原子系/連続体変換とナノスケール切削の 応力ひずみ解析*

稲村 豊四郎** 武澤 伸浩** 熊木 保浩***

Atomic/Continuum Model Transformation and Its Application
to Stress-Strain Analysis of Nanoscale Cutting

Toyoshiro INAMURA, Nobuhiro TAKEZAWA and Yasuhiro KUMAKI

A method by which to transform quantities of an atomic model to those of a continuum one, and *vice versa* has been proposed. The method is based on an idea that the displacement at a point in a continuum model should be a weighted mean of those of surrounding atoms in the corresponding atomic model, while stress values should have the inverse relation so as to preserve strain energy between the two models. The continuum model is then discretized by the Finite-Element Method so that matrix equations for the transformation are derived. These equations have been applied to the results of atomic-model-based simulation of nanoscale cutting to evaluate the stress and strain distributions in nanoscale cutting. The results show that the strain distribution is not very different from that of macroscale cutting but that there is almost no concentrated shear stress in the primary shear zone in nanoscale cutting.

Key words: atomic model, continuum model, FEM, stress, strain, nanoscale cutting

1. はじめに

最近、ナノスケール切削のメカニズムやき裂先端での力学現象の解明などを目的として、分子力学や分子動力学などの粒子(原子)モデルによる計算機実験が行われ^{1)~3)}、従来の連続体モデルによる解析では得られない新たな知見を我々に提供しつつある。しかし一方で現実の固体の持つ原子個数に比べれば、これらの手法で扱える原子個数は極端に少ないから何らかの近似法が必要であり、連続体モデルの中に局部微細観察を目的とした粒子モデルを埋め込むなどの手法が要求される。また超微小切削について言えば、それがマクロ切削とどのように違うかが問題であり、これを調べるためには超微小切削の応力やひずみ分布が必要になる。いずれにしても粒子モデルと連続体モデル間で同じエネルギー原理が働くという意味での力学量の等価変換が鍵であり、これができて初めて前述の原子モデルの埋込み⁴⁾⁵⁾が正しく行え、また超微小切削の力学機構をマクロ切削のそれと比較するなどの新たな研究への道がひらかれる。

本研究では上記の等価変換の考え方とこれに基づく力学量の具体的な算出法を提案し、更にこれを使ってナノスケール切削の応力ひずみ解析を行う。提案する手法では応力を原子間力から、ひずみを原子変位から各々独立に算出できるから、いわゆる構成方程式の精度に左右されない応力分布が得られる。

2. 力学量の等価変換

2.1 変位

原子系と連続体とを重ねた場合を想定すると、原子系の変位は各原子の場所でのみ与えられるのに対し、連続体の変位は原子と原子のすきまでも存在する。これは原子変位の補間によって可能となるわけであり、補間は平均化の一形態にはかならない。以下、2次元の場合を例に、これを数式表現する。いま原

子 q の位置ベクトルを $\mathbf{r}_q = (x_q, y_q)$, $q = 1, 2, \dots$, 変位ベクトルを $\mathbf{u}(\mathbf{r}_q)$ とし、位置ベクトル $\mathbf{r}_p = (x_p, y_p)$ における連続体の変位ベクトル $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}_p)$ は、 $\mathbf{r}_p$ を中心とする重み分布 $w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q)$ によって

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}_p) = \int_{\Omega} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) \mathbf{u}(\mathbf{r}_q) d\mathbf{r}_q = \sum_q w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) \mathbf{u}(\mathbf{r}_q) \quad (1)$$

の形で与えられるとする。 Ω は平均化の範囲を表す。式(1)で、原子がすべて同一の動きをしている場合は、対応する連続体の変位もこれに等しくなければならないから、平均化の規模にかかわらず

$$\int_{\Omega} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) d\mathbf{r}_q = \sum_q w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = 1 \quad (2)$$

が要請される。更に点 $\mathbf{r}_p$ での変位 $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}_p)$ に関与する点 $\mathbf{r}_q$ の重みと、点 $\mathbf{r}_q$ での変位 $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}_q)$ に関与する点 $\mathbf{r}_p$ の重みとは等しいとするのが妥当であるから

$$w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \quad (3)$$

したがって

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_p} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) &= -\frac{\partial}{\partial x_q} w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \\ \frac{\partial}{\partial y_p} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) &= -\frac{\partial}{\partial y_q} w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

が成り立つ。重み分布の統計力学的な意味を後述の応力を使って付録Aに記すが、以下での重み分布は必ずしもこの意味に限定しない。具体形としては

$$w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = A \exp \left[-\frac{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_q|^2}{2\sigma^2} \right] \quad (5)$$

