

論文審査の結果の要旨および担当者

報告番号	※ 甲 第 12308 号
------	---------------

氏 名 小林 敬之

論文題目

薄膜潤滑現象の粗視化分子動力学解析のためのモデル構築に関する研究

(Study on modeling for coarse-grained molecular dynamics analysis of thin film lubrication)

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	法政大学	教授	平野 元久
委員	名古屋大学	准教授	伊藤 伸太郎

論文審査の結果の要旨

小林敬之君提出の論文「薄膜潤滑現象の粗視化分子動力学解析のためのモデル構築に関する研究」は、ハードディスクドライブ (HDD) におけるヘッド・ディスク潤滑のようなナノメートルオーダー厚さの液体薄膜による潤滑作用の解明をねらいとして、粗視化分子動力学シミュレーション方法の構築を試みた。薄膜潤滑では、潤滑剤の密度、粘度、および密度-圧力関係、並びに潤滑剤分子と固体表面との相互作用が潤滑特性に大きく影響する。これらを高精度にモデル化するために、transverse散逸粒子動力学法を導入し、さらに保存力の決定にはiterative Boltzmann inversion法を改良した方法を用いた。その結果として、全原子分子動力学シミュレーションの結果および実験から得られた潤滑剤特性を粗視化分子動力学シミュレーションで再現できることが確認された。さらに、極性潤滑剤の潤滑特性に大きく影響する極性相互作用について、全原子シミュレーションで得られた水素結合の性質を再現するように極性相互作用を考慮した粗視化モデルを構築した。以上の結果を用いて、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を行い、本法により薄膜潤滑に関する知見が得られることを示した。

各章の概要は以下の通りである。

第1章では、本研究の背景となるHDDのヘッドディスクインターフェース (HDI) におけるナノ厚さ液体潤滑膜のせん断現象の解析には、粗視化モデルによる分子動力学 (MD) シミュレーションが有効であることを述べ、これを踏まえて、潤滑剤分子と固体表面の粗視化モデルの構築を本研究の目的とすることを述べた。

第2章では、HDIにおける薄膜潤滑現象を対象とした粗視化シミュレーションを実現するために、フッ素系潤滑剤分子および炭素系固体表面について、粗視化モデル構築のために必要な全原子モデルの構築について述べた。

第3章では、フッ素系潤滑剤分子および炭素系固体表面について、第2章で構築した全原子モデルをもとにした粗視化モデルの構築について述べ、構築した粗視化モデルを用いたMDシミュレーションの計算効率を全原子モデルの場合に比べて2桁以上向上することを示した。

第4章では、第3章で構築した粗視化モデルを用いたナノ厚さ液体潤滑膜のせん断シミュレーションについて述べ、極性の有無や表面粗さがせん断特性に与える影響を明らかにした。

第5章では、本研究の結論を与えている。

以上のように本論文では薄膜潤滑現象を対象としたMDシミュレーションのための粗視化モデルを構築し、ナノしゅう動すきまでの潤滑膜のせん断特性解析に有効であることを明らかにしている。得られた結果は、HDDを含めた微小機械や精密機械の潤滑技術を確立するために重要であり、工学の発展に寄与するところが大きい。よって、本論文の提出者である小林敬之君は博士 (工学) の学位を受けるに十分な資格があると判断した。