

# 一軸配向したポリテトラフルオロエチレン表面における 原子溝エピタキシをもたらす分子間相互作用

## Intermolecular Interactions Inducing Atomic Groove Epitaxy on Uniaxially Aligned Poly(tetrafluoroethylene) Surface

福島高専<sup>1</sup>, 理研 CPR<sup>2</sup>, ASET 住友化学研究室<sup>3</sup>, 東大院薬<sup>4</sup>

○田中利彦<sup>1,2,3</sup>, 青山哲也<sup>2</sup>, 石飛昌光<sup>3</sup>, 梅澤洋史<sup>1</sup>, 村中厚哉<sup>2</sup>, 内山真伸<sup>2,4</sup>

T. Tanaka<sup>1,2,3</sup>, T. Aoyama<sup>2</sup>, M. Ishitobi<sup>3</sup>, H. Umezawa<sup>1</sup>, A. Muranaka<sup>2</sup>, M. Uchiyama<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup> NIT Fukushima College, <sup>2</sup> RIKEN CPR,

<sup>3</sup> ASET Sumitomo Chemical Laboratory, <sup>4</sup> The University of Tokyo

E-mail: ttanaka@fukushima-nct.ac.jp

摩擦によって一軸配向させたポリテトラフルオロエチレン(PTFE)薄膜を基板とする分子配向技術は広範な物質、すなわちさまざまな形状（線形、ディスク状）や大きさ（低分子～高分子）の分子、無機固体、ナノ複合材料、ナノ粒子、ナノチューブ、等の配向薄膜を作製出来る一方、特定の線形分子の場合に極めて高い配向度を有する薄膜を作製できる<sup>1-3</sup>。今回は本現象の原因がPTFE表面に固有な負電荷を帯びた原子溝が線形の分子を捕捉する事にあると、ある種の分子動力学計算と実験の相関によって示した<sup>4-5</sup>。今回は末端置換基の配向度への影響を議論する。

これらの依存性を分子動力学計算で説明できるので、同計算を分析すれば表面でのPTFEと線形分子間のいかなる分子間相互作用が配向度に寄与するのかを妥当に議論し得る。典型的な直鎖アルキル末端については、分子溝に捕捉される過程を促進する効果がある事が判明した。すなわち分子がむしろ溝に直交する配置付近でアルキル鎖の熱運動

(Fig.1a)によって隣接するベンゼン環とPTFEの間に斥力増加(Fig.1b)を生じて位置エネルギーが上昇し、この配置からより安定な溝に平行な配置への運動をうながす。この効果はアルキル鎖の炭素数が4程度で最も顕著で、より長くするとアルキル鎖は溝をはみ出す傾向が現れて配向度はむしろ低下してしまうことが判った。またそもそも最良の鎖長を予測可能な精度を有する点で、蒸着可能な低分子量の線形分子はもちろん多くの物質で負に帯電した分子溝がPTFEの希有な配向誘起力の本質であると考ええる。

【謝辞】本研究の一部はJSPS科研費JP18K04930, JP17K04996の助成を受けて実施した。

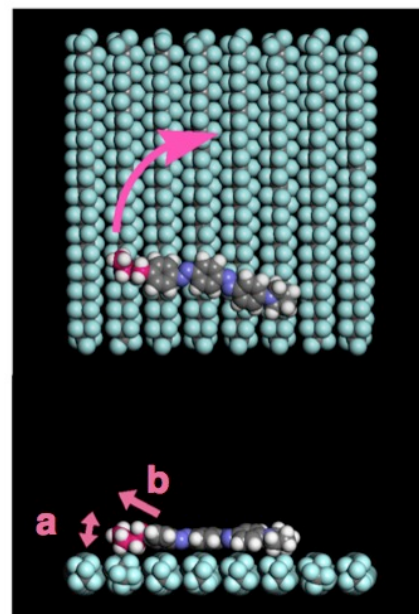
[1] *Langmuir*, 17, 2197(2001).

[2] *Chem. Lett.*, 40, 1170(2011).

[3] *Chem. Lett.*, 44, 462(2015).

[4] *J. Phys. Chem. B*, 106, 564(2002).

[5] *Chem. Lett.*, 47, 55(2018),



**Fig.1** An unstable early stage of atomic groove epitaxy of a n-butyl linear bisazo dye molecule demonstrated by an MD simulation: a) motions of the butyl chain; b) the repulsion force induced by the motions.