



## 北理工在材料微观组织模拟领域取得系列进展

发布日期：2019-09-05 供稿：前沿交叉院  
编辑：石殊伦 审核：王博 阅读次数：1523

目前，北理工前沿交叉院集成计算材料ICME王俊升教授团队的黄厚兵特别研究员在相场模拟材料微观组织演化方面取得系列研究成果，入职一年半以来，以第一作者或通讯作者发表论文SCI论文12篇，包括Small, Physical Review Materials, Applied Physics Letters, Journal of the American Ceramic Society, Journal of Physical Chemistry Letters等，与清华大学、北京师范大学、北京科技大学、北京大学、武汉大学和北京航空航天大学分别发表合作文章Nature Communications, Physical Review Letters, Advanced Materials, Materials Horizons, Advanced Functional Materials等。相场模拟方法的优势在于揭示多物理场耦合机制并与实验完美结合，构建了铁电和铁磁多场耦合机制的相场模型，揭示了铁性材料中极化强度-应变-热多场耦合、磁化强度-应变多场耦合等复杂相互作用物理机制。

铁电材料方面成果为：1) 构建了表面电荷诱导极化强度翻转的相场模拟，揭示了可逆极化翻转归因于其水溶液中 $\text{BiFeO}_3$ 薄膜表面的原子化学键的重构，导致表面电荷聚集， $\text{BiFeO}_3$ 薄膜表面上的负(正)电荷的累积可以导致从向下(上)到向上(下)状态的极化强度翻转，同时，模拟预测了表面电荷也可诱导铁电涡旋畴结构的产生。2) 构建了宽温变电卡效应的相场模型，在铁电超晶格中，通过调节层间失配应变和衬底错配应变之间的平衡，扩大电卡效应的温度范围到281 K。3) 构建了压电效应相场模型，锆钛酸铅如果远离准同型相界，压电常数的提高主要依赖于畴翻转，而靠近准同型相界，其各相之间的自由能差异小，电场容易诱导相变，能够大大提高压电常数。

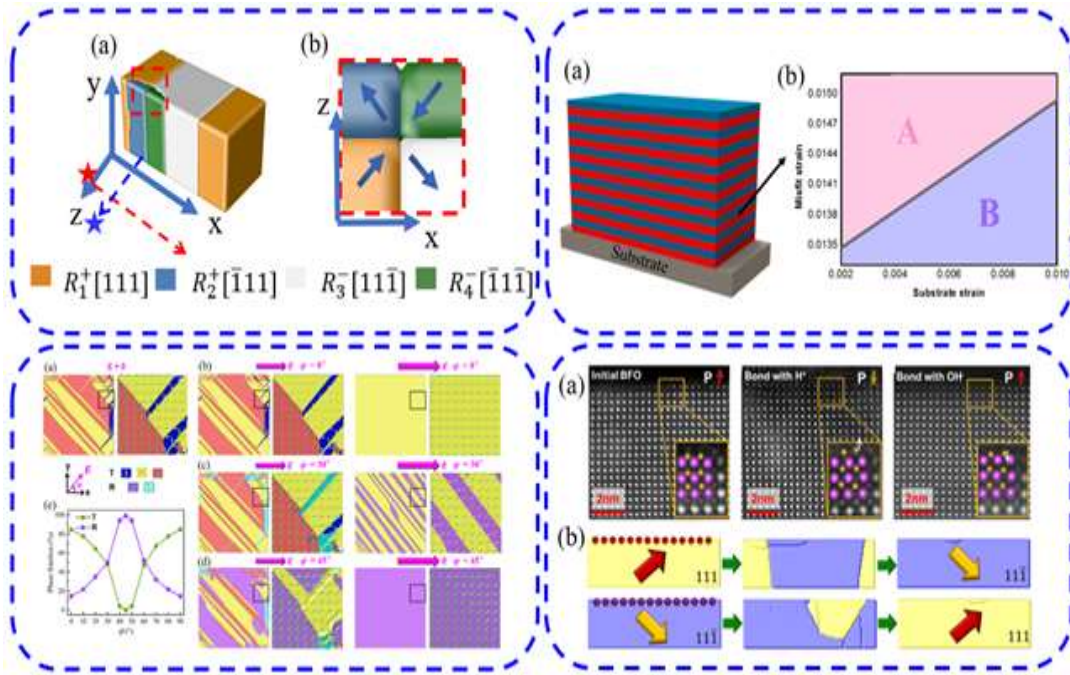


图1 表面电荷诱导铁电涡旋畴，铁电超晶格结构中的宽温区电卡效应，铁电畴翻转和相变提升压电效应，表面电荷翻转极化强度

Nature Communications. 9, 3809 (2018).

