

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 5 年 6 月 21 日現在

機関番号：12101

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K04235

研究課題名(和文) 実験結果を考慮した分子動力学解析の新たな試みによる弱点克服とトライボ現象の解明

研究課題名(英文) Overcoming weaknesses and elucidating tribological phenomena by a new trial of molecular dynamics analysis considering experimental results

研究代表者

清水 淳 (Shimizu, Jun)

茨城大学・理工学研究科(工学野)・教授

研究者番号：40292479

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)：分子動力学によるすべり摩擦・摩耗や表面機械加工現象のシミュレーション結果と実験結果との乖離は、従来から問題となっている。その大きな原因として、大気や潤滑剤、物質の内部欠陥などを適切に考慮したシミュレーションが難しいことが挙げられる。本研究では、その克服を目指し、接触実験結果や文献調査の結果などから類推した原子間ポテンシャルを分子動力学モデルに導入する手法を提案した。単結晶の銅や亜鉛、シリコンに対するダイヤモンドによるすべり摩擦・摩耗や引っかかり過程へのその応用を試みた結果、シミュレーションと実験との結果を定量的に比較できるレベルに歩み寄りを図れることが明らかになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

周囲環境や材料欠陥などを忠実に考慮した分子シミュレーションモデルを構築するには、第一原理分子動力学ないしそれに準じた方法を採用する必要があるが、扱える原子の数や計算容量の限界から、それを実際のすべり摩擦・摩耗や表面機械加工などの現象のシミュレーションに当てはめることは困難である。その問題を、接触実験結果や文献調査の結果などから類推した原子間ポテンシャルを分子動力学モデルに導入することにより解消する本試みは、学術的に新たな手法であり、その成果は多様な分野の発展に貢献し得るものである。

研究成果の概要(英文)：The discrepancy between the results of molecular dynamics simulations of sliding friction/wear and surface machining phenomena and the results of actual experiments has long been a big problem. One of the major reasons for this is the difficulty of simulations that properly account for atmospheric conditions, lubricants, and internal defects of materials. To overcome this problem, we proposed a method to introduce interatomic potentials, which are analogous to the results of contact experiments and literature surveys, into molecular dynamics models. The application of the method to sliding friction/wear and scratching processes by diamond on single crystals of copper, zinc, and silicon has shown that it is possible to approach a level where the results of simulation and experiment can be quantitatively compared.

研究分野：トライボロジー

キーワード：分子動力学 原子間ポテンシャル 摩擦 接触試験 環境 スクラッチ

1. 研究開始当初の背景

自動車や半導体をはじめ、機械要素を用いた精密装置やデバイス開発先進技術の発展には、しゅう動要素の開発・改良、部品の機械加工や塑性加工、表面改質、摩擦・摩耗・潤滑技術の開発・改良が不可欠である。各種精密部品の精度は、表面加工や改質の状況に左右され、それは摩擦・摩耗・潤滑状態に左右される。近年の先進デバイスの精度はとりわけ半導体に至ってはナノレベル未満に到達し、また、空気静圧軸受け表面粗さもナノレベル、流体軸受けの浮上量はナノレベルが求められるというように、製品の製造と使用環境は原子ないしナノレベルの域になっている。よって、面同士や軸と軸受け間、工具と工作物間の摩擦・摩耗・潤滑を原子スケールで根本的に解明し、次の製品や技術の開発に活かすことが強く求められている。

原子スケールで摩擦・摩耗・潤滑や表面加工現象を解明する一手法として、分子動力学シミュレーションに対する期待は大きく、各種現象の解析に広く役立っている。しかし、シミュレーション結果と実機実験結果との間にはオーダ的な乖離があり、シミュレーションは定性的な現象の解釈に役立つものの、定量的な比較は困難という課題が解消されずにいる。その原因として、実現象を忠実にモデル化したシミュレーションが難しいことが挙げられる。

一方、第一原理や Tight-binding 分子動力学は、原子間相互作用の記述に経験的な要素がほぼないことから、数～百原子程度の系による極界面における原子・分子同士の接触や摩擦における、とくに化学反応の解明に利用され、そのスケールでの現象解明に役立っている。しかし、計算容量の制約から、高々百原子強の系を扱うのが限界で、製品開発において求められる塑性変形や材料除去、熱伝導などを伴う摩擦・摩耗現象の予測・解明への利用は困難である。

