

Title	極微小切削機構の基礎研究
Author(s)	田中, 宏明
Citation	大阪大学, 1993, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.11501/3065908">https://doi.org/10.11501/3065908</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

# 極微小切削機構の基礎研究

1992年12月

田中 宏明

# 極微小切削機構の基礎研究

平成4年11月18日

大阪大学大学院工学研究科

精密工学専攻

田中 宏明

# 目次

第 1 章 序 論 .....	1
第 2 章 極微小切削現象の解析手法 .....	4
2.1 緒 言 .....	4
2.2 連続体モデルによる解析 .....	5
2.2.1 Krystof による切削抵抗の理論 .....	5
2.2.2 切れ刃稜丸みを持つ二次元微小切削モデル .....	7
2.2.3 せん断力 .....	8
2.2.4 押し込み力 .....	10
2.2.5 工具・切りくず間の相互作用力 .....	12
2.2.6 切削抵抗 .....	12
2.2.7 切削エネルギー .....	14
2.2.8 表面エネルギー .....	17
2.2.9 切削温度 .....	19
2.3 分子静力学法による極微小切削シミュレーション .....	20
2.3.1 ポテンシャル関数 .....	22
2.3.2 要素間の剛性マトリックス .....	24
2.3.3 全体剛性マトリックスへの組み込み .....	26
2.3.4 計算手順 .....	27
2.3.5 分子静力学による計算機実験条件 .....	32
2.4 分子動力学法による極微小切削シミュレーション .....	32
2.4.1 運動方程式と数値積分 .....	33
2.4.2 Bookkeeping Method .....	34
2.4.3 原子間ポテンシャル .....	36
2.4.4 初期条件の設定 .....	37

2.4.5	初期モデルおよび境界条件の設定	39
2.4.6	分子動力学による計算機実験条件	40
2.4.7	1次元モデルによる弾性波の伝播	42
2.4.8	簡単な変形・破壊現象への応用	44
<b>第3章</b>	<b>極微小切削実験</b>	<b>45</b>
3.1	緒言	45
3.2	極微小切削実験	46
3.2.1	切削実験機	47
3.2.2	工具	50
3.2.3	被削材	52
3.2.4	切削条件	53
3.2.5	切りくずの観察	53
3.3	切りくずの観察例	55
3.4	実験装置の運動精度の検討	57
3.4.1	最小切り取り厚さの重要性	57
3.4.2	切り取り厚さの再現性	58
3.5	結言	61
<b>第4章</b>	<b>切りくず形態</b>	<b>62</b>
4.1	緒言	62
4.2	切りくず形態からみた極微小切削機構	62
4.3	極微小切削における特異な切りくず形態	68
4.4	結言	76
<b>第5章</b>	<b>計算機実験と切削実験との連続性</b>	<b>77</b>
5.1	緒言	77
5.2	切りくず形態の比較	77
5.3	切削抵抗の比較	78

5.4 結 言 .....	81
<b>第 6 章 切りくずおよび仕上げ面生成過程 .....</b>	<b>83</b>
6.1 緒 言 .....	83
6.2 切りくず生成過程 .....	83
6.3 仕上げ面の粗さと変質層深さ .....	88
6.4 結 言 .....	91
<b>第 7 章 最小切り取り厚さとその支配要因 .....</b>	<b>95</b>
7.1 緒 言 .....	95
7.2 切削実験による最小切り取り厚さの推定 .....	96
7.3 計算機実験による最小切り取り厚さの推定 .....	96
7.4 切れ刃稜丸み半径の影響 .....	101
7.5 被削材種の影響 .....	105
7.6 切削速度の影響 .....	114
7.7 バニシングと EEM .....	114
7.8 結 言 .....	121
<b>第 8 章 分子動力学による切削温度の解析 .....</b>	<b>122</b>
8.1 緒 言 .....	122
8.2 金属材料における熱伝導補正法の提案 .....	123
8.3 原子の運動エネルギーから等価温度への変換 .....	132
8.4 切削温度の解析 .....	135
8.5 結 言 .....	139
<b>第 9 章 総 括 .....</b>	<b>140</b>
<b>参考文献 .....</b>	<b>143</b>

# 第1章

## 序論

切削加工は各種の機器要素の機械加工法として最も古くから広く用いられている加工技術であるが、いわゆる精密機器要素の最終仕上げの手段としては従来は必ずしも一般的でなく、研削、ラッピング、ポリッシング等の砥粒加工の前加工として用いられるのが普通であった。しかし最近では、サブミクロンあるいはそれ以上の高い加工精度を実現する超精密切削加工技術が開発され、磁気ディスク、レーザ光や赤外光用の光学部品などの仕上げ加工においてはすでに実用化の域に達し、今や先端産業における基盤技術とも言える位置を占めるにいたっている。高精度工作機械と単結晶ダイヤモンド工具を用いた SPDT ( Single Point Diamond Turning ) と呼ばれるこの超精密切削加工技術は、さらに、さまざまな産業分野において積極的に利用され、ますます一般化される傾向を示している。SPDT においては、工具が実際に材料を削り取る厚さである切り取り厚さは、サブミクロンあるいはそれ以下のレベルにまで小さくなり、従来は高々10  $\mu\text{m}$  台であった切削加工精度が、10 nm 台に達し、さらに1 nm 台の加工精度が議論されるまでにいたっている [1][2][3]。

超精密切削加工において、このような高い加工精度の実現は、静圧軸受けや静圧スライドをはじめとする高精度機器要素の採用による工作機械の信頼性の向上と、鋭利でしかも高い幾何学的形状精度を持つ高信頼性超精密切削工具の開発に負うところが大きい。これらの基盤技術の進歩によって、ナノメートルレベルの小さい切り取り厚さでの安定した切削加工が実現でき、切れ刃近傍での変形・破壊の規模、すなわち加工単位をやはりナノメートルレベルにまで小さくすることが可能になっ

た。しかしながら、その一方では、従来の切削では切削現象をかなり大きな規模の変形・破壊として取り扱えば良かったために直接には問題にならなかった、加工精度を低下させる種々の要因が、加工単位の微小化にしたがって、相対的に顕著に現われてくる。例えば、安定してサブミクロンオーダの切りくずを排出するためには、当然、工作機械の運動精度および工具切れ刃の幾何学的形状精度はそれよりも高いことが必要となる。また、実際に SPDT を実行するに当たって大きな問題となっていながらその原因が明らかにされていない現象として、仕上げ面の性状が切削工具の個体差や取付角の微小な変化、被削材の特性によって大きく変化することが挙げられるが、これらも切削工具あるいは被削材に起因する何らかの精度要因が切り取り厚さが小さくなることによって顕在化した結果であると考えられる。したがって、このような微小切削機構の解明にあたっては、工具切れ刃近傍の微視的な変形・破壊にもとづく仕上げ面の生成過程を対象とした、従来とは異なったアプローチが必要となる。このような観点からの切削機構を、従来のマクロな切削機構と区別して、極微小切削機構と呼ぶことにする。

さて、極微小切削機構の解明に当たっては、従来の切削理論においては極めて影響が小さいため無視されてきた、工具の切れ刃稜丸みや工具・被削材間の相互作用力などの影響を考慮する必要がある。また、切り取り厚さがナノメートルレベルにまで小さくなると、削り取られる被削材の厚さはたかだか数原子層になり、変形領域に存在する原子数も数百から数千のオーダとなる。このような極微小領域での材料挙動を議論するには、例えば格子振動などのような、構成原子の微視的運動の影響を考慮に入れる必要がある。しかし、従来の連続体力学にもとづく解析では、非常に多くの構成原子挙動の長時間平均値として観察される巨視的な挙動を確定的に取り扱っており、微小な変形挙動の解析に用いるには問題があると考えられる。

本研究においては、微小切削に特有の加工現象を解明し、ひいては微小切削理論を確立するための基礎研究として、特異な切りくず形態の生成過程や工具・切りくず間の相互作用力の差による最小切り取り厚さの違いなど、極微小切削特有の加工現象を解明することを目的としている。本章に続く第2章においては、極微小切削現象の解析方法の検討を行っている。まず、従来の切削理論、連続体力学にもとづ



く切削抵抗、切削エネルギー、切削温度などについての解析では、工具・切りくず間の摩擦係数や工具切れ刃近傍での塑性流動応力、また、切りくず分離点などを解析的に求めることが困難であることを示した。次に、それらの問題を解決するために、原子モデルを用いた分子静力学および分子動力学法を用いた計算機実験にもとづく、極微小切削機構の解析法を提案している。第3章においては、ナノメートルレベルでの切り取り厚さにおける、極微小切削実験を行うための実験装置および実験方法について述べている。切削加工における幾何学的精度の到達限界を直接支配すると考えられる、切り取り厚さの分解能および最小切り取り厚さの重要性を議論し、これらの要因を直接支配すると考えられる極微小切削実験装置の運動精度を詳細に検討する。その結果、これらの装置を用いて、ナノメートルレベルの極微小切削が可能であることを示している。第4章においては、ナノメートルレベルの切り取り厚さにおける細かく折り畳まれた特異な切りくずの形態より、連続体モデルを用いて、工具・被削材間の相互作用力を求めている。第5章においては、計算機実験によって求められた切削抵抗についての解析結果を、より大きい切り取り厚さでの切削実験結果と比較し、その連続性から本計算機実験の解析手法が妥当であることを確かめた。第6章においては、分子動力学を用いて切削現象における転位の発生、移動および転位反応にもとづく切りくずおよび仕上げ面の生成過程を詳細に解析し、転位論の立場から検討した。また、切りくず生成過程および仕上げ面のあらさや変質層深さに対する被削材の結晶方位や切削条件の影響も調べた。第7章においては、計算機実験にもとづいて、最小切り取り厚さに対する、被削材種、工具切れ刃稜丸み半径、工具・被削材間の相互作用力および切削速度の影響について解析を行った。第8章においては、従来の分子動力学法では、誤差が大きく困難であった金属材料の熱伝導および温度分布の解析が可能となる補正方法を提案し、極微小切削における切削温度の解析を行なっている。最後に本研究を総括した。

## 第2章

# 極微小切削現象の解析手法

### 2.1 緒言

加工機構の解明には工具切れ刃近傍での被削材の変形挙動を観察または解析することが不可欠のアプローチである。しかし、極微小切削においては切り取り厚さがサブミクロンまたはナノメートルレベルにまで小さくなるため、切削抵抗、切削エネルギー、切削温度などは通常の切削と比較して格段に小さくなり、それらを直接測定するのは、現在の技術的限界を越え、極めて困難である。また、工具切れ刃稜丸みや工具・被削材間の相互作用力の影響などのような切り取り厚さの減少にともなって顕在化する種々の要因を考慮する必要がある。したがって、切削力や切削温度などのマクロな測定値をよりどころにしている従来の連続体力学にもとづく解析手法をそのまま適用できないことがある。

このような背景のもとに、本章では、従来の連続体力学にもとづく手法を用いて極微小切削現象を解析することを試み、さらに、新しい手法として原子モデルを用いた一種の計算機シミュレーションを提案している。まず、被削材を連続体として取り扱い、2次元微小切削モデルを用いた切削力、切削エネルギー、切削温度などの解析手法を検討した。その結果、工具切れ刃稜丸みを考慮すると、切れ刃稜上での切りくず分離点の位置が決まらなければ厳密な解析ができないこと、また、工具・被削材間の相互作用力を巨視的な確定値である摩擦係数として取り扱わざるを得ないために、切れ刃近傍の微視的な挙動を解析できないなどの欠点があることを明らかにした。つづいて連続体モデルにもとづく解析のこれらの制限を受けない解析手

法として、原子モデルを用いた2通りの切削シミュレーションを提案した。ひとつは分子力学あるいは分子静力学を応用したもので、系を構成する原子を、常に、相互に作用する力の平衡位置に変位させてゆく手法である。もうひとつは分子動力学を応用したもので、系を構成する個々の原子の運動方程式を解き、微小時間ステップ毎のそれぞれの原子の位置と速度を順次求めて行き、個々の原子の挙動を追跡する手法である。これらの原子モデルを用いた手法により、工具切れ刃近傍の被削材原子の微小挙動を解析する有力な手段を得ることができた。

## 2.2 連続体モデルによる解析

### 2.2.1 Krystof による切削抵抗の理論

Krystof は、図 2.1 に示すように、被削材が切れ刃前方の単一のせん断面で次々にせん断変形を受けて切りくずを生成する単一せん断面モデルを考えた。せん断面は最大せん断応力の働く方向に生ずるとする最大せん断応力説の立場をとり、流れ型切りくずを生成して切削が行われるとき、せん断面内ではそのせん断応力は各場所において材料の臨界せん断強さ  $\tau$  の値を取るとした。[5]

一般に一軸圧縮応力によって材料がせん断変形を生じるときには、せん断の生ずる面と圧縮応力とのなす角は  $\pi/4$  であって、そのときの圧縮応力  $\sigma$  とせん断破壊面上のせん断応力(このときはせん断強さ)  $\tau$  との間には

$$\sigma = 2\tau \quad (2.1)$$

の関係が存在する。このモデルにもとづけば、図 2.1 に示すように切削力の合力  $F_R$  とせん断面とのなす角は  $\pi/4$  であって、それによる応力の間には (2.1) 式の関係が成立する。

一方、切削面積を  $A_0$ 、せん断面の面積を  $A_s$  とすれば

$$A_0 = t_n b \quad (2.2)$$

$$A_s = \frac{A_0}{\sin \phi} \quad (2.3)$$

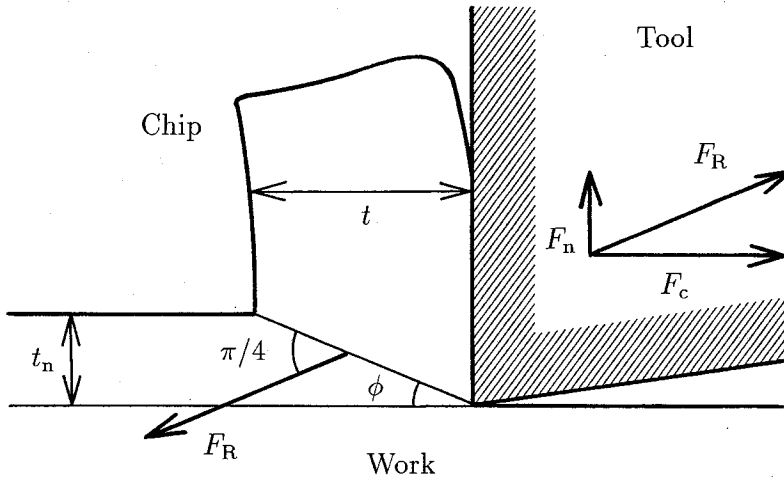


図 2.1 Krystof による二次元切削モデル

$$\sigma = \frac{F_R}{A_s/\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}F_R \sin \phi}{A_0} \quad (2.4)$$

の関係があるので、(2.1)、(2.4) 式より

$$F_R = \frac{\sqrt{2}\tau A_0}{\sin \phi} \quad (2.5)$$

また

$$\beta + \phi - \alpha = \frac{\pi}{4} \quad (2.6)$$

であるので、これらの関係を利用すればつぎの関係が得られる。

$$F_c = F_R \cos(\beta - \alpha) \quad (2.7)$$

$$= \tau A_0(1 + \cot \phi) \quad (2.8)$$

$$F_n = F_R \sin(\beta - \alpha) \quad (2.9)$$

$$= \tau A_0(\cot \phi - 1) \quad (2.10)$$

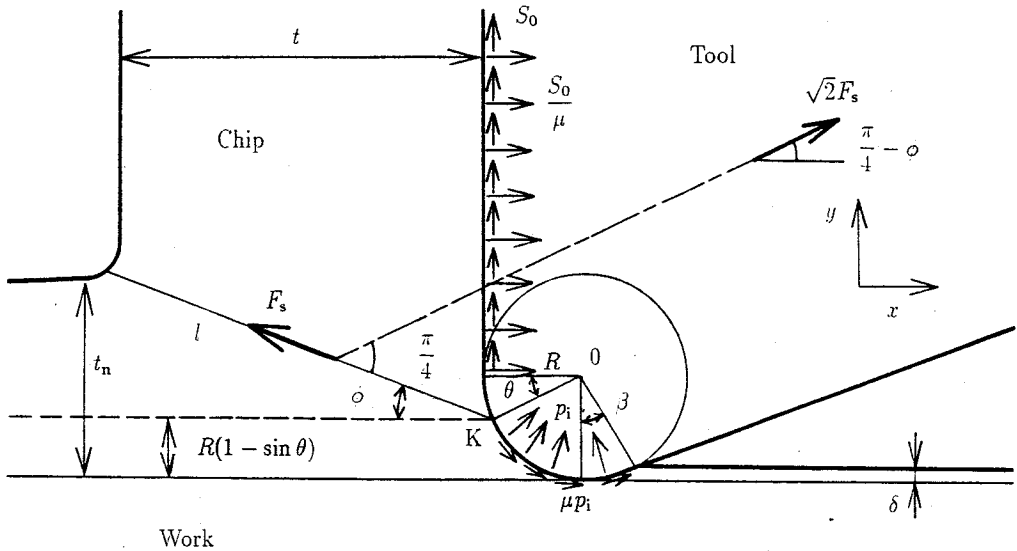


図 2.2 切れ刃稜丸みを持つ二次元微小切削モデル

この式を用いれば工作物のせん断強さ  $\tau$ 、切削面積  $A_0$ 、せん断角  $\phi$  の大きさより切削力を計算することができる。

### 2.2.2 切れ刃稜丸みを持つ二次元微小切削モデル

切り取り厚さが小さくなると切れ刃稜丸みが無視できなくなる。そこで図 2.2 に示すように切れ刃稜丸みを持つすくい角  $\theta$  の工具による 2 次元切削モデルを考える。工具切れ刃稜丸み部分上の水平方向からの角度が  $\theta$  の位置に切りくず分離点 K があると仮定する。すなわち切れ刃稜前方に K から引いた破線より上の被削材は切りくずとして排出され、破線より下の被削材は工具により押し込まれ仕上面を生成するとする。また、このモデルでは単一せん断面を仮定する。解析に当たっては被削材の変形・破壊現象に関与する力を次の 3 種類に分類して解析する。

1. せん断面上のせん断力
2. 押し込み力
3. 工具・切りくず間の相互作用力

図 2.2 で、

- $t_n$  : 公称切り取り厚さ  
 $t$  : 切りくずの厚さ  
 $b$  : 切りくずの幅  
 $a$  : 工具・切りくず接触長さ  
 $R$  : 工具切れ刃稜丸み半径  
 $\theta$  : 切りくず分離点の水平方向からの角度  
 $\phi$  : せん断角  
 $l$  : せん断面の長さ  
 $\tau$  : 理想せん断応力  
 $F_s$  : せん断面上に作用するせん断力  
 $P_i$  : 被削材押し込み時に作用する内圧  
 $S_0$  : 工具・切りくず間の単位面積当たりの相互作用力  
 $\mu$  : 工具・被削材間の動摩擦係数  
 $\delta$  : 被削材の弾性回復量  
 とする。

### 2.2.3 せん断力

このモデルでは工具切れ刃丸みを考慮しているため、せん断角  $\phi$  の定義は従来の切削理論と異なり、図 2.2 より幾何学的に (2.11) 式のように定義する。

$$\tan \phi = \frac{t_n - R(1 - \sin \theta)}{t} \quad (2.11)$$

またせん断面の長さ  $l$  も、せん断角  $\phi$  を用いて図 2.2 より幾何学的に (2.12) 式のように定義する。

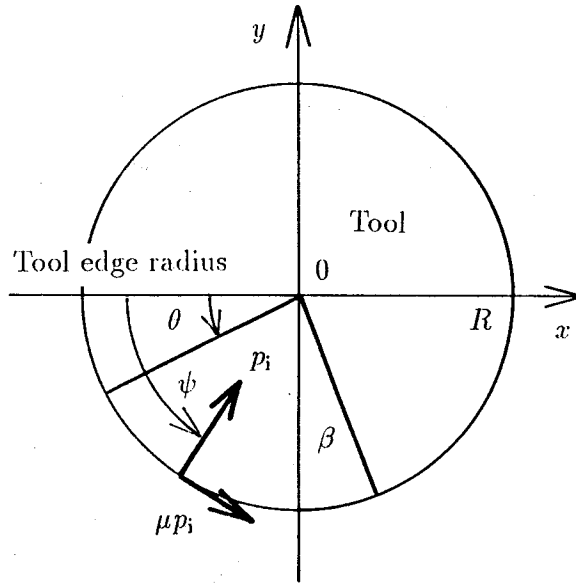


図 2.3 切れ刃稜上の押込み力解析モデル

$$l = \frac{t_n - R(1 - \sin \theta)}{\sin \phi} \tag{2.12}$$

これから、

(せん断面の面積) = (せん断面の長さ) × (切りくずの幅)

より、せん断面上に作用するせん断力を  $F_s$  とすると、

$$F_s = \tau lb \tag{2.13}$$

となる。このせん断面上のせん断力が最大せん断力となるように工具から力を受けると考えると、工具に働くせん断に要する力は図 2.2 のようにせん断面から  $\pi/4$  の方向に作用し、力の大きさは  $\sqrt{2}F_s$  となる。このせん断力の  $x$  方向と  $y$  方向をそれぞれ、 $F_x$ 、 $F_y$  とすると、

$$F_{x1} = \sqrt{2}\tau lb \cos\left(\frac{\pi}{4} - \phi\right) \tag{2.14}$$

$$F_{y1} = \sqrt{2}\tau lb \sin\left(\frac{\pi}{4} - \phi\right) \tag{2.15}$$

となる。

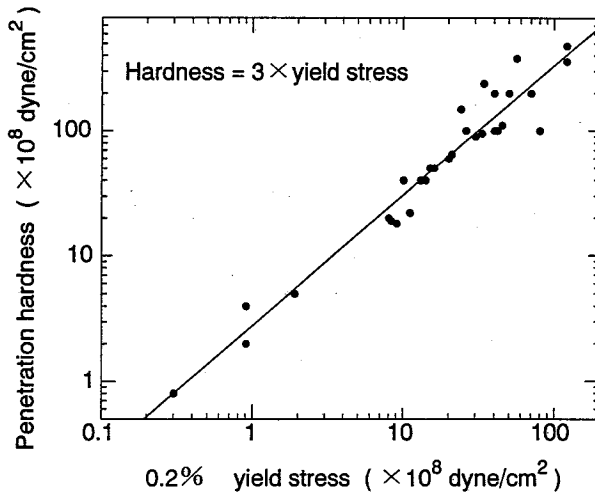


図 2.4 金属材料における微小ビッカース硬度と単軸引っ張り降伏応力

2.2.4 押し込み力

工具切れ刃通過後の被削材の弾性回復量  $\delta$  を、押し込み量  $R(1 - \sin \theta)$  の 10 分の 1 とした。この仮定は後述の原子モデルの解析結果を考慮したものである。弾性回復量を  $\delta$  とし、図 2.3 に示すように角度  $\beta$  をとると、幾何学的に、

$$\delta = R(1 - \cos \beta) \tag{2.16}$$

$$\delta = \frac{R(1 - \sin \beta)}{10} \tag{2.17}$$

となる。

これらより、 $\delta$  を消去して、 $\beta$  を求めると、

$$\cos \beta = \frac{9 + \sin \theta}{10} \tag{2.18}$$

となる。いま、切れ刃稜上の内圧  $p_i$  をほぼ被削材の塑性降伏圧力  $p_m$  に等しいとする。

$$p_i = p_m \tag{2.19}$$



また、微小ビッカース硬度を  $H_v$ 、単軸引っ張り降伏応力を  $\sigma_r$  とすると、 $\alpha$  を定数として、図 2.4 に示すように、

$$p_m = H_v = \alpha \sigma_r \quad (2.20)$$

のような関係がある。一般に材料力学にもとづけば

$$\sigma_r = 2\tau \quad (2.21)$$

であるので、

$$p_i = 2\alpha\tau \quad (2.22)$$

となる。また図 2.4 に示すように、多くの金属材料では  $\alpha = 3$  [6] であるので。

$$p_i = 6\tau \quad (2.23)$$

となる。

このモデルでは図 2.3 に示すように角度  $\psi$ 、

$$0 \leq \psi \leq \beta + \frac{\pi}{2} \quad (2.24)$$

において切れ刃稜上で内圧  $p_i$  を受け、接線方向に摩擦力  $\mu p_i$  を受けるとする。内圧が切れ刃稜全体に作用していることから、図 2.3 より計算される押込み力は  $x$  方向と  $y$  方向をそれぞれ  $F_{x2}$ 、 $F_{y2}$  とすると次式のようなになる。

$$\begin{aligned} F_{x2} &= \int_0^{\beta + \frac{\pi}{2}} Rbp_i(\cos \psi + \mu \sin \psi) d\psi \\ &= 6\tau Rb\{-\sin \theta + \cos \beta + \mu(\cos \theta + \sin \beta)\} \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} F_{y2} &= \int_0^{\beta + \frac{\pi}{2}} Rbp_i(\sin \psi - \mu \cos \psi) d\psi \\ &= 6\tau Rb\{\cos \theta + \sin \beta + \mu(\sin \theta - \cos \beta)\} \end{aligned} \quad (2.26)$$

### 2.2.5 工具・切りくず間の相互作用力

すくい面上の工具・切りくず間に作用する単位体積当たりの接線力を  $S_0$  とすると。 $y$  方向に働く工具・被削材間の作用力は

(接触面積) = (切りくずの幅  $b$ )  $\times$  (工具・切りくず接触長さ  $a$ )  
より次式のようになる。

$$F_{y3} = S_0 ab \quad (2.27)$$

$x$  方向に働く工具・被削材間の作用力は、工具・被削材間の動摩擦係数  $\mu$  を用いて、

$$F_{x3} = \frac{S_0 ab}{\mu} \quad (2.28)$$

となる。

### 2.2.6 切削抵抗

切削抵抗は、せん断力、押し込み力、工具・切りくず間の相互作用力の合力として求めることができ、主分力  $F_x$ 、背分力  $F_y$  はそれぞれ次式のように表される。

$$F_x = F_{x1} + F_{x2} + F_{x3} \quad (2.29)$$

$$F_y = F_{y1} + F_{y2} + F_{y3} \quad (2.30)$$

ここで述べた 2 次元切削モデルを用いると、実験によって求められた切りくず厚さ、幅、および工具・切りくず接触長さからせん断角、単位切れ刃当たりの主分力、背分力、切削抵抗を求めることができる。今、一例として、後述する切削実験 A で得られた実測値を用いて解析を行ってみる。表 2.1 は切削実験で得られた実測値をまとめたものである。せん断応力  $\tau$  は極微小切削であることを考慮して、銅の理想せん断強さ [26]  $\tau = G/2\pi = 7.69$  GPa、を用いた。ここで  $G$  は銅多結晶のせん断弾性係数で  $4.83 \times 10^{10}$  Pa [27] とした。工具・被削材間の相互作用力  $S_0$  および摩擦係数  $\mu$  には、第 4 章での切りくずの折り畳み現象の解析から求められた値であ

表 2.1 極微小切削実験 A による切りくず観察結果

$t_n$ (nm)	107	32.2	10.7	3.22	1.07
$t$ (nm)	252	70.9	47.1	27.7	20.3
$b$ ( $\mu\text{m}$ )	12.6	12.0	11.8	13.0	12.5
$a$ ( $\mu\text{m}$ )	14	0.90	0.73	0.48	0.38

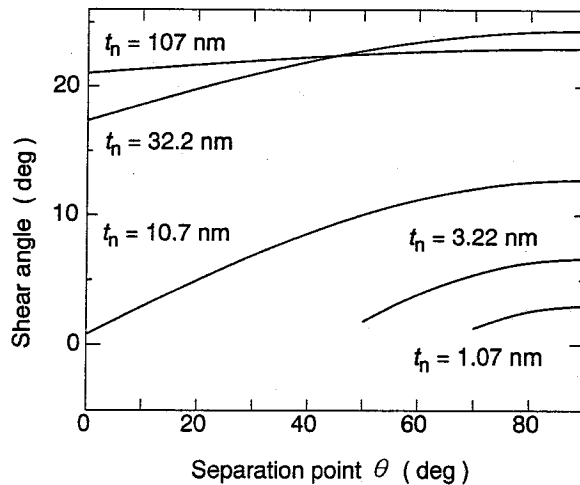


図 2.5 公称切り取り厚さに対するせん断角

る、 $S_0 = 6.8 \times 10^7$  ( $\text{N}/\text{m}^2$ ) および  $\mu = 0.18$  を用いた。工具切れ刃稜丸み半径は、SEM 写真から推測し、 $R = 10$  nm とした。図 2.5 に切りくず分離点  $\theta$  の関数とし、(2.11) 式に従って計算したせん断角を、図 2.6、図 2.7 に (2.29) 式および (2.30) 式に従って計算した単位切れ刃当たりの主分力、背分力をそれぞれ示す。

図 2.5 より公称切り取り厚さが小さくなるほど、せん断角が小さくなるのが分かる。また公称切り取り厚さが切れ刃稜丸み半径の 10 倍程度になると、切れ刃稜丸みの影響は小さくなるのが分かる。この解析結果は、切削抵抗の実測値 [7] と良い一致を示す。この結果は、極微小切削においては、単一せん断面モデルを仮定すれば、理想せん断応力のもとで被削材の変形・破壊が起きていることを示唆している。

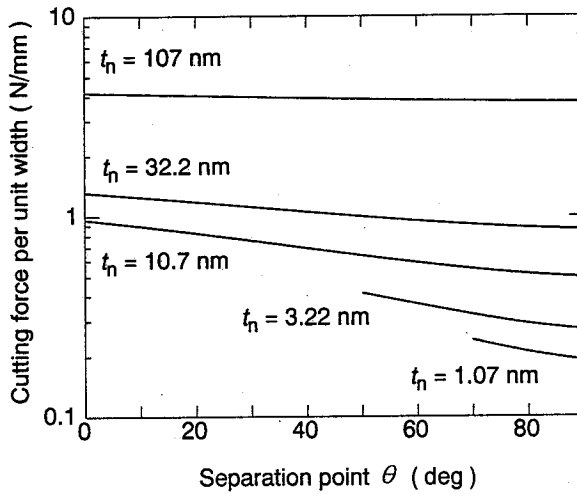


図 2.6 単位切れ刃当たりの主分力

2.2.7 切削エネルギー

切削エネルギーに関しても切削抵抗と同様にして 3 種類に分けて解析し、工具を単位長さ移動させた時の

1. せん断面上のせん断に要するエネルギー
2. 押し込み力に要するエネルギー
3. 工具・切りくず間の相互作用に要するエネルギー

を求める。

せん断に要するエネルギー  $W_1$  は (2.14) 式から、 $F_{x1} \times (\text{単位長さ})$  より、

$$W_1 = \sqrt{2} \tau l b \cos\left(\frac{\pi}{4} - \phi\right) \tag{2.31}$$

となる。

次に、押し込みに要するエネルギー  $W_2$  は、図 2.8 に示すように工具が  $dx$  進むと被削材は  $dx / \tan \psi$  押し込まれ、内圧  $p_i$  と押し込まれる方向とのなす角度は  $(\frac{\pi}{2} - \psi)$  である。

これらより工具が単位長さ移動するのに要するエネルギーは、

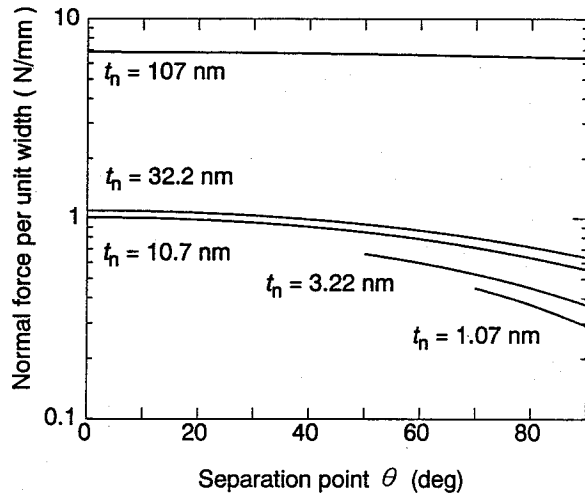


図 2.7 単位切れ刃当たりの背分力

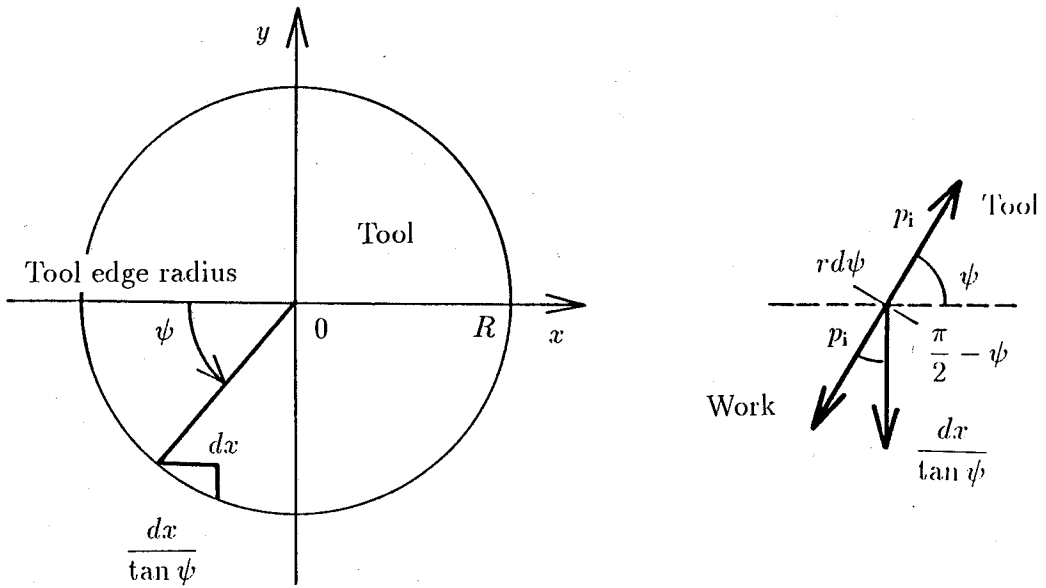


図 2.8 切れ刃稜上の押込みエネルギー解析モデル

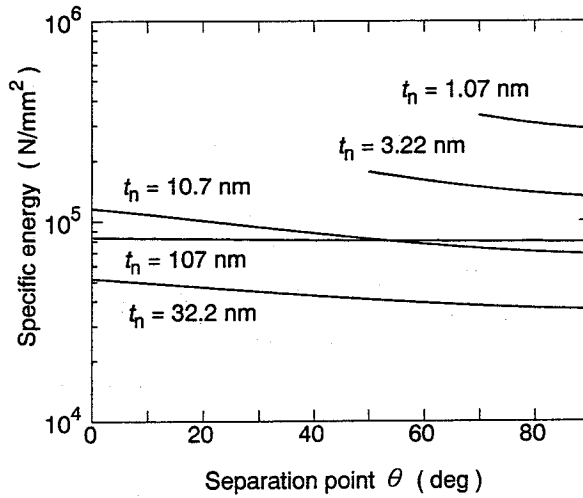


図 2.9 単位体積当たりの切削エネルギー

$$\int_0^1 \int_{\theta}^{\frac{\pi}{2}} \frac{p_i b R \cos\left(\frac{\pi}{2} - \psi\right)}{\tan \psi} d\psi dx \quad (2.32)$$

となる。押し込み時の摩擦に要するエネルギーは、単位面積当たり接線方向に  $\mu p_i$  が働いており、この力が働く面積は  $bR\left(\frac{\pi}{2} - \theta + \beta\right)$  であるから、工具が単位長さ移動するのに要するエネルギーは

$$\mu p_i b R \left(\frac{\pi}{2} - \theta + \beta\right) \quad (2.33)$$

となる。従って押し込みに要する全エネルギー、 $W_2$  は (2.32)、(2.33) 式をたし合わせて整理すると、

$$W_2 = b p_i R \left\{ (1 - \sin \theta) + \mu \left(\frac{\pi}{2} - \theta + \beta\right) \right\} \quad (2.34)$$

となる。

最後に、すくい面上に働く工具・被削材間の相互作用力に要するエネルギー  $W_3$  は、工具が単位長さ移動するとすくい面上の切りくずは  $\tan \phi$  だけすくい面上を移動するので、

$$W_3 = S_0 a b \left( \tan \phi + \frac{1}{\mu} \right) \quad (2.35)$$

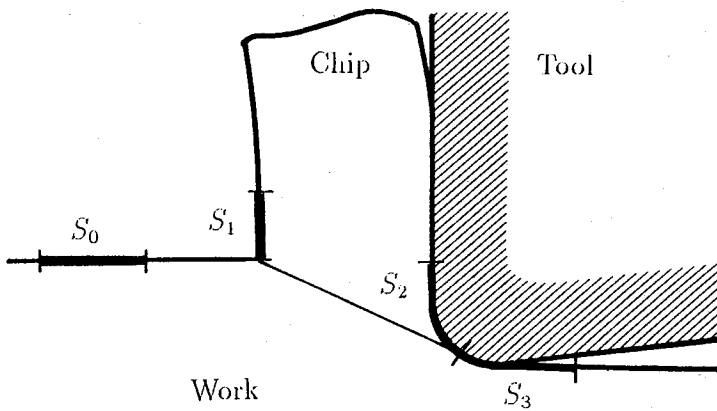


図 2.10 表面エネルギー解析モデル

となる。

これらの解析結果に、前出表 2.1 の切削実験の結果を適用したものが図 2.9 である。図 2.9 より、切り取り厚さが小さくなるほど、単位体積当たりの切削エネルギーが大きくなると言える。これは切り取り厚さが小さくなるほど、工具切れ刃の周囲に及ぼす変形・破壊の割合が相対的に大きくなり、切りくずとして排出するために費やされるエネルギーの割合が小さくなるためと説明できる。

### 2.2.8 表面エネルギー

2.2.7 小節で求めた切削エネルギーがどのような被削材の変形・破壊現象に消費されたかを知るため、表面エネルギーに変化する割合を求めた。図 2.10 に、切削によって生成される新生表面を示す。 $S_0$ を切削前の表面とすると、切削により  $S_1$ 、 $S_2$ 、 $S_3$  の表面が生じる。図 2.10 より幾何学的に

$$S_0 = S_3 \quad (2.36)$$

$$S_1 = S_2 = S_0 \tan \theta \quad (2.37)$$

である。また、単位体積当たりの切削を考えて、

$$t_n S_0 = 1 \quad (2.38)$$

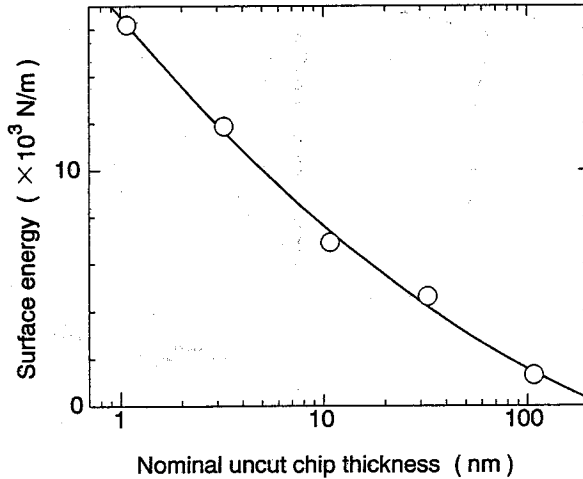


図 2.11 切削により増加した表面エネルギー

となる。従って切削により増加した表面エネルギー  $W_s$  は、

$$\begin{aligned}
 W_s &= (S_1 + S_2)G \\
 &= 2S_0G \tan \theta \\
 &= \frac{2G \tan \theta}{t_n}
 \end{aligned}
 \tag{2.39}$$

と表せる。ここで  $G$  は銅の表面自由エネルギーで、

$$G = 1.65 \times 10^{-12} (\text{J}/\mu\text{m}^2)
 \tag{2.40}$$

である。図 2.11 に切削実験 A の結果を (2.40) 式に適用して求めた、切削によって増加した表面エネルギーを示す。図 2.9 に示す切削エネルギーと切削により増加した表面エネルギーを比較すると、切削エネルギーの約 5% 程度が表面エネルギーに費やされている。従って、切削エネルギーの約 95% は被削材の塑性変形による歪エネルギーと切削によって発生する熱エネルギーに費やされると考えられる。

次に、切削現象を被削材原子同士の結合を切るものと考えて、単位体積当たりの切削エネルギーと単位体積当たりの原子の結合を切るエネルギーとを比較する。銅を室温の固体状態から融点の液体状態まで融解するのに要する熱量を計算すると



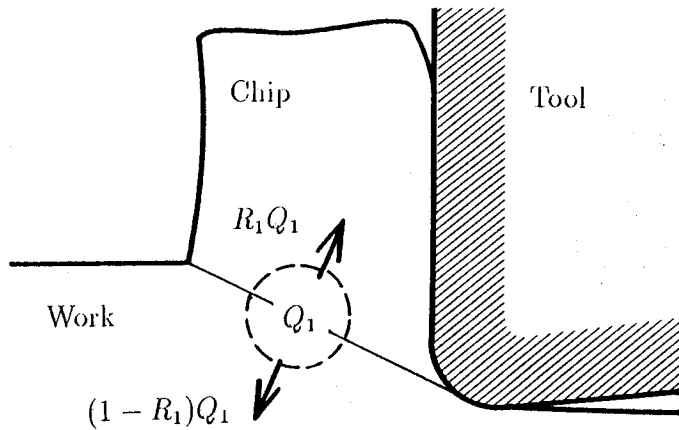


図 2.12 切削熱源と熱の流れ

$5.64 \times 10^{-9} \text{ (J}/\mu\text{m}^3)$  となる。この融解エネルギーと切削エネルギーを比較すると、図 2.9 より銅の単位体積当たりを切削するのに要するエネルギーは、融解エネルギーの約 10 - 80 倍になることが分かる。このことから極微小切削はエネルギーの点では非常に効率が悪く、切りくずの排出以外に多量のエネルギーが主に工具切れ刃周囲の被削材の歪エネルギーに費やされている。したがって、極微小切削によって生じる加工変質層は排出する切りくずの大きさと比較してかなり大きいと考えられる。

### 2.2.9 切削温度

連続体モデルにもとづく極微小切削における切削温度の解析手法として Loewen と Shaw によって提案された手法 [5][8] を用いた。本モデルによれば、図 2.12 に示すように、せん断面における発熱量  $Q_1$  (単位面積、単位時間当たり  $q_1$ ) の一部が  $R_1$  の割合で切りくずへ、残りの  $(1 - R_1)$  は工作物に伝導される。ここで、 $Q_1$  はせん断仕事とすくい面上の摩擦仕事の全てが熱に変換されると仮定する。熱の分配割合  $R_1$  は、せん断面を境にして切りくず側と工作物側の温度分布が連続になるように、切りくずになされた仕事量から求められる切りくず平均温度上昇と、工作物上を移動する熱源 (せん断面) の平均温度が等しいとして求められる。

