

平成 21 年度戦略的基盤技術高度化支援事業

「高機能性グラファイト材料のメタライジングによる放熱材料への応用に関する研究」

研究開発成果等報告書

平成 22 年 3 月

委託者 中国経済産業局

委託先 財団法人 岡山県産業振興財団

目 次

第1章 研究開発の概要

- 1-1 研究開発の背景・研究目的及び目標
- 1-2 研究体制
(研究組織・管理体制、研究者氏名、協力者)
- 1-3 成果概要
- 1-4 当該プロジェクト連絡窓口

第2章 本論

- 1 ストライクめっきの採用によるめっき密着強度の向上
 - 1-1 銅ストライクめっき浴による密着性の改善検討
 - 1-2 ニッケルストライクめっき浴による密着性の改善検討
 - 1-3 クロムストライクめっき浴による密着性の改善検討
- 2 表面改質法によるめっき密着強度の向上
 - 2-1 オゾンガスによる表面改質におけるめっき密着性の検討
 - 2-2 常温プラズマ照射による表面改質におけるめっき密着性の検討
 - 2-3 ドライアイスブラストによる表面改質における密着性の検討
- 3 めっき膜の密着性のメカニズム解明
 - 3-1 めっき膜との接合界面の解析
 - 3-2 グラファイトとの密着性のシミュレーションによるメカニズムの解明

第3章 全体総括

第1章 研究開発の概要

1-1 研究開発の背景・研究目的及び目標

近年目覚ましい発展を遂げているハイブリッド自動車、電気自動車、新しい照明として脚光を浴びているパワーLED などにおいては発熱に伴う放熱性に課題を抱えている。自動車用インバータは家電、情報家電に比べて巨大である。ハイブリッド車で15～40kW、電気自動車で40～100kW。1台に使う量がエアコンの10倍、100倍という数字になる。高出力のインバータのSi半導体からの発熱はもはや水冷方式の放熱を用いないといけない状況であるが、現在のシステムの重量の軽量化が最重要課題の一つとなっている自動車にとっては採用が困難となっている。またSiC半導体の採用による発熱量の低減化も検討されているが、性能の低下や技術的な問題から実用化は難しい。その放熱については、アルミニウム、銅などが用いられるが、シリコン半導体との接合に線膨張係数の違いによる品質的な問題を抱えている。今後のハイブリッド自動車、電気自動車への普及に伴い要求される高性能化を阻害している。

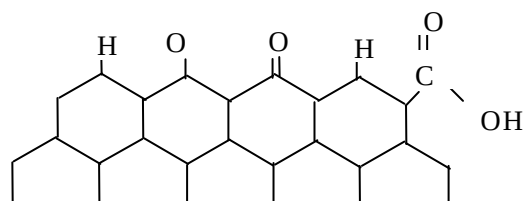
また、パソコンなどCPU(中央演算装置)半導体デバイスは近年、高速化、並列処理の進展からファインピッチのコアの中を大きな電流を流さざるを得ない状況となっており、それとともに発生する熱の放熱に対して、従来のヒートシンク材料ではアルミニウム、銅などが用いられていたが、熱膨張係数が半導体素子よりかなり大きいため、半導体素子や接合層に「ワレ」を生じる等の問題があり、銅/タングステン、銅/モリブデンなどを複合化して熱線膨張係数を下げることが実施されているが、その結果、熱伝導性を下げることになっている。このように実用材料で放熱性能には限界があることから、放熱性能を上げるためにサイズのアップが必要となり、特にモバイル用途においては致命傷となっている。

一方、グラファイトは実用材料中で一番高い放熱性、軽量性を有した材料であり、線膨張係数もシリコンウェハに近く、今後の放熱材料として注目を浴びている材料である。またその他に窒化アルミニウムなどのセラミック系材料があるが、放熱性、コストの面ではグラファイト材料が最良である。

材料	放熱性 (W/m ² ・K)	密度 (Mg/m ³)
グラファイト	600	2.7
アルミニウム	234	2.7
銅	398	8.96
Cu/W	190	16.4
Cu/Mo	255	9.3
窒化アルミニウム	96	2.52

しかしながら、グラファイトを採用するためには、シリコンなど他の材料との接合が必須であるが、グラファイトのメタライジングはドライ工法、めっき工法など様々な工法で実施されてきたが、放熱材料に要求される高温環境下においては「剥がれ」、「ふくれ」が発生しており、信頼性がないのが実態である。またメタライジングのカバーリングが完全ではないためにグラファイト材料の発塵の問題が指摘されている。信頼できるグラファイトのメタライジングは今まで可能となっていない。

グラファイトの表面構造は基本的に C-H 構造であり、最表層に C-H の他に-O や-OH や COO-が存在している。(参考文献：Characterization of Powder Surfaces, G.D. Parfitt and K.S.W.Sing 著)



