



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

E04-先进凝固科学与技术

E04-Advanced Solidification Theory and Technology

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



E04-先进凝固科学与技术

分会主席：李金山、翟启杰、王同敏、陈豫增、卢一平

E04-01

轴承钢凝固与链式制备技术

李殿中

中国科学院金属研究所

摘要内容：报告从高品质特殊钢材料入手，研究了特殊钢到高端轴承的链式制备技术，包括微量稀土特殊钢材料研发，高纯净高均质钢锭凝固与制备，套圈锻轧和热处理，轴承精密加工，装配评价，以及小批量示范应用等；展望了 AI 赋能特殊钢设计、高效制备和工艺寻优等；总结了机床轴承、盾构机轴承、发动机轴承等关键节点的制备技术，包括组织性能调控与残余应力控制等，以及国产主轴承的示范应用效果。

E04-02

PMO 对高合金钢凝固组织的影响及其应用探讨

翟启杰

上海大学先进凝固技术中心

摘要内容：高合金钢合金含量高，碳化物发达，其凝固组织，特别是碳化物和宏观偏析调控一直制约着高合金钢质量的提升。报告人及其团队原创了脉冲磁致振荡（简称 PMO）凝固组织细化技术，并已经成功应用于多家冶金企业连铸生产。PMO 技术通过脉冲电磁效应促进金属液形核并形成结晶雨，从而细化金属凝固组织。本文介绍了报告人及其团队近期将 PMO 技术应用于高合金钢凝固组织调控的研究进展，并探讨了该技术在冶金生产中应用的相关工艺及其前景。

E04-03

面向应用的高性能铸造镁合金及关键技术

蒋斌

重庆大学

摘要内容：当前，新能源电动汽车的整车重量明显超过同等尺寸的燃油车。汽车零部件轻量化已成为电动汽车行业的迫切需求。作为地球上最轻的结构材料，镁合金受到了电动汽车制造商的广泛关注。汽车用镁合金铸件的材料设计、制造工艺、耐蚀与连接等多个关键技术取得了重要进展，实现了材料-工艺-装备的一体化，已成功应用于多种大型复杂汽车轻量化构件，如仪表盘支架、前端模块、电池包壳体等，与同类型铝合金铸件相比，镁合金构件可以实现 20-30% 的有效减重。

E04-04

超高强韧钛合金的跨尺度模拟与高通量实验

陈瑞润

哈尔滨工业大学

摘要内容：超高强韧钛合金在航空航天和国防等领域有重大需求，传统“试错式”研究方法和“强韧反向增长”的矛盾，导致超高强韧钛合金的研发过程效率低且碎片化。报告展示了通过电磁冷坩埚连铸高通量技术，再进行热变形和热处理（固溶+时效），结合跨尺度数值模拟，构造多层次耦合的显微组织，实现超高强韧化。详细介绍了基于跨尺度模拟的成分优化方法以及连铸工艺、热变形工艺、热处理工艺对高通量材料制备的影响规律。深入探讨了组织变化和形成的热力学和动力学机制、元素相互作用及强韧化机理，并揭示了多层次耦合的显微组织与强韧化的相关性。为超高强韧钛合金的成分设计和强韧性能调控提供理

论基础和实验依据，提升我国的钛产业水平。

E04-05

镍基高温合金定向凝固过程传热行为研究

侯新梅

北京科技大学碳中和研究院

摘要内容：航空飞机涡轮叶片作为推动航空发动机发展的核心驱动力，其制备技术直接决定了发动机性能极限。随着推重比要求的提升，叶片结构复杂化导致缺陷控制难度剧增，报废率居高不下。缺陷形成与定向凝固过程中的复杂传热行为密切相关。受限于传热过程的复杂性，传热数据难以直接获取，且当前工艺优化依赖于经验试错，造成资源严重浪费。因此，基于叶片定向凝固传热机制揭示，提出缺陷生成抑制新策略，对实现叶片高效制备至关重要。针对上述难题，本项目针对某牌号单晶高温合金定向凝固过程，构建基于修正的界面换热系数的凝固传热模型，使模拟精准度提高 20%。通过改变型壳厚度（3, 6, 8mm）、铸件结构参数（1.2, 4.1, 16mm），结合数值模拟与物理实验，系统解析并量化型壳/合金界面传热行为对缺陷形成的作用机制，构建了传热条件-缺陷分布的关联模型。此外，通过多工艺参数的交叉组合传热模拟与浇注实验构建了数据库，揭示了定向凝固过程中传热行为对缺陷形成的作用机理，助力精密铸造工艺优化策略的迭代升级，为镍基高温合金复杂构件的高品质制造提供了重要的理论参考。

E04-06

AZ91D 镁合金复杂薄壁构件半固态触变射铸成形研究

姜巨福

哈尔滨工业大学

摘要内容：本文聚焦于 AZ91D 镁合金半固态触变射铸成形技术，对复杂薄壁件进行成形。该工艺可提升构件的质量与性能，避免充型不良、气孔、缩松等缺陷，确保成品率；并通过热处理工艺，进一步提升产品性能。通过正交实验法，分析了成形参数对 AZ91D 镁合金半固态触变射铸汽车导航仪支架的组织性能的影响，最优参数为：触变射铸温度 605°C、模具温度 240°C、射铸速度 2.25m/s、射铸压力 15MPa，该参数下的性能为：抗拉强度 256MPa，屈服强度 152MPa，延伸率 6.9%，热处理后，抗拉强度 287MPa，屈服强度 191MPa，延伸率 4.9%。利用半固态触变射铸成形的 AZ91D 镁合金笔记本外壳，初始性能为：抗拉强度 283MPa，屈服强度 185MPa，延伸率 7.1%，通过控制变量法，对热处理参数进行探究，得到最优参数为：固溶温度 380°C、固溶时间 0.5h、时效温度 180°C、时效时间 4h，该参数下性能为：抗拉强度 351MPa，屈服强度 201MPa，延伸率 6.5%。触变射铸 AZ91D 镁合金复杂薄壁产品平均晶粒尺寸为 6-15 μm ，这是复杂薄壁件适用于半固态触变射铸工艺的佐证；产品主要强化相为 Mg₁₇Al₁₂，在热处理后弥散分布，与成形过程中产生的大量位错、层错、孪晶的协同作用保证其抗变形能力，进而提高材料性能。半固态触变射铸成形技术凭借其在提升镁合金性能的卓越潜力，已成为镁合金复杂薄壁构件制造的重要工艺。

E04-07

以凝固为起点的纳米颗粒调控镁合金微观组织及高抗疲劳性能

姜启川，杨宏宇，董柏欣，张鑫，邱丰*

吉林大学材料科学与工程学院

摘要内容：针对镁合金疲劳性能低的关键瓶颈问题，以凝固为起点构建镁合金高抗疲劳损伤特性微观组织。采用自主研发的“纳米颗粒高效调控镁合金微观组织技术”，通过向镁合金熔体中引入微量纳米颗粒并结合热挤压和一步退火工艺，开发出微量纳米颗粒增强 AZ91 型材。微量纳米颗粒调控实现了高密度晶界/小角晶界，弱化织构，弥散细小析出相/纳米析出相和高密度位错；应力控制拉压疲劳极限强度(126MPa，应力比 R=-1)超过 2024 铝合金，130MPa 时疲劳寿命提高 11 倍。进一步研究了微量纳米颗粒增强镁合金微

观组织及其演变对疲劳服役行为的影响规律，揭示纳米颗粒增强镁合金高抗疲劳特性微观组织强化效应对延缓疲劳应力集中/促进应力卸载从而提高裂纹萌生阈值，以及降低裂纹尖端应变累积损伤、提高抗损伤能力和裂纹稳态扩展阻力的机制，揭示纳米颗粒增强镁合金微观组织协同强化疲劳性能机制。实现高抗疲劳微量纳米颗粒增强镁合金可控制备，突破通过简单工艺调控镁合金高抗疲劳损伤微观组织和高效强化疲劳性能的技术难题。

E04-08

极端凝固条件下非平衡动力学相图初探

胡侨丹

上海交通大学

摘要内容：在先进制造技术（如激光增材制造和太空制造）中，极端凝固过程放大了热力学非平衡条件下相选择预测的挑战。通过气动悬浮无容器处理技术，我们研究了伪二元 $\text{MgTiO}_3\text{-TiO}_2$ 体系的凝固行为。实验发现了一种异常的跨相区选择现象：热力学稳定的 MgTi_2O_5 相在析出过程中受到动力学抑制。这种选择源于 MgTi_2O_5 的形核动力学势垒，过冷和成分波动的耦合作用使得临界晶核形成不稳定。通过将成分和温度相关的界面能动力学整合到经典形核理论中，我们建立了定量预测异常相选择区域的框架。该方法构建了该系统的第一个非平衡动力学相图，并获得了实验验证，解决了平衡预测与非平衡实验结果之间长期存在的差异。本研究所提出的方法建立了一种相选择预测的通用范式，为极端非平衡凝固条件下的微观结构和相控制提供了变革性的见解。

E04-09

新型 Al-Mn 多相微结构抑制 Mg-Al 系低合金铸轧偏析与耐蚀提高机制

查敏

吉林大学

摘要内容：多元少量铸轧 Mg-Al-Mn 系合金具有高熔点 Al-Mn 相和界面偏聚等组织特征，有望制备低成本高性能宽幅板材。然而，该体系面临两大挑战：一是铸轧过程中糊状区变形和溶质截留易诱发宏、微观偏析；二是粗大 Al-Mn 相引起强微电偶腐蚀，严重制约工业应用。为此，本研究提出 Ca-Y 微合金化策略，引入核壳结构和依附生长等多相结构，协同弱化偏析并提升耐蚀性。通过液-固不完全包晶反应，基体中原位生成 $\text{Al}_2\text{Ca@Al}_8\text{Mn}_4\text{Y}$ 核壳颗粒，有效细化 Al_2Ca 共晶，降低多物理场梯度，阻碍 Al-Al 原子对形成，从而减弱铸轧偏析。同时，利用固态相变调控局域溶质场析出次序，引入 $\text{Al}_8\text{Mn}_4\text{Y-Al}_8\text{Mn}_4\text{Ca}$ 共析出相，该多相界面通过增强氢吸附、促进氧化物形核和限制电荷转移，减缓阴极析氢反应，提高合金耐蚀性。本研究系统揭示了核壳与依附生长多相结构的形成条件及其对偏析与腐蚀行为的协同调控机理，为弱偏析、高耐蚀铸轧镁合金的组织设计提供了新思路。

E04-10

自主开发相场软件 PFCSU 及其在合金凝固过程中的应用

张利军

中南大学

摘要内容：材料制备与服役过程中微结构演变的定量描述是实现材料设计的核心。经过近二十年的高速发展，相场方法已成为模拟材料微结构演变的关键手段。本报告首先概述了有限界面耗散相场模型及其最新进展，并介绍了自主开发相场软件 PFCSU 的发展历程。PFCSU 不仅集成了有限界面耗散相场模型，还融入了最新的合金形核模型、高效的 CPU-GPU 异构并行算法，以及多样化的 CALPHAD 数据库耦合方式。最后，通过将 PFCSU 应用于不同合金在低速凝固（铸造）和快速凝固（增材制造）过程中的微结构演变模拟，并将模拟结果与实测数据进行对比，验证了该软件在定量模拟多元合金复杂微结构演变方面的

高效性与准确性。

E04-11

磁场下定向凝固 CuFeCo 合金的凝固行为研究

王军*, 孙梓琛, 李金山

西北工业大学凝固技术全国重点实验室

摘要内容: CuFeCo 是一种具有相分离特性的中熵合金, 本文研究了强磁场下液态金属冷却定向凝固 CuFeCo 合金的凝固行为。获得了相分离后 FeCo-rich 相与 Cu-rich 相定向排列的弥散组织, 兼具良好的磁性能和力学性能。实验研究表明, 定向凝固抽拉速度增加使组织发生胞状晶-胞枝晶-纤维枝晶转变, 提高了 FeCo-rich 相体积分数, 使饱和磁化强度 M_s 增加, 磁场强度增加促进 CET 转变, 使胞枝晶形态提前, 且对铁磁性相产生更强定向作用, 固液界面更加平直, 施加磁场在特定参数下能调控 FeCo-rich 相 $\{100\}<001>$ 织构, 最高占比达 74.3%, 易磁化织构 $<001>$ 的增加使磁化速度得到显著提升。同时, FeCo-rich 相与 Cu-rich 相界面处产生的 HDI 硬化作用扩大了对力学性能的调控窗口, 通过定向凝固抽拉速度和磁场强度对两相界面分布调控, 获得抗拉强度 650MPa, 延伸率 8% 的优异力学性能, 相比无磁场下非定向凝固试样分别提高 40% 和 100%。磁场下定向凝固制备的力学和磁学性能兼具的材料扩大了难混溶中熵合金的应用范围, 同时为设计新型结构功能一体化材料提供了全新平台。

E04-12

高端装备用大尺寸低偏析钢

曹艳飞

中国科学院金属研究所

摘要内容: 大尺寸特殊钢的宏微观偏析及粗大碳化物是典型的凝固缺陷, 基于多尺度模拟计算、实验表征和工程应用: 1) 建立了耦合夹杂物浮力的多相流宏观偏析新模型, 提出均质钢的临界氧含量判据和通道偏析诱发的瑞利数无量纲修正判据, 阐明氧致偏析新机制, 拓展了经典偏析理论。2) 揭示了稀土提升钢的宏微观均质性和抑制粗大共晶碳化物的内在机制, 发现固溶稀土偏析于晶界的直接证据, 为低氧稀土均质钢研制提供理论依据。3) 基于上述理论创新, 开发了低氧低偏析、稀土均质钢和偏析模拟仿真关键共性技术, 实现了低偏析特殊钢在某舰船筒节、核电大封头、某型号航空发动机主轴承上的成功应用。同时, 与国际著名的法国电力集团合作, 在大构件碳偏析这一世界性难题上取得了重要进展, 成功为百吨级核电大锻件碳偏析事故追根溯源, 提高了国际影响力。

