

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

C14-结构材料热-动力学
C14-Thermo-kinetics of Structural
Materials

Organized by

Chinese Materials Research Society

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

C14. 结构材料热-动力学

分会主席：刘峰、屈瑞涛、黄林科、杜经莲、宋韶杰

分会编号-01

金属结构材料设计中的热-动力学思考

刘峰*

西北工业大学

分会编号-02

Strengthening complex concentrated alloy without ductility loss by 3D printing induced high-density coherent nanoparticles

黄明欣*

香港大学

Strengthening alloy by high-density coherent-nanoprecipitates (HDCN) is a proven and effective strategy to break the strength and ductility trade-off. How to induce such HDCN is a necessary link for development of high strength, high ductility materials. Here, we report a strategy to prepare HDCN-enhanced materials. The proposed strategy is demonstrated in a 3D printed Cu-based complex concentrated alloy. Fast cooling of the melt pool for additive manufacturing brings high-supersaturated-solid-solution, which provides a very large number of solute-atoms for precipitating, it contributes the high-density. Coherent can be attained by spinodal decomposition. The above two components build the HDCN. The paradigm reported here is strengthen, but its ductility is retained. Which relies on the passing-and-pinning dislocation. This strategy provides a pathway to develop excellent material for structural applications.

分会编号-03

晶格畸变和化学有序相互作用对难熔多主元合金位错动力学的影响

李苏植*, 陈冰, 丁向东, 孙军, 马恩

西安交通大学

以难熔多主元合金 NbTiZr 为例, 利用分子动力学模拟发现: 化学短程有序度的增加伴随着局部晶格畸变的降低, 二者此消彼长的关系会显著影响刃型和螺型位错的运动能力。以不含化学短程有序的随机固溶体为参照, 当化学有序度较弱, 位错滑动阻力降低, 运动能力增强; 而当有序结构尺寸足够大时, 则会显著阻碍位错滑动, 降低其运动能力。对比两类位错, 刃位错的运动速度主要由局部晶格畸变主导, 而螺位错运动更多地受到化学短程有序度的影响。进一步构建了力学模型, 定量评估了化学短程有序和晶格畸变对位错滑移临界切应力的贡献: 当化学有序度较小, 临界切应力主要来源于晶格畸变; 随着有序结构尺寸增大, 其贡献可以超过晶格畸变, 成为影响临界切应力的主导因素。该研究为如何利用化学短程有序调控多主元难熔合金的力学性能提供了思路。

分会编号-04

基于成分异质的钢铁材料强韧性设计

孙彬涵*

华东理工大学

材料的强度和韧性（抗损伤断裂能力）往往相互矛盾，难以调和。新一代先进高强钢因为具有较高的合金含量，其相变规律较为复杂，同时也为材料微观组织调控提供了新的机会。这里我们以系列中锰高强钢为研究对象，探索基于成分异质的钢铁材料强韧性调控方法。我们利用奥氏体-铁素体相变过程中形成的 Mn 元素的配分，在不同尺度上形成奥氏体中 Mn 元素的异质分布。随后发现，这些异质的 Mn 元素分布可有效的提升奥氏体的稳定性，进而使得应变诱发塑性效应更为持久，最终导致更高的塑性。同时，在抗断裂方面，局部富锰的区域也可稳定奥氏体，进而有效的阻碍微裂纹的萌生和扩展。进一步，本报告也对中锰钢中成分异质的形成机理以及与强韧性的关联规律做了进一步讨论。

分会编号-05

位错热激活滑移机制的应变速率依赖性

李亦庄^{*1}，徐新宇²，黄明欣²

1. 东北大学
2. 香港大学

本工作以含碳奥氏体钢及镁合金为例，揭示了在密堆积结构（fcc 和 hcp）金属材料里可能存在的一种普遍现象，即位错机制具有应变速率依赖性。该机制在宏观尺度上表现为材料屈服强度的“两段式”应变速率敏感性，并伴有显著差异的激活体积。我们基于先进表征结果及位错理论，系统性分析了表象应变速率敏感性规律背后的不同位错机制及其成因，期望这些结果有助于进一步理解金属结构材料的塑性机理。

分会编号-06

基于热-动力学的高强度高导铜基材料设计

姜伊辉，梁淑华*

西安理工大学

第二相强化是实现铜基材料强度与导电性能协同提升的重要途径之一。以液相原位自生陶瓷相和固相沉淀析出金属间化合物相为例，本研究分析了铜基材料中不同类型第二相形成的热-动力学机制。首先，基于三元富铜液相中形成陶瓷相的热力学分析了铜基复合材料中原位自生硼化物陶瓷相的形成驱动力，并根据经典形核长大动力学研究了二元硼化物陶瓷相竞争形成机制。其次，基于沉淀强化型铜合金时效过程中电阻率变化，分析了 α -Cu 过饱和固溶体中沉淀析出金属间化合物相的动力学过程，并准确判断了不同时效温度下析出动力学机制的演化；同时，阐明了时效过程中先析出共格型亚稳相，随后转变为非共格稳定相的析出的热力学原理。然后，以上述理论研究为指导，设计并制备出多元多尺度第二相混杂增强铜基复合材料，实现了铜基复合材料强度与导电合理匹配。综上，基于材料热-动力学可有效调控和设计导电铜材料组织特征，从而为高性能铜基材料设计提供理论支撑。

分会编号-07

奥氏体逆相变热动力学

张献光*

北京科技大学

相变作为先进高强钢组织性能的调控手段,在其制备过程中扮演着重要角色。特别是近年来,随着逆相变技术在高强钢制备中的应用,逆相变不单作为晶粒细化的手段,更重要的是被用作相变强化手段与贝氏体相变或马氏体相变协同作用调控先进高强钢组织性能。从板条马氏体或贝氏体到奥氏体的逆相变过程中,有两种形貌的奥氏体形成,即针状和块状。过去的研究表明^[1-4],逆相变前的初始组织,如淬火马氏体、回火马氏体或贝氏体,直接影响逆转变奥氏体的相变动力学和组织形貌。然而,有关逆转变奥氏体的形成规律、合金元素配分、相变动力学及相变机制尚不清楚,如何对逆转变奥氏体进行精细化调控、精准掌握其相变规律,成为了亟待解决的关键问题。针对上述奥氏体逆相变机制关键科学问题,深入研究了高强钢中奥氏体逆相变晶体学、热力学、动力学、合金元素配分及形核行为等基础问题,研究揭示了高强钢中奥氏体逆相变行为的基本规律,推进了对奥氏体逆相变本质的认识,为利用逆相变技术开发新型钢铁材料提供了重要理论依据与解决思路。

分会编号-08

钢中纳米碳化物的析出机理:从相间析出到随机析出

董浩凯^{*1,2}, 柴俊³, 黄明欣², 陈浩³

1. 中国科学院宁波材料所

2. 香港大学机械工程系

3. 清华大学材料学院

析出强化是提高金属结构材料力学性能的有效方式。在钢铁材料中,如何引入弥散纳米级的碳化物一直是学界和工业界的研究热点。钢铁材料中的纳米碳化物析出主要有相间析出与随机析出两种方式。前者于 1968 年在含 Nb 钢的铁素体相变中被发现,因其空间上独特的片层状排列特征而备受学界关注;后者的发现历史难以追溯,普遍见于回火的马氏体和贝氏体中。然而,近些年的研究结果表明,即使在铁素体相变过程中,相间析出与随机析出均可发生(取决于温度与相变进程),表明两种析出模式在热动力学上是相互统一而非完全独立的。目前实验上已证实碳化物的析出模式与相界面的晶体学特性、界面移动速率、相变驱动力等因素密切相关,但尚未给出碳化物析出模式的物理判据。本报告将首先综述两种析出方式的研究现状,接着基于报告人在元素偏聚和团簇化行为方面的实验与理论研究进展,介绍相间析出启动的微观物理机制,明确两种析出模式转换的临界条件,为钢中纳米析出相的组织调控和设计提供理论支撑。

分会编号-09

钢中碳过饱和贝氏体铁素体的热动力学形成机制

代宗标*

西安交通大学

在贝氏体铁素体(α_b)生长过程中,铁及置换型合金元素主要以位移(Displacive)模式转变已达成共识;但碳元素是扩散(Diffusional)模式还是非扩散(Diffusionless)模式,仍然存在争议。扩散模式的论据为: α_b 板条伸长速率缓慢且恒定,可采用经典 Zener-Hillert 理论定性描述;而非扩散模式的论据为: α_b 板条存在显著的碳过饱和现象,并且远高于准平衡理论值。本研究发现,将碳溶质拖曳效应引入 Zener-Hillert 理论中,能够同时定量预测 α_b 板条伸长速率缓慢与碳过饱和现象。基于此,进一步构建考虑相变晶体学与热/动力学的位移-扩散模型,成功预测了 Fe-C-Si 和纳米贝氏体钢体系不完全转变后的贝氏体铁素体/奥氏体碳浓度;分析表明引起不完全转变的能量耗散起源主要归因于位移模式中的应变能和扩散模式中的碳溶质拖曳效应。

分会编号-10

镁稀土合金中析出相变的热-动力学协同效应

王天乐, 刘峰*

西北工业大学

在镁合金中添加稀土元素是提高强塑性的有效方式, 很大程度归因于在基体六方晶格柱面产生的片状析出相的强化作用, 其主要包括时效前期的 β' 系列相 (譬如 $\beta's$, $\beta'1$ 和 $\beta'h$) 与后期的 $\beta 1$ 相。然而迄今, 尚缺乏可靠的实验结果去论证 $\beta 1$ 究竟从基体直接析出还是由先形成的 β' 相转变而来。为解答该问题, 我们通过结合第一性原理计算、集团展开法与蒙特卡洛模拟构建出多尺度相场模型, 并基于热-动力学相关性提出了一种新的相场显式形核算法, 以 Mg-Sm 合金为例来表征 β' 与 $\beta 1$ 相的形成热-动力学。结合现有的实验证据, 我们的模拟结果揭示了镁稀土合金中关键析出相的形成机制。 β' 与 $\beta 1$ 相的形成均受到热-动力学协同效应的调控, 热-动力学的变化可直接对应 β' 与 $\beta 1$ 的形貌演化过程, 呈现出单变体分布与多变体联合分布的形貌特征。同时, 不同晶体学情形下的结果表明, 任意的 β' 取向变体可以通过单独或联合的方式向特定的一种 $\beta 1$ 变体联合形态转变, 并且该转变受到应变能主导的热-动力学相关性与贯通性的调控。我们所提出的新的形核算法可以在相场的析出模拟中广泛应用, 所揭示的析出相变的热-动力学协同效应对于镁稀土合金的理性设计具有一定的启发意义。

分会编号-11

6xxx 系铝合金多相竞争析出的热-动力学协同研究

张子临¹, 杜经莲^{*1}, 刘峰^{1,2}

1. 西北工业大学 凝固技术国家重点实验室

2. 西北工业大学 分析测试中心

6xxx 系铝合金是实现汽车轻量化制造的理想材料, 其强度主要来源于固溶-时效过程中形成的不同析出强化物相。这些析出相的形核-生长过程相互重叠, 协同竞争, 最终形成多相复合的析出微结构直接影响着合金的强度和塑性等力学性能。6xxx 系铝合金中 β'' 相的析出强化效果最显著, 然而目前 β'' 相与其它析出相间竞争关系并不明晰。为此, 本研究基于多相析出 KWN 模型, 从相变热-动力学协同角度分析了 6xxx 系铝合金中多相竞争析出的影响因素和转变特征, 进而阐明了 β'' 相在多相竞争析出中占优所对应的合金成分和时效工艺参数选择缘由。首先, 多相竞争析出动力学演化结果表明: 随着 6xxx 系铝合金中硅含量的增加, β'' 相更难转变为 β' 相、U1 相、U2 相和 B' 相; 例如, 当硅/镁比从 0.52 增加到 1.96 时, 523 K 下 β'' 相被 β' 相取代的时间从 1.2 h 延长至 2.7 h, 对应于富硅合金中更明显的析出强化效应。其次, 基于析出相变热-动力学协同作用下的广义稳定性计算结果, 分析了 β'' 相与 β' 相间竞争析出随时效工艺参数的变化关系, 发现降低时效温度和缩短时效时间均有利于 β'' 相在多相竞争中的胜出, 对应 6xxx 系铝合金强度的上升。综上所述, 当前研究探讨了不同成分和时效工艺下 6xxx 系铝合金多相竞争析出微结构的影响因素及转变特征, 从析出相变热-动力学协同角度为合金成分和时效工艺参数的选取提供理论支撑。