＜グラファイトの表面構造図＞

信頼性の高いメタライジングを可能にするためには、炭素との金属結合をさせることが最良のプロセスであるが、上記構造図からグラファイト表面に直接金属結合をすることは、困難であり高い密着性を得ることは困難な材料である。

本研究においては、還元力の非常に強いプロセスを採用し、グラファイト表面を親水性化させてめっき皮膜の密着性改善ができると考えられる。安価で大量生産が容易なめっき方法を用いて高温環境下での密着性を確保する工法の研究開発を目的とする。

具体的には以下の手法による開発検討を行う。

＜表1＞ サブテーマ毎の開発技術、開発目標、担当研究団体

	開発技術	開発目標	主担当
1. ストライクめっきの採用によるめっき密着強度の向上	銅、ニッケル及びクロムのストライクめっきによる密着性の改善検討を行う。一般的には、[脱脂—酸洗い—ニッケルめっき—乾燥]のめっき工程であるが、ニッケルめっき前にストライクめっき浴を導入して密着性の改善を図る。	前処理 還元雰囲気中 850℃ 15 分処理 ・高温試験(850℃10 分)後、基盤目テープ剥離試験(JIS H8504)において剥離なきこと ・高温試験(850℃10 分)後、引張荷重(JIS H8504) 8Kg/cm ² 以上のこと	オーエム産業(株)
2. 表面改質法によるめっき密着強度の向上	オゾンガス、常温プラズマ照射、ドライアイスブラストによるグラファイト表面の活性化による密着性の改善検討を行う。	* オゾンガスの濃度や処理時間及び処理方式などによって、グラファイト材料表面状態を把握して、めっき密着性との相関性を検討する。 * 常温プラズマ照射法によりめっきの密着性、カバリング性能を向上させる * ドライアイスブラストにおける検討については、噴射方式、ドライアイス粒状・サイズ・流量及び加エスピードなどの処理条件を実験しグラファイトへのめっき密着性の改善を狙う	オーエム産業(株)
3. めっき膜の密着性のメカニズム解明	3-1 めっき膜との接合界面の解析	上記 1 項及び 2 項の密着性のメカニズムを、表面粗さ測定、IR測定及びXPS測定などにより解明する。	岡山県工業技術センター
	3-2 グラファイトとの密着性のシミュレーションによるメカニズムの解明	第一原理計算法を用いてグラファイトとめっき膜との密着性についてのシミュレーションを行い、密着性のメカニズムの解明を行う。	岡山県立大学
4. プロジェクトの管理・運営		研究を円滑に推進するため、一連の研究全体について参加機関相互の連携を図り、研究の進捗管理、会議の開催、報告書作成などを行い、研究開発を統括する。	財団法人岡山県産業振興財団

実施計画日程

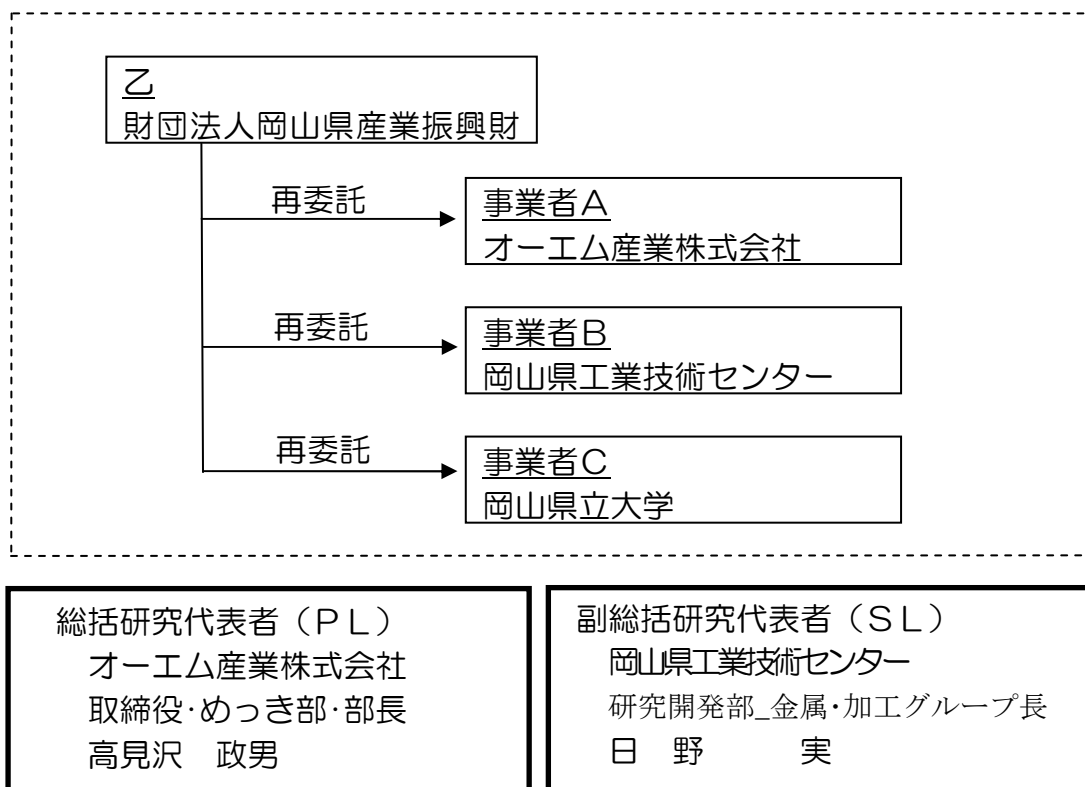
実施内容	H21 4月	5月	6月	7月	8月	9月	10月	11月	12月	H22 1月	2月	3月
1. ストライクめっきの採用によるめっき密着強度の向上												
1-1 銅ストライクめっき浴による密着性の改善検討							↔					
1-2 ニッケルストライクめっき浴による密着性の改善検討								↔				
1-3 クロムストライクめっき浴による密着性の改善検討									↔			
2. 表面改質法によるめっき密着強度の向上												
2-1 オゾンガスによる表面改質におけるめっき密着性の検討									↔			
2-2 常温プラズマ照射による表面改質におけるめっき密着性の検討										↔		
2-3 ドライアイスブラストによる表面改質における密着性の検討											↔	
3. めっき膜の密着性のメカニズム解明												
3-1 めっき膜との接合界面の解析									↔			
3-2 グラファイトとの密着性のシミュレーションによるメカニズムの解明							↔					

