

Title	高機能光学素子の型加工におけるダイヤモンド切削工具の損耗機構
Author(s)	島田, 尚一; 宇田, 豊; 本田, 索郎
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2014, 4, p. 33-36
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/70481
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

高機能光学素子の型加工におけるダイヤモンド切削工具の損耗機構

島田 尚一⁽¹⁾、宇田 豊⁽¹⁾、本田 索郎⁽²⁾

⁽¹⁾大阪電気通信大学 工学部 機械工学科、⁽²⁾大阪府立産業技術総合研究所

1. はじめに

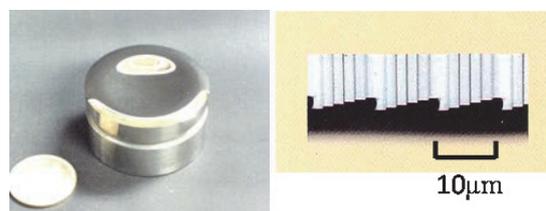
非球面鏡やレンズ、マルチステップ回折格子、フレネルレンズ、マルチレンズアレイなどの高機能光学素子の需要は近年益々増加している。図1に例を示すように、これらの光学素子は複雑な曲面やアスペクト比の高い三次元形状を持ち、一般的には、型を用いてガラスや樹脂を成形して製作される。型の加工には、工具輪郭の転写性が高く、微細形状の高効率加工ができる、ダイヤモンド工具を用いた超精密切削加工が最も適している。

一方、耐熱性の高い鉄系金属やニッケルなどの型材は、ダイヤモンド工具が激しい損耗を示すため、この方法では加工できない。ニッケル (Ni) に 10~14%のリンを添加したニッケルリン (Ni-P) メッキ層はなんとかダイヤモンド工具で削ることができ、精細型材として多く使用されているが、耐熱性が鉄系材料に比べて低く、厚さが 100 μm 程度の薄いメッキ層であるためアスペクト比の大きな型は加工が困難である。また、Ni を加工するときの損耗機構、P の添加による損耗抑制機構は、今のところ、よく分かっていない。

本研究は、まず Ni の加工におけるダイヤモンド工具の損耗機構および P の添加による損耗抑制機構を明らかにし、その結果を鉄系材料の加工における損耗抑制に応用し、高精度・高能率という超精密切削加工の特性を生かした耐熱性の高い高精細型の実用的な加工技術を開発しようとするものである。

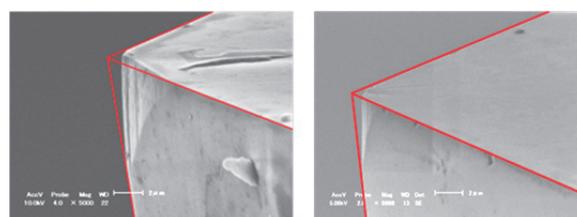
2. 切削実験および接触加熱損耗試験

図2は Ni および Ni-P を先端角 130° の直線切刃ダイヤモンド工具で切削したときの工具先端部の損耗を示す[1]。切削速度、切込み、送りはそれぞれ 3.3 m/s、3.5 μm 、2.5 $\mu\text{m}/\text{rev}$ である。Ni の切削においては、切削距離が 20m で既に工具寿命を超えた大きな



(a)非球面レンズ (b)マルチステップ回折格子

図1. 高機能光学素子用精細型の例



(a) Ni 20m 切削後 (b) Ni-P 1400m 切削後

図2. Ni および Ni-P の切削における工具損耗

損耗を示しているが、Ni-P では、1400m の切削後でも Ni に比べて損耗はかなり少なく P の添加が損耗を抑制していると考えられる。

次に、切削中の工具先端の雰囲気模擬したダイヤモンドと被削材との接触加熱損耗試験を行った[1]。ダイヤモンドの平板試料に Ni ワイヤおよび Ni に Ni-P をメッキしたワイヤを載せ、 4.2×10^{-3} Pa の真空中で 473 K から 773 K までの温度で3時間加熱したときのダイヤモンドの損耗量を求めた。Ni-P に比べて、Niの方が損耗量はほぼ2倍と大きく、損耗量のアレニウスプロットはともに直線となった。また、ダイヤモンド円錐を用いた種々の被削材の単粒研削実験では炭素鋼や鋳鉄などの硬さの高い被削材よりも軟らかい純鉄や Ni の研削の方が激しい損耗を示すことが分かっている[2]。これらの実験結果は、鉄やニッケルの加工におけるダイヤモンド工具の損耗は機械的な摩耗ではなく熱化学的な損耗であることを示唆している。

