



直流燃弧下铜钨表界面 SF_6 腐蚀机理研究

张心霖¹, 王淮^{1,2}, 张弘宇¹, 杨生春¹, 杨志懋¹, 孔春才^{1*}

1. 西安交通大学物理学院, 陕西省先进功能材料及介观物理重点实验室, 教育部物质非平衡合成与调控重点实验室, 西安 710049

2. 国家电投集团四川电力有限公司, 成都 610213

*联系人, E-mail: kongcc@xjtu.edu.cn

收稿日期: 2025-10-16; 接受日期: 2025-11-20; 网络出版日期: 2026-03-06

国家自然科学基金(编号: 92266107, 92366207, 92366301)和陕西省基础研究发展计划(编号: 2025SYS-SYSZD-032, 2023GXLH-008)资助项目

摘要 随着柔性直流输电技术发展, 高压直流断路器对耐电弧烧蚀以及耐灭弧气体腐蚀能力要求提高. 铜钨材料因优异性能常用作触头, 其性能影响气体绝缘断路器系统安全. 本研究通过第一性原理, 探究铜钨表界面不同结构在直流条件下的 SF_6 腐蚀性能. 结果显示, 铜钨功函数与结构相关, 铜钨晶界最低(4.28 eV); SF_6 气体与钨相吸附更强(-1.17 eV), 晶界吸附能最低(-5.80 eV), 且阴阳极环境影响显著; 腐蚀后功函数与最大应力下降7%. 研究为高性能触头设计提供理论支撑.

关键词 铜钨复合材料, 烧蚀机理, 第一性原理

PACS: 71.15.Mb, 73.30.+y, 68.43.-h, 73.20.-r

1 引言

在全球对高效率、低能耗的新能源的需求不断增加的趋势下, 柔性高压直流输电技术(High Voltage Direct Current, HVDC)凭借输送距离远、输电走廊更窄、无交流损耗、不存在相位问题等优点, 成为目前新能源发电并网的关键战略技术之一^[1]. 直流断路器因其保证整个系统的安全和可控性成为构建柔性直流输电网络的关键装备^[2]. 相比机械式与固态式直流断路器, 混合式直流断路器因其导通损耗更低, 开断速度更快, 成为目前直流输电网络中常用的直流断路器^[3,4]. 而其中快速机械开关(High Speed Switching, HSS)作为高压直流断路器的核心部件, 长时直流燃弧热效应会引起

其在灭弧室内部的触头等部件烧蚀, 缩短服役寿命^[5,6]. 因此, 用于制备快速机械开关材料的选择就显得尤为重要, 钨、铌、锆等超高温金属^[7-9]成为制备开关材料的重要候选组元, 特别是作为自然界熔点最高的金属, 金属钨则成为了首选.

面对特高电压、大电流的断路环境, 铜钨合金是特高压直流断路器材料的首选^[10,11]. 该金属基复合材料中铜相与钨相因其物化性质差异而出现两相分离的组织结构, 整体结合了钨的耐高温特性和铜的优良导电性, 能有效吸收电弧能量并更好切断大电流, 在抗腐蚀、耐烧蚀以及抗熔焊等触头材料关键性能上表现优秀^[12]. 然而这种金属结构既是其优势互补的来源, 却也是其失效发生的起因. 铜钨两相界面间存在键合

引用格式: 张心霖, 王淮, 张弘宇, 等. 直流燃弧下铜钨表界面 SF_6 腐蚀机理研究. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2026, 56: 240020

Zhang X W, Wang H, Zhang H Y, et al. Investigation on the corrosion mechanism of W/Cu surfaces and interfaces induced by SF_6 under DC arc discharge (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2026, 56: 240020, doi: 10.1360/SSPMA-2025-0457

弱、机械强度弱等特点, 在电弧高温下会产生较强热应力使得界面处更易生成裂纹并生长, 导致材料失效^[11,13,14]. 因此, 对铜钨界面的结构的调控和其对材料性能的影响研究成为现在研究的核心热点之一. Jiang等人^[15]利用飞秒激光微纳加工技术在钨表面构建了纳米波纹、微立方体阵列和微坑阵列等Cu/W界面结构, 其界面结合强度提升190%. Zhang等人^[16]通过精准控制实现铜钨界面处的直接扩散键合, 从而制备出高抗拉强度的铜钨接头. 调控界面的手段可以改变触头材料本身的物化性质进而扩大材料的适用范围, 但对于特高压的断路环境, 产生的高温等离子体电弧会烧蚀触头材料表面, 并且其烧蚀行为在不同电压和气体中显著不同. 因此, 界面结构对烧蚀行为的影响及其相互作用的研究就尤为必要. Guan等人^[17]的实验研究证实电弧烧蚀特性与阴极斑点区域的材料特性密切相关, 并且此过程中涉及能量转移、材料表面以及服役工况等多因素耦合. Duan等人^[18]通过实验发现服役环境与材料结构之间的耦合关系, 即在空气中的耐电弧烧蚀性能主要取决于钨骨架的连续性. 由于电弧烧蚀是多物理场与材料结构之间的耦合作用, 其机理的复杂性导致仅依靠实验手段无法完全理解烧蚀行为内在机理, 需要结合理论仿真手段加以解释. Li等人^[19]通过系统的电弧

烧蚀实验与第一性原理计算结合, 深入研究锡酸锌铜复合材料界面润湿性对电弧烧蚀行为的影响机制. Liang等人^[20]构建W-Cu的梯度分级界面模型, 从而利用密度泛函理论解释了渐变的界面能够提高铜钨材料的界面性能. 盖逸冰等人^[21]则探究铜钨体系中铜晶界、钨晶界、铜钨界面与不同元素之间的理化性质.

铜钨合金界面结构不同理化性质已经有相关研究, 在气体绝缘断路器背景下, 系统性揭示灭弧气体与触头材料不同界面结构之间的相互作用的研究却较少. 因此本文通过第一性原理对不同典型的铜钨界面进行建模, 通过改变外加电场模拟直流断路器中的工况环境, 揭示灭弧气体SF₆与界面结构的相互耦合关系, 为高压直流触头材料的设计提供理论参考.

