theory. We simulate the process from in-plane deformation to out-of-plane deformation using molecular dynamics, and discuss the effect of geometry parameters on stability.

Key words:

Kirigami structure, Elasticity, Bifurcation, Beam theory, Strain energy

1 緒 言

切り紙や折り紙の技法は、元来は2次元の材料である紙を用いて複雑な3次元の構造を作る日本の伝統工芸にみられる技術である。近年、このような技術の数理的な一般性の研究や、2次元材料から3次元構造を創成する技術としてのメカニズムに関する研究が、世界的に盛んに行われてきており^{1)–3)}、その概念はkirigamiやorigamiと呼ばれるようになっていく。以下では、折り紙、切り紙の概念を利用して作成される構造体を、それぞれオリガミ構造体、キリガミ構造体と呼ぶ。

オリガミ構造体では、例えば、1970年代に発明されたミウラ折りと呼ばれる折り方は人工衛星の太陽電池パネルなどの薄膜宇宙構造物の折り畳みや展開に応用されている⁴⁾。このような折り目での変形のみを考える剛体オリガミ構造体は、ミウラ折りに限定されず様々な折り方での応用が期待されている。Silverbergら⁵⁾はsquare twistパターンと呼ばれるオリガミ構造体について安定性の幾何パラメータ依存性を報告している。その研究では曲げ剛性が重要な因子として考えられており、弾性オリガミ構造体では、折り目以外の部分が剛体の剛体オリガミ構造体では考えられないような分岐現象が現れることを示している。このような構造物の柔軟性を考慮したモデルでは、変形体の力学からのアプローチが有効であると考えられる。またオリガミ構造体の規則的なパターンの中に欠陥を導入することで固有の曲率を導入するなど、さまざまな検討がなされている。

キリガミ構造体は、2次元材料にカットパターンを付

与することにより、さまざまな変形を可能にした構造である。このような変形は主に力の作用面からの面外変形であり、局所的にはほぼ等長変形の条件下で面外変形や回転の組合せによる多様な変形モードを実現できることがわかっている^{6),7)}。面外変形の発生によって、平面内の変形が限界に達していても系全体として変形が進行する現象は層状構造体においても観察される。長周期積層マグネシウム合金をはじめとする積層構造を有する合金を圧縮すると、キンク構造と呼ばれる原子列の折れ曲がり構造が観察される。著者らは、そのメカニズムが、原子列が回転し折れ曲がることで圧縮を緩和し、系としてより安定な状態になるという不安定化現象と密接に関係することを報告している⁸⁾。このように面外変形は安定状態の遷移に関わる現象である。

本研究の目的はキリガミ構造体の変形の基本メカニズムを不安定現象・分岐現象と捉えて、単純な力学モデルを用いて解析することにある。まず、キリガミ構造体の変形をはりの曲げの組み合わせと見なすことでひずみエネルギーを定式化し、面内変形から面外変形への分岐現象における分岐点の変位や引張力を、キリガミ構造の形状を表す幾何パラメータで表現する。さらに粒子モデルを用いたキリガミ周期構造体の引張変形シミュレーションを実施し、面内変形から面外変形への変形モードの遷移に関する計算機実験を行う。そして、解析解とシミュレーション結果の相違について考察を加え、キリガミ構造体の変形の基本メカニズムを解明する。

† 原稿受理 平成29年7月12日 Received July 12, 2017 ©2018 The Society of Materials Science, Japan

* 正会員 福井大学学術研究院 工学系部門 機械工学講座 〒910-8507 福井市文京
Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, University of Fukui, Bunkyo, Fukui, 910-8507.

** 大阪大学大学院 工学研究科 知能・機能創成工学専攻 〒565-0871 吹田市山田丘
Department of Adaptive Machine Systems, Graduate School of Engineering, Osaka University, Yamadaoka, Suita, 565-0871.

*** (株)デンソー 〒448-0029 刈谷市昭和町
DENSO Corporation, Showa-cho, Kariya, 448-0029.

すなわち,

$$\theta = 0 \quad (7)$$

または,

$$\cos \theta = \frac{EI_I \lambda}{(EI_I - EI_{III})(\lambda + \frac{\delta}{2})} \quad (8)$$

である.

