

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 29 年 6 月 15 日現在

機関番号：12612

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2014～2016

課題番号：26286053

研究課題名(和文) グラフェンの湾曲を用いるフラーレン分子ベアリングの超潤滑制御

研究課題名(英文) Superlubric control of fullerene molecular bearings using graphene curvature

研究代表者

佐々木 成朗 (Sasaki, Naruo)

電気通信大学・大学院情報理工学研究科・教授

研究者番号：40360862

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：グラフェンの湾曲が超潤滑に与える影響を調べるため、グラファイト基板に吸着させた単層グラフェンシートの剥離過程の分子力学シミュレーションを行った。吸着の初期配向角度を、AB積層配向(0 deg.と仮定する。)から少しずつ変化させていくと、面接触部の格子不整合性の効果が現れ、面接触時の平均水平力は著しく減少して、9 deg.の配向角度では、ほぼ0 pN近傍まで落ち込み、それ以上の配向角度では平均水平力は0 pN付近で微小変化をするにとどまった。

研究成果の概要(英文)：In order to investigate the influence of graphene curvature on superlubricity, molecular mechanics simulation of peeling process of monolayer graphene sheet adsorbed onto the graphite substrate was carried out. As the initial orientation angle of the graphene adsorption is varied little by little from the AB stacking orientation, the effect of lattice mismatch of the surface contact area appears, and the mean lateral force during the surface contact process markedly decreases to about 0 pN for the orientation angle of 9 deg. For larger orientation angle, the mean lateral force changed only slightly around 0 pN.

研究分野：ナノトライボロジー、表面物性理論、計算物質科学

キーワード：表面・界面物性 ナノトライボロジー 超潤滑 接着 剥離 グラフェン フラーレン 分子シミュレーション

## 1. 研究開始当初の背景

摩擦は二物体が接触する界面で生じる現象である。従ってマイクロ～ナノメートルサイズの微視的物体では、体積に比べて表面・界面の効果が支配的になるため、物体にかかる摩擦力が著しく増大して運動を阻害する。従ってナノテクノロジーで作製した微細構造体をスムーズに動作させるには摩擦を低減する必要がある。一方、摩擦・摩耗による機械部品の故障や波及損失は年間 10 数兆円に達しており、省エネルギー・経済的観点から国家レベルの多大な損失が生じているという試算がある。従って摩擦を低減する方法の探索は産業上の要請である。

研究代表者のグループはグラフェンの超潤滑特性を更に上げるため、グラフェンの間にフラーレンを挟んで、その回転・転がりによる超低摩擦稼働を目指した。このフラーレン分子ベアリングのアイデアに基づいて C<sub>60</sub> サンドウイッチシステム、C<sub>60</sub> 封入グラファイトフィルム、C<sub>60</sub>-グラフェン交互積層フィルムを開発した。特に C<sub>60</sub> 封入グラファイトフィルムで、最大静止摩擦力・動摩擦力の両方を 100pN 以下に抑える事に成功した。

一方、研究代表者はナノスケールの超潤滑機構の数値的研究を一貫して進めてきた。まず若手研究(B)(H17~H18)でグラフェン/C<sub>60</sub>/グラフェン界面のグラフェン層間距離の実験値を分子力学シミュレーションで再現した。次に基盤研究(B)(H20~H22)で本界面の超潤滑の異方性を発見した。さらに基盤研究(B)(H23~H25)でグラフェンの剥離過程にも超潤滑が現れていることを指摘した。また、これまでに、多層グラフェンのベアリング系で C<sub>60</sub> 分子と接するグラフェンが波状の変形(微小湾曲)を起こし、そこに C<sub>60</sub> 分子がロックされて摩擦に影響を及ぼす傾向を予備計算で得ている。そこで、研究代表者は「グラフェンを湾曲させて曲率を系統的に変化させることにより、フラーレンベアリングの超潤滑特性を調節することができるのではないか？」と着想し、本プロジェクトの提案に至った。

