
静态摩擦性能标准计算模型研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/31763.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！

静态摩擦性能标准计算模型研究获进展。

计算摩擦学是研究与调控摩擦行为的新途径。然而，若使用不精确的计算模型，所得结论或无法为摩擦学发展增添助力，甚至可能增加对摩擦现象基础物理机制理解的困惑。为更准确地描绘摩擦现象全貌，探索摩擦现象的物理本质，亟需建立科学、标准的静态摩擦性能计算模型。

近日，中国科学院兰州化学物理研究所研究员鲁志斌和助理研究员何文豪团队，联合兰州交通大学等的科研人员，利用自主搭建的固体界面摩擦性能第一性原理高通量计算平台LICP-FPHTC-Platform，考虑等距模型、等载模型、无负载做功的等载模型三种静态摩擦性能计算模型，针对已报道的负摩擦系数的二维材料界面体系即Gr/Gr、h-BN/h-BN、In₂Se₃/In₂Se₃，探讨了摩擦性能的计算结果对计算模型的依赖情况。结果表明，只有无负载做功的等载模型出现了文献报道的负摩擦系数现象，而等距模型和等载模型的摩擦计算结果定量一致。

该研究通过等载与等距滑动过程中界面受力分析并结合能量守恒原理发现，忽略负载做功的无负载做功的等载模型在理论上存在根本性缺陷，而等距模型和等载模型可作为静态摩擦性能计算的标准模型。这提示已报道的基于无负载做功的等载模型计算得到的负摩擦系数现象或是不精确计算模型的错误结果。

相关研究成果以Potential Negative Friction Coefficient Predicted by First Principles: A Possible Consequence of Inaccurate Computational Models为题，发表在《物理评论B》（Physical Review B）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会和中国科学院的支持。

研究团队单位：兰州化学物理研究所

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

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