

平成22年 6月 7日現在

研究種目：若手研究 (B)

研究期間：2008～2009

課題番号：20760065

研究課題名 (和文) 粒子法を用いた境界潤滑のマルチスケールシミュレーション

研究課題名 (英文) Multiscale simulation for boundary lubrication by using particle method.

研究代表者

熊谷 知久 (TOMOHISA KUMAGAI)

東京大学大学院工学系研究科 助教

研究者番号：30456149

研究成果の概要 (和文)：原子レベルの表面形状の影響を受けるために、これまで難しかった固体表面間の摩擦シミュレーションは難しかった。本研究では原子レベルのシミュレーションの表面相互作用の強さを粒子のシミュレーションにおける表面粒子の相互作用力の強さとして取り入れた。現実と近いフラクタル形状を持つ表面を対象にこのような固体表面間の摩擦シミュレーションを実施したところ、実験値と近い摩擦係数が得られた。

研究成果の概要 (英文)：Imitating frictional phenomena between solid surfaces had been difficult since the surface shape in atomic level affected the phenomena. In this work, interactions between surface atoms obtained in molecular simulations are used as interaction between surface particles in particle method. As a result of such friction simulations for fractal surfaces, friction constants which were similar to experimental values were obtained.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2009年度	2,000,000	600,000	2,600,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,200,000	960,000	4,160,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学, 機械材料・材料力学

キーワード：摩擦係数, 粒子法, 第一原理計算, 分子動力学, マルチスケール解析, 酸化物

1. 研究開始当初の背景

摩擦試験の結果はばらつきが大きく、摩擦のメカニズムにも不明な点が多い。数値計算による摩擦の解析は条件を一定にできる上に、メカニズムについて調べることもできる。しかし、原子レベルからメカニズムを調べたくとも、スケール (時間, 空間) の問題から一

般的には摩擦の原子レベルからのシミュレーションはいまだ困難な状況にある。

2. 研究の目的

本研究においては、原子レベルの知見を反映したマルチスケール解析手法を確立することを目的とする。

(1)まずは、第一原理計算を用いて材料の摩擦試験の定性的な傾向を算出し、材料表面間の相互作用の強さを原子レベルから算出する。多くの材料が大気中では酸化しているため、酸化物を対象としてシミュレーションを行った。

(2)次に、この第一原理計算によって得られた相互作用の強さを粒子法における表面摩擦係数として用いるマルチスケール解析を行う。

(3)研究当初は炭素系材料も対象としていたため、これらの研究結果も記す。

3. 研究の方法

まず、Fig. 1 に示すように切り出した2つの酸化物結晶表面原子モデルを対向させた。面間隔を変化させたときのエネルギー曲線を描き、その勾配から適当な斥力が働く面間距離を選択し、このときの斥力を代表垂直斥力とした。酸化物の中でもイオン化ポテンシャルが大きく異なる NiO, TiO₂, WO₃ を計算対象とした。

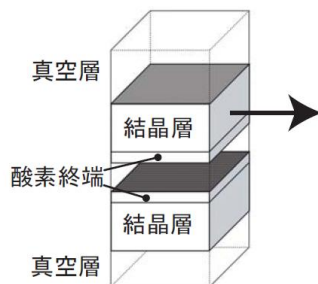


Fig.1 A snapshot of the sliding simulation in the particle method.

この面間距離を固定し、表面間に垂直方向に斥力が加わっている状態で、準静的にせん断方向に位置関係を変化させた。各位置での内部エネルギーからエネルギー曲線を作成し、その勾配を算出した。これをはじめに計算しておいた代表垂直方向の斥力で除し、無次元数 K (以下の式より定義) を求めた。この K の最大値 K_{max} を摩擦係数に関連すると考えられる。

$$K = \text{エネルギー勾配} / \text{代表垂直斥力}$$

第一原理計算には、密度汎関数法に基づく平面波擬ポテンシャル法ソフトウェア VASP[1]を用いた。

計算した K の値を疋田ら[2]が開発した2次元粒子法プログラムにおける表面摩擦係数として取り込む。この粒子法プログラムは弾塑性変形を取り扱うことができる。粒子法

においては、Fig. 2 に示すようなフラクタルな表面形状[3]の断面を剛体によって押し付けた後、この剛体をせん断させた。このとき、剛体を受ける抗力とせん断力の比から摩擦係数を求めた。

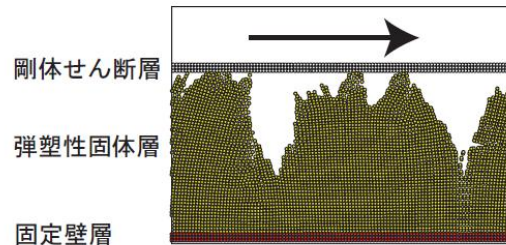


Fig.2 A snapshot of the sliding simulation in the particle method.

