ナノスケールの切削におけるトライボロジー
現象の分子動力学的検討*前川 克廣^{*1}, 伊藤 彰彦^{*2}, 北條 寧^{*3}Molecular Dynamics Investigation of Tribological Phenomena
in Nanoscale Machining

Katsuhiro MAEKAWA, Akihiko ITOH and Yasushi HOJO

The orthogonal nanoscale machining of copper with a diamond-like tool has been simulated using molecular dynamics, focussing on tribological phenomena such as friction at the tool-workpiece interface and tool wear. Supposing that the atomistic friction at the interface depends on the cohesion energy of the Morse potential, the level of the energy is reflected in the shape of the chip, the cutting forces and the integrity of machined surface, to a great extent. The tool wear has been simulated by reducing the cohesion energy of the tool atoms. The wear mechanism involves interdiffusion of the workpiece and tool atoms, and re-adhesion of the worn particles to the tool. The shape of interface potential and the tool wear distributions also affect the minimum thickness of cut and the depth of the region where the displaced workpiece atoms exist: two and ten atomic layers are their minimums, respectively. The influence of the friction and the tool wear on the cutting mechanism in nanoscale machining is similar to that observed in macroscale machining.

Key Words: Nanoscale Machining, Chip Formation, Surface Integrity, Friction, Wear, Microtribology, Molecular Dynamics

1. ま え が き

切削厚さがサブミリメートルのマクロな切削におけるトライボロジー現象, すなわち摩擦, 摩耗, 潤滑が切削機構に及ぼす影響は重要であり, したがって多くの研究が行われてきた。例えば, 工具-被削材界面の摩擦が大きければ厚い切りくずが生成し, 切削抵抗が大きくなり, 切削温度も上昇する。その結果仕上げ面粗さが悪化し, 切れ刃の摩耗も激しくなる。これを回避するために潤滑作用をもつ切削油剤や快削添加物が利用されることになる⁽¹⁾。このような一連の現象は, 解析的にも有限要素法を用いて予測する技術が確立されている⁽²⁾。

一方, 切削厚さがナノメートルのミクロな切削におけるトライボロジー現象に関してはどうか。このような原子レベルの領域では, 加工と摩耗が共存し⁽³⁾, いかに摩擦・摩耗を制御するかが機械的加工限界の観点からは重要である。このような原子レベルの

切削加工機構の解析には原子モデルによる計算機実験が有力な手段であり, 分子力学法⁽⁴⁾や分子動力学法⁽⁵⁾が適用され始めている。その背景には, X 線反射ミラーや磁気記憶ディスク等の加工では, 切削厚さが数十 nm の切削加工が実用化⁽⁶⁾され, さらに切削厚さを減少させることによって加工精度を向上させる努力が続けられている。また, AFM の探針を利用した原子単位の除去加工の試み⁽⁶⁾も見られる。

本研究では, ナノスケールの切削におけるトライボロジー現象に着目し, 工具-被削材間の相互作用や工具摩耗が切りくずの排出状況や仕上げ面性状に及ぼす影響を分子動力学法を用いて検討する。解析の対象はダイヤモンド単粒による銅完全単結晶(111)面 [10 $\bar{1}$] 方向の直交切削とし, ポテンシャル関数の凝集エネルギーを変化させた場合の切削機構について論じる。

2. 分子動力学法と解析モデル

解析に用いた分子動力学法⁽⁷⁾は, ニュートンの運動方程式

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = -\frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i}, i=1, 2, \dots, N \dots\dots\dots (1)$$

をベルレーのアルゴリズム

* 平成 6 年 9 月 9 日 「原子/分子モデルを用いる材料の強度評価」シンポジウムにおいて講演, 原稿受付 平成 6 年 7 月 25 日。

*¹ 正員, 茨城大学工学部 (〒316 日立市中成沢町 4-12-1)。

*² コニカ(株) (〒192 八王子市石川町 2970)。

*³ 茨城大学大学院。

$$\mathbf{r}_i(t+\Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{(\Delta t)^2}{2m_i} \mathbf{F}_i(t) \cdots (2)$$

$$\mathbf{v}_i(t+\Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{m_i} \{\mathbf{F}_i(t+\Delta t) + \mathbf{F}_i(t)\} \cdots (3)$$

