

분자동력학을 이용한 공구형상에 따른 미소절삭현상에 관한 연구  
 (A Study on the Microcutting for Configuration of Tools  
 using Molecular Dynamics)

문찬홍\*, 김정두\*\*

\*. 한국과학기술원 정밀공학과 대학원

\*\* 한국과학기술원 정밀공학과

ABSTRACT

Recently, the analysis of microcutting with submicrometer depth of cut is tried to get a more high quality surface product, but to get a valuable result another method instead of conventional finite element method must be considered because finite element method is impossible for a very small focused region and mesh size. As the alternative method, Molecular Dynamics or Statics is suggested and accepted in the field of microcutting, indentation and crack propagation.

In this paper using Molecular Dynamics simulation, the phenomena of microcutting with subnanometer chip thickness is studied and the cutting mechanism for tool edge configuration is evaluated.

As the result of simulation the atomistic chip formation is achieved.

Key Words : Microcutting(미소절삭), Edge radius(공구 끝단 반경), Fixed boundary condition(고정경계조건), Thermostat(온도 조절장치), Molecular Dynamics(분자 동력학), Morse Potential(모스 포텐셜)

Nomenclature

$\phi_{ij}$ : 원자 $i, j$ 사이의 포텐셜	$F_{ij}$ : 원자 $i, j$ 사이의 힘
$r_{ij}$ : 원자 $i, j$ 사이의 거리	$F_{ext}$ : 외력
$r_i$ : 원자 $i$ 의 위치 벡터	$v_i$ : 원자 $i$ 의 속도 벡터
$t$ : 시간	$\Delta t$ : 적분 시간
$u_i$ : 재설정 속도	$a$ : 재설정 상수
$g$ : 입자의 운동 자유도	$N$ : 입자들의 총수
$k_b$ : 볼츠만 상수	

1. 서론

최근 공작기계와 미소제어기술의 발달로 단결정 다이아몬드를 이용한 신삭시 최소절삭두께(Minimum Thickness of Cut, MTC)가 1nm 이하의 수준에 이르고 있다.<sup>(1,2)</sup> 이러한 수치는 수 개의 원자층만을 포함한 정도이며 이런 미소영역에서의 절삭을 규명하기 위해서는 유한요소법이나 진단모델을 이용한 절삭모델을 적용하기에는 절삭부근의 크기가 너무 작기 때문에 연속체의 개념에서 미소절삭을 해석하기가 불가능하다. 또한 공작기계의 제이가능성의 한계나 공구의 형상, 측정할 수 있는 장비의 분해능의 한계 때문에 칩의 두께가 1nm 이하에서의 절삭을 규명하기 위한 실험이 불가능하다. 이러한 난제를 해결하기 위해서 재료의 원자 계계를 고려한 개념의 분자 동력학(Molecular Dynamics)을 미소절삭에 적용하고 있다.<sup>(1,3,4,5,6,7,8)</sup> 분자 동력학은 주로 크래의 전파나 진위의 움직임을 규명하기 위하여 재료과학에서 많이 이용되고 있으며<sup>(9,10)</sup> 컴퓨터의 계산능력의 향상으로 그 사용범위가 계속 넓어지고 있다. 현재의 분자동력학을 이용한 미소절삭의 해석은 크게 미소절삭시 공구의 끝단반

경(Edge radius)에 따른 절삭기능상<sup>(3)</sup>과 생성된 표면의 기침기, 변질층의 두께<sup>(3,8)</sup>등의 연구와 이러한 미소영역에서의 응력의 해석등이 있다.<sup>(5,6,7)</sup> 또한 다이아몬드 지식을 이용한 초정밀 연삭에서도 다이아몬드 입자 한 개를 고려한 절삭 해석이 시도되고 있다.<sup>(11)</sup> 나노미터 정도의 절삭을 하기 위해서는 공구의 끝단이 매우 예리하고 경도가 커야 하며 두 조건을 동시에 만족시킬 수 있는 재료로는 단결정 다이아몬드가 가장 유력하기 때문에 대부분의 초정밀 선삭에서는 단결정 다이아몬드를 사용하고 있다. 최적의 가공표면율 얻기 위해서는 공구 끝단의 반경이 0인 경우가 이상적이거나 다이아몬드 공구가 가질 수 있는 이론적인 최소 반경은 2~2.6nm인 것으로 보고되고 있다.<sup>(12)</sup> 이러한 끝단 반경은 예리한 공구와 비교하여 매우 큰 음의 상면경사각을 갖는 경우와 같다. 즉, 공구의 끝단 형상에 따라 공구의 끝단 부근에서의 상면경사각과 여유면 각도가 달라지기 때문에 인신율 고려한 절삭해석이 이루어져야 한다.

