

# 切削温度がすくい面摩擦に及ぼす影響のモデル化 Modeling of Friction Force on the Rake Face under the Influence of Cutting Temperature

精密工学専攻 23号 黒澤勇貴  
Yuuki Kurosawa

## 1. 緒言

切削加工は多くの機械材料に適用可能であり、柔軟性に富む高効率かつ経済的な除去加工法であることから、工業界・産業界では従前より広く多用されてきた加工法である。それゆえ、新規機械材料や新規工具材料の開発時には、付加価値を高めるために切削加工時の被削性を良好とすること、たとえば、切削力が小さくなるとか、付着や凝着が生じ難いとか、切りくずが伸びないといった内容を、新規材料の製造前に見積もることが労力や時間の無駄を省くことにつながる。しかるに、切削加工のシミュレーションは長足の進歩を遂げているのにも関わらず、工具すくい面でのすべり条件が解明されていないために被削性の予測は困難であり、材料製造前の被削性を見積もりは、材料開発を行なう研究者や技術者の経験と勘に頼っている面が多い。

一般に、被削材と工具材すくい面界面におけるすべり条件は、当初は摩擦面が固着するとされ、やがて摩擦面に働くせん断応力 $\tau$ が増大して、同応力 $\tau$ が摩擦応力 $\tau_f$ に達するとすべりが生じると考えられる。摩擦応力 $\tau_f$ は、アモントン・クーロン摩擦により考える方法、摩擦特性式を用いる方法、材料のせん断降伏応力に適切な係数をかけた平均的な摩擦力を仮定する方法がある<sup>(1)</sup>。しかしながら、いずれの方法も問題がある。アモントン・クーロン摩擦は切削加工時のすくい面摩擦のような真実接触面積と見かけの接触面積の比が1に近い場合には成立せず、摩擦特性式はパラメータ導出時に実験値が多数必要となるため面倒であり、適切な係数をせん断降伏応力にかける方法は係数の算出根拠が薄弱である。そのため、新しい工具材や被削材を開発する場合にはあらかじめ摩擦応力 $\tau_f$ を近似する方法がない。そこで新たに、切削中の工具刃先近傍において被削材新生面と工具すくい面が量子力学的に結合していると考え、すべり条件を求めて各種工具材種の摩擦分力を予想する一手法が提案された<sup>(2)</sup>。しかし、実際には摩擦分力は切削温度の影響を受けることが知られているが、同報告で提案された理論には切削温度による影響を考慮していない。

そこで本論文では切削温度がすくい面摩擦に及ぼす影響を原子スケールでモデル化し、摩擦特性式を導くことで、切削温度を考慮した摩擦分力予想の構築を目的とする。

## 2. すくい面摩擦モデル

### 2.1 すくい面上での滑り移動

酸素などの気体が固体に化学吸着する場合、吸着は固体表面上の特定サイトで生じるので、被削材と工具すくい面界面でのみかけの接触面積と真実接触面積とが等しい領域、メタルコンタクト領域<sup>(3)</sup>に着目すると、Fig. 1に示す

ように被削材原子の結合位置は、整然と並んだ工具表面原子群の特定のサイトと考えられる。したがって、結合した被削材原子が移動する場合は、移動方向にある特定サイト間の距離 $l$ だけ移動すると仮定すると同値 $l$ が平均自由行程である。平均自由行程 $l$ はすくい面界面における転位移動とみなすことができる。すなわち、Fig. 1に示すように、せん断面における塑性変形を経てランダム性が増した被削材原子群が、整然と並んだ工具表面原子群の特定のサイト上に瞬間的に固着し、次いで外力 $F_t$ による切りくず移動に伴って、クラスターサイズの転位が切りくず移動とは逆方向に移動するとモデル化される。また、同領域では工具すくい面原子と被削材切りくず原子とが量子力学的に結合していると考え、第一原理的に固着時の工具材原子と被削材原子間の結合力 $F$ が近似できる<sup>(3)</sup>。

