

분자정역학 기법을 이용한 초미세 절삭특성에 관한 고찰

정구현*, 이성창*, 김대은**

Investigation of Ultraprecision Machining Characteristics by Molecular Statics Simulation Method

Koo-Hyun Chung*, Sung-Chang Lee*, Dae-Eun Kim**

ABSTRACT

Machining technology has emerged to the point of performing atomic-scale fabrication. In this paper atomic-scale machining characteristics are investigated by using Molecular Statics simulation method. The cutting model used in this work simulates machining with tools such as an AFM. It is shown that built-up edge formation and cutting forces depend on tool tip geometry. Also, the material flow during cutting is shown for various cutting conditions such as depth of cut, rake angle, and edge radius of tool.

Key Words : Ultraprecision Machining(초정밀 가공), Molecular Statics(분자정역학), Atomic Force Microscope(원자현미경), Lennard-Jones Potential(레너드-존스 포텐셜), Cutting Force(절삭력)

기호 설명

1. 서론

- E_b : 전체 원자들의 결합 에너지
- $\Phi(r_{ij})$: 원자 i, j 간의 포텐셜
- $\Phi^*(r_{ij}^*)$: 원자 i, j 간의 무차원 포텐셜
- r_{ij} : 원자 i, j 간의 거리
- r_{ij}^* : 원자 i, j 간의 무차원 거리
- F^* : 원자간의 무차원 힘
- ϵ : 결합 포텐셜 에너지
- σ : ϵ 에 의한 원자간 거리
- θ : 경사각 (rake angle)
- φ : 여유각 (clearance angle)

많은 기계 부품을 포함한 전기적, 광학적 요소는 마이크로미터이하의 정밀도와 나노미터 수준의 표면 거칠기를 요구한다. 이를 위한 초정밀가공 기술은 현재 보편화되어 있는 실정이며, 최근에는 원자 단위까지 고려하는 극초정밀가공 수준에 이르고 있다. 특히 단결정 다이아몬드를 이용한 선삭의 경우에 절삭 가능한 두께는 1 nm 이하이며⁽¹⁾, 이는 수 개의 원자층만을 포함한 것으로서 원자단위 가공에 대한 연구가 불가피함을 나타낸다. 이러한 원자 단위 가공의 경우에는 거시적인 측면의 가공에 적용되는 연속체 개념의 모델링은 성립하지 않으며 유한 요소

* 연세대학교 기계공학과 대학원
 ** 연세대학교 기계공학과

법을 이용한 해석은 많은 한계를 가지고 있으므로, 보다 미세한 절삭시의 특성 및 원자들의 거동에 대한 해석을 위해서는 원자간의 힘에 대한 개념을 도입할 필요가 있다.

현재까지 초정밀가공시의 절삭특성에 관한 실험적인 접근⁽²⁾이나 유한 요소법을 이용한 해석이 많이 진행되어 왔으며⁽³⁾ 그에 대한 기술적인 기반확보를 위해 공구의 재질 및 형상, 제어 가능 여부, 절삭시 발생하는 외란 및 진동 등과 같은 환경적 요소, 가공 방법 등에 대한 체계적인 연구가 활발하게 행해지고 있다. 그러나 미소 가공에 대한 실험적 측면의 분석은 아직까지 연구 중에 있으며 현실적인 제약이 많은 형편이다. 특히 큰 음의 경사각을 가지는 다이아몬드 공구에 의한 선삭 가공 및 절삭력이나 에너지 변화, 정밀 가공에 용이한 재료로 알려진 알루미늄이나 구리 등의 공작물에 따른 칩 유출 형태, 절삭 깊이와 공구 반경에 따른 가공 변질층과 표면 거칠기 등은 주요 관심 대상이 되고 있으며⁽¹⁾, 이러한 부분에서 컴퓨터의 발전과 더불어 이루어진, 각각의 원자들의 거동까지 고려한 분자동역학 (molecular dynamics)의 개념이 활용되고 있다. 실제로 이러한 연구는 초정밀가공의 실현 가능성 및 한계를 타진하는 것으로부터 나노미터 수준의 절삭 가공에 대한 절삭 특성에 관한 연구, 즉 미소절삭시의 가공 표면의 상태⁽⁴⁾, 전단 영역⁽⁵⁾, 칩 유출 형태⁽⁶⁾, 그리고 공구의 마모⁽⁷⁾ 등, 다양한 접근이 이루어지고 있으며, 원자 단위에서의 마찰 특성⁽⁸⁾, 가공 방향에 따른 가공 표면의 영향⁽⁹⁾, 경도 측정시의 압흔(indentation)에 대한 원자의 거동⁽¹⁰⁾ 등에서도 분자동역학 및 정역학 기법을 이용한 연구가 진행되고 있다.

