

# Langmuir-Blodgett 膜摩擦分子动力学模拟和 机理研究<sup>\*</sup>

张兆慧 韩奎<sup>†</sup> 李海鹏 唐刚 吴玉喜 王洪涛 白磊

(中国矿业大学理学院, 徐州 221008)

(2007 年 4 月 27 日收到, 2007 年 10 月 8 日收到修改稿)

采用分子动力学方法, 模拟了在两块石英基板上由脂肪酸( $C_{15}H_{31}COOH$ )组成的单层 Langmuir-Blodgett (LB) 膜间的摩擦特性, 探究了超薄膜在滑动过程中的摩擦和结构机理. 得出对于单层 LB 膜在滑动过程中, 在速度小于 60 m/s 时, 随着速度的增大, 其剪切压增大, 在速度大于 60 m/s 时, 剪切压随速度的增加而减小. 其链的倾斜角随着滑动速度的增加而减小. 单层膜内的分子之间以氢键方式形成了较大的分子簇, 由此导致了剪切压呈现较长的周期性, 但在单层膜之间无氢键形成.

关键词: 分子动力学模拟, 朗缪尔布洛杰特膜, 纳米摩擦, 氢键

PACC: 7115Q, 6817, 3520G

## 1. 引言

随着计算机存储及微/纳米机电系统(micro-/nano electro mechanical systems, MEMS/NEMS)的设计、制造的发展, 从技术上对系统的零部件之间的润滑及磨损的要求也越来越高. 由于组成微/纳米机电系统的部件的摩擦要求在纳米级别, 而磁盘的大存储量也要求软磁盘磁头和储存介质间的磨损在一个原子级别, 对硬磁盘则要求零磨损. 因此, 降低这些摩擦副的摩擦和磨损是这些系统成功运行的关键. 而利用超薄膜的可调控性, 对摩擦副表面结构进行修饰, 则是降低磨损、减小摩擦的一种有效方法. Langmuir-Blodgett (LB) 膜由于其结构的高度有序性、厚度在纳米尺度上的可调控性以及有机分子合成的多样性等特点, 使其可应用在微/纳米机电系统及磁盘的存储上. 因此利用 LB 膜研究纳米尺寸的摩擦性质与分子结构之间的关系变成一个十分重要的研究课题.

目前对有机分子超薄膜的纳米摩擦行为和摩擦机理进行了比较广泛的研究. 在实验上, 主要采用高精度的表面力装置(SFA)、扫描隧道显微镜(STM)、

扫描力显微镜等仪器在原子尺度上研究滑动摩擦与分子结构的关系<sup>[1-9]</sup>; 在理论上, 由于计算机的发展, 近几十年来盛行的分子动力学模拟(molecular dynamics simulation, MDS)方法因其相对低廉的成本和可靠的精度而被用来对有机分子超薄膜进行原子尺度上的摩擦行为研究, 以期理解有机分子超薄膜的纳米摩擦机理. 这些工作主要集中在有机大分子的结构基团、分子链长度和环境温度及溶剂等对有机分子超薄膜摩擦的影响机理等方面<sup>[10-15]</sup>. 而对 LB 膜的摩擦机理研究的较少. 本文利用分子动力学模拟方法对脂肪酸( $C_{15}H_{31}COOH$ )组成的单层 LB 膜间的摩擦特性进行研究, 以期了解 LB 膜的摩擦机理和氢键的形成对摩擦特性的影响. 我们主要探讨了不同滑动速度下的两个单层  $C_{15}H_{31}COOH$  LB 膜间的摩擦性质和结构的变化机理.

