

論文

分子オーダの弾性流体潤滑理論

——液体の構造圧力の影響——

原稿受付 1995年12月14日

“トライボロジスト” 第42巻 第1号 (1997) 68~75

松 岡 広 成*

東京大学 大学院学生

(〒113 東京都文京区本郷7丁目3-1)

加 藤 孝 久

東京大学 工学部機械工学科

(同上)

概要 2 固体表面が液体を介して非常に小さな距離まで接近したときに受ける構造圧力を計算するため、2 種剛体粒子系の transformed ORNSTEIN-ZERNIKE 方程式と DERJAGUIN 近似を用いる新しい方法を提案した。さらに、分子オーダの流体潤滑膜厚さを予測するため、従来の弾性流体潤滑理論にファンデルワールス圧力と構造圧力を組み込んだ。その結果、実験結果と定量的によく一致する値が得られた。

1. 緒 言

近年の機械技術の発展とともに、機械要素は非常に小型化している。これに伴い、相對運動する 2 面間距離も急速に小さくなっている。たとえば、ハードディスクではその記録密度の向上のため様々なヘッド・媒体インタフェースが考えられており、現在の磁気ヘッドスライダは空気膜を介して約 $0.1 \mu\text{m}$ 以下の浮上量が達成されているが、さらに高記録密度化をはかる一手法として液体浮上方式が提案されている^{1,2)}。この場合、軽荷重(数百 μN)であり、浮上量も数~数十 nm と非常に小さなものになっている³⁾。このような例からもわかるとおり、非常に小さな膜厚における潤滑特性に関する知見はこれからのキーテクノロジーを支えるものとして必要不可欠であろう。著者らは既報^{4~6)}において、この潤滑特性の一つ、潤滑膜厚に着目し、分子オーダの流体潤滑膜厚さを測定する実験装置を製作した。これを用いて膜厚を測定した結果、膜厚が数液体分子層程度になると膜厚の離散化が観察され、この原因が液体の構造力によるものであることを推察した。したがって、この実験結果を説明するためには、構造力を

考慮した潤滑理論を構築する必要がある。また、構造力によって固体表面が弾性変形すると考えられるため、構造力を考慮した EHL 理論が必要となろう。本研究では、まず、この液体の構造力を圧力として算出する方法を示す。さらに、これを従来の EHL 理論に組み込み、実験結果と比較する。

2. 薄い液体膜で隔てられた 2 面に働く圧力

従来の EHL 理論では、弾性方程式とレイノルズ方程式とから求まる粘性圧力を連立して膜厚分布および圧力分布を求めている。しかし、既報^{4~6)}において、膜厚が非常に小さくなると実験値がこの理論からずれることを示した。これは、構造力の影響であると考えられるため、緒言で述べたように、構造力による圧力(構造圧力と呼ぶ)を考慮した EHL 理論が必要となる。また、非常に小さな膜厚(数 nm 程度)の場合、固体表面間のファンデルワールス力による圧力(ファンデルワールス圧力と呼ぶ)も考慮しなければならない。そこで、本研究では、圧力 p が構造圧力 p_s とファンデルワールス圧力 p_{vdw} 、および粘性

EHL Theory for Ultrathin Liquid Lubrication Film Considering Solvation Pressure

By Hiroshige MATSUOKA*, Student, Graduate School, The University of Tokyo (3-1, Hongo, 7-chōme, Bunkyo-ku, Tokyo 113), and Takahisa KATO, Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, The University of Tokyo (ditto)

*現所属: 出光興産(株)大阪支店 (〒530 大阪市北区梅田 1-12-39)

Present address: Osaka Branch, Idemitsu Kosan Co., Ltd. (1-12-39, Umeda, Kita-ku, Osaka 530)

圧力 p_h から成り立っていると考える。つまり、

$$p = p_s + p_{vdw} + p_h \quad (1)$$

のように線形独立と仮定して、圧力 p を計算し、弾性方程式と連立させる。以下構造圧力、ファンデルワールス圧力および粘性圧力の計算法を順に示す。

3. 構造圧力の計算

3.1 構造力の概要

構造圧力の計算を行なう前に、まず、構造力について説明しておく。構造力は、二つの固体表面が液体を介して非常に接近したとき（数 nm 程度）に 2 面に働く力であり、これを Fig. 1 に模式的に示す。実験⁷⁻⁹⁾ およびモンテカルロシミュレーションや分子動力学などの数値計算¹⁰⁻¹²⁾ により、構造力は次のような性質をもつことが知られている。

(i) 2 面間距離に対して指数関数的に減衰する振動力である。

(ii) 2 面間距離に関する振動の周期は 2 面間に介在する液体分子の分子直径にほぼ等しい。

次に、この構造力がどのようにして発生するかについて説明しておく。固体表面間の液体分子の状態を Fig. 2 に模式的に示す。このような 2 面間の液体分子の密度を考えたとき、Fig. 2(a) の状態では 2 面間の液体分子の密度が高く、Fig. 2(b) の状態では密度が低くなることがわかる。構造力はこのような 2 面間の液体分子の周期的な密度変化^{10,13)} によって引き起こされるものである。

