

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

FB04-青年学者前沿闪报大讲台

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



FB04.青年学者前沿闪报大讲台

FB04-01

火焰喷雾热解低锂过量制备高离子电导率锂镧锆氧固态电解质

罗俊潇、李世龙、王昆

天津大学机械工程学院

摘要：石榴石型固态电解质 $\text{Li}_{7-x}\text{La}_3\text{Zr}_2\text{O}_{12}$ (LLZO) 凭借其对金属锂负极的高稳定性、高离子电导率及优异的热稳定性，被视为下一代高安全性、高能量密度全固态电池的理想候选材料。然而，其大规模商业化生产仍受限于成熟的制备工艺，目前传统高温固相法制备锂镧锆氧耗时长达十余小时、现有火焰喷雾热解法(FASP)因反应温度高于 1000°C 需添加 30%-50% 过量锂。本研究提出一种低温火焰调控策略，同时解决上述问题，在显著降低锂补偿需求的同时实现快速合成。

首先，通过精确控制火焰场参数，开展低温火焰合成(849°C)，从源头抑制锂挥发，仅需 10% 锂过量即可完成 LLZO 前驱体快速制备；其次，通过优化烧结方法 (母粉法、埋粉法、自补锂法)，实现 LLZO 陶瓷致密化，进一步降低烧结时间。最后结果显示：烧结温度是立方相 LLZO 形成的关键， 1300°C 下可获得致密纯立方相 LLZO；保温时间 ≤ 1 小时离子电导率稳定，延长则引发非线性变化。本研究通过低温 FASP 结合母粉法烧结，在 10% 低锂过量条件下成功制备高性能立方相 LLZO 陶瓷，离子电导率($2.13 \times 10^{-4} \text{ S/cm}$) 与文献报道的高锂过量火焰法制备结果相当，且合成周期较固相法大幅缩短。该策略为降低固态电解质制备成本及推进规模化生产提供了有效路径。

FB04-02

CuO 纳米棒与 NiCo-Se 纳米片复合材料的构筑及电化学性能研究

郝月、李泽、刘景顺

内蒙古工业大学

电池型电极材料动力学迟缓和循环稳定性差是限制超级电容器 (SCs) 大规模储能的两大障碍。本文采用原位氧化反应、退火处理及电化学沉积的方法在高导电性泡沫铜 (CF) 基底上直接构筑了无粘结剂的分级 CuO@NiCo-Se 纳米阵列的复合电极材料，并系统探究了沉积浓度对其电化学性能的影响规律。研究表明：将具有三维多孔结构的 CF 同时用作集流体和铜源基底，既有效避免了电极材料合成过程中的团聚现象，又消除了添加导电剂和粘结剂对活性材料电化学性能的负面影响。同时，具有互连通道的分级 CuO@NiCo-Se 纳米阵列结构可有效缓冲循环充放电过程中的体积膨胀，并为电子/离子传输提供了高效路径。得益于 CuO 与 NiCo-Se 两种活性材料的协同效应，该电极表现出高的质量比容量 (在 3 A g^{-1} 的电流密度下质量比容量可达 1477.1 F g^{-1})、优异的倍率性能 (电流密度增加至 20 A g^{-1} 后其容量保持率为 94.5%) 以及长循环稳定性 (经 10000 圈循环后容量保持率为 84%)。总之，该工作表明 CuO@NiCo-Se 是一种非常具有潜力的电极材料，有望用于先进的超级电容器储能器件。

FB04-03

面向能源转换与储存的共价有机框架材料的分子设计与功能化研究

刘从学

北京大学深圳研究生院

共价有机框架 (COFs) 作为一种高度有序且具备分子可编程特性的多孔晶态材料，因其可调的化学功能性和优异的结构稳定性，在能源转换与储存领域展现出独特的应用潜力。本研究围绕 COFs 的结构可设计性与功能调控，分别针对储能和能源转换方向开展了深入研究：在锂离子储能方面，通过引入吡啶鎓磺基甜菜碱基团，实现了 COF 纳米片的自剥离组装，有效构建了连续的锂离子迁移通道，室温离子电导

率达 $10^{-4} \text{ S} \cdot \text{cm}^{-1}$ ，且在宽电化学窗口内展现出优异的电化学稳定性与锂金属界面兼容性，优于传统聚合物基电解质；在光催化领域，基于菲咯咪唑单元设计的共轭 COF，通过调控其 π 共轭网络与 D-A 分布，提升了可见光吸收与电荷分离效率，实现了高效的光催化析氢（产氢速率达到 $7.4 \text{ mmol} \cdot \text{g}^{-1} \cdot \text{h}^{-1}$ ），并在循环测试中保持稳定的催化活性。该研究从分子层面揭示了 COFs 结构调控对性能优化的关键作用，展示了 COFs 作为新一代多功能能源材料的广阔前景，为推动能源转换与储存技术的发展提供了新的设计理念与研究范式。

FB04-04

Imaging Anisotropic Proton Intercalation in Photochromic MoO₃

Zhihang Xu^{1,2}, Chunnian He², Ye Zhu¹

1. The Hong Kong Polytechnic University

2. Tianjin University

Protonation represents a fundamental chemical process with promising applications in the fields of energy, environment, and memory devices. Probing the protonation mechanism, however, presents a formidable challenge owing to the elusiveness of intercalated protons. In this work, we utilize the atomic and electronic structure changes associated with protonation to directly image the proton intercalation pathways in α -MoO₃ induced by UV illumination. We reveal the anisotropic intercalation behavior which is initiated by photocatalyzed water dissociation preferentially at the (001) edges and then propagates along the c axis, transforming α -MoO₃ into HxMoO₃ to realize photochromism. This photochromic process can be reversed via heating in air, leading to anisotropic proton deintercalation, also preferentially along the c axis. The observed anisotropic behavior can be attributed to the intrinsically low energy barriers for both proton migration along the c axis and water dissociation/formation at (001) edges.

FB04-05

可预警锂枝晶刺穿的细菌纤维素纳米纤维锂电池隔膜

高璐、陈琳、洪枫

上海市松江区广富林路 2399 号东华大学

锂电池已成为新能源车领域最重要的能量储存设备[1-2]，其安全性始终是人们关注的焦点[3-4]。为了实现新一代高能锂金属电池的商用，开发具有锂枝晶监测功能的隔膜具有重大意义[5-6]。然而，石油基商业隔膜难以实现该功能的最优配置。细菌纳米纤维素（BNC）作为环保型隔膜的候选者，深受高性能电池隔膜研究者的青睐[7-8]。在此，我们设计了一种三明治结构“一体化”的新型安全 BNC 智能隔膜，并运用独特的水平转鼓反应器和连续动态发酵技术制备获得该隔膜。简而言之，在转鼓反应器中：首先发酵首层 BNC 纯膜；随后在培养基中添加碳纳米管（CNT），原位发酵获得中间层 BNC/CNT 复合膜；最后添加新鲜培养基培养获得 BNC 末层，即得到“一体化”三明治结构的 BCB（BNC-BNC/CNT-BNC）复合凝胶膜。再经纯化、热压烘干得到 BCB 复合隔膜，实现了结构规整复合膜的“一浴法”连续制备。结果表明，该隔膜不仅具有优异的热稳定性（200℃ 零收缩）、电解液吸收（556.99%）和拉伸性能（168.88 MPa），以及高锂离子迁移（ t_{Li^+} : 0.71）和快的传输速率（ DLi^+ : $2.99 \times 10^{-8} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$ ），且实现了 BNC 基隔膜 500 次全电池的稳定循环。

更重要的是，它能预警锂枝晶是否刺穿隔膜，保障电池安全。该“一体化”隔膜的设计思路为开发高性能、超安全且可持续的各类电池隔膜提供了新视角。该水平动态转鼓制备技术为今后的自动化规模生产奠定基础。

参考文献

- [1] G. Harper, R. Somerville, E. Kendrick, et al. Nat, 2019, 575: 75-86.
- [2] J. M. Turner. Sci, 2022, 376: 1361.
- [3] C. Liao, X. W. Mu, L. F. Han, et al. Energy Storage Mater, 2022, 48: 123-132.
- [4] Y. Xiao, A. Fu, Y. Zou, et al. Chem. Eng. J., 2022, 438: 135550.
- [5] H. Wu, D. Zhuo, D. Kong, et al. Nat Commun, 2014, 5: 5193.
- [6] M. S. Gonzalez, Q. Yan, J. Holoubek, et al. Adv. Funct. Mater., 2021, 31: 2102198.
- [7] C. H. Jo, N. Voronina, Y. K. Sun, et al. Adv. Mater., 2021, 33(37): 2006019.
- [8] W. Lei, D. Jin, H. Liu, et al. ChemSusChem, 2020, 13: 3731-3753.

FB04-06

Ru clusters and bimetallic ZnNi synergistic catalysis for efficient electrocatalytic hydrogen production

Shiting Luo, Ying Wu

North China Electric Power University

Electrocatalytic composite materials demonstrate exceptional potential in the hydrogen evolution reaction (HER) by combining highly dispersed metal sites with nanoclusters. However, the precise synthesis of these structures and the synergistic mechanisms between active sites remain significant challenges. Here, we propose the synthesis of a three-dimensional framework (Ru-ZnNiNC) via in situ growth and pyrolysis strategies, achieving atomic-level dispersion of Zn active sites and stabilising Ru clusters (2.22 nm). Electrochemical testing reveals that Ru-ZnNiNC exhibits extremely low overpotentials (54 mV/10 mA cm⁻²), Tafel slopes (65.9 mV dec⁻¹), and high specific capacitance values (161.06 mA cm⁻²), Faradaic efficiency (99.7%), and stability (240 h/100 mA cm⁻²), with overall performance superior to that of commercial 20% Pt/C. Density functional theory (DFT) calculations indicate that the coexistence of Ru and ZnNi effectively suppresses Ru aggregation and dissolution. The synergistic strategy modulates the Ru d-band centre, thereby reducing the Gibbs free energy barrier. The optimised structure significantly enhances catalytic activity and stability. This study provides new insights into the rational design of nanomaterials through electronic modulation strategies, achieving high performance in the HER.

FB04-07

原子级掺杂构筑超稳定 BaWO₄ 基陶瓷析氢催化剂

李振殿

西安电子科技大学

开发具有低成本、高性能、高稳定性且可批量生产的电催化剂是实现析氢反应 (HER) 的关键。本工作报道了一种新型的多孔钨酸钡基 (BaWO₄) 陶瓷自体催化剂, 制备出的陶瓷片可直接用作自体催化的析氢反应电极。在不加入任何贵金属的条件下, 通过固相法球磨、压片、烧结等一系列简单的工艺制备出了不同 Ni 掺杂量的电催化剂, 通过引入 Ni 元素改变材料的结构和微观形貌, 提高材料导电性, 暴露更多的活性位点, 从而提升 BaWO₄ 自体催化陶瓷的电化学性能和稳定性 (化学稳定性和机械稳定性)。极少含量 Ni 的引入使材料的 HER 性能有了大幅度的提升, Ni_{0.01}-BaWO₄ 在 10 mA cm⁻² 时达到了 122 mV 的过

电位, 而且 200h 的长循环测试下几乎没有损耗。实验和理论还表明, Ni 的引入降低了 H-OH 的反应能垒, 有利于 H₂O 的解离, 提高了材料的电化学性能。本研究为合理设计低成本、双重稳定性和大规模生产的电催化剂提供了新的方案。

FB04-08

Pre-lithiation and Si Valence Engineering via Thermal Reduction Enable SiO_x Anode with High Initial Coulombic Efficiency and Capacity

Kunye Yan, Huaiyu Shao

University of Macau

Abstract

Silicon oxides (SiO_x) are one of the most competitive anode materials for lithium-ion batteries with high specific energy densities due to their high theoretical specific capacity (2400 mAh g⁻¹) and smaller volume change during lithiation and de-lithiation compared to silicon. However, the low initial coulombic efficiency (ICE) caused by the irreversible lithiation reaction of SiO_x has severely hindered its large-scale application. Meanwhile, the electrochemical inert products resulting from the irreversible lithiation reaction caused by the introduction of oxygen make the theoretical specific capacity of SiO_x smaller than that of silicon (4200 mAh g⁻¹). Here, we report a simultaneous pre-lithiation and in situ silicon valence modulation strategy to enhance the ICE and specific capacity of SiO_x. As a proof of concept, pre-lithiation and silicon valence states modulation of SiO@C, SiO, SiO₂ were achieved via thermal reduction methods. The electrochemical performance results showed ICE enhancement to 88.3%, 88.6%, and 85.8% for the three samples and capacity enhancement to 1985.4 mAh g⁻¹, 2051.9 mAh g⁻¹, and 1530.2 mAh g⁻¹, respectively. This work presents a pre-lithiation strategy for SiO_x anode materials to enhance the ICE of SiO_x while increasing its capacity.

FB04-09

基于溶剂交换策略构建可控水解制氢铝基凝胶的性能研究

熊郁、王辉虎

湖北工业大学

高活性铝基复合材料在水解制氢的过程中反应动力学不可控, 导致氢气与热量的爆发式释放, 严重限制了其在质子交换膜燃料电池 (PEMFC) 中的应用。为解决这一挑战, 本研究提出了一种将高活性铝基复合材料分散于聚乙烯醇 (PVA) /二甲基亚砷 (DMSO) 有机凝胶体系的新技术。其中, PVA 作为凝胶因子, DMSO 作为分散介质。该方法基于溶剂交换策略, 通过调节材料内部的网络结构来控制 DMSO 与 H₂O 的梯度扩散, 从而调控铝水反应的动力学。同时, 稳定的 DMSO 物理包裹铝颗粒, 进一步提升了材料的抗氧化能力。在铝基凝胶内部, PVA 三维网络结构不仅有效分散了铝活性组分, 防止团聚对材料的制氢能力产生负面影响, 还为材料水解提供分级限域的反应通道。本文系统研究了影响铝基凝胶制氢性能的因素。通过调整 PVA 浓度及铝基复合材料与 PVA 溶液的质量比, 实现了铝基凝胶平稳产氢速率的精确调控 (4.2-52.4 mL·s⁻¹), 同时保持最终转化效率稳定在 90% 左右。进一步优化材料参数后, 铝基凝胶成功驱动了额定功率 5.2 W 的 PEMFC 的持续放电。通过 SEM、BET 等表征技术证实, 铝基凝胶的孔径大小、单位面积活性铝含量及结构稳定性是决定制氢性能的关键因素。

FB04-10

高熵合金催化机制与结构功能一体化有机吸氢复合材料研究

岳国宗

中国工程物理研究院材料研究所

氢蚀、氢爆及氚辐射对系统性能与环境安全构成严重威胁，开发高效吸氢材料是解决密闭环境氢安全的核心挑战。本研究聚焦有机吸氢复合材料的催化性能提升与功能集成：针对传统催化剂 Pd/C 室温下仅能催化炔基部分氢化、吸氢量低且无法催化苯环加氢的难题，创新性设计 PdPtRuCuNi 高熵合金纳米催化剂。该催化剂通过多金属活性位点协同作用，实现固态芳烃化合物室温无溶剂完全氢化，使的炔基和苯环在室温常压都可以氢化，使不可逆吸氢材料的吸氢量达到 800mL/g (为 Pd/C 体系的 4 倍)。

结合结构功能一体化需求，开发相分离聚合物基柔性吸氢薄膜（如 SEBS 基材），通过优化催化剂分散性与基材透气性，制得兼具高吸氢性能（109.6 mL/g）和优良力学性能的自支撑薄膜，解决了传统吸氢剂成型与性能难以兼顾的问题。

目前正推进针对复杂气氛场景开展定制化复合吸氢材料的设计与研发，相关成果可为密闭条件下的氢安全等领域提供了新的解决方案。

FB04-11

EMSI 诱导缺电子钌调节甲苯吸附，实现室温常压下甲苯储氢

赵慧妮、岳国宗

中国工程物理研究院材料研究所

液态有机氢载体 (LOHCs) 在氢能的储存和利用中起着重要作用^[1]。甲苯多步加氢反应 (TOL) 制备甲基环己烷 (MCH) 由于其相对较低的毒性和较高的氢存储容量，在有机液体储氢中得到了广泛的研究^[2]。传统的芳烃加氢受到稳定的 π 共轭苯环结构的阻碍，通常需要高温和高压，这使得环境条件下加氢成为一项巨大的挑战^[3]。钌 (Ru) 基催化剂是苯环加氢反应的有前途的候选者，但由于甲苯与 Ru 之间的强化学吸附，导致氢气在 Ru 上的解离变得困难，其本征活性受到限制^[4]。在这项研究中，我们报道了一种由锚定在氧化碳纤维 (O-CNFs) 上的 Ru 纳米颗粒组成的催化剂。实验和基于密度泛函理论的计算都表明，O-CNFs 和 Ru 纳米颗粒之间的电子转移加强了两种组分之间的金属-载体电子相互作用 (EMSI)。强 EMSI 有助于生成缺电子状态的 Ru 并增加了 Ru 与甲苯的吸附惰性，增强了氢气的解离及产物的解吸，并促进了氢溢出，协同提高了催化储氢活性。值得注意的是，使用 18Ru/O-CNFs 催化剂，甲苯可在室温 ($<30^{\circ}\text{C}$) 常压条件下被有效转化 (TOF=98.6)，性能优于 18Ru/CNFs (TOF=20.8)，甲基环己烷总收率达到 99.9 %。

参考文献

- [1] Daniel Teichmann, Wolfgang Arlt, et al., Energy Environ. Sci., 2011, 4, 2767–2773.
- [2] Lang Chengguang, Jia Yi, et al., Energy Storage Mater., 2020, 26, 290–312.
- [3] Jing Zekun, Guo Yakun, et al., Nat. Commun., 2024, 15, 5806.
- [4] Lu Bingzhang, Guo Lin, et al., Nat. Commun., 2019, 10, 631.

FB04-12

Encapsulating SiO with biomass-derived 3-dimensional carbon network for high-performance lithium-ion batteries

Congcong Zhang, Huaiyu Shao

University of Macau

Encapsulating SiO with biomass-derived 3-dimensional carbon network for high-performance lithium-ion batteries

Congcong Zhang¹ and Huaiyu Shao^{1*}

¹Institute of Applied Physics and Materials Engineering, University of Macau, Avenida da Universidade, Taipa, Macao SAR, 999078 China

*Corresponding author: hshao@um.edu.mo (H. S.).

Abstract

Silicon monoxide (SiO) anode holds promise for high energy density lithium-ion batteries owing to its high theoretical specific capacity and lower lithiation potential. However, simultaneously addressing the challenges of large volume change, fragmented conducting network, and poor electronic/Li⁺ conductivity is crucial for its practical application for the next generation of high-energy-density batteries. Herein, we report for the first time the successful encapsulation of nano-sized SiO (N-SiO) via carbon networks prepared by dissolved cotton cellulose. The dissolved cellulose uniformly reprecipitates in ethanol and forms a 3D carbon network after the following carbonization, encapsulating the N-SiO as micrometer-scaled particles(CFNs-SiO). Meanwhile, the cellulose can form cavities between the SiO and carbon during the carbonization, forming a honeycomb-like structure and thus greatly improving the cycling performance. CFNs-SiO can still maintain a capacity of 762 mAh/g after cycling at 1C for 500 cycles, much higher than N-SiO of 452 mAh/g. Additionally, in-situ EIS, XPS, and HR-TEM illustrate that the cavities can provide a certain expansion space for N-SiO, improving the stability of electrodes and forming a thin and uniform SEI. Benefitting from the 3-dimensional carbon network and uniformly distributed cavities, the pouch cells of CFNs-SiO@Gr||LiNi_{0.88}Co_{0.08}Mn_{0.04}O₂ can maintain the capacity of 141 mAh/g after 200 cycles at a high current density of 0.5 C, much higher than N-SiO@Gr||LiNi_{0.88}Co_{0.08}Mn_{0.04}O₂ of 97 mAh/g.

Keywords: SiO anode material, 3-dimensional carbon network, Li⁺/e⁻ conductivity, cavities, cellulose

FB04-13

Stress Release and Enhanced Kinetics Promote Continuous Embedded Type SiOC@Graphite as Practical Anodes for Lithium-ion Battery

Pingshan Jia, Huaiyu Shao

University of Macau

Silicon graphite composite anodes have been successively introduced into the global market due to enhanced specific capacity, mitigated volume changes, and applicable manufacturing. However, the composite anode still suffers from the cyclic instability and limited kinetics stemming from the severe volume expansion of silicon-based anode. Developing optimized silicon-based materials and improving the compositing forms are urgent. Herein, continuous embedded SiOC@Graphite anode is developed to release stress and enhance kinetics during cycling. Comprehensive characterization and DFT analysis suggest that the continuous embedded structure alleviates expansion and releases stress while the bridged interface and free carbon in composite anode accelerate kinetics. SiOC@Graphite anode demonstrates enhanced rate performance at 4C and 10C and over 2000 cycling stability in half cell. And the practicality of improved cycling stability and enhanced kinetics is further validated through coin-type and pouch-type NCM811||SiOC@Graphite full cells, demonstrating good effectiveness for practical applications of LIBs. This continuous embedded structure provides insights on high-performance practical silicon graphite composite anode.

FB04-14

低温配对电解 CO₂ 体系的设计与研究

姜小艺

武汉工程大学

利用可持续能源将 CO₂ 转化为高附加值的燃料和化学品是实现碳中和的重要途径，但高能耗和低能量效率限制了其实际应用。除电解中的电能消耗外，将未反应的 CO₂ 分离提纯也需要巨大的能量成本。以目前最具能源优势的中性电解体系为例，碳酸根离子迁移导致的阳极碳损失会引发额外的 CO₂/O₂ 分离能量需求，使得总能耗增加~35%。针对这一关键问题，我们采用配对电解技术替代阳极析氧反应，同时结

合掺杂工程优化阳极材料，并精心设计几种 CO₂ 电解器件，从原理上避免了阳极 CO₂ 分离过程。

(1) 通过设计电化学流动池开创性地将 CO₂ 还原反应 (CO₂ Reduction Reaction, CO₂RR) 与氢气氧化反应 (Hydrogen Oxidation Reaction, HOR) 进行耦合。该电解池利用 Ni(OH)₂/NiOOH 氧化还原介质将 CO₂RR 与 HOR 在时间与空间上解耦，有效地避免了 CO₂RR 产物迁移引发的阳极 HOR 催化剂中毒以及阳极生成的 CO₂ 与未反应的 H₂ 混合导致的阳极碳损失。以产生气态产物 (CO₂-CO) 和液态产物

(CO₂-HCOOH) 为模型反应，验证了 H₂-CO₂RR 电解池的可行性。该电解池在 50 mA cm⁻² 条件下，能够以高选择性 (95.3%) 和稳定性 (> 100 h) 产生气态 (CO) 或可溶性 (HCOO⁻) 产物，并且其全电池电压 (< 0.9 V) 相较于传统 CO₂ 电解池降低了 62.8%。即使考虑制氢能量，新体系仍然可以将总能耗降低至 23%。

(2) 相较于解耦体系，将 CO₂RR 与乙二醇氧化 (Ethylene Glycol Oxidation Reaction, EGOR) 耦合更具有短期经济潜力。针对配对电解体系中产物复杂以及副反应解析困难的问题，利用红外光谱、差分电化学质谱原位技术以及电化学分析方法对模型催化剂 NiOOH 在 EGOR 反应过程中副反应的演变进行了详细解析。并定量获取了不同电位下的副反应信息。这些副反应包括，OER、乙二醇过氧化生成 CO 和 CO₂、催化剂溶解、以及碳酸氢盐重新质子化生成 CO₂。基于以上数据，通过优化 EGOR 的反应条件、Ni 活性位点的电子环境、电势以及电解液的类型，实现了 EGOR 的高选择性产生甲酸盐、乙醇醛或者乙醇酸。在低 pH 以及低电势条件下，EGOR 的产物以乙醇醛为主，其最高法拉第效率可达到 86.2%。相反，在强碱或高电势条件下，乙醇醛会进一步氧化为乙醇酸和甲酸等羧酸类物质。另外，过渡金属掺杂可以合理的调节 Ni³⁺活性位点的电子结构、优化脱氢的关键步骤，增强 EGOR 活性，并且有效抑制 EG 完全氧化生成 CO₂。经过筛选，NiCu_{0.05}OOH 在宽电压范围内可实现接近 100%的甲酸法拉第效率。通过对 EGOR 副反应的精确调控，CO₂RR-EGOR 体系可将传统 CO₂RR 电解池能耗降低~10%。

参考文献:

[1] X. Jiang, L. Ke, K. Zhao, X. Yan, H. Wang, X. Cao, Y. Liu, L. Li, D. Dang, N. Yan*, Integrating hydrogen utilization in CO₂ electrolysis with reduced energy loss. *Nature Communications*, 2024, 15, 1427.

[2] Xiaoyi Jiang, Kai Zhao, Haozhou Feng, Le Ke, Xiude Wang, Yuchen Liu, Lingjiao Li, Pengfei Sun, Zhou Chen,* Yifei Sun, Zhiping Wang, Lin Yu, and Ning Yan*, Unraveling side reactions in paired CO₂ electrolysis at operando conditions: a case study of ethylene glycol oxidation, *Journal of the American Chemical Society*, 2025, <https://doi.org/10.1021/jacs.5c00325>.

FB04-15

DFT Analysis of Cu₄-Decorated Modified Graphene for Enhanced Hydrogen Storage Applications

Habibullah ¹, Wanglai Cen¹, Yao Wang^{1,3}, Chaoling Wu^{2,3,4}

1. Sichuan University

2. College of Materials Science and Engineering, Sichuan University, Chengdu 610064, Sichuan Province, PR China

3. Engineering Research Center of Alternative Energy Materials & Devices, Ministry of Education, Chengdu 610064, Sichuan Province, PR China

4. State Key Laboratory of Intelligent Construction and Healthy Operation and Maintenance of Deep Underground Engineering, Sichuan University, Chengdu 610065, Sichuan Province, PR China

Graphene has attracted attention as a hydrogen storage material due to its large surface area, structural stability, and rapid adsorption [1]. However, its hydrogen adsorption capacity is limited in its pure form. Researchers are investigating transition metals/clusters (such as Pd, Pt, Ni, and Ti) on graphene to enhance adsorption and catalytic activity [2]. A significant challenge is the aggregation of metal atoms on graphene. Doping with elements (N, B, P) and defect modification can improve interactions of the clusters and graphene surface, and facilitate hydrogen spillover [3]. Copper (Cu) and its oxides are being studied as dopants. Cu-functionalized B-doped graphene reached a gravimetric density of 4.23 wt% [4]. Nonetheless, more

improvements are needed for better hydrogen storage capacity.

This work utilizes density functional theory (DFT) to assess the potential of a Cu₄ cluster for hydrogen adsorption and spillover as a hydrogen storage material. Four graphene slabs were evaluated, revealing that pristine graphene (PG) and phosphorus-doped graphene (PPG) are unsuitable for Cu₄ decoration due to low binding energies. In contrast, Cu₄ on single vacancy graphene (SVG) and phosphorus-doped SVG (PSVG) showed favorable hydrogen adsorption, with average energies of -0.22 eV/H₂ and -0.30 eV/H₂, respectively, both ideal for hydrogen ads/desorption. The migration barriers for hydrogen on Cu₄/SVG and Cu₄/PSVG are 1.36 eV and 1.10 eV, respectively, with reaction times significantly reduced at higher temperatures. Notably, Cu₄/PSVG could achieve a hydrogen storage capacity of approximately 5.71 wt% at 400 K. These findings highlight Cu₄/PSVG as a promising candidate for hydrogen storage technologies, potentially minimizing the need for costly transition metals in graphene-based systems.

References

- [1] Xia, G., Habibullah, Xie, Q., Huang, Q., Ye, M., Gong, B., Du, R., Wang, Y., Yan, Y., Chen, Y., & Wu, C. Recent progress in carbonaceous materials for the hydrogen cycle: Electrolytic water splitting, hydrogen storage and fuel cells. *Chemical Engineering Journal*, 495 (2024) 153405.
- [2] Habibullah, Cen, W., Wang, Y., Yan, Y., Chen, Y., & Wu, C. DFT study of Pd₄ and Pd₃P supported on modified graphene for hydrogen storage. *International Journal of Hydrogen Energy*, 50 (2024) 659–669.
- [3] Jin, C., Li, J., Zhang, K., Habibullah, Xia, G., Wu, C., Wang, Y., Cen, W., Chen, Y., Yan, Y., & Chen, Y. Pd₃P nanoparticles decorated P-doped graphene for high hydrogen storage capacity and stable hydrogen adsorption-desorption performance. *Nano Energy*, 99 (2022) 107360.
- [4] Faye, O., Eduok, U., Szpunar, J., Szpunar, B., Samoura, A., & Beye, A. Hydrogen storage on bare Cu atom and Cu-functionalized boron-doped graphene: A first principles study. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(2017) 4233–4243.

This study was supported by a project funded by the National Natural Science Foundation of China (No. U2030208).

FB04-16

钯基催化剂氢迁移轨迹调控加速氢氧化反应

夏广辉、王尧、吴朝玲

四川大学

钯 (Pd) 广泛应用于传感器、能量转换、生物医学治疗和催化等领域^[1, 2]。由于其特殊的储氢特性，在许多电化学反应中引起了广泛的关注。而对于碱性膜燃料电池的氢氧化反应(HOR)，其显著的储氢性能将使其在 HOR 的电位范围内易于转化为氢化物^[3]。因此，氢结合能(HBE)的增加，将抑制 HOR 中的沃尔默步骤。目前，研究者只是利用 Pd 的储氢特性作为活性氢的临时储存库，在超高电位下为催化剂的缺氢界面提供活性氢原子，使 Pd 作为 HOR 催化剂的添加剂而非主催化剂^[4]。因此，有必要通过有效的策略来优化 Pd 的表面性质并平衡吸附氢(H_{ads})和吸收氢(H_{abs})的能力，以实现 Pd 本身较高的 HOR 活性。

在本工作中，我们巧妙地通过有序介孔碳 (OMC) 的限域作用实现了对钯纳米粒子的碳原子掺杂进而调节钯的界面结构。这是首次通过调整 Pd 的亚表面结构，降低了 Pd 的吸氢能力，优化了 Pd 的 HBE。此外，由于作为晶格 H 原子传输通道的表面 PdC_x 层上存在一些缺陷，Pd 核仍然可以作为活性氢库，提供可以迁移到表面的晶格氢，从而加速高电位下碱性 HOR 的动力学。因此，Pd@PdC_x@OMCs 催化剂的质量活性比商业 Pd/C 催化剂高 18.6 倍，显示出在碱性交换膜燃料电池应用中的潜力。这一工作为通过调节催化剂表面界面来调节氢中间体的迁移路径提供了启示，并在实际氢相关反应中显示出独特的催化效果。

参考文献

- [1] M.C. Luo, Z.L. Zhao, Y.L. Zhang, Y.J. Sun, Y. Xing, F. Lv, Y. Yang, X. Zhang, S. Hwang, Y.N. Qin, J.Y. Ma, F. Lin, D. Su, G. Lu, S.J. Guo, PdMo bimetallic for oxygen reduction catalysis, *Nature*, 574 (2019) 81-85.
- [2] X.T. Zhang, L. Hui, D.X. Yan, J.Z. Li, X. Chen, H. Wu, Y.L. Li, Defect Rich Structure Activated 3D Palladium Catalyst for Methanol Oxidation Reaction, *Angewandte Chemie-International Edition*, 62 (2023) e202308968.
- [3] W. Xu, G. Fan, J. Chen, J. Li, L. Zhang, S. Zhu, X. Su, F. Cheng, J. Chen, Nanoporous Palladium Hydride for Electrocatalytic N₂ Reduction under Ambient Conditions, *Angewandte Chemie-International Edition*, 59 (2020) 3511-3516.
- [4] X. Song, X.-G. Zhang, Y.-L. Deng, Z.-A. Nan, W. Song, Y. Wang, L. Lu, Q. Jiang, X. Jin, Y. Zheng, M. Chen, Z. Xie, J.-F. Li, Z.-Q. Tian, F.R. Fan, Improving the Hydrogen Oxidation Reaction Rate of Ru by Active Hydrogen in the Ultrathin Pd Interlayer, *Journal of the American Chemical Society*, 145 (2023) 12717-12725.

