

# 金属之光

5

中国科学院金属研究所  
2017年 第5期 (总第193期)

INSTITUTE OF METAL RESEARCH, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

立足高端科研资源  
打造材料领域科普品牌





# 金属材料表面电化学习问题理论研究 取得系列重要进展

表面是物质的基本分界面，理解材料的表面电化学习性质对于材料的制备和应用至关重要。与金属材料表面电化学习最紧密相关的典型问题有表面腐蚀、表面催化、表面吸附等等。由于金属材料表面电化学习性质受众多因素的影响，基于理论方法找出主导关键因素进行建模计算相当困难。传统上合金电化学习研究多以实验为主，理论工作严重匮乏。

最近，金属所沈阳材料科学国家(联合)实验室固体原子像部王绍青研究组基于材料基因组研究思想就金属材料表面电化学习第一原理计算问题开展了一系列研究工作，在如下三个方面获得重要进展。

合金表面腐蚀问题建模及其在铝合金中的应用：伏打电势差测量是实验研究金属材料表面腐蚀的基本方法，但测量结果存在因仪器设备导致的较严重系统性干扰因素，测量对象本身的特性也会对测量结果有潜在影响。由此仅由伏打电势差测量的实验结果难以对金属材料表面腐蚀的本征性质获得准确了解。本项工作率先明确了实验伏打电势差与基体和析出相表面电子逸出功第一原理计算值之间的定量化相关性。以此为依据全面研究了铝合金的本征表面腐蚀问题，首次从伏打电势差/逸出功的角度解释了铝合金中的 $Al_3Ti$ 、 $Al_7Cu_2Fe$ 、 $Mg_2Si$ 和 $Al_2CuMg$ 等析出相常见的选择性溶解和极性逆转现象。该工作为金属材料表面腐蚀问题的研究开发了一条新途径。

合金表面偏析模拟与铝合金表面元素偏析材料基因组计算：在一定的热处理条件下，合金中的某些微量元素倾向于偏析到合金表面，这种偏析现象可以引起合金性能的大幅度改变。本研究工作采用材料基因组高通量计算思想，用第一原理方法求出了铝合金中41种常见添加/杂质元素在 $Al(111)$ ， $(110)$ ， $(100)$ 表面的偏析能，分析了相关

的影响因素。对于大多数添加/杂质元素，表面的类型不影响偏析能的符号，但 $(111)$ 面即密排面的偏析能相对于 $(100)$ 和 $(110)$ 绝对值意义上更小。偏析能的周期性演变规律非常明显：过渡族元素的偏析能随原子序数增大而先正移再负移；主族元素的偏析能随原子序数增加而正移，同一主族元素从第3周期到第6周期的能量依次负移。上述成果有效地填补了关于添加/杂质（下转五版）

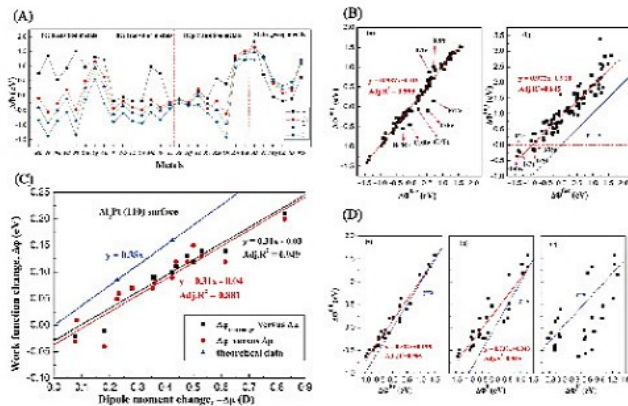


图1. (A) 卤素元素在金属表面吸附引起的功函数偏移，(B) 典型吸附位对应的功函数偏移量线性关联性，(C) 卤素元素在 $AlPt$ 表面吸附引起的偶极矩变化和功函数偏移量的关系，(D) 卤素元素吸附引起的功函数偏移量线性关联性

