

令和 4 年度 防衛装備庁
安全保障技術研究推進制度

研究成果報告書

超熱A0によるソフトマテリアル表面への ナノ構造付加と機能制御

令和 5 年 5 月

国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構

本報告書は、防衛装備庁の安全保障技術研究推進制度による委託業務として、国立研究開発法人宇宙航空研究開発機構が実施した令和4年度「超熱AOによるソフトマテリアル表面へのナノ構造付加と機能制御」の成果をとりまとめたものです。

1. 委託業務の目的

1. 1 研究課題の最終目標

本研究課題では、超熱A0ビームをソフトマテリアル表面に照射することによって生じるナノスケール構造形成プロセスと材料表面に与える影響を深く理解し、超熱A0ビームの照射条件と、形成されるナノスケール構造の相関関係を明らかにすることを旨とする。また、当該ナノスケール構造付加により、加工前とは異なる機能・性能を発現させ、その発現機序を明らかにするとともに、性能制御の実現も目指す。さらに本研究課題では、実験的アプローチに加え、数値解析的アプローチも採り入れ、超熱A0照射によりソフトマテリアル表面で生じる事象をモデル化し、数値解析的に予測することも目指す。

なお本研究課題では、上記に示す超熱A0ビームの照射による影響を理解する目的から、シンプルな化学構造を有する高分子材料を選択した上で、以下に示すように、光学的特性、電磁波吸収特性、濡れ性の3つの機能・性能を制御することを試みる。

- 光学的特性：透過性に優れる高分子フィルムを加工することで、可視域（380 - 780 nm）で、モスアイ材料級の低反射（反射率1%以下）・高透過性能（透過性材料を対象として、透過率99%以上）にする
- 電磁波吸収特性：導電性及び非導電性のフィルム双方に対し、未処理品と比べ、テラヘルツ波帯での電磁波吸収特性を3dB以上変化させる
- 濡れ性：未処理品と比べ、純水に対する接触角を±30° 超変化させる

1. 2 最終目標を実現するために克服又は解明すべき要素課題

(1) 超熱A0ビーム照射により発現可能な3特性の理解

超熱A0照射による被照射材料の上記3特性の発現機序を明らかにするとともに、「最終目標」に示す機能・性能を制御し得るのか把握する。

(2) 超熱A0照射による微細構造形成の数値解析モデル作成

超熱A0照射表面の「最終目標」に示す機能・性能発現に必要な微細構造形成を予測できる、数値解析モデルを作成する。

(3) 超熱A0照射により発現可能な機能・性能の数値解析モデル作成

超熱A0照射表面の「最終目標」に示す機能・性能を予測できる数値解析モデルを作成する。ここでの数値解析モデルは、要素課題(2)に示す微細構造形成数値解析モデルを包括する。

1. 3 要素課題に対する実施項目及び体制

(1) 既存装置を用いた、超熱A0ビーム照射による3特性発現への寄与把握

既存の宇宙機材料用の照射装置を用いて、超熱A0ビームにより形成された表面微細構造によって、光学的特性、電磁波吸収特性、濡れ性の各特性（3特性）がどの程度発現するか分析を実施する（要素課題 1）。

具体的には、超熱A0の照射量と被照射材料の種類をパラメータとして、ソフトマテリアル表面に微細な突起形状を形成する。その後、加工前及び加工後のサンプルに対して、3特性の変化を測定し、照射量・被照射材料・3特性に対する関係性を整理する。本研究チームが行った過去の検討結果より、民生用として一般的な非芳香族系樹脂及びエンジニアリングプラスチックを含む芳香族系樹脂等に対して、突起高さが数十ナノメートル～二十マイクロメートル程度の緻密な突起形成が可能であることが判明しており、3特性発現に対する期待値は極めて高い。

なお、既存の照射装置は照射条件の自由度が低く、照射装置側で変更できるパラメータは照射量（照射時間）のみであり、その変更可能な量も限られているものの、初期の3特性の把

握としては十分な検討が可能である。3特性のうち光学的特性は積分球付き紫外・可視分光光度計を用いた測定にて定量する。また電磁波吸収特性はテラヘルツ波帯での機能・性能発現を目指す。濡れ性はJIS R 3257（基板ガラス表面のぬれ性試験方法）に準ずる手法にて定量する。

（２）数値解析モデル構築のため、照射により形成された表面状態の詳細把握

実施項目（１）で得た加工後サンプルの表面形態について、物理的及び化学的な分析を行い、超熱A0ビーム照射と微細構造形成との関係を詳細に捉えると共に、特に物理的な形状に着目して、微細構造形成過程の数値モデル化を行う。

具体的には、加工前及び加工後のサンプルに対して、電子顕微鏡、レーザー顕微鏡、原子間力顕微鏡等を用いた物理的な形状観察と測定を実施する。得られた形状データについては、高さ・幅・密度といった単純な寸法因子に留まらず、表面粗さの規格も参考にしながら、周期的、統計的な情報も含めて指標化する。また、加工後表面の化学的な因子が機能に影響することも考えられるため、フーリエ変換赤外分光分析、X線光電子分光分析をはじめとした各種の化学的な分析手法を適切に活用し、加工後サンプルの化学的な特徴についても同定する。超熱A0と高分子の反応量は質量計測にて、A0照射量についてはポリイミドを用いた手法にて定量しておく。

次に、上記の各種分析によって得られた結果を基に、基礎となる数値解析モデルの構築を試みる。数値解析モデルは、超熱A0の衝突、超熱A0と高分子との反応・脱離、被加工材料である高分子材料の3つの要素について仮定を設定し、微細構造形成に関わると考えられる各種因子をモデル化して取り込む。数値解析モデルを用いて計算機上で超熱A0加工を実施する。得られた微細表面の形状指標が、実際の照射で得られた加工面と整合するようなモデルを構築する（要素課題 2）。これらは、実施項目（４）で行う数値解析モデルを活用した表面微細構造とそれによって発現する機能との関係性把握のための準備作業として重要である。

（３）超熱A0加工実験のための専用装置の製作

既存の超熱A0ビーム照射装置は、宇宙機材料に対して専らLEO環境のみを模擬するニーズが主であったため、ビーム照射のパラメータ選択の自由度は限定的であり、表面構造の形成能には限界があった。超熱A0ビーム照射を加工法として研究するためには、照射密度、照射速度、照射方向、照射雰囲気等の各種パラメータを変化させた試行が必須であるが、現状の設備での実施は困難である。また、既存設備は本来の用途である宇宙機材料の損傷評価で混雑している共通インフラであるため、本研究課題のためのマシンタイムも確保できない。従って、微細加工を目的とした「超熱A0加工実験」を行うための装置を製作し、研究環境を構築することが必要である。

そのため、各種パラメータを幅広く設定可能な加工実験専用装置を製作する。本装置は、照射チャンバおよびロードロックにて構成される。A0生成方法としては、従来装置と同様の、パルス状炭酸ガスレーザーにて酸素分子ガスを解離および加速するレーザーデトネーション法を採用する。超熱A0の照射量は、水晶振動子微小天秤（QCM）センサを用いて定量する。照射密度、照射方向を調整できるように、（レーザー集光用）金ミラーやサンプルステージの取付位置を可変とする。また、パルスバルブの適切な選定により酸素導入量を調整できるようにし、照射速度範囲を従来装置以上とする。さらに照射チャンバ内の雰囲気についても、真空度やガス成分を変更できるよう工夫する。

上記のような超熱A0による加工専用装置は存在しておらず、世界的にもユニークな装置が開発されることとなり、複雑な微細表面形状をシンプルなプロセスで効率良くつくりだすことが可能となる。また、要素課題 3 の達成に必要なA0加工実施が可能となる。

（４）様々な超熱A0照射条件と機能発現・性能制御の相関関係把握

実施項目（３）で構築した超熱A0加工実験専用装置で、様々な照射条件での被加工試料を得ることが可能となる。各種パラメータを変更して製作したサンプルについて、3特性評価を行って、照射条件と機能発現・性能制御の相関関係を明らかにしていく。実施項目（２）で

行ったような、微細構造・化学的分析も実施する。

実験で得られた結果と実施項目（２）で得られた数値解析モデルをベースに、機能発現・性能制御までを含めたモデルの構築に挑戦する。まず、表面構造の各種パラメータ（微細形状寸法、密度、周期性、統計的分布、化学的性状等）と、機能・性能との関連度を設定する。さらに、実施項目（２）で得られたモデルに専用装置で可能となった加工条件パラメータと機能・性能を発現するパラメータとを関連付けることにより、超熱A0の照射から発現する機能・性能までの一貫したモデル化を検討し、加工理論の構築を試みる。これらのモデル化には、原子の反応という非常にミクロな領域から、材料の機能・性能が発現するマクロな領域までの物理化学的な現象を取り扱う必要があり、マルチフィジクス数値解析の手法を適用する。本実施項目の取り組み（実験と解析のイタレーション）が、本研究の最終結果（要素課題 3 の達成）を左右する鍵を握っていると考えており、本実施項目を充実させるため、特に、迅速な作業遂行と、慎重な考察を継続的に取り組む必要がある。