## 2. 理论、模型及方法

在本文中的模拟采用以下势函数:

$$V_{\text{总}} = \sum \frac{1}{2} k_{ij} (r_{ij} - b_{ij})^2 + \sum \frac{1}{2} k_{ijk} (\theta_{ijk} - \theta_{ijk}^0)^2 + \sum \frac{1}{2} k_{\xi} (\xi_{ijkl} - \xi_0)^2$$

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号: 30674177)和中国矿业大学科技基金(批准号: 2006B025)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: han6409@263.net

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\phi} k_{\phi} (1 + \cos(n\phi - \phi_s)) \\
& + \sum 4\epsilon_{ij} \left( \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) + \sum \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r_{ij}} \\
& + \sum k_{\theta} (|r_i - r_j| - r_{3e}) \\
& \times (|r_i - r_j| - r_{1e} + |r_k - r_j| - r_{2e}) \\
& + \sum k_{\tau} (|r_i - r_j| - r_{1e}) \chi (|r_k - r_j| - r_{2e}), \quad (1)
\end{aligned}$$

式中第一、二、三、四项为每一条链中键的伸缩势、弯曲势、二面角势和外相角项,第五、第六项为 Lennard-Jones(L-J)势与库仑项,其他分别为键与键、键与角交叉项,由于交叉项在这里的影响很小,我们不考虑交叉项的作用.对于膜内分子之间、尾基以及膜间的分子之间的作用采用 L-J 势和库仑势来描述.模拟使用的参数来自文献[16].

模拟采用的系统是由 2 个相对吸附在二氧化硅基板上的单层 LB 膜组成.每一单层膜可看成是由 36 个  $C_{15}H_{31}COOH$  分子组成<sup>[17]</sup>,分子结构和模拟计算的单元结构如图 1 所示,有机长分子链按三角排列而成,因为这样的排列更接近真空 LB 膜的实际情况<sup>[16]</sup>.模拟采用 OPLS-AA 力场<sup>[18-20]</sup>作为模拟力场,各原子的电荷和质量及其他的参数均采用 OPLS-AA 力场的参量.单层膜的尺寸为  $3.06 \text{ nm} \times 2.46 \text{ nm}$ ,平均每个分子的面积是  $0.21 \text{ nm}^2$ (其面积可从水面上有机分子面积-压力等温线获得),对单层膜进行复制反转构建模拟体系.两基板的距离  $d$  固定为单层膜厚度的两倍(即  $d = 3.9 \text{ nm}$ ).对初始系统构型,其每个原子的初始速度由程序按 Maxwell 分布生成,先对其进行 5000 步的能量优化达到收敛,第二步采用 10000 步的分子动力学(MD)平衡,同时采用 Nose-Hoover 方法<sup>[21-23]</sup>对系统施加 300 K 的温度热浴.第三步采用 100 万步分子动力学方法在具有周期性边界条件的长方盒子中模拟两单层膜的相对运动.由于模拟中固定了上下基板间的距离(该距离小于盒子高度),因此单层膜在基板法线方向( $Z$ 方向)上的运动被限制在盒子内部,即周期性边界条件基板平面( $XY$ 平面)内起作用.模拟采用的时间步长均为  $0.002 \text{ ps}$ ,采用 SHAKE 算法<sup>[24]</sup>对分子链施加约束,利用蛙跳(leap-frog)方法对牛顿方程进行积分.非键合作用的 L-J 势和 Coulomb 截断半径分别为  $0.9 \text{ nm}$  和  $1.0 \text{ nm}$ .模拟时保持下层膜不动,以恒定速度拉动上面的单层膜沿  $X$  正方向运动.我们对不同滑动速度下的摩擦体系进行了模拟.

本模拟是在 P4.3.04G fedora5.0 操作系统上采

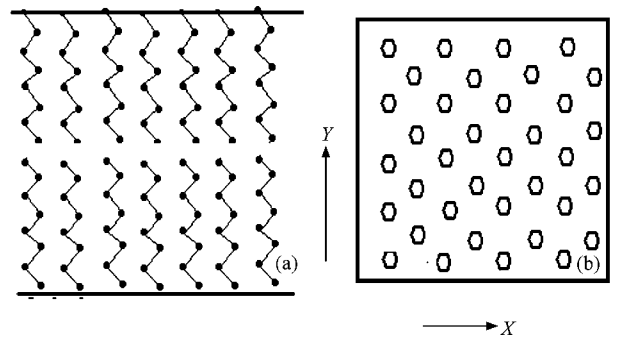


图 1 单层膜的侧视图(a)和俯视图(b)

