

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

Z-材料模拟、计算与设计
Z-Materials Simulation,
Computation, and Design

Organized by

Chinese Materials Research Society

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

Z. 材料模拟、计算与设计

分会主席：赵纪军、刘利民、陈星秋、范晓丽、陈时友、吕广宏

Z-01

Deep Charge: Deep learning model of electron density from a one-shot density functional theory calculation

钟志诚

中国科学技术大学

Electron charge density is a fundamental physical quantity, determining various properties of matter. In this study, we have proposed a deep learning model for accurate charge-density prediction. Our model naturally preserves physical symmetries and can be effectively trained from one-shot density functional theory calculation toward high accuracy. It captures detailed atomic environment information, ensuring accurate predictions of charge density across bulk, surface, molecules, and amorphous structures. This implementation exhibits excellent scalability and provides efficient analyses of material properties in large-scale condensed matter systems.

Z-02

非线性光学下的磁调控

周健

西安交通大学材料科学与工程学院

光与物质的相互作用对于许多具有各种应用的奇异物理过程至关重要。由于非接触和非侵入性的特性，光学方法对材料的调控非常灵活，且不易在材料内引入杂质。在磁性材料中，由于磁晶各向异性的存在，磁轴经常被限制在某一方向上，通过光学手段调控其方向成为光控磁的一个重要问题。我们通过二阶非线性光学过程，提出了超快地切换磁矩方向的有效方案。根据光的偏振，我们厘清了四种不同的微观机制，分别与体系带间贝里曲率以及自旋/轨道矩的有效速度相关，并且可以通过群论方法来确定其选择性。这一方案提供了一种操纵磁化的有效途径，并且适用于比电流诱导自旋极化（例如 Rashba-Edelstein 效应）更广泛的材料系列（不需要时间或空间对称性破缺，并且不需要费米面的贡献而发生在本征磁性半导体中）。另外，我们揭示了轨道角动量与自旋角动量的同等重要性，这在以前很大程度上被忽视了。我们进一步展示了使用单层 NiCl_2 的这一过程，根据我们的动力学模拟，我们指出其面内磁化方向可以在光照下超快地调整到面外，其响应时间为纳秒量级。

Z-03

低维材料中新型等离激元研究

王建峰

北京航空航天大学

等离激元是电子由于长程库仑相互作用集体激发而形成的一种准粒子，它提供了与光耦合的有效载体，可以突破光的衍射极限，对于微纳光电子学的应用具有重要意义。传统的等离激元是贵金属中电子在可见光至深紫外频率的激发；而石墨烯等离激元的发现引起人们的极大关注，它在太赫兹至红外区域具有可调的频率、高的空间约束和长的寿命，这些与石墨烯二维的狄拉克能带相关。随着各种低维材料和拓扑材料的发现，等离激元呈现出新的类型和行为，其非传统等离激元及新奇性质亟待广泛研究。在此报告中，我们在发展的基于电子结构的等离激元计算程序基础上，将介绍两类新型等离激元。一方面是在低维拓扑材料中发现的与载流子密度无关的等离激元，可通过二维的线节点或一维的点节点体系电子集体激发产生，可以克服常见太赫兹等离激元由于敏感的载流子密度相关而产生的不稳定性或不精确性。另一方面是在电子化合物材料中发现双曲型等离激元，可以在红外波段产生高空间约束和高度定向传输的极化激元，为设

计和寻找低损耗远传导的天然双曲超材料提供了新的思路。

Z-04

Current-driven skyrmion and antiskyrmion dynamics in Kitaev magnets

邹小龙

清华大学深圳国际研究生院

We take monolayer frustrated magnet NiBr_2 as an example to reveal the general current-driven skyrmion and antiskyrmion dynamics induced by Kitaev exchange. Through first-principles calculations and Monte Carlo simulations, a magnetic field-strain phase diagram is proposed, which contains five different phases, including topological skyrmion and antiskyrmion. Subsequently, by performing Landau-Lifshitz-Gilbert simulations, we find that the skyrmion/antiskyrmion has specific helicity in the presence of Kitaev term, leading to its translational motion under current driving. Furthermore, the helicity is unlocked for sufficiently high current density, resulting in its rotation. The critical behaviors and skyrmion velocity are analyzed by Thiele theory. Based on these phenomena, we propose two new proof-of-concepts devices, skyrmion separator and non-gate logic unit. Our findings lay a foundation for studying topological structures dynamics in Kitaev magnets.

Z-05

One-Dimensional van der Waals Polymers with Nonlinear Optical Performance Approaching Theoretical Upper Limit

杨靖宇

中国科学院物理研究所

Nonlinear optical materials (NLO) attract great attention because of their applications in generating coherent laser sources, etc. Many efforts have been devoted to looking for crystals with large nonlinearities to meet the demand for high-power coherent laser sources. However, crystals with NLO susceptibilities close to the theoretical upper limit are rare.

In recent years, attention has been moved to van der Waals materials, where crystals consisting of low-dimensional building blocks could be a possible solution to realize large NLO susceptibility and high birefringence. And numerous two-dimensional crystals were predicted to own giant optical nonlinearities near the theoretical upper limit. Inspired by a recent report of one-dimensional (1D) material PNF_2 with excellent NLO performance, we extend this region to crystals made up of 1D building blocks, where the dipoles along the chain result in strong second harmonic oscillations.

Recently, a novel protocol based on graph theory and density functional theory (DFT) calculations is conducted in the structural classification for atom-scale one-dimensional materials, allowing us to look for 1D polymer patterns with NLO properties. In this work, by high throughput calculations, we searched new NLO crystals from 244 materials constructed by vdW stacking of one-dimensional (1D) polymers. Besides, the weak vdW interaction of these 1D building blocks allows them to be easily exfoliated from bulk to two-dimensional flakes and 1D chains. We found 14 experimentally synthesized bulk vdW materials, 11 2D and 11 1D forms as NLO candidates. Nearly half of their NLO susceptibilities approach the theoretical upper limit, and their working frequencies cover ultraviolet, visible, and infrared regions. Moreover, we found that their NLO susceptibilities are positively related to the charge difference of atoms on the chains. Finally, we proposed a design strategy that superior NLO polymers can be obtained with proper bandgap and large charge difference on the chain.

Z-06

用于指导材料生长实验设计的理论开发

丁峰

深圳理工大学材料科学与能源技术学院
中科院深圳先进技术研究院碳中和所与材料所

到目前为止，虽然我们已经有成熟的材料生长理论，材料制造仍然是一个非常依赖于经验的学科，这也导致一个新材料开发的周期通长达 20-30 年，甚至更长。我们课题组在过去 20 年内致力于低维材料生长机制，开发可以用于指导材料制造的理论。本次报告我将主要介绍我们课题组过去在低维材料生长机制方面取得的标志性的理论成就，以及这些理论在材料生长实验中的应用，包括：

- (1) 开发可以用于指导实验设计的理论的多尺度计算方案。
- (2) 我们对碳纳米管生长机制与碳纳米管可控合成的研究，包括碳纳米管的成核理论，生长动力学，结构选择碳纳米管的制备方法。
- (3) 包括二维材料外延生长理论，制备二维大单晶的理论方案与实验实现。

最后我将介绍在 AI 时代，进行大规模材料生长过程模拟和材料生长机制研究的可行性。并介绍我们一些关键材料，如单晶硅，SiC，金刚石可控生长等方面的尝试。

Z-07

新型硼烯结构和物理性质的计算研究胡振芃
南开大学

基于硼团簇设计出具有双层 Kagome 结构的硼烯材料，通过紧束缚模型和第一性原理计算预测其特殊的电子结构。通过分子动力学、声子谱、成键分析等方法论证了这一双层硼烯的稳定性，并基于 BCS 理论预测其超导转变温度。

Z-08

Modulating Physical Properties in Two-Dimensional Materials via Intercalation李佳
清华大学深圳国际研究生院

Intercalating guest substances such as atoms, ions, and molecules into the van der Waals gaps of layered two-dimensional materials can effectively modulate their physical properties. In this talk, I will present our findings on the controllable gap-opening of Dirac cones in Kekulé-distorted bilayer graphene via lithium intercalation, enhanced topological superconductivity in transition metal dichalcogenides through self-intercalation, and accelerated ultrafast charge transfer in MoS₂/WS₂ heterostructures via lithium-water intercalation.

Z-09

二维材料可控生长及物性调控董际臣
有机固体实验室，中国科学院化学研究所

二维纳米材料独特的结构及量子限域效应使该类材料在信息与能源等领域具有广泛的应用前景。设计具有优异物理化学性能的二维材料并可控制备其高质量样品是研究其性质及应用的前提。第一性原理计算、分子动力学模拟等多尺度方法可在原子尺度研究材料的性质与制备机理提供深入理解。另外，化学气相沉

积(CVD)方法由于其高度可控且成本低廉,是大规模制备高质量二维纳米材料最有前景的方法之一。

本次报告将从多尺度理论模拟的角度讲述报告人在理论设计二维材料及CVD可控制备二维材料机理方面取得的一些研究进展,包括: (i) 边缘重构依赖的二维原子晶体生长动力学机制; (ii) 制备晶圆级单晶二维材料的方法; (iii) 二维材料的结构稳定性与物性调控。

关键词: 二维材料; 晶体生长; 多尺寸模拟; 物性调控

参考文献

- [1] Dong Jichen, et al., *Nat. Commun.*, **2020**, **11**: 5862.
- [2] Yao Wenqian, et al., *Adv. Mater.*, **2022**, **34**: 2108608.
- [3] Jichen Dong, et al., *ACS Nano*, **2023**, **17**: 127-136.
- [4] Huang Haojie, et al., *Adv. Funct. Mater.*, **2024**, 2400380.
- [5] Wang Huan, et al., *Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, **2023**, **120**: e2219043120.

Z-10

具有方形晶格的新型二维硫族化合物的第一性原理探究

刘宇、李锋钰*

内蒙古大学

发现新的二维材料并探索其独特性质与潜在应用是凝聚态物理与材料科学的重要课题。在此,我们基于实验合成的方晶格 GeS_2 材料,通过元素替换的方式,从理论上筛选了12个热力学、动力学、力学和热学稳定的单层材料,命名为 S-XS_2 ($\text{X} = \text{Si, Ge, Sn, Pb, Ti, V, Cr, Mn, Zr, Mo, Re, Os}$) [1]。其中的 S-SiS_2 、 S-GeS_2 、 S-SnS_2 和 S-PbS_2 具有拉胀行为; S-VS_2 、 S-CrS_2 、 S-MnS_2 为具备高居里温度的铁磁材料 (平均场近似下的结果分别为 202.66, 879.34, 439.07 K), S-MoS_2 为反铁磁材料; S-ZrS_2 和 S-TiS_2 具备较高的载流子迁移率 (分别为 17068.47 和 5834.02 $\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$); 金属性的 S-ReS_2 和 S-OsS_2 是潜在的氢气还原反应的电催化剂。另一方面,通过将 S-XS_2 材料的一层 S 替换为 Se 打破面外对称性,通过理论计算确定了7种具有准方晶格的稳定的新型二维 Janus S-XSSe ($\text{X} = \text{Si, Sn, V, Cr, Mo, Re}$ 和 Os) 单层材料[2]。值得注意的是, S-SiSSe 和 S-SnSSe 单层都具有拉胀行为,此外,由于具有合适的带边位置、可见光区的高吸收系数和较大的载流子迁移率差,它们是潜在的光催化剂,且光催化性能还可以通过改变 pH 值和施加双轴应变来提高。在不考虑自旋轨道耦合 (SOC) 时, S-VSSe 、 S-CrSSe 和 S-MoSSe 是铁磁半金属,并具有较高的居里温度 (海森堡模型下的蒙特卡洛模拟结果分别为 210, 810 和 390 K)。加入 SOC 后, S-VSSe 成为量子反常霍尔 (QAH) 绝缘体,具有较大的带隙 (45.4 meV) 和一个手性边缘态 (陈数 $C = -1$)。通过对半导体 S-XSSe ($\text{X} = \text{Si, Sn, V}$) 单层的对称性分析,基底面上的单轴应变只能诱发面外压电响应。其中, S-VSSe 的面外压电系数 d_{31} 和 d_{32} 最大,分别为 -0.013 和 0.025 pm V^{-1} 。压电性、拓扑性和铁磁性的共存使单层 S-VSSe 成为具有大带隙和高居里温度的多功能自旋电子学应用的潜在平台。具备多样性质的 (准) 方格子硫族化合物不仅为二维材料家族增添的新成员,也为理论和实验的进一步探索提供了指导。

参考文献:

- [1] Yu Liu, Wenlong Li, Fengyu Li* and Zhongfang Chen*, Computational discovery of diverse functionalities in two-dimensional square disulfide monolayers: auxetic behavior, high curie temperature ferromagnets, electrocatalysts, and photocatalysts. *J. Mater. Chem. A*, 2023, 11, 20254.
- [2] Yu Liu, Shuaiyu Wang and Fengyu Li*, A new 2D Janus family with multiple properties: auxetic behavior, strain-tunable photocatalyst, high Curie temperature ferromagnets, and piezoelectric quantum anomalous Hall insulator. *Sci. China Mater.*, 2024, 67, 1160.

Z-11

电化学合成氨催化材料设计与制备

蒋青
吉林大学

氨是现代粮食生产的关键，重要化工产品和几乎所有药品的原料，还被作为新能源或氢能源载体。2020 年我国合成氨行业 CO_2 排放量 2.19 亿吨，占总排放量的 2%。为实现低碳要求，需要使用新能源替换化石燃料清洁生产合成氨。我国 2023 年非化石能源发电装机容量 15.7 亿千瓦，占总装机容量的 53.9%，具有替代化石燃料清洁生产合成氨的能力。为此，本文基于对催化材料的新设计理念，制备了新型催化材料，研究了其在低耗电量条件下电化学生产合成氨的可能性。结果表明，新型催化材料可明显提高合成氨的产率、效率和选择性，具有应用前景。

Z-12

基于 ORR 电催化剂设计的表面特征参量化机器学习方法

王如志
北京工业大学

低成本与高性能 ORR 电催化剂作为质子交换膜氢燃料电池的关键材料，引起了人们的极大关注与重视。但是，目前 ORR 催化剂因存在着价格高昂或性能较差等诸多问题难以进行大规模的产业化应用。近年来发展起来的机器学习方法有望为高效 ORR 电催化剂研发提供有效与快捷手段。本工作通过系统分析影响催化性能的 7 个特征参量，提出了一种能较准确有效预测潜在的双功能 ORR 电催化剂的机器学习模型，该模型建立起了二元合金体系催化过程中的表面参量如活性位点与反应自由能的直接关联，预测其中间体反应自由能，其最高方差可达 91.3%。同时也具有良好预测速度，其预测效率是传统的第一性原理密度泛函计算方法 150000 倍。我们所提出的表面特征参量化机器学习模型将为快速发现新型低成本与高性能 ORR 电催化剂提供高效与快捷的计算预测方法。

关键词：机器学习，ORR 催化剂，计算预测

Z-13

对称性破缺二维异质结的电子特性及其在清洁能源中的应用

黄维清
湖南大学 物理与微电子科学学院

对称性破缺导致许多新奇物理现象，是物质科学的基本研究范式之一。二维材料是研究对称性破缺物理学的良好平台，其对称性破缺可被外场（如电场、磁场、光场和应变等）调控，为操控对称性破缺相关的新奇物性提供了可能。这不仅可以探究凝聚态物理中的相关基础问题，而且在新型光电器件和高效能源利用等方面具有广阔的应用前景。

围绕二维材料对称性破缺光电子学及其应用，我们采用结构、应力和电场等方法构建了多种对称性破缺二维异质结，探究了它们的电子特性及其在清洁能源中的应用。在考虑 Janus 半导体/金属界面的界面偶极矩和 Janus 材料本征偶极矩后，我们提出了修正的肖特基-莫特（S-M）方程以预测其肖特基势垒高度（SBH），并发现“反常电荷转移”可诱导界面较小的电偶极矩和费米能级近似“解钉”。在应力和电场的作用下，Janus $\text{TeGa}_2\text{Se/InS}$ 异质结可分别发生 II-I-II 型能带排列、直接-间接-直接和半导体-金属的转变，施加适当的应力可使其太阳能转换效率峰值达 23.2%。结构镜面对称破缺策略可使二维 Cr 基结构转变为自旋零带隙半导体和低功函数材料，可应用于 PN 结和催化析氢等领域。基于机器学习发现在 Janus 二维 γ -PC 体系中，围绕活性位点的局域偶极是一个评估析氧反应活性的重要描述符。

Z-14

利用表面偏析现象优化设计纳米合金颗粒催化剂

罗光富^{*1}、唐雅欣^{1,2}、侯明敖¹、何迁²

1. 南方科技大学材料科学与工程系
2. 新加坡国立大学材料科学与工程系

双金属纳米颗粒催化剂具有丰富可调的催化特性，但其在实验条件下的微观结构和优化设计原则仍有待深入研究。在本项研究中，我们通过基于第一原理的分子动力学模拟揭示了近 100 种铂族双金属纳米颗粒中较为普遍存在的表面偏析现象。进一步分析表明，材料的表面能和体相形成焓在上述偏析现象中扮演了关键角色。在此基础上，我们提出利用该现象，使得具有催化活性的贵金属元素聚集在纳米颗粒表面，同时选择合适的助剂元素提高纳米颗粒的稳定性。为了验证该策略，我们研究了 36 种铂基双金属纳米颗粒在丙烷脱氢中的催化性能，并最终确定了多种表面富集铂、具有出色热稳定性和优异催化活性的材料。本研究同时也为其他双金属纳米颗粒的优化设计提供了有益参考。

Z-15

高通量筛选 MN4-G 高选择性乙炔半加氢电催化剂

谢克锋*

兰州交通大学

石油化工行业聚乙烯的大规模生产需要有效去除微量的乙炔杂质。目前，乙炔在高温高压条件下通过催化加氢选择性还原为乙烯。然而，由于这种热催化方法的反应条件苛刻，需要大量消耗的能源且选择性较低。电催化乙炔半加氢(EASH)已成为传统热催化加氢的一种有前途的替代方法。在本研究中，采用密度泛函理论(DFT)计算系统地研究了 25 种含有 3d、4d 和 5d 过渡金属的氮掺杂石墨烯复合材料(MN4-G)对 EASH 的电催化活性和选择性，旨在确定用于 EASH 反应的高效单原子催化剂(SACs)。首先，结合能、内聚能和形成能计算表明，除 Mo、Ru、Ag、W、Re 和 Os 外，所有单金属原子都可以稳定地固定在氮掺杂石墨烯上。其次，吉布斯自由能图显示 Cu 和 Ni SACs 促进了 EASH，抑制了析氢副反应。此外，金属位点的 d 带中心和乙炔吸附能可以作为特征描述符来预测催化剂的 EASH 选择性。最后，从电子和轨道的角度阐述了催化活性的机理，揭示了 d_{z^2} 和 $C_2H_4-\pi_{z^*}$ 轨道之间的耦合在乙烯脱附中起着至关重要的作用。本研究在电子轨道水平上对高效 EASH 催化剂的机理提供了深入的理解。

Z-16

Unveiling the Morphology of Carbon-Supported Ru Nanoparticles by Multiscale Modeling

禰文烨

英国利物浦大学

Simulating the behavior of metal nanoparticles on supports is crucial for boosting their catalytic performance and various nanotechnology applications; however, such simulations are limited by the conflicts between accuracy and efficiency. Herein, we introduce a multiscale modeling strategy to unveil the morphology of Ru supported on pristine and N-doped graphene. Our multiscale modeling started with the electronic structures of a supported Ru single atom, revealing the strong metal-support interaction around pyridinic nitrogen sites. To determine the stable configurations of Ru₂₋₁₃ clusters on three different graphene supports, global energy minimum searches were performed. The sintering of the global minimum Ru₁₃ clusters on supports was further simulated by ab initio molecular dynamics (AIMD). The AIMD data set was then collected for deep potential molecular dynamics to study the melting of Ru nanoparticles. This study presents comprehensive descriptions of carbon-supported Ru and develops modeling approaches that bridge different scales and can be applied to various supported nanoparticle systems.

Z-17

水在 Ru(0001)表面分子及解离吸附的机器学习分子动力学研究

曹宇、陈星秋、刘培涛*

水是地球上最普遍和最重要的液体之一。水在固体表面的行为对光催化水分解、多相催化、电化学、材料科学和腐蚀等诸多科学和技术领域至关重要。尽管过去几十年研究者对水进行了广泛的研究，但是对水中氢键网络及水与固体表面复杂相互作用的研究仍尚未十分明晰。当液态水接近固体表面时，体积水的氢键网络会发生变化，最终界面水的吸附结构将由水-固界面和水-水氢键相互作用之间的微妙平衡控制。但是这对实验研究却提出巨大挑战，因为实验很难探测表面位点上水分子吸附构型及单层水的结构和动力学细节。第一性原理分子动力学则因计算昂贵而无法进行大体系上时间尺度的模拟。为此，我们针对困扰领域多年的水在 Ru(0001)表面的分子及解离吸附难题，开发了精度与效率兼顾的机器学习势函数，成功揭示不同覆盖度下 Ru(0001)表面水分子吸附的基态结构，获得的双层水中 O-O 高度及表面功函数与实验一致。阐明了解离水尽管热力学更加稳定，但是水分子需要克服很大的动力学能垒才能分解，即水分子不易在 Ru(0001)分解，但是一旦分解后，解离的 H 将会吸附在 Ru 的顶位，构型十分稳定，不再参与水层的质子交换过程。我们的计算结果对水在金属表面的吸附和润湿问题提供了新的认识。

Z-18

TBD

杨利明

华中科技大学

Z-19

高氧化电位电解液溶剂分子设计研究及数据库建立

王达

上海大学

设计高氧化电位电解液溶剂体系以匹配新型高电压正极材料是进一步提升锂离子电池能量密度并改善循环寿命的途径之一，但面临在电解液多组分相互作用、工况温度多变或界面衍生等复杂影响因素下提升氧化电位同时平衡离子电导率等其它性能难题。近几年利用官能团取代、分子骨架重构等手段在探寻耐高电压溶剂方面取得一定进展，但仍面临缺乏精确预测氧化电位方法致使调控其稳定性微观机理不明的挑战。我们前期工作中提出一种包含重组能和溶剂化能修正的热力学循环方法，实现更高电解液溶剂电化学窗口预测精度（误差低至 1 V 以下）。藉此收集溶剂分子特征参量、氧化电位等物化性质并进行数据质量治理以构建电解液溶剂专题高质量数据库，设计出 2 种 (Carbamic fluoride 和 2-Oxo-1,3-dioxolane-4-carbonitrile)宽电化学窗口、高抗氧化稳定性及优异结构稳定性的可充电电池电解液溶剂。

Z-20

锂电池电解质材料模拟计算与机器学习研究

陈翔

清华大学

锂电池作为先进储能技术代表之一，在电动汽车、消费电子器件、移动通讯、无人机等领域中取得了广泛的应用，也是我国实现“碳中和”目标、构建可再生能源体系的关键技术之一。电解质是电池的重要组成部分之一，发挥导通离子、绝缘电子的作用，很大程度上决定电池的实际电化学性能。探究锂电池电解质微观化学机制、理解电解质材料的工作原理和构效关系，对构建下一代高比能电池体系具有重要的科学价值和实践意义。

本报告将主要介绍锂电池电解质微观化学规律和机器学习研究相关进展。具体而言，发展多尺度模拟方法，探究液态电解液及固态电解质材料微观化学规律，如发展介电常数、粘度等多种电解液物性预测方

法,可以精准预测设计电解液所需的关键物理化学性质;结合机器学习方法,探究固态电解质材料中离子输运机制,发现了锂离子协同输运与温度之间的响应关系。相关工作加深了对电解质材料构效关系的理解,为实现电解质材料的高通量筛选与反而设计提供了理论基础。

Z-21

二维 C-N 化合物用于锂电负极材料的第一性原理计算研究

郭根材

湘潭大学物理与光电工程学院

锂离子电池由于其工作比容量大、电压高、循环寿命长、绿色无污染等优点,在手机、平板电脑等便携式电子设备和动力电池等领域展现出诱人前景,已成为全球各国关注的产业焦点。

在石墨烯中用 N 取代 C 是形成类石墨烯二维材料的一种有效方法。近年来多种二维 C-N 化合物相继发现。然而,如何通过各种手段的灵活使用,对二维 C-N 化合物及其异质结结构的多种特性进行耦合调控,从而实现二维 C-N 化合物及其异质结的储锂性能增强,是当前需要解决的重点问题。这些问题的研究对于深入理解 C-N 化合物及其异质结构的特性具有很大的益处。通过这些研究有望为寻找高性能锂离子电池负极材料提供理论指导。

Z-22

Design of High-Efficiency Hydrogen Evolution Catalysts in a Chiral Crystal

Jie Zhan^{1,2}, Yu Cao^{1,2}, JunWen Lai^{1,2}, JiangXu Li², Hui Ma^{1,2}, Song Li³, PeiTao Liu^{1,2}, Xing-Qiu Chen^{1,2}, Yan Sun^{*1,2}

1. School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology of China

2. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences

3. Key Lab for Anisotropy and Texture of Materials (MoE), School of Materials Science and Engineering, Northeastern University

The design of highly efficient hydrogen evolution reaction (HER) catalysts is one of the most important tasks for electrochemical water splitting in the field of renewable energy resources. In this work, via an effective combination of topologically trivial electronic intensity and the topologically nontrivial energy window, we predicted high catalytic performance in chiral material SiTc, with a close-to-zero hydrogen adsorption Gibbs free energy (-0.062 eV). With both a large intrinsic projected Berry phase and close-to-zero Gibbs free energy, SiTc provides a promising candidate for the HER catalysis reaction. In addition, this work offers an effective strategy for designing more potentially high activity topological electrocatalysts via the combination of topological states and high electronic intensity in metals.

Z-23

Computational screening and functional tuning of chemically stable metal-organic frameworks for I₂/CH₃I capture in humid environments

Guangcun Shan^{*1,2}, Haoyi Tan¹

1. Beihang University

2. City University of Hong Kong

High chemical stability is of vital significance in rendering metal organic frameworks (MOFs) as promising adsorbents for capturing leaked radioactive nuclides, under real nuclear industrial conditions with high humidity. In this work, grand canonical Monte Carlo (GCMC) and density functional theory (DFT) methods have been employed to systematically evaluate I₂/CH₃I capture performances of 21 experimentally confirmed chemically stable MOFs in humid environments. Favorable structural factors and the influence of hydrophilicity for iodine

capture were unveiled. Subsequently, the top-performing MIL-53-Al with flexible tunability was functionalized with different functional groups to achieve the better adsorption performance. It has been revealed that the adsorption affinity and pore volume were two major factors altered by the functionalization of polar functional groups, which collectively influenced the iodine adsorption properties. In general, this work has screened the chemically stable high-performance MOF iodine adsorbents and provided comprehensive insights into the key factors affecting I_2/CH_3I uptake and separation in humid environments.

Z-24

铜原子负载的非金属二维波浪型硼烯上 C1 和 C2 产物选择性研究

孙韬智

桂林理工大学

High specific surface area and flexible out-of-plane deformation of two-dimensional materials exhibit unique advantages in CO₂RR catalysis. First-principles calculations reveal that highly flexible borophene generates periodic nano-scale undulations on a tailored metal substrate, transforming into a three-dimensional structure upon detachment from the substrate. This structural transformation is accompanied by surface electronic reconfiguration, with the "wavy" borophene configuration exhibiting greater stability and localized electron density compared to its planar form. Anchoring Cu atoms, the most active metal for hydrocarbon formation, on the "wavy" borophene surface reduces CO₂ adsorption energy and enhances activation of CO₂. The synergistic interface interaction between Cu and B atoms significantly improves CO binding strength, thereby promoting C-C coupling. This "wavy" two-dimensional catalytic model indicates that transferring undulating borophene onto elastic substrates enables high levels of stretchability and compressibility for efficient electroreduction of CO₂ to ethanol. This provides a novel guiding design principle for experimentalists and paves the way for catalytic materials design.

