

研究揭示金刚石中非共格孪晶界面的结构转变和迁移

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25603.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！

研究揭示金刚石中非共格孪晶界面的结构转变和迁移。北京时间2024年1月4日，Nature杂志在线发表了燕山大学亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室高压科学中心田永君院士团队的最新成果。研究人员系统地表征了纳米孪晶金刚石中 $\Sigma 3\{112\}$ /非共格孪晶界上共存的多种原子级构型，并原位记录了室温条件下由位错介导的界面结构转变和依赖于结构的界面迁移行为。

燕山大学高压科学中心田永君院士、徐波教授和胡文涛研究员为共同通讯作者，仝珂博士后、张祥博士和李子鹤博士为共同第一作者。

在面心立方结构或金刚石结构的纳米孪晶材料中， $\Sigma 3\{112\}$ /非共格孪晶界(ITB)是一种常见的界面。在金属中，这种界面在孪晶厚度低于某一临界值时会迅速迁移，诱发去孪晶化过程，这也是导致纳米孪晶结构金属材料软化的关键原因。与金属材料不同，纳米孪晶立方氮化硼和纳米孪晶金刚石随着孪晶进一步细化并没有出现软化现象，材料的硬度持续增加。这表明 $\Sigma 3\{112\}$ ITB在共价材料中具有迥异于金属体系的高稳定性。探明这种高稳定性的结构起源，对于理解纳米孪晶金刚石的持续硬化机制、发展高性能纳米孪晶结构材料具有重要意义。

为此，研究人员使用球差校正扫描透射电子显微镜系统地表征了纳米孪晶金刚石 $\Sigma 3\{112\}$ ITB原子分辨的界面结构，并借助电子辐照荷电效应所产生的机械应力，研究了界面结构转变和迁移过程及机制。他们发现，由于共价键的方向性和饱和性，以及 sp^2 和 sp^3 两种杂化态的存在，纳米孪晶金刚石中的 $\Sigma 3\{112\}$ ITB呈现多种构型（两类—镜面对称和非镜面对称，各三种），并表现出构型相关的不同迁移方式：镜面对称构型可以进行长距离快速迁移，其结构与行为特性与金属材料中观察结果类似；而非镜面对称构型则以剪切耦合模式进行短距离迁移。在应力作用下，不同构型的ITB可以通过位错介导机制相互转变，进而影响界面的迁移模式；但非对称构型与对称构型之间的转变涉及到界面两侧刚体位移变化，受共格孪晶界的约束而具有较高的转变势垒。因此，纳米孪晶金刚石中 $\Sigma 3\{112\}$ ITB主要以低能量、低迁移率的非对称构型存在，即便在孪晶厚度低至约1 nm时依然如此，从而导致了纳米孪晶金刚石的持续硬化行为。