を考える。ただし A は条件式(2)を満たすように定める。 σ は平均化の範囲を決めるパラメータであり、 σ が大なる程、連続体変位や後述の応力ひずみ分布の詳細が消失する。また σ の下限値は原理的には付録Aの議論から定まる。

2.2 ひずみ

連続体変位を微分して求める。原子の変位ベクトル $\mathbf{u}(\mathbf{r}_q)$ を x, y 成分に分解したものを改めて $u(\mathbf{r}_q), v(\mathbf{r}_q)$ とすれば、

* 原稿受付 平成5年5月6日

** 正会員 名古屋工業大学(名古屋市中区御器所町)

*** 学生会員 名古屋工業大学

ひずみの各成分は

$$\bar{\varepsilon}_x(\mathbf{r}_p) = \sum_q \frac{\partial}{\partial x_p} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) u(\mathbf{r}_q) \quad (6)$$

$$\bar{\varepsilon}_y(\mathbf{r}_p) = \sum_q \frac{\partial}{\partial y_p} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) v(\mathbf{r}_q) \quad (7)$$

$$\bar{\gamma}_{xy}(\mathbf{r}_p) = \sum_q \frac{\partial}{\partial x_p} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) v(\mathbf{r}_q) + \sum_q \frac{\partial}{\partial y_p} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) u(\mathbf{r}_q) \quad (8)$$

となる。

2.3 応力

原子系と連続体とで蓄えられるひずみエネルギーが等しいという要請から導く。いま連続体内に任意の領域 V を考える。 V 内に蓄えられるひずみエネルギー Π_e は、連続体の応力を $\bar{\sigma}_x(\mathbf{r}_p)$, $\bar{\sigma}_y(\mathbf{r}_p)$, $\bar{\gamma}_{xy}(\mathbf{r}_p)$ とすると

$$\Pi_e = \frac{1}{2} \int_V [\bar{\sigma}_x(\mathbf{r}_p) \bar{\varepsilon}_x(\mathbf{r}_p) + \bar{\sigma}_y(\mathbf{r}_p) \bar{\varepsilon}_y(\mathbf{r}_p) + \bar{\gamma}_{xy}(\mathbf{r}_p) \bar{\gamma}_{xy}(\mathbf{r}_p)] d\mathbf{r}_p$$

であるから、式 (6), (7), (8) を代入し、式 (3), (4) を使うと

$$\begin{aligned} \Pi_e = & \frac{1}{2} \int_V u(\mathbf{r}_q) \left[\int_{\Omega} \frac{\partial w}{\partial x_q} \bar{\sigma}_x(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \right. \\ & + \left. \int_{\Omega} \frac{\partial w}{\partial y_q} \bar{\tau}_{xy}(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \right] d\mathbf{r}_q \\ & + \frac{1}{2} \int_V v(\mathbf{r}_q) \left[\int_{\Omega} \frac{\partial w}{\partial x_q} \bar{\tau}_{xy}(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \right. \\ & + \left. \int_{\Omega} \frac{\partial w}{\partial y_q} \bar{\sigma}_y(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \right] d\mathbf{r}_q \end{aligned} \quad (9)$$

を得る。そこで場所 $\mathbf{r}_q$ にいる原子 q の占有体積 V_q に働く体積力の x, y 各成分を

$$\begin{aligned} X(\mathbf{r}_p) = & \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_q} w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \bar{\sigma}(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \\ & + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y_q} w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \bar{\tau}_{xy}(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} Y(\mathbf{r}_q) = & \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_q} w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \bar{\tau}_{xy}(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \\ & + \int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial y_q} w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \bar{\sigma}(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \end{aligned} \quad (11)$$

とすれば、上記の要請が満たされる。そこで体積 V_q に働く体積力 $X(\mathbf{r}_q)$, $Y(\mathbf{r}_q)$ とこの体積の表面で考えた原子の応力 $\sigma_x(\mathbf{r}_q)$, $\sigma_y(\mathbf{r}_q)$, $\tau_{xy}(\mathbf{r}_q)$ との関係式

$$\left. \begin{aligned} X(\mathbf{r}_q) &= \frac{\partial \sigma_x(\mathbf{r}_q)}{\partial x_q} + \frac{\partial \tau_{xy}(\mathbf{r}_q)}{\partial y_q} \\ Y(\mathbf{r}_q) &= \frac{\partial \tau_{xy}(\mathbf{r}_q)}{\partial x_q} + \frac{\partial \sigma_y(\mathbf{r}_q)}{\partial y_q} \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