초정밀가공에서 각광받고 있는 단결정 다이아몬드 공구의 현실적으로 가능한 최소 공구반경은 약 2~2.6 nm에 이르고 있다⁽¹¹⁾. 그러나 최근에 Atomic Force Microscope (AFM)을 이용한 원자 차원에서의 가공이 연구되고 있으며^(12, 13), 이러한 AFM 침 (tip)의 경우 반경은 수 나노미터에서 수십 나노미터에 이르므로, 실제 접촉이 일어나는 요철은 원자단위의 반경을 가지게 된다. 또한 이를 이용하여 10⁻¹⁶~10⁻¹⁸ N의 힘까지 측정이 가능하다고 한다⁽¹⁴⁾. 그러므로 본 연구에서는 AFM, Scanning Tunneling Microscope (STM)에 사용되는 침 (tip)을 공구로서 모델링하고, 분자정역학 (molecular static simulation) 기법을 이용하여 공구의 형상, 절삭 깊이 등에 대한 절삭력과 원자의 거동을 알아보고자 한다. 그러므로써 AFM, 또는 STM을 이용한 측정시의 침과 시편의 상호

작용을 원자 단위에서 파악하고, 나아가 이러한 침을 응용하여 보다 미세한 가공에 활용할 수 있도록 하고자 한다.

2. 원자간의 힘과 포텐셜

분자동역학에서 각각의 원자 운동을 묘사하기 위해 사용되는 방법으로는 전통적인 포텐셜 에너지에 의한 방법과 전자 구조에 의해 원자간의 힘을 구하는 방법이 있다⁽¹⁵⁾. 본 연구는 원자간의 힘을 구하기 위해 포텐셜 에너지를 사용하였으며, 원자간의 포텐셜 함수로는 레너드-존스 포텐셜 (Lennard-Jones Potential)을 이용하였다. 즉, 상호 작용하는 두 원자의 포텐셜 에너지의 합으로써 여러 원자들의 결합에너지를 식 (1) 과 같이 나타내고 각각의 포텐셜은 레너드-존스 포텐셜 함수를 이용해 구하였다.

$$E_b = \Phi(r_{12}) + \Phi(r_{13}) + \dots + \Phi(r_{22}) + \Phi(r_{23}) + \dots$$

$$= \sum_{i < j = 1}^N \Phi(r_{ij}) \quad (1)$$

레너드-존스 포텐셜은 두 원자간의 포텐셜이 또 다른 원자에 의해 영향을 받지 않는다는 가정과, 원자간의 거리는 상호 작용하는 원자의 중심의 거리이며 작용하는 힘의 방향은 두 원자의 중심을 연결한 직선의 방향을 따른다는 가정을 전제로 하고 있다. 그러나 레너드-존스 포텐셜은 원자간의 거동을 잘 나타내는 방법으로써⁽¹³⁾ 식 (2) 와 같이 주어진다.

$$\Phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2)$$

여기서, $\Phi(r_{ij})$ 는 i, j 원자간의 포텐셜, r_{ij} 는 원자간 거리, ϵ 은 결합 포텐셜 에너지, σ 는 포텐셜 에너지에 의해 결정되는 원자간 거리를 나타내며 다음과 같이 결정된다.

$$\sigma = \frac{r_{eq}}{2^{1/6}} \quad (3)$$

$$\epsilon = \Phi(r_{eq}) \quad (4)$$

즉, $\Phi(r_{ij})$ 는 평형 상태를 이루는 두 원자의 거리에 의해서 결정되는 값으로 재료에 따라 다른 값을 갖는다. 여기서 두 원자간의 포텐셜 에너지는 두 원자간의 거리에

의하여 지배됨을 알 수 있고, 식 (2)의 첫 번째 항은 최소 에너지를 갖는 거리 이하에서의 강한 반발력을 나타내고 두 번째 항은 최소 에너지 거리 이상에서의 약한 인력을 나타낸다.

