

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

E11-中子源与同步辐射先进材料表征技术
E11-Application of Advanced Neutron
and Synchrotron Radiation Technology
in Materials

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



E11. 中子源与同步辐射先进材料表征技术

分会主席：钟圣怡、王芳卫、刘栋、李曷、曾建荣

E11-01

中子多层膜光学技术进展

张众^{1,2}, 王占山¹, 伊圣振¹, 黄秋实¹, 王昆¹, 齐润泽¹

1 同济大学 物理科学与工程学院 精密光学工程技术研究所

2 上海理工大学

中子散射和衍射技术是现代科学检测技术的重要手段。中子谱仪是实现中子检测的核心装置。中子薄膜器件及其光学系统可以实现中子束传输、聚焦、准直、极化等状态调制，是构成中子导管、准直器、极化器、翻转器等中子光学装置的核心器件，可以提升中子传输效率，简化中子光学仪器结构，是中子谱仪功能实现和性能提升的关键。面向我国各类中子源应用谱仪开发的需求，同济大学精密光学工程技术研究所聚焦中子薄膜器件关键制作技术创新，解决了中子超镜制作和极化中子薄膜翻转元件的制作问题；以高端薄膜器件支撑了高性能中子光学系统的研制，成功研制出中子导管部件、高通量高空间分辨率的中子多通道 KB 聚焦系统、基于超镜的多层嵌套式中子聚焦系统，成功应用于国内大型和小型中子源的谱仪装置，支撑了我国小角散射、粉末衍射、自旋回波等中子谱仪的自主研发和升级改造。

E11-02

先进中子成像技术及其应用研究

陈洁¹

1. 中国科学院高能物理研究所

中子具有穿透能力强、对轻元素敏感、区分近邻元素、有磁矩等独特优势，在物质结构表征研究方面发挥着非常重要的作用。中国散裂中子源（CSNS）能量分辨中子成像谱仪（ERNI）是国内首台高分辨成像与衍射相结合的中子成像谱仪。基于 ERNI 发展的多尺度、多维度、多模态耦合的多种表征手段，可探测材料和器件内部数厘米深处的结构信息：常规中子照相和中子 CT 可提供试样内部的缺陷、孔洞、裂纹等信息；布拉格边中子成像和中子衍射可获得材料内部晶体结构、磁结构和应力应变的二维/三维空间分布；中子光栅成像可对材料内部的磁畴结构进行 3D 可视化。这为新能源、新材料、高端装备制造等领域中，材料和器部件的研发与设计、加工制造、运行与服役性能评价等研究与应用提供新的表征手段，同时将应用于文化遗产和考古、植物生理学、地质、深海等特色研究领域。

E11-03

Damage physics-informed tomography mechanics in additively manufactured components

吴圣川¹

1. 西南交通大学

Additive manufacturing (AM) processes give rise to complex internal architectures, which in turn lead to anisotropic mechanical properties. To identify failure origins, various microscopic instruments can well gather damage features. Nevertheless, these slice-based methods offer limited two-dimensional (2D) information, making it difficult to connect long-term service behaviors to internal events. To tackle this drawback, damage constitutive-informed mechanics enables the modeling of critical damage processes. For three-dimensional (3D) objects, cutting-edge techniques, such as time lapse X-ray tomography and neutron tomography/scattering with sample environments, can non-destructively probe those history events beneath the surface of the AM components. By combining powerful computers, machine learning algorithms, and a vast number of radiographs and images, we can reconstruct precise 3D renderings with internal structures. Additionally, to visualize damage features and their evolution, numerical modeling can be employed under real conditions, quantifying critical failure events and

then tailoring the fatigue resistance of AM materials. This work formulates a framework that integrates time-resolved 3D computed tomography (CT) with failure physics (5D CT). The ultimate goal of novel tomography mechanics is to trace vector damage fields, rather than solely relying on qualitative 2D images.

E11-04

Atomic-scale Structure Modulation and Electrochemical Application of Noble Metal-based Catalysts

Guigao Liu¹

1. Nanjing University of Science and Technology

Noble metal-based catalysts exhibit broad application prospects in electrochemical synthesis, energy conversion, and storage. However, their widespread adoption is constrained by high costs and scarcity. Enhancing the atomic utilization efficiency of noble metal-based catalysts remains a key research focus. This study focuses on atomic-scale structure regulation of noble metal-based catalysts and their applications in electrochemical hydrogen evolution and alcohol oxidation. Through strategies such as nanostructuring, alloying, defect engineering, and lattice engineering, we aim to optimize the electronic structure of catalysts, enhance their intrinsic catalytic activity, and thereby significantly improve the atomic utilization efficiency of noble metals. These investigations provide valuable theoretical insights and practical guidelines for developing more efficient electrocatalysts.

E11-05

中国散裂中子源微小角谱仪介绍和在材料结构表征中的应用

马长利¹, 左太森^{1,2}, 陈青^{1,2}, 王芳卫¹, 程贺^{1,2}

1. 散裂中子源科学中心

2. 中国科学院高能物理研究所

微小角中子散射是以中子作为探针, 探测从纳米到(亚)微米的介观尺度的研究手段。其测量的最大尺寸为 π/q 。这里 q 是散射矢量, $q=4\pi\sin(\theta/2)/\lambda$, θ 是散射角, λ 是入射中子波长, 基于此, 传统的小角散射, 包括小角激光、小角 X 射线, 和基于反应堆的小角中子散射, 为探测更大的尺寸, 即足够小的 q , 需要把散射角 θ 做到比较小, 这也是“小角散射”这个名称的由来。由于散射矢量是由入射波长和散射角共同决定, 所以基于散裂源的微小角中子散射还可以综合利用不同波长来涵盖更大的散射矢量范围, 从而达到更大的测量尺寸范围。小角中子散射谱仪测量的是样品的弹性相干中子散射, 观测的特征尺寸范围在 1~300 nm; 微小角中子散射, 通过将中子进一步聚焦, 比如采用透镜聚焦、磁聚焦、或者多孔/多狭缝聚焦的方式, 将测量的特征尺寸再提高一个数量级, 可以测量 1 nm~1 μ m 的特征尺寸。微小角中子散射可以检测材料中纳米到微米尺度的结构不均匀性, 应用领域十分广泛, 包括物理、化学、生物、材料等。实验中, 微小角中子散射实验测量样品绝对散射强度随散射矢量变化的信息, 在倒易空间, 给出样品从纳米到微米尺度的结构。通过分析散射曲线, 我们可以分析材料中各种散射体的尺寸、形状、含量、相对位置关系和相互作用。这里的散射体包括高分子、生物分子、悬浮颗粒、析出相、自组装结构、粉末、孔洞、磁涡旋、磁畴、浓度和成份涨落等。

E11-06

上海光源 BL19U2 线站方法学进展及 TR-SAXS 的应用研究

张建桥¹

1. 中国科学院上海高等研究院

上海光源 BL19U2 线站是我国首条专注于高时空分辨率溶液散射技术的先进实验平台, 依托第三代同步辐射光源的高通量特性, 在材料科学、生命科学、化学及能源等领域发挥关键作用。该线站以时间分辨

小角 X 射线散射为核心技术，突破了传统表征手段（如透射电镜的局限性，能够对溶液中纳米颗粒的动态自组装过程进行原位实时追踪。经过十年发展，BL19U2 线站在方法学上取得显著突破，开发了 SEC-SAXS，高压溶液 SAXS，SAXS-WAXS，GISAXS 等多种实验模式，并搭配了冷热台，原位拉伸，Stop-flow 等动态样品环境装置，实现了从静态结构解析到非平衡态动力学研究的覆盖。其毫秒级时间分辨率结合高灵敏度探测器，可捕捉瞬态组装中间态（如纳米团簇形成、相变临界点），为动态过程机制研究提供直接实验证据。以双亲性异质团簇 POM-DL-4POSS 的溶剂挥发诱导自组装研究为例，本团队通过 TR-SAXS 技术首次揭示了其与金属纳米颗粒自组装的不同的组装过程，阐明了动态路径的四阶段演化机制（单体→聚合团簇→中空球壳→超晶格），凸显了同步辐射 SAXS 在复杂溶液体系中的独特解析能力。目前，BL19U2 线站已支持生物大分子构象动力学、纳米药物载体组装、能源材料界面演化等前沿研究，未来将进一步融合 AI 驱动数据分析与多技术联用，深化对非平衡态复杂系统的多尺度认知，为新材料设计与机理研究提供不可替代的实验支撑。

E11-07

同步辐射吸收谱在能源材料界面反应机理研究中的应用

刘统¹

1. 国防科技大学

碳中和与碳达峰作为国家能源战略的核心目标，其实现亟需发展高效清洁能源技术，而新型能源材料的设计与优化是其中的关键。能源小分子反应、电解水制氢及氧还原反应等能源转换过程的研究，对推动绿氢规模化生产及可再生能源发展具有重要意义。同步辐射技术凭借其高时空分辨率与元素特异性，能够精准表征能源材料界面反应中原子/电子结构的动态演变，揭示反应的本质机理。本报告将系统探讨 X 射线吸收谱等多种同步辐射技术在能源材料反应中的应用，包括活性位点的精准鉴别、反应中间体的动态追踪以及材料性能与结构之间的定量构效关系解析，为高性能催化材料的设计与优化提供理论指导。

E11-08

开放性晶体结构的压卡效应研究

李万武¹，张琨¹，于德洪¹，李昂¹

1. 中国科学院金属研究所

压卡制冷技术是替代当前主流气体压缩制冷最有希望的方案，一直受到广泛关注。与原型新戊二醇相比，最好能获得熵变更大且温度跨度更宽的压卡制冷材料，这也是该技术的核心。具有“开放性晶体结构”的材料在压力下发生结构相变，为压卡材料的进一步开发提供了契机。本工作中，我们研究了两种典型材料 NbO₂F 和 ZIF-4(Zn)。对 NbO₂F，我们利用中子衍射和同步辐射衍射得到了 P-T 相图，证明了 NbO₂F 在 200~298 K 发生压力诱导的，证明了 NbO₂F 的宽温区压卡潜力。进一步，在 ZIF-4(Zn)中，我们利用 DSC 和变温变压拉曼光谱证明了 ZIF-4(Zn)在 140~298 K 发生压力诱导的 Pbca 到 P21/c 的相变，得到了超宽的制冷温区。而且 ZIF-4(Zn)的压卡效应显著，其熵变、绝热温变分别达到 426 J kg⁻¹K⁻¹ 和 15.1 K。进一步，我们利用变温高压非弹性中子散射证明了 ZIF-4(Zn)相变的晶格动力学机制归因于超低能刚性单元振动模式。而该模式主要控制振动熵，成为压卡效应的物理来源。本项研究实现了对制冷温区和熵变的同步优化，并且从分子级别的研究中得到了清晰的结构-性能关系，有利于推动压卡制冷技术的发展。

E11-09

复杂工程构件应力与织构的高分辨中子衍射表征研究

钟圣怡¹

1. 上海交通大学

工程部件服役中的多尺度应力与服役环境耦合作用是影响材料损伤与功能行为的核心要素。中子凭借

高穿透性优势，成为揭示材料多尺度应力-组织关联的关键手段。基于上海交大“河图”冷中子高分辨工程应力谱仪，突破了航空发动机单晶叶片等各向异性复杂构件的应力与织构表征瓶颈：通过开发高精度中子衍射数据分析方法，实现复杂构件内部三维应力分布与织构的高分辨定量解析，建立了微观应力场-宏观性能的精确关联模型，为材料强韧化机理研究及工程部件全寿命可靠性评估提供了关键实验支撑。