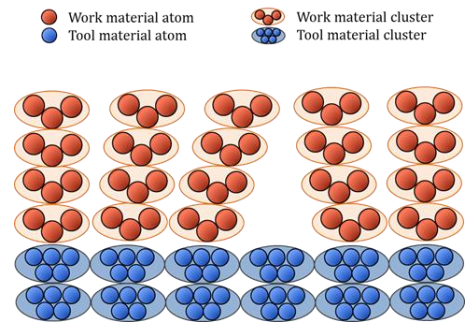


Fig.1 Work- tool molecules-cluster model

転位移動に関わる被削材原子  $M$  が一定の外力 $F_t$ のもと、原子レベルの力 $F_f$ を受けて、Fig. 2に示すブラウン粒子モデルのように、周囲の原子 $m_j$ から受けるランダム力で運動する場合の運動方程式は、ハミルトンの正準方程式を利用すると最終的に式(1)、式(2)のように表される<sup>(4)</sup>。

$$m_j \frac{d^2 q_j}{dt^2} = -m_j \omega_j^2 \left\{ q_j - \frac{\gamma_j Q}{m_j \omega_j^2} \right\} \quad (1)$$

$$M \frac{dV}{dt} = F_f + \gamma_j \sum_{j=1} \left\{ q_j - \frac{\gamma_j Q}{m_j \omega_j^2} \right\} \quad (2)$$

なお、 $m_j$ は工具材など周囲原子の質量、 $\omega_j$ 、 $q_j$ は同原子の固有振動数、変位であり、 $\gamma_j$ は結合関数、 $M$ 、 $Q$ 、 $V$ は被削材原子の質量、変位、速度(= $dQ/dt$ )である。なお、 $F_f$ と $F_t$ の関係は $n$ を単位面積当たりの転位数、 $A$ をメタルコンタクト領域の面積とすると次式で与えられる。

$$F_f = \frac{F_t}{nA} \quad (3)$$

ここで、式(2)に関して射影演算子法を用いると式(4)が得られる。

$$M \frac{dV(t)}{dt} = F_f - \int_0^t \Gamma(t-t') MV(t') dt' + R(t) \quad (4)$$

なお、 $\Gamma$  は記憶関数と呼ばれ、与えられた初期位置  $Q(0)$  に応じて、工具材の初期位置  $(q(0), p(0))$  が温度  $T$  のカノニカル分布に従うと仮定すると次の関係が成り立つ。なお、 $p = mdq/dt$  である。

$$\langle R(t)R(t') \rangle = k_B T \Gamma(t - t'), \quad \langle R(t) \rangle = 0 \quad (5)$$

また、記憶効果をもたらす相関時間が被削材運動の観測時間に比べて無視できるくらい小さいと考え、振動数  $\omega_j$  の分布をデバイ形で仮定すると式(6)が得られる。ただし、結合係数  $\gamma_j$  は一定で  $\gamma/\sqrt{N}$  とし、 $\omega_d$  は振動数の上限とする。

$$\Gamma = \frac{3\pi\gamma^2}{2M\omega_d^3} \quad (6)$$

この結果、式(4)は式(7)のランジュバン方程式となる。

$$M \frac{dV}{dt} = -\Gamma V + R + F_f \quad (7)$$

式(7)における粘性  $\Gamma$  は、界面での滑りに対する結合力による抵抗を表すエネルギー損失であり、本モデルでは切削工具面上の外力である摩擦分力  $F_t$  の散逸に平衡すると考える。式(7)は、転位移動に伴う被削材原子の質量  $M$  が転位の移動速度  $V$  にて移動するときに原子的な摩擦分力  $F_f$  に釣り合う  $\Gamma V$  なる減衰抵抗力を受けることを意味する。このとき、 $R$  はサイトおよび周囲の工具表面原子から受けるランダム力であり、平均 0 の正規分布をなしている。したがって、同式は転位移動に伴う多数粒子の運動で同一であるから、粒子数が膨大な数になると  $R$  の分散は小さくなり無視できる。同時に、微粒子のため  $M$  は小さく慣性力が無視できるとすると、式(7)は式(8)に変形される。

