

TR-O-0103

29

超潤滑
—摩擦ゼロとなる状態—

新上 和正

1996. 2.26

ATR光電波通信研究所

超潤滑 — 摩擦ゼロとなる状態 —

新上 和正

概論

超潤滑とは摩擦がゼロとなり、接触する固体同士が抵抗なく滑る状態をいう。電気工学における抵抗がゼロとなる超電導状態と同様に、機械を利用しようとする人々にとっては夢のような状態である。超潤滑が理論的に予言され、その存在を実験的に実証することが完了されようとしている。更に超潤滑を利用して摩擦を制御したり、また技術応用する提案がなされています。

超潤滑は機械的な運動が入ってくる全ての応用技術と関係し、例えば衛星間光通信の研究における相手衛星を追尾する光アンテナの摺動部、またマイクロ・マシンや宇宙空間でロボットなどの摺動部の摩擦を軽減する問題を解決しようとしています。その実現は技術革新の新たなシーズとして期待されています。ここで摩擦の概論、超潤滑の理論的及び実験的検証の解説を行なう。

目次

本報告の構成	---	3
第1章 摩擦概論 (トライボロジ概論)	---	4
1.1 始めに	---	4
1.2 摩擦の研究史	---	5
1.3 摩擦の原因	---	5
A. 凹凸説と凝着説	---	5
B. 二つの説の反駁する性質	---	6
C. 凹凸説の実験的否定	---	7
D. その後の凝着説	---	7
E. 摩擦の複合的要因: その多様性	---	8
F. 塑性変形を伴わない摩擦の分子説	---	8
参考 & 文献	---	9
第2章 超潤滑の概論	---	10
2.1 始めに	---	10
2.2 超潤滑の構成論的骨格	---	10
A. その物理学的機構	---	10
B. 研究の始まり	---	10
C. 実験的検証	---	11
D. 生物と摩擦現象	---	12
2.3 超潤滑の主な適用技術	---	12
2.4 摩擦の制御	---	12
2.5 非対称運動 (Asymmetric Motion)	---	13
参考 & 文献	---	14
第3章 超潤滑の本論: 理論と実験	---	15
3.1 始めに	---	15
3.2 原子論的モデル	---	15
3.3 原子運動と静摩擦	---	16
A. ダイナミック・ロッキング (DL) とアトミスティック・ロッキング (AL)	---	16
B. 静摩擦	---	17
C. 現実での静摩擦	---	17
3.4 動摩擦	---	18
A. トムリンソンによる動摩擦	---	18
B. 幾つかの場合	---	19
C. 散逸の起源	---	20
3.5 超潤滑の現れる条件	---	21
A. 静摩擦の場合	---	21
B. 不純物・格子欠陥に対する安定性	---	22
C. 検証実験	---	22
3.6 終わりに	---	23
文献 & 参考	---	24
第4章 結論	---	25
謝辞	---	26
Appendix A	---	27
A.1 判定条件	---	27
A.2 高次元化	---	27
A.3 判定条件の色々な摩擦系への応用	---	28
Appendix B	---	31
B.1 モデル	---	31
B.2 計算式の導出	---	31
B.3 $r_{i\alpha}(\omega)$ の計算	---	32
B.4 (平均化した) 摩擦エネルギー	---	34
B.5 調和近似の良さ	---	34
B.6 I の評価	---	35

本報告の構成

第1章は摩擦の概論を話します。身近な摩擦から極限状態での摩擦、摩擦の研究の歴史、摩擦の原因を巡って紆余屈折した議論の進展などがその内容である。

第2章は超潤滑を簡単に概説します。超潤滑に関する色々な内容を含んでいます。

第3章では超潤滑について、摩擦の起原とともに現在知られている知識の詳細な内容を展開します。(その理解のために Appendix A、B を含む)

(** 章ごとの読み易さを考えて、各章の内容と引用した文献の幾つかは重複する **)

第1章 摩擦概論 (トライボロジ概論)

摩擦学はトライボロジ (tribology) と呼ばれている。'tribos' はギリシャ語の「擦る」という言葉に由来する。削る・引っかく・掘起こすといった摩擦を含め広範囲な現象を対象とする学問分野である。

1.1 始めに

車がうまく走るためにはタイヤは地面を滑らないことが必要である。スキーで速く滑るにはスキー板と雪の摩擦が小さい方がよい。また、綱引きに勝つには靴と地面の摩擦が大きい方がよい。他に摩擦を巧く利用している例は沢山ある。私達は摩擦を巧く利用して生活している。私達は経験を通して摩擦をよく知っているにも関わらず、摩擦がどうして現れるのかを知っている人はいない。

摩擦の定義は、二つの固体¹を接触させ一方を他方に対して動かそうとするときその動きに抗する力である。この定義は、ある物が他の物に対して滑べるということを前提としている、則ち、対象を注目するものと注目しないものとに分けるということを前提としている。摩擦は、対象がマイクロであろうがマクロであろうがスケールを離れていつでも定義することが出来る。

摩擦は、更に、二つの固体が静止しているか動いているかに従って静摩擦力を動摩擦力に分類される。以下、簡単のため静摩擦及び動摩擦を一括して摩擦と呼ぶことにしよう。(混乱の恐れがあるときには静摩擦または動摩擦と区別することにしよう。) 摩擦¹⁾⁻³⁾について知られている法則²は次の三つである：(アモントン・クーロンの三法則と呼ばれる)

- (1) 静摩擦力は摩擦面に働く垂直力に比例する、(見かけの接触面積の大小に関係しない)
- (2) 動摩擦力³は滑り速度の大小に関係しない、
- (3) 静摩擦力は動摩擦力より大きい。⁴
摩擦係数で言えば、

$$\mu_s(\text{静摩擦係数}) < \mu_d(\text{動摩擦係数}).$$

アモントン・クーロンの摩擦法則は私達の日常生活のレベルでは成り立っているように見えるが、日常生活するレベルを離れるとしばしば成り立たない場合がある。例えば、滑り速度が1mm~1cm/秒以下のように小さくなると成り立たなくなる。接触面をどんどん汚れをなくし清浄にしてゆくと摩擦力が急激に増えることが見いだされている。また接触面の面積が小さくなると法則(1)は成り立たない。また、荷重が小さくなると成り立たなくなる。

AFM(atomic force microscope) を使えば原子レベルの摩擦力を測定することが出来る。この様な微細な領域でアモントン・クーロンの摩擦法則は必ずしも成立しないことが実験で確かめられている。計算機のフロッピーディスクと(数十から数千オングストロー

¹ 固体と液体、液体と液体、気体と液体など様々な場合がある。その時々に応じて、慣性抵抗、粘性抵抗、など様々な名前で呼ばれる。この報告書で論じようとするのは固体摩擦の場合である。

² これに従わない例は幾つもある。経験則又は摩擦の経験的事実を理解するための多く人が共通に知っている法則と考えるのが正しいように思われる。

³ 動摩擦力は一定の速度で動かし続けるのに外から加える力である。従って、この動摩擦力は仕事をす。動摩擦は絶えずエネルギーを放出(散逸)する過程である。クーロンは、実験的で動摩擦力は滑り速度にあまり依存しないことを知った。摩擦の起源はそのエネルギーが何が原因で/どの様に散逸するかが核心問題である。静摩擦のほうは何とかなる。

⁴ 当然のようで当然でない。滑りが原因で滑り面の焼付けが起こる場合がある。つまり、動く方が摩擦力が大きくなる。

ムのサイズのものが考えられている)磁気ヘッド間の摩擦がある。現在の工業技術では非常に微細な領域での摩擦が重要となっている。

1.2 摩擦の研究史⁴⁾⁻⁶⁾

1400 年

(最初の科学研究)

摩擦の凹凸説 & 摩擦係数の概念化 - - - - Leonardo Vinci(1442-1519)

1500 年

1600 年

摩擦の実験的研究 - - - - Guillaume Amontons(1633-1705)

1700 年

(産業革命)

摩擦の分子説 / 凝着説 - - - - J. T. Desaguliers(1683-1744)

動摩擦係数の理論 - - - - Leonhard Euler(1707-1783)

摩擦法則の集大成 - - - - Charles Augustin de Coulomb(1736-1806)

1800 年

(凹凸説の実験的否定)

1900 年

分子説 / 凝着説の実験的確認 - - - - W. Hardy (1864-1934)

分子説に拠る摩擦の起源の提案 - - - - J. A. Ewing (1855-1935)

その理論化 - - - - R. Holm, F. P. Bowden, D. Tabar

分子レベルでの摩擦発生機構 - - - - G. A. Tomlinson (1929)

流体潤滑 - - - - Lord Reynolds (1918)

2000 年

摩擦の最初の科学的な研究を行なったのはイタリアのルネサンス期のレオナルド・ダ・ビンチである。彼は日常で手に触れる石や木を対象に精緻な摩擦研究を行ない'摩擦係数'の概念を導入した。その後、17世紀から18世紀前半にかけて摩擦研究が一気に咲いた。18世紀のイギリスに起こった産業革命はフランスに渡り工作機械の性能向上・耐久性向上といった機械技術の信頼性を確保する目的で摩擦研究の進展を促した。フランス科学アカデミーは摩擦の論文の懸賞募集を行い、今日静電気学で良く知られているクーロン(C. A. Coulomb)が当時知られていた摩擦の法則を纏めた。アモンソン・クーロンの摩擦法則は^{5),6)}18世紀中葉迄にはほぼ確立された。

1.3 摩擦の原因

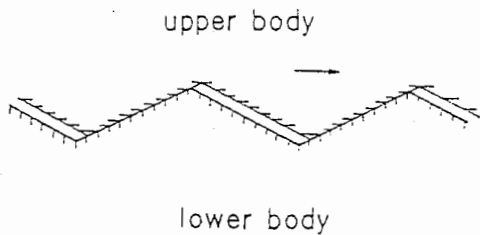
A. 凹凸説と凝着説

摩擦法則の成立の原理について当時の人達は二つの考え持っていた。一つは凹凸説でありもう一つは分子説または凝着説と呼ばれるものである。

凹凸説は、レオナルド・ダ・ビンチを含め殆ど人々が摩擦抵抗の発生する理由として考えていた説である。これはクーロンの言葉からも伺い知ることが出来る：「互いに

滑り合う二つの面の摩擦抵抗の物理的要因は表面凹凸の引っかかりによる以外に考えられない。そこでは凹凸部に曲げも破壊も凸部の乗り越えも、また、接触部が接近するために潰れる事もあるだろう(図 1.1)。ともかくこれらの引っかかりを克服せねばならない。これらの内何物が起源であるかこれを決定するのは実験である」。この様に表面の凹凸の引っかかりが摩擦力の発生する基本原理であると考えた。17 世紀の終わりから 18 世紀の中頃迄論議が重ねられ、凹凸説は次第に固まっていた。

図 1.1 摩擦の凹凸説



一方、分子説 / 凝着説は、凹凸説が支配的な 18 世紀中頃は極めて過激的で、異端であった。デザギュリエ (J.T.Desaguliers) は、鉛の球から直径四分の一インチ程の破片 (セグメント) を切り取り同じように切りとったもう一つの鉛の球に手で少し捻りながら強く押しつけたら二つの球はくっついてしまった。その付着力が予想外に強く 7-20 キログラムで引っ張ってようやく離すことが出来た。この事実から凹凸説に不信を抱いた。「表面が平で滑らかなほど摩擦面は互いに接近し表面の分子力の干渉は増す。摩擦力の起源を分子の干渉で

ある」と信じた。そして、「平面をどこまでもなめらかに磨いて行けばいずれは摩擦は増大する筈だ」と予言した (分子説)。この考えはその後、接触部に於て凝着を生じその部分の剪断の力が摩擦力の本質的なものだとする (凝着説と呼ばれる) 考えに引き継がれた。この説は接触部で凝着現象が起こることが一つの前提になっている。

クーロンの時代には誰もが凹凸説を信じながら其の根拠には積極的なものが欠けていた。デザギュリエの分子説は予言的な性格を持っていたが積極的支持は少なかった。デザギュリエの後百年の間彼の見解に味方したのは物理学者ビンズ (S.Vince, 1749-1821) ぐらいである。摩擦力は荷重に比例するのに大して付着力は面積に比例する。だから分子説に基づく付着力は摩擦力とは無縁の力であると考えられていた。

B. 二つの説の反駁する性質

二つの説での違いは、接触面の状態と摩擦の材質依存性に明らかに現れる：

滑らかな表面

凹凸説：は滑らかな面は粗い面より摩擦が小さい。

分子説 / 凝着説：滑らかな面同士の接触は凝着面積が大きくなり強く剪断力を生じて摩擦力も大きくなる。

材質依存性

凹凸説：表面の凹凸のみに摩擦力は関係するので摩擦力はあまり材質に依らない、

分子説 / 凝着説：凝着力は分子種に依るので材質に強く依存する。

20 世紀以前では、凝着による物性的性質から、また、凹凸の形状からそれぞれ摩擦係数を数式化し、その計算値を比べても数字だけからは二者択一の結論は得られなかった。また「表面の凸凹を小さくして行けば何れ二面の表面分子は互いの分子間力の引力圏内に入り両者の間に強い凝着が起こり其れが摩擦力だ」とデザギュリエは予言しながら実証出来なかった。

19 世紀は摩擦の論争は摩擦法則の確立のために行なわれたのに対して 20 世紀は摩擦法則の解釈を巡って行なわれようとしていた。この違いは 20 世紀になってハーディー

卿⁸⁾に依って証明された。レオナルドからアモンソンまで凹凸説の道のりは200年、その完成期クーロンの時代まで300年を要した。デザギュリエの分子説もまた、次の分子論者(明治期外人雇われ教師で日本に来たこともある)ユーイング(J.A. Ewing, 1855-1935)、ハーディー卿(W. Hardy, 1864-1934)まで150年、その発展的変身である凝着説の完成したと見られる現在まで200年を要している。それには技術上の理由があった。表面の仕上げ技術と他方は固体表面の清浄化技術。電子工学管による真空技術、清浄環境を作る技術も一応の段階に達していた。表面の仕上げ技術・接触測定技術の進歩が両者の決着の準備した。(最近の宇宙技術の中には其の機械の可動部分が高い真空(10^{-13} mmHg以上)にさらされるものがありこうした真空中の摩擦の研究は新しい応用技術の分野ともなっている)

