



**中国材料大会 2024**

**暨第二届世界材料大会**

**CMC 2024 & WMC 2024**

**July 8-11, 2024**

**Guangzhou, China**

**E02-材料界面/表面分析与表征**  
**E02-Analysis and Characterization**  
**of Materials Interface & Surface**

**Organized by**

Chinese Materials Research Society

Website: <https://cmc2024.scimeeting.cn>

**E02-材料界面/表面分析与表征**

分会主席：陳福榮、许并社、韩晓东、马秀良、隋曼龄、郭俊杰

**E02-01****量子電子顯微鏡的量子震盪器設計及製造**

陳福榮 教授

香港城市大学

**E02-02****基于原位拉曼光谱的高温结焦积炭动态表征**

田振玉

中科院工程热物理研究所

**摘要内容：**航空发动机燃烧室积炭是由于燃料不完全燃烧和热解造成的，高超声速飞行器的热管理再生冷却管路内也发生热解结焦反应过程，积炭和结焦会造成喷管堵塞、燃油消耗增加、功率下降，甚至影响飞行安全。拉曼光谱是一种无损的分析技术，可以提供化学结构、形态、结晶度等方面的详细信息，已经广泛应用于碳材料的表征。采用原位拉曼光谱，在火焰或热态反应条件下，对积炭和结焦进行动态表征，可以准确揭示结焦积炭结构的动态变化情况。在积炭研究方面，采用原位显微拉曼光谱研究了乙炔燃烧喷嘴尖端积炭结构的变化情况，喷嘴温度可达 1000 K。研究表明，不同工况的积炭晶粒尺寸变化较小；但随着积炭过程的发生，D<sub>4</sub>峰的成分增加，最表层积炭的结构晶粒尺寸具有略微减小的趋势，说明后续生成的积炭较最开始生成的表层积炭有颗粒逐渐变小的趋势。在结焦研究方面，用原位显微拉曼光谱对乙炔热解过程中惰性石英表面局部位置的焦炭结构进行了动态表征。研究表明，焦炭的晶粒尺寸变化具有急剧减小、逐渐增大、过渡转变和稳定平台等四种现象特征。据此，提出了惰性表面局部焦炭演化机理，包括物理沉积阶段、表面反应阶段、内部反应阶段和内部成熟阶段；定义了转变时间来描述焦炭的演化进度。根据所提出的机理，分析了温度的影响，在 760 至 930 K 的温度范围内，温度的升高能促进焦炭的成熟，并可通过较早的转变时间来定量描述；温度升高也能促进晶粒尺寸的增加。本工作采用原位拉曼光谱技术，在火焰或热态反应条件下（温度接近 1000 K），对燃烧积炭和热解结焦开展了动态研究，揭示了积炭和结焦结构的动态变化规律，丰富了对燃烧积炭和结焦生成过程的机理认识。后续将进一步开展原位实验以研究金属表面的结焦过程，并对催化有序转化等开展原位表征研究。

**E02-03****原位观测表面-亚表面动态耦合**

孙宪虎

中国科学院大学

**摘要内容：**材料的性能优化与其表界面结构调控密切相关。由于亚表面和界面埋藏在材料内部，相对于表面而言，它们的表征和调节难度更大。因此，错失了很多以此为出发点的性能优化机会。材料在氧化还原反应中会涉及表面化学势驱动的结构和成分双重改变。表-界面离子浓度梯度驱动离子传质到材料更深层，并激活亚表面和界面相变，即“跨域相变”。反过来，亚表面/界面自身结构也会调节离子扩散动力学过程，从而影响表-界面间传质，最终影响表面结构的稳定性、活性位点的产生和整体的反应动力学。因此观测氧化还原反应中表面、亚表面和界面的动态行为一直是技术上的挑战。原位环境电镜技术是目前较为可行的新技术，能够实时定量测量材料表-界面结构在原子尺度和反应环境下的动态演变。报告人利用环境透射电镜，原位研究表面氧化还原反应驱动亚表面和界面演变，旨在深入探究氧化还原反应对材料中亚表面和界面结构演变的影响，并为材料性能的优化提供理论基础和实验指导。

**E02-04****JEOL JEM-F200 场发射透射电镜的性能特点及应用**

陈桐民

捷欧路（北京）科贸有限公司

E02-05

**Engineering flat bands in twisted bilayer graphene**周树云  
清华大学

**Abstract:** Twisted bilayer graphene exhibits emergent correlated phenomena such as superconductivity, Mott insulating state etc. The experimental electronic structure, in particular the evolution flat band near the Fermi energy, is critical for understanding the fundamental physics. In this talk, I will present our recent progress on the electronic structure of various twisted bilayer structures by using Nano ARPES. In particular, by combining AFM which allows to determine the twist angle accurately with Nano ARPES, we have succeeded in revealing the evolution of the flat band electronic structure across the magic angle and extracting the interlayer tunneling parameters. Moreover, the remote bands also carry important information about the interlayer interaction. We also observe a switching of the spectral weight for the remote bands, highlighting the critical role of lattice relaxations. I will also represent our progress on the electronic band structure of an asymmetrically-stacked twisted van der Waals heterostructure, where the flat band is further tunable by a bias voltage.

E02-06

**同步辐射原位谱学成像技术及应用**姚涛  
中科大

E02-07

**二维材料拉曼散射强度的定量分析**谭平恒  
半导体所

**摘要内容:** 拉曼散射作为一种光谱研究技术已经在固体材料的研究中得到广泛的应用。这种技术不仅可以被用来研究材料的晶体微观结构和晶格振动性质,还可以被用来研究材料的能带结构、电子态密度和电声子相互作用等。自拉曼散射现象发现以来,人们不断地革新技术来提升拉曼系统的灵敏度。但是,如何定量地理解拉曼模式的拉曼光谱强度却一直是一个挑战。此报告将基于我们利用显微拉曼光谱研究二维材料及其相关异质结等材料所取得的部分研究成果,来具体阐述如何在经典和量子原理范畴内,定量地理解晶格振动模的拉曼散射强度。

E02-08

**扫描透射电子显微技术 (STEM) 在低维量子材料的应用与研究进展**林君浩  
南方科技大学

**摘要内容:** 透射电子显微技术是窥探材料原子与电子结构的有力工具。随着二维量子材料的兴起,众多奇特低维物理现象被相继发现,同时催生出一系列材料物理的新分支,如扭角电子学,滑移铁电,谷自旋电子学等。研究二维材料这些奇特物性的物理起源,首要步骤是在原子尺度深入了解材料的晶体与缺陷结构与物性的系统关联,进而进行结构工程的物性调控,对二维材料功能器件的改进与性能提供具有重要意义。然而,由于二维材料的极限厚度,只有少数几种二维材料在单层极限下在大气环境中是稳定,大部分新型二维材料,如铁电性,铁磁性或超导的单层材料在大气环境下会迅速劣化,无法表征其缺陷的精细结构。在这个报告中,我将报道定量衬度分析技术在二维材料缺陷表征中的应用与方法学发展,以及我们课题组在克服二维材料水氧敏感性的一些设备创新尝试。我们搭建了一套具有完全知识产权的大型氛围控制互联系统,将水氧敏感二维材料的生长-表征-转移-高精度结构解析-器件制作与测量整个实验过程都保护在惰

性氛围下。我们利用该系统在直接观测二维敏感单层材料晶格原子结构与缺陷中取得的一些初步成果，包括单层敏感  $\text{WTe}_2$  的大范围无损本征褶皱结构， $\text{MoTe}_2/\text{WTe}_2$  本征缺陷的统计分布，少层卤族铁磁反铁磁材料的直接 CVD 制备与无损表征，单层  $\text{CrI}_3$  的缺陷磁性调控，层状拓扑反铁磁绝缘体  $\text{MnBi}_2\text{Te}_4$  的自发表面重构现象等。最后，我将讨论透射电子显微技术发展的新机遇与新挑战，包括低温冷冻电镜技术在二维材料中的应用和透镜消磁技术研究二维磁性超导相变等。

## E02-09

### 多维碳材料的精准合成、表征及应用

黄明

电子科技大学

**摘要内容：**基于化学气相沉积法合成的高品质碳材料具有非凡的电、热、光学和化学特性，在高性能微纳电子器件、柔性透明导电薄膜和催化领域都显示出具有巨大潜力。首先，我们介绍单晶铜镍合金基底在单晶石墨烯薄膜的快速生长、层数可控的多层石墨烯薄膜的制备中的作用，并展示了不同表征技术对石墨烯的生长过程和机理解析中的应用。其次，我们探讨了不同维度碳材料在碳中和领域的研究，特别是电催化二氧化碳还原方面的应用，运用多种原位手段深入研究了催化机理和表面活性位点的特性，为设计更高效的电催化剂提供了理论基础。

## E02-10

### Arina 直接电子探测器及其在 4D-STEM 技术中的应用

赵颀

上海微纳国际贸易有限公司

## E02-11

### 功能氧化物的纳米精度离子调控研究

于浦

清华大学

**摘要内容：**近年来，离子调控策略被广泛应用于功能材料的物性调控中。研究人员借助离子在材料中的可控嵌入和析出以及与之伴随的电荷、晶格演化，获得了磁性调控、超导增强、绝缘体—金属相变等系列有趣物性。然而，传统的离子液体门电压调控方法和热还原方法面临着空间尺度局限、调控时间长等困境，从而制约了相应的应用探索。本报告将介绍我们近期在纳米尺度离子调控研究中的两个尝试。首先，结合课题组在离子液体门电压和贵金属催化氢溢出反应的调控特点，我们提出了纳米探针电场辅助的氢溢出调控策略。利用 Pt 镀层的扫描探针作为高效、可控的催化剂，将氢气环境中的氢分子在针尖与薄膜的接触界面处进行裂解，并通过正向偏置电场将氢离子注入到薄膜中；而当在探针上施加反向电压时，氢化区域中的氢离子将从样品中脱出，从而获得氢离子的可逆操控；最终结合扫描探针特有的高精度空间操控能力，实现纳米精度的可逆氢离子调控。此外，我们还发现高能电子束能通过二次电子的形成在样品表面形成内建电场，从而辅助氧化物中的氧离子跨越逃逸势垒，形成氧空位；而氧空位的进一步定向迁移，则能实现整个薄膜样品的还原反应。以  $\text{VO}_2$  为例，研究发现电子束辐照能够驱动  $\text{VO}_2$  向  $\text{V}_2\text{O}_3$  的结构转变，以及与之伴随的绝缘体—金属相变；而高能电子束的短波长、高相干性特性则赋予该调控以纳米精度。我们期待这两种纳米精度的离子调控方法能被拓展到众多的功能材料研究中，孕育出丰富多彩的量子物性和功能特性。

## E02-12

### 界面原子级透射电镜表征和调控

王建波

武汉大学

**摘要内容：**结合球差校正电子显微学技术和第一性原理计算，对材料界面从倒空间到原子级正空间表

征，如畴界取向关系和原子量级界面结构，再到外场激励下相变和界面原子级的原位观测，如 ZnO、CuO 等相变，最后根据所需要的性质对界面进行设计和调控。

## E02-13

### 介电材料的局域结构表征与性质关联

胡万彪

云南大学

**摘要内容：**介电材料是电子元器件基础材料，具有丰富的物相、电子结构与光电性质。这些性质的关键在于介电极化，而极化又受到局域结构的直接影响，因此测定介电材料的局域结构对于理解介电等物理性质及其性能调控与器件设计具有重要意义。本工作采用多重电子原子表征技术（球差校正透射电镜、磁共振和光电子能谱等），研究了几个典型的介电铁电材料的缺陷、原子占位、八面体畸变和旋转等局域结构，钙钛矿结构，并建立缺陷和局域结构与电学、光电、铁电等性质关联。

## E02-14

### 碲化锡热电材料中异质纳米结构的原位制备

张虎

陕西师范大学

**摘要内容：**热电材料的微观结构可以显著的影响材料的电学和热学输运性能。材料晶粒尺寸的减小提高了界面热阻，补偿界面电导损失的同时可以带来热电性能的提升。材料中不同尺度第二相通过散射不同频率的声子，可以降低材料的晶格热导率、提高材料的热电性能。第二相及其界面在调控热电性能方面发挥着重大的作用，但目前仍然存在一些尚未解决的问题。一方面，获得尺寸可控、分布均匀的二次相很难，这限制了热电材料在纳米级功能器件中的应用。另一方面，相同化学式但不同晶体结构的材料可以表现出不同的电学和热学传输性质，不同相的结构特征、物理性质及其异质界面的研究不够深入。基于此，本文利用球差电镜的高角环形暗场像技术研究了环境友好型 SnTe 热电材料的相结构。利用聚焦的电子束在  $\beta$ -SnTe (Fm-3m) 相基体中原位制备了尺寸可控的菱方结构 h-SnTe (R-3m) 新相和纳米阵列。该菱方 h-SnTe 新相具有范德华键结合的层状结构，通过第一性原理计算表明该相具有金属性。本研究为 SnTe 基热电性能优化和电子束辐照制备异质纳米结构提供了一种新的技术方案。

