

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2022年4月21日(21.04.2022)



(10) 国際公開番号

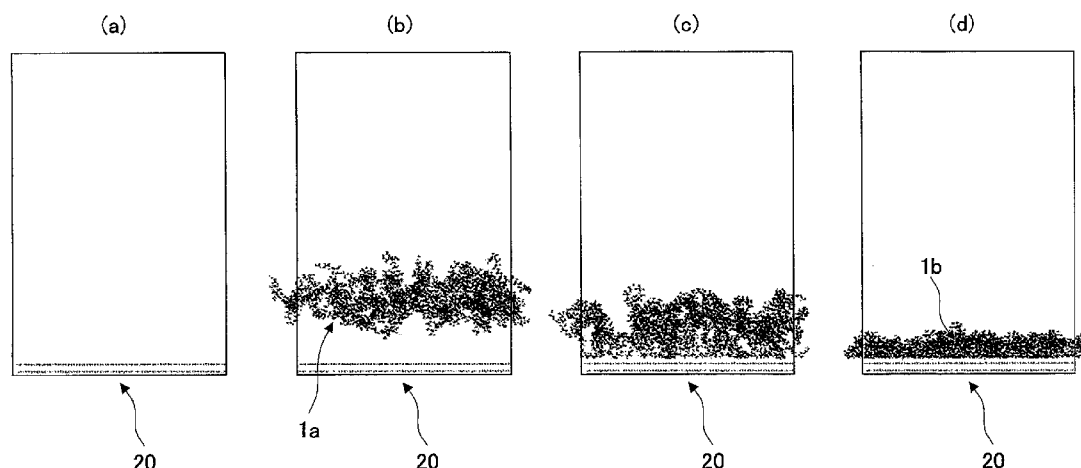
WO 2022/080402 A1

- (51) 国際特許分類:
G01N 19/00 (2006.01) *G01M 99/00* (2011.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2021/037849
- (22) 国際出願日: 2021年10月13日(13.10.2021)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2020-174602 2020年10月16日(16.10.2020) JP
- (71) 出願人: 昭和電工株式会社 (SHOWA DENKO K.K.) [JP/JP]; 〒1058518 東京都港区芝大門 1 丁目 1 3 番 9 号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 落合 宏平(OCHIAI, Kohei); 〒1058518 東京都港区芝大門 1 丁目 1 3 番 9 号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 西澤 尚平(NISHIZAWA, Shohei); 〒1058518 東京都港区芝大門 1 丁目 1 3 番 9 号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 奥野 好成(OKUNO, Yoshishige); 〒1058518 東京都港区芝大門 1 丁目 1 3 番 9 号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 加藤 剛(KATO, Tsuyoshi); 〒1058518 東京都港区芝大門 1 丁目 1 3 番 9 号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP).
- (74) 代理人: 伊東 忠重, 外(ITO, Tadashige et al.); 〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目 1 番 1 号 丸の内 M Y P L A Z A (明治安田生命ビル) 1 6 階 Tokyo (JP).

(54) Title: METHOD FOR EVALUATING PERFORMANCE OF LUBRICATING LAYER

(54) 発明の名称: 潤滑層の性能評価方法

[図2]



(57) Abstract: A method for evaluating the performance of a lubricating layer according to the present invention comprises: a step for preparing a lubricant molecule model and a protective layer model by using a quantum chemical calculation; a step for performing a molecular dynamics calculation of an initial lubricating layer model constructed from the lubricant molecule model and the protective layer model; and a step for calculating an index of the adsorption degree of a lubricant molecule to a protective layer, from the results of the molecular dynamics calculation.

[続葉有]

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告(条約第21条(3))

(57) 要約: 本発明の潤滑層の性能評価方法は、潤滑剤分子モデルと保護層モデルとを、量子化学計算を用いて準備する工程と、前記潤滑剤分子モデルと前記保護層モデルから構築した潤滑層初期モデルの分子動力学計算を実施する工程と、前記分子動力学計算の結果から潤滑剤分子の保護層への吸着度合いの指標を算出する工程と、を含む。

明 細 書

発明の名称：潤滑層の性能評価方法

技術分野

[0001] 本発明は、潤滑層の性能評価方法に関する。

背景技術

[0002] ハードディスクドライブ等の磁気記録再生装置の記録密度を向上させるために、磁気ヘッドの浮上量を小さくすることが要求されている。このため、磁気記録媒体の保護層上に最表面層として形成されている潤滑層の厚みをより薄くすることが求められている。現在、その厚みは10 Å以下という単分子膜レベルの薄さに達している。

[0003] このような単分子膜レベルの厚みに達した磁気記録媒体の潤滑層は、潤滑層を構成する潤滑剤分子の微細な構造の違いによって、その性能が左右される。そのため、分子動力学計算や量子力学計算を利用した潤滑剤分子の微細な構造に着目したミクロスケールのシミュレーションが実施され、潤滑剤分子の提案がなされている（例えば、特許文献1及び2参照）。

先行技術文献

特許文献

[0004] 特許文献1：日本国特開2010-168512号公報

特許文献2：国際公開第2018/159232号

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0005] 潤滑層の性能は、潤滑や浮上に代表されるマクロな現象から定義される。実験ではこれらの現象を観測し、その観測結果から潤滑性能及び浮上性能等の性能を評価する。そのため、潤滑層を取り扱うシミュレーションでは、このようなマクロな現象を予測して数値化することが必要とされる。

[0006] 例えば、特許文献1では、潤滑剤分子1つが保護膜表面に吸着している状態のシミュレーションを実施しており、その潤滑剤分子の極性基の向きから

潤滑層の表面エネルギーの低減を示唆している。

[0007] 一方で、特許文献2では、周期境界条件下で複数の分子を取り扱う、磁気記録媒体の最表面に潤滑層を形成した場合を想定したシミュレーションを実施している。このシミュレーションからは、潤滑層の膜厚と被覆率をシミュレートしている。

[0008] しかしながら、特許文献1及び2のいずれにも、現在の潤滑層分子の開発において重要な特性とされている、潤滑性能及び浮上性能についての記載や示唆はない。

[0009] 本発明は、上記事情を鑑みてなされたものであり、潤滑層の性能を評価できる潤滑層の性能評価方法を提供する。

課題を解決するための手段

[0010] 本発明者は、上記課題を解決するために鋭意研究を重ねた。その結果、以下に記載するシミュレーションを実施することで、潤滑層の性能を予測できることを見出した。

[0011] [1] 潤滑剤分子モデルと保護層モデルとを、量子化学計算を用いて準備する工程と、

前記潤滑剤分子モデルと前記保護層モデルから構築した潤滑層初期モデルの分子動力学計算を実施する工程と、

前記分子動力学計算の結果から潤滑剤分子の保護層への吸着度合いの指標を算出する工程と、

を含む潤滑層の性能評価方法。

[2] 潤滑剤分子モデルと保護層モデルとを、量子化学計算を用いて準備する工程と、

前記潤滑剤分子モデルと前記保護層モデルから構築した潤滑層初期モデルの分子動力学計算を実施する工程と、

前記分子動力学計算の結果から潤滑剤分子の保護層上での潤滑度合いの指標を算出する工程と、

を含む潤滑層の性能評価方法。

〔３〕 〔１〕で算出された前記吸着度合いの指標と、〔２〕で算出された前記潤滑度合いの指標との２つの指標に基づいて、潤滑層の性能を評価する潤滑層の性能評価方法。

〔４〕 前記保護層が、磁気記録媒体表面に形成された保護層であり、前記潤滑剤分子が、磁気記録媒体用の潤滑剤分子である、〔１〕～〔３〕の何れか一つの潤滑層の性能評価方法。

