

# 金属所等亚稳超硬材料的相变研究取得进展----中国科学院

2019-05-21 来源：金属研究所

【字体：大 中 小】

语音播报

近期，中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心材料结构与缺陷研究部研究员陈春林、马秀良、中科院院士叶恒强与东京大学教授Yuichi Ikuhara、NIMS教授谷口尚等人合作，利用像差校正电子显微术在原子尺度上研究了纤锌矿型氮化硼中的缺陷结构及其对材料相变的影响，发现材料中的三维缺陷网络可显著提高该亚稳超硬材料的稳定性，突破了人们对材料缺陷与相变关系的传统认识。相关成果于5月17日在《美国国家科学院院刊》(PNAS)上在线发表。

纤锌矿型氮化硼是硬度接近于金刚石的超硬材料，有望在许多应用领域中替代金刚石。此外，纤锌矿型氮化硼还是一种很有前景的宽带半导体，具有比氮化镓更宽的能隙、更高的导热性等优点，有望在高性能电子器件中得到应用。然而，纤锌矿型氮化硼是一种高压亚稳相，在常压下极易转变为六角氮化硼（具有类似于石墨的结构），通常仅能通过冲击波压缩法制备微米尺寸的纤锌矿型氮化硼。如何制备较大尺寸的纤锌矿型氮化硼并使其在常温常压下保持稳定是个具有挑战性的问题，相关机理尚不清楚。

研究团队通过高温高压处理六角氮化硼单晶的方法制备了毫米尺寸的纤锌矿型氮化硼晶体，并利用扫描透射电子显微术与第一性原理计算相结合的方法系统地研究了纤锌矿型氮化硼中的缺陷结构及其对材料相变的影响。电子显微学研究发现纤锌矿型氮化硼中基面上的层错与棱柱面上的倒反畴界相交在一起从而形成一个三维缺陷网络。该缺陷网络将氮化硼晶体分割为平均尺寸约十几纳米的棱柱体，相邻的棱柱体具有相反的晶体极性。层错与倒反畴界相交形成了数量众多的“层错-倒反畴界结”，交叉点的核心结构包含一个混合型不全位错。第一性原理计算表明三维缺陷网络可显著抑制纤锌矿型氮化硼向六角氮化硼的相变，极大地提高了材料的稳定性。传统相变理论认为材料中的结构缺陷具有较高的能量、易于偏析杂质原子，通常是材料相变的易形核位置，会促进相变的发生。该研究发现的三维缺陷网络对材料相变的显著抑制作用，突破了人们对材料缺陷与相变关系的传统认识。

该项研究得到中科院前沿科学重点研究项目、国家自然科学基金与国家青年千人计划等的资助。

图1、利用六角氮化硼 (h-BN) 高温高压条件下相变的方法制备的纤锌矿型氮化硼 (w-BN) 晶体。(A)高质量六角氮化硼单晶，(B)合成的纤锌矿型氮化硼晶体为黑色，(C)晶体相变前后的X射线衍射图；(D)纤锌矿型氮化硼的拉曼光谱。

