

水潤滑シミュレーション

○ 小林 康彦¹、佐藤 誠一¹、白 珊丹¹、樋口 祐次¹、
尾澤 伸樹¹、足立 幸志²、久保百司¹

¹ 東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター

(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-703)

² 東北大学大学院工学研究科ナノメカニクス専攻 (〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-01)

【緒言】地球環境への負荷が少ない水潤滑において、炭化ケイ素(SiC)は表面の摩擦特性が変化することで低摩擦プロセスを示すことがわかっている[1]。しかし、実験では摩擦と化学反応が複雑に絡み合った反応を直接的に観測することは難しいため、その詳しいメカニズムは明らかになっていない。そこで本研究では、Tight-binding 量子分子動力学法を用いて、SiC 膜の水潤滑における低摩擦発現メカニズムを明らかにすることを目的とした。

【方法】SiC の水潤滑摩擦シミュレーションには Tight-binding 量子分子動力学プログラム Colors を使用した。計算モデルを Fig. 1 に示す。SiC はアモルファス構造のモデルを使用し、上の基板上部を一定速度 100 m/s で強制移動させ、下の基板下部を固定した。

【結果】実際の SiC 膜には微小な凹凸が存在するため、接触部では摩擦環境が異なる。この摩擦環境の差異による摩擦プロセスの変化を検討するため、摩擦荷重を変化させて計算を行った。計算条件は水 104 分子において摩擦荷重を 1 GPa, 3 GPa とし、シミュレーション時間は 50 ps とした。それぞれの条件における 20 ps 後の摩擦界面のスナップショットを Fig. 2(a), (b) に示す。Fig. 2(a) より、SiC を水環境下で摩擦することで、界面に Si-O 結合が生成することがわかった。また、Fig. 2(a) と (b) の比較を行った結果、摩擦荷重が大きい方が SiC 基板と水分子の間の距離が近くなり、摩擦界面での化学反応が起こりやすくなることが明らかになった。

次に、SiC 水潤滑における化学反応プロセスを明らかにするため、荷重 3 GPa, 水 104 分子における結果から摩擦界面の構造変化について検討した(Fig. 3)。その結果、水分子と SiC 基板の化学反応によって基板上的 Si 原子に OH 基が吸着し(Fig. 3(a))、吸着した OH 基が同基板上的他の Si 原子に接近することで Si-O-Si 結合が生成される様子が確認された(Fig. 3(b))。その後、Si-O-Si 結合が連続的に生成することで Si-O-Si 結合の鎖が生成されることが明らかになった(Fig. 3(c), (d))。この Si-O-Si 結合の生成は低摩擦化に寄与するゲル状物質発生の初期反応だと考えられる。

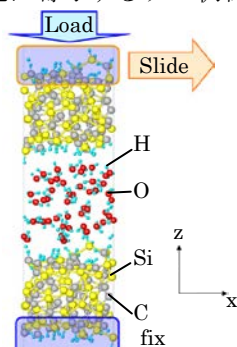


Fig. 1 Friction simulation model of a-SiC films in water environment.

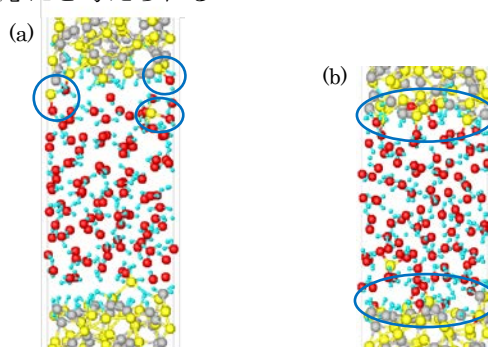


Fig. 2 Sliding simulation for a-SiC films under a pressure of (a) 1 GPa, (b) 3 GPa with 104 water molecules at 20 ps. Circles indicate a generation of Si-O bond during friction.

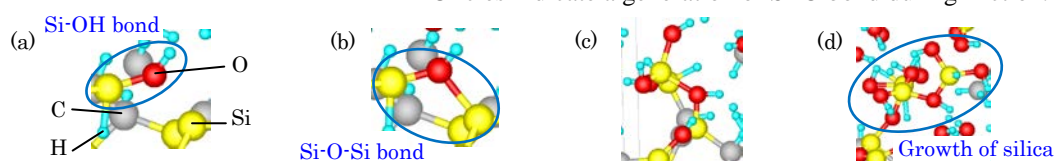


Fig. 3 The reaction processes between H₂O and a-SiC films during friction in water environment. ((a) 5.185 ps, (b) 5.190 ps, (c) 30.535 ps, and (d) 43.070 ps.)

【参考文献】 [1] 足立幸志, 日本機械学会東北支部第 41 期総会・講演会講演論文集, (2006) 93-94.