

グラフェン/C₆₀/グラフェン界面の特異な超潤滑特性

佐々木 成朗*¹, 浅輪 紘子*², 板村 賢明*³

Unique Superlubricity Appeared at Graphene/C₆₀/Graphene Interface

Naruo SASAKI*¹, Hiroko ASAWA*², Noriaki ITAMURA*³

ABSTRACT : Unique near-zero friction regime of the C₆₀ molecular bearings, graphene/C₆₀/graphene interface, is numerically found for the lateral scan along the [11 $\bar{2}$ 0] direction under the relatively low loading condition. The sinusoidal motion of the C₆₀ molecule along the carbon bond is continuous and reversible during the forward and backward scans. As a result, the hysteresis loop of the lateral force curve nearly disappears, which leads to a mean frictional force of nearly zero, $\langle F_L \rangle \approx 0$. The mechanism of this conservative motion is clarified by the direct calculation of the local minimum position located on the total potential energy surface V_{total} . The energy barrier between the neighboring minimum positions always exists, which prevents the C₆₀ molecule from taking stick-slip motion.

Keywords : Tribology, friction, superlubricity, C₆₀, graphene, molecular mechanics simulation

(Received October 2, 2012)

1. はじめに

微小領域での摩擦のコントロール、特に超低摩擦・超潤滑研究は、ナノテクノロジー産業の要請から必要不可欠である。一方、微小領域で現れる大きな摩擦力を接着に利用するという真逆の研究ニーズも存在する。これらの状況を鑑みて、我々は、電子、光学、磁気、機械などあらゆるタイプのデバイス材料として注目を集めている炭素材料の同素体に着目し、特にその六員環ネットワークで形成される界面の原子スケール摩擦・摩耗の実験的^{1)~4)}、数值的^{5)~14)}研究を進めている。本稿では2010年度特別研究費「カーボンハイブリッド表面・界面のナノ摩擦の数値的研究」で進められた研究の中から、特にグラフェン/C₆₀/グラフェン界面の超潤滑の走査方向による異方性の計算から摩擦力がほぼゼロになる領域を発見したのでその結果を報告する。

2. モデルと計算手法

本研究では、分子力学シミュレーションを用いてナノカーボン界面のトライボロジー特性を数値的に調べた。グラフェン内部の炭素原子ネットワークの共有結合を表す Tersoff ポテンシャル¹⁵⁾と、グラフェン-グラフェン間、グラフェン-C₆₀分子間、C₆₀-C₆₀分子間の非結合相互作用を表す LJ ポテンシャル^{16,17)}の和で表わされる全エネルギーを、Polak-Rebireタイプの共役勾配法(CG)法¹⁸⁾を用いて極小化する。準静過程の近似が成立する条件下、すなわち $v \rightarrow 0$, $T = 0$ Kの極限で、(0001)面内に周期的なグラフェン/C₆₀/グラフェン系(図1(a))における、グラフェンシートの滑り(走査)に対して、モデル全系の構造最適化を行った。

3. 計算結果

図1(b)は、平均荷重 $\langle F_z \rangle = 0.27$ nNの条件下で、平均水平力 $\langle F_L \rangle$ を上層グラフェンシートの走査角度 θ の関数としてプロットしたものである^{12,14)}。明らかに平均水平力 $\langle F_L \rangle$ が60°周期で変化している。 $\langle F_L \rangle$ は、 $\theta = 0^\circ$, 60°でほぼゼロの極小値を取り、 $\theta = -30^\circ, 30^\circ, 90^\circ$ で極大

*¹ : 理工学部物質生命理工学科 教授 (naru@st.seikei.ac.jp)

*² : 理工学研究科物質生命コース 修士学生 (2011年3月修了)

*³ : 理工学部物質生命理工学科 助教

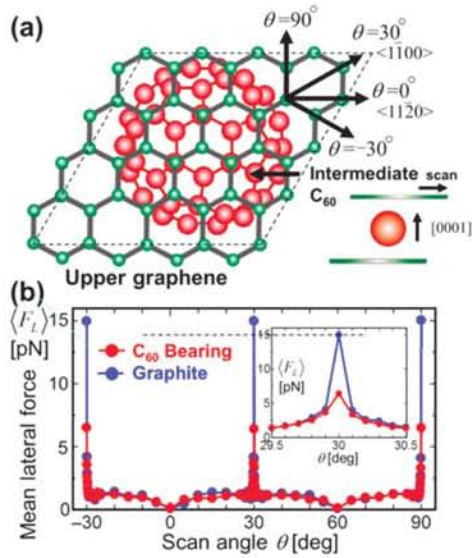


図1 (a)グラフェン/C₆₀/グラフェン界面のモデル
(b)摩擦力の異方性。

値を取る。極めて狭い角度領域 $\theta \sim 30^\circ \pm 0.5^\circ$ を除いて、 $\langle F_L \rangle$ は約 1pNの一定値を取る。極大値はC₆₀分子とグラフェンシートの格子の整合性の良さに起因している。

一方、 $\theta = 0^\circ, 60^\circ$ 方向の走査で摩擦力がほぼゼロとなる傾向は低荷重領域になるほど顕著であることが分かった。これはC₆₀分子が傾く(微小回転する)ことなく、その6員環を上下グラフェンシートにほぼ平行に向けて、炭素結合に沿って並進移動するためである。このときグラフェンシートの往復走査に対してC₆₀分子は同じ軌道上を動くため、水平力曲線にヒステリシスは現れず、平均水平力はほぼゼロ $\langle F_L \rangle \approx 0$ になる^{13,14}。このC₆₀分子の保存的運動のメカニズムはC₆₀分子が感じる全ポテンシャルエネルギー V_{total} (図2)の解析で明らかとなる。グラフェンの走査過程で全ポテンシャルエネルギー面の二次元パターンは顕著に変化するが(図2(a)-(g))、一点変化しない特徴がある。それはC₆₀分子が現在位置している極小点Pと隣接極小点Qとの間に、常にエネルギー障壁が存在するということである(図2(h))。そのため絶対零度近傍では、C₆₀分子はスティック・スリップ運動などを行うことができず、極小点にトラップされたまま連続的に動くことになる。

