
研究发现一类理想的超滑体系——大晶格失配范德华异质界面

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/15210.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

当前，因摩擦和磨损导致的能源损耗约占人类能源总消耗的三分之一。实现极低摩擦可以降低能源消耗，延长机械寿命。超滑（superlubricity）定义为两个固体表面接触时摩擦力接近于零（摩擦系数小于 10^{-3} ）的状态，自上世纪九十年代被发现以来一直是摩擦学的前沿研究方向。结构超滑（structural superlubricity）是实现超滑的重要手段，简单来说，如果不考虑两个晶体接触原子间的成化学键，结构超滑要从非公度的界面中寻找。

自然界中存在的层状材料如石墨、二硫化钼、六方氮化硼等由于层间弱范德华力，作为天然的固态润滑剂已被使用超过一百年。从原理上来看，非公度的范德华界面是研究结构超滑的理想体系。如何构造这样一个界面成为近年来超滑研究领域内广受关注的问题。此前，已有研究在具有一定转角的两层石墨间测量到极低摩擦力（Phys Rev Lett 2004, 92,

Phys Rev Lett 2008, 100, 067205）。在这种同质范德华界面中，零转角接触下是公度，导致摩擦力最大；小转角接触会产生莫尔图案，莫尔周期内的局域晶格也存在公度情况，导致摩擦力较大；大转角接触近似是非公度，导致摩擦力极小。

为了摆脱范德华界面中摩擦的转角依赖性，一个可能的解决方案是构造范德华异质界面。2016年，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心研究员张广宇团队研究了石墨烯 - 六方氮化硼界面的热稳定性，发现热致旋转现象（Phys Rev Lett 2016, 116, 126101），揭示出此种范德华异质界面可能存在结构超滑。2018年，中科院院士、清华大学教授郑泉水团队测量其界面摩擦力，验证了结构超滑现象；发现在异质结中观察到的摩擦各向异性比在其均质部分测到的数据大大降低（Nature Materials 2018, 17, 894）。然而，由于石墨烯和六方氮化硼的晶格失配小（ $\sim 1.7\%$ ），此种范德华异质界面在小转角下仍存在由于莫尔超晶格导致的钉扎效应。研究揭示稳定的、不同转角下各向同性的结构超滑依然具有挑战。

近期，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心研究员张广宇团队与捷克理工大学教授Tomas Polcar团队合作，系统研究大晶格失配范德华异质界面的超滑现象。科研人员利用环境控制下的原子力显微镜技术研究了外延生长的二硫化钼 - 石墨（晶格失配 $\sim 26.8\%$ ）以及二硫化钼 - 六方氮化硼（晶格失配 $\sim 24.6\%$ ）异质界面的本征摩擦特性，发现这两种大晶格失配范德华异质界面是理想的超滑系统，不仅摩擦

系数可低于 10^{-6}

（和测量极限处于同一水平），且不依赖于层间的相互转角（即各向同性）。进一步研究不同尺寸样品揭示摩擦力的来源，发现在这种大晶格失配范德华异质界面中面内接近零摩擦，而边界的钉扎效应是整体摩擦力的主要来源。作为对比样品，在小晶格失配范德华异质界面（石墨烯 - 六方氮化硼）中，面内界面摩擦仍占主导地位。为解释边界钉扎效应机理，科研人员对此进行了分子动力学模拟。模拟结果表明，由于晶格周期性在边界被破坏，边界原子束缚减弱。因此，相较于中心原子，边界原子更加活跃。此外，计算结果也显示边界原子势能面较中心原子显著升高。分子动力学模拟结果显示边界原子和中心原子的不同状态，更不稳定的边界原子更容易在滑移中耗散能量。

该研究在实验上探究了一类大晶格失配范德华异质界面中的各向同性超滑现象，为设计和应用超滑界面提供了新思路。研究表明，在界面超滑体系中要尽量避免晶格边界、界面台阶及位错等结构缺陷，从而降低其对结构超滑的负作用。相关研究成果发表在Nature

Materials

上，研究工作得到国家自然科学基金重点项目、中科院战略性先导科技专项、松山湖材料实验室等的支持。

[论文链接](#)