Z-25

Fe、Mn 对 CeO₂(111)表面 NH₃/NO 吸附及 SCR 催化性能影响的密度泛函理论研究

罗慧娟¹、张露²、龚志军²、张凯²、武文斐*²

1. 宿州学院

2. 内蒙古科技大学

CeO₂具有一定的催化还原、储存释放氧的能力,是潜在的低温 NH₃-SCR 催化脱硝材料。探究本征 CeO₂和改性 CeO₂的脱硝机理,对开发高性能催化剂具有重要意义。本论文将研究 Fe、Mn 掺杂 CeO₂(111)表面对 NH₃-SCR 反应气体 NH₃、NO 的吸附行为,分析 Fe、Mn 掺杂对 CeO₂催化脱硝机理的影响。研究发现,Fe、Mn 掺杂均促进 CeO₂(111)表面对 NH₃的吸附,分别伴随着一个和三个 N—H 键的解离。Fe、Mn 掺杂也增强了 CeO₂(111)表面 O 活性位点对 NO 的吸附。CeO₂(111)表面及 Fe、Mn 掺杂 CeO₂(111)表面 NO₂结构的稳定形成,表明 L-H 机制始终占主导地位。Fe、Mn 掺杂改变了表面原子的化学反应性和电子转移能力,降低了 NH₃的 N—H 键解离能,降低了反应能垒,增强了吸附体系的催化活性。Mn 掺杂改性时,三个 N—H 键的解离表明副产物 N₂O 容易生成,将降低催化反应的 N₂选择性。

Z-26

TBD

管鹏飞

北京计科中心

Z-27

基于微观机理的钛基合金集成计算设计

王皞

上海理工大学, 材料与化学学院/增材制造研究院

轻质高强钛基合金是航空航天等领域的关键结构材料, 目前国际上正在逐步发展基于材料基因组理念的研发模式, 然而对微观变形机理等方面的认识还存在局限。国内在先进钛基合金的计算设计方面仍存在差距, 严重影响合金研发。针对微观变形机理, 开发多款模拟软件, 形成多尺度集成计算设计平台, 系统考察了金属及合金塑性变形中多种原子过程, 展示了位错通过偶极型反应导致强化及点缺陷过程, 揭示了塑性变形下局部晶体取向转变等新型相变和孪晶机制, 为航空用高温钛合金及钛铝合金、增材制造钛合金等新材料的成分设计、组织控制和工艺优化奠定理论基础。相关工作发表 SCI 论文 100 余篇、专著章节 2 章、软件著作权 4 项、授权专利 4 项。工作围绕先进制造钛基合金的全流程集成计算设计, 结合计算模拟、实验表征和数据技术, 开展微观缺陷行为—显微组织演化—加工服役性能关系研究, 服务于钛基合金优化设计。

关键词: 钛基合金; 集成计算; 微观变形机制; 显微组织演化; 机器学习

Z-28**利用强化学习的可解释性理解锆合金的相变动力学机制**

宗洪祥*、李鸿江、张丰沛、丁向东、孙军

西安交通大学

相变合金以其卓越的力学性能和独特的功能特性而收到广泛关注。通过向金属中固溶适量的合金化原子, 我们可以有效地改变其相变行为, 进而可调控其力学性质。这一点在 Ti 和 Zr 基合金中的 $\beta \rightarrow \omega$ 相变中表现的尤为显著。然而, 合金化原子的占位效应增加了理解其背后机理的复杂性。在这项研究中, 我们采用了一种创新策略, 将强化学习与分子动力学 (MD) 模拟相结合, 以揭示无序固溶体合金的相变机制。该策略使我们能够直接从分子动力学模拟的数据轨迹中, 通过强化学习模型学习到影响相变动力学行为的关键因素。以 Zr-Nb 合金的 $\beta \rightarrow \omega$ 相变为例, 人工智能模型指出 β 相(111) 面法向的结构周期性与 Nb 浓度波动的周期之间存在关联性, 在 ω 相的成核及其后续生长过程中发回来至关重要的作用。此外, 我们的密度泛函理论 (DFT) 计算进一步表明, 这种机制同样适用于其他固溶体系的 Zr 和 Ti 基合金。本项工作不仅拓展了人们对合金相变动力学的认识, 而且为深入探索合金复杂相变行为提供了新的视角和工具。

Z-29**结构材料设计中的热动力学思考**

刘峰

西北工业大学

本工作面向国家重大需求, 聚焦基础理论前沿, 提出材料设计的热-动力学研究框架, 集成热动力学相关性、广义稳定性、热-动力学配分理论。利用热动力学相关性规律描述过程, 利用广义稳定性概念设计性能, 利用热动力学配分参量解释机理。这些为定量描述成分工艺组织性能间理论关键奠定了坚实的基础。

Z-30**多尺度钛合金析出组织相场动力学模拟及性能优化**

王栋

西安交通大学

钛合金中的析出相变及其相对应的微观组织对综合力学性能有重要影响, 合金化及热处理工艺是调节

钛合金微观组织并优化力学性能的主要手段。通过耦合热力学数据库,相场动力学模拟和实验表征,研究了合金成分、热处理温度、及冷速等对钛合金微观组织影响规律,在低温时效及合金临界成分处发现了具有高形核密度、细小析出尺寸的伪调幅分解机制。通过设计多步时效、初生析出相溶解及调控冷速等方法,提出了基于伪调幅分解这一新型机制来设计钛合金多尺度微观组织的有效途径,并进一步指导实验设计出相应的钛合金多尺度微观组织并改善其强韧性能。

Z-31

基于映射 CPMP 模型的结构材料正逆双向设计研究

林成*、任廷臻、马启航、李飞

辽宁石油化工大学

当今材料设计已经成为结构材料研究热点问题之一。然而,多尺度材料设计中的正逆双向映射关系在至关重要的 CPMP 模型(成分-工艺-组织-性能)中仍难以精确获得。因此,本文拟将合金价电子结构模型、元胞自动机方法、材料能量学的阻力最小原则进行融合,以相结构单元为基本维度,构建结构材料中“多尺度质量守恒追踪法”和“静-动态多尺度阻力效应分析法”的模型及其描述方法,给出材料设计中正逆映射 CPMP 的建模方法,建立基于映射 CPMP 模型的结构材料的正逆双向设计方法。

Z-32

β 稳定元素影响下 β -Ti 合金典型界面结构及界面相形成的计算模拟

马尚义,陈秋捷,张文字

中国科学院金属研究所

β -Ti 合金中存在 ω 、 α'' 、 α 等多种第二相,基体 β 相之间、 β 相与各第二相之间的复杂相互作用决定着第二相的形成、演化、尺寸大小与分布状态,并最终影响着 β -Ti 合金的微观组织结构与宏观力学性能。这一切均与 β 稳定元素影响下的 β -Ti 合金的界面微观结构、能量状态及界面相的形成息息相关。基于第一原理计算,本工作详细研究了亚稳 β -Ti 合金 Ti-Mo、Ti-Nb、Ti-V 中随典型 β 钛稳定元素 (Mo、Nb、V) 含量变化的 β/ω 、 β/α'' 最优界面结构、界面各向异性特征。计算表明具有两相过渡结构的界面可平滑异质两相间的界面结构变化,从而降低 β/ω 、 β/α'' 两相的界面能;同时,从界面能和界面各向异性的角度描述了 β 钛稳定元素及含量对 ω 、 α'' 相形核与形貌的影响。进一步研究发现,基于对 β 稳定元素浓度的适度调控,可促使界面 ω 相在 $\{332\}\{113\}_\beta$ 孪晶、特别是在 $\{112\}\{111\}_\beta$ 孪晶界的形成。从动力学形核角度来看,其形成源于 $\beta \rightarrow \omega$ 相变引起的能量降低。相反地,无论是在 $\{112\}\{111\}_\beta$ 孪晶界还是在 $\{332\}\{113\}_\beta$ 孪晶界,界面 α'' 相在动力学上均难以形成。因此实验上在 $\{332\}\{113\}_\beta$ 孪晶界观察到的界面相 α'' 应该源于伴随 $\{332\}\{113\}_\beta$ 孪生而形成或在 α'' 相辅助 $\{332\}\{113\}_\beta$ 孪生中未完全转变为 β 相的前驱体。本工作清晰描述了 β -Ti 合金典型界面结构及界面相的形成是如何受 β -Ti 稳定元素的类型和浓度所影响的。

Z-33

核材料表面腐蚀机理的理论与模拟研究

孙博

北京应用物理与计算数学研究所

铀、钍及其氧化物均属于战略核材料,其表面腐蚀防护是国防与能源领域的重大问题。深入研究腐蚀气氛与核材料氧化层的反应行为,揭示复杂腐蚀过程中的重要微观作用机制,是构建核材料腐蚀预测模型的前提。核材料的毒性、放射性给实验研究带来诸多困难挑战,理论与模拟研究需求迫切。近年来,我们构建了核材料氧化、氢化腐蚀动力学理论模型,其中腐蚀机理的系统、深入研究是理论建模的重要基础,将在本报告中重点介绍。

采用第一性原理 DFT+U 计算、分子动力学模拟和原子级热力学方法,探究铀、钍氧化物与活性分子

相互作用的物理机制：提出钷氧化物相互转化、铀氢化物热解离的微观机理与热力学模型[1-4, 15]；揭示钷氧化层阻氢性能的差异及其主导机制，发现氧化物晶界的氢捕获与损伤效应[5-9]；获得 H₂O、CO₂ 在钷氧化物表面的不同吸附规律与模型，给出电子作用机制[10-12]；揭示氧化物表面电子、空穴极化子的形成机制，及其对 CO₂、H₂O 吸附反应行为的不同调控作用[10, 13-15]；揭示水汽促进氧化层生长的微观机理，提出温度、湿度加速氧化的机制与模型[16, 17]。微观机理研究深入解读了核材料腐蚀实验规律，推动了腐蚀预测模型和防腐蚀技术的发展。

关键词：钷、铀氧化物；表面反应；强关联材料；第一性原理；极化子

参考文献

- [1] **Bo Sun**, Ping Zhang*, and Xian-Geng Zhao, *Journal of Chemical Physics* **128**, 084705 (2008).
- [2] **Bo Sun**, and Ping Zhang*, *Chinese Physics B* **17**, 1364 (2008).
- [3] **Bo Sun***, Haifeng Liu, Haifeng Song, Gunagcai Zhang, Hui Zheng, Xian-Geng Zhao, Ping Zhang, *Physics Letters A* **376**, 2672 (2012).
- [4] **Bo Sun***, Haifeng Liu, Haifeng Song, Gunagcai Zhang, Hui Zheng, Xian-Geng Zhao, Ping Zhang, *Journal of Nuclear Materials* **426**, 139 (2012).
- [5] **Bo Sun***, Haifeng Liu, Haifeng Song, Gunagcai Zhang, Hui Zheng, Xian-Geng Zhao, Ping Zhang, *Journal of Chemical Physics* **140**, 164709 (2014).
- [6] Li-Fang Wang, **Bo Sun**, Haifeng Liu, De-Ye Lin*, Haifeng Song*, *Journal of Nuclear Materials* **526**, 151762 (2019).
- [7] Le Zhang, **Bo Sun***, Qili Zhang, Haifeng Liu, Kezhao Liu, Haifeng Song, *ACS Omega* **5**, 7211–7218 (2020).
- [8] Le Zhang, **Bo Sun***, Qili Zhang, Haifeng Liu, Kezhao Liu, Haifeng Song, *Computational Materials Science* **179**, 109688 (2020).
- [9] Zhang Le, Wang Li-Fang, **Sun Bo***, Liu Haifeng, Li Gan, Yu Hui-Long, Zhang Qili*, Song Haifeng*, *Journal of Solid State Chemistry* **313**, 123314 (2022).
- [10] Le Zhang, **Bo Sun***, Qili Zhang, Haifeng Liu, Kezhao Liu, Haifeng Song, *Applied Surface Science* **516**, 146164 (2020).
- [11] Le Zhang, **Bo Sun***, Qili Zhang, Haifeng Liu, Kezhao Liu, Haifeng Song, *Applied Surface Science* **537**, 147882 (2021).
- [12] Le Zhang, **Bo Sun***, Qili Zhang, Haifeng Liu, Kezhao Liu, Haifeng Song, *Journal of Alloys and Compounds* **870**, 159371 (2021).
- [13] Wenting Lv, Zhongwei Zhao, **Sun Bo**, Pengfei Guan*, Yu Yang*, Ping Zhang, *Applied Surface Science* **610**, 155511 (2023).
- [14] Le Zhang, **Bo Sun***, Qili Zhang, Haifeng Liu, Haifeng Song, *Journal of Nuclear Materials* **585**, 154642 (2023).
- [15] Le Zhang, Yanhong Zhao, Hongzhou Song, Xingyu Gao, Qili Zhang, Yu Liu, **Bo Sun***, Mingfeng Tian, Haifeng Song, Haifeng Liu*, *Physical Chemistry Chemical Physics* **25**, 12515 (2023).
- [16] Le Zhang*, **Bo Sun***, Qili Zhang, Haifeng Liu, Haifeng Song, “The reaction mechanism of CO₂ on PuO₂ and α -Pu₂O₃ surfaces”, *Journal of Nuclear Materials* (under review).
- [17] Le Zhang*, **Bo Sun***, Qili Zhang, Gan Li, Hui-Long Yu, Haifeng Liu, Haifeng Song, “Water accelerates parabolic oxidation of Pu-Ga alloy: from mechanism to model”, *Applied Surface Science* (under review).

Z-34

单质金属玻璃中的新奇原子结构与裂纹传播

蒋元祺

南昌师范学院

近年来, 为了改善非晶合金的玻璃形成能力, 提高金属玻璃的韧性, 人们对液态金属的非平衡凝固与金属玻璃断裂行为的物理机制进行了大量的研究。然而, 目前仍有许多悬而未决的科学问题。在 2022 至 2023 年的工作中, 我们一方面以液态金属 Ta 的非平衡凝固过程为研究对象, 发现自由 Ta 团簇的基态几何结构对其形核早期的原子结构演化起着重要作用, 解释了为什么当以 1×10^{10} K/s 的速率冷却时, 六角密堆 (HCP) 原子团簇在 Ta 中占据主导地位, 该工作为深入了解液态金属形核初期的原子团簇生长模式提供了初步的知识储备; 另一方面, 针对 Al (基) 金属玻璃在极限应力条件下, 其无序原子结构的晶化、裂纹的扩展以及孔洞的形成等重要科学问题进行了深入研究, 结果表明 Al 基金属玻璃在拉伸时会逐渐晶化。在拉伸 (形变) 初期, 晶化可以显著提高 Al 基金属玻璃的韧性和塑性, 但与此同时, 晶化会形成大量不同取向的 FCC 晶块, 而这些 FCC 晶块之间存在的由大量无序高熵原子形成的 HCP 晶界是拉伸后期 Al 基金属玻璃发生灾难性断裂的最重要诱因之一, 对 Al 基金属玻璃来讲, 晶化是一把双刃剑。

Z-35

航空铝合金腐蚀疲劳裂纹扩展行为的多物理场耦合仿真模拟

王海涛*、王洪堃、吴振爽、韩恩厚

广东腐蚀科学与技术创新研究院

铝合金具有比重小、强度高、耐蚀性优异、加工性能好等优点, 因此被广泛应用于飞机结构中。但是航空铝合金在服役期间不断受到交变载荷和腐蚀环境的双重作用, 这会导致腐蚀疲劳裂纹萌生并加速扩展, 破坏了结构的完整性和可靠性。铝合金发生腐蚀疲劳时, 其裂纹扩展过程涉及到电化学、无机化学、力学等多个领域共同作用, 从机理层面澄清腐蚀疲劳裂纹扩展行为对于预测和延长结构的使用寿命极其重要。我们构建了铝合金腐蚀疲劳裂纹扩展电场-化学场-力学场多物理场耦合仿真模型, 利用质量守恒方程、能斯特-普朗克方程描述裂纹内电解质溶液的扩散, 电迁移和对流、考虑了电解质溶液中水解反应, 引入了循环载荷作用下裂纹内溶液泵送效应, 利用塔菲尔方程表征了金属/溶液界面的阳极溶解反应动力学, 以及阴极氧还原反应和析氢反应动力学, 裂纹尖端阳极溶解电流通过滑移氧化模型描述, 并引入了裂纹尖端应变速率方程, 结合法拉第定律计算铝合金腐蚀疲劳裂纹扩展速率, 并利用机器学习算法优化了腐蚀疲劳模型微观参数以保障模型的高保真性。我们仿真模拟了 7075 和 2024 铝合金在不同环境溶液和加载条件下腐蚀疲劳裂纹扩展过程, 结果表明裂纹内溶液的 pH 值明显低于本体环境溶液, 在裂纹尖端处达到最低并向着裂纹口方向逐渐升高, 而氯离子浓度在裂纹尖端最高并朝向裂纹口降低。随着本体溶液 pH 值的降低和氯离子浓度的增加, 腐蚀疲劳裂纹扩展速率增加, 而氯离子浓度的影响比 pH 值更加显著。7075 铝合金的裂纹扩展速率随着应力强度因子幅值的增加而增加, 随加载频率增加而减小, 而 2024 铝合金则表现出负频率效应。整体而言, 2024 铝合金裂纹扩展速率比 7075 铝合金更慢, 耐蚀性能要优于 7075 铝合金。

Z-36

高熵合金的第一性原理高通量计算

张华磊

西安交通大学

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

选高性能高熵合金，为实验研究提供了精确的数据库和理论指导，期望实现材料的按需设计。

Z-37

结合 DFT 计算与实验研究 Cu-10Ni-X 合金在 NaCl 溶液中的腐蚀行为及机理

肖星宇、刘新华、王志磊、陈明营、谢建新*

北京科技大学

铜镍系合金的耐蚀性能依赖于表面 Cu_2O 钝化膜的保护作用。针对合金元素对 Cu_2O 钝化膜的影响，结合 DFT 计算和实验系统研究了 Cu-10Ni-X (Al、Fe、Mn、Cr、Sn、Ti、Zn) 合金在 NaCl 溶液中腐蚀行为及机理。浸泡腐蚀和电化学腐蚀实验结果表明，除 Ti 之外的其他元素提高 Cu_2O 钝化膜阻值，降低合金腐蚀速率，提升耐蚀性能，其效果排序为 $\text{Fe} > \text{Cr} > \text{Mn} > \text{Al} > \text{Sn} > \text{Zn}$ ，而 Ti 元素损害合金耐蚀性能。DFT 计算表明，合金元素通过占据 Cu_2O 表面饱和 Cu 原子位点，降低 Cu_2O 钝化膜表面与 NaCl 的电荷转移，抑制其对 NaCl 的吸附，从而改善合金耐蚀性能。基于 NaCl 吸附能，建立了合金的腐蚀速率预测模型。本研究可为新型高性能耐蚀铜镍基合金的开发提供理论依据。

Z-38

化学环境和磁效应对高熵合金间隙缺陷稳定性的调控

骆之岭、李博、高旺*、蒋青

吉林大学材料科学与工程学院

高熵合金(HEAs)的点缺陷，如空位和间隙，在控制 HEAs 的抗辐射和耐腐蚀性能起着至关重要的作用。然而，HEAs 独特的化学无序和磁无序限制了我们对其点缺陷与其耐损伤性能之间构效关系的理解。为了解决这一问题，我们通过高通量计算，定量揭示了化学环境和磁矩效应对 CrMnFeCoNi 中间隙结构的决定性影响。结果发现，在 CrMnFeCoNi 中，Ni 原子具有最小的键合强度和弱的磁矩，抑制了含 Ni 纺锤间隙的形成，而 Mn 原子具有最强键合强度和独特的磁适应能力，有利于含 Mn 纺锤间隙的形成，对 CrMnFeCoNi 的体系稳定性起到重要作用。此外，自旋向下的磁矩使 Cr 原子具有强磁挫效应，且 Cr 原子的键合强度较弱（与块体 Cr 原子相比），抑制了含 Cr 纺锤间隙的形成，使 Cr 原子更倾向于与自旋向上的 Fe、Co 和 Mn 原子配对形成纺锤间隙。另外，基于 Tight-Binding 和 Friedel 模型，利用元素内聚能和 s 态占据数分别构建了 HEAs 中局域化学环境和磁矩效应的描述符。通过量化 HEAs 点对点的化学键和磁性作用，阐明了控制 HEAs 中局域磁矩的一般准则，并支持了短程有序的存在，为设计具有优异耐辐照性能的先进 HEAs 提供了指导。

Z-39

TiV-M (Cr, Mo, Nb, Ta) 中熵合金短程有序行为的理论模拟研究

陈亦杰^{1,2}、胡双林¹、许灿辉¹、王月霞^{*2}、周晓松¹

1. 中国工程物理研究院核物理与化学研究所

2. 复旦大学 现代物理研究所

TiV 系中熵合金因其优异的耐腐蚀性和高温稳定性在航空航天、生物医学、核工程等领域具有重要的应用潜力。化学短程有序结构已被证实会影响多主元合金的力学性能响应。因此，充分认识并掌握多主元合金中化学短程有序结构的演化规律对其结构稳定性的调控与预测至关重要。我们采用基于密度泛函理论计算的团簇扩展法(CE)对四种关键 TiV 系中熵合金 TiV-M (Cr, Mo, Nb, Ta) 的化学短程有序演变及相稳定性进行了理论研究，获得了具有较高精度的 CE 模型。在有限温度下，采用蒙特卡罗方法研究了等比浓度合金的相稳定性，可以观察到 V 和 M (Cr, Mo, Nb, Ta) 相互作用的规律性演变，观察到四种中熵合金的有序-无序转变温度分别为 1500 K, 700K, 900 K, 和 400 K。理论计算和实验中报导过的相分离、相偏析或无序固溶在四种中熵合金中都得到了重现。为设计预制具有短程有序结构的中/高熵合金提供了可靠的

理论依据。

Z-40

合金元素对 7xxx 系铝合金析出相性能影响的第一性原理研究

黄艳、张亮*

重庆大学材料科学与工程学院

7xxx 系铝合金具有高强度、高韧性等一系列优势而被广泛应用,但为了追求优良的综合性能,同时提高其强度与热稳定性是目前的研究热点之一。针对 7xxx 系铝合金中常用的合金化元素 Sc、Zr、Er,本文考虑其可能会形成纳米析出相、固溶于析出相、偏聚在析出相界,三种存在形式,利用第一性原理计算,从结构稳定性、力学性能以及热力学性能,讨论了合金化元素的不同存在形式对 7xxx 系铝合金析出相性能的影响。总的来说,对于 L_{12} 型纳米析出相 Al_3X ($X=Sc, Zr, Er$), Al_3Zr 的结构稳定性和综合力学性能最好,另外三相均具有良好的高温结构稳定性;此外,为了更好的模拟元素固溶至析出相的现象,本文建立了各元素随机掺杂至 η ($MgZn_2$) 析出相的模型,根据计算结果,本文认为 Sc、Zr、Er 均偏向侵占 η 析出相的 Mg 位点,并且升高掺杂元素浓度,可以增强掺杂 η 析出相的结构稳定性。另外,Sc 对 η 析出相的硬度、塑性、各向异性无明显改善效果,而过量的 Zr 可以提高其刚度,但同时也会增大 η 析出相的各向异性;Er 的加入并不能提高 η 析出相的硬度和刚度,通过控制浓度可以提高其塑性。

Z-41

UO₂ 高燃耗结构演化的相场模拟研究

孙丹*¹、姜彦博²、辛勇¹、柳文波²、赵纪军³

1. 中国核动力研究设计院
2. 西安交通大学
3. 华南师范大学

二氧化铀(UO₂)具有熔点高,辐照稳定性好,与冷却剂和包壳材料有良好的相容性等优良特性,是当前核反应堆的主要燃料。UO₂ 陶瓷燃料芯块的性能改进和抗辐照性能机理的工作一直在持续进行,改进型 UO₂ 应具有经受更高燃耗和长循环周期的能力。掺杂大晶粒 UO₂ 芯块能够降低裂变气体释放和辐照肿胀,是当前 UO₂ 改进的重要研究方向。但是晶粒尺寸和掺杂元素对燃料在不同燃耗下的微结构演化影响机制尚不清楚。因此,本工作通过建立多晶 UO₂ 微结构演化相场模型,耦合气泡演化和晶粒细化,研究不同燃耗条件下 UO₂ 燃料辐照微结构的演化,同时考虑了晶粒尺寸等因素的影响。模拟结果表明,气体原子的扩散速率和晶粒尺寸是影响气泡演化的关键因素;再结晶晶粒和气泡相互促进彼此的演化过程;增大晶粒尺寸会增加气泡扩散到晶界的距离,从而降低了孔隙率和高燃耗结构占比。

Z-42

钛铝合金包晶相变的多相场模拟研究

许海生^{1,2}、张金虎*^{1,2}、徐东生^{1,2}

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学

γ -TiAl 合金具有低密度、高比强度和优异的高温抗氧化与抗蠕变性能,在航空航天、汽车工业等领域展现出巨大的应用潜力。但传统钛铝合金作为典型的包晶合金,在凝固过程中发生包晶相变,极易导致局部显微组织粗大与成分偏析等现象,显著地影响了其服役性能。为深入理解包晶相变过程并合理调控微观组织,本文基于多相场模型并耦合热力学数据,主要考察了 Ti-45Al 合金发生包晶相变时,过冷度和界面能对钛铝合金微观组织演变的影响规律。研究发现:包晶转变过程由扩散控制,随着过冷度增大, α/L 和 α/β 两种相界面迁移速率均增大,且 α/L 界面迁移速率的增幅较为显著;发生包晶反应($L+\beta\rightarrow\alpha$)时, α 相沿

β/L 界面快速增长, 并将 L 液相与 β 相分开。由于 α 相向 L 与 β 相的生长速度存在差异, 使得 α 相片层生长时表现出非对称性。较低过冷度下, 在 α 片层前端 β 相发生重熔, 随着过冷度的增大, 重熔现象逐渐消失, 但 $L/\beta/\alpha$ 三相区的形状保持不变。可见, 三相交界区形状主要由界面张力之间的平衡决定, 而与界面迁移速率的差异无关。

Z-43

UO₂、 γ -UO₃ 和 α -U₃O₈ 弹性及热力学性质的第一原理研究

黄致远^{1,3}、麻礼东^{2,3,4}、张建宝¹、周青¹、杨磊^{2,3,4}、王海丰^{*1}

1. 西北工业大学
2. 中国科学院近代物理研究所
3. 先进能源科学与技术广东省实验室
4. 中国科学院大学

作为核反应堆中应用最为广泛的燃料, 二氧化铀(UO₂)在过去数十年中已经得到了十分广泛的研究, 而 γ -三氧化铀(γ -UO₃)和 α -八氧化三铀(α -U₃O₈)作为核燃料循环中除 UO₂ 之外最为常见的两种铀氧化物却尚未得到充分的研究。因此本工作基于密度泛函理论(Density Function Theory, DFT)使用 VASP 软件包结合 PBE+U 和 LDA+U 两种泛函对这三种氧化物的机械性质和热力学性质进行了全面详细的研究。计算得到的晶格参数与前人的实验结果十分吻合, 证明了这项工作的可靠性。在此基础上, 通过应力-应变法确定了 UO₂、 γ -UO₃ 和 α -U₃O₈ 的弹性常数, 同时利用 Voigt-Reuss-Hill 近似法推导出了体模量、剪切模量、杨氏模量以及泊松比等弹性性质。随后通过各向异性指数的计算解释了这三种氧化物的弹性各向异性, 并通过对弹性性质的三维表征直观反映了这三种铀氧化物的弹性各向异性程度。对 UO₂、 γ -UO₃ 和 α -U₃O₈ 弹性特性和各向异性的预测有助于人们更深入地了解这三种铀氧化物, 从而为乏燃料的回收以及燃料芯块的再制造提供理论基础。随后, 在准谐波近似(Quasi Harmonic Approximation, QHA)模型下, 利用 Phonopy 代码计算并详细分析了 UO₂、 γ -UO₃ 和 α -U₃O₈ 的热力学性质, 包括热容、熵、焓、声子自由能和吉布斯自由能等在 0 到 2000 K 范围内与温度的函数关系。所计算出的热力学性质与前人已有的实验结果保持了高度的一致性, 人们由此能够理解并预测这些铀氧化物在极端条件下的热力学行为。这项工作所获得的机械性质及热力学性质能够为进一步的实验研究提供有意义的参考数据, 并能够在一定程度上促进核燃料循环的发展。总之本研究的全面性能够使得人们对 UO₂、 γ -UO₃ 和 α -U₃O₈ 的机械和热力学性质有更加深刻的理解, 并为核燃料循环中的材料回收与重制提供宝贵的视角, 最终将有助于核能技术的安全高效运行。

Z-44

大尺度相场模拟在凝固研究中的应用

巩桐兆*、陈云、郝玮晔、樊玮琦、陈星秋、李殿中

中国科学院金属研究所

金属凝固过程中合金元素不均匀分布及其导致的非平衡第二相严重制约材料性能, 因此深刻理解凝固过程析出行为和溶质元素偏析, 对于调控材料微观组织以获得优异性能具有重要意义。相场方法由于避免了显式的复杂形貌固-液界面追踪, 目前已经发展成为凝固研究的重要方法之一。针对合金凝固过程大尺度相场模拟计算量大、效率低的问题, 通过扩散界面模型非线性预条件处理、多晶凝固晶粒取向界面前沿追踪法、自适应有限元法和 Navier-Stokes 方程向量化求解方法等, 发展了合金凝固大尺度定量相场模拟快速计算模型和高效数值计算方法, 分别将二维和三维定量相场模拟空间尺度提高至厘米和毫米尺度, 并实现了与 Al-Cu 合金同步辐射 X 射线原位观察凝固实验尺度一致的大尺度相场模拟; 在合金凝固枝晶生长动力学方面, 借助 Al-Cu 合金三维定量相场模拟和同步辐射 X 射线原位观察凝固实验, 揭示了凝固初期由形核过冷度驱动的合金等轴晶反常生长动力学现象, 发展了一系列等轴晶生长动力学模型, 在拓展传统晶体生长理论的基础上, 提出了一种准确测定凝固形核过冷度的新方法; 在合金凝固过程微观偏析方面, 通过

对 Al-Cu 和 Fe-C 等合金体系凝固过程大尺度相场模拟, 揭示了晶粒尺寸、冷速和溶质扩散系数对溶质元素分布及第二相析出的影响规律, 在经典模型的基础上发展了可以更准确预测凝固末期溶质元素分布的微观偏析新模型。

Z-45

钛合金全成分空间基本物性参数高效预测

陈新澳^{1,2}、胡青苗*¹、曹烁¹、杨锐¹、范群波³

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学
3. 北京理工大学

基于基本物理性质参数如晶格常数、弹性模量等, 采用物理模型预测金属及合金的力学性质, 是工程合金优化设计的有效手段之一。然而, 一般来说, 工程合金的成分复杂, 成分空间巨大, 难以用实验或计算手段获取全成分空间的物性参数, 这是工程合金优化设计的瓶颈问题之一。本工作中, 我们尝试采用机器学习方法, 利用低维成分空间中合金的物性参数, 建立成分-物性参数代理模型, 进而高效预测高维全成分空间中任意成分合金的物性参数。研究表明, 利用二元及三元钛合金的物性参数建立的成分-物性参数机器学习代理模型, 能够准确预测四元、五元等高维成分空间中钛合金的物性参数, 为采用物理模型预测钛合金的力学性质提供了基础。

Z-46

高温钛合金中元素在 α_2/α 间的分配关系

梁弼宁^{1,2}、曹烁¹、刘建荣*¹、杨锐¹、胡青苗¹

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学

合金元素在析出相与基体相间的分布决定了两相间的基本物理性质错配进而显著影响合金性能。 α_2 相是高温钛合金中重要的强化相, 受限于高温钛合金复杂的成分构成以及 α_2 相纳米级的尺寸, 合金元素在 α_2 相与 α 基体间的分布规律, 特别是合金元素之间的相互作用对元素分配的影响, 尚不明确。本文采用第一性原理计算的方法, 研究了不同温度下, Ta 在 α_2 相与 α 相间的分配系数随 Si/Sn 浓度的变化。结果表明随着 Si/Sn 浓度的提高, Ta 向 α_2 相分配的倾向减弱, 向 α 相分配的倾向增强。本研究可以为高温钛合金成分设计以及 α_2 相的调控提供参考。

Z-47

基于差分进化和离散模型的体心立方金属中纳米空洞结构与能量学性质计算

李小林、李祥艳*、钱方清、张艳革、许依春、吴学邦、刘长松

中国科学院合肥物质科学研究院

材料在服役过程中受到高能中子辐照时会产生大量的离位缺陷, 包括空位和自间隙原子。由空位累积演化而来的纳米空洞在材料的诸多性能中扮演关键角色, 如肿胀、气体杂质滞留以及合金元素沉淀。然而, 由于缺乏探索纳米团簇超大构型空间的有效方法, 现今仍无法准确获得纳米空洞的结构和能量学性质, 这为考察与之相关的材料性能演变带来了挑战。

为了解决上述问题, 我们发展了一种启发式的团簇构型搜索方法。该方法以用于全局优化的差分进化算法为基础, 可有效探索纳米空洞对应的复杂高维势能面并定位到全局最小点。我们将此工作流程应用于作为核用金属结构材料的钨、铁和钼这三种典型体心立方金属, 揭示了纳米空洞的生长和转变机制。结果表明, 在空洞的生长过程中, 其特征结构由组成小型空位团簇的紧凑多面体逐渐发展为围绕空洞的低能表面。此外, 还发现纳米空洞周围空位的能级具有几个不同的常数值, 每个值对应于特定的局域原子环境。

通过考虑纳米空洞的拓扑结构及其与周围原子的相互作用，我们建立了一种线性离散模型。该模型捕捉到了纳米空洞的能量学性质，并再现了空洞附近空位能级的振荡特征。此外，基于纳米空洞周围的局域环境，我们提出了一种新的描述团簇解离的物理模型。该模型的相关动力学涉及空洞捕获空位和空位在空洞表面扩散这两个过程的耦合。对表面和晶界处纳米空洞的探究进一步验证了我们发展的搜索框架以及离散能量模型的有效性。

本工作报告了研究金属中纳米空洞结构和能量学性质的有效方法和模型，为理解乃至预测核材料中与纳米空洞相关的辐照损伤演化过程迈出了重要的一步。

Z-48

机器学习预测合金元素存在下 HCP 非金属杂质的稳定性和形成能

鲁国栋*

湖南大学材料科学与工程学院

本文主要讨论了利用机器学习方法实现替位元素存在下的间隙稳定性和形成能预测。目前在 HCP 晶体中非金属杂质间隙的稳定性和预测间隙形成能方面，尚缺乏一个完整的流程和判断标准。本文对比了不同的晶体结构识别算法，发现 VoronoiNN 效果最好。提出了使用 VoronoiNN + 人工方法来提高筛选的精确度和效率，最终得到了准确的识别结果。此外，针对描述符的设计进行了详细的讨论，将描述符分为几何特征和元素特征两大类。根据设计的描述符训练了能够精确分类间隙稳定性的机器学习模型，通过 SHAP 方法解释了特征对模型的贡献。在形成能预测部分，结合 SISSO 方法找到了可以精准预测间隙形成能的描述符，实现了对 HCP 晶体中间隙形成能进行了精准的预测，本研究为 HCP 晶体中间隙的识别和预测提供了新的思路和方法。

Z-49

碲镉汞探测器抗串扰特性的优化设计研究

张曼曼、行琳、刘立英*、王如志

北京工业大学

碲镉汞材料具有电子有效质量小、本征载流子浓度低、光吸收系数大，光量子效率高，红外吸收频谱范围大，使得碲镉汞是一种最重要的红外探测器材料之一。但是其光照情况下串扰效应极大地影响其器件性能。本文利用 Silvaco 软件，对 $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}(x=0.39)\text{n-on-p}$ 型探测器在 $0.4\text{-}12\mu\text{m}$ 波长背照射下的进行光电仿真研究。研究了平面结构，外延层结构，台面结构等不同 n 结区对其光电流响应，串音和增益等影响，进一步探索了三种不同结构的探测器像元工作在不同波长背照射条件下，中心被照射像元的光响应情况、像元之间的串扰情况。通过仿真结果，分析了其串扰抑制措施，并给出了最优工艺参数。我们的研究工作将进一步优化抗串扰特性的碲镉汞探测器工艺结构。

Z-50

Efficient Machine Learning of Solute Segregation Energy based on Physics-informed Features

Zhiliang Pan*, Zongyi Ma

Guilin University of Electronic Technology

Machine learning models solute segregation energy based on appropriate features of segregation sites. Lumping many features together can give a decent accuracy but may suffer the curse of dimensionality. Here, we modeled the segregation energy with efficient machine learning using physics-informed features identified based on solid physical understanding. The features outperform the many features used in the literature work and the spectral neighbor analysis potential features by giving the best balance between accuracy and feature dimension,

with the extent depending on machine learning algorithms and alloy systems. The excellence is attributed to the strong relevance to segregation energies and the mutual independence ensured by physics. In addition, the physics-informed features contain much less redundant information originating from the energy-only-concerned calculations in equilibrium states. This work showcases the merit of integrating physics in machine learning from the perspective of feature identification other than that of physics-informed machine learning algorithms.

