

《小特集》

浮動ヘッドスライダの分子気体潤滑シミュレーション

福井 茂 寿*

ABSTRACT This article describes molecular simulations of micro/nano tribology for higher density magnetic recording devices, especially computer simulations of molecular gas film lubrication (MGL) in flying head sliders with nanometer spacings. In gas film lubrication problems with submicron or smaller spacings, the gas cannot be dealt with as a continuum. Analyzing such lubrication characteristics requires use of 1) MGL equation, which was derived from the Boltzmann equation, or 2) direct simulation Monte Carlo (DSMC) technique. Recent topics in these simulation methods are briefly discussed.

1. まえがき

近年の情報化・マルチメディア化の急速な進展は、それをとりまくハードウェア技術の進歩に負うところが大きい。とりわけ、情報の入力・処理・蓄積・出力を行う情報機器の高性能化・小形化・低価格化はよく知られているが、その実現のために各種のシミュレーション技術が駆使されている。特に、小形・高性能化のためには既存のハードウェア要素のためのシミュレーション技術では必ずしも十分ではなく、原子・分子の立場からのシミュレーション結果が設計に必須となりつつある。

その典型例には、コンピュータやOA機器で情報蓄積に用いられる磁気ディスク装置(ハードディスク)用の磁気ヘッドがある。そこでは数m/s~数十m/sの速度で走行する記録媒体上に磁気ヘッドが動圧気体潤滑効果によって $0.1\ \mu\text{m}$ 程度以下の超微小すきまで安定に保持され、情報の読み出し・書き込みが行われており(図1参照)、この超微小すきの実現のため原子・分子レベルのシミュレーションが行われている。

この磁気ヘッドにおける気体浮上(浮動ヘッドスライダと呼ばれる)や接触しゅう動の様に、相対運動する2表面に生ずる摩擦・摩耗・潤滑を総称した学問体系は“トライボロジー”と呼ばれ、さらには原子・分子の微視的な立場から本質を解明しようとする研究は

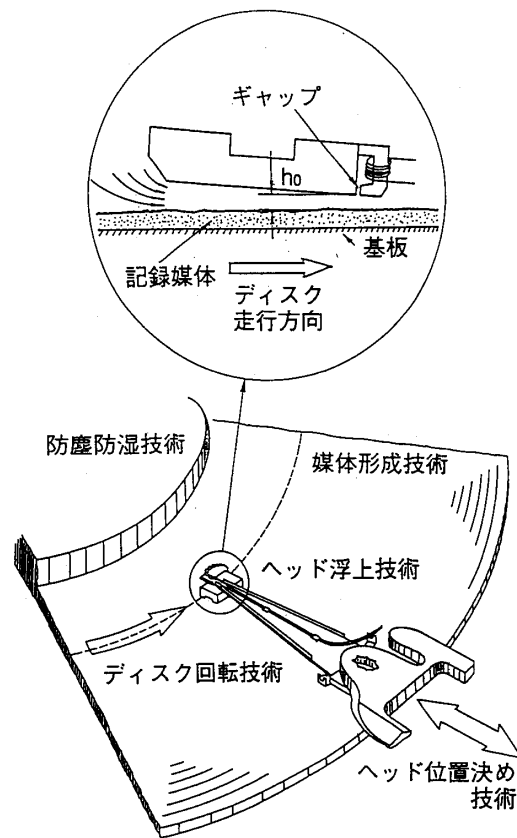


図1 磁気ディスク装置の基本構成

マイクロトライボロジーあるいはナノトライボロジーとして精力的に推進されている^{1,2)}。

本稿では、磁気ディスクのヘッドと記録媒体のトライボロジー現象のシミュレーション技術を概観し、特に浮動ヘッドスライダの気体浮上のための発生圧力のシミュレーション技術について詳述する。

Molecular Gas Film Lubrication Simulation for Flying Head Sliders with Nanometer Spacings. By *Shigehisa Fukui* (Dept. of Applied Mathematics and Physics, Faculty of Engineering, Tottori University).

