

令和 3 年 6 月 14 日現在

機関番号：13701

研究種目：挑戦的研究（萌芽）

研究期間：2018～2020

課題番号：18K18939

研究課題名（和文）ナノメートルでの「切断」の科学：原子シミュレーションによる現象解明とモデル構築

研究課題名（英文）Sciences in nano-meter incision: observation and modeling by atomic simulation

研究代表者

屋代 如月（Yashiro, Kisaragi）

岐阜大学・工学部・教授

研究者番号：50311775

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 4,900,000円

研究成果の概要（和文）：せん断力ではなく刃先が侵入して材料を分離する「押し込み切断」という独自の視点から、二次元状の剛体刃を様々な金属結晶に押し込んで切断するシミュレーションを分子動力学法により行った。3次元のナノインデンテーションと、長手方向に無限長の2次元刃の押し込み切断の大きな違いとして、押し込まれた材料の弾性変形が少なく塑性変形が容易に発生し、3次元ナノインデンテーションで活発に議論されているポップインのような現象が生じないこと、刃先表面には刃の結晶方位と一体化した「膜」が形成され、膜と母材の間の結晶の回転やすべりなどによって切断面の粗さや切断方向が変化するなど、切断初期の重要なキーマニズムを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

3Dナノインデンテーションとの違いから明白になったこととして、刃を極限まで鋭利にすることは、塑性変形を発生させるための応力集中を極限まで高めることに他ならない、ということである。したがって、刃先に生じる応力集中、塑性変形をナノレベルでコントロールすることで新しい切断の方法論につながると思われる。一方、プラスチックなど高分子材料については「塑性変形」の定義が金属に比べて曖昧であり、切断されたプラスチックは局所的にC-Cの共有結合が切れているのか、分子鎖がすり抜けて流動変形しているだけなのか、今後さらなる研究が期待される。

研究成果の概要（英文）：Focusing on the “indentation-cutting” that bisects target materials not by shear force but by penetration of sharp blade, various molecular dynamics simulations are performed on the indentation and cutting of crystalline metals by 2D-like infinite rigid blade. As a definite difference between 3D nano indentation and 2D-like infinite blade, plastic deformation easily occurs from 2D blade without large elastic deformation under indenter, so that there is no “Pop-in” response that actively discussed in 3D indentation. Another important mechanism is also found; that is, a “skin” is formed on the blade surface, of which crystal orientation is coincident with that of the blade surface. It is revealed that subgrain formation, rotation and slips between the skin and base metal play important roles in change in the roughness of the cutting surface or cutting direction.

研究分野：計算固体力学，分子動力学

キーワード：ナノメトリック切断 インデンテーション 応力集中 塑性変形 分子動力学シミュレーション

### 1. 研究開始当初の背景

通常の打ち抜き加工は、はさみと同じくせん断力による切断である。ワーク（加工される材料）とダイ、そして刃の間には隙間があり、切断面には通常バリが発生する。そのため、切断面の仕上げ・洗浄・乾燥などの二次工程を経てようやく組み立て作業が可能となる。回転刃はきれいな切断面を得ることはできるが、同時大量加工には不向きであるので、回転刃を用いず、バリや割れを生じないきれいな切断面を得ることが出来れば、打ち抜き加工のコストは飛躍的に減少するはずである。刃先を極限まで鋭利にすれば、通常のせん断とは異なり、刃先が進入してラッセル車のように材料を「一刀両断」しているのではないかとそれは従来考えられてきたせん断による「切断」の概念とは異なるのではないかとそのような独自の視点を本研究はモチベーションとしている。1990年代後半に一大ムーブメントとなったナノインデンテーションは、原子シミュレーションでも多くの検討例があるが、転位バーストなどの初期の不安定挙動などに焦点が置かれており、延々と押し込み＝塑性加工をし続けるような研究はない。その後もFIBによるナノピラーの作成・座屈実験など、ナノメートルの実験が多数なされているが「切断」の視点のものはない。他方、切削加工の分野では「かんな」のようなシミュレーションにより、工具を原子レベルまでサイズダウンしてすくい角や切りくずを議論したものがあるが、カミソリのような単純な「刃」で材料を分離したときの挙動を議論したものはなかった。

