

2019 年度財団法人 JKA 研究補助事業

超潤滑-摩擦遷移状態における
超潤滑の安定性・持続性制御の確立補助事業 (2019M-116)
研究報告書

法政大学理工学部機械工学科
平野元久

2020 年 5 月 1 日

1. はじめに

摩擦は日常身のまわりに存在し、物体運動の抵抗として古代より認識されてきた。摩擦により機械製品には摩擦や摩耗が引き起こされ、膨大なエネルギーが失われている。試算によると全世界で生産されるエネルギーの約 25% が摩擦に消費され、機械故障の約 70% は摩擦に伴う摩耗や材料疲労が原因とされている。このように摩擦を極力少なくする技術開発があらゆる産業において大きな役割を担うことは明らかである。近年、原子レベルで発見された摩擦消失現象である超潤滑の原子論的機構は理論・実験の両面から解明されつつある。当研究室ではこれまでに、摩擦・超潤滑の原子論的機構の全貌解明および超潤滑応用の実現に向けて、摩擦の原子論研究に取り組んできた。摩擦理論構築を目的として、以下で述べるフレンケル・コントローワモデル (FK: Frenkel-Kontorova model) を用いて、すべり速度と摩擦ポテンシャル振幅 (凝着エネルギー) のパラメータ空間で摩擦領域と超潤滑領域を記述する**摩擦相図** (Friction Phase Diagram) を作成し原子論モデルの摩擦特性を調べてきた [1, 2]。Fig.1 に示すように当研究室では詳細に摩擦相図を作成した [3]。摩擦相図に示された摩擦領域と超潤滑領域の考察から、超潤滑が発現するかどうかは初速度と摩擦ポテンシャル振幅の 2 つのパラメータに強く依存しており、これらのパラメータに依存して現れる摩擦特性を調べ考察することは、摩擦・超潤滑の発生機構解明の重要課題となる。このように摩擦相図が高精度に作成され、超潤滑領域と摩擦領域の境界が特定された。これまでの摩擦相図の分析から見出された興味ある課題は、特定のパラメータにおいて、凝着が小さいにも関わらず摩擦発生が生ずる現象の機構解明である。特に、超潤滑領域と摩擦領域の境界付近ではすべり初めには当初超潤滑を示すが、ある時刻において重心のすべり速度がカタストロフィックに急落する超潤滑-摩擦遷移現象が現れる。このカタストロフィックな超潤滑の破綻による特異的なエネルギー散逸機構の解明を本研究の主要課題とする。本研究の目的を以下に掲げる。

1. 原子論モデルの摩擦特性として、モデルの重心速度、原子振動の時系列データを算出し時系列データ解析として、特に、FFT 解析、原子運動の周期性に着目した原子の運動状態の位相空間における軌跡、ポアンカレ写像の分析により振動解析を実施し、超潤滑機構および動摩擦におけるエネルギー散逸機構解明を図る。
2. 超潤滑から摩擦への遷移過程における原子振動を明確化し、超潤滑から摩擦発生にカタストロフィックに遷移する特異的なエネルギー散逸現象の機構を非線形振動論の視点から考察する。

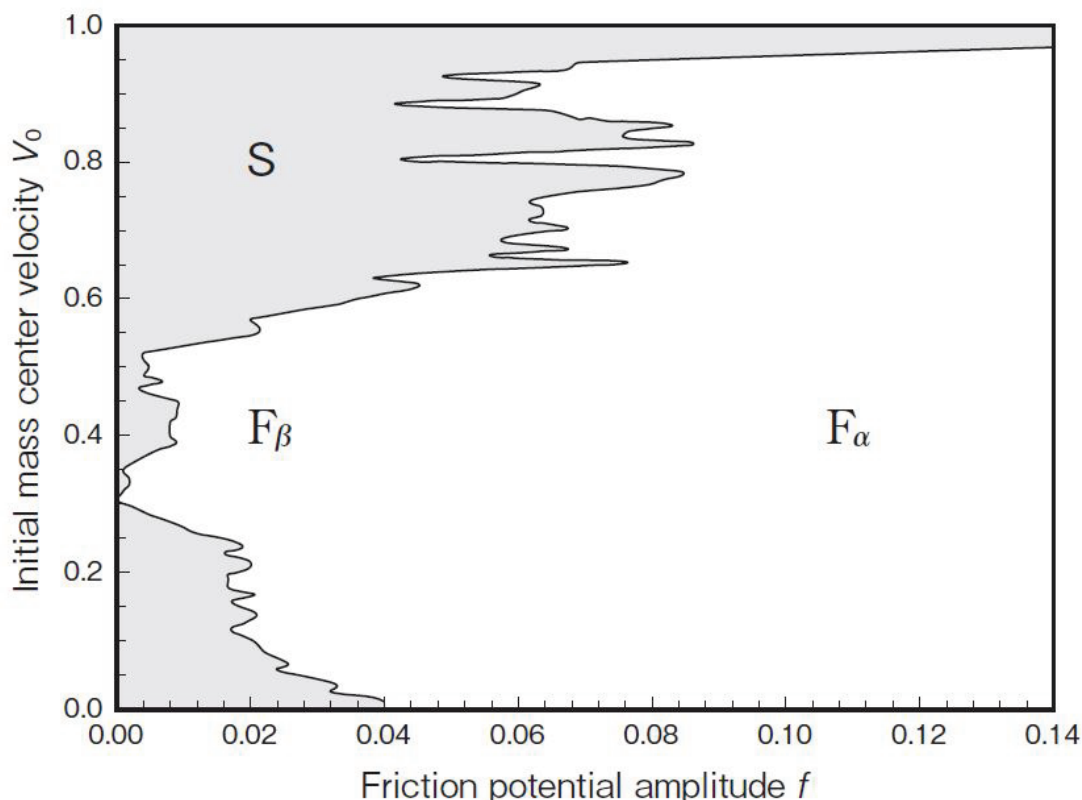


図 1 Friction Phase Diagram

2. 摩擦の原子論モデル

2.1 原子モデルの摩擦と超潤滑発現

超潤滑発現の機構解析を行うために、清浄表面における結晶同士のすべり運動シミュレーションを行う。固体同士の接触面を原子スケールで考え、モデル化する。Fig.2 に原子モデルを示す。単純格子で構成した固体表面の上を、同様な単純格子で構成した別の固体が滑る様子が表されている。単純化のため、固体同士のすべり運動は一次元方向のみとする。原子の摩擦は、接触面の固体の原子配列に強く依存する。上下の固体の原子配列がすべり方向に対して同じである整合接触の場合、各原子に作用する力の方向は、そろって逆向きとなり、その総和は有限となり摩擦力が発生する。一方、上下の固体の原子配列がすべり方向に対して異なる非整合接触の場合は、各原子に作用する力の向きと大きさは一様ではなく、力が互いに打ち消し合う。これまでの超潤滑に関する研究によって、上下の固体の原子間隔比が無理数となる非整合接触系では、極限に摩擦ゼロの超潤滑が現れやすくなることが示されている [1]。本研究では超潤滑発現の機構解析をより効率的に行うために、非整合接触を前提として Frenkel-Kontorova 摩擦モデルを基に、原子スケールの摩擦現象の解析を行う。

2.2 Frenkel-Kontorova 摩擦モデルと運動方程式

摩擦モデルに、1次元 Frenkel-Kontorova モデルを用いる。Frenkel-Kontorova モデルは、バネ定数 k の線形バネによって連結された多数の質点がすべり方向に沿って周期ポテンシャルを受けて運動するというモデルである。原子摩擦運動では、これらの質点を原子としポテンシャルエネルギーは原子間に作用する弾

