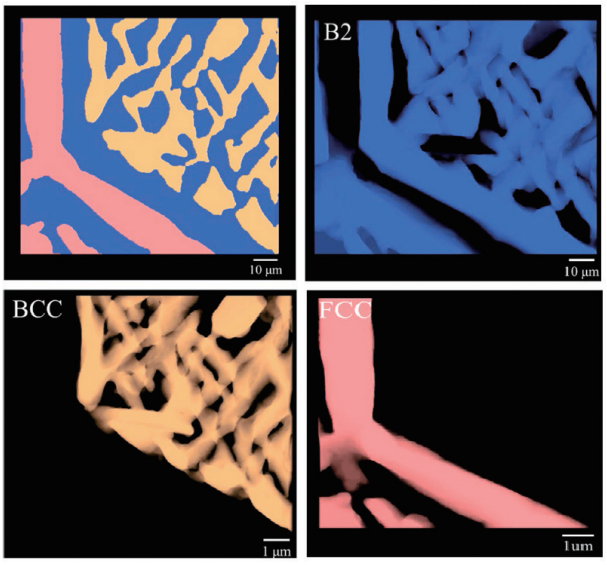
穿透式 X 光顯微鏡在 AlCoCrFeNi 高熵合金抗腐蝕研究的應用

由清華大學材料系葉均蔚教授所提出的高熵合金理論，透過等莫耳多主元素固溶以達到熵值的最大化，可形成比一般合金更優異的機械性質，然而對於高熵合金抗腐蝕特性的相關研究，目前仍相當缺乏。由中興大學材料系顏秀崗教授主導，與清華大學材料系張守一教授、交通大學材料系羅友杰教授、及本中心實驗設施組王俊杰博士合作，利用 TLS BL01B1 光束線的穿透式 X 光顯微鏡，定量分析不同退火溫度下 AlCoCrFeNi 三相高熵合金的微結構與抗腐蝕特性。研究結果發現，在 0.5 M 硫酸的腐蝕實驗中，其 B2 相將優先被腐蝕，而晶界的 FCC 相和迷宮狀的 BCC 相則具有較佳的抗腐蝕特性。搭配第一原理之計算，發現在 B2 相的氫氧離子吸附能最低而優先被酸腐蝕，其模擬結果與實驗一致。此外，不同退火溫度的效應則是在合金表面形成 $Co(OH)_3$、$Fe(OH)_3$、以及 $Cr(OH)_3$ 等低溶解度常數乘積 (k_{sp}) 的均勻鈍化膜，將直接影響高熵合金的抗腐蝕特性。



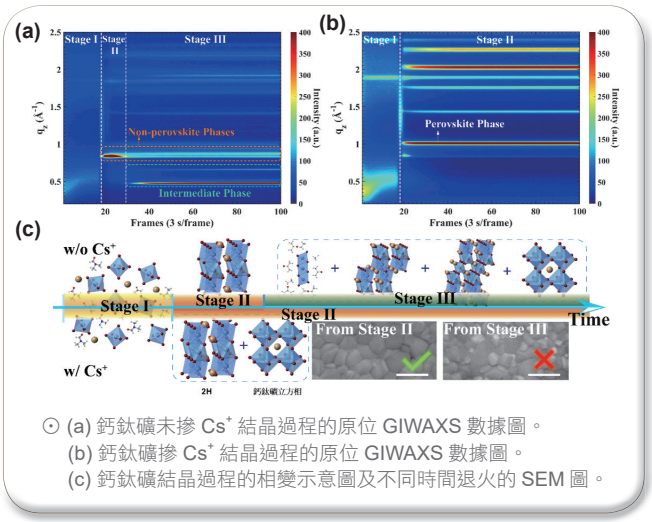
⊙ AlCoCrFeNi 高熵合金在 1100° C 退火 2 小時後，穿透式 X 光顯微鏡的 3D 電腦斷層掃描微結構。其中藍色、黃色、以及粉紅色分別代表 B2、BCC 和 FCC 相的三維結構。

參考文獻：

C.-C. Yen, H.-N. Lu, M.-H. Tsai, B.-W. Wu, Y.-C. Lo, C.-C. Wang, S.-Y. Chang, and S.-K. Yen*, "Corrosion Mechanism of Annealed Equiatomic AlCoCrFeNi Tri-phase Highentropy Alloy in 0.5 M H_2SO_4 Aerated Aqueous Solution", Corros. Sci. **157**, 462 (2019).

