



中国科学院
兰州化学物理研究所
LANZHOU INSTITUTE OF CHEMICAL PHYSICS

立足西部 唯实求真
团结协作 创新奉献

[首页](#) > [新闻动态](#) > [科研动态](#)

兰州化物所摩擦的电子起源研究取得新进展

来源：固体润滑国家重点实验室 | 发布时间：2020-08-03 | [【大】](#) [【中】](#) [【小】](#) | [【打印】](#) [【关闭】](#)

摩擦作为一种极为常见的表/界面物理现象，是表/界面相互作用的最直接反映。随着表征技术的迅速发展，人类对摩擦本质的认识逐渐从基于阿蒙顿定律的宏观经验总结发展到对微观原子尺度摩擦起源的探索。

中国科学院兰州化学物理研究所固体润滑国家重点实验室低维润滑材料课题组长期聚焦于机械摩擦与界面电子结构关系的研究。近期，该课题组与兰州大学、西南交通大学等合作，在二维材料纳米摩擦的电子起源方面取得了新进展。

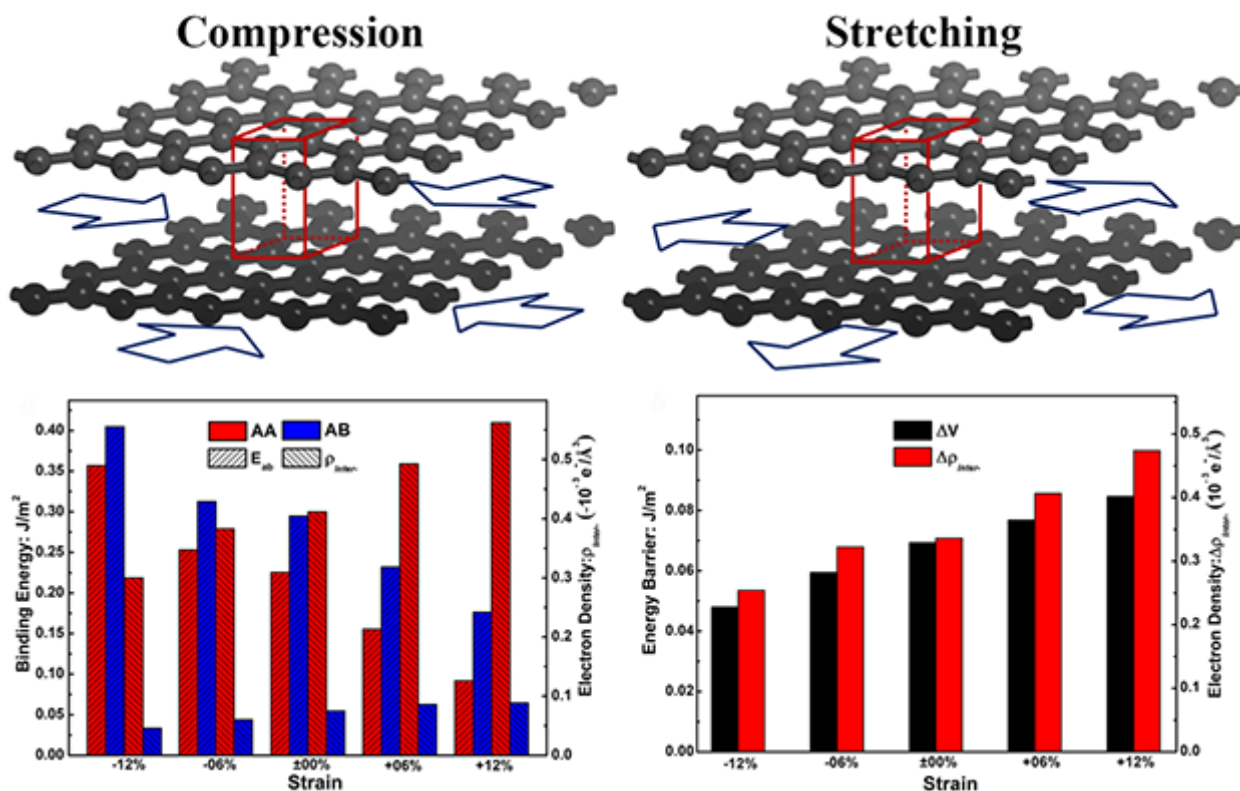
他们首次指出即使没有原子失配，表/界面的相互作用也可以通过层间应变进行操纵，模拟结果清楚地说明了无失配表/界面间的耦合强度是由应变诱导的表/界面电子重新分布来调节的。其次，研究首次证明滑动势垒的涨落与摩擦面/界面间电子密度的相对变化密切相关，电子重分布的量化直接证实了PES上的纹波与表/界面电子密度的相对值几乎是线性相关的。这种通过对电子分布量化来揭示摩擦起源的方法促进了对低维材料纳米摩擦的认识，为更好地在纳米尺度上调控摩擦提供了全新的思路。



研究人员以典型二维结构石墨烯(Gr/Gr)、六方氮化硼(h-BN/h-BN)和二硫化钼(MoS₂/MoS₂)双层模型为载体, 利用第一性原理研究了无层间堆垛失配的状态下二维结构层间相互作用随双轴应变的演化行为。结果表明: 双轴拉伸有益于双层之间的垂直分离, 而双轴压缩则有利于双层之间水平滑动。层间电子重分布程度的定量分析证实了层间电荷密度及其相对值的变化与双轴应变促进垂直分离和水平滑动密切相关: 拉伸导致层间的电荷密度 ρ_{inter} 降低, 削弱了层间结合; 而压缩导致了层间电荷密度的相对值 $\Delta\rho_{\text{inter}}$ 降低, 削弱了层间剪切强度。

此前, 该课题组通过理论上定义二维材料的界面, 在电子尺度上揭示了纳米摩擦的电子起源 (*J. Phys. Chem. C* 2019, 123, 26912-26920)。然而, 摩擦是一个与表/界面相对运动中所需克服能垒密切相关的过程量, 这一关键参数的本质属性在电子尺度上并没有被清晰地反映出来。

以上工作到了国家重点研发计划和国家自然科学基金项目的支持。相关的成果发表在 (*The Journal of Physical Chemistry C* 2019, 123, 26912-26920 和 *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2020, 11, 5815-5822)。



双轴应变下二维结构层间结合能和滑动势能波动



版权所有 © 中国科学院兰州化学物理研究所*党政办公室
陇ICP备05000312-1号 甘公网安备62010202000722号
地址 Add: 中国·兰州天水中路18号 邮编 P.C.: 730000
E-Mail: webeditor@licp.cas.cn 技术支持: 青云软件



未经中国科学院兰州化学物理研究所书面特别授权, 请勿转载或建立镜像, 违者依法必究

