

固体表面における塑性流動の分子シミュレーション

Molecular dynamics simulation of plastic flow at solid surface

兵庫県立大・大学院情報科学（正）*岡本 隆一 （正）鷲津 仁志

Ryuichi Okamoto, Hitoshi Washizu

University of Hyogo

1. はじめに

固体間の摩擦(乾燥摩擦)において、摺動面の塑性破壊・流動の解明は、摩擦・摩耗特性を理解する上で欠かすことができない。これを原子・分子レベルから理解するため、本研究では反応力場を用いた分子動力学(MD)シミュレーションによって、ダイヤモンドライクカーボン(DLC)-ジルコニア摺動における塑性破壊・流動を解析する。このような解析は、乾燥摩擦の理解のみならず、摺動 MD シミュレーションにおけるモデル設定の妥当性に関しても示唆を与えるものである。

2. 計算方法

化学反応(結合ボンドの形成・破断)を古典 MD の形式内で扱える力場として van Duin らによって開発された ReaxFF がある[1]。この方法では、原子同士の距離などに依存する bond order parameter という変数を導入することで化学反応を扱う。古典 MD で計算可能であるため、量子 MD に比較してはるかに多粒子・長時間のシミュレーションを行うことが可能となる。我々は ReaxFF が組み込まれている LAMMPS シミュレータを用いてシミュレーションを行った。Figure 1 に示したように、初期条件としてシミュレーションボックス内に DLC とジルコニア結晶を配置した。xy 方向には周期境界条件を課した。DLC 上方およびジルコニアの下方を固定し、ジルコニアの固定部分に面圧をかけて押し付けると同時に y 方向に一定速度でスライドさせることで摺動を行った。

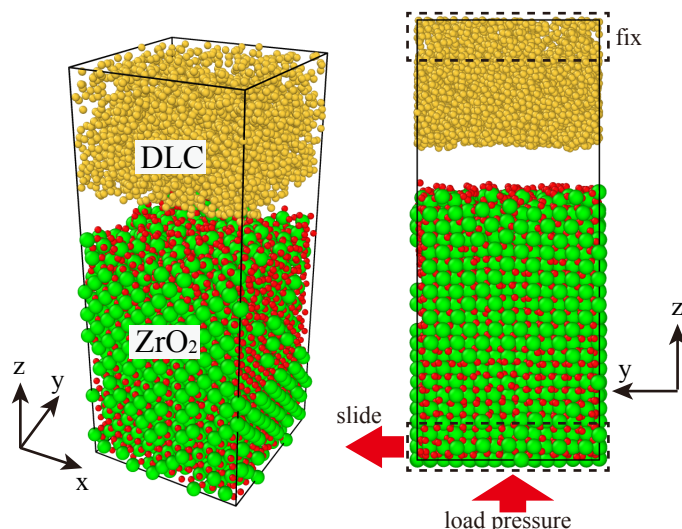


Figure 1. 摺動シミュレーションの初期配置

3. 結果

摺動を行うと、徐々にジルコニア表面が塑性破壊を起こし、流動化し始める。この流動領域は時間と共に徐々に拡大していく。この流動化を定量化するために、摺動方向(y 方向)の原子速度を時間間隔 Δt で平均する。すなわち各原子の速度 y 成分 v_y に対して、

$$\overline{v_y}(t) = \Delta t^{-1} \int_t^{t+\Delta t} v_y(\tau) d\tau = \frac{y(t+\Delta t) - y(t)}{\Delta t}$$

を計算する。ただし、ジルコニアの原子は(流動化が無くても)平均的に y 方向へ摺動速度で動くので、摺動速度分を差し引く。平均化する理由は、激しいランダムな振動を平均化して消去し(より遅い)流動部分を観るためである。本研究では $\Delta t = 10\text{ps}$ とした。Figure 2 には摺動速度を 20m/s とした場合の、時刻 1ns と 3ns における $\overline{v_y}$ を色で表示した。摺動面は $z=60\text{\AA}$ 付近にあり、図の青く表示されている辺りが流動化したジルコニアを示す。時間が経つにつれて流動化領域が広がっていることがわかる。さらに深さ方向の変化を観やすくために、各 z に対して厚さ 1.8Å の厚さの xy 平面に並行なディスク領域を考え、その中に含まれる原子に関して $\overline{v_y}$ の平均値 $\langle \overline{v_y} \rangle_z$ を計算した。これをプロットしたも