切りくずせん断仕事のうち  $R_1$  が加熱に費やされるので、周囲温度  $T_0$ 、切りくず

単位体積当たりのせん断仕事を  $u_s$  とすれば、せん断面の平均温度  $T_s$  は次式で与えられる。

$$T_s = T_0 + \frac{R_1 u_s}{\rho_1 c_1} \quad (2.41)$$

$$R_1 = \frac{1}{1 + 1.328 \sqrt{\frac{K_1 \gamma}{V t_n}}} \quad (2.42)$$

$$u_s = \frac{F_s V_s}{V b t_n} \quad (2.43)$$

$$F_s = \tau b l \quad (2.44)$$

$$K_1 = \frac{k_1}{\rho_1 c_1} \quad (2.45)$$

$$\gamma = \cot \phi + \tan \phi \quad (2.46)$$

$F_s$  : せん断面上のせん断力

$V_s$  : せん断面上の切りくずのすべり速度

$V$  : 切削速度

$b$  : 切りくず幅

$t_n$  : 切込み

$c_1$  : 被削材の比熱

$\rho_1$  : 被削材の密度

$K_1$  : 被削材の温度伝導率

$k_1$  : 被削材の熱伝導率

$\gamma$  : 切りくずのせん断歪

$\phi$  : せん断角

### 2.3 分子静力学法による極微小切削シミュレーション

極微小切削において公称切り取り厚さがナノメートルレベルにまで小さくなると、切れ刃近傍での微視的な変形・破壊現象を直接観察するのは現在の技術の限界を超

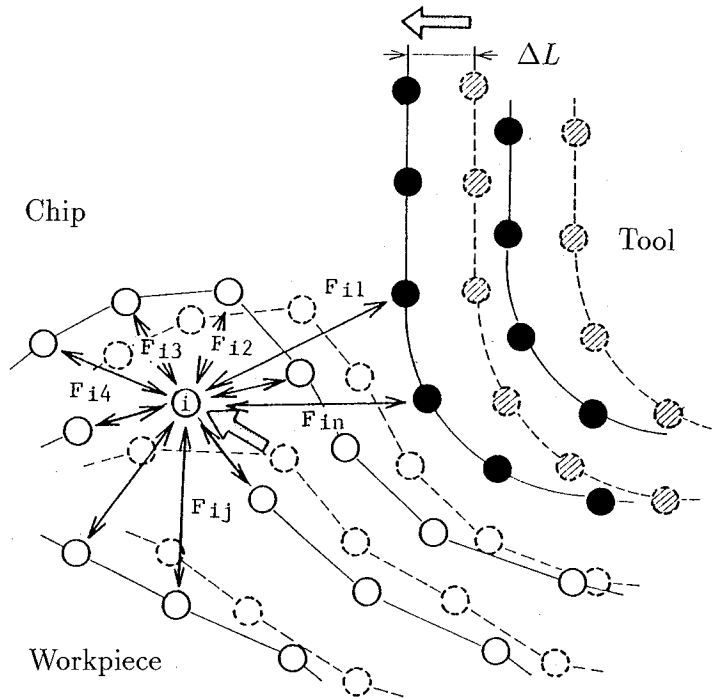


図 2.13 分子静力学による解析手法

え、極めて困難である。また、被削材の変形領域は非常に小さくなり、切り取り厚さがたかだか数原子層、変形領域に存在する原子数は数百から数千のオーダーになる。このような極微小切削領域での材料挙動を解析するに当たって、はたして材料を連続体として取り扱えるのかという問題が生じる。また、前節で述べたように、被削材を連続体として取り扱うと、工具・切りくず間の相互作用力、切れ刃近傍での塑性流動応力および切りくず分離点を理論的に求めることができないという問題が生じる。そこで、稲村らが報告している [4] 原子モデルを用いた二次元微小切削のシミュレーションを行ない、切れ刃近傍での被削材の微視的な変形・破壊挙動の解析を行った。

本手法では、まず、解析する系を原子の集合体としてモデル化し、それぞれの原子は他のすべての原子との間には何らかの原子間ポテンシャルから導かれる原子間力が作用しているとする。切削の進行にともなって工具が微小距離  $\Delta L$  だけ前進す

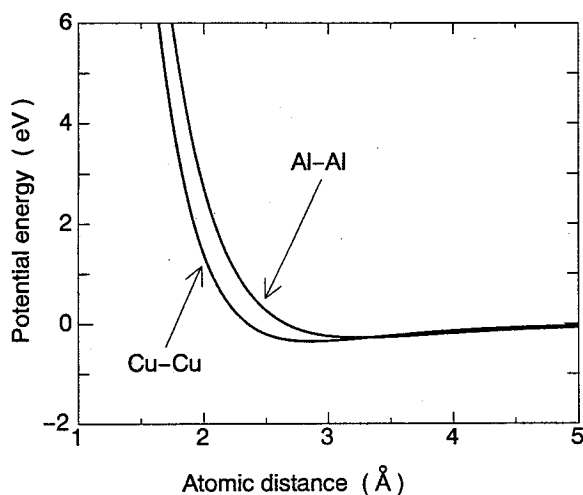


図 2.14 被削材原子間のポテンシャル

ると、個々の原子間の距離が変化し、原子間力も変化する。この時、図 2.13に示すように、全ての原子を、それぞれの原子に作用する原子間力の平衡位置に準静的に移動させる。このステップを順次繰り返すことによって切削現象の解析が原子レベルで可能となる。ここではこの解析手法を分子静力学法 (Molecular statics, MS) と呼ぶことにする。この手法によって、従来手法では得られなかった微小な切れ刃稜丸みを持つ切れ刃近傍での応力分布や、工具・被削材間の相互作用力の差による微視的変形・破壊現象への影響を知る手段を得ることができた。

### 2.3.1 ポテンシャル関数

解析に用いたモデル中の各原子間ポテンシャルには原子間距離  $r_{ij}$  によって2原子間に引力または斥力を発生する2体間ポテンシャルであるモースポテンシャルを採用した。式中の定数  $D$ 、 $a$ 、 $r_0$  はそれぞれ結晶の凝集エネルギー、体積弾性率、平衡原子間距離に相当する値である。

$$\phi(r_{ij}) = D[\exp\{-2a(r_{ij} - r_0)\} - 2a \exp\{-a(r_{ij} - r_0)\}] \quad (2.47)$$

銅原子間のポテンシャル関数のパラメータは凝集エネルギー、体積弾性率、平衡原子間距離などの実測値をもとにした文献値 [9] を採用した。工具・被削材間のポ

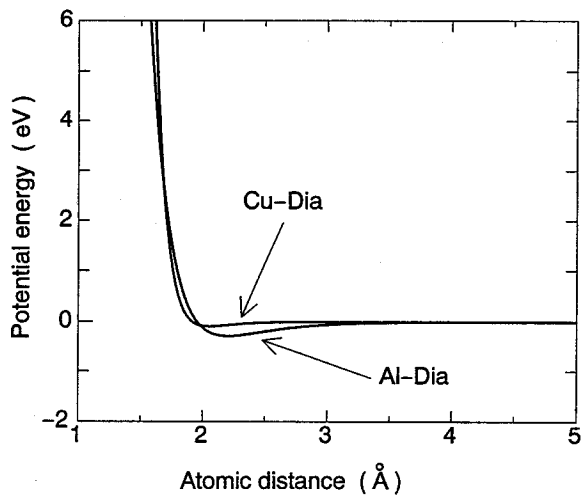


図 2.15 工具・被削材原子間のポテンシャル

ポテンシャルは関数のパラメータの内  $D$  は、森ら [10] が報告している、超高真空中  $1.3 \times 10^{-3}$  Pa での銅-ダイヤモンド間の相互作用力の測定値から次のようにして決定した。接触している 2 固体を分離するのに必要な単位面積当たりの仕事の測定値を  $\gamma_0$ 、原子半径を  $r$  とすると、

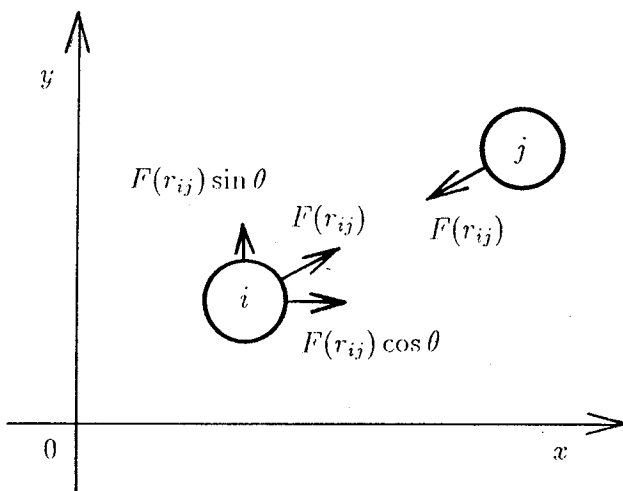


図 2.16 要素レベルでの原子間力

$$D = \gamma_0 \pi r^2 \quad (2.48)$$

また、銅とダイヤモンドの体積弾性率の平均値および平衡原子間距離の平均値から定数  $a$ 、 $r_0$  を定めた。同様にしてアルミニウム-ダイヤモンド間のモースポテンシャル定数も求めた。被削材・工具材のポテンシャル関数は以上のようにして決定したパラメータを持つ仮想のものを用いた。図 2.14 に被削材の銅原子間のモースポテンシャル関数を、また、図 2.15 に工具・被削材間の銅-ダイヤモンド原子のポテンシャル関数を示す。

### 2.3.2 要素間の剛性マトリックス

切削モデルは被削材の原子と工具の原子を理想結晶とし、変形の解析には非線型有限要素法を適用する。原子を節点、各原子間に働く原子間ポテンシャルから導かれるバネを要素とする。原子  $i$ 、 $j$  の座標をそれぞれ、図 2.16 に示すように、原子  $i$ : 座標  $(x_i, y_i)$ 、原子  $j$ : 座標  $(x_j, y_j)$  とする。

$$\Delta x = x_i - x_j \quad (2.49)$$

$$\Delta y = y_i - y_j \quad (2.50)$$

とすると。原子間距離  $r_{ij}$  は (2.51) 式で表せる。

$$r_{ij} = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2} \quad (2.51)$$

いま、図 2.16 のように原子  $i$ 、 $j$  の原子間力を  $F(r_{ij})$  とし、原子  $i$  に作用する外力を  $x$  方向  $f_{ix}$ 、 $y$  方向  $f_{iy}$ 、原子  $j$  に作用する外力を  $x$  方向  $f_{jx}$ 、 $y$  方向  $f_{jy}$ 、そして座標軸となす角度を  $\theta$  とする。力の平衡条件より、(2.52) - (2.55) 式が導かれる。

$$f_{ix} = F(r_{ij}) \cos \theta \quad (2.52)$$

$$f_{iy} = F(r_{ij}) \sin \theta \quad (2.53)$$

$$f_{jx} = -F(r_{ij}) \cos \theta \quad (2.54)$$

$$f_{jy} = -F(r_{ij}) \sin \theta \quad (2.55)$$

また、外力のベクトル  $\{f\}$  を

$$\{f\} = \{f_{ix}, f_{iy}, f_{jx}, f_{jy}\} \quad (2.56)$$

とおく。(2.52) - (2.55) 式は要素レベルでの非線型の力の釣り合い方程式である。  
(2.52) - (2.55) 式の数値解を求めるために、(2.52) - (2.55) 式を (2.57) - (2.60) 式のように変形する。

$$\xi_{ix} = F(r_{ij}) \cos \theta - f_{ix} \quad (2.57)$$

$$\xi_{iy} = F(r_{ij}) \sin \theta - f_{iy} \quad (2.58)$$

$$\xi_{jx} = -F(r_{ij}) \cos \theta - f_{jx} \quad (2.59)$$

$$\xi_{jy} = -F(r_{ij}) \sin \theta - f_{jy} \quad (2.60)$$

(2.61) 式で定義される不釣り合い力

$$\{\xi\} = \{\xi_{ix}, \xi_{iy}, \xi_{jx}, \xi_{jy}\} \quad (2.61)$$

を修正ニュートン法により最小にするため、変数

$$\{x\} = \{x_i, y_i, x_j, y_j\} \quad (2.62)$$

に関する微分を求める。

$$\frac{\partial \xi_{ix}}{\partial x_i} = \cos^2 \theta \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{ij}^2} + \frac{F(r_{ij})}{r_{ij}} \sin^2 \theta \quad (2.63)$$

$$\frac{\partial \xi_{ix}}{\partial y_i} = \cos \theta \sin \theta \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{ij}^2} - \frac{F(r_{ij})}{r_{ij}} \cos \theta \sin \theta \quad (2.64)$$

$$\frac{\partial \xi_{ix}}{\partial x_j} = -\cos^2 \theta \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{ij}^2} - \frac{F(r_{ij})}{r_{ij}} \sin^2 \theta \quad (2.65)$$

$$\frac{\partial \xi_{ix}}{\partial y_j} = -\cos \theta \sin \theta \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{ij}^2} + \frac{F(r_{ij})}{r_{ij}} \cos \theta \sin \theta \quad (2.66)$$

以下、同様に  $\xi_{iy}, \xi_{jx}, \xi_{jy}$  を変数  $\{x\}$  で微分して、行列の形で表現する。

$$[K_1] = \frac{\partial^2 \phi}{\partial r_{ij}^2} \begin{bmatrix} \cos^2 \theta & \cos \theta \sin \theta & -\cos^2 \theta & -\cos \theta \sin \theta \\ \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta & -\cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta \\ -\cos^2 \theta & -\cos \theta \sin \theta & \cos^2 \theta & \cos \theta \sin \theta \\ -\cos \theta \sin \theta & -\sin^2 \theta & \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta \end{bmatrix} \quad (2.67)$$

$$[K_2] = \frac{F(r_{ij})}{r_{ij}} \begin{bmatrix} \sin^2 \theta & -\cos \theta \sin \theta & -\sin^2 \theta & \cos \theta \sin \theta \\ -\cos \theta \sin \theta & \cos^2 \theta & \cos \theta \sin \theta & -\cos^2 \theta \\ -\sin^2 \theta & \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta & -\cos \theta \sin \theta \\ \cos \theta \sin \theta & -\cos^2 \theta & -\cos \theta \sin \theta & \cos^2 \theta \end{bmatrix} \quad (2.68)$$

とおくと、要素間の剛性マトリックス  $[K_e]$  は式のように書ける

$$[K_e] = [K_1] + [K_2] \quad (2.69)$$

これより、不釣り合い力の微分は、( 2.70 ) 式のようになる。

$$d\{\xi\} = [K_e]d\{x\} \quad (2.70)$$

### 2.3.3 全体剛性マトリックスへの組み込み

次に、節点番号が  $i$  の原子と  $j$  の原子による要素間の剛性マトリックス  $[K_e]$  を全体剛性マトリックス  $[K_t]$  に組み込む。 $[K_t]$  の  $i$  行  $j$  列の要素を  $k_{ij}$  とすると、要素間のマトリックス要素は次式のように書ける。

$$\begin{bmatrix} d\xi_{ix} \\ d\xi_{iy} \\ d\xi_{jx} \\ d\xi_{jy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{2i-1,2i-1} & k_{2i-1,2i} & k_{2i-1,2j-1} & k_{2i-1,2j} \\ k_{2i,2i-1} & k_{2i,2i} & k_{2i,2j-1} & k_{2i,2j} \\ k_{2j-1,2i-1} & k_{2j-1,2i} & k_{2j-1,2j-1} & k_{2j-1,2j} \\ k_{2j,2i-1} & k_{2j,2i} & k_{2j,2j-1} & k_{2j,2j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx_i \\ dy_i \\ dx_j \\ dy_j \end{bmatrix} \quad (2.71)$$



また、要素全体の不釣合い力は、原子間力を全てたし合わせるにより次式の様になる。

$$\xi_{ix} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N F(r_{ij}) \cos \theta - f_{ix} \quad (2.72)$$

$$\xi_{iy} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N F(r_{ij}) \sin \theta - f_{iy} \quad (2.73)$$

境界条件としては、被削材の底辺と左辺を固定節点とした。また、ダイヤモンド工具は完全剛体とし、被削材に押し当てる。

自由節点では外力が働かないため、

$$f_{ix} = 0 \quad (2.74)$$

$$f_{iy} = 0 \quad (2.75)$$

となる。また、固定節点では外力が働き不釣合い力がゼロとなるので、

$$\xi_{ix} = 0 \quad (2.76)$$

$$\xi_{iy} = 0 \quad (2.77)$$

となる。

#### 2.3.4 計算手順

計算手順のフローチャートを図 2.17 に示す。 $\{\xi\} = \{0\}$  を求める数値解法には、修正ニュートン法を用いた。ここで、修正ニュートン法 [11] について簡単に説明する。この方法は、固体力学や構造力学の非線型問題に広く応用されている。いま非線型連立方程式 (2.78) 式を考える。

$$f(x) = 0 \quad (2.78)$$

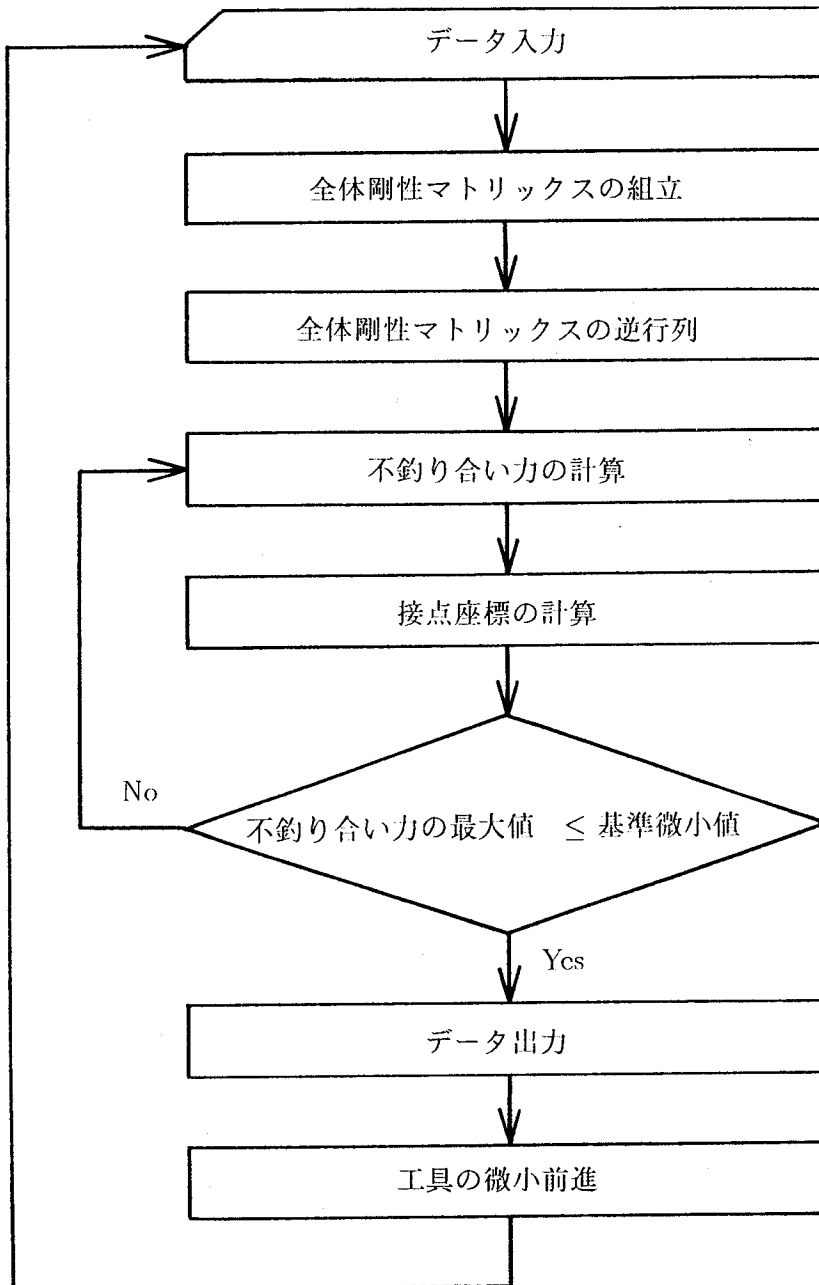


図 2.17 分子静力学の計算手順

初期試験点  $\mathbf{x}_0$  は解から微小ベクトル  $\Delta \mathbf{x}$  だけ離れているとする。 $f(\mathbf{x})$  が点  $\mathbf{x}_0$  において、十分微分可能ならば、テイラー展開ができて、

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}_0 + \Delta \mathbf{x}) \\ &= f(\mathbf{x}_0) + \mathbf{J}_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \dots \\ &= \mathbf{o} \end{aligned} \tag{2.79}$$

となる。ここで  $\mathbf{J}_0$  は点  $\mathbf{x}_0$  におけるヤコビマトリックス

$$\mathbf{J}_0 = \frac{\partial f_i(\mathbf{x}_0)}{\partial x_i} \tag{2.80}$$

である。(2.79) 式を、線型項だけを残して打ち切れば、

$$\mathbf{o} \simeq f(\mathbf{x}_0) + \mathbf{J}_0(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \tag{2.81}$$

が得られる。よって、

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 - \mathbf{J}_0^{-1} f(\mathbf{x}_0) \tag{2.82}$$

を得る。もちろんこの  $\mathbf{x}$  の値は近似的なものにすぎないが、反復過程の次の段階の出発値としてこれを用いることができる。一般に、反復公式

$$\mathbf{x}^{r+1} = \mathbf{x}^r - \mathbf{J}_r^{-1} f(\mathbf{x}^r) \tag{2.83}$$

を用いる。ある定められた精度  $\varepsilon$  について、

$$|\Delta \mathbf{x}_j| < \varepsilon \tag{2.84}$$

になるまで、この過程を繰り返す。

Newton-Raphson 法 [11] の例として、未知数が一つだけという古典的な場合を考える。出発点を  $x_0$  として、 $f(x_0)$  と  $f'(x_0)$  を計算し、次に  $x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$  を  $x$  の新しい  $x_1$  とする。図 2.18(a) に示されているように、点  $x_1$  は  $x_0$  における  $f(x)$  の接線と  $x$  軸との交点に対応する。反復過程で図 2.18 (b) のように  $f'(x)$  が 0 になる点

表 2.2 Parameters of MS simulation

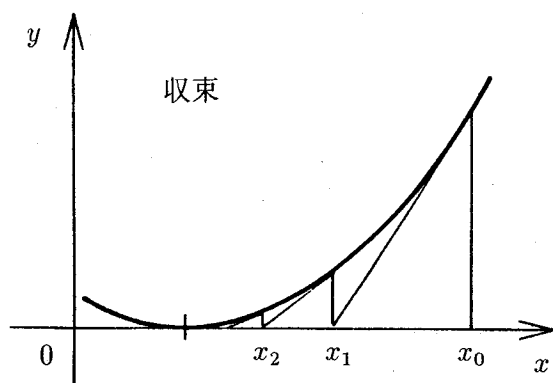
Method	Molecular statics
Configuration	2-D orthogonal cutting
Cutting speed	0 m/s
Uncut chip thickness	1 or 2 atomic layers
Tool edge radius	0.5 , 1.5 , 5.0 nm
Rake angle	0°
Clearance angle	7°
Width of cut	1 atomic layer
Bulk temperature	—

があれば、Newton-Raphson 反復法は発散する可能性がある。また、反復の各段階において、 $n \times n$  のヤコビマトリックス  $J_r$  の逆をとる必要がある。この困難は、最初のヤコビマトリックスだけを用いるようにした修正 Newton-Raphson 法を使えば克服することができる。つまり、( 2.83 ) 式の代わりに ( 2.85 ) 式を用いる。

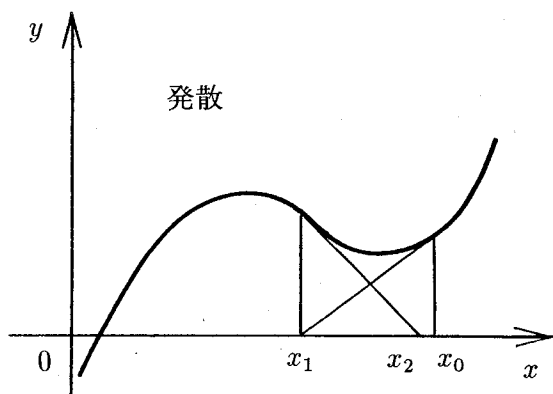
$$\mathbf{x}^{r+1} = \mathbf{x}^r - \mathbf{J}_0^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^r) \quad (2.85)$$

収束までに要する反復回数は、一般に修正された方法を用いたときの方がずっと多いが、実際の計算回数と必要な計算時間で比較すれば、修正しない Newton-Raphson 法よりも非常に少なくなる。図 2.18 (a) と (c) で修正されない方法とこの修正法との比較が、概念的になされている。図 2.18 (c) では、最初の傾き  $f'(x)$  が反復過程の各段階で使われているのがわかる。この原子モデルによる解析では、修正 Newton 法を使用した。

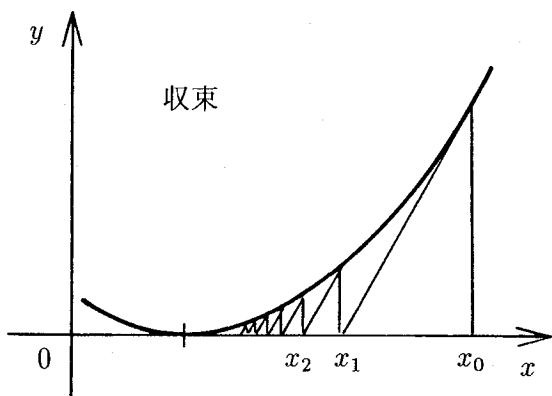
また図 2.14 、 2.15 に示すように、ポテンシャル関数は変曲点を持つため、ポテンシャル関数の一階微分である原子間力のグラフの傾きがゼロとなる点が存在し、ニュートン法による計算が発散する場合がある。この発散を抑えるために、剛性マトリックスの対角線上の要素  $\{k_{ii}\}$  に絶対値をとり適当な値を加える手法を用いた。



(a) Newton-Raphson 法



(b) Newton-Raphson 法



(c) 修正 Newton-Raphson 法

図 2.18 Newton-Raphson 法と修正 Newton-Raphson 法

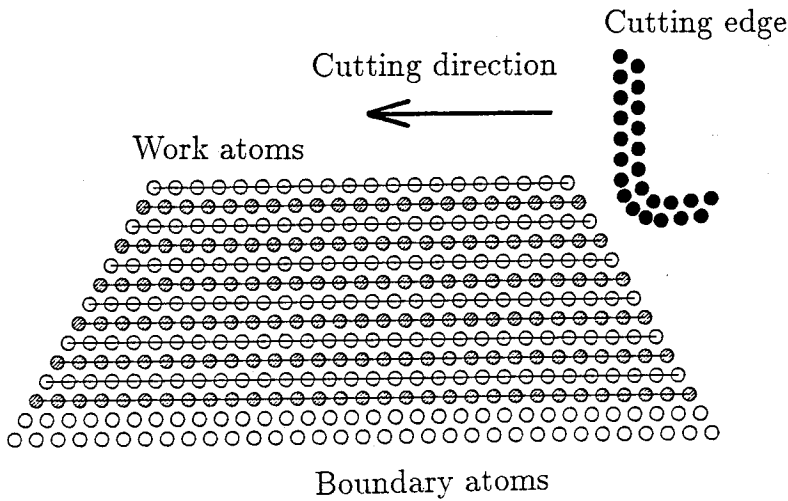


図 2.19 分子静力学による切削シミュレーション初期モデル

この手法により収束するのが遅くなるが、収束値は変化しない。

### 2.3.5 分子静力学による計算機実験条件

極微小切削の解析にあたっては、図 2.19 に示すように、銅の理想結晶の最密面を完全剛体であるダイヤモンド工具が切削する 2 次元モデルを考える。境界条件は下端の 2 原子層を固定原子 ( Boundary atoms ) とした。計算機実験は表 2.2 に示す切削条件下で行った。

## 2.4 分子動力学法による極微小切削シミュレーション

分子静力学による解析手法では材料を構成する各原子を微小時間ステップ毎に相互作用力の平衡位置に準静的に変位させるため、原子の質量および時間の概念は入っていない。つまり本手法では材料内の力学的エネルギーのみを取り扱っており個々の原子の運動は考慮していないことになる。しかし原子数にして数千というような極微小切削領域での材料挙動を議論するには、例えば格子振動のような、構成原子の微視的な運動の影響を考慮に入れる必要がある。このような条件をみたす原子モデルの解析手法として、計算物理学の分野で最近注目されている、分子動力学法 ( Molecular Dynamics, MD ) [12][13][14][15] がある。分子動力学法では系を構成する

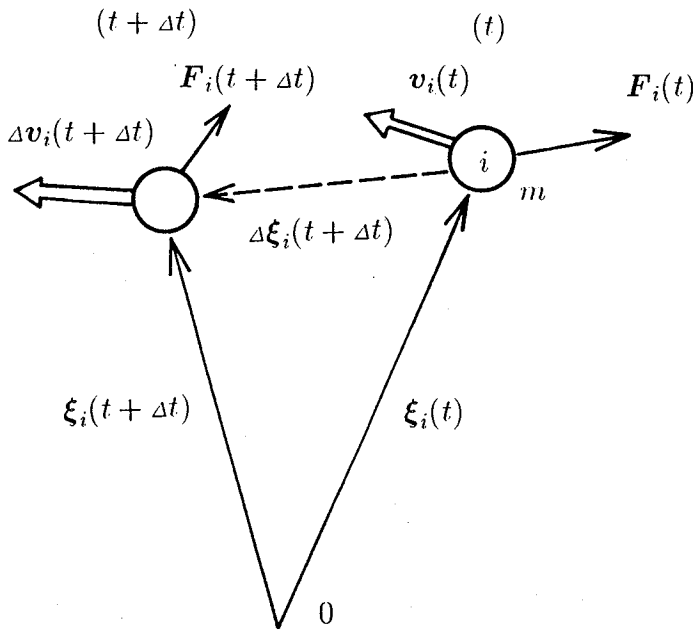


図 2.20 分子動力学の解析手法

個々の原子の運動方程式をたて、格子振動の周期より十分小さい時間ステップ毎に数値積分してゆくことにより、各原子の位置と速度を逐次追跡してゆき、原子の集合体である物体の挙動を解析しようとする手法である。したがって、個々の原子間での位置エネルギーから運動エネルギーへの変換にもとづく原子の等価温度の変化のような微視的な挙動と、それらの空間的・時間的積分値として求められる力や応力の伝達および変形や破壊などの集合体の巨視的な挙動が同時に解析できる。いいかえれば、分子動力学法は材料中の力学的エネルギーと熱エネルギーを同時に表現できる解析手法であるといえる。

### 2.4.1 運動方程式と数値積分

分子動力学では系を構成する原子や分子についてニュートンの運動方程式をたて、これを数値積分する。図 2.20 に示すように、他の原子から力を受けながら運動する  $N$  個の原子からなる質点系を考える、質量  $m$ 、座標  $\xi_i$  の原子  $i$  の受ける力を  $F_i$  とすれば、この原子の運動方程式は

$$\frac{d^2 \xi_i}{dt^2} = \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}_i}{m} \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.86)$$

で表わせる。

この微分方程式を数値積分するのにベルレの方法を用いる。まず、時刻  $t$  での各原子の位置と速度が分かっているものとする、

$$\Delta \xi_i(t + \Delta t) = \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{(\Delta t)^2}{2m} \mathbf{F}_i(t) \quad (2.87)$$

$$\xi_i(t + \Delta t) = \xi_i(t) + \Delta \xi_i(t + \Delta t) \quad (2.88)$$

として時刻  $t + \Delta t$  での座標を求める。そして (2.88) 式の  $\xi_i(t + \Delta t)$  を用いて時刻  $(t + \Delta t)$  での力  $\mathbf{F}_i(t + \Delta t)$  を計算し、 $\Delta \mathbf{v}_i(t + \Delta t)$ ,

$$\Delta \mathbf{v}_i(t + \Delta t) \equiv \mathbf{v}_i(t + \Delta t) - \mathbf{v}_i(t) \quad (2.89)$$

$$= \frac{\Delta t}{2m} \{ \mathbf{F}_i(t + \Delta t) + \mathbf{F}_i(t) \} \quad (2.90)$$

から、時刻  $t + \Delta t$  における速度

$$\mathbf{v}_i(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \Delta \mathbf{v}_i(t + \Delta t) \quad (2.91)$$

を求める。この計算を  $\Delta t$  秒毎に逐次繰り返すことによって個々の原子の挙動を追跡することができる。

## 2.4.2 Bookkeeping Method

$N$  個の粒子から成る系の場合、あらゆる粒子対について力を求めようとする、その計算時間は  $N(N-1)/2$  に比例して増加する。たとえば2原子間の距離が  $r_c$  以上では相互作用力が働かないとしても、全ての粒子対について距離  $r_{ij}$  を計算し、 $r_c$  との大小を比較すると、計算時間はやはり  $N^2$  に比例して増大する。このため計算時間短縮の工夫がなされている。

粒子登録法 (Bookkeeping method) は、図 2.21 のように距離  $R_c$  を  $r_c$  より大きくとり、全ての粒子  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ) について  $i$  からの距離  $R_c$  以内の粒子の番



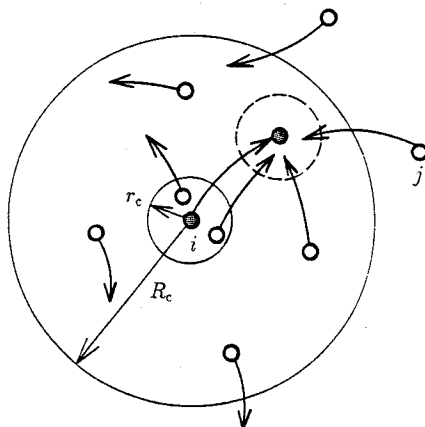


図 2.21 Bookkeeping method

号をある時刻  $t$  にリストアップし、それをグループ  $i$  に属する粒子として計算機に記憶(登録)させておく。 $t$  から  $n\Delta t$  までは、粒子  $i$  に働く原子間力は、このグループ  $i$  に登録された粒子  $i$  のうち距離  $r_c$  以内のもののみ取り入れる。このような方法で  $n$  回のステップ毎に再登録を行う。 $R_c$  とステップ数  $n$  は、条件(時刻  $t$  に粒子  $i$  から  $r_c$  以内に近づくことはない。)を満たすように選ぶ。すなわち図 2.21 で時刻  $t$  にいた粒子(○印)は  $t+n\Delta t$  に矢印の先端に達するとして粒子  $j$  のような運動は起こらないようにする。 $R_c$  や  $n$  は粒子密度、温度に依存し経験的に決めざるを得ない。しかしうまく選ぶと、登録法を用いて計算した粒子の速度、座標を、用いないで計算したときの値と完全に一致させることができる。しかも1桁近くも計算時間を短縮することができる。

本研究においては、工具原子を  $1\text{\AA}$  進める毎に粒子の再登録を行なった。力の切断距離  $r_c$  は  $9\text{\AA}$  とし、半径  $r_c$  の円より外の原子から受ける力は最も近い原子同士の相互作用力と比較して4桁以上小さくなるようにした。また粒子を登録する半径  $R_c$  は、 $14\text{\AA}$  とし、工具を  $1\text{\AA}$  移動させる間に、図 2.21 で時刻  $t$  にいた原子(○印)は  $t+n\Delta t$  に矢印の先端に達するとして原子  $j$  のような運動は起こらないようにした。

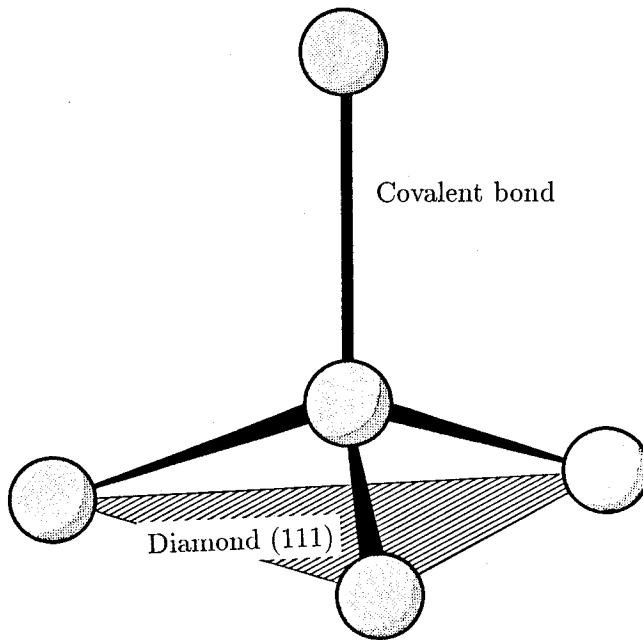


図 2.22 ダイヤモンド(111)面近傍の原子構造

### 2.4.3 原子間ポテンシャル

被削材原子間および工具・被削材間の原子間ポテンシャルは分子静力学での解析に使用したものと同様のモースポテンシャルを採用した。また、工具に関してはダイヤモンドを完全剛体として取り扱ったものとダイヤモンド原子間のポテンシャルを考慮したものの2種類のモデルで解析を行った。ダイヤモンド原子間のポテンシャルを考慮したモデルは、おもに切削温度の解析を行うために使用した。

工具原子はダイヤモンド構造をしており、図 2.22 に示すように、(111)面上の原子は互いに直接には結合していない。したがってここで用いた2次元モデルでは、隣接する(111)面上の原子を介して間接的に作用するポテンシャルにもとづく力および変位を考える必要がある。そのために2体間と3体間ポテンシャルを考慮したダイヤモンド(111)面上の原子間での Stillinger-Weber ポテンシャル [16] を2次元に等価変換したものに一致するようにモースポテンシャル関数のパラメータを決めた。

このように決定した仮定のダイヤモンド(111)面上の原子間ポテンシャル関数を

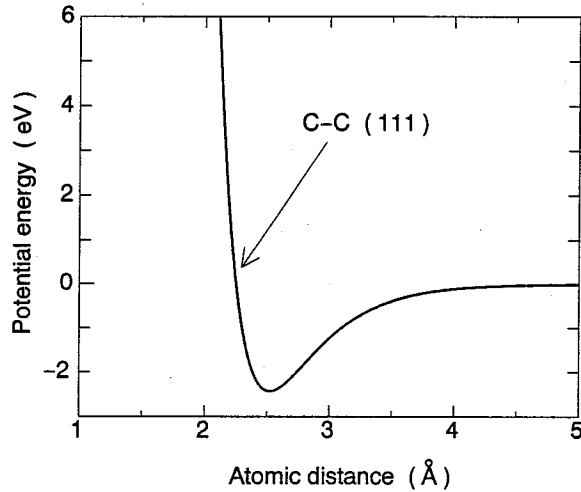


図 2.23 ダイヤモンド(111)面上の原子間ポテンシャル

表 2.3 Parameters of Morse potential

	Cu-Cu	Al-Al	Cu-C	Al-C	C-C (111)
$D$ (eV)	0.3429	0.2703	0.087	0.28	2.423
$a$ ( $\text{\AA}^{-1}$ )	1.3588	1.1646	5.14	2.78	2.555
$r_0$ ( $\text{\AA}$ )	2.866	3.253	2.05	2.20	2.522

図 2.23 に、パラメータを表 2.3 に示す。被削材原子間および工具・被削材原子間ポテンシャル関数は、図 2.14 と図 2.15 に示す。

#### 2.4.4 初期条件の設定

原子の初速度はマックスウェル分布 [17] に従うように決める。そのためには、温度  $T$  の時、粒子の速度  $\boldsymbol{v}$  の  $x$ ,  $y$ ,  $z$  方向成分をいずれも正規分布

$$f(v_0) = \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( -\frac{mv_0^2}{2k_B T} \right) \quad (2.92)$$

に従うように決める。ここに  $v_0$  は  $\boldsymbol{v}$  の 3 成分のいずれかである。

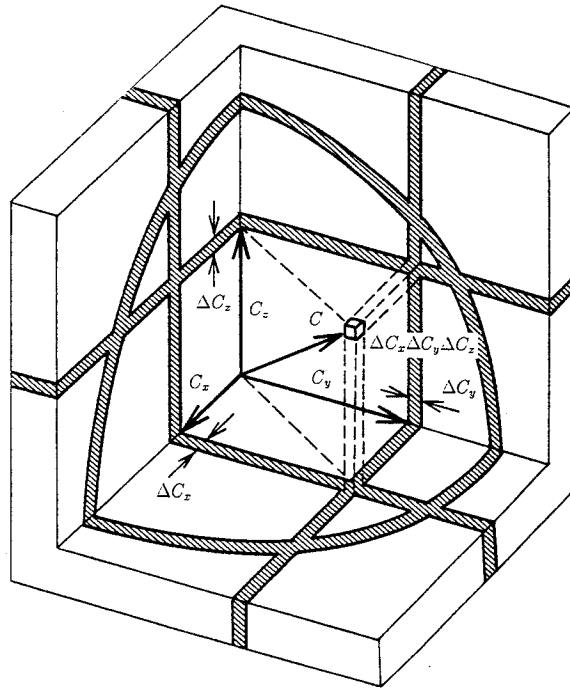


図 2.24 速度空間

このように、分子の速度の  $x$  成分が  $c_x$  と  $c_x + \Delta c_x$  との間にある確率は、

$$f(c_x)\Delta c_x = A \exp\left(-\frac{\lambda c_x^2}{2}\right) \Delta c_x \quad (2.93)$$

と求められる。もちろん、分子の  $y$  軸に沿う速度成分が  $c_y$  と  $c_y + \Delta c_y$  との間にある確率、さらに分子の  $z$  軸に沿う速度成分が  $c_z$  と  $c_z + \Delta c_z$  との間にある確率に対しても同様な式が得られる。

3 個の座標軸に沿う分子の速度成分が同時に  $c_x, c_y, c_z$  から  $c_x + \Delta c_x, c_y + \Delta c_y, c_z + \Delta c_z$  までのあいだに含まれる確率  $\Delta N_c/N$  は、それぞれの確率の積として求められ、次式のようになる。

$$\frac{\Delta N_c}{N} = A^3 \exp\left(-\frac{\lambda(c_x^2 + c_y^2 + c_z^2)}{2}\right) \Delta c_x \Delta c_y \Delta c_z \quad (2.94)$$

ここで重要なことは、図 2.24 における速度の向き、つまり速度成分  $c_x, c_y, c_z$  の値とかこれに対する区間  $c_x + \Delta c_x, c_y + \Delta c_y, c_z + \Delta c_z$  ではなく、速度の絶対値  $c$  およびこの速度に対する区間  $\Delta c$  だけである。この場合、指数のなかの和  $c_x^2 + c_y^2 + c_z^2$

