

EHL 油膜の大規模 MD シミュレーション

(豊田中央研究所)○鷲津仁志, 三田修三, 大森俊英, 兵頭志明

【緒言】トロイダル式無段変速機 (CVT) の小型化・高容量化, それに伴う燃費向上・環境負荷低減の観点から, 高トラクション係数を発現するフルードの分子設計・開発が望まれている. ここで, フルードのトラクション特性は, その分子構造に大きく依存する. 一方, 動力伝達しゅう動部は, 高圧・高せん断が印加される弾性流体潤滑 (EHL) 条件下にある. EHL の特徴は, マクロには高圧とせん断により誘起される相転移的な状態変化であり, 分子論的にはフルード分子集団の相関長や相関時間などの変化にあると考えられる. しかし, シミュレーション上, 扱える分子数が少ない場合, この状態変化の安全な議論は困難であり, また, 固体原子層の存在による境界条件の影響との切り分けが難しい.

これまで, 分子動力学 (MD) 法により二つの固体原子層に挟まれたフルード分子の高圧せん断下の挙動を扱うシミュレータを製作し, トラクション発現機構の解析を行ってきた [1]. 本研究では, 全原子 MD により空間的・時間的に大規模な EHL 油膜の計算により上記課題に取り組んだ. 空間的にはサブ μm の油膜厚さの系により実験と同等の条件におけるトラクション計算を行い, 時間的には数十 ns と比較的長時間の計算によりトラクション係数の圧力依存性の解析を行った.

【シミュレーションの方法】 溶液状態の n -ヘキサンフルード分子層を $10 \times 10 \times 3$ 層の α 鉄の固体原子層で挟み, 固体原子層間に 1.0 GPa の z 方向の定圧力 p_{zz} を印加し, x 方向に相対すべりを与えた. 境界条件は, x, y 方向について周期的境界条件とした. 固体原子層に作用するすべり方向の反力 p_{xx} を p_{zz} で除することにより, トラクション係数 μ を計算した. 有機分子内の相互作用には Amber 力場を用い, 時間積分は RESPA にて行い, Nosè-Höover 法により 350 K の定温とした. 固体原子層内の振動は凍結させ, 固体-フルード間の相互作用は巨視的すべりの起きない条件に調節した Lennard-Jones 型の相互作用とした.

日立 SR11000 の 32 ノードを用いプログラムの MPI 並列化を行った上で, n -ヘキサンをフルードとする高圧せん断シミュレーションを, 膜厚 430 nm の大規模系, および圧力の異なる系において実行した. 並列化は膜厚方向における領域分割とした. 手法の概略およびスナップショットを図 1 に示す.

【膜厚 430 nm の大規模系におけるトラクション計算】 CVT の動力伝達しゅう動部の接触面における平均油膜厚さはサブ μm のオーダーである. そこで実験と同じオーダーである $z_0 = 430 \text{ nm}$ の系において高圧せん断場下のシミュレーションを行った. 固体原子層の間に, 溶液状態の n -ヘキサンを膜厚方向に合計 25,920 分子並べた初期配置に対して, $p_{zz} = 1.0 \text{ GPa}$ の定圧力を固体原子層に印加し系全体の圧縮およびせん断を行った.

図 2(a) にシミュレーション開始時からの油膜厚さ z_0 の経時変化を示す. 図中 $t = 1.1 \text{ ns}$ の時点において, 固体原子層に相対すべり速度 1.0 m/s を与え, せん断を開始した. $t = 8.0 \text{ ns}$ 付近において圧縮がほぼ終了した. トラクション係数 μ の経時変化を図 2(b) に示す. $t = 1.5 \text{ ns}$ 付近において定常状態が得られている. μ の平均値は 0.06 であり, 実験値 (0.02) に対応するオーダーと

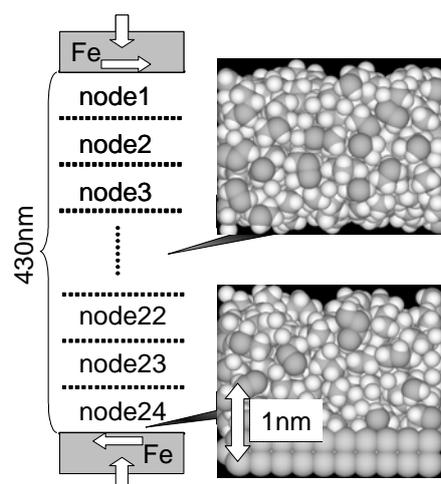


図 1. 大規模油膜のシミュレーションにおける定常状態のスナップショット. 膜中心部 (上), 固体原子層近傍 (下) とともに n -ヘキサン 100 分子を抽出し表示.

