

## メソスケールシミュレーションと組み合わせた 走査型プローブ顕微鏡法: 薄膜中のブロックコポリマーの相挙動が明らかに

BIOVIA Materials Studio Modeling は、薄膜中に形成するシリンダ状ブロックコポリマーの相挙動をモデル化するために活用されています。

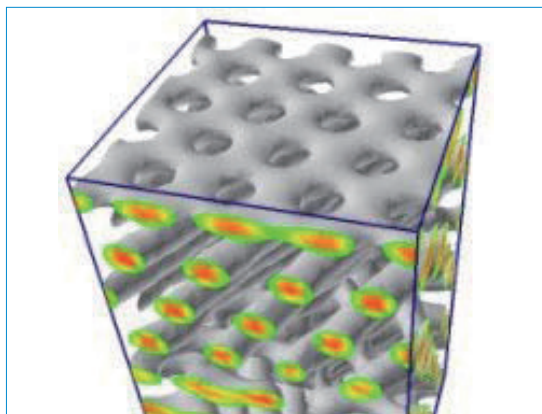
メソスケール シミュレーションと走査型力顕微鏡法の実験を組み合わせて用いた研究によって、そのような系の相挙動が表面の再構成によって左右されることが明らかになりました。この発見は、界面活性剤をベースにした系などの秩序ある液体中の薄膜の構造を、理解および制御する上で役立ちます。

この研究では、メソスケール シミュレーションと走査型力顕微鏡法が、複雑なナノ構造の材料に取り組む場合に、力強い相補的アプローチになることを示しています。

メソスケール (10-1000 nm) では、秩序ある液体 (たとえば両親媒性のブロックコポリマー) が、結晶に似た秩序を示すのは興味深いといえます。同時にそれらの液体は、分子スケールで液体らしく無秩序を示し、また液体らしくマクロスコピックな時間的長さのスケールで行動します。通常 1 つの成分の界面エネルギーは他の成分の界面エネルギーより低く、界面で集まる傾向があるため、界面上や薄膜の中ではさらに秩序が生じます。

表面付近や薄膜の中では、興味深い現象、たとえば湿潤層、球状のマイクロドメイン、有孔のラメラ、ネック部のあるシリンダ状のもの存在が多く観察されています。数々の実験的およびコンピュータ的研究が行われているにもかかわらず、これらの現象の原因は明らかになっていません。こうした問題を解明するために、Bayreuth University (ドイツ) と Leiden University (オランダ) の研究者たちは MesoDyn メソスケールのツールを用いて、薄膜中に形成するシリンダ状の polystyrene-block-polybutadiene-block-polystyrene (SBS) トリブロックコポリマーの相挙動をモデル化しました。

Robert Magerle 氏の研究チームは、適切な試料調整法と走査型力顕微鏡法を用いて、薄膜中に形成する SBS トリブロックコポリマーについての相平衡状態図を実験的に作成しました。構造形成プロセスに関する見識をさらに深めるために、MesoDynを用いてこの系の相平衡状態図をモデル化しました。



シリンダ状のトリブロックコポリマーのフィルムについての MesoDyn シミュレーション。フィルムの表面では有孔ラメラが表面を再構成しています。

### Organization

Bayreuth University, Germany  
Leiden University, The Netherlands

### Products

BIOVIA Materials Studio MesoDyn

研究者たちはこのシミュレーションを用いて、バルク構造から構造的に逸脱する部分についての根本的な原理、いわゆる表面の再構成 (SBS トリブロックコポリマーの表面付近および薄膜に形成される湿潤層、有孔ラメラやラメラなど) を確認できます。

これらの発見は、以前の研究結果を考慮に入れると、表面上および薄膜でのブロックコポリマーの相挙動に関する一般的なメカニズムを支持することになります。表面付近の構造は、成分の 1 つが選択的に表面に引き付けられる力の強さとバルク構造の変形能に依存し、マイクロドメイン構造の配向に影響を与えるか、あるいは表面の再構成が形成されるのを促します。

この研究によって、広い範囲の秩序ある液体 (界面活性剤や潤滑油を含む) の中での薄膜の構造をより深く理解し最終的にはコントロールすることができると考えられます。

Dr Robert Magerle は、「ブロックコポリマーを、無機質のナノ構造の材料を合成する際に、自己組織化したテンプレートとして用いているナノテクノロジーの分野に、大きな影響が及ぼされることを期待します」と語っています。

### 参考文献

1. A. Knoll, A. Horvat, K. S. Lyakhova, G. Krausch, G. J. A. Sevink, A. V. Zvelindovsky, and R. Magerle, Phys. Rev. Lett., 2002, 89, 035501; [www.unibayreuth.de/departments/pcii/magerle/index.html](http://www.unibayreuth.de/departments/pcii/magerle/index.html)