*鳥取大学工学部応用数理工学科

2. 磁気ディスクのマイクロ/ナノトライボロジーのシミュレーション技術

マイクロ/ナノトライボロジー (Micro/Nano Tribology) の展開には、磁気ディスク装置などの情報機器やマイクロマシン (MEMS: Micro Electro Mechanical Systems) からの技術的な要請に加え、各種の解析ツールや分析技術の発展が大きく寄与している。実験的手法としては、走査トンネル顕微鏡 (STM: Scanning Tunneling Microscope) を始めとするプローブ顕微鏡技術や分析技術の進展があり、また解析的手法としては、計算機パワーの増大によるシミュレーション技術の発展がある。原子・分子レベルのシミュレーションの具体例として、分子動力学による摩擦現象のシミュレーション^{3,4)}、超微小すきまの分子気体潤滑解析^{5,6)}やそのモンテカルロ法による直接シミュレーション⁷⁾などが挙げられる。これらの原子・分子レベルのトライボロジー現象の解明は、従来経験的あるいは実学的手法で進められたトライボロジー研究における、より原理・原則に立ち返った解明が必須であるとの認識の高まりを反映している。

2.1 物質・材料の原子・分子シミュレーション

トライボロジー現象を含む物質・材料を対象にした理論解析、とりわけ材料分野の解析において、現象をよりミクロに捕えようとする試みは古く、古典的な連続体力学をより精緻に展開する方向で膨大な研究蓄積がなされてきた^{8)~10)}。さらに、近年の材料分野の計算機シミュレーションでは、対象とする現象や機能・特性に応じたモデリングの階層化が存在する。例えば金属材料では、従来からのマクロあるいはメゾレベルの現象論的あるいは連続体力学的なアプローチの他、電子レベル、原子レベルのアプローチが広く用いられ始めている¹¹⁾。

i) 電子レベルのアプローチ: 量子力学に基づき、最小の合理的・物理的な仮定に基づいて電子構造計算を行う第一原理的手法と、一部に実験データ等の経験的知見を用いた半経験的手法がある。これまで、コンピュータ能力の制限から単純な系しか扱えなかったが、より複雑な計算が可能になりつつある。

ii) 原子レベルのアプローチ: 原子間ポテンシャルを用いて原子系の内部エネルギーや原子に働く力を計算し、いわゆる分子動力学法 (MD: Molecular Dynamics) やモンテカルロ法 (MC: Monte Carlo) によるシミュレーションを行うものである^{12)~14)}。トライボロジー分野における原子・分子レベルの計算機シ

ミュレーションは、ほとんどこの範疇である。分子動力学法は、各原子の運動を古典力学の範囲で再現し、系の熱力学的性質や動的挙動を探る手法であり、電子レベルの計算手法に比較してより大きな系を対象とすることができる。すでに、点欠陥や転位の構造、融解や凝固、結晶成長、薄膜形成などのほか、トライボロジーなどの界面現象^{3,4,15,16)}、変形や破壊などの微細加工プロセス等についてシミュレーションが行われている。一方、モンテカルロ法は、分子動力学法と同じ原子レベルアプローチの範疇にあるが、系全体の確率論的平衡状態を求めることに違いがある。なお、原子レベルのアプローチで最も重要なのは原子間ポテンシャルの精度であるが、新たな手法の開発などにより改良され、原子レベル解析の有用性が増している。

2.2 気体浮上圧力の確率・統計的シミュレーション

気体内の圧力発生によって物体を非接触に支持する気体潤滑においても、同様の観点からの研究が進展している。超微小なすきま (例えば $0.5 \mu\text{m}$ 以下) で気体潤滑される場合には、潤滑領域内の流れは連続流体としては扱えず分子気体力学^{17,18)}に基づいて流れを考察する必要がある。すなわち、気体の粒子性を表わすパラメータであるクヌッセン数

$$K_n = \lambda / h \quad (1)$$

λ : 分子平均自由行程 (大気中では $0.064 \mu\text{m}$)

h : 系の代表長 (潤滑問題ではすきま量)

が無視し得ない場合に、気体の振舞を確率・統計的に取り扱うことになる。気体潤滑におけるこの様な取り扱いは、広義に“分子気体潤滑 (MGL: Molecular Gas film Lubrication)”と呼ばれている。

