

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

D03-非晶与高熵合金

D03-Amorphous and High-Entropy Alloys

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



D03. 非晶与高熵合金

分会主席：姚可夫、张勇、沈宝龙、乔珺威

D03-001

先进金属材料的多性能一体化探讨

吕昭平

北京科技大学 北京 100083

人类社会的可持续发展，尤其是重大工程和关键核心装备的苛刻复杂服役环境对金属材料提出了多种性能一体化的需求，这不仅迫切地需要提升先进金属材料的力学性能，而且还需要提高材料对超高温、强辐照、强腐蚀等极端服役环境的耐损伤特性。然而，以上多种性能往往互相制约，甚至呈现典型的倒置关系，如何破解强度-塑性、强度-耐辐照以及其他耐损伤性能之间的矛盾，实现金属材料多种性能一体化是目前金属材料领域的重要科学问题。本报告将从金属材料多性能一体化所面临的科学难题出发，探讨如何通过金属材料的微结构调控实现多机制协同增效，探索先进金属材料极端服役环境下多性能一体化的新原理和新方法。

D03-002

大块非晶合金应用进展

李扬德

美国液态金属科技公司

D03-003

二维抗断裂高熵氧化物支架实现多功能纳米膜

杨勇

香港城市大学机械工程系

在面向显示、光伏和传感器应用的柔性电子器件中，亟需兼具无缝粘附性、机械耐久性、光学透明性和蒸汽阻隔性的超薄封装材料。虽然透明金属氧化物薄膜常被视为理想候选材料，但其本征脆性严重制约了实际应用。本研究通过在水凝胶中原位构建纳米氧化物支架，成功制备出具有优异抗断裂性能的自支撑高熵氧化物（HEO）纳米膜。该材料展现出接近 90% 的断裂延伸率和超过 300 MJ/m² 的韧性，性能媲美聚合物薄膜，显著优于传统金属/金属氧化物薄膜及氧化石墨烯、MXene 和 WS₂ 等先进二维材料。这种卓越力学性能源于双相纳米结构：HEO 支架与分解的水凝胶链相互交织形成的多级增韧机制，可有效阻碍和偏转裂纹扩展。该纳米膜还表现出优异的基材粘附性和 83.2% 可见光透过率（反射率仅 9.2%）的光学特性，性能超越多种薄膜封装材料。在 85°C/85% 相对湿度的湿热环境与 5% 弯曲应变耦合的严苛条件下，HEO 纳米膜封装能有效防止铜电路氧化。

D03-004

高 Bs 非晶软磁合金研发与应用研究进展

姚可夫

清华大学/Tsinghua university

非晶软磁合金因具有独特的优异软磁性能，自问世至今一直受到科技界和产业界的高度重视。经过半个世纪的基础研究和应用研发，在经历三个阶段的发展后，非晶软磁合金不仅在基础研究中取得了很多重要成果，还在工程应用中取得了巨大进展。最近十多年里，高饱和磁感强度(Bs)非晶软磁合金一直是研究热点，工程应用领域对非晶合金软磁性能的要求也在不断提高，特别是第三代半导体的应用，进一步促进了非晶纳米晶软磁合金研发，国内外多个研究组不断有高 Bs 非晶合金和高 Bs 纳米晶合金研究成果报道。

而且，综合软磁性能也在不断提升。最近，基于 AI 辅助的合金设计与研发模式的推出，进一步加快了高性能非晶纳米晶软磁合金研发。同时，在工程应用领域，非晶变压器、无线充电、纳米晶合金功率器件等已得到越来越广泛的应用。最近，具有高效、高功率密度等优异特性的非晶电机已逐渐得到了科技界和产业界的重视，有望带来新的突破和重要应用。这不仅将为我国新能源汽车产业的技术竞争力提升发挥重要作用，还将带来重大市场价值和社会效应，为“双碳”目标贡献力量。本文将综述近年非晶软磁材料研发和器件加工与应用的研究动态，供科技界和产业界研发人员和技术人员参考。

D03-005

冷拔诱导多级异质结构设计实现多相高熵合金强塑性协同突破

张勇^{*1,2}、邓林¹

1. 北京科技大学

2. 福耀科技大学

冷拔加工技术作为一种高效的塑性变形手段，在调控多主元合金微观组织与力学性能方面展现出显著潜力。传统冷拔研究主要集中于单相合金体系，而多相合金因加工成形性挑战，相关研究相对受限。针对这一局限，本研究聚焦冷拔技术在多相多主元合金中的应用，系统探索了多种新型微观结构设计策略，并取得以下重要进展：

1. 仿生竹纤维结构的构建与强化效应：在 AlCoCrFeNi_{2.1} 共晶高熵合金中，通过多道次冷拔结合退火工艺，成功构筑了独特的仿生竹纤维状微观结构——硬质 B2 相纤维均匀嵌入软质 FCC 基体。该异质结构诱发了显著的异质变形诱导（HDI）强化效应，协同提升了合金的强度与延展性；

2. 超细中熵合金纤维的高强塑协同：成功制备出直径 300 微米、长度超过 3 米的 CoNiV 中熵合金纤维。通过精确调控 κ 相含量，实现了优异的力学性能组合：屈服强度达 1681 MPa，抗拉强度高达 1932 MPa，同时保持良好塑性。其高塑性源于局部高应力激活的形变孪晶机制；

3. 双相层状异质结构实现超高强度与大弹性应变：创新性地在冷拔前于 CoNiV 合金中预先引入 κ 相，构建出双相层状异质结构。该设计实现了超高强度（2600 MPa）与高弹性应变极限（1.5%）的协同提升。 $\kappa \rightarrow \text{FCC}$ 相的应力诱导相变以及形变孪晶等机制的激活，显著改善了合金的冷拔加工性能与抗开裂能力。冷拔工艺在多主元合金中的成功应用，标志着该技术从传统成形手段向微观结构拓扑工具的范式转变，为设计下一代兼具超强、抗损伤与功能特性的金属材料开辟新途径。

D03-006

无序合金中的有序调控

王刚

上海大学

从序/熵调制设计角度，开展了无序结构合金的设计，开发了具有室温和中温（600 °C）高比强度的高性能轻质合金。进一步通过优化热处理工艺，实现了多级加工硬化行为；利用增材制造技术与非平衡凝固结合实现了高熵合金中纳米尺度非平衡结构复合调控；对所开发的新型无序合金开展了一系列的空间微重力凝固实验、地面微重力凝固实验、地面模拟太空增材制造和空间碎片地面模拟撞击实验研究，获得了良好的结果，有望应用于在轨修复和空间碎片防护。

D03-007

高性能铁基非晶合金的多目标生成模型逆向设计及多性能调控

李茂枝

中国人民大学

铁基金属玻璃由于其优异的软磁性能，在能源转换、电子设备和信息通讯等多个领域展现出显著的应用价值。然而，传统的设计方法依赖于耗时的试错实验，并面临磁饱和强度、矫顽力与玻璃形成能力间复杂权衡的挑战。针对这一问题，我们提出了一个多任务生成式深度学习模型，利用 Wasserstein 自动编码器来逆向设计高性能铁基金属玻璃。多任务生成式深度学习模型不仅能够揭示合金成分与性能之间的联系，还整合了多个性能预测任务。该模型可直接生成的具有超高磁饱和强度的新型金属玻璃，并得到了验证。更重要的是，该模型具有可解释性，可以直接揭示“元素-性质”的相关性，有助于指导未来的材料设计，为铁基软磁金属玻璃的开发和性能调控提供了新的逆向设计策略。

D03-008

共晶高熵合金研究进展

卢一平*

大连理工大学

高熵合金是最近十几年发展起来的一类新型合金，具有很多优异的物理、化学和力学性能，目前已经成为国内外金属合金研究领域的热点。但是高熵合金铸造流动性差、成分易于发生偏析，是制约其工业化应用的主要瓶颈之一。申请人围绕上述问题，深入系统地开展了从合金设计、组织调控到制备应用的全链条工作。主要取得三方面学术成绩：1) 提出了共晶高熵合金的设计理念，开辟了共晶高熵合金这一新的研究领域，并命名这种合金为共晶高熵合金 (eutectic high entropy alloys)；2) 建立了共晶高熵合金元素选择与成分设计模型，设计和制备出系列性能优异的共晶高熵合金；3) 推进的大体积、轻质、高强耐腐蚀共晶高熵合金铸锭工业化应用相关的基础理论研究，有望满足下一代舰船、水下潜航器、极地破冰船对轻质、高强、耐腐蚀螺旋桨推进器部件的使役要求，直接服务于国家重大工程领域。

D03-009

高 Bs 铁基非晶合金成分设计与全流程制备工艺研究

惠希东*

北京科技大学

针对 Fe-Si-B-C (HB1) 系非晶合金存在的非晶形成能力 (GFA) 较低和生产工艺窗口窄的问题，以 Fe₈₃Si₅B₁₁C₁ 合金为基础成分，通过类金属元素 Si、P、C 共混调控合金原子错配度和混合焓、以及铁磁性元素 Co 的掺杂，开发兼具高 GFA 和高 Bs 的合金成分。针对工业生产用低成本原材料纯度低和杂质多等问题，通过泡沫陶瓷过滤器与底吹氩透气砖集成组合使用，优化了熔体底吹氩除杂效果，实现了对熔体中夹杂物数量、尺寸和形貌的有效控制，大幅提升熔体的洁净度，进而提升了非晶宽带的制带工艺顺行度。采用低成本工业原材料成功实现了新型非晶合金带材 (合金成分 Fe₈₀Co₃Si₁B₁₁P₄C₁) 的中试化生产。

D03-010

高饱和磁通密度高电阻率软磁非晶合金薄膜的研制

陈娜

清华大学材料学院

伴随人工智能的快速发展和大数据时代的到来，数据传输、存储和能量转化设备的能耗问题日益严重，对研制高频、低功耗、小体积的电力电子器件提出了更加苛刻的性能需求。作为功率转换器件和电机的核心材料，软磁材料的功耗决定了器件的能量转换效率。而功耗主要来源于磁滞损耗和涡流损耗，尤其是应用于高频工况时涡流损耗的影响会更加严重。软磁非晶合金矫顽力低，使得磁滞损耗很低。而涡流损耗主要由电阻决定，电阻率 (ρ) 越高，涡流损耗越小。但高功率密度要求软磁非晶合金要有足够高的饱和磁

通密度 (B_s)。但通常软磁材料的 B_s 越高, ρ 会越低。因此, 如何在软磁非晶合金中打破 B_s - ρ 之间的制衡关系, 研制出综合软磁性能更为优异的软磁非晶合金是突破硅钢和铁氧体软磁性能桎梏的关键挑战之一。通过在软磁非晶合金体系中原位添加氧形成局域含氧化学短程序结构, 调控磁性原子间的磁交互作用并增强单个磁性原子的平均磁矩, 研制出 B_s 高达 2.02 ± 0.02 T (商业 35H300 硅钢 B_s 为 2.03 T), ρ 高达 $1076 \pm 178 \mu\Omega\cdot\text{cm}$ (比传统软磁非晶合金高约 1 个数量级) 的软磁非晶合金薄膜, 成功打破了 B_s - ρ 之间的制衡关系, 有望拓展软磁非晶合金在微纳电子器件中的应用范围。

D03-011

基于能量状态调控的非晶纳米晶功能材料设计

霍军涛、宋丽建、高萌、张岩、王军强
中国科学院宁波材料技术与工程研究所

非晶合金独特的无序原子结构赋予其优异的力学、磁学、化学及物理性能, 在能源、电子、航空航天、生物医学等领域具有广阔的应用前景。作为典型的亚稳材料非晶合金具有非平衡态特性, 其能量状态可在很大范围内变化。然而, 能量弛豫动力学过程非常复杂, 包含多种相互耦合的弛豫类型, 这使得精确调控能量状态并研究能量与性能的关系极具挑战性。我们系统研究了等温退火过程中的弛豫动力学, 发现了多步弛豫转变现象, 探测到弛豫动力学基本单元, 阐明了玻璃态能量状态对纳米晶化的影响。并通过精确调控非平衡能量状态, 设计出一系列具有优异功能特性的非晶合金及其纳米晶复合材料, 如兼具优异软磁性和良好塑性的铁基非晶合金、具有大磁热效应的钆基非晶/纳米晶复合材料, 以及具有高催化性能的铁基非晶合金。

D03-012

钴基非晶合金的磁性能调控及其传感器性能研究

黎嘉威*、牟春阳、潘丽宁、苏梦然、贺爱娜、董亚强、满其奎、沈保根
中国科学院宁波材料技术与工程研究所

高端磁通门传感器对低饱和磁感应强度 (B_s) 和优异软磁性能的钴基非晶合金材料提出了迫切需求。本研究探讨了铬元素掺杂与退火工艺对钴基非晶合金磁性能与微观结构的影响, 并探索了通过成分与工艺优化提升磁通门传感器精度、稳定性及线性度的方法。研究发现, 适宜的 Cr 掺杂配合退火处理能在高温环境下稳定钴基磁芯的非晶结构, 同时实现低 B_s 、低矫顽力与高磁导率的协同优化。研发的磁通门电流传感器实现了 0.28% 的高精度、0.018% 的低线性误差以及 ≤ 10.3 ppm/K 的极小温漂系数。此外, 采用冷拉与张力退火诱导的环向各向异性可有效降低开环平行磁通门传感器中感应信号的二次谐波分量, 提升非晶丝在变化外磁场下的磁化稳定性, 从而显著改善传感器的线性度, 线性误差从 5.9% FS 降至 0.29% FS。相关工作作为高性能磁通门传感器磁芯材料的设计与优化提供了参考。

D03-013

基于序调控工程创制退火脆性改善的新型稀疏态纳米晶软磁合金

周靖¹、李雪松¹、刘李晨¹、柯海波¹、孙保安^{1,2}、白海洋^{1,2}、汪卫华^{1,2}

1. 松山湖材料实验室
2. 中科院物理所

非晶/纳米晶软磁合金由于实际的产业化应用需求, 常规炉内退火工艺引起的材料脆性是其能否进一步拓宽应用场景的关键难题。近期, 团队基于序调控理念, 结合多场耦合后处理工艺, 探索制备了一系列兼具高饱和磁感应强度、低矫顽力和退火脆性改善的新型高性能过渡态稀疏纳米晶软磁合金体系。其中, 采用柔性退火工艺克服了带材表面凹凸不平的本征缺陷, 实现了精细纳米晶结构的构建, 退火后的带材沿条带方向扭转超过 540°后仍保持完整, 该新材料表现出优异的综合性能, 同时兼具高饱和磁感应强度 (高达

1.88 T)、低至 6.3 A/m 的矫顽力和低的退火脆性。此外,自主设计了 FeCoNiBSiTa 多组元复杂新合金体系,采用特殊热处理工艺构建了纳米尺度的稀疏态过渡结构,获得了矫顽力 ≤ 1 A/m,且退火脆性大幅度改善的新型软磁合金。基于序调控工程,有望开发更多具有优异综合软磁性能的非晶基软磁材料,可以应用在诸如高速电机,大功率光伏并网逆变器等现代电子产品中,为探索制备新一代高性能软磁材料提供了一种新的思路。

D03-014

铁基非晶合金结构和性能研究

李福山, 张锁

郑州大学, 材料科学与工程学院, 郑州, 450001

在铁基非晶合金的制备过程中,工业原材料的使用可能引发非晶带材成分的一定程度波动,同时熔体温度的控制也存在一定的不稳定性。这些因素对铁基非晶合金结构及其软磁性能的具体影响尚未被完全阐明。本研究通过设计形成能边界成分,系统分析成分扰动对合金表面状态的影响,深入探究成分微小变化所导致的表面特征差异,并揭示成分波动对铁基非晶合金表面微观结构、磁性能及热物性的具体作用机制。基于上述成分优化结果,进一步针对 Fe₇₈Si₉B₁₃非晶合金成分,探讨熔体温度波动在制备过程中对其外观、结构及磁性能的影响规律,阐明生产过程中熔体温度波动对非晶合金性能产生作用的内在机理,为高性能铁基非晶带材的开发提供科学依据和技术支持。

D03-015

粉末粒度分布优化对 FeSiBNbCu 纳米晶软磁复合材料性能的影响研究

董亚强、李笑、贾行杰、贺爱娜、黎嘉威、满其奎、沈保根

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

铁基纳米晶软磁粉末兼具高饱和磁化强度、高磁导率和高频低损耗,是发展新一代高性能电感器必不可少的关键原材料。通过优化粒径分布提高致密度是改善纳米晶磁粉芯高频磁性能的关键途径之一,但当前采用的试错法粒度配比存在效率低、精细度差等问题。本工作提出机器辅助计算优化纳米晶粉末粒径分布,通过 Matlab 数学模型高通量计算不同配比纳米晶粉体致密度,建立粉体粒径分布、配比和致密度参数之间的精细关联,优选高致密度纳米晶粉体配比方案,并进行实验验证。实验结果表明,机器辅助计算粒径分布优化显著提高纳米晶磁粉芯致密度,使孔隙率下降 7.8%,磁粉芯性能显著提高,其中磁导率提高 9.0%,2 MHz/20 mT 损耗下降 16.7%,100 Oe 直流偏置特性提高 4.3%。致密度提高可有效集中并且引导磁力线分布,降低磁阻,进而全面提升纳米晶磁粉芯的高频性能。

D03-016

高饱和磁密低损耗 FeNiSiB 系非晶合金设计制备与性能调控

范星都、李磊、彭怡楚、沈宝龙

东南大学

软磁材料是现代电力电子工业发展的关键材料,铁基非晶软磁合金因其具有高饱和磁通密度、低矫顽力、低损耗等优异性能而广泛应用于配电变压器、电机等电力电子器件。然而,现有铁基非晶合金饱和磁密仍明显低于硅钢,铁心空载损耗仍较大,亟待开发兼具高饱和磁密、低损耗的铁基非晶合金,打破饱和磁密与非晶形成能力制约关系,突破高饱和磁密与低矫顽力、低损耗难以兼得技术瓶颈。本文以商业化 FeSiB 非晶合金为基础,通过 Ni 元素微量添加与类金属元素配比优化,设计制备出综合软磁性能优异的 FeNiSiB 系非晶合金,通过磁场热处理优化其软磁性能。研究发现微量 Ni 元素添加使合金过冷度由 39 °C 提升至 158 °C,带材临界厚度 ≥ 51 μm ,临界铜辊转速低至 15 m/s,增强了非晶形成能力。Si/B 增大有利于提高合金韧脆转变温度,在最佳退火状态下表现出优异的抗弯折性能。发现分步磁场热处理可诱导类晶体

有序结构转变,促进磁畴沿纵向易轴有序排列,形成由均匀畴壁位移主导的磁化机制,实现磁性能最优化,获得兼具高饱和磁密、低损耗与宽热处理窗口的 FeNiSiB 非晶合金,饱和磁密达 1.66 T,矫顽力低至 1.4 A/m,有效磁导率达 12600。在千公斤级生产线对其非晶形成能力与软磁性能进行验证,制备出 142 mm 宽 FeNiSiB 系非晶合金带材,饱和磁密提升至 1.68 T,矫顽力 1.5 A/m,1.4T/50Hz 条件下铁心损耗降低至 0.081 W/kg。

D03-017

FeSiAlBPCu 非晶合金的热学性能、磁学性能及晶化行为

兰颂、兰春瑶、夏金花、夏垚、王锋

重庆交通大学

本文以 FeSiBPCu (Nanomet) 软磁合金为研究对象,基于 Sendust (FeSiAl) 合金成分,采用快速凝固技术制备 $\text{Fe}_{87.3-x}\text{Si}_x\text{B}_8\text{P}_4\text{Cu}_{0.7}$ ($x=0\sim 21.8$)、 $\text{Fe}_{87.3-y}\text{Al}_y\text{B}_8\text{P}_4\text{Cu}_{0.7}$ ($y=0\sim 21.8$)、 $\text{Fe}_{87.3-x-y}\text{Si}_x\text{Al}_y\text{B}_8\text{P}_4\text{Cu}_{0.7}$ ($x=12.2\sim 16.1$, $y=6.5\sim 11.5$) 铁基合金薄带,使用快速退火(加热速率 $\sim 530^\circ\text{C}/\text{min}$)和等温退火(加热速率 $\sim 5^\circ\text{C}/\text{min}$)进行晶化处理,研究 Si、Al 元素微合金化对 Nanomet 非晶合金热学性能、磁学性能和晶化行为的作用。研究表明,单掺 Si 和单掺 Al 均显著增大了 Nanomet 非晶合金的晶化激活能和晶化温度,提高了非晶结构的热稳定性,可拓宽纳米晶化的温度区间(ΔT_x , $58\sim 122^\circ\text{C}$)。但高硅含量($x=21.8$)导致快淬合金晶化,降低了非晶形成能力。与单掺情况相比, Si、Al 元素共掺减小了非晶合金的 ΔT_x ($22\sim 32^\circ\text{C}$),但增大了晶化激活能。由于磁稀释作用, Si 和 Al 元素含量的增加降低了非晶合金的饱和磁化强度,而矫顽力远小于 100 A/m,仍保持较好的软磁性。但非磁性元素过多($x=16.1$, $y=11.5$)使得非晶合金为顺磁性,造成软磁性能的恶化。快速退火可有效减少晶化过程中硼磷化合物的相含量和晶粒尺寸,但仍有硬磁相析出,亟需结合 Nanomet 非晶合金的热学性能进行工艺优化。

D03-018

非晶磁性浸润剂的制备与性能研究

杨春成*、李腾

河北地质大学

玄武岩纤维因优异力学与耐腐蚀性备受关注,但其非磁性限制了在磁性材料领域的应用。现有磁改性方法易损伤纤维,导致力学性能下降。为此,本研究采用化学还原法制备了具有优异软磁特性的 FeZrB 非晶纳米颗粒,并与共沉淀法制备的 Fe_3O_4 晶体颗粒进行对比。以不同表面改性的 FeZrB 非晶或 Fe_3O_4 晶体磁性颗粒为核心,结合聚乙烯醇(PVA)和硅烷偶联剂 KH-550,开发了纤维用磁性浸润剂。通过简便的浸润剂涂覆法对玄武岩纤维进行赋磁。利用 XRD、FT-IR、SEM、TEM、VSM 等表征技术分析了浸润剂的物相、官能团、形貌、粒径及磁性能;通过 SEM、EDS、VSM 和力学测试研究了改性纤维的表面形貌、元素分布、磁学及力学性能。结果表明,表面改性(特别是柠檬酸 CA 改性)能有效调控非晶与晶体磁性颗粒的分散性及浸润剂性能。CA 改性浸润剂在纤维表面形成均匀致密的磁性颗粒层,并构建有机-无机复合交联网络结构,显著提升了纤维的综合性能。采用非晶 FeZrB@CA 的浸润剂表现出更高的饱和磁化强度(M_s 达 98.9 emu/g),显著优于晶体 Fe_3O_4 @CA 体系(M_s 78.4 emu/g)。涂覆 FeZrB@CA 浸润剂的玄武岩纤维上浆率达 25.18%,抗拉强度为 1868 MPa(比原始纤维提升 104.01%),纤维 M_s 高达 63.5 emu/g,展现出极其优异的磁响应性。涂覆 Fe_3O_4 @CA 浸润剂的纤维性能亦有显著提升(抗拉强度 2187 MPa,提升 138.87%;纤维 M_s 41.3 emu/g)。柠檬酸根的分散作用及非晶/晶体颗粒与基体形成的交联网络是性能提升的关键。本研究特别是利用非晶磁性颗粒的高性能,为高性能磁性玄武岩纤维的制备及磁性浸润剂设计提供了新策略与理论基础。

D03-019

反铁磁性 Cr 元素在因瓦合金设计中的非典型效应研究

刘微子*

因瓦合金在室温上下约 100 °C 范围内具有近零热膨胀系数 ($<2 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$), 是航空航天和精密仪器多领域中不可或缺的关键材料。然而, 实际工程应用中的严苛环境对材料的耐腐蚀性能提出了更高要求, 也对其综合性能提升提出了更严苛的挑战。Cr 元素虽能显著提升合金的耐蚀性与力学性能, 但其反铁磁性会削弱铁磁有序, 从而破坏低膨胀现象所依赖的磁弹耦合机制。在以往工作中被认为会急剧恶化因瓦特性, 因此 Cr 添加量通常受到严格限制。本研究设计了一系列多组元 FeNiCoCr 合金, 引入 Cr 含量梯度, 获得了热膨胀系数低于 $1.6 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, 具有高塑性和优良耐蚀性能的合金成分。并通过热力学计算和磁性行为演化分析, 揭示了 Cr 在影响结构稳定性和磁性转变过程中的关键作用。通过 Cr 元素在本工作中展现的不同寻常的效应, 探索低膨胀现象的物理机理, 为设计新型多组元因瓦合金提供经验。

D03-020

通过应力释放与局部结构有序化调控软磁非晶合金的高频铁损

吴忧, 姚可夫

清华大学

D03-021

Fe 基非晶合金的晶化行为、纳米晶调控与磁性研究

刘丛*

河北工业大学

Fe 基非晶/纳米晶合金具有优异的软磁性能, 如高饱和磁化强度 (B_s)、高磁导率(μ)和低矫顽力 (H_c) 等, 在变压器、电机等领域, 具有广泛的应用。本文采用单辊甩带方法制备出 Fe 基非晶/纳米晶条带, 并对其晶化行为、软磁和硬度进行了研究。Fe 含量增加到 82 at.% 以上时, FeSiBCCu 非晶合金的 B_s 保持在 1.7 T 以上, H_c 降低为 3 A/m, 有效磁导率(μ_e)在 1 kHz 时增加到 23100, 退火纳米团簇和纳米晶的 B_s 增加到 1.75 T, H_c 在 6 A/m 以下, μ_e 在 1 kHz 时达到 24500, 完全晶化后, 合金条带的硬度高达 1820。FePC 非晶条带去应力退火后的 B_s 达到 1.68 T, H_c 低于 5 A/m, 初始磁导率约为 9300, 表现出良好的软磁性能。此外, 将 Fe 含量增加 85 at.% 时, 合金条带的结构变为非晶+fcc 相, 条带的 B_s 达到 1.69 T, 硬度为 621。本论文制备的高 B_s 、低 H_c 和优异弯折韧性的 Fe 基非晶合金实现商业化应用提供理论依据, 具有重要的研究意义。

D03-022

深冷处理对铁基金属玻璃结构和软磁性能影响的差异

胡飞、龚攀*、王新云

华中科技大学

Fe 基金属玻璃 (Metallic glass, MG) 材料因其优越的饱和磁化强度 (M_s)、高磁导率 (μ_e) 和超低矫顽力 (H_c) 而成为下一代电力电子器件的候选者。然而, 新兴产业的快速增长推动了对高频、小型化和节能元件的需求。因此, 迫切需要具有更高综合性能的软磁材料。虽然增加铁磁元素含量可以直接提高软磁性能, 但它往往会严重损害玻璃形成能力。研究表明, 调整 MG 的异质结构可以有效地优化铁基 MG 的软磁性能。传统的优化策略, 包括磁场退火、应力退火和非晶纳米晶结构形成, 通常会受到加工窗口狭窄和大量试错要求的限制。

相比之下, 大量研究证明, 液氮温度下的低温处理 (Cryogenic treatment, CT) 为修改 MG 的局部原子结构提供了一种强有力的替代方案。该方法将操作简单性与可扩展性相结合, 对样本维度没有实际限制。同时, 大量研究已经对合金体系/成分对 CT 或低温循环处理 (Cryogenic cycling treatment, CCT) 后机械性

能的影响进行了广泛的研究，但文献中明显缺乏对其对磁性能影响的系统研究和全面总结。为此，在这项研究中，我们选择了两种具有代表性的铁基 MG：经典的 Fe78Si9B13（METGLAS 2605）合金和含有少量 C 和 Cr 的改性成分 Fe73Si11B11C3Cr2。系统地研究了 CT 对两种铁基 MG 的影响，特别关注了它们的微观结构演变、力学性能和软磁特性。此外，还研究了影响 CT 处理后软磁性能变化的因素。主要结果总结如下。

（1）实验结果表明，CT 后，两种 MG 的弛豫焓和软磁性能都经历了多次周期性变化。然而，两种 MGs 在微观尺度上的弛豫或再生演化路径存在差异。这种差异可能来自两个 MG 的不同初始能量状态。

（2）CT 后，FeSiBCCr 的软磁性能显著提高，磁导率从 250 最大增加到 308， M_s 从 164emu/g 最大增加到 178emu/g， H_c 的最大降幅为 2.1%。相比之下，FeSiB 的磁导率和饱和磁化强度随着 CT 时间的增加而降低或基本保持不变，但 H_c 在 CT 24 小时后降低了 7.3%。

（3）通过相关性分析，我们发现电负性是影响 M_s 变化的关键特征，而混合焓和平均原子尺寸差是影响 H_c 的两个主要变量。具有高电负性和低混合焓/平均原子尺寸差的 MG 在低温处理后可以获得优异的综合磁性能。这一发现对于研究低温处理对软磁材料磁性能的影响具有重要意义，为高性能软磁材料的成分设计和微观结构调控提供了指导。

D03-023

多主元合金局域化学有序结构的调控与性能优化

吴渊

北京科技大学 北京 100083

随着体系构型熵的提高，材料的化学成分复杂性逐渐增加，基于“熵”设计的多主元合金设计理念应运而生，为实现强度-塑性等多性能协同提升提供了新机遇。然而，其复杂的原子环境使得亚微观或原子尺度局域结构的形成机制及其对力学性能的影响规律仍未明晰。本报告以多主元合金中局域化学有序结构的形成与演变规律为切入点，系统探讨其形成机理、热力学起源及对缺陷演化的调控作用，揭示化学短程有序与宏观力学性能的跨尺度关联机制。研究发现：面心立方 CoNiV 中熵合金经 530℃ 低温退火后屈服强度提升至 653 MPa，延伸率仍保持约 60%，通过多尺度表征首次阐明其强化源自 L_{12} 型化学短程有序的形成与发展。这种原子级有序结构通过提高位错滑移平面性、减少位错缠结实现强塑协同，突破了传统低温退火工艺导致材料软化的固有认知。本研究发掘了低温退火处理用于调控多主元合金原子尺度结构的新策略，揭示了利用化学短程有序设计高性能材料的新路径。

D03-024

纳米复合析出强化高熵合金：合金设计与组织调控

焦增宝*

香港理工大学

纳米复合析出强化高熵合金可发挥不同析出相在强化效应、塑性变形、加工硬化等方面的协同作用，突破单一析出相的局限，在超高强度水平下实现优异的强韧性匹配。本研究发现，在 FCC 高熵合金中添加 Nb 元素可以促进共格 L_{12} 纳米相和非共格 Laves 纳米相的复合析出，其中共格 L_{12} 纳米相可以被位错切割，促进位错在合金中的长程滑移，而非共格 Laves 相可有效地阻碍位错运动，在其界面处形成大量的位错堆积，提高了合金在塑性变形初期的加工硬化能力，获得了良好的综合力学性能。本研究还发现，在共晶高熵合金添加 Nb 元素，既可以促进共格 L_{12} 纳米相在 FCC 基体中的析出，还可以促进 α' 纳米相和 Laves 纳米相在 B2 基体中的复合析出，形成一种双相基体和多种纳米析出的复杂微观组织，该高熵合金在 700 度时具有 900MPa 屈服强度和 50% 塑性，获得了较好的高温力学性能。本研究结果对设计和开发具有优异

力学性能的纳米析出强化高熵合金有一定的指导意义。

D03-025

高熵合金的拉伸变形与塑性成形

黄永江*、王克研、宁志良、孙剑飞
哈尔滨工业大学

高熵合金以其独特的多主元素固溶体结构和优异的综合力学性能(如高强度、高塑性及良好的低温成形性),已成为材料科学与工程领域的研究热点。然而,作为结构部件实现工程应用,高熵合金必须具备出色的塑性变形能力和成形性能。因此,深入研究高熵合金在复杂应力和温度条件下的塑性变形行为及微观组织演变规律,特别是变形特征,对于推动高熵合金的实际应用具有重要意义。为此,本报告以CoCrFeNiMn0.75Cu0.25高熵合金为研究对象,探究轧制工艺对该高熵合金微观结构与塑性性能的影响规律,系统揭示其在极端条件下的变形机制,深入评估剪切冲孔和杯突成形过程中的材料塑性流动行为,以期高熵合金的工程应用及工艺优化提供理论依据。

D03-026

化学复杂金属间化合物的高温性能及其应用研究

赵怡潞*
哈尔滨工业大学(深圳)

化学复杂金属间化合物(CCIMA)因其独特的超晶格结构和元素协同作用,有望抵抗高温软化,成为一种极具潜力的新型高温合金材料。然而,当前对该类合金的高温力学行为及其变形机制、复杂构件的制造等方面还缺乏细致的实验研究和理论认识,严重阻碍了其在高温应用领域的发展。针对这些问题,我们借助多尺度先进表征技术系统地研究了一系列L1₂型CCIMA的力学性能、变形机制及其增材制造。其中一种富钴CCIMA在700–900℃的宽温度范围内展现出优异的拉伸强度。值得注意的是,该合金存在显著的反常屈服现象,其屈服强度与温度成正相关,且在700℃时达到峰值(>1.0 GPa),超过了大多数文献报道的L1₂型金属间合金。精细的透射电镜分析表明这一优异的抗高温软化性能主要归因于位错的交滑移硬化和偏析辅助硬化机制的协同作用。此外,利用激光增材制造技术,我们实现了无裂纹、高致密度(99.995%)金属间化合物复杂构件的制造成形,并获得了远超其他3D打印金属间化合物与合金的力学性能。这些工作为新型耐热结构材料的设计与开发提供了重要的科学指导。

D03-027

富Ti/Zr高熵合金研制进展

朱正旺*、周永康、张海峰
东北大学

高熵合金是一类全新的、基于“熵”进行合金成分设计先进金属材料。一般情况下,高熵合金含有至少为5种主要组元,且每个组元含量在5%~35%之间,与传统的金属及其合金相比,合金成分和性能都具有更多的调节空间,也为材料性能极限探索带来无限可能。其中由高熔点的IV副族(Ti、Zr和Hf)、V副族(V、Nb和Ta)和VI副族(Cr、Mo和W)元素组成的难熔高熵合金,因其高强度、高硬度、耐磨性、耐腐蚀性以及耐辐照性能,在航空航天、核以及运输行业等具有广泛的应用潜力。针对材料的工程应用而言,材料各项性能的均衡是其能否应用的关键。为此,研究团队围绕“熵”设计材料设计思想,以富单一组元或双组元为理念,设计开发了多个富Ti/Zr高熵合金,如:Ti₃Zr_{1.5}Nb₁Al_{0.25}合金室温拉伸屈服强度为900MPa、塑性能达到25%同时冲击韧性~131.3J/cm²;Zr₄₂Ti₁₅Nb₂₀Ta₂₀Al₃合金室温拉伸屈服强度超过1300MPa,兼具8%左右的塑性;Zr₄₅Ti₁₅Nb₂₀Ta₂₀合金经高温固溶和中温时效后形成精细的纳米立方结构,同时提高合金硬度、室温和高温强度;等等。这些合金在强度、比强度、室温塑性以及成型性等方面

具有突出表现。富 Ti/Zr 高熵合金多尺度的组织变化和优异的力学性能使其具有广泛的应用空间。

D03-028

Unique Mechanisms for Strengthening and Toughening of High-Entropy Materials

Zhiming Li*

Central South University

Multi-principal element high-entropy materials (MPE-HEMs) have practically infinite chemical composition space, and their microstructures can also be effectively controlled by synthesis and processing technologies. Therefore, through the coupling design of chemical composition and microstructure, various mechanisms can be effectively coordinated in MPE-HEMs to achieve excellent comprehensive mechanical properties. In addition to the strengthening and toughening effects in traditional single-principal element materials, unique mechanisms can be activated in MPE-HEMs to obtain better combinations of strength and ductility/toughness. In this talk, we will discuss on a variety of unique strengthening and toughening mechanisms in MPE-HEMs, including massive substitutional and interstitial solid solution, metastable engineering and bidirectional transformation, symbiotic dual-nanoprecipitation and hierarchical nanoprecipitation, high-stress twinning, high-density stacking faulting and sluggish martensitic transformation, and nano-amorphous-crystalline composite mechanisms. The principles and ideas for designing compositions and microstructures of MPE-HEMs to realize the above unique mechanisms will be described, the microscopic fundamentals of the typical mechanisms in specific MPE-HEMs will also be revealed. Furthermore, based on the classical strengthening and toughening mechanisms in traditional single-principal element materials and the uniqueness of MPE-HEMs, other possible strengthening and toughening mechanisms will be discussed. Finally, the potential of MPE-HEMs for simultaneously achieving excellent mechanical properties and other functional properties based on the large room of compositional and structural design will be prospected, which can indicate important ways to effectively exploit the unique advantages and values of MPE-HEMs.