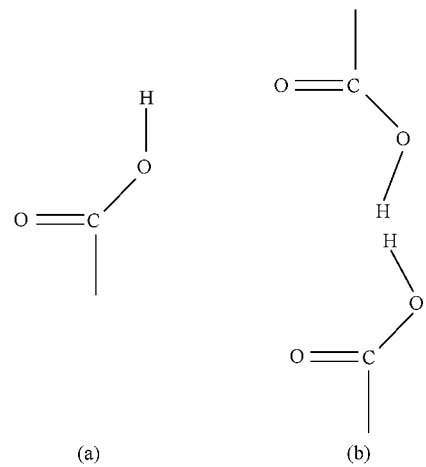


图 2 脂肪酸链的尾基构型

用 GROMACS-3.3.1<sup>[25-29]</sup>程序包进行的.

### 3. 模拟结果及讨论

对于极性的羧酸( $C_{15}H_{31}COOH$ ),其尾基的相对构型如图 2 所示,图 2(a)为羧基的结构,图 2(b)为上下相对两层膜中羧酸尾基结构示意图.我们采用图 2(b)型方式构建分子摩擦体系,探讨了系统的剪切压和构型结构与滑动速度的关系,首先以 36 根分子链组成的单层膜,以图 2(b)构型作为研究对象探讨其摩擦中的结构机理.

#### 3.1. 剪切压的变化

在摩擦学中,剪切压即剪切力和与之垂直的接触面积的比值,在文中剪切力即摩擦力.图 3 为 LB 膜的滑动距离与剪切压的变化关系图,其中图 3(a)为滑动速度为  $6 \text{ m/s}$  时的剪切压随滑动距离的变化关系,图 3(b)为 5 到  $9 \text{ nm}$  区间的放大示意图.从

图 3(a) 中可以看出, 剪切压与滑动距离有严格的周期性, 且周期为 3 nm, 这正是我们模型沿着  $x$  方向的长度, 这个周期性主要是由于我们的程序采用的周期性边界条件引起的. 从图 1(b) 可以看出, 由于系统的分子排列为三角排列, 沿  $x$  方向有 7 个晶格周期. 而从图 3(b) 中显现出和非极性分子膜不同的周期性, 结果没有出现以沿  $x$  轴方向的以单晶格长度为周期的周期性, 而是呈现以两个晶格长度的周期性变化, 即周期为 0.9 nm. 导致这种不同的原因主要是由于在膜内分子的极性尾基之间形成了氢键和膜间的非键合作用. 在滑动过程中, 由于膜间的排斥作用和膜内的氢键吸引, 致使相邻的几个分子链向一起集中, 形成分子簇, 在相互滑动的过程中表现出

的是以分子簇为单位的晶格周期性, 因此出现了较长的间隔周期, 出现了以两个晶格为周期的周期性. Koike<sup>[17]</sup> 在模拟中考虑了二氧化硅基板表面的势能与膜内的库仑能相比来得比较平滑, 是使振荡没有呈现晶格周期的主要原因, 当不考虑膜内的库仑相互作用能时, 基板与羧基间的作用力使得其呈现周期性, 在我们的模拟中考虑了膜间和单层膜内的库仑作用, 但剪切压振荡的周期比文献 [17, 30] 报道的结果要长, 且其振荡幅度要小得多. 另外, 从图 3 中可以看出剪切压比文献 [30] 的结果稍大, 这可能是我们采用的模型和单层膜的滑动速度比文献 [30] 报道的要大造成的.

