
科研人员在原子尺度揭示海洋环境中氯离子诱发铜钝化膜破裂关键机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/34875.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！

科研人员在原子尺度揭示 海洋环境中氯离子诱发铜钝化膜破裂关键机制

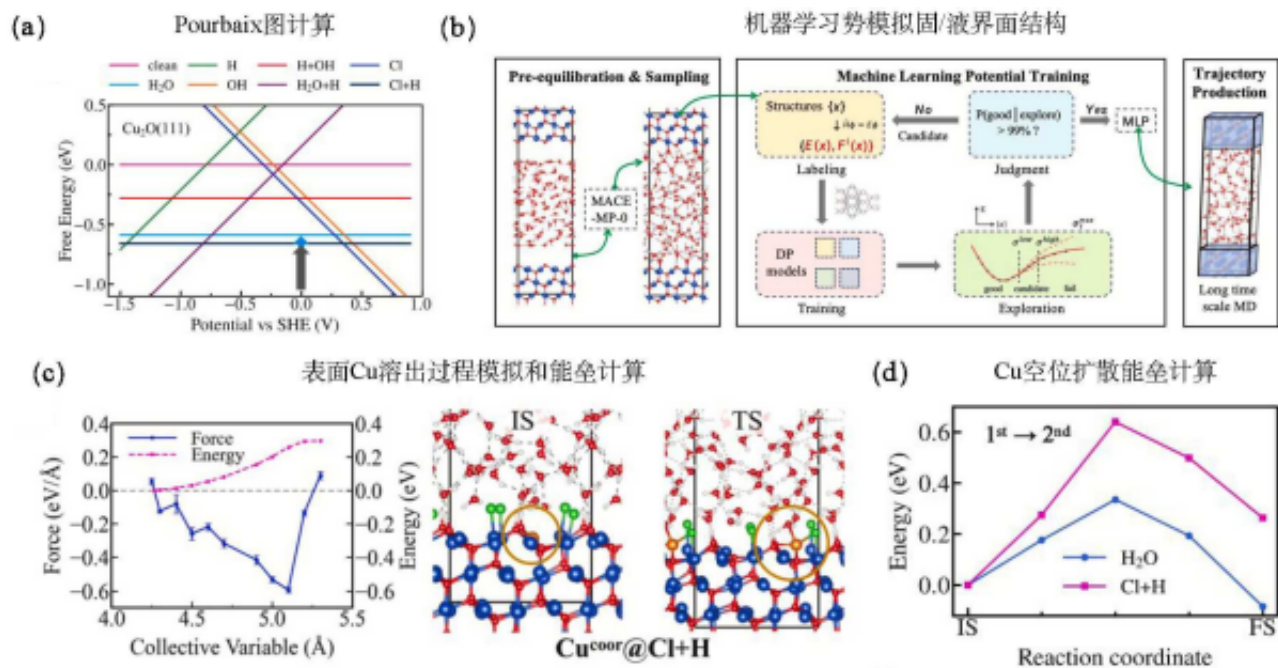
铜凭借优异的导热导电性，在工业与海洋工程领域得到广泛应用。通常，铜表面在碱性环境中可形成以氧化亚铜为主的钝化保护膜，来有效抑制腐蚀。然而，在富含氯离子的海洋环境中，该保护膜极易破坏脱落，继而导致材料失效。此前，有研究提出应力诱导断裂、局部溶解变薄、孔洞诱导坍塌等多种失效机制，但学界对氯离子如何在原子尺度上促进氧化亚铜钝化膜破裂的精确过程与主导机制尚不明晰。

为准确理解这一机制，中国科学院宁波材料技术与工程研究所研究员常可可、副研究员乐家波和徐凯综合运用第一性原理热力学计算，并基于机器学习势的分子动力学模拟及约束分子动力学等先进计算方法取得了突破性发现：氯离子在氧化亚铜表面发生强化学吸附；氯离子表面吸附显著降低了铜原子溶出能垒；氯离子吸附导致表面空位形成速率远超内部扩散速率。

基于上述原子尺度的发现，研究人员从微观动力学层面揭示了局部溶解变薄机制为氯离子诱发氧化亚铜保护膜破坏的主导机制。这一机制核心在于氯离子吸附强力加速了表层铜原子的溶解流失，同时显著抑制了表面空位向材料内部的扩散速率。这种空位形成与扩散的巨大速率差异导致高浓度的表面空位无法及时“愈合”，从而在局部区域引发钝化膜急剧减薄并最终破裂。

近日，相关研究成果以Atomistic insights into chloride-induced depassivation mechanisms of protective Cu_2O films in marine environments为题，发表在《腐蚀科学》（Corrosion Science）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、中国科学院等的支持。

[论文链接](#)



相关计算方法和结果

氧化亚铜腐蚀溶解机理示意图

研究团队单位：宁波材料技术与工程研究所

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](https://www.iikx.com)转发