を  $c^2$  に替える。そして速度空間は、体積  $\Delta c_x \cdot \Delta c_y \cdot \Delta c_z$  を半径  $c$  および  $c + \Delta c$  の球面のあいだの球殻の体積  $4\pi c^2 \Delta c$  に替えなければならない。その結果、求める確率として次式が成立する。

$$\frac{\Delta N_c}{N} = A^3 4\pi c^2 \exp\left(-\frac{\lambda c^2}{2}\right) \Delta c \quad (2.95)$$

この方程式において定数  $A$  および  $\lambda$  の値を決めることによって、向きには関係なく  $c$  から  $c + \Delta c$  までの区間内の速度で分子が運動する確率は、次式で表される。

$$\frac{\Delta N_c}{N} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} c^2 \exp\left(-\frac{mc^2}{2k_B T}\right) \Delta c \quad (2.96)$$

この式がマックスウェルの分子の速度分布法則である。このように各軸方向に正規分布に従うよう初期速度を与えることにより、速度分布はマックスウェル分布となる。

#### 2.4.5 初期モデルおよび境界条件の設定

極微小切削の解析にあたっては、図 2.25 に示すように、銅の理想結晶の最密面である (111) 面を完全剛体であるダイヤモンド工具の (111) 面が被削材の  $[1\bar{1}0]$  方向に切削する 2 次元モデルを考える。有限のモデルを用いて切削現象を解析するためには、境界が存在していることにより、境界までの距離が近い場合と十分離れている場合とで、応力や温度の分布が変わらないことが必要である。ここでは境界の 2 原子層を固定原子 (Boundary atoms)、その内側の 2 原子層を系全体の温度が上昇しすぎるのを防ぐ温度調節原子 (Thermostat atoms) とした。その他の原子はニュートンの運動方程式に従って運動する原子 (Newtonian atoms) である。

温度調節原子層の原子には (2.97) 式のように、速度の項に定数  $s$  をかけ、温度調節原子層全体の平均温度を一定にする。 $s$  は温度調節原子層の平均温度を一定に保つための定数で、この層の全原子の運動エネルギーの総和が一定となるように各時間ステップ毎に計算して与える。設定温度を  $T$ 、ボルツマン定数を  $k_B$ 、運動の自由度を  $g$  とすると定数  $s$  は (2.98) 式で与えられる。この温度調節原子層により、層全体の平均運動エネルギーすなわち温度を一定値に近づけると共に、固定原子からの弾性波の反射を防いでいる。

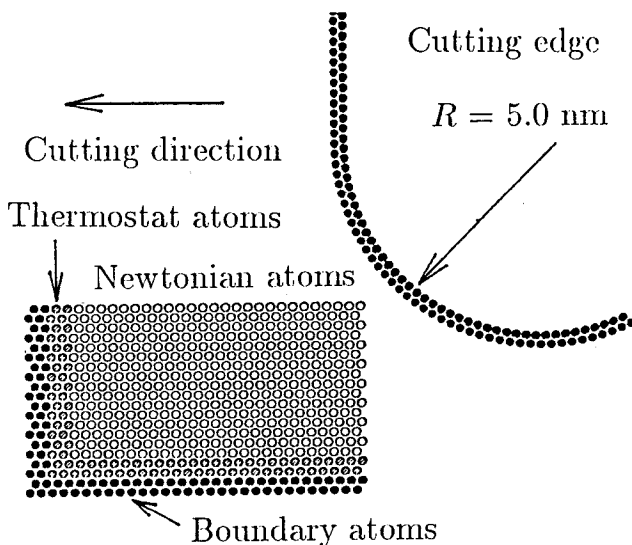


図 2.25 分子動力学による切削シミュレーション初期モデル

$$\mathbf{u}_i = s\mathbf{v}_i \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.97)$$

$$s = \sqrt{\frac{\frac{gNk_B T}{2}}{\sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2}{2}}} \quad (2.98)$$

適正な境界層の位置および設定温度は切削条件によって変わり、確立された選択指針は今のところ得られていない。本解析においては、応力分布、温度分布が境界層の存在によって変化しないことを計算機実験的に確かめた上で、切り取り厚さの 16-20 倍程度に相当する、表面から約 40 原子層離れた所に境界層を設け。s は温度調節層の平均温度が室温である 293 K になるように設定した。また、境界層による弾性波の反射は切りくずの形態に影響を与えるが、表面から 40 原子層以上の所に境界層を設けたモデルとの比較においても得られた切りくずの形態に大きな差はなかった。

#### 2.4.6 分子動力学による計算機実験条件

運動方程式を逐次数値積分してゆく時間ステップ、 $\Delta t$ 、は原子の格子振動の周期よりも十分小さくとる必要がある。そのため、原子の格子振動の周期を、次のよう

表 2.4 原子の格子振動の周期

Work	$k$ ( kg/s <sup>2</sup> )	$m$ ( 10 <sup>-25</sup> kg )	$T$ ( fs )
Cu	20.2	1.0552	320
Al	11.7	0.448	275
Dia	500.68	0.199	27.8

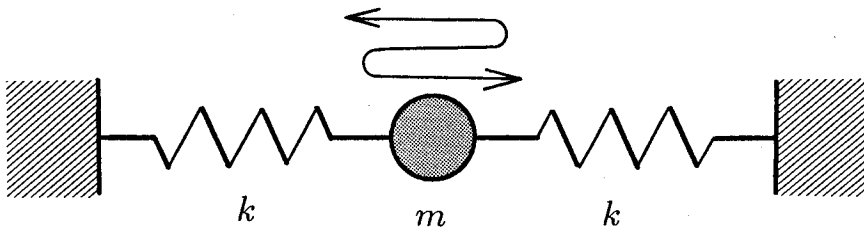


図 2.26 格子振動の周期に関する解析モデル

に、見積もり、 $\Delta t$  を決定した。固体の原子の振動は、十分に高い温度においては、独立して行われていると考えてよいので、解析モデルには、図 2.26 に示すような、原子間ポテンシャルから導かれるバネで原子同士が繋がれている両端固定のモデルを考える。バネ定数  $k$  は、( 2.99 ) 式に示すように、平衡位置におけるポテンシャル関数の 2 階微分から求める。

$$k = \left. \frac{d^2\phi(r)}{dr^2} \right|_{r=r_0} \quad (2.99)$$

原子の質量を  $m$  とすると、図 2.26 における原子の格子振動の周期  $T$  は、( 2.100 ) 式で与えられる。表 2.4 に、この計算により求められた、被削材原子である銅およびアルミニウム原子の格子振動の周期を示す。計算結果にもとづいて、時間ステップ  $\Delta t$  は格子振動の周期の  $1/20 - 1/30$  程度になるように選んだ、具体的には、工具原子を完全剛体とし、被削材原子のみの挙動を解析する場合には  $\Delta t = 10$  fs とし、切削温度の解析を行うため、工具原子の挙動も解析する場合には  $\Delta t = 1$  fs とした。

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{m}{2k}} \quad (2.100)$$

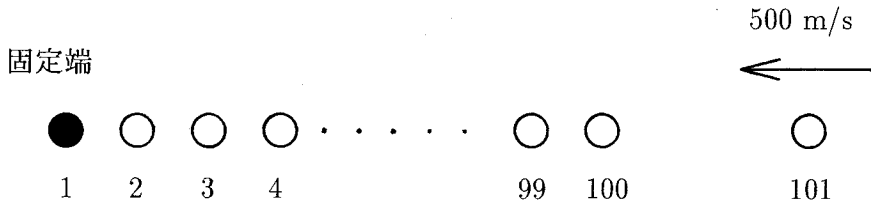


図 2.27 弾性波の伝播速度解析モデル

切削実験は表 2.5 に示す切削条件で行った。計算機実験は SUN microsystems 社の SPARC station 2 および SKY computers 社の SKY station を用いて計算を行った。

表 2.5 Parameters of MD simulation

Method	Molecular dynamics
Configuration	2-D orthogonal cutting
Cutting speed	20 , 200 m/s
Uncut chip thickness	-0.2 - 1.2 nm
Tool edge radius	0.5 , 2 , 5 , 10 nm
Rake angle	0°
Clearance angle	7°
Width of cut	1 atomic layer
Bulk temperature	293 K
Work atoms	5400 , 8000
Tool atoms	676 , 172
Time step	1 , 10 fs

#### 2.4.7 1次元モデルによる弾性波の伝播

分子動力学による解析の妥当性を検討するために、1次元モデルによる弾性波の伝播速度をシミュレートし、実測値との比較を行った。解析モデルは図 2.27 に示す



表 2.6 弾性波伝播速度解析結果

Material	Cu	Al
MD simulation ( m/s )	4985	6747
Measurement ( m/s )	3750	5000

ように、銅およびアルミニウム原子を直線上に並べ右方向から原子を衝突させ弾性波の伝播速度を解析した。各原子は直線上のみを運動し、初速度は与えていない。解析結果と実測値の比較を表 2.6 に示す。この結果、分子動力学による解析結果の方が実測値よりも2割ほど大きい値となっている。しかし、解析モデルが原子を直線上に並べ、直線上のみしか運動できないために、弾性波の減衰は無く理想結晶中を伝わるのに等しいと考えると、妥当な計算結果であると思われる。

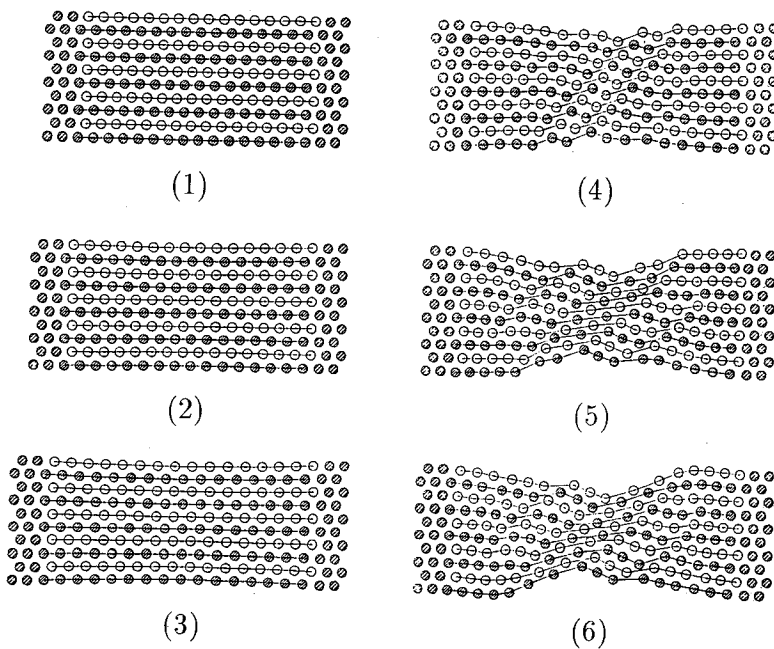


図 2.28 分子動力学による単軸引っ張り試験のシミュレーション

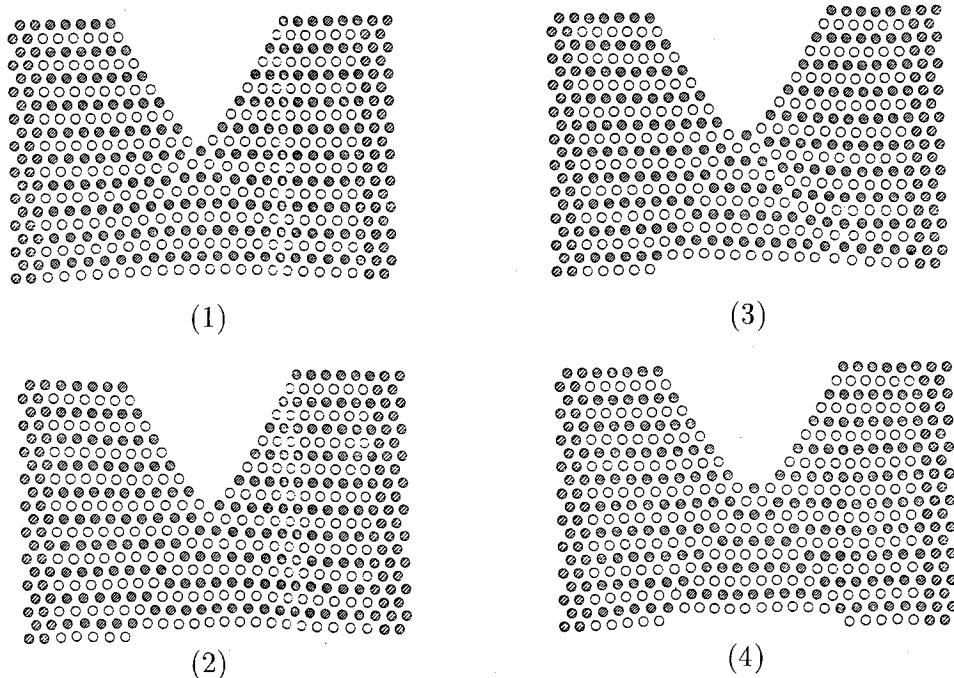


図 2.29 分子動力学によるクラックのある引っ張り試験のシミュレーション

#### 2.4.8 簡単な変形・破壊現象への応用

図 2.28 は 2 次元モデルによる銅の単軸引っ張り試験のシミュレーション例を示す。45 度の方向にリュースダース帯が形成・伝播され、実際の引っ張り試験に見られる現象とよく一致している。図 2.29 はクラックを入れた試験片の引っ張り試験の例を示す。やはり、実際の変形現象を同じく、クラック先端から発生した転位は試験片の表面に抜け、クラックの先端は丸くなっていることがわかる。以上の結果は分子動力学による解析が金属材料における原子論的な立場からの変形・破壊現象の解析に応用できることを示している。

## 第 3 章

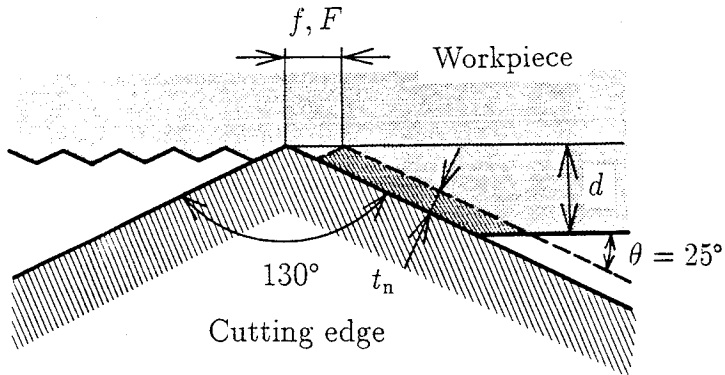
# 極微小切削実験

### 3.1 緒 言

超精密切削加工技術は、安定した加工技術として確立されるためにまだ解決すべき多くの問題を残してはいるものの、一応表面粗さ 10 nm 台、形状精度 100 nm 台の加工精度が実現され、さらにもう 1 桁高い精度レベルに進みつつある [18][19]。

しかし、この加工技術によって、「果たしてどこまで薄く工作物表面を削り取り得るのか?」という最も素朴な疑問に対する回答はまだ得られていない。また、「サブミクロンからナノメートルレベルに達しようとする極微小切削における切りくず排出機構は通常のマクロな切削におけるそれと同じなのか?」という本質的な問題もまだ明らかにはされていない。

本研究では、このような背景のもとに、現在得られる最高の精度レベルにあると見られる実験用工作機械、ダイヤモンド工具および被削材を用いて、切り取り厚さをナノメートルレベルにまで小さくした切削実験を行い、その限界を実験的に確かめた。このレベルの切り取り厚さでは、通常の切削加工におけるような切削力や切削熱などの測定は極めて困難であるため、高分解能走査型電子顕微鏡 (SEM) による切りくず形態の観察および工作機械の運動精度と実験条件の詳細な検討を通して切りくず排出機構および最小切り取り厚さの解明を試みた。

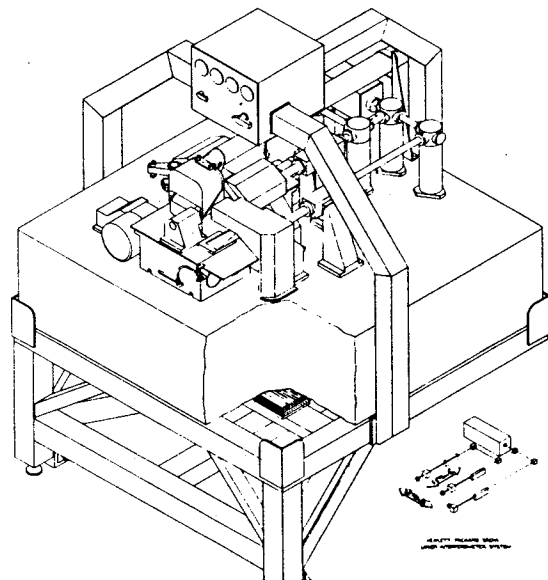


$$t_n = f \sin \phi = \frac{F}{N} \sin \phi$$

図 3.1 直線切れ刃ダイヤモンド工具での微小切削モデル

### 3.2 極微小切削実験

信頼性の高いナノメートルレベルでの極微小切削実験を行うためには、公称切り取り厚さの安定性、すなわち切削中の工作機械の運動の再現性が少なくともナノメー



Precision Engineering Research Lath - II

図 3.2 極微小実験装置 PERL-II

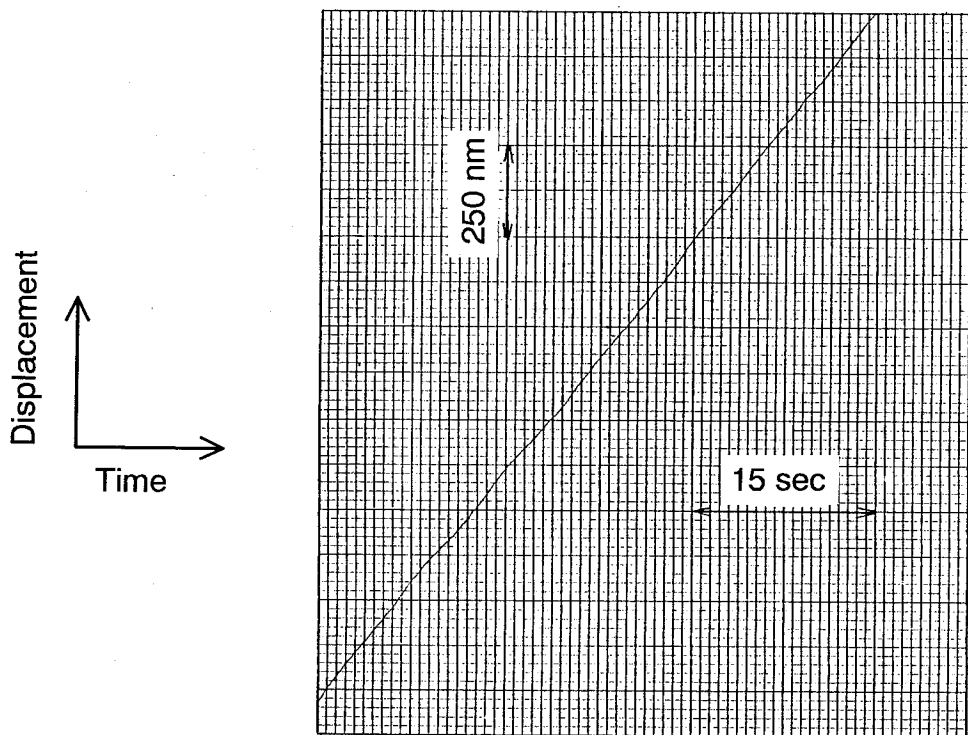


図 3.3 PERL-II の送りテーブルの送りむら

トルレベルであることが要求される。

このような観点から本研究では、現在の最高精度レベルにあると思われる、米国 Lawrence Livermore National Laboratory ( LLNL ) の超精密切削実験機 PERL-II ( Precision Engineering Research Lath-II ) [20] および同機と同様に信頼性の高い機器要素を用いて筆者らが設計試作した極微小切削実験機を用い、3つのシリーズの切削実験を行った。いずれの実験も極めて注意深く仕上げを行った直線切れ刃ダイヤモンド工具を用いて図 3.1 に示すように、疑似2次元正面旋削を行った。

### 3.2.1 切削実験機

図 3.2 に示すように、PERL-II は極微小切削実験用に設計製作された小型の実験機で、主軸には空気静圧スピンドルにブラシレス DC モータをビルトインしたものを採用、送りテーブルには油静圧スライドを採用している。後述するように、この種の主軸の振れの再現性は極めて高く 2 nm 程度である [19]。また、キャプスタンによって摩擦駆動される油静圧スライドも同程度以上の運動再現性をもち、LVDT (

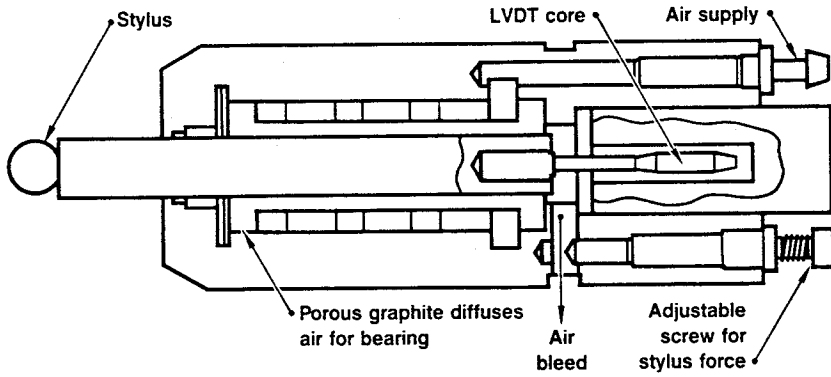


図 3.4 LVDT ( Air-Bearing Linear Variable Differential Transformers ) の概略図

Air-Bearing Linear Variable Differential Transformers ) によって計測した結果、送りむらは本実験で用いられた最小送りの時でも、図 3.3 に示すように、約 10 %程度と実測されている。図 3.4 に示すように、LVDT は差動変圧器型変位計で、エアーベアリングにより可動スピンドルを支持しているため、可動スピンドルは固体摩擦

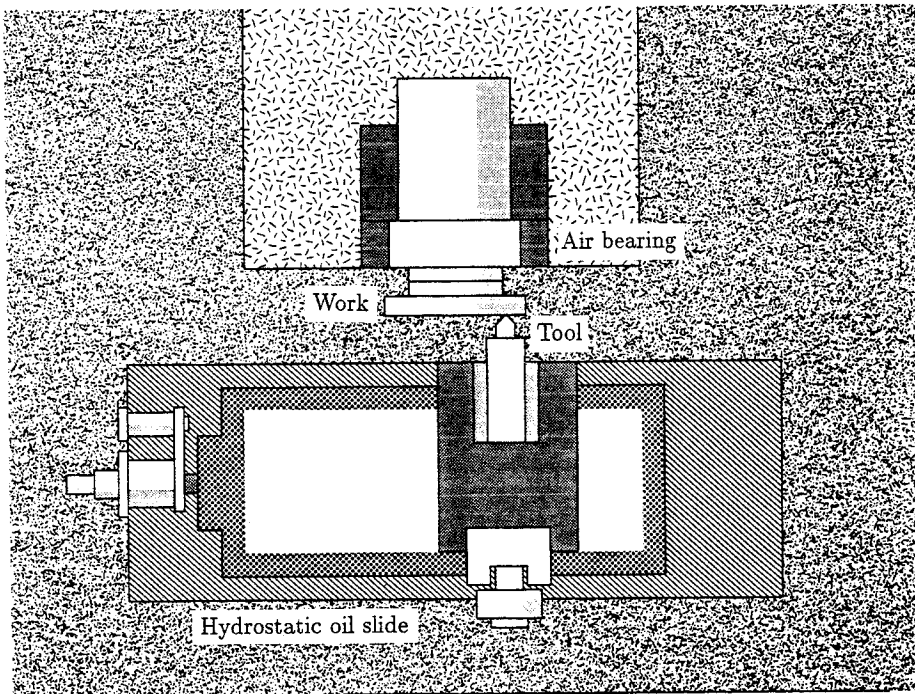


図 3.5 精密切削実験機

のないほぼ理想的な直線運動が可能であり、測定分解能は1 nm 以下である。工具台と主軸との間の剛性は、実測の結果、スピンドル軸方向（正面旋削における背分力方向）で約 60 mN/nm、鉛直方向（同じく主分力方向）で約 90 mN/nm である。

また、本学で設計試作した精密切削実験機は図 3.5 に示すように空気静圧スピンドルと油静圧スライドを採用し、工具台の剛性は背分力方向で 54 mN/nm、主分力方向で 82 mN/nm である。表 3.1、表 3.2 と表 3.3 にエアール・ベアリングとオイルスライドの仕様を示す。

表 3.1 空気静圧軸受の仕様

Type	MODEL 4B	
Factory	P I company	
Radial load capacity	ultimate	45 kg
	working	23 kg
Axial load capacity	ultimate	180 kg
	working	91 kg
Angular load capacity	ultimate	4.6 kg
	working	2.3 kg
Radial compliance		0.084 $\mu\text{m}/\text{kg}$
Radial stiffness		12 $\text{kg}/\mu\text{m}$
Axial compliance		0.028 $\mu\text{m}/\text{kg}$
Axial stiffness		36 $\text{kg}/\mu\text{m}$
Angular compliance		22 $\mu\text{rad}/\text{kg m}$
Angular stiffness		0.046 $\text{kg m}/\mu\text{rad}$
Air flow rate (free air)		Less than: 60 $\ell/\text{min}$
Weight of rotating element		3.5 kg
Total weight		8.2 kg

表 3.2 空気静圧軸受の運動精度

Type	MODEL 4B
Axial error motion	Less than: 50 nm
Radial error motion	Less than: 50 nm
Angular error motion	Less than: 0.2 $\mu$ rad

表 3.3 油圧スライドの仕様

形式	NHL - B1 - 200S
製造元	不二越株式会社
耐荷重	100 kgf (精度保証は 1/2)
テーブルの大きさ	320 mm (w) $\times$ 370 mm ( $\ell$ )
ストローク	200 mm
速度	微小送り 0.003 - 3 mm/min 早送り 0.15 - 150 mm/min
真直度	0.1 $\mu$ m/100 mm
スライド形式	静圧油スライド
送りネジ	静圧ネジ
使用モータ	DC サーボモータ

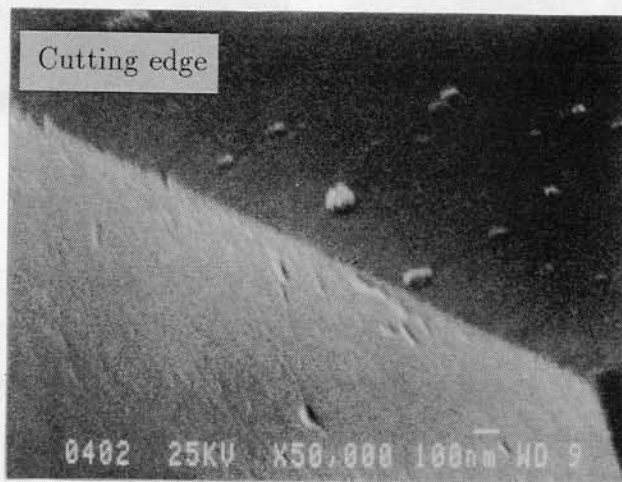
### 3.2.2 工具

刃先の鋭さや一様性などの微視的構造とその安定性は、高性能ダイヤモンド工具に最も必要とされる機能である。このような機能という視点から、工具材であるダイヤモンドの強度と耐摩耗性は、工具の信頼性を支配する最も重要な要因であり、基礎的な実験によると、いずれも原石中の欠陥の密度に関係していることが明らかになっている。[21] ダイヤモンド中の欠陥密度は電子スピン共鳴 (Electron Spin Resonance

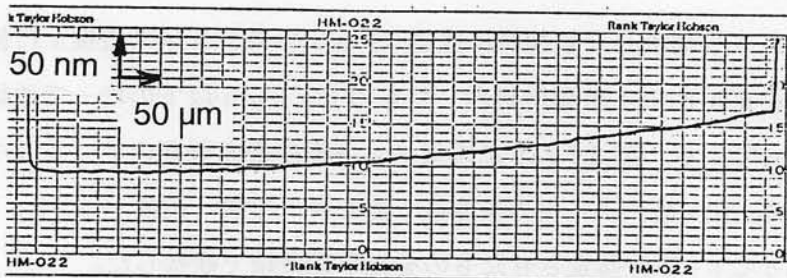


, ESR) により測定した。P2 センターと呼ばれる欠陥密度は天然ダイヤモンドに典型的な欠陥であり、3 個の窒素原子が炭素原子と置換し、(100) 面上に互いに最密に集合した欠陥である。この P2 センターの密度はその不対電子スピン密度に比例し、ESR によって測定できる。

工具には、電子スピン共鳴スペクトルによって不純物窒素の少ない原石を選び、静圧空気軸受を主軸とする研磨装置を用いて、図 3.1 に示す形状に極めて注意深く研磨仕上げされたものを用いた。工具切れ刃稜の微細構造は、SEM 観察および結晶粒



(a) 工具切れ刃稜 SEM 写真



(b) 工具切れ刃稜プロフィール

図 3.6 工具切れ刃稜の SEM 写真および転写されたプロフィール

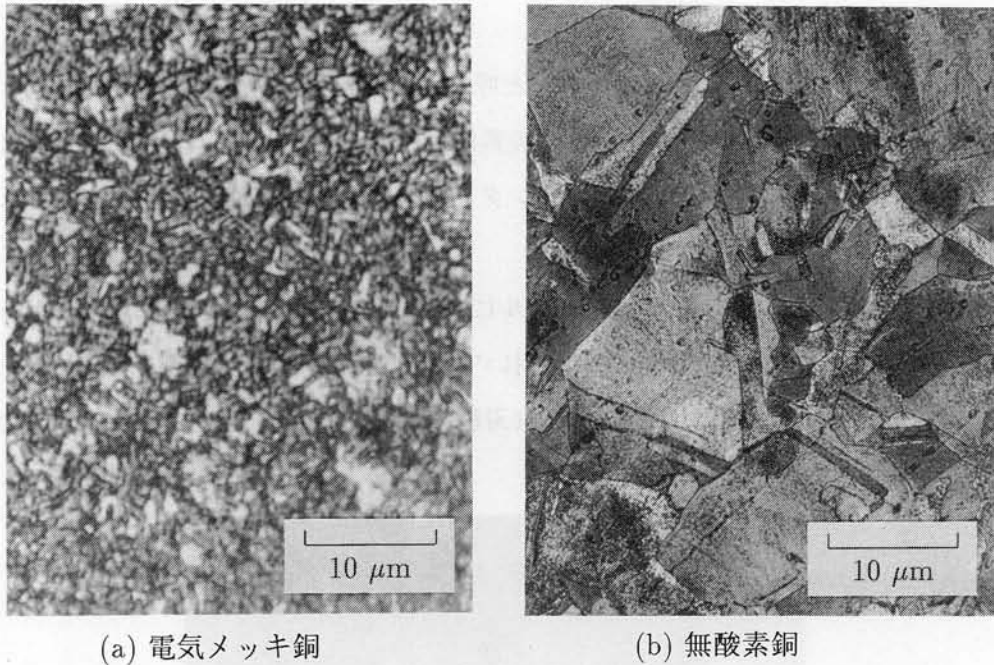


図 3.7 被削材の表面組織観察

を微細化した無酸素銅板にプランジカットによって転写された切れ刃稜プロフィールの Talystep 測定によって評価した。その一例を図 3.6 に示す。これらの評価法を用いての切れ刃稜丸み半径の測定は困難であり、20 nm 程度以下であろうとしか評価できない、切れ刃稜に存在するチップングの形状や寸法に対する分解能はより高く、実験に用いた工具には少なくとも 10 nm 以上のチップングは観察されなかった。

### 3.2.3 被削材

PERL-II により切削した被削材は直径 38 mm のステンレス円板上に施された電気メッキ銅を 523 K で 1 時間熱処理したもので、1  $\mu\text{m}$  以下の均一で微細な粒子状の組織を持っている。図 3.7 (a) に電気メッキ銅の表面観察のノマルスキー写真を示す。組織は、リン酸による電界研磨後、蒸留水：塩酸：硝酸が 3：1：1 のエッチング液によって 1-2 分腐食させたものを光学顕微鏡で観察した。

また、本学の精密切削実験機により切削した被削材は直径 140 mm の無酸素銅円板および純アルミニウムで、図 3.7 (b) に示す無酸素銅の表面観察のノマルスキー写真から、結晶粒径は 10  $\mu\text{m}$  程度である。

## 3.2.4 切削条件

切削実験は図 3.1 および表 3.4 に示す切削条件で行い、任意の公称切り取り厚さ  $t_n$  を得られるように送り速度および主軸回転数を調節した。

表 3.4 Parameters of micro cutting experiment.

Series of experiment	A	B	C
Machine tool	PERL-II, LLNL	Experimental cutting machine, Osaka Univ.	Experimental cutting machine, Osaka Univ.
Configuration	3-D orthogonal cutting	3-D orthogonal cutting	3-D orthogonal cutting
Material	Electroplated Cu	OFHC-Cu, Al	OFHC-Cu
Tool nose shape	Chevron nosed	Chevron nosed	Chevron nosed
Tool edge radius	10 nm estimated	10 nm estimated	50 nm estimated
Rake angle	0°	0°	0°
Clearance angle	7°	7°	7°
Spindle speed	1900 rpm	2500 rpm	2400 – 3700 rpm
Cutting speed	3.79 – 2.53 m/s	14.9 – 15.1 m/s	12.5 – 20.8 m/s
Depth of cut	5 $\mu\text{m}$	4 $\mu\text{m}$	3 $\mu\text{m}$
Feed speed	483 – 4.83 $\mu\text{m}/\text{min}$	590 – 5.9 $\mu\text{m}/\text{min}$	140 – 2100 $\mu\text{m}$
Feed rate	254 – 2.54 nm/rev	236 – 2.36 nm/rev	38 – 882 nm/rev
Uncut chip thickness	1 – 100 nm	1 – 100 nm	20 – 440 nm
Width of cut	12 $\mu\text{m}$	10 $\mu\text{m}$	6 – 19 $\mu\text{m}$
Bulk temperature	293 K	293 K	293 K

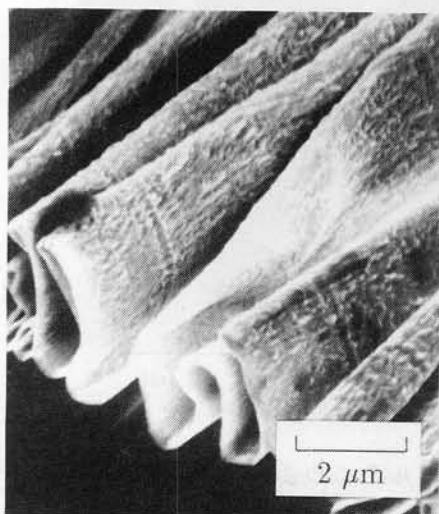
## 3.2.5 切りくずの観察

切りくずは粘着テープを着けた紙の上に回収し、輝度および分解能の高い電界放射型電子銃を持つ SEM で観察した。表 3.5 に本研究で使用した日立製作所製の S-800 型の特性を示す。

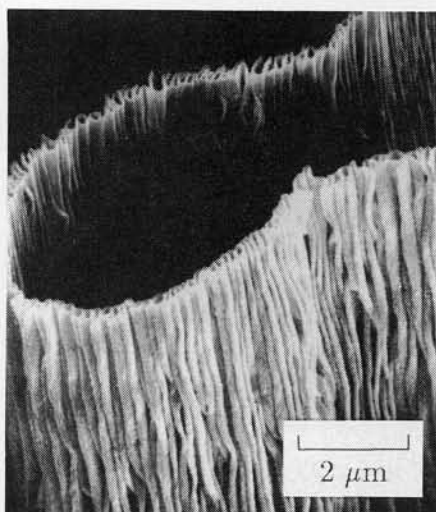
表 3.5 走査型電子顕微鏡 ( S-800 ) の特性

2次電子像分解能	20 Å 保証
倍率	× 20 - 30000
電子銃	クリュータイプ電界放射型電子銃
加速電圧	1 - 30 kV ( 1 kV ステップ )
エミッション引き出し電圧	0 - 6 kV
レンズ系	2段電磁レンズ縮小方式
対物レンズ	可動絞り (真空外より4孔切り替えおよび微調可能)

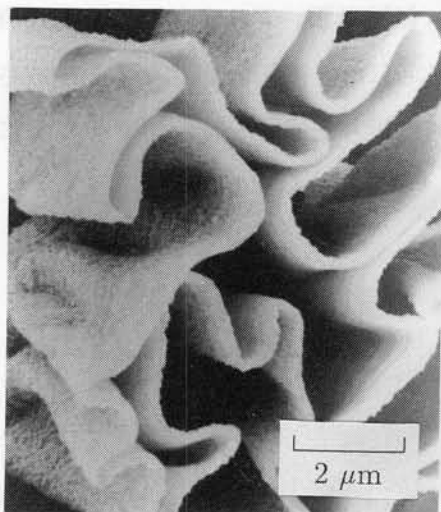
3.3 切りくずの観察例



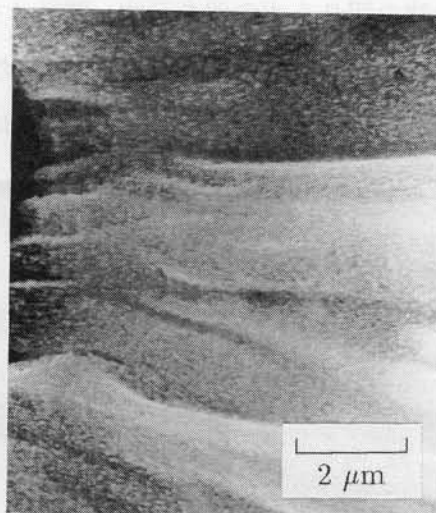
(a) 電気メッキ銅、 $t_n = 30$  nm



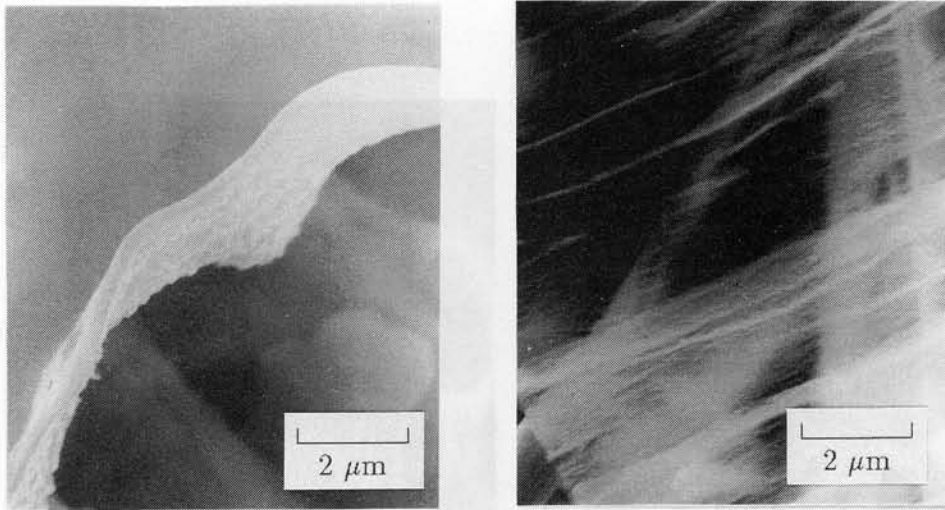
(b) 電気メッキ銅、 $t_n = 3$  nm



(c) 無酸素銅、 $t_n = 30$  nm



(d) 無酸素銅、 $t_n = 3$  nm



(e) アルミニウム、 $t_n = 30 \text{ nm}$

(f) アルミニウム、 $t_n = 3 \text{ nm}$

図 3.8 切削実験で得られた切りくずの SEM 写真

図 3.8 に切削実験 A および B で得られた、公称切り取り厚さ  $t_n$  が 30 nm および 3 nm の時の切りくずの例を示す。電気メッキ銅、無酸素銅、アルミニウムともに有効切れ刃長さすなわち切削幅の全域にわたって安定した連続型の切りくずが生成されている。また、切りくずはひだのように規則的に折り畳まれ、 $t_n$  が小さくなるに

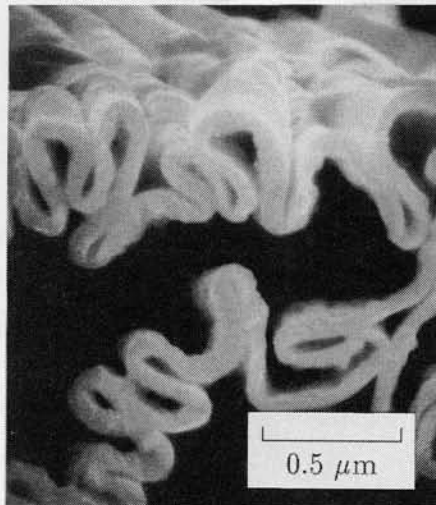


図 3.9 電気メッキ銅の切りくず側面の SEM 写真  $t_n = 30 \text{ nm}$

表 3.6 電気メッキ銅の切りくず厚さ測定値

$t_n$ (nm)	100	30	10	3	1
$t$ (nm)	250	71	47	28	20

したがって、そのひだが細かくなっている。これは従来の切削における切りくずには観察されなかった特徴である。

図 3.9は、 $t_n = 30$  nm での電気メッキ銅の切りくず側面の SEM 写真を示し、切りくずが規則的に折り畳まれている様子がよくわかる。このような切りくず側面の SEM 写真から切りくず厚さ  $t$  を測定する。表 3.6 は切削実験 A によって得られた種々の切り取り厚さでの電気メッキ銅の切りくず厚さを測定した結果を示す。

### 3.4 実験装置の運動精度の検討

#### 3.4.1 最小切り取り厚さの重要性

工作機械が理想的な運動をしているとすれば、切削加工の幾何学的精度は工作物の表面から工具が実際に削り取る材料の厚さ、すなわち有効切り取り厚さの精度によって決定される。この有効切り取り厚さは、工具形状と切削条件から計算される公称切り取り厚さとは必ずしも一致しない。図 3.10 は切り取り厚さの公称値  $t_n$  と有効値  $t_e$  との関係を示す [22]。ある  $t_n$  を与えたときに  $t_e$  の大きさがどの程度になるかは通常前もって知ることが困難であるし、 $t_e$  は刃先近傍の切削現象の不安定さのために確立的に変動する。この変動の幅の絶対値  $t_R$  を切り取り厚さにおける分解能と定義することにする。 $t_R$  は安定した切りくず排出が行われている間はほぼ一定値を保つが、切り取り厚さが極めて小さくなると、切りくずの排出が不安定になり、いわゆる切削とラビング (rubbing) との遷移領域に入る。この安定して切りくずが排出される限界の切り取り厚さを最小切り取り厚さ (Minimum Thickness of Cut) と定義することにする。切り取り厚さの分解能および最小切り取り厚さは切削加工における幾何学的形状精度の到達限界を直接支配するとともに、工作機械や

