
金属所等实现晶界三维原子结构成像

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/12008.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！

晶界作为材料中广泛存在的重要缺陷，它的结构和行为很大程度上决定了多晶材料的物理、化学和力学性能。晶界结构和行为的研究一直是材料科学的研究焦点之一。虽然透射电子显微技术的发展已将材料研究推进到亚埃尺度，但是由于晶界结构本身的复杂性以及传统透射电镜二维投影成像模式的限制，人们对实际晶体材料中的晶界结构的认知极其有限。因此，从实验上实现晶界三维原子结构成像对深入认识晶界具有重要意义。

目前，传统透射电子显微技术（包括透射成像或扫描透射成像）可以对百纳米厚度的样品进行形貌和原子结构的投影成像。尽管像差校正技术已将透射电镜的分辨率提高到亚埃尺度，但二维投影包含的有限性信息极易使人们对材料真实三维结构的认识产生偏差甚至误解。因此，通过三维成像直接从纳米，甚至原子尺度解析材料的三维结构变得尤为重要。电子层析三维重构技术（Electron Tomography）是电子显微术与计算机图像处理相结合而形成的一门具有重要应用前景的新技术。近年来，随着电子显微镜、计算机技术和图像处理算法的发展，电子层析三维重构技术在生物、化学和材料科学等领域得到广泛应用。

近日，中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心材料结构与缺陷研究部杜奎课题组与合作者实现了原子分辨率电子层析三维重构技术，并解析了金属晶界的三维原子结构，包括大角的结构单元型晶界和小角的位错型晶界。相关研究结果以Three-Dimensional Atomic Structure of Grain Boundaries Resolved by Atomic-Resolution Electron Tomography为题，发表在Matter上。

与传统研究中普遍认为的晶界具有一维平移周期性不同，该研究表明实际晶体材料中大角晶界的结构单元在三维空间不具有平移周期性。晶界原子配位数分析与曲率分布表明大角晶界的结构单元分布、晶界局部曲率有关。小角晶界的三维重构结果表明晶界位错形成了大量割阶和扭折。三维原子尺度对割阶和扭折直接成像从实验上证实了此前理论上提出的位错割阶和扭折模型。基于晶界原子坐标，可以同时获得晶界的晶体学信息与三维原子结构，由此可全面解析晶界结构信息。通过电子层析三维重构技术获得的晶界三维原子结构，为后续晶界实验研究与计算模拟提供了重要参考，并推动晶界结构与行为、晶界-位错交互作用的研究。

研究工作得到国家自然科学基金、国家重点研发计划等的资助。

[论文链接](#)