4. プロジェクトの管理・運営											
・ 推進委員会の開催						↔			↔		
・ 報告書の作成									↔		

1-2 研究体制

(1) 研究組織及び管理体制

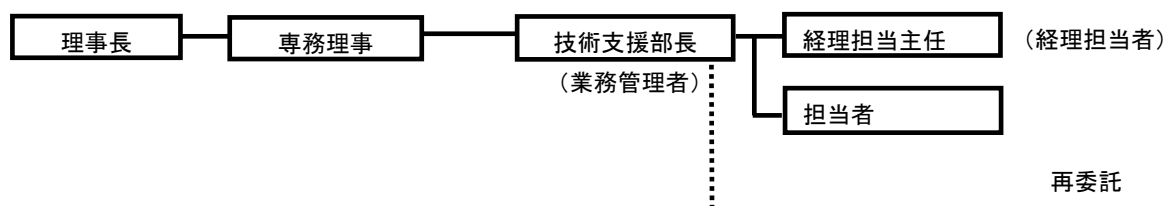
1) 研究組織(全体)

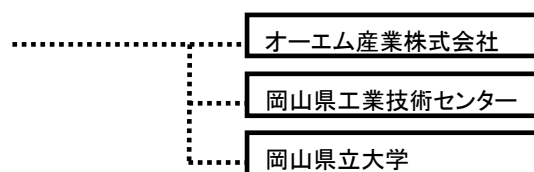


2) 管理体制

①事業管理者

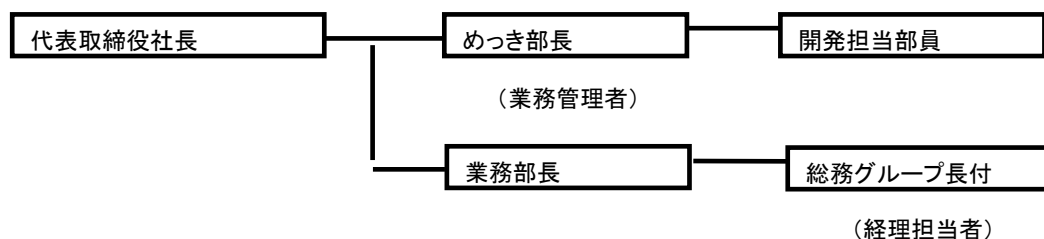
【 財団法人 岡山県産業振興財団 】



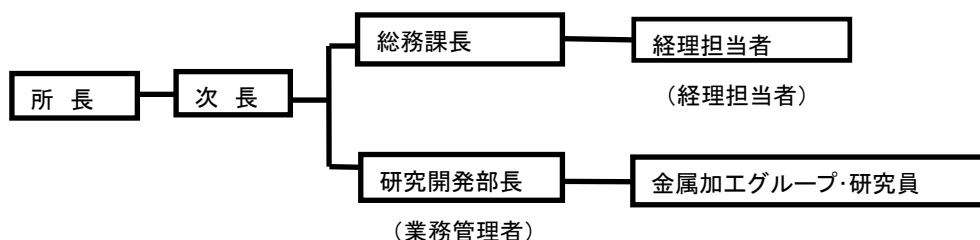


②（再委託先）

【オーエム産業株式会社】



【岡山県工業技術センター】



【岡山県立大学】



(2) 管理員及び研究員

【事業管理者】財団法人岡山県産業振興財団

①管理員

氏 名	所 属 ・ 役 職	実施内容 (番号)
三島 佳洋	財団法人岡山県産業振興財団・技術支援部・部長	4
深井 康光	財団法人岡山県産業振興財団・技術支援部・次長	4
横田 尚之	財団法人岡山県産業振興財団・技術支援部 ・研究開発支援課長	4
宮内 隼	財団法人岡山県産業振興財団・技術支援部・主事	4
綱澤 知則	財団法人岡山県産業振興財団・技術支援部・主事	4
猪口 陽平	財団法人岡山県産業振興財団・技術支援部・主事	4