FB04-17

高能耐用的柔性全聚合物水系电池

贾康康、何思斯

哈尔滨工业大学（深圳）

摘要内容：柔性全聚合物水系电池以其本征安全及柔性的优势，在可穿戴电子等柔性供能场景中展现出良好的应用潜力^[1, 2]。作为其核心的有机电极材料，因分子结构可调、资源丰富及高比容量特性，成为推动该技术发展的关键支撑^[3, 4]。然而，柔性全聚合物水系电池仍面临电压窗口限制导致能量密度低、聚合物电极稳定性差以及电极与电解质作用机制不明等问题^[5, 6]。基于聚苯胺开发出一种全新的柔性全聚合物水系电池。该研究提出了一种环境友好的聚合物-水系电解液，首次实现了聚苯胺在水系电解液中通过稳定存储钠离子作为负极材料的应用，并验证了其作为对称电极的可行性，从而简化了电池的结构设计。该全聚合物电池可实现高达 139 mAh/g 可逆容量，经过 4800 次循环后电池仍能保持 92.0% 的容量，平均库仑效率为 99.5%，最终可实现 153 Wh/Kg 的能量密度，是当时已报道水系钠离子电池能量密度的最高值。这种柔性全聚合物水系电池具有优异的加工性，可以满足纤维状和平面柔性器件的制备需求，有效地满足了多样化场景应用。此外，该电池在保证优异电化学性能的同时，展现出高度的柔性与形变稳定性，为实现高性能柔性储能提供了有力支撑，该体系有望为可持续柔性储能技术的发展提供新的思路与动力。

参考文献：

- [1] Hong, Y.#, Jia, K.#, Zhang, Y. et al. Energetic and durable all-polymer aqueous battery for sustainable, flexible power. *Nat. Commun.* 2024, 15, 9539.
- [2] Jia, K., Zhang, J., Hu, P. et al. Adjusting morphological properties of organic electrode material for efficient Sodium-ion batteries by isomers strategy. *J. Colloid Interface Sci.* 2022, 623, 637-645.
- [3] Jia, K., Liu, H., Huang, G. et al. Highly efficient phenanthroline-based organic anode materials with a three-electron redox mechanism. *J. Mater. Chem. A* 2022, 10, 14917-14922. [4] Jia, K., Zhu, L., Wu, F. .Phenylpyridine Dicarboxylate as Highly Efficient Organic Anode for Na-Ion Batteries. *Chemsuschem* 2021, 14, 3124. [5] Tang, M.#, Jia, K.#, Ma, G. et al. Isomers of terephthalate derivatives as anodes for sodium-ion batteries. *Inorg. Chem. Front.*, 2024, 11, 5103-5110.
- [6] Luo, Y.#, Jia, K.#, Li, X. et al. Tetrathiafulvalene carboxylate-based anode material for high-performance sodium-ion batteries. *Chemsuschem* 2024, 17, e202301847.

FB04-18

Synergistic Modification of SiO/C Anode via Mg-Li Doping and Carbon Reconstruction

Zhiyuan Zhang, Huaiyu Shao

Institute of Applied Physics and Materials Engineering, University of Macau

Silicon suboxide (SiO_x , $x \approx 1$) is a promising high-capacity anode material for lithium-ion batteries, yet its low initial Coulombic efficiency (ICE) originates from irreversible lithium silicate formation during the first cycle. Magnesium doping serves as a cost-effective strategy for ICE enhancement via low-cost Mg powder. However, the low reactivity of Mg (compared to Li) leads to incomplete reaction with SiO_x , and the resultant magnesium silicates impede Li-ion diffusion. Herein, SiO/C precursor is co-modified using Mg powder and LiOH. The introduced LiOH improves lithium-ion diffusion kinetics and synergistically enhances ICE. Magnesium silicates formed on the SiO/C surface establish a core-shell structure, reducing irreversible lithium loss. But during acid washing for MgO and residual Mg removal, structural exfoliation of the carbon layer occurs; thus, polydopamine hydrochloride coating coupled with carbonization is implemented to reconstruct the carbon layer. The optimized anode achieves an ICE of 84.22% and a reversible capacity of 1087.7 mAh g^{-1} . Compared to pristine SiO/C , synergistic optimization of overall electrochemical performance (ICE and cycling stability) is demonstrated.

FB04-19**Li-Si alloy pre-lithiated silicon suboxide anode constructing a stable multiphase lithium silicate layer promoting Ion-transfer kinetics**

Yingying Shen, Huaiyu Shao

University of Macau

Enhancing the initial Coulombic efficiency (ICE) and cycling stability of silicon suboxide (SiO_x) anode is crucial for promoting its commercialization and practical implementation. Herein, we propose an economical and effective method for constructing pre-lithiated core-shell SiO_x anodes with high ICE and stable interface during cycling. The lithium silicon alloy ($\text{Li}_{13}\text{Si}_4$) is used to react with SiO_x in advance, allowing for improved ICE of SiO_x without compromising its reversible specific capacity. The pre-lithiated surface layer contains uniform multiphase lithium silicates (Li_2SiO_3 , Li_4SiO_4 , and $\text{Li}_2\text{Si}_2\text{O}_5$) in the nanoscale. This multiphase lithium silicate layer exhibits mechanical robustness against variation of micro-stress, which can act as a buffer layer to relieve volume variation. In addition, analysis of dynamic electrochemical impedance spectroscopy (dEIS) and distribution of relaxation time (DRT) confirm that the multiphase lithium silicate layer enhances Li-ion diffusion kinetics and contributed to constructing stable SEI. As a result, the optimal L10-850 anode shows a high ICE of 85.3 %, together with a high specific capacity of 1771.5 mAh mg^{-1} . This work gives a perspective strategy to modify SiO_x anodes by constructing a pre-lithiated surface layer with practical application potentials.

FB04-20**Multifunctional Interface Engineering of $\text{Li}_{13}\text{Si}_4$ Pre-Lithiation Additives with Superior Environmental Stability for High-Energy-Density Lithium-Ion Batteries**

Yinan Liu, Huaiyu Shao

University of Macau

Considering the growing pre-lithiation demand for high-performance Si-based anodes and consequent additional costs caused by the strict pre-lithiation environment, developing effective and environmentally stable pre-lithiation additives is a challenging research hotspot. Herein, interfacial engineered multifunctional $\text{Li}_{13}\text{Si}_4@\text{PFPE/LiF}$ micro/nanoparticles are proposed as anode pre-lithiation additives, successfully constructed with the hybrid interface on the surface of $\text{Li}_{13}\text{Si}_4$ through perfluoropolyether (PFPE)-induced nucleophilic substitution. The synthesized multifunctional $\text{Li}_{13}\text{Si}_4@\text{PFPE/LiF}$ realizes the integration of active Li compensation, long-term chemical structural stability in air, and solid electrolyte interface (SEI) optimization. In particular, the $\text{Li}_{13}\text{Si}_4@\text{PFPE/LiF}$ with a high pre-lithiation capacity (1102.4 mAh g^{-1}) is employed in the

pre-lithiation Si-based anode, which exhibits a superior initial Coulombic efficiency of 102.6%. Additionally, *in-situ* XRD/Raman, DFT, and finite element analysis jointly illustrate that PFPE-predominant hybrid interface with modulated abundant highly electronegative F atoms distribution reduces the water adsorption energy and oxidation kinetics of $\text{Li}_{13}\text{Si}_4@\text{PFPE}/\text{LiF}$, which delivers a high pre-lithiation capacity retention of 84.39% after exposure in extremely moist air (60% relative humidity). Intriguingly, a LiF-rich mechanically stable bilayer SEI is constructed on anodes through a pre-lithiation-driven regulation for the behavior of electrolyte decomposition. Benefitting from pre-lithiation via multifunctional $\text{Li}_{13}\text{Si}_4@\text{PFPE}/\text{LiF}$, the full cell and pouch cell assembled by pre-lithiated anodes operate long-time stability of 86.5% capacity retention over 200 cycles and superior energy density of 549.9 Wh kg^{-1} , respectively. The universal multifunctional pre-lithiation additives provide enlightenment on promoting large-scale applications of pre-lithiation on commercial high-energy-density and long-cycle-life lithium-ion batteries.

FB04-21

受线粒体启发的体内高密度镁-氧电池

何儿¹、任俊烨¹、王列¹、李方琰¹、李录河¹、叶婷婷¹、焦一丁¹、李丹²、王嘉诚¹、王远贞¹、高睿¹、张晔¹

1. 南京大学

2. 南京中医药大学

电池作为电子器件的心脏，为其提供能源，保证各功能的正常运行。随着新兴电子器件如植入式生物电子器件等领域的蓬勃发展，要求可植入电池需要具备优异的生物安全性、高密度、稳定的输出电压、小尺寸及高集成度。现有的商用植入式电池通常使用有毒的有机电解液，增大了安全风险；需要严密封装，因此是刚性的，力学性能与软组织不匹配；能量密度低，体积大，无法满足应用需求。为了解决这一核心难题，我们提出模仿线粒体，构建生物匹配的体内高密度镁-氧生物电池，该电池在体内同时实现了高密度和生物相容性。该电池能够与生物环境高度适应，在生物体多个部位包括脑、腹腔、皮下、肌肉等稳定工作，能量密度高达 $2517 \text{ Wh} \cdot \text{L}^{-1}$ ，是目前植入电池的最高纪录，显著超过商业电池和文献报道，有效满足可植入领域应用要求。电池体积可以缩小至 0.015 mm^3 ，并在放大 400 倍后其性能基本能保持不变。不仅如此，通过双层膜的设计，电池的电化学反应不会影响生物安全，电池更是能够与生物组织形成良好的界面，降低异物反应，具有优异的生物相容性。本研究提出了一种有效的策略，可用于开发高性能的可植入电池。

FB04-22

涂敷隔膜协同原位聚合构筑高性能全固态锂硫电池

崔明昱

华中科技大学材料科学与工程学院

锂硫电池作为一种能量密度高且成本低的储能电池，有望成为下一代锂离子电池的候选者。然而，多硫化物穿梭效应、硫活性物质利用率低且电性差以及充放电过程中硫体积变化大等问题严重阻碍锂硫电池的实际应用。本研究利用隔膜涂敷和原位聚合双重策略，设计了一种具有高稳定性和高库伦效率的全固态锂硫电池。通过将 $\text{Co}_3\text{O}_4@\text{CNT}$ 和 PVDF-PEO/LLZNO 分别涂敷在商用聚烯烃隔膜两侧，成功制备了功能型涂敷隔膜。研究表明，这种协同增效的涂敷隔膜具有双重作用：阴极侧形成致密物理阻隔层有效抑制了多硫化物的扩散迁移并通过表面催化作用加速了氧化还原动力学进程；阳极侧与金属锂形成稳定界面，调控锂沉积行为，抑制锂枝晶生长，提升电池的安全性与循环耐久性。最后，以偶氮二异丁腈为引发剂、季戊四醇四丙烯酸酯为单体，构筑了一种基于该涂敷隔膜的全固态锂硫电池。组装的全固态锂硫电池在 1C ($1\text{C}=1675 \text{ mAh}$) 倍率下循环 500 圈后的放电比容量为 513.4 mAh g^{-1} ，平均库伦效率高达 99.3%，容量保持率为 81.3%。该方法可为设计锂硫全固态电池提供参考，有助于解决锂硫电池实际应用中产生的问题。

FB04-23**Mechanistic insights into the enhancement of MgH₂ hydrogen storage performance by ultra-stable bimetallic Mo₂V₂C₃ MXene**

Xingqing Duan, Ying Wu

Energy and Power Innovation Research Institute of North China Electric Power University (Beijing)

Magnesium hydride, as an important light-metal hydrogen storage material for on-board hydrogen storage, aerospace, and energy fields, has long been limited in its large-scale applications by slow hydrogen storage speed and high dehydrogenation temperature. In this work, ultra-stable bimetallic MXene Mo₂V₂C₃ was successfully synthesized and used to accelerate the hydrogen storage speed and reduce the dehydrogenation/hydrogenation temperature of MgH₂. The MgH₂ + 10 wt% Mo₂V₂C₃ sample starts dehydrogenation at 180 °C and reaches the maximum dehydrogenation rate at 259 °C. It also exhibits outstanding room-temperature (RT) rapid hydrogenation performance and cycling stability, retaining up to 100% capacity after 50 cycles at 300 °C. Another interesting phenomenon is that the hydrogen storage speed of the sample is even faster without capacity decrease as the dehydrogenation/re-hydrogenation cycle proceeds. First-principles calculations show that the Mg atoms are stabilized at the top sites of Mo atoms, and the Mg–H bonds that are adsorbed on Mo₂V₂C₃ are more susceptible to breakage. The key to the accelerated rate of Mg/MgH₂ hydrogenation/dehydrogenation is the enhancement of the interaction between Mg/MgH₂ and Mo₂V₂C₃ MXene with the increasing number of cycles, whereas the existence of the V renders the structure of MXene more stable. Our study refines the mechanistic understanding of bimetallic MXene catalyst for MgH₂ hydrogen storage and expands reference on the type and preparation of bimetallic MXene.

FB04-24**TiH and V₇C₈ in-situ Generated from Bimetallic TiVC MXene Tailoring the Li–Mg–B–H Composite towards Eminent Hydrogen Storage Property**

Shixuan He, Ying WU

School of Energy Power and Mechanical Engineering, North China Electric Power University, Beijing 102206, China

2LiBH₄ + MgH₂ (Li–Mg–B–H) composite system is regarded as a hydrogen storage method with promising outlook because of its high capacity (11.4 wt%). Nevertheless, some problems prevent the system application, that slow hydrogen absorption and desorption kinetics, as well as the tendency for the cyclic capacity to decay. In this study, TiVC MXene was obtained by etching TiVAIC and introduced into 2LiH + MgB₂ by ball milling. 2LiBH₄ + MgH₂ system was formed after heating and hydrogenation, which exhibited distinguished kinetic properties and capacity retention rate. In LMBH + 6 wt% TiVC composite, 9.3 wt% hydrogen was released within 35 min at 400 °C as well as hydrogenation was completed within 30 min at 350 °C, 9 MPa. Moreover, the capacity retention rate was up to 96% after the 15th cycle. During the heating and hydrogenation process, TiH and V₇C₈ were generated in-situ as active products, and stably existed in the subsequent process to catalyse the hydrogen absorption and desorption reactions of the system. The nucleation period of MgB₂ was shortened, and the presence of TiH/LiH/V₇C₈/MgB₂ interface enhanced the kinetic performance of the system. Reversibility was improved by inhibiting the generation of polyborane and the aggregation during the hydrogen absorption and desorption process of composite. The interface structure-activity relationship was first elucidated that between bimetallic MXene and Li–Mg–B–H composite system hydrogen absorption and desorption processes, providing a novel viewpoint and optimization path for the modification research of Li–Mg–B–H composite system.

FB04-25

有限水场景下镁钙基材料的水解反应机制

黄琴、吴加鏊、郭超、吴朝玲

四川大学

镁基材料因低成本、高理论储氢密度和“制-储-运”一体化特性被视为理想水解制氢材料，但其完全水解受限于副产物 $\text{Mg}(\text{OH})_2$ 钝化层^[1]。本团队开发了由 MgH_2 和 $\text{Ca}_4\text{Mg}_3\text{H}_{14}$ 组成的镁钙氢化物 (MCH)。归因于 $\text{Ca}_4\text{Mg}_3\text{H}_{14}$ 易水解特性和副产物 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 更高溶解度，MCH 水解性能优于纯 Mg 或 MgH_2 ，室温下储氢密度达 12.01wt% (不考虑反应水)^[2]。然而，面对无人机等有限水资源应用场景，MCH 水解产氢效率受限显著。本工作系统研究了反应溶液体积对 MCH 基材料水解性能影响，优选低水环境（水解材料质量：反应溶液体积=1g：2mL），探究环境温度及高容量易水解相 LiAlH_4 作为添加剂调控水解动力学及水解性能机制。结果表明，MCH 基复合材料水解性能受反应溶液体积显著影响。随着水解反应质量体积比从高于理论当量比降至低于理论当量比，水解反应经历了反应水量限速到副产物氢氧化物钝化层限速的转变。低水量环境下，通过高能球磨制备的 MCH-5EG 复合材料水解性能随反应温度提高而提升，在 70 °C、去离子水中，水解转化率达 83%，储氢密度达 10.47 wt% (不考虑反应水)。高温下，反应物分子更易解离且扩散速度加剧，伴随着材料表面水解副产物氢氧化物钝化层受热应力破坏，水解反应进程得到显著提升。进一步制备了新型 MCH-5EG-15 LiAlH_4 复合材料，其在室温下的储氢密度即可达 10.22 wt% (不考虑反应水)。 LiAlH_4 的添加提高了复合材料理论储氢密度；水解过程中， LiAlH_4 优先水解产生的热诱导效应有助于提升 MCH 基材料水解动力学；此外，生成双金属层状氢氧化物 $\text{Ca}_2\text{Al}(\text{OH})_7 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ 副产物有助于为 H_2O 分子深入颗粒内部提供传质通道。本研究有望大力推动镁基水解材料在无人机等有限水源环境的实际应用。

本研究为国家重点研发 (2022YFB3803705-1) 和 THL-K-24-103 资助项目。

参考文献：

[1] Wu Chaoling, Huang Qin, Gong Bingshou, Zhou Ji, Xia Guanghui, He Fangnan, Wang Yao, Yan Yigang, Chen Yungui, Journal of materials science & technology, 2023, 163, 1.

[2] Huang Qin, Gong Bingshou, Habibullah, Wang Ziyuan, Wang Yao, Yan Yigang, Chen Yungui, Wu Chaoling, Journal of power sources, 2024, 595, 234004.

FB04-26

AI+Automation 驱动新能源材料研发范式革新

张巍然

深圳晶泰科技有限公司

在“碳中和”目标指引下，新能源材料研发正加速向数字化、智能化方向演进。传统材料开发模式受制于人工操作的效率瓶颈与经验依赖，普遍面临研发周期长（12-18 个月）、资源消耗大等系统性挑战。为解决这一行业痛点，我们构建了“AI+Automation”双轮驱动的研发新范式，通过“计算预测-智能设计-高通量验证”的技术闭环，实现材料化学空间的高效探索与工艺参数的精准优化^[1-3]。

技术体系创新聚焦三个维度：1) 研发流程重构：将 AI 算法深度融入材料设计与过程优化，开发具有自主知识产权的智能计算平台，实现材料研发从劳动密集型向数据驱动型转变；2) 硬件设施突破：建成全流程自动化实验矩阵，集成智能仓储、自动投料、精准反应控制、在线检测等模块，通过 AGV 物流系统与协作机器人实现实验流程的无缝衔接；3) 人机协同进化：开发智能调度中枢系统，采用标准化的化学过程描述语言，实现 200 余台自动化设备与科研人员的实时协作，形成 7×24 小时连续运行的“数字化学家”工作模式。

目前该技术体系已在新能源材料领域形成示范应用^[4-5]。本报告将系统阐述技术架构创新点，重点展示在锂电池、钙钛矿等新能源材料领域的制备、加工、表征的全流程自动化解决方案和应用案例，为新能源材料研发新范式提供可复用的方法论与实践参考。

关键词：人工智能；机器人；高通量实验；新能源材料自动化

参考文献

- [1] 李华, 张伟, 王磊, 等. 人工智能与机器人技术融合的新材料高通量实验平台构建[J]. 自动化学报, 2021, 47 (8) : 1623-1634.
- [2] Chen Z, Sun Y, Ceder G, et al. Accelerated discovery of lithium battery materials via robotic experiments and machine learning[J]. Nature Energy, 2020, 5(9): 725-735.
- [3] 刘洋, 陈明, 黄涛, 等. 面向钙钛矿太阳能电池的自动化制备与性能优化系统[J]. 中国科学: 技术科学, 2022, 52 (3) : 456-468.
- [4] Szymanski N J, Zeng Y, Bartel C J, et al. Toward autonomous materials research: A system for automated experimentation in solid-state chemistry[J]. Science Robotics, 2021, 6(58): eabe1563.
- [5] 国家新材料产业技术创新联盟. 新能源材料研发智能化转型白皮书(2020-2025)[R]. 北京: 中国科学技术出版社, 2020.

FB04-27

锂硫电池中 (多) 硫化锂的反应机制研究

王志华、朱贺

南京理工大学

锂硫电池是下一代高能量密度二次电池的候选者之一, 但其应用受限于硫转化动力学缓慢和严重的“穿梭效应”。我们从结构优化的角度出发, 实现了对 (多) 硫化锂分子结构和硫化锂局域结构的调控, 并开发了新型分子电催化剂结构。具体来说, 以电解液添加剂改变了多硫化物的溶剂化结构并改变其物化性质, 抑制多硫化物歧化主导的穿梭问题。同时, 利用添加剂打破定向生长的硫化锂晶体结构, 从而实现了具有快速反应动力学的非晶化结构。进一步, 通过原位聚合在硫正极表面形成栅栏型分子电催化剂来解耦了吸附/催化位点数量之间的矛盾, 构建微米级限域反应空间。

FB04-28

高效稳定的 $10 \times 10 \text{ cm}^2$ 质子陶瓷电化学氢泵用于氢的分离与纯化

张广君、王绍荣

中国矿业大学

质子陶瓷电化学氢泵(PCEHPs)作为一种极有潜力的氢分离技术受到了社会的广泛关注。与传统的氢分离技术相比, PCEHP 具有能耗低、稳定性好、材料便宜等优点, 具有广阔的应用前景。然而, PCEHPs 的性能和稳定性不足, 限制了其实际应用。本文通过流延成型、叠层热压、共烧结工艺成功制备了结构为“多孔 Ni-BaCe_{0.7}Zr_{0.1}Y_{0.1}Yb_{0.1}O_{3-δ} (BCZYYb) 支撑层|多孔 Ni-BCZYYb 功能层|致密 BCZYYb 电解质层|多孔 Ni-BCZYYb 功能层|多孔 Ni-BCZYYb 支撑层”的大面积($10 \times 10 \text{ cm}^2$) PCEHP。其中, 650 °C 时, 活性面积为 1.13 cm^2 的 PCEHP 在 0.3 V 下的泵 H₂ 速率可达 $7.93 \text{ mL min}^{-1} \text{ cm}^{-2}$, 其法拉第效率为 88%, 另外, 其在超过 500 小时的电解和热循环模式下均表现出优异的稳定性。此外, 活性面积为 81 cm^2 的 PCEHP 在 650 °C, 0.3 V 下的泵 H₂ 速率为 $153.32 \text{ mL min}^{-1}$ 。结果表明, 本文制备的 PCEHPs 具有巨大的氢净化应用潜力。

FB04-29

Lattice Oxygen Participation in Methanol Electrochemical Refinery to Formate

Fanxu Meng

The Berkeley Education Alliance for Research in Singapore

Developing technologies based on the concept of methanol electrochemical refinery (e-refinery) is promising for carbon-neutral chemical manufacturing. However, a lack of mechanism understanding and material properties that control the methanol e-refinery catalytic performances hinders the discovery of efficient catalysts. Here, using ¹⁸O isotope-labeled catalysts, we find that the oxygen atoms in formate generated during the methanol e-refinery

reaction can originate from the catalysts' lattice oxygen and the O-2p-band center levels can serve as an effective descriptor to predict the catalytic performance of the catalysts, namely, the formate production rates and Faradaic efficiencies. Moreover, the identified descriptor is consolidated by additional catalysts and theoretical mechanisms from density functional theory. This work provides direct experimental evidence of lattice oxygen participation and offers an efficient design principle for the methanol e-refinery reaction to formate, which may open up new research directions in understanding and designing electrified conversions of small molecules.

FB04-30

双功能团策略下 Janus MoB 作为锂离子电池负极的电化学性能研究

张文博

兰州理工大学

随着储能技术的不断进步,以及响应当前绿色、低碳政策的需求,追求兼具快速充电/放电能力和高安全性的电极材料逐渐成为了永恒的话题。2D 材料相比于块体材料具有更大的表面积与体积比、优异的化学活性与良好的机械稳定性,此外,2D 材料具有丰富的离子扩散和存储通道,很有做电极材料的潜力,而到目前为止已有很多成功制备的此类材料。二维(2D)过渡金属硼化物(MBenes)作为其中一类材料有极大的优势。MoB 作为 MBene 的一种显示了高的比容量(相比于石墨的 372 mAh/g 而言),但由于金属原子外露损害了碱金属离子的吸附,限制了其在高端储能领域的应用。探索出通过用电负性原子进行表面功能化是优化 MBenes 电极材料电化学的有效方法。为此提出了用双官能团功能化 MoB,构建非对称 Janus MoBXY (X/Y=O, S)结构来解决这些挑战。Janus 配置引入了界面极化,同时保持了结构优势,实现了表面电荷再分布和离子迁移路径的双重优化。通过第一性原理计算,一方面功能化显著降低了 Li⁺扩散势垒,另一方面改进的系统实现了增强的比容量,同时保持了安全的工作电压范围以抑制枝晶形成。这些性质归因于功能化的 Janus 结构重新分配了材料的表面电荷,导致被吸附的原子和基质之间的相互作用力均匀一致,从而提高了锂离子的吸附稳定性。总之,该研究从微观上阐明了 O 和 S 功能化 MBene 电极材料的储能性能机理,为后续基于 MBene 的电极建立了基本准则,强调了表面功能化在实现高倍率能力和抗枝晶中的关键作用,从而推动了安全高效的储能系统的发展。

FB04-31

Synergistic Li⁺ and Al³⁺ Doping Stabilizes P2-Phase Structure and Enables Reversible Oxygen Redox in Sodium-Ion Layered Cathodes

Wei Tang

Shandong University of Science and Technology

Among cathode materials, P2-type layered transition metal oxides (Na_xMO_2 , where M denotes transition metals) stand out for their high theoretical capacity and broad operational voltage window. However, these materials face substantial hurdles in practical implementation, including irreversible P2-O2 phase transitions under high voltage, structural degradation induced by Jahn-Teller distortion, and interfacial side reactions arising from air sensitivity. While single-element doping strategies have been widely employed to optimize P2-type material performance, their limitations—such as capacity degradation from excessive Li doping or compromised rate capability due to Al-induced reductions in electronic conductivity—have become increasingly evident. This work introduces a Li-Al co-doping strategy to engineer the $\text{P2-Na}_{0.85}\text{Li}_{0.15}\text{Ni}_{0.15}\text{Al}_x\text{Mn}_{0.7-x}\text{O}_2$ cathode material. Through systematic investigation of varying Al-doping ratios ($x=0-0.06$), the composition with $x=0.02$ (denoted as NMLA2) exhibits optimal comprehensive performance within the 1.5-4.5 V voltage range, achieving a capacity retention rate of 75.3% after 200 cycles and delivering a rate capability of $42.1 \text{ mAh} \cdot \text{g}^{-1}$ at 10

C. Ex situ XRD reveals a minimal volume change of only 1.01% during charge-discharge processes, significantly lower than the 23% volume variation observed in undoped counterparts. The Li-Al co-doping strategy achieves performance enhancement through complementary roles: (i) Li doping activates additional high-voltage oxygen redox reactions while suppressing byproduct formation; (ii) Al doping stabilizes the crystal structure via strong Al-O bonds, inhibiting P2-O2 phase transitions and structural degradation; (iii) combined, they optimize Na⁺ diffusion pathways and reduce charge transfer resistance, balancing capacity and cycle stability while circumventing the drawbacks of single-doping approaches. This work demonstrates that Li-Al co-doping represents an effective strategy to enhance the structural stability and electrochemical reversibility of P2-type layered oxides for SIBs. By suppressing Jahn-Teller distortion, mitigating cation migration, and enabling reversible oxygen redox reactions, the NMLA2 material exhibits ultra-low volume strain and robust cycling performance. These findings provide a novel framework for designing high-energy-density cathode materials with balanced properties, paving the way for the commercialization of SIBs. Future research directions may focus on elucidating the effects of dual doping on interfacial electrochemistry and ion transport kinetics to further advance this technology.

FB04-32

玻璃表面原子层沉积 Al₂O₃/TiO₂ 复合膜的耐磨抗反射疏水特性

安泽宇、郝金明、董兵海

湖北大学

抗反射疏水膜具有自清洁、高透光率等优点，在太阳能电池等领域有着重要的应用。然而，以简单易得的方式获得高透射率、高耐久性和超疏水表面仍然是一个挑战。报道了一种氧化铝氧化钛复合薄膜，该薄膜在拥有疏水抗反射能力的同时具备良好的耐磨性。结果表明，复合薄膜的接触角大于 130°，可见光范围内透光率最大值大于 96%，平均透光率在 94% 以上。该薄膜经过剥离、洗刷以及人手磨损后仍能保持改性能。同时该薄膜具有优异的抗紫外性能和热稳定性以及相对化学稳定性。还研究了复合薄膜成分比例与薄膜透光率和疏水角的关系。这种方法为提高减反射疏水薄膜的耐磨性与实用性提供了新思路，同时，由于金属氧化物的绝缘性，该复合薄膜在 SOFC 等储能领域拥有巨大的应用潜力。

FB04-33

电子束诱导沉积双金属功能层构筑协同界面实现锂金属电池稳定循环

唐宇²、陈艾²、吕霄蓉²、高莉²、张鹏²、刘秉鑫²、张世鹏¹

1. 青海理工学院

2. 青海大学

锂金属电池负极侧中锂枝晶不可控生长和体积膨胀引发的安全风险与循环寿命不足严重制约其商业化进程。对此本研究提出基于电子束诱导沉积 (EBID) 技术的双路径改性策略，实现集流体表面化学-形貌-力学特性的多维度协同优化。通过 EBID 在铜箔表面分别构建纳米级镁晶种 (精细晶粒结构) 与锌功能层 (200 nm 厚度)，显著优化锂成核与沉积行为。镁改性层通过缓解尖端效应、增强界面亲锂性，使锂沉积更均匀，在 3 mAh cm⁻² 高容量下有效抑制枝晶，对称电池循环寿命达 420 小时 (0.5 mA cm⁻²)。锌功能层则展现出近零的锂成核过电位 (≈ 0 V) 与高活性位点密度 ($C_{dl}=239.23 \mu F cm^{-2}$)，结合近 100% 的基底机械结合强度，赋予半电池 200 次循环后 95% 的高库仑效率及对称电池超 3100 小时的长循环稳定性。两种改性策略均通过调控锂沉积动力学与界面特性，突破传统铜箔的固有缺陷，为高能量密度锂金属电池的实际应用提供了兼具高效性与可扩展性的解决方案。

FB04-34

多级次结构硅碳负极：化学预锂化协同原位聚合工艺构筑高性能全固态锂离子电池

邱鹏源

华中科技大学

硅材料因其优异的比容量，已成为下一代锂离子电池中替代石墨负极的极具前景的候选材料。然而，由于锂化过程中硅材料巨大的体积膨胀和固体电解质界面层的持续生成，硅基负极难以直接应用于全固态锂离子电池。本研究通过联合采用双层碳包覆、化学预锂化方法和原位聚合技术的三重策略，设计出具有高稳定性和优异库仑效率的全固态锂离子电池。通过将硅纳米颗粒嵌入柠檬酸和 ZIF-8 衍生的双层碳基体中，成功制备了 Si@C@C 复合材料。有限元模拟证明，双层碳策略显著缓解了硅锂化引起的应力集中现象。此外，引入化学预锂化方法补偿了 Si@C@C 电极首周循环中的不可逆锂离子损失，从而提高了首次效率。最后，开发了原位聚合技术以实现全固态电池构建，其中以 LiPF₆ 为引发剂、SN 为关键添加剂的 PDOL-SN 聚合体系展现出优异的离子电导率和高氧化电位。组装完成的 NCM811|PDOL-SN|Si@C@C-10%全固态电池表现出高首效（79.5%）和优异的循环稳定性（300 次循环后容量保持率 82.4%）。该方法可为设计硅基全固态锂离子电池提供参考，有助于解决硅负极实际应用中的瓶颈问题。

FB04-35

钨和钨-铼机器学习势函数的开发及应用

李冬冬¹、尤玉伟²

1. 合肥工业大学材料科学与工程学院

2. 安徽建筑大学数理学院

钨因其优异的力学和抗辐照性能被视为聚变堆最有前景的面向等离子体候选材料之一。聚变堆高能中子辐照下，钨发生核嬗变反应生成铼和钨等元素，这些嬗变元素在空位型缺陷附近偏析对缺陷进行修饰，从而对钨的结构与力学性能产生重要影响。为了研究聚变堆有限温度下大尺寸钨中铼和钨与空位型缺陷相互作用，我们开发了该体系的机器学习势函数。首先基于密度泛函理论方法，构建了包含 46000 个钨、铼和钨等单质及其合金的数据集，采用球谐函数-切比雪夫基组生成描述符，采用全连接神经网络构造相应的机器学习势函数。该机器学习势函数具有较高的精度，在测试集上的平均绝对误差和均方根误差仅为 5.9meV 和 9.5meV。其次，该机器学习势函数可准确地描述钨和钨铼合金的晶格常数、弹性常数、缺陷形成能、表面能、熔体的对关联函数以及 σ 相、 χ 相的形成能。我们将该机器学习势函数与蒙特卡洛方法结合，探讨了钨铼合金中铼原子在孔洞和晶界附近的偏聚行为。研究表明，铼原子优先在孔洞和晶界周围发生聚集。我们的开发的势函数为钨和钨铼二元合金体系的结构与性能研究提供了精准而又重要的工具。

FB04-36

γ 相铀-钼合金晶界中的自扩散行为以及空位和自间隙原子的影响

韩全福

烟台大学

铀-钼 (U-Mo) 合金是一种极具发展潜力的金属型核燃料，是新一代裂变堆燃料的主要研究方向，同时它也是优质的空间堆燃料。本论文应用分子动力学模拟，系统研究了 U 和 Mo 在 γ 相 U-Mo 合金 9 种不同晶界中的扩散行为，同时重点关注了空位和自间隙的影响。研究表明，晶界作为快速扩散通道可显著降低扩散势垒，从而促进 U 和 Mo 的扩散。作为典型的点缺陷，自间隙原子和空位的引入通过提供额外的迁移通道，使 U 和 Mo 在体相中的扩散势垒显著降低，从而增强其迁移能力。进一步的研究发现，自间隙原子和空位在晶界体系中对 U 和 Mo 扩散行为的影响严重依赖于晶界类型。对大部分晶界而言，空位和自间隙原子会增强 U 和 Mo 在晶界体系中的扩散行为。通过对比自间隙原子对 U 和 Mo 在体相与晶界体系中扩散行为的影响，我们发现，在引入相同自间隙浓度条件下，晶界体系中的扩散系数低于体相体系。这表明