## E02-15

### 功能陶瓷跨尺度微结构和构效关系研究

许钊钊

中国科学院上海硅酸盐研究所

**摘要内容：**报告将介绍利用球差电镜和原位透射电镜研究 PZT 基反铁电陶瓷和  $\text{Cu}_2\text{X}$  (X=S, Se, Te) 基热电材料中的跨尺度微结构和构效关系，包括 PZT 基陶瓷多级畴、极化序构、电魔梯现象和相变储能机制； $\text{Cu}_2\text{X}$  (X=S, Se, Te) 基热电材料的晶体结构、固溶结构、分相共生结构、面缺陷及其与电-热输运性能的关系。

## E02-16

### 半导体纳米材料原子尺度结构性能研究

李露颖

华中科技大学

**摘要内容：**结合电子全息技术的纳米尺度定量电学性能表征功能和球差校正技术的原子分辨率微结构表征功能，实现了半导体纳米材料电荷分布的电子全息研究，半导体纳米材料界面纳米尺度电场与原子尺度微结构的结合研究，以及各种外界激励下半导体纳米材料及器件的原位结构性能相关研究。利用电子全息技术，得到了 IV 族 Ge/Si 族量子点和核壳结构纳米线、III-V 族 GaAs/InAs 纳米线、量子点和量子阱组合器件的电荷分布情况，以及 n-ZnO/i-ZnO/p-AlGaIn 异质结发光二极管性能增强的微观机理。利用球差校正技术的原子尺度表征功能，获得了复合半导体 ZnSe 纳米带同质异构结中自发极化相关电荷裁剪效应的直接

实验证据,并对 InSe 纳米棒中多型体界面极化场进行了原子尺度定量研究。同时通过精确测定(K,Na)NbO<sub>3</sub> 铁电纳米线界面原子尺度极化场,获得其相应材料在退火后宏观压电效应线性增加的微观机制。利用原位热学表征技术,研究了 K<sub>x</sub>WO<sub>3</sub> 纳米片中阳离子有序结构并随温度的变化规律,PbSe 纳米晶随尺寸变化的晶体生长和升华机制。利用原位力学表征技术获得 MXene 高性能压阻传感器的微观作用机理。

## E02-17

### 百纳米级金刚石颗粒自驱动热渗入钢铁晶体的机理研究

单智伟

西安交通大学

**摘要内容:** 钢铁渗碳的历史可以追溯到两千年多年前,其主要过程是:外界碳源(固/液/气)在高温下分解为活性碳原子并逐渐渗入进钢铁,从而使低碳钢工件拥有高碳表面,再经淬火、回火处理,获得高硬度、高耐磨表面的同时,心部仍保持高韧性。传统认知中,渗碳所用的碳源必须要先分解成活性碳原子,然后才能在浓度梯度驱动下,以单个原子的形式扩散进入铁晶格并间隙固溶其中,过饱和后以碳化物或石墨的形式析出。然而,进入的碳因形核困难,无法以最理想的强化相——金刚石出现。由此引发了一个科学上的创新思考:金刚石小颗粒有没有可能像上述碳原子一样,整体进入钢铁晶体中,并且保留金刚石结构。为验证这一设想,我们以金刚石纳米颗粒和高纯铁及低碳钢为对象,利用原位透射电子显微镜对加热过程中金刚石的运动过程进行实时观察:当表面附着有金刚石颗粒的钢铁被加热到一定的温度后,其表面氧化膜首先发生分解,暴露出新鲜的铁原子。然后这些铁原子迅速向上扩散覆盖金刚石颗粒的表面,并在界面处形成高达 GPa 量级的毛细应力,金刚石颗粒在此力驱动下被快速“吞没”进钢铁基底中。将分散良好的纳米金刚石覆于工业纯铁、低碳(低合金)钢(如 20 钢、20C 钢)等材料表面,并在普通真空炉中进行加热。冷却至室温后发现:金刚石颗粒能够大量进入到钢铁内部,并且深度可达到纳米金刚石颗粒自身尺寸的数千倍以上(毫米级)。结合第一性原理计算、蒙特卡洛模拟及多维度表征,进一步揭示了纳米金刚石颗粒在钢铁晶体内部运动的微观机制:高温和铁的催化作用下,金刚石表面发生石墨化并部分溶解,在钢铁基底中及纳米金刚石颗粒周围分别形成长程和局部的碳势梯度。在此化学浓度梯度驱动下,金刚石周围的铁沿着金刚石和基底的界面不断上涌并形成一个向下局部应力,“推动”着金刚石前进。正是金刚石表面的石墨层为铁原子的界面扩散提供了一个快速通道,使得铁原子沿此通道向上运动的速率能够高于铁晶格中碳原子向下迁移的速率。由于纳米金刚石具有超高强度、热导率、化学稳定性与低热膨胀系数、低摩擦系数、超高等特点,是一种理想的金属强化粒子。基于上述发现,将纳米金刚石渗入进钢铁材料中,形成钢铁和金刚石的梯度复合材料,可大幅改善钢铁的表面性能,如硬度,导热性和耐磨性等。该研究不仅揭示了一种固体中新的物质传输方式,同时也为制备金刚石强化的梯度钢铁材料提供了新的思路。

## E02-18

### 非化学计量 Ba<sub>1+x</sub>(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3+x</sub> 微波介电陶瓷畴界面结构解析与性能调控

刘洋洋

西北工业大学

**摘要内容:** 微波介质陶瓷是微波谐振器、滤波器、双工器、天线以及基板等微波通讯核心元件的关键材料,不同尺度的结构、微结构特征对于微波介质陶瓷介电损耗存在重要影响。本研究以具有超低介电损耗的 1:2 有序 Ba(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3</sub> 陶瓷作为研究对象,系统地研究了 B 位 1:2 有序复合钙钛矿陶瓷的阳离子有序类型和有序畴特别是畴界面特征对其微波介电性能的影响。采用传统固相反应法成功制备了 Ba<sub>1+x</sub>(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3+x</sub> (x = -0.02 ~ 0.02)微波介质陶瓷,所有陶瓷均合成了有序单相,空间群 P-3m1。随着 Ba<sup>2+</sup>含量的增加有序度逐渐下降,有序畴尺寸逐渐减小。非化学计量显著影响有序畴的尺寸和分布,偏离化学计量越多,畴尺寸不均匀性越强。x = -0.01 的 Ba<sub>1+x</sub>(Mg<sub>1/3</sub>Nb<sub>2/3</sub>)O<sub>3+x</sub> 陶瓷样品的有序畴尺寸及分布最均匀。通过高分辨双球差电子显微镜进一步对其畴结构进行细致研究,晶内有序畴由临近晶界的大尺寸有序畴和晶内纳米畴组成。大尺寸畴由反相畴界分隔,反相畴界上存在 5-10 个原子层的无序,这是有序畴界带来介电损耗的起源。纳米畴内部由无序和孪生畴组成。畴界面分三类,A、B 型孪生畴界面和 C 型界面。A、B 型孪生面分别<100>c 和<110>c。孪生畴界面沿<100>c 和<110>c 滑移使得整体界面呈现曲面。A 型

畴界面存在过渡相，过渡相在  $1/3(001)c$  和  $2/3(001)c$  方向出现新微弱超结构衍射斑点，形成  $\langle 001 \rangle c$  方向的有序，这在 1:2 有序钙钛矿体系中首次发现新的相结构。过渡相  $Mg:Nb \approx 1:1$ ，成分不平衡、电荷不平衡导致八面体畸变。在从高对称相位到低对称相位的相变过程中，由于缺少对称元素而形成了丢失元素对应的界面，界面中携带着相变的信息。通过畴结构、畴界面原子组态的精细表征，推测出了  $Ba(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$  陶瓷的相变过程和有序畴生长机制。有序畴生长机制：晶界附近成分波动，有序相首先形核长大，有序畴长大前端形成的成分波动导致次级有序相形核长大。非化学计量调节了  $Ba(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$  陶瓷微结构的均匀性，从而提升了品质因数。贫 Ba 显著降低了  $Ba(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O_3$  陶瓷的烧结温度并提升了品质因数近一倍。本研究的重要发现可为有序钙钛矿微波介质陶瓷的微观结构表征和性能调控提供有效参考。

## E02-19

### 溶剂热合成具有多相界面复合的二维纳米片及其磁性研究

夏宝瑞

兰州大学

**摘要内容：**近年来，诸如  $CrI_3$ 、 $Cr_2Ge_2Te_6$  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 ( $Cr_xTe_y$ ) 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。本实验以  $Cr(CO)_6$  和 Te 为前驱物，利用溶剂热合成法制备了  $Cr_2Te_3$  纳米片材料。实验中通过控制前驱物的比例和反应条件，制备了不同厚度的  $Cr_2Te_3$  纳米片。并对制备所得的  $Cr_2Te_3$  晶体的形貌、晶体结构进行了研究和表征。原子力显微镜测试结果证明了我们通过前驱体的比例成功地改变了  $Cr_2Te_3$  材料的厚度。并通过实验发现当平均厚度分别为 3.6 nm 和 13 nm 时， $Cr_2Te_3$  的 TC 值分别为 180 K 和 250 K。在此基础上，我们通过在驱物中添加  $Fe(CO)_5$ ，经过一步反应制备了  $Cr_2Te_3@FeTeX$  系列异质结，即  $Cr_2Te_3$  与  $FeTeX$  自然堆垛形成的垂直异质结构。通过表征分析，我们发现随着前驱体中  $Fe(CO)_5$  含量的增加， $FeTeX$  发生了从铁磁  $FeTe_2$  到反铁磁  $Fe1.125Te$  的相变。与此同时，我们也通过磁性测试结果看到  $Cr_2Te_3$  与  $Fe1.125Te$  形成的异质结中存在着明显的交换偏置效应，交换偏置场 Hex 可以通过  $Fe1.125Te$  反铁磁相的增减来实现有效的调控。此外，我们通过溶剂热合成法制备了具有多相结构的二维过渡金属硫族化合物，并通过实验手段，通过构建多相异质界面的方式，调节了材料的磁性，验证了多相结构对它们磁性的影响作用。

## E02-20

### 锂离子电池电极材料的原位透射电镜表征

吴劲松

武汉理工大学

**摘要内容：**锂离子电池电极材料在充放电过程中会发生复杂的结构、缺陷和成分上的变化。该研究以高镍正极和硅氧负极材料为例，采用高分辨原位电子显微学，分析了材料在充放电时的动态结构变化。在电极材料的充放电过程中，随着锂离子的嵌入和脱出，电化学反应产生的应力会在材料中产生相应的应变。其中塑性应变的积累会在材料中产生微裂纹，导致高镍正极的失效。随着原位电镜技术的发展，使得人们可以在高分辨率下，观察和研究锂离子电池电极材料在充放电时动态的结构变化。我们利用原位电子显微学研究了高镍正极材料中微裂纹产生的本征机制，以及具有不同纳米结构的硅氧负极在充放锂时的结构变化。这为揭示电极材料在充放电过程中的电化学反应机制提供了新的视角，为发展制备高性能电极材料的新方法提供了一些理论依据。

## E02-21

### 原位电镜研究金属离子电池的固液界面输运动力学

章炜

南开大学

**摘要内容：**金属离子电池中普遍存在电极-电解质界面处的离子传输缓慢问题。以钠离子电池为例，由于其

遭遇界面动力学问题，电池在快速充电或低温运行时经历快速的容量衰减。一种激动人心的改性策略是构建类神经元电极，以模拟神经系统中的快速信号传输模拟。然而，人们认为这些仿生设计仅通过碳网络改善了电极的电子/离子传输能力，而不是电极-电解质界面处的电荷转移。我们通过将碳纳米管的开口与碳包覆  $\text{Na}_3\text{V}_2\text{O}_2(\text{PO}_4)_2\text{F}$  正极颗粒的表面连接，可以使用碳纳米管捕获从颗粒中释放的  $\text{Na}^+$  离子。通过原位电子衍射和成分分布分析发现， $\text{Na}^+$  运动仅限于类神经元正极内部，消除了电解质与正极之间的离子传输。结果，与未修饰的正极相比，界面电荷转移电阻减少了 14 倍，从而实现了在高达 100C 的倍率下的快速充电性能和优异循环性能。并且在没有电解质改性的情况下，电池可在低至  $-60^\circ\text{C}$  的低温下可逆运行，超过了迄今为止报道的其他电池类型。由于在过去 200 多年内，电池运行一直依赖于电极-电解质界面的电荷转移，我们的方法摒弃了这一传统的离子传输模式，为构建可在恶劣条件下工作的高性能电池开辟了道路。

