

審査の結果の要旨

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)

論文提出者氏名 マイト、モハト、サジャト

本論文は、「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)」と題し、9章からなる。

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)における摩擦・摩耗は、ディスク表面に塗布されたフッ素系潤滑剤 (perfluoropolyether, PFPE) の潤滑特性に依存する。現在 PFPE 潤滑膜は数ナノメートルの厚さでディスク表面に塗布されており、また超高密度化の要求からさらに薄膜化が進んでいるため、このような超薄膜のキャラクタライゼーション法を確立することが緊急の課題となっている。このような現状認識から、本研究はカーボン表面に塗布された PFPE 潤滑膜に関する種々のコンピュータシミュレーションを行い、その物理的性質を明らかにすると同時にキャラクタライゼーション法を確立することを目的として行われたものである。

第1章ではこの研究の目的および本論文の構成を述べている。また、PFPE 潤滑膜のキャラクタライゼーションの重要性、HDI (ヘッドディスクインターフェース) における関連する問題点などを述べている。

第2章はシミュレーションの詳細について述べている。まず PFPE 高分子のビーズモデルによるモデル化について述べ、続いてビーズ間に働くポテンシャル、ビーズ/固体表面間のポテンシャル、高分子鎖の動きに関するルール (レピュテーションアルゴリズム)、モンテカルロ法の適用手法、初期・境界条件、そして高分子鎖の末端官能基の取り扱い方について述べている。さらに、固体表面上の PFPE 潤滑膜の流動に関しては簡便法として拡散方程式が適用できる場合があり、本研究ではモンテカルロ法と拡散方程式による方法とを比較しているため、拡散方程式の導出、解析方法について述べている。

第3章は第一のモンテカルロ法適用として PFPE の構造 (形状) が薄膜化に伴ってどのように変化するか計算している。そして、薄膜化に伴って分子慣性半径に異方性が生じ、膜厚が 10 ナノメートル程度の時にはほぼ等方 (球形) であった分子も、2 ナノメートルの膜厚では長径/短径比が約 2 に増加することを示している。このことは PFPE を 1 分子層だけ敷きつめるときの膜厚を見積もるのに重要である。

第4章はPFPE潤滑膜内の密度分布を計算してその結果を示している。潤滑膜内では固体表面に近づくに伴ってビーズの（すなわち原子の）密度が低下することを示し、従来の実験結果と定性的に一致することを示している。また低下の仕方はPFPEの分子量、末端基種類、膜厚によって異なることを示している。この結果は固体表面での摩擦、熱伝達などの制御に関連付けることができるという点で重要である。

第5章はPFPE超薄膜のスクラッチ痕の回復過程を計算している。厚さ数ナノメートルで幅10ナノメートル程度のスクラッチ痕が回復する過程を計算しているが、さらにモンテカルロ法のステップ数を実時間と関連付ける方法を提案した。これによって計算結果から回復に要する時間が計算できることになり、本計算手法を実用レベルまで価値を高めた。

第6章はPFPE超薄膜のスクラッチ痕の回復過程に関する実験を行った結果を述べている。マイクロエリプソメータを用いてスクラッチ痕が回復する過程を観察し、これと計算とを比較することにより、超平滑固体面上の回復は拡散方程式を用いて簡便に予測できることを示した。ただし、表面粗さが大きい、あるいは構造物を有する固体平面上の超薄膜の回復に関しては、拡散係数を求めることが極めて困難であり、モンテカルロ法によらなくてはならない。

第7章は2固体面に介在するPFPE潤滑膜を引伸ばすことを仮定して計算を行った。その結果、ある限界をすぎると潤滑膜内に空洞ができ超薄膜が引きちぎられることがシミュレーション結果から明らかになった。これは、PFPE潤滑剤の固体間の移着に関連する現象であり、磁気ディスク上をヘッドが間欠接触する場合に問題となる潤滑剤移着（これはヘッドの汚れとなるため避ける方法が模索されている）の機構解明に役立つ。

第8章はPFPE潤滑膜表面上に形成される固有粗さに関するシミュレーションについて述べている。この粗さは原子の熱振動および表面波に起因するものとされているが、平均約4オングストローム程度の粗さが報告されている。このような小さな粗さでも磁気ディスク浮上量が10ナノメートル以下になると、安定浮上に影響する。本研究によってほぼこの固有粗さが予測できることを示した。また、この固有粗さは、PFPE分子の分子量、末端基の影響を受けることがわかり、今後超薄膜潤滑剤を設計・選定する上で重要なパラメータである。

第9章は結論であり、上で述べた計算の結果を総括している。

以上要するに、本研究は磁気ディスク用潤滑剤として用いられ、また今後その薄膜化が求められているPFPE超薄膜の静的・動的特性に関してモンテカルロ法を用いた予測手法を開発したものであり、超薄膜潤滑のキャラクタライゼーションにきわめて不可欠なツールを提供したと考えられる。また、本研究によってPFPE超薄膜に関する多くの新しい知見が得られ、これらは超薄膜の選定、設計に役立てられ、機械工学およびトライボロジーに寄与するところが多い。

よって、本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。