

Law of Wearless Friction Explored with Molecular Dynamics Simulation Based on an Atomistic Simplified Model

Keiji Hayashi[†], Satoru Abe, Hiroyasu Hiromae, Noriyuki Sakudo, and Toshio Kawai^{*}

Advanced Materials Science R&D Center, Kanazawa Institute of Technology, 3-1, Yatsukaho, Ishikawa 924-0838, Japan

[†]Fax: 81-76-274-9251, e-mail: khayashi@neptune.kanazawa-it.ac.jp

^{*}Chitose Institute of Science and Technology, 758-65, Bibi, Chitose, Hokkaido 066-8655, Japan

Law of wearless friction in sub-micrometer scale system is studied by means of molecular dynamics simulation based on an atomistic simplified two-dimensional model. A large number of simulation data were analyzed to examine frictional force as a function of load, temperature, and sliding velocity. Exploration of universal features lying in the function revealed unique dependence of the frictional force on sliding velocity and load. We discuss microscopic origin of the observed law in terms of energy transfer between phonon modes due to anharmonicity and resonance.

Key words: Wearless friction, Molecular dynamics method, Nano-machine

1. はじめに

近年、高密度記録媒体やマイクロアクチュエーターに代表される機構部品の微細化、高性能化が長足の進歩を遂げた。機構部品において、動摩擦現象は、エネルギー効率を左右する重要な因子であると同時に、動摩擦に伴う発熱が劣化を促進するため信頼性を左右する要因でもあることはよく知られている。またブレーキに用いる機構部品には、動摩擦力が大きいことが要求される。機構部品の微細化が進むに連れて、部品へのエネルギーの供給が難しくなるためエネルギー効率の向上はますます重要な課題になり、また、部品の熱容量が小さくなるため熱発生の抑制が部品の信頼性向上の観点からますます重要な課題になる。さて、マクロな系においては、現象論的な摩擦法則として高等学校でも習う Coulomb-Amonton の3法則がよく知られており、その発現機構として、例外は多々あるものの、凝着説が広く受け入れられている。しかし、近い将来、機構部品のサイズがサブマイクロメートルスケールになると、動摩擦現象の起こる状況がマクロな動摩擦系の場合と根本的に異なってくる。サブマイクロメートルスケールの機構部品では、まず、2つのパーツ（例えば結晶格子）を原子スケールで平坦な界面で接触させることになり、真実接触面積は見かけ上の接触面積と同じオーダーになる。また、界面に垂直な方向のパーツの高さもサブマイクロメートルスケールになるため、界面にかかる荷重がマクロな摩擦系に比べて一般に桁違いに小さくなる。サブマイクロメートルスケールの系で、動摩擦現象の起こる状況がマクロな動摩擦系の場合と異なるとなれば、動摩擦現象の発現機構も凝着説とは異なり、したがって、現れる動摩擦法則も Coulomb-Amonton の法則とは異なって然るべきである。我々は、サブマイクロメートルスケールの機構部品に用いる所望の動摩擦特性をもつ材料の開発への応用を目指した基礎研究として、弾性接触条件下での動摩擦現象[1] すなわち 磨耗を伴わない滑り摩擦現象 にみられる普遍的な法則性を、分子動力学(MD)法を用いてシミュレーション実験により調べてきた[2-4]。本研究では、弾性接触摩擦系の原子論的な単純化した二次元 MD モデルに基

づいて、様々な実験条件のもとで、2つの結晶格子を定常的な相対速度で滑らせるシミュレーションを行い、弾性接触条件下で発生する動摩擦力を調べた。その結果から、滑り速度をパラメタとし荷重（垂直抗力）と系の平均温度（または、界面近傍における局所疑似温度[2]）を独立変数にとって動摩擦力をその関数として系統的に整理し、法則性を検討した。なお、三次元系では粒子の運動の仕方として atomistic rocking が重要であることが指摘されており[5]、この点では二次元系と異なるが、二次元系では三次元系より明快な法則性が現れると期待され、二次元系と三次元系で動摩擦現象の微視的な発現機構は本質的には同じであると考えられるので、本研究では二次元のモデルを採用した。

