

无处不在的摩擦学：从宏观到单原子尺度*

刘坤¹ 任晓燕¹ 孟胜^{2,†} 李顺方^{1,††}

(1 郑州大学物理学院(微电子学院) 材料物理教育部重点实验室 郑州 450001)

(2 中国科学院物理研究所 表面物理国家重点实验室 北京 100190)

2023-05-23 收到

† email: smeng@iphy.ac.cn

†† email: sflizzu@zzu.edu.cn

DOI: 10.7693/wl20230603

Ubiquitous friction: from the macroscopic to the single-atom regime

LIU Kun¹ REN Xiao-Yan¹ MENG Sheng^{2,†} LI Shun-Fang^{1,††}

(1 Key Laboratory of Material Physics, Ministry of Education, School of Physics and Microelectronics, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

(2 State Key Laboratory for Surface Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

摘要 摩擦，是一个人类文明发展史和日常生活中至关重要、无处不在、离开它人类将无法正常生活和生产的科学问题。原子制造也不得不考虑摩擦问题。从宏观到微观，摩擦现象非常复杂、神秘和精彩！在宏观领域，早在500年前，就建立起著名的达·芬奇—阿蒙顿经典定律；在微观领域，摩擦具有诸多新奇的特性，比如摩擦力被降低至接近于零的超润滑现象以及摩擦力随着载荷的增加而减少的负摩擦系数现象等。微观摩擦和宏观摩擦表现出的不同规律为我们从微观和单原子尺度上理解摩擦起源，进而调控摩擦力的大小提供了重要的理论基础和途径。文章简要介绍摩擦学及其发展历史，并重点介绍摩擦起源的微观物理机制以及在单原子尺度上调控摩擦力大小的可能途径。

关键词 摩擦学，超润滑，微观机制，单原子尺度摩擦

Abstract Friction is a crucial and ubiquitous scientific issue in the history of human civilization and daily life, without which humans cannot live or create products; therefore, friction must be considered in all types of fabrication on the atomic scale. From macro to micro, friction is very complex, mysterious and intriguing! In the macroscopic regime, the classic da Vinci—Amontons law was established 500 years ago. However, in the microscopic regime, friction exhibits behavior that is quite distinct from those on the macroscopic scale, such as super-lubrication in which the friction coefficient is reduced to almost zero, and also negative friction in which the friction force decreases as the load increases. This presents a new perspective on controlling friction at the microscopic level. The present article briefly describes tribology and the history of its development, with a focus on micro-physical mechanisms and regulation of the origin of friction on the single-atom scale.

Keywords tribology, superlubricity, microscopic mechanism, single-atom scale friction

* 国家自然科学基金(批准号: 12074345, 12174349, 12204421)资助项目

少二氧化碳排放具有重要意义^[8, 17]。

1 引言

摩擦是一个在物理中常常涉及到的概念，主要指的是当两个物体相互接触时，存在于两个物体之间阻碍它们相对运动的一种作用力，这种作用力被称为摩擦力。摩擦是最古老、最重要的现象之一，由于其巨大的实用性和技术重要性，几个世纪以来一直在推动技术的进步^[1, 2]。摩擦与我们的生活息息相关，世界上万事万物的运转都可能与摩擦相关。

事实上，在实际应用中，摩擦有两方面作用：有时它被用来改善我们的生活^[3, 4]，没有摩擦力，人类做不了任何事情，举起水杯会变得异常困难，行走会变得不可思议，更不用说高速行驶的汽车和高铁；但在大多数情况下，人们需要减少摩擦，用以节省机械能的耗散和表面的磨损^[5, 6]。据估计，世界上大约三分之一到二分之一的一次能源消耗在机械摩擦中^[7, 8]，80%的机械部件故障是由磨损引起的^[9]。此外，摩擦可能对各种系统的运转都有重要影响，从宏观设备^[10-12]，到纳米机器中的纳米接触^[2, 13, 14]，再到生物分子马达等等^[15, 16]。特别是，随着纳米科学和纳米技术的发展，原子尺度的原子制造已不再是遥不可及的梦想，而成为现在科技界研究前沿的现实对象。相应地，各种原子制造所需的高品质材料，及其相关器件和系统的运转，都需要考虑原子尺度的扩散、成核、长大和表面界面相互作用过程，这些过程本质上都和原子尺度的摩擦息息相关。从原子级水平深刻理解和控制纳米、亚纳米级摩擦学规律，设计高质量润滑剂，有效降低纳米、亚纳米甚至是单原子尺度器件系统的能耗，对显著减

2 人类社会对摩擦的早期认识和探索

摩擦，是一个非常古老的问题。在距今约2万年前，燧人氏在今河南商丘发明钻木取火，成为中国古代人工取火的发明者，教人熟食，结束了远古人类茹毛饮血的历史，使人类与动物的生活习性区别开来，对华夏文明的发展有巨大的贡献。恩格斯曾说：“就世界的解放作用而言，摩擦生火还是超过了蒸汽机。因为摩擦生火第一次使得人类支配了一种自然力，从而最终与动物界分开。”从现代科学角度而言，钻木取火其实就是克服摩擦力做功，把动能转变为热能和光能的物理学过程。

在大约9000年前，在冰雪道路上行走时，人们开始使用滑雪橇代替行走和奔跑，这是针对摩擦学的实践和应用。考古发现，中国最早的战车出现于距今约3700年前的夏朝时期，当时人们就通过“滚动”摩擦代替“滑动”摩擦，并且用羊油润滑车轴，这是最早期的润滑剂的使用记录。在1700年前，西晋时期张华编纂的中国第一部博物学著作《博物志》，其中提到人们用矿物油做润滑剂。这些都是在社会发展的早期，人类对摩擦学的重要探索。

国外关于摩擦学的研究，如图1所示，最早可以追溯到距今2000多年前，古希腊科学家亚里士多德初步提出摩擦力的概念。对摩擦学开展比较系统的理论研究，其实是始于500多年前意大利文艺复兴时期的画家达·芬奇，他最早开始对摩擦进行定量的研究并提出摩擦系数的概念。他研究了物体接触面积对摩擦阻力的影响，严格