【再委託先】

オーエム産業株式会社

氏 名	所 属 ・ 役 職	実施内容 (番号)
高見沢 政男	オーエム産業株式会社・取締役・めっき部・部長	1 2 3
仲 俊秀	オーエム産業株式会社・めっき部・開発グループ・主任	1 2 3
福田 千紗	オーエム産業株式会社・めっき部・開発グループ	1 2
滝田 歩	オーエム産業株式会社・めっき部・開発グループ	1 2

岡山県工業技術センター

氏 名	所 属 ・ 役 職	実施内容 (番号)
日野 実	岡山県工業技術センター・研究開発部・金属加工グループ・グループ長	3-1
村岡 賢	岡山県工業技術センター・研究開発部・金属加工グループ・研究員	3-1
村上 浩二	岡山県工業技術センター・研究開発部・金属加工グループ・研究員	3-1
余田 裕之	岡山県工業技術センター・研究開発部・金属加工グループ・技師	3-1
中西 亮太	岡山県工業技術センター・研究開発部・金属加工グループ・技師	3-1

岡山県立大学

氏 名	所 属 ・ 役 職	実施内容 (番号)
末岡 浩治	岡山県立大学・情報工学部・情報システム工学科・エネルギーシステム工学・准教授	3-2

(3) 経理担当者及び業務管理者の所属、氏名

(事業管理者)

財団法人岡山県産業振興財団

(経理担当者) 技術支援部・主事

宮内 隼

(業務管理者) 技術支援部・部長

三島 佳洋

(再委託先)

オーエム産業株式会社

(経理担当者) 業務部・総務グループ・グループ長付

川中 良太

(業務管理者) 取締役・めっき部・部長

高見沢 政男

岡山県工業技術センター

(経理担当者) 総務課・主任

三宅 正生

(業務管理者) 研究開発部 部長

光石 一太

岡山県立大学

(経理担当者) 事務局・総務課・経理班

富山 夕香

(業務管理者) 情報工学部・情報システム工学科・エネルギーシステム工学・准教授

末岡 浩治

第2章 本論

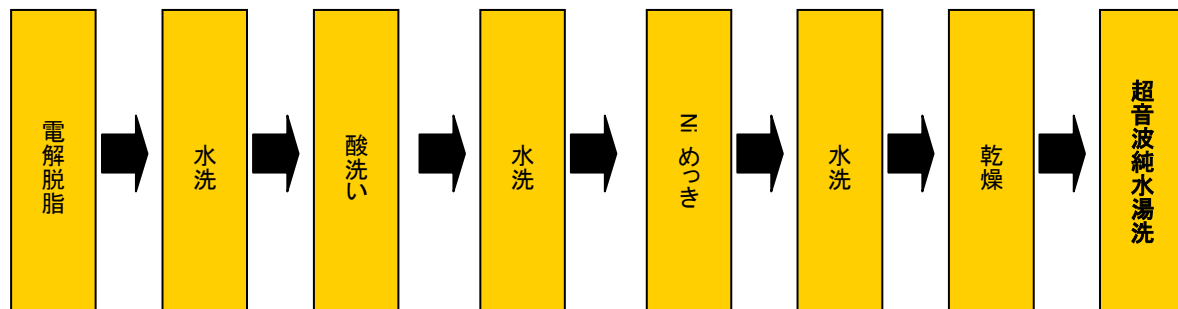
1. ストライクめっきの採用によるめっき密着強度の向上(オーエム産業)

銅、ニッケル及びクロムのストライクめっきによる密着性の改善検討を行う。一般的には、[脱脂—酸洗い—ニッケルめっき—乾燥]のめっき工程であるが、ニッケルめっき前にストライクめっき浴を導入して密着性の改善を図る。

