

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7月5-8日, 2025

福建 厦门

E02-材料界面/表面分析与表征
E02-Analysis and Characterization of
Materials Interface & Surface

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



E02-材料界面/表面分析与表征**分会主席：谷林、陈春林、王建波、郭俊杰、钟虓癸****E02-01****金属腐蚀基础科学问题的像差校正电子显微学解析****马秀良****松山湖材料实验室****E02-02****原镁中杂质的形貌成分和物相研究****单智伟****西安交通大学****E02-03****界面构效关系解析中的先进电子显微学表征****余倩*****Zhejiang University**

摘要内容：近几十年来，电子显微学的发展为材料科学的探索提供了重要的利器，使得材料科学的探索回到了实空间。从传统的金属结构材料到丰富新奇的功能材料，电子显微学分析成为了解析材料中构效关系最有效的方法之一。而近年来算法的进步极大提高了实空间显微学表征的效率。结合多尺度和三维的缺陷结构表征与重构，以及多场耦合下的原位表征技术，我们实现了对材料缺陷结构和缺陷运动，及其与界面相互作用，和对材料性能影响的新认识；同时，通过结合不同的原位和芯片技术，我们可以对力、热、光、磁、电外场作用下材料中的多尺度相结构演化及材料性能变化进行同步的表征，大力推进了材料中准确构效关系的建立。本次报告将重点讲述在高温合金，钛合金，高熵合金等金属中，通过结合显微学表征与计算机重构，我们所实现的对材料构效关系的新认知。

E02-04**晶界塑性变形行为的原子尺度研究****王立华****北京工业大学**

摘要内容：如何在微观水平上表征和测量晶界现象是最基本的问题之一。在这里，我们将介绍我们团队开发的机械热电原位仪器，该仪器能够获得材料的原子尺度变形过程[1-4]。通过上述原位装置，我们能够在微观水平上，特别是在原子尺度上动态观测晶界的塑性机制。通过在原子层次上观测和测量晶界的塑性，我们发现大角度非对称倾斜晶界的滑移是通过晶界位错攀移和滑动实现[1]。这两种不同的晶界位错外在晶界处相互作用产生了位错锁。解锁和重新锁定过程导致晶界滑动。同时晶界滑移伴随着原子转移和扩散。对于晶界迁移机制，我们发现晶界迁移机制取决于晶界的类型[5-7]。一般（混合）晶界周围的晶粒通过晶界的位错行为（包括晶界位错爬升、滑动、解锁）以及晶界原子重新排列，自我调整位置共同协调晶粒转动，这种机制导致晶粒的旋转总是伴随着晶界迁移[5-6]。当晶界是倾斜晶界的是和，它们的旋转几乎完全是通过晶界位错活动完成的[7]。我们发现，晶界位错的爬升、滑移和反作用往往导致 Lomer 位错的形成和破坏，这种晶界位错在晶界塑性中起着重要作用。

E02-05**体心立方纳米金属变形机制及性能调控研究****钟立****东南大学**

摘要内容：体心立方纳米金属因其高强度、高熔点、抗辐照和耐腐蚀等优异特性，在微纳电子器件和

集成电路等领域展现出重要应用前景。然而，受尺寸效应和表界面效应影响，纳米金属的力学行为与宏观材料存在显著差异，其微观变形机制与性能调控规律仍有待进一步阐明。本研究基于高分辨原位透射电镜观察、原位力学测试与分子动力学模拟等方法，研究了体心立方纳米金属的变形行为，揭示了：1）孪晶/异常孪晶主导的新型变形模式及其原子尺度机制；2）界面诱导的钨纳米线超塑性行为及其物理起源。上述结果为体心立方纳米金属的变形机制提供了直接证据，建立了"结构-机制-性能"的定量关联，为高性能微纳器件的材料设计与优化提供理论依据。

E02-06

表面与界面的超分辨 4D-STEM 叠层成像

于荣*

清华大学材料学院

摘要内容：表面与界面对材料的微观结构演化、物理性能、化学行为都起到关键作用，是物质科学研究的重要主题。电子显微学方法的每一次重大进展，包括相位衬度高分辨电子显微学、扫描透射电镜环形暗场像技术、像差校正电镜等，都加深了人们对表面与界面物理与化学的理解。近年来，超分辨电子叠层成像作为一种基于扫描透射电镜中像素化探测器数据（也称 4D-STEM）的计算成像方法，不仅具备准三维成像能力，更在空间分辨率、位置精度和剂量效率等关键性能指标上超越了像差校正电镜的 HAADF、ABF、iDPC 等传统技术，成为原子分辨结构分析领域的前沿技术[1-4]。我们将简要介绍超分辨 4D-STEM 的新进展及其在表面与界面结构研究中的应用。这些实例充分表明了超分辨电子叠层成像技术，在去伪存真、揭示材料本征结构方面所具有的不可或缺性。

E02-07

位错声子的原子尺度测量机其输运特性

高鹏

北京大学

摘要内容：在现代材料科学与工程领域，热管理系统的设计需依据不同应用场景对热导率进行精准调控。于芯片界面这类高功率、高集成密度的散热关键场景中，提升热导率是实现高效散热的核心；而在隔热材料与热电材料体系内，降低声子热导率则成为优化器件性能的关键突破口。纳米级缺陷（如位错）广泛存在于晶格失配的界面结构中，由此衍生的缺陷工程技术，已成为调控材料热导率的前沿策略。为充分发挥缺陷工程在材料热管理与热设计中的应用潜力，深入解析缺陷声子模式的内在机制迫在眉睫。本研究以经典的 Si-Ge 异质界面为模型体系，运用扫描透射电子显微镜搭载的单色电子能量损失谱技术，在原子尺度下对单个位错的局域声子特性展开精确测量。通过与扫描透射电子显微镜原子成像技术的深度耦合，将局域声子模式与微观原子结构进行关联分析，系统揭示了位错对局部热输运过程的调控规律。研究发现，在位错核心周围 2-4 纳米的微区范围内，光学支声子出现显著的红移现象，能量偏移可达数毫电子伏特，这一现象归因于应变场与 Ge 元素偏析的协同作用。结合理论计算进一步证实，位错的引入可使局部界面热导呈现增强或减弱的复杂响应，该效应本质上源于界面处晶格无序（位错）与元素无序（异质界面混合和 Ge 偏析）间的相互作用及竞争关系。上述研究成果为材料热管理领域开辟了新思路，不仅为芯片散热技术的革新提供了理论支撑，更为热电发电机及热管理系统的性能优化指明了基于缺陷工程的创新路径，有望推动相关领域的技术突破与产业升级。

E02-08

High spatiotemporal characterization of surface space-charge layers of materials based on five-dimensional scanning transmission electron microscopy (5D STEM)

朱峰

香港城市大学

E02-09

先进超快电子显微镜研制及拓扑磁结构与光生电荷动力学可视化

付学文*

南开大学

摘要内容：超快电子显微镜由于可以在超高的时间和空间尺度直接观察物质的形貌变化、结构相变、载流子传输、磁结构演变等超快动力学过程，成为物理、化学、材料和生物等多学科研究领域重要的动力学研究手段之一。本报告首先简单介绍超快电子显微镜技术的发展历程和当前研究现状，随后将重点介绍近年来我们在先进超快电子显微镜技术研制及其在低维功能材料非平衡态动力学研究方面取得的进展，包括：1) 针对磁涡旋、斯格明子等微观纳米拓扑磁结构动力学可视化测量的难题，发展了超快洛伦兹电子显微镜，实现了对拓扑磁结构的飞秒激光原位超快调控及动力学过程的可视化测量，揭示了飞秒激光对室温二维磁性材料中拓扑磁结构的可控擦写及对其拓扑自由度精准调控的物理机制；2) 针对半导体中光生载流子动力学高时空分辨可视化测量的难题，开发了国际首套超快扫描电子显微镜与超快阴极荧光多模态载流子动力学探测系统，实现了对半导体载流子动力学在时间、空间和能量维度的跨尺度成像测量。最后，本报告将对超快电子显微镜技术的未来发展和应用进行简单展望。

E02-10

三维原子结构探测的倾转耦合多片层电子叠层成像技术

陈震*

中国科学院物理研究所

摘要内容：利用单次投影 4D-STEM 数据和开发可靠的多片层电子叠层成像技术，我们成功实现了多重散射的数值反解和突破极限的三维空间分辨率。然而，其投影方向的分辨率通常仅能达到约 2 纳米。结合系列倾转的电子断层成像技术是提高深度分辨率的一种有效途径，但是受限于实验和大数据重构的复杂性，目前大范围角度倾转的高质量原子分辨三维重构仍存在极大地困难。同时，大多数体系的缺陷结构为准二维结构，三维原子分辨率通常并非必须的。因此，我们开发并实验实现了一种倾转耦合多片层电子叠层成像技术，基于有限几次倾转的 4D-STEM 数据和进行耦合重构，获得一个共享的三维物函数和分别的束斑函数。模拟显示，最大倾转角 4 度的 5 次倾转，有望在低剂量下获得优于 5 埃的深度分辨率。我们也利用 4 次小角度倾转的实验数据，成功实现了亚纳米的深度分辨率和单原子点缺陷的精确三维定位。同时，我们也将展示该技术在解决缺陷、畴壁和界面等体系上的巨大优势。

E02-11

超快透射电镜的设备搭建与材料超快电子显微学表征

李万鹏*、李逸涵、李馨龙、王中林

北京纳米能源与系统研究所

摘要内容：超快透射电镜的发明为超快时间分辨与超高空间分辨的同步分析提供了绝佳的解决方案。通过将透射电子显微术与飞秒激光的泵浦-探测技术相结合，该超快透射电镜系统在频闪模式下成功实现了纳米尺度的空间分辨和~500 fs 的时间分辨。首先利用金薄膜在飞秒激光激发条件下的形貌超快动力学行为以及金纳米颗粒、多壁碳纳米管的衍射超快动力学行为，初步确定系统的时间零点，进而通过铜网和银纳米线的表面等离激元行为精确确定时间零点。在设备搭建完成后，对 Te 单质的超快动力学行为进行了初步的探究。

