

表面テクスチャリングによる Al/Fe 摩擦界面の 移着抑制機構の分子動力学シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation Study on Suppression Mechanism of Material Transfer at Al/Fe Sliding Interface by Surface Textureing

東北大・金研（学）*川浦 正之 東北大・NICHe（非）陳 茜 東北大・金研（正）大谷 優介
東北大・NICHe（正）尾澤 伸樹 東北大・工（正）足立 幸志 東北大・金研（正）久保 百司

Masayuki Kawaura*, Qian Chen**,*, Yusuke Ootani*, Nobuki Ozawa***, Koshi Adachi***, Momoji Kubo*,**

*Institute for Materials Research, Tohoku University

** New Industry Creation Hatchery Center, Tohoku University

*** Department of Mechanical Systems Engineering, Tohoku University

1. 緒言

環境保全のため、自動車のエネルギー効率の向上が求められている。自動車の摩擦によるエネルギー損失の約 69 % はオイルの流体潤滑に由来するとされているため、近年、低粘度潤滑油の開発・利用が推進されている¹⁾。しかし、低粘度の潤滑油はエネルギー損失を低減する一方で、境界潤滑領域を拡大し、エンジン内の金属面が直接接触する可能性を高める。岡林らは、高速回転する鋳鉄がアルミニウム合金に直接接触すると、アルミニウム原子が鋳鉄表面に移着し、摩擦係数が増加することを報告している²⁾。したがって、低粘度潤滑油を用いて摩擦を低減するためには、アルミニウム原子の鉄表面への移着を抑制することが重要である。最近、足立らはアルミニウム合金の表面テクスチャリングがアルミニウム原子の移着を抑制し、摩擦を減少させることを報告した³⁾。さらに、表面テクスチャリングされたアルミニウムを鉄のボールで摺動すると、アルミニウムの硬度が上がることを明らかにしている。しかし、なぜ表面テクスチャリングによって硬度が上昇し移着が抑制されるのかは明らかになっていない。そこで、本研究では、Fe/Al 摺動界面の分子動力学（MD）シミュレーションを行い、表面テクスチャリングがアルミニウム原子の移着および硬度に及ぼす影響について解析した。

2. 計算方法

Figure 1 は、シミュレーションモデルの初期状態のスナップショットである。シミュレーションセルの上部に Fe 球を配置し、下部にテクスチャを模した構造を作成した Al 基板モデルを配置している。はじめに Fe 球を 0.1 GPa の圧力で Al 基板に押し付ける加圧シミュレーションを行った。十分に加圧をした後、Fe 球に圧力をかけながら x 方向に 100 m/s で Al 基板表面上を移動させる摺動シミュレーションを 900 ps 間行った。Al 基板が動かないように、基板最下部の Fig.1 中で Fix と示した緑色の領域は固定し、温度制御のために Fig.1 中で Thermostat と示した紫色の領域に Langevin 熱浴を用いた。Fe と Al の結晶構造の同定には Polyhedral Template Matching⁴⁾を使用し、転位の同定には Dislocation Extraction Algorithm⁵⁾を用いた。また、表面テクスチャリングが移着や硬度の変化に与える影響を考察するため、表面テクスチャリングを施していない Al 基板のシミュレーションも同様に実施し比較した。

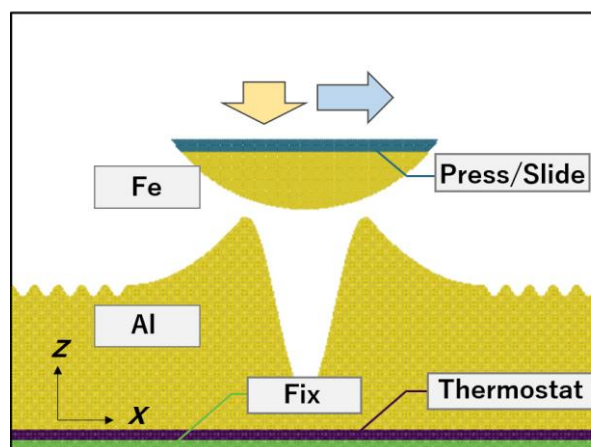


Fig. 1 Snapshots of simulation model at initial state.

3. 結果及びその考察

初期状態（Fig. 2(a)）では、Al 基板は FCC 構造であったが、テクスチャのある Al 基板表面に Fe 球を押し付ける加圧シミュレーションを行うと、凸部にひずみが発生した（Fig. 2(b)）。このとき、ひずみ部分は FCC 構造から BCC 構造へと変化している。さらに、そのひずみ部分から HCP 構造の積層欠陥が発生し、一定間隔で基板全体に広がった。

加圧シミュレーションの後、摺動シミュレーションを開始した。Fig. 2(c)は、摺動シミュレーション開始から 100 ps 時のスナップショットである。Fe 球が x 方向に移動し、Fe 球と Al 基板左側の凸部とが分離し Al 基板左側の凸部から荷重が取り除かれた。荷重が取り除かれると Al 基板の BCC 構造は FCC 構造に戻り、積層欠陥の一部も消失している。これらの結果は、荷重を取り除くと結晶構造が元の構造に戻ることを示している。Fig. 2(d)は摺動シミュレーション開始から 675 ps 時のスナップショットである。Al 基板左側の凸部が Fe 球によって大きく変形させられ、凹部に押し込ま

