

ダイヤモンドライクカーボンにおける 低摩擦機構の量子分子動力学シミュレーション

○林 健太郎、尾澤 伸樹、島崎 智実、久保 百司

東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-703)

1. 緒言

ダイヤモンドライクカーボン(DLC)は低摩擦・低摩耗・高強度といった優れたトライボロジー性質を持っており、HDD やエンジンなど多くの分野で使用されている。しかし、その詳しい摩擦低減メカニズムは解明されていない。また、DLC は特定の条件で超低摩擦状態となることが知られている。高真空状態で鉄と DLC を摩擦した場合に、摩擦係数 0.002 付近という極めて低い値が記録された後に急激に上昇するという実験結果が報告されている[1]。この実験では変化前後の摩擦面を比べると移着膜が形成され、その後壊れていることが観察されている。この膜は炭素系であることは分かっているが、移着膜の組成や構造、また低摩擦化のメカニズムなどは解明されていない。

原子レベルの摩擦低減メカニズムを解析するには、実験的手法とともに計算化学手法による解析も重要である。本研究では、DLC の摩擦特性を詳しく調べるために量子分子動力学法を用いて DLC の低摩擦機構の検討を行い、特に移着膜の効果に着目した。

2. 計算方法とモデル

2.1 量子分子動力学シミュレーション

Tight-binding 量子分子動力学法に基づく計算コード Colors を使用した。

2.2 パラメータの決定

炭素のパラメータを決定するためにダイヤモンドのモデルを用い、その平均結合エネルギーと平均結合距離を文献値に一致するように決定した。また水素においては、水素分子の結合距離と結合エネルギーが文献値に一致するようにパラメータを決定した。結果を表 1、2 に示す。

表 1 炭素の計算結果

	結合エネルギー[eV]	結合距離[Å]
計算値	7.379	1.55
文献値	7.37	1.54

表 2 水素の計算結果

	結合エネルギー[eV]	最安定距離[Å]
計算値	4.511	0.74
文献値	4.506	0.74

2.3 摩擦係数の計算

摩擦計算および摩擦係数の計算方法の概略を図 1 に示す。計算条件は温度 300K 体積一定で、1.0fs/step(水素を含む場合は 0.2fs/step)である。摩擦は下層の原子を固定し、上の原子を Z 方向について固定しながら 100m/s で強制移動させた。摩擦係数は、強制移動させている原子に働く X 方向と Z 方向の力をそれぞれ合計し、時間平均をとり、図 1 に示す式により算出した。

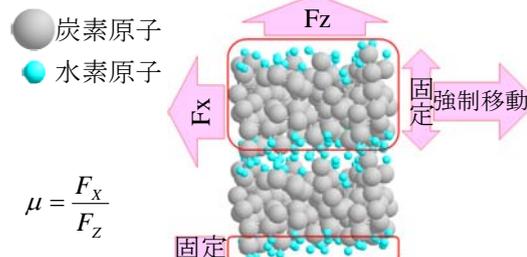


図 1 摩擦計算モデル

3. 計算結果及び考察

水素終端されていない DLC 同士の摩擦シミュレーションを行い、摩擦係数を計算した (図 2)。時間が経過するとともに、C-C 結合の生成と切断の繰り返しとなり、摩擦よりもせん断に近い状態となった。このため摩擦係数は約 4.0 という非常に大きな値となった。

同様の計算を DLC を水素終端させて行った。摩擦時の様子を図 3 に示す。(a)は初期位置、(b)は 2.0ps 後、(c)は 5.0ps 後である。摩擦係数を図 4 に示す。摩擦係数は約 4.0ps でおおよそ 0.08 の最大値を示しており、水素終端していない場合に比べ非常に低くなっている。これは終端水素が他の C-C 結合を抑えるためと考えられる。また、摩擦係数が徐々に上昇しているが、これは C-C 結合が生成したためだと考えられる (図 3 (b))。さらに、摩擦係数の低下が 4.0ps 付近で始まっており、これは一度生成した C-C 結合がここで切れているためと予想できる (図 3 (c))。

以上より、DLC の低摩擦機構を検討するには C-C 結合の生成について考えることが重要であると考

えられる。そこで生成していると思われる C-C 結合についての Atomic Bond Population を調べた(図 5)。この図より 4.0ps 付近で Atomic Bond Population が 0 になり C-C 結合が切れていることが確認できる。図 4 において、4.0ps で摩擦係数が低下し始めるので、摩擦係数の低下は C-C 結合が切れたことが原因であると明らかになった。

次に、C-C 結合が切断される様子を解析した(図 6)。(1)C-C 結合に水素原子が近づき、(2)それにより結合が不安定になり C-H 結合が長くなる。(3)C-H 結合が長くなった水素原子が下の炭素原子と結合し、(4)結合が切れる、という様子が観察された。これらの炭素原子は水素終端されるため再び C-C 結合は生成されなかった。以上から水素原子は C-C 結合の抑制だけでなく C-C 結合の切断にも影響していると考えられる。