Z-51**材料性质分析软件包 PASP 中的机器学习方法**

向红军

复旦大学

We have developed a software package, namely, PASP (Property Analysis and Simulation Package for materials), to analyze the structural, electronic, magnetic, and thermodynamic properties of complex condensed matter systems. Our package integrates several functionalities including group theory analysis, global structure searching methods, tight-binding approach, effective Hamiltonian methods, Monte Carlo simulation, spin-lattice dynamic simulation methods, and machine learning approaches. In this talk, I will mainly focus on the implemented machine learning approaches in PASP. In particular, I will discuss our newly developed machine learning potential approach for magnetic systems, the transferable equivariant graph neural networks for the electronic Hamiltonians of molecules and solids, and the universal machine learning electronic Hamiltonian for any materials. The applications of these machine learning approaches to two-dimensional magnets, electron phonon coupling related phenomena, and high-throughput search of new functional materials will be presented as well.

Z-52**物质模拟方法与软件的发展与应用**

王彦超

吉林大学

近年来,随着计算科学领域的快速发展,计算已经成为与理论和实验并列的第三种研究范式,在当代科学技术和工程应用领域具有不可替代的重要作用。计算科学的发展强烈依赖于计算方法的创新与计算机软件的研发。因此,发展原创计算方法与软件已经成为计算科学研究领域的核心和源动力。

基于数学分治策略、物理对称性约束和计算机群智优化算法,发展了以 CALYPSO 命名的晶体结构计算方法和软件,实现了仅依据化学组分的晶体结构计算。利用该方法,计算提出了 SO₃ 等新型化合物的晶体结构,被实验证实。目前, CALYPSO 已成为本领域通用方法和软件,被包括诺奖得主团队在内的 77 个国家 4,500 余位同行广泛采用。用户利用 CALYPSO 解决了物理、化学和材料等多学科领域的一系列科学难题,在 Nature 子刊、PRL 等期刊发表 SCI 论文 1,900 余篇。

基于均匀电子气物理模型,结合数学线积分方法,构造了适用于描述近均匀电子气体体系的动能泛函;通过建立轨道波函数与电子密度的数学映射关系,提出了适用于无轨道密度泛函理论的非定域赝势计算新方案;基于无轨道密度泛函理论,发展了以 ATLAS 命名的晶体结构能量计算软件,实现了亿原子金属铝的第一性原理能量计算,为开展大体系晶体结构计算提供了重要工具。

Z-53**电子化合物的计算智能设计**

王俊杰

西北工业大学

电子化合物是一类非常规离子化合物材料，其含有限制在晶格间隙空间中的电子并起到阴离子的作用。由于其具室温稳定性和强供电子能力，电子化合物可实现许多技术应用，成为近年来蓬勃发展的一类新材料。然而，已知的电子化合物数量偏少，严重制约了该材料体系的发展和应用。近年来，报告人应用计算智能设计方法，发现了一系列新型电子化合物材料，并探索了该材料体系在合成氨催化领域的应用，代表性研究成果包括：

(1) 应用高通量计算筛选，发现 LaTMSi ($\text{TM}=\text{Sc}, \text{Co}, \text{Fe}$) 金属间化合物中，存在于镧 (La) 四面体的间隙电荷显示电子化合物特征，可促进氢原子的动态交换和 N_2 分子的裂解，并显示强耐氧化性；基于该电子化合物形成机制，采用阳离子取代的方法对金属间化合物进行改性，激活其电子化合物特征，得到 34 种新型金属间电子化合物 (*Nat. Catal.*, 2018, 1, 178–185; ESI 高被引论文，他引 211 次; *Adv. Funct. Mater.*, 2022, 2112198)。

(2) 突破价电子“富余”的电子化合物设计原则，揭示了电子化合物形成的全新机制，设计出“缺电子”型电子化合物：基于高通量计算预测，发现在施加外压时，可诱导电子从阴离子迁移到晶格空腔，从而使“缺电子”材料转化为电子化合物；在该机制的指引下，开展计算设计，以高压 Ca_5Pb_3 为原型，证实了“缺电子”型电子化合物的存在，打破了电子化合物只存在于价电子“富余”体系的固有观念 (*J. Am. Chem. Soc.*, 2021, 143, 8821–8828)。

(3) 以“阴离子”电子特征为预测目标，通过机器学习在超过 14000 种化合物的成分空间中，预测了 145 种具不同局域电荷浓度的金属间电子化合物，并合成了代表性材料 Nd_2ScSi_2 、 La_2YbGe_2 和 Y_2LiSi_2 ；阐明了间隙“阴离子”电荷浓度对电子化合物催化活性和化学稳定性的双向影响机制；所得“缺电子”型金属间电子化合物 Y_2LiSi_2 水洗 5 天后，仍保持 70% 以上催化活性 (*J. Am. Chem. Soc.*, 2023, 145, 48, 26412–26424)。

参考文献：

- [1] J. Wang et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2017, 139, 15668–15680.
- [2] J. Wang et al., *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143, 8821–8828.
- [3] J. Wang et al., *Adv. Funct. Mater.* 2022, 32, 2112198.
- [4] J. Wang et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 2022, 144, 8683–8692.
- [5] J. Wang et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 2023, 145, 48, 26412–26424.

Z-54

含时密度泛函计算模拟新方法与应用

周谐宇 北京龙讯旷腾科技有限公司

基于平均势能面的 **rt-TDDFT**，由于其在计算速度和精度上的良好平衡，而在固体材料计算领域获得了广泛应用。但是平均势能面方法本身并没有包含细致平衡和退相干过程，也不能描述退相干后势能面演化的随机性。针对这些问题，我们发展了 **Boltzmann-TDDFT** 和 **nature orbital branching** 两种方法，并将其应用在载流子冷却和断键产物预测等问题。结果表明，这些方法可以极好的改善已有的 **rt-TDDFT**，并促进人们对电子动力学的认识。

Z-55

第一性原理材料计算在工业界的应用

汪林望

中国科学院半导体研究所

一个方法只有当它可以在工业界广泛应用之后，才能充分发挥它的影响。第一性原理材料计算在学术界已经有三十多年的应用历史，但在产业界的应用还十分有限。我将探讨在推向工业界时所面临的挑战，以及如何结合 AI 的技术进一步推动这一过程。我也会例举一些已有的工业界应用，以及现有第一性

材料计算软件可达到的大尺度，长时间的水平。

Z-56

TBD

何力新
中国科技大学

Z-57

Rational Design of Novel Tetrahedral Semiconductors as Efficient Light-Emitting Materials

曾在平
河南师范大学

Colloidal quantum dots of groups II–VI and III–V are key ingredients for next-generation light-emitting devices^[1]. Yet, many of them are heavy-element-containing or indirect bandgap, causing limited choice of environmental friendly efficient light-emitting materials^[2-3]. In this contribution, we will introduce two design principles of novel tetrahedral semiconductors, namely cation stabilizing charged cluster network^[4] and “super atom” perspective^[5]. Based on those two design principles, we have discovered six novel categories of multi-component semiconductor compounds. Using first-principles calculations with pre-defined crystal structures, over a hundred novel functional materials have been screened with emitting wavelength covering from far-infrared to ultraviolet region. Our work provides a comprehensive database of highly efficient light-emitting materials, which may be of interest for a broad field of optoelectronic applications.

References

- [1] H. Shen, **Z. Zeng**, et al, Nature Photonics **13**, 192-197 (2019).
- [2] **Z. Zeng**, et al. Nano Letters **22**, 3604-3611 (2022).
- [3] **Z. Zeng**, et al. Nano Letters **23**, 3239-3244 (2023).
- [4] **Z. Zeng**, et al. Nano Letters **23**, 4648-4653 (2023).
- [5] **Z. Zeng**, et al. Nano Letters **24**, 3237-3242 (2024).

Z-58

氧化物陶瓷材料原子间机器学习势的研究

任佳丽
山东科技大学

先进陶瓷作为新材料的重要组成部分，2021 年行业市场规模达 890 亿元。先进陶瓷按照材料可分为氧化物陶瓷、氮化物陶瓷和碳化物陶瓷。其中氧化物陶瓷研究和产业化应用较早，目前应用领域最为广泛，占比达 46%。

氧化物陶瓷材料的很多性能需要理论研究给出清晰的物理图像。常用的计算模拟方法第一性原理计算、分子动力学、有限元模拟等，不但需要耗费大量的时间和资源，还存在诸多限制；而机器学习不但可以扩大计算体系的空间和时间尺度，还可以通过数据拟合优化原子间势函数，使已有的计算模拟方法更加快速、精确。

本文以氧化物陶瓷材料为研究对象，通过改变数据集的大小、数据集的构成以及优化高斯回归模型的各种超参数，训练了一系列机器学习势函数，并通过分子动力学模拟氧化物陶瓷材料的晶格常数、热导率以及热膨胀系数验证势函数的精度。

本文首先利用第一性原理分子动力学计算得到包含不同构型以及不同数量在不同温度下的二氧化锆、二氧化钛和二氧化硅的数据集，然后基于高斯回归模型训练了一系列机器学习势函数，并通过分子动力学计算各种氧化物的能量、力和应力与第一性原理的计算结果做对比，结果表明数据集的适当增大，可以提

高势函数的精确度；数据集中不同构型分布不均匀，占比大的构型对相应的结构预测精确度高，占比小的构型对相应的结构预测精确度低，导致势函数外推的预测能力减弱。通过优化高斯回归模型的超参数，结果表明随着稀疏点的个数、截断半径的大小等超参数的不断增大，当增大到一定值后，势函数的精度以及计算开销适中；继续增大超参数的值，势函数的精度降低且计算量增加。因此，我们通过测试，选择了误差以及计算开销适中的数据集和超参数训练氧化锆、氧化钛和氧化硅的机器学习势函数。

应用机器学习势函数计算氧化锆、氧化钛和氧化硅的晶格常数、热导率和热膨胀系数，并与实验结果或已有的势函数结果做对比。结果表明机器学习势函数能够达到第一性原理的精度。氧化锆的机器学习势函数计算的晶格常数的均方根误差为 $0.005\text{\AA}$ ，热导率的均方根误差为 $0.47\text{ WK}^{-1}\text{m}^{-1}$ ，热膨胀系数误差为 0.004 K^{-1} 。氧化钛的机器学习势函数计算的晶格常数的均方根误差为 $0.01\text{ \AA}$ ，热导率的均方根误差为 $1.2\text{ WK}^{-1}\text{m}^{-1}$ ，热膨胀系数的均方根误差为 0.005 K^{-1} 。氧化硅的机器学习势函数计算的晶格常数的均方根误差为 $0.031\text{ \AA}$ ，热导率的均方根误差为 $0.08\text{ WK}^{-1}\text{m}^{-1}$ ，热膨胀系数的均方根误差为 $5.66\times 10^{-6}\text{ K}^{-1}$ 。

Z-59

低维耦合系统中超越布洛赫振荡的新型电子周期振荡

钟建新*

上海大学

Bloch's seminal paper in 1929 has initiated a long history of discussion on the dynamics of electron in a static electric field within crystals. Bloch and Zener showed that the period of Bloch oscillation is given by $T=h/eFd$, where h is the Planck constant, e is the elementary electron charge, d is the lattice period, and F is the magnitude of the electronic field. Considering small lattice periods in crystals and the intensity of the electric field that crystals can withstand, the period of the Bloch oscillation is in the range of picoseconds, which is much larger than the electron relaxation time in crystals and thus has been difficult to observe in crystals.

In this talk, I will introduce our recent discovery of a novel type of electron oscillations in coupled low-dimensional systems beyond Bloch oscillations. Using the tight-binding Harper model for electrons in a two-dimensional lattice under magnetic field, we show that electrons in the coupled system composed of two identical low-dimensional sub-systems with mirror symmetry, exhibits a well-defined periodic oscillation in both transverse and longitudinal directions with the period determined by $T=h/2u$, where u is the hopping strength of electrons between sub-systems, no matter whether the sub-systems are periodic or non-periodic. We further show that the oscillation can be effectively tuned by external electric fields. Existence of this universal periodic oscillation is a result of equal level spectral splitting of the iso-spectra of two subsystems, independent of system size, boundary condition, and onsite potentials. Because the oscillation frequency and spreading distance of wavepacket can be tuned independently, the periodic oscillation in coupled systems is expected to find applications in control of quantum states and in designing nanoscale quantum devices.

Z-60

新型量子功能材料及异质结构的理论设计和物性调控

杜世萱*

中国科学院物理研究所

量子材料由于量子力学特性产生奇异物理性质，包括：铁电、磁性、拓扑、超导、以及多物性间的耦合。这些新奇物性是构筑未来超快、低耗散、高密度集成量子计算、存储等器件的基石。本报告中，我将介绍近期我们通过理论计算研究在高性能铁电材料结构预测、磁电耦合调控、离子层状材料数据库构建几个方面的进展。针对正交晶向铁电 HfO_2 具有 CMOS 兼容但寿命短、矫顽场大的问题，我们理论计算预测了一种界面插层铅导致的铁电三方相 ($\text{Hf}(\text{Zr})_{1+x}\text{O}_2$)。这种 $\text{Hf}(\text{Zr})_{1+x}\text{O}_2$ 材料在 7% 的应力条件下展现出 $15.7\text{ }\mu\text{C}/\text{cm}^2$ 的极化值和 7.6 meV 每原子的铁电翻转势垒。 $\text{Hf}(\text{Zr})_{1+x}\text{O}_2$ 材料具有宽的畴界，进一步降低了

铁电翻转势垒。该材料同时实现了具有高剩余极化和极低矫顽场特性。当将铁电材料与磁性材料构筑异质结, 层间 Rashba 效应、轨道杂化等将调控磁性材料交换相互作用、诱导层间 DMI、改变磁各向异性, 产生单层不具备的新物性。研究发现在二维铁磁铁电异质结 $\text{CrI}_3/\text{Pt}_2\text{Sn}_2\text{Te}_6$ 中, 层间滑移和铁电翻转将导致丰富磁结构的产生, 包括: Bloch 型斯格明子、面内铁磁、面外铁磁, 等。这些磁结构间可逆、非易失的调控, 可用于多态存储、赛道存储等原理性器件的设计。最后, 我还将介绍近期构建的离子层状基元和材料数据库。该数据库包含 1000 余种离子层状基元和 300 余种离子层状材料。对该数据库中的基元按照对称性、结构原型等方面进行了分类, 首次确定了部分基元的功能性并根据功能进行分类, 如超导电性、磁性、拓扑等物性。我将通过几个示例展示基于该材料数据库的新材料和新物性发现的应用。

Z-61

单分子尺度界面结构与性能调控

刘伟

中国科学院长春应用化学研究所

单分子电子学旨在利用单个分子这种极小尺寸的结构作为电子器件的功能单元, 以解决半导体尺寸不断缩小的挑战。在极微观环境下, 分子与电极的耦合会导致界面结构的随机性和多样性, 使得体系的量子电导等行为变得难以控制, 呈现出复杂的统计特征。然而, 传统的理论计算基于假设结构模型, 难以对实验中获得统计变化规律进行定量解释。针对这些问题, 本报告在第一性原理高通量计算的基础上, 将无先验统计学习方法引入到单分子科学的研究中。通过基于原子神经网络的机器学习模型, 构建了第一性原理精度下的力场势函数, 实现了对分子结机械裂结过程的精确重演, 并通过线性降维和聚类算法实现了电导特征的分类识别。此外, 通过采用基于线性回归的统计方法, 建立了简单且通用的分子偶极矩描述符, 以定量化描述取代基电子和空间的协同效应对界面能级排列的影响, 构建了单分子微观结构与分子结电导之间的构效关系。

Z-62

基于深度学习先进分子动力学的复杂材料体系相变研究

牛海洋

西北工业大学材料学院/凝固技术国家重点实验室

材料的相变过程是材料科学、凝聚态物理、医药制备和气象预测等诸多领域最重要的研究课题之一。受限于空间和时间分辨率, 现有的实验手段难以在原子尺度下动态观察研究材料的相变过程。原子尺度下的计算机模拟为研究材料的相变过程提供了有效手段, 然而材料的相变过程的模拟需要至少上千原子量级、数十微秒的高精度计算, 远远超过了第一性原理分子动力学能够达到的时空尺度。这一时空尺度难题又反过来阻碍了人们对材料相变机理的系统理解。因此, 实现效率与精度兼顾的第一性原理精度分子动力学模拟显得尤为重要。本报告针对以上问题, 通过引入映射材料内部原子结构的结构因子作为序参量, 采用巨分子动力学等先进分子动力学方法解决了材料凝固形核原子尺度模拟的时间尺度难题^[1-2]。本报告还进一步发展了将先进分子动力学方法与深度学习方法相结合的研究思路^[3], 成功构建出了第一性原理精度的水、硅酸镁、碳酸钙、硒化镉、二氧化钛等复杂体系的深度学习势函数, 并基于深度学习先进分子动力学方法对上述体系的相变过程进行了系统研究^[4-9]。研究作为构建复杂体系的高精度势函数及研究它们的温度-压力相图及相变机理提供了系统性的研究手段。

参考文献

- [1] Niu H., Piaggi P. M., Invernizzi M., Parrinello M., *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* 2018, 115: 5348.
- [2] Yang Y. I., Niu H., Parrinello M., *J. Phys. Chem. Lett.* 2018, 9: 6426.
- [3] Niu H., Bonati L., Piaggi P. M., Parrinello M., *Nat. Comm.* 2020, 11: 2654.
- [4] Niu H., Yang Y. I., Parrinello M., *Phys. Rev. Lett.* 2019, 122: 245501.
- [5] Chen, M., Tan, L., Wang, H., Zhang, L., & Niu, H. *arXiv*. 2023:2304.12665.

- [6] Deng J., Niu H., Hu J., Chen M., Stixrude L., *Phys. Rev. B* 2023, 107, 064103.
- [7] Zhang, L.; Yang, M.; Zhang, S.; & Niu, H. *Journal of Materials Science & Technology*. 2024, 185: 23-31
- [8] Liu, M.; Wang, J.; Hu, J.; Liu, P.; Niu, H.; et al. *Nat. Comm.*, 2024, 15, 3079.
- [9] San, X.; Hu, J.; Chen, M.; Niu, H.; et al. *Nat. Comm.* 2023, 14, 7858.

Z-63**基于群论和图论的平带格子预测及其材料实现-RG2 软件**

何朝宇

湘潭大学，物理与光电工程学院

人类对材料的应用水平取决于对材料的认知水平，而对晶体材料的认知水平在很大程度上取决于描述晶体材料所选用的理论工具和手段。商图是在描述晶体材料的结构方面比晶体结构更加先进的数学模型，应该能像晶体结构一样在对材料的认知和开发应用中发挥重要作用。近年来，报告人团队对商图这一先进数学模型在晶体结构预测中应用的可能性进行研究，提出了基于图空间的晶体结构预测方法，发展出结合群论、图论和随机策略的晶体结构搜索软件RG2（登记号：2020SR0295721，2023SR0515685；网址：www.crystal-rg2.cn），为计算凝聚态物理和计算材料科学中的晶体结构预测贡献了新的思想、方法和工具，取得系列创新性研究成果。基于RG2方法和软件，研究团队持续在PRL\PRB\PRAppl.\PRM等期刊上发表最新研究成果，获得多项国家自然科学基金面上项目和湖南省杰出青年基金的资助；目前全国有**近100所高校约600人**使用RG2软件从事晶体结构相关研究，基于RG2方法解决了一系列晶体结构问题，发现众多新奇的物质结构和物理现象，在NC,PRL,PRB,JPCL,APL,Nanoscale等重要国际学术期刊发表SCI学术论文**90余篇**。本次报告将进一步展示RG2方法和软件在平带格子预测和平带材料设计中的潜力和独特魅力。

参考文献：

1. X. Shi, **C. Y. He**, C. J. Pickard et. al., **PRB**, **97**, 014104, 2018
2. **C. Y. He**, X. Shi, S. J. Clark et. al., **PRL**, **121**, 175701, 2018.
3. H. Yin, X. Shi, **C. Y. He** et. al., **PRB-R**, **99**, 041405, 2019.
4. Z. H. Gong, X. Shi, J. Li et. al., **PRB**, **101**, 155427, 2020.
5. N. Zhou, P. Zhou, J. Li et. al., **PRB**, **100**, 115425, 2019.
6. L. Wang, Y. P. Shi, M. F. Liu et. al., **Nat. Commun.**, **12**, 2361, 2021.
7. Y. J. Liao, X. Z. Shi, T. Ouyang et. al., **JPCL**, **12**, 8889, 2021.
8. J. Li, S. F. Li, T. Ouyang et. al., **JPCL**, **12**, 732, 2021.
9. **C.Y.He**, Y.J.Liao, T. Ouyang et. al, Fundamental Research, Accepted.

Z-64**滑移铁电新类型设计**

董帅

Southeast University

滑移铁电是近年来新兴的低维铁电类型，引起了广泛关注。本报告将介绍滑移铁电的基本背景以及我们在拓展滑移铁电新材料类型方面的一些尝试[1-4]，包括在有机无机杂化体系中实现滑移铁电、预测了滑移铁电普遍的负压电性，以及从二维范德华层间滑移推广到层内滑移和一维链间滑移。

- [1] Nature Materials 21, 1158-1164 (2022)

[2] Physical Review Materials 5, 084405 (2021)

[3] Physical Review Materials 5, 074408 (2021)

[4] Physical Review B 108, 235423 (2023)

Z-65

长离子位移铁电的量子极化与边界影响

吴梦昊

华中科技大学

在经典模型中，铁电相通常是高对称顺电相在软模下的较小偏离，只存在于属于特定十个极性点群的晶格中。报告人将介绍几类跳出该框架的非传统铁电设计，特殊键型使其能以较低翻转势垒长离子位移，包括提出独特的滑移铁电机理，使多数非铁电二维材料能通过堆叠产生极低势垒的稳定铁电性，其垂直极化可通过层间水平滑移翻转，在层间扭角下还会产生一种铁电莫尔超晶格，随后该预测在多种二维体系中实验证实，相关报导目前已有近 30 篇文章发表于 Nature、Science 和子刊；提出利用类共价离子键在高电离度体系诱导高极化铁电性，由于库仑作用的长程特性，也能极大降低长离子位移的翻转势垒；一些质子/离子导体甚至可产生离子位移为多倍晶格常数的铁电性，极化也呈量子化。上述铁电性可存在于非极性点群的晶体中，即使在宏观尺度下其极化仍高度依赖于边界，这些性质都迥异于以往的铁电研究。

Z-66

基于机器学习的大尺度计算方法及其应用

杨玉荣*、马兴越、吴迪

南京大学

第一性原理计算方法是计算材料基态结构、电子结构、介电性质等相关性质的可靠工具。然而，由于计算量巨大，第一性原理计算只能计算 100 原子数量级的小体系，材料有限温度下的性质和相变的计算仍是很大的挑战。分子动力学和有效哈密顿量方法可以计算大尺度的原子结构，但经典的分子动力学势函数很难准确描述较为复杂的体系结构；有效哈密顿量方法的序参量耦合参数众多，得到这些参数过程复杂并且可能存在较大误差。借助近年来的机器学习方法，我们发展了基于机器学习的分子动力学势函数，以及发展了基于机器学习构造有效哈密顿量的方法。发展的这两种方法的精度接近第一性原理方法，并且计算体系大大增大。

利用基于机器学习的分子动力学方法，我们提出了利用太赫兹光驱动双层 BN 的相对滑动，并得到了极化翻转，是滑移极化翻转的一种新的有效方式。利用基于机器学习构造有效哈密顿量的方法，我们预言了 $\text{PbTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ 异质结上存在新的极化斯格明子拓扑结构态，拓展了极化态的存在范畴，并解释了其存在机理。

Z-67

二维铁电材料中自发面外极化起源的研究

赵锦柱

华南师范大学

由于退极化场的存在，传统铁电材料在样品厚度低于临界值时会失去垂直面外方向的自发电极化，常规的声子软膜诱导铁电相变的方式不再成立。然而近一段时间人们先后在实验中报道了若干具有自发面外方向铁电极化并且只有若干原子层厚度的二维单层铁电材料，引起了广泛关注。这些与声子软膜理论不一致的二维铁电材料中，自发极化的形成机制一致是这个方向的核心问题。本报告将重点介绍我们从晶格动力学出发对这个问题的研究。我们的结果显示，与面外极化直接相关的极化光学膜通常是自身稳定的。然而这个模式与其他非极化不稳定模式的复杂耦合行为是产生二维铁电效应的重要机制之一。此外，不同于

传统钙钛矿铁电体系，有序-无序的竞争也在二维铁电材料的相变中扮演了重要的角色。将第一性原理计算结果与唯相模型结合分析，我们得到了很多区别与传统常规铁电材料的有趣结果。

Z-68

相场模拟设计铁电材料

黄厚兵

北京科技大学

伴随着电子元器件的小型化，对芯片等电子元器件的高效制冷也成为领域内重大需求。铁电材料在电、力、热等外场下发生相变，相变可用于在高效固态制冷器件，因此铁电材料在电子元器件领域展现出巨大应用前景。铁电材料的性能由铁电畴形貌决定，铁电畴形貌受到电-力-热等多场交叉调控。因此，揭示多场下畴形貌演化规律是提升其性能的关键。精准设计、开发高性能铁电材料需要对多场耦合作用下铁电畴形貌演化进行解耦，但由于这一过程是瞬态动力学过程，为解耦耦合作用带来了极大的科学挑战。围绕此问题，本报告主要介绍如下研究进展：针对低电场下熵变低的应用瓶颈，搭建电致结晶相场模型，提出电场诱导结晶相变提升熵变设计思路，实现低电场下熵变的 4 倍提升；相场理论指导实验，制备出纳米岛实现拓扑铁电畴逻辑器件，为低功耗、高密度存算一体化器件提供设计思路。

Z-69

非极性点群晶体的长程离子位移铁电性

盛宇轩、吴梦昊*

华中科技大学

在经典模型中，铁电性与高对称性顺电相中的短程离子位移有关，根据诺埃曼原理，铁电晶体必须采用 10 个低对称性的极性点群之一。我们认为，这一结论是基于不考虑边界的完美体相晶体。第一性原理的证据表明，在一些非极性点群中，在一些非极性点群中也可能形成铁电极化，因为边界条件通常会破坏晶体对称性。同时，当通过长离子位移实现多个等效高对称状态之间的转换时，这种极化可以在宏观尺度上得以保持并且是可翻转的。例如，在滑动铁电双层系统或具有共价方向性的离子化合物中，翻转势垒可以大大降低。此类非常规铁电性可归因于边界和长离子位移，且在诸如 CuCrS_2 等几个系统中的存在得到了实验观测的支持。它可能解释了以前报道的一系列未明现象，并显著扩展了铁电材料的范围，特别是那些由长离子位移引起的高极化材料。

Z-70

核材料中氦致辐照损伤产生机理与控制方法研究

周洪波^{*}，李宇浩，吕广宏

北京航空航天大学

氦是核材料中最常见的杂质元素之一。一方面，中子辐照诱发(n, α)核反应和核燃料衰变均会在产生氦杂质；另一方面，聚变氦等离子体辐照会向材料中注入大量的氦。因此，氦杂质效应是核材料研究的前沿热点之一。众所周知，氦原子最外层为满壳层，是典型的惰性气体元素。但氦在材料中展现出与其化学惰性完全相反的行为，极易自发聚集，继而导致材料出现起泡、起丝、硬化、脆化、肿胀等问题，严重劣化核材料的服役性能。阐明氦在材料中自发聚集的物理原因是解决氦致材料辐照损伤的必由之路，但至今尚不清楚。

以钨基核材料为例，我们采用第一原理、分子动力学、对象动力学蒙特卡洛等不同尺度的计算模拟方法对氦在钨中的行为及其产生辐照损伤的机理。提出了通过应力张量定量测定氦在材料中有效体积的方法，解决了长久以来材料中间隙占位体积与能量相矛盾的争议，发现了拉应变（压应变）对钨中氦溶解的促进作用。类比于亲水和疏水，提出了金属中氦相互作用“electrophobic（疏电子）”的新概念，揭示了氦在金

属中“self-trapping (自捕获)”及氦致起泡起丝的物理本质；疏电子机制不仅适用于氦，而且普适于电子吸附能为正的所有元素。疏电子机制导致氦在金属中极易自发聚集，进而挤压原有晶格原子离位形成氦泡，氦泡将通过“loop-punching (发射位错环)”机制进一步长大，而位错环的发射方式与氦泡曲率直接相关。与此同时，氦的疏电子性将导致材料中形成小尺寸的高密度微型氦团簇，这些氦团簇将会协同钉扎位错运动，加剧材料辐照硬化；据此，我们提出了微型氦团簇的协同钉扎硬化模型，且结果与实验相一致。有趣的是，除了不利作用外，氦对间隙缺陷粘附将使其迁移模式由一维变为三维，进而起到提升核材料自修复能力的作用。在此基础上，我们提出氧化物纳米颗粒或满/半满壳层元素掺杂控制氦致辐照损伤的方法，这为抗辐照材料的开发与设计奠定了重要基础。

关键词：金属钨；氦；自捕获；疏电子；辐照损伤；控制方法

Z-71

Temperature effects on annealing crucial deep-level defects in neutron-irradiated silicon: multiscale modeling

Jun Liu, Yonggang Li*, Yang Gao, Chuanguo Zhang, Zhi Zeng

Institute of Solid State Physics, Hefei Institutes of Physical Science, Chinese Academy of Sciences

Studying temperature effects on defect behaviors during thermal annealing is significant for understanding the performance degradation and recovery of semiconductor devices under irradiation. We systematically studied temperature effects on annealing crucial deep-level defects in neutron-irradiated silicon, by developing a multiscale modeling approach. The temperature-dependent concentrations and electron occupation ratios of crucial defects of divacancies (V_2) and tri-vacancies (V_3) were given for dynamic and post-irradiation annealing. Besides the common direct dissociation, we found a new approach to eliminating V_2 and V_3 by their recombination with interstitials dissociated from interstitial-relative defects at relatively low temperatures. To effectively eliminate V_2 and V_3 by post-irradiation annealing, we further determined the activation energies of 1.98 eV and 1.71 eV for V_2 and V_3 , respectively. We also found that, within the operation temperature range of devices, the higher the temperature, the better the radiation resistance. It is thus recommended that the optimal temperature of post-irradiation annealing for device performance recovery is near 600 K.