E11-10

中国先进研究堆（CARR）中子科学平台最新进展

贺林峰¹，李天富¹，孙凯¹，陈东风¹

1. 中国原子能科学研究院 核物理所 中子散射实验室

中国先进研究堆（CARR）是我国自主研制的 60 兆瓦大型多用途研究堆，其热中子通量达到 8×10^{14} n/cm²s，技术指标位居亚洲首位、世界前三。基于 CARR 建设的中子科学平台具备国际一流的技术水平。平台建设采用开放合作模式，联合中科院物理所、化学所、北京大学、人民大学、中南大学、德国于利希研究中心（FZJ）等国内外科研单位和高校，共同开展谱仪研制与技术攻关。目前已建成 15 台先进中子科学装置，构建了包含衍射、小角散射、反射、成像、活化分析等在内的完整中子实验研究体系。2025 年上半年运行数据显示，平台已累计提供 60 余天有效束流时间，有力支撑了材料科学、凝聚态物理、化学工程、生命科学等领域的创新研究。本报告将重点介绍：平台运行现状与开放共享成效；近期取得的重要科研成果与应用进展；未来发展规划与技术升级路线。

E11-11

循环载荷下镁合金析出强化的微观力学行为

汪华苗¹，刘楚昊¹

1. 上海大学

The microscopic-deformation mechanisms of an extruded magnesium alloy with and without precipitates [Guinier-Preston (GP) zones] subjected to cyclic deformation were investigated by in-situ neutron-diffraction (ND) measurements and crystal-plasticity modeling. The relationship between the macroscopic-cyclic-deformation behavior and the microscopic responses (particularly twinning and detwinning) at the grain level was established. The general deformation-mechanism evolution in the solution-state (ST) sample was similar to that in the peak-aged-state (PA) sample over fatigue cycles. Both samples plastically deformed by extension twinning during compression, and by a sequential process of detwinning and dislocation motion under reverse tension. The main difference is that in the PA sample, the presence of precipitating particles constrains the twinning/detwinning behaviors, which leads to an increase in the participation of dislocation slip in the plastic deformation and then induces a strengthening effect during cyclic loading. Based on the combination of the previous in-situ ND results and crystal-plasticity model, our work provides a comprehensive analysis of the interaction between the precipitation strengthening and twinning/detwinning mechanism under the whole multi-cycle cyclic loading and their effect on the macro- and micro-mechanical behavior of the precipitate-strengthened magnesium alloys.

E11-12

Zintl 相热电材料中层状结构与晶格热导率的中子散射研究

任清勇^{1,2}

1. 散裂中子源科学中心

2. 中国科学院高能物理研究所

声子准粒子主导非金属材料中的热传导，而低热导率对于热电材料至关重要，因为维持温度梯度可提升能量转换效率。由晶格非谐性引起的倒逆散射可以通过耗散声子振动来缩短声子平均自由程。这种非谐

性源于多种机制,如立体化学活性的 ns^2 孤对电子、弱原子键或共振原子键引发的晶格动力学效应,表现为声子软化和避免交叉现象。层状 Zintl 相化合物由共价聚阴离子层和金属层交替堆叠构成,这种独特的结构为通过改变层间离子键合强度来定向调控晶格非谐性提供了可能。我们通过中子衍射与非弹性散射研究发现,聚阴离子层的内部结构决定了非谐性的调控方式:具有单层聚阴离子的 $Sr(Cu,Ag,Zn)Sb$ 化合物因层间键弱化可以引发全局晶格软化,使热导率降低约 90%;而具有刚性双层聚阴离子的 $(Mg,Ca,Yb)Mg_2Sb_2$ 相虽将声子软化限制在特定能量范围,仍实现热导率下降约 70%。这种非谐性晶格工程有望为先进热管理材料的设计提供了一条全新思路。

E11-13

基于中子、同步辐射技术的工程材料、部件多尺度应力研究

李时磊¹, 王沿东¹

1. 北京科技大学

工程材料与关键部件中的多尺度应力,特别是残余应力,对其服役安全性和性能具有决定性影响。航空发动机、反应堆等复杂装备在制造和服役过程中,易因多尺度应力诱发疲劳开裂、应力腐蚀等失效模式,导致灾难性事故。准确表征和理解多尺度应力的分布、演化及其与材料宏观性能的关联机制,是当前面临的重大科学与工程挑战。中子衍射技术因其高穿透性和对晶格应变的敏感性,能够无损测量工程部件内部的三维、三向宏观残余应力。同步辐射 X 射线衍射则凭借其高亮度、高能量和微束聚焦能力,可实现材料表层及亚表层微区应力的高分辨测量。本研究依托中子衍射和同步辐射 X 射线衍射等大科学装置的独特优势,开展工程材料与部件的多尺度应力表征与演化研究。利用中子衍射技术,对核电关键焊接部件的焊接态及焊后热处理态残余应力进行了三维表征,分析了粗晶与织构对测量的影响,并与有限元仿真结果进行对比验证,为焊接工艺优化和结构完整性评估提供了依据。利用同步辐射 X 射线衍射技术,对铝合金喷丸强化层残余应力梯度分布及其在单轴拉伸载荷下的演化行为进行了原位研究,揭示了纳米晶区、形变孪晶区等不同深度区域的微观力学响应和应力释放机制。研究团队致力于融合中子、同步辐射及其他现场适用应力测量技术,突破原位热/力耦合加载下的多尺度应力表征、薄壁件厚度方向应力梯度测量等关键技术,旨在建立一套服务于航空航天大型复杂结构件(如飞机起落架、涡轮盘、飞船返回舱等)的多尺度残余应力复合测量技术体系与规范,为解决关键工程部件的应力评估、寿命预测和失效预防等问题提供核心技术支撑。

E11-14

基于同步辐射衍射的层状金属局域应力与微观变形机制研究

缪克松¹, 夏夷平¹, 吴昊¹, 曹国剑¹, 李学问¹, 范国华¹

1. 南京工业大学

层状金属因其独特的结构而展现出许多新颖的材料变形和断裂特性,例如高于混合定律的强度、不符合施密特定律的变形机制、反常的裂纹萌生和扩展规律等。借助同步辐射光的高亮度和微束特性,可以实现对变形过程中微观组织、应力状态、变形机制等材料信息的原位高空间分辨率表征,进而揭示层状结构调控层状金属力学响应的本征机理,为设计和研发新一代高性能层状金属提供方法基础与理论指导。

E11-15

基于同步辐射衍射技术的金属材料变形行为研究

夏夷平¹, 吴鹤², 杨一鸣³, 缪克松¹, 李学问¹, 范国华^{1,4}

1. 南京工业大学

2. 广东工业大学

3. 中国科学院高能物理研究所

4. 苏州实验室

金属材料的变形行为表现出明显的不均匀性和难预测性，先进的同步辐射衍射技术为金属材料变形行为的研究提供了新的范式。本报告将以高能 X 射线衍射、三维 X 射线衍射与劳埃微衍射三种先进的同步辐射衍射技术为主要手段，研究金属材料中变形行为相关的关键科学问题，为同步辐射衍射技术在金属材料中的应用提供了典型案例。在异质金属强塑性协同提升的案例中，利用同步辐射劳埃微衍射技术，首次在细晶/粗晶层状异质金属中发现变形初期的界面影响区，该界面影响区由低施密特因子的滑移系激活所形成；优化同步辐射高能 X 射线衍射技术追踪组元层的微观应力状态，讨论了多轴应力状态与反常变形机制的关联，该项研究有望丰富异构设计强韧化的基础理论。在晶体塑性有限元模拟多晶钛变形行为的案例中，结合同步辐射三维 X 射线衍射技术，建立了考虑真实组织与第二类残余应力的晶体塑性有限元模型，澄清第二类残余应力对多晶钛晶粒变形行为的影响机制，系统讨论了晶体塑性模型中滑移系临界分切应力和应变梯度理论在预测多晶钛晶粒变形行为方面的关键作用，该项研究有望为多晶体细观力学的模型优化提供新的思路。

E11-16

基于原位高能射线衍射技术的金属层状复合材料微观变形机理研究

姜爽¹，贾楠¹

1. 东北大学

借助基于中子源/同步辐射源的原位高能射线衍射表征技术，研究了具有简单层状构型的 Ti/Nb 复合体的微观力学行为。定量追踪了在拉伸载荷下各组元金属中的位错类型演化以及组元金属之间的交互作用，发现 Ti/Nb 复合体的良好强度-塑性匹配起源于由剪切带诱导的<c+a>滑移开动。进而，发现 Ti/Nb 复合体的塑性来源于加载过程中位错的动态演化，而不仅仅是加载后位错密度的提高。此外，通过定量表征组元金属之间的交互作用，发现相间相互作用是评估非均匀叠层材料中异变诱导（HDI）强/硬化的重要指标。最后，综合分析晶格应变、应力配分、微观变形机制、应力状态等演化特征，阐明了组元金属之间的载荷配分、残余应力在复合体各向异性塑性变形过程中的作用，以及应力状态与各向异性损伤之间的关联性。这些发现有助于推动金属层状复合材料的设计与性能优化，并为异构金属/合金走向实际应用提供理论指导。

E11-17

位错密度对中锰钢抗氢脆性能的影响

李一锋^{1,2,3}，成钊意^{1,2}，夏远光^{1,2}，徐菊萍^{1,2}，陈怀灿^{1,2}，殷雯^{1,2,3}

1. 中国科学院高能物理研究所

2. 散裂中子源科学中心

3. 中国科学院大学

中锰钢由于其优异的力学性能而受到汽车工业界的广泛关注。研究表明，通过调控中锰钢的制备工艺（如热处理、轧制或合金设计），可定向优化其微观结构。具体表现为调控残余奥氏体含量与稳定性、降低位错密度、引入高密度纳米析出相。上述微观结构的演变，都能够实现其抗氢脆性能的提升。最近有研究表明，对中锰钢进行温轧工艺处理可有效提升中锰钢的抗氢脆性能。与其余制备方法相比，温轧工艺具有成本低、工艺简单的优势，同时，可以实现锰钢的强度-抗氢脆性能平衡。本研究基于中子衍射实验，采用修正 Williamson-Hall(MWH)拟合等方法，系统评估了不同工艺下中锰钢(Fe-10.2Mn-2.8Al-1Si-0.2C(wt.%))的相成分，位错密度和奥氏体稳定性。研究发现，温轧工艺使得中锰钢位错密度显著降低，同时，变形过程中位错塞积效应减弱，进而导致中锰钢抗氢脆性能显著提高。

E11-18

Neutron scattering of plastic crystals for barocaloric refrigeration and heat storage

李昂¹

1. 中国科学院金属研究所

Plastic crystals, also known as orientationally disordered crystals, are characterized by dynamically and randomly oriented molecules located on highly symmetric lattices. As temperature decreases, an ordered state forms with aligned molecules and broken symmetry. Similarly, external pressure can also induce this phase transition, where colossal barocaloric effects are named for the significant thermal changes, offering a promising solution for solid-state cooling technology. Additionally, the plastic crystal state can be supercooled, eventually becoming orientational glasses (glassy crystals). A small pressure application can induce crystallization, releasing substantial latent heat. The orientational degree of freedom in plastic crystals can be effectively harnessed through a combined temperature-pressure cycle for refrigeration and heat storage applications. Given these properties, pressure-dependent neutron scattering, particularly quasi-elastic neutron scattering, has become highly valuable for studying these materials. In this presentation, I will report our recent findings from pressure-dependent neutron scattering and synchrotron X-ray scattering experiments on a series of barocaloric materials, including the prototype neopentylglycol, ultrasensitive NH₄I and carboranes, inverse barocaloric NH₄SCN, and supercooled (NH₂)(CH₃)C(CH₂OH)₂. These studies provide crucial insights into the behavior and potential applications of various barocaloric materials.

