

清浄グラファイト間の摩擦の温度効果

大阪大学理学研究科 松下 勝義¹

成蹊大学工学部、科技団さがけ 21 佐々木 成朗²

青山学院大学理工学部 松川 宏³

我々は有限温度下におけるナノスケールの清浄グラファイト面間摩擦を分子動力学シミュレーションを用いて調べた。その結果、動摩擦力は低温ではスティックスリップ運動のため荷重に線形に依存するが高温ではクリープ運動のため非常に小さくなることを示した。また動摩擦力の駆動速度依存性が高温かつ低速度で強くなることを示した。

1 序論

相対運動する二面間の摩擦研究の歴史は古く、記録に残っている系統的研究はレオナルド・ダ・ビンチにまで遡ることができる。しかしながら、摩擦現象は取り扱うのが困難な複雑な系の非平衡現象であるため、そのメカニズムが明らかになり出したのはごく最近のことであり、未だに未解決の問題が多く残されている。そのなかでも摩擦の発生機構の微視的起源は重要な未解決問題である。近年、発展した表面力測定装置 (SFA)、水晶発振子マイクロバランス (QCM)、摩擦力顕微鏡 (FFM) などの実験手法の開発や数値シミュレーション技術の発達により、原子、ナノスケールの摩擦現象の機構の解明が進み、巨視的摩擦現象の微視的起源の解明にも迫りつつある。我々は特にグラファイトの清浄なナノ接触領域での摩擦現象に注目し理論的、数値的に研究を行っている。グラファイトは固体潤滑剤としてよく知られ、その微視的摩擦機構、巨視的摩擦、潤滑特性の微視的起源の解明が本研究の目的である。

グラファイトは FFM によるナノスケールの摩擦現象の研究がよく行われている物質である。*Mate et al.* の研究によるとその動摩擦力 (時間平均摩擦力) は荷重へ線形に依存し、その摩擦係数が 0.012 程度の非常に小さい値である。またチップの原子スケールのスティックスリップ運動により得られるグラファイト基板表面像は基板表面のハニカム構造ではなく菱形からなる鱗状のものであった¹⁾。その後、*Miura et al.* によりその鱗状の表面像はチップと基板の間にグラファイトフレークが介在することにより再現されることが明らかされた²⁾。また我々の数値的研究によってグラファイトフレークと基板との間の動摩擦力は荷重へ線形に依存し、摩擦係数はほぼ実験で観測されたオーダーである 0.0055-0.013 程度であることが示された³⁾。

¹E-mail: kmatsu@presto.phys.sci.osaka-u.ac.jp

²E-mail: naru@apm.seikei.ac.jp

³E-mail: hm@phys.aoyama.ac.jp

これまでの数値的研究は主に絶対零度で行われてきた、しかし通常 FFM による摩擦の実験は室温で行われており有限温度の効果は重要な役割を果たすと考えられる。実際、*Hoshi et al.* らにより有限温度でのグラファイトの FFM 実験でチップのスキャン速度 V_s を早くするとチップのスティックスリップ運動が不安定になることや⁴⁾、*Gnecco et al.* により NaCl の FFM 実験で動摩擦力のスキャン速度依存性が $\log(V_s)$ になることが示されている⁵⁾。本稿ではグラファイト清浄面間摩擦の有限温度での分子動力学シミュレーションの結果を報告する。

我々がシミュレーションで採用したモデルは図 1 に示されているもので、グラファイト基板表面単層、単層グラファイトフレーク、FFM チップやカンチレバーを模した駆動バネからなる。シミュレーション中は基板内原子は固定しておき、フレーク内原子は運動方程式を数値的に解く。 i 番目原子の α 座標成分の運動方程式は下記のランジュバン型のものとした。

$$m_C \ddot{x}_i^\alpha = -\gamma \dot{x}_i^\alpha - \frac{\partial V_{\text{Sub}}}{\partial x_i^\alpha} - \frac{\partial V_1}{\partial x_i^\alpha} - \frac{k_\alpha}{N_f} (x_C^\alpha - x_B^\alpha) + f_i^\alpha$$

左辺第一項は基板への散逸、第二項は基板から受けるレナード-ジョーンズ型の力、第三項はフレーク内原子間のバネの相互作用、第四項は駆動バネの力、第五項は基板からの揺動力を表す。第四項の x_C と x_B はそれぞれフレークの重心座標、図 1 に示されている駆動バネの基点位置である。第五項の揺動力は第二項の散逸係数と揺動散逸定理を満たしており、これによりフレーク内原子の温度 T を一定に保つ。このシミュレーションで用いられたフレークは図 2 で実線により示された長方形のもので原子数 N_f は 42 である。また点線は基板格子を表しているが、その格子に対して x 、 y 軸を図のように定義する。今回のシミュレーションは基板とフレークの安定配置から y 軸方向へ駆動し、フレーク-基板間の摩擦力を計算する。