のが Fig. 2a,b の各グラフである。摺動面からジルコニアの深さ方向に向けて速度勾配が生じており、その領域が時間と共に大きくなっていることがわかる。

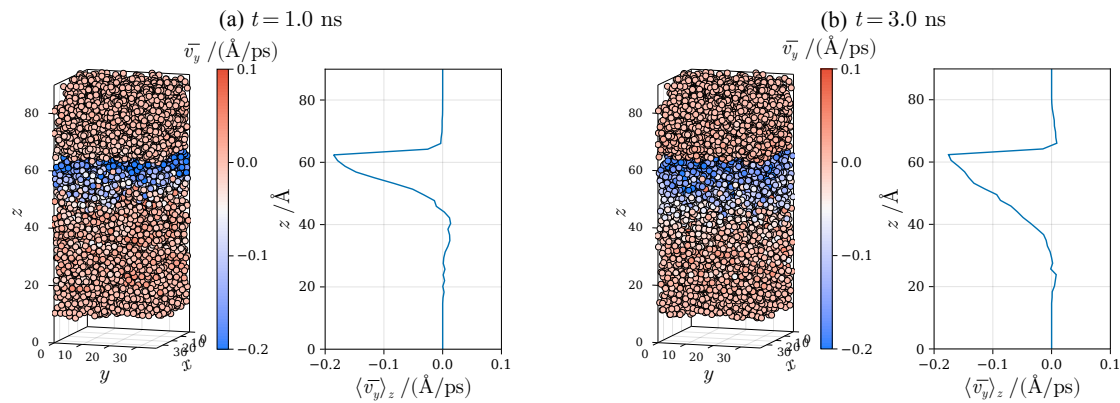


Figure 2. 流動領域の定量化. (a) $t=1$ ns, (b) $t=3$ ns.

このような流動領域の拡大は、永遠に続くわけではない。Figure 3a には摺動速度 20 m/s、面圧は 4.5 GPa および 7.5 GPa とした場合の、 \bar{v}_y の全粒子に関する平均値 $\langle \bar{v}_y \rangle$ を時間の関数としてプロットした。3.5 ns 付近までは $\langle \bar{v}_y \rangle$ は徐々に小さくなっていく(流動領域が拡大)が、それ以降はほぼ(振動を除き)変化がなくなっている。Figure 3b には 2 ps 毎に移動平均をとった単位面積あたりの摩擦力(ずり応力)をプロットした。こちらも $\langle \bar{v}_y \rangle$ と同様に 3.5 ns 以降はほぼ一定値の周りを振動していることがわかる。

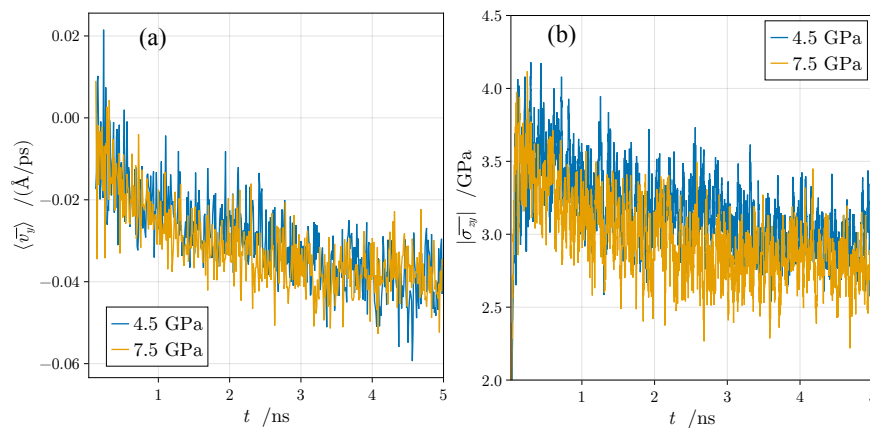


Figure 3. (a) 塑性流動の時間変化. (b) 摩擦力の時間変化(2 ps 毎の移動平均).

これらは単純化すれば以下のように理解できる。流動化したジルコニアを単純にニュートン流体と仮定し、その粘性率を η とする。流動領域の厚みを L 、摺動速度を V 、とするとずり応力は $\sigma_{zy} = \eta V / L$ となる。このずり応力がジルコニア結晶のずり降伏応力 σ_{yield} より大きければ流動化が進む。流動領域の厚み L が大きくなるほどずり応力 σ_{zy} は小さくなる。実際、Fig. 3b でも流動領域が広がるにつれてずり応力は小さくなっている。したがって、ある最大値 L_{max} に達した段階で $\sigma_{\text{yield}} = \eta V / L_{\text{max}}$ となり、流動領域拡大は止まる。この考察から、摺動速度が大きいほど最終的な流動領域は大きくなることも予想される。実は、この考察は完全には正しく無く、最終的なずり応力 σ_{zy} の平均値がジルコニア結晶の降伏応力 σ_{yield} よりも小さいところで流動化の拡大が止まることが計算によりわかっている。講演ではこの点の詳細、また摺動速度依存性、アモントンクーロン則との関係などについてお話する予定である。

文献

- 1) A. C. T. van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, and W. A. Goddard: ReaxFFs, J. Phys. Chem. A, 2001, 105(41), 9396.