

清浄表面の摩擦

大阪大学理学部 松川 宏

1、はじめに

ある程度きれいな表面を持つ金属などの乾燥摩擦では通常、表面の凸凹が小さくなるほど摩擦係数は大きくなる。そして十分平らにしてしまうと表面を接する2つの物質は真空中ではくっついてしまい、摩擦係数(摩擦力/垂直抗力)は無限大となる。しかし原子的なスケールで表面の乱れが完全に無い特別な場合には、少なくとも最大静摩擦力は0になる事を、理論的に示すことができる。それはどのような場合に起こるのか、多少、乱れがある場合にはどうなるのか、動摩擦力も0になりうるのかなどを主に報告する。

通常の乾燥摩擦に対しては良く知られた摩擦の3法則(クーロンの法則)が経験的に成り立つ。それは(i)摩擦力は見かけ上の接触面積に依存しない、(ii)摩擦力は垂直抗力に比例する、(iii)動摩擦力は静摩擦力より小さく、速度に依存しない、というものである^{1), 2)}。(i, ii)は摩擦係数は見かけ上の接触面積にも垂直抗力にも依らないということである。この静摩擦に関する部分については表面の凸凹の凸の部分での塑性変形、そこで分子間力による凝着などを考慮して説明することができる。しかし、動摩擦に関する部分の説明やこの3法則の適用限界、3法則が成り立たない場合これに変わって成り立つ摩擦の法則などまだまだ明らかでない問題も多い。我々はそれらの問題を理論的に明らかにすることを目標として研究を行っている^{3)~5)}。本論ではまず摩擦力を原子的なモデルに基づき理論的に計算する一般的方法を紹介した後、原子的なスケールで表面の凸凹が完全に無い場合(以下清浄表面と呼ぶ)の摩擦を調べる。このような場合にはもはや摩擦の3法則は成立しないと考えられる。この清浄表面の摩擦の1次元モデルを導入する。このモデルはある場合(表面を接する2つの物質のうち一方の結晶の変形が許されない場合)には転位の研究などで良く知られるFrenkel-Kontrovaモデルに一致し、そこでは2つの物質の格子間隔の比が無理数(不整合、incommensurate)の場合、最大静摩擦力が0になり得ることを説明する。次に、固定されていた結晶が変形できるとした現実的な場合や動摩擦力はどうなるかを見た後、最大静摩擦力が0の状態は、現実には必ず存在する乱れに対して安定か否かを調べる。最後に摩擦力を小さくする可能性の一つと考えられる量子効果について議論したい。

2、摩擦力として何をどのように計算すればよいか

摩擦力を理論的に求めるには何をどのように計算すれば良いのかを考えよう^{3)~5)}。お互いに表面を接する2つの物質の一方に力を加えたときの静及び動摩擦力を問題とする。原子を適当な相互作用を持つ古典的な粒子とみなし、上(下)の物質を構成する*i*-番目の原子の位置ベクトルを $\mathbf{u}_i(\mathbf{v}_i)$ とし、上の物質に表面に平行な方向に外力が加わっているとすると。又、簡単のため表面は(乱れがあっても平均として)水平だとする。この時の上の原子の運動方程式は、次のように表される。

$$m_a \ddot{\mathbf{u}}_i + m_a \gamma_a (\dot{\mathbf{u}}_i - \langle \dot{\mathbf{u}}_i \rangle_i) = \sum_{j \in a} \mathbf{F}_a(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) + \sum_{j \in b} \mathbf{F}_I^{(i,j)}(\mathbf{u}_i - \mathbf{v}_j) + \mathbf{F}_{ex} + \mathbf{F}_{Ga} \quad (1)$$

