



# 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

### C14-结构材料热-动力学

### C14-Thermo-kinetics of Structural Materials

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



**C14. 结构材料热-动力学**

分会主席：刘峰、屈瑞涛、黄林科、杜经莲、宋韶杰

**C14-01**

题目待定

刘峰

西北工业大学

**C14-02**

基于相变热-动力学计算的高强高导热铸造镁合金设计

罗群

上海大学

高性能铸造镁合金是汽车轻量化和节能减排的关键材料，其广泛应用对解决我国能源安全和实现“双碳”目标具有重要意义。本工作针对铸造镁合金强塑性低和散热性能差的行业瓶颈，聚焦高强塑高导热铸造镁合金相变热/动力学和“物相-性能”构效关系，构建了 Mg-Zn-Al-RE(La, Ce, Nd, Gd, Y)多元系物相热力学描述，提出与相组成有关的热导率计算模型，将合金热导率表达为合金成分、温度、物相热阻、物相含量的函数，实现多元系相平衡和热导率的准确预测。揭示了镁合金凝固和热处理过程中的关键强化相的形成和转变动力学机理，提出亚稳析出相形核长大动力学模型，实现“成分-温度-时间”空间中的相含量和相尺寸的准确预测。提出了元素脱溶增强增导热技术，开发出高强高导热铸造镁合金，设计的高强高导热铸造 Mg-Zn-La 合金屈服强度达 173 MPa，热导率达 155 W/(m K)，是常规 AZ 系列的 2 倍。本工作打通了合金成分-工艺参数（热处理温度和时间）-物相种类-物相含量/尺寸-合金性能（强度、热导率）的全链条计算关键环节，提出的高强高导热铸造镁合金的设计开发思路为复杂体系的合金设计和性能寻优提供了新途径。

**C14-03****Free Energy Criterion for Thermal Stability of Schwarz Nanocrystals**

王云江

中国科学院力学研究所

The discovery of Schwarz nanocrystals (SCs)—characterized by interpenetrating networks of minimal surface grain boundaries (GBs) stabilized by coherent twin boundaries (CTBs)—has pushed the boundaries of nanoscience and nanotechnology to length scales of only a few nanometers. However, the physical mechanisms governing thermal stability remain unresolved. Here we establish a free energy criterion for thermal stability of SC using large-scale thermodynamic integration, benchmarking SCs against other nanostructures like Voronoi and Kelvin nanocrystals. Surprisingly, the free energy of minimal surface GBs in SCs is higher than that of conventional GBs in Voronoi nanocrystal. Therefore, the competition between decreasing GB volume fraction and increasing local GB energy imposes a fundamental size limit. Kinetic stabilization of SCs is accommodated by the topological interlock between CTBs and GBs. The free energy-based criterion for stability of SCs provides a rule for selecting Schwarz-like nano-structures stable at extreme conditions.

**C14-04**

金属基复合材料的微纳变形行为分析

王慷

金属基复合材料国家重点实验室，上海交通大学，上海，200240，中国

金属通过复合化，即向基体引入高性能增强体，实现传统金属所不具备的高比强度、高比刚度等优异

性能。然而，复合化同时引入了增强体与基体间复杂的异质界面及晶格错配，导致其变形机理更为复杂，这也成为金属基复合材理想设计的障碍之一。针对此问题，当前基于机器学习力场的高精度原子间互作用力场，采用分子动力学和路径积分方法，计算金属基复合材料异质界面的热力学和力学性质，并结合原子尺度表征、微纳力学测试等实验手段，精确解析金属基复合材料的变形机理及界面行为。当前工作为金属基复合材料设计提供理论依据。

#### C14-05

##### CALPHAD-Based High-Throughput Calculations for Phase Control and Alloy Design in Secondary Al-Si-Mg-Fe-Mn Alloys

SONGMAO liang, Chuan Zhang, Kamalnath Kadirvel, Fan Zhang  
Computherm LLC

Impurity control and solidification behavior are critical to enhancing the recyclability and mechanical performance of secondary aluminum alloys. In this study, a high-throughput computational framework based on the CALPHAD-based Scheil solidification model was developed to investigate the effects of Si, Fe, Mg, and Mn on phase formation and solidification characteristics in Al-Si-based alloys. A total of 14,641 compositions within the quinary Al-Si-Mg-Fe-Mn system were systematically evaluated, with Si ranging from 7 to 12 wt% (step size: 0.5 wt%), and Fe, Mg, and Mn each ranging from 0 to 2 wt% (step size: 0.2 wt%). Calculations were performed using Pandat software with PanAl2025 database and the PanPython SDK, completing in just 4.8 hours on a standard 8-core desktop processor—demonstrating the efficiency of the high-throughput approach.

The simulations yielded a comprehensive mapping of solidification sequences, primary phase formation, solidification ranges, and the evolution of critical intermetallic phases such as  $\beta$ -AlFeSi and  $\alpha$ -Al<sub>15</sub>FeMnSi. Additionally, key indicators—including the Growth Restriction Factor (GRF) and the Hot Cracking Susceptibility Index (CSI)—were computed across the entire composition space. These results provide valuable insights for data-driven alloy design aimed at suppressing detrimental Fe-rich intermetallics while promoting desirable phase formation, ultimately supporting the development of high-performance, recyclable aluminum alloys.

#### C14-06

##### 多尺度计算材料学驱动的高性能合金设计与先进制造优化

郭志鹏  
北京适创科技有限公司

本报告系统阐述计算材料学在金属材料和制造工艺研发中的突破性进展。理论层面构建跨尺度模拟框架：微观尺度揭示镍基高温合金  $\gamma'$  相各向异性生长机制，提出新型晶体学函数并发现镁合金 18 主分支双优先生长方向；介观尺度建立多场耦合高温合金雀斑缺陷预测模型；宏观尺度开发超声空化破碎动力学方程。算法创新首创并行动态网格加密技术，使相场计算效率提升  $10^2$ - $10^3$  倍，研发 LBM-LES-MRT 混合算法攻克  $Re \sim 10^6$  级紊流仿真难题。工业应用实现粉末盘缺陷避让系统（成品率 50%  $\rightarrow$  90%）、自主 CAE 云平台（成本降 90%）及 AI+CAE 智能模温控制技术，支撑航发涡轮后机匣和新能源汽车一体化压铸等关键部件制造。成果发表于 Acta Materialia 等顶刊，获国际会议最佳论文奖及机械工程学会“国际先进水平”评价认证，为航空发动机与新能源汽车制造提供数字化解决方案。

#### C14-07

##### 亚稳 $\beta$ 钛合金电脉冲-压力耦合热处理下的微观组织演变及其力学性能研究

谭元标  
贵州大学

亚稳  $\beta$  型 TB8 钛合金因其高的比强度、良好的加工性能、耐高温和耐蚀性能,被广泛应用于制作航空航天飞机的发动机、起落架和紧固件等零部件。对于亚稳  $\beta$  型钛合金,其力学性能取决于合金的内部组织,如  $\alpha$  相的尺寸、分布、形貌和含量等。因此,如何调控合金的微观组织进而获得理想的强塑性匹配一直是航空航天领域亟待解决的重要工程问题。电脉冲处理技术可以影响金属内部原子的扩散,被认为是调控合金微观组织,提高合金力学性能的一种先进的热处理技术。针对传统固溶+时效强化 TB8 钛合金强塑性不匹配的问题,本文提出采用电脉冲+压力耦合热处理技术对亚稳  $\beta$  型 TB8 钛合金进行处理,通过电脉冲压力耦合热处理在 TB8 钛合金中引入纳米孪晶来提高合金的强度和塑性,同时研究了不同压力电脉冲热处理过程中微观组织的演变机理及其对合金力学性能的影响。

#### C14-08

##### 基于团簇加连接原子模型的高熵材料成分设计

董闯<sup>1</sup>、张爽<sup>1</sup>、王清<sup>2</sup>、邹存磊<sup>1</sup>、赵亚军<sup>1</sup>、刘世民<sup>1</sup>

1. 大连交通大学
2. 大连理工大学

高熵合金和高熵氧化物统称为高熵材料,其成分和组织特征为由多种主组元组成但保持简单组织。在前期工作中,本课题组首次提出“团簇加连接原子”模型的概念,把近程序描述成第一近邻配位多面体团簇(这里简称团簇)以及位于团簇之间的连接原子,看似复杂的合金成分可表述为简单的团簇式:[中心原子-壳层原子  $n$ ](连接原子) $x$ ,其中  $n$  和  $x$  分别表示对应原子的个数。本报告从团簇式角度揭示了高熵材料的成分特征,即团簇壳层位置由多种原子混合占据。进而全面分析了现有不锈钢和多元氧化物的成分特征及化学近程序结构,总结了高熵不锈钢和高熵氧化物的成分规律,为新型高熵材料的研发提供了理论依据。

#### C14-09

##### 服务科研一线 打造纯中文精品科技期刊

肖素红

中国科学院金属研究所

《金属学报》创刊于 1956 年,月刊,是所在学科领域唯一纯中文出版的 SCI 期刊。最新 SCI 影响因子 2.2,位于 Q2 区、中科院分区二区。《金属学报》致力于打造金属材料冶金领域中文精品学术期刊,具备高学术地位,是反映我国冶金和材料领域研究水平的核心学术期刊,具有良好的品牌形象。本次报告带您走近《金属学报》,了解期刊发展历史和现状、稿件情况及投稿注意事项。

#### C14-10

##### Ultrahigh intermediate-temperature strength and good tensile plasticity in chemically complex intermetallic alloys

Tao Yang

City University of Hong Kong

As a newly emerged class of materials, chemically complex intermetallic alloys (CCIMAs) with exceptional thermal and mechanical properties are a promising candidate for high-temperature structural use. However, serious intergranular embrittlement at intermediate temperatures (600~800 °C) is frequently found in those CCIMAs, obstructing their large-scale engineering applications. In this study, through deliberately tailoring thermomechanical processing, we designed a lamellar-structured (LS) L12-type Co-Ni-Al-Ti-Ta-Nb-B-based CCIMA that effectively overcomes this critical issue. The LS-CCIMA exhibits an excellent yield strength (YS) of ~1.0 GPa with a large tensile elongation of ~17% at room temperature. More prominently, it also presents an anomalous YS of ~1.2 GPa combined with an acceptable tensile elongation of ~10% at intermediate temperatures

ranging from 600 to 800 °C, outperforming those of many other simple ordered intermetallics and conventional superalloys. Such superb immediate-temperature strengths primarily originate from the high anti-phase boundary energy caused by the addition of multiple alloying elements (Ti, Ta, and Nb) and the pile-ups of geometrically necessary dislocations. Moreover, we attribute the acceptable tensile plasticity to the increased plastic deformation capacities from the activation of various deformation-induced substructures (e.g., dislocation pairs at 600 °C and superlattice intrinsic stacking faults at 800 °C) and the inhibiting mechanisms of the lamellar structures on oxygen-induced grain boundary damage and microcrack's propagation. This work provides a new pathway for the innovative design of strong-yet-ductile heat-resistant CCIMAs.

## C14-11

### 快速设计和筛选高强高韧高熵合金

张华磊、丁向东、孙军

西安交通大学

高熵合金(high-entropy alloys, HEAs)突破了以一种或两种元素为主的传统合金的设计理念,多主元的设计策略使高熵合金的种类更为丰富,高熵合金的多种优异性能引起了材料科学界的广泛关注。多主元特性使高熵合金在合金化和外力作用下的结构稳定性和形变更加复杂,单纯的实验试错法不能快速地研究无限可能的高熵合金成分组合,需要借助于快速高效的第一性原理计算优化合金组元及其配比,为开发和制造高性能高熵合金提供理论指导。然而,传统的第一性原理方法很难处理具有顺磁性的多主元无序固溶体,精确的 muffin-tin 轨道(exact muffin-tin orbitals, EMTO)和相干势近似(coherent potential approximation, CPA)相结合的方法能够高效准确地描述高熵合金中的化学无序和磁性无序。因此,我们利用第一性原理 EMTO-CPA 方法计算研究了合金化效应对 Cantor 高熵合金、Senkov 难熔高熵合金以及铀基高熵合金的相稳定性、弹性性能、层错能、力学性能以及相变机制的影响规律,利用高通量计算实现了快速设计和筛选高性能高熵合金,为实验研究提供了丰富的数据库和精确的理论指导,期望实现材料的按需设计。

## C14-12

### 多晶体系中晶界迁移的全景图

胡剑峰

上海大学

晶界迁移是影响多晶材料显微组织演化及其性能的关键过程。近年发展的三维实验技术揭示了晶界迁移行为与传统的晶界迁移理论之间存在着明显的矛盾冲突,引发了有关晶界迁移速率与曲率关系及晶界能对晶界迁移影响的根本问题<sup>1, 2</sup>。本文系统地分析了多晶体中晶界迁移动力学,揭示了其规律;并从理论上解决了上述冲突的根本问题。研究发现,多晶体系中晶界迁移速率与曲率大小相关性较弱,晶界能对迁移的影响随台阶能降低而显著减弱,晶界迁移速度的分布范围与曲率值无关,但随台阶能减小急剧收窄。该新模型非线性地描述了曲率与晶界迁移速率的关系,并能有效解释双晶及多晶中实验观测到的晶界迁移行为;最后,进一步将新晶界迁移模型扩展至(包含曲率驱动力在内)更广泛驱动力的、更普适的晶界迁移模型,为多晶体材料性能调控提供理论支持。

#### Reference:

1. Bhattacharya A, Shen Y-F, Hefferan CM, et al. Grain boundary velocity and curvature are not correlated in Ni polycrystals. *Science* (80- ). 2021;374(6564):189–193. <https://doi.org/10.1126/science.abj3210>
2. Xu Z, Shen YF, Naghibzadeh SK, et al. Grain boundary migration in polycrystalline  $\alpha$ -Fe. *Acta Mater.* 2024;264. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2023.119541>

