

ナノカーボン複合材料表面・界面のメカニクス

佐々木 成朗*¹, 岡本 英哲*², 斎藤 漠興*², 板村 賢明*³

Mechanics of Surface and Interface of Nanocarbon Hybrid Materials

Naruo SASAKI*¹, Hideaki OKAMOTO*², Hirooki SAITOH*², Noriaki ITAMURA*³,

ABSTRACT : Recently carbon materials have attracted many attentions as electronic, magnetic, optical and mechanical devices. We have so far numerically studied tribology of the carbon materials, particularly atomic-scale friction and wear at carbon interfaces formed by graphene, fullerene, and carbon nanotube by molecular mechanics simulations. First atomic-scale wear of graphene/graphene interface induced by friction-force microscopy tip is investigated. The transition from the nano-tip state to the graphene-tip state is revealed. Next, during the peeling process of the graphene sheet from the graphite surface, the effect of the superlubricity on the peeling process is clarified.

Keywords : Tribology, friction, adhesion, graphite, friction force microscopy

(Received September 24, 2010)

1. はじめに

近年のナノテクノロジーの発展によって微細加工のバリエーションは驚くほど多岐に渡り、マイクロマシン、ナノマシンの実用化への夢が膨らむが、現実には問題はいくつではない。その理由はミクロの世界では機械が動きにくくなってしまふからである。例えば半径 1cm の球体と 1nm の球体を比較すると、表面積の体積に対する比率は、1nm の球の場合、1cm の球に比べて 1000 万倍にも及び、表面の効果が 1000 万倍になる。この時表面を介して働く微視的な物理結合・化学結合が顕在化して摩擦力が極めて大きくなる。つまりナノテクで作成に成功した微細機械を動かし始めても、何らかのきっかけで摩擦が生じて機械が止まってしまう可能性が高い。これはマイクロ・ナノマシン市場の拡大を推進する上で大きな障害となり得る。こうしてナノテクノロジー産業の要請から、微小領域での摩擦をコントロールする研究、特に超低摩擦・超潤滑研究のニーズが発生する。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全く逆方向の研究ニーズも存在する。そこで我々は、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・摩擦の実験的^{1)~3)}、数值的^{4)~11)}研究を進めている。本稿では 2009 年度特別研究費「ナノカーボン複合材料表面・界面のメカニクス」で進められた研究の中から、特にグラフェンで形成された炭素界面の摩擦、凝着を分子力学法で調べた結果を報告する。

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グラフェン/グラフェ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¹²⁾と、ナノ探針-グラフェン、グラフェン-グラフェン間の非結合相互作用を表す LJ ポテンシャル^{13)~14)}の和で表わされる全エネルギーを、Polak-Rebierre タイプの共役勾配法(CG)法¹⁵⁾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 $v \rightarrow 0$ 、 $T = 0 \text{ K}$ の極限で、ナノ探針、非周期孤立グラフェンシート、周期的上層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。

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

*2 : 工学研究科物理情報工学専攻 修士学生

*3 : 理工学部物質生命理工学科 助手

3. 摩擦力顕微鏡の走査過程⁴⁾ (探針/グラフェン界面)

先ず多層グラフェン基板上でナノスケール探針を水平走査する際のグラフェン生成過程を調べた (Fig.1 (a))。ナノ探針を一定高さモードで $\langle 12\bar{3}0 \rangle$ 方向に走査した後、逆方向に元の位置まで走査する。探針をグラフェン試料に押しつけるに伴って、グラフェン層がナノ探針に付着して滑るようになり、ナノ探針モードからグラフェン探針モードへの転移が現れる。平均荷重が増加するにつれて、平均水平力は、ナノ探針モードで急激に増加してピークを示し、その後グラフェン探針モードで減少して荷重によらずほぼ一定の値をとる (Fig.1 (b))。この結果は、ナノ探針モードが探針-グラフェン最外層間の摩擦を検出し、グラフェン探針モードが、グラフェン最外層-第2層間、または第2層-第3層間に働く内部摩擦を検出する事を示している。このようなグラフェン探針生成過程の理解は原子スケール摩擦の素過程のメカニズムの解明につながる。

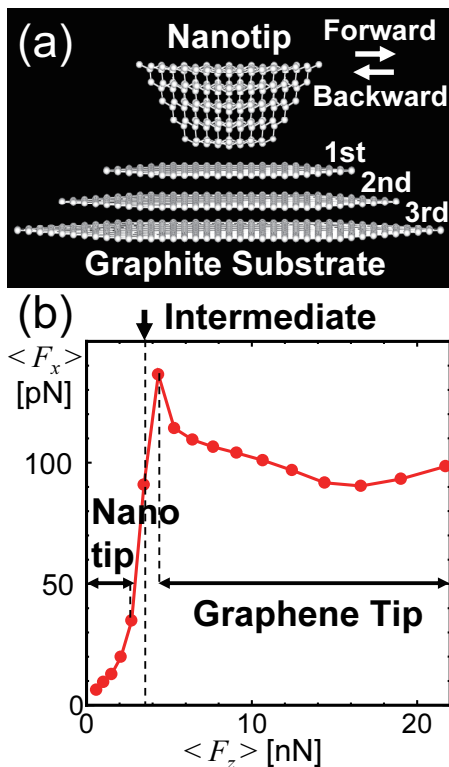


Fig. 1 (a) Model of tip/substrate interface. (b) Mean lateral force as a function of the mean loading force.