Z-72

辐照下钨中嬗变元素铪聚集演化行为及其对力学性能影响研究

李宇浩*、岳方雅、杨天任、周洪波、吕广宏

北京航空航天大学

钨基材料是未来聚变堆最有可能全面应用的面对等离子体材料。但在聚变高能中子辐照下，钨将不仅发生嬗变反应，产生铪等嬗变元素，而且铪在辐照作用下将会聚集析出，进而加剧材料的辐照硬化/脆化，这将严重影响聚变装置的运行安全和稳定性。更重要的是，这与无辐照条件下嬗变元素行为完全不同，辐照下铪的析出浓度远低于其在钨中的溶解极限。因此，系统研究钨中辐照诱导嬗变元素铪聚集析出行为及其对力学性能的影响对于抗辐照材料的设计和开发具有重要意义。

辐照下嬗变元素铪的聚集析出行为：我们发现了辐照缺陷在铪聚集中的媒介作用，提出了辐照诱导嬗变元素析出的间隙扩散聚集机制，获得了辐照条件下嬗变元素聚集形核的物理图像，给出了随着辐照剂量增加铪从促进离位缺陷复合到自身聚集析出的临界条件，明确了辐照下铪与离位缺陷协同演化的相图，并在此基础上给出了通过合金化元素钽掺杂控制嬗变元素聚集析出的方法。嬗变元素铪对钨力学性能影响机制：发现均匀分布的铪将降低钨材料广义堆垛层错能和位错滑移佩尔斯应力/能垒，有助于位错的运动，从而增强钨材料的韧性；而铪团簇将显著抑制位错的运动，导致材料硬化脆化，据此提出了辐照下铪分布状态变化是导致其对钨由初化元素转变为脆化元素的物理本质。我们进一步探究了铪团簇存在时位错环/空洞与刃位错的相互作用，发现铪偏析显著增强了位错环对刃位错滑移的阻碍作用，但对空洞阻碍作用的影响

非常微弱，这导致位错环由刃位错滑移的弱钉扎元素变为强钉扎元素。有趣的是，当偏析的铯低于临界浓度时，位错环延缓位错的运动，该过程的临界剪切应力与铯原子浓度正相关；一旦偏析的铯高于临界浓度，位错环在与刃位错的相互作用时被铯原子完全钉扎，刃位错只能通过攀移形成超级割阶的方式（位错环较小）或者直接切过的方式（位错环较大）脱离位错环，这些过程的发生都对应着较高的临界剪切应力，进而导致材料硬化。

上述研究结果深化了对于聚变堆壁材料中嬗变元素效应的理解与认识，为壁材料的服役行为评估奠定了重要基础。

Z-73

基于速率理论的多相场模拟中子辐照纳米相和空位演化

李永胜*、张海伟、张赞、卓集成、王晟龙、牛堃宁

南京理工大学

奥氏体-铁素体双相不锈钢具有优异的抗氧化和耐腐蚀性能，在核反应堆领域具有巨大发展潜力。然而，在高温和辐照环境下，辐射损伤导致晶体缺陷并产生纳米尺度富 Cr- α' 相，导致硬化和脆化。因此，辐照缺陷和相变对核材料的性能和使用寿命有很大影响。通过耦合速率理论和多相场模型，研究了中子辐照剂量率和辐照温度对 Fe-Cr-Al 合金中富 Cr 纳米相、空位和间隙原子的影响，通过合金显微硬度随时效时间的变化，建立了力学性能和微观组织动力学的关系。随着辐照剂量率的增加，溶质原子的扩散增强，产生空位和间隙原子，加快了 α' 相的长大和粗化。辐照剂量率影响元素在 α/α' 相中的分布，高辐照剂量率促进 Fe 和 Al 进入 α' 相，Cr 进入 α 相，并且辐照剂量率越高， α' 相更早达到平衡成分，平衡成分中 α' 相的 Cr 浓度越低。随着中子辐照温度的升高， α' 相的相分离加快，体积分数的变化率和 α' 相的粗化速率加快。10Al (at.%) 的加入使 Fe-(25, 30, 35)Cr (at.%) 合金的硬度值增大，增大的幅度随 Cr 浓度的上升而减少，并且 Al 元素的加入还会抑制 Cr 含量较低的 Fe-25Cr (at.%) 合金的硬度增量。研究结果对预测合金在辐照条件下的形貌演化和力学性能具有重要意义。

Z-74

辐照缺陷影响钨偏滤器热性能的多尺度模拟研究

李磊、金硕、李炳辰、梁林云*、吕广宏

北京航空航天大学

在现代先进的磁约束核聚变反应堆中，偏滤器是一个关键组件。由于其直接与等离子体接触，偏滤器不仅需要承受高能中子的辐照损伤，还必须耐受高热负荷。偏滤器的热负荷能力限制了聚变堆运行的最大功率。因此，寻找能够在高热负荷和强中子辐照条件下仍保持良好热导率的偏滤器材料，对于核聚变能源研究至关重要。

辐照引入微观缺陷对偏滤器宏观热导率的影响是一个典型的多尺度物理现象。目前实验和单一模拟手段难以系统解决这些问题。尽管已有多种方法研究不同尺度上的有效热导率，但尚无方法在宏观构件尺度上充分考虑微观缺陷对有效热导率的影响。为解决这一问题，我们开发了一种结合相场模型、机器学习和有限元方法的多尺度模拟方法，以有效预测在高热通量和中子辐照条件下大尺寸钨偏滤器的有效热导率。首先，通过相场模型模拟微米级钨在辐照条件下的微观结构，并基于这些微观结构计算其有效热导率。然后，将每个相场计算得到的热导率输入到有限元模型的节点中，以获得基于相场微结构的大尺寸钨偏滤器的更精确的有效热导率。然而，由于有限元分析需要大量的相场计算结果，直接基于相场演化计算每个微结构的有效热导率所需时间过长，为此，我们引入了机器学习方法以加速这一过程。具体而言，我们使用 ResNet 深度神经网络提取相场信息的潜变量，并利用 LSTM 加速相场演化过程。最终，将演化后的相场潜变量输入到训练好的多层感知机 (MLP) 中，以获得演化后的有效热导率。通过这种方法，我们显著加快了基于相场演化的有效热导率计算过程，从而能够快速且有效地预测大尺寸钨偏滤器在高热通量和中子辐照条件下的有效热导率。

Z-75

金属和共价材料统一可计算参数力学本构关系构建及应用

温斌

燕山大学 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室 极端变形研究中心

金属-共价混合键型是一类具有重要用途的材料，它是航空、航天发动机、核工业装备的关键结构部件用材。目前，针对这类材料，其力学性能主要是通过实验进行研究，受方法的限制，基于实验的力学性能设计达到了瓶颈，亟需定量理论设计，用来进一步提升装备的性能。但由于混合键型的特点，金属-共价混合键型材料定量的理论设计是一个难题。其难点在于，一是化学键对力学性能影响的统一描述难，对于金属材料，可以用位错理论进行描述，对于共价材料，可以用价键理论进行描述，但是对于金属-共价混合键型材料，它既包含金属键，也包含共价键，没有统一的模型进行描述。另外一个难题就是力学性能定量计算难，目前，材料力学本构关系一般是通过对力学性能实验数据拟合获得。因此，统一描述和可计算问题已经成为亟待解决的世界性难题。

针对上述问题，本研究提出了一个金属和共价材料统一可计算参数力学本构关系构建方法。通过考虑化学键对位错的影响，提出了位错滑移的二维位移势模型，在该模型中，化学键对的影响可以通过势垒进行描述，在此基础上，获得位错的滑移模式，进而建立金属和共价材料统一的应力激活能关系和多晶材料的本构关系，该方法的优势是：不同键型材料的位错动力学方程可统一，而且不同强化机制的强度贡献可统一，不需实验标定，参数均可计算。利用该方法，对一些金属和共价材料的力学性能进行了计算，其计算结果与实验结果非常吻合，证明了该模型的有效性。本研究工作可为材料力学性能设计提供一个有力的工具。

Z-76

梯度结构特征对梯度纳米晶金属力学行为影响的多尺度模拟研究

侯兆阳*、刘娜娜、周赛

长安大学

梯度纳米晶（GNG）金属往往兼具了粗晶的塑性和细晶的强度，但具有最优强-塑匹配关系的梯度结构特征仍需要进一步深入研究。本研究同时采用分子动力学方法和晶体塑性有限元方法，对具有不同梯度结构特征的纳米晶 Cu 和 Ni 从不同空间尺度下进行了模拟计算。两种尺度下的模拟计算均得到，当晶粒尺寸分布的梯度率 $n=1$ 时，即晶粒尺寸梯度满足线性关系，梯度结构平衡了强度和塑性两个关键的力学性能指标，具有最优的强塑性匹配。进一步分析发现，当梯度率 $n=1$ 时，梯度纳米晶在塑性变形中具有最大的应变和应力梯度；而且此时体系中的位错和层错密度最高，晶粒生长和晶界迁移明显被抑制，这对最优强-塑匹配关系的产生起关键作用。研究结果对实验上调控梯度纳米晶力学行为具有理论指导作用。

Z-77

高分子复合材料断裂力学性能的多尺度模拟研究

高洋洋

北京化工大学

理解高分子纳米复合材料的断裂性能非常重要。在本工作中，首先利用玻尔兹曼反演方法构建了白炭黑填充天然橡胶复合材料多尺度模型。随后采用三轴拉伸模式对体系进行变形，结果表明接枝白炭黑颗粒可以提高复合材料的断裂韧性。通过结构分析，发现接枝链间或基体链与接枝链间缠结数的增加可以弥补基体链间缠结数的减少，从而降低总缠结数随应变的下降速率。这可以通过量化基体链、接枝链和白炭黑的应力贡献度来进一步证明。此外，通过分别计算基体和白炭黑珠子的 Voronoi 体积，探讨了裂纹的成核与扩展过程。我们也量化了白炭黑的障碍效应和接枝效应对总缠结数以及裂纹的成核与扩展的竞争。最后，通过表征局部模量分布，发现低弹性模量的界面区域容易出现裂纹。此外，接枝链可以抑制裂纹的过早出

现,减少裂纹的融合,从而提高纳米复合材料的断裂韧性。另外,我们构建了聚氨酯的多尺度模型。结果显示随着硬段含量的上升,聚氨酯的断裂韧性逐渐上升。通过分析两相的应力分解、形态和构象,硬相由于具有较高的强度,可以作为物理交联剂,提高了低应变下的应力。由于大的伸长率,软相提高了高应变下的应力。这种微观结构的演变可以通过表征 von Mises 应变和局部应力来可视化,其分别反映了微观应变和应力。最后,通过表征裂纹的体积分数、数目和表面积理解了裂纹的演变过程。裂纹成核位置主要在软相,少部分在界面,这与局部弹性模量分布一致。此外,硬相可以抑制裂纹的过早成核、生长和融合,从而提高断裂韧性。总地来说,本工作有助于从分子尺度上理解高分子复合材料断裂韧性以及裂纹演变机制。

Z-78

通过晶界偏析调控材料的热稳定性和力学性能

彭浩然*

西北有色金属研究院

高密度的晶界给纳米晶金属带来两个负面问题:(1) 低热稳定性;(2) 晶间断裂,严重影响了纳米晶金属的热加工、热处理和工程应用。本工作通过结合理论建模、第一性原理计算和分子动力学模拟方法,系统研究了纳米晶金属的尺寸软化行为和晶界偏析强化效应,通过晶粒尺寸和溶质浓度协同优化显著提高了霍尔-佩奇晶界强化的极限,讨论了纳米晶金属的变形机制、位错形核机制和强化策略;探究了晶界偏析引起的热稳定化效应和晶界强化效应及其两者之间的关联性,分析了晶界偏析能和强化能同原子半径和电负性之间的依赖关系,构造了晶界偏析能-强化能图,为理解晶界偏析、纳米晶热稳定性和强化性能之间的关系提供帮助,同时为高强高稳定纳米晶合金设计提供理论指导。

Z-79

面心立方金属/合金中退火孪晶形成机制及形成能力预测

谢红献*¹、何婷婷¹、吕广宏²

1. 河北工业大学

2. 北京航空航天大学

退火孪晶普遍存在于面心立方金属/合金中,对其力学及抗腐蚀性能有显著影响。因此,研究退火孪晶的形成机制及形成能力对于通过晶界工程调控面心立方金属/合金的晶界结构至关重要。目前人们对退火孪晶的形成机制及形成能力还不清楚。通常用材料的“堆垛层错能”来表征退火孪晶的形成能力,Ni 和 Al 的层错能相近,但它们的退火孪晶形成能力相差很大。在本研究中,通过实验和分子动力学模拟相结合的方法,我们发现退火孪晶通过 $\Sigma 3\{112\}$ 非共格孪晶界的迁移形成的,其迁移驱动力来源于晶体弹性各向异性引起的孪晶界两侧晶粒之间的弹性应变能不平衡。基于上述发现,我们提出了一个新的退火孪晶形成能力判据:定义为共格孪晶界能量与材料各向异性因子之比,以表示退火孪晶的形成能力(反比关系)。这一新判据很好地解释了实验观察结果,并可推广到零宏观应变形成孪晶。

Z-80

金属固溶强化的电子原子结构起源

高旺

吉林大学

金属固溶强化主要取决于溶质原子和位错的相互作用,溶质原子造成晶格畸变,阻碍位错运动,从而使合金的强度和硬度增加。这一图像在稀合金和多组元合金中都获得了广泛认可,但其电子原子结构起源仍旧存在很大争议。例如,前人模型往往依赖于溶质原子和位错相互作用的获取,且形式随着晶格结构变化而变化;对晶格畸变的作用,主要关注平均晶格畸变的强化作用,而原子级晶格畸变与位错运动的耦

合作用知之甚少。基于紧束缚模型中 d-和 s-带的成键特性，我们提出了新的电子结构描述符来表征溶质原子和位错的相互作用，关键参数是杂质原子的价电子数和电负性，其物理本质来源于悬空键对应的 d-带中心作用，该描述符可以跨越晶格结构准确衡量稀合金和多组元合金的固溶强化参数。另一方面，基于紧束缚模型中表面原子的弛豫特点，我们提出了新的原子描述符去表征多组元合金中原子级晶格畸变，发现给定原子的近邻大原子和小原子个数的比值直接决定了原子级晶格畸变的大小，实现了点到点的晶格畸变的定量预测。据此获得了原子级晶格畸变的解析公式，并且建立了新的近程有序概念——尺寸近程有序，区别于前人提出的化学近程有序。我们发现尺寸近程有序直接决定了晶格畸变对位错运动的钉扎效应，而化学近程有序无法做到这一效应。并且，我们构建的晶格畸变模型可直接确定多组元合金中的固溶强化作用和浓度引起的相变等性质。这些描述符和模型具有稳固的物理基础，为理论和实验设计高强度金属材料提供了坚实的基础。

Z-81

应变状态对 BCC-Fe 表面氢吸附及渗透影响的第一原理研究

曹烁^{*1}、王超明²、杨锐¹、胡青苗¹

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国石油集团工程材料研究院有限公司

氢气储运是连接氢气生产端和需求端的关键桥梁，使用现有的天然气管道运输掺氢天然气使氢运输更具经济性和时效性。然而管线钢的基体及焊接热影响区都存在明显的氢脆敏感性。钢的氢脆行为是氢致解离断裂及氢致局部塑形等多机制协同作用的结果，其中氢在裂纹尖端区域的聚集是金属材料氢脆失效的重要因素。然而，裂尖区域的氢吸附及扩散行为仍缺乏系统研究。本工作采用施加应变的方法模拟 BCC-Fe 裂纹区域的应力状态，对氢分子的解离以及氢原子的吸附、扩散进行第一原理计算。结果表明，裂尖拉应变状态下，Fe 中的氢固溶度增加，从而使氢发生偏聚，诱发解离断裂及局部塑形的发生，使裂纹进一步扩展，提高管线钢的氢脆敏感性；同时，裂纹处表面的氢分子解离及氢原子吸附和渗透都较 BCC-Fe 自由表面更容易，有助于氢通过裂纹向管线钢中渗透，提高管线钢的氢脆敏感性。

Z-82

固体润滑材料反应力场参数开发及应用

王杨

西南交通大学

碳/硅基固体材料在现代科学技术领域中扮演着极为重要的角色，亦具有非常广阔的应用前景。在很多领域中，表面化学反应对碳/硅基固体材料性能具有重要的影响，例如类金刚石薄膜的摩擦磨损、硅晶圆的机械化学抛光等。尽管揭示这些化学反应对材料性能的影响机理十分重要，但这些见解却很难通过实验获得。基于反应力场的分子动力学模拟提供了一种研究原子级详细反应动力学的方法。但是，因为反应力场表达式极为复杂、所涉及的参数个数繁多，目前仍缺少可精确描述碳/硅基材料物理化学性质的泛用反应力场参数。针对此难题，本项研究基于模拟退火算法成功开发了一个适用于 H/C/N/O/Si 体系的反应力场参数集。该参数集涵盖了当前碳/硅基固体材料所涉及的大部分研究目标，能够很好地描述碳/硅基固体与水、氢气分子和氧气分子等常规环境反应物间的化学反应。经验证，该反应力场参数在摩擦化学反应、表面氧化、等离子刻蚀等诸多领域问题中展现出良好的适用性。

Z-83

仿生强初化启发的 Bi₂Te₃ 无机功能半导体塑性行为调控

黄贲

湖北大学

提高无机半导体塑性变形能力对促进功能材料的微型化和柔性化等先进应用意义重大。本工作以 Bi_2Te_3 热电半导体为例, 针对其能够形成可动位错, 但通常室温塑性变形能力欠佳的问题, 基于计算材料力学, 探讨 Bi_2Te_3 改善变形能力的实验进展及相关微观塑性机理。同时, 受天然材料强韧化原理的启发, 从阻尼的角度, 阐明可逆动态键和多尺度缺陷对 Bi_2Te_3 塑性变形行为的影响规律。本工作结合仿生原理与分子模拟方法, 围绕 Bi_2Te_3 塑性行为调控, 为无机半导体结构-功能一体化设计提供新的研究思路。

Z-84

钛合金的固溶强化: 溶质原子偏心占位的影响

喻梓韩^{1,2}、曹烁¹、杨锐¹、胡青庙*¹

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学

经典金属物理理论认为替换金属固溶体中, 溶质原子占据晶格高对称格点位置。但最近的研究表明, 密排六角结构 α 钛中, 某些溶质原子占据偏离高对称格点位置的低对称偏心位置, 并造成剧烈的局域晶格畸变, 可能引起强烈的固溶强化效应。本工作采用弹性偶极子模型, 对比研究了 α 钛中高对称格点占位及低对称偏心占位溶质原子与基面/柱面 $\langle a \rangle$ 位错的相互作用能和作用力, 进而采用 Labusch 模型评估了偏心占位溶质原子产生的固溶强化效果。结果表明, 相较于高对称格点占位溶质原子, 偏心占位溶质原子与位错 (除了基面刃位错) 的相互作用更为强烈, 引起的固溶强化强度增加量增加可达一个数量级以上。

Z-85

稀合金和浓缩合金固溶强化的电子结构起源

李昕

吉林大学材料科学与工程学院

固溶强化是材料强化方法之一, 对合金材料的力学性能有显著影响, 这在很大程度上取决于溶质类型和浓度以及不同的合金组织。然而, 合金种类繁多, 按溶质浓度可分为稀合金和浓缩合金, 按混合熵可分为低熵、中熵和高熵合金, 每种合金受不同固溶强化因素的影响, 表现出其独特的组织和力学性能。巨大的成分空间和复杂的合金类型使得确定固溶强化的构效关系仍然是一个重大挑战。对此, 我们提出了一个本征电子描述符, 仅基于组成元素的价电子数、电负性以及浓度, 从金属成键性质的角度来量化稀合金和浓缩合金的固溶强化电子效应。该描述符可有效地确定纯金属、二元合金、中熵合金和高熵合金的固溶强化效应, 独立于溶质种类和浓度、合金种类 (稀合金和浓缩合金) 以及晶格类型 (面心立方和体心立方)。我们的描述符不仅反映了关键参数-溶质/位错相互作用, 还揭示了全新的物理图像: 金属 d 带的中心和上边缘决定了固溶强化效应。我们的理论框架加深了对固溶强化效应的理解, 并为设计高性能合金提供了物理指导。

Z-86

Different phase transformation behaviors of B2-CuZr crystalline phase and their associated mechanical properties by molecular dynamics using different potentials

Jiaqing Wu, Xiaoling Fu*

Guangdong University of Technology

Metastable CuZr-based alloys have attracted much attention due to their high glass-forming ability and shape memory effect. Many experiments have underscored the pivotal role of the B2-CuZr phase as an effective inclusion to improve both the strength and ductility of metallic glass matrix composites. The improved ductility can be attributed to the dilatation induced by martensitic transformation, while the strengthening effect is owed to the higher strength and hardness of the martensite phase compared to the austenite phase. Well-designed atomistic

simulations can predict the mechanical behavior of materials before experiments and offer sufficient information on the atomic scale. The selection of an appropriate interatomic potential is a primary concern in any atomistic simulation and needs to be carefully considered to ensure reliable results. The uniaxial tensile behavior of B2-CuZr crystalline phase is investigated by molecular dynamics simulations using five typical potentials, namely the potentials developed by Mendelev-2007, Mendelev-2009, Mendelev-2016, Mendelev-2019 and Cheng-2009. The phase transformation behavior during tension, Young's modulus, and yield strength of the simulated samples exhibit variations when different potentials are employed. Notably, only by employing Mendelev-2019 and Cheng-2009 potentials, the strength and Young's modulus of the transformed phase are higher than the untransformed austenite phase, corresponding well with experimental results. This work emphasizes the impact of different interatomic potentials on phase transformation behaviors within a specific simulation context.

Z-87

钢系计算材料方法及应用

邱睿智

中国工程物理研究院材料研究所

钢系材料由于 $5f$ 电子能带的窄带特征、局域-巡游双重特性、电子之间的强相互作用、以及强自旋轨道耦合，因而显现出丰富的物理和化学性质，譬如钢系金属单质的各种低对称性晶体结构等。这些复杂电子特征也使得钢系材料的理论描述和计算模拟极具挑战性。这里我们将介绍在哈伯德修正密度泛函理论 (DFT+ U) 计算方法上所取得的一些进展及其在钢系材料中的应用：(1) 有效相互作用的线性响应理论计算；(2) 钢系元素物理氧化态的评估；(3) DFT+ U 应用中数值亚稳态的规避手段。

Z-88

钷电子结构与性质的理论研究

胡淑贤

北京科技大学

In this talk, we report a comprehensively quantum-chemical study of the electronic structure and properties of bimetallic X-Pu bonds. First, in the mono-carbonyl compounds, the XPuCO structure alternates from cyclic [PuCBO] to linear [AlCPuO] and [GaCPuO] when atomic radii of the group 13 elements increase. A donor-acceptor model is the best description for bonding interactions between X and Pu, that is donation patterns of CBO $\rightarrow$ Pu or XC $\rightarrow$ PuO (X = Al and Ga), and the backdonation patterns of XC $\leftarrow$ PuO. Second, the first ethylene dione (OCCO) compounds of plutonium are found in AlPu(CO) $_n$ ($n = 2, 3$). A direct Ga-Pu single bond is first predicted in the series of GaPu(CO) $_n$, where the bonding pattern represents a class of the Pu $\rightarrow$ CO π back-bonding system. Third, the d-f multiple bond is in sharp contrast with a single bond between plutonium and transition metals.

关键词：钷，电子结构，化学成键

Z-89

钛及钛铝合金固溶体和金属间化合物缺陷性质的 AI 辅助原子尺度模拟

文通其^{*1}、刘安文²、李卓远¹、王锐²、张林峰³、韩健²、王涵⁴、Zhaoxuan Wu²、David J. Srolovitz¹

1. 香港大学机械工程系

2. 香港城市大学

3. 北京科学智能研究院

4. 北京应用物理与计算数学研究所

钛及钛-铝合金表现出由一系列位错和孪晶系统控制的复杂塑性变形，但我们对包括位错核心和孪晶界在内的缺陷性质的理解目前仍不完整且通常只有半定量。在该工作中，我们使用机器学习深度势能(DP)、密度泛函理论(DFT)和线弹性断裂力学方法确定了 HCP 和 BCC 钛以及钛-铝合金中的 HCP 固溶体和金属间化合物相中的位错核心、孪晶和裂纹性质。我们还开发了一个开源、可扩展、云原生的平台 APEX (Alloy Property EXplorer)，以促进材料性质的高通量计算和大原子模型的微调。利用各种计算方法和 APEX 平台，我们计算了 HCP 中的 $\langle a \rangle$ 、 $\langle c+a \rangle$ 、 $\langle c \rangle$ 位错和 BCC 钛中的 $\langle 111 \rangle/2$ 位错的核心结构、临界剪应力和迁移能力。我们发现基面上的裂纹会以脆性模式扩展，这与实验中观察到的解理面一致。我们还分析了 HCP 钛-铝固溶体和 α_2 -Ti₃Al 及 γ -TiAl 金属间化合物在广泛成分和温度范围内的相稳定性、层错和位错核心结构。 γ -TiAl 中 {111} 平面上的 $\langle 110 \rangle/2$ 螺位错核心呈现非平面结构，并且在 HCP 钛-铝固溶体中观察到了溶质铝对 $\langle a \rangle$ 螺位错核心结构的短程有序效应。我们展示了钛及一系列钛-铝合金中缺陷的完整、自洽的模拟结果，并解释了已有关于钛及钛-铝塑性和断裂的实验结果。

Z-90

晶体材料中非晶热传导的调控研究

王学智^{*1}、车军伟²、令狐佳珺¹

1. 长安大学
2. 西安科技大学

具有非晶状热导率的固体晶体材料在热能转换和热管理应用中备受青睐。作者以 HfO₂-Y₂O₃、RETa₃O₉、RE₃TaO₇ 为研究对象，利用原子模拟方法揭示了晶体中非晶状低热导率的物理机理。研究发现，非晶状低热导率主要是由原子间结合力相差较大引起的。这种相差较大的原子键可以极大地软化声子模式，从而抑制声子输运。通过分解声子振动模式，我们发现大多数热量通过扩散模式传输。这些工作对开发设计低导热率的材料有重要意义。

Z-91

DFT+U Study of Plutonium Hydrides with Occupation Matrix Control

Liuhua Xie*, Ruizhi Qiu

China Academy of Engineering Physics

We investigate the structural, magnetic, and thermodynamic properties of plutonium hydrides (PuH₂ and PuH₃) using Hubbard-corrected density functional theory (DFT+U), with Hubbard parameters U derived from linear response calculations. Four exchange-correlation functionals are considered: LDA, PBE, PW91, and PBEsol. To address the issue of metastable states in DFT+U simulations, we employ an occupation matrix control strategy and break structural symmetry. This advanced computational approach establishes that the ground state magnetic order for PuH₂ is antiferromagnetic (AFM) and for PuH₃ is ferromagnetic (FM), consistent with Faraday and NMR experimental results. Using a simplified H-vacancy model, we investigate the AFM-FM transition as a function of hydrogen content and monitor the magnetic moment of the Pu atom. Our model accurately predicts the critical hydrogen content threshold, closely aligning with experimental magnetic susceptibility data. Furthermore, we determine the valence state of the Pu atom in the hydrides to be +3, consistent with NMR experimental observations. Our calculated values for the enthalpy of formation, heat capacity, and entropy are in good agreement with empirical data, thereby validating the robustness of our theoretical framework.

Z-92

Molecular dynamics analysis of the deformation behavior of nanotwinned GaAs during nanoscratching

Zhan Zhang, Tinghong Gao*, Chen Qian, Lianxin Li

Institute of Advanced Optoelectronic Materials and Technology, College of Big Data and Information Engineering,
Guizhou University, Guiyang 550025

Gallium arsenide (GaAs) is an important III-V direct bandgap semiconductor material and generally appears as the zinc-blende structure. Previous studies have investigated the deformation of single crystal GaAs crystals during nanoscratching. This study focuses on the effects of twin boundaries (TBs) on the deformation of zinc-blende materials. Surface/subsurface damage to nanotwinned GaAs (tw-GaAs) during nanoscratching was studied via molecular dynamics. Different scratch velocities and scratch depths were considered. Results show that elastic recovery occurs during nanoscratching. The presence of TB limits the downward expansion of dislocations. Overall, the damage caused to the TB by a shallow scratch is minimal; however, increasing the scratch depth results in irreversible damage to TB. These findings offer new insights into understanding the impact of TB on the deformation behavior of zinc-blende GaAs structures during nanoscratching. Thus, the findings have significant implications for the crystal processing of GaAs.

Z-93

合金元素对纯铁 $\Sigma 3$ (111)晶界氢偏聚影响的第一性原理计算

许泽岷、成林*、夏锴、胡丞杨、吴开明

武汉科技大学

钢铁是最重要、通用性和适应性最强的工程材料，为降低资源、能源消耗，提高力学性能是钢铁材料研发的永恒主题。但一般认为，钢铁材料抗拉强度达到 1000MPa 时容易发生氢致延迟断裂，并且强度越高，通常氢脆敏感性也越高；氢作为宇宙中最丰富的元素，可再生且随时可用，是支持零碳能源战略的清洁灵活的环保能源，因此迫切需要研制储氢、富氢环境中工作的新一代高强抗氢钢材料。钢铁材料中氢的来源主要分为两种：内氢和外氢。内氢指的是材料在加工制造的过程中，不可避免进入到材料体内的氢，主要是生产和制备过程中引入的氢，比如：冶炼或者浇注时，空气中的水蒸气或者与材料接触的器具、炉料中所含水分，这些水在炉中都有可能水解为氢进入钢液。此外，燃料与保护渣中的碳氢化物在受热情况下分解产生的氢也可能进入钢液，给钢材后续的生产制造及使用带来隐患；钢铁材料热加工之后通常会进行酸洗或者电镀，这些过程中也可能引入氢。如酸洗过程中，易发生电化学反应或阴极析氢，从而导致氢原子进入到材料内部；电镀更是与充氢过程类似，易出现氢原子遗留在材料中的情况；氢还可以通过焊接过程渗入材料体内，如高温焊接时气态的氢分子容易发生受热分解成氢原子进入钢中，且不同的焊条导致焊接后的构件中氢含量差距也比较大，不成熟的焊接工艺也会使高温水解的氢原子渗入到材料中去。外氢指的是材料的使用过程或者从服役环境中氢的进入，比如：长期处在 H_2 或者 H_2S 气体环境中（如储氢装置、含氢反应塔等），部分氢分子会发生分解，从而生成氢原子，进而通过吸附扩散等过程进入到材料体内；潮湿环境或者海洋环境内，材料长期接触水分子或者处于阴极保护状态，容易使氢原子进入体内。

当前，金属材料氢脆微观机理以及抗氢脆金属材料设计（特别是钢）一直是材料科学研究领域的重点；氢脆敏感性也是具有优异综合力学性能的先进高强钢（AHSS）在推广使用过程中必须考虑的重要因素。已提出氢脆微观机理包括：氢压理论、氢致表面能降低、氢致弱键理论（Hydrogen enhanced decohesion mechanism, HEDE），氢致局部塑性增强理论（Hydrogen enhanced local plasticity, HELP），氢促进位错发射（Adsorption-induced dislocation emission, AIDE）以及氢致应变诱导空位增强理论（Hydrogen-enhanced and strain-induced vacancies, HESIV）等，但系统研究合金元素与氢之间的相互作用及其钢铁材料氢脆敏感性的影响的工作还较少。

本工作采用基于密度泛函理论的第一性原理方法研究了体心立方纯铁的 $\Sigma 3$ (111)晶界氢偏聚行为以及合金元素的影响。研究发现，每个周期的合金元素的晶界偏聚能与该周期的原子序数呈上凹的类抛物线关系，4d 过渡合金元素表现出更高的平均偏聚倾向。4d 过渡族元素 Mo、Tc、Ru 和 5d 过渡族元素 Ta、W、Re、Os、Ir 不仅可以强化晶界还可以抑制氢在晶界偏聚。通过分析氢与合金元素相互作用起源的化学贡献

和机械贡献, 阐明了合金元素与氢在晶界处偏聚的相互作用的物理本质, 并探索了氢在合金元素影响下晶界偏聚能的合适描述符。该工作可通过理解晶界工程设计高性能抗氢脆钢提供理论基础。

Z-94**氢原子在钛及锆/铪中不同占位行为的电子结构根源**杨帆西^{1,2}、王超明³、曹烁¹、马英杰¹、杨锐¹、胡青苗*¹

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学 材料科学与工程学院
3. 中国石油集团工程材料研究院有限公司

固溶态 H 原子占据密排六角 Ti、Zr、Hf 中的间隙位置。Ti、Zr、Hf 的基态晶格参数接近, 它们的四面体和八面体间隙的相对大小几乎相同。然而, 实验及理论计算均表明固溶 H 原子占据 Ti 中的八面体间隙位置, 但占据 Zr 及 Hf 中的四面体间隙位置。这种不同占位行为的物理根源仍不明确。本工作采用第一性原理方法计算了 H 原子占据 Ti、Zr 和 Hf 不同间隙位置时的溶解热, 结果表明, H 原子占据 Ti 八面体间隙时溶解热低于四面体间隙, 即, 八面体间隙为 H 原子的稳定位置; Zr 及 Hf 中 H 原子占位反之。电子结构分析表明, H 原子在 Ti 和 Zr/Hf 的不同占位行为决定于基体中四面体和八面体间隙位置的相对电荷密度以及氢原子位于不同间隙位置时和近邻基体原子成键的相对强弱, 与间隙大小关系不大。

Z-95**External stress induced novel transformation pathway with reduced lamellar size in γ -TiAl alloys**

Jianwei Li, Dong Wang*

Center of Microstructure Science, Frontier Institute of Science and Technology, State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China.