分会编号-12

难熔高熵合金强塑性调控

徐流杰

河南科技大学

分会编号-13

宽温域、高强、高韧纳米析出强化高熵合金的设计

杨涛*

香港城市大学

为满足极端环境下的使用要求，设计在宽温域范围内均具有优异性能的合金对于航空、航天、低温海洋等先进现代工业尤为重要。然而传统合金的性能通常仅限于特定且相对较窄的温度范围。基于高熵准则的多主元合金设计方法，为在广阔的成分空间中设计具有优异机械性能的新型合金提供了巨大的机会。本研究基于相图计算与热机械处理获得了一种宽温域范围内（-196~1000°C）均具有优异力学性能的析出强化高熵合金。该合金中 L_{12} 密度较高（58.5%），从而在低温到高温能够维持较高的强度。另一方面，合金的层错能较低，从而激发在低温变形过程中大量层错的产生，进而提高其在低温下的强塑性。此外，该合金在 700°C 表现出了明显的反常屈服现象，屈服强度可达 1045 MPa，这主要归功于 L_{12} 内部超晶格位错的交滑移现象所形成的 Kear-Wilsdorf (K-W) 锁。更重要的是，我们通过机械热处理的方法使得晶界产生锯齿化，从而显著提高了晶界抗中温脆性的能力。即使在较高的应力下，该合金在 600–800°C 中温区间仍然表现出了良好的拉伸塑性，并未发生中温晶界脆性现象。这些研究发现也有望应用到其他的金属结构材料，从而进一步推动材料的组织优化与性能提升。

分会编号-014

温度场仿真与相变动力学耦合增材制造钛合金组织预测

赵宇凡*, 谢朋辰, 杨海欧, 林鑫

西北工业大学

由于激光定向能量沉积 Ti-6Al-4V 成形过程中高温梯度、高冷却速率以及逐层沉积的加工特点，构件会经历较为复杂的循环热历史，往往呈现微观组织不均匀性。其中 α 板条宽度是决定激光定向能量沉积 Ti-6Al-4V 构件机械性能的关键组织特征。但目前对于增材制造往复热循环过程和 α 板条尺寸的关联仍缺乏定量评估，并且多次加热/冷却循环过程的相变动力学模型也有待进一步修正拓展。本研究基于宏观温度场模拟，结合单一变量对照实验，获得了工艺参数-热历史-微观组织演化关系。在此基础上，进一步耦合相变动力学，分别优化及建立了基于相分数与基于多次溶解-沉淀转化机制的两种 α 板条宽度预测模型。通过验证实验，发现前者在 α 板条宽度预测精度方面略高于后者，显示出 α 板条宽度和相分数的显著相关性，且后者在模型构建中存在误差来源并有待优化。但是在热循环过程中板条宽度演化和粗化程度随沉积高度的变化趋势判断方面，后者呈现出更明显的合理性。这是由于前者缺少板条变温粗化的理论基础，恰恰证明了多次溶解和沉淀转化机制解释激光定向能量沉积 α 板条粗化的合理及可靠性。本研究对增材制造 Ti-6Al-4V 合金 α 板条宽度的准确预测，将有助于提高对微观组织及其力学性能控制能力

分会编号-15

多主元合金的热力学与力学稳定性

王云江*

中国科学院力学研究所

在过去的二十年中，材料学领域取得的最显著的突破之一为多主元合金概念引入，从而引发了物理冶金学中被称为高熵合金一类材料的引入，在材料的力学与功能性质等方面开拓了极大的调控空间。多主元合金通常表现出一种独特的结构特征，即由于焓和熵相互竞争而形成了局部的化学短程有序。然而，化学序形成的物理机制仍不清楚，并且其对多主元合金的热力学与力学稳定性的影响仍在探索中。为此，本报告将基于原子尺度模拟，从自由能与熵的观点，探讨无序固溶体中“化学无序-有序转变”的热力学机制；并且弹塑性性质原子模拟，探讨短程化学有序在弹性失稳、扩散和位错等塑性机制中的作用，从而为多主元合金的宏观力学性质提供微观的热力学与动力学图像。

分会编号-016

高锰 TWIP 钢的位错演化行为及加工硬化机制

骆智超*

广东省科学院新材料研究所

孪生诱发塑性 (TWIP) 钢作为第二代先进高强钢具有极高的强塑性, 其均匀延伸率可高于 50%。一直以来, 大家认为形变孪晶是 TWIP 钢优异拉伸性能和高加工硬化率的原因。在这个报告中, 作者基于控制温度和速率的拉伸和同步辐射试验, 证明相比于形变孪晶, 间隙固溶原子是 TWIP 钢高位错密度和高加工硬化率的关键。同时, 报告进一步阐明了间隙固溶原子影响 TWIP 钢位错热激活和增殖行为的微观机制。

分会编号-17

固态相变共生热-动力学

黄林科*

西北工业大学

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

分会编号-18

难熔钼基亚稳金属材料形成热力学和动力学因素

郭胜锋*

西南大学

亚稳态无序合金因其结构或成分无序, 而展现出独特的力学、物理和化学性质。然而, 随着服役温度、时间、压力等外部环境的变化, 其亚稳态结构易失稳, 从而丧失其优异性能。如何发展高热稳定性无序合金, 成为当前领域关注的热点之一。近年来, 随着高温非晶合金的出现 (其玻璃转变温度通常大于 1000K), 为解决这一问题提供了可能。然而, 已报道的高温非晶合金主要局限在 Ir、Os 等贵金属体系^[1,2], 其高昂的原材料成本限制了进一步发展。本报告结合团队近年来发展的难熔钼基高温非晶合金^[3], 重点探讨其形成热力学和动力学因素, 揭示这类极具工程化应用背景的难熔亚稳金属材料形成本质, 并简要介绍其独特的力学、物理和化学性质。

分会编号-19

基于热/动力学相关性和机器学习的枝晶生长建模

李述^{*1}, 王鑫¹, 刘峰²

1. 哈尔滨理工大学

2. 西北工业大学

枝晶生长是金属和合金凝固过程中最常见的现象之一, 在凝固理论研究与生产实践中, 枝晶生长都扮演着至关重要的角色。机器学习作为数据驱动的典型代表, 可以较好的克服以往研究范式的不足。然而机器学习缺乏物理基础, 这将导致模型预测精度和外推能力的下降。因此, 将枝晶生长物理模型与机器学习深度耦合, 探讨如何提升枝晶生长速度预测的准确性, 建立准确可靠的枝晶生长模型具有重要的理论意义与潜在的应用价值。本文首先建立了纯数据驱动的机器学习模型。通过对现有的二元合金实验数据的预测探索了该模型的插值能力, 并探讨了其对于未知合金界面速度的两种外推能力, 针对完全外推效果较差的 Ni-B 和 Co-Cu 合金进行了部分外推的探索。结果表明, 该模型实现了较好的插值能力与外推能力。其次, 为了进一步提高模型预测的准确性, 提出了两种基于枝晶生长物理模型的机器学习模型。首先提出了基于 GD 枝晶生长模型的机器学习模型, 对模型的插值能力进行探讨, 由于 GD 模型本身与某些实验点拟合的偏差较大, 因此会导致模型的准确性下降。鉴于该缺点, 本文提出了基于热/动力学相关性的机器学习枝晶生长模型, 生成了相对于 GD 模型与实验点拟合更好的曲线, 验证了该模型的插值能力, 探讨了其热/动力学相关性的本质规律。结果表明, 引入了热/动力学相关性的机器学习枝晶生长模型具有更好的插值能力。在探究了两种基于枝晶生长物理模型的机器学习模型的插值能力后, 对两模型的完全外推和部分外推两种外推能力进行了探讨。结果表明, 部分外推相较于完全外推大大降低了其误差, 针对于 Co-Cu 合金, 上述三种模型的 RMSE 分别下降了 66.2%、76.1%和 66.4%; 综合五种合金的外推能力, 基于热/动力学相关性的机器学习自由枝晶生长模型相比纯数据驱动的机器学习模型展现了更高的准确率。

分会编号-20

Thermodynamically Informed Graph for Interpretable and Extensible Machine Learning: Martensite Start Temperature Prediction

Chenchong Wang*

Northeastern University, China

A common challenge in accelerated material design is to apply machine learning (ML) methods that can handle data with different structures and dimensions, and also provide physical interpretability. Unfortunately, most existing ML methods are ‘black box’ models incapable of providing physical interpretation or dealing with missing dimensions data that are often encountered in materials science. To overcome this challenge, we propose an interpretable and extensible machine learning framework based on thermodynamically informed graphs and deep data mining from graph neural networks. We demonstrate our framework on the problem of predicting the martensite start (Ms) temperature, which depends on various factors (composition, austenite grain size, and outfield conditions). We construct a thermodynamically informed graph that captures the quantitative relationships between these factors and the Ms temperature using limited and incomplete data. The prediction results indicate that our framework provides clear physical insights because the thermodynamic mechanisms are embedded in the thermodynamic representation graph. Our framework has several advantages: 1) it incorporates thermodynamic mechanisms into the graph structure, 2) it can handle missing dimensions data by filling in the gaps with graph information, and 3) it can be easily extended to new features without requiring much additional data for training. Moreover, we derive a general empirical equation for the Ms temperature prediction from the trained graph neural networks for practical applications.

分会编号-21

多元多相铜合金相图热力学与热物性研究

胡标^{*1}, 左锐¹, 王雨霏¹, 刘玉玲¹, 刘钰玲², 杜勇²

1. 安徽理工大学材料科学与工程学院
2. 中南大学粉末冶金国家重点实验室

热力学及热物性数据库对提升合金性能、改善生产工艺、开发新型合金材料具有重要意义。本课题组建立了包含 30 种元素的多元铜合金热力学数据库, 涵盖了大多数商用铜合金中的主要合金元素和添加元素。该热力学数据库在整个成分范围内评估了 330 多个二元系和 60 多个三元系, 包括大约 300 种不同的溶体相和金属间化合物。利用该热力学数据库, 可计算从纯铜到复杂商用铜合金的各种成分、相平衡等, 采用 Scheil 模型预测了合金在凝固过程中的相变序列以及相组成和相分数。结合相应的动力学数据库, 将本工作建立的热力学数据库用于模拟铜合金在时效过程中的微观结构演变。模拟结果得到关键实验的验证, 证明建立的热力学数据库具有准确性。同时, 本课题组对多元铜合金的热导率、粘度、摩尔体积等热物性质进行了研究, 建立了相应的热物性数据库, 为合金微观结构演变的定量描述提供关键数据。

分会编号-22

转变错配弹塑性调节与固态相变热-动力学

宋韶杰*

西北工业大学

固态相变通常伴随着新/旧两相的晶格(或体积)错配, 而错配应变能及其塑性弛豫往往对固态相变的热力学和动力学有着重要影响。该报告针对扩散型固态相变中界面/扩散混合控制界面迁移过程, 考虑化学驱动力、应变能与扩散的交互作用, 构建考虑热-动力学混合效应的界面迁移模型, 澄清应变能变化和溶质再分配对界面迁移的热力学抵消效应, 以及相界面前沿的应变能累积在降低界面化学驱动力的同时提高界面迁移动力学能垒。