を用いて解くが、原子間相互作用力 $\mathbf{F}_i$ はモースポテンシャルを仮定して次式で与える。

$$\mathbf{F}_i = - \sum_{j=1(j \neq i)}^N \nabla_i \phi(r_{ij}) \cdots (4)$$

ただし、

$$\phi(r_{ij}) = D[\exp\{-2\alpha(r_{ij} - r_0)\} - 2\exp\{\alpha(r_{ij} - r_0)\}] \cdots (5)$$

ここで、 m_i は原子 i の質量、 $\mathbf{r}_i$ と $\mathbf{v}_i$ は原子 i の位置と速度、 N は全原子数、 t は時間、 Δt は時間刻み、 D 、 α 、 r_0 はいずれも定数である。

図1は熱緩和後の解析モデルである。銅完全単結晶の(111)面を $[10\bar{1}]$ 方向に、ダイヤモンド単粒の(111)面で直交切削する場合を想定している。用いたCu原子は2496個、C原子は120個である。工具切れ刃先端から一定距離はなれた被削材の前方と下方の原子を固定し、その内側には系の温度を一定に保つために数層の温度調節原子を配置した。工具の内側にも固定および温度調節原子層を設けた。初期速度(マクスウェル分布)および温度調節層の速度は

$$\mathbf{v}_i^{\text{new}} = \sqrt{\frac{N_f N k_B T_0}{2}} \frac{\mathbf{v}_i^{\text{old}}}{|\mathbf{v}_i^{\text{old}}|} \cdots (6)$$

を用いて $T_0 = 300$ K に設定した。ここで k_B はボルツマン定数 ($= 1.381 \times 10^{-23}$ JK⁻¹)、 N_f は系の自由度 ($= 2$) である。解析では切削速度を 20 m/s 一定とし、切削厚さ t 、工具先端丸味半径 r およびポテンシャル形状(凝集エネルギー D) を変化させた。表1に解析に用

いたモースポテンシャルの係数を示す。

被削材と工具の組合せは文献(5)と同一であるが、解析手法的には領域限定分子動力学法⁽⁸⁾を用いた。これは、図1に示すように工具刃先端から一定距離内にある被削材原子のみを解析の対象とし、工具の進行とともに解析領域を移動させるものである。これによって、全領域を解析の対象とするよりも約1/6の計算時間の短縮がはかられる。

3. 解析結果

3.1 摩擦(工具-被削材界面ポテンシャル形状)の影響 おもに軽荷重下の原子レベルのすべり摩擦機構に関しては、超潤滑⁽⁹⁾やスティックスリップ現象⁽¹⁰⁾などの研究が行われている。しかし、原子の移動、分離、付着を伴う高荷重下の摩擦についての研究はほとんど見当たらない。本解析では、工具(C原子)と被削材(Cu原子)の界面相互作用を与えるモースポテンシャルの形状を変えることによって、摩擦の相違を表現することにする。

図2は仮定した界面ポテンシャル形状である。表1に示すモースポテンシャルの凝集エネルギー D の値を(a) 1 倍、(b) 10 倍、(c) 1/10 倍、(d) 100 倍とした場合と、さらに(e) 斥力のみをボルン・マイヤーポテンシャルを仮定した場合である。

図3(a)~(e)に、図2のポテンシャル形状の変更によってそれぞれ対応した被削材原子の位置変化を $t = 1$ nm、 $r = 3$ nm の場合について示す。(a)~(c)は切りくずがほぼ定常的に排出する総時間刻み数が 60 000 ステップ、切削距離にして約 12 nm のときのスナップ

表1 モースポテンシャルのパラメータ

	Cu-Cu	Cu-C	C-C
D eV	0.3429	0.100	2.423
α Å ⁻¹	1.3588	1.700	2.555
r_0 Å	2.6260	2.200	2.522

図1 熱緩和後の初期解析モデル

図2 種々の界面ポテンシャル形状

ショット, (d)と(e)は20 000 ステップの結果である。図中の○印と●印は次式によって換算される原子温度が, それぞれ1 000 K 以下, 1 000 K より高温であることを意味している。

$$T_i = \frac{2}{N_f k_B} \frac{1}{2} m_i v_i^2 \dots \dots \dots (7)$$

また, F_H と F_V は切削抵抗の水平分力と垂直分力であり, 30 000~60 000 ステップ間あるいは20 000 ステップまでの平均値である。結果を比較すると, 界面ポテンシャル形状の相違が切りくずの生成に大きく影響していることがわかる。すなわち, 界面の相互作用を大きくすることによって, 厚い切りくずを排出するようになり, 切削抵抗も増大する。一方, 図3 (d)の場

