



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

**FB04-青年学者前沿闪报大讲台**

**Organized by**

Chinese Materials Research Society

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

## FB04 青年闪报大讲台

**Correlating Single-Atomic Ruthenium Interdistance with Long-Range Interaction Boosts Hydrogen Evolution Reaction Kinetics**

Bowen Jiang, Litao Sun, kuibo Yin

SEU-FEI Nano-Pico Center, Key Laboratory of MEMS of Ministry of Education, Southeast University

As the global energy crisis and environmental deterioration deepen, the promotion of clean and sustainable energy while decreasing non-renewable resource usage is a crucial scientific research task. Hydrogen, an energy source that is clean, has high energy density, and emits no carbon, has generated significant interest<sup>[1]</sup>. However, electrocatalysts for electrochemical hydrogen precipitation reactions require highly efficient and stable materials typically reliant on costly and scarce precious metals like Pt to reduce overpotential<sup>[2]</sup>. This creates a barrier to widespread applicability. Consequently, the development of low-cost, durable, and high-performance catalysts is of paramount importance.

Among the novel discoveries, single-atom catalysts (SACs) have drawn significant attention due to their exceptional performance in a wide range of catalytic applications<sup>[3]</sup>. With the catalyst particle size reducing to the atomic level, SACs provide uniform active site comparable to homogeneous catalyst, achieving theoretical 100% atomic efficiency with well-defined active sites and unsaturated coordination environment<sup>[4]</sup>. Although SACs offer a viable alternative to conventional catalysts, yet their simple structure and insufficient synergistic active sites limit their performance when dealing with complex electrocatalytic reactions. Therefore, optimizing metal center and surrounding ligand interaction can enhance SAC performance further, and Correlated Single-Atom Catalysts (*c*-SACs) are a potential solution to achieve this optimization. Moreover, at high SAC loads, metal atoms are more likely to form diatomic pairs, which is necessary to explore the field of *c*-SACs. Hitherto, *c*-SACs have drawn considerable attention in recent years due to their amazing high activity and selectivity in electrocatalytic reactions<sup>[5]</sup>. Compared to SACs, *c*-SACs composed of two atoms of different isotopes or elements introduce synergistic effects and exhibit higher electrocatalytic activity and selectivity<sup>[6]</sup>. Notably, the long-range interaction (LRI) between the two atoms in the *c*-SACs plays a crucial role in determining its performance<sup>[7]</sup>. The LRI in *c*-SACs predominantly relies on the electrostatic forces between the two atoms, and this interaction is greatly influenced by slight variations in interatomic distances and can be harnessed to manipulate the catalyst's electronic structure. A pioneer study revealed that the modulation of SAD in the *c*-SACs near the peak or valley of a wave intensified the LRI to a certain degree<sup>[8]</sup>, thus resulting in enhanced electrocatalysis. Consequently, the interatomic distance between the two atoms is a crucial factor in understanding the essential mechanism from the atomic level, constructing the structure-activity relationship and then designing efficient electrocatalysts.

Herein, we have designed new binuclear metal-organic complexes to control interatomic distance, discuss the impact of LRI on diatomic electrocatalysts and analyze its effects on their electrocatalytic performance. We report three kinds of catalysts,  $Ru_{d=9.3 \text{ \AA}}$ ,  $Ru_{d=7.0 \text{ \AA}}$  and  $Ru_{d=2.4 \text{ \AA}}$  with varying atomic distances, and we find that the overpotential decreases as the interatomic distances decreases. Mass activity relative to metal of  $Ru_{d=7.0 \text{ \AA}}$  reach  $100.4 \text{ A} \cdot \text{mg}^{-1}$  at  $\eta = 100 \text{ mV}$  and the turnover frequency (TOF) of  $Ru_{d=7.0 \text{ \AA}}$  is  $17.92 \text{ s}^{-1}$  at  $\eta = 50 \text{ mV}$  higher than those of both  $Ru_{d=9.3 \text{ \AA}}$  ( $8.68 \text{ s}^{-1}$ ) and  $Ru_{d=2.4 \text{ \AA}}$  ( $5.02 \text{ s}^{-1}$ ), and such value is 143.4-fold and 228.0-fold that of 20 wt% Pt/C and 5 wt% Ru/C, respectively, demonstrating superior catalytic activity. The effect of LRI on the HER performance of the Ru-based catalysts was unveiled theoretically. Density functional theory (DFT) calculations illustrate that the d-band center of Ru moves closer to the Fermi level as the distance between two adjacent Ru atoms decreases. Moreover, the LRI is found to affect the d-band center through the highest degree of overlapping with the unoccupied O orbital, facilitating the adsorption and dissociation of water. Compared with  $Ru_{d=2.4 \text{ \AA}}$  and  $Ru_{d=9.3 \text{ \AA}}$ ,  $Ru_{d=7.0 \text{ \AA}}$  has a moderate binding capacity to hydrogen ( $-0.45 \text{ eV}$ ), creating a site for hydrogen desorption ( $\Delta G_H^* = 0.04 \text{ eV}$ ) and achieving a synergistic enhancement of adsorption and activation in the HER process, which is in line with the experimental observations.

In summary, this study demonstrated the existence of LRI and found that the Ru single-atomic interdistance

equal to 7.0 Å has the highest mass activity and ultra-high TOF.

#### References

- [1] aM. Martín, *Joule* 2023, 7, 15-17; bS. Chu, A. Majumdar, *Nature* 2012, 488, 294-303.
- [2] aB. Jiang, T. Yang, T. Wang, C. Chen, M. Yang, X. Yang, J. Zhang, Z. Kou, *Chemical Engineering Journal* 2022, 442, 136119; bD. Li, X. Chen, Y. Lv, G. Zhang, Y. Huang, W. Liu, Y. Li, R. Chen, C. Nuckolls, H. Ni, *Applied Catalysis B: Environmental* 2020, 269, 118824.
- [3] aX. Zhang, P. Chen, S. He, B. Jiang, Y. Wang, Y. Cheng, J. Peng, F. Verpoort, J. Wang, Z. Kou, *InfoMat* 2023, 5, e12421; bB. Chang, L. Zhang, S. Wu, Z. Sun, Z. Cheng, *Chem Soc Rev* 2022, 51, 3688-3734; cA. Beniya, S. Higashi, *Nature Catalysis* 2019, 2, 590-602.
- [4] aL. Zhang, J. Zhu, X. Li, S. Mu, F. Verpoort, J. Xue, Z. Kou, J. Wang, *Interdisciplinary Materials* 2022, 1, 51-87; bR. T. Hannagan, G. Giannakakis, M. Flytzani-Stephanopoulos, E. C. H. Sykes, *Chemical Reviews* 2020, 120, 12044-12088.
- [5] aY. Pan, C. Zhang, Z. Liu, C. Chen, Y. Li, *Matter* 2020, 2, 78-110; bM. A. Hunter, J. M. T. A. Fischer, Q. Yuan, M. Hankel, D. J. Searles, *ACS Catalysis* 2019, 9, 7660-7667.
- [6] R. Li, D. Wang, *Advanced Energy Materials* 2022, 12, 2103564.
- [7] W. H. Li, J. Yang, D. Wang, *Angewandte Chemie, International Edition* 2022, 61, e202213318.
- [8] G. Li, C. Fu, W. Shi, L. Jiao, J. Wu, Q. Yang, R. Saha, M. E. Kamminga, A. K. Srivastava, E. Liu, A. N. Yazdani, N. Kumar, J. Zhang, G. R. Blake, X. Liu, M. Fahlman, S. Wirth, G. Auffermann, J. Gooth, S. Parkin, V. Madhavan, X. Feng, Y. Sun, C. Felser, *Angewandte Chemie, International Edition* 2019, 58, 13107-13112.

### 有机相变复合材料的结构设计及其在太阳能转换、储存应用

吴昌梅

贵州大学

有机相变材料(PCMs)固有的导热系数(TC)差和太阳能热能转换能力差,很大程度上限制了相变材料在太阳能热转换中的应用。通过对封装材料进行结构设计可同时有效解决其易泄露、低导热和差光吸收问题。本人研究通过定向冷冻干燥技术制备了具有良好封装 PCMs 和定向传热的 3D 多孔材料,此外,通过表面光刻蚀和沉积技术赋予其高光热吸收层,研究了获得的复合 PCMs 的储能、传热及光-热/光-热-电转换性能,为具有高吸收的光热复合 PCMs 的结构设计策略提供了有价值的见解,可以缓解迫在眉睫的能源危机。

### Mass Transport Modulation by Interface Engineering in Proton Exchange Membrane Fuel Cells

Ningran Wu, Luda Wang

Peking University

Proton exchange membrane fuel cells, as a zero-carbon method of direct conversion from chemical energy to electrical energy, have an expected energy utilization rate exceeding 60%. Compared to the reversible open-circuit voltage of 1.229 V, there exists polarization, ohmic, and mass transfer losses. Mass transfer loss comes from the kinetic energy loss generated in the process of gas reaching the catalyst, accounting for over 70% of the total voltage drop, severely affecting the output power of the fuel cell. The balance of water vapor transport is key to achieving high output power, which can be achieved by adjusting the pore size, selecting suitable materials, and controlling the interface of water vapor transmission.

Due to the slippage of water on the surface of graphene and inside carbon nanotubes, rapid water transport might promote transport in the microporous layer of the fuel cell. Supercritical fluid-exfoliated graphene, as a microporous layer, compared to the carbon black, reduced surface cracks by 35% and surface resistance by 4% with only 1% graphene loading. It tripled the gas permeation rate, achieving a peak output power of 1.1 W cm<sup>-2</sup>. Electrochemical impedance spectroscopy characterization found that the high output power comes from the reduction of ohmic loss and mass transfer loss, as it decreased by 80%.

Furthermore, graphene grown from top-down and bottom-up approaches were analyzed, and the effect of graphene loading was explored. The microwave-grown graphene, with particle diameters in the hundreds of nanometers, defect density of  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$ , a high surface area of up to  $30 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$ , and a low tortuosity of about 3, is more promising to enhance the power density of proton exchange membrane fuel cells under all humidity conditions. This provides a standard for material selection and lays the foundation for designing high-efficiency energy conversion devices based on novel carbon materials.

### **Spongy and Anti-pollution MXene/Ag<sub>2</sub>S/Cellulose Acetate Membrane for Sustainable Solar-driven Interfacial Evaporation and Water Purification**

Xue Bai, Xin Huang  
Tianjin University

Solar-driven interfacial evaporation (SIE) technology stands out as a promising approach for seawater desalination, leveraging solar energy efficiently in an environmentally friendly manner. However, the enrichment of organic pollutants on the interfacial evaporator has posed significant obstacles to the sustained implementation of SIE. Herein, a spongy, anti-pollution cellulose acetate membrane consisting of Ag<sub>2</sub>S-doping MXene nanosheets (MT-Ag<sub>2</sub>S/CAM) is proposed for sustainable desalination. The MT-Ag<sub>2</sub>S/CAM exhibited ultralow water vaporization enthalpy of  $1.50 \text{ kJ g}^{-1}$ . Meanwhile, the MT-Ag<sub>2</sub>S/CAM, featured by high porosity (75.25%), excellent light absorption and salt resistance, demonstrated a notable solar-driven evaporation rate of  $1.8 \text{ kg m}^{-2} \text{ h}^{-1}$  and a remarkable photothermal conversion efficiency of 91.6% under one sun irradiation. Meanwhile, MT-Ag<sub>2</sub>S/CAM can realize a removal efficiency of 93.3% for methylene blue, exhibiting outstanding anti-pollution and self-cleaning capabilities as well as long-term stability due to its strong mechanical properties. Finally, a device for sustainable desalination, water purification and clean water collection is designed and implemented in a practical SIE process.

### **Multiple regulation mechanism of space-constrained composite electric field facilitates the ultrafast lithium/sodium-ion storage**

Qi Meng  
Shandong University of Science and Technology

The built-in electric field formed by heterostructure has been widely studied in the field of secondary battery energy storage, but most of the current research focuses on the built-in electric field formed by a single heterojunction. It is difficult for a single electric field to function adequately. Accordingly, it is of great significance to construct a stable complex built-in electric field and probe the fast electron transport rate and the transmission path, then improving the electrochemical performance of lithium/sodium ion batteries. Herein, a complex built-in electric field confined in carbon nanotube structure (Co-Co<sub>2</sub>P@C core-shell) engineering is proposed by a controllable strategy of carbon coating, etching and phosphating process. Complex electric field derived from Co|NC, Co|Co<sub>2</sub>P and Co<sub>2</sub>P|NC interfaces accelerates the charge transfer, optimizes the transmission path. The heterostructure of carbon nanotubes in the core-shell confinement structure not only protects the stability of electrode materials but also shows excellent electrical conductivity. Benefitting from its composite electric field in confined structure, Co-Co<sub>2</sub>P@C electrode exhibits the large reversible capacities, excellent rate capability and cycling performance. When it used as an anode of SIB and LIB, Co-Co<sub>2</sub>P@C shows excellent pseudocapacitance and electrochemical performance ( $220 \text{ mAh g}^{-1}$  for SIB and  $471.25 \text{ mAh g}^{-1}$  for LIB in  $0.1 \text{ A g}^{-1}$ ). When used as a lithium-ion capacitor, it can be stable for more than 7,000 cycles. This work provides a

strategy for constructing a composite electric field in confined structure for a secondary battery to get excellent electrochemical performance.

### Sub-3 nm ultrafine Cu<sub>2</sub>O for electroreduction of carbon dioxide to ethane

Fanshi Meng

Shandong University of Science and Technology

Carbon dioxide reduction reaction (CO<sub>2</sub>RR) is a promising technology to solve environmental problems. However, the CO<sub>2</sub>RR catalysts have the disadvantages of low selectivity and poor stability. The size of the nanostructured catalyst is closely related to the C<sub>2</sub><sup>+</sup> product selectivity, because the ultrafine structure not only enlarges the surface-active sites by an order of magnitude, but also improves the charge transfer efficiency. In this report, layered double hydroxide (LDH) containing three cations of Cu, Zn, Al is synthesized, and then ultrafine Cu<sub>2</sub>O with lateral dimensions of less than 3 nm are assembled on LDH support using ascorbic acid as a reducing agent under ambient conditions which is one of the smallest Cu<sub>2</sub>O particles so far. Compared with the bulk Cu<sub>2</sub>O grain, the ultrafine Cu<sub>2</sub>O grain has significantly improved the faraday efficiency of ethane (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>) by 64.73%. Double-layer capacitance analyses and BET show that the excellent CO<sub>2</sub>RR behavior of ultrafine Cu<sub>2</sub>O is mainly due to the higher surface roughness, which endows more active sites with rich defects for promoting C-C coupling and thus forming C<sub>2</sub><sup>+</sup> product. Density Functional Theory (DFT) calculations were performed to determine the intrinsic properties of the active species in cuprous oxide (Cu<sub>2</sub>O) for the reduction of CO<sub>2</sub> to ethane. This study provides a new reference for later CO<sub>2</sub>RR research.

### CeO<sub>2</sub> 晶面效应对 MgH<sub>2</sub> 储氢性能的影响

于智超、李媛、韩树民

燕山大学

氢化镁(MgH<sub>2</sub>)是一种典型的固态储氢材料,具有储氢密度高、重量轻、价格低廉等优点,但其脱氢过程所需温度较高、动力学缓慢,严重限制了其实际应用。二氧化铈(CeO<sub>2</sub>)具有丰富的氧空位,是改善 MgH<sub>2</sub> 动力学性能的极佳催化剂。本研究制备了不同形态的 CeO<sub>2</sub> 纳米颗粒(nps)和纳米棒(nrs)晶体,它们分别主要暴露出(100)和(111)晶面。不同形貌的 CeO<sub>2</sub> 对 MgH<sub>2</sub> 的吸氢和放氢过程有不同的影响。对于吸氢过程,在 150 °C 下, MgH<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub> nrs、MgH<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub> nps 在 10 分钟时的氢含量分别为 2.36、3.13 wt%。对于放氢过程而言,在 325 °C 下, MgH<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub> nrs、MgH<sub>2</sub>-CeO<sub>2</sub> nps 在 30 分钟的放氢量分别为 3.6、2.66 wt%。DFT 计算表明,(100) 晶面更容易吸附氢原子形成 CeH<sub>2.73</sub>, CeH<sub>2.73</sub> 的氢泵效应加速了氢分子的解离和氢原子在镁界面的扩散,从而改善 MgH<sub>2</sub> 的吸氢性能。(111) 晶面含有更多的氧空位,能吸引带负电荷的 H<sup>-</sup>, 加速 Mg<sup>2+</sup> 和 H<sup>-</sup> 的化学键断裂,从而提高 MgH<sub>2</sub> 的放氢性能。本工作揭示了 CeO<sub>2</sub> 不同晶面对 MgH<sub>2</sub> 吸放氢性能的影响机制,为高活性催化剂的制备与形貌调控提供了理论指导。

### n 型单壁碳纳米管自支撑薄膜的制备及其热电性能

徐鑫<sup>1</sup>、蒋丰兴<sup>1,2</sup>

1. 江西科技师范大学

2. 柔性电子江西省重点实验室

单壁碳纳米管(SWCNTs)是一种独特的一维碳同素异形体,具有结构、电学和热特性,能够实现高效的热电能量转换,被认为是最具前景的热电(TE)材料之一。在这项工作中,对 SWCNTs 采用了不同的溶剂进行分散,再通过真空抽滤的方法得到了质地均匀的 771 nm 厚的自支撑 SWCNTs 薄膜。相较于 DMSO、DMF 等有机分散剂,SWCNTs 在直接用去离子水作为分散剂的溶液中分散最好,得到了最高的电导率为

1821 S cm<sup>-1</sup>。此外，还选取了以去离子水为分散剂，对不同厚度的 SWCNTs 进行了研究。发现随着厚度的减小，薄膜的电导率在不断增加，而塞贝克系数保持恒定，因此功率因子也在不断增大，厚度为 331 nm 的薄膜得到了 2129 S cm<sup>-1</sup> 的电导率和 42.3 μW m<sup>-1</sup> K<sup>-2</sup> 的功率因子。综上所述，通过选取合适的分散剂和调节薄膜的厚度是增强 SWCNTs 薄膜热电性能的有效方法，这也为今后获得高的 TE 性能提供了参考。

### 过渡金属元素 Zr、Y、Ti 对 Sm-Mg-Ni 系超晶格合金储氢性能的影响

丛立安、王浩、张璐、李媛、韩树民

燕山大学

Sm-Mg-Ni 系合金吸/放氢平台压高，有效储氢容量大。为了进一步改善 Sm-Mg-Ni 系超晶格储氢合金的综合储氢性能，本文研究了 Zr、Y 和 Ti 等过渡金属元素对合金晶体结构和储氢性能的影响。通过感应熔炼法制备了 Sm<sub>0.78</sub>R<sub>0.04</sub>Mg<sub>0.18</sub>Ni<sub>3.40</sub>Co<sub>0.10</sub>Al<sub>0.10</sub>(R=Mg、Zr、Y、Ti)合金，在 980-1080 °C 温度范围内进行退火，在 1080 °C 退火温度下得到了 Ce<sub>2</sub>Ni<sub>7</sub> 型单相合金。分别对含 Zr、Y、Ti 等过渡金属元素的 Ce<sub>2</sub>Ni<sub>7</sub> 型单相超晶格储氢合金进行晶体结构与储氢性能研究。室温活化中，原始合金在第一周吸氢 30 min 后完全活化，而相同条件下，含 Zr、Y、Ti 等过渡金属元素的合金活化仅需 10 min，Zr、Y、Ti 等元素加入能够明显改善合金的活化性能。完全活化后，分别在 298 K、323 K、348 K 温度下进行 PCT 测试，结果表明含 Zr 元素的合金具有较高的平台压力，在 348 K 的温度下，吸氢平台压力可达 1.11 MPa，远高于原始合金；Y 元素对合金的储氢容量具有很大提升，在 298 K 温度下吸氢量达 1.39 wt.%，并对合金循环吸放氢性能有很大提升，40 圈循环保持率为 96.3%，这是由于 Y 元素的加入明显提高合金抗粉化能力；Ti 元素对于滞后系数的降低有一定贡献，但 Ti 元素的加入也一定程度上降低了吸放氢平台压及储氢容量。

### PEDOT:PSS 聚集态结构对热电性能的影响

高翔、刘佩佩

江西科技师范大学

近年来,聚(3,4-亚乙二氧基噻吩):聚(苯乙烯磺酸)(PEDOT:PSS)在改善其热电性能的策略方面发展迅速。然而内在分子机制对热电性能的影响仍然模糊不清。聚合物薄膜微观结构不仅具有复杂性,而且覆盖多层次的空间尺度,因此合理控制 PEDOT:PSS 的分子排布方式和堆积方式,对于调节热电传输和提高热电特性至关重要。本研究采用溶剂后处理方法来改变薄膜的聚集结构。实验表明,极性溶剂二甲基亚砜(DMSO)是提高 PEDOT:PSS 热电性能的最佳溶剂,其功率因数可达 22.6 μW K<sup>-2</sup> m<sup>-1</sup>。这归因于对溶剂进行后处理后,PEDOT 和 PSS 链之间的库仑力减弱。这就促使 PEDOT 和 PSS 在纳米尺度上有效分离。与此同时,PEDOT 分子链的构象从苯式结构转变为醌式结构,从而使分子链更加有序。分子间 π-π 堆叠距离的减小促进了电荷沿分子链的传输。这些变化对电导率的提高产生了有利影响,从而进一步影响热电性能。

### Ag NWs 增强 PEDOT:PSS 薄膜光热电性能

肖素珍、蒋丰兴、柳成

江西科技师范大学

对于太阳能应用的研究是响应国家“碳达峰、碳中和”的新型能源技术,在太阳能集热技术中,基于光电热电效应的 PT 转换被认为是一种可再生、绿色、无污染的可持续发展方式。相较于传统的无机光热和热电材料,有机半导体兼具资源丰富、廉价、易加工处理和良好机械柔韧性等特点。其中,PEDOT:PSS 是当前热电材料研究进展中的热门,具有电导率和塞贝克系数可调以及热导率低等优点,而单一的 PEDOT:PSS 的光吸收性能比较差,还不能很好的直接用于光热电材料,基于此,选取 Ag NWs,借助其高电导率、高透过率以及较强的紫外光吸收的特点,制备了 Ag NWs/PEDOT:PSS 复合薄膜。研究发现,Ag NWs

的引入可以提高热电性能，与原始的 PEDOT:PSS 相比  $\sigma$  和 PF 分别提高了 123% 和 125%；薄膜在同等温度下光照可以获得更大的 S，且光照与加热下的  $\sigma$  几乎不变，可能是光照射 Ag NWs 结构时，在 Ag NWs 结构上产生局域场，增强光子吸收，进而提高 PEDOT:PSS 的光热电性能。综上所述，复合薄膜可以同时提高 PT 和 TE 性能，为光热电源转换技术提供了参考。

### 晶体缺陷对纯铜电催化 CO<sub>2</sub> 还原性能的影响

郝胜男、林怀俊

暨南大学

铜基材料是一种很有前景的电化学催化剂，可用于二氧化碳还原反应 (CO<sub>2</sub>RR)，合成多种碳氢化合物和含氧化合物等高价产品。晶体缺陷 (包括空位、位错和晶界) 可以基本控制 CO<sub>2</sub>RR 的产物选择性。然而，关于晶体缺陷对块体铜基合金电催化 CO<sub>2</sub>RR 性能的影响还缺乏实验证据。本研究通过高压扭转 (HPT) 结合退火处理制备了直径为 10 毫米、具有精心设计的位错和晶界的纯铜圆片，并系统研究了晶体缺陷对电催化 CO<sub>2</sub>RR 性能的影响。与具有少量晶界和大量位错的铜圆片相比，具有大量晶界和低密度位错的铜圆片具有更好的 CO<sub>2</sub>RR 性能，尤其是在生成 CO 和高价值产物 (如 C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) 方面。

### MnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>/ $\alpha$ -MnO<sub>2</sub> 复合材料作为铝-空气电池的高效氧还原催化剂

崔斌<sup>1,2</sup>、朱云峰<sup>1,2</sup>、杨建<sup>1,2</sup>

1. 南京工业大学材料科学与工程学院
2. 江苏先进无机功能复合材料协同创新中心

利用两种或多种组分之间的几何结构、费米能级以及电荷分布差异来构建异质界面，被认为是调控催化剂电子结构、增强其本征催化活性的一种有效策略。同时，考虑到碳基材料在碱性条件下的自腐蚀，选择合适的氧化物作为载体可有效提高催化剂的电化学稳定性。在本研究中，我们将 MnCo<sub>2</sub>O<sub>4</sub> 纳米颗粒均匀分散在具有高比表面积的  $\alpha$ -MnO<sub>2</sub> 纳米棒上，通过在不同温度 (450 °C, 600 °C, 750 °C, 900 °C) 下热解，合成出具有异质界面的复合催化剂 (MCM-450, 600, 750, 900)。得益于复合催化剂较大的比表面积和丰富的孔结构，为氧还原反应 (ORR) 提供了更多的活性位点以及氧气传输通道。其中，MCM-450 在 0.1 M KOH 中展现出最佳的 ORR 活性 (半波电位: 0.78 V vs. RHE) 与稳定性，并且以 MCM-450 组装的铝-空气电池表现出 875.6 mAh/g 的高放电比容量，151.1 mW/cm<sup>2</sup> 的高功率密度，甚至超过商用 20 wt% Pt/C 催化剂 (601 mAh/g, 128.2 mW/cm<sup>2</sup>)。此外，密度泛函理论 (DFT) 计算表明，更多的电子在异质界面处转移，使得复合体系的 (Mn<sup>3+</sup>+Mn<sup>4+</sup>)/Mn<sup>2+</sup> 比例升高，并且界面工程进一步优化了 ORR 中间体的吸脱附能垒。这项工作为开发过渡金属氧化物 (TMOs) 催化剂提供了一种新的策略，并为在其他能源转换和储存领域的应用提供了机会。

### Size-induced d band center upshift of copper for efficient nitrate reduction to ammonia

Jincheng Zhang, Jian Tian, Min Ma

Shandong University of Science and Technology

Electrocatalytic nitrate reduction (NO<sub>3</sub>RR) technique has emerged as a hotspot in NH<sub>3</sub> production, for its practicability, and a series of advanced electrocatalysts with high activity and robust stability needed to be constructed in today's era. In this work, size-tunable Cu nanoparticles on porous nitrogen-doped hexagonal carbon nanorods (Cu@NHC) were reasonably designed and served for catalyzing NO<sub>3</sub>RR in neutral media. Especially, Cu<sub>30%</sub>@NHC demonstrated a remarkable electroactivity for NH<sub>3</sub> production as it showed a suitable grain size with massive catalytic centers and favorable d band structure with faster \*NO<sub>3</sub><sup>-</sup>-to-\*NO<sub>2</sub><sup>-</sup> catalytic dynamics. As expected, Cu<sub>30%</sub>@NHC (3628.28  $\mu\text{g h}^{-1} \text{mg}_{\text{cat}}^{-1}$ ) had a much higher NH<sub>3</sub> yield than those for Cu<sub>20%</sub>@NHC

(1268.42  $\mu\text{g h}^{-1} \text{mg}_{\text{cat.}}^{-1}$ ) and  $\text{Cu}_{40\%@\text{NHC}}$  (725.03  $\mu\text{g h}^{-1} \text{mg}_{\text{cat.}}^{-1}$ ). And those collected  $\text{NH}_3$  products indeed derived from  $\text{NO}_3\text{RR}$  process revealed by  $^{15}\text{N}$  isotope-labeling and systemic control tests. Moreover,  $\text{Cu}_{30\%@\text{NHC}}$  was also durable for  $\text{NO}_3\text{RR}$  bulk electrolysis with minor loss in activity. This work offered an effective modifying tactics to boost  $\text{NO}_3\text{RR}$  catalysis and could guide the design of other advanced electrocatalysts via size-induced surface engineering.

### Oxygen vacancies-rich molybdenum tungsten oxide nanowires as a highly active nitrogen fixation electrocatalyst

Jincheng Zhang, Jian Tian

Shandong University of Science and Technology

Herein, vacancy engineering is utilized reasonably to explore molybdenum tungsten oxide nanowires ( $\text{W}_4\text{MoO}_3$  NWs) rich in O-vacancies as an advanced NRR electrocatalyst, realizing further enhancement of NRR performance. In 0.1 M  $\text{Na}_2\text{SO}_4$ ,  $\text{W}_4\text{MoO}_3$  NWs rich in O vacancies (CTAB-D- $\text{W}_4\text{MoO}_3$ ) achieve a large  $\text{NH}_3$  yield of 60.77  $\mu\text{g h}^{-1} \text{mg}_{\text{cat.}}^{-1}$  at -0.70 V vs. RHE and a high faradaic efficiency of 56.42% at -0.60 V, much superior to the  $\text{W}_4\text{MoO}_3$  NWs deficient in oxygen vacancies (20.26  $\mu\text{g h}^{-1} \text{mg}_{\text{cat.}}^{-1}$  and 17.1% at -0.70 V vs. RHE). Meanwhile,  $\text{W}_4\text{MoO}_3$  NWs rich in O-vacancies also show high electrochemical stability. DFT calculations present that O vacancies in CTAB-D- $\text{W}_4\text{MoO}_3$  reduce the energy barrier formed by the intermediate of  $^*\text{N-NH}$ , facilitate the activation and further hydrogenation of  $^*\text{N-N}$ , promote the NRR process, and improve NRR activity.

### MXene/二硫化钛层状复合薄膜热电性能的研究

高小焯、陈志鸿、刘聪聪

江西科技师范大学

MXene 由于高导电性、高稳定性和可调节的电子带隙，被预测具有良好的热电性能，这为 MXene 在热电材料领域的应用提供了新的可能性。但 MXene 的塞贝克系数较低，限制了其在该领域的应用。复合材料能够实现不同组分各自优势的互补，是实现材料性能改善的有效策略之一。基于此，我们制备了层状结合的 MXene/  $\text{TiS}_2$  复合薄膜。实验结果表明，该夹层结构复合膜具有较高的塞贝克系数 ( $-80.4 \mu\text{V K}^{-1}$ ) 和较高的电导率 ( $322.12 \text{ S cm}^{-1}$ )，功率因子是 MXene ( $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ ) 薄膜的 22 倍，热电性能明显优于传统的物理混合方法制备的复合薄膜。MXene/  $\text{TiS}_2$  复合薄膜热电性能的提升主要归因于层状结构复合材料界面处的能量过滤效应，可以有效地改善载流子输运以获得高热电性能。此外，MXene/  $\text{TiS}_2$  复合薄膜展现了优良的弯曲性能，在弯曲半径为 4 mm 反复弯曲 2000 次后，MXene/  $\text{TiS}_2$  复合薄膜的电导率保持率可以达到 90%。基于 MXene/  $\text{TiS}_2$  复合薄膜构筑的柔性热电器件，在温差为 70 K 时，其功率密度可达  $26.6 \text{ W m}^{-2}$ 。本工作为研究新型的 MXene 基复合热电材料和探索提高其热电性能的关键因素提供了有效的策略和参考指导。

### Atomically Dispersed Ni Active Sites supported $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ as a High-Performance eNRR catalysts

Shanna An

Shandong University of Science and Technology

Electrocatalytic Nitrogen Reduction reaction (eNRR) for environmentally friendly chemical production technology is still a challenging work for the efficient and stable electrosynthesis of ammonia ( $\text{NH}_3$ ). Herein, we synthesized atomically dispersed Ni active sites supported  $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$ -MXene (Ni/MXene) by using a self-reduction

strategy via the assistance of rich Ti vacancies on the  $Ti_3C_2T_x$  MXene surface, which act as the trap and anchor sites for individual Ni atoms. Ni/MXene as an efficient eERR catalyst achieves a high ammonia yield of  $66.31 \mu\text{g h}^{-1} \text{mg}^{-1}_{\text{cat}}$  and faradaic efficiency (FE) of 72.3% at -0.5 V (vs. RHE). In addition, Ni/MXene present great stability and selectivity, and there is no significant change in  $\text{NH}_3$  rate and FEs after multiple cycles. The structural characterization shows that the active center in the NRR process is the Ni sites in the catalyst, thus boosting the electrochemical activity. This work provides a reasonable way for the design and application of MXene-based NRR catalysts in the future.

### **Decorate Ultra-fine Sb Atomic Clusters on 2D MXene Nanosheets as Anode for Lithium-Ion Batteries**

Jiajia Sun  
Ningxia University

In this work, the ultra-fine Sb atomic clusters (ACs) have been decorated on MXene for lithium ions battery (LIB) with enhanced capacity and rate capability. It is found that the SbACs evenly distributes on 2D MXene without aggregating, which effectively provides rich electroactive sites. On the other hand, the agglomeration of MXene is to some extent alleviated due to the involvement of SbACs. Remarkably, the strong interaction between the SbACs and MXene enabled by Sb-F and Sb-C bonds promises the high structural stability with excellent cyclic stability. As a result, the optimized SbACs/MXene anode delivers highest specific capacity of  $403.2 \text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$  after 100 cycles at  $0.1 \text{A}\cdot\text{g}^{-1}$  among all samples, which is almost twice higher than that of pure MXene ( $169.8 \text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$ ). Notably, even at high rate of  $1 \text{A}\cdot\text{g}^{-1}$ , it exhibits  $186.3 \text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$  after 1000 cycles. Further, the kinetic analysis suggests that the capacitance contribution increases to 74% which allows for rapid transfer of electrons.

### **Three-dimensional Nanoflower Design of Bionic Rose: Mesoporous $\text{NiMnCoO}_3$ Anode and its Derivative $\text{LiNi}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$ Cathode towards High-properties Lithium-ion Battery**

Junxiang Zhou, Jia fu Wang, Bo Feng  
Air Force Engineering University

Firstly, we present the bionic design and preparation processes and electrochemical properties of three dimensional (3D) Ni-Mn-Co-O nanoflowers (NMCO-NF) as a conversion anode material for lithium-ion batteries (LIBs). The 3D NMCO-NF is assembled via two dimensional (2D) mesoporous Ni-Mn-Co-O nanosheets (NMCO-NS), and the nanosheets structure is composed of multitudinous nanoparticles, and numerous mesoporous exist between the nanoparticles. Furthermore, an integrated electrode is constructed by NMCO-NF supported via Ni foam (NMCO/Ni-NF). Benefited from the unique hierarchical structure design, the NMCO/Ni-NF can not only effectively alleviate the large volume changes during cycling, but also provide three scale channels for lithium ion transmission, which makes it exhibit excellent electrochemical properties, that is,  $1079 \text{mAh g}^{-1}$  in an average charging capacity and 75.83% in capacity retention ratio after 120 cycles at  $1 \text{A g}^{-1}$ . Secondly, mesoporous  $\text{LiNi}_{1/3}\text{Co}_{1/3}\text{Mn}_{1/3}\text{O}_2$  nanoflowers (LNCMO-NF) is successfully synthesized via taking 3D NMCO-NF as a template and using sacrificial template method. The feasibility of constructing complex mesoscale structures in ternary cathode system is demonstrated.

### **Building Stable Solid-State Potassium Metal Batteries**

Wang Lv  
hunan university

Solid-state potassium metal batteries (SPMBs) are promising candidates for the next generation of energy storage systems for their low cost, safety, and high energy density. However, full SPMBs are not yet reported due to the K dendrites, interfacial incompatibility, and limited availability of suitable solid-state electrolytes. Here, stable SPMBs using a new iodinated solid polymer electrolyte (ISPE) are presented. The functional ions reconstruct ion transport channels, providing efficient potassium ion transport. ISPE shows a combination of high ionic conductivity, superior interfacial compatibility, and electrochemical stability. In situ alloying and iodinated interlayer increase K metal compatibility for prolonged cycling with low polarization. Moreover, the ISPE enables SPMBs with Prussian blue cathode stable operation at a high voltage of 4.5 V, a superior rate capability, and long-term cycling over 3000 cycles (4.2 V vs K<sup>+</sup>/K) with an ultra-high coulombic efficiency of 99.94%. More importantly, a classic solid-state potassium metal pouch cell achieves 4.2 V stable cycling over 800 cycles with a high retention of 93.6%, presenting a new development strategy for secure and high-performance rechargeable solid-state potassium metal batteries.

### **Boosting OER Activity of Stainless Steel via Thermal Oxidation for Water Electrolysis in Acidic Environment**

Xiaoling Chen, Kaiping Yu, Mingxin Huang  
The University of Hong Kong

There has been a long-time desire to replace the costly noble-metal-based catalysts (e.g., IrOx, RuOx) and anode material (e.g., Ti) with low-cost earth-abundant materials for acidic proton-exchange-membrane (PEM) water electrolysis. It is noted that traditional stainless steels are low-cost materials but are generally considered non-catalytic and susceptible to corrosion in strong acids at high potentials above water splitting. Here, we report a stainless steel with significantly enhanced catalytic activity and superior corrosion resistance in acid. Compared with the non-catalytic stainless steel, the present stainless steel anode yielded a magnitude higher current density of ~0.75 mA/cm<sup>2</sup> at 1.65 V (standard hydrogen electrode, SHE), which is attributed to the mixtures of crystalline and amorphous manganese oxides formed on the surface achieved by simple heat oxidation treatment in air furnace. Meanwhile, the present stainless steel anode durably catalyzed oxygen evolution reaction (OER) for over 100 hours due to the robust mixed Mn oxides and another Co-rich layer that bridged them to the matrix. Despite degradation after a prolonged time, the stainless steel anode can be easily recovered by quick and simple oxidation heat treatment. This study provides a possible cost-effective strategy to make active and renewable stainless steel anode for affordable green hydrogen.