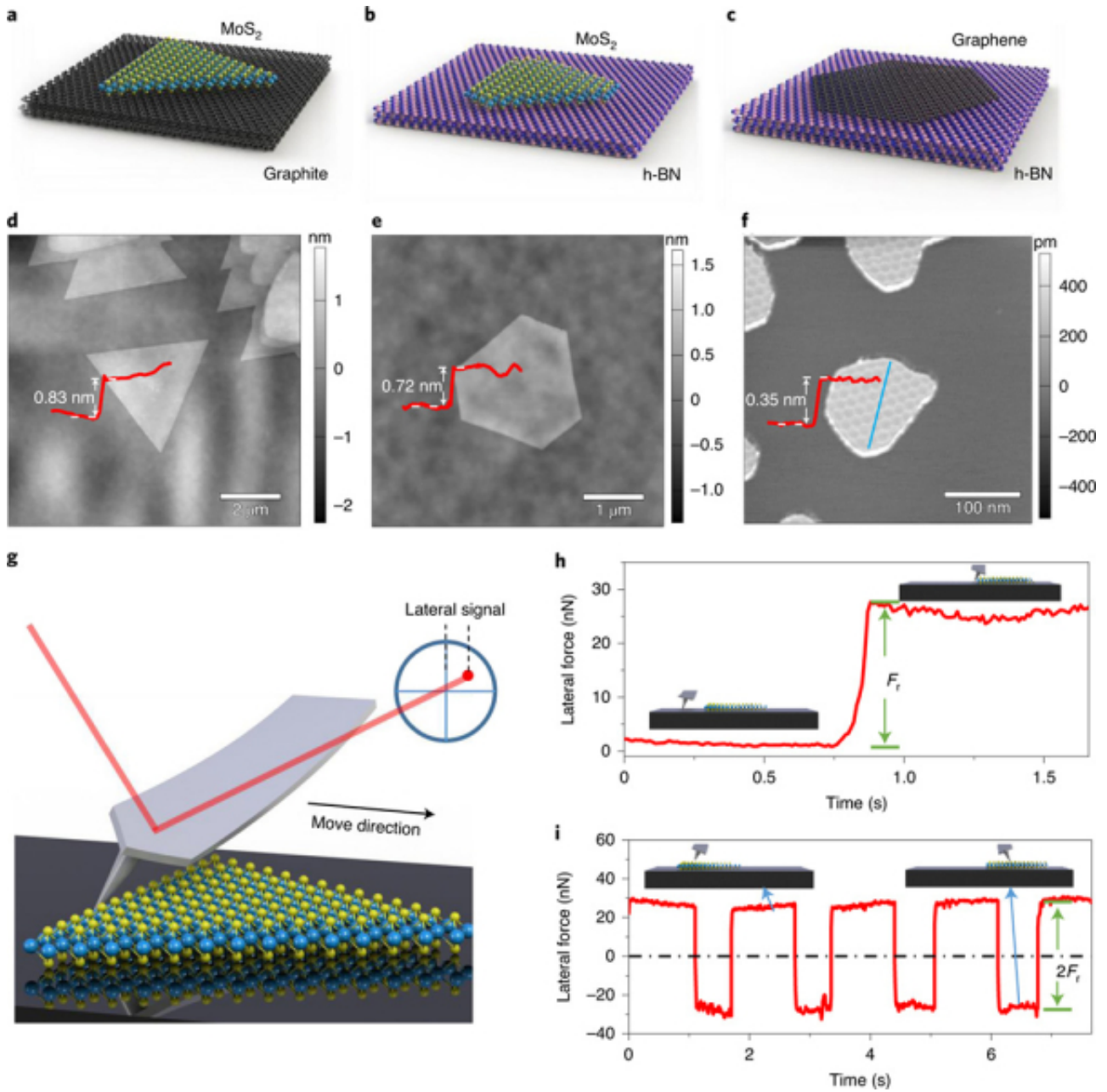


图1.范德华界面摩擦力的测量方法。

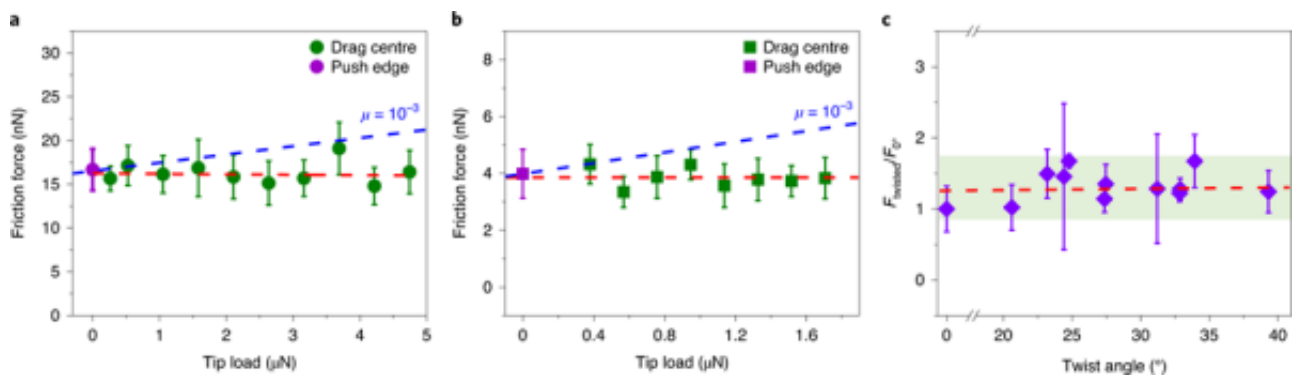


图2.大失配范德华界面中的超滑现象。

