



Universität Regensburg

令和5年10月3日

各報道機関文教担当記者 殿

物を擦りあわせるとなぜ熱くなるのか？ 動摩擦の謎を原子スケールで解明！

金沢大学理工研究域数物科学系の岡林則夫助教，ドノスティア国際物理センターのフレデリクセン教授，レーゲンスブルク大学のリービック博士，ギージブル教授による国際共同研究チームは，鋭利な針を用いて表面上の一個の分子を原子の大きさ分だけ動かすときに生じる動摩擦の謎を解明しました。

日常にありふれた摩擦は，何世紀にもわたって科学者を当惑させてきました。物体と物体の間のさまざまなスケールにまたがる多面的な相互作用が摩擦に寄与するからです。二つの物体の間の接触状態を正確に把握することは長年の課題でありましたが，走査型プローブ顕微鏡（※1）の進歩により最近可能になりました。そして，鋭利な針を用いて表面上で一つの分子を動かし始めるために必要な静摩擦を測定できるようになりました。しかし，このような技術的なブレークスルーをもってしても，分子を動かし続けるために必要な動摩擦の複雑さは解明されていませんでした。

今回，国際共同研究チームは，原子間力顕微鏡（※2）を用いて，清浄な銅表面上で一個の一酸化炭素（CO）分子を動かす過程を詳細に調べました。最先端の第一原理計算（※3）による裏付けとともに，次のようなことを明らかにしました。

- 鋭利な針，表面を構成する銅原子，CO分子の位置関係
- 鋭利な針を動かすことで引き起こされる分子の運動と静摩擦，動摩擦の関係

本研究は，摩擦の発現過程を曖昧さなく解明したという点が特徴です。長年研究されてきた現象に新たな洞察を与えるだけでなく，動摩擦によりエネルギーが散逸する際の緩和過程まで含めた研究への道を開くものです。将来的には，摩擦の有効活用に寄与できると期待されます。

本研究成果は，2023年10月2日（米国東部標準時間午前11時）に米国科学雑誌『*Physical Review Letters*』ならびに『*Physical Review B*』のオンライン版に掲載されました。

【研究の背景】

摩擦は二つの物体が擦れ合うときに生じる、エネルギーの散逸を伴う現象です。学術的にも応用の面からも重要な課題であり、レオナルド・ダ・ヴィンチの時代から継続的に研究されてきた現象ですが、今なお科学者を当惑させています。それは、さまざまなスケールでの相互作用が複合的に寄与するからであり、その理解のためには、物体間の接点の正確な把握が何よりも重要となります。近年のプローブ顕微鏡の発明・発展は、この問題を克服させつつあります。例えば、清浄な表面上に孤立して吸着した一つの分子を、プローブ顕微鏡の鋭利な針（探針）を用いて自在に動かせるようになり、その分子を動かすために必要な力（静止摩擦力）も測定することが可能となりました。しかしながら、分子を動かす際の動的過程や、その時に生じるエネルギー散逸、それに関連する動摩擦力についての議論は、測定の難しさとそれを解釈するために必要な第一原理計算の難しさから取り扱われてきませんでした。

本研究では、この問題を解決するために、プローブ顕微鏡の探針を用いて、清浄な銅表面上の一個の一酸化炭素（CO）分子を動かす過程に着目しました。そして、トンネル電流を用いた振動分光で表面に吸着した分子の状態を、原子間力顕微鏡を用いた分子のイメージングによって探針先端の構造を把握しました。このような物体間の接点の精密な把握は、これまでの研究を大きく上回るものであります。さらに、探針と分子との間の相互作用によって引き起こされる分子の吸着状態の変化と、それに伴って生じるエネルギー散逸を、原子間力顕微鏡を用いて測定しました。そしてファンデルワールス力を考慮に入れた最先端の第一原理計算により、接点で起きている過程を理解し、長年の課題であった動摩擦力とは何であるかを原子レベルで明らかにしました。

【研究成果の概要】

まず、探針による CO 分子の吸着状態の変化（図 1A）を調べました。図 1B に示したように、探針を遠くから表面上の分子に近づけると、探針と分子の間の引力により原子間力顕微鏡のカンチレバーの共鳴周波数が徐々に減少し、距離が 160 pm になるとその量が増加へと転じます。さらに探針を近づけると、図の矢印の位置で周波数変化が急激に減少します。この急激な変化は、トンネル電流を用いた振動分光ならびに第一原理計算により、図 1A に示したように、CO 分子の吸着位置がトップサイトと呼ばれ銅原子の直上の位置から、銅原子と銅原子の間のブリッジサイトが変わったことに対応することを見出しました。また、振動する探針を CO 分子の近傍に近づけると(図 1C の矢印)、探針の振動に同期してトップサイトとブリッジサイトの間で吸着状態のスイッチングが起き、そのたびにエネルギーの散逸が生じることが分かりました。