E11-19

基于中子表征技术的全固态电池研究

韩松柏¹

1. 南方科技大学

由于中子与原子核相互作用,中子的散射长度与原子序数无关,具有高穿透能力,与物质弱相互作用,特别是对锂元素敏感,这些独特优势使得中子技术成为锂离子电池原位机理研究的必备工具。中子大科学装置为探索电池运行期间涉及的各种相互关联的多尺度、多反应过程提供了不可替代的手段。中子表征技术可以高分辨、全尺度实时监测电池循环过程中电极和电解质内部的化学、形态和结构的多重动态演化;获取锂离子电池内部跨越原子、介观和宏观尺度以及涵盖静态和动态的综合信息,包括晶体结构变化、缺陷与无序产生、离子动力学、晶格动力学等;揭示锂离子电池内部的动态过程,包括锂离子传输路径、锂金属负极和电解质之间的界面演化(SEI的生成、锂枝晶的生长)。在过去的十年中,研究人员基于中子粉末衍射、中子对分布函数、小角中子散射、中子反射、中子成像、中子深度剖析、准弹性中子散射和非弹性中子散射等中子表征技术,测量电池循环期间纳米、微米及毫米级的结构、形态和化学变化,开展了高时空分辨和全时空尺度研究,为高安全、高性能全固态锂金属电池的研发提供了重要的理论和实验依据。本文通过阴、阳离子掺杂/取代调控晶体结构以提高离子导电性,基于中子表征技术揭示固态电解质中快离子传导的机理;同时,表征分析锂金属与固体电解质间的界面反应与锂枝晶生长的机理及其抑制策略,为设计下一代锂电池固态电解质提供重要的理论指导。

E11-20

磁相变与中子衍射

胡凤霞¹、沈保根¹

1. 中国科学院物理研究所

基于相变卡效应的固态制冷技术具有重要应用。磁序、极化序、晶格序改变伴随的磁热、电热、机械热效应是当前材料学和凝聚态物理的研究热点。我们介绍近期相关研究进展。La(Fe,Si)₁₃基化合物由于巨磁热效应的发现已经研究了20余年,但Co等磁性掺杂元素的占位信息并不清楚,这源于衍射手段对多种掺杂元素占位信息精修过程中的不收敛。我们利用中子和X射线对Fe/Co相邻元素不同的分辨能力,采取中子衍射和X射线衍射联合精修的方式,首次解析出LaFe_{10.6}Co_{1.0}Si_{1.4}中Co在两个Fe位置随机占据的特点,并且掺杂原子具有一定的在二十面体中心(8b)优先占据的趋势(在Fe的8b和96i位置,Co占位率分别为9.80%和7.52%)。在此基础上,我们利用从头计算研究了原子分辨的电子能带结构。结果表明,

Co 原子的引入通过增加 Co 亚晶格上的 3d 成键电子数改变电子转移性质；与不含 Co 的 LaFe_{11.6}Si_{1.4} 相比，铁磁区的自发磁致伸缩被抑制，磁有序诱导的晶格应力被削弱。被抑制的磁致伸缩与非谐晶格振动引起的正膨胀的平衡导致 LaFe_{10.6}Co_{1.0}Si_{1.4} 化合物在宽的铁磁区域出现因瓦效应。此外，电子局域函数的计算证实了由于 Fe 和 Co 之间更多的局域电子，Fe(Co)-Fe(Co)之间的金属键得到增强，从而提高了 Co 掺杂后合金的力学性能。

E11-21

甲烷绿色选择性催化氧化

吴文婷¹

1. 中国石油大学（华东）

天然气在全球能源结构占比逐渐上升，其高效利用推动着清洁低碳能源化工的发展。煤层气等散放、低品质天然气的甲烷含量低、不易燃烧、应用难度高，直接排放则温室效应严重。光催化氧化甲烷制甲酸、甲醇等液体含氧化学品是一种双赢策略，符合国家双碳战略和未来能源转型发展需求。通过催化剂活性位点结构的精确调控，可控活化 O₂/H₂O₂ 和甲烷，实现了甲烷的“绿色、高效、安全”光催化选择性氧化。为低品质天然气和散放甲烷气等难处理气体的液化提供借鉴，为酸性条件下过氧化物分解提供技术支撑，避免爆炸事故。

E11-22

钌电子结构调控促进生物质平台化合物定向转化

杨英¹

1. 中国石油大学（北京）

生物质平台化合物的高效定向转化是实现可再生资源高值化利用的关键，但其面临副反应严重、目标产物收率低等挑战。本研究通过精准调控钌(Ru)活性中心的电子结构，结合 X 射线吸收精细结构谱(XAFS)等表征技术，系统探究了 Ru 电子态对催化性能的调控机制。在乙酰丙酸转化体系中，XAFS 证实 Ru-Co 单原子合金中 Ru 的富电子结构显著促进 C=O 键和 H₂ 的协同活化，使 γ -戊内酯收率提升至 99%；Ru-Co 原子对与 Co 单原子/颗粒共存体系的对比进一步揭示了活性位点电子结构对 H₂ 解离活化的影响。在纤维素转化中，XAFS 动态追踪到 Ru-SO₃H 催化剂中 Ru 单原子位点主导葡萄糖加氢生成山梨醇，而 Ru³⁺、Ru⁴⁺位点分别调控异构化与逆羟醛缩合路径，实现 1,2-丙二醇和乙二醇的定向制备。研究建立了“电子结构-配位环境-反应路径”的定量关联模型，为生物质高值化催化体系的设计提供了原子级见解。

E11-23

共振 X 射线散射实验技术及其在功能薄膜中的应用

廖昭亮¹

1. 中国石油大学（北京）

共振 X 射线散射是一种基于同步辐射光源的先进探测技术，通过调节 X 射线能量接近靶元素的特定吸收边，利用原子内壳层电子跃迁的共振效应，显著增强材料的散射信号。该技术对元素种类、价态和局部结构高度敏感，可精确解析材料的电子结构、磁有序及轨道有序等微观信息，广泛应用于凝聚态物理、材料科学和化学领域，尤其适用于研究复杂氧化物、超导体和磁性材料中的微弱有序现象。其高元素选择性和相位分辨能力为揭示材料微观机制提供了独特手段。相较于中子技术，X 射线纳米尺度材料具有很强的灵敏度，因此是探测薄膜材料内部靶元素外壳层电子结构的理想工具。在共射反射计模式下 X 射线共振散射还可以表征深层电子结构信息，进行薄膜结构的层分辨解析。本次报告将介绍目前合肥先进光源量子材料共振 X 射线散射实验站的建设情况，以及该技术在氧化物异质结材料体系中的应用。

E11-24

基于大科学装置的放化分离体系表征技术

袁立永¹

1. 中国科学院高能物理研究所

核裂变能的开发利用依赖于放化分离材料与技术的不断发展和革新,其前提和基础是对放化分离体系进行全面深入的分析和表征。而放化分离涉及放射性且大多体系复杂,分析表征手段极其有限,是本领域面临的难题和挑战。基于大科学装置的表征分析技术具有常规技术无法比拟的突出优势:例如基于同步辐射装置的同步辐射技术具有对重元素灵敏,分辨率高、测试灵活性大,测试样品量少,方便封装和屏蔽等特点;基于散裂中子源的中子散射技术具有对轻元素敏感,不带电及穿透性强等特点。二者的结合必将为放化分离基础研究提供强有力的表征手段。本文分析了基于大科学装置的表征技术在放化分离研究中的优势,总结了近年来同步辐射/中子散射技术在放射性元素液液萃取分离和固相吸附分离中的应用研究进展,指出了当前面临的难题和挑战,并对未来技术发展方向进行了展望。

E11-25

功能复合固体的结构表征

侯香岩¹、祝乾¹、高爽¹、仲夏¹、曾建荣²、黄科科^{*1}

1. 吉林大学

2. 中国科学院上海应用物理研究所

功能复合固体通过化学调控多固体组分间作用强度,借助化学键合、界面匹配或能量传递等机制实现组分间功能的协同增益与新型功能的定向创制。精准解析功能复合固体的原子及电子结构特征,是深入挖掘其结构-性能内在关联、揭示构效关系本质规律的必要前提与核心基础。X 射线吸收谱(XAS)可在原子尺度解析材料中元素价态、配位环境及局域结构。在脱溶构筑复合固体研究中,以 NiFe_2O_4 为研究模型,结合穆斯堡尔谱和 X 射线吸收谱发现脱溶过程中八面体金属—氧键优先断裂,为尖晶石的定向脱溶提供重要设计依据。磁场辅助构筑的 $\text{FeO}/\text{Cu}_2\text{O}$ 复合固体中,Fe 和 Cu 的 L 边分析表明:磁场使 Fe 核外电子轨道能级分裂、重构 FeO_6 八面体晶体场,电子可从 Fe 3d t2g 经 eg 轨道传至 Cu 4s,形成多价态 Cu 负载的二维结构,提升 CO_2 光还原制乙醇活性。在 Cu/TiO_2 复合体系中,Ti 的 L 边研究表明,Cu 含量调控使 t2g 轨道能级下移、Cu 的 3d 电子向 Ti 的 t2g 轨道迁移并调控 t2g 与 eg 轨道电子占据比例,当 t2g 轨道电子占据最高时复合体系的 CO_2 光还原性能最优。在 $\text{Co}_3\text{O}_4/\text{CeO}_2$ 复合体系中,经傅里叶变换处理的 Co K 边得到的 R 空间证明了 Co-O-Ce 单位的存在,表明复合相间具有强化学相互作用。通过 Co L-edge 和 O K-edge 分析发现八面体 Co^{3+} eg 轨道占据率升高,表明八面体 Co^{3+} 自旋态升高并实现水氧化性能优化。此外原位同步辐射可追溯反应过程中中间体的变化。如在 $\text{Co-B@Co}_3\text{O}_4/\text{Co}_3\text{O}_4$ 复合固体体系的水氧化机制研究中,依托工况原位同步辐射技术对不同电压下中间体 $\text{Co-}^*\text{OOH}$ 的形成过程与去质子化行为进行定向表征,解析催化反应过程的核心关键。中子衍射技术基于中子与原子核的相互作用具独特优势,可精准测定功能复合固体中轻元素分布,是含轻元素材料晶格解析及占位研究的关键。将中子衍射与同步辐射联用能优势互补,可全面解析功能复合固体多组分的原子排列、键合状态及动态结构演变,为其性能优化与功能创新提供表征基础。

E11-26

中子衍射技术在磁性功能基元研究中的应用

邓司浩^{*1,2}、王聪³、何伦华^{2,4}

1. 中国科学院高能物理研究所

2. 散裂中子源科学中心

3. 北京航空航天大学

4. 中国科学院物理研究所

近年来, 自旋失措体系由于多种序参量(如自旋、晶格、电荷、轨道)的相互竞争出现丰富的性质而引起了研究者的极大兴趣。其中, 非共线/非共面型磁结构相关联的现象成为了关注的热点之一。在反钙钛矿化合物 Mn_3XN 中, 磁性原子 Mn 与体心的 N 原子可以形成 Mn_6N 八面体, 容易存在复杂的磁失措现象, 加上化合物中“晶格-自旋-电荷”的强关联, 从而形成丰富的非共线/非共面型磁性功能基元并表现出新颖的物性, 如负/近零热膨胀、压磁、压卡、磁卡、巨磁阻、反常霍尔效应等。由于中子不带电、具有磁矩、穿透性强、能分辨轻元素、同位素和近邻元素, 因此特别适用于无损研究物质的微观结构, 尤其是在材料磁结构研究方面具有不可替代的优势。本次报告中, 我们将介绍基于中子衍射技术对反钙钛矿化合物磁结构的解析和确定, 认识磁性功能基元与材料宏观性能的关联关系和调控机制, 主要包括: 非共线/非共面型磁体中磁场诱导的拓扑轨道动量存在、自旋手性的操控及其反常霍尔效应、稳定非共线反铁磁相而获得的零热膨胀行为。同时, 我们还将简要介绍中国散裂中子源单晶中子衍射仪以及通用粉末衍射仪的最新进展。