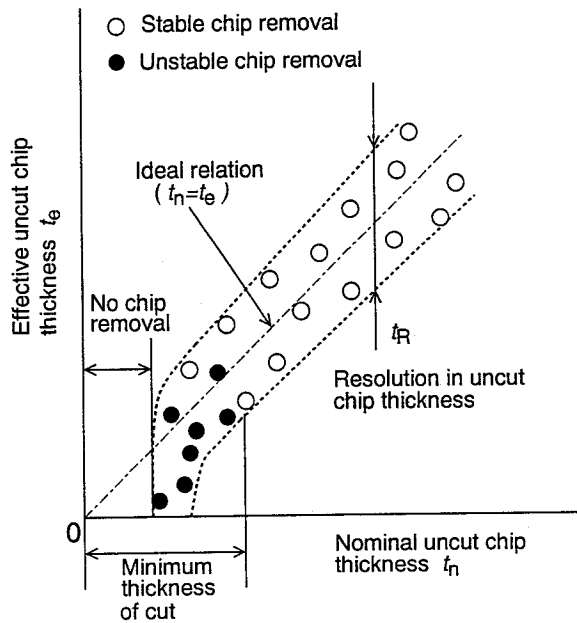


図 3.10 公称切り取り厚さと有効切り取り厚さとの関係

その制御機構の設計における精度目標という観点から重要な意味を持つ。また、これらの加工精度の到達限界を決定するふたつの指標の関係は今のところ明かではないが、その大きさはおそらく同程度であると思われる。切削加工における最小切り取り厚さの概念はかなり古くから提唱されているが[23]、超精密切削加工の精度限界を考える上でその重要性が注目されだしたのは最近のことである[18][24]。

### 3.4.2 切り取り厚さの再現性

前述のように、切りくず形態から見る限り、公称切り取り厚さがナノメートルレベルにまで小さくなくても安定した切りくずの排出が行われているように見える。しかし、このような極微小切削においても、果たして切れ刃が常に、しかも、確実に工作物表面を削り取っているのかという疑問が残る。そこで、最小切り取り厚さを定量的に議論する前に、まず工具と工作物の間の相対位置、公称および有効切り取り厚さのナノメートルレベルでの再現性を検討する必要がある。

本研究に用いた切削実験機において、運動精度、剛性、振動減衰能などの点から、切り取り厚さの再現性に最も大きく影響するのはスピンドルの回転振れの再現性



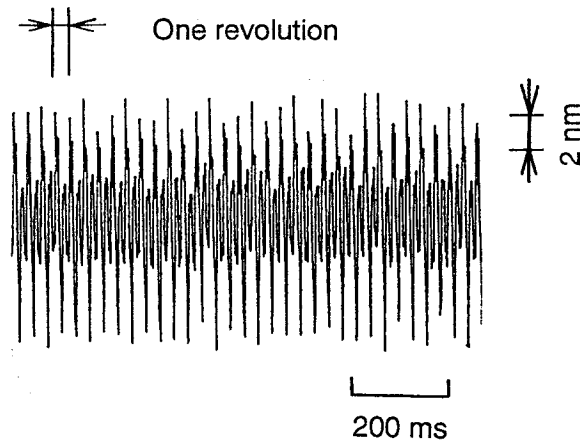


図 3.11 静圧空気軸受け軸方向の回転再現性

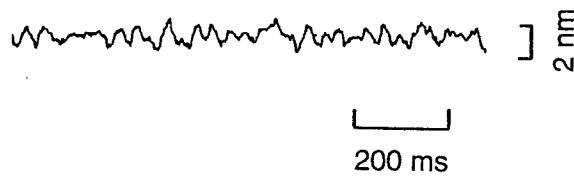


図 3.12 静圧空気軸受け静止時の軸と軸受け間の相対変位

である。図 3.11 は、本切削実験機の主軸に採用されたものと同機種 ( Professional Instruments 社 Model 4B ) の空気静圧スピンドルを防振台上に載せたグラナイトベース上に設置して、正面旋削における工具刃先に相当する位置で、軸方向の回転振れを実測した結果である。回転振れの絶対値は 20 nm 程度であるが、回転振れの包絡線の振幅、すなわち数十回転にわたる振れの再現性は 2 nm 程度である。また図 3.12 は、回転を止めた状態でこのスピンドルのロータとステータの間の軸方向相対変位を測定したもので、やはり 2 nm 程度の振幅を持つ振動が観察される。これは、床からベースを介して伝達される外部からの振動によって軸受が微小な強制変位を受け、静圧支持されているロータとの間に生ずる相対変位であり、この相対変位を 2 nm 以下に抑えることは極めて困難であると考えられる。したがって、この振動が工具・工作物間の相対位置の再現性、すなわち切り取り厚さの再現性を限界づける

表 3.7 切削力による切れ刃の弾性変形による後退量の推定

$t_n$ (nm)	100	30	10	3	1
$t$ (nm)	250	71	47	28	20
$\phi$ (deg)	23	24	13	6.6	3.0
$F_c$ (mN)	35	9.5	5.2	3.1	2.1
$F_t$ (mN)	14	3.6	3.3	2.4	1.8
$\delta_c$ (nm)	0.39	0.11	0.06	0.03	0.02
$\delta_t$ (nm)	0.23	0.06	0.06	0.04	0.03

可能性がある。実際に本実験においても、 $t_n$ が10 nm以上の時には一本の連続した切りくずが排出されるが、 $t_n$ が3 nmでは不連続になり、1 nmではさらにその長さが短くなっている、この結果は $t_n$ が工具・工作物間の相対位置再現性の限界である2 nm程度に近づくと、公称切り取り厚さそのものが変動し、空切削や計算値より大きい公称切り取り厚さでの切削が行われる可能性があることを示唆している。しかしながら、図 3.11 からわかるように、全体としての回転振れの再現性は2 nmであっても、隣合う主軸回転周期毎の再現性、すなわち瞬間的な切り取り厚さの変動を決定する再現性が1 nm以上になる可能性は極めて少ないといえる。また、切りくず厚さ $t$ が小さくなるに従って小さくなっていることから、少なくとも $t_n$ が1 nmの時に $t_c$ が3 nm以上になるという極端な現象は起こっていないと考えてよい。

一方、有効切り取り厚さの再現性には切削抵抗による工具切れ刃の逃げが影響する。しかし切削抵抗は極めて小さく実測が困難であるため、第2章 2.2.1 小節で述べた、Krystof の提唱した最も単純な単一せん断面モデル [5] を用いて、本切削実験における切削抵抗を推定した。同モデルによれば、被削材のせん断強さ $\tau$ 、せん断面積 $A_0$ 、せん断角 $\phi$ から切削主分力 $F_c$ 、背分力 $F_t$ を計算することができる。本実験では工具すくい角が $0^\circ$ であるので $\phi$ は $t_n$ と $t$ から、 $A_0$ は $t_n$ および図 3.1 に示す工具形状と切り込み $d$ から計算できる。 $\tau$ は極微小切削であることを考慮して、銅の理想せん断強さ [26]  $\tau = G/2\pi = 7.69$  GPa、を用いた。ここで $G$ は銅多結晶のせん断

弾性係数で  $4.83 \times 10^{10}$  Pa [27] とした。表 3.7 は、これらの値および切削抵抗と前述の実験機の主軸・工具台間の剛性から計算した工具の主分力および背分力方向への逃げ量  $\delta_c$ 、 $\delta_t$  をまとめたものである。この結果から、切削抵抗による工具逃げ量は  $t_n$  に比べて十分小さいと考えられる。

以上の結果より極微小切削における最小切り取り厚さは少なくとも 1 nm 程度以下であろうと推定できる。

### 3.5 結 言

極めて注意深く電気メッキ銅の極微小切削実験を行い、得られた切りくず形態を高分解能走査型電子顕微鏡によって観察した結果、次のことが明らかになった。

1. 公称切り取り厚さがナノメートルレベルにまで小さくなくても安定した連続型の切りくずが生成される。
2. 切りくずはひだのように折り畳まれた特有の形態を示し、切り取り厚さが小さくなるにしたがい、ひだが細くなる。
3. 公称切り取り厚さの再現性を支配する工具・工作物間の相対位置の再現性を詳細に検討した結果、使用した極微小切削実験機では公称切り取り厚さの再現性は 1 nm 以下であると考えられる。
4. 切削抵抗による工具の逃げは公称切り取り厚さに比べて十分小さく有効切り取り厚さの再現性は極めて高い。

## 第4章

### 切りくず形態

#### 4.1 緒言

本章では電気メッキ銅をナノメートルレベルの切り取り厚さで切削した時に生じる切りくずの形態をSEM写真によって詳細に観察し、極微小切削における切削機構を解明することを試みた。また、細かく一様に折り畳まれた特異な切りくず形態の生成過程を明らかにし、切りくず・工具間の摩擦力を推定した。その結果、工具・被削材間の摩擦力は超高真空中での銅とダイヤモンドの摩擦実験結果と一致し、微小切削現象の解明には、このような接触・摩擦モデル実験結果が適用できることを示した。

#### 4.2 切りくず形態からみた極微小切削機構

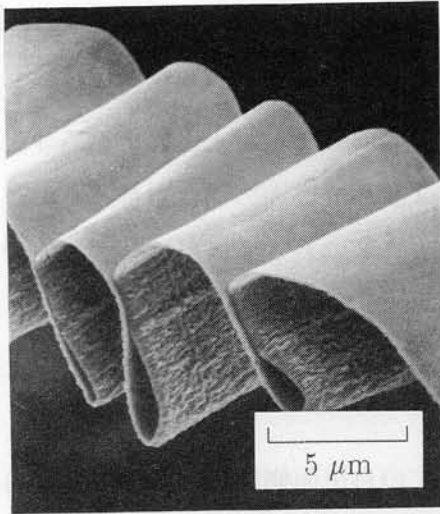
切削実験Aによって得られた、公称切り取り厚さ $t_n$ が100 nmから1 nmの時の電気メッキ銅の切りくずを図4.1、図4.2に示す。 $t_n$ がナノメートルレベルにまで小さくなくても、有効切れ刃長さすなわち切削幅の全域にわたって、安定した連続型の切りくずが生成されている。また、切りくずはひだのように折り畳まれ、 $t_n$ が小さくなるにしたがってそのひだが細くなる。これは従来の切削における切りくずには観察されなかった特徴である。

図4.3は、電気メッキ銅の切りくず側面のSEM写真から、各切り取り厚さでの切りくず厚さ $t$ および切削比 $t_n/t$ を実測したものである。 $t_n$ が10 nm以下になると $t$

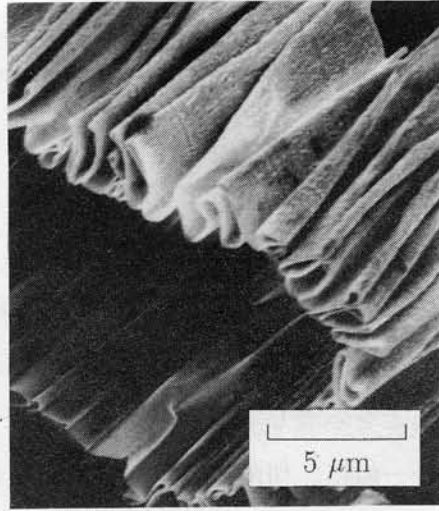
はほぼ一定の値に近づく傾向を示し、 $t_n$ が大きい時には、約0.4で、ほぼ一定であった切削比は1桁以上小さくなる。これは $t_n$ が切れ刃稜丸み半径より小さくなり、実効すくい角が負になったためである。この結果から、この工具は10 nm以下の切れ刃稜丸み半径を持っていると推定できる。切削実験後の工具切れ刃および $t_n = 1$  nmでの切りくずの工具すくい面側のSEM写真を図4.4に示す。すくい面にはクレータ摩耗が観察されるが、工具切れ刃稜自体はまだ摩耗がそれほど進んでおらず、鋭い切れ刃が残っていることを確認した。また、工具すくい面の切れ刃稜近く、おそらくダイヤモンド原石中の欠陥にもとづくと考えられる、極微小な突起と切りくずに残る裂け目(共に白矢印で示す)の位置が一致しているのが観察される。これは、ダイヤモンド工具を用いた切削では工具輪郭が極めて高い精度で仕上げ面に転写することを示唆している。

さて、一般に、切削によって得られた切りくずの自由面側においては切削方向に垂直に周期的な微細構造が観察される。この微細構造をラメラ(Lamella)と呼ぶ[28][29][30]。被削材と加工条件が決まればこのラメラの周期は極めて安定して一定になる。ここでラメラの周期と切りくずが細かく折り畳まれている現象とは別のものである。切りくずが細かく折り畳まれるのは、切削直後の強い相互作用によりすくい面から離れるとすぐに凝着を起こすため、ラメラとは全く別の物である。

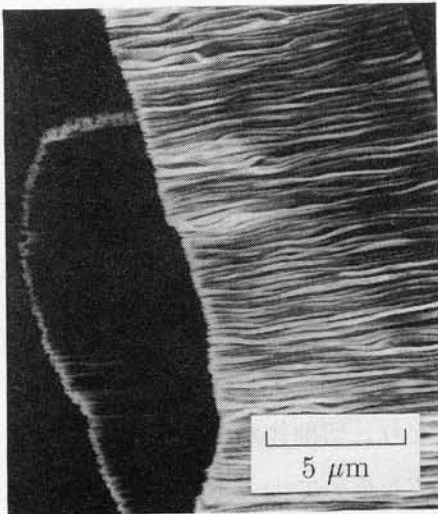
図4.5に電気メッキ銅の切りくずの自由面側を示す。 $t_n$ が大きいときには(a)のように被削材の粒界で生じたと思われる著しい凹凸が見られ、 $t_n$ が10 nm以下では(b)のように間隔および凹凸が極めて小さいラメラ様の構造が見られる。(a)に見られる凹凸は、被削材がせん断領域で変形を受ける時に銅粒子間の結晶異方性のために粒子によってせん断歪の大きさが異なり、粒界で段差を生じた結果であると考えられる。また、実効すくい角が大きな負の値をとり、切削比が非常に小さくなるナノメートルレベルの切り取り厚さでは、せん断歪が極めて大きくなるため、ラメラ間隔が小さくなるとともに、変形を受けた結晶粒は全て同一方向に近くなるまで回転してしまい、(b)のように異方性の影響が目立たなくなったものと考えられる。また転位の密度を $10^6/\text{cm}^2$ 程度だと考えると、 $0.1 \mu\text{m}$ ごとに転位が存在することになるが、公称切り取り厚さが小さくなると変形領域に転位が存在せず、工具切れ刃に



(a)  $t_n = 100 \text{ nm}$

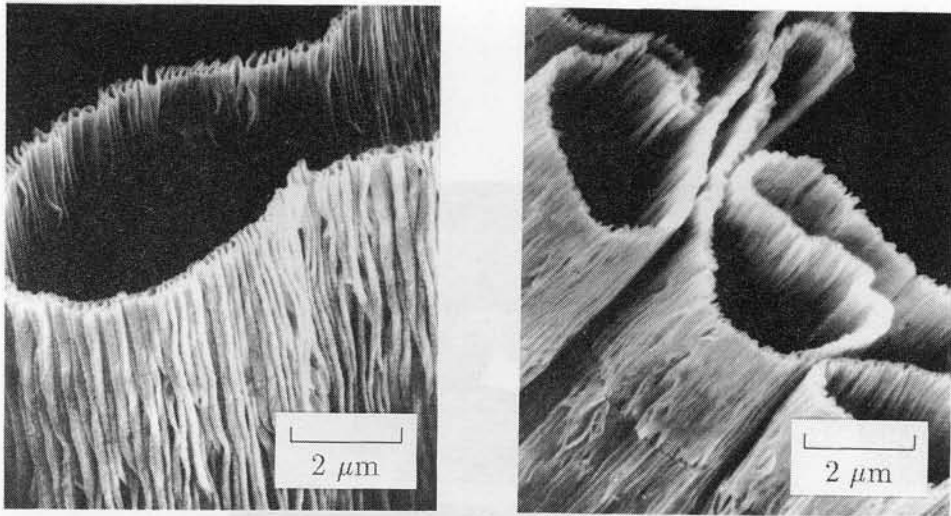


(b)  $t_n = 30 \text{ nm}$



(c)  $t_n = 10 \text{ nm}$

図 4.1 切削実験 A で得られた切りくずの SEM 写真



(a)  $t_n = 3 \text{ nm}$

(b)  $t_n = 1 \text{ nm}$

図 4.2 切削実験 A で得られたナノメートルレベルの切り取り厚さにおける切りくずの SEM 写真

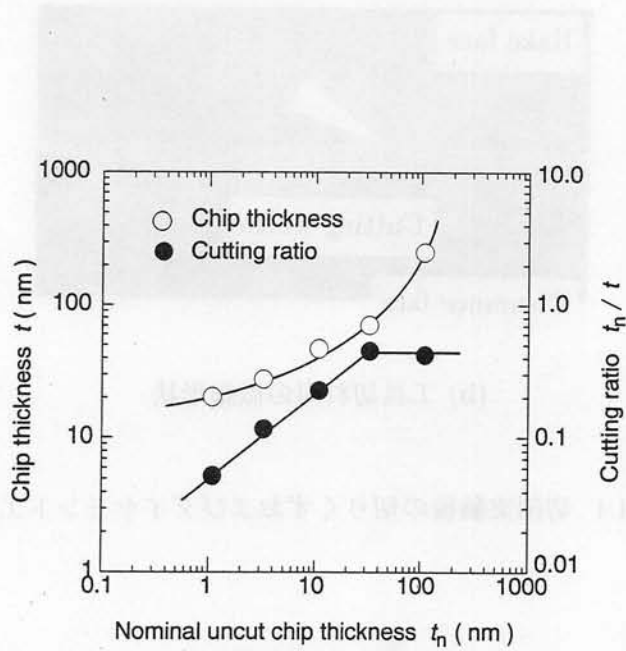
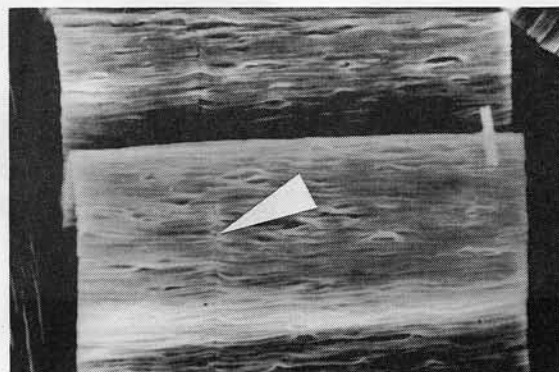
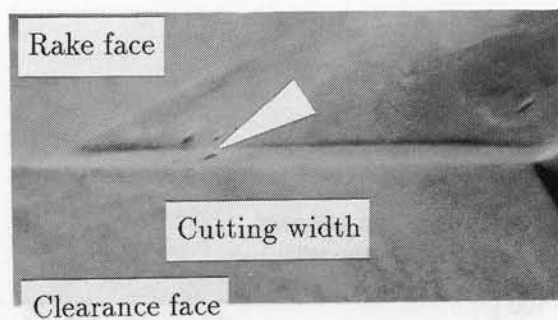


図 4.3 公称切り取り厚さに対する切りくずの厚さおよび切削比の関係



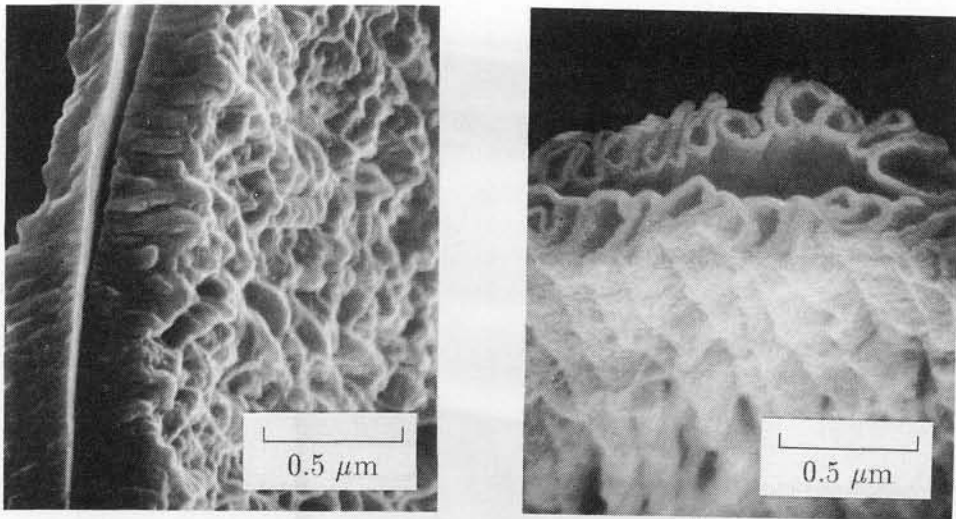
(a) 切りくず工具面側



(b) 工具切れ刃の微細形状

図 4.4 切削実験後の切りくずおよびダイヤモンド工具





(a)  $t_n = 100 \text{ nm}$

(b)  $t_n = 3 \text{ nm}$

図 4.5 切りくず自由表面側

作用する転位源が次々と転位を発生し順次移動して均一な変形がおこると考えられる。図 4.6 は、種々の切り取り厚さで得られた切りくず自由表面側に現れるラメラ構造の平均間隔の変化を示し、 $t_n$ が小さくなるにしたがって小さくなっている。以

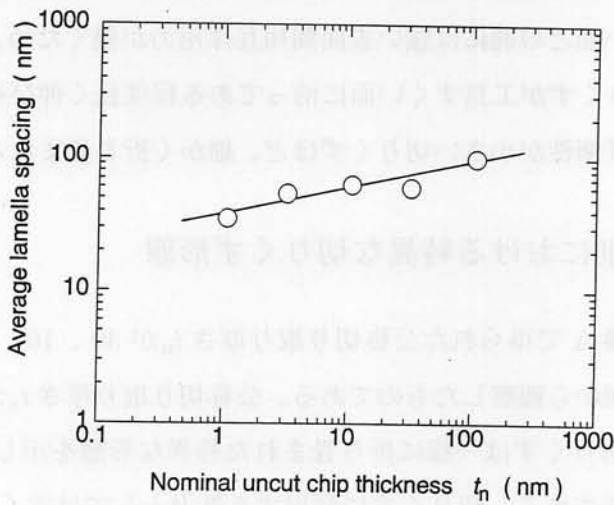


図 4.6 公称切り取り厚さに対する平均ラメラ間隔

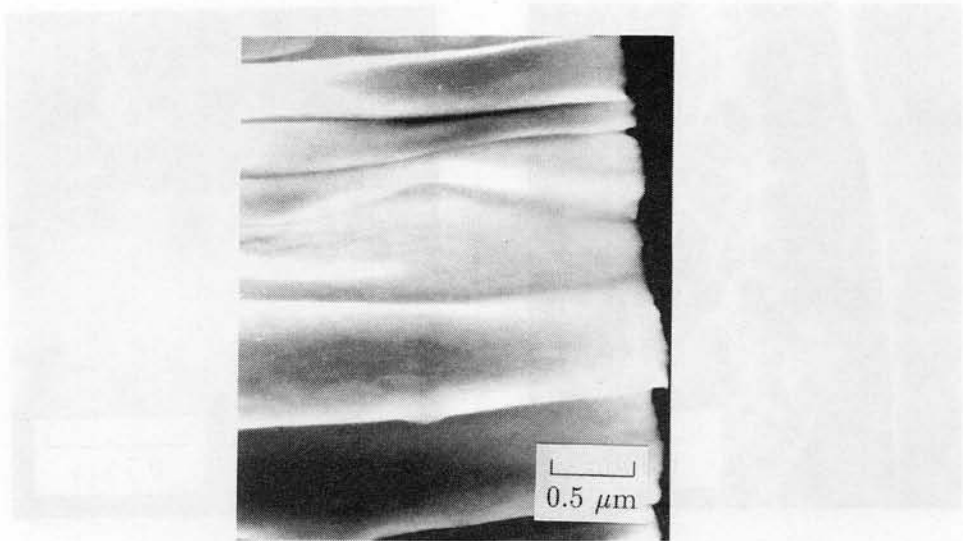


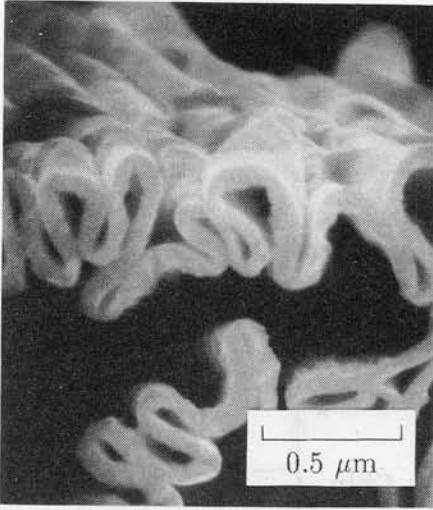
図 4.7 切りくず工具面側 ( $t_n = 30 \text{ nm}$ )

上に示した切りくず形態および図 4.3、図 4.6 に見られる諸元の連続性から、切り取り厚さがナノメートルレベルに小さくなっても切りくず排出機構そのものには通常切削と比べて大きな違いがないと考えられる。

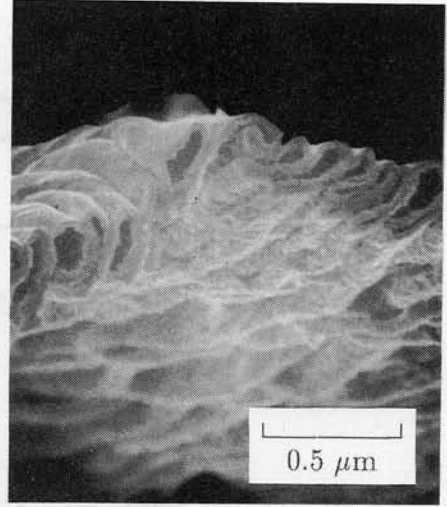
一方、工具すくい面と接触する側では変形が拘束されるため、図 4.7 に示すように  $t_n$  の大きさにかかわらず極めて滑らかな面が観察される。この新生面同志あるいは新生面と工具すくい面との間には強い表面間相互作用力が働くため、図 4.8、図 4.9 に示すように、切りくずが工具すくい面に沿ってある程度長く伸びると挫屈を生じ、厚さが薄くその曲げ剛性が小さい切りくずほど、細かく折り畳まれると考えられる。

### 4.3 極微小切削における特異な切りくず形態

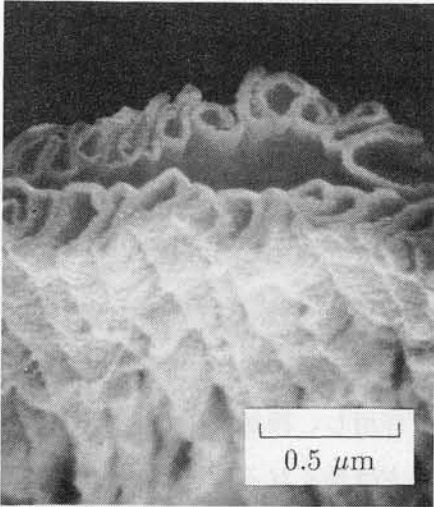
図 4.8 は切削実験 A で得られた公称切り取り厚さ  $t_n$  が 30、10、3 及び 1 nm の時の切りくずを側面から観察したものである。公称切り取り厚さ  $t_n$  が 30 nm 程度よりも小さくなれば切りくずは一様に折り畳まれた特異な形態を示し、 $t_n$  が小さくなるほど細かく折り畳まれる。切りくずに作用する外力としてはすくい面との界面での摩擦力のみであり、曲げモーメントは働かないので、切りくずのこの特異な形態



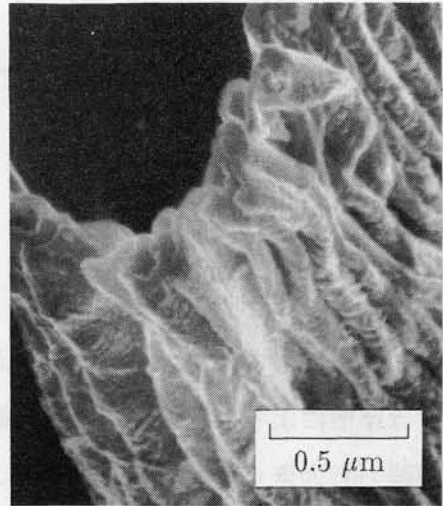
(a)  $t_n = 30$  (nm)



(b)  $t_n = 10$  (nm)



(c)  $t_n = 3$  (nm)



(c)  $t_n = 1$  (nm)

図 4.8 切り取り厚さがナノメートルレベルでの切りくずの特異形態

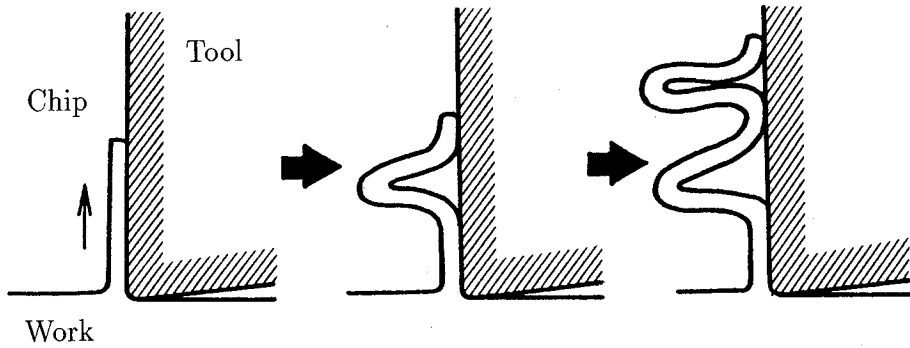


図 4.9 特異形態の切りくず生成モデル

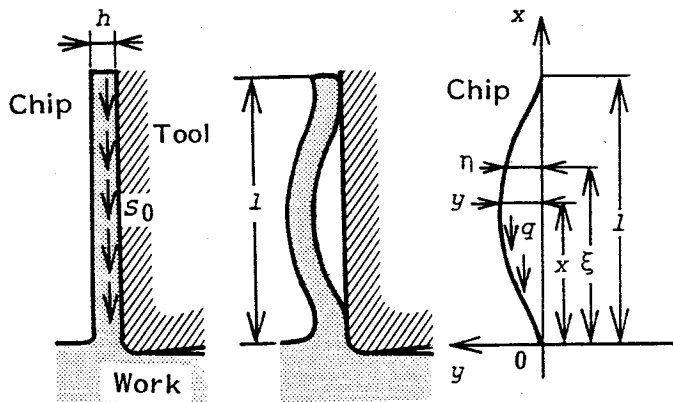


図 4.10 切りくずの挫屈解析モデル

は挫屈によって生じると考えられる。このような切りくず形成過程のモデルを図 4.9 に示す。切りくずは初め工具すくい面に沿って長く伸びていくが、すくい面との界面では摩擦による接線力が切れ刃先端に向かって作用し、接触面積が大きくなるほど接線力も大きくなっていく。一方、切りくずの方は長くなるほど挫屈しやすくなる。挫屈が生じた時の解析モデルを図 4.10 に示す。切りくずの下端を原点とし、厚さ  $h$ 、幅  $b$  の切りくずが工具すくい面から連続的に接線力を受け、挫屈した時の長さを  $l$  とする。切りくず下端は鉛直に固定してあり、上端はすくい面から離れず、曲げモーメントは生じないとした [31]。

単位長さ当たりの等分布荷重  $q$  を受ける材の撓み曲線の微分方程式は、切りくずの断面 2 次モーメントを  $I$ 、弾性率を  $E$  とした時

$$EI \frac{d^2 y}{dx^2} = \int_x^l q(\eta - y) d\xi \quad (4.1)$$

となる。ここに (4.1) 式の右辺の積分は等分布荷重  $q$  によって生じる任意の位置  $x$  ( $0 \leq x \leq l$ ) における曲げモーメントを表している。(4.1) 式の解を得るために、両辺を  $x$  で微分すれば (4.2) 式を得る。

$$EI \frac{d^3 y}{dx^3} = -q(l - x) \frac{dy}{dx} \quad (4.2)$$

上式の右辺は位置  $x$  での断面のせん断力を表す。簡単のため、 $x$  の代わりに、(4.3) 式のような新しい独立変数  $z$  を用いる。

$$z = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{q}{EI}} (l - x)^3 \quad (4.3)$$

従って、

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{dy}{dz} \sqrt[3]{\frac{3qz}{2EI}} \quad (4.4)$$

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \sqrt[3]{\left(\frac{3q}{2EI}\right)^2} \left( \frac{1}{3} z^{-\frac{1}{3}} \frac{dy}{dz} + z^{\frac{2}{3}} \frac{d^2 y}{dz^2} \right) \quad (4.5)$$

$$\frac{d^3 y}{dx^3} = \frac{3q}{2EI} \left( \frac{1}{9} z^{-1} \frac{dy}{dz} - \frac{d^2 y}{dz^2} - z \frac{d^3 y}{dz^3} \right) \quad (4.6)$$

となる。これらを (4.2) 式に代入して、変数変換を行ない、

$$\frac{du}{dz} = u \quad (4.7)$$

とすれば (4.8) 式を得る。

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{du}{dz} + \left(1 - \frac{1}{9z^2}\right) u = 0 \quad (4.8)$$

この方程式は Bessel の微分方程式であるので、(4.8) 式の一般解は、

$$u = C_1 z^{-\frac{1}{3}} \left( 1 - \frac{3z^2}{2 \cdot 4} + \frac{3^2 z^4}{2 \cdot 4 \cdot 4 \cdot 10} - \dots \right) + C_2 z^{\frac{1}{3}} \left( 1 - \frac{3z^2}{2 \cdot 8} + \frac{3^2 z^4}{2 \cdot 8 \cdot 4 \cdot 14} - \dots \right) \quad (4.9)$$

となる。 $C_1$ 、 $C_2$ は積分定数で材の両端の条件を満足するように定める。

上端の変位とモーメントが0であることより、 $x=l$ において

$$y = 0, \quad \frac{d^2 y}{dx^2} = 0 \quad (4.10)$$

下端で変位と傾きが0より、 $x=0$ において

$$y = 0, \quad \frac{dy}{dx} = 0 \quad (4.11)$$

これらの境界条件より、挫屈が起こる時の材に掛かる力  $ql$  を定める次式を得る。

$$\left( \frac{2\sqrt{ql^3}}{3\sqrt{EI}} \right)^{-\frac{1}{3}} \left( 1 - \frac{3}{2 \cdot 4} \frac{4ql^3}{9EI} + \frac{3^2}{2 \cdot 4 \cdot 4 \cdot 10} \left( \frac{4ql^3}{9EI} \right)^2 - \dots \right) = 0 \quad (4.12)$$

上式を満足する  $ql$  の最小値は、 $I = bh^3/12$  であるから、

$$(ql)_{cr} = \frac{\pi^2 EI}{(1.122l)^2} = \frac{\pi^2 E}{(1.122l)^2} \frac{bh^3}{12} \quad (4.13)$$

となり、これが等分布荷重の挫屈値である。これよりすくい面上に働く単位面積当たりの摩擦力  $S_0$  は、

$$S_0 = \frac{q}{b} = 0.6533E \left( \frac{h}{l} \right)^3 \quad (4.14)$$

となる。切りくず側面の SEM 写真から実測したそれぞれの切りくずの厚さでの  $h$  と  $l$  のグラフは図 4.11 のようにほぼ直線関係にあり、相関係数は 0.989 になった。このことから、単位面積当たりの摩擦力  $S_0$  は一定になると考えてよい。グラフの傾きより、

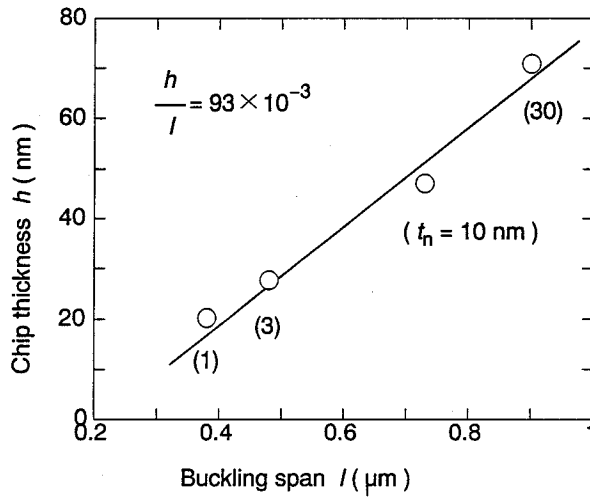


図 4.11 挫屈長さと切りくず厚さの関係

$$\frac{h}{l} = 9.3 \times 10^{-2} \tag{4.15}$$

となる。この値を ( 4.12 ) 式に代入すると、単位面積当たりの摩擦力は、

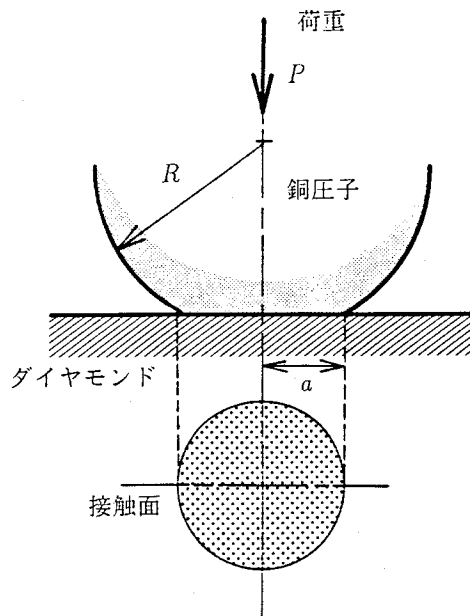


図 4.12 銅・ダイヤモンドの摩擦実験

$$S_0 = 6.8 \times 10^7 \text{ (N/m}^2\text{)} = 6.9 \text{ (kgf/mm}^2\text{)} \quad (4.16)$$

となる。

前述した解析によって推定した工具すくい面と切りくずの単位接触面積当たりの摩擦力  $S_0$  と、Pepper の報告している、 $6.7 \times 10^{-7}$  Pa の超高真空中でアニールしたダイヤモンド研磨面と Ar イオンスパッタによって清浄化した Cu 球との接触摩擦実験結果 [32][33][34] との比較を行なった。この摩擦実験は室温で  $6.7 \times 10^{-7}$  Pa の超高真空中で行なわれ、図 4.12 に示すように、半径 3.17 mm の銅の球状圧子をダイヤモンド研磨平面に荷重 560 mN で接触させ、摩擦係数を測定したものである。ダイヤモンドの摩擦係数はダイヤモンドの表面状態が大きく影響するため、この実験ではダイヤモンドの表面に吸着した気体分子を除去するためにアニールを行なっている。図 4.13 に示すように、ダイヤモンド表面に気体分子が吸着していれば摩擦係数が小さく、吸着気体分子が脱離するにしたがって摩擦係数が大きくなる。また、静止摩擦係数と運動摩擦係数は同じであったと報告されている。

ここでは  $S_0$  との比較を行うために報告されている摩擦係数から単位面積当たりの摩擦力を推定する。銅圧子とダイヤモンド表面の接触円半径  $a$  は、銅の圧子半径を  $R$ 、接触荷重  $P$ 、銅とダイヤモンドのヤング率とポアソン比をそれぞれ、 $E_{\text{Cu}}$ 、 $E_{\text{Dia}}$ 、 $\nu_{\text{Cu}}$ 、 $\nu_{\text{Dia}}$ 、とすると、Hertz の弾性接触論より、

$$a^3 = \frac{4k}{3E_{\text{Dia}}} PR \quad (4.17)$$

$$k = \frac{9}{16} \left\{ (1 - \nu_{\text{Dia}}^2) + (1 - \nu_{\text{Cu}}^2) \frac{E_{\text{Dia}}}{E_{\text{Cu}}} \right\} \quad (4.18)$$

と求められる。これらの式に

$$R = 3.17 \times 10^{-3} \text{ (m)} \quad (4.19)$$

$$P = 5.58 \times 10^{-1} \text{ (N)} \quad (4.20)$$

$$E_{\text{Cu}} = 1.29 \times 10^{11} \text{ (N/m}^2\text{)} \quad (4.21)$$

$$E_{\text{Dia}} = 1.00 \times 10^{12} \text{ (N/m}^2\text{)} \quad (4.22)$$



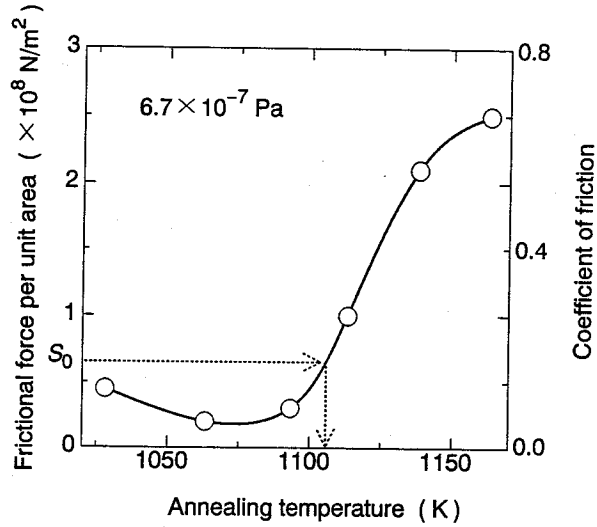


図 4.13 ダイヤモンドのアニール温度による銅とダイヤモンドの摩擦力の変化

$$\nu_{\text{Cu}} = 0.34 \tag{4.23}$$

$$\nu_{\text{Dia}} = 0.29 \tag{4.24}$$

を代入して、接触円半径を求めると、

$$a = 2.17 \times 10^{-5} \text{ (m)} \tag{4.25}$$

となる。これより接触円面積は、

$$A = \pi a^2 = 1.48 \times 10^{-9} \text{ (m}^2\text{)} \tag{4.26}$$

となる。従って、荷重と接触面積から計算される単位面積当たりの荷重  $F_0$ は、

$$F_0 = \frac{P}{A} = 3.76 \times 10^8 \text{ (N/m}^2\text{)} \tag{4.27}$$

となる。実験結果から求めた切りくず・工具間の単位面積当たりの摩擦力  $S_0$ と  $F_0$ から、切りくず・工具間の等価摩擦係数  $\mu$ を求めると、

$$\mu = 0.18 \tag{4.28}$$

となる。

図 4.13 より工具すくい面と切りくずの単位長さ当たりの摩擦力は、 $6.7 \times 10^{-7}$  Pa の超高真空中で 1100 K でアニールしたダイヤモンド研磨面と Ar イオンスパッタによって清浄化した Cu 球との接触界面に生じる摩擦力にほぼ等しいことがわかる。1100 K では、ダイヤモンド表面の吸着物質は完全には取り去られておらず、切削工具すくい面と切削によって生じた銅の新生表面との接触界面の状態に近いと考えられる。また切削直後の表面は活性なため折り畳まれると活性な表面同士が凝着を起こして離れなくなり、細かく一様に折り畳まれた切りくずが形成される。

