

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	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

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 能率加工ができる、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 µm/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を模擬したダイ 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、C₁₀H₁₄ク ラスターを用いた。図3は緩和後のクラスターモデ 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 3.49Åとなり、文献値である 3.52Åとほぼ等しくな った。この単位胞を並べて x×y×z 方向に2×2× 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 3.50Å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 1.50Å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 削材側に変わる。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 1.10Å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、1.05Å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 言を賜わった小野倫也助教、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

- 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).