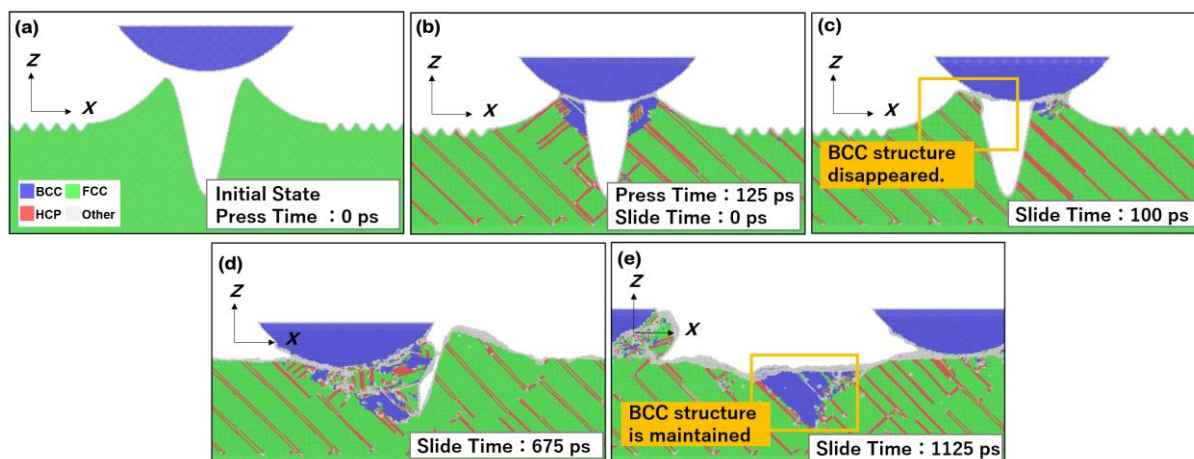


Fig. 2 Snapshots of (a) initial state, (b) press simulation, (c, d, e) sliding simulation. Blue, Green and Red atoms are BCC, FCC and HCP structure. White atoms are other structures.

れている。凹部に押し込まれた凸部の Al は、FCC 構造から BCC 構造へと構造を変化させている。興味深いことに、凹部に押し込まれた Al の BCC 構造は、Fe 球による荷重が取り除かれた後も維持されていた (Fig. 2(e))。この現象は、凸部のアルミニウムが小さな凹部領域に押し込まれることによって、ひずみが緩和されないために生じると考えられる。

テクスチャのない Al 基板についても、同様の加圧・摺動シミュレーションを行った。その結果、Fe 球に押されている部分の Al 基板では結晶構造が一時的に BCC 構造に変化した。荷重が取り除かれれば BCC 構造は FCC 構造に戻り、結晶構造は維持されなかった。これらの結果は、テクスチャがなければ BCC 構造は維持されないことを示している。

また、テクスチャのある Al 基板とテクスチャのない Al 基板それぞれの摺動による転位線の長さの合計の変化を比較した。Fig. 3 に示すように 500 ps までは転位線の長さの合計に顕著な差はない。しかし、600 ps においてテクスチャがある Al 基板の左側の凸部を Fe 球が変形させるとテクスチャがある Al 基板中の転位線の長さが急激に増加している。

一般に、BCC 構造は FCC 構造よりも硬くまた、硬さの尺度の一つである臨界分解せん断応力は転位密度の平方根に比例して上昇する。Al 基板に表面テクスチャリングを施すと BCC 構造が増加し、また転位密度も上昇することから、表面テクスチャリングは摺動を通して Al 基板の硬度を高める作用があると考えられる。また硬い材料では移着が生じにくいので、表面テクスチャリングを施すことで移着を抑制し、摩擦を低減することができると考えられる。

4. 結言

Fe/Al 界面の MD シミュレーションを行い、表面テクスチャリングがアルミニウムの硬度や移着に与える影響を解析した。その結果、表面テクスチャリングは Al 基板表面で生じる FCC 構造から BCC 構造への構造変化を荷重の除去後も維持させる作用があること、また、テクスチャのない Al 基板と比較して転位密度を上昇させる作用があることがわかった。これにより、Al 基板表面の硬度が上昇し、移着が抑制されるために摩擦の低減につながると考えられる。

文献

- 1) 木村:日本の工業技術の進展とトライボロジー, トライボロジスト, 61, 10 (2016) 653-658.
- 2) K. Okabayashi & M. Kawamoto: Wear of high strength wrought aluminum alloys, J. Jpn. Inst. Light Met., 22, 4 (1972) 259-268.
- 3) 足立ら:表面テクスチャによる MoDTC 油中における Al 合金を用いたトライボシステムの摩擦制御, トライボロジー会議 2018 春 東京 (2018) 198-199.
- 4) P. M. Larsen, S. Schmidt & J. Schiøtz: Robust structural identification via polyhedral template matching, Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 24 (2016) 55007.
- 5) A. Stukowski & K. Albe: Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data, Model. Simul. Mat. Sci. Eng., 13 (2010) 085001.

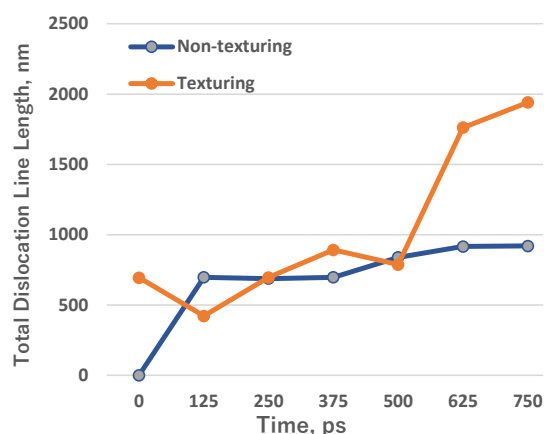


Fig. 3 Change in total dislocation line length. The orange and blue lines show the dislocation line length in the texturing Al substrate and non-texturing Al substrate.