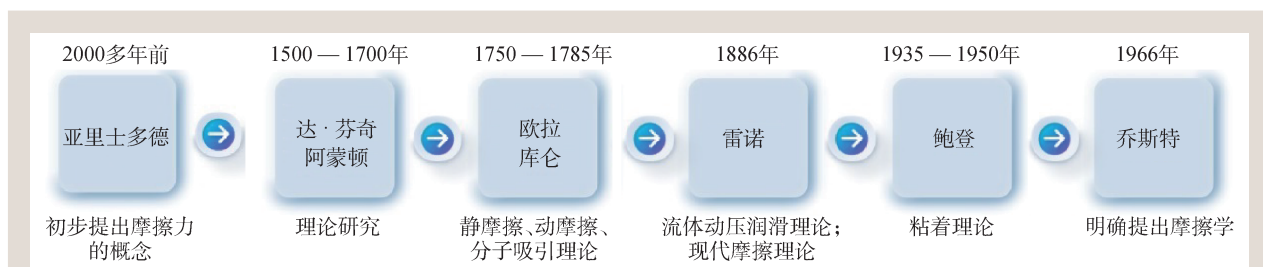


图1 摩擦学的研究历史

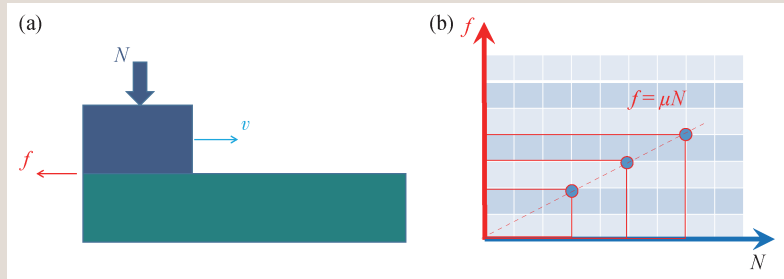


图2 (a)达·芬奇研究相互作用物体之间摩擦力的模型图, 外加载荷为 N , 滑动速度为 v , 摩擦力为 f ; (b)达·芬奇—阿蒙顿定律($f = \mu N$)的示意图

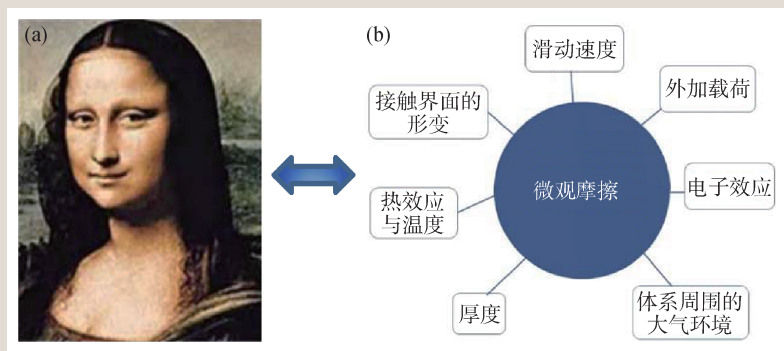


图3 蒙娜丽莎的微笑照片和微观尺度影响摩擦力的各种复杂因素

区分了滚动摩擦和滑动摩擦, 研究了润滑剂的优点。同时假设了两个摩擦定律。分别是: (1) “如果重量增加数倍, 产生的摩擦力 f 就会增加同样的数倍”, 表明摩擦力与施加的外力成正比, 如图2所示; (2) “尽管接触面的宽度和长度可能不同, 但是相同重力下产生的摩擦力 f 在其运动开始时将具有相等的阻力”, 表明摩擦力与外力的接触面积无关。并将摩擦力 f 随 N 变化的斜率, 称之为摩擦系数 μ 。这就是达·芬奇—阿蒙顿经典定律, 也被称为“阿蒙顿—库仑”摩擦模型: $f = \mu N$ 。

时间来到1750年, 在达·芬奇的研究基础上, 欧拉和库仑研究了静摩擦、动摩擦、分子吸引理论。1886年, 雷诺提出润滑方程, 他基于粘性流体力学建立了流体动压润滑理论, 开创了人们对流体润滑理论的研究, 为现代摩擦理论打下了基础。进入二十世纪以来, 1935年英国的鲍登开始用材料粘着概念研究干摩擦, 并于1950年提出了粘着理论。关于摩擦的研究, 如图1所示, 直至1966年, 英国乔斯特明确提出“tribology”,

即摩擦学, 为现代摩擦学奠定坚实的理论基础。发展到如今, 摩擦的形式丰富多样, 按运动形式摩擦可分为滑动摩擦和滚动摩擦。相对滑动的两接触物体间的摩擦称为滑动摩擦, 比如滑动轴承的轴瓦与轴颈。作相对滚动的以点或线接触的两物体, 其接触处产生的摩擦称为滚动摩擦, 如滚动轴承中滚动体与内、外圈间的摩擦。按照摩擦实际状态来区分, 滑动摩擦又可被分为: 干摩擦、流体摩擦、边界摩擦和混合摩擦。

随着现代分析和测试技术的发展, 特别是计算机模拟的飞速发展, 摩擦学逐步发展为一门非常重要的现代科学。

3 摩擦起源的微观物理机制

我们都知道, 人们举起一个空杯子并不费力, 如果往杯子里倒满水, 则需要更大的力气抓紧水杯以免其掉落; 推一个装有货物的箱子比推一个空箱子也需要更大的力。那么摩擦系数 μ 是由什么引起的呢? 如果将视角放到更小的尺度, 我们会发现任何平整光滑的平面都会有凹凸不平的纹路。当物体产生相对滑动的时候, 这些凹凸不平处就会产生阻力。因此在早期, 摩擦系数长期以来被认为是粗糙程度。比如同一个物体, 在光滑的桌面上和粗糙的桌面上滑动, 表现出的 μ 就不一样, 越光滑则 μ 越小。

