法政大学学術機関リポジトリ
HOSEI UNIVERSITY REPOSITORY

PDF issue: 2025-07-04

2次元Frenkel-Kontorovaモデルにおける超潤滑安定性評価と摩擦相図作成

井上, 洋隆 / INOUE, Hirotaka

(出版者 / Publisher)
法政大学大学院理工学研究科
(雑誌名 / Journal or Publication Title)
法政大学大学院紀要. 理工学研究科編
(巻 / Volume)
65
(開始ページ / Start Page)
1
(終了ページ / End Page)
5
(発行年 / Year)
2024-03-24
(URL)
https://doi.org/10.15002/00030626

2 次元 Frenkel-Kontorova モデルにおける超潤滑安定性評価と摩擦相図作成

Estimation of stability of superlubricity and drawing of friction phase diagram based on two-dimensional Frenkel-Kontorova model

井上洋隆
Hirotaka INOUE
指導教員　塚本英明

法政大学大学院理工学研究科機械工学専攻修士課程

This research studied the dynamics of friction phenomena at the atomic level. We formulated friction behavior examining whether the kinetic energy for translational motion dissipates into kinetic energies for internal motions during sliding. In the current study, the two-dimensional Frenkel-Kontorova model, which includes kinetic energy terms, was developed, and applied to drawing original friction phase diagram, which consists of two distinct regimes such as superlubricity and friction regimes. The effect of atomic spacing ratio, sliding angle, initial velocity, and friction amplitude potential on these regimes was investigated.

Key Words *: Superlubricity, Atomic Friction, 2D Frenkel-Kontorova model, non-linear by dynamics*

１．はじめに

摩擦は歩行など人の動きを助ける一方で，摩擦により機械故障が生じるなど産業面ではデメリットが大きい．そこで当研究室では超潤滑という近年原子レベルで発見された摩擦消失現象について研究を進めてきた．以下で述べる 1 次元 Frenkel-Kontorova モデルを用いて，Fig. 1 にすべり速度と固体間相互作用の 2 つのパラメータ空間で摩擦発生領域と超潤滑領域を記述する

”1 次元摩擦相図(Friction Phase Diagram：Fig.1)”を作成し，原子論モデルの摩擦特性を調べてきた．これまでに分かったことは下の個体と上の個体の原子間隔比が無理数になれば超潤滑現象が起こりやすいということである．そして次の段階として本研究ではより現実系に近づけるため次元を拡張し，2 次元空間における超潤滑発現性について調べる．また，上の個体と下の個体の原子間隔が等しい，つまり原子間隔が 1.0 の場合に上の個体を回転させ原子の間隔を無理数に変更させた時の超潤滑発現性を調べる．以下に本研究の目的を記す．

(1) 2 次元 Frenkel-Kontorova モデルによる原子鎖のすべりシミュレーションを行い，超潤滑領域と摩擦領域を記した摩擦相図を作成する．そして 1 次元摩擦相図との比較を行う．

(2) 下の固体と上の固体を回転させ，すべらせる角度や原子数，原子間隔比を変更した時の超潤滑領域と摩擦領域を調べる．

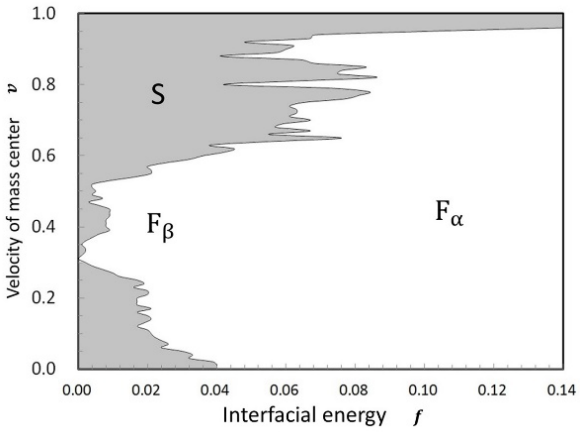

Fig. 1 1D Friction Phase Diagram (GM model)