E02-12

原子可视化物理测量与结构调控

白雪冬*

中国科学院物理研究所

摘要内容：电子显微镜具有亚埃分辨能力，在物质科学研究中发挥着越来越重要的作用。我们基于扫描探针和超快光谱技术，开发高时空分辨材料测量方法，研制原位电镜仪器，利用外场（光、电、力、低温、超快激光）和表界面模板等手段调控材料结构与物态，实时成像物理/化学现象的原子过程，将结构-

物性测量与调控的能力提升到原子分辨水平。本报告将介绍自主研制原位电镜仪器及其在结构-性质测量与调控以及表面生长动力学方面的研究进展,包括原位电镜超快光学测量装置的研制、氧化物超晶格铁电极性拓扑结构调控、立方冰的实验发现和人造菱方氮化硼单晶薄膜等方面的研究成果。

E02-13

快充锰酸锂正极材料的透射电镜研究

吴劲松*

武汉理工大学

摘要内容: 锰酸锂正极材料有三维的锂离子传输通道,是潜在的快充锂离子电池正极材料。我们通过熵增的方法,极大地减缓了锰酸锂材料在循环中产生的结构不稳定性。并通过透射电镜,表征了材料中的本征缺陷,及其在循环中出现的晶体缺陷。原位电子显微学可以有效表征电极材料的充放电过程中,结构、缺陷和成分上的变化。随着原位电镜技术的发展,使得人们可以在高分辨率下,观察和研究锂离子电池电极材料在充放电时动态的结构变化。本文也将总结部分近期利用原位电子显微学研究了正极材料中的工作,包括微裂纹产生的本征机制,以及材料在充放锂时的结构变化,这将为揭示电极材料在充放电过程中的电化学反应机制提供了新的视角,为发展制备高性能电极材料的新方法提供了一些理论依据。

E02-14

电化学固液界面反应动态的原位电镜研究

廖洪钢*

厦门大学

摘要内容: 原位电镜可从原子分子尺度实时成像并获取相关结构及价态的高空间分辨率信息,突破了过去电镜只能看真空中“不会动”的静止样本,实现了对材料微观反应动态过程的成像,从而使微观领域研究从静态跨入动态的新阶段,为深入研究化学、材料基础及应用提供了一个新的视角。本团队致力于原位电镜技术开发及其在材料、化学中的应用。自主开发研制了多种原位透射电镜芯片反应器和控制系统,将气液体流场、电光热力控制与测量引入纳米芯片反应器,突破了电化学原位显微表征分辨率低及真实反应条件难实现的两大瓶颈,实现了多个反应体系的原子尺度实时成像及动态反应过程追踪。对固液界面原子分辨动态成像,追踪单离子动态及输运过程,发现界面富集相新结构及溶液中离子跳跃运动模式,亚纳米通道中锂离子超致密输运新现象等。探究电化学界面反应及电子转移过程,首次发现了锂硫电池电荷存储聚集反应新机制,揭示出在传统的电化学界面“内球反应”和“外球反应”机制外存在第三种“电荷存储聚集反应”新机制。

E02-15

金属材料相变腐蚀过程中的原子行为原位研究

邬剑波

上海交通大学

E02-16

纳米金属氧化物表面的动态演变

袁文涛*

浙江大学

摘要内容: 金属氧化物纳米晶在能源、环境及化工领域应用广泛。例如在催化过程中,金属氧化物常常被用作催化剂或催化剂载体,因反应分子通常在其表面发生吸附、活化和反应等过程,故其性能与表面原子结构紧密关联。在实际应用中,气氛、温度等外场环境常常会引起金属氧化物表面发生动态重构,导致性能变化。因此,精确解析金属氧化物的表面原子构型及其在外场条件下的演变规律,对高性能催化材料的设计至关重要。近年来,原位透射电镜技术的发展为纳米氧化物表面原子结构的解析及原子尺度观测表面动态演变提供了有力手段。本团队利用和发展了表面原位电子显微学表征方法,在原子尺度探索了

SnO₂、TiO₂等金属氧化物的表面在外场条件下的动态演变行为，揭示了表面重构的原子结构和形成机制，为高性能负载型催化材料的设计提供了原子尺度的科学依据。本报告将重点介绍我们团队近期基于原位电镜技术在表面科学研究方面取得的进展。

E02-17

纳米氧化物半导体材料原子尺度原位表征

王建波*

武汉大学物理学院

摘要内容：化合物半导体材料是第三代半导体典型材料，其结构、缺陷、表界面和相变是影响其功能的重要因素。球差校正电镜的出现让原子尺度的表征成为可能，更让化合物半导体材料中的缺陷、表界面的表征更有了深层次认识。外场的激励让半导体材料的结构、微结构和相变的响应在原位电镜中获得原子尺度动态信息，进一步促进了半导体微结构-性能关系的动态连锁响应机制的理解，让半导体调控更加深入精确。

E02-18

硬碳储能电极材料的表界面结构设计 with 调控

张伟*

吉林大学

摘要内容：硬碳材料在电化学储能领域存在倍率性能不足、循环稳定性差、结构与性能关系不明等问题。我们通过杂原子掺杂、微观结构优化、纳米孔设计和界面工程等策略，对硬碳材料进行设计与优化。借助多种表征技术，深入剖析其构效关系与反应机理，发现：1. 引入预钠化使硬碳纳米管表面形成更薄、致密的 SEI 层，减少钠离子不可逆损失，提升首周库仑效率和循环稳定性，且钠离子可深入材料内部，增加能量密度 (Nano Lett., 2024, 24, 7180-7187)；2. 制备氮氧共掺杂碳纳米管，其较大层间距和比表面积利于钠离子吸附和插层，展现出优异的倍率性能和循环稳定性 (Acta Mater., 2025, 284, 120592)；3. 设计具有丰富封闭孔结构和较大层间距的硬碳材料，通过控制预热解温度调控闭孔尺寸，提升平台区容量和循环性能；四是通过切换电解液界面模型，区分脱溶行为和 SEI 过程对硬碳电极动力学的影响。发现在硬碳微观结构无序时二者协同作用，而随着硬碳有序度增加，脱溶剂化作用更为显著 (Angew. Chem. Int. Ed., 2025, 64, e202425507)。

E02-19

敏感二维量子材料与有机材料的无损结构表征与构效关系研究

林君浩*

Department of Physics, Southern University of Science and Technology

摘要内容：由于二维材料的极限厚度，大部分新型二维材料，如铁电性，铁磁性或超导性单层材料在大气环境下会迅速劣化，不耐高能电子束辐照，无法表征其缺陷的精细结构。在这个报告中，我将报道我们课题组在克服二维材料水氧敏感性的一些设备创新尝试，以及利用互联真空转移与扫描透射电镜 (STEM) 定量衬度分析技术表征水氧敏感二维材料的晶格原子结构与缺陷，并研究其对物性的影响，如敏感单层 MoTe₂/WTe₂ 本征缺陷及其可能的拓扑性质等。此外，引入低温冷冻电镜技术，我们在克服水氧敏感的基础上也成功克服二维材料与一系列有机无机复合材料、全有机材料体系不耐电子辐照的问题。

E02-20

低剂量电子显微成像探索：从静态到动态

朱艺涵

浙江工业大学

E02-21

机器学习视角下原子级缺陷和单原子催化剂的智能分析

赵晓续

北京大学材料科学与工程学院

E02-22

实空间下的材料构效关系

谷林

清华大学

E02-23

铁电畴与畴壁的外场响应与观测

田鹤

浙江大学

E02-24

Atomic scale imaging of magnetism, chemistry and structure of materials

钟虬葵

香港城市大学

E02-25

反铁磁材料磁结构的原子尺度探究

王琦*、张淼、钟虬葵

香港城市大学

摘要内容：反铁磁因其独特的磁性行为和自旋电子学、磁存储等领域的应用前景，已成为磁性材料研究的前沿领域。然而，反铁磁体的零净磁化特性使其在原子尺度的表征面临重大挑战，这限制了对磁性特性的深入理解和实际应用。为解决这一问题，本研究提出了一种基于束移四维电子磁圆二色性（4D Electron Magnetic Circular Dichroism, 4D EMCD）的新方法。该方法通过精确控制电子束的移动和探测，并结合四维数据采集，实现了对磁性信号的精确捕获和分析。这一技术首次在实空间中以原子分辨率映射出了原子面磁信息，突破了传统 EMCD 方法的空间分辨率限制，为研究零净磁化材料的磁性结构提供了强大的新工具[1]。在本研究中，我们将束移 4D EMCD 方法应用于 YFeO_3 ，分析了单个 Fe 原子平面的 EMCD 信号。结果显示，奇数原子面的自旋-轨道磁矩比（mL/mS）为 0.0849 ± 0.037 ，偶数原子面的值为 0.0936 ± 0.0719 。尽管单个原子的信噪比（SNR）较低，但通过对九个原子平面的分析，我们观察到了明显的 EMCD 特征[2]。并且相邻平面的信号强度呈现交替的正负变化，这表明 EMCD 信号发生了反转。这种交替模式反映了反铁磁体内部交错的磁矩排列特性。

E02-26

铁电拓扑畴结构的场外调控

王宇佳

中国科学院金属研究所

E02-27

铁电拓扑畴的有序化和多阶构筑

耿皖荣*、朱银莲、马秀良

Songshan Lake Materials Laboratory

摘要内容：拓扑态作为凝聚态物质科学的前沿领域，其独特的手性特征与拓扑保护特性，在超高密度信息存储与量子传输等领域展现出革命性应用前景。近十年来，铁电体系内已发现多种类型的极性拓扑态

