科学家发现机电耦合材料设计新策略

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/30065.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！

科学家发现机电耦合材料设计新策略。想象一下，如果你手里有一块特殊的橡皮泥。当你拉伸或者压缩它时，就会产生电流；给它通上电后，又会自动伸缩。这就是我们所说的压电材料，是一种能实现机械能和电能相互转化的机电耦合材料。

随着微电子技术和微机电系统的快速发展，电子器件的微型化、可集成性变得更加重要，发展高性能机电耦合薄膜材料对未来高效信息传输和能量转换应用具有重要意义。

近日，新加坡科技研究局（A*STAR）研究员刘华俊团队通过在铌酸钠薄膜中引入竞争性反铁电和铁电序来实现超高机电响应，相关成果发表于《自然》。

发现拔河比赛新思路

压电材料的压电系数反映了其对机械能与电能相互转换的效率。刘华俊告诉《中国科学报》，作为衡量压电转换性能优劣的综合物理量，人们从未停止对高压电系数材料的追求。

1880年，皮埃尔·居里和雅克·居里兄弟发现首个压电材料——石英，对石英晶体施加机械压力时，石英晶体表面会产生电荷。第二次世界大战期间，人们又发现了传统钙钛矿铁电材料，以钛酸钡为例，经极化后可获得比石英大100倍以上的压电系数，这一发现大大推动了超声检测及成像技术的发展。

随后，材料准同型相界及相应的高机电响应性能的发现成为近七十年来高性能压电材料设计的主流策略。刘华俊说，其背后所蕴含的结构竞争、极化旋转以及自由能曲线平坦化机制为近年来新兴的策略提供有效指导，如通过掺杂或反位缺陷构建纳米尺度的极化或结构异质以提升压电性能。

机电耦合材料的高机电响应通常在具有强结构不稳定性的材料中发现。凭借着较好的性能，目前铅基陶瓷材料仍占据市场主流，但存在较高环境和健康风险。

在归纳梳理传统压电材料设计方法的基础上，为了实现超高机电响应，刘华俊团队提出了一种新思路：他们发现了压电材料中存在两种不同的状态：铁电状态和反铁电状态。这两方在压电材料中相互竞争、相互拉扯，就像进行一场激烈的拔河比赛。

刘华俊团队通过在铌酸钠薄膜中引入竞争性反铁电和铁电序，发现借助外电场调控，铌酸钠薄膜内部的晶格序构会更活跃地响应电场变化，进而实现超高机电响应。

这一策略的关键在于，通过研究铌酸钠材料的相图以及密度泛函理论计算验证了反铁电和铁电相共存的可行性，并结合应变工程手段，成功制备出具有铁电-反铁电序共存的薄膜材料。刘华俊告诉记者，这些薄膜由于电场诱导的反铁电-铁电相变，显示出超过5000 pm
V^-1的有效压电系数，为设计和利用反铁电材料制作机电设备提供了一种通用方法。

七年科研长跑

我们团队一直关注机电耦合材料的前沿研究和压电薄膜的商业化进展，该研究最早可追溯到2017年，当时我们就致力于开发无铅高性能压电薄膜。刘华俊表示。

随着课题研究的深入，刘华俊团队发现铌酸钠在低温时存在铁电—反铁电相共存现象，这给了他们很大的启发。

首先，结合文献和理论计算，我们肯定了从实验上构建铌酸钠薄膜在室温下铁电-反铁电相共存的可行性。同时，基于理论计算和薄膜应变工程策略，我们确定了具体的实验方案。刘华俊说，可开始实验验证时，又出现了问题。

