

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

2021 年度採択研究代表者

2021 年度 年次報告書

辻井敬亘

京都大学 化学研究所
教授

超低摩擦ポリマーブラシの摩耗現象の階層的理解と制御

§ 1. 研究成果の概要

厚膜濃厚ポリマーブラシ(tCPB)の摩耗現象の階層的理解に向けて、「ものづくり」、「精密計測」、「理論/シミュレーション」の観点から、摩耗分析に特化した基盤技術(プラットフォーム)の確立に注力した。主な研究成果は、以下のとおりである。

- tCPB の摩耗現象を追跡すべく、(1)分子鎖切断により発生するメカノラジカルの蛍光検出に成功するとともに、(2)蛍光像と高さ像を組み合わせて、摩耗進展機構について一考察を与えた。本系は、任意に導入した欠陥を起点として摩耗が進展しており、摩耗機構の解明に有用であることが確認された。
- 蛍光観察を利用した摩耗解析手法の構築にあたり、(1)青緑赤蛍光色素の吸収・蛍光スペクトル解析による、蛍光観察に適したイオン液体(IL)の選定、および、(2)摩耗分析に特化した蛍光標識 tCPB の in-situ 重合条件の最適化を行った。その結果、蛍光観察に適した混合 IL 系を見出し、最大の蛍光応答を示す CPB 合成条件が得られた。
- 摩耗現象の階層性を記述するマクロ領域とメソ領域のモデリングに関して、マクロ領域のモデルとして有望なファンデーションモデルを基礎として、摩耗現象の記述および導入手法を検討し、CPB のマクロな粘弾性と対向面のマクロな形状および動特性を反映可能な力学モデルを構築した。さらに、次年度以降に予定している摩耗試験に向けて、高位置決め精度の実験装置を設計した。
- 摩耗解析に特化した粗視化分子動力学(MD)シミュレーションプラットフォームの構築に取り組んだ。具体的には、(1)ヘテロ構造の一つである分子量分布を有する tCPB モデルを構築し、(2) tCPB の摩耗解析を可能にする摩擦シミュレーションを実現した。摩擦シミュレーションと高分子の応力解析から、摩耗につながる応力集中が相手材と接触していない高分子の中央部と根本にも起こることを明らかにした。

§ 2. 研究実施体制

(1) 辻井グループ

- ① 研究代表者: 辻井 敬亘 (京都大学化学研究所 教授)
- ② 研究項目
 - ・コンビナトリアル摩耗解析のための CPB 設計ならびに測定手法の確立

(2) 佐藤グループ

- ① 主たる共同研究者: 佐藤 貴哉 (鶴岡工業高等専門学校創造工学科 教授)
- ② 研究項目
 - ・摩耗分析に特化したイオン液体の選定
 - ・摩耗分析に特化した緑蛍光 tCPB の開発

(3) 中野グループ

- ① 主たる共同研究者: 中野 健 (横浜国立大学大学院環境情報研究院 教授)
- ② 研究項目
 - ・摩耗現象のマクロモデリングと力学システム応答解析

(4) 大谷グループ

- ① 主たる共同研究者: 大谷 優介 (東北大学金属材料研究所 准教授)
- ② 研究項目
 - ・粗視化分子動力学シミュレーション解析

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Exploiting the Synergy between Concentrated Polymer Brushes and Laser Surface Texturing to Achieve Durable Superlubricity”, ACS Applied Materials and Interfaces, vol. 14, No. 13, pp. 15818–15829, 2022
- 2) “Processes of Molecular Adsorption and Ordering Enhanced by Mechanical Stimuli under High Contact Pressure”, Scientific Reports, vol. 12, No. 3870, pp. 1–9, 2022
- 3) “Molecular-Level Elucidation of a Fracture Process in Slide-Ring Gels via Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulations”, Macromolecules, vol. 55, No. 6, pp. 1946–1956, 2022