

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

E17-相场理论与应用

E17-Phase-field theory and its applications

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



E17 相场理论与应用

分会主席：赵宇宏，孙东科，张利军，邢辉，黄厚兵，洪子健

E17-01

铁电材料的相场摄动法及其应用

王杰^{*1}，郑斯峥¹

1. 浙江大学

铁电材料的微观畴结构对其宏观弹性、介电、压电和热导等特性具有决定性影响。在力电载荷作用下，畴结构会自发演变，从而显著改变材料的宏观物理特性。尽管现有理论模型能较好描述畴结构的准静态演化，但在刻画其弹性动力学特性和稳定性方面仍有明显不足。因此，构建畴结构弹性动力学特性和稳定性的定量分析模型，对于铁电材料及其器件的性能研究与设计具有重要意义。本研究基于铁电相场模型与线性摄动理论，提出了一种预测畴结构弹性动力学特性及稳定性的相场摄动模型（PFPM）。该模型需与相场模型耦合使用，二者关系类似于密度泛函微扰理论（DFPT）与密度泛函理论（DFT）。首先利用相场模型获取平衡态畴结构作为参考态，进而推导出极化相关的空间分布材料系数（如弹性模量，压电系数和介电刚度），将其代入 PFPM，即可高效求解畴结构的色散曲线，等频曲线及谱响应等动力学特性。

基于 PFPM，我们揭示在 $[(\text{PbTiO}_3)_m/(\text{SrTiO}_3)_n]_p$ 超晶格中，极性涡旋的面外振动模式在临界外延应变或温度下会发生软化。这种模式软化在涡旋核心形成轴向极化，从而引发手性相变。深入分析表明，局部负介电常数在相变邻近处轴向极化的增强振动中起关键作用。该发现不仅阐明了极性涡旋手性相变的本源，更为铁电系统拓扑结构与拓扑相变的动力学行为提供了重要新见解。采用 PFPM，研究进一步揭示铁电块体材料中存在显著的 SV 波带隙，其源于相邻畴壁间扩散畴壁的负剪切模量。在铁电薄膜中，扩散畴壁处的局域剪切振动会引发多重带隙，通过调节畴壁间距可有效调控带隙。这一结果不仅阐明了扩散畴壁对铁电材料弹性波传播的关键作用，更为基于铁电周期畴结构设计主动可调的亚太赫兹声学超材料提供了新思路。

E17-02

疲劳断裂相场模型的航空航天应用探索

易敏^{*1}

1. 南京航空航天大学

相场模型是一种利用序参量来描述界面及微结构时空演化的理论方法，以有限厚度光滑扩散型界面替代零厚度突变型界面，在微结构演化，多场耦合建模，断裂等领域具有独特优势。报告人将分享最近在疲劳断裂相场模型及其航空航天应用探索方面的研究进展，具体包括：1）经典疲劳理论驱动的疲劳断裂相场模型；2）融入增材缺陷特征的疲劳断裂相场模型；3）疲劳断裂相场模型在激光冲击强化叶片，激光增材修复叶片，液体火箭发动机推力室等航空航天结构寿命评估中的应用探索。

E17-03

铁电斯格明子的可控拓扑相变

洪子健^{*1}

1. 浙江大学

斯格明子是一类具有拓扑保护性（拓扑电荷为 ± 1 ）的准粒子，近年来在凝聚态物理领域获得广泛关注。在铁磁材料中，斯格明子的形成通常需要借助 D-M 相互作用。而在低维铁电材料中，最近发现通过引入弹性能，电能和尺度效应的相互竞争，可以形成稳定的铁电斯格明子。然而，铁电斯格明子在外场作用下的动力学过程尚不明晰。相场模拟是一种介观尺度的模拟方法，被广泛应用于预测铁电畴结构及其在外场作用下的响应。在这次报告中，我将介绍本课题组通过相场模拟预测铁电斯格明子拓扑相变的一些最新进展，特别是它在力、电等外场耦合作用下的拓扑变换与操控。研究表明，在不同外场的作用下，铁电斯格明子展现出了截然不同的翻转路径，并生成了许多奇异的新型拓扑相。这些研究展现了铁电拓扑学丰富的物理内涵，并为铁电斯格明子等拓扑相的未来器件应用奠定了基础。

E17-04

一种描述相变制冷的统一相场理论框架

汤启云^{*1}

1. 东南大学

相变过程通常伴随能量的消耗或释放,进而使得物体冷却或者升温,可用以调控物体温度。蒸发制冷作为一种典型的相变降温现象,在实际应用中广受关注。由于蒸发过程焓变和物质-能量输运动力学之间存在强耦合,如何揭示相变调控温度机理仍存在挑战。我们从气-液共存系统自由能出发,利用能量守恒和物质守恒,推导耦合的物质-能量运输耦合方程,用以研究蒸发诱导冷却过程[1]。该方法可在气-液界面处自发产生蒸发降温,且预测结果与最近实验一致。此外,我们还发现通过禁止液体-环境热交换可将冷却幅度提高 2~4 倍。该方法为探索蒸发,升华或凝聚等不同相变过程调控温度提供统一理论框架。

E17-05

热力学驱动相场模拟 γ' 相强化 CoNi 基高温合金李永胜^{*1}, 牛堃宁¹, 张赞¹, 单野¹, 王晟龙¹

1. 高端装备铸造技术全国重点实验室, 先进金属及金属间化合物材料技术工信部重点实验室, 南京理工大学 南京 210094

高温合金作为先进动力系统的材料,其显微组织演变与力学性能的关联机制一直是材料设计的研究重点。近年来,基于 L12 有序 γ' 相强化的 CoNi 基合金体系因其优异的高温性能及较低的密度,成为极具潜力的新型高温合金。本研究通过集成热力学计算,相场动力学模拟与实验验证,研究合金元素对 γ' 相稳定性,组织演化动力学及力学性能的调控规律。

通过 Thermalcalc 和 JMatPro 设计具有 $\gamma + \gamma'$ 两相区的 CoNi 基合金,实验验证预测成分和显微组织性能,通过相场 (Phase-field) 模拟拓展成分区,获得系列成分合金的显微组织,演化动力学规律。结果表明: γ' 相的析出过程呈现典型的形核-生长-粗化三阶段特征,其动力学行为受成分依赖的界面能和弹性应变能共同调控。随着关键合金元素含量的变化, γ' 相的尺寸分布,体积分数及 γ/γ' 两相晶格错配度发生显著改变,这种显微组织演变直接影响了合金的力学性能。通过建立热力学-动力学耦合模型,揭示了溶质元素在 γ/γ' 两相间的分配行为及其对相稳定性的影响机制。实验表征结果验证了模拟预测的显微组织特征,证实了相场模型在描述共格析出相演化过程中的可靠性。

本研究阐明了合金成分-显微组织-力学性能之间的构效关系,证明了相场模拟作为定量预测工具在高温合金设计中的有效性。研究成果不仅为理解 γ' 相强化机制提供了理论基础,更为开发新型高性能 CoNi 基高温合金提供了多尺度研究方法学指导,对推进计算材料学在合金设计中的应用具有重要意义。

E17-06

连接近平衡与远平衡的合金凝固相场模型

王雷^{*1}, 李越¹, 王志军¹, 王锦程¹

1. 西北工业大学

在相场模拟中,准确映射吉布斯-汤姆森 (G-T) 条件对于获得可靠且符合实际的凝固组织至关重要。然而,现有相场模型难以同时满足近平衡和远离平衡状态下的 G-T 条件,这限制了相场方法在增材制造等宽速度范围场景中的应用。本研究提出了一种新型相场模型,通过将界面浓度场重新定义为守恒项 (描述长程扩散) 和非守恒项 (描述扩散界面内的短程再分配) 两个分量,成功桥接了两种状态。该模型具有完全变分特性,可通过薄界面分析严格解析推导模型参数,并通过引入短程再分配通量的自由能耗散,在薄界面极限下提供额外自由度,从而协调近平衡与远离平衡的 G-T 条件。研究通过模拟带状组织验证了模型的有效性,清晰捕捉了从近平衡态到远离平衡态的转变过程。这一突破为增材制造,激光加工等极端非平衡凝固过程的显微组织预测提供了新的模拟工具。

E17-07

凝固过程中气-液-固多相流体的相场模型与介观格子 Boltzmann 方法

湛承杰¹, 柴振华^{*1}

1. 华中科技大学

本报告首先给出了一类描述凝固过程中气-液-固多相流体系统的相场模型。在该模型中, 我们提出了一种气-液-固多相流体系统的总自由能, 它在没有固相的情况下自动退化为气-液两相系统的能量, 而在气泡消失时退化为枝晶增长问题的能量形式。我们进一步通过极小化总自由能得到了气-液-固多相流体系统的宏观控制方程, 并考虑了各向异性及接触角的影响。此外, 为了描述流体流动, 在包括气体, 液体和固体区域的整个域采用了不可压 Navier-Stokes 方程, 并借助简单的扩散界面方法考虑了流固相互作用。为了检验当前相场模型的有效性, 我们利用介观格子 Boltzmann 方法研究了具有接触角或 Marangoni 效应的气-液流动, 枝晶增长以及存在气泡的凝固问题, 数值结果展现了本模型和数值方法在研究这类复杂问题方面具有良好的性能。

E17-08

相场法模拟在区熔提纯及非平衡凝固过程中的应用

董祥雷^{*1}, 胡俊华¹, 石正达¹, 张豪然¹, 郭春文¹, 赵红亮¹

1. 郑州大学

本研究以多取向/多组元定量相场模型为基础, 重点关注其在区熔提纯, 非平衡凝固过程中的应用。首先以多元碲合金为对象, 基于跨尺度方法来阐明结构演变与杂质分离效率之间的关联, 揭示界面结构和晶粒竞争驱动下晶体择优取向的转变规律, 为开发有针对性的深度提纯技术提供了理论指导; 其次以镍基高温合金为研究对象, 探究其在快速凝固过程中非平衡组织的形成与演变规律。结果表明, 快速凝固下枝晶尖端发生平面晶转变, 形成周期性的循环带状结构, 溶质成分在带状结构前沿富集, 产生典型溶质截留, 带状结构的组织形态, 成分偏析以及循环周期受到凝固条件, 晶体取向以及初始间距的调控, 相关研究为增材制造过程中的组织缺陷控制提供理论依据; 最后以铜银基合金为研究对象, 利用相场-格子玻尔兹曼方法研究横向磁场, 流场等多场耦合作用下非平衡组织的转变规律。结果表明, 横向磁场对合金固/液界面形态, 枝晶生长方向选择等产生显著影响。随着磁场强度的增加, 枝晶生长方向偏离温度梯度方向, 二次, 三次侧枝快速生长, 且受熔体中热电磁对流的影响, 溶质分布发生横向富集, 柱状晶间过冷差异增加, 相关研究为揭示复杂外场条件下的非平衡相变过程及组织调控机理提供理论依据。

E17-09

极性斯格明子动力学研究

王宇佳^{*1}

1. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences

铁电薄膜中的极性拓扑畴结构具有尺寸小, 抗串扰等优点, 有望应用于高密度非易失性存储器等电子器件中。尽管当前已经发现了很多极性拓扑畴, 然而对其动力学的研究才刚刚起步。我们利用相场模拟对 PbTiO₃/SrTiO₃ 多层膜中的斯格明子动力学进行了研究。通过施加面内温度梯度, 我们发现斯格明子会自发地发生运动。斯格明子的运动方向与温度梯度有关。当温度梯度较小时, 斯格明子从低温区向高温区运动; 在较大的温度梯度下, 斯格明子从低温区和高温区向中温区运动。进一步通过驱动力分析, 从斯格明子两段畴壁的驱动力竞争的角度对斯格明子的运动方向进行解释。该工作提供了一种非接触式驱动斯格明子运动的方法, 为赛道存储器, 逻辑器件等的研发提供参考。

E17-10

一维快速凝固模型中的动力学晶格波数选择机制

王楠^{*1}

1. 广东以色列理工学院

金属材料在快速凝固过程通常会产生大量的晶格缺陷。通常认为, 由固液相摩尔体积差产生的凝固收缩是导致晶格缺陷形成的主要机制。然而, 在非线性和自组织理论中, 晶体结构的形成是与凝固的动力学过程密切关联的。研究对流系统中元胞结构形成过程的临界稳定性理论表明, 有序-无序界面的运动度会对界面附近生成的有序元胞结构的波数产生影响。晶体相场模型作为研究凝固过程的非线性动力学模

型，由其模拟的凝固晶体结构同样也会受到固液界面移动速度的显著影响，晶格缺陷会在由固液界面动力学选择产生的晶格波数向热力学平衡态波数的弛豫过程中产生。在这个工作中，我们利用描述一维快速凝固过程的晶体相场模型，探索了凝固潜热对于固体晶格波数的影响。研究发现，虽然液相过冷度是实现快速凝固的重要条件，但是由固液界面运动速度选择出的固体晶格波数却与凝固潜热密切相关。虽然目前的工作仅限于一维模型，但是它对于理解和控制快速凝固中的缺陷形成过程有一定的理论指导价值。