E04-13

Cu-Cr-Zr 合金表面激光熔覆 GH3625 高温合金的非平衡态冶金行为

赵若涵, 郭乾应*, 王祖敏, 刘永长

天津大学高性能轧辊材料与复合成形全重实验室

摘要内容: 铜合金/镍基高温合金异质材料因其兼具优异强度与高热导率的特性, 在航空航天领域得到广泛应用。这类构件的传统制备方法通常是铸造成型-机械加工-组装的减材制造, 成本较高且效率较为低下。直接能量沉积 (direct energy deposition, DED) 在异质材料制造方面具有包括高精度、高效率以及低浪费等优势, 为异质材料的制备提供了一种新方法。然而现有沉积方法常常采用蓝-绿色激光器或在铜合金表面添加中间层的方式去解决铜合金的高红外激光反射率, 存在低效、工艺较为繁琐, 违背了增材制造技术的高效性。本研究基于一种基板预热和引入中间层的新型 DED 制备策略, 成功克服了铜表面反射壁垒, 降低了异质材料间物理性质的差异, 实现了性能良好的铜合金/镍合金异质材料的制备。对铜合金/镍合金界面区域的微观结构演变以及元素分布行为进行讨论分析, 结合非平衡凝固计算, 进一步分析了成分过冷、马兰戈尼对流等现象对非平衡态凝固过程的作用机制, 为基于非平衡态冶金的异质材料体系制备提供了新

思路。

E04-14

相分离合金凝固组织演变及调控

江鸿翔*, 赵九洲, 张丽丽, 何杰
中国科学院金属研究所

摘要内容: 相分离合金凝固过程中发生的液-液相分离现象有助于形成特征差异较大的两个液相, 这为研制弥散型组织或核/壳结构的原位金属基复合材料提供了一种新的途径。然而, 该类合金凝固过程中极易形成偏析型凝固组织, 这严重限制了相分离合金凝固理论的研究和工业制备技术的研发。近几十年来, 人们非常重视对相分离合金凝固理论的研究, 自上世纪七十年代起便开始在航天飞机上开展了相分离合金凝固实验, 试图利用空间微重力条件避免重力导致的相偏析, 获得弥散型凝固组织。此后, 人们分别在空间和地面对相分离合金开展了大量的凝固实验, 并结合实验对相分离合金凝固组织形成过程开展了深入的建模与模拟研究。本研究探索了电磁场及微合金化处理对相分离合金凝固过程及组织的影响, 以期对相分离合金凝固组织的调控提供指导。

E04-15

Fe-Mn-Al-C 轻质钢中的纳米析出调控与强塑性协同研究

张鉴磊*, 宋长江, 翟启杰
上海大学

摘要内容: 随着轻量化成为汽车产业发展的重要趋势, 兼具低密度和优异力学性能的 Fe-Mn-Al-C 轻质钢受到广泛关注。纳米强化相析出是影响轻质钢力学性能的关键因素。其中, κ -碳化物 ($(\text{Fe}, \text{Mn})_3\text{AlC}$, E21 结构) 是轻质钢中最重要的纳米强化相之一, 纳米尺寸的 κ -碳化物析出可以在显著提高轻质钢强度的同时, 维持良好的塑性。但是, κ -碳化物的析出和长大会显著降低轻质钢的应变硬化能力, 严重限制轻质钢的力学性能的进一步提升。

一些研究尝试通过合金化策略在轻质钢中形成多相析出结构, 利用硬质析出相改善轻质钢的应变硬化能力, 但是一些微合金碳化物或 B2 相的形成不可避免地会降低轻质钢的塑性。本研究发现, Mo 元素的添加不仅可以调控 κ -碳化物的析出行为, 延缓其长大速率, 还能在轻质钢中形成 Mo-C 对的短程有序结构, 实现轻质钢中纳米强化相的合理调控, 使轻质钢获得优异的综合力学性能。本研究详细分析了这种短程有序结构的析出机制与强化机理, 为轻质钢力学性能的优化提供了新的路径。

E04-16

Cu-xAl/1010 钢双金属复层材料制备及摩擦性能研究

彭博
大连理工大学

摘要内容: 与钢复合是提高轴承材料强度和韧性的常用方法。本研究采用连续固/液复合法制备了 Cu-xAl/1010 钢 ($x=0, 6, 7.5$ 和 9) 的双金属层状复合材料 (BLCs), 并获得了四种结合良好且无界面缺陷的 BLCs。研究了不同铝含量的 Cu-xAl/1010 钢双金属复层材料的界面微观结构演变和结合机理。结果表明, 在纯 Cu/1010 钢 BLC 中形成了平直的冶金结合界面, 而在 Cu-7.5Al (C61000)/1010 和 Cu-9Al (C61800)/1010 钢 BLC 中, 1010 钢一侧出现了由铁和铝组成的扩散层。相反, 由于晶界扩散, Cu-6Al (C60800)/1010 BLC 中形成了 Cu-Al-Fe 过渡层。拉伸剪切试验结果表明, 界面始终结合良好, 大变形后断裂发生在 Cu-xAl 侧。这种足够牢固界面的形成归功于扩散层以及铜和铁之间紧密的原子间结合。研究还揭示了三种铜铝合金 (C60800、C61000 和 C61800) 在不同速度和载荷下的摩擦学特性。结果表明, 随着 Al 含量的增加, 耐磨性也随之增加, 并且由于 AlCu_3 相的形成, 磨损机理从粘着磨损转变为磨粒磨损。

这些结果为双金属的工业制备提供了重要指导。

E04-17

激光选区熔化高温合金的微结构设计和性能研究

李金国

中国科学院金属研究所

摘要内容：激光选区熔化技术由于其具有快冷快凝和设计自由度高的特点，在高温合金复杂构件制备方面具有独特的优势，内部微观组织定制与特定的外部形状叠加可显著提高构件功能和机械性能。在本报告中，以航空发动机空心叶片为例，根据其三种特征部位（叶身，榫头和叶根）的服役温度定制相应的微观组织。其中包括面向高温服役的定向凝固组织，中温服役下的层状结构组织和中低温服役的细晶组织。结合有限元模拟和单晶种子实验，揭示了熔池内不同方向主导凝固的驱动力，为微结构进一步设计指明了方向。

E04-18

基于高通量计算和机器学习的高温合金成分设计和性能预测

惠希东

北京科技大学

摘要内容：基于高通量计算和机器学习开展了高温合金的成分设计和性能预测：（1）通过机器学习构建了单晶镍基高温合金显微组织与蠕变持久寿命之间的关系。表现最佳的特征量组合，如 γ 相、TCP 相含量和 TS 等与以往经验认为重要的特征量有很好的 consistency。并结合高通量热力学相图计算扩展预测了近 4 万个合金成分的持久寿命，对单晶高温合金成分设计具有指导意义；（2）采用不同的机器学习模型建立了 DZ466 高温合金显微组织与持久寿命之间的关系，其中 SVR 模型可以快速准确地预测持久寿命；（3）基于高通量相图热力学计算和目标性能导向的筛选判据，从 6 万多个合金成分中筛选出了具有优异焊接性能的 800°C 机匣用等轴晶高温合金；（4）运用 FCNN 模型预测了 K492M 合金的剩余持久寿命，平均误差为 1.9h，准确率高达 98%。

E04-19

粒子改性镁合金的组织与性能调控

郭恩宇*, 康慧君, 陈宗宁, 张至柔, 王同敏

大连理工大学

摘要内容：镁合金是当前最轻的金属结构材料，广泛应用于空天、通讯和交通运输装备零部件的制造。镁合金要实现大规模工程应用，亟需开发新材料和新工艺以提升其强塑性。本研究报告近些年本课题组在陶瓷粒子改性镁合金方面做的一些研究工作，包括：（1）微纳 SiC 陶瓷颗粒增强的 ZK60/AZ 系镁合金复合材料研究；（2）晶种陶瓷 TiB₂ 粒子改性的 AZ91 铸造合金研究；（3）晶种陶瓷 TiB₂ 粒子在 AM60B 镁合金中的组织调控研究。报告将从材料制备、工艺优化与凝固组织调控机理等方面系统介绍相关工作，重点聚焦陶瓷粒子对镁合金组织与性能的调控机理。

E04-20

增材制造高熵合金凝固偏析-位错自组织结构的异常位错强化行为与机理

何峰

西北工业大学

摘要内容：传统位错强化理论认为，加工硬化材料中高密度位错在提高强度的同时必然导致塑性下降，

这一“强度-塑性倒置”关系已成为材料强韧化设计的固有瓶颈。本研究采用增材制造技术，构建了偏析修饰的高密度位错结构，显著提升了合金强度而不损害塑性，打破了位错强化必然牺牲塑性的教科书传统认知。通过系统研究增材制造凝固偏析-位错自组织结构的异常位错强化行为与机理，揭示了偏析-位错自组织结构作为位错源的本质，该结构还与滑移位错交互作用，显著增强位错增殖及存储能力，进而促进变形亚结构的动态细化，使增材制造合金展现出“高位错密度-高塑性”协同。在位错强韧化的基础上，研究进一步通过调控偏析-位错自组织结构与再结晶及析出行为的耦合作用，在增材制造合金中成功诱导了高密度多尺度退火孪晶，实现了基于线(位错)、面(界面)、体(析出)多层级晶体缺陷的材料强塑性协同优化，为高性能金属材料的设计和开发提供了新思路。

E04-21

合金熔体短程序结构研究及其应用

林晓航

山东大学材料科学与工程学院

摘要内容：本文提出了一种新的热力学统计模型（Wulff cluster model），该模型以熔体的最概然结构为等效体系描述金属熔体内部短程序结构，其中熔体最概然结构外形是由 Wulff 理论决定，内部近似为金属晶体结构。本工作利用密度泛函理论（DFT）与高温 X 射线衍射（HTXRD）实验获得建模的必要数据。经验证，该模型可以合理并且准确的描述纯金属、二元匀晶、共晶以及含金属间化合物的普通二元合金熔体结构。值得注意的是，对于固液两相区附近温度的熔体，模型明确的暗示了形核的过程的发生。在此基础上，与有序结构相关的物理过程可以用以上等效结构代替熔体体系进行研究。本研究以金属熔体粘度为例，阐述了纯金属熔体粘度非阿伦纽斯跃变机理，以及跃变温度的预测及其实验验证。

E04-22

快速定向凝固铁基磁致伸缩材料单晶生长和性能研究

吴煜焯*, 徐一琛, 颜克愚, 牛洁珏, 王敬民, 蒋成保

北京航空航天大学

摘要内容：FeGa 合金具有磁致伸缩性能高、饱和场低、力学性能好等优势，在大潜深潜艇、精密加工等领域有着重要的应用前景。前期研究，采用快速凝固制备的带材实现了 0.2 at.% 稀土原子 Tb 的过饱和固溶，磁致伸缩性能提高了 5 倍。然而，高性能 FeGa 合金要求在快速凝固条件下实现晶体取向生长，获得稀土原子过饱和固溶的非平衡单晶组织。

快速定向凝固技术可结合快速凝固能形成非平衡结构和定向凝固可生长具有特定取向晶体的优势，有望实现材料性能的变革性突破。本文通过以电子束为热源的高能量密度输入结合液态金属多级冷却的高通量热量快速导出的结构，设计出第一代快速定向凝固装备，其固液界面可达 10^6 K/m、熔体冷速可达 10^3 K/s，相比现有定向凝固技术均提高一个数量级以上，可实现在非平衡条件下的晶体生长。

本文通过有限体积法数值模拟构建了快速定向凝固的动态传热模型，探索出具有 $\langle 001 \rangle$ 取向 FeGa-Tb 单晶的生长技术，制备出了一系列成分为 Fe $_{100-x}$ Ga $_x$ Tb $_{0.1}$ 单晶，其中 Fe $_{81}$ Ga $_{19}$ Tb $_{0.1}$ 单晶磁致伸缩性能可达 489 ppm，相比同成分的传统定向凝固制备的材料性能提高了约 60%。通过球差电镜分析和三维原子探针等表征技术，证实了快速定向凝固制备出的微量稀土过饱和固溶 FeGa 单晶材料的非平衡结构。结合第一性原理计算，阐明了过饱和固溶态稀土原子增大磁致伸缩性能的效应机理。

