表面層原子挙動の分子動力学シミュレーション*

大村悦二**

Molecular Dynamics Simulation on Atomic Behavior in Surface Layer /
Etsuji OHMURA

Key words: computer simulation, molecular dynamics, friction, wear, micro-tribology

1. はじめに

通常の摩擦・摩耗現象は、接触する固体の質量や荷重に依存し、界面に存在する吸着分子層や流体が潤滑効果をもたらす。しかし、比較的清浄な表面を持つ固体同士が接触する場合は、固体間の相互作用、とりわけ原子間力が大きくかわると考えられる。軽質量、軽荷重の場合、特にその影響が顕著といえる。超精密、あるいは極限状態における摩擦・摩耗、潤滑の諸現象は、原子レベルでの解明を必要としている。近年、STMやAFMなどにより表面の原子状態が観測できるようになって、摩擦・摩耗に伴う表面の構造変化がある程度理解できるようになった。とはいえ、観察できるのはあくまで極表面層である。内部原子の構造変化までを観察することは、現在のところ不可能である。原子オーダーでのコンピュータシミュレーションは、超固体潤滑を探る上で有用な研究手段として注目される。

本稿は、分子動力学法を用いて摩擦・摩耗現象をシミュレーションし、表面付近の原子挙動と微視的応力状態を明らかにすることを目的として行った研究の一部を紹介するものである。ここでは、完全剛体のスライダによる摩擦・摩耗過程における金属の表面近傍の原子挙動をシミュレーションした結果について述べる^{1)~3)}。

2. シミュレーション

試料として銅単結晶、スライダに完全剛体のダイヤモンド

ドを想定する。3次元空間の原子間力を考慮した平面ひずみ問題を取り扱い⁴⁾、全原子についてNewtonの運動方程式を解く。ここで、2原子間にはMorseポテンシャルを仮定し、原子間力はその勾配で与える。試料の対象領域には、表面方向に1層当たり200個の原子を深さ方向に100層、計20000個の原子を配置する。領域の下辺境界は温度指定、その外側は完全剛体とする。最小ポテンシャルエネルギーの原理と熱膨張を考慮して、まず、300 Kにおける原子配列モデルを作る。このとき、原子の速度がMaxwellの速度分布に従い、熱平衡状態にあることを確認している⁵⁾。

シミュレーションでは、スライダを表面に垂直に押し込んだ後水平に移動させるが、スライダが銅2原子分移動するごとに、300 Kに制御した2原子列を領域の左端に挿入し、右端の2原子列を除去して、スライダが常に試料中央位置にあるようにする。

シミュレーション結果は、原子配列と原子の応力状態⁵⁾を評価したものをグレースケールで表示する。そして、滑り面や刃状転位の発生と移動に伴う材料の弾性変形、弾性回復、塑性変形機構、摩耗粉生成過程などを明らかにする。スライダにかかる反作用力、摩擦係数なども評価する。

ところで、刃状転位に注目して、座標系と応力成分を図1のように定義すると、刃状転位近傍の応力 $\sigma_{\xi\xi}$ 、 $\sigma_{\eta\eta}$ は、弾性論によれば、以下の式で求められる⁶⁾。

$$\sigma_{\xi\xi} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\eta(3\xi^2 + \eta^2)}{(\xi^2 + \eta^2)^2} \quad (1)$$

$$\sigma_{\eta\eta} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\eta(\xi^2 - \eta^2)}{(\xi^2 + \eta^2)^2} \quad (2)$$

ここで、 G は剛性率、 ν はポアソン比、 b はバーガースベクトルの大きさである。そこで、刃状転位近傍の原子の応力と、式(1)、(2)で得られる応力分布との比較も試みる。

* 原稿受付 平成6年10月25日
** 正会員 茨城大学工学部(日立市中成沢町4-12-1)
1981年大阪大学大学院工学研究科後期課程単位取得退学。同年大阪大学助手。1991年茨城大学工学部助教授。現在に至る。工学博士。主な研究分野は、精密工学分野における物理現象の理論解析、コンピュータシミュレーション

