

摩擦現象解明のためのプログラム開発とその応用

○大山高裕¹・亀井大輔¹・遠藤 明¹・久保百司¹・今村 詮²・宮本 明^{1,3}

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 07)

²広島国際学院大学工学部(〒739-0321 広島市安芸区中野6-20-1)

³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 04)

【緒言】

近年、世界規模で省エネルギー化や省資源化が進んでいるが、その貢献が大いに期待される分野としてトライボロジーが挙げられる。中でも潤滑分野で求められてきているのは、より低粘度で、エネルギーロスの少ない新規な潤滑剤の開発である。低粘度流体は潤滑剤には不向きとされているが、摩擦面など特殊な環境下では特異的な化学反応が起こり、表面に潤滑膜が形成される場合がある。このような反応メカニズムを解明するには、ナノレベルでの評価が必要であるが、従来からの実験的手法ではそれが困難である。そこで本研究では、現象の解明をナノオーダーで行うことが可能な計算化学を用いて、潤滑化学反応のメカニズムの追跡、解明を行った。

【計算方法およびモデル】

計算プログラムには、当研究室で開発した古典分子動力学プログラム TRIBOSIM と高速化量子分子動力学プログラム colors を、計算結果の可視化には RYUGA を用いた。潤滑剤分子としては、ジメチルエーテル(DME)、メタノール、シクロヘキサンを用いた。colors は tight-binding 近似に基づいており、計算式の各所にパラメータを用いることによって計算の高速化を実現している。パラメータは、密度汎関数法の計算結果を再現するようにそれぞれ決定した。

【結果および考察】

基板として、水素終端したダイヤモンド(111)表面を用いた。まず TRIBOSIM を用いて、潤滑剤分子の温度 300K におけるバルク計算と基板間での挟み込み、せん断計算を行い、せん断計算によって得られた構造を摩擦環境とした。次にせん断シミュレーションによって得られた構造について colors による電子状態計算を行った。図1には、せん断シミュレーションによって構築した摩擦環境モデルとそのときの電子状態計算の結果を示す。図中で各原子は、電子状態の違いによって色付けされており、黒色は負の電荷、白は中性電荷、灰色は正の電荷を示している。これを負荷をかけていないバルクの電子状態と比較すると、電荷状態に違いが見られた。また、圧力を変えてダイヤモンド基板表面の水素の電子状態について解析を行ったところ、圧力が高くなると基板表面の水素の電荷が増加することがわかった。発表では、メタノール、シクロヘキサンについての結果についても報告する。

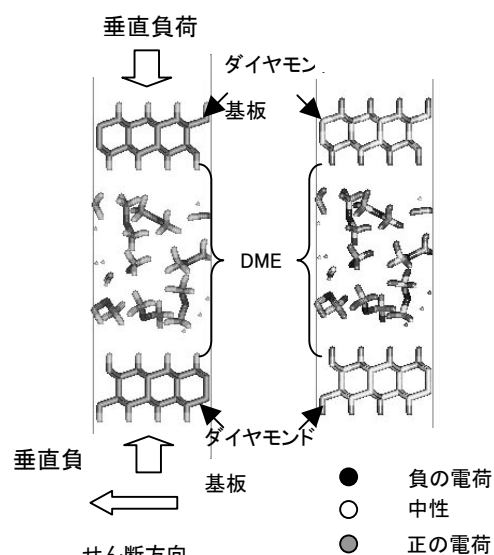


図1 TRIBOSIM のせん断シミュレーションの計算結果(左)とその構造に対して電子状態計算を行った結果(右) (挟み込み分子は DME)