2. 研究の目的

本研究では、背景において示したような分子動力学シミュレーションの弱点を克服する手法として、分子動力学シミュレーションにおいて必須で、元来はバルク材料物性や第一原理計算から得られてきた同種や異種原子間の原子間ポテンシャルエネルギー関数には頼らず（基準にはするが）、代わりに①独自に微視的レベルで実施した接触実験結果を基に改めた原子間ポテンシャル関数を用い、②そこにさらに環境（化学作用を含む）や酸化膜の影響を考慮した表面や亜表面の変質層をモデル化して取り入れることにより、表面すべりや表面加工現象のシミュレーションを遂行する手法を提案することを目的とする。そして、応用として超精密切削・研削として精密金型や半導体基板の加工に用いられる、ダイヤモンド（または低強度の炭素系硬質膜）を工具とし、銅や亜鉛、シリコンのアプレシブ摩擦・摩耗ないしスクラッチ過程における現象を対象に検討し、実トライボロジー現象の定量的評価に耐えるような新しい半経験的理論解析技術を開発する。

3. 研究の方法

(1) ナノ接触実験によるスライダ試料間の原子間ポテンシャルの推定（酸化膜の考慮）

走査型プローブ顕微鏡に搭載したナノインデンタを用い、ナノ接触（押し込み・除荷）実験を行なう。大気中で(001)面を表面とする銅 (Cu) 単結晶試料に対し、先端半径 100 nm の単結晶ダイヤモンド (C) 製の Berkovich 圧子により押し込み・除荷を行なう。図 1 に、荷重曲線と圧痕の模式図を示す。試料-圧子間の解離エネルギー（原子間ポテンシャルパラメータの一つ）の算定には、凝着圧力 P_A （除荷時の最大凝着力/圧痕の投影面積）より求める。

図 2 は、次の手順で行なうナノ接触実験の模式図である。①洗浄後に大気中に露出させた鏡面試料（表層に酸化膜が存在）に対し、圧痕形成に十分な荷重で圧子を押込む。これにより酸化膜は破れ、圧子とバルク試料が接触する。②除荷を行う。その過程で圧子-バルク試料間の最小荷重 (C-Cu 間の凝着圧力を求める際に利用) が観測される。③10 分間試料を大気中に露出させ圧痕表面に自然酸化膜 (Cu_xO とする) を形成させる。④圧痕に対しできるだけ圧痕を増大させない低い荷重で圧子を押込む。これにより圧子と試料表面の酸化膜が接触する。⑤除荷を行う。その過程において圧子-試

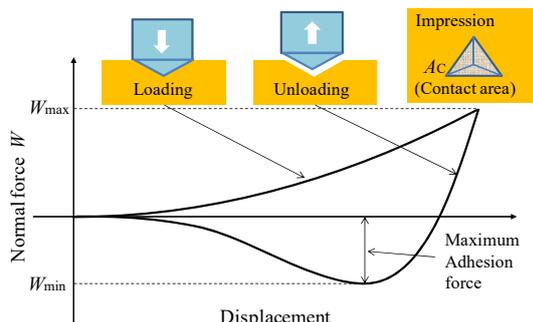


図 1 押し込み・除去試験の模式図と最大凝着力

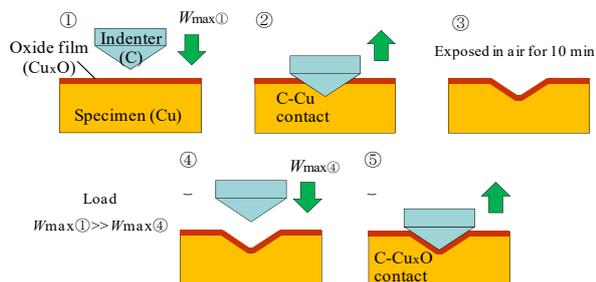


図 2 ナノ接触実験の手順

料表面酸化膜間の最小荷重（最大凝着力、 $C-Cu_xO$ 間の凝着圧力を求める際に利用）が観測される。

ナノ接触実験結果との対比に用いる押し込み・除去の分子動力学シミュレーションモデルは、試料に銅単結晶、圧子（スライダ）に完全剛体ダイヤモンドを想定する。試料表面は $Cu(001)$ 面とし、試料の解析領域（ $30\text{ nm} \times 30\text{ nm} \times 4\text{ nm}$ 、塑性変形までは扱わないため厚さは 4 nm ）の境界には、温度制御用の 2 原子層を設けてそれより外側は剛体とする。解析領域内部から力学的エネルギーの伝達がある場合、温度制御層により散逸し剛体層の影響は極力排除される。圧子の先端半径は、ナノ接触実験に用いられているものと同等の 100 nm としている。 $Cu-Cu$ 間および $C-Cu$ 間の相互作用には、Morse ポテンシャルを用いる。結合の強さを表す Morse ポテンシャルの解離エネルギー D に制御係数 C_E をかけることにより、二原子間の結合強度を制御する。