식 (2)를 무차원화하면 다음과 같이 나타낼 수 있고,

$$\Phi^*(r_{ij}^*) = 4\left[\left(\frac{1}{r_{ij}^*}\right)^{12} - \left(\frac{1}{r_{ij}^*}\right)^6\right] \quad (5)$$

여기서,

$$\Phi^* = \frac{\Phi}{\epsilon}, \quad r^* = \frac{r}{\sigma} \quad (6)$$

두 원자간에 작용하는 힘은 포텐셜을 거리에 대하여 미분함으로써 얻어질 수 있으므로, 원자간 작용하는 힘을 구할 수 있다.

$$F^*(r^*) = -\frac{d\Phi^*}{dr^*} = 24\left[2\left(\frac{1}{r^*}\right)^{13} - \left(\frac{1}{r^*}\right)^7\right] \quad (7)$$

이를 그래프로 나타내면, Fig. 1 과 같다. 여기서, 포텐셜 에너지가 가장 작은 값을 가지는 안정된 상태의 원자간 거리는 1.12σ 임을 알 수 있고, 인력이 작용할 경우 음의 값을 갖으며 반발력을 가질 경우 양의 값을 나타내게 됨을 알 수 있다.

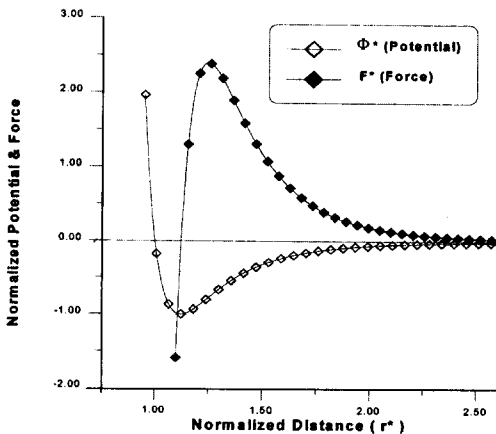


Fig. 1 Lennard-Jones pair potential and force. The units are $r^* = r/\sigma$, $\Phi^* = \Phi/\epsilon$, $F^* = F\sigma/\epsilon$

3. 가공에 대한 모델

모든 원자는 원형으로 가정한 후, 100 개의 원자를 2차 원으로 배열하여 공작물을 구성하고 15개의 원자로 공구를 구성하여 분자정역학적 기법을 이용한 미소 절삭 시뮬레이션을 행하였다.

공작물은 초기의 정적인 상태에서 가장 안정된 형태를 가지도록 Fig. 2 와 같이 원자간 거리 1.12σ 를 가지는 삼각구조의 형태로 구성하였고, 개개의 원자들의 거동을 관찰하기 위하여 순서대로 번호를 삽입하였다. 공구는 Fig. 3 과 같이 끝단의 반경이 서로 다른 2 가지 형태 (Type A, B)로 구성하였으며, A 형태의 공구는 끝단 반경이 없는 이상적인 공구이고, B 형태의 공구는 1.12σ 만큼의 끝단 반경을 갖도록 하였다. 거시적인 관점의 절삭 과정에서 적용되는 경사각 (rake angle)과 여유각 (clearance angle)은 Fig. 2 에서 각각 θ 와 φ 로 나타낼 수 있다.

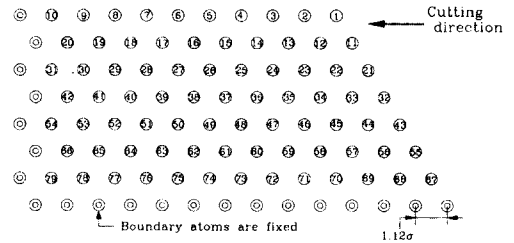


Fig. 2 Workpiece modeling

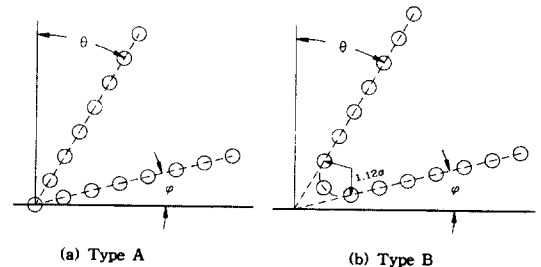


Fig. 3 Tool modeling

Fig. 2 에서 공작물의 경계조건으로써 바닥과 왼쪽 면의 원자들은 움직이지 않도록 고정되어 있도록 하였고, 맨 위층과 오른쪽 원자들은 이상적인 진공상태에 노출되