3. 損耗機構解明のための第一原理計算

3.1 Ni とダイヤモンドとの相互作用

Ni および Ni-P の切削におけるダイヤモンド工具損耗の素過程を解明するために、被削材とダイヤモンドとが接触したときの相互作用の第一原理解析を行った。計算には実空間差分法に基づく高精度第一原理分子動力学法を用いた[3]。

ダイヤモンド(100)表面のモデルとして、 $C_{10}H_{14}$ クラスタを用いた。図3は緩和後のクラスタモデルを示す。モデル最下端の炭素原子が被削材と相互作用をするラジカルカーボンであり、この炭素原子以外のダングリングボンドは水素原子で終端化している。白字の数値は個々の原子に所属する価電子数の指標であるアトミックポピュレーションを表す。また、黄字の数値は化学結合に関与する電子数の指標であるボンドポピュレーションを表し、その変化が相互作用前後の化学結合の強さの変化を示す。

Ni 表面のモデルは以下の手順で求めた。まず全方向周期境界を持つ fcc 構造単位胞からなる Ni バルクのモデルを用いて最安定構造の格子定数を求めると 3.49 \AA となり、文献値である 3.52 \AA とほぼ等しくなった。この単位胞を並べて $x \times y \times z$ 方向に $2 \times 2 \times 1$ 単位胞の大きさを持つ Ni 薄板のモデルを作った。 x および y 方向は周期境界、 z 方向は非周期境界とし、 z 方向を緩和させて表面の安定構造を求めたところ、格子定数はバルクよりやや大きい 3.50 \AA となった。図4に作成した Ni(100)表面を示す。Ni 原子のアトミックポピュレーションは全て約 10.0 となった。

図5は Ni 表面モデルにダイヤモンド表面モデルを、Ni 原子のブリッジサイトにダイヤモンドのダングリングボンドが相互作用するように、 z 方向から近づけたときの最安定構造を示す。この時のラジカルカーボンと表面 Ni 原子との距離は 1.50 \AA となった。相互作用後のラジカルカーボンのアトミックポピュレーションは 4.108 から 4.913 に増加した。また、ラジカルカーボンと相互作用している Ni 原子のアトミックポピュレーションは 10.00 から 9.73 に、その周辺の Ni 原子のそれらも 9.84 から 9.92 程度に減少した。この結果はラジカルカーボンと Ni 原子の間

