

多体原子間相互作用下における超潤滑安定性の解明

平野, 元久 / HIRANO, Motohisa

(雑誌名 / Journal or Publication Title)

科学研究費助成事業 研究成果報告書

(開始ページ / Start Page)

1

(終了ページ / End Page)

5

(発行年 / Year)

2016-06

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 28 年 6 月 13 日現在

機関番号：32675

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2013～2015

課題番号：25390009

研究課題名(和文)多体原子間相互作用下における超潤滑安定性の解明

研究課題名(英文)Evaluation of Stability of superlubricity under operation of many-body atomic potential

研究代表者

平野 元久 (HIRANO, Motohisa)

法政大学・理工学部・教授

研究者番号：50362174

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：原子スケール摩擦系において、摩擦転移の発生条件を解明した。タングステンとシリコンの現実系で摩擦転移を調べるために多体効果を考慮した高精度原子間ポテンシャルを作成した。この原子レベル摩擦系では、摩擦領域と超潤滑領域が、すべり速度と表面間相互作用力の大きさに依存して特徴的な領域に現れる。原子レベル摩擦系の動力学解析により、摩擦条件に強く依存して摩擦系のエネルギー散逸速度が大きく異なることを解明し、このエネルギー散逸機構を、周期倍分岐やカオスによって制御可能であることを示した。摩擦振動のスペクトル分析とポアンカレマップ分析により、摩擦振動のストレンジアトラクタ発現の可能性を示した。

研究成果の概要(英文)：The friction properties of the one-dimensional atomistic models have been investigated in terms of friction transition and nonlinear atomic vibrations. The friction model depends on the interfacial interaction and initial sliding velocity. Two regimes, which are friction and superlubricity, are found. Friction regime has two sub-areas. It has been found that the boundaries between Friction area and Superlubricity area look like irregular. The mechanism for the appearance of the multi peaks is complex problem; it will need to elaborately examine vibration mode signals in terms of non-linear system analysis. A scenario for the transition Superlubricity (S) mode to Friction (F) could be described in terms of several non-linear vibrations such as subharmonic oscillation, summed-and-differential harmonic oscillation, superharmonic oscillation, internal resonance phenomena.

研究分野：機械工学

キーワード：摩擦 原子論 超潤滑 トライボロジー エネルギー散逸機構 カオス 非線形振動

1. 研究開始当初の背景

清浄な結晶表面同士のすべり摩擦は接触表面の原子配列に強く依存し、2つの表面の原子間隔比が無理数となる不整合接触では、摩擦力がゼロとなる超潤滑が現実的なパラメータ領域で現れることが理論的に示された[1-3]。この理論予測を受けて、世界の研究機関で超潤滑の実証実験が実施され[4,5]、摩擦力が極めて小さくなる実験が報告されてきた。近年、微細加工技術を活用して原子スケールを超えたマイクロメータスケールの極小摩擦系も報告されている[6]。一方、これまでの理論では原子間相互作用として結晶内の電子分布を平均化する平均場近似が用いられてきた。本研究は、従来研究とは対照的に、原子間の局所的な環境に依存して原子間相互作用に影響する多体効果を考慮することより、金属や半導体の原子間結合を精密に評価し、摩擦と超潤滑の発生機構や超潤滑安定性を解明する点で他の関連研究とは大きく異なる。

2. 研究の目的

超潤滑状態が現実的な摩擦条件のパラメータ領域、例えば、接触面が含む不純物原子・格子欠陥などの結晶の乱れや、有限のすべり速度等に対して安定に存在するかどうかを理論・実験の両面から調べ、超潤滑の安定性の条件を明らかにし摩擦と超潤滑の原子論と摩擦におけるエネルギー散逸機構を解明する。