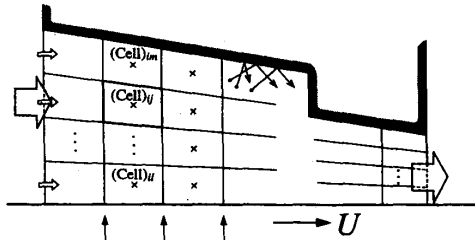
超微小すきまに生ずる気体圧力を求める解法には大別して2つあり、1) ボルツマン方程式から導いたレイノルズ形の圧力場の方程式 (分子気体潤滑方程式) を解くもの (MGL 解析)、2) 超微小すきまで有用性を増すモンテカルロ直接シミュレーション (DSMC 法) がある。図2に、MGL 解析と DSMC 法の比較を示す。これらの2つは、解析可能な対象 (計算時間、メモリー量) と求め得る物理量などの観点から、相補的な関係であると言える。

3. 分子気体潤滑のシミュレーション⁵⁾

3.1 分子気体潤滑 (MGL) 方程式

気体潤滑とは、狭いすきまを介して相対すべり運動する二面間で介在する気体に圧力が発生する現象をいう。圧力発生メカニズムを簡単のために連続流の場

DSMC Method



MGL Method

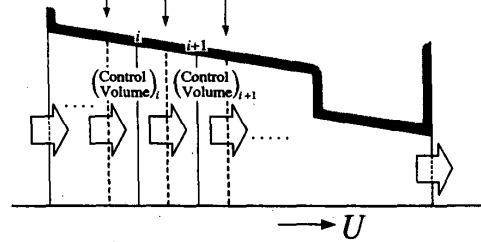


図2 気体浮上シミュレーション (DSMC法とMGL解析の比較)

合について説明する (図3参照). 狭いすきまでその変化がゆるやかな場合には, 流れは局所的に平行平板間の流れで置き換えられ, 圧力差による流れ (ポアズイユ流れ) と相対すべり運動による流れ (クエット流れ) の重畳で表される. 気体潤滑領域の任意断面において, ポアズイユ流れの質量流量 Q_p とクエット流れの質量流量 Q_c の和 $Q_p + Q_c$ が一定であるとする事により圧力場の方程式 (レイノルズ方程式) が得られる. これを周囲圧力が大気圧に等しいとした境界条件のもとで解くことにより圧力分布が得られる. ところが, 浮動ヘッドスライダの様に超微小すきまの流れでは, 気体の挙動を統計的に記述するボルツマン方程式に基づいて詳細に検討する必要がある.

ボルツマン方程式は, 時刻 t , 位置 $x_i \sim x_i + dx_i$, 分子速度 $\xi_i \sim \xi_i + d\xi_i$ の範囲にある分子の確率密度を表す速度分布関数 $f(x, \xi, t)$ の変化を与える関係式で, この f を用いれば気体の巨視的物理量である密度 ρ , 速度 v_i , 温度 T などが完全に記述される. クヌッセン数 K_n が特別な場合には取り扱いが簡単になる.

i) $K_n \ll 1$: K_n が充分小さく気体の粒子性が顕著でない場合には, すべり流れ近似によって連続流の結果を修正する形で流れを扱うことができる.

ii) $K_n \gg 1$: K_n が充分大きい場合は自由分子流と呼ばれ, 分子と壁面との衝突だけを考えればよい.

