鳥取大・工(正) 松岡 広成 鳥取大・工(正) 福井 茂寿 鳥取大・院(学) \*山根 加津子

1. はじめに

二つの固体表面が,液体を介して分子の直径の十倍(数 ~ 数十nm)程度まで近づくと,二面間には,構造力と呼ばれる力が働くことがわかっている<sup>1),2)</sup>.

本研究では,液体で満たされた平面・球面間に働く液体 構造圧力を考慮し,平面に球体を近づけた時,球体がどの ような運動をするかを,コンピュータシミュレーションに よって解析した.

2. 構造力のしくみ <sup>1), 2)</sup>

図1は,固体表面間の液体分子の状態を模式的に示した ものである.この図から,二面間距離Dが液体分子の直径 sの整数倍となるところでは液体分子の密度が高くなり, その間では密度が低くなることがわかる.このような,固 体表面間の液体分子の周期的な密度変化によって,構造力 は発生する.

図2は、構造圧力を模式的に表したものであり、図中の aからdは、図1での(a)から(d)に対応している.この図 から、確かに密度の高い所では斥力が、密度の低い所で は引力が発生していることがわかる。構造力は、二面間距 離に対して指数関数的に減衰する振動力であり、また振動 の周期は二面間に介在する液体分子の分子直径にほぼ等 しい、という性質がある.



図4は,球の半径を,5,10,20mと変化させて,二面間 の最小すきま *h*<sub>min</sub>とその間に働く力 *F* との関係を調べた ものである.

(社)日本トライボロジー学会トライボロジー会議予稿集(東京 2001-5)



この図から、二面間のすきまが大きいときはほとんど 力は働かないが、すきまが小さくなるほど、振幅が大き くなることがわかる.また、球の半径が大きいほど振幅が 大きくなることがわかる.

4.2 衝突運動の時間変化

図5,6は,衝突運動を行った際の,二面間の最小すきま *h<sub>min</sub>*,球の速度v,二面間に働く構造力Fの,それぞれの時 間変化を表したものである.

図5は,球の質量mを1.0mg,初速度v<sub>0</sub>を-2.0mm/s,半径 Rを0.5mとして計算した結果である.この図から,球が平 面に近づくにつれてだんだんと構造力の振幅が大きくな り,それにしたがって速度も振動し,約7.5µsec過ぎたあ たりで平面に衝突することがわかった.



に変えて計算を行った結果である.この場合も先ほどと同 じように,球が平面に近づくにつれてだんだんと構造力の 振幅が大きくなり,それにしたがって速度も振動した.し かし,二面間の最小すきまが3.41nmとなったところで跳 ね返されることがわかった.

4.3 最小すきまとポテンシャルエネルギーの関係

図7は,図4に示した二面間に働く力を積分して,ポテ ンシャルエネルギーを求めたものである この図から,二 面間のすきまの大きいところではポテンシャルエネル ギーU。はほとんど0であることがわかる.したがって,初 期の力学的エネルギーは運動エネルギー E<sub>a</sub>のみとなり,  $E_0 = mv_0^2/2$  で求められる.図7から,  $E_0 = 20$ pJのとき  $h_{\min}$ =1.51nmで球が跳ね返されることがわかる.さらに,mやv<sub>0</sub>を大きくし, E<sub>0</sub>を30pJ, 40pJとすると, 跳ね返される 位置は,0.61nm,0.57 nm と平面に近づくことがわかる.ま た, E。が30pJや40pJの時のように,同じポテンシャルエ ネルギーの山で跳ね返される場合は,跳ね返される位置は ほとんど変わらない.しかし, E。が20pJの時は, 異なる ポテンシャルエネルギーの山で跳ね返されるので、跳ね返 される位置は大きく変わる.したがって,mやv。をだんだ んと大きくし,跳ね返される位置を調べると,ほとんどそ の位置が変わらないところと、大きく変わるところがある ことが予想できる.

4.4 各パラメータごとの跳ね返される位置の変化

図 8(a)は,球の質量 m をさまざまに変えて計算を行い, 球が跳ね返される位置 $h_{min_b}$ を調べたものである(図中の黒 丸).4.3 でも述べた通り,ポテンシャルエネルギーUが, 初期の運動エネルギー $E_0$ と等しくなった時,球は跳ね返 される.したがって,つぎの式が成り立つ.

$$U(h_{\min_{b}}) = E_0 = \frac{1}{2}mv_0^2 \qquad \therefore m = \frac{2}{v_0^2}U(h_{\min_{b}})$$
(2)

よって,4.3で求めたポテンシャルエネルギーUに $2/v_0^2$ をかけて,質量*m*と球が跳ね返される時の最小すきま $h_{\min_b}$ の関係を求めたものを実線で表した.

図8(b)は,初速度 $v_0$ をさまざまに変えて計算を行い,球 が跳ね返される位置 $h_{\min_b}$ を調べたものである(図中の黒丸). 先ほども述べた通り, $U=E_0$ となった時に球は跳ね返され るのでつぎの式が成り立つ.







Fig.8 Relation between minimum spacing at bouncing point  $h_{\min_b}$  and mass of a sphere m

よって,4.3 で求めたポテンシャルエネルギー*U*を用いて 初速度 $v_0 = -\sqrt{2U/m}$ (初速度 $v_0$ は負)として計算し,初速 度 $v_0$ と球が跳ね返される時の最小すま $h_{\min_b}$ の関係を求め たものを実線で表した.

図8から,質量や初速度の絶対値は,大きくするほど跳 ね返る位置は平面に近づき,ある値を超えると平面に衝突 することがわかった.これは,質量や初速度を大きくする と初期の運動エネルギーが大きくなるためである.

また,いずれの場合もシミュレーションによって得られた  $h_{\min_b}$ は,階段状に離散的な値をとっている.これは,4.3で も述べた通り,同じポテンシャルエネルギーの山で跳ね返 される場合には跳ね返される位置はほとんど変わらない が,異なる山で跳ね返される時は大きく変わるためであ る.

5. おわりに

本研究では,液体で満たされた非常に狭いすきまにおい て発生する液体構造圧力を考慮して,平面に向かって球が 衝突するような運動を想定し,シミュレーションを行った.

条件によって,球が平面に衝突したり,衝突する前に跳 ね返されたりすることがわかった.

また,球の質量と初速度の大きさをパラメータとして計 算を行った結果,跳ね返される位置がパラメータによって 変化し,階段状に離散的な値をとることがわかった. 参考文献

1)J. N. イスラエルアチヴィリ, 1996, 分子間力と表面力, 朝倉書店

2)松岡広成,1995,分子オーダーの流体潤滑膜厚さに関す る研究,東京大学博士論文