$$-\Gamma V + F_f = 0 \quad (8)$$

式(8)に式(3)を代入すると摩擦分力  $F_t$  は式(9)のように表すことができる。

$$F_t = nAV\Gamma \quad (9)$$

粘性係数  $\Gamma$  は電子状態解析を用いて式(6)から求め、摩擦分力に影響を及ぼす単位面積当たりの転位数  $n$  は、工具/被削材界面に存在するクラスター数と比例の関係にあるとして、同値との比から求める。

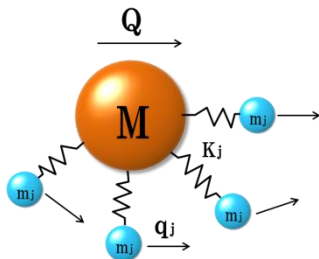


Fig.2 Brown particle model

### 3. 粘性係数 $\Gamma$ の具体的な算出

#### 3.1 シミュレーションモデル

量子力学的結合力の近似には分子軌道法 DV-X $\alpha$  法<sup>(5)</sup>を用いた。同法では原子集合体の波動関数を各原子軌道の波動関数の重ね合わせとして記述し、クラスター法に基づい

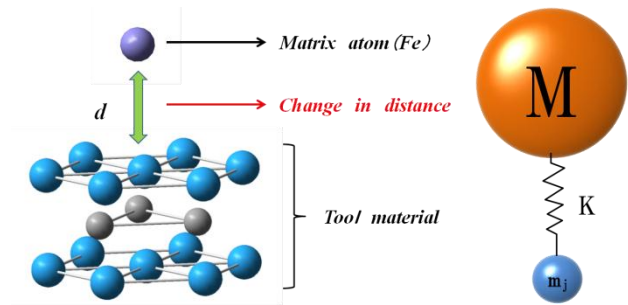
た計算が可能である。したがって、任意の原子配列に対する計算が可能であることから表面、界面などの局所的な部位を計算するのに優れている。そこで、Fig. 1 のすくい面に距離  $e$  で接している被削材原子と工具材原子を対象に、Fig. 3(a)に示すような被削材原子と工具主成分クラスターを用いて切削工具すくい面界面をモデル化した。工具主成分クラスターとは、具体的には、超硬工具の場合は WC を選択した。その他の工具材の場合は、Fig. 3(c), Fig. 3(d), Fig. 3(e), Fig. 2(f)に示すようにジルコニアは ZrO<sub>2</sub>、アルミナは Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> を使い、サーメットは、主成分が明らかとなっていないので TiN・TiC・WC の 3 種を独立に用いて平均を取った。

界面の距離  $d$  は、最密面中心原子の最外殻が接触する距離を  $d = 0 \text{ \AA}$  とした。

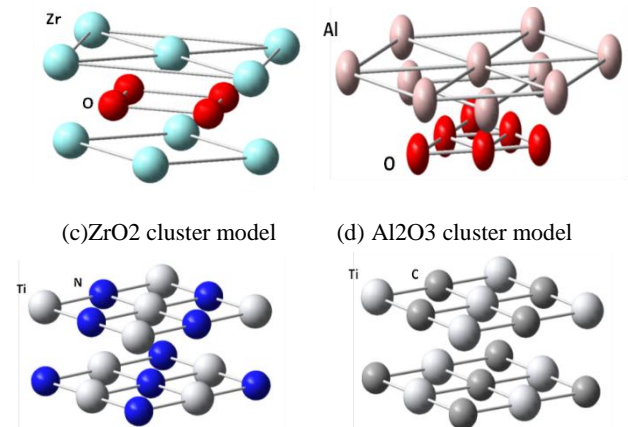
#### 3.2 計算解析方法

原子核が及ぼす力の遮蔽や内殻電子の悪影響を考慮して、エネルギー抽出の対象は被削材原子と工具材原子の外殻軌道である HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) 軌道とした。なお、Fig. 3(a)に示した距離  $d$  を  $-1.0 \text{ \AA}$  から  $1.0 \text{ \AA}$  まで変化させてエネルギーを求め、距離に対する同エネルギー変化の最大傾きを結合力とした。

