

凝着摩耗素過程 MD シミュレーションの試み —— 真実接触部における摩耗素子生成過程の再現 ——

長谷 亜蘭*, 三科 博司**

* 埼玉工業大学工学部機械工学科

**千葉大学大学院 工学研究科

alan_hase@sit.ac.jp

Attempt to Simulate Elementary Process of Adhesive Wear by MD : Reproduction of Wear Elements Generation Process on Real Contact Point

Alan HASE* and Hiroshi MISHINA**

* Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Saitama Institute of Technology

**Graduate School of Engineering, Chiba University

Abstract

Establishing a wear theory is one of the greatest challenges in the field of tribology because it is very complex and a lot of problems exist in wear phenomena. That is one of the main reasons why an equation to predict the amount of wear has not been established yet. Adhesive wear is one of main wear mechanisms, and leads to the failure and destruction of a machine such as seizure. That is why, in adhesive wear, it is very important to predict the amount of wear in designing and developing a sliding material. In the elementary process of adhesive wear, the generation of wear elements in real contact area is the inception of the wear process. So, examining wear process in atomic scale is necessary because wear elements are generated in nano-scale. However, investigating experiments like this in an atomic level requires special equipment and environment. This report discusses the generation process of wear elements simulated using a molecular dynamics method. The simulation was performed with several paired metals. It was found that there is a correlation between the simulated results and the actual experimental results except for the iron to iron metal combination.

Key Words : Tribology, Molecular Dynamics Simulation, Wear Mechanism,
Asperity Contact, Wear Element

1. 諸言

トライボロジーいわゆる摩擦・摩耗・潤滑に関する研究分野において、摩耗理論の確立は未だ達成されていない課題の一つである。摩擦・摩耗現象の素過程は、ナノスケールの微細な変形や破壊現象を伴い非常に複雑であるため、その変形・破壊メカニズムが解明されていないのが現状である。筆者らは、摩耗の素過程を考慮した摩耗式の検討を行っているが^{1,2)}、不確定因子が残されており、完全な摩耗式と呼ぶことはできない。現在、筆者らは以下の摩耗式を提案している³⁾。

$$V = \frac{1}{3} \left(\frac{n}{\lambda} \right) \left(\frac{b}{a} \right)^3 \frac{P \cdot l}{p_m} \quad (1)$$

ここで、 V は摩耗体積、 a および b はそれぞれ真実接触部（ジャンクション）および摩耗素子の平均半径、 P は垂直荷重、 l は摩擦距離、 p_m は軟らかい方の材料硬さ、 λ は吸着に関する係数である。そして、 n がジャンクション内で生成する摩耗素子の数であり、凝着力に依存する。摩耗素子とは、凝着摩耗の素過程で生じる素粒子であり、これは後で詳しく説明する。この凝着力と摩耗素子生成数の比例関係を実験的に導き出しているが⁴⁾、この比例定数に関して詳しく検討する必要がある。この際、まず凝着力を求める必要があるが、金属間凝着力を簡単に測定できる手法がない。現在、筆者らは走査型プローブ顕微鏡を用いて金属間凝着力を測定する手法を検討している⁵⁾。また、摩耗素子の生成数を実験評価するのにも多くの労力を必要とするのが現状である。

凝着摩耗（くっ付いて千切れる摩耗）は主な摩耗機構の一つであり、機械システムを焼け付きのような致命的な損傷・破壊に至らせることもある^{6,7)}。また、摩擦条件や環境によって摩耗速度が異なるシビア摩耗やマイルド摩耗といった摩耗形態が変化する場合も多くみられる^{8,9)}。そのため、特に凝着摩耗における摩耗量の予測は、しゅう動材料の設計開発において大変重要である。凝着摩耗の素過程は、表面突起同士が接触・変形して形成される真実接触部における、

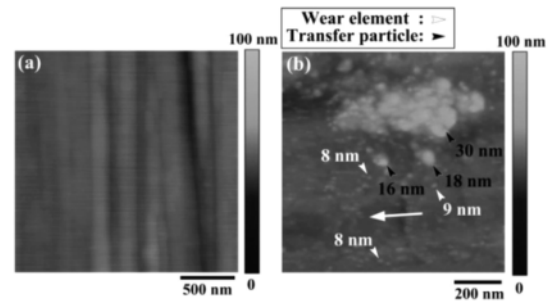


Fig. 1 Atomic force microscope images of the sliding surface: (a) before rubbing; (b) after rubbing (Fe/Fe, dry, $v=120 \mu\text{m/s}$, $P=0.1 \text{ N}$). Arrow shows the direction of sliding. The values indicate the height of the particle¹²⁾.