前処理 還元雰囲気中 850℃ 15 分処理

・高温試験(850℃10 分)後、基盤目テープ剥離試験(JIS H8504)において剥離なきこと

従来の工法

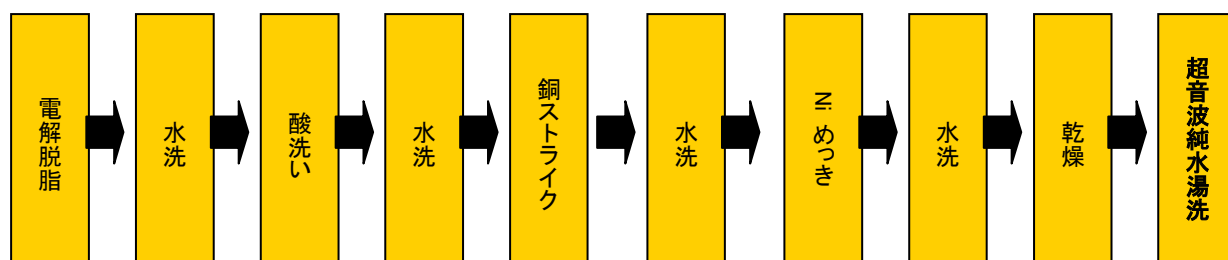


□□	□ □	Ni□□ (□□□)
10□		
200□		

Niめっき□□:10□m

グラファイトとニッケルめっきとの密着性は全く得られなかった。

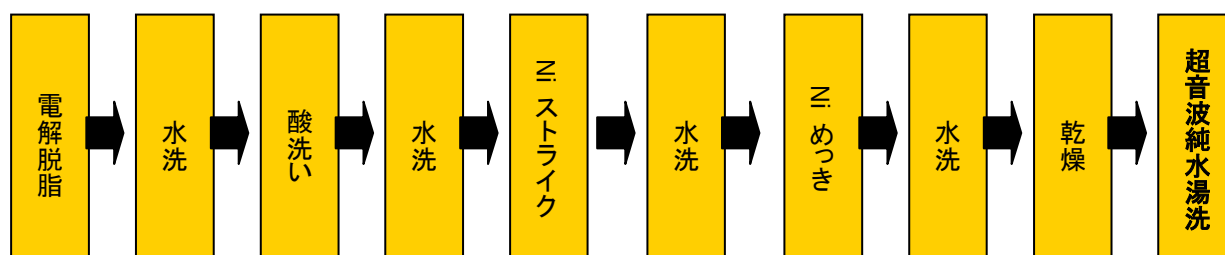
1-1 銅ストライクめっき浴による密着性の改善検討



	厚み 0.5 μm	厚み 1.5 μm	厚み 2.5 μm
銅ストライク			
評価	NG	NG	NG

銅ストライクめっき工程による密着性の改善は見られなかった。

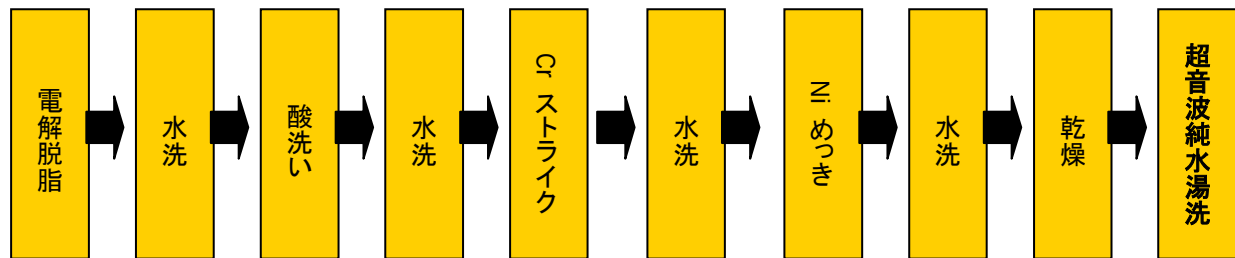
1-2 ニッケルストライクめっき浴による密着性の改善検討



	厚み 0.5 μm	厚み 1.5 μm	厚み 2.5 μm
ゼストライク			
評価	NG	NG	NG

ニッケルストライクめっき工程による密着性の改善は厚み 0.5 μm において良化する傾向が確認されたが、NGであった。

1-3 クロムめっきストライクめっき浴による密着性の改善検討



	クロムめっきストライク	
	0.5 μm	1.0 μm
サージエント		
6価クロムめっき		

□□□めっき膜 □10 μm

クロムめっきストライク 1 μm において密着性が改善される傾向が見られ、耐熱試験後においても剥離は発生しなかった。特に 6 価クロムめっきにおいて顕著な傾向として現れた。しかしながらめっき膜の変色など製品実使用上において問題となる部分も見られた。

ストライクめっきを採用することでクロムめっきストライクで最良の結果が得られたが、電子部品としての製品使用上に十分な結果は得られなかった。

2. 表面改質法によるめっき密着強度の向上(オーエム産業)

オゾンガス、常温プラズマ照射、ドライアイスブラストによるグラファイト表面の活性化による密着性の改善検討を行う。

- * オゾンガスの濃度や処理時間及び処理方式などによって、グラファイト材料表面状態を把握して、めっき密着性との相関性を検討する。
- * 常温プラズマ照射法によりめっきの密着性、カバリング性能を向上させる

