# 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 1 2 日現在

機関番号: 82108

研究種目: 基盤研究(C)(一般)

研究期間: 2020~2022

課題番号: 20K04115

研究課題名(和文)真実接触部の原子挙動に基づくすべり速度変化に応答した摩擦力変化の解明

研究課題名(英文)What is the origin of friction force depending on the sliding velocity? Approach from atomic-scale behavior in real area of contact

#### 研究代表者

佐久間 博 (SAKUMA, Hiroshi)

国立研究開発法人物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・主幹研究員

研究者番号:20400426

交付決定額(研究期間全体):(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文):地球表層では、大地震を起こす断層・定常的にすべるクリープ断層・スロー地震を起こす断層など様々なタイプの断層が知られている。これらの違いを説明するために必要な断層物質の性質として、すべり速度の変化に応答した摩擦力の変化値(a値と呼ばれる)がある。しかしこのa値が物質の何の性質によって決まるのか未解明である。本研究では他の物質とは異なるa値を取る白雲母について摩擦試験や理論計算を行い、a値を決める物質の性質を明らかにすることを目的とした。結果として、白雲母の摩擦面にはせん断方向と垂直に線状構造が発達することがわかり、層間すべりや線状欠陥構造がa値を決める重要な性質であることがわかってきた。

研究成果の学術的意義や社会的意義 物質の摩擦物性は経験的な速度・状態依存則に従うことが知られているが、そのような経験則から摩擦挙動を予 測することが難しい。この経験則の背景にある物理を解明することができれば、予測性のある摩擦則の構築につ ながる。社会的には地震や地滑りの性質を理解することにつながり、将来的な防災への基礎となる。

研究成果の概要(英文): Various types of faults are known on the Earth's surface, including faults that cause major earthquakes, creep faults that slip steadily, and faults that cause slow earthquakes. One of the properties of fault materials necessary to explain these differences is the value of change in frictional force (called the a-value) in response to changes in slip velocity. However, it is still unclear what property of a material determines this a-value. In this study, we conducted friction tests and theoretical calculations on muscovite, which has a unique a-value from other materials, to clarify the properties of the material that determine the a-value. As a result, it was found that a linear structure developed on the friction surface of muscovite perpendicular to the shear direction, and that interlayer slip and dislocation structure may be clues to determine the a-value.

研究分野: 鉱物物理学

キーワード: 速度・状態依存摩擦則 直接効果 熱活性化過程 粘土鉱物 摩擦 分子動力学計算 断層 地すべり

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等に ついては、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

### 1.研究開始当初の背景

地球表層では、大地震を起こす断層・弱い地震のみで定常的にすべるクリープ断層・スロー地震を起こす断層など様々なタイプの断層が知られている。これらの違いを説明するパラメータの一つとして、(a-b)値が知られている。図 1 に(a-b)値の概念を示す。(a-b)値はすべり速度の増大に応じて、断層の摩擦力が増大しすべり停止に向かう安定型 (a-b)>0)断層の摩擦力が低下し大地震に至る不安定型 (a-b<0) を判断する基準である。

この (a-b) 値は、 $1970 \sim 80$  年代の岩石の摩擦試験により"経験的"に導出された速度・状態依存摩擦則の重要なパラメータである(Dieterich, 1979; Ruina, 1983)。速度・状態依存摩擦則が経験則であるため、その応用範囲は摩擦試験を実施した温度・応力・物質に限られる。より予測性のある摩擦則を構築するためには、これらのパラメータの物理的な背景を確立する必要がある。

これまで提案された仮説の中で、a については接触面での塑性変形等に起因する熱活性化過程 (Heslot et al., 1994 など)が有力であると多くの研究者が信じている。もしa が熱活性化過程に基づく現象に起因するとすれ

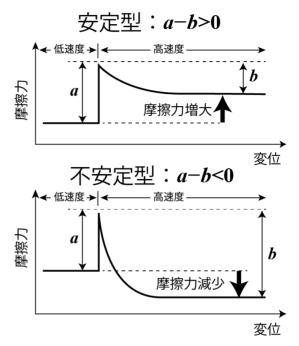


図1 摩擦試験での安定・不安定の概念

ば、a値は温度に比例する。これを支持する摩擦実験の結果が長石に関して報告され(Nakatani, 2001 など)、この仮説が常識とされている。

しかしながら、我々がアメリカ地質調査所 (USGS) の研究グループと白雲母単結晶の摩擦試験を実施したところ、温度の増加 (室温から  $473~\mathrm{K}$ ) に伴い、a 値が明確に減少した。この予察的な結果は、a を摩擦の熱活性化過程とする常識と相いれない。

