

機関番号：13501

研究種目：基盤研究 (C)

研究期間：2008～2010

課題番号：20540368

研究課題名 (和文) ナノ界面のコヒーレンスと相転移が織りなす新奇な潤滑現象の解明—超潤滑を中心として

研究課題名 (英文) Novel lubrication phenomena at nanoscale interfaces

研究代表者

川口 高明 (KAWAGUCHI TAKAAKI)

山梨大学・教育人間科学部・准教授

研究者番号：10273913

研究成果の概要 (和文)：

ナノ界面系における新奇な潤滑現象を中心にコンピュータシミュレーションと理論解析の方法で調べた。潤滑の発生方法としては、表面原子層に時間空間的変調波を励起することに着目した。そして解析の結果、変調パラメータに対して多様かつ新奇な潤滑現象が現れることが分かった。潤滑状態では表面原子の断熱運動及び緩和効果が重要であることが理解された。これをもとに非平衡現象及び超潤滑効果等に関する理解が深まり、複雑なダイナミクスも明らかにできた。そして関連物理系において、上記潤滑と関係する現象も調べることで、新奇な潤滑についての包括的な理解を得た。

研究成果の概要 (英文)：

Novel lubrication phenomena concerning directed motion of atoms on solid surfaces were studied using computer simulations of an atomic lattice model. We considered the possibility of lubrication which is based on a spatiotemporal modulation method. It is found that several novel lubrication states occurs under certain conditions on the modulation and interfacial parameters. Complicated behaviors appear in the novel lubrication states. In related systems we also clarified the physical properties of the directed transport which have a close relationship with the novel lubrication phenomena.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	2,000,000	600,000	2,600,000
2009年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2010年度	500,000	150,000	650,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：潤滑，界面

1. 研究開始当初の背景

研究開始当初は、物理学的な観点からいくつかの新奇な潤滑現象が実験的及び理論的に研究されるようになってきていた。特に、ナノサイエンスの発展によって、各種ナノプローブが開発され、それを摩擦・潤滑の実験に応用する試みが精力的に始められるよう

になっていた。そのような状況下で、新奇な潤滑及び摩擦現象を予言及び説明できる理論研究が急務となっていた。そこで、本研究は、その要請に応える新奇潤滑現象の理論研究として位置づけられる。

申請者は研究開始当初までナノスケールでのみ現れる新奇な摩擦・潤滑現象を調べて

きた。すでに、その過程でいくつかの新奇な現象を明らかにしていた。そこで申請者のこれまでの研究成果を背景にしつつ、当時の最新の研究動向に刺激されて、さらに新奇な潤滑現象を解明することとした。

2. 研究の目的

本研究の目的は、ナノ界面及び関連物理系におけるコヒーレンスと相転移等の織りなす新奇な潤滑現象について、その物理機構及び性質を、統計物理的方法を用いて理論的に解明することである。ここで新奇な潤滑として重要視しているのは、超潤滑、自発的有方向性の潤滑である。ここで、超潤滑状態は摩擦力の消失した状態を意味している。自発的潤滑とは、ある種の自己駆動原理を利用して自発的に起こる方向の定まった潤滑を指す。また、上記以外にも、いくつかの新奇な潤滑が考えられる。そして、これらの潤滑現象は、最近の実験報告及び理論研究結果から考えて、条件が整えば、ナノ界面及び関連の各種物理系において実現可能な新奇の物理現象であると考えられる。

本研究では、このような各種の新奇な潤滑現象について、基本概念を整理した上で、コンピュータシミュレーション及び統計物理学的な理論解析の方法によって、その発生機構・素過程から特異な性質にわたって明らかにする。そして、ナノ界面及び関連物理系(位相結合系及びvortex系等)で現れる新奇な潤滑現象について、統一的にその物理機構及び特性等を理解する。

