法政大学学術機関リポジトリ
HOSEI UNIVERSITY REPOSITORY

PDF issue: 2025-07-16

分子動力学による熱雑音外乱下での超潤滑安定性解析

清水, 連太朗 / SHIMIZU, Rentaro

(出版者 / Publisher)
法政大学大学院理工学研究科
(雑誌名 / Journal or Publication Title)
法政大学大学院紀要. 理工学研究科編
(巻 / Volume)
65
(開始ページ / Start Page)
1
(終了ページ / End Page)
6
(発行年 / Year)
2024-03-24
(URL)
https://doi.org/10.15002/00030632

分子動力学による熱雑音外乱下での超潤滑安定性解析

MOLECULAR DYNAMICS ANALYSIS OF SUPERLUBRICATION STABILITY
IN THERMAL NOISE DISTURBANCE

清水連太朗
Rentaro SHIMIZU
指導教員　塚本英明

法政大学大学院理工学研究科機械工学専攻修士課程

Friction phenomena were studied at the atomic level using molecular dynamics on the basis of 1D Frenkel-Kontrova model. Simulation on superlubricity demonstrated that superlubricity and friction regimes appear in the parameter spaces of initial mass center velocity and friction potential amplitude such as friction phase diagram. It was seen that superlubricity occurs in case that atomic spacing ratios were irrational numbers. The differences were examined in stability of superlubricity under thermal noise disturbance between the golden number model and the continued fraction model satisfying periodic boundary conditions. It was found that the golden number model was more sensitive to thermal noise disturbances than the continued fraction model.
Key Words : *Superlubricity, Atomic Friction, Frenkel-Kontorova model*

1.　はじめに

SDG’sの目標達成に向けて, 摩擦を制御することは極めて重要である. しかしながら摩擦特性の研究においては、主に実験的手法が支配的であり, 解析的手法の確立が急務とされている. 超潤滑は限られた系で観測されるが, 地球規模の産業振興と環境保全の両立にとって極めて重要な役割を果たすことは明確である. 原子レベルでの超潤滑現象の発見は, 理論と実験の双方から解析が進行中であり, 超潤滑現象に関する理解が進み, その注目度が高まりつつある. 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の理解を深めるべく, 解析的研究手法の提案に取り組んできた．摩擦理論構築を目的として，以下で述べるFrenkel-Kontrovaモデル を用いて，計算機による実験で様々な条件で解析を行い原子論モデルにおける摩擦特性を滑り速度と固体間相互作用の2つのパラメータ空間で摩擦領域と超潤滑領域の2種類の運動状態を記述する摩擦相図 “(Friction Phase Diagram of golden ratio model:Fig.1, Friction Phase Diagram of Continued Fraction:Fig.2)を作成してきた．摩擦相図に示された摩擦領域と超潤滑領域の検討及び考察から，超潤滑が発現するかどうかは初速度と固体間相互作用の2つのパラメータと原子間隔に強く依存していることが確かめられた．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.

これまでの研究では, パラメータを変化させてFig.1及びFig.2に示すように原子鎖のすべり速度，発生する力を観察し超潤滑発現の有無を判定してきた. 物体の運動を解析する上で着目する物体だけでなく環境を考慮することはとても重要である.

原子レベルでの運動を検討する場合, 気体分子による外乱の影響は無視できない大きさである. そのため本研究では次の事項を検討することにより外乱を考慮した運動の解析を行うことを目的として掲げる.

1. 超潤滑状態，摩擦状態の原子が熱雑音外乱の影響を受けた場合の運動を解析する.
2. 原子モデルの違いにおける熱雑音付加状態の安定性の評価を行う.