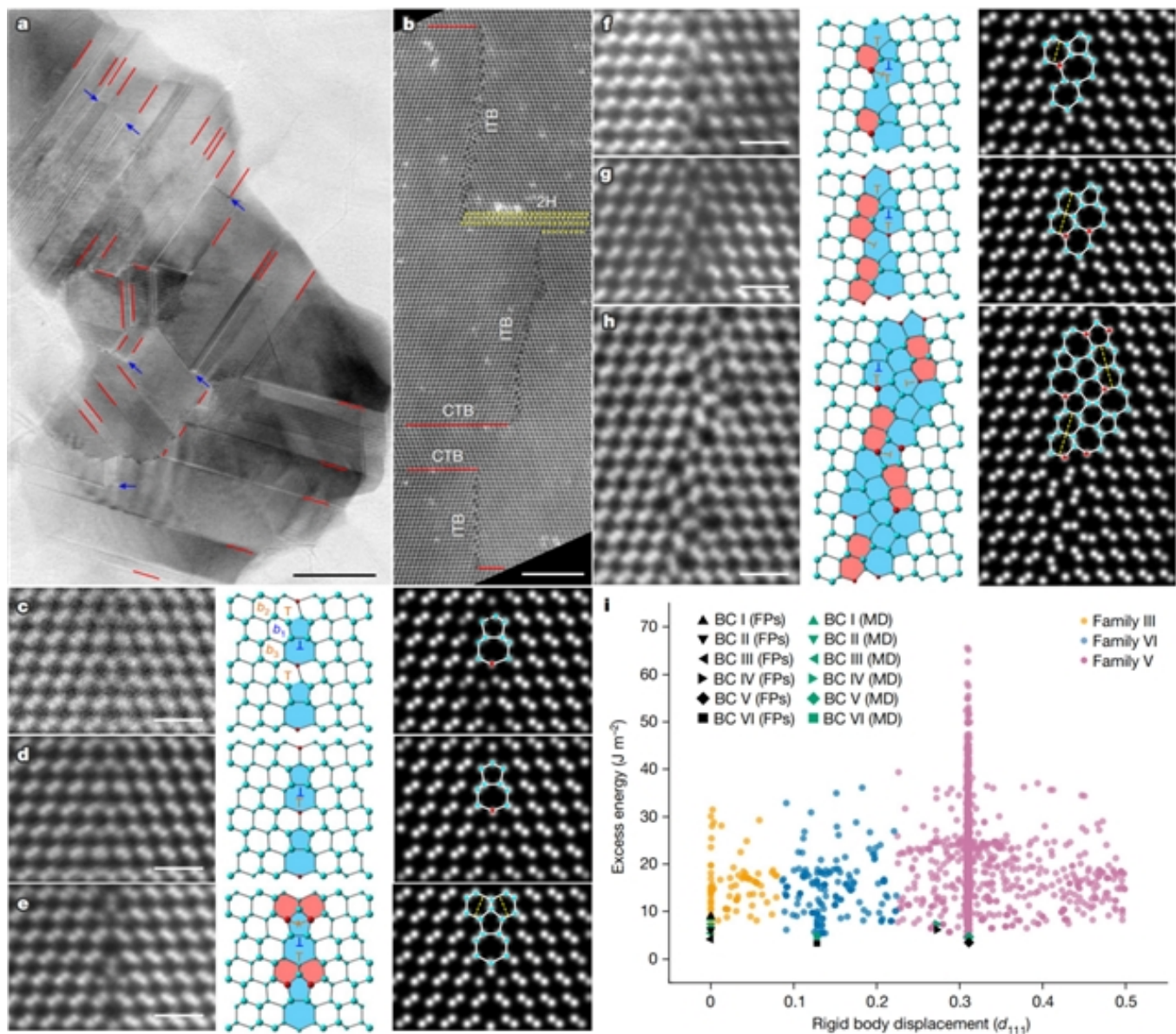


图1. 纳米孪晶金刚石中 $\Sigma 3\{112\}$ /非共格孪晶界的原子级构型。a，典型的纳米孪晶金刚石晶粒，包含大量的 $\{111\}$ 共格孪晶界（CTB）和 $\{112\}$ ITB；b，纳米孪晶金刚石中的典型 $\{112\}$ ITB；c-h，室温条件下共存的六种 $\{112\}$ ITB原子级构型；i，结构搜索表明识别出的六种构型具有较低的界面能。

