

原子スケールの摩擦を見る

東京大学大学院 工学系研究科材料学専攻 佐々木 成朗¹

東京大学大学院 理学系研究科物理学専攻 塚田 捷

低速・低荷重極限の原子スケール摩擦はTomlinson(トムリンソン)モデルによって記述される。Tomlinson モデルを用いてグラファイトへき開面と単一突起の間に生じる原子スケール摩擦を数値シミュレートした結果を紹介する。摩擦の特徴を2次元的に可視化して、その垂直抗力依存性を示す。

1 はじめに

摩擦はピラミッドの昔から知られている身近な現象であり、二つの平面をすべらせる時に生じるずれ応力である。摩擦は地震のように非常に巨視的なスケールから原子のように極めて微視的なスケールまで、幅広い階層で姿を見せるが [1, 2]、ここでは原子スケールで現れる摩擦に焦点を当てたい。原子スケールの摩擦を初めて観察したのは、IBM アルマーデン研究所の Mate 達である [3]。彼らはタングステンの針でグラファイトへき開面をこすって、1) 摩擦力がグラファイトの格子周期で変動する事、2) $1\sim 10\mu\text{N}$ 程度の微小荷重領域で、摩擦力が荷重に比例する事を見出した。彼らが原子スケール摩擦を観察するのに使った実験方法は原子間力顕微鏡法 (AFM: Atomic Force Microscopy) [4] であり、微小探針と表面との間に働く力を測定する力学的走査プローブ法である。AFM を特に摩擦力測定に用いる場合、摩擦力顕微鏡 (FFM: Frictional Force Microscopy) と呼ぶ。FFM は理想的には探針先端の単一突起 (原子) が受ける摩擦を測る装置として考案されたが、Mate らの実験では、表面からはがれて探針先端に付着したグラファイトの切片 (フレーク) が実効的な探針になっていたと考えられている。確かに探針と表面間の接触領域には複数の原子が関与するであろう。しかし単一突起による摩擦を考える事によって原子スケール摩擦の素過程の情報を引き出す事が期待出来る。そこに単突起 (原子) 摩擦を考える意味がある。一つ注意しておきたいのは、本稿で扱う原子スケール摩擦が、我々が日常的に体験する巨視的な摩擦に比べて低速・低荷重極限の摩擦である事である。すなわち、実験的に探針を走査する (引きずる) 速度は毎秒数百～数千 Å であり、荷重 (垂直抗力) は nN (ナノニュートン) という原子数個

¹ E-mail:naru@cello.mm.t.u-tokyo.ac.jp

が保持できる程度のきわめて微小な量である。本稿では低速・低荷重極限の原子スケール摩擦を扱うのに適したモデルを紹介した後、それをもとにグラファイト平面上の原子スケール摩擦を数値シミュレートした結果を2次的に可視化して、その垂直抗力依存性を示す。

2 Tomlinson モデルによる摩擦

本節では Tomlinson(トムリンソン) モデル [5] について説明する。摩擦力顕微鏡の探針表面系を図 1(a) のように三次元バネ(カンチレバー)に接続された単突起(原子)探針-表面系と考え、全エネルギー V をカンチレバーの弾性エネルギー V_T と探針-試料表面原子間の相互作用エネルギー V_{TS} の和 $V = V_T + V_{TS}$ で表す。ここで、

$$V_T = \frac{1}{2} {}^t(\mathbf{r} - \mathbf{r}_s) \mathbf{k} (\mathbf{r} - \mathbf{r}_s), \quad (1)$$

である。 $\mathbf{k}$ 、 $\mathbf{r}$ 、 $\mathbf{r}_s$ はそれぞれ、カンチレバーの弾性マトリクス、探針原子の位置、探針-表面間相互作用が無い時の探針原子の平衡位置(カンチレバー位置と等価)を表している。一方 V_{TS} は第一原理的電子状態計算や、種々の経験的ポテンシャルを用いて与える事が出来るが、我々は

$$V_{TS} = \sum_i 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_i} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_i} \right)^6 \right], \quad (2)$$

のように第一原理計算からパラメタフィッティングしたレナード-ジョーンズポテンシャルの和として表して計算を行なった [6, 7, 8]。表面の具体例として、原子的に平坦なグラファイトへき開面を考えよう。