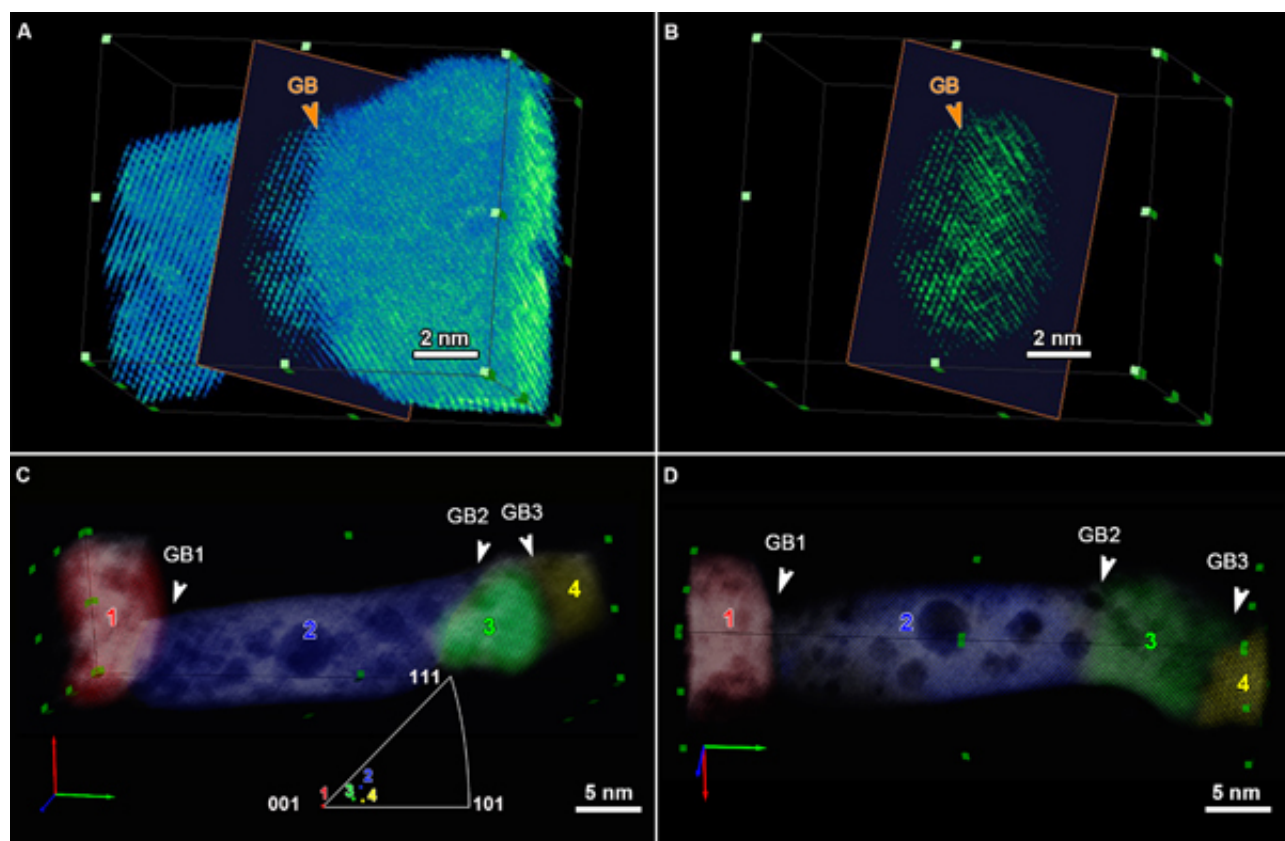


图1.双晶及多晶金属的原子分辨率电子层析三维重构

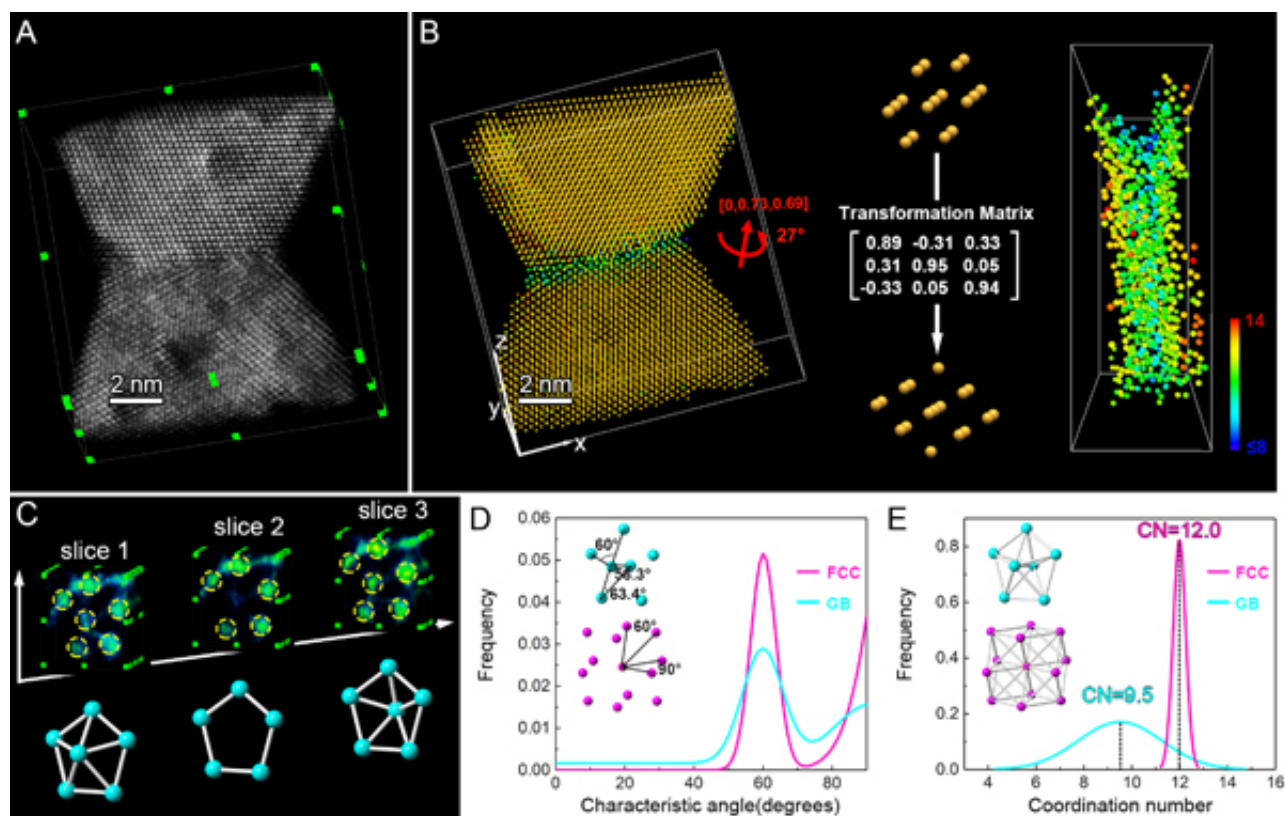


图2.大角晶界（结构单元型晶界）的三维原子结构、晶界原子配位数与结构单元组态分析