E17-11

7xxx 系铝合金应力腐蚀过程微观组织演变的相场法研究

唐赛*¹

1. 中南大学

7xxx 系铝合金因其高比强度及良好的断裂韧性等性能被广泛应用于航空航天飞行器制造领域。然而，如长期暴露在高温，高湿，高盐度的服役环境中，高强铝合金受载结构件易产生应力腐蚀开裂，对航空航天器的服役安全形成重大隐患。目前，实验手段难以原位观察材料应力腐蚀过程的微观组织演变过程，使得对金属材料腐蚀的微观机理认识仍非常有限。相场法可模拟实验中难以达到的极端环境条件，是研究材料电化学腐蚀的有力工具。本研究结合氢离子，氯离子，铝离子等八种离子及六种电化学反应，耦合力场，建立了多元多相的应力腐蚀模型相场模型。通过傅里叶谱方法高效精确求解弹性形变的应力场，实现多相场腐蚀模型与应力腐蚀裂纹扩展力场的耦合，分析晶界特征，第二相和外加载荷对应力影响下点腐蚀，晶间腐蚀过程的影响。研究发现应力场与电化学腐蚀反应对应力腐蚀裂纹形貌和动力学存在耦合和竞争的影响作用，当基体过电位从 1.06 V 降低至 0.87 V 时，应力场的作用逐渐增强，半圆点腐蚀凹坑转变为尖锐的腐蚀裂纹。研究阐明了第二相对应力腐蚀裂纹扩展的影响。无论阳性或者阴性第二相，只要其半径足够大均能有效地阻碍点腐蚀和晶间腐蚀裂纹尖端的扩展，从而提高材料的耐应力腐蚀性能。此外，揭示了应力腐蚀过程中沿晶腐蚀与穿晶腐蚀的竞争机制，随着应力影响作用增强，沿晶腐蚀逐渐转变为穿晶腐蚀。

E17-12

基于物理信息神经网络的镁合金组织预测

张昂*¹

1. 重庆大学

镁合金比强度，比刚度高，延展性能优良，在航空航天，汽车，3C 等领域应用广泛。镁合金组织结构较为复杂，对其力学性能及服役状况有重要影响。数值模拟通过刻画材料组织变化的物理机制，可为镁合金性能优化提供理论指导。但传统数值模拟方法存在网格过大，算力不足等问题，与之相比，机器学习方法有强大的非线性拟合预测能力，可在复杂物理问题求解中展现独特优势。本报告采用物理信息神经网络求解刻画镁合金组织变化的相场方程，包括镁合金调幅分解过程与镁合金枝晶生长过程。通过对比神经网络预测结果与传统有限差分法的求解结果，验证了神经网络模型的准确性与适用性，体现了物理信息神经网络在固固相变和固液相变相场模拟中的泛化能力。

E17-13

弛豫铁电体形成及其高性能起源的相场模拟研究

洪政凯*¹

1. 西北有色金属研究院

相比于正常铁电体，弛豫铁电体和再进入弛豫铁电体由于具有高的压电系数，优异的介电温度稳定性，小滞后下的大电致应变，较高的储能密度等特性更是成为现代社会航空航天，无人驾驶，生物医学等尖端技术领域高速发展的关键材料。无论是弛豫铁电体还是再进入弛豫铁电体，都是通过在正常铁电体中掺杂大量的点缺陷而得到。但是点缺陷是如何影响弛豫铁电体和再进入弛豫铁电体的形成还不是很清楚。本研究利用相场模拟手段，综合考虑点缺陷掺杂产生的纳米尺度成分不均匀所引起的三种局部效应（局部相变温度效应，局部内电场效应和局部相变路径效应），重现了弛豫铁电体以及再进入弛豫铁电体的形成，揭示了弛豫铁电体中三个特征温度（TB，T*和 Tf），可回复电致应变曲线和再进入弛豫铁电体出现的物理机制，为设计更多具有优异性能的铁电材料提供理论指导。

E17-14

离子辐照对 HZO 铁电薄膜铁电性能的调控机理研究

蒋丽梅^{*1}

1. 湘潭大学, 材料科学与工程学院, 411105

氧化铪(HfO_2)基铁电材料能很好地弥补传统铁电材料中出现的尺寸效应及与 CMOS 工艺不兼容等问题。但氧化铪基材料处于多相共存状态, 因此铁电性不稳定。研究表明氧空位是稳定和控制氧化铪基铁电薄膜铁电相和铁电畴翻转行为的关键因素。本文提出从离子辐照诱生氧空位的角度出发来优化薄膜的铁电性。本文对实验制得的 HZO 薄膜样品进行了离子辐照实验并得到了相关性能数据, 同时我们以辐照氧空位缺陷为桥梁将 SRIM 和相场模拟联系并建立了考虑离子辐照氧空位缺陷的多相共存 HZO 铁电薄膜模型并将模型数据同实验表征结果进行了对比。本文利用该模型研究了辐照条件对薄膜中诱生氧空位的影响、离子辐照条件对 HZO 薄膜铁电性的影响、辐照离子类型对薄膜铁电稳定性的影响。本工作阐明了离子辐照优化 HZO 薄膜铁电性能的基本原理, 并给出合适的辐照条件, 为离子辐照优化改性方面实验提供理论支持。

E17-15

功能薄膜极性畴壁与超弹性起源的相场模拟

彭仁赐^{*1}

1. 西安电子科技大学

中心对称的铁弹材料(如 BiVO_4)中的极性畴壁会产生内建电场, 并通过促进电荷载流子的分离, 有望用于光电能量的高效转换。然而, 在介观尺度上极性畴壁的起源及其与来自相变的自发应变之间的关系仍不清楚。本文从唯像热力学的角度, 揭示了四方-单斜(T-M)相变过程中 BiVO_4 薄膜 M 相四种变体与对应晶格常数间的关系。介观相场模拟表明, 铁弹孪生畴的形成源于 T-M 相变的自发应变, 形成了 4 组孪生铁弹畴, 每种变体有两个相互垂直的取向。结果表明: (i) BiVO_4 薄膜极性畴壁的起源源自畴壁处应变梯度引起的挠曲电效应; (ii) 极化强度的大小主要来自剪切应变梯度的贡献, 极化取向取决于两种剪切应变梯度的比值。进一步, 从总自由能的角度分析了几种铁弹畴壁的稳定性。研究结果不仅为铁弹孪生畴的形成机制提供了深入的理解, 而且揭示了由铁弹畴壁处应变梯度诱导的极性畴壁起源。

E17-16

极性纳米拓扑结构的超快相变动力学

杨天南^{*1}

1. 上海交通大学

铁电材料在强电场脉冲, 激光脉冲等超快激励下可产生极化, 电子, 应变等多序构的动态耦合, 因而展现出独特的动力学演化现象。理解和预测其中介观尺度极化结构的结构演化动力学过程, 是实现材料超快功能控制的关键。我们展开了铁电异质体系中极性涡旋等极性纳米拓扑结构的相场理论研究, 揭示了其超快结构运动与相变动力学行为。模拟了钛酸铅/钛酸锶超晶格中极性涡旋对超快电场脉冲的独特结构响应, 理论获得了其运动方程与有效质量, 阐明了模式频率的应变调制原理。解析了超快光脉冲诱导形成极性超晶体等隐匿相的超快相变过程, 厘清了体系极化结构的多阶段演化的能量路径, 揭示了光激发的载流子效应与热效应的共同作用机制, 提出了超快相变的控制方法。本工作为极性纳米拓扑结构及其动力学功能的探索与调控提供了理论指导。

E17-17

自然对流诱导的定向凝固柱状枝晶形貌演化

郭春文^{*1}, 查华祥¹, 张书亚¹, 赵红亮¹

1. 郑州大学

本研究通过耦合相场(PF)与格子玻尔兹曼(LB)方法, 系统研究了自然对流条件下单一枝晶阵列与不同取向汇聚枝晶阵列的微观结构演化行为。研究发现, 流场强度随溶质膨胀系数绝对值的增大而增强, 但负膨胀系数(向下的自然对流)对应的流动强度显著弱于正膨胀系数(向上的自然对流)对应的流场强度。在单一枝晶阵列中, 一次枝晶间距随溶质膨胀系数的增大而减小。当该系数达到临界阈值时, 原本稳定的枝晶形貌开始失稳并发生退化。这一临界点受倾斜角影响, 倾斜角增大时, 倾斜枝晶主干对液态流动

的阻滞效应增强。在溶质向下流动的初始条件下，汇聚枝晶竞争生长过程中择优取向与非择优取向晶粒共存；而在向上流动条件下，小溶质膨胀系数时择优取向与非择优取向晶粒仍可共存，但系数增大后择优取向枝晶的不断失稳使其逐渐竞争淘汰掉非择优取向晶粒。

E17-18

轻合金析出行为的多尺度模拟与计算

刘泓*¹

1. 上海交通大学

析出强化是铝合金和镁合金等轻合金的主要强化机制。在本研究中，采用多尺度模拟方法系统地研究了镁-稀土合金的析出和强化行为。研究人员利用热力学模型和第一性原理方法计算了析出相的热力学稳定性和成核驱动力。应用经典成核理论计算了析出相的成核能垒和最佳成核路径。相场模型被用来预测在晶体缺陷影响下析出颗粒的非均匀生长过程及析出颗粒的空间分布。此外，使用相场位错模型预测析出颗粒的强化效果。通过与实验结果的比较分析发现，采用这种多尺度模拟方法的模拟结果与实验结果一致。这种多尺度模型突破了合金开发中基于传统试错方法的限制，提供了通过多尺度计算平台描述析出成核和生长的初步框架。

E17-19

纳米晶粗化过程的晶体相场法研究

郭灿*¹，高莹¹

1. 西安理工大学

晶粒粗化是一种重要的材料微观组织演化机制，是一个在曲率驱动下小晶粒消失大晶粒长大，从而导致平均晶粒尺寸增大的过程。这一现象在材料制备，热处理及服役过程中普遍存在，并对材料的力学性能，热稳定性和使用寿命具有重要影响。晶粒粗化通常遵循 LSW (Lifshitz-Slyozov-Wagner) 理论，即粗化过程受表面扩散机制控制。然而，近年来的研究表明，在纳米尺度或多个接触晶粒等复杂条件下，晶粒粗化过程还涉及晶粒旋转，逆粗化等非经典特征，这些现象对传统粗化理论提出了新的挑战。以往的研究大都基于平均场的概念来处理粗化过程中的晶粒，并且从一个相对宏观的角度来研究粗化过程中的动力学规律，未能揭示诸如晶界迁移，晶粒旋转等与材料晶体学性质相关的组织演化机制，并且限于研究手段，在原子尺度上揭示晶粒粗化的微观机制仍然存在困难。因此，本文采用晶体相场模型，以粗化过程中的晶粒旋转为研究对象，系统研究了纳米晶粒在原子尺度上的粗化过程，探讨了多晶体系，双晶体系以及三晶体系的竞争生长机制以及异质界面上纳米晶粒的粗化行为，重点分析了固相体积分数，界面能，晶粒尺寸以及初始取向差等关键参数对粗化动力学的影响规律，特别是对粗化过程中的晶粒旋转现象及其内在机制进行了深入探讨。

E17-20

CoCrFeNi₂Ti_x 异质结构高熵合金的设计及强化机理研究

文志勤*¹，吴镇宇¹，赵宇宏²

1. 桂林理工大学

2. 中北大学

面心立方结构 (FCC) 的高熵合金因具有优异的延展性和加工硬化能力而被广泛研究。但该类型合金强度较低，极大地限制了其工业化应用。为解决这一问题，本研究通过经验判据，相图计算 (CALPHAD) 以及第一性原理计算对合金进行成分设计，以 Co, Cr, Fe, Ni 为基体元素，添加大原子半径的 Ti 元素调控合金的组分，探究了不同 Ti 含量的对 CoCrFeNi₂Ti_x 异质结构高熵合金组织结构，力学性能以及强化机理的影响。当 Ti 含量从 0 增加到 1.2 时，CoCrFeNi₂Ti_x 异质结构高熵合金经历了从单一的 FCC 固溶体到 FCC + η -Ni₃Ti + σ 多相异质结构最终到 C14 + η -Ni₃Ti + σ 复杂结构的转变。其中，Ti_{0.8} 合金展现出软质相 (FCC) 和硬质相 (η/σ) 的异质结构。该合金通过背应力与正向应力的相互作用实现了强度 (YS = 1177.8 MPa, UTS = 1865.3 MPa) 与塑性 ($\epsilon = 24.4\%$) 的优异匹配，硬度也随着 Ti 含量增加从 118 HV 提升至 737 HV。合金强化机制以位错强化和沉淀强化为主导，Ti 元素的添加细化了合金晶粒 (细晶强化)，使合金的力学性能进一步提升。此外，Ti 含量的增加使 ELF 值趋近于 1，促进合金体系内离子键的形成，进而显著提升合金的强度，而背应力的作用则使合金在强度提高的同时还能维持良好的塑性。

E17-21

相场格子玻尔兹曼模型改进及其在烧结模拟中的应用

徐兴春^{*1}

1. 哈尔滨工业大学

相场格子玻尔兹曼方法 (PFLBM) 是相场法和格子玻尔兹曼方法的有机结合体, 它兼具相场法的隐式界面捕捉能力和格子玻尔兹曼方法的高效并行优势, 在大规模多相界面追踪模拟中具有潜在的应用价值。本报告针对 Allen-Cahn 方程、守恒型 Allen-Cahn 方程和 Cahn-Hilliard 方程等三类相场方程, 在格子玻尔兹曼理论框架下构建了相应的求解模型。进一步通过优化碰撞算子、设计平衡态分布函数、引入高阶修正源项等手段, 从准确性、有界性、局部性和稳定性等角度对模型进行了一系列优化改进, 显著提升了模型的数值性能。以烧结过程为例, 利用改进后的相场格子玻尔兹曼模型, 开展了烧结过程中颗粒重排、晶粒生长和孔隙演变等微观组织演化的模拟研究。