発明の効果

[0012] 本発明の上記態様によれば、分子動力学計算により潤滑層モデルのシミュレーションを行い、算出された結果から潤滑剤分子の吸着性又は潤滑性の優劣を評価することで、潤滑層の性能を評価できる。これによって、浮上性能又は潤滑性能について、開発現場での目標を満たす性能を持つ潤滑層を形成できる潤滑剤分子を実験をせずに選別することが可能となる。

図面の簡単な説明

[0013] [図1]保護層の単位構造を示す図である。

[図2]塗布シミュレーションの流れを示す図である。図２（a）は、保護層のみの図であり、図２（b）は、保護層の上に潤滑剤分子をランダムで配置した図であり、図２（c）は、塗布シミュレーションの途中経過の図であり、図２（d）は、塗布シミュレーションが終了し、潤滑層初期モデルが完成した図である。

[図3]シミュレーション結果のN a b sと自己拡散係数との両方を示す散布図である。

[図4]シミュレーション結果と実験結果との相関を示す散布図であり、N a b sと浮上性試験結果との比較を示す図である。

[図5]シミュレーション結果と実験結果との相関を示す散布図であり、自己拡散係数と潤滑性試験結果との比較を示す図である。

発明を実施するための形態

[0014] 以下、本発明の実施の形態について説明する。以下の実施形態では、分子動力学計算により潤滑層モデルのシミュレーションを行う方法と、この手法

により算出された結果を利用して潤滑剤分子の優劣を判定する方法とを開示する。なお、本実施形態は以下の記述によって限定されるものではなく、本発明の要旨を逸脱しない範囲において適宜変更可能である。また、本明細書において数値範囲を示す「～」は、別段の断わりがない限り、その前後に記載された数値を下限値及び上限値として含むことを意味する。

[0015] 本発明の実施形態に係る潤滑層の性能評価方法の一形態は、潤滑剤分子モデルと保護層モデルとを量子化学計算を用いて構築する工程と、潤滑剤分子モデルと保護層モデルから構築した潤滑層初期モデルの分子動力学計算を実施する工程と、分子動力学計算結果から潤滑剤分子の保護層への吸着度合いの指標を算出する工程と、を含む。

[0016] 本実施形態に係る評価方法の対象の一例として、保護層が、磁気記録媒体表面に形成された保護層であり、潤滑剤分子が磁気記録媒体用の潤滑剤分子であり、潤滑剤分子を用いて作製される潤滑層等が挙げられる。

[0017] 磁気記録媒体は、基板上に磁気記録層が形成され、その磁気記録層上にカーボン等を使用した保護層が形成され、その保護層の表面に潤滑剤が塗布され、潤滑層が形成されている。

[0018] そこで、本実施形態では、磁気記録媒体が有する潤滑層のシミュレーションを行うために、潤滑剤分子の構造モデル（以下、潤滑剤分子モデルと記す。）と保護層の構造モデル（以下、保護層モデルと記す。）を作成し、保護層モデルの上に、任意の数の潤滑剤分子モデルを敷き詰めることで、保護層上に潤滑層が形成されている状況を再現する。

[0019] <潤滑剤分子モデル及び保護層モデル構築工程>

本実施形態に係る評価方法は、最初に潤滑層を構成する潤滑剤分子及び保護層のモデルを構築する。

[0020] [潤滑剤分子モデル]

磁気記録媒体に使用される潤滑剤分子としては、例えば、パーフルオロエーテル鎖（ $-\text{CF}_2-$ ）を含む繰り返し構造を有するフッ素系のポリマーの末端に、ヒドロキシ基等の極性基を有する化合物が挙げられる。その分子量と

しては、1000～10000程度のものが挙げられる。

[0021] 下記一般式(1)は、本実施形態で計算される含フッ素エーテル化合物の一例を表す。この分子は、鎖状高分子である。

[0022] [化1]



[0023] 式(1)中、Xは、繰り返し構造を含む主鎖部分である。また、R1及びR2は、それぞれ、第一末端部、第二末端部であり、水酸基に代表される極性基を少なくとも1つ有する。R1及びR2の構造は、同一でもよいし異なってもよい。

[0024] このような分子を量子化学計算を用いて構造最適化し、潤滑剤分子モデルとする。このモデルは分子構造と各原子の電荷の情報を有することから、分子動力学計算で適切に使用できる。

[0025] [保護層モデル]

保護層は、記録層を保護するための層であり、炭素原子又は炭化ケイ素から構成される。炭素原子からなる層の単位構造としては、グラフェンやダイヤモンドカーボンの単位構造が使用できる。このグラフェンやダイヤモンドカーボン構造では、酸素や窒素等をドーピングされていることが好ましい。これらを吸着サイトとすることで、潤滑剤の極性基との結合を強くすることが可能であるためである。

[0026] 例えば、グラフェン構造の保護層は、炭素6個からなる最小単位を「単位構造」とする。

[0027] 保護層は、原子一層の厚みから構成されていてもよいし、複数原子の層が

ら構成されていてもよい。

[0028] このような保護層の単位構造を量子化学計算で最適化し、この最適化された単位構造を、平面方向に、後述する分子動力学計算で使用する周期境界セルの範囲内で繰り返したものを保護層モデルとする。

[0029] この保護層モデルは、構造と各原子の電荷の情報を有するため、分子動力学計算で適切に使用できる。

[0030] <潤滑層初期モデル構築工程>

潤滑層初期モデル構築工程では、前工程で作成した潤滑剤分子モデルと保護層モデルとを用いて、潤滑層の初期モデル（潤滑層初期モデル）を構築する。

[0031] シミュレーションを実施するための潤滑層初期モデルは、保護層モデルの上に潤滑剤分子モデルがある程度均一に並んでいるものが構築されていればよい。また、潤滑層初期モデルは、潤滑剤分子が10～1000個ほど配置できる程度の大きさの周期境界セル中に構築することが好ましい。

[0032] 潤滑層初期モデルにおける潤滑剤分子の配置方法としては、個々の分子が重ならないように、保護層モデル付近に任意に配置してもよいし、分子動力学計算等を用いて安定化した初期配置を準備してもよい。

[0033] <分子動力学計算を実施する工程>

分子動力学計算を実施する工程では、潤滑層初期モデル構築工程で構築した潤滑層初期モデルを用いて、分子動力学計算を実施する。

[0034] 例えば、以下の条件で、分子動力学計算を実施できる。なお、分子動力学計算の諸条件は下記に限定されない。

- ・セルのサイズ：96 Å×84 Å×150 Å（周期境界セル）
- ・追跡時間：6 ns（1ステップの時間1 ps、総ステップ数600万ステップ）
- ・温度：300 K（室温を仮定）
- ・分子力場：GAFF力場
- ・クーロン相互作用の計算手法：Particle-Particle P

a r t i c l e - M e s h E w a l d 法

[0035] <吸着度合いの指標を算出する工程>

潤滑剤分子は、分子内の極性基と保護層モデルの吸着サイトとの相互作用により吸着する。そこで、潤滑剤分子内のある1つの吸着基について、保護層モデルの表面に十分近づいている状態を、「保護層に吸着している状態」と定義する。