（５）数値解析による予測モデルの完成

実施項目（４）の取り組みで得たデータ及びモデルを基に、実際の試験結果とモデルとのコリレーション、最適化を繰り返し実施し、超熱A0照射条件／形成される微細構造／発現する機能・性能までを予測するモデルの完成度を向上させる（要素課題3）。

（６）プロジェクトの総合的推進

各実施項目を遅滞なく進行し、研究期間終了までに成果創出を確実なものとするため、プロジェクトの推進を行う。なお、本研究の遂行にあたり材料の専門家である福島和宏氏に研究アドバイザとして参画いただく。研究アドバイザに対する技術指導の依頼およびミーティングの設定は、本実施項目の作業として行う。本実施項目の担当者は、P0と各研究実施者との窓口となり、研究委託者との円滑な情報共有にも取り組む。

2. 研究開始時に設定した研究目標の達成度

- ① 超熱A0ビームの照射条件と、形成されるナノスケール構造の相関関係を明らかにすることを旨とする。また、当該ナノスケール構造付加により、加工前とは異なる機能・性能を発現させ、その発現機序を明らかにするとともに、性能制御の実現も目指す。

→概ね達成した。

照射量と構造には明確な相関があることを確認した。また、機能・性能の変化を観測したものの、構造と機能・性能の相関は材料種によることがわかった。

- ② 数値解析的アプローチも採り入れ、超熱A0照射によりソフトマテリアル表面で生じる事象をモデル化し、数値解析的に予測することも目指す。

→達成した

分子動力学シミュレーションによる微視的（分子スケール）での挙動を再現。超熱A0と材料マトリックスの相互作用は、材料最表面分子との衝突で生じているのではなく、表面下にA0粒子が侵入し、一定程度貯め込んだ後に表面の分子が脱離していく結果を得た。

- ③ シンプルな化学構造を有する高分子材料を選択した上で、光学的特性、電磁波吸収特性、濡れ性の3つの機能・性能を制御することを試みる。

■ 光学的特性：透過性に優れる高分子フィルムを加工することで、可視域（380 - 780 nm）で、モスアイ材料級の低反射（反射率1%以下）・高透過性能（透過性材料を対象として、透過率99%以上）にする

→定量的には達成できなかったが、定性的には達成した。

選定した2種類の材料で、目標値には到達しなかったものの、超熱A0照射量の増加に伴って反射率・透過率が期待する方向（反射率低下、透過率向上）に変化する結果を得た。

■ 電磁波吸収特性：導電性及び非導電性のフィルム双方に対し、未処理品と比べ、テラヘルツ波帯での電磁波吸収特性を3dB以上変化させる

→達成できなかった

今回選定した2種類の材料に対しては、表面に付加したナノ構造に対するテラヘルツ波の感度が無く、材料自体の厚さに依存する結果となった。

■ 濡れ性：未処理品と比べ、純水に対する接触角を±30° 超変化させる

→一部達成した

PSでは目標達成レベルの変化を確認した。Shakoでは、±20° 程度の変化であったが、照射量により、親水側・撥水側両方向に変化する結果を得た。

3. 委託業務における研究の方法及び成果

(1) 超熱AOビーム照射により発現可能な3特性の理解

a. サンプル及び超熱AO照射試験

本研究課題で使用したサンプルを、表3-1に示す。

表3-1 本研究課題で使用したサンプル

サンプル	ポリスチレンフィルム	カーボンブラック練り込み ポリオレフィンフィルム
略称 (以下、本文 で使用)	「PS」	「Shako」
メーカー	大石産業株式会社	株式会社武田産業
品名・型番	スチロファン30GK	Shako-BPF LLDPE 40 μm
厚さ	30μm	40μm
性状	無色透明	黒色不透明

これらサンプルに対し、JAXA筑波宇宙センターにある「真空複合環境試験設備」[1]の「原子状酸素照射装置」及び超熱AO実験装置を用いて、表3-2のとおり超熱AO照射を行った。

表3-2 超熱AO照射の実施結果

サンプル	PS、Shako			
目標照射量 [atoms/cm ²]	2×10 ¹⁸	6×10 ¹⁸	2×10 ¹⁹	2×10 ²⁰
照射面	両面／片面	両面	両面／片面	両面／片面

b. 光学特性

表3-2に示した超熱AO照射済みサンプルと未照射サンプルについて、表3-3に示す装置・条件で分光透過率及び分光反射率の測定を行った。また、片面照射を行ったサンプルについては、測定光の入射方向依存性の観点で比較を行った。測定結果を図3-1～3-2に示す。

表3-3 光学的特性を測定した装置及び測定条件

メーカー	株式会社日立ハイテクノロジーズ
品名・型番	紫外可視赤外分光光度計 U-4100
方式	ダブルビーム直接比率測光方式
測定波長範囲	250nm～2,500nm
測定間隔	1nm
入射角	5°
走査速度	紫外・可視域：120nm/min、近赤外域：750nm/min
測定積分球	200mm φ

■ 黒 (反射率・左軸)	■ 灰色 (透過率・右軸) : 未照射
■ 緑 (反射率・左軸)	■ 薄緑色 (透過率・右軸) : 2×10^{18} [atoms/cm ²] (目標) 両面照射品
■ 青 (反射率・左軸)	■ 水色 (透過率・右軸) : 2×10^{19} [atoms/cm ²] (目標) 両面照射品
■ 赤 (反射率・左軸)	■ 桃色 (透過率・右軸) : 2×10^{20} [atoms/cm ²] (目標) 両面照射品

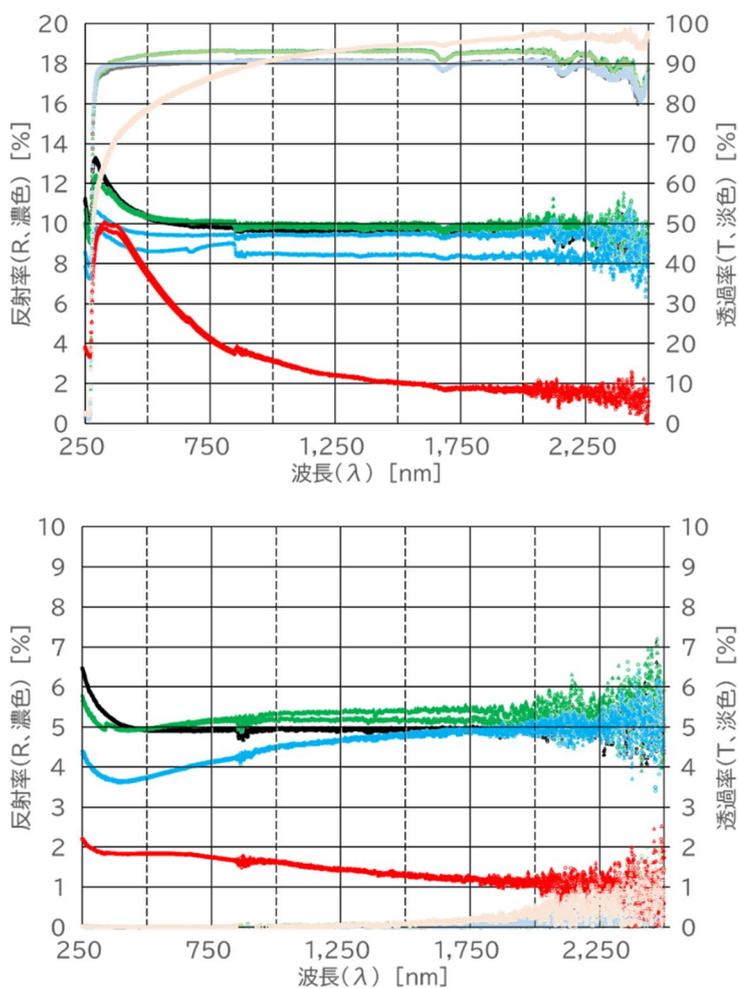


図3-1 光学的特性測定結果(上)PS(下)Shako

両面照射PSでは、 2×10^{19} [atoms/cm²] レベルまでの変化に対し、 2×10^{20} [atoms/cm²] レベルの超熱AO照射によって、透過率・反射率とも大きく変化すること結果となった。 2×10^{20} [atoms/cm²] レベル照射品の透過率は、可視域において低下する結果となっているため、検討を要する。また、反射率は照射量増加に伴って低下する傾向を示している。