E17-22

双峰时效增强 Mg-Zn 系变形镁合金强韧化机制研究

柳伟¹, 赵宇宏^{*1}, 王凯乐¹, 张云涛¹, 谢涛泽¹, 刘文育¹, 侯华²

1. 中北大学

2. 太原科技大学

Mg-Zn 系合金是广泛使用的商业镁合金之一, 通过合金化, 塑性变形以及后续的人工时效, 可显著提高其强度和韧性。然而, 如何克服 Mg-Zn 系合金强度与韧性之间的矛盾仍是目前高强韧镁合金研究领域面临的挑战。通过对 Mg-Zn 合金进行 Ca, Al, Mn 微合金化, 热挤压变形及时效处理, 成功开发出了一种新型高强高韧 Mg-1.0Zn-0.1Ca-0.1Al-0.1Mn (wt.%) 变形合金, 其屈服强度, 抗拉强度和延伸率分别达到 352 MPa, 413 MPa, 15.2%。同时, 通过不同挤压角度 (30° 和 90°) 和挤压温度 (220 °C, 235 °C 和 250 °C) 的热挤压变形, 研究了动态再结晶与动态析出行为。通过结合相场模拟和实验验证, 研究了纳米颗粒相半径对晶界迁移的钉扎效应。通过 180 °C 的时效处理, 研究了该合金的双峰时效特性。结果发现, 在 90° 的挤压角度和 220 °C 的挤压温度下, 由于 Ca₂Mg₆Zn₃ 和 Al₈Mn₅ 纳米颗粒相的钉扎效应以及 Zn 和 Ca 元素对晶界迁移的拖曳效应, 形成了由再结晶区和非再结晶区组成的异质结构。其次, 晶界在颗粒相的钉扎力作用下发生了弯曲演化, 且最大钉扎力随颗粒相半径的增大而增大。此外, 由于 GP 区与 β1'/β2' 相的析出, 该合金展现出了明显的双峰时效特性。最后, Mg-1.0Zn-0.1Ca-0.1Al-0.1Mn (wt.%) 变形合金优异的强韧性平衡主要归因于异质变形强化, Orowan 强化以及孪晶和非基面滑移的变形协调作用。

E17-23

三维重构和相场模拟揭示 Ni-YSZ 电极长期服役过程中的 Ni 迁移机制

杨胜兰^{1,2,3}, 陈铭², 张利军^{*3}, 罗群⁴, 李谦¹

1. 重庆大学

2. 丹麦技术大学

3. 中南大学

4. 上海大学

镍(Ni)与氧化钇稳定氧化锆(YSZ)复合多孔金属陶瓷电极是目前应用最广泛的固体氧化物电池(SOC)燃料电极, 但其在长期服役过程中易发生退化, 其中微结构演化是关键影响因素之一。Ni 颗粒粗化是常见的 Ni-YSZ 电极微结构演化形式, 而 Ni 迁移则在长时间运行中成为关键因素, 被认为是其性能衰退的主要原因。为深入理解 Ni-YSZ 电极的退化机制并预测其寿命, 亟需对其长期服役过程微结构演化进行定量描述。本研究耦合原位表征, 三维重构技术与三维相场模拟, 建立了 SOC 电极材料服役过程微结构演变定量描述的科学方法。实现了对 Ni-YSZ 电极中 Ni 粗化的定量建模, 提出了一套材料参数优化与验证流程。模拟结果与实验结果一致, 验证了建模的有效性。在此基础上, 进一步引入 Ni/YSZ 界面梯度接触角, 研究了长期测试的固体氧化物燃料和电解池(SOFC 和 SOEC)中的 Ni 迁移。探讨了开路电压(OCV), SOEC 和 SOFC 模式下的 Ni 迁移机制, 揭示了微观结构非均匀性和接触角梯度对 Ni 迁移的协同作用。本研究为理解 Ni-YSZ 电极的退化行为和其性能优化设计提供了重要科学依据和理论支撑。

E17-24

利用磁耦合多相场方法分析两相 SmCo 厚膜中的非寻常磁畴

霍流¹, 邱兆国*¹

1. 华南理工大学材料科学与工程学院

我们利用洛伦兹透射电子显微镜(Lorenz-TEM)在磁控溅射制备的非晶态 SmCo 厚膜中观察到了具有不寻常形貌的条带状磁畴, 其结构和形貌与常见的单轴磁晶各向异性材料中的条纹磁畴存在显著差异。该磁畴在单一非晶相 SmCo 厚膜中未能重现, 因此其形成可能与非晶态 SmCo 在退火过程中形成的 Sm₂Co₁₇ 硬磁相纳米晶粒对畴壁的钉扎效应有关。为了分析非寻常磁畴的成因及性质, 我们利用磁耦合多相场方法在模拟复杂多相材料时的优势, 建立了微米级的三维大尺寸模拟样本, 重现了不寻常磁畴的形成过程, 并分析了畴壁在外磁场作用下的动力学行为以及硬磁颗粒对磁极化翻转过程的影响。模拟结果验证了硬磁相晶粒的钉扎效应对畴壁形貌的决定性作用, 并定性地指出了其对磁性能的影响, 对 SmCo 非晶厚膜的后续研究具有指导性意义。

E17-25

结合准原位 EBSD 与相场模拟的梯度纳米结构材料热稳定性研究

彭威¹, 高建宝², 张显程¹, 张利军*², 孙彬涵¹

1. 华东理工大学, 承压系统与安全教育国家重点实验室, 上海, 200237

2. 中南大学, 粉末冶金国家重点实验室, 湖南, 长沙, 410083

梯度纳米结构(Gradient Nanostructured, GNS)金属因其独特的组织梯度特征, 展现出优异的强韧匹配性能。然而, GNS 金属在高温服役过程中易发生异常晶粒长大(Abnormal Grain Growth, AGG), 破坏梯度组织稳定性, 从而引发力学性能退化, 限制其工程应用。探究 GNS 金属的 AGG 行为及热稳定机制对于实现其高温服役具有重要意义。

本研究通过准原位电子背散射衍射(EBSD)实验与多序参数相场(Multi-Order-Parameter Phase-Field, MOP-PF)模拟相结合, 系统研究了 GNS-Ti 与 GNS-Ni 中的 AGG 行为。结果表明, GNS-Ti 在 700°C 下的变形孪晶富集层(约位于深度 280 μm)发生明显 AGG, 而在 550°C 下未观察到异常长大。这一差异源于不同温度下微结构层间储能差异及晶界迁移率的变化。此外, 研究揭示孪晶界在热稳定性中具有双重作用: 一方面, 其较低的界面能与迁移率有助于增强稳定性; 另一方面, 其存在又加剧层间能量非均匀性, 可能诱导 AGG。

在 GNS-Ni 体系中, 发现 AGG 行为具有明显的层依赖性。表层晶粒因晶界迁移率较高而发生迁移率主导型 AGG; 次表层则因与相邻层之间存在显著储能差, 引发能量驱动型 AGG。此外, 研究进一步发现 CSL 中的 Σ3 孪晶界在高温下表现出优异的热稳定性, 其低迁移率与低界面能协同抑制了 AGG 的发生。

本研究建立了实验与模拟相结合的研究框架, 揭示了 GNS 金属中 AGG 的多机制耦合行为, 并提出了基于晶界类型与组织调控的热稳定性优化策略。该方法可为其他梯度结构合金体系的稳定性设计提供理论支持与实践参考。

E17-26

粉末床激光熔融成形 Ti-Nb 合金非平衡凝固组织的相场模拟研究

王刚*¹, 成永富¹, 吴丹¹, 施荣沛²

1. 华南理工大学材料科学与工程学院

2. 哈尔滨工业大学(深圳)材料科学与工程学院

Ti-Nb 合金具有良好的力学性能, 较低的弹性模量和优异的耐腐蚀性, 且不含有生物毒性元素, 在生物医用材料领域备受关注。若采用传统的铸造, 锻造方法, 存在材料利用率低, 生产周期冗长, 制造成本高昂, 复杂形状成形难度大, 无法为患者提供个性化解决方案等问题。粉末床激光熔融(LPBF)是目前最流行的金属增材制造技术之一, 其快速成型, 减少材料浪费, 高度复杂的几何形状设计以及定制化制造等优点为解决以上难题提供了新途径。然而, LPBF 成形是一个快速升温 and 降温的过程, 并且涉及到传热, 传质, 流体流动以及快速凝固等多种复杂的物理现象, 具有瞬时性和复杂性的典型特点, 目前尚无有效的实验手段能准确表征熔池内非平衡凝固组织的形成与演化过程。

为此, 本工作基于相场理论, 结合计算流体力学, 针对 LPBF 成形 Ti-25Nb (at. %)合金在单道次和双道次激光扫描过程中的非平衡凝固过程进行了系统的模拟研究。宏观热传导模型考虑了激光加热, 对流, 辐射和热蒸发传热机制, 其中激光加热采用动态移动和高斯分布的热源模型; 流体流动模型采用纳维-斯托

克斯方程,考虑了重力,浮力,表面张力和马兰戈尼力等作用,并使用流体体积法对自由表面进行跟踪;根据真实粉末粒径及其分布,采用离散元法构建了高精度的 Ti-25Nb 合金粉末床几何模型,导入热传导模型和流体流动模型即可求解得到 LPBF 成形过程中的熔池形貌与尺寸,粉末床温度分布以及熔池内流场分布;将计算流体力学得到的宏观温度场模拟结果代入到介观尺度的有限界面耗散相场模型中,通过跨尺度耦合模拟,系统研究 LPBF 快速冷却过程中不同熔池微区的非平衡凝固行为,揭示了其影响规律及其内在机制,这对获得优异力学性能的 Ti-Nb 合金成形件具有重要指导意义。

模拟结果表明:(1)在单道次扫描时,激光功率过低或扫描速度过快,将会形成不连续,表面粗糙的熔道;熔池形貌为不规则的椭圆形,随着激光功率的升高或扫描速度的降低,熔池尺寸会增大,同时温度分布曲线的温度峰值也会增大,激光功率的升高会导致最大温度梯度和最大冷却速率的增大以及最小温度梯度和最小冷却速率的减小,增快扫描速度会导致最大温度梯度和最小温度梯度的减小以及最大冷却速率和最小冷却速率的增大;此外,熔池中典型的流体流动特征为:熔体从熔池中心沿着熔池表面流动到熔池边缘,在熔池边缘从熔池上表面沿着熔池侧边界流向熔池底部,并且在过渡区域产生涡旋;随着激光功率的升高或扫描速度的降低,熔池的对流和涡旋将会增强。(2)在双道次扫描时,由于热积累的作用,第二熔道变得连续平直,第二道扫描时形成的熔池尺寸也更大,并且熔池表面也变得光滑更趋于椭圆状;第二道激光扫描过后,粉末床温度再次上升,第一熔道和第二熔道的温度场均呈双峰分布形态,且第二熔道的最高温度峰值较第一熔道的最高温度峰值更高;对于第一熔道而言,如果第二个温度峰值高于液相线温度,则该处已凝固区域会发生重熔,发生重熔后熔池内的温度梯度和冷却速率较第一次熔化凝固时都要小得多。(3)合金非平衡凝固组织受固液界面处温度梯度和冷却速率双重控制:单道次扫描结果表明,熔池顶部的温度梯度较小,冷却速率较大,导致了熔池边界顶部为平面组织,而底部为胞状组织,随着激光功率的升高或扫描速度的降低,界面形貌发生平面状-胞状-树枝状的转变,晶粒变得更粗大,Nb 溶质的偏析现象加重;在双道次扫描时,由于热历史的作用,第二道扫描后形成的熔池流场分布更加均匀,如果第一熔道的温升超过液相线发生重熔,界面速度较第一次熔化凝固时会大幅度下降,凝固组织形貌发生平面状-胞状-树枝状的转变,同时微观组织尺寸也会变大,表现为晶粒的变粗以及一次枝晶臂间距的增大,Nb 溶质的偏析也会加重。

E17-27

一种亚稳 β 钛合金单轴压缩过程中的应力诱导 α'' 相转变 及其变体选择行为研究

董瑞峰¹, 谭雨欣¹, 侯华^{1,2}, 赵宇宏^{*1,3,4}

1. 中北大学 教育部共建铝/镁材料研发应用协同创新中心, 新材料智能铸造先进成型山西省重点实验室, 材料科学与工程学院
2. 太原科技大学 材料科学与工程学院
3. 北京科技大学 材料基因工程高精尖创新中心
4. 辽宁材料实验室

亚稳 β 钛合金中的 β 稳定元素含量介于 ($\alpha+\beta$) 两相钛合金和稳定 β 钛合金之间,使其亚稳 β 相的转变, ω 相和 α 相的形核生长等均表现出独有的特征。其中,应力诱导 α'' 相转变是亚稳 β 钛合金中亚稳 β 相常见的一种相转变途经,其转变机制为位移型转变。本工作中,以亚稳 β 钛合 Ti-7333 为研究对象,聚焦其亚稳 β 相单轴压缩过程中的应力诱导 α'' 相转变行为。研究表明,应力诱导 $\beta \rightarrow \alpha''$ 的相转变涉及体心立方晶体向正交晶体的结构转变,其晶体结构转变主要与 β 相在 $\{112\}$ 面上沿 $\langle 11-1 \rangle$ 方向的切应变相关。同时,在单轴压缩初期发现 β 晶粒内只有一定取向的 α'' 相优先产生,表明 α'' 相存在变体选择行为。进一步研究表明,在外加应力作用下只有 $\{112\}\langle 11-1 \rangle$ 剪切系统对应施密特因子大的 α'' 相才被优先产生。以上研究结果,对丰富亚稳 β 钛合金中的相转变理论及其组织调控具有一定的理论和实践价值。

E17-28

多元合金多相凝固组织演化和显微气孔形成的模拟

胡梦丹¹, 孙东科^{*1}, 韩青有¹, 朱鸣芳¹

1. 东南大学

显微气孔是铝合金铸件凝固过程中形成的最有害的组织缺陷之一。本工作建立了二维多相元胞自动机 (cellular automaton, CA)-有限差分方法 (finite difference, FD)-格子玻尔兹曼 (lattice Boltzmann, LB) 耦合模型,结合 CALPHAD 方法,对多元铝基合金在凝固过程中的显微气孔形成及其与凝固组织协同演化过程进行了模拟研究。该耦合模型能够模拟,柱状/等轴枝晶,包含了非小平面 α -Al 相和小平面 β -Si 相的非规则共晶组织的形貌演化,再现了氢气孔形核,运动和合并等动力学行为以及气/液/固三相之间的流固作用现象。