スライダディスク間の超微小すきまの流れを解析する際にも, 従来の潤滑理論とはほぼ同様に a) 流体の

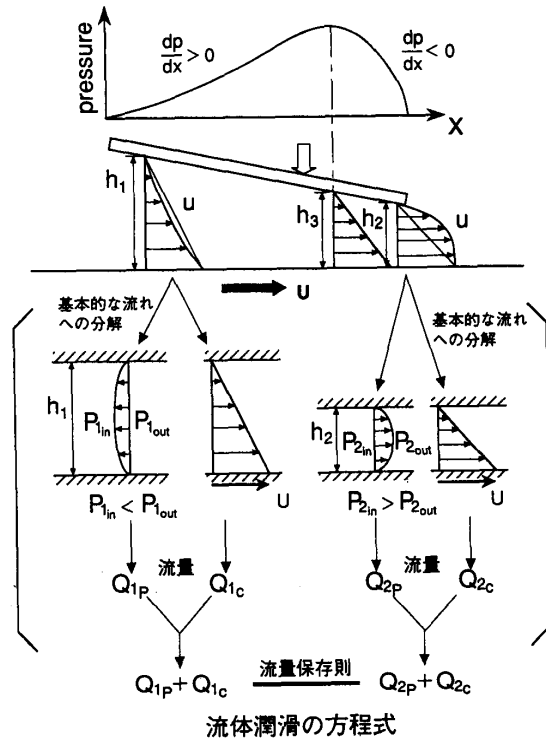


図3 圧力発生メカニズム (連続流の場合)

慣性力を無視, b) 薄膜の仮定, c) 流れは平衡状態に近い, などの仮定を置く. ボルツマン方程式に基づき一般化された気体潤滑方程式である分子気体潤滑方程式は, 動的特性を表わす時間項を含め次式で表わされる^{5,6)}.

$$\frac{\partial}{\partial X} \left\{ \bar{Q}_p \cdot PH^3 \frac{\partial P}{\partial X} \right\} + \frac{\partial}{\partial Y} \left\{ \bar{Q}_p \cdot PH^3 \frac{\partial P}{\partial Y} \right\} = A \cdot \frac{\partial(PH)}{\partial X} + \sigma \cdot \frac{\partial(PH)}{\partial \bar{t}} \quad (2)$$

この方程式の左辺はポアズイユ流れの流量を, 右辺第1項はクエット流れの流量を, 第2項はスクイズ項を表わしている. 左辺に含まれる流量係数 \bar{Q}_p は圧力流れの流量係数比である.

$$\bar{Q}_p(D) = Q_p(D) / Q_{con}, Q_{con} = D/6 \quad (3)$$

従来の気体潤滑方程式との差異がこの係数で集約されている (図4). 連続流, すべり近似の場合には, それぞれ $Q_p = 1$ および $1 + 6K_n/PH$ である. 一般の場合の流量係数比はデータベース化されており¹⁹⁾, これを適宜参照することにより連続流に対するのと同程度の計算時間で圧力分布を得る. この理論に対する実験的検証²⁰⁾, さらには適応係数の影響や動特性などの様々な展開が図られている.

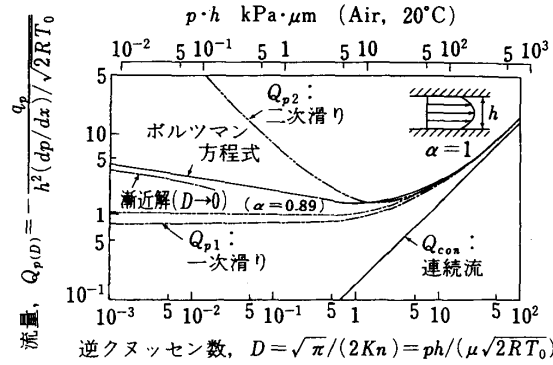


図4 圧力流れの流量係数

3.2 MGL 方程式のシミュレーション技法

式(2)で示される MGL 方程式を含め、気体潤滑のさまざまな効果を考慮した広義の“修正レイノルズ方程式”は、一次元で次の様になる²¹⁾。

$$2\lambda \frac{\partial PH}{\partial \bar{t}} + \lambda \frac{\partial PH}{\partial X} = \frac{\partial}{\partial X} \left(Q \frac{\partial P}{\partial X} \right) \quad (4)$$

この修正レイノルズ方程式と類似の形をした方程式にバーガス方程式がある。

$$\frac{\partial f}{\partial t} + c \frac{\partial f}{\partial x} = \nu \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (5)$$

このバーガス方程式では、 $\nu=0$ とすると代表的な双曲形微分方程式である波動方程式となり、 $c=0$ とすると放物形の非定常熱伝導方程式でかつ空間的には楕円形となる。浮動ヘッドスライダの様に超微小すきまの分子気体潤滑では、式(2)あるいは(4)の λ 値が著しく大きくなり、このため式(5)の ν が相対的に非常に小さい場合と等価になる。