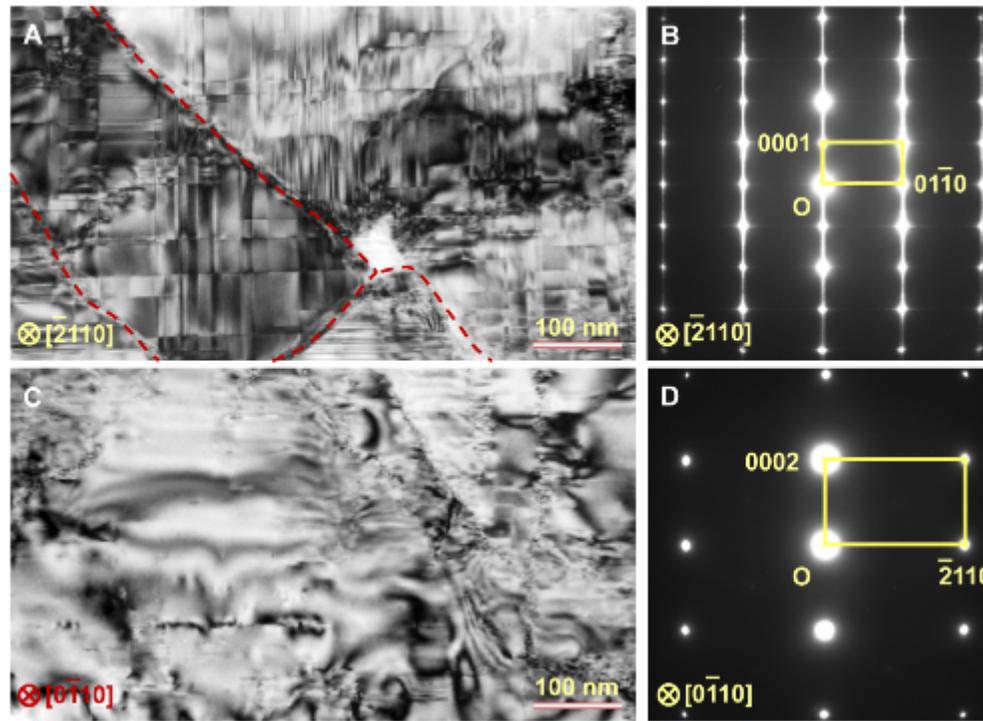


图2、纤锌矿型氮化硼的显微结构。(A, B)沿 $[-2110]$ 晶带轴的TEM明场像(a)和相应的选区电子衍射(b)。材料中形成了 $(0001)$ 界面上的层错 (ISF) 和 $(01-10)$ 棱柱面上的倒反畴界 (IDB) 组成的两类平面缺陷。红色虚线表示晶界。(C, D)沿 $[0-110]$ 晶带轴的TEM明场像(C)和相应的选区电子衍射(D)。从中可见在 $(-2110)$ 面上没有平面缺陷。