さて、量子力学的な結合力は Fig. 3(b)に示すようなバネ結合に近似できる。後述するが、本手法ではこのバネ近似を利用するので、本節でバネ定数  $K$  を算出しておく。 $K$  値は被削材原子と工具材原子間の結合力を距離で微分することによって得られる。本来、被削材は工具すくい面上を滑るので原理的には Fig. 3 の水平方向の距離で微分すべきであるが、界面原子の実際の動きは複雑であることと簡単化のために、本手法では Fig. 3(b)に示す様に被削材原子を垂直方向に移動する場合の結合力と距離  $d$  を用いて  $K$  を近似する。



(a) Simulation model [WC-Fe] (b) Spring bonding model



(c) ZrO<sub>2</sub> cluster model (d) Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> cluster model  
(e) TiN cluster model (f) TiC cluster model

Fig. 3 Simulation model for K-value

### 3.3 粘性係数 $\Gamma$ の算出

Table.1 に式(6)を用いて算出した粘性係数  $\Gamma$  を示す. 同式の  $\Gamma$  は  $\omega_d$  と  $\gamma$  が分かれば算出できるので,  $\gamma$  には最大値 1 を仮定し,  $\omega_d$  は  $\omega_d = \sqrt{K/M}$  から算出する. なお, 同式の  $M$  は被削材で固着に影響の強い原子の質量をとり,  $K$  は前節で求めたバネ定数を用いる.

Table 1 Viscous coefficient

Model	WC	ZrO <sub>2</sub>	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Gemet
Viscous coefficient( $\times 10^{-12}$ )	10	4.3	4.1	6.1

## 4. 転位数 $n$ の具体的な算出

### 4.1 被削材の空孔濃度

空孔が入ると結晶のエネルギーは高くなるが, 点欠陥の配置の仕方は複数あるので, 有限温度ではある程度の点欠陥を含む方が実現確率は高い. 例えば, 空孔を含む 16 個の格子点から成る結晶を考える. 結晶中に一個の空孔が存在するという巨視的状态は, 空孔がどの格子点にあるかの場合の数 = 16 通りの微視的状态を含む. 空孔一個を導入するのに必要なエネルギーを  $E_f^V$  とすると, いずれの微視的状态も温度  $T$  では  $e^{-E_f^V/k_B T}$  に比例する確率で実現する. ここで  $k_B$  はボルツマン定数である. そのような微視的状态の数は, 二個の空孔が存在するという巨視的状态に対しては  ${}_{16}C_2=120$ , 三個の空孔が存在する巨視的状态に対しては  ${}_{16}C_3=560, \dots$  と, 空孔の増加とともに多くなる.

有限温度  $T$  に保たれた結晶中に熱平衡で存在する点欠陥の濃度は, 点欠陥一個をつくるのに必要なエネルギー(形成エンタルピー)  $H_f^V$ , 空孔の数  $n$ , 系の全エントロピー  $S$  を用いて式(10)のように表されるヘルムホルツの自由エネルギーを最小にするように決まる. すなわち,  $\partial F/\partial n = 0$  を満たす  $n$  の値が熱平衡で存在する空孔の数である. 単一元素から成る結晶について考える. 結晶を構成する全格子点の数を  $N$  とすると, 全エントロピー  $S$  は式(11)のように表せる<sup>(6)</sup>.

$$F = nH_f^V - TS \quad (10)$$

$$S = k_B \ln(NCn) + n\Delta s \quad (11)$$

式(11)の右辺第一項は  $N$  個の格子点に  $n$  個の空孔を配置する仕方の数で決まる配置のエントロピー, 第二項はその他の原因により空孔一個当たり  $\Delta s_f^V$  のエントロピー変化(形成エントロピー)があることによる項である.

