224 凝集シミュレーションによる超微粒砥石の組織解析

Structure Analysis of Abrasive Tool Using Ultrafine Grain Based on Aggregation Simulation

○学 六門貴裕 (関西大) 正 樋口誠宏 (関西大)

正 山口智実 (関西大) 小田廣和 (関西大)

松森昇 (ミズホ) 吉沢功 (ミズホ) 尾倉秀一 (ミズホ)

Takahiro MUKADO, Graduate School of Engineering, Kansai University, 3-3-35 Yamate-cho, Suita

Masahiro HIGUCHI, Tomomi YAMAGUCHI, and Hirokazu ODA, Kansai University,

Noboru MATSUMORI, Isao YOSHIZAWA, Shuichi OGURA, Mizuho

Recently, many kinds of abrasive tools using ultrafine grains are developed to mirrorfinish the surface. However, it is difficult to disperse the grains and the pores uniformly in such tool because of the aggregation peculiar to fineparticles. Therefore, the structure of agglomerates of three kinds of particle, grain, vitreous bond and organic substance has been discussed. The process used to generate the agglomerates is the diffusion-limited aggregation. As a consequence of the simulations, it has been found that the simulated agglomerate is similar in structure to the real one and the structure of agglomerates is affected by the component ratio.

Key Words: Aggregation, Diffusion-limited aggregation, Ultrafine grain, Porosity, Density

1. 緒言

ナノレベルの鏡面仕上げを目標にする様々な研磨・研削工具の開発が進んでいる。これらの工具では、サブミクロンサイズの砥粒が使用されるため、微粒子特有の凝集が起こる。その結果、砥粒が均一に分散する組織が得られにくく、工具は安定した仕上げ機能を維持できないという問題を抱えている。このような状況にもかかわらず、微粒化された砥粒や結合剤の凝集に関する報告はほとんどなく、凝集が形成するクラスターの機械的性質も知られていない。そこで、砥粒、結合剤、および気孔形成を目的に加える有機性粒子の凝集状態を、拡散律速凝集シミュレーションから推定することを試みた。そして、構成粒子の直径、その分散、重量比がクラスターの気孔率、密度に及ぼす影響を明らかにした。

2. 砥粒、結合剤、有機性粒子のクラスター

GC 砥粒(#4000)、ビトリファイド結合剤、有機性粒子を 10:3:1 の重量比で攪拌混合したときに形成されるクラスターの SEM 写真を、図 1 に示す。粒径の分散が大きい砥粒と結合剤の粒子が不規則に付着して、クラスターを形成している様子がわかる。このクラスターの構成粒子の付着状態をマクロに評価するために、水銀圧入法によって細孔分布を測定した。その結果、本クラスター

Fig.1 Agglomerate of ultrafine grain, vitreous bond and organic substance: $w_b/w_g=0.3$, $w_o/w_g=0.1$

は平均直径 $0.26 \mu\text{m}$ のマクロ孔をもち、そのクラスター中に占める気孔の体積百分率は 54.3%であった。さらに、クラスターのかさ比重は 1.06g/cm^3 、真の密度は 2.31g/cm^3 であることがわかった。

3. 凝集シミュレーション

ブラウン運動する粒子がクラスターに接触すると付着させ、クラスターを成長させる拡散律速凝集モデルを、砥粒、結合剤、有機性粒子の凝集過程のシミュレーションに適用する。

いま、砥粒、結合剤、有機性粒子を球、それらの直径比を 6:2:13、直径の変動係数をそれぞれ 0.4, 0.8, 0.2 と仮定する。また、ブラウン運動させる構成粒子 i の数 n_i をその重量百分率 w_i から、次式によって求める。