２．Frenkel-Kontorova 摩擦モデルと運動方程式

原子スケールの摩擦現象のモデルを解析するために，二次元 Frenkel-Kontorova モデルを用いる．二次元 Frenkel-Kontorova モデルはバネ定数 k の線形バネによって連結された質量 m の多数の質点がすべり方向に沿って sin，cos 関数で表される周期ポテンシャル（以下摩擦振幅ポテンシャルとする）を受けながら運動するというモデルである．原子摩擦運動ではこれらの質点を原子とし，上の固体の原子間力をバネ定数 k の線形バネ力によって，下の固体が上の固体に及ぼす固体間相互作用を振幅 f の摩擦振幅ポテンシャルによって表現する．Fig. 2 に上の固体である 2 次元 Frenkel-Kontorova モデル，Fig. 3 に下の固体である摩

擦振幅ポテンシャルの図を示す．また，ポテンシャルの頂点の間隔は 1.0 としている．

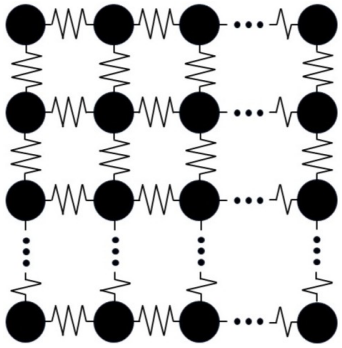

Fig. 2 2D Frenkel-Kontorova friction model

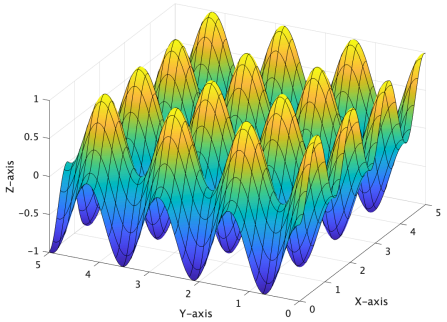

Fig.3 2D potential model

二次元 Frenkel-Kontorova モデルのハミルトニアンは次式で表される．

$$\boldsymbol{H}(\{\boldsymbol{p}_{i,j}\}\{\boldsymbol{r}_{i,j}\}) = \sum_{i}^{N}\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{p}_{i,j}^{x^2}+\boldsymbol{p}_{i,j}^{y^2}\right)$$
$$+\sum_{i,j}^{N}\left\{\frac{1}{2}\boldsymbol{k}\left\{\begin{array}{c}\left(\sqrt{\left(\boldsymbol{r}_{i+1,j}^{x}-\boldsymbol{r}_{i,j}^{x}\right)^2+\left(\boldsymbol{r}_{i+1,j}^{y}-\boldsymbol{r}_{i,j}^{y}\right)^2}-\boldsymbol{l}\right)^2\\+\left(\sqrt{\left(\boldsymbol{r}_{i,j+1}^{x}-\boldsymbol{r}_{i,j}^{x}\right)^2+\left(\boldsymbol{r}_{i,j+1}^{y}-\boldsymbol{r}_{i,j}^{y}\right)^2}-\boldsymbol{l}\right)^2\end{array}\right\}\right.$$
$$\left.+\frac{\boldsymbol{f}}{\boldsymbol{\pi}}\boldsymbol{\cos\pi}(\boldsymbol{x}'+\boldsymbol{y}')\times\boldsymbol{\cos\pi}(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{y}')\right\} \quad (1)$$

$$\begin{cases} x' = r_{i,j}^{x}\cos\theta + r_{i,j}^{y}\sin\theta \\ y' = -r_{i,j}^{x}\sin\theta + r_{i,j}^{y}\cos\theta \end{cases}$$