### **n 型 MXene/硒化银复合薄膜的制备及其热电性能研究**

刘怡欣、赵文弟、刘聪聪  
江西科技师范大学枫林校区

近年来, Ag<sub>2</sub>Se 凭借高载流子迁移率和固有的低晶格热导率, 在热电领域受到了广泛关注。但室温下, Ag<sub>2</sub>Se 的低电导率限制了其进一步发展。这里, 我们采用溶液混合的方法得到 Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXene/Ag<sub>2</sub>Se 柔性热电复合薄膜, 通过引入具有高电导率的 Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXene, 改善了材料的热电性能。与纯 Ag<sub>2</sub>Se 材料相比, 适量引入 Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXene 第二相, 使得材料在保持高 Seebeck 系数的同时, 电导率提升了约 2.5 倍, 从而使功率因子提升了约 2.5 倍。这项工作为制备具有高热电性能的柔性复合薄膜提供了有效途径。

### **钠-碲电池的反应机理和改进策略**

黄雨

作为 VIA 主族元素的一员，碲 (Te) 在锂/钠离子电池中表现出类似的电荷存储机制，并具有 2621 mAh/cm<sup>3</sup> 的超高理论体积容量。此外，Te 还有望成为钾离子电池的高容量和高倍率电极。与碱金属离子-Se 和碱金属离子-S 系统相比，碲基电池的优势在于碲的高电导率。碲的本征电导率 ( $2 \times 10^2$  S/m) 比 Se ( $1 \times 10^{-6}$  S/m) 和 S ( $1 \times 10^{-17}$  S/m) 高出几个甚至十几个数量级，因此碲的利用率高，在高电流密度下性能良好，且可在常温下发生电化学反应。

与纯碲相比，碲-碲合金具有更高的硬度和导电性。碲-碲合金的结晶相具有六方晶格几何形状，由相互平行的弧形螺旋链组成。碲和碲在所有比率下都可以混溶，形成一系列合金。将碲和碲这两种半导体金属材料制成一维结构 (碲/碲纳米棒)，电化学存储性能得到改善，是因为一维 Se/Te 纳米棒结构为碱金属离子提供了较短的扩散路径，并缓冲了充放电循环过程中产生的应变。受此启发，我们将碲作为与碲合金化的对象，研究其对钠离子电池中纯碲纳米线电化学行为的影响。

原位透射电子显微镜表征是在原子级别上观察实验样品在热、力、电和磁作用下以及在原位化学反应过程中的形貌和结构演化。借助先进透射电镜的多重信息获取功能，原位实验中可利用 TEM 模式实现形貌动态演变的表征；在电子衍射下获取相的结构信息；通过高分辨结构演变可获得晶格参数变化信息；在电子能量损失谱 (EELS) 模式下获得物相价态信息；能谱模式可提供动态反应中的成分变化。原位通电实验已在电化学以及纳米材料领域得到了广泛的应用，大量的原位通电实验在研究电池活性材料的反应及失效机理都做出了重要的贡献。

本文对碲纳米线和碲碲化合物进行了原位电化学钠化实验。通过分析纳米线的形貌和相变，我们发现碲纳米线经历了三步钠化反应，在钠嵌入的第一阶段，Te 转化为中间相 NaTe<sub>3</sub>，随后中间相 NaTe<sub>3</sub> 进一步钠化为 Na<sub>2</sub>Te<sub>2</sub>，最后钠继续嵌入 Na<sub>2</sub>Te<sub>2</sub> 得到 Na<sub>2</sub>Te。然而，由于中间相 Na<sub>2</sub>Te<sub>2</sub> 的带隙与纯金属接近，活性材料的钠化速度过快，最高可达 33 nm/s (是碲的 10 倍)，在钠嵌入过程中无法保持形貌的完整性，最终在钠离子电池中的性能迅速衰减。而后对碲碲化合物进行原位嵌钠实验的结果表明，化合物中的碲元素和碲元素通过中间相 Na<sub>2</sub>TeSe<sub>3</sub> 作为缓冲直接转化为最终相 Na<sub>2</sub>Se 和 Na<sub>2</sub>Te，这使得碲碲化合物的反应速度只有碲纳米线的三分之一 (即 11 nm/s)，活性材料在多次循环过程中能很好地保持形态完整性，是改进碲电极的优选方案。

### **An asymmetrically coordinated CoMn-NSC hetero-diatomc catalyst enables efficient oxygen reduction reactions**

Yue Zhao

Tianjin University

Heterometal atomic site with asymmetric coordination structures is significant for improving the oxygen reduction reactions (ORR) electrocatalytic performance in fuel cells and metal-air batteries. Herein, an asymmetrically coordinated CoMn-NSC hetero-diatomc catalyst was synthesized through the adsorption-pyrolysis process of a bimetallic zeolitic imidazolate framework (ZIF). The catalyst consists of the adjacently sulfur/nitrogen dual-coordinated Co atoms and the nitrogen-coordinated Mn atom (CoN<sub>2</sub>S-MnN<sub>3</sub>), anchored in N-doped carbon. Atomic structural investigations and density functional theory (DFT) calculations demonstrate that CoN<sub>2</sub>S-MnN<sub>3</sub> experiences spontaneous OH binding to form CoN<sub>2</sub>S-MnN<sub>3</sub>-2OH with asymmetric charge distribution. This leads to a multiple electron-filled state in the orbital and optimized O<sub>2</sub> adsorption energy. In the bimetallic atomic structure, Co is the main active site and Mn is the co-catalytic site. The asymmetric hetero-diatomc CoN<sub>2</sub>S-MnN<sub>3</sub> can accelerate the formation and cleavage of ORR intermediates, further promoting the catalytic reaction. The CoMn-NSC catalyst exhibits excellent ORR activity with a high half-wave potential of 0.901 V. The assembled Zn-air battery with CoMn-NSC catalyst has high power density of 152.2 mW cm<sup>-2</sup> and ultralong lifespans of up to 1000 hours. This work provides a new idea for designing new diatomc oxygen electrocatalysts.

### Ti-Mn 合金调控 MgH<sub>2</sub> 储氢性能及其机理研究

刘海镇、伍志业、陆兆秋、罗辉

广西大学

氢化镁 (MgH<sub>2</sub>) 具有重量储氢密度高 (7.6 wt%) 以及镁资源丰富等优点, 是具有潜在应用前景的储氢材料, 但其实际应用仍受限于高热力学稳定性和较差的吸放氢动力学性能。本研究通过电弧炉熔炼法制备了 Ti-Mn 系合金 (Ti<sub>0.9</sub>Zr<sub>0.1</sub>Mn<sub>1.5</sub>V<sub>0.3</sub>), 并以碳纳米管 (CNT) 作为导热助剂, 通过球磨将两者引入到 MgH<sub>2</sub> 中以改善 MgH<sub>2</sub> 的储氢性能。储氢性能研究表明 Ti-Mn 系合金和 CNTs 对 MgH<sub>2</sub> 的储氢性能具有协同改善作用。其中 MgH<sub>2</sub> + 10 wt% Ti-Mn + 1 wt% CNTs 复合材料的初始放氢温度降低至 195 °C, 放氢后可在室温下进行吸氢; 此外, 在 300 °C 恒温时, 可在 5 min 内释放 6.1 wt% 的氢气, 放氢活化能降低至 86 kJ·mol<sup>-1</sup>, 在 150 °C 恒温时, 可在 10 min 内吸收 4.8 wt% 的氢气, 经过 100 次循环后, 它仍然具有 6.2 wt% 的可逆容量, 容量保持率为 96.8%。在调控 MgH<sub>2</sub> 储氢性能方面, Ti-Mn 合金和 CNTs 的结合比单独使用 Ti-Mn 合金或 CNTs 更有效, 且不会改变 MgH<sub>2</sub> 的整体热力学性能。高分辨透射电镜显示, 在 MgH<sub>2</sub> 与 Ti-Mn 合金的界面处, Mg-H 键变长。第一性原理密度泛函理论 (DFT) 计算表明在 MgH<sub>2</sub>/Ti-Mn 系合金的界面处出现了 Mg-H 键的局域失稳, 这是 MgH<sub>2</sub> 储氢能力增强的原因之一。本工作不仅实现了 Ti-Mn 系合金与 CNTs 对 MgH<sub>2</sub> 储氢性能的协同改善, 还提出了局域失稳催化机制解释了 Ti-Mn 系合金对 MgH<sub>2</sub> 储氢性能的改善机制。

### NiFe(OH)<sub>x</sub>/MnO<sub>2</sub> p-p 异质结构电催化尿素氧化反应研究

宋玉兰、黄景林、唐翠兰、王涛、刘艳松、何小珊、谢春平、陈果、邓承付、何智兵

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

开发高效的尿素氧化反应 (Urea Oxidation Reaction, UOR) 电催化剂是实现绿色制氢和含尿素废水处理的关键。Ni 基电催化剂因其高活性和低成本, 有望替代贵金属催化剂用于 UOR。然而, 构建能够协同增强 UOR 的镍基电催化剂, 仍需进一步深入研究。研究表明, 异质结构的形成可以促进电子相互作用, 不同相的能带排列不同, 会导致界面处的电荷转移和电荷重新分布, 从而在界面处形成相对稳定的局部亲电/亲核区域, 从而促进尿素的分解。基于此, 本研究通过两步电化学沉积法在泡沫镍 (Nickel Foam, NF) 上构筑了 NiFe(OH)<sub>x</sub>/MnO<sub>2</sub> p-p 异质结构的高活性电催化剂 (NiFe(OH)<sub>x</sub>/MnO<sub>2</sub>/NF), 考察了含量、沉积时间、循环圈数对催化性能的影响。同时, 清晰地阐明了异质界面电子结构变化对 UOR 的影响, 揭示了 UOR 的催化机理。结果表明: Ni(0.07M)Fe(0.02M)(OH)<sub>x</sub>(100s)/MnO<sub>2</sub>(40)/NF 复合材料具有最佳的 UOR 催化性能。NiFe(OH)<sub>x</sub>/MnO<sub>2</sub>/NF 仅需 1.364 V (vs. RHE) 达到 10 mA cm<sup>-2</sup> 的 UOR。能级结构分析表明, MnO<sub>2</sub> 与 NiFe(OH)<sub>x</sub> 之间的功函数差 (1.04 eV), 使得异质界面电荷由 Ni、Fe 向 Mn 中转移, 形成富电子 (MnO<sub>2</sub>) 和贫电子 (NiFe(OH)<sub>x</sub>) 区域, 促进尿素的分解。原位电化学拉曼和理论计算结果表明, 一方面, d 带中心更加靠近费米能级, 这表明异质结构电催化剂对尿素和反应中间体的吸附增强, 这允许催化剂与尿素和反应中间体之间有更强的相互作用, 从而导致更有效的催化反应。另一方面, UOR 中速率控制步骤的反应能垒大大降低 (约为 2.7 倍), 这表明其在热力学上更有利于 UOR 催化反应的进行。此外, 它加速了催化剂的表面重构, 并在较低电位下促进了高价态 Ni<sup>3+</sup>相的形成, 这有利于提高 UOR 的催化活性。

### Constructing High-Performance In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXene Composite Nanostructures for Sodium-Ion

Battery

Xianghui Hu

Ningxia University

Preparing nano-anode materials with high structural stability and outstanding electrochemical performance for sodium-ion batteries (SIBs) is still very difficult. Herein, In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub> MXene composite nanostructures synthesized by electrostatic adsorption and subsequent vulcanization strategy are developed. The strong interfacial interaction renders the material of good structural durability and enhanced reaction kinetics. Meanwhile, the enlarged and few-layered MXene nanosheets can be easily obtained according to this interaction, providing a conductive network for sufficient electrolyte penetration and rapid charge transfer. Moreover, these nanostructures exhibit small charge transfer impedance evidenced by electrochemical impedance spectroscopy (EIS) analysis. Therefore, the SIB based on the In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/MXene electrode presents outstanding electrochemical performance with the excellent sodium-ion storage capacity of 250 mAh g<sup>-1</sup> at 0.5 A g<sup>-1</sup> and rate capability. It also exhibits excellent pseudocapacitive characteristics with a capacitance control ratio of up to 97.3%. Such excellent performance indicates that high theoretical capacity In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> and good conductivity MXene can be combined through reasonable design, providing ideas for the development of negative electrode materials for SIBs.

### Synergically Enhancing Lithium Ions Storage Performance of Silicon Anode by Designing Double-shelled Structures with Reduced Graphene Oxide and ZrO<sub>2</sub>

Huibin Jin, Zehao Zhang, Haibo Li  
Ningxia University

In this work, we prepared Si@reduced graphene oxide@ZrO<sub>2</sub> (Si@rGO@ZrO<sub>2</sub>) with a double-shell structures as novel anode for lithium-ion batteries (LIBs) with stable electrochemical performance. Such structure not only greatly improves the electrical conductivity of the whole electrode, but also protects the inner Si nanoparticles (Si NPs) from rupturing and being damaged by undesired side reactions with the electrolyte. The results realize that the Si@rGO@ZrO<sub>2</sub> anode has delivered high initial discharge capacity of 3046 mAh·g<sup>-1</sup> at 1.0 A·g<sup>-1</sup>. After 100 cycles, it can be maintained at 613 mAh·g<sup>-1</sup>, which is much higher than that of either the pure Si NPs (31 mAh·g<sup>-1</sup> after 100 cycles) or the Si@rGO (261 mAh·g<sup>-1</sup> after 100 cycles). Even at 2 A·g<sup>-1</sup>, it still provides high specific capacity of 834 mAh·g<sup>-1</sup>, while the pure Si anode merely possess 41 mAh·g<sup>-1</sup>. Further, the density functional theory calculations point out that the ZrO<sub>2</sub> shell can significantly improves the adsorption energy of Li<sup>+</sup> and optimizes the migration paths of Li<sup>+</sup>, which in turn enhances the electrochemical performance of Si@rGO@ZrO<sub>2</sub> composite anode.

### 考虑金属电负性和对氨电氧化的亲氧性的非铱三金属合金的筛选

张正威、杨娟、李毅  
江苏大学

Ir 含合金代表了直接氨燃料电池 (DAFCs) 中氨氧化反应 (AOR) 电催化剂的最先进水平, 但其高成本极大地阻碍了其应用。在此, 我们合理地设计并合成了非 Ir 的三元合金, 考虑了控制合金表面反应性的金属电负性和亲氧性。通过将具有类似 Ir 电负性的金属 (如 Pd) 和亲氧性金属 (如 Mn、Fe、Co 或 Ni) 引入 Pt 中, 我们筛选出了高性能的非 Ir 三元合金电催化剂系统。其中, 实验选出了一种最佳的 AOR 电催化剂 Pt<sub>3</sub>PdNi, 其峰值电流密度明显高于 Pt 和 Pt<sub>3</sub>Pd, 以及对照组的 Pt<sub>3</sub>IrNi 和 Pt<sub>3</sub>RuNi。同时, 碳载体在分散合金纳米颗粒中起到了关键作用, 并最终影响了它们的 AOR 活性。此外, 肼电氧化实验表明, AOR 过程中缓慢的步骤可能是 NH<sub>3</sub> 脱氢生成 \*NH<sub>2</sub> 及其进一步 N-N 二聚化。

### Co-Ni-Fe layered double oxides as anode materials to improve the performance of sodium ion batteries

Xiaoyi Liu

Layered double hydroxides (LDHs) as two-dimensional materials have gradually emerged in the field of electrochemical energy storage batteries due to their large interlayer spacing, high redox activity and interlayer channels providing ample diffusion pathways for ions. However, the intrinsic low electronic conductivity of LDHs severely hinders the kinetics of electron/ion transfer, and their fragile structure prone to aggregation reduces the cycling performance and stability of batteries. To address these challenges, we employed a simple hydrothermal method using glycerol acid nanospheres as sacrificial templates and adopted a straightforward sequential self-templating approach to prepare hollow microflower-like structures of ternary metal Co-Ni-Fe LDH, which were subsequently calcined at different temperatures to obtain Co-Ni-Fe layered double oxides (Co-Ni-Fe LDO). The results indicate that the structure state and stability of Co-Ni-Fe LDO oxides can be controlled by varying the calcination temperature, forming uniform nano-pores during this process, increasing the specific surface area, and providing more active sites. Therefore, Co-Ni-Fe LDO calcined at 850°C exhibits a specific capacity of 268.5 mAh g<sup>-1</sup> at 0.1 A g<sup>-1</sup> with excellent rate performance and significantly improved cycling stability as well as capacity retention. The rational design of Co-Ni-Fe LDO electrode materials opens up new avenues for the high-performance sodium-ion secondary batteries.

### 高密度石墨烯干凝胶的设计构筑与高体积电容性能研究

李雨蝶、夏开胜

中国地质大学（武汉）

近年来，超级电容器作为一种新型的电子元器件，拥有充放电时间短、循环寿命长、能量密度高、绿色环保等特点，在电化学储能方面有着广泛的应用前景。随着电子设备逐渐走向微型化、便携化，人们对储能设备的要求逐渐演变成如何在有限的空间内储存更多的能量，于是开发具有更高体积电容性能的碳电极材料已成为面向国民经济主战场的重要课题。

石墨烯材料因为其超高的本征电导率、极高的理论比表面积（2630 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup>）和优良的理论比电容（2630 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup>），是目前最有潜力的超级电容器电极材料之一。然而，由于石墨烯片层之间强烈的  $\pi$ - $\pi$  相互作用，石墨烯薄片容易重新堆积形成类石墨粉末，严重降低石墨烯的离子可达表面积，降低离子扩散速率，导致目前已报道的石墨烯电极仅表现出 100 F g<sup>-1</sup> 的比电容。石墨烯气凝胶虽然具有高质量比电容，但材料中普遍存在的介大孔结构导致其体积电容远远达不到实际应用需求，于是我们使用乙醇介导的毛细管蒸发诱导干燥代替冷冻干燥，利用乙醇溶剂的表面张力和挥发速度精确调节材料孔结构，在保留凝胶贯通连续的孔隙的同时，大幅度的降低介大孔占比，其平均孔尺寸降低至 6.02 nm；进一步使用外加压力减少材料颗粒间的空隙，将制备的石墨烯干凝胶密度提升至 1.53 g cm<sup>-3</sup>，相应的，体积电容提升至 413 F cm<sup>-3</sup>，体积能量密度达到 25.7 W h L<sup>-1</sup>，这种溶剂介导的毛细管蒸发诱导干燥方法在制备致密储能材料方面显示出巨大的潜力。

### M-Nx-C 过渡金属氮氧化制硝酸单原子电催化剂的高通量筛选

智闯、杨娟、孙中体

江苏大学

电催化氮氧化反应(eNOR)已成为一种可持续的固氮策略。金属-氮-碳(M-N-C)单原子催化剂(SAC)在电化学 eNOR 中显示出巨大的潜力。然而，探索同时具有高催化活性和高产物选择性的先进 SACs 仍然是一个巨大的挑战。在这项研究中，密度泛函理论(DFT)计算与机器学习(ML)相结合，用于快速和高通量筛选高性能氮氧化催化剂。通过催化剂稳定性、析氢反应抑制能力、以及反应能垒等多项有效指标，最终筛

选出有效地单原子催化剂。其中 Fe-N<sub>4</sub>、Cr-N<sub>4</sub>、Cd-N<sub>4</sub>、Ir-N<sub>4</sub> 的催化活性最好，可以作为 eNOR 的潜在催化剂。利用这种方法可以有效地筛选出对 eNOR 催化剂的探索，从而更好地降低实验成本。

### 氧化钌基催化剂的设计、制备与酸性析氧电催化性能研究

武子瑞、李毅、杨娟

江苏大学

氧化钌基材料已被公认为非常有前途的电催化剂，为酸性析氧反应提供了钌基材料的潜在替代品。然而，氧化钌基材料一直面临着严重的稳定性问题。一方面，析氧过程中的高电位导致的晶格氧的氧化会产生氧空位，进而导致 Ru 原子暴露在表面，被过度氧化成不稳定的 Ru<sup>4+</sup>物种，另一方面，表面 Ru 的直接脱金属不可避免地引起氧化钌的晶体结构崩溃，因此，在酸性析氧条件下，氧化钌基材料中晶格氧和表面 Ru 原子的稳定是加强 OER 结构稳定性和提高 OER 耐久性的关键。在此，我们通过掺杂策略、异质结构策略等，成功地制备出了一系列高性能的氧化钌基电催化材料。在酸性析氧反应中，这些材料表现出优异的电化学活性和长时间的稳定性，证明了我们的策略在解决氧化钌基材料稳定性问题方面的有效性。这一研究为开发新型高效、稳定的电催化剂提供了重要的理论基础和实践指导。

### Surface oxidation of Mo<sub>2</sub>CTx synergises with phosphorus doping to improve lithium-ion battery performance

Shengzu Xiao

Ningxia University

MXenes is a class of two-dimensional (2D) transition metal carbons and nitrides with unique layered structure, fast cation embedding channels, excellent conductivity and hydrophilicity, and tunable surface terminations, which are highly promising for energy storage applications. The construction of uniquely structured 2D MXene heterojunctions can promote charge transport and lithium ion adsorption capacity. In this work, the heterojunction structure of MXene with MoO<sub>2</sub> was synthesised by simple surface oxidation and subsequent phosphorylation process using Mo<sub>2</sub>CTx as the precursor. While constructing the heterojunctions, phosphorus doping was innovatively introduced to produce lattice distortions, which enriched the lithium-ion adsorption sites, altered the electron distribution on the surface of the heterojunctions, and facilitated the charge transport. The experimental results show that the heterojunction synergistic phosphorus doping reduces the charge transport impedance and improves the lithium-ion storage capacity compared with Mo<sub>2</sub>CTx. The Mo<sub>2</sub>CTx/MoO<sub>2</sub> heterojunction has a discharge specific capacity of 1380.8 mAh g<sup>-1</sup> at 0.1 A g<sup>-1</sup>, and a specific capacity of 350.1 mAh g<sup>-1</sup> after 300 cycles at 1 A g<sup>-1</sup>, which is higher than that of Mo<sub>2</sub>CTx. which is higher than the discharge specific capacity of 246.1 mAh g<sup>-1</sup> of Mo<sub>2</sub>CTx. This work provides a new idea for the rational design of heterojunction of Mo<sub>2</sub>CTx, which is of great significance for the application of Mo<sub>2</sub>CTx in energy storage.

### 金属锂/固态电解质界面力学-电化学失效机制研究

刘洋洋

西安交通大学

以固态电解质和锂 (Li) 金属负极为核心组件的固态电池具有高能量密度和高安全性的特点，具有广阔的应用前景。然而，固态锂金属电池一旦在高于临界电流密度的条件下运行，将不可避免得引发内部短路和电池失效，严重阻碍其在高功率场景的应用。研究认为，这种内部短路是由锂枝晶在固态电解质中的生长和扩展造成的，这种生长会导致固态电解质力学失效直至连通正负极。理解这一失效机理是开发设计新型材料和界面，实现固态电池产业化的关键，然而采用常规实验方法难以获取固态电解质内部的应力、

位移和电场。我们采用多物理场模拟方法建立了电化学-力学耦合模型，对固态电解质内部锂细丝生长引起的失效过程进行了系统研究，通过应力场动态演变、局部位移和相对损伤的可视化，揭示了裂纹形成及其在固态电解质内扩展过程。研究结果表明：

(1) 固态电解质的局部位移是应力传递的结果，导致固态电解质内部的结构损伤和裂纹形成。

(2) 界面缺陷的几何形状是局部应力场集中的主导因素，而半球形缺陷在初始阶段造成较少的损伤累积和最长的电解质解体失效时间。

(3) 界面缺陷内部金属锂电沉积产生的压缩在电解质中形成局部应力并进一步向本体传递，直至导致固态电解质解体，界面缺陷的几何形状和固态电解质的内部缺陷可以影响内部力学损伤扩展的路径。

### 新型多孔中空结构的硅碳负极材料

石文华

武汉理工大学

传统商业化石墨负极材料由于其较低的比容量，已经不能满足市场的高容量储能要求，硅负极具有较高的理论比容量(4200mAh/g)，成为近几年的锂离子负极研究热点。然而，硅负极材料合金化过程会产生较大的体积膨胀，同时其本征导电性较差，导致其容量衰减较快。为此，我们构筑了多孔中空结构的硅碳负极材料，经测试，合成的多孔中空结构的硅/碳负极，具有较好的电化学性能，在 1A/g 的大电流密度下，其循环 300 圈，能保持 1000mAh/g 左右的容量，同时，在 5A/g 的大电流密度下，其能保持大约 600mAh/g 的容量。这种独特的中空多孔结构，为硅的体积膨胀提供了缓冲空间，同时，增加了电子/离子的传输速率，实现了高稳定和高倍率性能的储锂容量。

### 水凝胶基柔性储能材料与器件

章炜、孙正明

东南大学

水凝胶是一类由亲水高分子交联网络和液体相互渗透形成的柔性材料，其多孔多层次的三维结构可容纳多种功能性填料，使其兼具电化学活性和机械柔韧性，是构建柔性储能设备的理想框架。通过合理设计得到的电子导电水凝胶具有高导电性三维骨架，可为嵌于其中的活性物质提供电子通路，且其极大的比表面积为电化学反应提供大量活性位点，使其成为一种优异的柔性电极材料。同时，水凝胶的弹性网络能解决电化学反应中活性物质的体积变化和结构不稳定问题，提升电极使用寿命。另外，水凝胶因含有大量亲水性基团，可容纳大量电解液，从而具备高离子导电性。其具有比液态电解质更高的安全性和保水性，且无漏液风险，以及比固态电解质更高的离子电导率和更强的拉伸折叠能力，故其也是一种优秀的电解质材料。因此，使用水凝胶同时构建电极与电解质，可实现二者的集成，设计出具备全水凝胶结构的一体式柔性储能器件。水凝胶使电极和电解质具备本质的高柔性和相互匹配的力学性能，可容许拉伸、扭曲、折叠等各种变形。并且通过氢键等相互作用，可实现电极和电解质之间的强自粘结合，降低了界面电阻。此外，水凝胶组装成的器件不再需要额外的弹性基底，电极粘合剂和隔膜，从而简化了器件的结构，在多功能可穿戴设备的发展中显示出巨大的潜力。

### 具有电解液内在迁移特性的微流体铝-空气电池

杨云、蒋涛、洪阳、罗自荣

国防科技大学

背景：铝-空气电池是下一代微型化能量存储设备中最有前景的候选者之一，因为它具有高理论能量密度和容量密度。然而，阳极自腐蚀和庞大的液态电解质输送系统严重限制了其实际能量密度，阻碍了其微型化应用。为此，本文提出了一种微流体铝-空气电池，利用纤维素纸的毛细管效应自动运输电解质。为解决铝阳极在碱性环境中发生严重的析氢腐蚀，提出在电解质中添加氧化锌抑制剂的策略，并对其电化学

性能进行了研究。

材料：氢氧化钾、氧化锌、去离子水、6061 铝合金、高性能空气阴极、实验室用清洁拭布

方法：（1）称量一定质量的 KOH 粉末于离心管中，使用磁力搅拌器搅拌均匀并冷却形成 KOH 碱性电解质；（2）裁剪特定尺寸的阴极、阳极、拭布，按照三明治原则构建铝-空气电池样机；（3）将拭布的 A 端置于电解质中，B 端置于吸水纸下侧，使得电解质顺利流过电极区域参与发电；（4）使用电化学工作站对电池实施线性伏安扫描，以确定最佳的 KOH 浓度；（5）称取一定量的 ZnO 于 KOH 溶液中，使用混匀仪搅拌均匀形成复合电解质；（6）将复合电解质转移至排水集气装置后，向其中投入特定尺寸的铝阳极，并收集所产生氢气的体积；（7）对基于复合电解质的电池实施包括线性伏安扫描、恒流放电在内的电化学测试。

结果与讨论：液态电解质运送系统复杂和碱性环境中铝阳极析氢腐蚀严重是制约水系铝-空气电池小型化的主要问题。本文提出利用多孔纤维素纸构建微流体通道自动运动电解质，以代替传统的蠕动泵和管道系统使得电池的复杂度大幅下降。根据质量增益计算了微流体通道中电解质的流量。深入对比了微流体电池和非微流体电池的电化学性能，发现电解质持续流动的策略有助于提升电池的输出性能。使用电化学工作站对微流体电池实施了线性伏安扫描，考察了电解质 KOH 浓度对电池放电性能的影响。以峰值功率密度为考核指标，确定了最佳的电解质浓度。

针对铝阳极发生析氢腐蚀的问题，提出在 KOH 电解质中添加 ZnO 抑制剂的策略。使用排水集气法，考察对比了不同浓度 ZnO 的抑制效果，通过计算抑制效率得到了最佳的 ZnO 浓度。得益于抑制剂的使用，电池的开路电压、持续工作时间、能量密度、阳极效率等关键指标得到大幅提升。在典型应用演示中，电池成功点亮了发光二极管、驱动迷你风扇。

结论：本文采用基于纤维素纸的微流体设计思路，实现了电解质的连续流动，并成功应用于铝-空气电池。通过对 KOH 碱性溶液实施氧化锌改性，达到了抑制铝阳极氢析腐蚀的目的。电化学测试结果表明了在电解质中添加氧化锌抑制剂和采取微流体设计能显著改善铝-空气电池的电化学性能。

### 三维过渡金属硼基整体电极构筑及其在 AEMWE 制氢中催化性能研究

张娟、郭艳辉

复旦大学材料科学系

利用太阳能、风能等可再生能源驱动的阴离子交换膜水电解技术(AEMWE)，兼具催化材料体系低成本以及动态响应灵活特性，是实现廉价、高效、规模化绿氢制取的极具应用前景的途径之一。然而，大电流密度下快速电荷/电子转移、优异化学/机械稳定性、气泡动力学以及中间体吸附或覆盖等工业水电解条件下所需承受的苛刻指标难以同时满足。因此，加速催化剂大电流密度下反应动力学和提高其机械稳定性是实现高效 AEMWE 制氢技术的一个重要瓶颈。在此研究中，成功探索了一种实现工业安培级电流密度 AEMWE 的三维分层多孔整体电极的通用策略。采用简单的化学镀技术结合腐蚀工程工艺，制备了一系列低成本、高活性，高稳定性的三维过渡金属硼化物催化电极(etched-TMB@MS)。因其独特的花片状多层结构，etched-TMB@MS 整体电极具有优异的析氢反应(HER)和析氧反应(OER)催化活性以及大电流稳定性，这源于增强的本征活性、充足的电化学活性位点、机械稳定性以及高效气/液传输途径。放大制备后的 etched-TMB@MS 催化电极应用于 AEMWE 电解槽，实现在  $1 \text{ A cm}^{-2}$  的大电流密度下高效稳定运行，验证了其在工业制氢方面的巨大潜力。本研究为高效催化电极和工业安培级电流 AEMWE 的研制开辟了新途径。

### 磷酸铁锂电池正极材料用新型超低碳钢的研究

王坤、罗衍昭

首钢集团有限公司技术研究院

本文重点研究了磷酸铁锂电池正极材料用新型超低碳钢化学成分体系和材料性能控制关键工艺技术。

通过建立转炉双渣发深脱磷评价体系和精准控制钢中[Al]-[O]平衡，将新型超低碳钢中的 P 含量控制到 30ppm 以下，钢中夹杂物尺寸 $\leq 10\mu\text{m}$ 的比例达到 98%。构建出新型超低碳钢碳当量与电阻率的线性对应关系，即随着碳当量  $C_{\text{eq}}$  的增大，对应电阻率  $\rho$  也增大，反之，随着碳当量  $C_{\text{eq}}$  的减小，对应电阻率  $\rho$  也减小。研究表明，在新型超低碳钢中加入微量的 Al 和 Cr 元素元素，能够在高温态析出形成  $\text{AlN}$ 、 $\text{Cr}_7\text{C}_3$ 、 $\text{Cr}_{23}\text{C}_6$  和  $(\text{Fe,Cr})_3\text{C}$  分布在珠光体、铁素体晶界与晶内，能够有效抑制外部碳原子向新型超低碳钢基体的渗入。

### 金属单/双原子催化剂微环境的精准调控及其锌空气电池应用

王哲

苏州大学

单/双原子催化剂因其高原子利用率和结构组成的可调控性成为电催化、光催化及能源存储与转换等领域研究热点。但单/双原子催化剂局域结构的精准调控及其可控制备仍是其发展道路上的主要挑战。本报告将从单/双原子催化剂的金属原子结构设计——金属双原子、金属单原子/团簇异质结、金属双原子/团簇异质结——引入金属原子间的“协同作战”，**到其微环境的精准控制**，阐明金属单/双原子催化剂的结构与其催化性能的“构-效”关系，实现其对氧还原/析氧（ORR/OER）电催化的高活性和高稳定性，并探究了金属单/双原子催化剂在锌空气电池领域中的应用。

### 金属锂电池负极失效及调控

金成滨<sup>1</sup>、盛欧微<sup>2</sup>

1. 中国计量大学

2. 杭州电子科技大学

金属锂电池是下一代的高比能电池技术。然而受限于负极问题，电池循环寿命和稳定性难以满足应用需求。近年来，大量研究致力于通过抑制锂枝晶生长和调控稳定的固体电解质界面（SEI）膜来提升电池性能。最新研究表明存在更为复杂、关键的难题限制了电池的高效运行，包括 SEI 膜动态失效，锂金属腐蚀，以及死锂累积等。基于上述认识，我们团队系统研究了液态和固态体系中死锂的结构化学信息及其形成机制，探索了 SEI 膜溶解引起的界面性质变化规律，解析了锂金属在电池存储和运行过程中的化学和电化学腐蚀行为，定量区分和讨论了不同过程对于不可逆锂损失的贡献，并提出了有效抑制腐蚀、稳定 SEI 膜和激活再利用死锂的多级策略，并在实用化条件的扣式和软包电池中得以验证。

参考文献：（\*共同通讯作者，#共同第一作者）

[1] Ouwei Sheng\*, Tianyu Wang, Tao Yang, Tenglong Jin, Xinyong Tao\*, **Chengbin Jin\***. Passivating lithium metal anode by anti-corrosion concentrated ether electrolytes for longevity of batteries. **Nano Energy** 2024, 123, 109406.

[2] Ouwei Sheng\*, **Chengbin Jin\***, Tao Yang, Zhijin Ju, Jianmin Luo, Xinyong Tao\*. Designing biomass-integrated solid polymer electrolytes for safe, energy-dense lithium metal batteries. **Energy & Environmental Science**, 2023, 16, 2804–2824.

[3] **Chengbin Jin\***, Lanhang Li, Yiyu Huang, Zhijin Ju, Gongxun Lu, Jiale Zheng, Ouwei Sheng\*, Xinyong Tao\*. A corrosion inhibiting layer to tackle the irreversible lithium loss in lithium metal batteries. **Nature Communications** 2023, 14, 8269.

[4] **Cheng-Bin Jin**, Nan Yao, Ye Xiao, Jin Xie, Zeheng Li, Xiang Chen, Bo-Quan Li, Xue-Qiang Zhang\*, Jia-Qi Huang, Qiang Zhang\*. Taming solvent–solute interaction accelerates interfacial kinetics in low-temperature lithium metal batteries. **Advanced Materials** 2023, 35, 2208340.

[5] **Chengbin Jin#**, Tiefeng Liu#, Ouwei Sheng, Matthew Li, Tongchao Liu, Yifei Yuan, Jianwei Nai, Zhijin Ju, Wenkui Zhang, Yujing Liu, Yao Wang, Zhan Lin, Jun Lu\*, Xinyong Tao\*. Rejuvenating dead lithium supply in lithium metal anodes by iodine redox. **Nature Energy** 2021, 6, 378–387

## $\pi$ -d Conjugated Copper Chloranilate with Distorted Cu-O4 Site for Efficient Electro-catalytic Ammonia Production

Chengyong Xing

Shandong University of Science and Technology

Understanding the relationship between electrocatalytic performance and local structure at the molecular level is of great significance. Herein, a bifunctional electrocatalyst CuCA (CA = chloranilate) was constructed for both nitrogen reduction reaction (NRR) and nitrate reduction reaction (NORR). Combined structural analyses using Rietveld refinement, extended X-ray adsorption fine structure (EXAFS) and pair distribution function (PDF) revealed a significant distortion of the Cu-O4 structure. Benefitting from the unique local structure, Cu-CA shows an impressive NH<sub>3</sub> yield rate of 286.00  $\mu\text{g h}^{-1} \text{mg}^{-1}$  (FE = 18.25%, -0.85V vs. RHE), 3180.00  $\mu\text{g h}^{-1} \text{mg}^{-1}$  (FE = 90.3%, -0.9V vs. RHE) for NRR and NORR reactions. In contrast, the pyrazine (Pyz) decorated compound Cu-CA-Pyz with less distorted Cu-O4 structure and fewer active sites show much lower activity. Density functional theory (DFT) calculations shed light on that the distorted nature can effectively regulate the electron density distribution, which can lower the energy barrier of adsorption and activation of the intermediate species, leading to the enhanced activity. These findings may give a new insight into the structural-property relationship and open up opportunities for exploring efficient electrocatalysts.

## 本征结构空位对 ZrNiSn 基材料热电输运机制的影响

杨雄

西南交通大学

half-Heusler 合金是一种热电性能和力学性能优异的热电材料,在废热回收和深空探测等领域具有很好的应用前景。目前普遍认为,性能较好的 N 型 half-Heusler 热电材料为  $\text{Zr}_{1-x-y}\text{Hf}_x\text{Ti}_y\text{NiSn}_{1-z}\text{Sb}_z$  体系。然而,该体系中 Hf 的最优掺杂量在 0.3~0.7 之间, Hf 使用量过高会增加热电材料的生产成本,限制了其实际应用。本研究通过调整基体中本征结构空位的含量,同时将能带工程和缺陷工程引入 ZrNiSn 基合金中,在提升电学性能的同时优化热学性能,使其 ZT 值可与大多数 Hf 掺杂试样的 ZT 值相比拟,从而有效解决了 Hf 的使用量较高的难题。

## Sn 基储锂负极在低温快响电池中的应用基础

胡仁宗

华南理工大学

目前采用低嵌锂电位石墨作为负极的锂离子电池在低温充电时,由于电荷传输阻抗增大导致嵌锂电位降低,负极表面极易析锂而导致电池性能衰减或安全问题。因此采用嵌锂电位高、无析锂风险的负极材料是提升电池低温充电能力的技术途径之一。我们研究发现具有适中嵌锂电位的金属 Sn 在低温储锂过程会转变为晶格致密度更低的  $\alpha$  相,更利于 Li<sup>+</sup>在晶体内的快速迁移而降低低温充放电极化,加以利用可进一步提升 Sn 基负极材料的低温储锂性能。我们拟利用该负极体系来构建具备-40°C 下快速充电能力的电池体系与器件,为实现低温转化电能可在高比能电池体系中的快速存储提供支持。本报告将主要介绍上述研究进展。

## 高镍层状正极材料合成及复合掺杂研究

王海<sup>1,2,3,4</sup>、张杰<sup>2,3,4</sup>、骆文彬<sup>1</sup>

1. 东北大学冶金学院
2. 银亿集团有限公司

## 3. 广西银亿新材料有限公司

## 4. 广西银亿高新技术研发有限公司

通过典型的共沉淀法和复合掺杂策略，制备了具有零应变的高镍层状正极  $\text{LiNi}_{0.83}\text{Co}_{0.11}\text{Mn}_{0.04}\text{Me}_{0.02}\text{O}_2$  材料。通过热分析 (DSC)、X 射线衍射 (XRD)、扫描电镜 (SEM)、EDS 能谱分析、电化学阻抗 (EIS)、循环伏安 (CV) 和恒流充放电测试等探究了烧结温度、烧结时间、复合参杂量等对正极材料的结构、形貌及电化学性能的影响。表征发现:复合掺杂正极在较宽的电化学窗口内呈现的体积变化几乎为零,掺杂引起材料层状结构整体有序局部无序,从而实现循环稳定和高容量。材料在  $25^\circ\text{C}$ 、 $0.1\text{C}$  的测试条件下,首次放电比容量为  $210.0\text{mAh}\cdot\text{g}^{-1}$ ,首次库伦效率为  $91.7\%$ ;其在  $1\text{C}$  倍率下循环 100 次后容量保持率为  $97.8\%$ ,具有较佳的电化学性能。

**固态金属电池界面化学**

张春晓

中南大学

金属电池兼具高比能、轻量化等优点,是电化学储能领域的热点前沿课题。然而,其应用仍然受制于枝晶生长、死锂演化、电极-电解质界面副反应等难题,导致其循环寿命差、倍率性能差和容易引起安全隐患。因此,如何调控离子迁移、枝晶生长和界面反应称为本领域的研究热点,而电解质优化、人工 SEI 构建以及固态电解质设计等策略已经被证实可以解决金属电池的应用难题。基于此,我们通过电解质组分优化固态电解质设计协同策略在金属负极侧界面构筑了稳定 SEI,并调控了离子迁移和界面反应。通过采用高古特曼给体数的可交联的增溶剂 DMAA 将  $\text{LiNO}_3$  引入到碳酸酯电解质中,并利用增溶剂原位聚合形成 GPEs,实现了锂金属负极的高库伦效率;通过进一步引入  $\text{LiPO}_2\text{F}_2$  设计了高熵型聚合物固态电解质,在锂金属负极界面构筑了稳定的 SEI,实现了软包电池的长循环性能。此外,我们还通过将苯硼酸、硅氧烷系列添加剂引入到 GPEs 中,在钠金属负极表面构建了强健的 SEI,并通过调控离子迁移和分布实现了钠金属负极的出色的循环稳定性和优异的动力学性能。这些策略为高安全金属电池的设计与应用提供了指导。

**高比能锂硫电池设计和优化**

方如意

浙江工业大学

锂硫电池是实现  $500\text{Wh kg}^{-1}$  能量密度的有效途径之一。但是由于硫正极的低电导率、体积膨胀、穿梭效应等诸多问题,制约了锂硫电池的发展。本论文为了改善 Li-S 电池电化学性能,通过引入 Se,并将  $\text{Se}_{1-x}\text{S}_x$  封装在具有三互连多孔结构 ( $\text{NC@SWCNTs}$ ) 的氮掺杂碳框架中,制备了自支撑正极。其中  $\text{Se}_{1-x}\text{S}_x$  通过  $\text{CO}_2$  超临界辅助技术均匀分散在三维多孔碳基质中, $\text{NC@SWCNTs}$  宿主不仅为  $\text{Se}_{1-x}\text{S}_x$  提供空间限域效应和中间体的有效物理/化学吸附,而且还提供高导电框架以促进离子/电子传输。所制备的硒-硫固溶体 ( $\text{Se}_{1-x}\text{S}_x$ ) 正极,具有比 S 更高的电子电导率和比 Se 更高的放大比容量比容量,是一类有前途的高性能正极材料。得益于合理的结构和化学成分设计, $\text{NC@SWCNTs@Se}_{0.2}\text{S}_{0.8}$  正极表现出优异的循环稳定性 ( $0.2\text{A g}^{-1}$  下 200 次循环后放大比容量为  $632\text{ mA h g}^{-1}$ ) 和优异的倍率性能 ( $2.0\text{ A g}^{-1}$  下为  $415\text{ mA h g}^{-1}$ )。 $\text{NC@SWCNTs@Se}_{0.2}\text{S}_{0.8}$  自支撑正极不仅提供了高性能正极的新设计策略,而且为制造自支撑正极以实现高能量密度锂电池的实际应用提供新方法,有望构建新一代高比能、高性能锂硫电池。

**Approaches Towards High-Energy-Density Anode-Free Lithium Metal Battery**

Yidan Cao, Kangning Cai, Nanrui Li, Geng Zhong, Shifei Huang, Feiyu Kang

Tsinghua Shenzhen International Graduate School

With the wide application and rapid development of lithium-ion batteries in electric vehicles and portable devices, it is highly demanded to develop batteries with higher energy density, improved safety performance, longer lifetime and lower cost. Lithium metal possesses extremely high theoretical capacity of 3860 mAh g<sup>-1</sup>, ten times that of graphite (372 mAh g<sup>-1</sup>), and low redox potential (-3.04 V vs standard hydrogen electrode). Replacing graphite-based anode with metallic lithium is one of the most promising strategies to improve the energy density of rechargeable lithium-ion battery to achieve the goal of 400 Wh kg<sup>-1</sup> or even higher energy densities. The strategy around current collector is also powerful for developing zero excess lithium or lithium-free rechargeable batteries which is called anode free lithium metal batteries (AFLMBs). Strategies enhancing the interfacial stability between electrode and liquid electrolyte have been investigated. Artificial interface layers in nanoscale with desired architectures, including lithiophilic metallic sites, super three-dimensional structure and crosslinked lithiophilic networks, have been developed to regulate the lithium deposition behavior and prolong the cycle life of AFLMB. Besides, novel cathode and electrolyte materials with high-capacity/wide electrochemical window have been developed to improve the stability of electrode-electrolyte interface and enable high-energy-density anode-free batteries.