上述のポテンシャルエネルギー面を考えると、カンチレバーの走査によって、探針と試料表面間の原子間結合の破断・生成による原子の非断熱的運動が起きる。これが Tomlinson モデル [5] のコンセプトである。すなわち、全エネルギー V の断熱ポテンシャル面を考えると、荷重が大きい、バネ定数が小さい時 ($d^2V_{TS}/dx^2 \geq d^2V_T/dx^2 = k$)、図 1(b) のように局所的な極小点が複数現れる。走査位置 (1)、(2) では探針原子は初期付着点近傍に束縛されながら、連続的に動く(スティック)が、(3) では極小点近傍のエネルギー障壁が消えるため、探針原子は隣接する極小点へ不連続的(非断熱的)に移動する(スリップ)。この時カンチレバーにたくわえられていた弾性エネルギーは、探針原子の運動エネルギーや表面原子のフォノンに瞬時に散逸すると考えられる。探針原子は、(1)-(3) 間では原点付近に初期付着していたが、(3) 以降では格子周期 L で不連続運動を繰り返す。これをスティック・スリップ運動と呼ぶが、これが Tomlinson 摩擦の素過程である。

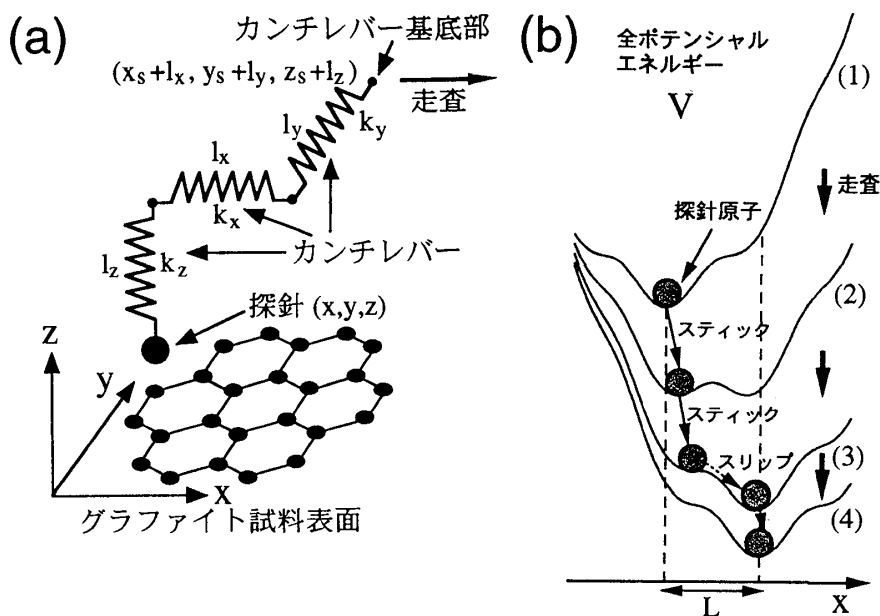


図 1: (a) 摩擦力顕微鏡をシミュレートするためのカンチレバーと探針のモデル。(b) Tomlinson モデルの概念図。(1)-(4) は、カンチレバーの走査 (x 軸方向) によるポテンシャルの時間発展を示している。

3 原子スケール摩擦の可視化シミュレーション

FFM のカンチレバーの各位置に対して全エネルギーを極小化する数値シミュレーションを行うと、Tomlinson モデルを表現出来る。図 2 のようにレバー位置 $\mathbf{r}_s = (x_s, y_s)$ の関数として摩擦力を二次元プロットすると、原子スケール摩擦を「見る」事が出来る。図 2(a)-2(f) では、荷重を変えて計算したグラファイト (0001) へき開面の原子スケール摩擦力の数値シミュレーションの結果を実験と比較した [8, 12]。(a) から (f) に向かって、荷重を大きくしている。いずれもラスト走査によって得られた水平力を、走査方向に平行な成分 (F_x/k_x) と垂直な成分 (F_y/k_y) について表したものであり、理論-実験間の非常に良い一致が得られている。まず (a) では実験の SN 比が良くないが、理論と実験の明暗パターンの対応は良い。次に F_y/k_y に着目すると、(a)、(b) に見られる明暗境界部の作るジグザグ模様 (グラファイトの炭素結合に対応) が、(c)、(d) では角が取れたような形状になり、(e)、(f) では完全に消滅している。一方 F_x/k_x に着目すると (a)、(b) の蜂の巣格子型のセルから成るパターンが、(c)、(d) で崩れ、(e)、(f) の矩形型のセルから成るパターンに変化している。このように、像のパターンは荷重に依存して顕著な変化を見せる。