ここで N は上の固体の原子数，$p_{i,j}$は各原子の運動量，$r_{i,j}^{x}$，$r_{i,j}^{y}$は上の固体の各原子の位置，k はバネ定数，ℓ は X, Y 軸方向のバネの自然長（上の固体の格子定数），f は固体間相互作用の大きさ，θは固体間相互作用の角度を表す．よって各原子の X 軸方向の運動方程式は以下のハミルトニアンの正準方程式から求まる．

$$\frac{dp_{i,j}^{x}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_{i,j}} = F_{i,j}^{x} \quad (2)$$

$$\frac{dx_{i,j}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_{i,j}^{x}} = p_{i,j}^{x} \quad (3)$$

各原子に働く X 軸方向の力は次式となる。

$$F_{i,j}^{x} = k\{\frac{\left(\sqrt{\left(r_{i+1,j}^{x}-r_{i,j}^{x}\right)^2+\left(r_{i+1,j}^{y}-r_{i,j}^{y}\right)^2}-l\right)\left(r_{i+1,j}^{x}-r_{i,j}^{x}\right)}{\sqrt{\left(r_{i+1,j}^{x}-r_{i,j}^{x}\right)^2+\left(r_{i+1,j}^{y}-r_{i,j}^{y}\right)^2}}$$
$$+\frac{\left(\sqrt{\left(r_{i,j+1}^{x}-r_{i,j}^{x}\right)^2+\left(r_{i,j+1}^{y}-r_{i,j}^{y}\right)^2}-l\right)\left(r_{i,j+1}^{x}-r_{i,j}^{x}\right)}{\sqrt{\left(r_{i,j+1}^{x}-r_{i,j}^{x}\right)^2+\left(r_{i,j+1}^{y}-r_{i,j}^{y}\right)^2}}$$
$$-\frac{\left(\sqrt{\left(r_{i,j}^{x}-r_{i-1,j}^{x}\right)^2+\left(r_{i,j}^{y}-r_{i-1,j}^{y}\right)^2}-l\right)\left(r_{i,j}^{x}-r_{i-1,j}^{x}\right)}{\sqrt{\left(r_{i,j}^{x}-r_{i-1,j}^{x}\right)^2+\left(r_{i,j}^{y}-r_{i-1,j}^{y}\right)^2}}$$
$$-\frac{\left(\sqrt{\left(r_{i,j}^{x}-r_{i,j-1}^{x}\right)^2+\left(r_{i,j}^{y}-r_{i,j-1}^{y}\right)^2}-l\right)\left(r_{i,j}^{x}-r_{i,j-1}^{x}\right)}{\sqrt{\left(r_{i,j}^{x}-r_{i,j-1}^{x}\right)^2+\left(r_{i,j}^{y}-r_{i,j-1}^{y}\right)^2}}\}$$
$$-f\begin{pmatrix}-cos\theta\sin\left\{2\pi(r_{i,j}^{x}cos\theta+r_{i,j}^{y}sin\theta)\right\}\\+sin\theta sin\left\{2\pi(-r_{i,j}^{x}sin\theta+r_{i,j}^{y}cos\theta)\right\}\end{pmatrix} \quad (4)$$

Y 軸方向にも同様の操作を行い$F_{i,j}^{y}$を得る．また周期境界条件を考慮して，格子の端にある原子同士は影響し合うものとする．

３． 分子動力学による摩擦シミュレーション

（１）摩擦シミュレーションの手順

すべり摩擦運動のシミュレーションの実施手順を以下に記す．

1. 正規乱数を用いて，等間隔に配置した全原子にマックスウェル・ボルツマンの速度分布を与える．全原子の振動速度を徐々に減少させた．この操作を，固体温度が絶対零度に達するまで継続し，固体全体の固体間相互作用エネルギーが最小となる原子の平衡位置を決定する．
2. 上記の平衡化処理で求めた原子配列を安定な初期配列とし，次に固体感相互作用下で上の固体を所定の初速度で滑らせ，すべり運動下の全構成原子の運動の軌跡を計算する．Table1 は計算条件を示す．運動方程式の数値計算には速度ベルレ方を用いた．