E04-23

高温合金大面积薄壁铸件熔体完整充型挑战分析

何林*^{1,2}, 杜大帆^{1,2}, 熊良华^{1,2}, 董安平^{1,2}, 孙宝德^{1,2}

1. 上海交通大学材料科学与工程学院

2. 上海市先进高温材料及其精密成型重点实验室

摘要内容：高温合金铸件薄壁化是航空与航天装备轻量化的重要途径，当前国外高温合金大面积薄壁铸件最小壁厚约为 1.5mm，我国最小壁厚约为 1.8mm。大面积薄壁铸件壁厚的进一步降低为铸件完整成型带来极大挑战。本文通过实验和模拟手段，分析了高温合金熔体在薄壁空间中完整充型的挑战，结果显示挑战主要来源于大的充型阻力和快的冷却速度。根据哈根泊肃叶方程推导了高温合金熔体在陶瓷型腔中流动产生的粘滞阻力与到型壳壁面距离的关系；结果显示，粘滞阻力大小与到壁面距离成负三次方关系，是熔体充型阻力的主要来源，1.0mm 壁厚的熔体中心最小粘滞阻力仍然可以达到 10 kPa。测试了高温合金熔体与陶瓷型壳界面润湿角，结果显示添加铝酸钴晶粒细化剂可以将高温合金熔体/陶瓷型壳界面的润湿角从 135° 降低至 89°，从而消除界面张力导致的充型阻力。

此外，薄壁型腔中高温合金熔体的比表面积大，冷却速度快。一般认为高温合金熔体中固相率达到 20% 以上熔体就失去流动型。采用 procast 软件模拟了不同厚度高温合金熔体的凝固行为，计算了熔体停止流动时间。结果显示，k4169 合金在熔体充型温度为 1450°C、型壳温度为 1000°C 条件下，熔体从浇注温度冷却至熔体停止流动时温度所需时间随壁厚减小而大幅缩短。壁厚 2.5mm 的熔体需要 11.65s 降低至停止流动温度，但当壁厚降低至 1mm 时，所需时间仅为 2.25s，熔体充型时间缩短了 80%。在薄壁铸件充型过程中，熔体一边充型一边凝固，导致充型距离短。

为改善薄大面积壁铸件充型能力，对比了常规重力铸造和反重力铸造充型特点。结果显示，反重力铸造熔体充型速度平稳可控，平均充型时间短；而常规重力铸造熔体流动速度波动大，容易产生卷气、夹杂等缺陷。因此，认为反重力铸造是大面积薄壁铸件完整充型的有利手段。

E04-24

异质性缓解策略促进析出强化型 FCC/B2 双相高熵合金的强塑性协同提升

贾宇浩

大连理工大学材料科学与工程学院

摘要内容：本研究提出一种新的“异质性缓解”策略，旨在提升析出强化型 FCC/B2 双相高熵合金 (DP-HEAs) 的强延性协同性能，重点解决传统设计中因应变局域化与相界开裂所导致的早期失效问题。尽管 FCC/B2 双相高熵合金可依赖异质变形效应提升强韧性，但在析出强化体系中，更高的强度往往伴随着应变局域化加剧，导致延展性受限。针对高低模量相体积分数差异显著、析出相复杂的双相体系，传统的晶粒细化或相形貌调控手段在改善协同性方面往往效果有限。本工作通过精准的显微组织调控，实现了双相异质性的有效缓解，使延展性提升至原来的两倍，同时显著增强了合金强度。采用微区数字图像相关 (μ -DIC) 技术揭示了双相组织异质性在界面应变分配中的关键作用；结合纳米压痕与多尺度模拟，进一步阐明了异质性削弱与变形协调性提升之间的内在联系。该策略突破了传统手段的局限性，为异性质、异体积分析出强化型 FCC/B2 双相高熵合金的强韧性协同优化提供了全新路径。

E04-25

超声结合定向凝固构建 Mg-Gd-Y 合金周期性非均质结构

翟薇

西北工业大学

摘要内容：非均质结构具有显著的异质强化和背应力硬化能力，在协调金属材料强塑性方面表现出显著优势。本研究将间歇超声施加于 Mg-5.8wt.%Gd-0.6wt.%Y 合金的定向凝固过程，沿温度梯度方向实现了非均质组织的周期性构建。超声作用下，初生 α -Mg 相呈现为与间歇周期一致的周期性等轴晶/柱状晶组织。其中超声开启时，瞬态空化在固液界面前沿产生高达 81 K 的局域过冷，促使等轴晶形核生长，而在超声关闭时，稳定热流作用下细化柱状晶沿着与等轴晶一致的取向保持定向生长。此外，溶质和位错也随着非均质界面表现出周期性分布的特征，其中 Gd 元素在非均质界面的等轴晶一侧富集，溶质含量从静态定向凝固下的 2.9 wt.% 增加至 5.1 wt.%。这是由于声流效应对流传质系数提高了 11%，减小了溶质边界层厚度并导致固液界面前沿溶质富集。由于超声的高频振动作用，已凝固固相尖端糊状区的局域弹性应变

能提高了一个数量级，因此位错聚集于在柱状晶一侧，几何必要位错密度增大为静态条件下的 6.4 倍。

超声调控所得周期性非均质界面的异质强化和背应力硬化促进了变形孪晶的形成并显著提高加工硬化能力，使得合金高温下的抗拉强度与延伸率同步提升，其在 523 K 下的强塑积可达 $4.5 \times 10^3 \text{ MPa} \%$ ，优于均质的等轴晶或柱状晶结构。本研究为非均质结构可控构建和高性能金属材料制备提供了一种新思路。

E04-26

相场和液态成型建模与软件开发

赵宇宏^{*1, 2, 3}

1. 中北大学
2. 北京科技大学
3. 辽宁材料实验室

摘要内容：根据具体问题设计相应的守恒/非守恒相场序参量，构建以序参量为变量的系统热力学自由能函数和演化动力学方程，描述各层级凝固/时效组织，获得相变或组织生长特征，开发相应的 EPhase 相场软件，耦合已有的液态成型宏观过程模拟软件 EasyCast，形成宏观微观一体化特色的系统，指导相应的工程材料设计和工艺优化。

E04-27

Ni3Al 基高温合金中 γ' 相及 M23C6 碳化物析出行为的协调控制

李冲

天津大学

摘要内容：在 Ni3Al 基高温合金的服役过程中， γ' 相和 M23C6 碳化物分别控制着晶内与晶界处的变形（断裂）行为。然而由于二者析出温度接近，且均对冷速具有较高的敏感性，传统固溶处理的一段式冷却制度难以同时获得理想的晶内与晶界组织，制约了该合金的服役性能。

本研究采用两段冷却处理方案，实现了对 Ni3Al 基高温合金中晶内 γ' 相和晶间 M23C6 碳化物的协调控制。其中快速冷却阶段抑制了 γ' 相的粗化，随后的缓慢冷却阶段促进了 M23C6 的析出，晶内与晶界的协调强化大大延长了样品的蠕变寿命。蠕变过程中，晶内形成了拓扑反转组织，蠕变变形受 γ' 相内部反相畴界耦合位错对的运动控制。同时，高密度的 M23C6 对亚结构的运动起到了阻碍作用，抑制了晶界处蠕变孔洞及显微裂纹的萌生。基于上述实验现象，采用理论模型计算了由 γ' 相贡献的临界分切应力、由 M23C6 贡献的晶界障碍应力以及晶界孔洞形核能垒，建立了 Ni3Al 基高温合金中晶内/晶界蠕变抗力与亚/微观结构之间的关系。

E04-28

铝熔体凝固中超声诱导纳米陶瓷颗粒晶内分布研究

刘志伟

西安交通大学

摘要内容：液相复合法制备颗粒增强铝基复合材料具有成本低、适合规模化生产等突出优点，成为铝合金力学性能提升重要选择。然而，铝熔体凝固过程中小粒径陶瓷颗粒易晶界偏聚。一方面造成颗粒增强效果弱化，另一方面严重降低铝合金塑韧性。基于此，本研究在含有纳米陶瓷颗粒铝熔体中引入高强超声，利用超声空化及声流效应诱导更多纳米陶瓷颗粒晶内分布。研究发现，在 α -Al 形核阶段，超声可诱发更多纳米陶瓷颗粒成为有效形核核心；在 α -Al 形核阶段生长阶段，超声可诱发固液界面捕获更多纳米陶瓷颗粒。本研究第一次实验证实超声辅助凝固可有效提高纳米颗粒分散性，并可诱导更多颗粒在 α -Al 晶粒内部分布。纳米陶瓷颗粒在基体内的有效分布对于铝合金综合力学性能的提升至关重要。

E04-29**镍基高温合金增材熔凝过程的多物理场多尺度模拟**

李军

上海交通大学

摘要内容：镍基高温合金激光粉末床熔融过程（LPBF）成形件中极易产生裂纹，是制约增材制造技术在两机热端复杂几何形状构件的高精度成形中发展的瓶颈问题。基于前期对高温合金定向凝固过程中的传热传质、微观组织演变的数值模拟研究，进一步发展了适用于 LPBF 过程的微观组织演变与宏观多物理场传输在“亚晶粒”尺度双向强耦合的数值模型；揭示了高温合金 LPBF 熔凝过程快速冷却及强烈对流条件下溶质元素的动态传输过程以及固液界面形貌的演变过程，从合金元素微观偏析的角度解释了高温合金增材制造的裂纹敏感性；建立了对增材制造微观组织及溶质元素在循环熔化-凝固过程中演变规律的直观认识；为高 γ' 相体积分数高温合金的增材制造工艺设计及优化提供参考。

E04-30**液固界面迁移的分子动力学模拟研究**

王海丰

西北工业大学

摘要内容：近年来，由于快速凝固在诸如增材制造等现代加工技术中扮演关键的角角色，针对快速凝固过程液固界面迁移物理机制的探究已引起了研究者的高度关注。然而到目前为止，有关过冷熔体液固界面迁移的激活行为及合金快速凝固非平衡效应的研究仍存在争议。针对这一问题，本文采用自由凝固模拟技术系统分析了元素种类、溶质含量及晶体取向对液固界面迁移过程热激活行为的影响，明晰了界面原子协同运动、熔体结构及弛豫特征与界面迁移动力学的依赖关系；借助定成分分子动力学模拟方法，深入分析了合金液-固界面迁移过程的自由能耗散行为，并发现完全溶质截留前后的合金液固界面迁移行为，可采用非常数型溶质拖拽系数在统一的动力学约束下进行描述。

E04-31**Effects of electromagnetic fields on horizontal continuous casting of copper alloys hollow billets and strip plate**

Zhiming Yan*, Cunlei Zou

Dalian Jiaotong University

摘要内容：Rotating magnetic field (RMF) of commercial frequency is used in pilot scale of horizontal continuous casting CuNi10Fe1Mn alloy hollow billets. The effect of RMF on solidification structure, element distribution and mechanical properties is studied. The result shows that the formerly inhomogeneous columnar grain structure turns into homogeneous equiaxed grain structure with the application of RMF, the average grain size reduces from 6.1 mm to 0.56 mm and the element segregation is restrained, the tensile strength is increased by 20.3 % and the elongation is improved by 65.7 % compared to those without RMF. Moreover, the action mechanism of RMF is discussed to explain its effect on improving the solidification structure, element distribution and mechanical properties.

Alternating magnetic field of commercial frequency was used during horizontal continuous casting of copper hollow billets. The effects of input current intensity of alternating magnetic field and casting parameters were studied to obtain good quality production. The result shows that the formerly unhomogeneous columnar grain structure turns into homogeneous equiaxed grain structure with the application of alternating magnetic field. Different casting parameters such as casting speed, casting temperature and cooling intensity are attempted to explore best technics to match with the effect of alternating magnetic field. When the input current intensity is 50

A, casting speed is 0.0042 m/s, casting temperature is 1150 °C and cooling intensity is 1m³/h, the tensile strength is increased by 15.9 % and the elongation is improved by 63.8 % compared to those without alternating magnetic field.

In order to improve the quality of tin-phosphor bronze strip plate, imposing alternating electromagnetic field to the horizontal continuous casting process of tin-phosphor bronze strip plate was developed. The results showed that when the alternating electromagnetic field with 50 Hz frequency and 18 A current was imposed, the grain of the tin-phosphor bronze strip plate was obviously refined and the segregation and shrinkage cavity were greatly lightened. The quality of tin-phosphor bronze strip plate was remarkably improved, so the annealing time was shortened from 7 hours to 5 hours, and the service life of graphite mold was extended from 168 hours to 334 hours.

