

Title	NUMERICAL STUDY OF ATOMIC SCALE FRICTION BETWEEN CLEAN GRAPHITE SURFACES
Author(s)	松下, 勝義
Citation	大阪大学, 2003, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/44035
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	まつ した かつ よし 松 下 勝 義
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)
学位記番号	第 17515 号
学位授与年月日	平成15年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 理学研究科物理学専攻
学位論文名	NUMERICAL STUDY OF ATOMIC SCALE FRICTION BETWEEN CLEAN GRAPHITE SURFACES (清浄グラファイト面間の原子スケール摩擦の数値的研究)
論文審査委員	(主査) 教授 赤井 久純 (副査) 教授 阿久津泰弘 教授 菊池 誠 助教授 松川 宏 教授 森田 清三

論 文 内 容 の 要 旨

原子スケールの摩擦は巨視的摩擦の基礎として、また、ナノテクノロジーなどの応用面で重要である。我々は清浄グラファイト面間の原子スケール摩擦の研究を分子動力学シミュレーションを行った。この研究の目的は、グラファイトの摩擦力顕微鏡実験での原子スケール摩擦の機構を明らかにすることと、重要な固体潤滑剤の一つであるグラファイトの摩擦、潤滑特性の原子スケールでの起源を明らかにすることである。シミュレーションで用いたモデルはグラファイト基板表面の単層、グラファイトの単層フレーク、そのフレークを駆動するバネからなっている。

今回のシミュレーションでは柔らかい駆動バネの場合に実験で観測されている原子スケールのスティックスリップ運動と低い摩擦係数を再現した。前者はフレークの基板上でのバルクのグラファイトの積層構造を再現する配置で留められる事によって引き起こされ、後者はフレークの中に存在する二種のサイト間でポテンシャルの増減がキャンセルする軌跡をフレークが取ることによりおきていることを明らかにした。また動摩擦力のパラメーター、駆動バネのバネ定数、フレークサイズ、駆動する向きなどの依存性を調べた。動摩擦力の荷重依存性とフレークの運動の間には、スティックスリップ運動と動摩擦力の荷重への線形依存性、断熱運動と非常に小さい動摩擦力、という対応関係が存在する。駆動バネのバネ定数やフレークサイズを変えた場合、スティックスリップ運動と断熱運動の間でフレークのダイナミクスが転移が起こる。それゆえ、動摩擦力は駆動バネのバネ定数やフレークサイズに強く依存することになる。このことはトムリンソン描像で説明される。我々は、また、摩擦力像の荷重、駆動バネのバネ定数、駆動方向依存性を調べた。弱い柔らかい駆動バネの場合に、菱形模様が摩擦力像に見られた。しかし、バネが硬い場合ではその模様が見られない。この模様の変化もまたトムリンソン描像によって議論できる。バネ定数や荷重によって断熱運動とスティックスリップ運動の転移が起こるが、その際フレークの断熱運動できる空間領域が大幅に変わる。そのため模様の大きな変化が現れる。さらに、我々は温度が大きくなるほど摩擦係数が大きくなるという結果を得た。それは、高荷重で熱励起による摩擦力の減少が大きいことが原因となっている。

論文審査の結果の要旨

原子スケールの摩擦現象は、近年、摩擦顕微鏡など新しい実験装置の発達により実験が可能となり、マクロな摩擦現象の素過程として、また、マイクロマシーンなどとの関連において、精力的に研究されている。申請論文において申請者は、乱れの無いグラファイト基板とグラファイトフレーク間の摩擦現象を分子動力学法により調べた。摩擦顕微鏡によるグラファイトの摩擦実験結果、および、最も代表的な固体潤滑剤としてのグラファイトの摩擦機構の、原子レベルからの解明が研究目的である。

用いたモデルでは、フレーク内の炭素原子は、互いに線形のパネで相互作用しており、基板の炭素原子とはレナードジョーンズポテンシャルで相互作用している。フレーク内の炭素原子はさらに摩擦顕微鏡の針を模したチップとパネで結合しており、これにより駆動される。基板炭素原子は固定されている。

実験に対応すると考えられる広いパラメーター領域でこの系は原子スケールのスティックスリップを起こすことがわかった。このとき、計算された摩擦係数は実験的に得られている小さな摩擦係数を定量的に再現する。グラファイト基板上の単一炭素原子の摩擦のシミュレーションとの比較から、この小さな摩擦係数の原因は、これまで考えられてきたようにグラファイト層間の相互作用が弱いことにあるのではなく、基板との関係において2種類のフレーク内炭素サイトがあり、この2種類のサイト間で基板から受ける力が打ち消し合うためであることを明らかにした。さらに申請者は、加重、フレークの大きさ、駆動パネの強さなどにより、フレークの運動は上記のスティックスリップ運動と、準断熱的運動の間の相転移を示すこと、強いパネで駆動された低加重領域や小さなフレークで起こる準断熱的運動では動摩擦力は極めて小さくなることを示した。これらの結果を、系の運動の安定性を示すヘシアン行列の解析、および、トムリンソンモデルを用いて説明した。さらに申請者は摩擦顕微鏡実験によって得られる摩擦力像を解析し、また、温度上昇とともに摩擦力の加重依存性が弱くなることも示している。

これらの結果は、固体潤滑剤としてのグラファイトの摩擦機構を解明するとともに、これまでのこの系における実験を説明し、さらに、マイクロマシーンなどの応用という見地からも重要な知見を与えた。審査員一同、博士(理学)を授与するのに適当であろうとの結論を得、論文審査は合格と判定した。