3. 研究の方法

全体の計画方法の概要は次の通りである。まず、考察する物理系の明確化とモデル化を経て、計算機シミュレーションのための準備を行った。その後、ナノ界面及び関連物理系について、潤滑・摩擦特性の計算とコヒーレンスや相転移等に関するシミュレーション解析を通して、様々な新奇の潤滑状態の物理機構と性質について考察した。研究方針として、各種の潤滑を独立した現象としてとらえるのではなく、それらの発生機構と性質を統一的に考察した。

具体的研究方法を以下に述べる。まず、これまでの研究において、シミュレーションからデータ解析までを行える統合シミュレーション環境を構築した。この環境に対して、今回申請する並列計算機による補強を行い、性能を向上させた。大規模なシミュレーションは、外部の共同利用機関のスーパーコンピュータを援用した。

そして、シミュレーション及び理論解析のために、潤滑現象を記述できる理論モデルを検討した。これは、基本的に格子モデルの一種である。ナノ界面系の場合は、界面を構成

する基板表面を周期ポテンシャルで近似し、基板上の原子層等のナノ物質を離散格子とみなすモデルが基本となる。これをもとに、いくつかの拡張を施すことで、考慮する物理系の特徴をとらえることが可能となる。

これらのモデルをもとに、コンピュータシミュレーションのためのプログラム開発を行った。基本的には、運動方程式を解いて、系の時間発展を追いながら、各種物理量を調べていく分子動力学的方法を採用した。随時、高速化及び解析のためのプログラム及びアルゴリズムの開発及び改良を進めた。

解析的には、統計物理及び非線形力学理論を基礎とした。そして、ナノ界面系及び位相結合系等における有方向性の並進運動を潤滑ととらえて、主に潤滑の素過程と物理機構を解析した。

上記方法によって、新奇な潤滑の詳細を調べた。特に、界面物性パラメータや力学的パラメータへの依存性に着目して解析することで、各潤滑状態の発生条件と摩擦機構の関係、及び詳細な物理的特性などが明らかになった。また、実験との関連について、実験の原理・方法、及び潤滑を起こす物質のもつ基本的特性等について考察した。

全研究期間を通じて得られた研究結果を総括して、新奇な潤滑現象の全体像の包括的理解を行い、現象の普遍性や個別性等を明らかにした。

4. 研究成果

近年のナノサイエンスとナノテクノロジーの非常な進歩は、全く新しい研究分野を生み出した。それらの例として、ナノスケールで稼働するナノマシンや、超潤滑等の新奇なナノトライボロジーに関する研究が挙げられる。ここでナノマシンに関して、外力のない状況下での有方向性運動はマシンの駆動機構として有望な物理現象である。そのような機構は分子モーターや統計物理等の様々な分野で研究がなされてきた。特にラチェットでは、通常、系に空間的な非対称性が有り、それが有方向性運動を引き起こすことを可能としている。

これに対して、本研究では新奇な潤滑現象として、方向性のある外力のない状況において、空間的に対称的な周期ポテンシャル上で原子層における有方向性運動の可能性についてまずは調べた。これは超潤滑及び摩擦の問題と直接的に関係する重要な未解決の物理現象となっていた。以下に本研究におけるいくつかの成果を選んで説明する。

まず、1次元の格子モデル(フレンケル-コントローバモデル)をもとに拡張し、少数の原子からなるモデルについて検討した。その詳細を述べる。表面原子層を表す1次元の格子では、隣接する原子同士は調和バネでつ

ながら、個々の原子は基板原子層の効果としての周期ポテンシャルと相互作用しているとする。周期ポテンシャルは、簡単には、正弦波状タイプで表される。ここで、表面原子層に対応する1次元格子において、原子間の自然長が時間空間的に周期的な変調を受けるものとする。この変調は、変調振幅、変調時間周期、変調波長によって制御される。直接的な方向性を持った外力は導入していない。そこで、この系を駆動するのは、この原子間の自然長に対する時間空間的な変調のみとなる。この時間空間的な変調を導入した格子モデルの運動方程式をもとに、分子動力学的手法でコンピュータシミュレーションを実行した。そのシミュレーションの結果を次に説明する。