随着研究的深入, 人们发现表面越光滑摩擦系数越小并不是在所有条件下都成立。人们认识到, 在微观尺度, 多种因素都会影响到摩擦力的大小, 摩擦行为也因此变得愈加复杂多样^[5]。正如达·芬奇的不朽之作——“蒙娜丽莎的微笑”(图3(a)), 一副看似简单的肖像画, 有研究人员利用微表情理论得出结论: 蒙娜丽莎的微笑中, 含

有83%的高兴、9%的厌恶、6%的恐惧、1%的愤怒，等等。在微观尺度下，摩擦力的复杂性完全不亚于蒙娜丽莎的微笑。在微观理论中，人们提出了“鹅卵石”模型^[18]，振子模型^[19]等。在“鹅卵石”模型中^[18]，物体表面被视为原子级光滑，相对滑动过程被抽象为球形分子在规则排列的原子阵表面上的移动。这个模型表明摩擦力和临界剪切应力都和粘着滞后成正比，而与粘着力的大小无关，这一结论得到部分实验结果的证实。振子模型^[19]是指一个原子在原子级表面滑动时，会激发起晶格振动或声子，从而引起摩擦。

如图3(b)所示，随着研究的深入，能够影响摩擦力的诸多因素都被相继报道出来：(1)接触界面的形变^[20-24]；(2)热效应与温度^[25, 26]；(3)电子效应^[27-31]；(4)体系周围的大气环境^[32, 33]；(5)外加载荷^[34, 35]；(6)厚度^[36, 37]；(7)滑动速度^[38, 39]等。在这些研究基础上我们了解到，微观领域的摩擦行为受到不同因素的影响，因此摩擦力，是一个像蒙娜丽莎的微笑一样迷人的问题，也是一个令人琢磨不透的科学问题。

接下来，我们简要介绍一下影响摩擦性能的因素和机制以及相关的国内外进展。

3.1 接触界面的形变和面积

正如章节2所说，近代摩擦学的研究基于“阿蒙顿-库仑”摩擦模型，人们认为摩擦力与接触面积无关。在20世纪50年代，剑桥大学Bowden和Tabor一起合作，他们认为摩擦力与真实的接触面积有关，强调了接触中物体表面粗糙度的重要性。这种观点促使人们从真正“接触面”的分子作用来考虑摩擦的起源。通过对表面粗糙度的研究发现，真实接触面积要小于表面接触面积。2009年，美国威斯康星大学Szulufarska等人^[40]通过分子动力学模拟证明了摩擦力线性取决于在接触中化学

相互作用的原子数量，并表明宏观观察到的摩擦力和接触面积之间的线性关系可以扩展到纳米尺度。2015年，奥地利维也纳技术大学Vernes等人^[41]使用分子动力学模拟了具有原子级粗糙的Fe表面的磨损过程。同时发现，即使在涉及磨损的情况下，也可以将摩擦力描述为实际纳米接触面积的函数，预测系统的摩擦情况。

同时，也有研究表明，滑动接触界面发生形变时也会影响摩擦力。美国桑迪亚国家实验室Burns课题组^[20]证明了烷硫醇单分子层中的硫醇链在拉伸应变时会为能量耗散提供额外的通道，从而导致摩擦增加。美国哥伦比亚大学James课题组^[21]报道了二维材料的摩擦力随着层数的增加而减小，这主要是因为层数的增加可以减少载体的弹性变形。对于石墨/h-BN异质结，以色列特拉维夫大学Mandelli课题组^[22]预测出负摩擦系数，即当法向载荷增加时摩擦力会减小。这种现象是由于压力抑制了异质结中的上层结构的面外变形，从而降低了能量的界面耗散，减小了摩擦。

清华大学的李群仰课题组^[23]通过对体系施加面内拉伸应变的方法实现了对石墨烯体系的表面摩擦行为的调控，如图4(a)所示，随着拉伸应变的增加，摩擦系数会显著降低。美国匹兹堡大学Scott课题组^[24]用压电系统控制钨针尖与金表面的摩擦，在摩擦过程中直接实时观测原子尺度的界面结构。研究发现金属接触点在拉伸应力下表现

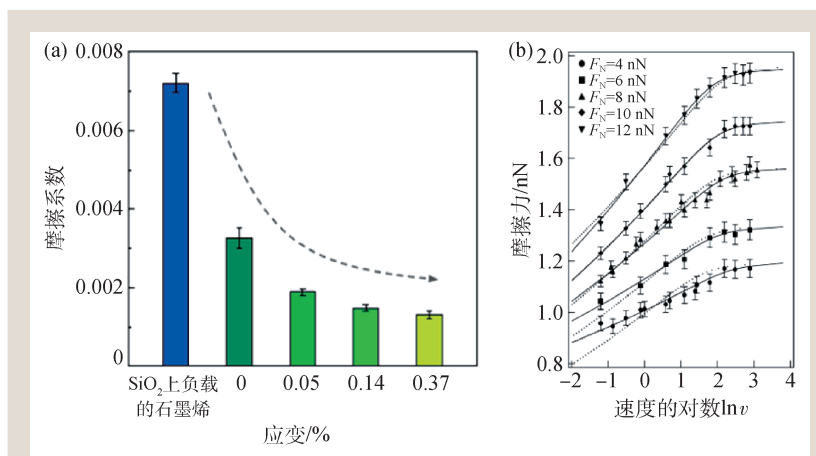


图4 (a)石墨烯体系中摩擦系数与应变的关系^[23]；(b)硅包裹的尖端在云母表面上滑动，当法向负载在4 nN和12 nN之间时，实验摩擦力随速度对数($\ln v$, v 为滑动速度)的变化^[25]