また、内部に水素を含ませた DLC の一つの場合で C-C 結合ができない場合があった。その際の摩擦係数を図 7 に示す。摩擦係数は非常に低く、約 0.026 となっている。この結果より C-C 結合ができない場合は DLC は非常に低摩擦となることが確認できた。

4. 結論

量子分子動力学法を使用することで DLC の低摩擦機構の検討を行うことに成功した。DLC の摩擦では C-C 結合の影響が大きく、それを防ぐために水素終端することが非常に重要であるということが明らかになった。また、C-C 結合が切れることで摩擦係数が低下することを Atomic Bond Population を調べることで確認できた。さらに、水素原子は C-C 結合の抑制だけでなく切断にも影響していると考えられる。水素終端され C-C 結合ができていない場合には計算でも DLC は低摩擦となることが確認できた。

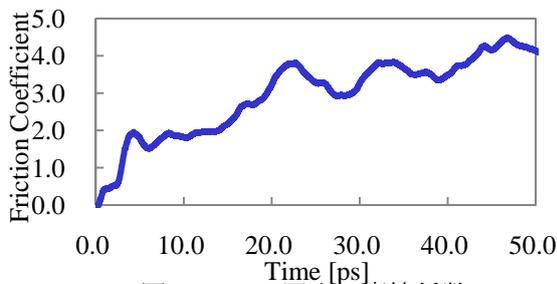


図 2 DLC 同士の摩擦係数

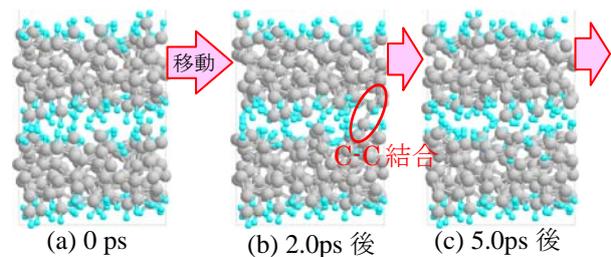


図 3 水素終端 DLC の摩擦時の様子

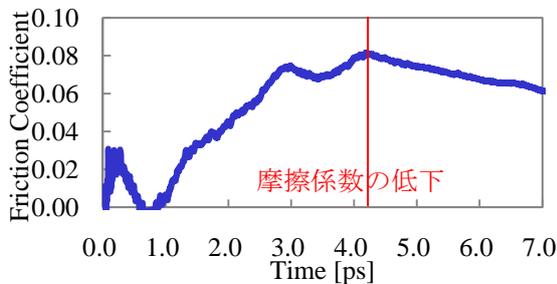


図 4 水素終端 DLC の摩擦係数

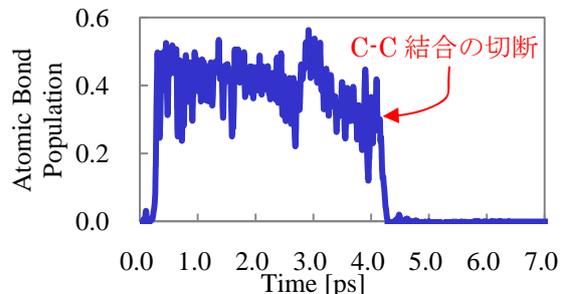


図 5 C-C 結合の Atomic Bond Population

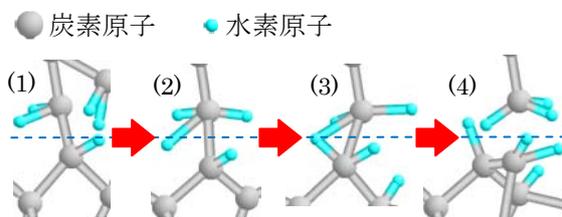


図 6 C-C 結合の切断の様子

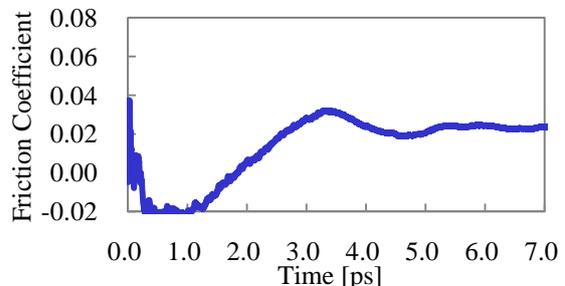


図 7 C-C 結合ができない場合の摩擦係数

5. 参考文献

- [1] J.Fontaine et al., Thin Solid Films, **482**, 99, 2005.
- [2] A.Erdemir et al., J.Phys.D:Appl.Phys, **39**, R311, 2006.