#### 2.研究の目的

本研究の目的は、摩擦の a パラメータの起源を明らかとすることである。そのために層状結晶の摩擦を支配する物性を探索する。

# 3.研究の方法

過去の研究から摩擦が起きる真実接触部は、ギガパスカルを超える高圧かつ原子スケールの物性が重要であると認識されている。しかしながら、せん断中に真実接触部を原子スケールで直接観察する実験技術がいまだ確立されていない。そこで本研究では、高圧・高温で原子スケールの物性・挙動を再現することのできる分子動力学計算を用いる。またa値の挙動の違いは、物質

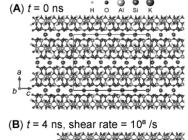
の違いと捉えることでそのメカニズムの解明に迫ることができるかもしれない。そこで比較対象として層間結合力の異なる雲母・粘土鉱物の摩擦試験・理論計算を実施する。

### 4. 研究成果

#### (1) 白雲母単結晶の摩擦試験と理論計算

USGS と共同で実施した白雲母単結晶の摩擦試験の回収試料を分析し、温度変化による摩擦挙動の変化を解明することを目指した。回収試料の摩擦面を走査電子顕微鏡(SEM)で観察したところ、せん断方向と平行に伸びた摩擦条線を確認した。またこの摩擦条線と垂直方向に伸びる線状の構造が発達することがわかった。これは摩擦試験前にはない構造であり、せん断により形成された構造である。

この観察結果から白雲母単結晶の摩擦には層間すべりか "Ripplocation"と呼ばれる線状欠陥構造が重要かもしれないことを見つけた。本研究では層間すべりのすべり速度・温度依存性を分子動力学計算で調べることとした。まず独自に開発してきた分子動力学計算のプログラムに、せん断変形に



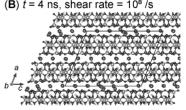


図 2 せん断変形における白 雲母の分子動力学計算

おける原子の取扱手法を組み込み、近接相互作用の最適化、並列化効率の最適化を実施した。この計算プログラムを用いて、白雲母のせん断に関するシミュレーションを行った(図2)。せん断速度を5桁の範囲で変化させた結果、高速せん断の場合には温度の増加と共に a 値が減少した。この傾向は摩擦実験で我々が予備的に得た結果と調和的であるが、実験とシミュレーションでせん断速度の絶対値に大きな差がある。一方で実験のせん断速度に近い低速せん断のシミュレーションでは、摩擦係数の温度依存性は見られなかった。このことは実際の白雲母のせん断速度・温度依存性を支配する要因が層間すべりではない可能性を示唆しており、Ripplocation による変形のすべり速度・温度依存性を今後調べる必要があることがわかった。

## (2) パイロフィライトの理論計算

パイロフィライトは、層間がファンデルワールス力により弱く結合した摩擦係数の小さい層状結晶である。この結晶の摩擦特性を調べるため、層間すべりの第一原理電子状態計算を実施した。パイロフィライトは化学組成が一定で結晶構造が X 線回折法や高分解能電子顕微鏡で良く記載されているため、層状結晶の変形機構を調べるためには良い結晶である。層間すべりの理論計算結果から、すべり時に安定・準安定な積層構造がいくつか確認されたが、この構造と安定性は高分解能電子顕微鏡で観察される積層構造(Kogure et al., 2006)と一致することが分かった(図3)。このことは本研究の理論計算が信頼できることを示唆している。計算による摩擦係数の理論値は、粉末のパイロフィライトの摩擦係数の実験値を説明できることが分かった。この結果からパイロフィライトにおいては、層間すべりが最も主要な摩擦変形機構であることが示唆された。

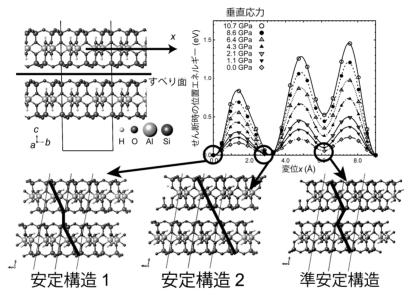


図3 せん断変形時のパイロフィライトの安定構造

#### (3) モンモリロナイトの理論計算と摩擦試験

モンモリロナイトは白雲母同様にケイ酸塩構造が負に帯電しているが、白雲母とは異なり層間に水を含んで膨潤する特徴を持つ粘土鉱物である。パイロフィライトよりも層間結合力が強く、白雲母よりも結合力の弱く、層間結合力としては中間に位置する層状結晶である。モンモリロナイトは摩擦係数が低く、大きな地震を起こさないクリープ断層の原因物質であると考えられている。USGS の共同研究者は、モンモリロナイト層間を結合している層間陽イオンを様々に交換した試料を準備した。この試料で摩擦試験を行うと、層間陽イオンのイオン半径が大きいほど摩擦係数が増加することが明らかとなった。そこでその原因を明らかにするため、パイロフィライト同様の理論計算を行った。結果として、層間陽イオンのサイズが大きくなるほど、せん断時に乗り越える必要のあるポテンシャルエネルギーバリアが高くなり、このことが摩擦力の増加につながることがわかった。また含水状態でも一部の層間イオンは脱水しており、そのため水による潤滑効果が低減していることが示唆された。この結果からも層間すべりがモンモリロナイトの摩擦を支配する大きな機構であることが分かった。

