



## Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-17-0560**  
**Tribologické vlastnosti 2D materiálov a príbuzných nanokompozitov**

Zodpovedný riešiteľ **Ing. Milan Ťapajna, PhD.**  
Príjemca **Centrum pre využitie pokročilých materiálov SAV, v. v. i.**

### Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Centrum pre využitie pokročilých materiálov SAV, v.v.i. (CEMEA SAV);  
Elektrotechnický ústav SAV, v.v.i. (EIÚ SAV);  
Fyzikálny ústav SAV, v.v.i. (FÚ SAV);  
Ústav materiálov a mechaniky strojov SAV, v.v.i. (ÚMMS SAV);

### Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

Institute for problem of material science (IPMS), National Academy of Sciences of Ukraine (NASU);  
Department of Physics Chemistry, and Biology, Thin Film Physics Division, Linköping University, Linköping, Sweden;

### Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

--

### Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. A. Kozak, et al., Nanofriction properties of mono- and double-layer Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXenes, ACS Appl. Mater. Interfaces 14 (2022) 36815.
2. M. Bodík, et al., Friction control by engineering the crystallographic orientation of the lubricating few-layer MoS<sub>2</sub> films, Appl. Surf. Sci. 540 (2021) 148328.
3. A. Kozak, et al., Angular dependence of nanofriction of mono- and few-layer MoSe<sub>2</sub>, Appl. Surf. Sci. 567 (2021) 150807.
4. A. Kozak, et al., Effect of the crystallographic c-axis orientation on the tribological properties of the few-layer PtSe<sub>2</sub>, Appl. Surf. Sci. 605 (2022) 154883.
5. M. Sojková, et al., High carrier mobility epitaxially aligned PtSe<sub>2</sub> films grown by one-zone selenization, Appl. Surf. Sci. 538 (2021) 147936.
6. M. Sojková, et al., Growth of PtSe<sub>2</sub> few-layer films on NbN superconducting substrate, Appl. Phys. Lett. 119 (2021) 013101.
7. J. Hrdá, et al., Tuning the charge carrier mobility in few-layer PtSe<sub>2</sub> films by Se: Pt ratio, RSC Adv. 11 (2021) 27292.
8. A. Anušová, et al., On the extraction of MoO<sub>x</sub> photothermally active nanoparticles by gel filtration from a byproduct of few-layer MoS<sub>2</sub> exfoliation, Nanotechnology 32 (2021) 045708.
9. A. A. Onoprienko, et al., Structural and mechanical properties of Ti-B-C coatings prepared by dual magnetron sputtering, Thin Solid Films 730 (2021) 138723.

10. V. I. Ivashchenko, et al., Structural, mechanical, optoelectronic and thermodynamic properties of bulk and film materials in Ti–Nb–C system: First-principles and experimental investigations, *Physica B* 646 (2022) 414311.
11. A. Shaji, et al., Stepwise sulfurization of MoO<sub>3</sub> to MoS<sub>2</sub> thin films studied by real-time X-ray scattering, *Appl. Surf. Sci.* 606 (2022) 154772.
12. P. Hutár, et al., Highly crystalline MoS<sub>2</sub> thin films fabricated by sulfurization, *Phys. Stat. Solidi B* 256 (2019) 1900342.
13. M. Sojková, et al., Tuning the orientation of few-layer MoS<sub>2</sub> films using one-zone sulfurization. *RSC Adv.* 9 (2019) 29645.
14. M. Bodík, et al., Collapse mechanism in few-layer MoS<sub>2</sub> Langmuir films. *J. Physical Chem. C* 124 (2020) 15856.
15. M. Bodík, et al., Langmuir films of low-dimensional nanomaterials. *Adv. Colloid Interf. Sci.* 283 (2020) 102239.
16. M. Bodík, et al., Langmuir–Scheafer technique as a method for controlled alignment of 1D materials. *Langmuir* 36 (2020) 4540.
17. P. Hutár, et al., Correlation between the crystalline phase of molybdenum oxide and horizontal alignment in thin MoS<sub>2</sub> films. *J. Physical Chem. C* 124, (2020) 19362.
18. N. Mrkývková, et al., Simultaneous monitoring of molecular thin film morphology and crystal structure by X-ray scattering. *Cryst. Growth & Design* 20 (2020) 5269.
19. M. F. U. Din, et al., A synergistic effect of the ion beam sputtered NiO<sub>x</sub> hole transport layer and MXene doping on inverted perovskite solar cells. *Nanotechnology*, 33 (2022) 425202.

### Uplatnenie výsledkov projektu

Projekt mal charakter základného výskumu. Aj keď sme pri návrhu plánovali prípravu jedného patentu, v priebehu riešenia sa ukázalo, že daná problematika vyžaduje detailné študovanie základných mechanizmov trenia. Na druhej strane, riešenie projektu za celú dobu riešenia prinieslo 23 karentovaných publikácií v kvalitných zahraničných časopisoch, čo vysoko prevyšuje plánovaný počet publikácií (8).

### Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Projekt si kládol za cieľ rozvoj technológií prípravy tzv. dvoj-dimenzionálnych (2D) materiálov a výskum ich tribologických vlastností na nano a makroškále, za účelom vývoja ultratenkých nízkotrecích povlakov. Riešenie projektu prispelo k vývoju technológie depozície vrstiev 2D materiálov tepelne asistovanou konverziou (sulfurizácia, selenizácia) s riadenou orientáciou fliačikov voči substrátu v prípade ultratenkých vrstiev MoS<sub>2</sub> a PtSe<sub>2</sub>. Prispelo aj k rozvoju depozície ultratenkých Mxénov na báze Ti<sub>2</sub>C<sub>3</sub>T<sub>x</sub> pripravených pomocou modifikovanej Langmuir-Schaeferovej (LS) metódy a ultratenkých vrstiev MoS<sub>2</sub> deponovanými chemickou depozíciou z pár (CVD). Intenzívne sme sa venovali výskumu nanotribologických vlastností mono- (ML) a niekoľko-atomárne (FL) tenkých vrstiev 2D materiálov. Zamerali sme sa na efekt uhlovej anizotropie trecích síl medzi AFM hrotom a fliačkmi ML a FL MoSe<sub>2</sub> vrstiev rastených CVD. Ďalej sme skúmali anizotropiu trecích síl FL vrstiev MoS<sub>2</sub> s podobnou povrchovou topografiou ale odlišnou kryštalografickou orientáciou voči povrchu substrátu, kde sme pozorovali zreteľne odlišné tribologické správanie vertikálne a horizontálne orientovaných MoS<sub>2</sub> fliačikov na nano- aj makroúrovni. Medzi najvýznamnejšie práce patrí výskum nanotribologických vlastností ML a FL Mxénov na báze Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> deponovaných modifikovanou LS metódou na SiO<sub>2</sub>/Si substrát. Pozorovali sme vynikajúce lubrikačné vlastnosti týchto vrstiev a ukázali sme, že trecia sila monovrstiev je vyššia v porovnaní s dvoj- a trojvrstvovými fliačkmi. Originálnou metodikou sme určili COF skúmaných Mxénových vrstiev. Počas riešenia projektu sme nadviazali úspešnú spoluprácu so zahraničnými partnermi (Ukrajinská akadémia vied, NASU). V spolupráci sme skúmali štruktúrne a tribologiccké vlastností tvrdých povlakov na báze Ti-B-C a Ti-Nb-C. Úspešne sme ukončili aj výskum transferu ultratenkých povlakov na priemyselne využívané substráty ocelí. Ukazuje sa, že použitie ultratenkých Mxénových povlakov v kombinácii s väčším ocelovým substrátom výrazne znižuje trenie v porovnaní so substrátom vo vzduchu aj vo vákuu. Takýto povlak teda môže byť využitý ako suchý lubrikant v otvorených rozhraniach mikromechanických systémov alebo MEMS súčiastkach. Konečne, identifikovali sme možné využitie ultratenkých povlakov na báze 2D materiálov

pre zariadenia mikroaktuátorov pracujúcich vo vzduchu aj vo vákuu.

**Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)**

The project aimed to develop technologies for the preparation of the so-called two-dimensional (2D) materials and research of their tribological properties on the nano and macro scale, in order to develop ultra-thin low-friction coatings. The solution of the project contributed to the development of the technology of deposition of layers of 2D materials by thermally-assisted conversion (sulfurization, selenization) with controlled orientation of the flakes in respect to substrate surface in the case of ultra-thin MoS<sub>2</sub> and PtSe<sub>2</sub> layers. It also contributed to the development of the deposition of ultrathin MXenes based on Ti<sub>2</sub>C<sub>3</sub>T<sub>x</sub> prepared using a modified Langmuir-Schaefer (LS) method and ultrathin MoS<sub>2</sub> layers deposited by chemical vapor deposition (CVD). We have intensively studied the nanotribological properties of mono- (ML) and few-atomic layer (FL) thin layers of 2D materials. We focused on the effect of angular anisotropy of the frictional forces between the AFM tip and flakes of ML and FL MoSe<sub>2</sub> layers grown by CVD. Furthermore, we investigated the anisotropy of the frictional forces of FL MoS<sub>2</sub> layers with similar surface topography but different crystallographic orientation to the substrate surface, where we observed distinctly different tribological behavior of vertically and horizontally oriented MoS<sub>2</sub> flakes at the nano- and macro-scale. Among the most significant works is the research of the nanotribological properties of ML and FL MXenes based on Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> deposited by the modified LS method on SiO<sub>2</sub>/Si substrates. We observed excellent lubrication properties of these layers and showed that the frictional force of monolayers is higher compared to two- and three-layer flakes. Using the original methodology, we determined the COF of the examined MXenes layers. During the implementation of the project, we established successful cooperation with international partners (Ukrainian Academy of Sciences, NASU). Within this cooperation, we investigated the structural and tribological properties of hard coatings based on Ti-B-C and Ti-Nb-C. We have also successfully completed research on the transfer of ultra-thin coatings to industrially used steel substrates. The use of ultra-thin MXene coatings in combination with a softer steel substrate has been shown to significantly reduce friction compared to the substrate in both air and vacuum ambient. Such a coating can therefore be used as a dry lubricant in open interfaces of micromechanical systems or MEMS components. Finally, we have identified the possible use of ultrathin coatings based on 2D materials in microactuator devices operating in both, air and vacuum.