$$n_i = \frac{3}{4\pi} \left(\frac{2}{d_i} \right)^3 \frac{Mw_i}{\rho_i}$$

ただし、 d_i , ρ_i は粒子 i の直径、密度である。また、 M はすべての構成粒子の総重量である。

クラスターの成長は拡散律速凝集モデルとシミュレートッド・アニーリングを組み合わせた、以下のアルゴリズムによって行う。

- (1) 3次元正方格子を用意し、原点の格子に種粒子を置く。
- (2) 原点から十分に離れた格子点をランダムに選択し、そこに n_i に比例した確率で粒子 i を置く。そして、その格子点から粒子 i を酔歩させる。
- (3) 粒子 i が種粒子またはクラスターと接触すると酔歩を止め、接触粒子を p_{opt} とする。
- (4) (2)と同様に粒子を酔歩させ、種粒子またはクラスターに接触した粒子を p_{new} とする。
- (5) 接触粒子 p_{opt} と p_{new} の原点からの距離 d_{opt} と d_{new} を求め、 $d_{opt} \geq d_{new}$ の場合、 $p_{opt} \leftarrow p_{new}$ と置き換え、 p_{new} をクラスターに暫定的に付着させる。 $d_{opt} < d_{new}$ の場合、次式の確率で粒子 p_{new} をクラスターに暫定的に付着させる。

$$\xi < \exp\left(-\frac{d_{new} - d_{opt}}{T}\right)$$

ただし、 T は温度、 ξ は(0, 1]の乱数である。

- (6) (2)～(5)を規定の探索回数だけ繰り返し、 p_{opt} をクラスターに付着させる。
- (7) 規定数の粒子について、(2)～(6)を繰り返し、クラスターを成長させる。

4. シミュレーション結果

上述の方法で、総数 3000 個の粒子を凝集させたクラスターの例を図 2 に示す。直径の異なる 3 種類の粒子はほぼ球状に凝集されることがわかる。また、図 3 は砥粒、結合剤、有機性粒子の重量比を変えて成長させたクラスターの断面図を示したものである。クラスターの成長過程で、直径の大きい有機性粒子は内部に侵入しにくいいため、クラスターの外側に付着される傾向がある。また、砥粒に対する有機性粒子の重量比 w_o/w_g を増やすと、クラスターが大きくなり、砥粒、結合剤の付着状態が少し粗になる傾向が認められる。

以上のように、粒子の凝集状態が若干異なるクラスターのマクロな性質を評価するため、各クラスターの気孔率を算出した結果が、図 4 である。図において、砥粒、結合剤、有機性粒子の重量比を変えても、クラスターの気孔率はさほど変わらない。しかし、クラスターを焼成する場合を考えると、有機性粒子は焼失されて気孔となるので、有機性粒子の重量比 w_o/w_g を増やすと、焼成後の研磨・研削工具の気孔率は大きくなる。

また、図 5 はクラスターのかさ比重と真の密度を算出し、それらと有機性粒子の重量比 w_o/w_g の関係を調べたものである。密度の低い有機性粒子を多く配合すると、かさ比重、真の密度ともに小さくなる。しかしながら、焼成後には、砥粒に対する結合剤の重量比 w_b/w_g が一定であるので、真の密度は有機性粒子を多く配合しても変化しないが、かさ比重は小さくなることがわかる。このことより、構成粒子の重量比の違いは研磨・研削工具の仕上げ機能に重大な影響を及ぼすと推測される。

以上の解析結果を砥粒、結合剤、有機性粒子の攪拌混合によって形成されたクラスターと比較すれば、図 1 と同条件で凝集させたクラスターの気孔率は 54.6%、かさ比重は 1.06g/cm³、真の密度は 2.52 g/cm³ となり、実際のクラスターの性質と一致した。したがって、拡散律速凝集モデルを用いた本シミュレーションは砥粒、結合剤、有機性粒子の凝集過程の考察に十分利用できるものと思われる。今後は、種々のクラスターを作成してその性質を測定し、シミュレーション結果との比較を基に、凝集状態をより詳細に検討する予定である。

Fig.2 Simulated agglomerate: $w_o/w_g=0.3$, $w_b/w_g=0.1$

Fig.3 Cross section of agglomerate: $w_b/w_g=0.3$

Fig.4 Influence of w_o/w_g porosity: $w_b/w_g=0.3$

Fig.5 Influence of w_o/w_g on density and bulk density: $w_b/w_g=0.3$