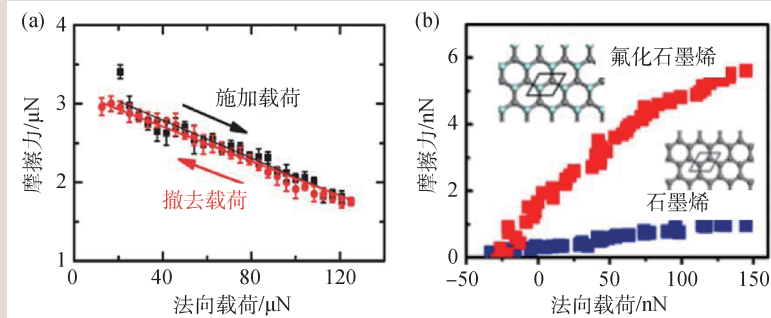


图5 (a)微米级石墨烯/云母片异质结中的负摩擦系数。摩擦力对法向载荷 F_N 表现出负向依赖性。加载和卸载状态下的摩擦力—载荷曲线均表现为负摩擦^[32]；(b)未氟化和氟化后的石墨烯的摩擦力^[33]

出了低摩擦现象，这种现象是由摩擦表面之间的原子扩散促成的。这突显了界面结构在确定原子摩擦机理方面的关键作用，接触界面的改变可以为调控摩擦力起到积极作用。

3.2 热效应与环境温度

原子的热活化与环境温度也是影响系统摩擦特性的重要因素。在一些特定温度下的系统界面处可能以一定的速率发生原子运动。在滑动过程中，接触界面附近的原子热激活过程会增加，从而影响体系摩擦特性。美国佐治亚理工学院 Riedo 课题组^[25]研究了用硅包裹的纳米针尖在云母表面上的滑动行为，如图4(b)所示，摩擦力与原子热活化跳跃的过程有关，驱动速度和法向载荷可以影响摩擦对温度的依赖性。在热激活跳跃的过程中，能量的耗散或摩擦将会减小，从而使滑动变得容易。以色列特拉维夫大学 Tshiprut 课题组^[26]报道了一项纳米摩擦对温度依赖性的研究，他们发现摩擦力随温度变化急剧增加或减少。同时，他们讨论了驱动速度和法向载荷对摩擦温度依赖性的影响，也预测了表面缺陷或被吸附物可能会影响摩擦对温度的依赖性。这些研究表明温度也是影响摩擦力的因素之一。

3.3 电子效应

电子效应也是一种可以影响摩擦力的因素。具体表现为一些体系的接触界面出现电荷聚集或

转移后，界面之间的摩擦力会发生显著变化。在原子尺度上，粘附力是由接触表面之间的化学相互作用决定的，并且该相互作用会因两个表面相对位置的变化而改变，从而产生粘附摩擦力。因此，研究人员可以通过分析接触界面中电荷密度的变化来理解粘附力和摩擦力，也就是可以分析处于相对移动过程中界面电荷转移来分析摩擦力。因此，理解界面电荷密度和摩擦之间的联系对于设计润滑剂至关重要^[27-29]。

意大利莫德纳和勒佐艾米利亚大学 Righi 课题组^[30]研究了固体界面的电子特性对摩擦力的影响，证实了摩擦力是由接触界面的滑移引起的电荷重新分布所决定。美国东北大学的 Dayo 课题组^[31]采用了石英晶体微天平技术来测量固体 N_2 在Pb的超导转变温之上和之下沿着Pb表面滑动的摩擦。该实验发现 N_2 固体在Pb表面滑动时，如果Pb从正常态突变到超导态，观察到的摩擦在过渡处突然下降，侧向摩擦力减少了大约1/2。这一观察结果标志着一种由电子结构主导的摩擦新现象。

3.4 体系周围的大气环境

在上述的摩擦机制中，影响摩擦特性的因素主要是体系接触界面之间的相互作用。这种假设基于体系在真空条件下，尤其是在理论计算中，完全排除了环境中体系以外的其他杂质对摩擦的影响。但在实际应用时，体系所在的大气环境中存在着的特定气体或化学物质，可能会影响接触界面的性质，影响体系的摩擦和磨损。

环境影响摩擦特性的原因包括接触界面吸水、被氧化或被诱导产生其他化学反应等。因此，在体系做相对滑动时，需要考虑环境中的杂质对摩擦的影响。如图5(a)所示，清华大学郑泉水课题组^[32]报道了微米级石墨烯/云母异质结中负摩擦系数的研究。其潜在的机理是水分子在接触界面上重新分布，导致亚纳米厚的水膜具有更大的密

度和更有序的结构,从而出现了负摩擦。韩国科学技术大学Kim课题组^[33]报道了石墨烯摩擦力升高的情况,这是他们对石墨烯采取了化学改性的方式实现的,通过将石墨烯表面氟化,摩擦力增加了6倍,如图5(b)所示。

以上,我们“挂一漏万”地介绍了近年来科研人员所发现的能够影响摩擦性能的典型因素及其相关代表性研究成果。这些研究成果进一步加深了人们对摩擦起源的深刻认知,并为设计和制备新型的润滑剂提供了新的思路和方向,为实现真正意义上的控制摩擦和减少磨损提供重要的借鉴。

4 摩擦的微观调控: 结构超润滑

润滑是摩擦学研究的重要内容,是改善摩擦系统的摩擦状态以降低摩擦阻力减缓磨损的技术措施。充分利用现代的润滑技术能显著提高机器的使用性能和寿命并减少能源消耗。传统的液体润滑剂在高温高压下,容易逸出,并且有机分子在界面处会形成新的化学键,反而增加摩擦^[42]!因此,人们把目光放在了固体润滑剂上。

1991年,日本东京大学的Murata^[43]预言:两个原子级光滑的表面(白云母),当上下表面的原子处于公度接触的时候,会有显著的摩擦力;然而,当非公度接触时,摩擦力几乎为零,并把这一新奇现象命名为结构超润滑。后续结果表明,界面处于非公度接触时可以有效降低薄层间的摩擦力,这意味着不需要任何额外的润滑剂,即可实现超低摩擦系数。

公度接触,从微观尺度上而言,是指材料的晶格彼此完全匹配,且在滑动方向上完全对齐的一种接触状态^[44-46]。处于公度接触状态会使表面出现原子尺度的彼此锁定,从而产生较大的附着

