

摩擦の理論

川口高明, 松川宏^A 島根大 教育, 阪大 理^A

1 摩擦の研究

摩擦現象においては Coulomb-Amonton の法則が古くから広く知られている [1]。しかし、この法則の適応範囲については現在においても議論がある。さらに、これら以外の摩擦法則が存在するかどうかと言った理論的試みは少ない。そこで我々は摩擦の理論的解明ということで研究を進めている。現在までに 1 次元不整合系の Frenkel-Kontrova モデル [2] を拡張した上下物質の原子が変位可能なモデルにおける摩擦現象を調べてきた [3][4]。これらの研究において、上下物質の原子が変位可能な系でもその物質間の相互作用が小さい場合には最大静摩擦力がゼロとなる状態が存在することが明らかになった。この状態では動摩擦力は大きな速度依存性を示す。ただし、上下の物質の格子が変位可能な場合、最大静摩擦力がゼロとなる相互作用の強さの臨界値は変位の無い場合より小さくなる。さらに、相互作用が大きくなって最大静摩擦力が有限となると動摩擦力の速度依存性は弱くなることが分かった。また、摩擦を生じる表面に乱れが存在する場合には最大静摩擦力がゼロの状態は不安定となり、有限の最大静摩擦力が現れることが変分的方法等で理論的に示されている [4]。

ここではこれらをふまえて、まず乱れの無い系の摩擦現象における非線形ダイナミクスとしての動摩擦力のスライディング速度依存性を上下物質間相互作用を摂動とする摂動計算をもとにして調べる [5]。次に、表面に乱れ (不純物的な乱れ) が存在する場合の最大静摩擦力の振る舞いと乱れの関係を解明する [6]。

2 摩擦のモデル

ここで考える摩擦のモデルの特徴を次にまとめる [3]。(1) 摩擦を考える上下 2 つの物質として 2 つの 1 次元原子列 (1 次元格子) を仮定する。(2) 上の物質の格子のみ 1 次元的に変位可能とし、その原子間には調和型相互作用が存在する。下の物質は基板に固定する。(3) 上下物質間に相互作用が存在する。(4) 上の物質に外力をくわえる。(5) 上下物質の格子列は不整合とする。これらをもとに上の物質の原子の運動方程式は以下のように表される。

$$m_a \ddot{u}_i + m_a \gamma_a (\dot{u}_i - \langle \dot{u}_i \rangle_i) = K_a (u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) + \sum_{j \in b}^{N_b} F_I(u_i - v_j) + F_{ex} \quad (1)$$

ここで、次のように定義する。 $u_i \{v_i\}$: 上 { 下 } 層の原子位置座標、 $\langle \dots \rangle_i$: 原子サイト平均、 $K_a(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i)$: 上の物質内の原子間力、 γ_a : フォノンの減衰定数、 F_{ex} : 外力、 $N_a \{N_b\}$: 上 { 下 } の物質の原子の数。 $F_I(x)$: 上下層間での原子間力は以下の場合を考える。

$$F_I(x) = -\frac{d}{dx} U_I(x), U_I(x) = -\frac{K_I}{2} \exp \left[-4 \left(\frac{x}{c_b} \right)^2 \right] \quad (2)$$

定常状態でのこのモデルの摩擦力 F は以下で与えられる。

$$F = - \sum_{i \in a}^{N_a} \sum_{j \in b}^{N_b} \langle F_I(v_i - u_j) \rangle_t = N_a \langle F_{ex} \rangle_t \quad (3)$$

研究会報告

ここで $\langle \dots \rangle_t$ は時間平均を表す。摩擦力は運動方程式の数値シミュレーションにより求める。この際のパラメータ値は次の通り。上, 下物質の格子間隔 (c_a, c_b) の比は黄金比の連分数展開の 10 次まで考慮して $\frac{c_a}{c_b} = \frac{N_b}{N_a} = \frac{89}{144}$ と選ぶ。さらに、 $c_b = 1, K_a = 1, m_a = 1, \gamma_a = 1$ とする。なお、数値計算は周期境界条件を仮定し、慣性項を無視した過制動状態で行う。

3 摩擦力の摂動計算

摩擦のダイナミクスとしての動摩擦力のスライディング速度依存性について考える。動摩擦力についてはシミュレーションと、さらに上記の摩擦力の表式を用いて上下物質間相互作用を摂動とした摂動計算でも評価する。ここではクリーンな表面をもつ物質を仮定する。摂動計算の際、上の物質のスライディング時(重心速度 V) の格子変位を $u_i = Vt + ic_a + \delta u_i$ と書き、下の物質の原子は固定されているので上の物質の原子に下の原子から働く力は三角関数で近似できる。これは $V = 0$ の場合には Frenkel-Kontrova モデル [2] に対応する。運動方程式は以下ようになる。

$$m_a \gamma_a \delta \dot{u}_i = K_a \{ \delta u_{i+1} + \delta u_{i-1} - 2\delta u_i \} + \frac{K_I}{2} \sin \left[\frac{2\pi}{c_b} (Vt + ic_a + \delta u_i) \right] \quad (4)$$