2 模型与计算方法

构建(111)晶面以及重合位置点阵指数为 $\sum 5\{310\} < 110 >$ 的晶界作为铜相典型的界面结构^[21,22], 而钨相界面结构则选用(110)面和 $\sum 3\{111\} < 110 >$ 晶界^[23], 铜钨界面结构则选用文献中证明较为稳定的Cu(111)/W(110)界面^[24]. 其中所有表面模型的结构示意图如图1

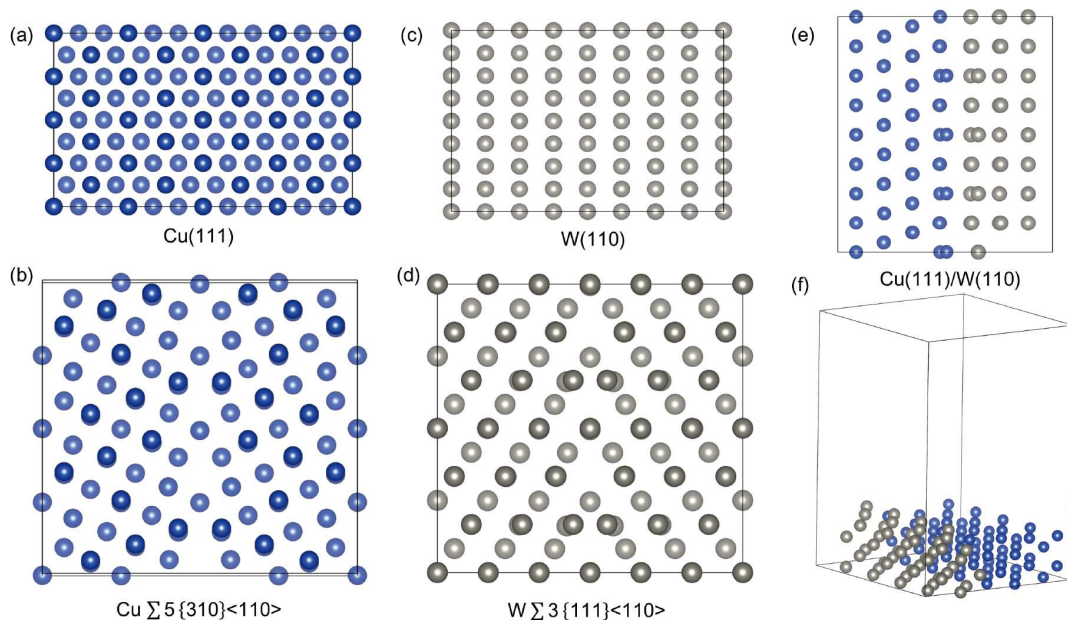


图 1 铜钨各表面模型示意图. (a), (b) Cu的表面和界面; (c), (d) W的表面和界面; (e), (f) Cu/W界面的俯视和侧视图

Figure 1 Schematic diagram of various surface and interface models of W/Cu. (a), (b) The surface and interface of Cu; (c), (d) the surface and interface of W; (e), (f) the top view and side view of the Cu/W interface.

所示.

采用Materials Studio软件进行晶体界面建模并计算, 所有界面模型均采用20 Å的真空层以满足界面周期性要求, 其中铜/钨晶面模型均弛豫表层原子, 孪晶晶界模型则要固定晶界两侧原子. 铜钨界面总计115个原子, 弛豫原子数为40个; 铜表面总计113个原子, 固定两层原子后, 弛豫原子数为36个; 钨表面总计121个原子, 固定两层原子后, 弛豫原子数为40个; 铜界面总计142个原子, 弛豫原子数为31个; 钨界面总计123个原子, 弛豫原子数为31个. 图1(a)和(b)为铜的表面和界面模型, (c)和(d)则为钨的表面和界面模型, (e)为铜钨界面的俯视图, (f)为铜钨界面的侧视图. 铜钨界面模型的晶格失配度为1.43%, 满足第一性原理计算要求. 利用Materials Studio软件的CASTEP模块进行上述模型的第一性原理计算, 采用PBE的广义梯度近似泛函形式, 平面波基组的动能截断能设置为550 eV, 采用Monkhorst-Pack类型的k点网格3×3×1对布里渊区进行采样, 采用Ultrasoft赝势. 设置收敛标准为总能量小于 2×10^{-5} eV/atom、原子间最大作用力为0.05 eV/Å、最大应力为0.1 GPa、原子间最大位移为0.002 Å.

3 结果与讨论

3.1 铜钨表界面与SF₆相互作用及电子结构变化

对铜钨触头表面的五种表界面模型进行功函数计算结果如表1所示.

可以看到铜相和钨相的晶面的计算功函数分别是4.60和4.55 eV, 尽管GGA近似关联泛函通常会低估真空能级的离散性使得功函低估, 但其大致符合实际测量值, 说明模型建立的合理性. 功函数的大小直接决定了电子逸出表面的能力, 对比不同结构的功函可知, 铜钨界面功函最小, 这是晶界处存在金属悬键, 导致局部电场增加, 使得界面更易逸出电子. 而晶界低功函这

一特点也表明在触头断开时, 高压电场使得触头表面的两相界面处的更易优先起弧, 界面处局部电流密度集中, 烧蚀优先出现在两相界面.

