

2023 年度年次報告書

原子・分子の自在配列と特性・機能

2022 年度採択研究代表者

桑原 卓哉

大阪公立大学 大学院工学研究科

講師

メカノケミストリーを活用した 2D 超潤滑原子構造の自在創成

研究成果の概要

メカノケミストリーを活用した 2D 超潤滑原子構造の自在創成技術を開発することを目的として、主に計算科学手法を用いた検討を行った。本年度は、超潤滑性発現の鍵を握るアモルファスカーボンの相転移プロセスの検討を行った。酸素を添加したアモルファスカーボンのバルクに対し、Lees-Edwards 境界条件を適用することでせん断を加えた。このとき、温度 300 K、圧力 5 GPa 一定の条件下 1 ns シミュレーションを行った。また、酸素含有量の異なるモデルを 200 個程度作製し、酸素含有量の影響を解析した。酸素を含まないとき、あるいは酸素含有量が少量のとき、相転移は見られず、高い摩擦状態が維持された。一方、酸素含有量が 3 から 15 at. % の範囲では、相転移とともにナノグラフェンが形成され、摩擦係数が 0.01 以下まで急激に減少した。ナノグラフェンの形成は、1 層あるいは 2 層程度であり、局所的な相転移が起こった。また、下層とは sp^3 炭素原子を介して結合しており、ドーム型形状を有していた。形成されたナノグラフェンの化学構造を詳細に解析するために、環状構造(主に 5-7 員環)の抽出及び分子軌道に基づく芳香性指数を評価した。接触部において高い芳香性を有する 6 員環が連続して形成されている一方、非接触部においては酸素終端基及び sp^3 炭素原子が観察された。これは、超潤滑発現が表面の芳香性発現と関係があることを示唆しており、せん断により芳香性表面の形成が誘起されることが明らかとなった。しかし、更に酸素含有量が増えると、不完全な酸化グラフェンライクな層状構造が形成された。せん断の局在化が起こる一方、摩擦係数は下がらなかった。以上より、酸素含有量を調節することにより、ナノグラフェン形成を制御可能であることが明らかになった。酸素含有量は気相成長プロセスにより制御できる他、グリセロール等の潤滑油分子の摩擦場でのメカノケミカル分解を活用することにより、その場ドーピングも可能であると考えられる。

【代表的な原著論文情報】

- 1) [Takuya Kuwahara](#), Yun Long, Aslihan Sayilan, Thomas Reichenbach, Jean Michel Martin, Maria-Isabel De Barros Bouchet, Michael Moseler, and Gianpietro Moras, “Superlubricity of Silicon-Based Ceramics Sliding against Hydrogenated Amorphous Carbon in Ultrahigh Vacuum: Mechanisms of Transfer Film Formation”, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 16, 8032-8044 (2024).
- 2) Stefan Peeters, [Takuya Kuwahara](#), Fabian Härtwig, Stefan Makowski, Volker Weihnacht, Andrés Fabián Lasagni, Martin Dienwiebel, Michael Moseler, and Gianpietro Moras, “Surface Depassivation via B–O Dative Bonds Affects the Friction Performance of B-Doped Carbon Coatings”, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 16, 18112-18123 (2024).