

マルチスケール材料シミュレーションによる高分子摩擦の解析 Analysis of Polymer Friction using Multiscale Materials Simulation

兵庫県大・情報（正）*鷲津 仁志

Hitoshi Washizu*

*University of Hyogo

1. はじめに

エンジニアリングプラスチック（エンブラ）は機械部品の軽量化のため適用範囲を広げつつあるが、その摩擦発現は、大変形を伴う、自己潤滑的である、バルクの弾性ではなく粘弾性に起因するなど、金属やセラミクスといった他の固体材料と異なる特性がある。本報告では、分子レベルからマイクロレベルまでのシミュレーションによる研究を紹介する。

エンブラの摩擦解析の困難は、単一成分子系であっても結晶・アモルファスの二次構造、球晶などの高次構造を有することに原因の一つがある。分子シミュレーションの観点からみると、結晶構造の再現自体が大きなテーマであるため、これまでアモルファス状態の高分子の摩擦が主として調べられてきた。たとえば、筆者らは短鎖の Polyethylene の弾性流体潤滑について分子動力学 (MD, Molecular Dynamics) 法により解析したが¹⁾、その際はアモルファス状態における摺動下の構造変化と摩擦発現について調べた。

本報告では、MD 法および SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法による摩擦摩擦の解析事例について報告する。MD では、結晶相・アモルファス相の両者を有するハイブリッドな表面・バルクにおける摺動シミュレーションを行い、硬質添加物の有無による摩擦挙動の違いなども調べた。また、分子構造の違いによる凝着および摩擦発現機構についても解析した。SPH では、表面粗さを含む系における金属との摩擦挙動の違いを調べ、金属材料では良く見られる「フラッシュ温度」の高分子系での発現について検討した。

2. シミュレーション手法

MD では、結晶相およびアモルファス相の両者を交互に持つ United Atom (UA) によるポリエチレン (PE) のモデルを作成し、まずは移着の作用を考慮しないために分子間力を斥力項のみとした金属球を PE 表面上に配置し、一定の速度において表面に沿った方向に移動し、荷重を変化させることで摩擦摩擦を調べた (Fig. 1)²⁾。また、添加剤の影響を調べるため、カーボンナノチューブを一本ずつ、または数本ずつ束ねた状態で PE 表面上に配置し、同様に摩擦摩擦を解析した (Fig. 2)³⁾。分子構造の違いによる解析においては、全原子分子動力学法を用いた (Fig. 3)⁴⁾。SPH では、FDPS (Framework for Developing Particle Simulator) 上に作成したシミュレータ⁵⁾を用いて、表面に幾何的な突起を有する二つの面を相対させ (Fig. 4)⁶⁾、摺動初期の発熱状態を調べた。それぞれの手法の詳細については、引用文献をご参考いただきたい。

3. 結果と考察

まず、UA-MD によって、アモルファス相と結晶相の摩擦摩擦の違いを調べたところ、後者において摩擦係数が低く耐摩擦性が高いことがわかった²⁾。これは、主として材料内部への嵌入に対して強度が高いためと思われる。つぎに、カーボンナノチューブの添加によって、両方の相において耐摩擦性が高まることもわかった³⁾。添加粒子を数本束ねることによって、耐摩擦性はさらに高まる。これは、グラスファイバーなどのよりマクロな添加粒子を用いる工業材料の系でも見られる現象であり、ナノシミュレーションがスケールを超えて実現象の摩擦機構を示唆する例の一つと考えられる⁷⁾。固体摩擦の起源は、一般的にはバルクにおける低周波のフォノンの緩和に起因するが⁸⁾、高分子においては弾性のみならず粘性効果も考慮する必要があると考えられる。そこで、バルクにおける粘弾性緩和について、線形応答理論を適用した平衡系およびせん断を印加した非平衡系の MD を用いて本 PE モデルについて調べたところ、結晶相と比較してアモルファス相の粘性が高く、摩擦挙動と相関することが推察された⁹⁾。つぎに、全原子分子動力学によって 4 種類の高分子の移着挙動および摩擦挙動を調べたところ、摩擦の高い材料は移着量が多いことや (Fig. 3)⁴⁾、せん断は金属-高分子界面というよりも高分子内部において生じることなどがわかった。

つぎに SPH によって、金属系と高分子系の摩擦による発熱の違いを調べたところ、高分子系において変形量が多く、低い熱伝導率により接触部のみが発熱するという顕著な違いがみられ、フラッシュ温度が見られる現象とは若干異なることがわかった⁶⁾。当グループで開発している SPH シミュレータは⁵⁾、最終的には全原子モデルからの射影によるボトムアップのシミュレーション手法となることを予定しているが¹⁰⁾、現状では連続体モデルで用いられる弾性率や熱伝導率といったマクロなパラメータを主として用いている。このことは、モデルの精密度においては課題となるが、逆に、冒頭に述べたエンブラの階層的な構造をモデル化するには適しているともいえる。

以上、エンブラの摩擦摩擦発現は、移着といった複雑な過程があること、材料の構造自体が階層的であること、などの理由により、1 つのスケールだけでない解析によって過程ごとに解析することにより、全貌が見えてくる対象である

ように思われる。しかし、計算機の高速化および材料モデリングの深化により少しずつ理解が進むものと思われる。

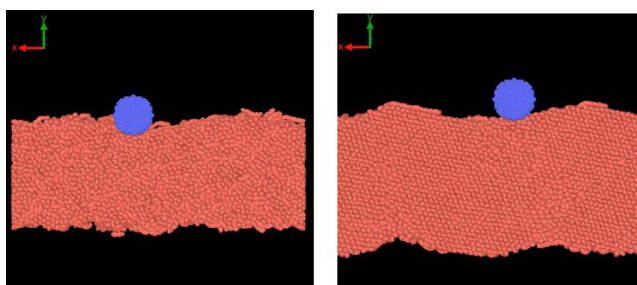


Fig. 1 Snapshots (side view) of UA-MD simulation for sliding friction dynamics of polyethylene. Amorphous part (left) and crystal part (right).