2 結果と議論

シミュレーションで計算された動摩擦力の結果を図 3 に示す。ただしこのデータは、実験でのスキャン速度が 40nm/s 程度であるのに対してシミュレーションでは 1m/s 程度の駆動速度になっている

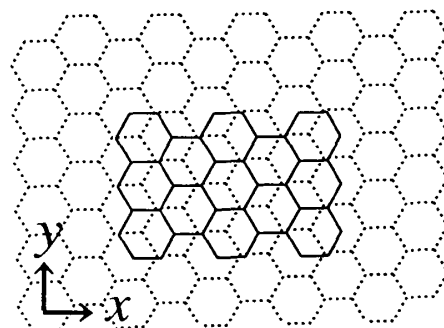
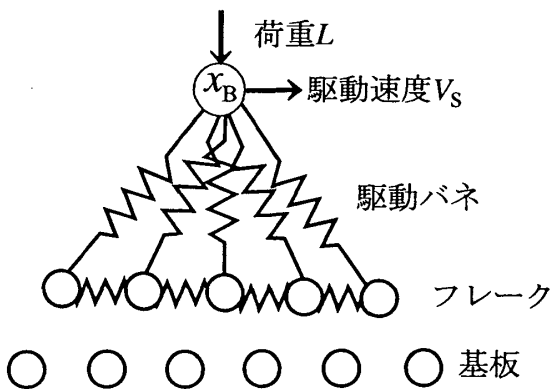


図 1: 清浄グラファイトの微小面間摩擦のモデル。
図 2: 本研究で用いたフレークと基板の安定配置。

ことを考慮し、駆動速度依存性を取り駆動速度 0m/s へ外挿することにより得ている。動摩擦力は比較的低温では凝着項を持ち荷重へ線形に依存する。しかし、温度を上げていくと動摩擦力は次第に小さくなり、最終的には非常に小さくなってしまふ。この性質は図 4 にみられるフレーク重心運動の温度依存性に起因している。比較低温ではフレークの重心は零温度同様の周期的なスティックスリップ運動を示す。温度を上げていくとフレークの重心運動の周期性は次第に失われていき、最終的には一箇所のフレーク-基板間ポテンシャルの極小の周辺に長時間とどまらない運動を示す。この運動状態では駆動バネは時間平均でほとんど伸縮しておらず動摩擦力は非常に小さいものとなり、図 1 で示した動摩擦力が非常に小さい温度、荷重領域に対応する。ここではこの運動をクリープ運動と呼ぶことにする。このスティックスリップ運動状態とクリープ運動状態は荷重 L と温度 T に対して図 5 のように分布している。スティックスリップ運動は比較的高荷重かつ低温領域で見られるのに対して、クリープ運動は低荷重かつ高温領域で見られる。これは以下のように考えることができる。熱活性によりフレークが基板のバリアー $\Delta U(L)$ を越えるのにかかる時間 τ_T は $e^{\beta\Delta U}$ のように温度と荷重へ依存する、ただし β は逆温度 $1/k_B T$ である。この時間がもし基板の一周期 a を駆動するのにかかる時間 $\tau_s = a/V_s$ より大きければ、熱活性によりバリアーを越えることができずにスティックスリップ運動を起こす。他方 τ_T が τ_s が十分小さければ熱活性によりバリアーを超える時間が十分あるのでクリープ運動を引き起こす。 $\Delta U(L)$ の荷重依存性は図 5 の実線で示される通り、荷重の上昇と共に単調に増加し、荷重の増加と共に τ_T は単調増加する。そのため、比較的高荷重、低温領域で $\tau_T \ll \tau_s$ が実現しスティックスリップ運動が現れる。他方比較的低荷重、高温領域では $\tau_T \gg \tau_s$ が実現しクリープ運動を示す。

図 6 に示したのは図 4 に対応する高荷重での摩擦力の駆動速度依存性である。比較的低温、高駆動速度領域で動摩擦力は駆動速度に依存しない。これは低温で見られるスティックスリップ運動では動摩擦力を決める散逸がスリップ運動の速度で決まり、スリップ速度は基板とフレークの間のポ