4. グラフェンの引き剥がし過程^{5)~7)} (グラフェン/グラフェン界面)

次にグラフェンシートのグラファイト基板からのナノスケール引き剥がし過程を調べた (Fig.2 (a))。グラフェンシートの中央部分を持って引き剥がす場合、中央付近の部分的な引き剥がれが起こり、力曲線に不連続なジャンプが現れる。それに対応してグラフェンシートはアーチ状の変形を起こした。一方グラフェンシートの端の部分を持って引き剥がす場合、原子スケール摩擦の効果が現れる。グラフェンシートがグラファイト基板と面接触している時、シートはグラファイト基板上を原子スケールでスティックスリップ運動を起こしながら水平方向に滑る。従って力曲線にはグラファイトシートが滑る方向の格子周期が現れる (Fig.2 (b))。更にグラフェンシートの自由端がアームチェア型かジグザグ型かによって、シートの原子スケール滑りに違いが現れた。これらの知見は、摩擦力顕微鏡探針/試料界面でのグラフェンシートの原子スケール摩擦の直接観察の評価法として役立つだけでなく、シートが滑る方向の結晶軸と自由端の構造を決定出来る可能性を示唆している。

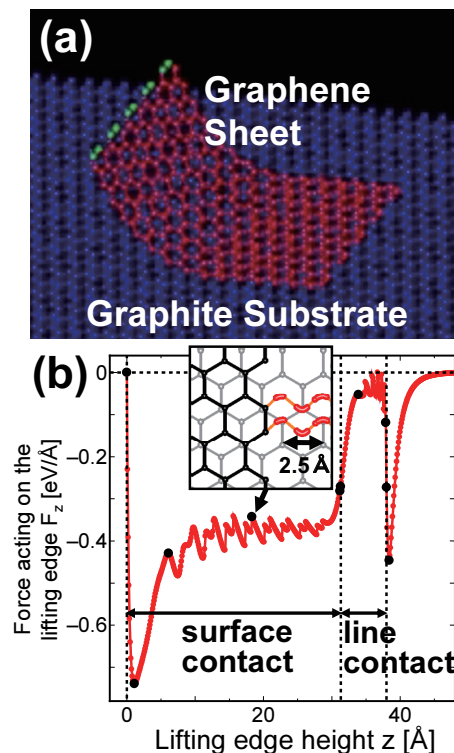


Fig. 2 (a) Model of graphene/substrate interface. (b) Force curve reflects stick-slip behaviors.

5. おわりに

本研究では、先ず多層グラフェン基板に摩擦顕微鏡探針を押しつけて、グラファイト摩耗の原子スケール素過程を調べ、探針押し付けに伴うナノ探針モードからグラフェン探針モードへの転移を見出した。次に単層グラフェンをグラファイト基板表面から引き剥がす過程で、面接触から線接触への転移と、面接触における超潤滑の寄与を明らかにした。

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) N. Sasaki, H. Saitoh, K. Terada, N. Itamura, and K. Miura: *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **7**, 173 (2009).
- 5) N. Sasaki, H. Okamoto, N. Itamura, and K. Miura: *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **7**, 783 (2009).
- 6) N. Sasaki, H. Okamoto, N. Itamura, and K. Miura: *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **8**, 105 (2010).
- 7) N. Sasaki, H. Okamoto, S. Masuda, K. Miura, and N. Itamura: *J. of Nanomat.* **2010**, 742127 (2010).
- 8) N. Sasaki, N. Itamura, and K. Miura: *J. Phys.: Conference Ser.* **89**, 012001 (2007).
- 9) N. Sasaki, N. Itamura, and K. Miura: *Jpn. J. Appl. Phys.* **46**, L1237 (2007).
- 10) N. Itamura, K. Miura, and N. Sasaki: *Jpn. J. of Appl. Phys.* **48**, 030214 (2009).
- 11) N. Itamura, K. Miura, and N. Sasaki: *Jpn. J. of Appl. Phys.* **48**, 060207 (2009).
- 12) J. Tersoff: *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2879 (1988).
- 13) J. P. Lu, X.-P. Li, and R. M. Martin: *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1551 (1992).
- 14) S. D. Stoddard and J. Ford: *Phys. Rev. A* **8**, 1504 (1973).
- 15) 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.