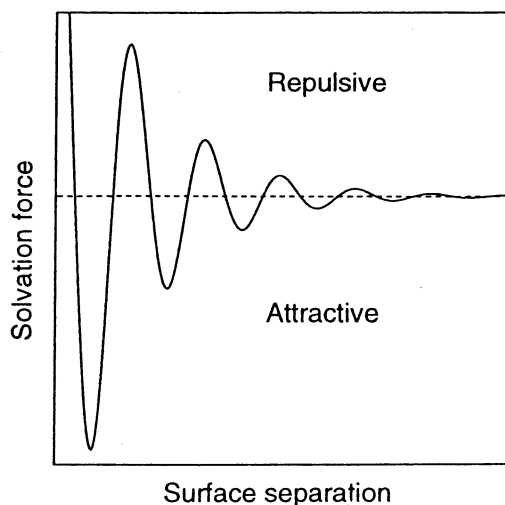
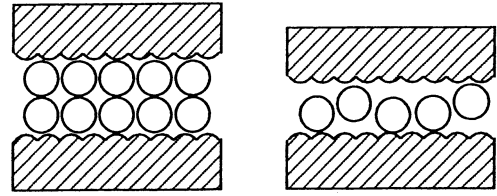


Fig. 1 Schematic show of solvation force



(a) dense

(b) dilute

Fig. 2 Liquid molecules between solid walls

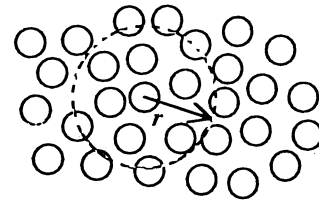


Fig. 3 One-phase system

したがって、2 面間の密度分布が 2 面間距離の関数として求まれば、構造力も計算できることになる。そこで、Fig. 3 のように、一種の多数の粒子で構成される系を考える。この中の任意の一つの粒子に着目し、この粒子の中心から距離 r における粒子の分布（数密度分布）を距離 r の関数として $g(r)$ とする。これを動径分布関数という。注目している粒子から距離 r にあるもう一つの粒子との相互作用エネルギーは、線形理論を用いて、

$$W^{s-s}(r) \approx -k_B T \{g(r) - 1\} \quad (2)$$

により近似できる¹⁴⁾（この場合 r は 2 粒子の中心間距離）。ここで、 $s-s$ は球 (sphere) と球 (sphere) との相互作用を表わし、 k_B はボルツマン定数、 T は絶対温度である。これは、Fig. 3 のような多粒子系における粒子構造（粒子分布）によるエネルギーであり、構造エネルギーとでもいべきものである。式(2)の相互作用エネルギーを用いて 2 球間に働く力が次式で求まる。

$$F^{s-s}(r) = -\frac{dW^{s-s}(r)}{dr} \quad (3)$$

これは、2 球間の正味の構造力を表わしている。これを 2 平面間の単位面積あたりの力、すなわち圧力に換算するためには、DERJAGUIN 近似を用いるのが一般的である。これは、2 球面間の正味の力と 2 平面間の単位面積あたりのエネルギーとを結び付けるもので、次式で表わされる。

$$W^{p-p}(r) = \frac{F^{s-s}(r)}{2\pi R_{eff}} \quad (4)$$

ここで、 p - p は平面 (plane) と平面 (plane) との相互作用を表わし、 R_{eff} は等価曲率半径である。DERJAGUIN 近似および R_{eff} の厳密な表式については WHITE の解説¹⁵⁾に詳しい。式(4)により単位面積あたりの力、すなわち圧力 F^{p-p} が式(3)と同様の関係により求まる。

$$F^{p-p}(r) = -\frac{dW^{p-p}(r)}{dr} = \frac{1}{2\pi R_{eff}} \frac{d^2 W^{s-s}(r)}{dr^2} = -\frac{k_B T}{2\pi R_{eff}} \frac{d^2 g(r)}{dr^2} \quad (5)$$

つまり、動径分布関数 $g(r)$ が求まれば、式(5)により構造圧力が求まることになる。したがって、動径分布関数 $g(r)$ を求めることが本節の主題である。

動径分布関数を求めるには大きく分けて二つの方法がある。一つはモンテカルロシミュレーションや分子動力学によりダイレクトに計算する方法である^{12,16-18)}。しかし、この方法は計算時間がかかるため、本研究ではとらない。二つめは統計的な近似により $g(r)$ を求める方法である。この場合、 $g(r)$ は積分方程式で表わされる。本研究では粒子を剛体と仮定し、積分方程式から得られた $g(r)$ により構造圧力を計算する。この積分方程式は ORNSTEIN-ZERNIKE 方程式と呼ばれる¹⁹⁾。

3.2 2 種粒子系における構造圧力の計算

さて、式(2)~(5)のように DERJAGUIN 近似を用いて構造圧力を求める場合、注目する二つの粒子の分子直径は2面間距離に比べて十分大きくなくてはならない¹⁵⁾。たとえば、オクタメチルシクロエトラシロキサン (OMCTS) による1種粒子系の構造圧力を求める場合、分子直径は約1 nm であり、これよりも十分に小さな2面間距離でなければ、DERJAGUIN 近似が成り立たなくなってしまう。通常、構造力は数 nm 程度の2面間