본 연구에서는 다이아몬드 공구의 인신형상이 절삭기구에 어떠한 영향을 미치는 지와 가공된 후 재료의 표면에 미치는 영향에 대하여 분석하였다.

2. 절삭 모델

2.1 분자 동력학

원자들 간의 관계를 묘사할 수 있는 한 방법으로 포텐셜 함수를 들 수 있고 실험적으로 알려진 식으로는 모스 포텐셜(Morse Potential)이 있으며 Fig.1에서와 같이 원자  $i$ 와  $j$  사이에 작용하는 포텐셜( $\phi(r_{ij})$ )는 식(1)과 같다. 포텐셜의 미분치는 포텐셜이 작용하는 원자들간의 힘의

관계를 나타내고 식(2)와 같다.

$$\Phi(r_{ij}) = D[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}] \quad (1)$$

$$F(r_{ij}) = \frac{\partial \Phi(r_{ij})}{\partial r_{ij}} = 2\alpha D[-e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} + e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}] \quad (2)$$

여기서,  $r_{ij}$ ; Distance between atom  $i$  and  $j$   
 $F(r_{ij})$ ; Force between  $i$  and  $j$  atoms  
 $D, \alpha, r_0$ ; Experimental material constants

$D, \alpha, r_0$ 는 실험 상수이며 Table 1에 나타내었다. Fig.2에 시와 같이 원자들 간의 힘은 크게 인력과 척력으로 이루어지며 특히 최소 에너지값을 갖는 거리 이하에서는 원자 사이의 거리에 따라 매우 큰 척력이 작용한다. 이러한 성질은 컴퓨터 시뮬레이션시 매우 취약한 성질로 작용할 수 있다. 원자  $i$ 에 작용하는 힘은 Fig.3와 같이 주위를 둘러싼 원자들과의 힘의 합력으로 생각할 수 있으며 힘의 크기의 유요성 때문에 원자간 거리가 격자 거리의 2~3배 내의 원자들에 대해서만 고려한다. 계산된 원자간의 척과 외력으로부터 원자  $i$ 의 가속도를 식(3)과 같이 구할 수 있다.

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = \frac{1}{m} \sum_{j \neq i} F(r_{ij}) + \frac{1}{m} F_{ext} \quad (3)$$

여기서,  $F_{ext}$ ; External force

식(3)은 미분형식이므로 가속도로부터 속도 및 변위를 구하기 위해서는 수치적분이 불가피하며 Verlet 알고리즘과 Schofield 알고리즘등이 있으며 본 연구에서는 에러를 최소로 줄이기 위해 Schofield 적분 알고리즘을 이용하였으며 속도( $V(t)$ ), 변위( $r(t)$ )를 구하면 식(4)와 식(5)와 같다.

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{6}[4a_i(t) - a_i(t - \Delta t)](\Delta t)^2 \quad (4)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{1}{6}[2a_i(t + \Delta t) + 5a_i(t) - a_i(t - \Delta t)]\Delta t \quad (5)$$

여기서,  $\Delta t$ ; Time step

위의 식들을 이용하여 원자  $i$ 에 대하여 시간  $t$ 에서 계산된 힘으로부터 시간  $t + \Delta t$ 에서의 가속도, 속도, 변위의 값들을 구할 수 있다. 즉, 시간  $t$ 에서 한번의 힘에 대한 계산으로 고려하고 있는 원자  $N$ 개에 대해 시간  $\Delta t$ 가 지난 후의 그 궤적을 구할 수 있다.

