

原子モデルを用いた極微小切削加工の シミュレーション



研究ノート

島田 尚一*

Molecular Dynamics Simulation of Microcutting Process

Key Words : Microcutting, Simulation, Molecular Dynamics, Chip Formation, Surface Generation

1. はじめに

切削加工とは、機械加工の内でも最も広く用いられている加工法で、図1に示すように、工作物表面を硬く鋭い工具で削り取って希望の形状に仕上げるものである。最近では、高精度工作機械と単結晶ダイヤモンド工具を用いる超精密切削加工が機器要素の精密仕上加工技術のひとつとして確立され、各種の機械・光学・電子素子などを形状精度数10nm/10mm、表面粗さ数十nm Rmax以内に仕上げる事が一般化しつつある。この加工技術によって得られる仕上面は工作機械の運動軌跡が工具輪郭形状の繰返しとして工作物表面に転写されたものとなる。

したがって、工作機械が理想的な運動をしているとすれば、その加工精度の到達限界は工具が安定して工作物表面を削り取り得る薄さの限界（最小切取厚さ）と工具輪郭の仕上面への転写精度（転写性）で決定される。

ところで、超精密切削加工ではどこまで加工精度を高めることができるのだろうか？ 図2は、現在の最高レベルにあると考えられる工作機械とダイヤモンド工具を用いて、設定切取厚さが1nmの切削によって得られた電着銅の切りくずであり、少なくとも加工条件を整えば、このレベルでの切削が可能であることを示している¹⁾。しかし、機械制御および測定技術上の限界のため、実験的に精度限界を究明することは極めて困難である。また、このレベルの切取

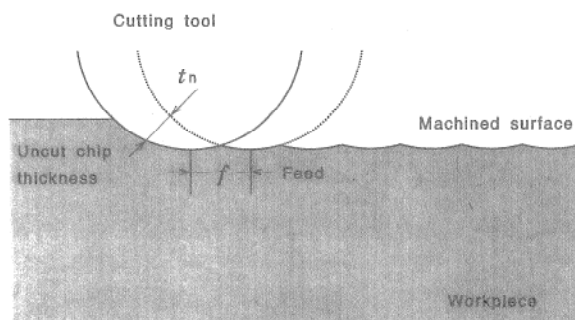


図1 切削加工による仕上面生成モデル



*Shoichi SHIMADA
1945年2月6日生
1969年大阪大学大学院工学研究科
修士課程精密工学専攻修了
現在、大阪大学工学部精密工学科、
助教授、工学博士、精密加工学、
精密機器学
TEL 06-879-7273

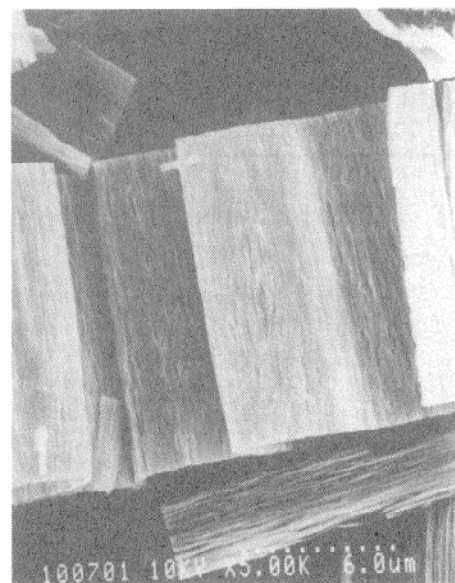


図2 電着銅の極微小切削における設定切取厚さ1nmでの切りくず

厚さで削り取られる被削材の厚さは数原子層となり、その加工現象をマクロな材料挙動を取り扱う連続体モデルを用いて解析することは問題があると考えられる。そこで筆者らは、原子モデルに基づき、分子動力学を用いた計算機シミュレーションによって加工精度の到達限界を究明することを試みている²⁾³⁾⁴⁾。ここではその一端を紹介する。

2. 分子動力学を用いた切削機構の解析

分子動力学法 (Molecular Dynamics, MD) は物体を、なんらかのポテンシャルに基づく相互作用を及ぼし合う原子や分子などの粒子の集合体としてモデル化し、そのポテンシャル場での個々の粒子の運動を詳細に追跡することによって粒子の集合体である物体の挙動を模擬しようとする計算機シミュレーションの一手法である。通常ある温度での粒子の熱振動の速度を初期条件として与え、熱振動周期より十分小さい時間ステップで各粒子の運動方程式を逐次数値積分してゆく。MDは、個々の粒子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、変形や破壊などの集合体の巨視的な挙動を同時に解析できるという特色を持っている。

