

第十四届全国青年表面工程学术会议

摘要

MoS₂ 涂层环境反应微过程和润滑性能的高精度计算

郝宇, 黄良锋, 王立平

中国科学院宁波材料技术与工程研究所, 海洋关键材料重点实验室, 宁波, 315201, 中国

固体润滑涂层的环境敏感性是制约其发展和应用的关键问题, 其中涉及丰富的原子和电子级动态相互作用过程, 非常需要高精度量子力学理论模拟方法来准确揭示材料宏观性能背后的微观本质, 从而更好地改性和设计材料。MoS₂ 固体润滑涂层作为目前最好的航空航天润滑材料之一, 虽然具有优异的真空润滑性能, 其服役行为非常容易受到周围环境尤其是湿度的影响, 对其储存以及近地运行造成巨大挑战。在本项工作中, 我们针对 MoS₂ 在潮湿环境下润滑性能急剧恶化并且会诱发电偶腐蚀的问题, 深入开展了高精度第一性原理计算研究, 发展了定量模拟电偶腐蚀反应活性的动力学极化曲线模型, 以及适用于定量研究材料摩擦行为-环境因子动态相互作用的第一性原理分子动力学慢生长模拟方法。研究全面探索了 MoS₂ 各类点、线缺陷与氧气和水分子的作用机制, 揭示了其边缘电化学活性所导致的电偶腐蚀加速机理, 并进一步阐明了 15 种稀土元素掺杂 MoS₂ 表面的高电化学活性以及活性背后由 4f 电子轨道杂化所导致的吸附物选择性增强机理, 从而深入揭示了 MoS₂ 涂层体系电偶腐蚀现象的本质。此外, 研究初步验证了所提出慢生长模拟方法在揭示应力、温度影响效应时的精确性, 其可在量子力学尺度精准计算材料动摩擦力和摩擦系数, 并实时考虑环境因子的动态耦合效应, 结合机器学习势函数加速, 未来有望更加深入地揭示大尺寸润滑体系动力学演变机制, 为全面理解材料环境服役行为和构效关系奠定理论基础。

[1] Yu Hao, Liping Wang*, Liang-Feng Huang*, *Nat. Commun.*, 2023, 14, 3256.

[2] Yu Hao, Peng-Lai Gong, Li-Chun Xu*, Jibin Pu, Liping Wang, Liang-Feng Huang*, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2019, 11, 46327 (Cover).

[3] Yu Hao, Li-Chun Xu*, Jibin Pu, Liping Wang, Liang-Feng Huang*. *Electrochim. Acta*, 2020, 338, 135865.

基金致谢: 国家自然科学基金 (U21A20127 和 22272192); 国家杰出青年科学基金 (51825505); 国家重点研发计划 (2022YFB3402803); 中国科学院战略性先导科技专项 B 类 (XDB0470103)。