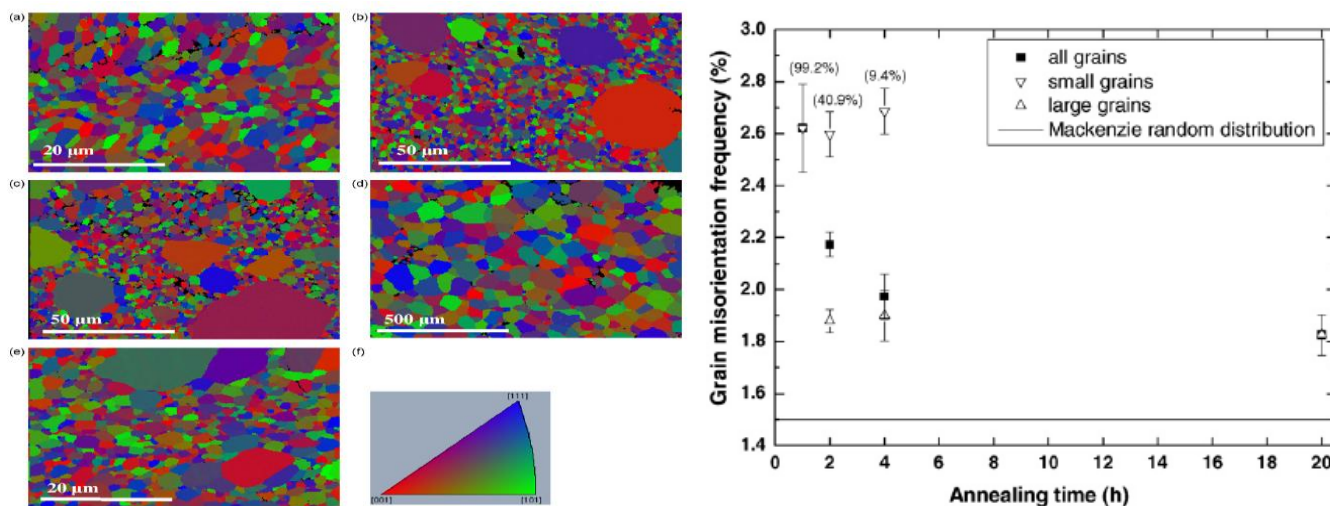


1.1 陶瓷晶界結構分析

本實驗室負責陶瓷晶界結構觀察，主要任務是將 Hoffmann 教授提供的各式陶瓷材料製成電子顯微鏡試片，並將觀察到的晶界結構(結晶、形貌、化學及原子結構)提供給理論計算的實驗室進行模擬模型的比對，以瞭解晶界結構對材料性質的影響。申請人的貢獻主要有三：第一，分析不同晶粒成長行控制低能量晶界的分佈圖一為鈦酸鋇材料背像散射電子繞射(electron backscatter diffraction, EBSD)晶粒取向圖(orientation image maps, OIM)。藉由這些 OIM， $\Sigma 3$ 晶界隨著燒結持溫時間的比例變化可以得知，如圖二所示，此結果成功的解釋前人文獻上對於低能量晶界($\Sigma 3$ 晶界)的歧見。



圖一、典型背 EBSD 之 OIMs 顯示出鈮(Nb)添加的鈦酸鋇材料在燒結持溫(a) 1小時, (b) 2小時 (c) 4小時及(d) 20 小時及(e)純鈦酸鋇材料在持溫 20 小時晶粒取向和形狀，這些是試片於 1425 °C 氧氣下燒結。顏色在 OIM 表示不同的晶粒取向並由(f)的立體投影圖三角(stereographic triangle)對應各晶粒表面的法向量。