[0036] 複数の吸着基 i （以下、吸着基 A、B、C・・・とも記載する。）を有する潤滑剤分子で構成された潤滑層の吸着度合いの指標を算出する方法を以下に説明する。

[0037] 分子動力学計算では、時間経過と共に変化する潤滑剤分子の形状及び潤滑剤分子を構成する原子の位置を追跡する。

[0038] 潤滑層全体における、ある時刻 t における、潤滑剤分子中の吸着基 A の吸着している状態にある割合は、次式 (I) で記述できる。

吸着基 A の吸着割合 = 吸着している状態にある吸着基 A の数 / 潤滑剤分子の総数 …… (I)

[0039] 算出された吸着基 A の吸着割合の時間平均を潤滑剤分子の吸着基 A の吸着確率とする。

[0040] 同様の手順を踏むことで、吸着基 B、C・・・と、すべての吸着基についてその吸着確率を算出する。

[0041] この吸着基の吸着確率の総和をとったものを、潤滑剤分子1つがもつ、保護層と吸着している吸着基の正味数とする。

[0042] この正味数を、潤滑層の吸着度合いの指標 N_{abs} として使用する。すなわち、指標 N_{abs} は、次式 (II) で表される。

[0043]

[数1]

$$N_{abs} = \sum_i \text{吸着基}i\text{の吸着確率} \quad \dots(\text{II})$$

[0044] 実施例において後述するように、潤滑層の吸着度合いの指標と、実験で測定される浮上性の値は相関関係がある。そのため、潤滑層シミュレーションから算出される吸着度合いの指標に基づいて、浮上性能の良い潤滑層を形成できる潤滑剤分子を選別することが可能となる。具体的には、後述する実施例において示すように、潤滑剤分子の吸着度合いは、実験結果が明らかである分子について算出された吸着度合いの指標を基準とし、相対的に評価する。

[0045] 本実施形態に係る潤滑剤の性能評価方法の他の形態は、潤滑剤分子モデルと保護層モデルとを含む潤滑層初期モデルを、量子化学計算を用いて構築する工程と、前記潤滑層初期モデルの分子動力学計算を実施する工程と、分子動力学計算結果から潤滑剤分子の保護層への潤滑度合いの指標を算出する工程と、を含む。

[0046] 潤滑剤分子モデル及び保護層モデル構築工程、潤滑層初期モデル構築工程、分子動力学計算を用いて構築する工程は、前述した本実施形態に係る潤滑剤の評価方法が含む工程と同様にして実施する。

[0047] <潤滑度合いの指標を算出する工程>

潤滑剤分子の潤滑性は、分子動力学計算の結果得られた、潤滑剤分子の自己拡散係数を算出し、それを潤滑層の潤滑度合いの指標として使用する。

[0048] 追跡時間Tの分子動力学計算から、対象とする潤滑剤分子の自己拡散係数

Dは、次式（III）により計算される。なお、式（III）中の、 t_0 は初期時刻であり、 $r(t)$ は時刻 t における分子の重心の位置である。

[0049] [数2]

$$D = \frac{1}{6T} \langle |r(T + t_0) - r(t_0)|^2 \rangle \quad \dots (III)$$

[0050] 実施例において後述するように、実験で測定される潤滑性の値と、潤滑層シミュレーションから算出される潤滑剤分子の自己拡散係数の値は相関関係にある。そのため、潤滑層シミュレーションから算出される自己拡散係数を、潤滑層の潤滑度合いの指標とする。具体的には、後述する実施例のように、実験で潤滑性の値が測定されている分子は、算出した潤滑度合いの指標に基づいて、潤滑層の潤滑性を相対的に評価する。

[0051] 本実施形態に係る潤滑層の性能評価方法は、上述した吸着度合いの指標と、潤滑度合いの指標との2つの指標に基づいて、潤滑層の性能を評価することもできる。この場合には、後述する実施例にあるように、実験結果が明らかである分子について算出された吸着度合いと潤滑度合いの指標とに基づいて、潤滑層の性能を相対的に評価できる。

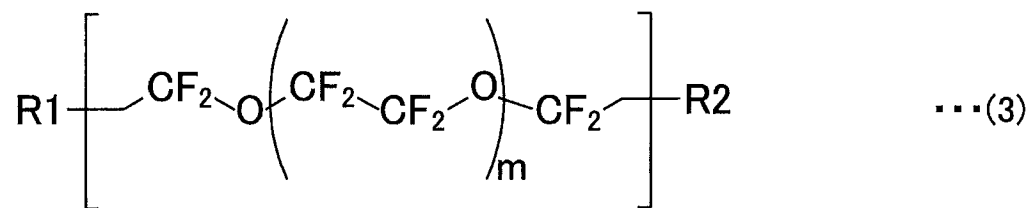
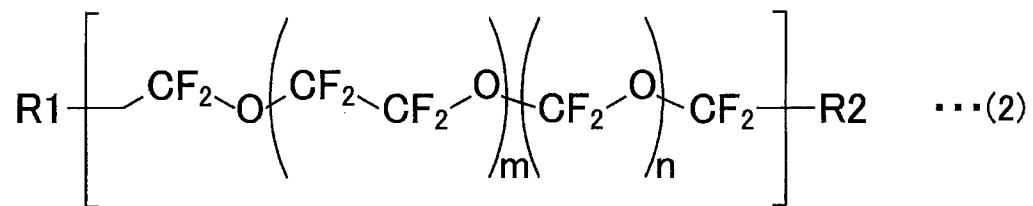
実施例

[0052] 以下、実施例により本実施形態を具体的に説明する。なお、本実施形態は下記の実施例により限定されない。

[0053] [潤滑剤分子]

前述した一般式（1）中の主鎖部分Xとして、下記一般式（2）又は下記一般式（3）のものをを用いた。

[0054] [化2]

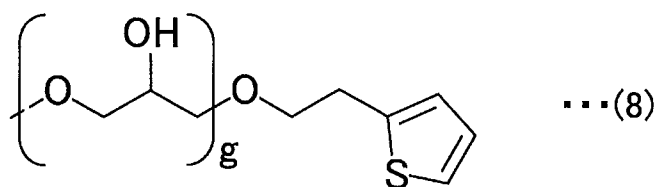
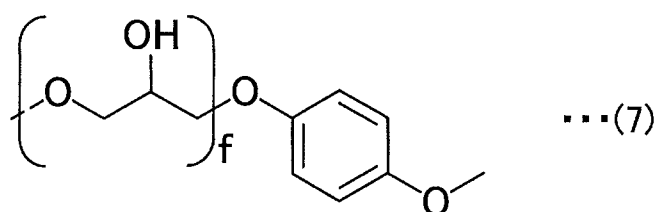
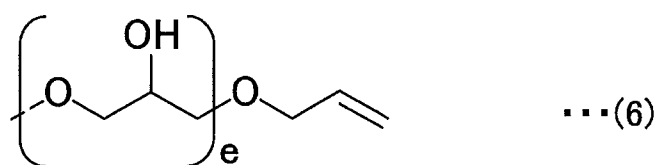
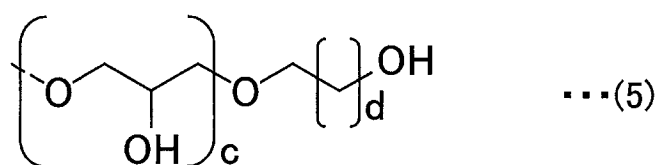
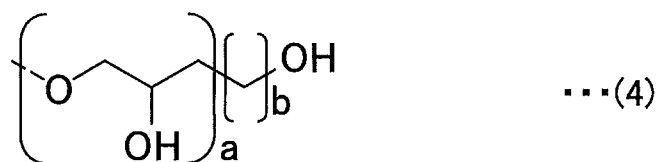