## 2. 研究の目的

本プロジェクトではグラフェンの湾曲効果が超潤滑に与える影響を調べて、超潤滑を制御する方法を提案する。具体的には C<sub>60</sub>@多層グラフェン(微小湾曲グラフェン)では、荷重により C<sub>60</sub> 分子の形状を反映してグラフェンの微小変形(湾曲)が生じる。この湾曲が摩擦に与える効果の荷重依存性を明らかにし、フラーレン/グラフェン界面、グラフェン/グラフェン界面、フラーレン/フラーレン界面のうちどれがシステム全体の超潤滑を促進あるいは抑制するのかを明らかにする。

## 3. 研究の方法

理論班の佐々木(電通大)によるフラーレン分子ベアリングシステムにおけるグラフェ

ン湾曲効果の分子シミュレーションおよび超潤滑制御法の探索・提案がメインである。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による超低摩擦力測定データを、鈴木(電気通信大)は固体内フラーレン動力学の NMR 測定による C<sub>60</sub> 分子の回転運動、水晶振動子法による並進運動のデータを理論班に提供し、本プロジェクトを理論・実験の両面から定量的に推進するために協力する。理論・実験両班とも各機関の大学院生 2 名を研究協力者とする。研究計画は、C<sub>60</sub>@多層グラフェンと幾何学的に同等な C<sub>60</sub>@DWCNT の安定構造、回転・並進運動特性、摩擦力の異方性、温度・荷重依存性や欠陥の効果を調べ、超潤滑制御法の提案を目指す。

## 4. 研究成果

### (1) 湾曲グラフェンの引き剥がし過程における超潤滑

グラフェンの湾曲に注目し、先ずグラファイト基板に吸着させた単層グラフェンシートの剥離現象が示す異方性のシミュレーションとその解析を行った。単層グラフェンシートの格子が基板グラファイト格子上に AB 積層で初期吸着した状態(配向角度 0 deg.)からの剥離過程を考えると、面接触部の格子整合性が最も高いため、剥離時の水平力の平均値は最大になった。

しかし初期吸着配向を AB 積層から少しずつずらしていくと、面接触部の格子不整合性の効果が現れ、それに伴い剥離時の平均水平力は急激に減少して、10 deg.前後の初期配向ではほぼ 0 pN 近傍まで落ち込んだ。10 deg. ~ 30 deg.の初期配向に対する剥離過程では不整合性を反映して 0 pN 近傍で微小変化をすることにどまった。

例えば、初期配向が微小角度の時、剥離過程でグラフェンシートは基板と整合性を示す擬周期的波形を示す水平力を受けながら剥離された。この際、初期配向の微小回転により生じた不整合性を打ち消して AB 積層に近付くために、グラフェンシートはその面接触部では局所的にスティックスリップ運動を行いながら、シート全体としては首振りのなたわみ運動を行った。

このように、剥離過程で形成される 3 次元的な湾曲グラフェンのナノ力学には、さまざまな運動自由度が局所的(原子スケール)・全体的(分子・ナノスケールで)に連動して発生することが分かった。

### (2) C<sub>60</sub> ベアリング系におけるグラフェンの湾曲効果

グラフェン/グラフェン系に C<sub>60</sub> を導入したグラフェン/C<sub>60</sub>/グラフェン系の引き剥がしの予備計算を行った。グラフェンシートを剛体にした時の剥離過程はベアリング系の破壊現象とみなす事が出来、界面の C<sub>60</sub> がクッションの役割を果たした。さらに(グラフェ