Shakoでは、 2×10^{18} [atoms/cm²] レベルでは未照射品と同等の反射率（5～6%）であったのに対し、 2×10^{19} [atoms/cm²] レベルでは若干低下（3.5%～5%）、 2×10^{20} [atoms/cm²] レベルでは2%を下回る結果となった。照射量増加に伴い、反射率が低下していく傾向を示すことが分かった。

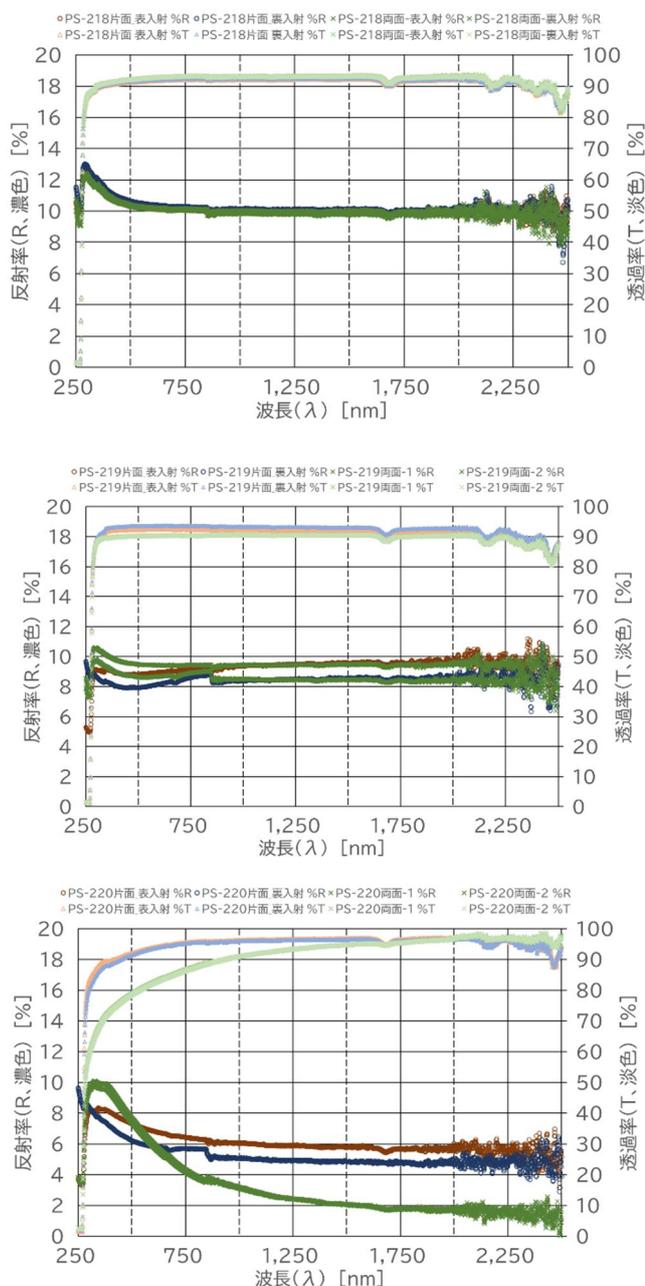
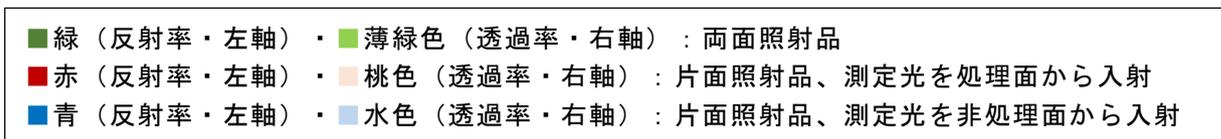


図3-2 PSに対する測定光入射方向毎の光学的特性測定結果
 (上) 2×10^{18} [atoms/cm²] (中) 2×10^{19} [atoms/cm²] (下) 2×10^{20} [atoms/cm²]

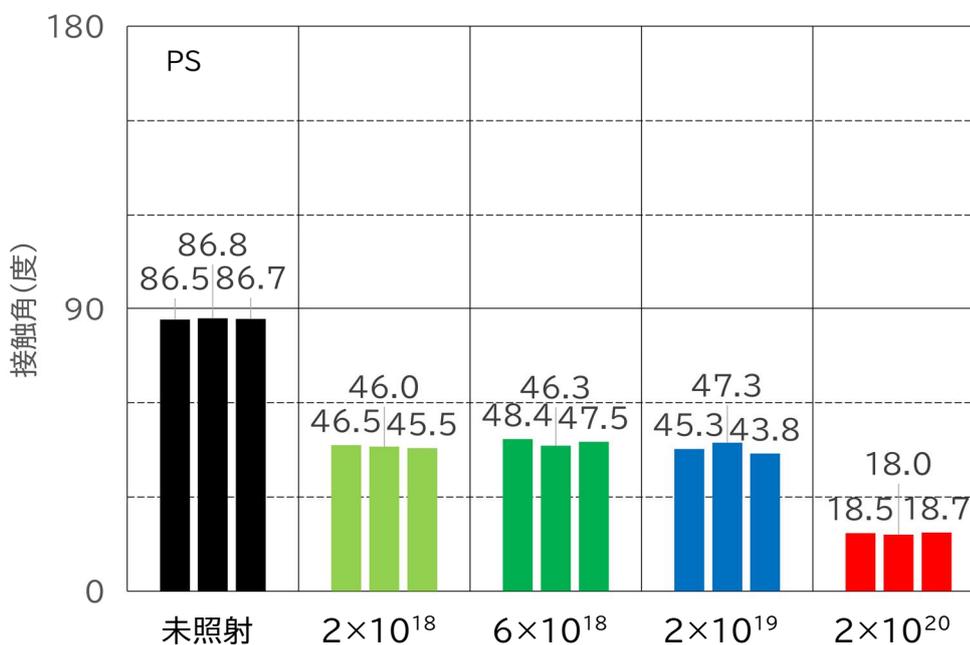
図3-2は、PSの結果を示している。 2×10^{19} [atoms/cm²] レベルまでの低照射量では顕著な差異が確認できないが、 2×10^{20} [atoms/cm²] レベルでは、両面処理品、片面処理品の入射方向による明確な差異が確認された。反射率では、500nmより短波長側で比較すると、両面照射品が8~10%であるのに対し、片面照射品の処理面入射では7~8%、同・非処理面入射では6~10%という結果となった。一方、長波長側では、両面照射品の反射率が最も低く、次いで片面照射・非処理面入射、片面照射・処理面入射の順で高くなる結果であった。透過率については、両面照射に対して、片面照射品は高透過になることが分かった。以上の結果は、処理の適用方法により、光学的特性が大きく変化することを示唆する結果を得たと言える。

c. 濡れ性

表3-2に示した超熱AO照射済みサンプルと未照射サンプルについて、表3-4に示す装置・条件で接触角測定を行い、濡れ性評価を行った。測定結果を図3-3に示す。

表3-4 接触角を測定した装置及び測定条件

メーカー	協和界面科学株式会社
品名・型番	画像処理式接触角計 CA-X型
接触液	純水
測定箇所	フィルム中央
測定回数	N=3
測定環境	室温23°C、RH50%