## C14-13

## 合金化对纳米晶热稳定性和力学性能影响的热-动力学研究

彭浩然

西北有色金属研究院

纳米晶材料具有高密度的晶界，这导致此类材料容易发生晶粒粗化和晶界开裂，严重影响了纳米晶材料的热稳定性和力学性能。合金化是改善纳米晶材料热稳定性和力学性能的有效方法。当前研究结合第一性原理计算、分子动力学模拟、模型计算以及实验设计，探究合金化对纳米晶热稳定性和力学性能影响的热力学和动力学效应。具体包括：针对晶界迁移行为，计算晶界能和晶界迁移激活能，建立晶界迁移热-动力学相关性理论，基于此，结合热力学和动力学稳定性效应，设计高稳定纳米晶合金；针对马氏体相变行为，计算相变驱动力和能垒，建立热-动力学相关性理论；针对位错运动行为，计算位错运动热力学势阱和能垒，建立热-动力学相关性理论。相关研究有助于揭示合金化对纳米晶热稳定性和力学性能影响的热-动力学机制。

### C14-14

#### 基于局部化学序调控的面心立方高熵合金力学行为的研究

孙利芳、何竹风、贾楠

东北大学

高熵合金（HEA）又被称为多主元合金和成分复杂合金，其非常规的多主元成分和复杂化学结构有望使材料实现前所未有的机械性能组合。近年来，面心立方（FCC）高熵合金因表现出优异的强度与塑性匹配、卓越的断裂韧性和抗冲击性等，成为结构材料领域的研究热点。早期的研究认为高熵合金中的原子排列受高熵值的影响而表现为随机无序的状态。然而，近期的研究发现高熵合金具有局部化学有序（LCO）的微结构特征，且 LCO 能够对合金的层错能、位错滑移方式以及滑移阻力等变形机制产生重要影响。作为 HEAs 本征的微结构特征，LCO 改变了合金内部的局域原子构型并不可避免地影响了块体合金的微观力学行为，在调控和改善中/高熵合金的宏观力学性能方面表现出巨大的潜力。在前期，本课题组提出了一种由间隙原子 N 引起的多尺度 LCO 结构的多主元合金设计策略，即对 FeMnCoCrN 高熵合金进行冷轧和部分再结晶处理，构造了一种由亚纳米尺度的短程有序（SRO）和 1~5 纳米尺度的中程有序（MRO）等引起的成分异构，以及非均匀晶粒尺寸引起的结构异构所构成的非均匀组织结构。多尺度异构特征引起的强化使合金屈服强度得到了极大的提升。由于 LCO 对高熵合金的变形行为和力学性能有直接影响，原子尺度元素分布是这类材料的设计和性能优化时应考虑的关键要素。基于此，本文对面心立方 FeMnCoCrN 合金进行了长时间低温时效处理（时效温度低于析出相形成的温度），以调控并构造具有不同 LCO 程度的材料。通过对时效前后合金中的 LCO 畴特征进行系统表征，揭示了 LCO 调控下面心立方高熵合金的微观形变机制与宏观力学性能之间的关联。结果表明，经长时间时效后合金内形成了更多从亚纳米到纳米尺度的 LCO 畴，实现了合金在拉伸载荷下强度与塑性的共同提升。经时效处理的完全再结晶态合金的屈服、抗拉强度和均匀延伸率由时效前的 565 MPa、916 MPa 和 47.2% 分别提升至 617 MPa、1000 MPa 和 48.3%。屈服强度的提升主要被归因于时效过程中 LCO 畴的形成和生长，这对屈服强度的贡献超过了 100 MPa。LCO 所引起的成分不均匀性还为合金提供了额外的异质变形诱导（HDI）硬化，使合金加工硬化能力提升的同时，韧性得到改善。这些发现为通过调控 LCO 结构特征以实现材料的性能优化提供了新途径。

### C14-15

#### TiAl 合金热力学与固液界面性质参数分子动力模拟计算

王龙、李文、殷亚军、计效园、沈旭、周建新

华中科技大学

TiAl 合金凝固特征复杂，且凝固过程对凝固末期组织成分状态影响大，有其特殊性。研究 TiAl 合金的凝固特性对于控制 TiAl 合金典型铸造缺陷具有重要意义。利用分子动力模拟方法结合毛细波动法计算了

TiAl 合金的平均固液界面能为  $95.27 \pm 1.81 \text{ mJ/m}^2$ ，各向异性参数  $\epsilon_{20}$ 、 $\epsilon_{60}$  分别为  $-2.43 \pm 0.517$ 、 $0.1 \pm 0.05$ ，界面自由能最低的取向对应于紧密排列的晶体平面即为(0001)。同时研究了动力学系数 ( $\mu$ ) 在 TiAl 合金凝固过程中的变化，过冷度与界面迁移速率呈非线性关系，界面粗糙度和 Al 原子分布分析表明，对于密排六方 TiAl 合金的凝固过程，光滑的固液界面不利于界面迁移，而光滑界面通常伴随着 Al 原子的非均匀分布。因此，增加界面粗糙度可能有助于提高界面迁移能力和合金凝固的偏析。

#### C14-16

##### 定向晶镍基高温合金的原位感应加热增材制造

陈凯、赵一舟、王兆伟

西安交通大学

限制激光增材制造技术在定向晶镍基高温合金中推广应用的瓶颈在于裂纹的产生；在增材制造的过程中对试样进行原位感应加热，虽然有助于抑制裂纹的萌生，但是同时也可能造成温度梯度过小、无法获得柱状晶或单晶，进而对合金的高温力学性能产生负面影响。本研究通过在激光增材制造过程中施加适当温度的感应加热，成功制备出具有定向凝固晶粒结构的镍基高温合金，并且有效抑制了裂纹的产生。同时，增材制造过程中的原位感应加热有助于  $\gamma'$ 析出相的粗化，从而获得更优尺寸，显著提升合金的显微硬度。此外，原位感应加热能够大幅降低增材制造合金中的固有位错密度，从而有效降低再结晶驱动力。原位感应加热所具有的这种抑制开裂、保持定向柱状晶结构、提升硬度与避免再结晶的四位一体协同优势，为先进高温合金的增材制造提供了有价值的解决方案。

#### C14-17

##### 镍基单晶高温合金高温高应变率变形机制探究

张悦、陈玥江、许巍、于慧臣、何玉怀

中国航发北京航空材料研究院

镍基单晶高温合金是用于制造先进航空发动机涡轮叶片的优选材料，其力学行为呈现明显的温度与应变率相关特性。基于航空发动机包容性设计与仿真的需求，叶片材料的动态力学性能研究变得日益迫切。国内尚未开展单晶高温合金在 100s-1 以上高应变速率下的力学性能测试与表征。本研究基于分离式霍普金森杆 (SHB) 技术，开展国产二代单晶镍基合金 DD6 的室温和高温高应变率下的应力-应变曲线的测试，并获取了取向、温度、应变速率等因素对其力学行为的影响规律，通过 TEM 等微观表征技术获取了镍基单晶合金微观变形机制，对其反常屈服效应应变率相关特性做出了合理解释。研究成果可为我国先进高温合金的研制和涡轮叶片结构强度设计提供有效支撑。

#### C14-18

##### 钢铁材料固态相变共生热-动力学与设计

黄林科

西北工业大学

固态相变研究是材料科学和物理冶金领域的重要课题之一。固态相变共生现象在金属材料的热加工过程中普遍存在，认识共生现象对微观组织调控和高强高塑金属结构材料设计至关重要。本报告围绕两类固态相变共生，也即纳米结构材料  $\alpha/\gamma$  相变和晶粒长大共生、先进高强钢贝氏体相变和珠光体转变共生，从热-动力学基础理论出发，主要介绍共生型相变中“晶界约束相变”和“位错加速相变”机制。进一步，从热-动力学角度探究共生和强塑性物理关联。

#### C14-19

##### Automated analysis framework of strain partitioning and deformation mechanisms via multimodal fusion

**and computer vision**

Dongdi Yin, Ran Ni

Southwest Jiaotong University

Simultaneously investigating strain partitioning and the underlying deformation mechanisms for both the grain interior and the grain boundary (GB) is essential for understanding the complex plastic deformation of hexagonal close-packed metals. To this end, an automated analysis framework based on high-resolution digital image correlation (HRDIC) and electron backscatter diffraction (EBSD) data fusion and computer vision, integrating nanoscale resolution and a large field of view, is proposed. This framework consists of: (1) HRDIC-EBSD data fusion; (2) Segmenting the strain field into individual grains each with a core and a mantle; (3) Data clustering of the Matrix and slip bands (SBs) for each grain; (4) Full slip system (SS) identification and SS assignment to the SBs. The capabilities of this framework were demonstrated on Mg-10Y during compression. The strain field data, which was segmented into different clusters, including grain mantle, grain core, Matrix, and SBs, was analyzed statistically and quantitatively. The pixel-based slip activity, which considers the SB morphology, was obtained from a statistical perspective. Inter-granular accommodating mechanisms, including GB strain, slip transfer, and GB sliding, were quantitatively analyzed. Overall, this analysis framework, which can be applied to other materials, can automatically and statistically evaluate both nanoscale strain fields and underlying intra- and inter-granular deformation mechanisms grain-by-grain. This work provides valuable experimental insights into plastic deformation and accommodation mechanisms for polycrystals.

**C14-20****镍基高温合金组织及性能演化的相场法研究**

杨敏、崔婷婷、郭敏、苏海军、刘林

西北工业大学

镍基高温合金凭借其卓越的高温强度、抗氧化性和抗腐蚀性，在航空发动机、能源动力等关键领域占据重要地位。深入研究其组织及性能演化规律，对提升合金性能、延长使用寿命具有极为重要的意义。本研究以液固相变、固态相变理论为基础，采用相场模拟方法，针对高温合金从制备到服役过程中组织演化复杂、演化过程追踪困难等问题，展开了系统性的模拟研究。建立了耦合 CALPHAD 的定向凝固相场模型和固溶相场模型，实现了高温合金在凝固和固溶过程组织演化的集成模拟，考察了组织形貌的转变规律以及元素分布的变化特征，研究了元素含量和凝固工艺对微观组织演化及元素分布的影响规律与内在机理，探讨了凝固工艺对后续固溶处理的关联影响规律。构建了耦合微观弹性变形的相场模型，考察了等温时效和连续二级时效过程中  $\gamma'$  相的演化特征及元素分布变化，系统研究了反相畴、弹性能和冷却速率等关键因素对  $\gamma'$  相演化的影响规律及作用机理。进一步通过耦合考虑蠕变损伤机制的晶体塑性变形理论，建立了适用于镍基合金蠕变组织及性能模拟的蠕变相场模型，基于应力、弹塑性应变、损伤等因素分析探讨了微观组织演化机理，研究了  $\gamma'$  相体积分数、错配度、蠕变应力等对蠕变性能的影响规律，为镍基高温合金的研发提供模型和理论依据。

**C14-21****ICME 框架下先进金属材料的设计研发**郑伟森<sup>1</sup>、王静雅<sup>2</sup>、何燕霖<sup>1</sup>、鲁晓刚<sup>1</sup>

1. 上海大学材料科学与工程学院
2. 上海交通大学材料科学与工程学院

随着集成计算材料工程 (ICME) 的发展，多种材料计算方法已被广泛应用于高性能材料的设计研发，不仅可以轻松地研究大量的合金体系和工艺参数，还能有效探索广阔的成分空间，突破了传统试错法在成

本和时间上的限制。计算热力学和动力学作为重要的计算方法之一，通过与专有数据库的结合，使得多元多相材料的相变过程和显微组织演变模拟成为可能。而专有数据库的可靠性直接决定了相变行为模拟预测的准确度。然而，相关数据库及其优化技术仍需进行完善。同时，针对组织结构复杂多变的轻量化金属材料，如何确定影响其力学性能的关键特征变量，依然是 ICME 框架下材料设计面临的首要挑战。本报告从集成计算材料工程理论框架出发，对先进轻量化金属材料专有数据库进行分析，结合研发实例，通过探究材料组织结构与性能之间的关系，重点解析了影响材料特定性能的热力学和动力学特征变量。

#### C14-22

##### 钽钨合金表面 $ZrB_2$ - $MoSi_2$ 涂层的制备及抗超高温氧化机理研究

徐一

南昌大学

#### C14-23

##### 基于第一性原理计算的 $Hf_6C_5$ 基多元碳化物氧扩散行为研究

张琦祥、王清

大连理工大学

本研究采用第一性原理计算方法，研究了氧原子在 Ti/Zr/Ta 合金化的  $Hf_6C_5$  碳化物中的扩散行为。构建了两种结构单元，包括基于 Hf-Ti 的碳化物 ( $Hf_4Ti_2C_5$ 、 $Hf_4Zr_1Ti_1C_5$ 、 $Hf_3Zr_2Ti_1C_5$ ) 和基于 Hf-Ta 的碳化物 ( $Hf_4Ta_2C_5$ 、 $Hf_4Zr_1Ta_1C_5$ 、 $Hf_3Zr_2Ta_1C_5$ )，以研究氧原子在 C 侧相邻两个空位之间的扩散行为。用 Ti 替代基体 Hf 可降低氧的扩散激活能，从  $Hf_6C_5$  中的  $E_a = 6.889$  eV 降至  $Hf_4Ti_2C_5$  中的  $E_a = 6.828$  eV，这是由于 Hf 与 C 或 O 之间的电荷积累减少，导致抗氧化性能下降。而用 Zr 替代 Ti 可增强元素间的电荷转移，从而提高  $Hf_4Zr_1Ti_1C_5$  中氧扩散的激活能 ( $E_a = 7.110$  eV)，抗氧化性能得到有效改善。相比之下，在  $Hf_3Zr_2Ti_1C_5$  中进一步增加 Zr 含量会降低氧扩散的激活能，这是由于 Zr/Hf 与 C/O 之间的键合较弱。对于基于 Hf-Ta 的碳化物，氧扩散激活能的变化趋势与基于 Hf-Ti 的碳化物相似，但 Hf-Ta 系列中较低的  $E_a$  值 (6.231~7.087 eV) 表明其抗氧化性能相对弱于 Hf-Ti 系列。