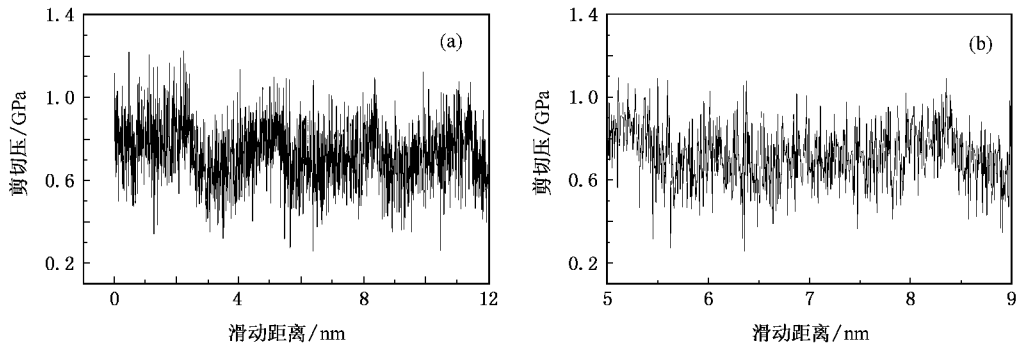


图 3 (a) 滑动速度为 6 m/s 时的剪切压随滑动距离的变化关系; (b) 为 5—9 nm 区间曲线图

图 4 为剪切压与 LB 膜滑动速度之间的变化关系图. 从图中可以看出在速度小于临界速度 60 m/s 区间里, 随着速度的增加剪切压也增加, 并且在滑动速度较大时, 剪切压单调增加; 但速度超过 60 m/s 时, 剪切压随速度的增加而减小. 在摩擦过程中, 摩擦副之间的摩擦力和剪切压有关, 剪切压越大, 摩擦力越大. 文献 [31] 的实验结果也表明当滑动速度增大时, 摩擦系数呈上升趋势. 在文献 [32] 中, 实验结果显示随着速度的增加, 以—OH 为尾基的  $\alpha$  (OHC<sub>16</sub>) 的摩擦力也增加, 在超过临界速度时, 随着速度的增加, 摩擦力减小, 这与我们的模拟结果一致.

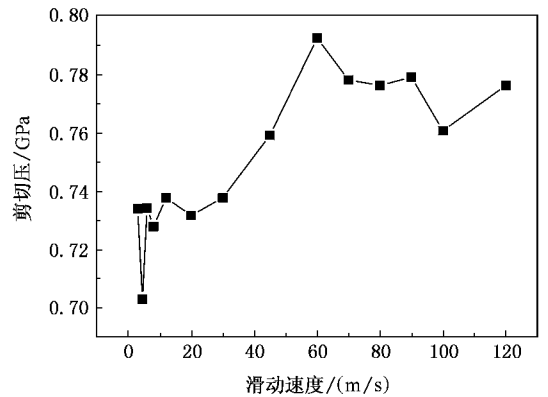


图 4 不同速度时的剪切压

系统中的压强张量可以表示为

$$P = \frac{2}{V_{\text{box}}} (E_{\text{kin}} - \mathcal{E}), \quad (2)$$

其中  $V_{\text{box}}$  是模拟系统的体积,  $\mathcal{E}$  是维里项,  $\mathcal{E} = -\frac{1}{2} \sum_{i \leq j} r_{ij} \otimes F_{ij}$ , 其中  $F_{ij} = -\nabla V_{ij}$ ,  $V_{ij}$  是势能, 由方程 (2) 可知, 当维里项减小时, 能量之差增大, 此时的压强张量也随之增大, 即剪切压也随之增加. 在滑动

过程中, 随着速度的增加, 膜内的分子簇也愈来愈不稳定, 分子快速地融进分子簇, 同时又有分子快速地脱离分子簇, 体系的势能变化较大, 此时的  $F_{ij}$  增加, 导致维里项减小, 从而导致压强增大. 但是, 当速度超过临界速度 60 m/s 时, 其滑动速度对单层膜的有序性有影响, 体系逐渐趋于稳定.