2. 弾性接触摩擦系の原子論的な二次元 MD モデル

本研究でシミュレーションに用いた弾性接触摩擦系の原子論的な単純化した二次元 MD モデルを図 1 に示す。2つの二次元最密格子 A および C を原子スケールで平坦な界面で接触させる。

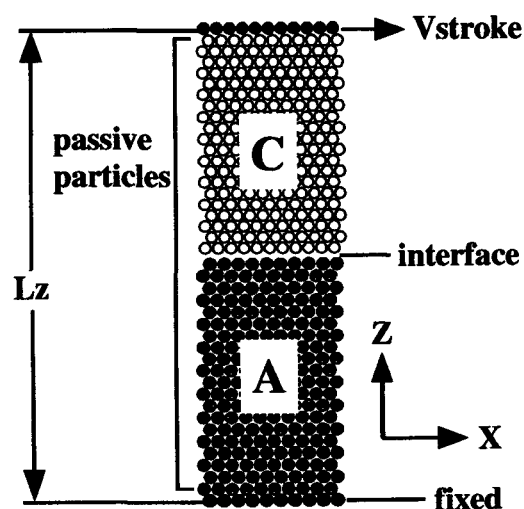


Fig. 1 An example of atomistic two-dimensional model.

以下に示す実験では、粒子間に Lennard-Jones ポテンシャルを仮定した。A-A 粒子間および C-C 粒子間に仮定したポテンシャルの深さに比べ、A-C 粒子間に仮定したポテンシャルの深さを $1/20 \sim 3/10$ の範囲で浅く採ることにより、界面の存在を考慮した。格子 A と C を接触させた後、動摩擦現象のシミュレーションに先立って、simulated anneal 法により粒子を平衡核配置に緩和させ、つぎにシミュレーションのランごとに Maxwell 分布に従う乱数を発生させて各粒子に初期速度として与え、さらに熱平衡系の分子動力学法により熱平衡状態にした。

その後、結晶格子 A, C を定常的な相対速度で滑らせるシミュレーションをおこなった。格子 A の最下端粒子層を固定し、格子 C の最上端粒子層を界面と平行 (x 方向) に一定の相対速度で移動させて、それぞれのシミュレーションのランを通して、格子 A 最下端粒子層から格子 C 最上端粒子層までの z 軸方向の距離 L_z は一定に保った。格子 C の最上端粒子層を移動させ始める時刻を時刻 $t=0$ とした。現実の機構部品では滑り速度が粒子の熱速度や結晶格子中の音速に比べて十分遅い場合が殆どなので、シミュレーションにおいても滑り速度は格子中の熱速度に比べて十分に遅く設定した。受動粒子すなわち格子 A の最下端粒子層と格子 C の最上端粒子層を除く全粒子の時間発展を、運動方程式を数値的に解くことにより追跡した。格子 A, C の左右の両端には周期境界条件を課した。なお、シミュレーションに際して、運動方程式に現象論的なエネルギー散逸項を付け加えたり、能勢の方法[6]を用いるなど、温度一定でシミュレーションをおこなう手法をもちいることは、取っておこなわなかった。動摩擦現象はエネルギー散逸機構の典型例であり、エネルギー散逸のミクロな発現機構を論ずるモデルに現象論的にエネルギー散逸を仮定したのでは本末転倒になる。なお、結果的には、系の初期温度に比べて摩擦熱による温度上昇は小さく、系の平均温度がほぼ一定の条件下での MD シミュレーションになった。粒子 C と A の質量比 m_C/m_A 、粒子間に仮定したポテンシャルの深さの比 $\epsilon_{CC}/\epsilon_{AA}$ 、 $\epsilon_{AC}/\epsilon_{AA}$ 、および平衡核間距離の比 σ_{CC}/σ_{AA} 、 σ_{AC}/σ_{AA} 、格子 A および C を構成する粒子数 N_A 、 N_C 、格子 A 最上端粒子層から格子 C 最下端粒子層までの距離 L_z 、系の平均温度 T_{set} 、滑り速度 V_{stroke} の設定値をそれぞれ広い範囲にわたって振り、様々な実験条件で数多くのシミュレーションを行った。本論文では、基本単位として、粒子 A の質量 m_A を質量の単位に採り、A-A 粒子間に仮定した Lennard-Jones ポテンシャルの平衡核間距離 σ_{AA} および深さ ϵ_{AA} をそれぞれ距離およびエネルギーの単位に採る。また、温度の単位としても ϵ_{AA} を用いた。

