
氟化钙晶体缺陷研究获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/33622.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！

氟化钙晶体缺陷研究获进展。氟化钙

晶体具有透射波长范围宽、色散效应低、抗激光损伤能力强等特点，是紫外光刻、高分辨空间相机、高精密光学检测设备等高端仪器装备核心元件。但是，氟化钙开放型立方结构使八面体空隙格位一半处于空置状态，位错密度达 $10^5/\text{cm}^2$

，严重影响性能

。因此，精准识别、解析并控制

晶体中位错缺陷，是实现氟化钙

晶体近理论极限性能并满足极端应用需求的

突破点。由于F⁻离子对电子束敏感，氟化钙

晶体位错原子级表征一直面临挑战，而传统表征技术难以解析并明确其位错构型和位错形成机制

。

对此，中国科

学院上海硅酸盐研究所研究

员苏良碧和副研究员张博团队针对氟化钙

晶体位错原子级表征技术瓶颈，构建了“化学腐蚀法-

高分辨电子背散射衍射技术（HR-EBSD）-积分差分相位衬度扫描透射电子显微技术（iDPC-STEM）”

多尺度联用表征体

系。研究通过开发基于菊池线旋转补

偿算法的高分辨EBSD技术，突破了传统EBSD

精度不足的瓶颈，并结合化学腐蚀法，实

现了晶体中“自由分布”与“规则聚集”

两类位错精准定位与微小取向差表征

。同时，研究采用超低剂量iDPC-STEM

技术，首次在原子尺度直接解析了F/Ca原子排列，并清晰捕获位错真实构型。

进一步，研究人员结

合晶体生长实验、第一性原理计算及结构

表征，揭示了氟化钙

晶体中位错形成机制。研究发现，过大的温度梯度使晶格错配，进而促进位错形成。同时，研究

从原子尺度阐明了空位择优聚

集与弗兰克不全位错成核的因果关系

。在此基础上，研究提出抑制/

减少位错缺陷策

略，并通过热处理实验验证了“

位错自我调节”的可能性，且将氟化钙晶体位错密度从 10^5cm^{-2} 降低至 10^3cm^{-2} 量级，为实现低缺陷氟化钙晶体提供了现实路径。

这一研究解决了长期以来氟化钙

晶体缺陷难以实现“原子级解析”的科学难题，并建立了从宏观到介观再到原子级缺陷的完整认知链条，为近理论极限性能晶体制备提供了关键科学依据。

近日，相关研究成果以 *Revealing the atomic-scale structures of dislocations in calcium fluoride single crystal* 为题，发表在《创新-材料》（*The Innovation Materials*）上。研究工作得到科学技术部和中国科学院的支持。

氟化钙晶体中位错的形态、分布和取向差分析

研究团队单位：上海硅酸盐研究所

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](https://www.iikx.com)转发