어 있어 자유롭게 이동할 수 있도록 설정하였다. 공작물의 원자 운동을 결정하는 레너드-존스 포텐셜 함수의 재료에 따른 인자로는 아르곤의 값을 이용하였다. ($\epsilon = 1.7 \times 10^{-21}$ J, $\sigma = 3.4 \times 10^{-10}$ m) 공구 원자는 매우 강한 결합을 이루고 있어 깨어지지 않는다고 가정하였으며, 공작물 원자와 공구 원자는 서로 다른 재료로 설정하였으므로, 공작물 원자 사이에 작용하는 힘과 공구 원자와 공작물 원자 사이에 작용하는 힘에 차이를 두었다. 즉, 서로 다른 원자간에 작용하는 힘은 같은 원자간에 작용하는 힘에 비해 상대적으로 반발력이 크고 인력이 적게 작용하기 때문에, 공작물 원자와 공구 원자 사이에 작용하는 인력을 공작물 원자간에 작용하는 인력의 1/4배로 가정하여 인력의 영향을 줄이도록 하였다. 이는 보다 의미있는 결과를 위해, 공작물 원자와 공구 원자간의 인력이 공작물 원자들간의 인력과 같을 경우와 1/2배로 적게 작용할 경우, 또한 반발력만 작용할 경우에 대한 시뮬레이션을 통해 결정하였다. 그러므로 공구의 원자와 공작물 원자사이의 상호작용에 있어서 작용하는 포텐셜 함수는 다음과 같은 식으로 나타내어진다.

$$\Phi(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \frac{1}{4} \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (8)$$

4. 시뮬레이션 방법

컴퓨터의 계산 속도를 고려한 효율적인 시뮬레이션을 위하여 시간의 개념을 배제한 분자정역학적 시뮬레이션을 행하였다. 즉, 초기의 상태에서 공구 원자를 일정간격 만큼 이동시킨 후 공구 원자와 공작물 원자 사이에 작용하는 힘과 공작물 원자들 사이에 작용하는 힘의 평형 위치를 찾아 공작물 원자를 재배열한다. 이 때 원자간 힘의 계산은 Fig. 1 에서 원자간의 거리가 2.5σ 이상일 경우에 원자간에 상호 작용하는 힘이 상대적으로 매우 작은 값을 가짐을 알 수 있었으므로, 컴퓨터의 효과적인 계산을 위하여 한 원자에 대해서 거리가 2.5σ 이내에 있는 원자들간에 작용하는 힘만을 고려하였다. 이렇게 재배열 된 공작물에 대하여 다시 일정간격 만큼 공구 원자들을 이동시킨 후 같은 과정을 반복하였다. 플로우 차트는 Fig. 4 에 나타내었다.

공구의 형태 (Fig. 3 의 A형과 B형), 각각의 공구 형태에 따른 경사각과 여유각의 변화, 절삭 깊이를 변화시키면서 시뮬레이션을 진행하였다. 여기서 절삭 깊이는 절입

깊이가 아닌 공구의 여유면과 공작물의 가장 위층의 원자 열과의 차이로 설정하였으며, 그에 따른 절삭력 (주분력 및 배분력), 칩의 유출 형태 등의 가공 특성을 알아보았다. 시뮬레이션 조건을 정리하면 Table 1. 과 같다.

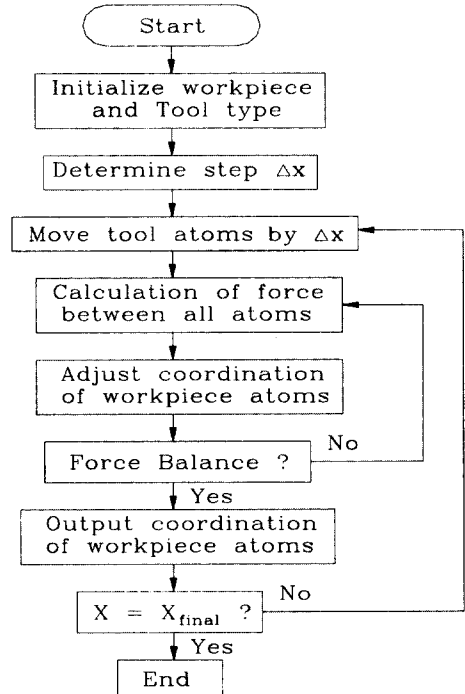


Fig. 4 Flow chart for computer simulation

Table 1. Simulation condition

변 수	공구의 형상	경사각	여유각	절삭 깊이
조 건	A 형과 B 형	30°, 45°, 60°	0° ~ 30°	원자 0.5층 ~ 원자 2.5층

5. 결과 및 고찰

각각의 시뮬레이션에 대하여 절삭과정에서의 수평 방향의 힘 (주분력)과 수직 방향의 힘 (배분력)의 변화를 구하고 두 힘을 합력 하여 절삭력의 크기를 구하였다. 또한 동일한 절삭 길이에 대하여 주분력 및 배분력의 평균을 구하여, 절삭 조건에 따른 변화를 알아보았다. Fig. 5 는 공구 A에 대하여 경사각 30°, 여유각 0°, 절삭 깊이가 원자 1층의 조건에서 절삭이 진행됨에 따른 주분력 (horizontal force)과 배분력 (vertical force)의 변화를 나타낸 것이다.