以臨場掠角入射的廣角 X 光散射研究如何操控多元混合鈣鈦礦的結晶過程

多元混合鈣鈦礦 $Cs_x(FA_{0.83}MA_{0.17})_{1-x}Pb(I_{0.83}Br_{0.17})_3$ 太陽能電池已取得很高的光電轉換效率，然而其複雜的結晶過程仍尚待研究。香港中文大學物理系路新慧教授的研究團隊與本中心實驗設施組鄭有舜博士、蘇群仁博士共同合作，使用 TLS BL23A1 光束線研究，並揭示多元混合鈣鈦礦 $(FA_{0.83}MA_{0.17})_{1-x}Pb(I_{0.83}Br_{0.17})_3$ 在旋塗過程中將經歷三個階段 (圖 a) 中 (I) 前驅體溶液、(II) 黃相 (2H)、(III) 複合相包括六方相 (4H、6H)、MAI-PbI_2-DMSO 中間相和鈣鈦礦立方相。結合在不同階段對薄膜退火製備出的器件性能和一系列非原位特徵，發現第二個階段 (2H) 是一個 “退火窗口” ：薄膜應在 “退火窗口” 內即時退火，以避免在鈣鈦礦結晶過程中形成六方相 4H、6H，進而實現良好的器件性能 (圖 c)。值得一提的是，Cs^+ 的摻入可以調控鈣鈦礦的結晶過程，結合密度泛函理論計算發現，Cs^+ 可以通過在動力學和熱力學上促進鈣鈦礦立方相的形成來繞過階段 III 中的六方相 4H、6H (圖 b)，進而顯著擴展退火窗口。



⊙ (a) 鈣鈦礦未摻 Cs^+ 結晶過程的原位 GIWAXS 數據圖。
(b) 鈣鈦礦摻 Cs^+ 結晶過程的原位 GIWAXS 數據圖。
(c) 鈣鈦礦結晶過程的相變示意圖及不同時間退火的 SEM 圖。

參考文獻：

M. Qin, K. Tse, T.-K. Lau, Y. Li, C.-J. Su, G. Yang, J. Chen, J. Zhu, U.-S. Jeng, G. Li, H. Chen, and X. Lu*, "Manipulating the Mixed-Perovskite Crystallization Pathway Unveiled by In Situ GIWAXS", Adv. Mater. **31**, 1901284 (2019).

以臨場 X 光能譜研究金屬與半導體界面在光催化水分解反應產生的自適應層

在水分解全反應中，氧化電極端的氧氣產生反應為主要的動力學瓶頸之一。為了降低水分解半反應的外加過電壓，了解新型光電極表面催化材料的光激活電荷載體在表面催化劑及吸光半導體界面處的動力學行為是核心問題之一。台灣大學化學系陳浩銘教授及本中心實驗設施組詹丁山博士、李志甫博士共同合作，在 TLS BL17C1 光束線架設並進行臨場實驗 (圖 a)，研究表面催化劑鎳金屬及矽吸光半導體在水分解反應中的電子結構變化。根據硬 X 光電子能譜 (圖 b) 及 (圖 c)，鎳金屬在低電壓且照光條件下有顯著的氧化價數變化。此外，自適應生成的鎳矽介面結構也僅在照光條件下，隨著水氧化產生反應過程中生成 (圖 d)。