表面原子層と基板との構造的な整合性、及び時間空間変調パラメータについて詳細な検討を行った結果、表面原子層が有方向性運動という形態で潤滑を起すことを確認し、その条件等について理解ができた。

この潤滑状態において、表面原子層の各原子は時間空間的な変調を受けた独特の運動を行う(図1)。原子層全体として、コヒーレントな運動が行われた結果、原子層の重心が時間平均してみると並進している。

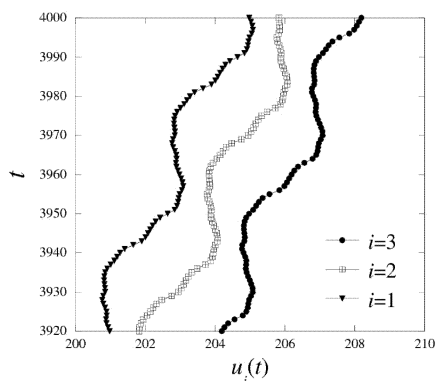


図1. 変調を受けた原子の運動

この潤滑状態において、原子の断熱的運動を仮定した理論解析がある程度有効であることが分かった。それによると、原子層内における隣接原子間距離を求めて、それを2次元空間の各座標軸に選ぶと理解しやすい。時間空間変調を受けて潤滑運動する原子層は、この2次元座標空間内において、トラジェクトリ(軌跡)を描く。そして、理論的には特異点が平面内に存在し、特異点には符号が与えられる。原子層のトラジェクトリが特異点を囲む場合、特異点の数と符号によって定まる速度と向きにロッキングすることで有方向性運動としての潤滑が行われる。そこで、運動のトラジェクトリを解析すれば、潤滑等に関して有益な情報が得られることが理解できた。

次に、この潤滑に現れる特異な運動形態として、方向の反転及びリエントランス現象について説明する。変調パラメータの変化に対して、不連続な方向の反転が起こる。図2の例では、変調振幅 α に対する変化を示している。規格化した速度 v/v_0 の状態から -2 の状態へ反転は急激におこる。しかも、この場合は変調振幅 α を大きく変化させると、再反転が

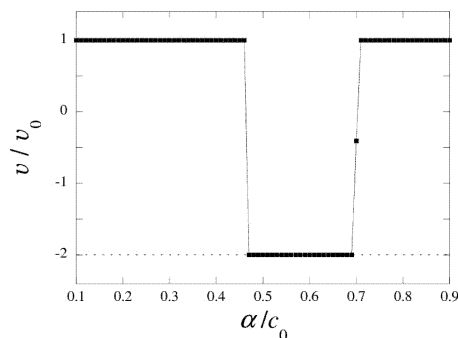


図2. 反転とリエントランス

起こって、もとの状態(同じ速度と向き)に正確にもどる。これは、潤滑の運動のリエントランス現象となっている。ここで注意すべきは、変調を強くする、つまりここでは変調振幅を大きくすると、速度が増大するのではなく一定に保たれ、ある範囲になると反転してまた一定速度を保つということである。つまり、変調振幅の増大は、潤滑速度の増加にはかならずしも関係が無い。

そこで、この反転・リエントランス現象について、上述のトラジェクトリ解析を行った。図3に3つの特徴的な変調振幅値でのトラジェクトリを示す。その他の変調パラメータは同一である。トラジェクトリAは1つの正符号の特異点を反時計方向に囲む。同様にみて、トラジェクトリBは、1つの正符号の特異点と3つの正符号の特異点を囲む。トラジェク