材料同士の凝着・破断で生じる摩耗素子（凝着摩耗における摩耗粒子を構成する素粒子）の生成に始まる^{4,10,11)}。図1は、その摩耗素子（および移着粒子）を原子間力顕微鏡で観察した例である。図中の白い矢印で示すように、摩耗素子はナノスケールで生じるため、原子レベルでの調査・検討が必要不可欠となる。しかし、このような原子レベルの実験調査は、特殊な実験装置および実験環境が必要である。

そこで本研究では、分子動力学（MD, Molecular Dynamics）シミュレーションを用いて、凝着摩耗における摩耗素子生成過程の模擬を試みた。分子動力学は、マクロな性質や系の起こす現象の特徴を調べることを目的としており、巨視的かつ微視的な摩擦・摩耗現象の挙動を解析するのに有効と考える。本稿では、今回のシミュレーションの妥当性、シミュレーション実験結果と過去に行った摩擦・摩耗実験結果との比較について述べる。

2. 解析方法

本研究では、分子動力学法（MD法：二体の原子間に働く相互作用のポテンシャルエネルギーを設定し、そのニュートン方程式を解くことによって、原子集合体として三次元モデル化し、シミュレーションを行う解析手法）を用い、凝着摩耗素過程のシミュレーション解析を行った。図2に示すように、材料表面には多かれ少なかれ表面粗さが存在し、その表面突起の相互作用によって摩擦・摩耗が生じる。本研究では、

図2における (i) から (ii) に示される真実接触部での摩耗素子生成過程をシミュレーションによって再現させる。

本研究では、市販の MD シミュレーションソフトウェア (Materials Explorer 5.0) を使用した。図3は、その MD シミュレーション実行画面の一例である。まず、金属原子平面上に表面突起を想定したピラミッド状の原子集団を作成し、上下相互の突起同士が接触するように設定する。ここでは、すべてのシミュレーション解析において、下面は Fe の金属原子を配列させた固定面とした。そして、上面は Fe, Co, Ni, Al, Cu, Ag の6種類の金属原子を用い、それぞれの

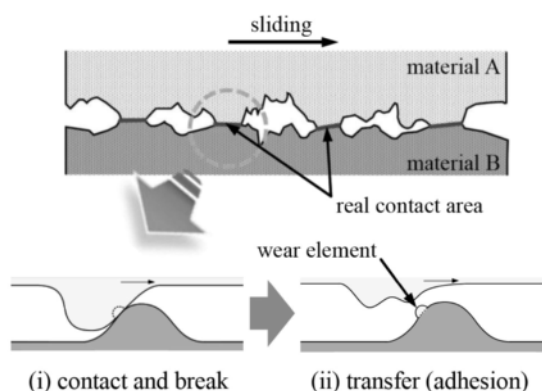


Fig. 2 Model for the generation of wear elements on real contact area.



Fig. 3 Simulation image of the elementary process of friction and wear with MD method (Materials Explorer 5.0).

Table 1 Conditions for MD simulation

Software	Material Explorer 5.0
Shape of asperity	quadrangular pyramid
Number of atoms in an asperity	70 atoms (400 atoms in a part of simulation for Fe, Al, Ag)
Velocity of asperity	5.0 Å/ps
Distance between surfaces	15 Å
Overlap rate of asperities	50%

結晶構造で配列させた移動面とした。上面の金属原子面の移動速度は、計算時間を考慮して、すべて5.0 Å/ps に設定した。また、原子間ポテンシャルは原子が最も安定するものにそれぞれ設定している。