幾何条件 (式 (2)) と力学的釣り合い条件 (式 (5), (7), (8)) を同時に満足する解を求めると, 一般に, 変形は, 変位 δ の増加に伴って, モード I から, モード I と III の混合モードに分岐することが分かる.

2.3 分子動力学シミュレーション

Fig.1 に示した寸法を $L_x = 400.0\text{\AA}$, $L_y = 69.3\text{\AA}$, $h = 9.80\text{\AA}$, $b = 3.20\text{\AA}$, $\lambda = 31.45\text{\AA}$ と規定して作成したキリガミ構造体の粒子モデルを Fig.3 に示す. ここで, 粒子モデルは面心立方構造を持ち, $[1\bar{1}0]$ 方向, $[11\bar{2}]$ 方向, (111) 面が, それぞれ, x 方向, y 方向, xy 平面に一致するように粒子を配置する. この配置では, 弾性特性は xy 面に関して面内等方性を示す.

Fig. 3 Particle model.

境界条件として, y 方向のみ周期境界条件とし, x , z 方向は自由境界とする. 粒子間の相互作用力は, 二体間ポテンシャルによって導かれる力によって結合力が発生するものとする. ここでは, 式 (9) に示す Morse ポテンシャルを使用する.

$$\begin{aligned} \phi(r) = & D_{\text{Morse}} \exp\{-2A(r - r_0)\} \\ & - 2D_{\text{Morse}} \exp\{-A(r - r_0)\} \end{aligned} \quad (9)$$

ポテンシャルのパラメータとして $D_{\text{Morse}} = 1.0 \times 10^{-21} \text{J}$, $A = 6.5\text{\AA}^{-1}$, $r_0 = 2.0\text{\AA}$ とする. ここでモデルの格子定数は $a_0 = 2.83\text{\AA}$ とする.

このモデルに対して局所安定配置になるまで緩和計算を行った後に, セルの周期長を変化させて引張ひずみを与える. 本解析では, 粒子の質量を $4.036 \times 10^{-25} \text{kg}$ とし, y 軸方向にひずみ速度 10^9s^{-1} でひずみを与え, 時間増分 $\Delta t = 0.75 \times 10^{-15} \text{s}$ で単軸引張シミュレーションを行う. 初期温度は 0K であり, 系の運動エネルギーの増加は十分に小さく準静的な弾性変形過程とみなすことができる.

3 解析結果

3.1 はり理論による解析

3.1.1 エネルギー曲面 典型的な幾何パラメーターとして, 2.3 節で規定した寸法に対して, 式 (3) で用いた式で評価したひずみエネルギー W の曲面を Fig.4 に図示

する. ここで, ひずみエネルギー W は, 変位 δ と回転角 θ の関数である. なお W , δ は, それぞれ, ヤング率 E と板厚 h を用いて, 無次元量 $\bar{W} = W/(Eh^3)$, $\bar{\delta} = \delta/h$ を定義して図示している. 力学的な釣り合い条件を満足する経路は, 式 (6) すなわち $\partial W/\partial \theta = 0$ を条件とする経路であり, 自明解から分岐解への遷移が確認できる^{9), 10)}. この現象は“引張荷重下の座屈現象”として近年報告されている変形機構¹¹⁾と本質的に一致する.

Fig. 4 Strain energy $\bar{W}$ as a function of $\bar{\delta}$ and θ .

分岐点の引張力 F_c , 分岐点の変位 δ_c とし, モード I, III に対する剛性比 $\gamma = EI_I/(EI_{III})$ を用いて表すと

$$F_c = \frac{24}{l^3} \frac{EI_I \lambda}{\gamma - 1} \quad (10)$$

$$\delta_c = \frac{2\lambda}{\gamma - 1} \quad (11)$$

となる.

