

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 26 日現在

機関番号：33302

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2015～2016

課題番号：15K13419

研究課題名(和文) NEMS用人工材料の設計指針としてナノ動摩擦によるエネルギー散逸の予測法の開拓

研究課題名(英文) Search for Laws of Dynamic Nano-Friction as Guiding Principles to Design Artificial Materials for NEMS

研究代表者

林 啓治 (HAYASHI, Keiji)

金沢工業大学・工学部・教授

研究者番号：30281455

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：NEMS(ナノ電子機械)の使用時に摺動界面で起こるナノ動摩擦には、滑り速度が閾値を超えるとナノ動摩擦力がたがってエネルギー散逸レートが飛躍的に増大する閾現象が普遍的に見られ、物性パラメタに対する閾特性の依存性について閾法則が成り立つ。摺動界面で相接する結晶それぞれにおいて、滑りに伴い界面近傍に強制振動が引き起こされ、波として摺動方向に伝播する。位相整合条件を満たす格子振動モードの共鳴励起がきっかけとなり、原子間相互作用の非調和性を介したエネルギー散逸が促進される。位相整合条件に加え、前述の強制振動の時空パターンが、滑り速度の閾値および閾特性を決定づける鍵であることを、当該研究で突き止めた。

研究成果の概要(英文)：Laws of dynamic nano-friction (i.e., continuous wearless friction) accompanying steady sliding motion between crystal lattices constituting a nano-electromechanical system (NEMS) were searched for under steady spatial distributions of the local quasi-temperature, by molecular dynamics (MD) simulations. The temperature control of the non-conservative model was carried out by extending the isothermal MD method using thermostats. A threshold phenomenon was predicted as a common feature characterizing dependence of the wearless-frictional resistance on the sliding velocity. A simple relationship was found between the threshold sliding velocity and the lattice-constant ratio. A further insight into the heat-generation dynamics was provided by the analysis of the forced vibration of the crystal lattices caused by the sliding motion. These results suggested an atomistic mechanism of energy dissipation underlying the threshold characteristics.

研究分野：デバイスとプロセスの化学物理

キーワード：コンピュータ物理 メゾスコピック系 ナノトライボロジー ナノマシン 表面・界面物性 複雑系

1. 研究開始当初の背景

ナノ電子機械 (Nano-ElectroMechanical Systems) の使用時に摺動界面で起こる、《I》NEMSのパーツ同士が原子スケールに比べ広い面で接して常に擦れ、既に熱を持っている摺動部においてなお持続的に摩擦熱が発生し、かつ、《II》磨耗を伴わない弾性接触条件下の、動摩擦現象 (以上が当該研究での“ナノ動摩擦”の定義) について、精密に測定する実験技術は世の中で未だ確立されておらず、また、法則性の抽出を意図した、体系的かつ組織的なアプローチによるシミュレーション研究も、研究代表者の取り組み以前には見当たらなかった。

2. 研究の目的

当該研究では、非金属の固体同士を滑らせた際のナノ動摩擦について、法則性を洗い出すとともに、それらの法則性の原子論的由来を解明し、実験技術者が使いやすい‘NEMS用人工材料の開発・設計指針’として整備することを目的とした。

また、この取り組みを、実験に先立って先見的に分子シミュレーションを役立てる具体例としたい。従来、定量的な予測を目的とした分子シミュレーションは「昨日の実験結果を明日に予測する。」と揶揄されることもあった。これに対して当該研究の主題は、結晶の空間並進対称性に由来して散逸特性がどのような縛りを受けるかを明確にすることにあり、このような定性的な予測においては、分子シミュレーションが実験結果を待たずに断定的なことを言える先見的な道具となり得る。

3. 研究の方法

分子動力学 (MD) 法による、文献 [1] と同様のモデルおよび方法を用いたシミュレーション研究に取り組んだ。2個の結晶 A と C とを、原子スケールで平坦な界面において接触させ、界面に平行に一定の相対速度 (滑り速度 v_{stroke}) で滑らせて、その際のナノ動摩擦を解析した。界面から離れた、界面に平行な数原子層をバッファー層とし、そこを介して仮想熱浴と熱的に接触させることで、MD モデルにおける局所擬似温度 [2] の空間分布を