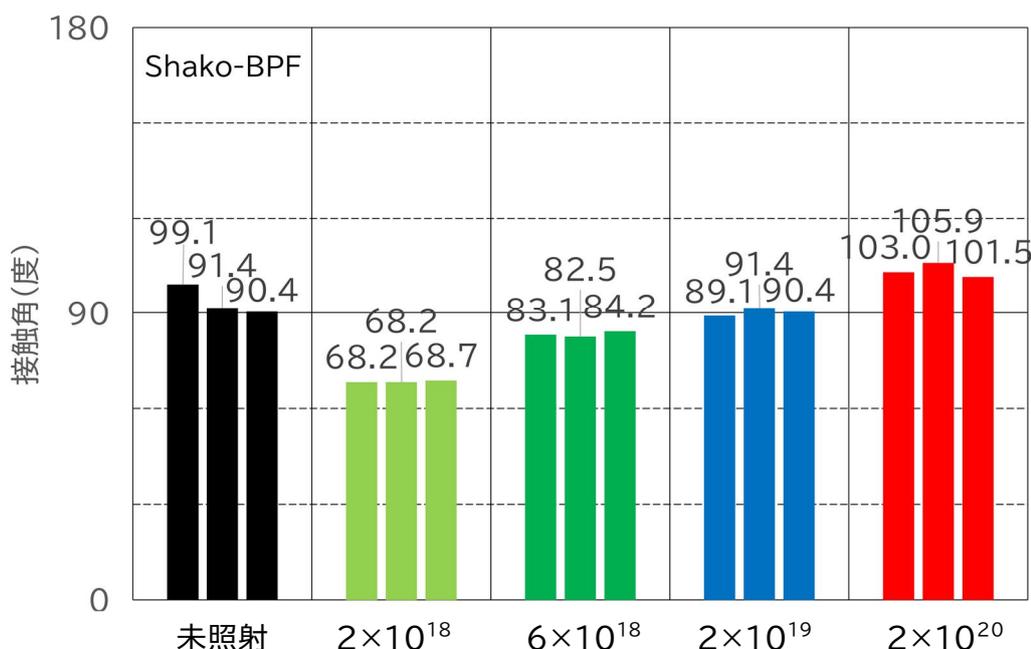


図3-3 接触角測定結果(上)PS(下)Shako

PSについては、超熱AO照射に伴って接触角が低下する結果を得た。未照射で 87° 程度のものが、 2×10^{18} [atoms/cm²]レベルの照射を行うと 46° 程度に低下して、 2×10^{19} [atoms/cm²]レベルまで変化しない結果となった。さらに 2×10^{20} [atoms/cm²]レベルまで照射を行うと、 19° 程度まで低下した。 2×10^{20} [atoms/cm²]レベルまでの範囲では、照射量の増加に伴って親水性を示すことが分かった。

一方、Shakoについては、未照射で 90° 強であったものが、 2×10^{18} [atoms/cm²]レベルの照射を行うことで 68° 程度に低下し親水性を示した。さらに照射量を増加していくと、今度は接触角が増加していき、 90° を超えて撥水性に転じる結果となった。これは、超熱AO照射によって、Shakoの親水性～撥水性の両方向への制御可能性を示すものと言える。

d. テラヘルツ分光分析結果

0.2~4THzの範囲での測定を実施した。測定方式等を表3-5に、結果を図3-4~3.5にそれぞれ示す。

表3-5 テラヘルツ分光分析装置及び測定条件

メーカー	日邦プレジジョン株式会社
品名	Tera Prospector
測定方式	THz-TDS (Time-Domain Spectroscopy)
測定帯域	200GHz~4THz
周波数分解	5.7GHz
測定回数	N=1

■ 黒 (反射率・左軸)	■ 灰色 (透過率・右軸)	: 未照射
■ 緑 (反射率・左軸)	■ 薄緑色 (透過率・右軸)	: 2×10^{18} [atoms/cm ²] (目標) 両面照射品
■ 青 (反射率・左軸)	■ 水色 (透過率・右軸)	: 2×10^{19} [atoms/cm ²] (目標) 両面照射品
■ 赤 (反射率・左軸)	■ 桃色 (透過率・右軸)	: 2×10^{20} [atoms/cm ²] (目標) 両面照射品

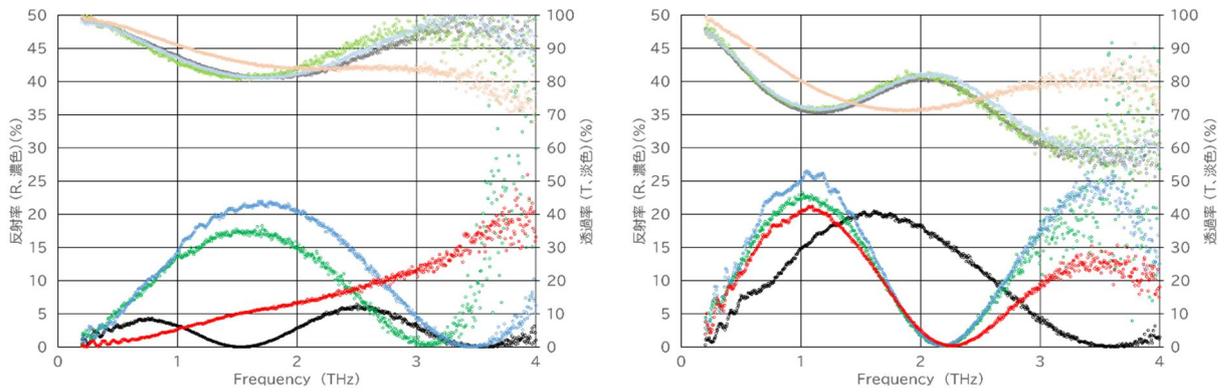
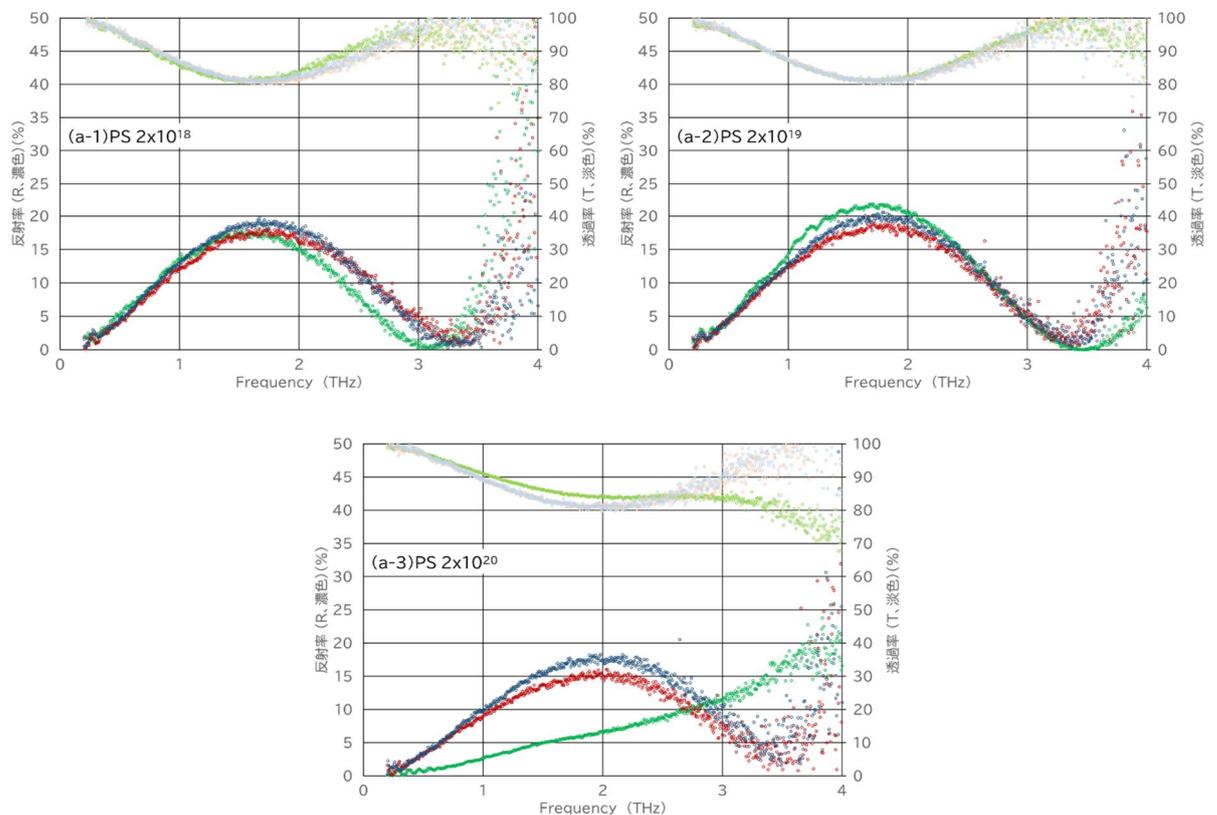
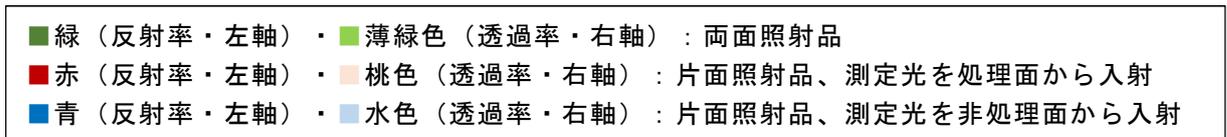