D03-029

杨氏模量差异性对界面应变再分配的影响

付小玲*

广东工业大学

界面应力集中在 B2 增强型金属玻璃基复合材料 (BMGCs) 中同时促进了马氏体相变的形核和剪切带的启动。由于马氏体相变发生在晶体 (软) 区域, 剪切带往往出现在非晶 (硬) 基体中。长期以来, 一个悬而未决的问题是: 应力集中何时会促使马氏体相变, 何时又会引发剪切带的启动。从定义上讲, 应力集中是由区域的杨氏模量与局部应变集中相乘而产生的。沿着晶体-非晶界面的局部应变集中在促进相变和局部剪切行为中起着决定性作用。通过分子动力学 (MD) 方法持续跟踪界面应变分布, 量化界面应变集中及其松弛的位置和幅度, 并将其与区域模量差异相关联。我们提出, 区域应变集中与松弛总是位于软/硬区域交界处, 以维持界面变形的相容性。

D03-030

基于检索增强生成技术构建的高熵合金大语言模型智能体

栾亨伟^{*1}、邵洋²、姚可夫²、吕坚¹

1. 香港城市大学

2. 清华大学

近年来人工智能大模型如 ChatGPT, DeepSeek 等发展迅速, 并逐渐成为科学研究领域的重要推动力量。

但当前大模型依然存在如产生幻觉、信息更新不及时和对专业问题了解不足等缺点,限制了大模型的使用。针对这些问题,采用 DeepSeek 大语言模型,并结合高熵合金领域的 1.5 万篇相关文献构建的专业知识库,我们开发了基于检索增强生成(RAG)的高熵合金领域的智能体。与直接使用大模型相比,该智能体将首先在知识库中检索与提问相关的文献内容,并将文献内容与提问一起提交给大模型,使得大模型的回答有据可查,并及时更新,显著减少了直接使用大模型的幻觉等问题。我们发现该智能体回答高熵合金相关问题的正确率相比直接使用大模型可以提高约 28 个百分点至约 88%。该智能体在合金性能预测、实验设计和优化和论文撰写等任务中较直接使用大模型也有显著提升。该研究为高熵合金领域使用大模型提供了一种增强方式,并为未来人工智能主导的自动化材料研发和多智能体协作等奠定了基础。

D03-031

Revealing the stress slow-released mechanism on dynamic recrystallization AlCoCrFeNi high-entropy alloys with structural and functional integration

Zhenyu Dou^{*1}, Lu Sujun², Yin Jingou¹, Wei Ming¹, Wang Jian¹, Zhang Xintao², Zhang Baoguang¹

1. Northwest Institute for Nonferrous Metal Research

2. State Key Laboratory of Ni & Co Associated Minerals Resources Development and Comprehensive Utilization

The mechanism of hot-extruded equimolar AlCoCrFeNi high entropy alloy (HEA) with trade-off properties was explained during the current work. The dynamic recrystallization process that occurs in the hot-extruded equimolar AlCoCrFeNi HEA leads to fine grains together with soft FCC phases distributed at the grain boundaries. The refined grains and the soft reticular FCC phase uniformly release the deformation potential energy during the compression process, which is the key to increase the plasticity of AlCoCrFeNi HEAs. These factors greatly passivate the crack initiation and blunt the propagation of cracks. Compared with the as-cast AlCoCrFeNi HEAs, the compressive strength and plasticity of the AlCoCrFeNi HEA have been greatly improved. Finally, an amazing result for the AlCoCrFeNi alloy exhibit the compressive strength and the elongation of the alloy reached 3500 MPa and 42 %, respectively. The EBSD and STEM information also reveal the dynamic changes of the stress and dislocations in hot-extruded AlCoCrFeNi HEAs at different compression degrees of 10 %, 20 % and 30 %. In addition, the soft magnetic properties of the AlCoCrFeNi HEAs in powder state and hot-extruded state are revealed to demonstrate their functional performance. These findings guide the future researches and applications on AlCoCrFeNi HEAs in the field of structural and functional integrated materials.

D03-032

含 W 多主元合金中实现优异的强塑性协同和高绝热剪切敏感性

刘海洋、王清*

大连理工大学

钨合金因其能够对目标造成高动能损伤而广泛应用于穿甲系统,但由于对绝热剪切带(ASBs)的敏感性较差,导致其在穿透过程中不可避免地形成钝化的蘑菇状头部,从而降低了穿透性能。在此,我们通过相图计算方法(CALPHAD)设计了一种新型含 W 多主元合金(MPEA)(W30.5Mo14Ta5.5Ni33.3Fe16.7, at. %)。研究发现,该合金基体由富 W 的 BCC 和富 Ni/Fe 的 FCC 固溶体组成,其中存在超细的 L12- γ' 和 D022- γ'' 纳米粒子(< 5 nm)在 FCC 基体中共格析出,除此之外 FCC 基体内部和边缘还存在 μ 相析出。这种独特的微观组织赋予合金更高的压缩屈服强度(σ_{YS} = 1245 ~ 1557 MPa)以及更大的断裂应变(ϵ_f = 20 ~ 40 %),在准静态和动态条件下均表现出优异的强塑性平衡。此外,本研究对相关的强化机制进行了详细讨论,其中多主元合金化引起的固溶强化和 γ' 、 γ'' 纳米粒子引起的共格析出强化是主要强化机制。在动态变形过程中,软的 FCC 和硬的 BCC 区域的界面处会出现较大的应变梯度,从而具备高绝热剪切敏感性以形成绝热剪切带。这些发现为开发具有优异强塑性协同和高绝热剪切敏感性的先进含 W 多主元合金穿透材料开辟了一条新途径。

D03-033

FeNiCr 系高熵合金的微观组织和力学性能、抗热腐蚀性能研究

陈景乾^{1,2}、付华萌¹、王爱民¹、朱正旺^{*1,3}

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国科学技术大学

3. 东北大学

本研究提出了一种基于多相协同强化的新型高熵合金设计策略，以 Fe₄₀Ni₃₀Cr₂₀Al₅Ti₅ (at.%) 合金体系为研究对象，成功通过 σ 相与 L21 相的互锁共沉淀结构实现了强度-塑性的协同提升。经 800°C×4h 时效处理后，该合金展现出优异的宽温域力学性能：室温条件下屈服强度达 920 MPa，极限抗拉强度 1300 MPa，同时保持 24% 的总延伸率；在 650°C 高温环境下仍维持 800 MPa 的屈服强度和 14% 的延伸率，表现出显著的高温性能优势。这种力学性能的突破源于独特的显微组织设计。通过精准的热机械处理工艺，在面心立方基体中实现了体积分数相近的 σ 相与 L21 相的互锁共沉淀结构。变形过程中，L21 相与 σ 相形成协同变形机制：前者通过位错钉扎效应强化基体，后者则通过应力场屏蔽作用有效缓解脆性 σ 相周围的应力集中。这种双相耦合作用促使合金在变形过程中持续保持高加工硬化能力，从而突破了传统含拓扑密堆相合金强度-塑性倒置的困境。值得注意的是，该合金在 650°C Na₂SO₄ 介质中的热腐蚀性能同样表现优异。腐蚀 200 h 后质量变化低于 0.2 mg/cm²，这归因于表面形成的致密 Cr₂O₃-Al₂O₃-TiO₂ 三元复合氧化膜，其多层结构有效阻隔了腐蚀介质的渗透。这种力学性能与耐蚀性能的协同优化，为开发新型耐高温结构材料提供了重要理论依据和工艺参考。

D03-034

结构和化学异质性结合实现轻质多主元合金创纪录的高比强度

汤庆辉*、张帆、程兴旺

北京理工大学

纳米异质结构是增强金属材料而不降低其应变硬化和延展性的有效策略。以前使用的异质性要么是结构上的（例如晶粒尺寸差异），要么是化学上的（成分波动），但从来没有同时部署在一个合金中。这里提出了一种将它们结合在一起的策略，这种策略可以通过多主元素合金（MPEA）的复杂固溶体来实现。在非等原子比 TiVZrAl 合金（密度~5.2 g/cm³）中证明了该方法的成功。首先，该 MPEA 中的局部化学有序（LCO）在室温轧制时促进了软化的“位错通道”，将位错集中在许多局部纳米变形带中，其中许多被细化成纳米晶粒。其次，随后的时效导致了调幅分解，这增加了纳米尺度上的成分波动。结构异质性和化学异质性共同促进了强化和应变硬化，导致达到 1.7 GPa 的显著屈服应力和前所未有的比屈服强度（326 MPa cm³ g⁻¹），同时保持了超过 10% 的可观失效延伸率，这一组合优于以往所有轻质合金。我们的新设计取代了常见的沉淀强化，为制造高性能合金提供了坚实的解决方案。

D03-035

基于第一性原理计算的 Ti-Zr-Hf-Nb 高熵合金设计策略

余博华、谢国强*

哈尔滨工业大学（深圳）

在生物医用植入材料中，传统材料由于毒性元素和高杨氏模量问题影响长期植入效果。高熵合金由于优异的性能成为极具潜力的生物材料候选，但是广阔的成分区间使其设计难度增加。本研究利用 Ti-Zr-Hf-Nb 体系中 Ti-Zr 和 Hf-Nb 原子对的倾向性，结合计算相图和第一性原理计算，提出了预测性设计策略。Ti₃₀Zr₃₀Hf₂₀Nb₂₀ (TZ6) 和 Ti₃₅Zr₃₅Hf₁₅Nb₁₅ (TZ7) 合金在强度、延展性和杨氏模量之间表现出最佳平衡。拉伸测试表明，TZ6 合金的屈服强度为 694.5 ± 5.6 MPa，延伸率为 20.7 ± 1.7%，杨氏模量为 79.8 ± 1.9 GPa；TZ7 合金的屈服强度为 676.3 ± 5.6 MPa，延伸率为 19.0 ± 1.7%，杨氏模量为 70.3 ± 1.5 GPa。

由于合金中 Ti-Zr 原子对比增加使电子结构失稳, 杨氏模量随之降低; 同时, 位错形核能的降低显著提升了延展性。值得注意的是, 与等摩尔比 TiZrHfNb (TZ5) 高熵合金相比, TZ6 和 TZ7 的杨氏模量分别降低了 11.1% 和 21.7%。此外, TZ6 和 TZ7 可以归类为 0 级无细胞毒性材料, 细胞相容性优于 Ti6Al4V 和 TZ5 合金。理论预测与实验结果高度吻合, 通过第一性原理计算有效提高合金设计效率, 加速生物高熵合金综合平衡性能的设计策略的发展。

D03-036

Al 含量对 TiZrHfNbAl_x 难熔高熵合金组织和性能的影响

赖隆桢、田海霞*

江西理工大学

国内外科学界和工程界一直都在寻找一种新型高温合金服役于愈发苛刻的高温环境, 由高熔点元素组成的难熔高熵合金(RHEAs)在室温和高温条件下均表现出优异的力学性能, 使其被视为高温服役环境下航空航天部件的理想候选材料。然而, 较高的密度和室温塑性等限制了其工程应用。本研究在 TiZrHfNb 难熔高熵合金为基体上添加 Al, 通过真空电弧熔炼的方法制备 TiZrHfNbAl_x (x=5, 10, 15, 20 at%) 难熔高熵合金, 研究了其显微组织、室温高温力学性能和室温摩擦磨损性能。实验研究结果表明, 合金均为 BCC 固溶体相, 由于 Al-20 合金中 Al 元素溶解度达到极限, 组织结构中出现了有序 BCC 相 (B2)。另外, 合金的硬度和室温压缩屈服强度随着 Al 含量的增加而增加, Al-20 合金的压缩塑性有一定程度的降低。在 1000°C 下, 合金的高温压缩屈服强度随着 Al 含量的增加先下降后上升。最后, 在室温下摩擦, 合金均发生了磨粒磨损和氧化磨损, Al-20 合金中有序 BCC 相可以提高耐磨性。本研究为含 Al 的 RHEAs 的研究建立了基础, 为新一代航空航天领域高温材料的研究提供了可能性。

D03-037

滑动剪切金属熔体扩散测量技术及应用

胡金亮、张博*、汪卫华

松山湖材料实验室

基于传统的长管技术, 自主开发了滑动剪切金属熔体扩散测量技术。进一步与 X 射线成像技术结合开发出适用范围更广的多层平动 X 射线成像技术, 并搭建出国内首台金属熔体原位、可视化扩散测量设备。基于这些技术, 系统研究了 Ce 基、Al 基和 Fe 基金属熔体的扩散行为, 发现金属熔体中自扩散与互扩散的关系复杂, 不能用简单的 Darken 关系描述, 需要引入 Manning 因子进行修正, 并对液态金属中 Manning 因子的起源进行了探讨。另外, 在摩尔体积随成分变化的在金属熔体中, 扩散会引起体积效应导致局域对流项的产生, 即所谓的摩尔体积效应。我们对这一效应进行了理论分析, 并在溶质线性偏摩尔体积近似下, 建立了摩尔体积效应对成分演化影响的定量模型。随后, 利用多层平动 X 射线成像技术, 首次在液态金属熔体的扩散过程中观测到显著的摩尔体积效应。原位观测结果精确符合我们模型的预测, 验证了模型的有效性。

D03-038

基于 DMA 动态力学分析技术探测非晶合金内耗模式及微观机制

乔吉超*

西北工业大学

非晶合金因其独特的微观原子结构, 具有优异的力学性能而在材料工程领域具有广泛应用潜力。固体内耗是研究原子迁移、微观结构演化的重要方法, 对理解非晶合金结构缺陷动力学弛豫过程及变形机制具有重要作用。本文从能量和应力应变滞回曲线出发, 引入并推导固体力学内耗表达式, 并详细介绍动态力学分析 DMA 技术动态测试原理。此外, 选取典型非晶合金系统, 利用 DMA 技术在温度域和频率域条件

下，通过测量储能模量和损耗模量的温度依赖性和频率依赖性，对其 α 和 β 两种内耗模式进行全面表征。结果表明，非晶合金内耗对温度和频率及其敏感，具有两种典型内耗模式，其中 α 内耗模式服从 VFT 方程，负责玻璃转变，与大规模原子重排相关。 β 弛豫模式则具有 Arrhenius 形式温度依赖性，与局部原子重排相关，其激活能量仅相当于 α 内耗模式激活能量的 1/3。

D03-039

Zr 基非晶合金深冷循环回春及变形行为研究

董福宇*

沈阳工业大学

Zr 基块体非晶合金具有高强度、高硬度、大弹性极限等优异力学性能，但是其室温脆性问题却严重阻碍了其在工程中的进一步应用。近年来，深冷循环处理作为一种简单有效的非晶合金室温塑性改善方法，受到材料科学领域学者们的广泛关注。本文首先对三种不同成分 Zr 基块体非晶合金进行深冷循环处理，之后利用 X 射线衍射 (XRD)、差示扫描量热法 (DSC)、纳米压痕仪、正电子湮灭寿命、多普勒展宽谱等分析方法，对深冷循环处理后 Zr 基块体非晶合金的结构、热物性和力学性能进行了系统研究。XRD 结果表明深冷循环后样品仍为非晶态结构，未发现晶体相的产生。DSC 结果表明随着深冷循环的进行，Zr 基块体非晶合金的弛豫焓出现峰值。在弛豫焓峰值之前随着循环次数的增加，非晶合金的硬度下降；在弛豫焓峰值之后随着循环次数的增加，非晶合金的硬度上升。对纳米压入过程中首次弹出 (first pop-in) 的剪切应力进行统计并结合协同剪切模型 (CSM) 分析，发现深冷循环后非晶合金的剪切转变区 (STZ) 体积随弛豫焓的升降而同步升降。通过对非晶合金正电子湮灭寿命 (PALS) 进行分析，得出深冷循环引起非晶合金的平均正电子湮灭寿命产生先上升后下降的变化。而多普勒展宽谱中 S-W 参数表明深冷循环后非晶合金缺陷类型没有发生变化，主要为空位型缺陷。最后，对三种不同成分 Zr 基非晶合金深冷循环后回春效果进行了分析及讨论。

D03-040

非晶合金弛豫子探测及其热历史依赖性

宋丽建、霍军涛、王军强*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

弛豫作为非晶合金重要的非平衡亚稳特征，在调控玻璃能量状态、晶化以及改善功能特性方面具有重要作用。由于非晶合金的弛豫动力学非常复杂，有关非晶合金弛豫动力学演化规律及其对性能的影响仍不十分清楚。为此，研究团队以抗氧化、低熔点和玻璃形成能力好的 Au 基非晶合金为模型，利用高精度闪速 Flash DSC 系统研究了 Au 基非晶合金等温弛豫演化规律及其热历史依赖性。发现玻璃态物质的热流弛豫谱满足指数型 Debye 方程，具有明确的特征弛豫时间和激活能，并据此提出“弛豫子”概念，明确了不同模式弛豫在焓空间的演化规律，揭示了 β 弛豫演化具有显著的热历史依赖性，而 α 弛豫对热历史不敏感，相关结果为精准调控不同弛豫模式提供了理论基础。

D03-041

基于应力松弛探测非晶的弛豫转变机制

童钰、王军强*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

软磁非晶合金因其高磁导率与低磁损耗，广泛应用于磁动力、电子信息及国防安全等关键领域，但在工程实践中常面临软磁性能与塑性难以兼顾的瓶颈。作为亚稳态材料，其结构在热力学或应力驱动下易发生复杂的弛豫演化，显著影响性能。针对这一问题，本研究系统开展了基于应力松弛探测非晶弛豫转变机制的工作，取得三方面进展：一是首次发现非晶合金的应力记忆效应，揭示其来源于小原子扩散驱动的可

逆滞弹性响应，为高温服役稳定性调控提供理论支撑；二是提出瞬时激活能提取方法，揭示弛豫模式在应力作用下由可逆 γ/β 过程向不可逆协同运动演化，并阐明其对软磁性能的调控规律和机制；三是打破传统“退火致结构均匀化”认知，发现非晶结构演化存在“先均匀化、后不均匀化”的双阶段过程，并厘清不均匀性转变对软磁性能的影响规律和机制。本研究从结构弛豫视角出发，建立了非晶材料微观结构演化与功能性能调控的内在关联，为高性能非晶合金的设计与服役提供新思路。

D03-042

非晶合金相变和形变过程的中程序结构演变

吴桢舵*

香港城市大学（东莞）

非晶态物质结构是科学研究前沿和难点问题之一，近年来越来越多研究表明非晶态物质存在短程-中程有序结构，但这些短程-中程有序结构对非晶态物质的物理过程、性能等的影响规律仍不清晰。因缺少长程周期结构，直接对非晶态结构进行表征存在很大挑战。我们利用先进原位中子散射和同步辐射技术，以非晶合金相变和形变过程为研究视角，揭示非晶合金中程尺度（5-20 Å）结构有序度的变化在相变和形变等过程发挥了关键作用。

D03-043

液态钽快凝过程中径向分布函数第一峰的反常扩展与微观机制

蒋元祺*

南昌师范学院

“热胀冷缩”是自然界的普遍规律，千百年来作为常识已被人们所普遍接受。但在金属熔体和玻璃体中的第一近邻原子之间的平均距离却随着温度的降低不减反增，其键长呈现反常的扩展行为，成因至今仍存在重大争议。本研究通过液态金属钽在非平衡凝固过程中的模拟发现，RDF 第一峰随温度降低呈现反常扩展行为，主要源于体系几何结构与电子结构的协同演变。在几何结构方面，低温下快凝体系会形成大量笼状二十四面体（0,0,12,2）和标准二十面体（0,0,12,0）。相较于高温状态，这些多面体具有更长的键长和更低的结合能，且通过嵌套组合形成键长变化极小的稳定 Ta₂₆-C_{2v} 原子构型，这种独特的几何排列从根本上导致了 RDF 第一峰的异常膨胀（即随着温度的降低第一近邻原子间距逐渐增大而不是减小）；在电子结构方面，温度通过影响 Ta 原子间相互作用，使得高温下电子局域化函数（ELF）和 Mulliken 键重叠布居数（ Q_{i-j} ）显著增大，电子相互作用增强导致近邻原子排列更紧密、键长更短，低温下则完全相反。非平衡凝固过程中几何结构与电子结构的这种协同作用，完美解释了 RDF 第一峰的反常膨胀现象。

D03-044

玻璃-玻璃转变诱导超稳定金属玻璃

卜亨通，邵洋，姚可夫

清华大学

As a medium to understand the nature of glass transition, ultrastable glasses have garnered increasing attention for their significance in fundamental science and technological applications. Most studies have produced ultrastable glasses through a surface-controlled process using physical vapor deposition. Here, we demonstrate an approach to accessing ultrastable glasses via the glass-to-glass transition, a bulk transformation that is inherently free from size constraints and anisotropy. The resulting ultrastable glass exhibits a significantly enhanced density (improved by 2.3%), along with high thermodynamic, kinetic, and mechanical stability. Furthermore, we propose that this method of accessing ultrastable glasses is general for metallic glasses, based on the examination of the competitive relationship between the glass-to-glass transition and crystallization. This strategy is expected to

facilitate the proliferation of the ultrastable glass family, helping to resolve the instability issues of glass materials and devices and deepen our understanding of glasses and the glass transition.

D03-045

基于蠕变探索 Cu₄₆Zr₄₆Al₈ 非晶合金的动态非均匀性

马熙阳¹、王云江^{2,3}、乔吉超^{*1}、Eloi Pineda⁴、Daniel Crespo⁴

1. 西北工业大学
2. 中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室
3. 中国科学院大学工程科学学院
4. 加泰罗尼亚理工大学能源技术研究所物理系

微观动态非均匀性是非晶合金固有特性，源自其到原子尺度的不均匀结构。本研究针对典型 ZrCuAl 非晶合金，在宽温度、应力及时间尺度范围内，采用恒温恒应力蠕变实验，从热力学角度定量探讨其动态非均匀性。在所研究的温度-应力-时间区域内，蠕变行为主要由扩散机制控制，且随时间延长，激活亥姆霍兹自由能显著增大。与晶体材料中蠕变机理唯一、活化参数恒定的特征不同，非晶合金的激活体积随温度升高而增大。基于激活-弛豫技术探索了非晶合金动态非均匀性，该非均匀性与体系势能面在空间上的分布密切相关。随温度、应力或等效的更长时间尺度的增加，激活能垒可实现从较小到较大依次跨越。针对蠕变过程，提出了一种考虑变形单元正向与反向激活通量的自由能垒概率分布模型。蠕变实验、原子尺度势能面分析及理论活化能谱一致验证了由非均匀动力学所调控的非寻常蠕变情景。基于蠕变测试方法，定量探讨非晶合金的动态非均匀性。

D03-046

Zr 基非晶合金在离子辐照布拉格效应下的结构演化及性能研究

何文辉、孙康、王刚*

上海大学，核电关键材料全国重点实验室

离子辐照作为研究材料辐照损失最广泛的技术手段，其特有的布拉格效应导致能量沉积沿入射路径呈非均匀分布，并在某一特定深度达到最大值。研究材料在离子辐照布拉格效应下的损伤行为，对实现材料结构的精准调控和制备改性具有现实意义。本研究选取 ZrCuNiAl(Nb) 非晶合金，结合模拟与实验方法，阐明辐照路径上能量沉积的非均匀分布对无序合金体系结构和力学性能变化的影响规律。对两种体系的非晶合金开展 40 MeV, 1.5×10^{13} ions/cm² 质子辐照实验。利用 SRIM 模拟对比可知，含 Nb 非晶合金体系在最大辐照损伤路径处表现出更小的位移损伤行为。通过 X 射线衍射仪分析发现辐照后两种样品表面均未晶化，相比于未辐照样品，无 Nb 体系原子堆积密度升高，含 Nb 体系原子堆积密度降低，两种体系样品的有序度均下降。能量耗散结果表明随能量沉积分布的增加，无 Nb 样品中“类液体”区域的数量减少，含 Nb 样品“类液体”区域的数量增加。小角中子散射结果表明辐照后无 Nb 样品的“类液体”区域的体积占比减少，含 Nb 样品的“类液体”区域的体积占比增加。纳米压痕结果表明，在辐照路径上随能量沉积分布的增加，无 Nb 样品硬度和模量均表现出不断增加趋势，含 Nb 样品硬度和模量基本无变化。通过同步辐射对辐照路径上结构信息采集，发现无 Nb 体系随能量沉积分布的增加，原子排列更紧凑且有序，含 Nb 体系变化趋势相反，随能量沉积分布的增加，原子排列基本无变化但更无序。由于 Nb 元素添加生成离位阈能较大的短程有序结构，致使含 Nb 体系表现出更好的抗辐照性能。本课题研究对理解带电粒子在不均匀结构物质内部的运动规律、能量沉积模式以及能量损失机制，对设计高效吸收和能量分散的微观结构具有重要现实价值。

D03-047

基于机器学习的低熔点钛基非晶合金钎料设计与制备

巩旭荷、邓锴阳、李然*

北京航空航天大学

传统的非晶合金成分开发多基于经验规律，实验成本随组元数目增加而剧增。近年来，机器学习已成为高效探索非晶合金成分的重要工具。本研究聚焦于开发适用于 TB8 钛合金钎焊的低液相线温度钛基非晶合金钎料。通过整合非晶合金实验与相关相图数据，本研究构建了合金液相线温度数据集，经模型对比选定 XGBoost 模型进行成分探索。研究遍历了 60 种 Ti-Cu-M 三元体系，优选 Ti-Cu-Ni 与 Ti-Cu-In 进行实验验证与迭代。基于非晶形成能力更佳的 Ti-Cu-Ni 体系，进一步在 Ti-Cu-Ni-X (X=In, Zr, Sc, Fe) 四元体系中筛选，并开发出液相线温度为 848°C 的 $\text{Ti}_{60}\text{Cu}_{11}\text{Ni}_{19}\text{Zr}_{10}$ 非晶钎料。该钎料应用于 TB8 钛合金钎焊，接头抗拉强度较传统 BT5 钎料提升 105MPa。本研究表明，机器学习为实现低熔点钛基非晶钎料的高效设计提供了有力工具。

D03-048

基于同步辐射和中子散射技术的铁基非晶合金晶化行为研究

吕志超*

松山湖材料实验室

在众多铁基非晶合金体系中，FeNi 基非晶合金表现出最为优异的室温力学性能。然而，其玻璃形成能力却远低于其它同体系合金。因此，深入研究 FeNi 基非晶合金的凝固和纳米晶化行为对于开发兼具有大塑性和玻璃形成能力的 FeNi 基大块金属玻璃至关重要。鉴于此，本研究结合同步辐射高能 X 射线原位衍射、中子小角散射和三维原子探针等先进技术研究了 Fe₄₈Ni₃₀Mo₃B₁₉ 高温熔体的凝固过程和非晶薄带的纳米晶化行为，成功描绘了其时间-温度-转变图。研究发现，在等温退火过程中，Fe₄₈Ni₃₀Mo₃B₁₉ 非晶基体中会析出纳米尺度的面心立方结构 γ -FeNi 初生相，其动力学上异常缓慢生长行为来源于 Fe 和 Ni 元素的再分配以及 γ -FeNi 相周围的 Mo 元素富集。本研究为理解 FeNi 基非晶合金玻璃形成能力及其与纳米晶化行为之间的关系提供了新的视角。

D03-049

无序材料弛豫过程中激活事件的时间分形特征研究

王峥*

山东大学

研究跨时间尺度的物理过程对于理解和预测复杂系统的长期行为至关重要。弛豫在时间上可跨越 16 个数量级，是多尺度物理过程的一个典型例子。然而，目前对跨多个时间尺度的弛豫过程的物理机制理解尚不清楚。本研究通过先进的闪速差示扫描量热仪来探测多种无序体系的弛豫动力学。我们发现，弛豫行为在多个时间尺度上表现出自相似的特征，这是时间上分形激活事件的累积所致。根据实验和模拟结果，我们提出了激活事件时间分形的微观机制。时间分形是连接无序材料中微观激活事件与宏观弛豫过程的关键纽带，同时可能为预测无序体系长时间性能演变提供了有效方法。

D03-050

回春后 Zr₅₈Cu₂₂Fe₈Al₁₂ 非晶合金的纳米压痕研究

张浩、晋玺、杨慧君、乔珺威*

太原理工大学

通过低温冷热循环处理，Zr₅₈Cu₂₂Fe₈Al₁₂ 非晶合金样品获得三种不同的活化体积 (V^*)，并在力控制的加载模式下对其进行纳米压痕实验。根据降噪处理和统计分析求得三种不同样品活化体积的具体数值，其中最大剪切应力值 ($\tau_{\max}$) 与概率密度的复合对数变换函数 ($\ln[-\ln(1-f)^{-1}]$) 曲线的非线性斜率使用一阶多项式来解释。结合平均场理论，建立了块体非晶合金临界最大剪切应力值的统一定律， $(\tau_{\max})_C = (V^*)^{-\lambda}$ ，

其中常数 λ 的值为 0.30 ± 0.10 。结合非晶合金的 $\tau_{\max}$ 和 V^* 的大量研究数据，总结出了统一定律的三个适用条件。最后，结合势能图谱，从原子、纳米、微米尺度依次讨论了该非晶合金回春的结构起源。在原子尺度上，发现回春的机制是 2 原子团簇连接转变为 3 原子团簇连接，并且这种转变有利于延展性。在纳米尺度上，通过纳米压痕统计分析可知，回春影响 Zr58Cu22Fe8Al12 非晶合金的剪切成核行为，生成较高的自由体积和较大的 STZ 体积，更容易增加剪切带密度以提高延展性。在微观尺度上，回春显著降低了非晶合金的纳米硬度和弹性模量。回春后 Zr58Cu22Fe8Al12 非晶合金的变化可归因于这三个尺度的物理量的变化。

D03-051

Revealing atomic strengthening mechanism in CoNiV medium-entropy alloy via machine learning-guided simulations

刘雄军*、李雯玥、吕昭平
北京科技大学

High/medium entropy alloys (H/MEAs) have shown unique strengthening behavior and mechanical properties because of the presence of massive local chemical orderings. Nevertheless, dynamic interactions between chemical short-range orders (CSROs) and dislocations, and the underlying atomic strengthening mechanism remain elusive. In this work, we first developed a novel machine learning-embedded atom method (ML-EAM) potential of the CoNiV system, trained on a comprehensive first-principles dataset, which enables accurate and efficient modeling of CSRO formation and dislocation dynamics. Then, we investigated the strengthening mechanisms of CSROs in CoNiV MEA through machine learning-augmented molecular dynamics (MD) simulations. Hybrid MD/Monte Carlo simulations reveal that CSRO domains possess an L12 (NiCo)3V structure, whose size increases with lowering annealing temperatures. These domains significantly enhance strength by impeding dislocation motion through complex energy pathways, increasing depinning forces, and reducing mobility. Moreover, the MD simulations combined with theoretical analysis elucidates the competition between CSRO-assisted strengthening (via antiphase boundary formation) and solid solution weakening (via reduced atomic misfit volume). Phonon-drag effects are also amplified by CSROs, further resisting dislocation glide. Our results demonstrate that L12-CSROs strengthen CoNiV MEA primarily through antiphase boundary and phonon-drag contributions, providing new insights for designing high-performance multi-principal-element alloys via tailoring CSROs.

D03-052

Decoupling tensile ductility and fracture toughness in additively manufactured AlCoCrFeNi2.1 eutectic high entropy alloy

Jie Pan*, Junhao Gao, Lv Zhao, Dongdong Li, Lin Liu
Huazhong University of Science and Technology

Eutectic high-entropy alloys (EHEAs) have attracted significant attention due to their excellent strength-ductility synergy under quasi-static tensile loading. This favorable mechanical performance has intuitively led to the assumption that EHEAs also possess high fracture toughness, given their capacity for substantial plastic energy absorption during deformation. In this study, we decouple tensile ductility and fracture toughness in a dual-phase AlCoCrFeNi2.1 EHEA produced via laser powder bed fusion. Experimental results demonstrate that this EHEA exhibits excellent tensile behavior with a yield strength of 1320 MPa, a tensile strength of 1590 MPa and a uniform elongation of 10.5%. Paradoxically, this EHEA exhibits a relatively low fracture toughness of 39 MPa $\text{m}^{1/2}$. Fractographic analysis reveals a largely brittle fracture process, wherein the fatigue pre-crack propagates nearly straight with limited evidence of dislocation-mediated plasticity at the crack tip. Crack propagation is facilitated by microcracks that form at the phase boundaries and coalesce with the main

crack along the lamellar direction. This embrittled behavior contrasts sharply with the coordinated deformation observed in both face-centered cubic (FCC) and body-centered cubic (BCC) phases during uniaxial tensile loading. Crystal plasticity simulations under varying stress states reveal that the local stresses within the FCC and BCC phases increase substantially under high stress triaxiality (i.e. with a pre-crack), reaching values approximately four times higher than those under low stress triaxiality condition (i.e. uniaxial tension). Such elevated local triaxial stress impedes dislocation slip across phase boundaries, promoting rapid crack propagation with minimal plastic deformation.