晶界减弱了自间隙原子对 U 和 Mo 扩散的促进作用。该现象可归因于晶界作为缺陷捕获中心，吸收了一部分引入的自间隙原子。另外，温度和 Mo 含量对 U 和 Mo 在晶界中的扩散行为也有不同程度的影响。在 1200K 条件下，U 和 Mo 的扩散系数较 300K 时提高了三个数量级，表明高温能够有效促进扩散过程。Mo 含量的增加对扩散产生一定的抑制作用，特别是在低温条件下，其抑制效应尤为显著。这些研究结果为优化 γ 相 U-Mo 合金核燃料的性能提供了数据支撑，并且对于研究其在高温及高辐照环境中的稳定性具有重要理论指导意义。

FB04-37

低活化铁素体马氏体钢散裂中子辐照硬化机理研究

时靖谊、胡业尚、解尧、孙勇杰、魏振予、马一怡、彭蕾

中国科学技术大学核科学技术学院，安徽合肥 230027

低活化铁素体马氏体钢 (RAFM) 钢及其改进型，如 ODS-RAFM 钢等是未来聚变堆中最有前景的候选结构材料之一。在聚变中子的辐照环境中，RAFM 钢中会通过 (n, α) 反应引入大量的氦原子。由于氦在 RAFM 钢基体中的溶解度极低，氦原子倾向于通过间隙扩散迁移并在具有过剩体积 (excess volume) 的缺陷处聚集，最终形成纳米尺度的氦泡。这些氦泡与 RAFM 钢中的各种本征缺陷 (如晶界和位错等) 发生相互作用，显著影响材料的尺寸稳定性与力学性能，进而引发更加严重的辐照肿胀、辐照硬化和辐照脆化等问题。然而，目前对氦泡与缺陷相互作用引发的辐照氦效应，其原子尺度的演化机制与力学响应行为仍不完全清楚。近年来，本课题组围绕 RAFM 钢中氦效应的微观机制开展了系统的分子动力学模拟研究，揭示了氦泡与晶界、位错等典型本征缺陷之间的多种原子尺度相互作用机制。

针对氦泡与位错的相互作用研究表明，位错线可作为氦泡的优先成核位置，并在其上形成一系列低 He/V 比的氦-空位团簇。较低的 He/V 比不仅降低了氦-空位团簇通过踢出合并机制长大的可能性，还增强了通过级联合并机制成长的概率。与传统空洞不同，氦泡对位错滑移的阻碍效应不仅取决于其尺寸，还与氦泡内部的 He/V 比密切相关：随着 He/V 比的增加，阻碍因子呈现出先升高后降低的趋势。基于这一规律，结合散裂中子辐照样品的退火后的硬化数据，我们评估了散裂中子辐照样品中氦泡的 He/V 比，结果表明，低剂量 (5.1, 5.4, 8.6 dpa) 和高剂量 (20.8 dpa) 下形成的氦泡平均 He/V 比约在 0.8 至 1.1 之间，而中等剂量 (9.0, 13.0, 17.5, 18.9 dpa) 下形成的氦泡平均 He/V 比约在 1.2 和 1.4 区间内。在氦泡与晶界的相互作用研究中发现，晶界能是主导氦泡在不同晶界上成核行为差异的关键因素。晶界能通过调控晶界氮偏析程度、界面间隙氮的迁移自由度以及空位形成能等因素，影响氦泡的尺寸分布与形核密度。同时，温度升高会加速氮原子的迁移与团簇演化，促进晶界上小尺寸氮团簇的自陷成核过程。晶界上的氦泡会在局部引起明显的应力与应变集中，进而在拉伸过程中促使微裂纹优先生成，降低晶界强度。这些微裂纹通常起源于位错活跃或氦泡密度高的晶界区域，随后在持续载荷作用下不断萌生扩展，最终合并形成贯穿性沿晶裂纹。裂纹尖端附近的氦泡则进一步增强了应力集中效应，改变了裂尖应力分布，抑制裂尖塑性区的变形能力，促进沿晶裂纹的扩展。上述研究为深入理解 RAFM 钢在聚变中子辐照环境下的结构稳定性和力学性能演化提供了原子尺度的理论依据，也为提升材料的抗辐照性能提供了重要的微观机制支撑。

FB04-38

堆内构件用不锈钢材料中子辐照 IASCC 研究进展

曹晗、钟巍华、高俊宣、郑全、贾乐洋、杨文

中国原子能科学研究院

辐照促进应力腐蚀开裂 (IASCC) 是造成堆内构件老化乃至失效的重要原因之一，随着核电站机组运行时间延长，IASCC 发生的风险升高，严重威胁核电运行安全，目前我国早期核电站已进入 IASCC 失效易发期，IASCC 已成为我国核电部件老化评估和延寿论证需考虑的重要内容。国际上针对 IASCC 失效行为机理，利用退役核电站材料早已展开大量研究，基于长期研究结果，建立了 IASCC 预测模型用于老化评价规范建立，而国内此前关于中子辐照 IASCC 的研究尚未开展。随着国内第一座重水堆—101 堆的

退役，原子能院掌握了一批中子辐照后不锈钢材料，可作为 IASCC 研究的试验材料。

本报告面向国内缺乏 IASCC 试验技术、数据以及预测模型现状，系统展示了中国原子能科学研究院在不锈钢材料中子辐照 IASCC 研究领域的详细进展。报告指出，原子能院在国内首次建立了中子辐照 IASCC 试验技术（具体包括考虑 IASCC 试验特点的放射性材料坯料切割技术、样品加工技术、中子辐照试验平台、小试样试验技术、微试样试验技术以及高通量测试评价技术），利用 101 堆退役的 321 不锈钢材料开展了一系列 IASCC 试验，获得了国内首批中子辐照不锈钢 IASCC 试验数据，并结合离子辐照试验结果，归纳得到了 IASCC 行为机理，初步建立了中子辐照与离子辐照 IASCC 的映射关系；基于上述国产数据，结合瑞典退役堆材料以及文献中公开报道的 IASCC 试验数据，在国内首次开发了 IASCC 临界起裂应力及裂纹萌生时间预测模型，准确性优于美俄同类模型，并在秦山一期实现示范应用。本工作的完成为我国自主开展压水堆核电厂堆内构件的 IASCC 老化评估提供了关键技术支撑。

FB04-39

高硅铁素体/马氏体耐热钢回火后的应变硬化行为研究

孟凡澳、燕青芝

北京科技大学

9~12%Cr 铁素体/马氏体耐热钢因其优异的高温力学性能、机械加工性能、低热膨胀性、抗蠕变性能和卓越的抗肿胀性而被作为第四代核反应堆的候选结构材料。然而，受限于第四代核反应堆冷却剂的强腐蚀性，耐热钢表现出不足的抗溶解腐蚀和渗透腐蚀性能。通过提高硅含量可以显著增强抗腐蚀性，但是高含量的硅会促进 δ 铁素体的形成，从而恶化材料的力学性能。为了获得良好的强塑性匹配，研究了高硅铁素体/马氏体耐热钢回火后的应变硬化行为。结果表明，随着回火温度升高和时间延长，强度逐渐降低，而塑性和韧性逐渐上升。应变硬化行为由三个阶段 (I, II 和 III) 逐渐转变为四个阶段 (I, b, II 和 III)，应变硬化能力逐渐提高。I 阶段是铁素体相的屈服，此时马氏体相仍处于弹性阶段；II 和 III 阶段是铁素体和马氏体的共同变形；b 阶段是钢中马氏体由弹性变形向塑性变形的转变。

FB04-40

压水堆一回路环境中 Cr 含量对奥氏体不锈钢微观组织和应力腐蚀行为影响研究

王一博^{1,3}、徐杨²、姜岳峰³、梁田³、马颖澈³

1. 东北大学

2. 中广核研究院有限公司

3. 中国科学院金属研究所

奥氏体不锈钢是压水核反应堆堆内构件用主要材料，其性能直接影响着核反应堆安全稳定运行，而应力腐蚀开裂 (SCC) 是其失效的主要原因之一。奥氏体不锈钢中的 Cr 含量是影响 SCC 抗力的关键元素，高 Cr 含量能够有效避免因晶间贫 Cr 发生 SCC。然而，过高的 Cr 含量可能导致高温 δ 铁素体的形成，降低材料的加工性能，且 δ 铁素体对 SCC 的影响仍尚不明确。本论文以堆芯组件用 Fe-X%Cr-15%Ni 奥氏体不锈钢为研究对象，在高温高压且含硼、锂、氯及溶解氧水溶液的模拟环境工况下，采用慢应变速率拉伸试验 (SSRT) 研究了 16 wt.%、18 wt.% 和 21 wt.% 三种 Cr 含量对不锈钢组织和抗应力腐蚀性能 SCC 的影响，结果表明，当 Cr 从 16wt.% 提高到 21wt.% 时，基体由低 Cr 含量的全奥氏体组织转变为高 Cr 含量的奥氏体和 δ 铁素体双相组织。晶内和晶界上均存在 NbC 析出，未见 M₂₃C₆ 形成。通过计算延伸率损失的百分比发现 16 wt.% 和 18 wt.% Cr 样品 SCC 敏感性较小，然 21 wt.% Cr 样品发生了明显的 SCC。结合断口形貌和 EBSD 分析发现 16 wt.% 和 18 wt.% Cr 样品以韧性断裂为主，存在部分准解理开裂特征。21wt.% Cr 样品表现为穿晶开裂以及沿晶开裂的混合断裂模式，且应力集中较大，裂纹多集中在 δ 铁素体附近，并沿相界面扩展。富 Cr 的 δ 铁素体的形成会导致 δ/γ 相边界处的铬耗尽，与奥氏体形成腐蚀原电池，加速开裂，导致 SCC 抗力下降的首要因素。

FB04-41

温度对 Mo/BNi2/304L 真空钎焊接头金属间化合物形成规律及性能影响研究

许松^{1,2}、王纪超²、李宪华¹、孟献才²、梁立振^{2,3}

1. 安徽理工大学

2. 合肥综合性国家科学中心能源研究院（安徽省能源实验室）

3. 中国科学院合肥物质科学研究院，等离子体物理研究所

离子源引出系统作为中性束注入（NBI）系统的核心组件，由等离子体电极（PG）、梯度电极（GG）、抑制电极（SG）和地电极（EG）构成。各电极主要由钼管、不锈钢支撑座、底板组成，各结构之间由焊接连接。钼（Mo）与 304L 不锈钢连接时，界面易形成金属间化合物（IMC），此类化合物在界面呈连续分布，显著降低接头的性能。由于离子源承受等离子体轰击及循环热载荷作用易导致钼/不锈钢异质材料连接处界面失效开漏，这一问题已成为制约大功率中性束加热技术发展的关键瓶颈之一，钼/不锈钢接头界面稳定性直接决定束流品质与系统可靠性。

本研究针对钼/304L 不锈钢异质接头界面金属间化合物调控问题，采用 BNi2 镍基钎料系统探究了钎焊温度对 Mo 与 304L 接头界面金属间化合物形成规律和对性能的影响。力图通过调控工艺参数，降低 IMC 的形成，从而获得较优的接头力学性能。

钎焊接头界面处主要形成 Mo_2NiB_2 、 Ni_3B 、 FeB_4 、 CrB 等脆性金属间化合物，随着钎焊温度的升高，扩散反应区的厚度逐渐增加。接头抗剪强度随着钎焊温度的升高的先减小后增加又减小。在 1000°C 保温 10min 钎焊的接头，抗剪强度最高可达 253MPa。断口分析显示，除 1020°C 样品外，其他温度接头均表现出从“Mo-Mo 侧反应区-钎缝中心-304L 侧反应区”逐步扩展的断裂路径， 1020°C 温度接头表现出从“Mo-Mo 侧反应区-钎缝中心”逐步扩展的断裂路径，其断裂界面是由于脆性金属间化合物 Mo_2NiB_2 的持续主导。

本研究结果为优化 Mo/304L 异种金属钎焊接头的组织设计和性能调控提供了理论支持与工艺参考。

FB04-42

真空蒸镀距离对 BNCT 锂靶薄膜沉积质量的影响研究

王小龙^{1,2}、王纪超²、李建刚²、孟献才²、梁立振^{2,3}

1. 安徽理工大学

2. 合肥综合性国家科学中心能源研究院（安徽省能源实验室）

3. 中国科学院合肥物质科学研究院，等离子体物理研究所

锂靶是加速器基硼中子俘获治疗（BNCT）系统关键部件之一，其主要功能是为 BNCT 提供锂源，通过质子打锂产生中子。高质量锂膜制备直接影响中子的产生性能。本研究针对 BNCT 锂靶需求，设计并构建了一套高真空蒸发镀膜系统，探讨了锂膜沉积过程中坍塌与基底之间距离对膜层质量和锂膜均匀性的影响。

研究了 3 cm、6 cm 和 9 cm 距离参数下的膜层截面及表面形貌。9 cm 时，锂膜呈致密层状堆积结构，颗粒排列紧密，但中心区域出现多条裂纹；6 cm 距离时，膜层结构均匀致密，晶粒尺寸适中，整体呈现不规则但趋于柱状排列，具备良好的附着性与稳定性；3 cm 距离时，锂膜表现为垂直柱状晶体结构，但伴随较高的孔隙率，形成多孔、松散的类柱状微通道结构。

综合所述，6 cm 为最优距离参数。进一步研究了最优工艺下的锂膜热导率，在 30°C 至 150°C 范围内下降约 40%。膜厚均匀性测试结果显示，在直径为 150 mm 的沉积区域内，膜厚变化在 $30\text{ }\mu\text{m}$ 内。

FB04-43

基于机器学习-动力学蒙特卡洛方法揭示多主元合金中间隙原子介导的迟滞扩散机制

徐彪

湖南大学

间隙原子扩散是影响非平衡条件下多主元合金相稳定性和辐照响应的关键过程。本研究结合机器学习 (ML) 与动力学蒙特卡洛 (kMC) 方法, 深入探究了 Fe-Ni 多主元合金中原子通过间隙原子介导的迟滞扩散机制。具体而言, 我们基于一个经过充分验证的嵌入原子方法 (EAM) 势函数, 通过微动弹性带 (NEB) 计算生成了迁移能垒数据集, 并利用该数据集训练了机器学习模型。训练好的 ML 模型能够在模拟过程中快速、准确地实时预测间隙原子迁移能垒。运用此工具, 我们发现间隙介导的迟滞扩散现象仅当示踪相关因子的衰减效应超过跳跃频率的增加效应时才会发生。与分子动力学 (MD) 模拟不同, ML-KMC 工具能够在长时间扩散过程中同时提供实际迁移路径和潜在迁移路径的能垒信息, 从而为理解 Fe-Ni 多主元合金的深层扩散机制提供了新视角。具体来说, 不同元素构成的哑铃状间隙原子的相互转化途径之间的能垒差异共同构成了一种“路径选择器” (Route Selector), 在哑铃状间隙原子介导的扩散过程中倾向于优先迁移单质态扩散较慢的成分。这种路径选择的特性会随着多主元合金中快速扩散成分浓度的增加而增强, 从而强化了关联效应 (导致示踪相关因子降低) 并抑制了跳跃频率的增加, 最终导致出现间隙介导的迟滞扩散现象。此外, 当前研究结果可推广用于解释其他多主元合金体系中的间隙介导迟滞扩散行为。

FB04-44

碳化硅纤维中碳包重离子辐照演化

胡潇天、张建、蒋胜明、尹然

厦门大学

碳化硅纤维的辐照诱导微观结构演变可能显著影响其作为燃料包壳的性能。本研究对 SiCf/SiC 复合材料在 900℃ 下进行了 800 keV Kr²⁺ 原位辐照实验, 累积损伤剂量达 75 dpa。辐照前表征显示碳包分布存在显著不均匀性: 距纤维外缘 0.21、0.96 和 1.58 μm 处的平均碳包尺寸分别为 32.8±3.6、72.5±1.0 和 85.8±0.4 nm², 对应面积分数为 13.9±6.8%、23.5±5.0% 和 29.5±7.1%。边缘区域的 SiC 晶粒尺寸也小于中心区域。辐照过程中, 边缘碳包的分解速率显著高于中心区域。180℃ 辐照实验表明, 碳包的空间分布差异对 SiC 晶粒非晶化无显著影响, 但其辐照稳定性明显降低。研究提出碳包的热回复行为可解释其温度依赖性辐照行为, 而间隙原子贫化被认为是导致区域间分解速率差异的主要原因。这些发现为预测碳化硅纤维在核环境中的性能提供了依据。

FB04-45

磷灰石固化体中α&β衰变引起的协同结构演化

蒋胜明、胡潇天、朱杰民、张建

厦门大学

陶瓷固化体长期受到高放废物中各种射线的作用。然而, 目前研究对α衰变与β衰变的协同效应关注不足。本研究中, 采用 Kr²⁺ 离子辐照后再进行电子束辐照的方式, 分别模拟α衰变产生的重离子反冲效应和 β 衰变过程。结果表明: 电子辐照不仅可促进外延再结晶, 还会诱导气泡生成; 气泡的演化取决于 Kr²⁺ 辐照引起的损伤程度, 具有中等缺陷吸收体密度的区域能够吸收并约束邻近气泡, 促进气泡生长; 相比之下, 在结晶区和非晶区中气泡生长缓慢。这些结果揭示了材料在多重辐照耦合作用下特殊的微观结构演化规律, 有助于更全面地评估核废料固化体的稳定性。

FB04-46

离子辐照强电子激发诱导氧化镓结构相变与物性调控研究

韩心晴¹、赵仕俊²、穆文祥¹、刘鹏¹

1. 山东大学

2. 香港城市大学

辐照驱动 Ga₂O₃ 多相转化通过缺陷介导的应变场分布与界面电子重构为纳米工程与性能定制提供了新机遇与挑战。基于强电子激发诱导能量沉积过程 (0.54 eV atom⁻¹, ~ 7500 K), 实验结合双温分子动力学模拟证实微区存在 $\beta \rightarrow \kappa \rightarrow \gamma \rightarrow \delta$ 多级相变路径, 揭示了多相结构、主导缺陷与光电性能间的内在关联, 构建了基于辐照诱导结构相变与缺陷工程的光电响应优化策略。成核初期, 晶格畸变与潜径迹微区膨胀导致吉布斯自由能升高, 驱动 β 相在负压环境下经重构型相变转化为 κ 相, 随后在应力弛豫过程中部分转化为亚稳态 γ 相—氧密堆积层间八面体/四面体位点呈现低占位特征。同时, 热驱动间隙原子在表面边界富集, 半共格结构形成导致继续增大, 引发局域正压环境下 $\beta \rightarrow \delta$ 相变。因此, 缺陷分布主导的正-负压动态平衡决定 Ga₂O₃ 相变路径 ($\beta \rightarrow \kappa \rightarrow \gamma \rightarrow \delta$), 评估了多相转化之间的稳定性差异 ($\beta > \kappa > \gamma > \delta$)。基于多相转化的缺陷工程设计, 辐照诱导光电信号呈现量级增强效应, 实现响应效率与稳定性的协同优化。

FB04-47

增材制造 718 合金辐照损伤的新认识

胡华彦¹、赵天吉¹、杜东海²、郭相龙¹、黄鹤飞³、卢晨阳⁴、宋森¹

1. 上海交通大学, 核科学与工程学院, 上海 200240

2. 西北工业大学, 清洁能源研究院, 太仓 215400

3. 中国科学院, 上海应用物理研究所, 上海 201800

4. 西安交通大学, 核科学与技术学院, 西安 710049

718 合金是微观结构最为复杂的核结构材料之一。增材制造技术为其构件的核用部署提供了新的技术路径, 但同时也引入了独特的打印微观结构, 使得辐照损伤行为更为复杂。迄今为止, 关于增材制造 (AM) 718 合金辐照微观结构的研究仍十分有限。本研究通过退火与时效热处理制备了七种变体材料, 系统研究了位错胞结构、胞壁元素偏析及析出相对 AM 718 辐照损伤的影响机制。其中, 退火热处理解耦了原始态材料的位错胞与偏析, 而时效热处理则分别使弥散的 γ'/γ'' 相或 δ 相析出。随后, 对七种变体材料在 400°C、500°C 和 600°C 下进行了 1 MeV He⁺离子辐照, 注入剂量为 5×10^{16} ions/cm²。研究结果表明: AM 变体中的位错胞结构能够有效吸收间隙原子/团簇, 从而延缓弗兰克位错环的演化。然而, 位错胞壁展现强烈间隙偏压特性, 加剧了氦胀。在多个研究变量中, 基体 Nb 和 Ti 元素含量对氦胀的影响最为显著。较高的 Nb 和 Ti 含量增强了基体缺陷俘获能力, 可与空位结合并促进间隙和空位缺陷复合, 从而降低稳态缺陷浓度并延缓缺陷形成和演化。相比之下, 不论是胞壁元素偏析亦或是 γ'/γ'' 与 δ 相析出导致的基体 Nb 和 Ti 的贫化, 都加速了位错环的形成并促进了氦胀, 其中含有 δ 析出相的老化样品表现出最为严重的肿胀。相较于再结晶态材料, 原始态 718 合金表现出更短的位错环形核孕育剂量和更高的氦胀; 相比于未老化材料, 含有 γ'/γ'' 相或 δ 相的老化材料位错环形成得到促进、且氦胀加剧。因此, 建议对原始态 718 合金进行均匀化热处理或再结晶热处理, 且在沉淀硬化组态中避免 δ 相的析出以提高材料的辐照抗性。本研究首次采用热分离策略阐明了位错胞结构、元素偏析和析出相对 AM 718 辐照效应的单一影响作用, 研究结果可为其在核能领域的应用提供有效的热处理工艺指导。

FB04-48

三束同时辐照马氏体钢研究

曹俊杰、郭立平

武汉大学

为了把握离子辐照对结构材料缺陷演化的规律, 对 CLAM 钢分别进行了三个温度 (350、450、550 °C)、三个剂量 (11、22、33 dpa) 的 Fe+H+He 同时辐照。350°C 时肿胀的增加表现为增加氦泡的数密度。450°C 时, 氦泡密度在 11~22 dpa 之间饱和, 向偏置驱动长大的空腔过渡, 最终产生了最大尺寸的空洞。550°C 高

温限制了空腔的数密度,同时热发射限制了空洞的长大速率。随着剂量的增加,由于氦泡-空洞转化以及尺寸对长大速度的影响,尺寸分布逐渐从单峰向多峰分布转变,这种转变在高温下更加明显。350℃和450℃下均观察到位错环,随着剂量增加,a<100>型位错环占比有所增加,同时尺寸变大。CLAM钢在三个温度下依次经历了辐照硬化、几乎不变、辐照软化三个过程,硬度的变化与辐照肿胀、位错线密度密切相关。高温退火以及氢增强局部塑型机制是诱导高温下辐照软化的主要原因。实验数据与规律为多束离子辐照模拟中子辐照提供了参考。

FB04-49

锆合金氧化膜及基体中氧的扩散

张君松、吴军、廖京京、韦天国、龙冲生

中国核动力研究设计院

锆合金氧化膜及基体中氧的扩散系数是锆合金腐蚀动力学中的重要参数,目前文献报道的氧在锆及氧化膜中的扩散系数数值差异较大。本文通过真空退火试验,得到不同温度下氧化膜中氧浓度分布,计算了氧在锆合金基体中的扩散系数;通过氧化膜的等效扩散模型,由腐蚀转折前的腐蚀增重曲线,估算锆合金氧化膜中氧的扩散系数,得到Zr-Sn-Nb合金基体中氧的扩散系数随温度的变化规律为 $D_{Zr}(cm^2/s)=0.18\exp(-180\,000/RT)$;通过转折前的腐蚀增重曲线,估算得到氧化膜中氧的扩散系数随温度的变化规律为 $D_{ox}(cm^2/s)=3\times 10^{-7}\exp(-101\,550/RT)$ 。

FB04-50

SiCf/SiC 复合材料在核能领域应用设计的历史回顾、挑战及发展

石浩江

中国核动力研究设计院

SiCf/SiC 复合材料于20世纪80年代研制成功,凭借良好的耐中子辐照、耐高温等性能特点,在核能领域有巨大应用潜力。本文系统梳理了近50年来, SiCf/SiC 复合材料在核能领域应用的研究进展。在聚变堆应用方面,重点整理收集了 SiCf/SiC 复合材料在美国ARISE聚变堆、日本DREAM聚变堆、法国TAURO聚变堆中的应用设计方案及关键运行参数。在裂变堆应用方面,针对气冷堆、熔盐堆等多种堆型介绍了 SiCf/SiC 复合材料在美国EM2气冷堆、法国ALLEGRO气冷堆、美国Sm-AHTR熔盐堆的设计应用方案及关键运行参数。此外,重点介绍了美国能源部耐事故燃料项目中 SiCf/SiC 复合包壳的研制规划及美国、法国、中国等国家目前 SiCf/SiC 复合包壳研制技术状态。虽然 SiCf/SiC 复合材料是托卡马克聚变堆装置包层以及裂变反应堆包壳的重要候选材料,但辐照后热导率下降、高温水氧腐蚀以及辐照后开裂等挑战,是限制其实现工程应用的重要技术瓶颈,建议从纤维编织结构、纤维体积分数、纤维界面相特征、复合材料致密化工艺等多方面进行针对性调整,以应对 SiCf/SiC 复合材料堆内实际工程应用所面临的挑战。

FB04-51

高 Si 含量铁素体/马氏体钢的蠕变行为研究

何琨

中国核动力研究设计院

本研究开展了600℃、3000h时效前后高Si含量铁素体/马氏体钢合金在550℃、空气环境中的200h蠕变试验,对比了4种高Si含量F/M钢合金与2种EP823合金的蠕变性能。研究结果表明:1.2wt%Si的合金具有最好的蠕变性能;时效制度对合金的蠕变性能没有明显影响;设计的4种成分F/M钢合金蠕变性能整体优于EP823合金;微观组织进一步分析认为引入少量N元素有利于改善材料的抗蠕变性能,其核心在于铁素体相中获得相弥散分布的VN相钉扎位错以提高其抗蠕变性能。

FB04-52

TPMS 拓扑结构对无压渗透 Ti-Mg 互穿复合材料塑性变形和断裂的影响

袁滔, 郭非 *

重庆理工大学

为推动镁基材料在高性能结构与功能集成领域的应用突破, 本研究构建并制备了一种基于三周期极小曲面 (TPMS) 结构的 Ti-Mg 互穿网络复合材料体系。利用选择性激光熔化 (SLM) 技术制备了 TC4 钛合金支架, 设计并打印了 Diamond、Gyroid 和 SplitP 三种典型 TPMS 构型。随后, 通过无压熔渗工艺将纯镁熔体引入骨架内部, 获得了具有三维连通性的双金属复合结构。通过准原位拉伸试验、数字图像相关 (DIC) 应变场测量、电子背散射衍射 (EBSD) 晶体学分析以及有限元数值模拟 (Abaqus) 等多种表征与模拟手段, 系统研究了这三种拓扑结构下的应变传递机制与断裂行为。研究表明, 不同 TPMS 结构的力学响应存在显著差异。Diamond 结构展现出最高的屈服强度 (185.4 MPa) 及较好的变形协调性。Gyroid 结构虽屈服强度相对较低 (143.3 MPa), 但塑性阶段最为显著、延展性最佳。SplitP 结构则因局部应变集中, 虽初始刚度较大, 却容易发生早期断裂。DIC 与有限元模拟结果一致显示, TC4 骨架在复合体系中主要承担载荷并约束 Mg 相变形, 界面处的应变不连续易导致应力集中并成为裂纹萌生源。其中, Gyroid 结构的应变分布最均匀、应力分散最有效, 而 SplitP 结构则存在显著的局部高应变风险。我们进一步基于体素化模型引入比表面积、欧拉示性数、通道数和连通区域数等拓扑参数进行定量分析, 发现高比表面积和复杂通道网络虽有利于增强界面接触和初始刚度, 但同时易引发局部失稳。相比之下, 高连通性结构 (如 Gyroid) 可有效提升载荷传递连续性与应变协同效果。本研究首次建立了 TPMS 几何特征与 Ti-Mg 复合材料应力-应变行为之间的定量关联, 为基于 TPMS 的金属复合材料结构-性能一体化设计提供了理论依据与实验支撑。

关键词: TPMS 结构; Ti-Mg 复合材料; 异质界面; DIC; 拓扑参数

FB04-53

化学复杂性与晶格畸变协同抑制多主元合金中的氦泡生长机制研究

熊耀旭¹、李永钢¹、赵仕俊²

1. 中国科学院合肥物质科学研究院

2. 香港城市大学

体心立方 (BCC) 多主元合金 (MPEAs) 因其优异的抗辐照性能, 有望成为新一代核反应堆结构材料。尽管前期研究发现氦 (He) 离子在 MPEAs 次表层中会诱发微结构演变, 但其原子尺度机制尚未明确。本研究通过阐明化学复杂性与多元组分的协同作用, 揭示了 MPEAs 抑制氦泡生长的双重机制: (1) 能量抑制—较低的间隙位错环结合能与氦泡内压降低, 共同阻碍了氦泡生长过程中的位错环形核; (2) 动力学阻碍—MPEAs 中显著的晶格畸变大幅限制了位错环的迁移能力。进一步研究发现, 氦泡界面处存在元素特异性偏析/贫化现象, 表明局部化学有序性调控了缺陷演化过程。通过解析点缺陷、线缺陷与化学异质性之间的协同作用, 本研究为理解 MPEAs 中氦泡抑制机制提供了理论基础, 并为设计新型抗辐照材料指明方向。

FB04-54

基于分子动力学的铁空洞中氢的捕获与动态分布研究

李子奇^{1,2}、李小椿²、周海山²、乔守旭¹

1. 哈尔滨工程大学核学院

2. 中科院等离子体所

在核聚变反应堆包层结构材料中, 由高能中子辐照诱导产生的过饱和空位会迁移并聚集形成空洞。被空洞捕获吸收的氢会在空洞内形成气泡, 造成氢同位素的滞留, 从而导致不良的结构特性。现有研究多集

中在小尺寸空位团簇，对于氢原子在大尺寸纳米空洞中的行为机制研究仍相对缺乏。

本实验研究了体心立方铁中空位-氢团簇的能量随氢原子数量增加的变化情况，并利用动力学退火弛豫和分子静力学方法计算了空位团簇对氢原子的捕获情况。

研究使用小空位团簇模型（15–60 空位团簇）来探讨空位-氢团簇的结合能与饱和氢数量之间的关系。结果表明，随着氢原子数量的增加，小空位团簇因表面吸附位点有限而较早达到饱和。当表面位点被完全占据后，团簇内部开始出现氢分子，同时氢原子向周围铁原子的间隙位扩散，判定此时空位团簇吸氢达到饱和。在氢原子数量较少时，结合能与系统内氢原子数呈线性关系；达到饱和后，结合能值在一定范围内波动。研究以结合能均值与各个氢原子结合能之间的相对偏差作为团簇捕获氢达到饱和的判据，进一步计算出 15–60 空位团簇的饱和氢数量。根据氢原子主要吸附于团簇表面的特性，得出空位团簇的饱和氢原子数与团簇表面积成正比的结论。

为研究氢原子在大尺寸纳米空洞中的行为，构建了半径为 1.0 nm 的空洞模型。研究发现，氢原子主要以原子态附着在空洞边界的类八面体间隙位，且在达到饱和之前，被空洞吸附的氢原子数量与空洞表面积呈线性关系。随着氢原子数量的增加，空洞内开始生成氢分子，表面逐渐形成饱和的氢吸附层。当氢含量继续增加，氢分子进一步分解为氢原子并扩散至铁晶格中，造成基体铁原子间隙中氢原子累积，铁原子被置换并向空洞内部扩散，空洞逐渐塌缩。当氢原子数量足够大时，空洞退化为一个空位-氢团簇，氢分子完全分解，系统内仅存在原子态的氢。进一步地，拓展对半径范围在 1.0 nm 至 1.8 nm 之间不同尺寸纳米空洞的氢捕获能力的研究。并且采用最小二乘法分别对原子态和分子态氢数量与空洞半径的平方和立方进行了拟合。拟合结果表明，原子态氢数量与空洞表面积呈线性关系，分子态氢数量与空洞体积呈线性关系。

本研究不仅量化了空洞-氢复合体的捕获效率与内部压力演化特征，还为抗氢合金的结构设计提供了理论依据。

FB04-55

机械合金化工艺对含 Zr 镍基 ODS 合金氧化物粒子的演变及其对力学性能的影响

钟雨钊

中国科学院金属研究所

氧化物弥散强化(Oxide dispersion strengthened, ODS)镍基合金具有优异的高温力学性能、抗氧化、耐腐蚀和抗辐照性能，有多种改善性能的强韧化途径，被认为是核反应堆包壳理想材料。但目前机械合金化制备的 ODS 镍基合金急需解决生产成本低、生成效率低等问题。本研究旨在通过优化机械合金化过程的工艺参数以及添加过程控制剂等方式降低粉末损耗，提高合金性能。本研究通过机械合金化和热等静压制备了含 Zr 的 ODS 镍基合金 (Ni-20Cr-0.3Al-0.5Ti-0.36Zr-0.6Y₂O₃)，研究了不同球磨工艺对球磨后的粉末产出、粉末结构以及最终热等静压成型合金的影响。对球磨后的粉末以及合金进行金相分析、扫描电子显微分析、能谱分析、X 射线衍射分析、透射电子显微分析以及高温拉伸测试等手段系统研究了不同球磨工艺对其组织和性能的影响。结果表明，添加 0.4%wt 硬脂酸球磨 50h 后能够将机械合金化的出粉率提高 30%，且所得粉末拥有较高的畸变能和较好的元素分布，同时所得合金中的氧化物弥散细小且分布均匀，类型主要以烧绿石结构的 Y₂Ti₂O₇和棱方结构的 Y₃Zr₄O₁₂为主，平均粒径大小为 7.54±0.44 nm，数密度为 (6.28±0.12) ×10²² m⁻³，在 800℃ 的屈服强度为 254 MPa，抗拉强度为 340 MPa，延伸率为 15%，合金表现为较为优异的高温强度并兼具良好的韧性。