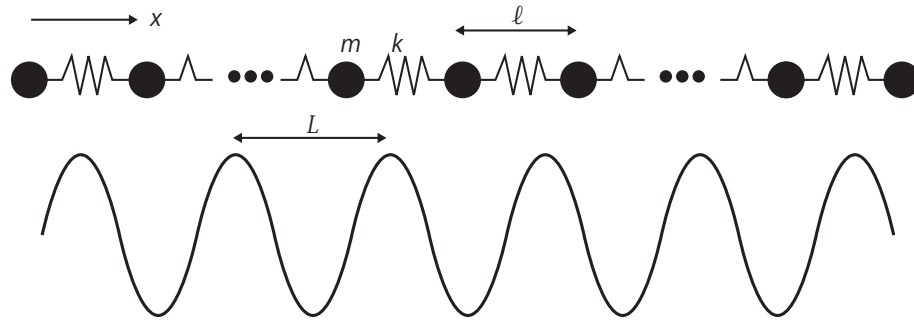


図2 Frenkel-Kontorova friction model

性エネルギーと、上の固体が下の固体から受ける振幅 f の摩擦ポテンシャルの振幅の大きさを表す。上の固体の原子間力を定数 k の線形バネ力によって、下の固体が上の固体に及ぼす摩擦ポテンシャル振幅を振幅 f の周期ポテンシャルによって表現する。一次元 Frenkel-Kontorova(FK) 摩擦モデルのハミルトニアンは次式で表される。

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{k}{2} (x_{i+1} - x_i - \ell)^2 + \frac{f}{2\pi} \sin(2\pi x_i) \right\} \quad (1)$$

ここで、 N は上の固体の原子数、 p_i は各原子の運動量、 x_i は上の固体の各原子の位置、 k はバネ定数、 ℓ はバネの自然長 (上の固体の格子定数)、 f は摩擦ポテンシャル振幅の大きさを表す。1次元 FK 摩擦モデルの運動方程式はハミルトンの正準方程式から次式となる。

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 x_i}{dt^2} &= -k \{ (x_i - x_{i-1} - \ell) + (x_i - x_{i+1} + \ell) \} \\ &\quad - f \cos 2\pi x_i \\ &= k(x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) - f \cos 2\pi x_i \end{aligned} \quad (2)$$

2.3 運動方程式の無次元化

式 (2) の運動方程式は、パラメータとして質量 m 、原子間相互作用を表すばね定数 k を含む。これらの値は原子レベルで極めて小さいため、数値計算の精度確保のため運動方程式を無次元化する。そこで、上式に含まれる ℓ を長さの単位に選び、時間の単位を τ とする。無次元量には'をつけ、座標成分 x_i 、時間 t に対応する無次元量をそれぞれ x_i' 、 t' とし次式を得る。

$$x_i = \ell x_i', \quad t = \tau t' \quad (3)$$

上式を代入して運動方程式を書き換えることで、次式のようになる。

$$m \frac{\ell}{\tau^2} \frac{d^2 x_i'}{dt'^2} = k\ell(x_{i+1}' + x_{i-1}' - 2x_i') - f \cos 2\pi x_i' \quad (4)$$

上式から $m/k\tau^2$ も無次元量となり、これを $m/k\tau^2=1$ とおくと、

$$\tau = \sqrt{\frac{m}{k}}$$

ポテンシャルについては、座標 x_i 、時間 t に対応する無次元量を次式とする。 σ は原子の直径に相当する。

$$x_i = \sigma x_i', \quad t = \tau t' \quad (5)$$

力 \mathbf{F}_{ij} は次式から求められる。

$$\mathbf{F}_{ij} = -\nabla_i \phi(r_{ij}) \quad (6)$$

力 \mathbf{F}_{ij} の x 成分は次式となる。

$$X_{ij} = -\frac{d\phi(r_{ij})}{dr_{ij}} \frac{x_i - x_j}{r_{ij}} \quad (7)$$

これらを用いて、レナード・ジョーンズポテンシャルと運動方程式より、時間の単位は次式により定められる。

$$\tau = \sqrt{\frac{m\sigma^2}{n\epsilon_0}} \quad (8)$$

したがって、単位の変更は以下のようになる。

$$\frac{r}{\sigma} \rightarrow r' \quad \sqrt{\frac{n\epsilon_0}{m\sigma^2}} t = \sqrt{\frac{48\epsilon}{m\sigma^2}} t \rightarrow t' \quad \frac{\phi}{\epsilon_0} \rightarrow \phi'$$

2.4 周期境界条件

分子動力学シミュレーションでは周期境界条件を用いて計算されるのが一般的であり、本研究でも同様に、計算できる原子数に限りがあるため周期境界条件を用いた。 Fig.3 にその参考図を示す。 仮想的に 1 番目の原子と N 番目の原子も線形バネでつながれているものとして、1 番目の原子は左から N 番目の原子の力を受け、N 番目の原子は右から 1 番目に原子の力を受けているものとし計算する。 本シミュレーションでは上下の固体が非整合接触となりすべり運動を行うために、原子間隔とポテンシャルの山の間隔の比が無理数になるように設定した。 実際の数値としては、線形バネの間隔 $\ell = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ 、ポテンシャルの山の間隔 $L = 1$ とした。 このような周期境界条件を考慮した場合、各原子に作用する働く力は次式で表される。

$$F_{ix} = \begin{cases} (x_2 - 2x_1 + x_N - N\ell) + f \cos(2\pi x_1) & (i = 1) \\ (x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1}) + f \cos(2\pi x_i) & (1 < i < N) \\ (x_1 + N\ell - 2x_N + x_{N-1}) + f \cos(2\pi x_N) & (i = N) \end{cases} \quad (9)$$

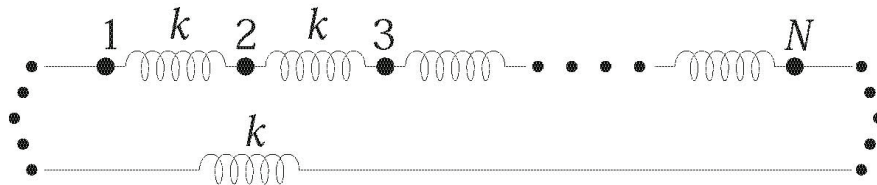


図 3 Periodic Boundary Condition

3. 分子動力学によるすべり運動シミュレーション

3.1 摩擦シミュレーションの手順 すべり摩擦運動のシミュレーションの実施手順を以下に記す。

1. 正規乱数を用いて、等間隔に配置した全原子にマクスウェル・ボルツマンの速度分布を与える。全原子の振動速度をゆっくりと減少させ、言い換えれば固体の温度を徐々に下げ平衡化処理(焼きなまし)を実施する。この操作を、固体温度が絶対零度に達するまで継続し、固体全体の原子間相互作用エネルギーが最小となる原子の平衡位置を決定する。
2. 上記の平衡化処理で求めた原子配列を安定な初期配列とし、次に、固体間相互作用下で上の固体を所定の初速度ですべらせ、すべり運動下の全構成原子の運動の軌跡を計算する。Table 1 は計算条件を示す。運動方程式の数値計算には速度ベルレ法を用いた。

Table 1 Molecule dynamics simulation parameters

構成原子数 N	100
時間ステップ Δt	0.001
くり返し数	2×10^7
計算時間 ($= \Delta t \times$ くり返し数)	20000
初速度 v_0	0.001~1.000
摩擦ポテンシャル振幅 f	0.001~0.140

3.2 平衡化処理

等間隔に配置した各原子に正規乱数を用いて高温でのマクスウェル・ボルツマン分布に従うように速度を与える。この速度とは、固体内の格子振動における各原子の速度を意味する。統計熱力学によると、ある温度における各原子の温度分布はマクスウェル・ボルツマン分布となる。高温状態の固体の各原子は平衡点周りに格子振動している。この状態から、各原子の速度を徐々に減少させて固体の温度を低下し、最終的に絶対零度に達する。そのときの原子配列が安定した初期配置と決定される。このようにして固体の原子間相互作用エネルギーが最小となる安定な原子の初期配置が決定される。マクスウェル・ボルツマンの速度分布を求めるために乱数の生成方法を述べる。一様乱数の生成には、乗算合同法を用いる。0 から M までの値をとる一様乱数列 R_i を漸化式

$$\begin{aligned} R_i &= \text{mod}(aR_{i-1}, M) \\ &= (aR_{i-1} \text{を } M \text{ で割った余り}) \end{aligned} \quad (10)$$