熱平衡条件式  $\partial F/\partial n = 0$  は,  $N \gg n$  のときはスターリングの公式から次式が成り立つ.

$$\ln(NCn) \approx N \ln N - (N-n) \ln(N-n) - n \ln n \quad (12)$$

熱平衡条件式は式(10), 式(11), 式(12)より次式(13)のように表すことができる.

$$\frac{n}{N-n} \left( \approx \frac{n}{N} \right) = e^{\frac{\Delta s_f^V}{k_B}} e^{-\frac{H_f^V}{k_B T}} \quad (13)$$

式(13)の左辺は空孔の濃度(サイト占有率)を表している.

### 4.2 被削材原子のジャンプ確率

#### 4.2.1 空孔機構

Fig. 4 に空孔機構を模式的に示す. 不純物原子は隣に空孔が存在するときだけ空孔サイトへジャンプして, この原子は拡散することができる.

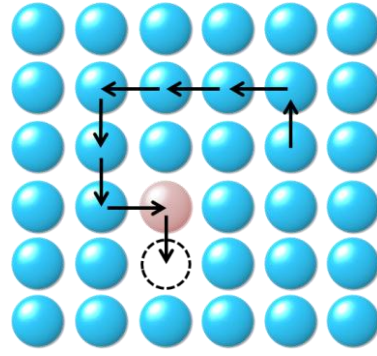


Fig. 4 Vacancy mechanism

#### 4.2.2 被削材原子がジャンプする確率

被削材内部における原子のジャンプ現象を, 自己拡散すなわち結晶構成原子と化学的に等価な元素同位体の拡散として考える. Fig(5)は工具/被削材界面において被削材原子がジャンプを起こすことで, 工具原子との結合を断つ様子を模式的に表したものである. 空孔機構ではジャンプ距離は最隣接原子間距離である. ジャンプ確率  $P$  における最隣接ジャンプサイトの数  $x$  は, トレーサー原子の最隣接格子点に空孔がなければならぬから

$$x = [\text{最隣接格子点の数 } Z] \times [\text{最隣接格子点に空孔がいる確率}] \quad (14)$$

となる. 右辺第二因子は, 系が熱平衡にあれば, 空孔の熱平衡濃度に他ならないから, 式(14)より式(15)を得る.

$$x = Z e^{\frac{\Delta s_f^V}{k_B}} e^{-\frac{H_f^V}{k_B T}} \quad (15)$$

これと, 着目するトレーサー原子が隣の空孔へジャンプする確率  $f$  は次式で求められる.

$$f = e^{\frac{\Delta s_m^V}{k_B}} e^{-\frac{\Delta H_m^V}{k_B T}} \quad (16)$$

ここで,  $\Delta H_m^V$ ,  $\Delta s_m^V$  はそれぞれ, トレーサー原子が安定格子位置にいる状態とそれが鞍点にいる状態の間のエンタルピー差, 振動エントロピー差である. そしてトレーサー原子がジャンプする確率  $P$  は  $P = fx$  で求められるから式(17)のようになる. 簡単化のためエントロピー項は  $Z$  に含め  $Z'$  とする.  $Z'$  については後に述べる.

$$P = Z e^{\frac{\Delta s_f^V + \Delta s_m^V}{k_B}} e^{-\frac{H_f^V + \Delta H_m^V}{k_B T}} = Z' e^{-\frac{H_f^V + \Delta H_m^V}{k_B T}} \quad (17)$$