4. おわりに

本研究では、グラフェン/C₆₀/グラフェン界面の超潤滑の異方性の分子力学シミュレーションから、摩擦力がほぼゼロになる特異な領域を発見した。その物理的起源は、C₆₀分子の保存的運動にあり、そのメカニズムをC₆₀分子

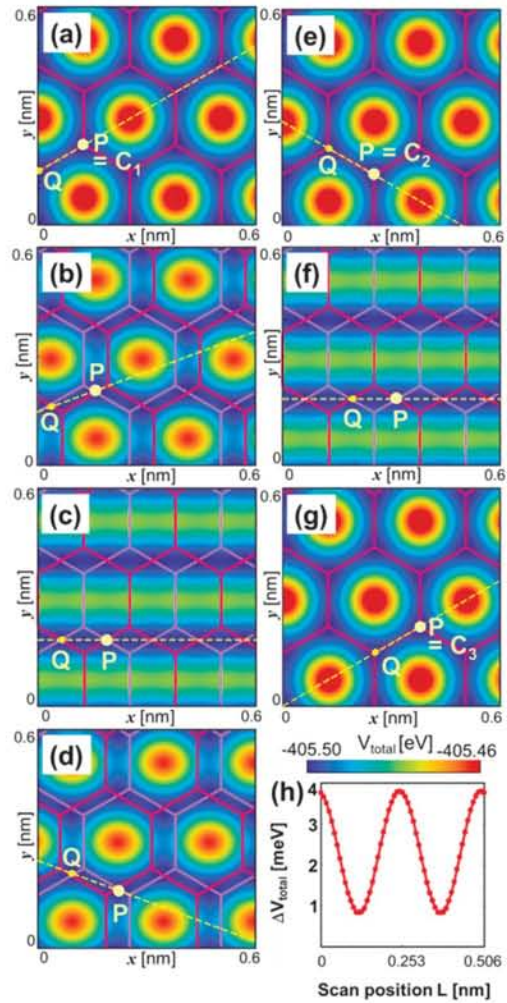


図2 グラフェン/C₆₀/グラフェン界面の $\theta = 0^\circ$ 方向の超潤滑特性。グラフェンシートの各走査位置 $L =$ (a) 0, (b) 0.067, (c) 0.127, (d) 0.186, (e) 0.253, (f) 0.380, (g) 0.506 nmに対する全ポテンシャルエネルギー面、 V_{total} 。(h) L の関数としてプロットしたPとQの間のエネルギー障壁。

が感じる全ポテンシャルエネルギー V_{total} の解析で明らかにした。すなわちC₆₀分子が現在位置している極小点Pと隣接極小点Qとの間には常にエネルギー障壁が存在するため、C₆₀分子は極小点にトラップされたまま連続的に動くのである。

参考文献

- 1) K. Miura, S. Kamiya, and N. Sasaki: Phys. Rev. Lett. 90, 055509 (2003).
- 2) K. Miura, D. Tsuda, and N. Sasaki: e-J. Surf. Sci. Nanotech.3, 21 (2005).

- 3) M. Ishikawa, R. Harada, N. Sasaki, and K. Miura: Phys. Rev. B80, 193406 (2009).
- 4) M. Ishikawa, M. Ichikawa, H. Okamoto, N. Itamura, N. Sasaki, and K. Miura: Appl. Phys. Exp. 5, 065102 (2012).
- 5) N. Sasaki, H. Saitoh, K. Terada, N. Itamura, and K. Miura: e-J. Surf. Sci. Nanotech. 7, 173 (2009).
- 6) N. Sasaki, H. Okamoto, N. Itamura, and K. Miura: e-J. Surf. Sci. Nanotech. 7, 783 (2009).
- 7) N. Sasaki, H. Okamoto, N. Itamura, and K. Miura: e-J. Surf. Sci. Nanotech. 8, 105 (2010).
- 8) N. Sasaki, H. Okamoto, S. Masuda, K. Miura, and N. Itamura: J. of Nanomat. 2010, 742127 (2010).
- 9) N. Sasaki, N. Itamura, and K. Miura: J. Phys.: Conference Ser. 89, 012001 (2007).
- 10) N. Sasaki, N. Itamura, and K. Miura: Jpn. J. Appl. Phys. 46, L1237 (2007).
- 11) N. Itamura, K. Miura, and N. Sasaki: Jpn. J. of Appl. Phys. 48, 030214 (2009)
- 12) N. Itamura, K. Miura, and N. Sasaki: Jpn. J. of Appl. Phys. 48, 060207 (2009).
- 13) N. Itamura, H. Asawa, K. Miura, and N. Sasaki: J. Phys.: Conference Series 258, 012013 (2010).
- 14) N. Sasaki, N. Itamura, H. Asawa, D. Tsuda, and K. Miura: Tribology Online 7, 96 (2012).
- 15) J. Tersoff: Phys. Rev. Lett. 61, 2879 (1988).
- 16) J. P. Lu, X.-P. Li, and R. M. Martin: Phys. Rev. Lett. 68, 1551 (1992).
- 17) S. D. Stoddard and J. Ford: Phys. Rev. A 8, 1504 (1973).
- 18) W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery: Numerical Recipes : The Art of Scientific Computing (Cambridge Univ. Press, New York, 1992) 2nd ed., 413.