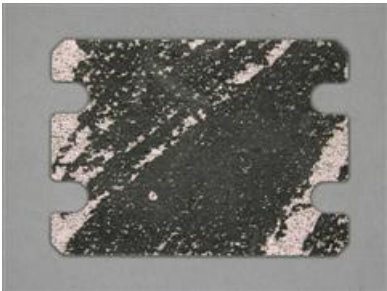
- * ドライアイスブラストにおける検討については、噴射方式、ドライアイス粒状・サイズ・流量及び加工スピードなどの処理条件を実験しグラファイトへのめっき密着性の改善を狙う

2-1 オゾンガスによる表面改質におけるめっき密着性の検討

オゾンガスは強い酸化力を持ち、常温では不安定で、自然に分解して酸素に戻る性質がある。この強い酸化力を利用して殺菌、脱臭、脱色、洗浄などが行われている。本研究においてはグラファイト材料の表面を酸化させてグラファイト材料表面に親水性を付与しめっきの密着性、カバリング性能を向上させる事を目的とする。オゾンガスの濃度や処理時間及び処理方式などによって、グラファイト材料表面状態を把握して、めっき密着性との相関性を検討する。

基本的な処理工程は脱脂処理－オゾンガス処理－活性化－Ni めっきである。オゾンガス処理条件は以下の項目及び範囲より、オゾンガスにおけるグラファイト表面改質の検討を行う。

耐熱試験後の密着性試験結果

ブランク	10min	30min
		
NG	NG	OK
60min	120min	180min
		
OK	OK?	OK?

オゾンガスにより表面改質を行うことにより著しく密着性が改善された。また耐熱試験後の外観にも変化は無く、製品実使用上において全く問題のないレベルであった。ニッケルと炭素との結合に作用していると考えられる。

2-2 常温プラズマ照射による表面改質におけるめっき密着性の検討

プラズマは気体分子が励起され、電離(分子がイオンと電子に分離すること)状態が発生し、正電気を帯びたイオンと、負電気を帯びた電子の集団が形成される状態をいい、高いエネルギーを持ち、反応性が非常に高い状態にあるため、物質の表面と反応を起こしやすく、表面の親水性を付与する事が出来る特徴があり、常温プラズマ照射法によりめっきの密着性、カバリング性能を向上させる事を目的とする。



常温プラズマ照射装置は以下の装置を使用した。

使用機器 薄膜製造装置(神港精機/AMF-1675SB型)

実施場所 岡山県工業技術センター

外観写真を左に示す。

耐熱試験後の密着性試験結果

ブランク	プラズマ処理
	
NG	NG

プラズマ照射を行うことにより密着性の改善は全く見られなかった。グラファイト表面への親水性付与は出来たがニッケルと炭素との結合には作用しなかったと考えられる。

2-3 ドライアイスブラストによる表面改質における密着性の検討

ドライアイスブラストはブラストガンのノズルから発射される細かい粒状のドライアイスの吹き付ける圧力により付着したゴミ等の除去とドライアイスの気化作用により、グラファイト表面を物理的に改質を行い、めっきの密着性、カバリング性能を向上させる事を目的とする。

グラファイト素材のめっき前処理には、各条件で噴射されたドライアイスはグラファイト表面にあたるとサーマルショックによるマイクロクラックを発生させる。同時に界面に到達したドライアイス粒子が昇華する際の膨張エネルギーを利用することができる。そのため、材料表面浄化だけではなく、質の改善にも寄与するのではないかと考えられる。

ドライアイスブラストにおける検討については、噴射方式、ドライアイス粒状・サイズ・流量及び加エスピードなどの処理条件を実験しグラファイトへのめっき密着性の改善を狙う。



ドライアイスブラストは以下の装置を用いた。

使用機器

① ドライアイスブラスト装置(日本液炭／ASCO JET-1501)

② ドライアイスブラスト装置(日本液炭／ECOPULIZIA2)

実施場所 日本液炭株式会社

耐熱試験後の密着性試験結果

ブランク	条件①	条件②
		
NG	NG	NG

ドライアイスブラスト処理を行うことで密着性の改善が得られなかった。

3. めっき膜の密着性のメカニズム解明

本項においては 1.2 項で検討して最も高い密着性が得られたオゾンガス処理を行ったサンプルを用いて密着性のメカニズムの検証を行った。

3-1 めっき膜との接合界面の解析(岡山県工業技術センター)

上記 1 項及び 2 項の密着性のメカニズムを、表面粗さ測定、IR測定及びXPS測定などにより解明する。

3-1-1 はじめに

本章では、グラファイト基板(以下「基板」と表記)上のニッケルめっき皮膜(以下「皮膜」と表記)について、その密着機構を解明するため、下記調査を行った結果を述べる。

- 1) 熱陰極電界放射型電子線マイクロアナライザ(Field Emission Electron Probe MicroAnalysis 以下「FE-EPMA」と表記)による皮膜剥離面の表面形態(粗さ)ならびに元素分析
- 2) 冷陰極電界放射型走査電子顕微鏡(Field Emission Scanning Electron Microscopy 以下「FE-SEM」と表記)による皮膜-基板界面の観察
- 3) 透過電子顕微鏡(Transmission Electron Microscopy 以下「TEM」と表記)による皮膜-基板界面の観察
- 4) X 線光電子分光分析(X-ray Photoelectron Spectroscopy 以下「XPS」と表記)による基板表面の化学状態分析