全エネルギーの安定平衡条件を用いる詳しい解析によれば、摩擦力顕微鏡に

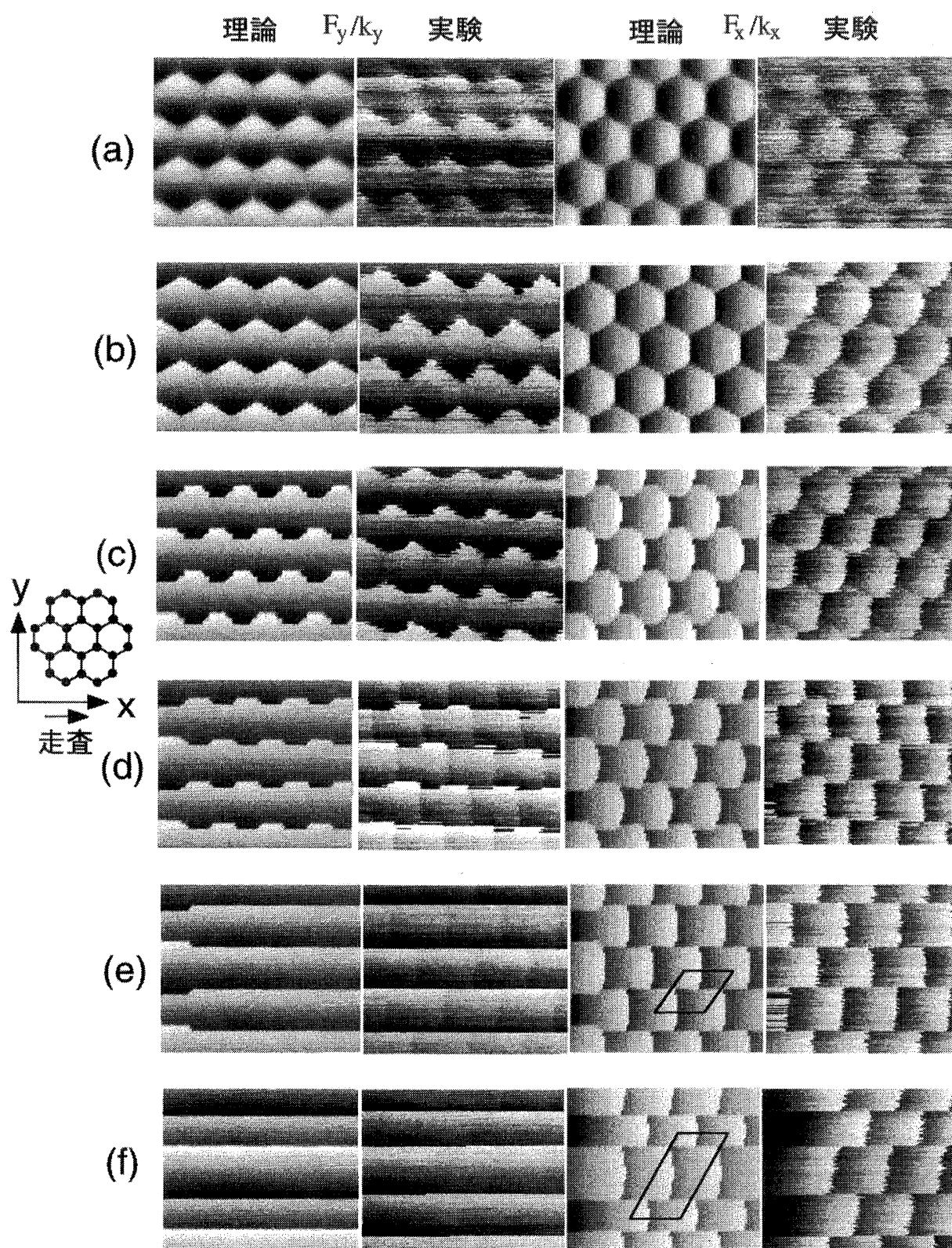


図 2: 理論シミュレーション及び実験で得られた、 F_x/k_x と F_y/k_y の摩擦力像。平均垂直荷重 $\langle F_z \rangle$ は理論、実験の順に (a)0.4 nN、22 nN、(b)0.6 nN、44 nN、(c)1.0 nN、91 nN、(d)1.1 nN、122 nN、(e)1.2 nN、327 nN、(f)2.2 nN、595 nN である。

おける探針原子 $\mathbf{r}$ とカンチレバー $\mathbf{r}_s$ との間には写像 $\mathbf{r} \mapsto \mathbf{r}_s$ 関係

$$\mathbf{r}_s = \mathbf{r} + \mathbf{k}^{-1} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} V_{\text{TS}}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

