

研究課題別評価

1 研究課題名: ナノ力学理論の開発と力学的制御による表面機能発現

2 研究者氏名: 佐々木 成朗

3 研究の狙い:

ナノ構造体(固体表面上に組織化される薄膜や原子・分子鎖)は、外場により容易に変形して物性が変化し、新たな機能を発現する。そこで本研究では外場の例として「力」を考え、表面・界面ナノ構造の力学的挙動を第一原理的電子状態計算、古典的分子動力学計算を併用して明らかにし、ナノサイエンスの基礎としての「ナノ力学」理論の構築を目指す。具体的には(1)ナノマシンの創出、(2)ナノ加工技術の確立を柱に据えて研究を進めた。

本研究で提案されるナノ力学理論は従来の固体物性論の枠にとどまらない新しい理論的枠組みであり、21世紀のナノテクノロジーの指導原理を与える事が期待される。ナノサイズの摩擦機構、探針-表面間相互作用、金属吸着半導体表面の動力学といった諸問題の解明を通して、理論の立場から有用な機能を示す表面の力学的制御・加工法の理論的提案を狙った。

4 研究成果:

(1) ナノマシンの創出

ナノマシンに関する重要な要素技術として、潤滑系が考えられる。ナノサイズの物体では、物体サイズに対する相互作用力の影響が極めて大きくなるため、容易に駆動することは困難である。そこで相互作用を小さくするような、化学的に安定なファンデルワールス力で相互作用を行う炭素材料の組み合わせによる潤滑系を考えた。

① グラファイト/C₆₀/グラファイト系 ~ 動摩擦ゼロの超潤滑 C₆₀ 分子ベアリング

本研究では、グラファイトの超潤滑に着目し、グラファイト薄膜シートでフラーレン C₆₀ の単層膜をはさんだシステムを検討した結果、これが動摩擦ゼロの超潤滑システムになることを、実験研究者との共同研究により世界で初めて発表した。同時に熱揺らぎの効果を取り入れてエネルギー極小経路を実現する「ステップ回転モデル」の概念を提唱した。これは C₆₀ 単分子の動力学に着目した「単分子ベアリング描像」と言える。グラファイトシートを動かすと、C₆₀ 分子とグラファイトシートの上にある炭素の六員環が AB 積層を保持するよう、ナノサイズの歯車(ナノギア)としてかみ合っ動作し、C₆₀ が「分子ベアリング」として転がる様子は、我々が日常体験する歯車や転がり摩擦の概念とのアナロジーがあるため理解しやすい。

グラファイト/C₆₀ 単層薄膜/グラファイト系のポテンシャル場を解析した結果、グラファイト-C₆₀ 単層膜間の距離を変えるとポテンシャル場の形状や安定点の位置が変化することが分かった。距離の変化は荷重の変化に対応するため、薄膜の搬送特性に著しい荷重依存性が見出された。この特性を利用した制動制御技術への展開が期待される。

② グラファイト/グラファイト系

摩擦力学実験の解析から、グラファイト薄膜は AB 積層を保ちながら stick-slip 運動を示す事が示唆された。測定された摩擦力と slip 運動を行う際のエネルギー障壁の値から、フレークの有効接触半径 0.856nm を見積もる事が出来た。

③ グラファイト系

グラファイト表面上の単突起摩擦を調べ、実験の力曲線から評価出来る水平方向硬さを、探針自体の変形を取り入れたモデルで説明出来た。走査時に探針の変形が起こる事は既に多くの研究者に指摘されているが、実験結果と対比させて定量的にその重要性を示したのは初めてである。

(2) ナノ加工技術の確立

非接触原子間力顕微鏡(NC-AFM)による操作技術のシミュレーションの精密計算技術を確立し、各種プローブおよび条件下にてシミュレーションを行った。

① 化学的に活性な Si(111)プローブおよび不活性な水素吸着プローブ

探針先端に Si が露出している活性 Si(111)探針で、Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 表面を走査する場合の非接触原子間力顕微鏡像を計算したところ、6.2K で測定された低温 AFM 実験の像のパターンを非常に良く再現した。また Si 探針を表面に接近させると探針の Si 原子と表面 Ag 原子間に強い凝着が生じ、結合が生成する事を見出した。

更に探針先端を水素で終端した不活性 SiH₄ 探針を Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 表面上で走査した時の極低温非接触AFM像の計算を行ったところ、探針の接近に伴い像のパターンが可逆的に変化する現象を発見した。実際の極低温実験でも同様の傾向が観察されており、実験を予測する事に成功した。