对于气体绝缘断路器而言, SF₆气体是目前典型的灭弧气体, 其极强的电负性使得可以吸附大量自由电子从而减少电弧电离过程进而熄灭断开过程中的电弧. 因此, 计算了SF₆在铜钨各表界面结构的吸附作用从而表征分子与材料表面的相互作用. 一般来说, 吸附能 E_{ads} 越小, 分子与材料表面的相互作用越强, 是放热反应^[25,26]. 因此比较不同表面对SF₆的吸附能可分析SF₆的吸附与腐蚀过程对表界面结构的选择性, 其计算公式为

$$E_{\text{ads}}^{\text{Cu-W-SF}_6} = E_{\text{Cu-W}_{\text{surf-SF}_6}} - E_{\text{Cu-W}_{\text{surf}}} - E_{\text{SF}_6}, \quad (1)$$

式中, $E_{\text{Cu-W}_{\text{surf-SF}_6}}$ 是铜钨表界面吸附SF₆后的总能量; $E_{\text{Cu-W}_{\text{surf}}}$ 是铜钨表界面的表面能; E_{SF_6} 是单个SF₆分子的能量. 得到SF₆单个分子能量为-4249.680 eV, 不同表界面的吸附能如表2所示. 结果表明所有表界面结构的吸附能均为负, 即SF₆均能稳定吸附. SF₆气体分子更易吸附在晶界处, 对于铜相和钨相而言, 晶界处的空位点更易吸附SF₆; 并且钨对应的吸附能更低, 并且, 对于铜钨界面而言吸附更强, 说明其更易吸附于铜钨晶界处且易于与钨结合, 从而产生腐蚀. 在吸附后的稳定构型中, SF₆气体分子在铜相表界面结构处的结构保持相对稳定, 但在钨相表面则发生了结构变形, S-F键长增加到3.0 Å, F与近邻W的距离为1.9 Å, 即分子分解并与W发生键合, 即SF₆对W腐蚀更大. 如图2(i)所示铜钨晶界处SF₆整体更加靠近钨相, 其两个F原子与表面结合, 其键长分别为1.900与1.906 Å, 剩余结构与SF₄近似, 即揭示了在界面处腐蚀时的内在分解机理是SF₆转变为SF₄.

差分电荷密度图可以直观理解材料内部不同结构之间的相互作用, 从而确定内部化学键合的内在电子变化机制^[27]. 铜钨表界面吸附SF₆的差分电荷密度图如图2所示. 其中黄色区域代表电荷增加, 蓝色区域代表电荷减少. 铜相的表界面与SF₆之间可以看到最表层铜原子向F原子有电子转移, 而随着层数的增加, 其与基底的相互作用减弱. 在钨相的表界面结构处, 可以明显看到钨基底电子转移涉及的层数较多, F原子得电子, 并与钨原子成键, 说明其在钨表面发生化学反应, 进而造成腐蚀. 相比完整晶面而言, 在界面处的电子转

表 1 不同铜钨表面结构功函数

Table 1 Work functions of different W/Cu surface structures

	功函数 (eV)
铜晶面	4.60
铜晶界	4.56
钨晶面	4.55
钨晶界	4.48
铜钨界面	4.28

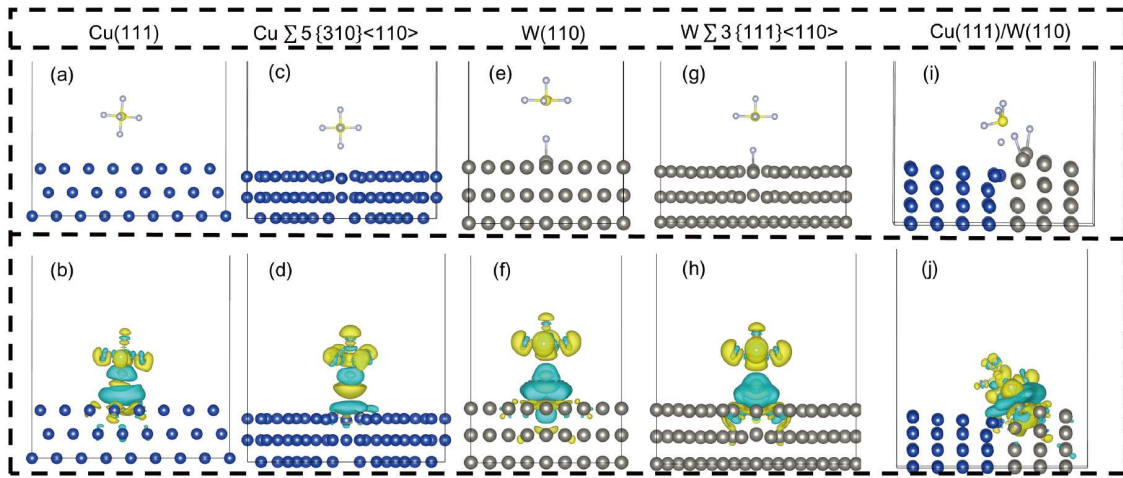


图 2 铜钨各表面吸附 SF_6 以及其电子云图. (a)–(d) Cu的表面和界面; (e)–(h) W的表面和界面; (i), (j) Cu/W界面
Figure 2 SF_6 adsorption and electron density maps of various W/Cu surfaces and interfaces. (a)–(d) Adsorption and electron density maps of Cu's surfaces and interface; (e)–(h) those of W's; (i), (j) show those of the Cu/W interface.

表 2 不同铜钨表面模型与 SF_6 吸附能

Table 2 Adsorption energies of SF_6 on different W/Cu surface models

	$E_{\text{Cu-W surfSF}_6}$ (eV)	$E_{\text{Cu-W surf}}$ (eV)	$E_{\text{ads}}^{\text{Cu-W-SF}_6}$ (eV)
铜晶面	-145968.965	-141719.270	-0.015
铜晶界顶位	-163657.297	-159407.264	-0.353
铜晶界空位	-163657.300	-159407.264	-0.356
钨晶面	-189821.700	-185571.144	-0.879
钨晶界顶位	-212940.020	-208689.400	-0.940
钨晶界空位	-212940.250	-208689.400	-1.172
铜钨晶界	-191465.554	-187210.071	-5.803

移更多, 因为腐蚀更易发生在晶界处. 对于铜钨界面而言, 铜相的存在使得在钨相表面的电子转移更深入, 并且两个F原子与晶界处的钨原子形成局域电子积累区以及局部电荷缺失区, 使得电子从钨转移向F更多, 导致晶界处钨原子与基底原子之间的键合减弱, 从而导致潜在钨结构的破坏, 进而发生严重腐蚀.