E04-32

同步超声耦合下激光熔丝增材制造微观组织及缺陷调控

刘兴涛¹, 孙东科*¹, 隋大山², 韩青有¹

1. 东南大学机械工程学院

2. 上海交通大学材料科学与工程学院

摘要内容: 激光熔丝增材制造 (Laser wire-feed additive manufacturing, 简称 LWAM) 材料利用率高、成形效率高、设备成本低, 而且对成形件的尺寸基本无限制, 工艺融合了激光加工与传统焊接技术的优势, 具有显著的制造灵活性和设计自由度, 可以高效制造具有复杂结构和大尺寸的金属零部件。由于 LWAM 过程涉及极短时间内金属材料的熔凝过程, 熔池中温度梯度和高速冷却速率等复杂现象不可避免地导致组织粗大、各向异性强, 微观组织常表现为粗大的柱状晶结构。熔池内超高的温度梯度引发粗大柱状晶导致微观组织各向异性, 对流不足导致引发合金元素偏析, 以及复杂热循环引发残余应力累积导致变形和裂纹, 严重制约构件性能与工艺稳定性。针对激光熔丝增材制造过程中的驼峰和未熔合等常见制造缺陷, 实现凝固组织调控、驼峰控制和未熔合缺陷抑制的兼顾, 这极大地限制了激光熔丝增材制造的发展。因此, 探究增材制造过程中的凝固过程及微观组织演变机制并加以控制, 对金属增材制造成形件的力学性能提升及缺陷控制具有重大科学与工程意义。超声场促进熔体均匀化、并通过高频振动增强晶核输运, 增加形核位点, 从而有效促进柱状晶到等轴晶的转变 (Columnar to Equiaxed Transition, 简称 CET), 实现晶粒细化、消除或降低缺陷形成, 减少偏析。此外, 超声在改变沉积层表面形貌和熔池几何形态, 以及提高构件致密度方面也具有显著作用。通过改变超声加载方式及热输入参数, 提升超声的能量利用效率, 可使熔池产生较强的声波流动和微观涡流, 加速气体和夹杂物在熔体中的聚集和脱除, 从而提高合金的净化程度和均匀性, 并且减少凝固缺陷, 这对于改善合金的力学性能和化学稳定性具有积极的影响。

E04-33

TiB₂ 对高压压铸亚共晶 Al-Si 合金偏析带、孔洞和力学性能的影响

刘磊

大连理工大学

摘要内容: 亚共晶 AlSiMnMg 合金经常被应用于高压压铸 (HPDC) 中使用的免热处理材料, 用于净成型制备汽车部件。在本研究中, 对 Al10SiMnMg 和 Al7SiMnMg 合金进行了比较研究, 以探讨 TiB₂ 的添加对高压压铸中共晶偏析带和孔洞演变的影响。结果表明, TiB₂ 的添加可分为两方面的影响。一方面, TiB₂ 可显著增加在料筒中形成的预结晶 (ESC) 的面积分数; 另一方面, TiB₂ 可细化在模腔中成核的 α -Al 晶粒 ((α -Al)II 晶粒)。这种双重效应极大地影响了型腔中固液混相的流变行为, 前者会引起孔洞的增加, 后者却有利于降低孔洞。微观组织表征证实, 在 Al10SiMnMg 合金中, 偏析带变得模糊, 孔隙率降低; 而在 Al7SiMnMg 合金中, 偏析带基本消失, 并出现较大的孔洞。因此, 加入 TiB₂ 后, Al10SiMnMg 合金的机械性能得到改善, 而 Al7SiMnMg 合金的机械性能则受到损害。这项研究为高压压铸 (HPDC) 中

缺陷的调控提供了新的见解。

E04-34

浇注温度及预制体结构参数对 WC/Fe 基复合材料有限元模拟与复合效果的影响

杨林, 李祖来*, 张飞, 吴迪, 韦贺, 山泉

昆明理工大学

摘要内容: 为了解决液态金属浸渗法制备陶瓷颗粒 Fe 基表层复合材料复合层薄、易剥落和磨损过程不稳定等问题, 制备了不同浇注温度、不同孔数量的预制体, 并采用熔渗铸造法制备了碳化钨颗粒增强高铬铸铁 (HCCI) 复合材料。为深入了解浇铸温度及三维结构预制体对 WC/高铬铸铁基复合材料的影响, 通过 Procast 对在浇注温度为 1425、1450、1475、1500、1525、1550、1575、1600°C 下及单孔、双孔和三孔结构预制体制备复合材料的应力场、温度场及凝固行为进行了预测。研究计算表明, 在不同浇注温度下预制体与基体的温度分布有所不同, 当温度升至 1575°C 时, 预制体周围的温度变化曲线最为平缓, 在凝固过程中不易产生激冷现象。随着浇注温度的升高, 预制体表面的应力分布情况呈现先升高后降低的趋势, 当浇注温度为 1575°C 时, 预制体表面所产生的应力最小值为 703.2MPa, 且分布均匀。但随着浇注温度继续升高, 预制体表面的 WC 陶瓷颗粒完全反应溶解, 由于温度过高, 复合区在凝固阶段温度降低过快, 导致与基体产生较大温差, 应力急剧增加。通过实验验证, 浇注条件为 1575°C 时, 预制体中的 WC 陶瓷颗粒和铁基体在铸造过程中扩散形成良好结合的界面层, 不同预制体孔结构数量所产生的应力分布存在显著差异。三孔结构的预制体对金属液的缓流效果最为明显, 金属液的最大流速仅为 1.561 m/sec, 三孔结构比其他两种结构的等效应力更小, 其等效应力为 655.8MPa, 应力分布更为均匀。

E04-35

四种快速凝固条件下 Ti-Nb-Si 合金中的梯度相选择机理研究

海颖超, 李浩然, 刘克伦, 阮莹*, 魏炳波

西北工业大学

摘要内容: 在 Ti-Nb-Si 合金中, Nb 元素的添加促进了亚稳 (Ti,Nb)₃Si 相的形成, 并加剧了 (Ti,Nb)₅Si₃ 相与 (Ti,Nb)₃Si 相的竞争形核。本文利用电弧熔炼、电磁悬浮、电磁悬浮-落铸和电磁悬浮-压铸技术系统研究了 Ti₇₀Nb₁₄Si₁₆ 合金在快速凝固过程中随冷却速率和过冷度变化的相选择机理和组织演变规律。通过原位温度监测和有限元模拟分析了合金凝固过程中的传热特征, 并确定了合金在凝固过程中的冷却速率和温度梯度。在电磁悬浮条件下, 合金的平均冷却速率约 20 K/s, 其凝固路径主要由过冷度控制, 当过冷度超过 210 K 后凝固路径由 L→(Ti,Nb)₅Si₃→(Ti,Nb)₅Si₃ + (βTi) 转变为 L→(Ti,Nb)₅Si₃ + (βTi)。在电弧熔炼、电磁悬浮-落铸和电磁悬浮-压铸条件下, 合金的平均冷却速率分别达到 102, 103 和 105 K/s 数量级, 这时由于合金熔体中 Si 元素的不充分扩散和 (Ti,Nb)₅Si₃ 相对较长的形核孕育时间, (Ti,Nb)₃Si 相成为主要相。同时, 当合金样品中心处的温度梯度达到 105 K/m 数量级时, 熔体内部的溶质起伏和能量起伏更加剧烈, 促进了少量初生 (Ti,Nb)₅Si₃ 相的形成。在高冷却速率 (105~106 K/s)、大温度梯度 (106~107 K/m) 和溶质截留效应的协同作用下, (Ti,Nb)₅Si₃ 相与 (Ti,Nb)₃Si 相之间的竞争形核进一步加剧, 从而在局部区域形成具有梯度相和梯度尺寸的共晶组织。在高冷却速率耦合深过冷的条件下, 合金中仍然存在这种双梯度共晶组织, 但是初生 (Ti,Nb)₅Si₃ 相的形成被抑制。

E04-36

用于预测金属-氧化物界面的基底导向原子堆叠模型

王辉, 曾龙, 李军, 任能, 夏明许*, 李建国

上海交通大学

摘要内容: 属/氧化物界面是控制界面反应机理和材料宏观性质的核心区域, 其原子结构的精确预测对

高性能半导体材料、涂层材料、多相催化材料及复合材料的研发至关重要。然而，受外部环境因素与材料本征特性的双重影响，准确预测金属/氧化物界面结构仍是材料科学领域亟待攻克的难题。本研究基于最小界面能原理，结合 Lennard-Jones 势函数，提出了基底导向的原子堆叠模型(substrate-directed atomic stacking model, SASM)并系统探究了三种典型晶体结构金属与氧化铝之间的界面原子排布，深入阐释了界面缺陷的形成机制。分别以 Cu/Al₂O₃、Zn/Al₂O₃、Fe/Al₂O₃ 界面为例，预测三种界面位错缺陷的形成。并应用同步辐射 X 射线衍射，高分辨透射电子显微镜和几何相位分析方法等表征技术验证了不同体系下界面刃位错、微孪晶、层错缺陷以及微观应力的形成。与传统理论模型及分子动力学模拟相比，SASM 拓展了界面缺陷预测的适用范围，大幅提升了预测效率，为快速开发高性能金属/氧化物体系提供了坚实理论基础。

E04-37

纳米介质调控镍基高温合金组织与显著强化高温使役性能

邱丰*, 钟鑫淼, 杨宏宇, 董柏欣, 姜启川

吉林大学材料科学与工程学院

摘要内容：高温合金需要兼顾高强/硬度、良好塑韧性、抗蠕变、抗疲劳、抗氧化等综合服役性能。目前强韧化技术面临着“强化易，成形难，成材率低，成本高”瓶颈，服役性能很难同步实现较大提升，一种打破传统的创新强化技术是进一步突破高温合金强韧化关键。本工作以用于航空发动机、燃气轮机及热端部件的镍基多晶高温合金 GH4169 为研究对象，以原位内生的纳米陶瓷颗粒中间合金(合金中纳米含量为 20wt.%，颗粒之间被 Al 基体间隔不团聚)为输运载体，将纳米颗粒引入高温合金熔体，通过微量 (0.03-0.05wt%) 纳米颗粒调控合金微观组织构建-高温使役性能全面强化-显著提升损伤容限为主线，实现合金组织可控、晶内和晶界强化、强化组织高温稳定性为研究核心，针对微量纳米颗粒调控高温合金组织构建机理、使役性能强化以及损伤容限提高机制等关键科学问题进行初步的揭示。

E04-38

TiB₂ 诱导大型压铸凝固组织缺陷形成规律初探

陈宗宁*, 张宇博, 郭恩宇, 康慧君, 王同敏, 李廷举

大连理工大学

摘要内容：已量产的一体化压铸车身底盘结构件采用 Al-Si 系自时效硬化合金，其基于高压压铸的亚快速凝固条件形成过饱和固溶组织，从而实现免热处理的目的。目前，该类合金存在自然时效和烤漆硬化的时间响应机制不明、远距离充型能力和致密度不足、压铸大型总成局域性能调控手段相对匮乏等难题。上述问题与压铸件高速高压凝固过程组织缺陷存在强关联，因此对于缺陷形成规律的深度揭示是解决此类问题的关键。大连理工大学自主开发的 Al-Ti-B 系列晶粒细化剂，通过能场干预和晶种结晶学控制来实现细化剂中 TiB₂ 晶种的形貌、尺寸和分布的主动控制。通过压铸过程中的少量添加，TiB₂ 具有影响合金的流动性、自然时效行为、烤漆硬化响应特征和富 Fe 相形貌等一系列作用，为一体化压铸技术迭代注入新增长点。

E04-39

基于深度学习先进分子动力学的材料相变机制研究

牛海洋*, 陈名毅, 胡俊伟, 张仕威, 余耀辰, 许晨涛

西北工业大学

摘要内容：材料的相变过程是材料科学、凝聚态物理、医药制备和气象预测等诸多领域最重要的研究课题之一。受限于空间和时间分辨率，现有的实验手段难以在原子尺度下动态观察研究材料的相变过程和相变界面的结构演化规律。原子尺度下的计算机模拟为研究材料的相变过程提供了有效手段，然而材料的相变过程的模拟需要至少上千原子量级、数十微秒的高精度计算，远远超过了第一性原理分子动力学能够

达到的时空尺度。这一时空尺度难题又反过来阻碍了人们对材料相变机理的系统理解。因此，实现效率与精度兼顾的第一性原理精度分子动力学模拟显得尤为重要。本报告针对以上问题，通过引入映射材料内部原子结构的结构因子作为序参量，采用巨分子动力学等先进分子动力学方法解决了材料凝固形核原子尺度模拟的时间尺度难题。本报告还进一步发展了将先进分子动力学方法与深度学习方法相结合的研究思路，成功构建出了第一性原理精度的水、硅酸镁、碳酸钙、硒化镉、氧化镁等复杂体系的深度学习势函数，并基于深度学习先进分子动力学方法对上述体系的相变过程及相变界面演化规律进行了系统研究。研究工作为构建复杂体系的高精度势函数及研究它们的温度-压力相图及相变机理提供了系统性的研究手段。

E04-40

加热速度对 Zr55Cu30Al10Ni5 非晶粉末的晶化和力学性能研究

赵炳戈*, 罗锦涛, 陈冯琛
上海大学

摘要内容: 加热速度对金属玻璃的形核与晶体生长过程具有显著影响。本文综合利用差示扫描量热仪、纳米量热仪以及多种结构表征技术，系统研究 Zr55Cu30Al10Ni5 (at.%) 金属玻璃粉末在 0.1-10000 K/s 加热速度下晶化行为，揭示了不同过冷度下的晶化动力学特征以及微观结构演变规律。基于经典形核理论和 Wilson-Frenkel 晶体生长模型，定量计算了过冷熔体中 CuZr₂ 的形核率和晶体生长速度，从理论上阐明了加热速度对晶体演变过程的影响机制。进一步结合纳米力学的单颗粒压缩试验，分析了加热速度对金属玻璃力学性能的调控效应。结果表明，在较低加热速度下，Zr55Cu30Al10Ni5 金属玻璃的晶化相主要是 NiZr₂ 和 CuZr₂，且晶粒尺寸细小，硬度较高，但是强度和塑性较差。随着加热速度的升高，晶化相逐渐演变为以 Cu₅Zr, CuZr₂ 和 Cu₁₀Zr₇ 为主的 Cu-Zr 基金属间化合物，晶体尺寸逐渐增大。此时，颗粒硬度降低，但是强塑性明显改善。该研究为理解加热速度调控晶化行为及优化金属玻璃复合材料性能提供了理论基础与实验依据。