4. 研究成果

(1)酸化物摩擦係数の原因の解明

Fig. 3 に、K と実験値における酸化物の摩擦係数を示す。K はイオン化ポテンシャルが大きくなると減少する傾向にあり、定性的には、実験における摩擦係数の傾向と一致する。この傾向の差は NiO, TiO₂, WO₃ の金属結晶の配位数が異なるため、結晶構造が異なり、酸化物の遮蔽の効果が及んだためであろうと考えられる。即ち、WO₃ では酸素原子が多いためにその遮蔽効果が強く、NiO では酸素原子の数が少ないためにその遮蔽効果が弱い。しかし、定量的には実験における摩擦係数と大きな隔たりが残った。

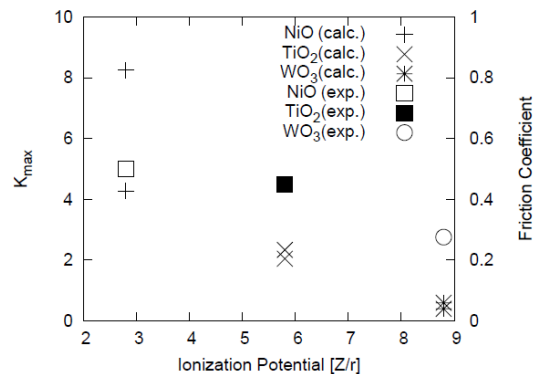


Fig.3 The K values of NiO, TiO₂ and WO₃. Experimental friction coefficients of them are also shown for comparison.

(2)粒子法による境界潤滑のマルチスケールシミュレーション

Fig. 4 に粒子法を用いて計算した摩擦係数の一例を示す。当初はせん断による塑性変形が起こり、大きな力の摩擦係数の変動が見られるものの、最終的な摩擦係数は定常的な値となった。このときの摩擦係数は第一原理計算によって計算された K の値よりも低く

なり、実験値と近づいた。

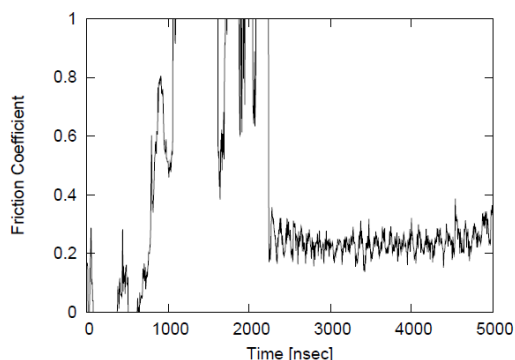


Fig. 8 A friction coefficient as a function of calculation time in the particle method.

(3)アモルファスカーボンのバルクおよび表面の構造解明

研究当初は近年摩擦材として広く注目を集めているアモルファスカーボン(a-C)を対象としていたため、これらに関する分子シミュレーションも行った。まずは、a-Cを古典分子動力学シミュレーションできるように原子間ポテンシャルを開発した。バルク構造の分子シミュレーションを行ったところ、名のグラファイト構造が多く含まれていることが明らかになった。さらにこのグラファイト構造のフォノンモードも調べた。また、Siが含まれているa-Cの場合は結合の軟化、Hが含まれている場合は内部変位によって構造が軟化していることを明らかにした。表面構造に関しては密度が低い場合、表面構造に5員環が含まれ、これによって表面構造が波打つことが明らかになった。

参考文献

- [1] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B, 47, 558 (1993).
- [2] Y. Hikita and T. Kato, World Tribology Congress 2009, 117.
- [3] B. N. J. Persson, J. Chem. Phys., 115, 3840 (2001).

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 3件)

- ①T. Kumagai, J. Choi, S. Izumi, T. Kato, Development of empirical bond-order-type interatomic potential for amorphous carbon structures, Journal of Applied Physics, Vol.105, 2009, 064310-1-10.
- ②T. Kumagai, J. Choi, S. Izumi, T. Kato, Structures and phonon properties of

nanoscale fractional graphitic structures in amorphous carbon determined by molecular simulations, Journal of Applied Physics, Vol. 107, 2010, 104307-1-6. (Virtual Journal of Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology, Vol. 21, Issue 22, 2010 に再録).

- ④T. Kumagai, S. Sawai, J. Choi, S. Izumi, T. Kato, Nanostructural interpretation for elastic softening of amorphous carbon induced by the incorporation of silicon and hydrogen atoms, Journal of Applied Physics, in press.

[学会発表] (計 6件)

- ①熊谷知久, 澤井周, 崔峻豪, 泉聡志, 加藤孝久, 原子シミュレーションによるアモルファスカーボンにおけるクラスター構造の検討, 日本機械学会第 21 回計算力学講演会, 2008年11月1日~3日, 琉球大学.
- ②T. Kumagai, S. Sawai, J. Choi, T. Kato, Ab-initio investigations of the atomic structures of Si-DLC films, World Tribology Congress 2009, 2009年9月8日, 京都市 国立京都国際会館.
- ③熊谷知久, 崔峻豪, 加藤孝久, タイトバインディング法を用いた DLC 膜のフォノンモードの解析, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 2009年10月11日金沢大学角間キャンパス.
- ④澤井周, 熊谷知久, 崔峻豪, 加藤孝久, 原子スケールシミュレーションによるシリコン添加ダイヤモンドライクカーボン膜の構造・特性評価, 日本機械学会第 22 回計算力学講演会, 2009年10月11日, 金沢大学角間キャンパス.
- ⑤熊谷知久, 炭素系薄膜の構造及び特性評価, 日本トライボロジー学会第 3 種研究委員会分子シミュレーションのトライボロジーへの応用研究会, 2010年3月26日, 東京大学本郷キャンパス. (招待講演)
- ⑥横井俊祐, 熊谷知久, 崔峻豪, 疋田康弘, 加藤孝久, 第一原理計算による酸化物表面相互作用の検討とその応用, 2010年5月21日, 札幌コンベンションセンター.

[図書] (計 0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計 0件)

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：

出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計0件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
特になし

6. 研究組織

(1) 研究代表者

熊谷 知久 (TOMOHISA KUMAGAI)
東京大学大学院工学系研究科 助教
研究者番号：30456149

(2) 研究分担者

()

研究者番号：

(3) 連携研究者

()

研究者番号：