

## 計算化学手法を用いたMoS<sub>2</sub>潤滑被膜の 超低フリクション発現機構の解析

○ 森田祐輔<sup>1</sup>、小野寺 拓<sup>1</sup>、坪井秀行<sup>1</sup>、古山通久<sup>1</sup>、畠山 望<sup>1</sup>、遠藤 明<sup>1</sup>  
高羽洋充<sup>1</sup>、久保百司<sup>1</sup>、Carlos Del Carpio<sup>1</sup>、西野典明<sup>2</sup>、鈴木 厚<sup>2</sup>、宮本 明<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>東北大学大学院工学研究科 (980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

<sup>2</sup>トヨタ自動車 (471-8572 愛知県豊田市トヨタ町 1 番地)

<sup>3</sup>東北大学未来科学共同研究センター (980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

**【緒言】**二硫化モリブデン(以降MoS<sub>2</sub>)は、自動車用エンジンオイルの添加剤ジアルキルジチオカルバミン酸モリブデンの分解により基板表面に形成され、潤滑被膜を形成することで超低フリクション特性を示す。現在、自動車の燃費向上のためエンジン摺動部の摩擦・摩耗の抑制が求められているが、これには実験的な解析が困難である境界潤滑下におけるMoS<sub>2</sub>潤滑被膜に関する原子・電子レベルでの知見が必要となる。そこで本研究では、計算化学手法を用いてMoS<sub>2</sub>潤滑被膜の超低フリクション発現機構の解析を行った。

**【計算方法】**計算には、当研究室で開発した化学反応対応型分子動力学計算プログラム NEW-RYUDO および Tight-binding 量子分子動力学計算プログラム New-Colors を用いた。

**【結果と考察】**まずNEW-RYUDOプログラムを用いて鉄基板表面におけるMoS<sub>2</sub>潤滑被膜形成ダイナミクスの解析を行った。図1に計算モデルを示す。計算モデルには鉄基板間にMoS<sub>2</sub>分子を不規則に配置した系を用いた。図2に潤滑被膜形成ダイナミクスの様子を示す。図2より、15 psにおいて鉄基板表面付近から徐々に被膜が形成され始め、60 psにおいて潤滑被膜が3層形成されることがわかる。またxy平面図から正六角形のMoS<sub>2</sub>結晶が形成されていく様子がわかる。さらに、潤滑被膜形成後は硫黄層-硫黄層間での滑りが観察された。次にMoS<sub>2</sub>分子の自己組織化による潤滑被膜の形成および硫黄層間での滑りが摩擦係数に与える影響について解析を行った。図3に摩擦係数の経時変化を示す。図から、潤滑被膜を形成する過程で摩擦係数は急激に減少することがわかる。さらに、硫黄層-硫黄層間で滑ることにより摩擦係数は約0.04まで減少した。500 psにおいて摩擦係数は減少過程にあり、計算を続けることでさらに低い摩擦係数が得られると考えられる。このように、MoS<sub>2</sub>分子の自己組織化による潤滑被膜の形成および層間での滑りという現象が、超低フリクション特性の発現に重要な役割を果たしていることが明らかになった。当日はNew-Colorsプログラムを用いた量子論的な解析を行った結果についても報告を行う。

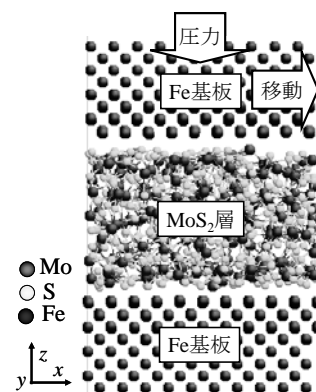


図1 計算モデル

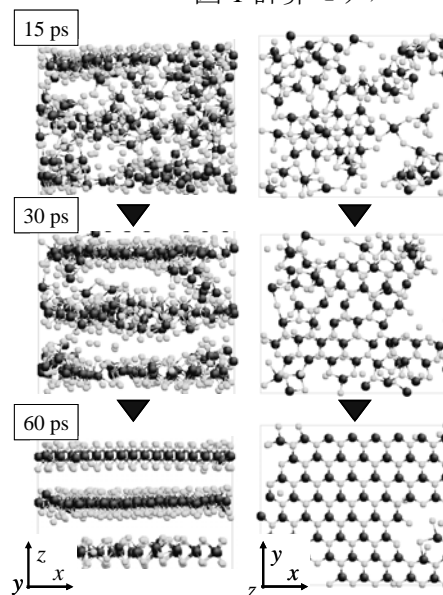


図2 潤滑被膜形成ダイナミクス

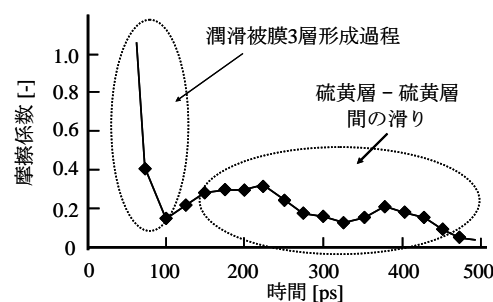


図3 摩擦係数の経時変化