Table 1 Simulation parameter

原子間隔比	$l=\frac{1+\sqrt{5}}{2}, l=1.0$
構成原子数	100, 144
すべり角度 [°]	0, 45
時間ステップΔt [s]	0.001
くり返し数	2×10^7
計算時間(=Δt ×くり返し数) [s]	20000
初速度v_0 (Δv_0= 0.010)	0.010~1.0
摩擦振幅ポテンシャルf	0.0010~0.010

（２）平衡化処理

正規乱数を用いて，等間隔に配置した各原子に高温でのマックスウェル・ボルツマン分布に従うように速度を与える．ここでの「速度」とは，固体内の格子振動における各原子の速度を意味する．統計熱力学によれば，ある温度における各原子の速度分布はマックスウェル・ボルツマン分布となる．高温状態の固体の各原子は平衡点周りに格子振動している．この状態から各原子の速度を徐々に減少させて固体の温度を低下し，最終的に絶対零度に達する．その時の原子配列が安定した初期配置と決定される．このようにして固体の原子間相互作用エネルギーが最小となる安定な原子の初期配置が決定される．マックスウェル・ボルツマンの速度分布を求めるために乱数の生成方法を述べる．一様乱数の生成には，乗算合同法を用いる．0からMまでの値をとる一様乱数列R_iを漸化式

$$R_i = mod(aR_{i-1}, M) \\ = \left(aR_{i-1}\text{を}M\text{で割った余り}\right) \tag{5}$$

を用いて発生させる．ここで，定数aとMは互いに素の値を用いる．R_0は乱数の初期値である．一様乱数から正規乱数を生成するには，-1から1までの値をとる2個の一様乱数から正規乱数を生成する Box-Muller 法を用いる．ここで，

$$u_i = \frac{2R_i}{M} - 1 \tag{6}$$

を計算し、一様乱数R_iを-1 から 1 までの一様乱数に変換する．そして Box-Muller 法により，$2n$個の一様乱数R_iからn個の乱数S_iを生成する．

$$S_i = \sqrt{-2\log u_{2i-1}}\cos(2\pi u_{2i}) \tag{7}$$

を計算すると，S_iは平均値 0，分散 1 の正規乱数となる．この正規乱数を用いて，設定温度において原子の速度分布がマックスウェル・ボルツマン分布となるように，各原子の速度v_iを，

$$v_i = \sqrt{\frac{k_B T}{m}} S_i \tag{8}$$

と設定する．ここで，k_Bはボルツマン定数，Tは個体の絶対温度を表す．今回のシミュレーションでは，$k_B T = 10$の条件下で固体の構成原子にマックスウェル・ボルツマン分布に従う速度分布に設定すると，原子は平衡点の周りで熱振動する．この高温状態から徐々に固体の温度を低下させ，最終的に絶対零度まで冷却する．このような平衡化処理によって固体の原子間相互作用エネルギーが最小となるような安定な原子配列が決定される．

４．固体重心の運動形態

超潤滑状態の場合，固体は一定速度で並進運動を行う．対して摩擦力が発生すると抵抗となり固体重心の速度が低下し重心の並進運動が停止する．超潤滑が発現するか否かは固体のすべり速度と上下の固体間相互作用の値によって決まるため，この2つのパラメータの様々な組み合わせに対して固体のすべり運動のシミュレーションを行い，各時刻における固体重心の位置，速度，エネルギーを計算した．例として原子数を縦 10 個×横 10 個の計 100 個，原子間隔比を黄金比($l=\frac{1+\sqrt{5}}{2}$)，すべらせる方向を X 軸に対して 45 度傾け，固体間相互作用$f = 0.003$，初速度$v_0 = 0.41, 0.44, 0.47$としたときの固体の重心速度の時間変化を Fig. 4 に示す．