図3-4 両面処理品のテラヘルツ分光測定結果(左)PS(右)Shako

PSについて、反射スペクトルは、超熱AO照射量毎に異なる様相を呈しており、 2×10^{20} [atoms/cm²]レベルの照射品で、傾向が異なる結果となった。透過スペクトルは、未照射から 2×10^{19} [atoms/cm²]レベルまで同様の結果を示し、 2×10^{20} [atoms/cm²]レベルでは傾向が変わった。

Shakoについて、反射スペクトルは、未照射品と照射品で腹・節の周波数が変わる結果となった。照射品では、腹・節周波数は同じで、反射率のピーク高さが変化する結果となっている。一方、透過スペクトルでは、未照射品と 2×10^{19} [atoms/cm²]レベル以下の照射品がほぼ同じスペクトルとなり、 2×10^{20} [atoms/cm²]レベルのみ異なる結果となった。



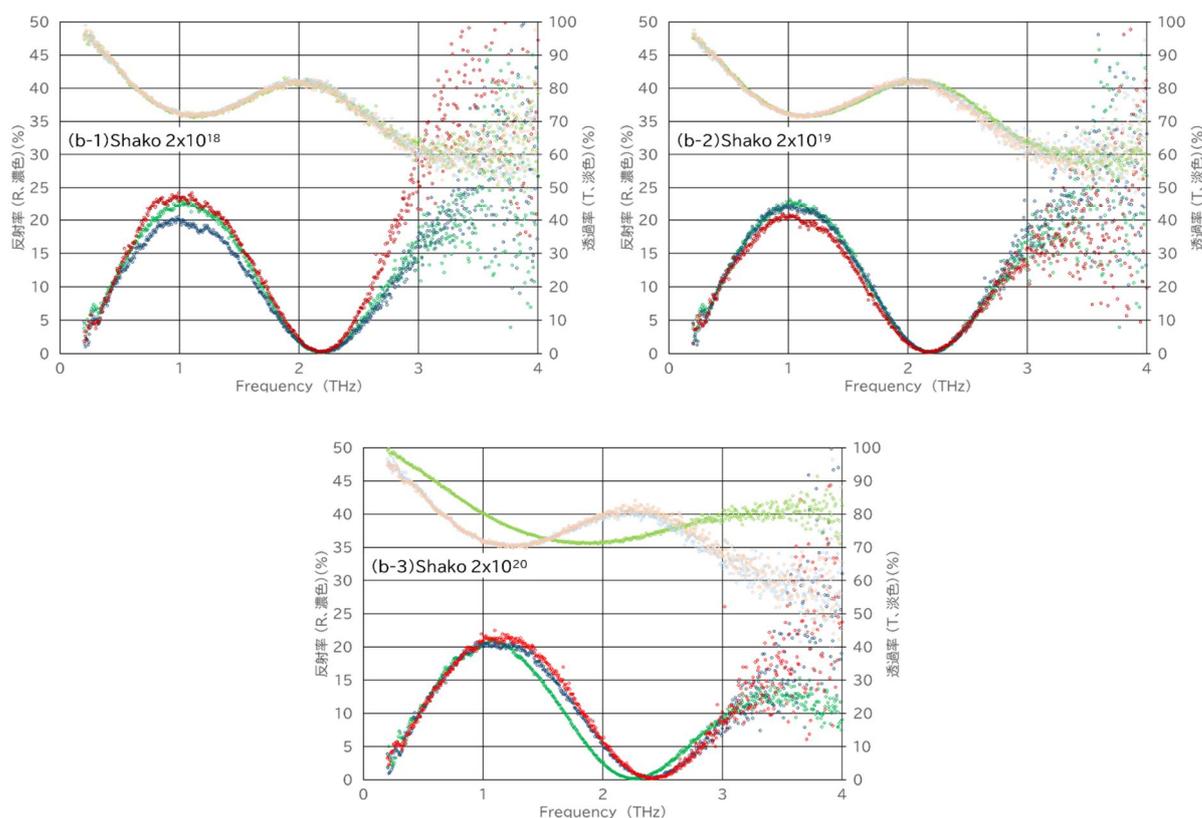


図3-5 測定光入射方向毎のテラヘルツ分光測定結果

両面処理品と片面処理品の測定結果を見ると、 2×10^{18} 及び 2×10^{19} [atoms/cm²]では、PS、Shakoとも顕著な差異は認められず、測定光の入射方向依存性も見られなかった。一方、 2×10^{20} [atoms/cm²]では、両面処理品と片面処理品で傾向に違いが認められた。表3-6にそれぞれの膜厚をマイクロメータで実測した結果を示す。 2×10^{20} [atoms/cm²]照射品の膜厚減少が顕著になっていることがわかる。このことから、テラヘルツ分光特性の変化は、膜厚に依存している可能性が高いと言える。

表3-6 テラヘルツ分光測定サンプルの膜厚測定結果

照射量 (atoms/cm ²)		未照射	2×10^{18}		2×10^{19}		2×10^{20}	
			片面	両面	片面	両面	片面	両面
膜厚 (μ m) (4回測定平均値)	PS	27	28	29	29	27	25	15
	Shako	40	39	38	39	38	35	32

e. 超熱A0加工実験装置

本研究課題で製作した超熱A0加工実験装置の写真を図3-6に示す。

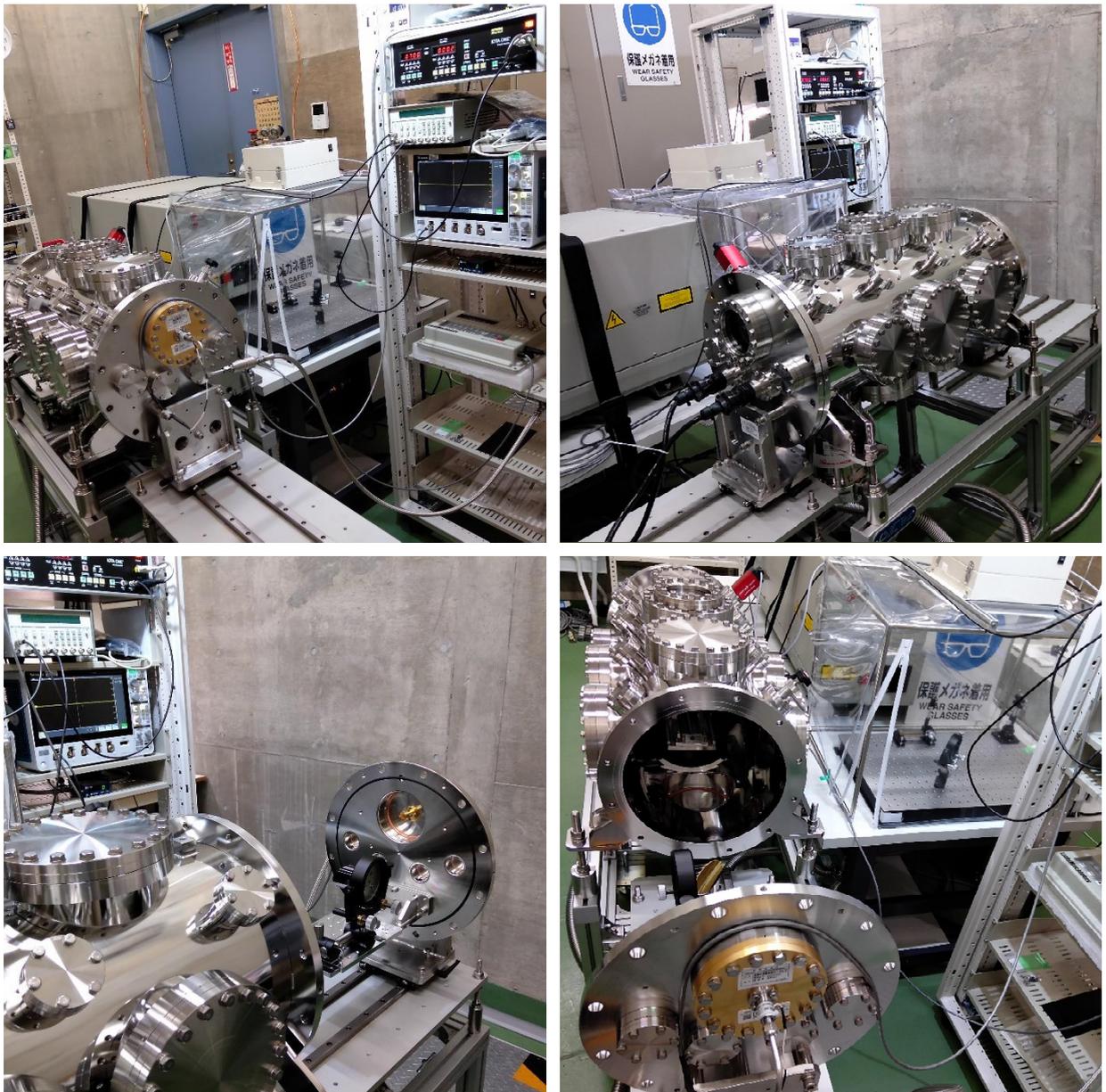


図3-6 超熱A0加工実験装置の外観写真

超熱A0実験装置には、図3-7に示す自動ステージを装備している。これにより、照射サンプル位置及び角度を変更することが可能となっており、ビーム発生源との相対位置を変えて超熱A0ビームを照射することができる。また、酸素ガスをノズルに導入するパルスバルブの開タイミングと、パルスレーザの放射タイミングを調整することによって、生成する超熱A0ビームの速度を調整することができる。このタイミング調整を、図3-7 (右下) に示す信号同期装置によって行う。これらの装備によって、様々な超熱A0照射条件を実現することができるようになった。