及伴随的新奇物理特性，包括全闭合、涡旋、斯格明子、麦纫、布洛赫点等结构。然而，关于铁电拓扑结构的研究仍存在问题尚待解决，例如如何实现纳米级铁电拓扑畴的有序化分布，如何构筑拓扑电荷可调的复杂拓扑组态等，这些问题的解决对实现高密度、非易失、多态信息存储具有重要意义。通过原子尺度的外延生长，在 LaAlO_3 衬底上制备出极大压应变 (-4.36%) 下的 BiFeO_3 超薄薄膜。像差校正条件下的透射电子显微学成像以及在此基础上的定量分析发现 BiFeO_3 薄膜中具有一维和二维超结构调制。二维调制结构伴随着周期性的电场和应变分布，并稳定了网格状分布的铁电斯格明子晶体。该斯格明子晶体在倒空间表现为两个倒易方向上的周期性超衍射峰，因此可归类为双波矢($2q$)的拓扑有序态。另外，以单波矢($1q$)为特征的一维拓扑有序态实现了涡旋管阵列的稳定。铁电斯格明子晶体的形成可归因于两个相互垂直的单波矢($1q$)拓扑有序态相交并交互作用，它们在相交区域晶格、电荷的协同耦合进而形成双波矢($2q$)的拓扑有序态，即斯格明子晶体。相场模拟研究进一步确定了电学 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用在铁电拓扑有序态形成中发挥的决定性作用，在实验上证实了铁磁体系中关于形成拓扑有序态的物理模型在铁电体系中的相似性。该研究结果表明在铁电材料中拓扑有序态的周期和对称性能得到有效的调控，未来有望进一步发现各向同性拓扑有序、各向异性拓扑有序等新型多重波矢拓扑态。另外，通过前期薄膜体系设计、后期精密调控边界条件及生长工艺，在 BiFeO_3 薄膜中成功诱导出多阶极性径向涡旋。基于高密度、自组装纳米结构的薄膜构型，直接观测到具有独特极化分布组态的二阶径向涡旋，其表现为具有“甜甜圈”状面外分量和四象限式面内分量的极化组态，实现了净拓扑电荷 $Q = 0$ 。通过改变 BiFeO_3 纳米结构尺寸，进一步稳定了从一阶到三阶的多阶铁电径向涡旋，并实现了拓扑电荷的多态调控。利用压电力显微镜针尖施加的局部电场，实现了不同拓扑态的动态切换和拓扑电荷的连续变化。该研究结果为下一步构筑复杂极性拓扑组态，丰富铁电拓扑构型，进而设计新型多态铁电存储提供了新的可能性。

E02-28**半导体材料界面的结构表征与物性调控****陈春林****中国科学院金属研究所****E02-29****半导体纳米材料及器件原子尺度构效关系研究****李露颖****华中科技大学武汉光电国家研究中心****E02-30****光电介质材料缺陷簇局域结构表征与性质****胡万彪*****云南大学**

摘要内容：介质材料具有丰富的物相、电子结构与光电性质。缺陷普遍存在于各类材料中，如何构筑特定缺陷以及缺陷如何影响物相、电子态和光电性质等方面仍存在诸多问题。本报告系统阐述介质材料中多层次结构序构筑和调控，并建立缺陷和局域结构与电学、发光及静电储能的关联；同时，基于缺陷偶极动力学，建立新的偶极相互作用普适性介电理论。

E02-31**半导体金属氧化物异质结的界面能带结构调控及其光降解应用****刘家龙*****北京化工大学**

摘要内容：半导体金属氧化物具有与可见光能量匹配的带隙宽度，在光的照射下产生电子和空穴，并进一步产生具有强氧化性和还原性的自由基（如 $\cdot\text{OH}$ 和 O_2^- ），使溶液污染物降解为二氧化碳和水。由于单一组分半导体金属氧化物的光生载流子复合过快，且不同氧化物导带底和价带顶的电势有所不同，并非

所有氧化物都能同时产生强氧化性和还原性的自由基, 因此采用两种或两种以上半导体形成异质结以调控界面能带结构, 改善光吸收、载流子复合、电子传输效率, 并最终提升光降解有机物、重金属离子的性能。本研究介绍了一系列半导体金属氧化物异质结纳米材料的合成, 完成了从 II 型、Z 型到 S 型异质结的设计、转化和构建。首先通过水热法制备了一种 II 型高效的(1T/2H)-MoS₂/CoFe₂O₄ 异质结, 具有良好的光催化去除有机染料性能, 并能够实现磁回收。随后遴选具有不同能带结构的 WS₂ 与 MoS₂ 配对制备了 Z 型 CdS/WS₂ 异质结, 使得光生电子和空穴分别保留在具有高还原性和高氧化性的能带上, 第一性原理计算为解释其光催化染料降解和 Cr(VI) 离子还原反应的机理提供了理论依据。此外, 结合水热法与煅烧法制备了 S 型 TCN/BiOI 异质结, 其中 TCN 为一维管状 g-C₃N₄, 并通过电子自旋共振谱证实了·OH 和 O₂·自由基的生成, 这使其在光降解抗生素和 Cr(VI) 离子还原反应中表现优异。此外, 还通过形貌、晶面选择调控 CeO₂ 纳米棒的带隙, 并制备了一维 CeO₂/ZnO 异质结纳米材料, 实现从 II 型到 S 型构型转变。这一系列工作为设计和制备具有 S 型异质结光催化剂建立了一条新的途径。

E02-32

溅射制备的 ITO 薄膜中厚度对残余应力演化的研究

梁建辉*、曾佳宇

科磊半导体

Abstract: Indium tin oxide (ITO) is a widely used transparent conductive film in devices such as solar cells, LCDs, LEDs, and sensors. However, stress generated during film growth can affect device performance and reliability. This study quantitatively investigates the relationship between ITO film thickness and residual stress. ITO films were deposited on glass wafers by standard radio frequency sputtering at room temperature. The film thickness was characterized using optical reflectometry and the stress was characterized by high-precision stylus profilometry. A stress-type transition from tensile to compressive was observed with increased ITO film thickness. The highest tensile stress was 1.9GPa for the 14nm thick ITO film, and the highest compressive stress of -0.4GPa was found in ITO films thicker than 300nm. A separate investigation of the surface morphology of the ITO suggests that the film follows Volmer-Weber growth, and the tensile stress originates from the impingement and coalescence of the newly-deposited film islands. With the continuous deposition of the film, the grain size becomes larger and the structure changes from equiaxed to columnar. Compressive stress dominates and stabilizes at -0.4GPa for thicker ITO films. The origin of the post-coalescence compressive stress is consistent with the incorporation of excess material in the grain boundaries. The study provides valuable insights into the evolution of stress versus thickness of ITO films and can serve as a reference for monitoring and modulating stress during the production process control of ITO devices. Understanding and controlling the stress of ITO films are crucial for ensuring the reproducibility, reliability and performance of devices utilizing these films.

E02-33

层状硼化物晶格堆垛构型的表征及调控

郑强*¹、傅晴俏²、高汉滨¹

1. 国家纳米科学中心

2. 上海大学

摘要内容: 含三角、正方、六角蜂窝、笼目等特殊几何构型晶格的化合物通常展现出超导、磁性、拓扑等诸多奇特的物理化学性质。这些晶格在结构中通常具有可变以及可调控的堆垛方式, 从而衍生出多种新结构和新物性。作为重要的无机材料, 硼化物拥有多样的结构类型和丰富的物性, 其结构中普遍包含过渡金属三角或正方晶格, 但对这些特殊晶格堆垛方式及其与物性关联性的研究甚少。本研究设计并采用两种不同方法成功制备了含有二维[Nb-Ir-Nb]三角晶格的新型超导硼化物 Nb₂IrB₂。研究利用扫描透射电子显微学(STEM)并结合电子背散射衍射(EBSD)技术, 对两种不同方法合成的单晶和多晶样品进行了从纳米到原子尺度的精细结构表征与分析。研究揭示了单晶中[Nb-Ir-Nb]三角晶格存在多种堆垛类型, 但多晶则较少出现堆垛缺陷。第一性原理计算表明, 结构中两种畴界面处极低的界面能是多种堆垛类型形成的关

键因素。此外,研究发现通过调整合成条件,可以有效调控这些三角晶格的不同堆垛方式。本研究为硼化物中三角和正方等晶格堆垛方式的设计与调控提供了新策略,也为硼化物新功能开发和探索开辟了重要途径。

E02-34

层状钙钛矿界面原子电子结构与物性调控

姚婷婷、乔贝贝、陈春林*

中国科学院金属研究所

摘要内容: 化学式为 (AnBnO_{3n+2}) 类化合物具有层状钙钛矿结构,其晶体结构与物理特性由氧含量决定,细微的氧含量变化就可实现对其原子结构与物性的调控。层状钙钛矿材料界面特殊的原子结构和键合状态,往往会表现出新奇的物理和化学性质。我们在 LaAlO_3 (001) 和 SrTiO_3 (001) 衬底上外延生长了高质量的 LaTiO_3 薄膜,揭示了薄膜的外延应变与晶格缺陷对其电学性能的影响。研究发现, SrTiO_3 衬底诱导的强压缩应变和 Sr 掺杂,促使 LaTiO_3 薄膜由 Mott 绝缘体向金属态转变;由于界面失配位错的形成释放了薄膜内的应变,生长在 LaAlO_3 衬底上的薄膜保持了半导体特性。结合透射电子显微术及第一性原理计算研究了 LaTiO_3 薄膜中形成于{100}和{110}晶面上的两类畴界的原子与电子结构,发现畴界处的带隙减小,载流子密度显著升高。我们构筑了 $\text{LaTiO}_{3.5}/\text{LaTiO}_3/\text{LaTiO}_{3.5}$ 异质结构薄膜,并通过高温退火诱发 Sr 元素扩散梯度偏析,阐明了应变集中对界面偏析的抑制作用。 LaTiO_3 和 $\text{LaTiO}_{3.5}$ 相同的元素组成、完美的晶格匹配以及丰富的物理性质,使得 $\text{LaTiO}_3/\text{LaTiO}_{3.5}$ 异质界面成为研究界面偏析驱动力及偏析对电学性质影响的理想模型。电子显微学研究结果表明 $\text{LaTiO}_{3.5}/\text{LaTiO}_3$ 界面为共格界面,界面上没有失配位错或者析出相存在。基板中的 Sr 元素向异质结构扩散,主要替换了 LaTiO_3 中的部分 La 原子,而且 LaTiO_3 中的 Sr 浓度呈明显的梯度分布: $\text{LaTiO}_{3.5}/\text{LaTiO}_3$ 界面处的 Sr 浓度最低,远离界面后 Sr 浓度逐渐升高。第一性原理计算表明静电势驱动 Sr 原子从 $\text{LaTiO}_{3.5}$ 向 LaTiO_3 扩散,界面应变导致了界面处 Sr 浓度的降低。本工作的应用价值首先在于为利用界面应变减少偏析引起的不利影响提供了重要的科学依据,其次也为界面设计和调控提供了新思路。此外我们利用电子束辐照诱发铁电相 $\text{SrNbO}_{3.5}$ 到导电相 SrNbO_3 的相变,并分别在纳米尺度和微米尺度实现了相变的精确调控,构筑了兼具二维铁电性和一维导电性的 $\text{SrNbO}_{3.5}/\text{SrNbO}_3$ 多功能薄膜。因为导电方向与铁电极化方向相互垂直,所以铁电薄膜引入面外一维导电相后并不劣化其铁电性能,具有突出的优势,为新型导电铁电多功能材料在光电、热电、压电等领域的研究和应用奠定了基础。

