

ツイストグラフェンのモアレ変形によるナノスケール接触の定義と摩擦への影響

○平尾 佳那絵¹, 佐々木 成朗^{1*}¹電気通信大学大学院 基盤理工

Definition of nanoscale contact by Moiré corrugation of twisted bilayer graphene and its effect on nanoscale friction

○Kanae Hirao¹ and Naruo Sasaki^{1*}¹The University of Electro-Communications

凝着説では、マイクロメートルサイズの突起間に働く種々の相互作用力によって凝着した真実接触部をせん断することで摩擦が生じると説明されている。しかし原子スケールでは、凝着説で考慮されていない結晶方位の効果が摩擦の異方性として現れることが実験[1]と理論[2]の両方から報告されている。本研究では、積層構造を反映するモアレパターンの二次元分布を用いて、原子レベルで平坦なツイストグラフェン界面の接触を定義する。それにより、ナノスケール摩擦の異方性を、凝着説にもとづくナノスケール接触の観点から説明することを試みた。

まず、剛体グラファイト基板上に、グラフェンシートをエネルギー的に最安定な AB 積層構造となるように配置したときの配向角度を $\theta_{in} = 0 \text{ deg.}$ と定義した (Fig. 1)。次に、グラフェンシートを $0 \text{ deg.} \leq \theta_{in} \leq 10 \text{ deg.}$ の範囲で回転させてから、各ツイスト角度 θ_{in} の方向へ並進移動させた。本研究の分子力学シミュレーションでは、結晶の周期構造を記述するポテンシャル関数[3]を Van der Waals 相互作用に適用し、Tersoff ポテンシャル関数[4]で共有結合相互作用を記述して、各原子に働く力やエネルギーを計算した。

各ツイスト角 θ_{in} (Fig. 1)で、グラフェンシート内の各原子に働く垂直力(凝着力) f_z の 2 次元分布を可視化すると、モアレパターンの数値で記述される周期的な分布が現れた。Fig. 2(a)と 2(b)は、シートをそれぞれ剛体、弾性体にしたときの力分布に対応する。黒丸内部は擬似的に AB 積層構造である領域 (β 領域), 赤丸内部は擬似的に AA 積層となる領域 (α 領域)である。シートが変形すると、 α 領域は基板から跳ね返されて膨らみ、 β 領域は基板に引っ張られてへこむことが分かった (Fig. 2(c))。さらに本発表では、このモアレ変形が摩擦に与える影響についても議論する予定である。

文 献

- 1) N. Sasaki, T. Ando, and K. Miura et al., *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* **14**, 204 (2016).
- 2) M. Dienwiebel et al., *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126101 (2004).
- 3) W. A. Steele, *Surf. Sci.* **36**, 317 (1973).
- 4) J. Tersoff, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2879 (1988).

*E-mail: naruo.sasaki@uec.ac.jp

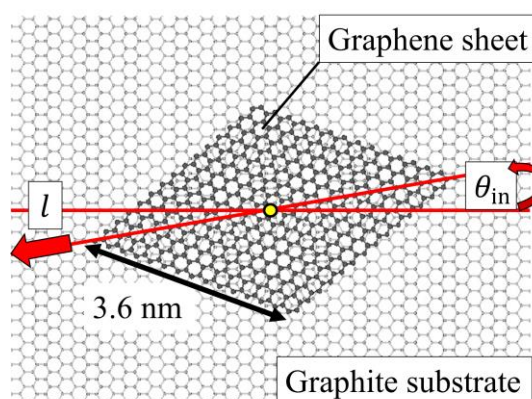


Fig. 1. Simulation model of twisted bilayer graphene.

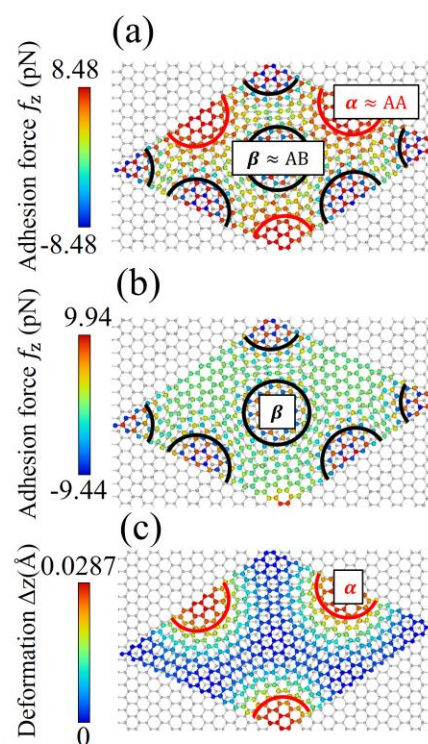


Fig. 2. Two-dimensional adhesion force map within (a) rigid- and (b) relaxed-graphene sheets. (c) Moiré corrugation for relaxed graphene sheet.