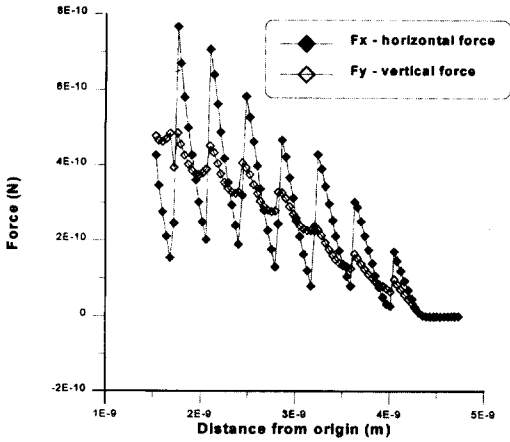


Fig. 5 Atomic scale cutting simulation (Tool : A, $\theta : 30^\circ$, $\varphi : 0^\circ$, depth of cut : 1 atom layer)

주분력과 배분력 모두 힘의 주기적인 변화가 발생하며, 절삭이 진행됨에 따라 그 크기가 커지는 것을 알 수 있다. 이러한 현상은 모든 시뮬레이션 결과에서 일반적으로 발생한 결과로서 힘의 주기적인 변화는 공작물 원자 배열에 기인하는 것이며, 절삭력이 커지는 것은 공구 원자와 주변의 다른 공작물 원자에 의해 운동이 구속되는 원자들의 수가 많아짐으로 인하여 발생하는 것이라 여겨진다. 또한, 절삭력을 거리에 대하여 수치 적분하면 각 절삭에 소비된 에너지를 나타내게 된다. 그러므로 절삭이 진행될수록 절삭력의 크기가 커지는 것은 공작물 원자의 결합을 파괴하는데 필요한 에너지가 커지는 것을 의미한다.

평균 절삭력의 상대적인 크기는 각 절삭 조건, 즉 절삭 깊이, 경사각, 여유각, 공구의 형상과 그에 따른 원자의 거동에 대하여 조금씩 다른 양상을 나타냈다.

5.1 절삭 깊이에 따른 절삭력의 변화

Fig. 6 은 경사각 30° , 여유각 0° 에서 절삭 깊이의 변화에 따른 평균 절삭력 크기의 변화를 나타낸 것이다. 여기서 공구의 형상 (A형과 B형)에 관계없이 절삭 깊이가 커질수록 절삭력이 커지는 것을 알 수 있다. 이는 예상했던 것으로 거시적인 가공에서 나타나는 것과 같은 양상을 띠고 있는 것을 알 수 있다. 즉, 절삭 깊이가 커질수록 공구 원자와 주변의 다른 공작물 원자에 의해 구속되는 원자의 수가 많아짐으로써 발생하는 현상으로 여겨진다. 또한 평균 절삭력의 크기는 끝단 반경을 갖는 공구 B의 경우에 더 크게 나타났다. 이것은 공작물 원자의 거동으

로써 설명할 수 있는데, 끝단에 반경이 존재할 경우 공작물 원자의 유동이 보다 불안하게 진행됨을 알 수 있었다. 공구 B의 경우, 공구의 끝단 원자에 달라붙어서 절삭이 진행되는 현상이 자주 발생하였는데, 이러한 현상은 거시적인 가공에서 발생하는 구성인선 (built-up edge)과 연관지어 생각할 수 있다.

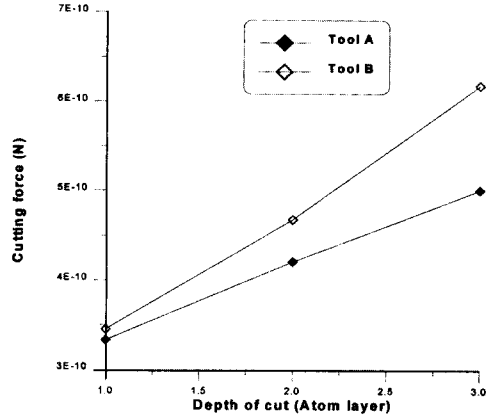


Fig. 6 Cutting force vs. depth of cut ($\theta : 30^\circ$, $\varphi : 0^\circ$)