ここで格子変位の表式はフォノングリーン関数 $G_{ij}(t)$ を用いて以下のように表す。

$$\delta u_i = \frac{K_I}{2m} \sum_j^{N_a} \int dt' G_{ij}(t-t') \sin \left[\frac{2\pi}{c_b} (Vt' + jc_a + \delta u_j) \right] \quad (5)$$

$$G_{ij}(t) = \frac{1}{N_a} \sum_k \int \frac{d\omega}{2\pi} G_k(\omega) e^{ik(i-j)c_a + i\omega t}$$

$$G_k(\omega) = (i\gamma\omega + \Omega_k^2)^{-1}, \quad \Omega_k^2 = \frac{2K_a}{m} (1 - \cos kc_a)$$

摩擦力 F の表式を δu_i で展開して K_I^2 に比例する最低次の項までの摂動計算を行うと以下の摩擦力の表式を得る。

$$F = \frac{K_I^2}{8\gamma m} \frac{\left(\frac{2\pi\gamma}{c_b} \right)^2 V}{\Omega_{k=\frac{2\pi}{c_b}}^4 + \left(\frac{2\pi\gamma}{c_b} V \right)^2} \quad (6)$$

動摩擦力 F は低速域では速度に比例して増加、高速域では逆比例して減少し、そのクロスオーバー速度はポテンシャル周期とフォノン分散関係で決まることが分かる。動摩擦はスライディング時の励起されたフォノンがそのエネルギーを散逸させることで生じる。この摂動計算結果と数値シミュレーション結果を比較してみる。上下物質間の相互作用が小さく最大静摩擦力がゼロの場合、計算機シミュレーションで得られた動摩擦力の速度依存性の結果はほとんどの速度領域で摂動計算結果と良く一致する(図 1(a))。相互作用が大きくなって有限の最大静摩擦力が現れた場合、低速域ではスライディング時の格子変位が大きくシミュレーション結果を摂動計算は説明できないが、高速度領域では格子変位が小さくなり、両方の結果は良く一致する(図 1(b))。

ここでは下の物質の原子が固定されている場合を考えたが、この摂動的扱いは下の物質の原子が変位可能な場合にも有効である。この場合、下の物質のフォノン励起による動摩擦力への寄与も重要となり得るため、より多様な動摩擦力の振る舞いが現れる [5]。

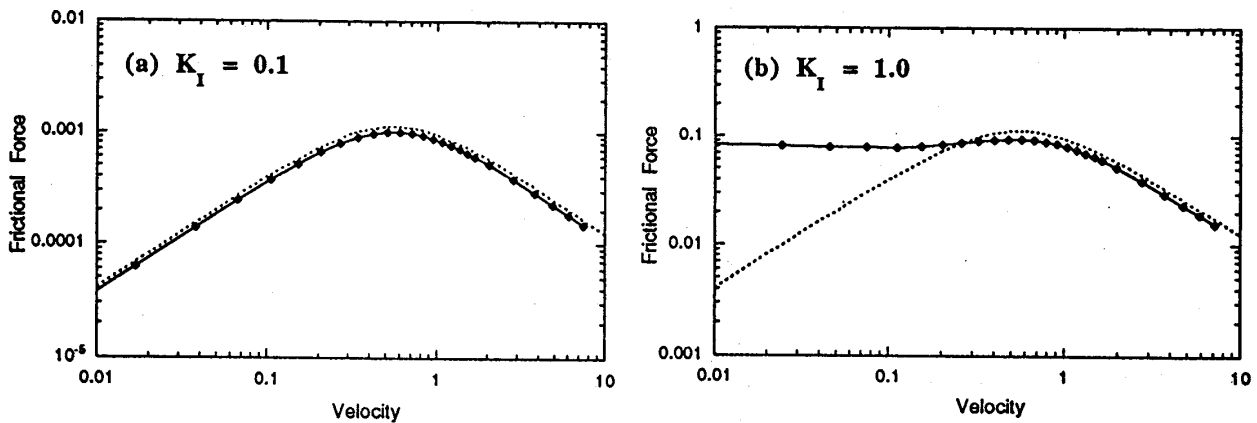


図1. 摩擦力の速度依存性（実線：シミュレーション、点線：摂動計算）

4 表面の乱れと最大静摩擦力

下の物質にのみ不純物 (N_I 個) が存在するとする。そのとき、上の物質の感じる下の物質との相互作用ポテンシャルは

$$U_I(u_i) = \sum_j^{N_b} U_I^P(u_i - v_j) + \sum_j^{N_I} U_I^{imp}(u_i - v_j) \quad (7)$$