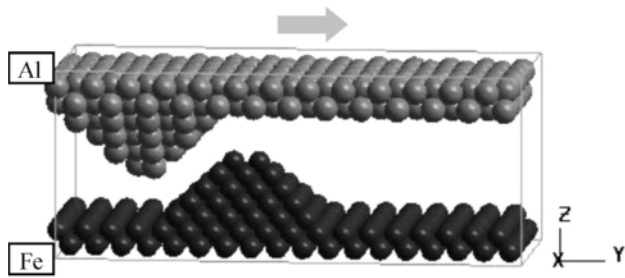
以上の設定条件の下、純金属同士[X(Fe, Co, Ni, Al, Cu, Ag)/Fe]の組み合わせに関して、突起原子数を約70個として MD シミュレーション解析を行った。さらに、突起原子数を約400個に増やして MD シミュレーション解析を行い、一部の組み合わせ[X(Fe, Al, Ag)/Fe]で検討している。表1に本研究の MD シミュレーション条件をまとめた。

3. MD シミュレーション結果および考察

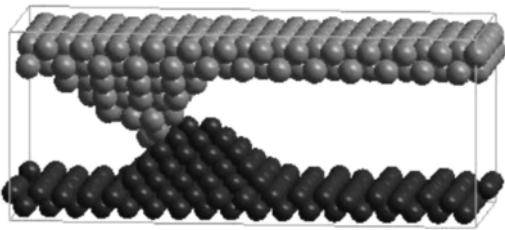
3.1. 凝着摩耗素過程の再現

図4は、Al/Feにおける MD シミュレーション解析結果である。これより、(ii) 表面突起同士の接触から (iii) 変形, (iv) 凝着, (v) 破断までの一連の過程を確認することができる。材料の組み合わせによって凝着の程度は異なるが、図4でみられる一連の過程が他の組み合わせでも確認された。したがって、図2に示したような真実接触部における凝着摩耗素過程を MD シミュレーションで再現することができたといえる。

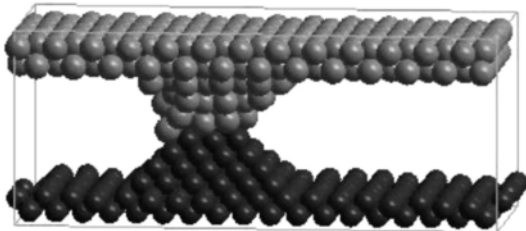
図5~9は、その他の金属原子の組み合わせ Fe/Fe, Co/Fe, Ni/Fe, Cu/Fe, Ag/Fe によるシミュレーション解析結果 (いずれも摩擦後の状態) である。また図10は、原子1個が移着した Ni/Fe のシミュレーション解析結果原子の移動軌跡を示している。図6~8の Co/Fe, Ni/



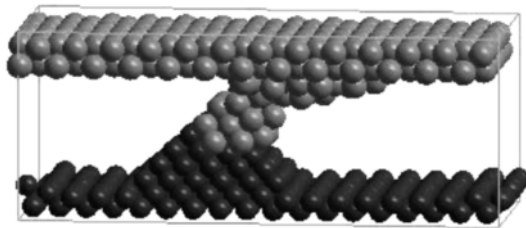
(i) 0 step (before sliding)



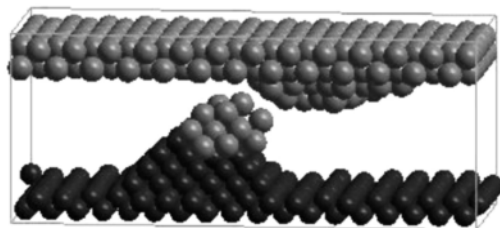
(ii) 160 steps (sliding distance : 4 Å)



(iii) 500 steps (sliding distance : 12.5 Å)



(vi) 900 steps (sliding distance : 22.5 Å)



(v) 1100 steps (sliding distance : 27.5 Å)

Fig. 4 MD simulation images for the sliding of aluminum to iron.