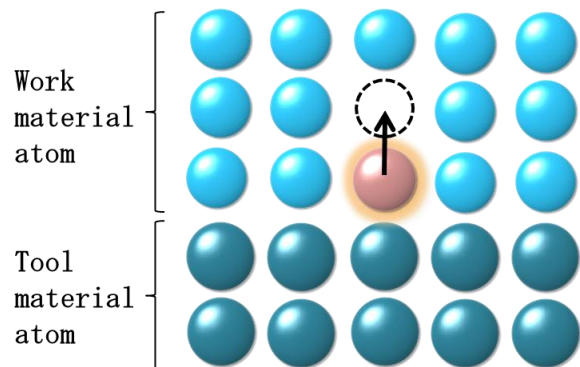


Fig. 5 Jump of work material atom

### 4.3 転位数 $n$ の算出

摩擦分力に影響を及ぼす転移数は、工具表面原子群の特定のサイトにどの程度の確率で被削材原子(クラスター)が存在するかにより変化する。そこで被削材原子がジャンプせずにサイトに留まる確率を求める。同値は4.3節で求めた被削材原子がジャンプする確率  $P$  を用いて式(18)のように表すことができる。

$$1 - P = 1 - Z'e^{-\frac{H_f^V + \Delta H_m^V}{k_B T}} \quad (18)$$

ここで、切削時における  $Z'$  及び形成エンタルピーとエンタルピー差の和  $H_f^V + \Delta H_m^V$  は工具すくい面上にひずみが発生し結晶の乱れが大きく、値を見積もるのは困難なため  $Z'=1$ ,  $H_f^V + \Delta H_m^V = H$  とする。式(18)の右辺についてテイラー展開を行い第二項まで有効としてまとめると式(19)のようになる。ここで、原子の存在確率、式(19)を Fig. 6 に示す。比較のため式(18)の値も同時に示す。Fig. 6 から切削時の温度領域ではテイラー展開で近似した原子の存在確率は本来の式で求めた値とほぼ同様の傾向を示しているので、十分使用に耐える。

$$1 - P = \frac{H}{k_B T} \quad (19)$$

次に  $q$  個の原子から一つのクラスターが成っているとすると、クラスター数  $C$  は原子数を用いて  $N_i/q$  となる。ここで、 $N_i$  は理想的な結晶において単位面積あたりに存在する原子の数である。よって式(19)から単位面積あたりに存在するクラスター数は  $C = HN_i/qk_B T$  と求められる。また、摩擦分力に影響を与える転位数  $n$  と、単位面積あたりに存在するクラスター数  $C$  は比例の関係であると考えられるから、転位数  $n$  は比例定数を  $g$  として式(20)のように表せる。

$$n = \frac{gHN_i}{qk_B T} \quad (20)$$

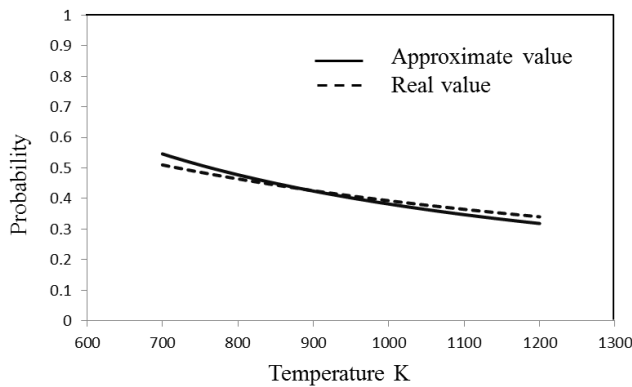


Fig. 6 Probability diagram

### 5. 摩擦分力 $F_t$ の推定

3.3 節、4.3 節で求めた粘性係数  $\Gamma$  および転位数  $n$  を用いて式(9)から摩擦分力  $F_t$  を求める摩擦特性式を導く。ここで簡単化のために  $gHAV/q$  はほぼ一定と考えて工学的係数  $\alpha$  を導入する。工学的係数  $\alpha$  は 1000K における摩擦分力のシミュレーション結果が、実験結果のそれと等しくなるように決めた。

$$F_t = \frac{gHAV}{q} \times \frac{N_i \Gamma}{k_B T} \approx \alpha \frac{N_i \Gamma}{k_B T} \quad (21)$$