通过比较不同表面结构中的原子分波态密度, 可以更准确地描述表面电子结构的内在变化, 确定不同原子轨道对整体电子转移的贡献, 从而明确在腐蚀过程中的键合变化^[28,29]. 如图3所示, 5个吸附模型分别选择铜钨表面最近的F原子的p轨道、及其近邻的W d轨道、Cu d轨道以及S p轨道. 结果表明, 铜相的分波态密度中, Cu d轨道与F p轨道无重叠峰, 而-13 eV附近S p与F p轨道存在重叠峰, 且Cu 3d轨道未参与, 表明 SF_6 与铜相相互作用弱, S-F键未断裂. 相反在钨相

中, -7 eV附近F p与W d轨道出现重叠峰, 体现二者杂化及强电子能级耦合, F 3p与W 5d轨道的显著杂化峰证实化学键形成, 同时S p与F p无重叠, 说明S-F键断裂, SF_6 发生分解. 铜钨界面的分波态密度中, W d与F p轨道存在重叠峰, 而Cu d轨道与其他原子无明显重叠峰, S p轨道与F p轨道几乎无重叠, 说明S-F键已经断裂, 说明在铜钨界面处存在明显的化学反应变化, 进一步证实烧蚀优先出现在两相界面处.

3.2 电极环境作用下铜钨界面与 SF_6 的相互作用

气体高压直流断路器开断时, 触头材料处于强电场与高密度空间电荷环境中, 因固定极性设计, 阴阳极工况差异显著. 阴极受强电场与电子积聚作用, 阳极则受强电场与电子耗损影响. 通过调控体系极性与外加电场从而模拟实际触头服役工况有助于理解表面结构与 SF_6 灭弧气体之间的相互作用. 因此, 对体系赋予正负电荷来模拟阴阳极的不同, 其中阴极加负电荷, 阳极加正电荷. 并且当体系为阴极时, 施加0.02 V/Å的电场垂直于表面向下, 而阳极时则和阴极电场施加方向相反. 从而探究不同服役环境下, 铜钨表界面与 SF_6 之间的相互作用.

实际工况下, 功函数也会影响电弧的初始形成与空间分布, 外加物理场与界面之间的复杂耦合作用可能会导致功函数非线性变化, 从而影响开断过程中的物理现象, 因此, 了解其耦合的作用对功函数的变化有

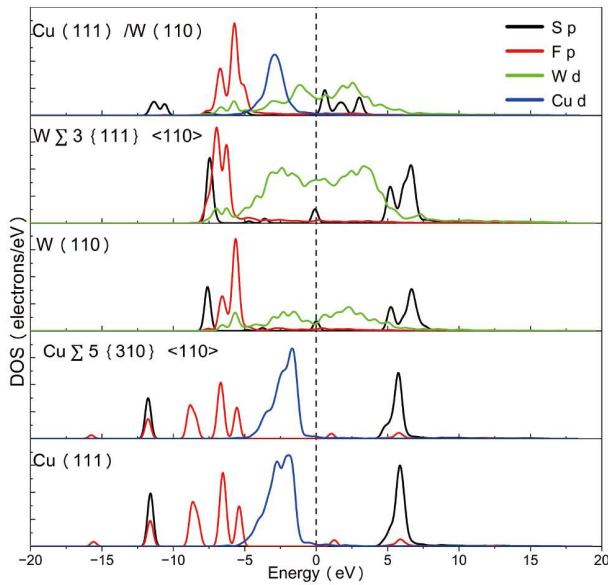


图 3 铜钨各表界面吸附 SF_6 的态密度图

Figure 3 Density of states maps of SF_6 adsorbed on various W/Cu surfaces and interfaces.

助于理解开断现象. 如图4(a)所示, 在阴极工况下, 铜钨触头功函数由于负电荷富集与向下电场协同作用显著降低, 其中铜相表界面功函数低于钨相, 晶界处功函数最低, 显著增强电子逸出能力, 成为电子发射主要区域; 阳极条件下, 正电荷与向上电场使功函数明显升高, 促使金属阳离子脱离晶格, 为电弧提供正电荷载体, 这种阴阳极工况下差异化电荷传输直接决定了电弧引燃和初始发展行为.

在不同电极环境中的 SF_6 吸附呈现显著环境依赖性, 如图4(b)所示. 在阴极环境下, 铜相对 SF_6 由吸附转

为排斥, 而钨相则呈现出更好的吸附能力, 且与无电场时相反, 晶面吸附能低于晶界, 这一现象表明阴极环境会改变对钨相腐蚀区域的选择. 在阳极环境下, 钨相吸附能力变弱, 铜相吸附能变强, 表明 SF_6 在阳极环境下对铜钨表面的钨相的吸附选择性与腐蚀能力下降. 而在两种电极环境下, 铜钨界面的吸附能力都强于未加电场.

通过计算不同电极环境对不同表界面吸附的电子态密度图如图5所示, 从而了解不同环境下的界面的吸附行为. 阳极环境下, Cu相模型中, F p轨道向费米能级附近移动, 与Cu d轨道的重叠面积相比未加电场以及阴极环境下的大, 其键合更强, 吸附增强; 而阴极环境下, Cu相模型的F p轨道远离费米能级, 键合减弱, 吸附减弱. W相模型中, 阳极环境下, S p轨道远离费米能级, 与W d轨道重合减少, 键合变弱, 从而导致吸附变弱, 而在阴极环境下, S p轨道靠近费米能级导致吸附增强. 因此, 在不同电场环境中, 不同模型中不同物质的电子轨道靠近或是远离费米能级的改变影响吸附能, 从而影响腐蚀行为. 加入电场后, W d轨道的变化在钨铜界面模型中很明显, 并且, 和没有加电场时的相比, S p轨道与其重叠峰在费米能级附近显著降低, 因此, 可以说明其结合能力变弱, 吸附减弱, 即在钨铜界面处电场使得W和S之间的相互作用减弱, 从而导致吸附能力降低.

