

潤滑化学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・古山通久¹・久保百司^{1,2}・今村 詮³・宮本 明^{1,4}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 科学技術振興機構さきがけ(〒332-0012 埼玉県川口市本町4-1-8)³ 広島国際学院大学工学部(〒739-0321 広島市安芸区中野6-20-1)⁴ 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 10)

【緒言】

近年、世界規模で省エネルギーや省資源が注目を集めているが、そこで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いるのは、より低粘度の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、潤滑を実現するに当たって物性の改善のため種々の添加剤が必要となる。そこでそれらの添加剤の果たしている役割を原子、電子のレベルで評価することが必要となる。しかし、実際のせん断場では摩擦によって誘起される化学反応も起こっていると考えられ、その複雑さから従来の手法では詳細な現象の解明は困難であった。そこで本研究では、現象の解明をナノレベルで行うことが可能な計算化学を用いて、潤滑化学反応現象の追跡、解明を試みた。

【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、結果の可視化には New-RYUGA 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、H、OH 終端したダイヤモンド(111)表面を用いた。潤滑剤分子としては、ジメチルエーテル(DME)を、DME の物性改善を目的とする添加剤としてエチルアミン、エチルアルコール、プロピオン酸、エチルアミドの4種類の添加剤を選択した。図1に TRIBOSIM を用いたせん断シミュレーションによって得られた構造のうち添加剤分子としてエチルアミンを用いたものを示す。添加剤ごとの抵抗比の算出を行った。その結果について図2に示す。図より OH 終端モデルでは、いずれの添加剤を用いた場合も H 終端モデルよりも抵抗比が大きいことが、また、添加剤の種類に注目すると、エチルアルコールがどちらの基板においても抵抗比が最も大きくなった。OH 基板を用いた際にすべての分子で抵抗比が大きくなるのは、基板と潤滑剤、添加剤分子の間の相互作用の大きさに起因すると考えられる。

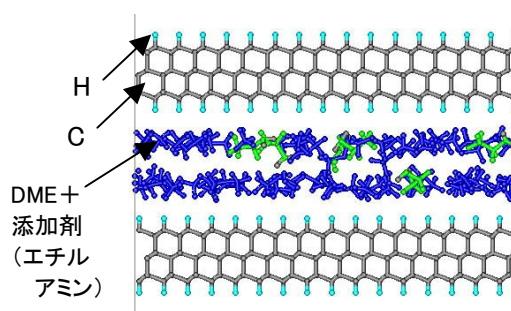


図1 H 終端基板を用いたせん断シミュレーションの最終構造(DME+エチルアミンの場合)

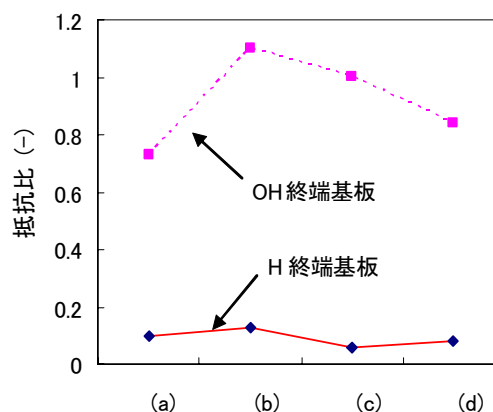


図2 H、OH 終端基板を用いたせん断シミュレーションにおける抵抗比
(a)エチルアミン (b)エチルアルコール
(c)プロピオン酸 (d)エチルアミド