

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 15 日現在

機関番号：32629

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2011～2013

課題番号：23360023

研究課題名(和文) 摩擦可変フラーレン分子ベアリングシステムの設計

研究課題名(英文) Design of Friction-Controllable Fullerene Molecular Bearing Systems

研究代表者

佐々木 成朗 (Sasaki, Naruo)

成蹊大学・理工学部・教授

研究者番号：40360862

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,300,000円、(間接経費) 1,290,000円

研究成果の概要(和文)：C60/グラフェン界面、グラフェン/グラフェン界面の超潤滑特性を分子力学シミュレーションにより調べた。まず(グラフェン)_n/C60/(グラフェン)_n界面の超潤滑において、多層($n>1$)と単層($n=1$)の違いを見出した。単層の超潤滑特性はC60-グラフェン間の積層関係のみによって決まるが、多層の時はグラフェン-グラフェン間の積層関係も寄与して、より低いエネルギーパスが開くためである。またグラフェンシートの剥離・接着において、面接触領域でのスティック・スリップ運動に由来する準周期的な水平力曲線波形が得られ、周期がグラファイトの格子定数にほぼ等しくなることを理論と実験の両方で見出した。

研究成果の概要(英文)：Superlubricity of C60/graphene and graphene/graphene interfaces is studied by molecular mechanics simulation. First, for superlubricity of (graphene)_n/C60/(graphene)_n interface, difference between multilayer ($n>1$) and monolayer ($n=1$) systems are found. For monolayer, superlubricity is derived from only stacking relation between C60 and graphene. However, for multilayer, superlubricity is also derived from that between graphene and graphene, which opens a lower energy path. Next, it is found by theory and experiment that, for peeling and adhesion of graphene sheet, quasiperiodic lateral force curve is obtained due to stick-slip motion during surface contact region, whose period nearly corresponds to the lattice constant of graphite.

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎 薄膜・表面界面物性

キーワード：ナノトライボロジー 表面・界面物性 摩擦 フラーレン グラフェン 分子シミュレーション 摩擦
力顕微鏡 走査プローブ顕微鏡

1. 研究開始当初の背景

摩擦の軽減は、全ての機械部品の故障とその波及損失の軽減につながり、省エネルギー問題に大きく貢献する。一方、フラーレンやナノチューブは、その形状から回転・転がりによる効率的な低摩擦稼動が期待出来る。研究代表者(佐々木・成蹊大)のグループは「ナノサイズのボール(フラーレン)をナノサイズのシート(グラファイト)で挟むと、ボールの回転・転がりによる超低摩擦の稼動が可能では無いか。」というフラーレン分子ベアリングのアイデアを実現して、フラーレン封入グラファイトフィルムの開発に成功し、本材料の超潤滑機構の研究を理論と実験の両面から進めている。

研究代表者は理論的観点から本システムの超潤滑機構解明の研究を進めている。透過電子顕微鏡測定は、層間距離約 1.3nm のグラファイト間に挟まれた C_{60} 分子がグラファイト平面内で最密充填構造を取る事を示唆している。そこで申請者は若手研究(B)(H17~H18)においてグラフェン/ C_{60} /グラフェン界面をモデル化し、グラフェン間の積層距離 1.3nm を分子力学シミュレーションで再現する事に成功した。次に申請者は基盤研究(B)(H20~H22)において、グラフェン/ C_{60} /グラフェン界面の超潤滑の異方性を見出し、整合性の良い走査方向では C_{60} 分子の微小回転と弾性接触が超潤滑特性の原因である事を明らかにした。

そこで研究代表者は、上記の研究成果を発展させて「フラーレン/グラフェン界面の摩擦特性を利用すれば、荷重、走査方向、温度をパラメータとする摩擦制御が可能なインテリジェント材料(システム)の提案につながるのではないかと」着想して本研究計画の提案に至った。

2. 研究の目的

フラーレン/グラフェン界面の摩擦特性を利用して、任意の摩擦制御が可能なインテリジェント材料(システム)の提案につながる糸口を探索することを本研究の目的とする。具体的には、 C_{60} /グラフェン界面、グラフェン/グラフェン界面の超潤滑特性を分子力学シミュレーションにより調べる。特に(グラフェン) $_n$ / C_{60} /(グラフェン) $_n$ 界面の超潤滑において、多層($n>1$)と単層($n=1$)の違いから多層効果を明らかにする。またグラフェン/グラフェン界面の超潤滑が、水平方向の滑りだけでは無く、剥離のような垂直方向の自由度によっても誘起されることを明らかにする。