3. 研究の方法

(1) 摩擦相図の作成

図1は、解析に用いた1次元の摩擦原子論モデルを示す。本モデルでは、構成原子の運動エネルギーを考慮している。このモデルは単純であり、摩擦の物理を調べるのに適している。上の固体として1次元の原子鎖が三角関数で表される周期ポテンシャル上におかれ、1次元鎖の構成原子は、隣の原子と線形ばねの調和ポテンシャルによって相互作用するとともに、下の周期ポテンシャルからも力を受けてすべり運動する。この摩擦モデルは2, 3次元モデルへの拡張が可能である。

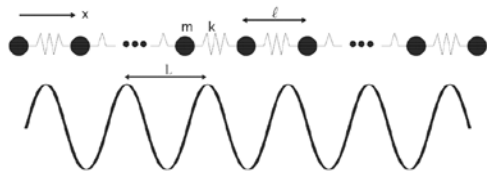


図1 1次元摩擦原子論モデル

本研究では、摩擦1次元モデルのすべり摩擦特性を分子動力学法によって調べる。この摩擦シミュレーションでは、モデルの構成原

子の初期配置を決めた後、全原子に初速度を与えて上の固体をすべらせ、その後のすべり運動を固体の重心位置と重心のすべり速度の経時変化を求めて調べる。表1は計算条件を示す。

表1: 計算条件 (値は無次元量)

構成原子数	$10^3 \sim 10^4$
時間ステップ Δt	0.001
計算時間 ($=\Delta t \times \text{くり返し数}$)	$10^4 \sim 10^5$
初速度	0.1~1.0
表面間相互作用 f	0.01~0.14

本摩擦シミュレーションでは、上の固体に初速度を与えてすべらせる前に、予め原子の平衡位置を注意深く求めておく平衡化处理が重要である。平衡化处理では、まず全構成原子にマックスウェル・ボルツマン分布の初速度を与え、その後、しだいに系の温度を十分にゆっくりと下げることにより平衡状態の安定な原子配列を求める。

(2) 摩擦転移解析

不整合接触面では、全エネルギーはすべり距離 Q に対して不変となり摩擦力がゼロとなる、表面間相互作用(凝着力)がある閾値以上に大きくなると不整合接触面に局所的に整合構造が現れる構造相転移が生じ、原子は局所的にピン止めされエネルギー散逸が生じて摩擦が発生する。このように、不整合接触面では凝着力の増加に伴って摩擦力がゼロから有限へと転ずる「摩擦転移」が現れる。

不整合接触面で摩擦転移が生ずると超潤滑は現れない。金属結合の現実系を対ポテンシャルのモースポテンシャルでモデル化し、金属系での摩擦転移が調べられた。このとき、摩擦転移の発生条件式が導かれた[4]。この条件式は、すべり面の原子が自身の平衡位置を確保できるかどうかを判定する。平衡位置が確保されないと超潤滑は不安定となり摩擦が生ずる。条件式の評価では、注目する原子のポテンシャルエネルギー $V(Q, r)$ の、定められた位置での2階微分値 $d^2V(Q, r)/dr^2$ を計算しその正負を判定する。この判定には、原子の平衡位置を正しく求めることが重要であり、このために注目する材料系に適用できる原子間ポテンシャルを求めることが必要となる。モースポテンシャルが適用可能な金属系[4]の研究によると、金属結合の強い相互作用下においても摩擦転移は生じないことが結論された[4]。

この結論に基づいて、走査型トンネル顕微鏡による原子レベルの摩擦実験が行われた[5]。実験では、清浄なタングステン針先端の(011)面と単結晶シリコン(001)面が用いられた。これらの表面による原子スケールの極微小構造の摩擦系を構成し、接触面間距離を原子間距離程度に制御して弾性接触下の

清浄表面の摩擦力を測定したところ、タングステンとシリコンの不整合接触面では摩擦力は測定分解能以下となって検出されなかった。この実験結果は、不整合接触面の実験系では摩擦転移は起こらなかったことを意味する。この実験の理論的根拠を得るために、タングステンとシリコンの摩擦系の摩擦転移の理論解析が必要となった。図2は摩擦転移の原子論モデルを示す。