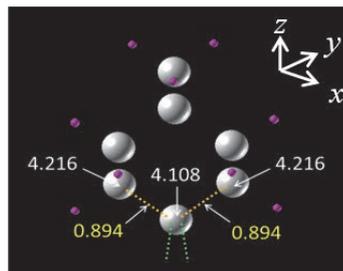


図3. ダイヤモンド(100)表面モデル

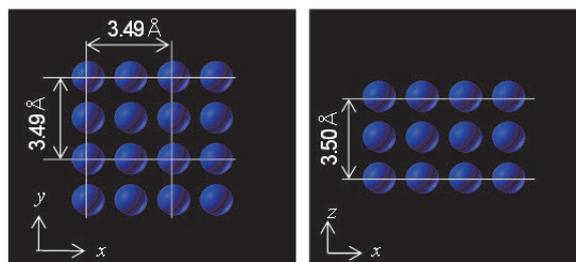


図4. Ni (100)表面モデル

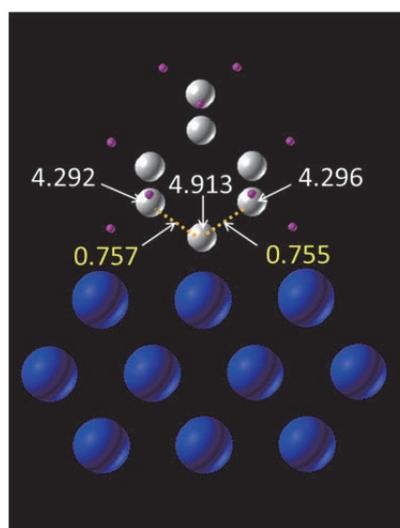


図5. ダイヤモンドと Ni 表面との相互作用

にイオン結合が生じていることを示している。一方、ラジカルカーボンのバックボンドポピュレーションは 0.894 から 0.755、0.757 と減少しており、共有結合強度が弱まっている。また、0.114、0.115 と小さい値であるが、ラジカルカーボンと Ni 原子の間のボンドポピュレーションが増加し、結合が生じていることが分かる。これらの結果から、ダイヤモンド表面炭素原子は切削熱によって自身の持つ運動エネルギーが大きくなると脱離して、Ni 表面に残り、ダイヤモンドが損耗すると考えられる。

3.2 Ni-P とダイヤモンドとの相互作用

次に、Ni-P とダイヤモンドとの相互作用を解析した。図3に示したNi表面モデルの格子間に、型材として一般的な、重量パーセントで12%相当のP原子を、ランダムに配置し、緩和させた後のモデルを図6に示す。元のfcc構造はひずみ、小さいモデルではあるが、Ni原子の動系分布からは、実際のメッキ層と同様に、アモルファスに近づいていると考えられる。NiおよびPのアトミックポピュレーションはそれぞれ6.3から6.4、9.6から9.8となっており、両者の間にイオン結合が生じている。

このNi-P表面モデルにダイヤモンド表面モデルを、Ni原子のブリッジサイトにダイヤモンドのダングリグリングボンドが相互作用するように、z方向から近づけたときの最安定構造を図7に示す。この時のラジカルカーボンと表面Ni原子との距離はNi表面の時よりもやや小さく1.10Åとなった。相互作用後のラジカルカーボンのアトミックポピュレーションは4.869となり、Niとの相互作用の時よりも増加が少なく陰イオン化の程度が小さい。ラジカルカーボンと相互作用しているNi原子のアトミックポピュレーションは9.3から9.7程度に減少しており、陽イオン化しているが、既にPとの相互作用を生じており、ラジカルカーボンとのイオン結合性はNiの場合に比べてかなり小さいと考えられる。また、ラジカルカーボンのダングリグリングボンドポピュレーションは0.007、0.088であり、Ni原子とのそれが0.114、0.115であったのと比べるとかなり小さい。一方、ラジカルカーボンのバックボンドポピュレーションは0.743と0.751であり、Niとの相互作用の時と大差がない。

これらの結果から、Ni-P表面でもラジカルカーボンとNi原子の間に結合は生じているが、Ni表面の場合と比べてその強度は弱く、ダイヤモンド表面炭素原子は脱離しにくいと考えられる。