FB04-56

纯钪高温吸氢过程中氢化钪微观组织研究

王鑫茹、刘实、熊良银

中科院金属研究所

金属氢化物因其高氢密度、高服役温度、结构紧凑和轻量化等特性，成为紧凑型反应堆系统中理想的中子慢化材料。其中，氢化钪 (YH_x) 凭借优异的热稳定性有效弥补了氢化锆服役温度低的不足，可应用

于高温核反应堆。然而，现有研究表明纯钯在吸氢后易发生开裂，且开裂行为与氢化物的微观结构密切相关。目前关于纯钯吸氢机制及微观结构的研究和认识仍十分有限。本研究采用透射电子显微镜（TEM）和电子背散射衍射（EBSD）技术，系统研究了纯钯在 850℃ 与氢反应的 YH_x 的微观结构演变规律。研究发现， $\delta\text{-YH}_2$ 优先在晶界处形核，形成贯穿晶粒的片层状氢化钯，随后在晶界处形成小块状氢化钯并逐渐聚集。片层氢化钯呈现具有 $\{111\}\langle 11\text{-}2\rangle$ 孪晶关系的两种取向 (δ_1 和 δ_2)，且均与 $\alpha\text{-Y}$ 基体保持 $\{0001\}_\alpha \parallel \{111\}_\delta$ 、 $\langle -12\text{-}10 \rangle_\alpha \parallel \langle -110 \rangle_\delta$ 的取向关系。随着氢含量增加，单个晶粒内出现多个氢化物变体共存现象，其中次生变体是由主变体 δ_1 诱导的孪晶变体，这表明钯氢体系通过应力激活孪生机制协调氢化物析出产生的局部应力。HRTEM 分析表明，从 $\alpha\text{-Y}$ 到 $\delta\text{-YH}_2$ 的相变是由 Shockley 部分位错滑移和原子重排共同驱动的。本研究结果可以为中子慢化材料的设计提供重要理论支撑，对推动先进反应堆慢化材料的性能提升具有重要意义。

FB04-57

含 Al 奥氏体不锈钢 550 °C 初始液态铅铋腐蚀行为研究

杨康^{1,2}、王旻²、马颖澈²

1. 东北大学

2. 中国科学院金属研究所

含 Al 奥氏体不锈钢 (Alumina-Forming Austenitic stainless steel, AFA) 在高温环境能形成稳定致密的 Al_2O_3 薄膜，其作为铅冷快堆结构材料服役时具有优异的耐腐蚀性，应用前景较好。经过研究发现形成致密的 Al_2O_3 膜的 AFA 不锈钢仍会发生点状腐蚀，而且目前 AFA 不锈钢的核心成分含量没有标准。所以我们开展了 Ni、Cr 和 Al 元素对合金点状腐蚀的影响作用研究。

在 550 °C 静态饱和氧铅铋环境中，我们针对不同 Ni 含量 (14Ni14Cr2.5Al (F1)、20Ni14Cr2.5Al (F3))、不同 Cr 含量 (20Ni14Cr2.5Al (F3)、20Ni18Cr2.5Al (F5)) 以及不同 Al 含量 (20Ni14Cr2.5Al (F3)、20Ni14Cr3.5Al (F7)) 合金开展了 500 h 腐蚀实验。实验结果表明：(1) F1/3/5/7 合金外表面均形成了连续的氧化膜，且氧化膜都存在破损现象，发生局部腐蚀；(2) 对于不同合金的局部腐蚀现象，就不同 Ni 含量而言，F1 合金局部腐蚀比例为 96.9%，此时合金表面的腐蚀形式不再是局部腐蚀，而是均匀腐蚀，F3 合金局部腐蚀比例为 10.2%，仍然为局部腐蚀；就不同 Cr 含量而言，F3 合金局部腐蚀比例为 10.2%，而 F5 合金表面腐蚀率为 1.11%，说明高 Cr 合金耐蚀性较好，基本没出现点状腐蚀；就不同 Al 含量而言，F3 合金局部腐蚀比例为 10.2%，而 F7 合金局部腐蚀比例为 1.85%，说明高 Al 合金耐腐蚀性良好；(3) 合金点状腐蚀形貌典型且单一，点状腐蚀氧化膜为双层结构，外层为 Fe_3O_4 膜，内层主要为 Fe-Cr 尖晶石层，内层氧化物外壁覆盖着 Al_2O_3 薄膜。深入 LBE 中点状腐蚀形貌为 Fe 元素在外扩散过程被氧化形成 Fe_3O_4 所致。而合金基体内的氧化物点状腐蚀形貌形成的原因是：间隔合金表面一定距离的内部 Cr 偏聚于晶界并被氧化然后横向延伸，该氧化物与基体表面形成一个分裂层。当深入 LBE 的氧化物达到一定厚度时致密性变差，外界环境中 O 元素穿过这层氧化物并氧化分裂层区域 Cr 及未及时外扩散的 Fe 元素，该氧化过程是氧化行为的纵向扩展，最后与横向延伸的内氧化层相连；(4) Ni 元素的添加可使合金保持单相奥氏体结构，使合金组织在 LBE 腐蚀过程更稳定。Cr 元素能促进 Al 元素的外扩散，更多含量 Cr 元素的添加使基体中 Al 更快扩散至外表面，促进了表面 Al_2O_3 薄膜的形成。提高合金中 Al 元素的含量可通过提高合金外表面 Al 浓度，使 Al 更容易被氧化。

FB04-58

正火温度对核用新型 12%Cr 铁素体/马氏体钢显微组织和力学性能的影响

关淦元^{1,2}、邢炜伟¹、梁田¹、王旻¹、欧美琼¹、马颖澈¹、郝宪朝¹

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国科学技术大学材料科学与工程学院

摘要：马氏体板条、原奥氏体晶粒(PAG)与析出相是影响高铬铁素体/马氏体耐热钢力学性能的关键因

素, 而显微组织演变与正火处理参数的变化密切相关。针对新型 12%Cr 铁素体/马氏体钢 (HT-9G), 选用 1000℃, 1050℃, 1100℃, 1150℃ 进行正火处理, 保温时间均为 30min, 空冷后统一进行 720℃、90min 的回火处理。显微组织分析显示, 热处理后 HT-9G 钢中析出相为块状 MC、颗粒状 M23C6 和球状 MX 相。正火温度从 1000℃ 升至 1150℃, PAG 尺寸从 10.2μm 增至 17.4μm, 马氏体板条宽度从 138.7nm 增至 185.7nm; 碳化物发生一定程度的细化, PAG 晶界处 M23C6 平均粒径从 227.5nm 细化至 191.2nm, 颗粒尺寸分布范围从 180-270nm 下降至 120-210nm; MC 相颗粒尺寸从 1.6μm 略微细化至 1.5μm。力学实验结果表明, 正火温度从 1000℃ 上升至 1150℃ 时, HT-9G 钢室温抗拉强度与屈服强度分别从 986MPa、817MPa 提高到 1094MPa、924MPa, 630℃ 时抗拉强度与屈服强度分别从 411MPa、305MPa 上升至 494MPa、406MPa, 而拉伸塑性呈现出小幅下降。蠕变测试结果显示, 700℃、100MPa 条件下蠕变性能随正火温度升高而显著提升, 其中蠕变断裂时间从 62.51h 延长至 658.13h, 最小应变速率从 0.0840%/h 降至 0.0065%/h。随着正火温度的提升, 晶界处 M23C6 相与 MC 相细化造成的强化效果大于原奥晶粒与马氏体粗化带来的削弱效果, 是蠕变性能提升的主要原因。依据组织性能研究结果提出, 核用新型 12%Cr 铁素体/马氏体耐热钢的正火温度选用 1100℃, 通过获得均匀细小的碳化物、马氏体板条与 PAG, 使其强塑性匹配良好。

FB04-59

Nb 对新型 12%Cr 铁素体/马氏体钢显微组织和力学性能的影响

单鹏展^{1,2}、邢炜伟¹、梁田¹、郝宪朝¹、马颖澈¹

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国科学技术大学

摘要: 铌 (Nb) 是高铬铁素体/马氏体耐热钢的关键微合金元素, 对合金的微观组织形态及力学性能具有显著调控作用。本项研究系统分析了 Nb 含量 (0.05-0.3wt.%) 对新型 12%Cr 铁素体/马氏体钢中析出相形貌、晶界特征及力学性能的影响。组织分析结果表明, 随 Nb 含量从 0.05wt.% 增加至 0.3wt.%, MC 体积分数增加, M23C6 平均粒径由 188.4nm 细化至 164.5nm, 晶界 M23C6 平均析出量由 3.9 个/μm 增至 5.8 个/μm; MX 相平均尺寸由 91.8nm 减至 62.6nm; 析出相协同钉扎效应促使原奥氏体晶粒 (PAG) 尺寸由 15μm 降至 12.9μm, 马氏体板条宽度由 244.0nm 缩减至 143.7nm; EBSD 分析表明, Nb 含量升高降低了大角度晶界比例 (27.4% 降至 17.3%)。力学性能测试显示, 随 Nb 含量增加, 合金 630℃ 抗拉强度与屈服强度分别从 451MPa、347MPa 上升至 472MPa、378MPa, 并仍保持较好的拉伸塑性; 蠕变性能得到显著优化, 700℃/100MPa 条件下, 蠕变断裂时间由 273.12h 延长至 561.36h; 630℃/200MPa 蠕变断裂时间则由 814h 增至 3000.7h, 最小应变速率由 0.0040%/h 降至 0.0007%/h, 降幅达 79%。其原因在于, M23C6 相细化增强其对晶界/板条界的钉扎效果, 抑制板条界粗化、强化晶界抗滑移能力; 同时, 细小弥散的 M23C6 相粗化速率下降, 延缓组织退化, 进而提升短时与长时综合性能。研究结果表明, 新型 12%Cr 铁素体/马氏体钢中, Nb 含量优化为 0.2-0.3wt.% 时, 可兼顾析出相细化、组织稳定性及优异的力学性能。

FB04-60

不同 Al 含量 AFA 在 600℃ 大气环境中的氧化膜演化机制研究——面向液态铅铋共晶 (LBE) 反应堆应用的预研分析

张贺宁^{1,2}、王旻²、马颖澈²

1. 中国科学技术大学

2. 中国科学院金属研究所

含 Al 奥氏体不锈钢 (AFA) 具备优异高温抗氧化和耐腐蚀性能, 该材料可以在 800℃ 的大气环境中展现出优异的抗氧化性, 有望应用于铅铋快堆中, 但该材料在更低温度的铅铋环境 (LBE) 中需应对液态金属腐蚀与低氧条件的双重挑战, 因此作者设计 600℃ 的大气氧化实验, 作为模拟铅铋环境服役条件的基础

预研, 从而排除液态金属的复杂影响, 探索较低温度下氧化膜形成机制。本次实验设置了多个不同 Al 含量 (0-4.5wt.%) 的 AFA 样品, 并对其进行 600°C 至多 300h 的大气氧化实验。研究发现, 材料在经过 100h 氧化后, 不含 Al 的样品表面出现大面积富 Fe、Cr 的严重氧化区域。相比之下, 含 Al 样品表面仅生成较薄的保护性 Al_2O_3 层, 具有明显的抗氧化性。当氧化时间延长至 300h 时, Al 含量较低的样品 ($\leq 3.0\text{wt.}\%$) 表面出现较多严重氧化区域, 与不含 Al 样品不同的是, 这些样品表面形成了外侧富 Fe、内侧富 Cr 的双层氧化结构, 同时在这些样品内侧观察到富 Nb 相的存在。值得注意的是, 随着 Al 含量从 1.5wt.% 增加至 3.0wt.%, 这些双层氧化结构中外侧富 Fe 氧化物比例减少, 这表明 Al 含量的增加有助于材料抗氧化性能的提高。当 Al 含量提升至 3.5wt.% 及以上时, 经过 300h 氧化后材料表面均能形成具有保护作用的连续 Al_2O_3 层。在低 Al 材料中, Al 扩散速度较慢, 材料表面难以形成连续的 Al_2O_3 保护层, 而 Fe、Cr 扩散速度相对较高 (尤其 Fe), 材料表面生成较多 Fe、Cr 氧化物 (Fe_3O_4 、 Cr_2O_3 等), 这些富 Fe 氧化物结构较为疏松, 孔隙较多, 易于被氧气穿透, 并且其在高温下稳定性较差, 材料表面氧化膜完整性遭到破坏, 使得材料的抗氧化性能较差; 然而当 Al 含量升高后, Al 的扩散速度增加, 形成一层连续致密的 Al_2O_3 薄膜, 这层氧化膜稳定性高, 并且具有高致密度、低孔隙率, 有效阻止了氧气的进一步扩散。综上, Al 含量为 3.5wt.% 的材料最优, 在保证 Al 含量较低的同时具有优异的抗氧化性。

FB04-61

C 含量对 800H 合金热暴露组织性能的影响研究

孙世航^{1,2}、赵霞^{2,3}、王旻^{2,3}、王平¹、马颖澈^{2,3}

1. 东北大学 材料科学与工程学院

2. 中国科学院金属研究所 核用材料与安全评价重点实验室

3. 中国科学院金属研究所 师昌绪先进材料创新中心

摘要: 高温气冷微堆作为我国第四代核反应堆, 具备热效率高、出口温度高、运行灵活可靠且固有安全性好等优势。控制棒作为核心部件, 承担着控制停堆和调节功率的重要作用, 800H 合金因优异的高温性能与组织稳定性, 成为高温气冷微堆控制棒包壳的候选材料之一。针对 800H 合金高温强度不足的问题, 通过设计 0.07wt.%、0.08wt.% 和 0.09wt.% 三种碳含量进行成分优化以提升高温强度。三种成分合金分别在 1120°C、1130°C 和 1130°C 下固溶处理使晶粒尺寸为 4-5 级, 然后进行力学性能测试, 结果发现: 随着碳含量从 0.07wt.% 增加到 0.09wt.%, 合金的拉伸强度提高, 塑性未明显降低; 冲击韧性和蠕变性能基本不变。碳含量增加, C 元素的间隙强化作用是合金固溶态强度提高的主要原因。合金固溶后在 650°C 长期热暴露 (300h、1000h、3000h) 发现: 热暴露 300h, 强度随碳含量增加而提高, 塑性韧性降低; 热暴露时间延长至 1000h, 不同碳含量合金强度和塑韧性无明显变化; 热暴露 3000h, 0.09C 合金强度略微降低, 塑性韧性增加。微观组织分析表明: (1) 热暴露 300h, 碳含量增加使晶内 M23C6 碳化物析出数量增多阻碍位错运动, 使强度提高, 塑性降低; 0.07wt.% 碳含量合金晶界上 M23C6 型碳化物呈颗粒状, 尺寸小、间距大, 比较而言 0.09wt.% 碳含量合金晶界上 M23C6 型碳化物呈长棒状或膜状连续分布, 导致冲击韧性降低。(2) 热暴露 1000h 时, 不同碳含量晶界和晶内碳化物尺寸和数量基本一致, 性能未发生明显变化。(3) 与 0.07wt.% 和 0.08wt.% 相比, 0.09wt.% 碳含量合金热暴露 3000h 晶界及其附近的 M23C6 发生优先回溶, 使 M23C6 碳化物数量变少, 尺寸变小, 合金强度略有降低, 塑韧性提高。综上, 对 800H 合金进行固溶处理后, 从 0.07Cwt.% 增加到 0.09Cwt.%, 合金强度上升, 塑韧性未明显降低; 650°C 下经过 3000h 长时间热暴露后, 0.09C 合金强度略有降低, 塑韧性上升。

FB04-62

固体电解质材料对铅冷快堆氧传感器性能的影响

刘国栋、鲁盛会

中国原子能科学研究院

氧传感器是实现铅冷快堆氧浓度准确测量的核心部件, 然而目前堆上使用的 Bi/Bi₂O₃ 型氧传感器尚

存在测量误差大、激活时间长、工作温度高等缺点,影响反应堆的安全运行。氧化钇部分掺杂氧化锆 (YPSZ) 是氧传感器最常使用的固体电解质,也是影响氧传感器激活温度、激活时间、工作温度的关键部件。本工作从 YPSZ 的角度出发:测定 YPSZ 在不同温度下保温不同时间的电导率,研究 YPSZ 的导电机理;检测不同温度下 YPSZ 与铈、铅铈合金的浸润效果,研究浸润能否影响氧传感器工作。通过对 YPSZ 的研究明确氧传感器激活机理,为后续低温氧传感器的制备提供理论支撑。

FB04-63

基于取样方法优化的含铈粉末铈含量精准检测研究

郝继东^{1,2}、赵雨梦^{1,2}、曹军文^{1,2}、张敏^{1,2}、郭波龙^{1,2}

1. 中核反应堆辐照特种元件制备工艺重点实验室

2. 中核北方核燃料元件有限公司

摘要:粉末性质的准确检测在工业生产与科研工作中,直接影响产品质量、过程安全及环境保护。然而,粉末固有的非均质性(如粒度偏析、团聚、吸潮等)及传统取样方法(样品量少、代表性不足等)常导致检测准确性受限。本研究聚焦于核燃料循环中含铈废渣资源化利用的核心需求——铈含量的高精度检测。在含铈废渣经干燥、研磨为粉末后进行铈回收的工艺中,铈含量的准确测定至关重要。

针对含铈粉末的特性,本研究采用严格的实验对比法,系统性地定量研究了粉末均匀性、粉末粒度及其分布一致性、取样空间位置(维度分布)及取样数量这四个关键因素对最终铈含量检测准确性的影响机制。实验过程中,利用同一批次粉末多次送检结果的离散度计算其均匀度,采用全部溶解法测定粉末的铈含量实际值。将不同取样方案下所得样品的铈含量均值作为检测值,通过对比检测值与实际值,定量计算检测准确度。

研究发现:粉末粒度减小和粒度分布一致性提高能显著提升粉末的整体均匀度。粉末均匀度是决定检测准确度的核心因素:均匀度越高,检测准确度越高。取样策略则影响代表性:仅在局部区域集中取样会导致检测准确度降低;而增加取样数量则能有效提高检测结果的可靠性。基于上述规律,本研究确立并验证了一套优化的含铈粉末取样方法:将粉末样品充分研磨至可通过 100 目筛(孔径约 150 μm)。在盛装粉末的容器内,于三个相互垂直的维度(如长、宽、高方向)上均匀分布地选取共计 9 个取样点。验证结果表明,该优化方法实现了接近 100% 的检测准确度。

本研究为含铈废渣回收工艺中铈含量的高精度、高效率检测提供了经过实验验证的、可操作的优化取样策略。同时,所揭示的粉末均匀性、粒度特性及取样策略(位置、数量、维度)对检测准确性的影响规律和优化方法,具有普适性意义,可为制药、材料科学、化工、环境监测及新能源等诸多涉及粉末检测的领域,在进行元素含量或其他关键物化性质分析时,提供重要的方法论参考和实践指导。

FB04-64

医用同位素靶件技术研究进展综述

夏晶晶²、王纪钧^{1,2}、曹军文^{1,2}、赵雨梦^{1,2}、李宗书^{1,2}、李昱^{1,2}、姬鹏波²

1. 中核反应堆辐照特种元件制备工艺重点实验室

2. 中核北方核燃料元件有限公司

医用同位素作为核医学领域的核心物质基础,在疾病诊断与治疗中发挥着不可替代的作用。随着核医学技术的快速发展和临床需求的持续增长,全球医用同位素应用市场呈现显著增长态势。医用同位素靶件技术作为同位素制备的关键支撑技术,其研发进展直接关系到同位素生产的效率与质量。本文对全球医用同位素的市场现状进行归纳分析,在此基础上系统梳理医用同位素靶件技术研究进展,重点围绕国内外医用同位素靶件研发类型和市场供给需求进行分析总结,对未来医用同位素技术发展趋势进行展望。

医用同位素在国际市场上的需求一直保持稳定增长,目前全球医用同位素供应链主要依赖比利时(BR-2)、荷兰(HFR)、南非(SAFARI-1)、捷克(LVR-15)、波兰(MARIA)、澳大利亚(OPAL)等 6 座研究堆,这些国家供应的同位素占全球供应量的 90% 以上。

全球医用同位素制备主流技术包括低浓铀靶件裂变生产技术和加速器辐照法生产技术。国际主流趋势是向低浓铀靶件转型，以降低核扩散风险。铀铝合金靶件通过提高铀密度等方式增强性能；金属铀箔靶件则解决了铀箔制备难题，提高了生产效率；氧化铀靶件具有更高的铀密度和更少的废物量；电沉积靶件和悬浮粒子靶件等新型靶件形式也在不断探索中，为医用同位素生产提供了更多选择。同时加速器辐照法生产技术因短周期、无废料等优势成为重要补充技术。光核反应靶件利用高能电子轰击厚金属靶产生 γ 射线，诱导 $^{100}\text{Mo}(\gamma, n)^{99}\text{Mo}$ 嬗变，该技术无需反应堆，被视为未来替代路径。

我国已成功掌握商用堆生产 ^{14}C 技术，首批氮化铝靶件已在秦山核电三期2号重水堆机组入堆。然而， ^{99}Mo 、 ^{177}Lu 等关键同位素依然依赖进口，原料供应受制于国际反应堆老化问题。国内仅中国工程物理研究院（CMRR）具备年产1万支 ^{99}Mo - $^{99\text{m}}\text{Tc}$ 发生器的能力，远不能满足需求。 ^{177}Lu 作为治疗类同位素，中国工程物理研究院具备年产1000 Ci的生产能力，但临床应用的 ^{177}Lu 同位素仍主要依赖进口。 ^{131}I 是我国治疗用医用同位素中临床用量最大且覆盖最广的同位素，中物院可实现自主生产，但80%仍依赖进口。 ^{89}Sr 是我国可以实现小规模市场供给的治疗类同位素，核动力院年产能50 Ci，初步缓解进口依赖，但临床需求未完全满足。

总体而言，我国在低浓铀靶件领域取得了一定突破。为继续突破发展瓶颈，亟需加速现有反应堆升级与专用堆建设，重点突破高密度靶件制备、辐照工艺优化等核心技术，构建产学研协同创新体系并制定靶件标准化规范。通过强化国际合作与技术引进，中国医用同位素靶件技术将在高效化与绿色化方向持续发展，为核医学自主化提供核心支撑。

FB04-65

Enhanced He irradiation-resistance of M/A-site two-component MAX phase revealed via defect evolution

Yulin Wei, Min Liu

Sun Yat-sen University

To enhance the resistance of MAX phases to He irradiation, this study employs first-principles calculations to investigate the evolution of irradiation-induced defects in Ti_3SiC_2 -based two-component MAX phases, including $(\text{Ti}_{0.5}\text{M}_{0.5})_3\text{SiC}_2$ ($\text{M} = \text{Ta}, \text{V}, \text{Nb}, \text{Zr}, \text{Hf}$) and $\text{Ti}_3(\text{Si}_{0.5}\text{A}_{0.5})\text{C}_2$ ($\text{A} = \text{Al}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Zn}$). This clarifies the laws and mechanisms of irradiation damage in different structural two-component MAX phases, which offers a crucial reference for the screening of new nuclear structural materials. It was found that the M-site solid solution promoted the vacancies formation, inhibited interstitial dissolution of He, and reduced the damage to atomic stability caused by He-vacancies. The A-site solid solution decreased the formation energy of antisite defects and enhanced the resistance to damage induced by vacancies. He bubbles are less likely to form because both two-component MAX phases prevent He atoms from migrating and binding within the lattice and interfaces. Furthermore, the degree of lattice distortion affected the degree of property alteration and the tendency, which made the comprehensive performance of $(\text{Ti}_{0.5}\text{Ta}_{0.5})_3\text{SiC}_2$ and $\text{Ti}_3(\text{Si}_{0.5}\text{Al}_{0.5})\text{C}_2$ better, while stability of $\text{Ti}_3(\text{Si}_{0.5}\text{Fe}_{0.5})\text{C}_2$ and similar phases is relatively poor. The difference in properties resulted from the combined effect of the interatomic binding strength and the mixed bonding type.

FB04-66

核聚变反应堆超导铠甲线圈盒和预紧件配套焊材及焊接工艺开发

原园、王松涛、刘锟

杨庄大街69号首钢技术研究院

针对我国BEST核聚变反应堆超导铠甲、线圈盒锻件和预紧件焊接材料“卡脖子”难题，深入研究不同合金元素对焊缝强韧化作用，创新性构建适配核聚变特殊工况的焊材合金成分体系，成功攻破高端焊丝制备领域多项技术难题，实现精准固氮、严格管控杂质元素、有效解决热加工裂纹和焊丝表面质量缺陷，成

功开发出高性能专用焊材，焊接接头 4.2K 强韧合格，完成锻件用焊材和第一幅预紧件示范件的顺利交付。

FB04-67

N 对 12Cr 新型铁素体/马氏体钢显微组织和力学性能的影响

周伟 1,3, 邢炜伟 2,3, 梁田 2,3, 郝宪朝 2,3, 王平 1, 马颖澈 2,3

1 东北大学 材料科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110819

2 中国科学院金属研究所 师昌绪先进材料创新中心, 辽宁 沈阳 110016

3 中国科学院金属研究所 核用材料与安全评价重点实验室, 辽宁 沈阳 110016

摘要：为提升铁素体/马氏体耐热钢在高温服役环境下的持久强度，常通过添加氮元素以促进 MX 相形成，并与 M23C6 碳化物产生协同强化作用。本研究针对一种新型 12Cr 铁素体/马氏体耐热钢，系统分析了氮含量 (0.02wt.%、0.06wt.%、0.10wt.%、0.15wt.%) 对该新型铁马钢的显微组织及力学性能的影响规律。研究表明，随氮含量增加，组织中 MC 碳化物由汉字状转变为块状，M23C6 尺寸从 174nm 增至 315nm，MX 相析出量增加，板条宽度先减小后增大，BN 的数量逐渐增加，且由块状向条状转变。力学性能呈现先升后降趋势：氮含量从 0.02wt.% 增至 0.10wt.% 时，新型铁马钢的室温抗拉强度、屈服强度分别由 948 MPa、790 MPa 提升至 1041 MPa 和 873 MPa，630°C/230MPa 持久寿命由 124 h 大幅延长至 1112 h；当氮含量进一步增至 0.15wt.% 时，抗拉强度、屈服强度和持久寿命分别下降至 985 MPa、774 MPa 和 73 h。性能的提升源于氮优化 MC 相形貌，促进 MX 相析出，细化板条，同时抑制 M23C6 过度粗化；但高氮 (0.15wt.%) 时，BN 数量及尺寸剧增、B 被大量消耗，M23C6 过度粗化削弱钉扎效应，导致力学性能恶化。研究表明，控制氮含量为 0.06wt.%–0.10wt.% 时，新型铁马钢可兼具优异的高温强度和抗蠕变性能。

关键词：12Cr 铁素体/马氏体钢；氮含量；BN；力学性能

FB04-68

原位交联 SAMs 用于高效倒置器件的制备

高亮

厦门大学

在 p-i-n PSCs 中，HTL 是重要的组成部分，不仅起着选择性提取和传输空穴的作用，同时还作为生长基底影响钙钛矿膜的质量，因而对器件的效率及稳定性影响显著。目前，p-i-n PSCs 中应用广泛的 HTL 是聚[双(4-苯基)(2,4,6-三甲基苯基)胺] (PTAA) 与聚(3,4-乙烯二氧噻吩)-聚苯乙烯磺酸 (PEDOT:PSS)。PTAA 价格昂贵 (>2000 元/克) 且表面润湿性差，不利于大规模应用；而 PEDOT:PSS 则存在酸性和腐蚀性的问题，损害器件的长期稳定性。这些问题制约着 p-i-n PSCs 的进一步发展，开发廉价、高效、稳定的新型 HTLs 显得尤为重要。在众多类型的新型 HTLs 中，具有锚定基团的自组装单层 (SAM) 材料显示出商业化应用的潜力。该类材料具备合成简单、批次重复性好、钝化效果明显等独特优势，不仅可自发锚定在金属氧化物表面以调节界面能级排列，同时还具有高的光透过率，因而可显著提升器件的开路电压 (VOC) 短路电流 (JSC)。但是，小分子 SAMs 仍存在光、热等压力下稳定较差的问题。为此，我们设计了一种在退火过程中可热交联的 SAMs 来提升分子的稳定性，进而改善器件的长期稳定性。

FB04-69

“弱空间限域”策略制备高效稳定的钙钛矿 LED

彭琛琛、肖正国

中国科学技术大学

金属卤化物钙钛矿的低激子束缚能使其在太阳能电池中能够高效电荷分离，但对 LED 而言，这一特性反而抑制了辐射复合，导致发光效率下降。为提升钙钛矿 LED 的外量子效率 (EQE)，研究者们提出了

多种“强空间限域”策略，包括利用纳米晶/量子点、低维钙钛矿结构，或超薄钙钛矿发光层以实现载流子的空间限制。然而，大多数强空间限域的钙钛矿体系通常面临严重的 Auger 复合、离子迁移以及热稳定性差等问题，限制了器件的亮度和使用寿命。

本研究提出了一种替代性的策略，基于“弱空间限域”的大晶粒全无机钙钛矿材料。通过引入牺牲性添加剂——次磷酸和氯化铵，诱导钙钛矿 (CsPbBr_3) 的成核和结晶，获得了结晶质量高、缺陷密度低、光致发光效率高的钙钛矿结构。受益于其高载流子迁移率和抑制的 Auger 复合过程，我们制备出高效钙钛矿 LED 器件，其外量子效率高达 22.0%，在接近 1000 mA cm^{-2} 的高电流密度下仍保持在 20% 以上，最高亮度超过 $1,167,000 \text{ cd m}^{-2}$ 。

此外，器件的离子迁移得到有效抑制，热稳定性显著提升，使得在室温、初始亮度为 100 cd m^{-2} 的条件下，器件的外推半寿命大幅延长至 185,600 小时。该研究为实现高效、高亮度及高稳定性的钙钛矿 LED 提供了一种全新的设计思路，推动其在实际应用中的发展。

参考文献:

Nature (in press). Weakly space-confined all-inorganic perovskites for light-emitting diodes.

<https://doi.org/10.1038/s41586-025-09137-1>.

作者简介

彭琛琛，中国科学技术大学凝聚态物理专业博士生，导师肖正国教授。博士期间主要研究方向是金属卤化物钙钛矿发光器件的稳定性。近期以一作身份在 Nature 期刊发表了关于采用“弱空间限域”策略制备高效稳定钙钛矿 LED 的研究工作。

FB04-70

钙钛矿太阳能电池界面材料研究

尹新星

嘉兴大学

界面调控对于钙钛矿太阳能电池的效率、稳定性和大面积制备具有关键作用。如何抑制界面处的非辐射复合损失，改善电荷抽取和传输特性，保护钙钛矿吸光层免受侵蚀是当前界面材料开发的重点。基于以上考虑，我们开发了系列新型非掺杂空穴传输材料、自组装单分子层空穴传输材料和界面钝化材料，实现了界面处能量损失的抑制和器件稳定性的提升。应用于钙钛矿太阳能电池，实现了高效的单节、叠层和大面积器件。

FB04-71

胶体锗量子点的掺杂辅助合成与配体工程及其光伏器件研究

林镁淇、赖鸣、杨振宇

中山大学化学学院

胶体锗量子点 (GeQD) 因其可调光电性能和溶液可加工性在光电器件中具有重要应用前景，但传统合成方法存在产率低、粒径不均等问题。本研究提出一种钴掺杂辅助合成 GeQD 的方法，通过利用溶胶-凝胶前驱体中小剂量的钴离子，在较低温度下促进晶体锗的生长，同时防止锗原子的升华。合成的 GeQD 在粒子均匀性、溶液可加工性和光电性能方面都有显著改善。此外，针对传统合成方法中 GeQD 表面长链配体（如油胺）导致的载流子传输限制，我们开发了固态配体交换方法，以甲基碘化铵替代油胺配体，显著降低 GeQD 薄膜的陷阱密度并增强其载流子迁移率，并通过逐层法制备出锗量子点太阳能电池。本研究为高性能 GeQD 光电器件的制备提供了合成与表面修饰新策略。

FB04-72

定制溶剂工程制备高效宽带隙钙钛矿太阳电池

王若浩¹、朱景伟²、陈聪²、赵德威²、张文华¹

1. 云南省碳中和与绿色低碳技术重点实验室, 云南省微纳米材料与技术重点实验室, 云南大学, 西南联合研究生院, 材料与能源学院, 云南昆明, 650504

2. 四川大学材料科学与工程学院, 四川大学可再生能源材料与器件工程研究中心, 四川成都 610065

具有宽禁带 (~1.65-1.68 eV) 的钙钛矿太阳能电池 (PSCs), 被认为是构建钙钛矿/硅叠层太阳能电池的理想选择。然而, 钙钛矿薄膜在快速结晶过程中会产生高密度的缺陷, 这些缺陷作为非辐射复合中心, 造成严重的开路电压 (V_{oc}) 损失, 进而限制光电转化效率 (PCE) 的提升以及叠层太阳能电池的发展。为了解决这一问题, 我们提出了一种定制的溶剂工程策略, 即用 1,3-二甲基-3,4,5,6-四氢-2(1H)-嘧啶酮 (DMPU) 部分取代传统溶剂二甲基亚砜 (DMSO), 以获得高质量的钙钛矿薄膜和具有宽反溶剂加工窗口的高效宽带隙钙钛矿太阳能电池。DMPU 定制溶剂系统归功于 DMPU 与 PbI_2 之间的强相互作用, 使得溶剂在钙钛矿薄膜退火过程中缓慢蒸发, 可以有效延缓和调节钙钛矿薄膜的结晶和生长过程, 使钙钛矿晶粒更大, 缺陷减少。形成的稳定的 DMPU- PbI_2 中间相可以连续释放 PbI_2 , 减弱了钙钛矿薄膜对反溶剂滴加时间的依赖性, 延长了加工窗口期。由于 DMPU 定制溶剂系统提高了钙钛矿薄膜质量, 制备的 1.65 eV PSCs 的性能和稳定性得到了显著提高, 其 PCE 达到了 21.9%, V_{oc} 达到了 1.256 V。

FB04-73

Salt-Resistant Composite Aerogel with Sponge-Templated 3D Interconnected Superhydrophilic Channels for Rapid Evaporation

Yong Bai, Fang Li *

Donghua University

Solar-driven interfacial evaporation (SDIE) offers an economically viable and sustainable solution for seawater desalination. However, simultaneously achieving a high evaporation rate and long-term salt resistance remains a critical challenge. Herein, a composite aerogel-based interfacial evaporator (PCPG) is presented, fabricated by attaching a hydrophilic gel matrix to a polyurethane sponge framework via a spatial confinement strategy. This innovative design optimizes pathways for water transport and salt ion diffusion: capillary action ensures continuous water supply, while three-dimensionally interconnected channels significantly enhance the back-diffusion of salt ions. Within the hydrated gel network, hydrophilic groups effectively activate water molecules, altering their state and substantially reducing the enthalpy of evaporation. Furthermore, the side surfaces of this 3D evaporator spontaneously harvest additional energy from the ambient environment, enabling an exceptional evaporation rate of 6.13 kg m⁻² h⁻¹ under one-sun illumination. Remarkably, the PCPG maintains a high evaporation rate of 5.21 kg m⁻² h⁻¹ even after continuous operation for 10 hours in simulated brine with a salinity of 20 wt%, demonstrating outstanding salt resistance. Additionally, the multicomponent polymeric cross-linked network significantly enhances the aerogel's mechanical robustness and long-term stability under harsh conditions. This work provides novel insights into the development of efficient and stable composite aerogel-based interfacial evaporators.

