

計算化学による C₆₀ フラーレンの境界潤滑メカニズムの解析

○小野寺 拓¹、鈴木 愛²、坪井秀行¹、畠山 望¹、遠藤 明¹、高羽洋充¹、久保百司¹、宮本 明^{2,1}

¹ 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)

² 東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

【緒言】ジアルキルジチオリン酸亜鉛(ZnDTP)に代表されるリン・硫黄を含んだ自動車エンジン油添加剤は、排ガス浄化触媒の被毒要因となるため代替添加剤の開発が課題である。近年、フラーレンやナノチューブ等の炭素ナノ材料を添加剤として使用することが試みられている[1]。結果、既存の添加剤に見劣りしない低摩擦性、耐摩耗性を発揮することが分かってきた。本研究では計算化学手法を用いて、未だに明らかにされていない炭素ナノ材料の潤滑メカニズムの解明を目的とした。

【計算方法】炭素ナノ材料として C₆₀ フラーレンを選択し、分子動力学(MD)計算プログラム NEW-RYUDO を用いてその摩擦場での挙動を解析した。C 原子間相互作用の表現には Brenner ポテンシャルを採用した。また、原子速度の自己相関関数をフーリエ変換して振動スペクトルを解析した。

【結果と考察】摩擦場での C₆₀ の挙動を調べるため、図 1(a)に示す計算モデルを構築した。Fe 基板に垂直圧力、水平方向のすべり速度を与えることで摩擦環境を模擬した。予め行った量子化学計算の結果、C₆₀ は Fe 表面に強い共有結合で化学吸着することが見出されたため、Fe-C 原子間には Morse ポテンシャルを導入した。図 1(b)にはシミュレーション中に観察された C₆₀ 層中の C₆₀ 分子の挙動を示す。摩擦中に C₆₀ 分子がすべり方向に沿って変形し、250 ps 後には破壊されたことが分かる。これを反映して、C₆₀ 層全体がアモルファス化する様子が観察された(図 1(c))。さらに、すべり速度を与えない計算も行ったところ C₆₀ の変形および破壊は全く観察されなかったことから、C₆₀ 層のアモルファス化には摩擦が必要であることが分かった。一方、グラファイトにインターカレートされた C₆₀ は破壊されずにボールベアリング様の挙動を示している[2]。この場合、C₆₀ は弱い van der Waals 力によってグラファイト層間に保持される。従って C₆₀ の破壊には、摩擦だけでなく C₆₀ の Fe 表面への強い化学吸着が必要であったことが示唆された。

次に実際に C₆₀ 薄膜に対する摩擦試験を行い、摩擦面のラマンスペクトルを調べた。摩擦前には明瞭な 495 cm⁻¹ の radial breathing mode の振動バンド(M1)、1465 cm⁻¹ の sp² 炭素原子の伸縮振動バンド(M2)が観察されたが、摩擦後には M1 が消滅、M2 がブロード化した(図 2)。摩擦シミュレーション中の C₆₀ 層の振動スペクトルを解析したところ、実験結果と同様に RBM の消滅、伸縮振動バンドのブロード化が観察された。これは、摩擦によって C₆₀ の球状構造が無くなったこと、C₆₀ 層がアモルファス化したことに対応する。以上の計算結果および実験事実から、C₆₀ による潤滑は摩擦中の破壊に伴うアモルファス炭素膜の形成に基づくことが明らかとなった。

【参考文献】[1] L. Joly-Pottuz *et al.*, *Tribol. Int.*, **41** (2008) 69, [2] N. Sasaki *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **46** (2007) 1237.

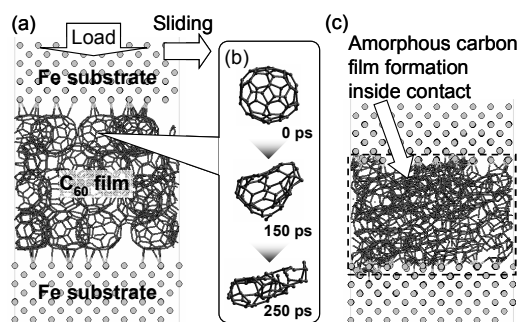


図 1(a)計算モデル, (b)C₆₀ 層中の C₆₀ 分子の挙動, (c)摩擦時間 250 ps での構造。

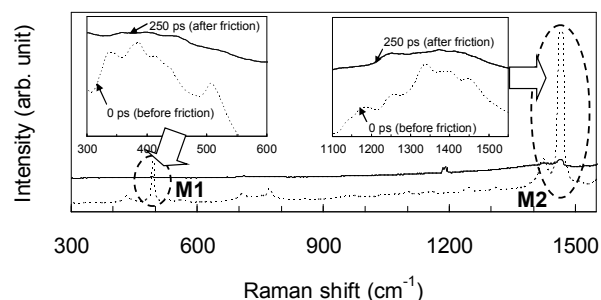


図 2 実験により得られた摩擦面のラマンスペクトル(点線は摩擦前、実線は摩擦後を表す)、挿入図は摩擦シミュレーションから得られた C₆₀ 層の振動スペクトル