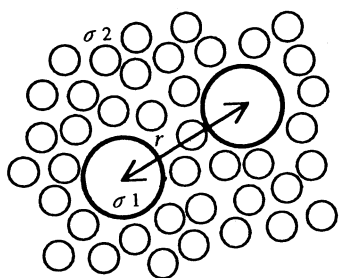


Fig. 4 Two-phase system

距離まで働く力であり⁸⁾、このような長距離に及ぶ構造圧力を求めるには、Fig. 4のように、大きな直径 σ_1 をもつ二つの粒子が小さな直径 σ_2 をもつ多くの粒子中に存在するような2種粒子系を考え、この大きな粒子間の相互作用力を求めなければならない。こうしてはじめて、2平面間の構造圧力が DERJAGUIN 近似により精確に求まるのである。以下の理論では、サフィックス1が大きな粒子、サフィックス2が小さな粒子を表わすことにする。

Fig. 4のような2種粒子系における ORNSTEIN-ZERNIKE 方程式は、次式で表わされる²⁰⁾。

$$h_{i,j}^*(r) = c_{i,j}^*(r) + \sum_{k=1}^2 \rho_k^* \int c_{i,k}^*(s) h_{k,j}^*(|r-s|) ds \quad (6)$$

ここで、 i, j は1または2であり、 $h_{i,j}^*$ は粒子 i と粒子 j との間の間接相関関数、 $c_{i,j}^*$ は直接相関関数、 ρ_k^* は $r \rightarrow \infty$ における粒子の数密度である。PERRAM の方法²¹⁾で計算するため、transformed ORNSTEIN-ZERNIKE 方程式を求めると、

$$r h_{i,j}^*(r) = -q_{i,j}'(r) + 2\pi \sum_{k=1}^2 \rho_k^* \int_{S_{i,k}^*}^{R_{i,k}^*} (r-t) h_{k,j}^*(|r-t|) q_{i,k}(t) dt \quad (7)$$

となる²⁰⁾。ここで、

$$\left. \begin{aligned} R_{i,j}^* &= \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \\ S_{i,j}^* &= \frac{\sigma_i - \sigma_j}{2} \\ q_{i,j}'(r) &= 0, \text{ for } r > R_{i,j}^* \\ q_{i,j}'(r) &= a_i r + b_j, \text{ for } r \leq R_{i,j}^* \\ q_{i,j}(r) &= 0, \text{ for } r > R_{i,j}^* \\ q_{i,j}(r) &= -\frac{1}{2} a_i (r^2 - R_{i,j}^{*2}) + b_i (r - R_{i,j}^*), \text{ for } r \leq R_{i,j}^* \\ a_i &= \frac{1 - \xi_3 + 3\sigma_i \xi_2}{(1 - \xi_3)^2} \\ b_i &= \frac{-3\sigma_i^2 \xi_2}{2(1 - \xi_3)^2} \\ \xi_i &= \frac{\pi}{6} \sum_{j=1}^2 \rho_j^* \sigma_j^i \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

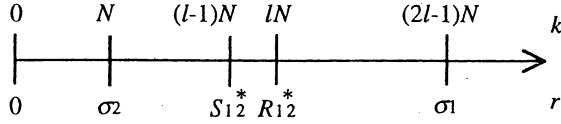


Fig. 5 Coordinate system

である。

Fig. 4 の 2 種粒子系において、式 (7) の $h_{i,j}^*$ は 4 種類存在する。しかし、対称性から $h_{i,j}^* = h_{j,i}^*$ となることが知られており²⁰⁾、三つの式に減らすことができる。この三つの式それぞれについて PERRAM の方法により離散化する。Fig. 5 のように $\sigma_1 = (2l-1)\sigma_2$ (l : 整数) とし、 σ_2 を N 分割する。これにより定式化した結果を次式に示す。ただし、 $\theta_{i,j}[k] = \theta_{i,j}(k\delta)$ 、 $q_{i,j}[k] = q_{i,j}(k\delta)$ などを表わす。

$$\left. \begin{aligned} \theta_{1,1}[k] &= -k\delta, \text{ for } 0 \leq k < (2l-1)N \\ \theta_{1,1}[k] &= \left\{ \begin{aligned} &\pi\rho_2^* \delta \theta_{1,2}[k - (l-1)N] q_{1,2}[(l-1)N] \\ &+ 2\pi\rho_2^* \delta \sum_{j=1}^{lN-1} \theta_{1,2}[k-j] q_{1,2}[j] \\ &+ 2\pi\rho_1^* \delta \sum_{j=1}^{(2l-1)N-1} \theta_{1,1}[k-j] q_{1,1}[j] \end{aligned} \right\} \\ &\quad / \{1 - \pi\rho_1^* \delta q_{1,1}[0]\}, \text{ for } (2l-1)N \leq k \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