を用いて発生させる。ここで、定数 a と M は互いに素の値を用いる。 R_0 は乱数の初期値である。一様乱数から正規乱数を生成するには、 -1 から 1 までの値をとる 2 個の一様乱数から正規乱数を生成する Box-Muller 法を用いる。ここで、

$$u_i = \frac{2R_i}{M} - 1 \quad (11)$$

を計算し、一様乱数 R_i を -1 から 1 までの一様乱数に変換する。そして Box-Muller 法により、 $2n$ 個の一様乱数 R_i から n 個の乱数 S_i を生成する。

$$S_i = \sqrt{-2\log u_{2i-1}} \cos(2\pi u_{2i}) \quad (12)$$

を計算すると、 S_i は平均値 0、分散 1 の正規乱数となる。この正規乱数を用いて、設定温度において原子の速度分布がマクスウェル・ボルツマン分布となるように、各原子の速度 v_i を

$$v_i = \sqrt{\frac{k_B T}{m}} S_i \quad (13)$$

と設定する。ここで、 k_B はボルツマン定数、 T は固体の絶対温度を表す。今回のシミュレーションでは、 $k_B T = 10$ となるように温度を与えた。固体の構成原子の速度分布をマクスウェル・ボルツマン分布となるように固体を高温状態に設定すると、原子は平衡点の周りで熱振動をする。この高温状態から、徐々に固体の温度を低下し、絶対零度まで冷却する。このような平衡化処理によって固体の原子間相互作用エネルギーが最小となるような安定な原子配列が決定される。

3.3 すべり運動

すべり運動では、全固体の重心に一樣な速度を与えるために、時間ステップごとの全原子の重心速度の時間変化を算出する。ここで、固体の縦波の音速 v は、 $v = \sqrt{E/\rho} = \sqrt{k/ma}$ と表されるので速度の単位となる。固体の音速は $v \sim 5000$ m/s 程度である。したがって、固体が速度 0.1 で 10^5 時間等速ですべる場合、すべり速度は 500 m/s, すべり距離は $5 \mu\text{m}$ ($=0.1 \times 5000 [\text{m/s}] \times 10^5 \times 0.1 \text{ ps}$) 程度となる。時間ステップごとの全原子の速度算出に速度ベルレ法を用いた。分子動力学計算を行うにあたって、各原子の位置と速度の経時変化を求める数値計算法について述べる。各原子の運動方程式は、

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (14)$$

$$\left(\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i), \quad \mathbf{F}_i = (F_{xi}, F_{yi}, F_{zi}) \right)$$

で表され、 \mathbf{F}_i は (6) 式ですでに示した。速度ベルレ法は、テイラー展開による多項式近似を利用した数値積分法で、(14) 式から直接原子の位置と速度の時間発展を求める差分式を作る。まず、現在の時刻 t での原子 i の位置を $\mathbf{r}_i(t)$, 速度を $\mathbf{v}_{0i}(t)$ とし、 Δt 秒後の位置 $\mathbf{r}_i(t + \Delta t)$ と Δt 秒前の位置 $\mathbf{r}_i(t - \Delta t)$ を、時刻 $t = t$ のまわりでテイラー展開する。

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{r}_i'(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + O(\Delta t^3) \quad (15)$$

$$\mathbf{r}_i(t - \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) - \Delta t \mathbf{r}_i'(t) + \frac{\Delta t^2}{2} \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + O(\Delta t^3) \quad (16)$$

この両辺の和と差を作ると、

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) + \mathbf{r}_i(t - \Delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) + \Delta t^2 \ddot{\mathbf{r}}_i(t) + O(\Delta t^4) \quad (17)$$

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t) = 2\Delta t \mathbf{r}_i'(t) + O(\Delta t^3) \quad (18)$$

を得る。この両式と、(14) 式、また $d\mathbf{r}_i/dt = \mathbf{v}_i$ を利用すると、時刻 $t + \Delta t$ の座標と時刻 t での速度が

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{m} \mathbf{F}_i(t) \quad (19)$$

$$\mathbf{v}_i(t) = \frac{\mathbf{r}_i(t + \Delta t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (20)$$

で与えられる。ここまではベルレ法による差分式である。この方法では、時刻 $t + \Delta t$ での位置を求めるには 2 つの時刻 t と $t - \Delta t$ での位置が必要となり、時間発展させる際に一番最初のステップだけは、(15) 式で $t = 0$ とおいた式から $\mathbf{r}_i(t + \Delta t)$ を求めなければならない。また、(19), (20) 式の差分式では、位置と速度の時刻が Δt ずれている。これらの難点を改良したのが速度ベルレ法である。

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2m} \mathbf{F}_i(t) \quad (21)$$

$$\mathbf{v}_{0i}(t + \Delta t) = \mathbf{v}_i(t) + \frac{\Delta t}{2m} \left\{ \mathbf{F}_i(t + \Delta t) + \mathbf{F}_i(t) \right\} \quad (22)$$

で与えられる。これが速度ベルレ法の差分式である。これらの手順によって、すべり運動シミュレーションを行った。

4. 固体重心の運動形態

超潤滑状態の場合、固体は一定速度で並進運動を行う。対して摩擦力が発生すると抵抗となり固体重心の速度が低下し重心の並進運動が停止する。超潤滑が現れるか否かは、固体のすべり速度と上下の摩擦ポテンシャル振幅によって決まるため、この 2 つのパラメータの様々な組み合わせに対して固体のすべり運動のシミュレーションを行い、各時刻における固体重心の位置と速度、摩擦力、エネルギーを計算した。例として、摩擦ポテンシャル振幅 $f = 0.005$ における固体の重心速度の時間変化を Fig.4 に示す。摩擦ポテンシャル振幅 f が一定 (0.005) のもとで初速度 v_0 を変化させた。 $v_0 = 0.367$ においては計算時間中常に重心速度が一定値を保っており超潤滑状態が認められた。一方、 $v_0 = 0.366$ 以下においては重心速度はすべり開始後、ある一定時間、超潤滑状態となるが、ある時刻において突然、超潤滑がカタストロフィックに破綻する特異的なエネルギー散逸が生ずる。本報告では特に、超潤滑状態が最も長く観測された $v_0 = 0.366$, $f=0.005$ の超潤滑-摩擦遷移現象に焦点を当て発生機構解明を試みることにした。以降、摩擦遷移現象を F_β と呼び、FFT 解析, 位相空間での解析等を行ったので順に報告する。

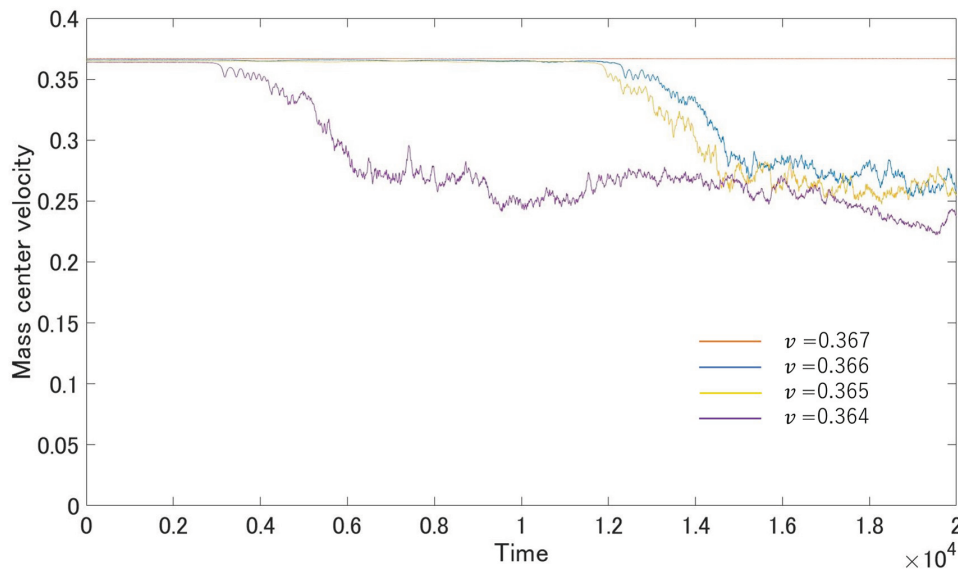


図 4 Changes in the mass center velocity for friction regime and superlubricity regime.