ここで*m*は原子の質量、 γ はエネルギー散逸の程度を表すパラメーター、添字の*a*は上の物質に関係する量であること、 $\langle \rangle_i$ は*i*についての平均を示す。(1)式右辺から説明すると、第1項は上の物質を構成する原子の間に働く力、第2項は上と下の物質を構成する原子の間に働く力、第3項は外力、第4項は重力である。左辺第1項は慣性項である。次に第2項であるが、これはエネルギー散逸の効果を表しているものである。我々は、考えている物質のすべての自由度を、明確な形で取り扱うことなどできはしない。扱うことができるのは考える問題に応じた代表的な自由度のみである。そして、その代表的な自由度にエネルギーが与えられれば、必ず他の自由度へのエネルギーの散逸が生ずる。通常、この効果は考えている自由度の速度に比例するものとして取り入れられるが、摩擦の場合、同じ物質を構成する他の自由度へのエネルギー散逸が主だと考えられるから、第2項のように考えている自由度の速度と重心の速度の差に比例するとするのが自然であろう。下の物質を構成する原子に対しても、同様の次の運動方程式が立つ。

$$m_b \ddot{v}_i + m_b \gamma_b (\dot{v}_i - \langle \dot{v}_i \rangle_i) = \sum_{j \in b} F_b(v_i - v_j) + \sum_{j \in a} F_I^{(i,j)}(v_i - u_j) + F_s(v_i) + F_{Gb} \quad (2)$$

記号の意味は(1)式と同様である。ここで下の物質はある基板の上に乗っていてそこから力を受けており、上の物質を引っ張っても一緒に動いていかないようになっているとしている。右辺第3項がその力である。ここで定常状態を考えることとし、(1)をすべての上の原子について和を取り、さらに時間平均をとると、

$$-\sum_{i \in a} \sum_{j \in b} \langle F_{Ij}(u_i - v_j) \rangle_t = N_a \langle F_{ex} \rangle_t \quad (3)$$

を得る。ここで F_{Ij} は F_I の外力に平行な成分、 N_a は上の物質を構成する原子の個数である。(3)式右辺の外力の下で系は静止、又は有限の一定速度で運動しているのであるから、左辺が摩擦力である。即ち、上下の物質の原子間に働く力の総和が摩擦力である。理論的にこれを計算すればよい。

3、清浄表面の摩擦の一次元モデルとFrenkel-Kontrovaモデル

我々が日常生活で経験する摩擦には、表面の乱れが重要であり、摩擦力は2つの物質の接触している凸同士が分子間力で凝着する事により生じると考えられている。一方、これと別に、原子的なスケールで乱れないような表面間の摩擦を考えることもできる。このような場合は、表面の全原子間に原子間力が働き、それに比べて重力は十分小さいので、無視できよう。そこではどのような摩擦力が働くのであろうか？この問題を明らかにするため、ここでは先ずそのような清浄表面の1次元モデルを考える^{4)~5)}。ここで1次元という意味は、上下の物質共、原子が1次元的に並んでできているとし、さらに各原子の変位も1次元とするという、2重の意味である。同じ物質の原子間、及び、下の物質の原子と基板との相互作用を線形近似し、その運動方程式は以下ようになる。

$$\begin{aligned} m_a \ddot{u}_i + m_a \gamma_a (\dot{u}_i - \langle \dot{u}_i \rangle_i) &= K_a(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i) + \sum_{j \in b} F_I(u_i - v_j) + F_{ex} \\ m_b \ddot{v}_i + m_b \gamma_b (\dot{v}_i - \langle \dot{v}_i \rangle_i) &= K_b(v_{i+1} + v_{i-1} - 2v_i) + \sum_{j \in a} F_I(v_i - u_j) - K_s(v_i - ic_b) \end{aligned} \quad (4)$$

ここで c_b は下の原子の平均間隔、 K_a , K_b , K_s は各々の相互作用の強さを表すパラメーターである。 F_I は全ての原子間で同じとした。 u_i と v_i には周期境界条件 $u_i = u_{i+N_a}$, $v_i = v_{i+N_b}$ を課すものとする。上下の原子間の力 $F_I(x)$ は原子間ポテンシャル $U_I(x)$ より求まるが、ここでは $U_I(x)$ を計算の実行しやすさと、次に述べるFrenkel-Kontrovaモデルとの対応のため、次のようにおく。

$$U_I(x) = -\frac{K_I}{2} \exp\left[-4\left(\frac{x}{c_b}\right)^2\right] \quad (5)$$