E11-27

负热膨胀化合物设计合成与构效关系

高其龙¹、陈骏²、邢献然²

1. 郑州大学

2. 北京科技大学

在精密光学、微机械和微电子器件等需要尺寸稳定性的所有技术应用中, 热膨胀控制是一个关键科学问题。负热膨胀(NTE)材料的出现为有效剪裁热膨胀带来了巨大希望。为了满足在宽温度范围内具有低热膨胀的工程应用需求, 在不影响基体性能的前提下, 考虑添加材料的热膨胀性能和数量至关重要。此外, 用于空间卫星和航天器时, 负热膨胀材料的密度成为满足超轻应用要求的关键因素。因此, 发现和设计具有超低密度性能的高性能负热膨胀材料在实际应用中无疑具有重要的意义。发现了四氰基化合物 $\text{AM}(\text{CN})_4$ ($\text{A} = \text{Li}, \text{Na}, \text{K}; \text{M} = \text{B}, \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$) 的反常热膨胀。随着 A 位原子半径的增加, 晶体结构从简单立方 $\text{LiB}(\text{CN})_4$ (P-43m) 变为面心立方 $\text{NaB}(\text{CN})_4$ (Fd-3m) 最后转变为具有四方晶系的 $\text{KB}(\text{CN})_4$ (I41/a)。利用同步 X 射线衍射观察到体热膨胀系数分别为: $\text{LiB}(\text{CN})_4$: $-18.9 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ($100 \sim 275 \text{ K}$)、 $\text{NaB}(\text{CN})_4$: $-92.4 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ($100 \sim 200 \text{ K}$)、 $\text{KB}(\text{CN})_4$: $111 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ($150 \sim 500 \text{ K}$)。其中 $\text{LiB}(\text{CN})_4$ 和 $\text{NaB}(\text{CN})_4$ 是一类新型负热膨胀材料, 具有超轻性质。在 $\text{LiB}(\text{CN})_4$ 和 $\text{NaB}(\text{CN})_4$ 的变温拉曼中观测到在低频范围内有异常蓝移的拉曼振动模式存在。晶格动力学模拟结果表明, 材料对称性越高, 低频声子能量越向低频移动, 相应振动模式的格林艾森参数负值越大, 对材料负热膨胀的贡献越强。进一步分析振动模式发现, $\text{NaB}(\text{CN})_4$ 中螺旋声学模式和非刚性振动模式对体系负热膨胀起着关键作用。之后对 M 位原子进行了 $\text{Al}, \text{Ga}, \text{In}$ 的元素替换, 晶体结构不变, 但增强了螺旋声学模式和非刚性振动模式对体系负热膨胀的贡献, 使得体系的负热膨胀行为加强, 设计出了 $\text{NaIn}(\text{CN})_4$ 超大负热膨胀 ($\alpha_v = -160 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$) 材料。

E11-28

Mn 基 $\text{MM}'\text{X}$ 体系合金的晶体与磁结构性质及相关物性的中子衍射研究

沈斐然¹、何伦华^{*1,2}

1. 散裂中子源科学中心

2. 中国科学院物理研究所

中子衍射技术与传统的 X 射线衍射技术相比, 都是基于晶体物质中的衍射效应来探究材料的结构信息。然而, 得益于中子具有本征磁矩、强穿透性、直接与原子核产生衍射行为等特点, 中子衍射技术具有诸多 X 射线衍射技术所难以实现的功能, 例如: 探测材料磁结构、解析材料局域结构信息、对轻元素/近邻元素/同位素的分辨、探测材料内应变等。 Mn 基三元金属间化合物 MnMX (M : 过渡族元素, X : 主族元素) 具有丰富的磁性与晶体结构性质, 并由此衍生出了磁热效应、压热效应、负热膨胀行为等相关物性。利用中国散裂中子源(CSNS)的通用粉末衍射谱仪(GPPD)并与美国国家标准局(NIST)中子科学中心的 BT-1 粉末衍射谱仪合作, 我们针对此类合金, 利用中子衍射手段对其晶体结构与磁结构性质进行更深入地系统性研究。

此前研究表明,正分 MnNiGe 合金的马氏体呈现螺旋反铁磁基态,在 MnNiGe 中引入 Fe 会引入 Mn-Fe 铁磁耦合并瓦解本征的 Mn-Mn 反铁磁耦合。我们利用中子衍射手段,在 MnFeNiGe 系列合金中首次成功解析出了其无公度圆锥螺旋磁结构。研究发现,具有无公度圆锥螺旋磁结构的 Mn_{0.87}Fe_{0.13}NiGe 与线性铁磁结构的 MnCoGe_{0.99}In_{0.01} 相对比,由于磁交换作用的不同,二者 Mn 原子最近邻与次近邻间距都出现差异,分别达到 3.61% 与 2.60%。这导致在马氏体相变过程中,Mn_{0.87}Fe_{0.13}NiGe 合金的晶格畸变度达到 8.68%,明显大于 MnCoGe_{0.99}In_{0.01} 合金的 7.49%。利用这种无公度螺旋磁结构诱导的显著晶格畸变,在粘结 MnFeNiGe 系列合金中实现了巨大 NTE 行为。其中,Mn_{0.87}Fe_{0.13}NiGe 合金的最大线性负热膨胀幅度达到 $\Delta L/L \sim -23690 \times 10^{-6}$,超过其平均晶格贡献的限制(-7121×10^{-6}),其负膨胀温度达到了 195K (80–275K)。在该工作基础上,我们利用变温中子衍射,在 Mn_{0.87}Fe_{0.13}NiGe 合金中,于 150 K 温度以下,发现了一种不同于正分 MnNiGe 螺旋反铁磁结构的新型摆线型反铁磁螺旋磁结构(CyS-AFMb)。原位磁场、压力下的中子衍射表明,5 K 温度下 CyS-AFMb 在 0.6 T 的低磁场转变为一种 70° 锥角的圆锥螺旋磁结构,其圆锥法线方向 l 仍然沿 b 轴,宏观表现为 canted FM 性;当磁场超过 1 T,磁结构逐渐进一步转变为一种线性铁磁结构。更重要的是,当压力超过 4 kbar 时 CyS-AFMb 演变成为一种锥角为 45° 易磁化的圆锥螺旋磁结构(45°CoS-FMa),过程中晶格仍保持 TiNiSi 型正交结构,但最近邻 Mn-Mn(d1)和次近邻 Mn-Mn(d2)键长发生了突变,使 Mn/Fe 位磁矩大幅下降 22%,并产生巨大压磁效应。0.35 T 磁场下压磁系数达到 5.34 emu·g⁻¹·kbar⁻¹,工作温区为 150 K (0-150 K); 2-5 T 磁场下压磁系数达到 9.03 emu·g⁻¹·kbar⁻¹,工作温区为 250 K (0-250 K),均超越之前报导的压磁材料。这两项工作利用中子衍射技术手段,深入地研究了 Mn 基 MM'X 体系合金中晶体结构与磁结构基于磁交换作用的关联,以及 MnFeNiGe 体系中无公度自旋结构随原子局域环境敏感和外场的丰富演化规律。不仅获得了巨大的负热膨胀行为与压磁效应,也为探索其他新颖物理现象(如:拓扑磁性)提供了极佳平台。

E11-29

中子散射技术在 Schwarz 晶体热输运研究中的应用

黄丹¹、傅皇留¹、吕孟²、刘恩克²、李秀艳¹、李昺^{*1}

1. 中国科学院金属研究所,沈阳材料科学国家研究中心
2. 中国科学院物理研究所,磁学国家重点实验室

具有 Schwarz 结构的极限纳米晶粒金属,因其优异的综合性能而受到广泛关注。这类材料具备三维孪晶网络结构,即便在极小的晶粒尺寸下,依然展现出接近熔点的热稳定性和接近理论极限强度的特性。然而,其微观结构对热输运行为的影响机制尚不明确。本研究以 Cu 和 Pt 为代表,系统测量了 Schwarz 晶体的低温热导率,发现其热导率在低温区间呈近似线性依赖关系,显著区别于传统块体金属。我们推测,这种异常的热输运行为源于 Schwarz 结构所带来的空间限域效应。为验证这一假设,我们利用中子全散射和非弹性中子散射技术,对 Schwarz 晶体 Cu 和 Pt 的局域结构和声子态密度进行了研究。中子全散射结果表明,Schwarz 晶体整体保持立方结构,但其原子对分布函数(PDF)显示出明显的峰劈裂特征,分别对应于基体相、无序的晶界相以及有序的晶粒相。结合 PDF 分析与透射电子显微镜观测结果,我们认为,声子在 Schwarz 结构中传播时,会受到三维互穿拓扑结构中无序晶界的空间限制,导致声子在有序晶粒中传播受阻,从而显著降低了整体热导率。非弹性中子散射结果进一步证实了这种观点,揭示出 Schwarz 晶体中存在显著的无序效应,表现为声子态密度峰的严重展宽,这可能是导致其低温热输运异常的关键原因。本研究通过建立 Schwarz 结构纳米晶粒金属的微结构特征、声子态密度与热性能之间的联系,突破了传统晶界散射理论的局限,为高强度、低热导纳米金属材料的设计提供了新的思路。同时,促进了中子散射技术在极限尺寸纳米金属材料研究中的应用和发展。该研究得到了中国科学院战略性先导科技专项(XDB0510302)的资助。

E11-30

超大承压设备焊接残余应力中子衍射测试与计算模型表征

蒋文春^{1*}, 万娱¹

1. 中国石油大学(华东)

焊接残余应力是导致超大承压设备疲劳失效和应力腐蚀开裂的重要原因，对设备的安全服役带来了巨大的挑战，准确评价其焊接残余应力分布对于指导焊接工艺、保障结构完整性具有重要意义。本文揭示了材质-中子总截面和波长的定量关系，建立了变波长厚壁残余应力中子衍射测试方法，实现了厚壁深部残余应力无损测试。提出了超大承压设备焊接残余应力“准稳态传热-固态相变-热弹塑性”高效高精度计算模型，建立了“温度-组织-应力”耦合计算方法。结果显示，发现厚壁焊态残余应力最大值位于表层~20%区域及沿厚度方向呈非对称抛物线分布的特征。进一步利用应力线性化理论将焊缝处应力分解发现，轴向和环向弯曲应力随着壁厚的增加而减小，膜应力在 0.7~0.8 之间，无明显的单调增减趋势；轴向弯曲应力和环向弯曲应力随径厚比的增大而减小，环向膜应力随径厚比的增加而单调增加；热输入不会改变应力的分布状态，但会影响应力幅值，热输入越高，应力幅值越大，且高应力区域越大。基于以上规律，提出了沿壁厚方向焊接残余应力的分布模型，为工程应用提供了残余应力快速计算方法。

E11-31

上海光源在产业方面应用

田丰^{1*}

1. 中国科学院上海高等研究院

上海光源从 2004 年底开始建设，至今已经走过了 20 余年。依托上海光源，利用先进同步辐射技术产出了一批高水平用户成果，已有 Nature/Science/Cell 249 篇，SCI 论文超过 1 万篇，其中一区占比 41%。还有多项成果入选中国十大科技进展新闻、中国科学十大进展、国家自然科学基金等国内外重大奖项。产业方面，上海光源也已与新能源、芯片、生物制药等领域领头羊企业有一系列地深入合作。本文拟介绍一下上海光源的最新应用成果。

E11-32

Ising-type antiferromagnetic order and gapped magnetic excitation in Shastry-Sutherland lattice

Er₂Be₂GeO₇

Erxi Feng^{*1}, Donger Cheng¹, Otkur Omar², Xiao Wang¹, Wentao Jin³, Zhendong Fu⁴, Lunhua He⁵, Wei Luo¹, Xintong¹, Gao Shang²

1. Institute of High Energy Physics, CAS / Spallation Neutron Source Science Center

2. Department of Physics, University of Science and Technology of China

3. School of Physics, Beihang University

4. Songshan Lake Materials Laboratory

5. Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences

The Shastry-Sutherland lattice (SSL) represents a canonical frustrated geometry known for hosting exotic quantum magnetic states. Er₂Be₂GeO₇, an insulating melilite-type compound with symmetry and orthogonally arranged Er³⁺ dimers, provides an ideal platform for investigating such phenomena. In this study, we investigate the ultralow-temperature magnetic structure and excitations of Er₂Be₂GeO₇ using various neutron scattering techniques. Specific heat measurements indicate long-range antiferromagnetic order below $T_N = 0.84$ K. Neutron diffraction reveals a commensurate non-collinear magnetic structure ($k = (0, 0, 0)$) of stripe-type like with ordered moment~ per Er³⁺, tilted around 18° from the c-axis due to the crystal electric field (CEF) effect. The temperature dependence of magnetic Bragg peaks suggests a two-dimensional Ising-type behavior. Inelastic neutron scattering identifies localized magnetic excitations at 0.43, 1.86, and 2.0 meV below the ordering temperature, exhibiting negligible dispersion and gradual suppression under weak magnetic fields. These findings provide insights into the complex magnetic behavior of Er₂Be₂GeO₇ and contribute to a deeper understanding of frustrated SSL systems.

