

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成 25 年 5 月 16 日現在

機関番号： 13701

研究種目： 基盤研究(C)

研究期間： 2010 ~ 2012

課題番号： 22560140

研究課題名（和文） 清浄結晶表面の摩擦における原子論的エネルギー散逸機構の解明

研究課題名（英文） Evaluating energy dissipation mechanisms of friction on clean surfaces

研究代表者

平野 元久 (HIRANO MOTOHISA)

岐阜大学・工学部・教授

研究者番号： 50362174

研究成果の概要（和文）：

多体効果を考慮した精密な原子間ポテンシャルを第一原理電子状態計算と熱力学計算を活用して求め、この原子間ポテンシャルにより摩擦の原子論モデルの超潤滑の安定条件を超潤滑系の分子動力学計算により解明した。具体的には、超潤滑状態が現実的な摩擦条件のパラメータ領域として、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調べ、超潤滑の安定条件を示した。

研究成果の概要（英文）：

The total energy of contacting surfaces is invariant for sliding distance Q , resulting in vanishing frictional force. The increase in interfacial interactions, on the other hand, leads to the discontinuous motion of constituent atoms, resulting in the appearance of friction. We, thus, see the frictional force changes from vanishing to finite due to increased interfacial interactions. This is called friction transition. It has been examined that the occurrence of the friction transition by deriving its condition in various inter-metallic systems by using pair-wise inter-atomic potentials. The related experiment has been done for the frictional system of W(011) tips and Si(001) clean surfaces, and it has been concluded that the friction transition has not occurred in the frictional system. This study theoretically has clarified whether or not the friction transition occurs in the frictional systems by taking into account of many-body inter-atomic potentials.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2011年度	500,000	150,000	650,000
2012年度	200,000	60,000	260,000
総計	1,800,000	540,000	2,340,000

研究分野：機械工学

科研費の分科・細目：機械工学・設計工学・機械機能要素・トライボロジー

キーワード：摩擦，トライボロジー，超潤滑，エネルギー散逸機構

1. 研究開始当初の背景

原子論モデルの原子スケール摩擦研究により、表面間の原子間相互作用から現れる静摩擦と動摩擦の原子論的機構が理論的・実験的に調べられるようになった[1, 2]. 摩擦の原子論研究により、特異な現象として、定められた接触条件で固体摩擦が完全にゼロになる超潤滑の存在が理論的に示され、超潤滑の計算機実験や実証実験が進められてきた[2]. 最近のマイクロマシン技術を基礎とした超潤滑の観測は、次世代機械の摩擦制御などの超潤滑応用研究に大きな進展をもたらしている[3].

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

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)があるしきい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、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確に求めることが重要であり、このため注目する材料に適用できる信頼性の高い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1は摩擦転移の原子論モデルを示す.

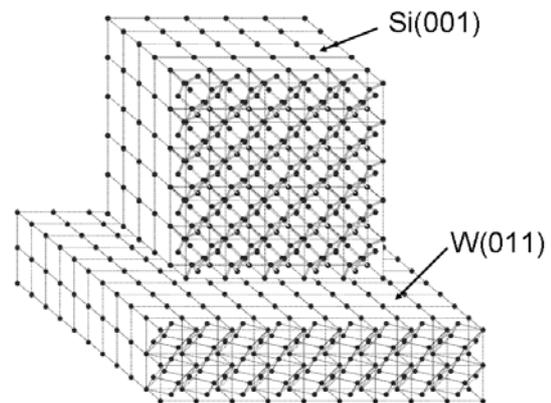


図1 摩擦転移の原子論モデル

4. 研究成果

(1) 現実系の多体原子間ポテンシャル

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1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。

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

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。

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

ここで、 $S = \theta/\lambda$ 、 $\alpha = \delta\epsilon$ 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。

$$D_e = ZA(S - 1) \exp(-\theta r_e) = ZABp^\epsilon \frac{S - 1}{S} \exp(-\lambda r_e) \quad (6)$$

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、これらの関係図2に示す。比例関係が示されている。表1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。