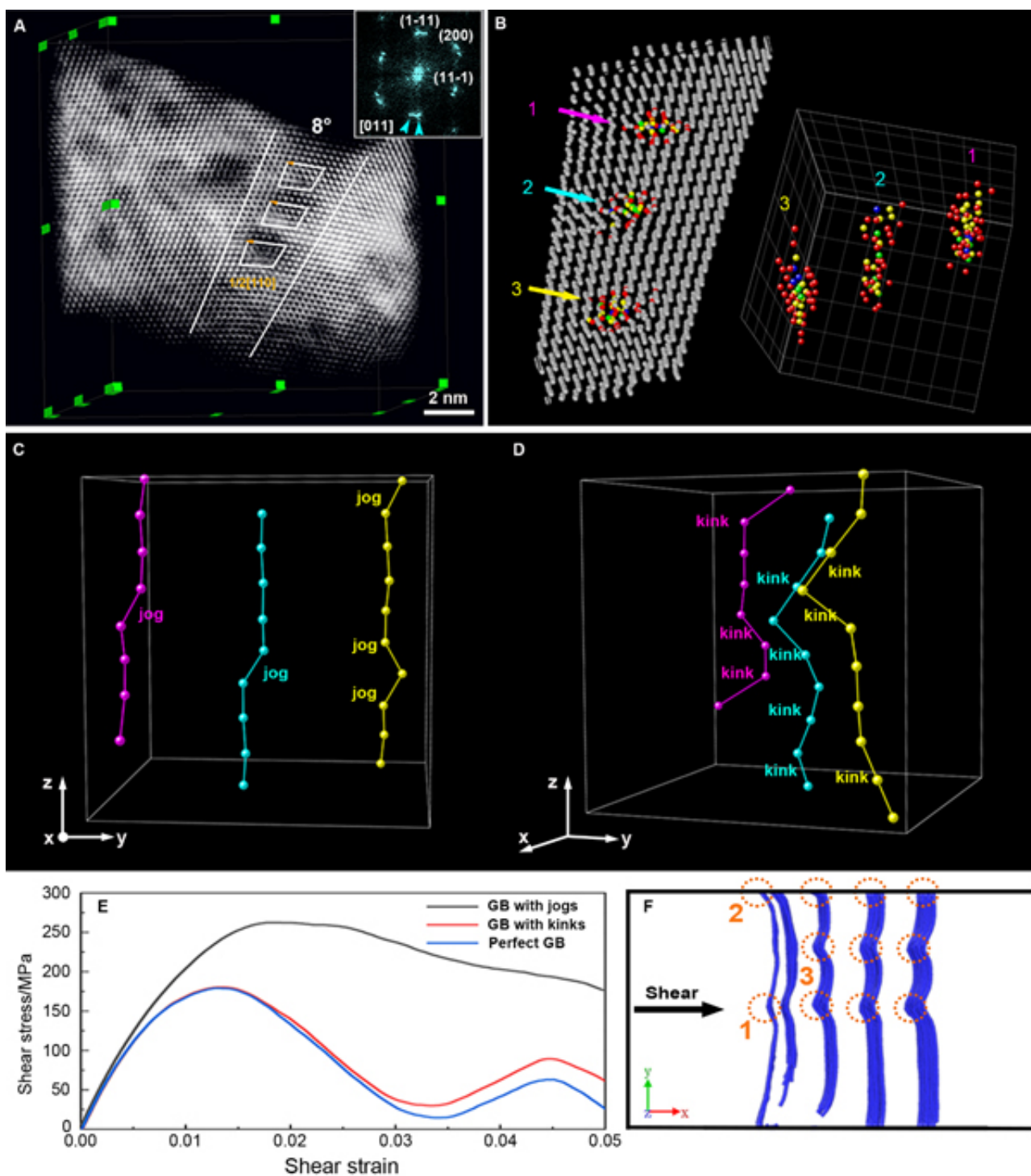


图3.小角晶界（位错型晶界）的三维原子结构、晶界位错的扭折和割阶组态及行为

研究团队单位：金属研究所

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发