制御した。MD シミュレーションの各ランで得た結果について、局所擬似温度の空間分布が定常状態に至った以降、かつ、磨耗が発生する以前の時間範囲のデータのみを、ナノ動摩擦の解析に使用した。

対象が複雑系であり、しかも、メゾスコピック系においては不可避免的に熱的揺らぎが大きいことに留意し、膨大な量のシミュレーションデータを組織的にとって統計的に処理した。様々な実験条件のもとでのナノ動摩擦特性を系統的に整理し、熱的揺らぎに埋もれている法則性を抽出した。

4. 研究成果

(1) 荷重と摺動界面最近傍における局所擬似温度 T_l とのそれぞれを、所望の値に、滑り速度に依らず揃えるため、MD モデルの体積と仮想熱浴の目標温度との値の条件出しを行う必要がある。当該研究では、この条件出しをより効率的に行えるよう、多段線形予測法を編み出した。これにより、現実的な所要時間で、荷重と摺動界面最近傍における局所擬似温度とのいずれも、値を相対誤差 1%未満で、揃えることが可能となった。

荷重、および、摺動界面近くの局所擬似温度の空間分布に関して同じ条件下での、バッファー層から摺動界面までの原子層数 $n^{z,buffer}$ に対するナノ動摩擦力の依存性を解析した。共通の滑り速度でのナノ動摩擦力のアンサンブル平均値は、 $n^{z,buffer}$ の値を増やすに連れ、収束する。これらの解析に基づいて、ナノ動摩擦によりエネルギーが熱へ転化する摺動界面近傍の遷移領域を特定した。以下の図には、遷移領域よりも十分に厚いバルク MD モデルを用いて得た結果を示す。

滑り速度に対するナノ動摩擦力の依存性の典型例を図 1 に示す。動摩擦に伴うエネルギー散逸のレートは摩擦力と滑り速度との内積で与えられる。図 1 に見られるように、滑り速度を或る閾値 v_{th} より速く設定した場合のエネルギー散逸レートは、遅く設定した場合のそれに比べて、飛躍的に大きい。この“閾現象”はナノ動摩擦の普遍的な特徴である。

摺動界面における滑り方向の、結晶 A、C それぞれの格子定数 (原子配置の空間的な基

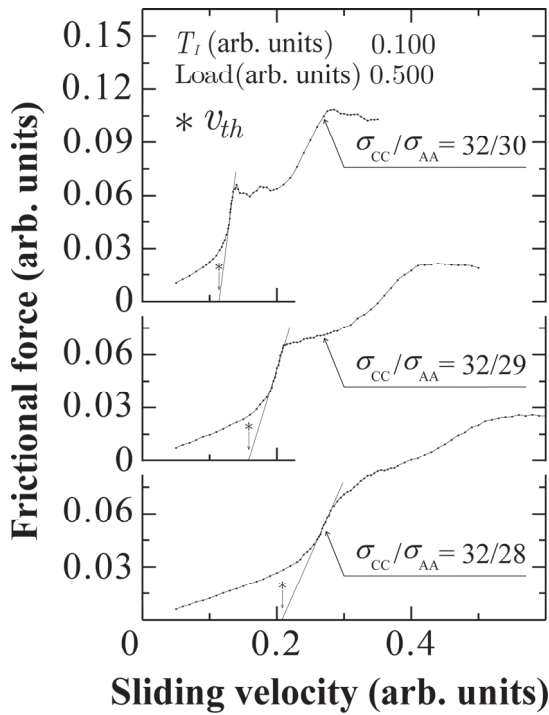


図 1 ナノ動摩擦力の滑り速度に対する依存性の典型例

本周期)を σ_{AA} 、 σ_{CC} とする。滑り速度の閾値 v_{th} と格子定数比 σ_{CC}/σ_{AA} との間には、図 2 におけるほぼ直線関係の類の、簡明な関係が、一般に成り立つ。

(2) 物体同士の(ナノ動摩擦に限らず一般に)動摩擦による熱発生は、物体を構成する原子の間にはたらく力に非線形性があるが故に起こる。そのプロセスは、原子間相互作用の非調和性を介したノーマルモード間のエネルギー移動によって、

