

論文の内容の要旨

論文題目 **Characterization of Ultrathin Liquid Perfluoropolyether Films on Solid Carbon Surfaces by Monte Carlo Simulation**

(モンテカルロ法によるカーボン固体表面の PFPE 超薄膜のキャラクタライゼーション)

氏名

マイト モハト サジャト

磁気ディスクシステムのヘッドディスクインターフェース (HDI)における摩耗・摩擦は、ディスク表面に塗布されたフッ素系潤滑剤 (perfluoropolyether, PFPE) の潤滑膜特性に依存する。しかし、一般に PFPE は数ナノメートルの厚さで塗布されるためそのキャラクタライゼーションが非常に困難である。本論文では、PFPE 超薄潤滑膜の分子密度分布、回復・流動特性、空気界面での表面粗さおよび固体間流体架橋などを計算することにより、固相炭素表面上の PFPE 超薄液膜の潤滑特性を明らかにした。

本研究では末端に官能基を有さない PFPE Z および官能基を有する PFPE Zdol の両者を考え、これをビーズ=スプリングモデルで単純化した上で、非格子点モデル (off-lattice polymer model) およびレプテーションアルゴリズム (蛇行アルゴリズム) を適用し、正準モンテカルロ (MC) 法に則って計算を実施する。ここで、ビーズ間および固体表面-ビーズ間にはレナードジョーンズポテンシャルを適用する。さらに、PFPE Zdol は双極子間の相互作用ポテンシャルを考慮し、そこでは遠距離力を扱うために反力場法 (Reaction field method) を使用した。こうして作成したシミュレーションソフトウェアは、磁気ディスク上 PFPE 薄膜に設けたスクラッチ痕の回復過程の計算を行い、これとエリブソメトリを用いた回復過程に関する実験結果と比較することにより、ソフトウェアの正しさを確認しながら研究を進めた。

続いて、このような計算手法を用いて PFPE 薄膜の特性に関する計算をいくつか行った。まず最初に、滑らかな炭素表面上に PFPE 超薄膜の内部の密度分布を調べた。密度低下は高分子潤滑剤の劣化を反映するため、密度分布はトライボロジー特性に影響する。PFPE Z および PFPE Zdol の密度は、両者とも表面からの約 3nm の位置から表面に向かって減少することが分かった。さらに、表面近傍での密度は、分子量の減少に伴い、および極性基の相互作用によって増加することが分かった。この結果は、X線反射率により求めた PFPE 潤滑剤の密度測定結果 (Shouji *et al.*, 1998) とよく一致している。

次に、このような超薄膜潤滑剤の保持力 (Retention) および回復 (Replenishment) は薄膜の摩耗耐久性において重要である。PFPE Z に設けたストレッチ痕の回復過程を考え、異なった分子量の PFPE に関して、また異なったストレッチ痕幅に関して回復過程の様子および回復速度を求めた。そして、Ma ら(1999)の実験から得られた拡散係数を用いて拡散方程式を解いた結果との比較を行った。その結果、MC サイクルを回復の実時間と対応させることに成功した。この結果は、拡散過程から測定された拡散係数を使用して、拡散方程式で回復の予測をすることが可能であることを示している。

磁気ディスクは超高密度記録が要求され、これに伴って HDI トライボロジー技術は、低摩耗および低スティクションを実現しつつ、ヘッド浮上量低下および潤滑剤の薄膜化を実現することが求められている。しかし、ヘッド浮上量低下によって、ヘッド/ディスク間に突然メニスカス架橋が形成されて、スティクションの険性が高まることが指摘され、また多くの実機による実験結果がそれを示している。そこで、2つの滑らかな炭素表面間に形成された超薄液体膜を伸張させるシミュレーションを行った。まず初期膜厚 4nm の膜を作り、これをストレッチさせたところ、2面間距離を約 28nm 以上離すと流体膜内分子の分布に不連続点 (ブレーキング) が見られることが判明した。これによって、流体膜は約 7 倍まで伸張されるがそこで両者は切断されることがわかる。こうして、2~30nm 以下のヘッド浮上量では PFPE のメニスカス架橋が形成される危険性を示した。

最後に、気体界面における液体の表面粗さについての計算を行なった。これは最近最も着目されているテーマであり、0.4nm 程度の粗さが液体表面に最終的に残ることが実験的に確認されている。その原因は分子形態 (Conformation) および熱励起 (Thermal Excitation) であると言われており、このような確率的現象はモンテカルロ法のもっとも得意とするところである。そこで、本計算手法によって予測したところ、超薄膜の自由表面粗さは平均値で上記実験値とほぼ一致した。また、粗さは計算数に関してガウス分布を持つことを示した。なお、表面粗さは膜厚さ、分子量および官能基の存在によって低下することがわかり、これは新しい知見である。

このように本論文では、モンテカルロ法を用いて固体表面上の数ナノメートル厚さのフッ素系潤滑剤のいくつかのキャラクタライゼーションを行った。そして、それぞれのキャラクタライゼーションで多くの新しい知見を得た。これらはナノスケールの潤滑膜の設計に有用である。