### 锂离子电池硅负极材料的常温固相包覆

刘辉、杨鑫

湖南农业大学化学与材料科学学院

高能量密度锂离子电池硅负极的实用规模化推进,需解决硅材料的体积膨胀以及其与电解液的界面稳定性问题。当前主流方法是对硅负极材料进行碳包覆。碳包覆不仅构建导电网络增加硅材料的导电性,同时可避免硅材料与电解液的直接接触,减弱了电解液与水的副反应产物 HF 对硅材料的腐蚀。目前较为常用的碳包覆方法是将大分子有机物分散在硅材料表面,再通过高温烧结碳化的方法进行包覆。然而,硅材料在高温碳包覆过程中再结晶长大粗化,最终会降低其循环稳定性。

本工作旨在解决避免硅材料再结晶长大粗化的前提下进行包覆的问题。首先,采用课题组自主开发的常温纳米包覆机对硅材料进行包覆;此外,为兼顾常温包覆可行性以及硅材料的导电性,选定快离子导体纳米材料 TiN 作为包覆材料。常温固相包覆可避免硅合金中的非晶/纳米硅在高温下晶粒再结晶长大现象,且包覆 TiN 后的硅材料表现出更小的阻抗,和较高的锂离子扩散速率,从而表现出更优异的循环稳定性及倍率性能。在 55°C 的工作温度下,包覆后的材料也展现出更稳定的电化学性能。电化学测试结果表明,包覆材料在 100 次循环后任剩余 850.0 mAh g<sup>-1</sup> 容量;电池的恢复性较好,经不同倍率测试后回到 0.2 C 时任剩余 850.3 mAh g<sup>-1</sup> 容量;循环后经 TOF-SIMS 进行界面分析结果表明,包覆材料具有良好的界面稳定性,生成了较薄的无机组分占比更多的 SEI 膜。

### 高安全性聚合物电解质的设计及其固态锂电池性能研究

邓魁荣

五邑大学

固态锂电池理论上具有高安全性、高能量密度、耐高温等优点,被认为是极具潜力的下一代电化学储能技术。固态锂电池中,固态电解质是最关键的组成部分,固态电解质的离子电导率低、界面稳定性差等问题是制约固态锂电池发展的关键瓶颈,固态电解质是当前固态电池领域研究的重点课题。聚合物电解质具有柔韧性好、密度低、安全性高等优点,在固态锂电池中有良好的应用前景。聚合物电解质目前面临室温离子电导率低,安全性较差,可燃性高,锂枝晶,界面稳定性差,电化学窗口低等问题。针对这些问题,我们通过引入阻燃氟化增塑剂、锂盐引发聚合原位制备聚合物电解质、引入阴离子受体、引入高可逆性共价键来实现聚合物电解质的快速自修复、功能化锂盐制备单离子导体等策略来有效提高聚合物的离子电导

率、阻燃性能、电化学稳定性窗口、界面稳定性和自修复性能，并实现了良好的固态电池性能。

### Constructions of high-performance flexible organic-inorganic composite thermoelectric films and generators using screen printing technology

Yong Du, Qiufeng Meng, Jie Qin, Zuo Xiao, Shichuang Ma, Xinlian Liu  
Shanghai Institute of Technology

P-typed Cu-Se nanowires (NW) and N-typed Ag<sub>2</sub>Se NW powders were synthesized using a wet chemical method, and then adding them into methyl cellulose (MC) matrix to prepare screen printing slurries. Flexible P-type Cu-Se/MC and N-type Ag<sub>2</sub>Se NW/MC composite thermoelectric films were constructed using a screen-printing technology, and the composition and microstructure of the films were optimized using cold pressing combined with annealing treatment. Results showed that the Ag<sub>2</sub>Se NW/MC composite films treated by cold pressing combined with annealing treatment exhibited excellent flexibility and maximum power factor of 1641.58  $\mu\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$  at 360 K. The flexible thermoelectric generator assembled with 4 Ag<sub>2</sub>Se NW/MC legs generated a maximum output power of 653.73 nW at a temperature difference of 14.1 K, corresponding to a power density of 3.51  $\text{Wm}^{-2}$ . This study opened an effective and large-scaled strategy for fabricating high-performance flexible TE materials and energy-harvesting devices.

### 纳米复合驻极体层改进的长期稳定固液接触摩擦纳米发电机用于水波能量收集

赵雪娇

北京化工大学

随着环境污染和能源危机的不断加剧，全球能源革命正在兴起。以纳米摩擦发电机(TENG)为基础开发可再生蓝色能源已成为未来能源发展的重要方向。固体-液体接触摩擦电纳米发电机(TENG)具有结构灵活、易于制造、长期稳定等优点，使波浪机械能更容易集成和实现大规模转换。但是，其输出功率还不够大，限制了其实际应用。在这项工作中，纳米复合驻极体层增强固体-液体接触提出了一种用于水波能量收集的液体接触摩擦纳米发电机(E-TENG)，它可以有效地提高电输出，实现无线传感的实时供电。通过将纳米复合驻极体层引入柔性多层固体-液体接触 TENG，实现更高的功率输出。E-TENG(有效尺寸为 50mm\*49mm)显示出理想的输出性能，功率密度为 521 mW/m<sup>2</sup>。产生的电能通过传输承载检测信息的无线信号驱动无线温度传感，周期为 5.5 min。本研究大大提高了电能输出，为蓝色能源中 TENG 的产业化提供了坚实的基础。

### 一种通过转化反应在 Li/石榴石型固态电解质界面上低成本有效地构建 P/Sn 多功能保护层的方法

赵永涛、司鹏超

山东大学

石榴石型固态电解质(SSEs)由于其高电化学稳定性、宽的电化学稳定窗口和优异的安全性能而被认为是全固态锂金属电池(ASLMBs)中最有应用前景的理想候选者之一。然而，目前它们的实际应用受到界面相容性差和循环寿命短的限制。本文提出了一种低成本、有效的界面改性方法，即在石榴石型 Li<sub>6.4</sub>La<sub>3</sub>Zr<sub>1.4</sub>Ta<sub>0.6</sub>O<sub>12</sub> SSE 表面引入薄而均匀的 Sn<sub>4</sub>P<sub>3</sub> 改性层，以改善界面接触。根据实验结果和理论计算，发现 Li 与 Sn<sub>4</sub>P<sub>3</sub> 发生转化反应，生成由 Li<sub>22</sub>Sn<sub>5</sub>/Li<sub>8</sub>Sn<sub>4</sub> 组成的多功能界面层。具体来说，由于该层的存在，Li-Li 对称电池的界面阻抗仅约为 1  $\Omega\text{cm}^{-2}$ ，对称电池在室温下的临界电流密度为 1.7  $\text{mA cm}^{-2}$ 。电解质界面的显著改性能确保对称电池在 0.5  $\text{mA cm}^{-2}$  下稳定循环 1800 h 以上。此外，ASLMBs 表现出良好的循环和倍率性能。这种转化反应驱动的界面改性策略为解决 Li/石榴石型 SSEs 的界面问题提供了有效的方法。

## Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub> MXene 调控 Li-Al-B-H 复合材料储氢性能及机理研究

刘海镇、罗辉、伍志业

广西大学

硼氢化锂 (LiBH<sub>4</sub>) 具有极高的储氢容量 (18.4 wt%), 被认为是车载储氢的候选材料之一。然而, 受限于严苛的放氢条件和较差的可逆性能, 其在储氢领域中的运用受阻。通过引入 Al 单质构建 Li-Al-B-H 复合体系 (2LiBH<sub>4</sub> + Al) 可以发生失稳反应从而改变其放氢路径, 有效降低了 LiBH<sub>4</sub> 的放氢温度, 但 Li-Al-B-H 复合体系仍存在吸放氢动力学缓慢和循环稳定性差等问题。本研究通过 HF 刻蚀法制备得层状的 Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub> MXene, 并通过球磨法构建了 Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub> 掺杂的 Li-Al-B-H 复合材料, 研究 Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub> 对 Li-Al-B-H 复合材料储氢性能的影响规律和作用机理。研究表明, 掺杂 20 wt% Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub> 的 Li-Al-B-H 复合材料初始放氢温度为 160 °C, 比未掺杂样品降低了 135 °C; 放氢表观活化能降到 85 kJ·mol<sup>-1</sup>, 低于未掺杂样品的 165 kJ·mol<sup>-1</sup>; 经过 5 次循环测试后, 仍保持 4.5 wt% 的放氢容量, 优于其他掺杂比例的样品。微结构研究表明, 在吸放氢过程中, Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub> 与 LiBH<sub>4</sub> 发生反应并生成了 TiB<sub>2</sub>, 这在吸氢过程中可以有效限制 Al 的结晶大小, 从而提高循环放氢容量。

## 高稳定锌电极构筑策略及储能应用

李子炯

郑州轻工业大学

水系锌离子电池 (电容器等) 近年发展迅速, 但锌枝晶生长、锌片的持续腐蚀、析氢副产物的积累严重制约了其进一步的产业化。项目团队采用先进二维钛碳化合物 (MXene)、生物质碳等材料, 通过修饰锌电极、隔膜等, 抑制了锌枝晶生长、析氢副反应等, 提升了锌离子储能器件的性能, 并揭示了储能原理, 对开发水系锌离子储能器件应用具有重要意义。

## 利用界面竞争作用消除 NiOX 基钙钛矿埋底空隙实现高效稳定光伏组件

李思博、丘龙斌

南方科技大学

钙钛矿太阳能电池 (PSCs) 因其优异的功率转换效率 (PCE) 有望实现商业化应用, 从而实现碳中和。然而, 将 PSCs 放大到大面积钙钛矿太阳能组件 (PSMs) 时, 其性能和稳定性会迅速下降, 这是限制其商业化应用的主要挑战。造成该结果的主要原因之一是面积钙钛矿薄膜埋底界面中存在局部空隙, 这可能归因于前体溶剂和基底之间不平衡的界面相互作用所致。对此, 我们提出了一种低温的可扩展的两步法化学浴沉积工艺, 旨在制备高质量的 NiOX 空穴传输层 (HTL)。此外, 通过调节 A 位阳离子来增强 DMSO 与钙钛矿前体之间的相互作用, 消除 DMSO 与 NiOX 界面间的相互作用力, 并改善钙钛矿薄膜埋底界面的质量。最终, 我们得到了基于无任何修饰的 NiOX HTL 的倒置结构的 PSC (有效面积 0.1 cm<sup>2</sup>, PCE = 22.40%) 和 PSM (有效面积 21.45 cm<sup>2</sup>, PCE = 19.09%) 器件。PSM 还表现出长期的运行稳定性, 在一个太阳光照下连续运行 1056 小时后仍保留了初始性能的 84%。

## 锂离子电池富锂锰正极材料的改性策略及其在全固态电池中的应用

严晨辉、邵期农、高明霞、刘永锋、孙文平、张欣、潘洪革

浙江大学材料科学与工程学院

锂离子电池层状富锂锰氧化物正极材料具有高于 280 mAh g<sup>-1</sup> 的理论容量和大于 1000 Wh kg<sup>-1</sup> 的高能量密度, 电压平台适中, 成本低, 是极具潜力的下一代高能量密度锂离子电池正极材料, 但其倍率性能差, 首次库伦效率低, 在循环过程中容量和电压持续衰减等问题严重阻碍了其商业化应用。本工作采用多种策

略对富锂锰氧化物正极材料进行改性。通过对富锂锰氧化物进行表面还原和包覆处理，构建了包含包覆层、层状-尖晶石异质层和表面氧空位的表面结构；通过简单的在电极浆料制备过程中添加碱金属硫族化合物，提高了表面氧空位浓度，构建了对氧的可逆氧化还原对。通过上述措施，有效抑制了富锂锰正极材料在循环过程中氧气的释放和层状结构向尖晶石结构的转变，减少界面副反应的发生和过渡金属的溶解，从而提高富锂锰正极的循环稳定性。实现了在 1C 下的首次容量达 234 mAh g<sup>-1</sup>，500 次循环后容量保持率达 96.2%。同时，通过调控富锂锰材料的成分，显著提高了其电子电导率，首次将富锂锰正极材料用于全固态电池，在全固态电池中在 0.5C 下具有 244 mAh g<sup>-1</sup> 的高放电容量，具有 853 Wh kg<sup>-1</sup> 的高能量密度，在 0.5C 电流密度下循环 1000 次后容量保持率高达 83%。

### Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub> 及其衍生物热电性能研究

张雄、罗浩凌、张喻

湖北师范大学

Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub> 作为一种极具商业化潜力的中温热电材料受到广泛关注，本工作从以下两个方面展开了研究：1) 阐明了 Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub> 的 p-n 型转变机制，提出 p-n 型本征转变的三个演化阶段：富 Mg 空位（富 Sb 相）期，Mg 空位补偿期（几乎没有沉淀）和 Mg 空位缺陷期（富 Mg 相）。同时发现 Mg 空位浓度是本征 p-n 型转变的关键因素。2) 通过研究 Cu 掺杂在引入衍生物 YbZn<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub> 中发挥的作用，发现 Cu 掺杂（与 La、Bi 和 Yb 掺杂情况相比）在载流子浓度调控和晶格热导率降低方面表现更突出，该工作认为 Cu 可以作为一种良好的掺杂剂，特别在载流子浓度调控方面，从而进一步提高该材料体系的热电性能。

### 基于矿物凝胶构筑单原子催化剂及其电催化析氢性能研究

吕富聪、吕坚

香港城市大学

绿色、可再生、可持续的氢能，被认为是替代化石燃料的理想新型能源载体，是解决全球生态环境危机的关键，对实现碳中和的最终目标至关重要。电解水制氢，是备受青睐的技术之一，但其相应低成本、高稳定性和高活性电催化剂的开发，仍然是一项极具挑战性的任务。具有单金属原子分散的异质结构材料因其高活性、大活性界面以及容纳高密度单原子电催化位点的巨大能力而成为制氢催化剂的优选。然而，实现大规模生产具有高稳定性、低成本和制备简单的单原子异质结构催化剂仍然是一个巨大的挑战。因此，我们报道了一种铁单原子分散的多孔异质结构钼基纳米片催化剂，该催化剂是从新型自组装二维纯无机的铁-磷酸钼酸盐矿物水凝胶纳米片衍生而来，并探索了其作为电解水制氢的电催化剂的性能。值得一提的是，这种单金属原子分散的异质结构纳米片是首次通过矿物水凝胶中开发出来的。该合理设计的单金属原子分散的异质结构纳米片催化剂在 1.0 摩尔的氢氧化钾溶液中表现出卓越的析氢活性和稳定性，表现为在 10 mA cm<sup>-2</sup> 的电流密度下其过电位为 38.3 毫伏，且在 200 mA cm<sup>-2</sup> 的电流密度下稳定运行 600 小时。这一性能优于大多数之前报道的非贵金属电催化剂。通过实验结果和密度泛函理论计算表明，氧配位的铁单原子分散异质结构大大促进了水分子的吸附，并实现了有效的吸附氢（H\*）吸附/解吸，而且二维多孔的结构非常利于暴露了更多的活性位点。因此，我们开发出了一种适合电解水制氢的新颖的、环保的、低成本的、可规模化生产的单原子分散异质结构电催化材料，此利用矿物凝胶合成单原子分散的异质结构催化剂的独特思路为下一步对廉价、高效的催化剂提供重要的理论基础和方向。

### 提高锌锰电池寿命：基于谷胱甘肽诱导的固体电解质保护层强化锌阳极

芦凯

西华大学

水性锌离子电池（AZIBs）以其卓越的成本效益和更高的安全性成为下一代大规模储能的极具前景的

候选者。然而，严重的树枝状生长、析氢和锌阳极腐蚀等问题阻碍了其在储能系统中的广泛应用。

在此，我们提出具有丰富极性官能团的还原型谷胱甘肽（GSH）作为一种有效的电解质添加剂的设计方法，该策略显著提升了 AZIBs 的稳定性和电化学性能。

实验和理论分析证实，GSH 不仅调节  $Zn^{2+}$  的溶剂化结构，加速其在锌表面的脱溶过程，而且通过其自身丰富的极性基团优先吸附在锌金属表面，形成固体电解质界面，抑制腐蚀和其他副反应。得益于两者的协同效应，极大地提高了锌锰电池的使用寿命。

### **Regulating the Zn Electrode/Electrolyte Interface Toward High Stability-- Insights from the Resting Time Impact on Zn Electrode Performance**

Zhijun Cai

The Chinese University of Hongkong

The resting period, commonly performed prior to cycling, is known to have a significant impact on the cycling performance of acidic aqueous zinc-ion batteries (AZBs). We have demonstrated that even without electrochemical cycling, the resting time significantly influences the cycling performance of the Zn electrode and is closely related to the evolution of zinc hydroxide sulfate (ZHS) byproducts formed on the Zn electrode, whose presence not only affects the corrosion of Zn but also determines the plating/stripping characteristics of Zn. As shown in the upper part of Figure 1, a short resting time (1 day) results in incomplete ZHS coverage on Zn, leading to a reduction in the electrode's lifespan due to short-circuit failures. A moderate resting time (3 days) allows for complete ZHS coverage on Zn and helps improve the cycling lifespan. However, a further prolonged resting time (7 days) leads to an excessive amount of ZHS, suppressing effective charge transfer at the interface and thus reducing the electrode's cycling lifespan.

The uniformity and quantity of ZHS are crucial factors determining the electrode's cycling stability. Therefore, controlling the ZHS at the Zn interface can prevent corrosion and promote uniform Zn stripping/plating during the cycling, effectively enhancing the cycling performance of the Zn electrode. Based on this understanding, we have developed a ZHS layer with an appropriate quantity and coverage on the Zn surface (ZHS-Zn) using a one-step hydrothermal method. As shown in the lower part of Figure 1, the fine ZHS layer can protect the Zn electrode from resting-induced damage, enabling a long lifespan of over 3800 hours at  $1 \text{ mA cm}^{-2}/1 \text{ mAh cm}^{-2}$ . The ZHS-Zn layer also exhibits stable cycling performance when assembled into  $MnO_2//Zn$  full cells, maintaining capacity stability over 6000 cycles.

In summary, this work emphasizes the importance of standardized resting time in evaluating the electrochemical performance of Zn anodes. It also deepens the understanding of the relationship between the resting period, ZHS evolution, and the cycling performance of Zn electrodes, providing guidance for further interface design strategies for AZBs of long stability.

### **高性能水|有机双相无膜锌卤素电池**

吴雨桐

南京工业大学

液流电池能量/功率独立、寿命长、安全性高，发展前景良好。目前主流研究致力于通过改性电解液、膜材料提高电池循环性能及降低成本，已取得诸多进展。但因高电化学性能与低自放电对液体活性物质扩散行为要求的矛盾，各类液体活性物质基储能体系均存在自放电问题且能量密度尚待提高。报告介绍一系列锌卤素双相无膜电化学储能设计。以双相无膜锌溴电池为基础，引入碘元素控制锌生长，搭配卤素络合

剂的系统合成、研究与改性，在保持低成本、自放电的同时提升储能体系的能量密度及电化学性能。目前该电池体系自放电性能达到断层世界第一，且能量密度为各类无膜液体电池现有报道两倍以上。通过液-液界面的研究优化及电极、安全材料的开发，该电池设计可助力超低成本大规模水系储能迭代。

### 水系锌离子电池阳极多尺度复合功能化界面的设计与构筑

张楠

中山大学

水系锌离子电池因其成本低、稳定性好、安全性高等优点，从众多电化学储能体系中脱颖而出，成为最具应用前景的规模储能电化学体系之一。然而，充放电过程中锌负极备受枝晶、析氢和腐蚀等问题的困扰，严重阻碍了锌离子电池的商业化应用。通过构筑高介电常数的氧化物阳极界面修饰层可以调控电极表面的电场分布，抑制枝晶生长，缓解析氢腐蚀。但传统的氧化物界面修饰层制备工艺复杂、结构稳定性差，且致密的界面层会阻碍锌离子在电极表面扩散和电荷转移过程，影响电极的动力学特性。针对上述问题，我们设计了一种由功能材料-结构骨架-保护层组成的多尺度复合界面层体系，用于实现高性能、长寿命的水系锌离子电池阳极。首先，通过在  $ZrO_2$  修饰层中引入高导电性、高孔隙率的石墨烯三维骨架，优化了锌离子的沉积行为，降低了反应过电位，由其构筑的对称电池在  $2\text{ mA cm}^{-2}$  的电流密度下稳定循环 3000 h。随后进一步引入聚 3,4-乙烯二氧噻吩作为保护层，利用其耦合交联作用，防止  $ZrO_2$  在锌的沉积溶解过程中剥离脱落，该多尺度复合界面在 400 次高倍率充放电循环后仍然保持结构稳定。上述研究成果为设计与开发先进锌负极开辟了新的策略。

### 凝胶电解质功能调控及其锌离子混合超级电容器性能研究

季辰辰

新疆大学

锌离子混合超级电容器 (ZHSCs) 作为重要的能量储存系统，具有成本低、理论容量高和环境友好等优势，受到广泛的关注。但是 ZHSCs 的金属锌负极面临着锌枝晶生长、析氢反应 (HER)、腐蚀和钝化等问题。以上问题严重影响了 ZHSCs 的安全性和长循环寿命并阻碍了其大规模发展。因此，开发有效实现无枝晶、耐腐蚀的高性能锌负极的策略是应对上述问题、并实现 ZHSCs 的大规模发展的关键。水凝胶电解质综合了水系电解质高离子电导率和固态电解质高稳定性等特点，在一定程度上能提高锌负极的稳定性和可逆性。鉴于此，本文将围绕着锌负极的诸多问题提出功能性添加剂填充水凝胶电解质的优化策略，显著提高锌负极的稳定性、可逆性和循环寿命，从而获得高性能的 ZHSCs 能量储存系统。基于此，本研究设计多种功能性添加剂填充的凝胶电解质，通过多种物相表征、电化学测试并结合理论计算等方法，分析添加剂在改善锌负极中的作用机理并探究其在 ZHSCs 中的实际应用性能。

### 水系锌电池电解液优化及负极保护策略研究

王省超

新疆大学化学学院

水系锌离子电池 (AZIBs) 由于高理论体积容量 ( $5855\text{ mAh cm}^{-3}$ )、低氧化还原电位 ( $-0.762\text{ V vs. SHE}$ )、安全且低成本的优势，有望用于大规模的储能设备。然而，界面副反应、腐蚀以及在锌电镀/剥离过程中形成的锌枝晶等问题阻碍了其商业化应用。为解决该问题，课题组从电解液调控和锌负极修饰开展了系列研究工作。理论计算与光谱实验结果共同证实了电解液添加剂 (TFA) 对解决锌枝晶、HER 和副产物等关键问题起积极作用。TFA 的 C=O 基团与  $Zn^{2+}$  之间发生了强烈的相互作用，这种相互作用改变了  $Zn(H_2O)_6^{2+}$  的固有结构，从而增强了  $Zn^{2+}$  在电解液中的迁移率。此外，TFA 与  $H_2O$  之间的相互作用破坏了水分子的

氢键网络结构，这导致了活性 H<sub>2</sub>O 的减少以及电解液 pH 值的稳定。此外，该类电解液具有良好的宽温域性能，组装的 Zn//PT 全电池可在 25°C 时稳定循环 10000 圈，组装的 Zn//AC 电容器可在 70°C 时也能稳定循环 10000 圈。基于 PEDOT:PSS 的良好吸附力、成膜性和导电性等特性，提出了聚合物/锌负极一体化保护策略，即通过简单的涂覆工艺，在 Zn 负极表面形成厚度约为 6 μm 均匀、致密的 PEDOT:PSS 膜。PEDOT:PSS 层作为关键功能层，有效提升了锌阳极的稳定性，显著抑制了锌枝晶的形成，从而提升了锌离子电容器的整体性能。使用 PEDOT:PSS 层的锌阳极相比传统锌阳极，具有更长的循环寿命和更高的能量密度。

### 生态环境材料合成过程中新污染防治的研究与实践

吴济舟

国检测试控股集团京诚检测有限公司

随着全球工业化进程的加速，新污染物的产生与排放问题日益严重，对生态环境和人类健康构成了严重威胁。新污染物，如持久性有机污染物、抗生素、内分泌干扰物以及微塑料等，在生态环境材料合成过程中尤为突出。本文旨在探讨生态环境材料合成过程中新污染防治的技术路线，通过深入研究与分析，提出一套高效、可行的防治策略。

本文首先分析了生态环境材料合成过程中新污染物的产生机制与排放特点，明确了防治的关键环节和技术难点。在此基础上，系统综述了国内外新污染防治技术的研究进展，包括源头控制、过程减排、末端治理等多个方面。随后，结合我国实际情况，提出了一种基于源头减排、过程控制和末端治理相结合的综合防治技术路线。该路线注重从源头上减少新污染物的产生，通过改进生产工艺和优化材料配方来降低污染物排放；同时，在合成过程中加强监控与管理，确保污染物得到有效控制；最后，在末端治理上采用先进的物理、化学和生物方法，实现污染物的无害化处理。

本文还通过实例分析，验证了所提出技术路线的可行性和有效性。结果表明，该技术路线能够显著降低生态环境材料合成过程中的新污染物排放，对改善生态环境质量、保障人类健康具有积极意义。最后，本文展望了新污染防治技术的未来发展方向，为相关领域的研究与实践提供了有益的参考。

### Effective recycling of waste polyimide into platform chemicals

Haodi Chen, Xuehui Liu, Shimei Xu, Yu-zhong Wang

FBR-环保型高分子材料国家地方联合工程实验室

Polyimide (PI) is one of the promising engineering polymers with outstanding thermal stability, but its recovery presents a formidable challenge due to the stability of aromatic heterocyclic rings. Recently, some chemical recycling methods have been developed including hydrolysis, aminolysis and hydrogenation. However, harsh reaction conditions and complex post-processing lead to poor monomer yield, high energy consumption and narrow applicability. Here, we present an aminolysis coupling hydrolysis method for PI's recycling. Under milder temperature, atmospheric pressure and simple post-processing, two kinds of monomers were recycled with the yield of 91% and 82%, respectively. Based on life cycle assessment (LCA), the CO<sub>2</sub> saving of this work is 1.74 times as conventional hydrolysis, making a substantial contribution to carbon neutrality. Such a cascade approach provides a mild and effective alternative to conventional one-step degradation and shows significant advantages regarding reaction conditions, monomer yield and carbon emissions.

### Environmentally robust superhydrophobic coating with pH-induced switchable wettability, antifouling, and recoatability

Meilin Guo, Fang Wang, Fei Song, Yuzhong Wang

Sichuan University

Low-surface-energy coatings, acting as significant protecting materials, are widely used in construction and building materials. Promoting the green manufacturing and low-carbon application of these coating materials is of great significance for the sustainable development of buildings and livelihood-related industries. However, there are very limited reports on low-surface-energy coatings that possess environmental robustness, multi-scenario practicability, and recoatability. Here, in combination with hydrophobic hydrocarbon chain segments, aminopropyl functional groups, inorganic silica nanoparticles, and epoxy coatings, we demonstrate a low-cost and environmentally friendly organic/inorganic hybrid superhydrophobic coating having high environmentally durability, as well as self-cleaning, antifouling, and recoating capabilities. This coating exhibits a water contact angle of  $155.4^\circ$ , and maintains superhydrophobicity even after the exposure to various harsh environmental conditions, including 100 cycles of sandpaper abrasion, 70 cycles of tape-peeling, 120 h of water immersion, and 144 h of heat and humidity corrosion. Relying on the design of pH-responsive groups, the reversible surface wettability of the coating is achieved from superhydrophobicity to hydrophilicity under pH regulation, thereby realizing the recoatability of the superhydrophobic coating with an adhesion strength as high as 5.34 MPa. The structural design of this study provides a feasible and sustainable strategy for constructing multifunctional low-surface-energy coatings for potential applications in construction, transportation, and electrical engineering.

### 黏土矿物功能化设计及其在能源、环境领域的应用

彭康<sup>1</sup>、李晓玉<sup>2</sup>

1. 西安交通大学
2. 长安大学

天然黏土为层状铝硅酸盐矿物，晶体结构单元层由硅氧四面体和铝氧八面体组成，具有丰富的表面羟基，不同的形貌特征，优良的吸附性和良好的亲水性，是吸附、催化等复合功能材料的优良载体。我国的黏土矿产资源分布广泛、储量丰富，在经济建设中起着重要作用，广泛用于化工、冶金、建材和农业等行业，但其开发利用水平有待提高。本研究基于黏土矿物表面良好的吸附性和亲水性、丰富的形貌特征以及层状结构等天然特性，采用表面负载催化材料、碳材料界面调控、不同形貌匹配和层间域调控等功能化设计方法，构筑系列功能矿物材料，应用于污染物吸附与降解、电/光催化产氢、二氧化碳捕集与还原等方向；面向双碳目标，满足环境和能源领域的应用需求，实现黏土矿物的高值化利用；同时也可作为矿物高值化加工提供指导，推动资源绿色高效利用。

### 均质冻干法合成含钡铝酸盐及高发射扩散阴极构筑

蔡永丰、王金淑

北京工业大学

扩散阴极的电子发射能力直接决定着大功率真空电子设备的性能，含钡铝酸盐位于多孔基体近表面的孔隙中，发挥着显著降低阴极表面逸出功的作用。本文开发了一种适用于铝酸盐体系的均质冻干技术，利用该技术合成多类型含钡铝酸盐。基于 DFT 计算确定了“411”型含钡铝酸盐的晶体结构为  $(\text{Ba}_{0.75}\text{Ca}_{0.25})_4\text{Al}_2\text{O}_7$ ，建立了活性相与扩散阴极发射特性之间的关系。当引入  $\text{BaF}_2$  后，所构筑的钨基阴极可在  $1100^\circ\text{C}$  提供  $15.89\text{A}/\text{cm}^2$  的零场电流密度，是普通 S 型扩散阴极的 1.11 倍。本研究将对新型含钡铝酸盐的开发和相关无机硅铝酸盐的合成提供新的视角。

### 小角度晶界对第四代镍基单晶高温合金组织及性能的影响

王强<sup>1</sup>、杨文超<sup>1</sup>、段星宇<sup>1</sup>、王新广<sup>2</sup>、张军<sup>1</sup>、刘林<sup>1</sup>

1. 西北工业大学

## 2. 中国科学院金属研究所

镍基单晶高温合金是制造先进航空发动机涡轮叶片的关键材料。为了满足航空发动机推重比不断提高的需要，单晶高温合金中难熔元素含量增加，涡轮叶片形状和内部风冷结构日益复杂，单晶涡轮叶片定向凝固过程中的不稳定因素增多，不可避免地导致小角度晶界（LAGBs）缺陷的形成。在枝晶生长过程中，相邻枝晶发生塑性变形，导致单个枝晶取向发生偏差，进而使枝晶在生长汇聚过程中产生 LAGBs。LAGBs 作为一种高扩散通道，能够为析出相提供优先形核位点，破坏了合金的  $\gamma/\gamma'$  组织，使合金性能恶化。目前，国产第四代单晶高温合金尚在研发阶段，由于其难熔元素的大量加入导致定向凝固过程中 LAGBs 形成倾向增大。因此，研究 LAGBs 对镍基单晶高温合金组织和力学性能的影响对加速国产高代次镍基单晶高温合金的应用进程具有重要意义。本文采用双籽晶法制备了具有不同 LAGBs 的第四代镍基单晶高温合金，系统研究了 LAGBs 对合金显微组织和性能的影响，结论如下：（1）沿 LAGBs 分布有粗  $\gamma'$  相，这与晶界处较高的能量和元素偏析有关。热处理后，粗  $\gamma'$  相在晶界处消失，析出不完全立方  $\gamma'$  相，其尺寸随晶界角度的增大而增大。（2）1100 °C 热暴露不同时间后，沿 LAGBs 形成  $\gamma$  相膜或 DP 菌落区，其宽度随热暴露时间的延长而增加，对高温合金的组织稳定性有不利影响。（3）在 1100 °C 高温拉伸作用下，随着晶界角的增大，极限抗拉强度先升高后降低，延伸率明显降低，沿晶断裂方式由延性断裂向脆性断裂转变。在 1100 °C/150 MPa 蠕变条件下，随着晶界角的增加，蠕变断裂寿命显著降低，基于 70%蠕变断裂寿命标准，合金的 LAGBs 损伤容限约为 7°。由于 LAGBs 处的微观组织劣化和应力集中的双重作用，材料的性能显著下降。在应力集中作用下，晶界处的碳化物和 TCP 相容易开裂，导致试样破坏。

**基于机器学习的 GH4175 合金成分-性能关系建模与分析**

刘宜瑞、李俊杰

西北工业大学

GH4175 合金是一种新型的镍基高温合金，具有高体积分数的  $\gamma'$  强化相。然而，该合金存在热加工窗口较窄和在铸锭开坯过程中易于出现开裂的问题，这限制了其在实际应用中的使用。为了优化高温力学性能，同时确保良好的热加工性能，我们开发了一种基于机器学习的策略。我们首先利用热力学计算缩小设计空间，然后通过主动学习策略优化成分与高温塑性的关系模型，以探索优异的高温塑性合金成分，并对高温塑性与合金成分及组织的关联进行了分析。最终，我们成功设计出了几种含有高体积分数  $\gamma'$  相且具有良好的加工性能的 GH4175 合金。最佳合金在 800°C 时， $\gamma'$  相含量为 55.69%，1170°C 时的延伸率为 53.5%，且加工窗口超过 70°C。

**Ta 对无 Re 镍基单晶高温合金在长期热暴露过程中  $\gamma'$  组织稳定性的影响**高玉婷<sup>1,2</sup>、董加胜<sup>1</sup>、楼琅洪<sup>1</sup>

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国科学技术大学

工业燃气轮机等先进装备动力推进系统的热端部件需要在高温下运行长达数万小时，因此合金的组织稳定性是影响其使用寿命和安全性的关键。尽管在合金中添加稀散元素(如 Re 和 Ru)可以增强其在极端高温环境下的耐久能力，但 Re 和 Ru 价格昂贵，不仅使合金成本大幅度提高，而且易于导致 TCP 相的析出，对合金热稳定性不利。Ta 作为镍基单晶高温合金中重要的强化元素，在高温合金的发展历程中一直保持着较高的含量，通常有利于组织稳定性和力学性能的提高，是替代稀散元素 Re 的重要元素。然而，关于 Ta 对镍基单晶高温合金长期热暴露过程中  $\gamma'$  组织稳定性的影响存在争议。

本文以三种不同 Ta 含量的无 Re 镍基单晶高温合金(分别为 7wt.%、8wt.% 和 9wt.%)为研究对象，利用 DSC、SEM、TEM、HR-XRD 和 3D-APT 等手段系统地研究了在热暴露温度为 900 °C 和 1000 °C 下，Ta 含量对  $\gamma'$  组织稳定性的影响规律。研究表明：i)、标准热处理后，Ta 的增加不仅增强了合金元素的配分行

