



# Bruciteの(001)面における真の接触面での摩擦特性

## 背景

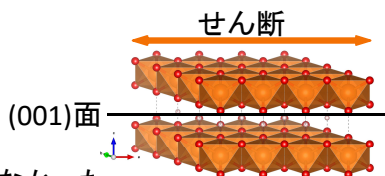
- プレート境界には層状鉱物が多く存在、断層のすべりを支配
- 層状鉱物の摩擦係数: 0.2~0.4 < 一般的な岩石: 0.6~0.8
- (001)面での摩擦係数は、ランダムな結晶方向での摩擦係数のおよそ半分
- 摩擦は一般にナノスケールの真の接触面に依存
- 断層のすべり挙動の理解には層状鉱物の(001)面における真の接触面での摩擦特性を見積もることが必要
- ナノスケール摩擦はすべり中のポテンシャルエネルギーの変化から見積もることができる

## 計算条件

- 東京大学: Reedbus-U, Oakforest-PACS  
東京工業大学: TSUBAME2.5
- 第一原理電子状態計算ソフトウェア:  
QUANTUM ESPRESSO
- 交換相関汎関数: GGA-PBE
- 分子間相互作用補正: DFT-D2
- 擬ポテンシャル: GBRV ultrasoft potential
- K点メッシュ: 6×6×4

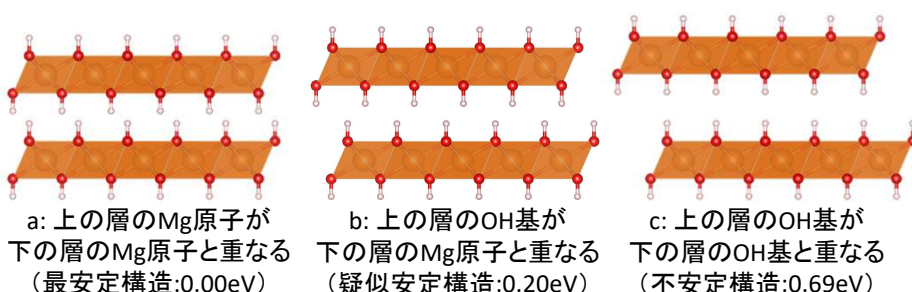
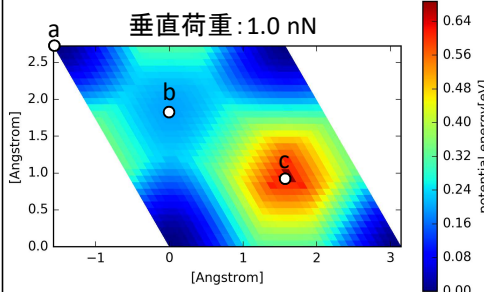
## 手法

- Zhong & Tománek (1990) に基づき、一定垂直荷重下で下の層を固定し、上の層をせん断させたときのエネルギー変化を計算 (ポテンシャルマップ)
- これまでは計算量の制約から(001)面全体でのポテンシャルマップは計算できなかった
- 単位格子中の原子数の少ないbrucite→高分解能かつ詳細な(001)面全体のポテンシャルマップが可能
- bruciteの(001)面内で約0.1 Åのメッシュ、(001)面に垂直方向に0.05 Å刻みで計算(32×32×35=35,840点)

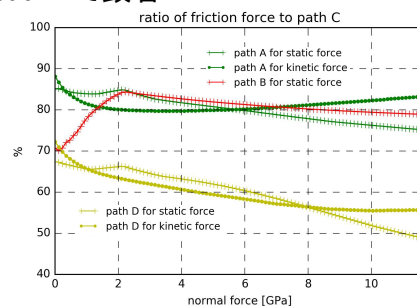
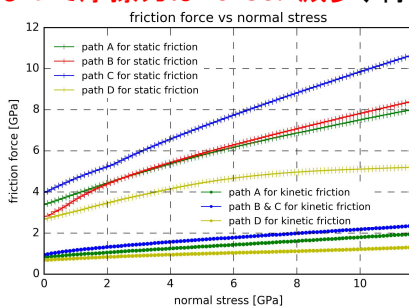
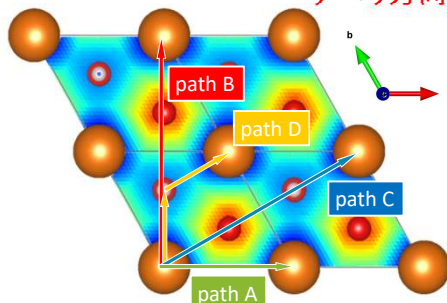


## 結果

- ポテンシャルマップ: (001)面全体で計算することでせん断時の構造の不安定性を定量化できる



- すべり方向と摩擦力: すべり方向を仮定し、その方向でのエネルギーの変位微分から摩擦力を求める
- すべり方向によって摩擦力は10~50%減少、特にpath Dで顕著



## 今後の計画

- 現在は温度0(K)下での計算→温度による摩擦力の低下 (thermolubricity) や原子振動を考慮する必要性  
→第一原理分子動力学法を用いた計算
- 現在はすべり速度がほぼ0の非常に遅いすべりを仮定→すべり速度の効果を考慮する必要性  
→原子間力顕微鏡(AFM)を用いた実験