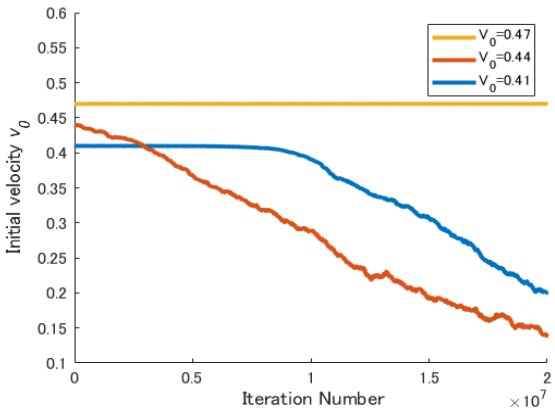

Fig.4 Center of gravity velocity change
(GM & 45degree model)

黄線は初速度$v_0 = 0.47$，赤線は$v_0 = 0.44$，青線は$v_0 = 0.41$ですべらせた時の重心速度変化となっている。この結果から重心速度変化にはすべり始めから摩擦が発生し重心速度の低下が見られる形態，すべり始めは重心速度の低下は見られないが計算途中で大きな摩擦が生じ重心速度の低下が見られる形態，すべり始めから最後まで重心速度の低下が見られず超潤滑状態を示す形態，以上の三つの形態があることが確認できた．また，最後の形態のみ本研究では超潤滑状態として扱う．

５．摩擦相図作成と超潤滑状態の判別方法

超潤滑状態と摩擦状態の判定を行うため，計算時間において固体の重心速度が初速度と比較して 0.1%の減少が見られれば摩擦状態であり，減少が見られなければ超潤滑状態であると判別した．この判別方法は1次元摩擦相図の作成に用いた判別方法と同じものである．この研究において原子間隔比を黄金比($l = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$)，原子間隔比を 1.0 に変化させ，また上の固体のすべらせる方向をX軸方向から 0 度と 45 度に変化させて実験を行った．最初に１次元 Frenkel-Kontorovaモデルにおける摩擦相図と比較を行う．Fig.5 に 2 次元 Frenkel-Kontorova モデルで、原子数を縦 10 個×横 10 個の計 100 個，原子間隔比を黄金比，すべり角度を 0 度としたときの摩擦相図を示す．Fig.1 と横軸の縮尺が異なるため注意していただきたい．

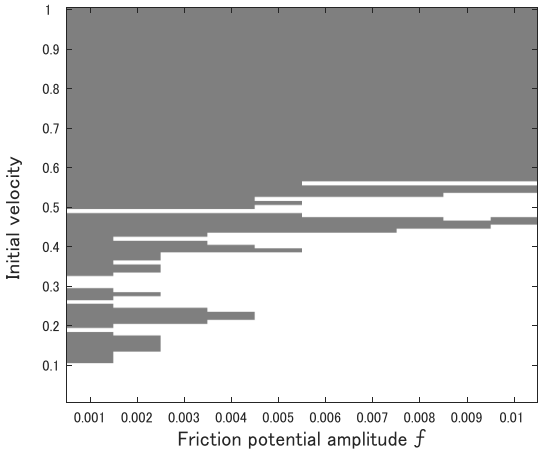

Fig.5 2D Friction Phase Diagram
(GM N100 & 0degree model)

横軸は摩擦振幅ポテンシャルf，縦軸は初速度v_0，灰色部分を超潤滑領域，白色部分を摩擦領域とする．Fig.5 から超潤滑領域は全体の 58.4%, 摩擦領域は 41.6%であった． 1 次元摩擦相図の超潤滑領域を同じ範囲で求めると 86.2%，摩擦領域は 13.8%となり，摩擦領域は 2 次元摩擦相図の方が３倍も多い事がわかった．低速領域 ($v_0 = 0.01\sim0.30$) に限って比較すると約 8 倍も摩擦領域に差が生じていた．次にすべり角度を X 軸に対して 45 度傾け，下の固体との原子間隔比を有理数に変化させた時の摩擦相図を Fig.6 に示す．