を式 (10), (11) と比較することにより、応力の変換式

$$\sigma_x(\mathbf{r}_q) = \int_{\Omega} w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \bar{\sigma}_x(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \quad (13)$$

$$\sigma_y(\mathbf{r}_q) = \int_{\Omega} w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \bar{\sigma}_y(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \quad (14)$$

$$\tau_{xy}(\mathbf{r}_q) = \int_{\Omega} w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \bar{\tau}_{xy}(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \quad (15)$$

を得る (付録 A 参照)。式 (13)~(15) は非局所弾性論⁵⁾⁶⁾ で用いられる式と形式的に一致するが、その意味や導出過程は全く異なる。また式 (1) と式 (13)~(15) を比較すればわかるように、応力と変位とは互いに双対の関係にあり、変位は原子系から、応力は連続体から与えられている。しかし式 (13)~(15)

Fig. 1 Pyramidal shape basis function of FEM

を左辺の原子の応力から右辺の連続体の応力への対応と見るとも可能であり、原子の応力をボルンの公式⁷⁾ (付録 A 参照) で測定し、これから式 (13)~(15) を使って連続体の応力を後述のように逆算することもできる。この場合の連続体応力は原子間力から直接に算出されることになり、これと式 (6)~(8) で得られるひずみとから、ミクロの構成方程式を導出することも可能になる。

3. 変換の数値計算

連続体を有限要素法で離散化した場合の、変換式を具体的に導出する。いま連続体を三角形 1 次要素で離散化すれば、離散化後の諸量へ変換する重み関数は、

$$w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = \sum_m \sum_n w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n) H_m(\mathbf{r}_p) H_n(\mathbf{r}_q) \quad (16)$$

となる (付録 B 参照)。ただし $\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n$ は節点 m, n の位置ベクトル、 $H_m(\mathbf{r})$ はいわゆる有限要素法の第 m 基底関数であり、図 1 のように節点 m 上に高さ 1 の頂点を持つピラミッド形の関数である。またこのピラミッドの各斜面がいわゆる形状関数 $N_m(\mathbf{r})$ になる。 $w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n)$ は展開係数であり、式 (2) の条件より

$$w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n) = \frac{\alpha_{mn}}{\sum_{n \in \Omega_e} \alpha_{mn} S_n + \sum_{n \in \bar{\Omega}_e} \alpha_{mn}} \quad (17)$$

となる。ただし

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{mn} &= \exp \left[-\frac{|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n|^2}{2\sigma^2} \right] \\ S_n &= \sum_q H_n(\mathbf{r}_q) \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

であり、 Ω_e は有限要素近似された領域、 $\bar{\Omega}_e$ はそれ以外の領域がもしあればそれ ($\Omega = \Omega_e \cup \bar{\Omega}_e$) を表す。

以下、式 (16) を前述の変換式に代入する。ただし変位の変換式はひずみのそれから容易に類推できるから、ひずみと応力への変換式のみ記す。式 (16) を式 (6) に代入すれば

$$\bar{\varepsilon}_x(\mathbf{r}_p) = \sum_m \sum_n w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n) \frac{\partial H_m(\mathbf{r}_p)}{\partial x_p} \sum_q H_n(\mathbf{r}_q) u(\mathbf{r}_q) \quad (19)$$

式 (19) で $\partial H_m(\mathbf{r}_p)/\partial x_p$ は、点 $\mathbf{r}_p$ を内部に含む三角形要素の節点 a, b, c 以外の m に対し消えること、また $\partial H_a(\mathbf{r}_p)/\partial x_p = \partial N_a(\mathbf{r}_p)/\partial x_p$ などであることに注意すれば

$$\begin{aligned} \bar{\varepsilon}_x(\mathbf{r}_p) = & \frac{\partial N_a(\mathbf{r}_p)}{\partial x_p} \sum_n w(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_n) \sum_q H_n(\mathbf{r}_q) u(\mathbf{r}_q) \\ & + \frac{\partial N_b(\mathbf{r}_p)}{\partial x_p} \sum_n w(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_n) \sum_q H_n(\mathbf{r}_q) u(\mathbf{r}_q) \\ & + \frac{\partial N_c(\mathbf{r}_p)}{\partial x_p} \sum_n w(\mathbf{r}_c, \mathbf{r}_n) \sum_q H_n(\mathbf{r}_q) u(\mathbf{r}_q) \end{aligned} \quad (20)$$

となる。 $\bar{\varepsilon}_y(\mathbf{r}_p)$, $\bar{\tau}_{xy}(\mathbf{r}_p)$ についても同様である。そこで