3.3 SF_6 腐蚀对铜钨界面电学与力学性能影响

研究表明^[30], 多次进行触头带电开断操作后可检测到 WF_6 等腐蚀产物. 基于前文计算, 可以认为暴露于

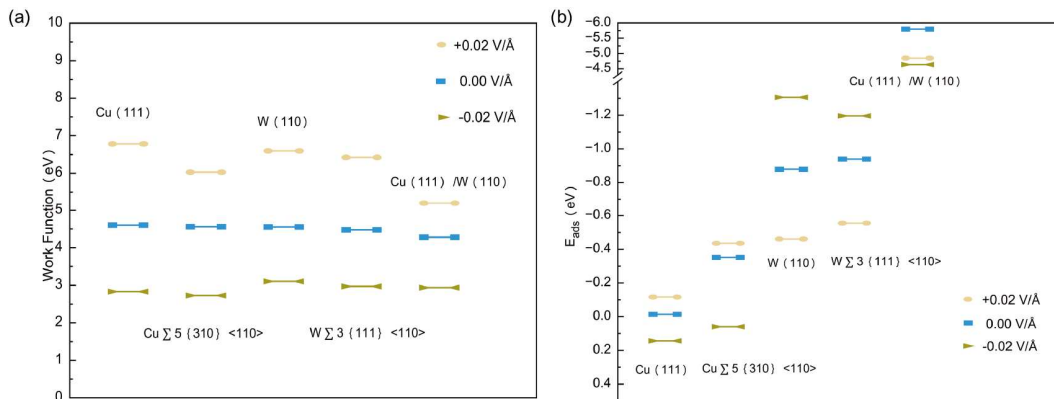


图 4 (a) 铜钨各表界面不同电场环境下的功函数变化图; (b) 铜钨各表界面不同电场环境下的功函数吸附 SF_6 吸附能变化图

Figure 4 (a) Work function variation of Cu-W surfaces/interfaces under different electric fields; (b) SF_6 adsorption energy variation thereof under different electric fields.

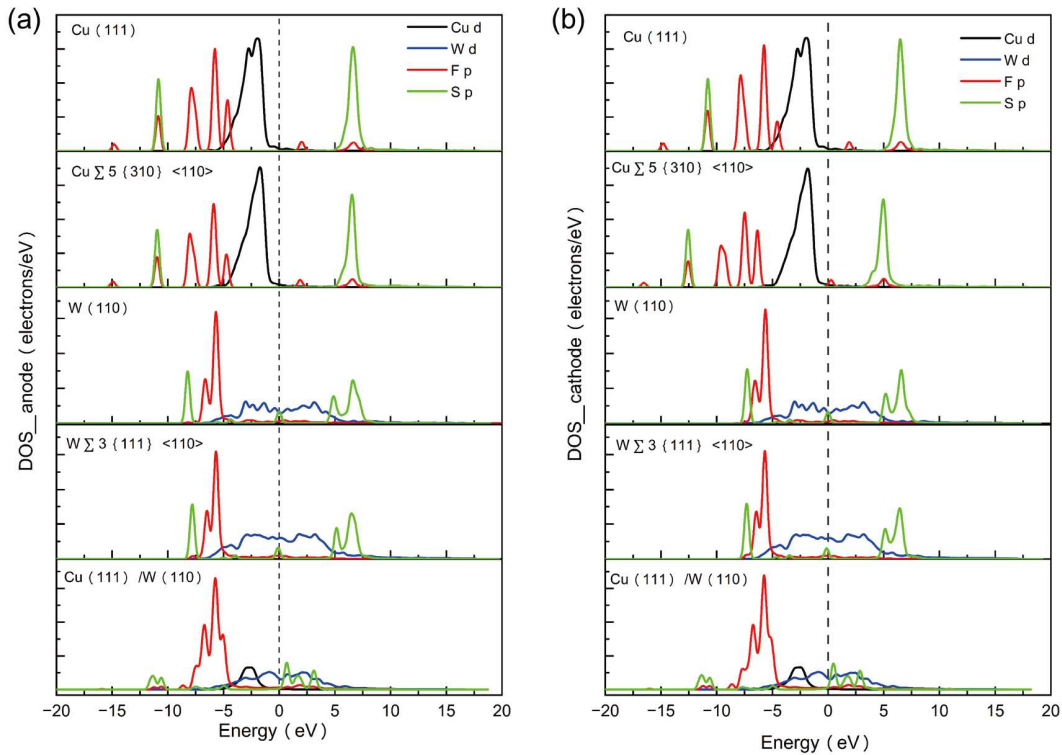


图 5 (a) 铜钨各表面阳极环境下吸附 SF_6 的态密度图; (b) 铜钨各表面阴极环境下吸附 SF_6 的态密度图
Figure 5 (a) DOS maps of SF_6 -adsorbed Cu-W surfaces/interfaces in anodic environment; (b) DOS maps thereof in cathodic environment.

灭弧气体的触头表面上的钨相被 SF_6 气体选择性腐蚀, 导致腐蚀的钨原子脱离钨骨架表面, 进而造成结构性损伤影响触头的电学与力学性质。因此, 根据前文计算结果, 删除与F稳定键合的W, 如图6所示, 从而理解其腐蚀后不同界面处的电学与力学性质的变化有助于理解触头烧蚀的内在机理。

对比腐蚀前后的功函数的变化如图6(d)所示。腐蚀后界面功函数均呈现下降趋势, 晶面处变化较低仅为 -0.014 eV , 铜钨晶界处的功函数显著下降其幅值为 -0.051 eV 。可以认为, 在开断操作后, 功函数降低会增强铜钨触头电子发射能力, 易形成初始电子发射点, 诱发电弧并改变烧蚀分布。同时, 表面电子特性改变会促进 SF_6 吸腐蚀, 在晶界等缺陷区域形成“吸附-腐蚀-功函数下降”的恶性循环, 导致钨骨架性能退化(导电性、机械强度及耐烧蚀性下降), 最终影响触头寿命和断路器可靠性。