E04-41

微纳米陶瓷颗粒调控铝合金梯度冷速下凝固行为及机制

董柏欣, 杨宏宇, 邱丰*, 李强, 姜启川
吉林大学

摘要内容: 以尺寸形貌可控的陶瓷颗粒调控铝合金，通过促进轻质铝基体和硬质的陶瓷颗粒的独一无二的协同效应，可使铝合金获得优化的凝固组织及良好的强塑性协同。本报告系统地对比了梯度冷速下两种纳米颗粒添加方式中（外加纳米颗粒和原位内生控制合成的纳米颗粒）的颗粒种类、尺寸、形貌及空间分布对纯铝和铝硅合金的凝固行为、凝固组织及力学性能的影响。研究发现，冷却速率的提升会引发异常晶粒粗化及等轴向柱状晶转变。通过纳米颗粒系统调控不同凝固条件下的凝固行为，发现 1wt.% 外加纳米 TiCN 颗粒和微纳米混杂尺寸 TiCN 颗粒展现出良好的凝固组织细化能力，还能促进等轴凝固，从而实现从粗大定向柱状晶到全细晶随机取向等轴晶的显著转变。相比之下，内生微纳米混杂尺寸颗粒在梯度冷速下具有更优异的抗晶粒粗化能力。1.0 wt.% 微纳米 TiCN-TiB₂ 颗粒添加后，90K/s 冷速下纯铝细化效率为 92.5%。此外，发现冷速增加将基体合金的凝固组织对纳米颗粒的敏感性降低。冷速增加改变了陶瓷颗粒的空间分布，慢冷速下大部分纳米颗粒被固/液界面推移而最终分布于晶界，而冷速增加导致部分颗粒被固液界面捕获。本文通过研究宽域温度场和孕育条件下凝固热力学与动力学行为，揭示了梯度冷速下纳米颗粒调控凝固组织的机制，为铝合金凝固组织的可控构建提供了新思路。

E04-42

增材制造 TC4 合金内部未熔合与匙孔缺陷对变形行为的影响

陈梓健¹, 万杰^{1,2}, 李杰¹, 李金山^{1,2}, 王军*^{1,2}
1. 西北工业大学

2. 西北工业大学重庆科创中心

摘要内容: 作为两种常见的内部缺陷, 未熔合 (lack-of-fusion, LOF) 和匙孔 (keyhole) 缺陷均会影响增材制造金属构件的力学性能, 但其内在机理尚未得到系统阐释。本研究通过调整激光扫描参数, 在 TC4 钛合金试样中分别预制两类缺陷, 并借助 XCT 开展原位拉伸实验以分析其力学响应。研究发现, 不同类型缺陷对拉伸性能的影响存在显著差异。含预制未熔合缺陷的试样在拉伸过程中, 缺陷沿载荷方向快速扩展并在横向合并成大尺寸裂纹, 导致严重应变局部化并提前失效; 而预制匙孔缺陷试样的孔隙聚结速率速率较慢, 应变局部化程度显著减轻。因此, 匙孔缺陷对拉伸性能的影响可忽略不计, 而预制 LOF 缺陷则使屈服强度和延伸率分别降低 17% 和 64%, 本研究可为增材制造高性能金属构件提供理论指导。

E04-43**增材制造高强 GH4099 γ' 初始形成机制及成分优化方法**

吕昱品, 聂振华, 郭乾应*, 刘永长

天津大学

摘要内容: 在增材制造高强合金的非平衡凝固过程中, 通常会因为应力集中和元素偏析产生裂纹, 以往的研究通常试图在易开裂高强合金中控制偏析元素或限制 Al, Ti 等强化相组成元素的含量, 大幅度损失合金强度。本研究通过利用 GH4099 含有高固溶元素的这一特点进行 γ' 强化相初始形成机制的探讨。研究发现, 在 γ' 相形成初期, 原子聚集诱导的化学调制过程为 γ' 相提供成分基础, 上坡扩散推动局部浓度提升, 最终在热力学驱动下形成有序结构。因此, 当设计提升合金中的 Al 含量, 使其达到 5 wt.% 时, 增材制造 GH4099 合金仍表现出低开裂趋势并能在后续热处理中析出大量强化相, 突破了增材制造合金中 Al, Ti 含量的上限并展示出更好的高温力学性能。这些发现为基于非平衡凝固过程制备的高温合金提供了一个新的合金设计思路。

E04-44**负混合焓路径指导设计具有高饱和磁化强度的高强韧软磁高熵合金**赵尚¹, 王明亮¹, 韩晓东², 丁泽宇¹, 王欢¹, Peter K. Liaw³, 王育生¹, 卢一平*¹

1. 大连理工大学

2. 北京工业大学

3. 美国田纳西大学

摘要内容: 软磁材料需要高饱和磁化强度、低矫顽力和优异的力学性能, 以保证电动发动机的安全高效运行。由于机械和软磁特性之间的冲突, 在材料中实现这些特性具有挑战性。软磁高熵合金 (HEAs) 由于其独特的显微结构, 克服了高强度和矫顽力的难题, 具有优异的力学性能而备受关注。然而, 与传统软磁合金相比, 其较低的饱和磁化强度限制了机器的功率输出, 不利于轻量化发展。本研究提出了负混合焓路线, 制备了 Fe-Co-Ni-Al-Nb-B HEA。该合金具有高饱和磁化强度 (135.28 Am²kg⁻¹), 低矫顽力 (227.54 A m⁻¹), 高抗拉强度 (1187.5 MPa) 和伸长率 (38.7%)。综合性能优于其他先进的软磁合金。这种优异的综合性能归因于铁磁性元素 (Fe、Co 和 Ni) 与强化元素 (Al 和 Nb) 之间的负混合焓, 促进了与基体共格的有序纳米沉淀形成, 提高力学性能的同时保持优异的软磁性能。本研究为开发具有强度和延展性的高性能软磁材料提供了有价值的见解。

E04-45**Cu-Co 难混溶合金组织演化的三维相场模拟研究**

姚睿东, 李金山, 王军*

西北工业大学

摘要内容: 本研究通过构建三维相场模型并结合实验验证,揭示了 Cu-Co 难混溶合金液相分离过程中核壳结构的形成机制。以 Cu₆₅Co₃₅合金为例,模拟结果表明:在富 Cu 相基体中,富 Co 相首先以细小液滴形式析出;随后,受 Marangoni 迁移和 Ostwald 熟化双重驱动,这些液滴向球体中心聚集并相互融合,最终形成以富 Co 相为核心、富 Cu 相为壳层的双层结构。进一步对比不同成分的 Cu-Co 合金演化过程发现,合金的体积分数会影响中间形貌但并不决定最终核壳结构;当体积分数较小的相以液滴形式析出后,Marangoni 效应使其向中心凝聚形成核心,随后表面张力差异驱动 Ostwald 熟化,使高张力相优先占据核心以最小化界面能;如果两相表面张力相等,则不会形成核壳结构。采用玻璃熔剂技术制备的过冷 Cu-Co 合金实验证实了模拟结果的可靠性:实验所观察到的凝固组织与三维模拟形貌高度一致。与传统二维模型相比,本研究的三维方法不仅能更直观地展示微观组织演化过程,还可与实验直接对比,为复杂相分离和非平衡凝固过程的三维建模提供了有力支持。

E04-46

FeCoNiSnx 高熵合金优化设计及其抗磨损和耐腐蚀性研究

翁祥, 王伟丽*

西北工业大学物理科学与技术学院

摘要内容: 随着海洋工程向深海和极地等极端环境的持续拓展,海洋设备面临高盐度海水腐蚀与颗粒冲击磨损的双重严苛考验,开发兼具优异耐蚀性与显著耐磨性的先进防护材料已成为深海工程领域的紧迫科学问题。高熵合金因在有序晶格结构中实现多组元协同强化效应,在航空航天关键承重结构、深海设备防腐体系及先进能源系统等前沿领域展现出独特的工程应用潜力,其通过成分设计与微观组织调控实现耐蚀-耐磨性能协同优化的机制,为极端环境海洋工程防护材料的研发提供了新思路。

本文研究了 Sn 元素调控的 FeCoNiSnx 高熵合金性能特征,着重于合金的微观结构演变、摩擦学行为与耐腐蚀性。结果表明,Sn 含量的增加使 FeCoNi 合金的结构发生了明显的变化,从单一的 FCC 结构逐渐转变为规则的 BCC+HCP 层片共晶,合金的磨损率显著降低,磨损机制由磨粒磨损转变为氧化磨损,这归因于 SnO₂ 的形成。FeCoNiSn0.25 合金具有最低的自腐蚀电流密度,在 3.5 wt.% NaCl 溶液中具有最优的耐蚀性。阐明了 FeCoNi 基高熵合金性能随 Sn 元素比例变化的内在机制,为开发兼具优异耐磨性与耐腐蚀性的新型海洋工程高熵合金体系提供了创新策略。

E04-47

生物医用二元 TiFe 和 NbSi 合金的力学性能与生物相容性研究

庞菲¹, 王伟丽¹, 李楠¹, 吴昊²

1.西北工业大学物理科学与技术学院

2.空军军医大学唐都医院

摘要内容: 开发兼具良好力学性能、耐腐蚀性和生物相容性的新型合金是生物医用材料领域的关键挑战。传统钛合金(如 Ti6Al4V)具有良好的耐腐蚀性和优异的比强度,在膝关节、牙科螺钉等钛植入物方面被广泛应用,但其释放出的 Al、V 离子具有神经毒性,长期使用在人体内可能引起软组织疾病和贫血。且由于 Ti6Al4V 的弹性模量为 110 GPa,而人骨的弹性模量在 10~30 GPa,存在弹性模量偏高(应力屏蔽),致使植入物松动或植入物移除后骨骼再骨折。因此迫切需要开发具有高强度、低模量以及良好生物相容性的金属植入物,以满足医学使用。

采用真空电弧熔炼技术成功制备了 TiFe 和 NbSi 二元合金。力学性能测试表明, TiFe 和 NbSi 合金的弹性模量分别为 42.9 GPa 和 26.3 GPa,接近于人体骨骼,远低于 Ti6Al4V 合金的弹性模量。通过人骨髓间充质干细胞(hBMSCs)体外培养评估其生物相容性: CCK-8 细胞增殖实验证实,两种合金表面培养的 hBMSCs 活性均高于对照组,且二者间细胞活性较高且差异不大。活/死细胞染色结果进一步显示, hBMSCs 在各组支架表面细胞形态正常,细胞膜完整,活细胞数量多。因此,本文制备的 TiFe 与 NbSi 二元合金兼具低弹性模量和良好的体外细胞相容性,展现出作为新一代生物医用植入材料的潜力。

E04-48**基于中国空间站的液态难熔合金快速凝固研究**

王海鹏*, 魏炳波

西北工业大学

摘要内容: 本报告利用中国空间站无容器材料实验柜, 对难熔合金的热物理性质、共晶生长及力学行为展开研究。在微重力环境下, 难熔合金液滴的流动受到显著抑制, 合金在凝固时两种相结构交替排列, 最终形成了具有独特波纹状组织的共晶胞, 这一发现有助于进一步理解合金的快速凝固机理。在胞内波纹状组织和胞外层片共晶的共同作用下, 合金获得了优异的强塑性匹配, 其硬度和弹性模量均显著提升。本报告重点介绍搭载中国空间站开展的初步实验取得的阶段性成果, 讨论空间特殊的物理条件对难熔合金凝固过程的作用机理。

E04-49**亚快速凝固轻合金凝固行为与高性能组织调控**

王瑾*

吉林大学材料科学与工程学院

摘要内容: 以铜模激冷、薄带连铸为代表的亚快速凝固是一种兼具高性能化潜力和高效节能特点的新型制备技术。然而, 目前对于亚快速凝固高固溶组织形成与调控机制、多相协同强化机制等关键科学问题和潜在机制尚不清楚, 严重限制了其广泛发展。本文从轻合金熔体原子结构和动力学性质出发, 提出了基于球面平均和偏差的累加粗粒化策略, 设计出兼具高表征能力和可解释性的熔体结构描述符, 成功预测了铝合金熔体的原子动力学性质。揭示了熔体性质对凝固过程中晶体相选择和溶质分配行为的影响规律及作用机制, 为调控轻合金亚快速凝固组织和分析凝固行为提供了借鉴。阐明了 Al-Mg-Si-Fe 合金在亚快速凝固条件下的多元溶质竞争捕获规律: 发现高冷速下多元溶质的分配行为和微观偏析缓解程度呈现不同敏感性, 其中溶质 Mg 比溶质 Fe 和 Si 更加敏感。基于亚快速凝固技术, 开发出新型 Al-Mg-Si-Cu-Zn 系合金, 与目前商用的 6022 铝合金相比, 不仅具有较高的 T4 态延伸率 (~34%)、还具备较高的 T6 态屈服强度 (390~409 MPa, 接近高强 7 系铝合金)。

E04-50**Al-Si 合金微观组织调控及强韧化**

贾海龙*, 薛利文

吉林大学

摘要内容: 传统 T6 热处理虽然能显著提高 Al-Si 合金强度, 但往往以牺牲塑性为代价。因此, 如何在保持高强度的同时提升塑性, 成为当前 Al-Si 合金研究的关键挑战。本研究系统分析了 Al-Si 合金中 β'' 、QP 和 θ' 相的时效析出行为及其对力学性能的影响; 提出了一种双级时效 (DA) 工艺, 通过精确调控溶质团簇和析出相的类型及数密度, 促进高密度团簇和 Mixed sub-unit 相的形成, 从而实现合金强度与塑性的协同提升。进一步结合原子探针断层扫描 (APT) 和分子动力学 (MD) 模拟, 揭示了微观组织与位错的相互作用机制, 为高性能 Al-Si 合金的设计提供了理论依据。