#### C14-24

##### 力致非晶化及再结晶

赵士腾

北京航空航天大学

许多晶体材料在极端载荷作用下可以产生晶体到非晶体的相变，由于发生相变的温度低于熔点，且通常伴随体积改变，因此是一种固态相变（一级相变）。力致非晶化过程中通常伴随缺陷的产生和快速积累，导致局部晶格畸变严重，自由能升高，进而发生晶格坍塌。力致非晶化提供了一种有别于传统熔体快淬的制备非晶材料的新方法。此外，由于非晶是热力学不稳定相，因此，可以通过快速加热的方法实现纳米晶的可控制备，从而调控材料的力学性能。本报告将结合多个案例，介绍力致非晶化的机制与可控再结晶方案。

#### C14-25

##### 晶体-非晶转变中的能量吸收与转化效率

尚宝双

松山湖材料实验室

力至非晶化是指晶体在力学变形作用下由晶体向非晶的转变，这一过程需要通过力学变形，向体系不断的注入能量，但不同体系力至非晶化的效率与程度均不相同，如何定量理解力至非晶化的决定参数及

关键影响因素，是设计及控制力至非晶化的关键。在本次报告中，我们利用分子动力学模拟的方法，系统研究了周期加载下力至非晶的影响因素，通过系统研究各个因素之间的关联关系，及利用双能态模型即势垒及能量差，来量化地理解非晶化的效率及所能吸收的能量。这一研究为实验上定量调控非晶化提供了理论参考。

## C14-26

### 高强度金属材料的缺口拉伸行为与缺口强度准则

屈瑞涛<sup>1</sup>、马昊天<sup>1</sup>、张哲峰<sup>2</sup>、刘峰<sup>1</sup>

1. 西北工业大学
2. 中国科学院金属研究所

缺口强度是衡量材料承载能力对缺陷敏感性的重要性能指标。尽管对于缺口强度的研究已有多年，但是目前仍未能建立起预测材料缺口强度的有效模型。本报告探讨了三种高强度金属材料（包括金属玻璃、难熔高熵合金与高强钢）的缺口拉伸与断裂行为，分析了缺口拉伸过程的变形损伤情况，探索了影响缺口强度的因素，建立了适用于高强度金属材料的缺口强度准则。

## C14-27

### 高温非晶合金形成过程中的热力学与动力学问题

郭胜锋

西南大学

非晶合金处于热力学亚稳态，在一定温度下会发生老化或转变为晶态合金，从而丧失非晶态的优异性能，这极大地限制了非晶合金服役温度和时间。最近发展的系列高温块体非晶合金（Ir、Os 等）为克服这一难题带来了曙光，然而，极其高昂的材料成本导致其实际应用受限。本报告基于团队近期发展的钼基高温块体非晶合金，借助特殊金属间化合物与非晶形成关联，通过中子衍射、纳米束电子衍射、分子动力学模拟等手段，揭示高温块体非晶合金形成过程中涉及到的热力学和动力学相关问题，解析这一特殊类型高温非晶合金的基本结构单元特征，深入理解其桥接特殊金属间化合物和非晶形成的本质。在此基础上，系统探讨了不同类型元素对高温钼基块体非晶合金氧化行为，阐明表面氧化层的成分、结构、生长动力学以及形成机制等，揭示高温非晶合金抗氧化机理，为拓展高温非晶合金的实际服役提供实验指导和理论依据。

## C14-28

### 压力诱导 FCC 结构高熵合金的多形性转变

张飞<sup>1</sup>、吴渊<sup>2</sup>、吕昭平<sup>2</sup>、曾桥石<sup>3</sup>

1. 中国科学院高能物理研究所
2. 北京科技大学
3. 北京高压科学研究中心

压力，作为热力学的重要基本参数之一，对物质的相结构稳定性有着重要影响。原位高压同步辐射 X 射线技术，是研究材料压力下相结构稳定性的有利手段。高熵合金，通过混合多主元带来最大化混合熵的成分设计理念，可以获得单相固溶体结构。研究高熵合金在压力下的多形性转变，不仅可以扩展对合金的多形性转变认知，还可以加深对高熵合金相结构稳定性的理解。本报告将围绕热力学里的压力维度，结合原位同步辐射技术，介绍典型的 FCC 结构高熵合金（包括三元合金、四元合金以及五元合金）高压下的相结构稳定性。观察到不同合金的不可逆相变/可逆相变面心立方到密排六方相变行为以及 40GPa 压力范围内无相变现象，并分析磁性结构、原子尺寸差、混合构型熵、价电子浓度以及合金层错能对相变的影响。同时，报告人还将介绍所在的第四代高能同步辐射光源高压线站（包括压力、温度以及动态加载速度等热

-动力学相关原位环境)建设进展,为学者们利用原位同步辐射技术开展极端条件(压力、温度)下物质的热力学与动力学研究提供参考。

## C14-29

### 面心立方高熵合金的低温变形机制研究

明开胜

河北工业大学

高熵合金由于其独特的、易调控的多组元成分体系和微观组织结构,表现优异的力学性能。特别是单相面心立方结构 CrFeCoNi 基高熵合金在室温和低温下均表现出目前为止报道的最优异的抗拉强度、延展性和断裂韧性组合,成为结构应用领域的潜在理想材料。面心立方高熵合金优异的力学性能与其丰富的塑性变形机制有关。我们系统研究了面心立方高熵合金在低温下的变形机制,重点报道了变形导致的纳米尺度非晶化和动态可逆剪切转变,并揭示了其转变机理。通过激活多种塑性变形机制,引入高密度纳米尺度变形条带,制备了纳米片层双相结构高熵合金,实现了强塑双增。

## C14-30

### TRIP 铁基高熵合金的变形断裂行为与力学性能优化探索

吴少杰、韩成府、冯石林、魏然、陈辰、王坦、蔡永福、田佳佳、李福山

郑州大学

铁基高熵合金不仅具有良好的力学性能,且具有合金成本优势,是一种极具工程应用潜力的新型结构材料。然而,该类合金仍受困于传统强度-塑性/韧性的制约关系。引入相变诱发塑性(TRIP)效应是一种有效提高加工硬化能力和抗拉强度的策略,而调控 TRIP 效应则是优化合金综合力学性能的关键。本文以 FeCrNiAl 基高熵合金为研究对象,先是通过合金化方法,发现添加少量 Ti、Mo 元素不仅能起到进一步固溶强化的效果,还能够延缓相变速率,使得合金屈服强度提高而塑性不变。其后,通过改变 Ni 元素调控层错能, Ni 降低到临界值能够形成体心立方(BCC)基体和少量面心立方(FCC)的铸态双相组织,呈网状分布在晶界处的 FCC 使得该合金具有良好的加工性;经过热机械处理工艺后,形成了超细晶组织和高密度纳米相,协同 TRIP 效应以实现高强度高塑性。最后,进一步考察冲击断裂行为,通过适当降低层错能调控 FCC/BCC 两相比例,可以促进相变和提高合金加工硬化能力,增大塑性变形区尺寸,从而提高裂纹扩展阻力和冲击韧性。综上所述,本文提出了优化 TRIP 铁基高熵合金强度、塑性和韧性的方法,并系统分析了其变形和断裂机理,以期铁基高熵合金的强韧化设计和工业应用提供理论依据。

## C14-31

### 基于多尺度局部化学序设计的高强韧面心立方多主元合金

何竹风、孙利芳、贾楠

东北大学

随着人类探索太空与未知世界的需求日益增加,应用于航空航天、深海舰船、极地科考和低温存储等高新领域的金属结构材料要求其在从室温到深低温(~70 K)的宽温域中同时具有高强度与良好的韧性。相比于传统的低温用金属材料,面心立方(FCC)结构的高熵合金在深低温下表现出更为优越的力学性能,包括高的强韧性匹配和卓越的断裂韧性。然而,FCC 结构的本征晶体属性通常使材料具有较低的屈服强度从而限制其在关键工程部件中的应用。

目前,传统的材料强化策略已被证实无法突破 FCC 高熵材料的强度-塑性倒置关系,即屈服强度的提升将以塑性的严重损失为代价。基于此,本文以著名的 Fe<sub>50</sub>Mn<sub>30</sub>Co<sub>10</sub>Cr<sub>10</sub>(at.%)亚稳高熵合金为模型材料,通过引入间隙原子 N 的手段调控合金的层错能并使材料内局部化学有序度显著增加,同时利用中等形变量冷轧和部分再结晶退火相结合的简单热机械处理,构造了一种具有多尺度异质结构的

Fe<sub>49</sub>Mn<sub>30</sub>Co<sub>10</sub>Cr<sub>10</sub>Ni<sub>1</sub> (at.%) 高熵合金。结果表明, 该材料在室温和液氮温度下均表现出超高的屈服强度和良好的韧性匹配, 特别是在 77 K 下拉伸变形时的屈服强度和均匀延伸率相比于 298 K 下获得了同步的提升, 分别由 1170 MPa 和 8.2% 提升至 1836 MPa 和 11.6%。研究表明, 室温下超高的屈服强度主要得益于所构造的多尺度异构, 即由非均匀晶粒尺寸、变形孪晶界、位错亚结构以及具有 LCO 特征的板条组织 (LCO 板条) 为代表的结构异构和包括亚纳米尺度的短程有序 (SRO) 和 1~5 纳米尺度的中程有序 (MRO) 等引起的成分异构。液氮温度下屈服强度的大幅提升则归因于在屈服阶段即已发生的机械孪生和马氏体相变以及低温引起晶格摩擦力的提升。深低温环境中加工硬化能力的提升则归因于该材料在塑性变形过程中除了室温下表现出的机械孪生和位错平面滑移外还激活了 LCO 板条的动态演化以及成分异构引起的位错交滑移行为。同时, 该材料避免了成本高昂的合金化。提出的设计策略可望为开发先进-低成本-低温用结构材料开辟新途径。

综上, 本文设计的 Fe<sub>49</sub>Mn<sub>30</sub>Co<sub>10</sub>Cr<sub>10</sub>Ni<sub>1</sub> 高熵合金原材料成本低廉, 热机械处理路线高效、经济, 有望成为新一代高性能低温用结构材料。相关发现不仅揭示了 LCO 结构在深低温塑性变形过程中的演化及其对位错行为的影响, 还将为开发在室温与深低温环境中均具有超高屈服强度和良好韧性匹配的 FCC 金属结构材料提供新思路。

### C14-32

#### 铁基非晶涂层的沉积制备及晶化行为研究

翟海民

兰州理工大学

铁基非晶合金因其独特的原子排列结构 (长程无序和短程有序特征), 相比普通不锈钢等晶体合金材料, 具有高的硬度和强度、更优异的耐蚀性能和耐磨性能, 有望作为工程结构材料, 故而倍受材料工作者的关注。然而, 较差的玻璃形成能力使得铁基非晶仅限于粉末状、带状及有限形状和小尺寸的块体, 难以实现大尺寸制备。而且, 块体铁基非晶合金在室温下的高局域剪切带和不均匀剪切变形行为, 使其在室温下呈脆性断裂特性, 严重限制了其实际工业应用。通过热/冷喷涂技术将铁基非晶粉末以涂层的方式涂覆在其他金属结构材料表面, 不仅有利于改善铁基非晶合金的室温脆性, 而且可实现其大面积制备, 因此铁基非晶在船舶、石油及发电工业等领域呈现出广阔的应用前景。但是, 相对于其极高的强度和硬度, 铁基非晶涂层并未达到人们预期的超高耐磨性和耐腐蚀性能, 这主要是由于热喷涂技术所引入的缺陷 (如孔隙、裂纹、氧化、晶化等) 极大削弱了铁基非晶涂层的耐磨、耐腐蚀性能。针对上述问题, 本研究通过调控工艺参数制备了具有不同缺陷 (也即含有不同孔隙率、不同氧含量) 的铁基非晶涂层, 通过系统地确定铁基非晶粉末的沉积行为, 结合分析不同喷涂工艺参数与涂层缺陷之间的内在关联性, 进而阐明铁基非晶涂层中缺陷的形成机制, 最终建立爆炸喷涂铁基非晶涂层的加工-结构-性能的相关性。

### C14-33

#### 单相难熔高熵合金的预测性能地图

胡毅龙、屈瑞涛、刘峰

西北工业大学友谊校区

由于元素组合的多样性, 大多数材料设计方法在短时间内很难全面覆盖高熵合金的广阔设计空间。在本研究中, 为了展示新型难熔高熵合金 (RHEAs) 的性能潜力并提高开发效率, 构建了单相 RHEAs 的性能预测图。基于九种难熔元素: Ti、V、Cr、Zr、Nb、Mo、Hf、Ta 和 W, 生成了一个包含 182,826 个成分的庞大组合空间。识别出了潜在的 BCC 单相固溶体成分, 并预测了屈服强度、价电子浓度、杨氏模量、密度、熔点和成本等性能。基于此, 建立了五元单相 RHEAs 的性能地图以及与传统合金进行比较的 Ashby 图。分析表明, RHEAs 在强度方面优于传统合金, 特别是在高温条件下, 展现了显著的优势。本研究还提供了一种 RHEAs 性能预测工具, 突出了开发具有所需性能和低成本的新型 RHEA 的巨大潜力。