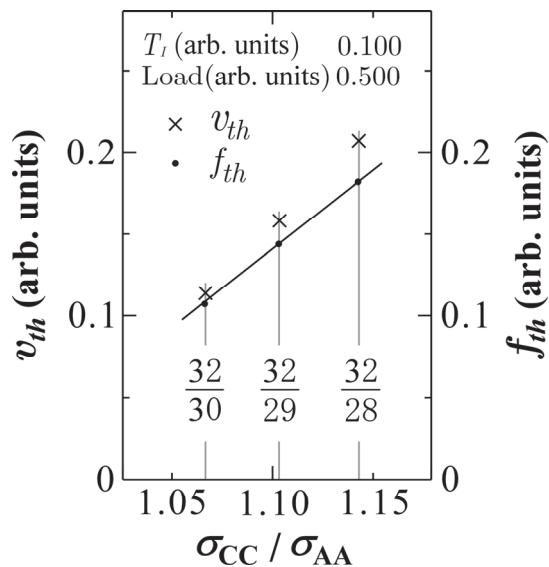


図 2 滑り速度の閾値 (、および、強制振動数の閾値) と格子定数比との関係

広範なノーマルモードの格子振動のインコヒーレントな励起に至り、フォノンの熱分布へ近づくことで完結する。

この前提のもとでナノ動摩擦に関してはなぜ閾現象が現れるのか、以下の原子論的機序によることを当該研究で明らかにした。

[第 1 ステップ] 摺動界面で相接する結晶それぞれにおいて、滑りに伴い、界面近傍に、まず、強制振動が引き起こされる。それぞれの強制振動は摺動方向に空間的周期性をもつ。

[第 2 ステップ] 強制振動からのコヒーレントなエネルギー移動が正味で起こり得る先は、格子振動の様々なノーマルモードのうち、“位相整合条件”を満たすモード(以下では位相整合モードと略記)、すなわち、強制振動と同様の空間的周期性を摺動方向に有するモード、に限られる。強制振動数(washboard frequency) v_{stroke}/σ_{CC} に一致する固有振動数の位相整合モードが存在する滑り速度では、強制振動からそれらの位相整合モードへ共鳴的にエネルギー移動が起こる。位相整合条件は、摺動界面で相接する結晶の表面の、摺動方向に沿った空間並進対称性由来しており、励起の空間選択則として位置づけられる。

[第 3 ステップ] それらの位相整合モードへの共鳴的なエネルギー移動をきっかけとする経路でのエネルギー散逸のレートが増大し、閾現象が現れる。

以上に述べた閾現象発現機序を踏まえると、“閾法則”として、強制振動数の閾値 $f_{th} \triangleq v_{th}/\sigma_{CC}$ と格子定数比との間に成り立つ関係には、摺動界面で相接する結晶におけるフォノン分散関係が、そのまま反映されていることが分る。その鍵は、閾現象のきっかけとなる位相整合モードの共鳴励起にある。一方において、格子振動のノーマルモードのうち、どれが位相整合条件を満たすかは、滑る相手の結晶との格子定数比に依存して決まる。他方において、強制振動数は滑り速度に比例する。ところで、格子振動のノーマルモードについて、固有振動数と波数ベクトルとの間にはフォノン分散関係がある。かくして、位相整合モードの共鳴励起の起こる滑り速度

が、格子定数比と、関係づけられる。同じ位相整合条件を満たすノーマルモードが複数あるうちで、固有振動数の最も低いモードが共通励起される、滑り速度の大きさが、滑り速度の閾値に他ならない。

MD シミュレーションに際して結晶 C における各 C 原子の相対配置を平衡配置に固定することで、閾現象の発現機序への結晶 A の格子振動の関与に焦点を絞って解析した。図 3 では、滑り速度を強制振動数へ換算し、横軸とした。結晶の摺動界面近傍に引き起こされる強制振動は、摺動方向に空間的周期性をもち、波として捉えたとき、波数ベクトルの摺動方向成分が $1/\sigma_{CC} - 1/\sigma_{AA}$ となる。

滑りに伴って結晶 A の摺動界面近傍に引き起こされる強制振動の周期に一致した時間間隔での各 A 原子の変位をサンプリングし統計処理を施すことで、この強制振動を、熱運動が支配的な原子集団の運動から単離した。