E11-33**Soft Phonon Mode Triggering Fast Ag Diffusion in Superionic Argyrodite Ag₈GeSe₆**Xingchen Shen ^{1*}

1. Northwestern Polytechnical University

The structural coexistence of dual rigid and mobile sublattices in superionic Argyrodites yields ultralow lattice thermal conductivity along with decent electrical and ionic conductivities and therefore attracts intense interest for batteries, fuel cells, and thermoelectric applications. However, a comprehensive understanding of their underlying lattice and diffusive dynamics in terms of the interplay between phonons and mobile ions is missing. Herein, inelastic neutron scattering is employed to unravel that phonon softening on heating to $T_c \approx 350$ K triggers fast Ag diffusion in the canonical superionic Argyrodite Ag₈GeSe₆. Ab initio molecular dynamics simulations reproduce the experimental neutron scattering signals and identify the partially ultrafast Ag diffusion with a large diffusion coefficient of $10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. The study illustrates the microscopic interconnection between soft phonons and mobile ions and provides a paradigm for an intertwined interaction of the lattice and diffusive dynamics in superionic materials.

E11-34**The dynamics beamline at SSRF**Zhen Liu ¹, Lihua Wang ¹, Yong Jiang ¹, Huachun Zhu ¹, Te Ji ¹, Min Chen ¹, Xiangjun Wei ^{1*}

1. Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences

The dynamics beamline (D-Line), which combines synchrotron radiation infrared spectroscopy (SR-IR) and energy-dispersive X-ray absorption spectroscopy (ED-XAS), is the first beamline in the world to realize concurrent ED-XAS and SR-IR measurements at the same sample position on a millisecond time-resolved scale. This combined technique is effective for investigating rapid structural changes in atoms, electrons, and molecules in complicated disorder systems, such as those used in physics, chemistry, materials science, and extreme conditions. Moreover, ED-XAS and SR-IR can be used independently in the two branches of the D-Line. The ED-XAS branch is the first ED-XAS beamline in China, which uses a tapered undulator light source and can achieve approximately 2.5×10^{12} photons/s 300 eV BW@7.2 keV at the sample position. An exchangeable polychromator operating in the Bragg-reflection or Laue-transmission configuration is used in different energy ranges to satisfy the requirements for beam size and energy resolution. The focused beam size is approximately $3.5 \text{ } \mu\text{m}$ (H) $\times$ $21.5 \text{ } \mu\text{m}$ (V), and the X-ray energy range is 5–25 keV. Using one- and two-dimensional position-sensitive detectors with frame rates of up to 400 kHz enables time resolutions of tens of microseconds to be realized. Several distinctive techniques, such as the concurrent measurement of in situ ED-XAS and infrared spectroscopy, time-resolved ED-XAS, high-pressure ED-XAS, XMCD, and pump-probe ED-XAS, can be applied to achieve different scientific goals.

E11-35**X 射线吸收精细结构谱 (XAFS) 在异质界面电子态调控研究中的应用**廖伟豪 ¹、王道瑞 ¹、王硕 ¹、杨英 ^{1*}

1. 中国石油大学 (北京)

电解水制氢是实现绿色氢能经济的关键技术，其核心挑战在于开发高效稳定的双功能催化剂以降低析氢反应 (HER) 和析氧反应 (OER) 的过电位。在碱性条件下，水分子解离动力学缓慢及中间产物吸附/脱附效率低等问题严重制约了电解效率。近年来，界面工程通过调控催化剂异质界面的电子结构，成为优化活性位点、加速反应动力学的有效策略。然而，异质界面处原子级配位环境、电荷转移路径及金属-载体

相互作用等微观机制的精准解析，亟需先进表征技术的支撑。

本研究结合同步辐射表征技术，聚焦于 X 射线吸收精细结构 (XAFS) 在异质界面电子结构解析中的应用，以 CoNi/C 和 Ni₃S₂-MoS₂/NC 两类高效催化剂体系为例，探讨界面效应对催化性能的调控机制。通过调控 ZIF67 添加量制备的 CoNi/C 自支撑催化剂 (Co₅₀Ni/C-NF) 中，同步辐射 XAFS 技术揭示了 Co 和 Ni 的局域配位环境及高浓度 CoNi/C 界面 (约 4%) 的形成。实验表明，该界面通过强金属-载体相互作用促进了电子快速转移，显著提升了碱性析氢反应 (HER) 动力学，其过电位 (η_{10}) 低至 27 mV，Tafel 斜率为 45.1 mV dec⁻¹，并具备 72 h 的稳定性；针对 Ni₃S₂-MoS₂ 异质结体系，通过氮掺杂碳 (NC) 调控内置电场 (BEF) 的界面电荷分布，XAFS 结合理论计算证实，NC 的引入显著增强了 Ni₃S₂ 与 MoS₂ 的电子耦合，使异质界面水分解能垒降低 0.62 eV，OH⁻ 吸附能提高 0.22 eV。同步辐射 XANES 和 EXAFS 分析进一步揭示了 NC 耦合后 Ni 的氧化态演变及 NiOOH 活性相的重构机制，为双功能催化剂的设计提供了原子尺度依据。

E11-36

基于小角中子散射技术的铝基材料时效析出行为研究

张冉¹、朱士泽^{1*}、刘振宇¹、柯于斌²、肖伯律¹、马宗义¹

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国科学院高能物理研究所东莞分部中国散裂中子源

以往对时效析出行为的表征手段如透射电子显微术、三维原子探针技术等只能提供局部、静态和定性的信息，难以对材料的析出行为取得深入认识。小角中子散射技术能够对块体材料大范围的析出相进行原位、定量表征，完美契合了现有表征技术的缺口，是研究时效析出行为的有力手段。本工作以 Al-Zn-Mg-Cu 合金和 SiC/Al-Zn-Mg-Cu 复合材料这 2 种铝基材料为研究对象，结合透射电子显微术和小角中子散射技术研究了 2 种材料的等温时效、非等温时效以及应力时效析出行为，并探讨了相关机制。以期为铝基材料时效工艺的改进和力学性能的提升提供指导。

E11-37

非弹性中子散射技术在反常低热导材料 NiP₂ 晶格动力学研究中的应用

冯远文^{1,2}，李昂^{1,2*}

1. 中国科学院金属研究所

2. 沈阳材料科学国家研究中心

低热导率材料在热电转换、热障涂层和电子器件的热管理等领域有广泛的应用，深入理解热传导过程中的原子过程对于材料性能的优化具有重要意义。声子是晶格振动的能量量子，也是晶体材料中主要的热载流子。非弹性中子散射技术因其对晶格振动模式敏感，且能直接获得声子色散和态密度等关键信息，已成为研究材料晶格动力学的重要手段。晶体材料的声子平均速度越高，晶格热导率也越大。然而，本研究中发现 NiP₂ 材料具有极高的声子平均速度 (4597 m s⁻¹)，而晶格热导率却反常的低 (4 W m⁻¹ K⁻¹)，比同类声速材料 GaAs 的热导率小一个数量级。本研究利用澳大利亚核科技组织 (ANSTO) 的非弹性中子散射谱仪，系统地研究了 NiP₂ 的晶格振动模式和声子动力学特性。利用飞行时间谱仪 PELICAN 在单晶中观察到了声子沿不同传播方向的色散，与第一性原理计算 (DFT) 的声子谱结果相当吻合。在声子色散中存在 avoid-crossing 行为，这是一种 rattling 软振动模式的特征，表明晶格中存在很强的非谐性，这会导致声子在传播中被强烈地散射，从而抑制热载流子声子的传导能力，使晶格热导率降低。为了证实这一点，我们利用热中子三轴谱仪 TAIPAN 在 300-600 K 进行测试，以研究声子的温度依赖性。首先，我们通过对中子数据进行拟合，证实了 avoid-crossing 行为的存在；其次，低能的光学声子模式在升温过程中发生了明显的软化现象，说明晶格振动模式的非谐性增强，反映出低能的光学声子模式对热载流子声子的散射加强，从而抑制了声子的热传导能力。本研究利用非弹性中子散射技术对材料的晶格动力学进行了研究，从而揭示了材料中反常热输运行为的原子振动过程，为声子工程调控高性能热电材料以及热管理材料提供了重要科

学依据。

E11-38

上海光源 BL13SSW 线站及开放进展介绍

曾建荣¹

1. 中国科学院上海高等研究院

报告介绍上海光源稀有元素分析光束线站（BL13SSW）装置情况及相关实验方法。BL13SSW 光子能量可覆盖 5~60 keV，配备了多类型 X 射线探测器，可开展多种衍射和谱学相关实验。包括原子对分布函数（PDF）分析、吸收谱（XAS）、高分辨发射谱（HR-XES）、高分辨 X 射线粉末衍射（HR-XRD）和微束粉末衍射（ μ XRD）等。实验站空间较大，便于开展多类型在线实验，同时具备开展放射性样品实验的条件。报告同时将介绍该线站的用户开放进展情况。

E11-39

基于同步辐射单原子结构构型分析

王春栋¹

1. 华中科技大学

随着全球化的加速和技术的快速发展，能源需求持续增长。氢具有原料丰富、零碳、环保、高能量密度（142.35 kJ/g）等优点，被认为是“碳中和”背景下的理想能量载体。氢能及氢燃料电池产业的发展将是未来新能源产业发展中的关键方向之一。报告人将介绍在绿氢制取过程中反应动力学缓慢的阳极催化剂的设计及其电子态的调控；燃料电池阴极端还原 4 电子过程的调控，并探讨从局域电子态调控到自旋调控的一些初步尝试。此外也将介绍同步辐射谱学结合理论计算对催化反应活性位点的甄别方法。

E11-40

中国散裂中子源通用粉末衍射仪联合同步辐射在材料研究领域的应用

何伦华^{1*}

1. 中国科学院物理研究所

中子衍射技术与同步辐射作为材料表征的尖端手段，凭借其互补性优势在材料科学领域形成多维研究能力。中子散射技术以其直接表征材料磁结构的独特优势和卓越的穿透能力，在温度、磁场和应力场等复杂外部环境下的中子衍射原位表征技术，为建立材料的晶体结构与磁结构之间的构效关系提供了绝佳的研究工具。同步辐射以超高亮度、宽波段连续谱和皮秒级时间分辨率，精准解析材料动态过程与电子结构。二者联用正推动材料科学进入多维度解析时代。

通用粉末衍射仪(General Purpose Powder Diffractometer, 简称 GPPD)是中国散裂中子源(China Spallation Neutron Source, 简称 CSNS)首批建设的三台谱仪之一，主要用于深入探究物质的晶体结构和磁结构。经过应力改造，GPPD 现已同时具备粉末衍射 1 和先进应力/应变测试条件 2，为科研人员提供更为全面和精准的实验手段。GPPD 现具有高分辨率、宽 d 值探测范围和优异的信噪比，其各项指标均达到国际先进水平，可满足绝大多数先进材料精细结构的高精度表征。目前，GPPD 谱仪研究领域涵盖铁电、热电、非常规超导、负热膨胀、磁热效应等复杂磁性和量子材料的机理研究等国际研究热点；同时满足航空航天发动机、高铁等部件的无损检测、与国家安全相关的设备检测和数据测量等国家重大需求；并为锂离子电池、可燃冰、页岩等新型能源材料，芯片和半导体等信息器件材料表征分析等国民经济主战场提供有力支撑。本次报告将简要介绍通用粉末衍射谱仪在相关材料研究领域的最新进展，并通过展示谱仪典型用户实验实例，特别关注用户工作中与同步辐射技术协同联用形成多尺度研究工作，进而为国内外科研人员提供新的研究思路和实验基础。