力和摩擦力,类似于日常生活中两个完全重合放置的鸡蛋托盘,如图6(a)所示。如果通过旋转等方式使晶格不能互相“咬合”,那么接触界面就会形成非公度的状态,如图6(b)所示,则更容易发生相对滑动,此时,摩擦力也会被显著降低,在某些条件下甚至出现摩擦力接近于零的结构超润滑^[44]。

以色列特拉维夫大学Bylinski课题组^[47]通过实验证明,用改变离子阵列的空间排布方式可使粘滑摩擦降至极低,几乎为零,说明晶体材料界面之间的非公度接触会显著降低摩擦力。美国麻省理工学院Dienwiebel课题组^[45]的研究结果也表明超润滑与界面之间的非公度接触有关,如图6(c)所示,人们可以通过旋转的方式,使两个刚性表面非公度的接触,从而出现了可控制且可重复的超润滑。美国阿贡国家实验室Sumant课题组^[48]证明:用石墨烯覆盖纳米级的金刚石,制成纳米卷,再在类金刚石碳上滑动,可以极大减少接触面积,形成非公度的接触,可以有效地降低摩擦系数(约

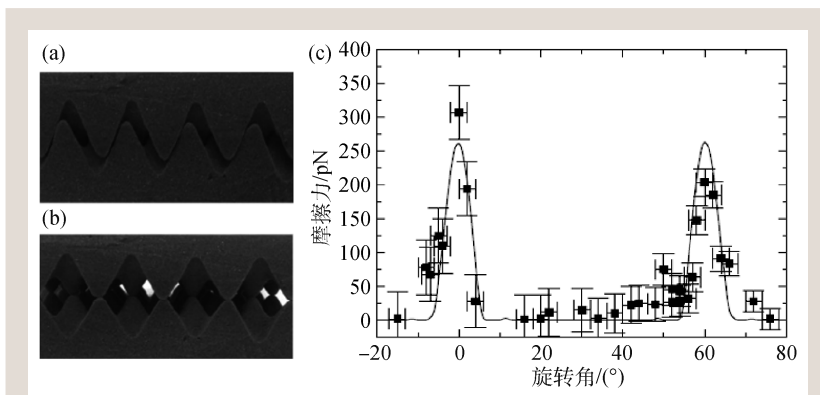


图6 泡沫蛋盒模型的公度(a)与非公度(b)接触^[44]; (c)在石墨烯上滑移的石墨薄片,非公度接触与公度接触(旋转角为0°或60°)相比,摩擦力显著降低^[45]

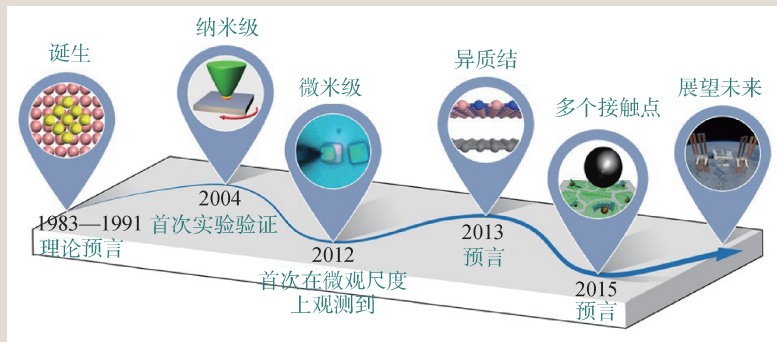


图7 结构超润滑的发展历史^[53]

0.004), 从而实现了超润滑。

值得注意的是, 如果在滑动表面上形成微小的缺陷, 那么在能量上就有利于克服表面公度, 减少滑动过程中产生的摩擦^[49]。土耳其比尔肯大学 Mehmet 课题组^[50]使金和石墨的接触界面非公度接触, 最终抵消了横向力, 从而减少了摩擦。清华大学雒建斌课题组^[51]通过构造具有莫尔云纹的二维异质结, 降低了摩擦力。中国科学院物理研究所张广宇课题组^[52]研究了多种异质结界面的摩擦状态, 并报道了 MoS₂/石墨和 MoS₂/h-BN 范德瓦耳斯异质结接触界面的超润滑现象和边缘处的钉扎效应。他们通过实验证实了低至 10⁻⁶ 的摩擦系数, 并用分子动力学模拟进行了验证, 理论计算结果强调了边缘和台阶对摩擦力的贡献。该项

研究证明了接触面之间较大的晶格失配, 即非公度接触, 是出现超润滑的原因。图 7 为结构超润滑的发展历史^[53]。

现代摩擦学对结构超润滑非常关注, 其本质是由于晶格失配导致滑动过程中侧向力的有效抵消, 从而实现极低的摩擦状态。然而超润滑的实现有赖于体系的非公度接触条件, 一旦在滑动过程中非公度条件被破坏, 层与层之间会倾向于旋转, 体系在滑动时会锁定在一个较为稳定的状态, 导致超润滑性消失, 因此降低和调控摩擦力仍是非常重要的一个科学问题。

5 公度接触负摩擦系数的二维同质结和异质结设计

为降低和调控摩擦力, 郑州大学物理学院李顺方课题组分别设计了公度接触的二维铁电、铁磁材料同质结和铁电材料/石墨烯异质结, 研究了由电磁相互作用主导, 而非接触面的结构形貌主导的奇异摩擦特性, 一方面突破了经典达·芬奇—阿蒙顿定律, 同时也突破了公度接触的限制, 分别发现了摩擦力随法向载荷增加而降低的负微分摩擦和周期性震荡变换的摩擦力。