Fig. 2 Finite elements $[m_i]$ covered by the m th basis function (=elements sharing the node m)

$$\begin{aligned} d_{xn} &= \frac{\partial N_a(\mathbf{r}_p)}{\partial x_p} w(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_n) + \frac{\partial N_b(\mathbf{r}_p)}{\partial x_p} w(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_n) \\ &\quad + \frac{\partial N_c(\mathbf{r}_p)}{\partial x_p} w(\mathbf{r}_c, \mathbf{r}_n) \\ d_{yn} &= \frac{\partial N_a(\mathbf{r}_p)}{\partial y_p} w(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_n) + \frac{\partial N_b(\mathbf{r}_p)}{\partial y_p} w(\mathbf{r}_b, \mathbf{r}_n) \\ &\quad + \frac{\partial N_c(\mathbf{r}_p)}{\partial y_p} w(\mathbf{r}_c, \mathbf{r}_n) \end{aligned} \quad (21)$$

とすれば、各要素内のひずみ $\bar{\varepsilon}_x(\mathbf{r}_p)$, $\bar{\varepsilon}_y(\mathbf{r}_p)$, $\bar{\tau}_{xy}(\mathbf{r}_p)$ が原子の変位 $u(\mathbf{r}_1), u(\mathbf{r}_2), \dots$, によって次のように計算される

$$\begin{aligned} &\begin{Bmatrix} \bar{\varepsilon}_x(\mathbf{r}_p) \\ \bar{\varepsilon}_y(\mathbf{r}_p) \\ \bar{\tau}_{xy}(\mathbf{r}_p) \end{Bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} d_{x1} & 0 & d_{x2} & 0 & \cdots \\ 0 & d_{y1} & 0 & d_{y2} & \cdots \\ d_{y1} & d_{x1} & d_{y2} & d_{x2} & \cdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_1(\mathbf{r}_1) & 0 & H_1(\mathbf{r}_2) & \cdots \\ 0 & H_1(\mathbf{r}_1) & 0 & \cdots \\ H_2(\mathbf{r}_1) & 0 & H_2(\mathbf{r}_2) & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u(\mathbf{r}_1) \\ v(\mathbf{r}_1) \\ u(\mathbf{r}_2) \\ \vdots \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (22)$$

式(22)中の $H_n(\mathbf{r}_q)$ には、実際には各原子位置 $\mathbf{r}_q$ を含む要素の形状関数 $N_n(\mathbf{r}_q)$ を代入する。

同様に応力についても式(16)を式(13)に代入して

$$\sigma_x(\mathbf{r}_q) = \sum_m \sum_n w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n) H_n(\mathbf{r}_q) \int_{\Omega_e} H_m(\mathbf{r}_p) \bar{\sigma}_x(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \quad (23)$$

そこで $\mathbf{r}_q$ を含む要素の節点を a, b, c とし

$$c_{qm} = \begin{cases} = N_a(\mathbf{r}_q) w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_a) + N_b(\mathbf{r}_q) w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_b) \\ \quad + N_c(\mathbf{r}_q) w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_c) : \mathbf{r}_q \in \Omega_e \\ = w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_q) : \mathbf{r}_q \in \bar{\Omega}_e \end{cases} \quad (24)$$

$$\sigma_{xm}^* = \int_{\Omega_e} H_m(\mathbf{r}_p) \bar{\sigma}_x(\mathbf{r}_p) d\mathbf{r}_p \quad (25)$$

とすれば、式(23)は

$$\sigma_x(\mathbf{r}_q) = \sum_m c_{qm} \sigma_{xm}^* \quad (26)$$

となる。 $\sigma_y(\mathbf{r}_q)$, $\tau_{xy}(\mathbf{r}_q)$ についても同様である。式(25)の σ_{xm}^* は、図2のように節点 m を共有する要素 $[m_i]$ ($i=1, 2, \dots$) の面積を $S_{[m_i]}$ 、要素内の一定応力を $\bar{\sigma}_{x[m_i]}$ とすれば

$$\sigma_{xm}^* = \sum_i \frac{1}{3} S_{[m_i]} \bar{\sigma}_{x[m_i]} \quad (27)$$

となるから、最終的に原子の応力と要素内応力とを結び付ける関係式は

$$\begin{Bmatrix} \sigma_x(\mathbf{r}_1) \\ \sigma_x(\mathbf{r}_2) \\ \vdots \end{Bmatrix} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots \\ c_{21} & c_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots \\ S_{21} & S_{22} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \bar{\sigma}_{[1]} \\ \bar{\sigma}_{[2]} \\ \vdots \end{Bmatrix} \quad (28)$$