E04-51**受控扩散凝固技术**

陈体军

兰州理工大学

摘要内容: 受控扩散凝固 (CDS) 技术是获得非枝晶凝固组织, 减少甚至消除缩松, 以及克服热裂、

实现变形合金铸造化的很有潜力的一种铸造技术。为了克服前期 CDS 技术对于母合金占比的规定和混合效率低的缺点，报告人提出了同时混合的 CDS。通过数值模拟和实验相结合的手段，研究结果表明，混合熔体由两种母合金微小熔池组成，高温的合金 1（纯金属）熔池受周围低温合金 2（高溶质含量）熔池的激冷作用，迅速在合金 1 熔池的边缘形核，而后随着过冷区的扩大，形核逐渐向熔池中心扩展；该晶核周围均因没有成分过冷，以平面生长的方式长大，从而形成细小的球状晶；随后，远离球状晶的合金 2 熔体达到一定的过冷度后，开始形核，而此晶核因成分过冷的原因，以树枝晶生长的方式形成树枝晶，而靠近球状晶的熔体，则直接依附于球状晶生长，导致其形状变的不规则，最后，剩余熔体则以共晶反应的方式结束凝固，形成细小球状晶及其周围的树枝晶和晶界共晶组织组成的凝固组织，非枝晶仅可来自于合金 1，因此，其量不能太少；另外，两熔体的温度、混合速率、混合时的高度、合金 2 的成分、两浇口间的夹角等均对混合效果，进而对凝固组织有很大影响；基于该 CDS 的特点，提出并验证了以压铸机压室作为混合坩埚的 CDS 压铸技术的可行性。

E04-52

粉末床熔融增材制造高温合金凝固组织高自由度调控

赵宇凡^{*1}，雷雨超²，李翔宇¹，彭逸琦¹，林鑫¹

1. 西北工业大学
2. 湖南大学

摘要内容：本研究针对难焊接高温合金在粉末床熔融（PBF）成形中凝固组织调控与缺陷抑制的难题，通过多尺度方法揭示了工艺参数、熔池动态演变及材料性能的耦合机制。基于机器学习优化工艺参数空间，构建热-机械场耦合模型，阐明熔池失稳与开裂机理，提出热-机械效应协同调控准则，显著抑制裂纹形成。创新性开发激光调制技术，通过动态调控能量输入及无籽晶动态选晶方法，在固-液界面沿构建方向（BD）形成均匀温度梯度，降低熔体流速并提升熔池稳定性，有效抑制杂散晶粒生成，实现了无裂纹 IN738 合金稳定成形。结合层间正交扫描策略，使横向热流方向与[100]/[010]晶向匹配，消除大角度晶界，突破传统外延生长依赖基板取向的局限，制备出具有{001}<100>织构的大尺寸近单晶结构。此外，提出“非静态柱轴转变”理论实现凝固组织定点定向调控，获得晶粒形态与晶向配置可控材料。进一步解析残余应力演变场演化规律，提出热流匹配消减策略，为高温合金增材制造组织-性能一体化调控奠定理论与技术基础。

E04-53

气孔形成和枝晶生长的定量多相场模型

陈宇，李俊杰，王锦程，王雷*

西北工业大学

摘要内容：凝固气孔是铸造、焊接和增材制造等加工工艺中常见的缺陷。然而，目前并没有模型能够准确描述凝固过程中的枝晶生长、气孔形成以及两者的相互作用。本工作基于多相场模型开发了固-液-气相场模型。我们在模型中考虑了合金溶质和气体元素的再分配和扩散，并推导了相变的驱动力形式。模拟了等温凝固过程中的枝晶生长，结果显示固相晶核逐渐形成枝晶形貌，尖端生长速度迅速下降，最后趋于稳定。模拟了过饱和熔体中的气泡演化，结果发现一维气液界面移动速度与解析解对比良好，二维气泡始终为圆形，气泡尺寸迅速增加达到稳定状态。此外，合金溶质和气体元素分布均符合尖锐界面模型描述的物理图像。该模型考虑了固-气、固-液和气-液界面能，准确模拟了三相点处的接触角。最后，利用该模型模拟了柱状晶与气泡的演化，模拟结果与实验结果对比良好。该模型能够准确预测气孔形成，这对提升构件性能、降低制造成本具有重要意义。

E04-54

通过合金元素调控实现增材制造 Invar 合金高强度与低热膨胀系数的协同优化

吝放，万杰，陈豫增*

西北工业大学

摘要内容: Invar 合金强度的提升通常伴随其低热膨胀系数 (Coefficient of Thermal Expansion, CTE) 的下降, 这一矛盾长期制约着兼具高强度与低 CTE Invar 合金的发展。针对这一难题, 本研究通过调控 Co 与 V 对 CTE 的相反作用, 自主设计了一种新型高强度低 CTE 的 Invar 合金。采用激光粉末床熔融 (Laser Powder Bed Fusion, LPBF) 技术制备, 研究发现该合金具有优异打印成形性, 在较宽工艺窗口内可实现近全致密 (>99.5%) 成型。通过优化确定 650 °C 时效 3 小时的热处理工艺可大幅提升强度。透射电镜与小角中子散射原位分析证实热处理可析出纳米级 (约 10 nm) VC 颗粒。拉伸测试表明峰值时效样品的屈服强度达到 600 MPa, 较传统 LPBF 成形 Invar 合金提升约 50%, 主要源自超细 VC 颗粒的奥罗万强化机制。同时材料保持 $1.41 \times 10^{-6} \text{ } ^\circ\text{C}^{-1}$ (30-150 °C 测试温区) 的低 CTE 特性。该新型合金综合力学性能优于文献报道的增材制造因瓦合金, 为兼具高强度与低 CTE Invar 合金的发展提供了有效途径。

E04-55

关键微孔特征对 A356 铝合金力学性能退化的影响

苗以升¹, 李钟尧², 吴雪龙², 侯清怀¹, 王诗豪², 陈远路², 郎玉玲³, 孔德才³, 乔海波³, 马小英³, 李响³, 冯树伟³, 王文博³, 王俊升^{*1,4}

1. 北京理工大学材料学院
2. 北京理工大学机械与车辆学院
3. 中信戴卡股份有限公司
4. 北京理工大学前沿交叉科学研究院

摘要内容: 在铸造铝合金构件中, 疲劳裂纹通常起源于凝固过程中形成的缩孔、气孔等铸造缺陷, 但目前尚不清楚何种微孔特征主导铸造 A356 铝合金力学性能的退化。本研究结合 X 射线计算机断层扫描技术(XCT)、有限元分析(FEA)和数字图像相关(DIC)技术, 系统探讨了不同 A356 铸造铝合金构件内微孔尺寸、形貌与空间分布对力学性能的影响。研究表明, 采用多种机器学习方法发现微孔投影面积与其至自由表面最短距离之比(PA/SD) 与微孔周围的应力集中系数(Kt)之间存在最强相关性, 其相关系数高达 0.90, 并呈现线性函数关系。DIC 应变云图与三维断口形貌进一步证实, 高 PA/SD 区域容易诱发局部应变集中, 进而成为裂纹萌生的起始位置。因此, 有效控制和去除边缘附近的大尺寸微孔, 将显著提升 A356 铸造铝合金构件的力学性能与服役可靠性。

E04-56

超声辅助定向凝固制备 CuSn 合金及其强塑性机理研究

宋大拙, 邹军涛*
西安理工大学

摘要内容: CuSn 合金是制备 Nb₃Sn 超导线的关键原材料。然而, Sn 在 Cu 中的固溶度较低, 容易引起偏析, 导致 Nb₃Sn 超导导线制备过程中合金断裂。提高 Sn 原子的固溶度可以显著提高 CuSn 合金的力学性能。本文通过实验和数值模拟, 研究了定向凝固条件下 Sn 的分布及其对 CuSn 合金力学性能的影响。结果表明, Sn 的固溶度与 δ 相的体积分数相互排斥。较高的凝固速度提高了 Sn 在 α-Cu 基体中的固溶度, 同时降低了 δ 相的体积分数。在此基础上, 通过施加超声场, 柱状晶粒逐渐发生等轴化转变, CuSn 合金的延伸率一度突破 120%。进一步分析发现, 高 Sn 固溶度合金的变形组织以大量层错(SFs)和孪晶界(TBs)的相互作用为主, 而低 Sn 固溶度合金则以高密度的孪晶界为主, 层错能(SFE)的降低是造成合金变形机制差异的主要原因。δ 相的体积分数与孪晶界的密度和尺寸密切相关, δ 相体积分数高更容易诱发孪晶。该研究为制备用于 Nb₃Sn 超导线材的高性能 CuSn 合金提供了理论依据和实验基础。

E04-57

基于格子玻尔兹曼方法的真空电弧熔炼过程建模与模拟李栋¹, 吴鹏霄¹, 孙东科*¹, 李俊杰²

1. 东南大学机械工程学院
2. 西北工业大学材料学院

摘要内容: 随着航空航天及军事装备领域对高性能材料需求的不断提升, 大型合金铸锭的制备技术面临更高要求。真空电弧重熔 (Vacuum Arc Remelting, VAR) 技术因其优异的杂质去除和偏析抑制能力, 已成为大型优质合金铸锭制备的关键工艺之一。本研究建立了基于格子玻尔兹曼方法 (Lattice Boltzmann Method, LBM) 的多物理场耦合数值模型, 用于大型合金铸锭 VAR 过程的模拟分析。该模型通过 LBM 求解熔体流动控制方程, 并与焓方程、溶质输运方程双向耦合, 实现了对流-传热-传质多物理过程的精确描述; 采用有限体积法求解电磁场控制方程, 精确获取 VAR 过程的电磁场分布; 同时开发了与热力学计算软件 Pandat 的数据交互接口, 实现了多元合金物性参数的动态演化计算。经多组基准算例和实验验证了模型的准确性。基于该模型, 系统研究了不同强度与换向周期的外部搅拌磁场对 Ti-6Al-4V 合金 VAR 过程中输运行为与相变过程的影响规律。研究发现: 随着磁感应强度和换向周期的增大, 熔池内自感对流和搅拌对流之间相互竞争, 熔池内流动强度呈先减弱后增强的非单调变化趋势, 导致熔池体积和铸锭宏观偏析程度随之先减小后增大。本研究不仅阐明了外部磁场对 VAR 过程的调控机制, 还为大型合金铸锭制备工艺的数值模拟提供了有效的数值方案。

E04-58**基于相变热-动力学的铸造镁/铝合金设计**

罗群

上海大学

摘要内容: 高性能铸造镁/铝合金是汽车轻量化和节能减排的关键材料, 其广泛应用对实现“双碳”目标具有重要意义。本工作聚焦高性能铸造镁/铝合金设计中“成分-物相-合金热物化性质-性能”关系, 构建了镁基和铝基合金热力学相图和粘度、热导率数据库和镁合金析出相形核长大动力学模型参数数据库, 结合位错切过理论建立析出相强度预测模型, 实现镁/铝合金从成分、物相到性质/性能的快速、准确预测。以高强 Mg-Gd-Y 合金时效过程中析出相尺寸、硬度演化为案例, 介绍了复杂析出过程中析出相形核长大的描述方法; 以高强高导电铝合金设计为案例, 介绍了相图、热物性质预测在铸造铝合金设计中的应用。

E04-59**激光增材制造微区冶金凝固的同步辐射原位研究**

熊良华*, 董安平, 孙宝德

上海交通大学

摘要内容: 激光增材制造过程中激光与金属材料超快交互作用涉及瞬态高温、快速熔凝、复杂热-流-力耦合, 是当前微区冶金研究前沿与热点。本研究利用同步辐射快速成像与衍射技术, 以微秒时间分辨和微米空间分辨来实时、原位、在线监测熔池动态演变、凝固速率、温度梯度及元素扩散行为, 多尺度原位解析微观组织生长、相变机制及缺陷形成的动态过程, 揭示微区熔池振荡下匙孔失稳、熔滴飞溅、凝固速度突变现象产生机理。本研究结果为优化工艺参数、抑制微观缺陷及调控异质结构提供关键实验依据, 将推动高性能金属构件激光增材制造的理论创新与工艺精准调控。

E04-60**基于多模态深度学习的高温合金铸件力学性能预测研究**

康茂东*

上海交通大学

摘要内容：随着航空航天用高温合金铸件向大型化、复杂化方向发展，铸件壁厚差异增大、薄壁结构增多，导致各部位凝固条件显著差异。这种非均匀凝固过程不可避免地产生显微疏松缺陷和非均匀组织分布，使得传统理论建模和 CT 重建有限元计算方法难以实现力学性能的精确预测，严重影响了重大装备的服役安全评估。针对这一挑战，本研究采用深度学习这一图像驱动的机器学习方法，充分利用其强大的复杂特征提取能力。研究团队从大型复杂薄壁高温合金铸件的典型部位取样，通过 X 射线检测获取宏观缺陷分布数据，结合力学性能测试和电子背散射衍射（EBSD）微观结构表征，建立了完整的疏松缺陷-微观组织图像数据库。基于此，本研究创新性地构建了双通道并行的多模态深度学习框架，通过图像旋转、切割等数据增强技术，建立了定量的“疏松缺陷-凝固组织-力学性能”映射关系模型，并对模型的可解释性进行了深入分析。研究表明，多模态输入的网络模型在力学性能预测方面表现出显著优势，其预测精度较单一模态输入提升明显。这一优势源于多模态数据能够更全面地反映凝固特征信息，特别是考虑了疏松缺陷与微观组织之间的空间位相关系，为大型复杂薄壁后机匣铸件的服役安全设计提供了重要的技术支持。