5.1 二维铁电 In₂Se₃ 公度同质结

李顺方团队设计出具有公度接触的二维铁电材料 In₂Se₃ 同质结, 结构模型如图 8 所示。在该

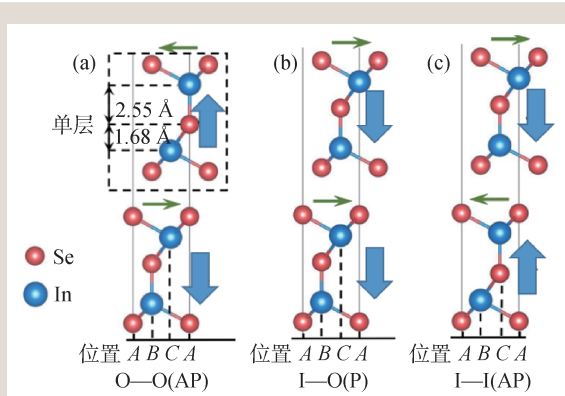


图 8 In₂Se₃ 的结构示意图: 两个 QL-In₂Se₃ (由于单层 In₂Se₃ 含 5 个原子层, 故称为 QL-In₂Se₃) 单层垂直界面的极化方向(蓝色箭头)分别指向(a)面外—面外(O—O)、(b)面内—面外(I—O)、(c)面内—面内(I—I), 平面内的极化方向(绿色箭头)相互平行和反平行分别用 P 和 AP 表示

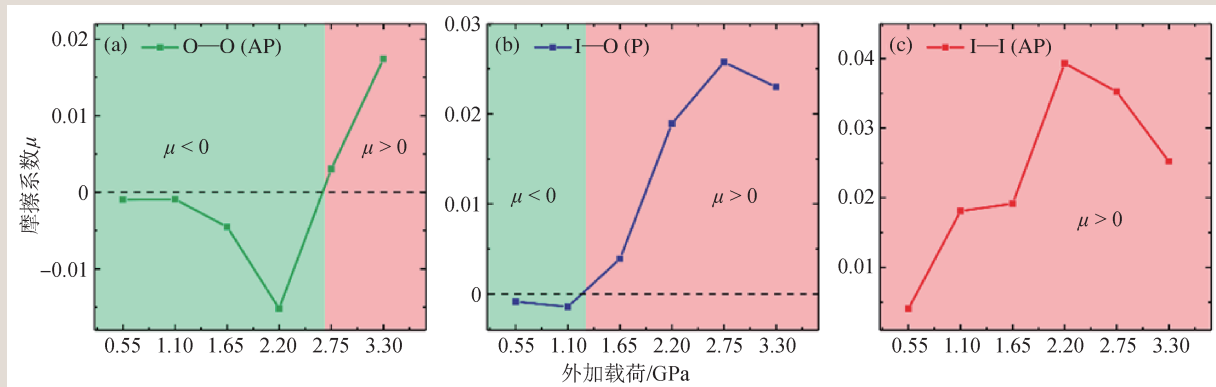


图 9 In₂Se₃ 同质结存在负微分摩擦系数 (a) 在 O—O (AP) 堆垛的 0—2.5 GPa 压强区间, 摩擦系数 $\mu < 0$; (b) 在 I—O (P) 堆垛的 0—1.1 GPa 压强区间, 摩擦系数 $\mu < 0$; (c) 在 I—I (AP) 堆垛下, 在所研究的压强区间, 摩擦系数 $\mu > 0$

材料中出现了负的微分摩擦系数($\mu=df/dN<0$), 即滑动能垒随着法向载荷的增加而减小^[54], 如图9(a), (b)所示, 从而同时突破了超润滑依赖的非公度接触条件和经典的达·芬奇—阿蒙顿定律。其反常摩擦行为的物理根源在于层间范德瓦耳斯相互作用引起的滑动能垒的增加部分可以被层内静电能的显著减少来进行有效补偿, 这也是载荷状态下极化电荷重新转移的过程。研究进一步指出, 滑动微分摩擦系数 μ 可通过面外或面内的偶极—偶极排列方向及施加适当的外电场来进行调控, 从而实现 $\mu < 0$, $\mu \approx 0$ 和 $\mu > 0$ 的转变, 如图9所示。这项研究结果有望在新型纳米结构的未来设计中发挥重要作用, 并在摩擦学、纳米机械、纳米传感器、纳米催化等物理和化学现象中具有潜在的应用价值。

5.2 二维铁磁材料CrI₃公度同质结

在公度接触的二维范德瓦耳斯磁性CrI₃同质结中发现了近乎为零以及负的微分摩擦系数, 即滑动能垒(摩擦力)随法向载荷的增加而保持不变或者减小的情况($\mu = df/dN \approx 0$ 和 $\mu = df/dN < 0$)^[55]。从微观机制上, 计算表明双层CrI₃层间铁磁—反铁磁相变可以显著降低界面滑动势垒(摩擦力), 从而导致负的微分摩擦系数, 如

图10(a)所示。此外, 界面原子面内($p_x + p_y$)和面外(p_z)波函数之间的相变主导了滑动势垒的演变, 这是在外部负载下, 体系层间范德瓦耳斯相互作用、静电相互作用以及上下两层CrI₃的层内形变之间相互制衡的结果, 如图10(b)所示。目前的发现不仅突破了超润滑性所需的非公度接触条件和经典达·芬奇—阿蒙顿定律, 而且可能会兴起“slide-spintronics”的新概念, 有望在新型纳米结构的未来设计中发挥重要作用, 并在摩擦学、纳米机械及纳米催化中具有潜在的应用价值。

5.3 二维材料石墨烯/In₂Se₃异质结

在上述两个工作的基础上, 李顺方团队设计了石墨烯/In₂Se₃二维材料异质结, 首先从能带结构

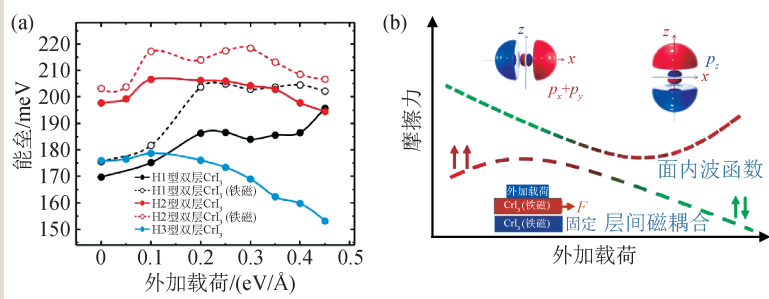


图10 双层CrI₃同质结的负微分摩擦系数 (a)双层CrI₃在H型堆叠时的三个代表性路径的能垒, 黑色及红色实线(虚线)为发生(不发生)铁磁—反铁磁相变的最大滑动势垒。红色和蓝色曲线存在随法向载荷的增加而降低的能垒, 即摩擦系数 $\mu < 0$, 黑色曲线存在摩擦系数 $\mu \approx 0$; (b)左下红色和蓝色长方形为上下两层CrI₃的模型示意图。固定底层, 对上层施加法向载荷, 并移动上层。上面的虚线表示界面原子面内(p_x+p_y)和面外(p_z)波函数分别使能垒的降低和升高, 下面的虚线表示铁磁(平行的红色箭头)—反铁磁(反平行的绿色箭头)相变能垒的降低