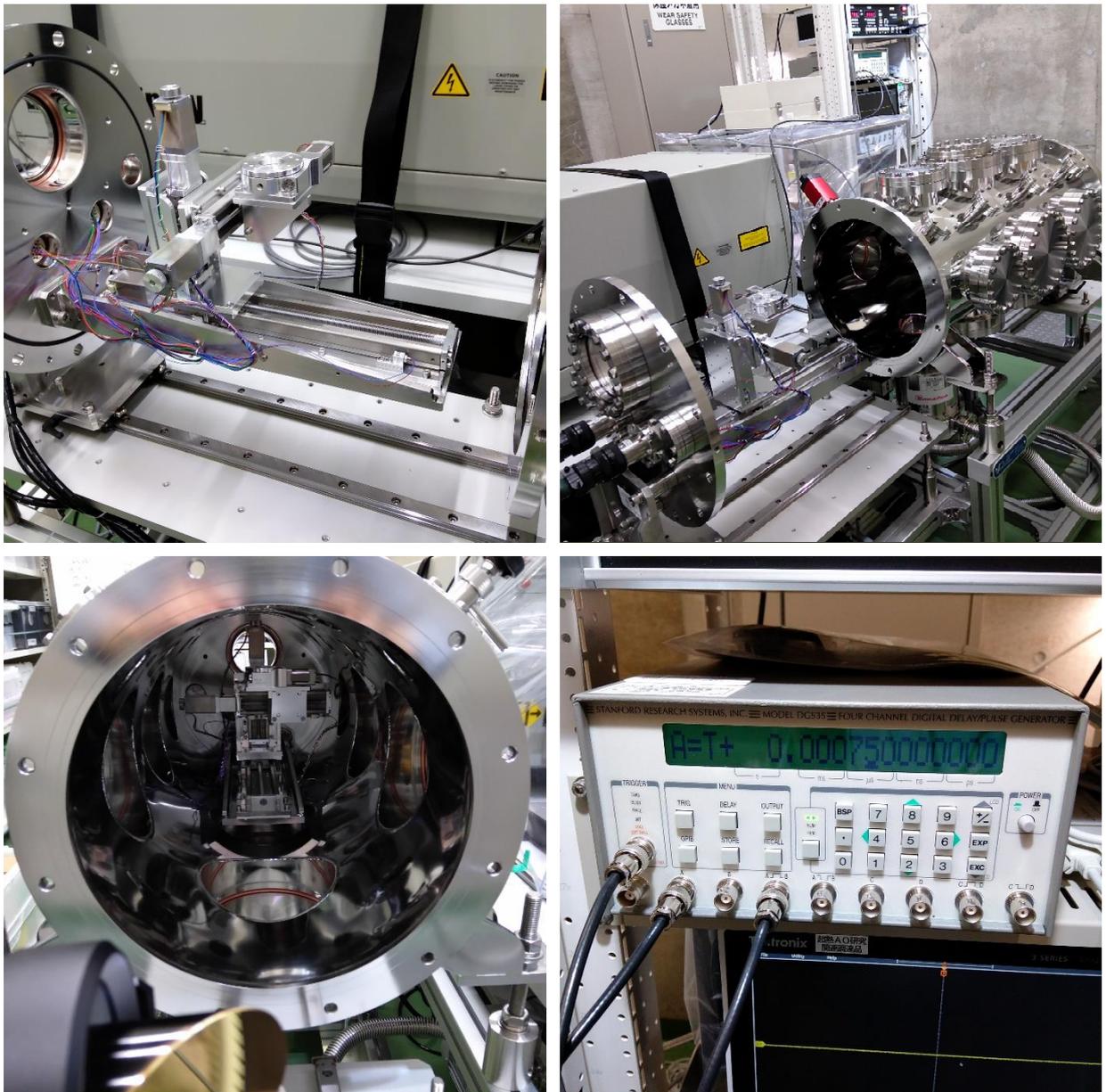


図3-7 超熱A0加工実験装置に装備した自動ステージと信号同期装置（右下）

（2）超熱A0照射による微細構造形成の数値解析モデル作成

超熱A0照射を行った処理面について走査プローブ顕微鏡（SPM）観察と断面SEM観察を行った。それぞれの条件を表3-7に、観察結果を図3-8～3-9にそれぞれ示す。

表3-7 表面SPM観察及び断面SEM観察の概要

観察手法	表面SPM観察	断面SEM観察
メーカー	ブルカー・エイエックスエス	日本電子
装置名	MultiMode8型 走査型プローブ顕微鏡	JSM-7800F 電界放出形走査電子顕微鏡
測定方法	タッピングAFM測定	凍結破断、Ptスパッタ処理 加速電圧2kV（二次電子像）

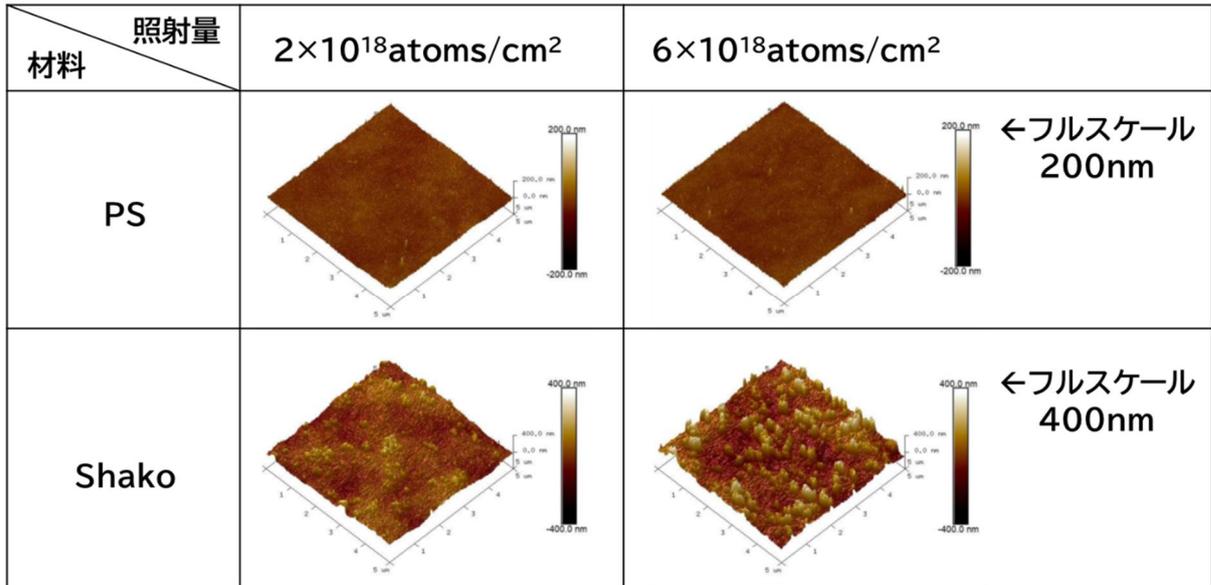


図3-8 表面SPM観察結果

これまで実施してきた照射量レベルでは、凹凸が大きすぎるため、SPM観察において凹部にプローブが届かず、高低情報を得ることが難しかった。今回実施した $10^{18} [\text{atoms/cm}^2]$ レベルでは、凹部も問題なく観察できている。この結果を基に、モデリングと実験結果の突合を進める。