一例として、 $C_E = 0.1$ でシミュレーションして得られた、垂直荷重が最小となった時点の接触部断面の原子配列を図 3 に示す。 C_E を変化させてシミュレーションした結果、図 4 に示したような C_E と P_A との関係が得られた。ナノ接触実験値を図 4 中の外挿式にあてはめることにより、 C_E は $C-Cu$ については 0.03 程度、 $C-Cu_xO$ については 0.01 未満と求められた。よって、真空中の引き離し試験結果を基本として求めた解離エネルギー D に比べ、 $C-Cu$ であっても顕著に小さく、 $C-Cu_xO$ に至っては $1/100$ 程度になることがわかった。

酸化膜 Cu_xO の強度は推定が難しいため、 $Cu-Cu$ の解離エネルギー D に対し、 $C_E = 0.5$ 、 2 として検討し、すべり試験結果と摩擦係数がより近いものが現実に近いと考えた。

(2) ナノ接触試験と酸化膜強度を考慮したすべり過程の分子動力学シミュレーション

試料に単結晶銅、スライダに単結晶ダイヤモンドを想定し、試料とスライダの解析領域に分子動力学計算を適用する。試料表面は $Cu(001)$ 面とし、試料の解析領域（ $40\text{ nm} \times 8\text{ nm} \times 4\text{ nm}$ ）の境界には、温度制御用の 2 原子層を設けてそれより外側は剛体とする。試料の解析領域内部から力学的エネルギーの伝達がある場合、温度制御層により散逸する。試料表面において酸化膜の影響を考慮する場合、試料最上層から 3 層までの強度をバルクに対して変化させてあてはめる。スライダの解析領域より上方に温度制御層を、さらにその上方に剛体層を設置する。スライダの先端半径は 4.5 nm とする。図 5 にシミュレーションモデルを示す。

前節と同様に、バルクの $Cu-Cu$ 間と真空中の引き離し実験から求めた $C-Cu$ 間の相互作用の既述には、Morse ポテンシャルを用いる。一方、凝着圧力を介し、ナノ接触実験と分子動力学シミュレーションを比較し求めた $C-Cu$ 間と $C-Cu_xO$ 間の相互作用、および酸化膜 Cu_xO-Cu_xO 間の強度は、 D を D^* に改めることで表す。具体的には、基準の D に対して $D^*_C-Cu = 0.0343D$ 、 $D^*_C-Cu_xO = 0.00934D$ 、強度が不明である酸化膜については基準の D に対して $D^*_Cu_xO-Cu_xO = 0.5D$ 、 $2D$ とした。各ポテンシャル曲線を図 6 に示す。 $Cu-Cu$ に比べナノ接触実験から求めた $C-Cu$ と $C-Cu_xO$ の井戸は浅く、結合（凝着）が弱いことがわかる。

(3) 摩擦力顕微鏡 (FFM) によるすべり摩擦実験

シミュレーション結果との比較のため、走査型プローブ顕微鏡の FFM（摩擦力顕微鏡）機能

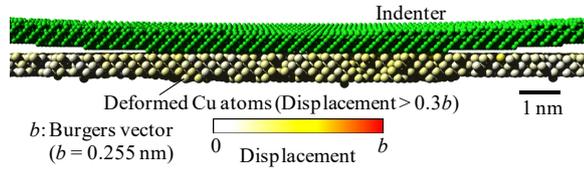


図 3 分子動力学による接触シミュレーション例 ($C_E = 0.1$)