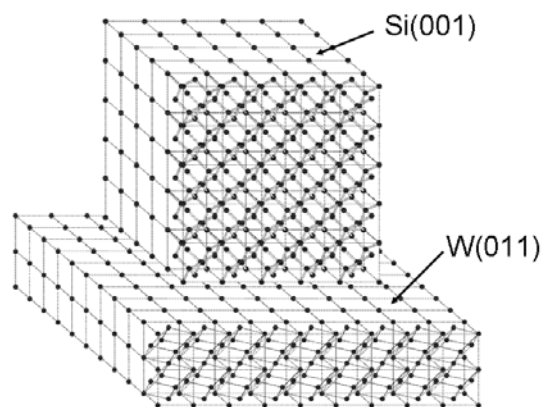


図2 摩擦転移の原子論モデル

4. 研究成果

(1) 摩擦相図

摩擦1次元FKモデルの摩擦特性は表面間相互作用(凝着力) f と上の固体の初速度、および接触面の原子配列に強く依存する。接触面原子配列が不整合となることは、超潤滑発現に必要な条件である。そこで、上の固体の格子定数と下の固体の格子定数との比を黄金数とした。図3は、初速度 $P(0)=0.2$ の摩擦特性を示す。

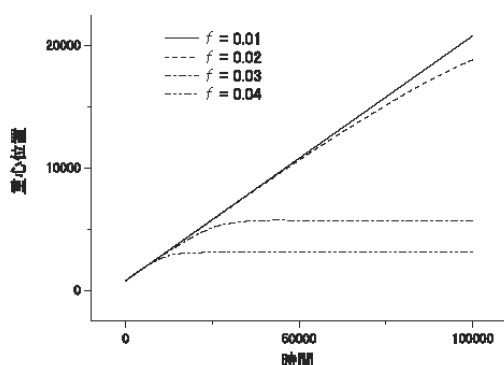


図3 重心位置の変化

この摩擦特性から、表面間相互作用が固体間相互作用が $f=0.01$ 程度に小さいと重心位置は等速運動し超潤滑となる。これに対し、 f が増加すると摩擦が発生して重心位置は減速する。このとき、重心の並進運動エネルギーは構成原子の振動に散逸し、重心は最終的に

に停止する。初速度が大きい場合には、大きな表面間相互作用 f に対して超潤滑が安定となることが示される。

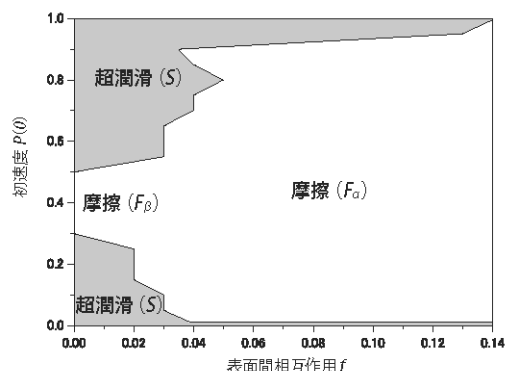


図4 摩擦相図

(2) 摩擦転移

タングステンとシリコンの現実系で摩擦転移を調べるには、信頼性の高い原子間ポテンシャルが必要となる。単純な電子構造の金属については、2体力(中心力)の対ポテンシャルが有用であるが、遷移金属や半導体などの電子構造の材料については原子間相互作用の局所環境を考慮に入れた3体ポテンシャルを研究対象に応じて作成する必要がある。

研究対象の材料・物性に応じてさまざまな3体ポテンシャルが提案されてきた。図2に示すタングステン(W)とシリコン(Si)の摩擦系については、W-Si, Si, Wの原子間ポテンシャルが必要となる。本研究では、摩擦の現実系ポテンシャルとして、少ないパラメータで表現でき、定量性の高いポテンシャル[6]を採用した。このポテンシャルは次式で表される。

$$V_{ij} = A \exp[-\beta(r_{ij} - R_i)^\gamma] \times \left[\exp(-\theta r_{ij}) - \frac{B_0}{Z_i^\alpha} \exp(-\lambda r_{ij}) G(\eta) \right] \quad (1)$$