5. 原子振動の FFT 解析

高速フーリエ変換 (Fast Fourier Transform) を用いて, 超潤滑から摩擦における原子運動の信号解析を行った. 信号波形は一般に三角関数の和で表現され, FFT によって代表的な周波数成分を特定することが出来る. 固体の重心に対する原子の相対速度の経時変化の FFT 解析を実施した. 計算条件は原子数 $N = 100$, サンプル周期 $\tau = 0.01$, サンプル点数 $n = 2^{20}$ とし, 時間 $1 \sim 10485.76$ までの時系列データを用いる.

5.1 超潤滑状態

Fig.5 は超潤滑領域 ($v_0 = 0.100, f = 0.005$) で FFT 解析を行った結果である. メインピーク f_1 が 106 の位置に振幅を確認でき, メインピークと高調波スペクトルが観測される. このことから超潤滑状態は調和振動の描像が確認された. メインピークから基本周波数を算出すると, サンプル周期 T は $T = N \times \tau = 10485.76$ であり, サンプル周波数 $\Delta f = 1/T = 9.53674 \times 10^{-5}$ となる. メインピーク位置 106 を参照すると, 基本周波数 f_1 は $f = 106 \times 9.53674 \times 10^{-5} = 1.0108584 \times 10^{-2}$ となる. FFT に

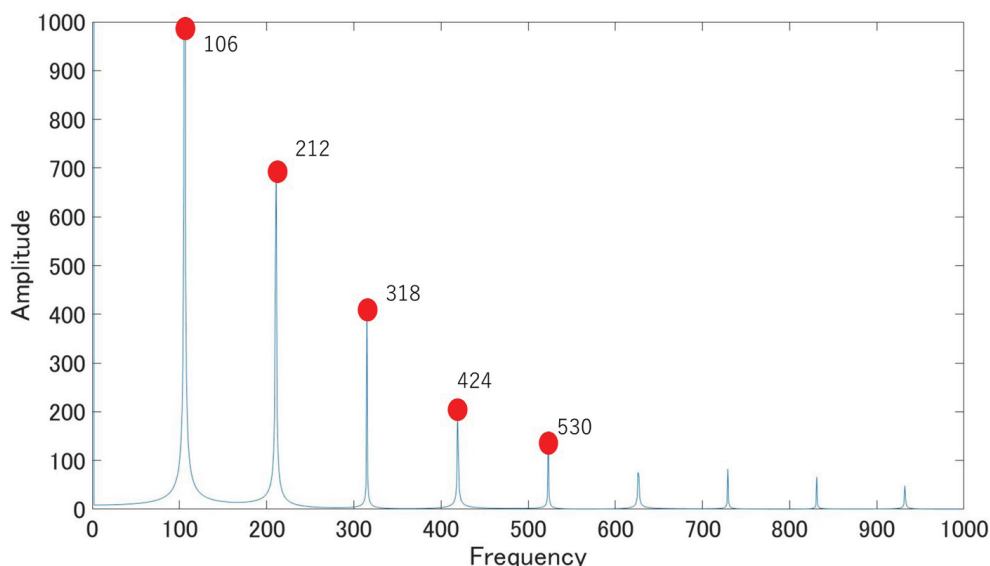


図 5 FFT for superlubricity regime

より算出された基本周波数を, 固有値解析解と比較する. 周期境界条件を有する 1 次元鎖格子振動は調和振動である. 固有値は,

$$\lambda = 2 - (\alpha + \beta) = 2 - 2 \cos \frac{2p\pi}{N} = 4 \sin^2 \frac{p\pi}{N} \quad (23)$$

$$\omega^2 = \frac{k\lambda}{m} \quad (24)$$

より, 基準振動の角振動数は

$$\omega_p^2 = \frac{4k}{m} \sin^2 \frac{p\pi}{N} (p = 0, 1, 2, \dots, N-1) \quad (25)$$

$\omega = 2\pi f$ より $f(\text{phonon}) = 0.99989 \times 10^{-2}$ となることから超潤滑の基本周波数 $f = 1.0108584 \times 10^{-2}$ と比較しても近い値を示すことより, 超潤滑の振動形態は調和振動の描像で理解される.

5.2 摩擦遷移状態

Fig.6 は Fig.4 の摩擦遷移現象 $F_\beta(v_0 = 0.366, f = 0.005)$ で FFT 解析を行った結果である. 基本周波数と高調波以外に乱雑なスペクトルが発生してしまうことが確認された. このことから摩擦発生によって振動がカオスのようなランダム現象に遷移していることがわかる. ここからは F_β での超潤滑破綻の要因解明を目的として, Fig.6 に対して時間領域を限定して FFT 解析を行った. 具体的なデータ点数は $N = 2^{19}$ とした. Fig.7 に示す. Fig.7 を観察すると, Fig.5 で観測された調和振動の基本波とその高調波が観測され, これらに加えて調和振動以外の非線形振動が観測された. 例えば, 挿入図に示したように $f=258$ の主ピークとこれを中心とした対象位置にサテライトピークがそれぞれ $f=250$ と $f=266$ の振動数に現れることが観測された. この調和振動には現れない振動ピークは非線形振動の一つである和差調波振動に類似していると考えられる. [4, 5] 超潤滑では見られない非線形振動が観測されたことで重心速度は超潤滑状態を表しているにもかかわらず, 内部振動は非線形振動に遷移していることが明らかとなった. このことから超潤滑が破綻し超潤滑-摩擦遷移現象が生ずる原因として, このような非線形振動が摩擦エネルギーの散逸に関与する新しい機構である可能性を指摘することができた.