E02-35

无机半导体材料室温超常塑性与微观机理

李晓翠¹、陆洋²、陈福荣^{*1}

1. 香港城市大学

2. 香港大学

摘要内容: 无机半导体材料因其离子或共价键特性,通常在室温下表现为脆性,限制了其在柔性电子等新兴领域的应用。本研究聚焦于无机半导体材料的微观结构与力学性能,取得了显著突破。我们揭示了全无机钙钛矿半导体材料(CsPbX_3 , $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$)单晶微米柱具有本征室温超常塑性及塑形能力,可通过多系滑移变形为立方体、L形和Z形等多种几何形态,平均塑性应变高达 $\sim 64\% \pm 8\%$,且无裂纹或解理断裂。通过原子级分辨率微结构表征,揭示不全位错的多系滑移为变形机制。结合第一性原理计算,阐明塑性的物理起源为低滑移能赋予的持续变形能力,以及化学键动态重组维持的晶体结构完整性。基于这一塑形能力,开发了形状可定制的微纳光电器件,验证其功能特性及带隙能量在大幅变形后保持稳定(Nat. Mater. 2023, 22, 1175-1181)。这一突破性成果打破了无机半导体材料必然脆性的传统认知,建立了无机半导体塑性特性的准则,为新型塑性材料的设计与高通量筛选提供了理论指导,同时为柔性电子及智能可变形传感等前沿领域提供了兼具优异光电性能的材料基础。

E02-36

铁氧化物的环境电镜研究

苏东

中国科学院物理研究所

摘要内容：材料创新是现代科学发展的重要驱动力。通过开发新型材料，科学家能够突破技术瓶颈，推动能源、电子等领域的革命性进步。对材料结构的深入分析是材料创新的核心，它帮助科学家理解材料的性能与行为，从而设计出高性能、高稳定性的新型功能材料。利用先进电子显微镜技术能帮助我们获得原子分辨率下实空间的结构信息，结合原位样品台在工况下进行研究则可以让我们了解材料在使用过程中的实时结构变化。本次报告中，我将汇报团队对金属氧化物氧化还原反应方向的环境电镜研究。用原位电子显微镜方法，观察 Fe_3O_4 纳米晶体在常压 H_2 氛下的的动力学行为，研究了生长模型，揭示了相互竞争的多步反应机制，并进一步澄清了合金化以及氢溢流效应对固态和气态反应的耦合的影响。

E02-37

磁性材料与器件的电子显微学研究

彭勇

兰州大学

E02-38

铁氧体阳离子无序和晶界占位竞争的原子尺度研究

张振华^{*1}、陈福荣²、文通其³、SROLOVITZ David Joseph²、张雪峰¹

1. 杭州电子科技大学

2. 香港城市大学

3. 香港大学

摘要内容：多组元体系陶瓷或合金由多个元素组成，多个元素在占据相同晶格位点时会产生竞争，这种竞争在界面中尤为激烈，这使得多组元体系中元素在体相和界面内的分布存在差异，并且这种占位竞争在离子键、共价键构成的陶瓷中更加复杂和激烈。软磁铁氧体为尖晶石结构，氧阴离子按照面心立方堆积，铁、锰、镍、锌、钴等金属阳离子占据在氧四面体和八面体间隙中，我们把金属阳离子既占据四面体又占据八面体的行为称为阳离子无序。软磁铁氧体是国民和国防领域中电压转换器、电感器的关键材料，通常为多晶组织，晶界是决定软磁铁氧体的能量损耗和磁导率的重要部分，理想的晶界特征表现为磁耦合、电绝缘。

软磁铁氧体中晶界的磁耦合、电绝缘完全取决于晶界的元素组成。在软磁铁氧体中，阳离子晶界占位竞争会受到电中性、阳离子无序的影响，使晶界结构组成变得复杂。本项目研究发现，软磁铁氧体的晶界占位竞争表现为：特定金属阳离子(钴、镍等)的优先耗尽，金属阳离子富集(如钙)在特定晶界中的晶界结构转变、晶界多余电荷。

E02-39

铁电极化拓扑畴的界面与原位电场调控

冯燕朋^{*}

松山湖材料实验室

摘要内容：近年来，在钙钛矿铁电氧化物中发现的铁电极化拓扑畴如全闭合结构 1、涡旋 2、斯格明子 3 等具有纳米级三维尺寸 4、拓扑保护 5、负电容 6 等特点，在超高密度、低功耗和非易失性信息存储器方面具有广泛的应用前景。另外，铁电氧化物材料本身的抗辐照能力则赋予了新型极化拓扑畴存储单元极高的信息存储稳定性。我们选取四方铁电 PbTiO_3 为模型体系，通过脉冲激光沉积设备设计并生长了铁电氧化物异质结，利用像差校正透射电子显微镜观察到近周期性排列的极化麦纳结构拓扑畴点阵，并且观察发现极化汇聚型麦纳、发散型麦纳和反麦纳呈现一定的交替排列 7。在此基础上，设计并生长了电极加持的 $\text{SrRuO}_3/\text{PbTiO}_3/\text{SrRuO}_3$ 三层膜结构，利用像差校正透射电镜在 PbTiO_3 层中观察到极化布洛赫点，该结构的中心极化为零，表现出异常的负电容效应 8。进一步发现，可以通过对称/非对称界面实现对麦纳和

布洛赫点的调控,具体表现为:对称性界面能稳定极化布洛赫点,而非对称界面更有利于极化麦纽的形成。最后,我们利用原位透射电子显微术在 PbTiO_3 多层膜中实现了电场诱导的 a/c 畴到大尺度全闭合畴的转变。结合原子尺度原位 STEM 成像、应变分析和离子位移提取发现在 2V 下 a/c 畴可转变为极化呈顺时针和逆时针交替排列的全闭合畴结构。利用相场模拟证实了这一转变过程,并揭示了静电能的降低是这一转变的主要驱动力⁹。以上结果揭示了外延应变、电学边界条件和异质界面在新型铁电拓扑畴结构的形成种扮演着重要的角色,对探索基于铁电材料的高密度非易失性信息存储器件具有重要意义。

E02-40**铁氧化物界面结构与性质的亚埃尺度研究****江亦潇****中国科学院金属研究所**

摘要内容:共格相界面由于其低界面能以及缺少聚集掺杂元素的位置,往往被认为不具有发生偏析的条件。本工作发现了 W 原子在共格 Fe_3O_4 (111)/ Fe_2O_3 (0001)相界面的周期性偏析现象,利用像差校正透射电子显微镜对该相界面的原子结构、元素分布进行了精细的分析,确定了 W 元素周期性取代界面特定位置 Fe 元素的偏析行为。通过第一原理计算证明了该偏析行为是受到界面氧原子自旋极化诱导产生的。这些发现证明了共格相界面能够聚集掺杂元素,而且局域的自旋极化是使掺杂元素偏析的驱动力之一,揭示了元素掺杂能够成为调控磁性材料界面乃至相关器件物理性能的有效手段。

E02-41**工程合金微结构设计及服役性能调控****郑士建****河北工业大学****E02-42****RP 层错工程强韧化 STO-LAO 微波介电固溶陶瓷的原位电镜研究****黄荣****华东师范大学****E02-43****二维电催化材料原子尺度可控构筑与精确表征****郭俊杰****太原理工大学****E02-44****二维铁电材料界面调控及力学行为****郑晓东*****河北工业大学**

摘要内容:二维铁电材料凭借其原子级厚度、优异载流子输运特性和本征柔性等优势,在新型存储器件和柔性电子领域展现出广阔应用前景,但其实际应用仍受制于大面积纯相薄膜制备困难、极化调控机制不明确及力学可靠性不足等关键科学问题。针对相变调控难题,本研究通过原位 TEM 技术对二维铁电 In_2Se_3 材料进行力-热-电多场耦合调控^[1],首次实现了铁电 α 相、反铁电 β' 相与顺电 γ 相的可控相转变及相界面动态迁移,系统阐明了应变场与焦耳热对相变行为的协同作用机制,并构建了应变-厚度相图。基于应变调控机理的深入理解,进一步实现了 α 相与 β' 相的可逆转变及 α/β' 异质界面的精准构筑,显著提升了铁电半导体场效应晶体管的电学性能^[2]。在极化拓扑调控方面,借助 4D-STEM 技术首次在二维扭角体系中观测到面内极化涡旋畴结构,通过层间扭转角度的精准调控,不仅实现了极化拓扑畴的周期性排布,更在二维准晶体系中成功构建了极化拓扑畴结构,并结合原位 TEM 技术进一步实现了二维准晶体系极化拓

扑畴的动态调控[3]。针对二维材料力学性能瓶颈，原位 TEM 力学实验发现通过在二维双层材料中引入扭转角度可诱导裂纹跨层愈合效应：二维双层材料上下层裂纹边缘在初始断裂后通过晶界重构实现自愈，这种独特的裂纹自愈机制使材料在保持极限强度的同时，断裂韧性相比无扭角二维材料大幅提升，突破了二维材料强韧性难以协同提升的困境[3]。本研究通过构建扭转晶界这一核心策略，在电子结构调控与力学性能优化两个维度实现了突破性进展，为二维铁电材料的器件化应用提供了理论依据和技术支撑。