分子気体潤滑方程式の解法には、有限要素法、有限差分法によるものがあり、いずれも研究が進んでいるが、一般に流体潤滑の方程式は流量保存則であるため、コントロールボリュームの流量保存を考えるダイバージェンス・フォーミュレーション (DF: Divergence Formulation) 法が理解が容易である。浮動ヘッドの高精度シミュレーション技法の研究として、超微小すきまではせん断流れが主となることに着目した重み付き上流化スキームが提案・詳細評価され^{22,23)}、またすきま形状が不連続であることをも考慮したスキームとして線形化した分子気体潤滑方程式を DF 法により離散化し、ADI 法で解く方法が示されている²⁴⁾。図5に MGL 方程式によるシミュレーションの結果の例として、ステップ形スライダの圧力分布を示す。

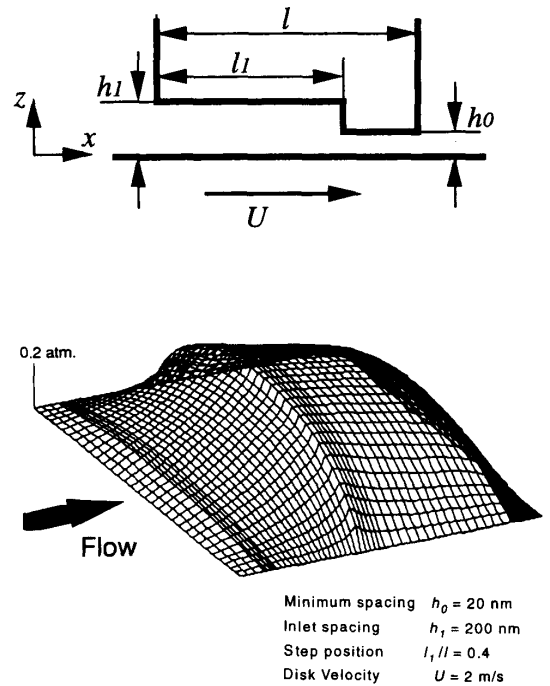


図5 MGL 解析による圧力分布の例 (ステップ形)

4. DSMC 法による気体潤滑解析

4.1 モンテカルロ直接シミュレーション (DSMC) 法^{25,26)}

DSMC 法は、実在気体流れのコンピュータモデル化手法の一つで、数千~数十万個のシミュレーション分子 (粒子) の速度および位置が分子衝突や境界面との衝突により時々刻々変化する様子を、物理空間上でシミュレーションするものである (図2参照)。DSMC 法では、各セルごとに平衡時のシミュレーション分子の速度、密度、温度などの物理量の時間平均を求める。また境界条件としては、潤滑領域の端面で得られるマクロ流速 U が潤滑領域外部のマクスウェル分布のマクロ流速と一致する様繰返し計算を行う。

DSMC 法では、MGL 解析における上記 a)-c) の様な仮定を設けないため、超微小すきまでも重要性となる境界面に粗さのある場合やほぼ接触する場合などにも適用でき、また速度プロファイルの詳細など得られる情報が多いが、計算時間が膨大となる。これに対し MGL 解析では、様々な仮定に基づくものそれらは妥当な場合が多く、また計算時間がわずかであるため解析・設計等のツールとして用いられる。これらを補完的に使い分けつつ、より複雑な現象の解明が進めら

れている。

4.2 DSMC シミュレーションの例

ナノメータ浮上スライダ気体軸受を対象として DSMC 解析が行われ、MGL 解析結果との比較が進められている。形状が単純な傾斜平面形スライダについては、両者がよく一致する^{7,27)}。DSMC 解析ではステップ形の様なすきまがゆるやかに変化しない形状にも適用できることから、ここでは、図5と同様のステップ形状であるが、流出端のすきまが流入端より大きい逆ステップ形スライダにおける解析結果を簡単に紹介する²⁸⁾。なお、この形状は周囲圧力(大気圧)より低い圧力を部分的に発生させ性能向上を図る負圧利用形スライダの基本形でもある。