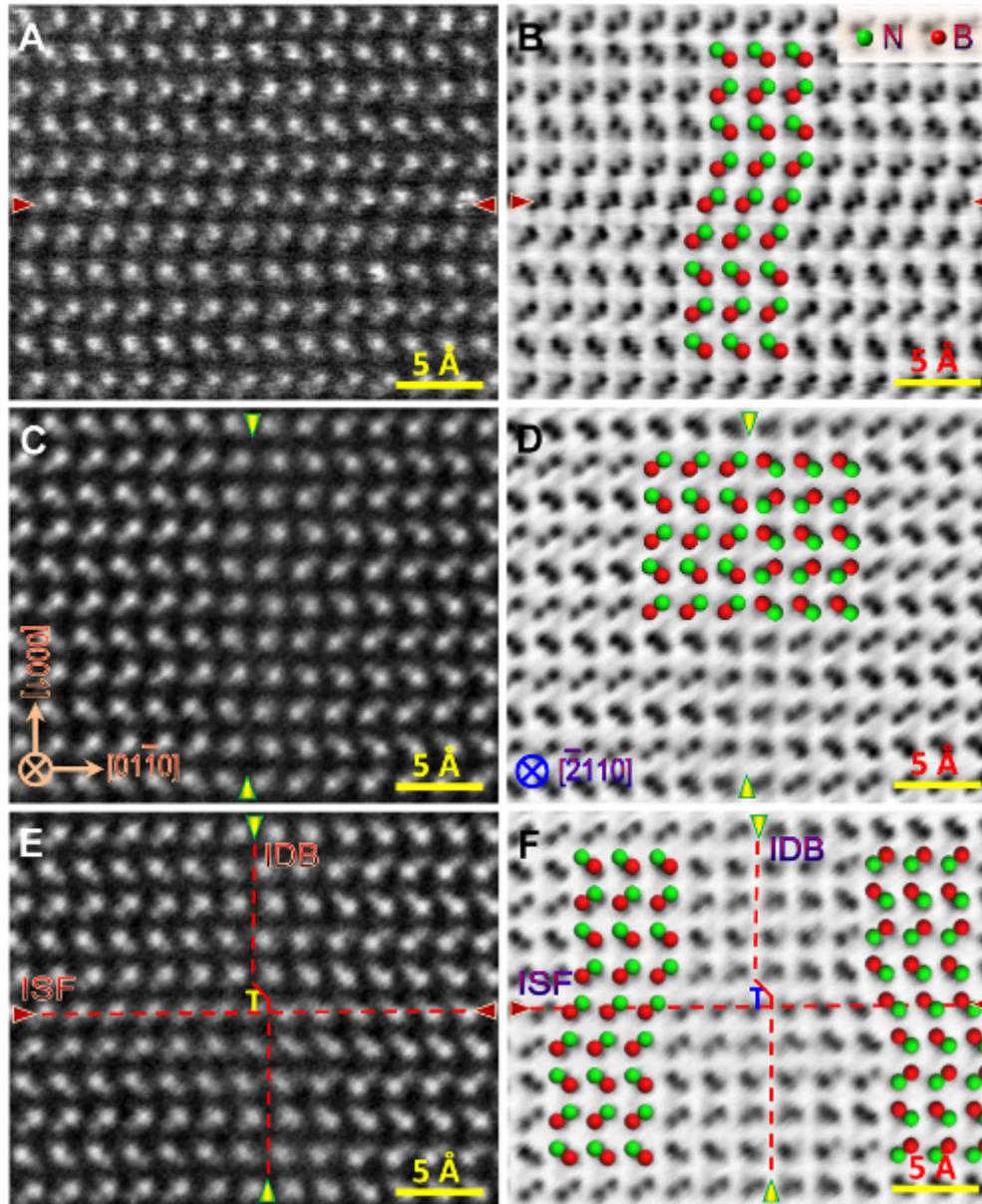


图3、纤锌矿型氮化硼的层错 (ISF) 和倒反畴界 (IDB) 的原子结构。(A, B) 层错的HAADF像(A)和相应的ABF像(B)。层错改变了w-BN原子层的堆垛顺序。(C, D) 倒反畴界的HAADF像(C)和相应的ABF像(D)，倒反畴界改变了材料的晶体极性。(E, F) 层错 (ISF) 和倒反畴界 (IDB) 交叉区域的HAADF像(E)和相应的ABF像(F)。两组垂直的平面缺陷交叉在一起形成了“层错-倒反畴界结”，并形成了柏氏矢量为 $1/3[10-10]$ 的混合型不全位错。