## C14-34

## 仿生分层结构与纳米析出相的耦合效应：多主元合金力学性能提升新路径

宋凯凯<sup>1</sup>、崔振鲁<sup>1</sup>、韩孝良<sup>1</sup>、张坤<sup>2</sup>、穆永坤<sup>3</sup>、Jürgen Eckert<sup>4</sup>

1. 山东大学

2. 中科院力学所

3. 上海大学

4. Austrian Academy of Sciences

异质结构材料的创新设计已成为解决金属及合金强韧性权衡问题的关键策略。受竹子层级结构的启发，本研究通过多步热机械加工在 $(\text{FeCoNi})_{86}\text{Al}_{17}\text{Ti}_7$  化学复杂合金中构建了类竹状的仿生异质结构。这种受生物启发的三重异质结构兼具层级化晶粒尺寸与多尺度、多形貌析出相，显著提升了强韧性平衡——实现近 2 GPa 超高抗拉强度的同时，仍保持良好的均匀塑性变形能力。在变形过程中，L12 纳米析出相通过剪切机制贡献析出强化，晶粒内的 L21 亚微米析出相则通过 Orowan looping 机制发挥强化作用，而晶界处的 L21 析出相则充当复合材料中的增强相。类竹状异质结构还通过粗晶与超细晶间的变形约束改变位错积累行为，这一过程受周围超细晶及析出相的多样行为影响。基体中显著的回应力强化效应大幅提升了应变硬化能力，从而确保了均匀塑性变形。总体而言，该创新方法展现出优异的力学性能，为突破先进合金中强韧性权衡难题提供了极具潜力的策略。通过仿生设计，我们不仅实现了材料性能的显著提升，还为未来材料科学的发展开辟了新的研究方向。

## C14-35

## 纳米晶合金力学性能的可变调控机制

寇宗德、吴尚书、冯涛、黄荣

南京理工大学

晶粒细化是金属材料最重要的强化方法之一。然而，对于细晶强化的探索主要受到两方面因素的限制：1) 极细晶粒尺寸 (<10-15 nm) 金属材料的制备越发困难；2) 极细晶粒尺寸下出现反常 Hall-Petch 效应。在符合 Hall-Petch 关系的晶粒尺寸范围内，塑性变形由位错机制决定。但当晶粒尺寸继续缩小至 10-15 nm 以下时，晶界相关过程开始主导塑性变形，并且开始发生软化，即出现反常 Hall-Petch 效应。因此，对于纳米金属材料本征强度的探索驱使人们不仅需要关注晶粒尺寸这一结构参数，还必须研究纳米金属材料的晶界以及位错行为。本研究提出利用元素的偏析效应，在低温热处理过程中诱发纳米晶的扩散相变，消耗残余晶格位错并避免晶粒显著长大。这些导致了极低位错密度多晶体的形成，使塑性变形由预存晶格位错滑移主导转变为由位错晶界形核主导，从而产生了超硬化效应。由于相变引发的位错的耗尽，尺寸为几十纳米的纳米金属材料可以增强到与极细纳米晶(5 nm)相当甚至更高的水平，显著降低了纳米金属材料强度对晶粒尺寸的依赖关系。

## C14-36

## 溶质原子团簇强韧化在室温和高温铝合金中的应用

张鹏

西安交通大学

金属材料，尤其是铝合金材料，表现出强度-延/塑性的倒置关系。这一关系不仅体现在室温力学性能上，在高温下，铝合金材料也表现出高温持久强度—延/塑性的倒置关系。本报告将关注铝合金中的溶质原子团簇，介绍了其在室温铝合金和高温合金中同时提高强度和塑/韧性的特殊微观机制。在室温下，溶质原子团簇在塑性变形过程中剧烈演化，通过动态应变时效增强加工硬化机制提升材料塑性和韧性。对于高温铝合金，脆性共晶相中的溶质原子团簇则可改变其脆性本质，打破高温持久强度-延/塑性的倒置关系。本报告表明，除了传统的析出强化，溶质原子团簇作为主要强化相，具有相当的应用潜力，应加以深入研究。

**C14-37****Dislocation engineering in Mg alloys by rotary swaging and flash annealing**

Leyun Wang

Shanghai Jiao Tong University

Magnesium typically exhibits low strength and ductility, challenging its widespread applications. These limitations are primarily due to the low activation stresses for  $\langle a \rangle$  dislocations, leading to early yielding, and an insufficient number of  $\langle c+a \rangle$  dislocations to accommodate plastic strain. Traditional approaches, such as severe plastic strain processing can enhance strength by introducing defects but compromises ductility, while common heat treatments reduce defects but often degrade strength. Alloying with rare-earth elements can improve both strength and ductility but is of high cost. Here, we developed a rare-earth free Mg-Al-Ca alloy, processed through rotary swaging followed by flash annealing. The resulting alloy exhibits superior strength and ductility, surpassing nearly all reported rare-earth free magnesium wrought alloys. Nanosized Al-Ca precipitates and clusters, formed largely during rotary swaging and flash annealing, significantly strengthen the alloy by pinning  $\langle a \rangle$  dislocations. Deformation twinning is suppressed, necessitating the formation of more  $\langle c+a \rangle$  dislocations to accommodate the severe plastic strain induced by rotary swaging. These  $\langle c+a \rangle$  dislocations are retained during flash annealing due to the high climb energy barrier and pinning by those nanosized Al-Ca precipitates and clusters. This retention of  $\langle c+a \rangle$  dislocations contributes to high ductility and provides forest hardening against  $\langle a \rangle$  dislocations, further increasing strength. This study offers a new strategy for designing high-performance magnesium alloys without rare-earth elements.

**C14-38****Study on the microstructure and strengthening mechanism of high-strength and low-density Al-Cu-Li alloy**Yuxing Tian<sup>1</sup>, Hailong Cao<sup>1</sup>, Haitao Lin<sup>2</sup>, Linzhi Tang<sup>2</sup>, Yunqiang Fan<sup>3</sup>

Shanghai Jiao Tong University

Magnesium typically exhibits low strength and ductility, challenging its widespread applications. These limitations are primarily due to the low activation stresses for  $\langle a \rangle$  dislocations, leading to early yielding, and an insufficient number of  $\langle c+a \rangle$  dislocations to accommodate plastic strain. Traditional approaches, such as severe plastic strain processing can enhance strength by introducing defects but compromises ductility, while common heat treatments reduce defects but often degrade strength. Alloying with rare-earth elements can improve both strength and ductility but is of high cost. Here, we developed a rare-earth free Mg-Al-Ca alloy, processed through rotary swaging followed by flash annealing. The resulting alloy exhibits superior strength and ductility, surpassing nearly all reported rare-earth free magnesium wrought alloys. Nanosized Al-Ca precipitates and clusters, formed largely during rotary swaging and flash annealing, significantly strengthen the alloy by pinning  $\langle a \rangle$  dislocations. Deformation twinning is suppressed, necessitating the formation of more  $\langle c+a \rangle$  dislocations to accommodate the severe plastic strain induced by rotary swaging. These  $\langle c+a \rangle$  dislocations are retained during flash annealing due to the high climb energy barrier and pinning by those nanosized Al-Ca precipitates and clusters. This retention of  $\langle c+a \rangle$  dislocations contributes to high ductility and provides forest hardening against  $\langle a \rangle$  dislocations, further increasing strength. This study offers a new strategy for designing high-performance magnesium alloys without rare-earth elements.

**C14-39****高密度亚稳退火孪晶界诱导超细晶高熵合金异常加工硬化行为**霍鹏达<sup>1</sup>、黄林科<sup>1</sup>、宋克兴<sup>3</sup>、秦刚<sup>4</sup>、刘峰<sup>1,2</sup>

1. 西北工业大学凝固技术全国重点实验室
2. 西北工业大学分析测试中心
3. 河南省科学院材料研究所
4. 哈尔滨工业大学材料科学与工程学院

孪晶界(TBs)在面心立方金属(FCC)及合金的力学性能中起着至关重要的作用。然而,当前大多数利用孪晶界与位错相互作用来实现金属高强高塑的策略中主要依赖于稳定的孪晶界,遵循广泛认可的“稳定更好”的观念。在本研究中,我们首次报告了在超细晶 FCC Fe49Mn30Co10Cr10C 高熵合金中成功制备了具有高密度( $1.93 \mu\text{m}^{-1}$ )的亚稳退火孪晶界(ATBs)。该结构在保持优异的强塑协同效应的同时,还展现出与粗晶相似的显著加工硬化能力,甚至在变形过程中超越了基材中具有稳定 ATBs 合金的表现,从而验证了“亚稳同样更好”的新策略。基于此,我们揭示了一种前所未有的由高密度亚稳 ATBs 驱动的加工硬化机制。这些亚稳 ATBs 与位错相互作用,并动态转化为高角度晶界,促进了高密度位错的产生,并形成了一种新的动态霍尔-佩奇效应,改变了位错的滑移方式。这些效应协同作用,促进了位错的生成、相互作用及增殖,最终导致了由大驱动力和大广义稳定性所控制的缓慢位错滑移行为。我们的研究为亚稳退火孪晶界在变形过程中的作用提供了新的见解,这一机制不同于传统文献中的报道,并强调了通过操控高密度亚稳孪晶界显著提升 FCC 金属及合金加工硬化的潜力。

#### C14-40

##### TESCAN Amber X 2: 重新定义氦气等离子 FIB-SEM

朱新利

泰思肯(中国)有限公司

本报告重点介绍 Tescan 新一代氦气等离子 FIB 的最新进展,包括全新的 Mistal 等离子镜筒增强离子束性能,保证加工质量下提高加工效率;基于 AI 优化的全自动 TEM 样品制备;集成 Ar 离子抛光获得理想的 TEM 样品;以及样品综合分析信息最全面的 3D 重构。

#### C14-41

##### 临界回火对铸造多相不锈钢组织演变、力学性能和腐蚀行为的影响

陈祥

清华大学

随着我国高端装备向大型化、精密化方向加速演进,市场对兼具高耐蚀性、优异强塑性匹配的不锈钢铸件需求显著提升。针对强度-塑性矛盾这一材料设计难题,本研究构建了软硬相协同增强的多相组织体系,通过硅元素微合金化调控与热处理工艺优化,开发了新型铸造马氏体-铁素体-奥氏体三相不锈钢。试验钢经 1050°C 固溶处理+水淬后,分别在 570°C、610°C、650°C 温度区间实施临界回火处理。系统研究了回火温度对组织演变、力学行为及耐蚀性能的耦合影响机制。采用 EBSD、TEM 等先进手段揭示了相分布特征,重点解析了逆变奥氏体的体积分数与形貌特征。拉伸试验结果表明,临界回火处理使材料抗拉强度提升至 1000MPa 级别,同时保持 15% 以上的均匀延伸率。逆变奥氏体通过 TRIP(相变诱导塑性)和 TWIP(孪晶诱导塑性)效应的协同作用,显著改善了材料的力学性能。电化学测试显示,随回火温度升高,材料耐蚀性能呈下降趋势。微观分析证实,高温回火加剧了铁素体/马氏体界面处的 Cr 元素偏聚,导致局部 Cr 贫化区尺寸扩大,这是耐蚀性劣化的主要原因。进一步计算表明,不同热处理状态下马氏体相变起始温度( $M_s$ )与层错能(SFE)存在显著差异,印证了逆变奥氏体对材料变形行为的调控作用。本研究揭示了多相不锈钢强韧化与耐蚀性之间的内在关联,为高端装备用不锈钢的材料设计提供了理论指导和技术支撑。

#### C14-42

##### 创新引领,打造金属材料领域一流学术期刊

杜晓宁

中国科学院金属研究所金属学报（英文版）编辑部

介绍金属学报（英文版）期刊概况、近几年取得的成绩、未来的发展目标等。

**C14-43****低碳钢中原奥氏体晶粒尺寸影响贝氏体相变之新见**

宋韶杰、刘飞龙、刘峰

西北工业大学

贝氏体相变在低碳钢的力学性能中起着至关重要的作用。目前关于原奥氏体晶粒尺寸（PAGS）的影响研究，大多集中于贝氏体转变动力学的加速或减速作用，但对多级微结构的形成关注甚少。联合转变动力学和变体选择，本文探讨了 PAGS 在无碳化物低碳钢贝氏体转变行为中的作用。实验表明，不同奥氏体化温度获得的三种 PAGS 分布下，贝氏体转变动力学和多级微观结构存在显著差异，但最终力学性能区别较小。不同于传统对贝氏体转变热力学和动力学约束的考虑，晶体学变体邻接引起的应变调节作为一个新的自由度，将显著改变 PAGS 的影响。模型拟合发现，较大 PAGS 表现出较低的自催化形核激活能（QA），更容易激活多个变体组合，从而更好地调节转变应变。尽管动力学模型假设恒定应变能，依据热-动力学相关性，变体调节的作用主要体现在 QA 的变化，即 QA 的降低对应着应变能的释放以及多变体形成。最后，热力学驱动力和广义稳定性的相似性表明力学性能存在较小差异。

**C14-44****基于纳米压痕研究奥氏体钢在不同应变率下的力学行为**

何斌斌、郑佳鹏

南方科技大学

先进高强度钢广泛应用于汽车和轨道交通等关键领域，在提升能效与减少碳排方面发挥重要作用。其在成型与服役阶段面临多样应变速率条件，力学响应呈现复杂性。本文通过纳米压痕手段系统研究其速率敏感行为。结果表明，对于 Fe-Mn-C TWIP 钢，低速纳米压痕测试中出现动态应变时效（DSA）引发的载荷波动，但对位错演化影响不大。在[001]晶粒压痕中，产生了变形孪晶界，低速压痕易引发裂纹，主要由于碳原子钉扎位错并在孪晶界局域应力集中的协同作用，诱导裂纹萌生并穿过变形孪晶。