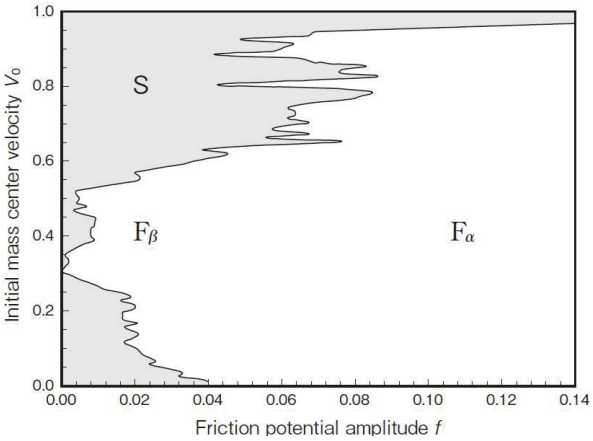

Fig.1 Friction Phase Diagram of golden ratio model

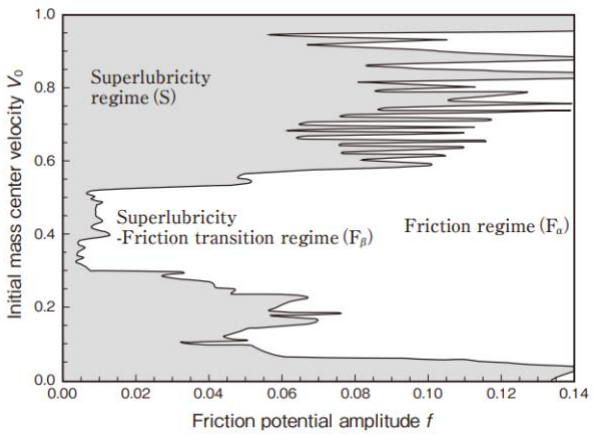

Fig.2 Friction Phase Diagram of Continued Fraction model

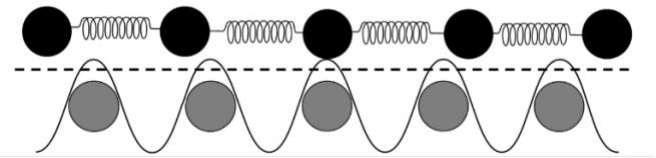

Fig. 3 Frenkel-Kontorova friction model

2. 摩擦の原子論モデル

2.1 原子モデルと超潤滑発現

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.3 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. この単純格子の原子の間隔は1として設定し, 解析を行う. 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原子間隔比が有理数, つまり連分数となる整合接触の場合, 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原子間 隔比が無理数, つまり黄金数と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. 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-Kontrova摩擦モデルと運動方程式

摩擦モデルに, 一次元Frenkel-Kontorovaモデルを用いる. Frenkel-Kontorovaモデル(以下FKモデル) は, 弾性定数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. Fig. 3に参考図を示す.

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の線形弾性力によって, 下の固体が上の固体に及ぼす固体間相互作用を振幅fの周期ポテンシャルによって表現する. 一次元FKモデルのハミルトニアンは次式で表される.

$$H = \sum_{i=1}^{N} \frac{{P_i}^2}{2} + \sum_{i=1}^{N} \{ \frac{k}{2} (x_{i+1} - x_i - l)^2 + \frac{f}{2\pi} \sin(2\pi x_i) \} \tag{1}$$

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 は弾性定数, l はバネの自然長（上の固体の格子定数), fは原子間相互作用の大きさを表す. 一次元FK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.

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

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弾性定数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.

$$x_i = l x_i', \quad t = \tau t' \tag{3}$$

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.

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

上式から$m\frac{k}{\tau^2}$が無次元量となり, これを $m\frac{k}{\tau^2} = 1$ とおくと,

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

ポテンシャルについては座標成分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.

$$x_i = \sigma x_i', \quad t = \tau t' \tag{5}$$

力 F_{ij} は次式から求められる.

$$F_{ij} = -\nabla_{ij}\emptyset(r_{ij}) \tag{6}$$

力F_{ij}のx成分は次式となる.

$$F_{ij} = -\frac{d\emptyset(r_{ij})}{dr_{ij}}\frac{x_i - x_j}{r_{ij}} \tag{7}$$

これらを用いて，Lennard-Jones potentialと運動方程式より, 時間の単位は次式により定められる.

$$\tau = \sqrt{\frac{m\sigma^2}{n\epsilon_0}} \tag{8}$$

したがって，単位の変更は以下のようになる.