② 試料表面のナノ力学効果の温度依存性

Si 探針と Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 表面との間に働く相互作用力の密度汎関数法計算を行ったところ、温度の変化により、表面吸着銀原子の熱揺らぎ特性が変化するため、高温、常温、低温で探針が受ける相互作用が顕著に変化する事が明らかにされた。高温では完全にランダムな揺らぎ、常温では IET 相の一方に重みのついた揺らぎ、低温では揺らぎのピン止めを示す結果が得られた。

③ 非接触 AFM 多突起探針モデル

非接触原子間力顕微鏡の多突起探針効果を調べた。単突起計算の結果を重ね合わせる事により、多突起探針による半導体表面の非接触 AFM 像を世界で初めて計算した。その結果従来説明のついていなかった Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag 表面の実験例の一つを新たに説明する事に成功した。

5 自己評価:

ナノテクノロジーにおける表面ナノ構造体の力学的効果に関する議論はこれまで皆無であったが、本研究のいくつかのテーマが元になり、その重要性を世間にアピールする結果が得られたと考えている。例えば、(1)ナノマシン・C₆₀ ペアリング系のダイナミクス概念は世界最小のペアリングであり、フラーレンを用いる人工ナノマシンとしては世界初の提案でもあるため、世界各国の雑誌や日本の雑誌、新聞でも紹介され、学会でも多く話題に挙げられている。本研究の結果はエネルギーを効率的に伝達する潤滑剤の開発につながり、省エネルギーをキーワードとして環境・エネルギー問題からバイオ、医療技術まで多分野へのインパクトのある研究である。一方 (2)ナノ加工・原子間力顕微鏡の探針効果の研究は、他グループの追従を許さない効率的な大規模 AFM 像シミュレーション法の確立につながり、その計算結果は多くの雑誌の表紙を飾っている。

ナノテクノロジーへの応用を目的としたナノサイズ構造体の制御の基礎を理論的に作るという野心的なテーマであり、当初は摩擦、走査プローブ法の二点からのアプローチでプロジェクトが収束するかどうか不安があったものの、ナノマシン、ナノ加工というより広い観点から本質的にまとめられるきっかけが得られたと考えている。方向付けが出来た。しかしこれらを有機的に結合して機能を引き出す指導原理を系統的にまとめるまでは及ばなかったため、さきがけでの成果を元に新しい理論体系を構築したい。

6 研究総括の見解:

佐々木成朗研究員は原子配列に対する熱振動効果を理論的に推論することに成功した。極低温での熱振動抑制に関しても構造予測し、実験値との一致を示したことは高く評価される。また、Graphite/フラーレン、インターカレーション系では摩擦力がゼロとなることをシミュレーションで見出したことも興味深い。応用面での具体例が期待される。

7 主な論文等:

原著論文 6 編

- 1) K. Miura, D. Tsuda, **N. Sasaki**, "Superlubricity of C₆₀ Intercalated Graphite Films", E-Journal of Surface Science and Nanotechnology, **3**, 21-23(2005).

- 2) S. Kaymiya, D. Tsuda, K. Miura, **N. Sasaki**, "MoS₂(0001)/MoO₃/(010)/MoS₂/(0001) friction-reducing system", Wear **257**, 1133-1136 (2004).
 - 3) **N.Sasaki** and K. Miura: "Key Issues of Nanotribology for Successful Nanofabrication - From Basis to C₆₀ Molecular Bearings", Jpn. J. of Appl. Phys. **43**, 4486-4491 (2004).
 - 4) K. Miura, **N. Sasaki** and S. Kamiya: "Friction of graphite", Phys. Rev. B **69**, 075420-075428 (2004).
 - 5) K. Miura, S. Kamiya and **N. Sasaki**: "C₆₀ Molecular Bearings", Phys. Rev. Lett. **90**, 0555091-0555094 (2003).
- ※本論文は、<http://news.nanoapex.com/>(世界のナノテクノロジーのトピックスを紹介する HP)のフラーレン部門で紹介され、読まれた回数が2004年4月の段階でベスト3に入った。
- 6) S. Furuya, Y. Gohda, **N. Sasaki**, and S. Watanabe: "Ab initio Calculation of the Electric Properties of Al Atomic Chains under Finite Bias Voltages", Jpn. J. Appl. Phys. **41** (2002) L989-L991.