ここで、 r_{ij} は原子間距離、 R_i は最近接原子間距離である。このポテンシャルは8つのパラメータとして $A, B_0, \theta, \lambda, \alpha, \beta, \gamma, \eta$ をもつ。

$G(\eta)$ は原子間相互作用の局所環境の違いから現れる3体効果を表し、局所的な原子配置の影響を考慮した次式により評価される。

$$G(\eta) = 1 + \sum_{k \neq i, j} [\cos(\eta \Delta \theta_{jik}) - 1], \quad (2)$$

ここで、 η はボンド変角パラメータ、 $\Delta \theta_{jik}$ は注目する原子間のボンド角 θ_{jik} と平衡ボンド角 θ_i (ダイヤモンド構造では 109.47° との

差であり次式で表される。

$$\Delta\theta_{jik} = |\theta_{jik} - \theta_i|, \quad (3)$$

上述のポテンシャルパラメータを求めるには、さまざまな物質の普遍的な凝集の性質を説明に提案された以下の凝集エネルギー E_b の表式を活用する。

$$E_b = ZA[\exp(-\theta r) - Bp^c \exp(-\lambda r)], \quad (4)$$

ここで、 Z は配位数、 p は結合次数である。上式の凝集エネルギーは対ポテンシャルの形で記述されており、局所環境に依存する3体力の修正項が加えられている。平衡原子間距離は r_e は $dE_b/dr = 0$ の条件から次式で与えられる。

$$r_e = \frac{1}{\theta - \lambda} \ln\left(\frac{S}{Bp^c}\right) = \frac{1}{\theta - \lambda} \ln\left(\frac{SZ^\alpha}{B_0 C^c}\right), \quad (5)$$

ここで、 $S = \theta/\lambda$ 、 $\alpha = \delta\varepsilon$ であり、 $p = C/Z^\delta$ を仮定した。平衡原子間距離 r_e での凝集エネルギーは次式となる。

$$\begin{aligned} D_e &= ZA(S - 1) \exp(-\theta r_e) \\ &= ZABp^c \frac{S - 1}{S} \exp(-\lambda r_e) \end{aligned} \quad (6)$$

以上の関係式から、平衡原子間距離 r_e は $\ln(D_e/Z)$ と $\ln(Z)$ と比例関係を持つことが示される。シリコンのいろいろな結晶構造について、これらの関係を図5に示す。比例関係が示されている。表2は、このようにして決定したシリコン、タングステン、W-Siのポテンシャルパラメータを示す。

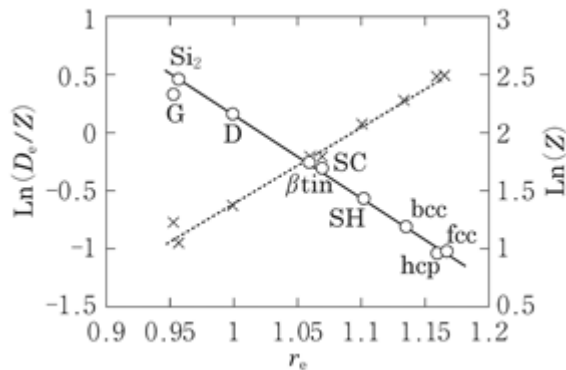


図5 ポテンシャルパラメータの関係

表2: Si, W, W-Si のポテンシャルパラメータ

パラメータ	Si	W	W-Si
A	2794.2386	3798.6189	38444.1675
B_0	0.08251716	0.251094	0.169645
θ	3.13269	2.68935	2.79434
λ	1.34146	1.52280	1.70172
α	0.6249096	0.548241	0.285641
β	25.44123	20.75723	25.42105
γ	3.38218	3.26327	3.39927
η	0.90084597	0	0