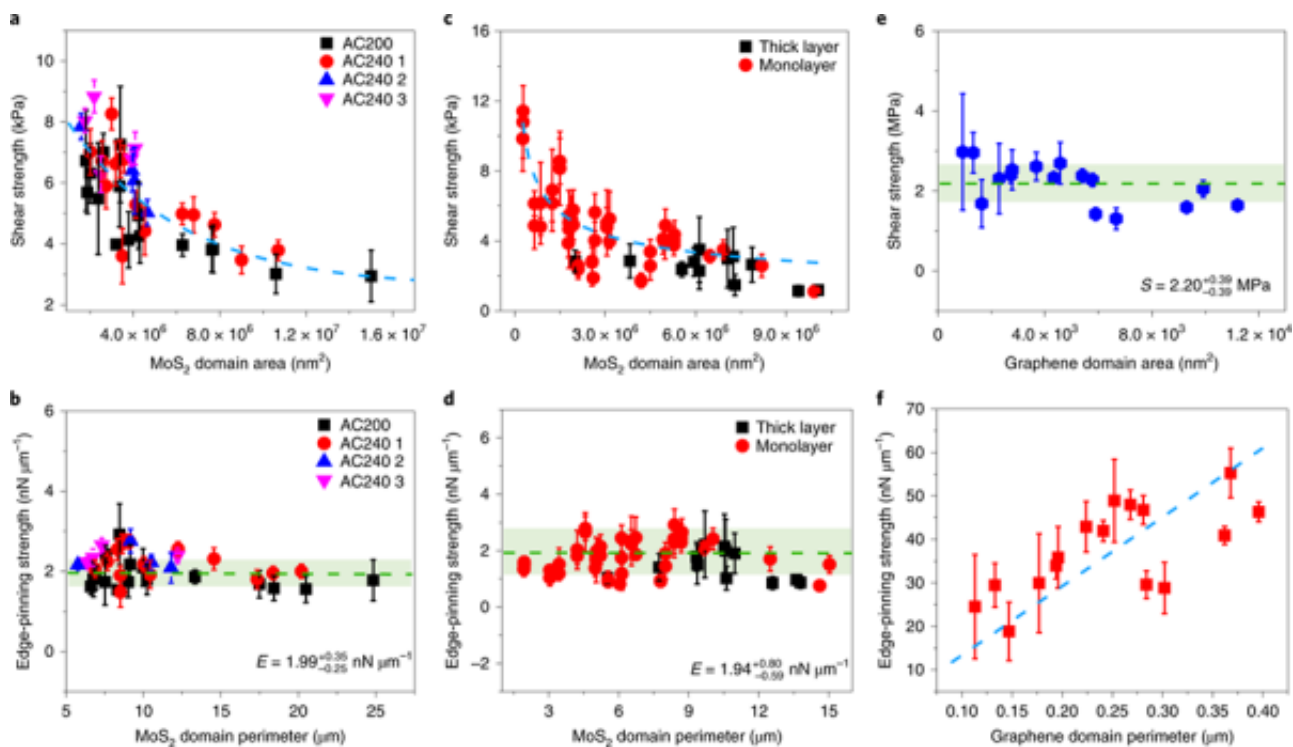


图3.摩擦力的来源探究。

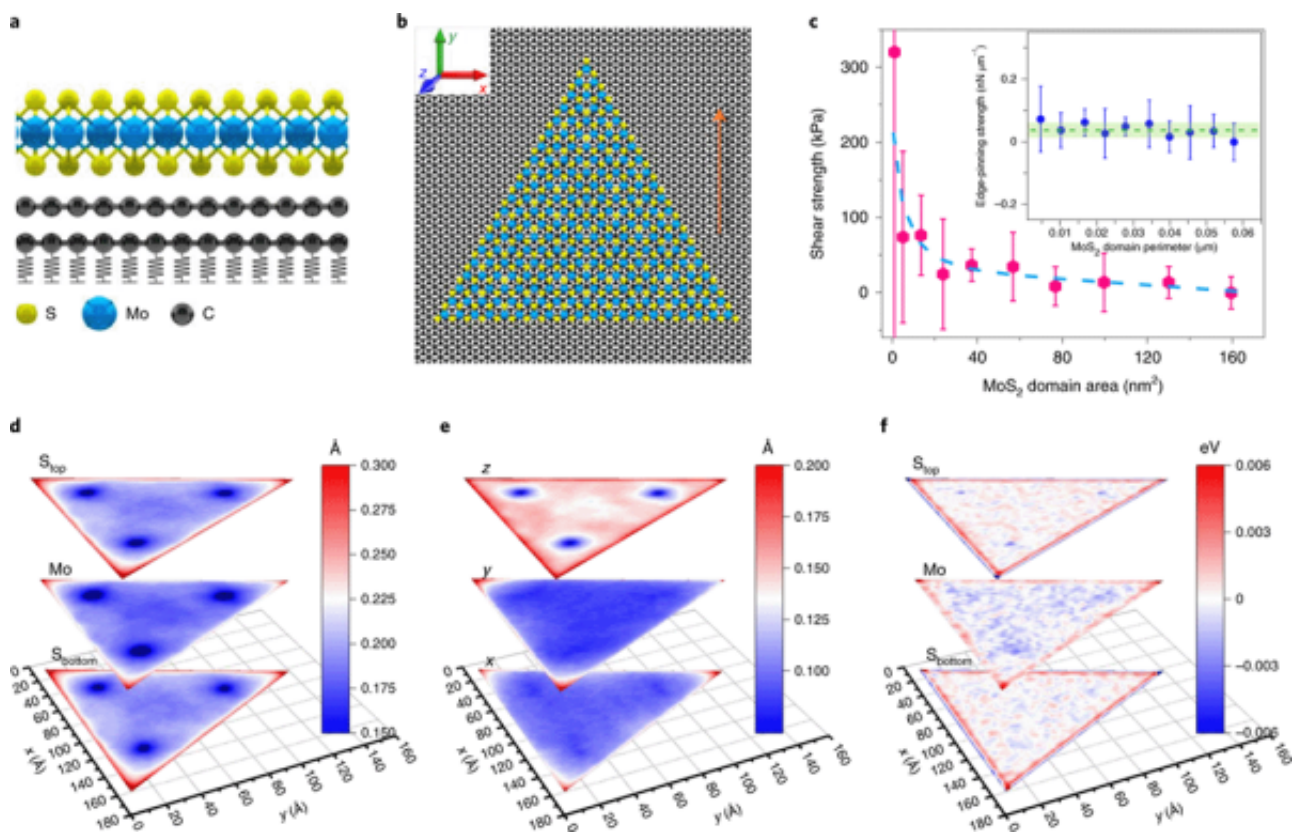


图4. MoS₂/graphite界面的分子动力学模拟。

