

萤石型结构晶体脆性—塑性竞争机理研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/39095.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！

萤石型结构晶体脆性—塑性竞争机理研究取得进展。

萤石结构碱土金属氟化物晶体

具备从深紫外至红外的超宽光谱高透过率、超低色散效应等特性，被广泛应用于光刻系统光学窗口、激光基质晶体、光谱仪核心元件等高端领域。同时，其良好的离子导电性也使其在固态电解

晶面极易发生解理，导致其在晶体生长、加工制造及极端工况服役过程中易出现开裂失效，严重制约了相关器件的性能与使用寿命，且这一现象背后的原子尺度变形机制尚未得到系统阐明。

针对上述问题，中国科学院上海硅酸盐研究所研究团队通过理论计算，揭示了萤石结构碱土金属氟

化物

晶体脆性

的各向异性与初始

塑性变形的微观机制，构建了基于滑

移面原子键合的解理—

滑移竞争统一理论框架，阐明了长期制约该类光学材料工程应用的脆性失效机理。

研究团队从能量竞争的角度，量

化揭示了萤石结构晶体“脆性—

塑性”的各向异性本质。研究表明，萤石晶

体{111}

晶面呈现极端解理倾向，源于其兼具最低拉伸强度、声子不稳定性所限制的临界应变阈值，以及全晶面中最低的解理能。同时，剪切变形过程中同号离子间的强静电斥力，使该晶面滑移能垒急剧升高，解理能与滑移能垒的比值接近1.0

，最终导致材料表现出极端脆性。与之相对，{001}<110>

滑移系作为碱土金属氟化物晶体主导滑移系的微观机制，具有最低剪切强度，且因阴离子显著弛豫效应呈现最低广义层错能，其

解理能与滑移能垒比值大于3.8

，这表明位错主导的塑性变形在能量上远优于解理断裂，合理解释了实验观测到的全位错行为。

研究团队进一步构建了基于不同滑移面的 E_C/Γ

能量判据框架。该框架可直接推广至 UO_2 、 CeO_2 、 ZrO_2

等其他萤石结构材料体系，实现了从“经验解释”到“定量预测”的转变，为该类材料力学性能优化提供了明确的设计路径。例如，通过构建{001}

晶面择优织构、精准掺杂调控键合特性等方式，可显著提升材料的抗断裂能力与服役可靠性。

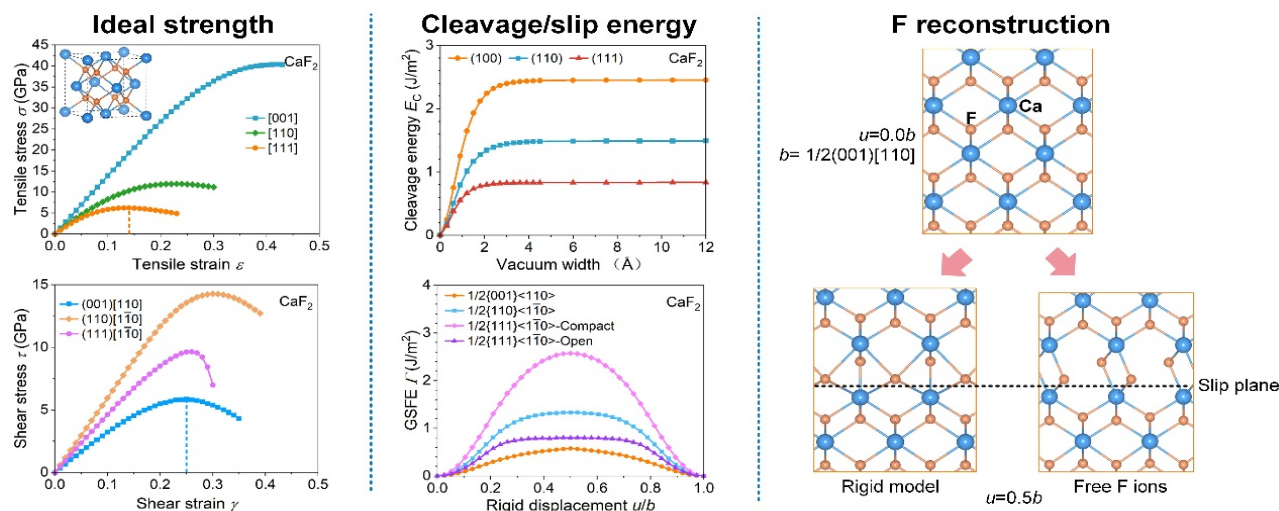
该研究建立了萤石结构晶体晶面原子尺度键合特性与宏观力学响应之间的关联，为高端光学装备、新能源系统等领域关键材料的性能升级提供了核心理论支撑，也为其他脆性功能晶体的变形机制研究与性能优化提供了新思路。

相关研究成果发表在《材料学报》（*Acta Materialia*

）上。研究工作得到国家自然科学基金委员会、中国科学院、中国博士后科学基金会等的支持。

[论文链接](#)

CaF₂晶体压缩强度、硬度及杨氏模量的各向异性



CaF_2 晶体力学各向异性及滑移面F离子重构降低(100)面的滑移能垒

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