Fe, Cu/Fe に注目すると、表面突起同士の真実接触部で上面突起部の原子が下面突起部に集団移着（凝着して移動）した様子が確認できる。図5のFe/Feに関しては、上下双方向への原子移動があった。この移動に関しては、原子のナ

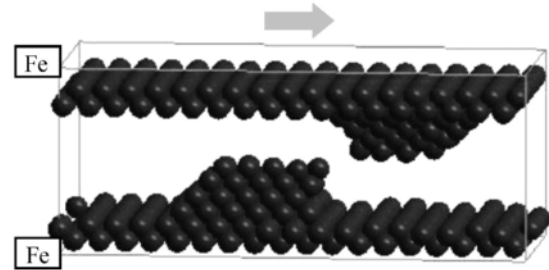


Fig. 5 MD simulation image for the sliding of iron to iron.

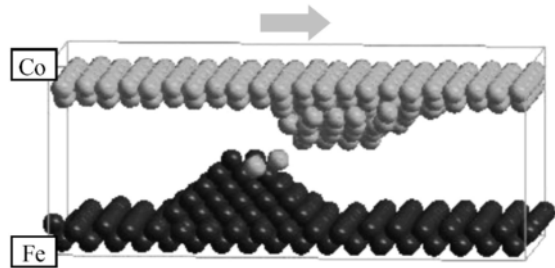


Fig. 6 MD simulation image for the sliding of cobalt to iron.

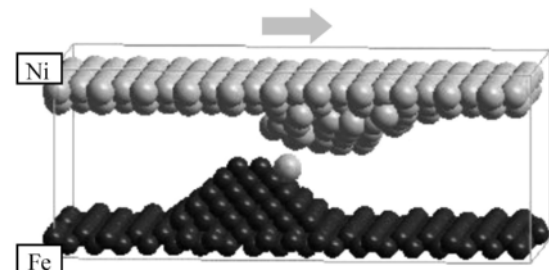


Fig. 7 MD simulation image for the sliding of nickel to iron.

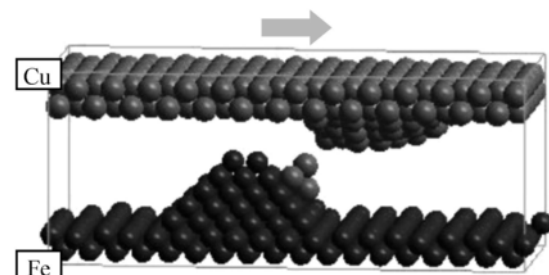


Fig. 8 MD simulation image for the sliding of copper to iron.

ンバリングから相互の移着を識別した。図9のAg/Feでは、原子の移着は生じなかった。よって、シミュレーション解析後に表面突起に移着していた原子の数は、Al/Fe：17個、Fe/Fe：5個（下面へ3個、上面へ2個）、Cu/Fe：4個、Co/Fe：2個、Ni/Fe：1個、Ag/Fe：0個と評価できる。

つぎに、Fe/Al、Fe/Fe、Ag/Feに関して、突起原子数を約400個に増やしたMDシミュレーション解析の結果を図11～13に示す。このスケールアップしたシミュレーションにおいても、移着した原子数はAl/Fe：49個、Fe/Fe：10個（下面へ6個、上面へ4個）、Ag/Fe：0個となり、突起原子数が少ないシミュレーション解析結果と同じ傾向を示していた。

凝着摩耗の素過程で生じる摩耗素子の大きさは材料の違いに関係なく直径十数nm程度であり、原子数十個が一つの摩耗素子として集団移着するものと考えられている⁴⁾。計算時間の都合上、今回のシミュレーションでは表面突起の形状・寸法、結晶粒等を条件に考慮していないため、それが生成過程の違いに影響したと思われる。

3.2. 摩耗素子生成量の実験結果との比較

ここで、今回のシミュレーションで移着した原子数を摩耗素子生成量と考え、実際の実験結果と比較を行う。図14は、Buckleyにより計測された純鉄に対する凝着力¹³⁾と摩耗素子生成量の関係をプロットした結果である。摩耗素子生成量に関しては、実際の純金属を摩擦して得られた実験結果⁴⁾（第1数値軸、プロット点：●、近似直線：点線）と本研究のMDシミュレーションから得られた結果（第2数値軸、プロット点：○、近似直線：一点鎖線）から、2本の近似直線を引いている。これより、シミュレーションにおけるFe/Feのデータのずれが大きいものの摩耗素子生成量は凝着力と比例関係にあることが確認でき、実験結果と同様の相関を示している。Fe/Feでは上下両方向への相互移着が確認され、他の金属原子の組み合わせに比べて相互作用は大きく、そのため表面突起の変形も大きかった。しかし、Fe/Feのシミュレ-