### 2. 研究の目的

ナノレベルまで鋭利にした刃先で生じている様々な現象を解明し、より「切れる」刃を開発するためのシミュレーションモデルを構築するための取り掛かりとして、刃先がワークに進入し掻き分けていく「切断」を、原子シミュレーションを主とした数値計算手法により検討する。1990年代から盛んに実験・シミュレーションがなされたナノインデンテーションでは、結晶欠陥を排除し極限まで精密にコントロールした実験によって、弾性変形から材料内部に塑性変形が発生する際の力学応答「ポップイン」の現象解明が盛んに議論された。刃先がワークに進入する際の力学挙動はこれに関連するが、半導体分野のSiをベースとしたin-situ試験と異なり、ワーク表面の凹凸の寸法は、ナノインデンテーションのようなきれいな平滑面ではなく、それらが進入時の方向や進入後の切断方向に影響するものとする。進入後、材料を掻き分けるようにまっすぐ切断するためには何がキーとなるのか？刃先の材料表面への接触、弾性変形→材料への刃先の進入、その後の材料の分離など、様々な要因が考えられるが現時点では明確な理論的指針がない。その取り掛かりとして、まずは先端で生じている原子レベルの現象を分子動力学シミュレーションにより検討する。

### 3. 研究の方法

図1に示すように、紙面垂直方向を周期境界とした二次元薄板状のワークに剛体刃（原子間の相互作用距離から、寄与しない内側の原子は除外してある）を上から押し込み続けてワークを両断するシミュレーションを、種々のワークと刃の組み合わせ（剛体刃は基本鉄原子とし、ワークはアルミニウム、マグネシウム、ポリマーなど多数）で行い、刃先先端での現象を議論する。図はワークの表面エネルギーと弾性係数に着目して行った計算で、刃先が90°の三角形とし、ワークをNiとCuとして、刃とワークの結晶方位を変えて切断挙動の変化を議論した論文でのモデルである。他、ワークを単結晶ではなく多結晶とした場合や、刃先の角度を変えた場合、放物線形状にした場合など様々な検討を行った。

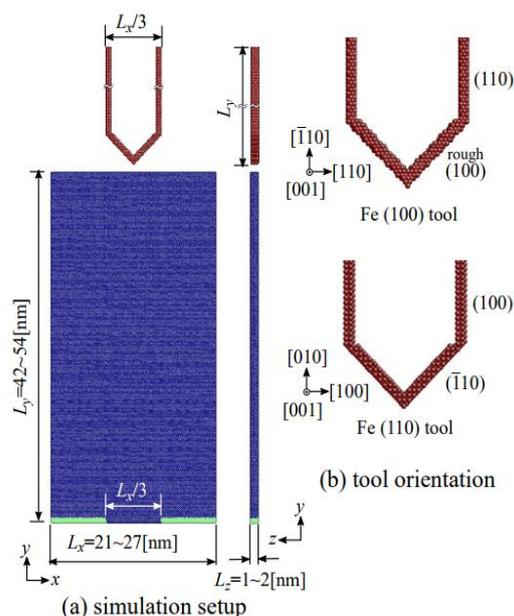
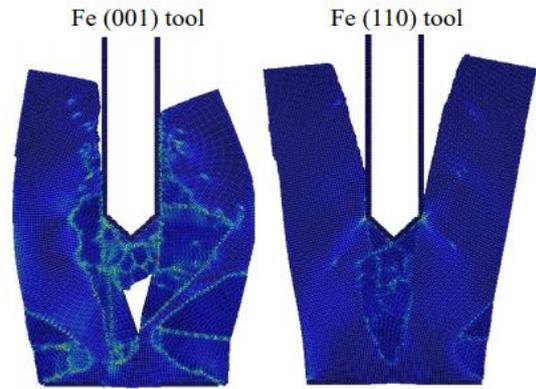


