2022年招生计划

六、预计招收博士生的课题研究方向和研究工作简介

1.博士论文研究方向： 不同湿度大气下单晶GaN的摩擦化学行为与机理研究

选题类别：☐基础性研究　☐应用性研究　☐工程技术攻关研究
■新开辟的研究方向　☐已有研究方向的继续　☐其他

2.博士论文的选题背景及意义和主要研究内容简介

项目采用实验分析与分子动力学模拟相结合的方法深入地揭示不同大气湿度下单晶GaN的摩擦化学磨损行为和机理。首先实验研究各种不同速度、载荷、湿度、配副材料等对GaN摩擦化学特性和摩擦电势的影响规律，阐明在GaN与典型配副材料间微观气-液-固界面上发生的摩擦致电现象及其电荷载体聚集和转移规律，提出摩擦致电模型和电致摩擦作用模型。结合实验
分析结果，采用密度泛函理论对GaN接触电荷和表面原子态密度进行第一性原理计算，再结合基于反应力场（ReaxFF）的分子动力学仿真方法研究水吸附下GaN的摩擦化学作用，揭示水吸附下GaN的摩擦化学反应和磨损机理。其成果可丰富摩擦化学理论，对GaN晶体的摩擦化学抛光及对潮湿/水环境下工作的氮化镓基光电器件的可靠应用具有潜在的指导意义。
【具体研究内容】
1） 研制湿度可控的摩擦电-摩擦化学综合试验机
增添湿度控制模块和摩擦电测量模块来改进现有高性能UMT-2 型摩擦试验机，拟分别采用高精度弱电压测量装置和Kelvin 静电仪，对GaN/金属摩擦时的摩擦自生电势与GaN/非金属摩擦时GaN 磨痕表面功函数进行在线测量。
2）GaN 摩擦化学综合实验研究
研究GaN 配副材料（Ni、Fe、轴承钢、氮化硅、氧化铝、氧化硅等）、摩擦往复次数、载荷、湿度等对摩擦自生电势和功函数的影响规律，及对摩擦系数和试件磨损的影响规律。考察摩擦磨损与摩擦电的相关性，结合表面形貌及亚表面结构与磨屑离线分析确定影响摩擦电的关键影响因素。
3）结合实验结果，仿真研究GaN 摩擦致电规律和作用模型采用密度泛函理论模拟计算得到GaN 在接触、晶格畸变、水氧吸附等过程中的电荷密度及电荷转移后的态密度，结合研究内容2）中电势和功函数实验测量结果，建立吸附水对不同摩擦配副的电荷产生及转移的摩擦致电模型和电致摩擦模型。
4）结合实验结果，仿真研究GaN 摩擦化学反应机理。
根据研究内容3）中对应条件下GaN 电荷密度及电荷转移后的态密度仿真结果，考虑摩擦温度和摩擦电对化学反应自由能的影响，基于反应力场（ReaxFF）的MD 对不同工况下GaN 的摩擦化学反应进行仿真；再结合研究内容2）中有关摩擦化学磨损实验结果，综合分析获得水吸附环境下GaN 的摩擦化学反应过程和磨损机理。

3.该选题所依托的科研项目或研究经费来源情况

1）申请了2022年度国家自然科学基金面上项目“不同湿度大气下单晶GaN的摩擦化学行为与机理研究”
2）机器人国重自主课题，各项异性梯度分级结构增材制造，20万，参加