为，也增大了室温和高温下  $\gamma/\gamma'$  绝对错配度；ii)、在 900 °C 热暴露下，Ta 的增加降低了  $\gamma'$  粗化速率从而提高了  $\gamma'$  组织的稳定性。这主要是由于 Ta 的增加减缓了元素在基体中的扩散速率，同时加剧了 W 在  $\gamma/\gamma'$  两相界面处的偏聚现象，引起部分界面能降低程度增加；iii)、在 1000 °C 热暴露下，Ta 的增加加速了  $\gamma'$  相的非定向粗化过程，即  $\gamma'$  筏化。这主要归于 Ta 的增加不仅通过加宽  $\gamma/\gamma'$  界面宽度来提高  $\gamma/\gamma'$  两相界面能，还增大了绝对晶格错配，导致高 Ta 合金更易形成完整、规则的位错网络，有利于溶质元素的快速扩散。此外，Ta 的增加还促进了  $\gamma'$  粗化机制由基体元素扩散向界面元素扩散转变。本研究系统阐明了 Ta 的增加对无 Re 镍基单晶高温合金  $\gamma'$  组织稳定性的作用机理，有望为合金成分设计和提高镍基单晶高温合金的组织稳定性提供理论指导。

### 超重力场对 Inconel 718 系合金 $\delta$ 和 $\gamma''$ 相组织演变机制影响

王嘉晖、赵新宝、尤方杰、岳全召、夏万顺、谷月峰、张泽  
浙江大学高温合金研究所

利用悬臂式高温超速离心机研究了 Inconel 718 镍基高温合金在包含超重力场的多场耦合条件下的微观结构演变，重点考察了  $\delta$  相和  $\gamma''$  相的析出及转变行为。结果表明，超重力场对 Inconel 718 变形合金中  $\gamma''$  相粗化有一定的抑制作用， $\gamma''$  相的变化导致其内部的层错明显减少，减少了  $\delta$  相的形核位置，进而抑制  $\delta$  相的析出。对于 Inconel 718 铸造合金，超重力场改变了合金的宏观枝晶偏析，抑制了  $\delta$  相析出的析出。超重力场在多场耦合条件下对复杂多元高温合金相结构和成分组成具有显著影响。

### 超声喷丸对 GH4151 合金疲劳性能的影响

蔡晋<sup>1</sup>、田永逸<sup>1</sup>、谭明昕<sup>1,2</sup>、曲敬龙<sup>2,3,4</sup>、谢兴飞<sup>2,3,4</sup>、吕少敏<sup>2,3,4</sup>

1. 沈阳航空航天大学
2. 北京钢研高纳科技股份有限公司
3. 钢铁研究总院有限公司
4. 四川钢研高纳锻造有限责任公司

为探究超声喷丸强化对航空发动机涡轮盘疲劳性能的影响，以 GH4151 合金为研究对象，研究合金表层形貌、硬度及残余应力在不同超声喷丸工艺参数下的分布特征，分析不同超声喷丸表层形貌及残余应力场状态对合金高循环疲劳性能的影响。结果显示，相比仅机加工状态，超声喷丸后，合金表面形貌一致性程度提高，表层晶粒呈细化及等轴状分布特征，与未喷丸合金相比，超声喷丸后硬化层深度达到 200 $\mu\text{m}$ ，硬度分布一致性提高，亚表层残余压应力均值达到 -641.5MPa，疲劳寿命提升约 9.7 倍。超声喷丸在提高 GH4151 合金表层形貌分布一致性的同时，提升了硬化层深度与残余压应力分布范围。另外，提高弹丸直径，硬度与残余压应力分布范围进一步提升，抑制了裂纹在合金表层的早期萌生，进而使合金疲劳性能显著提升。

### 气体调控对电极感应熔炼气雾化高温合金粉末特性的影响

张利冲、刘玉峰、许文勇、郑亮、刘娜、刘杨、李周、张国庆  
中国航发北京航空材料研究院

电极感应熔炼气雾化 (Electrode induction melting gas atomization, EIGA) 作为一种无坩埚的粉末制备技术，目前已成为制备超纯净金属粉末的重要方法。本文采用数值模拟和雾化实验相结合的方法，研究了雾化压力和气体温度对高温合金粉末粒度、粒形和空心粉的影响规律。采用数值模拟软件 FLUENT 研究了在 2.5MPa~4.0MPa 雾化压力下和 25°C~100°C 气体温度下的单相气体流场和气液固多相流场的变化规律，包括单相气体流场的速度分布、湍流动能分布以及离散相液滴/颗粒在炉内的运动轨迹和回流情况。在此基础上，使用 EIGA 制粉设备制备粉末，选用和数值模拟相同的工艺参数进行雾化实验，得到不同雾化压力

和气体温度下的高温合金粉末。使用激光粒度分析仪、扫描电子显微镜、动态图像分析仪和计算机层析成像 computed tomography (CT) 技术对粉末粒度、粒形和空心粉进行定量的表征。对比不同气体调控下粉末特性的变化规律, 结合数值模拟结果中单相气体流场和离散相液滴/颗粒的运动规律, 揭示气体特性对高温合金粉末粒度、粒形和空心粉的影响机制, 为高温合金粉末特性的精确控制提供理论基础。

### Co-Al-W 新型钴基高温合金高温性能及蠕变机理研究

于思凡、王民庆、杜金辉、徐啸鹏  
北京钢研高纳科技股份有限公司

随着航空航天的发展, 对高温零部件的高温性能要求越来越高, 因此寻找高性能高温材料迫在眉睫。具有 L12 结构的  $\gamma'$  强化相的 Co-Al-W 新型钴基高温合金具有较好的高温组织稳定性和抗蠕变性能, 因此近年来对 Co-Al-W 新型钴基高温合金研究越来越多。研究合金中三元体系的析出相稳定性对新型钴基高温合金的力学性能平衡是至关重要的。试验设计五组不同的 Co/Ni 比含量的 Co-Al-W 基高温合金为研究对象, 通过对比不同 Co/Ni 比合金的拉伸、蠕变性能, 以确定合金力学性能较优的成分。系统研究较优成分合金微观组织, 观察合金晶界析出相类型 (Co<sub>2</sub>W 相、碳化物、硼化物)、数量和分布。研究较优合金蠕变断裂规律及其机理, 观察在不同温度和不同加载载荷条件下蠕变后的变形组织, 采用 TEM 双束暗场照片, 观察位错、堆垛层错等缺陷的发展。

### 电子束增材制造高温合金定向性保持与裂纹抑制的协同机制研究

党晓凤、李尧、何卫锋  
西安石油大学, 空军工程大学

航空发动机涡轮叶片等热端部件呈现结构复杂化和高耐热高承载的发展趋势, 增材制造技术以其独特的优势为定向凝固高温合金涡轮叶片的成形制造提供了重要技术方案。然而, 定向凝固 Ni 基高温合金的增材制造面临两个关键难题, 即等轴杂晶和热裂纹的协同抑制, 但往往在工艺上很难实现。针对以上难题, 本研究采用电子束粉床熔化 (EB-PBF) 技术制备不可焊高温合金 IN738, 在失塑温度范围的上限进行预热 (~950°C), 并与无基板预热的激光直接能量沉积 (LDED) 技术制备的 IN738 合金进行对比。通过工艺参数优化, 在 EB-PBF 过程中同时获得了陡峭且单向的温度梯度、液固界面处足够高的冷却速率以及  $\gamma'$  溶解度处相对较低的冷却速率。这些条件促进了柱状树枝晶的定向生长, 抑制了元素偏析, 并降低了内部的微观缺陷和变形储能。因此, 相比于 LDED 样品中出现的大量裂纹和取向各异的杂晶, EB-PBF 完全抑制了热裂纹的形成, 其室温单轴拉伸显著优于铸态同种合金。此外, 在后续热处理过程中不会诱发再结晶, 具有优异的组织热稳定性。该研究详细阐明了沉积层裂纹萌生与定向晶组织形成的热力学条件, 证明了合理控制增材制造工艺和基材预热温度可同时维持液/固界面单向高温梯度并降低裂纹驱动力, 从而提出了无裂纹定向晶高温合金的增材制造策略。

### 新型钴基高温合金成分设计的研究

徐啸鹏、王民庆、杜金辉、于思凡  
北京钢研高纳科技股份有限公司

Co-Al-W 三元体系具有吸引人的特性, 在熔点温度和力学性能等方面较镍基高温合金具有优势。基于国内外在 Co-Al-W 新型钴基高温合金等方面的研究成果, 总结了该类合金在合金化原理、合金设计方法和力学性能机理等方面的研究现状。试验以不同 Co/Ni 比含量的 Co-Al-W 基高温合金为研究对象, 通过热力学软件计算, 确定合金析出相与温度的关系, 以及合金析出相有  $\gamma'$ -Co<sub>3</sub>(Al,W)相、Co<sub>2</sub>W 相、碳化钨和硼化物相。系统研究不同 Co/Ni 比对合金的显微组织的影响, 为进一步优化合金成分设计提供理论依据。通过观察合金显微组织, 研究晶界析出相的演化行为及稳定性, 并且研究添加微量元素 B 以改善合金塑性, 以

实现所需的性能组合。

### 选区激光熔化 GH2302 高温合金工艺优化及力学性能研究

刘惠<sup>1,3</sup>、周鑫<sup>1</sup>、刘国浩<sup>3</sup>、郭彩玉<sup>3</sup>、孙广宝<sup>3</sup>、张鹏<sup>3</sup>、于鸿垚<sup>2,3</sup>

1. 烟台大学精准材料高等研究院
2. 钢铁研究总院 高温合金新材料北京市重点实验室
3. 北京钢研高纳科技股份有限公司

镍基高温合金 GH3536 是航天航空领域高温部件的关键材料，且应用广泛。随着航空航天领域对低成本和轻量化的不断追求，迫切需要寻找成本更低、密度更小且性能相当的高温合金。基于上述需求，本团队开展了具有较低密度的 GH2302 高温合金增材制造工艺的研究，探讨了激光功率(P)和扫描速度(V)对 GH2302 高温合金选区激光熔化(SLM)成形性的影响，以及热等静压(HIP)和热处理制度对 SLM-GH2302 合金微观组织和拉伸性能的影响。研究表明：激光功率和扫描速度的适当调整可以优化打印效果，优化参数后致密度可达到 98.69%。经过 HIP 处理后，裂纹基本消失，仅存在少量未闭合孔隙，致密度升至 99.4%，微观结构得到改善。通过热处理制度的优化，该合金在室温下横向（垂直打印方向）与纵向（平行打印方向）的抗拉强度分别为 1269MPa 和 1209MPa，断后伸长率分别为 20.5%和 22.0%。在 800°C高温下，横向与纵向的抗拉强度分别为 625MPa 和 613MPa，断后伸长率分别为 17%和 37.5%。GH2302 合金在室温及高温环境下的拉伸性能均优于通过增材制造技术生产的 GH3536 合金，并且其性能与冷轧板材和热轧棒材相当，显示出其在高性能应用中的潜力。

### 基于合金成分优化的激光增材制造高温合金打印裂纹调控研究

刘航宇<sup>2</sup>、刘沛<sup>1</sup>、毕中南<sup>1</sup>

1. 北京钢研高纳科技股份有限公司
2. 中国石油大学(北京)

摘要：激光增材制造镍基高温合金过程当中由于其成分及强化机制与激光增材制造快速非平衡凝固及固态相变过程不匹配，其较宽的凝固区间和失衡的高温强韧性易引起微裂纹缺陷，难以保证合金的组织完整性和力学性能，基于此本文将高通量制备技术和增材制造技术相结合对新型镍钴基高温合金进行成分添加设计，利用 OM、SEM、EPMA 等手段对裂纹形貌以及裂纹附近相组成进行了系统分析，建立合金成分、微观组织之间的关系。研究结果表明在增材过程当中合金微裂纹的类型主要为凝固裂纹和时效裂纹，通过对四组不同成分的合金中裂纹数量的统计结果表明，通过调节 Al(1.8%-2.3%)，Ti(4%-5%)的含量，并且通过提高 Ta 含量减缓  $\gamma'$  相的析出速率以达到微裂纹减少的目的，使得最优元素设计下沉积态合金的微裂纹数量相比其他三组合金裂纹数量减少约 50%，同时随着 Ta、Mo、W 元素的添加，使得硬度整体上呈上升的趋势并达到母材合金硬度的约 1.5 倍。

### 镍基高温合金 K417G 持久性能强化机制研究

樊志明<sup>1</sup>、玄伟东<sup>1</sup>、曹后帆<sup>1</sup>、鲍俊<sup>2</sup>、任忠鸣<sup>1</sup>

1. 上海大学材料科学与工程学院
2. 中国航发商用航空发动机有限责任公司

研究了热等静压(HIP)和热处理(HT)对镍基高温合金 K417G 持久性能的影响。采用扫描电镜对试样微观组织、断口形貌进行观察。通过电子背散射衍射分析试样断裂后裂纹源及扩展通道的转变。使用透射电镜观察位错运动方式及确定碳化物类型。结果表明，与铸态试样相比，HIP 试样的持久寿命降低了 19.5%，

而 HIP+HT 试样的持久寿命提高了 41%，达到 63.04 小时。不同热处理条件下试样的断裂机制不同。铸态试样中存在大量的孔隙，裂纹萌生扩展后导致断裂。HIP 试样中孔隙几乎被消除，然而， $\gamma'$ 相的粗化和不均匀分布对位错的阻碍作用减弱。此外，晶界处长条形碳化物的增加加速了裂纹的萌生和扩展。热等静压热处理后，立方状  $\gamma'$ 相均匀析出，有效地阻碍了位错的移动。粒状的 M23C6 碳化物在晶界析出，起到钉扎作用，延缓晶界滑动和裂纹扩展，从而提高持久寿命。

### 高温合金大型锻件开坯过程组织演变与开裂倾向的预测依据及控制方法

张亨年、李昕、王川、江河、董建新

北京科技大学

随着大型发动机，燃气轮机及烟气轮机的需求不断增加，对其所需的核心高温合金大型锻件生产提出了更高的要求。高温合金开坯往往是在均匀化处理之后，通过一系列热变形过程，将锻件内部晶粒细化，提高锻件的热加工性能，为最终锻件成型提供锻态坯料，其中最为常见的开坯方式为墩拔开坯。而高温合金热加工塑性差，温度窗口窄，开坯工艺制度设计如果不合理，会导致开坯过程中锻件可能没有完全再结晶，组织没有完成均匀化态到锻态的转变；还可能发生开裂，造成切削成本的增加甚至整支坯料的报废，高温合金开坯过程中组织演变与开裂倾向的控制原则亟待更多的关注和探究。而大型锻件生产成本低，工况复杂，通过实验生产探究或简单的有限元模拟均不足以作为开坯的通用控制方法。为此，本文选择 Ni-Cr-Co 基沉淀硬化型变形高温合金 GH4738，其广泛用于 815°C 以下航空发动机和烟气轮机的大型涡轮盘，通过文献与实验结果构建了包含 GH4738 合金动态再结晶、亚动态再结晶及晶粒长大的开坯组织演变模型，使用均匀化态 GH4738 合金热加工温度下的高温拉伸实验及 Normalized C&L 准则构建损伤开裂判据，将构建的组织演变模型与损伤开裂模型通过 Fortran 语言写入 Simufact 软件二次开发程序中，建立起 GH4738 合金开坯模型。该开坯模型可用于模拟连续的多火次，多道次的开坯过程，计算开坯过程中再结晶分数，晶粒尺寸及损伤因子等结果，预测微观组织变化及损伤开裂行为。并通过对比该模型计算记过与实际大型锻件不同位置的组织结果，验证了模型的可靠性。该模型可推广至不同合金、锭型及工况下的高温合金开坯过程，用于开坯结果预测，为优化工艺提供理论依据，帮助企业高质量更安全的生产高温合金大型锻件。

### 高温合金环形件制备过程的组织控制与工艺优化

魏振、李昕、江河、王川、董建新

北京科技大学

高温合金环形件广泛应用于航空、航天、核能等领域中的机匣、燃烧室、密封环、支撑环等关键部位，这些部位反复处于高温、高压、高转速综合作用的恶劣环境中，常要求环形件具有良好的力学性能与承温能力，而均匀的锻后组织是环形件性能优良的前提。但高温合金环形件在多道次热-力耦合作用下极易出现混晶等问题，组织控制复杂。传统的“经验寻优”方式周期长且成本高，有限元模拟的广泛应用可以为工艺参数的优化提供参考，但环轧过程组织演变的复杂性限制了有限元模拟在环轧组织演变过程中的应用。根据 GH4169 合金组织演变特征和高温合金环形件制备工艺实际，在商用有限元软件 Simufact 的基础上进行二次开发，实现了组织演变模型的合理调用，开发了可实现高温合金环形件制备全流程组织预测的数值模拟方法。基于此数值模拟方法研究了环轧道次分配、环形件倒角有无以及各种工艺参数波动对环形件质量的影响，以期优化高温合金环形件的生产工艺，为环形件制备过程中组织演变的精准预测和工艺参数的优化设计提供参考。

### 界面可调控新型镍基变形高温合金高温力学性能研究

高钰璧<sup>1</sup>、丁雨田<sup>1</sup>、甘斌<sup>2</sup>、毕中南<sup>3</sup>、杜金辉<sup>3</sup>

1. 兰州理工大学

## 2. 苏州实验室结构材料研究部

## 3. 钢铁研究总院

针对传统合金强化方式在镍基变形高温合金发展过程中遇到力学性能与加工性能不匹配的瓶颈问题，基于界面调控的设计理念，设计并制备出了具有较低层错能、适量  $\gamma'$  相的新型镍基变形高温合金，研究了层错对新型镍基变形高温合金力学性能的影响。结果表明：随着预应变量的增加，合金中位错和层错的逐渐数量增加，使得新型合金在 760°C 发生塑性变形时，纳米孪晶的密度逐渐增加，导致合金的屈服强度随着预应变量的增加先增加后降低，并在 30% 时达到强化极限，这主要是变形孪晶、相交的连续层错和滑移带带来的强化效应实现的；同时，随着预应变量的增加，新型合金 760°C/480MPa 的持久寿命逐渐降低，并在预变形量为 3% 时合金同时兼顾高的高温强度和高的持久寿命；此外，通过温轧变形在合金中预制的高密度层错不仅可以提高合金的高温（650~850°C）强度，而且可以消除或抑制合金中温（650~850°C）低塑性现象。

**IN693 高温合金的高温氧化和耐熔融玻璃腐蚀行为及机理**

李应举、刘天宇、冯小辉、郑策、杨院生

中国科学院金属研究所

核废料处理是核工业发展的重要一环。玻璃固化处理是目前核废料处理最有效的手段，而玻璃固化熔炉电极材料在苛刻服役环境中的高温和熔融玻璃腐蚀是影响熔炉使用寿命的关键。IN693 合金在玻璃介质中呈现出较当前广泛使用的 IN 690 合金更优的抗腐蚀性能，成为下一代玻璃固化熔炉电极的候选材料。本工作通过调控 IN 693 合金中 Al 元素的含量实现了合金表面 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 膜由内氧化转变为外氧化，显著提高了合金的抗氧化性能。在该合金模拟实际工况通电条件下的腐蚀行为研究中发现，合金中 Al 元素含量过高或过低均不利于腐蚀过程中表面生成连续的 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 膜。并通过模拟揭示了交流电对腐蚀行为的影响机制，为我国自主研制玻璃固化熔炉电极材料提供理论支撑和技术支持。

**增材制造 GH3230 镍基高温合金热变形过程中的动态再结晶行为**

秦育林、陈龙庆

四川大学

增材制造目前被广泛用于制造用于极端环境应用的复杂形状的高温合金组件。镍基高温合金 GH3230 在高温服役条件下需要承受极端的机械应力和热应力，所期望的特定性能通常由热变形过程中的微观组织演变决定，而该过程与动态再结晶 (DRX) 过程密切相关。研究表明，GH3230 的微观结构在热变形过程中发生显著变化，这些变化包括晶粒细化、位错密度变化、相变等。再结晶行为直接影响这些微观结构的演变，进而影响合金的力学性能和服役寿命。因此，系统地研究不同温度条件下该合金动态再结晶组织的演变过程以及形核机理非常重要。本文通过研究 GH3230 在不同温度下（750°C、850°C 和 950°C）热变形过程中 DRX 微观结构的演变，阐明了 DRX 的形核机制。系统地进行了晶界取向差分析，以研究各种变形温度下的 DRX 形核和进展。结果表明，高温下，材料变形时存在 CDRX 和 DDRX 两种变形机制；850°C 时，DDRX 效果最为显著，塑性最佳，延伸率达到 111%；950°C 时，晶界剪切强度及碳化物/基体界面的粘接强度变得较弱，使塑性变形早期形成空隙，从而降低材料的延性。研究再结晶行为不仅可以通过优化热处理工艺和变形工艺帮助优化现有合金的性能，还可以为开发新型镍基高温合金提供理论基础和实验依据。

**Ta10W 合金电子束焊接接头宏观形貌及显微组织分析**

陈逢明

南昌大学

Ta10W 合金因其出色的焊接性和耐腐蚀性，在航空航天、军事、造船等领域得到了广泛的应用，但由于其在焊接方法和设备方面的要求较高，所以在实际使用过程中经常会遇到钽钨合金薄板件焊接的问题。本文以 Ta10W 合金为对象，对其电子束焊接工艺及接头性能进行研究，分别从 Ta10W 合金电子束焊接接头宏观形貌及显微组织分析、Ta10W 合金电子束焊接数值模拟和 Ta10W 合金电子束焊接接头的性能分析这三方面进行研究。得出以下结论：

(1) 对 Ta10W 合金板材进行不同工艺的真空电子束平板对接焊，确定了最佳焊接工艺参数，分析了焊接接头显微组织以及物相的变化。

(2) 利用有限元分析软件 Workbench 对 Ta10W 合金进行焊接建模，模拟了真空电子束焊接的过程，通过实际实验验证和分析模拟结果。建立了 EBW 温度场的三维模型，通过比较焊接接头的焊缝截面尺寸与数值模拟数据，确认了模型构建的精确度。

(3) 借助硬度测试、腐蚀实验以及摩擦磨损实验对 Ta10W 合金焊接接头的性能进行了分析。通过实验和分析得出电子束焊接降低了 Ta10W 合金焊接接头的显微硬度，同时降低了焊接接头的耐腐蚀性，但对焊接接头在不同质量载荷下的摩擦磨损性能影响较小。

### Macroscopic morphology and microstructural analysis of Ta10W alloy electron beam welded joint

Fengming Chen  
Nanchang University

Ta10W alloy has excellent weldability and corrosion resistance, and has been widely used in the fields of aerospace, military, and shipbuilding. However, due to its high requirements for welding methods and equipment, it is often difficult to weld thin plate parts of Ta10W alloy in practical applications. This paper takes Ta10W alloy as the research object, studies its electron beam welding process and joint performance, and conducts research from three aspects: macro morphology and microstructure analysis of Ta10W alloy electron beam welding joint, numerical simulation of Ta10W alloy electron beam welding, and performance analysis of Ta10W alloy electron beam welding joint. The following conclusions are drawn: (1) Different vacuum electron beam flat butt welding processes were carried out on Ta10W alloy plate, and the optimal welding process parameters were determined. The microstructure and phase changes of the welding joint were analyzed.

(2) The welding process of Ta10W alloy was modeled using finite element analysis software Workbench, and the vacuum electron beam welding process was simulated. The simulation results were verified and analyzed through actual experiments. A three-dimensional model of the EBW temperature field was established, and the accuracy of the model was confirmed by comparing the welding joint fillet section size with the simulated data.

(3) The performance of the Ta10W alloy welding joint was analyzed using hardness testing, corrosion testing, and friction and wear testing. Through experiments and analysis, it was found that electron beam welding reduced the microhardness of the welded joint of Ta10W alloy, while also reducing its corrosion resistance. However, the impact on the friction and wear resistance of the welded joint under different load conditions was relatively small.

### 钛合金高温晶界软化及断裂行为

李少龙<sup>1</sup>、李树丰<sup>1</sup>、朱运田<sup>2</sup>

1. 西安理工大学

2. City University of Technology

多晶金属材料中，晶界控制着多晶材料的力学性能，同时对材料变形、失效和其他冶金现象至关重要。但是，当晶粒尺寸低于 20nm (dc) 时，材料表现出逆 Hall-Petch 效应，这早在 20 世纪 80 年代已被发现。

当晶粒尺寸低于  $d_c$ ，材料的变形机制由位错介导变形机制转变为晶界介导变形，而以晶界介导变形为主的行为称为逆 Hall-Petch。然而，高温下晶粒尺寸和临界尺寸  $d_c$  与温度之间的关系仍然是个空白。本研究以高温钛合金 TA15 (Ti-6.5Al-2Zr-1Mo-1V) 为研究对象，通过晶粒尺寸设计，形成异常粗大的晶粒，进一步放大晶界在高温下的软化现象。根据 TA15 合金的服役温度 (550°C)，在服役温度前后进行高温拉伸实验，结果表明试样的屈服强度和晶粒强度随着温度的升高而降低。EBSD 结果表明高温下晶界和相界作为主要的变形位置，破坏了  $\alpha/\beta$  相之间的伯格斯矢量关系 ( $\{110\}\beta//\{0001\}\alpha$  和  $\langle 1-11 \rangle\beta//\langle 11-20 \rangle\alpha$ )，形成了大量的小角度晶界。其次，高温降低了晶粒滑移系的临界剪切应力 (CRSS)，为各个滑移系启动提供了充足的能量。同时，结合高温原位 SEM 和高温纳米压痕等实验，发现在 550°C 前后材料的变形机制和失效机制发生转变：当温度低于 550°C 时，试样以晶粒变形 (位错介导变形) 为主，穿晶断裂；当温度高于 550°C 时，试样以晶界变形 (晶界迁移，晶界滑移；晶界介导变形为主) 为主，沿晶断裂；晶界表现出高温逆 Hall-Petch 效应，这表明高温下 TA15 试样的临界尺寸  $d_c$  要远大于 20nm。因此，TA15 试样的临界尺寸  $d_c$  随着温度的升高而变大。该发现为提高多晶金属材料的高温力学性能提供了新的思路。

### Oxygen Strengthening for High-Fatigue Resistance in Powder Metallurgy Titanium Alloys Shangxing

Qiu, Fang Yang, Cunguang Chen, Xinhua Liu, Zhimeng Guo

北京科技大学

Oxygen is well-known as a double-edged sword in titanium alloys. By understanding the mechanisms of interstitial element regulation and employing a combination of powder metallurgy and thermomechanical deformation techniques, we successfully achieved an oxygen content of up to 0.48wt% in Ti-6Al-4V titanium alloy, addressing the brittleness issue caused by high oxygen levels. Utilizing precise interstitial element regulation, interface strengthening, and fine-grain techniques, along with multi-scale dislocations and twinning to release concentrated stress, we achieved an astonishing high-cycle fatigue strength of 865 MPa, the highest reported at this oxygen concentration. We confirmed the high fatigue resistance of high-oxygen microstructures and the potential advantages of powder metallurgy in producing structural components with maximum fatigue strength. Our research not only offers new solutions for addressing oxygen-induced brittleness but also provides valuable insights for the recycling of titanium alloys.

### 原料对反应烧结 SiC 性能影响

陈振祥

北方民族大学

反应烧结碳化硅拥有耐高温、耐磨损、抗氧化、力学性能优良、热导率高等特性。本文通过对绿碳化硅和黑碳化硅的原料进行分析，采用不同粒径原料制备反应烧结碳化硅陶瓷，研究不同的原料粒度及纯度对碳化硅力学-热学性能的影响。结果表明：不同碳化硅粒度不同，杂质 Fe 和 Al 含量不同。绿碳化硅 61 $\mu\text{m}$ 、绿碳化硅 38 $\mu\text{m}$  碳化硅的 Al 含量很低，Fe 含量较高，黑碳化硅与之相反。绿碳化硅 13 $\mu\text{m}$  的 Fe、Al 含量较低。采用 7.5% 石墨粉为碳源，在 1650°C 温度下与液相硅反应烧结制备碳化硅陶瓷。抗弯强度随着原料粒度的减小，呈现增大的趋势，其中绿碳化硅 13 $\mu\text{m}$  制备的碳化硅陶瓷抗弯强度大于其他陶瓷，抗弯强度达到 430Mpa。热学性能绿碳化硅陶瓷大于黑碳化硅陶瓷，二者 1:1 制备材料的热导系数介于绿碳化硅陶瓷和黑碳化硅陶瓷热导之间，Al 杂质对材料热导率影响远大于 Fe。

### 退火工艺对碳化硅陶瓷微观结构及热学性能的研究

袁子婷

北方民族大学

**摘要:** 使用亚微米  $\beta$ -SiC 粉, 选取 7 wt.% MgO 和  $\text{Yb}_2\text{O}_3$  作为烧结助剂, 通过放电等离子烧结 (SPS) 制备致密 SiC 陶瓷, 将样品在氩气中退火, 通过 XRD 和 SEM 对烧结和退火后的 SiC 陶瓷的相组成和微观结构进行了分析, 并通过激光闪射法对样品的热导率进行检测。实验结果表明, 通过添加 7 wt.% 的烧结助剂, 实现了致密化, 材料的热导率达到  $78 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$ 。退火后热导率进一步提高至  $86 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$  以上。SiC 陶瓷热导率提高的主要原因在于退火导致晶粒长大、液相含量减少。

### Ti 元素添加诱导的原位纳米颗粒对 FeCrB 合金微观组织和室温摩擦性能的影响

甄云乾

上海交通大学

本文采用了 SEM、XRM、EBSD 和 TEM 等多种先进的技术和室温摩擦实验研究了添加 Ti 元素之后原位生成的纳米颗粒对 FeCrB 合金微观组织和室温摩擦性能的影响。结果表明, Ti 元素添加可以原位生成 TiC 和  $\text{TiB}_2$  纳米颗粒, 这些原位纳米颗粒可以起到细化组织和改善 FeCrB 合金摩擦性能的作用。随着 Ti 元素含量的增加, 原位纳米颗粒的改善效果先逐渐提高后降低。其中, JDF2 (含 1.17 wt.% Ti 元素) 合金拥有最细小均匀的组织 and 最优异的耐摩擦性能。相较于 FeCrB 基础合金 (不含 Ti 元素), JDF2 合金中初生硼化物的平均尺寸和断裂韧性仅为 11.8 % 和增长至  $22.7 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ 。此外, 摩擦实验结果表明 JDF2 合金的磨损速率为  $3.38 \times 10^{-5} \text{ mm}^3/\text{N}\cdot\text{m}$ , 仅为 FeCrB 基础合金的 48.8%。通过揭示原位纳米颗粒在微观结构演变中的作用, 探讨了 FeCrB 合金的磨损机理, 均属于黏着磨损和磨粒磨损。原位纳米颗粒通过细化硼化物、改善硼化物的断裂韧性和强化基体的显微硬度, 从而达到提高室温摩擦性能的目的。

### T1 相对 Al-Cu-Li 合金热变形的影响

王奎朝、张存生、陈良、赵国群

山东大学材料科学与工程学院

T1 相是 Al-Cu-Li 合金中密度最高、强化效果最突出的析出相, 其在热加工过程中的动态演变规律对 Al-Cu-Li 合金热变形行为和成形后性能具有重要影响。本研究分析了 T1 相在  $400^\circ\text{C}$  下的动态演化规律及其对连续动态重结晶 (CDRX) 行为的影响。结果表明: T1 相的存在虽然会增加合金的变形抗力但也会通过促进再结晶的方式提升合金的成形能力。T1 相在变形过程中先后经历了粗化、断裂、回溶、动态析出、再粗化和球化的过程。在 T1 相动态析出过程中, 发现了 T1 相的尺寸和空间排列异质分布, 在 Al 基体中形成高密度的细小 T1 相 (位错壁处尺寸更致密、厚度更薄、直径更短), 通过促进 LAGB 向 HAGB 的转变来加速 CDRX 的演变。在粗化过程中, 粗化的 T1 相增加了变形的不均匀性, 并在晶内诱导了许多亚结构, 但也增加了 CDRX 行为的驱动力。研究结果可为高性能 Al-Cu-Li 合金的开发和成形制备提供实验参考。

### 高强度马氏体不锈钢热-机械驱动的动态再结晶行为及机制

陈珍珍<sup>1,2</sup>、曹艳飞<sup>1</sup>、李殿中<sup>1</sup>、刘宏伟<sup>1</sup>、傅排先<sup>1</sup>、陈云<sup>1</sup>、赵志坡<sup>1</sup>、类承帅<sup>1</sup>

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

航空轴承是发动机的关键部件之一。随着先进设备的快速发展, 航空轴承钢需要满足更高的性能, 如高硬度、耐磨性、耐高温、耐腐蚀性和优异的接触疲劳性能。高合金含量的高强度马氏体不锈钢 CSS-42L 因其优异的综合性能而作为一种潜在的航空轴承材料被广泛研究。然而, HSMSS 含有以 Cr 和 Mo 为代表的高铁素体形成元素, 这使得变形过程中, 基体与  $\delta$ -铁素体的界面容易形成微裂纹。这些短而小的裂纹将很难被检测到, 通过后续热处理也很难消除。因此, 迫切需要研究 HSMSS 的热加工性能, 避免不稳定缺陷, 提高组织的均匀性。

通过理论计算和多尺度实验表征,系统研究了动态再结晶的微观机制以及应变诱导析出与变形参数之间的关系。根据动态材料模型和 *prasad* 不稳定性准则,建立了热加工图,并提出了最优的热加工工艺。在此基础上,发现了与软化机制相关的临界判据  $\eta_{cr}$ 。当  $\eta$  小于  $\eta_{cr}$  时,DRV 是主要的软化机制,当  $\eta$  大于  $\eta_{cr}$  时,DRX 主导软化行为。高分辨率观测表明,CSS-42L 较小的  $\eta_{cr}$  是由于低层错能 ( $32.937 \text{ mJ/m}^2$ ) 导致的。基于第一性原理计算了三种不同位置合金元素对层错的影响,发现随着与层错平面距离的增加,合金元素对层错能的影响减弱。大多数溶质原子促进了层错结构的形成,也降低了层错组织的稳定性,而 Mn 和 Cr 可以促进其形成更多的层错结构。

这一工作为 CSS-42L 热加工工艺制定奠定了理论依据,也为深入理解钢中合金元素与塑性间的关联行为提供了新视角。

### Enhanced interfacial bonding quality of stainless steel clad plate by hot rolling and element diffusion

Bo Gao, Yinpeng Wang, Lu Zhu, Zhaodong Li

Central Iron & Steel Research Institute Company Limited

Stainless steel clad plates combine the corrosion resistance of stainless steel and high strength toughness of carbon steel, have been widely used in the field of bridge engineering. To study the effect of hot rolling and element diffusion on the interfacial bonding quality, low carbon weathering steel (0.06 wt% C)+316L stainless steel clad plates were prepared by hot roll bonding and the evolution of element, grain size, microstructure and shear strength at the interface was investigated using electron probe microanalysis, scanning electron microscope and universal testing machine. Result shows that after two-stage hot rolling, fine equiaxed grains (the average grain size  $< 5 \mu\text{m}$ ) appear at the interface of stainless steel clad plates, with a width of 5-20  $\mu\text{m}$ . And the smaller the compression ratio, the wider the width of the fine equiaxed grain zone. The diffusion of elements such as Cr and Ni at the interface enhances the metallurgical bonding between carbon steel and stainless steel, and also inhibits the formation of ferrite in carbon steel. The coupling effect of fine equiaxed grains and element diffusion leads to an improvement in interfacial bonding quality. The shear strength of interface reached 380~420MPa.