以上の 3 つの異なる層状結晶の理論計算と摩擦試験から、層間すべりが摩擦を支配する重要な変形機構であることが示唆されたが、白雲母に関しては層間すべり以外の変形機構(例えばRipplocation)を今後詳細に研究する必要のあることが明らかとなった。また本研究で開発した分子動力学プログラムで様々な温度・すべり速度における様々な結晶の a 値の変化を調べる必要がある。さらに摩擦時のすべり挙動を原子レベルで直接観察する手法の開発も今後の研究課題である。

# 5 . 主な発表論文等

「雑誌論文〕 計4件(うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件)

〔雑誌論文〕 計4件(うち査読付論文 4件/うち国際共著 1件/うちオープンアクセス 2件)	
1 . 著者名	4.巻
Sakuma Hiroshi、Kawai Kenji、Kogure Toshihiro	105
2.論文標題	5 . 発行年
Interlayer energy of pyrophyllite: Implications for macroscopic friction	2020年
3 . 雑誌名	6.最初と最後の頁
American Mineralogist	1204 ~ 1211
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.2138/am-2020-7333	有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著
1 . 著者名	4.巻
Okuda Hanaya、Katayama Ikuo、Sakuma Hiroshi、Kawai Kenji	12
2.論文標題 Effect of normal stress on the frictional behavior of brucite: application to slow earthquakes at the subduction plate interface in the mantle wedge	5 . 発行年 2021年
3.雑誌名	6 . 最初と最後の頁
Solid Earth	171~186
   掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)   10.5194/se-12-171-2021	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著
1 . 著者名	4.巻
Sakuma Hiroshi、Lockner David A.、Solum John、Davatzes Nicholas C.	3
2.論文標題	5 . 発行年
Friction in clay-bearing faults increases with the ionic radius of interlayer cations	2022年
3.雑誌名	6.最初と最後の頁
Communications Earth & Environment	-
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.1038/s43247-022-00444-3	有
オープンアクセス	国際共著
オープンアクセスとしている(また、その予定である)	該当する
1 . 著者名	4.巻
Okuda Hanaya、Kawai Kenji、Sakuma Hiroshi	一
2.論文標題	5 . 発行年
Atomic-scale interlayer friction of gibbsite is lower than brucite due to interactions of hydroxyls	2023年
3.雑誌名 American Mineralogist	6.最初と最後の頁
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)	査読の有無
10.2138/am-2022-8561	有
   オープンアクセス   オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著

〔学会発表〕 計5件(うち招待講演 1件/うち国際学会 2件)
1.発表者名 佐久間博、D. Moore、D. Lockner
2 . 発表標題 室温から高温における単結晶白雲母の摩擦における 直接効果の温度依存性
3 . 学会等名 日本鉱物科学会2021年年会
4. 発表年 2021年
1.発表者名 Sakuma H.、Kawai K.、Kogure T.
2 . 発表標題 Interlayer energy of pyrophyllite: Implications for interlayer structure and deformation
3.学会等名 The 4th Asian Clay Conference (ACC-2020), Fully-online conference (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2020年
1 . 発表者名 佐久間博、Moore D.E.、Lockner D.A.
2 . 発表標題 室温から高温における単結晶マスコバイトの速度・状態依存摩擦物性の測定
3 . 学会等名 JpGU-AGU Joint Meeting 2020: Virtual
4 . 発表年 2020年
1.発表者名 奥田花也、片山郁夫、佐久間博、河合研志
2.発表標題 乾燥および含水下におけるbruci teの弱く不安定な摩擦挙動
3 . 学会等名 JpGU-AGU Joint Meeting 2020: Virtual
4.発表年 2020年

1.発表者名
Okuda H.、Kawai K.、Sakuma H.
2 . 発表標題
First-principles investigation of brucite and gibbsite: An application to their macroscopic frictional characteristics
3.学会等名
AGU Fall Meeting 2020, Online(国際学会)
4.発表年
2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

\_

6.研究組織

_ 0	.研究組織						
	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考				
	片山 郁夫	広島大学・先進理工系科学研究科(理)・教授					
研究分担者							
	(10448235)	(15401)					
	河合 研志	東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・准教授					
研究分担者	(KAWAI Kenji)						
	(20432007)	(12601)					

# 7.科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
米国	U.S. Geological Survey			