上式で、 K_I はポテンシャルの強さを表すパラメーターである。

さてここで、基盤と下の原子の相互作用の強さ K_s を無限大としてしまえば下の原子は固定され周期的に並び、上の原子が下の全ての原子から受ける力は、上の原子の座標のみの周期関数となる。そして $U_I(x)$ を上記のように選んでおけば、この力はほとんど1つの三角関数で表されるものとなる。これを完全に三角関数で置き換えてしまえば、これは転位の研究などで良く知られたFrenkel-Kontrovaモデルである。そしてこの単純化されたモデルでは、上下の物質の平均格子間隔の比 c_a/c_b が無理数の時、即ち不整合な時、次のようなAubryの相転移がある⁶⁾。いま基底状態での、ポテンシャルの一周期の区間に折り畳んだ粒子の分布関数 ρ を考える(図1)。ポテンシャルの強さ K_I が0のときには上の原子は完全に周期的に並び、その周期と下のポテンシャルの周期の比が無理数のため ρ は一様となる。 K_I が徐々に増加していくと、ポテンシャルの山のあたりの粒子分布が小さくなり、谷底では逆に大きくなる。さらに K_I を増やすとある臨界値 K_{Ic} に達し $K_I > K_{Ic}$ では、山頂の粒子分布が0となり ρ にギャップが生じる。この ρ の K_{Ic} での変化は一種の相転移である。この相転移と摩擦力の関係を見るため、粒子全体の重心座標を微小量変化させたときのエネルギーの変化を考える。 $K_I < K_{Ic}$ では粒子分布が連続のため全ての粒子の位置の変化も微小であり、それぞれの粒子は無理数比の格子間隔のためポテンシャルエネルギーを得するものもあれば損するものもあり、全体としてのエネルギー変化はない。エネルギー変化なしに重心の位置を変えられるのであるから、力は働く

ず最大静摩擦力は0である。一方 $K_1 > K_{lc}$ ではギャップの直前にいた粒子は、重心位置のどんな微小変化によってもギャップを飛び越えねばならず、このため有限の静摩擦力を生じることになる。つまり K_{lc} で最大静摩擦力が0の状態と有限の状態の間の相転移-frictional transition-がある。最近、平野と新上はこのこと、及びFrenkel-Kontrovaモデルと同様の下の原子を固定した3次元のモデルの粒子分布を調べた結果から、現実の物質の不整合な清浄表面の間、例えば α -鉄の(110)面と(001)面間、では最大静摩擦力は0となると主張している⁷⁾。しかしこれらの研究は全て一方の原子を固定したモデルのものである。通常の場合では当然、両方の原子が動くことができる。そのようなときfrictional transitionは存在するのだろうか？最大静摩擦力が0のとき動摩擦力はどうなるのだろうか？又、現実の系では必ず存在する乱れはどのような効果を及ぼすのだろうか？これらも興味深い問題である。

4. 計算結果

次にさっそく我々の計算結果を示すことにする。実際の計算は有限系で行うので平均格子間隔の比の無理数がある有理数で近似して行うことになる。計算に用いた系は $c_b/c_a = N_b/N_a = 34/21 = 1.6190\dots$ に対するものであり、これは黄金比 $(5^{1/2}+1)/2 = 1.6180\dots$ の連分数展開を最初の8次で打ち切ったときの値である。又、 $m_a = m_b = 1, g_a = g_b = 1, c_b = 1, K_a = 1, K_b = 0$ としている。

図2に、下の結晶の原子も動けるモデルでの3通りの上下の原子間相互作用の強さ K_1 に対する摩擦力の速度依存性を示す。(a)は K_1 が十分小さいときであり、このように下の結晶の原子が動けるときのでも、最大静摩擦力が0になり得ることがわかる。このときでも動摩擦力は有限であり、そのため低速領域では速度の増加と共に摩擦力も増大する。動摩擦力には散逸が伴う。今のモデルでは(1)式からわかるように重心運動は散逸を生じない。空間的に一様な外力により与えられたエネルギーは個々の原子の振動に変換しそして暗に考えている自由度に散逸していく。(b)はAubry転移の直上であり、小さいが有限の最大静摩擦力が現れる。この時も動摩擦力は大きな速度依存性を示す。しかし(c)に示されるように、 K_1 と共に最大静摩擦力が大きくなるに従い、依存性は小さくなる。図でわかるように常に動摩擦力は最大静摩擦力から速度の関数として連続的に変化する。最大静摩擦力を K_1 の関数として図3に示す。下の原子を固定した場合($K_s = \infty$)に比べ K_s が有限の時は、最大静摩擦力が0の領域は減少する。そして同時に、臨界値以上での最大静摩擦力も急激に増大する。