Key Words: Solar-driven interfacial evaporation, composite aerogel evaporators, interconnected superhydrophilic channels, anti-salting, long-term stability

FB04-74

含纳米 M2C 碳化物低 Si 含量 ERNiMo-2 焊丝熔敷金属的强韧化研究

朱玉成

中国科学院上海应用物理研究所

本文以商用 Hastelloy N 合金焊丝 (ERNiMo-2) 以及对应调整的低 Si 含量 ERNiMo-2 焊丝为研究对象, 较为系统地研究了对应熔敷金属的显微组织和力学性能。同标准 Si 含量的商用 ERNiMo-2 焊丝相比, 低

Si 焊丝熔敷金属组织中含有更多纳米析出相, 该析相在枝晶间围绕 M6C- γ 共晶相或沿晶界析出。拉伸实验结果表明, 在室温和 700℃ 条件下, 低 Si 含量 ERNiMo-2 焊丝熔敷金属的强度均高于标准焊丝的焊缝金属。通过透射电镜(TEM)观察分析, Si 含量的降低使得熔敷金属中析出了纳米 M₂C 型碳化物, 纳米尺寸的 M₂C 碳化物不仅提高了材料的强度, 同时对合金塑性也有积极影响。本研究的结果对 ERNiMo-2 焊丝中的 Si 元素含量优化有明确的指导意义。

FB04-75

真空电子束焊接 Ti-2Al-2.5Zr/Ti-4Al-2V 管板接头显微组织与力学性能研究

牛连涛、芦丽莉、张玉佳、徐少峰、林腾飞

中国核动力研究设计院

本研究通过真空电子束焊接, 系统揭示了 Ti-2Al-2.5Zr/Ti-4Al-2V 钛合金管板接头的组织性能演变规律。焊接接头分为母材 (BM)、热影响区 (HAZ) 和熔合区 (FZ)。Ti-2Al-2.5Zr 侧母材由等轴 α 相和弥散 β 相组成, Ti-4Al-2V 侧母材由纤维状 α 相和晶间 β 相组成。焊接热循环促使两侧 HAZ 区及 FZ 区-近 HAZ 侧形成细小针状 α' 相, FZ 区-顶部因高热输入形成粗大针状 α' 相, FZ 区-中部经多次热输入使粗大 α' 相破碎为细小针状结构。晶粒尺寸呈梯度分布: BM/HAZ 区-Ti-4Al-2V 侧 < FZ 区-近 HAZ 侧 < BM/HAZ 区-Ti-2Al-2.5Zr 侧 < FZ 区-中部 < FZ 区-顶部。焊接热输入作用下 BM 区高位错密度及小角度晶界显著降低, HAZ 区和 FZ 区形成以低位错密度和大角度晶界主导的显微结构。显微硬度结果显示, FZ 区硬度 (约 220 HV₃) 较 Ti-4Al-2V 母材 (约 275 HV₃) 显著降低, HAZ 区硬度与 Ti-4Al-2V 母材相当。力学性能差异源于 α' 相演变: 细小针状 α' 相通过晶界和相界复合强化作用促使 HAZ 区抵抗变形能力提高, 粗大 α' 相因晶界和相界弱化导致 FZ 区抵抗变形能力下降。研究证实, 优化焊接热输入, 获得细小针状 α' 相是提升钛合金异种接头性能的关键, 此为提升钛合金异种焊接接头性能提供理论依据。

FB04-76

不同纳米改性环氧涂层在大气腐蚀环境下的防腐蚀性能研究

张天宇、张腾、付金辉

空军工程大学

研究工作: 制备了以纳米 CeO₂ 粒子 (NCPs)、石墨烯纳米片 (GNPs) 和碳纳米管 (CNTs) 三种纳米粒子为填料的纳米改性环氧涂层。通过开展模拟海洋大气环境的腐蚀试验, 分析了不同含量、不同类型纳米粒子改性涂层的耐蚀性能, 研究了不同纳米改性技术的防腐蚀机理, 并对比了其防腐蚀效果。对今后环氧涂层纳米改性技术的发展提出了建议。

主要研究结果: 研究发现当纳米 CeO₂ 含量为 0.5%wt 时, 涂层表面出现较多的裂纹, 当含量为 1.0%wt 时, 裂纹较浅, 而当含量为 2.0%wt 时, 裂纹又开始增多。当 GNPs 含量为 0.5%和 1.0%时表面较为平整, 而 GNPs 含量为 2.0%时, 表面由于团聚作用而出现凹凸不平的现象。三种含量的 CNTs-环氧涂层在腐蚀 816 小时后都出现了不同数量的微裂纹。

主要研究结论: 腐蚀后期, NCPs-环氧涂层中的纳米氧化铈粒子水解生成氢氧化铈, 进一步抑制腐蚀。石墨烯和碳纳米管都具有较好的导电性, 既能抑制电子在基体上传输, 又可以填料的阴极保护。且石墨烯本身具有不可渗透性, 隔绝效果较好, 容易与氨基自由基交联, 能提高界面处的结合力。CNTs-环氧涂层中碳纳米管表面包覆了大量的聚多巴胺, 使大量的羧基基团和氨基基团与涂层中环氧树脂的官能团交联, 从而提高界面处的结合力。NCPs-环氧涂层 (1.0%wt)、GNPs-环氧涂层 (1.0%wt) 和 CNTs-环氧涂层 (1.0%wt) 的耐蚀效果较好, 而其中 NCPs-环氧涂层 (1.0%wt) 的耐蚀效果最佳。

FB04-77

增材制造形状记忆合金的弹热效应及应变玻璃转变

侯慧龙^{1,2}、李泽怡¹、孙庄炜慈^{1,2}、霍雪艺^{1,2}、李冠奇^{1,2}、李政睿^{1,2}、张昌硕^{1,2}、赵新青¹

1. 北京航空航天大学, 材料科学与工程学院

2. 北京航空航天大学, 天目山实验室

通过固体材料内禀序参量在外场下可逆转变的吸/放热效应可实现热力学循环制冷, 固态相变制冷技术具有绿色环保、节能高效、低噪稳定等诸多优点, 兼具巨大的经济价值和环保价值, 并在航空、航天器的温控领域具有重要的应用前景。形状记忆合金作为弹热制冷技术的关键材料体系成为固态制冷剂的重要角色, 其力-热转换效率和稳定性成为备受关注的重要技术指标。本次报告重点针对记忆合金的功能疲劳问题, 介绍了通过驱动场调控和激光增材制造创制精细微结构方面的工作。首先介绍采用合金共晶点成分和局部快速冷却工艺构筑的纳米复合微结构, 然后讨论通过微结构生成小滞后, 实现制冷效率和稳定性的大幅提升。之后介绍利用相变滞后损耗占比, 建立准确描述弹热材料功能寿命的唯象模型。最后介绍基于深空探测的宽温域超弹性合金与应变玻璃转变的研究进展。

FB04-78

超高强度钛合金强塑性机理研究: Al 含量和位错滑移模式的影响

潘曦

西北有色金属研究院

航空航天武器装备的轻量化是国家重大战略急需。超高强度钛合金是迄今比强度最高的轻质金属结构材料, 替代高强钢或中等强度钛合金具有重大战略意义。现有 1.5GPa 级超高强度钛合金塑性不足 (通常 < 5%), 基于位错滑移模式的强塑性机理研究存在物理机制不清晰、潜在位错滑移路径尚未明确等问题, 极大地限制了其应用。本文通过 α 相稳定元素 Al 含量调控、热塑加工以及微结构控制等手段, 成功开发出一种新型超高强-塑钛合金 TP1, 实现了 1.5GPa 以上超高强度兼具 10% 以上塑性的突破。合金的超高强度主要来源于沉淀强化和固溶强化, 而卓越的拉伸塑性与初生 α p 相中位错由平面滑移模式向波浪滑移模式的转变有关。这种转变促进了多方向的位错活动, 并缓解了 α p/ β 边界处的局部应力/应变集中。理论计算表明, Al 含量的降低可以有效增加初生 α p 相的层错能, 从而促成了位错向波浪滑移模式的转变。该研究可为新一代高性能钛合金的设计优化和性能提升提供理论和实验基础。

FB04-79

基于碳纳米管集成优化碳纤维/聚酰亚胺复合材料的性能提升研究

翁宜婷^{1,2}、欧云福¹、李娟³、张松箫^{1,2}、孟祥胜¹、王震¹、茅东升¹

1. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所

2. 中国科学院大学

3. 浙大宁波理工学院

CF/PI 复合材料因其出色的热稳定性和力学强度, 广泛应用于航空航天、轨道交通等高端制造领域。然而, 由于碳纤维与聚合物基体之间界面结合力较弱, 在高温或复杂载荷条件下, 易出现层间剥离、开裂等问题, 从而限制了其进一步发展。为解决这一问题, 近年来研究者尝试了多种方法以改善界面性能, 其中碳纳米管由于其优异的力学强度、导电性及热稳定性, 成为最具潜力的增强材料之一。碳纳米管不仅具备高比表面积与良好的分散性, 还能与高分子链段产生物理或化学作用, 从而在不削弱原有性能的前提下, 有效提升复合材料的整体性能。

在本研究中, 通过向 CF/PI 复合材料中引入不同含量的 CNTs, 系统分析其对复合材料力学的强韧化机制。研究结果显示, CNT 的加入在室温及高温条件下可显著提高复合材料的力学性能, 尤其在界面区域起到了关键的增强作用。此外, CNT 的加入还提升了复合材料的热稳定性与导热性能。CNT 在复合材料中形成了有效的网络结构, 不仅有助于增强热导率, 也在一定程度上延缓了基体热分解过程, 提高材料的热稳定性。综合来看, CNT 在碳纤维与聚酰亚胺之间构建了良好的界面桥接结构, 通过 π - π 堆积作用、范德华力及氢键增强了界面粘结力, 并通过填充纤维间隙形成“桥联”效应, 从而有效传递载荷、阻止裂纹扩

展。

综上所述, 本研究为进一步提升高性能复合材料在极端环境下的力学与热稳定性提供了理论依据和技术路径, 也为 CNT 在聚合物基复合材料中的高效应用提供了有益的研究参考。

FB04-80

Ti/Al 比对一种新型铸造镍基高温合金持久性能的影响

王旻¹、李阳^{1,2}、马颖澈¹

1. 中国科学院金属研究所 师昌绪先进材料创新中心

2. 中国科学技术大学 材料科学与工程学院

当前镍基高温合金 Ti/Al 比研究多聚焦 η 相析出机制的定性分析, 而 γ' 相粗化与 Ti/Al 比的定量关系及 η 相对合金力学性能的影响尚存争议。本研究针对一种新型沉淀强化型铸造镍基高温合金, 通过成分梯度调控策略设计制备了 Ti/Al 比 (wt.%) 分别为 0.4、1.9、3.0 和 3.6 的试验合金, 系统分析了 Ti/Al 比对 850 °C 长期热暴露下合金持久性能及组织稳定性的影响规律。800 °C/430 MPa 持久测试结果表明: 标准热处理态合金持久寿命随 Ti/Al 比升高由 70 h (0.4Ti/Al) 提高至 286 h (3.6Ti/Al)。经 850 °C/300 h 热暴露后, 合金持久寿命均有所降低, 且随 Ti/Al 比升高呈现抛物线趋势: 0.4Ti/Al 和 3.6Ti/Al 的持久寿命分别为 19 h 和 36 h, 与标准热处理态相比分别降低约 72.9%和 87.4%; 而 1.9Ti/Al 和 3.0Ti/Al 的持久寿命仍高达 144~148 h, 与标准热处理态相比分别降低约 23.0%和 44.6%。显微组织分析表明: 标准热处理态合金的 γ' 相均呈球形, 经 850 °C/300 h 热暴露, γ' 相粗化均遵循 Lifshitz-Slyozov-Wagner 理论, 3.6Ti/Al 合金的 γ' 相转变成圆角立方状, 且有定向排列的趋势, 而其他合金的 γ' 相仍保持球状。相析出行为分析表明: 0.4Ti/Al 及 1.9Ti/Al 合金在 850 °C 热暴露过程中均未观察到有害相析出; 3.0Ti/Al 合金经 850 °C/100 h 热暴露, 晶界处有少量针状 η 相析出, 经 850 °C/300 h 热暴露, 晶界处针状 η 相析出含量增加; 3.6Ti/Al 合金经 850 °C/100 h 热暴露, 晶界处碳化物开始分解并伴随有针状 η 相析出, 经 850 °C/300 h 热暴露, 晶界处针状 η 相析出含量增加、不断长大, 晶内也有针状 η 相析出。晶界 η 相通过钉扎效应阻碍位错运动, 但过量析出会削弱晶界结合力, 晶内 η 相则切割基体连续性, 加剧应力集中, 是热暴露后持久寿命显著下降的主要原因。

FB04-81

Mg-Gd 系合金的热变形行为和组织演变规律研究

陈晓亚、李全安、庞浩、王东振、吴铮

河南科技大学

镁合金是最轻的金属结构材料, 具有较好的比刚度、比强度、减震性等优点, 被广泛应用于航空航天和国防军工等领域。在 Mg-RE 合金中, Mg-Gd-Y-Zr 系合金具有良好的综合性能, 是最有应用前景的稀土镁合金之一。本文以 Mg-Gd-Y(-Sm)-Zr 合金为研究对象。研究分析了 Sm 对 Mg-Gd-Y-Zr 合金室温孪生行为以及热压缩行为的影响, 探究了变形温度和应变率对 Mg-Gd-Y-Sm-Zr 合金动态再结晶和动态析出行为的影响。研究表明: Sm 的添加提高了 Mg-Gd-Y-Zr 合金的室温变形应力, 合金中激活的孪生类型均为 {10-12} 拉伸孪生。Sm 通过抑制锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移的活性来阻碍大角度晶界的形成, 从而延缓动态再结晶。析出相和再结晶晶粒呈现交错链状分布特征, 大尺寸析出相可有效钉扎晶界, 使再结晶晶粒的生长受到抑制, 再结晶晶粒更加细小。在高温变形过程中, 合金启动了锥面 $\langle a \rangle$ 滑移和锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移来协调变形。合金主要以非连续动态再结晶机制为主, 随着应变和温度的升高, 旋转连续动态再结晶占据主导地位。

FB04-82

M50 轴承钢滚动接触疲劳次表层蝶状白蚀形成与演化机制

杨丽琪、薛伟海、段德莉

中国科学院金属研究所

蝶状白蚀 (WEA) 在滚动接触疲劳的早期形成, 是亚表层裂纹形核的主要位置, 通常认为其与轴承的早期失效有关, 关于蝶状 WEA 的形成机制尚缺乏被广泛认可的理论。近年来, 针对蝶状 WEA 的研究主要集中在 AISI52100 轴承钢中, M50 钢作为最常用的航空发动机主轴轴承用钢, 其内部合金元素含量较高, 碳化物类型和成分十分复杂, 为研究蝶状 WEA 的形成机制带来更大的挑战性。针对上述难题, 本文在不同循环周次和接触应力条件下对 M50 轴承钢进行滚动接触疲劳实验, 利用 SEM、EBSD、TEM 等分析方法对不同阶段蝶状 WEA 的微观结构进行分析, 阐明蝶状 WEA 的形成与演化机制。同时, 利用 EPMA 分析了不同阶段蝶状 WEA 的元素组成变化, 揭示了元素扩散与微观结构的关系。并采用纳米压痕实验检测蝶状 WEA 的硬度, 为确定其裂纹形成机制提供证据。研究结果表明: 形成蝶状 WEA 的碳化物首先在位错的作用下被细化为 Mo_2C 和 M_7C_3 纳米晶, 进而增加了碳化物内部的界面能, 推动重金属元素开始扩散, 在中后期, 蝶状 WEA 内部形成非晶结构, 提出了“扩散辅助位错迁移”的蝶状 WEA 形成新机制。

FB04-83

用于镍基高温合金精密铸造的 Al_2O_3 基陶瓷型壳成分设计及其界面反应调控

寇宝弘、欧阳静

中南大学

镍基高温合金作为航空发动机叶片的核心材料, 广泛应用于航空领域。然而, 在熔模铸造过程中, 熔融金属与 Al_2O_3 基陶瓷型壳的界面反应会导致铸件表面质量下降, 并增加二次加工的难度和成本。针对此问题, 本文提出了基于界面反应特性的陶瓷型壳成分设计策略, 旨在调控合金/型壳界面反应与润湿性, 同时尽量不影响高温合金基体的固有成分和性能。选取了两种典型铸造镍基高温合金作为研究对象, 包括含较高 Al、Ti 元素含量的等轴晶合金 K417G 和含 Hf 元素的定向晶合金 DZ125, 通过原位固滴实验系统研究了成分设计策略对界面反应及润湿性的影响, 并对反应产物进行了表征以阐明其作用机理。研究结果表明, 通过陶瓷型壳的成分设计, 能够有效抑制合金/型壳界面反应, 减少反应产物和粘砂缺陷, 显著改善合金表面质量。该研究为开发适用于镍基高温合金熔模铸造的先进陶瓷型壳, 推动无余量精密铸造技术的实现提供了重要的理论依据和实践指导。

FB04-84

修理工艺对含表面划痕损伤复合材料剩余强度影响研究

马铭泽、吴富强、曹镜

南京航空航天大学

本研究围绕含划痕损伤非对称复合材料的修理后剩余强度, 开展了贴补修理与挖补修理的拉伸试验, 对比分析了不同修理工艺的强度恢复效果。通过建立数值仿真模型对修补试件进行模拟分析, 并将仿真结果与实测数据进行对比, 验证了模型的准确性。在此基础上, 进一步探讨了修理参数对挖补修理性能的影响, 计算了不同搭接宽度下的极限载荷, 获得了在不同厚度及搭接方式下的最优强度恢复系数。研究结果表明: 贴补修理工艺对表面划痕损伤具有显著的修复效果, 修理后强度恢复系数可达 90%; 逐层搭接方式优于双层搭接方式; 随着复合材料厚度的增加, 挖补修复效果呈下降趋势。

FB04-85

空间模拟压铸耦合半固态成形调控制备 Monel K-500 合金

杨明辉、李浩然、李路远、阮莹、魏炳波

西北工业大学

采用空间模拟压铸成形技术制备了具有梯度结构的 Monel K-500 合金。通过有限元模拟研究了压铸过程中合金中的流场, 温度场和压力分布, 分析了 γ 相微观组织的形成机制, 并通过晶体塑性模拟分析了晶

粒分布对合金力学性能的影响。压铸时合金冷却速率达到 $10^5 \text{ K}\cdot\text{s}^{-1}$ ，温度梯度达到 $10^7 \text{ K}\cdot\text{m}^{-1}$ 。液态合金压铸过程中模具的压力作用使用合金快速凝固并形成了表层细小等轴晶、亚表层过渡区柱状晶与中心等轴晶构成的梯度组织。半固态压铸合金中柱状晶粒减少且织构强度降低，平均晶粒尺寸减小至 $20.3 \mu\text{m}$ 。通过调控压铸前半固态时间可实现晶粒尺寸与分布的有效控制，当半固态时间从 0.6 s 增大至 3.5 s 时，晶粒尺寸增大至 $96.7 \mu\text{m}$ 。相比液态压铸，半固态成形合金屈服强度提升约 7% 。基于晶体塑性的数值模拟表明，压铸合金的拉伸性能由晶粒尺寸、施密德因子及晶粒分布共同决定，晶粒细化与施密德因子降低引起的应力分布均匀化是合金的屈服强度提高的主要机制。

FB04-86

增材制造高温钛合金的组织与性能调控

朱智浩、张学哲、牛京喆

西北有色金属研究院

增材制造技术制备突破了传统制造技术对材料轻量化结构尺寸和复杂程度的限制，无需模具，克服了传统材料冶金技术和塑性成形技术的原理性制约，为大型复杂结构的一体化整体制造提供了全新的技术途径。然而，现有工业高温钛合金存在热强性低、抗氧化性能不足和增材制造成形性差等诸多限制。本文利用团簇式成分设计方法，通过调控溶质元素添加、阻断柱状晶连续生长，实现高温钛合金晶粒细化与等轴晶转变，设计出具有全等轴 β 晶兼具有良好增材制造成形性的高温耐氧化钛合金，并且发现沉积态合金的微观组织为梯度组织，顶部组织为针状 α' ，细片状 α 相和少量 β 相，中部为全片层($\alpha + \beta$) 双网篮组织和少量次生 α_s 相，下部会产生较多 β 相，该合金具有较高的组织稳定性。

FB04-87

增材适用型镍基合金计算设计与实验验证

付佳博，于皓，王晨充，徐伟*

东北大学

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

关键词：增材制造；镍基高温合金；计算设计；硼元素偏析；相界面

FB04-88

NbC/γ 相界面对增材制造镍基合金开裂行为的调控机制

杨兴铭*

东北大学

高性能镍基高温合金增材制造 (AM) 过程中的开裂问题制约了其应用，凝固近终态的先析相调控可以有效解决开裂。然而，仍需要其进行定量调控以实现打印性能和力学性能间的平衡。本工作以 NbC/γ 析出相界面为例，系统性地研究了其含量对 L-PBF 镍基高温合金的开裂行为的影响机制。对不同合金裂纹密

度和无裂纹加工参数范围的统计分析,表明先析 NbC/ γ 基体界面具有双重性质,是一把双刃剑。具体而言, NbC/ γ 基体界面含量较少时无法有效地抑制 B 元素的偏析与低熔点相的形成,导致开裂。而过量的 NbC 会导致大量的共晶,阻碍了枝晶的生长与枝晶间液相的回填,同样诱导裂纹的形成。具有适量 NbC/ γ 相界面的合金不仅展现出优异的可印刷性,还具有优异的强度-延展性协同作用。该研究为增材制造镍基高温合金的裂纹抑制和成分优化提供了指导。

关键词: 镍基高温合金; 增材制造; 先析相界面; 裂纹机制

FB04-89

纳米孪晶对高碳纳米贝氏体轴承钢耐磨性的提升机制探究

贾德诚¹, 苏瑛龙¹, 杨志南^{2,3*}, 张福成^{2,3}

1. 燕山大学
2. 华北理工大学
3. 燕赵钢铁实验室

世界上大约三分之一的一次能源消耗在摩擦过程中, 80%的机械部件故障是由磨损引起的。对于轴承钢而言, 磨损作为其主要失效形式之一, 直接影响其使用寿命。日益严峻的服役条件对轴承钢的耐磨性提出了更高的要求, 寻求优化材料的机械强度一直是解决磨损问题的传统方法。纳米孪晶作为一种典型的面缺陷, 其为材料带来了前所未有的性能。本研究通过多级相变在纳米贝氏体钢中引入大量纳米孪晶。利用扫描电子显微镜、透射电子显微镜、EBSD、力学性能测试等系列研究方法, 系统研究了纳米孪晶对纳米贝氏体轴承钢耐磨性能的影响。结果表明, 引入纳米孪晶后轴承钢的硬度提高 5HRC, 硬度的大幅提高使得实验钢耐磨性提升 31%。纳米孪晶的引入会改变轴承钢的磨损机制, 其磨损表面具有更少黏着层, 更浅的犁沟。相较于传统轴承钢的严重黏着磨损与磨粒磨损转变为较轻的磨粒磨损。引入纳米孪晶后轴承钢具有更优异的抗变形能力, 因此其纵截面变形区尺寸仅为传统贝氏体钢的 45.1%。其纵截面裂纹在变形区形核后存在两种扩展路径, 一种是偏转向表面完成剥落, 一种是沿晶向基体偏转。纳米孪晶与堆叠层错对裂纹的阻碍作用是裂纹转向基体的主要原因。当裂纹被纳米孪晶界所捕获时, 会在裂纹尖端产生严重的塑性变形, 形成非晶区域纳米晶区。这种裂纹尖端处的多级结构可以有效钝化裂纹, 消耗裂纹扩展能力, 从而提高材料的耐磨性。

关键词: 纳米贝氏体, 纳米孪晶, 耐磨性, 裂纹扩展

FB04-90

通过等温淬火工艺优化和稀土微合金化来改善 DC53 冷作模具钢的强韧性

刘羽翔, 汪志刚*

江西理工大学

本文研究了等温淬火热处理以及稀土添加对 DC53 冷作模具钢的硬度、冲击韧性和耐磨性的综合影响, 探索了关键热处理参数 (奥氏体化工艺与下贝氏体等温工艺) 对材料显微组织与力学性能的影响, 并针对下贝氏体对钢中强韧化机理作用以及稀土元素添加对钢等温淬火组织及性能影响机理进行了研究。结果表明, 通过合适的等温淬火工艺优化, 形成的下贝氏体/马氏体双相组织相比高温回火组织在耐磨性和冲击韧性性能均得到提升。稀土元素的加入能够有效细化原始奥氏体晶粒尺寸、同时能够净化杂质元素、对钢中碳化物改性、改变钢的关键相变点影响热处理工艺, 最终实现强韧性统合提升。

FB04-91

贵金属基高熵非晶/纳米晶复合材料的制备及其催化性能研究

雷忠林¹、蒋婧¹、鲁振²、杨磊¹

1. 河北工业大学

2. 中国科学院物理研究所

引言: 氢气具有高能量密度(142MJ/Kg)和无污染的特性,是一种理想的新能源载体。析氢反应作为一种制氢的常用手段,其反应过程复杂、动力学缓慢无法自发进行,需要催化剂的催化作用。传统的贵金属材料虽然催化效果好,然而储量低、价格高限制了其工业化应用。贵金属“合金化”是降低成本的有效方法,非晶合金又称“金属玻璃”,其特殊的无序结构使其具有高度不饱和活性位点及空电子轨道,有利于反应物的键合和激活。此外,有研究表明,非晶/纳米晶复合材料结合非晶基体本征的高电化学活性及纳米晶形成的原电池效应,会进一步提高材料的催化性能,然而贵金属基非晶合金晶化速度快难以控制。因此如何调控贵金属基非晶合金的晶化速度使其变得可控是尤为重要的。

材料与方法: 通过真空电弧炉熔炼及感应熔炼制备非晶合金母锭,随后使用单辊旋淬甩带将合金母锭制备成非晶条带,并使用差示扫描量热仪(DSC)测试其热力学性质,确定纳米晶制备参数并对其进行热处理,制备非晶/纳米晶复合合金并测试其催化性能。

结果与讨论: 对经过不同条件热处理后的非晶条带进行电化学测试,在适当参数的退火处理后,非晶条带的 HER 性能会有所提升但效果仍不够理想,在此基础上对所制得的非晶/纳米晶条带进行恒电位腐蚀并对其进行电化学测试后发现,其 HER 催化效果得到较大提升。对恒电位腐蚀后的 PdPtCuNiP 非晶/纳米晶条带进行扫描电子显微镜(SEM)、原子力显微镜(AFM)等一系列表征后,发现其表面形成了多孔结构,有利于提高合金材料的催化性能。

本研究设计了三种不同混合熵的非晶合金分别为 PdNiCuP、PdPtCuNiP、PtNiCuP,通过利用高熵合金具有原子迟滞扩散效应并且在高温条件下会降低吉布斯自由能,克服了晶化速度难以调控的难题,并制得 PdPtCuNiP 非晶/纳米晶复合合金。在此基础上对其表面进行恒电位腐蚀后形成了多孔结构,进一步提升了 HER 催化效果。

FB04-92

聚变堆结构用高熵合金的微观结构研究

张博文、何智兵、刘艳松

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

氘-氚(D-T)聚变反应产生的热量和高能中子被周围的第一壁、限制器和偏滤器组件吸收,使聚变反应发生在真空容器内,以防止D-T等离子体受到大气污染。结构材料将受到氘(D)、氚(T)、氦(He)等高通量入射粒子的轰击,以及D-T反应产生的14 MeV中子的辐照,这种轰击会对面等离子体材料

(Plasma Facing Materials, PFM)造成不同程度的损伤,如气泡、裂纹、剥离等,也会导致氢同位素保留率(D/T)急剧增加。由多种原子百分比相等或接近相等(通常在5%到35%之间)的主要元素构成的高熵合金(High-Entropy Alloys, HEAs)的耐辐射性引起了研究者的兴趣,其出高硬度值、高屈服强度、大延展性、出色的抗疲劳性和良好的断裂韧性,并且其耐氦脆(Helium Embrittlement)性也得到了重点研究。因此,本研究选择了以目前主流用于PFM的钨金属为基体,采用了直流(DC)和高功率脉冲(HiPI)磁控溅射的方式沉积了W-Ta-V-Cr高熵合金。GIXRD和HRTEM的电子衍射都显示出了单相BCC结构,计算出其晶面间距为0.219 nm,晶胞参数为3.1 Å。SEM表征显示,随着W含量的增加,晶粒增大,通过TEM的微观形貌分析,W含量为20~30 a.t.%时其晶粒大小达到了纳米晶,并采用纳米压痕对其硬度进行表征,在W含量为30 a.t.%时达到最大值18.9 GPa。成功制备了单相BCC结构的W-Ta-V-Cr的纳米晶高熵合金,为后续含氦高熵合金中氦行为研究提供了坚实有力的基础。

FB04-93

一种制备高熵复合材料CrMnFeCoNiOx的新型方法

苑鑫、张富祥

松山湖材料实验室

本文提出了一种高效制备高熵氧化物CrMnFeCoNiOx的创新方法,通过直接氧化多组元合金粉末结合

热压烧结技术实现块体材料的简易合成。该方法以等摩尔比 CrMnFeCoNi 高熵合金粉末为前驱体，在空气环境中进行氧化处理，随后采用热压烧结工艺致密化制备块体材料。结构表征证实所得材料形成面心立方结构的合金与氧化物构成的符合材料，且元素呈原子级均匀分布。性能测试表明，该高熵氧化物表现出显著提升的力学性能，其压缩屈服强度达到 260MPa，较传统制备样品提高约 70%，这归因于热压工艺带来的致密化结构和残余压应力效应。同时，材料饱和磁化强度提升至 4 emu/g，600Oe 的矫顽力，展现出优于常规高熵合金的铁磁特性。本工艺摒弃了传统氧化物合成中复杂的化学合成步骤，实现了"合金氧化-热压成型"的短流程制备，具有工艺简单、成本低廉、可规模化生产等显著优势，为高性能高熵氧化物材料的开发提供了新的技术路径，在磁性功能器件、高温结构材料等领域展现出广阔应用前景。

FB04-94

超高强度 PAN 基碳纤维的微观结构与力学性能的相关性

贺健

东华大学

碳纤维的结构性能关联关系尚未完全明确，系统研究碳纤维的构效关系对于实现碳纤维的超高性能化具有重要意义。本研究基于 Griffith 断裂理论和 Pearson 乘积-矩相关系数定量研究了拉伸模量相似但具有不同超高拉伸强度的 PAN 基碳纤维的微观结构相关性。结果表明，高拉伸强度碳纤维具有更大的微晶长径比、更低的非晶碳含量和更小的孔径，且类石墨条带、微晶及孔隙沿纤维轴的取向程度更高。这些结构变化将导致碳纤维在受载断裂时，沿着纤维轴向延伸的裂纹比例增加，裂纹在径向和轴向的裂纹扩展路径延长，从而对碳纤维拉伸强度的提高产生积极影响。