図1 刃状転位近傍における応力成分の定義

3. シミュレーション結果

先端半径約 5.2 nm のスライダを表面から約 0.1 nm および 0.4 nm 押し込んだ後、速度 50 m/s で水平に滑らせたときのシミュレーション結果を示す。

3.1 摩擦過程

図2は、スライダを約 0.1 nm 押し込んだ後、水平に滑らせたときの、スライダにかかる反作用力の水平成分 F_x と垂直成分 F_z 、およびそれらの比で定義される摩擦係数の時間的変化を示す。この場合、押し込み深さが小さく、接触点近傍の原子配列と応力状態に顕著な変化は生じていない。図2において、反作用力はほぼ周期性をもって変動し、特に F_x は、スティックスリップ現象を示している。スリップするとき F_z はほぼ最大となっている。別のシミュレーション²⁾で、より顕著なスティックスリップ現象を得ている。摩擦係数は、 F_z の零点近傍で大きな値を示すが、それを除けばある程度周期的に変動している。図2の範囲内での平均摩擦係数は 1.39 である。

3.2 摩耗過程

3.2.1 摩耗過程の原子挙動

スライダを約 0.4 nm 押し込んだ後、水平に滑らせたときの原子配列と移動量を図3に示す。

押し込み時の図3(a)では、スライダ直下にわずかに深さ方向の原子移動が見られるが、弾性変形の範囲である。移動距離 3 nm の図3(b)では、スライダ直下の原子が下方方向に押し込まれ、左斜め下方方向に2本の滑り面が生成している。それらの先端には刃状転位が存在している。移動距離 10 nm の図3(c)では、スライダの前面に原子の堆積した塊（ここでは摩耗粉と呼ぶ）が生成しつつある。摩耗粉は、水平方向の滑りと、その先端の斜め上方への滑りにより主に生成し、原子が堆積することで成長する。堀切川⁷⁾は、半球状の硬質突起の摩擦によって生じる金属のアプレシブ摩耗形態を、cutting, wedge formation, ploughing に大別できるとしているが、ここでの摩耗形態は wedge formation 型に近い。スライダの通過した領域の下方に

図2 スライダを約 0.1 nm 押し込んだ後、水平に滑らせたときにスライダにかかる反作用力と摩擦係数

は、水平方向や「V」型に交差した滑り面が存在し、微視的な塑性変形領域が生成している。図3(d)は移動距離 25 nm の場合であるが、摩耗粉の成長が著しく、その直下に斜め前方への滑り面の生成が多く見られる。図4は、図3(d)における原子の深さ方向の垂直応力状態を示す。刃状転位には 25 GPa 程度の圧縮応力が作用している。

スライダにかかる反作用力と摩擦係数の変化を図5に示す。反作用力 F_z はひずみエネルギーが蓄積すると上昇し、滑り面の生成や刃状転位の移動によってひずみエネルギーが緩和されると減少する。反作用力 F_x は、摩耗粉が堆積するにつれてゆるやかに上昇していく。摩擦係数も、反作用力 F_x と同様に、ゆるやかに増加する傾向を示す。図5には、摩擦過程との比較のため、移動距離 0~25 nm における反作用力と摩擦係数の平均値も示した。

3.2.2 刃状転位近傍の応力状態

図6は、図3(b)に四角で示した刃状転位近傍の原子の応力 $\sigma_{\xi\xi}$, $\sigma_{\eta\eta}$ と、式(1), (2)から求めた応力分布を示している。ここで、 $G=45.472$ GPa, $\nu=0.34$, $b=0.25$ nm とした。