## E02-22

### 电化学固液界面结构与电荷存储聚集反应新机制

廖洪刚

厦门大学

**摘要内容：**自主开发研制了多种原位透射电镜芯片反应器和控制系统，将气液体流场、电光热力控制与测量引入纳米芯片反应器，突破了电化学原位显微表征分辨率低及真实反应条件难实现的两大瓶颈，实现了多个反应体系的原子尺度实时成像及动态反应过程追踪。实现了原子分辨固液界面动态成像，发现界面富集相新结构，毫秒级高时空分辨追踪单离子动态及输运过程，发现溶液中离子跳跃运动模式及亚纳米通道中锂离子超致密输运新现象。探究电化学界面反应过程，首次发现了锂硫电池电荷存储聚集反应新机制，揭示出在传统的电化学界面“内球反应”和“外球反应”机制外存在第三种“电荷存储聚集反应”新机制，为下一代电池设计提供指导。原位液相电镜可从原子分子尺度高分辨实时成像并获取相关材料电化学固液界面结构及价态的高空间分辨率信息，突破了过去电镜只能看真空中“不会动”的静止样本，实现了对材料微观反应动态过程的成像，从而使微观领域研究从静态跨入动态的新阶段，为深入研究化学、材料基础及应用提供了一个新的视角。

## E02-23

### 使役环境下光电及光催化材料与器件表界面失效机制

卢岳

北京工业大学

## E02-24

### 前沿电镜技术在材料表征上的进展和突破

张楨

赛默飞世尔科技（中国）有限公司

## E02-25

### 催化材料的生长与腐蚀的原位显微研究

邬剑波

上海交通大学

**摘要内容：**催化材料是发展绿色氢能制备和利用技术的核心材料。但面临着利用率不高、活化难和寿命短的难题。本报告提出“催化界面力电耦合”的研究思路，针对晶格界面失配大原子层生长困难、界面电子耦合复杂、界面失活机制不明的科学问题，聚焦界面生长模式、界面应变电子耦合效应、界面腐蚀动力学机制三个方面，系统开展了高活性催化材料的设计与制备研究：（1）揭示了枝状/扩散复合生长新机制，建立了生长和扩散的动力学动态平衡模型，液相原子沉积技术，实现了 1-3 层原子的可控生长；（2）阐明了晶格磷化应变效应和应变诱导电荷极化分离机制，揭示了应变主导的界面活化原理，开发了可逆掺/去磷应变调控技术；（3）揭示了纳米界面腐蚀失活机制，提出了微纳曲率应变钝化的抗腐蚀策略，催化活性损失从

49%下降到 9%，为金属基电催化材料失效机制和微纳腐蚀的普适性研究发展奠定了基础。

## E02-26

### ZIF 衍生催化剂的透射电镜三维重构与三维多孔结构设计

柯小行

北京工业大学

**摘要内容:** 基于热解 ZIF 策略得到纳米催化剂，应用于 ORR, OER 等电催化反应，在近年来获得较多关注与研究。ZIF 具有高比表面积、丰富的结构可调性和成分可调性、合成制备容易且成本较低等优点。而 ZIF 热解之后可作为良好的催化剂载体，其结构中的氮与碳形成氮掺杂碳，与金属中心形成高催化活性位点；与此同时，热解之后得到的多孔结构与石墨化碳，不但利于电子传输与传质，而且能负载更多的金属纳米颗粒，因此具备优良的催化性能。虽然通过热解 ZIF 来获得催化剂已经开展了部分研究，但是热解温度的选择仍具有一定的经验性，且在不同的研究中形成不同的结果。因此热解作为最重要的条件，在 ZIF 热解过程中对其微结构演变与对应的催化性能关系的影响，尚缺乏机理研究。本工作应用透射电子显微镜，结合原位加热与三维重构分析方法，以 ZIF-67、ZIF-8 及 Co-Zn-ZIF 为模型材料，研究不同结构在不同温度、不同升温曲线过程的微结构变化，以探求热解策略对催化性能影响的机理。研究发现，ZIF-67 在热解过程中经历了 ZIF 结构坍塌、N 的流失，Co 由单原子析出向纳米颗粒长大，以及等级孔的形成与合并长大等阶段，而每个阶段的微结构分别与催化活性中心的演变和载体的传质/电子传输性密切相关。ZIF-8 具有更高的热稳定性，Zn 的挥发与其微孔结构相关联。在深入研究机理的基础上，我们提出了不同催化剂设计策略：(1) “低温热解”策略中，降低热解温度至 550 摄氏度，便能够有效减少 N 的挥发、抑制 Co 原子的长大、并形成丰富的等级孔，实现了非贵金属基催化材料 ORR 性能的提升；(2) “扩散调控的还原策略”中，调控 Co-Zn 比例设计不同多孔结构及双载体，实现了双单原子-双载体的结构，进一步提升 ORR/OER 性能。

## E02-27

### 原位液相和气相电镜在纳米尺度探索纳米催化剂的工作机理

朱叶

香港理工大学

## E02-28

### 精准组装构筑复杂纳米颗粒超晶格材料

李同涛

复旦大学

**摘要内容:** 纳米颗粒的自组装是实现其宏观尺度实际应用的重要途径，有望获得大幅提升的、甚至是突破功能基元本身的颠覆性材料性能。纳米自组装一个重要发展方向在于将不同尺度、不同维度及不同物种的基元组装为复杂超晶格功能材料。然而，不同类型基元不兼容带来的组装相分离是目前自组装领域亟待解决的关键科学问题之一。为此，我们提出了基于分子配体工程的核心策略，从分子尺度平衡了不同基元及体系间的差异性，打破了不同类型基元难以协同组装的壁垒；发展了多种普适性组装方法，驱动了纳米颗粒的精准有序组装，构筑了一系列多级次超晶格材料，并揭示了组装规律和机制；在此基础上，利用多级次超晶格材料的结构优势，从介观-纳米-原子尺度揭示了其在光电器件应用中的构效关系，推动了复杂超晶格材料在光电化学领域的应用。

## E02-29

### 卤化物钙钛矿材料与光伏器件的扫描透射电子显微研究

蔡嵩骅

香港理工大学

**摘要内容:** 作为获得广泛关注的新型半导体材料，卤化物钙钛矿不仅具有优异的光-电特性，同时合成简便，

有望大幅降低太阳能电池的使用成本。然而受限于卤化物钙钛矿对多种环境因素的敏感性，钙钛矿太阳能电池的使用寿命相比硅太阳能电池还存在较大差距。因此，有必要深入了解卤化物钙钛矿不稳定性的结构来源。尽管先进透射电镜可以揭示原子尺度的结构信息，但卤化物钙钛矿在高能电子束下的不稳定性使得相关研究依然面临挑战。为提高卤化物钙钛矿对电子束辐照的耐受能力，我们通过沉积超薄碳膜对聚焦离子束制备的钙钛矿太阳能电池截面样品进行了后保护处理，优化了 STEM 表征的成像条件。结合低剂量成像，我们揭示了卤化物钙钛矿晶粒内部存在的组分界面，堆垛层错界面和孪晶界面的原子结构及潜在电子特性。此外，为实现对卤化物钙钛矿薄膜平面样品的高质量表征，我们开发了液相转移法用于在多种衬底上制备完整且均匀的卤化物钙钛矿薄膜透射电镜样品，克服了直接在透射电镜载网上旋涂薄膜可能遇到的成膜性差的问题。为了研究卤化物钙钛矿在外界刺激下的结构演化过程，我们优化了透射电镜原位光照测试平台的相关设计，对无机卤化物钙钛矿薄膜进行了光照条件下的原位和准原位电镜观察。在光致降解过程中，卤化物钙钛矿内部首先出现纳米尺度的碘化铅颗粒，并随着光照时间的累积而不断扩展。碘化铅颗粒的产生也会引入较大的晶内应力，可能影响卤化物钙钛矿的性能。在对实际钙钛矿太阳能电池器件的有机/无机杂化钙钛矿光吸收层的高分辨 STEM 表征中，我们发现合适条件的电子束扫描可以有效修复钙钛矿晶粒内部的碘化铅等纳米尺度杂相。利用这一独特的自修复现象，我们进一步探索了利用激光扫描消除卤化物钙钛矿薄膜在合成及储存过程中晶粒内部产生的杂相纳米颗粒的方法。这一激光修复方法适用于较大面积的钙钛矿太阳能电池组件，实现了对老化过程中器件的性能修复和寿命提升。

### E02-30

#### 高容量硅基负极界面表征与调控

杨卢奕

北京大学深圳研究生院

**摘要内容：**高比容量硅基负极的应用已成为提升锂离子电池能量密度的重要途径之一。然而，在充放电过程中，硅基材料经历着巨大的体积变化，不仅可能导致硅颗粒与导电网络脱离，还可能使得硅基负极表面的固体电解质界面（SEI）层老化，引发容量衰减。本研究通过多种表征手段的联合应用，对负极界面的结构演化进行了表征，揭示了硅基颗粒表面SEI生长和演化的过程，并提出了由于SEI老化导致颗粒界面导电网络坍塌的失效机制。基于以上认识，我们首先通过电解液优化，在硅基负极表面原位构筑了一层薄而稳定的SEI，旨在提升锂离子传输的同时，也能够适应负极的体积变化。此外，还结合了导电粘结剂的设计，在硅基负极构筑了一个兼顾导电性与力学性能的高分子粘结网络，既能抑制极片的不可逆体积膨胀，又能提供额外的导电网络。

### E02-31

#### 神奇的点缺陷复合体：反常强化、氧脆和辐照生长

韩卫忠

西安交通大学

**摘要内容：**高能粒子辐照、塑性变形在金属材料内部产生大量缺陷，包括空位、自间隙原子、位错环、位错线、氦泡和空洞等。晶格缺陷的进一步演化会造成金属材料的硬化、脆化和形状改变。研究发现，除了以上常见的晶格缺陷外，一种由空位和异质间隙原子组成的复合体在金属材料的强化、脆化、辐照生长和相变形核等方面发挥着关键作用。本报告将以氦-空位复合体、氧-空位复合体和氢-空位复合体为例，介绍点缺陷复合体在引起金属钨的反常辐照硬化、铌等第五副族金属的氧脆和锆的辐照生长中的关键微观缺陷机制。点缺陷复合体尺度小，密度高，对金属材料性能有重要影响，是一种难以探测的金属“暗物质”新形式，需引起足够重视。

### E02-32

#### 原位电镜在工程结构材料中的应用

逯文君

南方科技大学

**摘要内容:** 超高强结构材料（金属与陶瓷）是汽车、高铁、航空航天、高精密机床、海洋机械、核电、建筑、电子等领域占领国际高端市场的关键支撑之一。传统结构材料存在强韧性对立、结构热稳定性偏低及轻质元素易扩散等问题，给进一步提升其强韧性能、稳定性、抗腐蚀性等方面带来一系列挑战。本工作致力于结构材料的亚稳化、高强稳定化及多维表征技术的研究，在亚稳多主元合金的强韧化设计、新型高温用材料的开发、以及多维电镜表征方法三方面取得了一系列创新性的研究成果。

### E02-33

#### 金属氧化物纳米晶表面动态演变原位研究

袁文涛

浙江大学

**摘要内容:** 金属氧化物纳米晶在催化领域尤为引人注目，它不仅展现出卓越的催化性能，还常被用作催化剂的理想载体。纳米催化材料在能源、环境等化工领域扮演着举足轻重的角色。其中，作为与外部环境直接互动的的基本单元，材料的表面特性对其性能有着决定性的影响。然而，当前对金属氧化物纳米材料表面特性的认知尚存不足，这主要源于其表面结构的复杂性和在反应环境下与外部环境（如气氛）之间复杂的相互作用。为了深入理解催化机理、构建原子水平的构效关系以及设计高性能催化剂，我们需要从原子、分子层面揭示纳米催化材料在反应气氛环境下的表面动态结构演变规律。近年来环境透射电子显微学（ETEM）技术的兴起，为我们提供了一个前所未有的机遇，在多场耦合环境（如热、电、力等）下原子水平原位观察材料微观结构的动态演变；从而跨越“材料鸿沟”和“压力鸿沟”，揭示反应环境下纳米催化材料表面的动态演变规律。在本次报告中，将重点汇报近期利用原位电子显微学方法，在气氛等外场环境下，对金红石  $\text{TiO}_2$  (110)表面、 $\text{SnO}_2$  (110)表面、 $\text{CeO}_2$  (100)等表面重构行为的研究进展。