D03-053

高应变率下析出相对(WTaNb)50Hf50 体心立方高熵合金扭折变形与损伤的影响

徐吉琛*、张帆、程兴旺

北京理工大学

开展高应变率下高熵合金(High Entropy Alloys, HEAs)的变形和损伤行为研究对于其在极端载荷条件下的应用探索至关重要。本文主要报道了在高应变率下析出相对体心立方(Body-centered cubic, BCC)高熵合金的扭折变形和损伤的影响。我们的研究表明,经过 1000K 4h 时效热处理的(WTa Nb)50Hf50 合金具有显著的析出强化效果,其动态抗压强度达到了 2400 MPa。与铸态合金相比,时效态合金析出相的存在增加了动态压缩过程中扭折带与基体之间的晶体学取向差,但并没有改变扭折带的产生均来源于{112}<111>滑移系。此外,在动态压缩过程中,由于时效态的(WTa Nb)50Hf50 合金萌生了更多裂纹,其失效模式从铸态合金的绝热剪切与沿晶断裂的混合失效模式转变为沿晶断裂这一单一失效模式,最终导致时效态(WTa Nb)50Hf50 合金的动态断裂应变相比铸态合金降低了约 8%。

D03-054

不同 N 含量的(TiVCrZr)N_x 多元氮化物陶瓷制备与性能

陈旭园、战再吉*、王晓宇、曹海要

燕山大学

由于具有传统材料无法实现的独特性能,高熵陶瓷日益受到关注。尽管已经涌现出大量高熵陶瓷,但多组分固溶体的相组成理论预测仍显不足,这可能是由成分复杂性所致。在本研究中,利用 Thermo-Calc 软件和 TCHEA4 数据库,生成了由 Ti、V、Cr、Zr 和 N 五种元素形成的四元固溶体氮化物的一系列平衡相数据;同时,通过放电等离子烧结(SPS)技术,在 1600 °C 下利用市售过渡金属及其氮化物制备了五种具有不同氮化学计量比的四元固溶体氮化物。实验中的相组成检测与热力学计算证实,氮含量的增加有利于单相固溶体的形成。由于氮化学计量比的变化,氮-金属键的浓度相应改变,导致不同的相对密度和力学性能。基于实验数据,建立了最大绝对误差仅为 8.31%的 CALPHAD(计算相图)模型,为预测成分复杂陶瓷在复杂成分-温度空间中的物相提供了有力工具。

D03-055

In-situ study of dislocation coordinated plastic deformation mechanism in as-cast NiCoMn medium entropy alloy

Qing Gao*

Lanzhou university of technology

High-density dislocations and the simultaneous activation of multiple slip systems play a significant role in the deformation process of medium-entropy alloys (MEA). The in-situ scanning electron microscope/electron backscatter diffraction (SEM/EBSD) dynamic study of dislocation slip behavior and its interaction with grain boundaries is helpful in understanding the microdeformation mechanism of the alloy. In this work, the as-cast

Ni₃₃Co₄₀Mn₂₇ MEA alloy exhibits a tensile strength of 420 MPa and a fracture elongation of 45%. The fracture mode is ductile, and its mechanical properties are better than traditional as-cast alloys. However, the geometric incompatibility of the as-cast alloy's local grain size heterostructure region leads to significant stress concentration which becomes the primary site for crack nucleation. The primary reason for the alloy's excellent mechanical properties is the simultaneous activation of multiple slip systems and the formation of high-density dislocations. This process promotes the formation of sub-grain boundaries, slows down stress concentration, delays the formation of microcracks, and significantly enhances the alloy's plastic deformation capability. The coordinated deformation mechanism in the alloy primarily includes grain orientation rotation and slip transfer. Through in-situ research, the deformation mechanism is deeply understood, providing a key experimental basis and theoretical guidance for the subsequent optimization of microstructure and improvement of the mechanical properties of MEAs and aiding in the design of higher-performance materials to meet the demands of extremely complex working conditions.

D03-056

退火处理对激光粉末床熔融共晶高熵合金组织和性能的影响

郭一诺^{1,2}、苏海军^{*1}、高宏亮¹、杨培鑫¹、李喜²

1. 西北工业大学凝固技术全国重点实验室
2. 上海交通大学凝固科学与技术研究所

激光粉末床熔融制备的 AlCoCrFeNi_{2.1} 共晶高熵合金呈现具有高度亚稳态的多尺度、多相结构，其高强度归因于显著细化的层片组织和晶粒结构，且 FCC 相和 B2 相中的纳米结构析出相提供了额外的强化效果。然而，在激光成形有限的冷却时间内，AlCoCrFeNi_{2.1} 中沉淀相的析出行为受到抑制。基于此，本文开展激光粉末床熔融 AlCoCrFeNi_{2.1} 共晶高熵合金的退火处理研究，考察多尺度组织特征在不同退火温度下的演变行为，探明退火诱导硬化与软化响应以及对应的组织结构因素。研究结果显示，B2 相中 BCC 颗粒的形成并非遵循典型的形核长大机制，而是源于激光沉积冷却阶段的调幅分解以及后续退火过程中的结构无序化转变。FCC 相中的 L1₂ 颗粒尺寸更为细小，在 650°C 发生显著粗化。退火处理后，BCC 颗粒的沉淀强化作用对强度的贡献更为显著。600°C 退火 24h 后，BCC 和 L1₂ 协同沉淀强化效果增强，合金屈服强度提升至 1.6 GPa；650°C 退火 24h 后，L1₂ 颗粒显著粗化而 BCC 颗粒逐渐溶解，削弱的 BCC 沉淀强化作用抵消了 L1₂ 粗化产生的强度增量，诱导退火异常硬化行为。本研究建立了退火工艺、组织特征与力学性能之间的关联关系，为后续热处理制度的制定提供了技术和理论指导。

D03-057

摒弃随机占位假设，基于择优占位行为研究高熵合金四大效应的系列合理方法 and 应用

吴波*

福州大学

高熵合金新概念吸引了众多理论和实验科学家来挖掘高熵合金宝藏，但高熵合金的理论和模型研究还很不完善，存在很多争议。广为人知的高熵合金（高熵材料）的四大效应（热力学上的高熵效应，动力学上的迟滞扩散效应，结构上的晶格畸变效应，性能上的鸡尾酒效应），也不时受到质疑，表明高熵合金（高熵材料）的结构与性能的关系研究还很不充分，尤其是缺乏基于理性设计的定量化和图像化表征。以往对高熵合金（高熵材料）的计算模拟均以原子随机混合为准绳，实际上，这并不理性和公允，因为它忽略了组成原子的种类和亚点阵结构上的差异，以及热处理温度和时间等因素，对不同种类的原子的在不同种类的亚晶格上择优占位行为的影响。不合理的模型假设，导致材料结构与性能预测出现显著偏差，误导高熵合金研究开发。本报告将对高熵合金计算模拟文献进行述评，表明择优占位行为研究非常具有必要性，我们报道了我们课题组在高熵合金研究通用方法和应用新进展，对若干典型中熵合金和高熵合金四大效应定量化和图像化预测表征，包含随成分、相结构、热处理温度变化而变化的原子择优占位行为、晶格畸变、

间隙原子扩散、表面氧化和催化行为。我们迫切需要采用包含精细中子散射技术在内的先进实验技术的支持，进行可靠性验证。

D03-058

Ultrastrong and ductile precipitation-hardened alloy via high anti-phase boundary energy

Zhifeng Lei*

Hunan University

Coherent precipitation-hardened alloys often struggle to achieve both ultrahigh strength and exceptional ductility due to their limited resistance to dislocation motion and vulnerability to glide plane softening. Here, we tackle these challenges by introducing multicomponent precipitates with much increased anti-phase boundary (APB) energy. In a model Ni₃Al-type (L1₂) precipitation-hardened face-centred cubic (FCC) NiCo-based alloy, we incorporate multiple elements at the Al sublattice sites within the precipitates, reducing anti-site defects and enhancing ordering degree. This process yields multicomponent precipitates with an ultrahigh APB energy ($\sim 308 \pm 14$ mJ/m²), which notably strengthens the alloy. Moreover, the exceptionally high APB energy transforms the deformation mechanism from dislocation shearing to stacking fault shearing, thereby avoiding glide plane softening. These result in a tensile yield strength of 1616 ± 9 MPa, an ultimate tensile strength of 2155 ± 22 MPa, and a uniform elongation of $10.1\% \pm 0.3\%$ for the alloy. This work opens avenues for enhancing precipitation hardening and provides valuable insights into developing ultrastrong, ductile alloys.

D03-059

高温共晶高熵合金的硼微合金化研究

贾宇浩*

大连理工大学材料科学与工程学院

共晶高熵合金因其优异的力学性能而备受关注，然而其在高温下的软化问题仍是一大挑战。通常，共晶高熵合金中的晶界及相界是高温下最易失效的薄弱环节。本研究发现，在 Ni₃₀Co₃₀Cr₁₀Fe₁₀Al₁₈W₂ 共晶高熵合金中微量添加硼元素，可通过纳米析出强化机制显著提升高温下 FCC 晶界及 FCC/B2 相界的强度。在 800 °C 拉伸实验中，添加硼后合金展现出超过 581 MPa 的屈服强度与 71% 的延伸率，分别较无硼对照样提高了约 45% 与 129%，实现了强延性的协同提升。在高温变形过程中，硼元素强化的界面与纳米析出强化的 B2 相共同作用，使得 FCC 与 B2 两相内可持续发生动态回复与再结晶，从而有效维持高温塑性。此外，通过基准力学分析发现，硼及其形成的纳米硼化物在 800 °C 高温下对界面强度的贡献可达 166 MPa，进一步验证了微合金化策略对提升共晶高熵合金高温性能的有效性。上述研究成果为高温服役共晶高熵合金的设计提供了新的思路。

D03-060

共格纳米析出强化 CoCrNi 基多主元合金的强韧化和摩擦磨损行为研究

杨璐、任富增*

南方科技大学

针对 CoCrNi 基多主元合金强韧性失衡及极端工况耐磨性不足的难题，本研究基于热力学相图计算，设计并制备了含高密度 L₁₂ 纳米析出相的 CoCrNi₂(Al_{0.2}Nb_{0.2}) 合金。该合金通过调控基体层错能并结合 L₁₂ 析出强化，激活了微带和形变孪晶的协同机制，实现了高强度和塑性的协同，屈服强度高达 1150 MPa，均匀延伸率达 33%。此外，该合金在室温和高温（600 °C）干滑动摩擦条件下均表现出优异的耐磨性。室温下优异的耐磨性主要是由于高密度共格 L₁₂ 相的析出强化和层错网络的动态加工硬化。然而，在 600 °C 时，磨损率和摩擦系数的降低与釉质层的形成和对热软化的高抗性有关。通过表面机械研磨处理，结合梯度晶

粒结构设计, 实现了合金强度和塑性的进一步协同提升, 使拉伸强度达 1.73 GPa, 均匀延伸率~23%。

D03-061

Fe 含量对 NiCoCrTiAl 多主元合金高温组织稳定性和力学的影响

李焱鑫、陈淑英*

烟台大学

近些年, 关于 NiCoCrFe 系高熵合金的研究表明其不仅在室温下有较优异的性能, 同时通过合理的塑性加工、成分调整以及元素合金化, 都可显著提高合金的高温结构稳定性以及力学性能, 有望成为新型航空发动机的候选耐热材料。本研究前期通过高通量的制备与表征手段, 并结合机器学习建立了成分-力学性能预测模型, 最终筛选出一种具有优异力学性能的新型的 NiCoCrTiAl 合金。为调控组织与降低成本, 本研究进一步通过添加不同含量的 Fe 元素研究其对 NiCoCrTiAl 多主元合金的高温组织稳定性和力学的影响。通过微观表征表明, Fe 含量增加显著抑制晶界不连续析出 (Discontinuous Precipitation, DP) 区形成, 同时诱导晶粒内部类平行四边形 B2 相析出。而晶粒内部连续析出 (Continuous Precipitation, CP) 的 L12 纳米相随 Fe 含量的增加略有长大, 体积分数略有降低。在高温长时间时效条件下, L12 相尺寸增长速率遵循修正的 LSW 粗化理论, 且 Fe 含量变化对 k 值影响较小。通过 Arrhenius 方程计算得出了 L12 相粗化激活能, 其值随 Fe 含量增加未呈现显著变化, 证实 Fe 元素的引入未影响合金热稳定性。本研究建立了 CP 与 DP 的竞争动力学模型, 揭示了 Fe 元素通过降低溶质化学势梯度抑制 DP 过程的微观机制, 并提供了一种高性价比多主元合金的设计思路。

D03-062

NbTiVZr 难熔高熵合金的晶格畸变与力学性能研究

丁凝、谢国强*

哈尔滨工业大学 (深圳)

难熔高熵合金 (RHEAs) 在航空航天及核能等高技术领域中的应用前景日益广泛, 独特的结构与力学性能之间的作用机制成为材料科学中的重要研究课题。本研究借助第一性原理计算, 结合实验探索了 NbTi、NbTiZr 和 NbTiVZr 三种合金的结构稳定性、力学性能及晶格畸变效应, 以揭示晶格畸变对合金性能的影响。结果表明, 这三种合金均具备稳定的单相体心立方 (BCC) 结构, 展现出良好的结构稳定性。随着 Zr 和 V 元素的加入, 合金的强塑性与畸变程度得到显著提升。其中, NbTiVZr 合金的晶格畸变最为严重, 实现了密度、强度与塑性的优良平衡, 其屈服强度达到 1132 MPa, 同时仍能保持低密度 (6.47 g/cm³) 和优异的延展性 (11%)。电子结构从原子尺度揭示了严重的晶格畸变不仅通过轨道杂化提高了键合强度, 同时通过电荷重新分布引入了畸变应力场, 为 NbTiVZr 合金提供了卓越的结构稳定性与优异的强塑性。

D03-063

Fe₄₀Mn₂₀Cr₂₀Ni₂₀ 高熵合金

乔珺威

太原理工大学, 太原, 030024

高熵合金 (高熵不锈钢), 拥有高的混合构型熵, 使其晶格点阵构型组态千变万化。相比于传统的金属和合金, 例如低合金含量的奥氏体不锈钢, 高熵不锈钢具有更广的物态参量和性能调控范围, 可以突破现有材料的性能极限。本研究将该成分高熵合金的相形成、短程有序、力学性能等多个方面进行综述。课题组前期开发了吨级单相 Fe₄₀Mn₂₀Cr₂₀Ni₂₀ 高熵合金热轧成型技术。样品表现为无磁性, 在海水中腐蚀性能优于高锰钢和 304 不锈钢; 在室温下, 在 10⁻⁴ s⁻¹ 准静态拉伸下, 材料的屈服强度和抗拉强度分别为 398 MPa 和 679 MPa, 塑性有 32.6%; 在 3000 /s 的高应变率下, 材料的屈服强度和抗拉强度分别为 743 MPa 和 1412 MPa, 同时保持 37.5% 的断裂伸长率。同时, 室温和低温下的冲击功高达 214 J 和 170 J, 室温

断裂韧性达到 182 MPa m^{1/2}。在 77 K 的温度下, 当应变率从 10⁻⁴ /s 提高到 3500 /s 时, 合金的屈服强度从 502 MPa 增加到 1148 MPa, 极限拉伸强度从 982 MPa 增加到 1893 MPa。

D03-064

新型耐热高熵合金的成分设计与高温性能研究

陈淑英*¹、李卫东²、高雁飞³、赵雷⁴、王海舟⁴

1. 烟台大学
2. 北京科技大学
3. 美国田纳西大学
4. 北京钢铁研究总院

高熵合金 (HEAs) 凭借其多主元效应展现出卓越的高温结构稳定性与强塑性协同特性, 其近乎无限的成分空间为组织与性能调控提供了广阔前景。然而, 传统试错法受限于实验周期长、成本高及成分筛选效率低等瓶颈, 难以实现高性能合金的定向设计。本研究聚焦 CoCrFeNi 基高熵合金体系, 创新性地集成热等静压 (HIP) 与增材制造技术, 发展高通量制备与表征平台, 结合机器学习驱动的逆向设计策略, 系统解析成分-组织-性能关联规律, 并开发出具有突破性性能的高温合金材料。通过模块化蜂巢包套设计与多通道粉末填充工艺, 成功实现单批次制备 105 种 Co-Cr-Fe-Ni 四元块体合金, 结合微焦斑 XRD 与自动扫描微米压痕技术, 首次构建该体系的成分-晶格常数-硬度全息数据库, 揭示 Cr/Co 原子比对硬度的非线性调控规律。基于弹性网络交叉验证模型, 从 12 个关键特征参数 (包括价电子浓度、原子尺寸差及混合熵) 中筛选出 3-5 种高性能候选成分, 经验证其室温抗拉强度达 1100-1280 MPa, 延伸率超过 35%, 较随机搜索策略效率提升 50% 以上。基于上述筛选出的成分, 针对高温应用需求, 成功开发新型 Ni-Co-Cr-Al-Ti 析出强化合金。该合金经时效处理后在 600 °C 下实现屈服强度 1060 MPa、抗拉强度 1280 MPa 与延伸率 25% 的协同优化, 综合性能显著优于传统合金。多尺度表征阐明其强化机制源于多尺度耦合效应: Lomer-Cottrell 位错锁通过层错/孪晶交互作用形成三维强化网络, 动态析出的纳米级 L12 相 (~15 nm) 与异质变形诱导应力场协同抑制位错运动, 突破传统高熵合金强度-塑性倒置关系。

D03-065

亚稳态高熵合金的超声诱导孪晶强化机理研究

李足*

广州大学

FeMnCoCr 亚稳态高熵合金具有相变诱导塑性 (TRIP) 和孪晶诱导塑性 (TWIP) 效应, 因此拥有优异的综合力学性能。Fe₅₀Mn₃₀Co₁₀Cr₁₀ 亚稳高熵合金在室温和低应变水平下, 其主要强化机制是马氏体相变诱导强化, 即 TRIP 效应, 而孪晶诱导强化较难发生, 而单一强化机制往往难以实现强塑性协同。因此, 在本研究中, 通过超声辅助加载, 在 Fe₅₀Mn₃₀Co₁₀Cr₁₀ 亚稳高熵合金中诱导了大量的孪晶出现, 这些孪晶界对位错运动具有强烈阻碍作用; 同时, TRIP 和 TWIP 效应的协同作用, 提升了合金的加工硬化能力。相比于原始态, 超声处理 30min 后, 合金的屈服强度和抗拉强度分别提升至 615 MPa 和 960 MPa, 增幅分别为 40% 和 20%, 同时其延伸率保持不变 (44.5%)。上述研究为 Fe₅₀Mn₃₀Co₁₀Cr₁₀ 亚稳高熵合金的强塑性协同提供了一种新型高效的处理方法。

D03-066

W 含量对 HfNbTaTi 高熵合金组织结构及力学性能的影响

郭兴豪、李昱嵘、宋晓艳*

北京工业大学材料低碳循环再生全国重点实验室, 新型功能材料教育部重点实验室, 材料科学与工程学院,
北京 100124

难熔高熵合金以其优异的耐高温、高强度、高硬度等特性，在高温应用领域展现出强大潜力。在难熔高熵合金广阔的成分空间中，如何实现核心成分的高效筛选及设计，并揭示高性能相关机制，是当前研究面临的关键挑战之一。以获得高屈服强度难熔高熵合金为例，传统研究方式需对不同成分合金进行逐一制备与力学性能测试，进而逐步筛选确定最优成分，这一过程通常需要耗费大量的时间和资源。而高通量制备及表征技术的突破，显著加速了材料的筛选和优化。本研究提出了分层铺粉、固相烧结的制备新方法，成功制备出 W 含量呈梯度分布的 HfNbTaTiW_x 合金块体。利用纳米压痕仪对制备的梯度高熵合金不同成分区域进行高通量微纳力学性能测试，高效筛选出兼具高硬度、高强度、高塑性的最优成分为 $\text{HfNbTaTiW}_{0.8}$ 。结合第一性原理计算表明，该成分中 Nb 与 Ta 原子间电子杂化作用最强，易形成 Nb-Ta 团簇等微结构，从而协同提升合金强度与塑性。进一步，单独制备出 $\text{HfNbTaTiW}_{0.8}$ 块体样品，在其制备态微观结构中观察到多尺度分布的 Nb-Ta 富集现象。该合金的室温压缩屈服强度可达约 2 GPa，塑性应变约 15%，与文献报道的难熔高熵合金相比，展现出更优的强塑性匹配。本研究不仅为高性能难熔高熵合金的高通量制备和性能筛选提供了新途径，同时为协同强韧化机理研究提供科学理论依据。

D03-067

氧纳米团簇规避反霍尔-佩奇软化

俞潇龙、卞西磊*

上海大学

晶粒细化可以显著提高金属的强度。然而，当晶粒尺寸减小到极小的尺度（通常低于 10 纳米）时，这种方法的效果往往会减弱甚至逆转。这种软化效应源于晶界的不稳定性以及位错在超细纳米级晶粒内形成和移动的能力受限。不过，晶界稳定性可以通过晶界偏析或晶界弛豫来调控。在此背景下，我们提出了一种新颖的策略，以同时实现纳米晶金属的超高强度和塑性。在本研究中，我们以 $(\text{CoCrNi})_{87}\text{O}_{13}$ （原子百分比）合金为模型，发现晶界处形成的富氧团簇可以显著提高晶界稳定性，即使在 3 纳米的晶粒尺寸下也是如此。此外，晶粒内部富氧团簇的存在促进了位错的积累和增殖，从而在变形过程中促进了加工硬化。因此，尽管晶粒尺寸处于反霍尔-佩奇区间，该合金仍表现出约 3.6 GPa 的大屈服强度，并在微柱压缩中保持了超过 50% 的均匀变形应变。这些发现为纳米晶金属的设计提供了一种新策略，即利用氧团簇实现高强度与大变形能力的理想结合。

D03-068

L21 相强化 Al-Fe-Ni-Ti-V 轻质高熵合金的组织及性能研究

陈红梅、谢国强*

哈尔滨工业大学（深圳）

L21 相强化的高熵合金以其优异的强度和高温热稳定性而著称，在航空航天、能源和结构应用领域具有良好的应用前景。本研究深入研究了 $\text{AlFe}_x\text{NiTiV}_{40-x}$ ($x=0, 10, 20, 30, 35, 40$ at.%) 高熵合金，旨在发掘 BCC 和 L21 相的协同潜力。通过相调控实现了室温和高温下强度的协同优化， $\text{Al}_{15}\text{Fe}_{35}\text{Ni}_{30}\text{Ti}_{15}\text{V}_5$ 合金达到了压缩屈服强度 2140.9 MPa 和压缩塑性 6.7%。较低的晶格失配和纳米沉淀强化使合金在 600°C 时表现出优异的比屈服强度 ($245.2 \text{ MPa}(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})^{-1}$)。通过 Cu 微合金化对相界面调控进一步实现合金强塑性协同提升，其中 $(\text{Al}_{15}\text{Fe}_{35}\text{Ni}_{30}\text{Ti}_{15}\text{V}_5)_{99}\text{Cu}_1$ 合金实现了强度和延展性的最佳平衡，屈服强度达到 2375.2 MPa，极限抗压强度达到 3371.6 MPa。此外，高密度分布的 L21 纳米沉淀相缓解了应力集中现象，压缩应变为提升至 11.8%，为设计先进的轻质高强度合金在高温下的应用开辟了新途径。

D03-069

Unveiling composition-dependent deformation mechanisms for designing strong and tough Ni-Co-Cr multi-principal element alloys

Yang Tong*, Ruixin Sheng, Caixia Wang

NiCoCr equimolar multi-principal element alloys (MPEAs) currently exhibit the highest cryogenic fracture toughness among known alloys, an outstanding property often attributed to their complex and diverse deformation mechanisms. However, whether the equimolar composition represents the optimal composition for mechanical properties within the Ni-Co-Cr alloy system remains to be explored. Furthermore, a systematic understanding of the coupling relationships among the different deformation mechanisms underlying these excellent mechanical properties is still lacking. By combining tensile testing with characterization techniques including Synchrotron Radiation XRD, EBSD, and TEM, we systematically analyzed the precise mapping relationships between composition and various plastic deformation mechanisms (dislocation slip, stacking faults, twinning, and phase transformation) in the Ni-Co-Cr MPEA system. We identified regions of multi-mechanism synergistic deformation that deliver exceptional plasticity and demonstrated how this discovery can be leveraged to design high-strength, high-ductility Ni-Co-Cr alloys and their extended systems. This research offers important guidance for the design of ultra-strong and tough alloys.

D03-070

基于团簇加连接原子模型的 Fe-Cr-Ni 中熵合金成分设计及第一性原理计算

张爽*、李平平、张佰豪、邹存磊、赵亚军、刘超前、董闯
大连交通大学

Fe-Cr-Ni 是各种奥氏体不锈钢、部分 Ni 基高温合金和 Fe 基高温合金的基础体系，特别是对于高合金化元素含量的超级奥氏体不锈钢而言，对应的 Fe-Cr-Ni 三元合金已经属于中熵合金范畴。本报告引入“团簇加连接原子”模型，根据团簇式结构单元（包含中心原子、壳层原子及连接原子）给出基于近程序结构的高熵合金定义，即第一近邻壳层原子由多种主组元构成。基于该团簇式特征，设计了 5 组奥氏体组织稳定的 Fe-Cr-Ni 中熵合金，并实施第一性原理计算。结果表明，满足高熵合金团簇式局域结构特征的合金表现出更低的能量，进而给出了中心原子、壳层原子、连接原子的确定方法，验证了团簇加连接原子结构单元的合理性，为高熵合金的材料设计提供了基于团簇式的第一性原理计算新方法。

D03-071

化学复杂型金属间化合物成分设计及增材制造

周英豪¹、严明³、韩晓东³、刘锦川¹、赵怡潞²、杨涛*¹

1. 香港城市大学
2. 哈尔滨工业大学（深圳）
3. 南方科技大学

有序金属间化合物以其卓越的机械性能、化学稳定性和独特的物理特性备受关注，在航空航天、能源装备等领域表现出广阔的应用前景。然而，其固有的室温脆性和极差的加工性能长期制约着实际工程应用。针对这一挑战，本研究基于 L1₂ 型有序超晶格结构的特点，通过热力学相图计算并开发了新型(Ni, Co)₃(Si, Al, Ti)-B 系化学复杂型金属间化合物，并基于激光 3D 打印技术对其进行增材制造成形。该化学复杂型金属间化合物表现出了优异的可打印性，实现了其无裂纹、高致密度增材制造。更为突出的是，该材料实现了~1.6 GPa 的超高抗拉强度与~35%的均匀延伸率的协同提升，这一性能组合在现有增材制造合金体系中尚未见报道。微观机理研究表明，其卓越性能源于高度有序晶粒与晶界附近纳米无序层的协同调控，以及多尺度位错亚结构的动态演化与相互作用。本研究为突破金属间化合物的应用瓶颈提供了新的材料设计与制造范式。

D03-072

激光辅助增材制造原位调控多主元合金 FCC-BCC 双相结构及力学性能陈立佳¹、邹思昊²、逯文君²、毕贵军*¹

1. 广东省科学院智能制造研究所
2. 南方科技大学

本研究采用激光辅助增材制造 (Laser-aided additive manufacturing, LAAM) 技术, 通过协同送粉策略制备了一系列相结构与力学性能可调的多主元合金。以面心立方(FCC)型 CoCrNi 合金和体心立方(BCC)型 CoCrNiAl0.6TiFe 合金粉末为原料, 通过协同调节两种粉末的送粉速率, 实现了对合金相组成的精准调控。随着 BCC 型粉末比例的增加, 合金相结构从单一 FCC 相 (CoCrNi、CoCrNi(Al0.6TiFe)0.1、CoCrNi(Al0.6TiFe)0.2、CoCrNi(Al0.6TiFe)0.3) 逐渐转变为 FCC-B2 双相结构 (CoCrNi(Al0.6TiFe)0.4、CoCrNi(Al0.6TiFe)0.5)。由于 Ti 和 Al 原子半径较大且具有负偏析焓特性, B2 相富集于 FCC 基体周围, 其中 CoCrNi(Al0.6TiFe)0.4 和 CoCrNi(Al0.6TiFe)0.5 合金中 B2 相体积分数分别为 0.5%和 5.7%。相结构演变显著提升了合金力学性能: 屈服强度与极限抗拉强度分别从单相 FCC 合金 (CoCrNi) 的 486.0 MPa 和 781.2 MPa 提升至双相合金 (CoCrNi(Al0.6TiFe)0.5) 的 887.2 MPa 和 1165.2 MPa。微观机制分析表明, 单相 FCC 合金以位错强化为主, CoCrNi(Al0.6TiFe)0.3 的位错密度达 $2.5 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$, 而 B2 相析出后, 透射电镜观察到位错在 B2 相周围堆积, 析出强化成为主导机制。本研究提出的合金设计策略实现了 FCC-BCC 双相结构的精确调控, 为空间定制化性能构件的直接制造提供了新思路, 对开发异质结构多主元合金具有重要参考价值。

D03-073**高密度亚稳退火孪晶界诱导 FCC 高熵合金异常加工硬化行为**霍鹏达¹、黄林科*¹、宋克兴³、秦刚⁴、刘峰^{1,2}

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。

D03-074**梯度结构高熵合金塑性变形机理的多尺度研究**付武靖、范国华*、黄永江
南京工业大学

激光冲击强化(LSP)可于高熵合金(HEAs)表面诱导呈梯度分布的纳米孪晶、超细晶粒, 使其相较于同等平均晶粒尺寸的均质材料具备更为优异的应变硬化能力[1,2]。微观结构研究发现, LSP 诱导的位错、小

角度晶界及孪晶的共同作用增强了高熵合金的应变硬化能力，导致了其在变形过程中的优异塑性。采用数字图像相关(DIC)原位拉伸技术结合微观结构表征，从局域应变的角度揭示了一类典型的单相面心立方结构(fcc)的梯度结构高熵合金的塑性变形机理，结果表明，在变形过程中，该类梯度结构高熵合金在塑性变形过程的表面形成的致密剪切带(SBs)容纳了梯度层的塑性应变，延缓了纳米晶/细晶区域的应变局域化和过早失效，使其具有相较均质合金更为优异的塑性[3]。此外，在塑性变形阶段，合金硬化层中的细晶在失稳前产生了侧向局部应力分量。多向的局部应力状态激活了合金内部更多的滑移系统，提高了梯度结构 HEAs 的力学性能。透射电镜及循环加载结果表明，梯度结构在变形过程中高的背应力强化使得该结构的高熵合金材料具有优异的应变硬化能力和强塑性结合。

D03-075

软磁非晶纳米晶材料的智能与仿生设计

王军强*

宁波材料技术与工程研究所

软磁非晶纳米晶合金是高频大功率电力电子器件的关键核心材料。本报告将主要介绍宁波材料所基于人工智能模型方法，结合弛豫子调控技术，研发高饱和磁感、低损耗新型非晶纳米晶材料的研究进展。基于此，我们研发出系列饱和磁感达到 1.9 T，矫顽力小于 2 A/m 的非晶合金体系。并且，为了进一步提高磁导率，我们基于月球玻璃纳米晶化现象的启示，利用离子注入方法，细化纳米晶颗粒，使得非晶纳米晶磁导率显著提升。

D03-076

基于先验性物理参数的软磁非晶/纳米晶合金性能定量预测及其物理机制探索

施凌翔¹、陈娜²、邵洋²、姚可夫^{*2}

1. 北京理工大学

2. 清华大学

软磁非晶与纳米晶合金因其优异软磁性能，在现代电子器件中展现出巨大应用潜力。然而，其多组元成分与关键软磁及热力学性能间的关联机制极其复杂，元素间的协同效应使得难以利用单纯的叠加效应准确预测整体性能，严重制约了该类高性能合金的理性设计与开发。本研究聚焦于这一挑战，从先验性的可定量热力学、拓扑学等参数出发，构建并验证了软磁非晶/纳米晶合金的成分-性能定量关系模型。研究发现，铁基非晶合金的关键性能参量，如饱和磁通密度 (B_s)、居里温度 (T_C)、晶化温度 (T_x)，均与合金成分存在明确的定量依赖关系。针对 B_s 这一关键参量，提出了针对软磁非晶/纳米晶合金先验性参数的“部分分离”和“完全分离”处理法，该处理法能有效甄别先验性参数与 B_s 的“伪相关性”，并揭示先验性参数与 B_s 潜在的源于真实物理效应的关联。该方法为区分先验参数与材料性能之间数学关联与物理关联提供了有效工具，有助于深化对 B_s 内在物理机制的理解。本研究旨在深化对软磁非晶/纳米晶合金中成分-性能影响机制的理解，为构建更具解释性、更稳健的机器学习预测模型提供物理意义更明确的特征参量，并为该类合金的性能精准预测与按需定制提供高效的理论指导和数据驱动新范式。

D03-077

基于机器学习的铁基非晶纳米晶软磁材料设计与性能研究

郭文晖、吴忧、邵洋、姚可夫*

清华大学

随着信息通信、新能源汽车、5G 终端和第三代半导体(SiC/GaN)技术的进步，电力电子装备正朝着小型化、高频化和高效化方向发展，对于软磁材料的性能需求也越来越高。铁基非晶纳米晶软磁材料因其优异的综合性能而受到学术界和工业界的广泛关注，然而其发展仍面临以下瓶颈：一方面是磁性的制约，现

有铁基非晶纳米晶材料的饱和磁感应强度 (B_s) 普遍在 1.9T 以下, 与传统硅钢 ($\sim 2.0T$) 相比还存在差距, 限制了其在高功率密度场景中的应用; 另一方面, 非晶合金前驱体的玻璃形成能力 (GFA) 与 B_s 之间存在矛盾, 需要合理的成分设计和工艺调控寻求二者之间的平衡; 此外, 传统研发策略发挥效能的空间日益收窄, 亟待引入更高效的研发范式。为应对以上挑战, 我们首先构建了神经网络模型精准预测 B_s , 并从 486000 条的成分空间中筛选出 FeCoBSiCu 合金进行成分/工艺协同调控, 成功制备出一系列 $B_s \geq 1.95T$ 且矫顽力 $H_c \leq 10A/m$ 的超高性能软磁材料; 其次, 我们进一步构造了深度学习模型预测 GFA, 并与已有 B_s 模型集成为多目标优化器, 协同开发高 B_s 和高 GFA 的软磁材料。这种数据驱动策略可以作为实验开展前的先验式指导, 并有望改变传统研究范式、加速铁基非晶纳米晶软磁材料的研发和推动电子器件的更新迭代。

D03-078

基于应力弛豫模式转变优化铁基非晶的软磁性能

苏欣、童钰、王军强*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

铁基非晶合金因高磁导率、低矫顽力和低损耗, 作为能量转换材料广泛应用于高效电力电子与磁性元件。其优异软磁性源于无序原子结构赋予的低磁各向异性和强磁弹耦合效应, 但快速凝固引入的内应力和结构不均匀性会显著抑制磁畴壁运动, 限制性能提升。因此, 深入理解应力松弛退火过程中的软磁性能演化机制对于材料优化设计至关重要。本研究系统揭示了铁基非晶合金在应力松弛 (SR) 退火过程中的软磁性能及其动力学演变规律。结果表明, SR 处理可将矫顽力 (H_c) 降至 0.78 A/m, 较常规退火降低约 50%。基于修正扩展指数方程对即时弛豫激活能的分析发现, 短时 γ 弛豫阶段的原子局域运动可诱导磁畴有序化并有效降低 H_c ; 而长时 β 弛豫阶段的不可逆结构重排会加剧磁畴钉扎, 导致软磁性能劣化。上述结果明确了多尺度弛豫模式与磁性能的耦合机制, 为精确调控应力松弛工艺、优化非晶合金软磁性能提供了理论依据和工艺指导。