切削現象の解析には、図3に示すように、銅

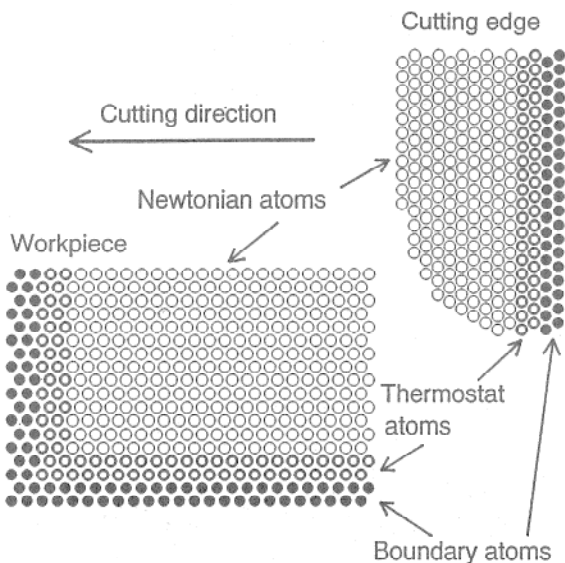


図3 分子動力学による解析に用いた原子モデル

単結晶の(111)面を $[10\bar{1}]$ の方向に、工具であるダイヤモンドの(111)面が切削する二次元

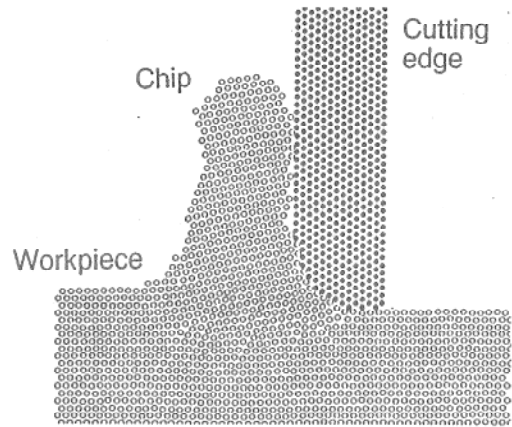


図4 銅の微小切削シミュレーションの一例
 切削速度：20m/s
 切刃稜丸味半径：2.0nm
 切取厚さ：0.5nm

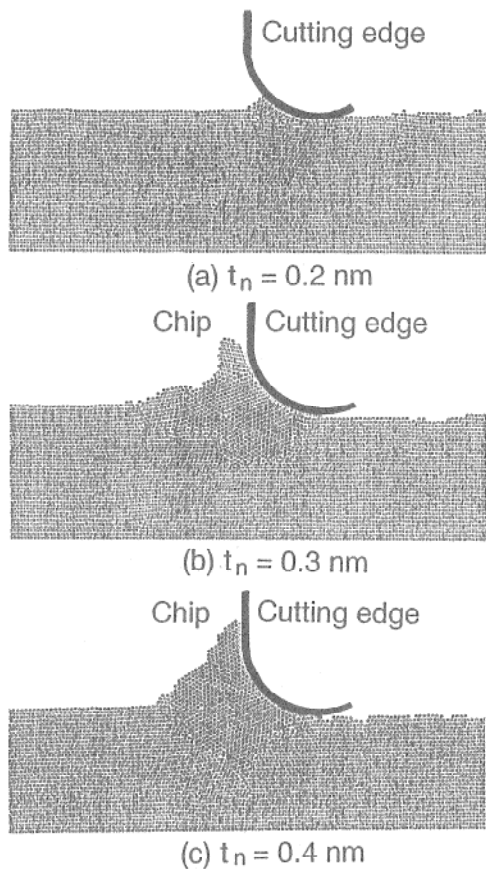


図5 銅の微小切削シミュレーションにおける切くず生成
 切削速度：200m/s
 切刃稜丸味半径：5 nm

モデルを用いた。境界の2層は固定原子，その内側には2層の温度調節原子を配し，その他の原子は運動方程式に従って運動する原子である。温度調節原子層内では，原子の運動エネルギーの平均値がある設定温度と等価になるように，個々の原子の速度が補正され，平均温度が室温に保たれる。モデル内部で発生した切削熱は，見掛け上，この層を通して外へ出て行くことになるが，モデル内の温度分布はこの層の存在によってほとんど変わらない。

原子間ポテンシャルには，モースポテンシャルを採用し，工具・被削材間には，超高真空中でのダイヤモンドと被削材との間の表面間相互作用力の実測地に基づく仮想の関数を用いた。