$$\left. \begin{aligned} \theta_{1,2}[k] &= -k\delta, \text{ for } 0 \leq k < lN \\ \theta_{1,2}[k] &= \left\{ \begin{aligned} &\pi\rho_2^* \delta \theta_{2,2}[k - (l-1)N] q_{1,2}[(l-1)N] \\ &+ 2\pi\rho_2^* \delta \sum_{j=1}^{lN-1} \theta_{2,2}[k-j] q_{1,2}[j] \\ &+ \pi\rho_1^* \delta \theta_{1,2}[k - lN] q_{1,1}[lN] \\ &+ 2\pi\rho_1^* \delta \sum_{j=1}^{lN-1} \theta_{1,2}[k-j] q_{1,1}[j] \end{aligned} \right\} \\ &\quad / \{1 - \pi\rho_1^* \delta q_{1,1}[0]\}, \text{ for } lN \leq k \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

$$\left. \begin{aligned} \theta_{2,2}[k] &= -k\delta, \text{ for } 0 \leq k < N \\ \theta_{2,2}[k] &= \left\{ \begin{aligned} &\pi\rho_1^* \delta \theta_{1,2}[k] q_{2,1}[0] \\ &+ 2\pi\rho_1^* \delta \sum_{j=1}^{lN-1} \theta_{1,2}[|k-j|] q_{2,1}[j] f(k, j) \\ &+ 2\pi\rho_2^* \delta \sum_{j=1}^{N-1} \theta_{2,2}[k-j] q_{2,2}[j] \end{aligned} \right\} \\ &\quad / \{1 - \pi\rho_2^* \delta q_{2,2}[0]\}, \text{ for } N \leq k \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

ただし、

$$\left. \begin{aligned} f(k, j) &= 1, \text{ for } j \leq k \\ f(k, j) &= -1, \text{ for } j > k \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

である。これより、動径分布関数は、

$$\left. \begin{aligned} g_{i,j}[k] &= 0, \text{ for } k=0 \\ g_{i,j}[k] &= \frac{\theta_{i,j}[k]}{k\delta} + 1, \text{ for } k \geq 1 \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

となる。式 (5) を離散化し、式 (13) を代入すると、

$$F_{i,j}^{p-p}[k] = -\frac{k_B T}{2\pi R_{i,j}^{eff} \delta^2} \{ g_{i,j}[k+1] - 2g_{i,j}[k] + g_{i,j}[k-1] \} \quad (14)$$

となり、構造力から構造圧力が求められた。ここで、注意することは、DERJAGUIN 近似は相互作用する粒子の半径が 2 面間距離 h に比べて、十分大きくなければ成り立たないということである。したがって、粒子 2 に関する構造圧力 ($F_{1,2}$, $F_{2,2}$) は、式 (14) によって一応の値を得られるが、この値は近似が成り立っていないものである。また、この計算でほしいものは小さな粒子が 2 面間に挟まれたときの構造圧力であるから、 $F_{1,1}^{p-p}$ が求められれば十分である。さらに、式 (14) は、中心間距離 r に対して得られたものであるので、これを Fig. 6 のように 2 面間距離 h の関数として算出するには、次式を用いる。

$$\left. \begin{aligned} p_s[i] &= -\frac{2k_B T}{\pi\sigma_1 \delta^2} \left\{ \begin{aligned} &\frac{\theta_{1,1}[(2l-1)N+i+2]}{((2l-1)N+i+2)\delta} \\ &- \frac{2\theta_{1,1}[(2l-1)N+i+1]}{((2l-1)N+i+1)\delta} \\ &+ \frac{\theta_{1,1}[(2l-1)N+i]}{((2l-1)N+i)\delta} \end{aligned} \right\} \\ &\quad \text{for } h[i] = (i+1)\delta \text{ and } i \geq 1 \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

ただし、ここで $F_{1,1}^{p-p}$ を p_s と書き換えた。また、式 (14) 中の等価曲率半径 R_{eff} に対しては次式を用いた^{15,22)}。

$$R_{i,j}^{eff} = \frac{\sigma_i \sigma_j}{2(\sigma_i + \sigma_j)} \quad (16)$$

これらの式を用いて構造圧力を計算するとき、考

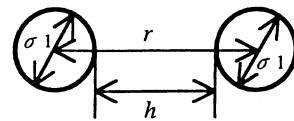


Fig. 6 Center separation and surface separation

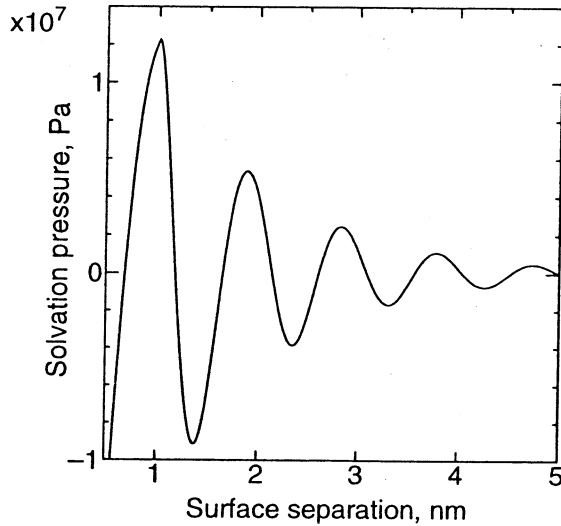


Fig. 7 Solvation pressure calculated by present method

えなくてはならないのはパラメータ ρ_1^* , $\rho_2^* \sigma_2^3$, l , N の値の設定である。まず, ρ_1^* については, 二つの大きな粒子を考えているので, $\rho_1^* = 2$ (m^{-3}) とする。次に, l , N を変化させて計算を行ない, 検討した結果, $l \geq 100$, $N > 75$ でほぼ収束解が得られることがわかった。また, $\rho_2^* \sigma_2^3$ については, ほとんどの液体の場合 0.7~0.9 程度であることが知られている^{11,13,23}。これらのことより, 本研究では, $\rho_1^* = 2$ (m^{-3}), $l = 150$ ($\sigma_1 = 299\sigma_2$), $N = 100$, $\rho_2^* \sigma_2^3 = 0.8$ として計算することにした。 $\sigma_2 = 1$ (nm) として得られた構造圧力を Fig. 7 に示す。