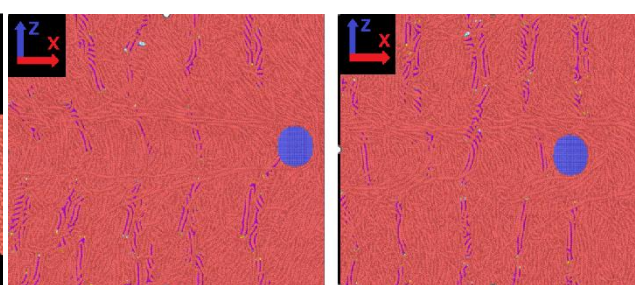


Fig. 2 Snapshots (top view) of UA-MD simulation for sliding friction dynamics of polyethylene with carbon nanotubes. Amorphous part (left) and crystal part (right).

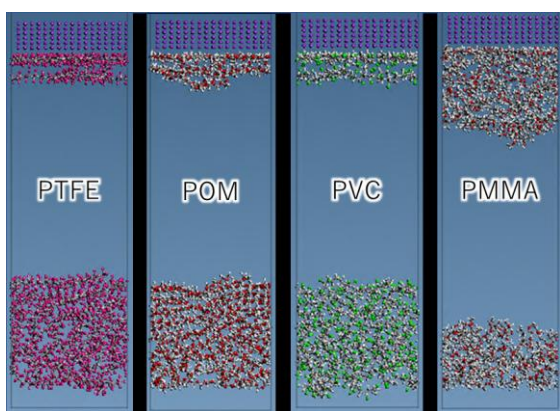


Fig. 3 Snapshots of all atom MD simulation for adsorption dynamics of polymers.

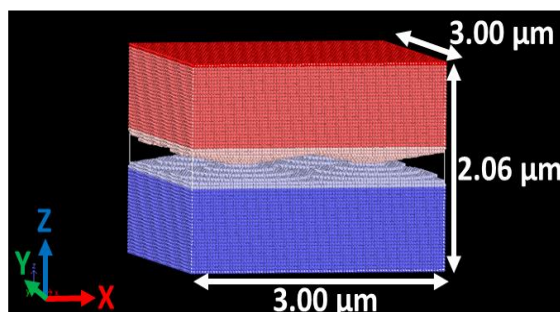


Fig. 4 Snapshot of initial structure of polymer surfaces modeled by SPH method.

文献

- 1) R. Katsukawa, Le Van Sang, E. Tomiyama, H. Washizu: High-Pressure Lubrication of Polyethylene by Molecular Dynamics Approach, Trib. Lett., 70 (2022) 101
- 2) 端山・樋口・鷺津: 粗視化分子動力学シミュレーションを用いたポリエチレンの摩擦プロセス, トライボロジー会議秋福井 2022, 日本トライボロジー学会, 福井 (2022).
- 3) 伊藤・端山・樋口・鷺津: 粗視化分子動力学法を用いたカーボンナノチューブ含有の有無による結晶性ポリマーの摩擦挙動, トライボロジー会議 2023 春 東京, 日本トライボロジー学会, 国立オリンピック記念青少年総合センター (2023).
- 4) 金城・山本・三枝・鷺津: 全原子の分子動力学シミュレーションによる高分子の摩擦性評価", トライボロジー会議秋福井 2022, 日本トライボロジー学会, 福井 (2022).
- 5) N. Sugimura, Le Van Sang, Y. Mihara, H. Washizu: Mesoscale Smoothed Particle Hydrodynamics simulation of seizure and flash temperature for dry friction between elastoplastic solids with asperities in a newly developed model, J. Comput. Sci., 82 (2024) 102325.
- 6) 藤田・石原・杉村・鷺津: SPH 摩擦シミュレーションを用いた高分子材料の焼き付き過程解明", トライボロジー会議 2024 秋 名護, 万国津梁館, 名護 (2024).
- 7) 鷺津: ナノシミュレーションで分かったマクロな現象: 月刊トライボロジー, 454, 6 (2025) 36.
- 8) S. Kajita, H. Washizu, T. Ohmori: Deep bulk atoms in a solid cause friction, EPL (Europhys. Lett.), 87, 6 (2009) 66002.
- 9) 小川・樋口・鷺津: 粗視化分子動力学法を用いた高分子界面における相構造と摩擦発現, トライボロジー会議 2024 秋 名護, 万国津梁館, 名護 (2024).
- 10) 鷺津: 粗視化モデルによる固体間摩擦のメソスケールシミュレーション, bmt (ベアリング&モーション・テック), No.022, 2020 (1) (2020) 38.