5) 赤外分析(Infrared Spectroscopy 以下「IR」と表記)による基板表面の化学状態分析

3-1-2 実験方法

FE-EPMA による剥離面の形態観察ならびに元素分析

基板には、オゾン処理を施したものをを用い、これに厚さ $5\mu\text{m}$ のニッケルめっきを施した。これらの一部については、 850°C の熱処理を行い、カッターナイフを用いて基板に至るまで皮膜に切込を導入した。切込部から皮膜を強制的に剥離し、剥離面の形態(粗さ)を FE-EPMA(日本電子製 JXA-8500FA)で観察するとともに、波長分散型分光器による元素分析を行った。

FE-SEM による皮膜-基板界面の観察

前項の試料(剥離前)について、アルゴンイオン線による加工(日本電子製 クロスセクションポリッシャ SM-09020)を行い、断面観察試料を作製した。被加工物の厚さが $500\mu\text{m}$ となるまで片面を研磨紙で研磨し、#4000 までの仕上げを行った。アルゴンイオン線の加速電圧を 5 kV 、皮膜側をアルゴンイオン線の下流側として設置し、被加工物の端と遮蔽板の端との距離を $100\mu\text{m}$ とした状態で、15 時間のアルゴンイオン線加工を行った。アルゴンイオン線加工領域が基板側から皮膜側まで到達したことを確認し、冷陰極電界放射型走査電子顕微鏡の反射電子像(組成像モード)を用いて、皮膜-基板界面の形態観察を行った。

TEM による皮膜-基板界面の観察

アルゴンイオン線加工によって得られた FE-SEM 観察面から、ガリウム集束イオンビーム加工観察装置(日立ハイテクノロジーズ製 FB2100, Focused Ion Beam 以下 FIB)を用いて TEM 観察用薄片を作製した。皮膜-基板界面近傍にタングステンの保護膜を堆積させた後、ガリウムイオン加速電圧 40 kV にて薄片の周辺体積を除去した。薄片部が片持ち梁となった状態で、薄片引上用微小プローブと薄片部をタングステン堆積で接合した後、薄片支持部を切断して薄片部を引き上げた。TEM 観察に用いる 2 細隙グリッドの約 $1/3$ をデザインナイフで切断し、中央梁部先端を FIB で楔形に成形した後、上記の薄片をタングステン堆積で楔先端に接合した。薄片の両側から交互に不要体積を除去し、厚さ約 100 nm まで薄片化した後、ガリウムイオン線の加速電圧を 10 kV まで低下させ、最終薄片化加工を行った。最後に、アルゴンイオンミリング(Gatan 製 691 Precision Ion Polishing System)を用いて、FIB 加工の際に薄片表面に付着した汚染の除去を行った。この時、アルゴンイオン線の加速電圧を 2.5 kV として、薄片の両面に 10 分間アルゴンイオン線を照射した。

上記の前処理によって得られた薄片について、TEM 観察を行った。電子線の加速電圧を 200 kV として、基板-皮膜界面の形態を明視野像で観察するとともに、制限視野回折図形によってグラフアイトの結晶方位分布を評価した。

3-1-3. 実験結果

3-1-3-1 FE-EPMA による剥離面の形態観察ならびに元素分析

図 1.2 は、無加熱材の剥離面(皮膜側)について、FE-EPMA による形態観察を行った

結果である。皮膜側には多数の暗部が認められ、これらは基板のグラファイトによる領域と考えられる。図 3 は、図 2 の面分析結果である。剥離面皮膜側では、全面で炭素が検出されたことから、皮膜と基板との間には十分な密着強度が得られていると考えられる。

図 4,5 は、図 1,2 に対応する基板側の形態観察結果である。反射電子像において明領域が全面に認められ、図 6 からこの領域はニッケルであることから、皮膜と基板との間で十分な密着強度が得られたと考えられる。

3-1-3-2 FE-SEM による皮膜-基板界面の観察

図 7 は、無加熱材についてアルゴンイオン線加工を行い、皮膜-基板界面を FE-SEM によって観察した結果である。基板表面に存在する多数の空隙にはニッケルが浸透しており、これが 3.1 で見られた様な密着強度の向上に寄与すると考えられる。

図 8,9 は、加熱材の皮膜-基板界面観察結果である。図 8 より、一部では皮膜が基板から剥離した様子が観察されたが、概ね図 9 の様に密着していることが確認された。