4. ファンデルワールス圧力

Fig. 8 のように, 物質 1 が媒体 3 を隔てて相互作用している場合のファンデルワールス圧力 p_{vdw} には次式を用いた^{5,6,22,24,25}。

$$p_{vdw} = -\frac{dW_{vdw}}{dh}, \quad W_{vdw} = -\frac{A_{131}}{12\pi h^2} \quad (17)$$

$$A_{131} = -\frac{3}{2} k_B T \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\tau_n}^{\infty} x \{ \ln(1 - \bar{A}_{13}^2 e^{-x}) \}$$

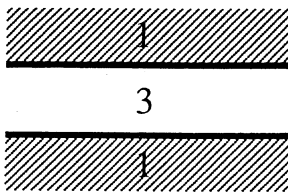


Fig. 8 Surface interaction between planes

$$+ \ln(1 - \bar{A}_{13}^2 e^{-x}) \} dx$$

$$\bar{A}_{jk} = \frac{\epsilon_j S_k - \epsilon_k S_j}{\epsilon_j S_k + \epsilon_k S_j}, \quad \bar{A}_{jk} = \frac{S_k - S_j}{S_k + S_j},$$

$$s_k^2 = x^2 + \left(\frac{2\xi_n h}{c} \right)^2 (\epsilon_k - \epsilon_3)$$

$$r_n = \frac{2h\xi_n \sqrt{\epsilon_3}}{c}, \quad \xi_n = \frac{2\pi n k_B T}{\hbar},$$

$$\epsilon_k = \epsilon_k(i\xi_n), \quad \hbar = \frac{h_p}{2\pi}$$

$$\epsilon_k(i\xi_n) = \begin{cases} 1 + \frac{n_k^2 - 1}{1 + \xi_n^2 / \omega_k^2} & (\text{for } \xi_n > 0) \\ \epsilon_{k0} & (\text{for } \xi_n = 0) \end{cases}$$

ただし, h : 2 面間距離, c : 光速, h_p : プランク定数, n_k : 屈折率, ω_k : 吸収振動数, ϵ_{k0} : 誘電率である。

5. 粘性圧力

本研究では, 球面と平面の点接触 EHL 計算を行なう。このとき, 粘性圧力 p_h は, 次のレイノルズ方程式を解くことによって得られる。

$$\frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\bar{\rho} H^3}{\bar{\eta}} \frac{\partial P_h}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\bar{\rho} H^3}{\bar{\eta}} \frac{\partial P_h}{\partial Y} \right) = 12U \frac{a}{R} \frac{\partial(\bar{\rho} H)}{\partial X} \quad (18)$$

$$X = \frac{x}{a}, \quad Y = \frac{y}{a}, \quad \bar{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0}, \quad \bar{\eta} = \frac{\eta}{\eta_0},$$

$$H = \frac{h}{R}, \quad P_h = \frac{P_h}{E'}, \quad U = \frac{\eta_0 u}{2RE'},$$

$$a = \left(\frac{3R_e F}{E'} \right)^{1/3}, \quad E' = \frac{E}{1 - \nu^2}, \quad R_e = \frac{R}{2}$$

ここで, F : 垂直荷重 (本研究では流体力と呼ぶことにする), E : ヤング率, ν : ポアソン比, R : 球面の曲率半径, ρ_0 : 大気圧での密度, η_0 : 大気圧での粘度, a : ヘルツの接触円半径である。また, 密度-圧力関係および粘度-圧力関係として次式を用いる^{26,27}。

$$\bar{\rho} = \frac{\rho}{\rho_0} = 1 + \frac{\rho_1 P_h E'}{1 + \rho_2 P_h E'}, \quad \rho_1 = 0.58, \quad \rho_2 = 1.68 \quad (19)$$

$$\bar{\eta} = \frac{\eta}{\eta_0} = \exp \left[(\ln \eta_0 + \eta_1) \left\{ \left(1 + \frac{P_h E'}{\eta_2} \right)^z - 1 \right\} \right]$$

$$Z = \frac{\eta_2 \alpha}{\ln \eta_0 + \eta_1}, \quad \eta_1 = 9.67, \quad \eta_2 = 1.9609 \times 10^8 \text{ (Pa)} \quad (20)$$