Reducing the size of the lamellar structures and increasing the number of twin structures are both effective ways to improve the low ductility and poor fracture toughness of γ -TiAl alloys. In this study, by integrating phase field simulations and CALPHAD thermodynamic database, a unique microstructural dependency in response to external stress-aging process is revealed. With the increase of external stress, the size of the lamellar structure initially decreases but then increases, while the number of twin structures initially increases but then decreases, showing nonlinear relationships. An increase in external stress shifts the free energy curves, altering the c (the intersection position between free energy of α_2 and γ), which leads to the nucleation mechanism's change and influences the final microstructure of γ precipitates. Further simulations have shown that the optimal external stress at different Al content shows a linear correlation, which has a fixed value away from c ($\Delta c_{Al} \approx 1.5$ at. %). Deeper analysis indicates that the intriguing variations in the size and twin structures can be attributed to the interplay among the growth rate of existing variants, the competitive nucleation rate of twinned variants and the redistribution of composition under varying external stresses. Our work may offer some new insights into designing refined structures and more twins in γ -TiAl alloys.

Z-96**金属氢化物中氢/氚原子扩散理论计算研究**

俞菲菲

中物院核物理与化学研究所

金属氢化物中氢/氚和氦的扩散特性研究是氢储存、燃料电池等领域的关键问题。氢气被广泛认为是一种清洁能源, 而金属氢化物作为氢储存和释放的潜在载体, 引起了广泛关注。氚作为氢同位素, 它们在金属氚化物中的扩散行为直接影响着储氚材料的性能和可持续性。了解扩散机制、势垒和速率等参数,

有助于深入了解氢在金属氢化物中的运动规律，为设计和改进高效的氢贮存材料提供理论基础。钛、锆等合金具有优良的延展性等诸多特点而被作为典型的储氢材料，储氢过程中氢的扩散以及氢成核会影响合金中沉淀物形成，决定了材料的储氢性能、老化速度以及其它性能的稳定性。然而，类似钛、锆等金属氢/氟化物中氢/氟和氢的扩散机制仍缺乏系统认识，包括晶界扩散、空位效应等。为解决这些问题并为氢能领域的发展提供新的挑战 and 机遇，本论文通过不同的理论研究方法分别计算了钛氢化物体相中和钛氢化物晶界处、锆氢化物体相以及部分金属氢化物中氢原子的扩散行为等。

Z-97

极性旋转双层二维材料中的布洛赫平带

赵兴举

郑州大学

电子的布洛赫平带为凝聚态物理中强关联量子现象的研究提供了新的重要平台。旋转双层石墨烯的魔角机制很好地解释了其莫尔体系中平带的形成，然而对于打破了原胞晶格对称性的二维极性旋转双层体系，其平带形成的物理机制、其与旋转角的依赖关系等关键问题仍需进一步的深入研究。本文运用第一性原理计算和紧束缚近似方法，研究并提出了极性旋转双层体系的非魔角平带机制，即只要旋转角度足够小，体系就会形成平带，而不受魔角的限制。这是由于莫尔超胞中不同原子堆垛引起的价带顶和导带底的脱耦效应造成的 [1]；根据这一平带形成机制，我们预测了一系列具有不同极性的二维旋转体系中电子布洛赫平带的形成 [2]；进而，我们研究了大角度平带的形成，即随着旋转角度的增大，平带从逐渐消失到在 30° 附近重新形成的物理过程 [3]，这一大转角平带体系表现出极强的 HER 催化反应活性。上述研究成果对极性旋转双层二维材料的平带物理及其 HER 活性等实际应有具有重要的科学意义。

[1] Xing-Ju Zhao, Yang Yang, Dong-Bo Zhang, and Su-Huai Wei, Formation of bloch flat bands in polar twisted bilayers without magic angles, Phys. Rev. Lett. 124, 086401 (2020).

[2] Xing-Ju Zhao, Yang Yang, Dong-Bo Zhang, and Su-Huai Wei, Flat bands in twisted bilayers of polar two-dimensional semiconductors, Phys. Rev. Materials 5, 014007 (2021).[3] Xingju Zhao, Simin Wu, and Shunfang Li, Large magic angle flat bands in twisted bilayer SiC, in preparation.

Z-98

二维过渡金属二硫族化合物中伊辛超导电性及其调控的计算研究

司晨

Beihang University, China

寻找和设计具有高超导转变温度和高临界磁场的超导材料一直是材料科学和凝聚态物理领域的重要研究课题。近年来，二维伊辛超导体的发现是超导领域的一个重要突破。在二维伊辛超导体中，库珀对的自旋被固定在平面外方向，因此，能够抵抗远超泡利极限的平面内上临界场。然而，目前的已发现的伊辛超导体还比较少，而且主要由重元素组成，超导转变温度普遍非常低。本报告将介绍我们最近在二维过渡金属二硫族化合物的伊辛超导电性及其调控方面取得的一些新进展：（1）我们发现对单层 NbSe₂ 进行表面氟化，能够抑制单层 NbSe₂ 中的电荷密度波，并在费米面附近引入范霍夫奇点，从而显著地增强了电子-声子耦合作用，进而大大提高了单层 NbSe₂ 的超导转变温度和平面内上临界场；（2）我们发现单层 HfTe₂ 在电子掺杂之后，电荷密度波消失，伊辛超导电性出现。不同于单层 NbSe₂ 中由于自旋-谷锁定导致的伊辛配对，HfTe₂ 中的伊辛配对来源于自旋-轨道锁定。

Z-99

插层构筑设计 MA₂Z₄ 材料中的电荷密度波

王磊

二维电荷密度波材料，由于其对费米面嵌套和电声耦合的双重要求，难以在新材料体系中复制出同样的电荷密度波畸变。该报告中，我们通过引入插层构筑方法，在复制材料晶体场的同时，可以调控出相似的费米面轮廓，使得 MA2Z4 材料表现出与过渡金属硫族化合物相似的电荷密度波性质。基于以上相似性，我们构建了统一的相图，并且发现了新的“大卫星”电荷密度波材料。

Z-100**智能驱动的新型金属超氢化合物超导材料理论设计**孙远慧¹、苗茂生^{*2}

1. 苏州实验室

2. 加州州立大学北岭分校

超导材料在理论和应用方面价值巨大，提高超导转变温度是该领域一致的奋斗目标。近年来，在高压强技术帮助下，一类超氢化合物材料相继创造超导转变温度的新记录。例如，理论预测的 LaH10 材料被实验合成并证实具有高达 260 K 超导转变温度，激发了科研人员在金属超氢化合物中寻找高温超导体的热情。然而，在对几乎所有的二元金属超氢化合物（MHn）体系开展理论研究之后，领域内仍未形成理解该类材料稳定机制的普适性理论，导致理论设计过程效率较低。通过对金属超氢化合物结构拆分后得到的金属晶格和氢晶格进行分析，发现金属晶格间隙处存在强电子占据（准原子），其极值点位置刚好与氢晶格原子的分布位置重合，二者共享准原子从而降低体系能量。我们将该理论融入智能算法，从百万量级的结构空间中筛选出 31 种新型金属超氢化合物，并发现实验合成证据。此外，为验证该方法的有效性，申请人专门针对复杂结构势能面开展研究，超过 80% 的新预测结构原胞中包含 50 个以上原子，这是传统方法（原胞少于 20 个原子）几乎无法探索的结构相空间。该方法也为设计三元金属超氢化合物材料提供新思路。

Z-101**How to design topological superconductors from ab initio calculations**

Gang Xu*

Huazhong University of Science and Technology

Topological superconductor (TSC) design and modulation is one of the most important but challenging task for its great potential in the topological quantum computations. In this talk, taking FeSe_{0.5}Te_{0.5} and PdBi₂Te₄ as example, I will introduce a new paradigm to design TSC in the ideal superconducting topological metal (SCTM). In 2016, we innovatively propose a new scheme to realize TSC in ideal SCTM, which host the inverted band structures and superconductivity simultaneously. The TSC properties of FeSe_{0.5}Te_{0.5}, as well as Majorana zero modes (MZMs) at its end of vortex line, are calculated for the first time, which are confirmed by experimental observations in 2018. Recently, we propose a new strategy to design the ideal SCTMs by intercalating superconducting units PdTe (or PdTe₂) into topological insulator Bi₂Te₃, and develop a general program to calculate the TSC spectrum and its topological invariant from ab initio calculations. Our results predicts that PdBi₂Te₄ and PdBi₂Te₅ are experimentally synthesizable and ideal SCTMs, which host both the topological surface states at the Fermi level and superconductivity at 3.11 K and 0.57 K respectively. Then the chiral TSC phases are confirmed under our program for the slab calculations by incorporating topological surface states with Zeeman effect. Our results pave a new way to realize TSC and MZMs in a large class of materials and provide a general tool to design and modulate the TSC system from ab initio calculations.

Z-102**Light-induced ideal Weyl semimetal in HgTe via nonlinear phononics**

Peizhe Tang*,

¹ School of Materials Science and Engineering, Beihang University

Interactions between light and matter allow the realization of out-of-equilibrium states in quantum solids. In particular, nonlinear phononics is one of the efficient approaches to realizing the stationary electronic state in non-equilibrium. Herein, by using extended ab initio molecular dynamics, we identify that long-lived light-driven quasi-stationary geometry could stabilize the topological nature in the material family of HgTe compounds. We show that coherent excitation of the infrared-active phonon mode results in a distortion of the atomic geometry with a lifetime of several picoseconds. The induced four Weyl points are located exactly at the Fermi level in this non-equilibrium geometry, making it an ideal long-lived metastable Weyl semimetal. We propose that such a metastable topological phase can be identified by photoelectron spectroscopy of the Fermi arc surface states or ultrafast pump-probe transport measurements of the nonlinear Hall effect.

Z-103

Topological and excitonic states in Ta₂Pd₃Te₅

王志俊

中国科学院物理研究所

Band topology and many-body correlations are prominent topics in the field of condensed matter physics. In this talk, I will be discussing the topological states in the Ta₂Pd₃Te₅-family materials. These van der Waals (vdW) layered compounds can be easily exfoliated, and the Density Functional Theory (DFT) calculations reveal that Ta₂Pd₃Te₅ is a near-zero-gap semimetal. Upon the inclusion of electron-hole interactions, an excitonic insulating state emerges. Our findings are consistent with the observed gap in the angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES), which varies with temperature and pumping frequency. We propose that Ta₂Pd₃Te₅ is an excitonic insulator without undergoing any structural phase transition.

Z-104

节线半金属 MgB₂ 水环境下发生吸附后拓扑表面态的变化研究

王长昊*、朱庞栋、王如志

北京工业大学

拓扑半金属，作为一种独特的拓扑电子态，近年来因其固有的拓扑特性和潜在的器件应用而备受研究关注。先前人们对拓扑材料表面态的研究主要集中在理想的纯净表面，而对材料表面吸附分子后的表面态变化研究较少。本工作基于第一性原理计算，采用以 Mg/B 原子为表面终端的平板模型来模拟 MgB₂ 表面。我们研究了氢原子（H）、氢氧（OH）和水（H₂O）在 MgB₂ 表面的吸附，以观察表面能带的变化。结果表明，提供拓扑态的表面原子的 Bader 电荷转移值是评估吸附后拓扑表面态变化的关键指标。本工作研究结果为不同吸附物对拓扑表面态的影响提供了系统性认识，也为拓扑材料的实际应用提供了理论支撑，并揭示了拓扑材料潜在的器件应用。

Z-105

H 原子吸附对 MB₂ (M=Al、Mg) 节线半金属拓扑非平凡表面态的影响

岳秦池、彭博、王长昊*、王如志

北京工业大学

MB₂ (M=Al、Mg) 型拓扑节线半金属材料具有独特的拓扑表面态 (TSSs), 其在高温超导, 光子晶体等领域具有潜在的应用前景。在应用领域中, 暴露面及该暴露面所提供的拓扑非平庸表面态是决定实际应用性质的关键。因此, 本文首先对两种 MB₂ (M=Al、Mg) 型拓扑节线半金属材料构建了表面模型, 通过改变 H 原子到表面的距离, 探究 H 原子吸附对拓扑非平凡表面态的影响以及对具有鲁棒性的表面态的“破坏”。研究结果表明多层 MgB₂ 模型的非平凡表面态出现了对称中心的转变, 以及 AlB₂ 模型提供非平凡表

面态的能带的有序下移。H 原子吸附过程中拓扑表面态并未被完全破坏,证明了非平凡拓扑表面态的鲁棒性,并给出电子扰动与拓扑非平凡表面态相互作用的物理模型。本研究结果为薄膜拓扑节线半金属材料在实际中的应用提供了可参考的物理模型。

Z-106

晶体变形对自旋-谷相互作用和拓扑相变的影响

孙振宁*

深圳大学物理与光电工程学院

自旋-谷耦合态的研究对于推进自旋电子学和谷电子学的融合具有重要意义。本报告以具有自发磁性和谷对比物理的二维过渡金属体系 VSi_2X_4 ($\text{X} = \text{N}, \text{P}$) 为平台,系统研究了其自旋与谷的耦合效应与拓扑相变。首先,通过二阶微扰理论解释了体系的磁各项异性,并确认对应的主要贡献轨道。接着,通过有效自旋-轨道耦合哈密顿量模型和第一性原理计算,展示了三棱柱晶体场下非简并 d 轨道导致的自旋-谷极化的一般物理图景。在关联性研究中,确认了自旋-谷极化的耦合关系及其应用潜力。进一步,通过配位场分析和晶体形变揭示谷极化翻转和非平衡拓扑相变的机理。同时,我们发现单谷翻转会导致陈数为 1 的非平庸拓扑相。对 VSi_2X_4 结构的本征谷极化行为、自旋-谷耦合效应与谷调控的相关研究,丰富了自旋-谷耦合效应及其调控的科学认知,为探索和设计自旋电子学和谷电子学器件中的谷极化拓扑和输运提供了新的视角和方法。

Z-107

理论探究稀土和过渡金属掺杂对 ZrO_2 表面能和功函数的影响

李兆轩、王薇、吴猛、金华、许伟伟*

厦门大学

降低材料功函数(Φ)被认为是激发电子蒸腾冷却(ETC)热防护机制,解决高超声速飞行器热障问题的有效途径。以往研究表明稀土氧化物掺杂阴极材料钨能有效提高其热电子发射能力,降低材料功函数。然而,目前有关掺杂对超高温隔热材料功函数的影响的研究很少。在本研究中,我们运用第一性原理全面研究了掺杂元素对 ZrO_2 基体的表面稳定性、功函数和电子结构的影响,有效缩短了提高基于 ETC 机制的 $\text{ZrB}_2\text{-SiC}$ 隔热材料在超高温下的冷却效率的化学搜索空间。对 $\text{ZrO}_2(101)$ 表面掺杂多达 22 种元素,其中包括全部镧系元素(LA)和部分过渡金属(TM)。结果表明,虽然镧系和过渡金属元素的掺杂降低了表面稳定性,但适当增加环境氧浓度可以提高表面稳定性。但过高的氧浓度会导致镧系元素和过渡金属掺杂 $\text{ZrO}_2(101)$ 表面的不稳定性。镧系元素中的 La、Ce 和 Pr 显著降低功函数,而 Yb 和 Lu 则相反。对于过渡金属元素, Nb、Ta 和 V 降低 Φ , 而 Sc、Ti 和 Y 则产生相反的效果。考虑到 ETC 材料对低功函和高熔点特性的需求, Ta、Nb 和 V 是降低 ZrO_2 功函数,作为 ETC 隔热机制的最佳候选掺杂元素。通过对电子结构的分析,可以从化学键和电荷密度等角度追溯合金元素的影响机理。

Z-108

二维材料中极化多态的设计与调控研究

陈明星

湖南师范大学

铁电材料在构筑低功耗、高速度的铁电随机存储器和铁电场效应管等方面有良好的应用前景。二维层状铁电材料能够在单层极限仍然保持其中的铁电性质,有利于铁电存储器件的小型化,从而提升存储密度。发展多态存储将进一步推动超高密度信息存储技术的发展。本报告将介绍我们近期在二维铁电材料中构筑极化多态的进展,重点介绍极化多态的构筑原理和调控规律。我们以 CuInP_2S_6 和 $1\text{T}'\text{-TMD}$ 薄膜为例,展示通过层自由度和极化自由度耦合诱导极化多态的思想,其中 CuInP_2S_6 双层 $1\text{T}'\text{-TMD}$ 双层分别能够实现

超越双稳态的极化 5 态和 6 态，而其三层分别可以具有 7 个和 8 个极化态，部分结果已经得到实验验证。

参考文献:

- [1] Chuhan Tang, Zhiqiang Tian, Tao Ouyang, Anlian Pan, Mingxing Chen*, Polarization multistates in composite ferroelectrics, arXiv:2403.11813
- [2] Guoliang Yu, Shengxian Li, Anlian Pan, Mingxing Chen*, Zhenyu Zhang, Polarization multistates in antiferroelectric van der Waals materials, arXiv:2312.13856
- [3] Tao Li, Yongyi Wu, Guoliang Yu, Shengxian Li, Yifeng Ren, Yadong Liu, Jiarui Liu, Hao Feng, Yu Deng, Mingxing Chen*, Zhenyu Zhang* and Tai Min*, Realization of sextuple polarization states and interstate switching in antiferroelectric CuInP2S6, Nature Communications 15, 2653 (2024).

Z-109

HfO2 中空穴稳定的铁电相与 MnBi2Te4 中层间电极化决定的磁序与 拓扑输运特性

曹腾飞

西北工业大学

Ferroelectric materials have a spontaneous electric polarization that can be switched between two or more orientations with an applied electric field. They enable devices such as nonvolatile random-access memories, ferroelectric field-effect transistors, and ferroelectric tunnel junctions. The discoveries of ferroelectricity in HfO₂, and sliding ferroelectricity in Van der Waals (VDW) materials are both attractive as they can be integrated with Si relatively easily, and provide an extra avenue to tailor magnetic orders as well as topological transport properties. However, the ferroelectric phase of HfO₂ is metastable, and it can only be stabilized on proper substrates or under specific growth conditions. Here, we will show that charge redistribution in HfO₂ can efficiently modulate the relative stabilities of its polar and non-polar phases, and hole doping contributes to stabilize polar phase of HfO₂. Furthermore, we will show that out-of-plane polarization that can be achieved in VDW materials through interlayer sliding. Even the sliding polarization is relatively weak (0.01 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$), it determines the direction anomalous hall current in even-layer MnBi₂Te₄, and can make odd-layer MnBi₂Te₄ magnetic topological insulator or trivial insulators.

1. Tengfei Cao*, Guodong Ren, Ding-Fu Shao, Evgeny Y. Tsymbal *, and Rohan Mishra*, Stabilizing polar phases in binary metal oxides by hole doping, Phys. Rev. Mater. 7, 044412 (2023).
2. Shu Shi#, Haolong Xi#, Tengfei Cao#, Weinan Lin, Zhongran Liu, Jiangzhen Niu, Da Lan, Chenghang Zhou, Jing Cao, Hanxin Su, Tieyang Zhao, Ping Yang, Yao Zhu, Xiaobing Yan*, Evgeny Y. Tsymbal*, He Tian* & Jingsheng Chen*, Interface-engineered ferroelectricity of epitaxial Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂ thin films, Nat. Commun. 14, 1780 (2023).
3. Tengfei Cao*, Ding-Fu Shao*, Kai Huang, Gautam Gurung, Evgeny Y. Tsymbal*, Switchable Anomalous Hall Effects in Polar-Stacked 2D Antiferromagnet MnBi₂Te₄, Nano. Lett. 23, 3781 (2023).

Z-110

硫族二维材料的接触工程与多铁隧道结

萨百晟

福州大学 材料科学与工程学院

The flourish of two-dimensional (2D) materials provides a versatile platform for building high-performance electronic devices in the atomic thickness regime. However, the presence of the high Schottky barrier at the interface between the metal electrode and the 2D semiconductors, which dominates the injection and transport efficiency of carriers, always limits their practical applications. Herein, we show that the Schottky barrier can be controllably lifted in the heterostructure consisting of Janus MoSSe and 2D vdW metals by different means. Based

on density functional theory calculations and machine learning modelings, we studied the electrical contact between semiconducting monolayer MoSSe and various metallic 2D materials, where a crossover from Schottky to Ohmic/quasi-Ohmic contact is realized. We demonstrated that the band alignment at the interface of the investigated metal-semiconductor junctions (MSJs) deviates from the ideal Schottky–Mott limit because of the Fermi-level pinning effects induced by the interface dipoles. Besides, the effect of the thickness and applied biaxial strain of MoSSe on the electronic structure of the junctions are explored and found to be powerful tuning knobs for electrical contact engineering. It is highlighted that using the sure-independence-screening-and-sparsifying-operator machine learning method, a general descriptor $W_M^3/\exp(D_{\text{int}})$ was developed, which enables the prediction of the Schottky barrier height for different MoSSe-based MSJ. These results provide valuable theoretical guidance for realizing ideal Ohmic contacts in electronic devices based on the Janus MoSSe semiconductors.¹

van der Waals (vdW) multiferroic tunnel junctions (MFTJs) based on two-dimensional materials have gained significant interest due to their potential applications in next-generation data storage and in-memory computing devices. In this study, we construct vdW MFTJs by employing monolayer Mn_2Se_3 as the spin-filter tunnel barrier, TiTe_2 as the electrodes and In_2S_3 as the tunnel barrier to investigate the spin transport properties based on first-principles quantum transport calculations. It is highlighted that apparent tunneling magnetoresistance (TMR) and tunneling electroresistance (TER) effects with a maximum TMR ratio of 6237% and TER ratio of 1771% can be realized by using bilayer In_2S_3 as the tunnel barrier under finite bias. Furthermore, the physical origin of the distinguished TMR and TER effects is unraveled from the $k_{\parallel}$ -resolved transmission spectra and spin-dependent projected local density of states analysis. Interestingly, four distinguishable conductance states reveal the implementation of four-state nonvolatile data storage using one MFTJ unit. More importantly, in-memory logic computing and multilevel data storage can be achieved at the same time by magnetic switching and electrical control, respectively. These results shed light on vdW MFTJs in the applications of in-memory computing as well as multilevel data storage devices.²

Reference:

[1] Nanoscale Horiz., 2024, 9, 264-277

[2] Nanoscale, 2024, 16, 1331-1344

Z-111

HfO2 基铁电薄膜力电调控和极化翻转机制研究

杨琼

湘潭大学材料科学与工程学院

铁电电子器件的高密度和低成本需求，要求铁电薄膜具有较好可微缩性和与半导体工艺的兼容性。近年，与 CMOS 工艺兼容、小尺寸下具有较好铁电性的 HfO2 基铁电材料的出现，有望突破铁电器件的发展瓶颈。我们针对 HfO2 基铁电薄膜的铁电性起源和调控机理不明确的问题，主要基于第一性原理研究方法，研究了缺陷、应变、电场和尺寸效应等对氧化铪铁电性的多因素诱导和调控机制，同时也揭示了 HfO2 基铁电材料的电畴结构和极化翻转规律，预测了 HfO2 铁电和铁磁薄膜的界面磁电耦合效应。研究结果较好地解释了实验规律，对理解新型 HfO2 基铁电薄膜的铁电性起源和调控机理、促进新型高密度铁电器件的发展具有重要意义。

关键词：HfO2 铁电；铁电相变；极化翻转；磁电耦合；第一性原理

Z-112

通用力场分子动力学预测螺旋铁电及巨压电

刘仕

西湖大学理学院物理系

基于深度神经网络的深度势能可以通过统一自洽的方式获得各类体系的力场，所获得的力场具有密度

泛函的精度以及接近传统力场的计算效率,有望解决精度与效率不可兼得的困境。我们采用模块化开发深度势能的策略,开发了能描述涵盖大量元素的钙钛矿氧化物的通用力场。基于该通用力场,我们通过大尺度分子动力学模拟发现,在适当的应变调控下,PbTiO₃ 自支撑薄膜可以实现与螺旋磁性类似的螺旋铁电性,即相邻电偶极子以螺旋模式进行排列。同时,螺旋铁电的压电响应远高于单畴。这种新的铁电拓扑结构有望为探索手性声子动力学和偶极间的 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用提供新的思路。

Z-113

基于共存铁电玻璃态的无铅钙钛矿陶瓷压电及储能特性优化模拟及实验研究

张乐

西安交通大学

无铅钙钛矿材料因其优异的压电铁电响应及环境友好特性在驱动器、换能器、水声及医用超声、脉冲电容器等领域具有广阔的应用前景。如何简便且有效地提高其压电及铁电储能特性已成为了领域重点关注的前沿热点问题。

我们在这里首先基于相场模拟结果提出了一种铁电玻璃态与准同型相界(MPB)多相共存概念耦合的新策略,不仅大幅提升了无铅钙钛矿陶瓷的电致应变性能,在 Mn 掺杂(Bi_{0.5}Na_{0.5})TiO₃-BaTiO₃ 无铅陶瓷中获得了 0.55%的大可逆电应变(S_{max})和 917 pm/V 的压电常数 d₃₃* (S_{max}/E_{max}),同时可用于将 Zr 掺杂 BaTiO₃ 陶瓷的静态压电响应 d₃₃ 大幅提高到约 610 pC/N。值得关注的是通过构建共存铁电玻璃态的技术路径还可以大幅降低滞后的同时提高其电致应变及铁电储能特性。以上模拟及实验成果表明了共存铁电玻璃态具有优化无铅钙钛矿陶瓷压电及储能特性的巨大潜力。相关数据已发表在 Advanced Functional Materials 2020, 2004641, Nano Energy 2021, 90, 106519, ACS Appl. Mater. Interfaces 2022, 14, 1434–1442 及 ACS Appl. Mater. Interfaces 2024, 16, 9, 11497–11505 等一系列论文上。

Z-114

HfO₂ 薄膜中额外空穴稳定铁电相的第一性原理研究

景熙翔

西北工业大学

在铅基铁电薄膜的研究中,如何稳定其铁电相是当前基础的热点问题。目前稳定铅基薄膜铁电相的方法包括应力因素、电荷交换以及元素掺杂等。本工作基于第一性原理计算系统研究了应力、元素掺杂以及界面效应对 HfO₂ 铁电相的稳定作用。我们的研究表明 HfO₂ 中不同类型的氧空位与空穴的耦合作用对 HfO₂ 的铁电相具有不同的调控效应。应力、氧空位等因素仅能减小 HfO₂ 铁电相与基态顺电相的能量差,并不能改变铁电相-顺电相的相对稳定性,HfO₂ 铁电相在不同的应力与氧空位浓度下仍为能量上的亚稳态结构。相比而言,体系中额外空穴的引入则能够有效稳定 HfO₂ 的铁电相。我们对其中机理做了详细的理论解析,并强调额外空穴在稳定铁电相中的重要作用;最后我们对 HfO₂ 各个相之间的转变势垒进行了模拟计算,结果表明不论哪种转变路径,空穴均能够减小顺电相到铁电相的转换势垒。

Z-115

几何铁电性材料中强磁电耦合性的探索

逯学曾

东南大学物理学院

寻找高温且具有强磁电耦合性的强铁电铁磁单相多铁材料是多铁领域的研究难点。通过几何铁电机理,科学家克服了材料中铁电性和磁性难以共存的困难,实现了室温铁电和弱铁磁的准二维钙钛矿氧化物。但在几何铁电材料中实现电控磁的强磁电耦合性仍然是一个难题。我们首先通过第一性原理计算发现了“杂化非本征反铁电性”和反常的外延应力诱导的铁电-反铁电相变,提出了基于相变产生的磁电耦合机制。近期与实验合作,利用 X 射线、中子衍射技术和第一性原理计算发现了第一个全无机钙钛矿卤化物多铁材料,并实现了之前所预测的一种相变产生的磁电耦合机制。同时,发现了电控、磁控以外的第三种多铁性调控形式:温控可逆相变实现的多铁性调控。基于温控可逆相变,理论工作通过分析铁电畴之间、反铁电畴之

间的对称性关系以及计算预测了电场调控弱铁磁方向的反转，为准二维钙钛矿材料中进一步实现电场调控铁磁性提供了新方向。

Z-116

范德华多铁异质结中的磁斯格明子调控

侯玉升

中山大学物理学院

磁斯格明子是一种受拓扑保护的、具有涡旋磁结构的准粒子，具有易操控、尺寸小、驱动速度快等优点，是未来自旋电子学存储和逻辑运算器件的理想信息载体。对磁斯格明子高效地、精准地操控是其在实际器件应用中的关键。但是，这种操控仍然面临着极大的挑战。在该报告中，我首先介绍磁斯格明子以及其实现的传统方案。然后，讨论我们在二维范德华 Janus 铬基磁性单层中发现的高温铁磁以及这类体系中由外磁场诱发的磁斯格明子。在此基础上，介绍我们在范德华多铁异质结 $\text{CrSeI/In}_2\text{Te}_3$ 中发现的由铁电极化翻转诱发的磁斯格明子和高温铁磁之间的转换，并给出该转换的物理机制以及类似多铁异质结中出现磁斯格明子的普适描述符。最后，展望二维磁性体系中磁斯格明子未来的研究方向！

Z-117

低维磁性材料的层/簇间磁耦合调控

王聪*、季威

中国人民大学

低维磁性材料在外场调控、测试表征和器件小型化等方面具有优势，为基础研究及其潜在自旋电子学应用提供了新材料平台。寻找合适的方式调控低维磁性是当下兼具科学意义与应用前景的重要问题。过去，人们通常认为二维材料层间为范德瓦尔斯(vdW)相互作用主导，显著低估了层间耦合对材料电子结构和磁性的调控作用，理解层间磁耦合机制有助于发现低耗、高速的新颖磁性调控方式。因此我们选取二维磁性材料 MnSe_2 等为代表，探索了层间耦合与应变等手段对磁基态与易磁化轴方向的调控，发现二维磁性材料的层数和层间堆叠结构（平行方向）等自由度都可以有效调控其宏观磁性。

Z-118

1T'-FeSe₂ 单层材料的结构预测，磁性相变与金属-拓扑绝缘体转变

明星*、阮倩莲

桂林理工大学

预测了具有 1T'结构的 FeSe_2 单层材料并系统的研究了其结构、稳定性、电子结构和磁性。发现它具有二聚的 Fe-Fe 键和罕见的 1T'结构，1T'- FeSe_2 单层具有优越的稳定性和铁磁性，且其电子结构与磁结构密切相关。单层 1T'- FeSe_2 表现出非常复杂的磁晶各向异性，这可能是由于金属电子结构的费米表面发生了强烈的变化。通过蒙特卡罗模拟发现，1T'- FeSe_2 单层的居里温度高达 400 K，当温度升高到居里温度或低于居里温度时，1T'- FeSe_2 单层的导电性可以从金属态切换到绝缘体，反之亦然。因此，1T'- FeSe_2 单层可以作为纳米尺度的温度控制开关。发现拉伸应变可以调控 1T'- FeSe_2 单层材料的晶体结构、磁性、电子结构和拓扑性质。在 1T'- FeSe_2 单层中可以实现铁磁-反铁磁 (FM-AFM) 磁性相变与金属-绝缘体转变并存，以及 AFM 平庸绝缘体向拓扑绝缘体的转变，其中两种磁性状态、导电状态和拓扑状态可以可逆的来回切换，这归因于二聚化的 Fe-Fe 键断裂导致的结构转变所产生的非晶态对称性。

Z-119

二维非范德华交错磁性半导体 $\text{FeX}(\text{X}=\text{S}, \text{Se})$ 中的反常磁热效应

刘芹茜

潜在的庞大二维非范德华磁体数据库不仅可以扩展低维自旋电子器件的新应用方向,而且能够出现许多新奇的物理现象。基于第一性原理计算,预测了两个二维交错磁性半导体 $\text{FeX}(\text{X} = \text{S}, \text{Se})$ 。二维 FeX 具有面外的磁各向异性,它们自旋子晶格中的旋转对称操作可以打破有效的时间反演和空间反演对称性,使 k 空间中出现了非零的贝里曲率。二维 FeX 具有与铁磁体一样的自旋极化行为,并在其中观测到反常霍尔效应, FeS 和 FeSe 的反常霍尔电导率分别为 $249 \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ 和 $143 \Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ 。同时,二维 FeX 中的 Fe 原子形成了具有几何阻挫的自旋晶格。在三角形自旋晶格中 J_1 路径中的反铁磁交换作用和 J_3 路径中的铁磁交换作用间的动态竞争引起了体系中自旋的扰乱,从而表现出具有正磁熵变($1.7 \sim 8.2 \text{ mJkg}^{-1}\text{K}^{-1}$)的反常磁热效应。该工作表明,二维非范德华磁性材料可以实现传统二维磁体无法实现的交变磁性,有望在其中找到新奇的物理现象,为研发新型低维制冷提供思路。

Z-120

从 MXenes 到 XMenes: 探索新的二维铁磁材料

唐佳伟¹、孙维威^{*2}、孙立涛¹

1. 东南大学 电子科学与工程学院 微电子机械系统教育部重点实验室
2. 东南大学 物理学院 量子材料与器件教育部重点实验室

二维 MXenes 在结构上的堆叠反转衍生出一类新的 XMenes 层状材料,开拓出一系列新的探索空间。在本工作中,利用密度泛函理论和蒙特卡洛计算对 XMene 硼化物(FeB , CoB 和 IrB)的磁性进行全面调查,发现具有四方晶格的 FeB 单层是一种铁磁性金属,具有面外易磁化轴,磁各向异性能约为 $416.6 \mu\text{eV}/\text{Fe}$,居里温度高达 425 K ,显著高于目前大多数过渡金属硼化物单层。 FeB 的长程铁磁序是由相邻铁原子之间的直接交换和超交换相互作用的耦合所驱动的。此外, FeB 被证实具有温度依赖的自旋过滤效应,在自旋热电子领域具有广阔应用前景。这些基于 XMenes 的新发现,不仅丰富了二维过渡金属硼化物的多样性,同时也为量子 and 自旋电子器件的发展提供了新的可能。

Z-121

铁镍因瓦合金非共线磁结构中磁无序诱导的纵向自旋衰减现象

黄建、吴维康、李辉*

山东大学

在 $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$ 合金中观察到的因瓦效应源于其复杂的磁性,有证据表明非共线磁结构对其低膨胀特性有重大影响。本工作采用原子自旋动力学和约束密度泛函理论研究了 $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$ 合金非共线磁结构(包括取向紊乱和磁矩长度)对合金平衡体积的影响。结果表明,小体积 $\text{Fe}_{65}\text{Ni}_{35}$ 合金中的非共线磁结构可能归因于复杂的原子间磁交换相互作用,尤其是来自更远近邻原子间负交换相互作用的竞争。然而,忽略磁矩大小波动的非共线取向无序,反而会增强因瓦合金的晶格热膨胀。由磁无序引起的纵向自旋衰减(即磁矩长度的减小)是因瓦效应起源的关键。最后,利用 Debye-Grüneisen 模型评估了因瓦合金的异常热膨胀行为。这项研究进一步丰富了因瓦效应的理论,并为因瓦合金的实验探索开辟了一条新的道路。

Z-122

Nonvolatile Multistate Manipulation of Topological Magnetism in Monolayer CrI_3 through Quadruple-Well Ferroelectric Materials

李佩璇

中国科学院物理研究所

Nonvolatile multistate manipulation of two-dimensional (2D) magnetic materials holds promise for low

dissipation, highly integrated, and versatile spintronic devices. Here, utilizing density functional theory calculations and Monte Carlo simulations, we report the realization of nonvolatile and multistate control of topological magnetism in monolayer CrI_3 by constructing multiferroic heterojunctions with quadruple-well ferroelectric (FE) materials. The $\text{Pt}_2\text{Sn}_2\text{Te}_6/\text{CrI}_3$ heterojunction exhibits multiple magnetic phases upon modulating FE polarization states of FE layers and interlayer sliding. These magnetic phases include Bloch-type skyrmions and ferromagnetism, as well as a newly discovered topological magnetic structure. We reveal that the Dzyaloshinskii–Moriya interaction (DMI) induced by interfacial coupling plays a crucial role in magnetic skyrmion manipulation, which aligns with the Fert–Levy mechanism. Moreover, a regular magnetic skyrmion lattice survives when removing a magnetic field, demonstrating its robustness. The work sheds light on an effective approach to nonvolatile and multistate control of 2D magnetic materials.