Fig. 3 Setup of atomic-model-based simulation of nanoscale cutting

となる。ただし式(28)中の S_{m_i} は

$$S_{m_i} = \begin{cases} = S_{[i]} : \text{節点 } m \text{ が要素 } [i] \text{ に含まれる時} \\ = 0 : \text{それ以外} \end{cases} \quad (29)$$

とする。式(28)を

$$\{\sigma_x\} = [G] \{\bar{\sigma}_x\} \quad (30)$$

と書けば、 σ_y , τ_{xy} についても同様に

$$\{\sigma_y\} = [G] \{\bar{\sigma}_y\} \quad (31)$$

$$\{\tau_{xy}\} = [G] \{\bar{\tau}_{xy}\} \quad (32)$$

となる。式(30)~(32)は、連続体の応力 $\{\bar{\sigma}_x\}$, $\{\bar{\sigma}_y\}$, $\{\bar{\tau}_{xy}\}$ から原子の応力 $\{\sigma_x\}$, $\{\sigma_y\}$, $\{\tau_{xy}\}$ への変換として使う場合は何ら問題ない。逆に原子の応力を知って連続体の応力を求める場合は、例えば $\{\bar{\sigma}_x\}$ について連立方程式

$$[G]^T [G] \{\bar{\sigma}_x\} = [G]^T \{\sigma_x\} \quad (33)$$

を解く。この際、変換 $[G]$ は式(13)と(30)の比較からわかるように平均化操作を表すため、式(33)の係数マトリクス $[G]^T [G]$ は通常、特異となる。そこで求解の際は $[G]^T [G]$ の対角成分に適当な正数を加えて正則化する⁹⁾。

4. ナノスケール切削への適用

計算機実験に使用した原子系切削モデルを図3に示す。被削材は銅単結晶、工具はダイヤモンド剛体結晶とし、刃先丸みは考えていない。被削材のサイズを銅単結晶の格子定数を a とし図中に示す。被削材は斜線部を固定している。原子間ポテンシャルは、銅原子間に多体ポテンシャルであるEAM (Embedded-Atom-Method)⁹⁾ を、銅炭素原子間にモースポテンシャル¹⁾ を使った。切削はZ方向に周期境界条件を導入して2次元切削とし、工具の微小前進ごとに被削材原子の安定配列を計算する純静的手法によって行った。切削実験の結果を有限要素モデルのそれに変換する手続きを図4に示す。まず基準とする切削途中の状態に図4(a)のように有限要素メッシュをかぶせ、境界線に沿って切り出す。次に工具を所定の量だけ前進させて原子系の切削を進行させる。この時、既述の式(1), (16)を使って各節点の変位をその周囲の原子変位から計算し、図4(b)のように有限要素モデルを変形させる。各要素内のひずみは式(22)で、応力は原子応力をボロンの公式で求め、これを式(33)の右辺に代入して計算する。

得られた相当ひずみ増分の分布を図5(a), (b)に示す。図中には、増分計算に使った工具基準位置と増分前進量も示す。平

Fig. 4 Procedure for obtaining equivalent finite element deformation

Fig. 5 Effective incremental strain distribution

均化のパラメータは $\sigma = a$ としている。比較的切削初期の状態である図 5 (a) を見ると、色の濃い高ひずみ領域が工具すくい面上および工具刃先からかなり前方に延びていることがわかる。これらのひずみはいずれも主としてせん断によるものであり、すくい面上では工具面との摩擦によって、刃先前方では材料表層部が切削方向に圧縮されていることによって生じている。切りくずとしての材料の盛上がりがこの段階ではほとんど見られないのに、未切削表層部がこのような大きな圧縮変形を示すのは結晶先端が固定されているためと、ミクロ特有の表面張力の影響である。図 5 (b) は、これより切削が進行した状態での相当ひずみ増分を示す。この段階ではいわゆる一次せん断領域および工具すくい面上で高ひずみ領域が現れ、これはマク

Fig. 6 Maximum tensile/compressive stress distribution (upper) and maximum shear stress distribution (lower)

