

レーザーテクスチャリングによるアルミニウムの凝着抑制効果: 反応分子動力学シミュレーションによる解析

Effects of Suppressing Adhesion by Laser Texturing on Aluminum:
A Reactive Molecular Dynamics Simulation Analysis

東北大・金研（学）*川浦 正之 東北大・金研（正）浅野 優太 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*, Yuta Asano*, 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、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、アルミニウム材料表面に施されるマイクロ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研究されている²⁾。その一方で、マイクロテクスチャが摩擦された際には、基板の表面において原子スケールの結晶構造変化が生じ、摩擦特性に影響があると考えられるが、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、ナノスケールのテクスチャを設けた Fe/Al 摺動界面について単結晶の Al 基板の場合と、多結晶の Al 基板の場合を比較することによって、テクスチャが摺動されることで、単結晶においては基板中の転位密度を上昇させ硬度を上昇させること、多結晶においてはナノサイズの結晶粒の粒成長を促進する作用があり摩擦を低減する効果があることを明らかにした³⁾。しかし、これらの計算では純 Al 基板を用いていたが、実際のアルミニウム基板では結晶粒界に沿って酸素が拡散浸透し、結晶粒界が酸化する。そのため Fe/Al 摺動において結晶粒界の酸素が摩擦に影響があると考えられるが、その作用は明確でない。本研究では、酸化した Al 基板と Fe 球の摺動界面の MD シミュレーションを行い、摩擦および凝着に及ぼす影響について考察した。

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 Atomsk⁴⁾ 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酸化した Al 基板のスナップショットである。青色部は Al 原子であり赤色部は O 原子である。結晶粒界が酸化した Al 基板をモデルリングするために表面および結晶粒界の Al 原子を O 原子に置換して作成した。

Figure 2 は計算モデル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単結晶の半円筒状の Fe 球を配置し、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 热浴を用いた。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計算を行った。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計算を 500 ps 間行った。また、酸化した Al 基板と純 Al 基板における差異を考察するため、Fe 球と純 Al 基板の摺動計算も同様に実施し比較した。MD シミュレーションは当研究室で開発した計算ソフト Laich を用い、原子間相互作用は ReaxFF⁵⁾を用いた。

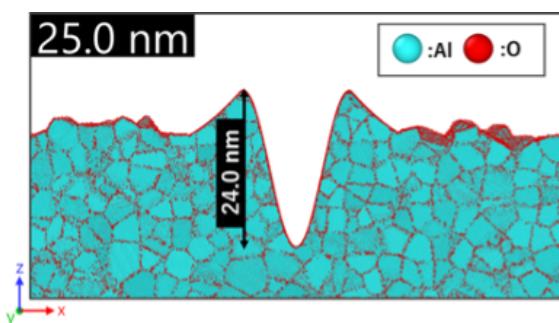


Fig. 1 Textured oxidized aluminum substrates.

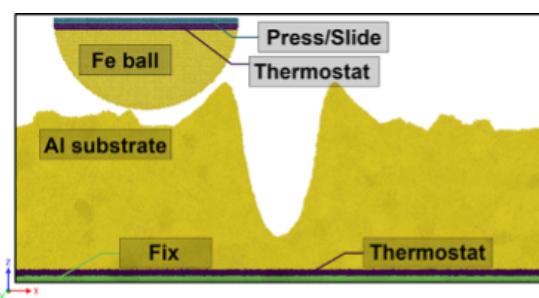


Fig. 2 Snapshot of simulation model at initial state.

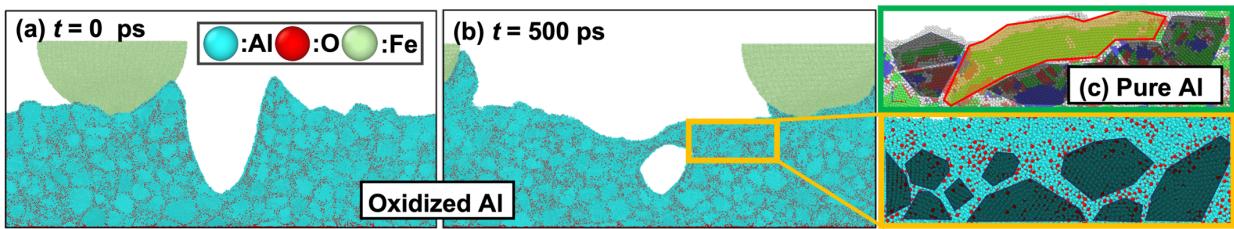


Fig. 3 Snapshots of sliding simulation (a) and (b) Fe ball/ oxidized Al substrate, (c) Fe ball/ pure Al substrate.

