

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第	号
------	-------	---

氏 名 陳 星宇 (CHEN Xingyu)

論 文 題 目

Molecular Dynamics Study of Chemical and Physical Behaviors of Nanometer-Thick Liquid Films for Effective Boundary Lubrication
(有効な境界潤滑のためのナノ厚さ液体膜の化学的・物理的挙動に関する分子動力学研究)

論文審査担当者

主 査 名 古 屋 大 学 教 授 張 賀 東

委 員 名 古 屋 大 学 教 授 吉 田 紀 生

委 員 兵 庫 県 立 大 学 教 授 鷺 津 仁 志

陳 星宇 (CHEN Xingyu) 氏提出の論文「Molecular Dynamics Study of Chemical and Physical Behaviors of Nanometer-Thick Liquid Films for Effective Boundary Lubrication」(邦題: 有効な境界潤滑のためのナノ厚さ液体膜の化学的・物理的挙動に関する分子動力学研究) は、機械システムの摩擦低減を目指し、有効な境界潤滑を実現できる分子の設計指針を探求するため、分子動力学 (Molecular Dynamics, MD) シミュレーションを用いて、ナノ厚さ液体膜の化学的・物理的挙動を解明したもので、5章で構成されている。

第1章は、研究の背景と研究の目的について述べていた。熱アシスト磁気記録 (Heat-Assisted Magnetic Recording, HAMR) における perfluoropolyether (PFPE) 潤滑膜および自動車パワートレインシステムにおける有機摩擦調整剤 (Organic Friction Modifier, OFM) に関する従来研究を概観し、残された課題とその解決法について述べた。

第2章は、HAMR のヘッドディスクインターフェイスにおけるナノ厚さの PFPE 膜の熱分解とメカノケミカル分解の反応速度と反応経路を調べた。PFPE の化学反応を高精度に計算できる反応 MD シミュレーションを実現するために、PFPE に特化した ReaxFF 反応力場を初めて開発した。PFPE 膜のバルク加熱と加圧・せん断という2種類の MD シミュレーションを行い、その結果、HAMR の 1 ns の加熱時間内では、PFPE 分子が熱分解はほとんど起こらないことに対して、圧力とせん断応力よりメカノケミカル分解が起こる可能性が高いことが分かった。PFPE 分子は主に極性末端基の C-O 結合の解離より分解することを明らかにした。

第3章は、さらに HAMR における PFPE 潤滑膜のメカノケミカル反応に及ぼす水の影響を調べた。まずは、第2章で開発した ReaxFF 力場で、PFPE と水の反応の活性化エネルギーを再現できることを確認した。これにより、PFPE と水との反応を高精度に計算できる MD シミュレーションを実現した。そして、PFPE と水を混合し、そのナノ厚さの膜を用いて、加圧・せん断 MD シミュレーションを行った。結果により、HAMR システムが作動している低圧条件下においても、水は D-4OH のメカノケミカル反応を促進することを明らかにした。その原因は、水の混合により、D-4OH 分子の加水分解反応が発生し、また低圧条件でも D-4OH 分子の極性末端基同士の反応が促進されるためである。

第4章では、新規提案の OFM である C₁₂TEMPO の優れた摩擦低減効果を解明するために、その吸着挙動を調べた。基油 poly-alpha-olefin (PAO) の中で C₁₂TEMPO の吸着膜が酸化鉄表面間で閉じ込め、せん断 MD シミュレーションを実行した。その結果、C₁₂TEMPO 分子はダブルサイトで表面に強く吸着し、さらに分子間の水素結合により、自己修復機能をもつ2層構造の境界膜を形成することを明らかにした。これらの特徴は、実験で観測された C₁₂TEMPO の優れた負荷能力、摩耗低減効果、および摩擦の経時安定性の起因と解釈される。

第5章は結論であり、本論文の成果をまとめるとともに、今後の課題について述べていた。

以上のように、本論文は、有効な境界潤滑を実現するための PFPE と OFM の分子設計に重要・斬新な知見を提供し、信頼性・耐久性が高い HAMR システムの実現、および自動車のパワートレインシステムの摩擦低減に貢献するものと期待される。よって、本論文の提出者、陳 星宇(CHEN Xingyu)氏は、博士(情報学)の学位を受けるに十分な資格があるものと判定した。