FB04-95

原位复合肝素-蛋白微球的细菌纤维素纳米纤维小口径人工血管

李格丽^{1,2,3}、陈琳³、洪枫^{1,2,3}

1. 东华大学 先进纤维材料改性国家重点实验室，上海，201620

2. 东华大学 生物与医学工程学院，微生物工程与医学材料研究组，上海，201620

3. 中国纺织工程学会 细菌纳米纤维制造与复合技术科研基地，上海，201620

现有材料用于小口径 (<6 mm) 人工血管时，易产生血栓、内膜增生、内皮化速度慢、长期通畅率低等问题，因此全球无临床可用的小口径人工血管产品。细菌纤维素也称为细菌纳米纤维素 (Bacterial nano-cellulose, BNC) 具有与细胞外基质相似的三维纳米纤维网络结构、良好的细胞相容性和血液相容性。为提高 BNC 管的抗凝血性，本研究以 BNC 管为结构支撑，采用液体施压注入技术结合冷冻相分离法，引入天然高分子丝素蛋白 (Silk fibroin, SF) 及抗凝药肝素 (Heparin, Hep)，管壁内原位形成了负载肝素的丝素蛋白微球，获得 Hep@SFMPs/BNC 复合管。结果显示，该复合管具有长效缓释肝素的效果 (15 d)，内表面支持人脐静脉内皮细胞的黏附和增殖；与纯 BNC 管相比，复合管的血浆复钙时间延长，全血凝固曲线中 OD 值下降缓慢，吸附的血小板数量减少，所有材料的溶血率均小于 0.3% (远低于国标要求的 5%)，并且炎症反应和钙化程度更低。血管体内移植实验表明，复合管替换大鼠腹主动脉 5 个月后，管腔保持畅通，无血栓形成，内腔原位生成完整内皮层，平滑肌细胞在内皮层和人工血管中间环形生长，胶原蛋白排列有序。该研究为 Hep@SFMPs/BNC 复合管在小口径人工血管领域的应用提供了相关动物实验证据，有作为小口径人工血管的巨大潜力。

FB04-96

基于高性能纤维的表面改性及冲击防护性能研究

马猛

中国工程物理研究院化工材料研究所

摘要：防护材料的研究密切关系到国防装备发展和个体防护安全，是材料科学、力学、医学等多学科领域的研究热点和前沿。高性能纤维，如芳纶纤维，具有高模量、高强度、低密度等特性，克服了传统防护材料笨重体积大的缺点，在柔性防护材料领域具有广阔的应用前景。但芳纶纤维内部的分子共轭效应和刚性苯环赋予其较低的活性和光滑的表面，使其性能难以进一步提升。本文利用仿生原理，在纤维表面构建氢键网络，获得了金属-多酚网络涂层工艺对芳纶纤维表面粗糙度的变化规律，实现了纤维表面氢键网络的构筑与调控，建立了氢键网络提升织物力学性能的关系，提高了纤维之间的摩擦力并赋予纤维织物优异的抗穿刺性能。

FB04-97

层间增韧和界面增强复合材料用于原位损伤传感和电磁干扰屏蔽

胡中文、阳劲松、王田天

中南大学交通运输工程学院

实现材料的高强度与多功能性集成已成为复合材料发展不可逆转的趋势，如何巧妙构建兼具功能性与结构优化的复合材料体系已成为亟待克服的重大挑战。本研究通过电泳沉积（EPD）技术，将 MXene 纳米颗粒均匀锚定于碳纤维（CF）表面，成功制备了性能增强型碳纤维增强聚合物（CFRP）复合材料。通过电泳沉积（EPD）技术将 MXene 纳米颗粒均匀锚定在碳纤维（CF）表面，成功制备了一种高性能碳纤维增强聚合物（CFRP）复合材料。该复合材料系统展现出显著提升的力学性能和电导率，并具备原位损伤检测功能。MXene 纳米颗粒通过氢键作用和机械咬合效应牢固地与 CF 表面结合，这有效提升了 CFRP 的剪切强度，支持该材料在复杂应力环境中的应用。此外，该复合材料还展现出优异的电磁干扰（EMI）屏蔽性能，其增强的 EMI 屏蔽性能可归因于 MXene 在 CF 表面引发的非均匀界面极化、偶极极化现象及导电损耗效应，这些因素共同构成了高效的 EMI 屏蔽屏障。本研究为优化 CFRP 复合材料的性能开辟了新路径。

FB04-98

Structural Design and Simulation Study of Carbon Fibre Electronic Enclosures for Vehicles

Shuhui Zhang^{1,2,3}, Qihua Ma^{1,2,3}, Xuehui Gan^{2,3}

1. Shanghai University of Engineering Science

2. Center for Civil Aviation Composites, Donghua University, Shanghai, China

3. Shanghai Collaborative Innovation Center of High Performance Fibers and Composites (Province-Ministry Joint), Donghua University, Shanghai, China

Carbon Fiber Reinforced Polymer (CFRP), as an advanced lightweight structural material, exhibits significant application potential in the protection of electronic devices under extreme vehicle-mounted conditions due to its excellent specific strength and specific stiffness, superior energy absorption capacity, and unique damping and vibration reduction properties. This study closely integrates the characteristics of the complex and variable service environment in vehicles and adheres to the principle of equivalent stiffness matching to conduct innovative design explorations for electronic enclosures made of CFRP. To comprehensively evaluate the dynamic strength performance of CFRP vehicle-mounted enclosures under vibration and impact conditions, in-depth and detailed analyses were conducted using ANSYS software to simulate the power spectral density curves of random vibrations and the loading of post-peak sawtooth waveforms. The research results indicate that the CFRP enclosures not only achieve remarkable weight reduction but also fully meet the requirements of the GJB150A environmental adaptability standard for military electronic devices in terms of their comprehensive mechanical properties. This achievement provides theoretical support and technical guidance for the engineering application of CFRP in the field of vehicle-mounted electronic devices and holds significant engineering application value for promoting the lightweight development of transportation equipment.

FB04-99

展平竹弯曲塑性成型研究-新型竹质弯曲异型材的制备

杨子萱、马欣欣

国际竹藤中心

【研究目的】根据联合国环境规划署发布的数据，1950 年-2017 年，全球累计生产了约 92 亿吨塑料制品，其回收利用率不足 10%，约 70 亿吨成为塑料废弃物。这些塑料废弃物大部分难以降解，对自然环境和人体健康构成了严重威胁。“以竹代塑”作为一种绿色、可持续的发展策略，正逐渐成为解决塑料污染问题的重要途径。2022 年 6 月 24 日，我国发起“以竹代塑”倡议，正式将竹材替代塑料的计划提上日程。自此，竹材不仅仅成为满足人们日常生活需要的重要材料，同时成为了以天然可降解材料替代塑料的新兴原材料，在国民经济建设中处于不可替代的地位。因此，综合来看，展平竹在制备竹衣架这类弯曲成型家居用品方面具备良好的材料性能、易加工成型性以及环保属性等优势。然而目前对于展平竹在长期使用过程中的性能稳定性研究仍相对不足，要实现其在日用品及家居用品领域的大规模应用和高质量发展，还需在工艺优化、性能提升以及长期稳定性研究等方面持续发力。本文将通过弯曲设备将展平竹条进行弯曲，制备得到弯曲件，探究不同的梯度结构及不同部位的展平竹材弯曲特性和弯曲应力松弛特性，揭示不同位置竹材的弯曲规律，并观察弯曲过程中的应变分布、弯曲胶合成型试件的微观结构以及弯曲胶合成型试件的瞬时回弹率和滞后回弹率，探索弯曲角处双向拉伸微观机制。丰富竹材力学理论，为竹制品生产加工服务，为展平竹弯曲胶合成型提供优化参数及理论支撑。

【材料方法】本研究使用的毛竹 (*Phyllostachys pubesens*)，风干几个月后沿长度方向将竹筒截断，然后将竹筒沿纵向切成三个弧形竹片。通过等厚精细刨光竹壁两侧，随后通过 180℃ 饱和蒸汽的加热方式实现展平竹软化，经饱和蒸汽软化后，立即将竹片放入压机中。再将其通过一系列椭圆形平滑滚筒均匀压力逐级连续(刨削)展平，制得无刻痕竹展平板。椭圆滚筒的曲率适应弧形竹片的形状，因此，弧形竹片在经过平滑压力滚筒的逐步压平后，被加工成没有刻痕的展平竹板材。将展平竹板材剖分为竹青板和竹黄板。再将单片材分为“节间材 - 竹青侧 (I-O)”“节间材 - 竹黄侧 (I-I)”“竹节材 - 竹青侧 (N-O)”“竹节材 - 竹黄侧 (N-I)”4 组，通过弯曲设备进行弯曲胶合一体成型，制备胶合材。采用原位双向拉伸技术与 X 射线衍射结合、应力松弛测试、数字图像相关 (DIC) 技术及微观形貌观察等方法，研究弯曲角附近双向拉伸性能、成型定型过程中应力应变变化等。

【试验结果与主要结论】确定热压弯曲成型最优工艺参数为热压温度 120℃、保压时间 20min，此条件下节间材与竹节材未受损试样占比均超 80%。竹青层因高纤维密度和取向性，应力松弛率较竹黄层低 32.6%，回弹率降低 41.2%；竹节材因三维维管束网络等结构，抗回弹性能和形状稳定性优异，“NI”组回弹率最低(瞬时 11.02%，滞后 16.29%)。DIC 应变分析显示竹黄侧压缩应变 (-0.046) 与竹青侧拉伸应变 (0.014) 分布均匀。弯曲过程中，压缩侧薄壁细胞折叠屈曲，拉伸侧细胞沿纤维轴向伸长，竹节处纤维分布不均、薄壁细胞密度高，弯曲前后变化不明显。本研究通过蒸汽软化展平与渐进弯曲成型工艺，成功制备出高尺寸稳定性的展平竹弯曲构件，优化了工艺参数，揭示了不同部位竹材的弯曲规律，为展平竹弯曲胶合成型提供了优化参数及理论支撑。

FB04-100

Janus 结构的温度传感纤维的制备及可穿戴监测应用研究

胡海波、张蓓、许嘉莉、陆莹

武汉纺织大学

针对智能穿戴、健康监测及环境监测等领域对高精度温度传感器的迫切需求，本研究开发了一种具有 Janus 结构的碳纳米管 (CNT) /聚偏氟乙烯 (PVDF) 与氮化硼 (BN) /聚氨酯 (PU) 复合导热温度敏感纤维，用于可穿戴温度监测领域。该 CNT/PVDF//BN/PU 复合纤维，兼具碳纳米管的高导电性和氮化硼的优异导热性。系统研究表明，Janus 结构显著提升了材料的机械强度、热稳定性和温度敏感性(灵敏度区间为 -1.8~ -1.2%/°C)。其中 BN/PU 层形成的半包裹保护结构有效增强了材料抗湿性并提升了界面稳定性。

本研究还设计开发了三种不同织物结构,其热响应性能和循环稳定性均获得显著提升。此外,基于该 Janus 结构纤维阵列开发的自供电智能腕带实现了 $\pm 0.2^{\circ}\text{C}$ 精度的实时体温监测与无线数据传输。本研究为个性化医疗和环境监测领域的多功能纤维传感器提供了一种可规模化制备的创新解决方案,对推动智能穿戴设备的发展具有显著意义。

FB04-101

聚酯/棉混纺织物阻燃改性研究

赵健、贾超

东华大学

聚酯/棉混纺织物因其优良的透气性与舒适性,广泛应用于服装与家居领域。然而,其易燃性及燃烧过程中释放的有毒气体对人体健康与环境安全构成严重威胁。为提升混纺织物的火灾安全性能,本文基于四羟甲基磷酸盐 (THPS)、尿素和磷酸等绿色、无卤的含氮磷化合物,设计合成了一种新型 THPS 基有机磷阻燃剂,并系统研究其在混纺织物上的耐久阻燃整理效果与服用性能。本研究采用溶胶-凝胶法,将 THPS/尿素与氨基硅烷前体协同构建致密的交联型阻燃功能层,使织物的极限氧指数 (LOI) 由 19.3 显著提高至 32.7,垂直燃烧损毁长度降低至 28 mm,阻燃性能得到有效提升。在此基础上,进一步合成了多聚磷酸酯型磷-氮阻燃剂,并采用浸渍法进行织物整理,织物的 LOI 进一步提高至 46.7,峰值热释放速率降至接近零,燃烧后形成中空碳壳结构,显著增强了隔热能力。为进一步提升织物的阻燃耐久性与疏水性能,本研究引入碱液预处理、等离子体活化及聚多巴胺功能化方法,并在织物表面构建聚丙烯酸酯疏水层,使接触角达到 152° ,在显著增强织物疏水性的同时,仍保持良好的透气性与力学性能。本文提出的基于 THPS 的绿色阻燃体系在提升聚酯/棉混纺织物的阻燃性、耐洗性与服用性能方面表现出显著优势,为高性能、绿色环保阻燃织物的开发提供了可行路径与理论支持。

FB04-102

碳纳米管/纳米纤维复合隔膜的“一体化”动态转鼓发酵制备以用于监测锂枝晶

高璐、陈琳、洪枫

上海市松江区广富林路 2399 号东华大学

锂电池已成为新能源车领域最重要的能量储存设备[1-2],其安全性始终是人们关注的焦点[3-4]。为了实现新一代高能锂金属电池的商用,开发具有锂枝晶监测功能的隔膜具有重大意义[5-6]。然而,石油基商业隔膜难以实现该功能的最优配置。细菌纳米纤维素 (BNC) 作为环保型隔膜的候选者,深受高性能电池隔膜研究者的青睐[7-8]。在此,我们设计了一种三明治结构“一体化”的新型安全 BNC 智能隔膜,并运用独特的水平转鼓反应器和连续动态发酵技术制备获得该隔膜。简而言之,在转鼓反应器中:首先发酵首层 BNC 纯膜;随后在培养基中添加碳纳米管 (CNT),原位发酵获得中间层 BNC/CNT 复合膜;最后添加新鲜培养基培养获得 BNC 末层,即得到“一体化”三明治结构的 BCB (BNC-BNC/CNT-BNC) 复合凝胶膜。再经纯化、热压烘干得到 BCB 复合隔膜,实现了结构规整复合膜的“一浴法”连续制备。结果表明,该隔膜不仅具有优异的热稳定性 (200°C 零收缩)、电解液吸收 (556.99%) 和拉伸性能 (168.88 MPa),以及高锂离子迁移 ($t_{\text{Li}^{+}}: 0.71$) 和快的传输速率 ($\text{DLi}^{+}: 2.99 \times 10^{-8} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$),且实现了 BNC 基隔膜 500 次全电池的稳定循环。更重要的是,它能预警锂枝晶是否刺穿隔膜,保障电池安全。该“一体化”隔膜的设计思路为开发高性能、超安全且可持续的各类电池隔膜提供了新视角。该水平动态转鼓制备技术为今后的自动化规模生产奠定基础。

参考文献

- [1] G. Harper, R. Sommerville, E. Kendrick, et al. Nat, 2019, 575: 75-86.
- [2] J. M. Turner. Sci, 2022, 376: 1361.
- [3] C. Liao, X. W. Mu, L. F. Han, et al. Energy Storage Mater, 2022, 48: 123-132.
- [4] Y. Xiao, A. Fu, Y. Zou, et al. Chem. Eng. J., 2022, 438: 135550.

- [5] H. Wu, D. Zhuo, D. Kong, et al. *Nat Commun*, 2014, 5: 5193.
- [6] M. S. Gonzalez, Q. Yan, J. Holoubek, et al. *Adv. Funct. Mater.*, 2021, 31: 2102198.
- [7] C. H. Jo, N. Voronina, Y. K. Sun, et al. *Adv. Mater.*, 2021, 33(37): 2006019.
- [8] W. Lei, D. Jin, H. Liu, et al. *ChemSusChem*, 2020, 13: 3731-3753.

FB04-103

高选择性的植入式纤维传感器用于监测血液高香草酸

邹旷怡¹、栗乾明¹、李丹²、焦一丁¹、王列¹、李录河¹、王嘉诚¹、李亦冉¹、高睿¹、李方琰¹、何儿¹、叶婷婷¹、唐文涛²、宋杰¹、卢江¹、李旭嵩¹、张韩婷¹、曹馨尹¹、张晔¹

1. 南京大学

2. 南京中医药大学

高香草酸 (HVA) 是中枢神经递质多巴胺的一种主要代谢产物, 血液 HVA 的波动与中枢多巴胺活性密切相关。在临床上, 中枢多巴胺的检测需要复杂的脑脊液分析或神经外科手术来植入装置, 容易造成感染和永久性中枢神经系统功能损伤。相比之下, 血液样本易于采集, 植入带来的侵入性较小, 血液 HVA 的动态监测将是对现有多巴胺活性研究的有力补充。此外, 血液 HVA 被用作评估精神分裂症进展和相关治疗药物有效性的指标, 并且与神经退行性疾病的发病机制有关。因此, 实时监测血液 HVA 对研究中枢多巴胺活性、疾病发病机制和药物疗效评估具有重要意义。然而, 血液中存在大量活性物质, 特别是同类的儿茶酚胺及其代谢物, 其分子结构与 HVA 非常相似, 甚至只有一个官能团的差别, 很难将它们与 HVA 区分开来, 进而实现对血液 HVA 的准确监测。针对上述问题, 我们开发了一种高选择性的植入式纤维传感器, 首次实现在体监测血液高香草酸。通过设计分子印迹聚合物, 传感器仅允许与识别位点精确匹配的分子通过, 进而实现了对 HVA 高选择性响应。该传感器对 HVA 的响应是对儿茶酚胺及其代谢物响应的 12.6 倍, 在体监测准确度达到 97.8%。传感器微创注射到大鼠尾静脉后, 没有观察到明显的血栓、生物粘附或炎症, 表现出优异的生物相容性; 此外, 传感器也成功监测到了中枢多巴胺波动引起的血液 HVA 浓度的平行变化, 并同时指示了大鼠的兴奋行为。本研究为提高植入式电化学传感器的选择性提供了一种通用的设计策略。

FB04-104

Plant Cell Wall Inspired Interfacial Bridging in Ultrastrong and Tough Carbon Nanotube Fibers

Xiangyang Li^{1,2}, Muqiang Jian², Jin Zhang¹

1. Peking University

2. Beijing Graphene Institute

The development of carbon nanotube fibers (CNTFs) offers a solution for achieving superior mechanical properties, making them a hot topic in the research of fibers. The assembly of carbon nanotubes (CNTs) into macroscopic fibers is constrained by weak intertube van der Waals interactions, causing interfacial slippage and structural failure. These defects reduce fiber strength by 1–2 orders of magnitude relative to individual CNTs, critically hindering their utilization in aerospace applications.

Herein, we developed a plant cell wall-inspired interfacial bridging strategy to synergistically optimize the hierarchical structures and intertube interactions of CNTFs. The engineered CNTFs manifest exceptional tensile strength (8.5 ± 0.2 GPa) coupled with remarkable toughness (239.1 ± 16.3 MJ·m⁻³), surpassing the performance of conventional fibers. The fibers simultaneously exhibit outstanding impact resistance properties. This study presents a strategy to enhance CNTF performance, advancing their potential for engineering applications.

FB04-105

化学接枝与物理包覆改性 CNTs 对 CF/BMI 复合材料层压板断裂韧性的对比研究

付安然^{1,2}、欧云福¹、李娟³、张耘箫^{1,2}、申栋梁¹、王震¹、茅东升¹

1. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所

2. 中国科学院大学化学科学学院

3. 浙大宁波理工学院材料科学与工程学院

碳纳米管 (CNT)，因其具有长径比大、比表面积高、优良的力学性能等特点被广泛用作增韧材料。此外，通过诱导裂纹偏转和钉扎，其有望在实现层间断裂韧性的提升，同时保持复合材料的刚度不变。但是 CNT 由于其自身结构导致的不溶性以及易于团聚等问题，非常不利于层间断裂韧性的提升。为了克服这些问题，许多研究学者提出对 CNT 进行改性，不仅能够提高其分散性，还能有效加强与聚合物基体之间的界面强度，这或许将成为提升其性能和应用潜力的重要手段。

本研究采用高压喷涂技术在 CF/BMI 预浸料表面沉积改性后的 CNT，探究其对复合材料层间增韧的影响。分别从化学接枝（接枝 5-氨基间苯二甲酸小分子得到 CNT-COOH）和物理包覆（多巴胺 DA 在 CNT 表面自聚合得到 CNT@PDA）两个方面对原始 CNT 进行功能化处理以提升其在基体中的分散性，同时期望利用引入的官能团进行化学键合。

研究表明，虽然改性后 CNT 的分散性得到了有效改善，但其在复合材料成型过程中的热稳定性差异导致了截然不同的增韧效果：化学接枝的 CNT-COOH 表现出色（较于标样和原始 CNT 试样，I 型和 II 型断裂韧性均有明显提升），而物理包覆的 CNT@PDA 的 I 型和 II 型断裂韧性甚至低于标样。这种差异可归因于 CNT@PDA 具有更差的热稳定性：一方面包覆层 PDA 自身热稳定性较差，在高温成型过程中极易分解；另一方面则受 CNT 改性方式影响，化学接枝（共价键结合）与物理包覆（范德华力等物理作用）的键合机制不同，导致其在高温下的稳定性存在显著差异。包覆层的分解及范德华力高温失效使得 CNT 表面官能团减少并引入缺陷，严重损害了层间断裂韧性。该发现揭示了热稳定性在先进复合材料纳米改性策略中的关键作用。

FB04-106

基于单向连续碳纳米管纤维膜的电加热碳纤维增强复合材料的设计与性能优化

张耘箫^{1,2}、欧云福¹、姬鹏哲¹、茅东升¹

1. 中国科学院宁波材料工程与技术研究所

2. 中国科学院大学化学科学学院

开发适用于碳纤维增强复合材料 (CFRP) 的电加热防除冰技术对于解决关键基础设施的表面结冰问题意义重大。其中，向 CFRP 层间引入内嵌式碳纳米管 (CNT) 插层，有潜力同步发挥高效电加热功能与层间增韧效能，达成面向防/除冰需求的结构/功能一体化 CFRP 复合材料设计。然而，基于嵌入式 CNT 插层设计高效电加热 CFRP 面临两大关键的“性能衰减问题”：CNT 的卓越本征性能在宏观组装体中的跨尺度传递失效现象，以及 CNT 纤维纱的优异电热性能在 CFRP 层间复合过程中的传递失效现象。为此，本研究提出，利用 CNT 的结构依赖性，对电加热层进行跨尺度功能化调制。针对问题 1，本研究选用高度规整的单向连续碳纳米管纤维膜 (CNTF) 作为电加热层，通过预浸料热压工艺一体复合至 CFRP 层间，以保证导电网络的连续和稳定性。进一步，探究输入电压、CNTF 取向和厚度与 CNTF/CFRP 电加热性能间的动态关联。针对问题 2，本研究选用非连续短 CNT，采用溶剂辅助预浸工艺，对 CNTF 隙间树脂进行针对性导电改性。并设置梯度浓度实验，确定最优的 CNT 掺杂浓度。最终实验结果如下：仅 8V 电压下，制备的 CNTF/CFRP 即表现为快速有效和均匀的加热，表面平衡温度高达 150℃。其温度分布呈现显著的各向异性特点，与电流方向一致的 CNTF 取向，具有最突出的电热转换能力。CNTF 厚度与其电加热效果呈正相关关系，更厚的 CNTF，对应稍高的 CFRP 表面平衡温度。经微米尺度 CNT 预浸掺杂改性，电加热 CFRP 的稳态温度和升降温速率先增大后降低。保持 8V 电压输入，得益于跨尺度 CNT 电加热层的构建，在最优

的掺杂浓度下 (1.0 %), CFRP 表面平衡温度提升约 120 %, 快速升温阶段 (300s 内) 平均升温速率提升 55.2 %, CNTF/CFRP 的电加热效果得到显著改善。

FB04-107

烯碳纤维复合材料动态冲击力学行为及应用研究

吕争强^{1,2}、胡东梅^{1,2}、李清文^{1,2}

1. 中国科学院苏州纳米所

2. 中国科学技术大学

高动态强度纤维材料因其优越的机械性能在航空航天、交通运输、个体防护装备等抗冲击领域具有重要作用。但现有纤维材料的实际强度与理论强度相差较远, 纤维材料与树脂的界面强度弱, 限制了动态载荷在纤维增强复合材料中的有效传递。纳米碳材料是一种极为有效的聚合物增强材料, 能够显著增强纤维材料的强度, 提高载荷传递效率。本工作报道了在芳纶纤维合成过程中引入氧化石墨烯, 杂环芳纶纤维的动态机械强度显著提高, 达到了 10.6GPa 的超高动态强度, 纤维的动态性能归因于聚合物链排列和界面相互作用的改善。此外, 本工作制备了大面积连续、柔性的烯碳纤维织物, 与芳纶织物相比, 在落锤冲击试验中, 该织物的最大载荷提高了 40.46%。进一步, 借鉴穿山甲的微观多层级结构, 本工作提出梯度密度混杂结构设计, 并对不同结构进行弹道冲击实验, 结果发现当烯碳芳纶纤维作为迎弹面, PBO 纤维作为背弹面时, 防 1.1g 破片 V50 值、SEA 值最高, 防 7.62mm 手枪弹凹陷值最低, 两种纤维相互协同作用, 解决了防护材料中单一纤维难以满足多重防护需求的问题。

FB04-108

聚酰亚胺气凝胶纤维的结构设计及其力-热性能研究

薛甜甜、樊玮、刘天西

江南大学

气凝胶纤维作为一类新型先进纤维材料, 凭借其极低密度、高孔隙率及优异隔热性能, 在个人热管理领域展现出广阔应用前景。然而, 当前气凝胶纤维普遍面临成型性欠佳、力学性能与隔热性能难以平衡的关键瓶颈, 严重制约了该材料的实际应用与产业化发展。针对上述挑战, 本研究通过分子结构设计与微观孔结构调控的多尺度协同优化策略, 开发了紫外增强动态凝胶的气凝胶纤维成型新方法, 系统揭示了气凝胶纤维成型动力学机制, 成功实现了聚酰亚胺气凝胶纤维的连续化常压成型工艺突破。研究进一步构筑了具有 "致密皮层 - 多孔芯层" 同质结构的聚酰亚胺气凝胶纤维, 其中高度取向的致密皮层赋予材料负载应力承受能力, 而多孔芯层通过有效阻碍热传递路径实现隔热性能优化, 最终达成高强度与低导热性的协同提升。基于该纤维织制的气凝胶织物在长期热冲击测试中表现出优异的隔热稳定性, 导热系数低至 $30.4 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。本研究为高强度气凝胶纤维的制备提供了普适性连续化生产方法, 对推动纤维工业向高性能化、功能化方向发展具有重要科学意义与工程应用价值。

FB04-109

原位湿法纺丝同步碘掺杂制备高导电性单壁碳纳米管纤维

张有权、焦新宇、石超、侯鹏翔、刘畅

中国科学院金属研究所

单壁碳纳米管纤维具有质轻、韧性好、导电性和力学性能优异等特点, 是理想的轻质高性能导线, 有望应用于柔性传感、电磁屏蔽、可穿戴器件等领域。然而, 目前碳纳米管纤维的电导率仍需进一步提升, 以推动其实际应用进程。对碳纳米管纤维进行掺杂已被证明是一种提升电导率的有效手段, 碘被认为是最有效的 P 型掺杂剂之一。然而传统的后处理掺杂操作过程繁琐、均匀性和稳定性较差, 不利于连续

化生产。本工作中，我们建立了原位碘掺杂方法，即将碘与丙酮混合，在湿法纺丝过程中实现单壁碳纳米管纤维的原位、均匀掺杂，同步提升纤维的电导率和稳定性。

实验结果表明，通过调节凝固浴中碘质量浓度，可以调控碳纳米管纤维中碘的掺杂量。扫描电镜下的能量色散谱中，碘的信号与纤维的分布形成很好的形貌一致性，表明碘在纤维中的均匀、有效掺杂。X-射线光电子能谱中 C1s 谱主要由 C-C 键、C-I 键和 C-O 键的信号峰叠加而成，说明碘可以与单壁碳纳米管纤维的 C 形成化学键键合。当碘的掺杂量提升至 0.87 at% 时，所制备单壁碳纳米管纤维电导率可提升 38.3%，达到 $9.2 \times 10^6 \text{ S/m}$ ；且其具有更低的温度电阻系数 ($1.67 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$)，相比真空后处理掺杂稳定性更好。这主要归因于碘的 P 型掺杂，碳管中的电子向碘转移，导致碳管内部留下空穴载流子，起到承载电荷的作用。另外，纤维的高密实度抑制了纤维内掺杂碘的逃逸，大幅提高了纤维的稳定性。

FB04-110

兼具优异电学与力学性能的金属凝胶纤维

王远贞¹、焦一丁¹、王嘉诚¹、张韩婷¹、叶婷婷¹、卢江¹、何儿¹、李录河¹、宋杰¹、白辰昱¹、李旭嵩¹、李亦冉¹、李方琰¹、李凤麒¹、菅静睿¹、杨朔¹、侯欣欣²、栗乾明¹、赵舒鹏²、谭睿阳³、张晔¹

1. 南京大学现代工程与应用科学学院
2. 南京大学化学化工学院
3. 南京大学电子科学与工程学院

纤维材料在工业和日常生活中扮演着至关重要的角色，其应用领域极为广泛。随着柔性电子技术的迅猛发展，特别是纤维电子器件和智能纺织品领域的兴起，迫切需要开发一种兼具金属级别的电导率，皮肤般的柔软度，并且在反复变形的情况下仍能维持稳定的机电耦合性能的纤维材料。然而，传统的纤维材料（例如金属纤维、碳纤维、本征导电高分子纤维以及复合纤维）受限于材料本征特性，很难同时满足上述需求。为解决这一问题，我们开发了一种具有独特结构的新型纤维材料，金属凝胶纤维。受水凝胶结构的启发，我们巧妙地将水凝胶中的水流体置换为液态金属流体，实现了液态金属在三维纳米结构的岩藻多糖高分子网络的稳定固定。岩藻多糖所富含的磺酸基团与液态金属表面氧化层通过静电相互作用展现出优异的兼容性，使得液态金属能够均匀渗透至整个高分子网络中，形成占比高达 98.3 wt% 的连续导电相。该独特的结构赋予纤维接近金属级别的电导率 ($2.8 \times 10^6 \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$) 和极低的杨氏模量 (1.8 MPa)，展示出类似皮肤的柔软度。更为重要的是，该纤维在经历 20,000 次按压、拉伸、弯曲和扭转等复杂变形循环后，仍能保持稳定的机电耦合性能（电阻变化小于 5%）。目前，金属凝胶纤维已被编织成多功能智能纺织品，充分展现了其在实际应用中的巨大潜力。

FB04-111

新型凝固浴控制制备碳纳米管纤维

柳钰可^{1,2}、侯鹏翔^{1,2}、刘畅^{1,2}

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学

轻质、高强、高模量的碳质纤维材料在航空航天、电力运输、汽车、建筑与基建等领域有着广阔的应用前景。碳纳米管具有极高的理论电导率、载流容量、拉伸强度和模量，是构建轻质、高强、高模量、高导电纤维的理想材料。液晶湿法纺丝制备的纤维具有高顺排、高致密的优点，其制备的纤维的电学、力学的综合性能与干法纺丝相比有一定优势。然而，目前的主流环境不友好的丙酮凝固浴因与氯磺酸发生较快双扩散，使纤维因径向硬度差较大而易产生皮芯、褶皱结构，限制了其实际性能与应用范围。

本工作基于丙酮凝固浴中纤维产生不规则、多褶皱截面的机理，探索了纤维在与氯磺酸双扩散速率较慢的新型 NMP 凝固浴中的成型与收缩过程。实验结果发现 NMP 可以显著减缓纤维的凝固速率、优化纤维的截面结构、制备圆形度较高的纤维。在此基础上引入了可以与氯磺酸发生快速反应的乙醇，适当调节双

扩散速率、提升纤维的拉伸比，从而在保留纤维圆形截面的同时提高了纤维的顺排度、致密度。所制备碳纳米管纤维的圆形度达到 0.87、拉伸强度为 1047 ± 44 MPa、模量为 24.0 ± 3.26 GPa、电导率为 $5.74 \pm 0.28 \times 10^6$ S/m、载流强度为 $3.99 \pm 0.07 \times 10^8$ A/m²。

FB04-112

纤维膜的表面亲疏水改性和应用

毛晓卉、刘青青、朱丽萍

东华大学

具有多级结构、优异力学性能和易功能化的纤维膜材料在多个应用领域备受关注。通过界面工程调控表面润湿性对提升服装、分离等领域的应用性能至关重要。发展刺激响应性结构可赋予材料动态环境下的自适应性能，满足工业界对多场景应用的需求。本研究通过聚多巴胺（PDA）与功能聚合物协同修饰纤维膜，构建了润湿性可调的表面体系。在疏水性 HDPE 纤维膜单侧依次沉积 PDA 和超亲水聚电解质，成功制备出具有显著疏水/亲水异质结构的 Janus HDPE 纤维膜。该膜展现出优异的水传递速率 (577.61 ± 72.66 g m⁻² h⁻¹)、水蒸气透过率 (131.62 ± 24.34 g m⁻² h⁻¹) 和气体渗透率 ($17,496 \pm 235$ m³ m⁻² h⁻¹ bar⁻¹)，性能显著优于商用 Tyvek 膜 (水传递速率 518.93 g m⁻² h⁻¹，水蒸气透过率 53.09 g m⁻² h⁻¹，气体渗透率 2,871 m³ m⁻² h⁻¹ bar⁻¹)。同时该膜保持卓越力学性能 (拉伸强度 17.00 ± 4.26 MPa，断裂伸长率 $45.49 \pm 8.75\%$)，并通过多种油水混合物的分离实验验证了其双侧不对称润湿特性。进一步地，通过在 PDA 修饰滤纸 (FP) 表面锚定嵌段聚合物，成功构建了具有液下双疏特性和 pH 响应性的功能表面。改性后表面在空气中水接触角达 115.5°，油中水接触角和水下油接触角分别达到 157.5°和 151.2°。随着 pH 值升高，体系 zeta 电位、空气中水接触角及油中水接触角降低，而水下油接触角增大。本研究不仅为纤维膜在油水分离和服装领域的多功能应用提供了新思路，更为开发可规模化、环境友好的液-液分离系统解决方案提供了重要参考。

FB04-113

绿色水凝固浴制备超细碳纳米管纤维

孙春阳、王昊梓轲、侯鹏翔、刘畅、成会明

中国科学院金属研究所

随着飞行器、电子信息设备等的多功能化与高度集成化，导线在其中的用量显著提高。铜是应用最广泛的导线材料，但密度高，导致飞行器的有效载荷低、能耗增大、装备机动性下降，无法满足快速发展的军工国防、航空航天等领域的应用需求。碳纳米管纤维由于其轻质、高强、高导电等特性是一种理想的轻质导线材料^[1]。湿法纺丝制备的碳纳米管纤维因具备更高的密实度和顺排度而具有更优异的电学性能。然而，目前的湿法纺丝普遍采用丙酮作为凝固浴，不仅对人体和环境产生严重的伤害，而且也限制了其产业化进程。

我们采用绿色无毒的水取代传统的丙酮作为凝固浴制备碳纳米管纤维。实验结果表明，水与碳纳米管液晶溶液的氯磺酸发生剧烈反应、产生大量的气泡。该气泡增加了碳管之间的距离（与丙酮凝固浴相比，管间距增加了 8 pm），降低了范德华力，有利于碳管取向排列。而且，气泡产生了丰富、可承载牵伸力的界面，使得牵伸比达到了 5460%，较丙酮提升了 35 倍。这种高牵伸比实现了对纤维的有效拉伸，在提升纤维内部碳纳米管取向的同时细化了纤维直径；制备了等效直径为 2.7 μm 超细的碳纳米管纤维。其赫尔曼因子达到 0.99。该纤维的电导率达 5.5 MS/m、极限载流量高达 1.9×10^9 A/m²、力学强度达 1.09 GPa，弹性模量高达 153.71 GPa。

[1]BEHABTU N, YOUNG C C, TSENTALOVICH D E, et al. Strong, Light, Multifunctional Fibers of Carbon Nanotubes with Ultrahigh Conductivity. Science, 2013, 339(6116): 182-6.

