

摩擦における atomistic locking と topology

NTT 電子応用研究所 平野元久 NTT 基礎研究所 新上和正

I. はじめに

これまでに行われた膨大な数の摩擦実験¹と日常の経験から、我々は固体を摩擦して滑らせるには常にある量のエネルギー（摩擦エネルギー）、したがって、ある大きさの力（摩擦力）が必要であることを知っている。摩擦力の起源を理解しようとしていくつかのモデルが提案されてきた。15～17世紀には、固体表面の macroscopic な表面粗さの機械的な噛み合い（mechanical locking）が摩擦の起源[†]と考えられた。^{2,3}また、17世紀後半になると固体間の分子の相互作用の重要性[‡]が強く示唆された。⁴現実の系で観測される摩擦係数の振舞いを説明するためには、現象論⁵が展開されてきた。現象論では、摩擦が接触面に存在することはあらかじめ仮定されており、“どうして摩擦は生ずるのか”という基本的な問題は依然解決されていない。最近の実験^{6,7}では、表面の粗さ、表面の汚染（O₂, H₂, 油など）などの多くの unknown factor を除いて well-defined された表面の微視的摩擦を解析しようとしている。

本研究では、理論的な立場から固体摩擦の atomistic な起源を明らかにする。ここで扱う摩擦の起源は、固体間の原子間相互作用などの内的（intrinsic）な要因に起因するものであり、表面粗さや表面の汚れなどの外的（extrinsic）な要因に関わるものではない。

II. 摩擦モデルと断熱ポテンシャル (adiabatic potential)

摩擦の系として接触して相対運動する2つの固体を考える。上の固体は下の rigid な固体に対して準静的に滑る。上の固体は N^u 個の原子から、下の固体は N^l 個の原子から構成され、これらの全構成原子は互いに相互作用を及ぼし合う。構成原子の各座標を $\vec{r}_i = (r_i^x, r_i^y, r_i^z; i = 1, 2, \dots, (N^u + N^l))$ で表す。系の全エネルギーは全原子の位置ベクトル $\vec{r}_i$ の関数であり、 $W(\vec{Q}; \{\vec{r}_i\})$ と表される。摩擦する固体は単純な対称性を持つ構造（例えば、f.c.c. 構造など）を持つものとする。上の固体（または、下の固体）に属する原子を、 a （または b ）で参照し、系に作用する相互作用ポテンシャルを $V_{aa}(r), V_{ab}(r), V_{bb}(r)$ と書く。接触する2つの固体の基本格子ベクトルを上の上の固体に対して $\vec{g}_1, \vec{g}_2$, 下の固体に対して、 $\vec{g}_1, \vec{g}_2$, 上と下の固体間のミスフィットベクトルを $\vec{g}_0$ と書く。系の断熱ポテンシャルは次式のように表される。

$$W(\vec{Q}) = \sum_i^{N^u} \sum_j^{N^l} V_{ab}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{N^u, N^u} V_{aa}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|). \quad (2.1)$$

$V_{ab}(0) = 0, V_{aa}(0) = 0$ とした。ここで、上式の右辺第1項の j についての和を $V^l(r) = \sum_j^{N^l} V_{ab}(|\vec{r} - \vec{r}_j|)$ と表す。 $V^l(r)$ は上の固体の原子が下の固体の原子から受ける相互作用ポテンシャルである。 $V_{bb}(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ の項は $\vec{Q}$ 依存性を持たないので上式から除いた。 $V^l(r)$ は下の固体の基本格子ベクトルの周期を持つ。そこで、Fig.1 に示すように、上の固体の構成原子を下の固体の primitive cell 内に投影しその分布を $P(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ とすると式 (2.2) は、

$$W(\vec{Q}) = \int d\vec{r} P(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2) V^l(r) + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\gamma,\gamma'}^{N^u, N^u} V_{aa}(|\vec{r}_i^\gamma - \vec{r}_j^{\gamma'}|), \quad (2.2.a)$$