### 原奥氏体晶粒尺寸对贝氏体相变动力学、微结构及强韧性的影响

李宏光、杨志南

燕山大学

合适的奥氏体晶粒尺寸可以提升贝氏体钢力学性能、增加贝氏体钢的生产效率。但是原奥氏体晶粒尺寸对贝氏体相变与显微组织影响的机制尚不明确。本研究详细的分析了随着原奥氏体晶粒的细化,无碳化物贝氏体的相变动力学、微结构、力学性能的变化规律。研究发现随着原奥氏体晶粒的细化导致晶界处间隙元素的偏聚,抑制贝氏体相变初期在晶界处形核,降低贝氏体的自催化因子,以及贝氏体板条细化,这共同导致了贝氏体相变速率降低。细化原奥氏体晶粒在增加贝氏体形核位置的同时抑制了贝氏体板条束的增长,导致试样 Packets 尺寸明显减小、Packets 与原奥氏体晶界增多, Packets 内的 V1-V2 变体对占比减少,  $\Sigma 3 < 111 >$  晶界减少。原奥氏体晶粒与 Packet 的细化,导致贝氏体晶粒取向更加随机,  $\{001\} \alpha$  晶面分布更加均匀,抑制了位错的聚集,阻碍了裂纹的萌生,同时裂纹扩展受到由细化原奥氏体晶粒导致惯习面变化从而产生解理台阶,这导致细化晶粒后试样韧性的提升。本研究可为制定贝氏体钢的奥氏体化工艺提供理论支持。

### 中碳贝氏体钢中预引入马氏体对微结构、RA 稳定性及强塑性的作用机制

王庆超、杨志南

燕山大学

将贝氏体钢在 Ms 温度以下等温引入预生成马氏体,能够细化贝氏体组织,但对力学性能的影响机制

尚未明确。本研究将一种 0.34C 的中 C 贝氏体钢在 Ms 温度以上和以下不同温度进行等温淬火处理。对经不同工艺处理试验钢的微观组织变化、残余奥氏体的机械稳定性及拉伸性能进行分析。结果表明，由于受到 C 扩散和 M/UA 界面的影响，随着预生成马氏体含量的增加，预生成马氏体对贝氏体形核起到一定的抑制作用，导致贝氏体铁素体的板条尺寸在 Ms 温度上下等温呈双线性分布。由于引入预生成马氏体分担了残余奥氏体所承受的应力载荷，且细化了残余奥氏体的尺寸，尽管残余奥氏体中的 C 含量略有降低，但整体上，引入预生成马氏体仍提高了残余奥氏体的机械稳定性。拉伸试验结果表明，引入预生成马氏体能够提高试验钢的强度，但由于其周围的应力较大，更容易萌生裂纹，导致试验钢的塑性降低。

### 多级循环水空交替下硅锰系耐磨钢铁材料的微观组织演变、力学性能及冲击磨料磨损性能

张飞<sup>1</sup>、李祖来<sup>1</sup>、山泉<sup>1</sup>、韦贺<sup>1</sup>、种晓宇<sup>1</sup>、张文<sup>1,2</sup>

1. 昆明理工大学

2. 云南昆钢耐磨材料科技股份有限公司

论文以硅锰系耐磨钢铁材料为研究对象，通过锻造工艺制备了具有大尺寸厚度截面的耐磨钢，研究了钢在多级循环水空交替淬火工艺下的微观组织演变、力学性能和冲击磨料磨损性能，利用光学显微镜(OM)、扫描电子显微镜(SEM)、X 射线衍射(XRD)、背散射电子衍射(EBSD)、透射电镜(TEM)等对钢铁耐磨材料的微观组织进行表征，测试不同热处理工艺下材料的硬度、冲击韧性和磨料磨损性能，分析其磨损机制。结果表明，经过锻造后的钢铁材料具有更佳的力学性能，通过设计热处理工艺中的冷却速度，可以获得珠光体、铁素体、贝氏体、马氏体等不同类型的组织，从而对钢铁材料的力学性能和耐磨性能进行调控，具有贝氏体和马氏体复相组织的试样中形成大量的位错且组织更细密，其硬度、冲击韧性和耐磨性均优于含珠光体和铁素体的钢，经过 3 次交替淬火循环的钢具有最佳的硬度、韧性和耐磨性组合，即硬度和冲击韧性分别从 245 HV 增加到 464 HV 和 28 J/cm<sup>2</sup> 增加到 50 J/cm<sup>2</sup>，冲击耐磨性从 4.99g<sup>-1</sup> 增加到 12.31g<sup>-1</sup>，在冲击变形下磨损表面残余奥氏体的加工硬化，耐磨性提高近 2.5 倍。钢的主要磨损形貌为犁沟和剥落坑等，钢铁耐磨材料的性能与冷却速度和组织类型密切相关，其微观组织和力学性能对耐磨性能具有重要的影响。

### DP780 双相钢变形行为的原位 EBSD 研究

任宇鹏

江西理工大学

利用扫描电镜(SEM)、原位电子背散射衍射(in-situ EBSD)技术，研究了 DP780 钢在单轴拉伸作用下的塑性变形行为。结果表明：随着应变的增大，平均取向角减小，LAGBs 的比例增大。史密斯因子(SF)反映了材料的塑性变形能力，变形后 SF 值较低的晶粒所占比例减小。在高应变下，塑性变形主要发生在与加载方向呈 45°条带状分布的软区，由于不同滑移系的激活，部分晶粒发生了旋转，单个晶粒内的晶格旋转因初始取向的不同而不同。在未变形状态下，双相钢的织构可以表征为  $\alpha$ -fiber (RD//<110>) 和  $\gamma$ -fiber (ND//<111>) 织构成分。织构取向 (112) [1-10] 是  $\alpha$ -fiber 的主要成分，(111) [1-10] 是  $\gamma$ -fiber 的主要成分。在拉伸过程中， $\alpha$ -fiber 的强度随应变的增加而增加， $\gamma$ -fiber 的强度随应变的增加保持不变。DP780 钢的损伤模式主要是界面脱黏，根据核平均取向差图，界面脱黏是由几何必须位错积累引起的，这些位错弥补了两相之间的变形不相容。断口形貌表明该试样具有典型的韧性断裂特征。

### 稀土对 40CrMnMoSi 轴承钢碳氮共渗微观组织及磨损性能的影响

张连腾<sup>1,2</sup>、蒋中华<sup>1</sup>、王培<sup>1</sup>、李殿中<sup>1</sup>

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国科学技术大学

本文通过在 40CrMnMoSi 轴承钢的基体材料中添加低氧稀土，采用真空碳氮共渗技术，系统地研究了

在钢中添加低氧稀土对碳氮共渗组织和渗层耐磨性的影响。采用逐层剥离法定量测试了渗层碳含量的变化,使用 SEM 等手段表征了渗层微观组织,并使用 UMT-2 型球盘式摩擦计对试样渗层表面的磨损行为进行了研究。结果表明,在 40CrMnMoSi 钢中加入低氧稀土,距离渗层表面 200 $\mu\text{m}$  范围内的碳浓度更高,渗层表面碳化物的面积占比和尺寸增加,渗后样品表面的硬度更高。此外,虽然稀土的添加没有改变轴承钢渗层的磨损方式,但由于添加稀土后 40CrMnMoSi 钢渗层的碳化物面积占比、平均尺寸均高于未添加稀土的 40CrMnMoSi 钢,在渗层表面磨损的过程中能够有助于位错的钉扎,有效提高了渗层表面组织抵抗变形和抵抗脱落的能力,降低了渗层的摩擦系数,提高了耐磨性。

### 梯度纳米结构和非晶钝化膜对新型高锰钢腐蚀磨损行为的影响

申书超<sup>1</sup>、陈晨<sup>1,2</sup>、杨志南<sup>1,2</sup>、张福成<sup>3</sup>

1. 燕山大学 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室
2. 燕山大学 国家冷轧板带装备及工艺工程技术研究中心
3. 华北理工大学 冶金与能源学院

高锰钢服役时会受到腐蚀和磨损的共同作用,导致零部件服役寿命缩短。Cr+N 合金化高锰钢 (Mn18Cr7C0.6N0.2 钢) 是针对严苛服役环境所开发的耐蚀耐磨钢[1-3]。本文对 Mn18Cr7C0.6N0.2 钢和 Mn13C1.1 钢在人工酸雨中的腐蚀磨损行为进行了测试,并使用电化学监测法、SEM、FIB-TEM、STEM-EDS 和 HRTEM 测试手段进行了观察和分析。结果发现,经腐蚀磨损后,两种试验钢的表面均形成了梯度纳米结构和钝化膜。在 Mn18Cr7C0.6N0.2 钢的表面形成了较为致密且与基体结合紧密的非晶钝化膜,对侵入性离子具有较好的阻碍作用,且该钢较高的应变抗性和塑性使其在腐蚀磨损形成的梯度纳米晶保持完整,在获得了较好的表面硬度的同时保持了基体的韧性,有利于提供较好的耐磨性。Mn13C1.1 钢的梯度结构中由于应变局部化形成了旋涡裂纹,其表面的钝化膜为具有晶体结构的  $\alpha\text{-FeOOH}$ ,旋涡裂纹的出现与相对较差的腐蚀防护能力导致其无法保持梯度纳米晶和钝化膜的完整性,因此耐腐蚀磨损性能较差。总之,新型 Cr+N 合金化 Mn18Cr7C0.6N0.2 钢在人工酸雨中比传统高锰钢具有更高的耐腐蚀磨损性能,有望成为服役于腐蚀性环境中的优异耐磨材料。

#### 参考文献

- [1] C. Chen, F.C. Zhang, F. Wang, H. Liu, B.D. Yu, Effect of N+Cr alloying on the microstructures and tensile properties of Hadfield steel, Mater. Sci. Eng. A 679 (2017) 95-103.
- [2] C. Chen, Wear behavior and the corresponding work hardening characteristics of Hadfield steel, Tribol. Int. (2018).
- [3] C. Chen, F. Zhang, B. Lv, H. Ma, L. Wang, H. Zhang, W. Shen, Asynchronous effect of N+Cr alloying on the monotonic and cyclic deformation behaviors of Hadfield steel, Mater. Sci. Eng. A 761 (2019) 138015.

### 40Cr10Si2Mo 马氏体耐热钢奥氏体晶粒长大行为及软化机制研究

杨彤瑶、王庆娟、杜忠泽、王钦仁

西安建筑科技大学

40Cr10Si2Mo 钢因其良好的机械性能被广泛应用,晶粒尺寸是决定后续相变工艺及热加工机械性能的重要因素。本文利用高温激光扫描共聚焦显微镜 (HT-LSCM) 进行原位观察实验,系统研究了 40Cr10Si2Mo 钢在 900-1250 $^{\circ}\text{C}$  保温 1800 s 的奥氏体晶粒长大及马氏体相变机理,并建立了奥氏体晶粒长大动力学模型以实现奥氏体化工参数的优化。采用 Gleeble 热模拟试验机对钢在 800-1100 $^{\circ}\text{C}$  和 0.1-20  $\text{s}^{-1}$  的温度和应变速率范围内进行了热力学实验,基于动态材料模型绘制了加工图,并与变形显微组织相联系。结果表明,晶粒尺寸随温度升高和时间延长而增大。Dong 模型计算得到晶粒尺寸预测值与实验值吻合良好。随着温度从 1000-1250 $^{\circ}\text{C}$  的升高,奥氏体晶粒通过晶界迁移与晶粒吞并长大,  $\text{M}(\text{Cr}, \text{Mo})_{23}\text{C}_6$  不断析出和溶解影响晶粒生长;部分晶界通过亚晶旋转扩展为新晶界。较低温度下的细小晶粒使马氏体转变开始温度 ( $\text{M}_s$  点) 降低,初生马氏体沿原奥氏体晶界成核生长;次生马氏体以一定角度依附初生马氏体形核后平行生长,同时

抑制周围未转变奥氏体的相变。热模拟实验分析表明不同温度和应变速率对钢的功率耗散效率和流动不稳定性有显著影响。较高的温度和应变速率形成了细小的马氏体包,并且高温下马氏体板条宽度增加。存在两个变形区域,低应变速率域的不连续动态再结晶(DRX)机制以应变过程中高角度晶粒的迁移和生长为特征。在高应变速率域中,新晶界的发展主要与低温变形域中的变形微带有关。DRX 机制由连续 DRX 向后 DRX 转变。

### 多元合金化高锰奥氏体钢微观组织及其力学性能的研究

白玉<sup>1</sup>、张嘉芮名<sup>1</sup>、范文学<sup>1</sup>、郝海<sup>1,2</sup>

1. 大连理工大学

2. 大连理工大学宁波研究院

因高锰奥氏体 TWIP 钢拥有较高的抗拉强度和优异的塑性,在汽车零部件中应用前景广泛。然而其屈服强度较低,难以通过单一元素合金化的方式达到日益增长的强度要求。本文采用多元素合金化对高锰奥氏体 TWIP 钢进行强化,探讨了 Al-Si-V-Mo 的添加以及轧制热处理工艺对微观组织及其力学性能的影响。冷轧退火样品的奥氏体晶粒尺寸为 1.26-2.54 $\mu\text{m}$ ,并形成尺寸约为 20nm 与 300nm 的两种析出相。透射电镜观察结果表明,析出相主要为 MC 与 M<sub>2</sub>C 相(M 为 V、Mn、Mo 元素),该结果符合相图中相应温度下的相组成。随着退火温度升高,晶粒长大不明显,而屈服强度和抗拉强度显示出先升高后降低的趋势。在中间退火温度条件下获得高屈服强度和抗拉强度,主要归功于在该温度下纳米析出相含量的增加。结果表明,多元合金元素的添加使材料的屈服强度和抗拉强度显著提升并使其展现出优异的伸长率和强韧塑积。

### 316L 不锈钢-35#碳钢复合槽钢轧制技术试验研究

梁高震<sup>1,4</sup>、王毓婧<sup>1</sup>、勾哲<sup>1</sup>、向勇<sup>2,4</sup>、钱学海<sup>1,3</sup>、张斌斌<sup>3</sup>、曾建岳<sup>2,4</sup>、谭建平<sup>1,4</sup>

1. 中南大学机电工程学院,湖南 长沙

2. 湖南三泰新材料股份有限公司,湖南 娄底

3. 广西柳州钢铁集团有限公司,广西 柳州

4. 湖南省层状金属复合材料工程研究中心有限公司,湖南 娄底

目前桥梁、海工等重大工程中广泛存在钢结构腐蚀严重的问题,对于低成本、高强高韧、耐腐蚀等优良性能钢铁材料存在迫切需求。复合槽钢是一种新型型材,由不锈钢和碳钢组坯后热轧成型,拥有良好机械性能和防腐性能,在钢结构领域具有广阔的应用前景。本研究选取 316L 不锈钢无缝管和 35#碳钢圆棒作为原材料,采用真空无氧化组坯技术制备复合坯料,通过 13 道次轧机热轧生产 10#复合槽钢,对其微观形貌和力学性能进行了分析。

复合槽钢成品横断面界面结合情况良好,无裂痕和微小孔洞,测量 316L 不锈钢覆层厚度最小值为 0.21mm,未发生“漏点”的情况,参照复合钢筋 GB/T 36707-2018 中覆层厚度最小值 0.18mm,复合槽钢覆层厚度合格。采用光学显微镜观察表明,界面不锈钢和碳钢两侧分别发现了不同程度的渗碳层和脱碳层。翼缘距离底部 1/3 位置外侧结合面 Fe、Cr 和 Ni 元素 3 次线扫描扩散均值分别为 2.16、3.09 和 2.70 $\mu\text{m}$ 。翼缘距离底部双金属界面抗剪切强度平均值为 348.33 MPa,表明复合槽钢成品双金属界面产生了良好的冶金结合;腹板 1/4 处取常规拉伸试样测试结果表明,抗拉强度、屈服强度和延伸率分别为 612.25 MPa、353.45 MPa 和 40.56%,延伸率提升明显,符合技术要求。

本研究验证了复合槽钢工业热轧的可行性,将为建立复合槽钢轧制工艺技术提供理论参考和依据,对实现复合槽钢工业化生产及市场化应用意义重大。

### TP347H 连铸坯中的含 Nb 析出相控制研究

陈其为<sup>1</sup>、包汉生<sup>1</sup>、杨钢<sup>1</sup>、李根<sup>1</sup>、吴明华<sup>2</sup>、代卫星<sup>2</sup>

1. 钢铁研究总院有限公司

2. 永兴特种材料科技股份有限公司

**摘要：**TP347H 改用连铸生产后，由于铌（Nb）元素的偏析等原因，导致在连铸坯的横向截面，特别是 R/2 位置和中心位置，存在大尺寸的含 Nb 析出相。这些大尺寸的含 Nb 析出相与斜轧穿管过程中钢管内壁的裂纹形成有直接联系，进而影响了钢管的成材率和整体性能。本研究通过解剖分析和热力学计算，对 TP347H 连铸坯及相关 TP347H 试样中大尺寸含 Nb 析出相的形态与分布进行了详细研究，并探讨了其类型和形成机制。实验和统计分析表明，这些大尺寸含 Nb 析出相在常规热加工过程中无法被完全消除，且保持了其原始的形态分布。通过高温金相观察和热力学计算，本研究进一步分析了冷却速度对 TP347H 凝固过程中含 Nb 析出相的影响，并据此对生产工艺进行了优化。对比优化前后的连铸 TP347H 管坯的热塑性，结果显示，优化后的连铸坯整体热塑性有所提高，尤其是在边缘位置和 R/2 位置改善显著，而中心位置的热塑性则略有降低。

### **Enhancing surface strength of tungsten by gradient nano-grained structure**

Daqian Xu,Zhifeng Huang,Like Xu,Hao Li,Fei Chen

Wuhan University of Technology

A gradient nano-grained (GNG) structure demonstrates satisfactory surface strength. However, the underlying mechanism responsible for its strengthening lacks sufficient research. To explain how gradient nano-grained structures improve surface strength in detail, large-scale parallel molecular dynamics simulations are utilized in this study to investigate the mechanical deformation behavior of BCC tungsten with varying grain sizes during spherical nanoindentation. The findings suggest that a well-designed gradient structure can promote rational plasticity and an appropriate distribution of internal atomic stress. The critical point of maximum stress and hardness is observed when the initial grain size is 4.5 nm, with an average grain size of 7.1 nm. The interaction between grain boundary slip and migration in small grains, along with the enhanced activity of grain boundary dislocations in large grains, collectively contributes to the enhancement of the strength and hardness of the GNG structure. Compared with a homogeneous nano-grained structure, the gradient nano-grained structure exhibits a more rational distribution of dislocations and stress relaxation effects to enhance strength. The present work utilizes the molecular dynamics nanoindentation method to study GNG materials, providing a methodology for investigating the surface strengthening effects of GNG structures at the atomic scale and effectively revealing potential mechanisms for resisting surface deformation in GNG structures.

### **Atomic-scale study of the synergistic deformation mechanism of nano-IMC and bimetallic Ti-Ni**

Hao Li, Daqian Xu, Fei Chen, Zhifeng Huang

Wuhan University of Technology

Due to the micrometer-scale intermetallic compounds (IMCs) generated by metallurgical reactions, they are widely recognized as the primary cause of interfacial cracking in titanium-nickel bimetallic alloys under high strain. However, research on the interface binding strength of nanoscale IMCs in titanium-nickel bimetallic alloys, especially under high strain, is limited. In this study, three different models established by molecular dynamics simulations were used to investigate the influence of the position and size of nanoscale IMCs under high strain on the binding strength of titanium-nickel bimetallic alloys. The results indicate that the presence of lamellar  $Ti_2Ni$  and  $TiNi_3$  (R) IMCs and granular IMCs within the matrix enhances the binding strength of titanium-nickel bimetallic alloys, while the IMCs at the interface weaken it. The presence of lamellar IMCs redistributes stress throughout the model, delaying the cracking of the Ti layer and altering the original cracking mode. Granular IMCs within the matrix promote the phase transformation of the Ni layer under high strain, with a greater degree of transformation as the grain size increases. Although the IMCs at the interface generate conical shear bands that can stabilize cracks, more stress concentration at the interface leads to premature cracking. This study plays a

significant role in enhancing the binding strength of titanium-nickel bimetallic alloys and in understanding the reinforcement mechanism of IMCs in these alloys.

### 铜浓度调节和银掺杂：对铝铜合金结构转变和力学性能的影响

李培博、罗国强、汪潇、孙一  
武汉理工大学

在这项研究中，通过热压烧结制备了一系列 Cu 含量变化的 Al-Cu-Ag 合金，探究微观结构演化和 Ag 的引入与 Al-Cu-Ag 合金力学性能的联系。研究表明，随着 Cu 含量的变化，Al-Cu-Ag 合金的内部物相演化机制和 Ag 元素的分布位置及形态发生变化。TEM 结果指出金属间化合物的主要类型是 CuAl<sub>2</sub>，Ag 的存在形式有 Ag<sub>2</sub>Al，Ag 单质和 Ag (Cu) 固溶体。Al-80Cu-3Ag 合金取得最优异的力学性能，这归因于其内部层错、纳米沉淀、固溶体的综合作用。Al-50Cu-3Ag 合金表现出强烈的脆性，这归因于大尺度金属间化合物的负面影响。Al-20Cu-3Ag 由于金属间化合物尺度的减小，表现出韧性断裂行为。Ag 的引入有效减小 Al-20Cu-3Ag 和 Al-80Cu-3Ag 合金的晶粒尺寸，使其表现出一定的塑形行为。本研究揭示了 Al-Cu 合金中金属间化合物演化规律与成分之间的联系，同时为 Al 基复合材料和 Cu 基复合材料的强化提供了新思路

### Material and shape optimization of multi-directional functionally graded materials with thermal-mechanical loading using an IGA and improved 3D-CNN multi-objective optimization algorithm

Guangshuai Gu  
Wuhan University of Technology

Functionally graded materials (FGMs) are an innovative composite material with a gradual variation in composition throughout the entire volume, enabling customized multifunctional properties. Multi-dimensional functionally graded materials (MFGMs) offer greater design freedom compared to traditional unidirectional gradient designs. This paper investigates the multi-objective optimization problem of variable-thickness MFGMs in thermal environments. A numerical optimization model is proposed, combining isogeometric analysis (IGA), three-dimensional convolutional neural networks (3D-CNN), and non-dominated sorting genetic algorithm III (NSGA-III), which can simultaneously optimize the shape and material distribution of MFGMs. Non-uniform rational B-splines (NURBS) basis functions and control points are used to describe the material and thickness distribution of the model. Based on three-dimensional elasticity theory and the IGA framework, governing equations for the static and dynamic mechanics of variable-thickness MFGMs under thermal environments are established. A 3D-CNN is employed to construct a rapid performance prediction platform for MFGMs, and combined with the multi-objective optimization algorithm NSGA-III to achieve simultaneous multi-objective optimization of material and shape for MFGMs. Various numerical examples are presented to demonstrate the effectiveness of the proposed algorithm, and the influence of different boundary conditions, temperature fields, and design models on the optimization results is discussed.

### 通过 CrN/TiAlN 多层涂层提高 45 钢摩擦磨损性能

董浩然<sup>1</sup>、魏琴琴<sup>1</sup>、罗国强<sup>1</sup>、田峰<sup>2</sup>、许鑫宇<sup>1</sup>  
1. 武汉理工大学  
2. 国营武汉新宇机器厂

特种设备车辆通常在复杂的环境中运行，导致底盘中由 45 钢制的旋转密封部件出现磨损而造成密封

失效，延长使用寿命的有效方法是在其工作表面沉积硬质涂层。以往的涂层研究主要集中在如高速钢等硬质金属表面，然而软质 45 钢的物理性能与硬质涂层之间存在显著差异，导致界面结合力较弱。本研究通过调节 CrN 过渡层厚度，在软质 45 钢表面制备出界面附着力强、摩擦磨损性能优异的 CrN/TiAlN 多层涂层。多层涂层由 3 层组成，即 CrN 过渡层、CrN/TiAlN 交替层和表面的 TiAlN 层。最厚 CrN 中间层涂层的 Lc1 和 Lc2 值分别为 8.71 N 和 25.57 N。优化后的 CrN/TiAlN 涂层减缓了硬度变化梯度，增强了涂层的结合力。重要的是，CrN/TiAlN 多层涂层的磨损截面积减小，磨损程度降低。最厚的 CrN 层涂层具有优异的耐磨性，平均摩擦系数为 0.79，磨痕截面积为 315.09  $\mu\text{m}^2$ ，CrN/TiAlN 涂层摩擦磨损试验中主要磨损形式为磨粒磨损。该研究在汽车旋转密封部件的应用中具有重要的前景，并为提高密封表面的耐磨性能提供了理论参考。

### 数据驱动新型超硬超耐蚀轻质难熔高熵合金的设计与实验验证

高田创<sup>1</sup>、高建宝<sup>2</sup>、张利军<sup>1</sup>

1. 中南大学
2. 华中科技大学

轻质难熔高熵合金兼具低密度、高强度、抗耐蚀等优异特性，在核能、航空航天等领域具有潜在应用前景。但高熵合金成分空间大、元素间相互作用复杂，实现高性能轻质难熔高熵合金的高效设计难度大。论文首先采用数据挖掘技术构建 AlNbTiVZrCrMoHf 系轻质难熔高熵合金“成分-结构-硬度”数据集，并通过特征分析发现 Cr 元素含量是影响合金耐腐蚀性能的关键因素。随后，通过机器学习建模方法构筑合金“成分-组织-性能”定量模型，结合多目标优化方法，逐层筛选合金相结构、密度、熔点、硬度和耐蚀性能，成功设计出 3 种具有单相结构的超硬超耐蚀轻质难熔高熵合金。最后，制备关键合金验证理论设计结果。实验表明：所设计的 3 种合金为无序 bcc\_A2 结构，密度仅为传统难熔高熵合金的一半（6.4~6.5g/cm<sup>3</sup>），硬度和耐点蚀电压均超过文献报道的高熵合金、钛合金与不锈钢。本文展示了仅通过一次建模设计就实现新型超硬超耐蚀轻质难熔高熵合金开发，进一步表明机器学习驱动的合金设计策略对未来新型高性能难熔高熵合金的设计具有重要意义。

### NbHfTiVCx 难熔高熵合金组织结构及力学性能研究

姜威、陶书天、朱宝宏、邱昊辰、吴帅帅、郭胜利、闫薛卉

有研工程技术研究院有限公司

作为新型金属材料，高熵合金因其独特的成分设计思路，以及自身的高熵效应、鸡尾酒效应、晶格畸变效应、缓慢扩散效应等，使其具有广阔的应用前景和设计空间。其中以难熔元素为主元的难熔高熵合金，拥有优异的综合力学性能，具有在航空发动机、核反应堆包覆材料等领域应用的潜力，有望成为新一代高温结构材料。本课题以 NbHfTiV 为基体合金，引入非金属元素 C，采用真空电弧熔炼技术制备了 NbHfTiVC<sub>x</sub>(x=0, 0.1, 0.2, 0.3)四种高熵合金，分析了碳元素对合金的组织结构和力学性能影响规律，并通过后续真空热处理，包套热轧进一步优化组织，提升了合金的综合力学性能。得出以下结论：

(1) NbHfTiV 合金由 BCC 单相固溶体组成，合金中引入碳元素后，在 BCC 基体中生成了 FCC 结构的 MC 型碳化物。随着碳含量的增加，晶粒尺寸由 537  $\mu\text{m}$  细化至 25  $\mu\text{m}$ ，碳化物尺寸和体积分数不断增加。

(2) 室温下，随着合金中碳含量的增加，合金的压缩屈服强度由 958 MPa 提升至 1115 MPa，塑性发生少量下降。结合分析测试结果和错配度计算结果可知，合金屈服强度的提高主要是由于硬质碳化物相含量的增加和晶粒的细化，在合金中产生了显著的位错滑移阻力；而随着碳含量的增加，基体相原子尺寸错配度和模量错配度皆降低，基体相的纳米压痕硬度由 8.13 GPa 降低至 6.81 GPa，发生相对软化。

(3) 合金在 700~900 °C 的中温区间进行 24 h 热处理后，基体相中析出了大量富 V 和 Hf 元素的 Laves 沉淀相。温度较低时，该 Laves 相为纳米尺寸的颗粒状和针片状析出相，尺寸为 200~600 nm；温度较高时，析出相粗化，其尺寸为 1~5  $\mu\text{m}$ 。900 °C 热处理后，所有合金中无析出相产生，其组织特征与铸态一致。

(4) 在中温相分解温度区间热处理 24 h 后, 合金中产生沉淀强化效应, 屈服强度得到提升。其中, 700 °C 热处理态 C0.1 合金的屈服强度由铸态的 1048 MPa 提升至 1563 MPa, 提升了 49.1%。屈服强度的提高主要来自热处理过程中生成的致密且分布均匀的纳米析出相, 在合金中产生了显著的沉淀析出强化作用。

(5) 在相同轧制温度下, 随着轧制压下量的增加, 合金的强度和塑性同时得到提升。随着变形量的增加, 碳化物破碎细化程度越高, 部分细小的碳化物颗粒脱落于块状碳化物, 沿着轧制方向弥散分布于基体中; 此外, 随着轧制压下量的增加, 基体中<101> (111) 的 G/B(T) 织构强度不断增加, 且基体相中发生了部分再结晶, 细化了组织。

(6) 在相同轧制变形量下, 随着轧制温度的提升, 合金的塑性变形量不断提高。当轧制温度较低时(低于 850 °C), 合金中加工硬化现象明显, 拉伸应力应变曲线中皆没有出现屈服和颈缩阶段; 当拉伸温度较高时(达到 1050 °C), 合金在热轧过程中发生回复再结晶, 恢复屈服和颈缩阶段。

### 难熔金属及其合金的电子束熔炼

赖奇\*, 赵曦光

攀枝花学院

采用了电子束冷床熔炼方法, 进行了金属 V、Nb、Cr、Ti 等金属及 ZrTiTaNb、VTiNi 等合金的熔炼, 并研究了这些金属及合金的成分、组织与性能的影响。实验结果发现电子束冷床熔炼与电子束直熔各有其熔炼特点。电子束冷床熔炼适合难熔金属及其合金。电子束直熔适合带有一定易挥发元素的难熔合金。

关键字: 难熔金属及合金, 电子束、冷床熔炼, 直熔

### AlMgZnCuTi 体系轻质高熵合金

徐光良<sup>1,2</sup>、李小武<sup>1,2</sup>、陈蓬<sup>1,2</sup>

1. 东北大学材料科学与工程学院材料物理与化学系
2. 东北大学材料各向异性与织构教育部重点实验室

高熵合金作为一种新兴材料, 具备传统合金所不具备的一些特殊性质, 如高强度、高硬度、优异的耐磨性能和抗氧化性能等, 得到了工业界和科学界的广泛关注。然而, 已研究的大部分高熵合金存在密度高、熔点高以及难以熔炼等问题。随着我国低碳战略和节能减排的推进, 对新型轻质、低成本且高硬高强高熵合金的需求日益迫切。基于此, 本工作采用低熔点和成本较低的 Al、Mg、Zn、Cu 元素以及 Ti 元素来设计轻质高熵合金以期实现综合性能的提升。利用 Matlab 根据热力学判据筛选了 3 种密度远低于 Ti 合金的合金成分, AlMg<sub>0.4</sub>Zn<sub>0.8</sub>Cu<sub>0.2</sub>Ti<sub>0.2</sub>(样品一)、AlMg<sub>0.4</sub>Zn<sub>0.8</sub>Cu<sub>0.1</sub>Ti<sub>0.05</sub>(样品二)和 Al<sub>1.2</sub>Mg<sub>0.2</sub>Zn<sub>0.4</sub>Cu<sub>0.1</sub>Ti<sub>0.1</sub>(样品三)均具有高强高硬的力学性能以及低成本、低熔点的优点, 并探究了热处理工艺对该体系轻质高熵合金组织性能影响。

结果显示, 三种成分样品在常温下均具有多相结构, 主要为 FCC 相、MgZn<sub>2</sub> 相和 Al<sub>3</sub>Ti 相。铸态样品强度分别达到 750 MPa、650 MPa 和 760 MPa。样品三铸态比强度达到 202 MPa·g/cm<sup>3</sup>; 经过 380°C 热处理后, 样品二强度达到 800 MPa, 比强度超过 200 MPa·g/cm<sup>3</sup>, 超过大部分传统轻质材料, 接近变形镁铝合金。这意味着所研究合金在大大缩短生产时间、降低成本的同时保持优异比强度, 有着较大的研究应用价值; 热处理过后, 三种材料电化学耐腐蚀性能也显著提高。得益于 MgZn<sub>2</sub> 相、Al 相、Al<sub>3</sub>Ti 相优异的耐腐蚀性能, 三种合金在 3.5 wt% NaCl 溶液中的腐蚀速率优于传统 Mg-Al 基合金, 大大扩展了其应用范围。

### 氟腐蚀防护-FeCoNiCrMo 高熵合金在氢氟酸溶液中的行为

张珠涛、郑

上海大学

The surging demand for advanced fluorine corrosion-resistant materials underscores their significance in

ensuring operational safety and reliability across various industries. This study investigates the corrosion behavior of the FeCoNiCrMo high-entropy alloy (HEA) via a series of 28-day immersion tests in hydrofluoric acid (HF) solutions with varying concentrations. The results resoundingly demonstrate the FeCoNiCrMo HEA's superior corrosion-resistant performance in HF environments, exhibiting remarkably low corrosion rates of 0.179 mm/y, 0.276 mm/y, and 0.352 mm/y in 20 vol.%, 30 vol.%, and 40 vol.% HF solutions, respectively. Comprehensive phase and microstructural characterizations were conducted on samples exposed to the 40 vol.% HF solution to elucidate the underlying corrosion mechanisms. The study revealed that localized pitting corrosion preferentially initiates within the interdendritic regions of the HEA matrix upon HF exposure. During the intermediate stage, micro-galvanic corrosion occurs between the dendritic arms and interdendritic regions, leading to the formation of a uniform and compact corrosion product film on the alloy surface. This film, enriched with Mo, Cr, and O, provides temporary protection. However, as corrosion progresses, the partial detachment of particulate corrosion products compromises the integrity of the film, resulting in increased dissolution within the interdendritic regions and the formation of irregular corrosion grooves in the later stage. These insights significantly enhance the understanding of the corrosion mechanisms of FeCoNiCrMo HEA in HF environments and provide valuable guidance for the development of innovative protective materials designed for fluorine-rich engineering applications.

### 非晶化对多组分 Ti-V-Zr-Nb-M (M=Mg, Al) 合金薄膜储氢性能的影响

卢志源、林怀俊

暨南大学

本工作研究了磁控溅射法制备的多组分非晶 TiVZrNb 合金薄膜的储氢性能。此外，还研究了轻质元素 Mg 和 Al 对多组分非晶 TiVZrNb 合金微观结构、形貌和储氢性能的影响。XRD 结果表明，通过该方法所有制备的沉积态薄膜均为非晶结构并在在氢化和脱氢后仍保持非晶态。非晶 TiVZrNb 合金薄膜在室温下的氢化能力达到约 0.50 wt%。然而，脱氢在室温下难以进行，非晶 TiVZrNb 合金在 150°C 和 250°C 时分别放出 0.14 wt% 和 0.18 wt% 的氢。添加镁和铝可提高储氢动力学，这种改善可能是由于元素掺杂引起的晶格畸变导致储氢位点数量增加。

### Superior high-temperature strength of a carbide-reinforced high-entropy alloy with ultrafine eutectoid structure

Xiao Wang<sup>1,2</sup>, Guoqiang Luo<sup>1</sup>, Qinqin Wei<sup>1,3</sup>, Yi Sun<sup>1,2</sup>, Jian Zhang<sup>1</sup>, Junjun Xu<sup>1</sup>, Xinting Wu<sup>1</sup>, Xiaohong Chen<sup>1</sup>, Peibo Li<sup>1</sup>, Shiqing Liang<sup>1</sup>, Qiang Shen<sup>1</sup>

1. Wuhan University of Technology

2. Hubei Longzhong Laboratory, Xiangyang 441000, Hubei, China

3. School of Materials Science and Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan, 430070, China

Refractory alloys with high-temperature softening resistance are crucial for extreme high-temperature components in aerospace and weapon equipment. Traditional alloys and single-phase refractory high-entropy alloys suffer from unstable microstructures and loss of strength at high temperatures. Here we report a strategy to obtain a superior strong high-entropy alloy by introducing eutectic carbides to form micro-nano scale eutectic and eutectoid structures. These metal-carbide interfaces remain stable under high-temperature deformation and exhibit strong dislocation blocking effects. The ultrafine eutectoid structure provides a primary strengthening effect due to its numerous enhanced phase interfaces. The resulting alloy achieves a high temperature yield strength of 1.17 GPa at 1473 K and 0.92 GPa at 1673 K. This work provides valuable insights for optimizing the high-temperature performance and microstructure design of high-temperature composites to further extend their potential applications in high-temperature areas.

## 掺镱石英光纤暗化微缺陷研究

石兆华

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

恶劣辐照环境中高功率光纤的暗化成为制约光纤激光器稳定运行的关键因素。在辐照环境和高能激光的共同作用下，掺镱光纤输出功率显著降低，光束质量劣化，导致激光系统稳定性降低甚至寿命缩短。关键原因是纤芯在辐照或高能激光的作用下产生了暗化微缺陷。当前暗化效应研究揭示了部分微缺陷结构及其产生机制，但是存在以下几个问题：(1)微缺陷的结构研究使用掺杂块体玻璃代替光纤，材料纯度和制备工艺差异较大，不能完全阐明光纤的暗化问题；(2)微缺陷的产生基于存在多个  $\text{Yb}^{3+}$  团簇的假设，但是目前在国际上掺镱光纤中  $\text{Yb}^{3+}$  的团簇尚未得到实验验证；(3)高能激光诱导损伤缺陷的前驱体缺陷仍不明确。由于对导致暗化的材料损伤认识不深刻，耐辐照高功率掺镱光纤的研制仍然面临挑战。

针对以上问题，我们分别开展了辐致暗化和高功率激光诱导的暗化微缺陷特性研究，旨在揭示微缺陷对掺镱光纤应用性能的影响。在辐致暗化研究中采用自研弱信号精密分析技术结合先进表征技术，分别从基质缺陷、 $\text{Yb}^{3+}$  发光性能和微团簇方向探索了纤芯损伤机制；在强激光诱导暗化研究中通过在线监测技术分别研究了泵浦端和输出端非线性光谱特性，进一步揭示了光致暗化的缺陷演变。研究结果表明纤芯中的  $\text{Yb}^{3+}$  相关团簇、载流子和  $\text{Yb}^{3+}$  配位场稳定性是影响掺镱光纤抗暗化性能的关键缺陷，抗暗化掺镱光纤研制需要抑制纤芯中的  $\text{Yb}^{3+}$  相关团簇和载流子浓度、并提高  $\text{Yb}^{3+}$  配位场稳定性。据此，提出了优化或开发制备工艺、纤芯材料体系中引入可捕获电子和空穴等载流子的组分（如 Ce）、纤芯材料体系中引入稳定  $\text{Yb}^{3+}$  配位场的组分（如 F）。研究结果将支撑国产抗辐照抗功率掺镱光纤性能的不不断提升。

## 开发用于极端环境紫外线防护的掺铈 $\text{Y}_2\text{O}_3$ 透明陶瓷

张聪、齐建起、周小兰、卢中华、卢铁城

四川大学

阳光中包含约 5% 的紫外线（UV），波长范围在 200–400 nm。长时间暴露在紫外线下会对人体和物体产生显著危害。虽然现有的紫外线屏蔽材料（如高分子，薄膜，涂层，玻璃）虽然能满足日常使用，但它们在高温、高压、腐蚀性和放射性等极端环境中的有效性会降低。透明陶瓷是一种通过压制和烧结形成的具有光学透明性的多晶材料，与高分子和玻璃等传统紫外线屏蔽材料相比，透明陶瓷通常表现出更优异的化学稳定性和优异的热、力学性能，包括抗热震性、硬度和热导率。在这项工作中，我们选择  $\text{CeO}_2$  作为紫外线吸收剂， $\text{Y}_2\text{O}_3$  透明陶瓷为透明基质，开发新型紫外线屏蔽材料。系统地研究了  $\text{CeO}_2$  浓度对  $\text{Y}_2\text{O}_3$  陶瓷光学、力学和热学性能的影响。结果表明， $\text{CeO}_2$  不仅可以作为紫外线吸收剂，而且还是  $\text{Y}_2\text{O}_3$  透明陶瓷有效的烧结助剂。5 at% Ce 掺杂的  $\text{Y}_2\text{O}_3$  透明陶瓷表现出最佳的光学质量，在 800nm 处具有约 77% 的透过率。Ce 的引入使  $\text{Y}_2\text{O}_3$  透明陶瓷的紫外截止边缘从 250 nm 移动到 375 nm，这归因于  $\text{Ce}^{4+}$  的可见波段吸收。这种转变赋予  $\text{Y}_2\text{O}_3$  透明陶瓷紫外线屏蔽能力，使其对 UVC（100–280 nm）和 UVB（280–320 nm）具有 100% 的屏蔽能力，对 UVA（320–400 nm）具有约 95% 的屏蔽能力。研究了在各种腐蚀条件（酸、碱、紫外线照射和高温）后的光学透过率，证实了  $\text{Ce}:\text{Y}_2\text{O}_3$  透明陶瓷优异的稳定性。对比了透明陶瓷与传统的紫外线屏蔽材料（如玻璃、薄膜和涂层）的性能参数。这项工作为极端条件下的紫外线屏蔽材料提供了新的设计理念和有效的解决方案。

## 激光极端条件碳材料加工及一体化传感器件制造方法

臧浞凝

清华大学

激光加工高分子制备碳纳米材料（石墨烯、量子点等）及激光直写碳基电子器件是激光微纳制造领域的新兴研究方向。但不同波长及脉宽的激光引起含碳材料脱氢、相变的热力学及动力学机理尚未得到充分

阐释。采用反应力场分子动力学模拟 (ReaxFF-MD) 结合实验研究, 可以研究不同碳源材料在高温高压过程中反应路径。本报告将讨论若干案例: 两种不同前驱体模型沥青基碳纤维的反应过程, 并模拟碳纤维产品的拉伸强度和拉伸模量; 激光冲击高压诱导煤制金刚石的热力学及动力学机理; 激光加工聚醚醚酮制备导电应变传感器件的工艺筛选及力学性能匹配; 焦油介导激光在空气中快速制造难熔金属 3D 电路。通过这几个案例, 我们将回答激碳化高分子材料制备不同高附加值碳材料的普适性及特殊性问题, 并为低阶碳材料的升级和转化提供理论依据。并在此基础上, 讨论面向医疗、健康监测、极端工况传感等应用场景的激光一体化传感功能器件制造方法。

### 原位研究 5052 铝合金中析出相与基体界面处的 He 泡演化行为及影响因素

王左江<sup>1,2</sup>、曹子奇<sup>1,2</sup>、刘正煜<sup>1,2</sup>、李玲<sup>3</sup>、杨义忠<sup>3</sup>、王煦嘉<sup>3</sup>、冉广<sup>1</sup>

1. 厦门大学

2. 福建省核能工程技术研究中心

3. 上海核工程研究设计院股份有限公司

铝合金具有耐辐照、抗腐蚀、中子截面小和机械性能优良等特点, 被广泛作为研究型反应堆的堆芯结构材料和屏蔽材料。但是, 在服役期间, 载能粒子辐照诱导的缺陷在铝合金中形核与生长, 影响微结构组织, 进而导致其力学性能快速衰退。然而至今, 铝合金中析出相在辐照过程中的演化行为及机制仍未解决, 尤其是在 He 影响下。本研究采用 30 keV He<sup>+</sup>束进行辐照, 通过透射电镜原位研究了 5052 铝合金中不同析出相在不同温度下辐照及后续退火过程中的演化行为。结果显示: 析出相微结构演化行为展现出明显的温度依赖性, 不同析出相以及不同析出相与基体界面处的 He 泡演化行为具有明显差异。在不同温度下辐照至 1.0 dpa 过程中, 部分析出相内部的 He 气泡生长率远大于铝基体中, 并在 373 K 至 473 K 间表现出显著的生长阈值。对两种典型的富 Al 析出相及界面处的缺陷阱强度进行了估算, Al-Mg 相大于 Al-Fe 相, 这应该是导致气泡演化行为差异的本质原因。本研究结果为铝合金辐照行为及机理研究提供了试验数据和理论参考。(该工作得到国家杰出青年科学基金 (12225506) 的经费支持)。

### Disorder-broadened phase boundary with enhanced amorphous superconductivity in In<sub>2</sub>Te<sub>5</sub> under Pressure

Yi Zhao<sup>1</sup>, Tianping Ying<sup>2</sup>, ChuiZhen Chen<sup>3</sup>, Yanpeng Qi<sup>1</sup>

1. ShanghaiTech University

2. 中国科学院物理研究所

3. 苏州大学

As an empirical tool in materials science and engineering, the iconic phase diagram owes its robustness and practicality to the topological characteristics rooted in the celebrated Gibbs phase law ( $F = C - P + 2$ ). When crossing the phase diagram boundary, the structure transition occurs abruptly, bringing about an instantaneous change in physical properties and limited controllability on the boundaries ( $F = 1$ ). Here, we expand the sharp phase boundary to an amorphous transition region ( $F = 2$ ) by partially disrupting the long-range translational symmetry, leading to a sequential crystalline-amorphous-crystalline (CAC) transition in a pressurized In<sub>2</sub>Te<sub>5</sub> single crystal. Through detailed in-situ synchrotron diffraction, we elucidate that the phase transition stems from the rotation of immobile blocks [In<sub>2</sub>Te<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>, linked by hinge-like [Te<sub>3</sub>]<sup>2-</sup> trimers. Remarkably, within the amorphous region, the amorphous phase demonstrates a notable 25% increase of the superconducting transition temperature ( $T_c$ ), while the carrier concentration remains relatively constant. Furthermore, we propose a theoretical framework revealing that the unconventional boost in amorphous superconductivity might be attributed to an intensified electron correlation, triggered by a disorder-augmented multifractal behavior. These findings underscore the potential of disorder and prompt further exploration of unforeseen phenomena on the phase boundaries.