**C14-45****汽车用先进高强钢动态力学行为与应变率敏感性机理**

梁志远

松山湖材料实验室

中国汽车工业快速发展，汽车轻量化和碰撞安全性需求不断提高。高强钢是既可实现轻量化又可有效提升安全性的理想车身结构材料。考虑到汽车碰撞时零部件在冲击载荷作用下发生高速变形，因此了解高强钢的动态力学行为及背后的机理，对预测零部件在碰撞时的变形和失效特性、优化零部件设计、提高汽车的碰撞安全性至关重要，对新钢种的研发及其在汽车上的应用至关重要。本研究选取了两种具有代表性的高强钢作为研究对象：1. 具有全奥氏体组织（FCC 结构）的孪生诱发塑性钢；2. 具有全马氏体组织（BCC 结构）的热成形钢。研究通过不同应变率（ $10^{-3} - 10^3 \text{ s}^{-1}$ ）的拉伸试验测定应变率对钢材力学性能的作用，并通过先进的微观组织表征手段（背散射电子衍射、透射电镜、同步辐射等）分析应变率对钢材高速变形过程中微观组织结构演化的作用规律。在实验的基础上，研究对钢材不同强化机理的贡献进行理论计算，并进一步建立包含应变率作用以及微观组织演变信息的本构模型，最后综合实验与理论建模结果揭示两种钢材应变率敏感性背后的微观机理。

## C14-46

## 物理冶金学指导迁移学习的耐热钢蠕变优化

魏晓蓼、王晨充、徐伟

东北大学

在能源、高温设备等领域，耐热钢作为关键结构材料，需长期服役于高温高应力环境，其蠕变寿命直接关系到服役安全性与经济性，已成为衡量其服役极限的核心指标之一。然而，传统蠕变寿命测试周期长、成本高，极大制约了新一代高性能耐热钢的开发效率。同时，尽管机器学习方法在材料性能预测与合金设计中展现出巨大潜力，但受限于蠕变数据获取的高成本与低数量，现有模型往往难以在小样本条件下实现稳定准确的预测。此外，传统模型普遍忽略了预测不确定性，在设计实践中存在“虚假最优”等风险，进一步影响了其在工程应用中的可靠性。因此，如何在有限蠕变数据条件下，实现对耐热钢蠕变性能的可靠预测与高效优化设计，已成为高温材料领域亟待突破的关键难题。针对上述问题，本研究提出了一种融合物理冶金机制与迁移学习策略的不确定性感知深度学习框架（PM-TR-BCNN）。该框架结合了短时拉伸性能与蠕变性能间的耦合关系，并引入与析出相粗化演化相关的物理强化因子，在贝叶斯神经网络中实现蠕变寿命及预测可信度的联合建模。在模型准确预测基础上，研究进一步结合多目标遗传算法，构建了面向蠕变寿命和预测不确定性的合金优化设计策略。在 650 °C/140 MPa 条件下，基于该策略成功设计出 3 种新型耐蠕变钢，其中性能最优合金的蠕变寿命较现有材料提升超过一倍。实验证实模型预测值与真实寿命高度一致，验证了该框架的实用性与可靠性。除此之外，该研究系统揭示了不确定性建模在合金设计过程中的关键作用。对比传统模型设计出的合金常存在性能过高但实际不可靠的情况，PM-TR-BCNN 框架通过量化预测可信度，有效避免了“虚假最优”设计结果的产生。此外，该工作还表明，将物理冶金知识（如析出强化机制）和小样本迁移学习有效结合，能够显著提升模型的泛化能力。研究结果为高温合金的快速、稳健设计提供了全新思路。

## C14-47

**High-performance medium Mn steels with expanded processing windows enabled by rapid austenite reversion**Chen Hu<sup>1</sup>, Binbin He<sup>2</sup>, Mingxin Huang<sup>1</sup>

1. The University of Hong Kong

2. Department of Mechanical and Energy Engineering, Southern University of Science and Technology

Medium Mn steels (MMnS) with high strength and large ductility are desirable for constructing structural components, and multiple plasticity carriers are indispensable for high-performance MMnS. The key to invoking collective deformation mechanisms is the proper tuning of austenite characteristics such as fraction and stability through the intercritical annealing process. However, since other metallurgical features including recovery and recrystallization are also impacted by intercritical annealing both kinetically and thermodynamically, MMnS are sensitive to minor variations of annealing conditions and plagued by narrow thermo-mechanical processing windows. To overcome this limitation, we propose a high-temperature pre-annealing (HA) strategy that enables strong and ductile MMnS across broad ranges of annealing temperature and duration. The HA process facilitates austenite reversion by enhancing nucleation sites and elemental pipe diffusion through dislocations, enabling austenite fractions exceeding the values predicted by thermodynamic equilibrium. Consequently, superior and stable mechanical properties with yield strength of ~1200 MPa and ductility up to 50% are achieved. Systematic multi-scale characterizations reveal that this exceptional ductility stems from hierarchical austenite with graded mechanical stability and synergistic activation of multiple plasticity mechanisms—martensitic transformation, dislocation glide, deformation twinning, and stacking faults—to mitigate strain localization. In contrast, the same MMnS without HA process exhibits inferior tensile properties with uniform elongation of <10% and a strong dependence on annealing conditions. Our findings underscore the capability of the HA strategy to decouple

mechanical performance from precise processing control, offering a scalable pathway for industrial-scale production of high-performance MMnS strengthened through multiple plasticity mechanisms.

#### C14-48

##### 间隙碳原子诱导高强钢的反常动态拉伸软化

黄成鹏

深圳大学

随着我国汽车工业的快速发展，汽车轻量化和碰撞安全性成为关键挑战。具有相变诱导塑性（TRIP）效应的第三代先进高强钢（AHSS）凭借其优异的强塑性成为当前最具应用前景的下一代汽车钢，包括淬火配分（Q&P）钢、中锰钢以及贝氏体钢等。然而，其在高速碰撞条件下的动力学行为和变形机理尚缺乏，制约了其在汽车结构的广泛应用。本研究以典型 Q&P 钢为模型材料，研究了其动态拉伸力学行为和应变率依赖的变形机制。结果表明，相较于准静态加载，在高应变速率下，TRIP 效应对材料的加工硬化贡献显著减弱，表现为负应变速率敏感性和动态拉伸软化。尽管在高速和准静态变形过程中的马氏体相变演化趋势相似，但高速变形后的位错密度却明显低于其在准静态变形后的水平。本研究认为，该 Q&P 钢反常动态拉伸软化的关键原因是间隙碳原子与位错的相互作用。在准静态变形时，碳原子气团会持续钉扎位错，促进位错增殖的同时提供额外的钉扎阻力；而在高速变形时，由于碳原子扩散速率远远低于位错运动速度，碳原子气团与位错相互作用消失，导致加工硬化减弱。本研究为推动第三代先进高强钢在汽车中的安全应用提供了指导。

#### C14-49

##### FeCoCr 基中熵合金的形变与强韧化

张金钰

西安交通大学

金属结构材料的高强度和大拉伸延性（意味着材料具有高静力韧性，即应力-应变曲线下的面积）是其工程应用的前提，特别是低温环境所用材料的强-塑-韧性匹配尤为重要，以避免低温脆性导致的灾难性事故发生。受铁基和镍基高温合金微观结构的启发，提出使用高体积分共格 L12 纳米析出相强化 FCC 富铁复杂浓缩合金(CCA)基体。为了实现低温高强度大延性/韧性，该合金的设计思想是：在 FCC 基体中构筑超高密度的双功能共格 L12 纳米析出相，一方面 L12 相作为位错障碍以显著增强屈服应力，另一方面在足够高的应力水平下使其作为位错源被激活，提供充足的不全位错以实现高加工硬化性能，从而实现大均匀延伸率。特别是，超高密度的纳米 L12 析出相在发生孪生变形的同时显著提升了合金的流变应力水平，使得在低温 77K 拉伸时 FCC 基体转变为 BCC 相，通过此 TRIP 效应进一步提升了合金的加工硬化率(WHR > 4GPa)。

#### C14-50

##### 团簇成分式方法+热力学相图计算研发高性能工程合金

王清

大连理工大学

航空航天和核电能源等领域高端装备对关键零部件材料的力学性能和功能性提出了更高要求，这在现有工程合金基础上更新工艺很难实现，需要多元合金成分的再设计。本工作以新型 / '共格析出强化的 Co 基高温合金和特种高 Si-F/M 不锈钢包壳材料为例，基于自主研发的团簇成分式方法，结合热力学相图计算，设计出系列新型合金，并进行了实验验证，实现了复杂多元合金的组织设计与性能调控。系列合金具有优异力学性能的同时，还表现出优异的功能性能，如极端环境下的耐蚀和抗氧化能力。本研究为高效研发高性能工程合金提供了新的设计策略。

## C14-51

## 原位高模量钢脆性第二相的近理论强度与高弹性特性

李亦庄、庄乾铎、徐伟

数字钢铁全国重点实验室，东北大学，沈阳

金属材料中的硬脆第二相常诱发随机损伤，导致材料延展性下降。尽管颗粒断裂通常归因于应力集中超过其本征强度，但对后者的量化分析相关研究至今仍不充分。本研究定量表征了高模量钢中原位生成 TiB<sub>2</sub> 颗粒的本征强度（该钢的主要损伤机制为颗粒断裂）。具体而言，采用聚焦离子束从单晶 TiB<sub>2</sub> 颗粒中制备微悬臂梁和 C 型试样，结合原位微纳力学测试与有限元模拟协同分析，提取了 TiB<sub>2</sub> 颗粒的各向异性本征力学性能。与以往报道的 GPa 级断裂强度不同，微米级 TiB<sub>2</sub> 颗粒呈现出高达数十 GPa 的近理论强度，并伴随显著的弹性变形（弹性应变高达 6.6%）。通过改变基体化学成分和刻蚀条件的对照实验，验证了测量结果的可靠性。不同晶体学方向各向异性评估表明，其强度差异在一个数量级以内，未发现显著的薄弱方向。测得的 TiB<sub>2</sub> 颗粒强度比基体最大承受应力高出两个数量级，表明无缺陷的 TiB<sub>2</sub> 颗粒在拉伸变形中应能抵抗断裂。由此推断，实验观测到的 TiB<sub>2</sub> 颗粒断裂主要源于其内部预存缺陷。该结果凸显了无缺陷 TiB<sub>2</sub> 颗粒作为高性能金属基复合材料理想增强相的巨大潜力。

## C14-52

## Zr 调控的均匀纳米析出实现纳米晶 ODS 钢

蔡学成<sup>1</sup>、沈同德<sup>2</sup>、黄明欣<sup>1</sup>

1. 香港大学
2. 燕山大学

有望用于先进核反应堆的纳米晶氧化物弥散强化（ODS）合金很难获得，主要原因是传统 ODS 合金的氧化物纳米颗粒（NPs）通常是非均匀分布的，这使其不足以抵抗高温热机械加工过程中极高的晶粒生长驱动力。本研究中，我们报道了一种 Zr 微合金化（0.5 wt.%）调控的均匀纳米沉淀行为，并获得了纳米晶粒的 ODS 合金。与传统观点相反，我们发现了 Zr 微合金化在改善 NPs 分布方面的独特作用，即 Zr 并没有显著提高 NPs 的初始形核速率，而是在机械合金化过程中有效地消耗了过剩 O，从而迅速消除了传统含 Ti 的 ODS 合金在烧结早期出现的竞争性氧化物。因此，Zr 微合金化有利于高密度的 Zr-Ti-O 型 NPs 快速均匀析出，并在高温烧结过程中对纳米晶粒施加强大的动态钉扎力。本研究表明，通过特意的 Zr 微合金化消除不利的竞争性氧化物，进而产生均匀纳米沉淀，可以获得平均晶粒尺寸为~ 50 nm 的纳米晶 ODS 合金。

## C14-53

## 热力学耦合人工智能的钢铁材料强塑性优化

王晨充

东北大学

传统合金设计通常依赖试错法，周期长、成本高，效率低下。物理冶金（PM）模型虽具理论预测能力，但在跨尺度建模过程中易出现误差累积，限制了其实用性。近年来，人工智能（AI）技术逐步应用于材料设计，提升了性能预测效率，但传统 AI 通常依赖大规模实验数据，缺乏对 PM 原理的深入理解，难以有效处理成分、工艺与性能之间的复杂耦合关系，在泛化能力和物理解释性上存在明显不足。为突破这一瓶颈，本研究提出融合物理冶金知识图谱（PMKGs）与图神经网络（GNNs）的新框架，用于高效预测 Q&P 钢的拉伸性能，并通过遗传算法实现抗拉强度（UTS）与总延伸率（TEL）的双目标优化。比传统 AI 模型，该方法在预测准确性和稳定性方面显著提升，尤其在 TEL 预测中，R 值提升了约 15%。此外，该方法能够在 UTS 与 TEL 之间实现有效平衡，设计出综合性能优异的合金，成分为约 0.3 wt.% C、3 wt.% Mn、1.2 wt.% Si，并含有少量 Cr 和 Al，UTS 超 1500 MPa，TEL 接近 20%，符合 PM 原理。本研究为多

