

超高速化量子分子動力学法のダイヤモンドライクカーボン成膜への応用

○ 敎 敦 其 木 格¹、鈴木 愛²、Riadh Sahnoun¹、古山通久¹、坪井秀行¹、畠山 望¹、
遠藤 明¹、高羽洋充¹、Carlos Del Carpio¹、Ramesh C. Deka²、久保百司³、

宮本 明^{1,2}

¹ 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

² 東北大学未来科学技術共同研究センター (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

³ 東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター
(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-701)

1. 緒言

ダイヤモンドライクカーボン(DLC)は、優れた低摩擦係数、耐摩耗性を有することから摺動部品、切削工具などの多彩な用途への展開が期待され、活発な研究が展開されている。各種の用途や目的に応じた特性を持つ DLC 膜を設計するためには、膜質の評価と DLC 成膜プロセスの検討が重要な課題となる。DLC 膜は、成膜方法により密度、硬度、摩擦係数が大きく異なるため、プロセス設計においては様々な手法に対応した汎用的かつ高精度な成膜シミュレーションによるプロセス設計が望まれており、このためには原子レベルでの量子化学計算に基づくシミュレーションが貴重な知見を与えるものと期待される。本研究では当研究室で新たに開発した超高速化量子分子動力学法を用いて鉄表面は DLC 膜の成膜プロセスダイナミクスの解析を行った。

2. 計算方法

計算には当研究室で新たに開発した超高速化量子分子動力学法シミュレータを用いた。まず、Tight-Binding 量子分子動力学計算を行い各原子の電荷および二原子間結合エネルギーを算出し、これを Coulomb ポテンシャル項および Morse ポテンシャルのエネルギー項に用い化学反応の進行を考慮しながら Tight-Binding 量子分子動力学計算によりそのポテンシャルを更新することで量子分子動力学シミュレーションの超高速化を実現した。

3 結果と考察

鉄 45 原子、炭素 5 原子からなる鉄表面を模擬したモデルを用い、各炭素原子に鉄基板に向かって 4000 m/s の初期速度を与えた。計算条件は温度 300 K、NVE アンサンブルとした。超高速化量子分子動力学シミュレーション結果の 335 fs 後のスナップショットを図 1 に示す。図 1 では 2.5 Å 以内に近づいた鉄原子-炭素原子間には結合線をつけて表示した。図 1 からわかるとおり、炭素原子は時間の経過と共に鉄基板表面に接近し 4-fold サイトに吸着していく様子が観察された。また、図 2 に示した結合次数の経時変化からわかるとおり、図 1 の通し番号 47 番の炭素とその近傍の 4 つの鉄原子 (通し番号 1,2,3,4) との平均の結合次数は初期の 0.003 から 335 fs 後では 0.258 と大幅な増加が見られた。このことから表面鉄原子と炭素原子の結合が共有結合的であることが示唆された。

4. 結言

DLC 成膜プロセスダイナミクスに関し、当研究室で新規に開発した超高速化量子分子動力学法シミュレータを用いて、鉄基板表面と炭素原子の原子レベルでの化学反応メカニズムを検討した。これにより開発した超高速化量子分子動力学法が DLC 成膜プロセスダイナミクスの解析に有効であることが示された。

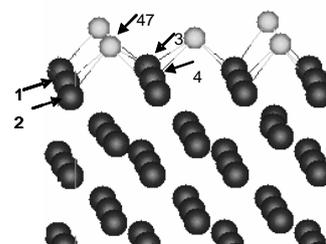


図 1 超高速化量子分子動力学シミュレーション結果スナップショット (335 fs 後)

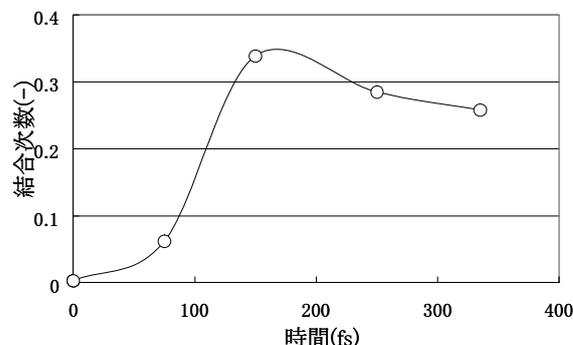


図 2 超高速化量子分子動力学シミュレーションでの結合次数の経時変化