C. 凹凸説の実験的否定

デザギュリエに発想された摩擦の分子説に山ほどの実験的データで揺るぎない基盤を与えたのは細胞学者ハーディー⁸⁾である。1919年、1920年の論文で十分に洗浄したガラス面の摩擦実験から重要な発言をした。綺麗に磨いたレンズと粗く磨いたレンズでは綺麗なレンズの方が摩擦力が大きくなることを実験で見出した。この実験は摩擦は凹凸に拠るとする説を否定した。

・他の凹凸説を否定する実験:

(i) わずかな汚れでも摩擦係数に大きな変化がある。凹凸の形に全く影響しない分子膜程度の汚れが摩擦係数に大きく影響するという事実は凝着説の強い支えとなっている。

(ii) 凹凸説では、接触する面は凹凸を持ちこれらが機械的に噛み合う。動かすためには上下の固体の凹凸を解くために上の固体を持ち上げるために力が必要となる。これが摩擦力の発生源理であると説明する。凹凸説は静摩擦力の起源を主張することは出来る。しかし、凹凸説の最大の弱点はそれが動摩擦に於けるエネルギーの散逸を説明出来ないことである。⁹⁾ 何故なら上の固体を持ち上げる力(重力)は保存力であるからである。

iii) ストラングは実際1949年に摩擦中の固体の上下運動を測って上下運動の仕事と摩擦の全体の仕事を調べると、その比は3-7パーセント程度で上下運動からの仕事の損失は殆ど無視出来ることが分かった。この結果は凹凸説に如何なる修正を加えようとも摩擦の発生原因に成らないことを意味する。

一方、凝着説に於ける問題は面に垂直な凝着力そのものが実際に出現するかどうか問題である。二面を押しつけたときもしも接触面に凝着という分子間力・分子間力による付着現象が生じ其の結果として横に引いたときその部分の剪断抵抗として摩擦力が現われるものだとすれば、押しつけた二面を再び垂直に離しても当然摩擦係数に相当する力、凝着力が現われる筈である。しかし、日常の常識では、横にすべらせれば万物なんらかの摩擦係数を示すのに上に持ち上げるときにはものが離れないで居ると言うことはないのである。これは凝着説の開祖であるハーディー自身が早くから取り上げている難問であった。同時に凹凸説論者から反撃されている論拠でもあった。この凝着力の存在はその後実験的に確認された。

D. その後の凝着説

凝着説では、何故接触部に凝着が起こるかという理由はそれほど明確ではなかった。これに対し、ホルム(R. Holm)¹⁰⁾は上と下の固体が接触するとき、上固体の重さを下固体は実は接触部全体でなくほんの僅かな部分(1/10000程度 - 真実接触部と呼ばれる)でのみで支えているということを明らかにした。そして、パウデン(F. P. Bowden)とテーバー(D. Tabor)らは、¹⁾ 真実接触部分で非常に大きな圧力が生じて塑性変形を伴った凝着が起こっており、摩擦は凝着接合部を剪断力であると説明した。今日凝着説と呼ばれているはこの考え方を指している。

この考え方と真実接触面 S は荷重 W に比例するという仮定を置けば、摩擦の一つの法則、見かけの接触面の大小に関係しない摩擦係数、が導かれる。即ち、摩擦係数 F は

$$F = \tau S \quad (\tau \text{は材料に固有な剪断応力である}), \quad (1)$$

$$S = p^{-1}W \quad (p \text{は接触応力 - 直観的には材料の'硬さ'を与える})$$

から摩擦係数

$$\mu = \frac{F}{W} = \frac{\tau}{p} \quad (2)$$

が得られる。 τ や p は、接触部の固体表面状態に依らない量であることから、表面粗さに依存しない摩擦係数が得られ、0.1-1.0の大きさを持つことなどが説明される。バウデンとテーバによる摩擦の理論(或いは、その修正版であるネオ凝着説)は、機械工学で広く認められているものである。

E. 摩擦の複合的要因: その多様性

問題は解決されたのであろうか。この凝着説の考えに従えば、摩擦は材料のバルクの機械的性質 τ 、 p にのみによって定まり、摩擦は接触部の固体表面状態に依らないことになる。しかし、金属であれば表面を覆う酸化膜や分子膜の存在などは大きく摩擦係数に影響する。また、接触表面での不純物を除いた超高真空下の金属の摩擦は非常に大きくなることが実験的に確認されている。⁸⁾更に、凝着説は逆性変形を必ず伴うと考えるが、ゴムと硬い固体の場合には弾性変形に基づくヒステリシス損失によって摩擦を生じる。

摩擦は、その他に、摩擦耗、破壊、掘起こし、電氣的或いは化学反応、また、大気中の湿度などさまざまな複合的要因が考えられる。凝着説の例で分かるように、摩擦は、各研究者がその摩擦の要因を特定しそれなりに正しくモデル化を行なえば、そのモデルが説明する又は予言する摩擦の性質を示す実験を行なうことが出来る。また、同時にそのモデルで説明できない実験も存在する。このことは、凝着説に限らず、常に摩擦のモデル化で出会うジレンマである。つまり、実験で見せる摩擦の'顔'は千差万別であり非常に多様性があり、モデル化もそれに応じて多様にならざるを得ない特性を摩擦現象は内在していることである。これが摩擦蔓陀羅と言われる所以である。にも拘らず、日常スケールでは摩擦の実験則は成り立っている。これらの法則は多様な摩擦を更に上部で統合してゆくメタモデル化を通して初めて理解されるであろうと思われる。

摩擦が発生するとエネルギーが散逸する。'散逸過程'が何を指すかを正確に説明することは難しいが、大まかにはエネルギーが散らばって行き元の状態に戻らないような非可逆過程を指す。しかし、トライボロジ(摩擦学)で散逸についての理解はそれほど進んでいない。その理由は摩擦過程で固体と固体の境界面で何が起きているかを知る実験的手段がないからである。この答えは誰も思いつくのであるが、STM法にその基礎を置くAFMやアトミックレベルでの摩擦のモデル化によってその質問に対して新しい知見が加わりつつある。一方で、こんもような微視的な研究が逆にマクロスケールでの摩擦についてどのような視点を与えるのであろうかという疑問が発生している。世界中の多くの研究所でSTMやAFMを揃えているのは、摩擦過程で起こる現象を単純化して固体の境界面でどのようなことが起こるかを限定することで、より理想的な摩擦の観察をしようとしているからであろう。

F. 塑性変形を伴わない摩擦の分子説

凝着力の重要性に初めて気づいたのは英国の物理学者デザギュリエ(Desaguliers)である。二つの面間で働く凝着力と面間に沿って現われる摩擦力とは違っている。分子説にせよ凝着説にせよ摩擦仕事が必要になるには摩擦方向に出現する力がなくてはならない。摩擦力と凝着力はどの様に関係しているのであろうか?

此の問いに対してユーイングは初めて摩擦によるエネルギー損失は凹凸の上下ではなく固体表面の分子の場の相互干渉に拠るものだと説明し、後にこれをトムリンソン(G. A. Tomlinson)が¹¹⁾定式化した。トムリンソンは摩擦力の現れを分子・原子の引力の場に於けるそれらの相対的運動の中に現われる力の中に求めた。彼は個々の原子の非断熱的運動を仮定した。非断熱的運動に依って個々の原子の弾性エネルギーが振動エネルギーに変化する。振動エネルギーは周囲の原子を振動し自分のエネルギーを失って行く。つまり、熱としてエネルギーが拡散する。(後で詳しく説明する)トムリンソンは、エネルギー

ギーの散逸が起こるためにはこの様な機構が必要である主張している。一口で言えば原子の運動方向の変位に合理的に非可逆過程を持ち込んだ。しかし、彼はそのような機構が起こるかどうかについて尋ねなかった。

参考 & 文献

- 1) Bowden F. P. and Tabor D., in *Friction and Lubrication of Solids, Vol. II* (Clarendon Press, Oxford, 1964).; 日本語訳, 曾田範宗, 固体の摩擦と潤滑 (丸善, 1961),
- 2) 木村好次、岡部平八郎、トライボロジ概論 (養賢堂, 1982),
- 3) Halling J., in *Principles of Tribology* (MacMillan Press Ltd, England, 1975); 日本語訳, トライボロジ 松永正久監訳 (近代科学社, 1984),
- 4) 摩擦学 (tribology) 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); Dowson D., J. Lub. Technol., Trans. ASME 99, 383 (1978),
- 5) Coulomb C. A., in it *Memories de M'athematique et de Physics de l'Academie Royale*, 161(1785). 解説として, 例えば, Tabor D., J. Lub. Technol., Trans. ASME 103, 169 (1981); Dowson D., J. Lub. Technol., Trans. ASME 100, 148(1978),
- 6) Amontons G., in *M'emories de l'Academie Royale* A, 275 (1699). 解説として, 例えば, Dowson D., J. Lub. Technol., Trans. ASME 100,2 (1978),
- 7) 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., T rans. ASME 100, 3 (1978).
- 8) Hardy W. B., in *Collected works* (Cambridge University Press, 1936); *Phil. Mag.*, 40,236(1920),
- 9) Leslie J., in *An experimental inquiry into the nature and propagation of heat*, print ed by J. Newman, No., 22, Paultry, London, 1804); Dowson D., J. Lub. Technol., Trans. ASME 100, 3 (1978),
- 10) Holm R., in *Electric contacts* Almquist and Wiksells, Uppsala 1946,
- 11) Tomlinson G. A., *Phil. Mag.*, 7, 905(1929).

第2章 超潤滑の概論

超潤滑とは、摩擦がゼロとなり接触する固体同士が抵抗なく滑る状態をいう。電気工学における抵抗がゼロとなる超電導状態と同様に、機械を利用しようとする人々にとっては夢のような状態である。超潤滑が理論的に予言され、その存在を実験的に実証することが完了されようとしています。更に超潤滑を利用して摩擦を制御したり、また技術応用する提案がなされています。

この章は、超潤滑に関する話題を網羅的に解説します。(超潤滑に関する理論的な議論は第3章以下を見てください。)

2.1 始めに

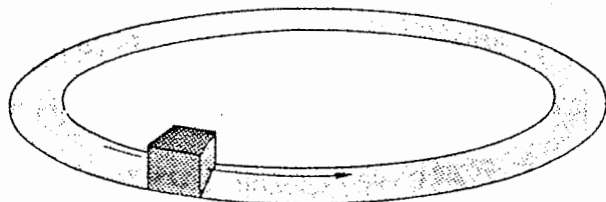
摩擦がゼロとなる超固体潤滑を実現することは、機械に関連した技術に携わる全ての研究者の長年の夢であろう。^{1),2)}それが私達の夢に留まらず日常の研究課題として登場してきたのは極く最近である。この状況を産みだした要因は、原子の像を見たりナノスケールで力を測定出来る装置 - - 走査型トンネル顕微鏡 (STM) や原子力顕微鏡 (AFM) - - の開発によって摩擦過程で固体と固体の境界面で何が起きているかを知る実験的手段が可能となってきたからであろう。また、この様な領域での摩擦は工学的にも重要となりつつあります。

2.2 超潤滑の構成論的骨格

A. その物理学的機構

滑り速度がゼロになる極限で摩擦(静摩擦)がゼロになるものを超潤滑³⁾⁻⁵⁾と呼ぶ。摩擦が完全にゼロなのかそれとも有限だが極めて小さい場合も含むのかは立場の違いによるであろう。摩擦ゼロの条件は、上の固体が下の固体から受ける力が完全に打ち消し合ってゼロになっていればよい。これは高校の物理を勉強した者なら誰でも知っている釣り合いの原理の一例となっている。ある物体に外から作用する力のベクトルが閉じた多角形を作るなら物体は釣り合った状態にある。つまり物体の全体の運動(上固体の重心運動)は(下固体から上固体に作用する)外力と無関係に決まる。こうして、超潤滑はそのような状態を如何に創り出すかという構成論的問題となる。

図 2.1 超潤滑による永久運動

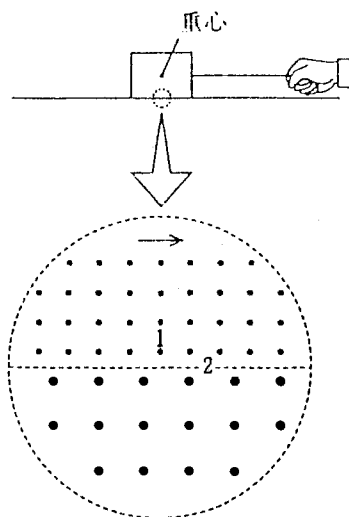


B. 研究の始まり

超潤滑がなぜ生じるかという問いはそのまま摩擦はなぜ発生するかという'古くて新しい問題'でもある。³⁾摩擦の存在は非常に古くから認められてた。摩擦の起原について当時の人々は、固体の接触部に凹凸がありその引っかかりによって摩擦が現れるという凹凸説を考えていた。またその頃、凹凸説と全く異なる考え方、つまり、接触部でむしろ凝着が生じてそれが原因で摩擦が起こるのではないかという凝着説が考えられていた。しかし、摩擦はそれほど単純ではなく、摩耗、破壊、掘起こしなど様々な要因が複合的に絡んで起こる現象です。摩擦は研究者の興味に応じてその'顔'を多様に変える複雑な現象であり、従

来から摩擦は捕らえ所のない対象として研究者を悩ませてきました。従来の現象論を越えて、より実体的に摩擦を理解したいという願いから摩擦を原子レベルで調べてきた(図2.2)。この原子レベルでの研究から摩擦のない超潤滑が示され、従来の'先ず摩擦ありき'という常識が破られ新しい可能性が開かれました。