#### 4.4 結 言

1. 切りくずはひだのように折り畳まれた特有の形態を示し、切り取り厚さが小さくなるにしたがい、ひだが細くなる。このひだは切りくずと工具すくい面との表面間相互作用力にもとづく切りくずの挫屈によって生じると考えられる。
2. 極微小切削では、切削力が微小なため切削力や工具・被削材間の相互作用力を直接測定するのは難しいが、切りくずの挫屈モデルを用いて工具すくい面・切りくず界面での摩擦力を求めたところ、超高真空中での摩擦力とほぼ等しいことが明らかになった。
3. 今後、極微小切削機構の解明に当たっての手掛りとして工具および被削材間の界面現象を考慮する必要がある、超高真空中での摩擦モデル実験結果が適用できることが示された。

## 第 5 章

# 計算機実験と切削実験との連続性

### 5.1 緒言

計算機実験は、前述したように、極微小切削現象の解析には極めて有効な手段である。しかし、使用する計算機の容量および演算速度からの制限を受けるため、原子数の大きなモデルを必要とする、切り取り厚さが大きい時の加工現象を解析することは困難である。一方、実験技術上の限界のため、ナノメートルレベル以下の切り取り厚さでの切削実験もまた極めて困難である。したがって、計算機実験結果の妥当性を確かめるためには切削実験結果との間の連続性を検討する必要がある。

本章では、計算機実験および第 3 章で述べた、切削実験 A、B によって得られた結果を、切りくず形態および切削抵抗の観点から比較し、両者の連続性を検討する。

### 5.2 切りくず形態の比較

被削材原子 5400 個、工具原子 676 個から成るモデルを用い、1 fs の時間ステップで 1750000 ステップまでの MD による計算機実験を行った結果の一例を図 5.1 に示す。定常切削状態になると巨視的な見かけのせん断角および切削比は切削速度が 20 m/s の時では、 $6.2^\circ$ 、0.11 でほぼ一定になる。表 5.1 はこれらの値を切削実験と比較したものである。公称切り取り厚さを切れ刃稜丸み半径で無次元化した値、 $t_n/R$ 、が同じ程度であれば、計算機実験および切削実験から得られたせん断角、 $\phi$ 、と切削比、 $t_n/t$ 、がほぼ等しくなっている。この結果は両実験の間で刃先近傍での被削材

表 5.1 計算機実験と切削実験との比較

Method	$V$ (m/s)	$t_n$ (nm)	$t$ (nm)	$R$ (nm)	$t_n/R$	$\phi$ (degree)	$t_n/t$
MD simulation	20	0.5	4.4	2.0	0.25	6.2	0.11
Cutting experiment	12 – 20	3.22	27.7	10	0.32	6.6	0.12

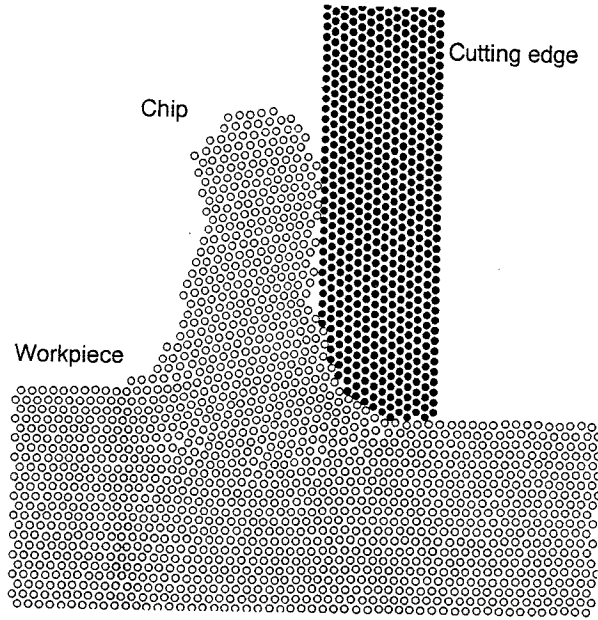
の変形挙動に相似則が成り立つことを示唆しており、計算機実験の妥当性を裏付けている。切削速度が 200 m/s と大きくなると、断熱的な変形のためせん断角、切削比はそれぞれ 11.2°、0.20 とより大きくなる。これらの結果はよく知られている切りくず挙動と良い一致を示している。

### 5.3 切削抵抗の比較

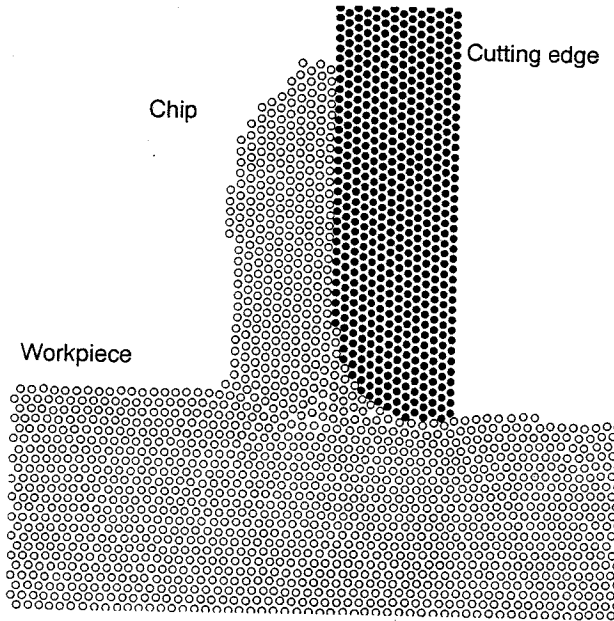
計算機実験による切削抵抗は切削中のダイヤモンド工具表面の炭素原子が受ける力の合力として計算される。変形領域に存在する原子数が少ないために切削抵抗は転位の発生、移動などの影響を受け、図 5.2 に示すように、工具の進行にともなって激しく変動する。また、計算機実験では単一格子面の 2 次元モデルを用いているので、切削実験結果との比較には定常切削状態に達した時の切削抵抗の平均値を被削材の格子面間隔で除した値を用いた。このとき隣接する格子面上の原子から受ける相互作用力の影響を考慮していないので切削抵抗は 3 次元モデルを用いた場合に比べてやや小さく計算されることがあるが、その場合でも減少の割合は最大 20 % 程度である。

20 – 440 nm の比較的大きい切り取り厚さでの無酸素銅の切削実験 C では、工具シャンクに組み込んだ 10 mN の分解能を持つ水晶圧電型ロードワッシャによって主分力および背分力を実測し、単位切れ刃長さ当たりの切削抵抗を求めた。

1 – 100 nm の極微小切り取り厚さでの電気メッキ銅の切削実験 A では公称切り取り厚さが非常に小さく切削抵抗の測定が困難なため、公称切り取り厚さと SEM による切りくず厚さの実測値から、第 2 章で述べた最も単純な切削モデルである Krystof の単一せん断面モデル [5] を用いて切削抵抗を推定した。同モデルを用いれば、切削



(a) 切削速度 : 20 ( m/s )



(b) 切削速度 : 200 ( m/s )

図 5.1 分子動力学による切削実験

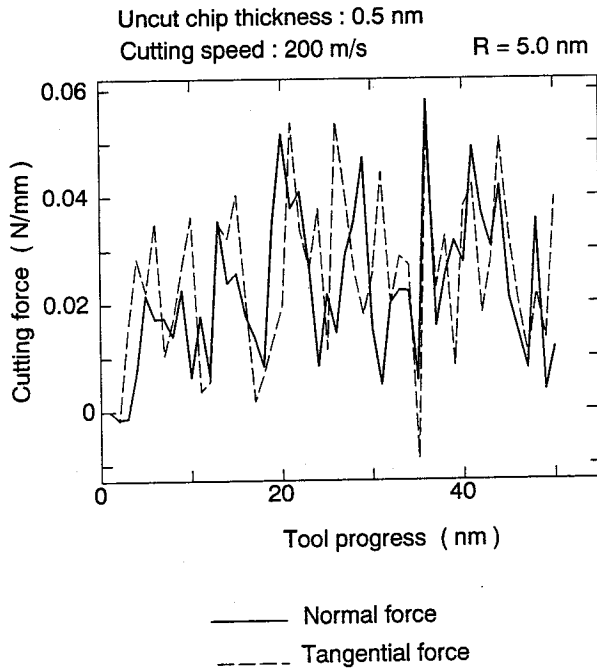


図 5.2 切削抵抗値の変動 (MD)

面積  $A_0$ 、せん断角  $\phi$ 、および被削材のせん断強さ  $\tau$  から切削主分力、 $F_c$ 、と背分力、 $F_t$ 、を計算することができる。本実験ではせん断領域が非常に小さくなること、および被削材が結晶粒の細かい電気メッキ銅であることを考慮して、せん断面上では銅の理想せん断応力 [26] のもとでせん断が生じていると仮定し、 $\tau = G/2\pi = 7.69 \text{ GPa}$  として切削抵抗を計算した。ここで  $G$  は銅多結晶のせん断弾性係数で  $4.83 \times 10^{10} \text{ Pa}$  とした [27]。

図 5.3 は以上の計算機実験および切削実験によって求められた単位切れ刃長さ当たりの切削抵抗主分力を公称切り取り厚さに対して示したもので、全データを通観すると、ほぼ同一の直線上にのっている。実験シリーズごとに小さな段差が見られるが、これは工具切れ刃稜丸み半径およびモデルの違いによるものである。丸み半径が大きければ切れ刃稜の押し込みおよびバニシ作用により切削抵抗が大きくなる。また、MD による切削抵抗値が MS よりもやや小さい値になっている理由は、せん断領域での温度上昇の効果が現われたものと考えられる。

図 5.4 は単位体積当たりの切削に費やされるエネルギーを示す比切削抵抗を比較したものである。横軸には工具切れ刃稜丸みの違いによる影響を除くために、変形領域近傍では応力分布の相似則が成り立つと考えて、丸み半径に対する公称切り取り厚さの比をとっている。この場合も全てのデータはほぼ同一直線上にのり。丸み半径に対する公称切り取り厚さの比が小さくなるほど比切削抵抗は大きくなる。また丸み半径に対する公称切り取り厚さの比が 0.5 よりも小さくなると、比切削抵抗の値は銅の凝集エネルギー（0 K の固体をばらばらの中性原子にするのに要するエネルギー）を超える。この結果は、公称切り取り厚さが小さくなるとせん断面以外での切れ刃稜近傍での被削材の変形にかなり多くのエネルギーが費やされ、被削材内の歪みエネルギーや熱エネルギーに変わることを示していると考えられる。

#### 5.4 結 言

1. 計算機実験によって得られた切りくず形態から推定されるせん断角および切削比は工具切れ刃稜丸みによって無次元化した切り取り厚さが同じ程度である切削実験結果と一致する。
2. 計算機実験と微小切削実験による切削抵抗および比切削抵抗の切り取り厚さに対する寸法効果はよい連続性を示す。
3. 以上の結果より、本研究で提案した計算機実験は極微小切削現象を良く模擬していると考えられる。

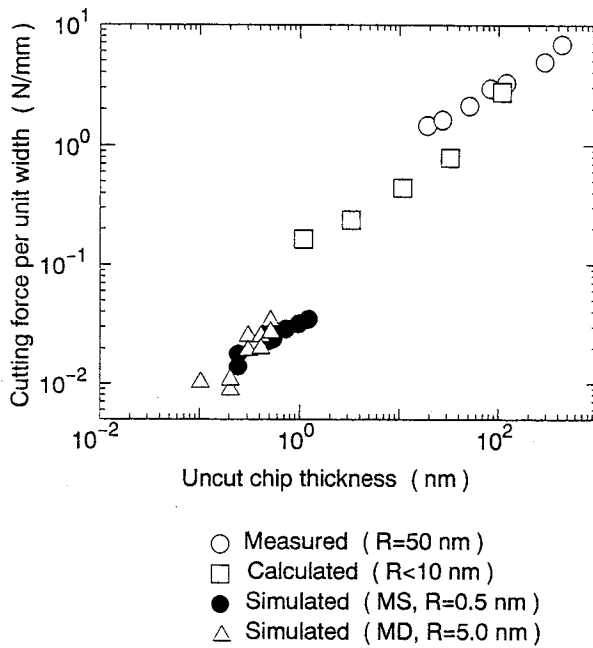


図 5.3 切削抵抗値の比較

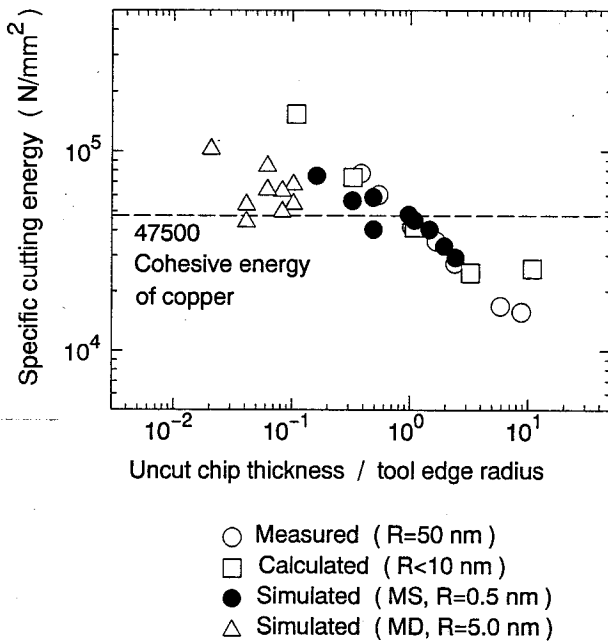


図 5.4 比切削抵抗値の比較



## 第 6 章

# 切りくずおよび仕上げ面生成過程

### 6.1 緒 言

切削加工における切りくず生成機構は有限要素法などの連続体力学にもとづく手法を用いた解析が報告されている [35]。しかし、原子レベルにまで踏み込んで解析した例はない。本章では分子動力学を用いて、転位の発生、移動および転位反応にもとづく切りくずおよび仕上げ面の生成過程を詳細に解析し、転位論の立場から検討した。また、切りくず生成過程および仕上げ面の粗さや変質層深さに対する被削材の結晶方位や切削条件の影響も調べた。

### 6.2 切りくず生成過程

極微小切削における切りくず生成機構を解析するために、工具切れ刃稜前方での被削材原子の挙動を 1 ps 毎に追跡し、転位の発生およびそのせん断領域での運動の軌跡を調べた。

図 6.1、図 6.2 は切れ刃の進行にともなう欠陥の発生過程を示している。なお、ここでは直観的な理解を助けるために、同じ格子面上にある原子を線で結び、欠陥の発生前に同一格子面上にあった原子に同じシャドウイングを施してある。工具の進行にともなって、切れ刃稜円筒部前方の被削材格子面では、切れ刃近傍の 1 ないし 3 個の原子が逃げ面側に押し込まれ、さらに前方の原子は切りくず排出方向に押し上げられ、格子面が挫屈を起こすように変形する。その結果、変形した格子面では局

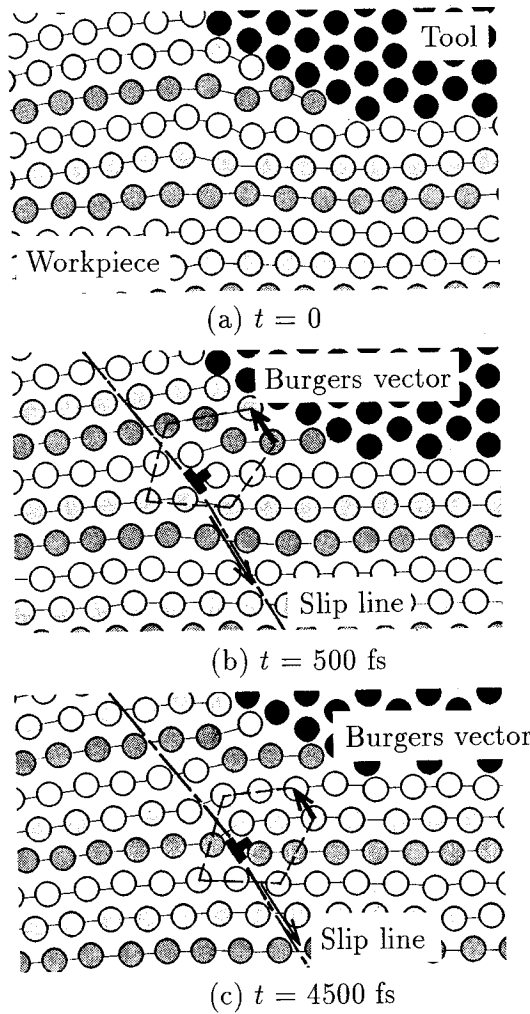


図 6.1  $a/2 [0\bar{1}1]$  のバーガースベクトルを持つ転位の発生

所的にひずみエネルギーが高くなり、下方に押し込まれた切れ刃稜近傍の原子はすぐ下層の格子面上に再配列を起こし、系のひずみエネルギーを緩和する。このような再配列は、切れ刃稜円筒部中央のやや逃げ面側よりで始まり、逃げ面側に向かって数層の格子面にわたって次々に起こる。しかし、逃げ面近くの格子面では変形も少なく、そう大きなひずみエネルギーが蓄積されていないため、再配列ができなくなり、結合相手のなくなった数原子からなる余分な格子面が一種の欠陥を生成する。したがって、この欠陥は必ず工具切れ刃稜円筒部逃げ面寄りの被削材内部で工具・被削材界面から数原子以内のところに発生し、被削材内部から発生することはない。

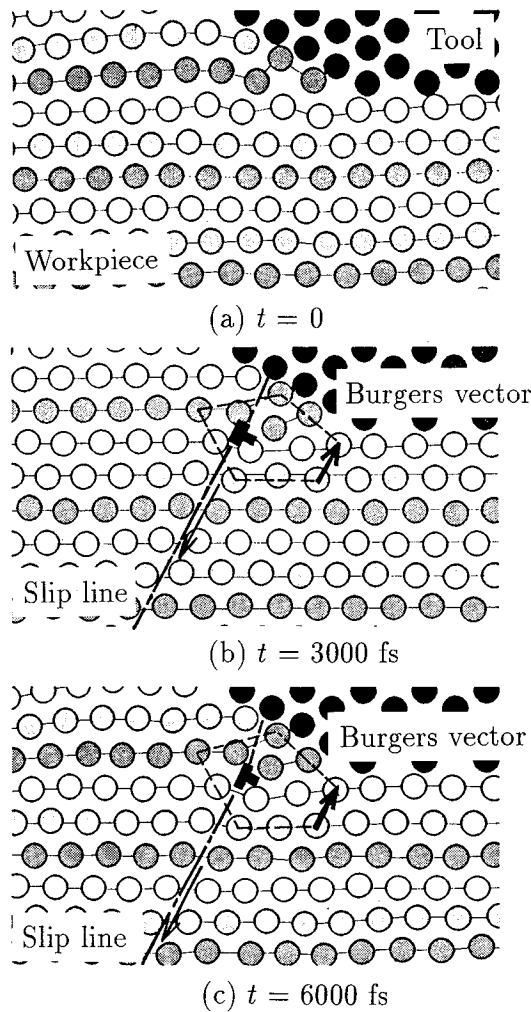


図 6.2  $a/2 [10\bar{1}]$  のバーガースベクトルを持つ転位の発生

このモデルに生じた欠陥の挙動にもとづいて実際の切削現象において切れ刃近傍の被削材中に発生する転位などの欠陥の挙動を議論するには2つの問題がある。ひとつは、計算機実験に用いた2次元材料において、原子の再配列によって生じた欠陥と実際の3次元材料における欠陥との対応である。しかし、3次元材料では本モデルと同じ2次元の格子面が切削幅方向に重なっており、これらの格子面で同時に同様の再配列が生じていると考えることは自然である。したがって、この欠陥は切れ刃稜に沿って(平行とは限らない)転位線を持つ刃状転位の一断面を表していると考えられ、ここでは単に転位と呼ぶことにする。

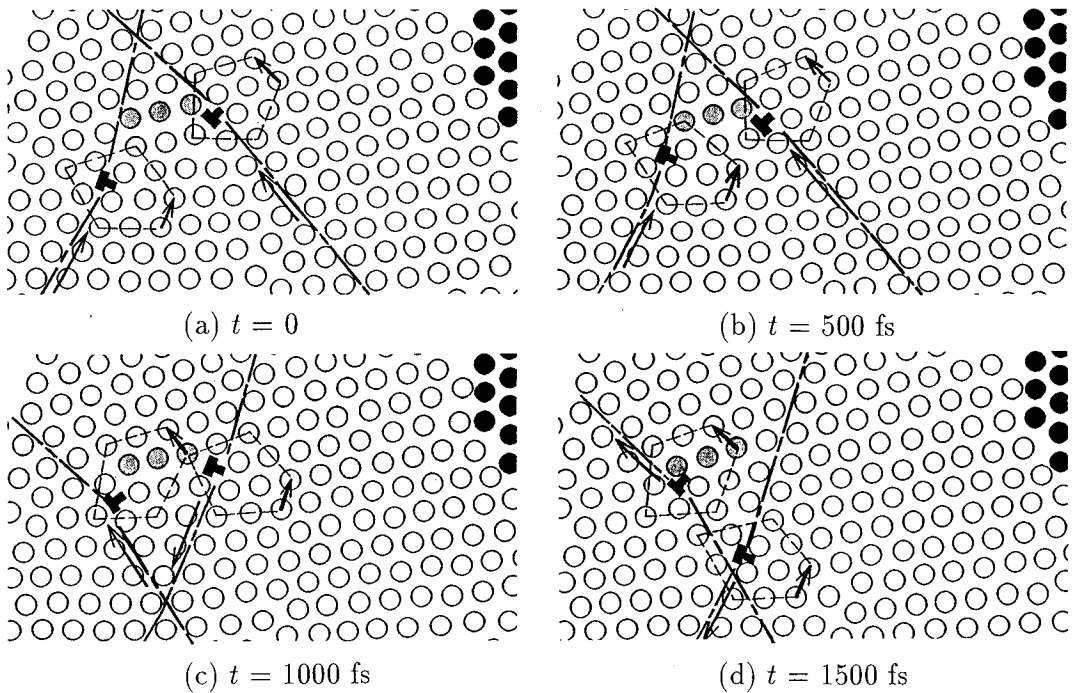


図 6.3 転位反応によるバーガースベクトルの変化

もうひとつは、計算機実験における転位の挙動といわゆる転位論にもとづく挙動との対応である。従来の転位論ではよりマクロにバルク中の転位の挙動を取り扱っているのに対し、本計算機実験では極微小でしかも表面に極めて近い材料中でのミクロな挙動を追跡することになる。しかし、基本的には、原子レベルではよく知られていない挙動であっても、従来の転位論にもとづくマクロな転位挙動に反していなければ起こり得る挙動であると考えことにする。

さて、切れ刃稜近傍では図 6.1 (c)、図 6.2 (c) に示すように、格子常数を  $a$  とする時、 $a/2 [0 \bar{1} 1]$  および  $a/2 [1 0 \bar{1}]$  のバーガースベクトルを持つ 2 種類の転位が発生する。なお、それぞれの転位が発生し易い場所や条件を特定することはできなかった。被削材は (111) 面であり、 $[0 \bar{1} 1]$ 、 $[1 \bar{1} 0]$ 、 $[1 0 \bar{1}]$  の 3 つのすべり方向を持っているが、これらの内  $[1 0 \bar{1}]$  方向には前方に多くの原子がありすべりを生じにくいいためか、この方向のバーガースベクトルを持つ転位は発生しない。発生

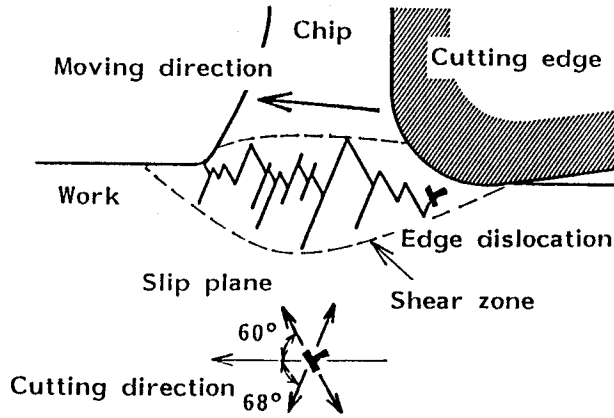


図 6.4 転位の移動

した転位は、バーガースベクトルの方向に働くせん断応力成分がある大きさに達するとその方向に運動を始める。図 5.2 に示すように、切削力は間欠的に変動するため、せん断応力成分の大きさも同様に変動する。また、いわゆる巨視的せん断領域の端に達するとせん断応力成分は転位を駆動するには不十分な大きさになる。そのため、2 種類の転位はそれぞれのすべり方向に沿って前進、停止、後退を繰り返す。

異なるバーガースベクトルを持つ 2 つの転位が数原子の距離に近づくと、図 6.3 に示すように、あたかも、それぞれのバーガースベクトルを交換するような一種の転位反応を生じる。その結果それぞれの転位は新しいバーガースベクトルの方向に移動を始める。この転位反応の前後では、例えば (6.1) 式に示すように、バーガースベクトルの総和は保存されており、転位論に矛盾しない。しかし、どのような条件の時にこの反応が生じるかは今のところ明かではない。

$$\frac{a}{2}[10\bar{1}] + \frac{a}{2}[0\bar{1}1] = \frac{a}{2}[0\bar{1}1] + \frac{a}{2}[10\bar{1}] \quad (6.1)$$

以上に述べたような、転位の発生、運動、反応を経た結果、図 6.4 に示すように、転位は巨視的せん断領域内で、見掛け上、ジグザグに移動し、自由表面に抜けると切りくずが一格子面分押し上げられることになる。図 6.1、図 6.2 に見られるように、常にせん断領域内で 4 から 5 個の転位が運動しており、それらが次々に自由表面に抜け切りくずを生成する。本実験では欠陥のない理想単結晶材料を極めて小さ

な切り込みで切削を行っており、転位の移動が途中で止められて切りくず内に残ることはない。

また、すべり面に沿って移動する転位の最大速度は 390 m/s と求められた。実験から巨視的せん断角を 6.3 度、せん断速度  $V_s$  を 20.1 m/s、せん断領域幅  $\Delta y$  を 8 原子層と見積もると、せん断領域での歪み速度  $\dot{\gamma}_s (= V_s / \Delta y)$  は  $1.0 \times 10^{10} \text{ (s}^{-1}\text{)}$  となる。図 6.5 に示す様に、通常歪み速度範囲が  $10^{-4} - 10^3 \text{ (s}^{-1}\text{)}$  では熱活性化過程が転位の移動を支配する要因となるが [36]、切削のようなより大きな歪み速度では転位の移動は粘性抵抗のみに律速されるようになり、移動速度は応力に比例して大きくなるといわれている。また転位の移動速度の最大値はせん断波速度により制限されるので、転位の移動速度がさらに大きくなると、相対論的效果により非常に大きな応力を要するようになる。銅におけるせん断波速度は約 2000 m/s であり、せん断領域での転位速度の計算値は妥当な値であると言える。

次に被削材の結晶方位を 30 度回転させ、すべり方向をマクロなせん断方向とほぼ一致させた場合の切りくず排出機構の解析結果を図 6.6 に示す。この場合、工具切れ刃前方で発生する転位はせん断方向とほぼ一致するバーガースベクトルを持つ一種類のみであり、すべり方向とせん断方向がほぼ同じであるために、転位は直ちに自由表面方向に向かって直線的に運動する。転位反応は起こらずすぐに転位が自由表面に抜け、切りくずが 1 原子層押し上げられる。転位のすべり方向とせん断方向が一致していないモデルと比較すると、せん断角は大きく、切りくずは薄くなる。

### 6.3 仕上げ面の粗さと変質層深さ

工具の進行にともなって、前節で述べたように、転位の発生および移動によって切りくずが生成される。一方、被削材中の切れ刃稜逃げ面近傍では、同様に、複雑な弾性および塑性変形が生じ、切れ刃の通過にともなうこれらの材料挙動の結果として仕上げ面が生成される。図 6.8 は、切削モデルの被削材各原子に、切削前に、図 6.7 に示すように、左下から順に番号を付け、切削後、もとの番号順にそれぞれの原子の位置を中心に平衡原子間距離の 1.3 倍の白丸を描いたものである。このような表現をすれば、切削前の位置からずれた原子が明瞭に判別できる。ここでは、

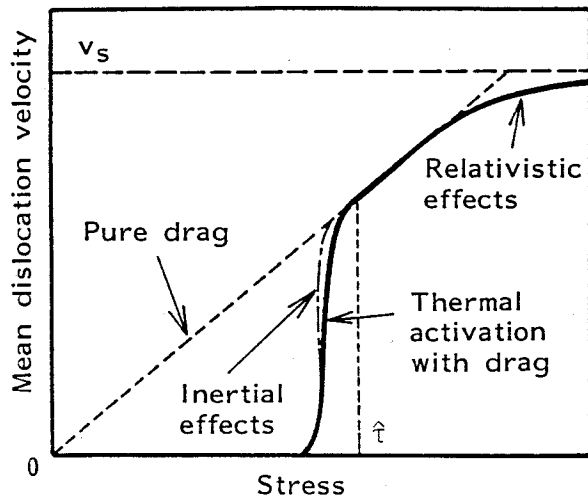


図 6.5 転位の平均運動速度と応力の関係

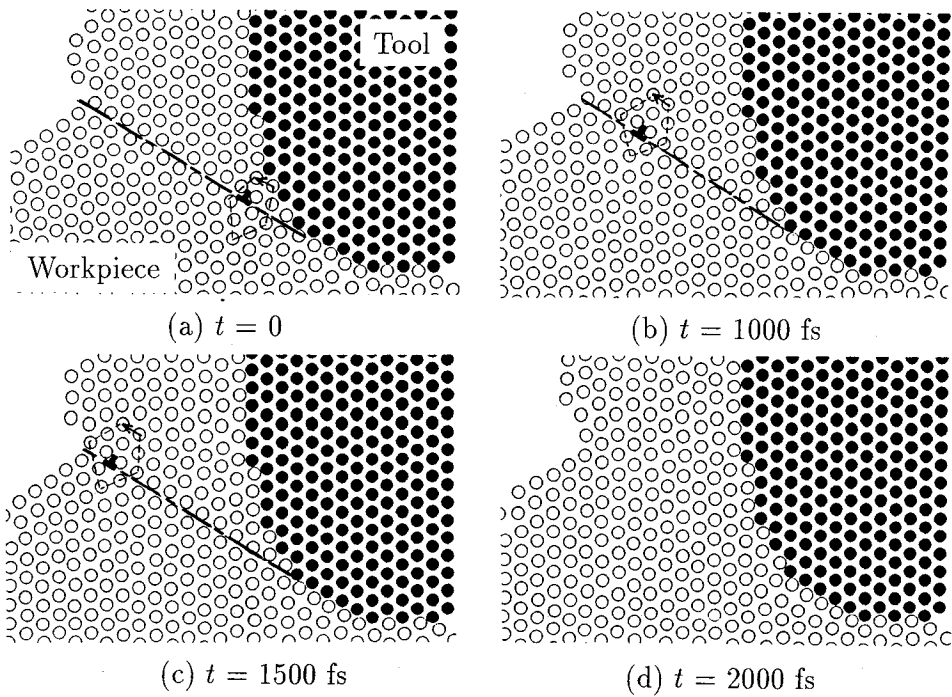


図 6.6 転位の移動—結晶方位の違い—

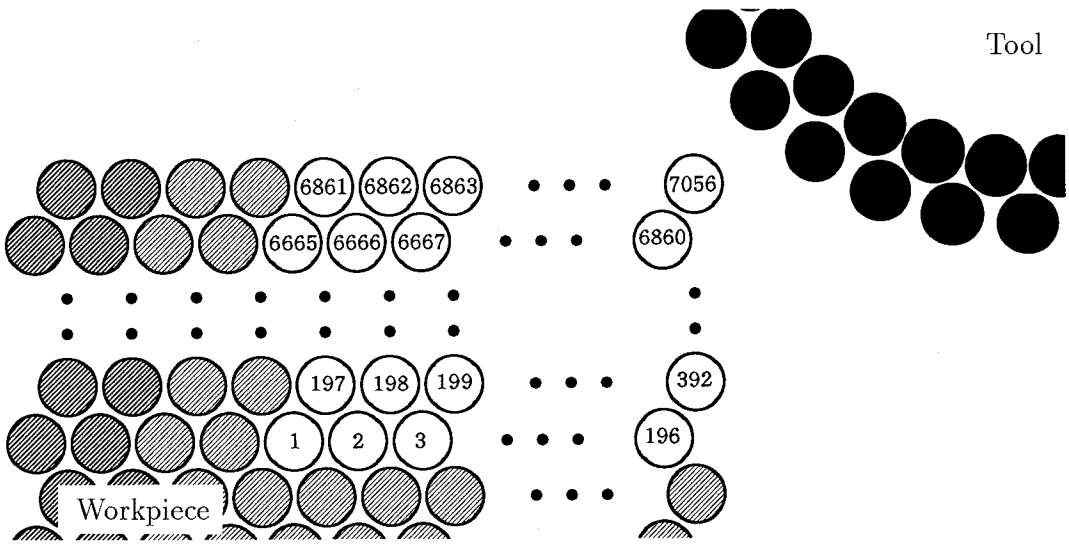


図 6.7 初期モデルにおける原子の番号

表 6.1 仕上げ面の粗さと変質層深さに対する被削材種の影響

被削材	仕上げ面粗さ ( atomic layers )	変質層深さ ( atomic layers )	転位の深さ ( atomic layers )
銅	2	19	22
アルミニウム	3	24	36

このように位置が乱れた原子が存在する範囲を变形領域と考えることにする。

図 6.8 は仕上げ面の粗さと変質層深さに対する被削材種の影響を解析したものである。このように、工具切れ刃近傍での転位の発生および变形領域が良く理解できる。工具切れ刃の通過後は原子の再配列および弾性変形の回復のため、切れ刃真下に比べて变形層の深さがやや減少する。ここではこの切れ刃通過後に仕上げ面に残る表層の凹凸を仕上げ面粗さ、また仕上げ面内部に残った变形層の深さを変質層深さと定義する。なお、この計算機実験は工具切れ刃稜丸み半径が 5 nm の工具を用い、切削速度 200 m/s、切り取り厚さ 0.5 nm で銅およびアルミニウムの切削を行ったものである。図 6.8 より銅およびアルミニウムの仕上げ面粗さおよび変質層深さを測定した結果を表 6.1 に示す。銅の方が、アルミニウムに比べて、仕上げ面粗さ



および変質層深さが小さいことがわかる。これは、銅よりもアルミニウムの方が工具・被削材間の凝集エネルギーが高く、弾性率、臨界せん断応力が低いことによると考えられる。

次に、仕上げ面粗さと変質層深さに対する被削材の結晶方位の影響を解析した結果を図 6.9 に示す。この計算機実験は工具切れ刃稜丸み半径が 2 nm の工具を用い、切削速度 20 m/s、切り取り厚さ 0.5 nm で銅の切削を行ったものである。図 6.9 (a) は、初期モデルと同じ結晶方位であり、6.2 節で述べた、せん断領域内を転位がジグザグに移動する計算機実験と同一のものである。また、図 6.9 (b) は初期モデルの結晶方位を 30 度回転させ、すべり方向をマクロなせん断方向とほぼ一致させたもので、せん断面上を転位が直線的に移動する計算機実験と同一のものである。

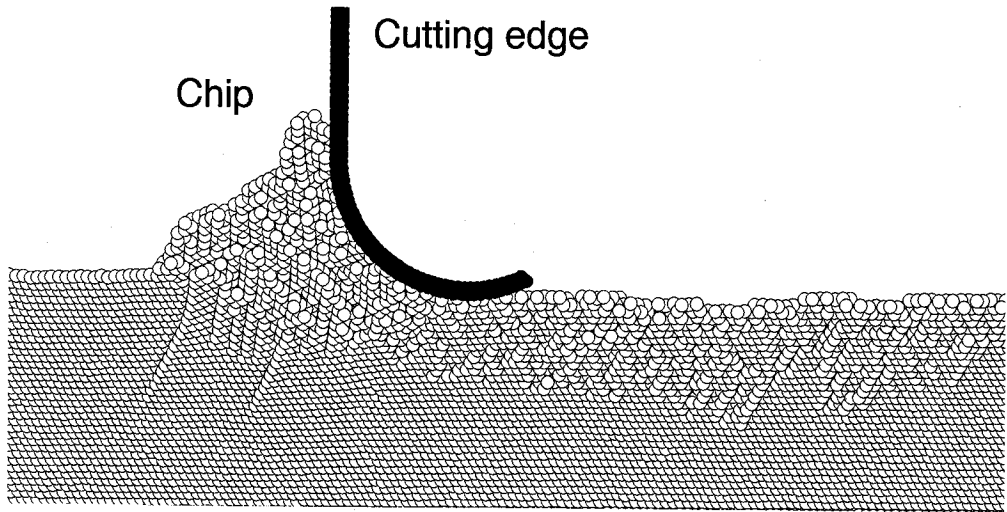
直観的には、せん断面上を転位が直線的に移動する (b) の方が、せん断領域内を転位がジグザグに移動する (a) よりも、仕上げ面の粗さと変質層深さは、小さくなるように考えられる。しかしながら、仕上げ面は、主に工具切れ刃稜丸みによる被削材の押し込みにより生成されるため、せん断領域内の転位の挙動の違いによる、仕上げ面粗さと変質層深さに対する影響は少ない。また、被削材内部のすべり方向は、工具進行方向に対して、(a) は 60 度、(b) は 30 度である。そのため、(b) の方が (a) よりも押し込みにより発生した転位のすべり方向と切削抵抗合力の力の方向が近く、転位が被削材内部の深くまで移動しやすい。その結果、(b) の方が加工変質層深さが大きくなったものと考えられる。

## 6.4 結 言

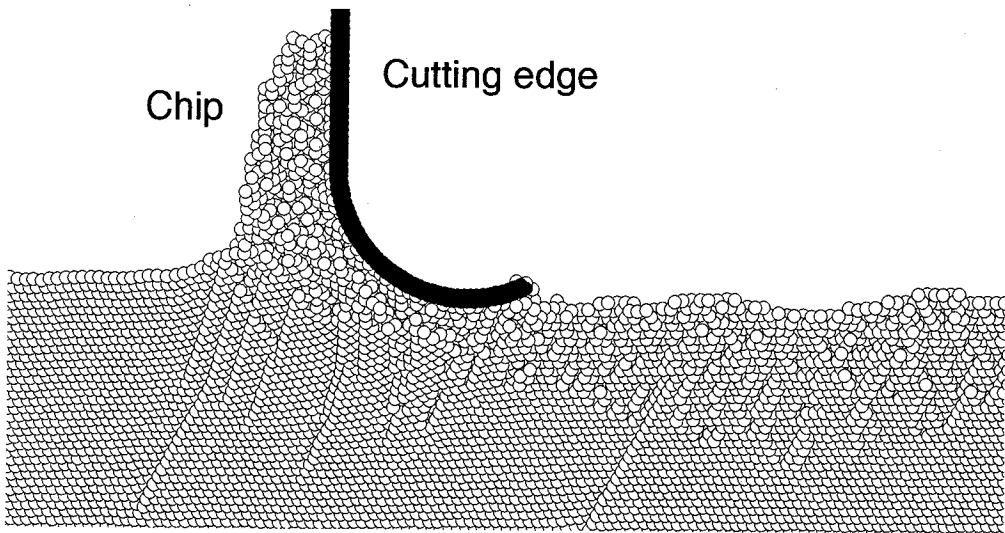
以上、分子動力学を用いて、転位の発生、移動および転位反応にもとづく切りくずと仕上げ面の生成過程を詳細に解析し、転位論の立場から検討した結果をまとめると以下のことが分かった。

1. 切りくず生成機構を詳細に調べた結果、転位は必ず工具切れ刃稜円筒部逃げ面寄りの被削材内部の工具・被削材界面から数原子層以内のところに発生し、被削材内部から発生することはない。

2. せん断応力によって発生した転位はすべり面に沿って上下運動を繰り返す。
3. せん断領域内で、異なるバーガスベクトルを持つ2つの転位が数原子の距離に近づくと、一種の転位反応を生じ、それぞれのバーガスベクトルが変化し、新しいバーガスベクトルの方向に移動を始めることがある。この結果転位は見掛け上巨視的せん断領域内でジグザグに移動し、自由表面に抜けると切りくずが一格子面分押し上げられ、切りくずを生成する。
4. せん断領域内ですべり面に沿って移動する転位の速度の計算値は、390 m/s と求められ、せん断波速度などの測定値と比較して妥当な値であるといえる。
5. すべり方向をマクロなせん断方向とほぼ一致させた場合の切りくず排出機構は工具切れ刃前方で発生する転位はせん断方向と一致するバーガスベクトルを持つ種類のみであり、転位反応は起こらず、自由表面方向に直線的に運動する。
6. 銅およびアルミニウムの仕上げ面粗さおよび加工変質層深さを解析した結果、銅よりもアルミニウムの方が仕上げ面粗さおよび変質層深さが大きい。これは、銅よりもアルミニウムの方が工具・被削材間の凝集エネルギーが高く、弾性率、臨界せん断応力が低いことによると考えられる。
7. 結晶方位の違いによる加工変質層深さを解析した結果、押し込みにより発生した転位のすべり方向と切削抵抗合力の力の方向が近く、転位が被削材内部の深くまで移動しやすい。その結果、加工変質層は大きくなる。加工変質層深さは結晶方位の影響を受け、せん断領域内の変形・破壊現象よりも工具切れ刃稜丸みによる被削材の押し込みの影響が大きいといえる。

