受限晶体在多晶金属中的形成及超高热稳定性研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/15923.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！

中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心纳米金属团队通过分子动力学模拟，揭示了在面心立方金属中，具有三维复杂晶界网络结构及极限晶粒尺寸的Kelvin多晶结构如何演变成具有类金刚石晶体对称性的周期性拓扑极小曲面受限晶体（Schwarz-D受限晶体，图1），澄清了这种新型几何拓扑晶体具有超高热稳定性的物理机制。相关研究成果以封面文章形式发表在《物理评论快报》上。

该研究借助分子动力学模拟，分析并阐述了受限晶体面临的三个关键问题，即形成受限极小面晶体的动力学演化过程、超高热稳定性的物理依据、最小的“极限尺寸”。研究人员首先构造出包含16个晶粒大小相等、形状均为截角正八面体的多晶模型。有别于一般多晶模型，研究通过调控晶粒取向，在Kelvin晶体里引入了完美的三维共格孪晶界网络。在分子动力学模拟中，对Kelvin多晶均匀加热，伴随温度升高，研究发现一系列复杂的晶界弛豫和演化行为，包括晶界分解、迁移，彼此吞噬或兼并（图1）。当温度足够高时，在四个不同<111>方向均被共格孪晶界约束的截角八面体晶粒会发生明显的定向生长，从而推动整个晶界网络趋近并最终形成Schwarz-D极小面。从Kelvin多晶转变成Schwarz-D晶体，整个过程如同发生了相变，其结果是有效降低了晶界面积，消除了Kelvin多晶中所有由界面交接导致的棱角（晶界三叉线和四级点），不仅有效降低了体系自由能，还使原始晶界网络演化成受孪晶界全方位约束，空间连续贯通并呈现周期性规则排列的极小曲面晶体。研究发现晶界网络做上述选择性调整的路径并不唯一，进而揭示了形成Schwarz-D晶体的“多形性”动力学演化特征。

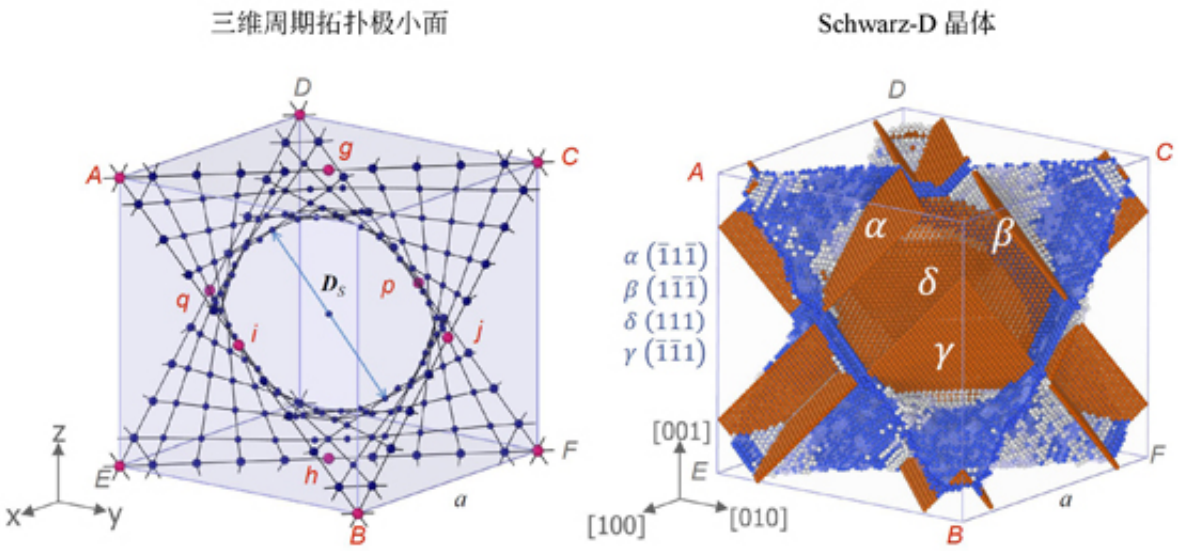
和在空气中吹肥皂泡类似，晶体界面也会随几何曲率变化发生移动，这样的现象被称为晶界迁移。根据Young-Laplace方程，晶界迁移的驱动力正比于界面的几何曲率。因为极小面各处平均曲率均为零，因此，晶界迁移的驱动力也同时为零，即理想的极小面晶界不会轻易发生迁移。然而，升高温度会加剧晶格原子和晶界原子的热运动，并伴随着可观的热涨落效应。尤其在高温下，如果热涨落使局部界面明显偏离理想极小面位置，会迫使晶界发生整体迁移，导致结构失稳。而热涨落会借助晶格弹性各向异性及晶格非简谐效应产生额外的晶界迁移驱动力，迫使晶界发生定向迁移，大幅度降低热力学失稳温度。