長さ $l=5 \mu\text{m}$ 、流入端すきま $h_1=10 \text{ nm}$ 、流出端すきま $h_0=100 \text{ nm}$ ($h_0/h_1=10$)、ステップ部 $l_1/l=0.2$ とし、境界面速度 U は、DSMC 法と MGL 解析の差異を顕在化するため、 94.6 m/s とした。DSMC 法における分子衝突のモデルには Bird 法を、また流入端、流出端の境界条件としてマクロ流入速度の垂直成分 (x 方向成分) を自動設定する流入境界条件²⁹⁾ を用いた。固定壁の境界条件には拡散反射、境界温度 293.15 K とし、圧力等のマクロ量を求める際には、平均化処理を行った。一方、MGL 解析では走行方向に最大1000分割して計算を行った。

図6に、DSMC 法におけるステップ比 $h_0/h_1=10$ の場合のセル分割図を示す。走行方向 (x 方向) に80分割し、すきま方向 (z 方向) には流入端部 ($x/l=0\sim 0.2$) で4分割、負圧領域 ($x/l=0.2\sim 1$) で20分割とした。図7は、DSMC 計算終了時のシミュレーション分子 (25万個) の存在位置を点で示したものである。粒子数が多数であるため濃淡として見えるが、その濃淡はシミュレーション分子の密度を反映している。

図8は、ステップ比 $h_0/h_1=10$ の場合の DSMC 法と

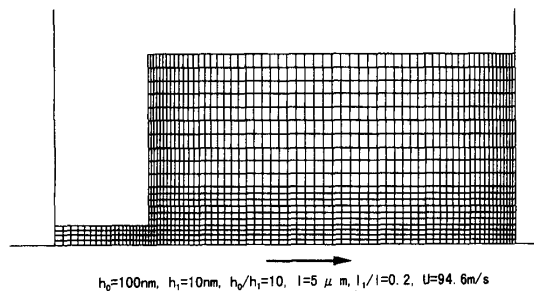


図6 DSMC 法のセル分割例 ($h_0/h_1=10$ の場合)

MGL 解析の圧力分布を比較したものである。DSMC 法では、圧力を境界面に分子から与えられる運動量変化から算定し、走行面 (○印)、スライダ軸受面 (▲印) のそれぞれについて示した。これらの2つの結果および MGL 解析 (実線) の結果は、よく一致している。ただし、詳細にはステップ部 ($x/l=0.2$) 付近でわずかな差異が認められる。

図9に、ステップ部の直後 ($x/l=0.203$) における DSMC 法による圧力 p 、温度 T 、数密度 n のすきま方向分布を、MGL の結果 (それぞれ一定値と仮定) と比較して示す。まず DSMC 法による圧力では、2つの算出方法による値、すなわち、運動量変化から算出する境界面圧力 (○および▲、図8に表示)、その他のすきま部では空間3方向に個別に定義される圧力の平均量 (□) を示した。運動量変化からの圧力 (○および▲、図8も参照) と MGL (—) を比較すると、