5. 乱れの効果

原子的なスケールで乱れない清浄表面では少なくとも1次元の場合、最大静摩擦力が0の状態が存在することがわかった。しかし、現実の系では必ずなんらかの乱れが存在する。そのときでも最大静摩擦力は0になりうるのだろうか。このことは上下の結晶間の原子間相互作用を摂動と見なし、上の結晶の原子の配列がこの摂動に対して安定か否かを調べることにより明らかとなる⁴⁾。上下の結晶間の原子間力が働かない場合の上下の原子の位置ベクトル $\mathbf{u}_i$ 及び $\mathbf{v}_i$ を $\mathbf{u}_i^{(0)}, \mathbf{v}_i^{(0)}$ としその原子間力の1次での $\mathbf{u}_i^{(0)}$ からのずれを $\mathbf{u}_i^{(1)}$ とする。 $\mathbf{u}_i^{(1)}$ の2乗平均を計算すると、原子配列に乱れがなく $\mathbf{u}_i^{(0)}, \mathbf{v}_i^{(0)}$ の周期の比が無理数であればこれは有限である。しかし乱れがあるときは、これは3次元以下では発散する。このことは3次元以下では $\mathbf{u}_i^{(0)}, \mathbf{v}_i^{(0)}$ の配置は無限小の乱れに対して不安定であり、少しでも乱れがあればその乱れから来るエネルギーを得る様に状態を変えてしまうことを示している。そしてそこでは、並進対称性は失われ有限の最大静摩擦力を生じると考えられる。