模拟发现,在初生枝晶和共晶凝固阶段,气孔呈现出不同的形核生长模式,显微气孔含量在共晶凝固阶段会发生显著增长,同时气孔形状因受到周围枝晶和不规则共晶组织的挤压而严重变形。定性和定量地模拟研究了初始合金成分,初始氢浓度和冷却速度对显微气孔最终气孔百分数(孔隙率),尺寸和分布特征的影响规律。结果表明,初始合金成分对显微气孔的尺寸和分布特征有显著影响,但对孔隙率的影响较小;终态组织中的最终气孔百分数会随着初始氢浓度的降低和冷却速率的增加而显著降低。通过与实验结果进行对比,模拟得到的气孔和凝固组织形态特征和预测的孔隙率与实验观测结果吻合良好,为实现显微气孔和凝固组织形貌地定性描述和孔隙率地定量预测提供有效的模拟工具。

E17-29

高压下 Al-Si 合金的热力学,扩散和凝固微结构: CALPHAD 与相场建模

易旺¹, 汪凯², 张利军*¹

1. 中南大学, 粉末冶金全国重点实验室, 长沙, 410083, 中国

2. Mechanics of Functional Materials Division, Institute of Materials Science, Technical University of Darmstadt, Darmstadt, 64287, Germany

深入了解高压下合金的热力学,扩散和微结构,是利用高压技术调控合金性能的重要前提。但仅通过实验研究难以全面认识压力对合金热力学,扩散和微结构的影响规律。论文结合相图计算(CALPHAD)和相场模拟方法,研究了压力对 Al-Si 合金热力学,扩散和凝固微结构的影响。首先,在常压 CALPHAD 热力学/原子移动性参数模型基础上,依据压力与摩尔体积的状态方程,在模型参数中引入压力相关项,发展了合金含压热力学/原子移动性参数模型,获得了 Al-Si 合金含压热/动力学描述,并通过 Scheil-Gulliver 凝固模型预测了不同压力下 Al-Si 合金的凝固行为。随后,考虑压力对相场和浓度场控制方程中热力学,扩散和界面能的贡献,提出了实现合金超高压凝固过程定量相场建模的有效策略。耦合含压 CALPHAD 热/动力学描述和多相场模型,实现了不同压力下 Al-Si 合金完整凝固过程微结构演化的相场模拟。最后,结合 CALPHAD,相场模拟,经典形核理论和 Jackson-Hunt 理论,揭示了超高压凝固 Al-Si 合金中初生相与共晶组织特征形貌的生长机制。

E17-30

有限界面耗散相场模型在定量高效描述镍基高温合金制备及服役过程微结构演变中的应用

吴晓科¹, 塔娜², 钟静³, 彭鹏¹, 张利军*³

1. 兰州大学 材料与能源学院

2. 北京科技大学 材料科学与工程学院

3. 中南大学 粉末冶金国家重点实验室

镍基高温合金以其优异的高温力学性,抗蠕变,抗氧化等性能广泛应用于航空航天发动机和涡轮叶片。但镍基高温合金组元众多,且制备过程涉及定向凝固,固溶和时效等,微结构跨尺度演变极为复杂,在服役过程还受到塑性载荷的影响,发生复杂筏化,实现其制备和服役过程微结构演变的高效定量描述难度大。

本文首先基于哈希表技术,构建 CALPHAD 类型数据通用耦合格式,发展了一种相场模拟的新型耦合方法,并开发了 C++接口程序实现了 CALPHAD 数据与有限界面耗散相场模型的高效耦合。经严格的基准测试其准确性和通用性后,实现了 Ni-Al-Ta 合金定量凝固过程的高效相场模拟,定量预测了冷却速率,温度梯度与微结构,一次枝晶间距,溶质偏析等的关系。随后,集成通用耦合方法,本工作发展的新型形核模型和并行加速技术,耦合两种类型镍基高温合金热力学数据库,实现了 Ni-Al 合金和 Ni-Al-Cr-Re 合金时效过程微结构演变的定量相场模拟。随后,耦合弹塑性有限界面耗散相场模型,模拟了 Ni-Al-Cr 合金服役过程在外加塑性载荷下的定向筏化行为,并讨论了拉/压载荷对 γ' 相形貌演变的影响。最后,进一步将耦合方法拓展至多元镍基高温合金,实现了多元镍基高温合金 CMSX-4 凝固及固态相变过程微结构演变的定量相场模拟。

本文成功实现镍基高温合金制备和服役过程微结构演变的定量高效相场模拟,将为镍基高温合金制备工艺的优化和新型镍基高温合金的设计提供有力支撑。

E17-31

颗粒强化难熔高熵合金球形粉制备技术及粉末成型工艺探索研究

顾涛¹, 赵宇宏^{*1}, 侯华¹, 武立¹, 马瑞¹, 田晓林¹

1. 中北大学

针对航空航天领域装备高温部件对难熔高熵合金粉末的重大需求, 开展颗粒强化难熔高熵合金粉体制备技术研究。针对不同基体材料特性, 优选相应的粉末制备工艺, 通过旋转电极雾化法和喷雾干燥和等离子球化相结合方法制备颗粒复合强化难熔高熵合金粉末, 阐明粉末制备过程中多组元溶质扩散, 凝固分配机制以及微观组织演化与相形成机理。重点研究粉末制备工艺, 粉体微观组织, 粉体性能的内在关联, 为高纯度, 高球形度, 高流动稳定性难熔高熵合金及其复合材料粉末的宏量制备提供技术方案支撑。以难熔高熵合金及复合材料粉末为原料, 通过粉末冶金/增材制造快速成形样件, 研究成形件微观结构和力学性能强化机制, 为难熔高熵合金在高温部件的应用提供理论依据和技术支撑。

E17-32

热压烧结中 Al_{0.3}CoCrFeNi 多晶高熵合金的聚结动力学: 分子动力学和相场研究郭庆伟¹, 侯华^{*1}, 杨坤¹, 彭敦维², 赵宇宏²

1. 太原科技大学

2. 中北大学

现有的基于分子动力学的热烧结模型主要针对具有同取向的单晶合金颗粒, 这类模型虽能揭示单一晶粒的烧结行为, 但难以模拟实际多晶材料中晶界, 位错和取向差等复杂因素的影响。为此, 本文提出了一种基于分子动力学的多粒子模型, 通过构建包含不同晶粒取向的多粒子体系, 系统研究了多晶 Al_{0.3}CoCrFeNi 高熵合金在热压烧结过程中的聚结动力学。通过引入相场法模拟晶界迁移和颗粒相互作用, 并与分子动力学结果交叉验证, 证实了多粒子模型在描述烧结颈缩, 孔隙演化等微观动力学过程的准确性和有效性。利用该模型发现, 当颗粒接触区由压力诱导演化为指数幂蠕变区时, 颈缩, 孔隙形成/填充, 位错积累/分解, 颗粒旋转/重排等现象的发生速度加快。基于拉伸试验结果, 计算得到烧结态 Al_{0.3}CoCrFeNi 高熵合金的杨氏模量为 214.11 ± 1.03 GPa, 与实验值偏差仅为 0.82%。这一结果不仅验证了多粒子模型在多晶体系中的适用性, 还可以为高熵合金烧结工艺的优化提供理论指导。

E17-33

形变诱导逆相变耦合低温热处理工艺调控中锰钢显微组织与力学性能

白韶斌^{*1}, 时赛楠¹, 徐若尧¹

1. 中北大学航空宇航学院

中锰钢因其优异的综合力学性能被认为是理想的第三代先进高强钢。中锰钢的强度和塑性与奥氏体稳定性密切相关, 而奥氏体中的 C 和 Mn 含量是决定其稳定性的关键。本研究聚焦于形变诱导逆相变耦合低温热处理工艺调控中锰钢显微组织, 通过加速富 Mn 纳米 κ -carbide 和细晶铁素体在高温塑性变形和热处理阶段逆相变为奥氏体, 获得细晶富 Mn 奥氏体的同时, 也保证了其足够的体积分数。最终, 获得了 1.37 GPa 屈服强度, 1.80 GPa 抗拉强度和 23% 伸长率的中锰钢。通过中断拉伸变形显微组织分析, 阐明了各变形机制的协同作用机理; 此外, 结合理论计算和实验验证, 系统研究了热处理过程中 V-carbide 颗粒对晶界迁移和再结晶晶粒形核, 长大的影响, 揭示了 V-carbide 颗粒对显微组织演变行为的影响机理。

E17-34

基于相场方法的电极材料力-电化学耦合失效机理研究

常力戈¹, 陆宇阳^{*2}, 倪勇³

1. 西湖大学

2. 北京理工大学

3. 中国科学技术大学

新型高容量电极材料内部普遍会产生显著的非均匀应力场, 诱发塑性变形甚至裂纹萌生等力学失效行为, 进而导致电池容量衰减。本研究通过建立多物理场耦合相场模型, 系统揭示了电极材料力学行为与电化学性能的相互作用机制。模型基于 Cahn-Hilliard 方程描述锂离子扩散与相变动力学, 结合弹塑性本构关系表征应力演化过程, 并采用应力耦合的 Butler-Volmer 方程量化电化学反应动力学。研究发现当应力超过

屈服强度后，塑性变形通过应力释放效应反而提升电极容量，其增强幅度与材料屈服强度呈正相关。进一步，将断裂相场理论和平滑界面方法相结合，研究了不同充放电条件下二级颗粒中一级晶粒取向和形貌对电极的倍率性能和结构稳定性的影响。本研究开发的相场模型将为高容量电极材料的设计与优化提供重要的理论依据。

E17-35

铁电有序无序相变相场模拟

施小明^{*1}

1. 北京科技大学

铁电相变以及铁电 - 顺电相变的内在机制一直是材料科学领域的研究热点与难点，尤其是有序 - 无序转变过程，被认为是影响相变的关键因素之一。本报告采用耦合涨落相场模型，以 BTO（钛酸钡）等典型铁电体系为研究对象，深入探讨了有序 - 无序相变过程。通过该模型，我们能够模拟铁电体系在不同温度，外场等条件下的微观结构演化，捕捉随机涨落对相变过程的影响。研究发现，在相变温度附近，体系的极化序参数表现出明显的涨落特征，这些涨落与有序 - 无序转变密切相关。本报告的研究成果为理解铁电相变的微观机制提供了新的视角。

E17-36

临界尺寸温度开关调控 α 相演化：TC18 钛合金界面强化的强塑性协同突破

郝梦园^{*1}，辛社伟¹，梁传鑫²，王栋²，王云志³

1. 西北有色金属研究院

2. 西安交通大学

3. 俄亥俄州立大学

TC18 钛合金（Ti-5Al-5Mo-5V-1Cr-1Fe）作为航空关键承力部件材料，其强塑性协同提升是该合金面临的长期挑战。传统退火工艺通过 α 相调控实现界面强化，但存在两难困境：低温退火：过量细小 α 相导致界面密度过高，引发位错严重塞积，塑性恶化；高温退火： α 相过度回溶造成界面密度骤降，强度显著衰减。究其根源， α 相在温度梯度下的非单调演化机制尚未明确，尤其缺乏对临界尺寸温度依赖性的定量认知，导致工艺设计缺乏理论指导。本研究通过相场模拟指导实验策略，在 700–850°C 区间内探究退火温度对 α 相演化的调控机制。初始细密 α 相微观组织呈现非单调演化规律转变：1. 数量演变： α 相数量密度随温度升高持续下降；2. 尺寸转折：平均尺寸呈先增大后减小的趋势。其机理源于两阶段竞争：1. 回溶主导阶段：小尺寸 α 相（<临界形核尺寸）因界面能垒失稳而快速溶解，溶解速率 > 长大速率；2. 粗化主导阶段：大尺寸 α 相（>临界形核尺寸）通过 Ostwald 粗化合并长大。此外，临界形核尺寸随温度升高而增大，退火温度通过控制临界形核尺寸调控两阶段动力学平衡，导致高温下更多 α 相落入回溶区间。在 700°C 退火工艺下， α 相与 β 相达到形成共连续网络，位错滑移受高密度界面阻滞保证合金的高强度（约 1250MPa），而界面间距优化通过缓解应力集中实现塑性的提升（~15%）。

E17-37

光电化学氨氧化反应表界面动力学研究

夏承锴¹，卫海琪¹，焦俊通¹，王斯琰¹，赵宇宏^{*1}

1. 中北大学

光电化学氨氧化（Photoelectrochemical Ammonia Oxidation Reaction, PEC AOR）技术通过耦合光能驱动与电化学调控，可在温和条件下实现氨氧化反应与产氢（H₂）的协同进行，兼具能量转化与污染物治理双重功能。然而，受限于光生载流子复合率高，表界面反应动力学迟缓，含氮官能团脱附困难等核心问题，提升催化效率与选择性仍是实现工程应用的关键挑战。同时，当前对光电化学氨氧化反应的微观机制缺乏系统认知，制约了高效催化体系的理性设计。本报告聚焦表界面改性工程在调控过渡金属基光阳极材料氨氧化性能中的作用机制，阐明通过电子结构调控，活性位点暴露优化及表面化学改性策略，可显著改善表界面反应动力学。重点探讨异质结构构筑，缺陷工程等方法对电荷传输与反应中间体吸附行为的调控机制。通过建立综合考虑能带结构，界面电荷转移及表面吸附动力学的多尺度模型，揭示晶格缺陷密度，异质界面原子配位，纳米结构维度等多重工程参数对光生载流子分离效率及催化选择性的耦合调控规律，为突破光电催化氨氧化制氢效瓶颈提供理论指导。