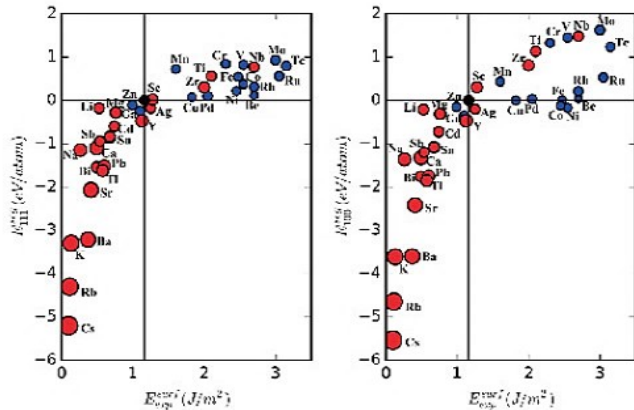


图2 铝中常见的金属类添加/杂质元素在 $(111)$ 和 $(100)$ 上的偏析能与表面能实验值、原子半径的关联性



## 先进析氢电极材料的探索研究及进展

氢能是终极绿色能源之一，制氢、储氢和用氢是与其相关的三个技术发展环节。有工业价值的制氢途径包括：甲烷重整、煤转化以及电解水。甲烷重整是最经济的制氢方法，但它依然以化石燃料天然气为原料，且制备过程释放等当量的二氧化碳。煤转化的技术经济或环境优势不显著。而电解水的产品纯度高，生产过程不释放污染物质，若进一步利用可再生能源电力实施电解，则可实现完全的“绿色化”制氢。

碱性电解是电解水制氢最主要的技术形式，但能耗高是其瓶颈性问题。析氢电极材料是降低制氢能耗的关键。单一元素的镍电极具有较良好的析氢性能和成本优势，但催化活性低、抗逆电流能力弱，难以满足未来的应用要求。

为此，金属所金属腐蚀与防护实验室应用电化学技术团队的张开悦等人基于电化学制造技术，进行了相应的研究探索，制备合金-复合镀功能电极，取得了有意义的进展：

以合金化方式设计镀层结晶结构，制备了Ni-Mo、Ni-Co及Ni-S等镍基合金电极，探索了合金活性对析氢性能的影响。研究人员进一步对合金电极进行第二相粒子复合化修饰，制备了Ni-S/CeO<sub>2</sub>、Ni-Mo/TiO<sub>2</sub>、Ni-S/Al等复合电极材料。这些电极在持续大电流或间歇电解工作条件下，均表现出了优良的活性和工作稳定性。

各镍基合金中的Ni-S合金具有最高的析氢活性，其活性与S含量有直接关系（Ni<sub>3</sub>S<sub>2</sub>相是主要的活性位点）。引入的第二相粒子会优先聚集在晶界和缺陷等能量较高位置，抑制晶粒增长，起到细化晶粒和增大电极有效表面积的作用。同时，以稀土化合物为代表的第二相活性粒子，能与镍基合金的析氢过程产生协同效应，有助于析氢活性的提升。

结合电极制备过程中元素的竞争沉积特性，调控镀层内合金成分，构建了梯度镀层，消除了合金镀层的应力问题。电极的合金镀层由低S层、中S层和高S层组成，实现了在保留高活性的基础上，大幅提高了工作电极的工作稳定性。其中，低S层和中S层位于内层，起到缓冲镀层内及镀层与基体间应力的作用；高S层具有较强的析氢活性，作为功能层位于镀层的最外侧。

相应工作结果发表在《Electrochimica Acta》（2017, 228, 422）、《Materials Letters》（2017, 193, 77）和《International Journal of Hydrogen Energy》（2016, 41, 22643）。

