

粗視化分子動力学シミュレーションによる粗さをもつ固体摺動面間の潤滑油添加剤の挙動解明

研究課題代表者：張 賀東（名古屋大学 情報学研究科）

本研究では、分子動力学（MD）シミュレーションを用い、固体摺動面のすきまにおける添加剤分子の挙動を解析することを目的としている。とくに、実摺動面のような表面粗さをもつ系を対象にした大規模なシミュレーションを可能とするために、原子個々の運動を計算する全原子モデルではなく、複数の原子を1つのビーズに置換し、ビーズ同士をばねで結合した計算効率の高い粗視化モデルを独自に構築し、利用することとした。

本年度では、前年度に固体摺動面に酸化鉄、潤滑油にドデカン、添加剤に脂肪酸を対象として構築した粗視化モデルを用い、MDシミュレーションを実施し、粗さをもつ固体摺動面間の微小すきまにおける潤滑油中添加剤吸着膜の形成・せん断剥離などの動的挙動を解析した。簡単のために表面粗さを一次元正弦波で表現した。温度は353Kに設定した。せん断なしの静的条件では、平滑な表面に比べて、粗さのある表面では添加剤吸着分子の面密度の増加が約4倍速く、また固体表面の隣接する原子層間で形成した角の部分には吸着分子の面密度が高いことを確認した。表面粗さが添加剤分子の吸着を促進する原因としては、角の部分には固体表面と添加剤分子の相互作用が強いためと解釈される。せん断ありの動的条件では、粗さの凸部で添加剤吸着膜の剥離を確認し、また粗さの凸部の両端にある吸着分子が剥離する確率が高く、一部の吸着分子の剥離に伴い残りの吸着分子がせん断方向に横滑りすることを見出した。これより、凸部の両端では吸着分子の位置が上下にずれて、アルキル鎖同士の横方向の相互作用が弱まることが剥離のきっかけで、添加剤分子の吸着強度の不足によって剥離が一層進むことを明らかにした。シミュレーションから得た知見を基に、環状構造とラジカルをアルキル鎖の末端にもつ新規な添加剤分子を設計・合成した。従来の添加剤に比べて、高荷重条件でも低い摩擦係数を維持し、かつ摩擦係数の時間変化が小さく、摩耗が少ないという優れた特性を確認した。

成果発表

1. X. Chen, K. Kawai, H. Zhang, K. Fukuzawa, N. Koga, S. Itoh, N. Azuma, ReaxFF Reactive Molecular Dynamics Simulations of Mechano-chemical Decomposition of Perfluoropolyether Lubricants in Heat-assisted Magnetic Recording, *Journal of Physical Chemistry C*, Published online, DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c06486, 2020.
2. T. Kobayashi, H. Zhang, K. Fukuzawa, S. Itoh, Effect of Transverse Dissipative Particle Dynamics on Dynamic Properties of Nanometer-thick Liquid Films on Solid Surfaces, *Molecular Simulation*, Published online, DOI: 10.1080/08927022.2020.1820004, 2020.
3. 陳星宇, 川合健斗, 張賀東, 福澤健二, 伊藤伸太郎, 東直輝, 反応分子動力学による熱アシスト磁気記録におけるPFPE潤滑膜のメカノケミカル分解解析, *IIP2020 情報・知能・精密機器部門（IIP部門）講演会 講演論文集*, 1A06, 4 pages, 2020年3月.
4. H. Zhang, T. Kobayashi, K. Fukuzawa, S. Itoh, Coarse-Grained Modeling for Molecular Dynamics Simulation of Thin Film Lubrication, 招待講演, *International Tribology Conference Sendai 2019*, September 2019.
5. J. Tang, S. Washio, H. Zhang, K. Fukuzawa, S. Itoh, Molecular Dynamics Simulation of Adsorption of Fatty Acid Additives in Lubricating Oil to Iron Oxide Surface, *International Tribology Conference Sendai 2019*, September 2019.