FB04-114

功能性 Janus 膜的构建及其在油水分离方面的应用

朱维、朱文浩、邢亚杰、李永强

浙江理工大学

含油废水对环境和人类健康造成严重威胁，其处理是世界范围内的一个难题紧迫感。近年来，Janus 膜由于其薄性，在油/水分离方面具有优异的选择性不同的润湿性层在相对的两侧。然而，双面不对称多层材料的制备与简单的合成和优异的稳定性被证明是具有挑战性的。Janus 膜具有独特的不对称润湿性，在各种应用中具有很大的前景。然而，开发具有可调厚度的 Janus 膜以满足特定的功能要求仍然是一个挑战巨大的挑战。本文制备了一种具有不对称润湿性的 Janus 膜 (FSBS-O-AM) 结构由两层疏水和亲水性膜通过薄膜层压策略为基础的商用橡胶 (苯乙烯-丁二烯-苯乙烯共聚物, SBS)。由于 SBS 的热塑性特性, Janus 膜的厚度可以通过不同的温度来调节。值得注意的是, 水分管理元素测试 (MMT) 结果表明, 在 90 °C 下, FSBS-O-AM 膜的厚度为 290 μm , 膜具备单向传导性能。机理研究表明, 过厚的薄膜 (332 μm , 80 °C) 导致“双向不通”。而过薄的薄膜 (235 μm , 在 100 °C) 会导致双向传导, 两者都缺乏良好的输运定向水分输送。相比与棉花相比, Janus 膜在油水分离中也表现出优异的性能, 包括油水混合物和乳剂。重要的是, FSBS-O-AM 膜具有良好的机械稳定性和优异的膜稳定性。本研究开发了一种方便、快速的制备膜的方法优异的性能, 从廉价的原材料, 有助于能源的可持续性。因此, Janus 型 FSBS-O-AM 膜具有广阔的应用前景一种可持续、有效的油水分离膜的应用前景。

FB04-115

“空气段预拉伸”湿法纺丝制备高性能双壁碳纳米管纤维

王昊梓轲^{1,2}、侯鹏翔¹、刘畅¹

1. 中国科学院金属研究所, 沈阳材料科学国家重点实验室, 沈阳, 110016

2. 中国科学技术大学, 材料科学与工程学院, 沈阳, 110016

碳纳米管 CNT 具有优异的电学、力学和热学性能, 是构建轻质高导电、高强纤维的理想材料。然而, 目前 CNT 纤维的宏观体性能仍然低于单根 CNT 理论值的 10%, 这极大地限制了 CNT 纤维的实际应用。其原因在于: 将纳米级 CNT 通过湿法纺丝组装成宏观尺寸的纤维时, 会引入“皮芯结构”及大量的纳米空隙, 降低 CNT 之间的管间接触, 并增大电子在 CNT 之间的接触电阻, 限制了纤维的电学和力学性能。

基于湿法纺丝 CNT 纤维的皮芯结构、取向度和致密度差等问题, 本工作发展了“空气段预拉伸”湿法纺丝制备双壁 CNT (DWCNT) 纤维方法。选用高结晶度、大长径比 DWCNT 为原料, 规避质子化分散带来 CNT 表面官能化导致单根 CNT 电学性能恶化的影响; 再利用重力作用使 DWCNT 纺丝液晶细流均匀取向化、致密化, 缓解纤维进入凝固浴后由于芯部和表层凝固时间差异而产生的皮芯结构; 实现了高致密度、高定向性、无皮芯结构 DWCNT 纤维的连续制备, 其电导率、强度分别达到 $1.1 \times 10^7 \text{ S/m}$ 、1.65 GPa, 其电学性能是目前文献报道纯 CNT 湿法纺丝纤维的最高值。

参考文献: [1] Hao-Zike Wang, et al. Highly Conductive Double-Wall Carbon Nanotube Fibers Produced by Dry-Jet Wet Spinning. *Advanced Functional Materials*, 2024, 34, 2404538.

FB04-116

基于离子-电子耦合效应的高性能木基微纳能源器件研究

曾绪、魏征、张晓升

电子科技大学

物联网和人工智能的飞速发展对微纳能源提出了新的需求, 纳米发电机因其微型化、易集成和可持续性而引起了广泛关注。本研究提出了一种基于离子和电子导电的高性能木基纳米发电机。天然木材具有独特的三维微观结构, 其特征表现为沿其生长方向排列的分层且相互连接的通道。这种高度定向的多孔结构在脱木质素过程中得到了完整的保留, 为制备高性能木基纳米发电机提供了关键的结构基础。本研究选取

巴尔莎木作为基材，采用氯化钙和银纳米线作为填充材料，对脱木质素木材进行改性处理，以提高其导电性能。所制备的导电木材兼具摩擦层与电极的双重功能，成功构建了一种单电极式摩擦纳米发电机，并展现出优异的电学输出性能。研究表明，基于多功能木材的纳米发电机在环保与可持续能源领域具有显著的应用潜力，为未来智慧城市的发展提供了新的思路与技术支撑。

FB04-117

A Low-Cost Thermogravimetric Approach for Semi-Quantitative Control of Magnetic Phases: Case Study on ϵ -Fe₂O₃ in Fe-Si-O Xerogels

Yifan Wang¹, Evgeny Gorbachev¹, Liudmila Alyabyeva²

1. Shenzhen MSU-BIT University

2. Laboratory of Terahertz Spectroscopy, Center for Photonics and 2D Materials, Moscow Institute of Physics and Technology, Moscow, Russia.

In the field of materials production, optimizing preparation conditions to achieve materials with superior performance and higher yields has long been a goal for scientists. Magnetic materials, with their unique properties, find widespread applications in modern society, such as in data storage, communications, healthcare, and spintronics. However, conventional sample detection methods face limitations, including long processing times, high costs, sample damage, and limited sensitivity. Therefore, developing accessible alternatives for real-time monitoring is crucial for advancing materials research from both fundamental and industrial perspectives.

In this study, we developed a strategy for semi-quantitative phase analysis using a thermogravimetric analyzer equipped with a permanent magnet, focusing on Fe₂O₃ polymorphs (α -, γ -, ϵ -) embedded in a silica matrix. The initial samples were Fe-Si-O xerogels containing 10, 20, 30, 40, and 50 wt% Fe₂O₃. Thermogravimetric cycling under a gradient magnetic field was performed across multiple temperature ranges (900–1100°C), with systematic variations in the final cycle temperatures (900–1100°C) and isothermal durations (0–20 h). In this methodology, each curve kink is attributed to the critical point of a specific magnetic phase (α -Fe₂O₃: $T_N \approx 950$ K; γ -Fe₂O₃: $T_N \approx 840$ K; ϵ -Fe₂O₃: $T_N \approx 490$ K), with the transition magnitude proportional to the phase concentration. This work successfully established a model, advancing the idea to a quasi in situ approach that enables the acquisition of phase composition information during cyclic heat treatment of the sample through analytical signals.

The results, validated by powder XRD, magnetometry, and particle size measurements, showed excellent consistency. The proposed method is suitable for magnetic systems exhibiting phase transitions and distinct the Neel temperatures among phases. In the case of these samples, XRD demonstrated better sensitivity to weakly ferromagnetic α -Fe₂O₃, while the proposed method exhibited significantly higher sensitivity to ϵ -Fe₂O₃ and γ -Fe₂O₃. ϵ -Fe₂O₃ is a material with low raw costs, high coercivity, and ferromagnetic resonance frequency, yet its metastability poses challenges for industrial applications. The measurements revealed that the content of ϵ -Fe₂O₃ increased with higher annealing temperatures and remained relatively stable during prolonged isothermal annealing at 1100°C. The highest yield of ϵ -Fe₂O₃ (approximately 0.3 g per gram of Fe₂O₃@SiO₂) was observed in xerogels containing 30 and 40 wt% Fe₂O₃.

The research was supported by Russian Science Foundation grant No. 24-79-10053.

FB04-118

利用轨道霍尔效应翻转垂直磁矩以及模拟人工神经元和突触的研究

魏晋武

兰州大学

轨道霍尔效应 (Orbital Hall effect, OHE) 最近引起了人们的广泛关注，因为它有可能在自旋电子学的

实际应用中产生轨道电流, 从而实现磁性随机存储器中磁矩的电学操控和模拟人工神经网络的功能。最近的理论和实验研究表明, 在轻金属中, 即使没有强的自旋轨道耦合效应 (SOC), OHE 也会产生显著的轨道流 (JOH)。由于 OHE 的存在, 纵向电荷流可以产生横向轨道流, 并且当轨道流注入到相邻的铁磁体 (FM) 中时, 它可以通过 SOC 转换为自旋流, 并对 FM 中的磁矩产生力矩效应, 称为轨道力矩 (OT)。目前的研究表明, 在磁性材料中, 镍中轨道流转化为自旋流的效率要高于钴或铁。这促使人们选择镍基铁磁系统来开发和研究新型轨道电子器件。本工作中, 我们围绕具有垂直磁各向异性的 Co/Ni 多层膜和轻金属 Ti 构成的材料体系, 研究了轨道力矩翻转垂直磁矩的效率, 以及模拟人工神经元和突出。

我们利用磁控溅射生长了 Pt/[Co/Ni] $\times$ 3/Ti 样品。为了定量表征 OHE 产生的有效场, 我们进行了反常霍尔效应和二次谐波霍尔电压测量。实验结果表明, 随着 Ti 层厚度的增加, 有效场 ΔH_x 与电流密度的斜率逐渐上升, 由于 Pt 层中的电流密度由于分流效应而降低, 因此 Ti 层产生的轨道力矩将占主导。经过计算, 随着 Ti 层厚度的增加, Ti 层中每单位电流密度产生的有效场也随之上升。具体而言, 对于 25 nm 的 Ti 层厚度, 每单位电流密度产生的有效场约为 560 Oe per 10^7 A/cm 2 , 轨道力矩的效率 ξ_{OT} 约为 0.25。

在面内磁场的辅助下, 轨道力矩可以实现磁化翻转, 翻转比率约为 60%。对于正 (负) 方向上的面内辅助磁场, 翻转极性为逆时针 (顺时针) 的, 临界翻转电流密度约为 1.2×10^7 A/cm 2 。相比之下, 参考样品 Pt/[Co/Ni] $\times$ 3/Pt 中并没有观察到明显的磁化转换, 这与对称 Pt 层结构中的自旋力矩效率非常低有关。除了展示有效的磁化翻转行为外, 翻转回线还表现出一系列多态的反常霍尔磁电阻, 表明轨道力矩实现的磁化翻转具有模拟人工神经元和突触的潜力。通过实验研究, 通过改变写入脉冲电压的大小, 这些回路清楚地展现出多个非易失性横向霍尔电阻, 并且这种多状态响应反映了典型的忆阻行为, 结果曲线类似于众所周知的 sigmoid 函数。实验数据与 sigmoid 函数吻合良好, 表明实验结果有效地模拟了人工神经元的行为。此外, 在基于多态翻转的人工神经网络中, 通过脉冲序列持续控制, 可以模仿突触行为, 包括长期抑制 (LTD) 和长期增强 (LTP) 等行为。本研究一方面提高了对轨道力矩的认识, 另一方面为开发基于 OHE 的新型轨道电子器件提供了研究基础。

FB04-119

二维碲化铬磁性材料的腐蚀控制合成与磁性研究

夏宝瑞

兰州大学

近年来, 诸如 CrI $_3$ 、Cr $_2$ Ge $_2$ Te $_6$ 具有本征铁磁性的二维材料在实验中被陆续合成与制备, 为自旋电子学的研究带来了新的机遇与挑战。但是它们在空气中的稳定性较差, 难以在实际应用中发挥应有的作用。基于此, 一种较为稳定的非层状结构的碲化铬 (Cr $_x$ Tey) 材料引起了人们的关注, 它们存在着多种物相结构和随着厚度可调控的居里温度 (TC), 有望为二维磁性材料的应用研究提供新的样本。本实验利用化学气相沉积我们制备了 CrTex 纳米片样品, 通过调节实验参数观测了其在生长过程中的沉积-腐蚀分解-再沉积的现象及其特征的分形形貌, 并在 100 K 下观察到了材料中的条纹畴结构。磁性表征结果显示, 制备所得样品中在低温时存在着铁磁与反铁磁共存的特征, 多相磁结构的耦合-解耦过程造成了条纹畴的出现。此外, 通过高能离子辐照实验对沉积的纳米片样品进行了金属元素的掺杂, 成功地使纳米片表现出了更高居里温度的铁磁相。

FB04-120

通过 Al $_4$ SiC $_4$ 辅助低温瞬态液相烧结制备轻质超硬 B $_4$ C/SiC 陶瓷复合材料

张妍彬、侯甲一、魏剑、李雪婷、姚毅

西安建筑科技大学

在提升碳化硼 (B $_4$ C) 陶瓷烧结性能与断裂韧性的同时, 保持其优异的硬度与低密度, 对于其在先进防护陶瓷及高端工程应用中的推广具有决定性意义。本研究提出以 Al $_4$ SiC $_4$ 为辅助剂的瞬态液相烧结策略, 通过原位反应构建轻质超硬 B $_4$ C/SiC 陶瓷复合材料。在 1700 $^{\circ}$ C 与 1850 $^{\circ}$ C 的烧结条件下, 复合陶

瓷分别展现出 33.7 GPa 与 37.9 GPa 的维氏硬度, 理论密度为 2.52 g/cm³ 与 2.55 g/cm³, 相对密度高达 98.13% 与 99.99%, 断裂韧性达到 3.03 MPa·m^{1/2} 与 3.36 MPa·m^{1/2}, 兼具致密性与力学性能的优异提升。Al₄ SiC₄ 的引入有效降低了致密化过程的激活能, 通过促进瞬态液相的形成显著加速了烧结动力学过程, 并显著优化了材料的微观结构。此外, Al₄ SiC₄ 在高温下可原位生成片状 SiC 相, 未引入有害副产物, 在保证复合陶瓷轻质特性的同时, 显著增强了其在极端服役条件下的结构稳定性与抗热性能。片状 SiC 作为裂纹偏转和分叉的重要调控因素, 在细化晶粒、延长裂纹传播路径方面发挥了关键作用, 实现了材料韧性与硬度的协同提升。本研究构建的低温高效烧结体系及其微结构设计策略, 为高性能 B₄ C 基复合陶瓷材料在弹道防护等领域的工程化应用提供了新路径, 展现出广阔的应用前景与工程价值。

FB04-121

AgCu 钎料钎焊加速管中 Al₂ O₃ /Ti 界面组织演化及其机理研究

欧开宇^{1,2}、王纪超²、宋云涛³、孟献才²、梁立振²

1. 安徽理工大学

2. 合肥综合性国家科学中心能源研究院 (安徽省能源实验室)

3. 中国科学院合肥物质研究院, 等离子体物理研究所

硼中子俘获治疗 (BNCT) 因其突出的临床效果, 已成为当前最具应用前景的中子俘获治疗手段之一。加速管是 BNCT 加速器的核心部件, 主要由氧化铝 (Al₂ O₃) 陶瓷与钛 (Ti) 构成。由于二者在材料性能与尺寸上的差异, 热膨胀系数不匹配常导致连接部位失效, 因此开发可靠的 Al₂ O₃ /Ti 连接技术对于提升 BNCT 装置的稳定性具有重要意义。

本研究采用 Ag-28Cu 共晶钎料, 开展了 Al₂ O₃ 陶瓷与纯 Ti 之间的真空钎焊连接研究。系统考察了钎焊温度与保温时间对接头界面显微组织及力学性能的影响。结果表明, Ti 基体中溶出的 Ti 元素与 Al₂ O₃ 陶瓷反应, 在界面形成了稳定的 Ti₃ Cu₃ O 反应层。在 860 °C 保温 10 分钟条件下, 界面形成典型多层结构: Al₂ O₃ /Ti₃ Cu₃ O/Ag(s,s)/Cu(s,s)/TiCu₄ /Ti₃ Cu₄ /TiCu/Ti₂ Cu/α-βTi/Ti。随温度升高, Ti₃ Cu₃ O 反应层逐渐增厚并趋于稳定, Ti-Cu 金属间化合物减少并向 Ti 侧迁移; 保温时间延长促进了 TiCu 层的生长。该条件下接头的最大拉伸强度达 85 MPa。裂纹通常在 Ti₃ Cu₃ O 层中萌生, 并向陶瓷基体扩展, 显示出界面相控制对接头可靠性的关键作用。

FB04-122

基于微流控技术的三维 DNA 晶体精准组装研究

陈旭根^{1,2,3}、刘佳^{1,2}、胡欢欢^{1,2}、周峰^{1,2}、张建涛^{1,2}

1. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所

2. 慈溪生物医学工程研究所

3. 中国科学院大学

在生物分子工程领域, DNA 纳米技术的快速发展为精准调控分子自组装过程提供了革命性工具, 同时也为新型生物材料构建提出了更高要求。虽然 DNA 分子凭借其独特的程序化组装特性, 在三维纳米结构构筑方面展现出显著优势, 但传统悬滴/坐滴法在宏观尺度三维 DNA 晶体生长控制方面始终存在显著局限性——难以实现晶体数量和尺寸均一性的精准调控。本研究创新性地提出基于微流控技术双乳液滴结晶控制策略: 利用微流控技术制备的水/油/水 (W/O/W) 双乳液微滴作为纳升级微反应器, 构建了严格受控的限域结晶环境。实验表明, 通过精确调控外部渗透压驱动内核液滴体积动态变化, 可精确控制封装 DNA 溶液的浓度, 最终在单个微反应器内获得单一 DNA 晶体, 其控制成功率达 98.6±0.9%, 并且晶体的尺寸在 19.3 ± 0.9 μm ~ 56.8 ± 2.6 μm 范围内高度可调。值得强调的是, 该方法展现出优异的普适性特征, 成功拓展至其他 3 种典型 DNA 晶体构型的受控生长, 为纳米材料精准制造和功能型生物材料开发开创了全新的技术路径。

FB04-123

含镝内嵌金属富勒烯的合成、结构及单分子磁体性质研究

辛金鹏

长江大学

富勒烯是由特定数量碳原子构成的封闭笼状分子，性质稳定，嵌入金属或金属团簇形成内嵌金属富勒烯 (EMFs)。当镝(Dy)、铽(Tb)等磁各向异性较大的镧系金属 (Ln) 嵌入时，EMFs 表现出单分子磁体 (SMM) 特性，具有超高密度信息存储和量子计算的应用前景。单核 SMM 结构简单，只需考虑一个磁性中心的配位环境，因此是研究磁构关系的理想平台，但是普遍存在零场磁化量子隧穿 (QTM) 现象；多核 SMM 通过磁耦合产生额外的翻转能垒，可以有效抑制零场 QTM，但是 4f 电子轨道收缩导致 Ln-Ln 磁耦合通常很弱。报告人通过普鲁士蓝实现含 Dy 单金属氰化物团簇富勒烯的高产率合成，并对其团簇-碳笼相互作用和磁构关系进行了系统研究；通过构建 Dy(II)-Dy(II)共价单键合成闭壳层电子结构的内嵌双金属富勒烯 Dy₂@C₈₂，产生直接的 4f-4f 耦合，有效抑制零场 QTM，大幅提高 SMM 性能；通过大磁各向异性的 Dy³⁺ 替换 Sc³⁺，合成新型内嵌三金属碳化物团簇富勒烯 Dy₃C₂@C₈₀，首次在 Ln 中构建三中心单电子 (3c-1e) 金属-金属键，通过电化学可以实现 Dy-Dy-Dy 金属键强度的调控，特殊的 3c-1e 金属-金属键将会产生独特的磁耦合作用，对于新型 SMM 磁弛豫机制的研究具有重大意义。

FB04-124

基于机器学习设计高性能钛合金

汪鑫、张金钰

西安交通大学 金属材料强度国家重点实验室 西安 710049

随着大数据和人工智能技术的迅速发展，数据驱动的材料研发正成为突破传统“试错—验证”模式的全新范式，被誉为“材料研发的第四范式”。在高性能合金领域，尤其是钛合金等多元复杂体系，传统实验筛选方法面临周期长、成本高的问题，亟需借助机器学习方法进行性能导向的组合筛选与优化设计。为此，本文基于集成学习方法，构建了用于钛合金抗拉强度 (UTS) 预测的机器学习模型。通过提取合金成分的物理冶金特征，结合热处理工艺参数等，建立包含随机森林、梯度提升树、极端随机树与 Bagging 回归器的堆叠回归框架，并以 Huber 回归作为元学习器提升稳健性。进一步引入期望改进值 (Expected Improvement, EI) 策略，对未知合金空间进行智能筛选，实现基于不确定性驱动的主动学习迭代优化流程。该方法可扩展至伸长率等其他力学性能的多目标建模，为高性能钛合金的智能设计提供理论支持与数据基础。

FB04-125

HH130: 用于半哈斯勒热电材料的通用机器学习力场开发的数据集及其在热输运中的应用

杨钰嫣、杨炯

上海大学

从数据库中对热电材料进行高通量筛选需要高效且精确的计算方法。机器学习原子间势 (MLIPs) 提供了一条有前景的途径，通过高通量模拟促进了基于数据库的热输运应用的发展。然而，目前的挑战在于缺乏用于精确大规模模拟的标准化数据库和公开可用的模型。在此，我们介绍了 HH130，这是一个针对 MatHub-3d 中 130 种半哈斯勒 (HH) 化合物的数据库，包含 31,891 个构型 (共 54 种元素) 和 390 个 MLIP 模型。利用 HH130 中的 MLIP 模型，我们能够精确预测对应 HH 化合物的能量、力和原子间力常数。此外，基于 HH130 中的数据集，我们利用高阶等变消息传递神经网络 MACE 开发了预训练通用力场 MACE-HH-v1.0。MACE-HH-v1.0 的能量和受力的平均绝对误差 (MAE) 分别低至 1.22 meV/atom 和 8.4 meV/Å，显著低于当前先进的通用力场。结合声子玻尔兹曼输运方程，MACE-HH-v1.0 被用于 HH 化合物的热输运研究。对于数据集中包含的 HH 化合物及等价固溶体，其晶格热导率可达到与 DFT 相当的精度。

这项工作表明，借助准确的数据集和通用力场模型，可以实现高阶力常数和热输运性质的精准预测。

FB04-126

热变形实验与 DAMASK 协同驱动的微观组织演变研究与性能预测策略

孙威、王志磊、谢建新

北京科技大学

Al-Zn-Mg-Cu 系合金锻件广泛应用于航空航天、交通运输等高性能结构件领域。明确其热加工过程形性演化规律，是热加工过程中调控锻件性能的必然要求。本研究通过热压缩实验结合 EBSD 和 SEM 等微观表征手段，获取了不同变形条件下的晶粒取向、再结晶程度、几何必要位错（GND）密度及内核平均错配（KAM）值等微观特征值信息。基于实验数据，构建了特征值与硬度的支持向量回归（SVR）模型，结合 SHAP 分析方法筛选出影响硬度的关键特征。基于实验与模拟数据，进一步构建并优化了支持向量回归（SVR）预测模型，建立了微观结构特征与材料硬度之间的定量关系。采用晶体塑性有限元方法模拟热变形过程真实初始组织的 GND、KAM、动态再结晶（DRX）以及晶粒尺寸的四个关键特征演变，并通过已建立的硬度预测模型实现了试样硬度变化的实时预测。

研究表明，机器学习与多尺度建模方法的结合不仅有助于揭示材料性能调控机制，还为热加工工艺的数字化设计与优化提供了坚实的理论基础和技术支撑。

FB04-127

基于组织演化的 Ti60 合金锻件性能场预测方法研究

李鑫哲、王志磊、谢建新

北京科技大学

传统锻造工艺实时调控难度大，导致产品质量稳定性差、合格率低。基于大数据与人工智能的数字化锻造技术是提升锻造工艺智能化水平的有效途径，而工艺数字模型是实现性能预测的关键。本研究以航空发动机高压压气机盘用 Ti60 合金为对象，选取常规锻造温度范围内的四种典型工艺参数组合，开展缩比锻造实验，并分析 1/4 截面六个典型位置的微观组织演化。结合等温热压缩实验（变形温度 800~1200°C 和应变速率 0.001~10s⁻¹），探究了 Ti60 合金的热变形行为，构建了 60%应变下的热加工图及峰值应力条件下的本构方程，分析了热压缩样品中心区域的微观组织。基于所建立的本构方程，采用 Deform 软件对不同工艺参数组合进行数值模拟，提取了 EBSD 检测点的等效应力、等效应变及温度数据。进一步结合支持向量回归（SVR）模型，构建多物理场-组织形貌特征-性能关系模型，并基于实验数据开发硬度场预测模型，为 Ti60 合金锻造工艺优化提供精准预测能力。本研究为 Ti60 合金锻造工艺优化及数字化锻造技术的发展提供了理论支持与实践指导。

FB04-128

基于富勒烯分子空间的化学语言分子生成模型

赵冲，李传豪，张舒，李攀

贵州医科大学药学院

在富勒烯及相关碳材料的理论研究中，传统的分子描述方法通常采用直角坐标系、SMILES 表达式或分子连接矩阵等形式，用于表征分子的几何结构与拓扑信息。然而，这些描述符在处理富勒烯类分子高度曲率、封闭笼状结构以及复杂空间构型时，表现出一定的局限性。尤其是当前广泛用于化学语言建模的 SMILES 描述符，由于其本质上是线性字符串编码，难以准确反映分子的三维结构和局部几何特征，限制了其在碳纳米材料建模与性质预测中的应用效果。

基于以上问题，本研究提出一种基于几何信息构建的分子描述方法，将分子中的键长与键角信息引入化学语言表达体系中，形成更具三维结构特征的描述符。该方法不仅能够更精准地表征富勒烯分子的空间

构型和结构异构性，还能有效提升基于人工智能模型在分子性质预测、结构生成与异构体筛选等任务中的表现。初步实验表明，该描述符在多个代表性任务中具有良好的准确性和稳定性，优于传统描述方法。

此外，该方法具备良好的泛化能力和跨体系适应性，有望扩展应用于更广泛的分子体系，包括有机共轭材料、功能高分子、生物大分子等，服务于化学、材料科学和生命科学等多个领域的分子模拟和材料设计任务。

A Chemical Language Molecular Generation Model Based on Fullerene Molecular Space

Chong Zhao, Chuanhao Li, Shu Zhang, Pan Li

School of Pharmacy, Guizhou Medical University

In the theoretical study of fullerenes and related carbon materials, conventional molecular descriptors, such as Cartesian coordinates, SMILES representations, and molecular adjacency matrices—are commonly used to represent molecular geometries and topological features. However, these descriptors exhibit inherent limitations when applied to fullerene molecules, which are characterized by high curvature, closed-cage structures, and complex three-dimensional conformations. In particular, the SMILES representation, which encodes molecular structures as linear strings, lacks the capacity to accurately capture spatial configurations and local geometric details, thereby restricting its effectiveness in modeling and property prediction of carbon nanomaterials.

To address these challenges, this study proposes a geometry-based molecular descriptor that incorporates explicit bond length and bond angle information into the chemical language framework, thereby enabling the construction of descriptors that better reflect three-dimensional structural characteristics. This approach allows for more precise representation of the spatial conformations and structural isomerism of fullerene molecules, and significantly improves the performance of artificial intelligence models in tasks such as molecular property prediction, structure generation, and isomer screening. Preliminary results demonstrate that the proposed descriptor outperforms conventional methods in terms of accuracy and robustness across multiple representative tasks.

Moreover, the method exhibits strong generalization capabilities and cross-system adaptability, with the potential to be extended to a wide range of molecular systems, including organic conjugated materials, functional polymers, and biomacromolecules. It is expected to serve as a valuable method in molecular modeling and materials design across diverse fields such as chemistry, materials science, and life sciences.

FB04-129

凝胶多糖功能化衍生体系的构建与生物活性研究

韩景芬

内蒙古大学 化学化工学院, 呼和浩特市 010020

RNA 干扰 (RNAi) 是一种有效沉默靶标基因 mRNA 的转录后疗法，对恶性肿瘤等疾病的临床治疗具有广阔的应用前景，而构建安全高效的 siRNA 递送载体实现 RNAi 临床应用最为关键的步骤之一。针对肿瘤微环境特征，挖掘天然多糖构建安全高效的特异性递送平台的构建，对于切实提升癌症的治愈率具有重要意义。

我们以天然凝胶多糖和氨基酸等为起始反应物，首先通过点击反应将凝胶多糖与三赖氨酸接枝，再用 PEG 连接的叶酸修饰，构建了靶向递送平台 (CTL-PEG-FA)。CTL-PEG-FA 载体显示出优异的基因结合能力来浓缩 siRNA，并显著降低了细胞毒性；体外实验显示，对 HepG2 细胞，能够通过叶酸介导的细胞内吞和电荷的协同作用实现对 CTL-PEG-FA/Bcl-2siRNA 细胞摄取与表达的显著提升，并通过下调 Bcl-2 蛋白的途径促进细胞凋亡；在动物模型试验中，CTL-PEG-FA/B1-2siRNA 复合物在肿瘤部位明显积聚，显著抑制了肿瘤的生长，且无明显的毒性。研究所得凝胶多糖靶向递送平台 CTL-PEG-FA 具有优异的生物相容性和肿瘤细胞靶向性，是 RNAi 治疗临床应用的优质候选载体。

关键词：凝胶多糖；RNA 干扰；氨基酸；点击化学；纳米载体

FB04-130

基于电刺激治疗与智能伤口监测一体化的生物活性自适应水凝胶平台

方莺¹, 许可², 王亚楠², 王士斌¹, 傅超萍¹

1. 华侨大学

2. 南方医科大学南方医院

电刺激 (Electrical Stimulation, ES) 疗法作为一种新兴的促进伤口愈合手段, 已展现出良好的应用前景, 但目前仍缺乏将治疗刺激与伤口状态实时监测相结合的平台。为此, 本研究构建了一种集成 ES 治疗与生物电子传感功能的多功能水凝胶体系, 用于智能化、个性化的伤口管理。该水凝胶以动态硼酸酯交联的聚乙烯醇 (PVA) 为基体, 引入羊毛角蛋白以增强止血性能, 并辅以单宁酸赋予其优异的组织粘附性和抗氧化能力, 从而实现材料的高度拉伸性、自适应性和自愈合能力。在电刺激作用下, 该水凝胶显著促进血管新生和上皮重建, 体内实验显示其在术后第 14 天创面闭合率高达 99.96%。同时, 通过构建的电阻传感机制可实现创面愈合状态的实时监测: 术后第 2 天和第 4 天处于活跃修复期的创面, 其电阻变化幅度较术前完整皮肤超过两倍; 而术后出现感染时检测到的皮下脓肿, 其信号强度则不足完整皮肤的一半。相较之下, 术后 3 周评估的完全愈合皮肤, 其电阻值接近术前完整组织水平。上述结果在初步临床验证中充分展现了该水凝胶平台在治疗效果与智能诊断融合方面的优势, 为下一代伤口管理提供了基于数据驱动个性化策略, 亦凸显其良好的临床转化潜力。

关键词: 导电水凝胶, 智能伤口敷料, 电刺激疗法, 实时监测, 伤口愈合

FB04-131

光操控微纳米马达的运动和组装

陈曦

成都理工大学

微纳米马达 (又称胶体马达或游动微纳机器人) 是一类通过消耗环境能量实现自主运动的微纳米颗粒, 在药物递送、环境治理和微纳操控等领域具有重要的应用潜力。为提升其应用效率, 精确控制马达的运动和组装至关重要。光作为一种非接触、可编程的外部刺激手段, 在实现马达运动响应控制中展现出独特优势, 已成为研究热点。在个体运动方面, 尽管已实现利用光刺激控制马达的运动速度、方向和轨迹, 但当前的策略仍存在控制方式单一、精度低等问题。在集群运动方面, 马达的集群传递运动行为有望推动其协同工作, 但该传递机制尚不清楚, 且缺乏对传递行为的有效控制。在自组装方面, 目前还缺乏原位实时调控微纳米马达组装体的手段。

本报告提出了系统性的光操控策略: 在马达个体运动方面, 通过光的开关 (on-off) 调节实现了马达在不同运动模式之间的可控切换^[1], 引入光电镊技术进一步提升了对马达轨迹的精确控制^[2]。在马达集群运动方面, 借助结构光照明装置揭示了马达集群传递运动的基本机制^[3], 并实现了对空间传递行为的可控调节^[4]。在马达自组装方面, 本研究还展示了光驱动马达在操控惰性胶体颗粒自组装方面的能力, 形成可控的组装结构^[5]。上述研究成果不仅丰富了光刺激响应驱动下微纳米马达个体行为的调控方式, 也深化了对集群运动和结构组装的理解与控制, 为其在复杂环境中的智能响应应用奠定了基础。

参考文献

[1] Chen, X.; Zhou, C.; Peng, Y.; Wang, Q.; Wang, W*. Temporal Light Modulation of Photochemically Active, Oscillating Micromotors: Dark Pulses, Mode Switching, and Controlled Clustering. ACS Appl. Mater. Interfaces 2020, 12 (10), 11843–11851.