对于腐蚀后的材料力学性能的变化, 一般有三类方法获得其应力应变曲线^[31]: 一是不预设断裂面, 沿垂直界面拉伸并改变尺寸, 考虑泊松效应, 全面弛豫原

子位置与尺寸以计算总应力; 二是预设断裂面, 保持尺寸不变(忽略泊松效应), 弛豫原子位置计算应力; 三是预设断裂面, 沿垂直方向分离原子, 不弛豫位置与尺寸。本研究采用第三类方法, 通过预设断裂面垂直分离原子且不弛豫位置, 虽无法揭示原子尺度断裂细节, 但计算效率高, 力学性能相对变化趋势与前两类一致, 可满足对比 SF_6 腐蚀前后钨骨架力学性能演变的需求。即本文预设其分离表面出现在晶界以及晶面中间处。这种方法是基于分离能 E_{sep} 计算获得^[32], 公式为

$$E_{\text{sep}} = \frac{E_x - E_0}{S}, \quad (2)$$

式中, E_x 是拉伸距离为 x 时的拉伸体系总能量; E_0 是未开始拉伸时的晶界模型总能量; S 是体系横截面积。分离能与拉伸距离之间的关系可以通过Rose方程进行拟合^[33], 其拟合公式为

$$\begin{cases} f(x) = E_{\text{frac}} - E_{\text{frac}} \left(1 + \frac{x}{\lambda} \right) e^{\left(-\frac{x}{\lambda} \right)}, \\ E_{\text{frac}} = \frac{E_{\infty} - E_0}{S}, \end{cases} \quad (3)$$

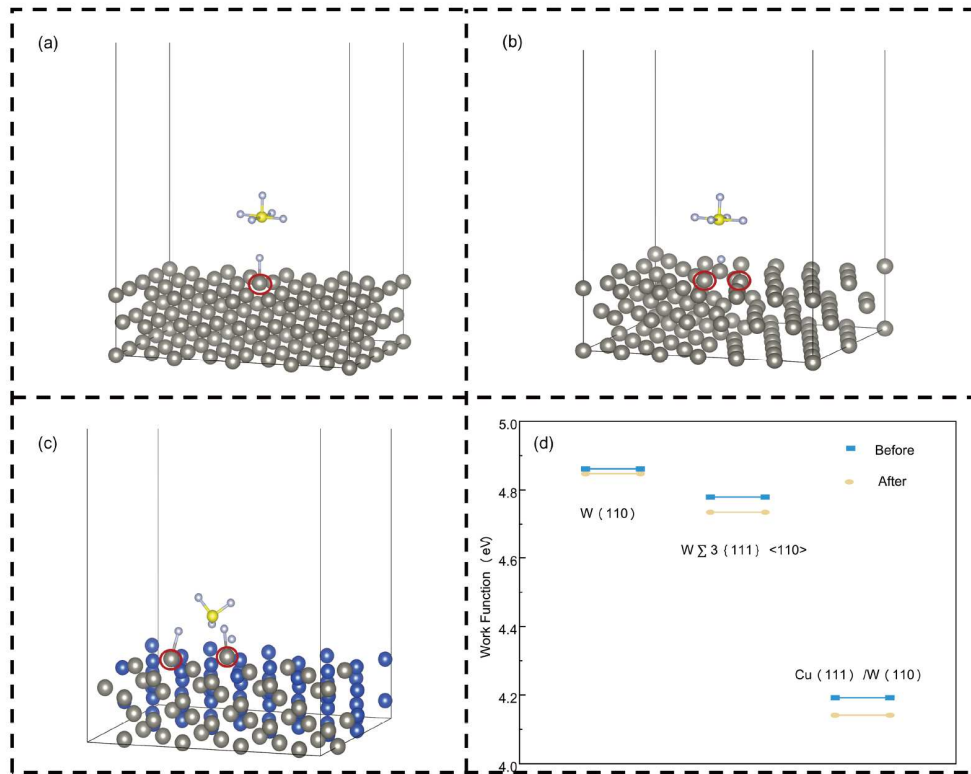


图 6 (a)–(c) 钨损伤结构模型图; (d) 腐蚀前后的功函数图
Figure 6 (a)–(c) W-damaged structure models; (d) work function plot before and after corrosion.

式中, λ 是特征距离^[34]; E_{frac} 是断裂能量即最大分离能; E_{∞} 是拉伸能量. 因此所得断裂能量计算结果如表 3. 可以看出, 铜钨材料的断裂能量与其微结构密切相关, 铜相和钨相的界面表现出较高的断裂能, 而铜钨晶界处的断裂能相对较低. 并且, SF_6 气体分子的存在会对钨骨架产生显著影响, 导致其各部位的力学性能进一步降低.

通过对 $f(x)$ 的导数可以获得拉伸应力, 并画出应力

应变曲线如图 6 所示, 其计算公式为

$$f'(x) = \frac{E_{\text{frac}} x}{\lambda^2} e^{\left(-\frac{x}{\lambda}\right)}. \quad (4)$$

因此, 当拉伸距离 x 等于特征距离 λ 时可以获得理论最大应力 σ_{max} 的最大值, 即

$$\sigma_{\text{max}} = f'(x) = \frac{E_{\text{frac}}}{\lambda e}. \quad (5)$$

从图 7 可见, SF_6 腐蚀后, $\text{W}\Sigma 3\{111\}<110>$ 模型最大应力从 40 GPa 级别降至 30 GPa 级别, $\text{W}(110)$ 模型从约 55 GPa 降至 40 GPa 级别, $\text{Cu}(111)/\text{W}(110)$ 模型从约 20 GPa 进一步低于 20 GPa; 整体上, 所有模型腐蚀后最大应力均明显下降, 且原本钨相晶面力学性能最强、铜钨晶界相对最弱的规律仍存在, 各部位整体应力水平和最大应力值均进一步降低, 这表明 SF_6 腐蚀对铜钨各界面的力学性能存在显著的退化作用. 铜钨触头在 SF_6 的腐蚀下的应力等力学性能的退化可引发界面开裂、铜相流失会直接破坏导电网络, 并且, 力学性能的改变也会导致其抗熔焊性能的下降.

