液中摩擦力顕微鏡における液体分子の秩序形成

The formation of ordered structure of liquid molecules on FFM in liquid environment

仙田康浩　山口大院創成科学

Yasuhiro Senda　Yamaguchi Univ.

E-mail: senda@yamaguchi-u.ac.jp

異なる相間の境界での振る舞いは様々な系で主要な役割を担う。触媒反応，電極反応，結晶成長，等の過程では，物質と液体間の境界面で重要な反応が現れる。生体系の動的システムの維持には，細胞膜近傍の境界面でのエネルギーや物質の出入りが必須である。潤滑材や液体を用いた摩擦では，固体表面と液体間の境界面でのミクロな振る舞いが表面摩擦力に大きな影響を及ぼす。プローブ顕微鏡（SPM）を用いた液中環境での摩擦力測定では，摩擦面での液体分子の関与が指摘されたが，そのメカニズムは解明されていない[1]。今回，液体環境での摩擦の計算モデルを用いて，境界面での液体分子の振る舞いが SPM での摩擦力にどのような影響を及ぼすのか調べた。

液中 SPM の摩擦観測に対応した計算モデルを作成した。摩擦面は分子動力学法による粒子モデルを用い，一方，SPM における探針の動きはバネで表現し，この２つを動的に結合した[2]。この方法を用いてエタノール中の NaCl 結晶表面の SPM 摩擦モデルを作成した。その結果，図１に示すように NaCl 表面上でエタノール分子が層状構造を形成することがわかった。この場合，図２に示すようにエタノールが無い場合と比べて表面摩擦力が低減していた。層状構造の出現による摩擦力の低減は，グラフェンや MoS_2 等の層状物質での低摩擦と関連しており興味深い。講演ではエタノール層のミクロな構造と，層の厚さが摩擦に与える影響について解説する。

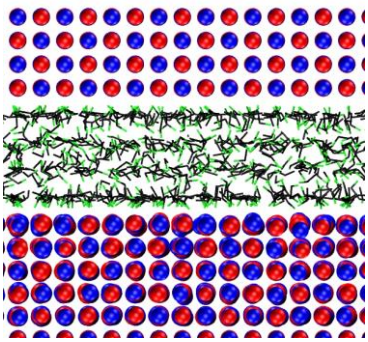

図１：NaCl 表面に挟まれたエタノール分子が層状構造を形成している様子。青と赤の球は Na^+と Cl^-のイオン，黒と緑の１本線は１つのエタノール分子を示す。

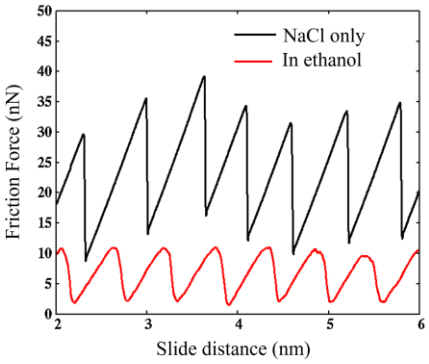

図２：SPM 探針のスライド距離に対する摩擦力。スティック・スリップ現象により，NaCl 表面の格子定数の周期を持つノコギリ状の摩擦力が現れた。赤線がエタノール中での摩擦力，黒線は NaCl 表面のみの場合の摩擦力。

参考文献

[1] Agmon *et al.* Sci. Rep. Vol. 8 4681 (2018)

[2] 仙田, Appl. Phys. Express Vol. 12 045505 (2019)

© 2021年 応用物理学会