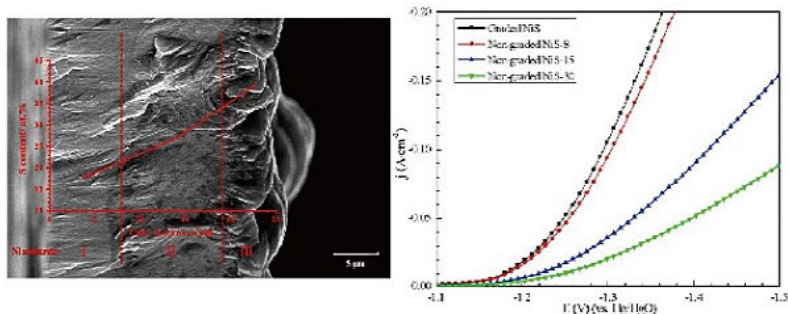


图1. Zr-4合金在静态聚焦低能（30keV）电子束下的辐照损伤

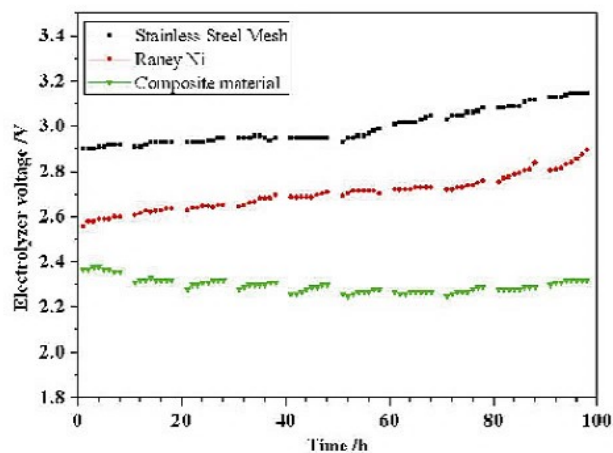


图2.  $\alpha$ -Zr基体在静态聚焦低能（30keV）电子束下的辐照损伤



## 立足高端科研资源 打造材料领域科普品牌

科学普及工作是国立研究机构应尽的社会责任和义务。近年来金属所按照院科普“高端、引领、有特色、成体系”的定位，不断挖掘研究所内在科普资源和潜力，加强高端科研资源的科普化，不断丰富研究所科普活动的形式和内容，并以网络和新媒体为重要载体，不断扩大科普宣传力度，为研究所改革创新发展营造了良好的环境。2017年金属所正式入选沈阳市科普教育基地。

### 一、以人为市建立高效工作机制

金属所把科普人才的挖掘和培养作为科普队伍建设的重点。通过各类科普活动中邀请院士专家作报告，收集高层次科技人才的科普信息，揽入了一批具备高科普能力的科学家入库，形成了不同学科方向、不同年龄梯度、不同演讲风格的高端科普人才信息库。近年来，李依依院士、叶恒强院士、成会明院士等著名科学家相继登上金属所科普讲坛，受到社会公众的广泛欢迎。一



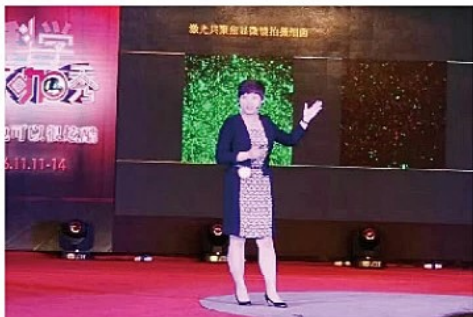
李依依院士作报告



叶恒强院士作报告

些青年科技人员也逐渐在科普报告的讲坛上崭露头角，2016年任玲副研究员走上中科院“SELF格致论道”，并在由中国科学技术交流中心主办的2016年全国科学大咖秀中获得“十佳科学脱口秀”奖，展现了金属所青年科研人员的魅力。

在院士专家的带领下，金属所青年科研人员特别是研究生参与科普活动的积极性大大提升，形成了一支60人左右的科普志愿者队伍，他们积极参与到中科院公众科学日、科普进校园、科普进



任玲博士参加十佳科学脱口秀比赛

社区等活动中。在对科普志愿者的组织和管理方面，金属所建立了科普志愿者微信群，不定期互动交流

流，并在重大活动前进行集中培训。

金属所科普工作已经形成了全所各部门密切配合、积极参与，专兼职科普人员相结合，院士专家当骨干，志愿者挑重担的良好工作局面。

### 二、深入挖掘科普资源

**系统梳理、深入挖掘科普资源。**金属所以内容建设作为科普资源建设的重点。通过“走进材料科学与工程”大型科普活动、公众科学日系列活动，金属所科普工作者以材料科学研究链条为依据，盘点和梳理出了若干“科普生长点”，原创出“材料起源”、“材料是人类文明发展的阶梯”、“材料科学的认知与奥秘”、“神奇的新材料”和“材料与美丽中国”等五大主题的系列科普素材，共计80余

张展板、20余个实物展台和互动小实验。为进一步挖掘科普资源，金属所连续举办了八届原创科普作品大赛，积累了高质量原创作品百余篇。同时，金属所还注意收集日常工作中的科普素





材,对学术报告、参观讲解词、实验模型、录像等素材、进行科普化的加工,有效地丰富了科普资源。

充分发挥科研人员的内动力。为了提升科研人员做科普工作的内动力,发挥科研人员挖掘科普资源的主动性,2016年起金属所举办了“暑期科学之旅—家属科学营”系列活动,使所职工切身感受到了科普工作对提升青少年科学素养的重要性,凝练出了高品质的活动内容,也锻炼了科研人员的科普能力。

