

炭素材料界面の超潤滑特性の数値的研究

佐々木 成朗^{*1}, 板村 賢明^{*2}, 三浦 浩治^{*3}

Numerical Study of Superlubricity of Carbon-Materials Interface

Naruo SASAKI^{*1}, Noriaki ITAMURA^{*2}, Kouji MIURA^{*3}

ABSTRACT : Superlubricity of the graphite/C₆₀/graphite interface is numerically investigated and compared with that of the graphite/graphite/graphite interface. Simulated interlayer distances of about 1.3nm are in good agreement with previous experimental results. The atomic-scale friction coefficient of the graphite/C₆₀/graphite interface decreases to about 30% of that of the graphite/graphite/graphite interface.

Keywords : Superlubricity, Friction, Fullerene, C₆₀, Graphite, Molecular Mechanics Simulation, Atomic Force Microscopy

(Received September 24, 2008)

1. はじめに～超潤滑システム概念

床の上に直接板を置いて滑らせるのと、パチンコ玉を床にばらまいてその上から板を置いて滑らせるのとでは、当然後の方が滑りやすい。これは床と板との間に働く摩擦が、パチンコ玉の転がりによって軽減されるためである。このパチンコ玉は機械工学の分野で言うボールベアリングの役割を果たしている。これと同じ構造をナノサイズの世界で作ってみたら摩擦は小さくなるのではないか？三浦、佐々木ら¹⁾⁴⁾は、ナノの「板」としてグラファイト(黒鉛)という炭素の二次元シート、ナノの「球」として世界最小のサッカーボールと呼ばれるフラーレンC₆₀を用いる事を考えた。これらの組み合わせは強い化学結合を誘起しない筈なのでスムーズな動きが期待出来る。C₆₀分子の六員環と上下層のグラファイトの六員環とが、エネルギー的に安定なAB積層の配置を取る事を考慮して上層グラファイト薄膜を滑らせると、C₆₀分子の上下にトルクがかかってC₆₀分子が転がる事が予想される(図1)。本稿では、平成19年度特別研究において「炭素材料界面の超潤滑特性の数値的研究」を推進して得られた結果を報告する。

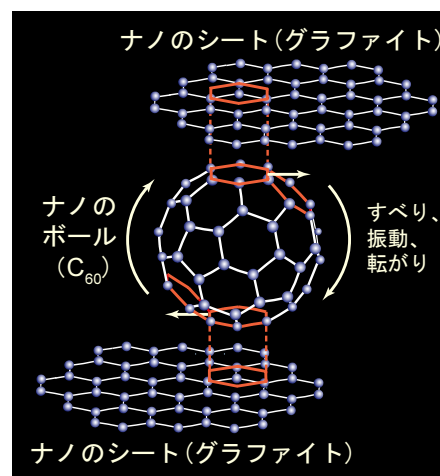


図1 単分子ベアリング描像

2. 超潤滑炭素薄膜の測定

グラファイトを硝酸と硫酸の混酸中でかくはんした後水洗いし、1000℃以上に保ってC₆₀粉末と共に2週間ほど保つと、図2(a),(b)の透過電子顕微鏡像が示すように、C₆₀が封入されたグラファイトの薄膜が作製される。グラファイト[0001]面内ではC₆₀分子は最密充填構造を取る(図2(a))一方、[0001]軸方向にはC₆₀単分子層が約1.3nmの間隔で積層する構造を取っている(図2(b))。