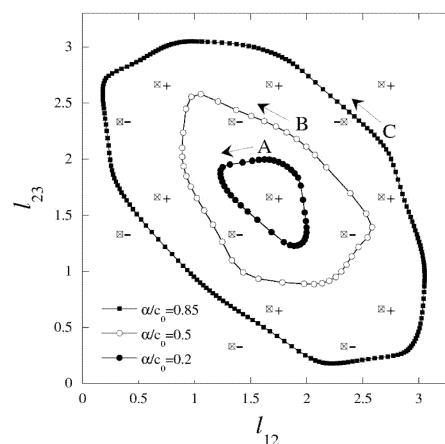


図3. 運動のトラジェクトリ解析

トリCは、7つの正符号の特異点と6つの正符号の特異点を囲む。これらの結果から、周期ポテンシャル上での原子の断熱運動をもとにした理論からは、トラジェクトリA, B, Cの場合は、それぞれ規格化した速度は+1, -2, +1となることが導かれる。これは、図2の結果に一致しており、潤滑方向の反転とリエントランス現象を説明している。

次に、この潤滑現象に対する基板原子層の影響を、基板の周期ポテンシャル強度依存性という点から考察した。それによると、周期ポテンシャルが弱い領域では、速度のロッキングが完全ではなく、周期ポテンシャルがある臨界値を越えた場合にのみ速度ロッキングが実現する。基板ポテンシャルは表面原子層内の各原子にとっては越えるべき障壁(バリア)となるので、この潤滑にはバリアが本質的に重要であることが理解できた。

ここで、時間空間的変調がない場合、周期ポテンシャルが非常に弱い領域では、この系の表面原子層は、静止摩擦力の消失という特異な摩擦・潤滑現象を示す。これは、静止した状態から並進運動を起こす際に、静止摩擦が働かないために、潤滑速度ゼロの極限で超潤滑状態になっているとみなせる。この静止摩擦の消失は、系の界面パラメータ等が変化した場合に摩擦相転移によって現れる。そこで、この周期ポテンシャルが非常に弱い領域で、上述の変調を受けた場合に、どのような振る舞いを示すのかについて調べた。図4は変調周期を変化させたときの潤滑速度の変

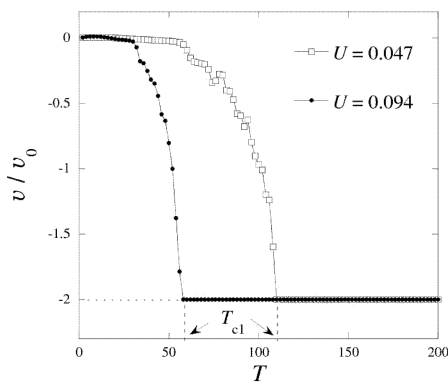


図4. 速度の変調時間周期依存性

化を示す。ここで、周期ポテンシャル強度について2つの極めて弱い場合を示している。速度は、-2にロッキングされるが、変調時間周期が小さい領域では、ロッキングが不完全となる。ロッキングされる時間周期の臨界値は、周期ポテンシャル強度に依存し、周期ポテンシャル強度が弱いほど時間周期の臨界値は大きくなる。そして、時間周期が臨界値以下の場合には、表面原子層は断熱変化が可能となるように緩和ができておらず、変調による変化は系のある種の緩和時間よりも短

いことが分かる。この周期ポテンシャルが弱い状態は、変調強度が弱い極限で超潤滑状態に対応しているとみなされ、この結果はそのような特異な状態と変調効果との関係を示している。一方で、時間周期が臨界値を超えている場合は、トラジェクトリ解析でみたような断熱変化が、変調条件下で可能となっていると言える。

図4の結果は、言い換えると、周期ポテンシャル強度が弱いほど、潤滑を発生させるにはゆっくりと変調する必要があることを示している。そこで、次に、図4の時間周期の臨界値が周期ポテンシャル強度にどのように依存するのかを調べた。図5に示すように、時間周期の臨界値が周期ポテンシャル強度の間には、反比例関係があり、スケールング則が成り立つ。ここで特徴的な点は、周期ポテンシャル強度が弱くても、変調時間周期を十分長く取れば、並進運動が起こることを示していることである。ただし、周期ポテンシャル強度がゼロ極限で、必要となる変調時間周期は無限大に発散する。ここで、この時間周期の臨界値は、系のある種の緩和時間に対応していることが分かる。そして、この系では、時間空間的変調の効果によって、表面原子層の緩和時間は非常に長くなっていることが理解された。