(一般式(2)及び一般式(3)中の、m及びnは1～30の整数を表す。
)

[0055] 前述した一般式(1)中の第一末端基R1及び第二末端基R2として、以下の構造を用いた。

[0056]

[化3]



(一般式(4)中のaは1～3の整数を、bは0～10の整数を表す。一般式(5)中のcは1～3の整数を、dは0～10の整数を表す。一般式(6)中のeは1～3の整数を表す。一般式(7)中のfは1～3の整数を表す。

。一般式（８）中の g は 1 ～ 3 の整数を表す。）

[0057] 表 1 に記載したとおりの、主鎖部分 X と第一末端基 R_1 、第二末端基 R_2 との組み合わせで構成される複数の潤滑剤分子に対して、下記シミュレーションを実施した。

[0058] [シミュレーション]
(保護層)

図 1 は、シミュレーションに使用した保護層の構造を説明するための模式図である。図 1 に示すように、シミュレーションでは、保護層として 2 層の窒素ドーピンググラフェンを使用した。ここで、濃色の丸 30 は窒素原子を示し、淡色の丸 31 は炭素原子を示し、各窒素ドーピンググラフェンの単位構造が平面方向に無限に繰り返される周期境界条件設定とした。図 1 中の矢印は、単位構造が繰り返される平面方向を示す。各窒素ドーピンググラフェンは、グラフェンの炭素原子の一部を窒素原子により置換したものである。各窒素ドーピンググラフェン中の窒素原子の割合は 12.5% (数基準) に設定した。

[0059] [潤滑剤分子モデル及び保護層モデルの構築]

前述した、潤滑剤分子と、保護層の単位構造について、量子化学計算により、安定構造及び各原子の電荷を求めた。それぞれ安定構造を計算する構造の最適化を実行した後、その構造における原子電荷を算出した。

[0060] 潤滑剤分子の安定構造の計算には、密度汎関数法のパラメータ／基底関数の組合せとして、B3LYP／6-31G*を使用し、求めた安定構造における原子電荷をMinimal Basis set Mulliken population analysisにより算出した。保護層の安定構造の計算には、密度汎関数法のパラメータ／基底関数の組合せとして、HSEH1PBE／6-31G*を使用し、求めた安定構造における原子電荷をMulliken population analysisにより算出した。これらの量子化学計算には、Gaussian社のGaussian (登録商標) 16 プログラムパッケージを使用した。

[0061] <分子動力学計算を実施する工程>

分子動力学計算を実施する工程は、保護層モデルの上に潤滑剤分子モデルを配置し、潤滑層初期モデルを構築する準備計算（以下、潤滑剤塗布シミュレーション、と記す。）と、構築した潤滑層初期モデルから実際の潤滑層の動きを追跡する本計算（以下、潤滑層シミュレーション、と記す。）の二工程からなる。

[0062] [潤滑剤塗布シミュレーション]

上記のようにして作成した構造と各原子の電荷の情報を含む潤滑剤分子モデル及び保護層モデルを使用し、潤滑層シミュレーションの初期構造となる潤滑層初期モデルを構築した。室温（300 K）において潤滑層が保護層を被覆した状態を再現するため、本実施例では、潤滑剤塗布シミュレーションを実施した。

[0063] 潤滑剤塗布シミュレーションの条件として、次のように設定した。分子力場としてG A F F力場を使用し、量子化学計算の結果と合致するように保護層と潤滑層の間のL e n n a r d - J o n e sポテンシャルの深さパラメータの値を1 / 2 倍にスケールした（ ϵ のパラメータを元の1 / 2 倍にした）。また、L e n n a r d - J o n e s相互作用には、カットオフ法を用いた。カットオフ距離は、相互作用が無視できると見なせる12 Åとした。温度制御法として、速度スケーリング法を用いて、粒子数（N）と体積（V）と温度（T）を一定にしたN V Tアンサンブルによるシミュレーションを行った。分子動力学計算は、フリーソフトウェアであるO C T AのC O G N A Cエンジンを使用した。

[0064] 図2（a）～図2（d）は、潤滑剤の塗布シミュレーションを説明するための模式図である。図2（a）～図2（d）において、符号1 aは潤滑剤分子を示し、符号1 bは潤滑層を示し、符号2 0は保護層を示している。

[0065] まず、図2（a）に示すように、96 Å × 84 Å × 150 Åの周期境界セル中に量子化学計算によって安定化された保護層の単位構造を敷き詰めて配置し、保護層2 0とした。保護層はシミュレーション中に原子位置が変化しないものとし、その原子位置を固定した。

[0066] 次いで、図2（b）に示すように、保護層20の表面上方にランダムに潤滑剤分子1aを配置した。実験では、9 Å程度の薄い膜厚の潤滑層を作成し、物性値を測定している。その物性値と比較するため、潤滑剤分子1aの分子数は、潤滑層1bを形成したとき、室温での熱平衡状態における膜厚が9 Å前後となるように調整した。

[0067] そして、図2（c）及び図2（d）に示すように、潤滑剤分子1aの末端に配置された水素原子に下向きの力を印加し、300 Kの常温条件下で分子動力学計算を実行することで潤滑剤分子1aを下降させ、保護層20の表面に潤滑層1bを形成し、潤滑層初期モデルとした。ここで、図2（c）は計算途中の構造であり、図2（d）は30 psの計算後の潤滑層1bの構造である。

[0068] <分子動力学計算（潤滑層シミュレーション）の実施>

潤滑剤シミュレーションでは、分子力場としてGAFF力場を使用し、量子化学計算の結果と合致するように保護層と潤滑層の間のLennard-Jonesポテンシャルの深さパラメータの値を1/2倍にスケールした（ ϵ のパラメータを元の1/2倍にした）。また、Lennard-Jones相互作用には、カットオフ法を用いた。カットオフ距離は、相互作用が無視できると見なせる12 Åとした。長距離クーロン相互作用の計算には、Particle-Particle Particle-Mesh Ewald法を使用した。温度制御法として、速度スケールリング法を用いて、粒子数（N）と体積（V）と温度（T）を一定にしたNVTアンサンブルによるシミュレーションを行った。分子動力学計算は、フリーソフトウェアであるLAMMPSを使用した。

[0069] 潤滑層シミュレーションでは、300 Kにおける熱平衡状態での潤滑層の構造、及びその挙動を再現し、解析した。

[0070] 短い時間で熱平衡室温に到達させるため、まずは400 Kの高温条件下で6 ns間のシミュレーションを実施し、次いで、1 nsかけて400 Kから300 Kまで徐々に温度を下げるシミュレーションを実施した。その後、室