摩擦力顕微鏡測定の結果、図3に示すように、二次元摩擦力像と水平カループが得られた。100nN以下では

^{*1} : 成蹊大学理工学部 物質生命理工学科 教授
naru@st.seikei.ac.jp

^{*2} : 成蹊大学理工学部 物質生命理工学科 助手

^{*3} : 愛知教育大学 物理学教室 教授

0.1nN の測定機器の分解能以下で最大静止摩擦力も動摩擦力(平均水平力)もゼロを示すこと、および摩擦係数が 0.001 未満である事が分かった⁴⁾⁻⁹⁾。

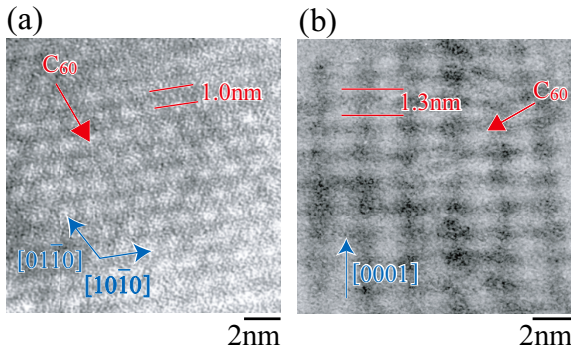


図2 C₆₀封入グラファイトフィルムの透過電子顕微鏡像。(0001)面に(a)平行 (b)垂直方向のパターン。

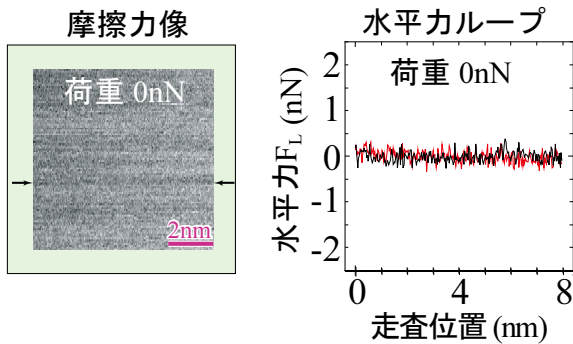


図3 C₆₀封入グラファイトフィルムの垂直荷重に対する摩擦像と水平カループ。測定精度以下で動摩擦力(平均水平力)も最大静止摩擦力もゼロに近い状況が成立している。

3. 超潤滑炭素薄膜のシミュレーション

分子力学シミュレーションを用いて、超潤滑薄膜の構造を調べた⁶⁾⁻¹¹⁾。図4(a)のようにC₆₀単層薄膜を二枚のグラファイト単層膜(グラフェン)で挟んだ周期モデルを考え、C₆₀分子内とC₆₀分子-グラファイト間に適当な結合、非結合相互作用ポテンシャル関数を適用して、層間距離 d の関数として垂直荷重 F_z と全エネルギー U を計算したところ、上下グラフェン層間間隔が 1.31nm の所で安定構造が現れた(図4(b))。佐々木、三浦は他にも複数の準安定構造を見出したが、いずれも約 1.3nm 近傍の層間距離を示した。このように TEM 測定で得られた層間距離を説明出来た⁶⁾⁻¹¹⁾。

次に上層グラファイトを水平走査して摩擦特性を調べたところ、C₆₀ベアリングシステムの超潤滑性の起源と考えられる、典型的なC₆₀分子の運動が出現した^{10),11)}。

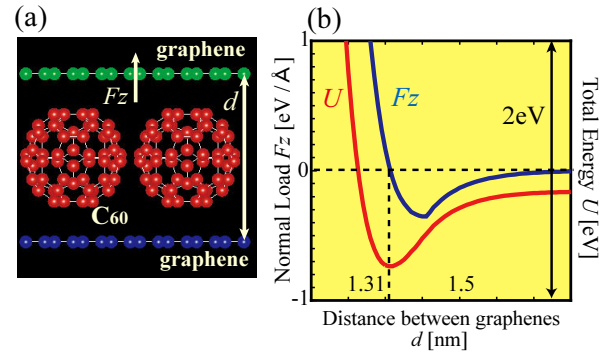


図4 (a) C₆₀ベアリング系のシミュレーションモデル。(b) グラファイト層間距離 d の関数としての垂直力 F_z と全エネルギー U 。 $F_z=0$ (U は極小)となる $d=1.31$ nmが平衡距離である事が分かる。

ここではC₆₀分子の六員環とグラファイトの六員環がAB積層を維持してC₆₀分子が滑るモード(図5(a))と、C₆₀分子が転がるモード(図5(b))を紹介する。[10 $\bar{1}$ 0]方向の走査に対して、C₆₀分子が滑るモードでは図5(a)のようにスティックスリップに伴うヒステリシスを持つ 0.44nm 周期の水平カループ、C₆₀分子が転がるモードでは図5(b)のように不連続回転に由来する微小なヒステリシスを持つ 2.56nm 周期の水平カループが得られた。滑りモードの摩擦係数は、グラファイトの計算値 0.0082 の 30% 以下、0.0023 に抑えられる事が分かった(図5下)。