3. 研究の方法

理論班の佐々木・板村(成蹊大)はフラーレン分子ベアリングシステムの原子スケール摩擦シミュレーションを以下の方法で行う。グラファイト、グラフェン、フラーレンの各同素体構造内部の炭素原子間共有結合には Tersoff ポテンシャル、グラファイトあるいは

グラフェンとフラーレン構造体間の非共有結合には修正 LJ ポテンシャルを用い、外部パラメータ(グラフェンシートの移動端の位置、グラフェン層数、走査・引き剥がし方向)を変化させて、共役勾配法や分子動力学法に基づくフラーレン/グラフェン界面ナノ構造の最適化を行う。

上記の理論班をメインの柱に据えて、実験班は連携研究者として本プロジェクトに参加する。三浦(愛知教育大)はフラーレン分子ベアリングシステムの摩擦力顕微鏡測定データを、鈴木(電気通信大)は固体内フラーレン動力学の NMR 測定データを理論班に提供し、多層滑り摩擦の効果、フラーレンの動力学が摩擦特性に与える効果を理論・実験の両面から定量的に理解するために協力する。その過程でフラーレン/グラフェン、グラフェン/グラフェン界面のダイナミクスを明らかにする。理論・実験両班とも大学院生を研究協力者とする。

4. 研究成果

(1) (グラフェン) $_n$ / C_{60} /(グラフェン) $_n$ 界面の超潤滑

(1a) 水平力曲線の FFT 解析 グラフェン/ C_{60} /グラフェン界面の水平力曲線の FFT 解析を行ったところ、FFT スペクトルに上層グラフェンのスライド方向の格子積層周期に対応するピークが現れ、動力学における格子の整合性の影響を指摘することに成功した。(Sasaki et al., Tribology Online 7, 96 (2012))

(1b) 単層界面との比較 グラフェン/ C_{60} /グラフェン界面を(グラフェン) $_n$ / C_{60} /(グラフェン) $_n$ 多層界面に拡張して、最外層の滑りに対する各層の滑り(並進運動)や回転が系の超潤滑に与える影響を全エネルギー計算で調べた。特に多層の場合、整合方向走査の詳細な解析を行ったところ、単層グラフェンで挟んで時とは異なり、 C_{60} 分子は明確なスティック・スリップ運動を行った。この理由として、単層の場合、 C_{60} -グラフェン間の積層関係のみがポテンシャルエネルギーを決めていたが、多層の場合、 C_{60} -グラフェン間だけでなくグラフェン-グラフェン間の積層関係もポテンシャルエネルギーに寄与するため、六員環が AB 積層的に配置しやすくなり、より低いエネルギーパスが開くようになったことが考えられる。

(1c) 荷重依存性 C_{60} 分子とグラフェンの接触界面で、グラフェンシートに C_{60} 分子由来の凹凸のしわが出来、凹部に C_{60} 分子が引っ掛かってスティック-スリップ運動が起きる事が見出されている。外部のグラフェン層を $n=2$ から 1 層ずつ増やしていったところ、荷重が増加するほど、 $n=2$ の変形量(凹凸の振幅)と、 $n \geq 3$ の変形量とのずれが大きくなり、グラフェン層数 n が増加するほど境界条件の影響を受けにくくなることが分かった。例えば平均荷重=5.8 nN 以下の場合、 $n=2$ の場合の凹凸振幅と比較して、 $n \geq 4$ のグラフェン

層の凹凸振幅が約 10%以下に抑えられることが分かった。

(1d) 水平力曲線の層数 n 依存性 層数の増加に伴い、三種類の波形 A'、B'、C'を組み合わせ合わせた水平力曲線が得られた。ただし、B'は n=2 以上で現れる。A'、B'、C'の最大値をそれぞれ $fA'c_{60}$ 、 $fB'c_{60}$ 、 $fC'c_{60}$ ($fA'c_{60} > fB'c_{60} > fC'c_{60}$)とすると、n の増加に伴い、 $fA'c_{60}$ は減少するが、 $fB'c_{60}$ 、 $fC'c_{60}$ はほぼ一定であった。グラフアイト系同様、n の増加に伴い、波形 A'はのこぎり波形のまま、波形 C'は正弦波形からのこぎり波形に変化した。同様の計算をグラフアイト系に対して行って比較したところ、水平力の最大値は $fA_{gr} > fA'c_{60}$ となり、多層構造であっても C₆₀ ベ어링系の超潤滑性の方が優れていることが分かった。

