

ナノスケール接触の数理的定義にもとづく ナノスケール摩擦の異方性の解釈

Interpretation of anisotropy of nanoscale friction based on mathematical definition of nanoscale contact

電通大院¹, °平尾 佳那絵¹, 岡本 遼治¹, 佐々木 成朗¹

Univ. Electro-Commun.¹, °Kanae Hirao¹, Ryoji Okamoto¹, Naruo Sasaki¹

先行研究[1]によりグラファイトのような層状物質界面のナノスケール摩擦が滑り方向に対して異方性を示すことが知られており、この異方性は接触界面の整合性により解釈されてきた[2]。本研究ではナノスケールの接触が摩擦に及ぼす影響を数理的に解釈するため、ナノスケール接触を数理的に定義し、層状物質界面のナノスケール摩擦の異方性の微視的メカニズムを解明する。

グラファイト基板上に剛体グラフェンシートを配向角度 θ_{in} で配置して (図1 参照), グラフェンシートを回転または滑らせて生じる相互作用ポテンシャルエネルギーとグラフェンシートにかかる力を計算する。グラフェンシート内の各炭素原子と基板間の相互作用は、基板の格子周期を反映する Steele 力場[3]を用いて解析的に計算した。

グラフェンシートを $0 \text{ deg.} \leq \theta_{in} \leq 10 \text{ deg.}$ の範囲で回転させて、各 θ_{in} でシート内の各原子にかかる垂直力 f_z をその大きさによって色分けしてプロットしたところ、図2のようにモアレパターンが現れた。配向角度 θ_{in} を 5 deg. から 9 deg. に増加させるとモアレパターンの周期が減少するが、ここで現れているモアレパターンはグラフェンシート/グラファイト基板積層における AB 積層と AA 積層の領域から形成されている。モアレパターン周期の減少は水平面内のナノスケール接触領域の減少に対応している。

本発表では、ナノスケール接触、つまりモアレパターンの変化を数値的に理解するために、全相互作用エネルギーにおける Steele 力場の高次項を解析してナノスケール摩擦の異方性を数理的に説明する予定である。

参考文献

- [1] N. Sasaki, T. Ando, and K. Miura et al., e-J. Surf. Sci. Nanotech. **14**, 204 (2016).
- [2] 平野元久, 表面科学 **24**, 6 (2003).
- [3] W.A.Steele, Surf. Sci. **36**, 317 (1973).

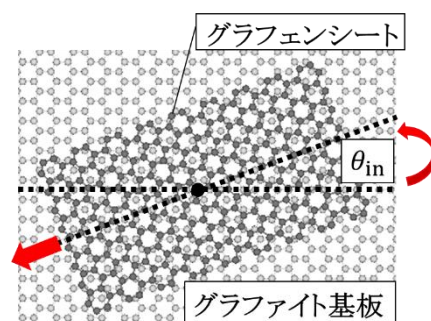


図1 計算モデル

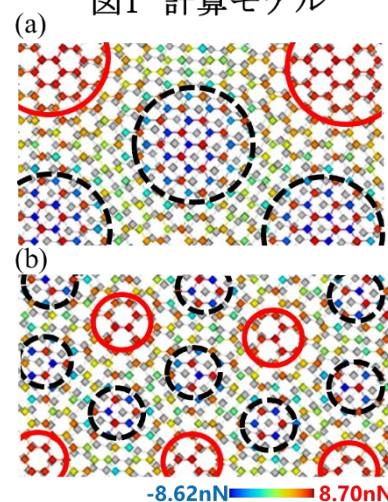


図2 シート内の各原子にかかる垂直力のモアレパターン
点線枠内がAB積層領域、赤線枠内がAA積層領域をそれぞれ意味する。
(a) $\theta_{in} = 5 \text{ deg.}$ (b) $\theta_{in} = 9 \text{ deg.}$