† 凹凸説と呼ばれる。

‡ 凝着説と呼ばれる。表面粗さの影響は2次的なものと認識されている。

となる。また、単純な対称性を持つ上の固体は原子面をいくつも積み重ねた (layer by layer) の結晶とみなすことができるので

$$W(\vec{Q}) = \sum_{\gamma} \int d\vec{r} P_{\gamma}(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2) [V^I(r) + \frac{1}{2} \sum_{j, \gamma'}^{N^I} V_{aa}(|\vec{r} - \vec{r}_j^{\gamma'}|)], \quad (2.2.b)$$

と書ける。互いに接近した $\vec{Q}$ と $\vec{Q}'$ を考えると、摩擦エネルギー $W(\vec{Q}, \vec{Q}')$ は $\vec{Q}'$ での原子配置が $\vec{Q}$ での原子配置に変化する時に消費されるエネルギーとして定義される。摩擦力 $\vec{F}(\vec{Q})$ は、

$$\vec{F}(\vec{Q}) = \lim_{\vec{Q}' \rightarrow \vec{Q}} \frac{W(\vec{Q}, \vec{Q}')}{\vec{Q} - \vec{Q}'}. \quad (2.3)$$

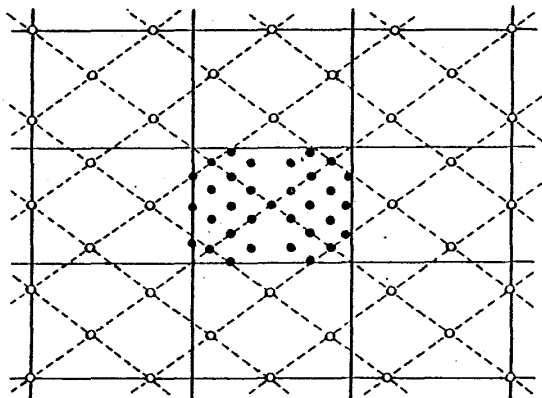


Fig.1 Two contacting surfaces where the upper body surface, shown by broken lines, is contacted against the lower body surface, shown by solid lines. Symbols (●) represent the $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ generated by projecting atoms of the upper body on the primitive cell of lower body.

III. 上の固体の構成原子が relax しない場合 - $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ の topology と摩擦 -

上の固体と下の固体は両方共に rigid であることを仮定する。 $W(\vec{Q})$ の $\vec{Q}$ 依存性から摩擦が生ずるので、式 (2.2.b) の右辺第 1 項の $P_{\gamma}(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の $\vec{Q}$ 依存性を調べる。ここでは上の固体も rigid であるので $P_{\gamma}(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の 2 次元分布 $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ の $\vec{Q}$ 依存性に注目する。 $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ は Fig.1 に示したように上の固体の構成原子を $\vec{g}_1$ と $\vec{g}_2$ によって作られる 2 次元空間に投影して求められる。この時、 $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ は、 $(\vec{g}'_m, \vec{g}_n)_i / |\vec{g}_n|$ ($m, n=1$ or 2) が有理数になるか無理数になるかに依存する。ここで、 $(x, y)_i$ は内積を示す。すべての可能な $(\vec{g}'_m, \vec{g}_n)_i / |\vec{g}_n|$ の組合せによって 9 種類の $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ を作ることができ、これらを $\vec{P}(\vec{\rho})$ の $\vec{Q}$ 依存性から下記の 3 つのカテゴリーに分類する。対応する模式的な $\vec{P}(\vec{\rho})$ を Fig.2 から Fig.4 に示す。