分会编号-23

Ni₄₄Co₁₀Cr₁₂Fe₁₅Al₁₇W₂ 共晶高熵合金相选择再结晶的温度依赖性及其力学效应

刘馨, 何峰*, 王锦程

西北工业大学

相选择再结晶是改善共晶高熵合金力学性能的有效策略。通过选相再结晶处理, 回复后的硬相和再结晶的软相协同工作, 充分释放共晶高熵合金的应变硬化能力。然而, 很少有研究关注共晶高熵合金中选相再结晶组织结构的优化。在本研究中, 我们以 Ni₄₄Co₁₀Cr₁₂Fe₁₅Al₁₇W₂ 为实验材料, 研究了退火温度和轧制时间对共晶高熵合金选相再结晶的影响。我们制备了不同轧制次数和退火温度下的选相再结晶样品, 并阐明了这些合金的强化机制和断裂行为。其中经过两次 30% 冷轧和随后在 1000°C 退火 20 分钟后, 合金的铸态屈服强度、极限拉伸强度和延展性分别提高到 842±26 MPa、1387±11 MPa 和 27±1%, 在不牺牲屈服和极限拉伸强度的情况下延展性提高了 50% 以上。结合理论计算与实验验证阐明了合金的强化机制, 表明其优异的强度来自于析出, 位错, 以及晶界强化, 而良好塑性是由于裂纹在相界处开裂, 并且不易扩展。这些发现创造了选相再结晶结合回复和再结晶两个过程的全新状态, 可以显著提高共晶高熵合金, 甚至其他双相合金的力学性能。

分会编号-24

基于热-动力学相关性设计木材衍生高性能电化学二氧化碳还原催化剂

于斐涵、杜敏疏、刘峰*

西北工业大学

背景和目标：利用电化学 CO_2 还原反应(ECR)将 CO_2 转化为高附加值化合物是一项很有前途的技术。木材衍生 ECR 电催化剂因其环境友好且具有良好的气体和离子运输能力等优点，近年来受到越来越多的关注。然而较高的过电位，剧烈的竞争反应是目前木材衍生 ECR 催化剂所面临的巨大挑战。因此如何高效的筛选和设计高性能电催化剂是亟待解决的问题。本文旨在通过建立催化剂微观组织和催化性能之间的关系，揭示其内在热-动力学机理。从而实现对目标催化剂的设计和筛选。

方法：本文将 Marcus 方程与热-动力学相关理论结合，利用 DFT 计算不同 N 掺杂形式和掺杂比例的热/动力学数据，从而建立了“热力学-动力学-N 掺杂形式/比例”曲线，成功地预测了最佳 N-C 掺杂比。通过调控三聚氰胺、氯化铁和杨木粉末三者的比例，从而合成一系列不同 N-C 掺杂比的杨木衍生 N 掺杂石墨碳催化剂，并根据这些催化剂的 ECR 活性对模型曲线的准确性进行验证。

结论：根据“热力学-动力学-N 掺杂形式/比例”曲线，筛选出吡啶 N 含量为 2 At% 的催化剂具有最佳 ECR 活性。在三聚氰胺(N 源)和氯化铁(活化剂)的辅助下，成功获得了具有最佳 N 掺杂含量(吡啶-N 1.87 At%，吡咯-N 1.52 At%)、高比表面积($471.2 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$)和丰富纳米孔的杨木基三维 N 掺杂石墨化碳催化剂(PB-NC₄)。该催化剂在-0.71 V(vs. RHE)的低电位下具有 86.78% 的 ECR 活性和至少 10 次循环的长期稳定性。此外所制得催化剂的 ECR 活性与模型曲线匹配良好，说明了模型的合理性。这扩展了热-动力学相关性理论在功能材料中的应用，并为未来高性能电催化剂的设计提供了新的思路。

分会编号-25

原位电子显微学在结构材料强韧化机理揭示中的应用

岳永海*

北京航空航天大学

制备与研发新型高性能结构材料是当前材料领域研究的热点问题，而明晰材料在变形过程中的结构演化规律是高性能结构材料设计的关键。原位电子显微学可以帮助我们从微纳尺度甚至是原子尺度动态揭示材料结构演化的机制，在当前新材料设计中发挥了越来越重要的作用。报告人重点介绍近年来通过原位电子显微学揭示材料动态演化规律方面的研究工作，包括动态揭示了纳米孪晶金刚石复合材料的韧化机理以及其室温自愈合的原子机制等，给相关领域科研工作者在高性能材料结构设计方面提供一些借鉴。

分会编号-26

高强钢中亚稳残余奥氏体的微纳米力学研究

何斌斌*, 潘帅

南方科技大学

高强钢广泛应用于汽车、轨道交通等国计民生产业，可提高能源利用效率和降低碳排放。亚稳态残余奥氏体在变形过程中发生马氏体相变，促进先进钢铁材料的加工硬化和力学性能。然而，先进钢铁材料中的亚稳奥氏体晶粒尺寸细小，表征单个残余奥氏体的力学行为具有较高的难度。通过纳米压痕技术可成功表征单个残余奥氏体的力学行为。针对力-位移曲线和组织结构的具体分析，本报告将讨论残余奥氏体在不同钢铁材料中所呈现出来的复杂微纳米力学行为，包括压痕下所发生的马氏体相变与屈服台阶 (pop-in) 之间的关系。此外，本报告也会涉及残余奥氏体的机械稳定性、本征硬度及应力引起的马氏体相变等相关内容。

分会编号-27

微米尺寸面心立方结构单晶的变形孪生机理

梁志远^{*1}, 黄明欣²

1. 松山湖材料实验室

2. 香港大学

当外观尺寸缩小到微纳米尺度时,金属材料常表现出独特的变形行为与机理。本研究采用具有面心立方结构(FCC)的孪生诱发塑性(TWIP)钢作为模型材料,通过小尺度力学试验及透射电镜表征研究微米尺寸 FCC 单晶的变形孪生机理。研究发现:(1)变形孪晶的形成与否与晶体取向密切相关,且孪晶形成的临界切应力比位错滑移更高;(2)变形孪晶的形成通过肖克利不全位错在样品表面发射、并在连续{111}面上滑移来完成。研究在实验的基础上建立了一个可以预测微米尺寸 FCC 单晶中变形孪晶形核与长大的物理模型,模拟结果显示该模型可有效预测孪晶体积分数、孪晶形貌及孪晶的爆发性形成行为。

分会编号-28

纳米多晶 NiCoCrFe 高熵合金多重变形机制的定量分析

侯兆阳*, 陈军

长安大学

高熵合金(HEA)因其独特的结构特征和优异的力学性能而受到广泛关注。NiCoCrFe 基高熵合金在变形过程往往呈现多重变形机制,但不同变形机制对总变形贡献的定量分析仍需要进一步深入研究。本研究采用分子动力学方法,对不同晶粒尺寸下纳米晶 NiCoCrFe 高熵合金的拉伸变形过程进行了模拟计算,结果表明随着晶粒尺寸的减小,体系平均流变应力从 Hall-Petch(HP)强化关系逐渐转变为 Inverse Hall-Petch (IHP)软化关系。进一步研究发现,在纳米晶 NiCoCrFe 高熵合金的 HP 强化和 IHP 软化机制中,均存在多重变形机制。HP 强化机制中存在 Shockley 部分位错滑移外,还存在大量的内禀堆垛层错和 HCP 马氏体相变;IHP 软化机制中除了晶界迁移,还存在大量的内禀堆垛层错和少量的 HCP 马氏体相变。基于连续介质运动学理论,定量给出了各单个变形机制对总应变协调中所起到的作用,该结果比根据各微观结构的数量占比更准确揭示多重变形机制。

分会编号-29

面心立方结构中/高熵合金的动态力学行为及变形机理研究

李建国*

西北工业大学

随着工程服役条件的愈加严苛化,对材料性能的要求越来越高,传统金属的性能设计已渐趋发展瓶颈,特别是在一些极端载荷下,例如,韧性金属受冲击作用时出现突发性失稳破坏,低温环境下韧脆转变等,这些都对结构安全造成威胁,因此,高强韧金属材料的研发及其力学行为的认识显得十分重要。高熵合金(HEA)以其独特的原子结构特征和优异的力学性能引起了世界范围的广泛关注,然而针对新型合金的动态力学行为及变形机理的研究较少,本文通过系列化实验建立了宽应变率、宽温度范围内单轴应力状态不同载荷条件下 HEA 力学行为演化与微观变形机理之间的对应关系,清楚地解释了极端载荷条件下新型 HEA 表现出更高强度和更好塑性的微观原因。值得注意的是,在高应变率低温耦合条件下,分阶段表征了随着应力水平的变化,由传统塑性变形机理(I阶段:位错滑移;II阶段:形变孪晶)向退孪生诱导局部变形带、纳米尺度 FCC→BCC 相变以及相继发生的固态非晶化转变等新机理(III阶段)的转化过程,并结合原子尺度的大规模分子动力学模拟分析,揭示了纳米尺度相变的临界应力条件及转变路径,发现了一种位错累积导致晶格畸变进而形成非晶化条带的塑性机制。

我们同时发现动态单轴压缩条件下该合金表现出反常的绝热剪切失效行为。根据传统认知,低屈服强度、高应变硬化率、良好的塑性能力的 FCC HEA 并不易发生动态失稳变形,前人研究中发现 FCC 高/中熵

合金即使在强制动态剪切下仍表现出优异的抗剪切局部化能力。然而，在 77K 低温下冲击时我们发现 Al0.1CoCrFeNi HEA 中形成沿剪切方向扩展的绝热剪切带（ASB）。为了深入研究其中 ASB 的形成机制，我们开展了不同温度下限制应变动态压缩试验以及一定应变下试样表面显微硬度的测量，并结合不同阶段微观结构演化特征揭示了绝热剪切失稳微观机理。结果表明，动态压缩过程中在 ASB 形成之前已经出现了大量的动态再结晶晶粒，低层错能合金中高密度位错及孪晶相互作用是主要的再结晶机理，这些再结晶软点成为诱导变形局部化并发生失稳的主因，结合 DIC 技术进一步分析了动态加载时离散再结晶软点诱导局部剪切变形开启，进而发生热塑性失稳的全过程。

分会编号-30

TiVNbTa 难熔高熵合金中晶界强化与固溶强化的权衡

邢轶，屈瑞涛*

西北工业大学

难熔高熵合金(RHEA)以优异的高温性能等特点得到人们的关注。TiVNbTa 是少数具有室温拉伸塑性的 RHEA 之一，但屈服强度较低。本研究关注了晶粒细化与固溶处理对 TiVNbTa 强塑性的影响，分析两种经典强化机制对 TiVNbTa 的作用。当晶粒尺寸从 48.7 μm 减小至 12.8 μm 时，TiVNbTa RHEA 的屈服强度从 769 MPa 提升至 800 MPa，合金为 740 MPa，Hall-Petch 系数 k 仅为 219.3 $\text{MPa}\cdot\mu\text{m}^{-1/2}$ ，远低于常见金属及合金。而后在 TiVNbTa 中添加较大原子半径的 Al，试图增大固溶体的晶格畸变，发现 Al 含量从 0 at.% 增加至 5 at.% 后，合金屈服强度显著提升，且断裂延伸率几乎无下降。(TiVNbTa)₉₅Al₅ 的抗拉强度可达 991 MPa，断裂延伸率~46%，表现出优异的强塑性配比。本工作阐明了固溶强化对 RHEA 性能调控的重要作用，为设计出具有良好强塑性配比的延性 RHEA 提供了线索。

分会编号-31

力致非晶化

赵士腾*

北京航空航天大学

晶体材料塑性变形的微观机制主要是位错的滑移与攀移、形变孪晶和马氏体相变。在一些极端的加载条件下，材料还可能发生晶体到非晶的固态相变，这主要是由于强塑性变形引入的缺陷使得原始的晶体结构自由能急剧上升，导致晶格失稳。本报告重点报道多种晶体材料在极端变形条件下产生的非晶化现象，提出力致非晶化的热力学模型，利用多尺度微观组织表征揭示非晶化的微观机制，开展分子动力学模拟阐明力致非晶化的演化规律。