### Superconductivity with Pauli limit violating upper critical field in Ta-Te granular nanowires under high

**pressure**

Lingxiao Zhao, Yi Zhao, Yanpeng Qi

ShanghaiTech University

Nanoscale superconductors present exotic properties compared with their bulk isomers. In the cases of few-layer 2D superconductors and some kinds of superconducting nanowires, the upper critical field ( $\mu H_{c2}(0)$ ) is much higher than the corresponding bulk materials. In this work, we have synthesized the Ta-Te granular nanowires. Superconductivity is induced via high-pressure modulations in these nanowires. The superconducting temperature  $T_c$  and  $\mu H_{c2}(0)$  is about 4 K and 16 T under high pressure, two times beyond the Pauli limit. The combinations of transition metal chalcogenides' elemental compositions, nanowires and high-pressure modulations have succeeded in realizing a large  $\mu H_{c2}(0)$  in the Ta-Te nanowires. Our work demonstrates that the Ta-Te nanowire is a possible candidate for applications in high magnetic fields, and it also provides an ideal platform for further investigations of the mechanisms between nanowires and large  $\mu H_{c2}(0)$ .

**快中子辐照下彩色 CMOS 图像传感器的位移辐射损伤**

李坤芳、冯婕、李豫东、文林、郭旗

中国科学院新疆理化技术研究所

彩色 CMOS 图像传感器广泛应用于空间探测及核环境监控等领域，为研究其在极端环境下的成像可靠性，对一种商用彩色 4T-CMOS 图像传感器进行了 14MeV 中子辐照试验。通过离线测试的方式测量了不同剂量下器件各颜色通道的暗信号、暗信号非均匀性、光谱响应以及饱和输出等参数的退化情况，结合器件工艺和结构并根据半导体器件辐射效应理论，深入分析了器件参数的退化机理。试验结果表明暗信号和暗信号非均匀性在较高剂量时发生显著退化，光谱响应的退化受到暗信号和不同波长光吸收深度差异性的影响，虽然整体上饱和输出信号基本不变，但蓝色通道的饱和输出发生相对退化。本文为空间及核辐射环境下色彩信息的退化评估以及抗辐射彩色相机的研制提供了理论依据和基础。

**黑腔柱面平台电火花铣削加工**

谢军、张昭瑞、黄燕华

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在 ICF 研究中，间接冲击波实验相对于直接驱动实验而言可产生更高的冲击压力，形成较均匀的辐射场等优势。黑腔是间接驱动实验必不可少的靶零件，且需要在黑腔柱面诊断孔区域放置平面金属材料台阶样品，为了实现样品与黑腔的紧密贴合，需要诊断孔区域为平面。

黑腔制备一般采用在芯轴上电镀后去除芯轴工艺制备，因此，要在黑腔柱面形成平台，需要预先在芯轴柱面加工平台。然而，由于黑腔端面入射孔直径较小，导致芯轴难以承受较大的切削力；由于机械加工切削力的存在，电火花加工不存在宏观切削力，为了确保芯轴加工过程不变形，拟采用电火花铣削加工工艺实现芯轴柱面平台加工。

实验设备为微细电火花机床，采用钨钢实心电极，工件材料为紫铜。通过软件对零件进行三维建模，规划加工工艺路线，分层铣削厚度控制在 10  $\mu\text{m}$  以下，在零件表面非加工区域定义基准点，每层加工完成后电极自动回到基准点测试电极损耗数值，从而自动补偿到程序中，零件加工前，通过计算机对加工刀路轨迹进行模拟，模拟结果正确，则自动生成电火花机床能够识别的数控加工程序。

根据电火花铣削加工平台的扫描电子显微镜照片看出，平台表面平整，无明显的高低起伏，平台呈长方形结构。通过 Veeco NT1100 白光干涉仪测量平台表面形貌，可以看出，平台在芯轴轴线方向，不存在明显的凸起区域，平台的平面性较好。从加工尺寸精度来看，样品在长、宽方向尺寸误差可控制在 5  $\mu\text{m}$  以内；而在 Z（即平台深度）方向，通过较小的分层厚度，将放电区域集中在电极底部，通过电极损耗在线检测与补偿后，测试值与程序设定数值偏差小于 0.1  $\mu\text{m}$ ，说明样品在高度方向尺寸精度可控制在 1  $\mu\text{m}$  以内。通过 Veeco NT1100 白光干涉仪相关软件分析可知，样品表面均方根粗糙度小于 Ra0.3  $\mu\text{m}$ ，峰谷高度小于 2  $\mu\text{m}$ 。

**Fe<sup>+</sup>-He<sup>+</sup>-H<sub>2</sub><sup>+</sup> 三束同时原位辐照纯铁时的缺陷演化行为及机理：氢氦与位移损伤比例的影响**曹子奇<sup>1,2</sup>、丁一帆<sup>1,2</sup>、崔德旺<sup>1,2</sup>、钟庆鸿<sup>1,2</sup>、冉广<sup>1,2</sup>

1. 厦门大学能源学院

2. 福建省核能工程技术研究中心

在聚变堆中，中子辐照和氢氦原子协同作用显著影响材料微观结构，进而快速降低材料的服役性能。因此，研究中子辐照损伤和氢氦协同效应不仅对研发高抗辐照损伤核能材料而且对于评估辐照服役性能均具有重要意义。但氢氦与位移损伤比例（H/dpa、He/dpa）影响辐照缺陷演化行为及机理依然不清楚。本研究在 723 K 使用 400 keV Fe<sup>+</sup>、50 keV He<sup>+</sup>和 50 keV H<sub>2</sub><sup>+</sup>对纯铁进行三束协同辐照，原位研究了辐照缺陷演化行为及特征。试验条件包括四种气体原子与辐照损伤比：10 appm He/dpa & 45 appm H/dpa、10 appm He/dpa & 100 appm H/dpa、100 appm He/dpa & 100 appm H/dpa 以及 45 appm He/dpa & 10 appm H/dpa。结果表明，H/dpa 和 He/dpa 比例显著影响辐照位错环与气泡的演化行为与特征，包括<100>位错环比例、位错环的尺寸和密度，气泡的大小、密度与分布等。当 He/dpa 保持不变时，增加 H/dpa 会减少<100>位错环的比例和位错环的尺寸，增加位错环和气泡的密度，并增加气泡的尺寸。当保持 H/dpa 不变，增加 He/dpa 有利于增加<100>位错环的比例、位错环密度、气泡尺寸和气泡密度，并减小位错环的尺寸。H/dpa 和 He/dpa 的增加均会增加由气泡引起的肿胀。通过比较氢与氦对辐照缺陷影响可知，氢对位错环形核的影响小于氦，而氦对位错环迁移的抑制效果强于氢。本研究结果为深入理解核能材料辐照损伤行为及机制等提供了重要的试验数据和理论参考。（该工作得到国家磁约束核聚变能发展研究专项(2022YFE03110000)的经费支持）

**氧化物二维电子气输运性能调控研究**

闫虹

西北工业大学

近年来过渡金属氧化物界面二维电子气（2DEG）由于其晶格、电荷自旋、轨道等自由度之间存在错综复杂的耦合作用，展现出丰富而奇特的物理性质，在电子器件应用方面展现了巨大的潜力。然而，界面有限的迁移率以及磁性 2DEG 的缺乏限制了其在新型电子器件与自旋器件方面的应用。因此，我们首先在室温下利用离子液体门控技术，通过影响界面氧空位，有效减少了界面上的无序现象，将迁移率提高了约 200%，2K 时可达到 22650cm<sup>2</sup>V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup>，并通过强磁场下的舒勃尼科夫-德哈斯震荡证实了高迁移率电子的子带分布；其次，采用了界面工程技术，通过在 LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> 中间插入不同厚度的 LaCoO<sub>3</sub> 层，利用 Co 离子在界面获得了高迁移率的 2DEG，并在 10K 以下观察到了反常霍尔效应，证实获得了自旋极化的 2DEG，并且磁输运结果也表明了增强的自旋轨道耦合。研究成果为氧化物 2DEG 电子器件应用方面提供了技术支持。

**三元氢化物 LaBeH<sub>8</sub> 在高压条件下的材料合成及超导电性研究**宋迎港<sup>1</sup>、毕敬凯<sup>1</sup>、Yuki Nakamoto<sup>2</sup>、Katsuya Shimizu<sup>2</sup>、刘寒雨<sup>1,3</sup>、邹博<sup>1,3</sup>、刘广韬<sup>1</sup>、王洪波<sup>1,3</sup>、马琰铭<sup>1,3,4</sup>

1. Key Laboratory of Material Simulation Methods and Software of Ministry of Education, College of Physics, Jilin University, Changchun 130012, China

2. Center for Quantum Science and Technology under Extreme Conditions, Osaka University, Toyonaka, Osaka 560-8531, Japan

3. State Key Laboratory of Superhard Materials, College of Physics, Jilin University, Changchun 130012, China

4. International Center of Future Science, Jilin University, Changchun 130012, China

自 20 世纪初昂纳斯发现超导电性以来，寻找高温超导体始终是人类的追求目标。近年来，高压强极

端条件下的超导富氢化合物取得了一系列突破性进展，理论预言的笼型富氢高温超导体（ $\text{CaH}_6$  和  $\text{LaH}_{10}$  等）相继被实验证实，开辟了超导研究的新纪元。相比于二元氢化物，三元体系的相空间自由度更高，不同金属元素的组合可以实现协同调控氢化物的晶体构型及电声子相互作用，从而为提高氢化物的超导温度提供了有效的途径。尽管理论工作已经提出了诸多具有三元结构原型的富氢高温超导体，但迄今为止，这些三元富氢高温超导体还没有被合成。

本工作以 La-Be 合金和氨硼烷或石蜡为前驱物，利用金刚石对顶砧在 110~130 GPa 和 800~2300 K 的压强和温度条件下成功合成了一种全新的三元富氢高温超导体  $\text{LaBeH}_8$ 。高压原位电输运实验测得该化合物在 80 GPa 下具有 110 K 的高温超导电性。实验工作通过两种不同的金属元素组合，首次在实验上获得了具有三元结构原型的富氢高温超导体  $\text{LaBeH}_8$ ，拓展了富氢化物的结构类型，建立了在三元氢化物体系中寻找高温超导体的重要范式。

### 质子辐照对 SiC 功率 MOSFET 栅氧击穿特性的影响研究

许菁怡、魏莹、梁晓雯、余学峰、向宇璿

中国科学院新疆理化技术研究所

宇宙空间中广泛分布的质子引发的辐射效应是制约 SiC MOSFET 器件的航天应用的因素之一。为探究 SiC MOSFET 在质子辐照后的器件损伤规律及可靠性退化特性，开展了不同辐照条件和不同偏置电压下的质子辐照试验，包括选取了 100 MeV 和 300 MeV 的质子能量，600 V-1000V 的偏置条件以及不同的辐照注量，辐照同时在线监测了器件栅极和漏极漏电流。试验结果显示，随质子能量增大，器件在较低的偏置电压即可发生单粒子烧毁；器件烧毁前，在线监测的漏电流基本不变，烧毁时突然增大至限流，表现出质子与重离子辐照的区别；对低偏置电压下未发生单粒子烧毁的器件进行电学特性测试，静态参数及转移特性改变不显著，但对其进行阶梯应力测试后发现栅氧击穿电压相比未辐照器件降低，且随着注量的增大而减小。试验结果为 SiC MOSFET 在空间环境中的可靠应用提供了参考依据。

### 低于兆帕压力下超导转变温度超过 105 K 的非笼型三元镧硼氢化合物

宋晓旭<sup>1</sup>、郝晓宽<sup>1</sup>、魏旭东<sup>1</sup>、何新玲<sup>3</sup>、刘寒雨<sup>2</sup>、马良<sup>4</sup>、刘广韬<sup>2</sup>、王洪波<sup>2</sup>、牛景雨<sup>1</sup>、王绍杰<sup>1</sup>、齐彦鹏<sup>5</sup>、柳忠元<sup>1</sup>、胡文涛<sup>1</sup>、徐波<sup>1</sup>、王霖<sup>1</sup>、高国英<sup>1</sup>、田永君<sup>1</sup>

1. 燕山大学
2. 吉林大学
3. 河南省科学院
4. 郑州大学
5. 上海科技大学

自室温超导被首次发现以来，人们对室温超导的追求已持续了一个多世纪，它有可能给各行各业带来革命性的变化。氢化物是实现室温超导的理想候选物质，目前。人们已经对其在理论和实验上进行了广泛的探索，其中，具有代表性的笼型氢化物  $\text{LaH}_{10}$  在 180 GPa 的超导转变温度 ( $T_c$ ) 高达 260 K。然而，这些高  $T_c$  的氢化物只有在极端压力下才会保持稳定，对于超过 110 K 的超导体来说，稳定压力通常超过 120 GPa，这极大的限制了此类超导材料的应用。这促使人们对设计和合成稳定压力较为适中的高  $T_c$  氢化物产生了兴趣。

本工作中，我们利用金刚石对顶砧高压技术和原位激光加热技术，成功的在 150 GPa 和 2000 K 的条件下合成了非笼型的三元镧硼氢化合物 ( $\text{LaB}_2\text{H}_8$ )。此外，我们分别使用物性测量系统和同步辐射 X 射线衍射装置对其超导电性和晶体结构进行了表征。电输运测量表明，在 90 GPa 的条件下，样品的  $T_c$  高达 106 K；随着外加磁场的增加， $T_c$  向低温移动，这进一步证实了超导电性的存在；通过 GL 和 WHH 模型拟合，样品在 92 GPa 时有高达 26 T 和 34 T 的上临界磁场。通过高压原位的 XRD 测量，我们得到了最基本的金属子晶格结构，并且在减压过程中，合成产物的结构可稳定至 59 GPa。结合电输运测量、XRD 测量结果

和对多个候选相的晶体结构、稳定性、电子性质以及超导电性的预测， $I4/mmm$   $\text{LaB}_2\text{H}_8$  是与实验结果最一致的候选相。值得注意的是， $\text{LaB}_2\text{H}_8$  呈现出一种以强共价键为主的非笼型结构，其中 B 与近邻的 B 和 H 原子以共价键结合形成了  $\text{B}_2\text{H}_8$  单元。这些发现表明，将非金属元素掺入已有的二元金属氢化物体系可以在保留较高的  $T_c$  情况下降低其稳定压力，这在多元氢化物领域探索能稳定至低压甚至常压的高  $T_c$  氢化物提供了一条前景广阔的途径。

### ReO<sub>3</sub> 高压相——氧元素主导的轻元素超导体

单鹏飞<sup>1,2</sup>、孙建平<sup>1</sup>、程金光<sup>1</sup>

1. 中国科学院物理研究所
2. 北京高压科学研究中心

常压下  $\text{ReO}_3$  为 A 位缺位钙钛矿结构 ( $Pm3m$ )，在 12 ~ 38 GPa 的压强范围内  $\text{ReO}_3$  为菱方结构  $R-3c$  相，该结构可以看作  $\text{ReO}_6$  八面体结构单元沿着常压立方相  $\langle 111 \rangle$  轴发生耦合旋转演化而来。详细的结构测试发现，上述旋转在 30 GPa 压强下达到  $30^\circ$ ，此时结构中的氧原子呈密堆积排布，进一步加压至 39 GPa。该旋转达到  $32^\circ$ ，此时发生相变，超导逐渐消失。高压电阻测试发现  $R-3c$  相低温下呈现超导电性，且在 30 GPa 附近达到最佳  $T_c \approx 17$  K，进一步升高压强，超导逐渐被抑制并在 39 GPa 下消失。理论计算分析发现， $\text{ReO}_3$  中较高的超导  $T_c$  源于氧原子中频声子振动模式与氧八面体分子轨道电子之间的强耦合。 $\text{ReO}_3$  高压超导相的发现提供了一种通过轨道杂化提高轻元素轨道电子对  $N(E_F)$  贡献，增强轻元素电子与其声子振动模式耦合，进而实现氧元素主导的轻元素超导体的可行方案。

### Wonderland of 2D black phosphorus under pressure

Yang Lu

Center for High Pressure Science & Technology Advanced Research

Black phosphorus (BP) has recently emerged as a promising two-dimensional (2D) semiconductor for optoelectronic applications mainly due to its thickness-dependent direct bandgap, relatively high charge mobility, and remarkable in-plane anisotropy. Pressure can effectively and continuously tune lattice parameters, especially the interlayer distance in layered 2D materials, hence alter their properties and performances. In this study, we discovered the anomalous layer-dependent shift of optical transitions in few-layer BP under pressure via infrared spectroscopy. The bandgap of 2L BP is enlarged with the pressure increasing to 2 GPa, while the bulk counterpart undergoes a semiconductor to semimetal transition under  $\sim 1.8$  GPa. These results can be described by a physical model involving the intra- and interlayer coupling. This work highlights the novel properties of 2D black phosphorus under pressure.

### 压力开启石墨烯/氮化硼摩尔超晶格中第三狄拉克点带隙的实验观测及理论解释

王宇鹏、叶春晖、安家骥、代如成、乔振华、张增明

中国科学技术大学

当两层晶格常数接近的二维材料叠加时，会形成摩尔超晶格。这种周期性的摩尔势能显著地调控能带结构，并引发诸如石墨烯/氮化硼系统中高阶狄拉克点的出现、转角双层石墨烯及转角双层  $\text{MoTe}_2$  中的摩尔平带等新的物理现象，为探索新奇物态和模拟强关联物理提供了重要平台。层间距离决定了层间耦合强度，进而影响摩尔势的强度。通过施加压力来调节层间距离，可以动态连续地调控超晶格体系的能带结构。我们开发出了一种基于金刚石对顶砧压机的新技术，可在高压下对二维微纳器件进行电输运测试。本文对石墨烯氮化硼摩尔超晶格体系在高压下的输运性质进行了深入研究。实验结果发现，压力能显著调控主狄拉克点和第二狄拉克点的带隙，并首次在 6 GPa 压力下观测到第三狄拉克点附近带隙的开启。基于完全弛豫模型的理论计算与实验观察结果相吻合。我们的研究展示出压力对于摩尔超晶格体系的能带的有效调控，

为调控摩尔超晶格体系的强关联物理和新奇拓扑物态提供了转角，垂直电场之外的另一有效手段。

#### 参考文献:

1. Yankowitz, M. et al. Dynamic band-structure tuning of graphene moiré superlattices with pressure. *Nature* 557, 404-408, doi:10.1038/s41586-018-0107-1 (2018).
2. Gao, Y. et al. Band Engineering of Large-Twist-Angle Graphene/h-BN Moire Superlattices with Pressure. *Phys Rev Lett* 125, 226403, doi:10.1103/PhysRevLett.125.226403 (2020).
3. Lin, X., Zhu, H. & Ni, J. High pressure induced secondary and tertiary gaps in relaxed graphene on hexagonal boron nitride. *Physical Review B* 105, doi:10.1103/PhysRevB.105.075424 (2022).

### 压力诱导二维手性材料 FeTa<sub>3</sub>S<sub>6</sub> 磁性相变

赵宏泽、Azizur Rahman、麦棣、代如成、王中平、张增明  
中国科学技术大学

近年来，二维手性磁性材料作为二维磁性材料家族的新成员，由于其在光电器件、数据存储及自旋电子学等方面具有重要的应用价值，受到越来越多的关注。手性磁体沿手性轴的反对称 Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用和对称 Heisenberg 交换作用的竞争会产生非平庸的自旋织构，如手性孤子晶格(CSL)或者磁性斯格明子等。竞争作用可以通过外部刺激如温度、压力、磁场等进行调控，有助于我们研究自旋-轨道相互作用和磁电性质的关系。

本文研究了高压下二维手性磁性材料 FeTa<sub>3</sub>S<sub>6</sub> 在不同磁场和温度下的电输运特性。在 0.2-3.2 GPa 压力区间，发现压力有助于 FeTa<sub>3</sub>S<sub>6</sub> 在低温区形成类 CSL 态，压力和温度的耦合可调制 DM 相互作用。随着压力增加，类 CSL 态逐渐消失，铁磁基态也由局域态转换成巡游态。结合拉曼光谱、XRD 和 DFT 计算，我们推断这种转变是由结构相变引起的，手性在高压下被完全破坏，导致 DM 相互作用的消失。本工作作为研究手性磁性材料在压力下的演化提供了很好的平台，有利于我们更深入地研究磁相互作用的机制。

#### 参考文献

1. Y. Togawa, Y. Kousaka, S. Nishihara, K. Inoue, J. Akimitsu, A.S. Ovchinnikov, and J. Kishine, *Phys. Rev. Lett.* 111, 197204 (2013).
2. J.-I. Yonemura, Y. Shimamoto, T. Kida, D. Yoshizawa, Y. Kousaka, S. Nishihara, F. J. T. Goncalves, J. Akimitsu, K. Inoue, M. Hagiwara, and Y. Togawa, *Phys. Rev. B* 96, 184423 (2017)
3. Rahman A, Rehman M U, Kiani M, et al. Critical behavior and phase diagram of layered ferromagnetic FeTa<sub>3</sub>S<sub>6</sub> single crystals[J]. *Physical Review B*, 2022, 105(14): 144413.

### 影响 SiC MOSFET 电离总剂量效应的关键因素研究

梁晓雯、魏莹、冯婕、余学峰、郭旗  
中国科学院新疆理化技术研究所

SiC MOSFET 具有优异的高频、高压、高温特性，在电力、高温和空间电子领域有着巨大的应用前景。SiC MOSFET 与 Si 基功率 MOSFET 类似，易受电离总剂量效应影响。但考虑其界面特性与 Si MOSFET 差异较大，因此对电离总剂量效应的敏感性同样存在差异。本文综合考虑总剂量辐照缺陷的测试方法、辐照偏置、辐照温度、辐照剂量率的影响发现，SiC MOSFET 的电离总剂量效应与栅氧化层中积累的辐射陷阱电荷密切相关，点测法与曲线扫描法提取的辐射陷阱电荷密度存在显著差异，主要由时间常数较小的边界陷阱引起。辐照偏置通过影响栅氧化层中的电场而改变陷阱电荷的积累。高电场下，产生的陷阱电荷量增加而复合较少，导致积累量增加。辐照温度同样可影响栅氧化层中陷阱电荷的积累。高温环境下，器件内部的载流子运动加快，使得电子与产生的氧化物陷阱电荷发生复合，最终导致积累的氧化物陷阱电荷量减

小。剂量率可通过影响单位时间的电荷产额而影响栅氧化层中的陷阱电荷积累，对比了高低剂量率下 SiC MOSFET 的关键电参数退化量发现，器件几乎不存在低剂量率退化增强效应，分析认为主要与界面处较为稳定的 N 钝化键相关。

### 替代合金(La,Ce)H<sub>9</sub> 超导温度的巨大提升

毕敬凯

河南省科学院量子材料与物理研究所

提高超导体的超导温度是凝聚态物理领域中最重要研究方向之一。作为室温超导体的候选者，高压富氢超导体已连续突破超导温度纪录，尤其是在笼型氢化物 LaH<sub>10</sub> 中观测到约 250-260 K 的  $T_c$  值。如何通过元素调控提高富氢高温超导体的超导温度是领域的热点问题。报告人提出通过用非磁性的 La 元素取代 CeH<sub>9</sub> 中的部分弱磁性的 Ce，形成与二元体系相似的笼型替代合金氢化物，降低了 Abrikosov-Gor'kov 抑制效应，大幅度提高目标体系的超导温度。本实验通过使用摩尔比为 1:1 的 LaCe 合金和氨硼烷作为前驱物，在高温高压下合成三元替代合金氢化物  $P63/mmc$ -(La,Ce)H<sub>9</sub>。相比于二元氢化物 CeH<sub>9</sub>， $P63/mmc$ -(La,Ce)H<sub>9</sub> 的  $T_c$  大幅度提高约 80 K (~80%)，在 97-172 GPa 的压强范围内具有 148-178 K 的  $T_c$  值，并且其稳定压强约为 90 GPa。该研究表明，多元素协同调控是提高高温超导体超导温度的有效手段，为未来在低压下合成具有高  $T_c$  的氢化物超导体提供了参考。

### 熔石英光栅元件表面湿法浅刻处理研究

刘太祥、杨科、李昌朋、严鸿维、蒋晓东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

激光系统是用于产生瞬时高温、高压极端条件的复杂系统之一。在激光系统中，熔石英光栅元件在激光光束能量测量方面发挥着重要作用。然而，熔石英光栅元件在进行光束能量测量的同时，会承受超强激光的辐照，并在激光辐照下极易产生表面损伤。光栅元件产生激光损伤后，可能会导致激光系统中光学元件组件产生级联性的崩溃性损伤增长，进而严重制约激光系统的安全、高效率运行。因此，迫切需求提高熔石英光栅元件的抗激光辐照损伤性能。本工作对熔石英光栅元件表面状态进行了分析，提出应用表面湿法浅刻处理以提升熔石英光栅元件抗激光损伤性能的方法。研究表明，通过调节湿法浅刻工艺参数，一方面可以保持熔石英光栅元件的光束能量测量功能和性能，另一方面可以有效去除熔石英光栅元件的表面激光损伤前驱体，进而大幅度提升光栅元件的抗激光损伤性能。本工作提出的表面湿法浅刻处理方法有望克服激光系统中熔石英光栅元件抗激光损伤性能较差的弱点，进而延长光栅元件的使役周期，降低激光系统运行成本。

### 非磁性锗基器件中双极驱动的室温负磁电阻效应

何雄<sup>1,2</sup>、杨凡黎<sup>1</sup>、潘礼庆<sup>1</sup>、夏正才<sup>2</sup>

1. 三峡大学理学院，湖北省弱磁探测工程技术研究中心

2. 华中科技大学，国家脉冲强磁场科学中心

在大数据和云计算的数字化时代，基于非磁性半导体材料的磁阻器件受到了研究人员的高度关注，具有很强的研究意义和价值，有望在磁性传感器、高密度存储等方面得到广泛的应用<sup>[1-7]</sup>。在单一载流子主导运输的体系中，研究发现基于载流子的非均匀性分布、二极管辅助几何增强和范德堡盘异质结构等，可以获得优异的磁阻性能。而在电子和空穴双极驱动的体系中，可以获得相对更大的不饱和正磁阻数值和磁阻敏感度<sup>[1-4]</sup>，且样品具有“金属/非磁性半导体/金属”的简单结构。因此，研究双极驱动的磁阻效应具有很大的研究价值和应用前景。

本文通过设计具有同侧金属探测电极的 Au/n-Ge:Sb/Au 器件，在 50T 脉冲强磁场特定的方向条件下，观察到了明显的室温负磁电阻效应，该效应很难在静态低磁场环境中观察到。结合霍尔效应实验测量结果

和双极输运理论, 分析认为这种异常负磁电阻效应主要与脉冲强磁场提供的极强洛伦兹力调制下器件表面电荷积累有关。调控器件的几何尺寸, 本文进一步印证了该理论分析模型<sup>[8]</sup>。本文研究成果为在脉冲强磁场环境中运行的基于非磁性半导体的新型磁传感、磁逻辑等器件的发展提供了新思路。

**资助项目:** 湖北省自然科学基金青年项目 (2024AFB333) 和三峡大学高层次人才科研启动基金 (8230202)

#### 参考文献:

- [1] He X., Xia Z.C., Niu H.Y., et al. *Journal of Materials Science & Technology*, 2022, 114: 1-6.
- [2] He X., Xia Z.C., Niu H.Y., et al. *physica status solidi (RRL) - Rapid Research Letters*, 2022, 16(8): 2200165.
- [3] Chen J.J., Zhang X.Z., Piao H.G., et al. *Applied Physics Letters*, 2014, 105(19): 193508.
- [4] Yang D.Z., Wang F.C., Ren Y., et al. *Advanced Functional Materials*, 2013, 23(23): 2918-2923.
- [5] He X., Yang Z., Zhu C., et al. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2020, 32(30): 305701.
- [6] He X., Sun Z.G. *Chinese Physics B*, 2018, 27(6): 067204.
- [7] Zhang K., Huang Q.K., Yan Y., et al. *Applied Physics Letters*, 2016, 109(21): 213503.
- [8] He X., Yang F.L., Niu H.Y., et al. *Chinese Physics B*, 2024, 33(3): 037504.

Shaojie Wang, Lin Wang

Key Laboratory for Microstructural Material Physics of Hebei Province, School of Science, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, P. R. China

The discoveries that the unconventional stoichiometric hydrides, SH<sub>3</sub> and P4H<sub>6</sub> become superconductors with critical temperatures ( $T_c$ ) of 203 and 103 K at high pressures motivate extensive investigations of hydrogen-rich compounds. The As-H system, the hydride of the same main group, has also been predicted to have a variety of stoichiometric ratios with high  $T_c$  under high pressure. However, its high-pressure stoichiometry evolution and superconductivity remain unknown. Here, we explored the stoichiometry evolution and thermodynamic process of the As-H system under high pressure. We observed that AsH<sub>3</sub> underwent liquefaction and solidification at approximately 0.01 GPa and 1.7 GPa, respectively. Upon further compression, AsH<sub>3</sub> dimerizes into As<sub>2</sub>H<sub>4</sub> at 5.3 GPa. Subsequently, the dimer starts to decompose at 8.5 GPa, and completely transformed into amorphous As (a-As) at 12.3 GPa. Additionally, elevated pressure and prolonged pressure maintenance promoted the formation of As<sub>2</sub>H<sub>4</sub> at 5.3-8.5 GPa. This comprehensive exploration of the high-pressure stoichiometric evolution of As-H is crucial for exploring superconductivity in the As-H system and understanding the internal arsenic cycling in planets like Jupiter and Saturn.

### 基于假想温度分布的激光表面热处理熔石英残余应力定量分析技术

张传超

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

CO<sub>2</sub> 激光已经广泛应用于熔石英元件的加工处理, 例如: 损伤修复、表面抛光、切割、表面图案制备等, 但是处理后可能产生较大的残余应力, 不仅会导致元件表面变形降低表面质量, 而且存在应力开裂导致元件报废的风险, 因此, 需要对熔石英 CO<sub>2</sub> 激光加工处理后的残余应力进行精准评估。本工作提出了一种从熔石英假想温度分布获取残余应力分布的方法, 通过测量熔石英的假想温度分布状态, 并设定熔石英假想温度初始冻结状态为残余应力零点, 计算各个位置假想温度状态从初始冻结温度降低到室温时的降温体积收缩量, 获得相对体积应变量, 把获得的相对体积应变量输入应力应变方程, 通过数值求解获得熔石英内部的残余应力分布。本工作实现了快速准确地获取熔石英 CO<sub>2</sub> 激光作用后残余应力分布特征, 为熔石英的 CO<sub>2</sub> 激光加工处理提供理论和技术支撑。

### 溶胶-凝胶化学增透膜离子束刻蚀干法去除技术研究

蒋晓龙<sup>1</sup>、倪卫<sup>1</sup>、栾晓雨<sup>1</sup>、谭宁<sup>1</sup>、廖威<sup>1</sup>、黎波<sup>2</sup>、向霞<sup>2</sup>、袁晓东<sup>1</sup>、蒋晓东<sup>1</sup>

1. 中国工程物理研究院激光聚变研究中心

2. 电子科技大学

在大型激光装置的运行中，紫外光学表面的疏松多孔的溶胶-凝胶化学增透膜会不可避免地会受到污染，形成被污染化学膜，而光学元件的循环复用需要定期下架元件，去除表面被污染化学膜。然而，传统的湿法超声波清洗方法会产生大量的高毒性危害和高处理难度的废液。在本工作中，我们提出了一种基于离子束刻蚀的干膜除膜方法。通过含能离子的轰击作业，将化学膜以及吸附其中的污染物以气态或固态粒子的形式剥离去除。固态或气态污染刻蚀产物可分别通过尾气过滤和室的定期清洗来收集。我们对离子束参数进行了理论和实验优化，获得了选择性和温和的刻蚀效果。弱键连膜层的蚀刻速度比熔石英基底快得多，这保证了涂层在精细光学上的选择性蚀刻。对不同离线样品和正式循环元件的实验表明，该方法是非常有效的。我们还研究了这种方法对光学性能的潜在影响，没有观察到退化。除膜后，元件表面粗糙度和表面形状处理后几乎没有变化，激光损伤性能略有提升。

关键词：溶胶-凝胶、SiO<sub>2</sub>膜、干法去除、离子束刻蚀

### 激光冲击下铈微喷及其气混过程研究\*

席涛<sup>1</sup> 辛建婷<sup>1</sup> 袁宗强<sup>1</sup> 单连强<sup>1</sup> 王欣欣<sup>2</sup> 王裴<sup>2</sup>

1 中国工程物理研究院激光聚变研究中心，等离子体物理全国重点实验室，四川 绵阳 621900

2 北京应用物理与计算数学研究所，北京 100094

摘要：当冲击波从金属-真空或金属-气体界面反射时通常会发生微喷现象。在内爆压缩科学和工程领域，喷射物质成为引发界面混合的一个主要来源，对冲击压缩效果产生直接影响。因此，微喷物的产生及其与气体的混合过程已成为冲击波物理研究中十分重要的热点和难点问题。获得不同条件下材料微喷气混过程的关键物理图像与量化数据，解读材料微喷气混规律对于深入认识微喷颗粒演化过程具有重要作用。本研究基于星光 III 激光装置开展了活泼金属铈在不同气体环境下微喷及其气混过程研究，采用双轴高能 X 射线照相和光子多普勒测速(PDV)技术对喷射及其气混过程进行了观测。通过比较不同输运环境下的实验结果，发现输运环境对射流速度谱分布影响较大，而对面密度分布影响较小。通过本研究，为理解气体环境中活泼金属微喷及其气混过程提供了重要支撑。

关键字：强激光 微喷 气体 活泼金属 高能 X 射线照相

### 含 U 高熵合金的制备及其性能研究

时洁

核燃料作为核反应堆的关键材料，其发展决定了反应堆的先进性、经济性及安全性。含 U 高熵合金利用高熵合金高强度高硬度、良好耐腐蚀性的独特优势，成为未来商用核燃料的重要候选材料。

采用磁控溅射的方法制备了不同 U 含量的(NbTiZr)<sub>100-x</sub>U<sub>x</sub>(X=50,80)系列高熵合金薄膜。通过调控 NbTiZr 靶材和 U 的溅射功率和溅射时间进行双靶磁控溅射，实现 NbTiZrU 高熵合金薄膜所需原子比的配比调控。通过 XRD、SEM 等手段对 NbTiZrU 高熵合金薄膜组织结构进行分析，采用纳米压痕对力学性能进行表征，采用电化学腐蚀和浸泡实验对耐腐蚀性能进行表征。

结果表明，(NbTiZr)<sub>50</sub>U<sub>50</sub>、(NbTiZr)<sub>20</sub>U<sub>80</sub> 高熵合金薄膜均为简单的体心立方(BCC)固溶结构，并且薄膜表面光滑致密，所有元素均呈现均匀化的分布，无第二相。电化学腐蚀和浸泡实验测量评估 U 含量对含 U 高熵合金腐蚀行为的影响，并制备 UMo 合金薄膜进行对比。动电位极化曲线表明(NbTiZr)<sub>50</sub>U<sub>50</sub> 的腐蚀电位为 32.98mV vs.SCE，(NbTiZr)<sub>20</sub>U<sub>80</sub> 和 UMo 合金的腐蚀电位分别为 -315.28 mV vs.SCE 和 -369.89 mV vs.SCE。通过 SEM 对浸泡实验结果进行表征，(NbTiZr)<sub>50</sub>U<sub>50</sub> 高熵合金薄膜的耐腐蚀性能明显优于

(NbTiZr)20U80 和 UMo 合金。

本文通过对 NbZrTiU 体系高熵合金薄膜的制备与性能研究，得到了含 U 高熵合金薄膜的组织结构及腐蚀性能，为进一步探究与设计新型的含铀高熵合金及核燃料提供有益指导。

### 基于 CVD 法的 Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 泡沫制备技术研究。

陈云建, 李宁, 易泰民。

黑腔在间接驱动惯性约束聚变 (Indirect-Drive Inertial Confinement Fusion, ICF) 中扮演着关键角色, 它直接影响到驱动器能量的转换效率以及辐射场的均匀性和清洁度。理论研究表明, 使用低密度多孔材料作为黑腔内衬可有效降低辐射能量的损耗, 并抑制发光区的运动。基于此理论, 利弗莫尔国家实验室 (Lawrence Livermore National Laboratory)、激光聚变研究中心(Laser Fusion Research Center)的团队分别采用了五氧化二钽 (Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub>)泡沫和金 (Au)泡沫作为黑腔内衬开展实验, 验证了低密度多孔结构黑腔内衬的有效性。传统的 Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 泡沫通常采用溶胶-凝胶法 (Sol-Gel Process) 制备获得, 然而, 该方法制备的泡沫材料普遍存在材料机械性能差、加工成形困难的问题, 这也限制了其在制靶领域的应用。为了解决泡沫材料在机械加工和成形方面的挑战, 包括材料加工困难、易开裂粉碎、尺寸精度差、成品率低等问题。本文探索了采用化学气相沉积法 (chemical Vapor Deposition, CVD) 制备低密度 Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 泡沫材料的可行性, 探讨了 RF 气凝胶烧结温度对 Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 薄膜材料结构稳定性的影响。扫描电镜 (SEM) 和透射电镜 (TEM) 表明该结构呈均匀的网络结构、比表面积可达 835.65 m<sup>2</sup>/g, 密度为 83 mg/cm<sup>3</sup>, 加工获得了壁厚~100.8μm 的 Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 泡沫内衬样品、初步验证了 CVD 法制备的 Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> 泡沫材料加工性能。

