

金(111)表面に吸着したスマネン単層膜上の滑り摩擦の 分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulations of load dependence of sliding friction
on sumanene monolayer film adsorbed onto Au (111) surface

電通大院情報理工¹, 阪大院工² ○(M2) 養和 伶央¹, 松山 倫太郎¹, 櫻井 英博², 佐々木 成朗¹

The Univ. of Electro-Commun.¹, Osaka Univ.²,

○Reona Minowa¹, Rintaro Matsuyama¹, Hidehiro Sakurai², Naruo Sasaki¹

E-mail: reona.minowa@uec.ac.jp

スマネン $C_{21}H_{12}$ は C_{60} の部分構造を有する π 共役化合物で、2003 年に初めてその合成法が報告された^[1]。スマネンはお椀型構造をとり、お椀が反転する特性を持つ芳香族分子である。また、金基板上で容易に単層薄膜を形成することも報告されている^[2]。一方、我々はカーボン材料表面・界面の原子間力顕微鏡(AFM)シミュレーションに関する研究を進めてきた^[3]。本研究では金(111)基板上に吸着したスマネン単層薄膜上の AFM 探針による滑り摩擦の荷重依存性を、分子動力学(MD)シミュレーションで調べたので報告する。

計算モデルは水素終端ダイヤモンド探針、スマネン単層薄膜、金(111)基板から構成され、水平方向に周期的境界条件を課したユニットセルで記述する。ポテンシャルには ReaxFF ポテンシャルを用いた。熱浴の温度は $T=0.1$ K、時間刻みは $\Delta t=0.1$ fs、探針速度は $v_{tip}=50$ m/s と設定し、速度 verlet 法を適用する。まず、共役勾配法(CG 法)を用いて構造最適化した系に熱平衡化処理をした。次に、 z 方向への探針の押し込み操作を行った。その後、各押し込み状態において高さ z_s を一定に保ちながら探針の水平走査を行った。

まず低荷重下 ($z_s = 24.0$ Å, $\langle F_z \rangle = 4.32 \times 10^{-2}$ nN) で探針を水平走査させたところ、水平力曲線に周期性が現れた(Fig. 1(a))。この水平力曲線の周期性を FFT 解析で調べたところ、3 つの特徴的なピーク k_1, k_2, k_3 が現れた(Fig. 1(b))。 k_3 は探針先端とスマネン先端の原子構造を、 k_1 と k_2 はスマネン分子の配列構造を反映していることが分かった。また、水平走査時には探針とスマネン、金基板間での電荷移動が発生していることが判明した。次に少し荷重を増加させたところ

($z_s = 23.7$ Å, $\langle F_z \rangle = 6.20 \times 10^{-1}$ nN)、探針直下のスマネンが往路で走査方向に傾き、復路では元に戻る現象が見られた(Fig. 2)。さらに荷重を増加させると ($z_s = 23.5$ Å, $\langle F_z \rangle = 1.09$ nN)、探針が走査後に元の位置に戻ってもスマネンの薄膜構造は元には戻らずに破壊が生じ、破壊の過程が水平力の FFT 波形に現れた。

参考文献

[1] H. Sakurai, T. Daiko and T. Hirao: Science **301**, 1878 (2003).

[2] S. Fujii, M. Ziatdinov, S. Higashibayashi, H. Sakurai and M. Kiguchi: J. Am. Chem. Soc. **138**, 12142 (2016).

[3] R. Okamoto, K. Yamasaki and N. Sasaki: Mater. Chem. Front. **2**, 2098 (2018).

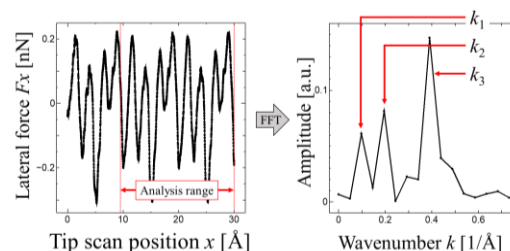


Fig. 1. (a) Lateral force curve for the tip height of $z_s=24.0$ Å (b) FFT spectrum of (a), peaks of which show typical periodicity of the crystal structure at the interface. ($\langle F_z \rangle = 4.32 \times 10^{-2}$ nN)

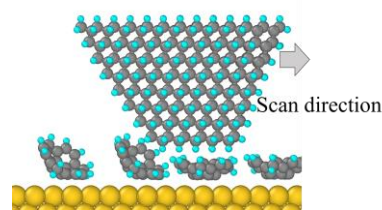


Fig. 2. Tilting of sumanene during the forward lateral scan of the tip for $z_s = 23.7$ Å and $\langle F_z \rangle = 6.20 \times 10^{-1}$ nN