4. 表面炭素原子の脱離エネルギーの比較

被削材表面と相互作用するダイヤモンド表面炭素原子の脱離の生じやすさを比較するために、ラジカ

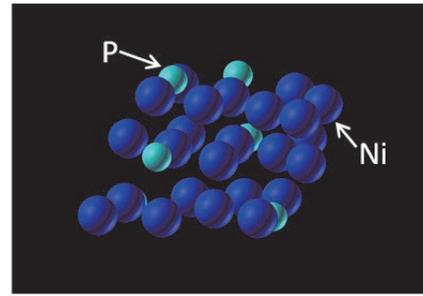


図6. Ni-P表面モデル

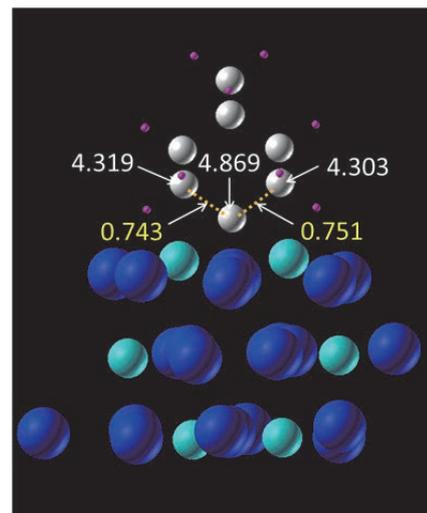


図7. ダイヤモンドとNi-Pとの相互作用

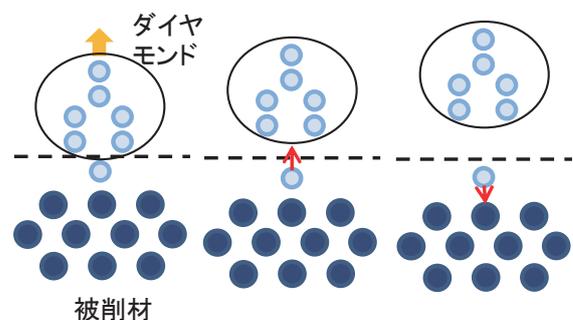


図8. ラジカルカーボン脱離エネルギーの推定

ルカーボンの脱離エネルギーの比較を試みた。図8に示すように、ラジカルカーボンを被削材表面に残して、ダイヤモンドを少し引き上げると、ラジカルカーボンには元のダイヤモンド側に戻ろうとする力が働く。引き上げる距離を徐々に大きくしてゆくと、ある引き上げ距離でラジカルカーボンに働く力が被削材側が変わる。この時のトータルエネルギーと最安定状態でのトータルエネルギーとの差が脱離エネ

ルギーに相当すると考えられる。本来は、引き上げ過程での緩和のために、原子配置に変化が生じるが、ここではそれを無視している。しかし、相対的な脱離エネルギーの比較は可能であると思われる。

計算の結果、Ni 表面と相互作用するラジカルカーボンの脱離エネルギーは 5.01 eV、その時の引き上げ距離は 1.10 Å であるのに対し、Ni-P と相互作用する時は、それぞれ、5.70 eV、1.05 Å となった。なお、相互作用をしていないダイヤモンド表面からのラジカルカーボンの脱離エネルギーは 7.87 eV と求まった。これらの結果は Ni よりも Ni-P と相互作用する時の方がダイヤモンド表面炭素原子の脱離が生じにくいことを示唆している。

5. おわりに

Ni の加工におけるダイヤモンド工具の損耗は、ダイヤモンド表面炭素原子と被削材表面 Ni 原子との相互作用によって両者の間にイオン結合が生じ、さらに、炭素原子のバックボンドの結合強度が低下するために、切削熱によって炭素原子の運動エネルギーが増加すると、炭素原子が結合を切って脱離することによって生じると考えられる。また、Ni 中に P を添加することによって、Ni と P がイオン結合し、炭素原子に対する反応性が低下して脱離が生じにくくなるため、ダイヤモンド工具の損耗が抑制されると考えられる。これらの結果はより耐熱性の高い鉄系金属に、適切な元素を添加することによって、ダイヤモンド工具で加工できる可能性があることを示唆しており、耐久性の高い高精細金型の実現が期待できる。

機械加工の分野でも、要求される加工精度が高まるにしたがって、従来無視されていた加工の素過程に含まれる微視的な問題が顕在化してきた。ここで紹介したような、工具の熱化学的損耗などはその好例であり、問題解明に対する第一原理計算の有用性が明らかになったといえよう。

第一原理計算には大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機システムおよび東京大学物性研究所のスーパーコンピュータを利用した。また、解

析には大阪大学大学院工学研究科附属超精密科学研究センターの小野倫也助教らの開発による、実空間差分法に基づく高精度第一原理分子動力学法を使用させていただいた。量子力学さえ分からない素人に対し、使用をご快諾いただき、懇切なご指導、ご助言を賜った小野倫也助教、現北海道大学大学院工学研究院応用物理学部門の江上喜幸助教に深甚の謝意を表します。

参考文献

- [1] N. Furushiro, et al., *Annals of the CIRP*, **59**, 105-108, (2010).
- [2] T. Tanaka, et al., *Annals of the CIRP*, **30**, 241-245, (1981).
- [3] T. Ono, K. Hirose, *Physical Review Letters*, **82**, 5016-5019, (1999).