

ナノすきま潤滑設計のための数理モデルとマルチスケール計算スキームの構築

研究課題代表者：張 賀東（名古屋大学 情報学研究科）

機械システムでは、高機能・高性能化、省エネ・長寿命化の不断のニーズに応えるため、小型化・高精度化が必須である。そのため、材料・加工技術の進歩のみでなく、ナノすきまを隔てた固体二面間の相対運動を精確・安定に実現できる潤滑技術の高度化も要請されている。例えば、情報記憶装置の中核であるハードディスクドライブ（HDD）の記録密度向上や、フラッシュメモリの製造技術であるナノインプリントリソグラフィの超高解像度化には、ナノすきま潤滑技術が必須である。自動車や工作機械でも、摩擦・摩耗によるエネルギー損失を低減するために、究極の潤滑油低粘度化が試みられており、その実現の鍵はナノすきま潤滑技術の確立にある。ナノすきま潤滑では、すきまがナノスケールである一方で、固体摺動面（軸受け面などのこすれ合いながら動く面）の面内寸法は、一般的にはすきまの 1000 倍程度広く、マイクロスケール以上である。現象の解明には、マイクロスケールの摺動面やその近傍における液体の流動に加えて、ナノすきまで顕在化する分子の不連続性による挙動についても、解析・計測が必須である。しかし、有効な手法がなかったため、ナノすきま潤滑技術は未だに確立されていない。そこで本研究では、ナノすきま潤滑の設計に役立つ数理モデルとマルチスケール計算スキームの構築を目的とした。

図 1 は、HDD のヘッドディスクインタフェースや極圧条件下のギアなどの系に対応するナノすきま潤滑のモデルを示す。今年度では、このような系を対象として、ナノ厚さ h_{ini} の潤滑膜を塗布したディスクとピンが摺動する際に発生する垂直圧力分布 $p_T(x, y)$ 、膜厚分布 $h(x, y)$ 、および摩擦力 F を算出可能とした。具体的には、まず p_T は以下のように 3 つの成分の和として与えられるとした。

$$p_T(x, y) = p_h(x, y) + p_s(x, y) + p_a(x, y) \quad (1)$$

ここで、 p_h は連続体理論で記述されている流体圧力、 p_s と p_a はナノすきまで顕在化する構造力と凝着力であり、いずれの成分も摺動面間の膜厚 $h(x, y)$ に依存する。また、膜厚は以下の式で計算される。

$$h(x, y) = h_0 + h_s(x, y) + \delta(x, y) \quad (2)$$

ここで、 h_0 は最小膜厚、 h_s は摺動ピンの形状による寄与、 δ は摺動面の弾性変形量である。 p_h は Elrod キャビテーションアルゴリズムに基づく Reynolds 方程式を解くことにより求められ、 p_s は膜厚をパラメータとした分子動力学シミュレーションもしくは実験の結果から得られ、 p_a は凝着理論により求められる。そして、圧力発生領域にわたる p_T の積分値が摺動ピンに印加する荷重と釣り合うまで繰り返し計算を行えば、各圧力成分および膜厚を算出できる。そして、摩擦力

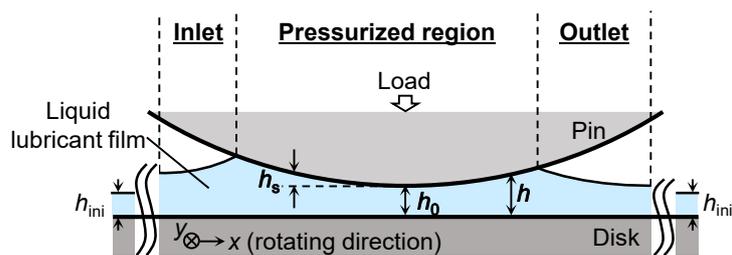


Fig. 1 Model for lubrication of tribological conjunction between a spherical pin and a flat disk with nanometer-thick liquid films

は次式により求められる。

$$F = \iint \tau_T(x, y) dx dy = \iint \left\{ \eta_0 e^{\alpha p_T} \left(\frac{u}{h} \right) + A \left(\frac{u}{h} \right)^{1-B} + C |p_a| \right\} dx dy \quad (3)$$

ここで、 η_0 は液体潤滑剤のバルク粘度、 α は粘度-圧力指数、 u は摺動速度、 A 、 B 、 C はフィッティング係数である。

ナノ厚さの無極性 perfluoropolyether 潤滑膜を塗布したディスクとガラスピン間の摺動に上記の方法を適用した。初期膜厚を 1.3, 1.7, 2.3 nm の 3 種類、垂直荷重を 1.0, 2.0, 3.0 の 3 種類、また摺動速度を 0.1–200 mm/s に設定した。広範の速度領域にわたって、膜厚および摩擦力の計算結果は実験結果と精度よく一致しており、提案した数理モデルと計算スキームの有効性を確認できた。またシミュレーションの結果により、低速摺動時は主に凝着摩擦であるのに対して、高速摺動時では粘性摩擦が支配的である。このように、提案した数理モデルにより、様々な動作条件において、ナノすきま潤滑で観測される膜厚と摩擦力に、流体圧力、構造力、凝着力のそれぞれが与える影響の解明が可能になり、ナノすきま潤滑の設計に役立つことが期待される。

成果発表

1. X. Chen, J. Yang, H. Zhang, K. Yasuda, N. Koga, Adsorption Behavior of TEMPO-Based Organic Friction Modifiers during Sliding between Iron Oxide Surfaces: A Molecular Dynamics Study, *Langmuir*, 38, pp. 3170–3179, 2022.
2. 李雨潤, William Woei Fong Chong, 張賀東, 福澤健二, 伊藤伸太郎, 東直輝, ナノ厚さ液体膜を介した固体摺動面間の摩擦特性の数値解析, 日本機械学会 2021 年度年次大会予稿集, S161-05, 3 pages, 2021 年 9 月.
3. 稲吉宏哉, 青砥巧真, 陳星宇, 張賀東, 福澤健二, 伊藤伸太郎, 東直輝, 水と酸素の存在下における PFPE 潤滑膜のメカノケミカル反応の分子動力学解析, IIP2022 情報・知能・精密機器部門 (IIP 部門) 講演会 講演論文集, IIP2R1-A06, 3 pages, 2022 年 3 月.