

ナノ界面における摩擦の探求

大学院シミュレーション学研究所

○教授 わしづ ひとし
鷲津 仁志

キーワード

トライボロジー, 分子シミュレーション, 摩擦, 自動車

研究概要

摩擦力の制御は、古代エジプトや古墳時代から人類にとって必須の技術であるが、意外にも原子分子レベルからの理解は進んでいない。これは、膨大な数の原子の集団運動であること、固体と固体あるいは固体と液体の界面という不均一な面における現象であること、原子、分子集団、連続体といったマルチスケールの現象であるため解析が困難であることによる。

我々 [1] は固体結晶間の摩擦から流体膜を介した系まで、様々な界面における摩擦発現機構について、全原子分子動力学から粗視化分子シミュレーションまで新しいアルゴリズムを含む様々な計算手法を用いて解析してきた。その一例として鉛筆の芯が低摩擦である機構 (図 1) を示す。移着片と基板との間は結晶面がかみ合っている状態であり、通常は摩擦力が高い。しかし、熱回避運動と我々が名付けた機構によって超低摩擦が発現することが明らかとなった。これは、超伝導、超流動に続く“超潤滑”の理解の一助となる。本講演では、流体潤滑なども加えた分子シミュレーションによる取り組みの概要を紹介する。

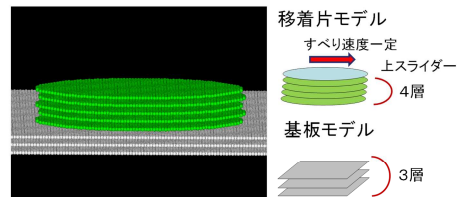


図 1 : 全原子分子動力学法によるグラファイトの低摩擦機構解析 (M2 前田達也君との共同研究)

アピールポイント

摩擦の起源は基礎科学の重要問題の一つであるが、応用面からみると、摩擦・摩耗・潤滑に関する技術 (トライボロジー) は省エネルギーと密接な関係があり、GDP の数パーセントの経済効果があるといわれる。本シミュレーション技術は図 2 に示すように、固体材料、表面処理、添加剤、基油といったトライボロジー上重要なテーマ全てに適用可能である。これは、固体・液体といった材料の状態をアприオリに決めない分子シミュレーションの利点を生かしたものである。現在は、分子レベルから連続体 (マクロ) レベルにおけるシミュレーション技術の融合を目指している。その際、大規模計算による実証的研究が必要となるが、当シミュレーション学研究所

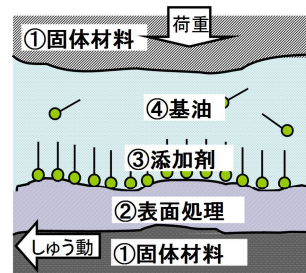


図 2 : トライボ分子シミュレーションの適用対象

は京コンピュータや FOCUS スパコンと連携しており、研究環境として恵まれている。本学では、工学部において長らくトライボロジーの研究を主として実験面から展開しており、分子シミュレーションが加わることにより相乗効果が期待されると考える。実験との連携は学内や大学間をはじめとして、重工、石油、軸受、製鋼、自動車といった県下および国内のメーカーと進めさせていただいている。

[1] <http://washizu.org/lab/>