ロ切削のそれにほぼ対応している。一方、図 5 に対応する応力分布を図 6 (a), (b) に示す。ただし応力は増分ではなく、図 5 の工具前進位置での値である。平均化のパラメータは $\sigma = a$, $[G][G]$ の対角成分に加える値は 1.0 とした。また図 6 (a), (b) では、それぞれ上側に最大引張り/圧縮応力分布を、下側に最大せん断応力分布を濃淡表現により示している。図 6 (a) の上側の図を見ると、被削材自由表面に表面張力が働いていること、また工具前方の未切削部には強い圧縮応力が作用していることがわかる。一方、図 6 (a) 下側の図では、被削材自由面に沿って表面張力に起因した強いせん断応力が働いていること、また図 5 (a) でせん断ひずみが集中している部分に、わずかに応力の高い部分が認められることがわかる。これに対し図 6 (b) を見ると、上側の図では工具刃先付近から前方に向かって強い圧縮応力が働いているのは前と同様であるが、下側のせん断応力の分布では、工具刃先から逃げ面とすくい面に沿って高い値が現れているものの、図 5 (b) でせん断ひずみの集中が見られた一次せん断域ではマクロ切削のようなせん断応力の集中が見られない。またこの一次せん断域での応力値は 1~3 GPa 程度であり、これはマクロ切削でのせん断面せん断応力よりは高いが、銅結晶の理論せん断応力 5~6 GPa より低い。この事実、ナノスケール切削における切りくず生成が結晶面での単純すべりによらず、より複雑なメカニズムによってより

低い応力で行われていることを示す。またひずみの分布と応力の分布が対応していないのは、塑性ひずみすなわち原子配列の乱れによって材料定数そのものが不均一に変わるためであると言え、これは例えば一次せん断域で発熱が仮になくても材料が軟化し得ることを示唆している点で興味深い。以上よりナノスケール切削の力学はマクロ切削のそれと大きく異なること、さらにこのようなマイクロ特有の現象を調べるには、応力とひずみを各々独立に評価できる本研究の手法が不可欠であることがわかる。

5. 結 論

- (1) 平均化の概念を使い、原子系と連続体との力学量の変換法を提案した。この変換は両モデル間でひずみエネルギーを保存する。
- (2) 提案した手法に基づき、原子系から応力やひずみを算出する具体的な数値計算法を示した。
- (3) 原子モデルによるナノスケール切削の計算機実験結果に本手法を適用したところ、ひずみ分布はマクロ切削と大差ないが、応力分布はマクロのそれと大きく異なることが見いだされた。

謝 辞

本研究は(株)松浦機械製作所の全面的な支援を受け行われた。また研究を進める上で、北川浩阪大教授を始めとする日本機械学会分子動力学研究分科会の諸氏との討論が役立った。なお数値計算の一部は本学4年生(当時)河野朗君が行った。終わりに、本研究は一部、文部省科学研究費補助金(一般研究(C))の交付を受けたことを付記する。

【付録 A】

Irving & Kirkwood¹⁰⁾によれば、2体ポテンシャル ϕ の作用する原子系内の点 $\mathbf{r}_p$ で定義される応力テンソル $\bar{\sigma}(\mathbf{r}_p)$ は、 $\mathbf{R}$ を原子対を結ぶベクトル、 α をスカラー、 $\rho^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}+\mathbf{R})$ を原子対の片方が点 $\mathbf{r}$ に、他方が $\mathbf{r}+\mathbf{R}$ にいる2体確率密度関数として

$$\bar{\sigma}(\mathbf{r}_p) = \frac{1}{2} \int \frac{\mathbf{R}\mathbf{R}^T}{|\mathbf{R}|} \frac{d\phi(|\mathbf{R}|)}{d|\mathbf{R}|} \times \left[\int_0^1 \rho^{(2)}(\mathbf{r}_p - \alpha\mathbf{R}, \mathbf{r}_p - \alpha\mathbf{R} + \mathbf{R}) d\alpha \right] d\mathbf{R} \quad (\text{A-1})$$

で与えられる。彼らは明確に述べていないが、 $\mathbf{r}_p$ として原子間位置を考える場合、明らかに連続体の概念が原子系の上に重ねられてそれが可能になっており、この時の式(A-1)は連続体応力を与える。また式(A-1)右辺中の

$$\bar{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p + \mathbf{R}) = \int_0^1 \rho^{(2)}(\mathbf{r}_p - \alpha\mathbf{R}, \mathbf{r}_p - \alpha\mathbf{R} + \mathbf{R}) d\alpha \quad (\text{A-2})$$

は、積分演算によって $\rho^{(2)}$ の第1変数に関する確率を1にしたもの、すなわち“任意の原子1個を場所 $\mathbf{r}_p$ で捕らえ、この原子から見た相手原子の存在確率密度”を表す。一方、原子の応力は $\mathbf{r}_p$ を原子位置 $\mathbf{r}_q$ に一致させて最初から $\bar{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_q + \mathbf{R})$ として考え、これを式(A-1)に代入した

$$\sigma(\mathbf{r}_q) = \frac{1}{2} \int \frac{\mathbf{R}\mathbf{R}^T}{|\mathbf{R}|} \frac{d\phi(|\mathbf{R}|)}{d|\mathbf{R}|} \bar{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_q + \mathbf{R}) d\mathbf{R} \quad (\text{A-3})$$