在实验中，刘华俊团队首先优化了薄膜生长参数，得到了高质量的薄膜，但在解析材料的晶体机构和电学性能测时，却发现其中一项衍射结果和结构模型相悖。

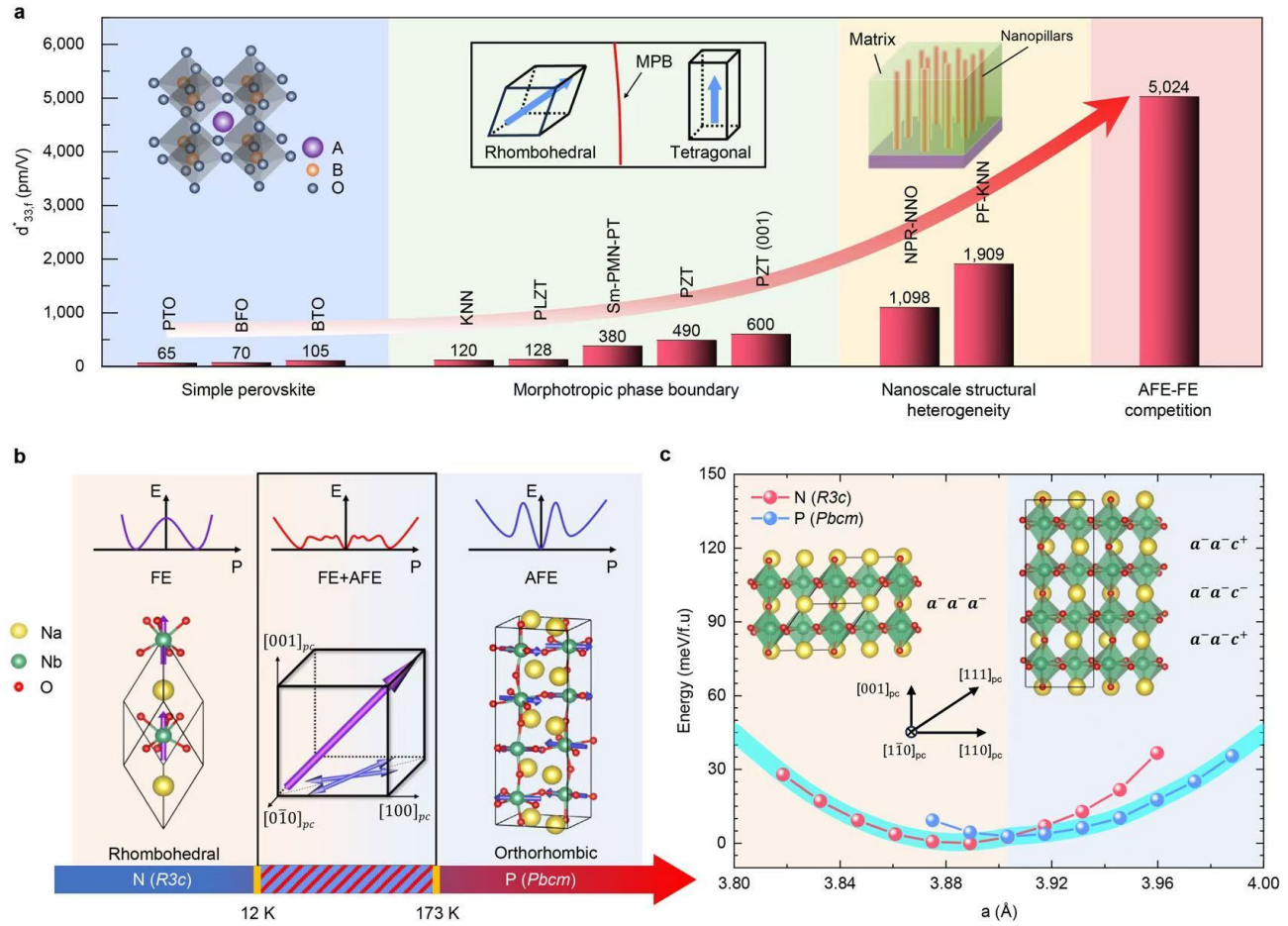
当看到反铁电相表现出三重对称性的结果时，刘华俊团队起初百思不得其解，因为这不符合反铁电相正交结构的性质。

为了解决这一矛盾，我们尝试了多种可能的猜想。通过在新加坡同步辐射光源和上海光源更多的结构表征，我们发现这一三重对称性来源于反铁电相畴的有序排列分布。刘华俊说，尽管研究过程中出现风波，但这也更坚定了团队攻克这一难题的决心。

当验证验证铁电-反铁电共存行为以及测量机电响应性能后，刘华俊带领团队结合实验数据和相场模拟结果，分析高性能机电响应的可能机制，成功通过施加外电场驱动薄膜中反铁电和铁电相的竞争，获得了高的机电响应。

然而，在刘华俊看来，尽管七年的科研长跑硕果累累，但他们仍在持续探索。

电场如何诱导两相竞争的具体机制尚未完全清楚。关于铌酸钠材料，此前有报道存在电场诱导的亚稳铁电相存在。该相是否存在于我们的薄膜中，并且是否影响以及如何影响机电响应测试结果仍有待进一步考证。刘华俊说，未来团队将通过原位电场下的结构测试来阐明电场下的相变过程和机制，探索能否通过控制薄膜厚度来调控薄膜中反铁电-
铁电相比例，从而优化机电响应性能。（来源：中国科学报 赵宇彤）



增强薄膜机电响应的策略（课题组供图）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41586-024-07917-9

作者：刘华俊等 来源：《自然》

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

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发