時々刻々の各受動粒子の速度と位置が分かると、その時刻における受動粒子系全運動エネルギーから格子 C の巨視的な並進の運動エネルギーを除いた部分 E_k および全位置エネルギー E_p がそれぞれ求まり、その和として系の全内部エネルギー E_{tot} が分かる。二次元系では、 E_k を受動粒子の総数で割った値が系の平均温度 T になる。他方、荷重および動摩擦

力は以下の手順で決めた。時々刻々の各受動粒子の位置が分かると、格子 A 最下端粒子層を構成する各粒子に働く力の合力の x 成分 (水平成分) F_{fx} と z 成分 (鉛直成分) F_{fz} 、および格子 C 最上端粒子層を構成する各粒子に働く力の合力の x 成分 F_{mx} と z 成分 F_{mz} が求まる。 $(F_{mz} - F_{fz})/2$ をその時刻における荷重 L 、 $(F_{fx} - F_{mx})/2$ をその時刻における動摩擦力 F_{fr} とみなした。動摩擦力 F_{fr} に滑り速度 V_{stroke} を掛け、時刻 0 から時間で積分することにより、受動粒子系に対して外からした摩擦仕事 W_{fr} が求まる。なお、観測された生の F_{fr} は揺らぎが大きいので、実際には、以上の手順で摩擦仕事 W_{fr} を求めた後、 W_{fr} を時間の関数として冪級数で最小二乗近似し、その時間微分として動摩擦力 F_{fr} を決めている。シミュレーションのランごとに、時刻 0 から任意の時刻までの E_{tot} の増分がその時刻の W_{fr} と一致していることを確かめ、リャープノフ不安定などによる誤差が生じていないことを確認した。また、界面近傍での局所疑似温度の上昇に伴って磨耗が起こっていないかを、シミュレーションのラン毎に確かめ、以下の解析には磨耗の起こっていない時間範囲でのデータを使用した。

3. 結果と考察

3.1 二次元系における 弾性接触 動摩擦法則

シミュレーション結果から、滑り速度をパラメタとし荷重と系の平均温度を独立変数にとって動摩擦力をその関数として系統的に整理し、法則性を検討した。平均温度が或る値になる時刻を求め、その時刻における動摩擦力と荷重の関係を調べた。まず、系の平均温度が異なっても荷重および他の実験条件が同じならば動摩擦力の値に有意の差が見られないことから、動摩擦力は系の平均温度に依存しないことが分かった。つぎに、滑り速度をパラメタとして動摩擦力の荷重依存性を調べ、さらに、荷重をパラメタとして動摩擦力の滑り速度依存性に整理し直した。 $m_C/m_A = 1.0$ 、 $\sigma_{CC}/\sigma_{AA} = 10/11$ 、

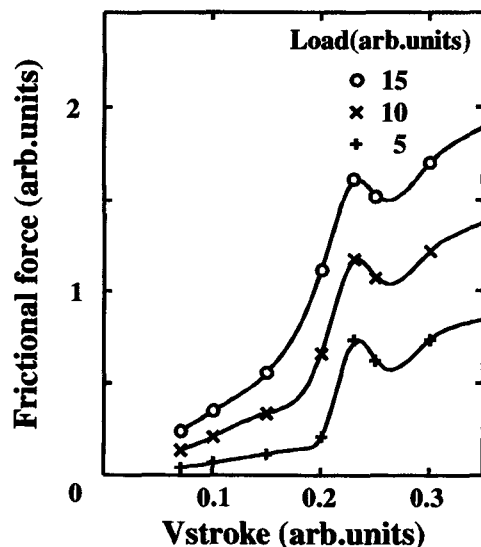


Fig. 2 Dependence of frictional force on sliding velocity.