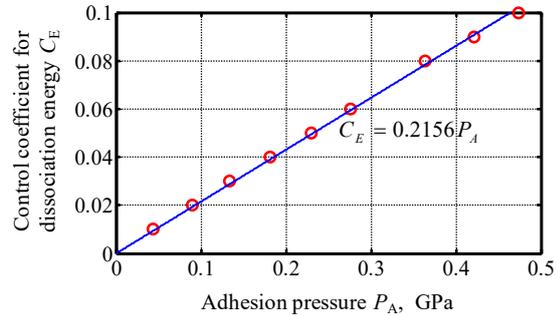


図 4 C_E と P_A との関係

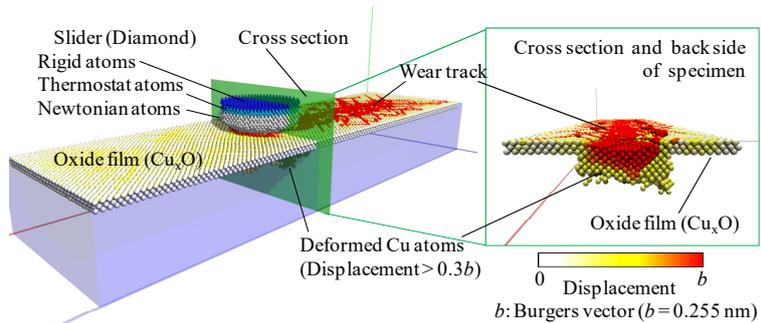


図 5 すべり過程の分子動力学シミュレーションモデル

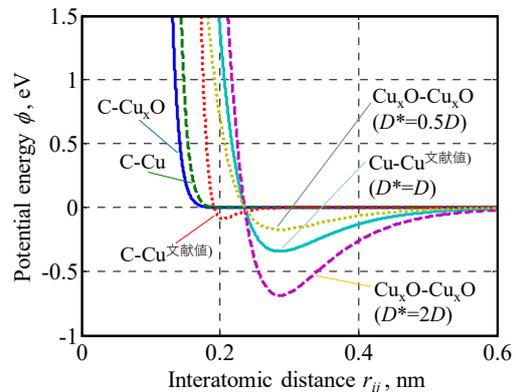


図 6 Morse ポテンシャル関数

を用い、カンチレバの長手方向に対し垂直の方向に垂直荷重（たわみ）一定で走査（すべり）し、カンチレバのねじれ検出を利用した摩擦力の測定を試みる。図 7 に、スライダに相当するダイヤモンドプローブの電顕（SEM）写真と無酸素銅試料の外観を示す。すべり試験はドライ環境で実施し、まず試験前の試料表面性状把握のため、 $20\ \mu\text{m} \times 20\ \mu\text{m}$ の領域を低荷重（ $0.19\ \mu\text{N}$ ）で FFM 測定する。次に、その FFM 測定した領域の中央に位置する $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ の領域を、ピッチ $1.25\ \mu\text{m}$ で 128 回に分割して FFM 測定することにより、すべり試験する。その後、試験した $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ の領域が中央に来るようにしつつ、最初の FFM 測定と同様な $20\ \mu\text{m} \times 20\ \mu\text{m}$ の領域を低荷重（ $0.19\ \mu\text{N}$ ）で FFM 測定し、すべり摩擦による表面の変化を観察する。摩擦試験と測定に用いるプローブは同じものである。摩擦力は、上述した $10\ \mu\text{m} \times 10\ \mu\text{m}$ の領域の走査における摩擦力の平均から求める。

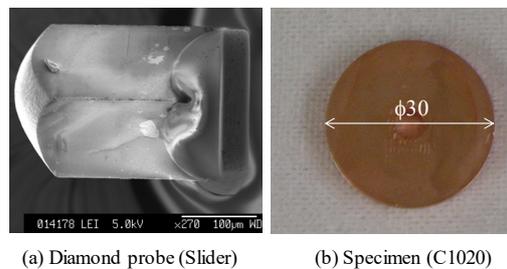


図 7 プローブの SEM 写真と無酸素銅試料外観

4. 研究成果

(1) すべり摩擦シミュレーション結果

ナノ接触実験結果を反映したモデルを用い、速度 $100\ \text{m/s}$ で $0.1 \sim 0.55\ \text{nm}$ のうちの任意の深さまでスライダを試料に押し込んだ後、スライダを速度 $100\ \text{m/s}$ で試料の長手方向に $20\ \text{nm}$ 水平移動させた。すべり距離 $10 \sim 20\ \text{nm}$ における摩擦力と垂直荷重の時間平均を用い、摩擦係数を求めた。シミュレーションにより得られた垂直荷重と摩擦係数の関係を図 8 に示す。各点は押し込み深さ順に実線で結ばれている。各プロット点とも、塗りつぶしは摩擦がみられた場合、白抜きはゼロ摩擦の場合として区別している。押し込み深さ $0.2\ \text{nm}$ 未満のゼロ摩擦領域では、(a) $D^* = D$ や (c) $D^* = 0.5D$ に比べ (b) $D^* = 2D$ の方が、若干ではあるものの摩擦係数は小さくなっており、公知である硬い材料の方が摩擦は小さいという事実を示している。また、摩擦係数値も 0.5 未満を示しており、通常金属の摩擦係数の基準である 0.3 程度と比べ大差ない。もし基準（文献値）の解離エネルギー D を $\text{C-Cu}_x\text{O}$ 間に用いると、低押し込み深さ域でとくに 1 を超えるような大きい値を示し、現実と異なることから、ナノ接触実験により得られた解離エネルギーの利用は、十分に有効であったといえる。