なっている。これは、膜厚 10 nm 以下の領域での膜厚依存性解析 (μ : 0.11~0.25) [1]における、膜厚の増加とともに μ は漸減し、十分に大きな膜厚において実験値に近づくという予測に対応している。

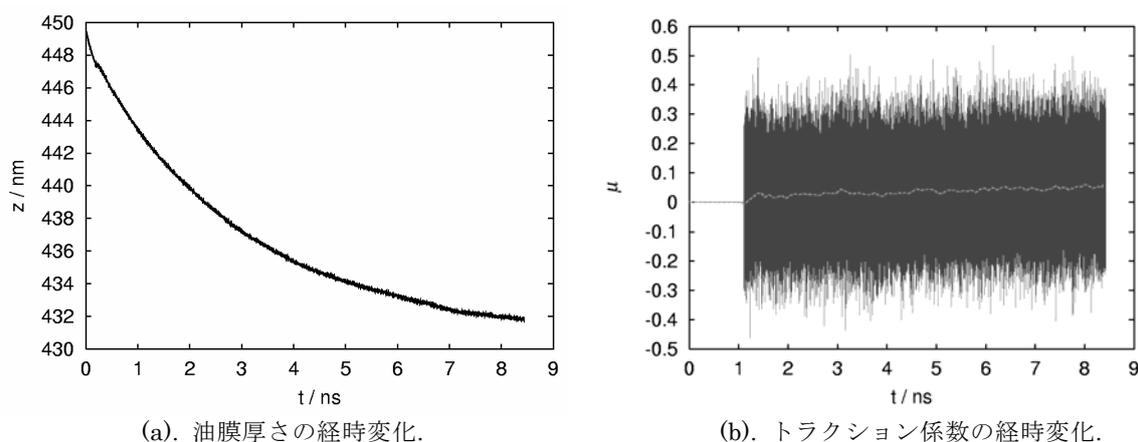


図 2. *n*-ヘキサン 25, 920 分子, 外部圧力 $p_{zz}=1.0$ GPa における大規模油膜のシミュレーション.

【トラクション係数の圧力依存性】 EHL 条件下における油膜のせん断挙動は、圧力に応じて Newton 粘性, Eyring 粘性, 粘弾性, 弾塑性の 4 種類に分類される。この中でも、圧力変化に対し粘弾性から弾塑性に転移し、トラクション係数が飽和する“限界せん断応力”は実験および巨視的な解析においてはよく研究されており、CVTドライブおよびフルードの設計においても重要である。膜厚が 10 nm 程度の系における膜厚 z_0 , トラクション係数 μ の圧力 p_{zz} 依存性を 図 3(a), 図 3(b) にそれぞれ示す。 p_{zz} の増加とともに膜厚は単調に減少するが、 μ は、 $p_{zz} = 1.0$ GPa でガラス転移し最大値を与え、限界せん断応力として観測されている。

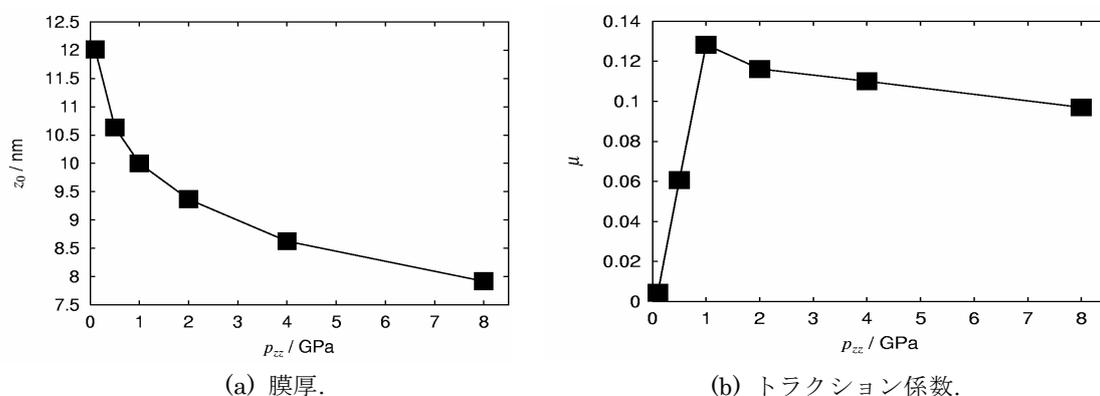


図 3. 膜厚およびトラクション係数の圧力依存性. *n*-ヘキサン 576 分子, すべり速度 1

【まとめ】 全原子 MD により大規模 EHL 油膜の高圧せん断シミュレーションを行った。実現象に相当する膜厚 430 nm の系の計算を実施し、計算で求めたトラクション係数は、実験値に対応するオーダーとなり、膜厚依存性から予測された傾向が確認された。また、トラクション係数の圧力依存性を調べることにより、EHL の実験において知られる限界せん断応力を分子シミュレーションにおいて観測できた。

(本研究は文部科学省超高速コンピュータ網形成プロジェクト NAREGI ナノサイエンス実証研究における大規模実証計算において行われた。)

[1] 鷲津, 三田, 大森, 鈴木. トライボロジー会議予稿集 (東京 2004-5) 229. , *ibid.* (東京 2004-5) 231. , *ibid.* (鳥取 2004-10) 465.