

## 論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 10605号
------	--------------

氏 名 福田 基雄

### 論 文 題 目

粗視化分子動力学シミュレーションを用いたナノ厚さ液体潤滑膜の  
せん断・凝着特性解析に関する研究

### 論文審査担当者

主査	名古屋大学	教授	福澤 健二
委員	名古屋大学	教授	松本 敏郎
委員	名古屋大学	准教授	張 賀東
委員	岐阜大学	教授	平野 元久

## 論文審査の結果の要旨

福田基雄君提出の論文「粗視化分子動力学シミュレーションを用いたナノ厚さ液体潤滑膜のせん断・凝着特性解析に関する研究」は、固体表面間に閉じ込められたナノ厚さ液体潤滑膜のせん断・凝着特性の解明を目的として、新しい粗視化分子動力学シミュレーション方法を提案したものであり、次の5章から構成されている。

第1章では、本研究の背景、目的および意義について述べている。

第2章では、本研究で提案している粗視化分子動力学シミュレーションのためのモデル構築法について論じている。粗視化モデルは仮想的なものであるため、実現象と比較可能なシミュレーション結果を得るには、粗視化粒子間の相互作用ポテンシャルを適切に決定する必要がある。従来法では、全原子シミュレーションにより特定の密度・圧力における分子の特性を計算し、それを用いて粗視化ポテンシャルを決定していたため適用できる密度・圧力条件が狭かった。そこで、二分子間のポテンシャルであるレナード・ジョーンズポテンシャルを基にして粗視化ポテンシャルを推定する新規な方法を提案し、従来法に比べ広い範囲の密度・圧力条件に適用可能な粗視化モデルの構築に成功した。

第3章では、構築したシミュレーション法を用いて解析したナノ厚さ液体潤滑膜の凝着特性について論じている。そして、得られた凝着特性を、固体基板から潤滑膜を分離するための分離力項と、潤滑膜が引き伸ばされることによる密度の低下に対する凝集力項の二項の寄与とした理論解析と比較し、おおむね一致することを示した。一方、マクロな厚さの液体膜では、凝着力の発生メカニズムとしては表面積の変化が支配的である。以上のように、ナノ厚さの潤滑膜は、マクロな厚さの潤滑膜とは異なり、特有の凝着特性および発生メカニズムを有することを明らかにした。

第4章では、ナノ厚さ潤滑膜のせん断特性解析について論じている。広く用いられているブラウン動力学法でなく、運動量が保存されるためせん断流れをより正確に再現可能な散逸粒子法を導入したシミュレーションを行った。せん断速度が増加するほど潤滑膜の層状構造が顕著になり粘性係数が減少するシアニングが発生すること、固体表面の粗さにより固液界面すべりの程度が異なることを見出した。また、厚さが二分子層程度の極薄膜では固体表面の特性をより反映した特性を示すことを明らかにした。

第5章では本研究の結論および今後の課題を述べている。

以上のように、本論文は、新たに提案したシミュレーション法によりナノ厚さ液体潤滑膜の凝着・せん断特性の解析が可能であることを示したものであり、潤滑現象のミクロなレベルでの解明や微小機械の設計指針の確立など、学術上、工業上寄与するところが大きい。よって、本論文提出者福田基雄君は、博士（工学）の学位を受けるに十分な資格があるものと判定した。