E04-61

增材制造低碳马氏体钢的纳米孪晶形成及强化硬化机制

杨国煜，万杰，陈豫增*

西北工业大学

摘要内容：纳米孪晶的引入可以显著提高材料的力学性能，研究人员对 FCC 金属中孪晶的作用机制已经进行了大量的研究。BCC 金属由于层错能较高，需要通过高压、高应变速率、高冷速等极端条件引入孪晶，然而这些孪晶的形成及对力学性能的作用机制尚不清楚。本研究通过 LPBF 技术在低碳钢马氏体中引入了大量纳米孪晶，通过对沉积态微观组织研究，分析了增材制造低碳马氏体钢中大量纳米孪晶的形成机制。同时，对比研究沉积态、深冷态、深冷回火态样品在拉伸变形过程中的微观组织演化，结合理论计算，揭示了 BCC 孪晶具有一定的强化作用和超强的加工硬化作用。

E04-62

混合添加剂（Sr 和 TiB₂）对 Al-Si-Fe 合金力学性能和导热性能的综合调控

周东虎¹，李林巍²，陈宗宁*¹

1. 大连理工大学材料科学与工程学院
2. 沈阳工业大学材料科学与工程学院

摘要内容：平衡 Al-Si 合金的导热系数与力学性能具有重要的科学意义和应用意义。在本工作中，我们基于商用 Al-9Si-0.8Fe 合金，提出了一种混合添加剂的策略来协调合金性能。首先，在重力铸造的条件下，设计 Sr 和 TiB₂ 添加的正交组合优化最佳性能。结果表明，TiB₂ 的加入对 Sr 的变质作用没有负面影响，优化后的配方中 Sr 和 Ti 的含量分别为 200 ppm 和 300 ppm，热导率为 173.0 W/(m K)。随后，采用高压压铸(HPDC)工艺制备大型构件。结果表明，HPDC 工艺可以显著减小 β -AlFeSi、共晶 Si 和 α -Al 晶粒的尺寸。合金的力学性能得到显著改善。然而，HPDC 工艺对合金的自然影响，如微观组织的细化和孔隙率的变化，导致导热系数降低到 148.5 W/(m K)。然而，这个值仍然超过了一些传统的导热合金。

E04-63

格子玻尔兹曼方法模拟不同固液密度比条件下液滴凝固与热流耦合规律

吴鹏霄，李栋，韩青有，孙东科*

东南大学机械工程学院

摘要内容：液滴凝固现象广泛存在于自然界与工业生产中，如喷涂、激光焊接和增材制造等领域。在凝固过程中，固液密度差异将显著影响液滴的凝固特性，同时这一过程涉及复杂的动态相变和传热过程。因此，深刻理解固液密度差异对液滴凝固过程的影响机制具有重要意义。本文建立了一种考虑液滴凝固过

程中液固体系体积变化的热流耦合格子玻尔兹曼模型(Lattice Boltzmann Model, LBM), 其中液相流动与界面演化基于自由表面 LB 方法求解, 热传导与固液相变通过宏观焓方程描述并采用总焓 LB 法求解。该模型特别考虑了固液密度差异对凝固过程与最终形态的影响。通过 Stefan 问题与冷壁面液滴冻结算例的模拟结果同基准解和文献结果进行比较, 验证了模型和算法的正确性。结果表明, 固液密度比小于 1 和大于 1 会分别导致凝固后的液滴顶部出现锥形和平台, 这同实验观察到的现象相吻合, 并且凝固时间随着密度比的增大会逐渐减小。随后, 进一步研究了接触角和底板温度对凝固过程及三相接触线演化进程的影响。结果表明, 在液滴体积一定时, 凝固时间随着接触角的增大而显著增长。而不同底板温度则在影响凝固速率的情况下不改变最终液滴形态, 表明液滴凝固后的特殊形态同凝固速率的无关性。本研究为理解液滴凝固过程提供了新思路, 并提出了一种有效的数值模拟方法。

E04-64

基于机器学习的跨尺度特征融合策略实现 LPBF 成形 TC4 钛合金强塑性协同优化

王信莲, 万杰, 李金山, 王军*

西北工业大学

摘要内容: 针对激光粉末床熔融 (LPBF) 成形 TC4 钛合金的强度与塑性难以协同提升的共性挑战, 本研究提出一种融合跨尺度特征与主动学习的多目标优化新范式, 突破传统工艺参数优化的黑箱局限。通过分别构建文献数据库 (202 组工艺参数-性能数据) 和实验数据库 (25 组工艺参数-微观组织-性能数据), 创新性地引入马氏体厚度和孔隙率特征引入机器学习输入空间。基于随机森林和遗传算法构建多目标主动学习框架, 筛选兼具高不确定性及性能潜力的候选参数, 进而通过实验迭代更新训练集。结果表明: 基于纯工艺参数数据库, 抗拉强度与断裂延伸率的平均预测误差分别为 5.2% 和 7.5%; 在迭代 4 轮后 (总计 16 组实验), 获得帕累托最优解集, 其抗拉强度和断裂延伸率分别达到 1180 ± 25 MPa 与 $9.2 \pm 1.8\%$ 。在引入马氏体厚度 (0.36-0.58 μm) 与孔隙率 (0.01-5%) 特征后, 抗拉强度与断裂延伸率的平均预测误差分别降低至 1.1% 与 4.3%; 经 3 轮主动学习迭代 (总计 12 组实验), 帕累托前沿不再扩展, 最优解下的为抗拉强度与延伸率分别为 1200 ± 25 MPa 和 $10.2 \pm 1.8\%$ 。微观表征进一步通过微观组织表征揭示了马氏体板条厚度 (0.46 μm) 与孔隙率 (0.02%) 的协同调控机制效应, 符合修正的 Hall-Petch 关系与 Eshelby 夹杂理论。

E04-65

激光熔化沉积 GH4169 中熔池流体流动诱导晶粒形貌调控机制研究

郝政华, 郭乾应*, 刘永长

天津大学

摘要内容: 在激光熔化沉积 (LMD) 的非平衡凝固过程中, 由于熔池与周围存在高温梯度, 制备合金的晶粒形貌通常为大尺寸柱状晶, 使得合金存在各向异性, 不适合承受多向应力的应用。以往的研究主要通过改变合金成分、添加外部磁场等方式来实现柱状晶向等轴晶转变, 改变了合金的原始特性或增加制备成本。本文通过开发一种利用间隔短时段熔化的新型扫描策略, 并结合调控工艺参数, 在沉积态的 GH4169 合金试样中实现了近等轴晶形貌, 随后在固溶时效处理后演化为均匀的等轴晶粒。并采用计算流体力学模型模拟实验条件下熔池的流体流动行为, 并计算固液界面前沿的温度梯度和凝固速度。结果显示, 与传统栅栏式扫描策略相比各向异性大幅降低。这些发现提供了一种新的工艺-冶金机制, 可通过 LMD 中的扫描策略创新来主动设计特定部位的晶粒形貌。

E04-66

复合剪切流铸造对 Cr-Ni-Mo-V 钢凝固组织均匀化的影响

秦军伟, 王自东*

北京科技大学

摘要内容：本研究探讨了复合剪切流铸造（CSFC）对 Cr-Ni-Mo-V 合金钢锭凝固组织的影响，并将其与常规凝固（CS）方法进行了比较。激光扫描共聚焦显微镜（LSCM）和电子背散射衍射（EBSD）用于表征 CSFC 和 CS 样品的凝固微观结构。结果表明，在 CSFC 样品中，柱状到等轴转变（CET）发生在明显较短的距离处，有效促进了等轴晶粒的形成。CSFC 技术通过枝晶破碎、温度梯度降低和爆炸非均匀成核等机制显著细化晶粒尺寸并提高凝固微观结构的均匀性。

E04-67

磁场对金属熔体结构及其形核行为的影响机理

帅三三*, 许周晴, 胡涛, 任忠鸣

上海大学

摘要内容：熔体结构特征对金属凝固行为及其微观组织形成有重要影响，电磁场作为一种无接触式外加物理场，对金属熔体的凝固行为有显著影响，如改变晶粒取向、固液界面能、破碎枝晶、细化晶粒、过冷度等。研究磁场对金属熔体结构及其形核行为的影响对于从原子尺度揭示电磁场影响金属凝固机理具有重要意义。本研究利用原位同步辐射高能 X 射线衍射技术研究了静磁场对锌（Zn）和铝（Al）熔体原子尺度结构演变及其对形核行为的影响，研究结果表明不同磁性的金属熔体特征在磁场作用下具有不同的响应：Zn 熔体的第一配位层膨胀，而 Al 的第一配位层收缩，这表明磁场对这些金属熔体中的原子团簇聚集产生了不同的影响，从而进一步影响了随后形核过程中的固液界面能（ γ ）。具体来说，磁场会增大 Zn 熔体形核过程的 γ ，阻碍形核过程，从而增加形核过冷度；相反，磁场会减小熔体 Al 形核过程的 γ ，从而促进成核，减小形核过冷度。这种差异行为源于两种金属不同的磁性以及对磁场的响应，与磁偶极子理论相一致。通过阐明磁场影响成核的原子尺度机制，该研究为通过控制磁场的应用来调控凝固微观结构提供了基础。

E04-68

基于计算驱动的免热处理压铸 TiB₂/Al-Si 复合材料

汪明亮

上海交通大学材料科学与工程学院

摘要内容：本研究构建了基于计算驱动的 TiB₂/Al-Si 复合材料集成设计方法。通过高通量第一性原理计算建立界面改性元素调控 TiB₂ 颗粒分散性图景，结合数据驱动的基体合金成分多目标优化算法，创新性地实现颗粒分散与基体强塑性能协同优化，成功开发出高强塑性的免热处理压铸 TiB₂/Al-Si 合金。在此基础上，通过跨尺度微观组织表征和材料模拟技术耦合分析方法，系统揭示 TiB₂ 颗粒对压铸材料组织演化行为的影响规律，阐明材料强韧化机理。主要研究内容及结论如下：

（1）开发基于高通量第一性原理计算的界面改性元素掺杂 Si-Al(111)/TiB₂(0001)界面研究流程，构建理论界面改性元素分布图景，用于系统评估不同元素的颗粒分散能力。

（2）在理论界面改性元素分布图景基础上，通过机器学习方法选择最优基体元素种类，并使用自适应学习优化策略实现基体合金成分的定量化设计。

（3）在最优基体合金基础上，引入 0.3 wt% TiB₂ 颗粒实现强塑性协同提升，从而获得高性能免热处理压铸 TiB₂/Al-Si 复合材料，其屈服强度达到 156.5 ± 5.0 MPa，延伸率达到 $10.5 \pm 0.5\%$ ，较现有合金平均性能水平（无真空辅助）分别提高 18.2% 和 28%。

本研究通过“理论计算-机器学习-实验研究”的多模态研究方法，建立 TiB₂/Al-Si 复合材料成分-工艺-组织-性能间关联关系，为开发高性能免热处理压铸铝基材料提供了新研发策略。

E04-69

非晶合金复杂构件铸造成形与凝固行为

张伦勇

哈尔滨工业大学

摘要内容：非晶合金具有优异性能，但长期以来受制于玻璃形成能力，难以成形大尺寸复杂构件而无法实现大规模工程应用，亟需实现大尺寸复杂非晶合金构件的铸造成形。该汇报将介绍报告人团队依托国家自然科学基金委重大科研仪器项目在大尺寸复杂非晶合金构件铸造成形装备、铸造工艺和凝固行为研究方面的进展，展示采用铸造方法成形大尺寸复杂非晶合金构件的巨大潜力及其应用价值。

E04-70

基于纳米有序结构调控的增材制造高强高韧钢

万杰*

西北工业大学

摘要内容：金属材料的强韧性协同调控一直是国内外研究的热点与难点。本研究利用激光增材制造技术的快速凝固特性，结合打印后热处理工艺，成功开发出兼具优异强度与韧性的新型高强高韧钢，其屈服强度达 1220 MPa 的同时，V 型缺口冲击功高达 167 J。通过综合运用 XRD、EBSD、APT 和球差校正电镜等先进表征手段，系统解析了材料的多尺度微观组织结构特征，明确了沉积态非平衡凝固组织中纳米有序结构的类型及分布特征，揭示了纳米有序结构在热处理过程中的演化机制，阐明了纳米有序结构对钢铁材料强度及韧性的协同调控机制。

E04-71

热挤压调控铸造 Mg-Ni-Y 储氢合金的微观组织提升吸放氢动力学

孙璇¹，罗群¹，李谦*^{1,2,3}

1. 上海大学材料科学与工程学院
2. 重庆大学材料科学与工程学院
3. 重庆大学国家镁合金材料工程技术研究中心

摘要内容：氢能是全球能源技术革命和转型发展的重大战略方向。如何实现氢气在安全的前提下经济性的储运，是氢能产业广泛应用的关键。镁基储氢合金具有理论储氢容量高(MgH₂:7.6wt.%)、可逆性好、低成本和可用性的特点，被认为是很有发展前景的固态储氢材料。然而，镁基储氢合金存在吸放氢速度慢，放氢温度高及循环寿命差等问题严重限制了其规模化应用。为提高镁基储氢合金的储氢性能，通常利用传统铸造方式引入稀土(RE)和镍(Ni)元素作为催化元素。然而引入 Ni 和 RE 不可避免地会降低储氢容量，且铸造 Mg-Ni-RE 合金组织粗大，在中高温范围（小于 300℃）仍存在吸放氢动力学缓慢的问题，如何平衡镁基储氢合金储氢容量与吸放氢动力学是材料设计与优化的核心挑战。