D03-079

基于原位相调控的增材制造高性能软磁中熵合金

张鹏程^{1,2}、曹祖睿¹、安佰灵¹、李大伟¹、于尧¹、潘杰¹、张诚¹、柳林*¹

1. 华中科技大学

2. 西南大学

增材制造是一种基于粉末逐层熔化的新型加工方法, 可实现复杂形状软磁材料与构件的成形制造。然而, 当前增材制造软磁合金难以同时满足高饱和磁感应强度、低矫顽力和低损耗等性能要求。在本工作中, 我们创新地提出了一种增材制造原位物相调控策略。该策略基于纳米氧化物表面改性的元素粉末, 在激光增材制造过程中原位调控物相结构 (BCC/FCC 双相向 FCC 单相转变), 实现了软磁性能的优化, 从而有效弥补了当前增材制造软磁多组元合金性能上的不足。本研究选择具有高饱和磁感应强度的双相、非等摩尔比 FeCoNi 中熵合金作为基础合金, 通过原位物相调控策略优化其物相结构和磁学性能。这一过程包括三个主要步骤: 首先在单质粉末表面包覆纳米 Fe₂O₃ 颗粒, 接着利用激光 3D 打印技术成形并实现原位相变 (BCC/FCC $\rightarrow$ FCC、Fe₂O₃ $\rightarrow$ FeO), 最后通过高温热处理进一步调控合金组织和磁学性能。经过上述调控过程, 成功获得了单一 FCC 结构的中熵合金/FeO 复合材料, 该材料表现出优异的软磁性能, 饱和磁感应强度达到 2.05 T, 矫顽力低至 115 A/m, 优于大多数文献中报道的增材制造软磁合金。此外, FeO 颗粒的引入还显著提高了电阻率, 达到未添加纳米颗粒样品的两倍, 从而大幅降低了铁损。研究表明, BCC 相纳米晶和 FCC/BCC 相界面对磁畴运动有显著的阻碍作用, 而粗大的 FCC 相晶粒和 FeO/FCC 半共格相界面对磁畴运动的阻碍显著降低, 从而能够大幅减小矫顽力。本研究提出的创新策略为增材制造高性能软磁合金的结构调控提供了新思路, 对高频高效电机铁芯的制造和应用具有重要的工程意义。

D03-080

合金化与微观结构调控策略协同提升 Fe 基非晶的耐蚀/抗氧化性

李永泰^{1,2}、黎明灿^{*1,3}、王安定²

1. 新疆大学物理科学与技术学院
2. 东莞理工学院交叉科学中心
3. 新疆大学材料科学与工程学院

针对低成本 Fe 基块体非晶合金 (BMGs) 热塑性成型 (TPP) 中存在的稳定性低、易氧化腐蚀及玻璃形成能力 (GFA) 不足等问题, 本研究通过新型合金化与微观结构调控策略, 开发了 $\text{Fe}_{69-x}(\text{B}_{22.8}\text{Nb}_{3.7}\text{Y}_{4.5})_{1-y}/31\text{Cr}_x\text{Al}_y$ ($x=0\sim8$, $y=0\sim3$) 合金体系。设计合金表现出高的玻璃形成能力、宽的过冷液相区 (SCLR)、优异的热稳定性 (923 K, 60 min)、良好的热塑性成型能力以及显著提升的耐蚀性和抗氧化性。研究揭示了 Cr-Al-Y 共合金化协同液-液相变 (LLPT) 对材料耐蚀性与抗氧化性的多重增强机制: Cr-Al-Y 共合金化优化了熔体局域有序结构, 提升氧化膜稳定性与对合金基体的保护能力, 显著增强高温抗氧化与耐腐蚀性能; 热塑性变形通过致密化非晶结构并降低能量状态与残余应力, 进一步改善耐腐蚀性。结合原子模型阐明了 GFA 提升、结构稳定性与 TPP 工艺性能的关联机制。该研究为开发兼具高成形性、耐蚀与抗氧化的 TPP 用 BMGs 提供了新思路。

D03-081

高性能可慢速退火铁基纳米晶软磁合金的设计制备

汪姚岑^{*1}、张岩²、曹崇德¹

1. 西北工业大学
2. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所

具有高饱和磁感应强度和极低矫顽力的铁基纳米晶软磁合金材料的设计与开发一直是磁性材料和相关电力电子产业研发领域关注的焦点之一。然而, 依靠 Nb 等前周期过渡元素抑制晶体生长的早期合金成分虽然获得了工业批量生产和实际应用, 却因为其饱和磁感应强度偏低而无法满足高功率密度的需要。新开发的多种合金体系虽然实现了超过 1.80 T 的饱和磁感应强度, 其纳米晶化却往往需要依赖高达 $\sim 10^2$ K/min 升温速率的退火工艺, 由此带来的受热均匀性和结晶潜热释放等问题使得此类合金难以被用于大尺寸磁芯。经过最近十余年的研究, 退火升温速率已经成为了制约铁基纳米晶软磁合金在大尺寸高功率场合应用的关键问题。本报告将向大家展示一种不需快速升温退火即可表现出优异软磁性能的高性能铁基纳米晶软磁合金的成分设计与性能。本研究为大幅强化非晶合金中的 $\alpha\text{-Fe}$ 形核能力, 适度提升合金中的 Cu 添加量并额外加入微量 Ag, 设计出 $\text{Fe}_{82.6}\text{B}_{16}\text{Cu}_{1.3}\text{Ag}_{0.1}$ 合金。该成分合金具有不足 400 °C 的低晶化温度, 可在退火前期仅发生 $\alpha\text{-Fe}$ 的形核而少有晶粒的生长, 从而实现在慢速升温退火条件下的纳米晶化。经 10 K/min 升温速率退火后, 可达到 $H_c = 10$ A/m, $B_s = 1.80$ T 的良好软磁性能; 添加 P 元素的 $\text{Fe}_{82.6}\text{B}_{15}\text{P}_1\text{Cu}_{1.3}\text{Ag}_{0.1}$ 合金经 10 K/min 升温速率退火后, 可达到 $H_c = 6.5$ A/m, $B_s = 1.85$ T 的优异软磁性能。即使进一步降低升温速率至极低的 0.5 K/min, 不含 P 的 $\text{Fe}_{82.6}\text{B}_{16}\text{Cu}_{1.3}\text{Ag}_{0.1}$ 合金也可维持 $H_c = 15$ A/m, $B_s = 1.77$ T 的软磁性能, 而含有 P 的 $\text{Fe}_{82.6}\text{B}_{15}\text{P}_1\text{Cu}_{1.3}\text{Ag}_{0.1}$ 合金则表现出 $H_c = 8.0$ A/m, $B_s = 1.79$ T 的优异软磁性能。根据目前研究结果推测, Ag 的添加既可因其与 Fe 的化学互斥性而大幅提高 $\alpha\text{-Fe}$ 的形核倾向, 也大幅降低了合金的起始晶化温度和必要退火温度, 从而实现在对晶粒生长的抑制, 实现了合金的纳米晶化。该成果为高性能铁基纳米晶合金的制备摆脱快速升温热处理提供了一条重要的研究思路, 所研究的含 Ag 合金或进一步替代 Ag 的合金系列有望在将来实现在大尺寸高功率电磁转换领域的应用。

D03-082

Fe-Cr-Mo-C-B 非晶合金高通量设计及涂层耐腐蚀性能研究

王倩倩^{*}、熊芳凯、沈宝龙
东南大学

铁基非晶涂层具有优异耐腐蚀与耐磨损性能,被广泛用于海洋装备表面保护材料。然而,铁基非晶合金体系复杂、成分范围广,传统试错方法开发非晶涂层材料试验周期长、研发成本高。将高通量实验与数据驱动的机器学习方法结合,可大幅提高研发效率,降低新材料研发成本。本文采用多靶磁控共溅射方法制备了包含 69 组成分的 Fe-Cr-Mo-C-B 组合材料库,研究金属元素 Fe、Cr、Mo 对合金形成能力及耐腐蚀性能的影响,并采用随机森林回归(RFR)模型开展机器学习,将数据集扩展至 690 组,探索综合性能优异的铁基非晶合金成分,实现高耐蚀耐磨铁基非晶涂层成分高通量设计。结果表明,合金耐腐蚀性能强烈依赖于 Fe、Cr 元素含量,而 Mo 元素在提高非晶形成能力方面起关键作用。筛选出兼具优异耐腐蚀耐磨损性能的 FeCrMoCB 合金成分,基于该成分制备的超音速火焰喷涂非晶涂层,具有优异耐腐蚀及耐磨损性能,在 3.5 w.% NaCl 溶液中腐蚀电位 $-0.34 \text{ V}_{\text{Ag}/\text{AgCl}}$ 、腐蚀电流密度 $1.4 \times 10^{-7} \text{ A/cm}^2$ 、涂层磨损率约为 $6 \times 10^{-7} \text{ mm}^3 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-1}$ 。与已报道的铁基非晶涂层、镍基合金涂层、钎基合金涂层以及高熵合金涂层进行对比,本文筛选出的非晶合金涂层综合性能优异。本文将高通量试验与机器学习结合,大幅提高了新型非晶涂层材料开发效率,为新材料开发提供思路。

D03-083

铁基块体非晶合金的成分设计以及形成能力预测

吴萧雨*

深圳大学

铁基非晶合金作为非晶态合金家族中的重要成员之一,具有独特的高饱和磁感应强度、低磁损耗的软磁性能,超高强度、高耐磨性和极佳的耐腐蚀性能等优点,广泛应用于电力电子、新能源等领域,是目前“双碳”背景下大力发展的新材料。但由于非晶形成能力低,普遍只能制成薄带或粉末,限制其应用范围。为了提高铁基非晶合金的形成能力,本文基于非晶序和熵理论,进行成分设计。并针对非晶合金形成过程中超快凝固温度场的变化进行数值模拟研究,通过计算合理预测非晶合金最大形成能力,基于此开发形成能力为 8 mm 的 FeCoBNbY 非晶合金。

D03-084

熔体抽拉 FeCePrB 合金纤维近室温磁热性能研究

柴玉琳、孙剑飞、张伦勇、沈红先*

哈尔滨工业大学材料科学与工程学院

相比传统的气体压缩膨胀制冷技术,磁制冷技术具有高效节能、制冷温度范围广、无噪音、绿色环保、装置简单等优点。近年来,为了满足室温磁制冷冰箱和空调的发展和应用,近室温区的新型磁制冷材料成为研究热点。具有二级相变特征的非晶态合金微丝具有接近室温的宽范围工作温区、较大磁熵变、低磁滞、高热导率及良好的力学性能,是较为理想的磁制冷工质。本论文采用熔体抽拉法制备了不同成分配比的微米级 FeCePrB 非晶合金纤维,系统研究了纤维的微观结构、磁相变行为及其磁热性能。结果表明,这些 Fe 基非晶合金纤维的居里温度随着 Fe 含量升高而升高,当纤维成分分别为 Fe₆₄Ce₁₅Pr₆B₁₅、Fe₇₀Ce_{12.5}Pr₅B_{12.5}、Fe₇₆Ce₁₀Pr₄B₁₀ 和 Fe₈₈Ce₅Pr₂B₅ 时,纤维的居里温度分别为 255K、308K、346K、400+K。其次,纤维的非晶化程度与其磁热效应相关,随着非晶化程度变高,纤维的磁熵变和磁制冷容量变大。在 5T 外场下,Fe₇₀Ce_{12.5}Pr₅B_{12.5} 纤维最大磁熵变为 $2.78 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$,相对制冷容量 RCP 及制冷容量 RC 分别为 347 J kg^{-1} 和 260 J kg^{-1} 。所制备的纤维机械性能良好,具有大的比表面积,有利于提高磁致冷机的热交换效率。以上研究结果表明,熔体抽拉 FeCePrB 非晶纤维有望成为室温磁制冷工质,本文为纤维制冷工质的设计提供了一定理论参考和数据支持。

D03-085

基于电子功函数组合开发具有优异耐腐蚀性能的金属玻璃

韩飞^{1,2}、李福成³、陈亚男¹、王付超^{1,2}、胡军²、柳延辉³、霍军涛^{*1}、高萌¹、王军强¹

1. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所
2. 浙江工业大学
3. 中国科学院物理研究所

由于无序的原子结构和多组分协同效应,金属玻璃通常表现出优异的耐腐蚀性能。然而,随着高性能耐腐蚀材料在极端环境应用中的需求不断增长,传统依赖经验与试错的材料开发方法逐渐显现出高成本和低效率的局限性。为此,本研究提出了一种基于电子功函数(electron work function, EWF)的高通量金属玻璃组合筛选策略,并以 Ni-Nb-Ta 合金体系为研究模型,系统构建并分析了金属玻璃样品库的组织结构、化学组成及 EWF 分布。成功筛选出具有最高 EWF 值且表现出最优耐腐蚀性能的 $\text{Ni}_{49.92}\text{Nb}_{11.75}\text{Ta}_{38.33}$ 合金。其卓越的耐蚀性归因于高 EWF 促进了稳定致密钝化膜的形成。本研究不仅揭示了 EWF 与金属玻璃腐蚀行为之间的内在关联机制,也为面向极端服役环境的高性能耐腐蚀金属玻璃设计提供了新思路。

D03-086

基于组合方法探索非晶合金原子间键合与耐蚀性能关联性

胡立威^{1,2}、柳延辉^{*1}、王刚²

1. 中国科学院物理研究所
2. 上海大学

金属玻璃因其独特的非晶结构,通常展现出卓越的耐腐蚀性能。然而,关于其化学成分与非晶结构在耐腐蚀性中所起的具体作用,目前尚不完全明确。本报告聚焦于 Ir-Ni-Ta 合金体系,通过组合制备技术与高通量表征手段,深入探究了合金成分与腐蚀电流密度、腐蚀电位之间的关联。研究结果显示,腐蚀电流密度与金属-金属键强度以及金属-氧键强度之间存在显著的相关性。这表明,在 Ir-Ni-Ta 合金体系中,耐腐蚀性主要受到化学成分的调控。同时,非晶结构的存在有助于形成更为致密的钝化膜,从而进一步增强了合金本身的耐腐蚀性,起到了积极的叠加效应。在此基础上,我们进一步利用组合方法,通过简单的浸泡实验,系统地研究了合金化元素添加对 Cu-Zr 基合金体系腐蚀行为的影响。研究发现,通过引入具有高金属-金属键和金属-氧键的合金元素,可以有效提升基础合金的耐腐蚀性能。从原子间相互作用的角度深入分析,我们发现,在基础合金体系中添加这些特定元素,实际上降低了实现耐腐蚀性所需的临界重量平均金属-金属键和金属-氧键。这一发现为合金化添加元素的选择提供了重要指导。上述发现将有助于设计具有优异耐腐蚀性能的非晶合金。

D03-087

利用仪器化压入表征大块金属玻璃弹性模量和压入硬度的新方法

刘明^{1,2}、周启杰¹、梁瑞^{*2}

1. 福州大学
2. 澳门科技大学

利用仪器化纳米压入对 30 种弹性模量和泊松比已知的大块金属玻璃进行测试,揭示了载荷对测试结果的影响,发现金属玻璃在压入的过程中通常在压头周围产生材料堆积而非下陷,导致传统 Oliver-Pharr 方法计算得到的缩减模量偏大。传统 Oliver-Pharr 方法不能考虑材料堆积效应,需要对计算公式中的常数 β 进行修正;对于金属玻璃应该修正为 1.15,而非常用的 1.03。压入过程的特征量呈现比例关系:弹性功和总功成正比;残余位移、接触深度和压头最大位移成正比;最大载荷和接触刚度的平方成正比;最大载荷与最大位移的比值与接触刚度成正比;接触刚度和接触深度成正比。发现这些比例系数之间具有线性关系。建立了四种无量纲比例系数(即弹性功和总功之比、残余位移与最大位移之比、接触深度与最大位移之比、最大载荷与最大位移和接触刚度乘积的比值)与压入硬度和缩减模量的比值之间的定量关系;结合传统 Oliver-Pharr 方法中压入硬度和缩减模量平方的比值关系,建立了四种新的分析材料模量和硬度的方法。此外,通过遗传进化算法首次推导出另外五个以缩减模量为未知数的一元二次方程。实验表明,这 9 种新模

型的计算结果与共振超声光谱法测量值误差小于 5%。通过文献中的 5 种大块金属玻璃的数据进一步验证了方法的适用性。提出的 9 种方法不需要知道压头的面积函数，无需校准压头，不需要考虑材料堆积或下陷的影响，为仪器化压入测试提供了新的分析方法。

D03-088

基于多体相互作用的深度图神经网络预测非晶塑性事件

王琦*

中国工程物理研究院材料研究所

非晶合金中的塑性变形表现出明显的不均匀性，仅少数局域区域——剪切转变区（shear transformation zones, STZs）——发生显著的塑性重排。如何基于结构信息精准预测这些稀有的塑性事件，一直是非晶领域的重要挑战。本研究基于深度图神经网络（graph neural networks, GNNs）的方法，通过系统性地引入从二体、三体到四体的逐级递进的原子相互作用，揭示了不同相互作用阶次对非晶合金塑性事件预测精度的影响规律。研究表明，引入三体相互作用的深度图神经网络[1]，显著优于传统的仅限于二体相互作用的模型[2]。此外，通过分析深度图神经网络预测的非仿射变形对原子位置的梯度，我们将剪切转变区原子划分为结构不稳定的“触发区”（triggers）和被动响应的“跟随区”（followers），并揭示了两类原子随变形过程的演化。这一可解释性分析不仅揭示了非晶合金局域塑性事件背后的结构脆弱性起源，也为理解和设计具有可控塑性行为的非晶合金提供了新的视角。

D03-089

Ti 基非晶复合材料的拉伸性能与断裂韧性协同提升策略研究

颜廷毅、张龙*

中国科学院金属研究所

非晶合金因其剪切带快速失稳扩展而普遍缺乏宏观拉伸塑性，这严重限制了其工程应用。为改善这一缺陷，在非晶基体中引入晶体相形成非晶内生复合材料。尽管块体非晶复合材料在拉伸强度和拉伸延展性组合方面明显优于块体非晶合金，但其断裂韧性往往显著降低。另外，非晶复合材料在单轴拉伸和复杂应力状态下的变形机制差异尚未得到深入理解。因此，系统开展了含稳定晶体相和相变晶体相的 Ti 基非晶复合材料拉伸性能与断裂韧性的研究。研究发现，相变型非晶复合材料虽然展现出更优异的拉伸性能，但其断裂韧性却低于含有稳定晶体相的非晶复合材料，这一现象与传统晶体材料的拉伸性能与断裂韧性正相关规律相悖。进一步分析表明，非晶-晶体双相复合材料的变形机制具有强烈的应力状态依赖性：在单轴拉伸条件下，相变型非晶复合材料可通过晶体马氏体相变诱发非晶剪切带钝化实现拉伸塑性与加工硬化能力的大幅度提升；然而，在断裂韧性测试中，裂纹尖端的复杂应力状态会严重抑制非晶剪切带钝化变形机制。与此同时，相变晶体与非晶基体之间显著的强度失配会诱发局部应力集中，促使裂纹过早形核与扩展，最终导致相变型非晶复合材料断裂韧性显著下降。基于以上发现，提出了一种通过调控晶体相稳定性优化非晶复合材料性能的策略，并经实验证实，新开发的非晶复合材料同时实现了拉伸性能与断裂韧性协同提升的目标。这些发现明确了非晶复合材料微观结构与力学性能的影响关系，加深了非晶剪切带性质和行为的理解，为开发更优异综合性能的非晶复合材料奠定了理论基础。

D03-090

Molecular dynamics study on the effect of cooling rate on the mechanical behavior of B2-CuZr enhanced bulk-metallic-glass-composites

Huahuai Shen, Xiaoling Fu*

Guangdong University of Technology

Metallic glasses (MG) have attracted considerable attention due to their high hardness, high fracture

strength, and excellent corrosion resistance. However, their poor room-temperature plasticity limits their widespread application to some extent. To address this issue, researchers have attempted to introduce crystalline phases into MG to enhance their mechanical properties. Molecular dynamics (MD) simulations provide a powerful tool for investigating the properties and deformation mechanisms of amorphous/crystalline dual-phase composite materials. In this study, MD simulations were employed to explore the effect of different cooling rates on the tensile properties of B2-CuZr enhanced bulk-metallic-glass-composites (BMGCs). Molecular dynamics simulations were conducted on B2-CuZr enhanced BMGCs at an ambient temperature of 300 K. The results indicate that as the cooling rate decreases, from 100 K/ps, 10 K/ps, 1 K/ps, 0.5 K/ps, the content of $\langle 0,0,12,0 \rangle$ polyhedra increases, resulting in improved mechanical strength but reduced plasticity. In this study, as the cooling rate increases from 0.5 K/ps to 100 K/ps, the deformation strain increases from $\varepsilon=0.407$ to $\varepsilon=0.466$. However, the specimens with a cooling rate of 1 K/ps display notably better plasticity, deviating from the trend. This enhancement in plasticity is attributed to the increased presence of $\langle 0,2,8,5 \rangle$ polyhedra in the 1 K/ps sample. The findings of this study provide valuable insights for the design and fabrication of high-performance metallic glass materials.

D03-091

Enhancing toughness and plasticity of multilayer metallic glasses composites with gradient heterogeneous free volume distribution

Yongwei Wang*

University of Science and Technology Beijing

A strategy to enhance mechanical properties of metallic glasses is proposed and validated by finite element modeling of multilayered metallic glass composites with various initial free-volume gradient interfaces. It is found the ductility of the composites improves significantly as the number of layers increases. The bimodal statistical distribution of free volumes (FVs) and its gradient play important roles such that the composites containing FVs exhibit tremendous improvement in their strength and toughness as compared to these with the random FV distribution. The strengthening and toughening mechanisms are related to the initiation, and most importantly, interaction of propagating shear bands at the interfaces. The results demonstrate the multilayered composites are promising in solving the strength-ductility tradeoff in metallic glasses, and have great implication in application and synthesis of multilayered metallic glasses with enhanced mechanical properties.

D03-092

应力状态调控提升非晶合金强塑性的分子动力学模拟研究

袁旭东*、张龙、颜廷毅

中国科学院金属研究所

长程无序的结构决定了非晶合金具有高强度、高硬度等优异的力学性能，具备广阔的应用前景。然而非晶合金塑性变形被限制在高度局域化的剪切带中，导致其表现出室温脆性缺陷。在不牺牲强度的同时提高塑性是非晶合金领域的研究重点。本工作通过分子动力学模拟方法在非晶合金引入不均匀分布的残余应力，对比探究了结构结构调整与应力状态调控对 Cu₆₄Zr₃₆ 非晶合金力学性能的影响规律，从微观尺度探究了残余应力的分布对非晶合金剪切带行为的影响机理。研究表明，残余压应力的存在能抑制剪切带的迅速扩展从而提高非晶合金的拉伸屈服强度；而不均匀分布的残余应力能够在拉伸变形过程中促进多重剪切带的形成，降低应变局部化程度从而增强其塑性。本工作的研究证实，通过调控残余应力分布状态而不改变其微观结构可以实现非晶合金拉伸强塑性的同时提高，这为高性能非晶合金材料的设计提供了新的思路。

D03-093

Ti 基非晶合金复合材料张龙*¹、颜廷毅¹、袁旭东¹、张海峰²

1. 中国科学院金属研究所

2. 东北大学 冶金学院

非晶合金复合材料具有“非晶+晶体”双相结构，可以兼具非晶态和晶态金属材料的性能特征。多年来我们围绕 Ti 基非晶复合材料开展了体系化全链条应用基础研究。本报告汇报我们在 Ti 基非晶合金复合材料方向上取得的主要成果，包括阐明了非晶合金复合材料的形成机理，实现了微观组织调控并揭示了两相协同变形机理，最终实现了非晶复合材料的性能提升。

D03-094**Fe 基非晶涂层超高速激光熔覆制备及其裂纹抑制与耐磨性能**

刘学*

中国工程物理研究院材料研究所

近年来新发展的超高速激光熔覆（EHLC）技术为 Fe 基非晶合金涂层制备提供了一种极具前景的新方法，但该技术在实际应用中仍面临严重的涂层开裂问题。本文首先选取 SAM1651 经典成分开展了超高速激光熔覆非晶合金涂层制备，系统研究了激光扫描速率对涂层非晶相含量、微观组织及耐磨性能的影响。结果表明，提高激光扫描速率可显著提高涂层的非晶相含量，并有效减少涂层的裂纹密度。析出的脆性 $\text{Mo}_{12}\text{Fe}_{22}\text{C}_{10}$ 、 $(\text{Fe}, \text{Cr})_{23}\text{C}_6$ 等碳化物相是引发裂纹的主要因素，通过优化工艺参数减少脆性相含量，可显著降低涂层的开裂风险。耐磨性测试显示，非晶相含量最高的 1-S100 样品磨损率低至 $7.5 \times 10^{-6} \text{ mm}^3 \cdot (\text{N} \cdot \text{m})^{-1}$ ，较 45# 钢提升 5 倍，其磨损机制以疲劳磨损为主，伴随轻微氧化磨损。随后针对 Fe 基非晶合金涂层在超高速激光熔覆过程中容易形成裂纹的问题，创新性提出引入韧性晶化相的裂纹控制策略，通过选取 Fe50Ni30P13C7 非晶合金，首次通过超高速激光熔覆成功制备出完全无裂纹的 Fe 基非晶合金涂层。在涂层中引入适量 (Fe, Ni) 韧性晶化相，显著提高了涂层的断裂韧性。通过数据拟合建立了物相组成与断裂韧性的定量关系模型 ($R \geq 0.95$)，为其他非晶涂层体系的裂纹控制提供了普适性指导。磨损机理研究表明，高断裂韧性涂层的主要磨损形式从疲劳磨损转变为氧化磨损，有效提升了涂层的耐磨性能。在此基础上，通过成分筛选与工艺优化协同策略，制备出具有工程应用价值的无裂纹 $\text{Fe}_{34}\text{Ni}_{20}\text{Cr}_{20}\text{Mo}_5\text{C}_4\text{B}_4\text{P}_{12}\text{Nb}_1$ 非晶合金涂层。在 Fe 基非晶合金中添加 Cr、Mo 等抗氧化元素，显著提升了涂层的抗氧化性能，降低了氧化磨损程度。研究结果表明，成分优化与抗裂纹扩展能力的协同作用使涂层的耐磨性能较前期研究提升 3-4 倍，磨损率最低达 $2.7 \times 10^{-6} \text{ mm}^3 \cdot (\text{N} \cdot \text{m})^{-1}$ 。这一突破性成果主要归因于涂层成分优化带来的抗裂纹扩展能力和抗氧化性能的协同增强效应。本文分别通过工艺优化、基于韧性相析出的涂层成分设计和基于稀释的塑性相引入三种方式，实现了 Fe 基非晶合金超高速激光熔覆过程中裂纹的有效抑制，首次实现了无裂纹 Fe 基非晶涂层的超高速激光熔覆制备，制备的涂层表现出优异的耐磨性能，相关研究为高性能 Fe 基非晶合金的制备与应用奠定了理论与技术基础。

D03-095**非晶合金形成与变形中的熵效应**

冯士东*、徐艺莹

燕山大学亚稳材料全国重点实验室

本研究从热力学熵的角度系统探究了非晶合金的形成与变形机制，建立了基于熵效应的非晶合金设计与性能调控新方法。在非晶合金形成方面，揭示了熔化熵作为关键热力学参数对玻璃形成能力的决定性作用，提出低熔化熵原则可有效指导非晶合金成分设计。基于此原则，成功开发出 $\text{Zr}_{47.59}\text{Cu}_{41.41}\text{Ag}_{11}$ 非晶合金，其临界尺寸达到 4mm，是文献报道最优成分的 2 倍，显著验证了熔化熵作为玻璃形成能力评估指标的可靠性。在非晶合金变形机制研究方面，引入振动熵作为连接微观结构与宏观变形的关键桥梁。通过建

立原子尺度振动熵计算方法，首次提出了原子振动熵和局域振动熵的概念，揭示了高振动熵区域与局部结构松散化的对应关系，阐明了松散局域结构的原子重排优先被激活的微观机制。本研究通过熔化熵指导非晶合金设计，结合振动熵解析变形机理，成功构建了非晶合金形成与变形中的熵效应理论框架，为非晶合金的形成和性能优化提供了新的理论基础和技术途径。

D03-096

月球水的新范例：“嫦娥五号”撞击玻璃中封存的超富水包裹物

陈自强¹、赵勇¹、邹敏杰¹、张博*¹、白海洋^{1,2,3}、杨孟飞³、汪卫华^{1,2,3}

1. 松山湖材料实验室
2. 中国科学院物理研究所
3. 中国空间技术研究院钱学森空间技术实验室

数十年来，月球始终被视作一个本质缺水的天体——这一认知范式源于阿波罗/月球样本的分析结果，其水含量普遍低于 100 ppm。尽管近期研究探测到月表羟基组分及极区水冰的存在，月球内部与非极区仍被广泛认定为无水环境。本研究利用透射电子显微镜，在嫦娥五号任务返回的撞击玻璃珠内，首次发现微米级玻璃包裹体含有异常偏高的水含量(>5.0 wt%)，且以分子水(H₂O)为主要赋存形式。结合能量色散谱、电子能量损失谱及三维断层重构技术，我们揭示这些包裹体具有冲击变质成因的水合特征，直接捕获了撞击输运至月表的水。该发现提出一项颠覆性认知：撞击玻璃可作为月球水的重要储库，对重塑月球挥发分演化模型、太阳系物质输送机制及未来月球资源利用战略具有重大科学意义。

D03-097

封孔处理和激光重熔提升 Fe 基非晶涂层性能研究

唐云龙²、李春燕*^{1,2,3}、权国宁²、王新华²、寇生中^{1,2}

1. 兰州理工大学省部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室
2. 兰州理工大学材料科学与工程学院
3. 兰州理工大学温州泵阀工程研究院

Fe 基非晶合金因价格适中、强度硬度高以及耐腐蚀耐磨损性能优异被广泛应用于涂层领域，对 Fe 基非晶涂层进行封孔处理和激光重熔可使得涂层耐磨性能和耐蚀性能更加优异。本研究以粉末成分为 (Fe_{0.5}Ni_{0.2})₆₁Cr₉Co₆Si_{1.5}B_{17.5}Nb₅ 的 Fe 基非晶涂层为研究对象，对涂层进行磷酸铝封孔处理及激光重熔处理，探究改性涂层性能优异的原因。研究表明：(1)磷酸铝封孔涂层孔隙率由处理前的 3.72% 下降至 0.41%，在 5 wt.% H₂SO₄ 溶液中封孔涂层具有更正的自腐蚀电位($E_{\text{corr}} = -336 \text{ mV}$)和更低的自腐蚀电流密度($I_{\text{corr}} = 1.331 \times 10^{-7} \text{ A/cm}^2$)，表现为更优异的耐蚀性能。(2)随着 H₂SO₄ 溶液浓度的增加，US 涂层与 APS 涂层的自腐蚀电流密度增大和自腐蚀电位减小，耐腐蚀性能降低，但 APS 涂层的腐蚀速率更低。封孔涂层在 H₂SO₄ 溶液中的耐腐蚀性能取决于 H₂SO₄ 溶液的浓度，其耐腐蚀性能随 H₂SO₄ 溶液浓度的增加而降低，直至失去腐蚀防护作用。变温使 US 涂层和 APS 涂层的耐腐蚀性能均降低，但 APS 涂层的耐腐蚀性能好于 US 涂层。(3)随着温度的增加，US 涂层和 APS 涂层表面出现的腐蚀坑也在增加。与常温下的涂层相比，80 °C 下涂层的自腐蚀电流密度(I_{corr})更高，自腐蚀电位(E_{corr})明显更低，表明涂层在 80 °C 有更高的热力学腐蚀倾向，加剧了涂层的损伤，致使涂层对基体材料保护效果变差。(4)激光重熔涂层的硬度得到提升，由 425.53HV 上升至 1089.06HV；激光重熔涂层的磨损率从 2.7861mm³ N⁻¹ m⁻¹ 下降至 0.6565mm³ N⁻¹ m⁻¹，表明激光重熔后涂层耐磨性能优异。

D03-098

基于 Mg 基非晶合金脱合金化制备 Cu 及 Cu 合金纳米颗粒

乔海清*

北京航空航天大学材料科学与工程学院

以 $\text{Mg}_{80}\text{Cu}_{10}\text{Y}_{10}$ ($\text{M}=\text{Cu}/\text{CuAg}/\text{CuNi}/\text{CuPd}/\text{CuRu}$) 非晶合金条带为前驱体, H_2SO_4 溶液为腐蚀液, 聚乙烯吡咯烷酮(PVP)和聚乙二醇(PEG)为保护剂, 采用脱合金化法, 制备获得了 $\text{Cu}/\text{CuAg}/\text{CuNi}/\text{CuPd}/\text{CuRu}$ 纳米颗粒。探究保护剂的种类、PEG 和 PVP 之间的比例对生成纳米 Cu 颗粒的粒径、抗氧化性以及分散性的影响, 并在此工艺基础上制备出 $\text{CuAg}/\text{CuNi}/\text{CuPd}/\text{CuRu}$ 合金纳米颗粒并探究所制备合金纳米颗粒的析氢(HER)、析氧(OER)催化性能。结果表明, PVP 具有良好的分散性且制备出纳米颗粒的粒径最小、PEG 具有良好的抗氧化性, PVP/PEG 以一定比例时, 所制备出的纳米 Cu 颗粒兼具分散性与抗氧化性的同时具有最小的粒径, CuPd 具有最小的析氢过电位和析氧过电位, 分别为 80 mV 和 376 mV。

D03-099

月表玻璃物质和空间环境相互作用研究

赵睿*

中科院物理所

报告人前期在嫦娥五号月壤中发现了不同起源、不同形态的丰富玻璃物质。进一步, 我们综合多种物质科学研究手段, 并交叉结合天文和空间科学, 深入研究了玻璃物质受月表陨石撞击和太阳风辐照这两大主要空间活动的改造特征和机制。通过原子级分辨的结构表征和系统的元素价态分析, 我们发现剧烈的陨石撞击会在熔体中原位产生较大尺寸(几十到上百纳米)的纳米铁颗粒, 随后凝固保存在撞击玻璃颗粒中; 而太阳风离子则通过长时间尺度的辐照作用, 在玻璃表面一百纳米的辐照损伤层内还原产生密集的尺寸仅为 3-5 纳米的小粒径纳米铁颗粒。这些不同尺寸的纳米铁颗粒会改变月壤的光学特征, 进而影响月球的光谱探测数据解读。我们的研究阐明了陨石撞击和太阳风辐照在纳米铁产生中的不同作用, 澄清了月表光谱变化研究的长期争议, 同时也从材料学角度为月壤玻璃的烧结建造、长期服役等提供了重要参考。

D03-100

石墨烯增强非晶复合材料的结构设计及协同变形机制研究

梁浩杰、张龙*

中国科学院金属研究所

非晶合金因其独特的无序原子结构而表现出优异的力学性能, 但其室温脆性严重制约了实际应用。虽然引入韧性晶体相可以改善塑性, 但往往以牺牲强度为代价。针对这一关键难题, 本研究提出了一种通过原位生成石墨烯增强非晶复合材料的设计策略, 协同提升了非晶复合材料的强塑性。通过化学气相沉积和高真空熔体压力浸渗相结合的方法制备了石墨烯增强非晶复合材料, 可以有效解决传统粉末冶金方法中常见的石墨烯团聚和相界面结合弱等瓶颈问题。研究发现, 原位生成的石墨烯和碳化钛与晶体相和非晶基体展现出独特的协同强韧化机制: 原位生成的碳化钛纳米颗粒作为硬质增强相, 通过强烈的位错钉扎效应显著提升了非晶复合材料的压缩强度; 另一方面, 三维网络石墨烯在复合材料中构建了高效载荷传递网络、有效降低了界面处应力集中, 并诱导非晶基体中多重剪切带的增殖, 从而进一步提高了复合材料的塑性变形能力。该研究不仅深化了对非晶复合材料变形机制的理解, 更重要的是建立了“工艺-结构-性能”的构效关系, 为设计轻质高强韧非晶复合材料提供了理论指导。