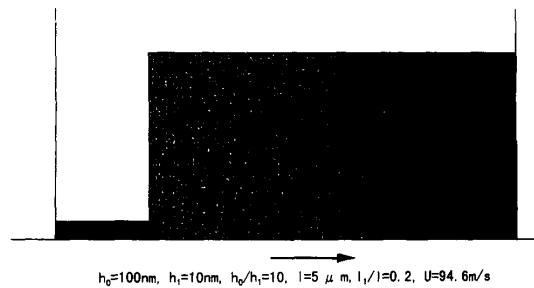


図7 DSMC 計算終了時のシミュレーション粒子のマッピング

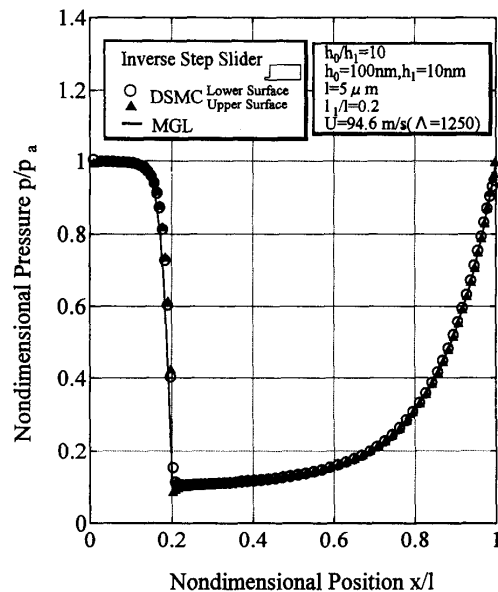


図8 MGL 解析と DSMC 法による圧力分布の比較

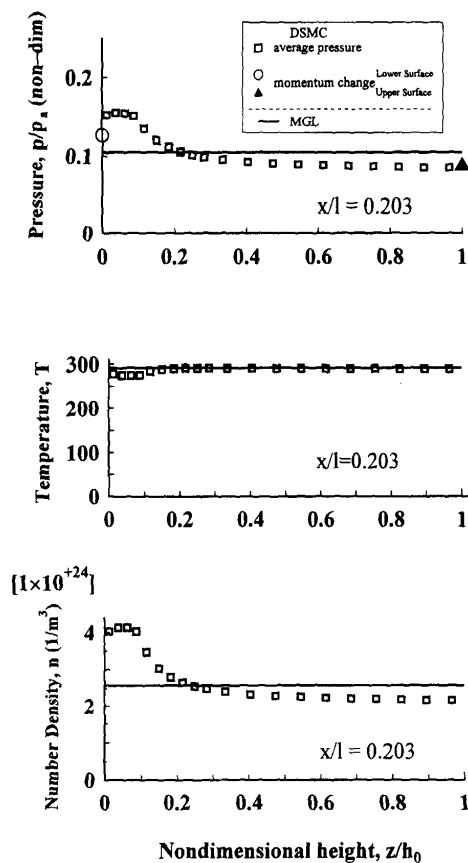


図9 ステップ直後の p , T , n のすきま方向分布の比較

MGL 解析は上面ではやや大きく、下面では小さく予測することが解る。一方、各点の平均圧力 (\square) は、すきま方向に分布を持ち、特に狭いすきまからの流れの影響を受けた $z/h_0=0\sim 0.1$ 付近では、MGL との差異が顕著である。

DSMC 法では、圧力 p は温度 T と数密度 n から $p=nKT$ の関係より求められる。このため温度 T 、数密度 n の分布を見ると、 $z/h_0=0\sim 0.1$ 付近では温度はやや低下し、数密度は増加することが解る。いずれもステップ部のごく近傍ですきま方向に分布を持つことが解るが、ステップ部以外ではほぼ一定値となり MGL の結果とはほぼ一致する。

5. あとがき

情報機器における原子・分子レベルのシミュレーションの例として、磁気ディスク装置用の浮動ヘッドのシミュレーションの現状を紹介した。相補う2つのシミュレーション技法を詳細に比較検討することにより、将来の接触をも許容するヘッド形態（近接触と呼

