

分子動力学法による $\text{CeO}_2\text{-La}_2\text{O}_3$ ナノ粒子の研磨プロセス機構の解析

○尾澤伸樹、佐藤支保、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)

【緒言】

CeO_2 はフラットパネルディスプレイ及びハードディスクドライブ向けガラスの精密研磨の砥粒として利用されているが、Ce は埋蔵量が少なく非常に高価なため安価かつ豊富な代替砥粒材料の開発が急がれている。そのためには、電子・原子レベルで起こる CeO_2 ナノ粒子の研磨プロセスを詳細に解析し、その優れた研磨特性要因及び研磨メカニズムを明らかにする必要がある。本研究では、分子動力学シミュレーションなどの理論的アプローチにより、 CeO_2 ナノ粒子の粒径や酸素欠陥などが、その粒子の特性に与える影響を調べた。

【方法】ここでは研磨に対して高い活性を示す、La を 40% 添加した CeO_2 ナノ粒子 ($\text{Ce}_{0.6}\text{La}_{0.4}\text{O}_{1.8}$) について解析した。モデルは Ce 原子 675 個、La 原子 450 個、O 原子 2025 個から構成された球で表した (図 1)。また、このモデルには 225 個の酸素欠陥が含まれている。このモデルに対して 1000K の温度における分子動力学シミュレーションを行い酸素の動径分布関数を調べた。また、密度汎関数法を援用して電荷分布の解析を行った。

【結果】シミュレーション結果から算出された酸素原子分布関数の時間平均を図 2 に示した。この図から、時間が経過すると共に球中心付近の酸素原子の分布関数のピーク値が増大しており、これは酸素原子が中心付近にある空孔へ拡散していることを示している。本講演では、様々な割合で La を添加した $\text{Ce}_{1-2x}\text{La}_{2x}\text{O}_{2-x}$ ナノ粒子の研磨に関わる特性について、分子動力学法や密度汎関数法によるシミュレーションを行った結果を報告し、その特性の要因について議論する。

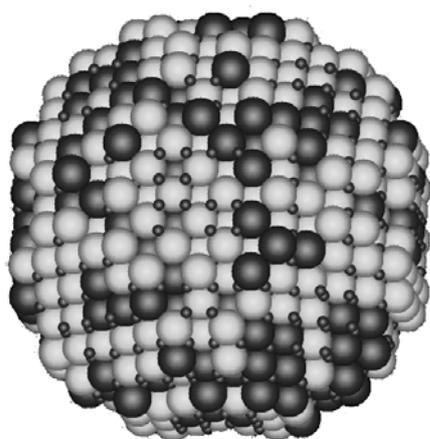


図 1 La を 40% 添加した $\text{Ce}_{0.6}\text{La}_{0.4}\text{O}_{1.8}$ のモデル。大きい黒、白の球がそれぞれ Ce、La 原子、小さい球が O 原子を表している。

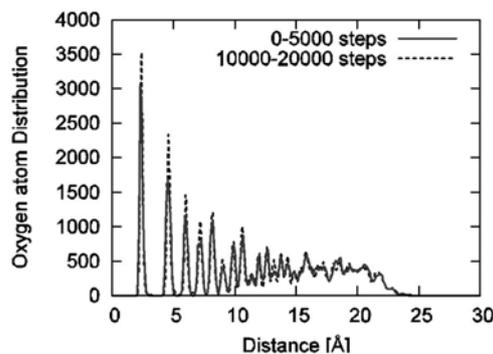


図 2 $\text{Ce}_{0.6}\text{La}_{0.4}\text{O}_{1.8}$ ナノ粒子における酸素原子の分布関数。横軸はナノ粒子の中心からの距離で、0 が球の中心に相当する。実線が 0 から 5,000 ステップまで、破線が 10,000 から 20,000 ステップまでの平均である。