結晶 A を構成する各 A 原子の運動として熱運動を無視し強制振動のみを仮定した場合のナノ動摩擦力を、強制振動数の関数として、図 4 に黒色のプロットで示す。閾値を超えた閾値近傍の滑り速度領域において、エネルギーは主として強制振動を介した経路で散逸することが、図 4 から分る。

結晶 A に引き起こされる強制振動について、局所擬似温度の空間分布が定常的になっている時間範囲の或る瞬間における、摺動界面近傍の原子それぞれの運動状態を可視化した。

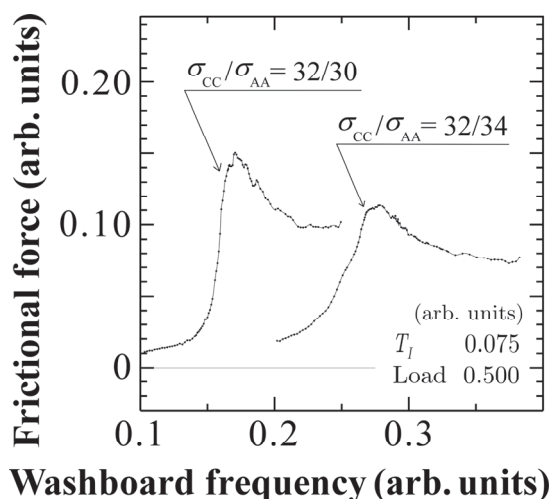


図 3 強制振動数に対するナノ動摩擦力の典型的な依存性 (各 C 原子の相対配置は平衡配置に固定)

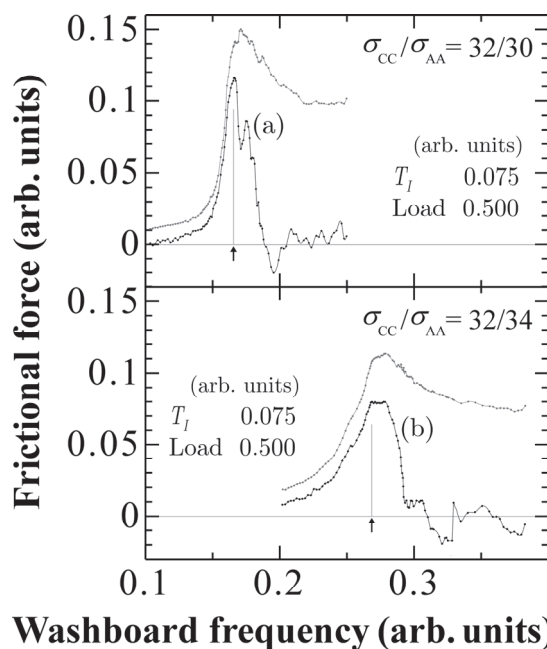


図 4 各 A 原子の運動として強制振動のみを仮定した場合のナノ動摩擦力の、強制振動数に対する依存性 (各 C 原子の相対配置は平衡配置に固定)

典型例として、強制振動のみを仮定した場合のナノ動摩擦力が最大となる滑り速度での、各 A 原子の、定常状態における平均位置からの変位を、大きさ 10 倍の矢印で図 5 に表す。まず、この強制振動が滑り方向に進行する波となること、および、その波の波数ベクトルの滑り方向成分は理論式 $1/\sigma_{CC} - 1/\sigma_{AA}$ と符合すること、が図 5 から見てとれる。さらに、図 5 において、摺動界面最近傍の A 原子のうち、平均位置の真上に C 原子のいるものは相対的に沈んでいるが、A 原子が最も沈み込んでいる位置は C 原子が真上にいる位置とずれており、すなわち位相差がある。このことが主要因となって結晶 C に、正味で、進行を妨げる向きのナノ動摩擦力がはたらくことが、より詳細な解析から分った。

(3) 例えば、結晶 A の格子定数 σ_{AA} は共通のもと、格子定数比 σ_{CC}/σ_{AA} が 32/30 なる MD モデルと 32/34 なる MD モデルとで比べると、強制振動に関し波数ベクトルの摺動方向成分 $1/\sigma_{CC} - 1/\sigma_{AA}$ の大きさは等しい。にもかかわらず、図 3 に見るように、強制振動数の閾値 f_{th} は異なる。一般に、結晶 A より C の格子定数が大きいモデルの方が小さいモデルよりも、閾値は強制振動数の低