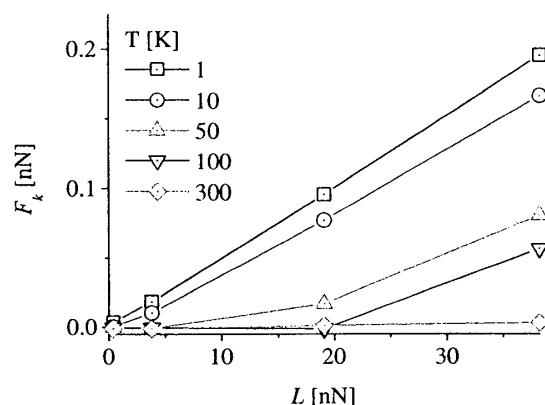


図 3: 動摩擦力 F_k の荷重、温度依存性。

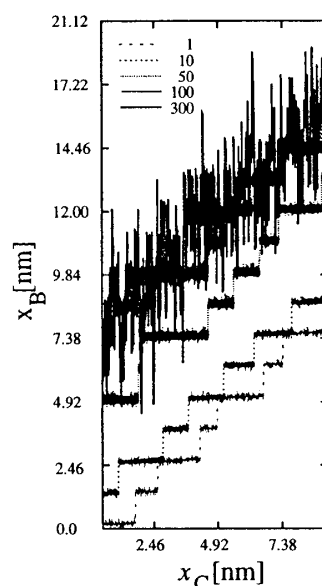


図 4: フレーク重心座標 $\bar{x}_C$ の駆動方向成分を基板の基点位置 $\bar{x}_B$ の駆動方向成分に対して。

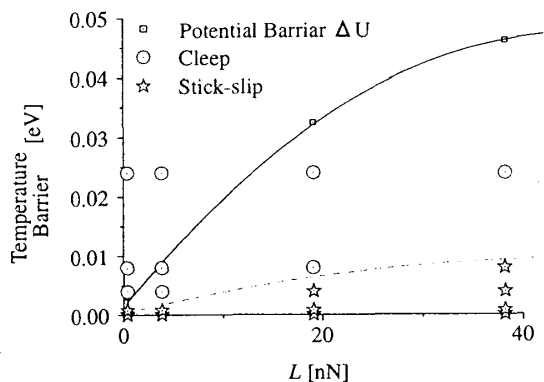


図 5: スティックスリップ運動とクリープ運動の動的相図。星印はスティックスリップ運動、円印はクリープ運動が見られた個所を表す。実線はポテンシャルバリアー ΔU の荷重依存性を示す。

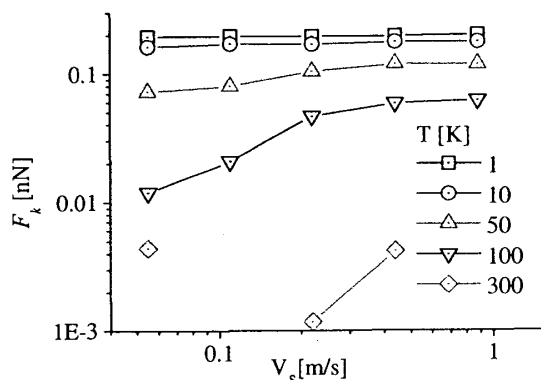


図 6: 高荷重下での動摩擦力の速度依存性。

特にクリープ運動と慣性運動の間で摩擦力の速度依存性を本質的に変える現象が見られる場合がある。微視的摩擦において対応する現象が見られるか興味ある問題である。

テンシタルと駆動バネのポテンシャルに蓄えられたエネルギーで決まるため駆動速度とは無関係であり、動摩擦力と駆動速度が無関係であるためである。しかしながら高温かつ低駆動速度で温度を上げるほど強い駆動速度依存性がみられる。これは高温のスティックスリップ運動では、動摩擦力が熱活性でバリアーを越える時間 τ_T に強く依存するので⁵⁾、 τ_T の駆動速度依存性が温度が高いほど強くなるためだと考えられる。現在までの計算結果ではスティックスリップ運動を示す特定の高荷重について $F_k(T, V_s) \sim T \ln(V_s/V_C)$ のような駆動速度への対数依存と温度への線形依存性を示す結果を得つつある、ただしその際 V_C は定数で数 m/s 程度である。

シミュレーションによる有限温度の効果の研究の報告と議論を行った。しかし、クリープ運動中の動摩擦力の計算はシミュレーション上の困難のためこれからの課題である。またフレイクサイズ、駆動バネの硬さなどへの動摩擦力の有限温度下での依存性も今後の課題となっている。フレイクサイズ依存性に関してはポテンシャルバリアーが同じ圧力 L/N_f の下でフレイクサイズに比例するためそれを反映した依存性が見られると考えられる。また駆動バネの硬さは巨視的な摩擦実験において運動状態を決めるパラメーターの一つとなっており、

- 1) C. M. Mate, G. M. McClelland, R. Erlandsson, S. Chiang, *Phys. Rev. Lett.*, **59**, (1987), 1942
- 2) K. Miura, N. Sasaki and S. Kamiya: (投稿中)
- 3) K. Matsushita, H. Matsukawa and N. Sasaki: (投稿中)
- 4) Y. Hoshi, T. Kawagishi and H. Kawakatsu, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **39**, (2000), 3804
- 5) E. Gnecco, R. Bennewitz, T. Gyalog, Ch. Loppacher, M. Bammerlin, E. Meyer, and H.-J. Güntherodt, *Phys. Rev. Lett.*, **84**, (2000), 1172