ここで、 α ：粘度-圧力係数であり、本研究では $10 \text{ (GPa}^{-1})$ とした。

通常の EHL では、式(18)と次節の弾性方程式を連立して解く。この解法としては様々なものが提案されている²⁸⁻³¹⁾が、本研究では HAMROCK と DOWSON による ϕ -solution により数値計算を行なうことにした²⁸⁾。これによる式(18)の差分化および境界条件、初期条件については、文献 28) に詳しいので本論文では省略する。また、ヘルツの接触円半径で無次元化した単位長さあたりの格子点数は X, Y 方向とも 10 とし³²⁾、緩和法による収束条件は JANG ら³³⁾のそれに準じた。また、著者らが既報⁴⁻⁶⁾で行なった実験と比較するには、 $R-1$ 領域における計算をもカバーしなくてはならないため、 X 方向の流入領域および Y 方向について計算領域を大きくした (X, Y とも 50 以上)。

以上で式(1)における圧力 p の要素すべてを求める準備が整った。なお、ファンデルワールス圧力と構造圧力については、計算にかなりの時間を要するので、2 面間距離 h に対する各圧力をあらかじめ求めてデータファイルに保存しておき、このデータを読み込んで線形補間により計算することにした。

6. 弾性変形

式(1)における圧力が求まると、固体の弾性変形が次式で求まる。

$$H(X, Y) = H_0 + \frac{S(X, Y)}{R} + \frac{w(X, Y)}{R} - \frac{w_0}{R} \quad (21)$$

ただし、 $H(X, Y)$ ：無次元油膜厚さ、 H_0 ：ヘルツ接触円中心油膜厚さ、 $S(X, Y)$ ：球形状による 2 面間距離、 $w(X, Y)$ ：弾性変形量、 w_0 ：ヘルツ接触円中心弾性変形量であり、弾性変形量

$w(X, Y)$ は次式で表わされる。

$$w(X, Y) = \frac{2a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{P(X', Y') dX' dY'}{\sqrt{(X-X')^2 + (Y-Y')^2}} \quad (22)$$

式(22)の離散化についても文献 28) に詳しいのでここでは省略する。また、弾性変形計算は非常に計算時間を必要とするので、圧力が高いと考えられるヘルツ接触円近傍に限った ($X = \pm 3, Y = \pm 3$ の範囲)。

以上で圧力および弾性変形計算に必要な式が揃った。プログラミングに使用した言語は UNIX マシン上の C 言語で、計算に使用したマシンは HP apollo Series 735 である。本研究で製作したプログラムを用いて構造圧力とファンデルワールス圧力をそれぞれ 0 とおいて粘性圧力のみで計算したところ、過去の計算結果とほぼ一致する結果が得られることが確認されている。なお、プログラムのフローチャートについては、文献 28-32) に詳しいので本論文では省略する。

7. 実 験

まず、計算を行なうのに必要な各物質定数を Table 1, 2 に示す。固体試料として雲母、液体試料として OMCTS、シクロヘキサン、ノルマルヘキサデカンを用いた。雲母を円筒凸レンズに接着したものを二つ用意し、これを直交に配置し

Table 1 Properties of mica

chemical formula	$\text{K}(\text{Al}_2)(\text{Si}_3\text{Al})\text{O}_{10}(\text{CH})_2$ ³⁶⁾
refractive index n	1.60 ⁸⁾
absorption frequency ω	$1.9 \times 10^{16} \text{ rad/s}$ ⁸⁾
dielectric constant ϵ_0	7.0 ²²⁾
Young's modulus E	34.5 GPa *
Poisson's ratio ν	0.205 *

* measured by scanning acoustic microscope

Table 2 Properties of liquids

liquid	OMCTS	cyclohexane	n -hexadecane
chemical formula	$[(\text{CH}_3)_2\text{SiO}]_4$ ⁸⁾	$(\text{CH}_2)_6$ ⁹⁾	$\text{CH}_3(\text{CH}_2)_{14}\text{CH}_3$ ²²⁾
diameter σ	1 nm ⁸⁾	0.6 nm ⁹⁾	0.4 nm ²²⁾
refractive index n	1.40 ⁸⁾	1.43 ⁹⁾	1.42 ²²⁾
absorption frequency ω	$1.60 \times 10^{16} \text{ rad/s}$ ⁸⁾	$1.82 \times 10^{16} \text{ rad/s}$ ²²⁾	$1.82 \times 10^{16} \text{ rad/s}$ ²²⁾
dielectric constant ϵ_0	2.30 ⁸⁾	2.02 ⁹⁾	2.05 ²²⁾
viscosity η_0	2.35 mPa·s ⁸⁾	0.980 mPa·s ⁹⁾	3.35 mPa·s ²²⁾

て滑り（せん断）を加え、点接触における潤滑膜厚さを測定した。この直交2円筒面配置は近似的に球と平面の配置に等しい^{22,28)}。実験装置および実験方法に関しては文献4~6) にすでに報告しており、ここでは省略する。また、滑り速度 u はすべて $200 \mu\text{m/s}$ とした。

8. 計算結果

上記の理論を用いて行なった OMCTS についての計算結果を示す。Fig. 9 は、膜厚と圧力分布の例である。レイノルズ方程式を解いたときに現われる通常の粘性圧力に構造力が重畳しているのがわかる。また、Fig. 10 は流体力 F と膜厚 h