E17-38

有限界面耗散相场模型在线性化合物扩散生长过程中的应用

马飒^{1,2}, 曾雨欣², 张利军^{*2}

1. 浙江大学, 硅与先进半导体材料全国重点实验室, 杭州, 310058, 中国
2. 中南大学, 粉末冶金全国重点实验室, 长沙, 410083, 中国

有限界面耗散相场模型可描述从非平衡到近平衡状态的溶质分配现象, 广泛用于多元材料制备和服役过程微结构演变的定量描述, 对成分/工艺设计具有重要理论指导作用。然而, 线性化合物具有固定的成分, 菲克定律失效, 无法直接应用有限界面耗散相场模型。论文首先综述了含线性化合物体系的相场模拟研究现状。然后, 针对多元合金的析出/溶解过程, 发展了含线性化合物体系的有限界面耗散相场模型。以 Al-Mg-Si 合金峰时效过程为例, 通过引入界面能和弹性各向异性参数描述了 β'' 针状形貌, 并成功重现了实验中的十字交叉形貌。最后, 针对三明治型反应扩散过程, 提出了线性化合物 CALPHAD 热/动力学描述与有限界面耗散相场模型的实用型耦合策略。以 Pu 的氧化过程为例, 成功重现了不同温度下多层氧化物竞争生长的微结构演变过程, 为实现 Pu 合金材料的存储和防护提供了理论依据, 有望为复杂反应扩散过程的定量相场模拟提供实用普适的解决方案。

E17-39

大尺度相场模拟在凝固研究中的应用

巩桐兆^{*1}, 陈云¹, 郝玮晔¹, 陈星秋¹, 李殿中¹

1. 中国科学院金属研究所

金属凝固过程中合金元素不均匀分布及其导致的非平衡第二相严重制约材料性能, 因此深刻理解凝固过程析出行为和溶质元素偏析, 对于调控材料微观组织以获得优异性能具有重要意义。相场方法由于避免了对形貌复杂的固-液界面的显式追踪, 目前已经发展成为凝固研究的重要方法之一。针对合金凝固过程大尺度相场模拟计算量大, 效率低的问题, 通过扩散界面模型非线性预条件处理, 多晶凝固晶粒取向界面前沿追踪法, 自适应有限元法和多组元合金准平衡热力学数据机器学习预测方法等, 发展了合金凝固大尺度定量相场模拟快速计算模型和高效数值计算方法, 分别将二维和三维定量相场模拟空间尺度提高至厘米和毫米尺度, 实现了与同步辐射 X 射线原位观察凝固实验尺度一致的大尺度相场模拟, 并极大提升了多组元合金凝固相场模拟计算效率。在合金凝固枝晶生长动力学方面, 借助 Al-Cu 合金三维定量相场模拟和同步辐射 X 射线原位观察凝固实验, 揭示了凝固初期由形核过冷度驱动的合金等轴晶反常生长动力学现象, 发展了一系列等轴晶生长动力学模型, 在拓展传统晶体生长理论的基础上, 提出了一种准确测定凝固形核过冷度的新方法; 在合金凝固过程微观偏析方面, 通过对 Al-Cu 和 Fe-C 等合金体系凝固过程大尺度相场模拟, 揭示了晶粒尺寸, 冷速和溶质扩散系数对溶质元素分布及第二相析出的影响规律, 在经典模型的基础上发展了可以更准确预测凝固末期溶质元素分布的微观偏析新模型。

E17-40

相场模拟反铁电畴调控和物理性能

许可¹, 黄厚兵^{*1}

1. 北京理工大学

以锆酸铅体系为代表的反铁电体具有区别于铁电体的反平行极化构型。在低电场强度下的线性极化响应和接近于零的剩余极化, 使其在电介质储能领域具有潜在的应用价值。从畴尺度层面深入理解多物理场作用下的反铁电相变动力学过程, 进而揭示畴翻转的物理机制, 是设计具备高储能性能反铁电材料的关键。

本研究采用相场法引入次近邻极化相互作用, 构建了反铁电相场模型。该模型能够通过调控梯度能系数比值, 实现反平行偶极子周期数的调控, 研究公度与非公度反铁电极化构型。针对陶瓷块体材料, 重点研究了均匀应变, 晶粒尺寸, 缺陷偶极子等因素对储能性能的影响。基于多尺度反铁电畴调控方案, 可使有效储能密度提升约 2.3 倍, 效率提升约 2.6 倍。此外, 在锆酸铅基薄膜体系中, 深入研究了薄膜厚度和衬底失配应变因素。揭示了薄膜厚度减小伴随畴尺寸减小, 降低损耗能量密度和拉伸应变提升相变电场等物理机制, 多因素调控下的最高储能效率达到 98%。本研究为实验层面调控反铁电畴结构, 设计高储能性能器件提供了理论基础。

E17-41

镍基高温合金 SLM 成型工艺中凝固组织行为的多尺度模拟

宋英灏^{*1}

1. 西北工业大学物理科学与技术学院

本文基于实验结果,通过结合宏观有限元模拟与细观相场模拟,对镍基高温合金选区激光熔化过程中柱状晶的竞争生长行为展开了研究。为探究熔池在流体流动与热传导作用下的运动规律,构建了宏观有限元模型,通过跨尺度模拟方法研究镍基高温合金选区激光熔化(SLM)过程中柱状晶的竞争生长机制。采用 COMSOL Multiphysics 构建三维瞬态宏观模型,耦合传热,流体动力学及激光-材料交互作用,考虑温度依赖的热物性参数与 Marangoni 效应。模型通过移动热源技术模拟激光扫描,预测熔池形态与温度场演化,单道实验验证显示熔池尺寸误差小于 7%。利用插值算法将相场模拟与 COMSOL 宏观结果集成,实现跨尺度分析。并将单道选区激光熔化实验所得的熔池形貌与宏观模拟结果进行了对比。从有限元模拟中提取的截面二维温度场可映射至相场网格,用于细观数值模拟。在目标区域内,温度场分布呈现高度非线性特征,热梯度与冷却速率亦如此,且液相线法线方向被视为热梯度的主导方向。在汇聚晶界处可观察到连续的异常过生长现象,这是由于择优取向(FO)枝晶阵列的一次间距减小,导致晶界处择优取向(FO)枝晶产生较高的局部过冷度。预测结果表明:在汇聚晶界情况下,择优取向(FO)枝晶阵列与非择优取向(UO)枝晶阵列的角度差增大,会使过生长事件发生更为频繁;而在发散晶界情况下,择优取向(FO)枝晶始终持续淘汰非择优取向(UO)枝晶。此外,研究证实,尽管溶质捕获效应可忽略不计,但界面动力学附着在 SLM 过程的竞争生长中起着关键作用。

E17-42

合金定向凝固过程初始过渡阶段枝晶选择的“黑障”区

郝玮晔, 巩桐兆, 陈云*, 陈星秋

1. 中国科学院金属研究所

定向凝固初始过渡阶段柱状晶的快速选择及其稳定生长是决定单晶高温合金叶片制备质量的关键。而熔体中晶粒形核是阻碍初始过渡阶段枝晶选择和后续稳定生长的重要因素。凝固过程新晶粒形核除了与合金熔体中存在无法避免的固相颗粒(比如夹杂物等)有关外,更与凝固过程中熔体的过冷度大小以及过冷区长度密切相关。本研究基于定量相场模型,系统研究了不同温度梯度和抽拉速度对合金定向凝固过程中熔体过冷度变化行为的影响,以阐明定向凝固过程实现枝晶快速选择和稳定生长的工艺控制方式。模拟结果表明,在初始过渡阶段,熔体中过冷度随着枝晶的生长会越来越大,达到最大值后又开始降低,存在一明显的枝晶选择“黑障”区。在该“黑障”区内如果存在形核剂极易发生形核。并且模拟发现,黑障区内的熔体所能达到的最大过冷度随温度梯度的升高而逐渐增大。另外,过冷区长度对于抽拉速度的敏感性较低,但是同样随温度梯度的增加而增加,这意味着单纯提高温度梯度可能并不利于定向凝固过程中的定向柱晶的选择。为了对定向凝固的计算结果进行验证,模拟了三维情况下在熔体中人为加入少量形核剂的情况,发现随着温度梯度的提高,液相中的晶粒形核数量逐渐增加,更容易在初始过渡阶段发生 CET 转变,不利于定向柱晶选择和稳定生长,该现象与文献报道的原位观察实验结果一致。这些研究对单晶高温合金叶片和孕育处理铝合金的铸造工艺优化设计均有一定的理论指导意义。

E17-43

层状结构与石墨烯在 2024 Al-GNPs/TC4 叠层材料中的协同抑裂机制

李沐奚, 赵宇宏*, 侯华, 王凯乐, 郭庆伟, 田晓林, 王康安

1. 中北大学

Al/Ti 叠层材料受启发于仿生层状结构,能够实现强度和塑性的同步提升。然而强度较低的 Al 层在应力作用下总是率先发生断裂,导致 Al/Ti 叠层材料的力学性能下降。本研究利用石墨烯(GNPs)强化铝层性能,以 2024 Al-GNPs 复合材料替代传统纯铝或铝合金层,制备了 2024 Al-GNPs/TC4 叠层材料。研究发现层状结构和 GNPs 分别通过抑制裂纹在层间和层内的扩展,协同提升力学性能。通过相场晶体模拟证实,层状结构对裂纹扩展的阻碍主要源于 TC4 中的应变离域效应。另一方面,分子动力学研究表明 GNPs 通过钝化和偏转机制阻碍裂纹扩展,这归因于位错阻碍和载荷传递作用。此外,研究确认影响金属间化合物形成的主要因素是扩散系数和固溶度,该工作为突破叠层材料性能极限提供了新思路。

E17-44

Cu-Al-Ni 合金在大塑性变形时效处理过程中的组织演变及强化机制武立¹, 顾涛¹, 田晓林¹, 赵宇宏^{*1,3}, 侯华²

1. 中北大学 材料科学与工程学院
2. 太原科技大学 材料科学与工程学院
3. 北京科技大学 材料基因工程高精尖创新中心

铜合金因其优异的导电导热性被广泛用于集成电路引线框架, 高端电子连接器等领域, 相关领域的发展对铜合金强度和延展性提出了更高要求, 通过引入孪晶结构制备高强度高延伸率的铜合金成为目前的研究热点之一。为在传统析出强化型铜合金中引入孪晶, 本文主要以 Cu-7Al 二元合金为基础, 以合金化法设计制备了 Cu-7Al-3Ni 和 Cu-7Al-6Ni 合金, 通过多级冷轧时效和多向锻造时效处理获得超细晶与孪晶结构的 Cu-Al-Ni 材料, 加以适当的时效处理调控微观组织引入析出相, 使 Cu-Al-Ni 合金强度和延伸率协同提升。本文主要研究了冷轧时效处理以及多向锻造时效处理过程中 Cu-Al-Ni 合金微观组织及晶界取向分布的变化, 探讨了在冷轧时效处理以及多向锻造时效处理过程中 Ni 含量变化对 Cu-Al-Ni 合金微观组织及析出相类型的影响。

E17-45

相场法在磁弹功能材料中的应用

胡成超*

1. 北京理工大学 (珠海)

相场法已成为材料科学与工程领域的强大工具, 为理解相变和微观结构演化提供了坚实框架。该方法通过介观尺度建模将原子尺度现象与宏观行为联系起来, 极大地深化了我们对材料过程的认识。本文提出微磁-微弹性相场建模方法, 并探讨了该技术在磁弹性功能材料 (包括磁致伸缩化合物和铁磁形状记忆合金) 中研究相界面微观结构演化与超灵敏磁弹性响应的最新应用。文章还系统论述了多铁性系统和磁电异质结构中磁-弹-电耦合相场建模的重要进展。最后, 我们指出了相场法推动磁弹性功能材料发展所面临的关键挑战与未来研究方向。

E17-46

位错调控纳米晶界演化的晶体相场法研究田晓林¹, 赵宇宏^{*1}, 李欢庆¹, 李沐奚¹, 顾涛¹, 侯华²

1. 中北大学 新材料智能铸造先进成型山西省重点实验室
2. 太原科技大学 材料科学与工程学院

纳米晶界迁移与位错交互机制是调控材料塑性变形的关键。本文通过原子级模拟揭示了温度场/应力场作用下晶界动力学规律。研究发现, 温度对晶界-位错相互作用具有显著调控效应, 高温环境下, 晶界对位错的捕获能力显著增强, 其吸引力大于异号位错间的相互作用, 形成热力学主导效应。应力诱发晶界迁移是材料硬化的内在原因, 呈现滑移孕育期, 位错反应期和周期波动期特征。位错对分解和晶界发射位错是滑移孕育期内晶界弯曲与破裂的关键环节, 位错对湮没或晶界吸收位错是位错反应期和周期波动期中位错密度降低的首要方式。新位错的萌生贯穿整个阶段, 主要由固有位错对分解和外来位错对合并两种机制介导。亚晶形核或位错对分解分别是原子单滑移或单攀移的结果, 而位错对的湮没涉及多种运动方式: 先滑移后攀移, 先攀移后滑移或攀滑移协同运动。相比于单轴应力变形, 双轴应力加载呈现出协同变形, 无位错锁 (限制位错滑移) 和位错密度低的特点, 为塑性变形提供一定缓冲空间。

E17-47

高温服役合金的多场耦合相场研究

单野, 王晟龙, 牛堃宁, 李永胜*

1. 南京理工大学

高温合金作为高温结构部件的核心材料, 常服役于高温, 应力, 辐照等复杂多场耦合环境, 其微观组织演化与力学性能调控是材料设计的关键。基于 Chan-Hilliard 和 Ginzburg-Landa 方程相场动力学模型, 耦合晶格错配应力及外载荷应力, 建立晶体塑性多组分相场模型, 研究 Ni 基高温合金中 $\gamma'-(\text{Ni}, \text{Co})_3(\text{Al}, \text{Ta})$