(1) variant $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ の場合。 Fig.2 に示した $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ は、線、ドット、ドメインから作られる。一例として、 $(\vec{g}'_m, \vec{g}_n)_i / |\vec{g}_n|$ ($m, n=1$ or 2) がすべて有理数である場合には、上の固体に属する多くの原子は下の固体の基本格子の同じサイトに投影されるので、 $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ は Fig.2(a) に示すようにドットだけから構成される。 Fig.2 に示した $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ を構成するドットと線は、 $\vec{Q}$ が変化すると動く。したがって、 Fig.2 の系では $\vec{P}_{\gamma}(\vec{\rho})$ は $\vec{Q}$ に依存して変化するので摩擦力が現れる、これがすべり摩擦の 1 つの起源である。この場合、上の固体と下の固体は相互作用ポテンシャルによる atomistic な roughness によって locking されている。したがって、我々はこの摩擦の起源を macroscopic な表面粗さの mechanical locking³ の機構とのアナロジーから atomistic locking と呼ぶことにする。(このカテゴリーを variant $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の場合として参照する。)

(2) invariant $\bar{P}_\gamma(\bar{\rho})$ の場合. Fig.3 に示した $\bar{P}(\bar{\rho})$ はドメインだけから作られる. このドメインは $\bar{Q}$ がいかなる方向に与えられても動くことはない. したがって, $\bar{P}(\bar{\rho})$ は任意の $\bar{Q}$ に対して不変であるので, 摩擦力は任意の方向に対して常に 0 になる. (このカテゴリーを invariant $P_1(\bar{r}; \bar{g}_1, \bar{g}_2)$ の場合として参照する.)

(3) restrictedly invariant $\bar{P}_\gamma(\bar{\rho})$ の場合. Fig.4 に示した $\bar{P}(\bar{\rho})$ は線とドメインから作られる. ドメインは任意の $\bar{Q}$ に対して変化しない. 一方, 線はその線に沿った $\bar{Q}$ に対しては変化しないが, その線を少しでも横切る方向の $\bar{Q}$ に対しては変化し得る. したがって, 摩擦力は線に沿った方向の $\bar{Q}$ に対して 0 になるが, そうでない場合には摩擦力は現れる. (このカテゴリーを restrictedly invariant $P_1(\bar{r}; \bar{g}_1, \bar{g}_2)$ の場合として参照する.)

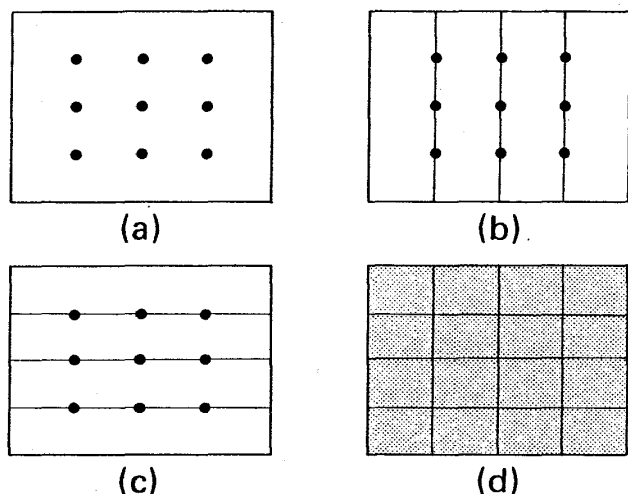


Fig.2 Schematic illustrations of possible non-vanishing regions where atoms of the upper body are projected onto a two-dimensional space spanned by g_1 and g_2 when $\bar{P}_\gamma(\bar{\rho})$ is variant with $\bar{Q}$. $((\bar{g}'_m, \bar{g}'_n)_i / |\bar{g}'_n| (m, n=1 \text{ or } 2)) = (r, r, r, r)$ for (a), (r, r, ir, r) or (r, r, r, ir) for (b), (r, ir, r, r) or (ir, r, r, r) for (c), and (r, ir, r, ir) or (ir, r, r, ir) or (r, ir, ir, r) or (ir, r, ir, r) for (d), where r represents rationality and ir irrationality.