Z-123**TBD**

陈时友
复旦大学

Z-124**外场下半导体中的物态调控**

黄兵
北京计算科学研究中心

半导体的器件应用起源于外场对其电子态和自旋态的精细调控，落地于能量转换和传输等众多应用场景。在本报告，我将介绍我们在外场下半导体中物态调控方法做的一些工作。首先，我们探索了光场下电子激发过程中的非线性响应及其调控机制。其次，我们进一步研究了外场下相互作用电子的集体激发及其基本物理规律。最后，我们探索了外场下低维半导体中相互作用自旋的集体演化方式。总之，我们的研究为理解外场下半导体中的物态演化提供了新的思路。

Z-125**亚氧化钛超快可逆固固相变的机器学习分子动力学研究**

刘培涛*
中国科学院金属研究所

固固相变普遍存在于自然界中，通常可分为位移型相变和重构型相变两种类型。与位移型相变相比，重构型相变因化学键断裂而需要克服较大的能垒，常表现出缓慢的相变动力学。亚氧化钛 Ti_3O_5 的 β 相与 λ 相之间的转变是一种典型的一阶重构型固固相变，然而却表现出反常的超快可逆动力学特性。但是，现有的实验技术因缺乏足够的空间和时间分辨率，很难捕捉到超快相变过程中的演化信息，而原子尺度模拟固固相变则需要大体系、长时间尺度动力学的精确描述。为了解决这个难题，我们发展了动态主动机器学习及矩张量势函数模型，结合先进增强采样技术，为亚氧化钛 Ti_3O_5 体系开发了精度与效率兼顾的矩张量机器学习势。基于该机器学习势，计算获得了与实验相符的温度-压力相图，通过大规模、长时间尺度的原子模拟，成功揭示了 Ti_3O_5 的 β 相至 λ 相独特的面内形核、借助亚稳中间相的逐层面外扩展的多步相变动力学机制。

Z-126**二维金属-无机框架材料的设计及合成**

徐虎

南方科技大学

设计新型量子材料对于推动材料科学与和信息科学等领域的发展具有重要的战略意义。本报告将以磷原子在金属衬底上的生长为核心介绍二维金属-无机框架材料。首先探讨了磷在 Au(111)衬底上的生长行为,并详细阐述了相应表面原子结构的确定方法。此外,还讨论了磷在 Pt(111)衬底上的生长及框架结构。并进一步拓展了对衬底影响二维材料形成机制的理解。最后,将探讨设计更多二维金属-无机框架材料的策略。

Z-127

电子输运的超快速第一性原理计算方法李圳^{*1,2}、Patrizio Graziosi³、Neophytos Neophytou²

1. 北京航空航天大学, 材料科学与工程学院, 北京, 100191

2. School of Engineering, University of Warwick, Coventry CV4 7AL, United Kingdom

3. Institute of Nanostructured Materials, CNR, Bologna 40129, Italy

The computational prediction of electronic transport properties in materials with complex band structures has gained significant attention in recent years. The relaxation time is strongly dependent on factors such as material composition, carrier concentration, temperature, and electronic structure, whose omission can lead to significant uncertainties in the calculated transport properties. Full ab initio calculations such as using EPW are computationally prohibitive. In this study, we offer a feasible and highly accurate path beyond the constant relaxation time (CRT) approximation. By combining density functional theory (DFT) and density functional perturbation theory (DFPT) calculations, we extract a limited number of electron-phonon matrix elements, from which we derive deformation potentials for all relevant acoustic, optical, and intervalley processes, to efficiently calculate scattering rates in materials with arbitrary band complexity. The transport properties are then calculated using our open-source Boltzmann transport code, ElecTra, which allows for detailed calculations of transport properties for each transport state, including polar optical phonon and ionized impurity scattering. The approach is validated using several materials, including the promising thermoelectric material Mg₃Sb₂ which is computationally one of the ‘difficult’ test cases due to its low symmetry, large unit cell, and conduction band minimum off high symmetry lines. Our results show good agreement with experiments and full ab initio computational methods, providing excellent accuracy while reducing computational costs by more than 90% in certain cases. Overall, this study offers a valuable contribution to the field of computational materials science and provides a new, efficient method for accurately predicting thermoelectric transport properties in materials with complex band structures.

Z-128

稀土二氧化铈负载型催化材料的电子和氧储存器效应

龚学庆

上海交通大学

Z-129

AI 赋能激发态载流子动力学

褚维斌

复旦大学

激发态载流子动力学是能源和信息领域的核心问题,深入理解和调控它对于推动这些领域的发展至关重要。实时含时密度泛函理论和非绝热分子动力学方法是研究激发态载流子动力学的有力工具,但与传统的

基态计算相比,这类方法的计算成本要高出几个数量级。近年来,机器学习在物理和材料科学领域得到了广泛应用,包括直接预测材料的各种性质、构建第一性原理精度的势能面模型、高通量生成分子和晶体结构以及开发更精确的交换关联泛函等。通过将机器学习与非绝热分子动力学方法相结合,我们有望在激发态载流子动力学模拟的尺度、精度和效率方面实现协同突破。在本报告中,我将介绍我们发展了一种新的基于图神经网络的非绝热分子动力学模拟框架, N2AMD。基于该框架我们可以实现大尺度杂化泛函非绝热分子动力学模拟。N2AMD 不仅大大提高了非绝热分子动力学模拟的效率和精度, 而且为超越现有非绝热分子动力学模拟的局限性铺平了道路。

关键词: 激发态动力学;非绝热分子动力学;机器学习;图神经网络

Z-130

PWmat 软件研究光调控半导体相到金属相的相变机理

刘文浩*

中国科学院半导体研究所

超快激光调控结构相变已成为当前该领域研究的热点话题。然而, 实验并不能给出原子尺度的原子/分子位移, 对激发态动力学的理解存在诸多争议。为了理解超快动力学现象, 基于含时密度泛函理论 (rt-TDDFT) 方法, 我们理论上模拟超快相变过程。以 VO₂ 和 Si 表面 In 纳米线材料等为例, 我们实现了半导体到金属相变过程的调控, 并提出局域化的原子驱动力是调控相变的本质原因, 为光致相变过程提供了更加简单的物理图像, 为实验调控结构相变提供了直观的理论指导。

Z-131

The structural and photoelectrical behavior of low dimensional polar Materials from first-principles study

殷文金

湖南科技大学

The structural and photoelectronic properties of low dimensional polar materials are different from that of can be different y is strongly determined by the structure configuration of the materials. Thus, understanding the structural behavior such as evolution, is important. Here, taking Janus MoSSe as a representation, the evolution process from MoS₂ is systematically investigated by first-principles calculation. The simulation shows that the evolution process of the structure is related to the crystal field involved in the structure. On the other, the application of the 2D material on electronic structure and is also investigated. It is interesting to find that surface modification can effectively improve the product efficiency and selectivity.

Z-132

宽禁带半导体中双能级增强载流子非辐射复合的物理机制

邱晨

北京计算科学研究中心

单缺陷能级介导的载流子非辐射复合过程, 即 Shockley-Read-Hall (SRH) 模型, 在确定半导体器件性能和可靠性方面扮演着关键角色。在相对窄带隙半导体, 例如 Si 和 GaAs 中, 载流子的非辐射复合过程通常使用单缺陷能级介导的 SRH 模型描述, 即价带空穴和导带电子被同一缺陷跃迁能级俘获并复合。一般来说, 缺陷能级俘获某一类型载流子的能力可以粗略的正比于缺陷能级与带边的距离。也就是说, 位于价带最大值 (valence band maximum, VBM) 附近的缺陷能级更容易俘获价带空穴, 而同一缺陷能级俘获导带电子则较为困难。相反, 位于导带最小值 (conduction band minimum, CBM) 附近的缺陷能级可以有效地俘获导带电子, 但较难俘获价带空穴。因此, 非辐射复合过程受到空穴和电子俘获过程中俘获速率较

低一方的限制。普遍的共识是，只有位于半导体带隙中部附近的深缺陷能级可以作为有效的非辐射复合中心，因为它们可以同时相对容易地俘获导带电子和价带空穴。然而，对于宽禁带半导体材料，如 SiO_2 、 HfO_2 和 GaN 等等，当缺陷能级位于带隙中部附近时，它与 VBM 和 CBM 的距离都相当远并且电子与空穴的俘获速率都很低。因此，根据经典单能级的 SRH 模型，这些宽禁带材料中的非辐射载流子复合速率应该很小。然而，这与实验观察明显不一致，因为许多氧化物和氮化物表现出显著的载流子介导的非辐射复合速率。因此，在理解宽禁带材料中观察到的强非辐射复合现象时，基于经典的单能级 SRH 模型遇到困难。并且亟需一个新模型阐明这些宽禁带材料中强非辐射复合的物理起源。

我们引入了一个普适的双能级非辐射复合模型，在宽禁带氧化物 SiO_2 中通过将两个稳态结构与两个亚稳态缺陷构型耦合在一起引入双能级增强非辐射载流子复合的基本原理进行了详细阐释。具体而言，我们发现由于宽禁带半导体中缺陷的缺陷电荷更局域化的特性，当缺陷价态发生改变时，局域缺陷位点周围会发生显著的结构弛豫。这表明在宽禁带半导体中，每个价态下的缺陷可能会呈现出不同的局部构型，即会呈现一个稳定构型和几个亚稳态或过渡态构型，在有限温度下，亚稳态构型能够弛豫到稳定构型。这导致导带电子和价带空穴的俘获能级彼此不同，即这些亚稳态缺陷构型使电子和空穴的俘获能级分别更靠近 CBM 和 VBM。这种能级上的接近显著提高了相应的电子和空穴俘获速率，因此显著增强了非辐射复合的整个过程。我们提出的双能级载流子复合机制为研究其他宽禁带材料中的非辐射复合提供了一种普适且根本的途径。

Z-133

CsAg₅Te₃ 基热电材料声子动力学属性的第一性原理计算和中子散射研究

王保田

中国科学院高能物理研究所

我们采用第一性原理计算结合中国散裂中子源多物理谱仪 MPI、J-PARC 非弹谱仪 AMATERAS 对近年来实验合成的具有超低晶格热导率的有序晶体 CsAg_5Te_3 进行了研究。我们首次在有序晶体中观测到了类液体的声子行为，发现该材料的超低晶格热导主要是由于弱化学键合作用和声子非谐导致，粒子性声子和波动性声子在不同温度下对热导有不同的贡献，它们的耦合共同导致了热导的弱温度依赖。另外，我们使用第一性原理计算及声子动力学计算详细研究了低热导晶体 CsCu_5Se_3 的晶体结构、化学键合、准谐及非谐声子动力学、晶格热导等，解释了晶格热导的弱温度依赖。

Z-134

基于电子-声子与电子-缺陷耦合的载流子输运性质研究

邓天琪

浙江大学杭州国际科创中心

半导体材料中的载流子输运决定了半导体器件的多种重要性能，如迁移率、载流子寿命、热电效应等。厘清载流子的散射与复合过程，高效、准确计算其中起决定性作用的电子-声子、电子-缺陷耦合，对于设计半导体材料、优化载流子输运、提高半导体器件性能具有重要意义。为深化半导体中载流子输运行为的理解，基于精确的第一性原理计算，澄清了电子-声子耦合与电子-缺陷耦合在多种先进半导体材料的载流子迁移率、寿命、磁电输运等行为中的重要影响。针对载流子散射与输运性质的高通量计算，提出了高效的电声耦合与缺陷散射第一性原理计算方法，开发相应软件，应用于高迁移率、高热电性能半导体的高通量筛选及数据库构建。

Z-135

新型 Be 基二维材料的结构设计

王晓

中国科学院深圳先进技术研究院

石墨烯的诞生,开启了二维纳米材料领域的大门。自此,二维材料因为其独特的结构特性以及新奇的物理和化学性质受到了科学家们的广泛关注,激发人们设计新型二维材料的浓厚兴趣。人们针对碳基、硼基开发了一系列新型的二维材料。作者针对铍基,设计了一系列新型二维材料。通过与硼族元素结合,可以形成 MBe_2 ($M=B, Al, Ga, In, Tl$) 型的二维金属材料,该类材料具有完美的共平面结构以及丰富的多中心键,并且具有超导特性;基于 BeC 骨架,通过引入不同的电子供体,实现了多种新型二维材料的设计:通过单位点电子注入的方法,得到了新型二维材料 $MgBeC$, $WBeC$, 二者都具有良好的热学、动力学和力学稳定性,而且 $MgBeC$ 具有负泊松比, $WBeC$ 是储锂、储钠的良好负极材料;通过双位点调控,得到了 $HBBBe_3C_2$, 该材料具有极高的光学吸收系数和较高的载流子迁移率。进一步作者验证了双位点调控的策略设计新材料的普适性。此外,作者通过电子注入和空位结合的方式,得到了具有超高的载流子迁移率的新型二维材料 $Be_3B_2C_3$, 该材料具有较高的稳定性,合适的带隙,是一种理想的半导体材料,期待在纳米电子学领域具有潜在的应用前景。

Z-136

芳香族环[n]碳($n=4k+2$)电子输运性质及其规律研究

郭骏楠、李辉*

山东大学材料科学与工程学院

已成功合成并广泛研究的环[18]碳(C_{18})具有独特的电子输运特性。环[n]碳(C_n , $n=4k+2$)与 C_{18} 具有类似的 π 电子共轭,可能表现出类似甚至更优越的输运特性。本研究采用密度泛函理论(DFT)和非平衡格林函数(NEGF)对三种不同类型电极的环[n]碳器件进行了研究。研究表明,具有大直径碳环的器件往往表现出负微分电阻(NDR)效应。NDR 峰值的大小、位置和数量明显受到碳原子数量和电极类型的影响。然而,奇数环的器件不会出现 NDR 效应。这项研究揭示了 C_n 分子的非凡电子传输特性,为开发先进的碳基分子器件提供了宝贵的启示。

Z-137

机器学习原子间势中的原子能量正则化约束: β - $Cu_{2-x}Se$ 热输运模拟

胡晏箫

南方科技大学

在材料科学中,原子分子尺度模拟是研究材料性质的重要手段之一。近年来,随着人工智能技术的发展,机器学习原子间势(Machine Learning Interatomic Potential, MLIP)已经成为材料模拟的重要工具。然而,由于缺乏物理可解释性,MLIP 也被称为数学势。一个重要的原因是 MLIP 中所定义的原子能量被认为是无意义的数学辅助量,这导致原子能量投影的不确定性,并使得基于 Green-Kubo 方法的热输运模拟在部分晶体部分液体的体系中失效。为了解决这一问题,我们基于贝叶斯理论提出了原子能量正则化约束对 $Cu_{2-x}Se$ 等体系的势函数模型进行了修正。通过对比加入约束条件前后势函数模型,我们发现不合理的原子能量涨落已经被消除。并且,基于 Green-Kubo 方法的热输运模拟结果表明原子能量正则化约束能够显著降低不同独立训练的 $Cu_{2-x}Se$ 势函数模型间的数值涨落并得到与实验值相近的热导率。

Z-138

ABX₂ 化合物中被有序-无序相变隐藏起来的混合配位结构梁汉普¹、魏苏淮^{*2}

1. 北京计算科学研究中心

2. 宁波东方理工大学

材料的晶体结构本质上由其化学键性质所决定,因此原子配位通常与材料的离子性、共价性紧密相关。

基于这一原理,具有相似化学成分的材料可以成功地归类为不同的配位组。然而,在复杂的三元化合物中最近出现了反例。例如,强共价性的 IB-III A-VIA₂ 化合物,如 AgInS₂,倾向于选择四面体配位结构(TCS),而强离子性的 IA-VA-VIA₂ 化合物,如 NaBiS₂,则倾向于选择八面体配位结构(OCS)。自然地,人们预期 IB-VA-VIA₂ 化合物,在离子性或共价性上居中的,如 AgBiS₂,应为混合配位结构(MCS),其由共价 AgS₄ 四面体和离子 BiS₆ 八面体形成。令人惊讶的是,实验中仅观察到 AgBiS₂ 的有序与无序 OCS 相。为了解决这一难题,我们进行了有限温度下三元化合物相稳定性的第一性原理研究。我们发现 AgBiS₂ 确实在基态偏好 MCS,符合预期。但在实验合成条件下,由于其低混合能和高构型熵,无序的 OCS 具有更低的自由能,从而实验更容易发现无序 OCS 而非 MCS。我们的工作阐明了 MCS 的构型无序在热力学稳定性上的关键作用,为 IB-VA-VIA₂ 化合物中的异常配位倾向提供了严谨的理论依据。

Z-139**融合先验物理信息的机器学习建模**

李华山

中山大学

现有的实验探索与理论计算手段难以在原子层面研究复杂系统性质和长时间演化过程,融合先验物理信息和机器学习算法构建智能预测模型是克服该挑战的潜在途径。本报告将介绍建立智能预测模型的思路以及团队最近在该领域取得的一些进展:创建了结合胶囊表征机制的基于对称性增强的等变性网络,实现了晶体全部对称性的识别与复杂晶系材料电子属性的准确预测;开发了多团簇表征机制模拟多种类相互作用,实现了对电子耦合属性的可迁移预测;发展了实验强化的时间序列生成对抗网络,实现了对一维时间序列的演化分析与逆向设计。

Z-140**基于富勒烯的低维组装及性质研究**

苏艳

大连理工大学

富勒烯及其衍生物由于其独特的笼状结构和成熟的合成技术,在量子计算、自旋输运、信息与能量存储、催化等多个领域有着潜在的应用。受最近实验中成功合成单层和多层 C₆₀ 聚合物的鼓舞,研究者们开始探索富勒烯在低维组装中的潜力,特别是在二维和三维结构方面。并通过进一步理解富勒烯分子间以及与外修饰分子的相互作用,设计和合成具有特定功能的新型富勒烯低维材料。在本次报告中,我们将利用第一性原理方法,研究了 U₂C@C₈₀, Sc₃N@C₈₀ 及 C₂₀ 富勒烯作为 2D 材料组装基元的潜力。利用 DFT 理论,详细研究其几何结构和电子结构,分析富勒烯基低维组装材料中富勒烯与富勒烯间,富勒烯与金属桥间的相互作用,设计多种具有优异铁电,铁磁以及光学性能的 2D 富勒烯基材料。这些发现为碳材料家族提供新的成员,并为发展高性能光电器件提供了指导。

Z-141**随机结构搜索在功能材料方面的应用与展望**

朱博南

北京理工大学

基于材料理论构型与元素替换的高通量筛选已被广泛用于新材料发现,但实验数据的稀缺限制了其在未知化学空间中的新材料预测能力。另一方面,晶体结构预测不依赖实验数据,可弥补这一不足。本报告将介绍第一性原理随机结构搜索(ab initio random structure searching, 即 AIRSS) 方法在功能材料等方面的应用。在针对高容量、低成本的锂电池正极材料的探索中,我们发现在随机结构生成过程中引入固定原子团簇、对称性以及基于化学知识的原子间最小间距对搜索效率十分重要。对于五元电极材料 LiFeSO₄F 的搜索不但找到已知的实验结构,还发现了一种新的异构体¹。该方法也被用于具有潜在阴离子氧化还原特

性的草酸根正极材料的研究, 以及在 Li-Fe-S-O 四元化学空间中寻找稳定的硫氧化物正极材料²。通过与实验表征结合, 我们对纳米晶体³、外延薄膜中的垂直/水平异质界面⁴与异常相⁵的结构进行了预测与验证。这些成果显示, AIRSS 可有效的确定特定组分、指定化学空间中的复杂基态晶体结构。同时, 将其与数据库构型挖掘、机器学习力场等方法深度结合, 可以进一步提升其搜索效率, 并且提高传统高通量筛选结果的可靠性, 从而实现加速新材料的加速研发。

参考文献

1. Zhu, B.; Lu, Z.; Pickard, C. J.; Scanlon, D. O. Accelerating Cathode Material Discovery through Ab Initio Random Structure Searching. *APL Materials* 2021, 9 (12), 121111.
2. Zhu, B.; Scanlon, D. O. Predicting Lithium Iron Oxysulfides for Battery Cathodes. *ACS Appl. Energy Mater.* 2022, 5 (1), 575–584.
3. Tappan, B. A.; Zhu, B.; Cottingham, P.; Mecklenburg, M.; Scanlon, D. O.; Brutchey, R. L. Crystal Structure of Colloidally Prepared Metastable Ag₂Se Nanocrystals. *Nano Lett.* 2021, 21 (13), 5881–5887.
4. Zhu, B.; Schusteritsch, G.; Li, W.; Xing, W.; Yu, R.; Pickard, C. J.; MacManus-Driscoll, J. L. Structure and Ionic Conduction Enhancement Mechanisms at CeO₂/SrTiO₃ Heterointerfaces. *Appl. Phys. Rev.* 2024, 11 (2).
5. Li, D.; Wang, H.; Li, K.; Zhu, B.; Jiang, K.; Backes, D.; Veiga, L. S. I.; Shi, J.; Roy, P.; Xiao, M.; Chen, A.; Jia, Q.; Lee, T.-L.; Dhesi, S. S.; Scanlon, D. O.; MacManus-Driscoll, J. L.; van Aken, P. A.; Zhang, K. H. L.; Li, W. Emergent and Robust Ferromagnetic-Insulating State in Highly Strained Ferroelastic LaCoO₃ Thin Films. *Nat Commun* 2023, 14 (1), 3638.

Z-142

Ice phases formed from water under the confinement of carbon nanotubes

Yuan Liu

School of Chemical Engineering and Technology, Sun Yat-Sen University

Water exhibits rich phases under nano-confinement. Based on molecular simulations, the spontaneously formed ice phases are studied for several cases, *e.g.* water confined in single/double/multi-walled carbon nanotubes (CNTs), water deposited on the surface of CNTs, and water confined among CNT arrays. After extensive search using molecular dynamics simulations, a series of porous ice phases are observed from water confined among CNT arrays at room temperature, and are named as WOFs; three distinct classes of ice nanotubes (INTs) are observed from water confined in CNTs, namely, INTs with flat square walls, INTs with puckered rhombic walls, and INTs with bilayer hexagonal walls, moreover, the one-dimensional ice structures could be controlled and the freezing behavior could be also controlled in the form of zone-by-zone or in a simultaneous way by tuning the inter-CNT spacing; in addition, it is found that INTs could be also formed from water on the surface of nanotubes by tuning the interaction between water and the surface. It provides deep insights on the phase behavior of water under the confined environment of CNTs.

Related publications:

1. Y. Liu, W. Zhu, J. Jiang, C. Zhu, C. Liu, B. Slater, L. Ojamäe, J. Francisco, X. C. Zeng, Formation of porous ice frameworks at room temperature. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **2021**, 118: e2104442118.
2. Y. Liu, Y. Pu, X. C. Zeng, Nanoporous ices: an emerging class in the water/ice family. *Nanoscale* **2023**, 15: 92.
3. Y. Liu, J. Jiang, Y. Pu, J. Francisco, X. C. Zeng, Evidence of formation of 1-10 nm diameter ice nanotubes in double-walled carbon nanotube capillaries. *ACS Nano* **2023**, 17: 6922-6931.
4. Y. Liu, W. Zhu, J. Jiang, Y. Gao, C. Zhu, C. Liu, J. Zhao, J. Francisco, X. C. Zeng, Assisted self-assembly of nanoporous ices via carbon nanomaterial templates. *J. Phys. Chem. Lett.* **2024**, 15: 1811-1817.

5. Y. Pu, W. Zhao, Y. Liu, Controllable structure phases and tunable freezing zones of water confined in multi-walled carbon nanotube capillaries. *J. Mol. Liq.* **2024**, 403: 124837.

Z-143**Advancing first-principles dielectric property prediction of complex microwave materials: An elemental-unit decomposition approach**

Yabei Wu^{*1}, Peihong Zhang², Wenqing Zhang¹

1. 南方科技大学

2. 纽约州立大学布法罗分校

Tungsten-bronze-type material $\text{Ba}_{6-3x}\text{RE}_8+2x\text{Ti}_{18}\text{O}_{54}$, (RE = rare earth elements) is an important microwave dielectric that has shown great promises for future miniaturization of microwave devices because of its high dielectric constant, low loss, and tunabilities, and there is still much room for improvement. With their proven predictive power, first-principles calculations may greatly help accelerate materials optimization by reducing or eliminating the expensive and time-consuming experimental trial-and-error process. However, microwave dielectrics such as the tungsten-bronze-type materials are rather complex systems with unit cells containing hundreds or thousands of atoms, making ab initio calculations prohibitively expensive. In this work, we propose an elemental-unit decomposition (EUD) technique that can drastically reduce the computational effort of predicting the properties of complex microwave dielectrics and demonstrate its accuracy and efficiency. Our approach facilitates first-principles prediction and design of complex microwave dielectric materials that would otherwise be extremely difficult.

Z-144**Ti 薄膜在 Si(100)表面扩散和生长机理的原子模拟研究**

张瀚资、龙开泓、韩韞泽、沈传凯、涂蒙河、张宝亮*

中国原子能科学研究院

采用分子动力学和蒙特卡罗方法研究了 500 K 时 Ti 薄膜在 Si(100)表面的成核和生长行为。重点研究了钛薄膜的成核特性、生长方式、晶体结构和表面结构。结果表明:在沉积初期, Ti 薄膜与 Si 衬底在界面处发生混合。Ti 薄膜的表面粗糙度受沉积原子速率的影响,而沉积原子速率与薄膜中的晶体结构转变有关,薄膜中稳定的 HCP 晶粒往往伴随着 FCC 层错。随着沉积原子速率的增加, Ti 薄膜的生长机制由随机取向转变为选择性取向。此外,我们重新计算了 Ti 在 Si(100)p(2×2)表面不同吸附位点的吸附能。这样做是为了确定 Ti 原子在 Si(100)表面的最佳扩散路径,然后通过过渡态搜索方法找到该路径。

Z-145**Revealing precursor reaction network and gaseous product distribution during chemical vapor deposition of MoS_2**

Zhengzheng Dang, Yanming Wang*

Shanghai Jiao Tong University

Two-dimensional MoS_2 , as a representative transition metal dichalcogenide (TMD), possesses exceptional optoelectronic properties, making it one of the most promising nanomaterials for next-generation electronic devices. Chemical vapor deposition (CVD) is widely used for producing large-scale, high-quality monolayer MoS_2 . This technique involves complex precursor reactions and subsequent deposition of gaseous products on substrates, where the gas-phase stage significantly influences the materials growth kinetics and film quality. Understanding the formation mechanisms of MoS_2 in the gas phase is crucial for controllable materials synthesis;

however, a systematic description of gas-phase reaction networks and product distributions still remains unclear. Herein, we utilized large-scale reactive molecular dynamics (RMD) simulations to investigate MoS_2 gas-phase reaction processes under a series of pressures and temperatures closed to experimental conditions, with leveraging an automated versatile protocol for post-processing trajectory data. We discovered that the Mo_3O_9 precursor molecule (obtained from sublimation of solid MoO_3) undergoes an initial reduction assisted by S_2 . This process produces SO by-products and evolves the molecule through sequential stages of ring-opening, fragmentation, and stepwise sulfurization. MoO and MoO_2 molecules, as major intermediates in the gas-phase reaction, yield MoS_7 and MoS_6 stable gaseous end products respectively. Based on these findings, our work further unveils dominant gas-phase reaction pathways and predicts product distributions for fabricating MoS_2 films from solid MoO_3 , providing valuable scientific insights to guide the optimization of MoS_2 production.

