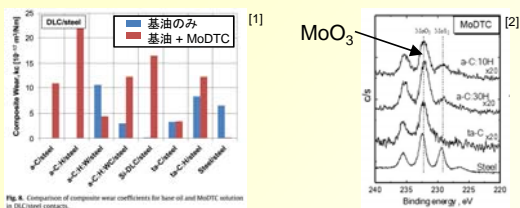


| | |
|----------------|--|
| テーマ名 (タイトル) | 排気エネルギーの有効利用と機械摩擦損失の低減に関する研究開発 |
| SIPチーム | 損失低減チーム リーダー大学: 早稲田大学 大聖 泰弘 |
| AICE分科会 | 排気エネルギー活用分科会 摩擦損失低減分科会 |
| 目的 | ターボ過給機の性能向上、燃料改質による排熱回収技術の開発を通じて排気エネルギーを低減する。従来は経験則に基づいていた摩擦損失メカニズムを解明し、大幅低減を狙う。 |

| | |
|----------------|--|
| テーマ名 (タイトル) | 境界摩擦領域での摩擦係数低減を目指す分子動力学を用いた摩擦予測 |
| クラスター大学 | 東北大学 久保 百司 |
| 50%への貢献 | 当研究室で開発した量子分子動力学法に基づくマイクロシミュレータを応用することで、①極圧添加剤による化学反応膜の生成、破壊メカニズム、②摩擦調整剤の吸着、離脱メカニズム、③摩耗粉の生成、移着メカニズムを解明する。「摩擦と化学反応」のマルチフィジックス現象の解明により、摩耗・劣化の低減、低摩擦実現のためのデザインプリンシプルを構築 |
| 目的達成のための構想 | ●マイクロシミュレータで得られた化学反応膜の生成メカニズムを、メソスケールシミュレータにつなぐ |
| アピールポイント | ●化学反応膜の摩耗メカニズムが解明されたことで、この知見をメソスケールシミュレータにつなぐ準備ができた |

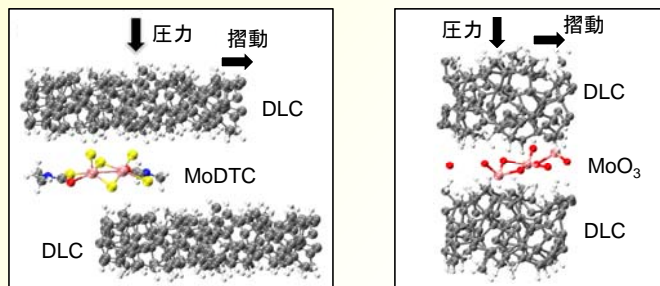
MoDTC添加によるDLCの摩耗



- MoDTCの添加でDLCが摩耗。
 - MoO₃が摩擦界面で生成している。
 - MoO₃との化学反応がDLC膜の摩耗に影響していると考えられる。
- [1] B. Vengudusamy et al. Tribol. Int. 54, 68 (2012). [2] M. Masuko et al. Tribol. Int. 82, 305 (2015).

実施した研究内容

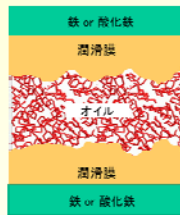
- DLCの摩擦界面でMoDTCからMoS₂が生成するプロセスの解析
- MoDTC添加でDLCが摩耗するメカニズムの解析



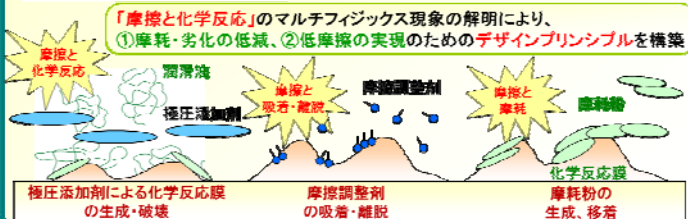
実施する研究

当研究室で開発した量子分子動力学法に基づくマイクロシミュレータで得られた知見をメソスケールシミュレータにつなぐ

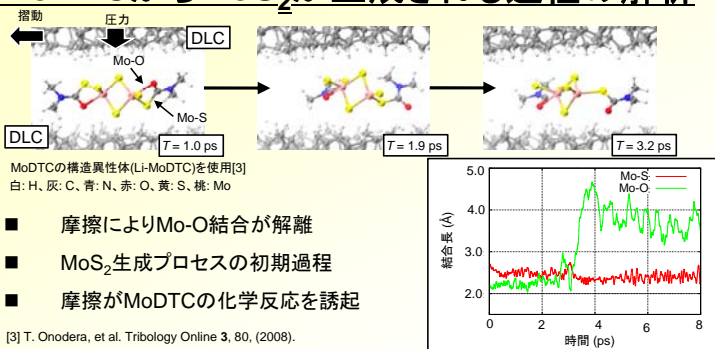
- 極圧添加剤による化学反応膜の生成、破壊メカニズム
- 摩擦調整剤の吸着、離脱メカニズム
- 摩耗粉の生成、移着メカニズム



研究全体の目指すゴール

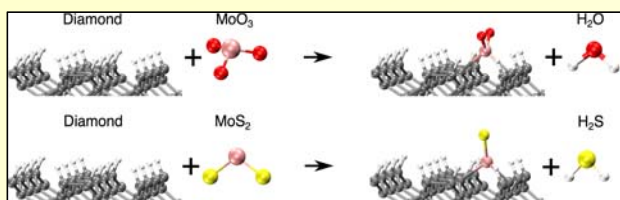


MoDTCからMoS₂が生成される過程の解析



DLC表面とMo化合物の化学反応解析

DLC表面をダイヤモンドを使ってモデル化



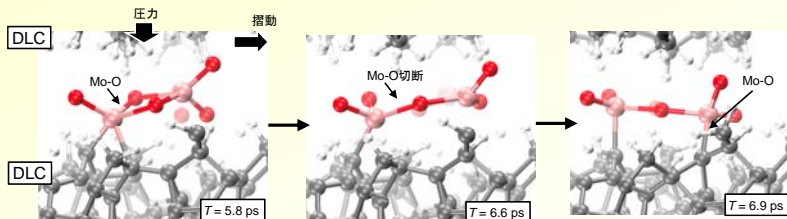
ダイヤモンド表面とMoO₃、MoS₂との反応エネルギー(kcal/mol)

| | MoO ₃ | MoS ₂ |
|--------------|------------------|------------------|
| 反応エネルギー(ΔE)* | + 5.6 | + 25.5 |

* ΔE = E(生成物) - E(反応物)

- MoS₂よりもMoO₃の方がDLC表面と結合しやすい
- MoO₃との化学反応が摩耗につながる

MoO₃との摩擦によるa-C:HのCsp²の増加



白: H, 灰: C, 赤: O, 桃: Mo

- 摩擦により、化学反応が起こる
- Mo-O結合が切断し、Mo-C結合が生成
- DLC表面とMoO₃の結合が増加し、摩耗につながる