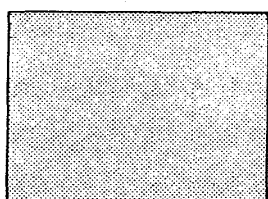


Fig.3 Schematic illustrations of possible non-vanishing regions where atoms of the upper body are projected onto a two-dimensional space spanned by g_1 and g_2 when $\bar{P}_\gamma(\bar{\rho})$ is invariant with $\bar{Q}$. $((\bar{g}'_m, \bar{g}'_n)_i / |\bar{g}'_n| (m, n=1 \text{ or } 2)) = (ir, ir, ir, ir)$, where r represents rationality and ir irrationality.

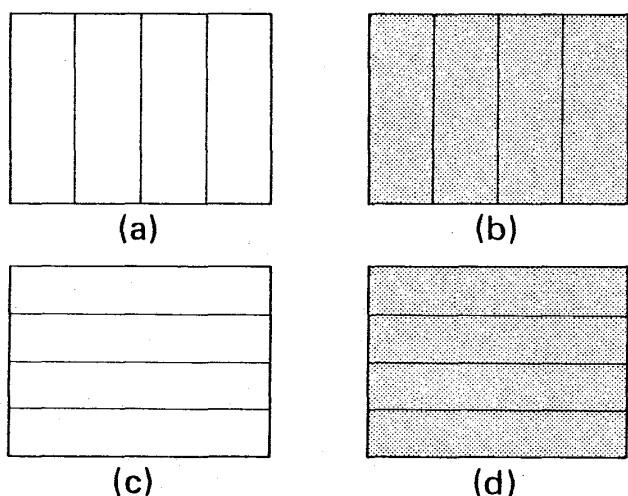


Fig.4 Schematic illustrations of possible non-vanishing regions where atoms of the upper body are projected onto a two-dimensional space spanned by g_1 and g_2 when $\bar{P}_\gamma(\bar{\rho})$ invariance with $\bar{Q}$ is restricted. $((\bar{g}'_m, \bar{g}'_n)_i / |\bar{g}'_n| (m, n=1 \text{ or } 2)) = (r, r, ir, ir)$ for (a), (r, ir, ir, ir) or (ir, r, ir, ir) for (b), (ir, ir, r, r) for (c), and (ir, ir, ir, r) or (ir, ir, r, ir) for (d), where r represents rationality and ir irrationality.

IV. より現実的な場合: relax する上の固体

上の固体の最下面に属する原子だけが、それぞれの位置を変えることのできるものとする。最下面から2番目、3番目、... の原子面に属する原子の relaxation は最下面に属する原子の relaxation に比べて小さいと考えられる。ここでは、式(2.2)の3次元分布 $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ を考える。

まず、相互作用ポテンシャル $V^I(r)$ が非常に弱い weak limit の場合を考える。 $V^I(r)$ が弱いと $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の各点は local な potential minimum の方向に僅かに移動するが、 $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ を構成する線、ドット、ドメインの位相的性質 (topological properties) は変化しない。したがって、 $V^I(r)$ の1次微係数が r の連続関数であれば、 $V^I(r)$ が弱いときの摩擦特性は本質的には上の固体が rigid な場合と同じでなる。

strong limit の場合には、上の固体の最下面の原子は各原子に最も近いポテンシャル $V^I(r)$ の極小の位置に落ち込む。 Fig.5 に示す系に小さな変位 $\vec{Q}$ を与えると、いくつかの原子は最も近い隣のサイトへ非断熱的にジャンプする。摩擦エネルギーは、原子配置を変化させるのに必要なエネルギーから求められる。これがもう1つの摩擦の起源である。原子配置はダイナミックなプロセスによって非連続的に変化するため我々はこの起源を dynamic locking と呼ぶ。