未来，随着中国散裂中子源（CSNS）与高能同步辐射光源（HEPS）等大科学装置的协同运行，材料

科学研究将突破单一技术的局限，实现对材料“结构-性能-环境响应”的全维度解析。

E11-41

铝合金粉末烧结过程的原位 CT 研究

吴昊^{1*}、范国华¹、耿林²

1. 南京工业大学
2. 哈尔滨工业大学

放电等离子烧结（SPS）是一种电流/电场和机械压力辅助的烧结技术，在较低温度、较短时间内可实现高密度化。上述优点主要归功于 SPS 的局部加热机制，该机制在很大程度上取决于颗粒之间的接触形态。报告人团队开发了基于实验室 X 射线显微镜的原位 SPS 设备，实现对颗粒间接触形态的三维无损可视化，以 7055 合金为例，原位分析了该合金烧结过程中的孔隙演变过程，阐明了颗粒接触特征和孔隙形态对孔隙生长和消除的影响。

E11-42

中国散裂中子源工程材料中子衍射谱仪（EMD）建设完成与试运行进展：性能验证与应用展望

丁超¹，李小虎^{1*}

1. 中国科学院高能物理研究所散裂中子源科学中心

中国散裂中子源（CSNS）工程材料中子衍射谱仪（Engineering Materials Diffractometer, EMD）作为面向国家重大工程材料服役行为研究的关键平台，已经完成主体建设，成功获得稳定中子束流，初步完成束线调试与优化并进入试运行阶段。本报告将重点介绍 EMD 谱仪的核心设计目标、性能参数、试运行期间成果，以及其广阔的应用前景。

EMD 谱仪专为工程材料（金属合金、复合材料、陶瓷、焊接结构、增材制造部件等）的高精度、原位、无损表征而设计，核心研究目标包括三维残余应力/应变场分布、织构演化、相变动力学及微观变形机制的深度解析，尤其强调在热、力多场耦合极端环境下的测量能力。当前，EMD 谱仪工作波长范围为 0.5 Å 至 6 Å，与常见工程材料衍射需求高度匹配，并兼顾分辨率及样品穿透深度需求。最佳品质因子模式下，晶面间距分辨率($\Delta d/d$)为 0.3%，通量达到 9×10^6 n/cm²/s，应力扫描空间分辨率达到 $2 \times 2 \times 2$ mm³，并已经实现谱仪控制系统与数据采集系统的稳定运行，初步建立了数据可视化及快速反馈流程。EMD 集成了 100 kN 原位加载装置、双轴拉伸仪以及高温炉等样品环境，并实现钢铁材料 800°C 稳定加热环境的接入。EMD 已初步引入智能化样品扫描及定位系统，提升复杂形状样品测试效率及精度。谱仪已服务于高铁车轮、发动机叶片、焊接部件等部件内部三维应力场表征，并为新型结构材料在力、热等环境下内部微观结构演化机制的阐释提供支撑。

E11-43

基于同步辐射的超高分子量聚乙烯材料辐照效应原位表征及应用研究

张昊¹

1. 中国科学院上海高等研究院

针对超高分子量聚乙烯（UHMWPE）辐照改性过程中存在多尺度微结构动态演化解析缺失与微区功能调控精度不足的核心问题。利用同步辐射高亮度、高准直、时空分辨的全尺度结构原位表征的特性，同时以同步辐射为辐照和表征载体；以丙氨酸剂量片定量的辐照吸收剂量为桥梁，模拟传统电子束、伽马辐照源下的材料辐照效果，原位研究 UHMWPE 材料辐照交联过程中的多级结构演变规律。建立 UHMWPE 材料的“辐照参数-微观结构-宏观性能”一体化辐照工艺表征模型。同时基于上述演变规律，结合同步辐射光斑聚焦系统，实现高精度微米级辐照接枝技术，在单一材料表面实现多种功能（如抗菌、润滑）区域选择性构筑。项目成果有望为高价值多功能集成 UHMWPE 器件提供理论范式与技术内核，推动辐照改性

工艺从经验试错向跨尺度精准设计模式转变。

E11-44

激光增材制造粉末燃烧的同步辐射快速成像和衍射研究

李媛媛¹, 叶灵灵¹, 胡亚鸥¹, 张庆霞¹, 熊良华^{1*}, 董安平¹, 孙宝德¹

1. 上海交通大学

激光增材制造的安全性挑战主要源于激光与粉末床超快交互作用机制的复杂性, 尤其在高温高能聚焦激光束作用下, 金属粉末颗粒的熔化、凝固及其潜在燃烧行为难以精准预测。现有实验手段虽能分析宏观表层粉末燃烧, 但对瞬态高温反应的时空分辨率不足。我们创新应用同步辐射快速成像和衍射技术, 以微秒时间分辨和微米空间分辨来实时、原位、在线捕捉微束激光点火作用下金属粉末快速熔化和凝固行为, 量化燃烧过程中粉末飞溅与团聚现象, 阐明金属粉末从激光点火、燃烧到冷却全周期内粉末动态演化行为, 从原子尺度揭示金属粉末燃烧时晶格演化及相变行为。本研究将为激光增材制造关键工艺参数优化和主动抑燃策略开发等提供理论支撑, 最终提升激光增材制造过程的安全性与可控性。

E11-45

单晶中子衍射数据分析方法与应用

盛普聪¹, 钟圣怡^{*1,2}, Arsen Goukassov³, 王柏桦¹, 林皓¹, 李楠^{4,5}, 黄维⁶

1. Shanghai Jiao Tong University

2. National Key Laboratory of Neutron Science and Technology

3. Laboratoire Léon Brillouin, CEA-CNRS, CE-Saclay

4. AECC Beijing Institute of Aeronautical Materials

5. Beijing Key Laboratory of Aeronautical Materials Testing and Evaluation

6. HiSilicon Technologies Co. Ltd, Shanghai 201206, People's Republic of China

中子衍射技术作为一种重要的材料无损检测手段, 可以对单晶内部各类缺陷进行系统表征分析。相较于 X 射线等衍射技术, 由于中子束对于金属材料有着良好的穿透性, 中子衍射技术能够有效获取块状金属材料内部晶粒应变与取向统计分布信息。近年来, 出现各类中子衍射数据处理软件, 能够快速准确分析多晶样品的织构与应变信息, 但是仍无法满足目前对于单晶样品高精度表征的需求。为快速准确提取单晶样品中亚结构信息例如亚晶粒晶格应变与晶面取向, 本工作提出 3DSOC (3DStrainOrientationCalculator) 方法。该方法通过对一维摇摆曲线的拟合分析, 实现了在二维衍射信号中分离亚晶粒衍射峰, 并通过二维高斯函数拟合, 实现了对于亚晶粒晶格应变与晶面取向的同步测量, 并且能够满足双相单晶例如镍基单晶高温合金提取两相微观结构信息的需求。本工作基于单晶碳化硅与单晶镍基高温合金样品, 分别在绵阳反应堆“河图”谱仪与“麒麟”谱仪上开展中子衍射验证实验, 发现相较于基于二维压缩的传统数据处理方法, 3DSOC 方法首先能够有效提取亚晶粒衍射峰的衍射强度, 其次能够消除压缩步长对于最终拟合结果的影响, 最后 3DSOC 方法在不借助超晶格衍射峰的基础上, 也能准确完成对于双相单晶中两相结构信息的提取, 并提升中子衍射实验效率。

E11-46

热等静压扩散焊接制备的 Zr-W 和 Zr-Ta-W 界面的微观组织和力学性能分析

李言^{1,2,3}、魏少红^{1,2,4}、张锐强^{1,2}、陈怀灿^{1,2}、成钊意^{1,2}、殷雯^{*1,2,3}

1. 中国科学院高能物理研究所

2. 散裂中子源科学中心

3. 中国科学院大学核科学与技术学院

4. 中南大学材料科学与工程学院

由于钽具有较高的中子产额、焊接相容性以及辐射环境中优异的耐腐蚀性能，常用作固体钨靶的包覆层材料，应用于先进的散裂中子源设施中。然而，从安全角度来看，钽在散裂环境中捕获热中子具有较高的衰变热，限制了靶上束功率的增加，本文研究了锆合金作为钽包覆材料替代的可行性。锆合金由于具有优异的辐照性能，广泛用于核燃料棒包壳材料。模拟计算结果显示，在散裂反应环境中，锆的衰变热明显低于钽，且衰变时间较短，可作为低衰变热的靶材包覆层材料。然而，锆与钨之间的扩散焊接困难，界面结合质量差，锆钨界面会形成 ZrW_2 的脆性相金属间化合物层，为了解决这一问题，本研究在 Zr 和 W 之间引入缓释层金属 Ta，在 1000°C 和 100 MPa 下进行 2 小时的 HIP 扩散焊接，成功制备锆包覆钨靶材，通过扫描电子显微镜(SEM)、透射电子显微镜(TEM)和纳米压痕硬度实验分析了样品的相组成和机械性能。结果表明，在 Zr-W 界面形成了超高硬度的金属间化合物 ZrW_2 ；硬度为 13.2 GPa。相比之下，在 Zr 和 W 之间引入 30 μm 厚的 Ta 中间层后，Zr-Ta 和 Ta-W 界面显示出优异的扩散结合特性，防止了脆性 ZrW_2 相的形成，提高了 Zr 和 W 基体之间的结合性能。

E11-47

基于小角和自旋回波小角中子散射的材料跨尺度结构研究

刘栋^{*1}、宋坤¹、屠小青¹、罗翔¹、屈正¹、黄渤川¹、孙光爱¹

1. 中国工程物理研究院核物理与化学研究所

目前，中国绵阳研究堆拥有小角中子散射 (SANS)、超小角中子散射 (USANS)、自旋回波小角中子散射 (SESANS) 等多类小角散射谱仪。利用中子散射技术对同位素尤其是氢和氘的分辨能力，可为我们在解决高分子基材料中多相体系结构解耦合的难题方面提供广阔的设计空间和思路。团队近几年利用小角中子散射和 X 射线散射开展了聚烯烃、水凝胶、高分子纳米复合材料等高分子基材料体系的结构解耦合和结构性能关联机理等研究，研究过程中充分利用散射的原位联用、基于中子氢氘分辨的“衬度变换”、中子/X 射线天然“衬度变换”等技术，在复合材料多层级结构演化与宏观性能响应关联、Mullins 效应结构机理等方面取得了一定认识。近期，我们利用“衬度变换”自旋回波小角中子散射技术 (SESANS) 等技术研究了 3D 打印硅橡胶在微米尺度下的填料网络和结合胶网络的结构信息，拓展了硅橡胶复合材料体系跨尺度微结构认识，有望为研究复合材料增强机理提供更宽尺度的微观图像及新思路。

E11-48

同步辐射在各工况下的应用

陈明哲^{*1}

1. 南京理工大学

近年来，作为电网调峰削谷的重要手段之一，大规模电化学储能越来越受到研究者的重视和广泛关注。钠离子电池因其近乎取之不尽用之不竭的钠资源，被认为是大型储能装置的最优解决方案之一。聚阴离子型正极材料与其它正极材料相比，具有循环稳定性好，热稳定性佳，充放电电位较高等优点，因此近年来受到研究者的广泛关注。但因其质量比容量较低，制约了该类材料进一步发展。新型材料电池体系的突破需要解决更为基础的关键科学问题：(1) Fe 基类材料可逆电压的进一步提升及其提升机制；(2) 更高可逆容量的循环保持率问题等。这些均依赖于先进中子源及同步辐射原位技术的开发。本次报告将针对下一代正极材料探索过程中的材料价态及物相变化进行深入探讨。

