

高分子溶液の相分離に関する大規模シミュレーション

Large-scale simulations for phase separation in polymeric solution

金沢大学 設計製造技術研究所

吉元 健治

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、マルチブロック共重合体の自己組織化に関するシミュレーションを実施した。次世代の半導体製造プロセスとして注目される誘導自己組織化(DSA)プロセスでは、標準材料としてポリスチレン(PS)とポリメチルメタクリレート(PMMA)からなるジブロック共重合体 PS-*b*-PMMA が用いられる。自己組織化した PS-*b*-PMMA のドメイン周期(L_0)は、PS-*b*-PMMA の分子量を下げることによって、約 20-30nm まで縮小可能であるが、更なる縮小化が求められている。本研究では、この下限値をさらに下回る L_0 を実現する手法として、PS-*b*-PMMA のマルチブロック化をシミュレーションによって検討した。具体的には、既存の PS-*b*-PMMA 粗視化モデルを用いて、 n 本の PS-*b*-PMMA を直鎖状に接合したマルチブロック共重合体(PS-*b*-PMMA) $_n$ を作成し、モンテカルロシミュレーションにより自己組織化モルフォロジを予測した。図1に示すように、ジブロック($n=1$)で形成されるラメラ構造の L_0 と比較して、テトラブロック($n=2$)及びヘキサブロック($n=3$)の L_0 は約 20%~25%減少することが明らかになった。この縮小は、マルチブロックのポリマー鎖がループ状およびブリッジ状のコンフォメーションを形成することに起因すると考えられる。今後は、(PS-*b*-PMMA) $_n$ による L_0 の低減だけでなく、ブリッジ鎖を介したガイド効果の強化など、DSA への適用性について検討を進める予定である。

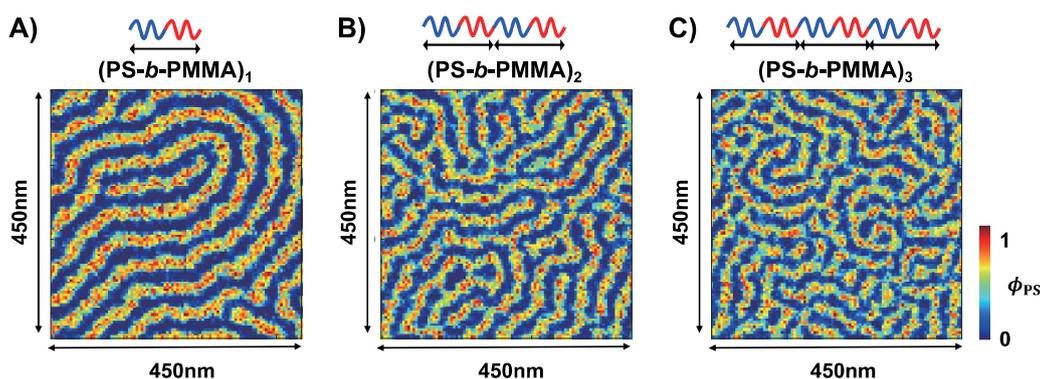


図1 マルチブロック共重合体(PS-*b*-PMMA) $_n$ のラメラモルフォロジ:(A) ジブロック($n=1$)、(B) テトラブロック($n=2$)、(C) ヘキサブロック($n=3$)。ラメラ周期 L_0 はジブロック、テトラブロック、ヘキサブロックでそれぞれ約 48 nm, 38 nm, 36 nm である。

発表論文(謝辞あり)

[1] K. Yoshimoto and T. Taniguchi, *Jpn. J. Appl. Phys.* **64**, 02SP05 (2025).