

○森田祐輔<sup>1</sup>、小野寺 拓<sup>1</sup>、鈴木 愛<sup>2</sup>、Riadh Sahnoun<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、坪井秀行<sup>1</sup>、  
 畠山 望<sup>1</sup>、遠藤 明<sup>1</sup>、高羽洋充<sup>1</sup>、Carlos Del Carpio<sup>1</sup>、Ramesh C. Deka<sup>2</sup>、  
 久保百司<sup>3</sup>、宮本 明<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>東北大学大学院工学研究科 (980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

<sup>2</sup>東北大学未来科学共同研究センター (980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

<sup>3</sup>東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター(980-8579仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-701)

**【緒言】** ダイヤモンドライクカーボン(DLC)膜は優れた低摩擦性や耐摩耗性を有することから、トライボロジー材料等への応用に関心が集まっている。DLC 膜は摩擦調整剤であるエステルとのトライボケミカル反応により、表面が水酸基終端することで超低フリクション特性を示すという報告がなされているが、その発現メカニズムは解明されていない。そこで本研究では計算化学手法を用いて、水酸基終端ダイヤモンド膜の超低フリクション特性発現機構について理論的な解析を行ったので報告する。

**【計算方法】** 分子動力学計算には本研究で開発した分子動力学計算プログラム New-Ryudo を用いた。Fig.1 に計算モデルを示す。ダイヤモンド基板の下側を固定し、上から鉄基板を 0.5 GPa で加圧・水平方向に 100 m/s で剪断することで、境界潤滑条件を模擬した。ダイヤモンド膜表面は水酸基終端・水素終端・終端なしの 3通りの条件で計算を行った。ポテンシャルには Consistent Valence Force Field ポテンシャルを用い、温度 300 K、積分時間 0.5 fs、500,000 step の条件でせん断計算を行った。また、密度汎関数計算には量子化学計算プログラム CASTEP を用いた。計算モデルを Fig. 2 に示す。分子動力学計算と同様に、水酸基終端・水素終端・終端なしの 3通りの条件で量子化学計算を行った。汎関数には一般化密度勾配近似の PW91 を用い、Ultra-soft 擬ポテンシャルを適用した。

**【結果と考察】** まず、分子動力学計算により、各ダイヤモンド表面における摩擦特性の解析を行った。Fig. 3 に各ダイヤモンド表面における積算摩擦力を示す。図から、終端無し of the diamond において積算摩擦力が大きいのにに対し、水素・水酸基終端することで積算摩擦力が減少することが読み取れる。さらに水素終端よりも、水酸基終端の方が低摩擦特性を発現することがわかる。また、この積算摩擦力から摩擦係数を算出した。終端無しでは摩擦係数が 0.07 であったが、水素終端によって摩擦係数は 0.05 まで減少、さらに水酸基終端では摩擦係数は 0.01 まで減少した。このように分子動力学計算によって各ダイヤモンド表面での摩擦力を測定し、水素・水酸基終端によって摩擦力が低減されることが明らかとなった。次に、水素・水酸基終端による摩擦低減メカニズムを探るため、量子化学計算による解析を行った。Table 1 に各ダイヤモンド表面における結合次数を示す。表から、終端無し of the diamond 表面における鉄原子-炭素原子間の結合次数は 0.47 であり、共有結合性を示すことがわかる。それに対し、表面を水素・水酸基終端することにより、鉄原子-炭素原子間の結合次数はそれぞれ -0.33、-0.20 と変化し、共有結合性がなくなったことがわかる。さらに、鉄原子-水素原子間・鉄原子-酸素原子間の結合次数も負の値であることから、鉄基板とダイヤモンド基板間には結合が生じないことがわかる。このようにダイヤモンド表面が水素・水酸基終端されることで鉄原子-炭素原子間の共有結合性がなくなり基板間が滑りやすくなることで、超低フリクション特性が発現されると考えられる。

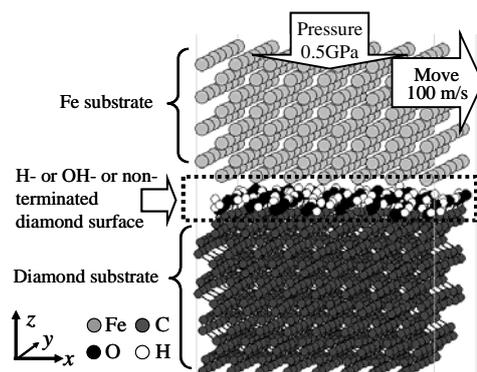


Fig. 1 Calculation model for molecular dynamics simulation.

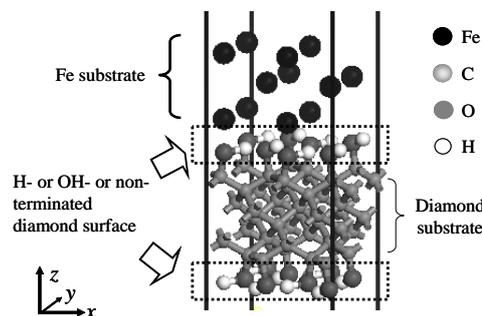


Fig. 2 Calculation model for density functional theory calculation.

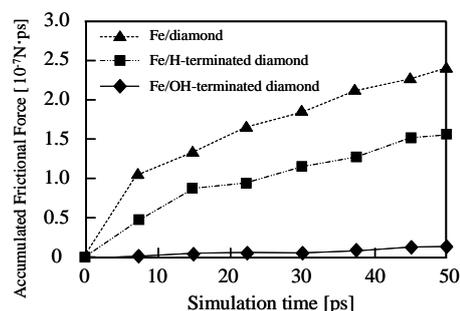


Fig. 3 Accumulated frictional force for each diamond surface.

Table 1 Bond population between Fe atom (upper substrate) and C or H or O atom (lower substrate) of each diamond surface.

Atom	Upper substrate Lower substrate	Pure Diamond Surface	H- terminated Surface	OH- terminated Surface
		Bond population [-]		
Fe	C	0.47	-0.33	-0.20
Fe	H	-	-0.43	-0.32
Fe	O	-	-	-0.01