図 2.2 摩擦系

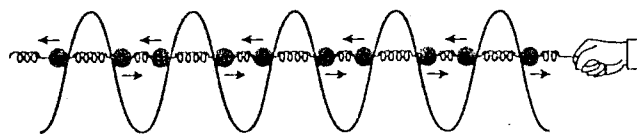


摩擦がゼロとなるということは、図2.2で上固体を構成する原子群が下固体を構成する原子群から受ける力が全体で正確に打ち消しあってゼロとなるということです。言い換えれば、下固体に対して(人間の手による)僅かな力が作用しても上固体は滑り始めるということです。超潤滑が起こる概念図を図2.3に示めす。ここでは簡単に上固体の原子はバネで繋れた球●として表されています。またこれらが下固体からの受ける力を→と←で示してある。大きな波のように上下に曲がった太い実線は上の固体の各々の(球で表示した)原子が下固体から受ける相互作用エネルギーを表して、球の位置でのその微係数が下固体から受ける力となります。→と←の力は反対向きになっていて、

上固体の原子群が全体で受ける力は完全に打ち消し合ってゼロとなっています。平坦で清浄な表面同士が滑る場合には殆どの固体接触でこの超潤滑条件が満たされること、超潤滑は現実の摩擦系で現れ得ること、不純物・格子欠陥があっても安定に現れることなどを計算機シミュレーションによって示しました⁶⁾。

図 2.3 超潤滑の簡単な例

超潤滑は接触面が(1) 清浄平坦で(2) インコメンシュレートな構成条件で理論的に提案された。この構成で静摩擦は完全にゼロとなり、動摩擦は通常の固体接触では滑り速度に比例し、薄膜同士の接触では運動量と励起エネルギーに関する保存則を満たされずにゼロとなる。超潤滑は接触面である程度の不純物や格子欠陥が存在していても比較的安定に存在する。また、接触面の凝着相互作用が強くなると摩擦はゼロから有限になる所を摩擦転移と呼んでいる。



C. 実験的検証

こんなことが実際に起こるのでしょうか? NTT 境界領域研究所との共同研究を通して、白雲母の劈開面を使った実験で超潤滑の兆候がでました。⁷⁾しかし、摩擦はゼロにはならなかったので、更に精度のよい超高真空中で摩擦を調べると、タンゲステンの(001)結晶面とSi(001)結晶面間の摩擦が確かに測定分解能($\approx 10^{-8}$ N)内でゼロとなることを確認しました。⁸⁾また、昨年、リヨン工科大学のグループがMoS₂膜の実験で非常に低い摩擦係数(≤ 0.002)を観測しています⁹⁾。それらの他にも、非常に低い摩擦係数

がアルミナの粉末で(東工大)、またクォーツ・クリスタルで(Northeastern大)得られています。豊橋技術科学大学、日本工業大学やIBMが同じく低摩擦を得ようとしています。

D. 生物と摩擦現象

超潤滑と生体系でのべん毛や筋肉の収縮運動などでの高い仕事効率との関連が指摘されています。生物の優れた機能の1つに運動能力がある。もう1つは情報処理能力である。大きさ $1\ \mu\text{m}$ ほどのサルモネラ菌などのバクテリアは長さ $10\ \mu\text{m}$ 、直径 20nm のべん毛を船のスクリューのように回転数： 10000rpm で回転して推進力を得ている。¹⁰⁾バクテリアのお尻の部分に軸受とモータがあり、べん毛は軸受によって支えられ、モータによって回転される。バクテリアの生きるミクロスケールの世界では、慣性項に対して粘性項が運動の支配的要因となる。相似則にしたがってバクテリアを人間程度の大きさに拡大すると、水の粘性は7~8桁大きい値にスケーリングされる。したがって、バクテリアは人間が泳ぐ場合に比べて桁違いに過酷な環境下で運動を実現していると言える。¹¹⁾

筋肉は、アクチンとミオシンという2つの蛋白質が、ATPと呼ばれる酵素の加水分解をエネルギー源としてすべり運動を起こし収縮運動を実現している。したがって、アクチン・ミオシン系は摩擦を伴う高分子リニアモータと言える。筋肉の入力エネルギーはおよそ $1\text{kT}\cong 25\ \text{meV}$ で熱揺らぎのエネルギー程度に小さい。これに対し、集積回路は 1000kT 程度で動いている。筋肉はこのように小さいエネルギーを使って非常に高い仕事効率を実現している。例えば、カメの筋肉の効率は80%に達する。筋肉の分野ではこの高効率の理由の解明が重要な課題となっている。筋肉の収縮運動メカニズムに関わる重要な課題の一つとして、アクチン・ミオシン系の摩擦が超潤滑との関連で調べられている。

2.3 超潤滑の主な適用技術

超潤滑で目指す応用は一口に言えば摩擦の制御とオイルレス・ベアリング¹²⁾であろう。期待される主な適用技術領域は次の三つである¹⁾：

- 微小領域の潤滑：マイク・ロマシン、大容量磁気記録密度の集積化、
- 過酷な環境下の潤滑：通信衛星(宇宙空間)・真空機器内での摺動部、
- 生体内での潤滑：人工臓器、関節(心臓の弁、肘の関節)、筋肉収縮。

これらは将来的に発展が期待されるが従来の潤滑技術が不得手である領域である。しかし、これらの領域では超潤滑の清浄で平坦な面接触という条件を比較的得易いと考えられる。ミクロン・サイズの超小型の機械であるマイクロ・マシンや分子機械の実現には摩擦を小さくすることが重要な課題となっています。これは機械が小さくなると接触面の割合が相対的に増大し接触部の摩擦が大きく働くからです。超潤滑はマイクロ・マシンの摺動部の摩擦を小さくするのに欠かせないでしょう。¹³⁾しかし、反対に接触面積は小さくなることから接触面でのトポグラフィーを制御し易く超潤滑条件を創り易くなっている。また、宇宙空間は通信衛星や地上観測システムの動作環境として今後益々重要になる。このような環境では潤滑油が使えないばかりか、一寸した機械動作の故障で一つの通信衛星が使えなくなることが起こる。このような環境下でこそ一旦清浄表面が作られてしまえばその状態が長く保たれるという超潤滑に都合のよい環境でもある。

ごく最近ですが超潤滑を使って超高密度で情報を記録する方法と情報の読み取り機構が提案されました(東工大)。¹⁴⁾これは光の波長程度の場所に情報を記録する光記録に比べ更に微細な領域に摩擦の有無を刻むことで高密度の情報集積を達成しようとするものです。また、通信用の人工衛星が働く宇宙空間は超潤滑応用の格好な場所であると考えられます。

2.4 摩擦の制御

二固体の接触角度に依存した摩擦がダイヤモンド、¹⁵⁾コバルト、銅、セラミックなどで観測される。これら摩擦係数の異方性は精々数十パーセントであるが白雲母では約4倍程度の摩擦異方性を示す。⁷⁾このことから接触角度を摩擦を決める外部条件と見なす

ことによって摩擦を摩擦系の属性としてではなく変化し得る‘状態’として捉えることが出来るようになる。この認識から摩擦の制御の考えが得られる。この時接触角度が摩擦力の制御変数となる。摩擦は従来ではどちらかという制御しようというより摩擦系の固有の属性として考えられてきたように思われる。白雲母の場合には摩擦係数を0.16から0.63の範囲で制御可能である。これは摩擦係数の変化であり荷重の変化による摩擦力の制御ではない。

摩擦異方性を使った機能例が図2.4に示される。台とそこに置かれた物体の摩擦係数は接触角度に依存する。初め摩擦係数の小さい接触角度で置かれた物体を二つのレーザー・ビームからの光圧により力を作用し任意の他の位置で摩擦係数が大きくなる接触角度で移動固定する。この例は非接触で物体の移動と固定が出来るという利点がある。

図 2.4 非接触での物体移動と固定

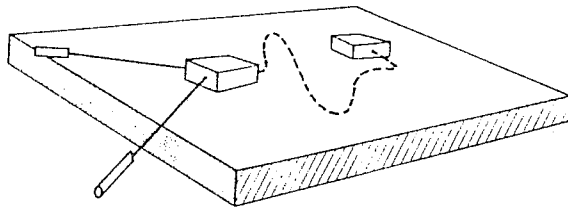
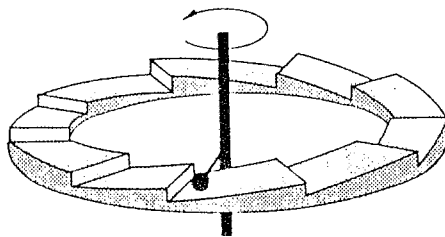


図 2.5 熱揺らぎ回転モータ



サイズは歯形の上にある球に周囲の熱により作用する力が空間的に平均化されない程充分小さければ良いであろう。中心部を周囲の温度に比べて冷却して置く必要がある。このような環境の下では、熱作用する反時計向きの力がある一定以上なら球は下の歯形か

2.5 非対称運動 (Asymmetric Motion)

超潤滑自身の物理的な側面に付いては、超潤滑や摩擦を活用するための新たな視点を獲得するために、摩擦の制御と方向性を持った運動(ここでは非対称運動¹⁶⁾と呼ぶ)を考えてみよう。

非対称運動とはマックスウエルの悪魔に似た性質を持つ運動である。この悪魔は一世紀以上昔に物理学者マックスウエルによって考え出された。¹⁷⁾ その悪魔は、真ん中に壁のある箱の中に閉じ込められた様々な速度を持つ原子が壁に衝突する際に箱の右側にある速い速度のみ原子は左に通過し左

側にある遅い速度の原子のみが右側に通過するという不思議な壁に相当する。悪魔は熱力学第二法則に反してエントロピを減少させ、高温と低温を自然に作り、この間で熱機関を働かすことで永久に仕事を取出すことを可能にする。現代物理学はこの悪魔を閉じた形で得ることに成功してはいない。(可能かどうかすら分からない)

しかし、‘閉じた形’や‘永久に’という修辭に拘らなければ可能である。更に応用上はマックスウエルの‘似非’悪魔を創ることで充分に有用となる(マックスウエルの悪魔と呼べないが)。この例を図2.5に与えてある。これは熱揺らぎを軸の回転運動として取出すマイクロ・マシンのモータである。全体が気体や液体中にある。モータの

ら来る抗力に打ち勝って左回転を行う。しかし、時計向きに作用する力は球の右回転に寄与しないであろう。軸の冷却は左回転した時に球の運動エネルギーは上昇するがこれを取り去るためである。これにより左向きの回転が永続して発生することになる。

これ迄超潤滑や摩擦を活用するための新たな視点を獲得するために、摩擦の制御と非対称運動を議論した。超潤滑の先端的課題はマイクロ・スケールで実証された超潤滑がマクロ・スケールでどう現れるのかの問題とその機能化に繋がる考え方を提出することにあるであろう。

参考 & 文献

(代表的なもの)

- 1) 日本機械学会誌: 「'超' の付く技術」の特集、10月号(1992)p900、
- 2) 精密工学会誌: 特集「超固体潤滑を探る」, vol.61, No.2,
- 3) Shinjo K. and Hirano M., Surf.Sci., sf283, 473(1993); Hirano M. and Shinjo K., Phys. Rev., B47, 11837(1990),
- 4) 新上和正, 数理科学特集 'トライボロジ'10月号, 17(1993),
- 5) 平野元久, 数理科学 10月号特集 'トライボロジ', 23(1993),
- 6) 新上和正, 平野元久, 1992年物理学秋の分科会, 27p-PSP-44, 第三分冊 p502; 日本トライボロジー会議予稿集(盛岡 1992-10)p385.
- 7) Hirano M., Shinjo K., Kaneko R., and Murata Y., Phys. Rev. Lett., 67,2642(1991),
- 8) Hirano M., Shinjo K., Kaneko R., and Murata Y., (submitted to Nature),
- 9) Martin J. *et al.*, Phys. Rev., B48(1993)10583,
- 10) 大和田勝久、生物物理, 32,122(1992),
- 11) 相沢慎一、鷺津正夫、応用物理, 62, 386(1993),
- 12) 川崎景民, オイルレスベアリング, (アグネ, 1973),
- 13) ステイツクス G., 日経サイエンス 1月号(1993)10, 'マイクロメカトロニクスの最前線',
- 14) 中野隆: トライボロジスト (投稿中),
- 15) Enomoto Y. and Tabor D., Proc. R. Soc. London, A373(1981)405,
- 16) Shinjo K. and Sasada T., (submitted to Phys. Rev. E); 新上和正: 物性研究 12月号,269(1992),
- 17) 戸田盛和: 「エントロピーのめがね」岩波書店,(1989).