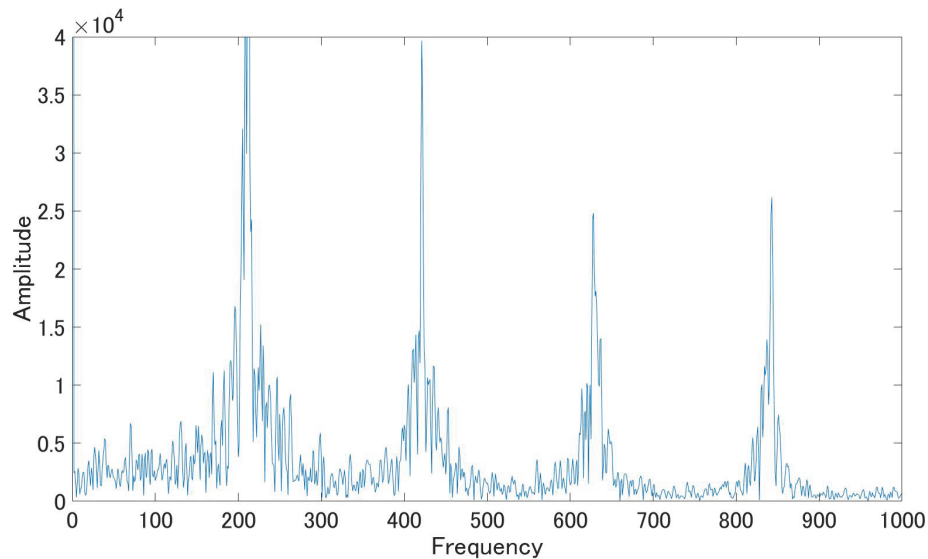


図 6 FFT for friction regime

Fig.8 は Fig.4 の (Time= $0.5 \times 10^4 \sim 0.52 \times 10^4$) までの拡大図を示す. この振動波形は和差調波振動の特徴的な波形に類似していることから, 上述したように超潤滑が破綻して超潤滑-摩擦遷移現象が生ずるかなり前に超潤滑の調和振動の描像から遠ざかって非線形振動が現れることが明らかとなった. 言い換えれば, 重心速度が超潤滑の描像であっても非線形振動が確認されれば, カタストロフィックに速度減少が発生する可能性が高い. 以上示したように, 摩擦モデルは線形系であるにも関わらず, 非線形振動の発生によって摩擦エネルギーの散逸が生ずることを明らかにした.

6. 位相空間

超潤滑領域と摩擦領域を区分する手法として, 原子の相対位置, 相対速度を算出し位相空間を用いて周期性を確認した.

6.1 超潤滑状態

Fig.9 は超潤滑状態 ($v_0 = 0.100, f = 0.005$) における位相空間の広がりを示している. 超潤滑は内部振動が小さくポテンシャルエネルギーが限りなく 0 に近いことから相対位置, 相対速度が周期的な運動をするため位相空間が大きな広がりをもたない. このことから超潤滑が調和振動の描像であることが言える.

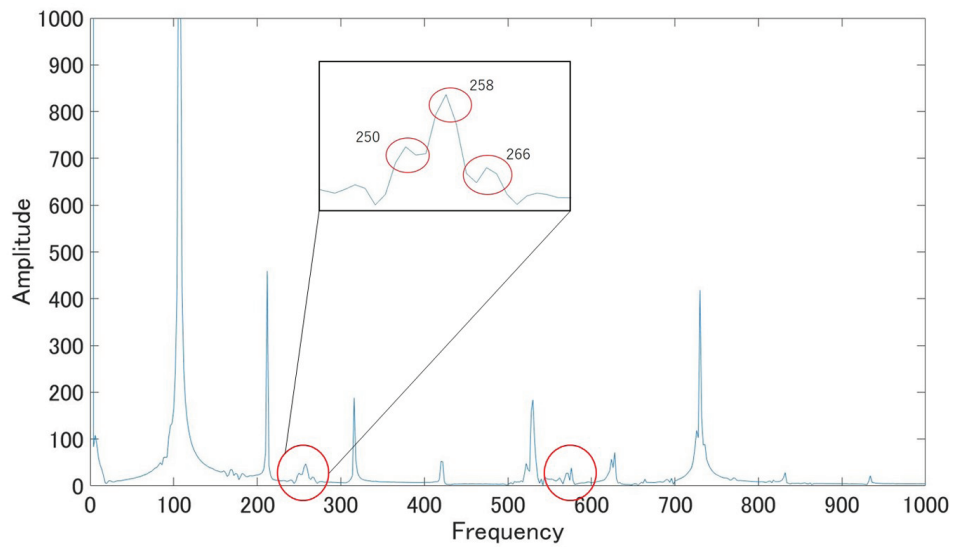


图 7 FFT for superlubricity - friction transition($N = 2^{19}$)

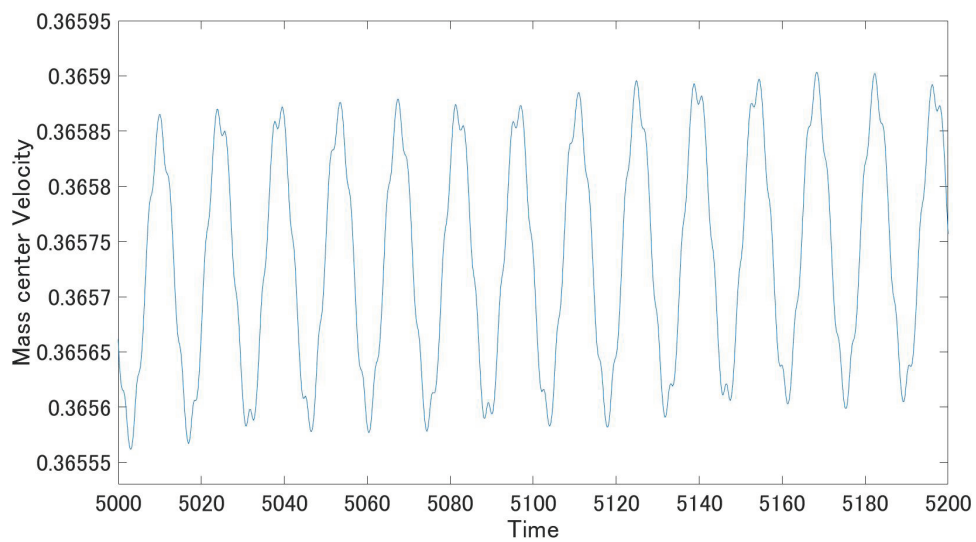


图 8 Changes in mass center velocity

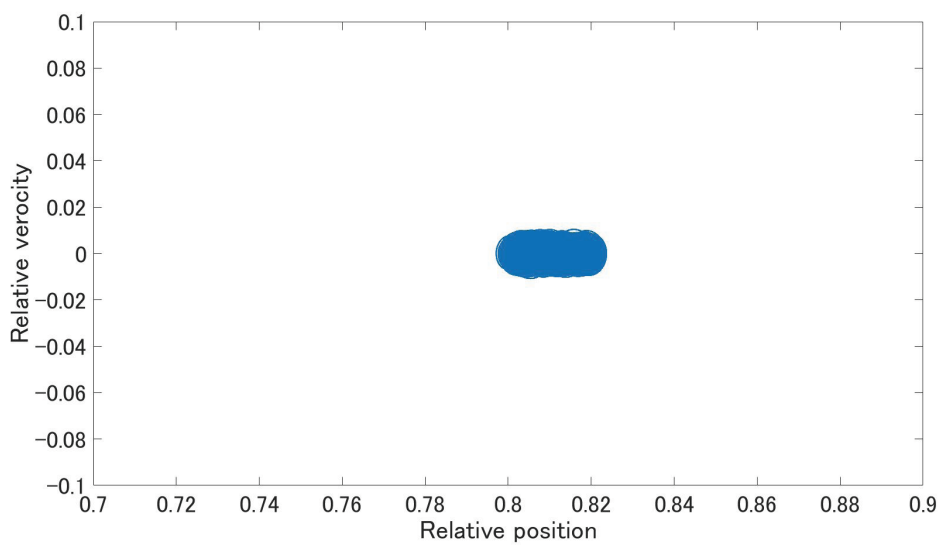


图 9 Phase space for superlubricity regime($v_0 = 0.100, f = 0.005$)

6.2 摩擦遷移状態 F_β

一方, Fig.10 は $F_\beta(v=0.366, f=0.005)$ での速度急落前に限定して位相空間内で広がりを示した. データ点数は Fig.8 の区間である. この限定区間では重心速度は超潤滑と同様な並進運動をしている. しかし Fig.10 を観察すると速度急落前にも関わらず, 位相空間に広がりが発生していることが顕著にわかる. これは速度急落が生ずるかなり以前に超潤滑は破綻しており非線形振動に遷移していることが言える. この事からもカタストロフィックに速度減少を引き起こした要因は非線形振動にあると考えられる. 言い換えれば, 重心速度が超潤滑に似た並進運動の描像であっても, FFT, 位相空間内で非線形振動的挙動が確認されれば, カタストロフィックに摩擦に遷移する可能性を持つといえる. これは非線形振動, 特に和差調波振動がカオス振動に遷移しやすいことから同様に考察される.

