

MoDTC による DLC の低摩擦発現に関する 量子分子動力学シミュレーション

○ 村林 宏紀¹, 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 宮城県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】現在、固体潤滑剤であるダイヤモンドライクカーボン(DLC)は優れたトライボロジー特性からエンジンの摺動部に使用されている。DLCはエンジン内において油環境下で潤滑される。一方で自動車等のエンジンでは潤滑油に対する添加剤として摩擦低減剤であるジアルキルジチオカルバミン酸モリブデン(MoDTC)が用いられている。MoDTCの摩擦低減効果はDLC膜への応用が期待されている。MoDTCを用いたDLC膜は摩擦試験の結果から、時間経過に伴い低摩擦を示すことが知られている[1]。この低摩擦の発現にはDLC表面におけるMoDTCの化学反応が関わっていると考えられているが、その詳細なプロセスは明らかになっていない。そこで本研究では、MoDTC添加時のDLCの低摩擦発現メカニズムを解析するため、摩擦環境下のDLC表面上におけるMoDTCの初期反応を検討した。

【方法】本研究ではTight-binding量子分子動力学プログラムColorsを用いてMoDTC添加時のDLCの摩擦計算を行った。

【結果】MoDTCは潤滑油中における異性化反応が示唆されている[2]。そこで、異性化後のlinkage isomer of MoDTC(LI-MoDTC)をDLC間に配置したモデル(図1(a))で摩擦計算を行った。摩擦の前段階として図1(a)のモデルに対し、温度300 Kで上部のDLCに圧力1 GPaを与える圧縮計算を1,500 fs行った。圧縮計算の結果を図1(b)に示す。図1(b)より、圧力1 GPaにおいて、DLC表面のC原子とLI-MoDTCのS原子がC-S結合を生成し、LI-MoDTCがDLC表面に吸着することを明らかにした。

次に、圧縮計算後のモデル(図2(a))に対して、稼働時のエンジンオイルの温度を400 Kと考え、温度400 Kで上部のDLCに圧力1 GPa、摩擦速度100 m/sを与える摩擦計算を1,000 fs行った。1,000 fs後の摩擦計算の結果を図2(b)に示す。図2より、摩擦環境において、LI-MoDTCのS-Mo結合が摩擦開始時の2.52 Åから3.76 Åまで伸長し、S-Mo結合が解離することを明らかにした。このS-Mo結合の解離について、DLC表面に吸着する前後のS_a原子(図1(b))の電荷を調べた結果、+0.45から+0.82へ増加していた。これは、LI-MoDTCのS_a原子からDLC表面へ電子が供与されたことを示す。つまり、DLCへの電子供与により、LI-MoDTCのS-Mo結合が弱まり、摩擦が加わることでS-Mo結合の解離が起きたと考えられる。この摩擦計算により得られた吸着構造から摩擦環境でLI-MoDTCのO-Mo結合が解離すると、MoS₂が生成すると考えられる。

そこで、次に圧力1 GPa、摩擦速度100 m/sでMoS₂層生成時のDLCの摩擦計算を行った。その結果、DLC膜とMoS₂層間ですべりが生じ、低摩擦を発現することを明らかにした。摩擦面の微小な凹凸に起因する圧力の変化を検討するため、圧力3 GPaにおける摩擦計算を行った。その結果、圧力3 GPaにおいてはDLC膜とMoS₂層の間で結合が生成するが、MoS₂層間ですべりが生じることで低摩擦を維持することを明らかにした。

【参考文献】 [1] B. Vengudusamy et al., Tribology International, 54 (2012) 68.

[2] T. Onodera et al., Tribology Online, 3 (2008) 80.

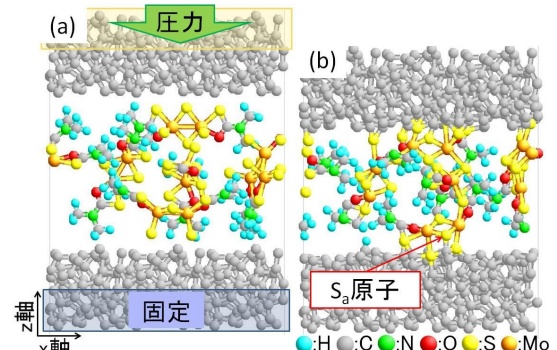


図1 圧力1 GPaにおける圧縮計算
(a) 計算モデル, (b) 1500 fs

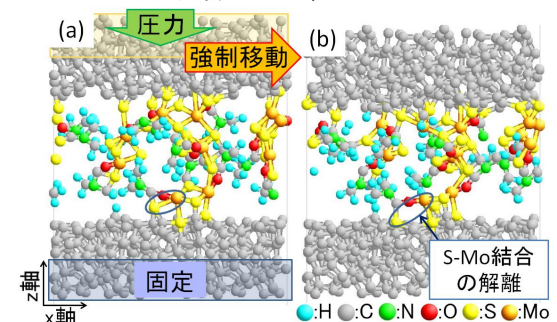


図2 温度400 K・摩擦速度100 m/s
におけるDLCの摩擦計算
(a) 計算モデル, (b) 1000 fs