

論文の内容の要旨

論文題目 流体および粘弾性体の力学的不安定化機構

氏 名 黒谷 雄司

粘性流体や粘弾性体に力学的な変形を印可すると、その密度や濃度といった保存量が時間・空間的に不安定化し破壊に至る現象はよく知られている。これまでに、この不安定化現象の理解に向けて様々な研究が行われてきたが、その物理的な機構の理解は不十分であり、その解明及び制御は基礎的にも応用的にも重要な課題である。

近年、我々の研究室で、粘性流体及び粘弾性体について、単純せん断変形下での密度不安定化を記述する流動誘起不安定化機構の理論が提案され、その理論予測が高粘性流体や粘弾性体の不均一化及び破壊現象の実験結果と一致することが示された。この理論の独創性は、これまで定数として取り扱われてきた粘性率や弾性率、緩和時間が保存量である密度に依存することを初めて考慮した点にある。従来理論では、単純せん断変形は体積変化を伴わないため、変形と密度の間には結合がなく、そのため変形下での密度場の不安定化を説明することは困難であった。一方、この新たな理論では、上記の物理量の密度依存性から、単純せん断変形に対しても、変形と密度場の間に結合に起因して、密度の不安定化を誘起する応力場が現れる。そのため、単純せん断下でも、高せん断率もしくは高せん断下で、系の有効圧縮率が負になり、密度揺らぎが不安定化し、破壊に至ることが理論的に結論できる。この物理機構は、線形な構成方程式という極めて一般的な条件下で成立するため、未だ十分な考察が行われていない外場下で誘起される様々な不安定化現象や破壊現象を理論的に説明できる可能性を持つ。

本博士論文では、上記の考え方の下に、固体境界壁上での粘性流体のスリップ、一軸伸長変形下での粘弾性体の破壊、という2つの現象の物理機構を明らかにすべく、理論的考察並びに数値シミュレーションにより研究を行った。以下、各研究テーマに関する成果を記す。

はじめに、固体境界壁上での粘性流体のスリップ現象に関する研究結果について述べる。流体力学で標準的に用いられる、固体境界壁上で流体と壁の相対速度が一致するというno-slip境界条件は、ミクロなスケールでは一般に成立せず、流体（特に水）は壁に対してスリップして流れる事が近年明らかになった。このスリップ現象は、小さな圧力勾配で多くの流体を輸送出来ることに結びつくため工業的にも重要である。その物理機構を説明すべくこれまでに提案された理論のうち、有力なモデルの1つとして、apparent slip modelが知られている。このモデルは、no-slip境界条件の厳密な成立を仮定し、境界壁近傍にバルクの流体（液体）よりも粘性率が小さい流体（気体）が局在することを予め仮定することで、見かけ上のスリップの発生を説明する。しかし、このモデルの最大の問題点は、壁近傍に気体が予め局在するという仮定そのものが非自明であり、それを正当化する物理機構が非明確な事である。実験的には、液体に気体が多く溶解している場合にスリップが容易に起こる事が知られているが、実際のスリップ現象の説明に対しては、この非自明な仮定の正当化が必要である。本論文では、流動誘起不安定化機構に着目し、この問題を考察した。すなわち、気体が十分に溶解した液体を考え、それにせん断流を印加した場合に境界壁上への気体の核生成が流動誘起不安定化機構により十分促進され得るか、また壁がスリップ現象に対して持つ役割を調べた。

数値シミュレーションは、圧縮性Navier-Stokes方程式に従う、気体が過飽和に溶解した2次元準安定液体に対して、単純せん断流を印加することで実施した。上述の過去の研究との大きな相違点は、固体境界壁の存在である。境界壁は流体力学的な境界条件と気体・液体・固体間の接触角として系の振る舞いに影響を与える。また粘性率の密度依存性を考慮し、揺動散逸定理に従う熱ノイズを印加した。この系は、十分長時間待てば熱活性化過程により気泡の不均一核生成・成長が起こるが、その気泡生成が境界壁の存在、及びせん断流の影響でどの程度促進されるかを調べる事が、本研究の主眼である。

研究の結果、まず静止下においても、境界壁近傍の密度の熱揺らぎは、バルク中の熱揺らぎよりも壁の存在により顕著に増大することを見出した。この局所密度揺らぎの増大は、流動誘起不安定化機構や流体と境界壁の間の接触角とは無関係であり、境界壁の存在により圧縮率に実効的に異方性が生じることに由来する。これは、壁近傍においては、気体の不均一核生成が起こりやすくなる事を意味する。次に、系にせん断流を印加すると、流動誘起不安定化機構により、系の密度揺らぎが実際に増加することを確認した。この密度揺らぎの増大は、系の有効圧縮率の増加に対応し、せん断流下での気体の核生成は静止下に比べて非常に促進される。また、せん断率を更に大きくすると、系は

絶対不安定領域に入り、スピノダル分解的な密度揺らぎの増大が起こることを見出した。そして、これらの核生成、もしくはスピノダル分解は固体壁と液体相の親和性（濡れ性）が低いほど、容易に起きる事も分かった。