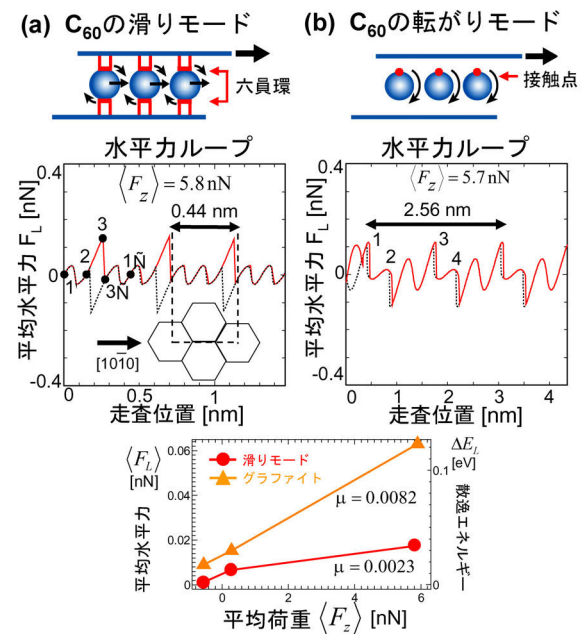


図5 (a) C₆₀分子ベアリングにおける[10 $\bar{1}$ 0]方向の(a)滑りモード(b)転がりモードの概念図と水平カループ。グラファイト系と滑りモードの摩擦係数の比較。

以上の結果は、グラファイトの層間にグラファイトシートを挟む場合よりも、 C_{60} 分子を挟む場合の方が、 C_{60} 分子の微小回転・並進運動の自由度によって、全ポテンシャルエネルギーのより低い経路が開きやすくなり、ずれ応力が減少する、という原子レベルの超潤滑シナリオで説明出来る^{10),11)}。

4. おわりに

本稿では特別研究費課題を推進して得られた結果として、超潤滑 C_{60} 分子ベアリングの FFM 測定及び分子力学シミュレーション研究の現状を紹介し、 C_{60} 分子の微小回転・並進運動の自由度が原子レベル超潤滑を誘起する可能性を指摘した。カーボン系超潤滑薄膜の研究は、単に従来のナノスケール摩擦の発展的研究課題であるだけでなく、環境・エネルギー問題から医療技術まであらゆる分野への適用可能性を持っており、より豊かな社会生活の実現に寄与する事が期待される。

参考文献

- 1) K. Miura, S. Kamiya and N. Sasaki: Phys. Rev. Lett. **90**, p.055509 (2003).
- 2) N. Sasaki and K. Miura: Jpn. J. Appl. Phys.**43**, p.4486 (2004).
- 3) 佐々木成朗, 三浦浩治: ナノマテリアルハンドブック, エヌ・ティー・エス, pp. 51-59 (2005).
- 4) 佐々木成朗: 日経ナノビジネス 4月11日号, pp. 18-21 (2005).
- 5) K. Miura, D. Tsuda, N. Sasaki: e-J. Surf. Sci. Nanotech.**3**, p.21 (2005).
- 6) K. Miura, D. Tsuda, N. Itamura, N. Sasaki: Jpn. J. Appl. Phys. **46**, p.5269 (2007).
- 7) 佐々木成朗, 三浦浩治: ナノテクのための物理入門, 共立出版, pp. 37-58 (2007).
- 8) 三浦浩治, 佐々木成朗: ナノカーボンハンドブック, エヌ・ティー・エス, pp.680-685 (2007).
- 9) N. Sasaki, N. Itamura, D. Tsuda, K. Miura: Current Nanoscience. **3**, p.105 (2007).
- 10) N. Sasaki, N. Itamura, K. Miura: J. Phys.: Conference Series **89**, p.012001 (2007).
- 11) N. Sasaki, N. Itamura, K. Miura: Jpn. J. Appl. Phys. **46**, p.L1237 (2007).