Physical Review Materials. 2, 111403(R) (2018).

Applied Physics Letters, 114, 112903 (2019).

Journal of Alloys and Compounds, 777, 821-827 (2019).

铁磁材料方面成果为：1) 提出一种高颗粒浓度的漂移扩散模型，耦合相场方法计算颗粒累积而产生的退磁场。研究发现，通过精确调节扩散过程和漂移过程，可以获得磁性颗粒的大尺度梯度分布，模拟获得的磁性颗粒分布与实验——对应，为实验设计磁场调控功能梯度材料提供了磁场大小、颗粒大小、磁场颗粒间距等参数。2) 利用微磁学和相场模拟的耦合，揭示了磁性材料的表面退磁场机制，由于退磁场的影响，表面形成针状的反磁化畴，模拟结果解释了实验中观察到的表面反向畴。

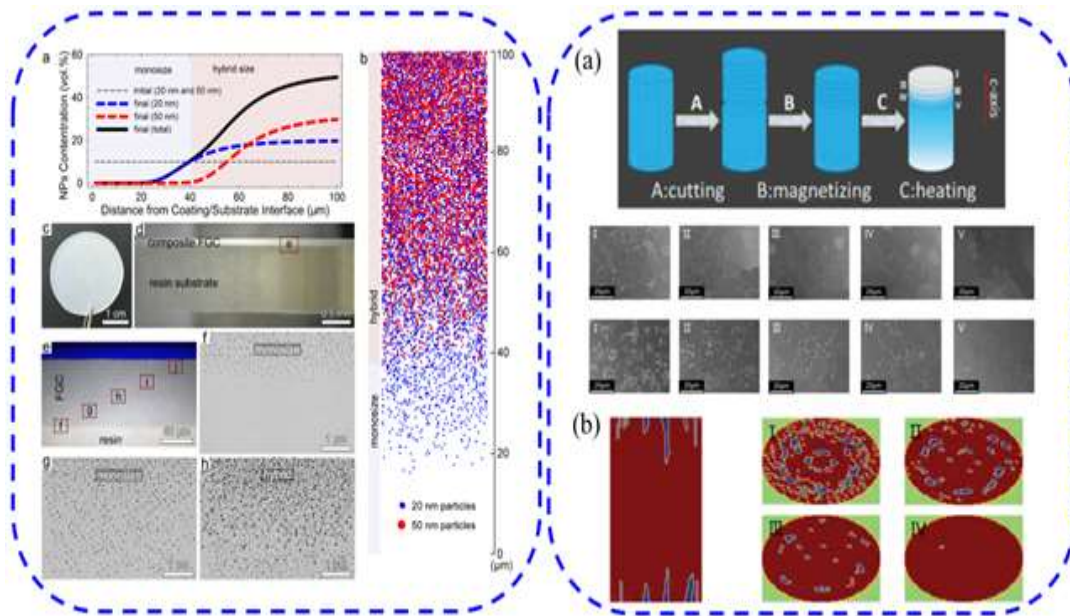


图2 磁场调控混合磁性颗粒的梯度分布，退磁场诱导的表面退磁畴结构

Small, 1802717 (2018).

Advanced Functional Materials. 1900690 (2019).

Advanced Materials. 31, 1900582 (2019).

#### 附黄厚兵特别研究员简介：

黄厚兵，特别研究员，2018年入职北京理工大学前沿交叉科学研究院集成计算材料团队，博士生导师。博士毕业于北京科技大学，博士后在美国宾夕法尼亚州立大学师从相场领域知名专家陈龙庆教授。主要从事相场模拟材料微观结构演化研究，以第一作者或通讯作者发表SCI论文37篇，包括Adv. Mater.(封面), Mater. Horiz., Small (内封面), Acta Mater.(2篇), JACerS (2篇), Appl. Phys. Lett.(4篇), J. Phys. Chem. Lett., ACS Appl. Mater. Inter., Phys. Rev. Mater.等。

分享到：