E02-45

氧化物陶瓷晶界原子偏析、相转变与扩散机理研究

杨楚楚*

哈尔滨工业大学

摘要内容：多晶陶瓷材料中晶界结构对其力学和电学等性质具有决定性作用。研究陶瓷材料的晶界结构和性质，是理解其构效关系的关键，也是改善陶瓷材料性能和开发新型陶瓷材料的前提。在陶瓷材料的热处理过程中，少量添加剂（掺杂剂或杂质）在晶界的扩散和偏析会对晶界和材料性质产生重大影响。高温下，晶界是掺杂剂原子扩散的快通道，调控了陶瓷材料的微观结构，从而影响其强度、韧性、电阻等性能。先前研究[Acta Mater. 201 (2020) 488–493]揭示了氧化铝晶界中 Ti 掺杂剂的偏析机制，但掺杂剂的扩散行为与晶界原子结构之间的关系仍未完全明了。以往对晶界扩散的研究多限于宏观测量扩散参数，未能充分考虑晶界原子结构的影响。在本报告中，我们利用球差校正的扫描透射电子显微镜（STEM）、X 射线能谱（EDS）和理论计算，研究了氧化铝晶界模型系统中 Ti 掺杂原子的晶界扩散机制。研究发现掺杂原子晶界扩散表现出两步自演化扩散过程：掺杂原子扩散首先引起晶界原子结构转变，进一步导致拥有不同原子结构的晶界扩散前端和晶界内部的掺杂物扩散系数存在约两个数量级的差异。这种意想不到的发现凸显了晶界原子结构对掺杂原子扩散的重要性。另外，研究结果显示，极低浓度的 Ti 偏析不会引起结构转变，而超过临界浓度则导致结构变化。我们的研究结果为理解晶界中复杂的偏析-相转变-扩散关系提供了宝贵的见解，并为在未来的材料设计中利用晶界掺杂扩散开辟了新的可能性。

E02-46

Cr/Nb 界面 Al 偏析对纳米金属多层膜强化的影响

范晓轩*

西安交通大学

摘要内容：操纵界面的原子尺度结构已被证明可以提供具有增强强度和变形能力的金属纳米复合材料。与传统的异相界面相比，本研究通过纳米压痕实验和基于位错的建模，系统地研究了纳米级 Cr/Nb 多层膜（NMs）的变形机制和强化策略。对于单片 Cr/Nb NMs，XRD 和 TEM 分析证实，在压痕过程中没有相变和元素相互扩散，层间存在协同塑性变形。通过将混合物规则与部分位错发射模型相结合，结合非均匀变形诱导（HDI）应力贡献，成功预测了硬度。引入界面铝偏析从根本上改变了变形途径：应力激活的铝扩散引发 Cr 层非晶化和 Nb 层 BCC→FCC 转变，协同提高硬度。FCC 结构的 Nb 层将塑性应变调节主要转移到 Cr 区域，压头下方变形微观结构的 TEM 图像证明了这一点。结合结晶/非晶界面介导的部分位错动力学和 Al-Cr 固溶体效应的多尺度强化模型准确预测了硬度。这些发现表明，应力激活的界面合金化过程提供了一种可行的途径，通过化学调节的应变分配机制来规避金属纳米层压板中固有的强度-延展性悖论。

E02-47

表征非晶体结构的纳米束电子衍射

穆晓柯*¹、Christian Kuebel²

1. 兰州大学

2. Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Germany

摘要内容：原子排列长程无序的非晶体材料在有机化工、医学药品、玻璃、半导体、合金等领域具有

广泛的应用。但是测定非晶体原子结构的手段却非常匮乏，之前仅有的少数技术只能获得材料内非局部的平均信息，无法在纳米领域有效的认识和利用非晶体，阻碍了相关学科和产业的发展。本报告将讲述作者在电子显微技术上为解决非晶材料（尤其是其中纳米相）的表征难题所做的开发。新技术融合了四维扫描透射电子显微（4D-STEM）技术和原子成对分布函数（Pair Distribution Function, PDF）分析方法，实现了在亚纳米局部解析非晶物质的键长、配位数、以及成像它们的空间分布。[1-3] 报告中的应用例子将涵盖：分析界面处潜藏的纳米尺度非晶氧化层[1][3]，分析电池材料长期循环后的缺陷区的化学键 [4-5]、低电子剂量下分析有机半导体复合材料的原子结构和成像其中纳米相的分布。[2]

E02-48

双相钛合金相界面对强度和加工硬化率影响的取向依赖性原位电镜研究

苗斌*

河北工业大学

摘要内容：钛合金有高的比强度和优异的耐腐蚀性能而被广泛应用，双相钛合金由 HCP 结构的 α 相和 BCC 结构的 β 相组成，通过调控 $\alpha+\beta$ 两相组织可以获得不同力学性能特点的钛合金，全片层双相钛合金因为包含有大量 $\alpha+\beta$ 两相片层相间平行分布组成的集束组织，而具有优异的损伤容限。相对于立方结构，具有 HCP 结构的 α 相的力学性能存在各向异性， β 相片层的形成进一步的加剧了双相钛合金的各向异性，位错等塑性变形如何在两相界面上传递，以及相界面的取向和间距等特征如何影响 $\alpha+\beta$ 双相钛合金力学性能，有待通过实验手段揭示。本工作通过原位扫描电镜微柱压缩实验和透射电镜的表征分析，系统性地研究了全片层双相 Ti-6Al-4V 合金在不同取向下的压缩力学性能及变形机制。结果表明，当沿着接近 $\langle \alpha \rangle$ 方向进行压缩加载时， α 相中柱面 $\langle a \rangle$ 滑移被激活，其 CRSS 约为 350 MPa，对于含有不同取向的 α/β 界面的样品， β 相中发生不同的位错滑移来协调变形，位错在 α/β 两相界面上发生的位错反应差异带来了不同的强化和加工硬化效率。强度的提升的差异主要是由跨界面传递的两个滑移系之间取向差所决定，而应变硬化能力的差异则主要由界面上残余位错矢量的大小和方向所决定。以上结果系统地揭示了双相钛合金强度和加工硬化率各向异性的微观结构起源，为通过调控片层组织组织和引入双相界面获得高强韧钛合金提供理论支撑。

E02-49

晶体材料中半共格界面的位错结构与位移-应力场

杨金波*

浙大宁波理工学院

摘要内容：晶体材料中的半共格界面（包括晶界、相界和外延界面）是决定材料力学性能与物理性能的关键因素。通过原子尺度模拟计算，可获取界面的全面精确信息，涵盖界面位错结构与应力场分布。通常，界面位错结构的确定依赖于预先定义的参考点阵，即界面位错的表征与参考点阵密切相关。然而，在原子尺度模拟中，界面应力场仅由原子位置决定，与参考点阵无关。我们提出的策略如下：通过不断改变参考点阵，表征原子尺度模拟计算中的界面，得到不同位错形态；基于位错分布，结合弹性力学理论计算界面应力场；将计算结果与原子尺度模拟得到的应力场进行对比，直至完全吻合；以此，选择正确的参考点阵，还有界面位移场与应力场，为进一步研究界面处电子和声子散射行为提供界面处各个原子的位移分布。这也有助于实验中界面位错的精准表征和分析。

E02-50

高熵氧化物优化钠离子电池的结构稳定性和电化学性能

肖明军*

兰州理工大学

摘要内容：随着锂离子电池（LIBs）中锂资源的短缺和价格昂贵等问题，迫切需要开发出新的能源储存体系。目前各种新能源储存体系被广泛研究，其中钠离子电池（SIBs）由于钠资源丰富、成本低、安全性高等优点，使其有望成为有力的竞争者，为各种能源储存器件提供可行的选择。钠离子电池（SIBs）是

与 LIBs 互补的有前途的能源储存器件。SIBs 利用钠盐和固体电极之间产生的氧化还原电位以电化学方式捕获和释放能量。SIBs 的开发和应用将有助于推动可再生能源的普及和利用,减少化石能源的依赖和排放。但是, SIBs 在实际应用中仍面临着诸多挑战,大多数 SIBs 使用的是低熵氧化物作为正极材料。然而,这些低熵氧化物在充放电过程中存在着结构稳定性较差、容量衰减快、体积膨胀效应明显、导电性以及库仑效率较低等问题,在一定程度上限制了 SIBs 的循环寿命和能量密度,因此,开发具有高能量密度、良好倍率性能和长循环寿命的有前途的电极材料是推广的关键。近年来,新兴的高熵氧化物 (HEO) 因其在先进领域中令人印象深刻的综合特性而受到了相当大的科学关注。HEO 是一种由多种金属元素组成的复合氧化物,具有高熵效应的优点,构型熵可以最大化和热力学稳定的结构可以通过 HEO 中的多种主元素的组合来实现。许多独特的高熵电极设计可以提高电极的电化学性能,其中一些具有很好的电化学性能。因此,研究 HEO 在 SIBs 中的应用具有重要意义。通过深入研究 HEO 的结构特性、电化学性能以及它的储钠机制,可以为 SIBs 的设计和优化提供新的思路和方法。此外,HEO 的应用还有望提高 SIBs 的循环寿命和能量密度,推动其在能源存储领域的广泛应用。

E02-51

FCC 金属形变孪晶演化过程中结构演变: M→ITB→9R→DT

闫康

西北有色金属研究院

E02-52

高熵合金纳米材料结构表征与生长机理

郝晓东*

陕西科技大学

摘要内容: 高熵合金 (HEA) 纳米材料因其多组分协同效应与结构稳定性,在能源催化领域展现出巨大潜力,但传统制备方法存在高温能耗与组分偏析等瓶颈。本研究创新开发喷雾干燥-热分解还原 (SD-TDR) 技术,实现高熵合金多元纳米颗粒 (HEA-NPs) 和三维纳米框架 (3DNF) 的低温可控制备。本研究借助球差校正透射电子显微镜技术 (HAADF 和 EDS 等) 分析,表明合金元素呈现原子级均匀固溶特征,证明 SD-TDR 技术在高效合成 HEA 纳米材料方面的优势。研究表明 Pt、Ir、Ru 等贵金属元素能够诱导其他过渡金属元素 (Co、Ni、Fe、Cu 等) 在低温下 (300 °C) 的共还原。基于此,我们在 300°C 条件下成功制备出十元高熵合金 (PtCoCuRuNiFeIrRhPdW) 纳米颗粒。电化学性能表明,高熵合金纳米材料的活性优于商用电极。本研究从可控合成高熵合金纳米材料入手,通过原子尺度结构表征,对其原子结构、组织成分等展开了深入的探讨与研究,并对生长机理进行剖析,为高熵催化剂的理性设计提供了理论框架,有助于促进高熵合金纳米材料在电解水催化领域的应用。