特許 1 件

- 1) **佐々木成朗**、高橋忠孝「動的モード原子間力顕微鏡の振動シミュレーション方法、シミュレーションプログラム、シミュレーションプログラムを記録した記録媒体及び動的モード原子間力顕微鏡探針の振動シミュレータ」、特願 2004-321591 (2004)

著書 7 編

- 1) **佐々木成朗**、塚田捷、「実戦ナノテクノロジー 走査プローブ顕微鏡と局所分光」河津璋 編、(株)裳華房 第2章「2.3 力学分光の理論」、印刷中 (2005).
- 2) **佐々木成朗**、三浦浩治、「ナノマテリアルハンドブック」、(株)エヌ・ティー・エス 第1章 ナノテクノロジー総説、第6節 力学物性「1. ナノトライボロジー」51-59(2005).
- 3) **佐々木成朗**、塚田捷、「複雑現象工学～複雑系パラダイムの工学応用」市川直樹 編、プレアデス出版 5.2章「原子間力顕微鏡に現れるナノと複雑系の物理」281-296 (2005).
- 4) **佐々木成朗**、「極微な力で拓くナノの世界 — 原子・分子のナノ力学最前線」(株)クバプロ「パネルディスカッション: 理論研究の現状」175-193 (2004).
- 5) M. Tsukada, **N. Sasaki**, S. Watanabe, M. Gauthier, and K. Tagami, "Theory of Non-contact Atomic Force Microscopy", "Non-contact Atomic Force Microscopy - NanoScience and Technology Series" (Springer-Verlag), Eds. S. Morita, R. Wiesendanger and E. Meyer, Ch.15, 257-278 (2002).
- 6) 塚田捷, **佐々木成朗**、「原子・分子のナノ力学」森田清三編, 丸善 2.9 章「非接触原子間力顕微鏡の理論的な基礎」51-65, 10 章「半導体を中心としたナノ力学理論」170-188 (2003).
- 7) 塚田捷, **佐々木成朗**、「理論と測定原理」,「ナノテクノロジーのための走査プローブ顕微鏡」2 章, 9-28, 日本表面科学会編, 丸善株式会社、表面分析技術選書 (2002).

解説 19 編

- 1) **佐々木成朗**「特集 I ナノテクノロジー: ナノマシンとトライボロジー」、月刊トライボロジー vol.13、16-18 (2005).
- 2) **佐々木成朗**「HEADLINE REVIEW 摩擦の原子論 — ナノトライボロジーとは何か —」、技術総合誌 OHM vol.92、10-11 (2005).
- 3) **佐々木成朗**「ナノサイズ力学の研究 — 作って動かす基本原理 —」、表面科学 **25**、780-786 (2004).
- 4) **佐々木成朗**「原子間力顕微鏡シミュレータ — ナノ力学の評価ツール」、材料の科学と工学 第41巻5号、246-251 (2004).
- 5)-11) 三浦浩治, **佐々木成朗**: 連載講座「ナノトライボロジー ナノテクノロジーの新時代における基盤技術(1)-(3)、(6)-(9)」
 - ・機械の研究 第56巻 6月号 (1), 681-684(2004).
 - ・機械の研究 第56巻 7月号 (2), 789-792(2004).
 - ・機械の研究 第56巻 8月号 (3), 880-884(2004).

- ・機械の研究 第 56 巻 11 月号 (6), 1189-1194(2004).
 - ・機械の研究 第 56 巻 12 月号 (7), 1271-1275(2004).
 - ・機械の研究 第 57 巻 1 月号 (8), 47-50(2005).
 - ・機械の研究 第 57 巻 2 月号 (9), 282-286(2005).
- 12)-13) **佐々木成朗**,三浦浩治:連載講座「ナノトライボロジー ナノテクノロジーの新時代における基盤技術(4)-(5)」
 - ・機械の研究 第 56 巻 9 月号 (4), 1001-1006(2004).
 - ・機械の研究 第 56 巻 10 月号 (5), 1076-1080(2004).
 - 14) **佐々木成朗**,三浦浩治:「C₆₀ 分子ベアリングの開発」日本機械学会誌 vol.107, p.62 (2004).
 - 15) **佐々木成朗**, 塚田捷:「非接触原子間力顕微鏡における摩擦の物理」トライボロジスト 49 巻, 460-465 (2004).
 - 16) 三浦浩治, **佐々木成朗**:「ナノ構造体の滑り・回転・転がり運動が拓く摩擦と超潤滑」固体物理 39 巻 388-398 (2004).
 - 17) 三浦浩治, **佐々木成朗**:「分子ベアリングによる動摩擦ゼロの超潤滑」日本物理学会誌 52 巻, 907-910 (2003).
 - 18) **佐々木成朗**:「SPM におけるナノマニピュレーション」,月刊「トライボロジー」11 巻, 48-50 (2003).
 - 19) 塚田捷, **佐々木成朗**, 田上勝規:「非接触モード原子間力顕微鏡の理論」, 固体物理 38 巻 4 号, 257-268 (2003).