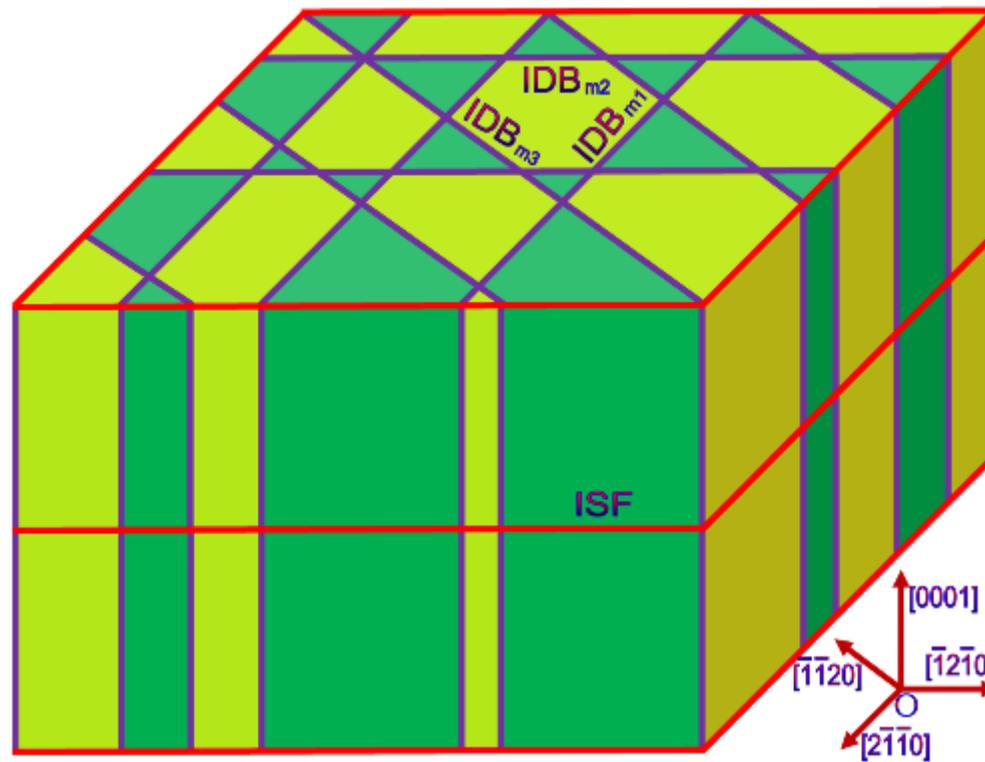


图4、层错 (ISF) 和倒反畴界 (IDB) 交织在一起构成三维缺陷网络的示意图。三维缺陷网络将w-BN分割为平均尺寸约十几纳米的棱柱体，相邻的棱柱体具有相反的晶体极性。

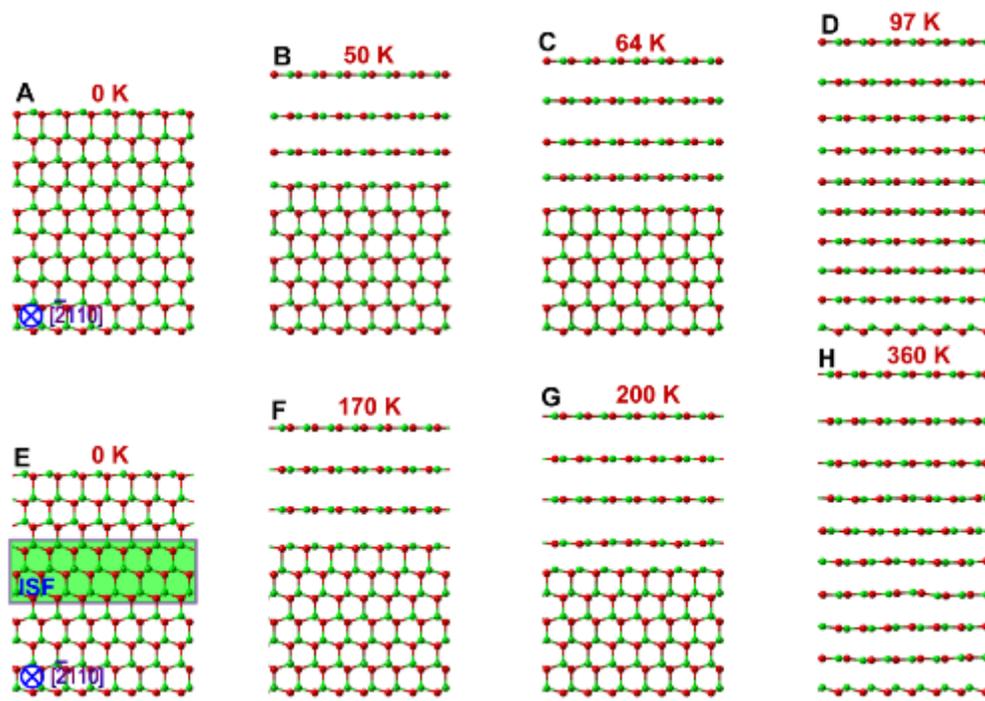


图5、第一性原理分子动力学模拟分析层错 (ISF) 对w-BN热稳定性的影响。(A-D)完美w-BN的结构演变过程。随着温度的升高, w-BN逐渐转变为类h-BN结构, 温度升到97K时相变完成。(E-H)包含一个层错 (ISF) 的w-BN的结构演变过程。层错可以显著地抑制w-BN的相变, 该结构的完全相变温度为360 K。

[更多分享](#)