$\varepsilon_{CC}/\varepsilon_{AA}=1.0$, $\varepsilon_{AC}/\varepsilon_{AA}=0.1$, $N_A=400$, $N_C=440$ としてシミュレーションを行った例から得られた弾性接触動摩擦力と滑り速度の関係を図 2 に示す. 図 2 から, 滑り速度に閾値が存在することが分かる. 滑り速度を閾値より遅く設定した場合には, 設定値が遅いほど動摩擦力は単調に減少し, この関係を直線で近似し 滑り速度ゼロに外挿して良いと仮定すれば, 滑り速度ゼロの極限で動摩擦力はゼロになる. 一方, 滑り速度を閾値より速く設定した場合には, 遅く設定した場合に比べて, 殊に低荷重のときに動摩擦力が飛躍的に増大し, また, 動摩擦力の滑り速度依存性は構造を持つ. 滑り速度を 閾値より遅く設定した場合 および 速く設定した場合 の動摩擦力と荷重の関係の典型例として $V_{stroke}=0.15$ および 0.3 の例を 図 3 に示す.

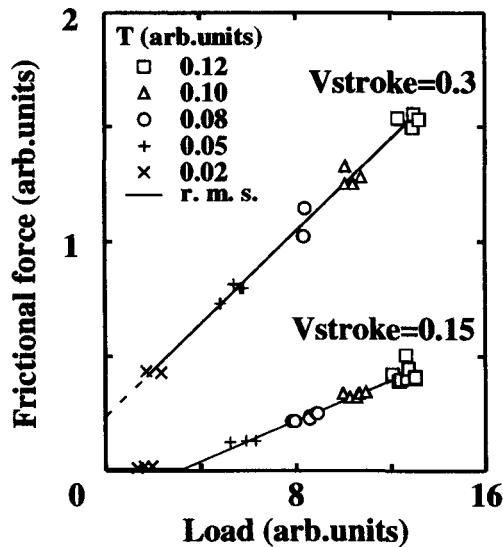


Fig. 3 Dependence of frictional force on load.

滑り速度を閾値より速く設定した場合には, ゼロ荷重でも動摩擦力が正の値をとり, 荷重の増加に伴って動摩擦力が直線的に増加する. ゼロ荷重でも動摩擦力が正の値をとることは, 粒子間ポテンシャルの斥力項のみならず引力項によっても動摩擦現象が起こることを意味している. 一方, 滑り速度を閾値より遅く設定した場合には, 荷重にも閾値が存在する. 閾値より大きい荷重領域では, 荷重の増加に伴って動摩擦力は直線的に増加する. 一方, 荷重が 閾値より小さいときは 大きいときに比べて 動摩擦力が極めて小さい値をとる. 動摩擦現象は, 滑りとしての巨視的な相対並進運動のエネルギーが固体中の様々なフォノンモードに分配されるエネルギー散逸過程に由来している. A-C 粒子間の相互作用 ε_{AC} が A-A, C-C 粒子間の相互作用 ε_{AA} , ε_{CC} に比べて充分小さく 結晶格子 A と C のカップリングが小さい場合には, 状況の本質を単純化して 以下のように捉えることができる. 滑りに伴って, 結晶格子 A, C のそれぞれが, まず, 滑り速度に比例した振動数をもつ弱い外力で強制振動される. さらに, 結晶格