## 2.2 가공 조건

가공물로는 구리(Face-Centered-Cubic(Fcc) lattice)를 사용하였으며 공구로는 단결정 다이아몬드를 사용하였다. 구리의 경우 가장 원자들이 조밀하게 충전된 (111)

면을 2차원적으로 고려하였으며 가공 방향은 [110]을 따라 동에너지상태에서 가공을 실행하였다. 그 외 시뮬레이션에서 이용한 수치들은 Table 2에 나타내었다. 한편 공구인 다이아몬드는 복잡한 3차원 구조이기 때문에 (111)면으로 2차원적으로 투영이 이루어므로 본 실험에서는 격자 사이의 거리가 구리의 1/3배로 가정한 2차원 강체로 가정하였다. 공구의 형상은 끝단반경이 없는 이상적인 공구와 끝단반경을 갖는 두 가지 공구를 실험대상으로 하였다.

## 2.3 경계조건

한정된 원자의 갯수(수백개에서 수천개)로 미소절삭의 기구를 규명하기 위해서는 계산에 선택되지 않은 원자들에 대한 보정이 필요하며 경계조건을 설정함으로써 이러한 보정을 할 수 있다. 경계조건은 Fig.3에서와 같이 크게 두 가지로 구분되며 변위에 대한 경계조건(Displacement boundary condition)과 온도에 대한 경계조건(Thermostat)이 있다. 변위에 대한 경계조건은 경계에서 변위가 고정되게 하는 방법(Fixed boundary)과 가변 경계 방법(Flexible boundary)이 있으며 본 연구에서는 고정된 경계 조건을 적용하였다. 한편 온도에 대한 경계조건은 절삭이 진행되는 동안 시스템의 운동에너지는 일정하다고 가정하였으며 개개의 원자속도를 식(6)에 시와 같이 재 설정하는 우드콕(Woodcock)방법을 적용하였다.

$$u_i(t + \Delta t) = \alpha v_i(t + \Delta t) \quad (i=1, 2, \dots, N) \quad (6)$$

여기서,  $\alpha = \sqrt{\frac{gNk_bT}{2} / \sum_{i=1}^N \frac{mv_i^2}{2}}$   
 $u_i$ : scaled velocity  
 $g$ : degree of freedom of particle (=2)  
 $N$ : Number of particles  
 $k_b$ : Boltzman constant

## 3. 시뮬레이션 및 결과

Fig.4에 미소절삭의 시뮬레이션을 위한 흐름도를 나타내었으며 입력으로 공구의 속도, 계산시간, 공구의 끝단반경 등 가공조건을 입력하면 가공물 구리 원자의 초기 위치는 구리의 결정(Fcc, lattice)에 따라 자동으로 생성된다. 그리고 주어진 온도하에서 초기 속도를 설정하기 위해 몬테카를로(Monte Carlo)방법을 사용하였다.<sup>(13)</sup> 그러나 이들 원자의 초기 위치, 초기 속도는 서로 독립적으로 설정된 값이므로 절삭을 하기전 몇 번의 예비 적분 단계가 필요하다. 이는 또한 Schofield 알고리즘을 사용하기 위해 시간  $t - \Delta t$ 에서의 값을 얻는 역할도 한다. 원자들간의 힘을 계산하기 위해서는 매 시간( $\Delta t$ ) 원자 개수에 대해 나머지 원자 모두를 고려해야 하므로 힘을 계산하는데 많은 시간이 소요된다. 이를 개선하기 위한 방법이 부기법(Book keeping method)이며 그 원리는 다음과 같다. 원자  $i$ 에 대해 유요한 힘을 작용하는 원자들은 원자  $i$  주변의 것들이며 또한 서로간의 간섭에 의하여 실제 유요거리의 원자는  $i$ 의 치음 내지 두번째 주변 원