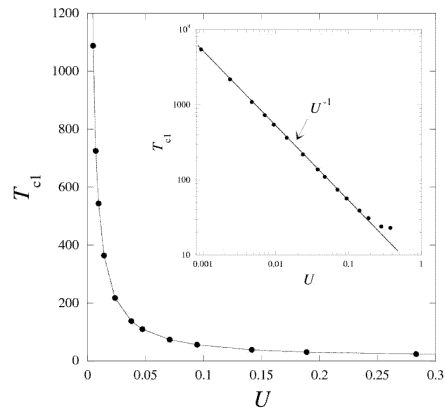


図5. 変調時間周期の臨界値のポテンシャル強度依存性

周期ポテンシャル強度がある程度大きくなると、潤滑状態において別の反転現象が現れることが明らかになった。図6に、周期ポテンシャル強度が強い場合の速度依存性の結果を示す。これを見ると、(a)と(b)の場合には、変調時間周期が小さい領域では、速度が+1にロッキングし、変調時間周期が大きくなると反転して速度-2の状態になる。ここで、この反転を生じる変調時間周期の臨界値が明確に定められる。しかし、(c)のように周期ポテンシャルが強くなると、速度+1の状態から-2への反転は、変調時間周期をいくら大きくしても起こらないで、無限大の変調時間

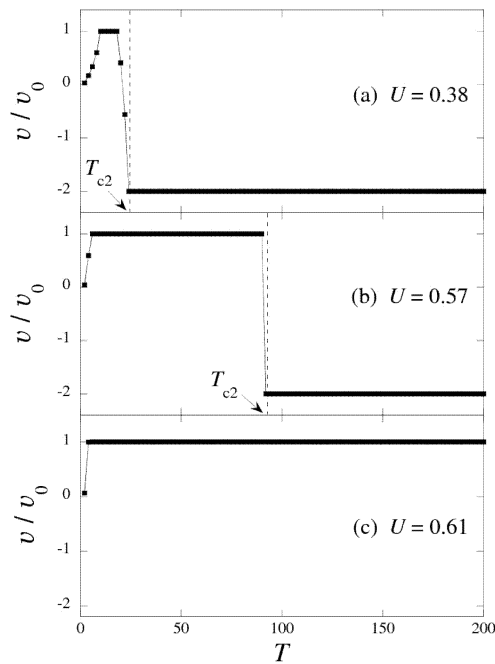


図 6. 速度の変調時間周期依存性

周期まで速度+1の状態が安定に存在する。この反転現象が特異な点は、図2の場合とは異なり、変調の時間スケールを変化させただけで、方向が反転してしまうことである。そして、これは、速度のロックが必ずしも断熱変化状態でのみ起こるのではなく、ある種の非断熱領域でも起こり得ることを意味している。そして、詳細な解析の結果、図6に示した反転を生じる変調時間周期の臨界値は、特異な臨界現象を示すことが分かった。特に、この臨界値は、周期ポテンシャル強度に大きく依存し、周期ポテンシャルを弱い状態から強くするとある周期ポテンシャル強度で無限大に発散する。この事もこの系に現れる長時間緩和の効果を示していることが理解された。