とすればよい。これはボルンの公式の一般形にはかならない。次に式(A-1)と(A-3)の関係を導くために N 個の原子を含む系の配置空間(相空間の座標部分)を考え、その確率分布関

数を $f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ とする。この時、デルタ関数を $\delta(\mathbf{r})$ として

$$f_q(\mathbf{r}) = \int \delta(\mathbf{r}_q - \mathbf{r}) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \quad (\text{A-4})$$

は場所 $\mathbf{r}$ に原子 q がいる確率を表す。したがって

$$f_q^*(\mathbf{r}) = \frac{f_q(\mathbf{r})}{\sum_{q=1}^N f_q(\mathbf{r})} \quad (\text{A-5})$$

は“どれかの原子が場所 $\mathbf{r}$ にいるという条件下で、それが原子 q である確率”になる。そこで式(1)における重み関数が

$$w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = f_q^*(\mathbf{r}_p) \quad (\text{A-6})$$

であるとすれば、これは式(2)の条件を満たす。また式(A-1), (A-2), (A-6)を本文の式(13)~(15)の右辺に代入すれば

$$\begin{aligned} (\text{右辺}) &= \int f_q^*(\mathbf{r}_p) \frac{1}{2} \int \frac{\mathbf{R}\mathbf{R}^T}{|\mathbf{R}|} \frac{d\phi(|\mathbf{R}|)}{d|\mathbf{R}|} \bar{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p + \mathbf{R}) d\mathbf{R} d\mathbf{r}_p \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{\mathbf{R}\mathbf{R}^T}{|\mathbf{R}|} \frac{d\phi(|\mathbf{R}|)}{d|\mathbf{R}|} \\ &\quad \times \left[\int f_q^*(\mathbf{r}_p) \bar{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p + \mathbf{R}) d\mathbf{r}_p \right] d\mathbf{R} \quad (\text{A-7}) \end{aligned}$$

式(A-7)で、 $[\]$ 内は $f_q^*(\mathbf{r}_p)$ と $\bar{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_p + \mathbf{R})$ の既述の意味から明らかなように、原子 q から見た相手原子の存在確率密度 $\bar{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_q + \mathbf{R})$ になる。したがって式(A-7)は(A-3)に一致し、連続体応力と原子応力の関係式(13)~(15)が立証された。なお式(A-3)のボルンの公式で、原子系が結晶構造であれば $\bar{\rho}^{(2)}(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_q + \mathbf{R})$ は原子位置にピークを持つデルタ関数となり、良く知られた成分表示

$$\left. \begin{aligned} \sigma_x(\mathbf{r}_q) &= \frac{1}{2V_q} \sum_s \frac{d\phi(r_{qs})}{dr_{qs}} \frac{x_{qs}^2}{r_{qs}} \\ \sigma_y(\mathbf{r}_q) &= \frac{1}{2V_q} \sum_s \frac{d\phi(r_{qs})}{dr_{qs}} \frac{y_{qs}^2}{r_{qs}} \\ \tau_{xy}(\mathbf{r}_q) &= \frac{1}{2V_q} \sum_s \frac{d\phi(r_{qs})}{dr_{qs}} \frac{x_{qs}y_{qs}}{r_{qs}} \end{aligned} \right\} \quad (\text{A-8})$$

が得られる。ただし V_q は原子 q の占有体積、 $r_{qs} = |\mathbf{R}_{qs}|$ は原子 $q-s$ 間の距離、 x_{qs}, y_{qs} は r_{qs} の x, y 成分である。

【付録 B】

要素分割後の節点の位置ベクトルを $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k, \mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n$ などとする。任意の点 $\mathbf{r}_p$ の連続体変位 $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}_p)$ は、 $\mathbf{r}_p$ を含む三角形要素の節点変位 $\bar{\mathbf{u}}_i, \bar{\mathbf{u}}_j, \bar{\mathbf{u}}_k$ を形状関数 N_i, N_j, N_k により補間して

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}_p) = N_i(\mathbf{r}_p) \bar{\mathbf{u}}_i + N_j(\mathbf{r}_p) \bar{\mathbf{u}}_j + N_k(\mathbf{r}_p) \bar{\mathbf{u}}_k \quad (\text{B-1})$$

と表現される。これを式(1)を使って書けば

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) \mathbf{u}(\mathbf{r}_q) d\mathbf{r}_q &= \int_{\Omega} N_i(\mathbf{r}_p) w(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_q) \mathbf{u}(\mathbf{r}_q) d\mathbf{r}_q \\ &\quad + \int_{\Omega} N_j(\mathbf{r}_p) w(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_q) \mathbf{u}(\mathbf{r}_q) d\mathbf{r}_q \\ &\quad + \int_{\Omega} N_k(\mathbf{r}_p) w(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_q) \mathbf{u}(\mathbf{r}_q) d\mathbf{r}_q \quad (\text{B-2}) \end{aligned}$$