ばれる）の複雑な現象における分子気体の影響が明らかにされつつある。

急減に普及している WS やパソコンの中のマイクロメカのハイテク技術とそのシミュレーション技術に興味をお持ち頂ければ幸いである。

参考文献

- 1) 金子礼三：ゼロ摩擦への挑戦—マイクロトライボロジーの世界—, テクノライフ選書, オーム社 (1995)
- 2) B. Bhushan 編：Handbook of Micro/Nanotribology, CRC Press (1995)
- 3) U. Landman, W. D. Luedtke and E. M. Ringer: Molecular Dynamics Simulations of Adhesive Contact Formation and Friction, in Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic Processes, I. L. Singer and H. M. Pollock 編, NATO ASI series 220, 463/510 (1991)
- 4) J. Harrison and D. Brenner: Atomic-Scale Simulation of Tribological and Related Phenomena, 文献2)の10章, 397/439 (1995)
- 5) S. Fukui and R. Kaneko: Molecular Gas Film Lubrication (MGL), 文献2)の13章, 559/604 (1995)
- 6) 福井茂寿：磁気ディスクの分子気体潤滑, 精密工学会誌, 62-9, 1242/1246 (1996)
- 7) F. J. Alexander, A. L. Garcia and B. J. Alder: Direct Simulation Monte Carlo for Thin-Film Bearings, Phys. Fluids, 6-12, 3854/3860 (1994)
- 8) C. Truesdell & W. Noll: The Non-Linear Field Theories on Mechanics, Encyclopedia of Physics, III/3, Springer-Verlag (1965)
- 9) C. Eringen 編：Continuum Physics, I-N, Academic Press (1981)
- 10) 例えば, 特集—材料と数理, 応用数理, 5-4, 岩波書店 (1995)
- 11) 化学技術庁：「原子・分子レベルの現象・機能の解明のための計算科学技術に関する総合的な研究開発の推進方策について」答申, 航空・電子等技術審議会諮問第21号 (1995)
- 12) 上田 顕：コンピュータシミュレーション—マクロな系の中の原子運動—, 朝倉書店 (1990)
- 13) 岡田 勲・大沢英二：分子シミュレーション入門, 海文堂 (1989)
- 14) 北川 浩：分子動力学—構成論と物質論の間は埋められるか—, 文献10), 84/97 (1995)
- 15) 佐々木直哉：原子スケール摩擦/摩耗の分子動力学解析の現状, トライボロジスト, 39-3, 194/200 (1994)
- 16) 大村悦二：マイクロトライボロジーの分子動力学シミュレーション, トライボロジスト, 41-3, 197/202 (1996)
- 17) 曾根良夫・青木一生：分子気体力学, 朝倉書店 (1994)
- 18) C. Cercignani: Mathematical Methods in Kinetic Theory, Plenum Press (1969) または Theory and Application of the Boltzmann Equation, Scottish Academic (1975)
- 19) S. Fukui and R. Kaneko: A Database for Interpolation of Poiseuille Flow Rates for High Knudsen Number Lubrication Problems, ASME J. Tribology, 112, 78/83 (1990)
- 20) 竹内芳徳, 田中勝之, 尾高聡子, 村主文隆：磁気ヘッドスライダ浮上量の光学的測定原理誤差を排除した測

- 定値に基づくスライダ浮上解析法の精度検証, 日本機械学会論文集 (C編), 60, 2547 (1994)
- 21) 川端信義: ヘッド浮上解析のための数値計算テクニック, 日本機械学会 (No. 940-52) 講習会教材 “ヘッド・媒体インターフェースのマイクロメカニクス技術の最前線”, 33/37 (1994)
- 22) 川端信義, 坂口洋之: 微小すきま気体潤滑流れの数値解析に対する各種スキーム (定常解析), 日本機械学会論文集 (C編), 59-565, 226/232 (1993)
- 23) 川端信義, 坂口洋之, 森 真人: 同上 (非定常直接解析), 日本機械学会論文集 (C編), 61-586, 367/373 (1995)
- 24) E. Cha and D. B. Bogy: A Numerical Scheme for Static and Dynamic Simulation of Subambient Pressure Shaped Rail Sliders, ASME, J. Tribology, 117, 36/46 (1995)
- 25) G. A. Bird: Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, Clarendon Press (1994)
- 26) 南部健一: ボルツマン方程式の確率解法, 数値流体力学 (保原・大宮司編) の第13章, 東大出版会, 287/324 (1992)
- 27) S. Fukui and R. Kaneko: Monte Carlo Direct Simulations of Slider Gas Bearings with Nanometer Spacings (Comparison with MGL Analysis), Proc. of ITC Yokohama 1995, 1943/1946 (1996)
- 28) 山根清美, 福井茂寿: ナノメータ浮上ステップ形スライダ気体軸受の特性解析 (速度および圧力分布のDSMC法とMGL法による比較), トライボロジー会議東京'97予稿集, 315/317 (1997)
- 29) 池川正人・小林淳一: 直接シミュレーションモンテカルロ法による希薄流シミュレータの開発 (第1報, 上流と下流の圧力条件を与えた場合の二次元流れ解析), 日本機械学会論文集 (B編), 54-507, 3057/3060 (1988)