上述のように、本研究では、表面原子層の原子間の自然長に時間空間的変調を与えることで多様かつ新奇な潤滑状態が現れることを明らかにした。そして、解析的理論を用いて、潤滑機構の解析とその速度等の理解が可能であることが明らかになった。そして、コンピュータシミュレーションも活用して、潤滑機構の素過程の詳細から、新奇な反転及びリエントランス現象、超潤滑状態との関係、断熱変化状態と潤滑速度ロックの関係、及び系における長時間緩和の効果などにわたって、様々な新奇な現象の物理機構及び特性の明らかになった。そして、潤滑が断熱状態として行われるかどうか等に関して、ある種の潤滑相が存在することも明らかにしたことを付記しておく。これに関して、各相の基本的性質を統計物理的方法で考察して理解された。

本研究では、上述の結果以外にも類似の変調効果を利用した新奇な潤滑現象を調べた。関連する物理系として、周期構造をもつデバイス及び位相系において、そこで現れる新奇な潤滑関連現象の物理機構及び位相等の非線形ダイナミクスと非平衡現象の詳細を、上記と同様に統計物理学的な理論解析及びコンピュータシミュレーションの方法で明らかにした。この結果を含めた考察によって、新奇な潤滑現象の物理について包括的な理解が得られた。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計6件)

- ① Phase dynamics of a Josephson junction ladder driven by modulated currents, Takaaki Kawaguchi, Physica C, 査読有, in press. (2011).
- ② Directed transport and complex dynamics of vortices in a Josephson junction network driven by modulated currents, Takaaki Kawaguchi, Physica C, 査読有, Vol. 470, pp. 1133-1136 (2010).
- ③ Directed motion of vortices in a current-driven Josephson junction network, Takaaki Kawaguchi, Physica C, 査読有, Vol. 469, pp. 1102-1105 (2009).
- ④ Interfacial friction and related tribological phenomena at nanoscale, Takaaki Kawaguchi, Hiroshi Matsukawa, Proceedings of World Tribology Congress 2009, 査読無, pp. 256-256 (2009).
- ⑤ Current-driven dynamics in Josephson junction networks with an asymmetric potential, Takaaki Kawaguchi, Physica C, 査読有, Vol. 468, pp. 1329-1332 (2008).
- ⑥ 摩擦の素過程と動的制御の物理 — 理論的アプローチ —, 川口高明, 日本表面科学会誌・表面科学, 査読無, 第29巻, 第3号, 195-201頁 (2008).

[学会発表] (計9件)

- ① Spatiotemporal dynamics of a Josephson junction network under

- current modulation, T. Kawaguchi, The 23rd International Symposium on Superconductivity, Tsukuba, 2010 年 11 月 3 日.
- ② ナノ潤滑現象のダイナミクス, 川口高明, 松川宏, 日本物理学会 第 65 回年次大会, 岡山大学, 2010 年 3 月 21 日.
- ③ Complex dynamics of vortices in a Josephson junction network driven by modulated currents, T. Kawaguchi, The 22nd International Symposium on Superconductivity, Tsukuba, 2009 年 11 月 4 日.
- ④ Interfacial friction and related tribological phenomena at nanoscale, T. Kawaguchi, World Tribology Congress 2009, Kyoto, 2009 年 9 月 8 日.
- ⑤ ナノ摩擦現象と潤滑のダイナミクスV, 川口高明, 松川宏, 日本物理学会 第 64 回年次大会, 立教大学, 2009 年 3 月 30 日.
- ⑥ Directed motion of vortices in an ac-current driven Josephson junction network, T. Kawaguchi, The 21st International Symposium on Superconductivity, Tsukuba, 2008 年 10 月 28 日.
- ⑦ ナノ摩擦現象と潤滑のダイナミクスIV, 川口高明, 松川宏, 日本物理学会 秋季大会, 岩手大学, 2008 年 3 月 23 日.
- ⑧ ナノ摩擦現象と潤滑のダイナミクスIII, 川口高明, 松川宏, 日本物理学会 第 63 回年次大会, 近畿大学, 2008 年 3 月 25 日.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

川口 高明 (KAWAGUCHI TAKAAKI)
山梨大学・教育人間科学部・准教授
研究者番号：10273913

(2) 研究分担者

該当なし

(3) 連携研究者

該当なし