また u_I と u_{III} , 引張力 F , 面外変形の回転角 θ を, それぞれ変位 δ の関数として表すと, 次のようになる:

(i) $0 \leq \delta \leq \delta_c$ に対して,

$$u_I(\delta) = \frac{1}{2} \delta \quad (12)$$

$$u_{III}(\delta) = 0 \quad (13)$$

$$F(\delta) = \frac{12EI_I}{l^3} \delta \quad (14)$$

$$\theta(\delta) = 0. \quad (15)$$

(ii) $\delta > \delta_c$ に対して,

$$u_I(\delta) = \frac{\lambda}{\gamma - 1} \quad (16)$$

$$u_{III}(\delta) = \frac{\gamma \lambda}{\gamma - 1} \tan \theta \quad (17)$$

$$F(\delta) = \frac{24EI_{III}}{l^3} \left(\frac{\delta}{2} + \lambda \right) \quad (18)$$

$$\theta(\delta) = \cos^{-1} \frac{\gamma}{(\gamma - 1)(\frac{\delta}{2} + \lambda)}. \quad (19)$$

3.1.2 幾何パラメータ依存性 寸法 $L_x = 400.0\text{\AA}$, $b = 3.20\text{\AA}$, $h = 9.80\text{\AA}$ を一定のもとで, 基準長さ $L_0 = 69.3\text{\AA}$ に対して, 寸法 L_y を $L_y = L_0, 0.75L_0, 0.5L_0, 0.25L_0$ のように変化させるときのひずみエネルギー W と変位 δ の関係を Fig.5(a) に示す. ここでは, W , δ は, それぞれ, ヤング率 E と板厚 h を使って, 無次元量 $\bar{W} = W/(Eh^3)$, $\bar{\delta} = \delta/h$ を定義して図示している. なお, このとき $\lambda = (L_y - 2b)/2$ も L_y の変化に伴って変化する. また, $\lambda = h$ の場合は, $\gamma = 1$ となり式 (11) で δ_c の値を評価できなくなるが, その条件に対応する $L_y = 0.375L_0$ の結果についてもあわせて示す. 図では, 面内変形 ($\delta < \delta_c$) と, 面外変形 ($\delta > \delta_c$) の領域を, それぞれ, 塗りつぶした記号と白ぬき記号で区別してプロットしている.

同様に, Fig.5(b) に引張力 F と変位 δ の関係を示す. F は, ヤング率 E と板厚 h を使って, 無次元量 $\bar{F} = F/(Eh^2)$ を定義して図示している.

これらの図から L_y の減少に伴って分岐点の変位 δ_c が増加することがわかる. また L_y が減少するとエネルギー曲線の傾きは小さくなる. さらに $L_y = 0.25L_0$ の場合には $\lambda < h$ であり, 分岐点は存在しない.

Fig. 5 Strain energy $\bar{W}$ and tensile force $\bar{F}$ as functions of displacement $\bar{\delta}$ with different size of specimen L_y .

先に述べたように, $I_I = h\lambda^3/12$, $I_{III} = \lambda h^3/12$ と与えられるので, h 一定のもとで, λ を変化させると, 剛性比 $\gamma = EI_I/(EI_{III})$ を変化させることができる. 式 (11) を用いて幾何パラメータ λ を変化させることで求めた

分岐点 $\delta = \delta_c$ におけるひずみエネルギー W と力 F についてそれぞれ Fig.6(a), 6(b) に図示する. なお, $\lambda \leq h$ の場合には, 分岐点は存在せず式 (11) を用いることはできないが, この場合には基本釣り合い経路のひずみエネルギー W と引張力 F は変位 δ の関数として一意に定まる. 比較のために $\lambda = h$ の関係を図に合わせて示す.

Fig.6(a) から分岐点におけるひずみエネルギーが極小となる点が存在していることが分かる. また Fig.6(b) を見ると, 分岐点における引張力 F_c は分岐点の変位 δ_c の増加に伴って $\lambda = h$ の直線に漸近していくことがわかる. また分岐点 δ_c は $\lambda = h$ では理論的に計算できなくなることから, $\lambda = h$ が面外変形が起こるか起こらないかを限界づける条件となる. そして $\lambda < h$ の場合には分岐が発生せず, 分岐点も存在しないことがわかる.

Fig. 6 Bifurcation points on $\bar{W} - \bar{\delta}$ and $\bar{F} - \bar{\delta}$ planes.