温における潤滑層の構造を再現し、その挙動を追跡するため、300 Kの温度条件下で6 ns間のシミュレーションを実施した。なお、表1に示す潤滑剤分子のそれぞれのシミュレーションにおいて、3 ns程度で十分に熱平衡状態に達することを確認した。

[0071] <各性能の指標の算出>

潤滑層の吸着度合いの指標と潤滑度合いの指標を算出した。

[0072] [吸着度合いの指標の算出]

前述した方法により、潤滑層の吸着度合いの指標 N_{abs} を算出した。

[0073] ここで、「十分近づいている状態」の保護層と吸着基との距離は、水酸基では2 Å以下、アミノ基及びニトリル基では3 Å以下と設定した。

[0074] [潤滑度合いの指標の算出]

実施形態に示す通り、潤滑剤分子の自己拡散係数を算出し、潤滑度合いの指標とした。自己拡散係数の算出には、300 Kでの6 ns間のシミュレーションにおける潤滑剤分子の変位を利用した。

[0075] 計算した潤滑層の構造と、その吸着度合いの指標 (N_{abs}) と潤滑度合いの指標 (自己拡散係数) との計算結果を表1に示す。ここで、シミュレーションNo. 4は、吸着性の基準となる潤滑剤分子である。No. 4より大きい N_{abs} の潤滑剤分子がより吸着性に優れる潤滑層を構成することができる潤滑剤分子である。シミュレーションNo. 3は、潤滑性の基準となる潤滑剤分子である。No. 3より大きい自己拡散係数をもつ潤滑剤分子がより潤滑性に優れる潤滑層を作ることができる潤滑剤分子である。

[0076]

[表1]

シミュレーションNo.	X (一般式番号) 繰り返し数 m,n	R1 (一般式番号) 繰り返し数 a~g	R2 (一般式番号) 繰り返し数 a~g	Nabs [無単位]	自己拡散係数 [Å ² /ns]
1	(2) m=6, n=7	(7) f=1	(5) c=1, d=1	1.95	8.98
2	(2) m=6, n=7	(6) e=1	(5) c=1, d=1	1.78	8.85
3	(2) m=6, n=7	(8) g=1	(5) g=1	2.63	10.89
4	(2) m=6, n=7	(6) e=2	(5) c=1, d=1	2.52	6.14
5	(2) m=6, n=7	(6) e=2	(5) c=2, d=1	2.75	7.59
6	(2) m=6, n=7	(7) f=2	(5) c=1, d=1	2.27	7.00
7	(3) m=9	(4) a=1, b=0	(5) c=2, d=1	3.17	11.80
8	(2) m=6, n=7	(4) a=1, b=0	(4) a=1, b=0	1.70	12.44
9	(3) m=9	(4) a=1, b=0	(4) a=1, b=0	1.72	17.65
10	(2) m=6, n=7	(4) a=1, b=0	(4) a=2, b=0	2.03	10.70
11	(2) m=6, n=7	(5) c=1, d=1	(5) c=1, d=1	2.48	8.41
12	(2) m=6, n=7	(5) c=1, d=2	(5) c=1, d=2	2.08	7.95
13	(3) m=9	(5) c=1, d=1	(5) c=1, d=1	2.83	10.62
14	(2) m=6, n=7	(5) c=1, d=1	(5) c=2, d=1	3.15	7.47
15	(2) m=6, n=7	(5) c=2, d=1	(5) c=2, d=1	3.97	6.54

[0077] また、Nabsと自己拡散係数との両方を併せて示した散布図を、図3に示す。縦軸をNabsとし、基準となるNo. 4の結果を水平な破線で示し

である。横軸を自己拡散係数とし、基準となるNo. 3の結果を垂直な破線で示してある。

[0078] 以上のシミュレーション結果から、例えば、No. 15の潤滑剤を使用して作製した潤滑層は吸着性にすぐれた性能を持ち、No. 9の潤滑剤を使用して作製した潤滑層は潤滑性にすぐれた性能をもつと予測できる。また、N a b s、自己拡散係数ともに基準値を上回るNo. 7は、両性能ともに優れる潤滑層を形成できると予測できる。

[0079] 上記潤滑剤分子を使用した潤滑層を含む磁気記録媒体について、従来公知の方法で浮上性試験と、潤滑性試験と、を実施した。その結果を表2に示す。なお、表2中の実験No. と表1中のシミュレーションNo. が同じ数字のものは、同一の潤滑剤分子を使用した。

[0080]

[表2]

実験No.	浮上性評価	潤滑性評価
1	1.5	3
2	2	2
3	3	4
4	4	1
5	4	2
6	2.5	2.5
8	2	4
12	2.5	2.5

[0081] また、計算結果と、それに対応する実験での評価値と、を比較した散布図を図4及び図5に示す。

[0082] 図4に浮上性試験の評価値とシミュレーションで算出した $N a b s$ との関係を示す。図4において、線形回帰式を求めたところ、その決定係数 R^2 は、約0.6728であったため、浮上性と $N a b s$ の間に十分な相関があり、 $N a b s$ を用いて浮上性の優劣を判断できることが確認できた。

[0083] 図5に潤滑性試験の評価値とシミュレーションで算出した自己拡散係数との関係を示す。図5において、線形回帰式を求めたところ、その決定係数 R^2 は、約0.8071であったため、潤滑性と自己拡散係数の間に十分な相関があり、自己拡散係数を用いて潤滑性の優劣を判断できることが確認できた。

[0084] 以上から、シミュレーション結果から十分な信頼性をもって潤滑層の浮上特性及び潤滑性の優劣を予測できることが確認できた。

[0085] 以上の通り、本発明の実施形態を説明したが、上記実施形態は、例として提示したものであり、上記実施形態により本発明が限定されるものではなく、特許請求の範囲に記載された本発明の要旨の範囲内において、種々の組み合わせ、省略、置き換え、変更等を行うことが可能である。これら実施形態やその変形は、本発明の範囲や要旨に含まれると共に、特許請求の範囲に記載された発明とその均等の範囲に含まれる。

[0086] 本出願は、2020年10月16日に日本国特許庁に出願した特願2020-174602号に基づく優先権を主張するものであり、特願2020-174602号の全内容を本出願に援用する。