E02-53

Zr 合金表面 AlCrFeNiCu 高熵合金涂层的制备及组织与性能研究

陈志培、任晓娜*

北京科技大学

摘要内容: 采用超高速激光熔覆技术在 Zr 棒上制备了 AlCrFeNiCu 高熵合金涂层。研究了不同激光功率和扫描速度对涂层成形质量的影响,当比能量密度的范围在 3.0~3.2 J/mm² 时,可得到与基体结合性好,稀释率低 (热影响区小),没有裂纹等缺陷的 AlCrFeNiCu 高熵合金涂层。对涂层的相结构、微观组织和显微硬度、耐腐蚀性及高温抗氧化性进行了测试分析。结果表明: AlCrFeNiCu 高熵合金涂层由富 Cr、Fe 元素的无序 BCC 相、富 Al、Ni 元素的有序 B2 相以及富 Cu 元素的 FCC 相组成,涂层成分均匀。由于 HSLC 快速冷却的特点,涂层组织由下到上逐渐从柱状晶转变为等轴晶。涂层硬度高达 805HV,这可能是高熵合金特有的固溶强化效应、晶格畸变效应和缓慢扩散效应所致。在 3.5% NaCl 溶液和 0.1mol/L KOH 溶液中,涂层的自腐蚀电流密度分别为 4.209×10⁻⁸ A/cm² 和 4.331×10⁻⁸ A/cm²,涂层表面的钝化膜由多种氧化物组成,钝化膜中的氧空位密度分别为 2.552×10²⁰, 5.794×10²⁰ cm⁻³,表面点蚀坑较少,耐腐蚀性能优异。

在 1200°C 下氧化 60min 后仍能保持涂层的结构完整性, 氧化过程遵循生长动力学曲线, 表面的氧化物主要由 FeAl_2O_4 、 Al_2O_3 和 Cr_2O_3 组成。 AlCrFeNiCu 高熵合金涂层提高了基体的耐腐蚀和高温抗氧化性能。

E02-54

FeCoNiPdPt 高熵合金纳米酶的合成、筛选及应用

任世乐、蒋婧*、赵乾斌、杨磊

河北工业大学

引言: 高熵合金纳米酶在抗肿瘤应用中越来越受到关注, 然而传统的碳热冲击法所合成的高熵合金纳米颗粒需要分散在导电碳载体上, 那么在应用时就会受到极大的限制。同时, 现在水热法作为一种在合成高熵合金纳米颗粒中应用较多的一种方法, 其所合成的高熵合金纳米颗粒不易与溶液分离或者分离出的高熵合金纳米颗粒中杂质较多。因此, 开发一种新的高熵合金纳米酶的合成方法以解决在应用中的挑战尤为重要。

材料与方法: 首先利用超高温 (约 5000K) 等离子气体对金属单质进行快速加热气化, 通过快速冷却制得高熵合金纳米酶, 并对纳米颗粒进行筛选提高尺寸均匀性, 最后对其结构、微观形貌、电化学催化性能、纳米酶催化性能、体外抗肿瘤能力、体外生物相容性及体内抗肿瘤效果进行综合测试。

结果与讨论: 通过对合成的高熵合金纳米酶进行扫描电子显微镜 (SEM)、能量色散 X 射线光谱 (EDS)、动态光散射 (DLS) 等一系列表征后, 发现纳米酶中的各元素分布均匀, 但是粒径分布不理想, 利用磁性微流控技术对纳米酶进行了筛选后得到了粒径均匀的高熵合金纳米酶。HER、OER 和 TMB 等测试结果表明合成的纳米酶催化析氢反应及酶活性良好。由于本研究所合成的高熵合金纳米酶具有约 60% 原子比例的铁钴镍元素, 同时又具有纳米结构, 所以表现出良好的光热和磁热等性能。细胞实验结果表明纳米酶具有良好的生物相容性, 并且结合光热可以对肿瘤细胞起到一定的杀伤效果。本研究通过超高温等离子气体气化 Fe、Co、Ni、Pd、Pt 五种金属单质并快速冷却合成了高熵合金纳米酶, 利用磁性微流控的方法对纳米酶的粒径进行了有效的均匀化筛选并表现出良好的催化性能及光热、磁热性能。在体外细胞实验中, 纳米酶又展现出较为良好的生物相容性和较好的杀死肿瘤细胞的能力。基于本研究中纳米酶的良好性能, 可以进一步通过肿瘤模型体内实验指导高熵合金纳米酶优化, 有利于提高多元合金纳米颗粒在生物医用领域的发展潜力。

E02-55

光-电催化材料表界面微结构演化对其功能性影响

卢岳*

北京工业大学

摘要内容: 催化剂表面活性位点的重构, 对于光电催化剂的活性和稳定性至关重要。我们采用液态环境透射电子显微镜 (LETEM), 观察 TiO_2 纳米颗粒在水中的光催化反应过程, 发现 TiO_2 表面在氢气泡生成前形成了自氢化壳。电子能量损失光谱 (EELS) 和第一性原理计算表明, 氢原子通过水合质子与光激发电子的反应扩散到 TiO_2 次表面, 形成亚稳氢化壳, 降低了氢气 (H-H 键) 形成的活化能。同时, Pt 共催化剂的存在可以加速光催化反应, 但氢化 TiO_2 壳在有无 Pt 共催化剂的情况下均可以形成[1]。需要指出的是, 电催化析氧 (OER) 过程中催化剂表面的结构演化也是普遍存在的。为此, 我们利用先进的球差校正透射电子显微镜 (TEM) 等技术, 在纳米甚至埃尺度上对 CoSx 在 OER 过程中的结构演变进行原位观察, 并结合 X 射线光电子能谱 (XPS)、傅里叶变换红外光谱 (FTIR) 等表征手段进行分析。结果表明无定形 CoSx 在 OER 过程中逐渐转化为结晶的 CoOOH , 其中 $\text{Co}(\text{OH})_2$ 为中间体。通过 XPS 分析确定 CoSx 表面在 OER 过程中发生了元素转化, S 元素减少, O 元素增加, Co 元素的价态升高。原位 TEM 观察显示 CoSx 从初始的无定形结构转变为最终的晶体结构, 其中 CoOOH 是其真正的活性位点, 这一发现为理解 OER 催化剂的活性与结构关系提供了独到的见解[2]。进一步研究表明, 在 CV 预处理过程中, Pt-Ni/NiS 纳米线的表面也发生了从结晶的 NiS 到非晶态氢氧化镍水合物 ($\text{Ni}(\text{OH})_{2-x} \cdot \text{H}_2\text{O}$) 的自重构现象, 其对析氢 (HER) 过程具有重要的影响[3]。近期, 我们还通过在纳米 Cu 中引入晶格拉伸应变以及诱发其表面低配位原子生成 (定义为 DNTs-Cu), 使其表现出优异的 HER 性能。通过 TEM 观察发现 DNTs-Cu 具有复杂的纳米结构,

包括纳米孪晶和边缘位错，这些结构引入了高晶格应变和低配位数，增强了铜与中间体的相互作用。该方法为开发高效、低成本的 HER 催化剂提供了新的思路[4]。

E02-56

光电功能材料与器件的低剂量与原位扫描透射电镜研究

蔡嵩骅^{*1}、李智民¹、王威振¹、段甜伟²、周菲迟³、周圆圆²

1. 香港理工大学

2. 香港科技大学

3. 南方科技大学

摘要内容：以卤化物钙钛矿为代表的新型半导体材料不仅具有优异的光-电特性，同时合成简便，有望推进光伏、通讯、传感等领域的技术革新。然而，卤化物钙钛矿对环境因素的敏感性制约了寿命和可靠性的提升。因此，有必要深入了解卤化物钙钛矿不稳定性的结构来源。为提高卤化物钙钛矿对透射电镜电子束辐照的耐受能力，我们通过沉积超薄碳膜对聚焦离子束制备的钙钛矿太阳能电池截面样品进行了后保护处理。结合低剂量成像，我们揭示了卤化物钙钛矿晶粒内部存在的组分界面，堆垛层错界面和孪晶界面的原子结构及潜在电子特性。此外，我们发现合适条件的电子束辐照可以有效修复卤化物钙钛矿晶粒内部的碘化铅等纳米尺度杂相，并基于此开发了利用激光扫描消除杂相的优化方案。我们还对不同合成方式的 2D/3D 钙钛矿异质结的界面结构进行了系统表征，通过引入有机分子中间层对 2D 钙钛矿钝化层的覆盖率、取向与厚度均匀性、相纯度等特性进行了优化，显著提升了太阳能电池器件的效率与稳定性。为研究新型光电器件的工作机制与结构演化过程，我们基于改进的 MEMS 芯片开发了原位光照透射电镜测试平台，实现了对卤化物钙钛矿在光照下降解过程的原位透射电镜观察。利用这一平台，我们对氧化铜基神经形态视觉器件的工作行为开展了原位表征与电子能量损失谱分析。该器件在不同光、电刺激下表现出高阶动态行为，因此融合了视神经元的关键功能。对氧化铜中铜和氧的含量以及近边精细结构分析揭示了不同工作状态下的载流子与氧空位相互作用的动力学过程，从而明确了其多模态特性的物理机制。

E02-57

溶质偏析诱导的共格孪晶界有序相变研究

潘志亮^{*}、张世民

桂林电子科技大学

摘要内容：在面心立方金属中，共格孪晶界是最稳定最有序的晶界结构。因此，共格孪晶界很难转变成其他有序结构，尽管高温和溶质偏析可能诱导其发生无序化相变形成无定形态薄膜。通过混合蒙特卡洛/分子动力学模拟，本研究发现在铜-锆合金体系中，锆元素的偏析可以诱导共格孪晶界转变为具有六重旋转对称性的有序平面结构。该有序结构与 Cu₅Zr 相的结构非常接近，而且仅仅在一定的锆浓度范围内形成。锆浓度太高太低都不会发生这种有序相变。而且这个浓度范围受到温度与应力的影响。高温，或者高的拉伸或者压缩应力都会使这种相变消失。这种严苛的条件说明共格孪晶界的有序相变很难在现实中发生，解释了此类相变的罕见性。这个很小的浓度范围来源于不同条件下有序相变与无序化相变的竞争，其本质可通过基于自由能最小化的热力学原理来解释。这项工作表明，即便是高度稳定的共格孪晶界，在适当溶质偏析条件下也能发生有序结构转变，揭示了晶界偏析工程调控合金设计中晶界转变的微妙性与多样性。