さらに、このようなブリッジサイトでの分子の吸着を考慮に入れることで、探針を表面に対して水平な方向に動かすときに引き起こされる分子の移動の動的過程（図 2A）が理解できることが分かりました。図 2B は、探針がトップサイトから隣のトップサイトに移動するときの、トップサイト（黒）、隣のトップサイト（青）、ブリッジサイト（赤）での CO 分子のエネルギーを示しています。太線は、探針の動きに対応した分子の吸着状態を表しています。すなわち、探針がトップサイトにいるとき、CO 分子はトップサ

イトに吸着しているが、探針が隣のトップサイトに近づき緑の×印の位置にくると、トップサイトでのエネルギーとブリッジサイトでのエネルギーが交差し、トップサイトからブリッジサイトへの分子の移動が起き、引き続いてエネルギーの低い隣のトップサイトへの移動が起きます。図 2B において、緑の矢印におけるトップサイトでのポテンシャルの傾きが、静止摩擦力（分子を動かすために必要な力）に対応することを明らかにしました。また、ブリッジサイトにおけるポテンシャルと隣のトップサイトにおけるエネルギー差（図 2B の E_d ）がエネルギー散逸に対応し、そのエネルギー散逸を分子操作における探針の移動距離で割ったものが、動摩擦力に対応することを明らかにしました。このように、表面上で一個の分子を探針により動かすという、摩擦を調べる上で理想となる研究対象において、静止摩擦力や動摩擦力は一体どのようなものであるかが明らかになりました。

【今後の展開】

本研究は、摩擦の発現過程を曖昧さなく解明したという点が特徴であり、その強みを生かし、電子正孔対やフォノンの生成といった、エネルギー散逸における緩和過程まで含めた研究への展開が期待されます。

本研究は、科学研究費助成事業（16K04959, 16KK0096, 20K05320）、ドイツ研究振興会（CRC1277）、欧州連合ホライズン 2020 プログラム（863098）、スペイン国立研究機関（PID2020-115406GB-I00）の支援を受けて実施されました。

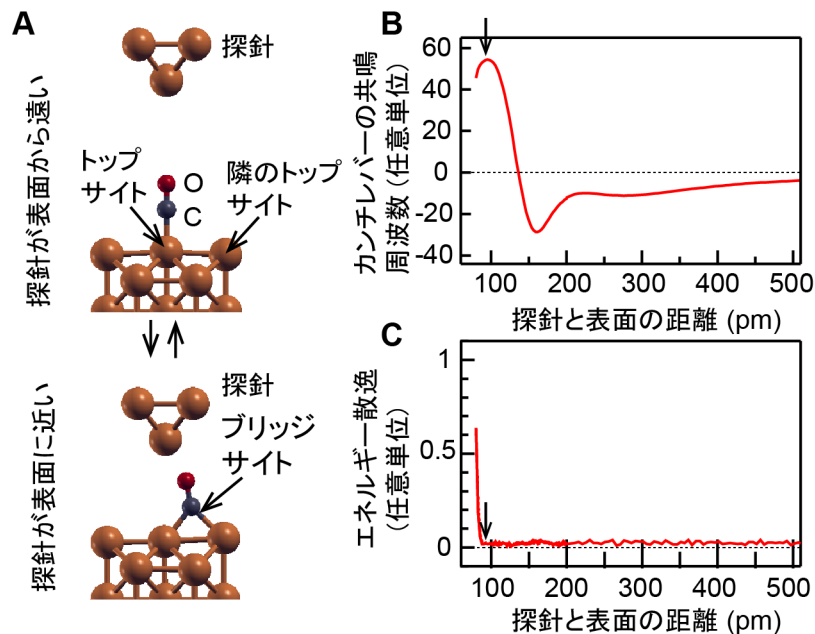


図 1. **A**. 探針を表面に近づけたり遠ざけたりするときの一酸化炭素 (CO) 分子の吸着状態の変化。探針が表面より遠いときは占有されていなかったブリッジサイトが、探針が近づくことで占有されます。**B**. 探針を表面に近づけると、矢印の位置で吸着状態が変化し、それに伴い原子間力顕微鏡のカンチレバーの共鳴周波数も大きく変化します。**C**. 振動する探針を矢印の位置まで近づけると、探針の振動に同期し分子の吸着状態がトップサイトとブリッジサイトの間でスイッチングし、そのたびにエネルギーの散逸が起きます。