ここで、Fig. 7 に式(21)を用いて工具 WC-被削材 Fe の組み合わせでシミュレーションした結果を示す。また Table 2 にシミュレーション条件を示す。Fig. 7 には比較のために Table 2 の実験結果も同時に示した。シミュレーション結果と実験結果を比較すると、やや相違があるものの切削温度の変化に伴う摩擦分力の傾向を捉えているので、本論文で提案したモデルは妥当性があることが分かる。

Table 2 Simulation conditions

WC-Fe			
$\alpha$	$N_i$	$\Gamma$	$k_B$ (J/K)
$1.98 \times 10^{-22}$	$5.95 \times 10^{12}$	10	$1.38 \times 10^{-23}$

Table 3 Experimental data<sup>(7)</sup> (Orthogonal dry cutting, Cutting condition: Tool: WC(P20), Work: manganese steel Cutting speed: 0.33m/s

Temperature K	950	975	1000	1025	1050	1075
Tangential force kN	0.9	0.85	0.81	0.76	0.75	0.72

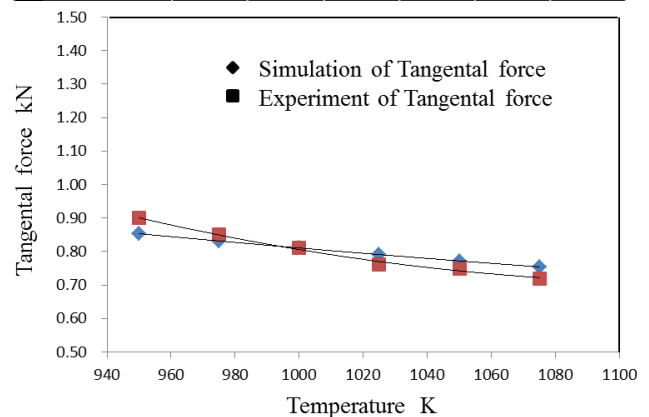


Fig. 7 Tangential force

### 6. 結言

1. 工具/被削材界面で生じるすべり現象を、被削材原子の転位によるものと仮定して導いた運動方程式中の転位数に着目し、摩擦分力が温度の関数となるモデルを提案することできた。
2. 提案したモデルから切削温度の影響を考慮した摩擦特性式を求め、摩擦分力を近似的に算出したことで、新規材料の製造前に温度特性を含めた切削力を見積もり、被削材の開発時における労力や時間の無駄を省く可能性を見出した。

### 参考文献

- (1) 吉野雅彦, Excel による有限要素法入門-弾性・剛塑性・弾塑性-, 朝倉書店(2002), pp.108-110. (in Japanese)
- (2) 桜本拓也ら, 切削工具すくい面上摩擦分力の予測法に関する一試案, 精密工学会誌
- (3) T.obikawa, Y.Asano and Y.Kamata: International Journal of Machine Tools and Manufacture, Volume 49, Issues 12-13, (2009),(in Japanese) 971-978.
- (4) 藤坂博一, 非平衡の統計力学, 産業図書, 東京, (1998)
- (5) M.Katayama: Effect of Tool Materials on Interface Adhesion between Free-machining Steel and Cutting Tool, Jpn.soc.Precis.Eng, 59-12 (1993), pp.1991-1996. (in Japanese)
- (6) 前田康二, 竹内伸, 結晶欠陥の物理, 裳華房, 東京, (2011)
- (7) 北川武揚ら, 難削材のプラズマ加熱切削(第1報), 精密工学会誌, 53-01(1987), pp.78-84.