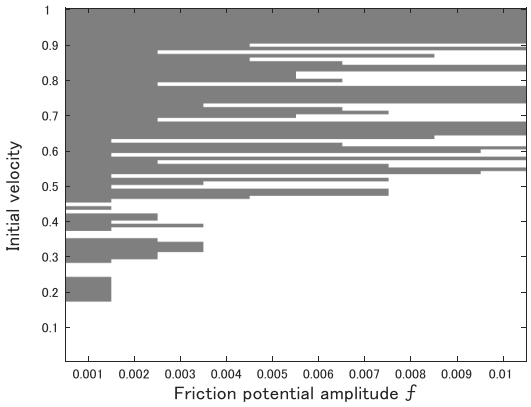

Fig.6 2D Friction Phase Diagram
(GM N100 & 45degree model)

Fig.6 の超潤滑領域は 44.4%，摩擦領域は 55.6%であった．すべり角度を 0 度とした時の結果と比較すると超潤滑領域は減少する結果となった．

次に原子間隔比を 1.0 に変更し，すべり角度を 0 度（左図）と 45 度（右図）に変化させた図を Fig.7 に示す．

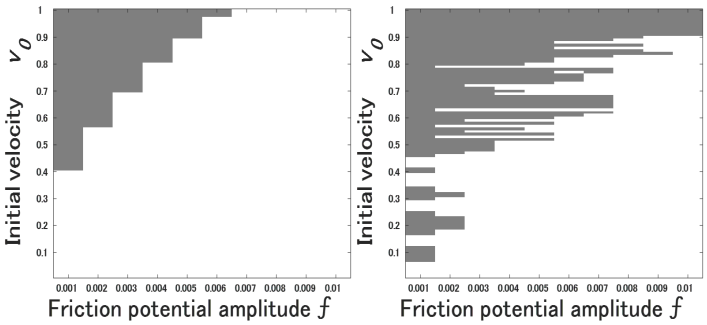

Fig.7 2D Friction Phase Diagram
(Space 1.0 N100 0degree & 45degree model)

すべり角度が 0 度の時（左図）の超潤滑領域は 16.9%, 摩擦領域は 83.1%，45 度の時（右図）の超潤滑領域は 34.3%，摩擦領域は 65.7%となり，45 度方向にすべらせた方が約 2 倍超潤滑領域が広がる結果となった．Table2 にそれぞれの条件における超潤滑領域と摩擦領域の割合をまとめる．

Table2 Stability percentage for each condition at N100

	超潤滑領域	摩擦領域
原子間隔比：黄金比 すべり角度：0 度	58.4%	41.6%
原子間隔比：黄金比 すべり角度：45 度	44.4%	55.6%
原子間隔比：1.0 すべり角度：0 度	16.9%	83.1%
原子間隔比：1.0 すべり角度：45 度	34.3%	65.7%

そして次に原子数を縦 12 個×横 12 個の計 144 個に増加させてシミュレーションを行った．Fig.8 に原子間隔比を黄金比，すべらせる方向を 0 度（左図）と 45 度（右図）に変化させた図，Fig.9 に原子間隔比を 1.0 とした時の摩擦相図を示す．

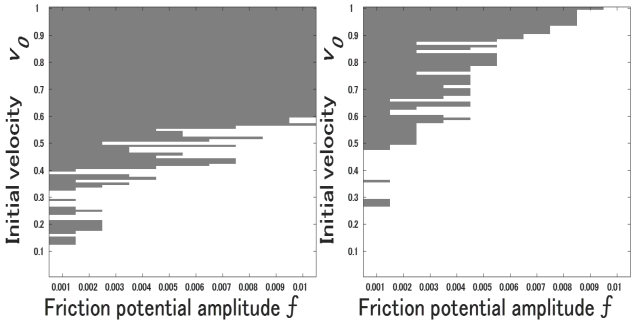

Fig.8 2D Friction Phase Diagram
(GM N144 0degree & 45degree model)

