

Tight-binding 量子分子動力学法による窒化ケイ素の水潤滑機構に関する研究

Study of water lubrication mechanism of Si_3N_4 using Tight-Binding Quantum Chemical Molecular Dynamics Method

○千田 遵¹, 鶴田 武¹, 村林 宏紀¹, 王 楊¹, 白 珊丹¹, 西松 毅¹,

樋口 祐次¹, 尾澤 伸樹², 足立 幸志², 久保 百司¹ (1. 東北大金研、2. 東北大院工)

○Jun Chida¹, Takeshi Tsuruda¹, Hiroki Murabayashi¹, Wang Yang¹, Shandan Bai¹,

Takeshi Nishimatsu¹, Yuji Higuchi¹, Nobuki Ozawa², Koshi Adachi²,

Momoji Kubo¹ (1. Institute for Materials Research (IMR), Tohoku Univ.,

2. Graduate School of Engineering, Tohoku Univ.)

E-mail: jun.chida@imr.tohoku.ac.jp

地球環境への負荷が少ない水潤滑において、窒化ケイ素(Si_3N_4)は表面の摩擦特性が変化することで低摩擦プロセスを示すことがわかっている[1]。しかし、実験では摩擦と化学反応が複雑に絡み合った反応を直接的に観測することは難しいため、詳細なメカニズムは明らかになっていない。そこで本研究では、 Si_3N_4 基板の水潤滑における低摩擦発現メカニズムを明らかにするため、Tight-binding 量子分子動力学法プログラム Colors を用いて、 Si_3N_4 基板の水潤滑における摩擦シミュレーションを行った。

Fig. 1 に Si_3N_4 基板の水潤滑モデルを示す。 Si_3N_4 はアモルファス構造を使用した。水潤滑モデルとして水 50 分子をアモルファス Si_3N_4 基板で挟んだ。計算条件は摩擦圧力を 1 GPa とし、上の基板上部を 100 m/s で強制移動させ、下の基板下部を固定した。この条件における摩擦界面の構造変化のスナップショットを Fig. 2 に示す。 Si_3N_4 を水環境化で摩擦することで界面の Si-OH 結合(Fig. 2 (a))の H 原子が脱離し N 原子に付着した(Fig. 2 (b))。その後、Si-O 結合は近くの Si 原子と結合し Si-O-Si 結合(Fig. 2(c))を生成することがわかった。この Si-O-Si 結合の生成は低摩擦に寄与するトライボ膜生成の初期反応と考えられる。結果および考察の詳細は当日発表する。

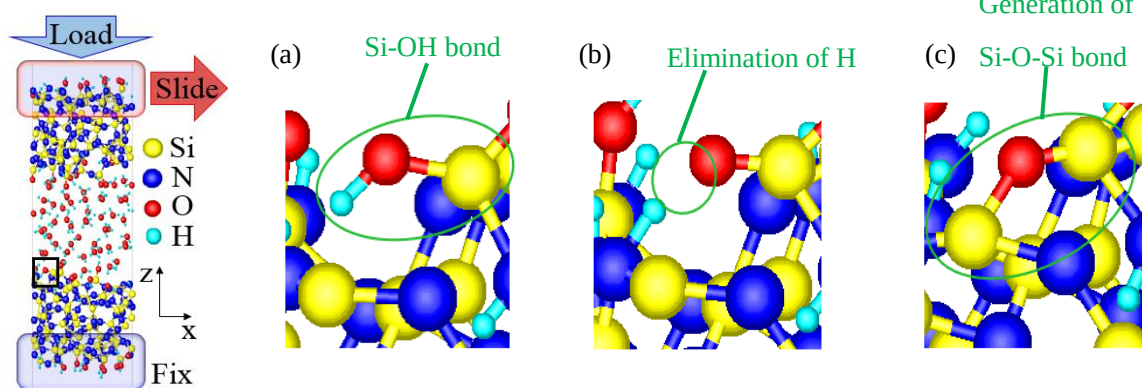


Fig. 1. Friction simulation model of Si_3N_4 films in water environment.

Fig. 2. The reaction process of Si_3N_4 during friction in water environment at (a) 6.500 ps, (b) 6.525 ps, and (c) 6.885 ps. (Enlarged view of the square in Fig. 1.)

【参考文献】 [1] 足立幸志, 日本機械学会東北支部第 41 期総会・講演会講演論文集, (2006) 93-94.