3.1 始めに

‘普通’に見られる摩擦は、¹⁾ 摩耗や破壊や掘起こしや電氣的或いは化学反応に起因していたりする。摩耗や破壊などを伴わない摩擦もある。また、摩擦は接触する境界に何があるか、例えば、油などにも影響される。更に、(理由は定かではないが) 大気中の湿度などにも影響される。寧ろ摩擦は観察者を離れてある(幻想であるが)のではなく、観察者の関心が対象となる摩擦を決めているように思われる。摩擦は滑り(対象に注目する物としない物とに分割するという境界線を入れている)に対して現れる抗力であるという定義はどの摩擦にも当てはまることである。しかしその定義は実に素っ気なくそれから話しを進めようとするとも摩擦は実に千差万別となる(実際に摩擦は研究者だけ摩擦種があり実に多彩なのである)。バラバラの個々の摩擦を繋ぎ止める際に現れる神は‘見掛けの効用’と‘摩擦という共通項’になっているのが現状である。観察者が対象を規定する対象だから「モデル→対象」から「構成論的对象→モデル」というサイクルを経由する。他の所で言われている構成論的方法とは違い、ここで‘構成する’とは通常の場合と逆の意味でモデルを自然系によってシミュレートという自然計算機的内容を包含しており過去無力だった状況からこれをサポートする fabrication 技術が早急に発展しつつあるという時代的背景がある。

出発したのは「種々の複合的要因を取り除いた後に残る摩擦は?」であった。この摩擦は、‘清浄平坦な固体面間の乾燥摩擦’として摩擦のテキストなどで‘典型的’な摩擦として現れる。だがそれが物理学/摩擦学(tribology) レベルでどれほどの意味を持ち得るのかについては心許ないがここから出発した(意味を獲得して行くという生成プロセスがあり、その後の研究はこの線に沿っている)。

この理想摩擦では、皮肉にも、アモントン・クーロンの摩擦法則は必ずしも成立しない。AFM法²⁾で測定されるような極微領域でもアモントン・クーロンのような日常のスケールで成立する法則はもはや成り立たないと考えられている。この時、何を出発点にすれば良いであろうか。考えてみると、アモントン・クーロンの実験則は日常スケールで成立している経験則であるが、摩擦力はスケールを離れていつでも定義することが出来る。つまり、滑べりに抗する力である。この定義は、摩擦の対象を滑べるものと滑べらないもの、或いは、注目するものと注目しないものに分割線を入れることを大前提としているが、どのようなものにも適用できる。

3.2 原子論的モデル

静止している固体に紐をつけ、この紐を引っ張って力を加えよう(図2.2の上方)。下方の図は、この摩擦系の原子の並びで、摺動面は破線で示されている。^{3),4)} 摩擦系全体は次の原子論的モデルで記述される:

$$H = \frac{1}{2} \sum_i^N p_i^2 + \frac{1}{2} \sum_i \left\{ \sum_{j(\neq i)} v_1(q_i - q_j) + v_2(q_i) \right\} - f_a \sum_i^N q_i \quad (3)$$

p_i, q_i : 上の固体の i 番目原子の運動量を位置座標、
 N : 原子の総数である、
 $v_1(q_i - q_j)$: 上固体の原子間相互作用、 $v_2(q_i)$ は下の固体(その位置は簡単のため固定されていると仮定している) から上の原子の受ける相互作用である、
 f_a : 紐から作用する力である。

定義に従い、摩擦は引っ張るときに現れる抗力である。即ち、摩擦で関心があるのは、上の固体の重心に作用する抗力である。この関心の移動によって摩擦系で注目すべきもの(重心運動)と注目しないもの(その他の‘内部’運動)を分けることになる。つまり、重心運動を表す

$$q_c = \frac{1}{N} \sum_i^N q_i, \quad p_c = \frac{1}{N} \sum_i^N p_i \quad (4)$$

と内部運動を表す $\tilde{q}_i = q_i - q_c$ 、 $\tilde{p}_i = p_i - p_c$ の座標を導入して式 (3) を書き直して、

$$H = \frac{N}{2} p_c^2 - N f_a q_c + \sum_i^{N-1} v_2(\tilde{q}_i + q_c) + H_0, \quad (5)$$

$$H_0 = \frac{1}{2} \sum_i^{N-1} \tilde{p}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v_1(\tilde{q}_i - \tilde{q}_j). \quad (6)$$

変数 p_c 、 q_c に注目する。 H_0 は上の固体の内部運動を表し、(5) の第二項は凝着項である。内部運動の方程式は式 (6) より、

$$\frac{d\tilde{p}_i}{dt} = \tilde{f}_i - \sum_j^{N-1} \frac{\partial v_1(\tilde{q}_i - \tilde{q}_j)}{\partial \tilde{q}_i}, \quad \frac{d\tilde{q}_i}{dt} = \tilde{p}_i, \quad (7)$$

$$\tilde{f}_i = - \frac{\partial v_2(\tilde{q}_i + q_c)}{\partial \tilde{q}_i}. \quad (8)$$

重心の運動方程式は (5) から

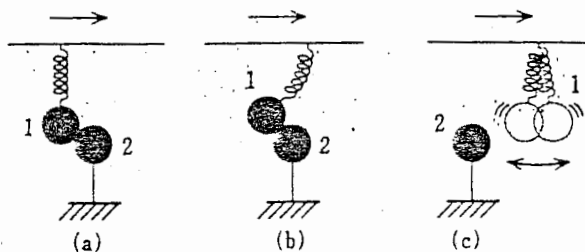
$$\frac{dp_c}{dt} = f_c + f_a, \quad \frac{dq_c}{dt} = p_c, \quad (9)$$

$$f_c = - \frac{1}{N} \sum_i^{N-1} \frac{\partial v_2(\tilde{q}_i + q_c)}{\partial q_c} = \frac{1}{N} \sum_i^{N-1} \tilde{f}_i. \quad (10)$$

f_c は重心に働く抗力である。摩擦力 f は抗力にその絶対値は等しいが抗力は一般に負符号を持つのでマイナス符号をつけた $f = -f_c$ で与えられる。このモデル自身は、乾燥摩擦に限らず、マクロ及びミクロのスケールの原子運動に起因する摩擦一般の現象に適用される。

以下では静摩擦及び動摩擦を、更に二つの仮定、(a) 平滑な摺動面。暗黙に弾性変形を前提としている、(b) 清浄表面固体間の接触 (乾燥摩擦)、の下で議論する。¹¹⁾ (実際には、エッセンスを抽出するために、モデルの幾つか簡単化したバージョンを用いてながら議論して行く。)

図 3.1 滑りによる原子運動



3.3 原子運動と静摩擦

A. ダイナミック・ロッキング (DL) とアトミスティック・ロッキング (AL)

上固体を非常にゆっくりと引っ張る場合に起こる原子運動を考えよう。本来、多原子からなる摩擦系で考えられた原子運動 (DL と AL) に類似した運動が数原子の摩擦系でも起こる。従って、この数原子モデルを使って DL と AL を説明しよう。この簡単な摩擦系はトムリンソンの原子論的モデル⁹⁾ と等価である。(図 3.1 を参照 -1, 2 の番号の原子を図 2.2 に相当する原子と考えて構わない)。原子 1 が非連続的にその平衡位置を変化する (図 3.1 で b から c)。急な位置変化に

より蓄えていた弾性エネルギー(図3.1の a から b で)は原子1の振動または運動エネルギーに転換する。このような原子運動は多原子系でも起こり、ダイナミック・ロッキング(DL)と呼んでいる。反対に、原子1がゆっくりとその位置を連続的に変化する原子運動をアトミスティック・ロッキング(AL)と呼んでいる。トムリンソン⁵⁾は、摩擦(動摩擦であるが)はDLに起因しているのではないかと考えた。³⁾ ALとDLは数原子摩擦系も多原子摩擦系でも起こるがそれらの物理的性質は相当程度違っている。

B. 静摩擦

静摩擦は上固体をゆっくりと引っ張り始める時に現れる抗力である。この定義に従えば、静摩擦は弾性エネルギーを蓄える過程が存在すれば現れる。何故ならば、式(8)と(10)から抗力 f_c は上固体の各々の原子 q_i が下固体からのポテンシャル $v_2(q_i)$ を感じる力 f_i の平均として与えられる。DLではその蓄積過程は常に起こるので静摩擦が現れる。一方、ALの場合は、静摩擦が現れる場合と現れない場合がある。現れる例は、図2で a から b のように弾性エネルギーを蓄える領域、つまり式(10)で $f_c \neq 0$ が現れる場合である。このときには、ある q_c で $f_c < 0$ が現れるので引っ張り方向に対して逆方向の抗力が現れたことになる。静摩擦が現れる最も簡単な例は、図3.2のように各原子が一斉に下からのポテンシャルを登る場合である。(各原子が、図3.1の a から b のような弾性エネルギーを蓄えている状態にある。)

図3.2 静摩擦と弾性エネルギー



一方、常に $f_c = 0$ となる時、(9)より任意に小さな引っ張り力 f_a により重心は加速される。つまり摩擦ゼロ(超潤滑状態)になっている。しかし、式(3)-(10)は摩擦一般に適用されるため超潤滑状態が実際に存在するかどうかは別の問題である。原子論的モデルがこの超潤滑状態の存在を含んでいることは、先に述べた摩擦の存在を最初から前提としている凝着説に対比される。

C. 現実での静摩擦

三次元空間の現実での多原子摩擦系ではDLは起こらないこと、つまり、ALによってのみ摩擦が現れることを示す。この節の表題に敢えて'現実での'という接頭語を挿入した理由は、DLが生じるかどうかの問題は摩擦系の空間的次元数、即ち、接触面で原子の運動(図2.2)が一次的か二次元的か或いは三次元的であるかどうかに関係するからである。この目的のために、DLが現れる条件を与え、現実の様々な摩擦系でその条件を調べよう。

DLが現れる条件の導出方法を簡単なモデル(図3.1)を使って説明しよう。原子1のポテンシャルは

$$v(q_1, q_c) = v_1(q_1 - q_c) + v_2(q_1) \quad (11)$$

である。記号の意味は節3.2と同様で、 $v_1(q_1 - q_c)$ は原子1と座標 q_c との相互作用、 $v_2(q_1)$ は原子1と下の固体との相互作用である。 q_c は固定した下の固体に対する上の固体の重心座標を与える。 q_1 の平衡位置は、与えられた q_c に対し式(11)の $v(q_1, q_c)$ の q_1 に関する微係数をゼロと置いた方程式の解で与えられる。DLが起こる条件は、原子1が平衡位置 $q_1(q_c)$ が不安定になることを意味する、即ち、

$$\left. \frac{d^2 v(q_1, q_c)}{dq_1^2} \right|_{q_1=q_1(q_c)} < 0 \quad (12)$$

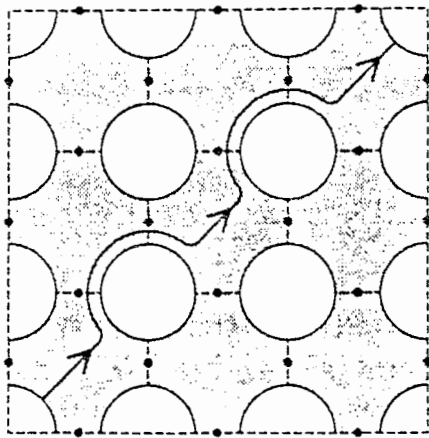
となる q_c が存在することである。例えば、

$$v_1(q_1 - q_c) = k_1(q_c - q_1 - \ell)^2 \quad (k_1: \text{弾性定数}; \ell: q_c \text{ と } q_1 \text{ の平均距離}) \quad (13)$$

$$v_2(q_1) = k_2 \sin(q_1) \quad (14)$$

で条件 $k_2/k_1 > k_c (=1)$ を得る。つまり、凝着の強さ k_2 が上固体の原子間相互作用の強さ k_1 に比べ大きい時に DL が現れる。この結論は多原子摩擦系でも一般的に正しい。(臨界値 k_c はモデルに - 正確には、次元数にも - 依存する。) 多原子系では、接触面の凝着を弱くして行くことによって DL は AL に転化する。これを摩擦転移 (frictional transition)⁹⁾ と呼んでいる。

図 3.3 平衡位置の安定領域と不安定領域



この条件を三次元多原子摩擦系に拡張する。この際の注意は、接触面は二次元平面になることと平衡位置座標は $\vec{q}_1 = (q_1^x, q_1^y, q_1^z)$ の三つの変数を持つことである。ある一定の滑り方向に沿って重心位置 q_c を変化させた場合に、接触面上のある一つの原子に注目して接触面に投影した平衡位置の取り得る領域を図 3.3 (但し、ポンチ絵) に与えてある。影の領域が平衡位置で空白の領域は不安定化する領域である。不安定化領域は、大抵下の固体の原子の真上を含んで現れる。図 3.3 は下固体の原子群は接触表面で正方格子配列している場合にあたる。(例えば、W(001) などの bcc 構造の基本表面など。) DL が現れる条件は、任意の重心座標の変化により上原子は連続的に平衡位置を変化出来ないことである。即ち、影の領

域が切断されることである。(最初の切断点は図 3.3 の太点 - 臨界点と呼ぶ - に現れる。) 言い替えれば、影の連結した領域が非連結した領域が現れるかどうかである。従って、三次元摩擦系で DL が現れる条件は、これらの臨界点で (但し、稜線に対し垂直方向に) 式 (12) の条件が成立することである。この時、問題を複雑にしているのは、この条件を全ての上固体の原子に対して調べなければならないことである。(基本表面が接触面となっている場合には、並進対称性を使えば比較的簡単に実行出来る。)

現実の摩擦系 (Pb, Al, Ag, Cu, Ni, Fe, Cr, Mo など) で拡張された条件を計算機を使って調べると DL 条件は満たさないことが示される (より詳しい記述は Appendix A を参照)。DL は起こるためには、現実の凝着の強さに比べ数 10 倍程度大きくなればならない。DL が起こらない理由は、摩擦系の次元数に関係する。接触面が図 3.3 のように二次元であれば平衡位置が不安定になる空白領域が部分的に現れてもこれらの領域を避けて通る経路があるからである。(仮に一次元の接触面を考えれば、一箇所でも不安定領域が現れれば DL が起こる。) 現実の摩擦系では接触面の高次元性が DL が現れない理由である。

計算された静摩擦力は、接触角や接触表面の基本面に依存するが、Fe で 3.6 GPa-7.6 GPa, W で 21.8 GPa, Pb で 3.9 GPa である。これらは実験で得られた摩擦力の大きさと同じオーダーである。

3.4 動摩擦

A. トムリンソンによる動摩擦⁵⁾

摩擦発生を原子運動と関係づけたのはトムリンソンが最初である。彼は、二原子からなる摩擦系を使って DL と同様に非連続に原子の平衡位置を変化させる原子運動が動摩擦の原因であろうと考えた。即ち、図 3.1 で b から c で転換した運動エネルギーは、更に原子 1 の周囲の原子の運動エネルギーに、即ち、'熱' として散逸するという前提を置いて動摩擦におけるエネルギー散逸を説明した。トムリンソンはこの散逸を前提としているので暗黙に多粒子を想定している。エネルギー散逸の物理過程 - 肝心な問題 - を黙認していることは欠点である。(尤も、トムリンソンは原子運動に'跳び'があるというのが彼の主な主張であった。) 節節 3.3.A でみた DL と AL は、原子の平衡位置にのみ注目して現れる原子運動である。しかし、動摩擦では DL のように原子の非連続的位置変化は現れず常に時間的に連続的な変化をするだけである。

もし、この問題を厳密に数原子からなる摩擦系で扱えば、一定の条件の下に転化した運動エネルギーは内部の運動に転化され次には再び重心運動に転化されるという重心運動と内部運動との間を往來するという再帰現象が現れる。³⁾ その結果、動摩擦は再帰時間で平均するとゼロになってしまうであろう。