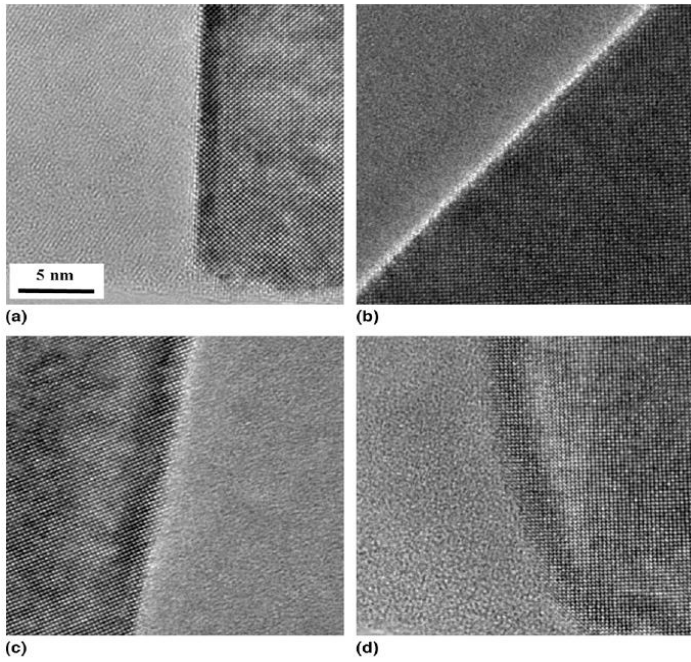
misorientations 隨著燒結持溫時間的變化。小晶粒占全部基材的比例顯示於括號中。實心的水平線代表 Mackenzie random distribution 中 $\Sigma 3$ misorientations 的比例。試片於 1425 °C 氧氣下燒結。Error bars 表示晶粒的標準差，此標準差由三個不同的區域(每個區域至少含有 600 個晶粒)。

圖二、在 Nb 添加的鈦酸鋇材料中全部及小及大晶粒的 $\Sigma 3$

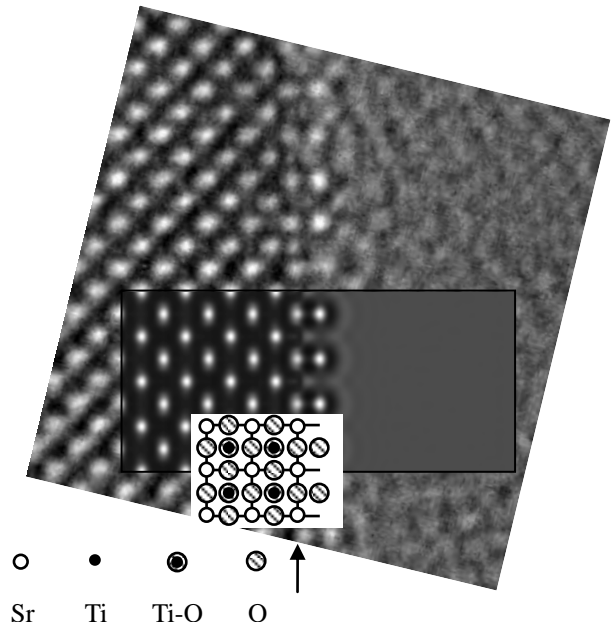
第二，試圖分析在沒有液相、很少雜質及缺陷的多晶陶瓷系統裡仍存在的異常晶粒成長行為。研究策略在於將晶界依形貌分類，如圖三所示，並加以統計分析，發現晶界自由能控制晶界形貌進而影響晶界移動性的直接證據。第三，同時也利用高解析穿透式電子顯微鏡加上 Multi-slice 影像模擬直接觀察到具有高移動性晶界的缺陷結構(如圖四)。隨後並將實驗數據交由英國帝國理工大學材料系 Finnis 教授模擬計算，已解釋此種晶界具有高移動速度的原因。

