
新研究揭示单质金属结晶与玻璃形成奥秘

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/35574.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！

新研究揭示单质金属结晶与玻璃形成奥秘。松山湖材料实验室研究员胡远超团队与合作者，成功揭示了单质金属的结晶动力学与玻璃形成能力起源。相关成果近日发表于《自然-通讯》（Nature Communications）。

在足够高的冷却速率下，理论上任何液体都能冻结成玻璃。但不同物质形成玻璃所需的最低冷却速率（即临界冷却速率）差异巨大，可超20个数量级。临界冷却速率是定量描述玻璃形成能力的重要参数，大块非晶的临界冷却速率低于1.0K/s。理解金属熔体的玻璃形成能力，是材料领域重要的基础科学问题，既关乎对玻璃态的物理认知，也决定新型非晶合金的开发应用。

由于非晶合金多组元特性，研究其玻璃形成能力颇具挑战。一方面，结晶与玻璃化作为熔体冷却的两个极端，揭示结晶动力学及其微观机制是阐释玻璃形成能力的有效途径。多组元效应带来的局域拓扑序和化学序及其耦合效应，常伴随非经典成核路径，使得理解其结晶动力学困难重重。这表明局域结构尤其是化学序对结晶行为至关重要。另一方面，统计分析冷却固体的结构特征可量化分析合金体系的临界冷却速率及其影响因素。大规模分子动力学模拟显示，局域结构序和化学序受冷却速率强烈影响且与临界冷却速率紧密相关，尤其是当原子尺寸差和结合能差共存时。这揭示了局域化学序是决定玻璃形成能力的关键因素，为实验设计非晶合金提供了思路。

为进一步解耦局域拓扑序和化学序对结晶动力学和玻璃形成能力的影响，研究人员对能形成体心立方结构的过渡金属钽和锆开展计算机模拟研究。大规模模拟表征发现，二者临界冷却速率相差约100倍，与实验观测相符。对其过冷液体的扩散系数和结晶热力学驱动力定量表征显示，这些物理性质差异较小。因此，根据经典形核理论，液固界面能仍是决定单质金属结晶速率和玻璃形成能力的关键因素，该结论也获计算验证。

揭示二者临界冷却速率巨大差异的根源对认识玻璃形成能力意义重大。微观结构分析表明，差异源于局域拓扑结构：锆倾向于形成二十面体团簇尺度短程序，结晶路径单一，结晶速度快；钽倾向于形成二十面体团簇尺度中程序，过剩的团簇尺度会引发复杂有序结构的准晶亚稳相形成，造成结晶路径不单一，出现准晶亚稳相和体心立方结构竞争，两相界面能稳定，延长结晶时间，降低结晶速率。这些结果佐证了二元合金中的相关结晶动力学物理机制，且结晶微观过程均为非经典成核路径，体心立方结构以原子尺度预序关系形成，准晶亚稳相以团簇尺度预序关系形成。

该研究阐明了液固界面能是决定玻璃形成能力的关键因素，揭示了序竞争在结晶和玻璃化过程中的重要作用，说明了非经典结晶路径的普适性，为深入认识非晶态材料与物理提供了新视角。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-025-63221-8>

作者：胡远超等 来源：《自然—通讯》

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