B. 幾つかの場合

動摩擦では、一定の滑り速度を保つため加えた外力に釣り合う抗力が如何にして発生するかが問題とする。或は重心の与えた運動エネルギーが内部運動エネルギーにどのように転化するかが問題となる。摩擦発生を原子運動と関係づけたのはトムリンソンが最初である。彼は、二原子からなる摩擦系を使って前節の少し触れた不安定領域を飛び越える原子運動が動摩擦の原因であろうと考えた。しかし、彼の摩擦系は余りにも小さいので飛び越えによって生ずるエネルギーがどう散逸するかについては、素早く他の原子の運動エネルギーにバラ蒔かれるという仮定を置かなければならないのが欠陥である。

動摩擦の発生機構には摩擦系の次元数に応じて二種類ある。(清浄平坦固体表面のインコメンシュレート接触を前提)

表 1

凝着力	弱い	→	強い
1次元	ゼロ		有限
2次元(薄膜)	ゼロ		有限
3次元(bulk)	有限($\sim v_s$)		有限

1、2次元の弱い凝着力の場合 凝着力(二固体の相互作用)が弱ければ、上固体の格子振動でフォノン描像が成り立ち波数ベクトル(運動量に相当)が意味ある量となる。この時上固体の全運動エネルギーが固体の内部運動(格子振動)に変換するならば摩擦が生じることになる。これ起こる為にはエネルギーの保存則の他運動量に対しても保存則を満足しなければならない。これら二つの保存則を同時に満たすフォノン・モードが無いために摩擦ゼロとなる。⁶⁾

1、2、3次元の強い凝着力の場合 一方凝着力が強くなるとフォノン描像が破れて運動量保存則を満たす必要がなくなる。その結果有限の摩擦が生じる。上固体内の原子の格子振動の集団運動は破綻し、むしろ原子の'個別運動'に運動エネルギーが散逸する。この場合の散逸は固体内部の色々な運動が複雑に絡り合う混合性(mixing)から生じる。

3次元の弱い凝着力の場合 フォノン描像は成り立っているが、接触面に垂直方向に沿った原子の振動から摩擦力が現れる。この時摩擦力は滑り速度 v_s に比例する。(計算の詳細は Appendix B を参照)

凝着の弱い場合と強い場合とでの摩擦発生の機構は異なる。その間にある種の'転移'があると思われる。1、2次元の弱い凝着力の場合の結果は、松川氏が一次元 FK モデルを用いて計算して得た有限の摩擦力となる結果⁴⁾と異なる。これはモデルの違いに拠るものと思われる。彼は格子振動に有限の緩和項(life time/damping)を入れ、これに

比べ慣性項が小さい仮定を置いている。私達のモデルでは慣性項を入れているが緩和項を入れている。(緩和項を入れた計算を行うとその大きさによって摩擦力が異なるという tentative な結果を得ている)

C. 散逸の起源

二つの異なる発生機構源が存在することが一次元 FK (Frenkel-Kontorova) モデルを使って結論された。⁷⁾ (他の摩擦系でも一般的に成り立つように思われる。) FK モデルは良く使われる理論モデルの一つで式 (3) で上固体をバネで繋がれた粒子群と下固体から上固体への影響 (凝着力) を三角関数で表したものが一次元フレンケル・コントローバ (FK) モデルである:

$$H = \frac{1}{2} \sum_i \left((q_{i+1} - q_i - \ell)^2 - \frac{\lambda}{2} \cos[2\pi(q_i + \alpha)] \right). \quad (15)$$

ℓ は粒子の平均距離、 λ は凝着力の強さを与える、 α は任意の位相である。 i 番目の粒子の平衡配置 q_i^0 を決める方程式はエネルギーを粒子座標 q_i で微分することで得られる。

$$q_{i+1}^0 + q_{i-1}^0 - 2q_i + \pi\lambda \sin(2\pi(q_i + \alpha)) = 0. \quad (16)$$

ここで、 $p_i \equiv q_{i+1}^0 - q_i^0$ 、 $\theta_i \equiv q_i^0 + \alpha \bmod(1)$ なる記号を導入すれば、

$$\begin{aligned} p_{i+1} &= p_i + \pi\lambda \sin(2\pi\theta_i), \\ \theta_{i+1} &= \theta_i + p_{i+1} \quad (\lambda: \text{凝着力の強さを与える}), \end{aligned} \quad (17)$$

或は、粒子番号 i を時間と読み違えることを通して

$$\begin{pmatrix} p_{i+1} \\ \theta_{i+1} \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} p_i \\ \theta_i \end{pmatrix} \quad (T: \text{保測写像})$$

という標準写像 (standard map) 系という呼ばれる馴染み力学系に帰結される。粒子配置はこの力学系の描く一つの軌道に相当する。この手続きを通して、力学系で期待される多くの現象が現れ、例えば解析性の破れ⁸⁾ (Aubry 転移と呼ばれる - KAM torus の崩壊 - カオスの発生) が起こる。この簡単な系は DL も AL も起こる。

一つの発生機構は、弱い凝着領域で現れ上固体内の原子の集団的内部運動 (格子振動) に滑べりの運動エネルギーが散逸する場合である。この時、小数原子摩擦系では、内部運動と滑べりの重心運動との間でエネルギーが規則正しく往来するという再帰現象が起こる。この結果動摩擦は再帰時間で平均するとゼロになる。しかし、再帰時間は系の原子数を増大すると増大し、十分多くの原子からなる系では、摩擦力を観測する時間内でもはや再帰現象が起こらず実質的に動摩擦が発生する。もう一つの発生機構は、強い凝着で領域で現れ、上固体内の原子の集団運動は破綻し、むしろ原子の '個別運動' に滑べりの運動エネルギーが散逸する。この場合の散逸は内部の色々な運動が複雑に絡り合う混合性 (mixing) から生じる。つまり、運動に関する相空間の体積は、並進運動の

$$\int dp_c dq_c \delta(\epsilon - Np_c^2/2) \propto N \quad (18)$$

に内部の運動の

$$\int \Pi d\tilde{p}_i d\tilde{q}_i \delta(\epsilon_0 - \epsilon - \sum \tilde{p}_i^2/2N) \propto (\epsilon_0 - \epsilon)^{N-1} \quad (19)$$

を掛けた積で与えられ、結局、 $N(\epsilon_0 - \epsilon)^{N-1}$ に比例する。 $(\epsilon_0: \text{全運動エネルギー}; \epsilon: \text{滑べり運動エネルギー})$ 。相空間体積が増大するには、 ϵ が減少すること、つまり、滑べり速度が減少する方向性が導かれる。

図 3.5 強い凝着 (p_c vs. 滑り位置 q_c)

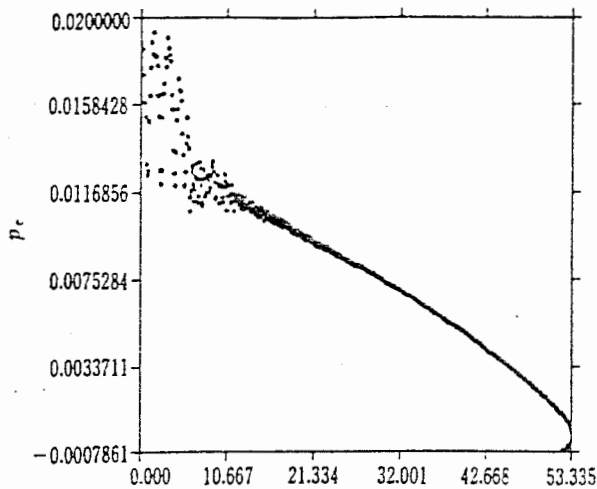
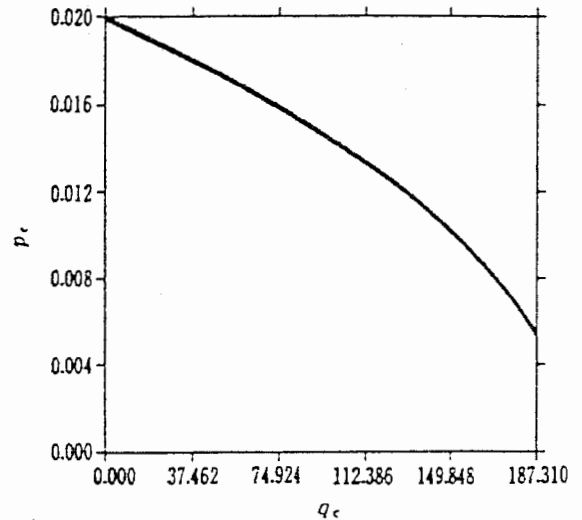


図 3.6 弱い凝着 (p_c vs. 滑り位置 q_c)



二つの機構が動摩擦にどの様に現れるかを簡単に説明しよう。弱い凝着領域では、原子の集団的内部運動は、滑り速度を特徴づける時間スケールに比べ長い周期時間スケールを持っているもののみが励起されることが断熱定理から結論される。このため散逸に関与する格子運動は限られてくる。滑り速度が格子運動の音波速度に比べて小さくなればなるほど長い周期時間を持つ格子運動のみが励起される。一方、強い凝着で領域では、原子の‘個別運動’によって滑りの運動エネルギーが散逸するが、この場合は内部の色々な運動が複雑に絡り合うために励起される内部運動に上記のような選択性はない。このために、弱い凝着に比べ強い凝着での動摩擦はずっと大きくなる。つまり散逸速度は大きい。図 3.5 と 3.6 は、FK モデルでの初速度 $p_c(0) = 0.02$ で押し出した後の $p_c(t)$ の減衰の様子を重心座標 q_c の関数として与えてある。原子数は $N=40000$ である。

運動は周期的境界条件 $q_i = q_{N+i}$ ($i = 1, \dots, N$) の下で方程式 (7) から (10) を数値積分することによって得られた。強い凝着 (図 3.5- $k_2=0.13$ の場合) は弱い凝着 (図 3.6- $k_2 = 0.05$ の場合) に比べ $0 < q_c < 10.0$ の初期滑り領域で大きな減衰が起こっていることが分かる。 $p_c(t)$ の大きな減衰は大きな摩擦を意味する。

3.5 超潤滑の現れる条件

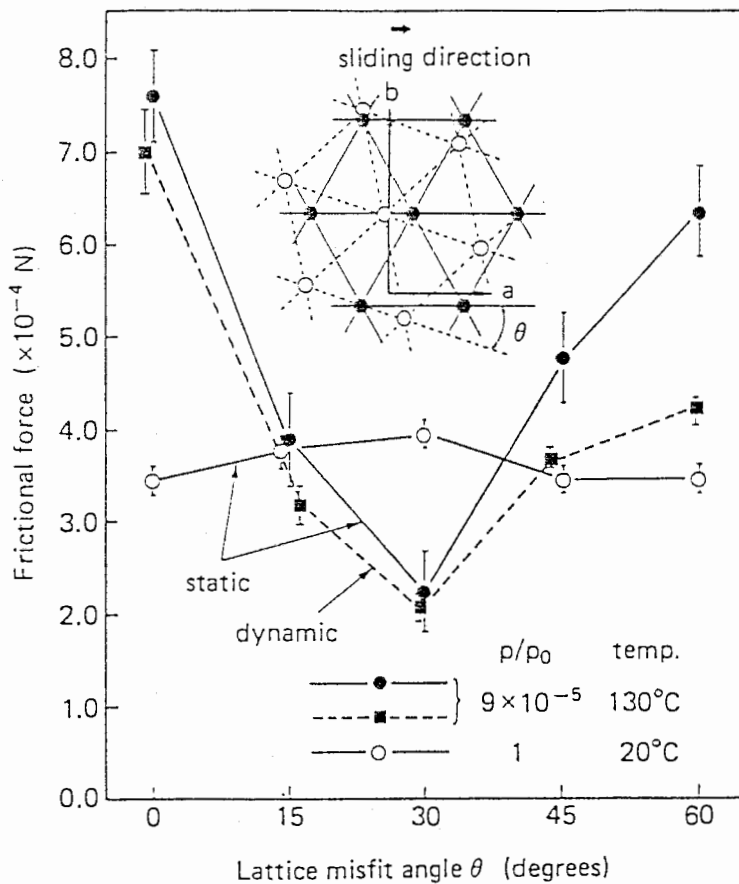
A. 静摩擦の場合

原子の連続的な運動 (DL が起こらない場合の運動) を条件として超潤滑が現れる。1次元モデルで摩擦が現れる場合と現れない場合を示そう。(例えば、図 3.2) 固体をゆっくり引っ張ると個々の原子は接触する相手の固体の周期ポテンシャルや隣同士の原子と相互作用しそれぞれの平衡位置をとりながら運動する。この場合、摩擦力は個々の原子がその周りの原子から受けるすべり方向に沿った力の総和に一致する。数学的にはその総和が有限になるかゼロになるかは接触する固体の原子配列によって決まる。(図 2.3) これは、接触する 2 つの固体の格子間隔比が有理数 (コメンシュレートと呼ばれる) になるとその総和は有限になり摩擦が現れる。図 2.3 ではその格子間隔比は 1 なので、全部の原子をいっせいに運動させるには各原子が受ける力の総和よりも大きな外力で引っ張る必要がある。これに対し、その格子間隔比が無理数になる (インコメンシュレートと呼ばれる) と原子が受ける力の大きさと方向はすべり方向に沿って決して一致しなくなる。このため各原子が受ける力は互いに打ち消し合い、無限系ではその総和は正確にゼロとなる。実際は、接触面積が $100 \times 100 \text{ \AA}^2$ 程度であっても、摩擦力は十分に小さくなる。

問題は現実の系でこのような力の打ち消し合いがうまく起こるかどうかである。このための条件が原子の連続的な運動である。何故なら、逆に個々の原子が非連続的に運動する(DLが起こる)とすると原子配列を個々の原子が受ける力の総和がすべり方向に沿ってゼロになるようにしても固体がすべると個々の原子は非連続運動によって勝手に振動し節3.3で述べたようにその振動によって固体がすべるためのエネルギーが消費されてしまうからである。したがって原子の運動の仕方が問題となるが、これについては節3.3.Bで現実の系では原子は非連続的に運動するのではなく連続的に運動することを結論した。したがって、各原子に作用する力が互いに打ち消し合うように接触面の原子を配列すれば、原子は連続的に運動するためにその力の打ち消し合いがうまく起こり、摩擦力は観測のタイムスケールに依存しないで常にゼロになる。これは凝着力が弱くても強くても起こる。

