

# 多結晶アルミニウム/鉄の摩擦に対する表面テクスチャリングの影響 :反応分子動力学シミュレーションによる解析

## Effects of Surface Texturing on Polycrystal Aluminium/Iron Friction

### : A Reactive Molecular Dynamics Simulation Analysis

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<sup>1)</sup>。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、結果的に高摩擦・摩耗量の増加といった機械部品の損傷を招く要因となりうる。環境保全のために過酷な環境下での摺動が余儀なくされる中、金属材料表面に施されるテクスチャリングは MoDTC や ZnDTP などの摩擦調整剤との反応を促進する効果が注目され盛んに研究されている<sup>2)</sup>。その一方で、表面テクスチャが摩擦された際にもたらされるナノスケールの構造変化については未だ未解明の部分が多い。我々は、分子動力学（MD）シミュレーションを用いて、単結晶の Fe/Al 摺動界面において Al 基板上の表面テクスチャが Al 基板における転位の密度を上昇させ、加工硬化を促進していること、また表面が酸化された Al 基板では転位が消失しにくくなることから、さらに転位密度が上昇し硬化することを明らかにした<sup>3)</sup>。しかし、実際の金属材料は多結晶構造を有しているが、多結晶構造を有する基板にテクスチャが与える影響は未だ明確ではない。そこで、本研究では、多結晶の Fe/Al 摺動界面の分子動力学（MD）シミュレーションを行い、多結晶基板の表面テクスチャリングが摩擦に及ぼす影響について解析した。

## 2. 計算方法

本研究で用いた多結晶構造はオープンソースツール Atomsk<sup>4)</sup> によるボロノイ分割法を用いて作成した。Figure 1 は、テクスチャ構造を有する多結晶 Al 基板のスナップショットである。緑色部は FCC 構造をなす原子であり、白色部は結晶粒界に相当する原子である。Al 結晶粒の平均粒径は約 3 nm である。MD シミュレーションは当研究室で開発した分子動力学シミュレーションソフト Laich を用い、原子間相互作用は ReaxFF<sup>5)</sup>を用いた。Figure 2 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多結晶の半球状 Fe を配置し、下部に Fig. 1 で示した Al 基板を配置している。Al 基板が動かないように、Fig.2 中で Fix と示した基板最下部の緑色の領域の原子は固定し、Thermostat と示した紫色の領域の原子には温度制御のために Langevin 熱浴を用いた。また、Fe 球の上部の Press/Slide と示した青色の領域は移動・加圧のための固定領域とした。MD シミュレーションでは、はじめに Fe 球を -z 方向に 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 0.1 GPa の圧力をかけながら 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 500 ps 間行った。Fe と Al の結晶構造の同定には Polyhedral Template Matching<sup>6)</sup>を用いた。また、多結晶の基板と単結晶の基板の差異を考察するため、単結晶の Al 基板のシミュレーションも同様に実施し比較した。

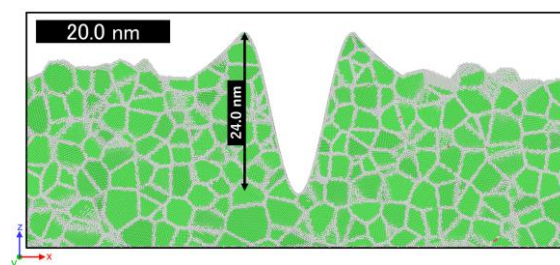


Fig. 1 Textured polycrystalline aluminum substrates. Green atoms indicate FCC structure. White atoms indicate grain boundaries