産業上の利用可能性

[0087] 潤滑層の性能評価方法は、磁気記録媒体等に用いられる、潤滑層の性能を評価する方法として好適に用いることができる。

符号の説明

[0088] 30 窒素原子

31 炭素原子

1 a 潤滑剤分子

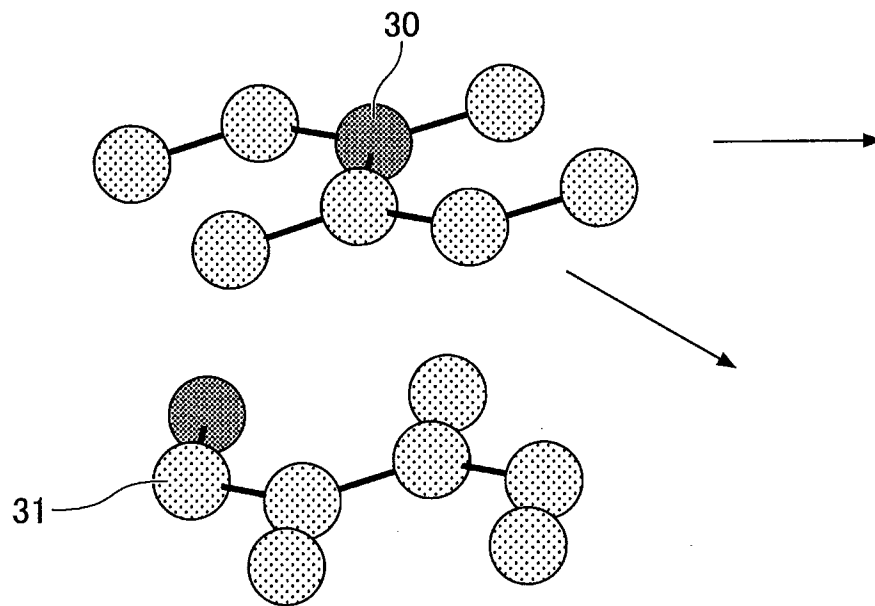
1 b 潤滑層

2 0 保護層

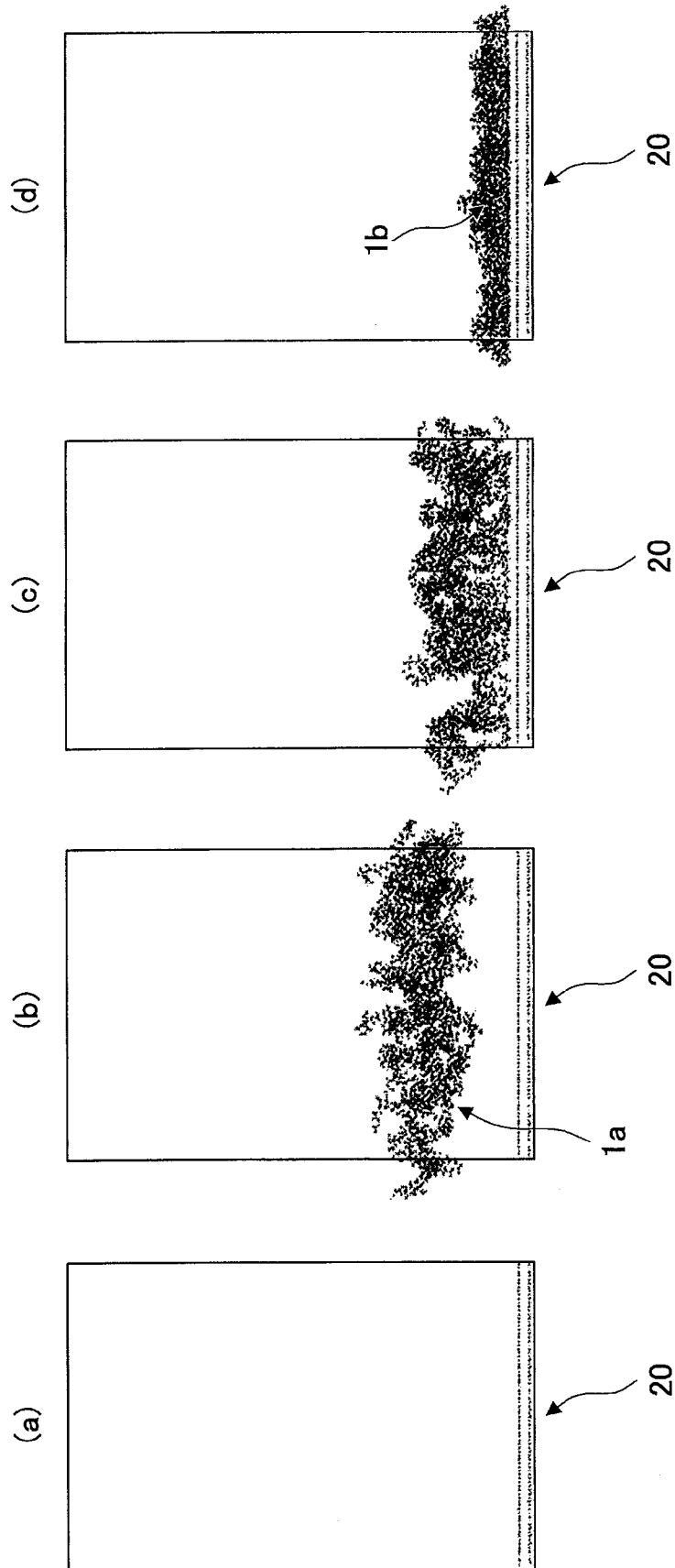
請求の範囲

- [請求項1] 潤滑剤分子モデルと保護層モデルとを、量子化学計算を用いて準備する工程と、
前記潤滑剤分子モデルと前記保護層モデルから構築した潤滑層初期モデルの分子動力学計算を実施する工程と、
前記分子動力学計算の結果から潤滑剤分子の保護層への吸着度合いの指標を算出する工程と、
を含む潤滑層の性能評価方法。
- [請求項2] 潤滑剤分子モデルと保護層モデルとを、量子化学計算を用いて準備する工程と、
前記潤滑剤分子モデルと前記保護層モデルから構築した潤滑層初期モデルの分子動力学計算を実施する工程と、
前記分子動力学計算の結果から潤滑剤分子の保護層上での潤滑度合いの指標を算出する工程と、
を含む潤滑層の性能評価方法。
- [請求項3] 請求項1で算出された前記吸着度合いの指標と、請求項2で算出された前記潤滑度合いの指標との2つの指標に基づいて、潤滑層の性能を評価する潤滑層の性能評価方法。
- [請求項4] 前記保護層が、磁気記録媒体表面に形成された保護層であり、
前記潤滑剤分子が、磁気記録媒体用の潤滑剤分子である、請求項1～3の何れか一項に記載の潤滑層の性能評価方法。