図1 基本モデル

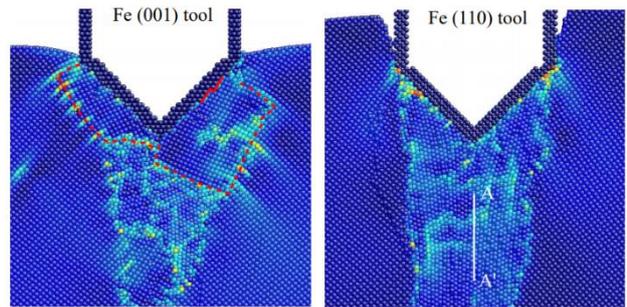
#### 4. 研究成果

図 2 は剛体刃の結晶構造の違いによって切断形態が著しく変わった例である。ワークは単結晶 Ni で、刃を押し込むワーク表面はどちらも (001) で同じ、押し込む刃の表面の原子レベルでの凹凸が違っただけで著しい差を生じている。ワークは Mises ひずみで着色しており、暖色ほど高ひずみとなる。左のワークには緑の点群が線のように見えているが、これは刃が押し込まれるとともに結晶方位の回転によって発生した結晶粒界（もともとは単結晶）である。左は刃先表面の原子凹凸が少ない方であるが、粒界が明確な緑の線として見られ、刃先の前方に割れを生じている。一方、右は原子凹凸が多い方であるが、粒界は進行方向に見られるのみでスムーズな切断となっている。図 3 は図 2 で示した切断の、初期の刃先近傍を拡大した図である。同じ押し込み量を示しているが、左はワークの上表面が見えており大きく弾性変形して沈み込んでいる。一方、右は既に切断が進行して弾性変形が開放されており、ワーク上表面は表示範囲外にある。左図で赤の破線で示した領域は、刃表面の結晶方位に従うように配向した部分で、ワーク母材とこの領域の界面は結晶粒界となり、切断の進行とともに多数のサブグレインが導入され、図 2 左に示したような粒界部分からの割れを生じた。一方、図 3 右では刃先前方深くに母材と異なる結晶方位の領域が発生している（Mises ひずみが高い暖色領域）。この領域の結晶方位は A-A' で示した面が Ni のすべり面であることが判明している。この領域とワーク母材の界面は刃の幅と一致しており、その間ですべることでスムーズに切断が進行する。この刃先前方の結晶方位が回転した領域も、刃表面の原子構造に起因している。図 4 は図 2, 3 で紹介した Ni ワークの切断時の切断反力の変化である。青色の線が図 2, 3 左の刃の原子表面凹凸が小さい場合、赤色の線が刃の表面凹凸が大きい場合である。図 3 で説明した、弾性変形によるワーク表面の沈み込み→侵入の挙動が、10nm ぐらいまでの挙動に差として現れている。なお、3 次元のナノインデンテーションでは、ここで示したよりずっと大きな反力を示した後に最初の塑性変形＝少数の転位の発生で反力が急減する「ポップイン」という不安定挙動を示すが、長手方向に無限の長さを持つ二次元状刃の押し込み切断では、転位射出が比較的容易に随時発生するため、反力-押し込み線は鋸歯状の応答を示す。それでもワーク表面の沈み込み→切断開始位置は「反力上昇→ほぼ一定反力での切断」の折れ曲がり点として把握される。3 次元のナノインデンテーションから 2 次元状刃の押し込みとすることで、ポップインを生じずに変形集中→塑性変形するが、刃の原子レベルの表面凹凸でさらに弾性変形が小さくなったことを図は示している。弾性変形をできるだけ小さくし、変形集中によって塑性変形を容易に生じさせることが、「切れる」刃の設計において重要であることを再認識させたと言える。