### 三、打造全方位科普体系

#### 1. 充分发挥高端科研平台的科普功能

开放国家级实验室。金属所拥有我国第一个以学科命名的国家实验室——沈阳材料科学国家(联合)实验室。国家实验室除每年在“公众科



学日”期间向社会公众开放外,还经常为学生提供参观和实习机会,使社会公众了

解了国家级实验室的科研实力和最新成果,增加对材料科学的了解和认识。

举办腐蚀探究科学营。金属所作为世界腐蚀组织会员单位,在腐蚀学科领域拥有丰富的科研和教学资源。2016年以来,金属所面向沈阳重点高中对化学和材料科学有兴趣的优秀高中生,开展了腐蚀学科探究营活动,促进了科研资源与教育相结合。



组织优秀大学生夏令营活动。金属所每年都

要举办2期优秀大学生夏令营活动,约400名优秀大学生来所体验学习,这为提高金属所在国内知名高校的影响力、吸引优质生源起到了重要作用。2016年,金属所荣获了“中国科学院大学生创新实践训练计划”优秀组织奖。

#### 2. 科普工作走向社会、服务社会

科普报告走出去。金属所的院士专家每年都不定期地走进大中小学校做科普报告。李依依院士多次为大学生作“从科研看大学生应具备的基本素质”的科学人文讲座,柯伟院士的报告“走近科学,构建多彩人生”等也在社会公众中产生了强烈反响。一些青年科研人员还走上媒体讲坛,扩大传播的影响。

科普活动进学校、进社区。2016年金属所组织了40余名科普志愿者到辽宁省贫困地区康平县高级中学,开展送科普下乡活动,活动使贫困地



区的孩子有机会近距离接触国立科研机构。金属所的研究生社团还定期组织科普进社区活

动,分发科普宣传册、普及材料科学知识、进行问卷调查、解答市民提出的各种生活中的材料问题。

举办大型科普活动。在每年的世界腐蚀日期间,金属所都要举办系列大型科普活动,2016年以来,活动都受邀在辽宁省科技馆举办,参观人数达到5000余人。在建所60周年活动中,金属所将科普作为所庆活动的重要内容,在辽宁省图书馆举办



了为期两天的“走进材料科学与工程”大型科普活动,向社会公众宣传普及材料学相关知识,参观



人数达到2000余人。

### 3. 做好宣传与科普相结合

金属所将科普作为宣传的重要手段，树立了研究所的良好形象。例如：针对研发含铜抗菌不锈钢系列成果以及超级计算在材料研发中的应用，与中央电视台合作录制了专题科普节目，在走进科学节目播出。金属所与湖南卫视《求真夏令营》合作录制了“净水材料”专题取得了良好的社会反响。2017年又携手央视



录制了“超级计算科普节目”。通过这些科普类节目的播出，在传播科学知识的同时也宣传了金属所的科技成果。

### 4. 积极开展网络和新媒体科普

金属所致力于利用网络及新媒体等手段进一步拓展科普的覆盖面和影响力。金属所在门户网站开设了“神奇美丽的材料世界”科普专栏，内容原创率达90%以上，并被评为中科院优秀科普栏目。金属所还承担了院信息化专项“材料科学与工程虚拟博物馆”项目和中国科学院网络化科学传播服务工程建设项目“材料新视野”科普专栏，进一步拓展了网络科普宣传阵地。金属所还通过官方微信平台发布科普、前沿、文化类信息，成为研究所科学传播的另一重要平台。

（上接一版）元素在铝表面偏析现象实验和理论研究的空白，针对偏析现象提供了全局性的横向研究思路。

金属材料表面吸附与表面电子功函数的规律性研究：表面功函数是材料电化学的关键性参量，由吸附物引起的功函数变化可以直接地反映出电极电位或零电荷电位的偏移情况，它也是决定晶体管阈值电压的重要参数；通过调控表面功函数可以有效改善金属材料腐蚀抗性和功能材料的电子调控性能。由于受到样品制备和测量设备精度的限制，迄今报道的材料表面功函数实验测量结果非常有限，并且仅限于最基本的两三种晶体表面类型。本项工作基于材料基因组思想，采用先进的第一原理计算技术实现了数十种立方和六角相纯金属的十余种晶面电子功函数的严格计算，较大程度地完善了金属材料表面功函数数据库。详尽地研究了氧、四种卤族元素和九种过渡族金属元素在多种金属和金属间化合物表面的吸附问题。发现几何环