3.2 分子動力学シミュレーション

粒子モデルを用いた引張変形の分子動力学シミュレーションにより得られたスナップショットを Fig.7 に示す. 視認性を高めるために変形した配置における x 座標値に対応して粒子の色にグラデーションを施し, 図に z 軸からみた xy 面の図を濃淡の基準 (オンライン版ではカラーバー) として示している.

Fig.7(a) は, 初期状態の粒子配置を示している. ユニットセルの一辺の長さを変化させることにより引張変形の付与を開始すると, 面内変形モードの変形領域を経て, さらに大きい変形では, 面外変形モードに移行する様子が観察される. Fig.7(b), (c) に, 面内変形, および面外変

形の典型的な粒子配置を示す。

このように、粒子モデルによる分子動力学シミュレーション、すなわち、計算機実験による結果は、理論的に求めた解析解と定性的な一致が見られ、両者の一致は、キリガミ構造体の変形様式の遷移を分岐現象として理解できることを示唆している。

Fig. 7 Atomic configuration obtained by MD simulation. Gradation of color corresponds to the x coordinate of each atom.

3.3 解析解とシミュレーション結果の比較

次に、はり理論に基づく解析解と、粒子モデルによる分子動力学シミュレーション結果の定量的な比較のために、本研究で用いた粒子モデルについて、二体間ポテンシャルに与えたパラメータと試料寸法から決定される曲げ剛性を評価する。ここでは、はりの粒子モデルを作成し、分子動力学法によりモード I またはモード III のみが生じるように変形を拘束して、曲げシミュレーションを行うことで曲げ剛性を求める。このようにして得られた曲げ剛性は、 $EI_I = 1.067 \times 10^{-25} \text{Pa} \cdot \text{m}^4$, $EI_{III} = 2.533 \times 10^{-26} \text{Pa} \cdot \text{m}^4$ である。以後、この値を用いてはり理論による解析解を求め、シミュレーション結果と解析解の定量的な比較を行う。

Fig. 8(a) に回転角 θ と変位 δ の関係、Fig. 8(b) に変位

u_I と変位 δ の関係、Fig. 8(c) に変位 u_{III} と変位 δ の関係を示す。図において、Mode I として示した $\theta = 0$ の実線（オンライン版ではマゼンタ色の実線）は分岐が生じる前の解、破線は分岐点よりも大きい変位 δ における、不安定な釣合い解を表している。また、Mixed Mode として示した曲線（オンライン版では緑色の曲線）は、分岐後の混合モードが生じたときの解を表している（Geometrical condition として示した濃い色（オンライン版では青色）の折れ線で結んだプロットについては後述する）。

Fig. 8 Comparison between MD result and geometrical condition.

いずれの図においても、シミュレーション結果（MD result として示した淡い色（オンライン版では橙色）の

折れ線で結んだプロット) の分岐前の Mode I ($\theta = 0$) から混合モード ($\theta \neq 0$) への遷移は、解析解との間で定性的に一致し、シミュレーションと解析解の分岐点の変位 δ の値のオーダーはほぼ一致している。

詳細に検討すると、Fig. 8(a) から、分子動力学シミュレーションでは、解析解で得られた分岐点よりもやや早い段階で面外変形がはじまることがわかる。これは初期不整がある場合の特徴に類似している¹⁰⁾。変位 δ のさらなる増加に対して、分子動力学シミュレーションの結果とはり理論の解析解の回転角の相違は、やや大きくなる傾向が見られる。また、Fig. 8(b), (c) から判断される、分岐点の変位 δ の定量的な値と分岐点までの変形の様子については、分子動力学シミュレーションの結果は、はり理論の解析解と、よく一致していることがわかる。