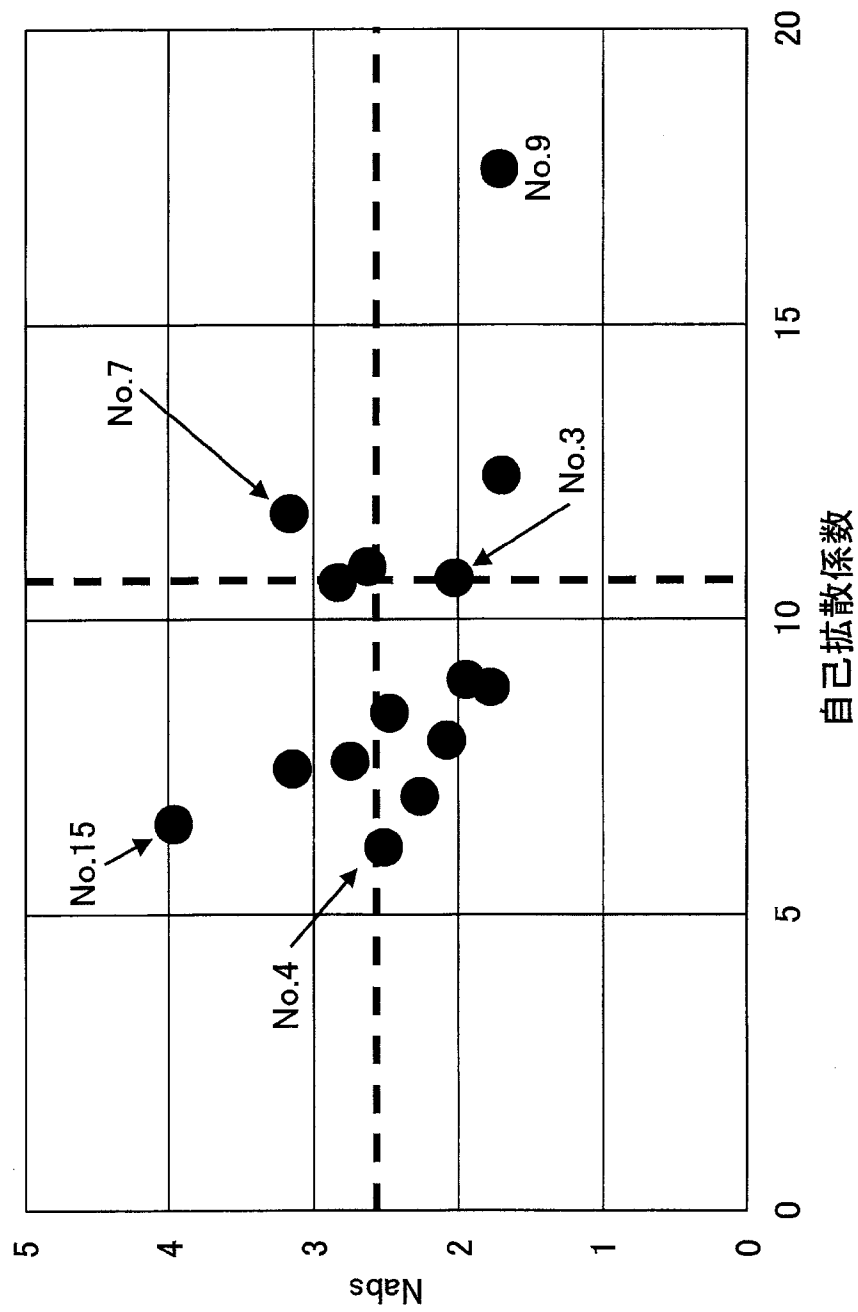
[図1]



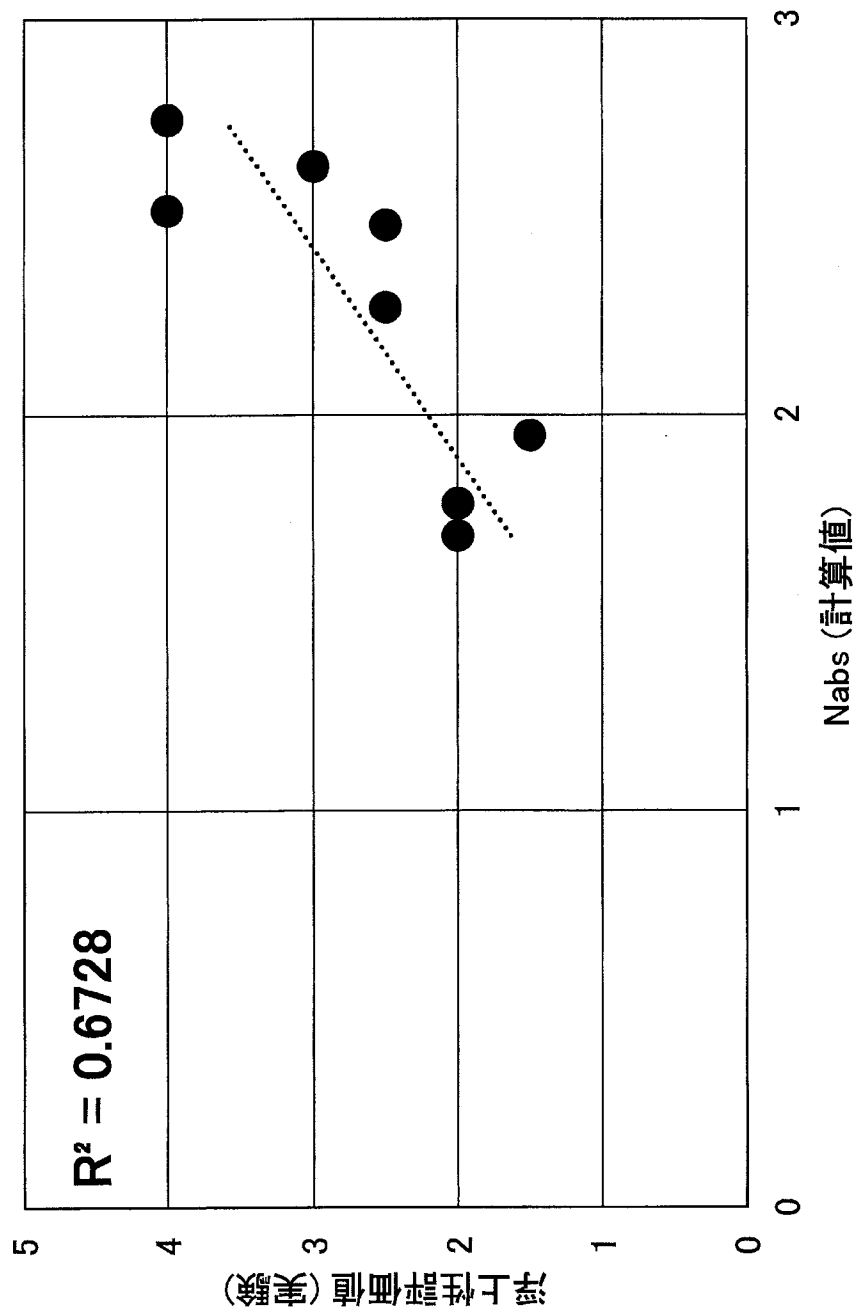
[図2]