分会编号-32

介观位错模型的热力学框架与动力学组态形成准则

巫荣海*

西北工业大学

位错是晶体材料塑性变形的载体，介观位错模型可保留纳观的主要物理机制，同时具备计算量不随位错密度升高而增大的特点，因而是塑性力学的重要研究方向。介观位错建模时的随意性问题突出，极少对其热力学和动力学进行验证。本报告从介观位错体系能量泛函出发，通过 Clausius–Planck 不等式建立介观位错模型的热力学框架。检验诸多经典模型并指出其中的热力学局限性，进而提出改进方案。通过介观位错动力学的线性稳定性分析推导位错组态形成准则，模拟了与实验一致的胞状位错组态并阐明了其形成机理。

分会编号-33

基于总位错密度场的晶体塑性理论

凌超*, 阮启超, 范张晨, Esteban Busso, 李东风

哈尔滨工业大学(深圳)

晶体塑性理论以连续介质理论为基础, 深入考虑晶体缺陷演化机理与塑性变形的关系, 能够准确刻画和预测金属在细观尺度上的不均匀变形和微结构敏感的失效行为, 因而受到了广泛关注。经典的晶体塑性理论常将位错密度作为内变量, 并以唯像的方式描述位错密度的演化, 对位错密度场的动力学特性考虑不足。本工作在晶体塑性有限变形理论框架下, 以“总位错密度”概念为基础, 采用统一的方式处理统计存储位错和几何必需位错, 使用尺度上推方法得到连续位错密度场, 通过总位错密度输运方程描述位错密度的演化。针对位错堆积、受约束单晶条带在变形过程中边界层发展等经典边值问题, 使用有限元方法对所发展的理论进行求解, 得到了与离散位错动力学模拟一致的预测结果, 验证了理论的可靠性。此外, 使用该理论对颗粒增强金属基复合材料在循环载荷下的响应进行了分析, 准确预测了其塑性变形行为的包辛格效应和增强相尺寸效应。

分会编号-34

高强钢断裂能量平衡及断裂韧性评价研究

张鹏*, 李鹤飞, 段启强, 屈瑞涛, 张哲峰

中国科学院金属研究所

材料的断裂过程由正断和剪切两种不同断裂形式共同构成, 两种断裂过程中消耗能量之和趋向于最小化的热力学稳定状态。而其中, 正断能量的大小(即断裂韧性)代表了裂纹扩展的难易, 被认为是衡量材料在静载荷下抵抗裂纹扩展的重要指标, 也是保障构件安全服役的关键参量。然而, 由于尺寸受限, 直接测量材料的断裂韧性, 对于高韧性材料往往较为困难。针对这一问题, 本报告将介绍四种在尺寸受限情况下, 通过考虑能量平衡实现断裂韧性准确评价的方法: (1) 从微观机制出发, 揭示断口微观特征与断裂韧性的定量关系, 从而实现通过断口观察预测断裂韧性, 并指导优化高强钢韧性的思路; (2) 基于断裂韧性样品的尺寸效应研究, 发展通过系列小尺寸样品预测断裂韧性的方法; (3) 从断裂能量入手, 首先通过改变冲击与断裂韧性测试样品尺寸, 建立了其断裂过程中正断与剪切断裂能量的平衡关系。进而发展剪切唇饱和尺寸与断裂韧性的关系, 建立宏观断口预测断裂韧性的方法; (4) 考虑冲击断裂过程通常由裂纹萌生与扩展两部分组成, 这与断裂韧性以扩展为主有所不同, 因此, 两种剪切唇尺寸间呈线性关系。基于上述研究, 成功建立断裂韧性、冲击韧性与拉伸强度间的定量关系。从而实现易于测试的拉伸强度与冲击韧性快速预测断裂韧性。

分会编号-35

退火孪晶失稳增塑 FCC 型高熵合金

霍鹏达, 黄林科*, 刘峰

西北工业大学, 凝固技术国家重点实验室, 西安, 710072

经典理念认为退火孪晶强化是提高结构材料力学性能的有效手段, 但随晶粒尺寸的减少, 退火孪晶则易成为裂纹萌生的首选位置从而导致塑性的“越小越差”。因此, 退火孪晶作为力学性能调控的“双刃剑”备受争议。本研究在超细晶高熵合金中引入“亚稳”孪晶结构, 不仅实现了强塑性的协同提升, 而且表现出优于粗晶高熵合金的加工硬化能力。研究表明: 大量的非共格 3D 退火孪晶结构为孪晶失稳提供亚稳环境。此外, 间隙 C 原子提高了晶格畸变并触发全位错与退火孪晶反应进而使得退火孪晶消失。孪晶失稳可减缓超细晶高熵合金局部应力集中并极大程度上避免了小尺寸材料退火孪晶处的裂纹萌生。本研究中的亚稳孪晶为超细晶高熵合金性能调控提供了一种有效的新型变形机制。

分会编号-36

增材制造钢的缺口强化效应

马昊天, 屈瑞涛*, 谭华, 刘峰

西北工业大学材料学院凝固技术国家重点实验室

近年来, 增材制造合金由于其优异的性能得到了广泛的发展。然而, 由于快速制造的独特工艺, 在增材制造合金中, 气孔或未熔化颗粒等外部缺陷似乎是不可避免的。本报告以定向能量沉积技术制备的 17-4PH 不锈钢作为合金模型。利用缺口模拟外在缺陷, 研究了缺口对拉伸强度的影响。制备了具有不同缺口根部半径和样品净宽度的样品, 并进行了三维弹塑性有限元分析。发现所研究的增材制造钢的抗拉强度对缺口不敏感, 并观察到缺口强化行为。随着应力集中系数的增加, 缺口强度比先增大后减小。将缺口拉伸试验与有限元分析结果相结合, 提出了缺口强度准则。当缺口平面中的 von Mises 有效应力的最低值达到样品颈缩真应力时, 缺口样品名义应力达到最大值, 即缺口强度。这表明韧性合金的缺口强度对应于缺口平面的塑性失稳。其次我们借助材料本征的加工硬化反应, 以及缺口样品的特殊几何结构, 理论分析了失稳条件。这些结果不仅有利于理解外在缺陷对增材制造合金力学性能的影响, 而且对预测其他韧性材料的缺口强度也非常重要。

分会编号-37

2000MPa 级高塑性-高韧性 C-Mn 系超高强度钢的设计及其应用思考

李云杰*, 袁国, 王国栋

东北大学

2000 MPa 级超高强钢是交通、深海及国防军工等领域的关键材料。然而, 该类材料普遍面临难以同时增强、增塑/韧的科学难题, 严重制约了其成形及应用。以高强中锰钢为研究对象, 当 C 碳含量提升至 0.3% 以上时, 马氏体基体中锰钢往往呈现脆性断裂, 且难以通过原奥调控、亚稳相含量调控等来解决。因此, 如何基于该成分体系实现塑韧性的同时提升是巨大的挑战。我们创新提出了“马氏体拓扑学结构设计+亚稳相调控”的协同增塑、增韧机制, 构筑出一种全新的拓扑学双重有序排列马氏体和多尺度亚稳奥氏体的纳米级多层次组织结构, 实现了 1600~1900 MPa 屈服强度、2000~2400 MPa 抗拉强度和 18~25% 均匀延伸率的极致性能。研究成果发表在 Science 期刊(2023, 379: 168-173), 并入选 ESI 高被引论文, 且入选了“2023 年世界钢铁工业十大技术要闻”。在此基础上, 我们考虑到层状结构材料在焊接以及后续热处理过程中将会破坏其组织结构优势, 对合金成分进行重新设计, 探索发现在一定 C/Mn 含量约束下, 并辅助添加少量 Ni、Mo 等合金元素可以避免脆断行为, 钢种进行调质处理后其低温 Akv 超过 20 J。上述机制具有普适性, 可应用于轧制、锻造等多个领域, 以生产制备大尺寸轴类、薄板、厚板, 同时置换型元素 Mn、Ni、Cr 可替换, 以提升材料韧性、耐磨性及耐腐蚀性等, 目前已在装甲、工程机械方面开展了应用研究工作。

分会编号-38

时效初期析出相结构的精确解析: 化学与应变的交互作用

王慷*

上海交通大学

在合金的热加工过程中, 不同种类原子在基体晶格上的占位决定了原子间相互作用和材料的稳定性, 而占位情形随加工条件的变化致使合金中出现诸多有趣现象, 例如有序/无序相变、共格析出相、短程有序结构等, 进而对材料的物理、化学和力学性能产生显著影响。时效处理早期, 析出相一般处于亚稳态、尺寸较小(若干纳米), 其结构也在不断演化, 因而难以用实验手段精确表征。在处理占位问题的理论方法中, 集团展开法(Cluster Expansion, CE)关注于基体晶格上的短程化学作用, 已成功应用于多种合金和化合物体系, 然而该方法对合金中组元尺寸错配引起的长程应变作用束手无策。前人开发的混合空间集团展开法(Mixed-Space Cluster Expansion, MSCE), 可同时处理短程化学作用与长程应变作用, 但只适用于立方对

称性、单套亚晶格、晶格错配较小的二元体系。当前工作中，我们将 MSCE 方法扩展至任意对称性、多套亚晶格、任意错配度的多元体系，当前方法对共格结构的能量预测精度接近第一原理计算（即 1 MeV/atom）。此外，我们将 CE 和 MSCE 方法应用到多个镁合金体系，包括 Mg-Sn, Mg-Zn, Mg-Zn-Ca 等，精确确定了形核早期 GP 区和亚稳析出相的原子结构。该工作不仅解决了时效加工早期新相原子结构的争议问题，所得到的原子结构也可成为更大尺度的析出相-位错相互作用或组织演化模拟的基础。

分会编号-39

Uncovering the origin and characteristics of Portevin-Le Chatelier bands in medium Mn steels

Li Liu*, Yao Lu

Harbin Institute of Technology (Shenzhen)

Portevin-Le Chatelier (PLC) effect often occurs in many alloy systems and leads to flow stress variation, but detailed mechanisms are not fully clear yet, especially medium Mn steel. The objective of the present work is to thoroughly clarify the complex spatiotemporal property of PLC band causing serrations in discontinuous flow of medium Mn steel in connection with its origin mechanism. For the purpose, a typical annealed medium Mn steel with duplex phase was tensile tested at room temperature at an initial strain rate of 10^{-3} /s, during which the digital image correlation (DIC) technique was applied for analyzing local strain and strain-rate distributions. The PLC band exhibits the transformation from high frequency serrations to large serration magnitudes. In addition, the solute carbon atoms surrounding dislocation was atomic-scale characterized by the correlative transmission electron microscopy (TEM)-atom probe tomography (APT) experiments. The abundant carbon atoms of austenite phase are clearly segregated linearly along free-dislocation core and the average carbon concentration around the dislocation is around 3.5 at. %. The physical model for the origin mechanism of serration is proposed and verified with theoretical calculation for the present steel. The proposed mechanism involves the rapid diffusion of interstitial carbon atoms and the movement rate of mobile dislocations. The results reveal that the diffusion time of carbon atoms into the dislocation and the movement time of dislocation within two orders of magnitude are considered as critical condition of PLC effect rather than some absolute value. The dislocation-core diffusion mechanism might also be applied to similar advanced high strength steels.