(a) Ni (001) work

図 2 刃表面の結晶構造による違い



(a) subgrains under Fe (001) tool

(b) single subgrain under Fe (110) tool

図 3 押し込み初期の刃の下の構造

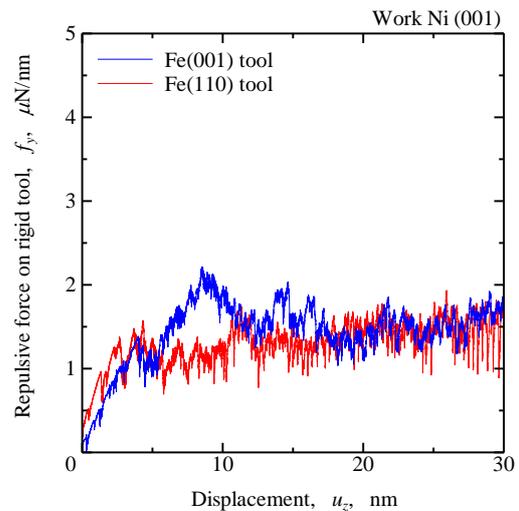


図 4 切断反力の変化

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 6件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 YASHIRO Kisaragi, HONDA Shunsuke, TERADA Ryo, NAITO Keishi	4. 巻 86
2. 論文標題 Molecular dynamics simulation of indentation-cutting on Ni and Cu by rigid Fe tool (Focus on combination of surface structure of tool and work)	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Transactions of the JSME (in Japanese)	6. 最初と最後の頁 20-00061
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1299/transjsme.20-00061	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yashiro K., Tsuchiya S., Naito K.	4. 巻 183
2. 論文標題 Atomic elastic stiffness analysis to predict twinning in Fe single crystal under shear	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 109804 ~ 109804
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2020.109804	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yashiro K.	4. 巻 10
2. 論文標題 Deformation mode analysis by eigenvectors of atomic elastic stiffness in static uniaxial tension of various fcc, bcc, and hcp metals	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 035301 ~ 035301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5141015	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Yashiro K.	4. 巻 9
2. 論文標題 Characteristics of atomic elastic stiffness at GSF energy surface, edge and screw dislocation cores in fcc, bcc and hcp metals	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 AIP Advances	6. 最初と最後の頁 065014 ~ 065014
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5094205	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yashiro Kisaragi, Nimura Kouhei, Naito Keishi	4. 巻 83
2. 論文標題 Molecular Dynamics Study on Adhesion of Various Ni/Al Interface for Ni-Plated Aluminum Alloys	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Japan Institute of Metals and Materials	6. 最初と最後の頁 198 ~ 206
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/jinstmet.J2019005	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Yashiro	4. 巻 147
2. 論文標題 Local lattice instability analysis on mode I crack tip in beta-SiC: Characteristics in binary covalent crystal	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Computational Materials Science	6. 最初と最後の頁 72-80
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.commatsci.2018.01.047	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Yashiro, K. Nimura and K. Naito	4. 巻 59
2. 論文標題 Molecular dynamics study on adhesion of various Ni/Al interface for Ni-plated aluminum alloys	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Materials Transactions	6. 最初と最後の頁 1753-1760
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.2320/matertrans.M2018182	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計14件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 2件)

1. 発表者名 K. Yashiro
2. 発表標題 Deformation mode analysis on edge and screw dislocation dipoles by eigenvector of negative atomic elastic stiffness
3. 学会等名 The fourth International Symposium on Atomistic and Multiscale Modeling of Mechanics and Multiphysics (ISAM4-2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 屋代如月
2. 発表標題 金属の局所格子不安定性解析および高分子MDシミュレーションの研究紹介
3. 学会等名 第24回高分子計算機科学研究会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 屋代如月，棚橋直哉，中村和康，内藤圭史
2. 発表標題 原子弾性剛性による異種金属界面の界面強度評価
3. 学会等名 第32回計算力学講演会（CMD2019）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 鈴木皓生，屋代如月，内藤圭史
2. 発表標題 異種金属界面強度に関する第一原理計算：表面エネルギー，弾性係数，はく離エネルギーの評価
3. 学会等名 TOKAI ENGINEERING COMPLEX 2020 (TEC20)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 棚橋直哉，屋代如月，内藤圭史
2. 発表標題 Co-Ti界面に第三元素を添加したトリメタルでの異種金属界面の強度評価；原子弾性剛性係数による検討
3. 学会等名 TOKAI ENGINEERING COMPLEX 2020 (TEC20)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 中村和康, 屋代如月, 内藤圭史
2. 発表標題 Pd中間層を加えたFe-Ni界面のはく離シミュレーションと原子弾性剛性係数による強度評価
3. 学会等名 TOKAI ENGINEERING COMPLEX 2020 (TEC20)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Yashiro
2. 発表標題 Deformation mode analysis by eigenvectors of atomic elastic stiffness
3. 学会等名 The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling, MMM2018 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 本多俊介, 屋代如月, 内藤圭史
2. 発表標題 分子動力学による切断現象の解明: 刃先に形成される膜とワークの親和性
3. 学会等名 機械学会東海支部 第68期総会・講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 屋代如月
2. 発表標題 原子弾性剛性係数マトリックスの固有ベクトルによる不安定変形モードの可視化
3. 学会等名 日本材料学会東海支部第13回学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 屋代如月
2. 発表標題 様々な元素の表面やGSFなどの基礎物性と原子弾性剛性係数の関係
3. 学会等名 第31回計算力学講演会CMD2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 本多俊介, 内藤圭史, 屋代如月
2. 発表標題 分子動力学法による押し込み / 切断シミュレーション: 刃先形状の効果
3. 学会等名 第31回計算力学講演会CMD2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 二村晟平, 内藤圭史, 屋代如月
2. 発表標題 第一原理計算による金属めっきの密着性予測
3. 学会等名 第31回計算力学講演会CMD2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 屋代如月
2. 発表標題 原子弾性剛性係数の固有ベクトルによる不安定モード解析
3. 学会等名 第28回格子欠陥フォーラム「格子欠陥研究における理論・実験・計算の最前線」(招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 屋代如月, 二村晟平, 内藤圭史
2. 発表標題 ニッケルメッキとアルミ合金の界面強度: 分子動力学による検討
3. 学会等名 第3回マルチスケール材料力学シンポジウム
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関