

第一原理計算によるトライボフィルム解析のための XAFS プロファイルの導出
Derivation of XAFS Profiles for Tribofilm Analysis by First-Principles Calculations

京都大学 大学院工学研究科 機械理工学専攻 機械機能要素工学研究室 平山 朋子

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムの Materials Studio を用いて、分子のモデリングおよび X 線吸収微細構造 (XAFS) の第一原理計算を実行した。XAFS 解析は、試料に X 線を照射し、X 線の吸光度から対象元素の結合状態を解析する手法である。XAFS プロファイルのうち、吸光度が急激に増加する箇所は吸収端と呼ばれ、第一原理計算は X 線吸収端近傍構造 (XANES) 領域で行った。我々は、トライボフィルムと呼ばれる摩擦界面に形成される膜の XAFS 解析に取り組んでおり、実験により得られた XAFS プロファイルから化学状態を推定する際に、第一原理計算による XAFS プロファイルを指紋認証的に活用している。

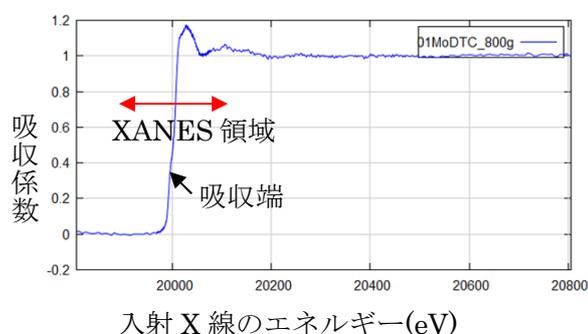


図1 Mo-K 吸収端近傍 XAFS プロファイル

化学状態の推定の際にリファレンスとして使用する XAFS プロファイルには、第一原理計算による XAFS プロファイルのほかに、標準試料を用いて実験することで得られる XAFS プロファイルがある。標準試料を測定する方法は、モデリングや近似なしに実際の構造を反映しているという点で信頼性があると考えられるが、事前に標準試料を準備しなければならないという問題点がある。このため、生成物が予想できない場合や生成物の入手が困難である場合には、第一原理計算による XAFS プロファイルの導出は有用である。また、価数や配位数を簡単に変更して XAFS プロファイルを導出できる点も第一原理計算による XAFS プロファイル算出の長所である。

Materials studio を用いて、分子のモデリングおよび XAFS プロファイルの導出を行った化合物の例を示す。算出された XAFS プロファイルは、標準試料を測定して得られた XAFS プロファイルとよく対応していることが確認できた。今後は、標準試料を準備することが困難な化合物の XAFS プロファイルの導出に取り組む。

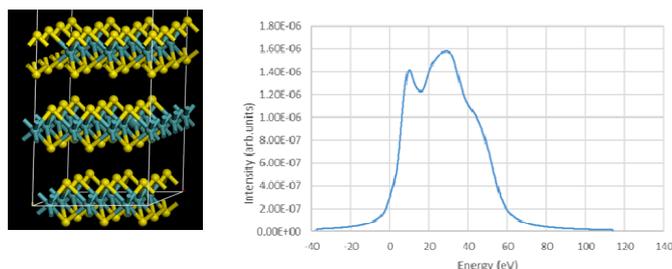


図2 MoS₂ の結晶モデルおよび第一原理計算による XAFS プロファイル