E02-58

基于原位液相 TEM 的软物质表面研究

宋晓辉

合肥工业大学

摘要内容：近年兴起的具有高时/空分辨率的原位透射电镜技术（in-situ TEM）为微观尺度下的材料研究提供了强有力工具，可实现纳米甚至原子尺度上的精准表征，具有实时、动态监测电极材料在工况下的结构、形貌、物相以及表/界面处的原子级结构和成分变化的独特优势。本次报告主要包括：1）利用原位 TEM 装置，结合透射电镜的各种成像和深度学习分析技术，原位 TEM 可以获得晶体生长、化学刻蚀、

以及自组装的动力学过程（图 1）；2）通过原位液相 TEM 技术及其它表征技术观测纳米硫锂化过程的微观结构演化、反应动力学、相变、化学变化、等信息。这些是传统表征技术难以实现的，为锂硫电池的机理研究提供实验参考。总之，原位 TEM 能带来新的认识和见解，这对深入理解能源材料的失效机理和设计高性能的电极材料具有重要的指导意义[1-2]。

E02-59

钛合金 α/β 相界面表征及其对 KIC 的影响

朱文光^{*1}、张金宇²、张聪惠¹、何叶¹

1. 西安建筑科技大学冶金工程学院

2. Department of Mechanical Science and Bioengineering, Osaka University

摘要内容：钛合金 α/β 相界面结构与位错的相互作用是其强化与韧化的重要微观基础。本研究结合 Pandat 热力学计算与 EMTO-CPA 第一性原理设计出高错配 Ti-Al-V (Cr)系、低错配 Ti-Al-Nb 系 α/β 双相钛合金。TEM 分析表明 Ti-5Al-6Cr 界面错配度最高，而 Ti-5Al-6Nb 合金错配度最低。HR-TEM 分析发现，不同错配度合金相界面均呈现半共格台阶结构，台阶面为(1-100) α || (112) β ，台阶棱为(0-110) α || (110) β 面。台阶高度为 2 倍的(112)面间距。高错配 Ti-5Al-6V 合金界面台阶宽度低，偏差角高；相反，低错配 Ti-5Al-6Nb 合金界面台阶宽度高，偏差角低。进一步利用 O-line 理论分析了合金成分对相界面结构的影响规律。断裂韧性研究发现，在相同强度水平下，低错配界面合金具有更高的 KIC，其源于塑性变形过程中更低的 α/β 相界应力，裂纹不易萌生并扩展。

E02-60

通过引入二维铁电微米片和构建双层结构获得高储能性能的聚合物电容器

范镇豪、王大伟^{*}

哈尔滨工业大学仪器科学与工程学院

摘要内容：聚合物基介电电容器由于击穿强度低、介电常数小、电迟滞大，导致其放电储能密度低，储能效率低。本工作提出了一种协同增强策略，通过引入二维铋层状结构的 Na_{0.5}Bi_{4.5}Ti₄O₁₅ (NBT) 微米片，并且设计异质双层结构，在抑制聚合物电迟滞的同时显著提高其击穿强度和介电常数。最终，所制备的 Na_{0.5}Bi_{4.5}Ti₄O₁₅-聚氟乙烯-共六氟丙烯/ Na_{0.5}Bi_{4.5}Ti₄O₁₅-聚醚酰亚胺(NBT-P(VDF-HFP)/NBT-PEI) 双层结构复合材料在 8283 kV cm⁻¹ 的击穿强度下，获得了 25.0 J cm⁻³ 的高放电储能密度和 81.2% 的高储能效率。有限元模拟和实验结果表明，二维片状 NBT 在聚合物基体中的均匀水平排列导致的电荷屏障效应和双层聚合物相邻层间介电差异较大导致的界面效应协同作用下，抑制了电树枝的演化生长，极大地提高了击穿强度。这项工作可为开发高性能聚合物储能器件提供研究基础。

E02-61

通过控制片层状纳米级不连续沉淀优化 Cu-Ni-Si 合金的综合性能

梁锦钰、解国良、刘新华^{*}

北京科技大学

摘要内容：在 Cu-Ni-Si 合金中同时实现高强度和高导电性是一个重大挑战，这极大地限制了其在电子工业中的应用。本文通过形变-时效-形变工艺制备出沿轧制变形方向排列的纳米级片层状不连续沉淀物 (DP)，为提高性能提供了一条新途径。强化效果主要归因于纳米片层状 DP 强化和位错强化机制。在冷变形过程中，纳米级片层状 DP 和基体之间的界面处位错的积累会导致基体晶粒内位错密度的降低，从而导致冷轧过程中合金导电率损失较低。通过这种方法，该合金的电导率为 45.32%IACS (International annealed copper standard, IACS)，抗拉强度为 882.67 MPa，屈服强度为 811.33 MPa。本研究可以通过控制 DP 的形态和分布，为未来 Cu-Ni-Si 合金的成分和微观结构设计提供指导。

E02-62

真空感应熔炼下镍基高温合金与 SiO₂ 坩埚界面反应过程及相生成机制研究

张晋鸿、王军*、李金山

西北工业大学

摘要内容：本文研究了真空感应熔炼过程中镍基高温合金与 SiO₂ 坩埚之间的界面反应。通过热力学与动力学分析，阐明了高温合金/SiO₂ 界面的相互作用机理：界面反应主要由元素扩散驱动。合金中的 Al 原子优先扩散至界面，与从坩埚扩散出来的 O 原子反应生成 Al₂O₃，优先形成的 Al₂O₃ 可作为 TiC 的异质形核位点。最终在界面处形成连续均匀的 Al₂O₃ 层与不连续的 TiC 层。通过 TEM 分析，证实 TiC 与高温合金基体存在取向关系，证明 TiC 从高温合金基体中析出。对界面反应层厚度数据进行简化后的双因素方差分析得出，在略高于合金熔点的温度范围内，熔炼时间是影响反应层厚度的显著性主导因素。

E02-63

东海海域细菌矿化行为及其机理研究

徐丽玲¹、吴政历^{1,2}、竺婷婷¹、宋振纶¹、杨丽景^{*1}

1. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所海洋关键材料全国重点实验室

2. 宁波诺丁汉大学

摘要内容：海洋微生物腐蚀是在我国大力发展海洋经济和海洋强国战略中面临的直接挑战，微生物诱导碳酸钙沉淀(Microbially Induced Calcium Carbonate Precipitation, MICP)及其附着物对金属材料的矿化和腐蚀具有协同作用。目前，关于微生物诱导碳酸钙沉淀后附着在海洋服役金属材料上的污损研究较少，主要受到海洋环境复杂性、微生物种类繁多以及微生物对环境的影响显著等因素的限制。本项研究对于海洋中存在的可能导致矿化的微生物进行了筛选，分离得到的单菌进行了菌种鉴定与海水腐蚀测试并且定位到了一株诱导矿化的细菌，对 TC4 材料产生了高效的矿化作用，经过菌种鉴定得到 9-2 是海洋微小杆菌属，将其命名为 *Exiguobacterium* sp. 9-2，保藏于中国典型培养物保藏中心，*Exiguobacterium* sp. 9-2 为短杆状的革兰氏阴性菌，菌落形态呈橘黄色，边缘光滑且规则。微小杆菌在不同钝性金属上表现出了差异性的矿化诱导，矿化程度为 TC4>玻璃>304，选择 TC4 继续进行研究后发现，TC4 表面矿化层由 23 μm 左右的杆状碳酸钙构成，能观察到含铁元素的球壳状产物附着在碳酸钙上；Fe³⁺在微小杆菌诱导碳酸钙沉淀的过程中起调控作用，并且 Fe³⁺ 可通过螯合引起蛋白质和多糖等生物大分子的聚集，成为关键的成核位点；最终构建微小杆菌的代谢产物富集 Fe(OH)₃ 后调控碳酸钙的过饱和情况从而形成矿化沉淀的机理模型，矿化层会增加 TC4 材料的表面能和粗糙度，在海洋环境中可能进一步形成生物污损。下一步，本研究将聚焦于如何提升微小杆菌在海洋常用服役金属上的矿化能力，通过矿化进行涂层的自修复保护和抗腐蚀能力的提升。同时，探索矿化细菌在海洋中的应用场景。

墙报

E02-P01

Ti₃Al 合金去除过程中亚表面缺陷演化的分子动力学模拟

生慧、李文渊、周刚*

中国科学院金属研究所

摘要内容：Ti₃Al 合金具有低密度、高比强度、高弹性模量、良好的抗氧化性和组织稳定性等优异性能，广泛应用于航空航天等领域。然而，其室温下塑性和韧性较差，在表面精加工过程中，易在亚表面产生大量缺陷，对工件疲劳性能和使用寿命等产生不利影响。目前对材料亚表面的研究主要集中在宏观尺度，对于微观缺陷演化过程的研究较少。本研究采用分子动力学模拟方法，对 Ti₃Al 合金去除过程进行研究，从原子尺度分析其亚表面缺陷演化机理，主要得到以下结果：(1) 在材料去除过程中，Ti₃Al 合金内部主要由 1/3<1-100>不全位错产生滑移，并产生大量堆垛层错；(2) 弗兰克位错存在位置为工件亚表面 von Mises 应力集中区域，且其下方产生静水拉应力；(3) 工件表面完整性较高区域，既为亚表面静水压应力集中区，也为堆垛层错稳定区；(4) 加工完成后，亚表面主要存在的位错类型为 1/6[-2203]和 1/2[0001]不全位错。本研究系统分析了 Ti₃Al 合金去除过程中亚表面的缺陷演化过程，从原子层次增加了对该过程的认识，可为

Ti3Al 合金表面精加工工艺的优化提供参考。

E02-P02

Investigation on stress behavior around carbon inclusions and dislocation generation mechanism inside silicon carbide

孔亚非

浙江大学杭州国际科创中心

E02-P03

Cr 诱导的共格效应和相润滑机制协同实现 Ni-WC 复合材料的有效减摩

罗昕昕、罗丰华*

中南大学

摘要内容：真空感应熔炼的 Ni-(Fe, Cr)-WC 复合材料通过 FIB、TEM、滑动摩擦、纳米压痕和微米划痕试验揭示了 Fe 和 Cr 相反的界面和摩擦学作用，证实了沉淀物控制对复合材料的摩擦学设计至关重要。铁对 WC 的溶解有轻微的促进作用，而铬对 WC 的溶解有显著的促进作用，并诱导了相应的沉淀生成。铁诱导脆性非共格 M6C 网络的形成(硬度:5.35-8.33 GPa, H3/E2: 0.00368-0.00431 GPa)和各相的本征 CoF 升高，通过 Fe3O4/NiO 转移加剧氧化磨损(体积损失:2.81 mm³, 增加 150.89%)。Cr 优先促进形成突出在摩擦表面上的 M7C3 沉淀(硬度:19.94-23.43 GPa, H3/E2: 0.0590-0.0611 GPa)，并将各相的本征 CoF 降低至 0.0701，并通过 M7C3/M23C6 和 M23C6/ γ -Ni 共格效应实现了低 GND 密度以抑制磨屑产生并减少接触点。这种协同优化将体积损失降低至 0.27 mm³(降低了 75.89%)。