### E02-34

#### 铝合金微观结构-机械性能的原位高通量表征分析

但承益

上海交通大学

**摘要内容:** 材料的失效行为，对于其服役性能评估至关重要。然而，多晶材料内晶粒取向复杂、微观结构不均匀且随时间实时演化，传统非原位实验手段难以对其失效行为进行全面且准确地评估。本研究通过结合多尺度原位表征和高通量机器学习算法，实现对材料失效行为的系统性研究。针对锻造铝合金，结合原位 EBSD 拉伸实验和高通量算法，系统揭示了铝合金中多种裂纹萌生/裂纹扩展与晶粒取向的映射关系，提出了可预测材料裂纹扩展的判定规律；针对增材制造铝合金，结合原位微纳力学测试、原位 CT 和有限元模拟等方法，首次揭示了三维微纳双相网络结构可以抑制金属疲劳裂纹萌生的新机制，三维微纳双相网络结构的本征疲劳强度可以达到抗拉强度的 85%以上，突破了金属材料疲劳强度不足的瓶颈。

### E02-35

#### Mg-La 合金中 $\beta''$ /Mg 界面性质和断裂行为的第一性原理研究

李岩

西北工业大学

**摘要内容:** Mg-La 合金由于其出色的高温强度、蠕变性能和耐蚀性，越来越受到汽车工业的关注。这些性能的改善主要归因于 La 原子的一系列析出行为所诱导的显著的沉淀强化。 $\beta''$ 相由于与 Mg 基体完全共格，被认为是一种很有前途的析出强化相。然而关于 Mg-La 合金中  $\beta''$ 析出相的报道仅处于表征阶段，其对 Mg-La 合金的力学性能有何影响目前尚不明确。深入研究  $\beta''$ /Mg 界面特征是提高 Mg-La 合金塑性和强度的有效策略。本研究对目前报道中 HAADF-STEM 观察到的  $\beta''$ /Mg 界面三种不同取向关系  $\beta''(0001)//\text{Mg}(0001)$ 、 $\beta''(11-20)//\text{Mg}(11-20)$ 和  $\beta''(-1010)//\text{Mg}(-1010)$ 进行了系统研究。通过第一性原理方法系统地研究了这三种不同取向  $\beta''$ /Mg 界面的粘附功、稳定性、电子结构和拉伸断裂行为。基于粘附能选择了不同取向界面的最佳界面构型和间距。结果表明  $\text{Mg1-T4-}\beta''(-1010)$ 构型具有最强的界面结合能力，并且该界面构型与报道中的 HAADF-STEM 观察结果一致。所有研究的界面都是热力学上稳定的。为了深入了解电子结构对界面结合

的影响,选取了不同取向向下粘附功最大和界面能最低的界面模型,研究了它们的分波态密度(PDOS)和电荷密度差(CDD)。PDOS 分析表明,界面附近的 Mg 原子与层内的 Mg 原子之间的原子轨道杂化存在差异,导致 Mg-Mg 金属键和 Mg-La 异金属键的形成。进一步的 CDD 分析揭示了 Mg-Mg 金属键的存在,以及 Mg 和 La 原子之间更紧密的电子云,表明对界面强度有很强的贡献。为了更深入地了解  $\beta''$ 相与 Mg 基体之间的界面结合强度,对三种不同取向的界面进行了第一性原理计算拉伸试验。三种界面在不同的强度和应变下表现出不同的力学性能,受原子取向和排列的影响。Mg(0001)- $\beta''$ (0001)界面的强度最高,为 3.44 GPa,应变为 12%,而 Mg(11-20)-Ti- $\beta''$ (11-20)界面的应变较高,为 16%,但强度较低,为 1.68 GPa。电荷密度分布分析表明,当应变达到一定程度时,由于 Mg 和 La 之间的结合强度不足,界面处的断裂发生在 La 原子附近, $\beta''$ 相的延展性影响了界面的塑性变形能力。这些发现为 Mg-La 合金的析出相界面提供了新的见解,并可指导其在各种应用中的性能优化。

## E02-36

### Mg-Nd-Ca 合金时效析出行为研究

陈厚文

重庆大学

**摘要内容:** 在 Mg-Nd 合金中添加 Ca 可以显著提高其时效硬化效果,并缩短到达峰值硬度的时间。目前对 Mg-Nd-Ca 合金时效过程中析出相的演变规律还缺乏系统深入的研究。本工作利用原子分辨 HAADF-STEM 技术对不同时效阶段 Mg-2.5Nd-0.6Ca (wt.%) 合金中析出相的特性进行了分析。在峰值时效合金中,发现  $\beta_1$  相与基面相和 Mg<sub>2</sub>Ca 相连接,形成直链状形貌析出相。棒状相  $\beta_1$  呈珊瑚状分布在由基面相和 Mg<sub>2</sub>Ca 相组成的盘状析出相内,沿 c 轴方向的投影表现为  $\beta_1$  相和基面相或 Mg<sub>2</sub>Ca 相的交替分布。几何相位分析和晶面错配度计算结果表明,该分布与析出相晶格弹性应变的最小化直接相关。在过时效合金中发现了 C14 和 C15 两种纳米尺寸 Laves 析出相,C14 和 C15 两种 Laves 析出相的形成都需要 Nd 原子有序替换基体中的 Mg 原子位置并在[0001] $\alpha$  方向上发生原子重组。不同的是,C14 型 Laves 相的形核过程没有切变产生,而 C15 型 Laves 相的形核则与 I1 层错密切相关。

## E02-37

### 氢促进局部塑性的晶体取向相关性与氢致界面解离

王帅

南方科技大学

**摘要内容:** 氢脆于 1875 年被发现,是金属在临氢、腐蚀、核反应堆环境中面临的严重失效现象之一。虽然经过了一个半世纪的实验和理论研究,氢脆还存在很多未解难题,尚无大一统理论的出现。近年来,“氢促进局部塑性”(HELP)理论逐渐被多数研究者接受,指出氢的存在会加速位错的演化,促进材料过早达到其可承受塑性变形的极限,是导致氢脆失效的主要原因。然而,氢促进的位错演化与断裂过程之间的联系仍不清楚,揭示氢对位错演化的影响对于全面理解氢脆的物理过程至关重要。其中一个关键的问题是氢对位错演化是否与晶体取向相关,若相关,则可以在制造过程中通过设计金属晶体取向,提升金属在氢环境中的兼容性。通过设计跨尺度的试验路线和表征手段,避免诸如表面效应、应变水平、应变速率、氢浓度和合金杂质等混杂因素对实验结果的影响,本研究系统的分析了[100]、[110]和[111]取向的充氢与未充氢纯镍晶粒的位错演化。较早揭示了氢不仅会影响位错胞状组织的大小,还会细化位错胞块组织。通过定量对比位错密度和位错组态单元尺寸,研究结果证明了氢对位错组态演化的促进作用在不同取向的晶粒中是不同的,促进程度从高到低遵循[100] > [111] > [110]的顺序。在不同取向晶粒中的位错演化行为导致晶界处变形无法协调,影响材料在含氢条件下的变形和开裂行为。研究揭示了氢对位错演化促进作用与取向相关,并建立了其与提前失效的关系。这些发现为抗氢脆金属部件的设计和制造提供了新的路线与理论指导。

## E02-38

### 异质界面微区的多尺度结构调控及微纳力学研究

郭晓雷  
黄淮学院

**摘要内容:** 结构调控是材料发展的一贯趋势,而合适的结构调控空间是获得高性能的关键。异质界面这个集合了应力场、原子力场、热场、电场、磁场的区域可以为材料的结构调控提供多场耦合的“奇异的空间”。启迪于聚焦离子束技术的微区刻蚀及微纳力学的微尺度力学表征功能,本团队长期致力于金属基复合材料界面结构及其力学特性研究工作,创新性地提出了利用单轴压缩具有单一倾角界面复合(SiC/Al)微柱来表征界面微区结构演化-力学特性的耦合关系,并成功获得模型用搅拌铸造态 SiC/纯-Al 的界面剪切强度  $133\pm 26$  MPa 和工程用粉末冶金态 15% vol. SiCp/2009Al 界面剪切强度  $200.3 \pm 14.2$  MPa。该方法剥离了一个单独的界面和界面微区排除了多组界面同时存在时的复杂耦合效应,为直观、准确地定量研究界面和界面微区的形变特性提供了一个绝佳的“空间”。通过这个独特的空间不但获得了界面强度还观察到了独特的界面微区形变特性,例如,Al 单晶微柱在单轴压缩下鲜有晶粒细化出现,但异质界面微区的 Al 单晶则在室温下紧凭单轴压缩即可诱导其晶粒细化,并且伴随着应力-应变曲线强度和加工硬化率的显著提高,而即使纳米厚度的 Mg 界面偏析也可显著增强 SiCp/2009Al 的界面强度和提升界面微区的抗形变能力。此外,凭借磁控溅射的原子级沉积功能在 SiC/Al 界面微区内构筑出了 Al 非晶、纳米晶、超细晶的多尺度结构,这在实际的工程材料制备中是难以实现的,且更为关键的是以该多尺度结构 FIB 刻蚀的 SiC/Al 复合微柱(直径 $\sim 3\ \mu\text{m}$ )的单轴压缩显示,30%塑性变形中最大抗压强度高达 1.7 GPa,为 Al 的纳米化及高性能化研究提供了相应参考。

E02-39

基片偏压对异质三靶高功率脉冲磁控共溅射(TiSiAlCrV)N 高熵合金薄膜微观结构与性能的影响  
林铁贵

山西农业大学

**摘要内容:** 采用三靶高功率脉冲磁控共溅射技术,通过改变基片偏压(0V $\sim$ -300V)在 65Mn 钢和(100) Si 片表面制备了(TiSiAlCrV)N 高熵合金薄膜,以实现(TiSiAlCrV)N 薄膜微观结构与性能的有效调控。采用 X 射线衍射仪(XRD)、扫描电子显微镜(SEM)、能量色散谱仪(EDS)、纳米压痕仪、摩擦磨损试验机和电化学工作站测量了薄膜的物相、成分、表面与截面形貌、力学性能和腐蚀性能。结果表明:偏压对薄膜元素组成影响不大,不同偏压所得薄膜的晶体结构均为单一的 NaCl 型 FCC 结构,且随着偏压的增加,薄膜的晶粒尺寸逐渐降低,晶格常数逐渐增大,但结晶度变化不大;薄膜的硬度和韧性均随偏压的提高而增加,最高硬度、H/E 和  $H^3/E^2$  分别为 21.9Gpa, 0.09 和 0.18Gpa;随偏压增加,薄膜平均摩擦系数变化不大,磨损率先增加后降低;薄膜在 3.5%NaCl 和土壤溶液中均具有良好的耐蚀性能,自腐蚀电压均高于 65Mn 基体,自腐蚀电流密度比 65Mn 基体低 1 $\sim$ 2 个数量级。

E02-40

钛合金氢脆机理:氢与钛自由表面的相互作用及氢化物的形成机理

曹烁

中国科学院金属研究所

**摘要内容:** 钛合金具有轻质、高强、耐腐蚀以及良好的焊接性能,在海洋工程领域具有广泛的应用前景,然而在海洋环境下的钛合金氢脆,是导致材料应力腐蚀失效的主要原因之一。钛合金的氢脆机理主要包括:氢致解理断裂、氢致局部塑性以及氢化物致脆等理论。理解氢在钛中的行为以及氢化物的形成机理是预测海洋工程用钛合金服役寿命的基础。本工作通过第一原理方法计算了 H 原子与钛表面的相互作用及扩散行为发现,氢降低了钛(0001)表面断裂功,从而诱发氢致解理断裂;同时, H 原子倾向于由基体向表面扩散及聚集,有利于在裂纹表面附近形成氢化物,导致氢化物致脆。进一步,本工作对氢化物的形成机理进行了热力学和动力学计算,研究了钛氢化合物的稳定性,揭示了氢化物的形成机制。

E02-41

金属材料的晶界塑性变形机制

王江伟  
浙江大学

**摘要内容:** 晶界是金属材料结构和力学性能调控的关键结构基元, 其原子层次的微观动力学机制是晶界塑性变形理论发展和高性能金属材料的晶界设计。本报告将系统介绍金属材料晶界塑性变形的研究进展, 通过解析阶错这一晶界本征缺陷的微观动力学行为, 阐明了晶界塑性变形的原子尺度微观机制, 基于阶错环的概念建立了三维晶界网络演化的物理模型, 进而阐释了阶错介导晶界塑性变形的动力学普适性及其对界面耦合机制的影响, 通过晶界结构设计实现了微纳结构材料的力学性能优化和损伤控制, 对高性能金属材料的界面设计具有重要理论意义。