分会编号-40

普适的晶粒生长理论及其应用

胡剑峰*

上海大学

多晶材料（包括金属、陶瓷和薄膜等）的微观结构能够强烈影响其实际的性能表现，材料最终微观结构的形成则主要受晶粒生长行为支配。然而，决定着材料微结构的形成和演变的晶粒生长机理是一个长期存在且极其复杂的基础难题；自 1940 年代以来，晶粒生长机理得到广泛的研究，一些理论模型公式（如经典的 von Neumann-Mullins 法则、Hillert 平均场理论和幂指数法则）从不同角度解释晶粒生长行为；但由于晶粒生长影响因素的复杂性，这些经典的理论公式只能唯象描述晶粒正常生长行为，而对于晶粒生长行为中同样重要的行为和现象则不能解释，比如，晶粒异常生长是怎么发生的？晶粒生长停滞（即热稳定）是如何发生？晶界特征和晶界现象如何影响晶粒生长？这些基础科学问题的存在，影响着人类对材料的科学设计与使用。因此，亟需对晶粒生长机理进行更深入、更广泛的研究和理解；可喜的是，晶粒生长的基础问题已受到越来越多的重视和研究，近年来以晶粒生长为主题的 SCI 文章已达年均万篇。

在这个报告里，我们将展示最新提出的一个普适的晶粒生长理论公式，该公式能够成功解释晶粒生长的一般行为（包括正常生长、异常生长和晶粒生长停滞等），并揭示了晶粒生长的演变规律和晶界与晶粒生长之间的关系。同时，比较了普适公式与经典理论公式之间的差异，并展示了我们对其正确性的实验验证。此外，我们将进一步探讨在新理论的指导下，对微结构的精确设计和材料微结构演变行为的深入理解。

分会编号-41

难熔高熵合金的断裂机制与成分设计

屈瑞涛*, 任发玲, 陈红, 黄煦东, 刘峰
西北工业大学凝固技术国家重点实验室

难熔高熵合金具有十分优异的高温力学性能, 然而多数难熔高熵合金表现出严重的室温脆性, 具有拉伸塑性的难熔高熵合金成分在所有已报道成分中占比不到 20%, 这制约着这类合金的工程应用。另一方面, 同为 BCC 单相结构的不同成分难熔高熵合金却可能表现出十分迥异的断裂行为。例如, 具有突出高温强度的 VNbMoTaW 在室温拉伸时呈现极低强度和屈服前断裂, 而 HfNbTaTiZr 却有着极高的断裂韧性。本报告将介绍我们最近在不同脆/延性难熔高熵合金断裂微观机制方面的一些认识, 同时介绍在高性能难熔高熵合金的成分设计方面的一些进展。

分会编号-42

金属缺陷塑性功热转化的微观机理

史荣豪*
河南省科学院材料研究所

长达一个世纪的塑性功热转化问题充满着争议和挑战性。我们通过 2D 和 3D 分子模拟来研究塑性功转化为热量的微观机制。结果表明, 热量的产生伴随着晶格恢复, 将部分缺陷势能, 即 stored energy of cold work (SECW) 转化为动能。因此, 特定的晶体缺陷会产生与其 SECW 变化相对应的热量。如果仅在系统表面检测微观结构和温度的变化, 则会观察到发热的时间滞后。模拟结果揭示了缺陷类型、传播路径和密度对塑性热的影响, 为升温时滞现象提供了纳米尺度的解释, 是对现有实验研究不可或缺的补充。

分会编号-43

基于相变/变形广义稳定性的马氏体、贝氏体高强钢设计

张宇¹, 刘峰^{*1,2}

1. 西北工业大学 凝固技术国家重点实验室 西安 710072
2. 西北工业大学 分析测试中心 西安 710072

相变和塑性变形是金属材料设计的两个重要过程, 其中相变中界面迁移和塑性变形中位错演化的热力学和动力学均遵循类似的热-动力协同, 即热力学驱动力 ΔG 增加伴随着动力学能垒 Q 降低, 反之亦然; 相变决定微观组织, 变形中位错演化反映了力学性能。经典的热力学稳定性概念决定了启动相变和变形的难度, 广义稳定性概念旨在评估相变或变形过程的持久性和可持续性; 大驱动力-大广义稳定性准则在金属材料设计中得到了广泛的应用。本工作从热-动力学相关性和广义稳定性出发, 针对贝氏体相变和变形中应变诱导马氏体相变进行热-动力学分析, 构建贝氏体相变和变形中应变诱导马氏体相变的热-动力学模型, 并推导其统一的热力学相关性和广义稳定性表达式。将计算结果与实验结果相拟合, 获得大驱动力和大广义稳定性的判据, 基于判据进行针对性的相变和强韧化设计, 实现对金属材料微观组织和力学性能的定量调控, 以获得目标先进高强钢材料产物。

分会编号-44

黑磷晶体电化学插层的热-动力学调控

冯晴亮*

西北工业大学

二维黑磷材料具有直接带隙、高载流子迁移率、带隙可调等优异的性质，在非制冷宽光电探测、成像及高光谱相机等领域有独特的应用优势。然而，由于磷原子孤对电子的存在，使其容易氧化，以至于目前尚无批量化制备薄层黑磷晶体的方法。电化学插层法是利用电场作用下，一定结构的离子迁移进入层状结构，以物理法破坏层间范德华力，使其纳米片脱落、剥离，具有成本低，易量产等优势。本报告首先将介绍课题组围绕黑磷插层过程中层间相互作用力、结合能等调控对插层行为及 P-P 键断裂的影响规律；其次，以电场方向和离子浓度等为诱导因素，揭示电化学插层过程中动力学过程对 P-P 键断裂的影响规律，以及形貌调控的机制；最后，围绕薄膜型黑磷材料在极端环境下宽光谱光电探测性能的探究，为拓展二维材料基全天时、全天候光电探测与成像芯片、非制冷高光谱识别相机在航空航天领域的应用提供理论支撑。

分会编号-45

纳米颗粒诱导铝合金激光熔凝孪晶形成

赵庆龙*, 马春峰

吉林大学

铝合金由于其层错能高，很难形成高密度的孪晶。我们提出一种在铝合金引入高密度生长孪晶的方法。本研究通过异质形核颗粒的孪晶结构诱发铝孪晶形核，利用激光熔凝技术促进铝合金中孪生枝晶生长，获得了超细孪晶层状组织。结合有限元模拟，研究阐明了激光熔凝过程中孪生枝晶优先生长的凝固条件。

分会编号-46

甲脒铅碘量子点光电转换过程中载流子动力学研究

阙美丹*, 何生辉, 徐源, 李裕田

西安建筑科技大学

钙钛矿量子点由于具有尺寸与带隙可调特性，在光伏、照明/显示、光电探测器等领域有着广泛的应用前景。其中，甲脒铅碘钙钛矿量子点由于其高光致发光量子产率、环境稳定性及窄带隙等优势，在众多钙钛矿材料中脱颖而出。然而，在制备过程中长链配体与表面缺陷的存在，以及量子点表面化学结构的复杂性，极大地限制了载流子的传输，使得其相关太阳能电池光电转化效率较低。本课题组致力于开发一些有机半导体小分子作为耦合材料毗连甲脒铅碘量子点，通过探索新的耦合材料与光生电荷迁移途径，从原子层面揭示分子结构-载流子迁移动力学-器件性能三者之间的构效关系，精准调控光生电荷扩散轨迹与理解量子点耦合机制，实现高效高稳定性 FAPbI₃ 量子点太阳能电池，为稳步推进钙钛矿太阳能电池产业化发展提供科学指导。

分会编号-47

基于热-动力学协同的高性能铝合金强塑性协同提升设计

杜经莲, 赵彩丝, 刘雨, 张堃钰, 张子临, 黄佳林, 刘峰*

西北工业大学

本工作围绕金属材料强度和塑性匹配问题, 以可热处理强化铝合金为典型代表, 基于其加工过程中涉及的关键相变和变形热-动力学协同效应, 探究了金属材料强度和塑性互斥的热-动力学物理缘由。耦合经典相变和位错理论, 建立了强度-塑性和热-动力学关键参量之间的本征量化关联解析模型, 并将其应用于可热处理强化铝合金的时效工艺优化和析出相设计方面。研究作为金属材料强度-塑性协同提升提供了新思路, 为从热-动力学协同视角进一步获取“合金成分-加工工艺-组织结构-力学性能”间量化关联信息奠定了基础。

分会编号-48

Zr 元素对新型核用镍铁基高温合金凝固偏析与元素扩散的影响

姚志强^{1,2}, 秦学智³, 王佳祺^{2,4}, 吴云胜^{2,5}, 管现军^{2,5}, 周兰章^{*2,5}

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 师昌绪先进材料创新中心
3. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所 中国科学院海洋关键材料重点实验室
4. 中国科技大学 材料科学与工程学院
5. 中国科学院金属研究所 中国科学院核用材料与安全评价重点实验室

高温气冷堆反应堆结构材料在服役时面临着高温和中子辐照等严苛环境, 对高温性能, 尤其是与晶界相关的蠕变等性能提出了更高要求。固溶强化型镍铁基高温合金以其优异的综合性能和良好的组织稳定性成为了该结构材料的重要候选材料。众所周知, Zr 是高温合金中的重要晶界强化元素, 相关研究已经证实添加 Zr 能够有效改善合金的力学性能, 但在凝固过程中带来偏析加剧和低熔点相析出, 在均匀化过程中促进晶粒长大和孔洞形成等不利影响, 继而影响合金后续的热加工性能。当前有关 Zr 对固溶强化型镍基高温合金凝固偏析和均质化过程中元素扩散的影响却鲜有研究。探究 Zr 对合金凝固偏析和均匀化过程中元素扩散的影响, 能够改善新型核用镍基高温合金热加工性能, 从而为后续工业化生产提供理论指导。

通过 Thermo-Calc 热力学软件、电子探针 (EPMA)、热重分析 (DTA) 等研究了 Zr 元素对合金凝固行为、元素偏析和均匀化处理过程中元素扩散的影响规律, 构建了该合金的元素扩散动力学模型, 并揭示了 Zr 元素在凝固过程中的作用机制。结果表明, 不同 Zr 含量铸态合金均在枝晶间析出富 Zr 型 MC 碳化物, 其面积分数随 Zr 含量增加而增加, 而 Zr 元素对二次枝晶间距无显著影响。Scheil-Gulliver 模型的模拟结果显示合金的凝固行为与元素偏析在 Zr 的影响下显示出不同的趋势, 且凝固过程中 Zr 在固-液界面处形成富 Zr 液膜, 阻碍液相内的元素向固相扩散, 从而扩大凝固温度区间, 并显著增加 Zr、Mo 和 Mn 元素在凝固过程中的偏析程度。基于扩散动力学模型估算出 Cr、Mo、Mn 和 W 元素在 1200°C 下的扩散系数随着 Zr 含量的增加而增加, 因此适当的 Zr 微合金化能够促进均质化过程中的元素扩散, 但过量的 Zr 元素则在凝固过程中造成严重的元素偏析, 对后续合金的热加工性能产生不利影响。

分会编号-49

相变与变形中的约束

贾东昇, 刘峰*

西北工业大学

材料加工与成形涉及的相变和变形中, 由于热力学和/或动力学变化而产生的对其本身发生与发展的物理作用, 可定义为约束。本文面向微观组织的形成与变形过程, 立足于作者近年来提出的内涵热力学稳定性和广义稳定性、热-动力学相关性和热-动力学配分的材料设计理论框架, 明晰了热力学约束和热-动力学约束的体现和机制。热力学约束代表相变/变形启动的难易程度, 而热-动力学约束从能量变化而言, 体现为形核约束长大和长大约束形核, 从过程快慢而言, 则体现为热力学约束动力学和动力学约束热力学。本文选择代表性相变或变形过程, 定量描述了上述约束, 基于此, 提出主动设计约束的学术理念, 旨在通过定量设计材料加工过程而获取力学性能优异的金属结构材料。