が成立する事が分かっている [8, 9]。従って $F_{\text{TS}} = -\nabla_{\mathbf{r}} V_{\text{TS}}$ が大きいほど (荷重が大きいほど)、もしくは $\mathbf{k}$ の成分が小さいほど (レバーが軟らかいほど) レバーの安定領域の面積が大きくなり、上記のような荷重依存が現れると説明される。このパターン変化は、荷重を外部パラメタにした時に、探針原子の運動に生ずる一種の相転移と考える事も出来る。ここでは実験との対応を示すため、荷重依存のデータを挙げたが、(3) 式から、バネ定数も荷重と同等な働きをするので、バネ定数の変化も摩擦力像に同様の転移を引き起こす。また (e)、(f) の F_y/k_y では走査 x 方向に平行な帯状の明暗パターンが現れている。それぞれの y 方向の帯の幅は (e) では殆んど一定だが、(f) では異なっており、 F_x/k_x は 1×2 型の超周期型のパターンを示しているがこれも (3) 式の写像関係から理解できる。

フレーク探針 (多原子摩擦) と考えられているグラファイトへき開面上の FFM 実験のパターンを、単原子モデルで再現出来たというのは驚くべき事である。計算の荷重のオーダーが実験に比べて 2 桁ほど小さい事から、実際にはフレーク探針になっているというアイディアも考慮すべきかも知れない。しかし、それなら単原子摩擦を仮定して得られた二次元像が何故実験像のパターンを再現しているのか、また単原子・多原子摩擦の違いは何かを探るのが今後の課題である。

4 おわりに

本稿では低速・低荷重極限の原子スケール摩擦を記述する方法である Tomlinson モデルを紹介し、摩擦を数値シミュレーションを用いて 2 次元的に可視化した。シミュレーションは実際の実験結果を非常に良く再現する他、像の明暗パターンの荷重依存性も予測出来た。一方で、原子スケール摩擦は、我々が日常的に経験している巨視的な摩擦法則では直感的に理解しにくい特徴が多い。本稿も研究の途上の一報告であり、原子スケール摩擦の概念の全てを網羅するものではないが、低速・低荷重極限の摩擦シミュレーションの雰囲気はいくらかつかんで頂けたものと思う。本稿では摩擦力顕微鏡の安定平衡条件や探針のスティック・スリップ運動の詳細、また運動カンチレバーの異方性や走査方向の効果については触れなかったがこの点については別報を参照されたい [10, 11]。また本稿では単突起による摩擦の素過程を考えたが、探針-表面間の接触に関与する原子数が増加した場合に、素過程がどのように変化していくのかは興味深い問題であり、現在研究を進めている。一般に摩擦を研究対象

として選ぶ時、どのような階層の摩擦を考えているのかを意識して研究を進める態度が必要と思われる。

参考文献

- [1] 松川宏: パリティ 8, 18 (1994).
- [2] 松川宏, 川端和重: 固体物理 35, 437 (2000).
- [3] C. M. Mate, G. M. McClelland, R. Erlandsson and S. Chiang: Phys. Rev. Lett. 59, 1942 (1987).
- [4] G. Binnig, C. F. Quate and Ch. Gerber: Phys. Rev. Lett. 56, 930 (1986).
- [5] G. A. Tomlinson: Philos. Mag. 7, 905 (1929).
- [6] N. Sasaki and M. Tsukada: Phys. Rev. B 52, 8471 (1995).
- [7] N. Sasaki, K. Kobayashi and M. Tsukada: Phys. Rev. B 54, 2138 (1996), Jpn. J. Appl. Phys. 35, 3700 (1996).
- [8] N. Sasaki, M. Tsukada, S. Fujisawa, Y. Sugawara, S. Morita and K. Kobayashi: Phys. Rev. B 57, 3785 (1998), J. of Vac. Sci. & Tech. B 15, 1479 (1997),
- [9] T. Gyalog, M. Bammerlin, R. Luthi, E. Meyer and H. Thomas: Europhys. Lett. 31, 269 (1995).
- [10] 佐々木 成朗, 塚田 捷: 日本物理学会誌 52, 704 (1997), 応用物理学会誌 67, 1370 (1998).
- [11] 佐々木 成朗, 塚田 捷: 固体物理 35, 513 (2000).
- [12] S. Fujisawa, E. Kishi, Y. Sugawara and S. Morita: Phys. Rev. B 58, 4909 (1998).