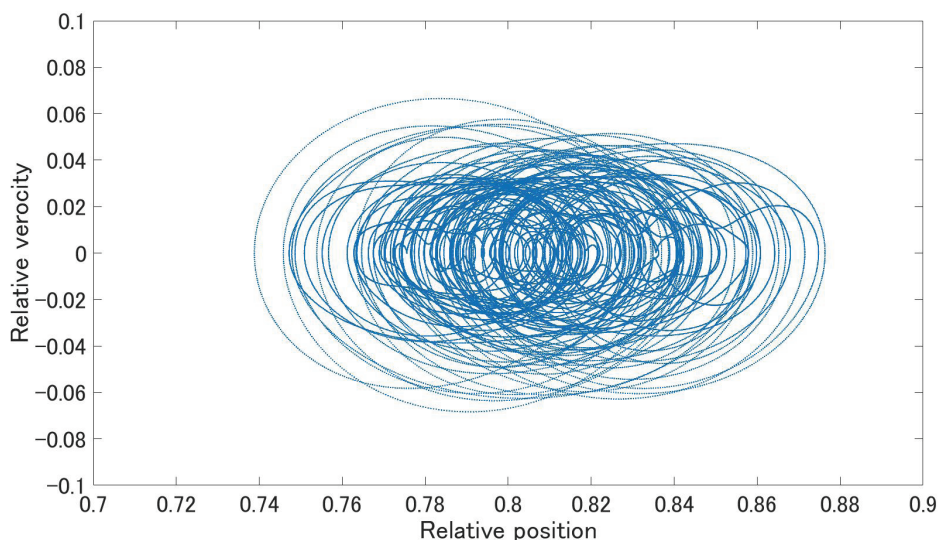


図 10 Phase space for friction regime($v_0 = 0.366, f = 0.005$)

7. 三次元位相空間

超潤滑領域と摩擦領域の原子運動状態を記述するため, 超潤滑の FFT において確認された基本周期 T を基準として, T の時間間隔で並べた原子の位置座標を 3 次元プロットした. Fig.11 に超潤滑状態 ($v_0 = 0.100, f = 0.005$), Fig.12 に $F_\beta(v = 0.366, f = 0.005)$, Fig.13 に摩擦状態 ($v = 0.300, f = 0.005$) を示す. Fig.11 は重心速度は低下しないことから, $X(t), X(t+T), X(t+2T)$ はほぼ同値であるため直線的な変位を示し周期性が強いことを表している. Fig.12 は, 速度減少に比例して運動エネルギーがポテンシャルエネルギーに散逸し振幅が大きくなるため, $X(t), X(t+T), X(t+2T)$ の値に違いが大きく現れ, 周期性がなくなりカオスに遷移しつつあることが言える. Fig.13 は速度減少が大きくカオスに近い様相を示す.

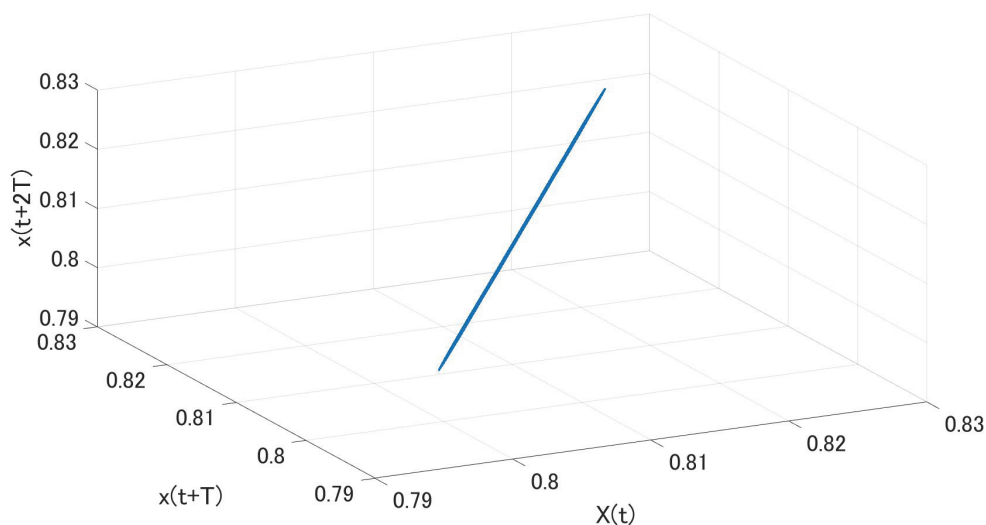


図 11 Phase space for superlubricity regime($v_0 = 0.100, f = 0.005$)

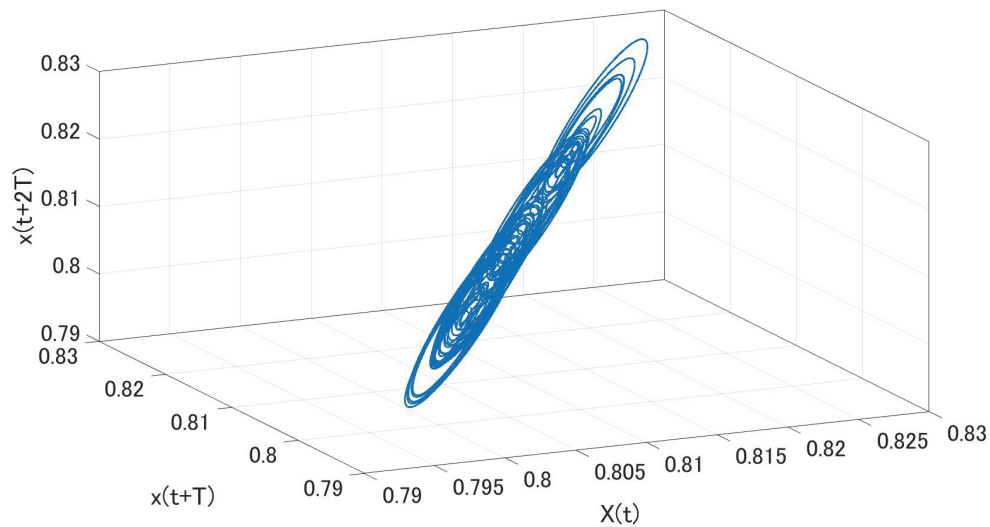


図 12 Phase space for transition regime($v_0 = 0.366, f = 0.005$)

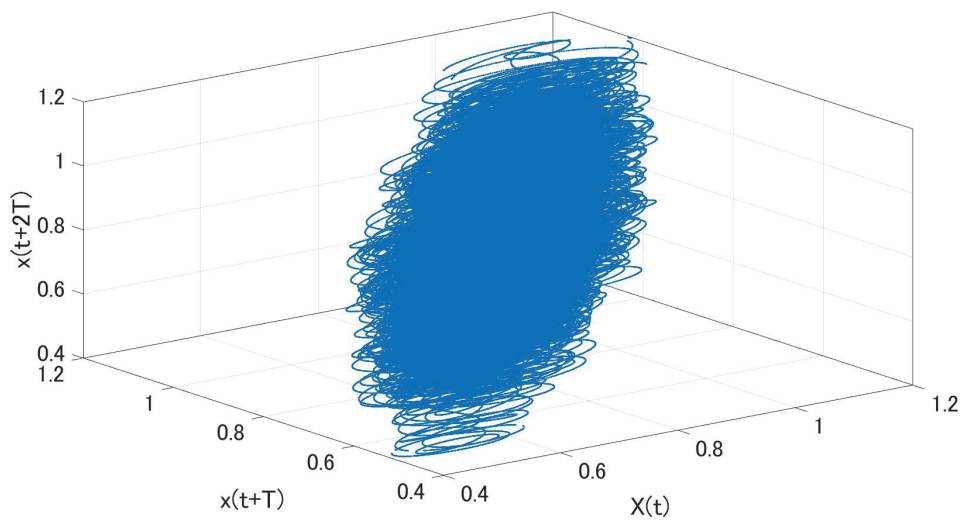


図 13 Phase space for friction regime($v_0 = 0.300, f = 0.005$)