3. 切削加工精度の到達限界

図4は，銅の微小切削の解析例を示す。定常切削状態での見掛けのせん断角および切削比は切削実験で得られたものと一致し，両者の間で刃先近傍での被削材の変形挙動に相似則が成り立っている。この結果は計算機実験が実際の切削現象を良く模擬していることを裏付けている。

図5は，銅の微小切削において，設定切取厚さ t_n を変えた時の切くず生成の様子を示している。 t_n が0.3nm以上では切くずが生成されるが，それ以下では切くずが排出されず，この加工条件での最小切取厚さは0.3nm程度であると推定できる。このようにして銅およびアルミニウムの最小切取厚さを推定したところ，工具切れ刃稜丸味半径の1/10から1/20程度となり，現実的な工具ではほぼ1nm程度であることが明らかになった。

工具切れ刃稜近傍の被削材原子の初期位置からの変化を強調して示したものが図6である。切れ刃稜の押込に基づいて工具・被削材界面で発生した転位が切れ刃稜前下方に押し込まれ，被削材中に変形を生じる様子がよくわかる。工具通過後，被削材の弾性回復にともなって，これらの転位は後退して表面に抜け，その結果仕上面には原子レベルの段差が形成される。この段差が最終的に仕上面に残る粗さとなり，工具輪郭の転写を乱す要因となる。計算機シミュレーションの結果から，銅の極微小切削における転

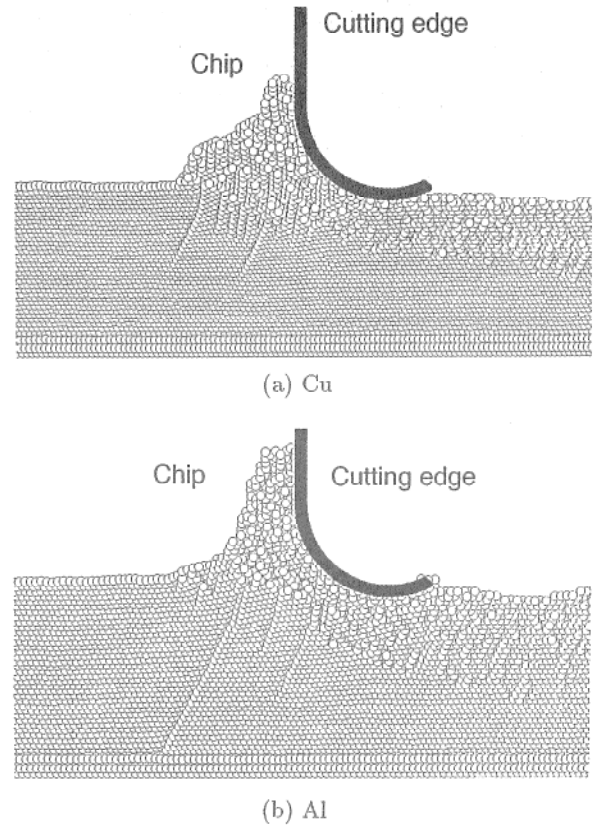


図6 工具切れ刃近傍での被削材の挙動
 切削速度：200m/s
 切れ刃丸味半径：5 nm
 切取厚さ：0.5nm

写精度は1nm以下，アルミニウムではそれよりやや悪く，1から1.5nm程度になることが予測される。

4. おわりに

以上に紹介したように，MDを用いた計算機シミュレーションは極微小切削における種々の加工現象をかなり忠実に模擬でき，実験技術の限界を越える極微小切削現象の解明に極めて有用な手段である。また，切くずおよび仕上面生成機構の原子論的な観点からの理解ができるようになり，被削性の良い金属の切削加工精度の到達限界は1nm程度であることが明らかになった。しかし一般に，計算機シミュレーションにおいては解析モデルの適否がその結果の信頼性を決定することは言うまでもない。現段階では計算速度，記憶容量などの計算技術上の限界に加えて，解析に必要な物理情報の不足のため，まだ真に有用な結果が得られるまでには至って

いない。実際の現象と対応する三次元モデルや凝着，吸着などの界面現象の適切なモデル化ができれば，加工現象の制御限界についての議論が可能になるものと期待される。

参 考 文 献

1) 井川，島田他，精密工学会誌，59，4 (1993)

673.

2) S. Shimada, N. Ikawa, et al., Annals of the CIRP, 41, 1 (1992) 117.

3) S. Shimada, N. Ikawa, et al., Annals of the CIRP, 42, 1 (1993) 91.

4) 島田，井川他，精密工学会誌，59，12 (1993) 2015.