3. 結果及びその考察

Figure 3(a)(b)は酸化したAl基板とFe球の摺動計算のスナップショットである。Fe球によってAl基板上の小さい凹凸が平坦化されており、テクスチャの凸部が変形して凹部へと倒れこむ様子が確認できる(Fig. 3(b))。純Al基板の場合では摺動によって、Al結晶粒の結晶方位が配向し結晶粒成長が生じたが(Fig. 3(c)), 酸化したAl基板ではFe球による摺動の後も結晶方位の変化は確認されなかった(Fig. 3(d))。

Figure 4は摩擦界面のせん断歪みを可視化した図である。純Al基板ではテクスチャを起点として、歪みが結晶粒界に沿って進展しており、基板全体に歪みが生じていることがわかる(Fig. 4(a))。一方で、酸化したAl基板では結晶粒界に沿った歪みの進展が純Al基板と比較して少なく基板表面にひずみが集中している(Fig. 4(b))。これは酸化による硬度の上昇が歪みを抑制しているためと考えられる。

Figure 5は純Al基板および酸化したAl基板上を摺動するFe球に働く摩擦抵抗力を示している。酸化したAl基板上を摺動するFe球の方が純Al基板の場合と比較して常に大きな力を受けていることがわかる。これは酸化したAl基板ではテクスチャの凸部を変形させる際の抵抗が大きいことが影響していると考えられ、硬度が高い材料においては凹がある場合、摩擦の初期段階においては高い摩擦力が生じることを示唆している。

以上のことから、酸化されたAl基板ではFe球の摺動によって表面の平坦化がなされるが、純Al基板の場合とは異なり結晶方位の配向の変化が生じないこと、また歪みが結晶粒界によって進展せず表面に歪みが集中することがわかった。さらに硬度が上昇する酸化したAl基板においてはテクスチャによって摩擦抵抗力が大きくなると考えられ、摩擦初期においては高い摩擦力が生じることが示唆された。

4. 結言

MDシミュレーションによって、Fe球と純Al基板および酸化したAl基板の摺動計算を行った。その結果、酸化したAl基板では結晶方位の配向の変化および歪みの進展が生じにくいうことがわかった。また、テクスチャがある場合、硬度の上昇によって摩擦抵抗力が大きくなると考えられ、摩擦初期においては高い摩擦力が生じることが示唆された。

文献

- 1) 木村：日本における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.
- 2) 伊原・足立：レーザー処理アルミ合金を用いたエンジン油中摩擦システムにおける照射エネルギー密度による摩擦制御，トライボロジー会議 2021 秋 松江 予稿集 (2021) E23.
- 3) 川浦・陳・大谷・尾澤・足立・久保：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，トライボロジー会議 2022 秋 福井 予稿集 (2022) F30.
- 4) P. Hirel: Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files, Comput. Phys. Commun. 197 (2015) 212.
- 5) A. C. T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant & W. A. Goddard III: ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons, J. Phys. Chem. A, 105 (2001) 9396.

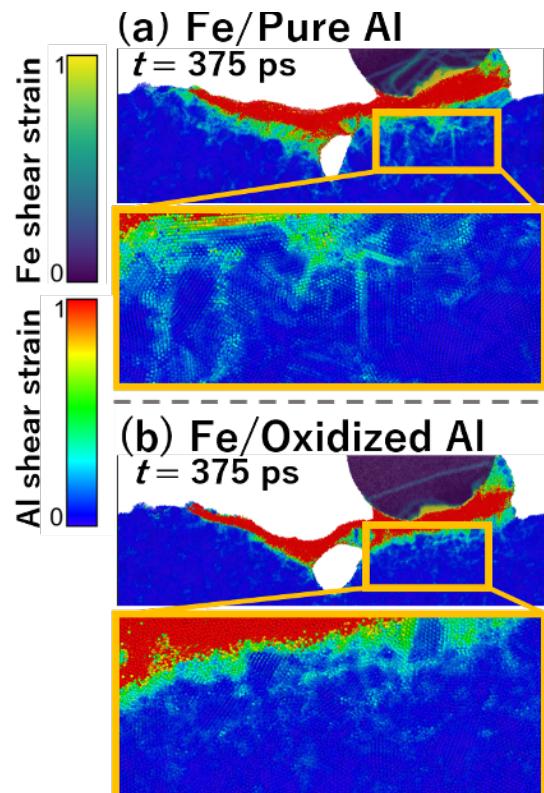


Fig. 4 Atomic shear strain snapshots of Fe/Pure Al and Fe/oxidized Al tribopairs.

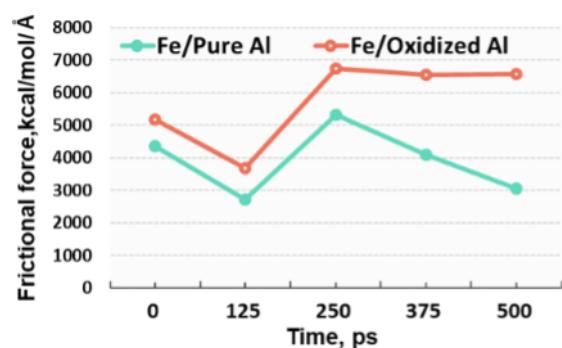


Fig. 5 Frictional force of Fe/Pure Al and Fe/oxidized Al tribopairs.