上記の場合は、静摩擦がゼロとなる場合であったが動摩擦もゼロとなる場合がある。これは節3.4.Bに述べたように、凝着力が弱い薄膜同士の摩擦の場合と固体同士の摩擦で、且つ、滑り速度の小さい場合である(摩擦力は滑り速度に比例する)。

図 3.7 白雲母摩擦異方性



B. 不純物・格子欠陥に対する安定性^{10),4)}

超潤滑は表面にある程度の濃度の不純物や格子欠陥が存在していても安定である。その理由は原子の運動の自由度にある。図3.3で述べたように、2次元系や3次元系では1次元系に比べて原子の運動の自由度が高いために原子はフレキシブルに運動し、格子欠陥が存在していても原子はその格子欠陥と直接相互作用しないで連続的に運動できる。このように超潤滑はある程度の濃度の不純物や欠陥に対して安定に存在するが、その濃度がある臨界値を越えると摩擦が現れその摩擦力は濃度の増加とともに単調に増加すると考えられる。

C. 検証実験

リヨン工科大学のグループがMoS₂膜の摩擦実験で(0001)面同士のすべり系によって超潤滑が実現される可能性を指摘している¹³⁾。そのMoS₂膜は超高真空下でスパッタリングによって形成され、それをそのまま超高真空下で鋼球と摩擦させると非常に低い摩擦係

数(0002)が観測されその原因が超潤滑の視点で考察された。MoS₂の摩擦粉のTEM観察によれば、摩擦粉の中にMoS₂の(0001)面間の格子ミスフィットが見い出された。このことから摩擦によってそのようなミスフィット界面が多結晶膜内に形成され、そのミスフィット界面で(0001)面同士がすべることによって低摩擦が実現されると考えられた。このような層状結晶の摩擦では摩擦に関与するすべり系は結晶内部に作られるために、清浄なすべり面を比較的作りやすいこととその清浄度を維持しやすいことは実用的にもメリットである。

白雲母のへき開同士の摩擦実験では超潤滑の存在を示唆する摩擦異方性が観測された。この実験では、摩擦力の接触面の格子ミスフィット依存性が理論予測と一致した。すなわち、その摩擦力は理論予測通りに接触条件が超潤滑の接触条件に近づくと減少し遠ざかると増大する異方性を示した。図 3.7 はその実験結果 (白雲母のへき開面同士の摩擦力と格子ミスフィット角度との関係) である。図中、●は非常に乾燥した雰囲気下、○は湿度が 60 % 程度の雰囲気下でのデータである。これらの振舞いは対照的で、●はミスフィット角度に対して異方性を示すが○は異方性を示さない。●は格子間の方位が最もそろわない 30 度のときに最低値を示し、格子間の方位がそろった 0 度と 60 度のときに大きくなる。○は異方性を示さないが、これは水の吸着層 (10 nm 程度) の存在によると考えられる。

超潤滑の最終確認実験が行われた。その実験では、清浄なタングステンの針先の (001) 面と Si(001) 面との摩擦がそれぞれの表面の清浄度、表面間の弾性接触、表面間の格子ミスフィットを超高真空下で明確に特定して調べられた。表面間の弾性接触を保証 (接触面で塑性変形が起こらないように) するために、表面間のトンネルギャップを STM (Scanning Tunneling Microscopy) 法を用いて制御した。この結果、理論予測と一致する摩擦力の格子ミスフィット依存性が確認された。測定された摩擦力は格子ミスフィットがないと (格子がそろった) 理論値と同程度の摩擦力: 10^{-7} N が現れ、逆に格子ミスフィットがあると (格子がそろわないと) 摩擦は測定分解能: 10^{-8} N 以下になることが示された。

3.6 終わりに

摩擦の発生の起源と超潤滑の発生を説明してきた。第 3.1 節で述べたように、これまで理論と対比できるような実験は殆んど行なわれなかった。例えば、凝着説の正しさを確認したとされるハーディ¹⁰⁾ の磨いたガラス同士の摩擦実験もどの程度接触面の表面の清浄なのかについて疑問がある。何故ならば、表面の清浄さを測定していないからである。しかし、STM 法などのナノファブリケーションによる超微細加工技術を使えば実験条件の同定が可能となり理論と実験結果との対比がようやく出来るようになってきた。ここで述べた結果は、例えば、幾つかの金属で計算した静摩擦の値は従来の測定値とオーダーで一致している。¹¹⁾ 摩擦の研究が、通常科学へと脱皮するのに必要な外的条件が整ってきたというのが今日の状況であると思われる。

原子論的な摩擦研究によって新しい摩擦研究の舞台が作られた。その新しい舞台では、理論によって摩擦の原子論的な起源と超潤滑状態が明確に示され、その結論の妥当性は摩擦の要因を特定した実験によって明らかにされつつある。このような原子論的研究の舞台には、周囲からの興味も集まり始めている。理論では松川と福山⁴⁾ が摩擦の原子論的な法則性を調べている。実験ではリヨン工科大学のグループが MoS₂ を用いて超潤滑の検証実験を行なった。これらの研究によってさらに新しい研究の舞台や分野が作られるであろうと期待される。

文献 & 参考

- 1) Bowden F. P. and Tabor D., in *Friction and Lubrication of Solids, Vol. II* (Clarendon Press, Oxford, 1964).; 日本語訳, 曾田範宗, 固体の摩擦と潤滑 (丸善, 1961),
- 1) 'ナノスペース' (上)(下) 日本放送協会 1992,
- 2) R. Erlandsson, et.al., *J. Chem. Phys.*, 89,5190(1988); C. M. Mate, et. al., *Phys. Rev. Lett.*, 59,1942(1987),
- 3) Shinjo K. and Hirano M., *Surf.Sci.*, sf283, 473(1993) ; Hirano M. and Shinjo K., *Phys. Rev.*, B47, 11837(1990),
- 4) 松川宏、*パリテイ* Vol 9, No.8, 18(1994),
- 5) Tomlinson G. A., *Phil. Mag.*, 7, 905(1929),
- 6) Sokoloff J. B., *Surf. Sci.*, 144, 267(1984); *Phys. Rev.*, B31,2270(1985); *Phys. Rev.*, B42, 760(1990),
- 7) 例えば、新上和正, 数理科学特集 'トライボロジ'10月号, 17(1993),
- 8) Aubry S., *J. Phys. (Paris)*, 44, 147(1983),
- 9) 摩擦転移は、解析性の破れ、又は、Aubry 転移と呼ばれるものとは等価ではない。摩擦転移はエネルギーの二回の微係数で非連続性が現れるが、Aubry 転移は解析性が破綻することである,
- 10) 新上和正、平野元久, 1992年物理学秋の分科会, 27p-PSP-44, 第三分冊 p502; 日本トライボロジー会議予稿集 (盛岡 1992-10)p385,
- 11) しかし、中身が相当違っていても、摩擦の研究では大抵どの様なモデルを使おうとオーダーはしばしば一致する。

第4章 結論

日常の経験を通して摩擦をよく知っているにも関わらず、摩擦がどうして現れるのかを知っている人はいない。超潤滑がなぜ生じるかという問いはそのまま摩擦はなぜ発生するかという'古くて新しい問題'であった。従来の研究では、'先ず摩擦ありき'の現象論から出発した。これに対して、摩擦の原因を現象論を越えて理解する立場から、摩擦のない状態(超潤滑)が示されました。従来の摩擦についての常識が破られ、新しい可能性が開かれました。

超潤滑は、機械を利用しようとする人々にとっては夢のような状態です。超潤滑が理論的に予言され、その存在を実験的に実証することが完了されようとしています。更に超潤滑を利用して摩擦を制御したり、また技術応用する提案されています。超潤滑についての研究が始まったのは、ごく最近であり、その可能性はすこしづつ開示されてきています。特に、二つの固体間に二硫化モリブデンの粉末を挿入して擦ると、超潤滑に適した状況が自然と出来上がってくるという実験は、超潤滑が特別なものではなく日常レベルで発生することを示しているように思われます。

謝辞

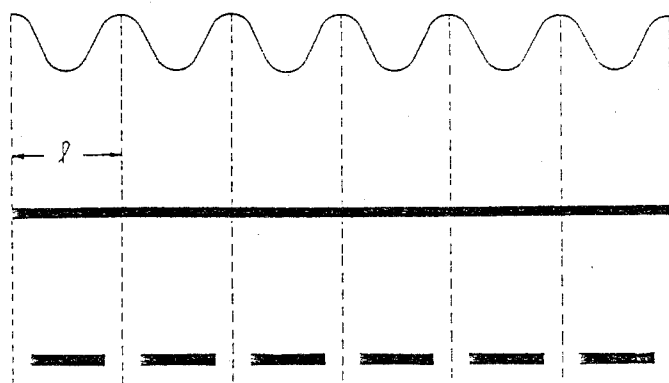
本研究の遂行に当たりその機会を与えて頂いたエイ・ティ・アール光電波通信研究所、葉原耕平会長、猪股英行社長、古濱洋治前社長、渡辺敏英室長に深謝いたします。Davis P. 客員研究員をはじめとする計算物理グループの方々に感謝いたします。

また、平野 元久 (共同研究者)、佐々田友平、池田研介、金子邦彦、中野隆の各氏との議論は大変有意義なものでありました。

A.1 判定条件

原子の平衡位置の不連続性 (DL 運動) の現れは原子が任意の平衡位置を取れないことを意味する。この現象をトポロジカルを利用して記述して行こう。トポロジーを使う理由は判定条件の直感理解を助けるからである。また、DL 運動が起こるかどうかの判定条件の指針を与えるからである。ある原子の平衡位置はポテンシャル面のその原子の平衡位置に関する極小点に対応する。滑り位置を与える Q が色々な値を取るとき平衡位置 $r(Q)$ が取る座標の集合 D を定義する。集合 D のトポロジカルな性質から以下のように理解出来る。

図 A.1 一次元系での安定領域と不安定領域



一次元 FK モデルでは、 $0 \leq r(Q) \leq l$ (l : 結晶の周期長) 内の単位領域 D を繰り返して敷き詰めることで全体の D は得られる。集合 D のトポロジが、トムリンソンの機構が生じるかどうか否かに応じて、どのように変化するか図 A.1 に示してある。トムリンソンの機構が生じないときの領域は連結した太線で、また生じるときは途切れ途切れになった (非連結な) 太線になる。図 A.1 の上段では、滑りによって、原子は連続的にその位置を変えながら動くことが可能である。他方、図 A.1 の下段では、

原子は二つの非連結な単位領域をジャンプして (つまり非連続的に) 動けるのみである。こうように、トムリンソンの機構が生じるかどうかは領域 D のトポロジ的な性質を深く関わっている。同様の議論は、上下の固体の接触するような接触面が 2 次元になる実際の摩擦系に適用出来る。

一次元多粒子系 (Frenkel-Kontrova (FK) モデル) でいえば、基底及び準安定な粒子配置を求めることに相当する。特に、粒子間の平均距離 l が無理数値である時、基底の配置は k_2 の小さい場合には、 $k_2 = 0$ の配置、つまり、粒子が等間隔 l が並んだ配置を連続的に変形させて得られる。更に、 k_2 を少しずつ大きくさせると、基底の配置は $k_2 = 0$ の配置を非連続的に変形させて得られる配置になる。連続性から非連続性への転移を Aubry 転移または解析性の破れと呼んでいる (これは力学系でのカオス発生の条件と等価である)。数学的に表現すると、 i 番目の粒子位置は

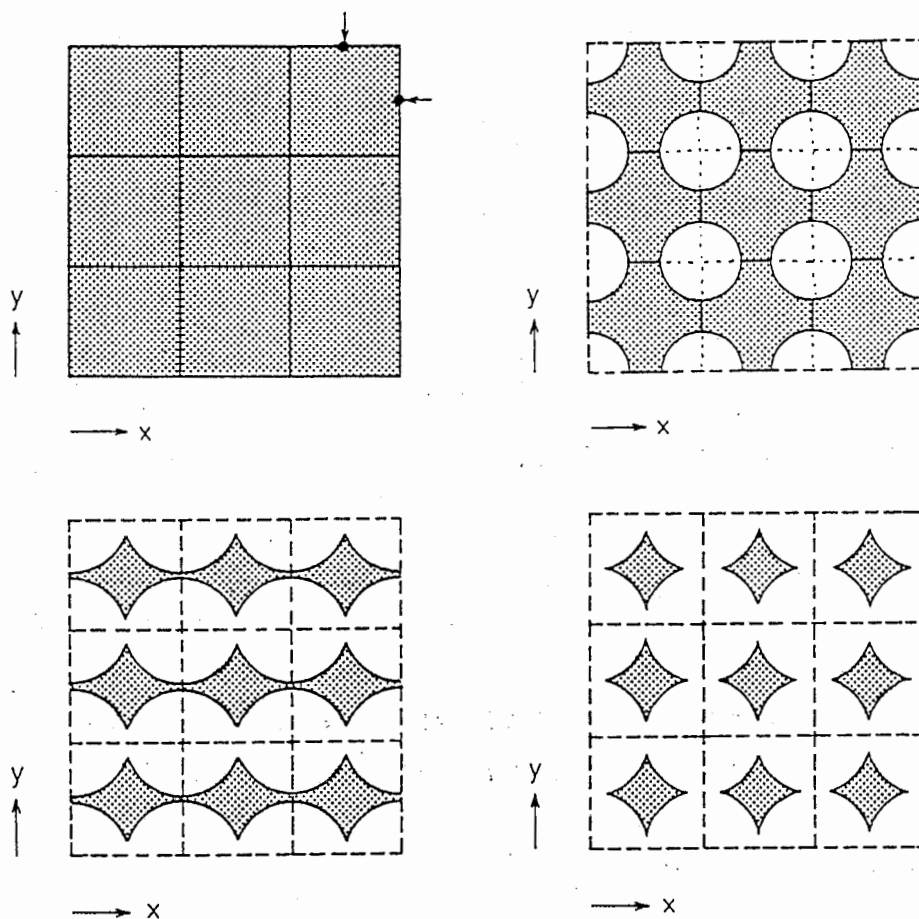
$$r_i = i \times l + \phi + f(i \times l + \phi) \quad (\phi: \text{任意の位相}) \quad (20)$$

