

bcc鉄の摩擦特性に関する分子動力学解析:表面凹凸の影響

○学 寺田 稜(岐阜大) 指導教員 正 内藤 圭史(岐阜大) 指導教員 正 屋代 如月(岐阜大)

1. 緒言

クーロンの法則で、摩擦力が接触面積に無関係で押しつけ力に比例することは、マイクロレベルでは表面が平らでなく押しつけ力によって真の接触面積が増えるためと解釈されている。しかしながら、依然としてミクロスケールでの摩擦のメカニズムは不明である。摩擦メカニズムへのマイクロレベルのアプローチとして分子動力学(Molecular Dynamics, MD)による検討も行われており、潤滑剤の効果などがシミュレーションされている⁽¹⁾。一方我々のグループでは、局所変形抵抗を表す物理量である原子弾性剛性係数(Atomic Elastic Stiffness, AES)の正值性から変形メカニズムを統一的に議論することに取り組んできた⁽²⁾。本研究では、トライボロジーへの適用として表面凹凸を与えた bcc 鉄のブロックをせん断させる分子動力学シミュレーションを行い、AES の視点からそのメカニズムを議論する。

2. シミュレーション条件

bcc 鉄の原子間相互作用には FS ポテンシャルを用いた。Fig.1 に示すように、上下2つの平板状の単結晶ブロックを x, z 周期境界下で配置し、表面に正弦波の凸凹をつけた系を解析対象とした。凸凹をつける前の上下の板の大きさは $100a \times 50a \times 6a$ (a は bcc 鉄の格子長さ 0.2867nm) である。波形の周期は $2\pi, 4\pi, 6\pi$ とし、接触部の面積と種々変えた検討を行うため、同位相の表面凹凸を避けて下部分は x 方向に $10a$ シフトさせた。表面凹凸の先端位置が FS ポテンシャルパラメータのカットオフ距離である 0.3570nm 離れた状態で 10000fs の緩和計算を行った後、スケーリングによる応力制御⁽³⁾により 30000fs かけて系の応力が指定の値になるまで圧着し緩和した。圧縮応力は $5\text{GPa}, 2\text{GPa}, 1\text{GPa}$ の3通りとした。その後、毎ステップ $5 \times 10^{-5}\text{nm}$ で上下板を互いに逆向きにシフトさせることでせん断シミュレーションを行った。ただし、中央ではシフト量が0となるように中央付近の原子には傾斜させた変位を与えている。温度は 0.1K とし、速度スケーリングにより制御した。応力一ひずみ関係を得るとともに 1000fs 毎に記録した原子配置データから原子応力 σ_{ij}^a と原子弾性係数 C_{ijkl}^a を求め、原子弾性剛性係数 B_{ij}^a (6×6 のマトリックス表記)を算出した⁽²⁾。