目标合金设计提供了一种可行、高效的新思路，展示了将专家知识与与数据融合的巨大潜力。

#### C14-54

##### 高强不锈钢镁合金的设计与制备

李扬欣

上海交通大学

如何通过合金化设计协同提升镁合金的强度与耐蚀性是学术界和工业界长期关注的热点和难点之一。本工作通过传统重力铸造和挤压变形方式制备的 Mg-Y-Al 合金屈服强度达 350 MPa，延伸率达 8% 和腐蚀速率低于  $0.2 \text{ mm y}^{-1}$ ，这些目前公开报道腐蚀速率最低的高强镁合金。少量 Al 元素的添加促进了 Y 元素在合金表面的快速致密沉积，形成了具有持久保护性的钝化膜，有效阻碍了合金中第二相和基体间的电偶腐蚀，极大降低了 Mg-Y-Al 合金腐蚀的组织敏感性和杂质元素敏感性，这为不同组织状态铸造和变形高强不锈钢镁合金在工业制备中的应用提供了一种新的设计思路。

#### C14-55

##### 高端连接器用 CuCrZr 合金低温变形行为及性能演变规律

柳亚辉

河南科技大学

位错是合金强化的关键，同时也是导电率及塑性降低的主导因素，差异化性能难以有效兼顾。我们创新性地地在轧制过程中引入低温因素，诱导产生孪晶及纳米孪晶，并与纳米晶粒和纳米析出相构成纳米复合结构，从而协同提升合金的强度、导电率和塑性。结果表明，经低温时效处理，CuCrZr 合金可获得较好的综合性能，抗拉强度达到 446 MPa，导电率为 86% IACS，延伸率为 14.1%。此外，双重梯度温控轧制及时效处理改变了变形过程中的晶粒旋转行为，经低温处理轧制后的合金表现为强 Y 织构，而双重室温轧制处理的合金则表现为弱 Y 织构。

#### C14-56

##### 工程驱动的第一性原理热力学计算

高兴誉

北京应用物理与计算数学研究所

报告介绍了基于改进平均场势方法的第一性原理热力学计算方法，以及结合 CALPHAD 的相图热力学集成计算方法，并应用于流体力学实验用三元合金的组分优化。

#### C14-57

##### 满足高温环境金属变形性能物理模拟过程的关键技术

黄星

深圳万测试验设备有限公司

#### C14-58

##### 循环加载下 TiNi 形状记忆合金晶粒尺寸调控的力学行为与变形机制

侯兆阳

长安大学

晶粒细化已经被广泛用于提高 TiNi 形状记忆合金(Shape memory alloys, SMAs)的疲劳寿命与强度，但通常伴随限制马氏体相变而减弱材料的延展性和断裂韧性。本研究基于分子动力学模拟，系统讨论了循环

加载条件下不同均匀纳米晶(Homogeneous nanograin, HNG)和梯度纳米晶(Gradient nanograin, GNG)结构 TiNi SMAs 的相变转化路径、超弹性行为以及能量耗散的演变规律。结果发现, 纳米晶 NiTi SMAs 的相变转化路径高度依赖于晶粒尺寸, 大晶粒尺寸结构以经典奥氏体-马氏体可逆相变为主导, 小晶粒尺寸则促进了无序相的形成。GNG 结构引发梯度晶粒尺寸之间协同效应, 细晶区域的晶界塑性提供较高拉伸强度, 大晶粒区域则贡献了显著可恢复应变, 实现了低残余应变的同时保持高强度。相同平均晶粒尺寸下, GNG 结构始终表现出稳定和典型的超弹性滞回特性, 在多次循环加载过程中保持良好的力学响应与应力平台特征, 并具有独特的能量变化以及优异的能量耗散能力。本研究为基于晶粒尺寸梯度调控设计高性能 SMAs 材料提供了原子尺度的理论支持和结构优化方向, 具有潜在的工程应用价值。

## C14-59

### 铁碳合金形变过程中位错形核与运动的分子动力学模拟

侯怀宇、刘天笑、丁志刚

南京理工大学材料科学与工程学院

本文采用分子动力学模拟方法, 在原子尺度上研究了 Fe-C 合金变形过程中位错形核与运动的热-动力学规律。对于 bcc Fe-C 合金中刃型位错和螺型位错的运动特性的模拟表明, 合金位错的运动存在热激活阶段和粘性拖曳阶段。含碳量的增大可以延长热激活阶段, 主要体现在含碳量的增大提高了位错能垒的作用。位错进入粘性拖曳阶段后, 合金中碳原子的存在可以提高声子拖曳系数, 进一步阻碍位错的高速运动。同时, 通过对 bcc Fe-C 合金中纳米压痕过程中的微观力学行为的分子动力学模拟, 研究了其中位错形核与运动的过程, 计算了激活体积并考察了激活体积与位错形核及运动的关联, 以及纳米压痕过程中温度、含碳量与加载速度对位错形核与运动的影响。

## C14-60

### 双异构超细纤维晶中碳钢: 晶体塑性耦合损伤相场模拟

张旭、刘少镨、熊宇凯

西南交通大学

超细纤维晶(Ultrafine elongated grain, UFEG)钢以其独特的多尺度多级层状异质结构特征, 在应对金属材料高强度与高韧性平衡这一挑战展现出了巨大的潜力。本研究中, 我们建立了耦合的非局部晶体塑性与损伤相场模型。该模型通过导出位错流动项, 以此引入几何必需位错(Geometrically necessary dislocation, GND)和背应力强化, 并反映材料的非均匀变形。基于晶界取向差与晶界能之间的关系, 对临界塑性功密度项进行了修正以研究具有 UFEG 结构的 45#中碳钢在单轴拉伸变形下的强化和失效机制。在本构模型上进一步引入析出强化以模拟不同轧制温度下超细纤维晶 45#钢的拉伸性能, 揭示了位错强化、析出强化、背应力强化及织构效应对材料拉伸力学行为的影响。模拟结果表明, GND 和背应力的强化效应与材料的初始位错密度和晶粒尺寸密切相关。高初始位错密度和大晶粒尺寸会限制这些强化效应。此外, 较高的晶粒长径比会增强 GND 的强化效果。不同的织构会显著影响材料的拉伸性能。通过实验获得的<110>//RD 纤维织构具有一定的强化效果, 但与理想纤维织构相比仍存在差距。损伤首先在细长晶粒中萌生, 但等轴晶会减缓损伤演化。大角度晶界会促进晶间损伤, 限制了晶内损伤的扩展。材料高屈服强度由位错强化和析出强化主导, 几何必需位错强化与背应力强化主要在塑性阶段发挥作用。轧制温度会显著影响不同强化机制的贡献, 随着轧制温度升高, 位错、背应力以及析出强化下降, 而 GND 强化增强。织构演变规律表明低温和高温轧制形成纤维织构进而强化材料, 而中温轧制会产生混合织构弱化材料。在引入损伤后能够反映材料的强韧倒置性能, 材料强度与损伤程度均会随着轧制温度升高而降低。这些研究成果为优化 UFEG 结构材料的微观结构设计提供了潜在指导。

## C14-61

## 深过冷金属单质等温结晶的热力学与动力学调幅分解特征

彭平、李媛、刘志邦

湖南大学 材料科学与工程学院

基于快凝期间液态金属组态结构的连续遗传性，提出了一种可有效区分晶胚与晶核的团簇分析方法，据此表征了 fcc-Al 单晶晶核的临界尺寸、几何构型、内部结构与界面形态，并从形核速率、形核能垒、液固界面能等方面，与先前的理论与实验结果进行了比较。进一步针对过冷液体 Al 的等温结晶过程，基于过冷液体的瞬态结构遗传性，发展了一种可直接测量晶胚孕育与晶胚生长时间（即晶体形核时间）的团簇分析技术，据此考察了过冷液体 Al 的均匀形核极限，导出了其对应的动力学调幅分解温度，并通过与热力学调幅分解温度的比较，分析了金属单质在均匀形核极限前后的形核特征。

## C14-62

基于物理信息的可解释机器学习模型  
加速开发新型铜铬合金并揭示其抗软化热动力学机理

马牧之

河南省科学院

铜铬合金因具有力学性能良好、传导性能优异等性能特点，广泛应用于新一代信息技术、航空航天、轨道交通、电力电气等战略性新兴产业。然而，铜铬合金抗软化性能不足、抗软化机理不清，严重限制了该合金的进一步应用。据此，本文提出一种基于机理信息机器学习的新策略，以期开发抗软化铜铬合金并揭示其抗软化机理。首先，通过第一性原理计算，获得描述混合焓、界面偏析、溶质扩散等可能与抗软化相关的机理特征，通过特征筛选和模型建立，发现描述界面偏析和溶质扩散的机理特征基尼重要性最高，且只有将其加入为输入数据，机器学习模型才能实现精准预测、开发出抗软化性能优异的 Cu-0.4Cr-0.10La/Ce(wt.%)合金。接着，通过基于博弈论的可解释性方法，分析输入进模型的机理特征对抗软化性能的贡献，然而意外发现，基于博弈论的特征贡献与基于研究经验和事先预期的特征贡献并不完全一致。最后，针对于上述不一致开展实验研究，发现 Cu-Cr-La/Ce 合金抗软化性能优异并非由 La/Ce 原子偏析在基体 / 析出相界面所导致，也并非由 La/Ce 原子提高 Cr 原子跃迁能垒所导致，而是由 La/Ce 原子减少 Cr 原子跃迁可用空位所导致。

## C14-63

## 机器学习驱动合金熔体热物性研究及其对溶质分配行为的影响

尤江<sup>1,2</sup>、王理<sup>2</sup>、王慧远<sup>2,3</sup>

1. 太原理工大学
2. 吉林大学
3. 河北工业大学

高性能镁、铝合金作为现代装备制造业轻量化发展的关键材料，为实现双碳战略目标提供了重要支撑。合金熔炼与铸造是构件制造的关键步骤，通过研究镁、铝合金熔体的结构和动力学性质，可以加深对凝固过程中晶体形核与枝晶生长的理解，对合金成分设计与凝固组织控制具有理论指导作用。例如，金属熔体的热力学、动力学参量包括热容（Heat Capacity）、扩散系数（Diffusion Coefficient）、粘度（Viscosity）等是铸造过程的重要影响因素，同时也是计算机仿真成型设计、相场模拟的重要输入参数。然而，由于高温熔体中存在温度梯度、重力和对流等因素，对熔体结构和动力学性质测量实验提出了严格的要求，严重影响了测量准确性。目前，对镁、铝合金熔体的研究尚不充分，缺乏对其原子结构的完整认知。此外，有关熔体动力学性质的研究仍处于数据积累阶段，迫切需要建立准确可靠的镁、铝合金熔体动力学数据库。

本文采用机器学习势函数驱动分子动力学模拟,对常见的二元、三元镁基和铝基合金熔体的原子结构和动力学性质进行了深入研究,提出了基于累加粗粒化策略的熔体结构特征表示方法,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,为调控镁、铝合金凝固组织和析凝固行为提供了借鉴。

## C14-64

### 机器学习在稀土钢铁材料研究中的应用探索

高雪云<sup>1,2</sup>、樊文波<sup>1,2</sup>、邢磊<sup>1,2</sup>、王海燕<sup>1,2</sup>

1. 内蒙古科技大学材料科学与工程学院
2. 内蒙古自治区新金属材料重点实验室

稀土微合金化可以调控钢的相变、力学性能和耐腐蚀性能,逐渐成为高性能钢铁材料研发的重要手段。本文基于从钢铁生产企业收集的稀土钢板生产线的工业数据构建了数据集。将合金成分和热机械处理(TMCP)参数作为特征值,热轧后钢的抗拉强度作为目标变量。在此基础上,使用多种回归算法构建特征值与目标值之间的映射关系,结果表明,优化后的DNN模型能够以低于5%的误差预测抗拉强度。在热变形方面,利用机器学习方法构建了稀土钢热变形本构模型,该模型与传统的ZA和Arrhenius模型相比具有显著的精确性,使快速且精细化构建热加工图成为可能。基于密度泛函理论的从头计算可以从电子结构层面获得材料的基本物理性能,但由于计算能力和成本所限,只能应用于小规模体系。在稀土钢相变机理的研究中,利用从头计算获得的参考构型数据构建数据集对机器学习模型进行训练并获得多体势能模型,在此基础上实现大规模含稀土原子体系的高精度分子动力学模拟。

## C14-65

### Si/Mo合金化纳米贝氏体高碳轴承钢相变动力学研究

王艳辉<sup>1</sup>、杨倩<sup>1,2</sup>、郑春雷<sup>2</sup>、李艳国<sup>2</sup>、杨志南<sup>2,3</sup>、张福成<sup>3</sup>

1. 河北工程大学,河北省智能工业装备技术重点实验室,河北 邯郸 056038
2. 燕山大学,国家冷轧板带装备及工艺工程技术研究中心,河北 秦皇岛 066004
3. 华北理工大学,冶金与能源学院,河北 唐山 063210

本文设计了Si/Mo合金化的新型高碳纳米贝氏体GCr15Si1Mo轴承钢,研究了其微观组织及未溶碳化物对纳米贝氏体相变动力学的影响。利用DIL-805型膨胀仪测试贝氏体相变动力学,利用SEM统计不同状态下碳化物的体积分数和尺寸分布,利用XRD对试样中的相组成及其相对含量进行分析,利用TEM对不同状态下试样的微观亚结构及未溶碳化物进行观测,并利用JXA-8530F型场发射电子探针分析了不同状态下基体中碳浓度差别及元素分布情况。结果表明:GCr15Si1Mo钢经低温等温淬火处理后,得到由纳米贝氏体、马氏体、未溶碳化物和残余奥氏体组成的混合组织。组织中未溶碳化物含量越多,基体的C浓度起伏越大。基体中大的C浓度差,不仅有利于贝氏体铁素体在贫碳区形核,从而缩短了贝氏体相变的孕育期;而且有利于C原子的扩散,从而促进了贝氏体铁素体的长大。在相同等温淬火温度下,即使组织中未溶碳化物体积分数不同,最终组织中得到的纳米贝氏体体积分数基本相同。钢的Ms温度随着组织中未溶碳化物含量的减少而降低,当钢中未溶碳化物含量从13.5 vol.%减少到4.5 vol.%时,Ms温度从170°C降低到125°C。钢中未溶碳化物含量越多,则纳米贝氏体相变速率越快,相变完成的总时间越少。未溶碳化物含量为13.5 vol.%的试样比4.5 vol.%的试样,在210°C和300°C贝氏体相变完成时间分别缩短了55%和35%。