(2) グラフェンの引き剥がし過程 グラフェン/グラフェン界面の例としてグラフェンシート上のグラフェン基板からの剥離・接着シミュレーションを行った。原子間力顕微鏡測定との比較を行ったところ、面接触領域でのスティック・スリップ運動に由来する準周期的波形が出現し、その間隔がグラフアイトの格子定数にほぼ等しくなることが、理論・実験の双方で確認された。(Ichikawa, Itamura, Sasaki, Miura et al., Appl. Phys. Exp. 5, 065102 (2012))

(3) カーボンバンドルと AFM 探針の凝着、摩擦 カーボンハイブリッド構造の例としてカーボンナノチューブのバンドル構造を考え、これに原子間力顕微鏡 (AFM) 探針を押し付けて戻す計算および、走査する計算を行い、その凝着・摩擦特性を議論したところ、座屈に由来する個々のカーボンナノチューブの不連続変形の効果が垂直力曲線および水平力曲線に現れることを明らかにした。(Sasaki et al., e-J. Surf. Sci. Nanotech. 9, 409 (2011))

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 14 件)

* は corresponding author

- 1) *N. Sasaki, N. Itamura, H. Asawa, D. Tsuda, and K. Miura: “Superlubricity of Graphene/C₆₀/Graphene Interface - Simulation and Experiment”, Tribology Online 7, pp. 96-106 (2012). **査読有**
- 2) M. Ishikawa, M. Ichikawa, H. Okamoto, N. Itamura, N. Sasaki, and *K. Miura: “Atomic-Scale Peeling of Graphene”, Appl. Phys. Exp. 5, pp. 0651021-0651023 (2012). **査読有**
- 3) *N. Sasaki, H. Okamoto, and N. Itamura, “Model Simulation of Adhesion and Friction of Nano-Scale Brush”, e-J. Surf. Sci. Nanotech. 9, pp.409-415 (2011). **査読有**

- 4) *T. Ishida, F. Cleri, K. Kakushima, M. Mita, T. Sato, M. Miyata, N. Itamura, J. Endo, H. Toshiyoshi, N. Sasaki, D. Collard, and H. Fujita: “Exceptional plasticity of silicon nanobridges, ” Nanotechnology 22, pp.3557041-3557046 (2011). **Selected for nanotechweb.org. 査読有**
- 5) 佐々木成朗, 三浦浩治: 「C₆₀/ グラフェン界面構造の合成と超潤滑特性」, 日本機械学会誌 vol. 116, pp. 865-865 (2013).
- 6) 三浦浩治, 佐々木成朗: 「ナノカーボンの原子スケールの剥離と接着」, 日本物理学会誌 vol. 68, pp. 309-313 (2013). **本解説の図が口絵(p.285)で紹介される.**
- 7) 三浦浩治, 石川誠, 市川真也, 佐々木成朗: 「グラフェンの接着・剥離」, 表面科学 vol. 34, pp.85-88 (2013).
- 8) 佐々木成朗, 三浦浩治: 「C₆₀ 分子ベ어링の原子スケール超潤滑～実験と理論」, トライボロジスト vol. 58, pp. 77-84 (2013).
- 9) 佐々木成朗, 三浦浩治: 「カーボンの表面・界面におけるナノトライボロジー」, 炭素 TANSO vol. 253, pp. 122-135 (2012).
- 10) 佐々木成朗, 浅輪紘子, 板村賢明: 「グラフェン/C₆₀/グラフェン界面の特異な超潤滑特性」, 成蹊大学理工学研究報告 vol.49, No.2, pp.91-93 (2012).
- 11) 佐々木成朗: 「先端追跡: ナノサイズ液体のレオロジーに対する表面弾性効果」, 表面科学 35 巻 2 号, pp.119-119 (2014).
- 12) 佐々木成朗: 編集後記, 表面科学 34 巻 2 号, (2013).
- 13) 佐々木成朗: 「巻頭言 ささまざまな系における接着・剥離の最前線」, 表面科学 34 巻 2 号, p. 61 (2013).
- 14) 佐々木成朗: 「先端追跡: 半導体再構成表面の高精度摩擦力顕微鏡測定」, 表面科学 33 巻 5 号, pp.310-310 (2012).