7.1 ポアンカレ写像

3次元位相空間における原子の軌道を可視化するために、軌道がZ軸断面を横切るときの点を取り出し、軌道の軌跡を平面に図示するポアンカレ写像を用いて周期性の確認を行った。Fig.11のポアンカレ写像をFig.14に、Fig.12のポアンカレ写像をFig.15に、Fig.13のポアンカレ写像をFig.16に示す。Fig.13は円軌道が毎周期ごとに同じ点を通過することが確認でき、周期性が強いことを示している。Fig.14は規則性を失い周期性が破綻しつつある。しかしランダムに散逸しているわけではなく、直線状に軌道が通過しているため弱いカオスであると考えられ摩擦に遷移しつつあることが現れている。Fig.16は規則性が破綻しておりカオス振動に遷移していることを示す。

7.2 F_β のポアンカレ写像

F_β において計算開始直後の超潤滑的挙動からカオスである摩擦に遷移する過程をポアンカレ写像によって時刻曆ごとに確認した。計算開始直後から摩擦に遷移するまでの重心軌道のポアンカレ写像を以下に示す。Fig.17は計算開始直後であり、この時点ですでに2周期に分割されている。以降Fig.18は計算時間1-2000、Fig.19は1-5000を表している。軌道を表す点が2点、4点、8点と倍々に増加しているのが確認された。これは周期倍分岐現象と呼ばれる、周期振動がカオス振動に遷移する予兆である。[6] すなわち、計算開始直後は周期振動であった F_β は、時間経過に比例して周期倍分岐が現れたことで、後々カオス、すなわち摩擦に遷移する可能性を持つことを明らかにした。

8. 結論

1次元 dynamic Frenkel-Kontorova モデルのすべり運動を調べ、初期すべり速度とすべり面の固体間相

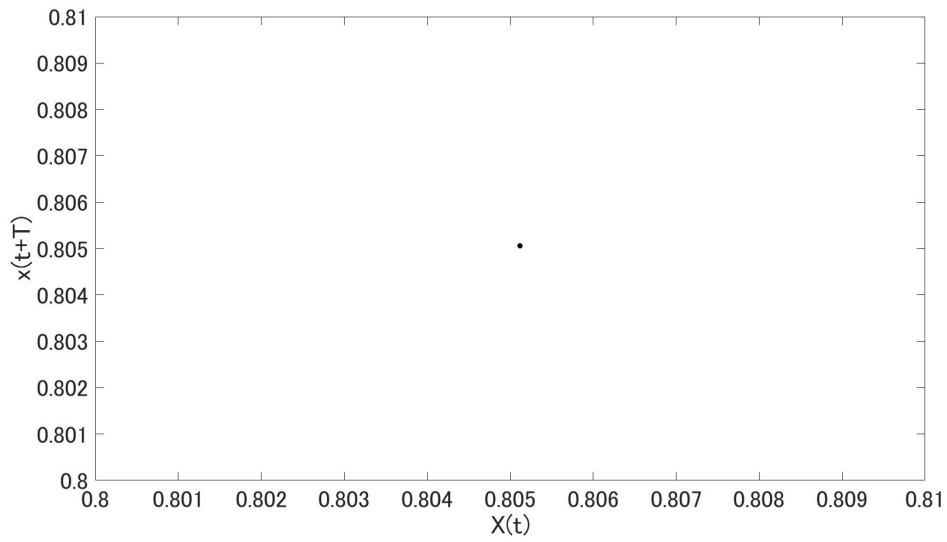


図 14 Poincaremap for superlubricity regime($v_0 = 0.100, f = 0.005$)

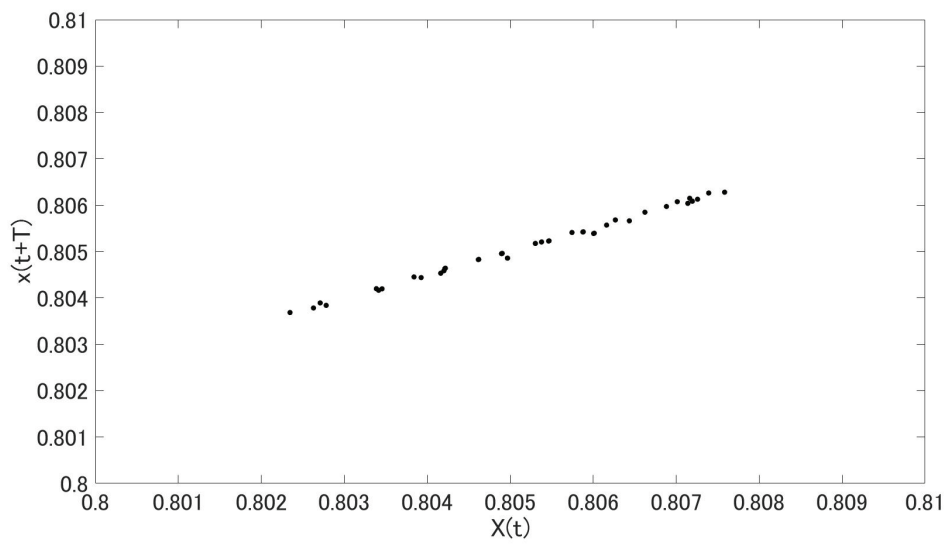


図 15 Poincaremap for transition regime($v_0 = 0.366, f = 0.005$)

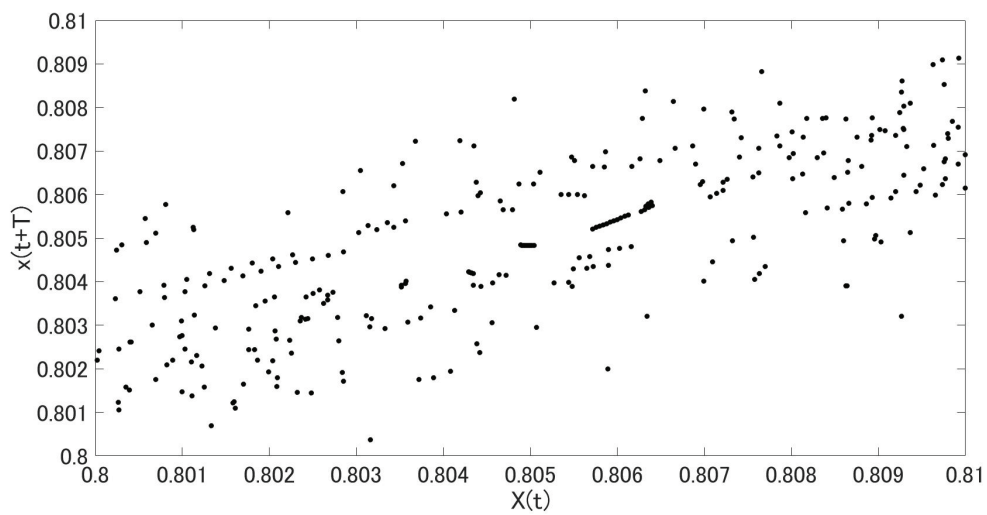


図 16 Poincaremap for friction regime($v_0 = 0.300, f = 0.005$)

相互作用の 2 つのパラメータに依存して 3 つの特徴的なすべり運動特性として現れることを見出した。これらのすべり特性は、第一に摩擦が消失する超潤滑 (S), 第二にすべり運動開始後重心速度が速やかに停止す