図6において、 $\sigma_{\xi\xi}$ は、弾性論、シミュレーションとも $\eta > 0$ で圧縮、 $\eta < 0$ で引張り傾向を示している。刃状転位の原子は滑り面方向に 25 GPa 程度の圧縮状態にあり、滑り面をはさんで反対側の原子は、滑り面方向に 20 GPa 程度の引張り状態になっていることが、シミュレーション結果よりわかる。式(1)では、転位芯の応力値は求められない。 $\sigma_{\eta\eta}$ については、シミュレーション結果では圧縮領域

図3 スライダを約0.4 nm 押し込んだ後、水平に滑らせたときの原子配列と初期配置からの移動量（グレースケールは移動量を示す）

図4 図3(d)における原子の深さ方向の垂直応力（○は圧縮，□は引張り，グレースケールは応力値を示す）

図5 スライダを約0.4 nm 押し込んだ後、水平に滑らせたときにスライダにかかる反作用力と摩擦係数

と引張り領域の境界をはっきり定めることはできないが、大まかな応力分布形態は弾性論とよく似た傾向にある。

応力値は、シミュレーション結果の方が弾性論よりも5倍程度大きい。これは、前者では原子1個1個について瞬間的な値を求めているのに対して、後者はいわばそれらの時間的、空間的平均値として評価されるためである。また、弾性論では静的な刃状転位近傍の応力状態を評価するが、ここでの刃状転位は動的状態にあることも相違の原因

(a-1) シミュレーション $\sigma_{\xi\xi}$ (a-2) シミュレーション $\sigma_{\eta\eta}$ (b-1) 弾性論 $\sigma_{\xi\xi}$ (b-2) 弾性論 $\sigma_{\eta\eta}$

図6 図3(b)に四角で示した刃状転位近傍の原子の応力 $\sigma_{\xi\xi}$, $\sigma_{\eta\eta}$ と、式(1),(2)から求めた応力分布 (シミュレーション結果のグレースケールと表示方法は図4に同じ)

として考えられる。実際、シミュレーションでは、転位芯から見て $\xi > 0$ の領域 (刃状転位が移動してきた側) で、その反対側の領域よりも相対的に $|\sigma_{\xi\xi}|$ が大きい。

4. おわりに

完全剛体のスライダによる摩擦・摩耗過程における金属の表面近傍の原子挙動を、分子動力学シミュレーションした結果を例示した。はじめにも述べたように、STMやAFMなどによって摩擦・摩耗過程における表面原子の構造変化が評価できるようになったとはいえ、内部原子の構造変化までをその場観察することは現在のところ不可能である。それを補う意味で、コンピュータシミュレーションによって、現象をある程度推測し、評価することができることを紹介させていただいた。拙稿が少しでも各位の参考

になるところがあれば幸甚である。

最後に、本稿をまとめるにあたりご協力いただいた共同研究者、清水淳氏 (茨城大学大学院学生) に謝意を表す。

参考文献

- 1) 大村悦二, 清水 淳, 佐名浩二, 江田 弘: マイクロトライボロジーの分子動力学シミュレーション——第2報, 摩擦・摩耗過程の原子挙動, トライボロジー会議予稿集, (1993) 81.
- 2) 大村悦二: マイクロ接触——分子動力学シミュレーション, 機械の研究, **46**, 1 (1994) 174.
- 3) 清水 淳, 大村悦二, 江田 弘: 砥粒摩擦・摩耗過程における原子面創成シミュレーション, 1994年度砥粒加工学会学術講演会講演論文集, (1994) 73 (砥粒加工学会誌, **39** (1995) に掲載予定).
- 4) 大村悦二, 清水 淳, 江田 弘: 単粒ダイヤモンド砥粒による銅単結晶の研削シミュレーション——分子動力学の適用と原子挙動, 砥粒加工学会誌, **38**, 5 (1994) 28.
- 5) 大村悦二, 福本一郎: レーザ照射による金属の溶融蒸発シミュレーション, 高温学会誌, **20**, 6 (1994) 228.
- 6) 鈴木秀次: 転位論入門, アグネ, (1967) 63.
- 7) 堀切川一男: トライボロジーの世界, 数理科学, 364 (1993) 10.