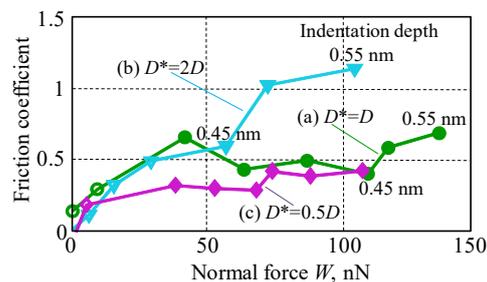


図 8 摩擦係数と荷重（酸化膜強度の影響）

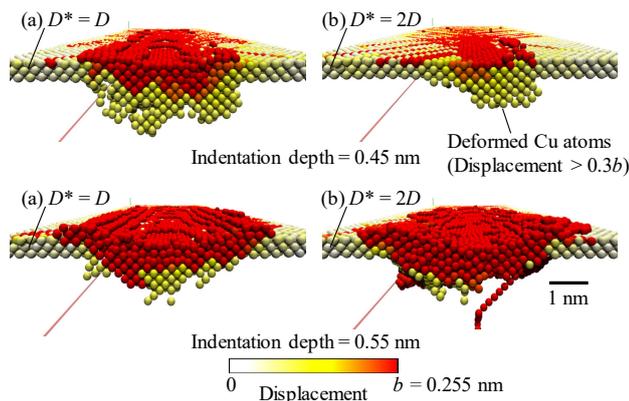


図 9 酸化膜強度の相違が摩擦形態に及ぼす影響

摩擦領域になると、押し込み深さ $0.45\ \text{nm}$ を境に (a) と (b) の双方ともに、摩擦係数の増大がみられる。ただし、(a) $D^* = D$ では比較的ゆるやかで ((c) $D^* = 0.5D$ は、よりゆるやか)、押し込み深さ $0.55\ \text{nm}$ の場合に摩擦係数は 0.7 になる程度である。一方、(b) $D^* = 2D$ では、押し込み深さ $0.5\ \text{nm}$ で摩擦係数は 1 を超え、 $0.55\ \text{nm}$ の場合には 1.2 にも及んでいる。

この現象を摩擦形態から調べるため、図 9 に押し込み深さが $0.45\ \text{nm}$ と $0.55\ \text{nm}$ における試料断面のスナップショットを、原子の移動距離のカラースケール表示とともに示す。表面層（酸化膜）の結合が比較的弱い (a) $D^* = D$ では、押し込み深さ $0.45\ \text{nm}$ で表面層は破壊し、2 原子間隔程度の高さの掘り起こしを形成するとともに、表面層下の Cu に塑性変形を及ぼしている。それに対し、表面層の結合が比較的強い (b) $D^* = 2D$ では、押し込み深さ $0.45\ \text{nm}$ でも表面層は破壊せず、摩擦も表面層の Cu 原子十数個が除去される程度で、塑性変形はみられない。一方、押し込み深さ $0.55\ \text{nm}$ では、(b) $D^* = 2D$ でも表面層は破壊し、掘り起こしを形成している。ただし、掘り起こしは (a) $D^* = D$ の方が高い反面、内部の Cu の塑性変形は、(b) $D^* = 2D$ の方が大きくなっている。

(2) FFM によるすべり摩擦実験結果

図 10 は、すべり試験で得られた垂直荷重と摩擦係数の関係を示している。荷重 $2.7\ \mu\text{N}$ 以下とそれ以上で傾向が異なることがよくわかる。荷重 $2.7\ \mu\text{N}$ 以下において摩擦係数は $0.28 \sim 0.38$ になっているのに対し、それを超過すると摩擦係数は急激に上昇し、荷重 $3.9\ \mu\text{N}$ においては 2.3

にまで及んでいる。

摩擦係数と摩擦形態の関係を調べるため、表面像を比較してみる。図 11 は、(a)荷重 $2.7 \mu\text{N}$ と (b) 荷重 $3.9 \mu\text{N}$ で実験した前後における摩擦表面の形状像をそれぞれ示している。比較的低荷重の図 11(a) について、試験前後における中央の $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ の領域を比較すると、試験前の精密切削仕上げ時に生成した引っかき加工痕は消えず、表面性状にほぼ変化がないことから、せいぜい酸化膜より上に堆積した低強度のコンタミ層が摩耗した程度とみなせる。一方、比較的高荷重の図 11(b) では、試験後、精密切削仕上げ時に生成した引っかき加工痕は摩耗により消失し、中央の $10 \mu\text{m} \times 10 \mu\text{m}$ の領域とその左右の領域はその上下の領域よりも高くなっている。これは、引っかきで酸化膜が破れ酸化膜とバルク Cu を含んだ摩耗粉が排出され、摩擦試験された領域とその左右の領域に残留したためとみなせる。

以上から、図 10 で観測された $2.7 \mu\text{N}$ を超えた荷重域における摩擦係数の急増は、酸化膜の破壊に伴う凝着の増大が引き金となって生じているとみなせる。さらにそこには、荷重の増加に伴う掘り起こしの生成と成長、さらなる荷重の増大による摩耗粉の生成と堆積が摩擦力を増大させるという現象も重畳してくると考えられる。

酸化膜の破壊に伴う摩擦係数の急増と摩擦係数の値は、図 8 において (b) $D^* = 2D$ とした場合のシミュレーション結果と酷似している。よって、本研究において提案した手法は、分子動力学と実現現象との乖離を解消するのに有効なことがわかる。