合は界面の凝集エネルギーが10 eV と大きいので, 被削材原子はもはや結晶構造を保てず, 散乱してしまっている。これは切削とはいえず, むしろエネルギービーム加工に相当し, 入射エネルギーによって被削材原子が溶融あるいは蒸発した状態とみなせる。また, 図3 (e)の界面ポテンシャル関数が斥力のみの場合には, 被削材は圧縮力を受けて右方に押し出され, 切りくずは生成していない。平均切削抵抗も垂直分力が異常に大きい。さらに計算を進めても, 一向に切りくずが生成する兆しはなかった。

図4は30 000~60 000 ステップ間の切削抵抗の水平分力と垂直分力の変動パターンを, 500 ステップごとにサンプリングして示す。図4 (a)および(b)はそれぞれ図2に示す界面ポテンシャル形状(b)および(c)に対応している。界面相互作用が強ければ, 切削抵抗が大きく変動することがわかる。図3に示した F_H , F_V はこのような切削抵抗の平均値をとったものである。図3 (a)~(c)の F_H/F_V の値は凝集エネルギーに比例して大きくなっている。すなわち, $D=0.01, 0.1, 1$ eV に対して $F_H/F_V=0.76, 0.89, 0.90$ となる。これに伴って切りくずの厚さも増加している。

図5 (a), (b)は界面ポテンシャル形状が仕上げ面性状に及ぼす影響を, それぞれ図3の(b)と(c)の場合について示す。折れ線は60 000 ステップにおける原子の並びを示し, 切削開始前に同じ原子層を構成していた切削方向 $[10\bar{1}]$ の原子の並びを直線で連結したも

(a) 図2の(a)

(b) 図2の(b)

(c) 図2の(c)

(d) 図2の(d)

(e) 図2の(e)

図3 界面ポテンシャル形状が切りくず生成と切削温度に及ぼす影響

のである。横線がほぼ平行を保ちながらずれている箇所は、刃状転位が通過したためにせん断すべりが生じ、その結果、他の原子層と再結合したことを示している。仕上げ面内部の乱れの激しい部分は加工変質層に対応する。界面の相互作用の強弱は加工変質層にも影響し、同図の場合には変質層深さが(a) 5 nm, (b) 3 nm 程度であることがわかる。仕上げ面最大粗さも界面相互作用の影響を受け、(a) 4 原子層、(b) 2 原子層程度と判断される。

3.2 工具摩耗のシミュレーション 切削中の工具先端形状の変化は、ナノスケールの切削においても加工精度や仕上げ面性状の観点から重要と考えられる。ここでは、原子レベルの摩耗現象を図1の解析モ

デルを用いてシミュレートする。設定したダイヤモンドの凝集エネルギーはCu 原子のそれより 10 倍近く大きいから、60 000 ステップの計算量以内ではC 原子の脱落現象は起こらない。そこで、C-C 間の凝集エネルギーを表1の値の1/10と小さく仮定した。その他のポテンシャル形状は表1の係数を用いた。

図6は(a) 20 000 ステップ、(b) 60 000 ステップにおけるスナップショットである。●印と○印はそれぞれC 原子とCu 原子を示す。まだ切りくずが十分に生長していない20 000 ステップでは、刃先丸味部から逃げ面にかけてCu 原子とC 原子の相互拡散が生じている。また脱落したC 原子が工具の後部に再凝着し出している。計算が60 000 ステップまで進行すると、切

(a) 図2の(b)

(b) 図2の(c)

図4 界面ポテンシャル形状が切削抵抗に及ぼす影響

(a) 図2の(b)

(b) 図2の(c)

図5 界面ポテンシャル形状が仕上げ面性状に及ぼす影響

(a) 20 000 ステップ

(b) 60 000 ステップ

図6 一具摩耗のシミュレーション

りくずの生成に伴って、すくい面側でも相互拡散と再凝着が起こっている。このような工具の摩耗が介在した結果、加工変質層深さは仕上げ面から 5 nm 程度までに達し、また仕上げ面最大粗さも 3 原子層に及んでいる。