5.2 경사각에 따른 절삭력의 변화

Fig. 7 은 여유각 0° , 절삭 깊이 원자 2층에 대하여 경사각에 따른 절삭력의 변화를 나타낸 것이다. 그 결과로서 경사각이 커질수록 평균 절삭력의 크기가 작아지는 것을 얻었다. 이는 거시적인 절삭시 발생하는 것과 일치한다. 즉, 일반적인 선삭 가공에서는 경사각이 커질수록

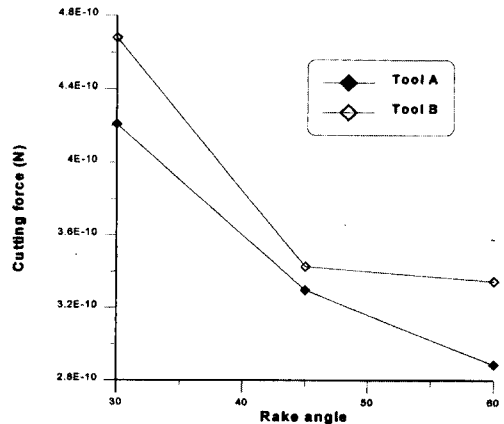


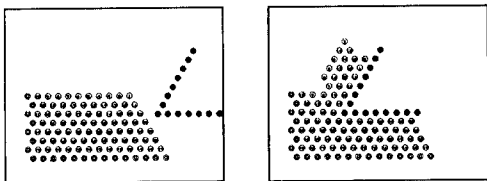
Fig. 7 Cutting force vs. rake angle ($\varphi : 0^\circ$, depth of cut : 2 atom layer)

절삭력의 크기는 작아지는 경향성이 있으며, 경사각의 크기가 커질수록 공구의 마모나 파괴 현상이 발생하기 쉬운 단점이 있다. 초미세 절삭 시뮬레이션에서도 이와 같은 현상이 발생하는 것을 알 수 있다.

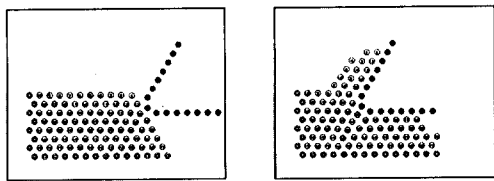
절삭력의 크기는 공구의 원자들이 받는 힘의 합력으로 구하였으므로, 공작물과 칩의 유출 형태에 따라 그 크기는 달라지게 된다. 그러므로 경사각이 커질수록 칩의 유출이 보다 자연스럽게 일어나게 되고, 그로 인하여 절삭력의 크기가 작아지는 것으로 해석할 수 있다. 또한, Fig. 7 에서도 평균 절삭력의 크기는 공구 B의 경우에 더 크게 나타나고 있음을 알 수 있다.

5.3 구성인선 (Built-up edge)

시뮬레이션 조건에 따라 공구의 끝단에 원자가 달라붙어서 가공되는 현상을 발견할 수 있었다. Fig. 8 (a) 는 공구 A에 대해 경사각 30° , 여유각 0° , 절삭 깊이가 원자 2층에 대한 시뮬레이션 결과이며, Fig. 8 (b) 는 같은 조건에서 공구 B에 대한 결과이다. 공구 B의 경우에는 절삭이 시작될 때 처음으로 닿게되는 공작물의 원자가 공구 끝단의 원자에 의해 끌려 다니며 절삭이 진행되는 현상이 나타났다 (원자 ①). 이러한 현상은 공구 A 보다는 공구 B의 경우에 주로 발생하였고, 공구의 끝단반경에 의한 것으로 여겨진다. 즉 끝단의 반경을 형성하는 두 원자의 인력으로 인하여 두 원자 사이에 공작물 원자가 달라붙게 되고, 이 원자가 절삭이 진행됨에 따라 다른 주변의 공작



(a) Tool : A, $\theta : 30^\circ$, $\varphi : 0^\circ$, depth of cut : 2 atom layer



(b) Tool : B, $\theta : 30^\circ$, $\varphi : 0^\circ$, depth of cut : 2 atom layer

Fig. 8 Built-up edge formation

물 원자들과의 상호 작용에 의하여 탈락하지 못하게 되는 것이며, 거시적인 가공에서 발생하는 구성인선 (built-up edge)과 같이 해석할 수 있다. 또한 이러한 현상은 절삭 깊이에 따라 다르게 나타나며, 공구의 끝단이 절입되는 방향이 원자층일 경우에 주로 발생하였다. 이러한 사실은 원자 단위의 절삭 가공에서, 원자층과 같은 깊이로 공구가 절입되는 경우와 원자층 사이로 공구가 절입될 경우에 원자의 거동이 다르게 나타나는 것을 의미한다.