(3) 亜鉛のスクラッチシミュレーションによる単結晶サファイアのスクラッチ機構の解明

前述の銅に対する検討と同様な処理をし、亜鉛 (Zn)(0001) 面のダイヤモンドによるスクラッチシミュレーションをした結果、hcp 構造に近似して表現される単結晶サファイア (Al_2O_3) (0001) 面のスクラッチにおける異方性 (60° ごとに比切削エネルギーが変化) を説明するのに役立つことを明らかにした (基底面すべりと双晶変形の相違が関与)。その成果は、「W. Lin, N. Yano, J. Shimizu, L. Zhou, T. Onuki, H. Ojima: Analysis of Nanoscratch Mechanism of C-Plane Sapphire with the Aid of Molecular Dynamics Simulation of Hcp Crystal, Nanomaterials, Vol.11, (2021) 1739.」にて公表されている。

(4) 単結晶シリコンウエハの化学機械研磨シミュレーション

単結晶 Si の化学機械研磨におけるアルカリ溶液による Si 表面の弱体化を表現するのに Tersoff ポテンシャルの解離エネルギーの制御を用いる手法を提案し、Si 表面の弱体化を表現できることを示した。Si 表面の弱体化なしの場合と、弱体化させた場合のスクラッチ結果の比較を図 12 に示す。(b)弱体化ありの方が、Si ウエハのひずみが低減していることがわかる。この成果は、砥粒加工学会誌に論文として採択され 2023 年中に掲載される予定である。

(5) まとめ

ナノ接触実験結果や表面や亜表面におけるバルク材料との違いを、原子間ポテンシャルパラメータに反映させて、すべり摩擦過程の分子動力学シミュレーションを試み、摩擦力顕微鏡によるすべり実験結果との比較などを通じ、それが実現現象と分子動力学シミュレーションとの間における乖離を狭めるのに有効であることを示した。これにより、今後、応用範囲を拡大することにより、実現現象の解釈に分子動力学シミュレーションがさらに貢献することが期待される。

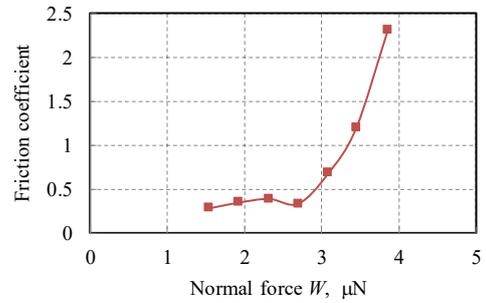
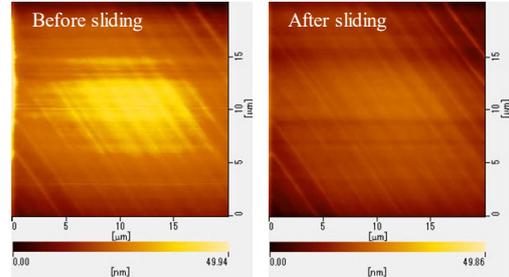
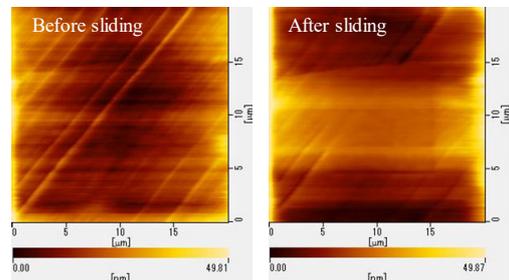


図 10 摩擦係数と荷重 (すべり実験結果)