子 A, C のそれぞれについて, 強制振動のエネルギーが 粒子間ポテンシャルの非線形性を介して 様々なノーマルフォノンモードに分配される. このエネルギー散逸に呼応して動摩擦仕事が見れる. ここで, 粒子間ポテンシャルの非線形性は, 粒子間距離が接近するほど, すなわち, 平衡粒子間距離に対する粒子変位の大きさの比が大きいくほど, 顕著になる. この解釈に立つと, 上述のシミュレーション結果は次のように説明される. 滑り速度を閾値より速く設定した場合には, 強制振動の振動数が 結晶格子 A, C いずれかの或るノーマルフォノンモードの固有振動数に一致し 共鳴が起こるため, その結晶格子を構成する各受動粒子の強制振動による変位が大きくなり, 粒子間ポテンシャルの非線形性を介したエネルギー散逸が起こる. 一方, 滑り速度を閾値より遅く設定した場合には, 滑り速度に対応する強制振動の振動数が低いため 結晶格子のノーマルフォノンモードとの共鳴が起こらず, 各受動粒子の強制振動による変位は小さい. この場合, 荷重が小さい時は, 粒子間ポテンシャルを調和ポテンシャルで良く近似することができ, 粒子間ポテンシャルの非線形性を介したエネルギー散逸は殆ど起こらず, 結果として動摩擦力は極めて小さい値を採る. 強制振動による粒子の変位が小さい場合でも, 荷重が大きくなる (すなわち, 系の平均温度が高く受動粒子の熱運動による変位が大きくなる かまたは 平衡粒子間距離が短くなる) と, 粒子間ポテンシャルの非線形性が顕著になり, エネルギー散逸レートが増加し, 動摩擦力が強くなる.

3.2 同位体層の挿入による動摩擦特性の変化

弾性接触摩擦系の原子論的な単純化した二次元モデルで, 結晶格子 A において 界面から n 層目と $n+1$ 層目のすべての A 粒子を質量 m_I の同位体 I で置換することにより, 動摩擦特性にどのような変化が見られるかを系統的に調べた. なお本論文では, $\sigma_{II} = \sigma_{AI} = \sigma_{AA}$, $\varepsilon_{II} = \varepsilon_{AI} = \varepsilon_{AA}$, $\sigma_{IC} = \sigma_{AC}$, $\varepsilon_{IC} = \varepsilon_{AC}$ なる粒子種 I を A の同位体と呼ぶ. 図 2 および図 3 に示した例のシミュレーション条件において 結晶格子 A を構成する受動粒子 全 40 層の内の一部を質量 $m_I=16$ の同位体で置換した条件における 動摩擦力の滑り速度依存性の例を図 4 に示す. 図 4(a)は $n=37$ の場合, 図 4(b)は $n=19$ の場合で, 界面から同位体層までの距離が異なる. 各図中で 破線は, 同位体置換を行なわなかった場合の結果である. 図 4(a), (b)において, 閾値より遅い滑り速度領域では, 動摩擦力に 同位体層の有無による有意の差は認められない. これに対し, 閾値より速い滑り速度領域では, 同位体層の存在によって 動摩擦力が概して減少するとともに 動摩擦力の滑り速度依存性に見られる閾値近傍のピークが高速度側にシフトする. しかもこの傾向は, 同位体層が界面に近いほど顕著である. 弾性接触動摩擦の発現機構に関する前述の解釈に基づくと, このシミュレーション結果は次のように説明できる. 簡単のために 置換した同位体の質量が重い極限を考えると, 同位体層を固定壁と見なすことができ, 従って, 界面から同位体層までの距離を

変えることは、実質的に、界面から固定壁までの距離を変えることに相当する。図4に示した例のシミュレーション条件では、周期境界条件を課した結晶格子の左右両端間の距離は L_z に比べ短いので、低い固有振動数を持つノーマルフォノンモードの波数ベクトルは界面に垂直な方向を持つと考えられる。よって、その固有振動数は界面から同位体層までの距離が短いほど高くなる。このため、同位体層が界面に近いほど、閾値近傍の滑り速度に対応する振動数での強制振動に共鳴する結晶格子Aのノーマルフォノンモードの状態密度が減少し、図4の結果がシミュレーション実験で得られたと考えられる。