相在多场作用下的演化动力学及蠕变性能关联机制。相场研究表明：Co 含量增加可显著促进 γ' 相析出，使其体积分数提升，颗粒半径减小，粗化速率降低。Co 抑制 Al, Ta 向 γ' 相偏聚，促使 Ni 向 γ' 相富集，晶格错配度降低，界面弹性应变能降低。Co 具有使蠕变应变降低，蠕变寿命延长，以及 γ' 筏状组织稳定性提升的作用。八面体滑移系中拉伸应力下 $\{111\}\langle 101\rangle$ ，压缩应力下 $\{111\}\langle 011\rangle$ 主导蠕变变形，其剪切应变贡献显著。研究了初始晶格错配对 $\gamma'-(\text{Ni},\text{Co})_3(\text{Al},\text{Ta})$ 相演化动力学和蠕变性能的调控作用。减小初始晶格错配可促进 Al 和 Ta 向 γ 基体分配，Ni 向 γ' 相分配，使 γ' 相体积分数提高，粗化速率降低；在蠕变阶段，较大初始晶格错配的合金蠕变应变大，筏状组织退化快，蠕变寿命短。研究阐明了多场耦合下 γ' 相粗化-筏化-断裂的连续演化路径，建立了成分-晶格错配-微观组织-蠕变性能的跨尺度关联模型，为通过合金成分优化和晶格错配设计提升高温合金服役寿命提供了理论依据与模拟方法。

E17-48

格子玻尔兹曼方法模拟弹性效应下的固态组织转变

吴寒¹，孙东科*¹，陈双林²

1. 高速飞行器结构与热防护教育部重点实验室，东南大学机械工程学院，江苏南京，211189，中国
2. CompuTherm LLC, Middleton, WI 53562, USA

大多数先进工程材料是非均质的，广泛应用于各类高性能合金零部件的研发设计中，其取向域的形状，取向和空间排列在决定材料的物理和机械性能方面起着重要作用。本工作根据格子玻尔兹曼方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)和相场(Phase Field, PF)的基本原理，提出了一种利用格子玻尔兹曼方法模拟六方-正方组织转变的建模方案，分别构建两种相场耦合模型，利用守恒非局部(Allen-Cahn, AC)方程验证了模型的准确性。以上两种模型都充分考虑了弹性应变能对固态组织演化的影响，区别在于考虑浓度场的模型可以通过控制成分从而研究析出相的体积分数对组织形貌的影响。主要研究系统中体自由能，界面能和弹性应变能三种能量的分配形式对于单，多变体系统生长形貌的影响机制及变体间相互作用的影响规律。模拟发现，在三变体系统中，六方到正交组织转变很容易完成，与单变体和双变体系统不同。整个转变过程大致分为两个阶段：第一阶段涉及正交组织的形核与生长，每个颗粒沿取向面形成薄板状的微观结构；第二阶段是畴粗化过程，不同的取向畴相互影响，彼此交织，从而形成了许多独特的组合模式。进一步考虑两种合金成分，在析出相体积分数较高的合金中，颗粒形貌主要是以矩形/正方形呈现，并且这些析出物在其角落处相互接触，形成各种自适应模式；在析出相体积分数较低的合金中，其主要形貌为薄板状，变体之间的相互排列也形成了一些独特的图案。表明以无应力转变应变为特征的弹性应变能是决定结构作用域形状，取向和排列的重要因素。随着弹性应变能的增加，畴结构表现出更高的各向异性，变体中出现更多的反畴结构，从而增加了三种变体之间相互作用产生复杂组织的可能性。模拟得到的多变体形态特征和组合模式与实验观测结果吻合良好，本模型可为求解弹性应变能作用下多相多畴结构组织转变过程提供有效的解决方案，为深入研究固态相变中组织演化提供新的思路。

E17-49

纳米填料取向增强电卡效应：P(VDF-TrFE-CFE)/Ba_{0.67}Sr_{0.33}TiO₃ 复合材料研究

邵灿灿^{1,2}，左如忠²，黄厚兵*¹

1. 北京理工大学
2. 淮南师范学院

聚合物展现出极高的击穿场强，而无机铁电材料则具有显著的自发极化特性，这使得对铁电无机成分增强的聚合物复合材料在巨电卡效应(ECE)方面的研究不断取得进展。本研究旨在通过分析 Ba_{0.67}Sr_{0.33}TiO₃ (BST67) 纳米晶粒在基体 P(VDF-TrFE-CFE) 中的长径比，复合比及取向性，探讨 P(VDF-TrFE-CFE)/BST67 复合材料的 ECE 特性。P-E loop 的计算结果表明，与 BST67 纳米晶粒相关的三种因素均能有效增强复合材料的铁电极化值。这种增强效应归因于大的长径比，高的复合比以及强取向性，这些因素使得 BST67 纳米晶粒能够激发更大的电场强度。通过 LGD 方法计算的绝热温变(ΔT)结果显示，BST67 的这三种因素能够独立提升 ΔT ，并且它们对铁电聚合物的 ECE 性能具有协同作用。我们的相场模拟结果为后续聚合物/无机铁电复合材料的 ECE 研究提供了重要的启示。

E17-50

A lattice Boltzmann-orientation tracking model for dendrite growth and motion of binary alloys during non-equilibrium solidification

Shilin Mao¹, Dongke Sun^{*1}

1. Southeast University

Dendrite growth is a micro-scale phenomenon ubiquitously observed in both natural and industrial settings, in which the evolution of microstructure is influenced significantly by non-equilibrium physical phenomena, such as melt convection, heat and mass transfer, and solid-phase movement and decisively impact and determine the macroscopic mechanical properties of the resultant structures. This study introduces a lattice Boltzmann-orientation tracking model to simulate dendritic growth and motion during non-equilibrium solidification involving solute diffusion and melt flow. In the present model, the anisotropic lattice Boltzmann scheme is employed to describe the growth of dendrite, while the two-relaxation-time (TRT) lattice Boltzmann scheme is utilized to compute melt flow. The MLS (Mei-Luo-Shyy) method manages the fluid-structure interaction between the dendrite and the melt, and the Galilean invariant momentum exchange method is used to calculate the hydrodynamic force and moment acting on dendrite. The model is quantitatively validated by the simulation of the continuous growth and the drafting-kissing-tumbling (DKT) phenomenon. Subsequently, it is applied to investigate the impact of dendrite movement and interfacial non-equilibrium on evolution of dendritic patterns for Si-9.0at%As and the columnar to equiaxed transition (CET) for Al-3.0wt%Cu alloys.

Investigations into the growth and remelt processes of isolated dendrites reveal that the growth, remelting and movement of dendrite fragments greatly affect the microstructure evolution and solute segregation patterns. At low cooling rates, the solute trapping effect increases the primary dendrite arm spacing (PDAS), while the solute drag effect is opposite. At high cooling rates, the solute trapping and solute drag will make the solid-liquid interface unstable and the solidification structure develops into seaweed crystals. In addition, the results show that the timing of equiaxed dendrites nucleation and the interface non-equilibrium effects exert a significant influence on the occurrence and final morphology of the CET.

This model inherits the parallelism of lattice Boltzmann method and the thermodynamic self-consistency of phase field method. It can reasonably and effectively describe the dendrite behavior in the non-equilibrium solidification process of binary alloy, and can effectively reveal the influence of interface non-equilibrium effect, dendrite sedimentation, rotation, drift, etc., on the microstructure evolution and solute segregation. Consequently, it serves as a powerful tool for investigating the formation and evolution mechanisms of alloy solidification structures, with crucial implications for enhancing the macroscopic mechanical properties of materials.

E17-51

类吡咯 N 对氮掺杂碳点缓蚀性能的影响及其机理研究

王斯琰*, 赵宇宏

1. 中北大学

随着环保和健康意识的提升, 高效, 绿色的新型缓蚀剂受到越来越多关注。碳点 (CDs) 是一类具有核壳结构的准球形碳纳米颗粒, 核心主要由 sp 杂化碳原子构成。除碳元素外, CDs 表面及边界常含有如 -COOH 和 -OH 等活性官能团, 赋予 CDs 良好水溶性。由于其光学特性, CDs 最初应用于生物成像, 离子检测, 光催化, 储能和 LED 发光等领域。近年来, CDs 因吸附性能佳, 生物相容性好, 环保且成本低等优势, 作为绿色缓蚀剂受到关注。氮掺杂可显著提升 CDs 缓蚀性能, 合成方法简单且环保, 是优化 CDs 缓蚀性能的主要途径。氮在氮掺杂碳点 (NCDs) 中的存在形式主要有氨基 N, 类吡咯 N, 类吡啶 N, 季铵 N 和类吡咯 N。为明确提高 NCDs 缓蚀性能的氮种类, 本研究采用两步水热法合成含氨基 N, 类吡咯 N 和季铵 N 的 NCDs: 首先以柠檬酸为原料通过水热法合成 CDs, 再引入氨水作为氮源实现氮掺杂。在合成的第二阶段, 通过调整氨水水热温度 (100°C, 160°C 和 220°C), 成功调控氨基 N, 类吡咯 N 及季铵 N 在 NCDs 中的含量。进一步探讨了这些 NCDs 对 1 M 盐酸溶液中 Q235 碳钢腐蚀的抑制性能。结果显示, 随着氨水水热温度升高, NCDs 中吡咯 N 含量增加。氨水水热温度为 220°C 时制备的 NCDs 含有最高类吡咯 N 含量 (4.10 at.%)。该 NCDs 在 200 mg/L 浓度下展现出最高腐蚀抑制效率, 达 96.63%, 明确了类吡咯 N 在提升 NCDs 缓蚀性能中的关键作用。为了进一步阐明 NCDs 的腐蚀抑制机理, 结合密度泛函理论分析了 N 原子对 NCDs 吸附性能的影响。计算结果表明, 作为吸附型缓蚀剂, NCDs 主要通过将其 π 电子转移至碳钢的 Fe 原子上, 形成配位键, 并以平行吸附方式完成在碳钢表面的吸附。大量 NCDs 在碳钢表面的吸附形成保护层, 有效隔离钢材与酸性溶液, 起到缓蚀作用。氮掺杂改变了 NCDs 中 π 电子的前线轨道能量 (HOMO-LUMO)。其中, 类吡咯 N 的 p 轨道与碳核 π 轨道法向平行, 其孤对电子能有效离域至碳核的 π 共轭体系, 形成 p- π 共轭, 导致整个 NCDs 内 π 电子能量变化, 这一变化降低了 NCDs 表面 HOMO 和 LUMO

间的能量差,从而增强了 NCDs 反应活性;同时其电子转移数增加 (ΔN),即给电子能力增加,从而显著提升其对碳钢表面的吸附能力。氨基 N 的 p 轨道与碳核 π 轨道的法向不平行,其孤对电子只能部分离域,因此对 NCDs 吸附性能的影响略低于类吡咯 N;季铵 N 的 p 轨道虽然与碳核 π 轨道法向平行,但其正电性导致 $\Delta N < 0$,不利于 NCDs 的吸附。综上,本研究明确了类吡咯 N 对 NCDs 缓蚀性能的影响规律和机理,为 NCDs 结构的精细调控以提高其缓蚀性能提供了重要的理论和实验依据。

E17-52

相场模拟铁酸铋纳米岛拓扑涡旋畴的尺寸效应

唐诗雨,郭常青,王静,黄厚兵*

1. 北京理工大学

铁酸铋纳米岛在铁电应用中具有独特优势,因其能够形成稳定的拓扑涡旋结构,这对先进器件设计至关重要。这种由拓扑特性驱动的涡旋畴在增强非易失性存储器和储能应用方面具有重要潜力。本研究通过相场模拟系统研究了高度,长高比和侧壁倾斜度三个关键几何参数对涡旋结构稳定性的影响。研究结果表明,较大的长高比,较高的侧壁倾斜度以及较小的纳米岛高度有利于涡旋结构的形成与稳定。相反,负向倾斜度会阻碍涡旋形成,但通过增大长高比可补偿这一效应,最终实现可翻转涡旋畴的稳定。我们构建了三维相图以阐明这三个参数的协同作用,并确定了有利于涡旋稳定的条件参数范围。这些发现为具有定制化拓扑结构的铁电纳米岛几何设计提供了重要理论指导,对开发基于拓扑涡旋构型的新一代铁电器件和逻辑单元具有重要参考价值。

E17-53

格子玻尔兹曼相场方法中的反问题及其 PINNs 求解

赵博睿,孙东科*

1. 东南大学机械学院

格子玻尔兹曼相场方法 (Lattice Boltzmann Phase-Field Method, LBPFM) 作为一种多尺度,多物理场耦合建模工具,在求解材料科学与工程中的正问题方面取得了巨大成功。而在实际工业应用中,如材料工艺调控,性能预测与服役行为分析等任务常常需要反向推断某些难以直接观测的物理场信息或微观控制参数,近年来兴起的物理信息神经网络 (Physics-Informed Neural Networks, PINNs) 因其在融合先验物理规律与稀疏观测数据方面的能力,为解决复杂反问题提供了全新的思路。本研究聚焦于格子玻尔兹曼相场理论背景下的反问题建模,构建了一个由数据驱动模块与物理驱动模块联合控制的 PINNs 框架,针对材料中的扩散,流动与相变耦合机制开展参数反演研究。模型分别对相场,温度场二场耦合以及相场,温度场和流场三场耦合情况下的反问题求解过程进行了系统建模与参数反演。其中, PINNs 利用基准各向异性函数成功反演出与期望函数吻合的结果,充分展示了其在复杂相场系统中参数识别与物理规律挖掘方面的潜力。本研究为研究材料科学与工程中的反问题求解提供了新视角,并为潜在规律推理提出了一种有效的求解方法。

