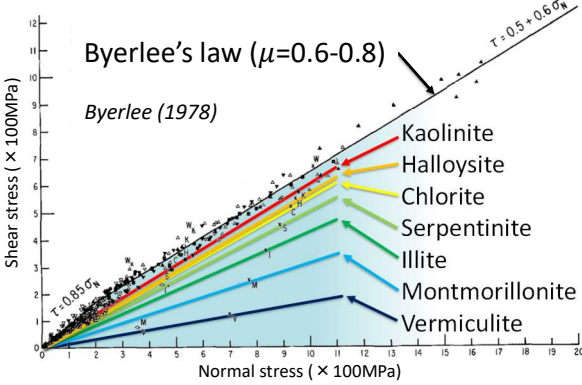




OBJECTIVE 層状鉱物bruciteの摩擦係数を第一原理計算で決定する

INTRODUCTION



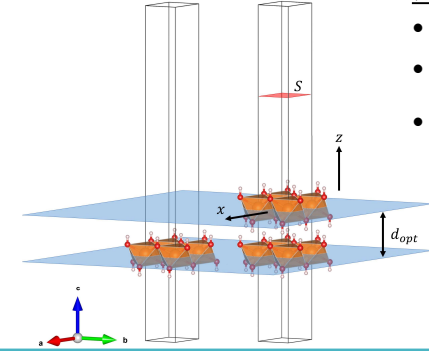
断層のすべり挙動：層状鉱物の摩擦特性が支配

- 断層に局在する (Chester et al., 2013; Uda et al., 2001)
- 層状鉱物の摩擦係数 (0.2-0.6) < 一般的な岩石 (0.6-0.8) (Byerlee, 1978; Moore & Lockner, 2004)
- 鉱物種で摩擦特性が異なる理由は不明 (Behnsen & Faulkner, 2004; Sakuma & Suehara, 2015)

層状鉱物の摩擦特性

- 層間を剪断面に配向 >>> 層間の摩擦特性が重要 (Moore & Lockner, 2004; Kawai et al., 2015)
- 層間の摩擦：真実接触面での原子スケール摩擦に支配 (Bowden & Tabor, 1950; Nakatani, 2001)

METHOD



原子スケール摩擦

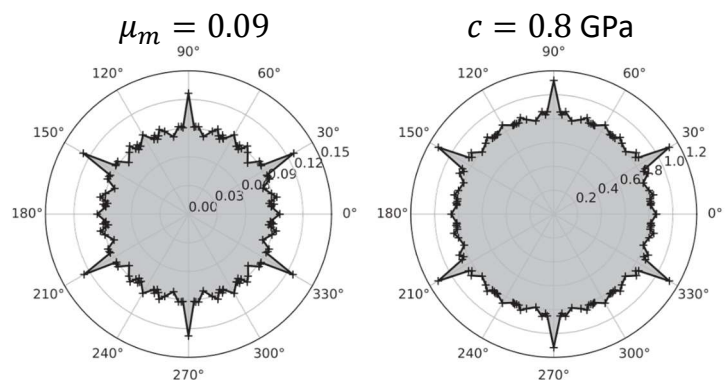
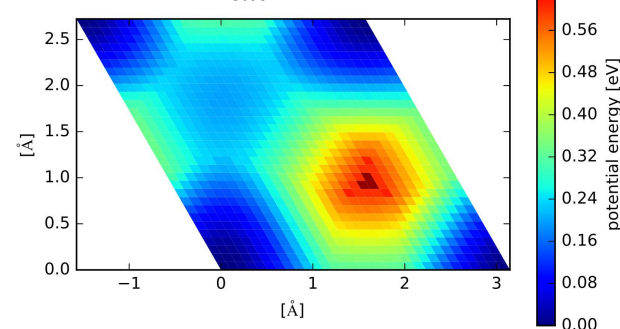
- 構造変化に伴うエネルギー変化 >>> 剪断応力 (Zhong & Tománek, 1990)
- エネルギー： $V(x, f_{ext}) = E_{ad}(x, f_{ext}) + f_{ext} \times (z(x, f_{ext}) + d_{opt})$
- 剪断応力： $\tau(x) = \frac{1}{S} \frac{\partial V}{\partial x} \gg \gg$ 垂直応力との関係式： $\langle \tau \rangle = \mu_m \frac{f_{ext}}{S} + c$

DFTを用いた第一原理電子状態計算 on Reedbush-U

- QUANTUM ESPRESSO (Giannozzi et al., 2009)
- GGA-PBE with DFT-D2 (Perdew et al., 1996; Grimme, 2006)
- GBRV ultrasoft potential (Garrity et al., 2014)

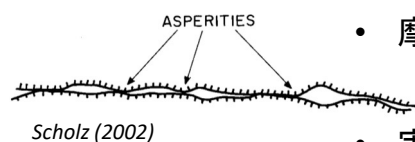
RESULT

$f_{ext} = 1.0$ nN



DISCUSSION

ミクロからマクロへ



- 摩擦の凝着説 >>> 真実接触面は全て降伏 ($\frac{f_{ext}}{S} = p$) (Bowden & Tabor, 1950)
- >>> マクロな摩擦係数： $\mu = \frac{\langle \tau \rangle}{p} = \mu_m + \frac{c}{p} = 0.29$ ($p = 4.0$ GPa)
- 実験での摩擦係数： $0.35 \pm 0.05 \ll \ll$ 破壊等も考慮すると計算値と一致

FUTURE WORK

1. 計算条件の精密化

- 水平方向に大きなスーパーセルでの計算 >>> 構造変化は水平方向で一様か？

2. 接触状態・鉱物種を変えた計算

- 層間以外での剪断は影響するか？
- 鉱物種で摩擦係数が変わる理由はなにか？