

2023 年度年次報告書

革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明

2020 年度採択研究代表者

水上 雅史

東北大学 未来科学技術共同研究センター

准教授

氷-ゴム界面摩擦機構のマルチスケール解明

主たる共同研究者:

泰岡 顕治 (慶應義塾大学 理工学部 教授)

研究成果の概要

ナノ計測、マクロ計測、シミュレーションにより、氷-ゴム界面の摩擦機構を解明し、摩擦の最適化と省エネルギーを両立する革新的なゴム材料の分子設計のガイドラインの確立を目的としている。以下、2023年度の主な研究成果を示す。

水上グループ

- (1) ポリエチレンオキサイド(PEO)、ポリビニルアルコール(PVA)膜と氷の界面で見いだした Enhanced premelting の再現性確認、摩擦との対応を検討した。また、Enhanced premelting には、高分子鎖の運動性が寄与していることを明らかにした。さらに低温和周波発生振動分光法による氷表面・界面の水の評価を開始した。
- (2) Lyon グループで得られた氷-ゴムのマクロ摩擦について、氷プレメルト層の挙動に基づいて理解する考え方を提示した。この考えの実証に向けて、氷-スチレン-ブタジエン共重合体膜の摩擦に対する、粘弾性、氷プレメルト層の寄与の検討を開始した。

泰岡グループ

- (1) 氷-蒸気界面の氷擬似液体層の解析のため、3種類の氷の大規模・全原子 MD シミュレーションを行った。教師なし深層学習モデルを用いた新規解析手法を開発し、氷擬似液体層での特異的な水分子構造・運動を明らかにした。
- (2) 氷-高分子界面 (PS, PEO, PVA) の MD シミュレーションを行い、氷界面と同様に氷擬似液体層を確認した。
- (3) 氷-ゴム界面 (PS, PEO, PVA) の MD シミュレーションを行い、氷界面と同様に氷擬似液体層を確認した。

Mazuyer グループ

マクロな氷-ゴムの摩擦を系統的に評価し、摩擦力がベル型の滑り速度依存性を示し、低温ほど増大することを観測した。この摩擦の温度依存性は、ゴムの粘弾性の温度依存性では説明できないため、摩擦熱による界面温度上昇を求める理論モデルを導出した。東北大で得られた氷プレメルト層の知見を合わせてマクロ摩擦の理解に向けた議論を進めている。

【代表的な原著論文情報】

- 1) S. Hemette, J. Cayer-Barrioz, D. Mazuyer, “Thermal Effects versus Viscoelasticity in Ice-Rubber Friction Mechanisms”, *Tribol. Int.*, **162**, 107129 (2021).
- 2) J. Pallbo, S. Hemette, M. Mizukami and K. Kurihara, “Enhanced Premelting of Ice in Contact with Hydrophilic Polymer Films”, *Chem. Lett.*, **53**, 50 (2024).
- 3) T. Miyata, Y. K. Sato, Y. Kawagoe, K. Shirasu, H.-F. Wang, A. Kumagai, S. Kinoshita, M. Mizukami, K. Yoshida, H.-F. Wang, T. Okabe, K. Hagita, T. Mizoguchi and H. Jinnai, “Effect of inorganic material surface chemistry on structures and fracture behaviours of epoxy resin”, *Nat. Commun.*, 2024, **15**, 1898.
- 4) Y. Takahashi, M. Mizukami, Y. Tsujii and K. Kurihara, “Surface Forces Characterization of Concentrated PMMA Brush Layers under Applied Load and Shear”, *Langmuir*, **40**, 325-334

(2024).

- 5) Ishiai, S., Endo, K. and Yasuoka, K., "Graph neural networks classify molecular geometry and design novel order parameters of crystal and liquid", *The Journal of Chemical Physics*, **159**, 064103 (2023). DOI : 10.1063/5.0156203
- 6) Ishiai, S., Yasuda, I., Endo, K. and Yasuoka, K., "Graph-Neural-Network-Based Unsupervised Learning of the Temporal Similarity of Structural Features Observed in Molecular Dynamics Simulations", *Journal of Chemical Theory and Computation*, **20**, 819-831.
- 7) Ishiai, S., Endo, K., Brumby, P. E., Sum, A. K. and Yasuoka, K., "Novel approach for designing order parameters of clathrate hydrate structures by graph neural network", *The Journal of Chemical Physics*, **160**, 064504 (2024). DOI: 10.1063/5.0177815
- 8) S. Homette, J. Cayer-Barrioz and D. Mazuyer, "Thermal effects versus viscoelasticity in ice-rubber friction mechanisms", *Tribol. Int.*, **162**, 107129 (2021).
- 9) L. Frérot, A. Crespo, J. A. El-Awady, M. O. Robbins, J. Cayer-Barrioz and D. Mazuyer, "From Molecular to Multiasperity Contacts: How Roughness Bridges the Friction Scale Gap", *ACS Nano*, **17**, 2205-2211 (2023).