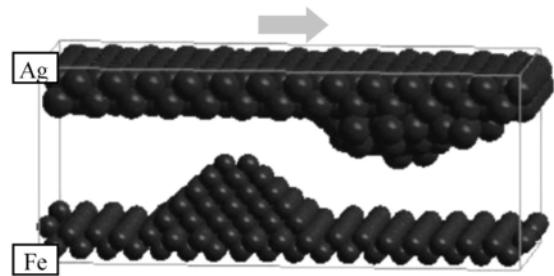


Fig. 9 MD simulation image for the sliding of silver to iron.

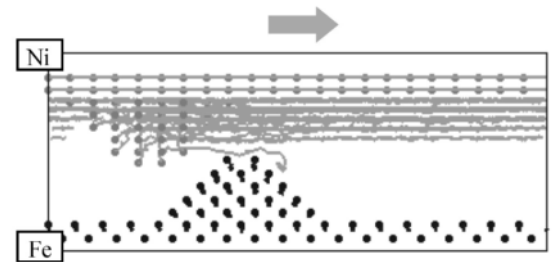


Fig. 10 MD simulation image for the sliding of aluminum to iron.

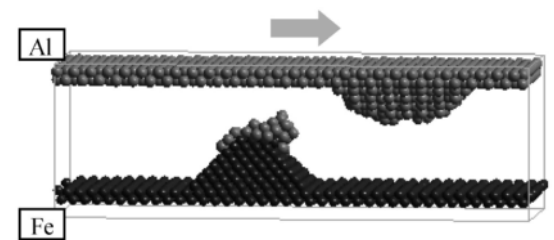


Fig. 11 MD simulation image for the sliding of silver to iron (400 atoms).

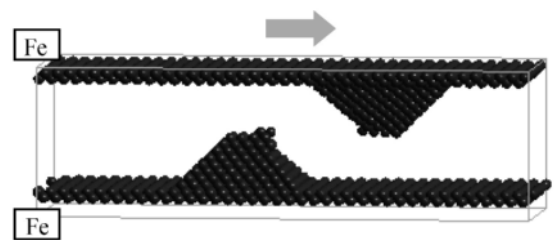


Fig. 12 MD simulation image for the sliding of iron to iron (400 atoms).

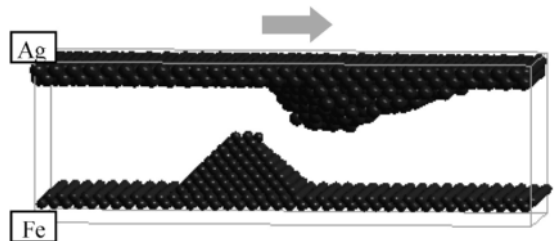


Fig. 13 MD simulation image for the sliding of silver to iron (400 atoms).

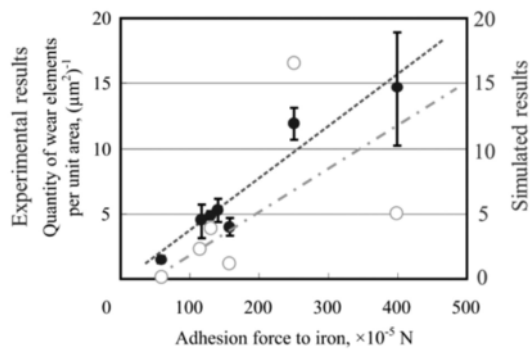


Fig. 14 The relationship between the quantity of wear elements and the adhesion force for the experimental data and the simulated data.