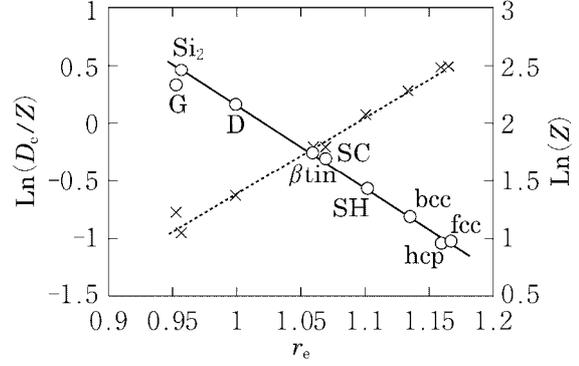


図2 ポテンシャルパラメータの関係

Table 1 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

(2) 超潤滑の安定性解析

シリコンとタングステンの摩擦モデルの摩擦転移を表1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1の原子論モデルを用いて、図3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。

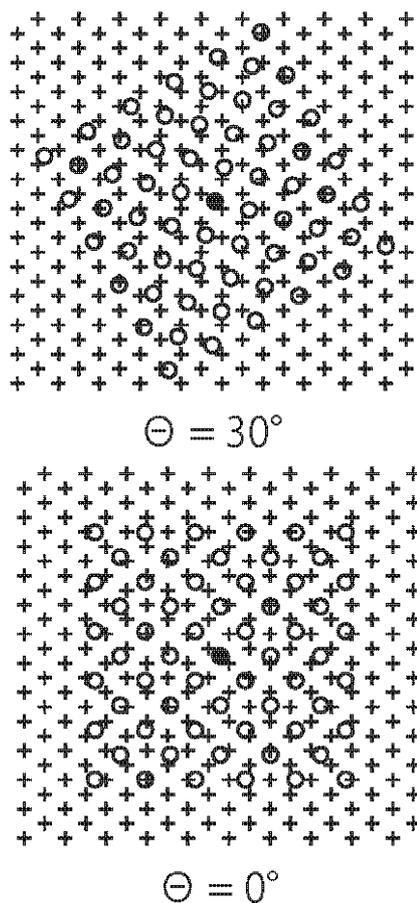


図3 摩擦転移の接触面モデル

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

〔雑誌論文〕(計1件)

- ① M. Hirano, H. Murase, T. Nitta, and T. Ito, "Evaluation of friction transition for metal-semiconductor interfaces using model potential comprising three-body contributions," Journal of Physics 258, 012014 (2010) pp.1-8. (査読あり)

〔学会発表〕(計5件)

- ①伊藤 伸, 平野元久, "温度制御下原子論的摩擦モデルの摩擦相図," 日本機械学会東海支部第62期総会・講演会, 2013年3月18日, 19日, 三重大学.
 ② M. Hirano, T. Nitta, and T. Ito, "Friction transition for metal-semiconductor interfaces," International Tribology Conference Hiroshima 2011, October 30-November 3, 2011, Hiroshima, Japan.T
 ③ M. Hirano, H. Murase, T. Nitta, and T. Ito, "Evaluation of friction transition at metal-semiconductor interfaces using model potential comprising three-body contributions," International Conference on Science of Friction, September 13-18, 2010, Ise-Shima, Mie, Japan.
 ④ . Nitta, K. Nishio, M. Hirano, and T. Katoh, "In situ observation of frictional interface of surface-molded elastomer during stick-slip steady sliding," {¥it International Conference on Science of Friction}, September 13-18, 2010, Ise-Shima, Mie, Japan.
 ⑤平野元久, "超潤滑技術の最前線," 日本機械学会2010年度年次大会講演資料集Vol.9, (2010) 389-390, 名古屋工業大学.

〔その他〕

ホームページ等

http://www1.gifu-u.ac.jp/~hira_lab/index_j.html

6. 研究組織

(1) 研究代表者

平野 元久 (HIRANO MOTOHISA)

岐阜大学・工学部・教授

研究者番号：50362174