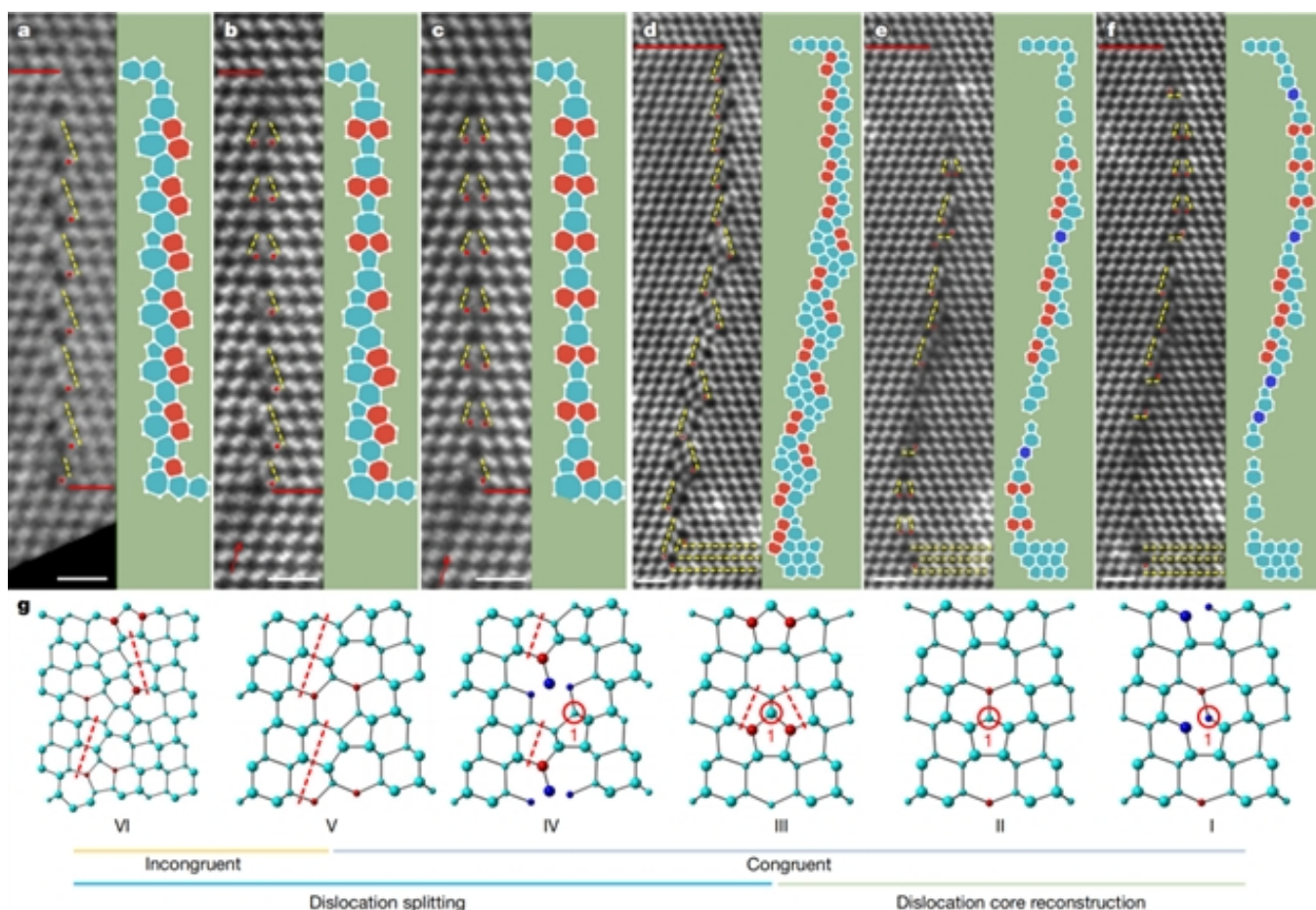


图2. 位错介导的界面结构转变。a-f，界面结构转变的两个典型实例；g，界面结构转变的类型及机制。

研究人员结合旋进电子衍射和分子动力学模拟结果，进一步确认了界面结构转变所需的激活应力接近于金刚石中全位错启动所需的临界剪切应力，从而揭示了纳米孪晶金刚石中 $\Sigma 3\{112\}$ ITB高稳定性的结构起源。这项工作进一步阐释了纳米孪晶金刚石的持续硬化机理，也为研究其韧化和室温塑性提供了新思路。此外，它进一步丰富了人们对材料界面及其行为的认识，不仅提供了共价材料中界面室温结构转变和迁移的直接信息，还为新型纳米孪晶材料设计及强韧化策略实施奠定了理论基础。

该项研究工作得到国家自然科学基金、国家重点研发计划、河北省自然科学基金等项目的支持。
(来源：科学网)

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06908-6>

作者：田永君等 来源：《自然》

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