

个人简介

基本信息

姓名：李冰

性别：男

出生年月：1989.1

导师：孙弘

所在单位：上海交通大学

研究方向：第一性原理人工超硬材料研究

教育经历：

2007-2011 上海交通大学物理系 本科 应用物理学

2011-现在 上海交通大学物理与天文系 博士在读 凝聚态



学习与科研工作简介：

科研工作方面，研究方向为使用第一性原理计算模拟，研究并寻找新型超硬材料。博士阶段主要研究重心为纳米孪晶超硬材料和过渡金属硼化物超硬材料。学习方面，现已以优异的成绩完成博士阶段全部学业、

主要科研成果：

在纳米孪晶超硬材料方面，自 2013 年以来，通过在材料中引入纳米孪晶面，已有小组合成出了两种硬度超过金刚石的材料。该结果对于现有纳米材料 Hall-Petch 理论提出了巨大挑战，迫切需要一个合理的解释。我们小组通过构建自有模型，计算发现在形变过程中，纳米孪晶面会产生规律性移动，致使材料像橡皮筋一样“越形变越硬” (strain-stiffening)，成功修正了材料领域的一块误区。该文章发表在 Nature Communication 上。B. Li, H. Sun, C. F. Chen, "Large Indentation Strain-Stiffening in Nano-twinned Cubic Boron Nitride", **Nature Commun.**, **10**, 1038 (2014).

在过渡金属硼化物超硬材料方面。自 2005 年以来，Science、PRL 等各大顶尖杂志都报导称过渡金属硼化物可能是一类成本低廉的新型超硬材料。而 CrB_4 以及 FeB_4 被认为是这类材料中最有潜力成为超硬材料的构成，甚至 FeB_4 被 PRL 报道称不但是一类电-声子相互作用的铁基超导，并且硬度达 60GPa。我们小组通过在计算中考虑压头产生的正压力作用，成功地解决了 CrB_4 硬度的理论预测结果与实验测量结果相差几十 GPa 的问题，同时发现 FeB_4 的理论硬度只有 17GPa，与最近的实验结果相当吻合。并总结相关研究成果，提出过渡金属硼化物很难形成硬度超过 40GPa 的超硬材料这一通用性结论。文章都发表在 PRB 上。B. Li, H. Sun, C. F. Chen, "Fundamental constraints on the strength of transition-metal borides: The case of CrB_4 ", **Phys. Rev. B** **87**, 174106 (2013). B. Li, H. Sun, C. F. Chen, "First-principles calculation of the indentation strength of FeB_4 ", **Phys. Rev. B** **90**, 014106 (2014).