

粒子シミュレーションによる2次元オーブリー転移

Aubry transition in two-dimensional system studied by molecular simulation

山口大院・創成科学（正） 仙田 康浩

Yasuhiro Senda

Yamaguchi University

1. はじめに

固体間の摩擦の制御は産業のエネルギー分野だけでなくナノスケールの微細加工においても重要な要素技術である。固体表面間の格子不整合による接触では、摩擦力がゼロに近くなる「超潤滑状態」が観測されている[1]。不整合状態では大きな表面間の相互作用により格子の並進対称性が崩れる相転移が生じることがオーブリーによって指摘された[2]。1次元 Frenkel-Kontorova (FK) モデルでこのオーブリー転移の存在が示されたが、近年になり2次元物質でのオーブリー転移が実際に観測されて注目された[3]。本研究では分子動力学法による粒子シミュレーションを用いて不整合接触面の2次元オーブリー転移を再現するとともに摩擦力との関連を考察する。

2. オーブリー転移とは

FK モデルでは Fig. 1 のように片方の表面をバネでつながった粒子で表現し、表面間の相互作用ポテンシャルを余弦関数であらわす。2つの表面の格子定数の比が有理数の時は格子整合と言い、この比が 1:1 の場合は Fig. 1(a)のようにバネでつながった粒子が相互作用ポテンシャルと同じ周期で並ぶ。一方、表面間の格子定数の比が無理数である不整合の場合は Fig.1(b)のように粒子間隔とポテンシャルの周期が一致しない。この場合、粒子のポテンシャルの損得が打ち消し合って最大静止摩擦力が理論上ゼロになる。実際にグラファイト等の表面間では整合と不整合の変化に伴う摩擦力の角度依存性が観測されている。

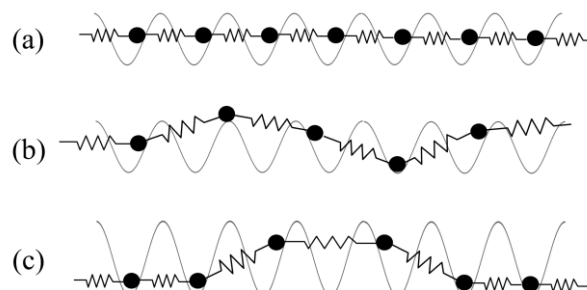


Fig.1: Schematics of FK models; (a) commensurate, (b) incommensurate and (c) Aubry transition

不整合の時に荷重を増して物体間の相互作用を大きくすると、相互作用力が閾値を超えたところで粒子系の構造が変化して Fig.1(c)のように整合領域と不整合領域が共存した粒子配列の構造に変化する。格子系の並進対称性を破ることで相互作用ポテンシャルを下げて系全体のエネルギーが低い安定な状態に転移する。オーブリーらは1次元 FK モデルの数学モデルからこの転移の存在を指摘した[2]。この1次元モデルの数値シミュレーションではオーブリー転移後に局所的なスタック・スリップ運動が現れた[4]。

3. 計算モデル

摩擦面の粒子モデルとしてレナード・ジョーンズ(LJ)ポテンシャルの粒子間相互作用を持つ粒子を用いた。Figure 2 のように面心立方格子(FCC)の(111)表面を摩擦面とした。接触面間の粒子間相互作用は LJ ポテンシャルの斥力項のみを用いた。接触面間の垂直荷重は接触面間の距離 Z を変えて調整した。各粒子の運動を分子動力学プログラムの LAMMPS を用いて追跡した。

接触面での摩擦力を評価するために、一方の接触面の粒子群 (Figure 2 の円形の赤い粒子群) にバネを接続したモデルを用いた[5]。バネの一端を摩擦面に平行にスライドすると、接触面間にせん断応力が発生してバネに変分が生じる。この変分量にバネ定数をかけたものをこの摩擦モデルの接触面間の摩擦力とした。

Figure 2 の青と赤の表面間の角度 θ が 0 のときは格子整合である。角度 θ を変えることで平面間の不整合を作成する。表面間距離 Z を近づけて垂直荷重による相互作用の変化で表面格子がどのように変化するか調べた。荷重下で角度方向に沿ってバネをスライドさせて摩擦力を調べた。

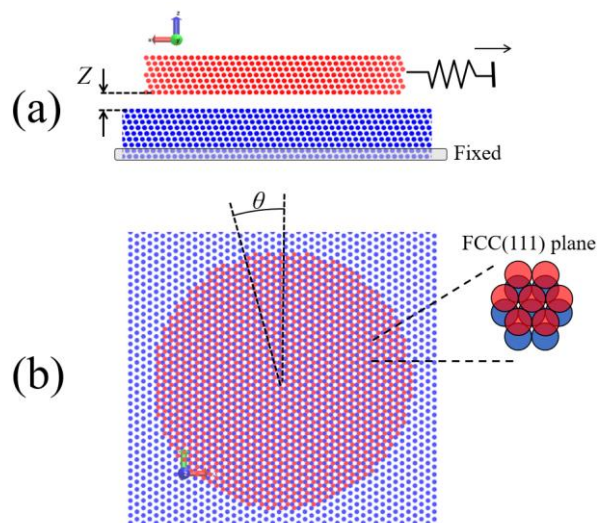


Fig.2: Schematics of computational model: The views of along (a) Y axis and (b) Z axis.