## C14-66

### 贝氏体板条生长中“碰撞”机制的原位研究

刘飞龙、宋韶杰、刘峰

西北工业大学

本研究结合高温共聚焦激光扫描 (LSCM) 原位实验、EBSD 以及相场模拟, 探讨了贝氏体板条的两类“碰撞”机制。研究表明, 相同 Bain 变体板条的碰撞并不会影响已有板条的生长, 仅导致应力积累, 使板条生长速度减缓, 最终新板条能够穿透现有板条, 而不同 Bain 变体板条的碰撞则会引起相互阻断, 并在原应力/应变影响区域内进一步催化形核, 促进板条的生长。不同变体板条的生长因相互碰撞而暂时停滞, 但应变的累积有助于板条的恢复生长。新形成的贝氏体板条的生长方向和晶体学取向与原有板条相似。此研究不仅揭示了贝氏体板条生长过程中的关键机制, 还为贝氏体的形成与相互作用提供了理论支持。

#### C14-67

##### 面心立方纳米颗粒原子尺度聚集生长行为及机理

宋淼<sup>1</sup>、张丁日<sup>1</sup>、陈家轩<sup>1</sup>、杨子昂<sup>1</sup>、冷丹<sup>1</sup>、耿赵文<sup>1,2</sup>、周科朝<sup>1</sup>

1. 中南大学
2. 香港城市大学

五重孪晶是一种重要的孪晶结构, 在晶体生长、生物医学以及力学性能调控等诸多领域具有广泛的应用价值。自五重孪晶被发现以来, 科研人员已在近百种材料中观察到其存在。然而, 由于五重孪晶的临界形成尺寸通常较小 (约 4 nm), 且其结构由五个孪晶单元构成, 使得在原子尺度上直接观察其形成过程面临较大挑战。本报告重点阐述如何利用球差校正透射电子显微镜结合特殊实验设计, 实现对面心立方结构纳米颗粒在原子尺度下的聚集生长行为及其演化机制的原位观察。研究揭示, 五重孪晶的形成可通过颗粒取向粘附、表面原子扩散以及高能晶界分解等多个步骤逐步实现。同时, 实验还证实所揭示的形成机制在其他金属材料 (如铂、钯) 中同样适用, 具有一定的普适性。此外, 本研究结合透射电子显微术、电子层析三维重构及晶格应变分析等技术, 系统探讨了五重孪晶中的晶格应变松弛、对称性破缺演化以及颗粒三维形貌变化之间的内在关系。相关研究成果为深入理解五重孪晶在原子尺度上的形成与演化机制提供了直观而有力的实验证据。

#### C14-68

##### 纯相 PtS<sub>2</sub> 薄膜的合成

冯晴亮  
西北工业大学

二维半导体材料有着直接带隙、高的载流子迁移率、柔性延展等优异的性质, 在光电探测与纳电子器件等领域有着潜在的应用优势。发展二维材料可控制备与结构调控的新方法, 对功能型器件的设计和构筑有着重要的意义, 是推动其实用化的前提。本报告首先将介绍课题组在具有宽光谱响应特性二维材料可控制备方面的进展, 重点介绍二维平面型二硫化铂大面积连续薄膜材料的可控制备新方法, 阐述金属铂薄膜形态调控的瑞利不稳定及硫化反应的动力学调控; 接着, 简要介绍课题组制备的黑磷材料基光电器件在极端环境下宽光谱光电探测性能的变化规律, 为拓展二维材料基全天时光电探测与成像芯片在航空航天领域的应用提供理论支撑。

#### C14-69

##### ODS 钢中氧化物纳米颗粒的调控及其力学行为

周晓胜、孙汝昊、李昊  
中北大学

氧化物弥散强化 (Oxide dispersion strengthened, ODS) 钢因其优异的耐辐照性能、良好的高温蠕变性能和抗拉强度成为核电用首选结构材料。本研究以进一步提高 ODS 钢的服役温度为目标, 主要通过调控氧化物纳米颗粒的分布状态开展工作。对于相变型 ODS 钢, 氧化物纳米颗粒与移动界面之间的相互作用将显著影响氧化物纳米颗粒的分布状态, 氧化物纳米颗粒不再随机分布于基体中, 而是有序分布。热轧处

理后, 氧化物纳米颗粒沿轧制方向高度有序分布, 室温及高温力学性能显著提升。对于非相变型 ODS 钢, 热轧处理将导致氧化物纳米颗粒的异质分布, 位错密度也呈异质分布特征, 轧制变形量对非相变型 ODS 钢的组织特征及力学性能具有显著影响, 异质结构 ODS 钢在宽温域范围内均表现出良好的力学性能。

#### C14-70

##### 微合金化亚包晶钢凝固过程组织演变与第二相析出机理研究

刘涛

中铝科学技术研究院有限公司

基于第二相沉淀强化的微合金化钢因其优异的综合性能而被广泛应用和关注, 确保其在连铸过程中的铸坯质量是实现微合金化钢高效生产的重要基石。然而, 大量频繁出现的铸坯表面裂纹缺陷严重制约着微合金化铸坯生产效率的提升, 尤其以微合金化亚包晶钢最为突出。其原因在于, 凝固包晶相变过程会严重影响微合金化铸坯的热状态、显微组织状态及应力状态, 并与凝固冷却过程中大量析出的第二相粒子共同作用恶化铸坯的高温性能, 显著增加铸坯薄弱环节形成裂纹甚至漏钢的风险。因此, 深入了解微合金化亚包晶钢凝固组织演变与第二相析出行为, 可为较大限度地减少微合金化铸坯的表面裂纹缺陷提供理论和技术指导。

#### C14-71

##### 高能球磨法合成的高比表面积 $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 纳米颗粒及其烧结行为和动力学研究

李璐<sup>1</sup>、杨红兵<sup>2</sup>、马骥<sup>2</sup>、李建功<sup>2</sup>

1. 甘肃农业大学

2. 兰州大学

The applications of high-specific surface-area (>100 m<sup>2</sup>/g)  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles in fields such as nanocrystalline ceramics and chemical mechanical polishing are of crucial scientific significance. However, the bulk stable phase  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> has a high surface free energy and becomes a thermodynamically unstable phase at the nanoparticle scale (specific surface area >100 m<sup>2</sup>/g, spherical particle diameter <15 nm). In conventional syntheses of  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles, particle coarsening is inevitable in the process of phase transitions from precursor nanoparticles into  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; therefore, synthesized  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles are usually with a specific surface area <10 m<sup>2</sup>/g. In our present work, a high-energy ball-milling method can be adopted to achieve  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles with an average size of 7.9 nm (specific surface area of 170 m<sup>2</sup>/g) and 4.8 nm (specific surface area of 253 m<sup>2</sup>/g). The data and the applications of these high-specific surface-area  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles in nanocrystalline ceramics shall be discussed.

#### C14-72

##### 钛基复合材料在热加工温度下的氧化行为研究

刘广宇、李莲、李淼泉

西北工业大学材料学院

钛基复合材料与普通钛合金相比, 服役温度可以提高 100~200°C, 是一种最具应用潜力的高温金属结构材料。过度氧化会制约钛基复合材料的扩大应用, 同时, 氧扩散与固溶使钛基复合材料的微观组织发生显著变化, 严重损害了钛基复合材料的加工性能。本文研究了 Ti55 合金及 TiBw/Ti55 复合材料在 960~1000°C 温度范围内的氧化行为和氧化机理。研究对象包括 Ti55 合金和两种体积分数的 TiBw/Ti55 复合材料 (TMC1-3.5 vol.% TiBw/Ti55 和 TMC2-7 vol.% TiBw/Ti55)。通过高温氧化实验、微观/纳观组织表征和氧化激活能计算, 阐明了 Ti55 合金和 TiBw/Ti55 复合材料高温氧化过程以及 TiBw 对氧化行为的影响。研究表明, 原位自生 TiBw 一方面细化了氧化物颗粒, 阻碍了氧进一步扩散; 另一方面出现了氧化物随机生长,

促进了 TiO<sub>2</sub> 孪晶形成，提高了材料的抗氧化性能。

### C14-73

#### 跨尺度耦合算法驱动铜基复合材料的组织演变规律及服役机理研究

董博闻<sup>1</sup>、吴振鹏<sup>1</sup>、接金川<sup>3</sup>、毛成荣<sup>2</sup>、傅明康<sup>2</sup>

1. 湖北理工学院
2. 日月重工股份有限公司
3. 大连理工大学

本研究旨在通过开发和应用跨尺度耦合算法（包括 CALPHAD、分子动力学（MD）和有限元方法（FEM）），系统地研究铜基复合材料的组织演变规律及其服役机理。该研究涵盖了力学性能、抗烧蚀性能、自润滑等多个关键属性，为铜基复合材料的设计与优化提供理论支持和技术指导。提出了一种结合 CALPHAD 计算与 MD 模拟的方法，用于预测和模型化铜基复合材料在复杂工况下的行为特性。在此基础上，我们进一步扩展了这一方法，深入探讨了铜基复合材料在不同条件下的微观组织演变和宏观性能表现。首先，CALPHAD 方法被用于准确预测铜基复合材料的相组成和元素分布，构建反映实际微观结构的 MD 模型。通过 MD 模拟，我们揭示了材料在不同温度条件下的微观组织演变过程，特别是位错行为及其对材料性能的影响。FEM 则用于模拟宏观尺度上的力学性能和抗烧蚀性能，确保从微观到宏观的全面覆盖。

### C14-74

#### 基于电化学反应热-动力学的电催化材料设计

杜敏疏、于斐涵、宫淑敏、刘峰  
西北工业大学

电化学反应的热力学与动力学决定了电催化反应的活性、选择性和稳定性。从热力学角度，CHE 模型与火山型曲线在电催化材料设计中被广泛应用；从动力学角度，Tafel 动力学与微观动力学模型均有力的指导了高活性电催化材料设计与反应机理分析。那么，电化学/电催化反应的热力学与动力学之间是否存在关联？我们认为二者具有相关性，并提出了基于电化学反应热-动力学协同的电催化材料设计方法，弥补了 Sabatier principle 中的动力学缺失。据此，面向小的动力学能垒，通过设计催化反应热力学或相关性因子，或基于热力学驱动力-动力学能垒的新型“火山型曲线”，我们设计并获得了高性能的 ECR、HER 与 OER 催化剂，证实了热-动力学协同能够有效指导高性能电催化材料设计。此外，我们还发展了单颗粒碰撞电化学分析技术，该技术能够在单颗粒尺度揭示电化学/电催化反应的本征动力学特性，辅佐电催化材料设计与表征。

### C14-75

#### 高温燃气环境下 EBC 的失效行为研究

于国强  
南京航空航天大学

陶瓷基复合材料（简称 CMC）在服役环境下受水-氧的腐蚀，力学性能会发生快速衰退。为了阻止或者减缓水-氧耦合作用对 CMC 的高温腐蚀，需要在其表面制备环境障涂层。本研究采用大气等离子喷涂技术以 CMC 作为基底，在试样表面制备了 Yb<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>/Yb<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>/Si 多层环境障涂层，然后通过开展水氧腐蚀（1350°C，90% H<sub>2</sub>O+10% O<sub>2</sub>，1atm）和非均匀高温燃气（丙烷-氧气，中心温度 1350°C）试验测试，通过表征试样重量、物相成分、宏观形貌和微观形貌演变规律等，建立了 Yb<sub>2</sub>SiO<sub>5</sub>/Yb<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>O<sub>7</sub>/Si 多层涂层失效模型，对其微观结构演变规律和性能退移行为有了直观的认识，为后续研究其服役环境下失效数值模型奠定了基础。

**C14-76****An unified variational approach for isothermal two-phase flow and its direct unified gas kinetic scheme**

陈亚萍

西北工业大学

This talk will present a novel unified variational approach for isothermal single-component and multi-component two-phase flows based on the Onsager principle. By constructing an appropriate Rayleigh functional that includes both the free energy functional and the dissipation function, we derive the macroscopic equations for two-phase flow, which encompasses various dynamics such as the van de Waals and Peng-Robinson models. Additionally, we demonstrate that all models maintain thermodynamic consistency by satisfying an energy dissipation law. To numerically validate these models, we develop a discrete unified gas-kinetic scheme (DUGKS) based on a well-balanced lattice Boltzmann free-energy model, which can be proven to be mass conservative. The efficiency of the proposed schemes is demonstrated through numerical simulations of both steady-state multiphase flows and transient flows. This research broadens the application and potential of the Onsager principle and DUGKS in multiphase systems, which are of great interest in engineering.