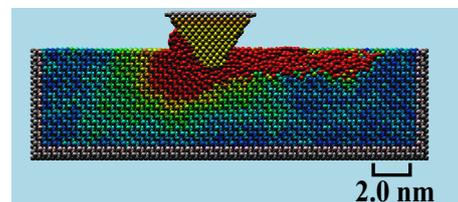


(a) Normal force $W = 2.7 \mu\text{N}$

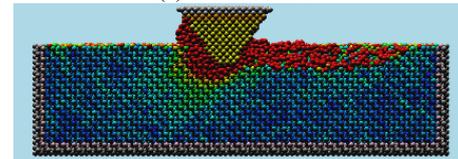


(b) Normal force $W = 3.9 \mu\text{N}$

図 11 荷重による摩擦・摩耗形態の違い



(a) 弱体化なし



(b) 弱体化あり

0.0 nm 0.1 nm

図 12 Si の化学機械研磨シミュレーション結果 (Si 原子の移動距離を色帯で表示)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 清水 淳	4. 巻 67
2. 論文標題 微小振動援用切削加工を用いた表面テクスチャリング加工技術	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 トライボロジスト	6. 最初と最後の頁 337-342
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.18914/tribologist.67.05_337	査読の有無 無
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 清水 淳, 山本武幸, 金子和暉, 周 立波, 小貫哲平, 尾畷裕隆	4. 巻 67
2. 論文標題 振動援用切削でテクスチャ加工した圧痕状パターン周期配置型金属面の乾式すべり特性	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 砥粒加工学会誌	6. 最初と最後の頁 218-223
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 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 清水 淳	4. 巻 66
2. 論文標題 接触実験結果を踏まえたすべり過程の分子動力学シミュレーション	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 トライボロジスト	6. 最初と最後の頁 275-280
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.18914/tribologist.66.04_275	査読の有無 無
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 Wangpiao Lin, Naohiko Yano, Jun Shimizu, Libo Zhou, Teppei Onuki, Hirotaka Ojima	4. 巻 11
2. 論文標題 Analysis of Nanoscratch Mechanism of C-Plane Sapphire with the Aid of Molecular Dynamics Simulation of Hcp Crystal	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nanomaterials	6. 最初と最後の頁 1739
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3390/nano11071739	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 Wangpiao Lin, Jun Shimizu, Libo Zhou, Teppei Onuki, Hirotaka Ojima	4. 巻 73
2. 論文標題 Investigation of nanoscratch anisotropy of C-plane sapphire wafer using friction force microscope	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Precision Engineering	6. 最初と最後の頁 51-62
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.precisioneng.2021.08.011	査読の有無 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 Jun Shimizu, Tomotaka Nakayama, Kouta Watanabe, Takeyuki Yamamoto, Teppei Onuki, Hirotaka Ojima, Libo Zhou	4. 巻 149
2. 論文標題 Friction Characteristics of Mechanically Microtextured Metal Surface in Dry Sliding	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Tribology International	6. 最初と最後の頁 105634
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.triboint.2019.02.042	査読の有無 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20件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 6件)