境相似的吸附位点之间以及与金属表面成键特性相似的卤素原子之间对于吸附引起的表面功函数变化都有着很好的线性关联性；对卤素原子吸附在金属间化合物表面的研究结果则显示，由吸附物引起的表面偶极矩变化与相应的功函数偏移量之间仅仅是一种一般的线性关系而非理想的正比例关系。得出的表面功函数和粘附能随覆盖率的依赖关系为合理有效地调节双金属表面合金的性能和预测合金体系的生长模式提供了理论依据。

基于以上研究工作的相关论文相继发表在Appl. Surf. Sci.357, 1046 (2015); 364, 29 (2016); 399, 351 (2017); 410, 282 (2017)、J. Electrochem. Soc.162, C503 (2015); 163, H796 (2016)和Surf. Sci.630, 216 (2014); 651, 137 (2016)等国际知名材料表面和电化学研究专业期刊上。上述工作得到了973国家重点基础研究发展项目、国家重点研发计划材料基因组专项项目和国家自然科学基金项目的资助。

## 腐蚀与防护类成果推广

### 高性能压载舱涂料

#### 成果简介及应用领域

针对船舶中腐蚀最敏感部位—压载舱的防腐要求，利用纳米技术和纤维增强技术研制出高性能压载舱涂料防护技术。该技术可应用于船舶中腐蚀最敏感部位—压载舱。

#### 技术特点（含技术指标）

经过180天的中性盐雾试验，涂层无起泡、锈蚀、针孔，附着力 $> 3.5 \text{ MPa}$ ；经过180天的 $40^\circ\text{C}$ 人造海水浸泡试验后，涂层无起泡、锈蚀、针孔，附着力 $> 3.5 \text{ MPa}$ 。

#### 创新要点

在高性能压载舱涂料体系的设计时，本技术不使用铅、铬等重金属化合物，并尽可能提高涂料的固体分，降低VOC含量。

#### 合作方式

联合开发、技术转让、技术入股

#### 联系人

项目负责人：刘福春

电话：024-23915895

邮箱：fcliu@imr.ac.cn



### 纳米复合电力防护涂层

#### 成果简介及应用领域

输电杆塔用纳米复合防腐蚀涂料、纳米复合自修复涂料、金具专用柔性耐磨防腐涂料，可广泛用于电力杆塔、电力金具。

#### 技术特点（含技术指标）

输电杆塔用纳米复合防腐蚀涂料整体防护性能好、失效时间长，适宜用作重工业污染区的输电线路的防腐蚀涂料。纳米复合自修复涂料适宜用作重工业污染区表面锈蚀程度较高的输电线路的防腐蚀涂料。

新型柔性耐磨防腐涂层料具有优异的柔性、耐磨性和耐腐蚀性能。

#### 创新要点

利用颜料装载转化剂和缓蚀剂技术制备带锈涂料。改性颜料在涂层中均匀分散，可以高效转化锈层。

带锈防腐涂料具有自修复作用，涂层在使用

过程中出现划伤、破损时仍能保护基材。

#### 合作方式

联合开发、技术转让、技术入股

#### 联系人

项目负责人：刘福春

电话：024-23915895

邮箱：fcliu@imr.ac.cn





5月26日，德国卡尔斯鲁厄理工学院（KIT）副校长Oliver Kraft教授到访金属所。杨锐所长和Oliver Kraft副校长分别代表金属所和卡尔斯鲁厄理工学院签署了合作备忘录。



5月25日，在科技工作者节日来临之际，辽宁省委常委、统战部部长范继英在辽宁省科学技术协会党组书记、副主席张春英的陪同下，到我所分别走访看望了李依依院士和柯伟院士。



5月24日，在中科大网络视频平台的支持下，金属所面向全国考生举办了首场网络视频招生宣讲会。

通过网络视频平台、手机客户端参加了此次宣讲会。

5月22日至23日，金属所承担的中国科学院战略性先导科技专项（A类）—“未来先进核裂变能—ADS嬗变系统”下设的两个子课题和一个任务通过了财务、科技目标、科研管理和档案等四个分项验收。



5月20日至21日，金属所举办“公众科学日”和“家属日”活动，千余人参加了为期两天的科普活动。



5月19日，“透射电子显微技术的应用及样品制备操作”所级培训班在北区学术报告厅举办，共计230余名所内职工和研究生报名参加了本次培训。固体原子像研究部主任马秀良研究员出席培训活动并致开班辞。