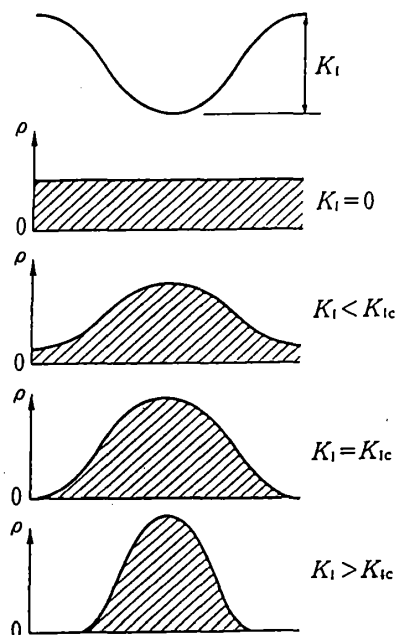


図1 ポテンシャルの強さ K_1 の増加による粒子分布 ρ の変化。

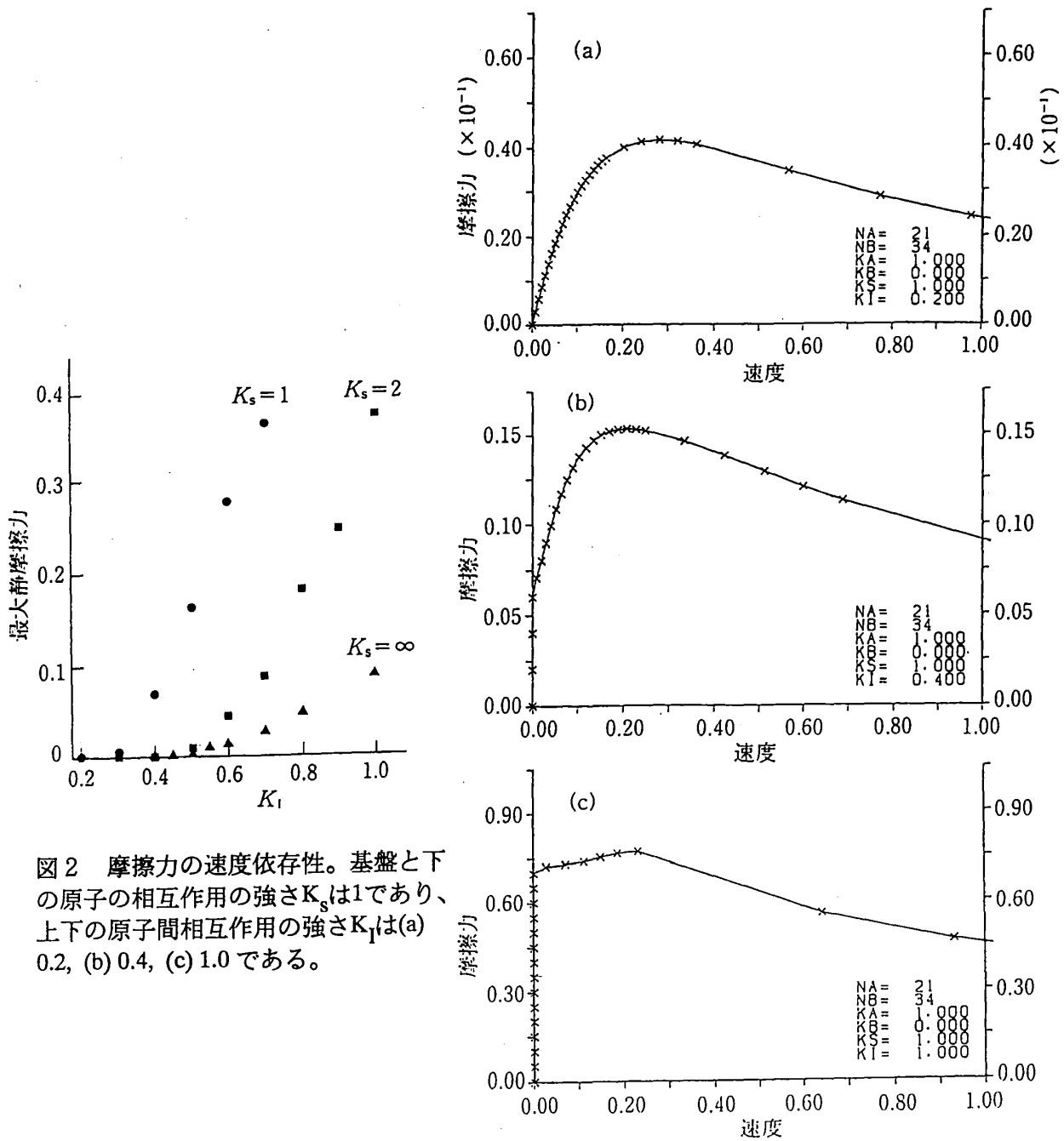


図2 摩擦力の速度依存性。基盤と下の原子の相互作用の強さ K_s は1であり、上下の原子間相互作用の強さ K_I は(a) 0.2, (b) 0.4, (c) 1.0 である。

図3 幾つかの基盤と下の原子の相互作用の強さ K_s の大きさに対する最大静摩擦力の上下の原子間相互作用の強さ K_I 依存性。

6、まとめと議論

この報告では摩擦力として何を計算すべきかを論じた後、清浄表面の摩擦の1次元モデルの計算結果を示した。そこでは摩擦の3法則と大きく異なる振る舞いが見られた。即ち、上下の原子間の相互作用の強さにより、最大静摩擦力が0の領域と有限の領域の間の相転移が存在する。しかし、下の原子が動きやすくなると共に、上下原子間相互作用の強さの臨界値は小さくなり、最大静摩擦力が0の領域は狭まり、同時に臨界値以上での最大静摩擦力が急激に増大する。一方、動摩擦力は、最大静摩擦力が0の時でも有限である。そして一般に速度依存性を持ち、特に最大静摩擦力が0、又は小さい時にはその依存性が大きい。しかし、最大静摩擦力が大きくなると共にその依存性は小さくなり、“動摩擦力は速度に依存しない”と言う摩擦の3法則の1つに近づく。又、表面に乱れがあると最大静摩擦力が0の状態は不安定化し有限の最大静摩擦力を生じる。そこでも乱れが小さければ乱れにより生じた最大静摩擦力もまた小さく、動摩擦力の速度依存性はここで得られたものと同じ傾向を示すと考えられる。

