

有機ナノ薄膜のせん断挙動に関する分子シミュレーション

○向川 慶汰¹, 河原 功弥¹, 多田 和広^{1*}¹富山高等専門学校

Molecular Dynamics Simulation on Shearing Behavior of Nano-Scale Thin-Film

○Keita Mukougawa¹, Katsuya Kawahara¹ and Kazuhiro Tada^{1*}¹Natinal Institute of Technology, Toyama College

1. はじめに

ナノスケールの微細加工技術のひとつとして、ナノインプリント法が広く用いられている。ナノインプリントにおいては、加工サイズの微細化に伴う物性や表面効果の急激な変化に伴い、アライメントや有機材料の充填、離型時のモールド-有機材料界面の摩擦特性などのナノトライボロジー現象に関する経験的予測が難しくなっている。

我々はこれまで、ナノトライボロジー現象に起因する課題の解決のための端緒として、分子動力学法を用いて、ナノスケールの隙間を有する基板に挟まれた有機材料のせん断特性解析を行ってきた。また、せん断条件の違いにより、せん断応力が大きく異なってくることを調べてきた。

本研究では、原子一つ一つにかかる応力がわかる原子応力分布解析を行い、せん断応力が異なってくる原因について原子レベルでの考察を行った。

2. 計算条件

図1にシミュレーションモデルの概略図を示す。本解析では、2枚の剛体基板に有機材料を挟み込み、下側基板を固定し、上側基板をX軸方向に滑らせたとき、各原子が受けたせん断応力を算出し、0から $\pm 3\sigma$ の範囲でせん断応力の低い原子を緑、正方向に高い原子を赤、負方向に高い原子を青というふうにBGRで色づけし系内のせん断応力分布を調べた。また、ラフネスパターンの周期、ラフネス深さ $Ro[nm]$ 、有機材料の重合度 DP を変化させ、せん断応力分布と上側基板が受ける力がどのように変化するかを調べた。使用する有機材料として、ポリエチレン(PE)、ポリメタクリル酸メチル(PMMA)、ポリスチレン(PS)とした。上側基板と下側基板は共にニッケルの結晶構造を持つ剛体とし、有機材料の温度は $300[K]$ で一定とした。

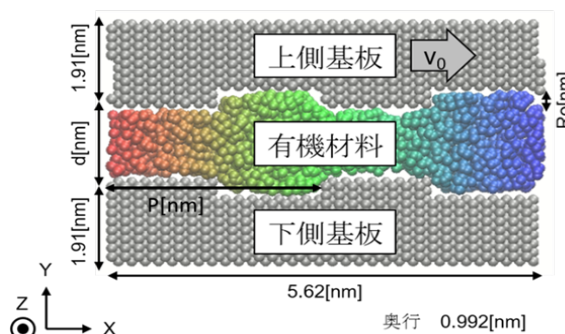


Fig.1. Schematic diagram of friction system for Polyethylene.

3. 解析結果

図2は、PMMAを $DP=10$, $d=2.0[nm]$, $Ro=0.747[nm]$, $v_0=10.0 \times 10^{10}[s^{-1}]$ の条件でせん断を行った際の $4.5 \times 10^4[fs]$ 経過後のせん断応力分布を示している。図の中央に線状の応力集中が2か所見られるが、これらの線状に応力集中した原子群はそれぞれ一本のポリマーの主鎖に所属する原子であることが分かった。このことから、1本のポリマー内でキャビティに入り込んだ部分では基盤の運動方向に引っ張られ、キャビティ外ではポリマー同士の絡み合いによりとどまろうとすることで大きなせん断応力が加わり、応力集中が発生したと考えられる。

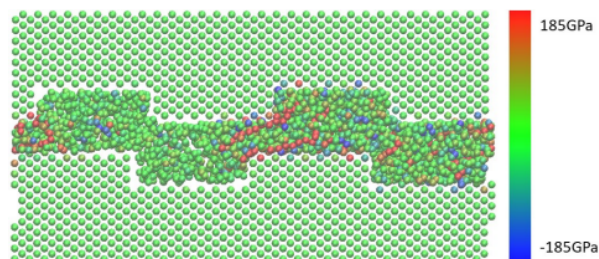


Fig.2. Atomic stress distribution of PMMA under shear flow. ($DP=10$, $d=2.0[nm]$, $Ro=0.747[nm]$, $v_0=10.0 \times 10^{10}[s^{-1}]$)

*E-mail: tada@nc-toyama.ac.jp