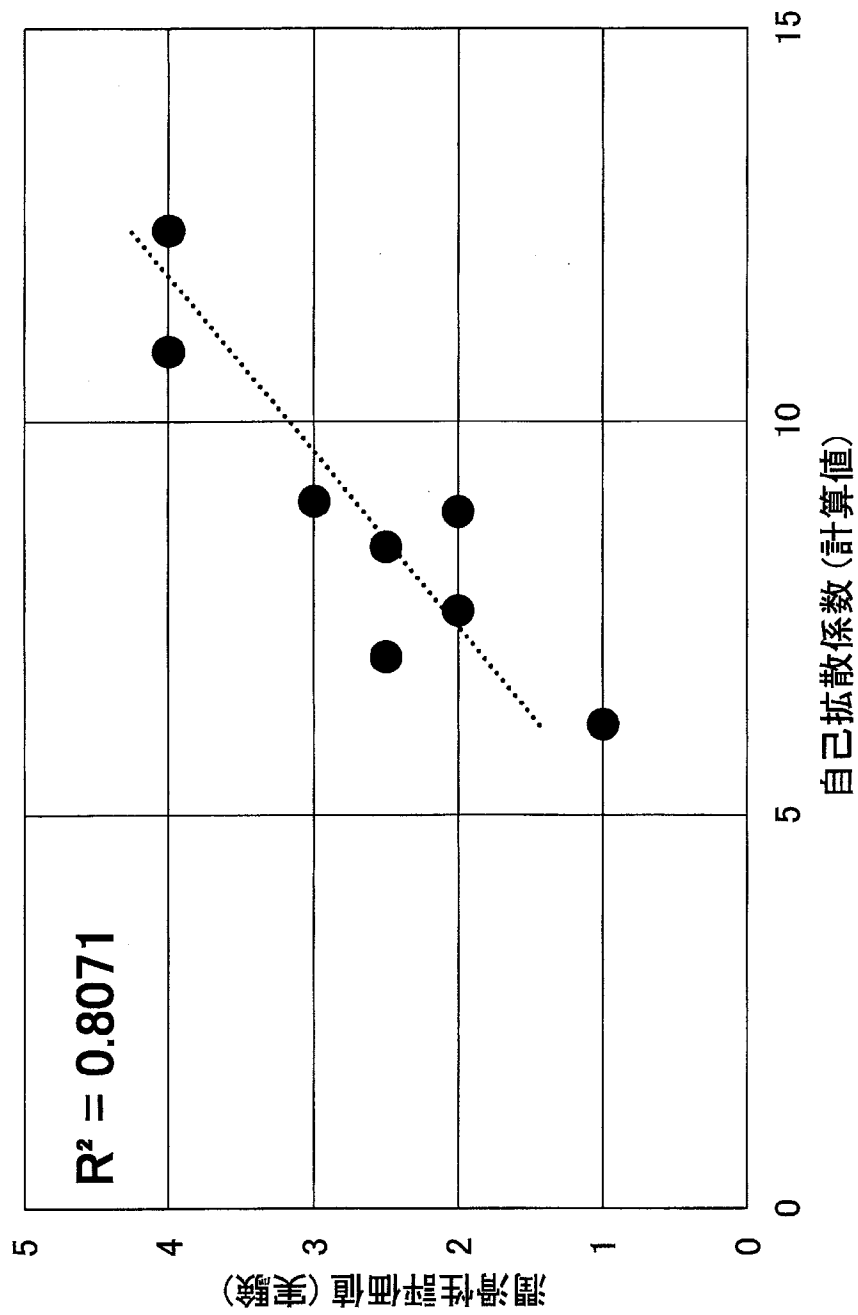
[図3]



[図4]



[図5]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2021/037849

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER**G01N 19/00**(2006.01)i; **G01M 99/00**(2011.01)i

FI: G01N19/00 A; G01M99/00 Z

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G01N19/00; G01M99/00

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2021
 Registered utility model specifications of Japan 1996-2021
 Published registered utility model applications of Japan 1994-2021

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JHON, M. S. et al. Simulation of Nanostructured Lubricant Films. IEEE Transactions on Magnetics., 2003, vol. 39, no. 2, 754-758 pp. 756-757	1-4
X	WO 2013/054393 A1 (HITACHI, LTD) 18 April 2013 (2013-04-18) examples	1, 4
A		2-3
X	JP 2010-168512 A (HITACHI LTD) 05 August 2010 (2010-08-05) paragraphs [0034]-[0036]	1, 4
A		2-3
A	US 2014/0368947 A1 (HGST NETHERLAND B.V.) 18 December 2014 (2014-12-18)	1-4

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

16 November 2021

Date of mailing of the international search report

07 December 2021

Name and mailing address of the ISA/JP

Japan Patent Office (ISA/JP)
 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915
 Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2021/037849

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO	2013/054393	A1	18 April 2013	(Family: none)	
JP	2010-168512	A	05 August 2010	US 2011/0293965 A1 paragraphs [0045]-[0047] WO 2010/084548 A1	
US	2014/0368947	A1	18 December 2014	(Family: none)	

特 許 協 力 条 約

P C T

国際調査報告

(法8条、法施行規則第40、41条)

[P C T 18条、 P C T 規則43、44]

出願人又は代理人の書類記号 SHD21010PCT	今後の手続 については、	様式 P C T / I S A / 2 2 0 及び下記 5 を参照すること。
国際出願番号 PCT/JP2021/037849	国際出願日 (日.月.年) 13.10.2021	優先日 (日.月.年) 16.10.2020
出願人 (氏名又は名称) 昭和電工株式会社		

国際調査機関が作成したこの国際調査報告を法施行規則第41条 (P C T 18条) の規定に従い出願人に送付する。
この写しは国際事務局にも送付される。

この国際調査報告は、全部で 3 ページである。

☐ この国際調査報告に引用された先行技術文献の写しも添付されている。

1. 国際調査報告の基礎

a. 言語に関し、この国際調査は以下のものに基づき行った。

☒ 出願時の言語による国際出願

☐ 出願時の言語から国際調査のための言語である _____ 語に翻訳された、この
国際出願の翻訳文 (P C T 規則12.3(a)及び23.1(b))

b. ☐ この国際調査報告は、 P C T 規則91の規定により国際調査機関が許可した又は国際調査機関に通知された明
らかな誤りの訂正を考慮して作成した (P C T 規則43.6の2(a)) 。

c. ☐ この国際出願は、ヌクレオチド又はアミノ酸配列を含んでいる (第 I 欄参照) 。

2. ☐ 請求の範囲の一部の調査ができない (第 II 欄参照) 。

3. ☐ 発明の単一性が欠如している (第 III 欄参照) 。

4. 発明の名称は

☒ 出願人が提出したものを承認する。

☐ 次に示すように国際調査機関が作成した。

5. 要約は

☒ 出願人が提出したものを承認する。

☐ 第IV欄に示されているように、法施行規則第47条第1項 (P C T 規則38.2) の規定により国際調査機関が作
成した。出願人は、この国際調査報告の発送の日から1月以内にこの国際調査機関に意見を提出することが
できる。

6. 図面に関して

a. 要約とともに公表される図は、第 2 図とする。

☐ 出願人が示したとおりである。

☒ 出願人は図を示さなかったので、国際調査機関が選択した。

☐ 本図は発明の特徴を一層よく表しているの、国際調査機関が選択した。

b. ☐ 要約とともに公表される図はない。

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G01N 19/00(2006.01)i; G01M 99/00(2011.01)i FI: G01N19/00 A; G01M99/00 Z		
B. 調査を行った分野		
調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G01N19/00; G01M99/00		
最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2021年 日本国実用新案登録公報 1996-2021年 日本国登録実用新案公報 1994-2021年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X	JHON, M. S. et al., Simulation of Nanostructured Lubricant Films, IEEE Transactions on Magnetics, 2003, Vol. 39, No. 2, 754-758 756-757頁	1-4
X	WO 2013/054393 A1 (株式会社日立製作所) 18.04.2013 (2013-04-18)	1, 4
A	実施例	2-3
X	JP 2010-168512 A (株式会社日立製作所) 05.08.2010 (2010-08-05)	1, 4
A	[0034] - [0036]	2-3
A	US 2014/0368947 A1 (HGST NETHERLAND B.V.) 18.12.2014 (2014-12-18)	1-4
☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日 16.11.2021		国際調査報告の発送日 07.12.2021
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号		権限のある職員（特許庁審査官） 外川 敬之 2J 3718 電話番号 03-3581-1101 内線 3252

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2021/037849

引用文献			公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO	2013/054393	A1	18.04.2013	(ファミリーなし)	
JP	2010-168512	A	05.08.2010	US 2011/0293965 A1	
				[0045] - [0047]	
				WO 2010/084548 A1	
US	2014/0368947	A1	18.12.2014	(ファミリーなし)	