$$\frac{r}{\sigma} \to r' \quad \sqrt{\frac{n\epsilon_0}{m\sigma^2}}t = \sqrt{\frac{48}{m\sigma^2}}t \to t' \quad \frac{\emptyset}{\epsilon_0} \to \emptyset'$$

2.4 周期境界条件と原子間隔比

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するため, 黄金数を利用した. パラメータの数値は線形バネの間隔比を $l = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ (黄金数), ポテンシャルの山の間隔を $l = 1$ とした. また, 原子モデルの違いにおける熱雑音付加状態の安定性の評価を行うために黄金数モデルに近く周期境界条件をみたしている連分数を用いた原子間隔比$l = \frac{13}{8}$の場合を比較した. 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.

$$F_{ix}\begin{cases}(x_2 - 2x_1 + x_N - Nl) + fcos(2\pi x_1) & (i == 1)\\ (x_{i+1} - 2x_i + x_{i+1}) + fcos(2\pi x_i) & (1 < i < N)\\ (x_1 + Nl - 2x_N + x_{N-1}) + fcos(2\pi x_N) & (i == N)\end{cases} \tag{9}$$

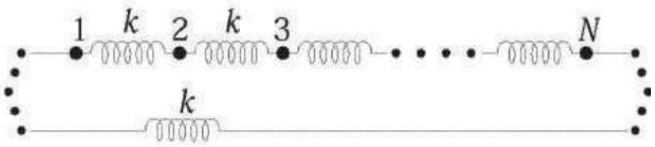

Fig 4. Periodic Boundary Condition

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徐々に減少(つまり固体の 温度を徐々に下げ平衡化処理) させた. この操作を, 固体温度が絶対零度に達するまで継続し, 固体全体の固体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.

Table1 Simulation parameter

原子モデル	黄金数モデル	連分数モデル
原子間隔比 1:l	$l = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$	$l = \frac{13}{8}$
構成原子数	144	
時間ステップΔt	0.001	
くり返し数	1.0×10^8	
計算時間 (=Δt×くり返し数)	20000	
固体間相互作用 f	0.005	

3.2 平衡化処理

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ックスウェル・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ックスウェル・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. マックスウェル・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

$$R_i = mod(aR_i - 1, M) \tag{10}$$

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,

$$u_i = 2\frac{R_i}{M} - 1 \tag{11}$$

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.

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

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ックスウェル・ボルツマン分布となるように, 各原子の速度v_iを

$$v_i = \sqrt{\frac{k_B T}{m}} S_i \tag{13}$$

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_BT=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ックスウェル・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.
すべり運動では, 全固体の重心に一様な速度を与えるために, 時間ステップ毎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vは~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5μm $(= 0.1 \times 5000\ [m/s] \times 10^5 \times 0.1\ ps)$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,

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = \frac{F_i}{m},\ i = 1,2,3,\cdots,N \tag{10}$$

$$(r_i = (x_i, y_i, z_i), F_i = (F_{xi}, F_{yi,}, F_{zi,}))$$

で表され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$\boldsymbol{r_i}(t)$, 速度を$\boldsymbol{v_{0i}}(t)$としΔt秒後の位置$\boldsymbol{r_i}(t + \Delta t)$と$\Delta t$秒前の位置$\boldsymbol{r_i}(t - \Delta t)$を, 時刻t=tのまわりでテイラー展開する.

$$\boldsymbol{r_i}(t + \Delta t) = \boldsymbol{r_i}(t) + \dot{\boldsymbol{r}}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2}\ddot{\boldsymbol{r}}_i(t) + O(\Delta t^3) \tag{15}$$

$$\boldsymbol{r_i}(t - \Delta t) = \boldsymbol{r_i}(t) - \dot{\boldsymbol{r}}_i(t) + \frac{\Delta t^2}{2}\ddot{\boldsymbol{r}}_i(t) + O(\Delta t^3) \tag{16}$$