#### E02-42

##### Design of corrosion-resistant alloys for preventing interface Cr-depletion by inclusion engineering

余开平  
香港大学

**Abstract:** Due to the preferential oxidation of Cr in various corrosion-resistant alloys, Cr-depletion extensively forms around the oxides and impairs their passivation ability. This harmful effect has been widely recognized, but available solutions are limited. Here, to prevent such oxidation-induced Cr-depletion in corrosion-resistant alloys, we proposed a general strategy based on inclusion engineering using oxygen-preferred elements in alloy design. This strategy was accomplished after a systematical and detailed investigation of the original, Si-modified, Al-modified, and Ti-modified CoCrFeMnNi high entropy alloys, in which the inclusion-matrix interfaces were studied by transmission electron microscopy (TEM), energy dispersive spectroscopy (EDS), and energy electron loss spectroscopy (EELS), and corrosion resistance was measured by potentiodynamic polarization (PDP). The underlying mechanism was elucidated by thermodynamic analysis, and its application was discussed using three newly-developed alloys. The prominent inclusions of the four alloys were identified as  $MnCr_2O_4$ ,  $MnO-SiO_2$ ,  $AlN$ , and  $TiN$ , respectively. Nano-scale Cr-depletion was generated around the inclusion-matrix interface in the original alloy. However, all modified alloys prevented the this Cr-depletion with improved corrosion resistance; however, the Si-modified alloy exhibited the most remarkable improvement due to few nitride by-products. Thermodynamic analysis on the free energy changes of potential reactions revealed that all the additives were preferential to be oxidized over Cr, whereas Al and Ti nitridation reactions have the most negative free energies compared to all oxidation reactions, which validated experimental results. From experiments and thermodynamics, an effective method was proposed, and its application was discussed with three newly-designed alloys prepared using arc melting.

#### E02-43

##### Understanding plastic deformation in boron carbide ceramics using advanced electron microscopy techniques

宁守琮  
中国科学技术大学

**Abstract:** Plastic deformation involves irreversible shape changes in materials under external forces, pivotal in manufacturing and enhancing mechanical properties. However, unlike metals, plastic deformation is rarely observed in ceramics due to the strong and directional covalent bonds that typically lead to catastrophic failure. In this study, using in situ transmission electron microscopy (TEM) experiments and atomistic simulations, we observed the vacancy-mediated plastic deformation in boron carbide ( $B_4C$ ) ceramic nanobelts during the tensile straining process. The presence of C-v-C chains with B vacancies in the  $B_4C$  crystal structures has been uncovered using four-dimensional scanning transmission electron microscopy (4D-STEM). Furthermore, we discovered that lattice distortion resulting from the formation of C-C bonds from chains with B vacancies under stress leads to nearly 20% plastic deformation beyond the elastic limit. This research sheds light on the plastic deformation mediated by

vacancies in B4C and provides a potential strategy for increasing the plasticity of strong covalent ceramic materials.

#### E02-44

##### 晶界工程对无氧铜导电率-强度关系及热稳定性的影响

秦铁键

东北大学

**摘要内容:** 无氧铜作为关键的导电导热材料,在轨道交通、航空航天、节能与新能源汽车等领域应用广泛。无氧铜中的晶界是影响其导电性的主要因素,而不同类型晶界对导电率的影响可能存在差异。鉴于此,本工作通过基于形变热处理的晶界工程改善其导电性及热稳定性,并通过拉伸性能测试考察了晶界工程对无氧铜力学性能的影响。结果表明,对基态无氧铜(50%冷轧+650°C/10min)进行一步或多步5-10%冷轧和550-700°C/5-30min退火的形变热处理,可大量引入以退火孪晶界为主的特殊晶界( $\Sigma \leq 29$ 晶界),其比例由60.3%提升至80.4%。晶界特征分布优化在一定程度上改善了无氧铜的导电性,其导电率从100.12%IACS上升至100.75%IACS;此外,通过对非晶界工程和晶界工程样品进行550-650°C不同时间(6h、12h、24h、48h)保温,探究了晶界工程对无氧铜组织热稳定性的影响;结果显示,在550°C、600°C和650°C下保温6h时,非晶界工程样品中即出现了个别晶粒异常长大现象,而晶界工程样品在同样的温度下保温至48h,显微组织中均未出现晶粒异常长大行为(注:统计晶粒尺寸时,平均晶粒直径超过2倍平均晶粒尺寸的视为异常长大晶粒)。对比晶界工程和非晶界工程无氧铜平均晶粒尺寸随保温时间的变化规律发现,晶界工程样品晶粒尺寸随保温时间延长的增大速率明显小于非晶界工程,表明晶界工程引入的大量低能特殊晶界,有效抑制了无氧铜在高温下的晶界迁移,改善了其热稳定性。对比两状态无氧铜拉伸性能发现,晶界工程处理稍微降低了材料强度,屈服强度从56MPa下降至50MPa,抗拉强度从203MPa下降至199MPa;塑性得到改善,其均匀伸长率由43%提升至48%,总伸长率基本保持不变。以上结果表明,在强塑性变化不大的情况下,晶界工程可在一定程度上提高无氧铜的导电率和热稳定性。

#### E02-45

##### 形变热处理对 Fe-10.5Cr 低铬铁素体不锈钢组织、织构和晶界特征分布的影响

姜秀娇

东北大学

**摘要内容:** 由于全球镍资源匮乏,奥氏体不锈钢的发展和应用受到制约。相比之下,铁素体不锈钢成本低,在家用电器、汽车、建筑和工业生产等领域得到了广泛应用。本文通过电子背散射衍射技术研究了形变热处理后 Fe-10.5Cr 低铬铁素体不锈钢组织、织构和晶界特征分布的演变,为探索形变热处理工艺对其性能的影响提供基础。Fe-10.5Cr 低铬铁素体不锈钢在高温下存在铁素体单相区、奥氏体单相区和铁素体-奥氏体两相区,在不同温度下进行热处理得到不同的组织。当冷轧压下量达到80%时,经800°C不同时间保温后空冷的样品,形成单一铁素体相, $\alpha$  织构强度低于 $\gamma$  织构,小角晶界( $\Sigma 1$ )和低 $\Sigma$ CSL晶界比例无明显变化。当热处理温度升高,经870°C保温3分钟后空冷的样品,形成铁素体和马氏体两相,马氏体的形成使 $\alpha$  织构的强度高于 $\gamma$  织构,并且小角晶界和低 $\Sigma$ CSL晶界比例增加,其中小角晶界比例达到了32.8%。 $\alpha$  织构的增强和小角晶界比例的增加与马氏体相变的发生密切相关。

#### E02-46

##### Diffusion controlled early-stage L12-D023 transitions within Al<sub>3</sub>Zr dispersoids

潘士伟

北京理工大学

**Abstract:** Antiphase boundary (APB) in Al<sub>3</sub>Zr was regarded to play an important role in the L12-D023 phase transition, the formation of which has long been explained through the shearing/slipping mechanism. Herein, the detailed atomic structures of conservative {100} APBs within L12-Al<sub>3</sub>Zr particles forming at the early-stage of L12-D023 transition in an Al-Zr alloy were systematically studied by high angle annular dark-field scanning transmission electron microscope (HAADF-STEM). As a strong evidence of diffusion-limited phase transformation process,

significant de-ordering of atoms in APBs and the neighboring atomic planes have been found. By analyzing the two possible pathways, it is suggested that L12-D023 phase transition has been achieved through a diffusion mechanism, instead of shearing mechanism while the formation of APB is an intermediate stage of the phase transition process. First principles density functional theory (DFT) reveals that the formation of APBs and subsequent phase transition are energetically favorable, which provide the driving force for diffusion.

#### E02-47

##### The influence of grain boundary engineering on the grain boundary characterization distribution of LPBFed IN718 alloy

丁小岑  
上海交通大学

**Abstract:** This research investigates the impact of grain boundary engineering (GBE) on the grain boundary characteristics of IN718 alloy processed via laser powder bed fusion (LPBF). Two distinct heat treatments were administered to the samples, and grain boundary characterization distribution was analyzed using stereopology method based on electron backscatter diffraction (EBSD) results. Despite both samples exhibited a notable presence of  $\Sigma 3$  grain boundaries, distinct interface features were observed following each heat treatment. The sample subjected to homogenization treatment (1080°C/1h) followed by aging (720°C/8h + 620°C/8h) displayed a higher occurrence of coherent twinning boundaries, while the sample treated with solutionizing (980°C/1h) added in between exhibited fewer coherent twinning boundaries. Microstructural analysis by SEM and TEM revealed the precipitation of the  $\delta$  phase along grain boundaries in the solutionized sample, accompanied by further recrystallization during the solutioning process, resulting in modified grain boundary interfaces. Although no significant differences in macroscopic tensile properties (yield strength: ~1150 MPa, ultimate tensile strength: ~1400 MPa, fracture elongation: ~18%) were observed between the two samples, the Vickers hardness of the sample with  $\delta$  phase precipitation was approximately 50 HV higher than that of the unsoluted sample (~450 HV). Moreover, both the mechanical properties and hardness of the grain boundary engineered samples were significantly superior to those of the as-manufactured sample (yield strength: ~800 MPa, ultimate tensile strength: ~1050 MPa, fracture elongation: ~24%, Vickers hardness: ~350 HV). These findings suggest that post-GBE has a remarkable effect on the additive manufacturing process, highlighting its potential for enhancing the mechanical performance and hardness of LPBFed IN718 alloy components.

#### E02-48

##### GaN 异质材料与肖特基二极管

王文梁  
华南理工大学

**摘要内容:** GaN 肖特基二极管是新能源汽车、军用雷达等的核心器件之一。然而，目前发展面临如下瓶颈问题：一方面，GaN 材料缺陷密度高，导致器件漏电流较大；另一方面，由于异质材料费米能级钉扎效应导致势垒高度不可变，致使器件整流比较低和开启电压较高。针对解决上述问题，开展了 GaN 异质材料调控与肖特基二极管制备研究。首先，提出了 PLD 结合 MOCVD 两步生长法，将 GaN 外延薄膜缺陷密度从  $10^{10}$  降至  $10^7$   $\text{cm}^{-2}$ ；其次，采用 CVD 制备了大面积  $\text{MoS}_2/\text{GaN}$  异质材料，其横向尺寸突破 0.3 mm；最后，基于该异质材料构建并制备了势垒可调的 MOS 结构  $\text{MoS}_2/\text{GaN}$  肖特基二极管，器件漏电流降低至  $10^{-7}$   $\text{A}/\text{cm}^2@-1$  V，高整流比  $2.74 \times 10^7$ ，开启电压低至 0.75 V。该研究作为高效整流应用的肖特基二极管制备提供了思路。

#### E02-49

##### 高熵合金纳米材料结构表征与生长机理

郝晓东

## 陕西科技大学

**摘要内容:** 贵金属基高熵合金 (NM-HEA) 纳米材料因其多样的组成和复杂的表面原子结构在催化领域中展现出巨大的潜力。然而, 理解其形成机制以及在原子尺度上精确控制元素组分和晶体结构仍然面临巨大挑战。本文提出了一种简便、成本效益高且通用的合成技术, 将喷雾干燥与热分解还原法 (SD-TDR) 相结合, 成功合成了一系列 Pt 基和 Ir 基的高熵合金纳米材料。利用扫描电子显微镜、透射电子显微镜、X 射线衍射、X 射线光电子能谱等技术, 对合成的 HEA 纳米材料进行形貌、相结构、元素分布及表面电子价态的表征。研究发现, 贵金属 Pt 元素具有自催化生长机理, 即在反应过程中优先被还原出来, 而优先还原的 Pt 原子作为催化剂, 促进了其他金属元素的还原反应, 从而在低温下合成出元素分布均匀的 HEA 纳米材料<sup>1,2</sup>。此外, 贵金属元素的比例直接影响其催化性能。我们进一步探讨了通过调节贵金属 Pt (Ir) 与 Ru 元素在同一体系中的比例, 探索精确控制体系中面心立方相 (fcc) 和密排六方相 (hcp) 的比例。研究结果不仅揭示了贵金属在 NM-HEA 形成过程中的关键作用, 还提供了一种有效控制纳米材料晶体结构和元素分布的新方法。这对于开发高性能催化剂材料具有重要意义, 推动了贵金属基高熵合金纳米材料在催化领域的应用。