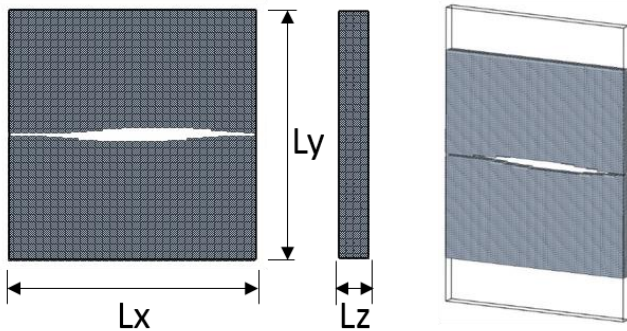


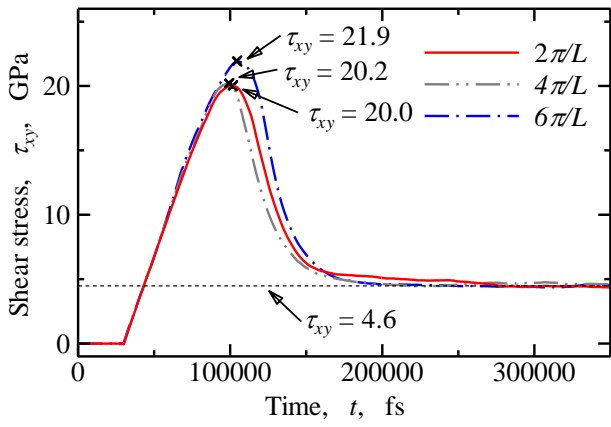
Fig.1 Simulation model

3. シミュレーション結果および考察

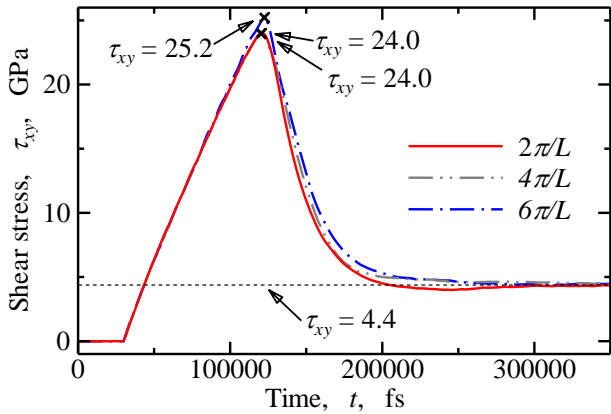
圧縮応力 5GPa および 1GPa でのせん断応力-時間曲線を次ページの Fig.2 に示す。せん断応力はいずれもほぼ線形に上昇し、 5GPa の場合は 100000fs 近傍、 1GPa の場合は 120000fs 近傍でピークを示した。この点は最大静止摩擦力に対応する。この値はいずれの波形周期においても 5GPa よりも 1GPa のほうが大きくなっており、クーロン摩擦と矛盾した結果となっている。これは負荷した応力が極めて高く、母材そのものの変形が通常の摩擦とは異なっているためと考える。同一圧縮応力で比較すると周期 2π と 4π にはほとんど差がなく、 6π は比較的高い値を示した。ピーク後応力は低下し、一定の値となった(動摩擦力)。動摩擦力はいずれの場合もほぼ同じの値に収束した。 B_{ij}^a の行列式 $\det B_{ij}^a$ が負となった原子数の変化を、同じく 5GPa と 1GPa について次のページの Fig.3 に示す。いずれもせん断開始時は負の原子は0であり、 5GPa のときは 50000fs 近傍から、 1GPa の場合は 80000fs 近傍から増加し始めた。 5GPa の $2\pi, 4\pi$ は増加がなだらかであるが、 6π は 75000fs の辺りから急激に増加した。 1GPa ではいずれも急激な増加を示した。周期 2π の表面凹凸について、圧縮応力 5GPa と 1GPa 下での最大静止摩擦直前の原子配置変化を次のページの Fig.4 に示す。上段が 5GPa 、下段が 1GPa であり、 $\det B_{ij}^a$ が負の原子を赤色(濃色)で着色している。Fig.4(c)と(f)がせん断応力の最大になる直前の様子である。表面接触した部分は $\det B_{ij}^a$ が負の原子が出現するのは共通していたが、 5GPa のときは接触面付近に集団的な負の原子が発生し、縞状に内部へ伝ばした。一方、 1GPa では図(e)に示すように接触面から離れた内部に突如集団的な領域が発生し、せん断方向とは逆向きに伝ばした。

参考文献

- (1)X. Zheng, et al. *Tribo. Int.* **67**, 217-221 (2013)
- (2)屋代他, 機論, **81**(829), 15-00271 (2015).
- (3)屋代他, 機論, **73A**(725), 66-72 (2007).