[学会発表] (計 126 件)

国際会議 招待講演(主著) 3 件

- 1) N. Sasaki: Panel discussion of CM3: Carbon-based Nanomaterials for Energy, International Conference of Young Researchers on Advanced Materials, IUMRS-ICYRAM 2012, Singapore, 2012.7.4.
- 2) N. Sasaki: “Superlubricity at Nano-Scale Interfaces Formed by Graphene, Fullerene and Carbon Nanotube”, International Conference of Young Researchers on Advanced Materials, IUMRS-ICYRAM 2012, Singapore, 2012.7.4
- 3) N. Sasaki: “Superlubricity of Fullerene Molecular Bearings and Peeling of Graphene”, BIT's 1st Annual World Congress of Nano-S&T, World EXPO Center, Dalian, China, 2011.10.24.

国内会議 招待講演(主著) 11 件

- 1) **佐々木成朗**: 「ナノカーボン・ナノシリコンの摩擦・剥離・せん断シミュレーション」, 第 9 回表面技術会議, ASTEC2015, 東京ビッグサイト東 4 ホール, 2014 年 1 月 30 日.
- 2) **佐々木成朗**: 「ナノテクノロジーの世界」, 平成 25 年度武蔵野市寄付講座「身近な最先端科学」, 成蹊大学, 2013 年 9 月 23 日.
- 3) **佐々木成朗**, **三浦浩治**: 「C₆₀ 分子ベアリングのナノスケール超潤滑」, 第 153 回 継電器・コンタクトテクノロジー研究会, 機械振興会館, 2013 年 7 月 19 日.
- 4) **佐々木成朗**: 「分子のボールを転がして究極の省エネルギー技術へ ~ 摩擦がつなぐナノテク・バイオ・環境の世界」, 平成 23・24 年度武蔵野市教育委員会 教育課題研究開発校研究発表会, 武蔵野市立第一小学校, 2013 年 2 月 8 日.
- 5) **佐々木成朗**, **三浦浩治**, **藤田博之**: 「ナノ構造体の接着・剥離のトライボロジー」, 第 32 回表面科学学術講演会「摩擦の科学」研究部会シンポジウム, 東北大学多元物質研究所, 2012 年 11 月 20 日.
- 6) **佐々木成朗**: 「ナノスケール接着・剥離における摩擦の科学」, 京大・基研研究会「摩擦、レオロジー、地震の新展開—異なる階層と舞台をつなぐ—」, 京都大学基礎物理学研究所パナソニックホール, 2012 年 11 月 7 日.
- 7) **佐々木成朗**: 「分子のボールを転がして究極の省エネ!? ~ 摩擦がつなぐナノテク・バイオ・環境の世界」, (社)日本表面科学会中部支部 市民講座「やさしい表面科学 低炭素社会とまさつ」, 名城大学 名駅サテライト, 2012 年 7 月 28 日.
- 8) **佐々木成朗**, **三浦浩治**, **藤田博之**: 「炭素・シリコン界面の超潤滑・接着~グリーントライボロジーに向けて」, 日本学術振興会 ナノプローブテクノロジー第 167 委員会 第 67 回研究会, 物質材料研究機構, 2012 年 7 月 17 日.
- 9) **佐々木成朗**: 「カーボンネットワーク界面の超潤滑・剥離のメカニズム」, 第 31 回表面科学学術講演会「摩擦の科学」研究部会シンポジウム, タワーホール船堀, 2011 年 12 月 15 日.
- 10) **佐々木成朗**: 「分子のボールを転がして究極の省エネ!? ~ 摩擦がつなぐナノテク・バイオ・環境の世界」, サイエンスカフェ星と風のサロン, 星と風のカフェ, 三鷹, 2011 年 9 月 29 日.
- 11) **佐々木成朗**: 「表面の特性基礎」, (社)日本表面科学会, 第 51 回表面科学基礎講座「表面・界面分析の基礎と応用」, 東京理科大学, 2011 年 6 月 28 日.

