

ナノスケールでの摩擦に関する分子シミュレーション

Molecular Dynamics Study of Friction at Nanometer-scale Regime

富山高専 ○宮下 侑也, Khishig-Ochir Altankhuyag, 多田 和広

NIT, Toyama Coll., ○Yuya Miyashita, Khishig-Ochir Altankhuyag, Kazuhiro Tada

E-mail: tada@nc-toyama.ac.jp

はじめに

ナノスケールの狭小領域における摩擦、潤滑現象を理解することは、ナノ加工プロセスやナノ流体工学などのナノテクノロジー分野において重要である。また近年では、ナノインプリントの高速成型に関する研究が行われており、成型時に金型と被成型材料の間で生じるナノスケールでの摩擦現象を理解することは非常に重要である。

本研究では、ナノスケールで生じる摩擦現象の基礎的知見を得るため、ニッケル基板とPMMA樹脂の間に働く摩擦の速度依存性および重合度依存性を分子動力学計算によって調べた。

シミュレーションモデル

本研究では、分子動力学計算にオープンソースコードであるLAMMPSを用いた。Fig.1に示すように、膜厚 d [Å]のPMMA樹脂をニッケル基板で挟み、下部ニッケル層を固定し、上部ニッケル層をせん断速度 v_0 [m/s]で横方向に滑らせた。PMMAの密度は、 1.19 [g/cm³]とした。PMMAの力の計算にはDreiding force field, ニッケルとPMMAの間の分子間力にはLennard-Jonesポテンシャルを用いた。

解析結果

Fig.2は、膜厚が 35 Åで、重合度が1と4のPMMA樹脂の粘度のせん断速度依存性を示している。せん断速度が比較的大きい領域では、粘度の重合度による違いは見られないが、せん断速度が 10 [m/s]より小さくなる辺りから、重合度4の方に粘度の上昇がみられた。これは、重合度1に比べて、重合度4の場合は、分子の絡み合いが生じてくることによりそれを断ち切るためのせん断力が増加したためだと考えられる。一方、せん断速度が上昇することにより、粘度が低下し、重合度による違いが見られなくなったのは、分子鎖がせん断方向に延ばされ、分子の絡み合いが解けたため分子間の滑りが支配的になったためであると考えられる。

本講演では、膜厚を変えた場合や、その他のポリマー材料の場合の摩擦と分子挙動の関係についても発表する予定である。

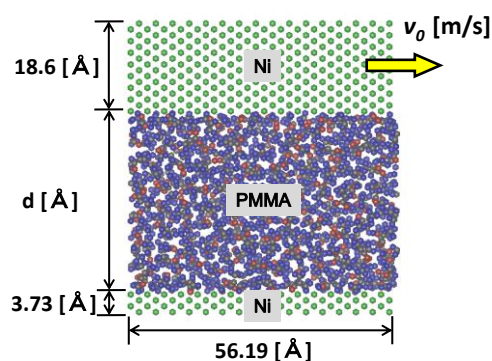


Fig.1. Schematic diagram of friction system for PMMA.

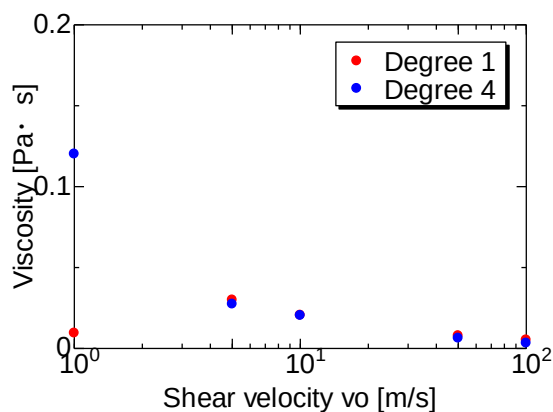


Fig.2. Relationship between viscosity and shear velocity.