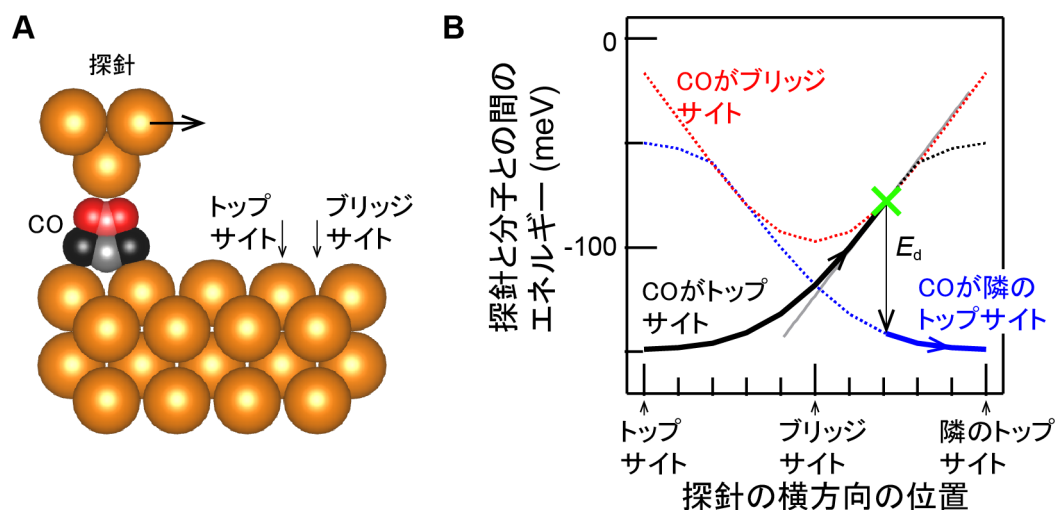


図 2. **A**. 銅表面上の CO 分子を、探針を用いて動かすときの模式図。**B**. 探針をトップサイトから隣のトップサイトへ表面に水平に動かしたときの CO 分子の吸着状態の変化。黒線、赤線、青線はそれぞれ、CO 分子がトップサイト、ブリッジサイト、隣のトップサイトに吸着したときの、探針と分子の間の相互作用エネルギーを表しています。図の実線に沿って、分子の吸着状態が変化します。

【掲載論文】

本研究成果は、*Physical Review Letters* と *Physical Review B* という二つの雑誌において同時に報告されています。*Physical Review Letters* においては、成果の重要な点が広い範囲の研究者に理解できるようにまとめられており、*Physical Review B* においては、専門家が納得できるように議論の詳細がまとめられています。なお、*Physical Review B* に掲載された論文は、編集者が推薦する論文として取り上げられています。*は責任著者を表しています。

雑誌名：*Physical Review Letters*

論文名：Dynamic friction unraveled by observing an unexpected intermediate state in controlled molecular manipulation. (制御された分子操作における予期せぬ中間状態の観察により解明された動摩擦)

著者名：Norio Okabayashi*, Thomas Frederiksen*, Alexander Liebig, Franz J. Giessibl*
(岡林則夫*, Thomas Frederiksen*, Alexander Liebig, Franz J. Giessibl*)

掲載日時：2023年10月2日(米国東部標準時間午前11時)にオンライン版に掲載

DOI：10.1103/PhysRevLett.131.148001

雑誌名：*Physical Review B*

論文名：Energy dissipation of a carbon monoxide molecule manipulated using a metallic tip on copper surfaces. (金属探針を用いて銅表面上で一酸化炭素分子を操作するときのエネルギー散逸)

著者名：Norio Okabayashi*, Thomas Frederiksen*, Alexander Liebig, Franz J. Giessibl*
(岡林則夫*, Thomas Frederiksen*, Alexander Liebig, Franz J. Giessibl*)

掲載日時：2023年10月2日(米国東部標準時間午前11時)にオンライン版に掲載

DOI：10.1103/PhysRevB.108.165401

【用語解説】

※1 走査型プローブ顕微鏡

鋭利な針（プローブ）で試料をなぞることで、その形状や性質を観察することができる顕微鏡の総称。後述する原子間力顕微鏡や、走査型トンネル顕微鏡がその一種にあたります。

※2 原子間力顕微鏡

鋭利な針を表面に近づけると、針と表面との間の相互作用により、針を取り付けたカンチレバーの共鳴周波数が増減します。この共鳴周波数の変化を利用して、針と表面に働く力を観測する顕微鏡のことを指します。カンチレバーの振幅を一定で振動させるために必要な仕事から、針と表面との間の相互作用によって生じるエネルギー散逸を評価できます。

※3 第一原理計算

量子力学（第一原理）に基づいて、原子番号だけを入力パラメータとして、非経験的に系の電子状態と安定構造を求める計算手法のこと。

【本件に関するお問い合わせ先】

■研究内容に関すること

金沢大学理工研究域数物科学系 助教

岡林 則夫（おかばやし のりお）

TEL : 076-264-5666

E-mail : okabayashi@staff.kanazawa-u.ac.jp

※オンラインでのお問い合わせも可能です。

ご希望の方は、2023年10月3日（火）10:00～12:00の時間帯に、下記URLにアクセスをお願いします。

<https://knzw-univ.webex.com/knzw-univ-jp/j.php?MTID=m2a9a08e1b73f672bb30634189260e44d>

■広報担当

金沢大学理工系事務部総務課総務係

野口 美雪（のぐち みゆき）

TEL : 076-234-6957

E-mail : s-somu@adm.kanazawa-u.ac.jp