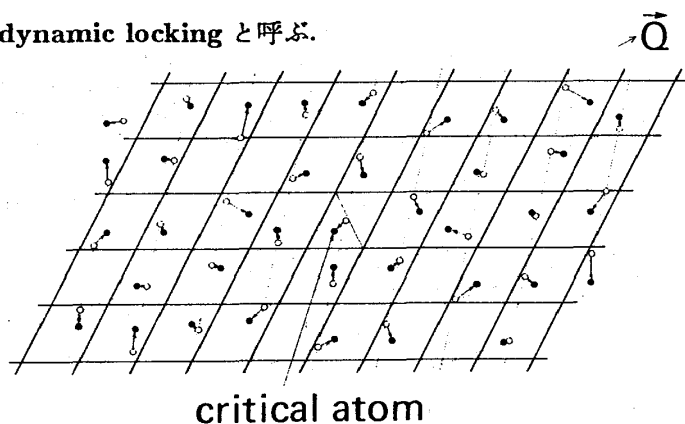


Fig.5 Two contacting surfaces where $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ of the frictional system is invariant with any $\vec{Q}$. The upper body surface, shown by broken lines, is contacted against the lower body surface, shown by solid lines. Atoms initially positioned at symbols (○) move into symbols (●) and correspond to the lowest minimum of $V^I(r)$. The critical atom near the boundary line of a primitive cell of the lower body is most likely to jump beyond the potential barrier when $\vec{Q}$ is given.

invariant $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の場合には、 $V^I(r)$ が弱いと $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ は任意の $\vec{Q}$ に対して変化しないため摩擦力は0になる。この時、atomistic locking は起こらない。 $V^I(r)$ が強くなると、 $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の中に vanishing 領域 (原子が居ることができない領域) が現れる。さらに $V^I(r)$ が強くなると、 $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ を周期的に敷き詰めたパターンは Fig.6 に示すようにある $\vec{Q}$ の方向に disconnect する。この時 $V^I(r)$ の強い相互作用による dynamic locking が起こる。このように、 $V^I(r)$ の増加によって摩擦力が0から有限に変化する転移が起こる。我々はこれを摩擦転移 (friction transition) と呼ぶことにする。

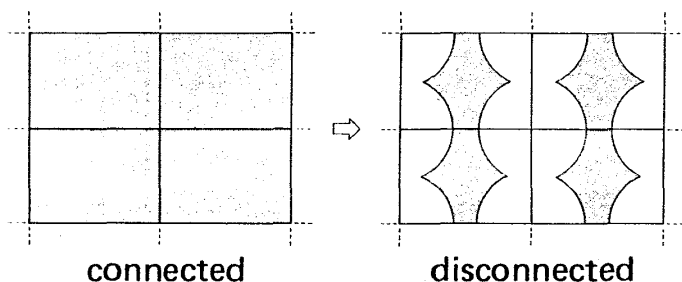


Fig.6 Disconnectedness of the pattern made by tiling $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ periodically. (a) is variant $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ case, and (b) invariant $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ case.

摩擦転移は Aubry 転移⁸と呼ばれる解析性の破れとは異なる。Aubry は格子欠陥や転位の動きを説明するために1次元系の Frenkel-Kontrowa モデルを調べた。この場合解析性の破れは $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ のパターンに disconnect された領域が現れることに対応する。restrictedly invariant $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の場合には、解析性の

破れは摩擦転移と等価になる。しかしながら, invariant $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の場合には, $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ に vanishing 領域が現れることとパターンが disconnect されることは等価でないので, 解析性の破れは摩擦転移と異なる。