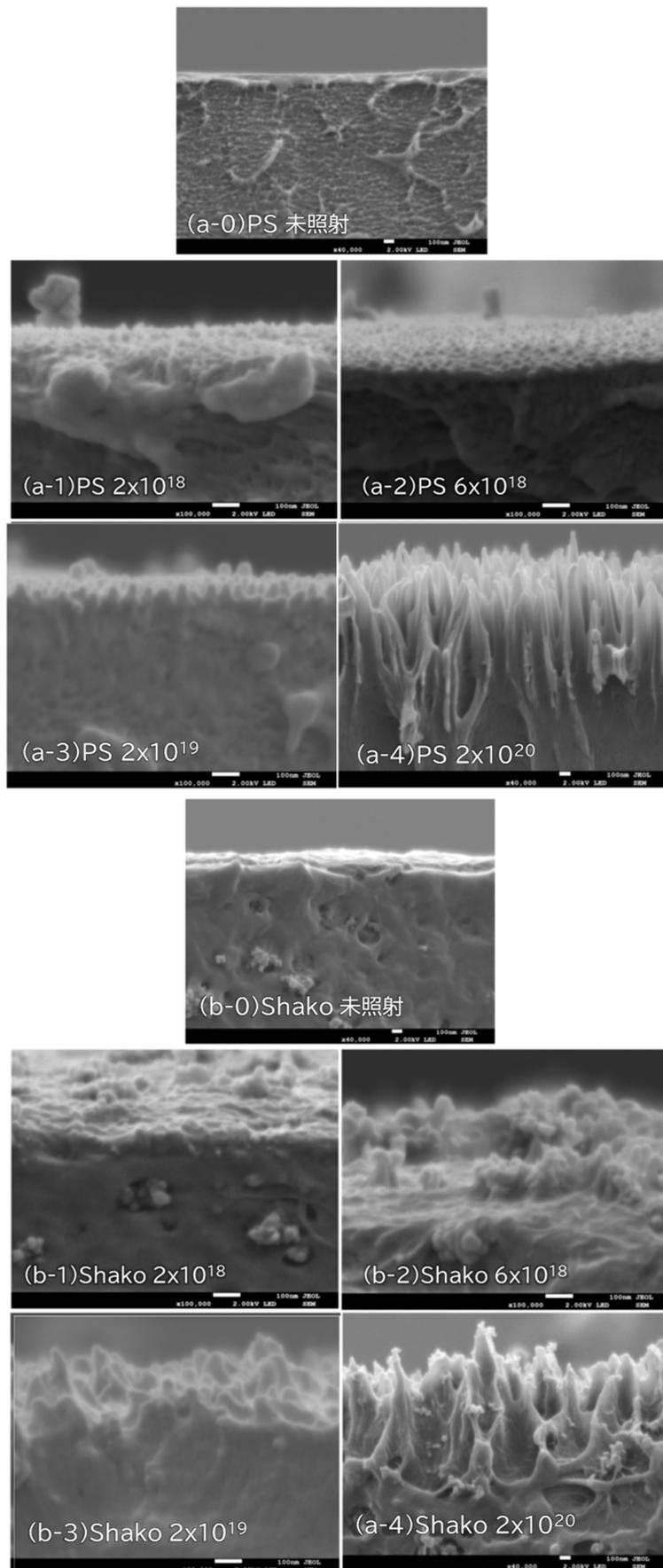


図3-9 断面SEM観察結果（スケールバー：100nm）

低照射量における構造形成の様子を捉えることができた。PS、Shakoとも 2×10^{19} [atoms/cm²] レベルまでは数十nmの凹凸であるのに対し、 2×10^{20} [atoms/cm²] レベルになると数百nm \sim μ mの凹凸になっており、 2×10^{19} [atoms/cm²] を超えてから凹凸構造成長が促進されることが分かった。

超熱AO粒子と、ソフトマテリアル分子の相互作用をモデル化し、解析を実施した。「材料設計支援プラットフォーム」(SciMAPS)を用いて作成した形状モデルを図3-10に、超熱AO衝突計算の条件を表3-8、計算結果を図3-11にそれぞれ示す。

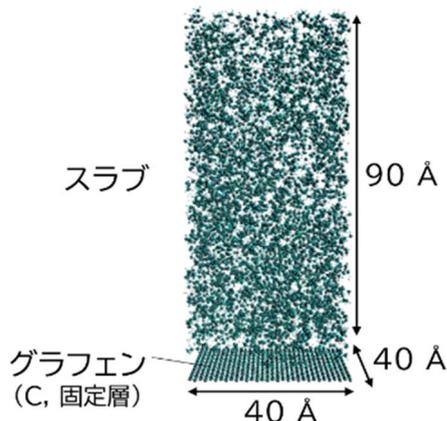


図3-10 SciMAPSを用いて作成した形状モデル

表3-8 超熱AO衝突の分子動力学計算の条件

プラットフォーム	AMS
力場	ReaxFF
計算時間	0.1 fs 間隔 300,000 ステップ (30 ps)
超熱AO入射	100 fs ごとに 1 個の頻度 合計 300 個
温度制御	あり (NVTアンサンブル@300K)

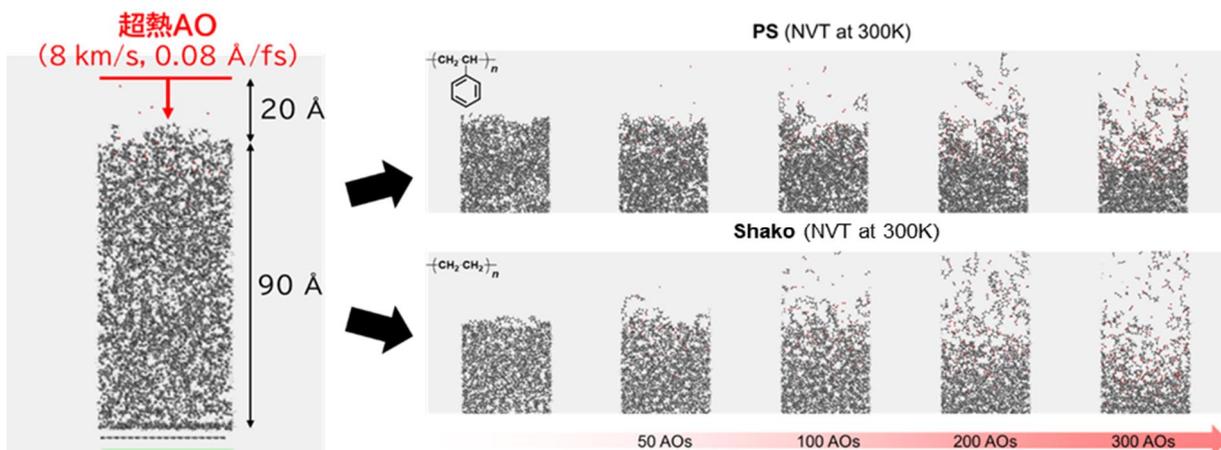
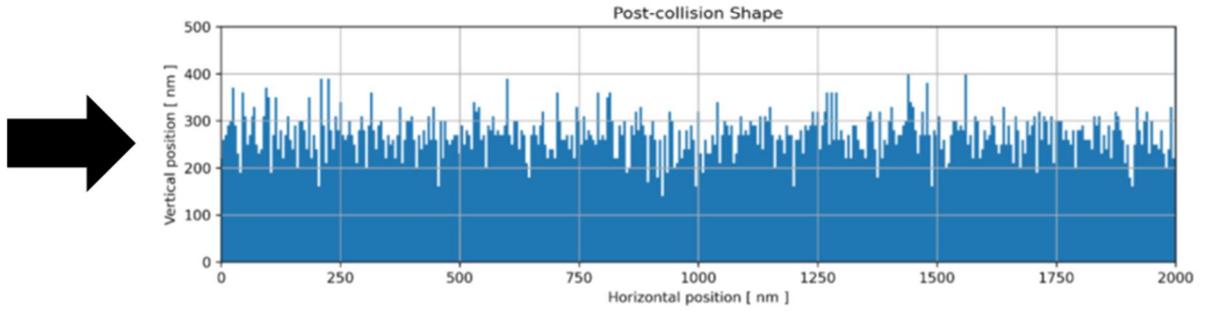
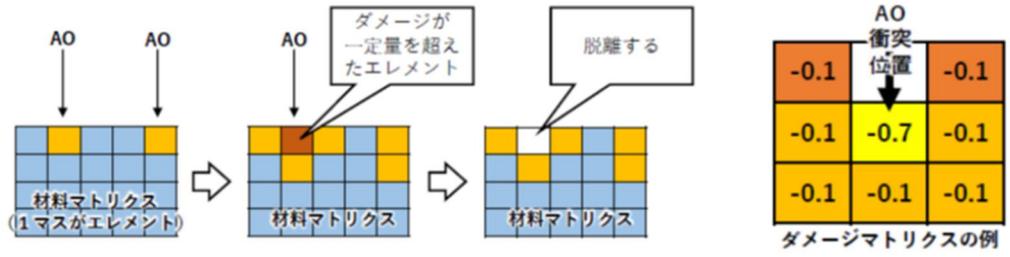