で一般に与えられる。 f は被覆関数 (hull function) と呼ぶ。 $f(x+1) = f(x)$ の周期関数である。この f は k_2 に依存し、 k_2 が小さいとき f は連続関数、 k_2 がある値を越えると非連続関数になる。連続関数から非連続関数への転移はトポロジー変化として捉えられる。

A.2 高次元化

領域 D が図 A.2 に上下の面の結合が増大するするときの様子が与えてある。下の固体の接触面は長方形になる場合である。一次元の場合と違った点は原子が連続的にその位置を変えて行ける経路が滑り方向に依存することである。例えば、図 A.2 を考える。原子は図 A.2(a)-(b) では任意の方向に滑ることときトムリンソンの機構が現われない。図 A.2(c) では原子は x 方向ではトムリンソンの機構が現われるが y 方向には滑るときはトムリンソンの機構が現われる。図 A.2(d) では任意の方向に滑るときトムリンソンの機構が現われる。摩擦系では固体の接触面は二次元である。一次元系での Aubry 転移に類似した現象が二次元系でも起こる。領域 D のトポロジーが変化するときに対応している。この時、摩擦がゼロから有限になるので "摩擦転移 (frictional transition)" とは呼んだ。摩擦転移は滑り方向依存性を持つ。また、摩擦転移は二次元あるいはより高次元では非常に起こり難い現象である。何故なら、高次元であればあるほど領域 D は非連結領域に分割され難くなる。しかし、図 A.3 のような形の図 6 領域の場合には、上のように簡単にいかないだろう。図 A.3 のカスプ付近の原子は領域の境界を通過して連続的に位置は変化しない。この場合は、原子の運動は滑り方向に依存して多種多様である。幸い、金属結合のような二体の相互作用では、この形の領域になる場合は (計算機シミュレーションの結果) ない。

図 A.2 凝着力 vs. 安定領域 (斜線部) の変化



A.3 判定条件の色々な摩擦系への応用

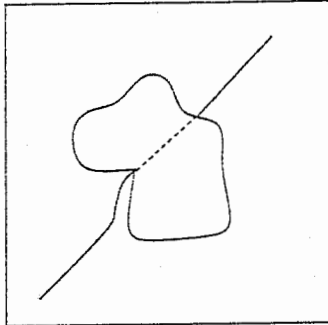
相互作用する多粒子系からなる三次元摩擦系を考察した。摩擦系は

$$v(\{r_i(Q)\}, Q) = \frac{1}{2} \sum_i \{ \sum_j v_1(r_i(Q) - r_j(Q)) + v_2(r_i(Q)) \}. \quad (21)$$

Q は上の固体の重心座標を与えるベクトルで

$$Q = \frac{\sum_i^{N_u} r_i(Q)}{N_u}, \quad (22)$$

図 A.3 カस्पを持つ安定領域



で与えられる。 $r_i(Q)$ は上の固体の i 番目の原子の平衡位置座標であり N_u は上の固体の原子の総数である。領域 D はある点 (臨界点と呼ぶ)、つまり、下の固体表面隣あった二つの原子を結ぶ稜線の中点で連結するか否かである。(図 A.2(a) の矢印の点) 判定条件はポテンシャルエネルギーがその臨界点で稜線に垂直な方向で上に凸になる条件で与えられる。此の方向を $s=(s_x, s_y)$ で与えると、

$$v^{cc} = v^{xx} s_x^2 + 2v^{xy} s_x s_y + v^{yy} s_y^2 < 0, \quad (23)$$

$$v^{\alpha\beta} = \sum_j^{N_u} v_1^{\alpha\beta}(s - r_j(Q)) + v_2^{\alpha\beta}(s). \quad (24)$$

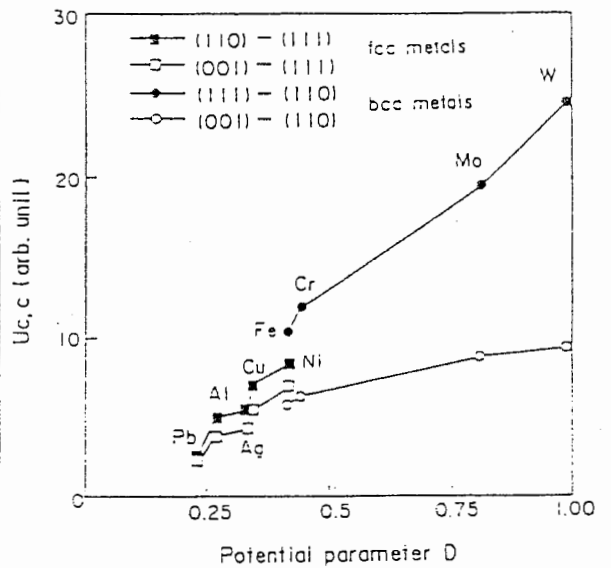
$v_1^{\alpha\beta}(s-r_j(Q))$ と $v_2^{\alpha\beta}(s)$ は各々 α, β に関する 2 回の微分である。

トポロジカルな性質を fcc や bcc 金属からなる摩擦系で調べた。原子間ポテンシャルは $v_1(r)$ 、 $v_2(r)$ はモース (Morse) ・ポテンシャル

$$v(r) = D\{e^{-2\alpha[r-r_0]} - 2e^{-\alpha[r-r_0]}\} \quad (25)$$

表 2 モースポテンシャルのパラメタ 図 A.4 2 回微分係数 vs. 相互作用強度 (D)

metal	r_0 (Å)	D (eV)
Pb	3.733	0.2348
Ag	3.115	0.3323
Ni	2.780	0.4205
Cu	2.866	0.3429
Al	3.253	0.2703
Mo	2.976	0.8032
W	3.032	0.9906
Cr	2.754	0.4414
Fe	2.845	0.4174



によって与えた。これらのパラメーターは表2に挙げてある。上の固体の原子はその位置を緩和するが下の固体の原子は固定してある。此の仮定は最密原子表面を下の固体表面に取ることで満たされる。fcc金属では(111)面でありbcc金属では(110)面である。計算では上の固体の原子が三次元的に緩和させている。図A.4はモース・ポテンシャルのパラメーター D の関数として v_{cc} を示してある。 v_{cc} は調べた全金属に対して正の値を取る。このことはトムリンソンの機構は現われにくいことを示す。 v_{cc} の符号は負の v_1 と正の v_2 の競合で決まる。これらの値を調べると臨界点で特に v_1 が小さな負値となるためである。このことはトムリンソンの機構が何故起こり難いかを示す。トムリンソンの機構は金属結合の様に強い相互作用でも起こらない。弱い相互作用の時は既に議論されている。こうして、この結論は色々な強さの凝着力の場合も成立する。

B.1 モデル

上固体と下固体の粒子がお互いに相互作用し相対速度 v で滑べる場合を考える。簡単のため下固体の粒子は動かないものとする。下固体は上の固体を構成する粒子に滑べりによって（外）力を与える。又下固体と接触する上固体の接触面は bcc 金属や fcc 金属の (100) や (110) のような並進対象性がある二次元の Bravais 格子を持つ場合を考える。又簡単のためにその単位胞は長方形で各辺の長さを a_x, a_y としその中に n 個の粒子で占有されているとする。そのベクトルは \vec{r}_i ($i = 1, \dots, n$) で指定されるとする。上の固体は、接触面の様な二次元の（数個の粒子を含む）単位胞からなる平面を重ねることによって構成される。以下接触面を第 1 層, 次の層を第 2 層, ... を呼ぶことにしよう。 i 番目の粒子の座標は $\vec{r}_i = (r_i^x, r_i^y, r_i^z)$ で表す。簡単に i 番目の α 成分の変位を r_i^α と表す。sliding の過程では、上の固体は下固体からの相互作用で粒子の座標は relax したり運動したり出来る。また、外から力が働かない、つまり、 $f_{i\alpha} = 0$ の時の粒子の平衡座標を $r_{i\alpha 0} = (x_i^0, y_i^0, z_i^0)$ の記号を持ちいる。（下固体表面と相互作用する）上固体表面表面の粒子総数を N_s で表す。以下では下固体からの力は上固体の第一層にある粒子のみに働くと仮定する。二次元面の単位胞の総数を N_t で表すと $N_s = nN_t$ 、粒子の質量を m で表す。二次元の位置座標を与えるために時々 $\vec{p}_j = (x_j, y_j)$ を使う。 $\vec{p}_j^0 = (x_j^0, y_j^0)$ (上添字 0 は力 f を受けていない時の粒子位置)。

B.2 計算式の導出

各粒子の運動方程式は

$$m \frac{d^2 r_{i\alpha}(t)}{dt^2} + m D_{i\alpha, j\beta} r_{j\beta}(t) = f_{i\alpha}(t). \quad (26)$$

ここで m は粒子の質量、 $r_{i\alpha}(t)$ は i 番目の α 成分の変位、 $D_{i\alpha, j\beta}$ は dynamical 行列の行列要素、 $f_{i\alpha}(t)$ は i 番目の粒子に作用する力を表す。これをスペクトル表示を行なう。

$$r_{i\alpha}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} r_{i\alpha}(\omega), \text{ 又は } r_{i\alpha}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{+i\omega t} r_{i\alpha}(t), \quad (27)$$

$$f_{i\alpha}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} f_{i\alpha}(\omega), \text{ or } f_{i\alpha}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{+i\omega t} f_{i\alpha}(t) \quad (28)$$

を式 (26) に代入すれば

$$-m\omega^2 r_{i\alpha}(\omega) + m D_{i\alpha, j\beta} r_{j\beta}(\omega) = f_{i\alpha}(\omega) \quad (29)$$

を得る。

ここで直行変換、

$$q_{\vec{k}}(\omega) = T_{\vec{k}, i\alpha} r_{i\alpha}(\omega), \text{ 又は } r_{i\alpha}(\omega) = T_{i\alpha, \vec{k}} q_{\vec{k}}(\omega) \quad (30)$$

を導入する。 $T_{i\alpha, \vec{k}}$ は、

$$T_{i\alpha, \vec{k}} T_{\vec{k}, j\beta} = \delta_{i\alpha, j\beta}, \text{ と } T_{\vec{k}, i\alpha} T_{i\alpha, \vec{k}'} = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}, \quad (31)$$

且つ、

$$T_{\vec{k}, i\alpha} D_{i\alpha, j\beta} T_{j\beta, \vec{k}'} = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \omega_{\vec{k}}^2 \quad (32)$$

を満たすものとする。($D_{i\alpha,j\beta}$ は実数であるので一般性を失うことなく $T_{i\beta,\vec{k}}$ も実数と考えて良い)。式 (30) と (32) を (29) に代入してをから

$$q_{\vec{k}}(\omega) = \left(\frac{1}{m}\right) \frac{1}{-\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2 + i\gamma\omega} T_{\vec{k},j\alpha} f_{j\alpha}(\omega) \quad (33)$$

を得る。これより

$$r_{i\alpha}(\omega) = \left(\frac{1}{m}\right) \frac{T_{i\alpha,\vec{k}}}{-\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2 + i\gamma\omega} T_{\vec{k},j\beta} f_{j\beta}(\omega). \quad (34)$$

また (27) から

$$r_{i\alpha}(t) = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \frac{T_{i\alpha,\vec{k}}}{-\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2 + i\gamma\omega} T_{\vec{k},j\beta} f_{j\beta}(\omega). \quad (35)$$

此所で

$$g_{\vec{k}}(\omega) = \frac{1}{-\omega^2 + \omega_{\vec{k}}^2 + i\gamma\omega}$$

なる格子振動の Green 関数を導入すると (33) は

$$q_{\vec{k}}(\omega) = \left(\frac{1}{m}\right) g_{\vec{k}}(\omega) T_{\vec{k},j\alpha} f_{j\alpha}(\omega) \quad (36)$$

と書ける。これを (34) に代入して

$$r_{i\alpha}(\omega) = \frac{1}{m} T_{i\alpha,\vec{k}} g_{\vec{k}}(\omega) T_{\vec{k},j\beta} f_{j\beta}(\omega). \quad (37)$$

また (35) より

$$r_{i\alpha}(t) = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} T_{i\alpha,\vec{k}} g_{\vec{k}}(\omega) T_{\vec{k},j\beta} f_{j\beta}(\omega). \quad (38)$$

次に $r_{i\alpha}(\omega)$ を計算しよう。

B.3 $r_{i\alpha}(\omega)$ の計算

先ず式 (38) の右辺の

$$T_{\vec{k},j\beta} f_{j\beta}(\omega) \quad (39)$$

を計算する。

$$f_{i\alpha}(t) = \delta_{\alpha,x} \frac{\lambda}{2\pi} \sin \frac{2\pi}{a} (x_i^0 + vt) \quad (40)$$

を仮定する。これは、上の固体表面は x - 方向に滑べると仮定したことと同じである。⁵ このので、粒子座標として $r_{i\alpha} = (x_i, y_i, z_i)$ の記号を持ちいた。また、外から力が働かない、つまり、 $f_{i\alpha} = 0$ の時の粒子の平衡座標を $r_{i\alpha 0} = (x_i^0, y_i^0, z_i^0)$ の記号を持ちいた。

$$f_{i\alpha}(\omega) = \lambda \left(\frac{1}{2i}\right) (e^{2ix_i^0\pi/a_x} \delta(\omega - \omega_v) - e^{-2ix_i^0\pi/a_x} \delta(\omega + \omega_v)). \quad (41)$$

⁵ より正確には λ は i 依存性を持つ λ_i とした方が良いかもしれない。この場合にも同様の計算を行なうことができる。

ここで $\omega_v = 2\pi\nu/a_x$ である。また、 $T_{\vec{k},j\beta}$ は、接触面は並進対象性を持つ 2次元の Bravais 格子を仮定する。(簡単のために単位胞は長方形で各長さを a_x, a_y としその中に n 個の表面粒子で占有されているとする。またその位置ベクトルは \vec{r}_i ($i = 1, \dots, n$) で指定されるとする)⁶ すると単位胞の総数を N_t で表すと $N_s = nN_t$ となり

$$T_{\vec{k},j\beta} = t_{k_z, z_j^0} u_j^{x-y}(\vec{k}_\rho) \frac{e^{-i\vec{k}_\rho \vec{\rho}_j^0}}{\sqrt{N_s}} \quad (42)$$