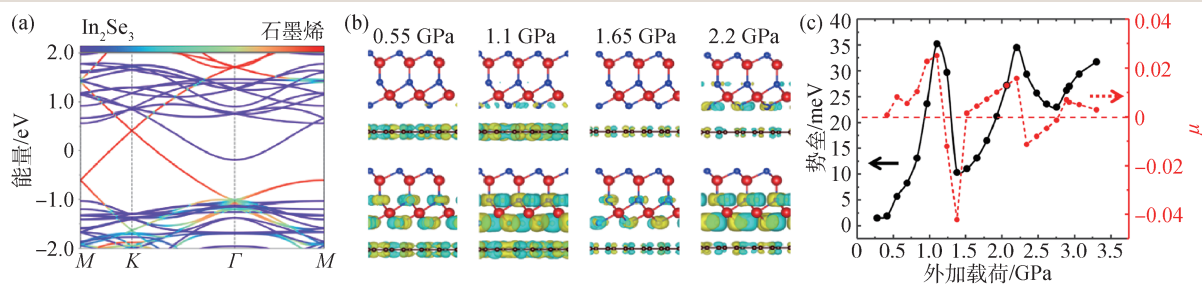


图11 二维材料石墨烯/In₂Se₃异质结负微分摩擦系数 (a)石墨烯/In₂Se₃异质结能带图; (b)在外部压力逐渐增加下, 石墨烯和In₂Se₃两种组分在界面处出现电荷隧穿和转移, 并随压力增加而振荡; (c)石墨烯/In₂Se₃异质结相对滑动时的能垒(黑色实线)和负微分摩擦系数(红色虚线)

上预测石墨烯/ In_2Se_3 二维材料异质结界面在层间相对滑移时,在外压力下摩擦系数可能会出现振荡现象^[56]。简单而言,石墨烯/ In_2Se_3 二维范德瓦耳斯异质结界面的能带结构在费米面附近是由石墨烯和 In_2Se_3 这两种二维材料的电子态所共同组成(图11(a));在外部压力逐渐增加时,体系层间范德瓦耳斯相互作用导致石墨烯所主导的 p_z 轨道上升和 In_2Se_3 所主导的 p_x/p_y 轨道下降之间的动态竞争,并导致石墨烯和 In_2Se_3 两种组分在界面处出现电荷隧穿和转移,并随压力增加而振荡(图11(b)),从而导致正-负振荡的摩擦系数(图11(c))。该工作在纳米器件和摩擦性能量子调控中具有潜在的应用价值。

6 总结与展望

本文介绍了摩擦学及其发展历史,并且从宏观到单原子尺度简要介绍了摩擦起源的微观物理机制及调控,还介绍了近些年人们对微观摩擦的认识和研究,以及关于电磁相互作用主导的而非

接触面的结构形貌主导的奇异摩擦特性。微观摩擦和宏观摩擦表现出的不同规律为我们从微观尺度上理解摩擦起源,进而调控摩擦力的大小提供了重要的理论基础和途径。这些新颖的摩擦特性和其产生的原因可能引发我们对调控摩擦力的新认识和理解。

摩擦是一个无处不在、古老神秘、有时让人讨厌而又无法割舍、宏观和微观表现截然不同规律的科学问题!未来是量子器件、量子科技、原子制造主导人类发展的时代,一些有趣的问题也应运而生,例如在亚纳米和单原子尺度量子行为显著的世界里,摩擦具有什么神奇的现象和规律?随着对摩擦在单原子尺度的深入研究,相信这些问题能够得到有益启发,并期望这些相关成果和进展能够为原子制造提供重要的科学支撑。

致谢 十分感谢中国科学技术大学张振宇教授给予的指导和帮助,感谢郑州大学物理学院赵兴举研究员、史金磊博士后、庞瑞副教授、张丽丽副教授、张一民博士等在写作中的有益讨论。