**C14-77****过冷奥氏体变形的超细贝氏体组织转变及性能研究**

赵敬、刘德政、李龙、曾樊龙、李罡

湖北文理学院

利用 Gleeble-3800 热模拟试验机对中碳富硅合金钢过冷奥氏体在 400-600 °C 进行 75% 的压缩变形, 降低了钢的  $M_s$  点, 使贝氏体转变得以在较低的温度进行, 细化了贝氏体铁素体组织, 从而在中碳钢中成功制备了纳米结构贝氏体。奥氏体低温变形缩短了贝氏体转变的孕育期, 但是阻碍了贝氏体后期的转变, 虽然如此, 依然加速了整个贝氏体转变过程。奥氏体变形对贝氏体转变的影响不仅取决于变形温度和变形量, 还与等温温度有关。奥氏体经 580 °C 温轧和 240 °C 等温转变获得的贝氏体具有最高的强塑积, 为 28587 MPa %。奥氏体经 500 °C 温轧和 200 °C 等温转变获得的贝氏体强度可达 2581 MPa, 高于高碳纳米贝氏体钢的强度 2300 MPa。温轧后等温试样的最高硬度可达 682 HV, 且所有的硬度均高于 600 HV, 可与高碳高硅钢低温等温获得的纳米贝氏体的硬度相媲美。

**C14-78****稀土对马氏体不锈钢中夹杂物的改性作用**

邢磊

内蒙古科技大学

非金属夹杂物的形态、尺寸和分布对不锈钢的力学性能、表面质量和耐蚀性具有重要影响。本报告基于稀土元素 La、Ce 改性不同钢种夹杂物的研究, 系统总结了稀土元素 La、Ce 对马氏体不锈钢、耐磨钢和超高强度钢等夹杂物的变质机理及其对凝固过程的影响。研究表明, 稀土元素的添加可显著改变钢中夹杂物的类型和形貌。在未添加稀土的钢中, 夹杂物主要为  $Al_2O_3$ 、TiN、MnS 等不规则形状的硬质夹杂物; 而添加稀土后, 夹杂物转变为近球形的稀土复合夹杂物 (如  $CeAlO_3$ 、 $Ce_2O_2S$ 、RE-O-S 等), 并抑制了  $Al_2S_3$  等有害夹杂物的形成。此外, 稀土元素的加入降低了夹杂物的数密度, 如 Ce 含量从 0.048% 增至 0.092% 时, 夹杂物数量减少 80%, 平均尺寸稳定在 2.13~3.41  $\mu m$  的较低水平。热力学计算 (FactSage) 和温度场模拟表明, 夹杂物的演变受冷却速率和析出温度影响。在连铸坯中, 边缘区域冷却速率较快, 夹杂物数量多且尺寸小, 而中心区域冷却较慢,  $Ce_2O_2S$  等硫化物更易析出, 导致夹杂物尺寸增大。此外稀土元素 La、Ce 加入后夹杂物的演变规律相似, 变质路径遵循  $REAlO_3 \rightarrow RE_2O_2S \rightarrow RES$  的顺序。

## C14-79

熔融 CaCl<sub>2</sub> 辅助镁热还原制备高比容电容器钽粉的机理研究

陈逢明、徐一

南昌大学

钽电容器具有高比容、高稳定性和宽温域性能，广泛应用于高端电子与通信领域。钽粉作为其核心材料，其纯度与粒形直接决定电容器性能。目前工业制备高比容钽粉的钠还原法存在反应温度高、颗粒大小不均匀等问题，本研究创新性地提出了一种熔融 CaCl<sub>2</sub>辅助镁热还原制备电容器钽粉的新工艺。系统研究了氯化钙添加量、镁添加量和反应温度等参数对还原过程及产物性能的影响，重点揭示了熔融 CaCl<sub>2</sub>在抑制副反应和深度脱氧中的核心作用机理。研究表明，熔融 CaCl<sub>2</sub>的引入有效阻断了钽酸镁(Mg<sub>4</sub>Ta<sub>2</sub>O<sub>9</sub>)杂质相的生成，并通过其助熔效应促进反应物接触与传质，同时发挥物理屏障作用实现 Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>的充分还原。通过正交实验设计结合微观结构表征(SEM,TEM,XRD)，确定了最优工艺参数：Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>:Mg:CaCl<sub>2</sub>摩尔比=1:10:1，反应温度 920 ℃，保温时间 6h。在此优化条件下，成功制备出具有均匀珊瑚状多孔结构的钽粉，其氧含量低至 0.35wt%。微观分析进一步表明，所得钽粉表面形成了厚度约 3nm 的均匀非晶氧化层，该氧化层可抑制内部钽粉继续氧化。本工作开发的熔融盐辅助还原新工艺，为高效制备电容器钽粉提供了一条具有重要应用前景的技术路径。

## C14-80

## 高熵合金在极高应变速率下的缺陷不敏感行为

谭逸鸿、屈瑞涛、刘峰

西北工业大学

基于分子动力学模拟，研究了单晶 CoCrFeMnNi 高熵合金在 10<sup>9</sup> s<sup>-1</sup> - 10<sup>12</sup> s<sup>-1</sup> 应变率范围内的单轴拉伸与单边缺口拉伸行为。结果表明：随着应变率的提高，塑性变形机制发生位错主导向非晶化主导的转变，同时缺口对拉伸变形行为和性能的影响逐渐消失，即出现“缺陷不敏感”行为。该结果可归因于在极高应变速率下，位错运动速度接近剪切波速且被其所限制，使得位错移动距离急剧缩短，位错萌生位点增多，而缺口根部的应力集中对于位错萌生不再重要，难以形成应变集中。这项工作深入了对高熵合金材料在超高速加载下变形与断裂行为的理解，也预示着在极高应变速率时，与裂纹相关的理论模型需要重新认识。

## C14-81

## 中熵合金中高压扭转诱导纳米结构形成机制

张利雯<sup>1</sup>、韩显焯<sup>1</sup>、霍鹏达<sup>1</sup>、黄林科<sup>1</sup>、宋克兴<sup>3</sup>、刘峰<sup>1,2</sup>

1. 西北工业大学凝固技术全国重点实验室
2. 西北工业大学分析测试中心
3. 河南省科学院材料研究所

近年来，基于晶粒细化的强化策略已成为推动体心立方(BCC)结构中/高熵合金发展的重要方向，并且相关报道日益增多。然而大多数研究仅聚焦于晶粒细化与材料性能的行为响应，忽略了加工阶段的微观结构转变以及纳米化过程的动力学行为。在本研究中，我们定量的探究了 Fe<sub>68</sub>Ni<sub>10</sub>Mn<sub>10</sub>Co<sub>10</sub>Ti<sub>1.5</sub>Si<sub>0.5</sub> 中熵合金在高压扭转(HPT)大塑性变形下层片状马氏体结构向纳米等轴晶马氏体原位转变过程以及动力学行为。基于大塑性过程中动态组织演化，我们揭示了在冷变形下的动态再结晶行为诱导晶粒细化的一种新策略，并发现了晶粒尺寸关联的应变硬化与软化机制调控下的位错密度随等效应变增加呈现先升高后降低的现象。我们的研究为理解 Fe<sub>68</sub>Ni<sub>10</sub>Mn<sub>10</sub>Co<sub>10</sub>Ti<sub>1.5</sub>Si<sub>0.5</sub> 中熵合金在不同变形应变下的微观结构演变以及晶粒纳米化提供了重要的塑性加工策略以及研究基础。

## C14-81

**多尺度热-动力学约束的高性能金属材料强塑性协同提升设计**杜经莲  
西北工业大学

本工作从金属材料加工过程涉及的多尺度相变和变形热-动力学协同作用角度出发,以可热处理强化铝合金为典型代表,探究了金属材料强度和塑性互斥的热-动力学物理缘由及其强塑性协同提升机制。通过耦合经典相变和位错理论,建立了强度-塑性和热-动力学关键参量之间的本征量化关联解析模型,并将其应用于可热处理强化铝合金的时效工艺优化和析出相设计方面。研究工作为金属材料强度-塑性协同提升提供了新思路,为从热-动力学协同视角进一步获取“合金成分-加工工艺-组织结构-力学性能”间量化关联信息奠定了基础。

**闪报****C14-81****增材适用型镍基合金计算设计与实验验证**付佳博、于皓、王晨充、徐伟  
东北大学

为了实现具有良好服役性能的增材制造镍基高温合金的有效设计,开发了一种混合计算设计模型,该模型将调控局部元素偏析的策略融入到最小化裂纹敏感性的方案中。更具体地说,将 NbC/ $\gamma$  基体的相界面引入设计过程,以调控关键溶质的空间分布,从而抑制硼化物的形成和硼元素的偏析所导致的开裂。在此基础上综合考虑裂纹敏感性判据以优化合金的打印性能,同时考虑合金组织稳定性、力学性能及抗氧化性能的多重判据,设计出新型增材制造适用的高性能镍基合金,新合金可以在相当宽的增材工艺窗口下打印而不出现裂纹,具有很好的打印工艺鲁棒性。实验验证了相界均匀分布硼原子的能力,这能够有效防止晶界处硼原子偏析所引起的开裂。新设计的合金在不同的服役温度下表现出良好的拉伸性能和良好的抗氧化性,与传统加工工艺所生产出的高温合金相当。利用相界来防止硼原子聚集的发现可以扩展到控制其他关键元素的分布,这为设计具有平衡的可印刷性和力学性能的新型镍基高温合金提供了一条新途径。

**C14-82****NbC/ $\gamma$  相界面对增材制造镍基合金开裂行为的调控机制**杨兴铭  
东北大学

高性能镍基高温合金增材制造 (AM) 过程中的开裂问题制约了其应用,凝固近终态的先析相调控可以有效解决开裂。然而,仍需要其进行定量调控以实现打印性能和力学性能间的平衡。本工作以 NbC/ $\gamma$  析出相界面为例,系统性地研究了其含量对 L-PBF 镍基高温合金的开裂行为的影响机制。对不同合金裂纹密度和无裂纹加工参数范围的统计分析,表明先析 NbC/ $\gamma$  基体界面具有双重性质,是一把双刃剑。具体而言, NbC/ $\gamma$  基体界面含量较少时无法有效地抑制 B 元素的偏析与低熔点相的形成,导致开裂。而过量的 NbC 会导致大量的共晶,阻碍了枝晶的生长与枝晶间液相的回填,同样诱导裂纹的形成。具有适量 NbC/ $\gamma$  相界面的合金不仅展现出优异的可印刷性,还具有优异的强度-延展性协同作用。该研究为增材制造镍基高温合金的裂纹抑制和成分优化提供了指导。

**墙报****C14-P01****冲击压缩下  $\alpha$ -UH3 的电子结构和物理性质**

崔娟、杨宇

北京应用物理与计算数学研究所

我们通过第一性原理分子动力学 (FPMD) 模拟研究了  $\alpha$ -UH3 在 200 GPa 以内的冲击压缩下, 原子结构、电子态分布和热力学性质的演化机制。我们从状态方程 (EOS) 中获得了其冲击 Hugoniot 曲线。基于对分布函数的详细分析, 我们揭示了冲击压缩下  $\alpha$ -UH3 的解离过程, 并对 Hugoniot 曲线中的电子态演化和热力学演化给出了自洽的化学图像。此外, 我们还系统揭示了对冲击压缩下  $\alpha$ -UH3 的电输运特性、光学反射率等物理性质。该研究丰富了人们对  $\alpha$ -UH3 冲击压缩特性的认识, 预计将有助于克服金属氢化物作为储氢材料应用中的一些难题。

## C14-P02

### 电沉积制备极小尺寸纳米晶铁镍合金热稳定性及扩散性能

王俊淞<sup>1,2</sup>、代春丽<sup>1</sup>、褚月鑫<sup>3</sup>、李毅<sup>1</sup>

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学材料科学与工程学院
3. 东北大学材料科学与工程学院

纳米晶体材料由于其独特的晶体学特征展现出了诸多优异性能, 尤其近几年在极小尺寸 (<10-15nm) 纳米金属领域取得了许多重大突破。但受制于制备技术, 目前对极小尺寸纳米结构金属材料的结构-性能关系的认识仍较有限。

本研究中, 利用双阳极 (铁阳极和镍阳极) 电沉积方法制备了极小尺寸纳米晶铁镍 (NG FeNi) 合金样品, 并研究其热稳定性与扩散性能之间的关系。通过扫描电子显微镜能谱仪 (SEM-EDS) 和辉光放电质谱仪 (GD-MS) 测量其主元素为 Fe87Ni9.5 (at.%), 同时含有约 2 (at.%) 的氧元素和 1 (at.%) 的碳元素, 并通过 x 射线光电子能谱仪测得氧元素和碳元素均以固溶态形式存在。在退火时间为 2h 的条件下, NG FeNi 样品的热力学行为呈明显的三段: 当退火温度在 370°C 及以下时, 发生晶界偏析, 退火后室温硬度上升; 当升到 370-430°C 时, 晶界偏析效应减弱, 硬度下降; 进一步升到 450-470°C 时, 存在明显的铁氧化物析出, 硬度继续下降, 但仍然高于电镀态; 温度进一步升高, 氧化物析出的同时发生晶粒长大, 硬度迅速下降, 除此之外还发生了晶界处的孔洞聚集。在相同的热处理条件下, Ni 元素在 NG FeNi 样品中的扩散行为也反应了三个阶段热力学行为的发生。在 Harrison-C 类型扩散条件下, 即 Ni 原子只沿晶界扩散, 发现当扩散退火温度不超过 370°C 时, 由于晶界偏析的发生, 其扩散系数先随温度升高减小; 当升到 370-430°C 时, 晶界偏析过程结束, 扩散系数开始增大; 当温度升到 450-470°C 时, 扩散曲线出现明显的第二段, 即晶界扩散和氧化物-基体界面扩散。低温电沉积方法制备的 12nm NG FeNi 样品晶界扩散系数略低于文献中 80nm 的  $\gamma$ -FeNi 测量值, 但仍高于晶格的扩散系数, 同时铁氧化物-基体界面的扩散系数比同温度下的晶界扩散系数高约一个数量级, 且随着温度升高, 差值增大。