金属所等五重孪晶形成机理研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/7914.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！

近日，中国科学院金属研究所钛合金研究部助理研究员周刚（共同一作）、副研究员王皞与美国太平洋西北国家实验室教授Li Dongsheng（通讯作者）、博士宋淼（共同一作）以及密歇根大学博士鲁宁（共同一作）等人合作，采用高分辨原位透射电镜和分子动力学模拟方法，在原子尺度揭示了两种五重孪
晶的形成机理。相关研究成果于2020年1月3日在《科学》（*Science*）在线发表。

作为一种重要的孪晶结构，五重孪晶在晶体生长、生物医学、光学和催化等领域均有着广泛的应用。比如，五重孪晶结构所引入的晶格畸变可以增加纳米线的杨氏模量；五重孪晶铜纳米线在还原CO_2制备甲醇的过程中表现出优异的催化性能等。尽管自G. Rose于1831年在金中发现五重孪晶以来，科研人员已在近百种材料中发现了五重孪晶结构并开展了大量的基础和应用研究，但由于无法在原子尺度直接观察形成过程，其形成机理至今仍无定论。

此次研究人员发现，在～3nm
Au、Pt和Pd纳米颗粒的聚集生长过程中，纳米颗粒可以通过颗粒间的取向粘附（Orientation attachment，OA）形成起始的两个孪晶界面，然后经原子表面扩散和高能晶界形成及分解（机理1）或不全位错的滑移（机理2）形成五重孪晶结构。两种形成机理主要取决于颗粒取向粘附后所形成的表面结构。如果经取向粘附后，形成的凹面夹角接近90°，则为机理1；如果形成的凹面夹角接近150°，则为机理2，其具体的形成过程如下：

机理1：通过取向粘附、原子表面扩散以及随后的高能晶界的形成和分解。首先，经颗粒取向粘附过程形成起始的两个Σ3孪晶界面以及一个～90°凹面；这种较大曲率的凹面将促使表面原子扩散到该处进而形成第三个Σ3孪晶界和Σ27高能晶界；最终通过孪晶极附近零应变孪晶的形核及生长，Σ27分解成另外两个Σ3孪晶界并形成五重孪晶结构。该机理可形成较为对称的五重孪晶结构。

机理2：通过取向粘附和不全位错的滑移或晶界分解。当取向粘附过程形成的凹面夹角为～150°时，通过在表层原子中不全位错的滑移或Σ9晶界的分解即可实现五重孪晶的形成。不全位错的继续滑移可促使孪晶界面向晶粒内部迁移，但也伴随着晶格应变能增大，因此该机理主要形成不对称的五重孪晶结构。在后续的生长过程中，五重孪晶对称性的演化可通过与其他纳米颗粒的聚集长大实现。

论文链接

图1. 五重孪晶形成机理1：通过取向粘附、原子表面扩散以及随后的高能晶界的形成和分解（零应变孪晶成核和生长）

图2. Σ27分解为Σ34和Σ35

图3. 五重孪晶形成机理2：通过取向粘附和不全位错的滑移或晶界分解

研究团队单位：金属研究所

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转发