と表す。ここで U_I^P : 下地ポテンシャル、 U_I^{imp} : 不純物ポテンシャルである。1 個の不純物ポテンシャルは以下のように選ぶ。

$$U_I^{imp}(x) = -\frac{K_I^{imp}}{2} \exp \left[-4 \left(\frac{x}{C_b} \right)^2 \right] \quad (8)$$

不純物数 N_I 、不純物ポテンシャル深さ K_I^{imp} により不純物ポテンシャルの強度を変化させることができる。ここでは、不純物は下の物質の原子サイトに存在すると仮定して、その不純物ポテンシャル深さを変化させる。次にこの系の特徴的なエネルギーの大きさを定義する。不純物 1 つ当りの不純物ポテンシャルエネルギー: $E_i = \frac{1}{2} K_I^{imp}$ 、不純物 1 つ当りの弾性エネルギー: $E_{el} = \frac{1}{2} K_a \times N_I / N_b$ 、そして、不純物 1 つ当りの外力 (最大静摩擦力) によるエネルギー: $E_f = \text{最大静摩擦力} \times N_b / N_I$ を定める。さらに系の特徴的なエネルギーの大きさとなる不純物ポテンシャルおよび外場のエネルギーを弾性エネルギーで規格化することで、不純物ポテンシャルの強さおよび外力の強さの相対的目安となるパラメータを定義する。そこで、不純物ポテンシャルの強さの目安: $\varepsilon_i = E_i / E_{el}$ 、そして、外力の強さの目安: $\varepsilon_f = E_f / E_{el}$ を定める。これらパラメータ間には、静摩擦現象を不純物ポテンシャルによるピン止め現象としてみなせる場合にはそのピン止めの状態に応じて特徴的な関係が成り立つことが理論的に導かれる。これは電荷密度波等におけるピン止め理論 [7] と同様の概念である。つまり不純物ポテンシャルが弱いと弾性エネルギーの損を小さくするため、複数の不

研究会報告

純物を含む相関長のスケールで格子歪が生じてピン止めが生じ、 $\varepsilon_f \propto \varepsilon_i^{4/3}$ の関係が成立する(弱いピン止め領域)。また逆に不純物ポテンシャルが十分強いと、各不純物のサイトで局所的に大きな格子歪が生じてピン止めされ、このときには $\varepsilon_f \propto \varepsilon_i$ となる(強いピン止め領域)。

数値計算の結果、図2のようになる。ここで不純物数については $N_I = 70$ とした。最大静摩擦力は3~10通りの不純物配置で平均してある。 K_I の小さい場合(図2(a)、 $K_I = 0.05$) ε_i が大きくなると、不純物ポテンシャルによる弱いピン止め状態から強いピン止め状態へ変化がみられる。また図より、不純物の存在により最大静摩擦力ゼロの状態は消失し、常に有限の最大静摩擦力が現れることが確認される。 K_I が大きくて $\varepsilon_i = 0$ でも有限の最大静摩擦力が生じている場合(図2(b)、 $K_I = 1$)、 ε_i を大きくしてゆくと、もとの $\varepsilon_i = 0$ での有限の最大静摩擦力の生じた状態から不純物ポテンシャルによる弱いピン止め状態へ移行し、さらに強いピン止め状態へと変化する。 K_I がさらに大きくなると(図2(c)、 $K_I = 6$)、弱いピン止め領域が狭められてほとんど消失するが、強いピン止め状態は存在する。