シリコンとタングステンの摩擦モデルの摩擦転移を表2のポテンシャルパラメータで記述される多体効果を考慮した原子間ポテンシャルを用いて調べた。図2の原子論モデルを用いて、図6のようにSi(001)面をW(011)面に対して格子ミスフィット角で接触させる。上の固体は、 $5 \times 5 \times 5$ のダイヤモンド構造の結晶(1625原子数)である。下の固体は $18 \times 18 \times 2$ の面心正方格子(3423原子数)である。下の固体の原子を固定し、上固体の原子の平衡位置を求めて摩擦転移の条件式を評価する。このとき、タングステン表面については最密結晶面(硬い面)のW(011)面を用いた。このようにして摩擦転移の条件式を調べた結果、超潤滑の接触条件のシリコンとタングステンの不整合接触面では摩擦転移が生じないこと、すなわち、超潤滑はこの不整合接触面で安定に存在することを明らかにした。

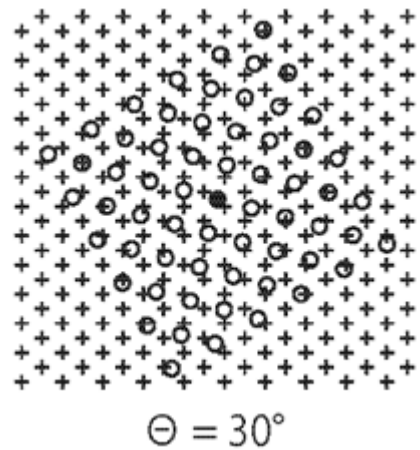


図6 摩擦転移の接触面モデル

参考文献

- [1] A. Erdemir and J. -M. Martin, "Superlubricity," Elsevier (2007).
- [2] M. Hirano, "Atomistics of friction," Surf. Sci. Rep. 60 (2006) pp.159-201.
- [3] Ze Liu, Jiarui Yang, Francois Grey, Jefferson Zhe Liu, Yilun Liu, Yibing Wang, Yanlian Yang, Yao Cheng, and Quanshui Zheng, "Observation of microscale superlubricity in graphite," Phys. Rev. Lett. 108, 205503 (2012) pp.1-5.
- [4] M. Hirano and K. Shinjo, "Atomistic locking and friction," Phys. Rev. B41 (1990) pp.11837-11851.
- [5] M. Hirano, K. Shinjo, R. Kaneko and Y. Murata, "Observation of superlubricity by scanning tunneling microscopy," Phys. Rev. Lett. 78 (1997) pp.1448-1451.
- [6] K. E. Khor and S. Das Sarma, "Proposed universal interatomic potential for elemental tetrahedrally bonded semiconductors," Phys. Rev. B 38 (1988) pp.3318-3322.

5. 主な発表論文等

[学会発表] (計 3 件)

(1) Motohisa Hirano and Sunryeo Kim, Atomistic Friction Phase Diagram and Non-linear dynamical effects in dynamic frictional energy dissipation, *14th World Congress in Mechanism and Machine Science, Taipei, Taiwan, 25--30 October, 2015*

(2) Motohisa Hirano, Atomistics of Superlubricity, *XIN Workshop on Superlubricity: Fundamentals and Applications, October 18-20, 2015, Beijing, China*

(3) Motohisa Hirano, Atomic Friction Phase Diagram and Non-linear Dynamical Effects in Dynamic Frictional Energy Dissipation, *2015 JSME-IIP/ASME-ISPS Joint Conference on Micromechatronics for Information and Precision Equipment (MIPE 2015) June 14-17, 2015, Kobe International Conference Center, Kobe, Japan*

[その他]

ホームページ等

http://hirano-lab.ws.hosei.ac.jp/index_j.html

6. 研究組織

(1) 研究代表者

平野 元久 (HIRANO Motohisa)

法政大学・理工学部・教授

研究者番号：50362174