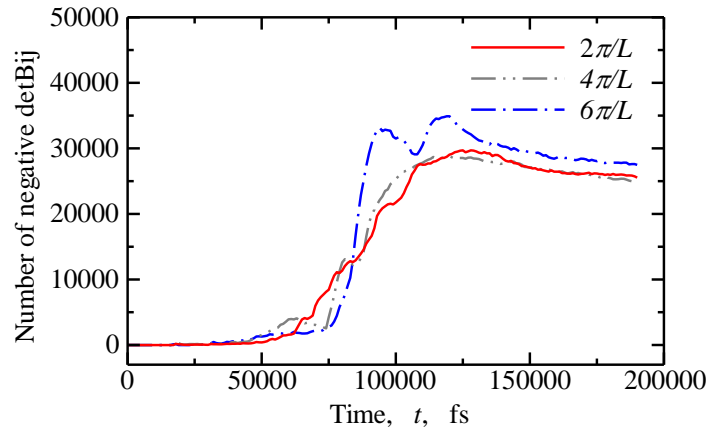


(a)5GPa pressure

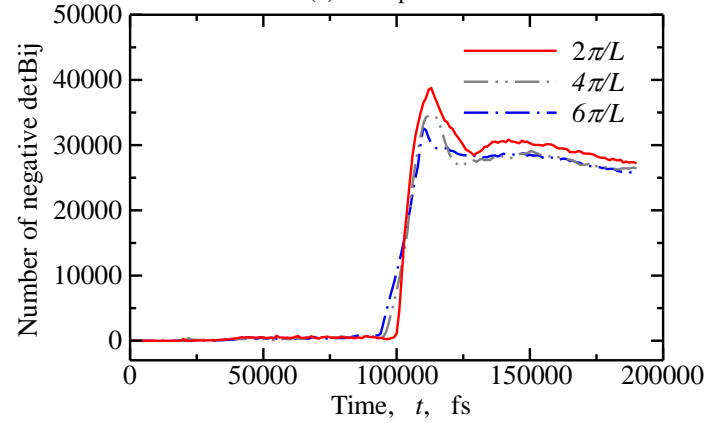


(b)1GPa pressure

Fig.2 Change in shear stress under pressure



(a)5GPa pressure



(b)1GPa pressure

Fig.3 Change in number of atoms of $\det B_{ij}^{\alpha} < 0$

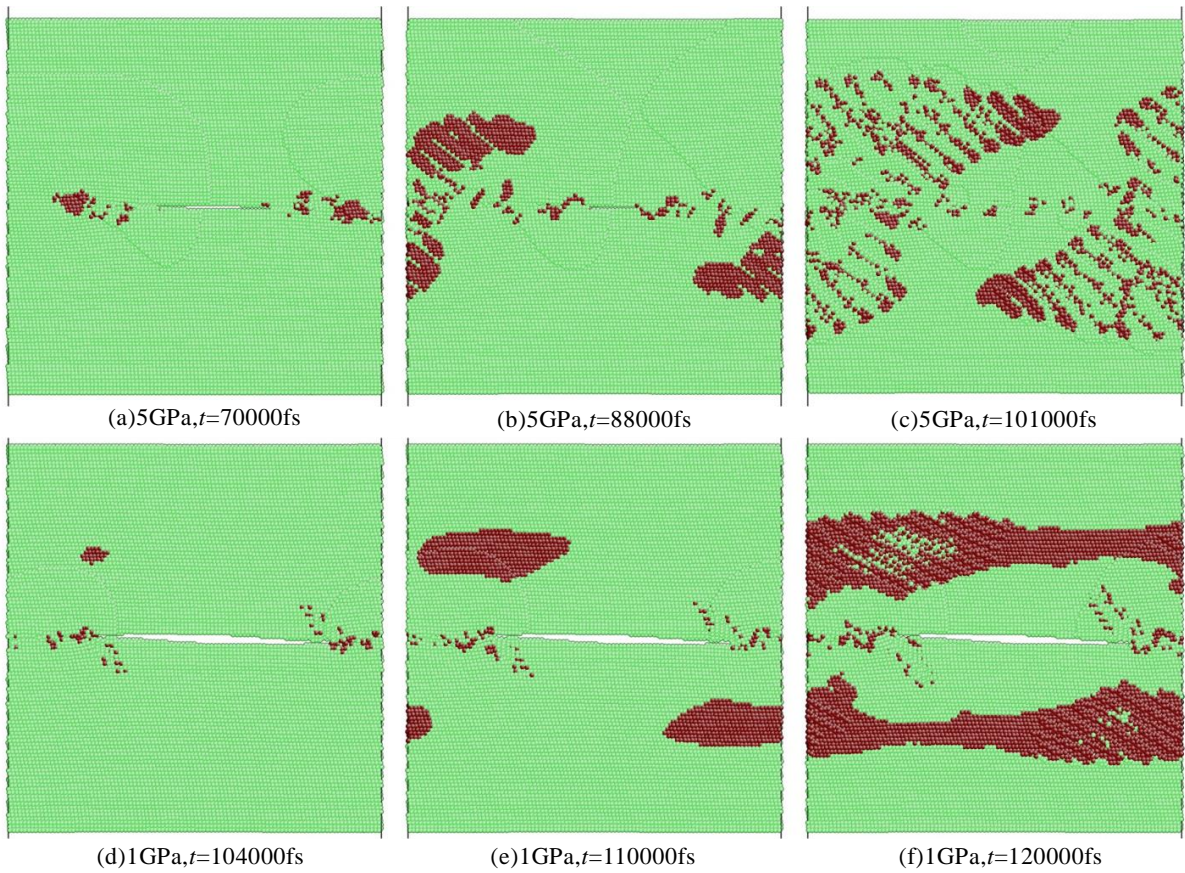


Fig.4 State of Negative $\det B_{ij}^{\alpha}$