通常情况下, 固体表面、非极性探头与非极性和

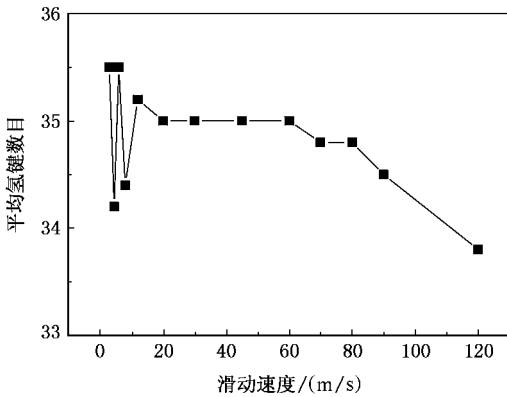


图5 氢键的数目随速度的变化

极性表面,极性探头与非极性表面间的摩擦与速度之间呈对数关系<sup>[33-36]</sup>;但极性探头与极性表面间的摩擦机理相对复杂,其速度在低速区增加很快,但到达临界速度后变化趋于缓慢<sup>[33]</sup>. Nikhil 等<sup>[37]</sup>的实验结果分析了不同表面的摩擦机理,得出以自组装膜修饰的表面在低速区主要是黏-滑(stick-slip)摩擦力起主要作用,而在超过临界速度后,则是黏滞摩擦力起主要作用,在临界区域对应着状态的变化,从而导致体系的摩擦力变化.文献[32]对极性有机超薄膜的实验也说明临界速度对应着体系分子状态的过渡态.

### 3.2. 氢键的影响

$C_{15}H_{31}COOH$  分子是长链脂肪酸,由于羧基基团是极性基团,并且羧基基团间可能形成氢键,因此羧基基团间的相互作用较无极性的烷链间作用要大.我们通过计算了系统内可能形成氢键的给体与受体间的距离  $r$  及键角  $\alpha$ ,对上层膜和下层膜及整个系统的氢键的数目作了分析<sup>[25]</sup>.结果表明,整个系统的氢键数目等于上下两层膜内的氢键数目之和,即在两个单层膜间没有氢键形成,只在在每个单层膜内分子的尾基之间形成了氢键.主要原因可能是:每一单层膜的表面都是相同的极性羧基,极性羧基之间的排斥作用力使得膜间距离超出了氢键作用的范围,因此不利于氢键的产生;在单层膜内分子相距的较近,相邻的两个尾基之间相互吸引形成氢键.我们研究了高速相对运动下的体系氢键的变化.图5为滑动过程中在单层膜内形成的氢键数目与滑动速度之间的关系.结果表明,在高速运动时,氢键数目比在低速时少.这主要因为在低速运动时,膜内分子之间的构型变化随运动的变化同步,分子弛豫时间较

长,不致破坏分子间的氢键,从而维持了构型的稳定;但是,在高速运动时,分子构型变化较大,弛豫时间比较短,同时由于氢键力属于弱相互作用力,部分氢键的作用力不足以保持氢键构型的稳定,使得其氢键遭到破坏,使得氢键数目比在低速时少.

### 3.3. 速度对脂肪酸链倾角的影响

在动力学模拟中,链的倾角往往是膜的构型变化的一个重要表征参量.由于组成单层膜的分子链有36根,在相对运动时由于膜间极性羧基间的排斥力作用比较大,克服了膜内氢键的弱吸引作用,导致边缘的分子向外张开,只有中部的分子很好地表现了无限大超薄膜中的分子的构型的变化,因此我们选取了处于中部的分子作为研究对象,由于链的头基吸附在基板上,其头部附近倾斜相对较小,而极性的尾基由于膜内分子之间的氢键作用和膜间的排斥力作用,尾基倾斜比较大,我们选取链的  $C_4-C_{10}$  之间的倾角作为分子链的倾角,以  $\theta = \cos^{-1}(l/l_0)$ <sup>[30]</sup> 表示之,其中  $l$  是任意时间的  $C_4$  和  $C_{10}$  间的  $z$  方向的距离, $l_0$  是单个分子链在理想状态下  $C_4$  与  $C_{10}$  之间的间距.图6是链的倾斜角随滑动速度的变化关系图,从图中可以看出,在低速时,分子链的倾角比高速时要大,这主要是由于相对滑动过程中构型的变化随运动较及时;当速度增大后,构型剧烈变化使得倾角程度减小.在速度从3 m/s到12 m/s的区域,我们可以看到其倾角的变化呈直线下降趋势,说明在速度较低时,速度的变化对分子的倾斜角影响较大,但当膜在高速运动时,链角的变化不是很大,这说明在速度达到一定程度后,运动速度对链的倾角的影响较小,在超过40 m/s的区域,倾斜角比文献[17,30]中的链的倾角来小,这主要是由于采用的模拟的模型和力场不同所致,文献[30]中采用了 unit-