### 冲击下过渡金属的高温高压电阻率测量技术与应用

甘波 1,\* , 尹远 2, 张友君 1

1 四川大学原子与分子物理研究所, 四川 成都 610065

2 中国科学院地球化学研究所矿床地球化学国家重点实验室, 贵州 贵阳 550081

\*E-mail: ganbo@scu.edu.cn

过渡金属的高温高压输运性质是凝聚态物理学的一个重要研究方向, 在高能密度物理、高压科学和行星科学中有着重要应用。利用激光加热金刚石对顶砧 (DAC) 技术, 已经实现在 170 GPa 和 3500 K 条件下测量过渡金属的高温高压电阻率。然而, 由于静态高压技术的加载能力有限, 更极端的高温高压条件 (如行星核心深处) 需要动态高压技术的支持。目前, 动态冲击下的电阻率测量技术尚不成熟, 早期实验结果可能受到趋肤效应的影响。在本研究中, 我们进一步开发了冲击电阻率测量技术, 并以典型过渡金属铜作为研究对象。我们采用四电极方法, 基于金刚石对顶砧测量了室温下铜在 50 GPa 压力范围内的电阻率, 并进一步利用二级轻气炮冲击波技术获得了铜在高达 118 GPa 和 1800 K 的高温高压电阻率。同时, 我们利用第一原理分子动力学模拟了铜在实验温压范围内的电热输运性质, 并获得了与实验结果总体一致的模拟结果, 表明所开发的冲击电阻率测量技术可以有效获取过渡金属在超高温高压条件下的电输运性质。理论和实验结果显示, 铜的电阻率随着压力的增加而减小, 并随着温度的升高而线性增大。这些趋势可以通过 Bloch-Grüneisen 模型有效拟合, 表明电子-声子散射是铜在高温高压下电阻率的主要影响机制。值得注意的是, 铜的高温高压洛伦兹数超过了理想的 Sommerfeld 值, 意味着在极端条件下, 铜不再适用于理想的 Wiedemann-Franz 公式。我们的动态与静态高压实验结合理论模拟研究, 为过渡金属在极端条件下的电热传输特性提供了有力工具和新的视角。

### 氢气传感器梯度薄膜电输运机制研究

刘广权 王新明 吴卫东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 四川绵阳, 621900

作为化石燃料的理想替代品，氢气是未来燃料电池动力车辆、高效能源存储设备等的关键能源载体。同时，人们在制备、储存、运输和使用等环节安全检测方面的研究兴趣也日益增加。例如，在纯钯 (Pd) 体系中，研究者通过减少 Pd 颗粒尺寸来降低功耗。有研究者通过在纯 Pd 薄膜中添加金属镍 (Ni) 来缓解，因相变导致的氢脆现象。在钯基合金材料研究中，耐久性始终是限制其全面发展的关键因素之一。在本文的研究中，创新性的将渐变梯度薄膜引入材料结构的设计中，有效的将应力延薄膜垂直于表面方向逐渐释放。在对不同氢浓度的测试中发现，PdNi 梯度薄膜均呈现出不同的响应值。同时，在高浓度氢气测试中，发现梯度 PdNi-30W 也呈现不同的响应，并且在去除氢气后，样品电阻值又恢复到初始状态。最后，在对不同渐变状态的 PdNi 梯度薄膜循环稳定性测量中发现，梯度 PdNi-10W 和梯度 PdNi-20W 样品出现了不同程度的波动。随着渐变层中金属 Ni 含量的增加，氢响应的稳定性均处于稳定状态。以此说明，梯度膜的引入很好的解决了 Pd 基合金薄膜传感器的稳定性问题。

关键词：氢传感器、耐久性、PdNi 梯度薄膜、渐变层

### 生物启发含冰片醇糖聚合物抗菌粘附表面

程秋丽

河南科技大学

抗菌表面材料被认为是预防医疗器械相关感染的一种有效策略。本研究将 2-乳酸氨基乙基甲基丙烯酰胺与结构独特的冰片化合物结合，通过简单的自由基聚合得到共聚物聚(2-乳酸氨基乙基甲基丙烯酰胺-甲基丙烯酸甘油酯-共异硼酸酯)(聚(LAEMA-GMA-BA))。通过硅烷化反应在衬底表面制备了含胺硅烷层，然后将糖基共聚物通过共价键接枝到硅烷层上，得到糖基化抗菌表面。X 射线光电子能谱(XPS)证实了功能化表面和聚合物层的成功制备。原子力显微镜(AFM)证实涂层表面相对平坦光滑。另外，该表面对大肠杆菌和金黄色葡萄球菌均表现出良好的抗菌粘附性能。此外，体外实验未观察到对肺成纤维细胞 MRC-5 有明显的细胞毒性，表明抗菌表面具有良好的生物相容性。该研究为设计含有糖共聚物和天然抗菌化合物的抗菌表面提供了新策略。

### 生物可降解镁钆合金在血管支架中的应用

王森巍<sup>1</sup>、余加<sup>1,2</sup>

1. 重庆大学材料科学与工程学院

2. 重庆市国家镁合金工程技术研究中心

The influence of microstructure and product films of Mg-xGd-5Y alloys on mechanical properties and corrosion behavior was investigated. The results showed that RE elements dissolved in the matrix can improve strength through a solid solution-strengthening and grain boundary strengthening effect. The non-basal slip systems also can be activated to enhance elongation. The Pilling-Bedworth ratio for film was proposed. The product films mainly consisted of oxides and carbonates, which can effectively improve corrosion resistance. Moreover, the cell morphology and relative growth rate were measured to evaluate the cytotoxicity of extracts. These results illustrated the promising potential of Mg-xGd-5Y alloys for cardiovascular stent application.

### 负载常温液态金属微纳米颗粒的新型功能微针构建

朱夏龙、符瑞煜、孟晨雨、徐敢、陈露、黄志海、储成林

东南大学材料科学与工程学院，江苏省先进金属材料高技术研究重点实验室

常温液态金属材料是近年来异军突起的战略性前沿新材料，在常温下一般呈液态，具有高沸点、强导电导热性和易固液转换等特点，已展现出诸多新奇的理化特性，在生物医学领域也表现出诱人的潜力。其中，镓基液态金属微纳米颗粒材料已被用于癌症治疗、抗菌、生物柔性传感、骨组织及神经修复等众多生

物医学研究。

微针则是一种新型经皮给药系统。近十多年来，微针尤其是可降解微针已被广泛用于药物、基因、蛋白质、RNA 和疫苗的递送研究，也被用于癌症诊疗、糖尿病和免疫治疗等，并取得了良好效果，为微针临床应用提供了可能。但是很多聚合物微针给药系统都存在微针刺入困难和载药量较低的问题，亟待改善。

在本研究中，我们采用阿霉素（DOX），一种常用的肿瘤治疗药物，作为表面活性剂与镓基液态金属相互作用，制备出镓基微纳米颗粒，并将其与透明质酸钠复合，进一步制备了具有高镓基液态金属微纳米颗粒含量的增强型复合微针。具体步骤如下：配置 4.2mg/ml DOX 水溶液，加入 80  $\mu\text{L}$  液态纯镓（Ga）或镓铟共晶合金（EGaIn），采用 600 W 探头超声作用 15 min，反应液颜色由亮红色逐渐变为墨绿色，将该产物液 2000 rpm 离心 10 min，过滤留取上部溶液备用。制备负载微针时，首先量取 5 ml 上述含有 DOX 稳定镓基液态金属微纳米颗粒的溶液，加入 50 mg 低分子量透明质酸钠（SH）混合并搅拌均匀，随后，移取 1.5 ml 混合液浇注到微针模具中，并置于冻干燥机中常温真空减压脱气 3h，以使含有液态金属的微针母液能充满微针模具的针尖部位，然后 -50 $^{\circ}\text{C}$  冻干 4h。这一步骤完成后，铲除模具中微针基底部位中的薄层母液基材，并量取 800  $\mu\text{L}$  的 10 wt% 低分子量透明质酸钠溶液重新浇注于模具中基底层部位。最后，将模具体置于常温（25  $^{\circ}\text{C}$  左右）干燥 24 h，再转入冰箱中 4  $^{\circ}\text{C}$  冷藏 2 h，最终实现微针与模具脱离，构建得到负载常温液态金属微纳米颗粒的新型功能复合微针。

我们通过 SEM、EDS 和 TEM、力学压缩实验、近红外激光光热转换实验等对阿霉素保护的镓基液态金属微纳米颗粒及其负载微针进行了表征测试。结果表明，阿霉素对稳定和减小镓基液态金属微纳米颗粒效果明显，最小可获得几十纳米的镓基液态金属微纳米颗粒。所制得的负载液态金属微纳米颗粒的复合微针抗压性能相较于纯透明质酸钠微针有了成倍提升，微针外观呈现明显的金属光泽，表明具有很高的液态金属微纳米颗粒负载量。此外，复合微针还具有优良的光热效应，经过光热处理后的液态金属颗粒可由球状转变为杆状或米粒状，可极大促进阿霉素的释放。

综上，我们构建的负载常温液态金属微纳米颗粒的新型功能微针可以结合光热效应及药物释放功能，有望用于浅表皮肤肿瘤的治疗。

### 自驱动电调节铜单原子纳米酶的 d 带电子以促进癌症治疗

钟颂婧、李琳琳

中科院北京纳米能源与系统研究所

单原子纳米酶（SAzymes）因其原子级分散的活性位点与天然酶的金属活性中心非常相似，被认为是最有前途的天然酶候选者。然而，对于他们的实际应用来说提高其催化活性仍存在重大挑战。我们应用人体自驱动摩擦电装置施加电刺激，使得单原子铜纳米酶（Cu-NC）的多种酶样活性得到显著提高，在 20 V 电压的电刺激下，Cu-NC 的过氧化物酶（POD）、过氧化氢酶（CAT）、氧化酶（OXD）和谷胱甘肽氧化酶（GSHOx）样活性均得到提高以促进催化自由基的高效生成，最终促进癌细胞氧化损伤和死亡，提高治疗效果。

### 通过三种模式爆发产生 ROS 的普鲁士蓝衍生纳米复合材料与钙过载协同作用增强抗肿瘤治疗

王辰、许文婷、周红梅、胡榜利、梁新强、唐艳萍、宁淑芳、丁鹤、杨飘萍

广西医科大学附属肿瘤医院

钙过载这种新型疗法可导致肿瘤细胞死亡。然而，由于肿瘤细胞内存在强大、复杂和精密的钙通道排泄系统，简单的钙超载无法实现有效的抗肿瘤治疗。因此，我们用聚乙二醇（PEG）供体修饰的磷酸钙（CaP）包覆锰掺杂的中空介孔普鲁士蓝（MMPB）装载葡萄糖氧化酶（GOx），制成了纳米颗粒，称为 GOx@MMPB@CaP-PEG（GMCP）。GMCP 可通过三种模式提高肿瘤内活性氧（ROS）水平，其合理设计可提高肿瘤细胞内钙超载的效率，从而增强其抗癌功效。释放的外源  $\text{Ca}^{2+}$  来自 CaP 涂层，而细胞毒性

ROS 的产生则来自 Fenton/Fenton 类反应和  $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$  和  $\text{Mn}^{2+}/\text{Mn}^{3+}$  循环消耗谷胱甘肽, MMPB 引导的改善缺氧以及 GOx 介导的饥饿疗法的三模式促使 ROS 完美循环爆发生成的羟自由基。由于 MMPB 的光热效应而产生的热量加速了上述反应。此外, 高浓度的 ROS 会导致线粒体受损, 钙离子通道的  $\text{Ca}^{2+}$  外流受到抑制, 从而导致钙过载。细胞内  $\text{Ca}^{2+}$  过多会进一步增加 ROS 水平, 促进肿瘤细胞凋亡, 从而达到出色的抗肿瘤能力。

### 全纳米纤维离电式柔性压力传感器的制备及性能研究

赵晰蒙、杨梦娟、金旭、马佳瑜、张慧杰、郭梦婷、张秀芹、汪滨

北京服装学院

柔性压力传感器广泛应用于电子皮肤和智能可穿戴设备中。因此, 开发出兼具高灵敏度和宽响应范围的柔性压力传感器是必不可少的。在传感器中引入微结构, 是提高传感器电容的有效途径, 可以大幅度提高传感器的灵敏度。然而大多微结构在受压期间明显变形并达到极限, 导致器件工作范围狭窄。本研究提出了一种基于 EDL 电容传感的高灵敏度离电式压力传感器 (NIPS), 在掺杂离子液体的聚丁二酸丁二醇酯对苯二甲酸丁二醇酯 (PBST) 纳米纤维膜基础上制备了一种离电式压力传感器。此外, 通过引入具有模量差异的刚性微球, 采用“刚柔并济”的方式, 显著减小了变形饱和的过程, 进一步提升了传感器的传感性能, 该传感器具有超高灵敏度 ( $546.58 \text{ kPa}^{-1}$ ) 和超宽响应范围 ( $1200 \text{ kPa}$ )。能够快速稳定地监测多种人体运动及生理信号。此外, 三维多孔纳米纤维网络赋予其良好的透气性, 确保了其长期佩戴舒适性。

### 功能性细胞球体的培养与应用

刘红梅

东华大学

自 20 世纪 70 年代以来, 科研工作者们已经认识到了细胞在二维(2D)培养条件下的局限性。因此, 学术界对三维(3D)细胞培养技术的研究兴趣日益增长, 尤其是对于细胞球体的研究。尽管如此, 3D 培养技术因其高昂的成本以及细胞球体在实际应用中所展现的不尽如人意的效果, 限制了其在再生医学、基础科学研究以及药物开发领域的广泛应用。在本研究中, 我们成功制备了具有独特形态结构的无机羟基磷灰石和有机聚乳酸纳米纤维。通过与干细胞共培养, 我们分别开发了可注射型和可植入型细胞球体, 这些新型细胞球体有望显著提升细胞治疗的疗效。

### PEDOT:PSS 基柔性热电纤维材料与器件

刘京<sup>1</sup>、王德平<sup>2</sup>、蒋丰兴<sup>1</sup>

1. 江西科技师范大学

2. 同济大学

近年来柔性电子领域的迅猛发展和集成化微型化的趋势, 为可穿戴能源供给器件提出了更高的要求。随着人们对于可穿戴设备功能的多样化需求, 如何高效、稳定地供给能源成为了研究的热点。热电效应作为一种能够通过温差产生电能的技术, 因其结构简单紧凑在柔性可穿戴器件中的潜在应用而备受关注。本项目立足于当前室温下性能卓越的有机热电材料 PEDOT:PSS, 通过优化一维限域凝胶法结合有效的溶剂置换和极性溶剂后处理制备出了柔性高导电的纤维材料[1]。在此基础上, 我们引入了包括碳纳米管和石墨烯在内的高导电性低维碳材料, 旨在通过复合材料界面处潜在的能量过滤效应实现 Seebeck 系数和电导率的解耦, 以期进一步提高材料的热电性能[2-4]。最后, 我们对基于 PEDOT:PSS 的混合纤维在可穿戴热电转换器件中的潜在应用进行了初步的探究和评估。结果表明, 基于 PEDOT:PSS 的混合纤维在可穿戴热电转换器件中具有潜在应用转化前景, 本项目推动了柔性可穿戴能源器件的进一步发展。

- [1] J. Liu, Y. Jia, Q. Jiang, F. Jiang, C. Li, X. Wang, P. Liu, P. Liu, F. Hu, Y. Du, J. Xu, ACS Appl. Mater. Interfaces 2018, 10, 44033.
- [2] Y. Lin, J. Liu, X. Wang, J. Xu, P. Liu, G. Nie, C. Liu, F. Jiang, Compos. Commun. 2019, 16, 79.
- [3] J. Liu, Z. Zhu, W. Zhou, P. Liu, P. Liu, G. Liu, J. Xu, Q. Jiang, F. Jiang, J. Mater. Sci. 2020, 55, 8376.
- [4] J. Liu, G. Liu, J. Xu, C. Liu, W. Zhou, P. Liu, G. Nie, X. Duan, F. Jiang, ACS Appl. Energy Mater. 2020, 3, 6165.

### 抗静电碳纤维/硅橡胶复合材料的界面强化及其应用研究

刘似玉  
山东大学

本工作通过硅氧结构表面改性抗静电碳纤维强化短切抗静电碳纤维/硅橡胶复合材料的界面性能,改善复合材料在 350°C 极端条件下长时间使用的热稳定性,同时探究了复合材料的抗静电性能、热性能、透波性能等应用性能。一方面,采用偶联剂改性抗静电碳纤维,在纤维表面形成致密的偶联剂层。该方法使得复合材料的拉伸强度和断裂伸长率分别提升 45.32% 和 19.07%。但是该方法中改性层刚性较强,且改性层厚度不易控制,橡胶复合材料力学破坏时,容易在界面层形成缺陷从而加速力学破坏,因此断裂伸长率较低。其次,采用二氧化硅纳米粒子改性抗静电碳纤维,在纤维表面形成纳米球森林。该方法使得改性层厚度可控,显著提高纤维表面的粗糙度,改善基体浸润,使得复合材料的断裂伸长率提升 23.22%。但是该方法难以避免纳米球的团聚并在力学破坏时形成应力集中。另一方面,采用“柔刚”结构改性抗静电碳纤维,在高模量纤维与低模量硅橡胶之间构建“柔刚”结构模量过渡层。该方法使得复合材料的拉伸强度和断裂伸长率分别提升 37.16% 和 27.46%。通过热分析及红外热成像分析得知,硅氧结构界面层的构建显著提高短切抗静电碳纤维/硅橡胶复合材料的导热散热能力,从而减少复合材料的分解,提高复合材料在 350°C 极端条件下长时间使用的热稳定性。通过抗静电性能测试发现,改性之后的复合材料仍能满足抗静电性能的要求。

### 高强高剪切烯碳/芳纶 III 复合纤维的制备及其在壳体构件中的应用研究

张子怡<sup>1</sup>、焦琨<sup>2</sup>、张锦<sup>2</sup>

1. 北京石墨烯研究院
2. 北京大学

杂环芳纶纤维及其复合材料的轻质、高强特性使其成为航空航天、武器装备等国家重大战略需求的不可替代材料。其中,在芳纶纤维缠绕类构件实际应用中,纤维和基体之间常受到剪切作用力,其失效模式主要包括纤维本体结构损伤和纤维-基体脱粘。纤维本体结构损伤主要表现为纤维原纤化和部分皮芯层分离。芳纶纤维具有多层次结构,分子链间以氢键方式相连,其内聚力较弱,表面光滑且呈现惰性。因此,我们提出了同时提升纤维的浸胶丝拉伸性能(6.27 GPa)和界面性能(49.3 MPa)的改进策略。通过引入二维材料-氧化石墨烯优化纤维本征结构,促进纤维结晶取向,增强纤维分子链内聚力,有效防止裂纹扩展,实现高效的应力传递,最终实现了高强高剪切烯碳/杂环芳纶纤维的制备,并进行了工业产出。

### 氢气调控拓扑霍尔效应

刘琳、安红雨  
深圳技术大学

自旋电子学技术通过调控与操纵电子的自旋和磁矩,实现逻辑运算、数据存储、磁性传感等功能,是新一代计算芯片、高速存储芯片以及精密磁传感器的核心技术。相比于传统的微电子器件,基于自旋电子

学技术的自旋电子器件能耗更低、工作速度更快。氢能作为纯绿色无污染的新能源拥有广阔的应用前景，已被世界上许多国家纳入能源储备战略计划。但氢气爆炸极限很低，因此需要高灵敏度氢气检测器进行检测。

本研究发现，Pd/Tm<sub>3</sub>Fe<sub>5</sub>O<sub>12</sub> (TmIG)异质结中的拓扑霍尔效应 (Topological Hall effect, THE)可以通过 Pd 中氢气的吸附/解吸进行可逆控制，并且 THE 电阻率的可调性达到 100%。此外，通过制备 Pd/W/TmIG 三层膜异质结，我们发现即使 W 层厚度只有 1 nm，通入氢气也不会改变 THE。这表明该三层膜异质结中 THE 源自 W/TmIG 界面产生的 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用(DMI)，与界面的净自旋积累多少无关。我们进一步研究发现，在 Pd/Cu/TmIG 异质结中，虽然 Cu 是自旋轨道耦合作用弱的轻金属，但在 Cu/TmIG 界面依然可以产生足够的DMI来诱导出THE。该研究提供了一种方法来精确地操控自旋电子器件中的THE，为探索基于自旋电子器件制备高灵敏度氢气检测器提供了新的思路。【1】Lin Liu, Hongyu An, et al. Reversible manipulation of the topological Hall effect by hydrogen. Phys. Rev. B 108, 024422 (2023)

### 氢气调控 CoPd 单层膜自旋轨道矩及磁化翻转研究

陈泽瀚、安红雨

深圳技术大学

基于自旋电子学的磁性随机存储技术 (MRAM) 因为其具有超快读写速度、低能耗、非易失性、高安全性而备受关注，有望替代传统存储技术。目前已发展到第三代基于自旋轨道矩 (SOT) 的 SOT-MRAM，尚且处于基础研究阶段。

重金属/铁磁体异质结作为 SOT-MRAM 的核心结构，其 SOT 得到了大量研究和报道。电流流经重金属层，由于重金属中自旋轨道耦合作用产生 SOT，并通过注入铁磁层形成有效磁场进而控制铁磁层的磁化方向。最近的研究表明，在缺少重金属层的情况下，铁磁单层膜也可以产生 SOT，并且实现电流驱动磁化翻转。但对于铁磁单层膜 SOT 的研究还只停留在关注其内部结构，外部操控铁磁单层膜 SOT 的研究报道较少。

本研究证明，在具有 Pd 成分梯度的 CoPd 单层膜中，利用 Pd 的氢气吸附特性可以有效调控其 SOT 的产生。同时，氢气的吸附能有效降低 CoPd 单层膜中电流驱动磁化翻转所需的临界电流密度。通过对 CoPd 单层膜吸附氢气产生的晶格应变进行分析，发现 CoPd 单层膜内应变在 SOT 调控中起到关键作用。该研究提供了一种外部调控铁磁单层膜 SOT 的方法，为单层铁磁膜 SOT 器件的应用提供了一种新思路。

### 揭示富 Mn 的 Ni-Mn-Sn 合金的磁性能和马氏体相变：第一性原理计算和实验

章羽、白静、左良

东北大学材料科学与工程学院材料各向异性与织构重点实验室

Ni-Mn-Sn 基合金因其优异的磁控功能行为而备受关注，研究表明其优异的物理性能通常与调制马氏体结构密切相关。然而，现有的理论计算大多集中在富 Mn 贫 Sn 合金系的奥氏体和非调制 NM 马氏体中，而在实验中发现的具有优良的磁热和弹热效应的富 Mn 贫 Ni 和 Sn 合金系的理论计算仍然空白，这严重阻碍了对富 Mn 全系列合金马氏体相变和磁性能深入研究的进行。本文结合第一性原理计算与实验，研究了 Ni<sub>24-x</sub>Mn<sub>18+x</sub>Sn<sub>6-y</sub> (x, y=0, 1, 2) 合金系中奥氏体、六层调制 6M 马氏体和 NM 马氏体的相稳定性和磁性能，以及马氏体相变热/动力学行为。分别得到了奥氏体形成能 (E<sub>form-A</sub>) 与 Mn 含量 (XMn) 之间的关系方程：E<sub>form-A</sub>=507.358XMn-274.126，以及 6M 马氏体形成能 (E<sub>form-6M</sub>) 与 Ni 含量 (XNi) 之间的关系方程：E<sub>form-6M</sub>=-728.484XNi+264.374，并建立了形成能和总磁矩的三元相图。过量的 Mn 会降低 6M 马氏体 (Mag<sub>6M</sub>) 和 NM 马氏体 (Mag<sub>NM</sub>) 的总磁矩，其关系方程如下：Mag<sub>6M</sub>=-15.905XMn+7.902 和 Mag<sub>NM</sub>=-14.781XMn+7.411，而对奥氏体总磁矩的影响则较为复杂。基于马氏体相变的热力学，合金很可能经历 A↔6M↔NM 的相变序列。结合热力学和动力学结果，马氏体相变温度随着 x 的增加而降低，随着 y 的增加而升高。这些结果有望为预测 Ni-Mn-Sn 合金的相稳定性和磁性能提供重要参考。

## 基于羟丙基壳聚糖的注射型多功能抗菌导电水凝胶用于糖尿病慢性伤口治疗的研究

彭淑婷、秦晓飞

遵义医科大学珠海校区

糖尿病是以高血糖为基本生化特征的代谢性疾病。糖尿病患者的皮肤受到创伤之后，由于其伤口部位的缺氧、高糖、缺血及炎症微环境，常常会导致持续性的氧化应激及伤口微环境的免疫反应功能障碍，从而阻碍血管生成并引起周围神经病变。与此同时，M1型（促炎）巨噬细胞吞噬病原体的能力下降，并且难以向M2型（抗炎）转变，这使得炎性M1型巨噬细胞聚集，伤口愈合延迟。此外，以金黄色葡萄球菌为代表的细菌感染导致伤口部位进一步加重慢性炎症反应，进而阻碍血管生成与神经生长，干扰表皮增殖，从而严重妨碍伤口愈合。

本项目基于羟丙基壳聚糖（HCS）和2,3,4-三羟基苯甲醛（TBA）之间的席夫碱反应及氢键作用力，以及三价铁离子和TBA之间的可逆配位的双重交联，同时利用三价铁离子氧化性启动吡咯（Py）在水凝胶网络中的原位聚合，一步法制备出能够快速交联、具有自愈能力的可注射抗菌导电水凝胶（HCS-TBA@Py）。通过流变仪、电化学工作站等验证了该水凝胶优异的理化特性，包括溶胀率、注射性与电敏感性等，证实其在不规则伤口快速填充应变传感器方面的应用潜力。同时，该多功能导电水凝胶能够有效清除活性氧并抑制细菌生长。随后，将该水凝胶与电刺激耦合（HCS-TBA@Py+ES）后，通过RT-qPCR与WB实验验证其能够有效激活缺氧诱导因子-1 $\alpha$ （HIF-1 $\alpha$ ）和c-JUN-AP-1信号通路，避免血管内皮细胞在缺氧微环境中的应激能力受损，上调下游血管内皮生长因子（VEGF）及p-ERK1/2的表达，最终影响级联通路MARK并调控细胞的增殖与迁移。同时，HCS-TBA@Py+ES还能够通过促进NF、GAP43等轴突相关基因和蛋白的表达，并且加强内皮细胞—神经细胞细胞间串扰，进而促进神经生成。更重要的是，HCS-TBA@Py+ES能够上调M1、M2型巨噬细胞标记基因及相关促、抗炎基因，表明其能够有效增强M1型巨噬细胞的吞噬能力，并促使巨噬细胞的M2型极化。最后，通过建立糖尿病大鼠慢性伤口模型，利用HE染色、Masson染色评估伤口部位表皮再生水平，并利用免疫荧光对伤口部位组织中血管生成、神经修复及巨噬细胞极化情况进行验证，明确了多功能导电凝胶（HCS-TBA@Py）在促进糖尿病伤口周围血管生成的同时清除活性氧，抑制伤口处细菌的生长，并且实现巨噬细胞向M2表型的极化以及快速血管生成和神经修复方面的实际应用效果，为全面改善糖尿病慢性创面愈合的研究奠定基础。

## Biomolecule-targeted functional dyes for imaging and therapy

Beidou Feng, Li Zhong, Hua Zhang

Henan Normal University

Mitochondria are the center of energy metabolism and cell death regulation in cells, playing a crucial role in the regulation of cell survival and death. Therefore, by targeting mitochondria and modulating the expression of relevant active substances, triggering mitochondrial dysfunction and thus inducing cell death, it may become an effective strategy for the treatment of cancer. Based on this, this work developed a targeted photo-sensitizing dye PAT-Cy-I for hypoxic tumor treatment that is specific to mtDNA. PAT-Cy-I accumulates in mitochondria through insertion of mtDNA and causes mtDNA destabilisation via PDT, leading to mitochondrial dysfunction and subsequent cell death. UV absorption and circular dichroism spectra show good binding of PAT-Cy-I to mtDNA. Solution and cellular experiments verified that PAT-Cy-I was capable of generating large amounts of ROS as well as inducing mtDNA damage under both hypoxia and normoxia. Tumour therapy experiments in mice showed that PAT-Cy-I was able to generate large amounts of ROS and inhibit tumour growth under specific light exposure. In conclusion, the present work provides a targeted photosensitive dye, which is capable of target binding to mtDNA to achieve in situ induction of mitochondrial dysfunction, and is an effective tool for cancer therapy.

## Regulation of excited state and enhancement of dye function

Yafu Wang  
Henan Normal University

Photosensitive dye is one of the key factors to regulate the efficacy of photodynamic therapy (PDT), the structure design and function strengthening have become the research focus at home and abroad. However, most of the existing photosensitive dyes still have some limitations in tumor cell lethality and efficacy monitoring, which greatly limits the clinical therapeutic efficacy. In view of this, based on the biological characteristics of mitochondrial DNA (mtDNA), which is easy to damage, sensitive, and can indicate the process of apoptosis [1, 2], this work takes mtDNA as the target and constructs a series of mtDNA target photosensitive dyes (DSs) through the molecular excited state regulation strategy. It is expected to improve tumor lethality by rapidly inducing mtDNA damage, and adjust treatment process with accurate feedback based on real-time monitoring of mtDNA damage, so as to maximize therapeutic efficacy. In this work, through a series of optical and biological properties tests, the dye molecule DSs can be highly bound to DNA through small grooves based on a special conjugated structure. At the same time, the molecular conformation changes significantly, which causes changes in the distribution and transfer of electrons within the molecule, triggering obvious fluorescence signals, and realizing specific and highly sensitive monitoring of mtDNA damage. In addition, the introduction of heavy atoms in the dye molecules enables them to induce photodynamic therapy when activated by light and exhibit high tumor cell lethality. Based on the above characteristics, further verified by living tumor model, dye molecules have high tumor cell lethality, and can monitor and feedback their PDT process in real-time to adjust relevant therapeutic parameters, and successfully achieve efficient treatment of living tumors.

### **Targeted peptide-functionalized reduction-responsive polyamide amine as vaccine adjuvants against *Streptococcus pneumoniae* infections**

Hangeri Liang, Xiao-Yan Yang, Sha Li  
Department of Bioengineering, Zunyi Medical University

The iron uptake ABC transporter proteins PiaA and PiuA have been reported as candidate protein antigens for *Streptococcus pneumoniae* vaccines. However, protein vaccines alone suffer from weak immunogenicity and limited level of immune response elicited. Therefore, we designed a reduction-responsive cationic polymer: bisulfide-bonded polyamide amine (PAA) and modified 30 amino acids at the C-terminal end of the peptide-Clostridium perfringens enterotoxin protein (CPE30) at the end of the polymer by an amide reaction, to obtain the cationic polymer PAA-CPE30, which has the function of targeting the antigen-presenting cells (M-cells) in the mucosal tissues. PAA-CPE30 was used as an adjuvant, and the fusion protein PiuA-PiaA was used as an antigen to prepare the *Streptococcus pneumoniae* protein vaccine PAA-CPE30@PiuA-PiaA by electrostatic interactions. The level and type of antigen-specific immune response induced by this vaccine preparation in mice immunised by nasal drops, as well as the immune protective effect against *Streptococcus pneumoniae* in the attacking mice, were further investigated. The results showed that in the presence of the vaccine adjuvant PAA-CPE30, the protein antigen PiuA-PiaA induced stronger antigen-specific humoral and cellular immune responses, and induced stronger resistance to bacterial infection. Mechanistic studies revealed that the vaccine adjuvant PAA-CPE30 prolonged the retention time of the vaccine in the nasal cavity, promoted the uptake efficiency of antigenic proteins by antigen-presenting cells, and mediated the lysosomal escape of antigenic proteins, which may be the mechanisms by which the vaccine adjuvant enhances the immune effect.

基于水溶液硫量子点的可调控氧化反应研究  
赵静楠、赵国峰、芦悦、孟庆伟、彭孝军

大连理工大学

氧化反应是化学工业的基石，然而氧化反应存在危险性大、选择性控制难、环境负担重等问题。因此，构建本质绿色、安全、高效的氧化反应是全球学术界和工业界的追求目标，如何实现分子氧的可控活化及催化剂的结构设计是实现绿色、高效氧化反应的关键。

本研究旨开展基于含硫光敏剂的可调控光催化分子氧氧化，前期实现了二硫化物介导的 C-O、C-C、C-N 选择性构建，在连续流光化学条件下，气液两相光催化反应效率大幅度提高。目前正在开展水溶液硫量子点的光催化分子氧氧化反应研究，系统建立可精细调控的水溶液硫量子点构筑方法，揭示硫量子点光催化俄歇效应与水/氧逐级活化的内在规律，重点发展有机化合物碳氢键和碳碳键可见光催化氧化策略，实现硫量子点催化剂的理论设计、可控制备及精准调控，建立硫量子点组成-结构-性质的关联机制。本项目采用非金属纯元素硫量子点为光催化剂，在水溶液中实现以分子氧为终端氧化剂的高效、高选择性氧化反应，为本质绿色、安全、高效的氧化策略开辟一条新方法。

### 采用相变材料的高散热效率低寄生电容高压碳化硅器件基板底板结构设计

马定坤、郭佳成、陈琪岭、王来利  
西安交通大学

近年来，随着新能源发电工程的广泛建设，电力系统柔性化、智能化的发展方向日益突出，这对作为电能变换装置核心的电力电子器件提出了更高的要求。碳化硅作为一种宽禁带半导体材料，具备着优异的电热特性，基于该材料的电力半导体器件如碳化硅 MOSFET 相较于传统硅基器件具备高压、高频、高工作温度的特点，对于减小电力装备体积，提高装备效率，提升装备可靠性具有重要意义。

然而现有的中压碳化硅器件封装结构通常采用源于硅基半导体器件的键合线封装结构，其核心组件为一块双面覆铜的陶瓷基板以及与之焊接的金属底板结构。这一结构在散热效率以及寄生电容上难以满足碳化硅器件高功率密度，高电压变化率的应用要求。因此需要对这一结构进行优化设计。

本研究提出了一种适用于中压 SiC MOSFET 器件的新型基板-底板结构。结构将非对称 DBC 基板与具有空隙的金属底板相结合，形成一个密封腔，将气液两相流相变材料注入并抽真空密封。相变材料在器件运行时于热端吸热汽化，随后在冷端放热液化，最后利用毛细力回流至热端完成循环，实现相变均热。该结构设计显著提高了器件基板-底板的均热效果，提高了散热效率，同时有效降低了共模电容。此外，在 DBC 基板上应用低 CTE 聚酰亚胺薄膜，有效提高器件绝缘性能，使其耐压超过 10kV。仿真和实验结果有力地验证了该结构优异的电热性能。在相同的 DBC 上铜走线下，与传统的基板-底板结构相比，该结构在单芯片加热功率为 30W 时，共模电容降低了 56.41%，最大结温降低了 13 度。

### 单极高频方波电压下不同频率和脉宽对硅凝胶电树枝的影响

闫飞、毕蓝天、丁培洋、王来利  
西安交通大学

硅凝胶作为封装材料，与半导体器件的高电压电极和 DBC（覆铜陶瓷基板）接触。随着 SiC 功率模块电压等级从 Si-IGBT 的 6.5kV 增加到 10kV~25kV，可能导致硅凝胶中电树枝放电的起始。以往的研究集中在交流正弦波和低频单极电压下的电树枝本文研究更接近硅凝胶真实工作环境的高频单极方波电压下硅凝胶的电树枝放电特性。

本文进行施加电压 10kV 到 18kV，频率 50Hz 到 10kHz，脉冲宽度为 10%到 90%，观察电压幅度，频率以及脉冲宽度对电树枝形状和电树枝的传播的影响。此外，本文研究了 PWM 电压频率对电气树发展的影响，指出频率和单位时间内的电压脉冲数量，以及局部放电和空间电荷的积累的关系。

因为硅凝胶的软特性使其具有一定的自愈能力，但重复的局部放电会导致不可逆的损伤，本文还深入

研究了硅凝胶的软材料特性，以及在单极方波电压下对空间电荷的影响。

最后，研究得出结论，随着功率模块的电压等级增加到 10kV~25kV，DBC 上金属边缘的尖锐角落可能诱发电树枝，威胁功率模块的可靠性。研究了 PWM 电压的电压幅度、频率和占空比对硅凝胶中电树枝特性的影响，为理解电压波形对硅凝胶中电气树的影响提供了基础，为深入研究高频方波电压下硅凝胶中电树枝的老化过程和机制提供了基础。

### 低 CTE 聚酰亚胺材料助力高压碳化硅功率器件封装

袁天舒、贾立新、马良俊、毕蓝天、马定坤、李磊、孙培元、王来利  
西安交通大学

近年来，随着碳化硅器件的发展，顺应碳化硅高压、高频特性的高压碳化硅 MOSFET 器件被制造出来。国外已经有 Cree 公司的 6.5kV30A 碳化硅 MOSFET、10kV20A 碳化硅 MOSFET 问世；相比而言，国内由中电科 55 研究所研制的 6.5kV-15kV 碳化硅 MOSFET 也在某些参数到达国际领先水平。然而，高压碳化硅 MOSFET 的封装方案仍然沿用传统封装方案，这会引起严重的绝缘问题。即使增大绝缘距离，也会在使用电压范围内有高于 10pC 的局部放电产生。

这是由于除了基板上的“三结合点（或翻译为三相点）”之外，还在芯片的终端区域附近有一个高场强区域。基板三相点的场强可以通过基板形貌设计、调制基板电容分布来调节，然而芯片终端区域的场强却无法采用以上方式消解。因此，需采用特殊绝缘处理。

本课题组提出一种基于 BPDA(3,3',4,4'-联苯四甲酸二酐)和 PPD（对苯二胺）为单体合成的聚酰亚胺族绝缘涂覆材料，这种材料的 CTE 在 3-5ppm 之间，与碳化硅材料类似。因此，将这类材料涂覆在芯片终端区域，可以形成保护区域，保护灌封硅凝胶不受高电场强度的侵袭。

通过温度循环实验比较自制涂覆材料与市售聚酰亚胺材料，发现自制材料由于其 CTE 更接近碳化硅，在长期温度冲击下无明显脱落；市售聚酰亚胺材料形成的膜则出现明显脱落现象。

通过局部放电实验证明，针对 10kV 碳化硅功率模块，采用自制材料涂覆的模块可以实现在 8.5kV 时无局放；而不采用涂覆材料的模块，在 8.5kV 时，十分钟内超过 20pC 的局放脉冲数量高于 100，超过 10pC 的局放脉冲数量高于 1000，认为已经产生较大局放。因此，自制涂料涂覆芯片终端的方法对于高压碳化硅功率器件的封装是有效的。