参考文献

- [1] Persson B N J. Sliding Friction. Physical Principles and Applications. Berlin: Springer, 2000
- [2] Vanossi A, Manini N, Urbakh M *et al.* Rev. Mod. Phys., 2013, 85: 529
- [3] Xu J, Li J. Friction, 2015, 3: 344
- [4] Liu D, Yin X, Guo H Y *et al.* Sci. Adv., 2019, 5: eaav6437
- [5] Berman D, Erdemir A, Sumant A V. ACS Nano, 2018, 12: 2122
- [6] Urbakh M. Nat. Nanotechnol., 2013, 8: 893
- [7] Holmberg K, Andersson P, Erdemir A. Tribology International, 2012, 47: 221
- [8] Holmberg K, Erdemir A. Friction, 2017, 5: 263
- [9] Saufi S R, Ahmad Z A B, Leong M S *et al.* IEEE Access, 2019, 7: 122644
- [10] Braun O M, Barel I, Urbakh M. Phys. Rev. Lett., 2009, 103: 194301
- [11] Sahli R, Pallares G, Ducottet C *et al.* Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2018, 115: 471
- [12] Androulidakis C, Koukaras E N, Paterakis G *et al.* Nat. Commun., 2020, 11: 1595
- [13] Urbakh M, Klafter J, Gourdon D *et al.* Nature, 2004, 430: 525
- [14] Achanta S, Liskiewicz T, Drees D *et al.* Tribol. Int., 2009, 42: 1792
- [15] Bormuth V, Varga V, Howard J *et al.* Science, 2009, 325: 870
- [16] Guerin T, Prost J, Martin P *et al.* Curr. Opin. Cell Biol., 2010, 22: 14
- [17] Braiman Y, Barhen J, Protopopescu V. Phys. Rev. Lett., 2003, 90: 094301
- [18] Israelachvili J N, Chen Y L, Yoshizawa H. J. Adhes. Sci. Technol., 1994, 8, 1231
- [19] Krylov S Y, Frenken J W M. Phys. Status Solidi B, 2014, 251, 711
- [20] Burns A R, Houston J E, Carpick R W *et al.* Phys. Rev. Lett., 1999, 82: 1181
- [21] Lee C, Li Q Y, Kalb W *et al.* Science, 2010, 328: 76
- [22] Mandelli D, Ouyang W, Hod O *et al.* Phys. Rev. Lett., 2019, 122: 076102
- [23] Zhang S, Hou Y, Li S Z *et al.* Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 2019, 116: 24452
- [24] He Y, She D S, Liu Z Y *et al.* Nat. Mater., 2022, 21: 173
- [25] Riedo E, Gnecco E, Bennewitz R *et al.* Phys. Rev. Lett., 2003, 91: 084502
- [26] Tshirut Z, Zelner S, Urbakh M. Phys. Rev. Lett., 2009, 102: 136102
- [27] Zhou Y, Qu J. ACS Appl. Mater. Interfaces, 2017, 9: 3209

- [28] Xiao H P, Liu S H. *Mater. Des.*, 2017, 135:319
- [29] Cahangirov S, Ciraci S, Ozelcik V O. *Phys. Rev. B*, 2013, 87: 205428
- [30] Wolloch M, Levita G, Restuccia P *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2018, 121:026804
- [31] Dayo A, Alnasrallah W, Krim J. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, 80: 1690
- [32] Liu B T, Wang W J, Zhao S J *et al.* *Sci. Adv.*, 2020, 6: eaaz6787
- [33] Kwon S, Ko J H, Jeon K J *et al.* *Nano. Lett.*, 2012, 12:6043
- [34] Tian K, Gosvami N N, Goldsby D L *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2017, 118:076103
- [35] Ouyang W G, Ramakrishna S N, Rossi A *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2019, 123: 116102
- [36] Li S, Li Q, Carpick R W *et al.* *Nature*, 2016, 539:541
- [37] Gao W, Tkatchenko A. *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 114:096101
- [38] Gnecco E, Bennewitz R, Gyalog T *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2000, 84:1172
- [39] Chen J, Ratera I, Park J Y *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2006, 96: 236102
- [40] Mo Y, Turner K T, Szlufarska I. *Nature*, 2009, 457: 1116
- [41] Eder S J, Feldbauer G, Bianchi D *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 115, 025502
- [42] Granick S, Zhu Y, Lee H. *Nat. Mater.*, 2003, 2:221
- [43] Hirano M, Shinjo K, Kaneko R *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 1991, 67: 2642
- [44] Hod O. *Phys. Rev. B*, 2012, 86:075444
- [45] Dienwiebel M, Verhoeven G S, Pradeep N *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92: 126101
- [46] Ma M, Benassi A, Vanossi A *et al.* *Phys. Rev. Lett.*, 2015, 114: 055501
- [47] Bylinskii A, Gangloff D, Vuletic V. *Science*, 2015, 348: 1115
- [48] Berman D, Deshmukh S A, Sankaranarayanan S K R S *et al.* *Science*, 2015, 348: 1118
- [49] Bohlein T, Mikhael J, Bechinger C. *Nat. Mater.*, 2011, 11: 126
- [50] Cihan E, Ipek S, Durgun E *et al.* *Nat. Commun.*, 2016, 7: 12055
- [51] Zheng X H, Gao L, Yao Q Z *et al.* *Nat. Commun.*, 2016, 7: 13204
- [52] Liao M Z, Nicolini P, Du L J *et al.* *Nat. Mater.*, 2022, 21: 47
- [53] Hod O, Meyer E, Zheng Q *et al.* *Nature*, 2018, 563, 485
- [54] Sun J, Zhang L, Pang R *et al.* *Adv. Sci.*, 2021, 9, 2103443
- [55] Liu K, Cheng J, Zhao X *et al.* *Nano. Res.*, 2022, 15: 5758
- [56] Cheng J, Liu K, Zhao X *et al.* *Phys. Rev. B*, 2022, 106: 195416



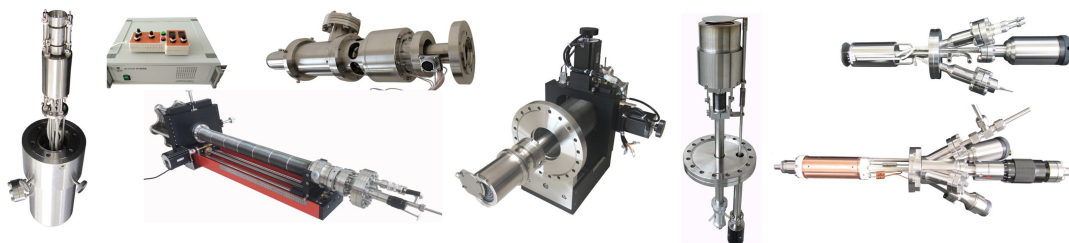
大连齐维科技发展有限公司

地址: 大连高新园区龙头工业园龙天路27号

电话: 0411-8628-6788 传真: 0411-8628-5677

E-mail: info@chi-vac.com HP: <http://www.chi-vac.com>

表面处理和薄膜生长产品: 氩离子枪、RHEED、磁控溅射靶、束源炉、电子轰击蒸发源、样品台。



超高真空腔室和薄膜生长设备: PLD系统、磁控溅射系统、分子束外延系统、热蒸发镀膜装置。