3-1-3-3 TEM による皮膜-基板界面の観察

図 10 は、無加熱材について FIB による薄片作製を行い、皮膜-基板界面を TEM によって観察した結果である。皮膜と基板との間には、顕著な空隙が観察されず、良好な密着が得られたと考えられる。また、このことは、皮膜と基板との密着が、図 7,8,9 で見られた浸透ニッケルによるアンカー効果のみによるのではなく、グラファイトとニッケルとの間に有意な結合が得られたことを示唆している。

図 11 は、図 10 の制限視野回折図形である。グラファイトならびにニッケルの回折点が Debye 環に近い形状であることから、グラファイトはほぼランダムに配向しており、ニッケルについても基板界面近傍ではグラファイトの影響を受け、ランダムに近い方位を示すと考えられる。

3-1-4 まとめ

グラファイト基板とニッケルめっき皮膜との密着性に関して、剥離面の形態観察・元素分析、皮膜-基板界面の電子顕微鏡観察、ならびにオゾン処理に伴う基板表面化学状態変化の分析を行った結果について述べた。基板表面に存在する空隙内部にニッケルが析出し、これが皮膜-基板間でアンカー効果を示すと考えられる一方、グラファイトとニッケルとの間には空隙が存在しないことから、両者の間には有意な化学的結合が得られたと考えられる。また、オゾン処理による基板表面の化学状態変化については、研究時間の制約があり実施できなかった。

3-2 グラファイトとの密着性のシミュレーションによるメカニズムの解明(岡山県立大学)

第一原理計算法を用いてグラファイトとめっき膜との密着性についてのシミュレーションを行い、密着性のメカニズムの解明を行う。

本節では、第一原理計算法を用いてグラファイトとめっき膜との密着性についてのシミュレーションを行うことで、密着性のメカニズムを解明することを目的とした。とくに、限ら

れた研究期間内に成果を挙げるため、「清浄なグラファイト表面と各種めっき金属原子の結合エネルギー」を計算することで、清浄グラファイト表面と金属めっき膜の密着性を推定した。

3-2-1 導入した計算機および使用した計算ソフトウェアについて

本委託研究費を用い、図 1 に示す HPC システムズ社製並列計算機 Box Cluster XNW-SIP を導入した。本計算機の仕様は、(1)CPU: Xeon E5540, 4node, 8CPU, (2)メモリ: 計 144GB, (3)node 間通信: Infiniband である。



この並列計算機に、アクセルリス社製第一原理計算ソフトウェア CASTEP¹⁾をインストールした。本ソフトウェアは岡山県立大学情報工学部・末岡研究室がすでに所有していたものである。インストール後に様々な性能チェックを行った結果、計算機の正常動作を 2009 年 12 月 8 日に完了した。

3-2-4 まとめと課題

本研究では清浄なグラファイト表面と金属めっき原子の結合エネルギーを第一原理計算により求めることで、密着性のメカニズムを解明することを目的とした。今回の計算から以下の結果を得た。

- (1) 清浄なグラファイト表面において、全ての金属原子は安定に存在することがわかった。また、その安定性は(10 $\bar{1}$ 0)表面の方が(0001)表面よりも高かった。さらに、Mo, W, Cr 原子といった第6族元素は結合エネルギー E が高いこともわかった。
- (2) グラファイト(10 $\bar{1}$ 0)表面における結合エネルギー E は元素の周期によらず、第 4 から 7 族の間でピークを示した。

なお、Fe 基板における Ni めっきは非常に密着性が高く、Ni 原子の Fe(100)面における結合エネルギーは約 11eV である。それゆえ、グラファイト表面において Mo, W, Cr めっきは非常に安定であること、Ni めっきも実用に耐えるであろうと推定した。

今後の課題として、以下が挙げられる。

- (1) 不純物が存在するグラファイト表面における金属原子の結合エネルギー計算
- (2) 金属めっき膜とグラファイトの引き剥がし計算機シミュレーション

第3章 全体総括

本研究において以下の成果が得られた。

1. ストライクめっきを行うことでグラファイトとの密着性が向上する事がわかった。
2. グラファイトを表面改質することで高い密着性を有する事が可能となった。
3. 基板表面に存在する空隙内部にニッケルが析出し、これが皮膜-基板間でアンカー効果を示すと考えられる
4. グラファイトとニッケルとの間には間隙が存在しないことから、両者の間には有意な化学的結合が得られたと考えられる
5. シミュレーションによりグラファイト表面において Mo, W, Cr めっきは非常に安定であることがわかった

時間制約の中で当初の目標であるグラファイトのメタライジング工法について検討する事が出来た。その中で要求事項である密着性の改善も達成できた。今後は以下の件について検討を行い、本研究プロセスの信頼性の確保を実施していく。

1. 条件による密着性の数値化
2. プロセスの信頼性の評価
3. 密着性の化学的なメカニズムの検証
4. 不純物が存在するグラファイト表面における金属原子の結合エネルギー計算
5. 金属めっき膜とグラファイトの引き剥がし計算機シミュレーション

以上