Fig. 9 는 공구 B에 대하여 경사각 15° , 여유각 30° 일 때 절삭 깊이에 따른 평균 주분력과 배분력의 변화를 알아본 것이다. 여기서 절삭 깊이가 커질수록 평균 절삭력의 크기는 커지게 되나, 주분력과 배분력은 다른 경향을 가짐을 알 수 있다. 절삭 깊이가 원자 1층, 2층일 때는 상대적으로 주분력의 크기와 배분력의 크기가 비슷하나, 절삭 깊이가 원자 1.5층, 2.5층일 때는 주분력이 배분력에 비해 훨씬 큰 값을 갖는다. 이것은 앞에서 언급한 공구의 절입 방향에 따른 것으로 볼 수 있으므로, 미소 가공시 공구의 절입 방향과 절삭 깊이는 절삭 특성에 중요한 역할을 하는 것을 알 수 있다.

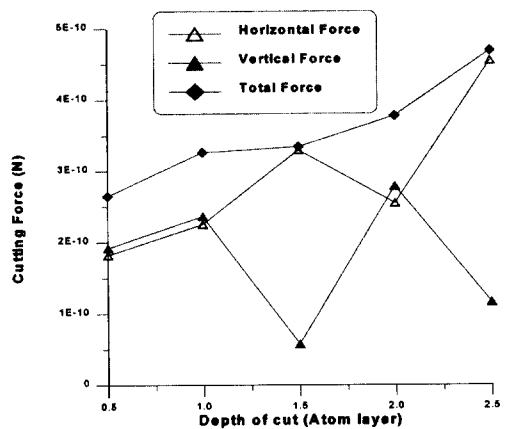


Fig. 9 Horizontal and vertical force vs. depth of cut (Tool : B, $\theta : 15^\circ$, $\varphi : 30^\circ$)

5.4 칩의 유출

각 시뮬레이션 조건에 따라 Fig. 10 (a), (b) 에서 나타나는 것과 같이 공구의 여유면 쪽으로 공작물의 원자가 달라붙게 되는 것을 알 수 있다. 이러한 현상은 주로 여유각이 30° 일 때 발생하였으며, 가공시의 공작물의 표면 상태를 결정하는 데 영향을 미칠 것으로 생각된다. 그러

나 Fig. 10 (c) 는 공구가 공작물 원자의 층사이로 절입된 것으로, 이 때는 공작물 원자가 달라붙는 현상이 발생하지 않았다. 공구가 원자층 사이로 절입된 경우에는, 공구의 끝단 부분과 여유면 쪽의 공작물 원자들의 상호 작용에 의하여 공작물 원자들이 여유면 쪽으로 붙는 것보다는 서로 밀려나는 것이 보다 안정된 상태를 유지하기 때문에 발생한 것이다. 즉 미소 가공시는 공구의 절입이 원자의 층 사이에서 일어날 경우와 그렇지 않을 경우에 절삭 특성의 차이가 발생함을 알 수 있다. 그러나, 이러한 현상을 보다 정확하게 해석하기 위해서는 공구 끝단의 반경을 바꾸어 가며 시뮬레이션을 진행해 보아야 할 것이라고 사료된다.

2) 가공 조건이 같은 경우에 공구 끝단 반경이 존재하는 경우가 존재하지 않는 경우보다 상대적으로 큰 절삭력을 가지며, 구성 인선이 형성되기 쉽다.

3) 초미세 절삭시 공구의 절입 방향은 절삭 특성에 큰 영향을 미치게 되는데, 공구의 절입이 원자층 높이로 이루어질 경우에는 주분력과 배분력의 크기가 비슷하며, 원자층 사이의 높이로 이루어질 경우에는 상대적으로 주분력이 크게 나타났다.

4) 절삭 깊이에 따른 절입 방향은 공작물 원자의 거동에도 영향을 미치게 된다. 원자의 거동 측면에서 보면, 원자층 사이로 공구가 절입될 경우가 공작물 원자의 유동이 보다 안정적이다.