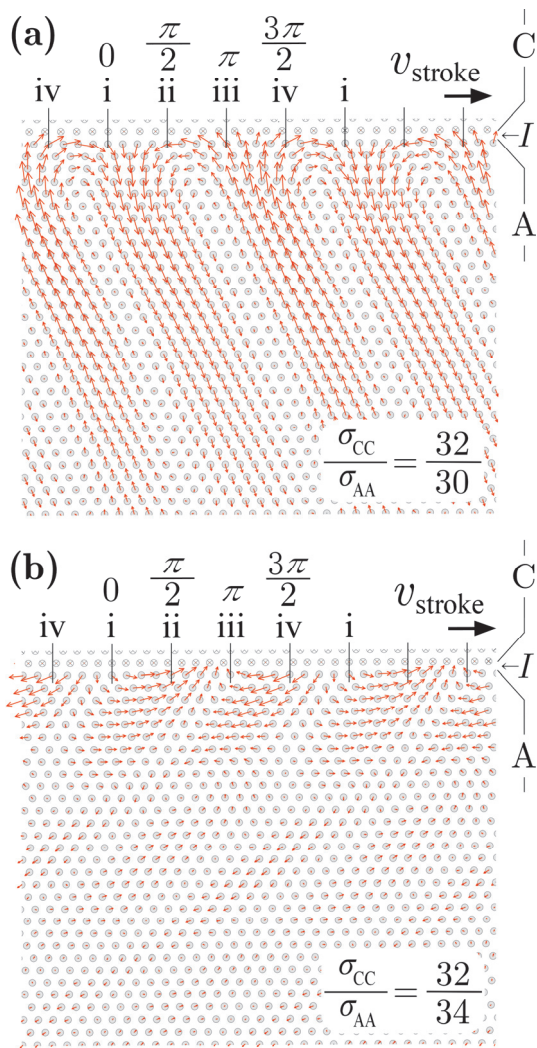


図 5 滑り速度が常に一定の状況下での、強制振動による各 A 原子の平均位置からの変位

い領域に現れる。当該研究で、このような閾値の食い違いが生ずる原子論的由来の明確化に取り組んだ。この取り組みから、位相整合条件に加え、摺動界面で相接する結晶における強制振動の時空パターンが、強制振動数の閾値およびナノ動摩擦の閾特性を決定づける鍵であることを突き止めた。具体的には、結晶 A における強制振動の時空パターンは、摺動界面近傍の各 A 原子に結晶 C からはたらく力の、摺動界面に垂直な成分と平行な成分との向きの兼ね合いにより決まる (図 5)。結晶 A より C の格子定数が大きいモデルと小さいモデルとでは、そのうち、垂直な成分の向きは同じになる一方、平行な成分の向きは逆になる。強制振動の時空パターンの相違により、共鳴的にエネルギー移動が起こる先の格子振動のノーマルモードが異なるため、それらノ

ーマルモードの固有振動数の差に由来して、強制振動数の閾値に食い違いが生ずる。

<引用文献>

- [1] K. Hayashi *et al.*, Computer Physics Communications, 182, 2011, 2032.
- [2] K. Hayashi *et al.*, Computer Physics Communications, 179, 2008, 98.

5. 主な発表論文等

[学会発表] (計 16 件)

- ① 池田 聖、齋藤 公希、東側 大輝、玉置賢人、林 啓治、ナノ動摩擦特性の予測指針確立へ向けた閾特性の決定諸要因の解明 (V)、日本物理学会 第 72 回 年次大会 (2017 年)、2017 年 3 月 20 日、大阪大学 豊中キャンパス (大阪府・豊中市)
- ② 町野 太樹、池田 聖、東側 大輝、林 啓治、NEMS 摺動界面に用いる人工材料設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究 (I)、第 30 回 分子シミュレーション討論会、2016 年 12 月 1 日、大阪大学 豊中キャンパス (大阪府・豊中市)
- ③ 齋藤 公希、町野 太樹、林野 光輝、林 啓治、NEMS 摺動界面に用いる人工材料設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究 (II)、第 30 回 分子シミュレーション討論会、2016 年 12 月 1 日、大阪大学 豊中キャンパス (大阪府・豊中市)
- ④ 小松 央征、齋藤 公希、中野 高嗣、林 啓治、NEMS 摺動界面に用いる人工材料設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究 (III)、第 30 回 分子シミュレーション討論会、2016 年 12 月 1 日、大阪大学 豊中キャンパス (大阪府・豊中市)
- ⑤ 池田 聖、小松 央征、林野 光輝、林 啓治、NEMS 用人工材料の開発・設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究 (V)、2016 年度 日本物理学会北陸支部 定例学術講演会、2016 年 11 月 26 日、富山大学 五福