となるが、 $\mathbf{u}(\mathbf{r}_q)$ としては任意の分布が可能であるから

$$w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = N_i(\mathbf{r}_p) w(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_q) + N_j(\mathbf{r}_p) w(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_q) + N_k(\mathbf{r}_p) w(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_q) \quad (\text{B-3})$$

が成り立つ。ところで式(B-1)は、変位の基底関数 $H_m(\mathbf{r})$ による展開

$$\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{r}_p) = \sum_m \bar{\mathbf{u}}_m H_m(\mathbf{r}_p) \quad (\text{B-4})$$

の別表現であるから、式(B-3)もこれに対応させると

$$w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = \sum_m w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_q) H_m(\mathbf{r}_p) \quad (\text{B-5})$$

となる。更に式 (3), (B-3) より

$$\begin{aligned} w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) &= w(\mathbf{r}_q, \mathbf{r}_p) \\ &= N_i(\mathbf{r}_q)w(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_p) + N_j(\mathbf{r}_q)w(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_p) \\ &\quad + N_k(\mathbf{r}_q)w(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_p) \end{aligned}$$

も言えるから、 $\mathbf{r}_p \rightarrow \mathbf{r}_m$ とすれば

$$w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_q) = \sum_n w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n)H_n(\mathbf{r}_q) \quad (\text{B-6})$$

ただし $w(\mathbf{r}_n, \mathbf{r}_m) = w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n)$ を再び使った。そこで式 (B-6) を式 (B-5) に代入すれば、本文の式

$$w(\mathbf{r}_p, \mathbf{r}_q) = \sum_m \sum_n w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n)H_m(\mathbf{r}_p)H_n(\mathbf{r}_q) \quad (16)$$

を得る。重み係数 $w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n)$ に関する条件は、式 (16) で $\mathbf{r}_p \rightarrow \mathbf{r}_m$ とし、式 (2) より

$$\sum_n w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n)S_n = 1 \quad (\text{B-7})$$

式 (B-7) を変形して

$$w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_m) \sum_n \alpha_{mn} S_n = 1 \quad (\text{B-8})$$

とし、 $\alpha_{mn} = w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_n)/w(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_m)$ および S_n を式 (18) で与えれば、式 (17) を得る。ただし式 (17) では、有限要素近似されていない領域の存在も考慮した。

参 考 文 献

- 1) 稲村豊四郎, 鈴木裕幸, 武澤伸浩: 銅とダイヤモンドの原子配列モデルによる計算機内での切削実験, 精密工学会誌, **56**, 8 (1990) 1480.
- 2) S. Shimada, N. Ikawa, G. Ohmori, H. Tanaka and J. Uchikoshi: Molecular Dynamic Analysis as Compared with Experimental Results of Micromachining, Ann. CIRP, **41**, 1, (1992) 117.
- 3) W. G. Hoover et al.: Molecular Dynamics Modeling of Indentation and Cutting, Thrust Area Report FY 90, LLNL, (1991).
- 4) M. Mullins and M. A. Dokainish: Simulation of the (001) Plane Crack in α -Iron Employing a New Boundary Scheme, Phil. Mag., **A, 46**, 5, (1982) 771.
- 5) S. Kohlhoff, S. Schmauder and P. Gumbsch: A New Method for Coupled Elastic-Atomistic Modeling, in *Large Atomistic Simulation of Materials - Beyond Pair Potentials*, V. Vitek and D. J. Srolovitz eds, Plenum Press, New York and London, (1988) 411.
- 6) A. C. Eringen: On Differential Equations of Nonlocal Elasticity and Solutions of Screw Dislocation and Surface Waves, J. Appl. Phys., **54**, 9, (1983) 4703.
- 7) M. Born and K. Huang: Dynamical Theory of Crystal Lattices, Clarendon Press, Oxford, (1954) 129.
- 8) 岡本良夫: 逆問題とその解き方, オーム社 (1992).
- 9) M. S. Daw and M. I. Baskes: Embedded-Atom-Method: Derivation and Application to Impurities, Surface, and Other Defects in Metals, Phys. Rev., B, **29**, 12, (1984) 6443.
- 10) J. H. Irving, J. Kirkwood: The Statistical Mechanical Theory of Transport Processes, IV The Equations of Hydrodynamics, J. Chem. Phys., **18**, 6, (1950) 817.