この両辺の和と差を作ると,

$$\boldsymbol{r_i}(t + \Delta t) + \boldsymbol{r_i}(t - \Delta t) = 2\boldsymbol{r_i}(t) + \Delta t^2 \ddot{\boldsymbol{r}}_i(t) + O(\Delta t^4) \tag{17}$$

$$\boldsymbol{r_i}(t + \Delta t) - \boldsymbol{r_i}(t - \Delta t) = 2\Delta\, \dot{\boldsymbol{r}}_i(t) + \Delta t^2 \ddot{\boldsymbol{r}}_i(t) + + O(\Delta t^4) \tag{18}$$

を得る. この両式と(14) 式, また $dr_i/dt = v_i$ を利用すると, 時刻t+Δtの座標と時刻tでの速度が

$$\boldsymbol{r_i}(t + \Delta t) = 2\boldsymbol{r_i}(t) + \boldsymbol{r_i}(t - \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{m}\boldsymbol{F}_i(t) \tag{19}$$

$$v_i(t) = \frac{\boldsymbol{r_i}(t+\Delta t) - \boldsymbol{r_i}(t-\Delta t)}{2\Delta t} \tag{20}$$

で与えられる. 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最初のステップだけは, (15)式で$t = 0$とおいた式から$\boldsymbol{r_i}(t + \Delta t)$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.

$$\boldsymbol{r_i}(t + \Delta t) = \boldsymbol{r_i}(t) + \Delta t v_i(t)\frac{\Delta t^2}{2m}\boldsymbol{F}_i(t) \tag{21}$$

$$\boldsymbol{v_{0i}}(t + \Delta t) = \boldsymbol{v_i}(t) + \frac{\Delta t}{2m}\{F_i(t + \Delta t) + F_i(t)\} \tag{22}$$

で与えられる. 以上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. 熱雑音外乱

熱雑音外乱を考慮した運動を解析するためにFig. 5のように初速度v_0で運動している1次元FKモデルの原子に正規乱数を用いた速度v_1を各原子に与え運動の解析を行う. 気体分子が運動中の原子鎖に衝突することで運動に影響を及ぼし原子に速度変化を起こす. また, 熱雑音外乱を及ぼす気体分子の速度はマックスウェル・ボルツマン分布に従うため, この分布に基づく乱数を用いて計算を行う. 本研究では外乱の大きさに着目するため，衝突頻度は時間ステップと同じくΔt=0.001とし速度v_1の大きさに

対する依存性を検討する.

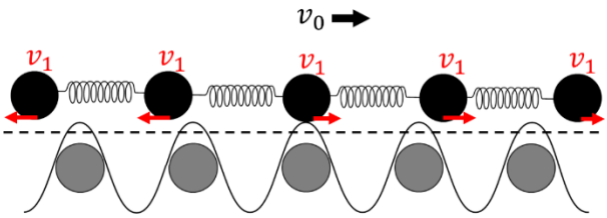

Fig. 5 Frenkel-Kontorova friction model
(Thermal noise disturbance addition)

外乱による影響下での超潤滑安定性を解析するために, Table 1の条件で初速度を変化させた場合の重心速度変化を調べた. 初速度v_0を0.1刻みで変化させながら計算時間に対する速度変化した中で最大値と最小値の速度差が初速度の0.1%以上となる時を不安定であるとし, 初速度による判別の閾値と判定した. この定性的評価を用いて黄金数モデルと連分数モデルの原子鎖の重心速度 $\boldsymbol{v_c}$の変化の移動平均を複数の初速度の場合で解析を行った結果を以下のFig.6及びFig.7に示す.