4. 考 察

4.1 解析の意義 分子動力学法を切削に適用することの妥当性に関しては種々議論されている⁽⁵⁾⁽¹¹⁾。本論文で用いた領域限定分子動力学法⁽⁸⁾による比切削抵抗は、図 3 (a) の場合には約 20 GPa となり、他の研究⁽⁵⁾⁽¹¹⁾とおおむね一致する。

次に、ナノスケールの切削を対象とした分子動力学法シミュレーションの意義について考察する。解析においては原子間相互作用としてモースポテンシャル関数を仮定した。しかも、Cu-C 間あるいは C-C 間の凝集エネルギーの値を変更することによって、それぞれ工具-被削材間の摩擦の影響と工具の摩耗をシミュレートした。ポテンシャル関数を必要としない第一原理分子動力学法⁽¹²⁾は扱える粒子数の制約から利用できないこと、高荷重下での原子レベルでの摩擦・摩耗現象の研究はほとんど進展していないことなどを考慮すると、人為的にポテンシャル形状を変更する本論文のアプローチも、方法的には有効と考えられる。

本来、Cu-C 間のポテンシャル関数は一意に定まるべきものであろうが、界面に異原子/分子が介在した場合、例えば切削油剤や快削添加粒子⁽¹⁾、あるいは工具のコーティング薄膜を想定すれば、図 3 のシミュレーション結果はある程度現実味を帯びてくる。一方、工具摩耗に関しても、ダイヤモンド工具が黒鉛化などによって劣化した場合、あるいはかなり柔らかい工具を使用した場合には、図 6 の摩耗機構が成立する可能性が高いものと考えられる。

4.2 最小切削厚さに及ぼす摩擦と摩耗の影響

切削加工を成立させるためには、切りくずとして被削材が除去されなければならない。そこで界面ポテンシャル形状と工具摩耗が、切りくずを生成しなくなる最小切削厚さにどのような影響を及ぼすかをシミュレートしてみた。

図 7 は図 2 のポテンシャル形状 (b) と (c) について、切削厚さを 0.3 nm と小さく設定した場合である。いずれも 40 000 ステップにおけるスナップショットであるが、相互作用の強い図 7 (a) の場合のほうが (b) の弱い場合に比べて、切りくずがより生成しやすい。すなわち最小切削厚さをより薄くできることがわかる。(b) の相互作用の弱い場合には、表面の被削材原子が逃げ面によっていったん下方に押し込まれた後、もとの表面位置まで弾性回復している。

図 8 は $t=0.3$ nm の場合について、工具摩耗が切り

(a) 図 2 の (b)

(a) C-C 間の凝集エネルギー=0.242 eV

(b) 図 2 の (c)

(b) C-C 間の凝集エネルギー=2.423 eV

図 7 界面ポテンシャル形状が最小切削厚さに及ぼす影響

図 8 工具摩耗が最小切削厚さに及ぼす影響

くず生成に及ぼす影響を示す。図8(a)はC-C間の凝集エネルギーを表1の値の1/10倍とした場合、(b)は表1の値を用いた場合である。(a)の場合には、工具の摩耗が進行した結果、実質的な切削厚さが減少してしまい、切りくずは生成しにくくなることがわかる。

最小切削厚さに及ぼす工具先端丸味半径の影響はShimadaら⁽¹³⁾によって検討され、現実的に到達限界といわれる3nm前後⁽⁵⁾の丸味半径では0.5nmが限界であることが報告されている。ポテンシャル形状を変えた図7(a)と図8(b)の場合でも同程度の最小切削厚さとなっている。一方、仕上げ面の変質層深さに関しては、切削厚さが薄くかつ界面の相互作用が小さいほど、浅くなるようである。

4.3 マクロな切削との比較 図9は工具先端丸味半径が $r=0$ の理想工具による $t=1$ nmの場合の60000ステップにおけるスナップショットである。先端丸味半径 r 以外は同一条件である図3(a)と比べると、生成した切りくずが多く、しかも仕上げ面性状が良好なことがわかる。したがって、先端丸味半径を