자들이다. 이 사실에 근거하여 원자  $i$ 에 대해 힘을 계산하기 전에 유효거리의 원자들을 원자  $i$ 에 등록시킴으로써 힘의 계산시간을 줄일 수 있고 이를 20 내지 30 계산단계 후 균을 갱신하는 방법이다. 본 시뮬레이션에서는 계산수치의 정확도를 높이기 위해 5 내지 10번의 계산단계 후 균을 갱신하였다. 부기법을 이용하여 구한 힘을 바탕으로 원자의 가속도, 속도, 위치를 구하게 되고 등에너지조건에 따라 원자의 속도를 재 설정함으로써  $\Delta t$  동안의 계산을 마치게 된다. 한편 원자들의 운동을 모니터링을 위하여 매 계산시간마다 컴퓨터 화면에 원자의 움직임을 출력하며 시간이  $\Delta t$ 후 속도의 초기화를 제외한 과정을 반복한다. Fig.5는 몬테칼로방법을 이용한 초기 속도 분포를 나타내고 있으며 가우스분포를 만족시키며 또한 주어진 온도에 해당하는 속도를 갖는 원자의 확률이 가장 높음을 볼 수 있다. 또한 원자의 갯수가 증가할 수록 속도 분포는 가우스분포에 더 가까워짐을 볼 수 있다. 분자 동역학에 사용되는 적분알고리즘의 타당성 여부와 적당한 적분시간(Integration time,  $\Delta t$ )을 알아보기 위하여 Fig.6에서와 같은 에너지 실험을 할 수 있다. 외부의 일이 주어지지 않는 한 시스템의 총에너지(운동에너지와 포텐셜의 합)는 일정한 값을 Fig.6에서와 같이 유지하여야 한다. Fig.7은 1sec에서 Schofield 적분방법이 적당함을 보여주고 있다. Fig.8은 적분시간에 대한 총에너지의 변화를 보여주며 5sec의 적분시간에 대해서는 시스템의 총에너지가 변하므로 5sec의 적분시간은 정확한 계산에 적당하지 않음을 알 수 있다. Fig.8에 공구의 끝단이 예리한 경우의 절삭과정을 나타내었으며, 실제 절삭이 일어남을 관찰할 수 있다. 기시적인 관점에서 칩의 유동과는 달리 공구의 상면경사가 앞 부근의 원자들은 심한 압축력으로 일직선상을 이루고 있는 원자 배열이 버클링(Buckling)을 일으키며 칩을 형성하고 있음을 알 수 있다. 즉, 칩의 흐름은 미시적 관점에서 매끈한 어떤 유선의 형태를 갖는 것은 아니다. 그러나 절삭이 진행되는 동안 상면에 균질한 원자들은 기시적으로 커다란 흐름을 이루며 칩을 형성해 나감을 알 수 있다. Fig.9에 절삭되는 동안 공구 끝단부근의 원자들의 움직임을 확대해 놓았다. 빗금친 영역은 대략적인 진단영역을 나타내며 진단이 일직선상으로 일어나지 않음을 볼 수 있다. 칩의 상향운동에 대한 공구의 상면에서의 마찰로 인한 저항력은 공구 진방의 밀충 원자들에 힘을 가함으로써 진위를 발생시킴을 알 수 있다. 그리고 공구가 예리한 경우원자라도 끝단의 원자들은 여유면으로 운동을 할 수 있기 때문에 여유면에 도달하기 전 압축력을 가하여 진위를 발생시키고 한층 밀으로 이동함을 관찰할 수 있다. 여유면에 도달한 원자들은 압축력이 풀리면서 원자층들이 약간 부풀어 오르며 이는 재료의 탄성회복을 잘 보여주고 있다. 한편, 가공변질층은 공구가 예리한 경우 매우 작음을 알 수 있다. Fig.10은 공구의 끝단반경이 있는 경우의 절삭이며 끝단이 예리한 경우에서와 같이 절삭이 이루어짐을 볼 수 있다. 예리한 공구에 비해 가공후 면은 원자층들간의 변화가 심하며 가공변질층이 생성됨을 알 수 있다. Fig.11에서와 같이 끝단반경이 있는

공구의 절삭의 두드러진 특징은 진단영역이 공구의 반경주위와 절삭깊이보다 깊은 데 까지 걸쳐 있음을 알 수 있다. 이 영역은 예리한 공구에 비해 크며 이 부근에서의 원자들의 운동은 절삭력의 증가와 매우 불규칙한 절삭력 변화의 원인이 된다. 이는 공구가 반경을 가짐으로써 반경부근에 힘을 받는 원자들이 생성되고 이들 원자들은 방향이 정해진 상태에서 운동을 하는게 아니라 공구의 반경부근에 계속 눌리면서 여유면으로 운동하기 때문이라 생각된다. 그리고 이들 원자들은 밀의 원자층들에 압력을 가함으로써 변위를 끝단이 예리한 경우보다 크게 생성하고 여유면으로 이동하면서 또한 변위를 생성시킨다. 그리고 여유면에서의 원자층들은 탄성회복이 이루어짐을 또한 알 수 있다. Fig.12은 공구가 예리한 경우와 반경이 있는 경우의 절삭력을 나타내고 있다. 끝단 반경이 있는 경우 절삭력이 증가하였음을 알 수 있고 두 경우 비절삭력(Specific force)이  $10^{-2}N/mm$  대의 크기를 갖고 있다. 그리고 고주파의 성분과 저주파의 성분을 공통적으로 갖고 있는데 이는 고주파의 경우 원자의 진동수와 관련이 있으며 저주파인 경우 원자들이 변형을 받아 다른 평형위치로 찾아가는 주파수일 것으로 추측된다.