最後に、解析解の定式化において仮定として考えたキリガミ構造体の変形に対する幾何学的な条件の妥当性について考える。粒子モデルの構造が、変形中に式 (2) の条件式を満たしているかを確認するために、分子動力学シミュレーションの結果得られた構造に対して測定した u_I , u_{III} を直接にプロットしたもの (MD result として示したプロット) に加えて、分子動力学シミュレーションによって得られた原子の座標から、変位 δ , 回転角 θ を計測し、それを幾何条件の式 (2) に代入して求めた u_I および u_{III} をプロットしたもの (Geometrical condition として示したプロット) を比較して、Fig. 8(b), 8(c) にあわせて示す。分子動力学シミュレーションで評価した u_I , u_{III} と幾何条件式に変位 δ , 回転角 θ を代入することで評価した u_I , u_{III} との比較から、両者は、分岐前、分岐後もよく一致していることがわかる。このことから、変形で仮定した混合モードにおける幾何学条件は満足されていることがわかる。つまり、解析解とシミュレーション結果の分岐後の領域での差は、定式化の前提になった仮定に由来するものではなく、むしろ曲げやせん断に対する材料非線形的な表現を線形化して考えたことによると考えられる。

4 結 言

本研究ではキリガミ構造体を、はりの組み合わせとしてモデル化し、エネルギー分布図を描くことによりキリガミ構造体の変形が分岐現象であることを示した。さらに分岐が発生するキリガミ構造体の変位と変形に必要な外力を幾何パラメータによって表し、面外変形の起こりやすさを幾何パラメータにより決定できることを示し

た。また分子動力学法による解析結果とはり理論による結果を比較し、複雑な自由度を持つ粒子モデルの変形の分岐点が単純化したはりモデルによって予測できる可能性を示した。

本研究は、科学研究費補助金挑戦的萌芽研究 (15K13835) および若手研究 B (17K14145) の援助を受けて、実施したことを記し、謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) M. K. Bless, A. W. Barnard, P. A. Rose, S. P. Roberts, K. L. McGill, P. Y. Huang, A. R. Ruyack, J. W. Kevek, B. Kobrin, D. A. Muller and P. L. McEuen, "Graphene kirigami", *Nature*, Vol. 524, pp. 204-207 (2015).
- 2) A. Rafsanjani and K. Bertoldi, "Buckling-induced kirigami", *Physical Review Letters*, Vol. 118, pp. 084301-1-5 (2017).
- 3) A. Nakatani, X.-W. Lei, S. Matsunaga and Y. Doi, "Bifurcation analysis of anti-plane deformation in kirigami structure under tensile loading", *The Proceedings of the Materials and Mechanics Conference*, GS-51, pp.957-959 (2016).
- 4) URL <http://www.miuraori.biz/hpgen/HPB/entries/11.html>
- 5) J. L. Silverberg, J.-H. Na, A. A. Evans, B. Liu, T. C. Hull, C. D. Santangelo, R. J. Lang, R. C. Hayward and I. Cohen, "Origami structures with a critical transition to bistability arising from hidden degrees of freedom", *Nature Materials*, Vol. 14, pp. 389-393 (2015).
- 6) T. C. Shyu, P. F. Damasceno, P. M. Dodd, A. Lamoureux, L. Xu, M. Shlian, M. Shtein, S. C. Glotzer and N. A. Kotov, "A kirigami approach to engineering elasticity in nanocomposites through patterned defects", *Nature Materials*, Vol. 14, pp. 785-789 (2015).
- 7) Y. Tang and J. Yin, "Design of cut unit geometry in hierarchical kirigami-based auxetic metamaterials for high stretchability and compressibility", *Extreme Mechanics Letters*, Vol. 12, pp. 77-85 (2017).
- 8) X.-W. Lei and A. Nakatani, "A deformation mechanism for ridge-shaped kink structure in layered solids", *The American Society of Mechanical Engineers (ASME) Journal of Applied Mechanics*, Vol. 82, pp. 071016-1-6 (2015).
- 9) D. Bigoni, "Nonlinear Solid Mechanics", Cambridge University Press (2012).
- 10) Y. Shibutani and A. Nakatani, "Mechanics of Materials", Corona Publishing Co., Ltd. (2017).
- 11) D. Zaccaria, D. Bigoni, G. Noselli and D. Misseroni, "Structures buckling under tensile dead load", *Proceedings of the Royal Society A*, Vol. 467, pp. 1686-1700 (2011).