を得る。 $u_j^{x-y}(\vec{k}_\rho)$ は波数ベクトル \vec{k}_ρ を持つ単位胞内の粒子の x, y 平面内の相対的位置変位ベクトルである。 N_s は(下固体表面と相互作用する仮定する)上固体表面表面の粒子総数を表す。 $\vec{\rho}_j^0 = (x_j^0, y_j^0)$ (上添字 0 は力 f を受けていない時の粒子位置を表す)。 \vec{k}_ρ は格子振動の接触面に沿った波数ベクトル、 t_{k_z, z_j^0} は接触面に垂直な z -方向の直行変換行列要素で k_z はその波数、 z_j^0 は z -座標である。例えば、 z -方向にも並進対象性をもつ単位胞に只一つの粒子を持つ単純な場合は

$$t_{k_z, z_j^0} = \frac{e^{-ik_z z_j^0}}{\sqrt{N_z}} \quad (43)$$

となる。 t_{k_z, z_j^0} の満たす式は

$$t_{k_z, z_j^0} t_{z_j^0, k_z} = \delta_{k_z, k_z'} \text{ and } t_{z_i^0, k_z} t_{k_z, z_j^0} = \delta_{i^0, j^0}. \quad (44)$$

式(41)(42)を(39)に入れて面内の和を先に計算すると

$$\begin{aligned} T_{\vec{k},j\beta} f_{j\beta}(\omega) &= \lambda \times \frac{\sqrt{N_s}}{2i} \times \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} u_j^{x-y}(\vec{k}_\rho) e^{-i\vec{k}_\rho \vec{r}_i} t_{k_z, z_j^0} \right] \times \\ &\quad [\delta(k_x - 2\pi/a_x + G_x) \delta(k_y + G_y) \delta(\omega - \omega_v) \\ &\quad - \delta(k_x + 2\pi/a_x + G_x) \delta(k_y + G_y) \delta(\omega + \omega_v)]. \end{aligned} \quad (45)$$

ここで残っているのは z_j について j の和である。(但し和は接触面の粒子に対してのみであることを思いだそう。何故なら $f_{j\beta}$ は接触面でのみ有限で他の粒子に対しては 0 と成るからである。 $G_\rho = (G_x, G_y)$ は面内の Bravais 格子の逆格子ベクトルである。(37)に代入して

$$\begin{aligned} r_{i\alpha}(\omega) &= \frac{1}{m} T_{i\alpha, \vec{k}} g_{\vec{k}}(\omega) T_{\vec{k},j\beta} f_{j\beta}(\omega), \\ &= \frac{\lambda}{2im} \sum_{\vec{k}_\rho, k_z} t_{z_i^0, k_z} u_j^{x-y}(\vec{k}_\rho) e^{i\vec{k}_\rho \vec{\rho}_i^0} \frac{1}{-\omega^2 + \omega_{\vec{k}_\rho, k_z}^2 + i\gamma\omega} \times \\ &\quad \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} e^{-i\vec{k}_\rho \vec{r}_i} t_{k_z, z_j^0} \right] \\ &\quad \times [\delta(k_x - 2\pi/a_x + G_x) \delta(k_y + G_y) \delta(\omega - \omega_v) \\ &\quad - \delta(k_x + 2\pi/a_x + G_x) \delta(k_y + G_y) \delta(\omega + 2\pi\nu/a_x)]. \end{aligned} \quad (46)$$

k_x, k_y について積分すれば、

$$\begin{aligned} r_{i\alpha}(\omega) &= \frac{\lambda}{2im} \sum_{k_z} t_{z_i^0, k_z} \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} t_{k_z, z_j^0} \right] \frac{1}{-\omega^2 + \omega_{0, k_z}^2 + i\gamma\omega} \\ &\quad \times [\delta(\omega - \omega_v) - \delta(\omega + \omega_v)]. \end{aligned} \quad (47)$$

⁶一般的な場合への拡張は容易である。

ここで G に対して最も効くものを取った。この様な $\vec{k}_\rho = \vec{0}$ に対して $e^{-i\vec{0}_\rho \cdot \vec{r}_i} = 1$ 、 $u_j^{x-y}(\vec{0}) = 1$ であることを使った。

B.4 (平均化した) 摩擦エネルギー

摩擦で消費されるエネルギーは

$$F_d * v = -\frac{1}{N_s} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{i,\alpha} \int_{-T/2}^{T/2} dt \frac{dr_{i\alpha}(t)}{dt} f_{i\alpha}(t). \quad (48)$$

N_s は (下固体表面と相互作用する) 上固体表面表面の粒子総数。スペクトル表示を持ちいると、

$$F_d * v = \left(\frac{1}{m}\right) \frac{1}{N_s} (i) \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{i,\alpha} \int_{-T/2}^{T/2} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega_2 e^{+i(\omega_1 - \omega_2)t} [f_{i\alpha}(\omega_1)]^\dagger \omega_2 r_{i\alpha}(\omega_2). \quad (49)$$

式 (47) の $r_{i\alpha}(\omega_2)$ と式 (41) の $f_{i\alpha}(\omega)$ を (49) に代入し ω_1 、 ω_2 で積分すれば、

$$= (i) \frac{1}{m} \left(\frac{\lambda}{2m}\right)^2 \frac{1}{N_s} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{i,\alpha} \int_{-T/2}^{T/2} dt [e^{2ix_i^0/a_x} e^{-i\omega_v t} - e^{-2ix_i^0/a_x} e^{i\omega_v t}]^\dagger \\ \left\{ \sum_{k_z} t_{z_i^0, k_z} \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} t_{k_z, z_j^0} \right] \left[\frac{\omega_v e^{-i\omega_v t}}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 + i\gamma\omega_v} + \frac{\omega_v e^{+i\omega_v t}}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 - i\gamma\omega_v} \right] \right\}. \quad (50)$$

ここで $\omega_v = \omega_v (\neq 0)$ である。 N_s 、 t について積分すれば

$$= (i) \frac{1}{m} \left(\frac{\lambda}{2m}\right)^2 \sum_{k_z} t_{z_i^0, k_z} \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} t_{k_z, z_j^0} \right] \\ \left[\frac{\omega_v}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 + i\gamma\omega_v} - \frac{\omega_v}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 - i\gamma\omega_v} \right]. \quad (51)$$

公式 $1/(x + i0^+) = P/x - i\pi\delta(x)$ を持ちいると

$$F_d * v = \frac{2\pi}{m} \left(\frac{\lambda}{2m}\right)^2 \omega_v \sum_{k_z} t_{z_i^0, k_z} \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} t_{k_z, z_j^0} \right] \delta\left(\frac{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2}{\omega_v}\right). \quad (52)$$

よって

$$F_d = \frac{2\pi}{m} \left(\frac{\lambda}{2m}\right)^2 \frac{1}{v} \sum_{k_z} t_{z_i^0, k_z} \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} t_{k_z, z_j^0} \right] \delta\left(\frac{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2}{\omega_v}\right). \quad (53)$$

B.5 調和近似の良さ:

近似の評価は厳密に、より高次の項が収束するかどうか、収束するならより高次の項と比べてどうかを検討しなければならない。ここでは簡単な目安を採用する。則ち、粒子当たりの平均変位距離が平均粒子間距離の数パーセント程度であれば許されるとしよう。

変位の評価式は、

$$I = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{N_s} \frac{1}{T} \sum_{i,\alpha} \int_{-T/2}^{T/2} dt [r_{i\alpha}(t)]^\dagger r_{i\alpha}(t). \quad (54)$$

N_s は（下固体表面と相互作用する）上固体表面表面の粒子総数。(35)を代入すれば

$$\begin{aligned} I &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{N_s} \frac{1}{T} \sum_{i,\alpha} \int_{-T/2}^{T/2} dt [r_{i\alpha}(t)]^\dagger r_{i\alpha}(t), \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{N_s} \frac{1}{T} \sum_{i,\alpha} \int_{-T/2}^{T/2} dt \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_1 \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega_2 e^{i(\omega_1 - \omega_2)t} [r_{i\alpha}(\omega_1)]^\dagger r_{i\alpha}(\omega_2). \end{aligned} \quad (55)$$

(55)を計算するには(47)の $r_{i\alpha}(\omega)$ を代入し、更に ω_1 、 ω_2 で積分すれば、

$$\begin{aligned} I &= \left(\frac{\lambda}{2m}\right)^2 \frac{1}{N_s} \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{i,\alpha} \int_{-T/2}^{T/2} dt \\ &\quad \left\{ \left[\sum_{k_z} t_{z_i^0, k_z} \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} t_{k_z, z_j^0} \right] \left[\frac{e^{-i\omega_v t}}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 + i\gamma\omega} - \frac{e^{+i\omega_v t}}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 - i\gamma\omega_v} \right] \right]^\dagger \right. \\ &\quad \left. \left[\sum_{k_z} t_{z_i^0, k_z} \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} t_{k_z, z_j^0} \right] \left[\frac{e^{-i\omega_v t}}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 + i\gamma\omega} - \frac{e^{+i\omega_v t}}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 - i\gamma\omega_v} \right] \right] \right\}. \end{aligned} \quad (56)$$

ここで $\omega_v = 2\pi\nu/a_x$ ($\neq 0$)。 t で積分すれば

$$I = \frac{2}{N_s} \left(\frac{\lambda}{2m}\right)^2 \sum_{i,\alpha} \left| \sum_{k_z} t_{z_i^0, k_z} \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} t_{k_z, z_j^0} \right] \frac{1}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 + i\gamma\omega_v} \right|^2. \quad (57)$$

i, α についてある単位胞の中を除いて他の単位胞について（並進対象性のある粒子について）和を取れば、以下では i, α の和を落し

$$I = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{m}\right)^2 \frac{1}{n} \sum_{i \in \text{unit-cell}} \left| \sum_{k_z} t_{z_i^0, k_z} \left[\frac{1}{n} \sum_{j \in \text{unit-cell}} t_{k_z, z_j^0} \right] \frac{1}{-\omega_v^2 + \omega_{0, k_z}^2 + i\gamma\omega_v} \right|^2. \quad (58)$$

を得る。後は t_{z_0, k_z} と $g_{\bar{0}, k_z}(\omega_v)$ に入る $\omega_{\bar{0}, k_z}$ を具体的に計算し(58)で k_z 、 z_j^0 の和を実行すれば良い。

B.6 | の評価

グラファイト同士の滑りの場合:

この計算は Sokolof がやっている。(Phys. Rev., B42,762(1990))
Iとして

$$I = \left(\frac{0.25\lambda_0 a_z a_x}{2\pi m v_{ph-z} v} \right)^2 \quad (59)$$

を導いている。(59)式の λ を λ_0 と記号を変えているのは Sokolof の定義と少し違うからである。 v_{ph-z} は z 方向の(c軸方向に沿った)格子振動の音速。 $\lambda_0 = 0.17 \times 10^{-5}$ 、 $m = 10^{-22}$ g、 $v_{ph-z} = 10^4$ cm/s、 $a_x = 3 \times 10^{-8}$ cm、使って $I \leq (0.01 \times 10^{-8}\text{cm})^2$ になるための v の大きさは

$$10^{2-3} v_{ph-z} \leq v \quad (60)$$

を結論している。つまり近似が成り立つためには滑り速度はグラファイトの音速の100-1000倍速くなければならない。

Fe(100)の場合:

この時 $n=1$ である。Fe 原子の間の相互作用ポテンシャルを使って実際に $\omega_{0,k_z}^2, t_{k_z, z_j^0}$ を計算する。

$$\omega_{0,k_z}^2 = v_{ph-z}^2 (k_z/k_d)^2, \quad t_{k_z, z_j^0} = \sqrt{\frac{3}{2N_z}} \left(1 - \left(\frac{k_z}{k_d}\right)^2\right) \quad (61)$$

を得る。これを (58) に代入して積分すれば

$$I = \left[\frac{3}{4\sqrt{2}} \frac{\lambda a_x}{v_{ph-z} v} \right]^2. \quad (62)$$

$\lambda \sim 0.02$ 程度を仮定し、 $v_{ph-z} = 8.311$ の値を $I \leq (10^{-2} a_x)^2$ に代入して v を求めると

$$0.15 \times v_{ph-z} \leq v. \quad (63)$$

となる。つまり近似が成り立つためには Fe 金属の z 方向の音速の 15 パーセント以上であれば良い。

Fe(110)の場合:

この時 $n=2$ である。Fe 原子の間の相互作用ポテンシャルを使って実際に $\omega_{0,k_z}^2, t_{k_z, z_j^0}$ を計算する。

$$\omega_{0,k_z}^2 = v_{ph-z}^2 (k_z/k_d)^2, \quad t_{k_z, z_j^0} = \sqrt{\frac{3}{2nN_z}} \left(1 - \left(\frac{k_z}{k_d}\right)^2\right) \quad (64)$$

を得る。 $\lambda \sim 0.02$ 、 $v_{ph-z} = 7.61$ 。これを (58) に代入して積分すれば

$$I = \left[\frac{1}{n} \frac{3}{4\sqrt{2}} \frac{\lambda a_x}{v_{ph-z} v} \right]^2. \quad (65)$$

$I \leq (10^{-2} a_x)^2$ に代入して v を求めると

$$\frac{1}{n} 0.15 \times v_{ph-z} \leq v. \quad (66)$$

となる。つまり近似が成り立つためには Fe 金属の z 方向の音速の 7.5% 以上であれば良い。⁷

⁷補足： n 依存性。単位胞中の独立に運動する粒子数 n に I はどのような依存性を持つかを議論する。(B.4) から直ちに分かることは単位細胞中の粒子の非対称的な運動は打ち消し合いプラスマイナスして残った部分が I に寄与することである。簡単のため ω_{0,k_z}^2 は n に依らないと仮定する。この仮定は Fe(100) で $n = 1$ 、Fe(110) で $n=2$ であるが近似的に成り立っている。これは他の bcc 金属表面や fcc 金属表面でも同じである。