1.2 奈米氧化物顆粒分析

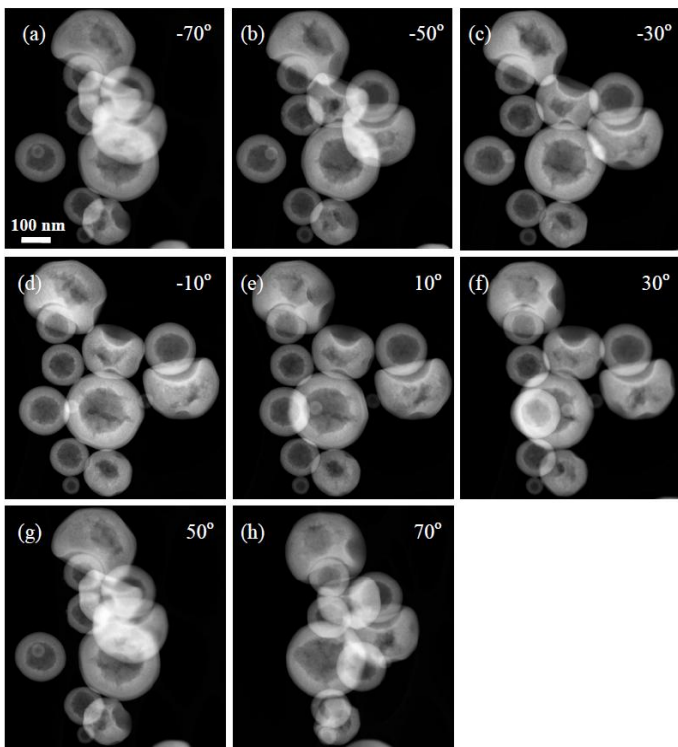
本實驗室與逢甲大學陳錦益教授合作，針對低成本噴霧裂解製作奈米氧化物做基礎研究，主要研究內容有二：第一，利用三維電子全像術(electron tomography)，結合-70 到 70 度(每隔 2 度)的一連串影像與影像重構技術(如圖五所示)，分析多孔二氧化鈣顆粒的孔洞分布，進一步探討先驅物對孔洞分佈及比表面積的影響(如圖六所示)，最後達到操控奈米顆粒多孔結構的目的。



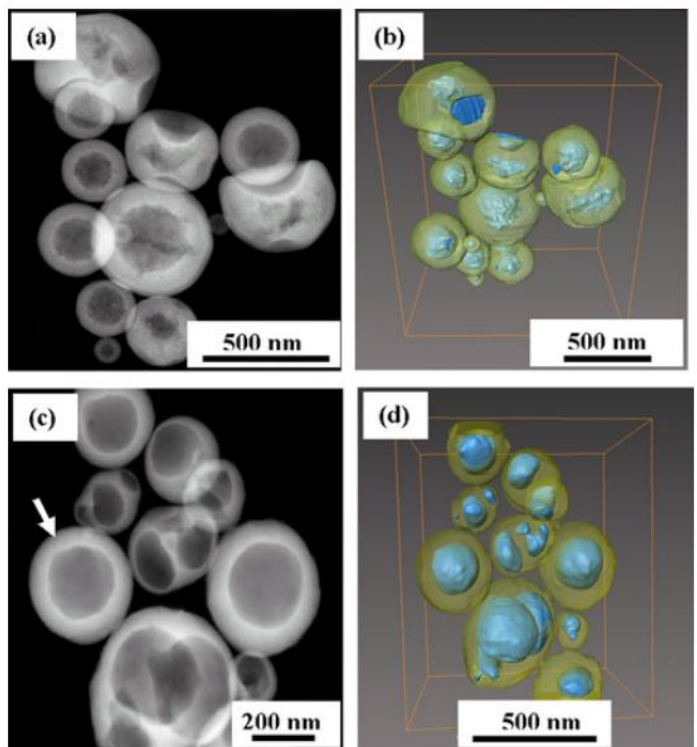
圖三、在 $[001]\text{SrTiO}_3$ 中常見晶界形貌的 HRTEM 影像 (a) straight and atomically flat (Type A), (b) straight and disordered (Type B), (c) stepped (Type C) and (d) curved (Type D)。



圖四、實驗及模擬(在底部)缺陷 HRTEM 影像比對，此晶界顯示出完整的 SrO 界面(如箭頭所示)再加上鈦及氧原子的空缺。



圖五、二氧化鈰顆粒(由醋酸鈰先驅物而來)的三維電子全像術 (electron tomography) 於掃描式穿透電子顯微鏡 (Scanning transmission electron microscopy) 上之高解度環狀暗場影像 (High angle high angle annular dark field, HAADF) 影像，不同轉角(a) -70° (b) -50° (c) -30° (d) -10° (e) 10° (f) 30° (g) 50° (h) and 70° 的影像)。



圖六(a) HAADF 影像(at 0° tilt)及(b)三維影像重構之二氧化鈰顆粒(醋酸鈰先驅物)模型(c) HAADF 影像(at 0° tilt)及(d)三維影像重構之二氧化鈰顆粒(硝酸鈰先驅物)模型 Ce \cdot 在(b)及(d)中黃色部分及藍色部分分別代表顆粒及空孔。