力学设计出具有极致力学性能的物质形态

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/17394.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！

力学设计出具有极致力学性能的物质形态。近期武汉大学的科研人员发掘设计出已知最强最韧物质形态，揭示了极致力学性能的物理机制。2022年2月16日，相关论文以《预测最强最韧材料：无派尔斯不稳定性的原子链》（The strongest and toughest predicted materials: Linear atomic chains without a Peierls instability）为题发表在Cell姊妹刊《物质》（Matter）上。

武汉大学高恩来副教授为第一及共同通讯作者，共同作者包括武汉大学郭雍哲、王正直与美国德克萨斯大学Steven O. Nielsen、Ray H. Baughman。

线性原子链是一种极致物质形态，其化学键全部沿轴取向，因而具有优异抗拉力学特性。线性碳链（linear carbon chains）此前曾被认为是已知最强最韧材料，例如其比抗拉强度分别为石墨烯与金刚石的1.5和3.2倍。然而，线性碳链具有派尔斯不稳定性，其键合结构分化为单三键交替，这种分化随拉伸应变会进一步加剧，其断裂力学性能由较弱化学键决定。

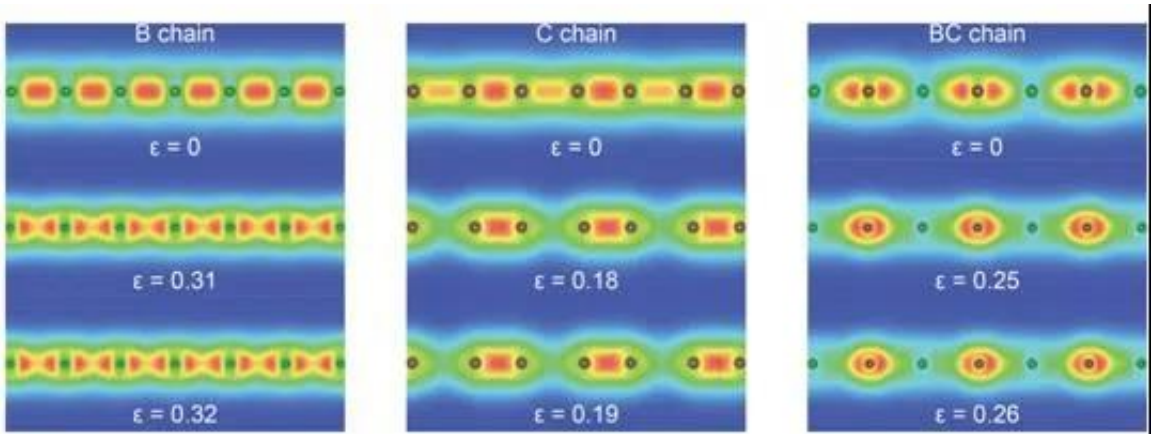


图1：具有极致力学性能的物质结构及其在力学荷载下演化。

为了获取更高力学性能的物质形态，武汉大学高恩来等开展了物理力学设计工作。前期基于上万种晶体结构-
性能关联的数据驱动研究表明，轻质元素（硼、碳、氮）易于形成轻质高模高强材料（Chem. Mater., 2021, 33: 1276）。源于对超高力学性能物质结构组分特征（化学键短而强、沿轴取向度、致密排布）的理论认知，基于硼、碳、氮元素设计出化学稳定、性能优异的线性原子链晶体结构

，其中线性碳化硼链的比强度和比断裂功（92 GPa·g-1·cm3和15.3
kJ·g-1）显著高于线性碳链（76 GPa·g-1·cm3和9.4
kJ·g-1），分别为石墨烯与金刚石的1.8和3.8倍，而其比强度接近于理论估计极限（104 GPa·g-1·cm3）。电子结构分析表明，在拉伸直到断裂应变之前，线性碳化硼链的化学键协调一致变形，无派尔斯不稳定性，其物理是原子结构对称的稳定驱动力（电子动能）与失稳驱动力（电子和离子之间静电相互作用）竞争机制。该机制为从原子尺度设计超高力学性能材料提供了启发。

该工作得到了中国国家自然科学基金委与美国威奥切基金会 (The Robert A. Welch Foundation) 的资助。（来源：科学网）

相关论文信息：https://doi.org/10.1016/j.matt.2022.01.021

作者：高恩来等 来源：《物质》

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