分会编号-50

基于淬火和等时 C 配分工艺设计高强高塑低合金钢

王耀, 黄林科*, 刘峰

西北工业大学

淬火配分(Q&P)工艺中, 淬火温度对奥氏体形貌和体积分数具有显著影响; 但大部分 Q&P 工艺中最佳淬火温度的选择往往仅考虑最大奥氏体体积分数, 而有意无意忽略了与形貌关联的奥氏体自身稳定性。因此, 如何设计工艺综合考虑奥氏体的体积分数和形貌最佳平衡对设计 Q&P 钢至关重要。本研究提出一种新的 Q&P 工艺, 即淬火与等时加热 C 配分, 在马氏体基底中引入大量低碳、薄膜状奥氏体。相比传统 Q&P 钢, 新型 Q&P 钢展现出较高的强度(屈服强度为 1168 MPa, 抗拉强度为 1722 MPa)和良好的塑性(均匀伸长率为~ 13.2%)。热-动力学分析表明, 新型 Q&P 钢中更大的位错强化、更高的背应力以及较为持久的相变诱发塑性机制来源于大驱动力的马氏体相变和大广义稳定性的 C 配分。

分会编号-51

控制双辊薄带连铸偏析的多场耦合模型

刘海钰, 刘峰*

西北工业大学

所谓的中心偏析和边缘偏析是在薄带连铸过程中形成的, 在后续的轧制和热处理中无法有效消除, 从而大大降低了最终产品的质量。遗憾的是, 迄今为止对这种偏析进行了大量的研究, 但没有充分考虑整个过程中质量、动量、能量和溶质的守恒, 以及界面迁移的热力学和动力学协同作用。因此, 本文建立了两相欧拉-欧拉体积平均模型来预测铝硅合金薄带连铸过程中的偏析, 该模型首次考虑了界面迁移和溶质扩散对溶质传输过程的影响, 以及所谓的热力学与动力学之间的关联(即热-动力学相关性)。在模拟中, 界面迁移热力学驱动力的增加总是伴随着动能势垒的降低, 反之亦然。在此基础上, 该模型准确地预测了薄带连铸时的偏析, 其中随着铸轧速度的增加, 驱动力增大, 从而减少了中心偏析, 而传热系数增大, 从而提高了广义稳定性, 从而有效地抑制了边缘偏析。通过采用前期较高驱动力、后期较高广义稳定性的策略, 可以有效抑制的中心偏析和边缘偏析。

分会编号-52

镍基单晶高温合金多尺度应力分布表征

陈凯^{*1}, 寇嘉伟¹, 王沿东²

1. 西安交通大学
2. 北京科技大学

镍基单晶高温合金制造先进航空发动机核心部件高压涡轮叶片的首选材料。镍基单晶高温合金在制备和加工中产生的残余应力对后续服役过程中微观组织的演化、力学性能的退化具有直接而重要的影响。因此,为了更好地理解镍基单晶高温合金的变形机理、优化合金设计,就需要对多尺度应力的分布进行高精度、高空间分布的测量。然而,作为公认的最准确的应力测量方法,X射线衍射技术在镍基单晶高温合金多尺度应力分布的表征方面遇到了巨大挑战:应用衍射技术测量应力的前提是需要知道合金材料无应力状态下的晶格常数 d ;但是,镍基高温合金等共格沉淀强化合金中,两相之间始终存在共格应力,因此无法获得每种物相的 d 。而且,更为麻烦的是,镍基单晶高温合金中合金元素种类多、含量高,尤其是W、Re等元素因为扩散速率慢而分布不均匀,进而导致 d 非均匀分布、处处不同且严重依赖于合金材料的制备条件、热历史,难以获得。即使对于同一种合金,改变制备方法和热处理制度甚至有可能改变两相晶格错配度的正负号,进而导致拉、压应力的倒置,对力学性能产生巨大影响。

为表征镍基单晶高温合金多尺度应力分布,本研究开发了一种具有亚微米空间分辨率的同步辐射微束衍射方法,克服了 d 未知导致的应力无法准确测量难题,并以镍基单晶高温合金为例,实现了非均匀共格沉淀强化合金中微观应力空间分布的表征。本研究利用同步辐射微束线站的单色光能量扫描技术,对镍基单晶高温合金中 γ/γ' 相的晶格错配度进行了定量表征并以此为基础计算了微米尺度下共格应力的空间分布。为描述共格应力在亚枝晶尺度上的影响,作者基于镍基单晶高温合金中 γ' 析出相与 γ 相通道的周期性组织特征,使用等效收缩描述了共格应力在析出相尺度上造成的材料形变,进而利用有限元模拟获得了非均匀分布的共格应力在亚枝晶尺度上造成的应力。

分会编号-53

同步辐射衍射方法及其在材料中的应用

苏圳煌^{*}

中国科学院上海高等研究院

国内外近十几年来同步辐射X射线技术在材料研究中作用凸显,与传统X射线相比,同步辐射X射线具有更高的光通量,更好的角分辨率,尤其是其广大灵活的实验空间,使其具有超强的原位实时监测表征能力,在金属材料表征尤其是晶格结构与形变应力等研究中意义重大。本次报告首先介绍同步辐射X射线产生的原理和技术优势,然后是上海同步辐射光源的BL14B1(衍射线站)与BL03HB(微束白光劳厄衍射线站)的相关情况与现有的原位装置(包括拉伸,加热等),最后介绍与金属材料研究相关的同步辐射技术以及应用案例研究。

分会编号-54

爆炸喷涂铁基非晶涂层粒子沉积结构调控及服役行为研究

翟海民^{*}

兰州理工大学

利用热喷涂技术将铁基非晶粉末涂覆在其他金属结构材料表面,不仅有利于改善铁基非晶合金的室温脆性,而且可实现其大面积制备,因此铁基非晶涂层在船舶、石油及发电工业等领域呈现出广阔的应用前景。但是,由于热喷涂引入缺陷(如孔隙、裂纹、氧化、晶化等)极大削弱了铁基非晶涂层结构均匀性,使其并未达到预期的超高耐磨蚀性能。针对上述问题,本研究通过调控工艺参数制备了具有不同缺陷(也即含有不同孔隙率、不同氧含量)的铁基非晶涂层,通过系统地确定铁基非晶粉末的沉积行为,结合分析

不同喷涂工艺参数与涂层缺陷之间的内在关联性，进而阐明铁基非晶涂层中缺陷的形成机制，最终建立爆炸喷涂铁基非晶涂层的加工-结构-性能的相关性。

分会编号-55

球差校正电镜微观

杨修波*

西北工业大学

材料性能和微结构的研究越来越深入到原子尺寸。现代球差校正透射电镜的透射模式（TEM）和扫描透射模式（STEM）的空间分辨率能达到原子尺度，配上大收集角度的 X 射线能谱探头还能做原子分辨率的元素面扫描。利用此特性，此报告展示了高角度环形暗场（HAADF）和积分差分相位衬度（iDPC），原子分辨率元素面扫描等扫描透射模式下的单原子成像，晶体中氧空位等缺陷微结构的表征，同时分析了微结构对材料催化等性能的影响。

分会编号-56

不全位错滑移诱导塑性

高翔宇*

西北工业大学分析测试中心

孪生和相变都可产生显著的塑性变形，因此被称为孪生诱导塑性和相变诱导塑性。然而，真正诱导塑性变形的是孪生和相变的过程，而这两个过程均由不全位错滑移引起。因此归根结底，孪生及相变诱导塑性变形实质上是滑移诱导塑性。位错、孪生及相变诱导塑性的本质均可归结为滑移，而区别仅在于全位错和不全位错的滑移。

分会编号-57

钛合金/硬质合金层状复合材料的制备及界面调控

何维均*, 李俊杰, 胥政, 田雨禾, 蒋斌

重庆大学

钛合金/硬质合金双金属层状复合材料有望兼具钛合金强度高、抗冲击性好，以及硬质合金的耐磨等特性，在航空航天、交通运输、海洋、国防等领域具有广泛的应用前景。针对钛合金和硬质合金之间易形成脆性化合物、热膨胀系数差异大而导致难以复合的问题，团队以钛合金（TA15）和钨钴硬质合金为原材料，研究了不同中间层材料、硬质合金中 Co 含量和热压扩散复合温度对界面组织和界面剪切强度的影响。研究表明，添加 Ti 箔、Fe 箔、Ag-Cu-Ti 箔、V+Fe 箔中间层时，能显著改善钛合金和硬质合金之间的界面结合，其中 V+Fe 箔为中间层时能获得最高的界面剪切强度（166 MPa）。此外，还设计开发了一种适用于钛合金/硬质合金层状复合管材的扩散复合工艺，制备出界面结合良好的复合管材。研究结果有助于加深对钛合金/硬质合金层状复合材料界面组织及界面结合性能调控的认识，为钛合金/硬质合金层状复合板/管材的制备和力学性能改善提供参考。

分会编号-58

高能球磨法制备高比表面积 α - Al_2O_3 纳米粒子及其在纳米陶瓷中的应用Lu Li¹, Hongbing Yang², Ji Ma³, Jiangong Li^{*3}

1. Gansu Agricultural University

2. Tsinghua University

3. Lanzhou University

The applications of high-specific surface-area ($>100 \text{ m}^2/\text{g}$) α - Al_2O_3 nanoparticles in fields such as nanocrystalline ceramics and chemical mechanical polishing are of crucial scientific significance. However, the bulk stable phase α - Al_2O_3 has a high surface free energy and becomes a thermodynamically unstable phase at the nanoparticle scale (specific surface area $>100 \text{ m}^2/\text{g}$, spherical particle diameter $<15 \text{ nm}$). In conventional syntheses of α - Al_2O_3 nanoparticles, particle coarsening is inevitable in the process of phase transitions from precursor nanoparticles into α - Al_2O_3 ; therefore, synthesized α - Al_2O_3 nanoparticles are usually with a specific surface area $<10 \text{ m}^2/\text{g}$. In our present work, a high-energy ball-milling method can be adopted to achieve α - Al_2O_3 nanoparticles with an average size of 7.9 nm (specific surface area of $170 \text{ m}^2/\text{g}$) and 4.8 nm (specific surface area of $253 \text{ m}^2/\text{g}$). The data and the applications of these high-specific surface-area α - Al_2O_3 nanoparticles in nanocrystalline ceramics shall be discussed.

分会编号-59

热等静压对同步加热增材制造 γ' 强化镍基合金微观组织和拉伸性能的影响

许建军*

西北工业大学

在国家加速推进航空制造业高质量快速发展的迫切需求下, 镍基高温合金的增材制造成为了近年来的研究热点。然而, 如何高效提高增材制造镍基高温合金的力学性能是该行业的永恒追求。本文选择 Inconel738LC 合金为研究对象, 通过同步感应加热 (加热至 1050°C) 的方式辅助定向能量沉积 (增材制造技术) 实验, 将沉积样品处理为三组: 沉积态、热处理态 (1070°C , $2 \text{ h} + 845^\circ\text{C}$, 24 h)、热等静压 (1190°C , 105 MPa , 3 h) + 相同热处理态, 以此研究热等静压对同步感应加热定向能量沉积 Inconel738LC 合金微观组织和拉伸性能的影响机制。研究结果表明, 沉积态样品主要由柱状晶和在枝晶间不均匀分布的 γ' 相组成。首先经过热等静压处理后, 样品的晶粒形态未发生明显变化, 但 γ' 强化相颗粒的尺寸不均匀程度明显增大。在相同热处理条件下, 沉积态样品和热等静压处理样品中的 γ' 相均呈现出双峰分布的特征, 但是热等静压处理样品中的 γ' 相尺寸均匀性更佳。对比热处理态和热等静压+热处理态样品的拉伸性能发现, 后者的抗拉强度和均匀塑性延伸率比前者分别提高了 5% 和 46% , 这得益于后者中更均匀的双峰分布 γ' 相的协同变形, 尤其是更均匀的立方体 γ' 相的变形。最后, 文章基于广义稳定性理论, 深入讨论了沉积样品在相变和塑性变形过程中的热-动力学相关性。