ン)2/C<sub>60</sub>(グラフェン)2 系の圧縮過程の計算を行い、グラフェンシートの湾曲を考慮した垂直抗力を求める事に成功した。

## 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 13 件)

\* は corresponding author

- 1) \*Naruo Sasaki, Takakazu Ando, Shingen Masuda, Hideaki Okamoto, Noriaki Itamura, and Kouji Miura, “Anisotropy of Atomic-Scale Peeling of Graphene”, e-J. Surf. Sci. Nanotech. **14**, pp.204-208 (2016 年 7 月 30 日). ISSN 1348-0391 DOI: 10.1380/ejsnt.2016.204 **査読有**
- 2) Young-Jin Kim, Seiichiro Yamamoto, Naruo Sasaki and \*Yukiko T. Matsunaga, “Multiwall Carbon Nanotube Reinforced Biomimetic Bundled Gel Fibre”, Biomaterials Science **4**, pp. 1197-1201 (2016 年 5 月 20 日). DOI: 10.1039/C6BM00292G **査読有**  
Biomaterials Science Issue 8 (2016)のバックカバーを飾った。  
各種プレス発表
- 3) Makoto Ishikawa, Noriyuki Wada, Takahiko Miyakawa, Hiroshi Matsukawa, Masaru Suzuki, Naruo Sasaki and \*Kouji Miura, “Experimental observation of phonon generation and propagation at a MoS<sub>2</sub>(0001) surface in the friction process”, Phys. Rev. B **93**, 201401(R) (2016 年 5 月 17 日). DOI: 10.1103/PhysRevB.93.201401 **査読有**
- 4) \*T. Ishida, T. Sato, T. Ishikawa, M. Oguma, N. Itamura, K. Goda, N. Sasaki and H. Fujita: “Time-lapse nanoscopy of friction in the non-Amontons and non-Coulomb regime”, Nano Lett. **15**, pp.1476-1480 (2015), Published(Web): 2014 年 10 月 20 日. DOI: 10.1021/nl5032502 **査読有**  
Nano Lett. **15**(3)の表紙を飾った。  
[http://pubs.acs.org/action/showLargeCover?jcode=nalefd&vol=15&issue=3#](http://pubs.acs.org/action/showLargeCover?jcod e=nalefd&vol=15&issue=3#)  
各種プレス発表
- 5) 薄葉亮, 佐々木成朗, 松永行子:「束状ゲルファイバーによる細胞接着制御」, 表面科学 **38**, pp.83-88 (2017 年 2 月).
- 6) 佐々木成朗, 三浦浩治:「ナノスケール超潤滑・接着の機構と制御」, トライボロジスト **61**(8), pp.506-512 (2016 年 8 月).
- 7) 石川誠, 佐々木成朗, 三浦浩治:「カーボンナノチューブの原子スケールの引き剥がし」, 表面科学 **36**「特集号 エネルギー散逸と摩擦の制御」, pp.253-256 (2015年5月). 申請者は本特集号の編集作業を行った。
- 8) 佐々木成朗:「ネバネバしたナノの世界を制御する」, 応用物理 **84**, pp.345-346 (2015 年 4 月).

- 9) 佐々木成朗:「電気通信大学 佐々木成朗 研究室」, 応用物理学会 薄膜・表面分科会 News Letter **156**, pp.44-45 (2016 年 10 月).
- 10) 佐々木成朗:「先端追跡:非接触原子間力顕微鏡のエネルギー散逸測定で固体の二次構造相転移を見る」, 表面科学 **36**(10), pp.550-550 (2015 年 10 月).
- 11) 佐々木成朗:「ナノトライボロジーと共に歩んで」, 月刊トライボロジー **29**(1), フロントコラム, p.11, 1月号 (2015 年 1 月).
- 12) 佐々木成朗:「ナノの目で「摩擦」を解き明かす」, 造形科学ニュースレター **05** (現代化学 2月号) (2014 年 12 月).
- 13) 佐々木成朗:「研究の原点」, 表面科学 **35**(10), pp.557-557 (2014 年 10 月).

[学会発表](計 133 件)

国際会議 招待講演(主著) 4 件

- 1) N. Sasaki, M. Suzuki, K. Miura, H. Fujita: “Nano-scale Control of Friction and Adhesion at Surfaces and Interfaces”, International Meeting of Friction - from atomic to geophysical scales -, Earthquake Research Institute, The University of Tokyo, Japan, 2015. 9.15.
- 2) N. Sasaki: “Nanoscale superlubricity, peeling and fracture at carbon and silicon interfaces”, MMM2014, 7th International Conference on Multiscale Materials Modeling, Berkeley, California, USA, 2014. 10.7.
- 3) N. Sasaki: “Molecular Simulation of Sliding and Shear in Silicon and Carbon Nanostructures”, SIS-2014, The 20th International Symposium on Surfactants in Solution, “Surfactants in Tribology”, Coimbra, Portugal, 2014.6.24.
- 4) N. Sasaki: “MD Simulation of Sliding and Shear in Carbon Nanostructures”, CIMTEC 2014, Symposium: Session CC-5 Material Solutions for High Demanding Tribology Applications, Montecatini, Italy, 2014.6.10.