E17-54

基于相场法的无铅铌酸钾钠中涡旋拓扑结构实现类生物突触可塑性

刘钟磊¹,曹津铭¹,王巧玲¹,侯华¹,赵宇宏¹

1. 中北大学

基于铁电材料的多态忆阻器是高密度存储设备很有前途的候选者,可控的涡旋拓扑结构在类生物突触方面具有巨大的应用潜力。然而,完整高效实现兼具内存与运算的生物突触功能是一个长期的挑战。本文通过匹配突触可塑性电场设计,在铌酸钾钠薄膜中的涡旋结构中首次完全实现了 7 种类生物突触神经元功能。通过相场法的分析,我们表明不同功能实现的电畴结构转变主要来自铁弹孪畴壁与不同电场脉冲之间的能量竞争。通过对两种相反来源增强信号位置的结构分析,首次发现铁弹孪畴结构有助于同时实现顺电场和逆电场两种面外极化。基于超过 100 处的功能区域,在 0.01V/nm 的外加电场下,实现的 PPF 功能相对于传统晶体管具有高达 16 倍的信号提升。STDP 和 SRDP 功能均可达到 80% 以上的脉冲信号识别表现。这将为人工突触忆阻器提供候选材料,有助于促进仿生领域中易集成的独立突触神经元的实现。

E17-55

一个耦合热-力-化多物理场的广义多相场理论：凝固裂纹研究

武雷刚，王雷*

1. 西北工业大学

凝固裂纹的形成是由热应力和微观组织演化多因素协同作用引发的多物理场失效行为，揭示其演化机理，量化各因素耦合作用仍是铸造，焊接和增材制造等领域的难题。本文建立了热-力-化多物理场耦合相场模型，系统研究了固相桥形成阶段之后凝固裂纹萌生及扩展过程中的多因素动态交互机制。该模型在 KKS 相场模型的基础上引入了弹性能，塑性能以及断裂能，通过插值函数区分固液两相的性质，最终建立了应力场，凝固相场，断裂相场及溶质场多场耦合控制方程。计算结果表明：（i）固液相变过程中产生的热应变会引起弹性应变的重新分布，形成热力耦合的内应力场，从而通过弹性能 σ_e 影响固液界面的演化，产生抑制/促进相变的双向反馈。（ii）裂纹面的形成会阻碍溶质扩散，改变凝固过程中的溶质偏析模式。

（iii）塑性能和断裂能之间的竞争决定裂纹脆性穿晶和韧性沿晶扩展模式。该模型定量阐述了合金凝固过程中热应力与其他因素之间的耦合作用，为控制凝固裂纹形成提供了理论支撑。

E17-56

自支撑双层膜中应变诱导的莫尔极性涡旋

张亦轩¹，沙浩治²，王学云¹，梁德山¹，王静¹，李千²，于荣²，黄厚兵^{*1}

1. 北京理工大学

2. 清华大学

由于铁电材料强烈的极化-晶格耦合特性，应变工程已成为设计新型铁电畴结构的关键策略。最新发现在二维莫尔自支撑双层膜存在涡旋图案，揭示了膜内复杂的应变场在调控此类纳米拓扑结构中的关键作用。然而，这些莫尔极性涡旋的起源与微观拓扑特性尚未被充分探究。本研究通过结合实验观测与弹性理论，确定了扭角自支撑双层 SrTiO_3 体系中应变的解析解，并进一步采用相场模拟研究莫尔涡旋图案的微观拓扑及其形成机制。研究发现：面内莫尔涡旋图案源于扭角堆叠诱导的周期性分布的原子位移涡度，而弹性能，挠曲电能与梯度能的复杂相互作用共同构成了涡旋形成的能量来源。通过三维相场模拟，我们揭示了极性涡旋具有显著的面内散度和面外手性。通过定量施加外电场或调节挠曲电效应大小，可实现对极性涡旋的面外手性的定量控制。本工作为莫尔体系中铁电拓扑结构的形成和调控提供了一定的理论指导。

E17-57

自由表面两相流格子玻尔兹曼模型中界面几何计算格式的误差量化研究

陈俊伟¹，李栋¹，韩青有¹，孙东科^{*1}

1. 高速飞行器结构与热防护教育部重点实验室，东南大学机械工程学院，江苏南京，211189，中国

在非混相两相流的自由表面格子玻尔兹曼方法（LBM）模拟中，界面几何参数（界面法向和曲率）的精确计算对于准确施加表面张力至关重要。此外，相分数函数的阶跃性质在数值求导中产生高频噪声，显著影响界面几何参数精度，进而诱发非物理的虚速度。本文系统评估了四种主要界面几何计算方案的数值精度特征，定量分析界面几何误差对两相流模拟稳定性的影响机制。通过构建圆形，椭圆和正弦波界面测试案例，系统比较了高度函数法（HF），分段线性界面重构法（PLIC），卷积平滑法（CV）和体积分数梯度法（VFG）的精度收敛特性。研究结果表明：HF 方法在抑制阶跃相分数函数求导产生的高频曲率噪声方面表现最佳，实现 2 阶收敛精度；PLIC 方法同样达到 2 阶精度，但曲率误差比 HF 方法高 0.5 个数量级；HF 和 PLIC 方法在法向角计算中均实现 1 阶精度，其中 PLIC 方法的曲率计算误差比 HF 方法低 1 个数量级；CV 方法在曲率和法向角计算中均表现为 0 阶精度；VFG 方法因未处理高频噪声而呈现精度发散特征。本研究量化了不同界面几何计算格式引入的误差，揭示了它们在计算精度，稳定性与效率之间的权衡特性，并基于误差传播机制和物理场景特点提出了方法选择建议。该工作为在自由表面 LBM 中选择合适的界面处理技术以进行高精度，高稳定性两相流模拟提供了理论依据。

E17-58

多铁拓扑孤子的电场调控

董守哲¹, 黄厚兵^{*1}

1. 北京理工大学前沿交叉科学研究院

多铁性材料 BiFeO₃ (BFO) 同时具备铁电性与 G 型反铁磁性, 是构筑新一代存储与逻辑器件的理想平台。然而, 对电场调控下磁化与极化耦合动力学行为——特别是磁化如何通过极化响应电场——的深入理解, 仍是一个关键挑战。本研究基于经典朗道理论中的双二次磁电耦合项 ($\lambda M^2 P^2$), 构建了描述外加电场下 BFO 反铁磁序演化的相场模型。模拟结果揭示反铁磁条纹畴的确定性重取向直接由极化翻转驱动。值得注意的是, 在 BFO 铁电畴壁 (极化发生转向处) 汇聚的不同反铁磁条纹畴, 会诱发非共线拓扑自旋构型的产生。研究进一步阐明了电场诱导的极化翻转如何动态操控这些磁拓扑构型。该工作为理解 BFO 中的磁电耦合机制以及设计利用铁电-铁磁 (多铁) 耦合序的新型功能器件奠定了理论基础。

E17-59

基于 CMC 的热力学模型贝叶斯优化与不确定性量化

张海辉¹, 孙东科^{*1}

1. 东南大学

组合材料芯片 (Combinatorial Materials Chips, CMC) 是沉积在基底上的成分分布薄膜, 可通过高通量表征快速确定三元相图的成分-温度信息。本研究提出一种结合 CMC 外推的相边界数据与贝叶斯方法的热力学参数优化策略, 系统评估其在三元体系 CALPHAD 建模中的有效性。以 Fe-Cr-Ni 和 Fe-Co-Ni 体系为例, 分别构建了仅含传统实验数据, 仅含 CMC 相边界数据以及两者结合的三种输入数据情形下的热力学模型参数自动优化流程。结果表明, 添加 CMC 数据能够有效提高 CALPHAD 模型的准确性和可靠性。进一步发展了针对三元系相边界不确定性, 相稳定性以及三相区顶点概率分布计算方法。结果表明, 整合 CMC 数据可以降低热力学模型中的不确定性, 同时计算得到的不确定性置信区间为三元系材料设计提供可靠的决策依据。

墙报

E17-P01

晶格错配应变调控多组分镍基高温合金动力学与蠕变性能

单野¹, 王晟龙¹, 牛堃宁¹, 李永胜^{*1}

1. 南京理工大学

耦合晶体塑性理论与相场模型, 研究了初始晶格错配对镍基高温合金演化动力学和蠕变性能的调控作用。研究了 1273 K 下 Ni-12.2Al-6Co-2.5Ta 模型高温合金中 γ' -(Ni, Co)₃(Al, Ta) 相特征, 包括微观形貌, 颗粒尺寸, 元素分配, 筏化断裂和塑性应变的定量演化。结果表明, 减小 γ 与 γ' 相之间的初始晶格错配促进了 Al 和 Ta 向 γ 基体相分配, Ni 向 γ' 相分配, 从而具有较高的 γ' 相体积分数和慢的粗化速率。在初级蠕变阶段, γ' 相发生连接和粗化, 而在次级蠕变阶段, γ' 相发生溶解和断裂。具有较大初始晶格错配的合金, 在蠕变阶段产生大的蠕变应变, 筏状组织退化越快, 蠕变寿命越短。本研究通过优化合金晶格错配来为今后设计高性能高温合金提供参考。

E17-P02

多铁性超晶格中极化孤子的稳定性和拓扑相变调控

刘可凡¹, 郭相伟¹, 洪子健^{*1}

1. 浙江大学

多铁性 BiFeO₃/SrTiO₃ (BFO/STO) 超晶格中的拓扑保护极化孤子 (solitons) 因其纳米级局域化与类粒子特性, 在新型电子器件和信息存储领域展现出重要潜力。本研究首先结合相场模拟与压电力显微镜 (PFM) 实验, 系统探究了 BFO/STO 超晶格中极性拓扑结构的调控机制。研究发现, 通过调节外延应变, 超晶格周期性和温度等热力学条件, 可实现极化孤子, 极性斯格明子 (skyrmions) 及平庸畴态之间的可控转变: 减小压缩应变可诱导极性 skyrmions 向 solitons 的演化并最终形成多畴态, 而增加超晶格周期或升温

则分别促使单畴态向 solitons 态及 solitons 向 skyrmions 态的转化。进一步, 通过相场模拟研究揭示了拓扑相变的电场取向依赖性: [100]pc 方向面内电场可实现极性孤子与波态的可逆切换及手性调控; [110]pc 方向电场则导致拓扑缺陷湮灭并形成单畴态; 而面外电场可在维持缺陷形貌的同时翻转拓扑电荷符号。该工作不仅阐明了极性拓扑相的热力学稳定性机制, 还建立了电场取向工程调控拓扑态的新方法, 为多铁性存储器件的可编程设计提供了理论依据与技术路径。

E17-P03

Pb(Zr_{0.7}Ti_{0.3})O₃ 基超晶格的拓扑相变, 相图和介电性能

陈周萍¹, 洪子健^{*1}

1. 浙江大学

Ferroelectric/paraelectric superlattices, created through the periodic stacking of their constituent materials, exhibit intricate phase diagrams that reveal a variety of polar topologies and properties not found in any of the individual components. In this study, we utilize the phase-field simulations to systematically calculate the phase diagrams of Zr-rich Pb(Zr, Ti)O₃/SrTiO₃ superlattices with varying periodicity, strain, and temperature. We observe a rhombohedral-type labyrinth domain oriented along the [110] direction under relatively low compressive strain. Meanwhile, higher compressive strains lead to the formation of polar skyrmions with shorter periodicities. Notably, a high dielectric permittivity of 1700 is found for the polar skyrmion phase with a periodicity of 6 at room temperature when grown on a DSO substrate, which is double the value for the skyrmion phase in a PbTiO₃/SrTiO₃ superlattice. Moreover, a phase transition from skyrmion, vortex/labyrinth states to a cubic phase at elevated temperatures is observed, accompanied by a significant reduction in dielectric responses. We hope this work will inspire further exploration into the design of intriguing polar topologies with superior properties.