#### 4. 결 론

분자 동역학(MD)을 미소절삭에 적용하여 다음과 같은 결론을 얻었다.

- 1) 적분 시간( $\Delta t$ , integration time)은 원자 궤적의 안정성에 영향을 주며 실험결과 1sec( $10^{15}$ sec)대의 시간이 적절하였다.
- 2) 공구가 진행됨에 따라 실제 가공에서와 같이 절삭이 이루어졌다.
- 3) 반경이 있는 공구의 경우 진단영역이 예리한 공구에 비해 크며 공구의 반경주위에 걸쳐 존재한다.
- 4) 끝단이 예리한 공구와 반경이 있는 공구 두 경우 모두 여유면에서 탄성회복이 이루어졌다.
- 5) 끝단 반경이 있는 경우 평균 절삭력은 커졌으며  $10^{-2}N/mm$ 대의 크기를 갖는다.
- 6) 절삭력은 저주파와 고주파의 성분을 갖고 있으며 각 원자의 평형운동과 진동수에 관계가 있다.

#### 참 고 문 헌

- [1] N.Ikawa, S.Shimada, H.Tanaka, G.ohmori, "An atomistic analysis of nanometric chip removal as affected by tool-work interaction in diamond turning", Annals of CIRP, Vol.40, Jan., 1991, pp.551-554.
- [2] N.Ikawa, R.R.Donaldson, R.Komanduri, W.Konig, T.H.Aachen, P.A.McKeown, T.Moriwaki, I.F.Stowers, "Ultra precision Metal Cutting -The Past, the Present and the Future", Annals of the CIRP, vol.40, 1991, pp.587-594.
- [3] S.Shimada, N.Ikawa, H.Tanaka, G.Ohmori, J.Uchikoshi, H.Yoshinaga, "Feasibility Study on Ultimate Accuracy in Microcutting Using Molecular Dynamics Simulation", Annals of the CIRP, vol.42, 1993

,pp.91-94.

- [4]Naoya Ikawa,Shoichi,Shimada and Hiroaki Tanaka,"Minimum thickness of cut in micromachining",Nanotechnology,Vol.3,1992,pp6-9.
- [5]T.Inamura,N.Takezawa,Y.Kumaki,"Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting",Annals of the CIRP,Vol.42,Jan.,1993,pp79-82.
- [6]T.Inamura,I.suzuki,N.Takezawa,"Cutting experiments in a computer using atomic models of a copper crystal and a diamond tool",JSPE,Vol.25, No.4,Dec.1991,pp259-266.
- [7]T.Inamura,N.Takezawa,"Atomic-scale cutting in a computer using crystal models of copper and diamond",Annals of the CIRP,Vol.41,Jan.,1992, pp121-124.
- [8]S.Shimada,N.Ikawa,I.Tanaka,J.Uchikoshi,"Structure of Micromachined Surface Simulated by Molecular Dynamics Analysis",Annals of the CIRP,Vol.43,Janu.,1994,pp51-54.
- [9]Benito deColis,Ali S. Argon, and Sidney Yip,"Molecular dynamics simulation of crack tip processes in alpha-iron and copper",J.Appl.Physics, Vol.54(9),Sep.1983.
- [10]M.Mullins,M.A.Dokainish,"Simulation of the (001) plane crack in  $\alpha$ -iron employing a new boundary scheme",Philosophical MagazineA,Vol.46,No.5,1982, pp771-787.
- [11]R.Rentsch,I.Inasaki,"Molecular Dynamics Simulation for Abrasive Processes",Annals of the CIRP,Vol.43, Janu.,1994,pp327-330.
- [12]M.Weck,H.Kunzmann,"Ultraprecision in Manufacturing Engineering",Proc. of the 3rd Int. Conf. on Ultraprecision in Manufacturing Eng.Aachen Germany,1994,pp21-24.
- [13]William H.Press et al,"Numerical recipes in C",2nd,Cambridge Univ.1992,pp280-309
- [14]J.Kushick and B.J.Berne,"Statistical Molecular Dynamics,Part B: Time-Dependent Processes", edited by B.J.Berne,Plenum,1977,pp41-49