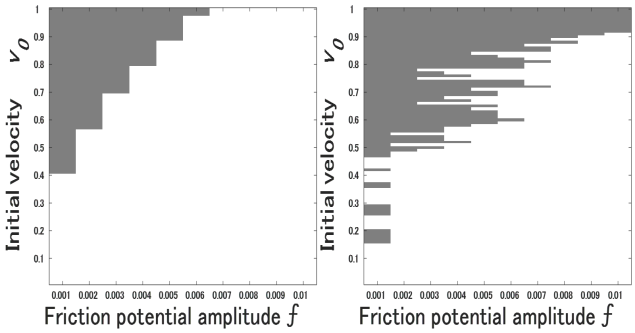

Fig.9 2D Friction Phase Diagram
(Space 1.0 N144 0degree & 45degree model)

Table3 にそれぞれの条件の超潤滑領域と摩擦領域の割合を示す．Table2 の結果と比較すると原子間隔比が黄金比，すべり角度が 45 度，原子数が 144 個の時の超潤滑領域に原子数 100 個の超潤滑領域と比べて$^1/_2$倍の減少が見られた．他の条件においては原子数を増加させると約 2~3%の超潤滑領域の減少が見られた．

Table3 Stability percentage for each condition at N144

	超潤滑領域	摩擦領域
原子間隔比：黄金比 すべり角度：0 度	55.3%	44.7%
原子間隔比：黄金比 すべり角度：45 度	22.2%	77.8%
原子間隔比：1.0 すべり角度：0 度	17.1%	82.9%
原子間隔比：1.0 すべり角度：45 度	30.5%	69.5%

６． 結論

2 次元 Frenkel-Kontorova モデルにおける条件ごとの超潤滑領域と摩擦領域を調べ，比較を行った．以下に結論を示す

(1) 1 次元摩擦相図と 2 次元摩擦相図を比較すると摩擦領域は 2 次元摩擦相図の方が 3 倍も多い事がわかった．これは 2 次元へと原子の動きを拡張し，かつ上下左右の 4 方向から力を受けることでより不安定状態へ移行しやすいためであると考えられる．

(2) 先行研究より 1 次元空間における原子間隔比は無理数の時に超潤滑状態になりやすいことがわかっていたが，2 次元空間における場合でも同じ事が言える事がわかった．

(3) 原子間隔比が 1.0 である時，すべらせる方向を 45 度傾けることで超潤滑領域が約 2 倍増加する事がわかった．これはすべらせる方向を 45 度とすることで下の固体との原子間隔比が無理数へ近づいた為であると考えられる．これにより上の固体と下の固体が同じ材料であっても原子層を回転させることにより超潤滑が発生しやすくなる事がわかった。

(4) 原子数を増加させたとき，原子間隔比が黄金比，すべり角度が 45 度の条件の時に最も超潤滑領域の減少が見られ，他の条件においては約 2~3%の減少であったため，さらに原子数を増加させ超潤滑領域が減少する境目を探る必要がある．

謝辞：本研究の遂行にあたり，お忙しい中多大なるご尽力をいただきました塚本英明教授に心より感謝申し上げます．

参考文献

1) M.Hirano, *Friction at the Atomic Level: Atomic Approaches in Tribology* (Wiley-VCH, Weinheim, 2018)
2) 小塩　ゆかり: “Frenkel-Kontorova モデルの摩擦と超潤滑に関する研究”(2005)
3) 長松　昭男: “モード解析入門”, コロナ社(1993).