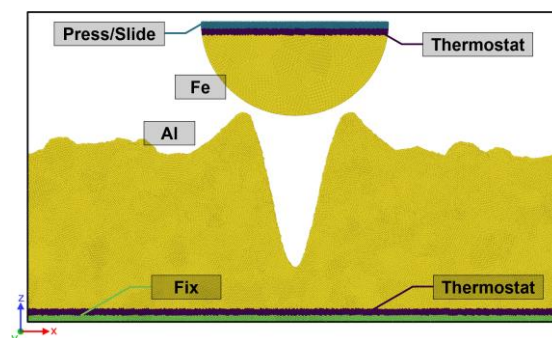


Fig. 2 Snapshot of simulation model at initial state

### 3. 結果及びその考察

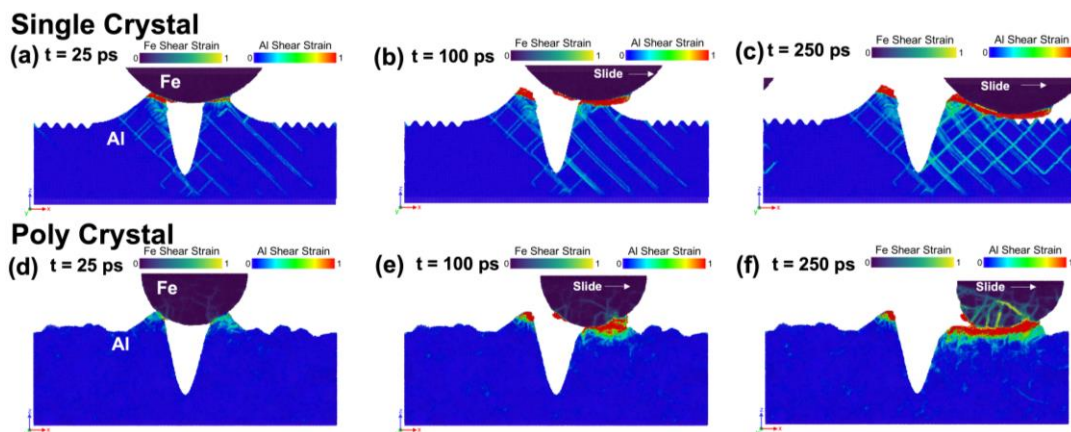


Fig. 3 Atomic strain snapshots of the single crystal of Fe and Al during sliding at a time period of: (a) 25 ps, (b) 100 ps, (c) 250 ps. Atomic strain snapshots of the poly crystal of Fe and Al during sliding at a time period of: (d) 25 ps, (e) 100 ps, (f) 250 ps.

Figure 3 は Fe/Al 摩擦界面における歪みを可視化した図である。Fig.3(a) ~ (c)は単結晶の, Fig.3(d) ~ (f) は多結晶の Fe/Al 摩擦界面を示している。Fe 球と Al 基板の歪みはそれぞれ異なるカースキームで表示している。単結晶の Fe/Al 摩擦計算では Fe 球の移動によって, Al 基板に積層欠陥が進展した(Fig. 3(a)). Fe 球の摺動が進行すると Al 基板上のテクスチャの凸部の一部を変形させ(Fig. 3(b)), 異なる方位の積層欠陥が生じ積層欠陥同士の交錯が生じた(Fig. 3(c)). 一方で, 多結晶の Fe/Al 摩擦計算では積層欠陥の進展が生じず, Al 基板のテクスチャの結晶粒界に沿って歪みが生じた(Fig. 3(d)). Fe 球の摺動が進行すると Al 基板のテクスチャ凸部が結晶粒界から変形した。さらに摺動が進行した Fig. 3(f)では, Al 基板表面で塑性変形が生じている。Figure 4 は塑性変形した部分の拡大図であり, 結晶構造。Fig. 4(a)では結晶粒界が存在し, 複数の結晶粒が存在していることが確認できる。しかし, 摺動後の Fig. 4(b)では結晶粒界の一部が消失し, 一つの粗大化した結晶粒が形成されていることが確認された。これは摩擦の作用による結晶粒成長が生じたためと考えられる。先行研究では摩擦やナノインデンテーションによって多結晶金属において変形誘起の結晶粒成長が生じたことが報告されており<sup>7, 8)</sup>, 実験の結果と一致したシミュレーションの結果が得られている。以上のことから, 単結晶の摩擦界面と多結晶の摩擦界面では積層欠陥の進展や塑性変形に差があり, 多結晶基板では結晶粒成長が生じるなど, 摩擦挙動が異なることがわかった。

### 4. 結言

分子動力学シミュレーションによって, テクスチャを有する単結晶および多結晶の Fe/Al 界面の摺動計算を行った。単結晶の Fe/Al 界面の摺動では積層欠陥が Al 基板に進展していくことが確認された。一方で, 多結晶の Fe/Al 界面の摺動では積層欠陥の進展はなく, Al 基板表面の塑性変形が生じた。また, 多結晶 Al 基板表面では摩擦の作用による結晶粒成長が確認され, 単結晶と多結晶の摩擦界面では摩擦挙動に差異があることがわかった。

### 文献

- 1) 木村, トライボロジスト, 61, 10 (2016) 653-658.
- 2) 伊原ら, トライボロジー会議 2021 秋 松江 予稿集 (2021) E23.
- 3) 川浦ら, トライボロジー会議 2022 春 東京 予稿集 (2022) E15.
- 4) Pierre Hirel, Comput. Phys. Comm. 197 (2015) 212-219.
- 5) Adri C. T. van Duin, *et al.*, J. Phys. Chem. A, 105 (2001) 9396-9409.
- 6) P. M. Larsen, *et al.*, Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 24 (2016) 55007.
- 7) Y. Liao, *et al.*, Philos Mag Lett, 90, 3 (201) 219-223.
- 8) M. Jin, *et al.*, Acta Mater., 52 (2004) 5381-5387.

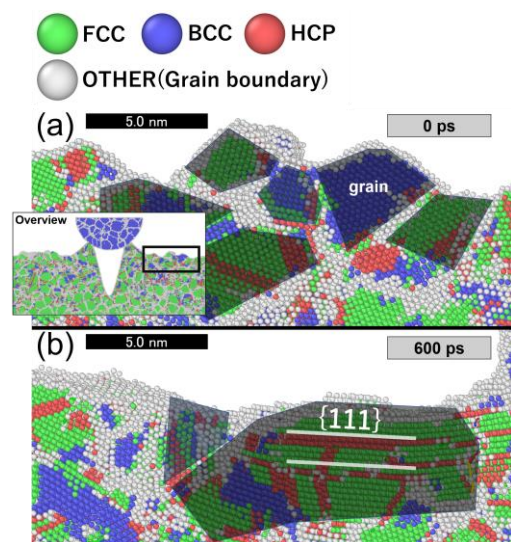


Fig. 4 Crystal structure snapshots of the polycrystal of Al substrate at a time period of: (a) 0 ps, (b) 600 ps. Green, blue and red atoms indicate FCC, BCC, HCP structure. White atoms indicate grain boundaries.