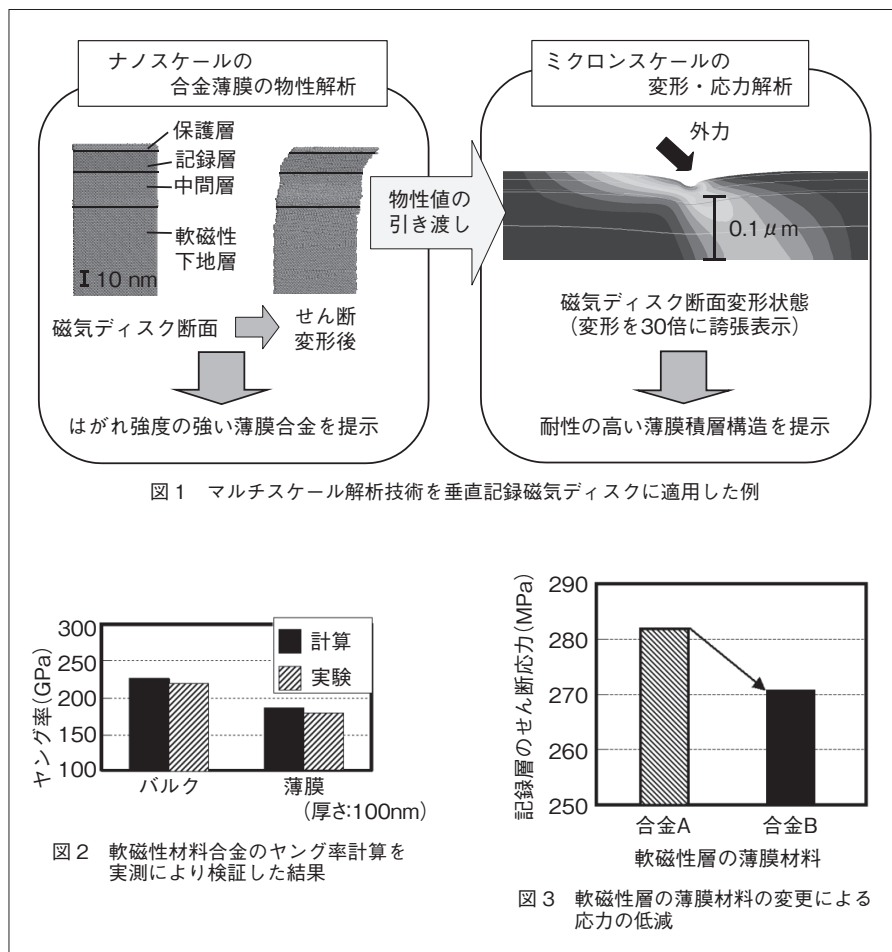


マルチスケールシミュレーション技術の開発



3. ミクロンスケールの変形・応力解析

ナノ薄膜デバイス全体の大きさはミクロンスケールであるので、外力が付加された場合のミクロンスケールの変形・応力分布を評価する必要がある。ミクロンスケールの解析を分子動力学法で行うと、解析規模が大きく計算コストが大きくなりすぎる。そこで、分子動力学法で得られた薄膜物性を、ミクロンスケールの有限要素解析に引き渡して変形・応力分布を算出するマルチスケール解析を行う。

本技術を実際に垂直記録磁気ディスクに適用した例を紹介する。はじめに、図1の左側に示すように、分子動力学法によりナノスケールの薄膜のはく離強度、ヤング率、ポアソン比といった物性値を計算する。これにより、すべての界面のはく離強度が従来の面内磁気記録媒体と同等以上のレベルになるように薄膜材料の候補を絞り込む。本事例では、60通り以上あった候補から約20通りを選定した。解析の妥当性を検証するために、ナノインデンテーションを用いたはく離試験、ヤング率測定などを実施した。軟磁性層に用いられる合金材料のヤング率について、計算と実測を比較した結果を図2に示す。バルクおよび厚さ100nmの薄膜とともに、計算と実測がよく一致しており、分子動力学法で得た物性値の妥当性が確認できる。

次に、このようにして得られた薄膜物性値をマクロな有限要素解析(図1の右側)に引き渡し、磁気ディスクに磁気ヘッドが接触する場合に磁気ディスク表面近傍に生じる変形・応力を評価した。これにより、磁気ディスクの変形・応力が小さくなる材料構成を選定する。記録再生のうえで重要な記録層におけるせん断応力を評価した例を図3に示す。この例では、軟磁性層の材料として合金Aを用いるより合金Bを用いるほうが、応力を低減できる。このように、変形・応力の低減に有効な設計指針を提示することができる。

4. おわりに

本技術は現在までに(株)日立グローバルストレージテクノロジーズの垂直記録磁気ディスクの材料設計に適用され、効果が得られているが、磁気ディスクに限らず、半導体製品等ほかの薄膜デバイスにも広く適用可能である。(原稿受付 2008年9月26日)
[大倉康孝(株)日立製作所]

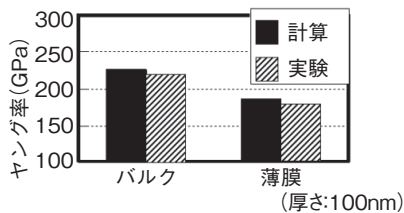


図2 軟磁性材料合金のヤング率計算を実測により検証した結果

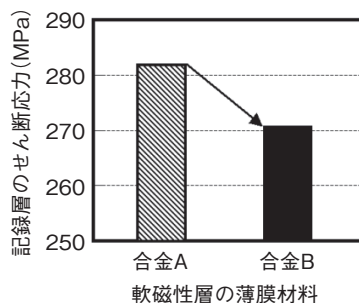


図3 軟磁性層の薄膜材料の変更による応力の低減

1. はじめに

近年、携帯用の電子機器に、磁気ディスクや半導体デバイスのような厚さがナノメートルオーダーの薄膜を用いたデバイス(ナノ薄膜デバイス)が組み込まれるようになってきた。これに伴い、ナノ薄膜デバイスに対しても、落下衝撃力のような外力によって破壊しない高信頼設計が重要となっている。ナノ薄膜デバイスは小型化・高性能化のために、厚さ数ナノ～数十ナノメートルの種々の機能性薄膜を組み合わせる必要がある。積層する薄膜数は10層程度になるうえに、それぞれの薄膜に対して候補材料が複数あり、材料の組み合わせは膨大な数になる。すべての組み合わせに対して、従来の実験主導の材料選定では多くの時間が必要となる。したがって、シミュレーションによって変形・応力分布を予測し、破壊しないような材料構成を短期間で選定し、開発期間・コストを削減することが望まれる。

このような背景から、ナノスケールの薄膜の物性値(ヤング率、ポアソン

比等)を分子動力学法により算出し、この物性値を有限要素解析(マクロ手法)に引き渡すことによってナノ薄膜デバイスの変形・応力分布を予測する技術を開発した。

2. ナノスケールの薄膜の物性解析

ナノスケールの薄膜の物性は、下地材料等の影響を受けてバルクの物性とは異なるため、文献等のデータを用いることはできない。また、測定が容易でないため、すべての材料を実測すると膨大な時間がかかってしまう。このような場合、薄膜の異種材料界面の扱いが可能な分子動力学法により薄膜物性を算出することが有効である。分子動力学法は、材料内の原子すべての運動方程式を解くことで、材料内の原子レベルの構造変化をシミュレートすることができる。この手法を用いれば、はく離強度、ヤング率、ポアソン比等の物性を算出することができ、適切な物性を有する薄膜を選定することが可能となる。