表 3 不同表面模型被 SF_6 腐蚀前后分离能

Table 3 Separation energies of different surface models before and after corrosion by SF_6

	$E_{\infty} - E_0$ (eV)	S ($\text{\AA}^2$)	E_{frac} (eV/ $\text{\AA}^2$)
钨晶面	38.199	54.874	0.696
腐蚀后钨晶面	31.292	54.874	0.570
钨晶界	39.099	68.421	0.571
腐蚀后钨晶界	35.923	68.421	0.525
铜钨界面	17.950	83.264	0.216
腐蚀后铜钨界面	15.371	83.264	0.185

4 结论

本文采用第一性原理方法研究了高压直流断路器铜钨触头与 SF_6 的作用机制, 构建五种典型铜钨表界面模型, 揭示了表界面结构对电子发射、 SF_6 吸附腐蚀及力电性能的影响. 计算结果表明, 铜相功函数高于钨相, 晶界功函数普遍降低, 其中铜钨界面功函数最低(4.28 eV), 为电弧优先在此形成提供理论依据. SF_6 吸附具有表面选择性, 钨表面化学吸附更强(吸附能较铜低0.6 eV), 铜钨界面吸附能最低(-5.803 eV), 且 SF_6 解离为 SF_4 并与钨结合, 揭示界面催化 SF_6 分解的新路径. 电极极性显著调控吸附选择性, 阳极条件下铜钨表面吸附能差缩小; 阴极条件下钨表面吸附能降至-1.1 eV, 铜表面出现正吸附能, 证实 SF_6 对铜相的排斥效应, 解释材料非对称腐蚀机制. SF_6 腐蚀导致钨相功函数下降, 增加电弧烧蚀风险; 力学性能呈现晶面-晶界差异, 铜钨晶界力学性能最差, 腐蚀后应力整体下降, 电-力性能耦合劣化构成材料失效关键因素. 本研究系统揭示了铜钨材料表面电子特性、气固界面反应

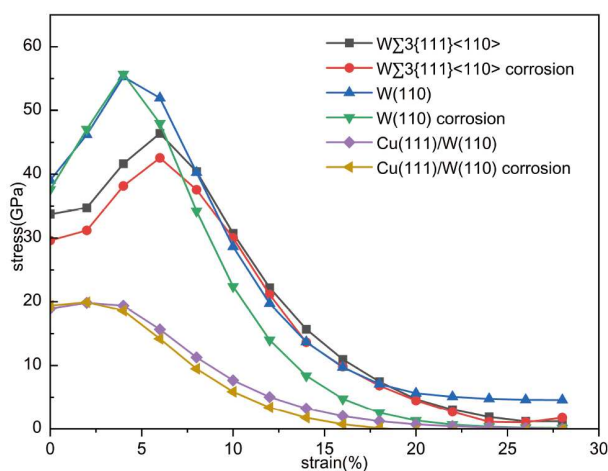


图 7 铜钨各表界面的理论拉伸应力与应变变化图

Figure 7 Variation diagram of theoretical tensile stress and strain of various W/Cu surfaces and interfaces.

及多机制耦合损伤机理, 为高压电器材料优化设计与寿命预测提供理论支撑.

参考文献

- Perez-Molina M J, Larruskain D M, Eguia Lopez P, et al. Review of protection systems for multi-terminal high voltage direct current grids. *Renew Sustain Energy Rev*, 2021, 144: 111037
- Wu Y F, Wu Y, Zhuang W B, et al. Research progress and prospect of fast DC current interruption technology (in Chinese). *High Volt Eng*, 2024, 50: 467–477 [吴益飞, 吴翊, 庄伟斌, 等. 直流快速开断技术研究进展和展望. *高电压技术*, 2024, 50: 467–477]
- Divinnie M D, Stacy J K, Parsons A C. Arc flash mitigation using active high-speed switching. *IEEE Trans Ind Applicat*, 2015, 51: 28–35
- Huo Q, Xiong J, Zhang N, et al. Review of DC circuit breaker application. *Electric Power Syst Res*, 2022, 209: 107946
- Yang X, Zhang C, Lv J, et al. Review on key technologies of DC high speed switch in a multi-terminal UHVDC system. *IET Conf Proc*, 2022, 2021: 195–201
- Straumann U, Schuller M, Franck C M. Theoretical investigation of HVDC disc spacer charging in SF_6 gas insulated systems. *IEEE Trans Dielect Electr Insul*, 2012, 19: 2196–2205
- Hu L, Wang W L, Yang S J, et al. Dendrite growth within supercooled liquid tungsten and tungsten-tantalum isomorphous alloys. *J Appl Phys*, 2017, 121: 085901
- Wang H P, Li M X, Zou P F, et al. Experimental modulation and theoretical simulation of zonal oscillation for electrostatically levitated metallic droplets at high temperatures. *Phys Rev E*, 2018, 98: 063106
- Wang H, Hu L, Xie W, et al. Metastable liquid properties and surface flow patterns of ultrahigh temperature alloys explored in outer space. *Angew Chem Int Ed*, 2024, 63: e202400312
- Damle T, Varenberg M, Graber L. Electric contact material selection for medium and high voltage DC circuit breakers. *Trans Electr Electron Mater*, 2020, 21: 329–338
- Wan C, Li J W, Wang Z, et al. Performances of high-density fine-grain W-25Cu electrical contact materials (in Chinese). *Trans Nonferrous Met Soc China*, 2017, 27: 504–513 [万成, 李继文, 王展, 等. 高致密细晶W-25Cu触头材料的电接触性能. *中国有色金属学报*, 2017, 27: 504–513]
- Huang W, Yu H, Wang L, et al. State of the art and prospects in silver- and copper-matrix composite electrical contact materials. *Mater Today*

