

AFM 探針押し込みによるスマネン自己組織化膜のトライボ特性の転移

○ 菱和 怜央¹, 松山 倫太郎¹, 櫻井 英博², 佐々木 成朗^{1*}¹電気通信大学大学院情報理工学系研究科, ²大阪大学大学院工学研究科

Transition of tribological characteristics of sumanene self-assembled monolayer by AFM tip indentation

○ Reona Minowa¹, Rintaro Matsuyama¹, Hidehiro Sakurai² and Naruo Sasaki^{1*}¹The University of Electro-Communications, ²Osaka University

1. はじめに

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 年に合成法が報告された¹⁾。スマネンはボウル型構造を持ち, ボウルが反転する特性を持つ物質である。また, 金基板上で自己組織化単層薄膜を形成するという報告がある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。本研究では, 金(111)基板上に形成した自己組織化スマネン単層薄膜上での AFM 探針による滑り摩擦を, 分子動力学(MD)シミュレーションで調べたところ, 顕著なトライボ特性の転移を見出したので報告する。

2. モデル・計算手法

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(Fig. 1)。ポテンシャルには ReaxFF ポテンシャルを用いた。熱浴温度は $T=0.1$ 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, 押し込み高さ z_s を一定に保ちながら荷重が正の領域で探針の水平走査を行った。

3. 計算結果・考察

まず低荷重下 ($z_s = 24.0$ Å, $\langle F_z \rangle = 4.33 \times 10^{-2}$ 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。この水平力曲線の周期性を解析するため FFT 解析を行ったところ, スマネン分子の配列構造, およびスマネン先端の原子構造を反映していることが分かつ

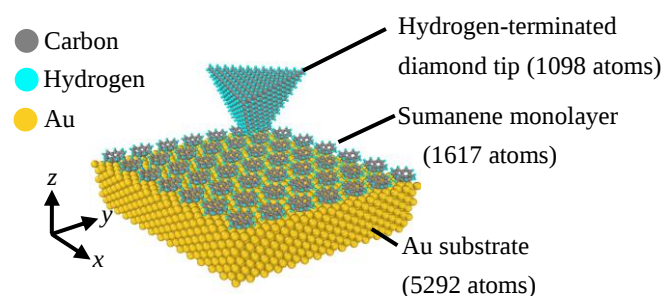


Fig. 1. 計算モデル

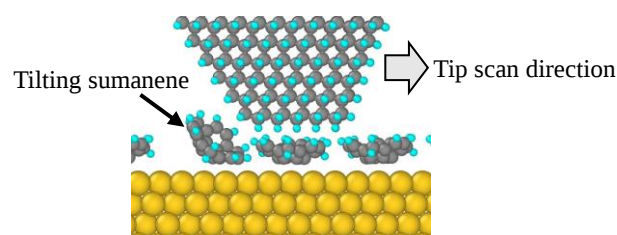


Fig. 2. 探針走査中に発生する, 走査方向へのスマネンの傾き

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)。特に, 傾き時も含めて, 水平走査時に探針とスマネン, 金基板間での電荷移動が発生することが判明した。さらに荷重を増加させると ($z_s = 23.5$ Å, $\langle F_z \rangle = 1.09$ nN), 探針走査によりスマネン薄膜構造が崩れて, セン断回数の増加に伴う破壊の特徴が FFT 波形に現れた。

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).

*E-mail: naruo.sasaki@uec.ac.jp