[2] Chen, X.; Chen, X.; Elsayed, M.; Edwards, H.; Liu, J.; Peng, Y.; Zhang, H. P.*; Zhang, S.*; Wang, W.*; Wheeler, A. R*. Steering Micromotors via Reprogrammable Optoelectronic Paths. ACS Nano 2023, 17 (6), 5894–5904.

[3] Chen, X.#; Xu, Y.#; Zhou, C.; Lou, K.; Peng, Y.; Zhang, H. P.*; Wang, W*. Unraveling the Physiochemical Nature of Colloidal Motion Waves among Silver Colloids. Sci. Adv. 2022, 8 (21), eabn9130.

[4]Chen, X.#; Xu, Y.#; Lou, K.; Peng, Y.; Zhou, C.; Zhang, H. P.*; Wang, W*. Programmable, Spatiotemporal Control of Colloidal Motion Waves via Structured Light. ACS Nano 2022, 16 (8), 12755–12766.

[5])Chen, X.*#; Liu, X.#; Khan, M. Y.; Yan, Z.; Cao, D.; Duan, S.; Fu, L.; Wang, W*. Reconfigurable Assembly of Planar Colloidal Molecules via Chemical Reaction and Electric Polarization. Research 2024, 7, 0490.

FB04-132

面向梯度蜂窝结构 RCS 特性预测的贝叶斯主动学习采样优化

张君涵，陆海鹏，白兴智，晏沪盈，王一帆，高锦程

电子科技大学清水河校区

梯度蜂窝结构因其灵活参数调控能力（如孔径、浆料厚度、高度等），在雷达散射截面（RCS）性能优化中展现出显著潜力。然而，传统仿真与实验方法受限于高维参数空间，存在计算效率低、耗时长长的瓶颈。机器学习方法虽能部分改善计算效率，但随机采样策略因样本信息熵不足，模型收敛速度与预测精度仍受严重制约。为此，本研究提出一种融合贝叶斯神经网络（BNN）与主动学习（AL）的高效采样框架。该框架通过 BNN 量化预测不确定性，驱动 AL 算法优先采集信息量最大的样本，突破梯度蜂窝结构复杂建模导致的采样困境。实验表明：在同等样本规模下，BNN-AL 采样模型的收敛损失仅为随机采样的 50%（500 轮训练）；相较于遍历采样，BNN-AL 以 10% 的时间成本实现相近精度（损失差异 < 5%）。本方法为复杂吸波材料 RCS 特性的快速精准优化提供了新范式。

关键词：梯度蜂窝；贝叶斯网络；主动学习；机器学习

FB04-133

温度触发的瞬间凝胶纤维束网络

门永军

东华大学

生物组织中纤维网络独特的力学特性，为合成纤维网络水凝胶的开发带来了灵感；然而，鲜有聚合物能够可逆地构筑此类结构。我们报道了一种由具有超刚性链（持续长度约 1 微米）的合成聚电解质构筑而成的可逆纤维网络水凝胶。该水凝胶由呈双螺旋构象的聚(2,2'-二磺酸基-4,4'-联苯胺对苯二甲酰胺) (PBDT) 与四丁基溴化磷 ([P4444]Br) 共同组装而成。当温度超越其低临界溶解温度 (LCST) 时，[P4444]Br 的疏水性增强，从而触发了体系独特的溶胶-凝胶相变。该过程通过静电相互作用，驱动 PBDT 分子链聚集成纤维束，继而生长、分支，最终形成一个连续的宏观网络。PBDT 双螺旋结构所赋予的分子链刚性，是实现凝胶化的关键因素。该水凝胶呈现出与生物组织类似的应变硬化力学响应，并在加热与冷却循环中表现出高达 21 °C 的显著热滞后效应。利用凝胶化前后显著的模量变化，本研究成功将该水凝胶以喷涂方式施加于超疏水的垂直特氟龙表面，形成了有效涂层，同时可以应用于抗菌、森林灭火等领域。本工作为设计仿生纳米纤维束网络水凝胶提供了设计思路与理论指导。

FB04-134

基于机器学习与优化算法的超表面图案筛选与阵列排布设计

王一帆，陆海鹏*，晏沪盈，白兴智，高锦程，张君涵

编码超表面因设计灵活且结构简易，已成为超材料领域的研究热点。在编码超表面设计流程中，0/1 图案的选取以及编码排布方案的设计是两个关键环节。本文基于 ResBlock 与 DenseBlock 网络结构构建机器学习模型，用于对 10 × 10 随机编码图案的相位进行预测，该模型预测准确率达 95% 以上，相较于 MPL、

CNN、ResNet 等其他模型，在相位预测准确率方面有显著提升；同时还设计了基于代理模型的图案筛选算法，并且利用该算法在 2 分钟内筛选出一组在 6GHz - 12GHz 波段满足编码超表面相位需求的图案；最后基于遗传算法对 0/1 单元图案的排布进行快速优化，优化耗时约 1 分钟。优化所得的图案排布方案在 6.6GHz-11.9GHz 频段实现了-10dB 以上的反射率衰减，且频段内 50% 以上的区域的反射率衰减高于-15dB。结果表明，利用此机器学习模型与算法可实现对编码超表面的快速设计与优化。

FB04-135

刺激响应性电致/光致变色纤维的制备及应用研究

王跃丹，李梦杰，林云，王栋

武汉纺织大学

刺激响应性变色材料的光学特性可在外部刺激（如电压、光照）作用下发生可逆变化，展现出丰富的动态颜色调控能力。其中，电致变色与光致变色技术因其可控性强、节能环保及智能特性，在智能穿戴、柔性显示、自适应伪装、信息加密与可视化传感等领域展现出巨大的应用潜力和市场价值，对环境、经济和社会具有重要影响。本研究聚焦于电致/光致响应变色纤维及织物的开发，通过创新材料设计、精准制备工艺、微观结构调控以及器件集成策略，成功构筑了具有优异刺激响应变色性能的纤维基材料。采用扫描电子显微镜（SEM）、X 射线衍射（XRD）、电化学、光响应动力学等多种表征手段，系统研究了材料组成、结构与形貌对其电致/光致变色性能（包括光学对比度、响应速度、着色效率、光调制率等）的影响机制。基于所制备的纤维及织物，组装了固态柔性电致变色器件，并深入评估了其关键性能指标，如光学调制范围、刺激响应时间、循环稳定性及机械柔韧性。同时，顺应功能化与智能化发展趋势，本研究探索了基于单一刺激响应变色器件或集成系统实现多重功能（如显示、热屏蔽）的可行性，为下一代智能纺织品与自适应系统提供了重要的材料基础与技术支持。

FB04-136

用第一性原理研究 Mn 替代 Ni 对 Sanicro 25 奥氏体耐热钢组织稳定性和力学性能的影响

巩胜利

兰州理工大学

随着社会的发展，人们在电力方面的需求日益增大，污染物排放量也急剧增长，导致环境污染加速，电力行业向高效清洁的方向发展成为较为关键的议题。瑞典山特维克公司在 NF709 基础上研发的 Sanicro 25 奥氏体耐热钢因其具有优异的结构稳定性和高温力学性能，有望成为 630~650℃ 等级超超临界火电机组的新一代奥氏体耐热钢。其合金元素种类较多，其中稀贵金属 Ni 元素含量较高。为了降低成本，我们采用第一性原理计算的方法对 Sanicro 25 奥氏体耐热钢中 Ni 元素的减量化进行模拟研究，基于主要元素 Fe-Cr-Ni 体系构建基本模型，从原子尺度研究了 Mn 元素对其结构稳定性和力学性能的影响。形成能、结合能以及吉布斯自由能等计算结果表明在 Sanicro 25 奥氏体耐热钢中使用 Mn 元素替代 Ni 元素后仍具有较好的结构稳定性，且在 630~650℃ 使用温度下结构稳定性表现的更为优异；通过分析电子性质，发现一定量的 Mn 替代之后体系表现出较好的热稳定性；弹性模量分析可知替代后使得体系的抗压强度有所提高，不同替代对应材料刚度发生不同程度的变化；随着应变的增加，各体系拉应力均先增大后减少。总之，Fe-Cr-Ni 系中以 Mn 代 Ni 是可行的，是 Sanicro 25 奥氏体耐热钢领域节约 Ni 的重要方法。

FB04-137

机器学习驱动的含钼高熵氮化物涂层摩擦磨损性能预测

张存修¹、彭爽¹、王笙伊¹、隋旭东³、Sam Zhang²、孙德恩¹

1. 西南大学

2. 哈尔滨工业大学

3. 维也纳工业大学

高熵氮化物涂层的摩擦学行为受到成分设计和工作条件的协同影响, 因此通过传统方法建立预测摩擦学规律具有挑战性。在这里, TiZrNbMoxN 涂层通过磁控溅射制备, 并进行系统实验, 包括 144 次变化的 Mo 成分和工作条件 (例如负载、速度、摩擦副、润滑环境) 的摩擦测试。获得了关键摩擦学参数的综合数据集: 摩擦系数 (COF)、磨损率 (Wr) 和磨损形态 (Wm)。为了揭示潜在的关系, 四种机器学习模型——随机森林 (RF)、支持向量机 (SVM)、极端梯度提升 (XGBoost) 和反向传播神经网络 (BPNN)——被用于参数预测和机制分类。结果显示, RF 对 COF (0.82) 和 Wr (0.89) 实现了最高的 R², 而 SVM 在分类 Wm (90% 准确率) 方面表现最佳。耦合 Mo 含量-工作条件关系的三维可视化进一步突出了成分设计和工作条件之间的非线性协同效应。本研究为优化复杂工程应用中含 Mo 高熵氮化物涂层的摩擦学性能提供了一个 ML 驱动的框架。

FB04-138

改性 MCrAlY 涂层的制备与性能研究

张澳、姜肃猛、宫骏

中国科学院金属研究所

工业燃气轮机和航空发动机的热端部件在服役过程中不仅需要良好的高温力学性能, 还需要良好的抗高温氧化和耐腐蚀性能, 通过在热端部件用高温合金表面施加高温防护涂层, 在高温下生成连续致密氧化膜隔绝有害介质, 提高抗氧化和耐高温腐蚀性能。本文采用电弧离子镀技术制备 NiCoCrAlY、NiCoCrAlYHf、NiCoCrAlYHfRe_{0.5}、NiCoCrAlYHfRe₁ 涂层。通过 XRD、SEM/EDS、TEM 等手段研究几种涂层在 1100℃ 高温氧化条件下微观结构、组织演变以及退化过程。主要结果: 1100℃ 恒温氧化条件下, 0.5 wt.% Re 改性氧化增重相较于另外两种改性涂层最小; Re/Hf 共改性后涂层的氧化膜厚度相较于 Hf 改性涂层厚度明显变薄; 改性 MCrAlY 涂层的抗剥落性能明显提高。

FB04-139

PTAW 制备高 WC 添加量且无裂纹的 Ni-WC 涂层: 建立 WC 类型、其保留量和涂层耐磨性的关系

罗昕昕¹、杨琪²、吴子恺¹、郭庆涛³、卢静⁴、罗丰华¹

1. 中南大学

2. 四川航天技术研究院

3. 鞍钢股份有限公司鞍钢北京研究院

4. 季华实验室

通过正交参数优化, 使用等离子堆焊在 42CrMo 钢板表面制备了无裂纹、WC 保留量高的 Ni 基自熔性合金-WC 复合涂层。采用球-盘摩擦磨损评价了 WC 类型对 Ni-WC 涂层室温摩擦磨损性能的影响, 使用销-盘摩擦磨损评价了摩擦载荷对 Ni-WC 涂层 200℃ 下摩擦行为的影响。结果表明, 所制备涂层耐磨性与硬度远高于基板, 且涂层中 WC 颗粒破坏形式不同: 铸造 WC 颗粒逐渐从其边缘磨损, 而碳热还原(C-R) WC 颗粒开始沿其内部颗粒的界面剥离。并发现 Ni-WC 涂层的室温磨损率与耗散能呈正线性相关, 而与磨痕中 WC 颗粒的保留量呈负线性相关。与 C-R WC 相比, 铸造 WC 提供了更低的摩擦耗散能, 使得涂层的磨损率降低了 10.24-68.32%, 硬度提高了 49.89%。在 200℃ 下, 30 N 的载荷导致了严重的材料转移, 造成较厚的应力集中层与高磨损率; 而更高的载荷则使得摩擦副之间形成连续稳定氧化层, 或是发生粘着磨损, 阻碍了应力集中层的形成, 涂层磨损率降低。

FB04-140

航空铝合金表面高强微织构切-滚协同低损创成及其磨损机理研究

于晓、翟彦春、李锋、魏红梅、乔华英

山东华宇工学院

微织构技术在航空零部件中的应用显著提升了材料的耐磨性、抗疲劳性和润滑性能。针对以去除材料为主的微织构加工方法带来的微裂纹等加工损伤,提出将切削轮廓与超声滚压加工的削峰填谷作用耦合,在航空铝合金表面创成兼具高强度、低损伤的微织构,同时探明切削-超声滚压协同工艺的耦合机制及高强微织构的磨损机理。通过对切削粗糙峰与滚动体接触区建模,分析了不同加工参数下的接触区形状及滚动体的受力。进行了不同切削参数的单道次和多道次超声滚压实验,得到了压痕尺寸与加工参数之间的关系。通过点接触摩擦磨损实验,探究了具有微织构表面的摩擦磨损机理。结果发现,压痕长度与切削进给量呈正相关,在相同的压入深度下,切削进给量越大,压痕长度越大。随着滚压方向与切削痕迹的角度 φ 的减小,单个压痕从沿滚压中线对称分布逐渐向一侧偏移。当进给量较大且搭接率较低时,滚压表面存在均匀分布的扇形凹坑区域,当搭接率为25%时,在较小的进给量下,扇形凹坑已完全消失。微织构表面在轻载时不容易出现微裂纹而使材料剥落形成磨粒磨损。重载时接触应力的提高,使得加工硬化程度较高的CURP试样表面反而更容易剥落。

FB04-141

热障涂层激光纳米沉积无裂纹上釉提升高温性能

袁江淮、刘铸

中国科学院宁波材料所

激光被称作最快的刀、最准的尺,在材料加工方面展现出独特的优势。通过激光上釉可以在热障涂层表面形成致密的上釉层,从而显著提升的涂层的抗高温氧化、CMAS腐蚀等高温性能。然而,该技术不可避免的会在涂层表面形成网状裂纹,从而限制热障涂层高温性能的进一步提升。本工作借助短波长激光对热障涂层上釉,在涂层表面形成了致密、无裂纹和纳米颗粒层复合结构,原位生成的纳米颗粒层和柱状晶层可以通过形成物理阻隔层和自愈合机制提升涂层的高温性能,涂层上釉后的抗高温氧化、CMAS腐蚀、热震、冲蚀等性能均得到了明显的提升。此外,该技术同样适用于其他陶瓷材料的上釉和封孔。

FB04-142

材料配方对轻质摩擦副粘滑振动及界面行为的影响研究

刘满强、周航宇、刘宇航、王志伟、莫继良

西南交通大学

市域列车制动轻质摩擦副在降低系统质量、推动列车轻量化发展的同时,有助于提升能源利用效率。然而,轻质摩擦副粘滑振动是运行过程中难以避免的问题,将导致制动性能退化、结构失效,甚至危及制动安全。为了有效抑制粘滑振动,本文采用试验与有限元仿真相结合的方法,系统研究了闸片材料配方对粘滑振动行为及其演变规律的影响。首先采用不同材料配方的闸片开展台架试验,从时域与相平面角度揭示了材料配方对粘滑振幅的影响,并结合表面粗糙度、接触平台、微观形貌和元素演变规律,建立了材料参数—界面状态—粘滑振动之间的动态关系。随后构建有限元模型,进一步探讨粘滑振动过程中界面接触状态及应力状态的演变规律。研究表明:高碳/低铁配方可显著降低粘滑振幅,具有良好的润滑性与动态稳定性;而高铁/低碳配方将导致粘滑振幅变大,极限环不规则扩展,系统非线性特征增强。高碳/低铁有助于形成致密稳定的石墨膜,系统更加稳定并降低磨损;而高铁/低碳易引发磨屑堆积、应力集中和界面扰动,诱发强烈粘滑振动并导致磨损加剧。综上,本文系统揭示了材料配方对摩擦膜形成、界面特性与粘滑振动行为的影响机制,为轻质摩擦副的材料优化与粘滑抑制提供理论支持。

FB04-143

基于氧化还原键合实现原位表面纳米化铜片的制备与接头强度提升

何思亮^{1,2,4}、刘向东²、西川宏²、左杨³

1. 桂林电子科技大学
2. 大阪大学接合科学研究所
3. 重庆邮电大学
4. 中山大学惠州研究院

通常认为氧化行为对功率器件中的铜烧结互连不利，影响铜元素的相互扩散，应在烧结前彻底去除。本研究通过氧化还原键合(ORB)过程中将预制氧化物转化为铜，制备出具有高烧结活性的原位表面改性铜片。随着氧化时间延长，铜片表面氧化物形貌呈现从均匀纳米晶向不规则微凸起的演化，导致微纳尺度颗粒混合结构的形成。结果显示，烧结接头强度随氧化物晶粒数量增加而提升，但过量氧化物会引起还原铜纳米颗粒粗化及接头强度劣化。在 ORB 工艺条件下，低温低压烧结形成的接头强度可达 80MPa，经 1000 小时老化后仅衰减 34%。本研究首次揭示了甲酸气氛中氧化物形貌对还原铜结构及烧结铜接头强度的影响机制。提出的键合工艺与现有回流焊炉兼容，为实现烧结铜互连提供了新途径。

FB04-144

航空发动机用 NiAl-hBN 与 NiCrAl-hBN 可磨耗封严涂层的高温高速冲蚀行为研究

赵智超

中国科学院金属研究所

可磨耗封严涂层是航空发动机转子-静子系统的关键材料，通过精确调控叶尖间隙显著提升气密性和发动机效率。然而，目前的研究多集中于室温及低速条件，难以反映其在高温 (>400℃) 和高速 (>100 m/s) 冲蚀工况下的实际性能。为此，本研究采用等离子喷涂技术 (APS)，在 NiAl-hBN 体系基础上开发了 NiCrAl-hBN 涂层，以解决高温高速冲蚀环境下的性能优化问题。通过高温喷砂冲蚀试验机，对比研究了 NiAl-hBN 与 NiCrAl-hBN 两种涂层在不同攻角及温度下的气固冲蚀行为。研究结果显示，在低攻角下，冲蚀材料主要以微切削和犁削损伤为主，裂纹主要源于颗粒对涂层的切削作用，裂纹的扩展方向是由表面向涂层内部扩展；而在高攻角下，涂层主要承受垂直应力冲击，最大应力位于涂层亚表面，裂纹由亚表面向表面逐步扩展。NiAl-hBN 涂层在室温下具有良好的可刮削性能，但高温会导致其多孔结构坍塌，硬度大幅提高，长时间使用可能会损伤涡轮叶片。相比之下，NiCrAl-hBN 涂层因 Cr 元素的添加，展现出更优的结构稳定性、抗氧化性和冲蚀性能，硬度也有所增加。其冲蚀性能优于 NiAl-hBN 涂层，且对温度与攻角变化不敏感，更适合用于高温及热循环工况。本研究通过深入了解涂层在不同条件下的冲蚀行为，可以为优化涂层性能和提高航空发动机的可靠性和效率提供有力支持。

FB04-145

专家知识引导的耐腐蚀共晶高熵合金数据驱动设计方法

董淑亚

上海大学 上海市

Eutectic high-entropy alloys (EHEAs) leverage multiphase eutectic microstructures to achieve exceptional castability and mechanical properties. However, their inherent heterogeneity often leads to micro-galvanic corrosion, limiting practical utility in aggressive environments. Conventional alloy design approaches struggle to navigate the vast compositional space of EHEAs, necessitating the development of innovative strategies to balance performance trade-offs effectively. The present work proposes a hybrid approach that combines machine learning (ML) techniques, including Multilayer Perceptron Classification, Gradient Boosted Regression, Support Vector Regression models, and uncertainty quantification, with corrosion expertise to rapidly identify corrosion-resistant EHEAs. This yields the novel AlCoCrFeNi_{1.7} EHEA, which shows a 33.3% improvement in toughness and 58.97% increase in pitting corrosion resistance compared to the benchmark AlCoCrFeNi_{2.1} EHEA. By strategically reducing Ni content in Al-Co-Cr-Fe-Ni EHEAs, we optimize the size and Cr concentration of

Cr-rich nanoprecipitates (Cr-NPs) within the B2-phase matrix. In the AlCoCrFeNi_{1.7} EHEA, the dislocation loops around the larger Cr-NPs enhance strength, while the increased Cr content in Cr-NPs promotes Cr₂O₃ enrichment in the passive film, thereby improving its corrosion resistance. This phenomenon demonstrates the dual mechanisms of performance enhancement. The integration of ML techniques with materials science expertise provides a generalizable framework for designing multifunctional alloys.

FB04-146

核磁共振水峰压制技术实现电解液中氨浓度定量检测

顾开智

中南大学高等研究中心

核磁共振 (NMR) 波谱是有机化合物结构鉴定的常用工具, NMR 在测定分子结构时具有无损检测、灵敏度高、测试时间短等优点, 广泛应用于化学、材料、药学、生物学等学科。但是, 对于含有高浓度水溶液样品时, 因水中氢原子会表现出极强的氢谱信号峰, 对目标化合物氢谱信号产生干扰。水峰压制技术是通过预饱和法先对溶剂水进行连续波照射, 此频段质子布局数差为零, 能够有效抑制溶剂水的信号, 以便更好地观察和研究目标化合物的信号, 进一步提高核磁氢谱的信噪比和分辨率。在电催化还原合成氨过程中, 电解液中氨浓度的定量检测是一项具有挑战性的工作。本工作我们采用核磁共振水峰压制技术对不同电位下电解液中还原产物氨进行检测, 然后对化学位移 7.0 ppm 附近的三重峰进行积分, 结合标准曲线, 实现了电解液中氨浓度定量检测。本工作中合成的六边形紧密堆积钴纳米片 (hcp-Co) 催化剂在 NO 还原反应中表现出合成氨的产率为 439.50 $\mu\text{mol cm}^{-2} \text{ h}^{-1}$, 法拉第效率为 72.58%。通过密度泛函理论计算和 NO 程序升温解吸实验表明, hcp-Co 催化剂具有优异的 NO 还原反应活性归因于其独特的电子结构和质子穿梭效应。

FB04-147

长石表面化学修饰的表征与冰成核调控

梁美辰

中南大学高等研究中心

沙尘气溶胶是大气中最丰富的冰的有效异质核, 其中长石因其优异的冰成核活性而备受关注, 探究其背后的机理对于揭示成核的本质具有重要意义。本研究以长石在自然界中最常见的 (001) 解理面为研究对象, 通过表面化学修饰与多手段表征相结合的方法, 探究了表面羟基对冰成核活性的调控机制。首先, 基于格子双晶特征, 采用反射偏光显微镜进行初步筛选, 并结合 X 射线衍射仪 (XRD) 结构分析, 确定了长石的 (001) 解理面。利用 X 射线光电子能谱 (XPS) 对氟硅烷修饰前后长石解理面的表面成分演化进行分析, 确定了取代程度与反应时间正相关。结合接触角测量仪 (CA) 对表面润湿性进行表征, 可以确定反应时间为 12 h 时, 表面羟基被完全取代, 实现了对表面羟基的调控。原子力显微镜 (AFM) 形貌表征进一步表明, 修饰前后表面粗糙度变化小于 1 nm, 有效排除了形貌改变对冰成核的干扰。通过关联长石表面化学状态与冰成核温度发现: 羟基的存在可以有效促进冰成核, 氟化修饰使冰成核温度降低, 完全氟化后表面的冰成核温度明显降低约 9.0 °C。本研究通过表面化学定向修饰与多手段表征相结合, 定量揭示了长石解理面羟基作为冰成核活性位点的重要作用, 为异相成核机理研究提供了新的思路。

FB04-148

Efficient Electrocatalytic Hydrogen Production via Asymmetric Seawater Electrolysis

Zhipeng Yu,^{1*} Yury V. Kolen'ko,¹ and Sitaramanjaneya Mouli Thalluri¹

¹ International Iberian Nanotechnology Laboratory, Braga 4715-330, Portugal

Corresponding author email: zhipeng.yu@inl.int

Seawater electrolysis (SWE) has emerged as a promising pathway for green hydrogen (H₂) generation. Notably, widespread application of SWE faces significant challenges, including the anodic competing chlorine evolution reaction (CER) and high energy demand. To overcome these obstacles, innovative hybrid SWE systems have been developed to mitigate CER interference and lower energy consumption.[1] These systems incorporate small molecules, such as hydrazine or sulfide, into an alkaline seawater electrolyte. By leveraging these additives, the anodic oxidation potential is effectively shifted negatively, thus affording low-voltage SWE by coupling with the cathodic hydrogen evolution reaction (HER) while avoiding the formation of environmentally harmful hypochlorite species.[2] In this study, we present a sulfur- and phosphorus co-doped FeCoNiCrMn high-entropy alloy (HEA-SP) catalyst, which demonstrates excellent catalytic performance for the sulfion oxidation reaction (SOR), in alkaline-saline water.[3,4] When employed as the anode catalyst, HEA-SP enables simultaneous, chlorine-free H₂ production from seawater and the upgrading of sulfions into valuable sulfur at 10 mA/cm² in a bipolar membrane settings. This innovative approach highlights the immense potential of HEA-SP catalysts and the asymmetric cell design to achieve energy and cost-efficient seawater electrolysis. Importantly, such hybrid SWE systems represent a transformative step toward sustainable and economical H₂ production from seawater.

Reference:

- [1] Yu, Z. P.; Liu, L. F.* Recent advances in hybrid seawater electrolysis for hydrogen production. *Adv. Mater.*, 2023, 36, 202308647.
- [2] Yin, H; Yu, Z. P.* Hybrid seawater electrolysis for hydrogen production: Integrating anodic oxidation reactions for enhanced efficiency. *The Innovation Energy*, 2024, 1, 100051.
- [3] Yu, Z. P.; Boukhvalov, D. W.; Tan, H.; Xiong, D. H.; Feng, C. S.; Wang, J. W.; Wang, W.; Zhao, Y.; Xu, K. Y.; Su, W. F.; Xiang, X. Y.; Lin, F.; Huang, H. L.; Zhang, F. X.; Zhang, L. Meng, L. J.; Liu, L. F.* Sulfur and Phosphorus Co-Doped FeCoNiCrMn High-Entropy Alloys as Efficient Sulfion Oxidation Reaction Catalysts Enabling Self-Powered Asymmetric Seawater Electrolysis. *Chem. Eng. J.*, 2024, 494, 153094.
- [4] Tan, H.#; Yu, Z. P. #; Zhang, C. Y.; Lin, F. Ma, S. Y.; Huang, H. L.; Li, H.; Xiong, D. H*; Liu, L. F.* Self-supported NiTe@NiMo electrodes enabling efficient sulfion oxidation reaction toward energy-saving and chlorine-free hybrid seawater electrolysis at high current densities. *Energy Environ. Sci.*, 2025, 18, 1440-1451.

FB04-149

花巷：一个用于进行非共价相互作用指数(NCI)分析的脚本

戚达炜，邓水全

福建物质结构研究所

Computations based on crystal field theory are paramount for accurately simulating and understanding the luminescent properties of rare-earth materials, which are critical for advanced optical applications. This approach demonstrates a significant advantage over traditional Density Functional Theory (DFT) calculations by achieving superior accuracy in reproducing experimentally observed energy levels. This work introduces a Python program designed to fit crystal field Hamiltonians to optical spectroscopy data of rare earth ions. The program first generates a canonical Hamiltonian based on the assumed site symmetry of the ion. It then employs a Monte Carlo search to explore all possible crystal field parameters, which represent the ligand's influence on the central ion, aiming to find the optimal set that reproduces the observed energy levels. Finally, a local optimization algorithm refines these results. PyCrystalField handles the evaluation and diagonalization of the Hamiltonian, utilizing our program's numerous built-in factors and information collected from various sources. Testing demonstrates that the program can reproduce observed rare earth energy levels with astounding accuracy. The accurately determined crystal field parameters offer profound insights into the local electronic structure and symmetry environment of the rare-earth ions, thereby providing crucial guidance for the rational design and discovery of novel high-performance luminescent materials.

基于晶体场理论的计算对于精确模拟和理解稀土发光材料的发光特性至关重要，这些材料在先进光学应用中扮演着关键角色。此计算方法在复现实验观测能级方面展现出超越传统密度泛函理论（DFT）计算的显著优势，实现了更高的准确性。本工作开发了一个用于通过光学光谱拟合晶体场哈密顿量的 python 程序。程序首先根据假定的稀土离子的位点对称性构建哈密顿量的形式。随后,它对所有可能的哈密顿量(反映了稀土离子所在的配位环境)进行了蒙特卡洛搜索以寻找最能够复现实验观察得到的能量的晶场参数。最后,程序通过局部优化算法进一步优化结果。哈密顿量的数值形式和特征值计算有 PyCrystalField 进行,使用了大量从各种来源收集的内置参数。测试表明,该程序能以惊人的准确度复现稀土离子的实验能量。精确拟合得到的晶体场参数能够深刻揭示稀土离子的局域电子结构和对称性环境,从而为新型高性能发光材料的理性设计与发现提供关键指导。

FB04-150

基于金属多酚网络界面强化的环氧/芳纶复合材料设计与抗穿刺性能研究

王雨^{1,2}, 马猛^{1,3}徐经宇^{1,4}周晋宇^{1,5}毛超英¹

1. 中国工程物理研究院 化工材料研究所, 四川 绵阳 621900;
2. 2.西南科技大学 材料与化学学院, 四川 绵阳 621010;
3. 3.武汉纺织大学 纺织科学与工程学院, 湖北 武汉 430200;
4. 4.中原工学院 纺织服装产业研究院 河南 郑州 450007;
5. 5.西华大学 材料科学与工程学院 四川 成都 650007

近年来, 全球暴力事件中刀具穿刺类伤害占比显著上升, 而现有防刺材料 (如金属插板、高性能纤维复合材料) 普遍存在质量密度高、柔韧性-防护性能协同优化不足的技术瓶颈。本研究提出通过金属多酚网络 (MPN) 界面改性策略, 构建芳纶织物与环氧树脂的强韧结合界面, 以实现复合材料抗穿刺性能的突破性提升。通过系统调控环氧涂层单位面积用量及环氧单体/固化剂化学计量比, 结合 MPN 的仿生黏附特性, 成功制备出轻量化、高柔韧的环氧/芳纶复合材料。结果表明, MPN 界面修饰使芳纶-环氧树脂界面剪切强度提升 35.3%; 复合材料的抗穿刺性能较纯芳纶提高了 287%; 本研究为新一代个体防护材料的"轻量化-柔性化-高防护"协同设计提供了理论依据和可工程化的技术路径。