在Schwarz-D受限晶体中，一方面，热激活很难诱发共格孪晶界迁移，另一方面，借助孪晶空间镜像对称性，可有效抵消由晶格弹性各向异性产生的驱动力（图2）。Schwarz-D受限晶体能够展示出超高热稳定性，是因为在借助普通晶界得到平均曲率为零的极小面结构的同时，能最大限度地借助平直孪晶界约束，使晶界迁移驱动力也能得到最小化，实现了晶体受限效应。此外，调整Kelvin多晶晶粒大小，发现从Kelvin多晶到Schwarz-D晶体的转变温度随晶粒尺寸降低而下降，得

到的Schwarz-D晶体极小面孔径也更小。如图2所示，受限晶体极小面孔径从9纳米到3纳米，失稳温度仅从0.98TE降低到0.87TE（TE，晶体热力学平衡热点）。孔径为3纳米的受限晶体晶胞仅包含了数千个原子，但仍能展示出超高的热稳定性。

不同于常规晶体结构及合金相图中亚稳相（包括Laves几何拓扑相及准晶）的原子点阵概念，Schwarz晶体结构单元是通过一类或一类以上晶界，按照特定空间对称性，对晶体沿三维极小面进行周期性切分的产物（图1）。这种广义的晶体结构单元，通过热激活或外力作用，由多晶金属内部原子自发形成，揭示出金属中一类具有特殊结构和新奇性能的固态亚稳结构。受限晶体为发展具备工业应用前景的纳米金属材料开辟了新领域，也为深入理解材料物理及化学等基础科学问题提供了新机遇。