E17-P04

镍基高温合金快速凝固非平衡组织形成与演变机理

石正达¹, 董祥雷^{*1}, 郭春文¹, 赵红亮¹

1. 郑州大学材料科学与工程学院

本研究以快速凝固定量相场模拟为基础, 以镍基高温合金为研究对象, 探究其在快速凝固过程中的微观组织演变规律。首先针对不同界面厚度计算一维稳态解, 研究快速凝固模型的收敛性, 发现其溶质截留现象与经典连续生长模型一致并确定了不同界面厚度下的最优模型参量。然后研究非平衡组织的形成与演变规律, 发现凝固速度超过失稳上限时, 柱状晶尖端发生枝晶-平面晶的转变, 并形成周期性的带状结构, 带状结构将固相分为枝状/胞状偏析带和平面状无偏析带, 其中枝状与平面状组织间存在残余液相, 并产生溶质富集, 且随着循环次数的增加, 液相区溶质浓度逐渐降低。最后, 研究不同凝固条件对非平衡组织的调控作用, 发现随着凝固速度的升高, 带状结构的平均宽度降低, 其偏析带侧枝受到抑制, 发生枝晶-胞状晶转变。随着温度梯度的升高, 带状结构的平均间距和宽度均减小, 且随循环次数的增加, 偏析带侧枝生长逐渐占据优势。本研究为揭示增材制造工艺优化和组织缺陷控制机理提供了理论依据。

E17-P05

横向磁场对铜银合金凝固组织的影响及其机制的研究

张豪然¹, 董祥雷^{*1}, 郭春文¹, 赵红亮¹

1. 郑州大学

熔体中的对流可以通过影响凝固过程中的传热和传质来改变微观结构演变, 而磁场作为一种外场调控技术, 以非接触方式在控制熔体流动和改变微观结构演变方面引起广泛关注。本研究以 Cu-Ag 合金为研究对象, 利用相场法+格子玻尔兹曼法方法, 重点探究了自然对流, 横向磁场等多场耦合对 Cu-Ag 合金界面形态, 生长方向以及微观偏析等的影响作用。结果表明, 当施加横向磁场时, 柱状晶由对称形态转变为倾斜阵列, 且随着磁场强度和温度梯度的增加, 溶质向一侧富集的程度增加, 枝晶生长方向偏离温度梯度方向。受热电磁力在熔体中产生的热电磁对流的影响, 二次, 三次侧枝快速生长, 导致两侧枝晶间的过冷差异显著增加。本研究为铜合金铸态组织与性能的工艺优化提供指导, 同时也为揭示复杂外场作用下的非平衡凝固过程及机制提供理论依据。

E17-P06

基于 GPU 并行与深度学习的大尺度相场模拟

康盼¹, 马飒¹, 张童弟¹, 张利军*¹

1. 中南大学粉末冶金研究院

大尺度相场模拟对于揭示实际工程材料中组织演变的跨尺度物理机制至关重要。然而, 极高的算力和存储资源需求严重制约了其发展。为突破计算效率瓶颈, 减少计算资源占用, 论文开发了一种基于 GPU 并行加速与深度学习预测的大尺度相场模拟加速框架。首先, 发展了一种基于 CUDA C++构建的 GPU 并行加速策略。基准测试表明, 单卡 GPU 计算较单核 CPU 加速约 1600 倍, 400 卡 GPU 并行弱可扩展性高达 71%。此外, 论文创新性地提出数据驱动构建端到端的深度学习预测模型, 采用 3D 卷积自编码器进行高效特征提取与降维, 并结合 Transformer 模型学习微结构演化的时序依赖关系, 最终实现对微结构的高效预测和时间序列插值。基于所提出的大尺度相场模拟加速框架, 成功实现了 Al-Si-Mg 合金定向凝固过程毫米级组织结构演化的定量相场模拟, 模拟得到的一次, 二次枝晶臂间距与实验一致, 并揭示了宏观/微观偏析机制; 同时, 深度学习模型可在存储有限时刻模拟结果的基础上, 实现对全时段组织结构的精准预测。

E17-P07

Fe-Mn-Al-Ni-C 轻质钢双纳米析出行为的热力学分析和相场模拟

曾雨欣¹, 王峰¹, 张利军*¹

1. 中南大学

Fe-Mn-Al-Ni-C 奥氏体轻质钢具有低密度, 高比强度及优异耐蚀性, 在航空航天与汽车轻量化领域具有广阔应用前景。实验结果表明, Ni 元素的添加会形成 B2 与 κ 的双纳米析出结构, 从而显著提高材料的力学性能。论文基于热力学计算与相场模拟对 Fe-Mn-Al-Ni-C 轻质钢双纳米析出行为进行深入探究。热力学计算结果表明, 5 wt % Ni 元素的添加会使得 BCC 相的有序-无序转变温度从 800 °C 提升至 1200 °C, B2 与 κ 双相在较高温度下稳定共存, 与实验结果一致; 析出相形核驱动力计算结果表明, 较低 Ni 含量下 κ 相优先析出, 而超过临界值后 B2 相优先析出。基于以上计算结果, 采用耦合弹性场的多元多相有限界面耗散模型, 模拟其形貌演化以及溶质分布情况。结果表明, B2 相与基体的界面处出现 Mn, C 元素的富集以及 Al, Ni 的贫瘠, 使得 κ 相位于 B2 与基体界面处时具有较大的驱动力, 促进了 κ 相在该处的优先生长。论文系统研究双相纳米析出形成原因, 成功复现了该合金中 κ 相包覆和接触 B2 相的形貌演化过程, 为理解轻质钢中双纳米相协同强化机制提供了重要理论支撑。

E17-P08

量子化涡旋

杜管诗涵*¹

1. 浙江大学

铁电异质结构中的拓扑相及其转变因其在下一代电子应用中的潜力而备受关注。在这里, 我们研究了在 DyScO₃ (DSO) 衬底上外延生长的约束 PbTiO₃/SrTiO₃ (PTO/STO) 异质结构中量子化极性涡旋的形成和操纵。通过打破 PTO/STO 超晶格的传统周期性边界条件, 在受限的 PTO 层中诱发了有限数量的偶数涡旋, 显示出量子化行为。这一现象得到了理论计算和实验观察的支持。能量分析表明, 偶数涡旋数量的稳定性源于朗道, 弹性, 静电和梯度能量成分之间的相互作用。外部电场下的切换动力学表明, 涡旋的手性和旋转方向可以由电场方向控制, 拓扑边缘钉扎效应促进了其显著的稳定性。这些发现深入揭示了铁电系统中极性拓扑结构的受控工程, 为精确控制极化态的纳米级电子器件提供了一条前景广阔的途径。

E17-P09

物理气相沉积薄膜生长的相场模拟研究

杜鑫磊¹, 邢辉*¹

1. 西北工业大学

作为一种重要的表面处理技术, 物理气相沉积在半导体, 光电材料, 涂层和纳米材料等领域具有重要的应用。在物理气相沉积过程中, 气相输送, 表面粘附与扩散以及亚表面微观结构动力学之间相互作用复杂, 共同决定薄膜的最终表面粗糙度, 形貌以及晶粒尺寸, 形状, 孔隙率, 相分布等关键特性。这些微观

结构特征直接决定了薄膜的性能,并受到具体沉积条件的影响。相场方法基于 Ginzburg-Landau 相变理论用于模拟相变和其他过程中微观结构和界面的演变,是一种直观且有效的研究物理气相沉积复杂过程的数值模拟手段。本文建立了基于 Cahn-Hilliard 方程的相场模型,结合平滑界面法,研究了物理气相沉积过程中薄膜生长的动力学过程研究了动力学参数对二元难混溶合金薄膜生长的影响。研究表明,气-固界面失稳导致了薄膜生长过程中表面产生的小突起的形成,在薄膜生长过程中自组织复合结构形貌调制随着沉积速度的增加发生了横向组分调制构型,垂直组分调制构型与随机组分调制构型的转变,揭示了初始膜层的厚度对自组织复合结构形貌调制的影响规律,证实了物理气相沉积薄膜生长的历史相关性。利用耦合平滑界面法的描述多晶薄膜生长的相场模型,研究了多晶 TiN 阻隔层在刻蚀坑中沉积生长的动力学过程。结果表明,刻蚀坑的几何形貌与生长动力学参数在多晶 TiN 阻隔层薄膜孔隙率调控中扮演着重要的角色,对多晶薄膜孔隙率产生较大影响。发现较小的沉积速度将会生成较光滑的 TiN 阻隔层薄膜,而较高的气体冲击速率有利于气相成分的补充,使 TiN 阻隔层薄膜更为致密。

E17-P10

气泡上升过程的多物理场耦合数值模拟研究

苗雨晨^{*1}

1. 西北工业大学

气泡动力学行为在电化学系统,多相流及微流体技术中具有重要科学价值,其复杂特性源于流体动力学与表面张力,流体粘度及边界条件的耦合作用。本研究针对粘性介质中气泡上升过程的界面演化与流场耦合难题,建立了基于相场模型的高精度数值方法,结合格子玻尔兹曼方法(LBM)实现了浮力-表面张力主导的复杂流场解析。通过开发并行化算法,显著提升了相场模型在动态界面捕捉和大规模计算中的优越性,系统揭示了气泡动力学行为的物理机制。研究构建了满足流场独立性准则的优化模型。数值结果表明:埃特沃斯数通过调节表面张力与浮力的竞争关系主导气泡形态演化,而雷诺数则通过惯性力与粘性力的动态平衡影响尾部涡结构特征。在多气泡耦合研究中,捕捉到尾流诱导的协同效应:前导气泡产生的低压尾迹区显著加速后续气泡运动,同时引发横向迁移的轨迹分岔现象。通过多组对照实验验证,数值模型成功再现了气泡的典型形变模式,定量表征了无量纲参数对界面动力学的影响规律。研究构建的"相场-LBM"耦合框架为复杂多相流系统提供了高保真模拟工具,所得结论对微流控器件设计,电化学沉积优化及多相反应器开发具有重要指导意义。

E17-P11

电化学沉积枝晶生长调控与多相流耦合动力学的相场模拟研究

景涵煦¹, 邢辉^{*1}

1. 西北工业大学物理科学与技术学院

金属电池中枝晶生长与多物理场耦合机制是决定储能系统性能的关键。本研究通过构建相场模型揭示了枝晶形貌演化规律:基于非守恒/守恒双序参量相场模型,发现电势差和电解质浓度调控球形颗粒生长振荡的振幅与波长。动力学各向异性强度降低促使枝晶形貌从枝状转向针状,尖端分裂形成侧枝,生长方向性减弱。引入异质相重构模型表明,电极表面附近锂离子消耗与异质相表面富集导致非均匀生长,枝晶受电势梯度驱动包裹气泡后形成复杂结构。

拓展至锌基液流体系,相场-晶格玻尔兹曼耦合模拟显示:静态下 Zn^{2+} 在尖端富集形成浓度边界层,产生尖端效应,交换电流密度与扩散系数通过达姆克勒数等效影响生长动力学。电解液流动显著改变生长模式,流速增加促进 Zn^{2+} 平流传输,使实际生长方向角减小,有效抑制枝晶形成。多晶晶粒在流动中呈现竞争性生长特征。

通过多相流-枝晶-障碍物相互作用模型,发现壁面效应显著影响单气泡上升轨迹,埃特沃斯数主导气泡形态演化。引入不同润湿特性障碍物时,疏湿表面通过限制接触实现低形变滑动,亲湿表面则增强粘附力诱发颈缩失稳。多气泡相互作用中,前导气泡尾流效应加速后续气泡运动并引发横向偏移。该研究为抑制枝晶生长,优化电池设计提供了多尺度理论支撑。

E17-P12

熔体流动作用下高温合金枝晶生长的数值模拟研究

谢颖^{*1}

1. 西北工业大学

镍基单晶高温合金作为航空发动机涡轮叶片的核心材料，其定向凝固过程的溶质传输机制直接影响材料服役性能。单晶高温合金在定向凝固过程中溶质组元间密度差异引起的自然对流，是雀斑缺陷形成的重要原因。本研究利用相场-格子玻尔兹曼耦合方法，系统研究了不同重力加速度驱动下自然对流对枝晶生长相貌的影响机制。基于镍基单晶高温合金多组分体系的复杂性，本研究采用了伪二元合金近似方法，分别通过施加正重力，零重力以及负重力等不同的重力加速度，深入揭示了流场-温度场-溶质场多物理场耦合作用下枝晶生长形貌演化规律，重点阐明了在流动作用下枝晶生长过程中枝晶尖端稳定性，溶质浓度差以及压降对枝晶间裂纹萌生的影响机制。通过数值模拟结果表明：在重力驱动下的自然对流中，正重力促进枝晶尖端稳定性，随重力增大，侧枝更粗大，沿温度梯度方向压强逐渐减小；负重力导致溶质向尖端富集，枝晶尖端不稳，尖端劈裂，沿温度梯度方向压强逐渐增大，出现溶质偏析，从而使得合金的机械性能下降。

仅发表论文

E17-PO01

旋转爆震燃烧室多层被动热防护结构热分析模型及试验验证

田佳*¹

1. 中北大学

针对环形旋转爆震燃烧室长时间工作的热防护需求，本章提出一种各层材料按照高热容到低热容梯度排列的被动热防护结构，各层材料从燃烧室高温侧到外界环境分别为陶瓷基类耐烧蚀层-树脂基类中高温相变烧蚀层-中低温柔性轻质隔热层-金属基体层。本章建立了考虑树脂基碳化烧蚀的多层平壁瞬态热分析模型，基于数值模拟中旋转爆震燃烧室典型热环境，采用动边界隐式差分计算格式求解获得热环境和隔热材料主要参数对被动热防护结构内部温度分布的影响。同时开展了旋转爆震燃烧室梯度复合热防护结构热考核实验，对燃烧室热环境和被动热防护结构的热分析模型进行了试验验证。

E17-PO02

Enhancement of strength and elastic modulus of Mg-Gd-Y-Zn-Zr alloy by Sn addition

Zhibing Ding¹, Rui Xu¹, Chao Wang¹, Wenmin Guo¹, Dongrui Chen¹, Bin Liu², Hua Hou³, Yuhong Zhao*⁴

1. Shaoyang University

2. Central South University

3. Taiyuan University of Science and Technology

4. North University of China

The effect of Sn addition on the microstructure and mechanical properties of Mg-12Gd-3Y-0.5Zn-0.6Zr (wt%) alloys was investigated. The results show that the microstructure of the as-cast Sn-containing alloys consists of α -Mg, Mg₂₄(RE,Zn)₅ and Sn₃RE₅ phases. The Sn₃RE₅ phases with superior high temperature stability increase with the Sn content. The Young's modulus of Sn₃Gd₅ and Sn₃Y₅ compounds are 109.0GPa and 119.2GPa, respectively, which results in the elastic modulus of the alloys increasing with the Sn element. Mg-12Gd-3Y-0.5Zn-0.6Zr-2Sn alloy has the highest elastic modulus of 51.3GPa. The addition of Sn can significantly increase the number density of fine circular β' phases in peak-aged alloys. Suitable volume fraction of Sn₃RE₅ phases, fine DRXed grains, weak basal texture and fine precipitates endow the peak-aged Mg-12Gd-3Y-0.5Zn-0.6Zr-1Sn alloy with excellent comprehensive performance, and its elastic modulus, UTS and YTS are 50.4GPa, 452MPa and 368MPa, respectively.