

原子・分子の自在配列と特性・機能
2022 年度採択研究代表者

2022 年度
年次報告書

桑原 卓哉

大阪公立大学 大学院工学研究科
講師

メカノケミストリーを活用した 2D 超潤滑原子構造の自在創成

研究成果の概要

メカノケミストリーを活用した 2D 超潤滑原子構造の自在創成技術を開発することを目的として、主に計算科学手法を用いた検討を行った。第一年次は、超潤滑性発現の鍵を握る二硫化モリブデン (MoS_2) の種となる潤滑油添加剤モリブデンジチオカーバメート (MoDTC) のメカノケミカル分解プロセスの初期過程の検討を行った。2 つの表面間に MoDTC 分子を 1 分子配置し、準静的に圧力を加えた。ここで、半経験的量子化学計算手法である GFN1-xTB と第一原理密度汎関数計算手法を用いた。アモルファスカーボン表面間での圧縮計算では、4 GPa 程度の接触圧力が Mo-S 結合を一本切断するのに必要だったのに対し、Hematite (Fe_2O_3) 表面では 2 GPa 以下で文献と同じサルファイド以下の分解まで反応が進行することが分かった。モリブデン原子が Hematite 表面の酸素原子と結合を形成することで、Mo-S 結合が弱まるためであると考えられる。また、炭化ケイ素 (SiC) 表面にエピタキシャル成長した単層グラフェンのせん断下でのナノスケールにおける摩擦特性に関して、実験とシミュレーションを組み合わせた検討を行った。低荷重下では超潤滑が示されたのに対し、荷重の増加によって摩擦係数が急激に増加することを、原子間力顕微鏡を用いたナノスケール摩擦試験により明らかにした。密度汎関数強束縛近似を用いた量子化学分子動力学シミュレーションにより、この超潤滑状態の破れは AFM チップとグラフェンの間での化学結合の生成に起因することが分かった。摩擦界面に 10 GPa の接触圧力が加わると、局所的にグラフェンの sp^2 -to- sp^3 転移が誘起されバッファ層との化学結合が生成する。しかし、この結合は荷重を取り除くことで破断可能な可逆的な現象であり、接触下でのみ高硬度なナノダイヤモンドを形成できることを明らかにした。故に、力学的な刺激の on-off により局所的にグラフェンの物性を操作できる可能性が示唆された。

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Formation of intermittent covalent bonds at high contact pressure limits superlow friction on epitaxial graphene”, Bartosz Szczefanowicz, [Takuya Kuwahara](#), Tobin Filleter, Andreas Klemenz, Leonhard Mayrhofer, Roland Bennewitz, and Michael Moseler, *Physical Review Research* 5, L012049, 2023