分会编号-60

碳纤维增强聚合物复合材料界面微观表征研究进展

刘丽婷*

西北工业大学分析测试中心

碳纤维增强聚合物复合材料 (CFRPs) 具有低密度、耐高温、高比模量和高比强度等优异性能, 在航空航天和民用工业中有着广泛的应用。CFRP 由碳纤维、聚合物基体以及两者之间的界面组成。CFRPs 界面的微观结构、化学成分、结合方式和界面结合强度对 CFRPs 的力学性能和破坏行为有很大影响。因此, 深入、系统和细致地表征界面的微观结构和性能是碳纤维增强聚合物复合材料研究领域的关键问题之一。本文综述了近年来发展起来的各种 CFRPs 界面微观形貌、微观结构、化学成分和力学性能的微观表征方法。

例如, 扫描电子显微镜(SEM)、透射电子显微镜(TEM)、原子力显微镜(AFM)、X 射线光电子能谱(XPS)、拉曼光谱(Raman)、纳米压痕等先进的分析表征技术, 以及新开发的显微原位力学测试方法在 CFRPs 界面表征中的应用。展望了 CFRPs 界面微观表征技术的前景和发展趋势。

分会编号-61

共格纳米析出相对铝合金应变硬化的影响:打破强度-塑性互斥

吴盼*

西北工业大学

在大多数工程材料中, 强度-塑性互斥通常是一个不可避免的情况, 例如在析出相强化合金中, 增强颗粒显著降低延性。为了解决这一挑战, 高密度共格纳米析出相(CNPs)作为一种微观结构, 通过 CNPs 与位错之间的多重相互作用(即共格性、有序性或 Orowan 机制)有效地提高了塑性。虽然针对单一强化机制的应变硬化理论已有一些报道, 多重相互作用的协同强化对应的应变硬化理论延性尚未实现。因此, 本工作耦合位错的形核、滑移和湮灭, 从不可逆热力学角度构建了基于位错的应变硬化理论框架, 该框架通过热力学驱动力和动能势垒来构建多重相互作用引起的协同强化。进一步, 结合球面像差校正的透射电镜和同步加速器高能 x 射线衍射, 通过 CNPs 的尺寸和塑性变形中的位错密度演化来验证当前模型。结果表明, 屈服应力与强化机制的转变有关, 颈缩应变与位错密度演化有关, 进而与激活体积有关。提出了一个高驱动力-高广义稳定性判据, 保证 CNPs 体积分数提高屈服强度, CNPs 半径提升颈缩应变。这种通过控制协同强化来打破强度-塑性互斥现象的策略可以推广到金属结构材料的设计中。

分会编号-62

Fe-C-Mn-Si 钢马氏体/贝氏体多级微结构相变行为研究

刘飞龙, 宋韶杰*, 刘峰

西北工业大学

在钢铁制造领域, 马氏体与贝氏体的相变行为研究一直是材料科学界的研究热点, 这两种非平衡相变组织, 在工程应用中的性能优化与工艺改进上扮演着至关重要的角色。本工作以 Fe-C-Mn-Si 钢为研究对象, 探究预先马氏体相变对贝氏体微结构相变行为的影响, 旨在揭示马氏体/贝氏体多级微结构变体选择机制。随着贝氏体相变温度降低, 贝氏体变体邻接关系逐渐由 V1-V2 大角度变体对为主, 转为以 V1-V4、V1-V8 小角度变体对为主导。随着不同体积分数马氏体预相变形成的不同非均匀应变场的交互, 变体邻接倾向逐渐从 V1-V2 为主的明显变体倾向, 转为 V1-V4 和 V1-V2 不均匀共存, 直至 V1-V4 变体邻接倾向为主导, 且应变能累积较大情况下, 倾向生成多变体来调节转变应变。同时预先马氏体引入可减短贝氏体形核孕育期, 提高贝氏体转变速率, 并对预先马氏体周围贝氏体板条能够起到明显细化作用, 有助于提高残余奥氏体稳定性。

分会编号-63

Unveiling Mechanical Degradation in a 3D-Printed Chemical Complex Alloy after High-Temperature Oxidation

Jiaqi Li, Zhao Shen, Xiaoqin Zeng*

Shanghai Jiao Tong University

Using selective laser melting (SLM) and hot isostatic pressing (HIP) techniques, the $\text{Ni}_{50}\text{Co}_{20}\text{Cr}_{10}\text{Al}_{15}\text{Ti}_2$ complex concentrated alloy (CCA) was fabricated. Subsequent investigation into high-temperature oxidation revealed a significant decrease in the ductility of the CCA. To address this issue, measures were taken to regulate the alloy composition, aiming to prevent the formation of depleted zones during oxidation. This approach successfully enhanced the mechanical performance of the CCA under high-temperature service conditions. After

2000 hours of oxidation at 700°C, the CCA exhibited a dramatic 62.4% reduction in elongation. In contrast, specimens subjected to 2000 hours of aging treatment at the same temperature showed no significant alteration in elongation. Selective oxidation of CCA, particularly targeting the L_{12} phase, occurs at elevated temperatures, leading to the depletion of L_{12} particles near the oxide layer and the formation of depleted zones. This phenomenon substantially diminishes the anchoring effect of the HEAs/CCAs, facilitating the rapid propagation of intergranular oxidation cracks. The absence of the L_{12} phase results in a significant decrease in the tensile strength of the depleted zone, suggesting that oxidized CCA exhibits a propensity for abrupt loss of ductility under relatively low strains, culminating in brittle fracture rather than undergoing significant plastic deformation. Utilizing advanced techniques such as ECCI and HRDIC, we observed and analyzed the expansion and internal tearing of oxidation cracks within the depleted zone with precision and clarity. Simulation outcomes highlight the exacerbation of stress concentration at crack tips within the metal matrix in the presence of depleted zones, significantly contributing to the propensity for brittle fracture in the material. To address these challenges, we propose an optimized solution focused on the composition of the L_{12} phase to mitigate selective oxidation at high temperatures. By preventing the formation of depleted zones, this strategy aims to preserve the ductility of CCA under high-temperature conditions, thereby enhancing its mechanical integrity and longevity.

分会编号-64

钒微合金化对中锰钢变形行为和加工硬化影响机理研究

刘鑫, 黄林科*, 刘峰

西北工业大学

微合金化是调控传统钢铁材料机械性能的一种行之有效的方法,但它对中锰钢机械性能的影响及其潜在变形机制仍不清楚。在此,我们报道了对临界退火中锰钢变形行为的深入研究,具体包括 Fe-0.2C-8Mn-1.5Si-0.1V (wt.%, V-alloyed) 和 Fe-0.2C-8Mn-1.5Si (wt.%, V-free) 两种成分中锰钢。与 V-free 钢相比, V-alloyed 钢具有相似的屈服强度和均匀伸长率,但却表现出更高的抗拉强度和更强的加工硬化能力。研究表明, 0.1 wt.% 的 V 会优先与 C 原子反应形成 VC 沉淀, VC 沉淀通过降低 C 含量而不是阻碍相界面迁移来影响铁素体向奥氏体的后续转变。我们发现,屈服强度不变的原因是:晶粒细化导致铁素体强度增加与 C 含量减少导致奥氏体强度降低相抵。此外,我们首次定量分析了 V-alloyed 钢和 V-free 钢加工硬化起源。在这两种钢中,相变诱导塑性 (TRIP) 效应、应力配分和位错行为的贡献不同。在此基础上,我们发现 V-alloyed 钢额外加工硬化归因于快速的 TRIP 效应、增强的应力配分,以及主要由统计存储位错促进的高效位错累积。该研究结果为了解微合金化在调控中锰钢变形行为和加工硬化方面的作用提供了宝贵的见解。

分会编号-65

Re 对一种低密度 Ni₃Al 基单晶高温合金组织和性能的影响

蔡航*^{1,2}, 侯介山¹, 周兰章¹, 郭永安¹

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学

Ni₃Al 基单晶高温合金由于其具有优异的高温性能,抗高温氧化性以及较低的密度而成为代替传统 Ni 基高温合金的最具有潜力的材料之一。同时,Re 是一种关键元素,其对高温合金性能的影响也是研究热点,截至目前,传统 Ni 基、Co 基以及 Ni-Co 基合金均有大量的相关研究,然而其对 Ni₃Al 基单晶高温合金的影响报道较少。本文结合 DSC、EPMA、OM、EPMA 和 FEI-TEM 等表征手段,系统地研究了元素 Re 对一种低密度 ($<8.0 \text{ g/cm}^3$) Ni₃Al 基单晶高温合金凝固行为、长期时效组织演化和 1100°C/100 MPa 持久性能的影响。1.5 wt.% Re 的加入仅略微地提升了特征温度点,但由于合金流动性的降低以及 Al、Ti 元素的偏析程度加剧,导致枝晶间距显著减小,并且提高了 γ/γ' 共晶相的体积分数。完全热处理后,含 Re 合金具有

更大的负失配值和更高的 γ' 相立方度,这是由于元素 Re 主要固溶于 γ 通道中,引起 γ 相的晶格常数增大。此外,在 900°C 的长期时效过程中,Re 的加入可以显著减缓 γ' 沉淀物的粗化速率,并延迟 γ' 的聚结行为,主要原因是 Re 引起扩散系数较低的 Cr 元素在 γ 通道中的分配浓度增加以及其本身具有极低的扩散系数,使合金的有效扩散系数降低。然而,添加 Re 并没有改变 γ' 沉淀的粗化机制,根据实验数据拟合结果,Lifshitz-Slyozov-Wagner (LSW) 理论比无 Re 和含 Re 合金的跨界面扩散控制 (TIDC) 粗化模型更适合描述 γ' 的粗化行为。最后,研究了 Re 对合金在 1100°C/100 MPa 下的持久性能的影响,结果表明,合金持久寿命从 96.8 小时提高到 160.1 小时,两合金的断口形貌均表现出典型拓扑反转形态的 γ 相被连续的 γ' 相包围,意味着 Re 在持久过程中对 γ/γ' 相结构稳定性影响较小。值得注意的是,在 1.5Re 合金中的 γ/γ' 界面处发现更致密的位错网,这表明持久性能的提高是 Re 对 γ/γ' 界面位错网络的优化而引起的。该研究对低密度 Ni₃Al 基单晶高温合金的成分设计具有指导意义。

分会编号-66

HfNbTaTiZr 难熔高熵合金拉伸断裂机理的准原位 XRT 研究

陈红, 屈瑞涛*

西北工业大学

难熔高熵合金(RHEA)具有优异的高温力学性能,被认为是取代传统高温合金的潜在候选者之一,但其应用受限于较低的室温塑韧性。HfNbTaTiZr 的高温性能突出,也是少数具有拉伸塑性的 RHEA,因此具有重要应用前景。然而,令人惊奇的是该合金的拉伸强/塑性并不突出,但断裂韧性却很高,接近最初的面心立方结构高熵合金。为探明此现象背后物理机制,本工作采用三维 X 射线成像(XRT)技术对 HfNbTaTiZr 高熵合金的拉伸断裂过程进行了准原位研究,对材料内部损伤行为进行了可视化表征,分析了材料内部的孔洞演化。结果表明:尽管铸态合金中存在许多铸造缺陷如孔洞,但拉伸过程孔洞长大十分缓慢,导致颈缩区并非应变局部化的逐渐加剧,而是不断地扩展变宽,从而产生较大的非均匀延伸率,极大地延缓了损伤发展。该结果解释了 HfNbTaTiZr 高熵合金具有较大断裂抗力的原因,阐明了高熵合金断裂的新特点,对于发展具有高韧性难熔高熵合金有一定指导意义。

分会编号-67

铝锂合金核壳结构的第一原理计算及高强高延合金成分设计

刘延文, 刘树红*, 杜勇

中南大学粉末冶金研究院

铝锂合金密度低、强度高、模量高,同时兼具优异的抗疲劳性能和耐腐蚀性能,是理想的航空航天材料。然而,随着 Li 含量的增加,晶界处 Li 的偏析逐渐加剧,导致合金的延性逐渐降低。研究指出,引入核壳结构是实现铝锂合金“强度-延性”平衡的重要途径之一。