D03-101

CuZr 基非晶复合材料的马氏体相变机制研究

董杰^{1,2}、黄燕²、张艺波²、马东*²

1. 深圳大学

2. 松山湖材料实验室

室温脆性一直严重遏制着非晶合金的工程应用, 被喻为非晶合金的“阿喀琉斯之踵”。在非晶基底中引入具有马氏体相变能力的 B2 晶体相的非晶复合材料, 利用相变诱导塑性效应实现了优异的拉伸塑性和加

工硬化能力，是目前突破非晶合金脆性难题的最有效途径之一。然而，该材料 B2-马氏体相变的晶格转变机制和晶体学特征，及其对非晶复合材料相变和力学行为的作用机制尚未明晰。最近，我们通过 EBSD、微柱压缩和原位同步辐射 X-射线衍射实验研究，结合晶体力学分析，在 CuZr 基相变增韧非晶复合材料中发现 B2-马氏体相变为临界应力控制的沿 $\{110\}_{B2}<001>_{B2}$ 剪切系的晶格切变机制，具有强各向异性特征，沿着加载轴方向，近 $<100>$ 取向的 B2 相难相变且易脆断，而近 $<111>/<110>$ 取向的 B2 相易相变塑性强，进而导致了复合材料变形中不同取向晶粒群相变的发生具有时序性，同时马氏体变体的取向性亦介导了裂纹扩展路径。研究结果对理解含 B2 相的形状记忆合金、金属间化合物、高熵合金和非晶复合材料的力学行为均具有一定的参考价值。

D03-102

高性能生物医用高熵合金的设计制备及其性能优化

谢国强*

哈尔滨工业大学（深圳）材料科学与工程学院

金属材料由于其高强韧性、耐疲劳、易加工成形性等优良的综合性能，一直是临床上用量最大和应用广泛的一类生物医用材料。然而，目前使用的生物医用金属材料存在与人骨力学性能不匹配、包含生物毒性或生物有害性元素等问题，为了适应生物医疗领域应用的要求，研究与开发新型的生物医用金属材料具有十分重要的意义。本报告将介绍我们课题组近年来在生物医用高熵合金方面的研究进展。我们设计并制备了不含生物毒性或生物安全性差元素的高熵合金及其复合材料，并通过成分优化、工艺调控、组织结构适配设计等对合金体系进行了优化，对其物理性能、热性能、化学性能、机械性能、生物安全性和生物相容性等进行了系统的评价。

D03-103

高熵材料的结构设计及多场景储能应用

王志峰*、秦春玲

河北工业大学

高熵材料因其独特的多组元协同效应在储能领域展现出广阔的应用前景。本研究通过不同策略设计高熵电极材料并探究其储能性能。一是采用双相高熵合金（HEA）选择性刻蚀制备了具有纳米多孔结构的 HEA，进一步结合非金属元素掺杂，利用该多孔网络作为锂硫电池载硫体，研究发现三维连通孔结构和丰富的活性位点可以有效抑制多硫化物的穿梭效应，提供高效的电子/离子传输通道，使锂硫电池展现高比容量和优异的循环稳定性。二是通过脱合金方法合成高熵氧化物（HEO）用作锂离子电池负极材料。结果表明，HEO 材料凭借高熵诱导的晶格畸变和丰富的氧空位，显著提升锂离子扩散速率和结构稳定性，表现出较好的循环稳定性。相关研究为高熵材料在多元储能体系中的结构与性能优化提供了参考。

D03-104

Al_{0.3}CoCrFeNi 高熵合金的高温组织演化行为研究

赵天浩、陈淑英*

烟台大学

Al_{0.3}CoCrFeNi 高熵合金由于其室温下高强度和韧性的优良组合、优异的高温结构稳定性与力学性能受到广泛关注。多篇报道指出该合金在 620°C 以下热处理时形成细小的 L1₂ 析出相，而随温度升高到 700°C 时，L1₂ 相消失，仅有 B₂ 相存在。但是报道中缺乏对 L1₂ 析出相演化规律的系统研究。本课题组前期研究发现 Al_{0.3}CoCrFeNi 高熵合金在 700°C 应力时效条件下，基体中形成大量的 L1₂ 相，与 B₂ 相同时存在，这与已报道的研究结果相反。本研究对该合金的相关组织演化进行了系统研究，进一步对该合金在不同时效与应力时效下进行热处理发现，温度，时间与应力均对析出相的稳定性有显著影响。在 700°C 进行热处理

时, 随时效时间的延长, B_2 相逐渐增, 而 L_{12} 析出相呈现出先形成, 长大, 增多, 后又减少的趋势。进一步将热处理温度升高至 715°C 时, L_{12} 在短时间内仍然存在, 且随时间延长而消失。继续升温至 720°C 时, L_{12} 相完全消失, 仅有 B_2 相存在, 证实 L_{12} 相溶解的临界温度为 $715\text{-}720^{\circ}\text{C}$ 之间。本研究阐明 $\text{Al}_{0.3}\text{CoCrFeNi}$ 高熵合金的 L_{12} 相形成可能高度依赖合金的初始状态, 应力分布, 温度与时间。

D03-105

非等原子比 NbTAMoWTi 难熔高熵合金的高温氧化行为研究

康斯清、庞景宇、张宏伟*

中国科学院金属研究所

难熔金属元素如钨、钼、钽、铌、钎、钒等由于其拥有优异的抗高温软化能力, 常被用于超高温结构材料。但难熔元素普遍不具备抗高温氧化能力, 在无防护状态下, 钎合金 600°C 即会发生“虫害”氧化, 生成疏松多孔的 Nb_2O_5 氧化物并且粉化脱落, 其他难熔金属元素合金有同样的问题。不具备抗高温氧化能力是限制难熔金属广泛应用的重要因素。由非等原子比难熔金属元素组成的高熵合金, 通过合金成分比例设计, 合理运用因氧化物生成所产生的应力集中和由挥发性氧化物挥发而造成的应力释放, 从而形成致密的保护性氧化膜, 有望使难熔金属元素合金抗氧化能力获得显著提升。研究发现 Nb40Mo15Ta20W10Ti15 合金具有较高的高温氧化抗性, 其氧化增重速率比 Nb521 合金低一个数量级。

D03-106

Corrosion behavior of FeTaBTiW refractory high entropy amorphous alloys in liquid lead-bismuth eutectic with ultra-low oxygen content

Shahbaz Muhammad¹, L.L. Zhang¹, Z.Z. Jiang², X.S. Wei^{*1}

1. Shanghai Key Laboratory for Development and Application of Metallic Functional Materials, School of Materials Science and Engineering, Tongji University, Shanghai 201804, China

2. Key Laboratory of Neutronics and Radiation Safety, Institute of Nuclear Energy Safety Technology, Chinese Academy of Sciences, Hefei, Anhui, 230031, China

High-entropy amorphous alloys exhibit considerable potential as corrosion protection materials against liquid lead-bismuth eutectic (LBE) due to their disordered atomic structure and the absence of grain boundaries. However, the intrinsic dissolution corrosion behavior of high-entropy amorphous alloys in ultra-low oxygen liquid lead-bismuth eutectic remains inadequately understood. This study investigates the dissolution corrosion behaviour of FeTaBTiW refractory high entropy amorphous alloys using a sandwich-structured composite film at 550°C . The experimental results indicate that as the temperature increases, the elemental diffusion behavior varies; however, the FeTaBTiW refractory high-entropy amorphous alloy does not exhibit dissolution corrosion after exposure to lead-bismuth alloy at 550°C . The amorphous structure acted as a diffusion barrier against Pb/Bi diffusion.

D03-107

(Fe35Ni35Cr20Mn10)100-xTix 高熵合金在凝固及随后冷却过程中的相变研究

史梦川*

东南大学

本文使用真空电弧炉制备铸态 $(\text{Fe}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{10})_{100-x}\text{Ti}_x$ ($x=0, 1.96, 5.66, 7.41$) 高熵合金。采用双束扫描电子显微镜和透射电镜对合金样品的显微组织结构和化学成分进行表征。在 $\text{Fe}_{35}\text{Ni}_{35}\text{Cr}_{20}\text{Mn}_{10}$ HEA 中加入 Ti 元素, 铸态合金呈现出典型的枝晶结构, 组织由灰色枝晶主干, 枝晶间的白色和黑色组织构成。在枝晶主干区域, 基体对于体系外的其他元素具有一定容忍度, 虽然枝晶主干随着 Ti 含量的增加表现出固

溶强化的特征($x=0, 1.96, 5.66$), 但依然由单一 FCC 结构组成。当 Ti 含量过高时会有二次相(γ' 相)脱溶析出($x=7.41$)。Ti 含量的变化对枝晶间组织有明显影响。从宏观来看, 随着 Ti 含量的增加, 枝晶间区域的面积逐渐扩大, 黑色岛状结构(富 Ti 混合物)的数量同步增加。从微观来看, 在最后凝固的共晶区中, 随着 Ti 含量的提高, η_2 相在二次相中所占的体积比例逐渐增大。结合 PandatTM 相图, 讨论了 Ti5.66 高熵合金的凝固过程: 随着温度降低, 枝晶主干区域率先结晶出单相 FCC 固溶体。在这一过程中, 电负性强的 Ti 元素在 FCC 枝晶主干中不太稳定, 被排斥到枝晶间区域, 致使 Ti 元素由枝晶到枝晶间区域梯度分布。在高温环境中, 枝晶间主共晶区是一个富 Ti 的过饱和固溶体, 当温度进一步下降时, Ni₃Ti 相以针状和颗粒状的形式脱溶析出。最后凝固共晶区, 在极小的温度区间内 (1017-1009°C), 发生非平衡凝固生成 FCC 相, Eta 相, BCC 相和 Laves 相。中间过渡相 Laves 相和 BCC 相通过固相反应消失。虽然这一过程会产生 Cr₈Fe₁₆Ti₅ 相, 但 Cr₈Fe₁₆Ti₅ 相也是中间过渡相, 同样通过固相反应消失并生成 Sigma 相。最后只留下 Eta 相, Sigma 相和基体 FCC 相一起组成了 Ti5.66 高熵合金 500°C 时的组织。

D03-108

利用高通量计算快速设计和筛选高熵合金

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。

D03-109

Effect of Cr on Flame Retardancy of CoCrFeNi high-entropy alloys

王辉, 喻嘉斌, 吴渊, 吕昭平*

北京科技大学新金属材料全国重点实验室, 北京, 100086

高熵合金(HEAs)因其卓越的热稳定性, 在高温应用中的需求日益增加。然而, 与传统钛合金类似, 高熵合金在富氧环境中易燃性存在显著的安全风险。含 Cr 高熵合金(HEAs)展现出良好的阻燃性能, 但铬在调控燃烧行为中的作用尚不明确。通过相变分析、燃烧动力学和氧化层表征, 系统研究了 Cr 含量 (0-45%) 对 (CoFeNi) 100-xCr_x 高熵合金阻燃性能的影响。实验结果表明, Cr 含量与阻燃性能之间存在非单调关系, Cr 的“竞争机制”是阻燃性能是这种关系的核心驱动力, 而相结构稳定性与氧化物层状态的动态平衡决定阻燃阈值。当 Cr 含量为 30%是最优成分, 由于形成连续的液态 CrO₃ 层, 抑制了氧扩散和熔池氧化。Cr 含量过高(>30%)会促进 BCC 相的形成和 CrO₃ 的挥发, 从而加速燃烧, 破坏保护性氧化层的稳定性。热力学建模和 VEC 分析进一步阐明了随着 Cr 含量的增加, 从 FCC 结构向双相 (FCC+BCC) 结构的转变, 可将相稳定性与燃烧阻力相联系。本研究为设计阻燃高熵合金提供了机理框架, 通过平衡 Cr 诱导的氧化保护和燃烧动力学, 为研发具有优异阻燃性能应用于航空航天等高温领域的新型阻燃合金提供新认识。

D03-110

Fe35Ni35Cr20Mn10 高熵合金的电弧熔丝增材制造

潘星惠、廖恒成*

东南大学

熔丝增材制造作为一种新兴的制造技术, 适合于大型复杂零件的快速成形, 然而, 受复杂的丝材加工工艺及制备过程中合金相变的限制, 目前熔丝增材制造的研究尚少。本研究采用连续冷拉拔制备直径为 1.2mm 的 Fe35Ni35Cr20Mn10 高熵合金丝材, 将其作为电弧熔丝增材制造的原材料, 研究电弧熔丝增材制造合金件的成形性、组织结构、力学和腐蚀性能。结果表明, Fe35Ni35Cr20Mn10 高熵合金增材制造件沿堆积方向呈细小的枝晶组织, 搭接位置处组织完全熔合, 未见界面层, 实现了冶金结合。增材制造件仍能保持 FCC 单相结构, 具有与铸锭样品相当的中等强度和高塑性, 且仍能保持较好的耐腐蚀性。

D03-111**层间暂停策略调控直接激光能量沉积制备的共晶高熵合金片层结构**

何洲洋、卞西磊*

上海大学

共晶高熵合金 (EHEAs) 因其独特的异质层片结构而备受关注, 该结构赋予了合金优异的强韧性结合。增材制造 (AM) 技术通过高效成型和快速加热/冷却过程进一步发挥了共晶高熵合金的性能优势。本研究采用激光定向能量沉积 (LDED) 技术制备了近全致密、无裂纹的 AlCoCrFeNi2.1 共晶高熵合金样品, 其由无序 FCC 相和有序 B2 相交替组成, 并呈现出纳米级共晶层片结构。通过提出一种新颖简单的层间暂停策略, 发现共晶层片结构可被显著细化, 细化程度较未采用该策略时提高约 40%。优化后的共晶高熵合金表现出 1,214 MPa 的超高强度和 16.3% 的高均匀伸长率, 其强度较无层间暂停样品提升 14%, 均匀伸长率提升 47%。该共晶高熵合金的优异力学性能源于异质变形诱导 (HDI) 强化与应变硬化机制的协同作用。此外, 细化的共晶层片结构能有效缓解应力集中而导致的微裂纹萌生, 从而延缓断裂并维持塑性。本文提出的层间暂停策略为通过 LDED 工艺制备高性能金属材料提供了一种简单而有效的方法, 并具有重要指导意义。

D03-112**TiZrHfNb (Mo, Y) 系难熔高熵合金的成分优化和性能调控**

张海飞、田海霞*

江西理工大学

难熔高熵合金 (RHEAs) 展现出比镍基高温合金更优异的屈服强度-断裂韧性匹配, 有望成为新一代高强度结构材料, 但目前 RHEAs 虽然高温性能优异, 但室温脆性大、密度高等问题使其工业应用受到了较大的限制。为设计出结构简单、低密度、综合性能优异的 RHEAs, 对等原子比的 TiZrHfNbMo 的成分优化, 调控其组织性能。本研究设计了 3 组不同 Mo 成分的 TiZrHfNbMox (x: 10、15、20) 难熔高熵合金, 研究了其室温/高温力学性能和摩擦磨损性能。研究发现 Mo 成分的变化并未引起相变, TiZrHfNbMox (x: 10、15、20) 均为单相 BCC 固溶体。室温/高温压缩和摩擦磨损试验结果表明, Mo20 的综合力学性能最优异, 但是其室温断裂应变降至 24%, 这是 Mo 添加增强的固溶强化效应和其本身的特性造成的。通过试验结果可知 Mo20 的除塑性较差其它力学性能都较为优异, 可通过添加稀土 Y 进一步优化塑性。在 Mo20 的 RHEAs 分别添加质量分数为 0.1% 和 0.2% 的稀土 Y, 并对添加稀土元素的 RHEAs 进行室温/高温压缩和摩擦磨损试验。试验结果表明, 当添加 0.1%wt% 的 Y 时室温塑性和摩擦磨损性能均增强, 而当 Y 添加到 0.2%wt% 会出现缺陷影响其性能。本研究对 RHEAs 进行的成分优化, 克服了其室温脆性大、密度高等问题, 并探究了稀土 Y 对 RHEAs 性能的影响机制。

D03-113

激光增材制造 BCC/B2 共格高熵合金的强塑性匹配研究

蔡选鸿¹、王清²、李晋锋^{*1}

1. 中国工程物理研究院材料研究所

2. 大连理工大学

BCC/B2 共格高熵合金(HEAs)优异的是高温强度引起了广泛关注,但是由于低塑性引起的难以加工的技术壁垒很大程度上限制了其应用。这主要归因于传统的真空电弧熔炼(VAM)缓慢的冷却速度导致合金晶粒粗大($d > 300 \text{ nm}$)并伴有显著的宏观偏析。此外,还需要经过复杂的热处理才能获得 BCC/B2 共格组织,但由于 B2 相的亚稳特性,在热处理过程中容易导致组织失稳转变成脆性的 Laves 相, ω 相, 和 Al_3Zr_5 等相。此外,高 Al 含量的添加,会导致高体积分数的 B2 硬脆相。因此,本研究通过调控 Al 元素含量,并利用激光定向能沉积(LDED)增材制造快速冷却的技术优势,有效控制脆性相析出的同时,实现了 BCC/B2 共格组织的直接获得。所设计的低 Al 含量合金表现出极佳的复杂部件成型能力和良好的室温力学性能(屈服强度: $\sigma_{\text{YS}} \sim 1300 - 1600 \text{ MPa}$, 压缩应变: $\delta \sim 22 - 50 \%$),实现了结构功能一体化。此外,由于 BCC/B2 共格组织良好的热稳定性,合金展现出优异的高温力学性能(873 K , $\sigma_{\text{YS}} = 1124 \text{ MPa}$; 1273 K , $\sigma_{\text{YS}} = 259 \text{ MPa}$)。合金出色的力学性能主要归因于高密度的等轴晶粒边界和位错带来的晶界强化和位错强化、溶质元素带来的固溶强化以及方形 BCC 纳米粒子的析出强化。本研究为高强度和高塑性合金的设计和制造提供了新的思路。

D03-114

异质结构设计在高熵合金强韧化中的应用探索

包伟宗*

南方科技大学

针对金属材料强韧化倒置问题,本研究以高熵合金为模型材料,采用异质结构设计策略实现材料力学性能提升。以含 σ 相的 $(\text{FeCoCrNi})_{90}\text{Al}_{10}$ 高熵合金为模型,通过短时高温退火构建双峰晶粒异质结构,利用 RX 区析出的少量 σ 相($\sim 0.8 \text{ vol.}\%$)调控区域硬度差,诱导显著 HDI 应力并促进协调变形与持续加工硬化,实现高强度(1412 MPa)与高延展性(14.9%)的协同提升,其机制在于 HDI 硬化强化 RX 区并降低 σ 相/FCC 基体应变失配,有效抑制界面裂纹。在 SMAT 处理的梯度结构间隙高熵合金(iHEA)中,通过于细晶(FG)区引入尖锐界面的再结晶(RX)层构建梯度-RX 层复合异质结构,克服 FG 区加工硬化不足的限制,利用层间不相容变形协同提升 HDI 应力与应变硬化能力,获得超高屈服强度与增强的加工硬化。本研究通过上述两种异质结构设计方法,为高熵合金强韧化协同提供了有效新途径。

D03-115

硅化物强化 $(\text{TiZrHfNb})_{100-x}\text{Si}_x(x=0, 1, 5, 7, 10 \text{ 和 } 15)$ 难熔高熵合金的显微组织演变和力学性能探究

韩晓磊、刘斌斌、叶丰*

北京科技大学

高熵合金因其独特的设计方法和优异的性能受到广泛关注。其中,高温性能优异的难熔高熵合金(refractory high-entropy alloys, RHEAs)在高温应用中具有十分良好的前景。然而当温度超过 1173 K , RHEAs 常发生快速软化。为了提高 RHEAs 的高温强度,通常引入碳化物和硅化物等陶瓷相开发碳化物/硅化物增强的 RHEAs。但是目前关于硅化物强化难熔高熵合金的形貌,硅化物相的晶体结构还存在混淆甚至矛盾的结果。Si 含量对 RHEAs 微观结构的影响仍然需要深入研究。本工作选取了具有优异室温延性 TiZrHfNb 高熵合金为基础合金,利用真空感应熔炼+铜模吸铸的方法制备了硅化物增强 $(\text{TiZrHfNb})_{100-x}\text{Si}_x(x=0, 1, 5, 7, 10 \text{ 和 } 15)$ 合金,系统研究了 Si 含量对其组织和力学性能的影响。结果表明,在 $1\%-15\%$ 的 Si 含量范围内,凝固组织和硅化物类型均表现出明显的依赖性,前者由亚共晶结构转变为过共晶结构,后者由 M_3Si 型演变为四方- M_5Si_3 型硅化物,最终演变为四方和六方 M_5Si_3 型硅化物共存。硅化

物相的形成提高了合金的室温和高温强度，当 TiZrHfNb 合金中添加 15%Si 时，合金在 800°C 下的峰值抗压强度从 221.3MPa 显著提高到 511.59 MPa。由于动态回复和动态再结晶的存在，流变应力达到峰值后开始下降，且这种下降趋势在 Si 含量较高时更加明显。

D03-116

氢环境下高熵合金的力学行为及高强度抗氢脆设计

刘敏、付文清、罗杰、王占勇*

上海应用技术大学

临氢环境（如氢能储运、油气开采、核电利用、航空航天、海洋工程）关键零部件在负载时普遍面临氢脆失效风险，且材料的氢脆敏感性随强度升高而加剧。多主元高熵合金（HEAs）是极具潜力解决该瓶颈的一类新型合金。本团队开发了系列 HEAs，通过慢应变速率拉伸实验与微观表征，系统研究了其力学行为及氢致延迟断裂现象，并揭示了机理。结果表明：HEAs 在充氢条件下的力学性能显著受充氢浓度、时间及加载速率影响。在特定应变速率下，FCC 基 HEAs 展现出优异的抗氢脆性能，归因于其较低的氢扩散系数；同时，氢溶解可诱发孪生变形机制，导致强度和塑性同步提升。基于此，通过微合金化与热处理在 FCC 基 HEAs 中引入适量纳米共格析出相和多级异质结构，成功开发出兼具高强度、耐腐蚀与优异抗氢脆性能的新型 HEAs 材料，为临氢环境工程应用提供材料支撑。

D03-117

高温钼基非晶合金的形成及其相关性能

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，揭示钼基高温块体非晶合金基本结构单元特征，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，系统研究了不同类型元素对钼基块体非晶合金氧化行为，揭示钼基非晶合金抗氧化机理，进一步拓展钼基高温非晶合金的实际服役空间。

D03-118

非晶合金的原子制造及功能特性研究

童星*

松山湖材料实验室

非晶合金因其无序原子结构和优异性能在多领域具有广阔应用前景。本报告提出从原子构型角度，基于原子制造技术，自下而上精准构筑非晶结构单元，优化非晶合金的结构性能。针对非晶合金研究面临的难题，主要在“非晶形成能力-结构本征特性-功能特性优化”三个方面取得了系列创新成果：（1）通过原子制造突破了单质金属非晶形成能力极限，实现所有结构类型单质金属的非晶化，为证明非晶态是物质基本属性之一提供了关键证据；（2）采用原子制造结合先进表征手段，揭示了非晶合金的多尺度结构特征，提供了非晶材料结构不均匀性和异质结构界面处的直接结构信息，为性能调控提供了理论依据；（3）明确了构型调控和性能优化关联性，通过原子构型调控和原子制造突破了非晶合金软磁和催化功能特性优化瓶颈，成功制备了高性能非晶合金。

D03-119

使用金属玻璃模具进行微米和纳米级玻璃压缩成型

黄世科、马将*

深圳大学

玻璃微透镜阵列 (MLAs) 提供灵活的可设计性和优越的光调制能力, 使其在光通信, 传感和成像中必不可少。使用金属模具进行玻璃压缩成型 (GCM) 被认为是大规模生产玻璃微透镜阵列元件的最有前途的方法之一。然而, 在 GCM 的金属模具表面制造精细的微米甚至纳米结构是一项重大挑战。为了克服这一限制, 我们利用金属玻璃(MG)独特的热塑性成型性能开发了一种非机械方法。在锆基 MG 上制造出了结构特征为 75 μm 和 400 nm 的透镜阵列。成型的 MG 随后进行了完全结晶, 并镀上了一层非晶态的 Ir-Ni-Ta-Nb 薄膜。这一“衍生”过程产生了适用于 GCM 工艺的金属模具。所制备的模具具有出色的抗粘连性能和高温耐久性, 表面粗糙度仅约 4.6 nm, 并且在 620 $^{\circ}\text{C}$ 下进行 30 次成型循环后也未出现劣化现象。利用这些模具, 相应的玻璃元件得到了高保真复制, 其可靠的成像和聚焦性能也得到了验证。总之, 我们为大批量制造精密玻璃元件提出了一种便捷且有前景的策略。

D03-120

非晶合金的净成型

王建国*

东莞理工学院

非晶合金本身有许多优势性能, 但非晶合金形成的定量化理论尚未建立, 制备工艺的主导因素也未被全面分析和优化, 而且成型为终端产品后保持性能优势极为困难, 因为成型过程中会不可避免地引入各种缺陷。首先, 无缺陷特别是无气孔或者缩孔的非晶合金坯料难以获得; 再者, 目前所采用的加工工艺都会在不同程度引起非晶合金的结构弛豫甚至晶化, 进而造成性能的恶化。为了综合解决以上问题, 本研究工作首先将从制备角度解析非晶合金形成在理论上的充分条件, 其次将通过净成型方法直接把熔体成型为终端产品, 无需复杂的后续加工, 不但能够最大限度地保留材料的优异性能, 而且可以大幅降低加工成本。

D03-121

基于三维原子构型的非晶合金形成能力的研究

周炯、朱凡*

复旦大学

由于其结构特殊性, 非晶合金在诸多领域都展现出相比于传统金属更优异的物理与化学性能。由于非晶合金结构的复杂性以及现有实验条件的局限性下, 人们对非晶合金的认识还远远不足, 因此往往依赖与分子动力学模拟。传统的分子动力学模拟达到的冷却速率(10^{10}K/s)与实际非晶合金的制备冷却速率(10^2K/s)相差甚远, 因此不能真实的反应非晶合金的微观结构与不均匀性。本文通过 VC-SGC-MC, 结合分子动力学模拟与蒙特卡洛方法, 显著的降低了体系能量, 将冷却速率降低了数个数量级, 得到更接近真实的非晶合金模型。并通过所得模型, 分析阐明了 Zr-Cu-Ag 体系中 $\text{Zr}_{45}\text{Cu}_{45}\text{Ag}_{10}$ 的玻璃形成能力高的原因, 并观察到了模型中存在的均匀性。

D03-122

基于机器学习和 CALPHAD 方法的非晶合金形成能力和热力学性能预测研究

佟冠明*

深圳大学

为了解决含非金属元素的非晶合金体系的玻璃形成能力预测问题, 本报告提出了一种创新性的两阶段

机器学习框架。在第一阶段，通过热力学计算结合支持向量回归模型，从相图数据中提取特征，突破传统离散点方法的局限性，成功预测了特征温度，其预测精度显著优于实验测量误差范围，并实现非金属元素模量特征的完整构建。第二阶段，基于大量合金成分数据库，构建了图神经网络模型，达到了更优的分类性能。本工作通过两阶段机器学习预测方法，为含非金属元素的非晶合金设计提供了新模型与新途径。

D03-123

高能态非晶合金催化与应用研究

陈双琴*、裴超群、冯涛、兰司

南京理工大学

亚稳态合金（非晶合金、高熵合金、纳米非晶等）由于具有丰富的低配位活性位点和高吉布斯自由能，成为电化学催化剂家族中极具潜力和竞争力的新候选材料。我们主要针对含氮污水处理与再利用开展了一系列研究，包括亚稳态结构调控、催化体系设计及其环境因素影响。通过纳米晶化、纳米团簇、纳米界面等不同尺度调控非晶合金的微观结构与能量状态，用于偶氮染料降解、尿素氧化、尿素燃料电池电极材料及电解水等研究。

D03-124

非晶合金的制造成型及催化性能研究

阮文清、马将*

深圳大学

非晶合金独特的长程无序结构赋予其优异导电性、耐蚀性与催化活性，在能源转换领域具重要应用价值。针对传统催化电极活性位点不足、界面电阻大等问题，本研究基于超声振动与热塑特性，开发两种新型电极制备工艺，优化铂基非晶合金表面能与活性位点密度，提升电解水性能。主要成果如下：（1）开发老化辅助超声振动加载工艺（A-UV Loading Treatment），耦合退火与超声振动调控表面能量状态，制备铂基析氢催化电极（UV50J-Tg）。该电极在 10 mA/cm^2 下析氢过电位 47.80 mV ，塔菲尔斜率 37.23 mV/dec ，比活性较传统老化电极提升 5.9 倍。机理表明，退火诱导低能态结构，超声振动触发“结构年轻化”恢复高能态，非晶 - 晶体相协同优化催化性能，工艺在钌基合金中具普适性。（2）提出可溶模板热塑性成型工艺（DT-TP Forming），基于“溶解制造”构建微米 - 纳米多级孔结构，制备铂基双功能电极（NPMG@RuO₂）。其在 1 mol/L KOH 中析氢过电位低至 $41.5 \text{ mV}@10 \text{ mA/cm}^2$ ，超越商业铂碳电极；析氧性能接近 RuO₂，稳定性达 620 小时。多级孔结构通过亲水疏气特性增加活性位点、加速气泡排出，铂基非晶合金表面自更新特性增强耐久性，RuO₂掺杂优化吸附能，协同提升催化效率。本研究从表面能调控与孔结构设计出发，为高性能非晶合金催化电极的绿色低成本制备提供新路径。

D03-125

自支撑纳米多孔及多级孔金属玻璃催化电极实现高效制氢

蒋继汉*

深圳大学机电与控制工程学院

金属玻璃（MGs）在中性和碱性介质中通常存在析氢反应（HER）动力学缓慢的问题，其催化性能主要局限于酸性环境。本研究报道了一种新型热塑性成型技术，用于制备自支撑部分晶化纳米多孔 Pt_{56.2}Ni_{5.2}Cu_{16.8}P_{21.8} 金属玻璃催化电极（C-NPMG），以及自支撑多级孔 Pt_{56.2}Ni_{5.2}Cu_{16.8}P_{21.8} 金属玻璃催化电极（HPMG），均展现出卓越的全 pH 值 HER 活性和长期耐久性。在 10 mA cm^{-2} 电流密度下，C-NPMG 催化剂表现出超低过电位：酸性介质（ $0.5 \text{ M H}_2\text{SO}_4$ ） 18.0 mV 、碱性介质（ 1 M KOH ） 42.2 mV 、中性介质（ 1 M PBS ） 88.0 mV ；C-HPMG 催化剂表现出超低过电位：酸性介质（ $0.5 \text{ M H}_2\text{SO}_4$ ） 20.6 mV 、碱性介质（ 1 M KOH ） 26.2 mV 、中性介质（ 1 M PBS ） 31.8 mV ，性能优于大多数先进非贵金属 MGs 和 Pt 基催化剂。

值得注意的是, C-NPMG 催化剂在碱性电解液中运行 1000 小时后性能衰减可忽略不计, HPMG 催化剂在碱性电解液中运行 1100 小时后性能衰减也很小, 两种催化剂都展现出了卓越的稳定性。实验与计算分析表明, C-NPMG 催化剂优异的 HER 活性源于三重协同效应: 1) 高比面积的纳米多孔结构最大化活性位点暴露; 2) 部分晶化过程中形成的微晶-非晶界面降低了 H_2 解吸能垒; 3) C-NPMG 的分级超亲水-超疏水润湿性优化了传质过程并防止电解液腐蚀; HPMG 催化剂优异的 HER 活性源于二重协同效应: 1) 高比面积的微纳米多级孔结构最大化活性位点暴露; 2) HPMG 的微米级通孔与纳米多孔结构优化了传质过程和气体逃逸过程。本研究通过将结构纳米工程与微晶-非晶相协同效应整合于金属玻璃体系, 为解决电化学水分解中性能与稳定性难以兼顾的难题建立了新型设计范式, 为开发高性能全 pH 值 HER 催化剂提供了新思路。

D03-126

Fabrication of self-supporting hierarchical porous metallic glass for pH-universal hydrogen evolution reaction

Xingran Zhao*

Shenzhen University

The development of efficient pH-universal electrocatalysts is crucial for large-scale hydrogen production via the electrochemical hydrogen evolution reaction (HER). A simple and environmentally benign dissolution manufacturing (DM) strategy is adopted to synthesize a self-supported hierarchical porous Pt-based metallic glass (HPMG) catalyst. In a pH-universal electrolyte, the HPMG demonstrates remarkable HER performance. At 10 mA cm^{-2} , the optimal HPMG-4 catalyst shows low overpotentials of 35 mV in 1.0 M KOH, 16 mV in 0.5 M H_2SO_4 , and 54 mV in a 1.0 M phosphate buffer solution. The catalyst also exhibits a large electrochemically active surface area and outstanding stability. The hierarchical porous structure of HPMG-4 is attributed to its hydrophilic and gas-repellent properties, which are critical factors contributing to the excellent HER activity. Additionally, the continuously renewed active sites are believed to enhance the performance. Computational analyses indicate that the amorphous structure reduces the energy barrier for water adsorption and dissociation, with a hydrogen ad/desorption free energy value close to zero (-0.067 eV). In conclusion, this study provides a universal strategy for developing HER catalysts with exceptional activity and stability across diverse media.