1. 発表者名 清水 淳, 林 旺票, 矢野直彦, 周 立波, 小貫哲平, 尾畠裕隆, 金子和暉, 山本武幸
2. 発表標題 hcp結晶の分子動力学解析結果を利用したc面サファイアのアプレシブ摩耗特性の評価
3. 学会等名 日本トライボロジー学会トライボロジー会議2022春
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 金子和暉, 橋村紀香, 清水 淳, 周 立波, 小貫哲平, 尾畠裕隆
2. 発表標題 シリコンCMPの分子動力学シミュレーション 第1報: ポテンシャル制御に基づく化学的作用のモデル化
3. 学会等名 砥粒加工学会学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清水 淳, 山本武幸, 金子和暉, 周 立波, 小貫哲平, 尾嶌裕隆
2. 発表標題 微小振動援用切削でテクスチャ加工した圧痕状パターンの周期的配置による金属表面の乾式すべり特性
3. 学会等名 砥粒加工学会学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 三枝剣悟, 林 王票, 矢野直彦, 清水 淳, 金子和暉, 周 立波, 小貫哲平, 尾嶌裕隆, 山本武幸
2. 発表標題 C面サファイア基板のナノスクラッチ特性 - nmオーダー送りにおけるスクラッチ異方性 -
3. 学会等名 精密工学会秋季大会学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清水 淳, 林 旺票, 矢野直彦, 金子和暉, 周 立波, 小貫哲平, 尾嶌裕隆, 山本武幸
2. 発表標題 ナノスクラッチによるC面単結晶サファイア基板の加工特性の検討 (単溝スクラッチにおける加工異方性)
3. 学会等名 日本機械学会第14回生産加工・工作機械部門講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Norika Hashimura, Jun Shimizu, Kazuki Kaneko, Libo Zhou, Teppei Onuki, Hirotaka Ojima
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Chemical Mechanical Polishing of Si Wafer using Potential Control
3. 学会等名 International conference on Precision Engineering (ICPE 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Jun Shimizu, Kazuki Ohya, Takeyuki Yamamoto, Libo Zhou, Teppei Onuki, Hirotaka Ojima, Kazuki Kaneko, Yoshiaki Fukahori
2. 発表標題 Boundary Lubricity of Metal Surfaces Textured by Vibration-assisted Cuttin
3. 学会等名 International conference on Precision Engineering (ICPE 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Jun Shimizu
2. 発表標題 Improvement of Tribological Properties by Surface Texturing Applying Vibration-Assisted Cutting
3. 学会等名 International Symposium on Advances in Abrasive Technology (ISAAT 2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Jun Shimizu, Wangpiao Lin, Naohiko Yano, Kazuki Kaneko, Libo Zhou, Teppei Onuki, Hirotaka Ojima, Takeyuki Yamamoto, Kengo Saegusa
2. 発表標題 Study on Abrasive Wear Mechanism of C-plane Sapphire Using Nanoscratch Test and Molecular Dynamics Simulation of HCP Crystal
3. 学会等名 The 24th International Symposium on Advances in Abrasive Technology (ISAAT 2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 清水 淳, 林 旺票, 矢野直彦, 三枝剣悟, 金子和暉, 周 立波, 小貫哲平, 尾嶌裕隆, 山本武幸
2. 発表標題 C面サファイア基板のナノスクラッチ特性 (第2報) - nmオーダー送りにおけるスクラッチ異方性の考察 -
3. 学会等名 精密工学会春季大会学術講演会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 清水 淳, 山本武幸, 周 立波, 小貫哲平, 尾島裕隆
2. 発表標題 局所静水圧が切削現象に及ぼす効果の分子動力学シミュレーション 転がり要素の適用
3. 学会等名 砥粒加工学会学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水 淳, 林 旺票, 矢野直彦, 周 立波, 小貫哲平, 尾島裕隆, 山本武幸, 金子和暉
2. 発表標題 ポテンシャル関数制御を用いたすべり摩擦現象の分子動力学解析 (第3報) - hcp結晶の加工異方性に関する検討 -
3. 学会等名 精密工学会秋季大会学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水 淳, 林 旺票, 矢野直彦, 周 立波, 小貫哲平, 尾島裕隆, 金子和暉, 山本武幸
2. 発表標題 hcp 結晶の分子動力学解析を用いたc 面サファイアのアブレイブ摩耗特性の考察
3. 学会等名 日本トライボロジー学会トライボロジー会議2021秋
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Jun Shimizu, Takeyuki Yamamoto, Hirotaka Ojima, Teppei Onuki, Libo Zhou
2. 発表標題 Molecular Dynamics Simulation of Localized Hydrostatic Pressure-Assisted Cutting with a Rolling Element
3. 学会等名 The 23rd International Symposium on Advances in Abrasive Technology (ISAAT2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 清水 淳, 林 旺票, 矢野直彦, 周 立波, 小貫哲平, 尾畠裕隆, 山本武幸, 金子和暉
2. 発表標題 ポテンシャル関数制御を用いたすべり摩擦現象の分子動力学解析 (第4報) - hcp 結晶のアプレシブ摩耗異方性 -
3. 学会等名 精密工学会春季大会学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 矢野直彦, 林 旺票, 清水 淳, 周 立波, 小貫哲平, 尾畠裕隆, 山本武幸
2. 発表標題 分子動力学シミュレーションによるhcp 結晶の変形・摩耗挙動の解析
3. 学会等名 砥粒加工学会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水 淳, 周 立波, 小貫哲平, 尾畠裕隆, 山本武幸
2. 発表標題 ポテンシャル関数制御を用いたすべり摩擦現象の分子動力学解析 (第1報) - 酸化膜による影響に関する検討 -
3. 学会等名 精密工学会秋季大会学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 清水 淳, 周 立波, 小貫哲平, 尾畠裕隆, 山本武幸
2. 発表標題 ポテンシャル関数制御を用いたすべり摩擦現象の分子動力学解析 (第2報) - スライダの強度による影響に関する検討 -
3. 学会等名 精密工学会春季大会学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 菊池晃太, 山本武幸, 清水 淳, 周 立波, 小貫哲平, 尾島裕隆
2. 発表標題 振動援用切削による表面テクスチャの摩擦特性 (第5報) - 境界潤滑における油量の影響 -
3. 学会等名 精密工学会春季大会学術講演会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Jun Shimizu, Tomotaka Nakayama, Takeyuki Yamamoto, Hirotaka Ojima, Teppei Onuki, Libo Zhou
2. 発表標題 Friction Characteristics of Textured Metal Surfaces by Vibration-assisted Microcutting in Dry Sliding
3. 学会等名 18th International conference on Precision Engineering (ICPE2020) (国際学会)
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

NANO-ENGINEERING LAB. (nLab) https://sites.google.com/site/nlabibarakiuniv/ ナノ・マイクロファブリケーションと表面機能 https://sites.google.com/site/nlabibarakiuniv/research/field4 茨城大学研究者総覧 https://info.ibaraki.ac.jp/Profiles/5/0000414/profile.html

6. 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
研究分担者	周 立波 (Zhou Libo) (90235705)	茨城大学・理工学研究科(工学野)・教授 (12101)	

6. 研究組織（つづき）

	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
研究 分 担 者	小貴 哲平 (Onuki Teppei) (70400447)	茨城大学・理工学研究科（工学野）・准教授 (12101)	
研究 分 担 者	尾嶌 裕隆 (Ojima Hirotaka) (90375361)	茨城大学・理工学研究科（工学野）・准教授 (12101)	
研究 分 担 者	山本 武幸 (Yamamoto Takeyuki) (40396594)	茨城大学・理工学研究科（工学野）・技術職員 (12101)	

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