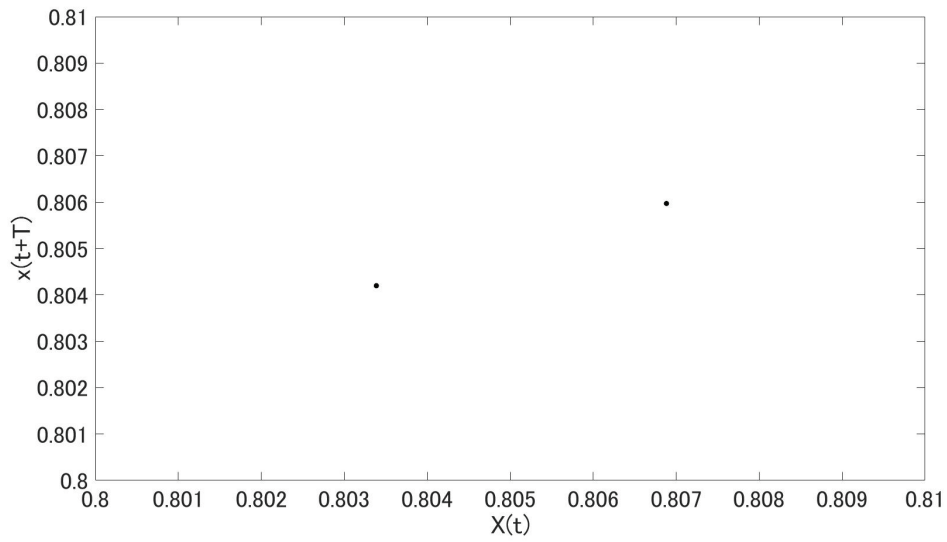


図 17 Poincaremap for transition regime($v_0 = 0.366, f = 0.005$)

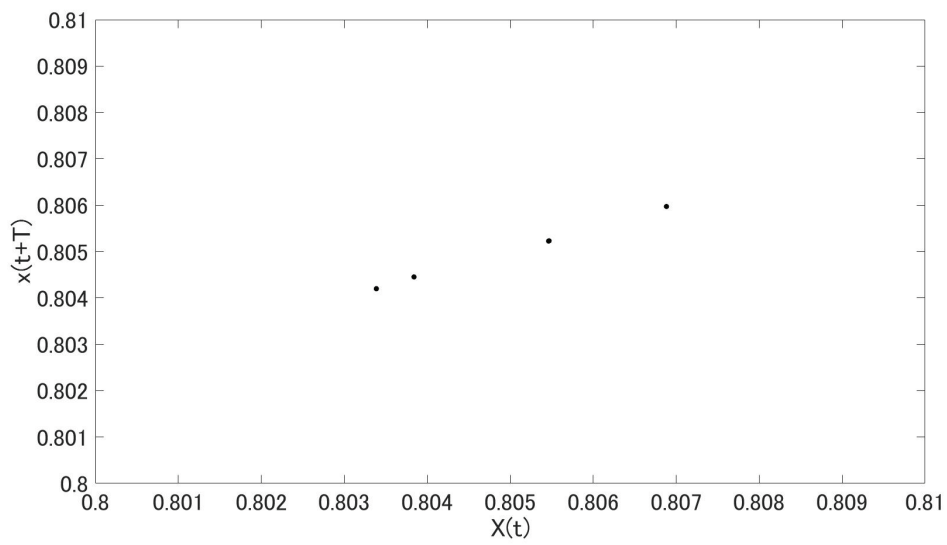


図 18 Poincaremap for transition regime($v_0 = 0.366, f = 0.005$)

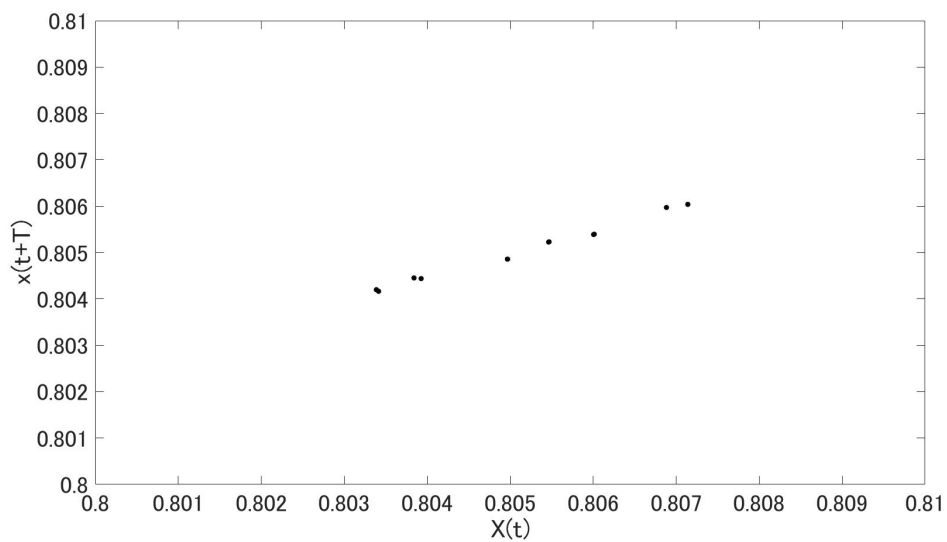


図 19 Poincaremap for transition regime($v_0 = 0.366, f = 0.005$)

る α 型摩擦 (F_α), 第三にすべり運動開始後いったん超潤滑を示すが, 予測不能な時間経過後, 重心のすべ

り速度がカタストロフィックに急落する β 型摩擦 (F_β) として現れる, これらのすべり運動特性を上記 2 つのパラメータ空間においてそれぞれの境界を明示して記述した. 本研究によって得られた結論を以下に記す.

- (1) 原子振動の FFT 解析から, 超潤滑状態での基本振動数は周期境界条件下の 1 次元鎖の格子振動の基本波の振動数と一致し, 超潤滑は調和振動しながら摩擦ゼロで等速運動する描像で理解できることを示した.
- (2) 様々なパラメータ条件の超潤滑領域 (S) では重心速度一定となり時間平均として共通なすべり特性を示すが, FFT 分析によると原子間は線形バネで連結されているにもかかわらず非線形振動として, 分数調波振動, 和差調波振動, 概周期振動が現れることを見出した.
- (3) 上記 1. で示した β 型摩擦 (F_β) 領域では, すべり運動開始後ある時間超潤滑状態を示し, この期間に 1 周期の運動が 2 周期, 4 周期, カオス振動に向かうことを予見した周期倍分岐を示すことをポアンカレ断面の解析から解明した.
- (4) β 型摩擦 (F_β) 領域では, 周期倍分岐を示したのち, 予測不能なある時刻において超潤滑がカタストロフィックに破綻し, その後「超潤滑-摩擦遷移現象」を示し, その後ブラウン運動状の不規則振動を示すことを明らかにした.
- (5) β 型摩擦 (F_β) は初期値敏感性を示すことを明らかにした.

以上の結論から, β 型摩擦 (F_β) では超潤滑における調和振動から周期倍分岐を経てカオス振動にいたるシナリオにより特異的な超潤滑-摩擦遷移現象の現る機構を提案した.

参考文献

- [1] M. Hirano, Friction at the Atomic Level : Atomistic Approaches in Tribology, Wiley - VCH Verlag GmbH & Co.KGaA, (2017).
- [2] 石田 幸男, 非線形往復振動系における 1/2 次分数調波・和差調波振動 四乗の非線形項による共振曲線の変化と不安定振動の発生, 日本機械学会論文集 C 編 53, 486, 269-277 (1987). 日本機械学会論文集 (1987).
- [3] 伊東 敬祐, カオスって何だろう, ダイヤモンド社 (1993).