シミュレーション解析結果においては、実際の摩擦・摩耗実験で得られる結果とは異なり、摩耗素子生成量は少なかった。これは、摩耗素子の生成に関わる諸現象（表面突起の塑性変形に伴うすべりの生成など）の再現が不十分であることが原因と考える。

以上の結果から、真実接触部における凝着摩耗素過程をMDシミュレーションにより再現させることができ、実際の実験結果との相関も確認できたといえる。しかし、今回は表面突起の形状・寸法、結晶粒、酸化膜や摩擦雰囲気などを考慮していないため、より正確な現象を再現させるための課題も残されている。

4. 結 言

金属原子 Fe に対して 6 種類の金属原子 (Fe, Co, Ni, Al, Cu, Ag) に関して、表面突起同士を衝突させる MD シミュレーションを行い、真実接触部における凝着摩耗素過程を再現することができた。このとき、突起原子数が 70 個と約 400 個の場合に関して、移着する原子数は同様の傾向を示した。また、シミュレーション解析の結果、Fe/Fe の移着量は少なかったが、移着する原子数が実際の摩擦・摩耗実験の結果と同様に組み合わせた金属間の凝着力との相関関係を確認することができた。

謝 辞

最後に、本研究の遂行にあたりシミュレーション解析補助いただいた当時埼玉工業大学工

学部機械工学科の学生であった河野 堯氏、萩原大貴氏に謝意を表します。

文 献

- 1) 長谷亜蘭, 三科博司: 摩耗素子の生成を考慮した摩耗理論の検討, 第 7 回埼玉工業大学若手研究フォーラム論文集, (2009) pp. 58-62.
- 2) 三科博司, 長谷亜蘭: 摩耗素過程から導かれる凝着摩耗の摩耗式, トライボロジー会議予稿集 東京 2011-5, (2011) pp.53-54.
- 3) H. Mishina, A. Hase: Wear Equation for Adhesive Wear Established through Elementary Process of Wear, *Wear*, **308** (2013) pp.186-192.
- 4) A. Hase, H. Mishina: Wear Elements Generated in the Elementary Process of Wear, *Tribology International*, **42** (2009) pp.1684-1690.
- 5) 市本大和, 小林英樹, 新井里美, 大森達夫, 三科博司, 長谷亜蘭: AFM-FC による金属間凝着力の測定, トライボロジー会議予稿集 福岡 2013-10, (2013) A3.
- 6) 三科博司: 軸・円筒間の摩擦面における焼けつき機構—乾燥面と潤滑剤が存在する面の焼けつき現象の比較—, *トライボロジスト*, **31**, **11** (1986) pp.821-826.
- 7) A. Hase, H. Mishina, M. Wada: Recognition of Wear State for Early Detection of Seizure in Slide Bearing Using Acoustic Emission Technique, *Proc. of the World Tribology Congress 2013, Torino*, (2013) No.367.
- 8) K. Hiratsuka, K. Muramoto, Role of Wear Particles in Severe-Mild Wear Transition, *Wear*, **259** (2005) pp.467-476.
- 9) A. Hase, M. Wada, H. Mishina: Acoustic Emission Signals and Wear Phenomena on Severe-Mild Wear Transition, *Tribology Online*, **3**, **5** (2008) pp.298-303.
- 10) T. Sasada and S. Norose: The Formation and Growth of Wear Particles through

- Mutual Material Transfer, Proc. 1975 JSLE-ASLE Intern. Lubri. Conf., Elsevier (1976) pp.82-91.
- 11) A. Hase, H. Mishina : Study on the Elementary Process of Adhesive Wear: Influence Factors for the Generation of Wear Elements and the Formation of Transfer Particles, Proc. of the International Tribology ASIATRIB Congress 2010, Perth, (2010) p.39.
- 12) A. Hase, H. Mishina : Study on the Elementary Process of Adhesive Wear: Generation of Wear Elements and Their Growth into Transfer Particles, Proc. of World Tribology Congress 2009, Kyoto, (2009) p.225.
- 13) D.H. Buckley : Adhesion of Single Crystal Metals to Clean Iron (011) Surface Studied by Emission Spectroscopy, NASA Technical Note, D-7018 (1971) pp.1-22.