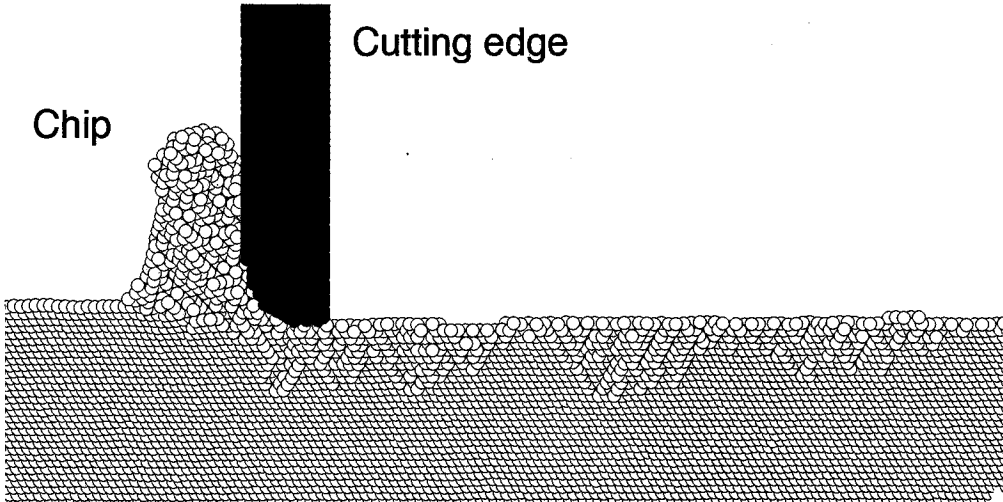


(a) 被削材：銅

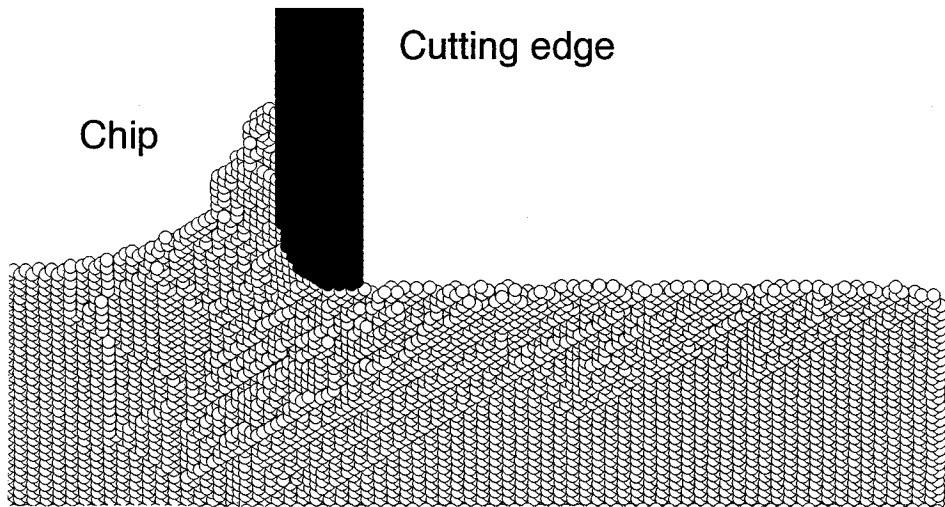


(b) 被削材：アルミニウム

図 6.8 仕上げ面の粗さと変質層深さに対する被削材種の影響、切り取り厚さ：0.5 nm、工具切れ刃稜丸み半径：5 nm、切削速度：200 m/s



(a) 初期モデルと同じ結晶方位



(b) 初期モデルに対して結晶方位を30度回転

図 6.9 仕上げ面の粗さと変質層深さに対する結晶方位の影響、切り取り厚さ：0.5 nm、工具切れ刃稜丸み半径：2 nm、切削速度：20 m/s

## 第7章

# 最小切り取り厚さとその支配要因

### 7.1 緒言

極微小切削において安定して切りくずを排出し得る最小の切り取り厚さ、すなわち最小切り取り厚さの絶対値とその変動幅は切削加工の精度限界を決定する一つの要因である。実験的には1 nmの切り取り厚さで安定した切りくず排出が行われることは第4章で述べた。また、この最小切り取り厚さは直観的に、切れ刃稜丸み半径が小さくなるほど小さくなることが予想される。しかし、このレベルの切削現象を従来の連続体モデルを用いて解析することは難しく、実験そのものも、計測・制御の限界に近く極めて困難である。そのため、最小切り取り厚さの限界および支配要因は明かにされていない。

本章では、まずナノメートルレベルの切り取り厚さでの極微小切削実験にもとづいて実験的に最小切り取り厚さの推定を試みる。つづいて、機械制御などの限界のため実験が困難なサブナノメートルレベルの切り取り厚さでの計算機実験にもとづいて切り取り厚さの到達限界とその支配要因について検討する。なお、計算機実験については切り取り厚さは被削材の最表面原子の中心と工具の最下端の原子の中心間距離で表している。

## 7.2 切削実験による最小切り取り厚さの推定

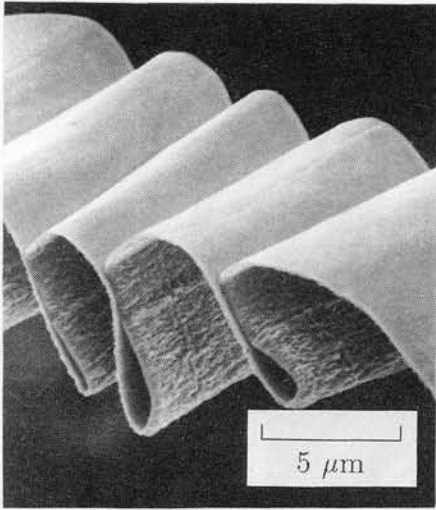
切削実験 A および B によって得られた電気メッキ銅、無酸素銅、純アルミニウムの 100 nm から 1 nm での切り取り厚さでの切りくずの SEM 写真を図 7.1、図 7.2、図 7.3 に示す。

切りくずの形態を見る限り、銅では  $t_n$  が 1 nm でも安定した切りくずの排出が行われているように見える。しかし、純アルミニウムの切削では  $t_n$  がナノメートルレベルになると、正常な切削が行われず、被削材は切れ刃に沿って横方向に押し出され、いわゆる「ばり」のような形状で排出されている。この結果から、銅より純アルミニウムの方が最小切り取り厚さが大きいように見える。しかし、銅および純アルミニウムを共に約 40 km 切削した後の工具切れ刃を観察すると、図 7.4 のように、純アルミニウムを切削した工具切れ刃稜は銅を切削したものに比べて損耗が著しく大きく、約 10 倍程度の切れ刃稜丸み半径を持っている。そこで新しく鋭い切れ刃を持つ工具を用いて純アルミニウムを公称切り取り厚さ 1 nm で切削すると、図 7.5 に示すように、安定した連続型の切りくずが得られることが明らかになった。

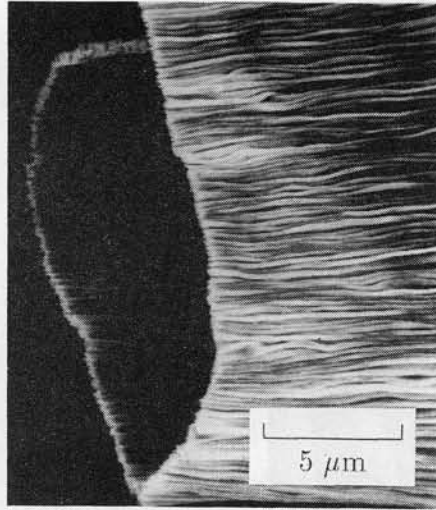
以上の実験結果から、純アルミニウムの切削では工具切れ刃の損耗が極めて速いため、切削開始後そう切削距離が大きくならない内に切れ刃稜丸み半径が大きくなり、見かけ上、銅に比べて最小切り取り厚さが小さくなると考えられる。しかし、切れ刃稜丸み半径が同程度であれば、銅および純アルミニウムの最小切り取り厚さは、実験的には、ほとんど差がないといえる。

## 7.3 計算機実験による最小切り取り厚さの推定

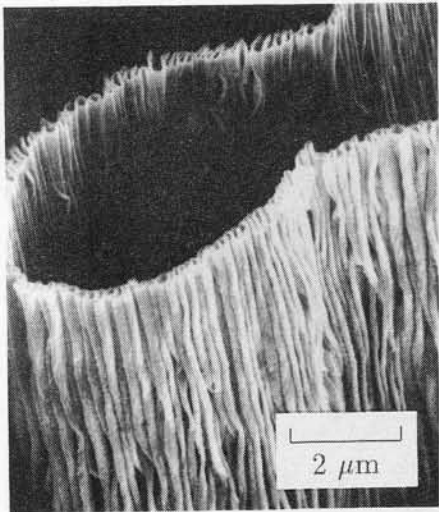
切削実験によって、少なくとも 1 nm の切り取り厚さでの切削が可能であることは明らかになった。しかし、機械の運動制御および測定技術の限界のために、切り取り厚さが 1 nm 以下での切削実験では極めて困難である。そこで、第 5 章において、切削実験との連続性が確かめられた、計算機実験によって最小切り取り厚さの極限を追求することを試みる。図 7.6、図 7.7 は工具切れ刃稜丸み半径 5 nm の工具を用い、切削速度 200 m/s で、切り取り厚さを変えて銅およびアルミニウムを切削



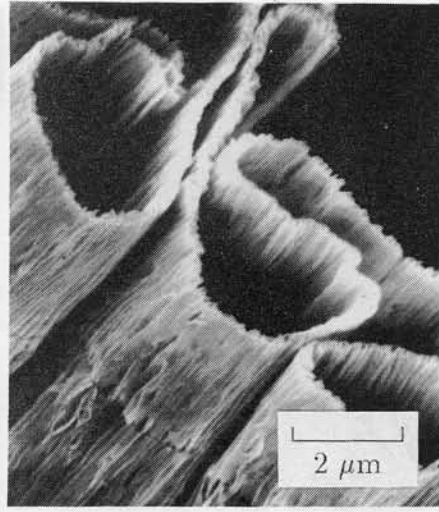
(a)  $t_n = 100 \text{ nm}$



(b)  $t_n = 10 \text{ nm}$

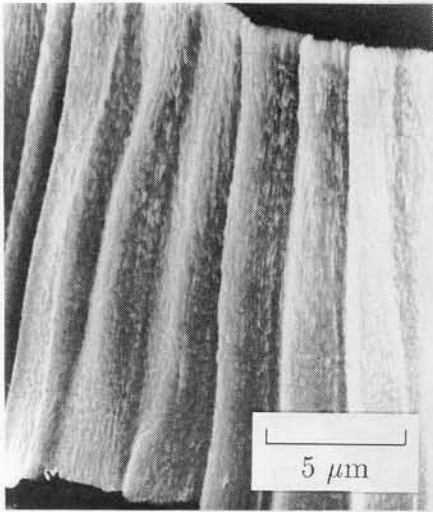


(c)  $t_n = 3 \text{ nm}$



(d)  $t_n = 1 \text{ nm}$

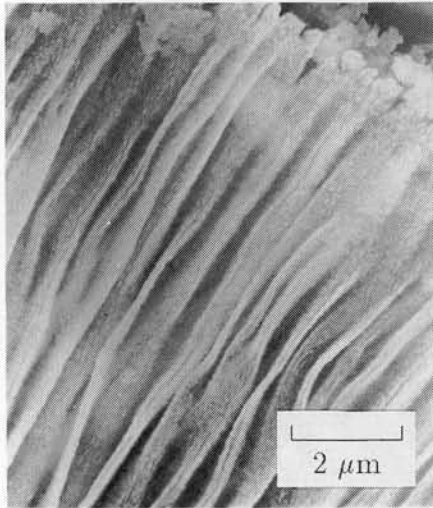
図 7.1 電気メッキ銅の切りくず SEM 写真



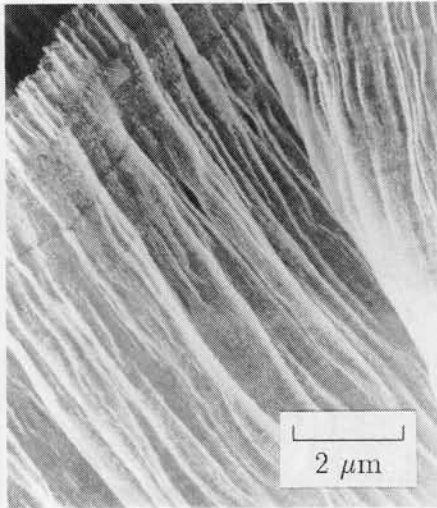
(a)  $t_n = 100 \text{ nm}$



(b)  $t_n = 10 \text{ nm}$



(c)  $t_n = 3 \text{ nm}$



(d)  $t_n = 1 \text{ nm}$

図 7.2 無酸素銅の切りくず SEM 写真

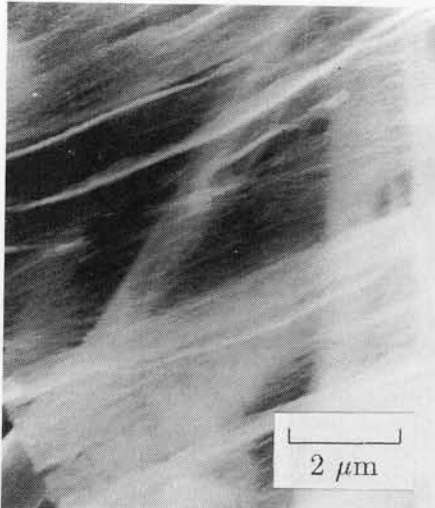




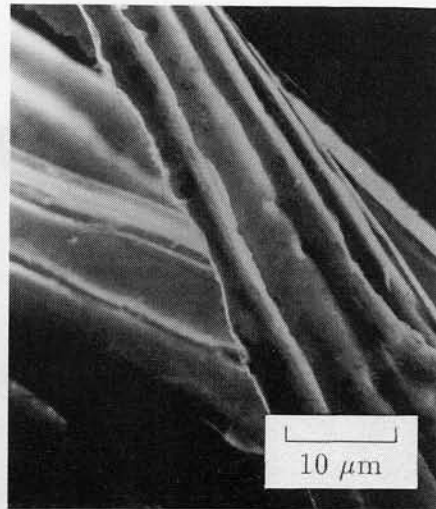
(a)  $t_n = 100 \text{ nm}$



(b)  $t_n = 10 \text{ nm}$

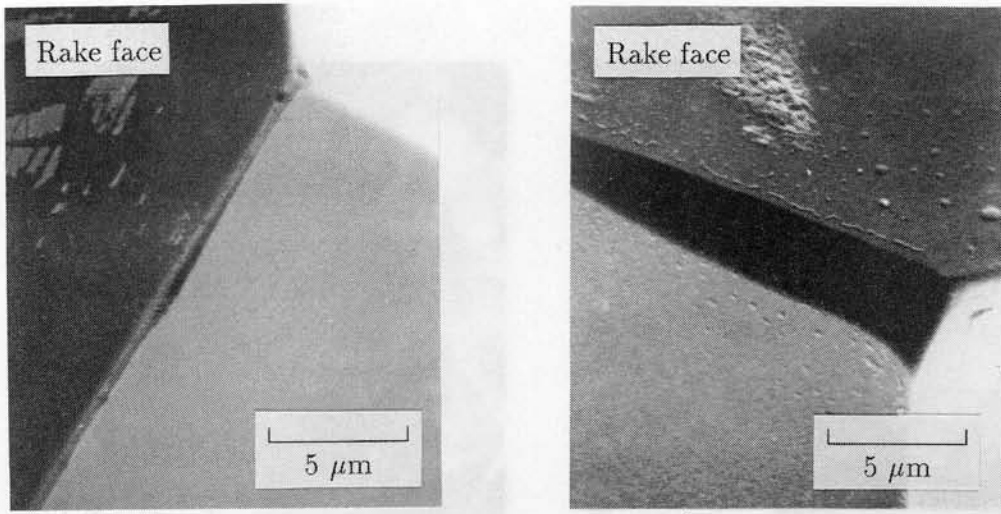


(c)  $t_n = 3 \text{ nm}$



(d)  $t_n = 1 \text{ nm}$ 、「ばり」

図 7.3 純アルミニウムの切りくず SEM 写真



(a) 無酸素銅

(b) 純アルミニウム

図 7.4 切削実験後の工具切れ刃の SEM 写真

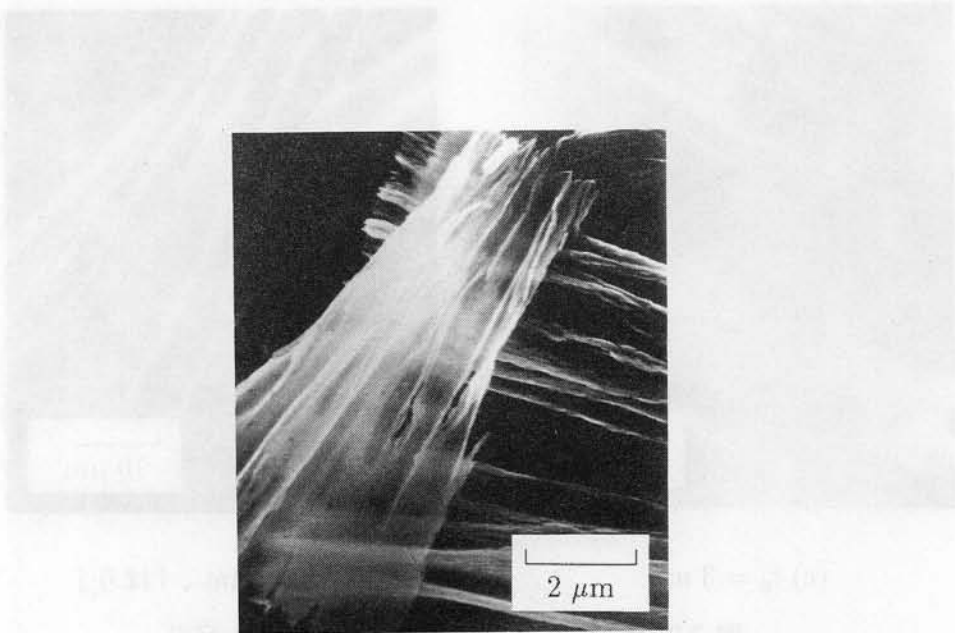


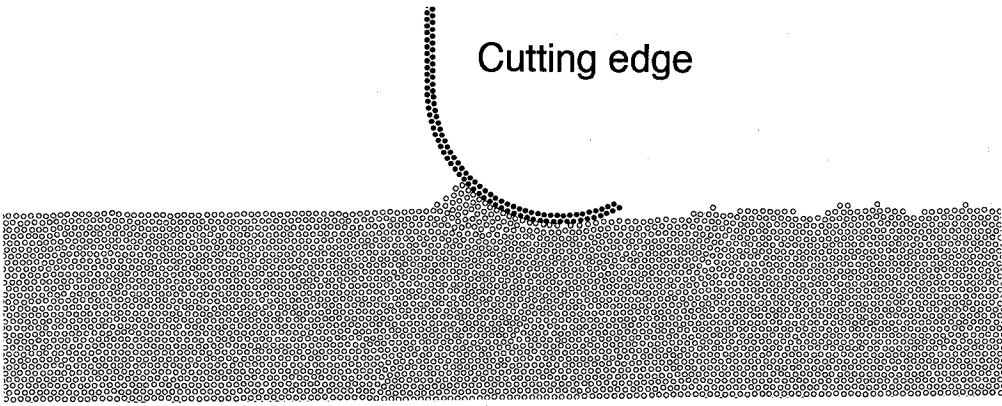
図 7.5 鋭い切れ刃を持つ工具で切削した純アルミニウムの切りくず、 $t_n = 1 \text{ nm}$

した時の切りくず生成の様子を示す。

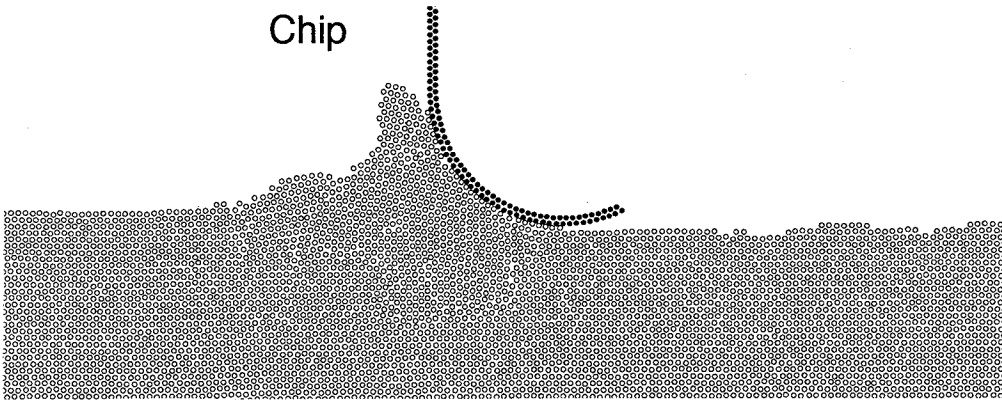
図より、銅、アルミニウム共に $t_n$ が0.3 nm より大きくなると切りくずの排出が観察されるが、 $t_n$ が0.2 nm 以下では、被削材が工具切れ刃前方に少し盛り上がって、堆積するものの、工具の進行にともなって、それらは切れ刃稜の逃げ面側に押し込まれ、切りくずとしては排出されない。これより、切削速度 200 m/s という多少非現実的な切削条件下ではあるが、銅、アルミニウム共にその最小切り取り厚さは0.2 nm 程度、工具切れ刃稜丸み半径の1/20 程度であると推定される。図 7.8は工具切れ刃稜丸み半径が0.5 nm の時の分子静力学による計算機実験結果を示す。やはり、銅、アルミニウム共に1 原子層の切り取り厚さで切りくずが排出されている。以上の結果より極微小切削においては機械の運動が完全であれば、少なくとも1 原子層の切り取り厚さでの切りくず排出が可能であると考えられる。

#### 7.4 切れ刃稜丸み半径の影響

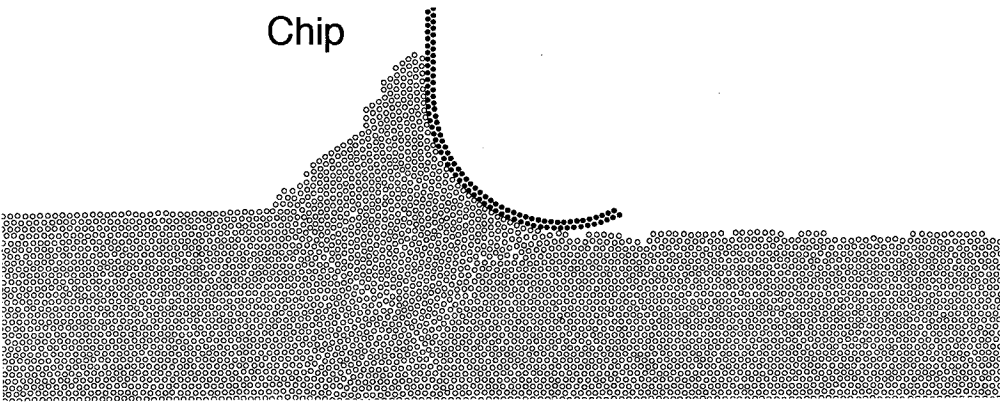
最小切り取り厚さを決定する最も重要な要因は、直観的に、工具切れ刃稜の丸み半径であると考えられる。切削開始に関するある拡大モデルによると、切り込みが切れ刃稜丸み半径よりやや小さい程度になると切りくずが排出され始めるといわれている [24]。一方、超精密切削用ダイヤモンド工具の切れ刃稜丸み半径を正確に測定することは極めて困難であるが、最近、改良型 SEM を用いた測定法が開発され、鋭利なものでは20 nm 以下であると報告されている [25]。したがって、10 nm 以下の最小切り取り厚さが期待し得ると考えられる。例えば、図 7.9 は鋭い切れ刃稜を持つ工具と摩耗した工具で無酸素銅を切削した時の切りくずを示す。 $t_n$ が大きいときはどちらの工具で切削された切りくずもそう違いがないが $t_n$ が30 nm 程度以下になると切りくずが不連続になり、正常な連続型の切りくずが得られない。しかし実際に最小切り取り厚さを定量的に解析しようとするれば、被削材の違いや工具・被削材間の相互作用力の影響、工具摩耗など様々な要因が複雑に影響し、実験的に解明することは困難である。例えば銅とアルミニウムでは直接的にはダイヤモンドとの相互作用力が違う。また間接的には、その差によって、図 7.4 に示すように、工具摩耗の進行に差が生じ工具切れ刃丸み半径の違いとなる。このように、複雑な現



(a)  $t_n = 0.2 \text{ nm}$



(b)  $t_n = 0.3 \text{ nm}$



(c)  $t_n = 0.4 \text{ nm}$

図 7.6 最小切り取り厚さ近傍での切りくず生成、工具切れ刃稜丸み半径：5 nm、  
切削速度：200 m/s、被削材：銅

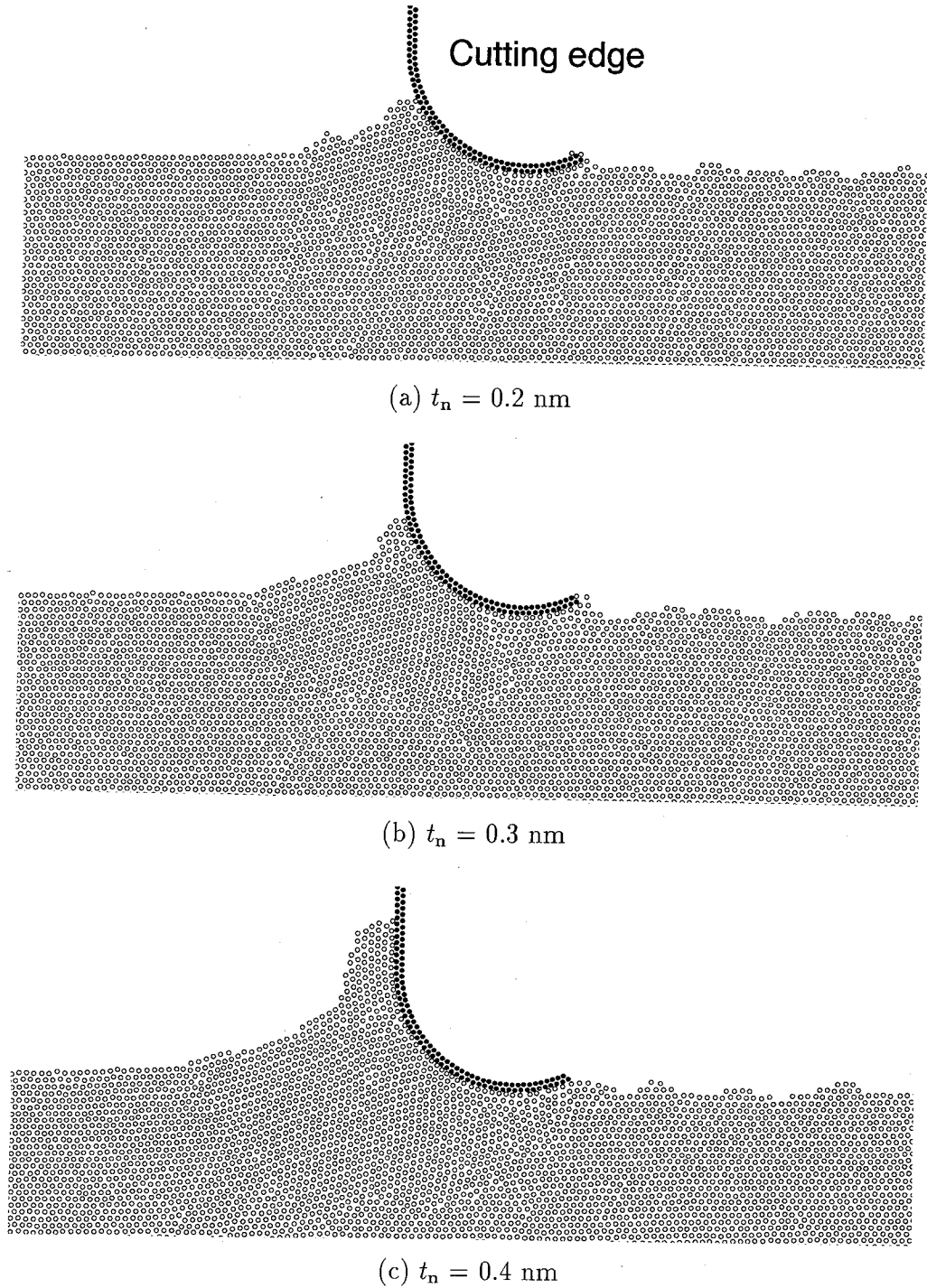
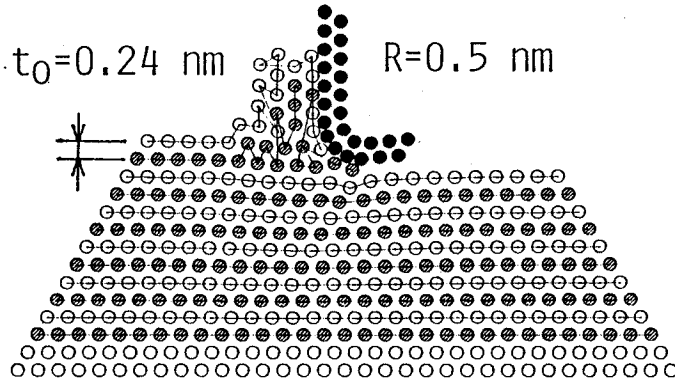
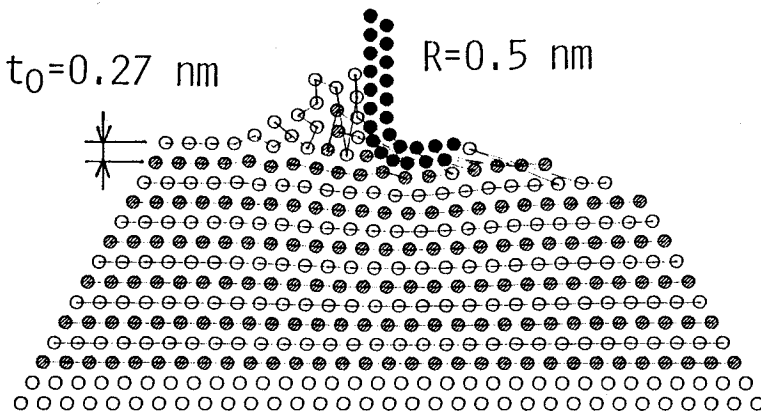


図 7.7 最小切り取り厚さ近傍での切りくず生成、工具切れ刃稜丸み半径：5 nm、  
 切削速度：200 m/s、被削材：アルミニウム



(a) 被削材：銅



(b) 被削材：アルミニウム

図 7.8 分子静力学による最小切り取り厚さに対する被削材種の影響、切り取り厚さ : 1 原子層、工具切れ刃稜丸み半径 : 0.5 nm

象を解明するには、任意の条件下でのシミュレーションが可能となる計算機実験が極めて有効な手段となる。

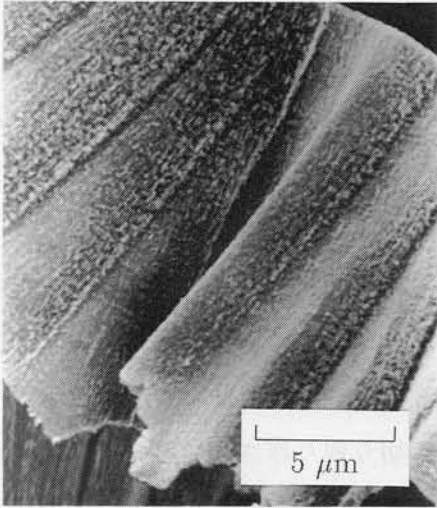
図 7.10 は切れ刃稜丸み半径が 10 nm の工具を用い、切削速度 200 m/s で銅を切削するときの分子動力学による計算機実験結果である。 $t_n$  が 0.6 nm 以上では切りくず排出が見られるが、 $t_n$  が 0.5 nm 以下ではバニシングが生じている。この結果は、前出図 7.6 に同様に、銅の最小切り取り厚さはやはり工具切れ刃稜丸み半径の 1/20 程度であることを示している。

一方、図 7.11 は工具切れ刃稜丸み半径が 0.5 nm の工具を用いた時の切りくず排出の様子を示している。工具切れ刃稜丸み半径が 5 nm、10 nm では切りくずが排出されなかった、 $t_n$  が 0.2 nm、0.1 nm においても安定した切りくずが排出されている。この場合も図 7.6、図 7.10 と同様に、最小切り取り厚さが切れ刃稜丸み半径の 1/20 になると考えると、最小切り取り厚さは 0.02 nm となる。しかし、工具・被削材原子間の相互作用のおよぶ範囲を考えると 1 原子以下の切り取り厚さの大小を議論してもあまり意味がないと考えられる。

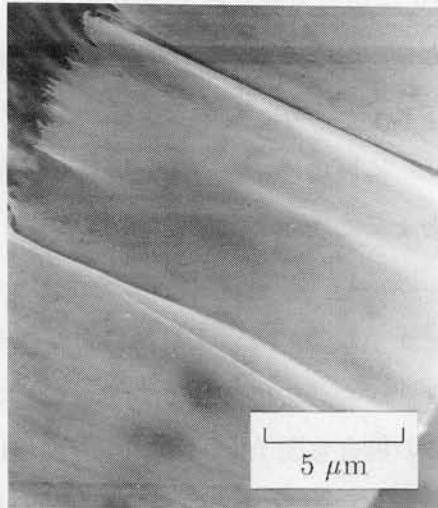
図 7.12 は MS によって、アルミニウムの切削の最小切り取り厚さに対する工具切れ刃稜丸み半径の影響を調べた結果を示す。 $t_n$  はすべて 1 原子層である。切れ刃稜丸み半径が大きくなるにしたがって、被削材が工具逃げ面側に押し込まれるバニシ現象が見られ、丸み半径が 5 nm になると切りくずは排出されなくなる。したがって最小切り取り厚さは切れ刃稜丸み半径の 1/10 - 1/20 程度であると考えられる。この結果は MD による計算機実験結果とも一致している。

## 7.5 被削材種の影響

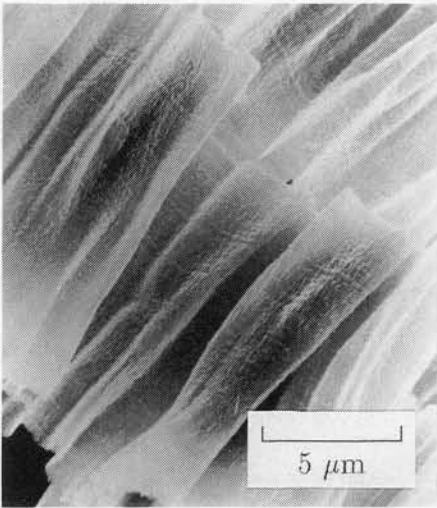
実際の極微小切削において、被削材の種類によって切りくず排出、仕上げ面性状、工具摩耗などの加工現象に大きな違いが見られることは良く知られている。このような被削性の違いは工具・被削材間のいわゆる親和性にもとづいていると説明されることが多い。親和性が物理的にどのような意味を持つのかは、今のところ、明らかにはされていないが、最も直接的には工具・被削材原子間の相互作用の強さを意味していると考えられる。そこで、ここでは、工具・被削材原子間のモースポテン



(a)  $t_n = 100 \text{ nm}$ 、sharp



(b)  $t_n = 100 \text{ nm}$ 、dull



(c)  $t_n = 30 \text{ nm}$ 、sharp



(d)  $t_n = 30 \text{ nm}$ 、dull

図 7.9 切削実験による最小切り取り厚さに対する切れ刃稜丸み半径の影響、工具切れ刃稜丸みの鋭い工具：sharp、工具切れ刃稜丸みの鈍い工具：dull



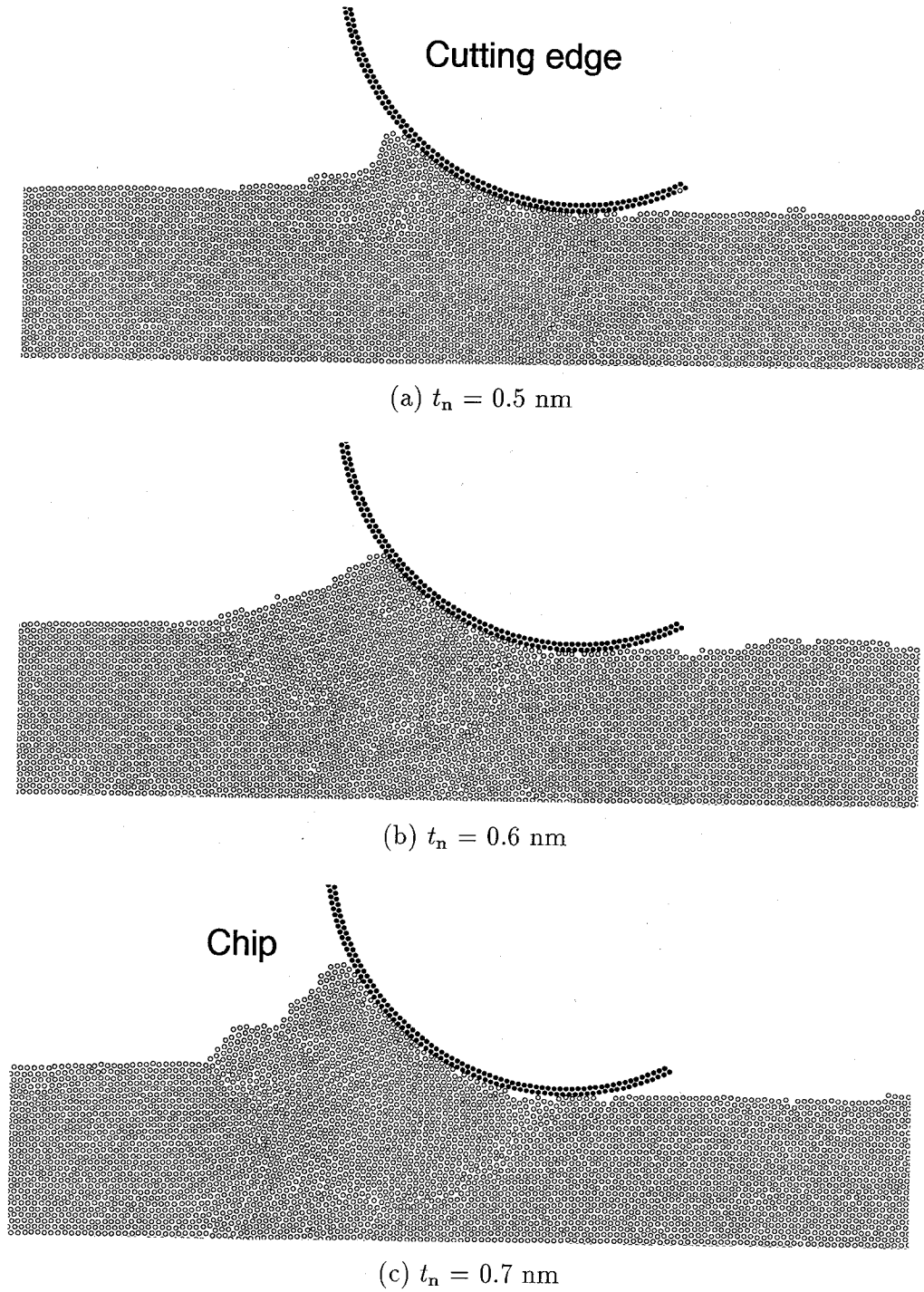
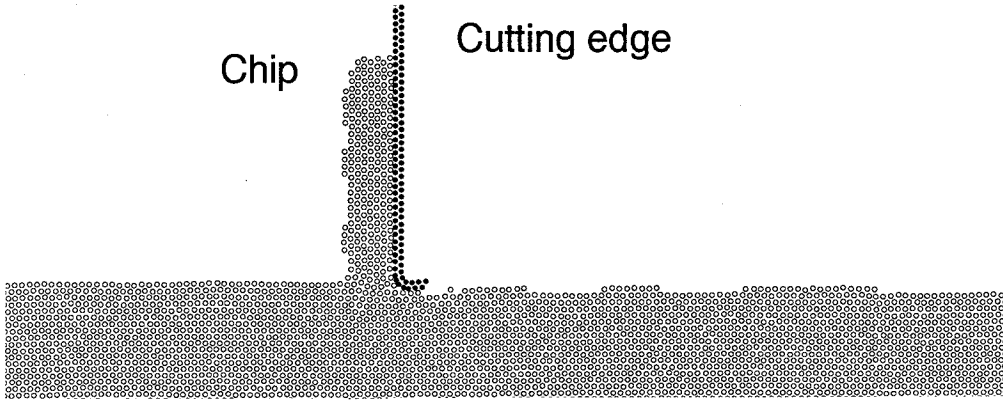
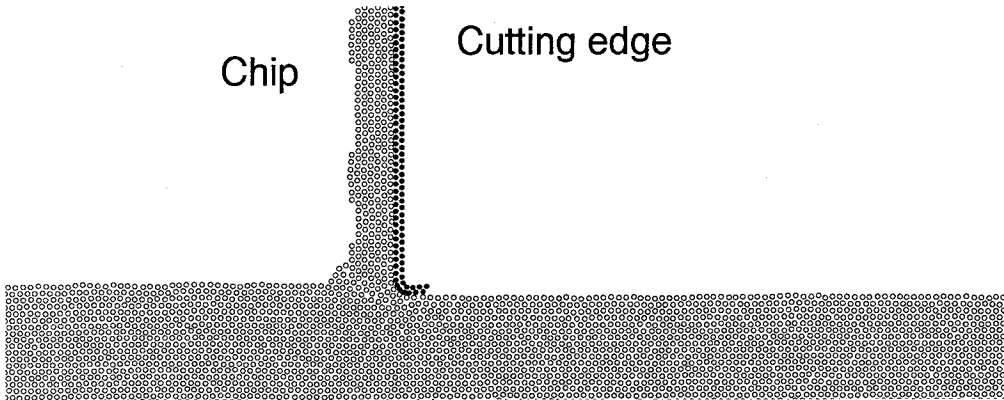