E11-49

Mn 基层状氧化物阴离子氧化还原反应的同步辐射谱学研究

程晨¹、张亮^{*1}

1. 苏州大学

由于全球分布广泛的钠资源以及低廉的钠盐成本，钠离子电池未来有望应用于大规模储能领域。但传

统的钠离子电池正极材料主要依靠过渡金属相关的阳离子氧化还原和电荷补偿，能够提供的充放电容量非常有限。在高电压下激活阴离子氧化还原活性可以提供额外的容量，但其稳定性和可逆性差等问题限制了其实际应用。

报告人发展了多维度原位同步辐射谱学表征技术，建立了阴离子氧化还原反应的同步辐射谱学精准定量分析方法，提出了共价调控、位点选择性掺杂、介电效应调控等策略提升阴离子反应活性和稳定性：利用同步辐射共振非弹性 X 射线散射全谱图技术实现了阴离子氧化还原反应的定量分析，阐明了阴离子反应的可逆性和循环保持率；利用过渡金属-氧共价性调控策略将阴离子氧化还原可逆性由 73% 提高至 95%，采用同步辐射多谱学联用原位表征技术阐明了阴离子氧化还原反应与过渡金属迁移、电压衰减等的内在关联，为钠离子电池阴离子活性的高效利用提供了有效途径；率先提出利用位点选择性掺杂、介电效应调控等策略提升金属-氧框架结构稳定性，结合多维度同步辐射表征技术揭示了其对体相氧演变、表面氧气释放、结构相变的改善作用，验证了表面与体相协同改性对阴离子氧化还原反应活性和稳定性的重要性，对钠离子电池正极材料结构设计与阴离子活性调控提供了良好的示范作用。

E11-50

中子全散射与 RMC 模拟在离子导体构效关系研究中的应用

蔡冠群^{*1}

1. 四川大学

传统实验方法难以精准表征离子导体原子尺度无序结构，而中子全散射可分辨轻、重元素，高 Q_{max} 等特点使其成为研究离子导体无序结构的理想探针。本报告拟结合中子全散射实验与反向蒙特卡罗(RMC)模拟，以载流子为阳离子的锂离子导体 LLZO 和载流子为阴离子的氧离子导体亚碲酸铋为例，系统阐明它们的载流子分布、多面体畸变、输运通道动态重构等关联无序结构的协同演化规律，揭示其离子输运机理，为固态电解质构效关系研究提供独到的基础科学依据。

E11-51

分相半晶高分子力学响应结构起源的小角散射研究

宋坤^{*1}、刘栋¹、张名科¹、黄蕊¹、白亮飞¹、罗翔¹、屠小青¹、张焱¹、黄渤川¹

1. 中国工程物理研究院

小角中子散射(SANS)与小角 X 射线散射(SAXS)技术是研究高分子基材料体系结构性能关系的重要互补手段。中子的同位素分辨能力使得衬度变换 SANS 测量能够有效解耦合复杂体系的多层级结构信号，同步辐射 X 射线的高通量使得原位 SAXS 测量能够高分辨地探测材料微介观结构的演化过程。在本工作中，我们结合 SANS 与 SAXS 测量，准确获取两类典型分相半晶高分子体系(物理凝胶、氟弹性体)内部微相分离与结晶的分布，原位追踪单轴拉伸条件下样品微结构的演化过程，从而研究分相和结晶对高分子力学行为的决定机制。结合单轴拉伸作用下的力学行为和网络结构演变，揭示了相网络和晶体网络对分相半晶高分子力学响应的竞争效应。

E11-52

联合中子和同步辐射衍射研究过渡金属化合物微结构和电化学性能

朱可夫^{1,2}、何伦华^{*1,3}

1. 散裂中子源科学中心，中国科学院高能物理研究所

2. 国家同步辐射实验室，中国科学技术大学

3. 磁学国家重点实验室，中国科学院物理研究所

过渡金属化合物因其丰富的电子结构、可调控的微观结构以及优异的电化学性能，在能源存储、催化与结构功能材料等领域展现出广阔的应用前景。其中，微结构调控被认为是提升其性能表现的关键路径，

尤其是在多价离子存储与极端环境稳定性方面更具挑战性。为深入理解结构调控对材料性能的内在影响机制，本研究聚焦两类具有代表性的过渡金属化合物体系-V2O3 与 MAX 相材料，分别以缺陷工程和元素置换为核心设计策略，构建面向储能与耐电化学腐蚀应用的多尺度结构调控模型。充分利用中子衍射与同步辐射多技术协同优势，深入揭示其晶体结构演化、缺陷构型及其与电化学行为之间的耦合关系，为新型结构化学功能材料的理性设计与高性能应用提供理论依据与实验支撑。

在 V2O3 体系中，构建了高达 5.7% 的钒缺陷团簇，通过中子衍射、X 射线衍射、正电子湮没寿命谱与同步辐射 XAFS 等手段实现精确结构解析。缺陷调控后的 V2O3 在水系锌离子电池中展现出优异的循环稳定性，在 5 A g⁻¹ 条件下循环 30,000 次后仍保持 81% 的容量。密度泛函理论 (DFT) 计算结果表明，钒缺陷既可以提供更多有效的 Zn²⁺ 储存位点，又可以降低其在氧八面体中的迁移能垒和静电相互作用，进而提高材料的倍率性能与循环稳定性。在 MAX 相体系中，采用路易斯酸熔盐法实现 A 位元素的可控置换，成功合成出新型异质 MAX 相 Mo2Ga0.36Sn0.64C。通过中子衍射 Rietveld 精修、高分辨 STEM 及 EDX，定量揭示其由 Mo2SnC 与 Mo2Ga0.5Sn0.5C 两相构成的本征异质结构。通过原位同步辐射 XRD 首次观察到反应过程中中间相 Mo2(GaxSn1-x)2C 的形成过程，并进一步揭示了元素置换驱动下的相演化机制。DFT 计算进一步证实了 Sn 掺杂可有效提升结构稳定性，从而显著增强材料在酸碱盐环境下的电化学稳定性。

E11-53

镍基非晶合金的原子序构与电化学性能调控

朱贺^{*1}、姜宇¹、姚忠正¹

1. 南京理工大学

非晶合金，又称金属玻璃 (MG)，因其长程无序的原子结构与亚稳态能量特征，使其具有丰富的不饱和和活性位点和高表面能的特点，在电化学领域展现出巨大的应用潜力。然而，限制非晶合金进一步发展的一个主要挑战是对局部结构及这些结构如何与其性能相关的机制了解不够清晰，这使得建立有效的性能控制策略变得困难。随着表征技术的发展，大量实验表明非晶合金并非完全无序，而是在短程序 (2-5 Å) /中程序 ((5-20 Å) 尺度存在一定的有序结构。因此，我们从非晶合金短程/中程序结构这一新视角出发，结合同步辐射技术，探究了镍基非晶合金在电化学过程中的结构演变机制。在 Ni-Pd-P 非晶合金中，基于中程序结构主导的多形性相变现象，通过原子连通模式的调控实现了电化学传感性能的大幅提高。此外，我们还通过热处理工艺，实现了 Ni-Pd-P 非晶合金短-中程序堆叠的无序-有序调控，并基于局域结构的异质性首创了选择性去除法，成功构筑出纳米多孔 Ni-Pd-P 非晶合金，极大提高了合金的比表面积，是其电化学传感性能提高 20 倍以上。我们还采用了成分调制策略，揭示了 Ni-Mo-P-B 非晶合金中由成分变化引发了短程化学结构的无序-有序转变。以有序 Z10 多面体结构主导 SRO 的金属玻璃展现了更高的热力学稳定性和卓越的电化学性能，同时短程化学有序结构的引入也为金属玻璃的电化学进程提供了出色的稳定性。

E11-54

Enhancing ductility of laser powder bed fusion Ti-6Al-4V alloys by molybdenum addition

Leyun Wang^{*1}

1. Shanghai Jiao Tong University

The limited ductility of laser powder bed fusion (LPBF) Ti-6Al-4V (Ti64) alloys, caused by their brittle α' -martensitic microstructure, significantly restricts their broader application. This study systematically investigates the influence of Mo additions (0, 1, 3, and 5 wt.%) on the microstructure evolution, deformation mechanisms, and mechanical properties of LPBF Ti64 alloys. Incorporation of Mo notably transforms the phase composition from purely α' -martensitic (Ti64 and Ti64-1Mo) to a multi-phase structure containing metastable β and α'' phases alongside α' (Ti64-3Mo and Ti64-5Mo). Ti64-3Mo exhibits an optimal balance of mechanical properties, achieving significant improvements in uniform elongation (9.5%) and maintaining high yield strength

(955 MPa). From in situ synchrotron X-ray diffraction, enhanced ductility in Ti64-3Mo and Ti64-5Mo is attributed to the synergistic activation of multiple deformation mechanisms, including stress-induced martensite (SIM) transformation in metastable β , and twinning coupled with multiple slip modes in the α' phase. However, early activation of twinning prior to basal slip reduces yield strength. These insights underscore the crucial role of Mo as a compositional modifier, providing a practical approach for engineering strength-ductility combinations in additively manufactured titanium alloys.

E11-55

基于同步辐射 X 射线技术的聚合物固态锂离子电池材料离子输运行为研究

张鹏^{*1}

1. 中山大学，聚合物复合材料及功能材料教育部重点实验室，材料科学与工程学院

本研究基于同步辐射小角 X 射线散射 (SAXS) 为核心的多尺度表征技术，系统解析了聚合物基能源材料的结构-性能关系，指导高性能固态电解质与电极设计。针对固态锂金属电池，开发了 MG30/LiTFSI/丁二腈三元复合电解质 (MP46)，SAXS 结合红外光谱证实其微相分离基体中嵌入球状纳米离子簇的层级网络结构，赋予 5.1 V 宽电化学窗口及 0.2 mA cm⁻² 下超过 800 小时的锂沉积/剥离稳定性；匹配 LiFePO₄ 和 LiCoO₂ 正极时分别实现 1400 次循环 (2C, 80.1% 容量保持) 和 200 次循环 (4.5V, 92.1% 保持) 的长寿命。进一步通过橡胶混炼工艺制备 MG30/LiTFSI 电解质，SAXS 揭示离子簇网络结构，获得 30 °C 下 2.7×10⁻³ S cm⁻¹ 高离子电导率，支撑 160 °C 高温稳定运行的柔性超级电容器 (3.5V 电压窗口)。在电极界面调控方面，PMMA-g-NR 两亲性粘结剂通过“相似相溶”构建微相分离导电网络，SAXS 证实富碳区域与 LFP 粒子的有序分布，使 LFP||Li 电池在 10C 倍率下 1200 次循环后容量保持率达 64%；而 PMMA 基深共晶电解质经 SAXS/Raman 表征显示“聚合物-盐”连续离子通道，实现 0.497 mS cm⁻¹ 电导率。此外，SAXS 与同步辐射 μ -FTIR 联用揭示 PEDOT:PSS/离子液体热电材料中棒状微区构成的长程有序通路，获得 190 μ W m⁻¹ K⁻² 高功率因子；两辊混炼弹性体电解质经同步辐射 FTIR/SAXS 证实连续离子通道，使 Li||LFP 电池具备 2000 次循环寿命。研究表明：同步辐射 SAXS 技术可普适性解析离子/电子传输网络的空间构效关系，揭示层级离子簇网络是协同提升电导率与机械强度的核心特征，微相分离有序通道可优化电极界面动力学，而规模化工艺（如两辊混炼）与结构设计的结合是推进固态电池与柔性储能器件实用化的有效路径。