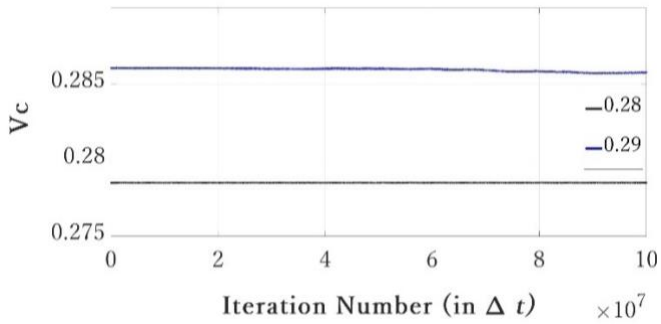

Fig. 6 Atomic center of gravity velocity change of golden ratio model

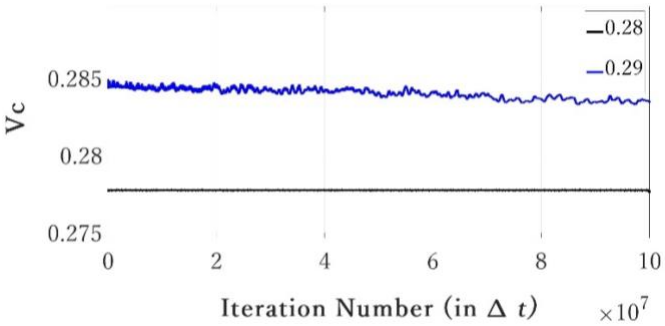

Fig. 7 Atomic center of gravity velocity change of continued fraction model

Fig.6及びFig.7から黄金数モデル連分数モデルともに$v_0 = 0.28$が安定判別の閾値となることが表される.

次にこの状態から熱雑音外乱を加え$v_0 = 0.28$の状態で運動が不安定となる大きさを調べた. 初速度v_cによる判別の閾値を決定した時と同様に, 計算時間に対する速度変化した中で最大値と最小値の速度差が初速度の0.1%以上となる時を不安定であると

し解析を行った. 熱雑音外乱v_1を1.0×10^{-10}の大きさから開始し,その後条件から外れるまでv_1を10倍するかたちで変化させた.不安定状態になったときの重心速度変化を次のFig.8及びFig.9に示す.

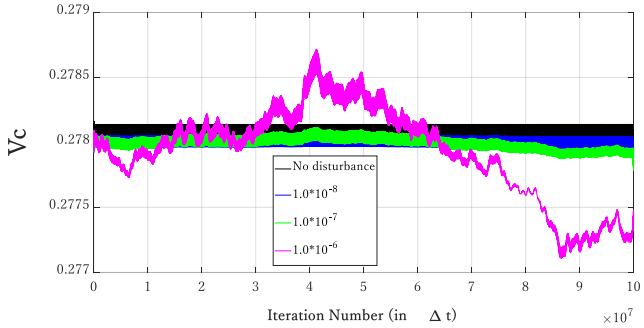

Fig. 8 Atomic center of gravity velocity change of continued fraction model under thermal noise disturbance

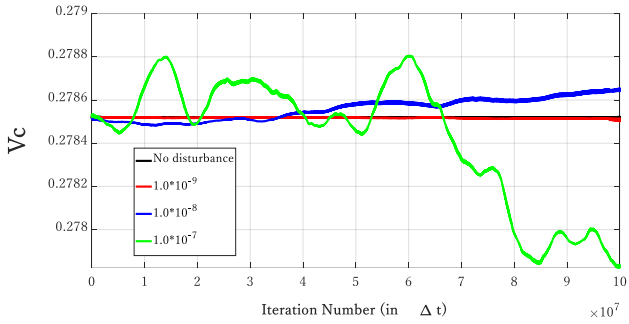

Fig. 9 Atomic center of gravity velocity change of golden ratio model under thermal noise disturbance

Fig. 8ではv_1が増大するにつれて外乱を加えていない時の速度を基準としてv_cが減少していることが分かる. また, $v_1 = 1.0 \times 10^{-7}$の場合では元の運動の時と比べ計算回数2.0×10^7~1.0×10^8の範囲で緩やかな増減が確認できる. Fig. 9も同様にv_1が小さいほど元の運動に近い速度変化をしているが$v_1 = 1.0 \times 10^{-8}$の場合では計算回数8.0×10^7~1.0×10^8にかけて外乱を加えていない状態に比べ速度が大きいことが確認できる. また, Fig. 8 及びFig. 9で比較した状態の力学的エネルギーの経時変化をFig.10及びFig. 11に示す.