図 7.10 最小切り取り厚さ近傍での切りくず生成、工具切れ刃稜丸み半径：10 nm、  
切削速度：200 m/s、被削材：銅

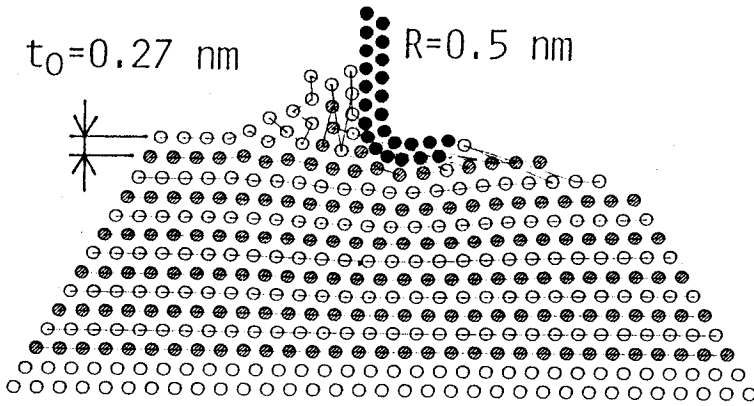


(a)  $t_n = 0.1 \text{ nm}$

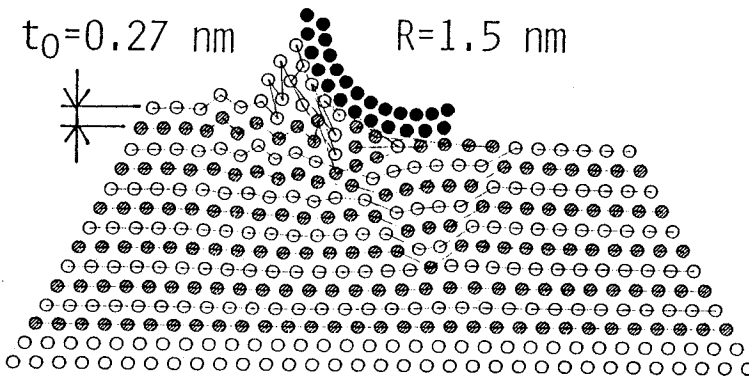


(b)  $t_n = 0.2 \text{ nm}$

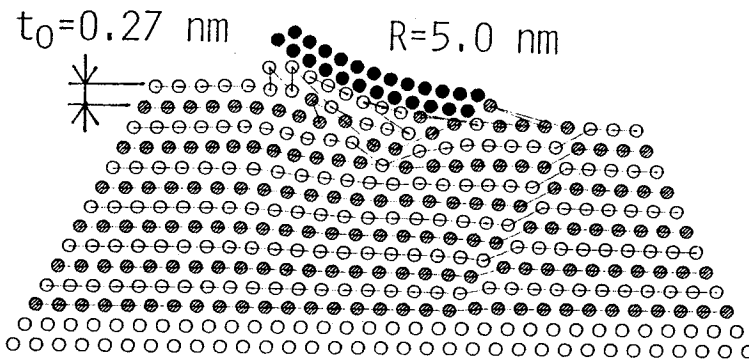
図 7.11 最小切り取り厚さ、工具切れ刃稜丸み半径：0.5 nm、切削速度：200 m/s、  
被削材：銅



(a)  $R = 0.5 \text{ nm}$



(b)  $R = 1.5 \text{ nm}$



(c)  $R = 5.0 \text{ nm}$

図 7.12 MS による最小切り取り厚さに対する工具切れ刃稜丸み半径の影響、切り取り厚さ：1 原子層、被削材：アルミニウム

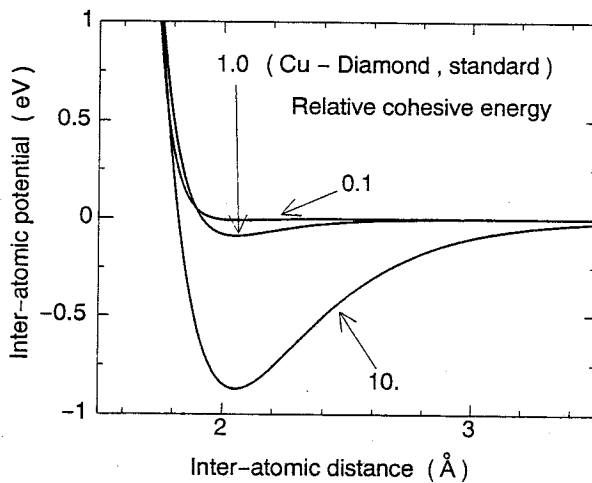
シャル関数の性質を表すパラメータの内、凝集エネルギーの大きさに依存する、パラメータ、 $D$ 、を変えて計算機実験を行い、工具・被削材間の相互作用力が切削現象に及ぼす影響を考察する。

計算機実験に用いた工具・被削材原子間ポテンシャルを図 7.13 に示す。第 2 章、図 2.15 に示した、銅 - ダイヤモンド間、アルミニウム - ダイヤモンド間のポテンシャルの他に、凝集エネルギーを銅 - ダイヤモンド間の  $1/10$ 、 $1$ 、 $10$  倍にした仮想のポテンシャルおよびアルミニウム - ダイヤモンド間の  $1/10$ 、 $1/100$  倍にしたものを用いた。

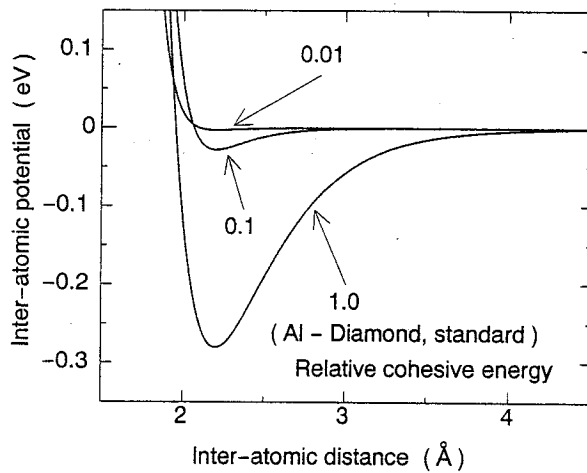
既に、7.2、7.3 節で示したように、切削実験および切れ刃稜丸み半径が  $0.5$ 、 $5$  nm での計算機実験結果によれば、銅とアルミニウムの最小切り取り厚さにはそう違いがないと考えられる。図 7.14 は切れ刃稜丸み半径が、 $10$  nm と大きい工具を用いた、切削速度  $200$  m/s での、銅およびアルミニウムの切削における最小切り取り厚さを MD による計算機実験によって推定した結果を示す。銅では  $t_n$  が  $0.6$  nm 以上で切りくずが排出されているのに対し、アルミニウムでは  $t_n$  が  $1.2$  nm 以上でなければ切りくずが排出されない。

図 7.15 は、それぞれの被削材について最小切り取り厚さよりやや小さい切り取り厚さでの切れ刃稜近傍での被削材の変形状態を示したものである。これより、切れ刃稜が押し込まれたときに、アルミニウムでは銅に比べてかなり変形が大きくその領域も広いことがわかる。切れ刃稜丸み半径が大きくなると、変形し易い材料では、切れ刃稜によるバニシ作用によって、切れ刃稜のかなり前方から被削材が工具逃げ面側に変形し、そのため切りくずとして排出されにくくなるためである。切れ刃稜丸み半径が小さければこの変形領域が小さくなり、材料による差が顕著に表れないと考えられる。

このような材料の弾性あるいは塑性変形挙動の影響を取り除き、純粹に工具・被削材原子間の相互作用力の影響を調べるために、銅 - ダイヤモンド間の凝集エネルギーを実際の  $1/10$  および  $10$  倍にした仮想のポテンシャルを用いた計算機実験の結果を図 7.16、図 7.17 に示す。切れ刃稜丸み半径が  $5$  nm および  $10$  nm 共に工具・被削材間の相互作用力が強い方が最小切り取り厚さは小さくなるが、その影響はそ

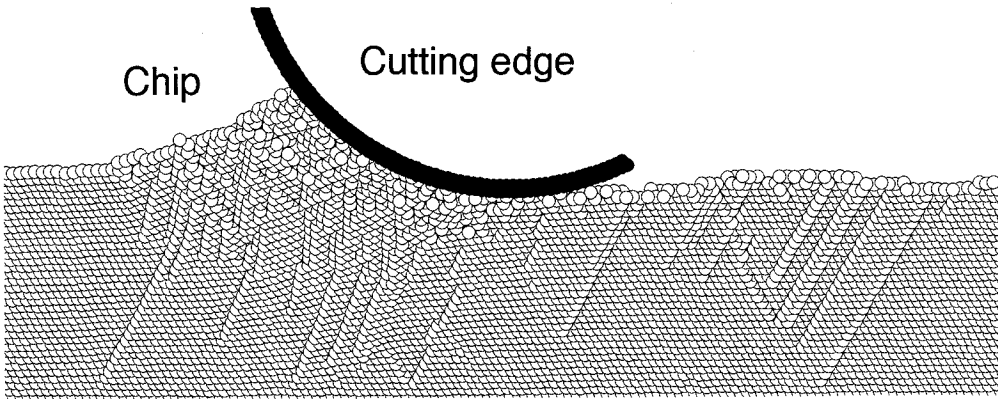


(a) Cu - Dia

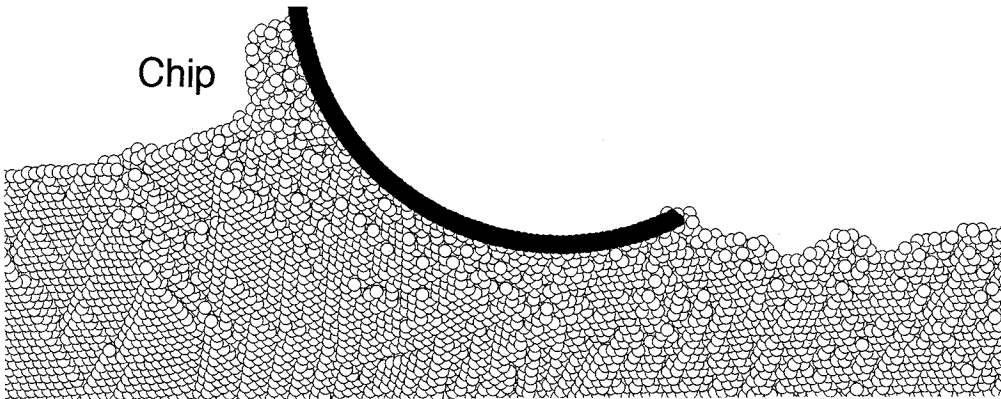


(b) Al - Dia

図 7.13 工具・被削材原子間仮想ポテンシャル

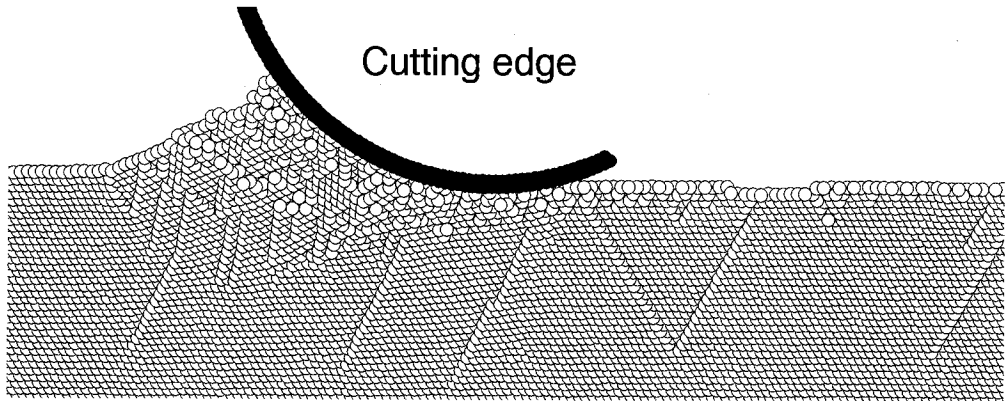


(a) 銅、 $t_n = 0.6 \text{ nm}$

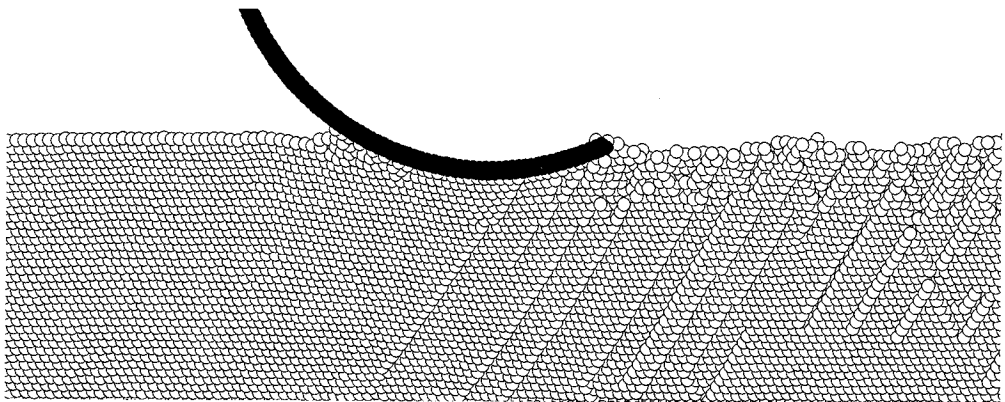


(b) アルミニウム、 $t_n = 1.2 \text{ nm}$

図 7.14 最小切り取り厚さに対する被削材種の影響、工具切れ刃稜丸み半径：10 nm、切削速度：200 m/s



(a) 銅、 $t_n = 0.4 \text{ nm}$



(b) アルミニウム、 $t_n = 1.0 \text{ nm}$

図 7.15 バニシングにおける変形領域の大きさへの被削材種の影響、工具切れ刃稜丸み半径：10 nm、切削速度：200 m/s

う大きくない。しかし、被削材内部の変形領域は、図 7.16、図 7.17 に示すように、相互作用力が強い方が大きくなる。

図 7.18 は逆に工具・被削材間の凝集エネルギーをアルミニウム - ダイヤモンド間の 1/10 および 1/100 に小さくした時の MS による計算機実験結果である。相互作用力が小さくなくても最小切り取り厚さにはほとんど影響しないと考えられる。

## 7.6 切削速度の影響

最小切り取り厚さに対する切削速度の影響について解析を行った。図 7.19 は工具切れ刃稜丸み半径 0.5 nm の工具を用いて、切り取り厚さ 0.1 nm において銅を切削したときの切りくず排出の様子を示している。切削速度が 20 m/s では切りくずが排出されなかったが、切削速度が 200 m/s では安定した切りくずが排出されている。このことから、切削速度が大きくなれば、それが小さいときに比べて、断熱的な変形のため、変形領域が局所的になり、せん断角は大きく、切りくずは薄くなり、最小切り取り厚さは小さくなると考えられる。

## 7.7 バニシングと EEM

最小切り取り厚さより小さい切り取り厚さでは被削材は工具切れ刃の逃げ面側に押し込まれいわゆるバニシングの状態となる。このような状態のもとでも被削材中には何らかの変形が生じ、その程度は工具・被削材間相互作用力に影響されることが考えられる。図 7.20 は、銅およびアルミニウムの切り取り厚さを小さくして行き、1 原子層以下から、工具先端原子の中心が被削材最表面原子の中心より上方に離れた状態である、負の値になるまで変えた時の計算機実験結果を示す。切りくずは排出されないが、アルミニウム被削材内部には、切りくずが排出される場合に比べて小さいものの、転位の発生およびかなりの深さまでの変質層の生成が観察される。

また、アルミニウム表面をダイヤモンド工具が通過するときには、工具表面に被削材表面原子が吸着するように除去される。この現象は、いわゆる EEM (Elastic Emission Machining) [38] に近い加工現象である。この現象は工具・被削材原子間



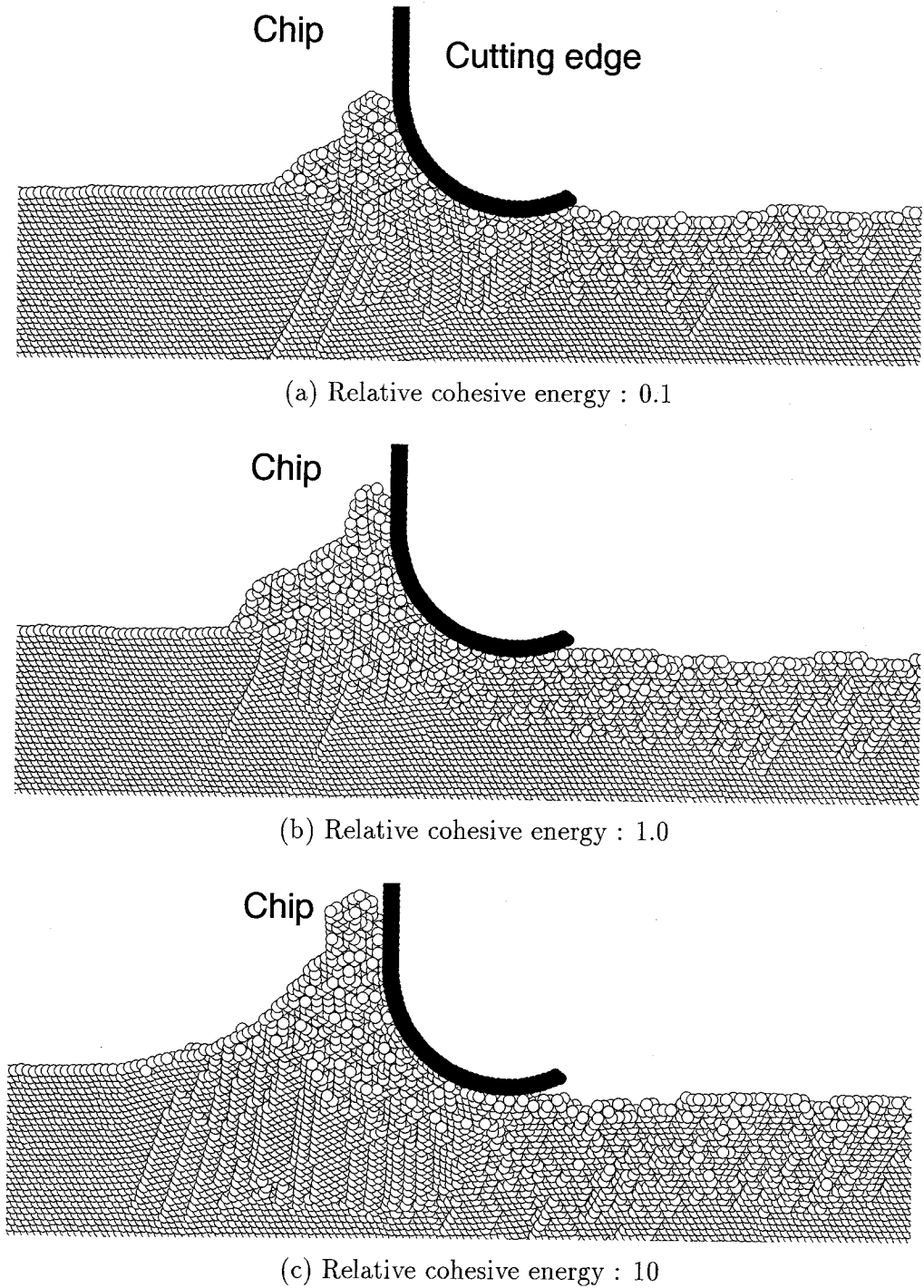
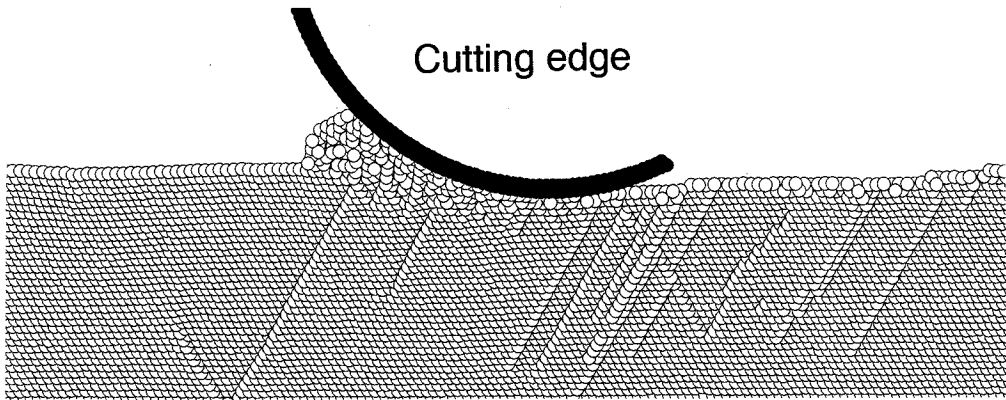
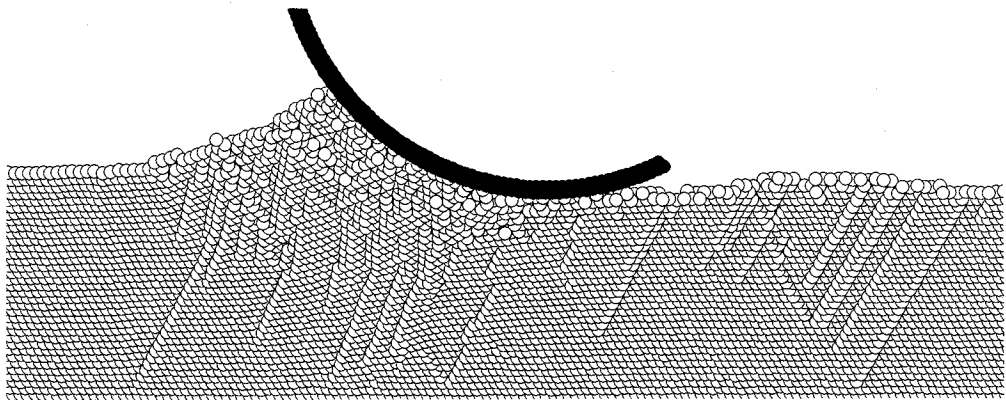


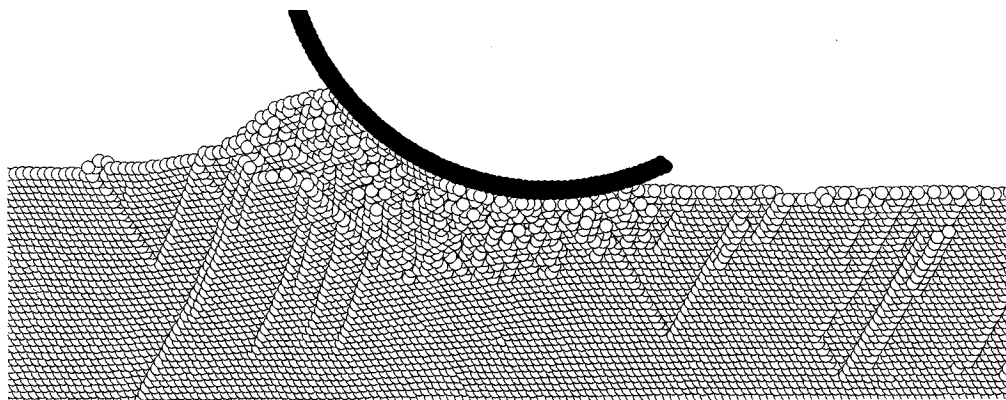
図 7.16 変形領域に対する工具・被削材間の相互作用力の影響、切り取り厚さ : 0.5 nm、工具切れ刃稜丸み半径 : 5 nm、切削速度 : 200 m/s、被削材 : 銅



(a) Relative cohesive energy : 0.1

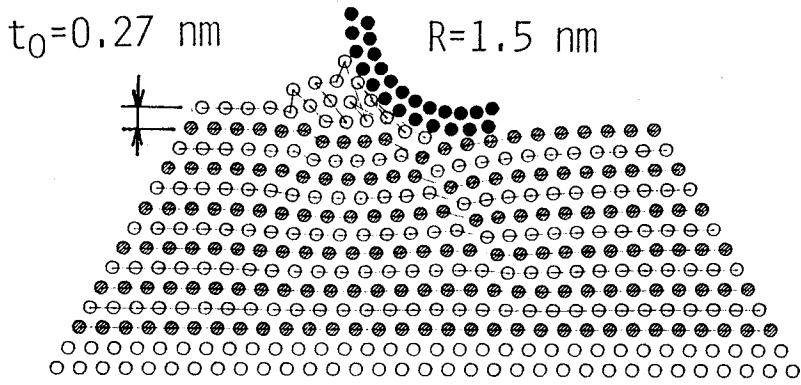


(b) Relative cohesive energy : 1.0

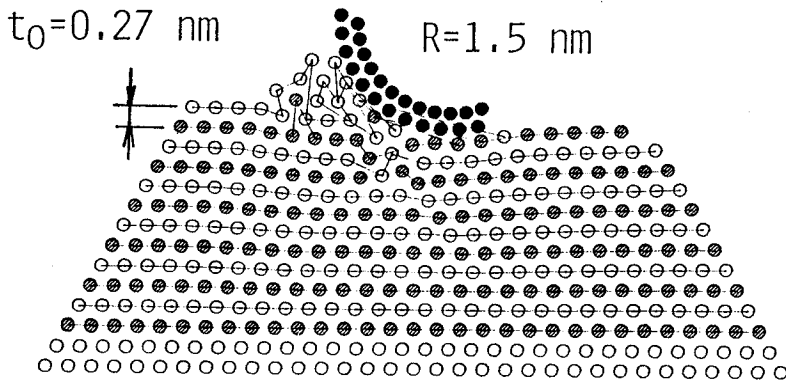


(c) Relative cohesive energy : 10

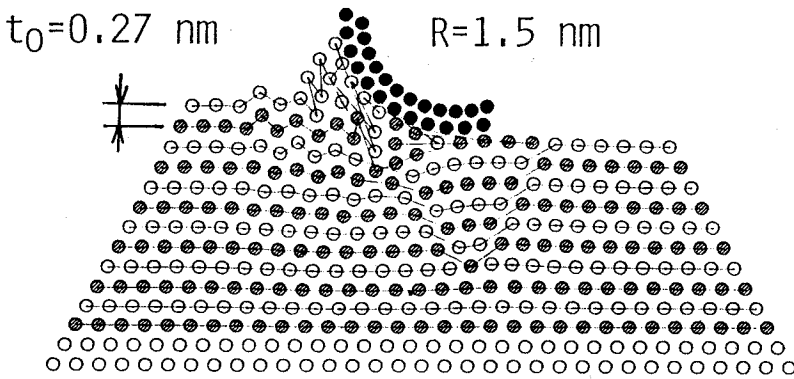
図 7.17 変形領域に対する工具・被削材間の相互作用力の影響、切り取り厚さ : 0.6 nm、工具切れ刃稜丸み半径 : 10 nm、切削速度 : 200 m/s、被削材 : 銅



(a) Relative cohesive energy : 0.01

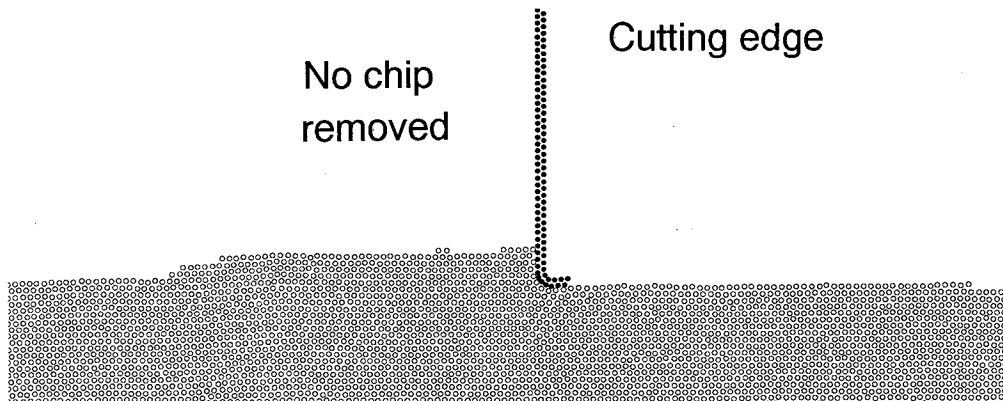


(b) Relative cohesive energy : 0.1

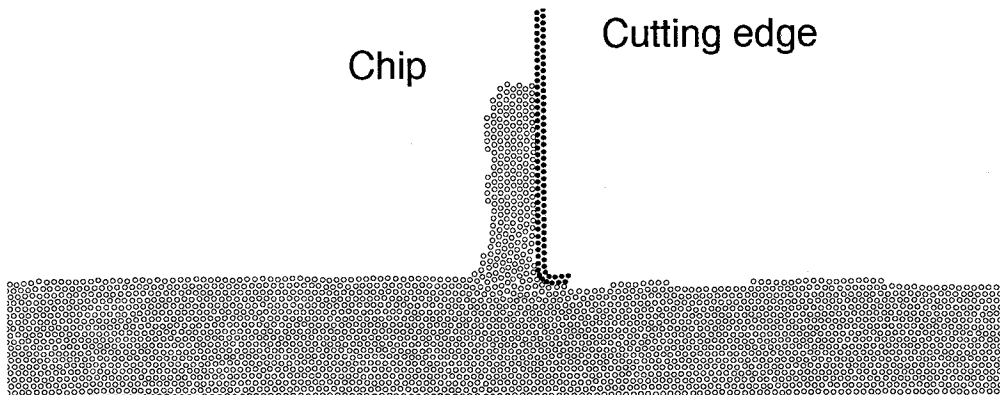


(c) Relative cohesive energy : 1

図 7.18 MS による切りくず生成に対する工具・被削材間の相互作用力の影響、切り取り厚さ：1 原子層、工具切れ刃稜丸み半径：1.5 nm、被削材：アルミニウム

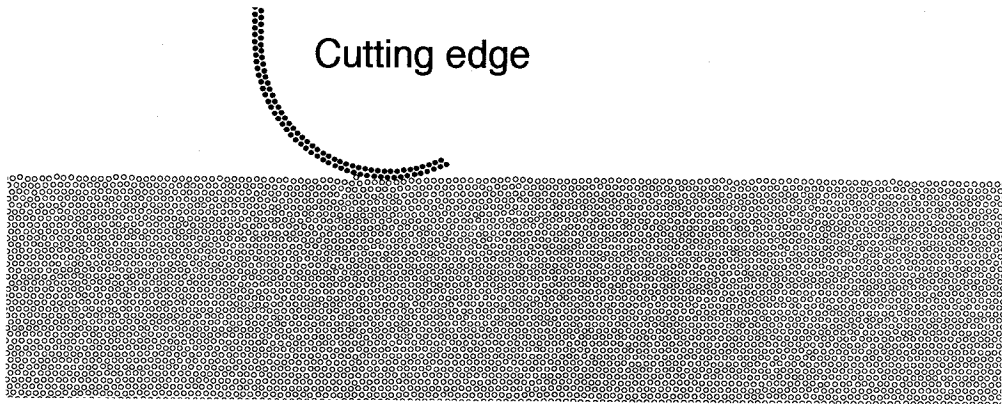


(a) 切削速度 : 20 m/s

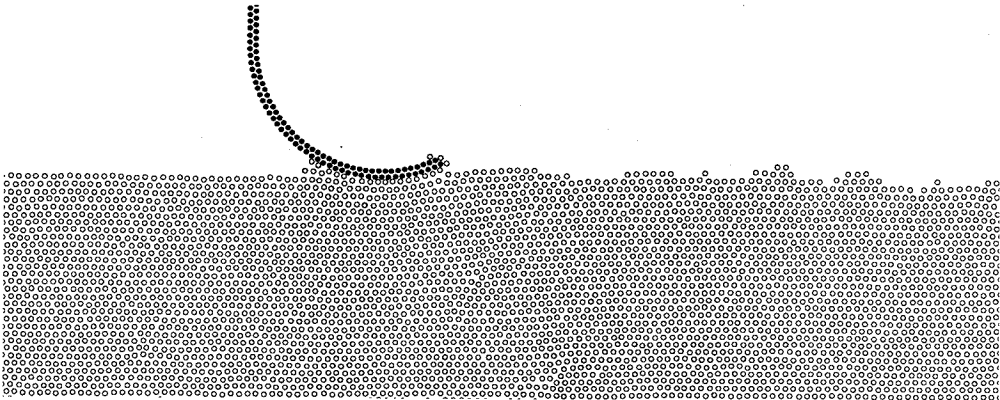


(b) 切削速度 : 200 m/s

図 7.19 最小切り取り厚さに対する切削速度の影響、切り取り厚さ : 0.1 nm、工具切れ刃稜丸み半径 : 0.5 nm、被削材 : 銅



(a) 銅



(b) アルミニウム

図 7.20 MD によるバニングの解析、切り取り厚さ： $-0.2 \text{ nm}$ 、工具切れ刃稜丸み半径： $5 \text{ nm}$ 、切削速度： $200 \text{ m/s}$

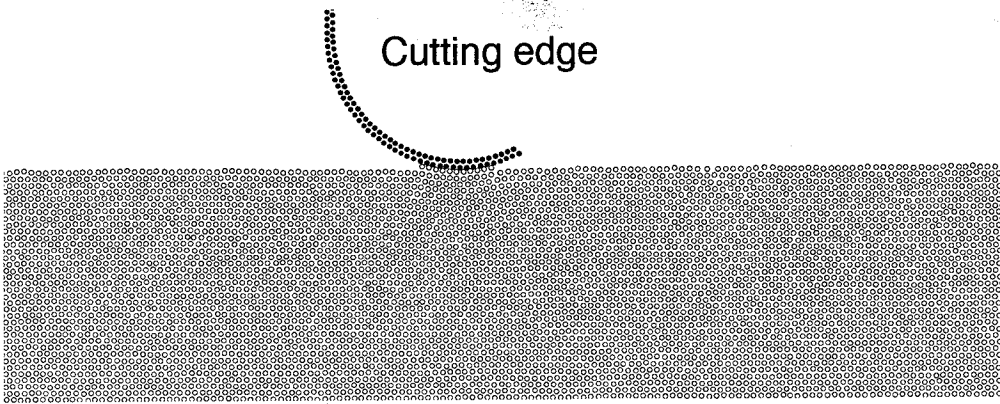


図 7.21 工具・被削材原子間の相互作用力に対するバニシングの解析、工具・被削材間の相互作用力：10 倍、切り取り厚さ： $-0.2 \text{ nm}$ 、工具切れ刃稜丸み半径： $5 \text{ nm}$ 、切削速度： $200 \text{ m/s}$ 、被削材：銅

の相互作用力が強い程生じ易いと考えられる。図 7.21 は相互作用力を銅 - ダイヤモンド原子間の 10 倍にし、切り取り厚さを小さくして行き、1 原子層以下から負の値にして計算機実験を行ったものである。工具が被削材表面に沿って移動することにより被削材表面原子は工具表面に吸着するように除去され、切り取り厚さが負になっても被削材表面原子は除去されている。この時にも仕上げ面内部には、図 7.22 に示すように、転位が生じている。

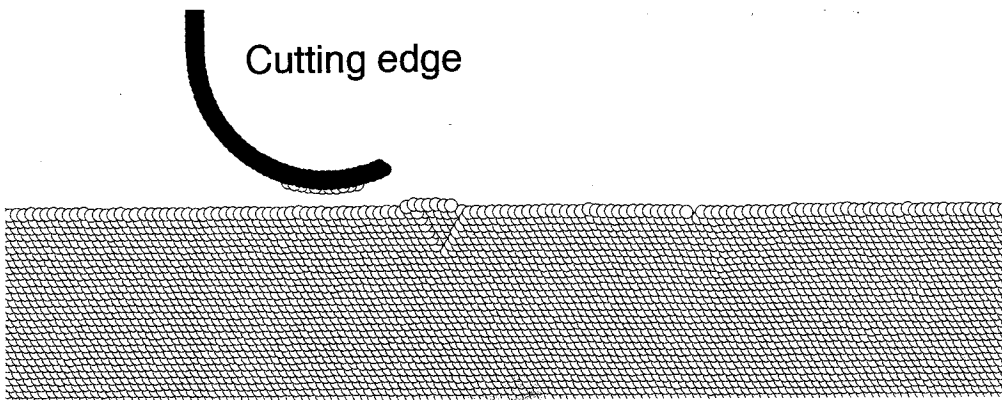


図 7.22 加工変質層に対するバニシング解析、工具・被削材間の相互作用力：10 倍、工具切れ刃稜丸み半径： $5 \text{ nm}$ 、切削速度： $200 \text{ m/s}$ 、被削材：銅

## 7.8 結 言

被削材の違いや工具切れ刃稜丸み半径および工具・被削材間の相互作用力の大小が最小切り取り厚さにおよぼす影響について、極微小切削実験、分子静力学 (MS) および分子動力学 (MD) を用いて解析し、比較・検討した結果、以下のことが明らかになった。

1. 工具切れ刃稜丸み半径は切削現象に大きく影響し、摩耗して切れ刃稜丸み半径が大きくなった工具では、最小切り取り厚さは大きくなる。
2. 被削材が銅である時と比べてアルミニウムでは工具切れ刃の摩耗が著しく速く進行し摩耗量も多い。そのため、アルミニウムの切削では銅に比べて、見掛け上、最小切り取り厚さが大きくなるが、鋭い工具ではどちらも 1 nm の公称切り取り厚さでの切削が可能である。
3. 計算機実験結果によれば、銅とアルミニウムの最小切り取り厚さにはそう大きな差がなく、最小切り取り厚さは工具切れ刃稜丸み半径の  $1/10 - 1/20$  程度であると推定される。
4. 極微小切削実験および原子モデルによる切削シミュレーションの結果、工具・被削材間の相互作用力の違いが切削現象に直接及ぼす影響は小さいが、相互作用力は工具の摩耗速度や摩耗量に大きく影響を与えると考えられ、間接的に最小切り取り厚さに影響する。
5. 切削速度が大きくなれば、それが小さいときに比べて、断熱的な変形のため、せん断角は大きく、切りくずは薄くなり、最小切り取り厚さは小さくなる。
6. 切り取り厚さを小さくして行き、1 原子層以下から負の値にして計算機実験を行った結果、工具・被削材間の相互作用力が強ければ、被削材表面に沿った工具の移動にともない、被削材表面原子は工具表面に吸着するように除去される。

## 第 8 章

# 分子動力学による切削温度の解析

### 8.1 緒 言

極微小切削現象の理解には、既に前章までに述べたように、原子モデルを用いる計算機シミュレーションが有力な手段となる。そのシミュレーションのひとつである分子動力学 (Molecular Dynamics, MD) は原子の変位量が近接原子との原子間ポテンシャルを介して直接伝わるために、力の伝達や材料の変形・破壊現象をよく模擬している。また、位置エネルギーと運動エネルギーの変換が自動的に行われるため、個々の原子の格子振動の観点からの運動エネルギーの増加、すなわち熱の発生もよく模擬している。一方、材料中のある位置での温度は、その位置にある原子の格子振動の運動エネルギーの大きさと等価であるから、材料中の温度分布はそれぞれの位置にある原子の運動エネルギーの分布を知れば明らかになる。

しかし、MD を金属材料中における熱伝導の解析にそのまま適用するには問題がある。金属材料における熱伝導は、原子間ポテンシャルとは無関係に、主として自由電子の移動により行なわれるからである。図 8.1 に示すように金属材料の熱伝導率は自由電子の動きやすさ、つまり電気伝導度に比例する。そのために、自由電子を考慮していない MD による解析では、金属材料の熱伝導率は実際のものよりも相当小さくなる。熱伝導も原子間ポテンシャルを介した格子振動によって支配される共有結合性材料では当然 MD による熱伝導のシミュレーションが可能である。したがって、MD を用いて金属材料中の温度分布を解析をするためには、熱伝導に対する何らかの補正が必要である。



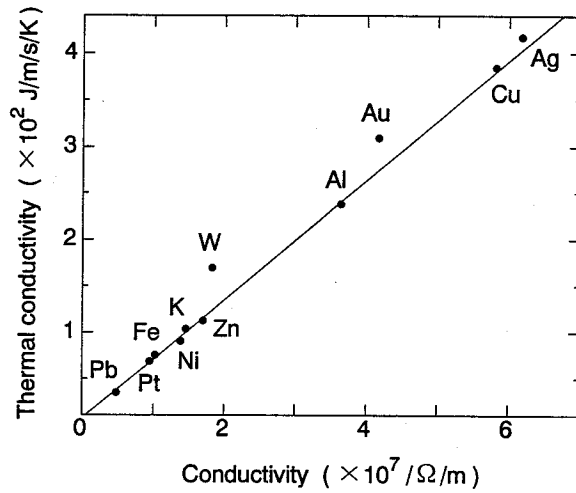


図 8.1 金属材料の熱伝導度と電気伝導度

本章では、MD に適当な熱伝導の補正を導入した上で極微小切削における切削温度の解析を試みる。

### 8.2 金属材料における熱伝導補正法の提案

原子論的に考えると、材料中の熱エネルギーは各原子の格子振動の運動エネルギーであり、熱伝導は格子振動の伝達にもとづく運動エネルギーの移動と考えることができる。金属材料では主に自由電子がこの運動エネルギーを伝えるが、一般の MD では、自由電子の存在を考慮しておらず、原子の運動エネルギーは原子間ポテンシャルを介してのみ伝達されるため、格子振動の伝達が実際よりも遅くなる。したがって適当な時間ステップ毎に、運動エネルギーの伝達を速くする何等かの補正が必要になる。ここでは次に示すような方法で熱伝導の補正を行なった。

$N$ 個の原子からなる系を考えたとき、系を構成する個々の原子の速度  $v_i$  の二乗平均  $v_m$  は ( 8.1 ) 式のように表わされる。

$$v_m = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i^2} \tag{8.1}$$

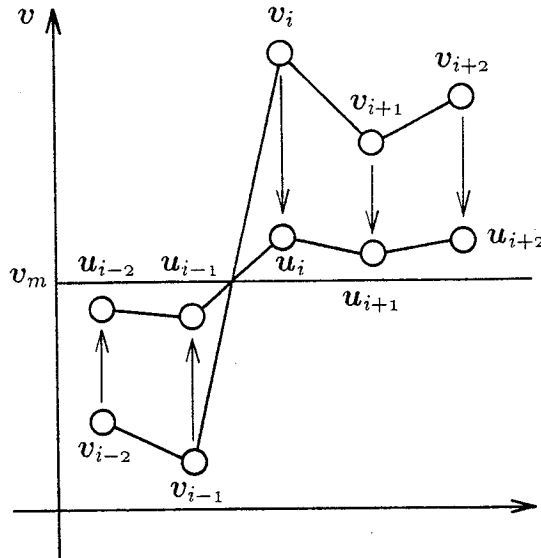


図 8.2 熱伝導補正スケージング 1 (速度分布縮小) の概念

熱は原子間の温度差を小さくする方向に伝達されるため、図 8.2 に示すように、熱エネルギー差、すなわち格子振動の運動エネルギー差を、通常の MD にもとづいて得られる差以上に、速く小さくする必要がある。そこで、(8.2) 式で表わされるように、補正係数  $\beta_1$  を用いて、補正後の速度  $u_i$  の分布幅を小さくする補正を行なう。補正係数  $\beta_1$ 、 $\beta_2$  はある単純な熱伝導問題において MD による計算機実験結果と連続体モデルにおける熱伝導理論にもとづく解析結果の温度分布とが一致するように決める。これらの係数は、本来、材料の各種の熱定数と結びつくと考えられるが、今のところその関係は明かではない。

$$u_i = \left[ 1 - \beta_1 \left( 1 - \frac{v_m}{|v_i|} \right) \right] v_i \quad (8.2)$$