D03-127

低能态金属玻璃的优异耐磨与催化性能

陈哲、任帅、阮文清、马将*

深圳大学

金属玻璃凭借其卓越的耐磨性、催化性等优异性能, 在广泛的工程应用领域展现出巨大的潜力。近期研究发现, 部分金属玻璃在经历多无定形转变后, 可形成一种低能态金属玻璃, 但目前对这种新玻璃相的研究还很有限。研究结果发现: (1) 当金属玻璃经历液-液转变形成一种新的玻璃相时, 其耐磨性得到显著增强。在同一体系中, 新玻璃相的耐磨性能比铸态样品提高了 104%, 相较于对应的晶态样品, 耐磨性能提升了 349%。我们认为其优异的耐磨性能归因于动态结构弛豫所证实的能量超稳定性。(2) 低能态金属玻璃展现出优异的析氢性能。对于 0.9T_g 老化样品, 其电化学性能出现下降: 在 10 mA/cm^2 电流密度下的过电位由 38 mV 升至 44.2 mV, 在 100 mA/cm^2 电流密度下的过电位从 113.2 mV 升至 131.1 mV。相比之下, 新玻璃相则呈现出性能提升现象: 在 10 mA/cm^2 电流密度下的过电位由 38 mV 降至 34.7 mV, 在 100 mA/cm^2 电流密度下的过电位从 113.2 mV 降至 104.0 mV。我们认为, 这一反常现象可归因于低能态金属玻璃中存在的中程有序结构及微观元素轻微偏聚, 这些特征赋予了低能态金属玻璃优异的析氢性能。该研究不仅为理解金属玻璃的多无定形转变及其性能提升机制提供了新的视角, 而且为高性能金属玻璃材料的开发提供了有效的策略, 对推动金属玻璃在实际工程应用中的进一步发展具有重要意义。

D03-128

高活性 Fe-Si-B 非晶合金催化剂的构建：比表面积提升与晶化协同增强染料降解性能杨陇鹏¹、李春燕^{*1,2,3}、翟文正¹、刘建辉¹、唐云龙¹、南红兵¹、寇生中^{1,2}

1. 兰州理工大学材料科学与工程学院
2. 兰州理工大学省部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室
3. 兰州理工大学温州泵阀工程研究院

Fe 基非晶合金因其优异的催化性能在染料污水降解领域展现出广阔的应用前景。本研究以化学脱合金法制备的大比表面积 Fe-Si-B 非晶合金条带为研究对象，系统考察了其在类芬顿高级氧化法和电化学法催化降解亚甲基蓝 (MB) 染料溶液中的性能，并通过热处理手段进一步优化其催化活性。采用 XRD、SEM、XPS、EPR 和电化学测试等手段对材料的结构、形貌、元素价态及反应机理进行了深入分析。研究结果表明：(1) 化学脱合金可在保持非晶结构的同时显著增大比表面积，通过调控酸浓度、腐蚀时间和温度等参数，可在条带表面形成纳米孔和脊状结构，但腐蚀演化存在临界阈值；(2) 大比表面积非晶条带在酸性条件下的类芬顿降解效率较原始条带提升一倍以上，其机制源于表面活性位点增加促进 OH 自由基的生成，且表面氧化物的动态更新确保了催化稳定性；(3) 电催化降解中，大比表面积条带的性能较石墨电极提升 123.1%，电极能耗降低 30%，其机制涉及 Fe 离子溶解释放、絮凝作用及 $\cdot\text{OH}/\cdot\text{O}_2^-$ 自由基的辅助氧化；(4) 热处理通过诱导 $\alpha\text{-Fe}$ 、Fe₃Si 和 Fe₂B 等晶体相析出，形成原电池效应并降低电子功函数，同时表面纳米尖峰结构进一步增加活性位点，使电催化性能显著提升，且电极稳定性保持良好（质量损失率约 10%）。本研究为 Fe 基非晶合金的结构设计及催化机制提供了新见解，对其在污水治理中的应用具有重要指导意义。

D03-129

A new insight into surface oxidation of Fe-based metallic glass for textile wastewater treatmentXiang Zhang¹, Yingjie Song¹, Zhaoyang Li¹, Xiang Xiong², Weiming Yang¹, Haishun Liu^{*1}

1. China University of Mining and Technology
2. Central South University

Removing azo dyes from effluents poses an environmental and socio-economic challenge due to their carcinogenic and mutagenic risks. The Fenton-like reaction using Fe-based metallic glass (MG) is feasible for wastewater remediation; however, the oxidation-induced passive film will impede the further reaction of Fe-based catalysts, especially for Fe-based MG recycled from end-of-life soft magnetic products. Here, the oxidation behavior of Fe_{73.5}Si_{13.5}B₉Cu₁Nb₃ MG ribbons and the consequential effect on the degradation performance of acid orange 7 have been systematically investigated. When the Fe-based MG is oxidized at low temperatures (<520 °C), a continuous and dense oxide layer forms, shielding the zero-valence iron (ZVI) from interacting with dye molecules. As the oxidation temperature rises to 580~680 °C, numerous $\alpha\text{-Fe}(\text{Si})$ nanocrystals and CuO nuclei will appear and degrade the protective oxide film during the rapid high-temperature oxidation (RHTO), enhancing the azo dye decolorization rate. Further oxidation at higher temperatures (>700 °C) will increase the oxide layer thickness and consume ZVI, thereby blocking the Fenton-like reactions. Notably, the RHTO could reactivate the inactivated Fe-based MG and endow the inactivated MG with a high dye degradation constant k of 1.5 min⁻¹, indicating a promising method for reusing the end-of-life Fe-based MG electronic products for textile dye wastewater treatment.

D03-130

黄铁矿/铁基金属玻璃协同降解偶氮染料及机理研究韦靖^{*1,2}、郑志刚³、邱兆国³、曾德长³

1. 广州航海学院
2. 广州交通大学（筹）

3. 华南理工大学

铁基金属玻璃 (FeMGs) 作为还原剂被广泛应用于含多种污染物的废水修复领域, 但其仍存在表面钝化及 pH 适用范围窄的问题。本研究采用黄铁矿提升 FeMGs 对偶氮染料的去除性能。当使用 FeMGs/黄铁矿复合体系时, 二者协同效应显著改善了对金橙 II 偶氮染料的去除效果, 其反应速率常数 (k_{obs}) 达 0.218 min^{-1} , 较单一 FeMGs 体系 (0.114 min^{-1}) 提升 91%。在黄铁矿存在的条件下, 金橙 II 在初始 pH (pH) 5.0~10.0 范围内均可有效去除; 而单一 FeMGs 体系 (10 g/L) 在 pH=10.0 时去除效果不佳。去除机理研究表明: FeMGs 与黄铁矿的协同作用通过强化 FeMGs 表面腐蚀进程, 加速 $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ 氧化还原循环, 促使体系中吸附态 Fe^{2+} 含量显著提升——该物种被确认为金橙 II 降解过程中的主导活性物种。本工作提出了一种利用矿山废物黄铁矿强化 FeMGs 处理染料废水的新策略。

D03-131

Fe 基非晶涂层表面改性生物 Mg 合金的可控降解

张香云*、张咪、丁国强

兰州理工大学

Mg 及其合金密度和弹性模量接近人骨, 可减少应力屏蔽现象的发生, 且降解产生的镁离子和微碱性环境可促进新生骨的生长, 可在体内自行降解, 无需二次手术取出, 作为骨植入材料有诸多优势。但 Mg 及其合金降解过快, 与骨折愈合时间不相匹配限制其临床大规模应用。为此, 我们采用冷喷涂技术在其表面喷涂生物相容的 FeSiB 非晶涂层, 以调控其降解速率。通过 XRD、SEM 分析涂层形貌及相组成; 采用维氏硬度计、纳米压痕仪、万能试验机等对其力学性能进行评价; 采用电化学工作站、析氢法、浸泡失重法等测试其在模拟体液中的体外降解性能, 最终确定在镁合金表面制备 Fe 基非晶涂层的最优工艺参数。研究结果显示气体压力为 5 MPa , 载气温度为 800°C , 喷涂距离 30 mm 时涂层沉积效率最高。当走枪速度为 300 mm/s 时, 单道次制备的 Fe 基非晶涂层厚度为 $83 \mu\text{m}$, 孔隙率仅为 0.75% 、非晶率为 92.56% 、水接触角为 $112.6 \pm 2.85^\circ$, 涂层硬度约为镁合金基体的 10 倍, 结合强度为 27.8 Mpa 。降低走枪速度可增加涂层厚度, 当喷枪移动速度降低至 100 mm/s 时, 单道次喷涂涂层厚度可增加至 1 mm 左右。涂层厚度可通过走枪速度实现可控。此外, 通过热处理也可调控涂层的降解速率。随着热处理温度和时间增加, 涂层的晶化体积分数增加, 降解速率提高, 所以也是对其腐蚀降解速率进行可控调节的有效方法。

D03-132

非晶合金的能量状态调控与其压缩变形行为

彭振

江苏大学

D03-133

多级仿生层状异构高熵合金的创制、性能调控机理及关键拓展应用

时培建*、钟云波

上海大学 材料科学与工程学院 核电关键材料全国重点实验室

汇报人聚焦高熵合金材料中普遍存在的强度-塑性倒置难题, 取得多项突破: 1) 通过磁控高温梯度定向凝固, 创新设计制备出仿生鱼骨结构的层片异构共晶高熵材料, 实现超高强塑性, 并具有优异的裂纹容限能力[1]; 2) 提出基于微层片遗传工程的多级层片异构设计方法, 解决超细晶造成的强塑性倒置难题[2-6]; 3) 构造蚕茧状位错网增强的异质层片结构, 解决高密度位错造成的强塑性倒置难题, 突破传统共晶材料强塑性记录[7]。基于上述一系列机制和手段, 制备出长尺寸的多级仿生纤维层状异构高熵高导铜铬合金, 强度达到 654 MPa 、电导率达到 $79.3\% \text{ IACS}$ ($\phi 14.8 \text{ mm}$), 突破我国第三代高铁接触线材料制备和高性能化难题, 综合性能处于国际领先[8]。

D03-134**抗菌铁基中熵合金的力学及热变形行为研究**

赵燕春*、马虎文、于志琦

兰州理工大学

抗菌铁基中熵合金在应力加载下表现出相变诱导塑性和孪晶诱导塑性效应，且与大肠杆菌和金黄色葡萄球菌相互作用 24 小时后，铁基中熵合金体系的抗菌率均达到 99.9%，其中优化的合金成分在 6 小时内就可达到 99.9% 的抗菌率，表明激活抗菌活性的时间更短。由态密度、功函数和表面能的第一性原理计算表明，该成分表现出最佳的离子释放能力，其功函数为 3.7 eV，表面能为 1.9J m⁻²。类苍耳仿生结构（抗菌相中的纳米级球形颗粒，尺寸小于 350 nm 有利于离子渗透到细胞中）的静电吸附效应增强了离子抗菌、电子抗菌和催化抗菌的协同作用。通过 Arrhenius 方程建立本构模型验证了动态材料模型（DMM）的适用性，进而基于 DMM 建立了中熵合金的热加工图，确定最佳加工参数，低堆垛层错能确保动态再结晶成为“安全区”的主要软化机制，并通过第一性原理计算确定该 MEA 的态密度（DOS）为 162.1 eV，显著低于 Ni 和 Fe，显示出强高温稳定性，且 DOS 随变形量增加略有升高。

D03-135**无中间退火下(CoCrFeNi)94Al3Ti3 高熵合金极薄带的微结构演化和变形机理研究**

马胜国*、吴蕾

太原理工大学

极薄带因其独特的性能，在精密电子元件、柔性电子设备和光学与航空航天等领域应用广泛。但目前对高熵合金极薄带的研究较少，因此限制了其在实际应用中的发展。我们通过累积冷轧法制备出了厚度约为 50μm 的(CoCrFeNi)94Al3Ti3 高熵合金极薄带，同时利用 SEM、TEM、EBSD 和准静态拉伸性能测试等技术研究了不同厚度下合金的微观组织和力学性能演化规律。结果表明，合金薄带在 0.1mm 时其抗拉强度最大，达到 1428MPa；但在 0.05mm 时出现了加工软化现象，此时抗拉强度约为 1160MPa。微观组织表明，从 5mm 到 0.1mm，(CoCrFeNi)94Al3Ti3 高熵合金薄带的强化机制主要是位错强化和晶界强化，而继续轧制到 0.05mm 时，力学性能降低是由于晶界处异号位错的湮灭和表面层效应导致了加工软化。该研究揭示了高熵合金极薄带制备过程中的微观机理，同时也可以为高熵合金极薄带未来的科学研究和潜在应用提供一定的数据参考。

D03-136**颗粒强化难熔熵合金球形粉制备技术及粉末成型工艺研究**

顾涛、赵宇宏*、侯华、武立

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。

D03-137**调节激光增材制造工艺对 NbTiW 中熵合金力学性能的影响**

谢增、刘学*

铌基合金具有熔点高、延展性和比强度高优点，有望替代传统镍基合金作为高温结构件材料应用于航空航天、熔炼等领域。近年来，增材制造技术(AM)被广泛应用于制备高温合金结构件。本研究利用激光直接沉积(LMD)技术成功制备了 50Nb-30Ti-20W 合金块体，并通过改变激光功率及调节合金中的氧、氮含量来调节合金的力学性能。通过对合金微观结构进行表征，揭示了合金在晶间及晶体内会析出钛的碳氧氮化物，因此通过调节析出相的含量可以调节合金的室温屈服强度。结果表明，在一定范围内，50Nb-30Ti-20W 合金拉伸屈服强度随工艺参数中激光功率升高，先增大后减小；合金的拉伸屈服强度随合金中氧、氮含量的升高而增大。制备的 NbTiW 合金的拉伸屈服强度最高可达到 1250MPa 以上，在高熔点合金中性能较为优异。合金中析出物调节合金强度的机制主要为析出强化及固溶强化，合金的拉伸屈服强度与析出物的含量呈正相关，通过调节析出物含量可有效调节合金的拉伸屈服强度。本研究为 LMD 制备的 50Nb-30Ti-20W 中熵合金的力学性能调节方式提供了见解。

D03-138

激光定向能量沉积 Hf-Nb-Ta-Ti-Zr 难熔高熵合金的微观组织与力学性能研究

王潇潇¹、姚波²、吴煜烨*¹

1. 北京航空航天大学

2. 西北工业大学

激光定向能量沉积 (Laser directed energy deposition: LDED) 为难熔高熵合金微观组织调控和力学性能提升提供了新的技术途径。本研究以 Hf-Nb-Ta-Ti-Zr 难熔高熵合金为对象，系统探究了激光功率与扫描速度对晶粒尺寸演变的影响规律，并揭示了其与力学性能之间的关联机制；结合有限元模拟阐明了热场分布特征及其在晶粒细化中的作用机制。研究表明，微观组织形态与力学性能之间存在显著协同效应，其中最细晶粒尺寸展现出高强度与高断裂延伸率的最佳匹配关系。胞状组织通过限制位错运动实现强度与延展性协同提升；而树枝晶组织易诱发应变局域化而导致过早断裂；等轴晶组织则通过均匀化变形机制改善了延展性，但以牺牲部分强度为代价。本研究为 LDED 工艺参数优化及高性能难熔高熵合金的微观组织与力学性能调控提供了理论支撑与技术指导。

D03-139

基于液态金属的高熵材料的可控合成

曾梦琪*

武汉大学

高熵纳米材料具有广阔的组分选择空间、复杂的原子构型以及原子水平的异质性，这为材料设计、性能优化和应用探索提供了新的发展契机。多主元混溶理念使其在能源存储和转换以及光热转换等领域有着广阔的应用前景。实现高熵纳米材料的可控制备是挖掘材料性质和推动应用发展的基础。然而，元素理化性质的巨大差异给其可控合成以及调控带来了挑战。目前的合成策略集中为高能的超快速反应，对精细控制形貌和结构的包容性较低。我们提出了基于液态金属的高熵材料的温和条件下的制备方法。以镓为代表的液态金属与大多数元素具有较负的混合焓，可以用作反应媒介，克服元素间的不混溶性。液态金属所提供的低温液态环境也可以在动力学上加速元素扩散，促进均匀混合。进一步地，通过调控制备过程中的反应热力学和动力学过程，可实现温和条件下高熵合金结构的精细控制，包括多面体结构和图案化结构的构筑，并以此为基础探索了其在催化等领域的应用。

D03-140

亚稳高熵合金形变诱导马氏体相变的精细调控及强韧化机理研究

李方杰*

强韧化是金属结构材料永恒的课题。面心立方结构（FCC）高熵合金因优异的低温韧性，成为在低温环境应用极具潜力的候选材料，但是其较低的强度成为工程应用的瓶颈。为了充分发挥相变诱导塑性（TRIP）效应对合金强韧化的作用，本项目拟基于热力学和第一性原理计算设计富 Fe 亚稳高熵合金，明确“成分—层错能—相变路径及程度”之间的依赖关系；然后通过解耦应变速率与绝热温升对马氏体相变的独立作用，研究应变速率与温度对马氏体相变路径和相变动力学的影响规律，并通过理论计算温度对层错能的影响，建立马氏体相变预测模型；最后基于温度补偿的原则，通过感应加热动态调控合金的层错能，有序激发位错滑移、形变诱导孪生（TWIP）和 TRIP 等多重塑性变形机制，量化它们对强化的贡献，并揭示它们对强韧化的协同机理，构建亚稳高熵合金的强韧化调控准则。本研究对丰富高熵合金的强韧化机理，促进高熵合金在极端环境工程装备中的应用具有重要意义。

D03-141

冷轧及热处理对 CoCrFeNiMn0.5 高熵合金组织结构和力学性能的影响

刘志宇、李泽、刘景顺*

内蒙古工业大学

本文系统研究了退火处理对冷轧态 CoCrFeNiMn0.5 高熵合金组织结构和力学性能的影响规律。研究结果表明：铸态合金呈典型的树枝状结构，经大变形冷轧后其内部发生晶粒细化并转变为变形带状结构。退火处理能够有效抑制合金的晶内偏析、释放其残余内应力，显著提升合金塑性。当退火温度为 800 °C 时，合金发生完全再结晶。合金经 1000 °C-1h 退火处理后，其内部观察到大量退火孪晶和孪晶边界，此时合金塑性变形机制由位错滑移和孪晶主导，显著提升其塑性（断后伸长率 A 为 56.1%）。合金的断裂类型由冷轧态准解理断裂转变为退火态韧性断裂，这与合金内析出退火孪晶有关。此外，合金经 500 °C-1h 退火处理后发生异常硬化，合金内部析出纳米级富 Cr 相，使合金发生弥散强化并钉扎位错，显著增强合金的硬度值，可达 472.8 HV。总之，相比其他传统合金，冷轧+退火处理所获取的 CoCrFeNiMn0.5 高熵合金，因其优异的综合力学性能，使其在装备用特殊零部件、关键材料器件等实际工程应用领域中具有重要的应用潜力。

D03-142

Evolution of microstructure and mechanical properties of Fe-30Mn-8Al-1.2C low-density austenitic steel during aging

易俊卓*

中南大学

To understand the effects of aging treatment on microstructure, mechanical properties, and deformation behavior of the Fe-30Mn-8Al-1.2C low-density austenitic steel, we systematically investigated the microstructural changes under different aging times at 600 °C and the corresponding mechanical properties. The as-annealed steel features nano-sized long-range ordered domains (<1 nm). The increase in aging time led to continuous growth of κ -carbides and the increase of lattice misfit between the precipitated phase and the matrix. The steel aging at 600 °C for 30 min already results in the precipitation of cuboidal L1₂ nano-sized intragranular κ -carbides (4.5 nm). The low-density steel exhibits pronounced precipitation hardening capability during aging at 600 °C, with peak aging achieved within approximately 30 min of thermal treatment. This strengthening mechanism is governed by the intragranular κ -carbides, which significantly enhance yield stress (YS, $\Delta YS \approx 440$ MPa), Young's modulus (E, $\Delta E \sim 12$ GPa), and hardness ($\Delta HV \approx 167$). However, prolonged aging (>8 h) initiates over-aging through precipitate coarsening, causing significant property degradation. According to the results of Electron channeling contrast imaging (ECCI) characterization, the deformation mechanisms of the as-annealed

steel and the steel aged at 600 °C for 30 min are dynamic slip band refinement. Moreover, the decrease in the work-hardening ability after aging is due to the inhibition of this mechanism.

D03-143

具有晶粒纳米梯度结构的双相 CoCrFeMnNi 高熵合金的协同强化机制

马虎文、赵燕春*、相甲铨、苏玉

兰州理工大学

金属结构材料的强度和塑性之间的“倒置”关系限制了其在更高层次和更广泛范围内的应用，已成为制约金属材料发展和应用的主要瓶颈。具有有序结构和无序成分的高熵合金（HEA）也很难摆脱这一约束。本研究通过分子动力学（MD）模拟研究了晶粒纳米梯度（GNG）结构和相变诱导塑性（TRIP）对 HEA 强化和增韧的协同作用。当热诱导 HCP 相（VHCP）的体积分数为 21% 时，观察到最佳的 TRIP 效应（即宏观应变为 15%，HCP 相的体积分数增加了 14.41%），并且在消失的横向层错（SF）区域首次观察到显著的塑性行为。研究发现，位错密度的增加（例如，VHCP=0%，位错密度从 $1.94 \times 10^{17} \text{ m}^{-2}$ 增加到 $3.04 \times 10^{17} \text{ m}^{-2}$ ）和粗细晶粒界面的累积有助于非均匀变形诱导（HDI）强化和硬化机制。强化机制可分为三个阶段：（a）在早期，通过位错和 SF 增强。（b）在中期阶段，它主要依靠 HDI 的增强。（c）在后期，FCC 发生向 HCP 的相变。

D03-144

Ni₂CoFeV 中熵合金分级有序相强韧化

顾雷*^{1,2}、陈翔¹、赵永好^{1,2}

1. 南京理工大学

2. 河海大学

中、高熵合金中大多数长程有序相由于其特定键合的复杂晶体结构具有本征脆性，往往表现出较差的延展性。我们提出一种设计策略，通过分级有序化在单相面心立方（FCC）结构 Ni₂CoFeV 中熵合金中逐步引入三方结构 κ 和立方结构 L1₂ 金属间相，实现强度数倍提升。这种三相中熵合金在室温下具有超过 1.6 GPa 的超高抗拉强度和 30% 的优异延展性，其强塑性协同效应超越了多数已报道的中、高熵合金。 κ 相中反常的多滑移系位错剪切和层错，以及耦合的 L1₂ 和 FCC 相中的纳米层错网络、Lomer-Cottrell 位错锁和高密度位错的协同激活，共同促进了应变硬化能力的显著提升和优异延展性的实现。这项工作采用分级有序相强韧化，为设计超强韧金属结构材料提供了一个新范式。

D03-145

积跬步至千里-利用频率域调控非晶合金性能

尚宝双

松山湖材料实验室

传统外场调控手段通常采用温度处理或应力处理，在高温或高应力状态下，利用退火、强塑性变形等来调控微观原子结构状态，以此来实现宏观性能的改变。然而调控过程中过高的应力和温度容易导致材料结构出现宏观损伤及产生剪切带引发破坏，从而使得材料可靠性降低。近年来在非晶外场调控中，涌现出了一批新的方法，如通过冷热循环、循环加载等周期外场作用即频率域来改变非晶合金性能，本报告将基于分子动力模拟结果来介绍和讨论频率域，如周期温度场、周期应力场等[1-4]调控非晶合金性能的思路与机理，为实验上利用频率域提升非晶合金性能提供思路参考与理论借鉴。

D03-146

超稳金属玻璃的形成与表面类液体动力学行为

罗鹏*、白海洋、汪卫华
中国科学院物理研究所

通过物理气相沉积制备超稳玻璃通常需要将衬底加热至约 0.7–0.9 倍玻璃转变温度 (T_g)。然而,我们发现,仅通过将沉积速率降低一个数量级,即可在室温 ($0.43T_g$) 下制备出锆基超稳金属玻璃。相比于传统快速淬制备的普通玻璃,超稳金属玻璃的 T_g 提高约 60 K,力学性能提升约 11%,在高温退火过程中展现出更强的抗晶化能力,并具备更均匀的微观结构。通过 T_g 对沉积速率的敏感性估算,在 $0.43T_g$ 条件下形成超稳金属玻璃所对应的表面弛豫时间约为 17 s,这与扫描隧道显微镜测量的结果一致,表明金属玻璃表面即使在低温下也具有类液体的动力学行为。在低能离子辐照作用下,金属玻璃表面可形成有序的原子级链滴结构,而相同成分的晶态材料表面则不会出现这一现象,进一步印证了金属玻璃表面独特的类液体动力学特征。

D03-147

基于理论结合实验的合金二元合金体系高温熔体/过冷液体短程序结构演变研究

王淳、林晓航*
山东大学材料科学与工程学院

基于 Wulff 团簇模型与高温液态 XRD 实验,对含金二元合金 (AuXCu_{1-x} 、 AuXAg_{1-x} 二元匀晶合金, AuXSi_{1-x} 二元共晶合金体系) 中多个成分点的熔体结构进行了系统的研究,尤其是对非晶形成能力强的 AuXSi_{1-x} 二元共晶合金体系中过冷液体结构进行研究。本模型将熔体结构中原子有序度进行处理,建立熔体有序结构在热力学上统计平均意义下的等效体系模型,基于此模型结果对实验中获得 HTXRD 数据进行模拟,证明了该模型的准确性。并利用该模型研究了合金成分、温度对熔体短程序的影响规律,以及在液相线附近发生的预形核现象。特别的,对于非晶形成能力强的 AuXSi_{1-x} 合金,进一步地研究了其过冷液体的短程有序 (SRO) 结构演变,这为从原子层面深入理解非晶态结构及其形成过程奠定了基础。

D03-148

纳米压痕实验探索不同能量状态非晶合金微观结构非均匀性

付胜强、乔吉超*
西北工业大学

非晶合金微观结构非均匀性对于理解其物理及力学性能至关重要,本研究借助纳米压痕仪详细研究了高压扭转处理后 $\text{Zr}_{50}\text{Cu}_{40}\text{Al}_{10}$ 非晶合金的微纳力学行为。基于协同剪切模型计算剪切转换区体积及原子数,探索了 STZ 的尺度变化规律。研究表明,高压扭转处理非晶合金可以导致较低能垒的 STZ 的形核并在低能量状态下诱导高密度剪切带的形成。通过微观结构表征发现,剪切带网络的形成及其相互交割作用可有效促进能量耗散,从而显著提升非晶合金的宏观塑性变形能力。基于蠕变实验的应变率敏感性分析进一步证实,高压扭转导致的机械软化效应源于 STZ 激活能垒的降低。

D03-149

基于电子显微三维原子重构的非晶态材料的结构表征研究

黄煌*
复旦大学材料科学系

非晶态材料是一类原子结构长程无序的新型多组元合金,其原子在三维空间中的排布直接决定了材料的物理和化学性质。因此,精确定位非晶态材料中原子的三维位置,是认识其结构与性能的关键。本研究采用电子显微三维原子重构技术(AET),将球差校正透射电镜、先进探测器、数据采集方法与强大的三维图像重构和原子追踪算法相结合,在不需要晶体学假设和先验信息的条件下,获取材料原子分辨尺度下的

三维成像以及原子坐标等信息。此方法可为非晶态材料的短中程有序提供直接测量证据，揭示非晶态材料短中程结构和微观形成机制，并对理解材料的构效关系具有重要意义。

D03-150

D-mannitol 冰川相具有条幅分解式结构特征

王家宁*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

液-液转变 (liquid-liquid transition) 是过冷液体在不涉及长程有序变化的情况下从一种无序态转变为另一种无序态的过程。“冰川相” (glacial phase) 概念最早用于描述 TPP 分子液体的液-液转变终态，其特征是具有宽 X 射线散射峰的无定形特性。D-mannitol 是一种重要的分子玻璃，其液-液转变过程在研究玻璃形成和结构演变方面具有代表性。然而，针对单组分冰川相的微观结构特征及其与过冷液体的相变动力学仍存在许多未解之谜。对冰川相微观结构表征和液-液转变动力学的研究有助于揭示无序态相变机制、完善玻璃材料理论，并为新型功能材料设计提供指导。

D03-151

结构-功能一体化高熵合金设计、制备与应用

王明亮、赵尚、卢一平*

大连理工大学

兼具高强塑、耐腐蚀、防污等结构-功能一体化合金材料是深海装备、生物医用等领域的重大需求，传统以单一组元为主的合金材料多性能相互矛盾，难以兼顾，亟需突破传统设计桎梏，开发新型合金材料及制备技术。高熵合金将合金成分设计扩展至相图的中心区域，极大拓展了合金成分设计范围，具有显著的鸡尾酒效应，有望同时兼具优异的力学和功能特性。本学术团队基于高熵合金设计思想，结合 CALPHAD 方法和实验验证，成功开发出系列结构-功能一体化新型高熵合金，包括高强塑-抗菌-耐蚀高熵合金、高强塑-软磁-耐蚀高熵合金、高强塑-低模量-抗菌-生物相容性高熵合金等，并系统分析了多性能平衡机制，从而为开发新型结构-功能一体化合金材料开辟了新思路。

D03-152

高稳定性高熵非晶合金的开发及其性能研究

王拓*

新疆大学材料科学与工程学院

本文利用高熵合金成分设计，开发出了一系列新型 Co-Cr-Mo-Nb-B 高熵非晶合金，并研究了其与其涂层的性能。结果表明，该系列高熵非晶合金均具有高的热力学稳定性，玻璃化转变温度高于 1020 K，初始晶化温度高于 1100 K。硬度和杨氏模量最高分别可达 18.1 GPa 和 267 GPa。通过雾化制粉和超音速喷涂技术制备的涂层维氏硬度达到 1589.4 HV。该涂层相比于 316 不锈钢和商业应用 Fe49.7Cr18Mn1.9Mo7.4W1.6B15.2C3.8Si2.4 非晶涂层表现出更加优异的耐腐蚀性和耐磨性能。

D03-153

高熵钢强塑性协同提升的析出强化新机制

王峰、宋旻、王章维*

中南大学

沉淀强化一直是提升金属材料强度的关键手段。本研究报道了一种轻质高熵钢在低温拉伸过程中，位错剪切硬脆 B2 相（通常被认为是不可剪切的金属间化合物）的强韧化新机制，该现象的成因主要归因于

亚纳米级局部化学有序结构和多主元固溶强化引起的超高位错滑移阻力。这一机制不仅充分利用了本不可剪切的硬脆纳米析出相所提供的显著强化和硬化效果，还通过随变形进程的连续剪切作用实现了优异塑性。因此，新研发的高熵钢在低温下表现出高达 2GPa 的超高抗拉强度，同时实现 34% 的卓越均匀延伸率。此项研究为设计高性能结构材料提供了全新策略。

D03-154

Ni-Co-Cr 体系中熵合金中温区的力学性能和变形机制研究

马瑞旗、全阳*

烟台大学精准材料高等研究院

析出强化型镍基高温合金在 760°C 中温区出现的塑性骤降问题，长期困扰其工程应用。此类合金的变形行为受析出相、晶界、氧化等多因素耦合影响，导致塑性损失的本质机制难以厘清。为解耦复杂因素，本研究选用无析出相的基底 Ni-Co-Cr 中熵合金作为研究体系，系统探究成分变化对中温力学性能的作用机制。研究发现，随着 Co 和 Cr 含量的增加，合金的屈服强度和抗拉强度显著提高，加工硬化能力增强，但塑性明显降低。组织分析表明，Co 和 Cr 的增加降低了层错能，促进孪晶形成，增强加工硬化效应，但同时抑制了塑性变形。中温变形过程中，晶界滑移和局部再结晶现象明显，表明晶界在变形中具有一定影响。此外，晶界氧化可能对裂纹萌生有一定促进作用，但并非主导因素。本研究系统揭示了该合金体系在中温条件下的变形行为、组织演化规律及微观变形机制。

D03-155

界面与构型设计优化 CuCrZr/CuAlCrFeNi_{2.5} 高熵合金复合材料的强度与导电性

洪陶、谢国强*

哈尔滨工业大学（深圳）

高强度和高导电性材料是航空航天、国防军工、电气通信及轨道交通等战略领域的核心需求，尤其适用于高应力与高效电力传输场景。然而传统铜基材料中，高强度和高电导率这两种性能往往相互抵触，不可兼得。本研究设计了 CuAlCrFeNi_{2.5} 双相高熵合金（HEA）为复合材料的增强相，并采用球磨-放电等离子烧结（BM - SPS）工艺进行制备。该复合材料独特的双相增强多模态界面构型，实现了强度与导电性的协同提升。通过调控烧结温度优化界面结合，在 723 K 的条件下，该复合材料展现出 852 ± 20 MPa 的屈服强度以及 39.76 ± 0.13% IACS 的电导率。

D03-156

共格析出相强化共晶高熵合金的组织与力学性能研究

张笑宇、王增鑫、陈淑英、陈苗苗、全阳*

烟台大学

为满足航空航天动力部件轻量化与复杂零部件一体化制造需求，兼具轻质、高强高塑及优异打印性的 Al-Co-Cr-Fe-Ni 体系共晶高熵合金（EHEAs）成为研究热点。然而，相较于成熟的镍基高温合金，该体系合金在中高温下存在组织失稳及强度显著衰减的问题，严重制约其高温应用潜力。为解决这一关键瓶颈，本研究通过引入 Ti 元素，开发了一种 L₁₂ 纳米析出相强化的 Al-Co-Cr-Fe-Ni-Ti 共晶高熵合金。该合金铸态呈现典型的 FCC（面心立方）与 BCC（体心立方）双相层片状共晶组织。通过时效热处理，成功在 FCC 相基体内原位析出高密度、共格的 L₁₂ 有序强化相。本研究系统表征了合金经高温长时间暴露后的微观组织演化规律，以及力学性能，结果表明合金的高温强度与抗软化能力获得有效改善。本研究为发展新一代轻质、高性能、高热稳定性的增材制造用高温结构材料提供了新策略与实验依据。

D03-157

基于界面能与固体润滑效应调控的电枢表面涂层设计

张诚*

华中科技大学

电磁发射武器是一种依靠强电流瞬时推进电枢驱动弹丸高速飞行的高科技武器，已被认为是未来海战的战略武器之一。然而，电磁发射武器的服役条件是在电-磁-热-力等多场耦合环境中，在发射过程中，Al 合金电枢可能会熔化并粘附在 Cu 轨道表面，从而降低轨道发射效率与服役寿命。针对枢/轨界面粘着磨损难题，本文提出了一种基于界面能调控的新策略，成功实现枢/轨界面粘着磨损大幅降低。首先，我们发现通过在 7075Al 合金电枢表面构筑与 Cu 非混溶（具有正混合热）的 W 薄膜，可以使摩擦系数（COF）降低 45%，Al 粘附量降低 100%。分子动力学模拟结果表明，Cu/W 之间在摩擦过程中形成了无序非晶界面层，有效匹配接触界面的原子运动并产生了润滑效应，从而导致摩擦系数降低。而 Cu/Al 间的高粘附能促进 Al 原子的扩散并在界面产生冶金反应，导致 Cu 表面发生严重的黏着磨损。其次，考虑到电磁发射涉及多场耦合作用与苛刻的服役环境，进一步提出枢/轨界面能和薄膜力学性能双调控策略实现减摩降磨。基于这一理念，开发出了性能更加优异的系列电枢表面改性涂层（W-M，M 为固态润滑剂），其中，通过 W 相来调控界面能，而 M 相来调控摩擦学性能。电磁发射条件下，我们发现采用改性后的电枢进行发射，Cu 合金轨道表面粘附量比采用未改性电枢降低 94%。我们的工作表明，在电-磁-热-力多场耦合条件下，电枢表面涂层需同时具有高的断裂抗力以及正界面能，才能更好的满足电磁发射的服役要求。

D03-158

一步法制备优异软磁性能与力学性能兼具的高熵软磁合金纤维

杨卫明*

中国矿业大学

高性能软磁合金纤维在能量转换、传输和储存中起着至关重要的作用。传统的非晶合金纤维具有优异的软磁性能，但几乎没有拉伸塑性。随着高技术装备、多功能复合材料、柔性电子等的发展，在长期服役中能够承受拉伸、扭转和剪切载荷的微米尺度软磁纤维的需求量大增。这些纤维不仅需要优异的软磁性能，还要有更小的直径、高的抗拉强度和塑性。最近的研究发现，高熵合金因其独特的成分和结构，有望突破软磁与力学性能相互制约的瓶颈。但现有的高熵合金纤维通常使用拉拔工艺制备，存在工艺复杂、能耗高、直径大（毫米级）、无磁性等问题。长期以来，制备兼具优异软磁性能与力学性能的高熵合金纤维仍面临挑战。我们通过内圆水纺丝技术，一步法制备出直径 200 微米以下的高熵软磁合金纤维。该淬态软磁纤维在 23 %延伸率下具有 674 MPa 的抗拉强度，矫顽力为 8.1 Oe、饱和磁化强度为 116 emu/g、居里温度为 770 K。通过调控 L12 相共格纳米晶的析出，还可以进一步优化该纤维的强度和矫顽力。这项工作为制备高性能软磁纤维提供了新思路，突破了软磁纤维塑性过低的瓶颈，对推动高熵合金的新应用具有重要意义。

D03-159

Ni_{2.1}CoCrFeTa_{0.2} 高熵合金的双超点阵相设计及其强化行为

曹榕天、卢健麟、杨中晟、王松宇、王雷、李俊杰、王志军、王锦程、何峰*

西北工业大学

L1₂ 和 D0₂₂ 超点阵相在高熵合金中表现出了卓越的强化效果和良好的热稳定性。研究表明，将这两种析出相引入到一种合金中可进一步提高合金的综合性能。然而，由于 L1₂ 和 D0₂₂ 相在时效过程中的竞争行为与相互作用尚不明确，在高熵合金中引入双超点阵析出相仍有挑战。本研究发现在 Ni_{2.1}CoCrFeTa_{0.2} 中添加极少量的 Al 元素（0.5 at. %），可以有效促进 L1₂-D0₂₂ 双超点阵相形成。结果表明，随着铝含量从 0 增加到仅 1 at. %，Ni_{2.1}CoCrFeTa_{0.2} 中的主要析出物先从单一的 D0₂₂ 相变为 L1₂-D0₂₂ 双相，最后变为单一的 L1₂ 相。为测试双超点阵的热稳定性，将样品置于 650°C-750°C 的不同温度条件下进行退火处理。当温

度高于 700°C 时, D0_{22} 相变得不稳定, 双超点阵结构被破坏; 而在 700°C 时效 84h 时, $(\text{Ni}_{2.1}\text{CoCrFeTa}_{0.2})_{99.5}\text{Al}_{0.5}$ 得到最优性能, 抗拉强度达到 1550MPa, 断裂伸长率达 16%。

D03-160

Extraordinary strength-ductility synergy in chemically complex intermetallic alloys with hierarchical dual-phase nanostructures

Weicheng Xiao, Tao YANG*

City University of Hong Kong

Developing structural materials with an excellent combination of strength and ductility is a paramount task in advanced industries. Conventional intermetallic alloys (IMAs) usually suffer from insufficient ductility, which severely restricts their practical applications. In this study, we developed a novel high-performance bulk chemically complex intermetallic alloys (CCIMAs) in the multicomponent (Ni, Co)₃(Si, Ti, Al) system. The microstructure, mechanical properties, and associated deformation behaviors were systematically investigated through combinational analyses such as three-dimensional atom probe tomography (3D-APT) and transmission electron microscope (TEM). By multi-step cold rolling and annealing path, the newly developed (Ni, Co)₃(Si, Ti, Al)-type alloys show a unique hierarchical dual-phase nanostructure, exhibiting extraordinary strength and ductility at ambient temperature. The yield strength, tensile strength, and ductility can reach ~1011 MPa, ~1690 MPa, and 35 %, respectively. Detailed TEM and 3D-APT analyses revealed that the coherent Co-rich disordered nanoparticles precipitated out from the L12 matrix region. These reversely precipitated nanoparticles are mainly sheared by superlattice dislocation pairs and generate a significant strengthening effect. Superlattice stacking faults (SSFs) were also observed at large deformation due to the reduction of stacking fault energy and high stress level that reaches a critical value. These findings are expected to accelerate the innovative design of ultra-strong yet ductile intermetallic compounds for structural applications.