他 112 件

- 国際会議 招待講演 (共著) 2 件
- 国内会議 招待講演 (共著) 1 件
- 国際会議 一般講演 (主著) 1 件
- 国際会議 一般講演 (共著) 8 件
- 国内会議 一般講演 (共著) 100 件

〔図書〕 (計 6 件)

- 1) **N. Sasaki** and **K. Miura**: "Superlubricity of Carbon Hybrid Interfaces," "Surfactants in Tribology volume 3", Edited by G. Biresaw and K. L. Mittal, Taylor & Francis Group, LLC, pp.3-31 (2013). **表紙に研究のイメージ図が採用される.**
- 2) **佐々木成朗**: 「現代表面科学シリーズ」日本表面科学会編 第 3 巻 表面物性「第 1 章 力学特性」pp. 1-43, (株)共立出版, (2012).
- 3) **K. Miura**, **N. Sasaki** and M. Ishikawa: "Nanoadhesion and Nanopeeling Forces of Carbon Nanotube on Substrate," "Carbon Nanotubes - From Research to Applications", Edited by Stefano Bianco, Hindawi Publishing Corp. New York, NY, United States, pp.55-66 (2011).
- 4) **K. Miura** and **N. Sasaki**: "Nanomechanics of Superlubricity", **ENCYCLOPEDIA of Nanoscience and Nanotechnology (2nd version)**, Edited by Hari Singh Nalwa, American Scientific Publishers, pp. 121-129 (2011).
- 5) **佐々木成朗**, **長谷川修司**: 「第 51 回 表面基礎講座 表面・界面分析の基礎と応用」テキスト, 日本表面科学会編, 「表面特性の基礎」, pp.117-138, (2011).
- 6) **佐々木成朗**: 2.3 節「カーボンネットワークで形成された表面・界面の原子スケール摩擦・磨耗」, 「CPC 研究会 2010 年度研究報:炭素材料の研究開発動向 2011」, CPC 研究会編, pp.53-60 (2011).

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
出願年月日:
国内外の別:

○取得状況 (計 0 件)

名称:
発明者:
権利者:
種類:
番号:
取得年月日:
国内外の別:

〔その他〕

(1) ホームページ
<http://www.seikei.ac.jp/ntechlab>
(2014.3.24 まで)

- (2) 受賞 6件
- 1) 第20回学術奨励講演賞 (表面技術協会)
(2014年3月14日付)
「C₆₀分子ベアリングのグラフェン層回転に誘起される超潤滑」
堀越大裕, 板村賢明, 三浦浩治, 佐々木成朗
 - 2) 優秀賞 (第4回トライボロジー秋の学校)
(2013年11月9日付)
「C₆₀分子ベアリングにおける超低摩擦の荷重依存性」
伊藤宏平, 板村賢明, 三浦浩治, 佐々木成朗
 - 3) 第19回学術奨励講演賞 (表面技術協会)
(2013年3月19日付)
「Si対向探針で形成された単一真実接触部のせん断破壊過程」
小熊将嗣, 石川貴大, 板村賢明, 石田忠, 藤田博之, 佐々木成朗
 - 4) 優秀賞 (第3回トライボロジー秋の学校)
(2012年12月1日付)
「グラフェンの回転に誘起されるグラファイト/C₆₀/グラファイト界面のC₆₀分子の力学」
堀越大裕, 板村賢明, 三浦浩治, 佐々木成朗
 - 5) 優秀賞 (第2回トライボロジー秋の学校)
(2011年11月5日付)
「単層グラフェンシートの引き剥がし—吸着過程における原子スケール動力学と摩擦」
増田親巖, 岡本英哲, 板村賢明, 三浦浩治, 佐々木成朗
 - 6) 優秀賞 (第2回トライボロジー秋の学校)
(2011年11月5日付)
「多層グラフェンの水平弾性の数値シミュレーション」
和知嶺介, 板村賢明, 三浦浩治, 佐々木成朗

6. 研究組織

- (1) 研究代表者
佐々木成朗 (SASAKI NARUO)
成蹊大学・理工学部・教授
研究者番号: 40360862
- (2) 研究分担者
()
研究者番号:
- (3) 連携研究者
三浦浩治 (MIURA KOUJI)
愛知教育大学・教育学部・教授
研究者番号: 50190583

鈴木勝 (SUZUKI MASARU)
愛知教育大学・教育学部・教授
研究者番号: 20196869

板村賢明 (ITAMURA NORIAKI)
成蹊大学・理工学部・助教
研究者番号: 90433854