참 고 문 헌

1. N. Ikawa, R. R. Donaldson, R. Komanduri, W. Konig, T. H. Aachen, P. A. McKeown, T. Moriwaki, and I. F. Stowers, "Ultra Precision Metal Cutting - The Past, Present and the Future", *Annals of the CIRP*, Vol. 40, 1991, pp. 587-594.
2. Y. Furukawa and N. Moronuki, "Effect of Material Properties on Ultra Precision Cutting Process", *Annals of CIRP*, Vol. 37, 1988, pp. 113-116.
3. J. Hwang and S. Namgung, "A study on the Effect of Cutting Parameters of Micro Metal Cutting Mechanism Using Finite Element Method", *Journal of Korean Society on Precision Engineering*, Vol. 10, 1992, pp. 206-215.
4. D. A. Lucca, Y. W. Seo, R. L. Rhorer, and R. R. Donaldson, "Aspect of Surface Generation in Orthogonal Ultraprecision Machining", *Annals of CIRP*, Vol. 43, 1994, pp. 43-46.
5. T. Inamura, N. Takezawa, Y. Kumaki, and T. Sata, "On a Possible Mechanism of Shear Deformation in Nanoscale Cutting", *Annals of CIRP*, Vol. 43, 1994, pp. 47-50.
6. N. Ikawa, Sh. Shimada, H. Tanaka, and G. Ohmori, "An Atomistic Analysis of Nano-

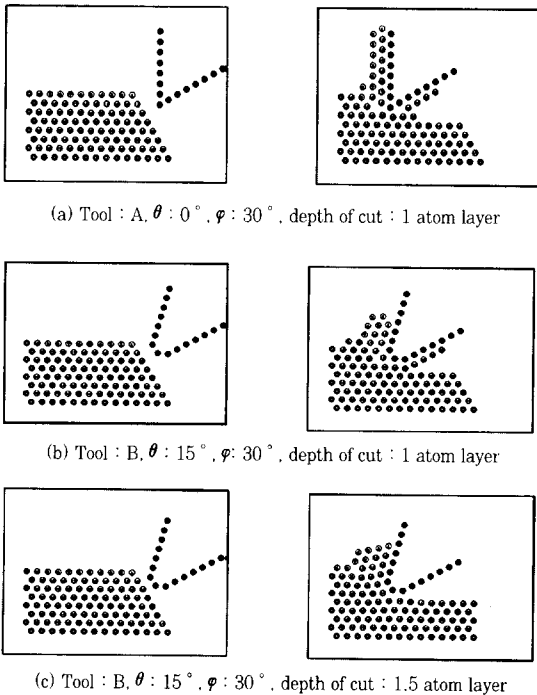


Fig. 10 Motion of atoms during machining

결 론

1) 초미세 절삭의 경우에도 거시적인 절삭과 같이 절삭 깊이가 커질수록, 경사각이 작아질수록 절삭력이 증가한다.

- metric Chip Removal as Affected by Tool-Work Interaction in Diamond Turning", *Annals of CIRP*, Vol. 40, 1991, pp. 551-554.
7. K. Maekawa, "Friction and Tool Wear in Nano-scale Machining - A Molecular Dynamics Approach", *Wear*, Vol. 188, 1995, pp. 115-122.
 8. D. E. Kim and N. P. Suh, "Molecular Dynamics Investigation of Two-Dimensional Atomic-Scale Friction", *Journal of Tribology*, Vol. 116, 1994, pp. 225~231.
 9. S. Shimada, N. Ikawa, H. Tanaka, and J. Uchikoshi, "Structure of Micromachined Surface Simulated by Molecular Dynamics Analysis", *Annals of CIRP*, Vol. 43, 1994, pp. 51-54.
 10. J. Belak and I. F. Stowers, "Molecular Dynamics Modeling of Surface Indentation and Metal Cutting", *Engineering Research and Development - Thrust Area Report FY 91*, Livermore, CA, Lawrence Livermore National Laboratory, 1992.
 11. M. Weck and H. Kunzmann, "Ultraprecision in Manufacturing Engineering", *Proc. of the 3rd Int. Conf. on Ultraprecision in Manufacturing Eng.*, Aachen Germany, 1994, pp. 21-24.
 12. D. M. Campbell, E. S. Snow, and P. J. McMarr, "Fabrication of nanometer-scale side-gated silicon field effect transistors with an atomic force microscope", *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 66, 1995, pp. 1388-1390.
 13. L. L. Sohn and R. L. Willett, "Fabrication of nanostructures using atomic-force-microscope-based lithography", *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 67, 1995, pp. 1552-1554.
 14. B. Bhushan, "Handbook of Micro/Nano Tribology", CRC Press, 1995.
 15. J. M. Haile, "Molecular Dynamics Simulation", John Wiley & Sons, 1992.