论文链接



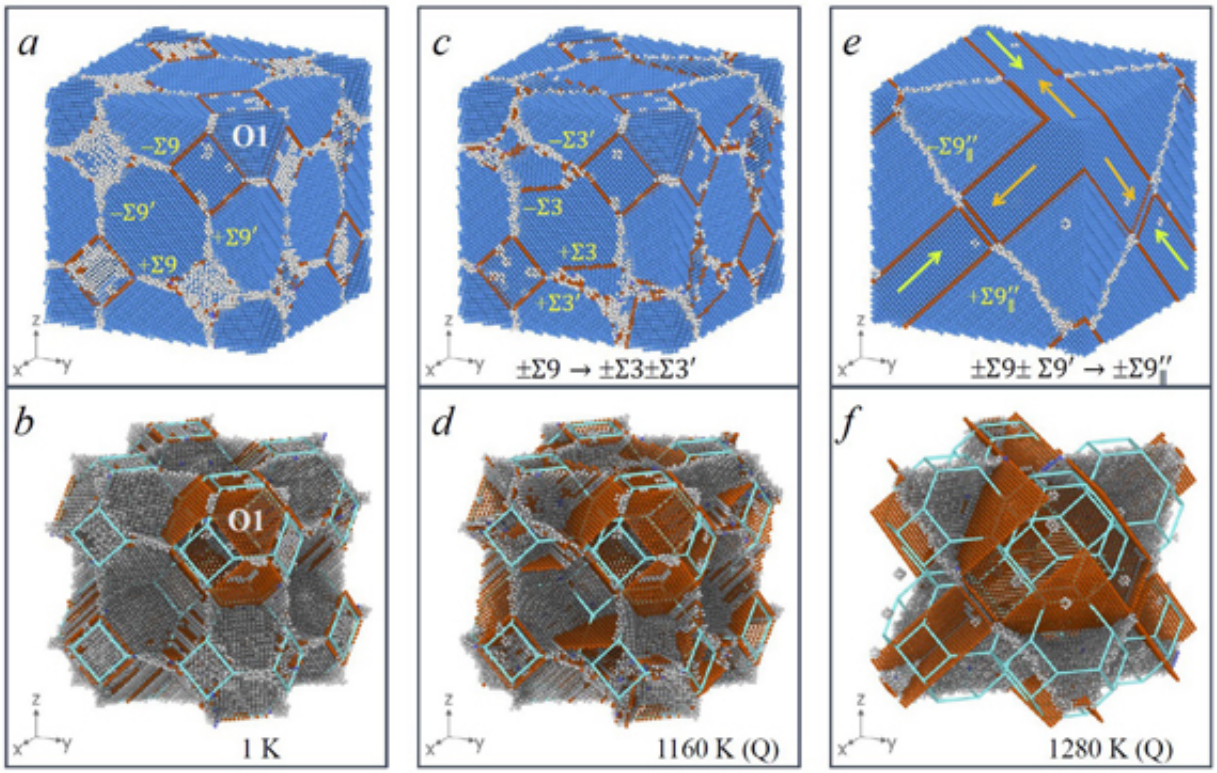


图1.Schwarz-D受限晶体结构单元及Kelvin多晶向Schwarz晶体演化过程的分子动力学模拟

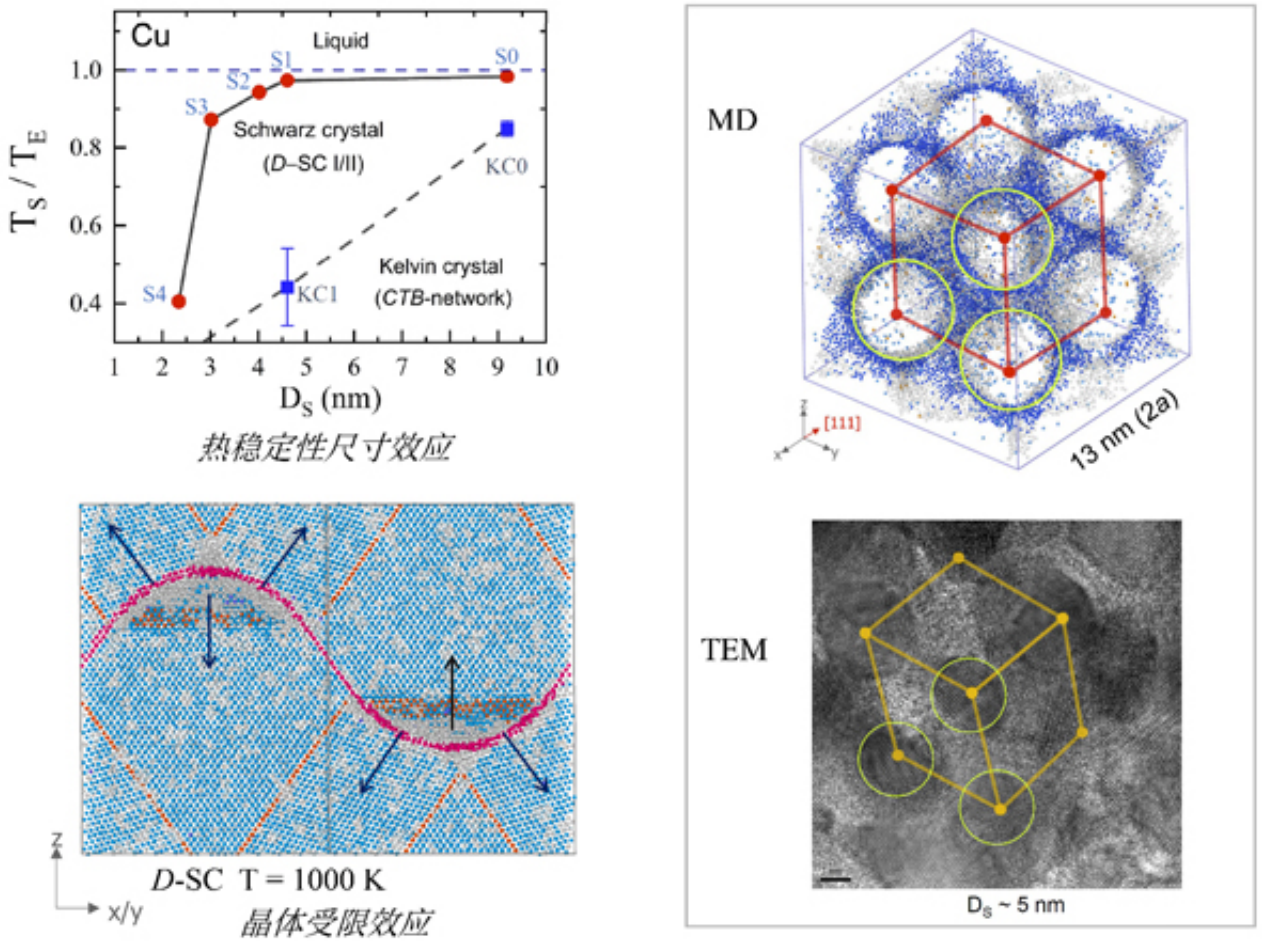


图2.Schwarz-D受限晶体热稳定性尺寸效应、晶体受限效应、分子动力学模拟及实验观测对照

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/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发