

2024 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、2024 年度の主な研究成果を示す。

水上 G

- (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 現象について、泰岡 G と連携により MD シミュレーションからも対応する結果を得た。
- (2) 氷-SBR(styrene butadiene rubber, 3 種類の組成)の摩擦を評価し、摩擦力はゴム粘弾性と氷プレメルト層に依存し、氷プレメルト層は氷-ゴム相互作用により影響されることが分かった。ゴム組成の影響についても検討を進めた。
- (3) 共振ずり測定法を用いたソフト材料表面の弾性評価する方法の開発・評価も進めた。

泰岡 G

- (1) 氷-高分子 (PS、PEO、PVA)界面の全原子 MD シミュレーションを実施し、固体・液体分類を行う機械学習手法により水分子の挙動や水素結合効果の違いを明らかにした。氷-PEO のせん断では界面温度評価法を確立し、界面付近温度は融点以下であることを確認した。
- (2) 氷-SBR 界面のプレメルト層の構造的・動的特性を明らかにした。特に 269 K 付近においてゴムの粗さと水分子の侵入による 1 層分のプレメルト層の拡張を確認し、液体様分子の割合・拡散挙動の温度依存性も定量化した。

Mazuyer G

マクロな氷-SBR の摩擦力を、SBR のガラス転移温度(40~50 °C)、弾性率 (1~5 MPa)を変えて評価しベル型の摩擦力の滑り速度依存性を観測した。摩擦熱の効果を考慮したモデルにより摩擦界面温度を適切に評価できた。SBR-氷の接着力の直接測定より SBR の特性による違いが得られた。摩擦力の温度依存性は氷プレメルティングの知見を合わせて議論を進めている。

【代表的な原著論文情報】

- 1) I. Yasuda, K. Endo, N. Arai, K. Yasuoka, “In-layer inhomogeneity of molecular dynamics in quasi-liquid layers of ice”, *Communications Chemistry*, 7, 117(2024).
- 2) R. Rana, N. Hopper, F. Sidoroff, J. Cayer-Barrioz, D. Mazuyer and W. T. Tysoe, “An Analysis of Shear-Dependent Mechanochemical Reaction Kinetics”, *Tribo. Lett.*, 72, 76 (2024)
- 3) Ashley Mungroo, Denis Mazuyer, and Juliette Cayer-Barrioz, “In Situ Chemical Mapping of the Thin-Film Lubricated Contact”, *Langmuir*, 40, 22068-22076 (2024).