## E02-50

## 电子封装 BGA 微互连界面的热疲劳损伤表征与机理研究

咸经纬

大连理工大学

**摘要内容:** 热疲劳损伤对电子封装微互连可靠性构成重大挑战, 而 BGA 锡球的微观组织是影响其热疲劳抗性的关键因素, 理解 BGA 锡球微观组织演变与热疲劳抗性之间的复杂作用关系对提高电子系统的可靠性至关重要。在这项工作中, 我们量化并比较了单晶焊点(单一锡晶粒)与多晶焊点(如沙滩排球、交织孪晶等)的损伤程度; 实验分析得出锡晶粒的取向差异(即热膨胀系数差异)影响了锡焊料在热循环过程中的应力和应变分布, 导致了疲劳裂纹的萌生和扩展; 通过 EBSD 实验测得界面处晶格转动程度、结合多尺度微观力学模拟, 阐明了单晶焊点优于多晶焊点的内在机理<sup>[1]</sup>。该研究可以指导锡焊点微观组织的设计与优化, 以提高半导体电子封装材料的长期可靠性。

## E02-51

## Ti-Pt 金属间化合物组织结构与力学性能的原位电镜研究

赵北凯

西北有色金属研究院

**摘要内容:** 金属间化合物作为重要的结构材料, 其塑性变形能力有限的特点往往限制了其应用。调控合金组织结构虽然有利于合金力学性能的改善, 然而由于金属间化合物相组织复杂多样, 我们对金属间化合物相结构体系以及不同相结构对材料力学性能的影响还缺乏科学系统的认知。我们以 Ti-Pt 二元金属间化合物体系为例, 通过多尺度、原位的电子显微镜表征和三维结构分析, 系统性表征了 Ti-Pt 二元体系中金属间化合物相结构, 原位揭示了高温下  $Ti_3Pt$  相至  $\alpha TiPt$  相扩散型相变过程, 解析了具有特殊层状结构的  $Ti_4Pt_3$  相。此外, 基于合金中微观结构演化过程, 结合原位力学实验, 发现精细化的微观组织结构可赋予合金塑性变形能力, 在金属间化合物中启动位错滑移、应力诱导塑性变形、晶界旋转等多种变形机制, 赋予其塑性变形能力。并且不同变形机制间可相互作用, 共同提升材料强塑性, 进而改善金属间化合物的力学性能。

## E02-52

## 揭示 SiC/M (M=Au, Pt)界面的粘附功、稳定性和电子结构: 第一性原理研究

吴尉

西北工业大学

**摘要内容:** SiC 是一种广受欢迎的宽禁带半导体材料, 因其高硬度、高热导率和优异的化学稳定性, 已被广泛应用于高压和高频电子器件的开发。Au 和 Pt 等贵金属通常被应用于  $\beta$ -SiC 衬底上, 以形成高效的 MESFET, 从而制造出电子迁移率更高的功率器件。MESFET 器件的成功和效率从根本上与金属/半导体界

面的复杂结构和行为有关。本工作通过第一性原理计算方法研究了 SiC(111)、SiC(001)、Au(111)、Au(001)、Pt(111)和 Pt(001)面的解离能和表面能, 构建了不同端口和堆叠位置的 40 种界面模型, 以深入研究粘附功和界面能。通过分波态密度 (PDOS)、晶体轨道哈密顿布居曲线 (COHP) 和电荷密度分布 (CDD) 对 SiC/M 的界面结合行为和强度进行了定量和定性描述。结果表明, 通过对 40 个界面模型的优化, 发现了 4 种最佳界面结合, 它们具有最强的成键能力和最佳的热力学稳定性, 分别是 Si<sub>3</sub>/Au(T)、Si<sub>3</sub>/Pt(T)、C/Au(IV) 和 C/Pt(IV)界面。其中, 在 Si<sub>3</sub>/M(T)界面附近, M-Si 之间的成键主要是由 M-d 和 Si-p 轨道杂化形成的。在一定范围内, M-d 和 Si-p 轨道出现共振峰, 表明 M-Si 具有共价键特性。C/M(IV)界面也得到了类似的结果。反键态主要归因于界面和金属层之间的成键。此外, 界面上 Pt-Si 和 Pt-C 的键合强度分别大于 Au-Si 和 Au-C。C/Pt(IV)界面上的 Pt-C 键由于其优异的键合强度和电子转移特性, 有可能增强材料的电子特性。因此, 与 SiC/Au 相比, SiC/Pt 接触将是电子器件材料更有利的选择。这些发现有望在指导生产 MESFET 的金属选择方面发挥重要作用, 并最终提高器件的潜在性能。

### E02-53

#### 添加微量 Ag 元素对 Zn-22Al 钎料组织和性能的影响

翟云龙

广东省科学院新材料研究所

**摘要内容:** 通过扫描电镜、X 射线衍射和电化学测试等方法研究了添加微量 Ag 元素(0-1.2wt.%)对 Zn-22Al 钎料组织和性能的影响。结果表明, Ag 元素使得铸态钎料合金中的网状共晶体逐渐开始连结, 并且挤压态钎料合金中的晶界偏聚现象越明显。随着 Ag 含量的增高, 钎料的熔化区间有所降低, 并且由于 Ag 原子固溶于钎料合金中, 起到固溶强化作用, 钎料强度和硬度均有所上升, 但塑性和韧性却持续下降。当 Ag 添加含量为 0.8wt.%时, Zn-22Al 钎料在 Cu 板上的铺展面积相对于 Zn-22Al 提升了 50.91%。此外, Zn-22Al-0.4Ag 自腐蚀电位最正, 所以其具有最好的耐腐蚀性能。

### E02-54

#### 高温功函数测量装置的建立及其在钨单晶涂层评价中的应用

钟武焯

中国原子能科学研究院

**摘要内容:** 为获得 W 单晶涂层不同表面处理工艺的高温功函数及其高温服役演变规律, 基于理查森直线法测量功函数的原理, 建立管状热阴极材料高温功函数测试装置并以多晶 Mo 为对比试样完成了装置的验证, 获得电解抛光和电解蚀刻处理的 W 单晶涂层及其在 1600°C高温服役考验 1000 小时后的功函数。研究发现, W 单晶涂层电解蚀刻样品的功函数比电解抛光样品高 0.34eV, 但电解蚀刻 W 单晶涂层在 1600°C服役 1000 小时后由于表面蒸发, 蚀刻获得的{110}择优面形貌趋于模糊, 功函数降低了 0.08~0.17eV, 蚀刻效果不能维持。

### E02-55

#### $\alpha$ 相形态对钛合金高应变率剪切局部化行为的影响

王鹏宇

沈阳工业大学

**摘要内容:** 利用分离式霍普金森压杆试验机研究了  $\alpha$  相形态对 Ti-6Al-4V(TC4)合金在高应变率压缩试验中力学性能、绝热剪切带(ASB)及再结晶行为的影响。高速变形的应变速率和温度分别为  $2500\text{s}^{-1}$  和  $25^\circ\text{C}$ 。通过热处理获得了两种  $\alpha$  相形态的样品, 它们是等轴状和片状结构。用光学显微镜、扫描电子显微镜和电子背散射衍射仪研究了 TC4 合金中 ASB 的微观结构。结果表明, 层状组织的峰值剪应力高于等轴状组织的峰值剪应力。ASB 在等轴结构和片层结构均形成。与片层结构的 ASB 相比, 等轴结构的 ASB 具有更宽的宽度和更长的 ASB 长度。片层组织具有较高的大角度晶界体积分数, 并且, 片层组织中的 ASB 中的晶粒取向扩展比等轴组织具有更小的面积分数和更均匀的应力分布, 这表明 ASB 中的片层组织具有更高的动态再结晶程度。

## 墙报

## E02-P01

## 热镀锌钢板表面大白斑缺陷的表征及形成机理研究

冯贝佳<sup>\*1</sup>、张少霜<sup>1</sup>、宋仁伯<sup>1</sup>、梁媛媛<sup>2</sup>

1. 北京科技大学

2. 邯郸钢铁集团有限责任公司

**摘要内容:** 热镀锌钢板由于其成本低、外观美观和良好的耐腐蚀性能,被广泛应用于汽车和高端家电等领域。然而,在实际生产过程中,由于各种因素的影响,热镀锌钢板的表面常常会出现一些缺陷,这不仅影响其美观性,还会大幅降低其性能。本文以改良森吉米尔法连续热镀锌带钢生产线上生产的热镀锌钢板为研究对象,探讨大白斑缺陷的形成机制。通过多种表征方法对比分析了正常区域和大白斑缺陷区域镀层表面及侧面的微观形貌和组织结构。通过 XRD 检测发现大白斑区域镀层表面存在少量的  $\text{Fe}_2\text{Al}_5$  相,表明基体表面的富铝层发生了断裂。在大白斑区域的镀层侧面发现了块状的 Fe-O 相,推测可能是基体表面残留的氧化铁皮在镀锌过程中滞留在锌液中。结合对实际生产情况的分析,发现大白斑缺陷的产生可能与加热炉中温度波动和还原性气体中水蒸气含量过高有关,并据此提出了大白斑缺陷的形成机制。

## E02-P02

## CMn Diffusion Kinetics during Cementite Precipitation Thermodynamic and Kinetic Modeling

Dingting Han\*

Beijing Superstring Academy of Memory Technology (SAMT)

C/Mn Diffusion Kinetics during Cementite Precipitation: Thermodynamic and Kinetic Modeling

Dingting Hana\*, Li Xiaolinb, Libin Jia, Hongbo Sun, Chao Zhao

aBeijing Superstring Academy of Memory Technology, Beijing, 100085, China

bNorthwestern Polytechnical University, Xi'an, 710072, China

**Abstract:** Recently, medium Mn steels (3-12 wt% Mn) with an attractive combination of strength and ductility (product of tensile strength and elongation, i.e. PSE, usually up to 20-50 GPa%) have become the representative of third-generation advanced high strength steels (3G-AHSS) owing to desired fraction of retained austenite (RA) with reasonable stability. The mechanical properties of medium Mn steel is determined by the initial phase composition, which has significantly influence on phase transformation during intercritical annealing. In our previous study, by comparison with austenite that nucleate at martensite boundary, the austenite that nucleate at cementite/ferrite boundary can directly inherit the high C and Mn content in cementite, resulting in high volume fraction and stability. Nevertheless, different volume fraction and size of cementite resulting in different austenite behaviors. Many reserchers pay more attention to cementite precipitation behavior, ignoring its fraction and size on the following intercritical annealing steps, in which austenite nucleate and growth at the cementite/ferrite grain boundary. In this paper, the cementite precipitation behavior of a medium Mn steel (Fe-C-Mn-Al) was investigated using the theory of local equilibrium assumption at different interface. The precipitation mode was established and the process was calculated using the TCFE7 database of Thermal-calc software and MOBFE4 database of DICTRA dynamic software. Various precipitation temp and time was simulated to verify the influence of cementite size, valume fraction and Mn concentration on austenite formation, valume fraction, Mn concentration and stability. The simulation results show that the formation of cementite during annealing was significantly influenced by temperature, owing to the fact that the during the cementite will be dissolved when temperature higher than a certain temperature. The dissolution of cementite high concentration C and Mn can significantly influence the formation of austentite. Based on the simulation results, the valume fraction of cementite increased with decreasing annealing temperature, while decreased at a certain temperature due to cementite will dissolution at relatively higher temperature. The diffusion of C reaches equilibrium in a short period of time, while the diffusion of Mn does not reach equilibrium in a long period of time, exhibiting a high concentration gradient at the interface. This is because the diffusion coefficient of

C is several orders of magnitude higher than that of Mn.