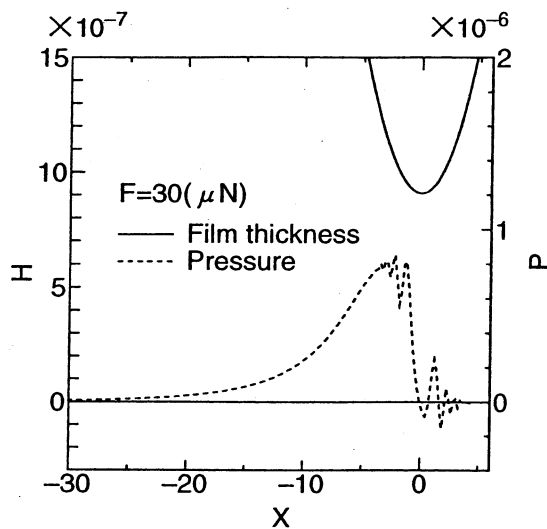


Fig. 9 Film thickness and pressure distribution

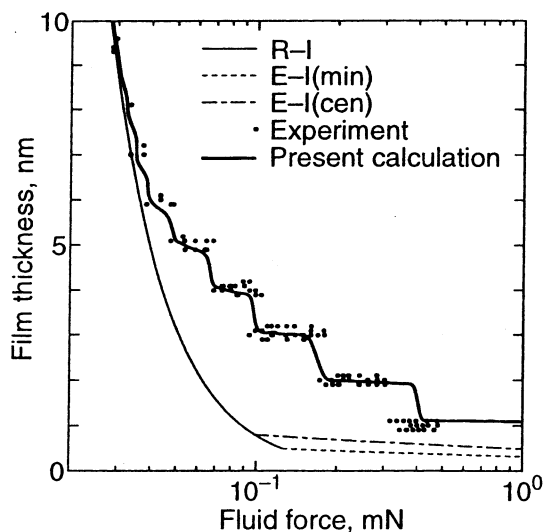


Fig. 10 Ultrathin film thickness (OMCTS, $u=200 \mu\text{m/s}$)

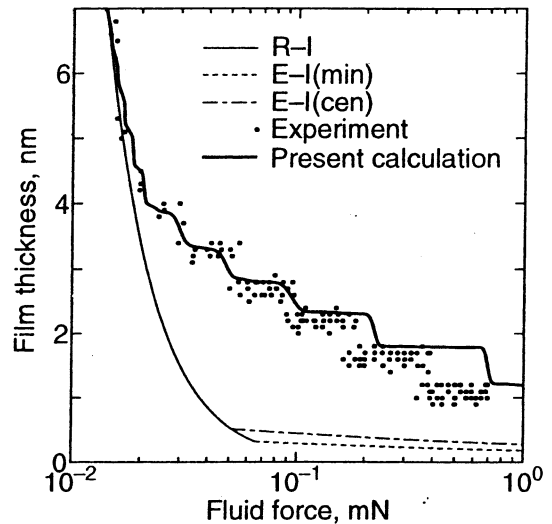


Fig. 11 Ultrathin film thickness (cyclohexane, $u=200 \mu\text{m/s}$)

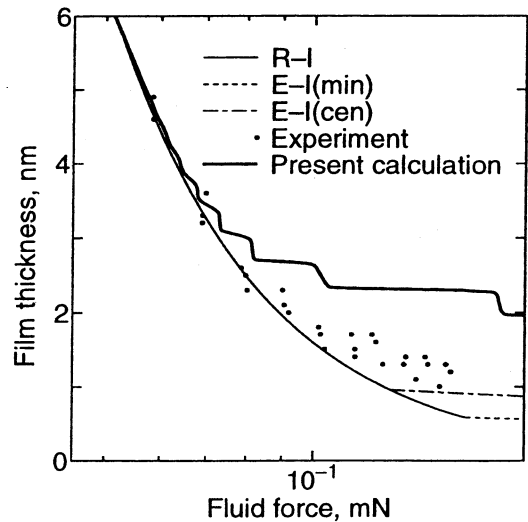


Fig. 12 Ultrathin film thickness (n -hexadecane, $u=200 \mu\text{m/s}$)

の関係を表わしたものである。黒い点は実験値^{4~6)}、細い実線は R-I 領域における従来の理論値、破線および一点鎖線はそれぞれ E-I 領域における最小油膜厚さおよび中心油膜厚さ、太い実線は本計算結果である。これより、本計算結果は実験結果と定性的、定量的に非常によく一致することがわかる。また、シクロヘキサンについての計算結果を Fig. 11 に示す。やはり実験結果とよく一致している。OMCTS やシクロヘキサンは構造力の強い物質であり^{8,34)}、このような物質の場合には本計算法が有効であると考えられる。次に、ノルマルヘキサデカンについて実験および計

算を行なった結果が Fig. 12 である。この場合、実験での膜厚の離散化は観察されない。これは、ノルマルヘキサデカンが直鎖状の柔軟な分子をもっており、固体表面近傍で絡み合っているため、分子層ができにくく、構造力も観察されにくい^{34,35)}ためであろう。したがって、このように、分子形状が球から大きく離れ、構造力がほとんど観察されない液体の場合には本計算の適用はむずかしいと考えられる。