上記は、気泡の生成過程の促進現象に関する議論だが、この系には生成した気泡がせん断流により消滅する物理機構も共存することも判った。従って、一般に気泡の生成機構と消滅機構の競合により気泡の存在が決まり、特にあるせん断率と接触角のパラメータ領域では、気泡は生成及び消滅を繰り返すことを見出した。

本研究により、低せん断率であっても、気泡核生成に必要な熱活性化時間が極端に減少するため、現実の流体のスリップ現象を上記の機構により説明し得ることを明確化した。本機構では、流体の見掛けのスリップ長は、境界壁近傍での気泡の生成量によって決定される。従って、流体の準安定度が小さくても、不均一核生成が起これば、流体のスリップ長はシステムサイズに比例して増大する。そのため、我々のモデルは、しばしば実験的に観察され、分子動力学シミュレーションでは説明困難な、数 μm スケールでの流体のスリップ現象を、自然に説明できる。また数 μm スケールでのスリップ現象は、スリップ挙動が時空間的に複雑に変化することが知られており、この特徴は本シミュレーションの結果と良く一致する。

次に、粘弾性体に対する伸長変形下での破壊に関する研究結果について述べる。高分子や金属ガラス等に対する破壊実験は、多くの場合一軸的な伸長もしくは圧縮変形により実施される。粘弾性体を一軸伸長すると、脆性破壊や延性破壊、破壊前のnecking形成、液体的な破壊等の多様な挙動を示し、それは試験時の伸長速度や材料のPoisson比、そして粘弾性の性質に依存する事が知られている。しかし、現状では、これらの複雑な挙動を説明可能な基礎理論は存在しない。その物理的機構の理解が不十分な理由として、結晶材料で有効であった欠陥を基礎とした破壊理論が、アモルファス構造を持つ粘弾性体に対しては適用できないことが挙げられる。また、材料中のミクロな潜在欠陥が存在し、亀裂進展を通じてマクロな破壊に至る、という仮説に基づいて伸長破壊を説明する試みも広く行われてきたが、この仮説は物理的な基礎付けが不十分なだけでなく、純度が高くミクロな潜在欠陥の存在が事実上無視できる材料における破壊現象を説明することは困難である。そこで本論文では、粘弾性体の破壊機構の基礎原理として、流動誘起不安定化機構に着目した。すなわち、「系に内在する微小な密度揺らぎが、流動誘起不安定化機構によって変形場と結合を介して力学的に増幅され、十分増幅されると系の破壊に至る」という考え方に基づいて、上記の破壊挙動の理解を試みた。

数値シミュレーションは、2次元の粘弾性体を用意し、伸長変形することでその破壊挙動を調べた。粘弾性応力をバルク成分とtraceless成分に分け、それぞれ標準的な構成方程式であるupper-convected Maxwell方程式に従うと仮定した。ここでバルク成分の構成方程式を設定するのは、伸長変形が本質的に体積変形モードを含み、またこの成

分の粘弾性緩和の存在が実験的に知られているからである。また、流動誘起不安定化機構が働くように、系の弾性率や緩和時間に対し密度依存性を導入した。これは、ガラス転移点近傍では極めて妥当な仮定である。そして、伸長速度や系のPoisson比を変化させた場合に現れる破壊挙動を調べた。

その結果、例えば、高伸長レートでは脆性破壊が起き、低伸長レートではneckingを形成し破壊に至るなど、実験結果と定性的に一致する挙動を得た。いずれの場合も、破壊直前に破壊領域近傍に伸長歪みや伸長レートが局所集中し、破壊に至る。その局所的な真歪みと真応力を用いて、応力歪み曲線を描く事で、例えば伸長レートが大きい場合やPoisson比が大きいほど降伏歪みが増加する現象など、実験結果と定性的に一致する破壊挙動が得られることが判った。

また破壊機構を詳しく理解するため、局所密度揺らぎの伸長歪みや伸長レート依存性を詳しく調べた。その結果、局所密度揺らぎの伸長歪み依存性が、流動誘起不安定化機構から予想される理論挙動と一致する事が分かった。すなわち伸長入力によりミクロな密度揺らぎが増幅され、それが十分成長するとマクロな破壊に至る事が分かった。このように流動誘起不安定化機構という新しい理論的枠組みを基礎に、粘弾性体の破壊機構を説明し得ることを見出した。

このように、輸送係数や粘弾性特性の密度依存性を介した流動誘起不安定化機構に基づいて、これまでその物理的機構が十分に理解されていなかった流動下の流体の壁面スリップ現象、伸長変形下での粘弾性体の破壊現象を理論的に説明することに成功した。連続体的な線形の粘弾性構成方程式を基礎とする本機構は、その適用範囲は広いと期待されるため、今回考察を行っていない様々な媒質や力学入力下における不安定化や破壊現象に対しても有効である可能性は高いと考えられる。