### E02-P03

#### Ar+CO<sub>2</sub> 混合保护气对 TC4/304SS 异种金属接头成形、界面组织及接头性能影响研究

陶玉洁、刘一搏、孙清洁\*

哈尔滨工业大学

**摘要内容:** Ti、Fe 之间的物理及化学性质差异大, 导致钛/钢接头焊后残余应力较大, 并且 Ti-Fe 金属间化合物极高的脆性使接头焊后极易发生断裂。采用第三种金属作为中间过渡层可以作为物理屏障阻隔 Ti、Fe 原子, 稀释熔池中 Ti 及 Fe 元素的浓度, 抑制 Ti、Fe 之间冶金反应; 还可以调节界面化合物组成, 缓解接头脆性。Cu 及 Cu 合金价格低廉, 高温下与 Fe 无限固溶, 低温下固溶度虽有所降低, 但是不产生脆性化合物; 同时 Ti-Cu 化合物的脆性低于 Ti-Fe; 此外, 较软的 Cu 基体可以协调接头变形, 降低残余应力。但由于 Cu/Ti 体系与 Cu/Fe 体系之间本征性质的差异, 熔融 Cu 在 Ti 和 Fe 表面的铺展不一, 导致接头成形较差, 表现为熔覆金属在钢板背部铺展受限。提高焊接热输入或熔敷金属质量可以一定程度上提高高温金属流动性, 改善接头成形, 但是过高的热输入同时也促进了界面脆性化合物的生长, 使界面层增厚, 化合物数量增多, 接头脆性增大, 力学性能反而下降。O 作为活性元素可以改变金属的表面张力温度系数, 进而改变熔池流动形式, 产生向内的马兰戈尼流动, 促进熔池的背部铺展。虽然 Ar+CO<sub>2</sub> 混合保护气已广泛运用于钢铁焊接中, 但由于钛合金性质活泼, 极易氧化, 焊接钛合金时需要严格把控 O 含量, 因此鲜有用 Ar+CO<sub>2</sub> 混合保护气焊接钛合金或者钛/钢异种金属的案例。在我们的研究中, 我们发现在保护气中添加少量的 CO<sub>2</sub> (5%以内), 不仅不会使焊缝明显氧化, 还因为产生了向内的马兰戈尼流动, 在较低热输入下得到了成形良好的焊接接头, 实现了接头的“低温成形”。分析得出, 接头成形的改善并不是由于 CO<sub>2</sub> 的加入改善了 Cu 在 Ti 及 Fe 表面的润湿性, 而是因为 CO<sub>2</sub> 改变了电弧能量分布, 促进了界面元素传质, 加剧了界面元素扩散及冶金反应。Ti/Cu 界面的潜在铺展动力学模型由反应控制型转变为扩散控制型, Cu/Fe 界面的铺展模型由扩散控制型转变为分子动力学模型。潜在铺展动力学模型的转变降低了 TC4/304SS 接头两侧的润湿差异性, 实现了 Ti/Cu/Fe 多金属体系的协同润湿, 这是接头成形提高的主要原因。此外, 界面组织也因为 CO<sub>2</sub> 的加入发生明显变化。适量 CO<sub>2</sub> 的加入促进了熔池流动, 有利于焊缝内部组织均匀分布。此外, 强烈的元素扩散促进 Ti/Cu 界面层的多相反应, 避免了某一脆性相剧烈生长。在接头成形与界面组织双重优化下, 接头性能有了很大提高, 在 3%CO<sub>2</sub> 浓度时接头平均抗拉强度达到 480MPa, 与纯 Ar 保护气下所得接头相比, 强度提高了 57.9%。但是如若 CO<sub>2</sub> 含量过高, 则剧烈的元素扩散使 Ti-Fe 化合物大量产生, 并且焊缝表面氧化严重, 导致接头性能恶化, 因此 CO<sub>2</sub> 含量需要控制在一定水平。

### E02-P04

#### 坩埚材料与 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-BaO-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 钡铁氧体三元渣系界面反应

洪莎莎<sup>1,2</sup>、潜坤<sup>2</sup>、李小兵<sup>2</sup>、宋海燕<sup>1</sup>、陈波<sup>\*2</sup>

1. 华南师范大学化学学院

2. 季华实验室

**摘要内容:** 基于 BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub> 的 M 型钡铁氧体作为一种典型的永磁材料, 具有高饱和磁化强度、高磁各向异性等优点, 被广泛应用于磁性传感器, 本文研究了 1500°C 温度下 ZrO<sub>2</sub>、Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、MgO 和 MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 四种耐火材料与 M 型钡铁氧体的腐蚀行为。采用电子探针(EPMA)、扫描电镜-能谱仪(SEM)、X 射线衍射仪(XRD) 等检测手段, 结果表明: ZrO<sub>2</sub> 耐火材料被钡铁氧体完全渗入与侵蚀; Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 坩埚基体被侵蚀, 并且钡铁氧体中出现大量长条富铝氧化物相; MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 坩埚与钡铁氧体之间不发生化学反应, 然而, MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 坩埚基体的孔隙中充满了液态渣。MgO 耐火材料与钡铁氧体界面处形成了一层由 MgFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 组成的厚度约 200 μm 反应层, 熔点较高, 防止了 MgO 坩埚与钡铁氧体接触, 抑制了坩埚的进一步腐蚀; 通过研究四种坩埚材料与熔渣的接触面, 根据综合性能分析, 确定了适合熔炼 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-BaO-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 钡铁氧体三元渣系的坩埚材料是 MgO 坩埚。结果考察了有钡铁氧体对耐火材料的侵蚀、渗透行为, 以及耐火材料对熔渣污染的影响规律, 探明耐火材料与熔渣的界面反应行为, 为熔炼 Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-BaO-B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 钡铁氧体三元渣系的坩埚材料的开发及应用提供理论依据。

## E02-P05

## 铜箔准原位超高温退火中异常晶粒晶界迁移研究

郭晶\*<sup>1</sup>、张春雷<sup>2</sup>、李昕<sup>3,4</sup>、吴桂林<sup>1</sup>、黄天林<sup>1</sup>、黄晓旭<sup>1</sup>、Dorte Juul Jensen<sup>5</sup>

1. 重庆大学

2. 苏州实验室

3. 重庆市多尺度制造技术重点实验室

4. 中国科学院

5. 丹麦科技大学

**摘要内容:** 研究了冷轧铜箔在 1000°C 的超高温退火时异常晶粒长大行为, 并对异常长大晶粒的晶界迁移情况通过光镜及背散射电子衍射进行原位观察。发现退火后晶粒穿过了厚度方向, 形成单层晶粒的多晶铜箔。异常晶粒的部分晶界在初始阶段迁移迅速, 而另一些保持静止。在退火后期, 晶粒的进一步生长受到晶界热蚀沟的阻碍, 均停止生长。随后进一步讨论了在异常晶粒长大过程中晶界能量密度分布以及晶界类型对晶界迁移的影响, 对于相同类型的晶界, 前方晶界能密度分布更高的片段更容易迁移。该研究强调了单层晶粒样品中晶界能密度分布对晶界迁移的重要性。

## E02-P06

## 化学镀 Ni 合金及后处理工艺与腐蚀规律研究

韩如意\*

海军工程大学

**摘要内容:** 金属材料作为海洋工程中应用最广泛的材料, 在实际应用中仍然存在着腐蚀问题, 尤其是管道早期腐蚀问题, 由于电镀槽长度的限制、电镀过程中阳极无法到达阴极管内部等因素, 电化学沉积方法对于长管内壁镀层的沉积运用于实装仍有一定的局限性。因此采用化学镀将合金管道经过镀液冲刷, 均匀生长厚度均匀、致密、硬度高的镍膜, 有效起到合金管道防腐作用。探索了乙酸镍为主盐、乙酸钠为稳定剂、乳酸为络合剂, 还原剂为二甲基氨基硼烷镀镍的制备镀层方案, 获得在低温 50°、pH 中性条件下的稳定镀液, 30min 可以获得 5 $\mu$ m 厚度的致密镀层。硫酸镍、硫酸锌为主盐、柠檬酸钠为稳定剂、乳酸和硫酸铵为络合剂, 还原剂为次亚磷酸钠镀镍磷锌的制备方案, 获得在高温 80°、pH 弱碱性条件下的稳定镀液, 1h 可以获得 3 $\mu$ m 厚度的致密镀层, 晶胞颗粒小而密集, 镀层质量较好, 通过电化学曲线测得原始镀层电位低于铜镍合金电位, 起到自牺牲保护作用。通过模拟不同情况下的海水环境, 在强酸、强碱、高氯、高硫等情况下观察镀层腐蚀情况, 并通过电化学曲线测镀层腐蚀后电位高于铜镍合金电位, 起到自氧化膜保护作用。为验证镀层是否影响基体自成膜, 将镀有一半镀层的金属基体至于腐蚀速率最快的前期配置人工海水中, 检测镀层自牺牲与基体成膜情况, 发现在镀层自牺牲的同时裸露基体面的电位升高, 生成了氧化膜, 对基体自身成膜未产生影响, 方案可行。

## E02-P07

**Mg/Fe site-specific dual-doping to boost the performance of cobalt-free nickel-rich layered oxide cathode for high-energy lithium-ion batteries**

Di Han\*

Shaanxi University of Science and Technology

**Abstract:** In order to address the fact that Layer-type LiNi<sub>0.9</sub>Mn<sub>0.1</sub>O<sub>2</sub> suffer from severely detrimental structural transformation that causes rapid capacity attenuation during charging and discharging processes Herein, site-specific dual-doping with Fe and Mg ions is proposed to enhance the structural stability of LiNi<sub>0.9</sub>Mn<sub>0.1</sub>O<sub>2</sub>. The Fe<sup>3+</sup> dopants are inserted into transition metal sites (3b) and can favorably provide additional redox potential to compensate for charge and enhance the reversibility of anionic redox. The Mg ions are doped into the Li sites (3a) and serve as O<sub>2</sub>-Mg<sup>2+</sup>-O<sub>2</sub> pillar to reinforce the electrostatic cohesion between the two adjacent transition-metal layers, which further suppress the cracking and the generation of harmful phase transitions, ultimately improving the cyclability.

**E02-P08****Unraveling the degradation mechanism of LiNi<sub>0.8</sub>Co<sub>0.1</sub>Mn<sub>0.1</sub>O<sub>2</sub> at the high cut-off voltage for lithiumion batteries****Liming Wang\*****Taiyuan University of Technology**

**Abstract:** LiNi<sub>0.8</sub>Co<sub>0.1</sub>Mn<sub>0.1</sub>O<sub>2</sub> (NCM811) layered oxides have been regarded as promising alternative cathodes for the next generation of high-energy lithiumion batteries (LIBs) due to high discharge capacities and energy densities at high operation voltage. However, the capacity fading under high operation voltage still restricts the practical application. Herein, the capacity degradation mechanism of NCM811 at atomic\_x0002\_scale is studied in detail under various cut-off voltages using aberration-corrected scanning transmission electron microscopy (STEM). It is observed that the crystal structure of NCM811 evolution from a layered structure to a rock-salt phase is directly accompanied by serious intergranular cracks under 4.9 V, which is distinguished from the generally accepted structure evolution of layered, disordered layered, defect rock salt and rock salt phases, also observed under 4.3 and 4.7 V. The electron energy loss spectroscopy analysis also confirms the reduction of Ni and Co from the surface to the bulk, not the previously reported only Li/Ni interlayer mixing. The degradation mechanism of NCM811 at a high cut-off voltage of 4.9 V is attributed to the formation of intergranular cracks induced by defects, the direct formation of the rock salt phase, and the accompanied reduction of Ni<sup>2+</sup> and Co<sup>2+</sup> phases from the surface to the bulk.