Table 1 Value of constants<sup>(1)</sup>

	Cu-Cu	Cu-C
D(eV)	0.3429	0.1000
$\alpha(\text{\AA}^{-1})$	1.3588	1.7000
$r_0(\text{\AA})$	2.7202	2.2000

Table 2 Cutting condition for material and tool

	Workpiece	Tool
Material	Cu	Diamond
Lattice size(nm),a	0.361	0.1203
Dimension	1000(个)	78(个)
Reference position of tool(nm)	0.6	
Time step(sec)	1f	
Cut off length(\AA)	7.5	3.0

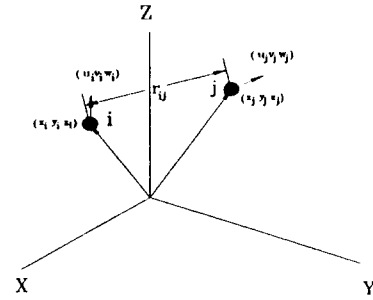


Fig.1 Two atoms in three dimension

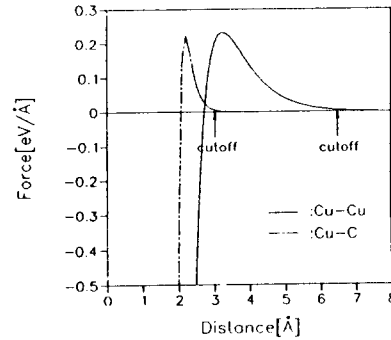


Fig.2 Forces between two atoms for distance

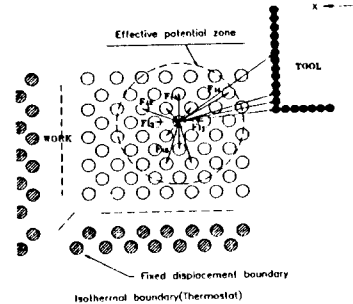


Fig.3 Interaction force between atoms

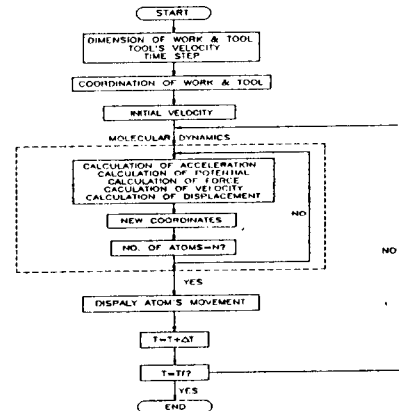


Fig.4 Flow chart to simulate the microcutting

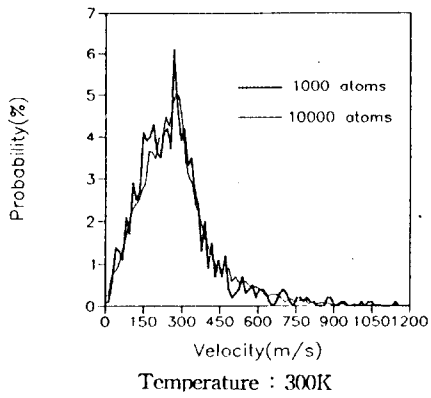


