项目名称：小尺度材料在外场作用下弹-塑性等行为原子机制及相关科学问题研究

完成单位：北京工业大学

 浙江大学

项目完成人：韩晓东 张泽 张跃飞 郑坤 王立华 岳永海 毛圣成 刘攀 邓青松

项目简介：

本项目属于材料科学与凝聚态物理交叉科学领域。材料在小尺度（低维、小尺寸、小晶粒尺寸、小畴尺寸等）下的弹-塑性理论体系、相变及力学行为等物理性质和与宏观材料相比会发生显著变化，具有明显的尺寸效应。研究、发现小尺度材料在外场作用下弹-塑性行为、相变等物理性质的原子机制是材料科学与凝聚态物理领域的重大基础科学问题。本项目在教育部"211项目"、科技部"973项目"、国家杰出青年基金，国家自然科学基金重点项目及北京市相关项目等支持下，基于自主发展的国际领域原创的材料力学行为研究的原子尺度原位表征等实验技术，开展典型晶体结构材料（例如：面心立方结构单质及化合物、共价键和金属键、单晶和多晶）和典型非晶材料（例如氧化硅玻璃，金属玻璃等）在小尺度下弹-塑性等行为的原子机制及相关材料科学问题的研究，主要的原创性成果有：

一．基于本项目发展的国际领域原创的材料力学行为研究原子尺度原位表征等方法，系统研究典型面心立方结构等材料（例如：共价键面心立方结构单质及化合物）在小尺度外场作用下的弹-塑性等行为；在国际领域较早发现半导体工业最重要材料单晶硅（室温本征脆性、四面体结构面心立方共价键单质）在纳米线状态下，发生室温大应变塑性变形，并阐明其原子机制。该发现得到国际领域密切关注和大量理论及实验跟踪研究，被大量引用（代表性论文单篇最高SCI他引为96次）；该项目发现高温半导体重要材料及高温结构材料碳化硅（室温本征脆性、四面体结构面心立方共价键化合物）在小尺度发生室温大应变塑性变形，并阐明其塑性原子机制（2篇代表性论文单篇SCI他引分别为84次和53次）；主要研究成果获2007年中国高等院校十大科技进展，被专家评论为："集现代电子显微学原位表征与纳米材料新异物理性能于一体的原创性成果"。

二．单晶和多晶金属键结构材料的弹-塑性行为的尺寸效应是国际金属物理领域的重大基础科学问题。本研究选取中等堆垛层错能的面心结构铜单晶展开系统研究，在国际上发现其塑性行为尺寸效应并首次定量化的给出了单晶铜塑性变形过程中各种塑性变形机制对总应变量的贡献；本研究以典型的高堆垛层错能面心立方金属铂的多晶纳米体系为研究对象，首次发现在理论预测的"Inverse Hall-Petch"效应晶粒尺寸区域，即：~10nm的晶粒中有大量位错行为，从而颠覆了人们普遍认为小于15nm的纳米晶中不存在位错行为的认识。该实验填补了晶粒尺寸在该区域的塑性变形原子尺度观察实验上的空白，将"Inverse Hall-Petch"效应的晶粒尺寸推向更小的范围, 并通过原位原子尺度力学性能实验发现晶粒转动的原子机制等。在教育部'211三期项目'验收工作中被专家组评论为"部分研究成果居国际领先水平"。

三．运用原子及纳米尺度原位电子显微学等表征方法，发现一维纳米单体材料的近室温大应变弹性，超弹性和超塑性行为及相关物理性质：系统研究了单晶铜的弹性行为的尺寸效应；通过对直径为5.8nm 的单晶铜纳米线的拉伸变形实验，首次从实验上测得了单晶铜纳米线的弹性应变极限为7.2%，接近8%的理论预测值。该成果得到国际同行高度关注。《Science》上撰文发表评论，将本研究发现的铜纳米线的超弹性列为迄今为止在金属材料中发现的最大的单轴拉伸弹性应变。该研究为人们理解金属材料弹性变形的尺寸效应提供了直接的实验证据，为‘金属基-纳米线’超强复合材料的突破性进展提供了新思路；超大晶格应变是晶体中晶格的奇异物理性质。早在一个世纪前，理论学家预言但至今尚未证实超大晶格应变可以存在于晶体中。本项目通过原子尺度原位弯曲变形实验，观察到Ni纳米线在弯曲及孪晶界面限制下可以达到34%超大晶格应变。该重大发现发表后立刻得到《Nature Materials》亮点报道，其为未来的应变工程等领域的发展展示了极大的空间。超塑性是材料均匀塑性变形的一个奇异特性，实现非晶材料体系室温下超塑性变形是凝聚态物理、材料科学及电子信息等领域的重大基础科学和应用研究课题。该研究通过原位电子显微学实验在世界上首次直接实现了在纳米尺度下，经过高能电子束的适当辅助辐照作用，氧化硅玻璃在纳米线形式下，在拉应力、低应变速率变形中可以具有室温超塑性行为（大于200%延伸率）。这项重大发现不仅有助于半导体工业简化氧化硅超薄膜制备工艺等，还从根本原理上阐明了其实现塑性及超塑性的原子机制。研究为脆性材料如氧化物玻璃的应用开辟出崭新的途径。

以上工作发表SCI论文36篇，重要学术论文包括:2篇《Nature Communications》，8篇《Nano Letters》, 2篇《Physical Review Letters》, 1篇《Advanced Materials》及3篇《Acta Mater.》等。论文总被引1102次，10篇代表论文SCI他引416次。部分研究成果获中国高等院校十大科技进展（2007）。本项目获授权国家发明专利3项，国际专利1项；培养1篇全国百篇优秀博士论文，1篇全国百篇优秀博士论文提名奖。