9. 結 言

本研究では、分子オーダの流体潤滑膜厚さを予測するための理論について述べた。まず、2 種剛体粒子系の transformed ORNSTEIN-ZERNIKE 方程式を PERRAM の方法 (stepwise method) で解き、DERJAGUIN 近似を用いて構造圧力を求める方法を示した。さらに、この構造圧力とファンデルワールス圧力を従来の EHL 理論に組み込み、実験結果と比較したところ、OMCTS やシクロヘキサンなどの強い構造力を示す液体に関して定性的、定量的に一致する結果を得た。

文 献

- 1) 加藤幸夫・浜口哲也・東谷輝義：日本トライボロジー学会トライボロジー会議予稿集 (1994-5) 75.
- 2) F. A. de BRUYNE & D. B. BOGY: Trans. ASME, J. Trib., **116** (1994) 541.
- 3) 池田裕一・田子一農：トライボロジスト, **40**, 3 (1995) 253.
- 4) 松岡広成・加藤孝久：日本トライボロジー学会トライボロジー会議予稿集 (1995-5) 441.
- 5) 松岡広成・加藤孝久：日本トライボロジー学会トライボロジー会議予稿集 (1995-5) 445.
- 6) 松岡広成・加藤孝久：「分子オーダの流体潤滑膜厚さの測定」, トライボロジスト, 投稿中.
- 7) A. M. HOMOLA, J. N. ISRAELACHVILI, M. L. GEE & P. M. MCGUIGGAN: Trans. ASME, J. Trib., **111** (1989) 675.
- 8) R. G. HORN & J. N. ISRAELACHVILI: J. Chem. Phys., **75** (1981) 1400.
- 9) H. K. CHRISTENSON: J. Chem. Phys., **78** (1983) 6906.
- 10) P. TARAZONA & L. VICENTE: Mol. Phys., **56** (1985) 557.
- 11) W. van MEGEN & I. SNOOK: J. Chem. Soc., Faraday Trans. II, **75** (1979) 1095.
- 12) I. BITSANIS, J. J. MAGDA, M. TIRRELL & H. T. DAVIS: J. Chem. Phys., **87** (1987) 1733.
- 13) I. SNOOK & W. van MEGEN: J. Chem. Phys., **70** (1979) 3099.
- 14) D. HENDERSON & M. LOZADA-CASSOU: J. Colloid Interface Sci., **114** (1986) 180.
- 15) L. R. WHITE: J. Colloid Interface Sci., **95** (1983) 286.
- 16) I. K. SNOOK & W. van MEGEN: I. Chem. Soc., Faraday Trans. II, **77** (1981) 181.
- 17) I. K. SNOOK & W. van MEGEN: J. Chem. Phys., **72** (1980) 2907.
- 18) B. J. ALDER, S. P. FRANKEL & V. A. LEWINSON: J. Chem. Phys., **23** (1955) 417.
- 19) J. K. PERCUS & G. J. YEVICK: Phys. Rev., **110** (1958) 1.
- 20) J. K. BAXTER: J. Chem. Phys., **52** (1970) 4559.
- 21) J. W. PERRAM: Mol. Phys., **30** (1975) 1505.
- 22) J. N. ISRAELACHVILI: Intermolecular and Surface Forces, 2nd edition, Academic Press (1992).
- 23) D. M. HEYES, J. J. KIM, C. J. MONTROSE & T. A. LITOVITZ: J. Chem. Phys., **73** (1980) 3987.
- 24) D. C. PRIEVE & W. B. RUSSEL: J. Colloid Interface Sci., **125** (1988) 1.
- 25) J. N. ISRAELACHVILI: Proc. Roy. Soc. London, A, **331** (1972) 39.
- 26) D. DOWSON & G. R. HIGGINSON: ELASTO-HYDRODYNAMIC LUBRICATION, SI edition, Pergamon Press (1977).
- 27) C. J. A. ROELANDS, J. C. VLUGTER & H. I. WATERMAN: Trans. ASME, J. Bas. Eng. (1963) 601.
- 28) B. J. HAMROCK & D. DOWSON: Trans. ASME, J. Lub. Tech., **98** (1976) 223.
- 29) H. P. EVANS & R. W. SNIDLE: Trans. ASME, J. Lub. Tech., **103** (1981) 547.
- 30) J. F. LIN & H. Y. CHU: Trans. ASME, J. Trib., **113** (1991) 12.
- 31) C. H. VENNER & W. E. ten NAPEL: Wear, **152** (1992) 351.
- 32) R. J. CHITTENDEN, D. DOWSON, J. F. DUNN & C. M. TAYLOR: Proc. Roy. Soc. London, A, **397** (1985) 245.
- 33) S. JANG & J. A. TICHY: Trans. ASME, J. Trib., **117** (1995) 22.
- 34) H. K. CHIRTONSON, R. G. HORN & J. N. ISRAELACHVILI: J. Colloid Interface Sci., **88** (1982) 79.
- 35) M. L. GEE, P. M. MCGUIGGAN, J. N. ISRAELACHVILI & A. M. HOMOLA: J. Chem. Phys., **93** (1990) 1895.
- 36) G. L. GAINS, Jr.: J. Phys. Chem., **61** (1957) 1408.