V. 結果の考察と結論: Atomistic locking

摩擦特性は $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の $\vec{Q}$ 依存性と原子間ポテンシャルの強さに依存して生ずる $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の位相的性質の変化によって特徴付けられる。 $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ の位相的性質は, $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ を 2 次元空間に敷き詰めることによって現れる。 $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ が $\vec{Q}$ に対して不変であり, かつ, $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ によって作られたパターンが connect されていると摩擦力は 0 になる。 $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ が $\vec{Q}$ に対して変化するかあるいはパターンが disconnect されると摩擦力が現れる。 2つのタイプの atomistic な起源として atomistic locking と dynamic locking を明らかにした。 atomistic locking は, すべての原子が連続的に動くことによって生ずる。 atomistic locking は任意の強さのポテンシャル $V^I(r)$ に対して起こる。 dynamic locking は, いくつかの原子が非断熱効果によって非連続的に動くことによって生ずる。 dynamic locking は, $V^I(r)$ が強くなって $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ によって作られたパターンが disconnect されると起こる。 摩擦特性の模式的な相図を Fig.7 に示した。 摩擦転移が起こるかどうかが判定する条件式を導いていろいろな系の摩擦特性を調べたところ, 摩擦転移は現実的な系では起こらないことが明らかになっている。⁹ このことは, 現実的な系のすべり摩擦では atomistic locking が摩擦の原因であることを示唆する。 もう 1つの重要な結論は, もし完全にきれいな結晶面を作ることができれば摩擦のない (超潤滑: superlubricity) 系が存在することである。 摩擦の dynamical な性質や, 金属などで観測される非晶質表面の摩擦特性を調べることは今後の課題である。

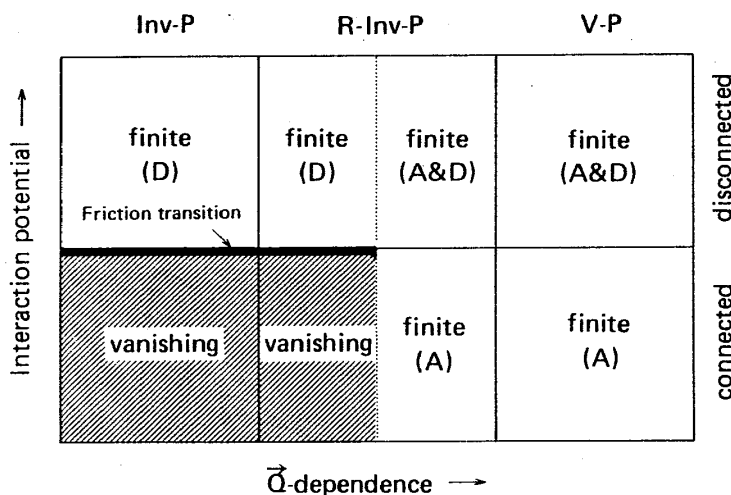


Fig.7 Schematic phase diagram representing whether or not frictional force is finite or vanishing. Here, invariant $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ case is denoted as Inv-P, restricted invariant $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ case as R-Inv-P, and variant $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ case as V-P. Atomistic locking is denoted as (A), and dynamic locking as (D). Dynamic locking occurs when the pattern of $P_1(\vec{r}; \vec{g}_1, \vec{g}_2)$ is disconnected.

参考文献

1. 材料の摩擦特性に関する最初の科学的記述はイタリアのルネサンス (Leonardo da Vinci) に見ることができる。摩擦の科学 (トライボロジ) の歴史に関する解説として, 例えば, 曾田範宗, 摩擦のはなし (岩波書店, 1971)。
2. G. Amontons, *Mémoires de l'Académie Royale* A, 275 (1699)。
3. C. A. Coulomb, *Mémoires de Mathématique et de Physique de l'Académie Royale*, 161 (1785)。
4. J. T. Desaguliers, *A Course of Experimental Philosophy Vols. 2*; J. T. Desaguliers, *Phil. Trans. Roy. Soc. (London)* 33, 345 (1725); D. Dowson, *J. Lub. Technol., Trans. ASME* 100, 3 (1978)。
5. F. P. Bowden and D. Tabor, *Friction and Lubrication of Solids, Vol II* (Clarendon Press, Oxford, 1964)。
6. R. Kaneko, K. Nonaka and K. Yasuda, *J. Vac. Sci. Technol.* A6, 291 (1988)。
7. C. M. Mate, G. M. McClelland, R. Erlandsson, and S. Chiang, *Phys. Rev. Lett.* 59, 1942 (1987)。
8. S. Aubry, *J. Physique* 44, 147 (1983)。
9. M. Hirano and K. Shinjo, *Phys. Rev.* B15, to be published。