

単層グラフェンシートの剥離過程における摩擦界面動力学

薄膜表面物性研究室 中澤 実希

S111101 Miki NAKAZAWA

背景と目的

C₆₀分子ベアリング (図 1) は、グラファイトと C₆₀分子を組み合わせた多層かつ多結晶構造の固体潤滑システムである[1]。これまでの潤滑メカニズムに関する研究は C₆₀分子に注目したものが多く[2]、グラファイト層の変形効果や多層構造における内部の層での滑り方向など、単一界面で生じる潤滑メカニズムについては議論されていない。そこで、単一界面を議論できるグラフェンシート引き剥がし実験[3]に注目した (図 2)。本研究では、グラフェンシートをグラファイト基板上や C₆₀分子薄膜上から引き剥がす実験をシミュレートし、C₆₀分子ベアリングの単一界面での挙動と潤滑メカニズムについて調べた。

計算モデルと手法

図 3 のグラファイトモデルと C₆₀分子薄膜モデルを用い、剥離過程をシミュレートした。グラファイト基板は 1 辺約 65 Å の六角形を用い、C₆₀は 61 個の分子を最密充填構造で基板上に配置した。グラフェンシートは横幅 37.983 Å、縦幅 20.438 Å のサイズを使用した。グラフェンシートの左端の原子列を+z 方向に引き上げ、各左端移動位置において構造安定化を行った。左端の原子にかかる力を計算し、力の振幅と周期を解析した。

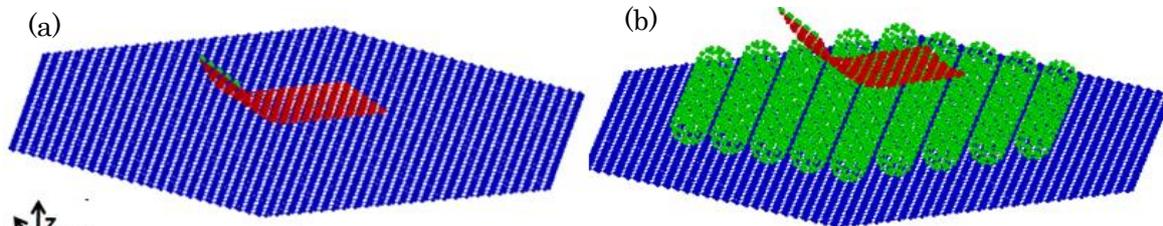


図 3. 用いたモデル : (a)グラファイトモデル (b) C₆₀分子薄膜モデル

結果および考察

図 4 は、剥離過程における y 軸方向の力曲線である。C₆₀分子薄膜モデルの力の振幅は、グラファイトモデルよりも小さくなった。両モデルの振幅の比は、グラフェンシートが接触している原子数の比と一致した。したがって、C₆₀分子薄膜上では、接触面積が減少することで、潤滑性が高まったと考えられる。

次に、力の周期に着目した。両モデルとも 2.53 Å の周期が見られた。この周期は [12-30] 方向のグラファイトの格子周期と一致しており、グラフェンシートが [12-30] 方向へ滑りながら剥離することがわかった。

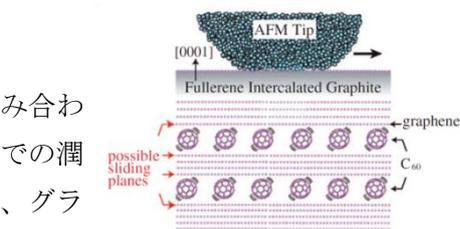


図 1. C₆₀分子ベアリング

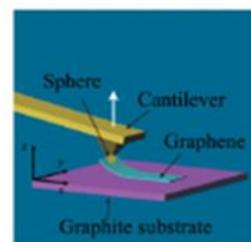


図 2. グラファイト引き剥がし実験

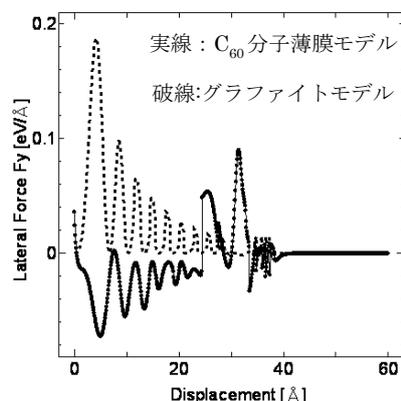


図 4. 剥離過程の水平方向の力 F_y

[1] K. Miura, D. Tsuda, N. Itamura, N. Sasaki: Jpn. J. Appl. Phys., **46** (2007) 5269.

[2] N. Itamura, K. Miura, N. Sasaki: Jpn. J. Appl. Phys., **48**, (2009) 030214.

[3] 三浦浩治, 石川誠, 市川真也, 佐々木成朗: 表面科学, **34**(2) (2013) 85.