国内会議 招待講演(主著) 13 件

- 1) 佐々木成朗:「表面・界面摩擦をナノスケールで見て制御する～理論と実験の協働から」, 金沢大学先魁プロジェクト「極限環境における新規ナノ・マイクロ物性の研究」主催 ナノ・マイクロ物性研究会, 金沢大学角間キャンパス(石川県金沢市), 2017 年 2 月 21 日.
- 2) 佐々木成朗:「カーボンファミリーのナノトライボロジー～エネルギー散逸の測定と理論構築に向けて」, 平成 28 年度第 2 回研究会 一般社団法人ニューダイヤモンドフォーラム, 東京工業大学石川台キャンパス(東京都目黒区), 2016 年 11 月 4 日.
- 3) 佐々木成朗:「ナノスケール摩擦の素過程とエネルギー散逸」, 第 190 回 継電器・コンタクトテクノロジー研究会, 機械振興会館(東京都港区), 2016 年 8 月 26 日.

- 4) **佐々木成朗**: 「摩擦の表面科学」, 2016 年市民講座「すごいぞ! 身のまわりの表面科学 ~ ツルツル、ピカピカ、ザラザラの不思議~ (社)日本表面科学会関東支部, 東京大学理学部小柴ホール(東京都文京区), 2016 年 7 月 31 日.
- 5) **佐々木成朗**: 「表面・界面摩擦をナノスケールで見て制御する ~ 理論と実験の協働から」, 日本表面科学会 第 86 回表面科学研究会・日本真空学会 2016 年 1 月研究例会「ナノトライボロジー: 現在と未来」, 東京大学理学部化学館 5 階講堂(東京都文京区), 2016 年 1 月 22 日.
- 6) **佐々木成朗**: 「ナノスケール表面・界面における摩擦・凝着の素過程」, 日本表面科学会関東支部 第 2 回関東支部セミナー「ナノ表面界面を介したエネルギー・物質輸送の計測とシミュレーション研究の最前線」, 東京理科大学 森戸記念館(東京都新宿区), 2015 年 11 月 13 日.
- 7) **佐々木成朗**: 「カーボン・シリコンのナノスケール界面摩擦の理論的・数値的研究 ~ 理論と実験の協働~」, 第 2 回多摩産業人・電通大連携協議会, 電気通信大学(東京都調布市), 2015 年 11 月 9 日.
- 8) **佐々木成朗**: 「ナノスケール界面摩擦のメカニズム」, 日本機械学会 2015 年度年次大会 先端技術フォーラム「マクロとミクロを繋ぐ摩擦の科学」, 北海道大学工学部材料化学系棟 M030 号室(北海道札幌市), 2015 年 9 月 14 日.
- 9) **佐々木成朗**: 「ナノカーボン・シリコン界面のトライボロジー ~ 理論と実験の協働~」, 東京理科大学総合研究機構ナノカーボン研究部門ワークショップ「実験と理論の協調によるナノ空間・ナノ物質研究の最前線」, 東京理科大学 神楽坂キャンパス(東京都新宿区), 2014 年 11 月 25 日.
- 10) **佐々木成朗**: 「ナノカーボン・シリコン界面摩擦における真実接触部の力学の理解へ向け」, 第 10 回 固体潤滑シンポジウム, 東京理科大学 森戸記念館(東京都新宿区), 2014 年 10 月 22 日.
- 11) **佐々木成朗**, 三浦浩治: 「ナノカーボン・シリコンの表面・界面におけるナノトライボロジー」, 第 166 回 継電器・コンタクトテクノロジー研究会, 機械振興会館(東京都港区), 2014 年 8 月 15 日.
- 12) **佐々木成朗**: 「表面・界面のナノトライボロジーの諸問題」, キヤノン株式会社講演会, キヤノン株式会社 総合R&D本部(東京都大田区), 2014 年 7 月 15 日.
- 13) **佐々木成朗**: 「ナノスケール摩擦の測定から制御へ ~ 分子のボールを転がして摩擦ゼロを目指す ~」, 千葉大学大学院理学研究科 物理学コース 物性セミナー(千葉県千葉市), 2014 年 7 月 8 日.

