

# 数学与系统科学研究院

## 计算数学所学术报告

报告人： 陈星秋 研究员

(中国科学院金属研究所)

报告题目：

材料电化学腐蚀的第一原理计算及  
多尺度建模

邀请人： 曹礼群 研究员

报告时间： 2018 年 3 月 27 日（周二）

下午 15:00--16:00

报告地点： 数学院南楼N714 教室

报告摘要：

金属与合金材料的腐蚀是一个非常复杂的现象，该现象的防护是一个传统而重要的的研究主题。但迄今为

止，还没有具有有效地预测金属和合金腐蚀行为的高通量多尺度计算模型，主要因为该现象复杂，而影响因素又众多。最近我们从腐蚀电化学基本原理出发，用第一性原理建模，结合已知和新定义的系列参数，建立了这些参数与电极电位、交换电流密度之间关系的表达式，提出了基于第一原理计算的金属和合金腐蚀的算法和模型。该模型很好地解释了一些已知的实验事实，并具有预测能力，将可应用于改善合金抗腐蚀能力的设计中。

欢迎大家参加！