図9 理想工具による切りくず生成

(a) 普通低炭素鋼

いかに小さくするかが、原子レベルの切削加工において、いわゆる被削性を向上させる上でのキーポイントといえる。

また図9の切りくず形状は、切削厚さがサブミリメートルのマクロな切削におけるそれとよく似ている。比較のために、低炭素鋼と低炭素鉛快削鋼を直交切削した場合⁽¹⁴⁾の切りくず形状と相当塑性ひずみ速度の分布図を、図10に示す。図10(a)は低炭素鋼、(b)は鉛快削鋼の場合である。用いた切削条件は、切削速度1.67 m/s、切削厚さ0.2 mmであり、 $r=0$ を除いて分子動力学解析モデルと著しく異なる。しかし、切りくず形状が類似しているだけでなく、工具-被削材界面の摩擦の変化がよく反映されている。すなわち、鉛を添加することは、その潤滑性によって摩擦を低減させるが、これによって、切りくずが薄くなり切削抵抗も減少し、仕上げ面性状も向上する。図3の(b)と(c)、あるいは図5の(a)と(b)においてもこのような変化は明瞭に現れている。

5. 結 論

ナノスケールの切削における工具-被削材間の摩擦と工具摩耗に焦点をあて、ダイヤモンド工具を用いて銅完全単結晶を直交切削する場合の分子動力学法シミュレーションを行った。得られた知見をまとめると、次のようになる。

(1) 工具-被削材間の摩擦の変化をモースポテンシャルの凝集エネルギーの相違と仮定した場合に、凝集エネルギーは切りくず生成や仕上げ面性状に大きく影響する。

(2) 炭素原子間の凝集エネルギーを弱めることによって工具摩耗をシミュレートした結果、原子レベル

(b) 低炭素鉛快削鋼

図10 切りくず形状と相当塑性ひずみ速度の有限要素解⁽¹⁴⁾

の摩耗は工具原子と被削材原子の相互拡散, および脱落した工具原子の工具への再凝着の繰返しによって進展する。

(3) 界面ポテンシャル形状と工具摩耗は最小切削厚さにも影響し, 界面原子同士あるいは工具原子同士の相互作用が強いほど最小切削厚さは薄くなる。

(4) 最小切削厚さは2原子層, このときの仕上げ面変質層深さは10原子層程度である。

(5) ナノスケールの切削における摩擦と工具摩耗が切りくず生成や仕上げ面性状に及ぼす影響は, マクロな切削におけるそれと類似する。

茨城大学工学部物質工学科・篠嶋 妥博士には, 分子動力学法のプログラミングに関して有益な助言をいただいた。また本研究の一部は平成5~6年度文部省科研費[一般研究(C)05650137]の援助のもとに実施された。記してお礼申し上げる。

文 献

- (1) Shaw, M. C., *Metal Cutting Principles*, (1984), § 13, 15, Clarendon Press.
- (2) Usui, E. and Shirakashi, T., *ASME, Publ.*, PED-7 (1982), 13.
- (3) Singer, I. L. and Pollock, H. M. 編, *Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic Processes*, (1992), 403-520, Kluwer Academic Publishers.
- (4) 稲村・鈴木・武澤, 精密工学会誌, **56**-8 (1990), 1480.
- (5) Ikawa, N., ほか6名, *Ann. CIRP*, **40**-2 (1991), 587.
- (6) Majumdar, A., *ASME*, PED-58 (1992), 59.
- (7) ヘールマン, D. W. (小澤・篠嶋訳), シミュレーション物理学, (1990), 第3章, シュプリンガー・フェアラーク東京.
- (8) Maekawa, K. and Itoh, A., *Wear*, 掲載決定.
- (9) Hirano, M. and Shinjo, K., *Phys. Rev.*, B, 41-17, (1990), 11837.
- (10) Kim, D. E. and Suh, N. P., *Trans. ASME, J. Tribology*, **116** (1994), 225.
- (11) Stowers, I. F., ほか11名, Molecular dynamics simulation of the chip formation process in single crystal copper and comparison with experimental data, *Proc. ASPE Annual Meeting*, (1991-10), 13.
- (12) Car, R. and Parrinello, M., *Phys. Rev. Lett.*, **55** (1985), 2471.
- (13) Shimada, S., ほか5名, *Ann. CIRP*, **42**-1 (1993), 91.
- (14) 前川・久保・北川, 精密工学会誌, **57**-12 (1991), 2193.