E02-P04

多元镧系元素表面及界面工程提高锂富锰氧化物正极材料的循环稳定性

余一梦

武汉理工大学

摘要内容：富锂锰基氧化物（LLO）面临着容量损失严重、电压衰减快等严峻挑战，限制了其在锂离子电池中的实际应用。本研究提出了一种简单的多镧系元素掺杂策略，通过同时进行表面和界面工程来缓解这些问题。在 Li_{1.2}Mn_{0.54}Co_{0.13}Ni_{0.13}O₂ 表面形成了一层富含镧系元素的层，层上修饰着细小的镧系氧化物 Ce_{0.32}La_{0.28}Yb_{0.40}O₂ 纳米颗粒。同时，在 LLO 晶粒内部形成了许多条状共格的纳米析出（Li_{1.2}TMLa_{0.009}O₂，其中 TM 代表过渡金属元素，La 代表镧系元素）。这些析出物强化了薄弱的晶粒边界和界面，减缓了循环过程中的体积变化，从而改善了 LLO 结构的机电性能。改性后的层状线粒体表现出增强的循环稳定性，500 次循环后容量保留率为 80.4%，而未改性的层状线粒体仅为 69.8%。此外，改性后的层状线粒体电压稳定性也得到改善，平均每循环电压下降 1.95 mV，而未改性的层状线粒体电压平均每循环电压下降 2.49 mV。该改性方法也适用于无钴富锂 Li_{1.2}Ni_{0.5}Mn_{0.5}O₂ 正极材料，为提升各种层状结构正极材料的循环稳定性提供了一种通用有效的策略。

E02-P05

反极性半导体 Ag₂Se 中的机电耦合现象

罗豪

武汉理工大学

摘要内容：机电耦合作为电能与弹性形变能相互转换的重要物理过程，在介电材料中已被广泛研究，该转换常在介电材料中以压电效应和电致伸缩效应的形式呈现，半导体中也观察到此类耦合响应，但在窄带隙半导体中的相关机制尚存争议。本研究取得突破性进展，发现在反极性半导体 Ag₂Se 中，电流可触发巨大的机电应变。其实现机制包含两个关键步骤：低电流密度下发生偶极子重构，随后在中等电流密度下发生相变。通过原位透射电子显微镜观察，发现由此产生的局部应变高达 6.7%。这一发现揭示电流同时具有热效应和非热效应，非热效应包括改变偶极子取向以及偶极子涡旋与电流的相互作用。该应变特性

使得电致弹性形变和电导率能够被同时调控，为相关领域的研究提供了新的思路 and 方向。

E02-P06

薄层 Cu_2S 晶体中电触发相变的原位研究

王美焱

武汉理工大学

摘要内容: 硫族化合物 Cu_2S 作为快离子导体材料, 在电场作用下表现出独特的阻变行为与相变特性。本研究通过原位透射电子显微技术, 揭示了 Cu_2S 单晶在外加电场驱动下 $\gamma(\text{L})$ 相与 β 相的可逆结构转变机制。实验表明, 电场 (阈值 ~ 0.4 V) 可诱导铜离子从有序态 ($\gamma(\text{L})$ - Cu_2S) 向无序态 (β - Cu_2S) 动态重组, 触发材料相变并伴随显著电阻下降, 该过程与电压极性无关且低温 (-140°C) 下仍可发生, 排除了焦耳热主导机制。结合几何相位分析与原子分辨 STEM 观测, 证实相变源于电场调控的铜离子迁移及晶格应变积累, 脉冲电压 (0.4-0.6 V) 下可实现 $\gamma(\text{L})/\beta$ 两相稳定循环切换, 同时高电压 (>1 V) 会引发铜离子不可逆析出, 形成金属铜沉淀及缺铜 $\gamma(\text{D})$ - $\text{Cu}_2\text{-xS}$ 相, 导致堆叠断层缺陷和阻变窗口消失, 造成器件失效。本研究为基于离子迁移调控的忆阻器设计提供了微观机制基础, 并揭示了电场-离子迁移-相变-阻变的耦合规律。

E02-P07

Cu_2Se 半导体中的电驱动畴壁运动

王正洲

武汉理工大学

摘要内容: 快离子导体 α - Cu_2Se 具有反极偶极子, 在外加电压下畴界的运动会引起电阻的变化, 在忆阻器中显示出广阔的应用前景。然而, 由于 α - Cu_2Se 中 Cu 离子的复杂排序, 存在多种类型的畴壁结构。得益于原位透射电子显微学的迅速发展, 能够对材料在外场作用下的结构动态演变进行直接观察, 探索它们的电阻变化机理。控制高温立方相 β - Cu_2Se 到 α - Cu_2Se 相变过程中的电压, 可以形成 α - Cu_2Se 中的两个典型畴壁 ($[10\bar{1}]/[0\bar{1}0]$, $[010]/[0\bar{1}0]$)。进一步证明, $[010]/[0\bar{1}0]$ 畴壁的稳定可能是由于界面中形成的位错。本研究表明, 应用预处理条件对于获得 α - Cu_2Se 的微观结构设计及其忆阻性能非常重要。

E02-P08

通过 Ag^+ 离子扩散和相变调制 Ag_2Te 半导体中的电阻开关

郭安安

武汉理工大学

摘要内容: 碲基硫系化合物, 作为性能优异的固态电解质材料, 被广泛应用于阻变式存储器的研究中, 如 GeTe , Sb_2Te_3 , $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 等。然而, 在这些碲基硫系化合物中, Ag_2Te 作为室温下具有优异热电性能和可伸缩的柔性性能的材料, 被广泛用于热电器件的研究, 而很少有关其阻变存储的研究, 其阻变机理尚不清楚。本研究以 Ag_2Te 半导体薄膜为研究对象, 通过聚焦离子束 (FIB) 制备样品, 结合原位透射电子显微技术 (TEM) 及高角度环形暗场扫描透射电子显微术 (HAADF-STEM), 系统表征了外部电场作用下材料界面/表面的结构演化与电阻开关行为。实验发现, 施加阈值电压 (0.37 V) 可触发单斜相 α - Ag_2Te 向面心立方相 β - Ag_2Te 的可逆相变, 并伴随电阻值显著突变 (如阻值增加 72%)。原子尺度表征表明: 1. 相变过程受 Ag^+ 离子定向扩散调控, 离子空位浓度变化直接影响相变阈值电压及电导率; 2. $\alpha \rightarrow \beta$ 相变伴随反铁电-顺电结构转变, 低对称性 α 相中局域化多极反铁电极化在电场作用下坍塌, 导致离子无序化; 3. 相界面结构分析 (如 α - $[0\bar{1}0]$ // β - $[\bar{1}\bar{1}0]$ 取向关系) 揭示 Te_2 -亚晶格连续性及 Ag^+ 占位有序-无序转变是电阻突变的微观起源。通过设计矩形脉冲电场 (0.2/0.4 V), 本研究实现了低能耗 (避免银沉淀) 且稳定的电阻开关操作, 证实 Ag_2Te 的电阻开关行为源于电场-离子扩散-相变耦合机制。该工作为开发基于相变调控的低功耗、高可靠性忆阻器功能材料提供了重要的界面科学依据。

E02-P09

通过强 Zr-O 亲和力缓解富锂锰基正极材料的不可逆氧损失

王冠

武汉理工大学

摘要内容: 由于 LLO 的高容量依赖于可逆的氧还原反应,不可逆的氧气损失是富锂层状氧化物(LLO)正极材料面临的严重问题。氧气释放可能在表面发生,导致形成尖晶石或岩盐结构。此外,晶格氧在长期循环后通常会变得不稳定,这仍是 LLO 应用的主要障碍。在此,我们展示了 Zr 掺杂是保持 LLO 中晶格氧的有效策略,因为锆与氧之间具有高亲和力。我们采用简单的溶胶-凝胶法将锆离子掺入 LLO 中,以调整局部电子结构并抑制循环过程中氧阴离子向表面的扩散。与未处理的 LLO 相比,LLO-Zr 正极展现出更高的循环稳定性,在 0.4 C 下经过 100 次循环后容量保持率达 94%,1 C 下最高可达 223 mAh g⁻¹,且在 300 次循环后容量保持率仍达 88%。理论计算表明,由于锆-氧共价键的强键合,氧空位形成能显著增加,从而抑制了高电压下晶格氧的损失。本研究为开发高容量、高循环性能的富锂锰基正极材料提供了简便方法。

E02-P10**具有最佳活化 Li_2MnO_3 相的微富锂锰基正极制备稳定的高容量锂离子电池**

柳召沛

武汉理工大学

摘要内容: 由于 Li_2MnO_3 中的氧配位不稳定,在高于 4.5 V 的电压下提取锂离子时容易释放,因此富锂层状氧化物的商业化应用仍存在许多障碍。在这些无钴富锂锰基氧化物(LRMO)中,LR-1.2(当 $\text{Li}/\text{TM} = 1.2$ 时)具有优化的双相(即 Li_2MnO_3 和类 LiTMO_2)结构,其中由于在 Li-2b 位点用 TM 部分取代 Li,部分氧的配位环境从 4Li-O-2TM 八面体转变为 3Li-O-3TM 八面体。因此,一些原本不稳定的 Li-O-Li 构型转变为 Li-O-TM 构型,形成了强大的 TM-O 共价键,增强了氧的结构稳定性。因此,LR-1.2 在 0.1 摄氏度条件下实现了 282.3 mAh g⁻¹ 的高可逆容量(库仑效率为 90.9%),表现出出色的循环稳定性(在 2 摄氏度条件下循环 400 次后容量保持率为 90.3%)和卓越的速率性能。这项研究建立了由 Li/TM 比率调节的微观结构与电化学性能之间的相关性,为高性能锂离子电池正极材料的设计提供了启示。