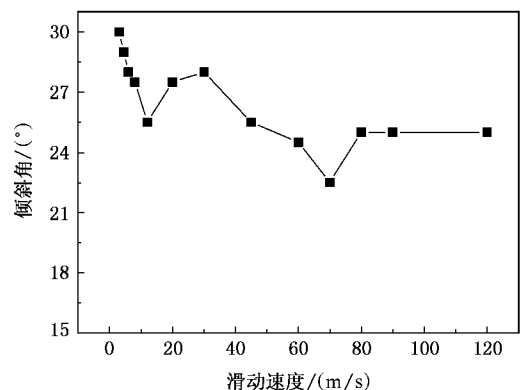


图6 链倾角随滑动速度的变化关系图

atom(UA)模型,在此模型下的分子间的作用较全原子模型下要大.文献[38]中指出,三角排列在通常情况下比其他种排列的倾斜角来的要大,但我们的模拟结果并没有表现出来,这可能与采取模型中,选取中间受边缘效应影响较小的分子作为分析对象有关.

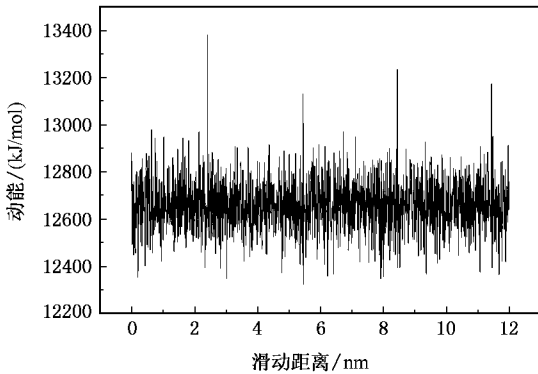


图7 动能与滑动距离的变化关系

### 3.4. 动能的变化机理

模拟时我们取每50步输出一次构型坐标,通过构型可视化软件VMD,可以观察系统在相对运动过程中的构型的变化情况,通过观察发现,分子沿Z轴在XZ面内做周期性摆动.同时我们也研究了其动能随滑动距离的变化,图7是模拟系统的动能随滑动距离的变化关系图.从图7可以看出,动能并不是保持恒定,而是呈现同剪切压一样的周期性.这是黏-滑效应的体现,它主要是尾基间的相互作用引起的.当膜间不同的两个分子滑动接近时,由于排斥力的作用,使得分子链相对基板平面的倾角加大,同时能量储存在膜内,使分子间作用力增大,同时剪切压减小,当它们相互远离时,分子链又由于排斥力而向

相反的方向运动,此时,有机分子把储存在膜内的能量释放出来,导致动能增大,剪切压减小.同时可以看出,在滑动过程中,相邻的几个分子由于氢键和膜间分子的排斥作用,使膜内分子向一起聚集,从而在基板上形成了几个分子簇,而在这些分子簇之间,则以“空谷”形式出现;每个单层膜中都是以分子簇正对应着另一个单层膜的一个“空谷”,即分子簇-空谷.这主要是由于聚集在一起的分子簇的极性很大,导致膜相互之间的排斥力增大,“推”着对面对应的分子链向四周倾斜.“空谷”和分子簇的出现也对应了剪切压力没有严格的晶格周期性.这种现象也导致了边缘的分子链向四周展开且有很大变形,它们的强排斥力和氢键的共同作用,使得分子链的倾斜角比非极性分子要大.