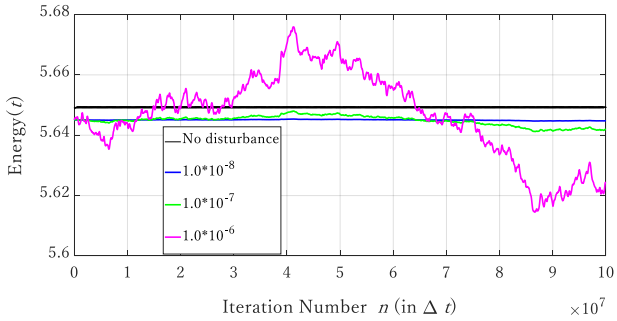

Fig. 10 Energy changes of continued fraction model

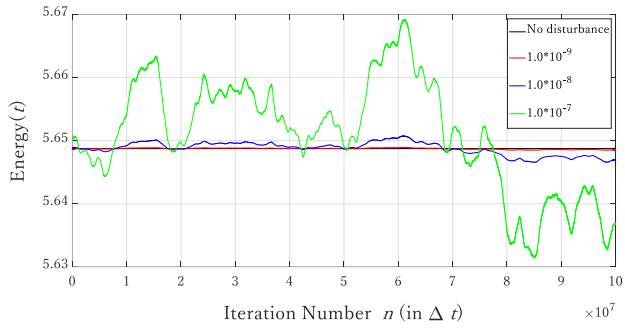

Fig. 11 Energy changes of golden ratio model

Fig. 10,Fig. 11から熱雑音外乱を加えていない状態を基準としたときの差を割合で考えた場合, エネルギー変化の差の方が小さいことが分かる．また, Fig. 11では計算回数$8.0 \times 10^7 \sim 1.0 \times 10^8$の範囲において$v_1 = 1.0 \times 10^{-8}$の時のエネルギー変化が大きいことが確認できる. このことから，外乱の影響で速度は大きくなりエネルギーが不安定化したと考えることが出来る.

5. 結論

本研究の結論は以下のようにまとめられる.

I. f=0.005, $v_0 = 0.28$の状態において連分数モデルより黄金数モデルの方が不安定になるまでの外乱の大きさが小さいことが分かった.

II. 両モデルにおいて，付加する外乱の大きさが小さいほど，重心速度やエネルギー変化は外乱を加えていない状態に近く, 外乱を大きくしていくと速度とエネルギーの低下がみられる.

III. 熱雑音外乱は運動している原子鎖の1つ1つに速度を与えているため周期境界条件をなるべくそろえた場合に, 近似モデルの精度が優れている連分数モデルの方が影響を受けにくいことが分かった.

IV. 黄金数モデルの方が外乱に対して敏感な反応が確認できた理由は原子間隔比から算出した下の原子に対する上の原子の個数がわずかながら連分数モデルに比べ少ないことに起因するからである．上の原子に熱雑音外乱を加えているため計算回数に比例して差が広がり違いが現れたと考えられる.

謝辞

この論文の完成に至るまで, 深い感謝を捧げます. 繁忙な日々でありながら, 絶えずご指導とご助言をいただいた塚本先生に心から感謝申し上げます. また, 急な変更にも迅速かつ親身に対応していただき, 心より感謝しています.

参考文献

[1] M. Hirano, *Friction at the Atomic Level：Atomistic Approaches in Tribology* (Wiley-VCH, Weinheim, 2018);

[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”, 日本機械学会論文集 (1987).

[3] 小塩 ゆかり:”Frenkel-Kontrova モデルの摩擦と超潤滑に関する研究”(2005).

[4] 井上 柊太:”超潤滑−摩擦状態遷移における原子振動解析”(2018).

[5] 安田 仁彦:”振動工学基礎編”, コロナ社 (2000).

[6] 日本機械学会:”原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション”, コロナ社(2001).

[7] 日本機械学会:”計算力学ハンドブック 第3巻 (原子/分子・離散粒子のシミュレーション)”, 日本機械学会(2009).

[8] 馬場敬之，高杉豊:”スバラシク実力がつくと評判の熱力学 ： キャンパス・ゼミ ： 大学の物理がこんなに分かる!単位なんて楽に取れる!”，マセマ出版社(2008)