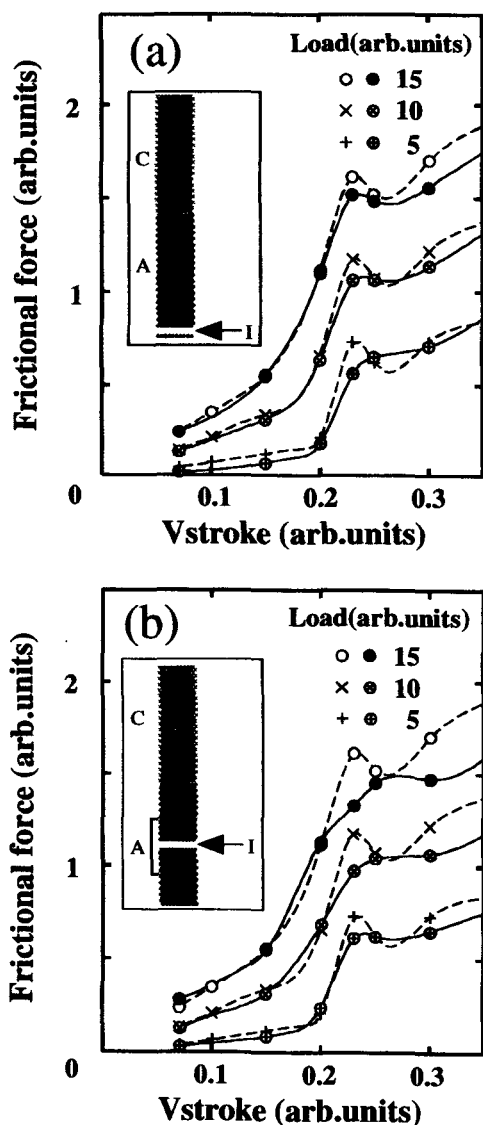


Fig. 4 Effect of isotope intercalation on sliding-velocity dependence of frictional force.

4. まとめ

弾性接触摩擦系の原子論的な単純化した二次元モデルに基づいて、2つの結晶格子を定常的な相対速度で滑らせる分子動力学シミュレーションを様々な実験条件のもとで系統的に行い、サブマイクロメ

ートルスケールの系における動摩擦現象について成り立つ法則性を調べた。さらに、弾性接触動摩擦現象の微視的な発現機構について検討し、動摩擦力の大小が粒子間ポテンシャルの非調和性を介したエネルギー散逸が起こり易いか否かによって決まるといふ仮説によってシミュレーション実験で見出された法則性を矛盾なく説明できることを示した。

系のサイズがマイクロメートル以上の場合には、滑り速度の閾値は実質的にゼロであり、したがって従来は、動摩擦力を軽減するために不純物注入などによって共鳴を起こりにくくすることが一つの有効な方策であった。今後微細化が進むに連れ、滑り速度の閾値は高速度側にシフトし、サブマイクロメートルスケールの機構部品で滑り速度を閾値より遅く設定して使用する状況になると、粒子間ポテンシャルの非線形性を抑える新たな工夫によって動摩擦力を飛躍的に軽減できる可能性がある。

謝辞：本研究は文部省の私立大学ハイテクリサーチセンター整備事業への指定に基づく助成による。

参考文献

- [1] M. Weiss and F. J. Elmer, "Physics of Sliding Friction", Ed. by B. N. J. Persson and E. Tosatti, Kluwer Academic Publishers, Netherlands (1996) pp.163-178.
- [2] K. Hayashi, N. Sakudo, and T. Kawai, *Surface and Coatings Technology*, 83, 313 (1996).
- [3] K. Hayashi, JST Forum for Multidisciplinary Research "FRICTION - BASICS OF TRIBOLOGY", p.79, Hayama, Japan (1997).
- [4] K. Hayashi, N. Sakudo, H. Hiromae, S. Abe, M. Fujiyama, and T. Kawai, 5th International Conference on Nanometer-Scale Science and Technology, SS.PTh.125, Birmingham, United Kingdom (1998).
- [5] M. Hirano and K. Shinjo, *Phys. Rev.*, B41, 11837 (1990).
- [6] S. Nose, *J. Chem. Phys.*, 81, 511 (1984).

(Received December 11, 1998; accepted February 28, 1999)