

鷲津仁志¹, 三田修三¹, 大森俊英¹, 鈴木厚²

¹ 豊田中央研究所 ² トヨタ自動車

【緒言】

機械部品の潤滑面において、高圧による固体表面の弾性変形および潤滑剤の粘度上昇の影響を無視できない流体潤滑領域を弾性流体潤滑 (EHL: Elastohydrodynamic Lubrication) とよぶ。EHL 下の油膜では、圧力やせん断速度に対し粘度は強い非線形性を示すが、分子論的にはよくわかっていない。一方、EHL 油膜のせん断を介して動力を伝達する機構としてトラクションドライブがあり、高トラクション係数 (摩擦係数) を発現するフルードの分子レベルからの開発が望まれる。そこで、全原子モデルの非平衡 MD シミュレータを製作し、相対すべりを与えた 2 つの固体原子層に挟まれたフルード分子層のせん断場における挙動を計算した。

このような系における MD 計算では、計算時間の制約から、油膜厚さとせん断速度が実際の EHL 油膜 (膜厚: $0.1 \mu\text{m}$ 以上, せん断速度: $10^6 / \text{s}$ 以下) と大きく異なる。本報告では、せん断速度および膜厚の違いが油膜の挙動に及ぼす影響を調べるとともに、粘度のせん断速度依存性について考察した。

【方法】

溶液状態の *n*-ヘキサンを $10 \times 10 \times 3$ 層の α 鉄の固体原子層で挟み、固体原子層間に 1 GPa の定圧力を印加し、相対すべりを与え、固体原子層の受ける反力によりトラクション係数 μ を計算した。有機分子内の相互作用は Amber 力場を用い、Nosé-Höover 法により 350 K の定温とした。

【結果】

膜厚 $z_0 = 1.0 \sim 10.0 \text{ nm}$, せん断速度 $\dot{\gamma} = 1.0 \times 10^7 \sim 1.0 \times 10^9 / \text{s}$ の範囲におけるトラクション係数 μ の時間平均を図 1 に示す。 $z_0 \geq 5.0 \text{ nm}$ の領域では (1) z_0 の増加とともに μ は減少し, (2) $\dot{\gamma}$ の減少とともに μ は減少する。一方, $z_0 = 1.0 \text{ nm}$ では, μ の計算値の $\dot{\gamma}$ に対する傾向にばらつきがある。これに関しては, μ の stick-slip 的な時間変化が非常に大きく収束性が悪いためであることを確認している。また, それぞれの膜厚における速度プロファイルでは, $z_0 = 1.0 \text{ nm}$ の系においては分子層間の離散的なすべりが発生し, $z_0 = 2.5 \text{ nm}$ の系においてもこの傾向が残り, $z_0 \geq 5.0 \text{ nm}$ の系ではみられなくなった。これらの結果から, 実現象と質的に同様な分子集団のふるまいを観測するためには, 膜厚において少なくとも 5.0 nm 以上必要であると考えられる。

さらに, $z_0 \geq 5.0 \text{ nm}$ のデータについて μ を粘度 η に換算し $\dot{\gamma}$ に対してプロットすると, その傾きの絶対値は 0.93 となった (図 2)。この値は, Stevens ら^[1] に比べ低せん断速度領域にもかかわらず大きく, 本計算が高圧で, よりガラス転移点に近い状態のシミュレーションになっていることを示す。

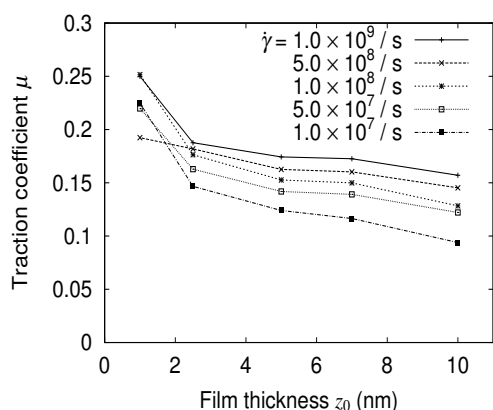


図 1 トラクション係数 μ の膜厚・せん断速度依存性。

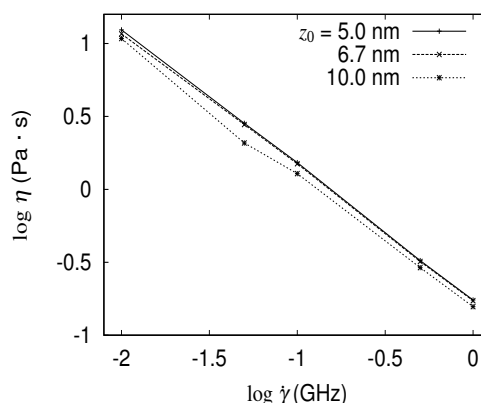


図 2 粘度 η の膜厚・せん断速度依存性。

[1] M. Stevens et. al. J. Chem. Phys. **106**(1997) 7303.