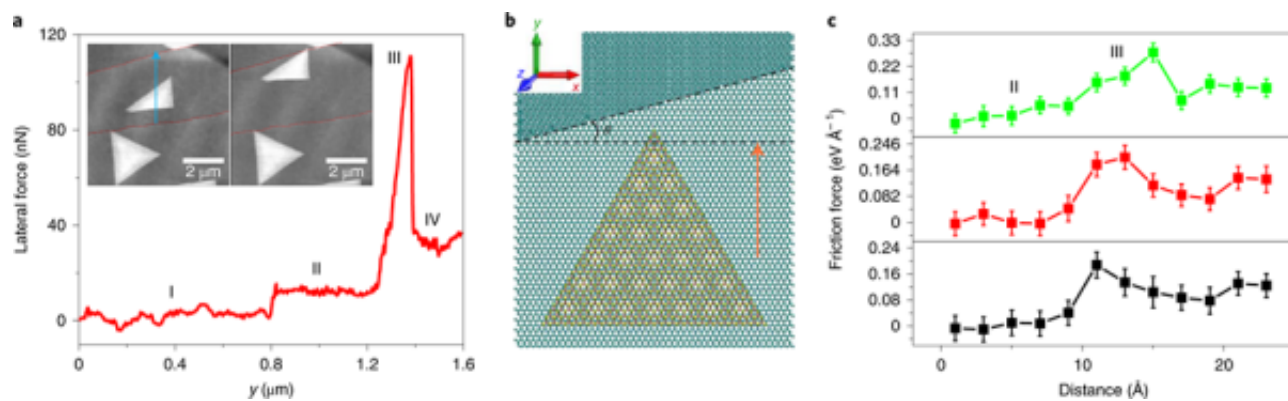


图5.界面台阶对摩擦力的影响。

研究团队单位：物理研究所

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发