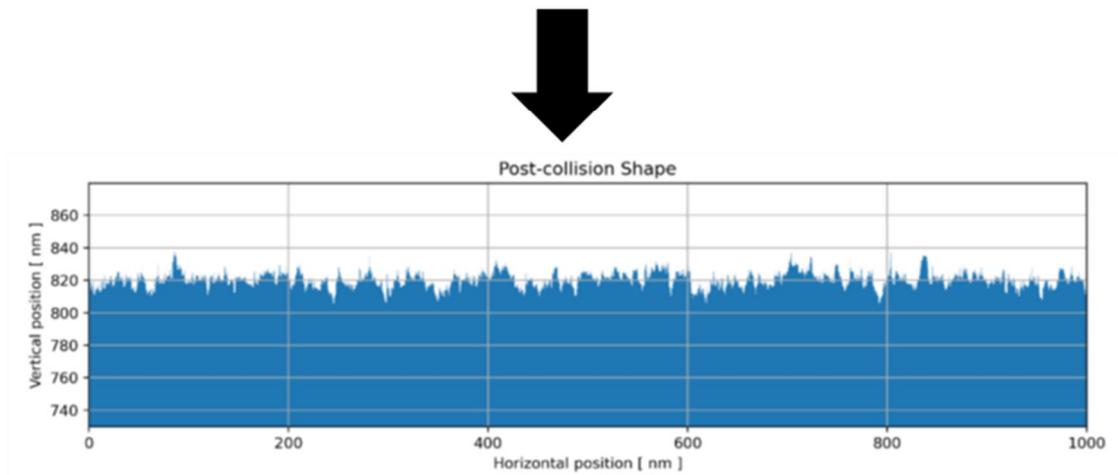
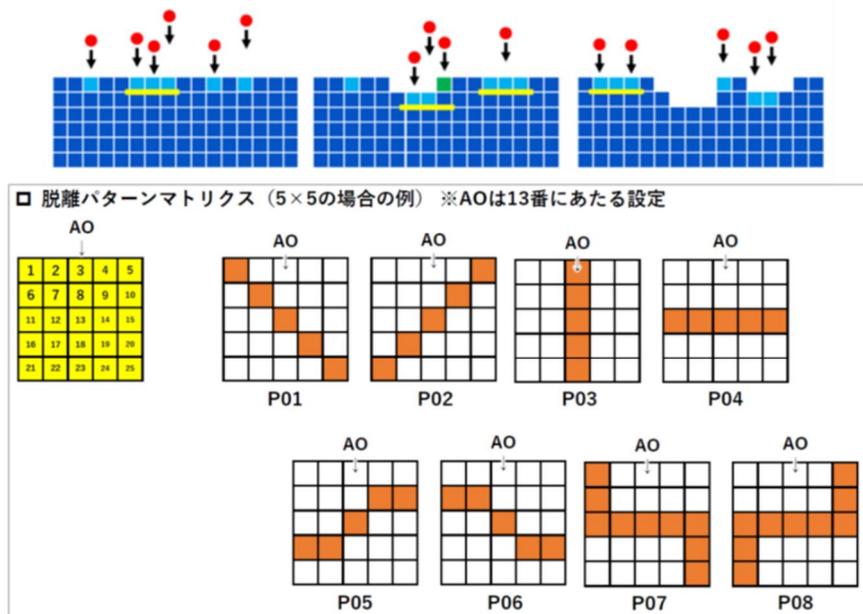
図3-11 超熱AO衝突の分子動力学計算結果

分子動力学計算結果から、超熱A0粒子が衝突することにより、スラブ（材料側）の分子がほぐれ、脱離していく様子が得られた。また、超熱A0粒子一つ一つに対して脱離が生じるのではなく、一旦、最表層よりも下の領域まで到達し、ある程度溜め込まれた後に、脱離が開始する、という挙動を示す結果となった。これは、先行研究における実験結果と整合する結果となっている。

次いで、空間的スケールを拡大したソフトマテリアル表面へのナノ構造付加過程の計算試行結果について述べる。なお、当初、本取組みのことを「粗視化」と表現してきたが、分野により「粗視化」という用語の捉え方が異なることが分かったため、今後は「ナノ構造形成モデリング」と呼ぶこととした。ナノ構造形成モデリングの試行結果を、図3-12に示す。



(a) 「Type 1」



(b) 「Type 2」

図3-12 ナノ構造形成モデリング計算の試行結果

2種類の超熱AO衝突によるナノ構造形成過程モデルを考案した。「Type 1」は、格子状の材料マトリクスを規定し、各エレメントに「ダメージ量」なる指標を設定する。超熱AOが当たると、各エレメントのダメージ量が増加し、ダメージ量がある閾値を超えたエレメントは、マトリクスから脱離する、というものである。「Type 2」は、分子動力学の計算結果から、原子が1個ずつ独立に飛ぶのではなく、まとまった単位で飛んでいく挙動が確認されたことを受け、エレメントに脱離するグループを設定する、という考えに基づいたものである。それぞれのモデルで計算を行ったところ、いずれも実験結果とは乖離がある結果が出力されることが分かった。この結果を踏まえ、ナノ構造形成モデルの改良を進めて、実験結果及び分子動力学計算結果との突合を行いながら、適切なモデルを検討していく。

(3) 超熱AO照射により発現可能な機能・性能の数値解析モデル作成

超熱AO照射表面の「最終目標」に示す機能・性能を予測できる数値解析モデルを作成した。ここでの数値解析モデルは、要素課題(2)に示す微細構造形成数値解析モデルを包括する。

4. 委託業務全体の成果

4. 1 計画時に想定していなかった成果(副次的成果)や、目標を超える成果

光学的特性の予想外な変化を観測した。それは、PSでの吸収増加、両面/片面処理の違いである。ナノ構造を付加することにより、反射が低下し、透過が増加することを企図していた。ところが、図3-1に示すように、PSの大照射量条件においては、反射・透過とも低下する結果が得られた。このことは、PS自体の吸収が増加したと考えざるを得ず、当初予想していなかった挙動を示した。また、光学的特性に対するナノ構造付加加工の効果は、両面処理することにより実現するものと想定していたが、片面処理で入射方向を変化させたケースの測定を試みたところ、図3-2に示すように、入射方向依存性を確認した。

濡れ性について、Shakoでは照射量に応じて親水側、撥水側の両方に変化する様子が観測された。(図3-3(下))この結果は、超熱AO照射をソフトマテリアル表面の改質に適用した場合、幅広い改質レンジを実現することができる可能性を示唆する結果であると考えている。(一般的には、初期特性(親水・撥水)を増強する方向に変化する。)

4. 2 研究課題の発展性(間接的成果を含む)

本研究課題の実施により、超熱AOビーム照射によるソフトマテリアルの表面加工・改質への道筋を拓いたものと考えている。また、本分野における解析的アプローチに技術レベルが格段に向上したと確信している。

4. 3 研究成果の発表・発信に関する活動

国内外での積極的な成果発表に努めた結果、11件の口頭発表を実施することができた。また、本研究課題の発端となっている宇宙材料分野コミュニティだけでの発表にならないよう、幅広い分野(化学、材料加工など)における発表機会を確保するように心がけた。

5. プロジェクトの総合的推進

5. 1 研究実施体制とマネジメント

本研究課題の採択条件として付された「材料の専門家のサポートを得ること」に基づき、研究アドバイザを委嘱した。研究の全期間において、助言を受けながら進めることで、確実な研究進行ができ、また、研究成果を向上することができた。

5. 2 経費の効率的執行

一般競争入札を活用し、経費を効率的に執行した。また、解析において主に使用したワークステーションはリースにより調達した。

6. まとめ、今後の予定

令和2年度より、超熱A0によるソフトマテリアル表面へのナノ構造付加と機能制御に関する研究に取り組んできた。実験的アプローチ、解析的アプローチの両面で行ってきた本研究課題で得られた知見は、今後の展開につながる有意義なものであったと確信している。

今後は、学術論文の投稿や学会発表に取り組みつつ、後継研究として、超熱A0ビームによるソフトマテリアルの表面加工・改質研究の発展に取り組んでいく。

7. 研究発表、知的財産権等の状況

(1) 研究発表等の状況

種別	件数
学術論文	該当なし
学会発表	11件
展示・講演	該当なし
雑誌・図書	該当なし
プレス	該当なし
その他	該当なし

(2) 知的財産権等の状況

該当なし。

(3) その他特記事項

該当なし。