## 4. 结 论

采用分子动力学方法对两块 $C_{15}H_{31}COOH$ 分子单层LB膜的摩擦特性进行了模拟,模拟结果显示剪切压随滑动速度增大而增大,在速度超过60 m/s时,剪切压随速度的增加而减小,说明单层膜在高速下有着较大的摩擦力;由于膜间的相互排斥作用及膜内相临分子间氢键的作用,单层膜内的分子相互聚集,形成分子簇,同时在另一LB膜对应位置出现了“空谷”,导致了在滑动过程中的剪切压出现了以两个晶格长度为周期的变化规律;膜内的分子间以氢键效应形成的“分子簇”阻止了分子因受膜间的排斥力而发生的大的倾斜,因此链的倾斜角较小;由于相对运动速度增加时膜的构型弛豫时间较短,使得链在黏滑过程中位置变化较大,导致部分分子间无法形成氢键,使系统的氢键数目在高速时比低速时来得少.

[1] Zhang L Z, Leng Y S, Jiang S Y 2003 *Langmuir* **19** 9742  
 [2] Qian L M, Luo J B, Wen S Z, Xiao X D 2000 *Acta. Phys. Sin.* **49** 2240 (in Chinese) [钱林茂、雒建斌、温诗铸、萧旭东 2000 物理学报 **49** 2240]  
 [3] Qian L M, Luo J B, Wen S Z, Xiao X D 2000 *Acta. Phys. Sin.* **49** 2253 (in Chinese) [钱林茂、雒建斌、温诗铸、萧旭东 2000 物理学报 **49** 2253]  
 [4] Bhushan B, Kulkarni A V, Koinkar V N 1995 *Langmuir* **11** 3189  
 [5] Overmey R M, Takano H, Fujihira M, Mayer E, Guntheradt H J 1994 *Thin Solid Films* **240** 105

[6] Fujihira M, Kawate H J 1994 *Vac. Sci. Technol. B* **12** 1604  
 [7] Fujiwara I, Kamei T, Seto J 1995 *Jpn. J. Appl. Phys.* **34** 4932  
 [8] Klein J, Perhia D, Warburg S 1991 *Nature* **352** 143  
 [9] Klein J, Kumacheva E, Mahalu D, Perhia D, Fetters 1994 *Nature* **370** 634  
 [10] Li X, Hu Y Z, Wang H 2005 *Acta. Phys. Sin.* **54** 3787 (in Chinese) [李欣、胡元中、王慧 2005 物理学报 **54** 3787]  
 [11] Byeongwon P, Michael C, Mark J S, Gary S G 2003 *Langmuir* **19** 9239  
 [12] Joseph H, Michael K 1990 *J. Chem. Phys.* **93** 7483