E11-56

双相不锈钢相分离的小角中子散射定量表征

刘渐陵^{*1}、舒忠良¹、陈超¹、周科朝¹

1. 中南大学

小角中子散射(SANS)作为一种高能物理实验技术，利用中子的高穿透性可以实现对合金块体材料的高通量表征。本研究聚焦双相不锈钢中铁素体里的相分离现象，开发了一种基于 SANS 数据的定量计算法表征调幅分解的波长与振幅，并应用于双相不锈钢服役条件下的高通量表征。针对相分离带来的低温脆性，本研究深入探讨了其产生机制和对力学性能的影响机理，并提出控制冷速、外加磁场等方式进行调控，为工业上延长双相不锈钢的寿命提供了方法指导。

E11-57

基于中子散射的多尺度正极结构演化解析与稳定性调控策略

冉沛林^{*1,2,3}、周小元¹、吴康^{2,3}、赵恩岳³、王芳卫^{2,3,4}

1. 重庆大学

2. 中国科学院物理研究所

3. 松山湖材料实验室

4. 散裂中子源科学中心

中子散射技术因其对轻元素（如 Li、O）的高灵敏度及对复杂结构体系的强穿透能力，已成为揭示锂离子电池正极材料内部结构演化规律的独特工具。针对高能量密度电池在高电压循环及极端空间辐照环境下面临的结构稳定性挑战，本研究选取三类典型正极材料，综合运用中子衍射与中子辐照技术，系统阐明了其多尺度结构失效机制，并提出了相应的稳定性调控策略。

在超高镍（ $\text{LiNi}_{0.9}\text{Co}_{0.05}\text{Mn}_{0.05}\text{O}_2$, NCM90）正极中，通过原位中子衍射精确追踪了其在充电过程中 $\text{Li}^+/\text{Ni}^{2+}$ 反位缺陷的动态演化，发现此类缺陷的形成与演变同高电压诱导的阴离子氧化还原反应密切相关，是导致晶格氧失稳与结构劣化的关键因素。基于该机制，通过 Mg 双位点掺杂有效降低反位缺陷比例，构建 Li-O-Mg 局部结构，显著抑制了 Ni 的迁移和氧的氧化过程，提升了材料在 4.5 V 高电压下的循环稳定性。对于富锂锰基（ Li_2MnO_3 ）正极材料，采用中子对分布函数（PDF），揭示了引入堆垛层错缺陷后，氧晶格的演化呈现局域化特征，从而稳定了阴离子氧化还原过程。改性材料在 100 次循环后仍保持 86% 的容量，并实现了低至 0.19 mV/循环的电压衰减，表现出优异的结构与电化学稳定性。在模拟太空辐照环境下，利用中国散裂中子源（CSNS）大气辐照谱仪的宽能谱中子束，对单晶 LiCoO_2 的辐照损伤机制进行了系统考察。结果表明，辐照诱生的微裂纹及层间滑移是破坏离子传输通道、削弱氧骨架稳定性的核心所在，进而导致容量衰减。进一步实验证实，减小颗粒尺度可有效缓解中子辐照损伤，为极端辐照环境下长寿命、高可靠性电池的设计提供了重要的结构优化新思路。

上述研究工作展示了中子散射与辐照技术在精确解析正极材料多尺度结构演化、动态追踪缺陷行为及评估辐照效应方面的独特价值。研究成果不仅深化了对高能锂离子电池正极材料在极端工况（高电压、辐照）下失效机制的理解，也为其性能提升和稳定性调控提供了关键的科学依据与创新策略。

墙报

E11-P01

力热耦合原位小角中子散射技术及应用研究

谢振华¹, 柯于斌²

1. 散裂中子源科学中心

研究力热耦合复杂外场条件下材料结构的演变对其力学性能和服役安全至关重要。然而受研究手段的限制，目前很难对复杂外场条件下材料的结构-性能关系进行原位表征研究。小角中子散射（SANS）技术是无损探测材料内部 1-100 nm 结构的利器，同时凭借中子能区分近邻元素和强穿透性的特点，SANS 被广泛应用于复杂外场条件下材料微介观结构的原位探测。基于中国散裂中子源小角散射仪，我们搭建了最大力值为 10 kN 的原位拉伸平台，并配备了 -90~1000 °C 的控温设备。利用原位拉伸平台，我们对聚合物复合材料、水凝胶和合金等多种材料开展了力热耦合条件原位 SANS 实验研究。通过对原位 SANS 数据进行按时间切割处理和按角度规约分析，得到在力热耦合条件下材料中纳米结构的动态演化规律，为材料结构稳定性研究和服役安全性评价提供技术支撑。

E11-P02

工程材料多尺度变形行为的原位中子衍射动态表征

杜文婷¹, 李小虎²

1. 中国科学院高能物理研究所/散裂中子源科学中心

本研究在中国散裂中子源（CSNS）工程材料中子衍射谱仪（EMD）上，成功开发了一套集力学加载与原位表征于一体的多尺度测试系统。通过集成定制化力学加载装置并优化谱仪控制系统，实现了中子衍射信号与三维应变场数据的同步采集，为工程材料变形机理研究提供了新的技术手段。基于该原位表征平台，系统研究了多种工程材料在不同温度条件下的拉伸/压缩变形行为，重点阐明了材料微观结构演变与宏观力学性能的关联机制。主要取得以下研究成果：1. 在 TA16 钛合金研究中，通过对比分析不同应力状态下的中子衍射谱，首次揭示了拉伸和剪切载荷对晶格旋转行为的差异化影响机制；2. 针对双相钢异质结构

材料,通过原位观测相界区域的应变/应力分布特征,证实了异质界面应变失配效应对材料强韧化的关键作用,这一发现为高性能异质结构设计提供了重要参考;3. 在 CrCoNi 中熵合金体系研究中,通过系统改变晶粒尺寸并结合原位中子衍射分析,明确了多机制协同变形的临界条件,阐明了位错滑移、层错形成和变形孪生三种机制共同作用对材料强塑性协同提升的贡献机制。

E11-P03

非磁性离子掺杂对阻挫磁体 MgCr_2O_4 磁行为的影响

周付喜^{1,2,3}、何政^{1,2}、王霄^{1,2}、何伦华^{1,4}、赵燕春^{3,5}、冯尔玺^{*1,2}

1. 散裂中子源科学中心
2. 中国科学院高能物理研究所
3. 兰州理工大学,材料科学与工程学院
4. 中国科学院物理研究所,北京凝聚态物理国家研究中心
5. 兰州理工大学温州泵阀工程研究院

几何阻挫磁性体系因自旋相互作用的竞争而表现出丰富的磁相变与奇异磁激发。 MgCr_2O_4 作为经典的海森堡反铁磁 3D 阻挫磁体,表现出复杂的基态磁结构和自旋共振与自旋波共存的磁激发,然而其共振磁激发模的来源存在争议。通过非磁性元素掺杂压制磁有序,排除非弹性中子散射实验中自旋波信号的干扰是理解共振磁激发模的方法之一。本研究探索了非磁性元素掺杂 MgCr_2O_4 样品的合成条件及其物性。通过固相反应分别制备了 Ga^{3+} 和 Cd^{2+} 掺杂的 MgCr_2O_4 系列粉末样品。随着 Ga^{3+} 的掺杂量从 0 增加至 20%, 样品晶格常数表现出反常的减小,中子粉末衍射谱结构精修表明是由于 Ga^{3+} 离子同时占据 Mg^{2+} 和 Cr^{3+} 两个阳离子位置的混掺现象造成的。并且磁性测量表明, Ga^{3+} 掺杂在 0-10% 范围内使材料逐步由反铁磁有序转变为玻璃态, 20% 的 Ga 掺杂压制了反铁磁转变。这可能是由于 Ga^{3+} 掺杂稀释了磁性位点引起的。 Cd^{2+} 离子掺杂样品的结构精修结果显示, Cd^{2+} 仅替代了部分 Mg^{2+} 离子。磁化率结果显示, Cd^{2+} 掺杂在较低掺杂浓度即诱发了显著的自旋玻璃行为,在 10% 掺杂比例下,反铁磁相变被完全压制。这可能是由于 Cd^{2+} 掺杂引起晶格畸变进而扰乱磁性交换路径,抑制了材料中反铁磁有序。因此, 10% Cd^{2+} 掺杂的 MgCr_2O_4 可以用于进一步的非弹性中子散射实验观测共振磁激发。本研究结果为理解 MgCr_2O_4 中共振磁激发模的来源提供了样品及前期研究基础。

E11-P04

超高分辨中子衍射仪和电池材料研究

季文海¹, 缪平²

1. 散裂中子源科学中心

中国散裂中子源(CSNS)的超高分辨中子衍射(TREND)于 2024 年 7 月出束成功,并在今年投入试运行,是我国首台,世界第三台超高分辨中子衍射谱仪,最高分辨率($\Delta d/d$)可达 0.032%。中子衍射技术在能源材料的研究中有其独特优势。利用中子不带电、对轻元素敏感和穿透性强等特点,采用 TREND 谱仪对电池器件进行无损检测,能够实现对电极材料晶体结构的精确探测,尤其适用于电极材料中轻元素定位、锂离子迁移路径、充放电过程中的相变行为及应力演化等核心问题的原位研究。目前 TREND 谱仪已经实现常规原位中子-电化学测试,并在积极拓展极端测试环境,未来将实现结合高压、高低温等测试环境,揭示电极材料在不同服役条件下的反应机理和失效分析,推动高性能和高安全性电极材料开发。

仅发表论文

E11-PO01

基于同步辐射与小角中子散射技术的反应堆结构材料析出相/团簇研究

徐超亮¹, 贾文清¹, 全琪炜¹, 李远飞¹, 尹建¹, 钱王洁¹, 钟圣怡², 张崇宏³, 刘向兵^{*1}

1. 苏州热工研究院有限公司
2. 上海交通大学
3. 中国科学院近代物理研究所

反应堆压力容器 (RPV)、堆内构件 (RVI) 是核反应堆的核心部件, 直接关系到反应堆的运行安全和效率。在压水堆工况下, RPV 与 RVI 处于高温、高压、一回路水腐蚀和强中子辐射的运行环境中, 将出现辐照脆化、辐照加速应力腐蚀开裂 (IASCC) 等辐照效应, 导致材料力学性能降低或失效。上述辐照效应的出现与辐照后相转变/团簇形成密切相关。

在 RPV 辐照后的团簇形成方面, 基于 352.8 MeV 的 Fe 离子辐照后的 RPV 钢开展了小角中子散射 (SANS) 与同步辐射 X 射线掠入射小角散射 (GISAXS) 测试。SANS 结果表明, 未辐照和 0.1 dpa 样品分角度信号区分不明显, 未检测到明显的团簇形成信号; 辐照 1.0 dpa 样品 0° 与 90° 散射强度区分明显, 即样品内部出现磁响应, 检测到团簇形成; 进一步分析发现辐照至 1.0 dpa 后形成的 Mn-Ni 团簇尺寸在 2 nm 范围以内。GISAXS 分析发现, 未辐照和 0.1 dpa 样品 Porod 图呈明显线性关系, 未检测到显著的团簇形成信号; 1.0 dpa 样品 Porod 图呈明显非线性关系, 可确定形成了 Mn-Ni 团簇, 进一步分析后确定团簇尺寸也在 2 nm 内, 与 SANS 结果基本一致。

在堆内构件用不锈钢辐照后相转变方面, 基于 6MeV Xe 辐照后的 Z6CND17.12 不锈钢开展了同步辐射掠入射 X 射线衍射 (GIXRD) 测试, 结果表明, 未辐照不锈钢观察到 FCC 相衍射峰 $\gamma(111)$ 、 $\gamma(200)$ 和 $\gamma(220)$, 未观察到 BCC 相的衍射峰, 这表明奥氏体不锈钢经历了完全的固溶处理; 不锈钢在辐照至 2 dpa 后出现 BCC 相衍射峰 $\alpha(110)$, 表明部分 FCC 相演变为 BCC 相, 随着辐照损伤量增加, $\alpha(110)$ 峰更显著, 并出现新的 BCC 相衍射峰 $\alpha(210)$, 表明 BCC 相形成更显著, 不锈钢中 BCC 相含量随辐照损伤量的增加显著升高。