キャンパス（富山県・富山市）

- ⑥ 東側 大輝、中野 高嗣、林 啓治、NEMS 用人工材料の開発・設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究（VI）、2016 年度 日本物理学会北陸支部 定例学術講演会、2016 年 11 月 26 日、富山大学 五福キャンパス（富山県・富山市）
- ⑦ 齋藤 公希、町野 太樹、林 啓治、NEMS 用人工材料の開発・設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究（VII）、2016 年度 日本物理学会北陸支部 定例学術講演会、2016 年 11 月 26 日、富山大学 五福キャンパス（富山県・富山市）
- ⑧ 池田 聖、小松 央征、林野 光輝、町野 太樹、林 啓治、ナノ動摩擦特性の予測指針確立へ向けた閾特性の決定諸要因の解明（II）、日本物理学会 2016 年 秋季大会、2016 年 9 月 16 日、金沢大学 角間キャンパス（石川県・金沢市）
- ⑨ 林野 光輝、池田 聖、小松 央征、中野 高嗣、林 啓治、ナノ動摩擦特性の予測指針確立へ向けた閾特性の決定諸要因の解明（III）、日本物理学会 2016 年 秋季大会、2016 年 9 月 16 日、金沢大学 角間キャンパス（石川県・金沢市）
- ⑩ 小松 央征、林野 光輝、池田 聖、東側 大輝、林 啓治、ナノ動摩擦特性の予測指針確立へ向けた閾特性の決定諸要因の解明（IV）、日本物理学会 2016 年 秋季大会、2016 年 9 月 16 日、金沢大学 角間キャンパス（石川県・金沢市）
- ⑪ 中野 高嗣、小松 央征、池田 聖、林野 光輝、林 啓治、ナノ動摩擦特性の予測指針確立へ向けた閾特性の決定諸要因の解明（I）、日本物理学会 第 71 回 年次大会（2016 年）、2016 年 3 月 20 日、東北学院大学 泉キャンパス（宮城県・仙台市）
- ⑫ 池田 聖、林野 光輝、町野 太樹、中野 高嗣、林 啓治、NEMS 用人工材料の開

発・設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究（III）、2015 年度 日本物理学会北陸支部 定例学術講演会、2015 年 11 月 28 日、金沢大学 角間キャンパス（石川県・金沢市）

- ⑬ 小松 央征、中野 高嗣、町野 太樹、戎井 惇史、林 啓治、NEMS 用人工材料の開発・設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究（IV）、2015 年度 日本物理学会北陸支部 定例学術講演会、2015 年 11 月 28 日、金沢大学 角間キャンパス（石川県・金沢市）
- ⑭ 池田 聖、東側 大輝、玉置 賢人、林 啓治、NEMS 摺動界面の材料設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究（I）、日本物理学会 2015 年 秋季大会、2015 年 9 月 17 日、関西大学 千里山キャンパス（大阪府・吹田市）
- ⑮ 中野 高嗣、町野 太樹、池田 聖、林 啓治、NEMS 摺動界面の材料設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究（II）、日本物理学会 2015 年 秋季大会、2015 年 9 月 17 日、関西大学 千里山キャンパス（大阪府・吹田市）
- ⑯ 町野 太樹、中野 高嗣、林野 光輝、戎井 惇史、林 啓治、NEMS 摺動界面の材料設計指針としてのナノ動摩擦法則の探究（III）、日本物理学会 2015 年 秋季大会、2015 年 9 月 17 日、関西大学 千里山キャンパス（大阪府・吹田市）

6. 研究組織

(1) 研究代表者

林 啓治 (HAYASHI, Keiji)
金沢工業大学・工学部・教授
研究者番号： 30281455