Fig.5 Maxwell velocity distribution for number of atoms

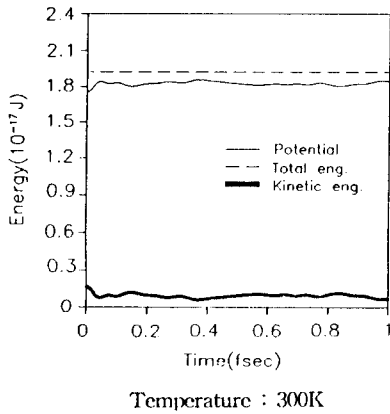


Fig.6 System energy for a 1fsec integration time

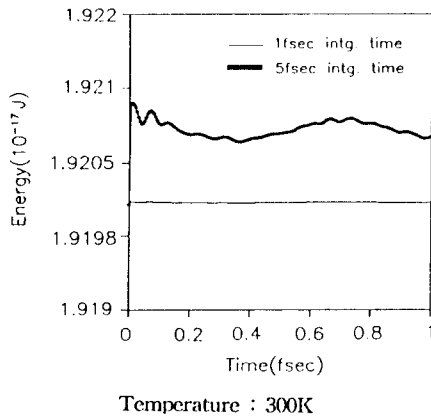


Fig.7 Total energy for an integration time

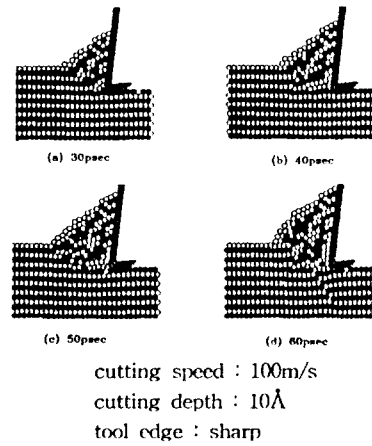


Fig.8 Cutting process for a sharp edge tool

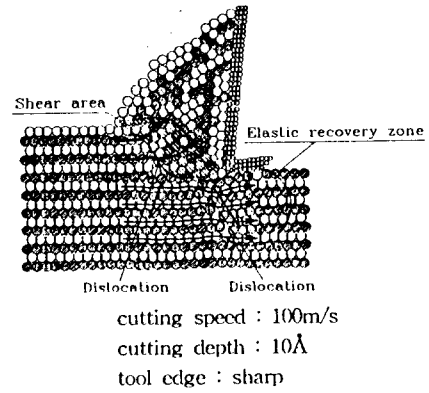


Fig.9 Mechanism around sharp edge tool

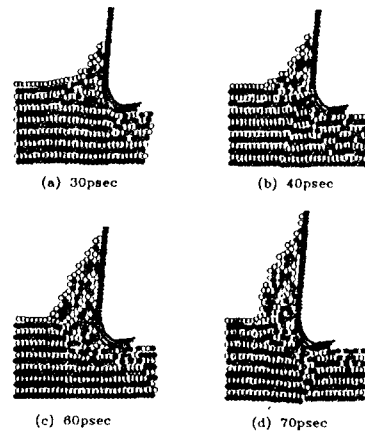


Fig.10 Cutting process for a sharp edge tool

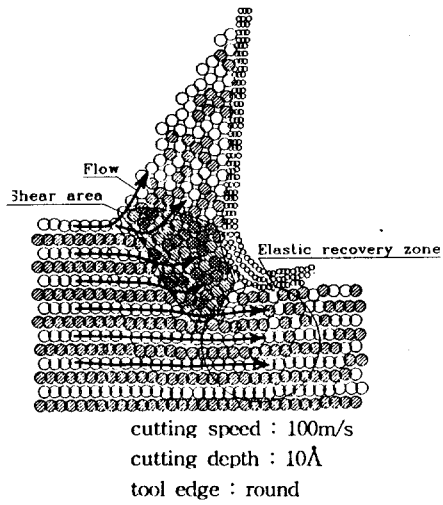
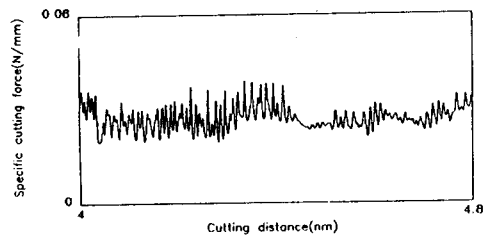
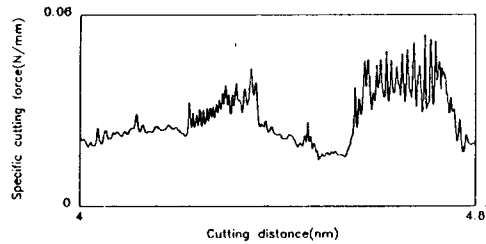


Fig.11 Mechanism around round edge tool



(a) Sharp edge tool



(b) 0.7nm edge radius tool

Cutting Speed : 100m/s

Fig.12 Cutting force for edge configuration