本工作提出在微合金化基础上进行微观组织调控实现吸放氢动力学优化的思路。通过传统铸造方式引入微量的 Ni 和 Y 元素制备铸态 Mg_{91.47}Ni_{6.97}Y_{1.56} 合金，在此基础上，进一步通过热挤压对铸造 Mg_{91.47}Ni_{6.97}Y_{1.56} 合金进行塑性变形。通过体积法高压气体吸附仪测定了铸造和热挤压 Mg_{91.47}Ni_{6.97}Y_{1.56} 合金的吸放氢动力学，热挤压显著提升铸造合金的放氢动力学，在 300℃ 下 5 min 内放氢 5.4 wt.%，比铸态合金(300℃ 下 5 min 内放氢 1.8 wt.%)快 3 倍。根据 Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) 和 Chou 动力学模型的理论计算分析，吸氢过程为形核长大控速；而放氢控速步骤由氢原子在 MgH₂ 中扩散（铸态）转变为氢原子的表面渗透（热挤压合金），且放氢活化能由铸造合金的 140.5 kJ/mol 降低至 71.4 kJ/mol，放氢峰值温度也由铸造合金的 320.1℃ 降低至热挤压合金的 287.6℃。通过 XRD、SEM 和 TEM 等表征技术对铸造、热挤压及吸放氢后相组成及微观组织进一步进行表征，热挤压改善铸造 Mg-Ni-Y 合金吸放氢性能提升的机理在于：热挤压诱导的微观组织细化提供大量晶/相界，以及促进 Ni 和 Y 元素的均匀分布，增加氢原子扩散途径和形核位点；受热挤压影响，氢致 LPSO 相分解形成晶粒更细小的催化相 Mg₂Ni 和 YH₂ 在粉末表面分布更加均匀，增加吸放氢反应的催化面积，促进动力学的提升。研究成果为未来镁基储氢合金的设计提供新的思路。

E04-72

基于 CALPHAD 方法的高强度高导免热处理铸造 Al-Fe-Ni 合金设计

张宇飞¹, 罗群*¹, 李谦^{2,3}, 胡斌⁴

1. 上海大学材料科学与工程学院
2. 重庆大学材料科学与工程学院
3. 重庆国家镁合金材料工程技术研究中心
4. 重庆新能源储能材料与装备研究院

摘要内容: 电导率和强度是新能源汽车电机转子材料的两个关键性能。然而, 铸造铝合金中电导率和强度存在着不匹配的关系。本研究结合了相图计算和凝固模拟, 通过调控金属间化合物的含量和形态, 设计了一种新型的免热处理 Al-Fe-Ni 合金。通过调整 Ni 和 Fe 的含量, 计算凝固路径, 预测了铸态合金组织中的相组成和相含量, 极大的改善了 Al-Fe-Ni 合金的电导率和强度。其中, 铸态 Al-2Fe-1Ni (wt.%) 合金表现出了优异的综合性能, 其抗拉强度为 131.2 ± 2.5 MPa, 伸长率为 20.2 ± 3.6 %, 电导率达到了 52.0 ± 0.1 % IACS。Al-2Fe-1Ni 合金中 $Al_{13}(Fe,Ni)_4 + \alpha-Al$ 的共晶组织占比超过 90 %, 远大于 Al-0.4Fe-3.4Ni 和 Al-1Fe-1Ni 合金中的共晶含量。Al-2Fe-1Ni 合金中细小的纤维棒状共晶组织提高了第二相强化效果和塑性变形能力。此外, 纤维棒状第二相减少了电子在传播过程中的散射, 为自由电子运动留出了更多空间, 使合金电导率得到提升。Al-2Fe-1Ni 合金中的主要第二相由 Al_3Ni 相转变为 Al_9FeNi 相, 进一步提高了合金的热稳定性。在 180 °C 时效处理过程中, 其电导率和力学性能均保持稳定。本工作作为开发高强度、高导电的铸造铝合金提供一种新的设计思路。

E04-73

三元 Fe-Dy-B 稀土合金的液态热物理性质与快速凝固研究

郑亚鹏, 翟薇*

西北工业大学物理科学与技术学院

摘要内容: 采用电磁悬浮和落管技术获得了最大过冷度为 215 K (0.14 TL) 和 386 K (0.25 TL) 的液态三元 Fe₈₄Dy₈B₈ 合金, 系统研究了液态合金热物理性质与快速凝固动力学。测定了液态合金表面张力、粘度和扩散系数随温度变化的函数关系, 从而推导出粘流活化能和原子扩散活化能。在液态过冷度 37~118 K 范围, 初生 γFe 相的枝晶生长速度与过冷度呈幂函数关系, 增大的过冷度促进二元共晶(Dy₂Fe₁₇(B)+ γFe) 和包共晶(Dy₂Fe₁₄B+ γFe) 组织的形核长大。在 118~264 K 过冷区间内, Dy₂Fe₁₇(B) 相作为领先形核相生长。随着过冷度增大, Dy₂Fe₁₇(B) 相枝晶生长速度以幂函数形式增大, 晶粒尺寸逐步细化, 进而显著促进后续包共晶转变, 致使 Dy₂Fe₁₄B 相成为凝固组织内的主相。一旦合金液滴达到深过冷状态, Dy₂Fe₁₄B 相直接从亚稳液态合金中形核长大, 增大的过冷度将其最大体积分数提升至 81%, 并且促使小面相-非小面相生长模式转变。这意味着深过冷快速凝固可以促进包共晶转变或者驱动 Dy₂Fe₁₄B 相直接形核长大, 从而调控 Dy₂Fe₁₄B 相体积分数

E04-74

颗粒含量和均匀化处理对 TiB₂/2219Al 复合材料微观组织和力学性能的影响

李林巍*^{1,2}, 周东虎², 陈宗宁², 王同敏², 臧喜民¹

1. 沈阳工业大学
2. 大连理工大学

摘要内容: 2219 铝合金是航空航天领域中的常用材料, 其在制造过程中的加工能力和最终部件的力学性能均与铸态下的晶粒尺寸和力学性能息息相关。TiB₂ 颗粒作为铝合金及其复合材料中最常见的晶粒细化剂和颗粒增强铝基复合材料中具有优异增强效果的第二相, 近年来获得了广泛关注。通常来说, 在一定范围内增加颗粒含量, 可以较好的发挥增强效果, 优化组织, 提高综合力学性能; 但颗粒含量过高不仅会增加成本, 降低颗粒的增强效率, 而且颗粒容易发生团聚, 使力学性能恶化。值得注意的是, 无论是细化作

用，还是强化作用，发挥最好效果的颗粒含量均与基体的元素组成有关。此外，为了使粗大第二相回溶，减轻元素偏析，减小内应力，提高热加工能力，加工变形之前对铸锭进行均匀化处理必不可少。尽管添加 TiB₂ 颗粒有望抑制均匀化过程中的晶粒长大，但相关研究目前仍相对匮乏。在本研究中，通过氟盐反应法与重熔稀释法相结合制备了不同颗粒含量（0、1、3、5 wt%）的 TiB₂/2219Al 基复合材料，对复合材料凝固组织中第二相的二维及三维分布进行了系统表征，对相界面进行了分析，并通过实验观察和计算确定了 Al 基体、Al₂Cu 共晶第二相、TiB₂ 增强颗粒三者间的界面取向关系；随后，建立了亚共晶 Al-Cu 合金的均匀化动力学方程，利用该方程从理论上分析了晶粒尺寸与均匀化温度对均匀化进程的影响，并用优选的工艺对各颗粒含量复合材料进行了均匀化处理，讨论了均匀化过程中不同微观组织对应的晶粒热稳定性差异以及对应的机制。此外，本研究还系统探究了 TiB₂ 颗粒含量对铸态及均匀化态复合材料力学性能的影响，确定了最优的颗粒含量。

墙报

E04-P01

Al-Ti-B 晶种对 Al-RE 合金微观组织、力学性能和热物性的影响

刘鹏宇，陈宗宁*

大连理工大学材料科学与工程学院

摘要内容：随着人工智能与智能设备的快速发展，先进热管理材料的需求日益迫切。Al-RE(Ce/La)合金凭借其优异的热导率、突出的热稳定性、良好的铸造性能及成本优势，已成为散热材料领域的研究热点。然而，其固有屈服强度不足(<60 MPa)严重制约了在精密散热部件中的应用。本研究通过多尺度协同调控策略，系统探究了 Si 单掺、Mg/Si 复合掺杂及 TiB₂ 纳米颗粒增强对 Al-RE 合金组织演变与性能的耦合作用机制。微观结构表征表明：Si 元素的引入促使基体中短棒状 Al₁₁RE₃ 相向粗大片层状 Al₁₁RE₃Si 三元相转变，实现强度提升；随后引入 Mg 元素，通过固溶强化机制在维持原有微观结构的同时，使合金抗拉强度和屈服强度分别提升至 132.5 MPa 和 62.56 MPa，强度提升约 13.9% 和 19.4%；最终通过引入 TiB₂ 纳米颗粒，同时载荷强化和细晶强化协同作用，使合金屈服强度提升至 74.65 MPa，且延伸率相较于基体仅下降 3.62%。本研究通过多相协同调控策略，成功开发出兼具优异导热性能和力学性能的新型 Al-RE 合金，为高性能散热器件的材料设计提供了理论依据和技术支撑。

E04-P02

多场耦合作用下调控 Cu-Fe-Co 难混溶合金显微组织与协同增强磁学/力学性能

孙梓琛，王军*，李金山

西北工业大学

摘要内容：为克服 Cu 基难混溶合金严重的相分离问题并挖掘其应用潜力，本研究开发了磁场下定向凝固技术，应用于创新的 Cu-Fe-Co 中熵合金体系。利用自建磁场-液态金属冷却定向凝固装置获得的温度场与磁场耦合作用，我们成功实现了 FeCo-rich 相与 Cu-rich 相的定向排列弥散分布。研究揭示：关键参数（抽拉速度、磁场强度）显著调控凝固组织演变（胞状晶-胞枝晶-纤维枝晶/CET 转变）与织构。施加磁场不仅促进组织细化与界面平直化，更在特定参数下诱导 FeCo-rich 相形成 74.3% 占比的 {100}<001> 易磁化织构，大幅提升磁化速度。同时，两相界面引发的显著 HDI 硬化效应（强化机制）结合参数调控，协同优化了力学性能，实现了 650 MPa 抗拉强度与 8% 延伸率的优异组合，较无磁场非定向试样分别提高 40% 与 100%。饱和磁化强度亦随 FeCo-rich 相比比例增加而提高。本工作研究表明，磁场定向凝固是制备具有高磁导率与高强韧性协同的难混溶中熵合金的有效途径，为开发新型结构-功能一体化材料提供了新平台。

E04-P03**基于机器学习分子动力学的金刚石硼-氧共掺杂模拟研究**

闫一恒, 牛海洋*, 胡俊伟, 余耀辰, 孙学成

西北工业大学

摘要内容: 金刚石被誉为未来最具发展前景的半导体材料之一, 然而金刚石 N 型半导体的制备却尤为困难。本文针对金刚石 N 型半导体制备中单元素掺杂效率低、共掺杂微观机制不明的问题, 聚焦于硼-氧(B-O)共掺杂体系, 通过机器学习方法突破传统模拟的时空尺度限制。开发了深度神经网络势函数(DNN), 采用主动迭代训练策略, 构建了不同掺杂浓度/构型初始数据集, 并通过分子动力学采样与第一性原理计算的迭代优化, 最终获得了可以准确描述金刚石掺杂体系的高精度势函数。基于此, 系统研究了 B/O 单掺以及 B-O 共掺体系的动力学行为。研究发现氧掺杂会引发显著晶格畸变, B 与 O 形成的 B-O 复合缺陷会提高晶格的完整性, 从而使体系能量降低, 且 B-O 共掺时杂质原子会通过空位辅助迁移在高温下自发形成 B-O 复合体。最后通过第一性原理计算发现该复合体会在禁带中引入两个深能级, 其可作为受主补偿中心。本研究有望为高性能 B-O 共掺金刚石的制备提供原子尺度理论支撑。

E04-P04**Al-Ag 合金中银原子调控均质形核与五重孪晶形成的分子动力学模拟研究**

孙学成, 胡俊伟, 张仕威, 闫一恒, 牛海洋*

西北工业大学

摘要内容: 铝合金由于轻质高强广泛应用于航空航天等领域, 而微量银的加入会使铝合金诸多性能得到提升。在铝合金凝固中形核作为凝固初始阶段, 而经典形核理论无法描述与晶体结构相关的问题, 本研究针对原子尺度下 Al-Ag 合金凝固形核机制以及银作用规律不明的问题, 通过机器学习分子动力学方法, 突破了现有实验手段时空间分辨能力的限制, 系统探究了富铝 Al-Ag 合金凝固过程中溶质原子对结构演化的调控机制。利用第一性原理精度的深度神经网络势函数, 对富铝 Al-Ag 合金的形核及生长行为进行了分子动力学模拟, 重点分析了溶质 Ag 对液相局部结构有序性和形核驱动力的影响规律。研究发现过冷液相中溶质原子与溶剂原子的局域环境存在显著差异, 这直接决定了均质形核的位点。此外, 研究还观察到面心立方结构中五重孪晶界面的动态形成过程, 并揭示了其与晶体生长路径的关联性。这项工作为理解合金凝固过程中的缺陷形成机制提供了原子尺度视角, 有望为调控金属材料微观组织与设计新型纳米孪晶结构提供理论支撑。