D03-161

通过稳定化工程与部分再结晶制备强韧轻质难熔高熵合金

刘鸿娟、雷智锋*

湖南大学

近年来, 轻质难熔高熵合金因其优异的比强度和抗高温软化能力受到广泛关注。然而, 轻质难熔高熵合金常常因脆性金属间化合物的形成而存在室温脆化问题。为解决该问题, 本研究结合 "相稳定化工程" 策略与部分再结晶, 开发了兼具高强度与高延展性的轻质难熔高熵合金。实验发现, 在 $\text{Ti}_{2-x}\text{Nb}_x\text{Al}_{0.5}\text{V}_{0.5}$ ($x=0, 0.5, 1.0$, 摩尔比) 轻质难熔高熵合金中, Nb 含量的增加提高了体心立方 (BCC) 相的稳定性, 并有效抑制了脆性金属间化合物的形成, 使拉伸延伸率从 $8.0\% \pm 1.4\%$ 提升至 $30.8\% \pm 5.6\%$ 。此外, 实施部分再结晶处理进一步增强了合金的应变硬化能力, 使屈服强度提高至 1154 ± 20 MPa, 同时仍保持 $15.8\% \pm 1.3\%$ 的延伸率。与此同时, 优化后的合金密度为 5.94 ± 0.06 g/cm³, 比屈服强度达到 194 MPa cm^{3/2}g。强度的提升源于部分再结晶组织和有序 BCC (B2) 纳米畴的形成, 而位错的平面滑移机制则有助于合金获得显著的延伸率。本研究为设计兼具高强度与高延展性的轻质难熔高熵合金提供了一种新方法, 有望加速其作为工程材料的实际应用进程。

D03-162

CoNiV 中熵合金锯齿流变振动模态的数学物理模型

刘博浩、兰爱东、王重、乔珺威*

太原理工大学

锯齿流变行为的出现对合金在工业中的应用有一定的影响,不同类型的锯齿可以反映材料内部的变化细节。本文研究了不同温度和应变率下 CoNiV 中熵合金的锯齿流变行为,通过对临界应变以及锯齿类型的分析发现正 Portevin-Le Chatelier (PLC) 效应及逆 PLC 效应。统计分析结果表明,正行为到逆行为的转变是由动态应变时效达到饱和所引起的,通过计算动态应变时效的强化效果,利用沙堆模型进一步证明这种转变的结果可由多种简单规则合成获取。利用变分模态分解算法分解锯齿波形的振动模态,对三种不同类型锯齿的振动模态进行拟合优化,建立了描述振动模态的统一数学模型。

D03-163

少量 Si 的添加对 FeCoNiAl 中熵合金软磁性能和微观结构的影响

徐晖*、吕梦馨、谭晓华

上海大学

磁性中、高熵合金作为一种新型的软磁材料而备受关注,但其磁性能与商用软磁材料仍存在一定的差距,阐明软磁参数与微观结构的关系以及相关的磁性机理,对于提升高熵合金的软磁性能是至关重要的。本文在综合性能较好的 FeCoNiAl 中熵合金中添加少量 Si,采用铜模熔炼后吸铸的方法制备出 FeCoNiAlSi_x ($x = 0, 0.01, 0.015, 0.03$) 中熵合金,利用软磁测量系统、MFM、SEM、EBSD、TEM 和 APT 手段对合金的软磁性能和微观结构开展研究。主要研究内容和得到的结果如下:研究了在 FeCoNiAlSi_x ($x = 0, 0.01, 0.015, 0.03$) 中熵合金的软磁性能。结果表明: $x = 0.01$ 合金呈现出最佳的直流软磁性能和交流软磁性能。与不含 Si 的合金相比,初始磁导率(μ_i)、最大磁导率(μ_m)、矫顽力(H_c)、直流磁滞损耗(P_u)和交流总损耗($P_s, f = 950$ Hz)分别改善了 36.5%、5.5%、11.7%、18.1%和 45%。EBSD 的结果表明: $x = 0.01$ 合金具有较大的晶粒尺寸(44.8 μm),可以减少晶界的含量并降低晶界对畴壁移动的阻碍;并且该合金中易造成应力集中的 $2^\circ \sim 5^\circ$ 的小角晶界的含量较少(2.7%),这有利于降低合金的矫顽力和增加最大磁导率。HRTEM 和 APT 的结果表明:在 $x = 0.01$ 合金中,B2 纳米析出物与 BCC 基体的晶格错配度很小,而且该合金在晶界处有 Fe 的富集;晶界处的铁磁性元素(Fe + Co + Ni)的含量为 76.12 ± 0.58 at%,高于晶粒内的铁磁性元素的含量。这可以促进晶粒间的交互耦合作用,降低合金的矫顽力和提高直流软磁性能。另外,提高电阻率可以降低高熵合金在高频下的涡流损耗。

D03-164

耐 1000 °C 高熵合金跨尺度设计与多性能协同优化

伍诗伟*¹、Wentao Yan²、杨守峰¹、王刚³、C.T. Liu⁴

1. 中国科学院重庆绿色智能技术研究院

2. Department of Mechanical Engineering, National University of Singapore, Singapore, 117575

3. 先进核能材料全国重点实验室,上海大学,上海,200444

4. Department of Materials Science and Engineering, City University of Hong Kong, Hong Kong, 999077

高熵合金 (High-entropy alloys) 因其独特的成分灵活性和可调的力学性能,在从低温到高温的广泛温度范围内的应用中备受关注。然而,高熵合金在 1000 °C 以上高温条件下的变形行为和性能仍缺乏系统研究。本报告将介绍我们在一种新型多组分、富镍高温高熵合金 (MnNiHEA) 的合金化设计上取得的最新进展 [1-3],该合金可在 1000 °C 及以下的温度下运行。我们将重点介绍旨在提升力学、耐高温、耐腐蚀/腐蚀和成型制造性能的跨尺度设计策略,并通过案例详细展示特定的成分/组织耦合如何增强相稳定性、抗粗化性能及宽温域 (-196–1000 °C) 内的强塑性协同。报告还将介绍在热机械加工和激光粉末床熔融增材制造方面实现的成型性优化。讨论的主题包括元素选择、相配置、热力学和力学特性以及微观结构改性,并揭示驱动实现这种多性能优化的协同机制。这些发现为开发具有卓越性能的下一代耐热材料提供了有价值的见解,特别是在航空航天、能源动力等相关行业的极端环境应用中。

D03-165

Au-Ag-Cu 基贵金属中熵合金的微观组织和力学性能研究付丽*¹、毛勇²、葛华龙²、何俊杰²、李才巨¹、易健宏¹

1. 昆明理工大学

2. 云南大学

Au-Ag-Cu 基贵金属中熵合金具有突出的化学稳定性、优异的电学性能和良好的塑性成形性能，被广泛应用于电接触材料。目前，针对 Au-Ag-Cu 基贵金属中熵合金微观组织演变与力学性能之间关联机制的深层次理解尚不清楚。本文以两种具有代表性的 Au-Ag-Cu 基贵金属中熵合金（AuAg20.3Cu51.8 和 AuAg37.4Cu14.8Ni6.9）为研究对象，结合热力学相平衡模拟计算和 XRD、SEM、EBSD 和 TEM 等微观组织表征技术，系统研究了 Au-Ag-Cu 基贵金属中熵合金在时效和变形过程中的微观组织演变以及力学性能变化趋势。研究表明，Au-Ag-Cu 基贵金属中熵合金表现为典型的时效强化和加工硬化行为；AuAg20.3Cu51.8 和 AuAg37.4Cu14.8Ni6.9 合金经固溶处理后分别形成面心立方（FCC）结构单相固溶体和 FCC 结构双相固溶体，AuAg20.3Cu51.8 合金经时效处理后在晶界处产生不连续析出沉淀，在晶内产生调幅分解和化学短程有序，AuAg37.4Cu14.8Ni6.9 合金经时效处理后在双相固溶体中均生成化学短程有序。晶内调幅分解和化学短程有序是 Au-Ag-Cu 基合金强化硬化的主要原因，而晶界不连续析出沉淀是 Au-Ag-Cu 基合金软化的主要原因。该研究为揭示贵金属中高熵合金的强韧化机制提供了理论指导。

D03-166**机械稳定型高熵合金温度调控的位错增塑机制**汤伟哲¹、郭博静¹、马月旻²、崔丁聪¹、杨中晟¹、王雷¹、王志军¹、李俊杰¹、王锦程¹、王循理²、何峰*¹

1. 西北工业大学 凝固技术国家重点实验室 西安 710072

2. 香港城市大学 物理系和中子散射研究中心 999077

面心立方高熵合金，例 NiCoCrFeMn、NiCoCrFe、NiCoCr、NiCoV 等，在低温环境表现出强度和塑性同时提升的特性。这一性能提升现象通常归因于机械亚稳态效应的激活，然而，作为晶体塑性本征起源，位错滑移在低温环境中的具体作用机制尚未得到充分的研究。通过调控位错运动学，Ni₂CoCrFe 高熵合金可实现力学性能的显著优化。在未发生变形孪生与相变前提下，合金在低温变形(173K)展现出优于室温的强度(~672 MPa)，延伸率(~67%)及应变硬化能力。通过原位同步辐射 X 射线衍射实验，揭示该合金应变硬化能力提升及塑性改善源于温度控制的位错存储速率与位错组态的耦合作用。研究证实，温度通过热激活调控位错运动学，决定塑件变形过程位错的存储行为与组态演变，热激活通过影响位错滑移势垒延迟了动态回复的激活并减缓其动力学。此外，位错激活体积与位错结构敏感的强化因子 $\alpha(\sigma = M\alpha\mu b^{1/2})$ 之间呈现的线性关联表明，热激活决定位错构型的演化规律。低温改变位错滑移模式，促进位错平面滑移和滑移的离域化。该研究为理解低温环境下金属材料塑性变形机制提供了新的视角。

D03-167**高比强度 TiVAlZrNb 轻质多主元合金的微观组织及变形机制研究**

张成全、郭胜锋*

西南大学材料与能源学院

本研究中采用真空电弧吸铸法成功制备了三种具有高比强度(SYS>300 MPa cm³ g⁻¹)及良好室温塑性的轻质多主元合金 (Ti60V20Al10Zr5Nb5((ZrNb)10)、Ti50V20Al15Zr7.5Nb7.5((ZrNb)15)、Ti40V20Al20Zr10Nb10((ZrNb)20))，对其铸态以及压缩态微观组织进行了细致表征，结合表征结果对表面硬度、压缩强度以及变形机制进行分析。结果表明，三种合金均为单一 BCC 固溶体，微观组织随着 ZrNb 含量增大而细化(平均晶粒尺寸分别约为 76 μm、40 μm、21 μm)。硬度及室温压缩测试结果表明，(ZrNb)15 样品表面硬度和压缩强度分别约为 402 HV 和 1560 MPa，而(ZrNb)20 样品的表面硬度与压缩强度分别约为

500 HV 和 1760 MPa, 相比于(ZrNb)10 (306 HV 和 1130 MPa)都有明显提升。准原位压缩结果显示, 三种样品中均为位错滑移为主导(晶粒转动为辅)的变形。但值得注意的是, 随着变形量增加(ZrNb)10 样品中的主要滑移系{123}<111>转变为{110}<111>; (ZrNb)20 则是主要滑移系{123}<111>转变为{112}<111>; 而(ZrNb)15 样品中是{123}<111>, {112}<111>, {110}<111>三者相互转换且总体含量相对稳定。结合微观组织特征分析表明, 随着 ZrNb 含量增大合金的硬度以及的主要滑移系强度均明显增大, 主要归因于合金的固溶作用、晶粒细化、成分梯度界面以及锯齿晶界协同。此外, 随着应变量的增加三种合金单个晶粒内部均出现多个可驱动的滑移系, 促使合金能够同时具有较高强度以及良好塑性。本研究可为制备低成本高性能 LMPEAs 以及其变形机制提供重要参考。

D03-168

晶格畸变促进多主元合金的均质位错成核

王露凌¹、曹阳^{1,2}、赵永好^{*1,2}

1. 南京理工大学

2. 河海大学

严重的晶格畸变已经被证明是多主元合金(MPEA)具有优异的位错存储能力并因此同时提高强度和延展性的主要因素。然而, 大块材料变形过程中由晶格畸变引起的强化可能与小尺度的变形不同步, 这是因为小体积变形下的初始塑性(弹塑性转变)通常由均质位错成核介导。尽管人们对 MPEA 的初始塑性给予了极大关注, 但晶格畸变和纳米压痕下的首次 pop-in 事件之间的相关性尚未得到很好的理解。一方面, 在纳米压痕下原位研究局部晶格畸变需要专用工具和复杂的实验技巧。另一方面, 很难排除块体金属材料中预先存在的缺陷对早期弹塑性转变的影响。而位错和空位等缺陷可能会通过触发异质位错成核而显著降低首次 pop-in 事件的载荷。基于此, 我们通过大规模原子模拟对总共 14 种面心立方金属材料进行了纳米压痕测试, 以研究纳米尺度下促进均质位错成核的物理起源, 其中包括纯 Ni、二元 NiCo 合金、以及一系列 NiCo 基中/高熵合金。我们发现, 对于面心立方合金的纳米压痕变形, 晶格畸变参数 δ 与归一化临界接触压力 p_c/E_s 之间存在良好的幂律依赖性。这意味着无论成分、堆垛层错能和化学不均匀性如何, 都可以通过晶格畸变来描述晶体材料弹塑性转变的特征。我们推测, 对于其他晶格结构的合金, 如体心立方和密排六方结构也存在类似的幂律依赖关系, 因为在无缺陷晶体中触发均质位错成核都需要达到一定程度的相对原子位移。我们的工作阐明了晶格畸变在完美晶体中介导均质位错成核的主导作用, 并证明了严重的晶格畸变是多主元合金在小尺度变形下触发较早弹塑性转变的主要原因。

D03-169

基于纳米尺度不均匀结构的金属玻璃力学性能调控

高萌*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

金属玻璃由于原子尺度的结构无序性和金属价键的特点, 拥有很多优异的物理和化学性能, 是一类潜力巨大的新型金属材料。但是, 由于缺乏有效的实验表征手段和原子结构模型, 金属玻璃微观结构和力学性能之间的本征关系仍然是未知的。最近, 研究人员发现金属玻璃中存在微纳米尺度的结构不均匀性, 而且这些不均匀结构与其塑性变形、形核晶化、弛豫耗散等行为都存在着紧密关系, 可以作为调控金属玻璃力学性能的微观结构基础。基于此, 报告人围绕金属玻璃纳米尺度不均匀结构的定量表征、各种内外部条件对纳米尺度不均匀结构的影响规律以及纳米尺度不均匀结构对金属玻璃力学性能的调控机理等开展系列研究。相关研究结果将促进人们对金属玻璃不均匀结构的全面认识, 加深对其变形机理的理解, 为金属玻璃中微观结构和宏观力学性能本构关系的建立提供重要的实验数据。

D03-170

空间环境下的非晶合金增材制造工艺研究

刘明*¹、赵少凡¹、白海洋²、汪卫华^{1,2}

1. 钱学森空间技术实验室
2. 中国科学院物理研究所

随着深空探索领域的不断发展,空间环境下的增材制造技术被认为是实现地外长期任务的必要发展途径。空间环境下受资源等的约束,利用地外资源进行原位制造,受到了极大的关注。不论是利用地外星壤直接进行的成形制造,或者是利用地外星壤冶炼出的矿产资源进行制造,都与地面现有的制造工艺有着巨大的差异。基于现有在模拟空间环境下进行的增材制造研究,本文基于成形过程中熔体或粘流体受真空、微重力等条件的影响,提出不同制造工艺过程中受空间环境影响的关键工艺参数,利用落塔等试验装置进行技术验证,为后续空间环境下的增材制造技术提供关键技术支撑。

D03-171

钛基高熵非晶合金热稳定性及结构演化行为研究

孙康、胡屹元、江浩然、王刚*

上海大学

通过结合原位同步辐射 X 射线、高分辨率透射电子显微镜和热分析,研究了一种设计的钛基化学复杂金属玻璃的原子尺度结构演化及其在高温下的高热稳定性。结果表明,在连续加热过程中,这种化学复杂体系经历了连续多态非晶态转变,并伴随着短程有序结构的多步转变。此外,研究表明,当含硼的短程有序结构在高温下形成时,与第一近邻原子壳层的扩张相关,而中程尺度上的原子协同重排导致第二和第三近邻原子距离的减小。通过 HRTEM 和 HAADF-STEM 检查揭示的这些热稳定的短程和中程原子尺度结构,使得研究的复杂金属玻璃在过冷液态区域的高温下展现出极高的抗结晶热稳定性。当前的研究结果为我们提供了化学复杂玻璃合金非晶化和热稳定性的原子尺度机制的见解。

D03-172

超声振动下非晶合金的特种环境焊接

李路遥¹、袁晨晨²、马将*¹

1. 深圳大学
2. 东南大学

焊接技术的演进深刻推动了人类文明的进步。尽管现代连接工艺在常规制造、建筑和航空航天领域已臻成熟,但其在水下、强腐蚀、易爆及深低温等极端环境中的应用仍存在根本性局限。这一挑战凸显了开发适用于此类严苛工况的便捷可靠连接方法的迫切需求。为此,本研究提出一种创新策略,巧妙地将超声振动技术与金属玻璃材料相结合,成功实现了在上述极端条件下跨材料体系的多材料高效连接。该方法的核心在于利用超声振动诱导的瞬时塑性变形,协同金属玻璃独特的粘性流动行为,从而展现出对晶体/非晶态以及块体/薄带/粉末等多元形态材料前所未有的普适兼容性。所得连接接头的机械强度可媲美母材(高达 1904 MPa),并可通过精确调控材料配比,实现其机械性能(400-1450 HV)与磁学性能(0-158.6 emu/g)的精准设计。这一技术突破不仅为海洋工程、极地勘探、油气开采及空间探索等极端环境应用构建了变革性平台,更开创了面向可编程性能复合材料结构的通用设计范式。

D03-173

高熵金属玻璃的微观结构及动态行为研究

蒋婧*¹、鲁振²、雷忠林¹、任世乐¹、加藤秀实³

1. 河北工业大学
2. 中国科学院物理所
3. 日本东北大学金属材料研究所

随着高熵合金的发展, 构型熵对合金材料性能的影响成为近期的热点问题。在我们前期的研究中发现高构型熵显著作用与金属玻璃的空间异质性, 从而影响了玻璃转化过程, 高熵金属玻璃的动力学与热力学玻璃转化温度出现了解耦合现象。“玻璃转化”是关于玻璃物理学与材料学中尚未解决的关键问题之一, 在玻璃转化过程中, 粘性液体被“冻结”成固态或者说结构阻滞状态。由于阻滞的机制统一, 热力学的玻璃转化温度“ T_g ”及动力学玻璃转化温度 (α -弛豫温度) “ T_α ”具有相同的变化趋势。对比三种金属玻璃体系的热力学与动力学玻璃转化之间的相关性, 我们发现高熵金属玻璃呈现出动力学玻璃转化被抑制的现象, 即具有较低 T_g 的高熵金属玻璃却出现较高的 T_α , 这种玻璃转化温度解耦合的现象与高混合熵效应导致的纳米级空间异质性有关。同时, 高构型熵有利于调控非晶无序相的纳米晶化行为, 形成非晶/纳米晶复合双相结构, 提高材料的催化性能。该结果对理解高混合熵对金属玻璃的动力学影响及设计具有独特物理、机械和催化性能的新型金属玻璃具有重要意义。

D03-174

通过相选择析出增强中熵合金的强度-塑性协同效应

蔡伟金、王章维*

中南大学粉末冶金研究院

析出强化是高性能中/高熵合金发展的关键, 然而潜在析出多样性给析出强化带来很大的挑战。本工作展示了一种应用于 (Ni67.2V32.8) 90Ti5Al5 中熵合金的相选择析出设计策略, 以增强合金的强度-塑性协同。950°C退火后, 该合金中形成多种析出相, 包括 L21 相、 σ 相和 HCP 相。然而, 退火温度提高 50 °C, 除 L21 相外, 其余析出相被去除。通过密度泛函理论计算, 阐明了相选择析出的形成机理。这种选择性的沉淀方法诱导了脆性到韧性的转变, 导致合金的延伸率从 4% 提高到 43%。值得注意的是, 1000 °C 退火的中熵合金极限抗拉强度保持在 ~ 1.4 GPa, 超过无析出的 Ni67.2V32.8 合金 (~ 1.1 GPa), 且延伸率维持在同一水平。分析模型表明, 强度的增加既归因于析出强化, 也归因于析出相的钉扎作用导致的晶粒细化强化。特别地, 深入研究了 L21 相的复杂变形响应, 包括滑移台阶的形成和从体心立方到体心四方结构的相变, 并通过实验表征和分子动力学模拟揭示了潜在的机制。FCC 基体与 L21 析出相的共变形缓解了应变过程中相界处的应力集中, 进一步保持了基体的微带诱导塑性直至变形后期。这种复杂变形响应导致了优异的应变硬化, 从而显著提高了塑性。综上, 本研究通过选择析出坚硬但可变形的沉淀物, 为制造强韧性的中/高熵合金提供新的见解。

D03-175

超声振动增强非晶态金属流变成型纳米线森林及其单根高灵敏度温度传感器

马将*、黄金标

深圳大学

金属纳米结构的可控快速制造在现代微纳器件如机械、电子、光学和传感等发挥核心作用, 然而, 由于化学还原、成型压力限制等问题, 大规模的纳米线森林成型工艺还未得到开发。通过动态调控超声-温度场耦合作用, 不仅实现完全填充模版 ($52\mu\text{m}$) 的高长径比纳米线森林的大规模成型制备, 还实现 20 nm 的极细纳米线成型。通过动力学和有限元模拟分析验证了超声振动通过高频剪切诱导的黏弹性滞后效应、界面摩擦矢量反转及应力场均匀化三重协同作用, 显著提升了成型能力和降低成型压力和时间。基于此构建的单根纳米线温度传感器展现出高灵敏度 $-0.6\%/^{\circ}\text{C}$ ($-100\sim 100^{\circ}\text{C}$), 线性度 $R \approx 0.999$ 。该工作突破高长径比金属纳米结构规模化制造瓶颈, 在微纳器件制造和温度检测具有广泛应用前景。

D03-176

非晶合金的弛豫动力学

王兵*

西北工业大学

非晶合金作为一种典型的亚稳态材料，弛豫行为是其本征物质特征，这种非平衡物理现象和非晶合金材料物理及力学性能演化密切相关，如塑性变形、应力松弛、热稳定性、玻璃转变等非晶合金非常重要且基础的性能。但由于非晶合金结构的无序性和复杂性，其缺陷的表征一直是此领域的难点问题，因此非晶合金弛豫行为的物理机制、各弛豫行为之间的关联，及弛豫行为和力学、物理性能之间的关联仍待进一步探索，成为了非晶合金材料领域的核心问题。非晶合金力学性能的调控同时也需要对其力学理论更加深入的认识，从而实现非晶合金微观尺度的深入认识及更加有效的力学性能调控。作者在计算模拟方面实现了与实验相似、规律一致且平滑的弛豫温度曲线。涉及的计算模拟方法为分子动力学、动态力学弛豫及等构型系综相结合的综合方法，并在分析过程中综合原子物理、逾渗等物理理论，探究弛豫行为的微观机制及其相互关联特征。同时采用实验手段研究非晶合金的多种力学行为（应力松弛、蠕变、弛豫行为和应力循环加载等），建立了新的力学模型理论更加深入地认识了非晶合金的应力松弛、蠕变等力学行为，为认识非晶合金的微观图像在理论上给出的论点支持，并延伸出多种有效调控非晶合金能量状态的新方法。

D03-177

基于玻璃超慢老化动力学的地质定年新方法

赵勇¹、张华平¹、陈自强¹、赵睿²、张博*¹、白海洋²、汪卫华^{1,2}

1. 松山湖材料实验室
2. 中科院物理研究所

准确测定地质事件的年代对于理解行星历史与演化至关重要。玻璃材料中同位素含量极低，难以采用传统的放射性同位素定年方法。亚稳态玻璃因其物理老化行为可在形成后持续演化，其瞬时物理性质与年龄之间存在确定对应关系，为发展基于动力学的测年方法提供了可能。然而，传统理论模型在描述远低于玻璃转变温度（ T_g ）下的超慢、非线性老化动力学时面临显著挑战，现有平衡态模型常严重高估了弛豫时间，甚至超出宇宙年龄。本文系统提出一种“玻璃时钟效应”测年新方法，发展出一套基于材料脆性指数的经验公式，可精确预测多类玻璃（如金属玻璃、琥珀和月球玻璃）在非平衡态下的有效弛豫时间（ τ_{eff} ）。该方法可类比同位素测年技术，不同玻璃具有对应的“动力学衰变常数”，使得该方法可有效测定从数十年到数亿年甚至数十亿年的时间尺度。该方法不仅为地质与行星演化研究提供了新的测年工具，也可作为传统测年技术的重要补充。

D03-178

基于分数阶微积分的描述非晶合金弛豫行为的粘弹性本构方程及其物理内涵

陈一鸣、乔吉超*
西北工业大学

非晶固体的弛豫行为通常用拉伸指数函数（KWW 函数）或幂律形式来描述，但这样的描述缺乏物理基础；而传统的粘弹性力学本构模型则存在参数过多难以准确反映其内部微观结构信息等问题。本研究以 Zr 基非晶合金为代表，通过引入分数阶微积分，建立了描述金属玻璃弛豫行为的分数阶粘弹性本构模型（MF 模型），在减少方程参数的同时，发现其在描述金属玻璃弛豫行为时与准点缺陷理论（QPD 理论）在数学层面高度一致。并通过动态力学分析仪研究了 Cu50Zr43Al7 非晶合金退火前后在温度域的力学弛豫谱，进一步阐明了从力学角度出发的 MF 模型和从物理角度出发的 QPD 理论的一致性。同时在分子动力学模拟中，模拟了 Cu50Zr43Al7 非晶合金的退火过程，并发现了二十面体团簇的聚集和扩展，又由于其在力学响应中贡献于弹性变形部分，因此我们将二十面体团簇的变化与 MF 模型和 QPD 理论中的参数变化相关联，丰富了二者的微观结构内涵。在此基础上通过计算退火前后的原子构型熵，分析了熵增原子在退火过程中的演化，更为直接的在模拟中证明了 QPD 理论的准确性。

D03-179

超声振动诱导老化非晶合金塑性恢复

陈建宇*、任帅、马将
深圳大学

非晶态材料的老化是不可避免的，并且会导致性能恶化。在非晶合金中，老化效应会引起结构弛豫，导致机械性能下降和加工难度的提高。因此，开发一种有效的方法来逆转非晶合金的衰老刻不容缓，并且极具挑战性。在这里，我们报告了一种简单的超声振动加工方法，可以在 0.4 秒内逆转 Zr 基非晶合金的老化。铸态样品在长时间老化后完全失去其塑性变形能力。但老化样品经过超声振动处理后塑性恢复到 14.5%，是铸态样品的 1.5 倍。这种独特的塑性恢复现象伴随着结构焓和玻色峰强度的强烈恢复，这与原子对分布函数分析揭示的局部结构无序化相一致。这些发现表明，超声振动为恢复老化玻璃和设计高性能非晶合金提供了另一种有效途径，并进一步揭示了非晶合金的结构演化机制。

D03-180

通过改良循环弹性加载方法实现锆基块体金属玻璃的年轻化

王旭阳^{1,2}、黎明灿*^{1,3}、陈自强²、张博²

1. 新疆大学物理科学与技术学院
2. 松山湖材料实验室
3. 新疆大学材料科学与工程学院

块体金属玻璃 (BMGs) 在室温下的脆性严重限制了其广泛应用。弹性加载是提升 BMGs 塑性最普遍的非破坏性回春方法之一，但若要达到理想的性能改善效果，通常需要较长的保载时间或较多的循环次数。本研究采用了一种改进的高效循环弹性加载方法，通过限制材料在弹性加载循环中的回弹，成功实现了 $\text{Zr}_{55}\text{Cu}_{30}\text{Al}_{10}\text{Ni}_5$ 块体金属玻璃的回春。具体而言，仅施加数次弹性加载循环后，该材料的塑性即获得显著提升——铸态样品的塑性从约 0.49% 增至四次循环后的最大值约 4.46%，尽管其强度相应有所降低。这种塑性的增强伴随着强度的降低，主要归因于自由体积的快速增加。增大的自由体积在块体金属玻璃样品中形成了更多“软区”，有利于多重剪切带的萌生。与此同时，弹性模量表现出相对稳定的行为，这可能是自由体积与样品中二十面体有序结构之间相互作用的结果。本研究提出了一种简单而有效的方法来提升块体金属玻璃的塑性，有望拓展其应用范围。

D03-181

剧烈变形 Zr 基大块金属玻璃亚 T_g 弛豫过程的中程序结构研究

刘思楠^{1,2}、姚忠正¹、兰司*¹

1. 南京理工大学
2. 香港城市大学

大块金属玻璃 (BMGs) 的塑性与剪切带密切相关，然而由于剪切带的快速扩展特性导致其难以直接观测，剪切带的结构起源仍未被充分揭示。本工作通过研究退火过程中的局域原子尺度响应，分析了剪切带在热弛豫过程中的微观结构演化。采用两种特定设计的剧烈变形方法：冷轧 (CR) 与高压扭转 (HPT)，对 Zr 基大块金属玻璃进行变形预处理，以生成具有不同自由体积分数和回春状态局域序构特征。原位同步辐射衍射结果表明，经过剧烈变形处理的样品在亚玻璃化转变温度 (sub- T_g) 下热弛豫过程中，中程有序结构演化特征明显强于原始铸态样品。其中，经 HPT 处理的样品表现出最高的剪切带体积分数和分布复杂性，同时其有序化过程的增长速率也最为显著。此外，在原位拉伸实验中，该样品在中程尺度上展现出类似的有序化机制：随着应变的增加，原子团簇连接方式由以 2 原子连接主导转变为以 3 原子连接，这一变化促进了强度的提升。原子团簇连接方式的转变，可能解释了在亚 T_g 热弛豫或拉伸过程中，剧烈变形金属玻璃剪切带中异常出现的中程有序结构特征。本工作为剪切带原子结构起源提供了新见解，有助于深入理解金属玻璃的塑性变形机制。

D03-182

老化辅助的超声振压实现多孔非晶合金的制备及其应用

林嘉庆*

深圳大学

玻璃材料的老化是不可避免的，它总是导致性能退化。在金属玻璃中，这种老化效应带来了结构弛豫，导致机械性能和加工性能的恶化。通过超声振动（UV）处可以逆转 MG 的老化过程。然而，经过 UV 处理后，老化样品能量态变高，恢复了塑性。同时其电化学性能也发生了很大的变化。不仅有腐蚀电位的变化；析氢性能都有比较明显的变化。更重要的是在相同条件下，超声回春的样品能更容易脱合金出均匀多孔结构，且此多孔结构在非贵金属催化剂领域有着优异的析氢、析氧性能。

D03-183

热塑性成形 Zr 基非晶合金光栅结构及性能研究

李春燕^{*1,2,3}、张亦舒²、侯少杰²、寇生中^{1,2}

1. 兰州理工大学省部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室
2. 兰州理工大学材料科学与工程学院
3. 兰州理工大学温州泵阀工程研究院