最後に少し、摩擦への量子力学的効果について考えてみたい。摩擦など巨視的な現象には、その対応する作用がプランク定数に比べ十分大きいと量子力学的効果は効かないと通常考えられている。しかしそのような巨視的なスケールでも現れる量子効果がある。その代表は超伝導と超流動であろう。そしてこれらと並んで巨視的量子力学的トンネル現象がある。これは巨視的なスケールのものが古典力学的には緩和できない準安定状態からポテンシャル障壁を乗り越えて、よりエネルギーの低い状態へ量子力学的トンネル効果により緩和する現象で、磁性体の磁区の反転など多くの系で観測されている。そしてこの効果が低温での結晶の塑性変形をも支配している場合がある⁸⁾。結晶にストレスを加えた場合の塑性変形の速度を考える。この速度を決めるのは結晶中の転位の運動であり、律速過程となるのは転位線が1つの準安定状態から次の準安定状態へ移るときの核の形成である。この核の形成は通常の温度領域では熱的な活性化により起こるため、低温になるほど転位は動きにくくなり、塑性変形は起こりにくくなる。しかしある程度以下の低温では核の形成は温度に依らないある一定の割合となる。これは量子力学的トンネル効果により核形成が起こっているためだと考えられる。この塑性変形の起こりやすさは結晶の降伏応力を決める。従って低温での降伏応力は量子力学的トンネル効果によって決まっていることになる。さて、この降伏応力というのは1つの物質中の最大静摩擦力とみなすことができる。それならば、低温では2つの物質間の最大静摩擦力も量子力学的トンネル効果により影響を受けていると期待される。また、摩擦の問題は擬1次元導体で観測される電荷密度波の運動による非線形電気伝導現象とも多くの共通点を持つが、後者の運動も低温では巨視的量子力学的トンネル現象によるといわれている。では、摩擦も量子力学的トンネル効果の影響を受けているとしたらどのようなことが起こるのだろうか？十分時間をかければある準安定状態から必ず緩和するのであるから、外力を加えてから‘十分長い観測時間’を用意すれば物質は必ず動き出す、つまり最大静摩擦力は0になってしまうだろう。結晶の塑性変形の場合、十分実験室内で観測可能な時間スケールで量子力学的トンネル効果はみられる。このことから考えればこの‘十分長い観測時間’というのも原子的なスケールの摩擦ではもちろんの事、通常のスケールの摩擦でもそれほど長くはなく観測可能かもしれない。そしてその時間スケールでは動摩擦力も極めて小さいことが期待される。

この研究は東京大学理学系研究科福山秀敏先生との共同研究である。

参考文献

- [1] 曾田範宗：摩擦のはなし、岩波新書。
- [2] バウデン、テイバー：固体の摩擦と潤滑、丸善株式会社。
- [3] 松川宏：摩擦という物理現象、パリテイ1994年8月号 p.18。
- [4] H. Matsukawa and H. Fukuyama: Theoretical study of friction: One-dimensional clean surfaces, *Phys. Rev. B* **49**, 24 (1994) 17286.
- [5] 松川宏、福山秀敏：摩擦力とは？、*固体物理* **28** 10 (1993) 686.
- [6] M. Peyrard and S. Aubry: Critical behaviour at the breaking of analyticity in the discrete Frenkel-Kontorova model, *J. Phys. C* **16** (1983), 1593.
- [7] M. Hirano and K. Shinjo: Atomistic locking and friction, *Phys. Rev. B* **41** 17 (1990) 11837.
- [8] T. Suzuki and H. Koizumi: Quantum tunneling of dislocations through Peierls potential, *Dislocations in Solids*, University of Tokyo Press (1984) p.159.