Z-146

Sb/In₂Se₃ 异质结中非易失性电控制 Rashba 效应的理论研究

成海霞

中国钢研科技集团有限公司

铁电 Rashba 半导体 (FRS) 因其具有对电子自旋的非易失性电控制的潜能而受到高度重视。理想的 FRS 应具有室温铁电性和强的 Rashba 效应, 然而这种材料目前很少被报道。本工作, 通过在室温铁电 In_2Se_3 单层上垂直堆叠 Sb 单层来设计室温 FRS。第一性原理计算表明 Sb/ In_2Se_3 异质结在费米能级附近拥有干净的 Rashba 态, 且 Rashba 效应与铁电序具有强耦合。转换电极化方向增强了 Rashba 效应, 且铁电翻转能垒仅有 22 meV, 具有可行性。这种强 Rashba-铁电耦合效应对异质结的界面距离和外部电场的变化具有鲁棒性。因此 Sb/ In_2Se_3 异质结中这种室温下的非易失性电可调的 Rashba 效应使其在下一代小电流数据存储和逻辑器件中具有潜在的应用价值。

Z-147

三层 MoS₂ 莫尔超晶格作为模拟蜂窝晶格中离子 Hubbard 模型的平台

钟泓臻、苏志鑫、康俊*

北京计算科学研究中心

最近的研究表明二维莫尔超晶格具有作为凝聚态量子模拟器的潜力。在莫尔超晶格中实现不同的晶格模型哈密顿量已经成为研究的焦点。我们的工作指出, 与只有一个界面的双层莫尔超晶格相比, 二维多层结构中不同界面间的莫尔图案相互干涉可以形成更复杂的晶格模型, 这一概念可以通过三层 MoS_2 莫尔超晶格来说明。我们在研究中发现三层 MoS_2 (TMSLs) 的价带顶处出现孤立的莫尔平带, 这些平带可以用蜂窝晶格中的离子 Hubbard 模型来描述。离子 Hubbard 模型中的跃迁幅度, on-site 库伦排斥能和 staggered potential 在平带中可以通过扭转角度, 介电环境和垂直于二维材料的电场分别进行调控, 在 TMSLs 中实现从弱关联到强关联区域的多种量子相的相变。因此, 我们认为 TMSLs 可以作为研究蜂窝晶格中离子 Hubbard 模型的良好平台

Z-148

基于二维正方格点哈伯德模型的摩尔超晶格材料理论设计研究

徐巧玲^{1,2}、洗乐德^{*2,3}

1. 四川师范大学

2. 松山湖材料实验室

3. Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Luruper Chaussee 149, 22761 Hamburg, Germany

通过转角堆叠或异质堆叠的方式构建的二维摩尔超晶格材料，电子态呈现出低能平带结构，具有丰富的关联物态，是模拟复杂强关联物理的理想材料系统。当前摩尔平带物理研究大多都集中于三角、六角以及长方格点模型，而与铜基高温超导有关的摩尔正方超晶格则研究稀少，体系可调控的正方格点哈伯德模型仍未在摩尔超晶格材料中实现。我们拟发展基于正方晶格的摩尔超晶格构建方法，创新性的利用二维长方晶格薄层材料体系构建正方摩尔超晶格，克服正方格点摩尔体系缺失真实材料体系的困境。通过理论计算方法研究等效正方格点哈伯德模型的摩尔平带材料体系，并模拟摩尔超晶格中该格点模型的关联物性。此外，通过增加层数、施加电场等物理参量实现对正方摩尔超晶格材料关联物态的进一步调控。该研究将拓展摩尔超晶格材料可模拟的关联物态，进一步发掘摩尔超晶格在量子材料上的应用潜力，从而推动量子材料前沿研究的发展。

墙报

Z-P01

Theoretical Study of CDW phases for bulk NbX₂ (X= S and Se)

Hongwei Du*, Zhenyi Jiang, Jiming Zheng, Xiaohong Chu
Institute of Modern Physics, Northwest University

Most two-dimensional transition metal chalcogenides, the superconducting phase frequently coexists with the charge density wave (CDW) phase. However, there is at least one notable exception, namely bulk 2H-NbS₂, which does not conform to this general pattern. Since 1975, scientists have been keenly interested in experimentally detecting the CDW phase in bulk NbS₂. The question remains whether there exists a more stable thermodynamic state than its high-temperature metal phase, particularly in scenarios involving charge injection.

Our theoretical predictions suggest the existence of the most stable CDW bulk configurations, such as TC for 2H-NbS₂ and TTs for 2H-NbSe₂, characterized by partial pseudo energy gaps. These predictions are based on the harmonic phonon softening theory and first-principles calculations. Notably, the ratios of the pseudo gaps around the K-H segment in the Brillouin zone for CDW phases are comparable to those observed in the superconductivity phases of bulk 2H-NbX₂ (where X= S or Se).

Importantly, for bulk 2H-NbS₂, the CDW phase is expected to coexist with its superconductor state below the critical temperature, rather than with the metal phase. Experimental observation of the CDW phase should be facilitated when the injected charge reaches 0.5e / Nb₁₈S₃₆. Our calculations of the density of states reveal that, during the formation of CDW phases through the contraction of Nb atoms and the accompanying in-plane symmetry breaking, the dominant conductive carriers in bulk 2H-NbS₂ are always of the *p*-type. In contrast, for bulk 2H-NbSe₂, a transition from *p*-type to *n*-type carriers is also predicted. This transition is marked by a continuous drop in the Fermi level and the emergence of the M-L segment of the out-of-plane energy band from the Fermi surface. Furthermore, a Lifshits transition of pocket-vanishing types occurs in the out-of-plane direction during the geometrically structural phase transition in bulk 2H-NbSe₂ without symmetry breaking.

Our calculations have theoretically addressed a long-standing challenge in understanding the coexistence of CDW and superconducting phases, clearing a significant hurdle in this field of research.

Z-P02

TiB₄ 和 SrB₈ 单层材料：高容量且无应变特性的 Li/Na/K/Ca 离子电池阳极材料

胡军平*、王运新
南昌工程学院

理论容量、平均开路电压 (OCV)、扩散势垒以及晶格参数的变化等是判断材料是否适用于锂离子或非锂离子电池 (LIBs 或 NLIBs) 阳极的关键指标。过去几十年, 二维材料的快速发展为这些指标提供了新的可能性。通过第一性原理计算, 我们证明了两种二维材料 TiB_4 和 SrB_8 在作为 LIBs 或 NLIBs 阳极时, 在上述指标上表现出色。具体来说, TiB_4 在 LiNaKCa 储存容量分别为 588mAh/g、588mAh/g、588mAh/g 和 1176mAh/g; SrB_8 在 LiNaKCa 储存容量分别为 308mAh/g、308mAh/g、462mAh/g 和 616mAh/g, 并且无论是否有 Li、Na、K 或 Ca 吸附, 都显示出良好的电导率。两种材料表面的扩散势垒都很低, 表明具有良好的倍率性能。平均开路电压也非常低。特别是, 在 LiNaKCa 嵌入过程中, 这两种材料的晶格变化很小。对于 Ti_9B_{36} , 相应的变化值约为 0.37% (Li)、0.33% (Na)、0.64% (K) 和 0.03% (Ca); 对于 Sr_8B_{64} , 相应的变化值约为 0.70% (Li)、0.16% (Na)、0.13% (K) 和 0.004% (Ca), 这意味着类零应变特性和优异的循环性能。以上所有结果表明, TiB_4 和 SrB_8 单层材料是非常有前景的 LiNaKCa 离子电池阳极材料。

Z-P03

合金定向凝固过程过冷行为研究

郝玮晔、巩桐兆、陈云*、陈星秋

中国科学院金属研究所

在合金凝固过程中, 液相中的过冷行为决定了晶粒的形核与生长, 对最终的凝固组织有重要影响。本文采用相场法定量模拟了 Al-Cu 合金的定向凝固过程, 分析了不同温度梯度以及抽拉速度下液相的过冷行为。模拟表明, 在距离枝晶尖端一定距离的液相中过冷度相对较高, 这与通常认识的定向凝固成分过冷分布一致。不过, 液相中的最大过冷度只在初始过渡阶段分布于固液界面最前沿的液相中, 并随温度梯度增加而增加, 而在稳态生长阶段, 最大过冷度主要分布于枝晶间区域, 随温度梯度增加变化不明显。这主要是因为稳态生长时一次枝晶臂间距达到最大, 枝晶间的溶质场叠加作用减弱, 导致过冷度比固液界面最前沿液相中的过冷度要大。虽然温度梯度对稳态生长时液相中的最大过冷度影响不明显, 但较高的温度梯度可以增大溶质抑制形核区 (Solute Suppress Zone, SSN), 有利于抑制晶粒形核。此外, 随着抽拉速度增加, 稳态生长的柱状晶间溶质交互作用减弱, 溶质场扩散边界层变窄, 因而凝固过程中的过冷度较大。依据上述模拟, 推导建立了定向凝固过程中枝晶最前沿液相过冷度分布的解析模型, 可以计算出不同工艺下的最大过冷度。这些研究结果不仅有助于指导调控定向凝固过程中的工艺参数, 进而避免液相中发生形核而产生柱状晶向等轴晶转变 (Columnar-To-Equiaxed Transition) 或杂晶, 而且对于孕育处理合金铸造凝固过程, 也可通过调整凝固温度梯度, 实现过冷度最大化, 促进更多的孕育剂形核, 从而细化凝固组织。

Z-P04

弹性模量对 TC4 超声手术刀刀杆性能影响的数值模拟

刘增云

烟台大学

超声手术刀材料的弹性模量不同会对其动态响应产生影响, 而超声性能又与相含量和织构类型密切相关。本文研究了 Ti6Al4V 合金弹性模量和超声性能的影响机理。通过有限元仿真建模, 对不同弹性模量的超声手术刀刀杆进行模态和谐响应分析, 探究不同的弹性模量对超声手术刀刀杆的纵振频率、输出位移和应力最大值的影响, 从而形成适合工况的弹性模量范围, 提高输出振幅以及稳定性。

Z-P05

超声手术刀的疲劳模拟及实验验证

张晓阳

烟台大学

目前，临床上常用的切割止血超声手术刀的刀头材料为 TC4 钛合金，其工作频率大多为 55kHz，循环次数高且时间短，极易出现疲劳断裂的现象。本文通过进行超声手术刀的瞬态动力学分析，进而进行疲劳分析，得到在 55.5kHz 频率下，超声手术刀在空载以及不同负载情况下的疲劳寿命云图。同时，通过建立 55.5kHz 超声疲劳试验系统，对模拟结果进行实验验证。

Z-P06

Nonlinear optics driven magnetism reorientation in semiconductors

Qianqian Xue,jian zhou*

Xi'an Jiaotong University

Based on nonlinear optics, we propose that light irradiation could induce a steady state magnetization variation. We develop a band formulism to elucidate its general microscopic mechanisms, which are rooted by the quantum geometric structure and topological nature of electronic Bloch wavefunctions. Their existence are determined by the light polarization and specific material symmetry, based on the magnetic group theory. In general, for a magnetic system, both circularly and linearly polarized light could exert an effective magnetic field and a magnetic velocity (variation rate over time, serving as an effective torque) effect, to reorient the magnetization orientation. They are contributed by spin and orbital angular momenta simultaneously. Aided by group theory and first-principles calculations, we illustrate this theory using a showcase example of monolayer NiCl_2 , showing that light irradiation effectively generates an out-of-plane effective magnetic torque, which lifts its in-plane easy magnetization. According to magnetic dynamic simulations, the in-plane magnetization could be switched to the out-of-plane direction in a few nanoseconds under a modest light intensity, demonstrating its ultrafast nature desirable for quantum manipulation.

Z-P07

衬底表面金属液滴的融合行为

李志超

山东大学材料科学与工程学院

研究了金属液滴在不同衬底上的融合行为。结果表明：由于光滑金属衬底对金属液滴的吸附作用，导致液滴运动能力较差，不能彻底融合为一个均匀混合的液滴。为此，本文采取了调控衬底表面粗糙度的方式来促进液滴的融合。由于钛纳米柱对液滴具有较强的吸附作用，钛和铝液滴直接渗入到纳米柱的间隙之中而呈现 Wenzel 润湿状态，使得液滴间原子相互扩散受到抑制，液滴在钛纳米柱修饰的衬底上无法彻底融合，融合效果较差。然而，在无定形碳纳米柱修饰衬底上，由于衬底吸附作用减小和钛液滴自身原子结合能较大，从而使得钛液滴处于 Cassie 润湿状态并在吸引作用下逐渐运动到铝液滴上方，以爬坡模式进行融合，融合效果较好。随着衬底表面粗糙度的减小，钛和铝液滴都存在由 Cassie 润湿状态向 Wenzel 润湿状态转变的趋势，由于二者润湿状态转变不同步，造成了液滴融合模式的差异。当 $f = 0.095$ 和 0.071 时(f 为粗糙度因子)，铝液滴处于 Wenzel 润湿状态，而钛液滴处于 Cassie 润湿状态，两液滴的位置在 z 轴方向有一定高度差，从而为液滴以爬坡模式融合提供了有利条件，促进了液滴的融合。结合纳米柱高度及排列密度对融合效果的影响，本文绘制了关于融合后液滴润湿状态转变的关系图，为更好地调控液滴融合行为提供了支撑。此外，继续研究了纳米柱排列密度梯度对液滴融合的影响，发现随着纳米柱排列密度梯度的增加，液滴融合模式发生了改变，由左右扩散融合转变为爬坡融合，融合后液滴从 Cassie 润湿状态转变为 Wenzel 润湿状态，液滴运动受到了限制，而且液滴混合程度降低。总体来看，通过选择合适的密度梯度，可以预测和控制液滴的润湿状态、融合模式以及融合后液滴的最终位置。

Z-P08

Terahertz-induced Wurtzite to Rocksalt Phase Transitions in MgX by Vibrational Anharmonicity

Hanli Cui,jian zhou*
Xi'an Jiaotong University

MgS (Magnesium Sulfide) and MgSe (Magnesium Selenide) are compounds that display a variety of crystal structures depending on conditions such as temperature and pressure. As noted, both experimentally and theoretically, these compounds have been found to crystallize in several different phases: Rock Salt (Fm-3m), NiAs Phase (P6₃/mmc), Wurtzite (P6₃mc), Zincblende (F-43m). Here, optical susceptibility, including electron and anharmonic phonon contributions, is used to evaluate Gibbs free-energy variations of MgS and MgSe under terahertz irradiation. This corresponds to an off-resonant light-controlled phase transition, rather than the resonant approaches that excites hot carriers over electronic band or infrared-active vibrations in the phonon band. We show that intermediate terahertz light can trigger polarization change between P6₃mc and Fm-3m similarly, the phase transformation from low-symmetric ferroelectric phase to high-symmetric paraelectric structure in MgS and MgSe can be driven by changing the polarization and intensity of the incident light. Analogous results are obtained in Wurtzite phase in detail, the phonon spectrum and optical susceptibility exhibit strong temperature dependence, in which we show significant effects of anharmonic vibration and hyperbolic properties under terahertz light.

Z-P09

Pure bulk orbital and spin photocurrent in two-dimensional ferroelectric materials

Xingchi Mu, Jian Zhou*

School of Material Science and Engineering, Xi'an Jiaotong University

We elucidate a bias-free light-induced orbital and spin current through nonlinear response theory, which generalizes the well-known bulk photovoltaic effect in centrosymmetric broken materials from charge to the spin and orbital degrees of freedom. We use two-dimensional nonmagnetic ferroelectric materials (such as GeS and its analogs) to illustrate this bulk orbital/spin photovoltaic effect, through first-principles calculations. These materials possess a vertical mirror symmetry and time-reversal symmetry but lack of inversion symmetry. We reveal that in addition to the conventional photocurrent that propagates parallel to the mirror plane (under linearly polarized light), the symmetric forbidden photocurrent perpendicular to the mirror actually contains electrons flow, which carries angular momentum information and move oppositely. This generates a pure orbital moment current with zero electric charge current. Such hidden photo-induced pure orbital current could lead to a pure spin current via spin-orbit coupling interactions. Therefore, a four-terminal device can be designed to detect and measure photo-induced charge, orbital, and spin currents simultaneously. All these currents couple with electric polarization **P**, hence their amplitude and direction can be manipulated through ferroelectric phase transition. Our work provides a route to generalizing nanoscale devices from their photo-induced electronics to orbitronics and spintronics.

Z-P10

SiC MOS 器件总电离剂量效应的动力学模拟

嵇辰丰、刘俊、李永钢*

中国科学院合肥物质科学研究院

近年来,随着碳化硅(SiC)功率器件在外太空等高辐射环境下的应用,对该种材料的辐射损伤效应的研究变得愈发重要,而其中总电离剂量(TID)效应作为一种重要的辐射损伤效应,会造成器件性能的逐渐退化。由于实验上缺乏对带电缺陷分布演化等微观机制的探测手段,基于连续性模型的动力学模拟对研究 TID 效应的机制是必要的。基于速率理论构建了适用于 SiC MOS 器件的二维连续性模型,该模型在

设定载流子分布与初始分布、已知反应事件与参数的情况下,采用有限差分法、子循环算法等方法耦合求解氧化层和沟道中粒子与缺陷的连续性方程和泊松方程,可定量模拟获得粒子与缺陷的动力学演化分布。研究发现:1)预测了外加不同栅压情况下的 TID 效应,尤其是负栅压下沟道中空穴载流子通过 Fowler-Nordheim 隧穿效应,使得氧化层-半导体界面发生电荷累积,进而影响 TID 效应的机制。2)模拟了不同的氧化后退火工艺对氧化层和界面固有缺陷的调控作用,评估了常见的一氧化氮和氢气退火工艺方案对抗 TID 性能的影响。该模型和结果对 TID 效应微观机制的验证和探索具有重要的理论意义。

Z-P11

分子动力学模拟金属氢化物的力学性能和氢扩散行为

俞菲菲、向霞、胡双林*

中物院核物理与化学研究所

金属氢化物,包括铪、钪、钽、钛、钇、锆等氢化物,因其具有较高的储氢容量而受到实验和理论的关注。由于氢元素进入金属材料中,材料的力学性能(如延展性,断裂韧性等)会发生退化,且在设计新型储氢材料和抗氢脆合金时,有必要了解氢化物的力学和扩散性能。因此,我们基于密度泛函理论,采用了机器学习分子动力学研究了氢在立方和四方金属氢化物 MH_2 ($M = Y, Sc, Er, La, Ta, Ti, Zr, Hf$)和含空位的非化学计量比 $MH_{1.75}$ 中的力学性能和动力学扩散行为。研究发现,金属氢化物的弹性模量一般随着温度的升高而降低。具有温度依赖性的弹性性质结果表明四方相和立方相的 TiH_2/ZrH_2 分别在较低和较高温度下具有机械稳定性。此外,温度和材料的成分也会影响扩散系数。本工作将弹性模量测量与分子动力学相结合,将有助于预测材料在应力作用下的响应,并比较金属氢化物在不同环境中的性质。

Z-P12

微结构对钨中氢滞留影响机制的团簇动力学模拟

张愿愿、陈孝茹、李永钢*

合肥物质研究院固体物理研究所

聚变堆中面向等离子体材料承受着低能、高束流离子的剧烈冲击,入射离子(氢/氦)被材料中的缺陷微结构俘获会改变缺陷的动力学演化行为,进而同时影响材料的服役性能和氢滞留行为。实验研究发现多晶钨中氦滞留量随着辐照通量的增加会出现饱和趋势,但其微观机制尚不明确。跨尺度理论模拟是研究氢/氦滞留的有效方法,为此我们基于微结构等效位点与缺陷相互作用的物理图像提出了统一的微结构位点吸收强度模型,引入到多元缺陷长时演化的空间分辨团簇动力学自主模型(IRadMat-Site)中,从微观上描述了吸收强度演化的非稳态过程,真实计及了缺陷在微结构处的饱和吸收及脱附效应。由此准确模拟了钨中典型微结构(如位错和晶界)的吸收强度,获得了与实验一致的氦饱和滞留行为。研究发现:1)低能氦离子在钨中的滞留深度分布与实验定量一致,从而验证了模型的准确性;2)低能氦离子在钨中的氦滞留量随着辐照通量增加而增加,并在约在 $10^{23}m^{-2}$ 后逐渐趋向饱和,这与实验趋势一致;3)系统分析了氦滞留的四种分布形式以及位点数目的统计规律,发现晶界和位错对滞留量起主要贡献,且随着辐照通量增加,位点数目减小,吸收强度减弱。这充分表明了位点模型的有效性以及微结构在材料中的重要作用,将对通过微结构调控和脱附路径设计来降低氢同位素滞留提供了理论思路。

Z-P13

二维 SiC 异质结作为锂离子电池阳极材料的第一性原理研究

唐欣、刘玉涛、李连欣、高廷红*、刘贵阳、黄宏

贵州大学大数据与信息工程学院

将二维材料组成异质结的形式可以综合各单层材料的优点,是开发新型电子器件的有效策略。在这项工作中,通过第一性原理计算系统地研究了将 SiC 异质结作为锂离子电池阳极材料的可行性问题。具体计

算了 SiC/Graphene、SiC/BN 和 SiC/MoS₂ 异质结构相应的几何结构、电子结构、锂吸附和迁移特性以及相关的电化学性能。计算结果表明这些异质结表现出优异的力学性能，其杨氏模量优于相应的单层结构。通过引入其他二维阳极材料，锂化的 SiC 异质结表现出更强的导电性、更高的理论容量以及可接受的扩散势垒，这些锂化性能对于保持锂电池的高倍率性能至关重要。所有的结果表明，基于 SiC 的异质结作为锂离子电池的理想电极材料具有很大的潜力。

Z-P14

RDM3D：材料辐照缺陷的三维可视化软件

戴鑫

中国科学院合肥物质研究院计算量子与材料研究部

辐照损伤是材料科学和核工程领域的一个重要研究方向。由于实验上对辐照损伤的研究存在极大困难，理论模拟已经成为研究辐照损伤的重要方法。初级辐照损伤作为材料辐照损伤动力学演化的开端，其准确模拟与分析对于后续的动力学演化过程的准确描述至关重要。缺陷三维可视化是初级辐照缺陷分析中的重要手段，可极大地促进材料初级辐照损伤的模拟研究。因此，亟需开发有效的可视化软件以更好地分析和表征缺陷分布。通过在辐照级联损伤模拟的三维程序(IM3D)中开发材料辐照缺陷三维可视化软件 RDM3D，实现了初级辐照缺陷分布的可视化分析。

软件在以往材料缺陷可视化模型基础上，主要扩展了以下功能：(1)直观显示出辐照缺陷分布；(2)采用自主创新的多种辐照缺陷分布的着色处理算法，可以直接可视化缺陷结果，并基于 VTK(可视化工具包)技术将计算结果通过着色模式显示出来；(3)采用了更先进的辐照缺陷鉴别切片自主技术，对结果进行捕获来可视化多种辐照缺陷的分布，提升了三维显示的可靠性；(4)通过 Qt(跨平台的 C++ 框架)技术实现可视化、可交互界面操作，能够让用户更加方便地使用缺陷分布的着色和切片处理。

Z-P15

纳米尺度下金和硅液滴润湿及融合过程分子动力学研究

赵若普

山东大学

液滴的润湿及融合现象随处可见，其对于自清洁及超疏水等材料的制备具有重要的指导意义，与润湿及融合相关的理论研究同样是关键的研究课题之一。并且，实验和模拟的结果都证明了通过改变衬底的表面结构可以调控润湿性。因此，液滴润湿及融合课题的研究为功能表面材料的研发及生产工艺的改进提供理论指导基础，对丰富相关理论基础具有重要意义。主要研究内容和研究结果如下：

(1) 研究了金和硅液滴在光滑石墨烯衬底上的润湿性。结果表明金和硅液滴在光滑石墨烯衬底上均不润湿。此外，研究发现液滴的初始形貌会影响润湿行为，初始形貌为球形的金和硅液滴在润湿过程中并未产生反润湿现象。

(2) 研究了衬底表面结构对金和硅液滴润湿性的影响。结果表明，相比于光滑石墨烯衬底，金和硅液滴在碳纳米柱修饰的石墨烯粗糙衬底上的润湿角明显增大。此外，研究表明液滴原子的扩散速率会显著影响其在衬底上的润湿行为。

(3) 研究了同种和异种液滴在光滑石墨烯衬底上的融合行为。结果表明，两个金液滴呈现出“互扩散”的融合方式，同时具有反润湿倾向，而且金和硅液滴的融合进程缓慢。研究发现液滴间与液滴和衬底间的相互作用会影响原子的扩散速率，同时证明了原子扩散能力的不同是融合行为存在差异的主要原因。此外，研究了体系温度对融合过程的影响，发现升高温度可提高原子的扩散速率，促进液滴融合。

Z-P16

钛铝层状孪晶结构和石墨烯的微观力学响应下的分子动力学研究

高廷红*、黄宏、黄晋、陈茜、肖清泉

贵州大学

纳米孪晶结构和石墨烯增强相能显著提升材料的力学性能。然而,有关这两者在 TiAl 合金材料中相互作用的强化研究相对较少。因此,我们采用分子动力学(MD)模拟研究了纳米孪晶钛铝/石墨烯(nt-TiAl/Gr)复合材料在单轴载荷下的力学性能和微观组织演变。研究了石墨(Gr)层数和温度对复合材料性能的影响。研究表明,孪晶界结构与石墨烯相互作用以提高力学性能,具有协同效应。相较于纯 nt-TiAl,引入不同 Gr 层后的最大抗拉强度分别提高了 7.42%、24.66%和 35.86%。此外,nt-TiAl/Gr 复合材料的力学性能与温度呈现出相反的趋势,随着温度的升高,材料的最大拉伸强度降低。Gr 和孪晶结构之间的协同作用在阻碍位错扩散和降低位错成核方面发挥着至关重要的作用,进而提高了复合材料的性能。

Z-P17

钛铝层状孪晶结构和石墨烯的微观力学响应下的分子动力学研究

高廷红*、黄宏、黄晋、陈茜、肖清泉

贵州大学

纳米孪晶结构和石墨烯增强相能显著提升材料的力学性能。然而,有关这两者在 TiAl 合金材料中相互作用的强化研究相对较少。因此,我们采用分子动力学(MD)模拟研究了纳米孪晶钛铝/石墨烯(nt-TiAl/Gr)复合材料在单轴载荷下的力学性能和微观组织演变。研究了石墨(Gr)层数和温度对复合材料性能的影响。研究表明,孪晶界结构与石墨烯相互作用以提高力学性能,具有协同效应。相较于纯 nt-TiAl,引入不同 Gr 层后的最大抗拉强度分别提高了 7.42%、24.66%和 35.86%。此外,nt-TiAl/Gr 复合材料的力学性能与温度呈现出相反的趋势,随着温度的升高,材料的最大拉伸强度降低。Gr 和孪晶结构之间的协同作用在阻碍位错扩散和降低位错成核方面发挥着至关重要的作用,进而提高了复合材料的性能。

Z-P18

Crystal Structure and Surface Morphology of GaN Thin Films Grown on Different Patterned AlN Substrate Surfaces

Shiyi Mao,Tinghong Gao*,Lianxin Li,Yue Gao,Zhan Zhang,Qian Chen,Quan Xie

Institute of Advanced Optoelectronic Materials and Technology, College of Big Data and Information Engineering, Guizhou University

Gallium nitride (GaN) is frequently used as the primary material for manufacturing high-brightness light-emitting diodes (LEDs). Recently, atomic layer deposition has become increasingly prevalent across microelectronics, optoelectronics, and nanotechnology as a method for thin-film growth. Gaining insights into the process of thin-film growth can significantly enhance the device performance. Herein, molecular dynamics was used to simulate GaN thin film growth on substrates with different patterned surfaces. Results showed that GaN thin films grown on cone- and dome-patterned substrate surfaces have smoother surfaces than those grown on a flat substrate. Moreover, the GaN thin films grown on flat surfaces exhibited an optimal crystalline quality compared to those grown on patterned substrate surfaces. However, the GaN thin films grown on flat surfaces showed strain levels higher than those grown on patterned substrate surfaces, potentially affecting the performance of the optoelectronic devices.

This study reveals the impact of different patterned substrate surfaces on GaN thin films and provides guidance on the design of substrate patterns for different GaN thin film application scenarios.

Z-P19

基于元启发式算法的高精度反应力场参数多目标优化方法研究

孙秦浩²、王杨*¹、许华杰¹

1. 西南交通大学前沿科学研究院

2. 西南交通大学机械工程学院

原子尺度模拟在研究材料微观现象过程中扮演着重要角色。反应力场(Reactive Force Field, ReaxFF)作为原子尺度模拟的关键工具,具有速度快、计算尺度大和适用范围广的优点。然而,其可移植性差、参数繁多等缺点导致了参数开发难度大,且精度不高,严重限制了 ReaxFF 在材料原子尺度模拟方面的应用。因此,迫切需要开发更加高效的自动优化方法来加速反应力场的开发并提高模型精度。本研究采用模拟退火算法实现全局寻优,同时利用粒子群优化算法提供优化方向,实现了两种元启发式算法的高效有机结合。此外,本研究创新性地引入了注意力机制,提升关键分子结构在多目标优化过程中的权重占比,进一步提高多目标全局优化的精度。在参数指标评价方面,本研究首次提出基于距离和夹角的向量化优化新策略,形成了更加直观和更高精度的参数指标评价体系,显著提升了 ReaxFF 参数多目标全局智能寻优的精度。最后,本研究选择 C/H/S/F 体系作为测试目标,探究了上述算法的精度和效率。研究表明,该算法相较于传统元启发式算法,具有更快的速度和更高的精度。基于这些高效的优化算法,我们开发了自动化优化程序,实现了 ReaxFF 参数的高效快速获取,为原子尺度模拟提供了关键的技术支持,对新材料的开发具有重要的参考价值。

Z-P20

一种新型镍基高温合金梯度冷却过程中温度预测模型的建立

徐真

山东省烟台市莱山区烟台大学精准材料高等研究院

镍基高温合金涡轮盘微观组织的不均性是影响其服役性能和寿命的关键因素,为探索固溶冷却速度与镍基高温合金组织、性能演变的内在联系。本研究采用有限元模拟、热力学计算和机器学习相结合的材料计算方法,通过端淬-梯度冷却实验,研究了不同固溶冷却条件下新型镍基高温合金(YTU-1002)的温度场分布及其演变规律,建立了 YTU-1002 合金的梯度冷却温度场预测模型。基于实验测定热物性参数及逆向求解试样水冷端面传热系数的有限元温度场数值模拟确定其冷速分布可达 $32-6276\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$,并通过测温结果进行了可靠性验证。为优化并加速温度场计算,对温度场的模拟与实验数据进行了回归处理,通过对比多种机器学习模型的预测精度,最终通过随机森林方法构建了端淬工艺-温度场预测模型。本研究可为建立固溶冷速-微观组织-合金性能内在联系提供基础,为优化镍基高温合金的热处理工艺以提高合金的服役性能与寿命提供依据。

Z-P21

石墨烯润滑下双磨氮化镓单晶加工的去理机理

徐美、高廷红*、李连欣、王蓓、陈茜、黄晋、肖清泉

贵州大学

氮化镓(GaN)是一种用于制造芯片晶圆和高功率器件的先进材料。近年来,磨削加工作为一种高效的加工方法,已应用于机械制造、航空航天、医疗器械等领域。深入了解双磨工艺产生的材料去除机理,可为 GaN 基纳米器件的设计提供指导。本研究采用分子动力学(MD)模拟研究了石墨烯润滑下氮化镓晶体的双金刚石磨粒磨削的去理机理,对表面形貌、磨削力、应力分布和亚表面损伤行为进行了系统研究。结果表明,石墨烯可以提高氮化镓衬底的耐磨性,降低表面磨损、温度、势能和亚表面损伤,对衬底起到保护作用。随着磨削深度的增加,磨削力和次表面损伤深度也随之增加。其次,分析了磨粒间距对亚表面损伤深度和相变原子的影响,发现其对材料的去除效率影响很小。此外,在低磨削深度下,衬底表面表现出超润滑。这些结果加深了我们对双磨工艺产生的材料去除和保护机制的理解,并为砂轮的合理设计提供

了有价值的见解。

Z-P22

基于氧化钒薄膜的双层红外焦平面阵列的设计与仿真

行琳、王晗、王如志*

北京工业大学材料科学与工程学院

近年来,微测辐射热计非制冷型红外探测器由于其便携性优异、成本低廉和优异的性能,已成为红外探测器中的研究热点。然而,传统单层器件在填充率提升与热学性能改善之间存在冲突,限制了其器件性能的进一步提升。因此,本文针对双层微测辐射热计结构优化进行了系统研究,设计并仿真了双层红外微测辐射热计。通过研究不同结构尤其是“伞”状结构和工艺参数对器件热学性能及电学性能的影响,并进行了其结构优化。结果表明,探测单元的主要热电参数,如电压响应率、热响应时间和 NETD(噪声等效温差)等,通过结构优化,均得到了显著提升。此外,我们工作中所提出的微桥设计仿真方法,可显著提高器件设计效率和精度,缩短研发周期,可用于超大规模小像元非制冷红外焦平面探测器的设计。本工作不仅为双层微测辐射热计的设计和优化提供了理论指导,也将为未来高性能、低成本的红外探测器开发提供了新的涉及思路和方法。

Z-P23

3C-SiC 晶体表面在固液界面下的均匀生长及缺陷演变

刘贵阳、高廷红*

贵州大学

碳化硅 (SiC) 在通信、显示器和照明等多个领域的设备中起着至关重要的作用。碳化硅生长的质量对于高性能碳化硅器件的制造至关重要;因此,探索其生长机制非常重要。本文采用基于分子动力学的方法,基于固液模型模拟了 3C-SiC 晶体的诱导结晶过程。此外,我们提出了一个不均匀晶体生长程度的表达式,使我们能够动态和定量地描述晶体生长过程。结果表明:低温下晶体生长质量不理想,缺陷密度高,晶面生长不均匀;此外, SiC 晶体生长过程在每个晶体生长方向上都产生了竞争性的生长模式,晶体优先沿着生长竞争相对较低的方向增殖。尽管系统表现出位错和空隙缺陷,但这些缺陷的数量在弛豫过程中表现出相反的趋势。此外,随着晶体表面的逐渐增长,涉及用晶体原子填充凹面的过程逐渐转移到系统内的非晶隙中。最后,本研究为 SiC 晶体的形成提供了见解。

Z-P24

基于机器学习的锻造/增材复合制造 TC17 合金疲劳寿命预测

王百涛、王皞*

上海理工大学

锻造与增材制造相结合的复合制造技术被广泛应用于零件修复,对其性能的精确预测至关重要。然而,增材制造钛合金部件的疲劳性能数据大多不足且分散,给疲劳寿命建模带来了困难。本工作中,利用机器学习方法系统地研究了孔隙的大小和位置对 TC17 样品旋转弯曲疲劳循环的协同效应,同时配合基于应力集中的物理模型,以实现疲劳寿命的精确预测,置信度达到在 90%。本工作为复合制造钛合金的疲劳性能预测提供了一个系统方案。

Z-P25

基于深度学习分子动力学的不同压力下水的结构和动力学性质研究

骆鹏、许晨涛、牛海洋*

西北工业大学

水的复杂氢键网络结构赋予了其非凡的物理特性，成为生命和物质传输的重要载体。水的氢键网络结构与所处的温压条件息息相关[1]。在一定压力下，水的氢键网络将向更加致密的形态转化，同时伴随着分子局域结构、可压缩性和动力学性质的变化[2,3]。这种结构变化也导致水的自扩散系数随压力增加而呈现出反常行为[4,5]。然而，对于不同压力条件下水的结构和动力学行为仍然缺乏系统性的研究。从原子尺度出发研究水对压力的响应方式是理解其结构和动力学行为演化规律的关键。受限于时空分辨率，现有实验研究手段难以直接原位观察水的动态结构演化。以分子动力学为代表的计算机模拟为我们理解这一过程提供了有效途径。本报告基于第一性原理精度的深度学习分子动力学，系统研究了 1 bar ~ 10 GPa 范围内水的结构及动力学演化特征，旨在揭示压力对水结构的影响以及水分子在不同压力下的动力学特性响应机制。

[1] Urquidi J, Cho C H, Singh S, Robinson G W. Temperature and pressure effects on the structure of liquid water[J]. Journal of Molecular Structure, 1999, 485-486: 363-371.