**E02-P09****碲化铋基合金和 Ni 电极原子尺度界面反应机理研究****薛泽帆、桑夏晗\*****武汉理工大学**

**摘要内容:** 热电材料和电极界面的互扩散和固相反应严重影响界面输运性能以及热电器件在服役过程中的整体能量转换效率, 寻找具有低电阻、良好热稳定性、与热电材料高适配性的电极材料, 是构建热电器件的重要一环。Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基合金是目前广泛应用的热电材料, 通常采用 Ni 或 Ni 合金作为电极, 但是 Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> 基合金与 Ni 形成的异质界面在原子尺度扩散机制和结构演化规律还有待研究。为此, 我们设计了 n 型 Bi<sub>2</sub>Te<sub>2.7</sub>Se<sub>0.3</sub> (BTS) 和 p 型 Bi<sub>0.5</sub>Sb<sub>1.5</sub>Te<sub>3</sub> (BST) (0001) 面与 Ni 电极的异质界面, 使用双球差校正电子显微镜在原子尺度下研究界面反应。界面反应初始阶段, Ni 扩散进入热电材料基体并形成与基体具有半共格取向关系的 NiAs 型 NiM 金属间化合物, 其中 M 为相应热电材料基体元素的无序排列。由于 Bi 原子较大, 阻碍 Ni 原子的穿晶扩散, 因此仅在 Bi 含量较少的 p 型 BST 中观察到 Ni 通过穿晶扩散形成的 NiM 纳米片。n 型 BTS 中 Bi 含量较高, Ni 与 Te 的优先反应在界面产生大量多余 Bi 原子, 改变界面能和反应路径, 导致界面 NiM 相形成晶粒异常长大、倾斜界面和旋转界面等现象。增加退火温度或时间进一步导致 n 型 BTS 中的多余 Bi 原子扩散进入基体形成双层 Bi 结构和 Bi<sub>2</sub>[Bi<sub>2</sub>(Te,Se)<sub>3</sub>]相。原位观察表明, 随温度增加, Bi 扩散进入 Ni 电极导致界面反应速率异常增加。研究结果揭示了 Bi 在界面反应中的重要作用, 为优化设计电极材料和电极材料/热电器件异质界面重要结构支撑。

**E02-P10****压痕测试中热浸涂层内部及界面损伤失效机理探究****李先柯、赵宏伟\*****吉林大学机械与航空航天工程学院**

**摘要内容:** 镀锌钢已广泛汽车、船舶、建筑等领域, 服役情况下既要承受静态力的作用, 又要承担动态力的冲击。为此研究人员对其开展了大量力学性能测试研究, 但始终停留在涂层表面, 难以探明涂层内部损伤失效机理。针对上述问题本研究研制了一种新型的可与扫描电子显微镜联用的原位压痕测试装置, 在对试件的 XY 面进行沿 Z 向加载的同时, 从 ZY 面对试件的亚表面区域进行实时观测, 记录侵入载荷作用下涂层各层损伤演化过程。发现了 η 层变形出现不连续的原因、裂纹萌生位置、界面断裂位置与涂层内部裂

纹相关性等新现象，为后续镀锌钢的改善工作打下了坚实的基础。

## E02-P11

### 尺寸效应对 Cu-Ni 合金薄膜表面偏析的影响研究

颜心良\*<sup>1</sup>、连松有<sup>2</sup>、王江涌<sup>2</sup>

1. 广东医科大学

2. 汕头大学

**摘要内容:** 表面偏析是指在合金材料中系统的吉布斯自由能要达到最低最稳定的状态，使溶质原子在表面和体内之间重新分布，从而导致溶质原子在表面的浓度远大于体内的浓度。在纳米薄膜材料中，由于表面成分和结构的变化直接影响着薄膜材料的性能，因此，薄膜材料中的表面偏析起着重要的作用。本论文基于上面原因，用电子束蒸发方法制备了不同厚度的 CuNi 多层膜，再退火成均匀的 CuNi 合金薄膜。合金薄膜用于俄歇电子能谱进行表面偏析表征，同时俄歇电子能谱中有原位加热，以线性加热方法，加热率 0.03 K/S 温度从 403 K 到 823 K。实验结果表明厚的薄膜表面偏析聚集系数  $\beta$  大于比较薄厚度的薄膜，同时我们运用修正的 Darken 模型对实验结果进行拟合，比较好的解析了实验结果，同时得到了偏析参数，这些参数和其他实验结果吻合较好。

仅发表论文

## E02-PO01

### Microstructure and microstructure of titanium silane film on NdFeB magnet surface

Xiuchun Wang\*

Material, Advanced Materials Institute, Qilu University of Technology (Shandong Academy of Sciences)

Xiuchun Wang<sup>1,a,\*</sup> Ying Liu<sup>2,b,\*</sup> Rongyan Jiang<sup>3,c</sup> Jing Zhang<sup>1,d</sup> Bin Zhou<sup>4,e</sup>

<sup>1</sup>Shandong Key Laboratory for Special Silicon-containing Material, Advanced Materials Institute, Qilu University of Technology (Shandong Academy of Sciences), Jinan, 250014, P. R. China

<sup>2</sup>Yantai CIMC Raffles Offshore Ltd, Yantai, P. R. China

<sup>3</sup>School of Materials Science and Engineering, Shandong Jianzhu University, Jinan, P. R. China

<sup>4</sup>Yantai zhenghai magnetic material co.,ltd, Yantai, P. R. China

awangxch@sdas.org, bying02.liu@cimc-raffles.com, cryjiang@sdjzu.edu.cn,

dzhangjing@sdas.org, ewitzhoubin@126.com

\*co-first author

**Abstract:** The optimized cerium titanium-doped silane treatment agent and its process silanized the NdFeB magnet, resulting in a dense film of titanium-doped silane on its surface. Using SEM, EDS, AFM, FT-IR, and NSS, the microstructure and characteristics of titanium-doped silane films were described. The findings demonstrate the dense structure and smooth surface of titanium-doped silane membrane. In addition, the nanoscale compound particles containing Ti and F elements were uniformly dispersed in the film. The Ti-O-Si bond was formed between the doped fluorotitanate and the silanol, and the F element did not form a chemical bond with the silane. In comparison to the pore silane film, Ti-doped silane film had lower self-corrosion current density, larger contact angle and stronger hydrophobicity. The titanium-doped silane film could effectively improve the adhesion of the paint film on the surface of NdFeB magnets, and the coating performance was excellent. Tight Ti-O-Si bonds were formed between fluorotitanate and silanol, which promoted the crosslinking of silane and improved the corrosion resistance of silane film. The compounds containing Ti and F elements were filled in the pores of the three-dimensional network structure of the silane film in a uniformly dispersed nanoscale particle state, which played a barrier role in reducing the path of the corrosive medium to the NdFeB matrix. The Ti-doped silane film had high hydrophobicity, which was beneficial to block the infiltration of corrosive medium and improve the corrosion resistance of the film.

**E02-PO02****The atomic oxygen resistant study of a transparent polyimide film containing phosphorus and fluorine****Chen Shu\*<sup>1</sup>, Xiuming Wu<sup>1,2</sup>****1. shanghai jiaotong university****2. Shandong Institute of Petroleum and Chemical Technology**

**Abstract:** As ideal packaging materials for solar cells of low-Earth orbit (LEO) spacecraft, polyimide (PI) films have to withstand various harsh space environment. Here, we investigate the atomic oxygen (AO)-resistant property of a transparent PI film with side diphenylphosphine oxide and trifluoromethyl. After exposed under AO, most excellent properties of the PI film can be maintained except for partial loss of transmittance. Its erosion yield is only 18.7% as that of Kapton film at the same condition. To understand the damage mechanism, the surface and bulk performances of the AO exposed PI film were systematically investigated and compared with those of the pristine PI film. The results indicate that the relative concentration of phosphorus and oxygen near to the AO exposed surface of the PI film increases, which means the formation of a phosphate passivation layer. The thickness of phosphate passivation layer is about 200 nm with the content of  $\text{PO}^{3-}$  decreasing in vertical direction of itself, which can reduce the further erosion of the PI film by AO. Such PI films containing P and F are much more AO resistant and expected a candidate as packaging material for LEO spacecraft.

**E02-PO03****Electrical Characteristics of Oxygen Vacancies on the HfO<sub>2</sub>-based RRAM Grain Boundaries****Dehao Qu, Dejun Wang\*****Dalian University of Technology**

**Abstract:** The demand for data storage is currently on the rise due to the rapid advancement of intelligent technology, sparking a surge of interest in HfO<sub>2</sub>-based resistive random access memory (RRAM). Currently, the widely accepted physical mechanism of RRAM is the microscopic conductive filaments of oxygen vacancies (VOs). Recent reports have shown that that conductive filaments (CFs) tend to form preferentially at grain boundaries (GBs). Understanding how to characterize the structural and electronic properties of GBs is essential for comprehending and controlling the characteristics of polycrystalline materials. However, characterizing the electronic properties of defects on GBs presents a challenging task, as distinguishing between defect properties associated with the GBs and those associated with the bulk is complex. In this work, we mainly study the structural and electronic properties of oxygen vacancies at (101) oriented twin GB in HfO<sub>2</sub>-based RRAM based on the density functional theory calculations, and analyze relationship between defect levels induced by oxygen vacancies at twin GB and charge densities. The Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE06) hybrid functional is used to avoid underestimation of the bandgap of m-HfO<sub>2</sub>. Six non-equivalent sites within the GB were selected for the creation of oxygen vacancies, neighboring VOs have been utilized to create oxygen divacancies, which serve as a comparison to the increased number of oxygen vacancies. Results showed that VOs exhibit an attraction towards neighboring oxygen atoms and energetically prefers to form at GBs rather than in the bulk phase. VO configurations at GBs lead to three different combinations of defect states, each corresponding to connected and localized charge density. Particularly, VO12 and VO45 configurations were found to enhance conductivity by creating charge channels, indicating its potential role as the origin of CFs at GBs.

**E02-PO04****CARR 堆中子反射谱仪的现状和性能****刘荣灯\*、李天富、王子军、闫士博、陈忠、余周香、陈东风**

**中国原子能科学研究院**

**摘要内容:** 本文主要介绍坐落在中国原子能科学研究院内 60MW 中国先进研究堆 (CARR) 导管大厅里中子反射谱仪的主要性能特征和现状。CARR 堆中子反射谱仪主要用于软物质薄膜和多层膜的结构表征, 也可以用于硬物质薄膜和多层膜的结构表征, 是一台固定波长垂直直射几何的多用途中子反射谱仪。该谱仪采用热解石墨晶体在冷中子导管 CNGD 底部选取波长为  $4.75\text{\AA}$  的单色中子束, 并采用碳化硼板准直单色中子束, 机械设计确保其散射矢量范围是:  $-0.23\sim 0.4\text{\AA}^{-1}$ 。CARR 堆中子反射谱仪采用透射式监视器, 采用 He-3 单管探测器和一维位置灵敏探测器记录反射中子束。该谱仪能够以镜面反射模式运行, 也能够以非镜面模式运行。CARR 堆中子反射谱仪预计今年下半年投入运行, 对国内外用户开放。

**E02-PO05****Mechanical Properties and Failure Evaluation of Ceramic Coatings on Metal Substrates****Manfeng Gong\*****Lingnan Normal University**

**Abstract:** This study presents a theoretical model for evaluating the shear strength and cohesion strength of coatings, based on interface constraints and linear strain theory. The model is applied to a ceramic coating/metal matrix system. Specifically,  $\text{Al}_2\text{O}_3 + 3\text{ wt.}\% \text{TiO}_2$  ceramic coatings were deposited onto 329 stainless steel substrates using plasma thermal spraying technology. A "three zones tensile testing method" was employed to examine samples with varying coating thicknesses. Stress/strain data were obtained by analyzing load-time relationships and stress-strain curves. The cohesion strength of the coatings and the shear strength at the interface were determined by analyzing critical times and failure phenomena during tensile tests. The results confirm the suitability of the mechanical model in combination with the testing method for the reliable determination of the mechanical and physical properties of thin coatings, including cohesion strength, elastic modulus, Poisson's ratio, and interface shear strength. These findings reveal a range of cohesion strength values from 318.2 to 517.2 MPa, indicative of robust internal bonding within the coatings. Simultaneously, the interface's shear strength exhibited variations ranging from 11.5 to 17.2 MPa. Furthermore, the results highlight a significant correlation between coating thickness and mechanical properties. As the coating thickness increased from  $50\text{ }\mu\text{m}$  to  $330\text{ }\mu\text{m}$ , both the interface's shear strength and the coating's cohesion strength consistently decreased. This study provides valuable insights into the mechanical behavior of ceramic coating/metal matrix systems, contributing to the field of material science and engineering.

**E02-PO06****Biomimetic polydopamine nanosheets to enhance the properties of bio-based polyesters****Jiyang Zuo<sup>\*1,2</sup>, Jiheng Ding<sup>2</sup>, Hongran Zhao<sup>2</sup>, Hao Wang<sup>2,3</sup>, Qin chao Chu<sup>2,3</sup>, Zhisen Shen<sup>1</sup>, Jिंगgang Wang<sup>2</sup>, Jin Zhu<sup>2</sup>****1. Department of Otorhinolaryngology Head and Neck Surgery, the Affiliated Lihuli Hospital of Ningbo University****2. Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering, Chinese Academy of Sciences, Ningbo 315201, PR China****3. School of Material Science and Chemical Engineering, Ningbo University, Ningbo 315211, PR China.**

**Abstract:** The application of two-dimensional (2D) inorganic nanomaterials as nanofillers in polyesters has received much attention due to their excellent mechanical and barrier properties. However, dispersion of nanofillers as well as interfacial compatibility remains a major challenge. Therefore, there is a need to explore innovative and environmentally friendly 2D nanomaterials for further improvement of polyester properties. In this study, an organic 2D nanomaterial, polydopamine nanosheets (PDANS), was synthesised by a simple hydromethod. Subsequently, the dispersibility of PDANS was analysed under different drying conditions and doped into a bio-based polyester, poly (ethylene-co-1,4-cyclohexanedimethylene 2,5-furandicarboxylate) (PECF), as an additive using in situ polymerisation. The lyophilised PDANS showed better dispersibility compared to other dry forms. The PECF

composite films exhibited the best barrier properties and ultraviolet (UV) shielding ability when the filler mass content was 0.5 wt%. Based on these results, it could be inferred that PDANS holds great perspectives for the development of innovative bio-based polyester materials.