

· 中国学者海外论文摘要 ·

类金刚石碳薄膜摩擦机理研究取得新进展

类金刚石碳(DLC)薄膜因其集高硬度和低摩擦因数于一身而成为固体润滑领域研究的热点。滑动界面钝化理论可以较好地解释环境气氛对DLC薄膜摩擦行为的影响规律。然而，对于无氢DLC薄膜在氧气气氛下的摩擦因数处于0.2~0.4中等范围的现象，钝化理论未能给出相应解释。为此，中科院宁波材料技术与工程研究所、兰州空间技术物理研究所和中科院兰州化学物理研究所等单位的研究者采用第一性原理模拟的方法解释了该现象。文章发表在《Carbon》2016年第100卷。

作者以金刚石(001)和(111)晶面通过镜像对称构建界面，并在其间夹入氧分子(原子)的模型来模拟无氢DLC薄膜在氧气气氛下的摩擦界面。作者首先考察了氧原子的界面覆盖度对金刚石界面几何结构的影响。结果表明：当氧的界面覆盖度不高于50%时，在几何优化过程中表面碳原子会与氧原子形成跨界面的C—O—C键而将两金刚石表面连接在一起。该状态下界面滑动需要打断C—O键，因此对应于高摩擦因数。当氧的界面覆盖度高于50%时，在几何优化过程中氧原子会化学吸附在两金刚石表面，形成氧对氧的分离界面结构。该状态下界面滑动仅需克服分子间范德华作用，因此对应于(超)低摩擦因数。图1给出了几种代表性的最稳定界面结构。

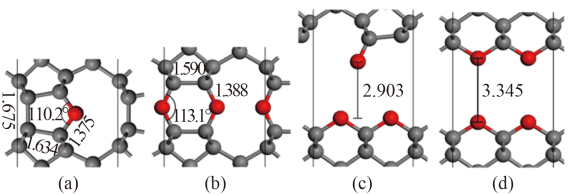


图1 几种最稳定的界面结构：(a, b)氧覆盖度不高于50%，(c, d)氧覆盖度高于50%

为理解几何优化背后的电子机制，作者研究了几何优化过程中界面电荷的分布状况。作者发

现当氧的界面覆盖度不高于50%时，两表面在靠近过程中，电负性大的氧原子会吸引对面碳原子的电子，引起电子的跨界面转移而进一步增强表面间的静电相互作用，进而促进两表面靠近直至结合在一起，如图2所示。而当氧的界面覆盖度高于50%时，两表面因其上的化学吸附氧原子带有同性(负)电荷而相互排斥，如图3所示。

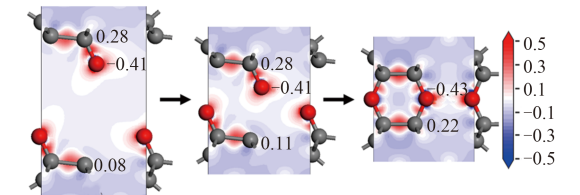


图2 氧覆盖度50%金刚石表面靠近过程的差分电荷密度和界面原子净电量变化

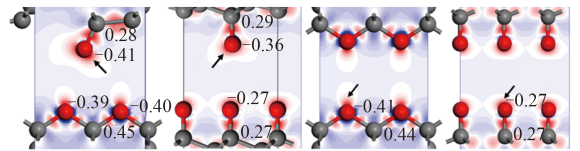


图3 氧覆盖度高于50%的稳定界面的分电荷密度图和界面原子净电量

作者指出即使在氧供应充足的情况下，氧在金刚石表面化学吸附的覆盖度也远远不能达到1。这是因为氧原子的范德华直径较金刚石表面活性碳原子的最小间距大，已吸附的氧原子会屏蔽邻近吸附位点。据文献报道，氧在金刚石(001)面的化学吸附覆盖度约为1/2，在金刚石(111)面的化学吸附覆盖度约为1/3。因此，在氧气气氛下无氢DLC薄膜的摩擦界面应同时存在高摩擦位点(跨界面C—O—C键)和低摩擦位点(氧-氧互斥)，而导致摩擦系数处于中等范围。该研究在原子和电子尺度上揭示了金刚石、无氢DLC等碳材料在氧气、干燥空气、原子氧等气氛下的摩擦机理，完善了DLC摩擦的钝化理论。

(中国科学院宁波材料技术与工程研究所 王立平 供稿)

英文全文见：WANG L P, CUI L C, LU Z B, et al. Understanding the unusual friction behavior of hydrogen-free diamond-like carbon films in oxygen atmosphere by first-principles calculations[J]. Carbon, 2016(100): 556-563.