一般に、(8.2) 式による補正を行えば、その前後で個々の原子の運動エネルギーの総和が変化する。そこで、図 8.3 に示すように、もう一度 (8.3) 式による補正を行ない、運動エネルギーの総和が補正前後で保存されるようにする。なお  $\beta_2$  は (8.4) 式で表される補正係数である。

$$v'_i = \beta_2 u_i \quad (8.3)$$

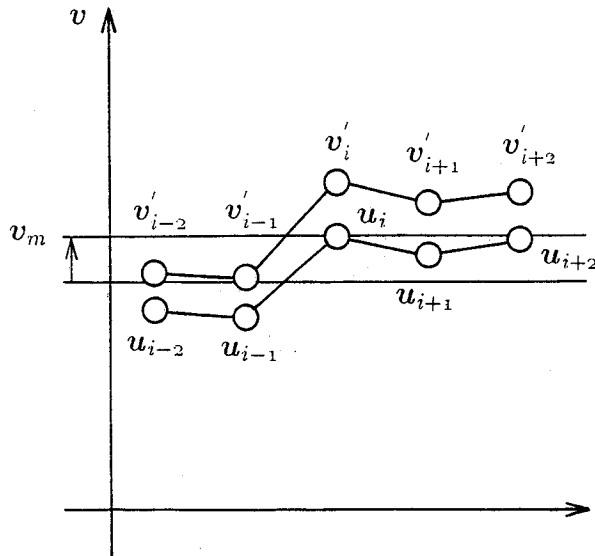


図 8.3 熱伝導補正スケーリング 2 (全運動エネルギー保存) の概念

$$\beta_2 = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N v_i^2}{\sum_{i=1}^N u_i^2}} \tag{8.4}$$

提案した熱伝導の補正法の妥当性と定数  $\beta_1$  を決めるため、1次元熱伝導、2次元熱伝導、瞬間点熱源、二重熱源についての計算機実験を行ない、連続体モデルを用いた解析結果と比較した。

図 8.4 に 1次元熱伝導の解析モデルを示す。このモデルは幅方向に 10 原子、長さ方向に 100 原子層から成り、左半分が 473K、右半分が 273K の初期温度分布を持つ。図 8.5、図 8.6、図 8.7 に原子モデルと連続体モデルによる熱伝導の解析結果を示す。熱伝導の補正を行わない MD による解析では熱がほとんど伝わらないことがわかる。なお補正係数は  $\beta_1$  を 0.7 とし、500 fs ごとに補正を行うことにより、連続体モデルによる解析解とよい一致が見られた。

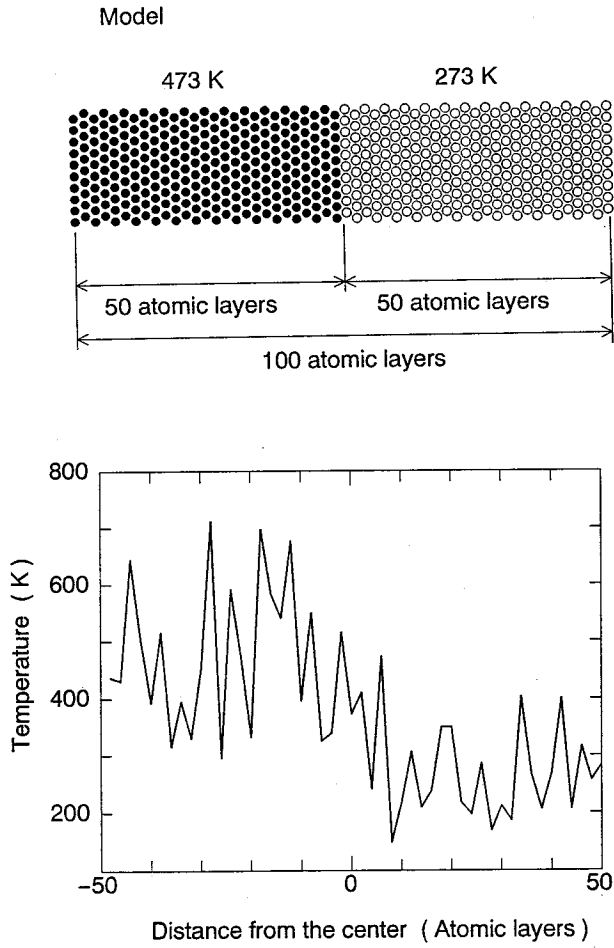


図 8.4 分子動力学による 1 次元熱伝導解析モデル  $t = 0$  ( fs ) (初期温度分布)

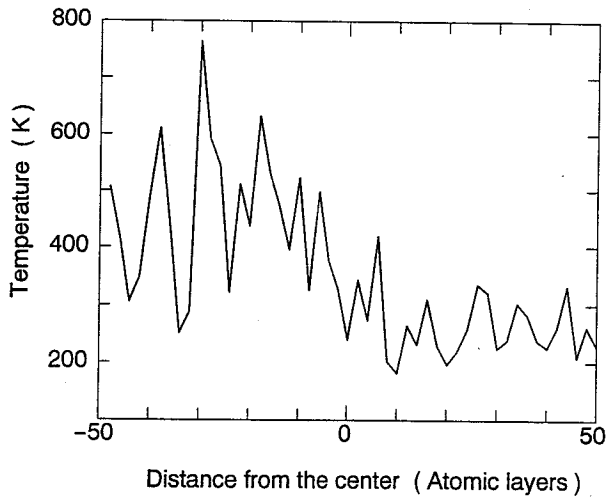


図 8.5 1次元熱伝導  $t = 500$  (fs) (熱伝導補正なし)

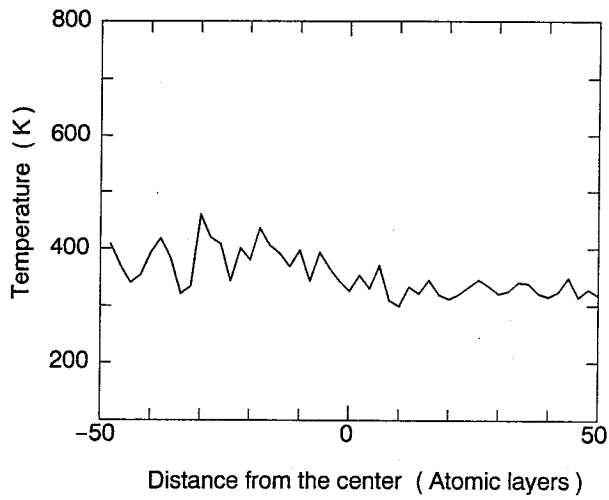
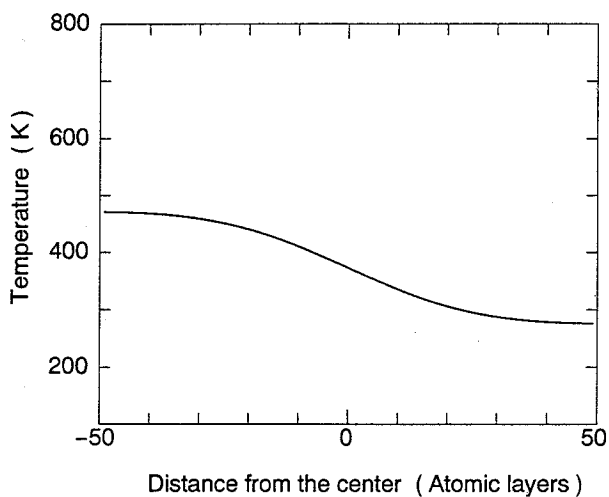
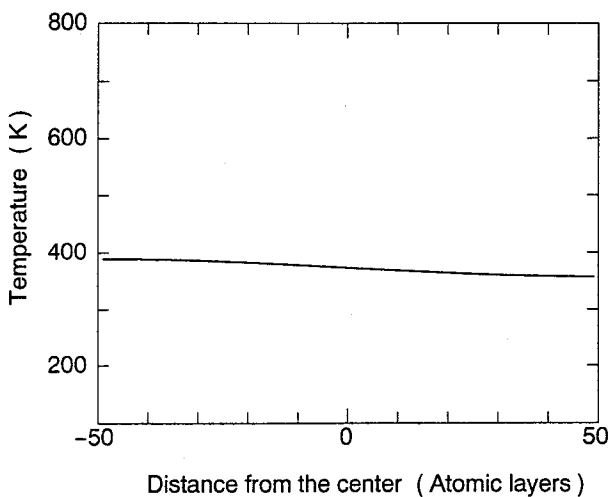


図 8.6 1次元熱伝導  $t = 500$  (fs) (熱伝導補正あり)



(a)  $t = 0$  ( fs )



(b)  $t = 500$  ( fs )

図 8.7 1次元熱伝導 (解析解)

次に図 8.8 に 2次元熱伝導の解析モデルを示す。このモデルでは、中央に瞬間熱源を置き熱伝導の解析を行った。図 8.9、図 8.10、図 8.11 に解析結果を示す、この場合も、同様に、補正係数  $\beta_1$  を 0.7 として、500 fs ごとに補正を行うことにより

連続体モデルによる解析結果とよい一致が見られた。以上の結果より、ここで提案した熱伝導補正を導入することによって、金属材料においても MD を用いた熱伝導の解析が可能となることが明らかになった。

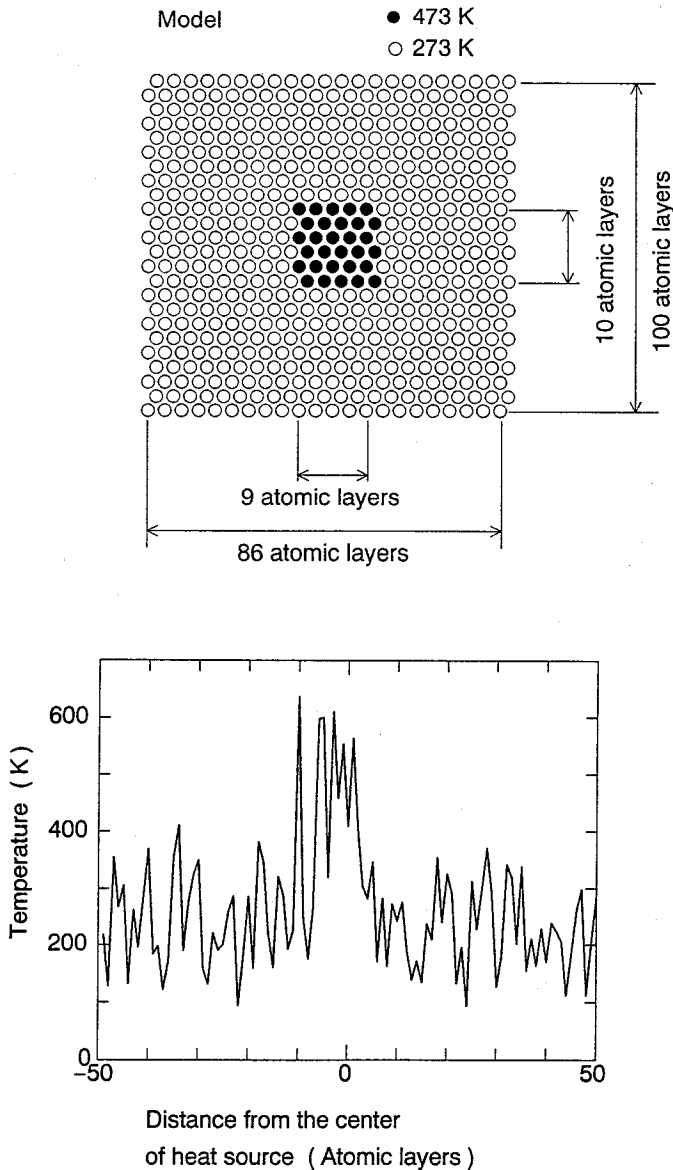


図 8.8 分子動力学による 2 次元熱伝導解析モデル  $t = 0$  ( fs ) (初期温度分布)

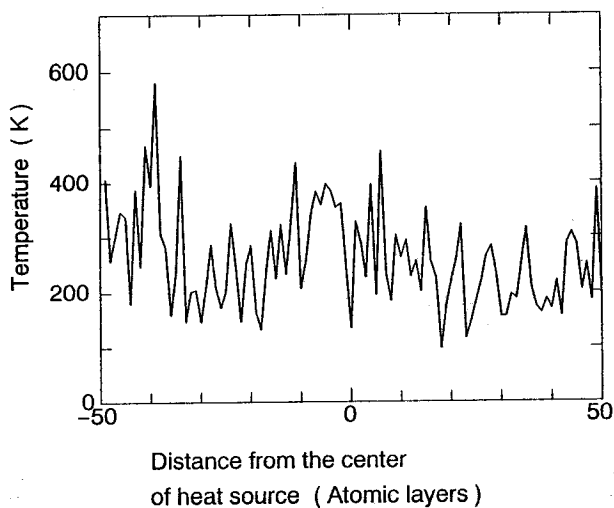


図 8.9 2次元熱伝導  $t = 500$  ( fs ) (熱伝導補正なし)

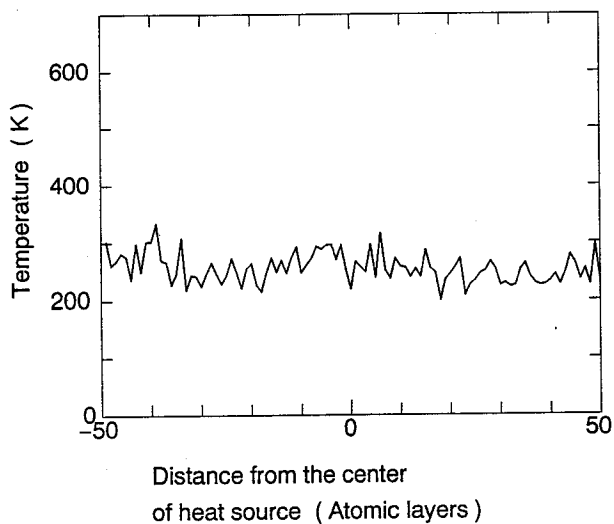
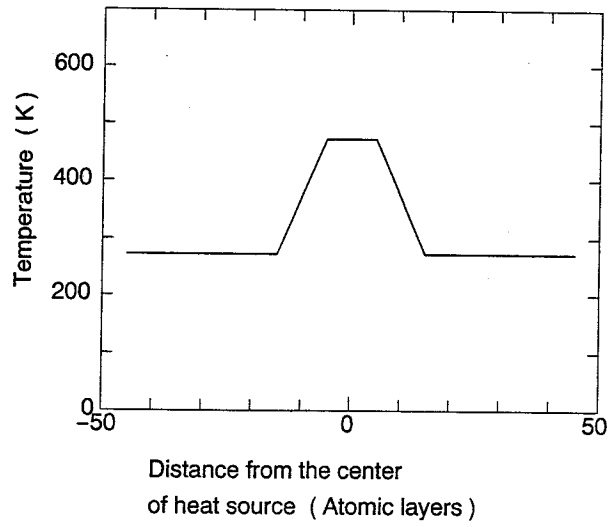
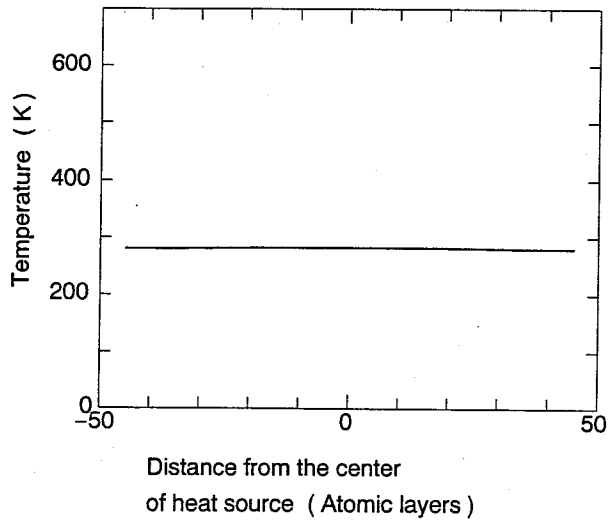


図 8.10 2次元熱伝導  $t = 500$  ( fs ) (熱伝導補正あり)





(a)  $t = 0$  ( fs )



(b)  $t = 500$  ( fs )

図 8.11 2次元熱伝導 (解析解)

### 8.3 原子の運動エネルギーから等価温度への変換

固体を構成する原子の持つエネルギーから固体の巨視的なエネルギーつまり温度を考えるためには、固体の比熱 [17] から考える必要がある。固体をつくっている粒子は絶えず熱運動をしていて、結晶格子の格子点と一致した釣合いの位置のまわりに振動している。もちろん各粒子はそのまわりの粒子と相互作用をするので、すべての粒子の振動は互いに結びついている。しかし理論的結論と実験とを比較すると、十分に高い温度ではこの結びつきは弱くなることが示され、各粒子は隣の粒子とは独立に振動していると考えられる。

運動の自由度が 1 の原子または分子の内部エネルギー  $u_0$  は、絶対温度に比例し、

$$u_0 = \frac{k_B T}{2} \quad (8.5)$$

である。ただし、 $k_B$  はボルツマン定数、 $T$  は絶対温度である。物質の原子が  $i$  個の自由度をもてば、1 モル当たりの内部エネルギーは、次の関係

$$U = \frac{i}{2} k_B T N_A \quad (8.6)$$

で表される。 $N_A$  はアボガドロ数で、 $N_A k_B = R$  となるから

$$U = \frac{i}{2} R T \quad (8.7)$$

となる

空間における原子の位置は (質点として) 3 個の座標によって決定される。したがって振動している原子は 3 個の自由度をもつ。

しかし自由度の数を計算する場合に、振動している質点は運動エネルギーとポテンシャル・エネルギーとを同時にもっているので、振動している原子の内部エネルギーを計算するときには、運動エネルギーに対する自由度と並んでポテンシャル・エネルギーに対する同じ数の自由度を考慮しなければならない。その結果、振動している原子は、3 個ではなく 6 個の自由度をもつことになる。

このようにして、結晶固体 1 モル当たりの内部エネルギーは

表 8.1 固体の原子熱

物質	原子熱
アルミニウム	3.07 R
鉄	3.18 R
銅	2.95 R
カドミウム	3.05 R
ダイヤモンド	0.68 R
ホウ素	1.26 R
ケイ素	2.34 R

$$U = 3RT \quad (8.8)$$

となる。

固体は熱膨張率が小さいので、つまり熱した場合の体積があまり増加しないので、固体に対しては定容比熱と定圧比熱とを区別しないで、簡単に固体の比熱ということが多い、この比熱  $C$  は物体の内部エネルギーの温度に関する一次微分である。すなわち

$$C = C_v = \frac{dU}{dT} \quad (8.9)$$

この比熱の式のなかに内部エネルギーの値を代入すれば、原子熱

$$C = 3R \quad (8.10)$$

が求められる。

すなわち、十分に高い温度においては、すべての固体の原子熱は温度に関係なく  $3R$  に等しい。この法則は、Dulong-Petit の法則と呼ばれる。

表 8.1 に示した値によれば、多くの場合に Dulong-Petit の法則が満足され、表に示した物質に対しては、室温において原子の振動がもはや独立して行われているこ

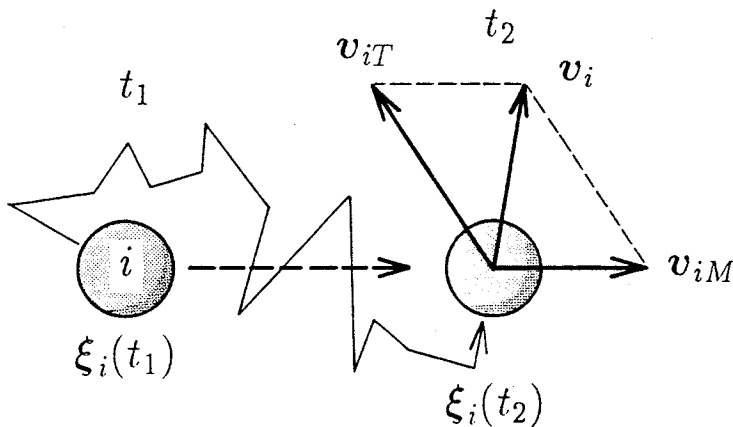


図 8.12 各原子の運動エネルギーから温度への等価変換

とがわかる。ところが、一方、ダイヤモンドやホウ素のような物質もある。これらの場合は、室温で測定される比熱の値は  $3R$  とはまったく違っている。これらの物質にとっては、原子の振動が独立して行われていると考えるには室温ではまだ十分な高さの温度ではないことが明かである。

次に、各原子のエネルギーから等価的な温度への変換を考える。一般に空間で振動している原子の運動エネルギーと位置エネルギーの自由度はそれぞれ 3 個である。本来はそれらの合計である内部エネルギーから温度に等価変換すべきであるが、エネルギー等配分の原理によって、多数の粒子からなる系においては内部エネルギーはそれぞれの自由度の間に平均して平等に分配されるため、運動エネルギーのみから等価温度を算出することができる。図 8.12 と (8.11) 式に示すように、原子  $i$  の速度  $v_i$  は原子の集合体の巨視的な運動である並進運動  $v_{iM}$  と微視的な格子振動  $v_{iT}$  とに分けることができ、並進運動の成分は温度と無関係であるので、格子振動のエネルギーのみから温度への等価変換を行なった。時刻  $t_1$  と  $t_2$  の  $i$  の位置を  $\xi_i(t_1)$ 、 $\xi_i(t_2)$  とすると、格子振動の運動成分は (8.13) 式で表わされる。いま 2 次元モデルを用いていることから格子振動による運動エネルギーの自由度を 2 として (8.14) 式にしたがって各原子の運動エネルギーを温度に等価変換する。

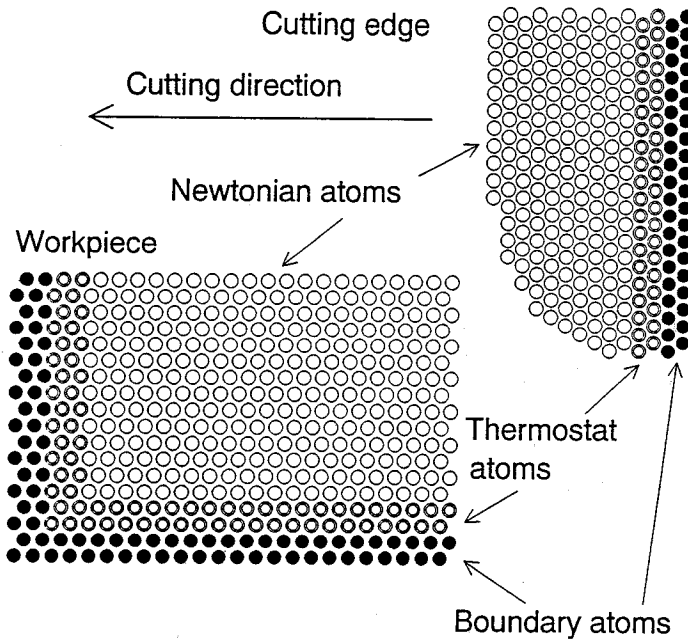


図 8.13 分子動力学による切削温度解析モデル

$v_i$  : 原子の速度

$v_{iM}$  : 巨視的な並進運動

$v_{iT}$  : 微視的な格子振動

$$v_i = v_{iM} + v_{iT} \tag{8.11}$$

$$v_{iT} = v_i - v_{iM} \tag{8.12}$$

$$= v_i - \frac{\xi_i(t_1) - \xi_i(t_2)}{t_1 - t_2} \tag{8.13}$$

$$\frac{1}{2} m v_{iT}^2 = k_B T \tag{8.14}$$

### 8.4 切削温度の解析

極微小切削の解析にあたっては、図 8.13 に示すように、第 5 章で述べたものと同じ銅の理想結晶の最密面をダイヤモンド工具の (111) 面が切削する 2 次元モデルを考える。境界も同様に、最も外側の 2 原子層を固定原子 (Boundary atoms)、その

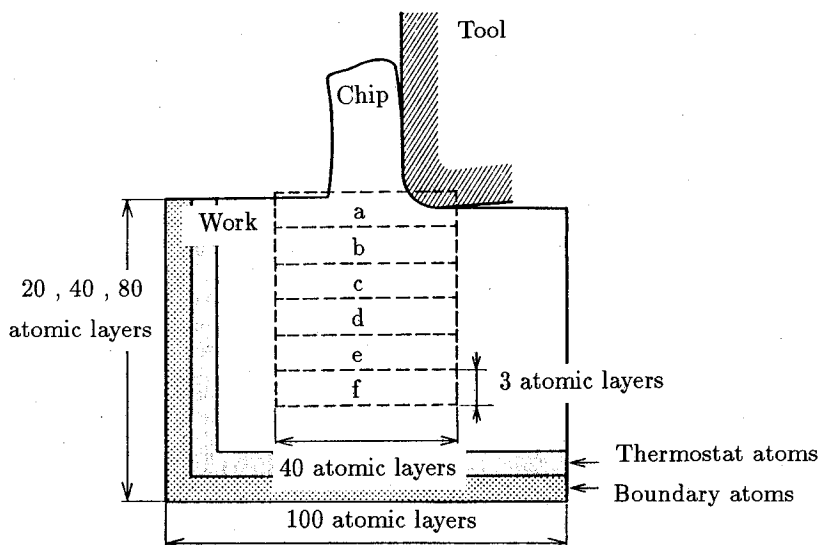
表 8.2 切削温度の比較

Method		Uncut chip thickness	Cutting velocity ( m/s )	Temperature on shear plane ( K )
MD	1	0.5 nm	20	298-352
	2	0.5 nm	200	441-646
Conventional Analysis	1	0.5 nm	20	391
	2	0.5 nm	200	560
Measurement		3-100 $\mu\text{m}$	9.4-22	473-573

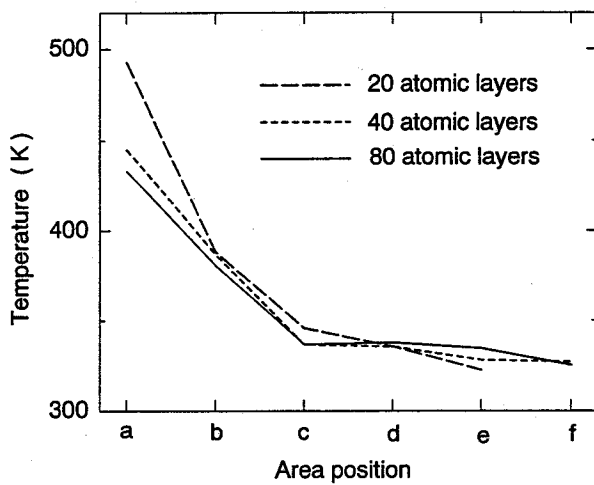
内側の 2 原子層を系全体の温度が上昇しすぎるのを防ぐ温度調節原子 ( Thermostat atoms ) とした。

切削温度を解析するに当たっても、境界層の存在が工具切れ刃近傍の温度分布に影響を与えないように設定する必要がある。本解析において、境界条件の妥当性を確かめるために、深さ方向に 20 原子層、40 原子層、80 原子層と 3 種類の解析モデルを用いて切削速度 200 m/s での温度分布の比較を行った。図 8.14 に示すように 3 種類の解析結果ともに温度分布に大きな差がないことが確認された。この理由は、本解析に用いた温度調節原子は温度調節原子層内の平均温度を一定に保つが境界層内で温度分布を持つことができ、自由原子の温度分布に与える影響が少ないためである。

この熱伝導補正を導入した MD を用いて切削速度 20 m/s および 200 m/s での銅の切削温度を解析した結果を図 8.15 (a)、(b) に示す。切削温度は、50 ps 毎にせん断領域に存在する 100 - 120 個の原子の運動エネルギーの平均値から求めた。計算機実験から求めたせん断領域内の原子の平均温度を、第 2 章で示した、E.G.Loewen & M.C.Shaw [8] による連続体モデルでの熱伝導解析および森脇ら [37] の熱電対による実測値と比較して表 8.2 に示す。これらの結果は良く一致しており、MD による切削温度の解析が可能であることを示している。

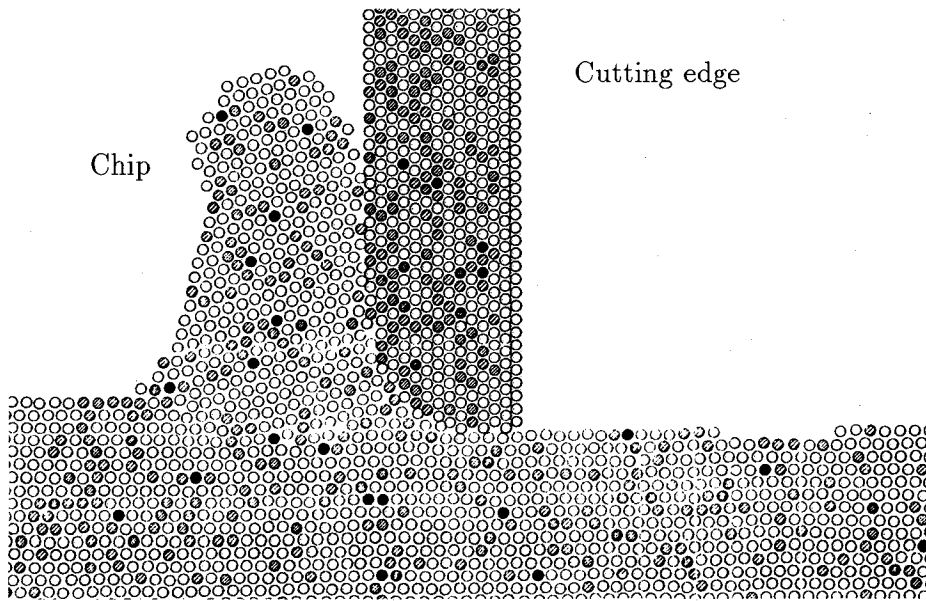


(a) 温度分布の計測範囲および計測位置



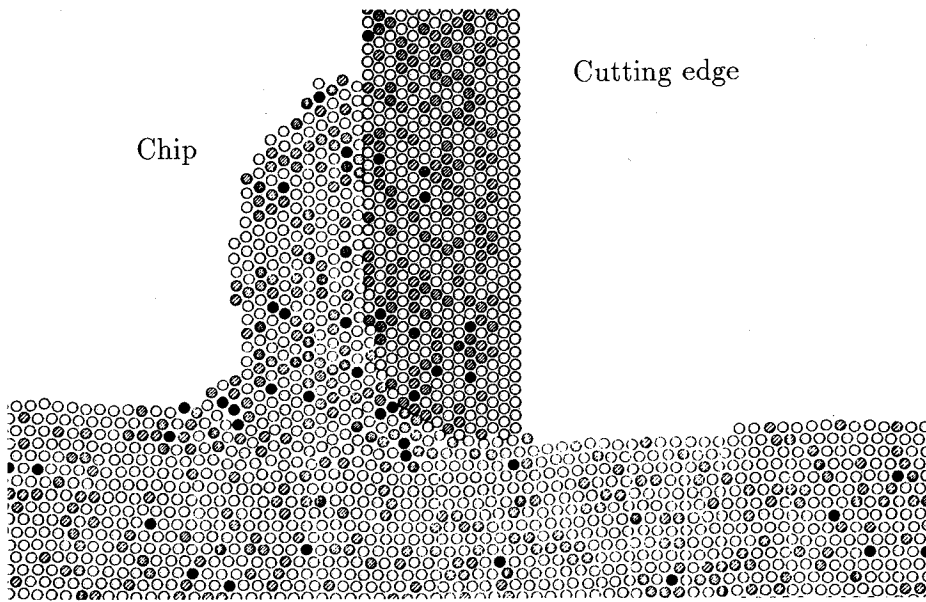
(b) 境界条件の違いによる温度分布の比較

図 8.14 境界条件の妥当性



Work

(a) 切削速度 : 20 ( m/s )



Work

(b) 切削速度 : 200 ( m/s )

図 8.15 分子動力学による切削温度の解析

● :  $2000 \text{ K} \leq T$  , ◐ :  $1500 \text{ K} \leq T < 2000 \text{ K}$

◑ :  $1000 \text{ K} \leq T < 1500 \text{ K}$

◒ :  $500 \text{ K} \leq T < 1000 \text{ K}$  , ○ :  $T \leq 500 \text{ K}$



## 8.5 結 言

1. MD を用いて金属材料における熱伝導を模擬する手段として、原子の速度分布幅を縮小させることにより、熱が速く伝わるように温度分布を補正する手法を提案した。
2. 簡単な熱伝導問題に対して、この補正法を適用した MD による解析結果と連続体モデルでの熱伝導解析結果と比較した結果、両者は良い一致を示し、本補正法が金属材料中の熱伝導解析に有効であることを確かめた。
3. 本補正を導入した MD を用いて、極微小切削における切削温度に関する計算機実験を行なった結果、連続体モデルにもとづく解析解および実測値と良く一致した。

## 第9章

### 総括

超精密切削加工技術は、各種光学部品、磁気ディスク、複写機ドラムなど精密仕上げ加工において既に実用化の域に達している。安定した加工技術として確立されるためにはまだ解決すべき多くの問題を残してはいるものの、一応、表面粗さ 10 nm 台、形状精度 100 nm 台の加工精度が実現され、さらにもう 1 桁高い精度レベルに進みつつある [19] [39]。しかし、この加工技術によって果たしてどこまで薄く工作物表面を削り取り得るのかという、最も素朴な疑問に対する回答はまだ得られていない。また、サブミクロンからナノメートルレベルに達しようとする極微小切削における切りくず排出機構は通常のマクロな切削におけるそれと同じなのか、という本質的な問題もまだ明らかにはされていない。

本研究では、このような背景のもとに、超精密切削の精度限界およびナノメートルレベルでの切削現象の特異性を解明することを目的とし、極微小切削実験および原子モデルを用いた一種の切削シミュレーションである計算機実験を行った。得られた主要な成果について総括すると次のとおりである。

序論に続く第2章では、極微小切削現象の解明には従来の連続体力学にもとづく解析では不十分であることを示し、原子モデルを用いた分子静力学および分子動力学にもとづく解析手法を提案した。分子動力学を簡単な変形・破壊現象へ応用した結果、実際の変形現象を良く模擬しており、金属材料における原子論的な立場からの変形・破壊現象の解析手法として分子動力学は有用となることを示した。

第3章では、実験的に、どこまで薄く被削材を削り取り得るのかを調べるための

方法および条件について述べた。本実験に用いた工作機械の運動精度を詳細に検討した結果、使用した極微小切削実験機では公称切り取り厚さの再現性は1 nm以下であり、ナノメートルレベルでの切削実験が可能であることを示した。さらに、本実験装置を用いた極微小切削実験の結果、公称切り取り厚さがナノメートルレベルにまで小さくなくても安定した連続型の切りくずが生成されること、切りくずはひだのように細かく一様に折り畳まれた特有の形態を示し、切り取り厚さが小さくなるにしたがって、ひだが細かくなることを明らかにした。

第4章では、ナノメートルレベルの公称切り取り厚さにおける極微小切削実験により得られた、特異な切りくず形態から、工具・被削材間の相互作用力を推定した。その結果、工具・被削材間の単位面積当たりの摩擦力は  $S_0 = 6.8 \times 10^7$  (N/m<sup>2</sup>)、等価摩擦係数  $\mu$  は  $\mu = 0.18$  となり、超高真空中での銅・ダイヤモンドの摩擦実験結果と良い一致が見られた。この結果は極微小切削機構の解明に当たっての手掛かりとして工具・被削材間の界面現象を考慮する必要があると、超高真空中での摩擦モデル実験結果が適用できることを示唆している。

第5章では、切削抵抗について切削実験および計算機実験の結果を比較した。その結果、両者には良い連続性が見られ、分子動力学にもとづく解析手法の妥当性を示すことができた。また、切れ刃稜丸み半径に対する公称切り取り厚さの比について整理した比切削抵抗も良い連続性を示し、切削実験および計算機実験ともに、公称切り取り厚さが切れ刃稜丸み半径の1/2程度以下では比切削抵抗は銅の凝集エネルギーを越えることが明らかになった。

第6章では、ナノメートルレベルの切り取り厚さにおける切りくず排出機構を分子動力学を用いて解析した。工具刃先近傍での被削材中に発生する転位がせん断領域内で前進・後退を繰り返したり、異なるバーガスベクトルを持つ転位の転位反応を経て切りくず自由表面側に抜けることによって切りくずが生成されることを明らかにした。また、仕上げ面の粗さおよび変質層深さの推定も可能であることを示した。

第7章では、最小切り取り厚さおよびその支配要因を解析するために、極微小切削実験および計算機実験との比較・検討を行った。その結果、最小切り取り厚さは、

工具切れ刃稜丸み半径の  $1/10 - 1/20$  程度であり、切削速度が大きいほど最小切り取り厚さは小さくなることが明らかとなった。また、工具・被削材間の相互作用力が大きいほど最小切り取り厚さは小さくなるが、その影響は小さいことが明らかになった。

第8章では、分子動力学による熱伝導の解析を可能にする、格子振動エネルギー分布に対するひとつの補正方法を提案した。熱伝導の補正を行った分子動力学による解析結果を連続体モデルにもとづく解析解と比較しこの補正方法の妥当性を確かめた。この補正方法を応用して、極微小切削における切削温度の推定を行った結果、連続体モデルによる解析結果と良い一致を示し、従来の分子動力学では困難であった切削温度に関する解析を可能とした。

## 参考文献

- [1] 井川、島田：日本機械学会誌 87,[791] (1984) 38
- [2] 井川直哉：機械の研究 24,[12] (1972) 1545
- [3] 井川、島田、張、吉永、西村：昭和 63 年度精密工学会春季大会学術講演会論文集 (1988) 389
- [4] 稲村豊四郎、鈴木裕幸、安井武司：1990 年度精密工学会秋季大会学術講演会論文集 127
- [5] 田中義信、津和秀夫、井川直哉：精密工作法 (第 2 版上)、共立出版 (1989) 40.
- [6] John Wiley and Sons : Friction and Wear of Materials (1966)
- [7] 井上統道：大阪大学卒業論文 (1987)
- [8] E.G.Loewen , M.C.Shaw : Trans. ASME (1954) 217
- [9] 黒田司：表面電子物性、日刊工業新聞社 (1990)
- [10] 森勇蔵、杉山和久、遠藤勝義、後藤英和：固体表面間の相互作用力に関する研究 (第 1 報) -界面エネルギーの原子論的評価- 精密工学会誌 52,1 (1986) 129
- [11] J.T. オーデン著：非線形有限要素法 2、倍風館 (1980)
- [12] 上田顯：コンピュータシミュレーション-マクロな系の中の原子運動-、朝倉書店 (1990)
- [13] 岡田勲、大澤映二：分子シミュレーション入門、海文堂出版株式会社 (1990)
- [14] 河村雄行：パソコン分子シミュレーション、海文堂出版株式会社 (1990)
- [15] 田中寛、山本良一：計算物理学と計算化学-分子動力学法とモンテカルロ法-、海文堂出版株式会社 (1990)

- [16] Frank H. Stillinger and Thomas A. Weber: Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. ,Physical Review B 31,8 (1985) 5262
- [17] クドリャフツェフ: 熱と分子の物理学、東京図書株式会社
- [18] 井川直哉: 切削加工の精度限界、機械の研究、24,12 (1972) 1545.
- [19] 井川直哉、島田尚一: 超精密切削加工の精度限界、精密工学会誌、52, 12 (1986) 2000
- [20] R.R.Donaldson and D.C.Thompson : Design and Performance of a Small Precision CNC Turning Machine, Annals of the CIRP, 36, 1 (1986) 373.
- [21] 井川直哉、島田尚一、田中宏明: 1990 年度精密工学会春季大会学術講演会論文集 539
- [22] N.Ikawa and S.Shimada : Cutting Tool for Ultraprecision Machining, Proc. 3rd ICPE, Kyoto (1977) 357.
- [23] A.P.Sokalowski, Prazision in der Metallbearbeitung: VEB Verlag Technk, Berlin (1955).
- [24] 山本明、中村示: 極微小切削における切削開始の条件について-切れ刃丸みを変化した2次元バイトによる実験的研究-、精密機械、34, 5, (1968) 18.
- [25] 浅井昭一、田口佳男、堀尾健一郎、河西敏夫、小林昭: 改良型走査電子顕微鏡 (SEM) による単結晶ダイヤモンド工具の切れ刃稜丸み半径の測定と解析、精密工学会誌、56, 7, (1990) 1311.
- [26] 黒木剛司郎、大森宮次郎: 金属の強度と破壊、森北出版 (1977)
- [27] 理科年表 昭和 61 年、丸善株式会社
- [28] J.T.Black : Trans. ASME. J. Eng. Ind. 101 (1979) 403
- [29] J.T.Black : Metallurgical Transactions 3 (1972) 2012

- [30] J.T.Black : Trans. ASME. J. Eng. Ind. (1972) 307
- [31] チモシェンコ著、仲威雄 [他] 共訳: 挫屈理論、東京コロナ社 (1953)
- [32] S.V.Pepper : J. Vac. Technol. 20 [3] (1982) 643
- [33] S.V.Pepper : Effect of Electronic Structure of the Diamond Surface on the Strength of the Diamond-Metal Interface, J. Vac. Sci. Technol., 20, 3 (1982) 643.
- [34] K.Miyoshi, S.V.Pepper / NASA : 私信
- [35] 白井英治: 現代切削理論—コンピュータ解析と予測システム—、共立出版 ( 1990 )
- [36] 鈴木平、吉永日出男、竹内伸: 転位のダイナミックスと塑性、裳華房 ( 1985 )
- [37] 岩田一明、森脇俊道、奥田孝一: 銅の超精密ダイヤモンド切削における切削温度の解析、精密工学会誌 53,8 (1987) 113
- [38] 森勇蔵、奥田徹、杉山和久、山内和人: EEM ( Elastic Emission Machining ) による超精密数値制御加工法精密機械 51,5 (1985) 149 - 155
- [39] B. Krauskoph : Diamond Turning - Reflecting Demands for Precision -, Manufacturing Engineering, May, 1984 (1984) 90.

## 謝辞

本論文を結ぶに当たり、終始かわらぬ暖かいご指導並びにご鞭撻を賜りました恩師、大阪大学工学部 井川直哉教授に深甚の謝意を表すと共に、有益なご助言を賜りました、大阪大学工学部 森勇蔵教授、北川浩教授、花崎伸作教授に厚く感謝いたします。また本論文の完成に当たり、有益なご助言、ご指導を賜った、大阪大学工学部 川邊秀昭教授、芳井熊安教授、片岡俊彦教授、梅野正隆教授、田村坦之教授、岸田敬三教授に深く感謝いたします。

本研究を進めるに当たり、直接ご指導頂いた島田尚一助教授、大森義市講師、打越純一先生ならびに精密工学教室の諸先生方に深く感謝いたします。

また、コンピュータ処理についてご教示頂きました、鳩野逸生先生、切りくず排出機構に付いてご教示頂きました、超高压電子顕微鏡センター、森博太郎助教授、SEM 観察についてご支援ご協力を賜った医学部付属共同研究実習センター、黒田正男講師、老木栄治技官に厚くお礼申し上げます。さらに、ワークステーションによる計算機実験に多大のご支援を頂きましたペガサスミシン製造株式会社、また、貴重なダイヤモンド工具を提供して頂きました大阪ダイヤモンド工業株式会社に厚くお礼申し上げます。

最後に、本研究の実験遂行および論文作成にご協力頂きました、張明忠氏、中原康博氏、堀健司氏、中高一郎氏、永留誠一氏、横川尚史氏、早川浩史氏、五十嵐宏明氏、若松治氏、佐藤剛氏をはじめ井川研究室の諸氏に厚く感謝いたします。