他 下記の 116 件

- |                |      |
|----------------|------|
| 国際会議 招待講演 (共著) | 6 件  |
| 国内会議 招待講演 (共著) | 1 件  |
| 国際会議 一般講演 (主著) | 8 件  |
| 国際会議 一般講演 (共著) | 22 件 |
| 国内会議 一般講演 (主著) | 7 件  |
| 国内会議 一般講演 (共著) | 72 件 |

〔図書〕(計 2 件)

- 1) **K. Miura**, M. Ishikawa, M. Ichikawa, **N. Sasaki**: “Atomic-Scale Exfoliation and Adhesion of Nanocarbon”, “Graphene Science Handbook: Vol. 1 Fabrication Methods”, Edited by Mahmood Aliofkhaezrai, Nasar Ali, William I. Milne, Cengiz S. Ozkan, Stanislaw Mitura, Juana L. Gervasoni, CRC Press, Taylor & Francis, pp.115-124 (2016. 4. 25). (総ページ数:576) ISBN 9781466591271 - CAT# K20505
- 2) **佐々木成朗 他**: ブルーボックス「すごいぞ! 身のまわりの表面科学」第 4 章「摩擦の表面科学」, 日本表面科学会編 講談社, (2015 年 10 月 21 日発行) (総ページ数:272) ISBN-10: 4062579405, ISBN-13: 978-4062579407. 第 4 章の編集及び執筆を行った。

〔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  
電気通信大学佐々木成朗研究室  
<http://nanotribo.g-edu.uec.ac.jp/indexj.html>

(2) 受賞 7 件

- 1) **表面技術協会 第 23 回学術奨励講演賞**  
(2017 年 3 月 10 日付)  
「カーボン分子ベアリングの超潤滑」  
成田 武史, 本橋 雅章, 今村 祥, 板村 賢明,  
杉本 学, 櫻井 英博, 鈴木 勝, 三浦 浩治,  
**佐々木 成朗**
- 2) **ナノトライボロジー研究センター開設シンポジ**

**ウム 第二部 電通大-東京理科大合同研究会  
優秀ポスター講演賞**

(2017年3月8日付)

「フラーレン分子ベアリングの一軸圧縮弾性の  
数値解析」

小宮山 史郎, 板村 賢明, 杉本 学, 櫻井 英  
博, 三浦 浩治, 佐々木 成朗

- 3) **東京理科大学-電気通信大学 合同若手研究  
会 - 表面・界面現象の新展開:吸着・物質移  
動・エネルギー散逸 - 優秀ポスター講演賞**

(2016年3月14日付)

「フラーレン分子ベアリングの超潤滑の走査方  
向依存性」

成田武史, 今村祥, 本橋雅章, 板村賢明, 鈴  
木勝, 三浦浩治, 佐々木成朗

- 4) **ITC Tokyo 2015 "Poster Award for Young  
Tribologists"**

(2015年9月17日付)

“Superlubricity of Fullerene Molecular  
Bearings”

S. Imamura, K. Itoh, N. Itamura, M. Suzuki, K.  
Miura, N. Sasaki

- 5) **ITC Tokyo 2015 "Poster Award for Young  
Tribologists"**

(2015年9月17日付)

“Measurements of Nanoscale Dynamic Friction  
in a Low Temperatures”

T. Oyamada, J. Taniguchi, M. Suzuki, N. Sasaki,  
M. Ishikawa, K. Miura

- 6) **表面技術協会 第21回学術奨励講演賞**

(2015年3月4日付)

「Si 対向探針で形成した単一真実接触部のせん  
断過程におけるアモルファス原子分布の効果」

中嶋 佑樹, 小熊 将嗣, 大野 真弘, 板村 賢  
明, 中野 武雄, 石田 忠, 藤田 博之, 佐々木  
成朗

- 7) **第5回トライボロジー秋の学校 優秀ポスター  
賞**

(2014年9月25日付)

「カーボンナノチューブの原子間力顕微鏡像  
のシミュレーション」

本橋雅章, 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)

電気通信大学大学院・情報理工学研究  
科・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)

電気通信大学大学院・情報理工学研究  
科・教授

研究者番号: 20196869

板村賢明 (ITAMURA NORIAKI)

成蹊大学・理工学部・助教

(2015年3月まで)

研究者番号: 90433854