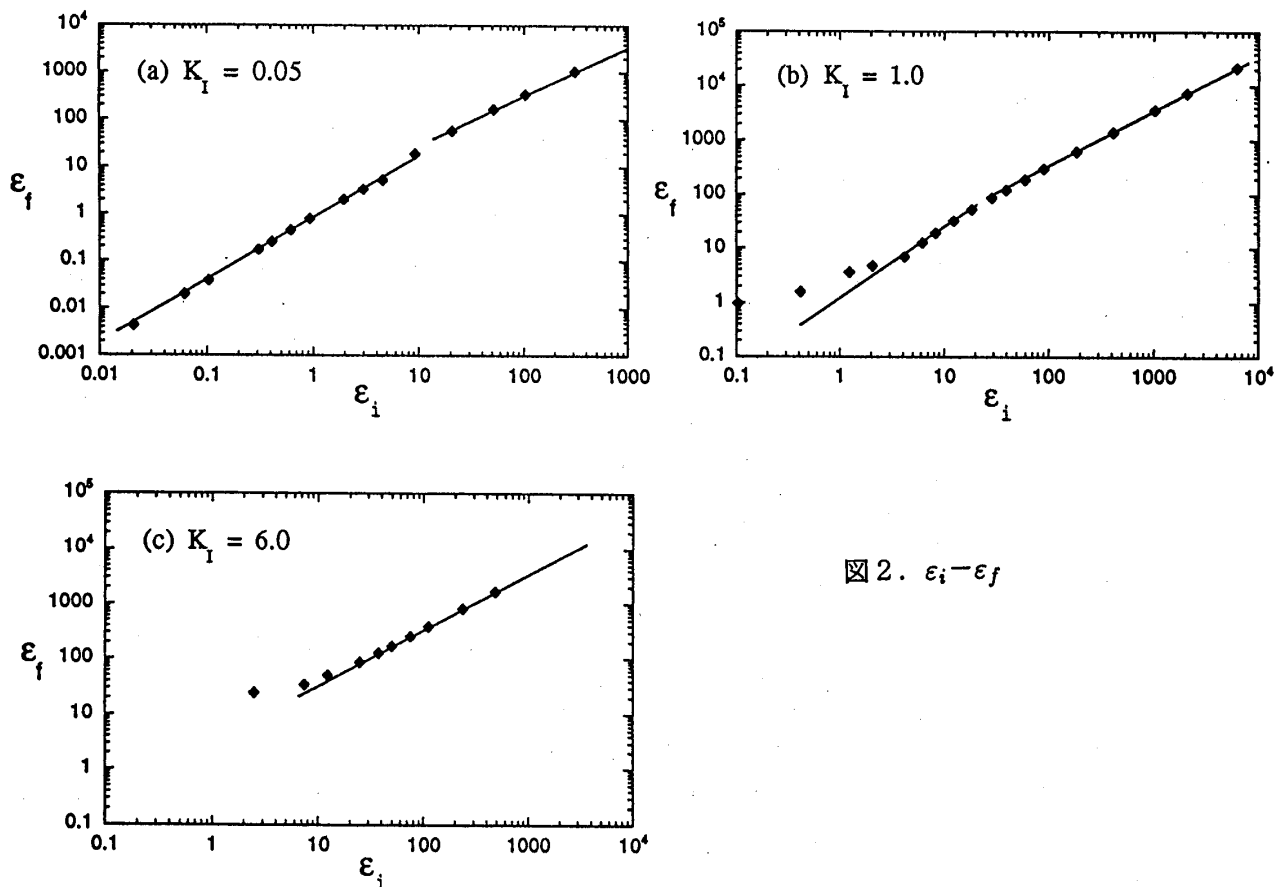


図2. $\varepsilon_i - \varepsilon_f$

5 まとめ

動摩擦力の速度依存性に関して計算機シミュレーションと物質間の相互作用についての摂動計算を用いて調べた。その結果、シミュレーションでみられた動摩擦力の速度依存性は、物質間の相互作用が小さい場合には最低次の摂動計算で良く説明されることが分かった。また、ここでの議論はクリーンな表面での話であったが、不純物などによる乱れが存在する場合の動摩擦力の振る舞いの解明も興味深い [6]。

表面の不純物的な乱れを導入して、ピン止め理論を用いて最大静摩擦力を調べた結果、不純物ポテンシャルの強さにより最大静摩擦力の振る舞いにクロスオーバーが生じ、これは不純物ポテンシャルによるピン止め状態の変化として説明できることが分かった。さらに、不純物ポテンシャルと下地の周期ポテンシャルの強さの違いによっても最大静摩擦力の振る舞いに別のクロスオーバーが生じ、これらのピン止め状態とは異なる状態も確認された。

参考文献

- [1] F. P. Bowden and D. Tabor: *The Friction and Lubrication of Solids* (Clarendon Press, Oxford, 1954).
- [2] Y. Frenkel and T. Kontrova: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **89**, 1340 (1938); **89**, 1349 (1938).
- [3] H. Matsukawa and H. Fukuyama: Phys. Rev. B **49**, 17286 (1994).
- [4] H. Matsukawa and H. Fukuyama: in *Physics of sliding friction*, B. N. J. Persson and E. Tosatti eds., (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996).
- [5] T. Kawaguchi and H. Matsukawa: to be published.
- [6] T. Kawaguchi and H. Matsukawa: to be published.
- [7] H. Matsukawa: J. Phys. Soc. Jpn. **57**, 3463, (1988).