本报告主要内容包含两部分:首先对铝锂合金中三种不同类型的核壳结构[Al₃Li(Al₃Sc)、Al₃Li(Al₃Zr)、Al₃Zr(Al₃Sc)]开展第一原理计算。通过计算表面能、界面能、弹性应变能以及临界形核功等,详细分析了合金化元素对核壳结构界面热、动力学行为的影响机理;其次基于 CALPHAD 方法及自主构建的多元多相铝锂合金热力学数据库,开展高强高延铝锂合金的成分设计。

分会编号-68

耦合广义层错能和全离散 P-N 模型的 α -Fe 变形机制研究

黄佳林, 杜经莲*, 刘雨, 刘峰

西北工业大学

铁素体钢的变形机制依赖于其位错芯结构,然而位错芯结构与变形机制之间的对应关系尚不明晰。对此,本工作将第一性原理计算所得三维原子错配势耦合至全离散 Peierls-Nabarro (P-N)模型,探究了铁素体

钢的位错芯结构特征及其塑性变形机制。不同滑移系 α -Fe 三维原子错配势的计算结果表明, 其在{110}滑移面上的不稳定层错能 ($\gamma_{\text{uns}} = 1090 \text{ mJ/m}^2$) 低于{112}滑移面 ($\gamma_{\text{uns}} = 1380 \text{ mJ/m}^2$), 位错更容易在<111>{110}滑移系运动。 α -Fe 及其合金 (Fe-X, X = C, Mn, Si) 在<111>{110}滑移系上的计算结果表明: 当溶质含量一定时 (Fe-1 at.% X), Mn 元素和 Si 元素使 α -Fe 的不稳定层错能分别降低至 1070 mJ/m^2 和 1040 mJ/m^2 , 而 C 元素使 α -Fe 的不稳定层错能提高至 6800 mJ/m^2 。当 Si 元素含量从 1 at.% 增加至 3 at.% 时, α -Fe 的不稳定层错能降低至 1000 mJ/m^2 。基于此, 得到了<111>{110}滑移系螺位错芯平衡结构特征参数, 进一步结合 Peierls 势垒和 P-N 力, 阐明了溶质组元对 α -Fe 的塑性变形方式的影响规律。

分会编号-69

新型核用 Ni-Fe 基高温合金均质化过程 MC 演变及扩散动力学研究

伍金荣^{1,2}, 秦学智³, 王佳祺^{1,2}, 吴云胜^{1,4}, 管现军^{1,4}, 周兰章^{*1,4}

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
3. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所 中国科学院海洋关键材料重点实验室
4. 中国科学院金属研究所 中国科学院核用材料与安全评价重点实验室

Ni-Fe 基高温合金具有优异的高温力学性能和良好的组织稳定性, 大量用于四代核电堆堆内构件的制造。然而, 高合金化使得合金铸态组织出现严重元素偏析, 并在枝晶间形成尺寸大且分布不均匀的初生 MC 碳化物, 显著影响后续热加工和力学性能。因此寻求合理的均质化工艺, 调控铸态组织中 MC 的尺寸和分布, 改善元素偏析现象, 成为优化合金热加工性能的关键。另外, 在高温均质化处理过程中, 元素扩散导致 MC 碳化物溶解演变仍缺乏系统性研究。

以自主研发的一种新型核用 Ni-Fe 基高温合金为研究对象, 探究了在均质化工艺 (1180 ~ 1240°C) 中 MC 碳化物的演变行为以及扩散动力学。结果表明, 合金铸态组织存在严重元素偏析, Nb 和 Mo 富集在枝晶间, 枝晶间存在三种类型的碳化物, 包括 (Nb, Zr)MC 碳化物、少量 (Zr, Nb)MC 碳化物和絮状碳化物。随着均质化温度升高, 絮状碳化物首先溶解到基体中, (Zr, Nb)MC 无明显变化, 而 (Nb, Zr)MC 由于 Nb 元素的扩散逐渐溶解到基体中, 最终演变为残余颗粒状富 Zr 型 MC, 其晶体学取向与 (Nb, Zr)MC 保持一致。基于元素扩散动力学模型, 计算了 Nb 和 Mo 的扩散激活能分别为 327.26 kJ/mol 和 312.98 kJ/mol , Nb 和 Mo 的扩散常数分别为 $2.59 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ 和 $0.5 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$, 在此基础上建立了 Nb 和 Mo 的均质化动力学模型。本研究为优化合金的均质化处理制度奠定了理论基础, 最佳均质化工艺为 1220°C 保温 20 h。该均质化工艺不仅能够有效改善元素偏析现象, 还能溶解初生 MC 碳化物, 有利于后期纳米级二次 MC 碳化物的析出调控。

分会编号-70

可热处理合金团簇强化对屈服强度的贡献

赵彩丝, 杜经莲*, 刘峰

西北工业大学

可热处理强化 6xxx 系铝合金是汽车轻量化制造的优选材料, 但其中等强度极大限制了在汽车结构件中的应用, 因此提升其强度已成为行业研究的热点之一。自然时效过程中形成的原子团簇对 6xxx 系铝合金的强度具有重要影响, 这些原子团簇对后续人工时效过程中强化相的形成以及其对合金析出强化效果的影响机制并不明确。对此, 本工作基于经典相变热-动力学理论, 通过模型解析的方法, 定量研究了 6xxx 系铝合金的成分和时效工艺对其团簇微结构和屈服强度的影响, 阐明了自然时效过程中形成的原子团簇对后续人工时效阶段强化析出相的作用机制。结果发现: 自然时效时期形成的溶质原子团簇在之后人工时效阶段的溶解速度会直接影响基体中的溶质浓度, 从而影响强化析出相的形核驱动力, 最终影响合金强度。随着自然时效时间的延长, 溶质原子团簇在人工时效阶段的溶解速度变慢, 降低了基体中的溶质浓度, 从而降低了强化析出相的形核驱动力, 因此不利于合金强度的提升; 通过增加镁含量或提高人工时效温度均

能促进合金中溶质原子团簇发生溶解，增大基体中的溶质浓度，进而提高强化析出相的形核驱动力，有助于合金强度的提升。所获结果有助于深入理解 6xxx 系铝合金团簇强化机制。

分会编号-71

Al-Li-Cu 合金中析出微结构与力学性能间本征关联的热-动力学协同研究

张堃钰，张子临，赵彩丝，杜经莲*，刘峰

西北工业大学

析出强化是可热处理强化 Al-Li-Cu 合金的主要强化方式。在时效过程中形成的各种析出相通过阻碍位错运动使合金强度增加的同时降低了其塑性。为了获得具有理想强度-塑性组合的 Al-Li-Cu 合金，业界对析出微结构与力学性能之间的关联进行了深入研究。受控于合金成分和热处理工艺的相变热-动力学通过调控析出相的形核和长大进而决定析出微结构，因此，考虑如何耦合析出相变的热-动力学协同效应对于实现面向目标析出微结构和强塑性的先进 Al-Li-Cu 合金时效工艺设计意义重大。本工作基于经典相变理论和析出动力学模型，探讨了 Al-Li-Cu 合金中主要强化相 (T_1) 的影响因素和微结构演化规律，进而以强化析出热-动力学关键参量为桥梁，建立了屈服强度和塑性应变与析出微结构特征参数之间的量化关联模型，由此实现了不同时效状态下 Al-Li-Cu 合金屈服强度和均匀延伸率演化的精确预测。研究工作从热-动力学协同角度出发，为面向目标析出微结构的高性能 Al-Li-Cu 合金热处理工艺设计提供了新视角。

墙报

分会编号-P01

Schwarz 晶体热力学稳定性

雷挺，王云江*

中国科学院力学研究所

金属通常以多晶固体的形式存在，由于晶界的无序性而在热力学上不稳定。晶界在加热时往往会粗化，或在晶粒足够小时通过转变为亚稳态非晶态来消除其不稳定性。最近在极细晶粒的多晶铜中发现了一种具有极高热力学稳定性的结构，被称为 Schwarz 晶体。这种新型金属多晶结构的热力学稳定性可通过自由能进行描述。我们采用高效非平衡路径自由能热力学积分方法，计算了 Schwarz 晶体及其他三种晶体结构的自由能及 Schwarz 晶体内部结构的自由能。结果表明，Schwarz 晶体的自由能接近于完美单晶结构。其内部的孪晶边界网络形成了三维最小界面结构，有效降低了整体自由能，使该结构即使在接近平衡熔点时也能稳定地防止晶粒粗化。

分会编号-P02

微束白光劳厄衍射线站介绍与应用

苏圳煌*

中国科学院上海高等研究院

上海光源微束白光劳厄衍射线站 (BL03HB) 是国内唯一专注于白光劳厄微衍射线站。本线站基于微束白光劳厄衍射方法，兼顾微束单色光衍射，一方面研究材料局域微结构和微晶体结构及其随时间的动态演变过程，为控制材料微结构、改进材料性能提供指导；另一方面实现常温劳厄法快速收集蛋白质晶体衍射数据。

分会编号-P03

验证金属玻璃的 Adam-Gibbs 关系

曹琳莉, 王云江*

力学研究所

玻璃是一种具有长程无序、短程有序独特微观结构的无序固体, 主要通过快速冷却粘性液体避免结晶获得。建立玻璃化转变过程的热力学与动力学定量关联是凝聚态物理学中的一项重大挑战。虽然经典的 Adam - Gibbs 关系已经验证了部分简单液体中弛豫时间与构型熵之间的关联, 但存在复杂多体相互作用的真实玻璃形成系统中, 这种定量关联尚未得过验证。我们运用自由能采样法和晶格动力学分析计算金属玻璃模型中的构型熵。计算结果不同于经典 Adam - Gibbs 关系的线性预测, 弛豫时间的对数与构型熵之间呈幂律关系 (指数约为 3)。这种非线性熵驱动的弛豫时间变化可能源自原子多体相互作用的各向异性特性, 这表明了玻璃转变现象受到热力学之外因素的影响。

分会编号-P04

基于图神经网络的金属玻璃机器学习本构模型

陶佳乐, 王云江*

中国科学院力学研究所

金属玻璃凭借各种优异的性能获得了广泛关注, 但是其较低的室温塑性变形能力限制了其作为结构材料的应用。相较晶态金属材料, 非晶合金原子排列长程无序, 无法定义类似晶体中位错的结构缺陷, 这为揭示非晶合金的塑性变形机理带来困难。目前非晶合金的经典塑性理论如自由体积模型等多基于平均场描述, 难以完全解释块体金属玻璃的变形行为。本工作利用分子动力学模拟典型金属玻璃 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 的在不同温度和应变率下的简单剪切, 通过数据驱动的方法提出了一种基于图神经网络的非晶合金本构模型。该模型以图作为金属玻璃无序原子排列的结构描述, 结合原子应变信息, 可以预测不同温度和应变率下 $\text{Cu}_{50}\text{Zr}_{50}$ 的应力应变响应, 并且能够反映塑性阶段的锯齿状波动, 从而展示了利用图神经网络方法研究非晶合金变形行为并建立无序固体通用本构模型的可能。

仅发表论文

分会编号-PO01

平面应变压缩过程中热电偶焊接位置对样品温度均匀性的影响规律

朱燕灵*

西北工业大学

基于 Gleeble 热模拟机, 研究平面应变压缩过程中, 样品的焊点位置、导热系数、焊点间距对样品温度均匀性的影响规律, 探究获得理想压缩温度的热电偶焊接方式。平面应变压缩实验中, 样品尺寸较大 ($20 \times 15 \times 10 \text{ mm}$), 而压头接触面积较小, 仅为 $10 \times 20 \text{ mm}$, 所以热电偶的焊接位置对样品温度控制至关重要。研究表明, 热电偶焊在顶部时, 温度控制差, 温度波动达 $\pm 20^\circ\text{C}$; 热电偶焊在侧面时, 温度控制良好, 温度波动可控制在 $\pm 1^\circ\text{C}$ 以内; 样品导热性越差, 热电偶焊在顶部的温度控制越差。