[2] Katayama Y, Hattori T, Saitoh H, et al. Structure of liquid water under high pressure up to 17 GPa[J]. Physical Review B, 2010, 81(1): 014109.

[3] Schwegler E, Galli G, Gygi F. Water under Pressure[J]. Physical Review Letters, 2000, 84(11): 2429-2432.

[4] Krynicki K, Green C D, Sawyer D W. Pressure and temperature dependence of self-diffusion in water[J]. Faraday Discussions of the Chemical Society, 1978, 66: 199-208.

[5] Fanetti S, Lapini A, Pagliai M, et al. Structure and Dynamics of Low-Density and High-Density Liquid Water at High Pressure[J]. The Journal of Physical Chemistry Letters, 2014, 5(1): 235-240.

Z-P26

石墨烯涂覆对晶体硅划痕损伤的影响:分子动力学视角

张展、李连欣、高廷红*、陈茜、谢泉、肖清泉

贵州大学大数据与信息工程学院新型光电子材料与技术研究所

研究超精密加工条件下硅材料的损伤行为对提高设备性能至关重要。本研究采用分子动力学（MD）方法，模拟研究了石墨烯涂覆下单晶硅的损伤。磨料的划痕速度、划痕深度以及划痕温度被考虑。研究表明，硅工件表层涂覆的石墨烯对划痕过程中的工件内原子运动有抑制作用，表层的切屑更少；石墨烯的涂覆使磨料工具所受切向力减小而法向力增大。划痕速度的增加使表层出现褶皱形貌，而不会使石墨烯发生断裂。当划痕深度增加时，石墨烯中易发生碳-碳键的断裂，并随着磨料的移动逐渐拓展，形成大规模断裂褶皱，其对工件内原子的抑制作用失效。划痕温度的增加，显著促进了硅晶体的非晶化；由于石墨烯涂层的抑制作用，在工件表面的划痕过程中，很少有切屑聚集在刀具前方。然而，刀具通过的表面留下更多的碎屑，形成更强的皱纹，并在更高的温度下使加工表面更加粗糙。

Z-P27

二维反铁磁双层中的无间隙边缘态

邹晓蓉

山东大学物理学院

磁性材料中的拓扑量子态为探索量子反常霍尔效应和反铁磁拓扑绝缘体等拓扑自旋电子学物理现象和应用提供了一个有利的平台。尽管三维反铁磁拓扑绝缘体已经得到了实验证实，但在二维反铁磁体中实现具有无带隙螺旋边缘态的非平凡拓扑相仍然存在挑战。基于第一性原理计算和紧束缚模型，我们在具有 C_3 旋转对称性的本征反铁磁 X_3MnN_3 ($X = Sr$ 和 Ba) 双层中发现了具有谷极化的无带隙边缘态。此外，通过电控方法，我们证明了该材料中稳定的反铁磁序能够实现拓扑相变，从而实现了反铁磁量子反常霍尔效应。另一方面，通过操纵二维材料中的堆叠结构，我们通过堆叠具有相反手性的陈绝缘体可以产生无带隙

螺旋边缘态。我们的研究结果揭示了磁性和能带拓扑之间的相互作用，为无耗散自旋电子器件的开发和新量子现象的探索提供了新的思路。

Z-P28

具有逐层破坏行为的钛合金梯度点阵计算设计

马玉婷、郭政杰、王皞*、岳学峥

上海理工大学 材料与化学学院/增材制造研究院

点阵结构在保证力学强度的前提下可同时满足轻量化及多功能化的要求，在航空航天等领域应用广泛。而随着应用对点阵性能的要求不断提高，亟需借助计算模拟和增材制造技术等先进技术，设计和制备更为复杂的点阵结构。基于有限元模拟，对不同基体性能的 TC4 合金，设计空隙率逐层变化的拓扑优化结构梯度点阵，并模拟其压缩变形行为，发现在相同的总空隙率下，梯度点阵比均匀点阵的压缩性能更好；压缩性能随空隙率梯度的变化而变化，并且存在一个最佳梯度与材料本征性能的组合，使总的吸能效果最佳。基于激光粉末床熔覆技术制备了 TC4 合金梯度点阵结构，验证了逐层破坏行为。相关结果为航空航天用点阵结构的性能优化及其结构功能一体化设计提供了理论支撑。

Z-P29

二维本征三铁材料中无需拓扑相变的角态操纵

冯晓冉、牛成旺*

山东大学

高阶拓扑绝缘体因其独特的体-边对应关系及其在拓扑电子学中的应用前景而受到广泛关注。尽管这一领域取得了显著进展，但在不经过拓扑相变的情况下操纵拓扑角态仍然难以实现。本研究从理论上提出了在二维本征三铁性材料中无需拓扑相变即可操纵高阶拓扑角态的一般机制，并给出了 $\gamma\text{-FeO}_2\text{H}$ 单层和 $1\text{T}'\text{-CrCoS}_4$ 单层作为材料候选者。在面内自发铁电极化作用下，电子将获得横向速度，导致在垂直于极化方向的镜面对称角上出现非平凡角态。值得注意的是，不同于以往通过拓扑相变实现的方案，我们提出通过铁弹相变可以有效地控制角态的空间分布。我们的工作推动了多铁性在拓扑自旋电子学中的发展。

Z-P30

Biomimetic Surfaces: Assessing Free Energy Barrier Using Molecular Simulation

Fan Meng, Noriyoshi Arai*

Keio University

The wettability of solid surfaces is intricately linked to surface energy and roughness, with nano- or micro-texturing serving as a common strategy to control hydrophobicity. In nature, organisms such as lotus leaves and butterflies have evolved superhydrophobic surfaces, inspiring multiple applications of bio-inspired materials. Molecular simulations unveil the transition between Wenzel and Cassie states on the rough surface of biomimetic materials, underscoring the pivotal role of free energy barriers in this process.

Moreover, this study compares the nanostructures of two biomimetic materials: the eye of the mosquito and the wing of the butterfly. Both biomimetic nanostructures exhibit a strong correlation between the spacing and height of surface protrusions and the magnitude of the free energy barrier. Manipulating the height and spacing of roughness can alter the magnitude of the free energy barrier, thereby rendering the material region hydrophilic or hydrophobic.

This study systematically categorizes droplet states on solid surfaces, aiming to utilize a novel free energy barrier evaluation system to guide the design of solid surfaces with superhydrophobic properties. By establishing the relationship between free energy barriers, surface parameters, and hydrophilicity, it seeks to deepen our

understanding of hydrophobicity in biomimetic materials.

Z-P31

钛合金梯度点阵设计及其激光粉末床熔覆技术制备

郭政杰、马玉婷、王峰*、岳学峥

上海理工大学,材料与化学学院/增材制造研究院

点阵结构具有质量轻、比表面积大、比强度高等特点,广泛地应用于航空航天、生物医疗等领域。但在一些特殊应用下,如何平衡其重量、力学性能仍然是设计点阵结构时所面临的挑战。梯度点阵结构能够大幅度改善残余应力分布、增强热性能、提高断裂韧性,比均匀点阵结构的能量吸收率更高,力学性能更好。本研究首先通过有限元模拟,设计了具有梯度拓扑优化结构的 TC4 合金点阵;进而基于激光粉末床熔覆技术进行工艺优化,制备出致密的 TC4 合金梯度点阵结构,实现了逐层破坏行为,获得较好的总吸能效果,并结合后处理工艺,实现其综合性能优于均匀点阵。相关结果为航空航天用部件的结构功能一体化设计提供技术基础。

Z-P32

TiZrNbVAl 高熵合金间隙氧占位的第一性原理研究

刘锐丽、袁佳淳、王峰*

上海理工大学

间隙氧在高熵合金中的占位表现出明显的短程有序现象。相较传统合金的间隙原子固溶,存在择优占位现象的含氧高熵合金在晶体结构和力学性能方面均会产生明显区别。本工作采用第一性原理计算研究了 $\text{Ti}_3\text{Zr}_{1.5}\text{NbVAl}_{0.25}$ 高熵合金中间隙氧的择优占位及其物理根源。结果表明,氧原子在 $\text{Ti}_3\text{Zr}_{1.5}\text{NbVAl}_{0.25}$ 高熵合金中形成能均为负值,表明氧能够稳定固溶在合金内部。此外氧原子的形成能大小同间隙配位金属原子之间表现出明显的相关性:Ti、Zr 配位环境时形成能低而 Al 配位环境时则相反。电子结构分析揭示了氧原子择优占位的原因:氧原子在合金内的占位情况主要取决于电荷转移量,氧原子同配位金属原子之间的电荷转移量越多,键和作用越强,则结构越稳定。因此,间隙氧倾向于占据富含 Ti 和 Zr 原子的配位环境,以实现更多的电荷转移。相反,Al 和 O 之间最小的电荷转移和短程排斥作用力阻碍了间隙氧的固溶。力学性能计算的结果表明,掺杂间隙氧原子有助于 $\text{Ti}_3\text{Zr}_{1.5}\text{NbVAl}_{0.25}$ 高熵合金力学性能的改善。相关研究结果有助于高性能轻质难熔高熵合金的成分设计。

Z-P33

位错网络对辐照缺陷及材料力学性能影响的分子动力学研究

李文华、高宁*

山东大学

位错网络在材料微观结构的演化及相应的力学性质中起着至关重要的作用,在辐照条件下,位错网络对辐照损伤的影响更加突出,例如,位错网络对空位和间隙子的偏向性吸收,以及位错网络与大尺寸的辐照缺陷之间的相互作用对材料肿胀、硬化和脆化的影响。对于此关键问题的研究,到目前为止,在原子尺度,研究人员对于单一位错线与不同缺陷之间的相互作用已经进行了大量的研究,但对位错网络的研究却很少,特别是位错网络的存在对位移级联、缺陷演化及力学性质的影响,没有系统研究,而这些情形比单根位错线与缺陷的相互作用更接近材料实际服役条件。

针对上述关键科学问题,本研究首次构建了大规模不同位错密度的原子尺度计算模型,基于分子动力学方法首先系统模拟了不同位错密度的位错网络与位移级联之间的相互作用,结果发现,与单根位错线结果不同,位错网络存在时,位错网络吸收了大量的间隙子,同时,位移级联会造成位错网络形成更多的位错片段或位错在缺陷富集区终结,从而形成更多的空位;级联过程中,位错反应同步进行,造成位错的滑移

和攀移，并导致由位错线上吸收或发射缺陷，特别是通过形成位错割阶，释放出更多的空位，获得不同于单根位错线与位移级联相互作用的结果，也发现了位错线密度对上述过程的影响。此外，在此位移级联模拟的基础上，开展了级联前后的拉伸和剪切应力应变模拟，研究了位错网络对辐照材料力学性能的影响。结果发现，位错网络，特别是其中的位错结及形成的高浓度的空位和团簇，会显著影响材料的力学性能。这些结果表明，不同于单个位错线，位错网络对辐照损伤的影响更加明显，特别偏向性形成空位及空位团簇对辐照损伤的影响，需要未来的计算模拟和实验研究中深入探索。

Z-P34

中子辐射下基于多尺度模型的 4H-SiC 中缺陷演化与深能级鉴定

高扬^{1,2}、刘俊^{1,2}、晏晓岚³、张传国²、李永钢^{*1,2}、曾雉^{1,2}

1. 中国科学技术大学
2. 中国科学院固体物理研究所
3. 北京计算科学研究中心

4H-SiC 基底电子器件由于耐高温，抗辐照等特点，常服役于核电、航天装置等强中子辐射环境中，产生大量位移缺陷。其中的深能级缺陷作为复合中心，会严重降低材料中载流子寿命与浓度，进而影响器件的光电性能。然而实验常用探测手段光致发光，深能级瞬态谱(DLTS)，电子顺磁共振等都无法直接观察材料中电子/空穴的捕获与重组；缺陷的产生、迁移与反应，更难以准确标定中子辐照后 4H-SiC 中深能级缺陷种类。我们用基于二体碰撞近似理论(IM3D)和实体动力学蒙特卡洛(MMonCa)方法相结合的多尺度模拟方法，研究了受中子辐照并退火后重 N 离子掺杂 4H-SiC 材料中位移缺陷的产生演化过程。揭示了三个退火阶段的主导因素；并基于 Shockley-Read-Hall(SRH)理论，模拟了存活深能级缺陷的充放电过程，获得了特征峰位、强度与实验相一致的 DLTS 模拟结果。实现了对存活深能级缺陷的鉴定。结果为理解 4H-SiC 电子器件光电性能退化机制并改进其抗辐照性能提供了理论指导。

Z-P35

Methoxy Photodissociation on Metal Oxide Surfaces Is Driven by Transient Capture of Hot Carrier: Ab Initio Quantum Dynamics Simulation

Siyi Wu, Weibin Chu*

Fudan University

The dynamics of photogenerated carrier at the molecule/TiO₂ interface are of great significance for enhancing photocatalysis and photovoltaic processes. It has been established that the chemisorbed methoxy anion CH₃O⁻, rather than methanol CH₃OH, acts as an effective hole scavenger. However, there remains a significant discrepancy in the timescales of inverse hole transfer between theoretical predictions and experimental observations. In this work, we explore the dynamics of photoexcited carriers and associated photodissociation processes at the CH₃O⁻/TiO₂ interface using ab initio non-adiabatic molecular dynamics simulations combined with hybrid functional. We find that strong hybridization between the molecule and the surface enables CH₃O⁻ to transiently capture holes, forming the methoxy radical CH₃O[•]. This formation shifts the HOMO of the molecule away from the valence band maximum, which inhibits reverse hole transfer and effectively prolongs carrier lifetime. Additionally, the transient captured photoexcited hole can finally result in the photodissociation of the molecule, leading to the oxidation of methoxy into formaldehyde. Our findings not only rationalize experimental observation but also provide profound insights into the mechanisms governing photogenerated carrier dynamics at the molecule/semiconductor interface.

Z-P36

石墨烯/铜的界面改性和力学性能的第一性原理研究

师荣荣、刘恩佐*

天津大学

石墨烯增强铜基复合材料中, 石墨烯和铜之间弱的界面结合限制了石墨烯的强化效果, 在界面处引入过渡金属元素, 是改善石墨烯/铜界面结合的有效策略。然而, 由于实验表征手段存在局限性, 难以深入研究微观改性机制。本文基于第一性原理计算, 研究了过渡金属元素 (Ti、Cr、Ni、Co 等) 界面掺杂对石墨烯/铜界面结合和力学性能的影响, 揭示了界面掺杂改性的微观机制, 确立了界面结合和力学性能的定量关系模型, 为石墨烯/铜的实验设计提供有力的理论指导。采用铜/石墨烯/铜的三明治模型模拟了过渡金属掺杂界面, 并结合电子结构证实了三明治模型优于简单的吸附模型。计算发现过渡金属界面掺杂有效提高了石墨烯/铜界面的分离功, 过渡金属元素对分离功的提高顺序均为 Ti 掺杂 > Cr 掺杂 > Ni 掺杂 $\approx$ Co 掺杂, 这与过渡金属元素和铜元素之间的电负性差值相关。采用刚性拉伸和弛豫拉伸研究了清洁界面和过渡金属元素掺杂界面的力学性能。结果表明, 在刚性拉伸下, 不同过渡金属元素掺杂界面的理论拉伸强度与其分离功成正相关, 相对大小顺序为 Ti 掺杂 > Cr 掺杂 > Ni 掺杂 $\approx$ Co 掺杂 > 清洁界面。而采用弛豫拉伸时, 弛豫过程中内应力的释放使各界面的理论拉伸强度较刚性拉伸降低, 尤其是 Cr 掺杂界面。结合拉伸过程中不同应变下的电荷密度和界面间距变化分析拉伸断裂机理, 得出过渡金属的电负性是影响力学性能的重要因素。将电负性参数引入拟合方程, 研究确立了界面结合和力学性能之间的定量关系, 定量说明了电负性对石墨烯/铜界面结合和力学性能的重要影响作用。

Z-P37**Pt 表面析氢反应阳离子效应的理论研究**

冀旭、乐家波*

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

在低电位/低浓度下 Li 离子和 K 离子都会促进 HER 反应, 而在高电位/高浓度下, K 会抑制 HER 反应。为了理解不同离子在不同浓度下的界面结构, 我们进行了 classical MD 模拟, 在大尺度下对界面处的水结构进行了模拟, 发现界面处的结构与表面电荷密度相关, 表面电荷密度大则界面处离子浓度越高, 离子去水合现象越明显, 这种水合结构的变化会影响 HER 的 Volmer 步骤。在此基础上, 我们进一步用 constrained AIMD 在界面处研究了不同离子对 Volmer 反应的影响。结合 classical MD 和 constrained AIMD 的结果, 我们发现在 Li 离子会降低 Volmer 步骤的反应能垒, 从而促进 HER 反应。

Z-P38**ABX₂ 化合物中被有序-无序相变隐藏起来的混合配位结构**梁汉普¹、魏苏淮^{*2}

1. 北京计算科学研究中心

2. 宁波东方理工大学

材料的晶体结构本质上由其化学键性质所决定, 因此原子配位通常与材料的离子性、共价性紧密相关。基于这一原理, 具有相似化学成分的材料可以成功地归类为不同的配位组。然而, 在复杂的三元化合物中最近出现了反例。例如, 强共价性的 IB-III_A-VI_A2 化合物, 如 AgInS₂, 倾向于选择四面体配位结构 (TCS), 而强离子性的 IA-VA-VI_A2 化合物, 如 NaBiS₂, 则倾向于选择八面体配位结构 (OCS)。自然地, 人们预期 IB-VA-VI_A2 化合物, 在离子性或共价性上居中的, 如 AgBiS₂, 应为混合配位结构 (MCS), 其由共价 AgS₄ 四面体和离子 BiS₆ 八面体形成。令人惊讶的是, 实验中仅观察到 AgBiS₂ 的有序与无序 OCS 相。为了解决这一难题, 我们进行了有限温度下三元化合物相稳定性的第一性原理研究。我们发现 AgBiS₂ 确实在基态偏好 MCS, 符合预期。但在实验合成条件下, 由于其低混合能和高构型熵, 无序的 OCS 具有更低的自由能, 从而实验更容易发现无序 OCS 而非 MCS。我们的工作阐明了 MCS 的构型无序在热力学稳定性上的关键作用, 为 IB-VA-VI_A2 化合物中的异常配位倾向提供了严谨的理论依据。

Z-P39

机器学习势辅助计算铁电材料中的电卡效应

许雄、王辉*

中南大学

单层电致冷材料作为实现经济和绿色固态制冷的有希望的候选材料，在摩尔定律后期的微尺度或纳米尺度芯片冷却中尤为突出。在这项工作中，我们训练了一个基于机器学习的深度势能（DP）模型，用于单层 IV 族单硫化物 MXs ($M = \text{Ge}, \text{Sn}; X = \text{S}, \text{Se}$)，该模型结合了从头算分子动力学的准确性和经典方法的效率。DP 模型进一步应用于研究单层 MXs 中的电致冷效应（ECE），通过模拟不同外部电场下的温度驱动相变和电极动力学。结果表明，MXs 在有序-无序相变附近具有巨大的可逆等温熵变 (ΔS) 和绝热温度变化 (ΔT)。特别是，对于 $E = 100 \text{ MV/m}$ ，GeS 获得了 $|\Delta S| = 68 \text{ J/(kg}\cdot\text{K)}$ 和 $|\Delta T| = 74 \text{ K}$ ，这些数值分别与最先进的 ECE 性能指标相媲美，超过了大多数其他铁电材料，特别是 2D CuInPS 和应变 SrTiO₃ 薄膜。此外，电场移动 10 MV/m 产生了巨大的可逆电致冷强度 $\Delta S/\Delta E = 5.4 \text{ J m kg}^{-1} \text{ K}^{-1} \text{ MV}^{-1}$ 和 $\Delta T/\Delta E = 6 \text{ K m MV}^{-1}$ 。通过对宏观热力学比率、现象学 Landau 理论和微观声子振动分析，解释了 MXs 中巨大 ECE 的起源。有趣的是，熵变可以近似地与极化变化的平方 (ΔP^2) 成比例，并且电场的应用将低频声子移动到更高的频率范围，其中 M 原子对熵变的贡献大于 X 原子。本工作为探索和设计未来实际应用中的 2D 电致冷材料提供了重要的见解。

Z-P40

第一性原理计算研究合金化元素对 7xxx 系铝合金析出相性能的影响

黄艳、张亮*

重庆大学材料科学与工程学院

7xxx 系铝合金具有高强度、高韧性等一系列优势而被广泛应用，但为了追求优良的综合性能，同时提高其强度与热稳定性是目前的研究热点之一。针对 7xxx 系铝合金中常用的合金化元素 Sc、Zr、Er，本文考虑其可能会形成纳米析出相、固溶于析出相、偏聚在析出相界，三种存在形式，利用第一性原理计算，从结构稳定性、力学性能以及热力学性能，讨论了合金化元素的不同存在形式对 7xxx 系铝合金析出相性能的影响。总的来说，对于 L1₂ 型纳米析出相 Al₃X ($X = \text{Sc}, \text{Zr}, \text{Er}$)，Al₃Zr 的结构稳定性和综合力学性能最好，另外三相均具有良好的高温结构稳定性；此外，为了更好的模拟元素固溶至析出相的现象，本文建立了各元素随机掺杂至 η (MgZn₂) 析出相的模型，根据计算结果，本文认为 Sc、Zr、Er 均偏向侵占 η 析出相的 Mg 位点，并且升高掺杂元素浓度，可以增强掺杂 η 析出相的结构稳定性。另外，Sc 对 η 析出相的硬度、塑性、各向异性无明显改善效果，而过量的 Zr 可以提高其刚度，但同时也会增大 η 析出相的各向异性；Er 的加入并不能提高 η 析出相的硬度和刚度，通过控制浓度可以提高其塑性。

Z-P41

二维共价有机框架 1,3,5-HPB-COF 膜用于高效海水淡化

袁美丽、屈媛媛*

山东大学

随着全球人口增长、城市化加速以及全球气候变暖等因素的影响，淡水资源短缺已成为全球面临的重大挑战之一。高度有序的二维多孔共价有机框架材料为设计和制造高效海水淡化膜带来了新的机遇。通过分子动力学模拟，我们发现多层堆叠的 1,3,5-HPB-COF 展现出卓越的海水淡化性能。特别是，三层膜不仅具备卓越的水渗透率，同时有效阻挡了大部分离子。这一出色的表现主要得益于其独特的向层间伸展的侧链结构，这不仅有效提升了膜的孔隙率，而且阻碍了水分子在层间的自由扩散，从而促进了水分子的穿膜运动。通过对水分子的微观性质分析，我们观察到水分子在 1,3,5-HPB-COF 膜中具有穿膜速度快和氢键网

络稳定等特点,有利于水分子的快速输运。此外,定量自由能分析进一步揭示了水分子仅需克服较低的能垒,而离子则需要克服更高的能垒。这一能垒差异增强了膜对水分子和盐离子的选择性,从而实现了高效的脱盐。因此,1,3,5-HPB-COF 膜展现出作为高效海水淡化半透膜的巨大潜力,具有显著的应用价值。

Z-P42

纯铝位错运动特性计算模拟研究

张恺¹、廖卓晶¹、张亮^{*1,2}

1. 重庆大学 材料科学与工程学院 轻合金材料国际合作联合实验室

2. 重庆大学 沈阳材料科学国家研究中心轻金属材料研究部

位错几乎存在于所有的晶体材料中,其对材料的物理性能,尤其是力学性能,有着极大的影响。作为材料塑性变形最基本的形式之一,位错运动直接影响着材料变形的机制、方式以及结果。然而目前实验技术非常有限,难以直接跟踪快速位错。金属中位错的运动特性在分子动力学模拟中虽然已经有了一定的研究,但是对刃型位错和螺型位错在热激活阶段和粘性拖曳阶段运动速度和温度的关系缺乏系统性的认识。本研究采用分子动力学(MD)计算方法,从原子尺度聚焦于铝单晶中刃型、螺型位错的运动性质,主要分析不同温度(10K,100K,300K,500K)和应变速率(0.01Å/ps,0.05Å/ps,0.1Å/ps,0.2Å/ps)下的位错运动规律以及临界应力大小。研究表明,铝中刃型位错和螺型位错运动时都处于粘性拖曳阶段,即位错运动速度均随温度升高而降低,随应力增大而升高,且近似呈现线性关系,但刃型位错运动速度远大于螺型位错的运动速度,这与刃型位错的拖曳系数以及临界切应力更大有关,计算所得螺型位错拖曳系数约为刃型位错的 1.83 倍。本研究的计算方法和结果为进一步深入研究合金元素在位错动力学中的作用提供了基础,也为深入探讨多晶体位错运动过程的变形和强化机理的计算模拟提供了强有力的工具。

Z-P43

通过多层 ABC 堆叠的大孔共价有机结构中的曲折路径实现高性能海水淡化的理论研究

吴文凤、屈媛媛*

山东大学

淡水资源的匮乏对全球可持续发展和人类福祉构成了不容忽视的威胁。探索和开发用于海水淡化的最先进的半透材料可能是解决这一问题的一个潜在方案。在本研究中,我们揭示了一种新合成的多层共价有机框架材料(ABBPM)的海水淡化潜力,其水通量高达 52 L/cm²/day/MPa,同时,对 NaCl 的排斥率也达到 97%。ABBPM 的卓越性能得益于其独特的结构特性——拥有大孔径(约 3 nm)和宽有机骨架(约 0.94 nm),并通过有序的 ABC 堆叠模式,构建了一条曲折但通畅的水流通道,极大地提升了过滤效率。通过深入的自由能分析,我们发现相较于水分子所面临的较低能量障碍(约 4 kJ/mol),离子在穿越 3 层 ABBPM 膜层时所遇到的能量障碍明显更高(约 9 kJ/mol 和约 11 kJ/mol),而这主要归因于其宽阔的有机骨架结构。值得一提的是,多层 ABBPM 膜上水的转移速度甚至超越了单层石墨烯或 MoS₂ 纳米孔中的速度。这一发现不仅证实了 ABBPM 作为高效海水淡化材料的巨大潜力,而且针对孔径尺寸超越水合离子直径的多层多孔材料,提出了具有前瞻性的战略设计方法,确保其在高效脱盐过程中发挥关键作用。这一进步为海水淡化领域开辟了新的道路,为进一步扩大海水淡化可用膜材料的范围提供了坚不可摧的支撑。

Z-P44

Strain-improved separation of CO₂/N₂ by the nanoporous r-N-GDY monolayer

Yunan Wang, Yuanyuan Qu*

Shandong University

Utilizing nanoporous membranes for efficient CO₂/N₂ separation presents a promising strategy for addressing climate change and related environmental issues. In this work, we employed first-principles

calculations and molecular dynamics simulations to investigate the separation efficiency of the monolayer *r*-N-GDY membrane in separating CO₂ from N₂ under uniaxial tensile strain. Our simulation results demonstrated that, at room temperature, strain along the zigzag direction of the *r*-N-GDY membrane leads to efficient separation of CO₂ from N₂, with a CO₂/N₂ selectivity of ~ 311 and a CO₂ permeance of $\sim 5.5 \times 10^{-3} \text{ mol m}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ Pa}^{-1}$ at 3% strain, surpassing the industry standard by 6 orders of magnitude. Further increasing the strain to 4% results in ultrahigh selectivity for CO₂/N₂, alongside a satisfactory CO₂ permeance of $\sim 3.7 \times 10^{-4} \text{ mol m}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ Pa}^{-1}$, likely due to the strong confinement of the nanopore to N₂ molecules. This is further supported by the density of states analysis, which reveals greatly enhanced high-frequency rotational modes for N₂ along the short axis of the nanopore, indicating that the confinement is primarily imposed by the negatively charged nitrogen atoms defining the length of the short axis. Moreover, quantitative free energy barrier calculations indicate that the outstanding separation performance originates from the higher energy barriers for N₂ (i.e., 37.5 kJ/mol at 4%) compared to the lower energy barriers for CO₂ (i.e., 18.9 kJ/mol at 4%) under the same strain level. In conclusion, this study proposes the monolayer *r*-N-GDY membrane as a strain-tunable and high-performance material for efficient separation of CO₂ from N₂. The findings highlight the potential of using strain engineering to enhance membrane separation technologies, offering a significant advancement towards sustainable and effective gas separation solutions.

Z-P45

集成电路溅射靶材用 Cu-Zn-Sn 合金涡流抗性机理研究

彭博¹、郭泽宁¹、岳秦池¹、黄蕾²、李丹丹^{1,2}、王长昊*¹、王冰¹、王如志¹

1. 北京工业大学材料科学与工程学院, 新型功能材料教育部重点实验室, 北京 100124

2. 中色创新研究院(天津)有限公司, 天津, 300380

随着磁控溅射技术的发展, 为了进一步提高靶材利用率, 在原有磁控溅射技术基础上发展出了许多特殊的磁控溅射方法, 旋转磁场法就是其中之一, 其具有增加溅射面积, 提高靶材利用率等特点。然而由于磁场旋转, 靶材背板内部产生涡流, 在材料内部转化为热能, 给靶材和背板散热造成负担。同时, 涡流感生的磁场还会影响溅射的均匀性和溅射效率。近年来的背板材料研究中, Cu-Zn-Sn 合金材料被报道认为具有优良的涡流抗性, 但由于合金材料制备的影响因素较多且具有一定复杂性, 目前对于 Cu-Zn-Sn 合金系统性的研究较少。本文采用第一性原理计算结合有限元分析的研究方法, 研究 Cu-Zn-Sn 合金背板的微观及宏观涡流特性。通过第一性原理计算对 Cu-Zn-Sn 合金的微观结构进行建模分析, 计算出不同元素配比条件下 Cu-Zn-Sn 合金的导电率、热导率等性能参数。然后, 利用有限元分析方法建立 Cu-Zn-Sn 合金背板的磁控溅射模型, 将第一性原理计算得到的材料性能数据作为有限元分析方法材料性能相关的输入参数, 从而将两种方法耦合起来, 研究不同元素配比下 Cu-Zn-Sn 合金的涡流分布特征, 获得最优元素配比范围。本工作为背板材料基础研究及产品开发提供详实的数据及理论支撑, 降低试错成本, 从而促进高性能靶材背板的开发。