- [ 13 ] Paul T M ,Gauangtu G ,Ginger M C ,Judith A H 2005 *J. Chem. Phys.* **122** 24701
- [ 14 ] Hu Y Z ,Zhang T ,Ma T B ,Wang H 2006 *Comp. Mater. Sci.* **38** 98
- [ 15 ] Zhang L Z ,Jiang S Y 2003 *J. Chem. Phys.* **119** 765
- [ 16 ] Zhang H Y ,Wei Y 1994 *Acta. Phys. Chim. Sin.* **10** 998 ( in Chinese )[ 张红宇、韦 钰 1994 物理化学学报 **10** 998 ]
- [ 17 ] Koike A ,Yoneya M 1996 *J. Chem. Phys.* **105** 6060
- [ 18 ] Andre F de M ,Milan T 2005 *J. Phys. Chem. B* **109** 14032
- [ 19 ] Marcus G M 2005 *Fluid. Phase. Equilibra* **248** 255
- [ 20 ] Orgensen W L ,Tirado R J 1988 *J. Am. Chem. Soc.* **110** 1657
- [ 21 ] Nose S 1984 *Mol. Phys.* **52** 255
- [ 22 ] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695
- [ 23 ] Pierleoni C ,Ryckaert J 1992 *Mol. Phys.* **175** 731
- [ 24 ] Ryckaert J P ,Ciccotti G ,Berendsen H J C 1977 *J. Comp. Phys.* **123** 327
- [ 25 ] Van der Spoel D ,Lindahl E ,Hess B ,Van Buuren A R ,Apol E ,Meulenhoff P J ,Tieleman D P ,Sijbers A L T M ,Feenstra K A ,van Drunen R ,Benrendtsen H J C *Gromacs user Manual Version-3.3.1*
- [ 26 ] Bekker H ,Berendsen H J C ,Dijkstra E J ,Achterop S ,Van Drunen R ,van der Spoel D ,Sijbers A ,Keegstra H ,Reitsma B ,Renardus M K R *In Physics Computing* 92 ( *Singapore* , 1993 ). *de Groot , R A . , Nadrchal , J , eds . World Scientific .*
- [ 27 ] Berendsen H J C ,van der Spoel D ,van Drunen R 1995 *Comp. Phys. Comm.* **91** 43
- [ 28 ] Lindahl E ,Hess B ,van der Spoel D 2001 *J. Mol. Mod.* **7** 306
- [ 29 ] Van der Spoel D ,Lindahl E ,Hess B ,Groenof G ,Mark A E , Berendsen H J C 2005 *J. Comp. Chem.* **26** 1701
- [ 30 ] H Wang ,Y Z Hu ,Tao Zhang 2007 *Tribol. Inter.* **40** 680
- [ 31 ] Xue Q J ,Zhang J 1996 *Ultra-thin Films with Molecule Ordering Structure and Their Applications in Tribology* ( Liaoning Science and Technology Press ) 120 ( in Chinese )[ 薛群基、张 军 1996 分子有序系统超薄膜及其在摩擦学中的应用( 辽宁, 辽宁科学技术出版社 )第 120 页 ]
- [ 32 ] Y H Liu ,D F Evans 1996 *Langmuir* **12** 1235
- [ 33 ] Gnecco E ,Bennewitz R ,Gyalog T *et al.* 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 1172
- [ 34 ] Sang Y ,Dube M ,Grant M 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 17 4301
- [ 35 ] Bouhacina T ,Aime J P ,Gauthier S *et al* 1997 *Phys. Rev. B* **56** 7694
- [ 36 ] Brewer N J ,Beake B D ,Leggett G J 2001 *Langmuir* **17** 1970
- [ 37 ] Nikhil ST ,Bhushan B 2005 *Nanotechnology* **16** 2309
- [ 38 ] Marvin B ,Julian H R C 1991 *J. Chem. Phys.* **95** 540

## Study of friction between hydrocarboxylic acid Langmuir-Blodgett films and its mechanism using molecular dynamics simulation<sup>\*</sup>

Zhang Zhao-Hui Han Kui<sup>†</sup> Li Hai-Peng Tang Gang Wu Yu-Xi Wang Hong-Tao Bai Lei

( *College of Science , China University of Mining & Technology , Xuzhou 221008 , China* )

( Received 27 April 2007 ; revised manuscript received 8 October 2007 )

### Abstract

Molecular dynamics simulation has been used to study the friction and structure mechanism of Langmuir-Blodgett films of hydrocarboxylic acid (  $C_{15}H_{31}COOH$  ) deposited on the  $SiO_2$  substrates at different sliding velocities. The results show that , for a certain monolayer , the shear pressure between the monolayers increases when the sliding speed is below 60 m/s and decreases when the sliding speed exceeds 60 m/s. The molecular tilt angle decreases as the velocity increases. The molecular clusters formed in the monolayers by the hydrogen-bond caused the long shear periods , but there is no hydrogen-bond between the monolayers.

**Keywords :** molecular dynamic simulation , Langmuir-Blodgett films , nano-tribology , hydrogen bond

**PACC :** 7115Q , 6817 , 520G

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 10674177 ) and the Science Foundation of China University of Mining and Technology ( Grant No. 2006B025 ).

<sup>†</sup> E-mail : han6409@263.net