Commun, 2023, 37: 107256

- 13 Wang Y, Zhuo L, Yin E. Progress, challenges and potentials/trends of tungsten-copper (W-Cu) composites/pseudo-alloys: Fabrication, regulation and application. *Int J Refract Met Hard Mater*, 2021, 100: 105648
- 14 Zhou Y X, Xue Y L, Zhou K. Failure analysis of arc ablated tungsten-copper electrical contacts. *Vacuum*, 2019, 164: 390–395
- 15 Jiang D, Long J, Cai M, et al. Femtosecond laser fabricated micro/nano interface structures toward enhanced bonding strength and heat transfer capability of W/Cu joining. *Mater Des*, 2017, 114: 185–193
- 16 Zhang J, Huang Y, Liu Y, et al. Direct diffusion bonding of immiscible tungsten and copper at temperature close to Copper's melting point. *Mater Des*, 2018, 137: 473–480
- 17 Guan W, Yuan J, Lv H, et al. Homogeneous arc ablation behaviors of CuCr cathodes improved by chromic oxide. *J Mater Sci Tech*, 2021, 81: 1–12
- 18 Duan J, Guo X, Huang T, et al. Arc ablation resistance behavior of Cu-W alloys with different W contents under atmospheric environment. *Mater Today Commun*, 2023, 34: 105173
- 19 Li W J, Chen Z Y, Jiang H, et al. Effects of interfacial wettability on arc erosion behavior of $\text{Zn}_2\text{SnO}_4/\text{Cu}$ electrical contacts. *J Mater Sci Tech*, 2022, 109: 64–75
- 20 Liang C P, Fan J L, Gong H R, et al. Interface structure and work function of W-Cu interfaces. *Appl Phys Lett*, 2013, 103: 211604
- 21 Gai Y B, Tang F W, Hou C, et al. First-principles calculation on the influence of alloying elements on interfacial features of W-Cu system (in Chinese). *Acta Met Sin*, 2020, 56: 1036–1046 [盖逸冰, 唐法威, 侯超, 等. 合金化元素对W-Cu体系多类界面特征影响的第一性原理计算. *金属学报*, 2020, 56: 1036–1046]
- 22 Zhan L, Zhu X, Qin X, et al. Sintering mechanism of copper nanoparticle sphere-plate of crystal misalignment: A study by molecular dynamics simulations. *J Mater Res Tech*, 2021, 12: 668–678
- 23 Tang F, Liu X, Wang H, et al. Solute segregation and thermal stability of nanocrystalline solid solution systems. *Nanoscale*, 2019, 11: 1813–1826
- 24 Wang J W, Fan J L, Gong H R. Effects of Zr alloying on cohesion properties of Cu/W interfaces. *J Alloys Compd*, 2016, 661: 553–556
- 25 Yang D, He D, Lu D, et al. The gas-sensing mechanism of Nb_2C monolayer for SF_6 decomposition based on the DFT study. *Phys Scr*, 2024, 99: 125404
- 26 Sun S, Wang H, Zhang L, et al. Intergranular-stress corrosion cracking mechanism of brass in H_2S environment: A DFT study. *Comput Mater Sci*, 2019, 170: 109193
- 27 Cui Z, Hao Y, Jafarzadeh A, et al. The adsorption and decomposition of SF_6 over defective and hydroxylated MgO surfaces: A DFT study. *Surfs Interfaces*, 2023, 36: 102602
- 28 Li B, Guan Z, Li Y, et al. Rare earth alloying in Cu enhances the C/Cu interfacial wettability for long-lasting copper-based electrical contacts. *J Mater Res Tech*, 2025, 35: 911–920
- 29 Wang L, Wang X, Yan Y, et al. Theoretical analysis of Ni atom-doped MXene for improving the catalytic degradation performance of SF_6 . *Comput Theor Chem*, 2023, 1229: 114325
- 30 Chen W, Shi Y, Dong L, et al. Infiltration sintering of WCu alloys from copper-coated tungsten composite powders for superior mechanical properties and arc-ablation resistance. *J Alloys Compd*, 2017, 728: 196–205
- 31 Xiao Z, Hu J, Liu Y, et al. Co-segregation behavior of Sc and Zr solutes and their effect on the Al $\Sigma 5$ (210) [110] symmetrical tilt grain boundary: A first-principles study. *Phys Chem Chem Phys*, 2019, 21: 19437–19446
- 32 Wu X, Kong X S, You Y W, et al. Effect of transition metal impurities on the strength of grain boundaries in vanadium. *J Appl Phys*, 2016, 120: 095901
- 33 Rose J H, Ferrante J, Smith J R. Universal binding energy curves for metals and bimetallic interfaces. *Phys Rev Lett*, 1981, 47: 675–678
- 34 Wu X, You Y W, Kong X S, et al. First-principles determination of grain boundary strengthening in tungsten: Dependence on grain boundary structure and metallic radius of solute. *Acta Mater*, 2016, 120: 315–326

Investigation on the corrosion mechanism of W/Cu surfaces and interfaces induced by SF₆ under DC arc discharge

ZHANG XinWei¹, WANG Huai^{1,2}, ZHANG HongYu¹, YANG ShengChun¹,
YANG ZhiMao¹ & KONG ChunCai^{1*}

¹ Ministry of Education Key Laboratory for Non-equilibrium Synthesis and Modulation of Condensed Matter, Shaanxi Province Key Laboratory of Advanced Functional Materials and Mesoscopic Physics, School of Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China

² State Power Investment Corporation Limited, Chengdu 610213, China

*Corresponding author (email: kongcc@xjtu.edu.cn)

With the advancement of flexible direct current (DC) transmission technology, high-voltage DC circuit breakers demand higher arc erosion resistance and arc-extinguishing gas corrosion resistance. Copper-tungsten materials are widely employed as contact materials for their exceptional comprehensive properties, and their performance directly affects the operational safety of gas-insulated circuit breaker systems. In this study, first-principles calculations were used to investigate the SF₆-induced corrosion behavior of different W/Cu surface and interface structures under DC conditions. Results show that the work function of W/Cu is structure-dependent, with the lowest value (4.28 eV) at the copper-tungsten grain boundary. SF₆ adsorbs more strongly on the W phase (adsorption energy: -1.17 eV), while the lowest adsorption energy (-5.80 eV) occurs at the copper-tungsten grain boundary; notably, anodic and cathodic environments significantly affect the adsorption and corrosion processes. After corrosion, both the work function and maximum stress of copper-tungsten decreased by 7%. This study offers theoretical support for designing high-performance copper-tungsten contact materials for high-voltage DC circuit breakers.

Cu-W contact, corrosion mechanism, first principles

PACS: 71.15.Mb, 73.30.+y, 68.43.-h, 73.20.-r

doi: [10.1360/SSPMA-2025-0457](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2025-0457)