

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

2022 年度  
年次報告書

足立 幸志

東北大学 大学院工学研究科  
教授

トライボケミカル協奏反応の制御による超低摩擦界面の継続的創成と長期信頼性機械の設計基盤  
の構築

主たる共同研究者:

久保 百司 (東北大学 金属材料研究所 教授)

七尾 英孝 (岩手大学 理工学部 准教授)

平山 朋子 (京都大学 大学院工学研究科 教授)

## 研究成果の概要

2022年度は、超低摩擦界面の継続的自己形成実現の鍵となる以下2つの項目に着目し、実験、分析ならびにシミュレーション手法の開発を推進した。主たる研究成果の概要は以下の通りである。

### (1) 超低摩擦界面及びその形成のためのトライボケミカル反応の解明

- ・窒化ケイ素 ( $\text{Si}_3\text{N}_4$ ) と炭化ケイ素 ( $\text{SiC}$ ) の合成炭化水素油 (MAC) 中摩擦において、MAC由来のグラファイト構造を有する低摩擦界面が形成し得ることを明らかにした。
- ・反応分子動力学シミュレーションにより、 $\text{Si}_3\text{N}_4$  を用いた水中摩擦システムにおけるトライボケミカル反応により、 $\text{Si}_3\text{N}_4$  表面上に低摩擦層が形成されるメカニズムを明らかにした。
- ・XAFS分析により、水中での  $\text{SiC}$  の超低摩擦層および摩擦調整剤である  $\text{MoDTC}$  による低摩擦層の構造に関する良好なデータの取得が可能であることを実証した。さらに、トライボフィルム形成のリアルタイム分析に向けた XAFS ビームライン用摩擦試験機的设计・開発を完了した。

### (2) 継続的超低摩擦界面形成のためのトライボケミカル協奏反応機構の解明

- ・ $\text{Si}_3\text{N}_4$  と  $\text{SiC}$  の2つのケイ素系セラミックスの4種類の組み合わせの水中摩擦において、いずれの組み合わせにおいても超低摩擦を示す一方で、同種材の組み合わせの時にのみ、その継続性の実現し得ることを明らかにした。
- ・連続的なトライボケミカル反応シミュレーションを実現するための反応分子動力学シミュレータを開発した。具体的には、摩擦摺動部分への反応分子の連続的な供給、及び原子間の化学結合を考慮した系外への摩耗分子の排出を可能とする新規アルゴリズムの導入を完了するとともに、供給する分子種を摩擦シミュレーションの途中で異なるものに変更可能なアルゴリズムも導入し、摩擦雰囲気の変化によって変動する摩擦界面の表面状態や潤滑膜形成過程の解析を可能とした。

## 【代表的な原著論文情報】

- 1) Y. Wang, J. Qin, J. Xu, J. Sun, L. Chen, L. Qian, and M. Kubo, "Definition of Atomic-Scale Contact: What Dominates the Atomic-Scale Friction Behaviors?", *Langmuir*, 38 (2022) 11699-11706.
- 2) Y. Wang, H. Zhao, C. Liu, Y. Ootani, N. Ozawa, and M. Kubo, "Mechanisms of Chemical-Reaction-Induced Tensile Deformation of an Fe/Ni/Cr Alloy Revealed by Reactive Atomistic Simulations", *RSC Advances*, 13 (2023) 6630-6636.
- 3) W. Shen, D. Han, T. Hirayama, N. Yamashita, T. Oshio, H. Tsuneoka, K. Tagawa, K. Yagishita, "N-Oleoyl Sarcosine as an Engine Oil Friction Modifier, Part 1: Tribological Performance of NOS+ZDDP Mixture at 100°C", *Tribology Online*, 17, 3 (2022) 216-226.
- 4) W. Shen, D. Han, T. Hirayama, N. Yamashita, T. Oshio, H. Tsuneoka, K. Tagawa, K. Yagishita, "N-Oleoyl Sarcosine as an Engine Oil Friction Modifier, Part 2: Elucidation of Friction-Reducing Mechanism at Room Temperature Focusing on Contribution of NOS in NOS+ZDDP Mixture", *Tribology Online*, 17, 3 (2022) 227-238.