4. 結果と考察

4.1. 2次元オーバーリー転移とモアレ縞

不整合の時の接触面の格子配列では Fig. 3 (c)で示したような一定の周期をもつモアレ縞が現れた。表面間距離 Z を変えて表面間を近づけると表面粒子間の LJ ポテンシャルの斥力により表面間ポテンシャルが上昇した。この斥力によって格子は若干歪むが FCC(111)面の結晶対称性は保っており、Fig.3(b)に示したように不整合によるモアレパターンにも大きな変化はなかった。さらに表面間を近づけると、あるところでFCC(111)面の対称性が破れ、Fig.3(a)に示したように整合領域と不整合領域が共存する構造に再配列した。この再配列とともに Fig. 3 のグラフに示したように表面間ポテンシャルが急激に下がり系全体のエネルギーが不連続に低下した。不連続なエネルギーの変化を伴うこれらの変化は、表面格子の対称性が破れて系全体が安定な状態に転移するオーバーリー転移が生じたことを示唆している。転移前後の格子配列を比較すると、不整合で現れたモアレパターンを基にして転移後の整合と不整合の配列が現れていることがわかった。

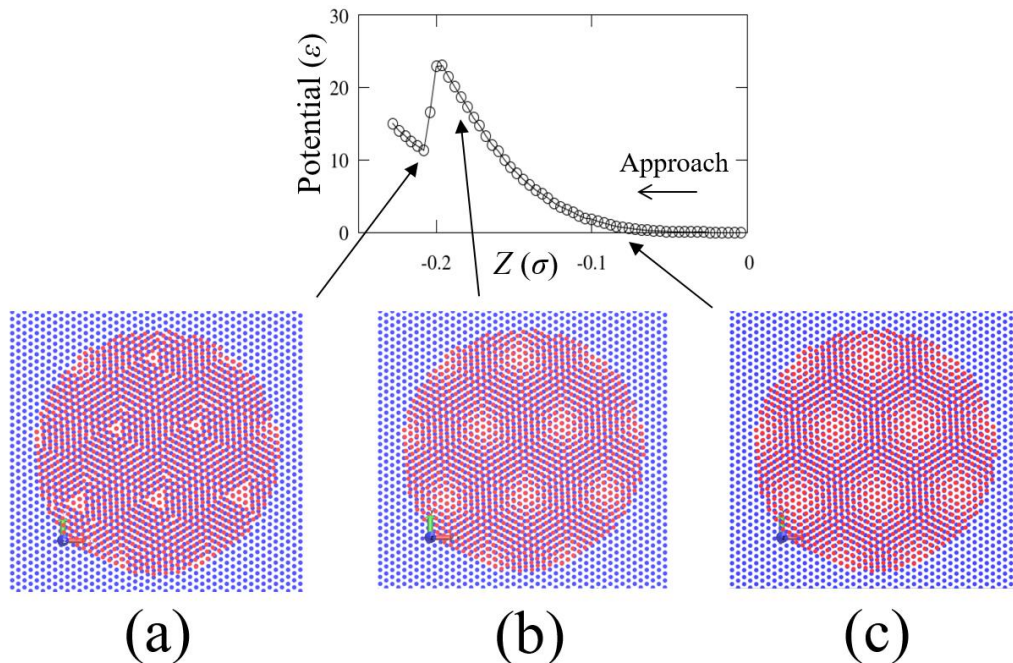


Fig.3: Upper panel: Interfacial potential as a function of Z at $\theta = 5$ degree.

Bottom panel: lattice arrangements on surface at the corresponding states indicated by arrow

4.2. オーブリー転移と摩擦力

Fig.3(a)-(c)のそれぞれの状態の時にバネをスライドさせて発生した摩擦力を Fig. 4 に示す。(c)の状態では摩擦力は0に近い。不整合を保っている(b)の状態では、斥力による格子の歪によりスティック・スリップ運動が生じている。オーバーリー転移後の(a)の状態では、転移前の(b)と(c)と比べると摩擦が急激に大きくなった。転移後の整合領域の存在により大きな摩擦力が生じていると思われる。また、この時はバネのスライドとともに Fig.3(a)の格子配列が乱れて不規則な摩擦力となった。

5. おわりに

分子動力学法により2次元オーバーリー転移を再現した。粒子群にバネを接続した摩擦モデルを用いて摩擦力を調べ、オーバーリー転移後は摩擦が増大した。講演では転移後の摩擦力の増大と、整合と不整合領域が共存する状態での粒子の振る舞いの関係について考察する。

文献

- 1) M. Hirano *et al.*, Phys. Rev. Lett. **78** 1448 (1997)
- 2) M. Peyrard and S. Aubry, J. Phys. C: Solid State Phys. **16** 1593(1983)
- 3) T. Brazda *et al.*, Phys. Rev. X **8** 011050 (2018)
- 4) 松川宏「摩擦の物理」93 ページ, 岩波出版 (2012)
- 5) Y. Senda, J. Phys. Soc. Jpn. **91** 014602 (2022)

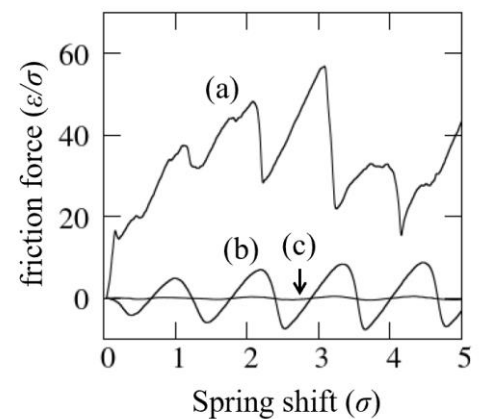


Fig. 4: Friction forces at the states of Fig.3(a)-(c)