プレス発表 15 件

- 1) 愛知教育大と成蹊大 摩擦ゼロの炭素系超潤滑物質を開発
(日経ナノビジネス 2005 年 2 月 14 日号、リサーチフラッシュ pp.9 -10)
- 2) 世界初、摩擦ゼロの超潤滑システムを開発 ナノマシン実現への難関を突破
(JST 基礎研究最前線 No.5 2004 年 4 月号, pp.12-13)
- 3) ナノ設計の理論 ～ナノマシン・ナノ加工の力学～
(文部科学省 Japan Nanonet Bulletin 第 54 号 2004 年 2 月 17 日)
- 4) 非接触 AFM 像 原子レベルで解析 成蹊大と東大 観察前の予測も可能
(日刊工業新聞 9 月 8 日 5 面)
- 5) 世界初、摩擦ゼロの超潤滑システムを開発 ナノマシン実現への難関を突破
(JST基礎研究最前線 No.5 2004.4, pp.12-13)
- 6) 愛教大の三浦浩治教授ら、世界最小のベアリング実現
(週刊ナノテク 10 月 20 日号 p.26)
- 7) 100 万分の 1 ミリ ベアリング実現 炭素分子「C₆₀」で
(朝日新聞 8 月 18 日 夕刊 2 面)
- 8) C₆₀ のベアリング ナノマシンの実現に不可欠といわれた技術が実現
(日経サイエンス 8 月号, p.11)
- 9) 摩擦ゼロに近いベアリング
(日本経済新聞 7 月 7 日 朝刊 23 面)
- 10) 動摩擦ゼロの分子ベアリング 愛知教育大と成蹊大が開発
(日刊工業新聞 6 月 11 日 4 面)
- 11) ナノ分子「フラーレン」で摩擦ゼロ 極小マシンの壁に風穴
(東京新聞 6 月 10 日 朝刊 24 面, 同じ記事が中日新聞 6 月 10 日 夕刊 5 面に掲載)
- 12) 分子ベアリングで超潤滑実現
(科学新聞 5 月 23 日 1 面)
- 13) Micro-Machine Lube Job
(Discover Magazine 5 月号, May 2003)

- 14) Fullerenes Add Motion to Micromachines
(Materials Research Society Bulletin 28 巻 4 月号, pp.254-255)
- 15) Friction-free bearing
(Materials Today 3 月号, p.10)

国際会議 9 件 (招待講演 4 件)

- 1) **N. Sasaki**:「Theoretical Study of Mechanics and Friction of Nanostructures on the Surface」
International Symposium on Nano-organization and Function, Tokyo Institute of Technology,
Tokyo, Japan, 2004 年 11 月 12 日 (招待講演).
 - 2) **N.Sasaki** and K. Miura: "Key Issues of Nanotribology for Successful Nanofabrication - From
Basis to C60 Molecular Bearings" , The 11th International Colloquium on Scanning Probe
Microscopy - ICSPM11, Shizuoka, Japan, 2003 年 12 月 12 日 (招待講演).
 - 3) **N. Sasaki**:「First-Principles Study of Tip Effects on Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag Surface Structure and
Its NC-AFM images」*Japan-Germany Joint Seminar - the 1st research meeting of FRC project
for nanomechanics and nanoelectronics*, Osaka Univ., Japan, 2002 年 7 月 22 日 (招待講演).
- 他

国内会議 69 件 (招待講演 25 件)

- 1) **佐々木成朗**:「Energy Dissipation in Dynamic AFM」第 3 回ナノプローブ研究会, 新世代研究所,
2005 年 3 月 17 日 (招待講演).
 - 2) **佐々木成朗**,三浦浩治:「分子ベアリングによる動摩擦ゼロの超潤滑」
The workshop for young researchers on "New Trends in Condensed Matter Theory"
東大物性研, 2004 年 2 月 19 日 (招待講演).
 - 3) **佐々木成朗**:「大学と科学」公開シンポジウム 極微な力で拓くナノの世界—原子・分子のナノ
力学最前線— パネルディスカッション: 基調講演「理論の現状と将来」, 仙台市情報・産業プ
ラザ, 2003 年 11 月 22,23 日 (招待講演).
- 他