非晶合金在过冷液相区具有良好的可加工性，可实现各种微结构的成形，这一特性拓展了非晶合金的功能性应用。本研究以 $(\text{Zr}_{0.6336}\text{Cu}_{0.1452}\text{Ni}_{0.1012}\text{Al}_{0.12})_{97.4}\text{Er}_{2.6}$ 非晶合金为基材，采用热塑性成形技术制备光栅结构，并根据 Arrhenius 理论建立了 $(\text{Zr}_{0.6336}\text{Cu}_{0.1452}\text{Ni}_{0.1012}\text{Al}_{0.12})_{97.4}\text{Er}_{2.6}$ 非晶合金的本构模型，结合 DERORM-3D 仿真模拟，探究了合金在微通道中的填充行为。同时以非晶合金光栅为模具，对聚甲基丙烯酸甲酯（PMMA）和 D-FK61 玻璃进行热压成形，并且对两种材料的样品进行形貌表征和功能性测试，探究其在实际应用中的可行性。研究表明：（1）最佳热塑性成形参数为温度 703 K、应变速率 $1 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ 、载荷 1200 N，对应光栅深度 100 μm ，轮廓清晰且非晶结构保持完整。热塑性成形后非晶合金的纳米压痕硬度和弹性模量得到显著提高。电化学测试表明热塑性成形提高了合金耐蚀性。对热塑性成形后的光栅结构进行功能性评估后发现光栅深度 100 μm 时，吸收率达 94.21%，接触角 121.837°，兼具优异抗反射与疏水性能。（2）通过 Arrhenius 理论建立的非晶合金的本构模型准确性较高。模拟结果表明，在温度或应变速率较高时，合金的流速分布不均匀现象明显。在较低的应变速率下，数值模拟的载荷-行程曲线与实际实验结果基本一致，随着应变速率升高为 $1 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$ 时，数值模拟的载荷-行程曲线与实际实验曲线差异较大，并且在温度达 713 K 时，两条曲线的差异更加明显。（3）PMMA 与玻璃光栅深度分别为 99.098 μm 和 97.898 μm 。热压成形后 PMMA 和玻璃光栅的反射率在 200~400 nm 的波长范围内显著降低，并且在整个波长范围内，PMMA 和玻璃光栅结构的平均反射率均有所下降，抗反射性能得到改善。同时，热压成形后 PMMA 和玻璃光栅的接触角分别为 113° 和 113.01°，具有良好的疏水性能。在高温、低温及酸腐蚀环境中，PMMA 和玻璃光栅结构的接触角在较小的范围内变化，仍保持了疏水性，验证了光栅结构在实际应用中的可能性。

D03-184

预测非晶合金性质的计算数据驱动机器学习研究

刘晓倬*

深圳大学

预测非晶合金的形成能力、性质，识别其微观结构特征，开发非晶合金新材料是该领域的重要问题，也是机器学习研究热点方向。利用公开的数据库和文献数据、高通量实验等自研数据，可以训练机器学习模型。除此之外，利用热力学相图计算、分子模拟等技术也可以产生大量数据，给机器学习模型训练带来便利。本研究基于计算数据建立数据库，训练机器学习模型，用于预测非晶合金的特征温度、玻璃形成能

力、微观结构等，取得了良好的准确率。

D03-185

超高温难熔高熵合金力学性能与强韧化研究

申耀祖¹, 王正奇², 吴渊¹, 吕昭平¹

1. 北京科技大学
2. 苏州实验室

近年来, 航空航天、能源化工等领域的快速发展亟需耐 1600℃ 及以上温度的新型超高温结构材料。含高熔点 Ta、W 元素的难熔高熵合金因其优异的抗高温软化能力和高温稳定性, 展现出巨大的潜力。本报告将介绍含 Ta、W 超高温高熵合金力学性能方面的研究进展, 以典型 NbMoTaW 合金在室温及高温下的变形行为作为切入点, 揭示其微观组织-力学性能关联及与传统难熔合金间的差异; 基于本团队在晶界工程及第二相强化等方面的典型工作, 分析其强化策略与机制, 特别地, 通过开发复杂成分碳化物强化策略, 我们实现了高温强度与室温塑性的协同提升—所制备超高温难熔高熵合金在 1600℃ 下强度接近 900MPa, 同时保持约 8% 的室温塑性; 本报告最后简要探讨了该领域面临的挑战与未来研究方向。

D03-186

基于机器学习的难熔高熵合金屈服强度预测模型及实验验证

丁书剑, 王伟丽*

西北工业大学 物理科学与技术学院

难熔高熵合金易于形成的简单固溶体, 具有高温下强度好、硬度高、抗氧化性强等特点, 被广泛用于诸多高温领域, 因此成为近年来研究的热点。但难熔高熵合金常温下韧性低等问题, 阻碍了其进一步应用。由于高熵合金的设计空间广阔, 传统的实验法效率低、成本高, 因此急需一种高效开发难熔高熵合金的方法。随着人工智能的发展, 机器学习在材料研究中得到了广泛应用。据此, 本研究提出了一种基于 LightGBM 算法的高熵合金屈服强度预测模型。通过多种特征筛选方法, 将 T 、 VEC 、 $D.B.$ 、 μ 、 S_{mix} 、 G_{mix} 和 r 的特征识别为最优特征集。该模型具有较好的预测效果, 10 折交叉验证的决定系数(R^2)为 0.88, 平均绝对误差(MAE)为 162 MPa。通过 SHAP 方法分析了关键特征对屈服强度的影响, 获得了相应的推荐阈值。构建了一个线性方程作为设计高屈服强度难熔高熵合金的决策边界。根据该框架, 制备了一种 $TiMoNbHf(AlNi)_{0.2}$ 新型铸态难熔高熵合金。其室温屈服强度和断裂韧性分别为 1610MPa 和 20%, 预测误差为 8.1%。以上实验证明了本框架的精度和泛化性, 以及该设计策略的有效性。

D03-187

通过多重异质结构调控优化高熵合金高温强度及延展性

张祝群^{1,2}, 庞景宇^{1*}, 杨一童^{1,2}, 邢振强¹, 王爱民¹, 张宏伟^{1*}

- 1 师昌绪先进材料创新中心, 中国科学院金属研究所, 沈阳, 110016
- 2 材料科学与工程学院, 中国科学技术大学, 沈阳, 110016

高熵合金在 650 ~ 750 °C 的温度范围内通常表现出强度不足和中温脆性问题, 这极大地限制了其在工程中的实际应用。本研究开发了一种具有晶粒尺寸和 $L1_2$ 析出物的多重异质结构的新型共格 FCC/ $L1_2$ 高熵合金。新设计的高熵合金在较宽的温度范围 (25 ~ 750 °C) 内表现出优异的力学性能。室温下, 高熵合金的抗拉强度高达 1700 MPa, 拉伸延伸率为 15.9%。值得注意的是, 在中温区, 高熵合金的屈服强度高达 1 GPa, 且在高拉伸应力下应变依然超过了 14%。这是由于初生 $L1_2$ 相的存在有效地钉扎了晶界, 抑制了裂纹的扩展和氧沿晶界的扩散。这种机制可防止拉伸过程中在晶界处形成脆性相, 从而保护晶界并改善中温脆性。异质结构调制策略为实现高性能高熵合金的定制设计提供了有效参考, 以满足先进高温结构应用的迫切需求。

D03-188

非晶合金/高熵合金纳米多层膜摩擦学行为及其尺寸效应

姜小芳*

浙大宁波理工学院

纳米结构金属多层膜结合了纳米增强和异质界面增韧效应,为高强度和耐磨性提供了显著的应用潜力。这些多层结构可以在组成、结构和性能方面进行精确的设计,以满足特定的使用条件。在本研究中,我们设计了 5~100nm 均匀的 CuZr/CoCrNiC 非晶纳米膜,以探索其尺寸依赖的摩擦学行为和磨损机制。我们的研究结果显示,摩擦系数(共价有机框架)和磨损率最初都随着 h 的减小而线性下降,在 10 nm 处达到临界点,低于临界点时,它们随着 h 的减小而略有增加,反映了硬度演化的趋势。值得注意的是,层厚为 h=10 nm 的纳米膜表现出优越的力学和摩擦学性能,共价有机框架和磨损率分别为 0.295 和 $8 \times 10^{-6} \text{ mm}^3/(\text{N} \cdot \text{m})$ 。摩擦影响区的微观结构分析表明,在 $h = 10 \text{ nm}$ 的临界层厚度下,磨损机制发生了转变:从非均匀剪切变形引起的疲劳磨损到均匀塑性变形和氧化磨损引起的轻微粘附磨损。

墙报

D03-P01

机器学习辅助无钴 $\text{AlCr}_x\text{CuFeNi}_2$ 高熵合金组织及性能研究

高健、单腾、秦旭、王可凡、尹轶川、黄鸣、杨森*

南京理工大学

机器学习(ML)的应用加速了新材料的发现、性能的预测和优化以及组织结构和性能之间相关性的分析。本文研究了 $\text{AlCr}_x\text{CuFeNi}_2$ 无钴高熵合金(HEAs)的组织演变和力学性能。通过结合 k 近邻算法模型(KNN)和极端梯度提升模型(XGBoost)的实验验证,综合分析了 Cr 元素含量对组织演变和力学性能的影响。结果表明,优化后的 KNN 和 XGBoost 模型 10 折平均交叉验证(CV)精度分别为 0.761 和 0.836。选择 $\text{AlCr}_x\text{CuFeNi}_2$ HEAs 中的 8 个合金组分进行实验验证。实验结果表明,合金的显微组织均由 FCC + BCC 相组成,与预测结果一致。随着 Cr 含量的增加,枝晶结构细化,晶格常数增大。Cr 元素的加入使硬度值得到显著提升,硬度值在 332.4 ~ 447.7 HV 之间变化,与预测值的偏差在 5.4 ~ 37.3 HV 之间。值得注意的是,合金比磨损率从 $3.152 \times 10^{-4} \text{ mm}^3/\text{Nm}$ 下降到 $6.357 \times 10^{-5} \text{ mm}^3/\text{Nm}$,当 $x = 2.0$ 时,合金的耐磨性达到最佳。这项研究强调了机器学习在加速 HEAs 的发现和性能优化方面的优势,为材料设计和工程应用提供了相关的研究基础。

D03-P02

高熵合金中纳米析出相的三维原子探针研究

栾军华*、开执中

香港城市大学三维原子探针联合研究实验室

三维原子探针(3D APT)是一种具有原子级空间分辨率的测量和分析方法,对分析高熵合金中的元素偏聚和析出相成分非常重要。纳米析出强化是提高高熵合金室温和高温力学性能的重要手段,其强化效果与纳米相的尺寸、数量、分布密切相关,从原子尺度深入研究纳米相的形成、长大和粗化机理对科学调控纳米析出组织具有重要的指导意义。在本研究中,我们利用 LEAP5000XR 三维原子探针系统表征了 FeCoNiCrAl 等体系的纳米析出组织,发现在晶界和晶内形成两种不同形貌的纳米析出相,一种是在晶内均匀分布的球状纳米相,其析出机制为连续析出;另一种在晶界处呈板条状或柱状纳米相,其析出机制为不连续析出,但与晶内的球状纳米相相比,其成分更接近平衡态成分。此外,我们利用三维原子探针还观测到高熵合金晶界处存在明显的 Nb 元素偏析,该晶界偏析可以抑制晶界 L12 相的不连续析出,促进晶内 L12 相的均匀析出,显著提升了高熵合金的强韧性。

D03-P03**Rejuvenation in metallic glasses with different initial states through memory effect**

Junzheng Wang, Yi Li*

Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences

Memory effect in amorphous materials is commonly observed and has been extensively studied [1,2]. The striking manifestation of the memory effect is its initial move away from equilibrium after two temperature steps of opposite sign, followed by the final approach to the equilibrium, first for volume observed by Kovas [3] and later for enthalpy by Hofer et al. [4]. This is to say that when a glass is annealed sequentially at two temperatures, i.e., first at a low temperature and then at a higher temperature, the glass can increase its volume or enthalpy (i.e. rejuvenation) initially during the second step of annealing [5]. It has been confirmed that the plasticity and fracture toughness of MGs can be improved by utilizing memory effect [6]. In commercial application, such as phone hinge, the complex geometry of MGs products can lead to differences in energy states. However, the rejuvenation of MGs with different initial energy states by memory effect is not clear. Here, we systematically investigated the effect of rejuvenation by memory effect on the energy states, mechanical properties and microstructure of monolithic Zr₅₁(Cu₉₀Ni₁₀)_{40.25}Al_{8.75} MGs with different diameters. For the as-cast sample, its exothermic enthalpy decreased sharply, from 0.565 kJ mol⁻¹ to 0.108 kJ mol⁻¹, with increasing diameters from 2 mm to 14 mm. After the first-step annealing, all the samples show similar sub-T_g peaks. Interestingly, rejuvenation by memory effect gives the same energy state of the rejuvenated samples, with the maximum exothermic enthalpy of 0.128 kJ mol⁻¹. In addition, the compressive plasticity of the rejuvenated MGs also become consistent and are significantly improved. This implies that memory effect can bring MGs to the same state although they have different initial states. Microstructure analysis shows that the memory effect is originated from the reactivation of soft regions. The above findings not only advance the understanding of the history-dependent behaviors of the memory effect, but also help to tailor the energy states and mechanical properties of BMGs, promoting their wider application.

D03-P04**电沉积高熵合金及其电催化析氢性能研究**

朱铭海、冯璇璇、秦凤香*

南京理工大学

氢能因其高能量密度和无污染等特点成为了应对能源危机和环境污染问题的最清洁、最有前途的可再生能源之一。电化学析氢反应（HER）作为一种很有前途的“绿色氢气”生产方法其反应途径都涉及氢吸附在催化剂表面形成氢中间体，这成为整个 HER 机制的速率决定步骤。因此，合理设计催化剂的成分及表面结构特征，可有效促进 HER 性能。高熵合金（HEA）因其独特的性能而在电催化领域引起了广泛关注。高熵合金中的灵活可调的多种组分在催化领域提供了独特的电子结构和不同的表面活性位点，进而可通过对高熵合金的精确成分控制和元素调整，实现高的 HER 性能。本文通过脉冲电化学沉积法获得了 FeCoNi 基微纳米结构高熵合金，研究了不同元素添加对析氢反应性能的影响。通过电沉积法制备的微纳米结构高熵合金大的比表面积提供了大量的反应活性位点。其在电催化领域展现出优异的电化学活性，特定元素的添加将显著降低了电化学析氢过电位同时加速了反应动力学，同时展现出良好的长期稳定性。这项工作为拓宽高熵合金成分和结构设计及其在电催化析氢提供了可能性。

D03-P05**多步磁场退火协同调控 Fe-Si-B-Nb-Cu-Mn-Al 合金中的纳米晶粒细化和高频磁软性能**

李筱莹*、贺爱娜、董亚强、黎嘉威、张博峻、满其奎

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

高频变压器作为将电子产品到电网级可再生能源集成的高效率转换桥梁,其性能和效率主要依赖于软磁铁芯材料,需要其在 10 ~ 50 kHz 工作频率下兼具低磁芯损耗、高磁导率、高饱和磁感应强度以及良好的热稳定性。纳米晶软磁合金因其双相交换耦合产生的优异综合磁软性,被认为是应用于高频变压器最理想的材料。然而,这些合金在高频应用中仍存在磁芯损耗较高的问题。因此,开发既能保持高磁导率和高饱和磁感应强度,又能显著降低高频磁芯损耗的先进纳米晶合金成为当务之急。本工作选择了一种具有较高饱和磁感应强度 ($B_s = 1.31 \text{ T}$) 的 $\text{Fe}_{74}\text{Si}_{13}\text{B}_8\text{Nb}_2\text{Cu}_1\text{Mn}_{1.9}\text{Al}_{0.1}$ 纳米晶合金,重点研究多步磁场退火对纳米晶演变和低频软磁特性的协同作用。通过在晶化前促进团簇析出、纳米晶化以及调控磁场各向异性的多步协同热处理手段,以提升其高频磁软性。多步磁场协同退火后该合金在 50 kHz 时表现出超低损耗与较高磁导率,这些特性使其在先进高频变压器应用中具有显著优势。同时进一步探讨了多步磁场协同热处理中不同阶段的局域结构、纳米晶粒尺寸和铜团簇分布的变化,并通过损耗分离和磁畴结构变化揭示了高频损耗降低的机理,为开发适用于高频应用的高性能纳米晶合金提供了新的思路和方法。

D03-P06

高温短时热处理得到的具有优良软磁性能的 FeCo 基纳米晶合金

刘俊龙、张涛*

北京航空航天大学材料学院

高饱和磁化强度 (B_s) 非晶合金应用于变压器、电感器等电力电子设备,可在相同功率输出下减小设备的体积和重量,降低铁芯损耗提高其工作效率;应用于电机可在相同体积下输出更高的功率,满足电动汽车、航空航天等领域对电机高功率密度的要求。由于 Co-Fe 原子之间的铁磁交换作用强于 Fe-Fe,用 Co 部分取代 Fe 有利于合金 B_s 的提高。然而,Co 元素的添加会使合金的磁各向异性增加,在常规的等温退火中难以降低矫顽力 (H_c),同时退火造成的弛豫脆性也限制了它的广泛应用。最近,我们研究了高温、短时间快速退火 (RA) 工艺对 FeCo 基非晶合金的软磁性能及其韧性影响。通过优化 Fe-Co-B 合金成分并采用快速退火技术,使 B_s 提高至 1.94 T 而 H_c 降低到 5.77 A/m。与现有的 FeCo 基非晶合金相比,软磁性能显著提高,并保持了良好的弯曲韧性。同时,研究揭示了 RA 在非晶基体中诱导过热和能量波动,促进细小 $\alpha\text{-Fe (Co)}$ 晶粒的均匀成核机制。形成的高度细化的非晶/纳米晶复合结构,降低了晶粒形状各向异性从而提高其软磁性能。该新工艺制备的高软磁性能非晶/纳米晶合金将进一步推动其更广泛应用。

D03-P07

成分调控对 Fe-Co-P-B 系非晶/纳米晶合金的制备及磁性能的影响

路煜田、张涛*

北京航空航天大学

铁基非晶合金虽具备优异的软磁特性,但其饱和磁感应强度较硅钢仍存在提升空间。本研究通过调控 Fe/Co、P/B 以及 Cu 元素比例,优化 $(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_{84-z}\text{PyB}_{16-y}\text{Cu}_z$ ($0.05 \leq x \leq 0.3$, $4 \leq y \leq 12$, $z \leq 1 \text{ at\%}$) 合金的非晶形成能力与磁性能。研究表明:Co 的添加可显著提升饱和磁化强度,其中 Fe/Co 比的优化是获得高饱和磁化强度的关键,随着 Co 含量的增加,饱和磁化强度呈先下降后上升的趋势;P 含量增加,会降低饱和磁化强度;微量 Cu 作为异质形核位点,促进纳米晶均匀析出,降低矫顽力,而过量 Cu ($z=1.0 \text{ at\%}$) 会损害非晶形成能力。优化成分 $(\text{Fe}_{0.95}\text{Co}_{0.05})_{83.5}\text{P}_{4.12}\text{Cu}_{0.5}$ 经 $\text{Tx1-20}(392^\circ\text{C})$ 退火 10min 后,获得饱和磁化强度 1.86 T、矫顽力 3.29 A/m,同时兼具良好的弯曲韧性。该研究为高磁感、低损耗铁基非晶合金的设计提供了成分优化策略。

D03-P08

漏电流传感器用钴基非晶合金制备与性能研究

彭怡楚、范星都*

东南大学材料科学与工程学院

研究适用于漏电流传感器的钴基非晶合金，对提升传感器精度具有重要意义。近年来，研究人员通过成分探索与热处理工艺优化，一定程度上降低了钴基非晶合金饱和磁感应强度与矫顽力，提高有效磁导率，但缺乏传感器综合性能表征与应用验证，尚未建立起软磁材料磁性能与传感器综合性能内在关联，严重制约了高精度漏电流传感器研发。本文以三种商用钴基非晶合金为基础，系统研究普通退火及纵磁退火对合金软磁性能与磁畴结构的影响，并对传感器精度、线性度、温漂系数、频带宽度、噪声等综合性能进行表征，以期探索适用于漏电流传感器的钴基非晶合金成分，建立传感器性能与软磁材料磁性能、磁畴结构、磁各向异性间的内在关联。研究发现通过去应力退火与纵磁退火可有效消除钴基非晶合金内应力，调节磁畴规则取向，消除磁畴钉扎缺陷，在降低矫顽力、提高初始电感值同时，实现电感在微电流下的大幅衰减。成功研制出具有优异软磁性能的 $\text{Co}_{67}\text{Fe}_4\text{Mo}_{1.5}\text{Si}_{16.5}\text{B}_{11}$ 非晶合金，饱和磁感 0.55 T、矫顽力低至 0.16 A/m、有效磁导率达 35200。其传感器精度为 0.50%、非线性误差低至 0.16%、零点温漂系数为 29.18 ppm/°C、频带宽度达 18 kHz，噪声低至 0.77 mV。通过研究确立饱和磁感是决定漏电流传感器线性度的最重要磁性能参数，饱和磁感越低，电感量在微电流下衰减越迅速，传感器线性度越小、精度越高。而感生各向异性越小，矫顽力越低、有效磁导率越高，有利于提高传感器初始电感值，进一步降低非线性误差。研究结果为高精度漏电流传感器研发提供理论指导与材料支撑。

D03-P09

FCC 基 Al-CoCrFeNi-Ti 体系高熵合金组织与性能研究

张静涛、张涛*

北京航空航天大学

高熵合金因其多主元组成特点，使其具有高强度、高韧性及耐腐蚀性等优异材料性能。多主元原子随机混合的高熵效应，可抑制金属间化合物生成，易形成简单形成 FCC 或 BCC 等简单固溶体。并且后过渡族元素通常形成 FCC 结构，而前过渡族元素则更易形成 BCC 结构。这种结构趋向导致部分合金出现强度不足或塑性较差的问题，限制了其工程应用。Al 元素与后过渡族元素之间具有较负的混合焓，倾向于在合金中形成化学短程有序结构（SRO），从而改善其综合性能。同时，传统等原子比高熵合金在性能调控方面存在局限性，因而非等摩尔比和多相协同强化的高熵合金逐渐成为研究热点。本研究采用电弧熔炼与快速凝固工艺制备 Al-CoCrFeNi-Ti 高熵合金板材，辅以热机械处理，系统研究了合金中 Al 和 Ti 含量变化对组织和性能的影响。结果表明：在 CoCrFeNi 基合金中引入 Al 元素并经不同热处理后，其屈服强度最高可达 856 MPa，延伸率保持在 20%以上，除此以外，合金表现出随成分规律性变化而产生的耐蚀性能非单调演化行为。进一步通过引入 Ti 元素强化多相结构及短程有序结构，屈服强度提升至 1157 MPa，抗拉强度达 1473 MPa，延伸率仍保持在 15%左右。上述结果为开发具有短程有序特征的非等摩尔比高熵合金提供了实验支撑和理论依据。

D03-P10

优化结构有序度提高非晶合金力学性能可靠性

苏爽、宁志良*、孙剑飞、黄永江

哈尔滨工业大学

本研究系统探究了退火处理对非晶合金能量状态、微观结构及宏观力学行为的影响。通过降低能量状态，退火过程显著提升了非晶合金的结构有序度与均匀性，从而改善其整体力学可靠性。具体而言，退火促进了局域二十面体短程有序结构的形成——这种结构特征有助于提高纳米硬度和抗拉强度。此外，退火过程中内应力的释放与重新分布进一步优化了内应力状态，显著增强了断裂韧性，实现了可靠的力学性能。本研究不仅阐明了退火对非晶合金微观结构的调控机制，还为开发兼具高强度与高断裂可靠性的非晶合金材料提供了理论支撑和实验依据。

D03-P11

氧含量对 Zr 基块体非晶合金微观结构及性能的影响机理研究

安子辰*

烟台大学

Zr 基块体非晶合金因高强度、高硬度、高断裂韧性及耐摩擦、耐腐蚀等特性而备受关注。但因其对氧敏感，制备和应用面临挑战。本研究以 Zr 基非晶合金为研究对象，通过主动添加氧以探究氧含量对非晶合金微观结构及性能的影响规律。XRD 研究结果表明，当氧添加量不超过 0.25 at.% 时，氧基本完全溶解于非晶合金中，未形成明显晶化相或氧化物。力学性能分析结果表明，当氧添加量为 0.1 at.% 时，合金试样的强度和塑性均得到明显提高，分别为 1873 MPa 和 0.9 %。随着氧添加量的继续增加，合金的强度和塑性开始下降。在氧添加量增加 0.2 at.% 时，非晶合金的强度大幅降低至 1692 MPa，塑性完全丧失，同时，断面形貌也由脉状花纹为主的特征转变为光滑鱼骨状特征，表明此时非晶合金转变为典型的脆性断裂。

D03-P12**脉冲放电法制备 Fe 基非晶纳米晶粉末及性能研究**

马云爽*

北京航空航天大学

Fe 基非晶纳米晶材料因高饱和磁化强度、高磁导率和低矫顽力等优异软磁性能，在高频电力电子和磁性器件领域发挥关键作用，但传统制备 Fe 基非晶纳米晶粉末的方法普遍存在尺寸较大、形状不规则等问题。本文采用脉冲放电法连续制备出粒径小，球形度高的 Fe-Nb-B 非晶纳米晶粉末。研究发现，脉冲放电参数的改变会影响粉末粒径的大小以及晶化程度。采用同一初始状态的 Fe-Nb-B 带材制备粉末，脉冲放电功率的增加会导致粉末粒径的增大和粉末晶化程度增加，从而导致粉末饱和磁化强度的增加。此外，B 元素对 Fe-Nb-B 体系的居里温度和非晶形成能力有着巨大的影响，B 含量由 13.3 at.% 增加至 19 at.%，合金非晶相的居里温度由 430 K 提升至 511 K，非晶形成能力也得到提高。

D03-P13**The synergistic enhancement of strength-plasticity of Zr₅₃Cu₃₀Ni₉Al₈ bulk metallic glass by adding carbon nanoparticles**

Dongmei Li*, Yiliang Liu, Peng Yu

Chongqing Normal University

Bulk metallic glass (BMG) has attracted much attention due to its high strength, elastic limit, hardness, and corrosion resistance. However, improving its plasticity without compromising its strength is still challenging. In this study, Zr₅₃Cu₃₀Ni₉Al₈ bulk metallic glass/carbon nanoparticle composites (BMG/C) were fabricated using the copper mold suction casting method, which exhibits good strength-plasticity synergistic enhancement behaviors in compression modes. With a carbon content is 5 % (at.%), the plasticity was up to 6.81%, which was 9 times higher than that of the Zr₅₃Cu₃₀Ni₉Al₈ matrix. Additionally, the yield strength and fracture strength were 1.95 GPa and 2.12 GPa, representing increases of 10.8% and 8.7% compared to the metallic glass matrix, respectively. The pinning effect of carbon nanoparticles can inhibit the propagation of shear bands and promote their branching and multiplication under compression, thus enhancing the plasticity of matrix material. Moreover, the hard phase can withstand higher stress concentration without deforming, thereby enhancing the yield strength and fracture strength of matrix material. This study achieves the synergistic enhancement of strength-plasticity in Zr₅₃Cu₃₀Ni₉Al₈ BMG, providing a reference for the preparation of bulk metallic glass matrix composites (BMGCs) with comprehensive mechanical properties.

D03-P14

合金化元素对 MoTaTi 基难熔高熵合金阻燃性能及机理研究

喻嘉彬

北京科技大学

难熔高熵合金因其在高温及超高温环境下展现出的卓越力学性能，有望在航空航天、国防等高端领域发挥重要作用。但其抗高温氧化和阻燃性能不足，限制了实际工程应用。本研究以聚焦于抗高温氧化性能优异的 MoTaTi 基难熔高熵合金，通过合金化 (Cr、Al) 手段，深入探究其对阻燃性能的影响。实验表明，高熵效应在高温下显著稳定合金相结构，从而有效增强其阻燃性能。Cr 的添加对 MoTaTi 基难熔高熵合金的阻燃性能提升尤为显著，可使燃烧速率降低约 50%，氧压门槛值提升 1.5 倍。而 Al 的加入却显著恶化了合金的阻燃性能。在燃烧动力学方面，Cr 的添加有效降低了合金的热释放速率，而 Al 的加入则极大地加快了热释放速率。从热力学角度分析，Al 主要以气相形式燃烧，不利于致密氧化层的形成；而 Cr 与氧具有较高的亲和力，且 Cr_2O_3 在高温下稳定，能够快速形成连续且致密的氧化层，从而有效抑制燃烧反应。本研究揭示了 MoTaTi 基难熔高熵合金成分与燃烧性能之间的内在关联，为开发高性能、高阻燃性的难熔高熵合金材料提供了理论依据和实验数据支持，有望推动其在高温工程领域的实际应用。

仅发表论文

D03-PO01

Machine learning-assisted design of refractory high-entropy alloys with targeted yield strength and fracture strain

Jianye He, Zezhou Li*, Jingchen Lin, Pingluo Zhao, Hongmei Zhang, Fan Zhang, Lin Wang, Xingwang Cheng
Beijing institute of technology

In order to improve the traditional “trial and error” material design method, machine learning-yield strength and machine learning-fracture strain models are incorporated into one system to predict yield strength and fracture strain in refractory high-entropy alloys (RHEAs) under compression. In order of the feature importance, the variables of the random forest model for predicting the yield strength of RHEAs include ΔS , μ , σ_{VEC} , D.G, ADTUS, w^6 , ADDEN, ΔH , and E_c . The variables of the random forest model for predicting the fracture strain of RHEAs include $\Delta\chi$, ADSVE, ADDVE, ADR, and σ_{Tm} . The ML-yield strength model and ML-fracture strain model achieve excellent predictions ($R^2=0.942$, RMSE=0.35) and ($R^2=0.892$, RMSE=0.41) in the testing set, respectively. Based on the machine learning model, $\text{Nb}_{0.22}\text{Ta}_{0.22}\text{Ti}_{0.24}\text{V}_{0.23}\text{W}_{0.09}$ and $\text{Nb}_{0.18}\text{Ta}_{0.26}\text{Ti}_{0.22}\text{V}_{0.21}\text{W}_{0.13}$ RHEAs in the Nb-Ta-Ti-V-W RHEA system were screened and synthesized. The yield strength (1915 MPa) of the $\text{Nb}_{0.22}\text{Ta}_{0.22}\text{Ti}_{0.24}\text{V}_{0.23}\text{W}_{0.09}$ RHEA is higher than that (1689 MPa) of the NbTaTiVW RHEA. The unfractured $\text{Nb}_{0.18}\text{Ta}_{0.26}\text{Ti}_{0.22}\text{V}_{0.21}\text{W}_{0.13}$ RHEA under compression exhibits superior performance than the fracture strain (16.6 %) of the NbTaTiVW RHEA. The mixing enthalpy of RHEAs is negatively correlated with the yield strength, whereas a negative relationship exists between electronegativity difference and fracture strain through the SHAP analysis. Decreasing the mixing enthalpy and increasing the electronegativity difference promote the formation of the precipitated phase. The electron probe microanalysis reveals that the differences in mechanical properties (yield strength and fracture strain) in the NbTaTiVW RHEAs primarily stem from the fraction of the precipitated phase.

D03-PO02

High temperature oxidation behavior of Ti60(AlCr-X)40 high-entropy alloys at 850°C

Zhiang Li^{*1}, Hongwu Liu³, Zhenxi Li³, Fan Gao³, Qingfeng Wang²

1. HBIS Material Technology Research Institute

2. Yanshan University

3. AECC Beijing Institute of Aeronautical Materials

The oxidation behavior of Ti60(AlCrNb)40, Ti60(AlCrSn)40, and Ti60(AlCrZr)40 alloys was studied at 850 °C using the oxidative weight gain method. XRD was performed to analyze the phase of the oxide layer. Furthermore, SEM and EDS were used to analyze the cross-sectional morphology and composition of the oxide layer. Additionally, the effects of alloying with Nb, Sn, and Zr on the oxidation resistance of Ti-based high entropy alloys were discussed. The results showed that the Ti60(AlCrNb)40 alloy exhibited the best oxidation resistance. Additionally, the oxidation kinetics of the Ti60(AlCrNb)40 alloy conformed to the parabolic law. Ti60(AlCrSn)40 and Ti60(AlCrZr)40 displayed parabolic behaviors in the initial stages and later transitioned to linear laws. It was also discovered that the presence of Nb enhanced the compactness of the TiO₂ layer on the alloy's surface, thereby improving its oxidation resistance. Furthermore, Sn formed a rich Sn layer within the oxide layer of the alloy, which coincided with the formation of Al₂O₃. This led to a decrease in the adhesion of the oxide layer to the matrix, occasionally resulting in the damage of the oxide layer and a subsequent reduction in the alloy's oxidation resistance. It was also observed that the addition of Zr not only generated a loose oxide layer dominated by ZrO₂ but also decreased the density of the alloy, weakening its oxidation resistance.

D03-PO03**Achieving near-ideal strength in a face-centered cubic high-entropy alloy through amorphous nano-heterostructure**

Chuangshi Feng*, Zhou Guan, Fuxiang Zhang
Songshan Lake Materials Laboratory

High-entropy alloys (HEA) with face-centered cubic (FCC) structure typically present high ductility but poor strength, severely limits their application in the fields that require both high strength and high ductility. Herein, a near-ideal strength was achieved in a CoCrFeNi/Si nanolaminate HEA (NLHEA) film utilizing amorphous silicon as a nano-heterostructure. This film demonstrated a remarkable enhancement of about 67.7% in yield strength as compared to the CoCrFeNi film, and maintaining a desirable ductility exceeding 77%. The excellent mechanical properties primarily stemmed from the nanostructure which includes nanotwins, high density nano stacking faults and shear bands, as well as the strong interaction at the crystalline-amorphous interface. This strategy of incorporating amorphous nano-heterostructures into FCC-structured HEA enables the achievement of ultra-high strength and ductility. Meanwhile, the incorporated amorphous silicon extended its application in the fields of microelectronic systems, solar cells, photoelectric sensors.

D03-PO04**Effect of the Si and Ge elements co-doping on the microstructure and mechanical properties of CoCrFeNi high-entropy alloys**

Xin Wang^{1,2}, Zhou Guan¹, Fuxiang Zhang*¹
1. Songshan Lake Materials Laboratory
2. City University of Hong Kong (Dongguan)

The alloying of non-metallic elements not only changes the structure of alloys, but also tunes the mechanical and physical properties of alloys. In this work, the microstructure and mechanical properties of (CoCrFeNi)_{100-x}(SiGe)_x (molar ratio $x = 0 \sim 33$) high-entropy alloy (HEAs) systems are investigated. The results show that (CoCrFeNi)_{100-x}(SiGe)_x HEAs transform from face-centered cubic (FCC) to body-centered cubic (BCC) solid solutions when $10 < x < 25$ and form monometallic intermetallic compounds (IMs) at $x = 33$. This crystal structure transition is different from single silicon doping evolution and closer to single germanium doping.

Tensile measurements show that the strength and plasticity of the alloys are simultaneously enhanced by the addition of Si and Ge elements in a single FCC region ($x \leq 10$), and the micro-Vickers hardness shows that the Ge element contributes more to the enhancement of the alloy's hardness by modulating the ratio of different Si and germanium elements at the same doping composition.