### 具有高密度导热路径的 3D BN 网络的构建及其增强导热性能的研究

黄延辉、刘照伟、汤玉斐  
西安理工大学

高效的散热是进一步提高大功率电子封装器件集成度的关键，寻求高性能的电子元器件热管理材料迫在眉睫。BN 具有高导热系数和良好的绝缘性能，是提高热管理材料导热系数的理想填料。本工作结合前驱体纤维原位转化与定向冷冻干燥技术，一步合成了具有纤维壁的垂直取向 BN 三维骨架，并进一步构建具有高密度导热通路的三维 BN 网络作为导热骨架，以提高聚合物材料的导热系数。空气煅烧过程中产生的熔融的 B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 使纤维相互粘结，从而得到垂直取向、相互连通的 BN 纤维骨架。得益于纤维壁短程快速传热和低界面热阻的特性，所获得的垂直取向 BN 骨架表现出明显的结构优势，在填充量为 25.7 wt% 时制备的复合材料单向热导率高达 1.372 W/(m·K)，单位体积增强效率高达 32.6%。而高密度导热通路比定向导热通路具有更强的聚合物增强导热系数，低 BN 填充含量（10%wt）下在面间和面内的导热系数分别提高了 250 % 和 286.5 %。该工作为制备具有优异热管理性能的电子封装与集成电路热管理材料提供了新思路。

### 高效稳定无机锡基钙钛矿太阳能电池

于海寰、王鸣魁  
华中科技大学

无机锡基钙钛矿因其低毒环保特性和合适的带隙而在光电应用领域受到广泛关注。然而，由于前驱体中二价锡的高路易斯酸性，使得低温溶液法制备锡基钙钛矿薄膜面临巨大挑战。在此，我们提出贗卤素阴离子中间相工程改善无机锡基钙钛矿层结晶过程。通过引入贗卤素阴离子形成中间相，明显减缓了锡基钙钛矿的结晶速率，从而获得了具有微米级大晶粒形貌的高质量钙钛矿薄膜。并且贗卤素阴离子会进一步合金化进入钙钛矿晶格，通过与二价锡离子之间的相互作用进一步提高二价锡的抗氧化性。基于此策略制造的反式平板结构的太阳能电池在 AM 1.5 太阳辐照 ( $100 \text{ mW cm}^{-2}$ ) 条件下，获得认证效率超过 13%，在已报道的无机锡基钙钛矿太阳能电池中名列前茅。

### LED 硼酸盐蓝青色荧光粉的制备及性能优化研究

张文博

兰州理工大学

随着生活水平的不断提高，人们对照明的品质要求越来越高，全光谱照明已成为世界范围内“高质量、健康绿色照明”的新趋势，而实现全光谱照明关键是填补位于 460-520 nm 区间的青光的缺失。通过填补青色间隙来提高显色指数相关色温等参数，从而满足光源具有与自然光接近的连续性和高显色性。1-1-1-3 型硼酸盐材料由于合成温度低，对紫外具有较强的吸收而受到广泛关注，为此选用  $\text{NaMgBO}_3:\text{Ce}^{3+}$  荧光粉作为研究对象，通过缺陷控制和第二相复合的方法对其发光效果进行优化，因基质具有特殊的结构在掺杂了三价离子后导致电荷不平衡，伴随各种复杂的缺陷出现，影响材料的性能表现。而这些缺陷可能对发光材料带来正反两方面的影响：一方面造成晶体场改变、结构的不稳定或者难以制备，另一方面也可能起到能量传递的途径，进而促进发光。事实上，共掺离子受限于基质格位和掺杂离子种类的影响，可选择的方案有限，也限制了改性的效果。因此，进一步通过复合第二相荧光粉来改善原荧光粉的性能。这种复合不仅可以作为生长模板对原荧光粉的形貌和结晶性能进行改善，而且不受原基质对于掺杂离子的限制，有望实现能量传递从而提高发光效果。通过选取优异的基质，对其本身进行优化，既减少了其他元素的影响，同时起到了优化性能的效果，这对于实现全光谱照明提供可行的指导意义。

### Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub>T<sub>x</sub>-Cs<sub>2</sub>SnI<sub>6</sub> 复合膜的制备及其光电性能研究

吴乔越

合肥工业大学

以  $\text{CsSnI}_3$  为代表的全无机锡基钙钛矿材料被认为是有机-无机杂化卤化铅钙钛矿材料最有潜力的替代品。但是， $\text{CsSnI}_3$  因具有  $\text{Sn}^{2+}$  而展现出较差的空气稳定性。同属全无机锡基材料的  $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$ ，则因其 +4 价 Sn 和更短的 Sn-I 键而具有比  $\text{CsSnI}_3$  更优异的空气稳定性，从而受到研究者的广泛关注。本工作以二维材料  $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$  为添加剂，通过喷涂法制备了  $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x\text{-Cs}_2\text{SnI}_6$  复合膜，并探讨了不同  $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$  添加量对复合膜光电性能的影响规律。研究表明， $\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x\text{-Cs}_2\text{SnI}_6$  复合膜不仅表现出比  $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$  膜高 4.3 倍的光电流密度，而且具有更低的载流子复合率，从而具有更高的光电转换效率。

### 基于 BiFeO<sub>3</sub>/XTiO<sub>3</sub>(Sr、Zn、Pb)多层膜的高灵敏度自供电柔性光电探测器

李泽

内蒙古工业大学材料科学与工程学院

铁电基光电探测器因其合适的带隙和不受限制的光电压而备受关注。然而，它们较低的光电流、响应度和探测率仍然是巨大的挑战。本文中制备了  $\text{BiFeO}_3/\text{XTiO}_3$  ( $X=\text{Sr, Zn, Pb}$ ) 多层薄膜，以实现自供电的柔性紫外-可见光光电探测器。该自供电光电探测器利用紫外吸收层  $\text{XTiO}_3$ 、 $\text{BiFeO}_3$  中的强内建电场以及异质结电场，实现了对紫外-可见光的快速和灵敏的光电探测。通过测试  $J$ - $V$  和  $J$ - $t$  曲线来确定紫外-可见光照射下的光伏效应，其中零偏压下光电流密度的上升和下降时间接近 20 ms，并表现出优异的疲劳特性。此外，

零偏压时  $\text{BiFeO}_3/\text{ZnTiO}_3$  薄膜分别在 365 和 500 nm 光照下获得了良好的光探测响应度(7.4, 1.3 mA/W)和探测率( $7.5 \times 10^{11}$ ,  $3 \times 10^{10}$  Jones)。最后, 验证了  $\text{BiFeO}_3/\text{XTiO}_3$  多层膜在柔性衬底上的光电探测性能。本工作为基于铁电自供电紫外-可见光探测器的应用奠定了基础。

### 构型熵增电催化析氢材料

何洪波、蒋建宏、叶丽娟、邓斌  
湘南学院

电解水制氢技术能将波动性可再生电能转换成绿色氢能, 是可持续清洁能源研究的重要方向之一。针对目前析氢电极材料的过电势高、反应能耗大和规模制备难等问题, 开发大电流密度高效析氢电极材料尤为关键。构型熵变可以优化催化位点的空间结构和电子性质, 对催化性能具有积极的调控作用。通过相变诱导掺杂和氧化刻蚀等策略设计系列构型熵增过渡金属化合物(钴基/镍基)析氢电极材料, 基于构型熵增调控催化位点微环境, 实现电极材料在大电流密度下的长效电催化析氢。结合实验表征和理论计算, 解析构型熵增对析氢反应中的扩散传质、电荷传递和催化位点的本征活性的积极作用, 为构型熵增过渡金属基电极材料的设计及其在大电流密度析氢应用提供理论和实验参考价值。

### 格子玻尔兹曼方法模拟六方相-正交相组织转变

吴寒、孙东科、韩青有、朱鸣芳  
东南大学

大多数先进工程材料是非均质的, 广泛应用于各类高性能合金零部件的研发设计中。其取向域的形状、取向、空间排列和相对数量在决定材料的物理和机械性能方面起着重要作用, 因此关注结构相变对于控制多畴多相组织的性能具有至关重要的意义。

本文根据格子玻尔兹曼方法和相场的基本原理, 提出了一种利用格子玻尔兹曼方法模拟六方相到正方相转变的建模方案, 该模型充分考虑了弹性应变能对固态组织演化的影响。采用单松弛格子玻尔兹曼模型对微观组织的演变进行刻画, 并利用守恒非局部 Allen-Cahn 方程验证了模型的准确性。基于朗道自由能多项式描述系统的热力学, 并构建相应的自由能函数, 采用由无应力转变应变张量和序参量构造的函数来刻画多相混合物的弹性能, 并通过快速傅里叶变换在倒空间中对序参量进行计算, 提高了模型整体的计算效率。研究了系统中体自由能、界面能和弹性应变能三种能量的分配形式对于单、多变体系统生长形貌的影响机制及变体间相互作用的影响规律。

在三变体系统中, 六方到正交相的转变很容易完成, 与单变体和双变体系统不同。整个转变过程大致分为两个阶段: 第一阶段涉及正交相的形核与生长, 每个正交相沿取向面形成薄板状的微观结构; 第二阶段是畴粗化过程, 在这一过程中, 不同的取向畴相互影响、彼此交织, 从而形成了许多独特的组合模式。结果表明以无应力转变应变为特征的弹性应变能是决定结构作用域形状、取向和排列的重要因素。随着时间的推移, 晶粒将在尺寸和形态上发生显著变化, 以适应演化过程中的各种外部条件和内部约束。随着弹性应变能的增加, 畴结构表现出更高的各向异性, 并在一定范围内保持显著的相似性。随着弹性应变能的进一步增加, 变体中会出现更多的反相畴结构, 从而增加了三种变体之间相互作用产生复杂组织的可能性。本文可为求解弹性应变能作用下多相多畴结构组织转变过程提供有效的解决方案, 为深入研究固态相变中组织演化提供新的思路。

### Ti-1023 合金变形过程中马氏体结构演化及其与固溶温度的关系

章嘉敏、吴小文、王一君、张欣蔚、赖敏杰、李金山  
西北工业大学

亚稳  $\beta$  钛合金在航空航天和生物医学领域有广泛的应用。当亚稳  $\beta$  钛合金中  $\beta$  相稳定性较低时, 其在

变形过程中可以产生除位错滑移之外的其他变形机制，如孪生、应力诱发马氏体相变（SIMT）和马氏体重取向（MR）等。其中，应力诱发马氏体（SIM）在变形过程中会继续发生演化，这可能影响其与位错的相互作用，从而影响合金的力学性能。为了系统了解亚稳  $\beta$  钛合金中马氏体在变形过程中的演化规律，本工作借助原位实验手段研究了亚稳  $\beta$  型 Ti-10V-2Fe-3Al 合金变形过程中马氏体结构的演化及其与固溶温度的关系。经 760 °C 固溶处理后，该合金的微观组织由等轴  $\beta$  晶粒和初生  $\alpha$  颗粒组成，而将固溶温度提高到 780 °C 对等轴  $\beta$  晶粒尺寸的影响很小（4.1~4.7  $\mu\text{m}$ ），但会显著降低  $\alpha$  相体积分数。继续提高固溶温度至 800 和 820 °C 分别会使  $\alpha$  颗粒变得极少和完全不存在，此时  $\beta$  晶粒尺寸分别增大到 109.1 和 151.3  $\mu\text{m}$ 。另外，在 770 °C 或更高温度固溶处理的试样中存在热诱发马氏体（TIM） $\alpha''$  板条，且所有经 760~820 °C 温度范围固溶处理后的试样在拉伸变形过程中都出现了双屈服现象。对于经 760~780 °C 固溶处理的试样，该现象主要是由 SIMT 过程引起的，而对于经 800 和 820 °C 固溶处理的试样，则主要是由 MR 过程引起的。值得注意的是，SIMT/MR 过程的激发应力随固溶温度的升高而增大。在早期变形阶段，TIM  $\alpha''$  板条首先经历 MR 过程，转变为有利的  $\alpha''$  变体，而 SIMT 过程可以同时发生。随着变形进行， $\alpha''$  相通过变形孪晶不断改变取向，在不断变化的应力条件下转变为有利的  $\alpha''$  变体。

### 任意基准合金凝固无量纲相场模型的建立

唐雨晨、张昂  
重庆大学

The relationship between available phase-field models is not clear due to inconsistency of dimensionless benchmarks. A general form of the phase-field model for binary alloy solidification is derived using arbitrary benchmarks including concentration and temperature. Different forms of the phase-field equations are obtained by substituting specific benchmarks in this general model. The effect of the benchmarks on characteristic parameters, including capillary length and relaxation time, is discussed, and a reasonable range of benchmarks is determined by evaluating both computing performance and numerical accuracy. The dimensionless phase-field equations with arbitrary benchmarks are validated by simulating the growth of two kinds of typical alloys including four-primary-branch (e.g., Fe, Al, and Cu) and six-primary-branch (e.g., Mg, Zn, and  $\alpha$ -Ti) patterns in both 2D and 3D cases. The proposed model establishes the connection between models with different dimension benchmarks, which provides guidance for further improvement and application of the phase-field models.

### 过冷 Ni75Cu25 合金的组织取向演化规律研究

屈佳润  
西北工业大学

过冷熔体快速凝固的晶粒细化机制即使经过了 60 年的研究，仍然是一个悬而未决的问题。本文从实验和模拟两个方面研究过冷 Ni75Cu25 合金的晶粒细化机制。借助 EBSD 表征分析凝固组织在小过冷和大过冷下的自发晶粒细化现象，并利用分子动力学模拟从微观原子尺度进一步对其凝固组织晶粒细化行为进行分析与验证。最终通过非平衡快速凝固实验发现 Ni75Cu25 合金在小过冷下细化晶粒取向分散化，大过冷时晶粒细化取向分裂化，而通过 MD 对合金进行拉伸变形后发现，变形导致取向分裂现象出现，即使在微小变形下也存在该现象，且发生分裂的原子数量随应变程度的增加而不断增加，分裂原子具有稳定的结构，这种特殊结构是唯一且确定的。

### 过冷 Ni-Cu 合金界面动力学的分子动力学模拟研究

崔德旭  
西北工业大学

对固/液界面迁移的动力学及组织形成过程研究的深入程度直接决定或影响着非平衡凝固枝晶生长理论、先进凝固技术与亚稳新材料制备等的发展水平。受制于实验手段，固/液界面迁移动力学及组织形成过程的原子级实时观测的仍然是材料科学领域的一个重大挑战。本研究以 Ni-Cu 模型合金为例，借助分子动力学模拟技术对合金过冷凝固过程的固/液界面迁移动力学过程及后续组织形成过程开展了原子尺度分析。采用定成分合金建模策略解决了传统分子动力学模拟凝固过程与实际实验不匹配的问题，明确了固/液界面迁移速度及界面成分分布随过冷度的变化规律，获得了无任何参数估计的固/液界面原子扩散速度计算方法。

### 模拟枝晶生长和运动的四元数各向异性格子玻尔兹曼模型

吴雅芳<sup>1</sup>、孙东科<sup>1</sup>、陈双林<sup>2</sup>、韩青有<sup>1</sup>

1. 东南大学

2. CompuTherm LLC

枝晶生长是凝固中普遍存在的现象，复杂的输运过程如溶质扩散、熔体对流、固相运动等在凝固组织的形成中起着重要作用，影响乃至决定了最终成形件的宏观性能。本文从格子玻尔兹曼(Lattice Boltzmann, LB)方法和相场(Phase Field, PF)方法出发，构建了用于模拟二元合金枝晶生长与运动的耦合模型。该模型利用各向异性 LB 方法和多松弛格式分别描述枝晶生长和熔体流动，采用对流扩散方程描述熔体中的溶质输运。本模型引入单位四元数处理依赖于局部晶体取向的各向异性，实现 LB 方法的曲面边界无滑移边界条件，采用满足伽利略不变性的动量交换法计算运动枝晶所受的作用力和力矩，实现了运动枝晶的位置更新。通过模拟单个圆形颗粒下落和两个圆形颗粒的 DKT(drafting, kissing and tumbling)现象，验证了模型的准确性。模拟研究了不同初始择优取向条件下 Al-4.0 wt%Cu 合金平面晶到柱状晶的竞争生长和形貌演化过程。结果表明，择优取向对平面晶向柱状枝晶的转变过程有显著影响。随着取向角增大，枝晶越晚进入竞争生长阶段。模拟研究了不同重力加速度条件下枝晶的生长和运动过程。结果表明，熔体流动影响溶质偏析，进而导致枝晶形貌的不对称，自由枝晶的生长速率随重力加速度的增大而增大。本模型能够有效的描述二元合金凝固过程中的熔体对流、溶质扩散、枝晶生长和运动行为，可用于研究溶质偏析、枝晶间相互作用对枝晶生长和运动过程的影响规律。

### 光固化 3D 打印高性能聚氨酯弹性体

杨星星<sup>1</sup>、王晓龙<sup>1,2</sup>

1. 石河子大学

2. 兰州化学物理研究所

3D 打印的聚氨酯弹性体功能部件已在许多领域具有重要应用，但在高强度、弹性和生物相容性方面仍面临根本挑战。在这里，高性能聚氨酯弹性体是基于氢键（氨基甲酸酯和脲基甲酸酯基团）和共价键（丙烯酸酯基团）的双交联网络实现的。具体来说，利用聚（氨基甲酸酯-脲）丙烯酸酯树脂的光固化 3D 打印，引入氨基甲酸酯和脲基甲酸酯基团形成多个氢键来实现机械性能的提高。在这种情况下，氢键有助于外部机械刺激的能量耗散，而共价交联网络在拉伸（压缩）过程中赋予稳定性和柔韧性，因此，3D 打印的弹性体表现出令人满意的机械性能：拉伸强度为  $29.3 \pm 1.1$  MPa，断裂应变为  $754.6 \pm 37\%$ 、韧性  $57.9 \pm 4.2$  MJ/m<sup>3</sup>、断裂能为  $22.9 \pm 4.2$  kJ/m<sup>2</sup>。这种策略可以轻松制造具有弹性的复杂晶格和超材料结构。此外，所提出的弹性体还表现出良好的生物相容性和血液相容性。事实证明，可以使用聚（氨基甲酸酯-脲）丙烯酸酯树脂轻松构建植入式血管支架，揭示了其在工程和生物医学应用方面的巨大潜力。

### 电子束粉末床熔融工艺制备的含铜钛合金在模拟体液中腐蚀行为的各向异性

蔡乐禹、吴宏

中南大学

设计具有强形核能力的钛合金成分,是促进柱状晶向等轴晶转变,解决增材制造的非平衡凝固过程中柱状晶外延生长问题的有效途径。通过原位合金化引入具有高生长限制因子的铜元素,制备所得钛合金晶粒显著细化,从而具有良好的力学性能。此外,含铜钛合金具有促成骨与抗菌的生物学特性,有望能够替代目前最常用的生物医用材料 Ti-6Al-4V 合金。本研究对电子束粉末床熔融(EB-PBF)工艺制备的 Ti-5 wt.% Cu 合金在模拟体液中不同平面(上表面与侧面)的腐蚀行为进行了分析。电化学测试结果表明,与侧面相比,上表面表现出更高的开路电位值、更低的腐蚀电流密度和更高的极化电阻,即具有更优异的耐腐蚀性。采用 SEM、EBSD、STEM 等手段对其微观组织和纳米尺度 Cu 的偏聚进行了表征,由于热影响区 Ti<sub>2</sub>Cu 的大量析出,铜元素存在宏观尺度的偏析。增材制造独特的热历史使得试样侧面呈现明显的微溶池形貌。上表面的平均晶粒尺寸大于侧面的平均晶粒尺寸且呈现不均匀的晶粒尺寸分布。上表面具有更低的小角度晶界分数、更小的晶界密度和更高的织构强度。分析表明,EB-PBF Ti-5 wt.% Cu 合金腐蚀行为各向异性与元素宏观偏析、晶粒尺寸分布、晶粒取向等显微组织差异有关。

### Post-heat treatment of laser powder bed fusion fabricated Al-La-Mg-Mn alloy: on intermetallic morphology control and strength-ductility balance

Xinkui Zhang, Liejun Li, Peng Zhengwu  
south china university of technology

In this study, a newly developed Al-La-Mg-Mn alloy was subjected to solution heat treatment for the first time. During the solution heat treatment at 500°C, the continuous network Al<sub>11</sub>La<sub>3</sub> intermetallics were transformed into a discontinuous granular form. Ultrafine intermetallics (~0.20 μm) were achieved via multi-point spheroidization with the aid of endogenous nanoprecipitates. Of note, the intragranular intermetallics were inert to coarsening, while the intergranular intermetallics grew gradually to ~0.58 μm within 6 h. Compared to the as-printed alloy (UTS ~588 MPa, Elongation ~6.4%), the solution-treated alloy at 500°C for 1 h (UTS ~477 MPa, Elongation ~14.3%) demonstrated a remarkable improvement in ductility, with a 123% increase, despite a modest decrease of 19% in strength, thereby balancing the strength-ductility. The limited decline in strength is primarily attributed to the high-content solute Mg atoms and thermally stable intragranular intermetallics. Interestingly, the mechanical properties were independent of the holding times at 500°C, despite the coarsening of intergranular intermetallics. This is mainly due to the optimization of intermetallics' scale distribution, which tailors and equalizes the stress distribution between the grain boundary and interior, as well as between the melt pool boundary and interior during deformation. These findings provide the first insight into the effect of post-heat treatment on the intermetallic evolution and mechanical properties of LPBF Al-(La, Ce) alloys.

### 直接能量沉积 Mo 添加下 Ti6Al4V 合金的显微组织形成及断裂韧性提升

叶梓萌<sup>1</sup>、余泽镨<sup>1</sup>、夏超<sup>1</sup>、张凤英<sup>1</sup>、谭华<sup>2</sup>

1. 长安大学
2. 西北工业大学

面向增材制造复杂热历史下 Ti64 合金的力学性能提升,研究了 Mo (0, 1, 2, 4 wt.%)添加对直接能量沉积(DED)Ti64 合金显微组织和力学性能的影响。Ti64-1Mo 合金的 α-板条显著细化(平均宽度从~1.12 μm 减小到~0.39 μm), α-板条的变异占优减弱, α 相体积分异常增大,合金的强度塑性得到同步提升。通过设计激光停光(LS)策略保留 DED 过程中形成的亚稳相,阐明了细化显微组织形成及力学性能提升背后的机制。此外,通过两种工艺策略(高线能量密度(HE)和低线能量密度(LE))获得了 Ti64-1Mo 合金不同类型的显微组织:相对于 LE 样品,HE 样品具有更粗的晶界 α(αGB)、更大的 α 束域和更粗的 α 板条。HE 样品表现出优异的断裂韧性,为 114.0 MPa·m<sup>1/2</sup>。通过分析裂纹扩展路径,HE 样品中粗 αGB 和大 α 束域的叠加效应引起的相当大的角度偏转在阻碍裂纹扩展中起着至关重要的作用。这种显微组织增韧机制可以作为未来涉

及钛合金断裂韧性提高研究的参考，为实现增材制造钛合金工程应用奠定理论基础。

### 激光粉末床熔融制备钼改性 Ti-6Al-4V 合金的强塑性平衡

郭焱、刘英航、宋哲、朱高明、曾小勤、王乐耘

上海交通大学

高强度和低延展性的特性成为增材制造 (AM) 钛合金开发的重大挑战。为了解决强塑性之间的矛盾，本研究通过激光粉末床熔融 (LPBF) 制备了 Ti6Al4V-xMo ( $x=0, 1, 3, 5$  wt.%) 合金，以探索 Mo 含量对晶粒组织、组成相、变形行为和力学性能的影响。结果表明，LPBF Ti64-3Mo 合金实现了最佳的强度-延展性平衡，这主要归因于 Mo 在晶粒细化和组成相中的作用。具体而言，未熔化的钼颗粒是晶粒细化的有效形核位点，而溶解的钼促进了  $\beta$  相和  $\alpha''$  相的形成。原位同步加速器 X 射线衍射和透射电子显微镜表明， $\beta$  相优先发生变形，并且在塑性变形过程中发生  $\beta \rightarrow \alpha''$  相转变诱导塑性提升。当应力集中在  $\alpha''$  时， $\alpha''$  孪晶的形成和界面处  $\alpha'$  位错的激活协调了  $\alpha'/\alpha''$  界面的应变分布。此外，Mo 促进了  $\alpha'$  中多系滑移模式和孪晶的激活，进一步提高了延展性。本研究为设计 LPBF 钛合金提供了新见解，该合金通过成分修饰来调整组成相和显微组织，无需热处理即可实现理想的强度-延展性平衡。

### 核电用 3D 打印 FeMnNiCrAl<sub>x</sub> 系高熵合金耐蚀性的研究

陈梦瑶<sup>1</sup>、钟巍华<sup>1</sup>、李伸<sup>2</sup>、高俊宣<sup>1</sup>、彭德全<sup>1</sup>、皮立新<sup>1</sup>、杨万欢<sup>1</sup>

1. 中国原子能科学研究院

2. 南昌大学

核电压水堆一回路水环境对结构材料的耐蚀性能提出了更高的要求。近年来，多主元的 FeMnNiCr 系高熵合金相比于传统合金，展现出优异的性能。本研究采用增材制造选区激光融化 (SLM) 方法制备了 FeMnNiCrAl<sub>x</sub> ( $x=0, 0.5, 1$ ) 系高熵合金块体材料，研究了 Al 含量对 FeMnNiCr 高熵合金微观组织及耐蚀性的影响机制。结果表明，获得的增材制造高熵合金材料具有较高的致密度，均达到 97% 以上。当打印工艺为：功率 100 w，速度 1000 mm/s，间距 0.07mm，层厚 0.03 mm 时，FeMnNiCrAl 的致密度最高，达到了 99.37%。电化学结果表明，3D 打印 FeMnNiCrAl<sub>x</sub> 系高熵合金耐蚀性顺序为 FeMnNiCrAl > FeMnNiCr > FeMnNiCrAl<sub>0.5</sub>。该研究可为堆用增材制造高熵合金的成分设计和腐蚀性能相关研究提供理论支撑与数据支持。

### 增材制造铝-稀土合金微观组织演变的实验研究与理论模拟

王一浩

上海交通大学

摘要：共晶体系合金因其良好的打印性及精细的双相网络被广泛用于金属材料增材制造。铝-稀土共晶合金体系，通常具有较低的扩散系数、半共格的界面特征及良好的热稳定性，成为发展新型增材制造铝合金的优秀候选材料。然而，作为非传统的共晶系统，其快速凝固组织需要详细的研究，以加快其开发迭代。本研究以 Al-La 二元共晶体系为研究对象，通过单道激光重熔实验来评估成分-激光增材制造工艺-凝固特征参数-微观组织之间的映射关系。基于相生长界面温度和稳定性分析，以实验结果为输入值和/或修正量，解析确定了共生耦合区的范围。在此过程中，通过耦合枝晶和共晶生长模型，提出了一种新的离异共晶形成准则。最终，这些凝固特征参数范围与微观组织演变区间可汇总为微观组织选择图，以量化反映微观组织与工艺参数的联系。本研究将为增材制造中铝合金的组分设计和工艺参数优化提供理论指导。本文主要结论为：

(1) 由于熔池内存在正的温度梯度，生长行为可以用定向凝固模型来描述。考虑到铝-稀土合金体系亚

稳相图的非线性特征，通过先假定界面温度，然后求解生长方程，以实现枝晶/共晶生长模型的精确求解。相较于传统的线性相图模型，该方法实现了更精确地计算成分过冷度及相图参数，计算结果与实验结果表现出良好的对应关系。

(2) 共晶和过共晶组分的组织分别以 0.002m/s 和 0.011m/s 的生长速度由共晶向亚共晶演化。对于亚共晶组织，熔池底部的胞状结构由温度梯度和溶质浓度决定，较高的温度梯度和较低的溶质浓度有助于其形成。

(3) 对于三维连续的共晶网络，共晶结构的形态可以分为层状和离异两种：(I) 在观察范围内，共晶片层间距随生长速度的上升而降低。(II) 离异共晶的形成与枝晶间距和共晶的片层间距有关。通过耦合枝晶生长和共晶生长模型，提出了一种新的离异共晶形成准则。该准则认为当枝晶间距等于两倍片层间距时，由于较低的形核势垒，剩余液体中的共晶 Al 倾向于在枝晶上生长，形成离异共晶。

(4) 基于上述模型准则，构建了成分 (C)、生长速度 (V) 及温度梯度 (G) 空间的微观结构选择图。此图可以定量预测不同打印参数和组分下熔池内部的微观组织及其转变点，为成分和工艺参数选择提供基本参考，从而对增材制造铝-稀土体系的快速开发和迭代具有重要意义。

### WC-12Co 球形粉体的制备及其 LPBF 成形性能研究

申巧云<sup>1,2</sup>、郝振华<sup>1,2</sup>、郭杉<sup>1,2</sup>、马如龙<sup>1,2</sup>、王培<sup>3</sup>、舒永春<sup>1,2</sup>、何季麟<sup>1,2</sup>

1. 郑州大学 材料科学与工程学院
2. 中原关键金属实验室
3. 河南工业大学

针对当前激光粉末床熔融 (LPBF) 制备硬质合金缺乏高质量球形复合粉末的问题，本研究采用射频等离子球化的方法制备了致密球形 WC-Co 粉末。球形 WC-Co 粉末由 WC、Co、W<sub>2</sub>C、C 和 Co<sub>3</sub>W<sub>3</sub>C 组成，钴含量随着等离子体功率的增加和送粉速率的降低而减小。粉末的平均粒径随等离子体功率的增加而先减小后增大，随送粉速率的增加而增加。球形 WC-12Co 粉末中存在黑白两种典型颗粒，且粉末的流动性和松装密度与黑白颗粒的比例呈正相关。通过优化球化工艺参数，得到了流动性为 9.23 s/50g，松装密度为 6.98 g/cm<sup>3</sup>，粒径分布为 15-45 μm 的 WC-Co 粉末。在其基础上，以造粒 WC-Co 粉为对比，对球形 WC-Co 粉末的 LPBF 成形性能进行验证。研究表明，相同工艺参数下，球形 WC-Co 粉末制备的打印件的孔隙数量更少且尺寸更小，因而具有更高的致密度。此外，由球形 WC-Co 粉末所制备的打印件表面呈现粗细晶粒交替分布的微观结构，且 WC 晶粒的平均尺寸小于以造粒粉为原料的打印件，其摩擦系数和显微硬度分别为 0.401 和 1630 HV<sub>0.2</sub> 同样明显优于造粒粉打印件。

### 连续碳纤维增强聚醚醚酮预浸丝制备及性能研究

皮展鹏

华中科技大学

连续碳纤维增强复合材料 (Continuous carbon Fiber Reinforced Composite, CFRP) 具有力具有轻质、高强、耐高温、耐腐蚀、抗疲劳、热力学性能优异等特点，是航空航天、军工装备、医疗设备、轨道交通和新能源产业等领域理想的零部件原材料。连续碳纤维预浸丝是增材制造制备连续碳纤维增强复合材料的原材料，其中以聚醚醚酮为基体的预浸丝相比其他材质的预浸丝则具有更号的力学性能，但由于聚醚醚酮熔点高，易老化等特点，连续碳纤维增强聚醚醚酮预浸丝难以制备。在本报告中，基于熔融浸渍法制备了拉伸强度 1200MPa，孔隙率小于 3% 的连续碳纤维增强聚醚醚酮预浸丝，并分析了制备过程中各个环节对于预浸丝质量的影响，得到了制备高性能连续碳纤维增强聚醚醚酮预浸丝的工艺窗口。同时从力学性能、微观结构、热稳定性等方面对制备的预浸丝做了系统性的性能评估。本工作对于熔融浸渍法制备高性能连续碳纤维增强聚醚醚酮预浸丝具有参考作用。

### 选区激光熔化多主元共晶合金的微观组织调控及力学性能研究

杨珂、张谦、董勇

广东工业大学

本研究将选区激光熔化 (SLM) 技术与典型  $\text{AlCoCrFeNi}_{2.1}$  共晶高熵合金和  $\text{AlCrFeNi}_3$  共晶中熵合金相结合, 探究共晶高/中熵合金 SLM 成形的适用性。实验结果表明两种合金均具有宽泛的工艺窗口, 最高致密度均达到 99% 以上。SLM 态合金呈现出典型的柱状和鱼鳞状结构, 产生了具有超细胞状和柱状亚结构的 FCC 相和晶间 B2 相。同时工艺参数的变化并不会引起相组成的变化, 但随着激光能量密度的增加, 柱状亚晶粒的尺寸变长, 片层区域更加明显, 显微硬度和屈服强度也随着能量密度的变化而发生不同程度的改变。SLM 态的两种合金的极限抗拉强度和塑性应变分别可达 1076.2MPa、20.8% 和 1146.9MPa、7.6%。经不同温度及时间的热处理后, 两种合金的组织 and 性能都得到进一步提升。 $\text{AlCoCrFeNi}_{2.1}$  合金在中温 600°C 下退火, 抗拉强度显著提高, 从 SLM 态 1076.2MPa 提升至 1481.1MPa, 硬度从 317.60HV 提升至 507.87HV。 $\text{AlCrFeNi}_3$  合金在高温 1000°C 下固溶, 抗拉强度达到 1336.5MPa, 延伸率为 12.3%。

### 协同四重氢键和化学交联网络制备高性能双光子聚合光敏树脂及其性能研究

胡佳铭、张帅

中物院激光聚变研究中心

本工作通过氢键以及化学交联构建交联互穿网络, 开发了一种可适用于宽广激光功率、超高印刷速度和优异机械性能的双光子聚合增材制造光敏树脂, 其中四重氢键的聚集作用增强了光敏树脂的力学性能, 显示为断裂伸长率相比于未改性的树脂增加了 71.4%, 断裂强度增加 33.3%, 模量增加 35%, 硬度增加 29.4%, 同时具有  $5.97\text{MJ m}^{-3}$  的韧性。并通过五次循环拉伸实验证实了其良好的重复使用性。双光子聚合 3D 打印实验证明, 与其他常用的市售光刻胶相比具有相当优秀的打印性能。在一系列激光功率 (5mW 至 50mW)、扫描速度 (100 至  $100000\mu\text{m s}^{-1}$ ) 下实现优秀的打印结果, 同时可以打印出具有特异结构的工件。双光子打印得到的毫米级立方体块, 仍然具有 5.2GPa 的模量和 0.22GPa 的硬度, 保持了优异的机械性能。最后, 光敏树脂还具有优秀的贮存能力, 无需在黄光或者低温下保存, 众多性能均优于大部分光敏树脂。

### 铜含量对选区激光熔化铁锰合金组织演变和力学性能的影响

梁晴、吴宏

中南大学

可降解金属植入物由于生物适配度高且能避免二次手术, 成为临床医学的研究热点。相比于镁合金和锌合金, 铁合金, 特别是铁锰 (Fe-Mn) 合金, 具有更优异的力学性能和良好的生物相容性, 同时其降解速率可调节范围更广。通过选区激光熔化技术 (SLM) 有利于改善合金成分分布均匀、组织偏析和力学不稳定等问题, 但是由于本身 Mn 的烧失, 容易形成  $\alpha$ -铁素体磁性相, 不利于核磁共振成像 (MRI) 兼容性。当添加 1 ~ 5 wt.% 的铜 (Cu) 元素可以稳定非磁性  $\gamma$ -奥氏体相, 而且 Cu 具有广泛的抗菌性。系统研究了 Cu 元素对 Fe-18Mn 合金微观组织演变和相关性能的影响规律, 获得了强度-塑性协同, 降解速率适中以及 MRI 兼容的 Fe-Mn-Cu 合金, 进一步拓展了医用可降解铁基植入材料的应用前景。

### 激光选区熔化多尺度退火孪晶助力中熵合金优异的强塑性

郭博静、王锦程、何峰

西北工业大学

共格孪晶界作为材料内部的面缺陷,为设计具有优异“强度-塑性”协同作用的先进金属材料提供了一条有效途径。然而,在未经严重塑性变形的情况下,将纳米级孪晶引入到增材制造组织中极具挑战性。本研究创新性地利用增材制造合金中的特征胞状组织,在激光选区熔化 Ni35Co35Cr25Ti3Al2 中熵合金中引入了高密度的多尺度退火孪晶。多尺度退火孪晶协同纳米析出网络以及大量位错,实现了~1.4 GPa 的抗拉强度和~25%的优异拉伸塑性。研究发现激光选区熔化工艺诱导的胞状组织,其胞壁具有高密度位错和 Ti 元素偏析共存特征,通过与再结晶迁移界面的交互作用,促进了多尺度退火孪晶的形核。此外,胞状纳米析出网络增强了退火孪晶的热稳定性。塑性变形过程中频繁的位错和退火孪晶相互作用有助于提高合金加工硬化能力,实现优异的塑性。高强度来源于界面强化、析出强化及位错强化等多种强化机制的耦合作用。目前研究结果推动了增材制造新型微观组织的设计和探索,为开发具有优异力学性能金属材料提供了指导。

### 基于 MWCNTs/PPyNTs/Fe3O4 的剑桥结构紫外光固化 3D 打印微波吸收材料

刘创纪、徐英杰  
北京印刷学院

立体光固化型 (SLA) 3D 打印机可以快速打印高精度微波吸收体,但光敏树脂基体中加入微波吸收剂会影响紫外光吸收效率,甚至造成无法固化成型。本研究设计了一种剑桥结构的 MWCNTs/PPyNTs/Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 纳米吸收剂,并将其加入到紫外光固化树脂中,形成复合材料,这种材料在较低的吸收剂含量下仍具有优异的微波吸收性能。使用 FeCl<sub>3</sub> 作为氧化还原型引发剂,将吡咯单体聚合包覆在 MWNTs 上形成剑桥结构,剩余的 FeCl<sub>3</sub> 与聚合过程生成的 FeCl<sub>2</sub> 副产物共沉积生成 Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>,并负载在剑桥结构上。这种三元复合材料,能够均匀分散在光敏树脂中,剑桥结构相互搭接,保证了低吸收剂加入量下的介电损耗性能,并兼具介电损耗与磁损耗。吸收剂含量为 0.5 wt % 的光固化微波吸收材料,在匹配厚度 1 mm 时,电磁损耗可达 -22.5 dB。使用这种紫外光固化微波吸收材料可以打印各种复杂形状、高精度的微波吸收体,拓展了微波吸收材料的应用范围。

### 粒子改性电弧熔丝增材制造 Al-Mg-Si 合金组织与性能研究

李涛、陈继强、幸婷  
江西理工大学

电弧熔丝增材制造是一种采用电弧或等离子弧为热源,将金属焊丝逐层堆积制造出三维金属坯件的数字化制造技术。通过该技术制备的 Al-Mg-Si 合金会产生大量的凝固热裂纹,添加亚微米级 TiB<sub>2</sub> 粒子和纳米 TiC 粒子后可以消除合金的凝固热裂纹并改善合金的性能。本文对两种电弧熔丝增材制造 Al-Mg-Si 合金(含 TiB<sub>2</sub> 粒子和 TiC 粒子)的组织、力学性能与耐腐蚀性能进行了研究。结果表明:亚微米 TiB<sub>2</sub> 粒子和纳米 TiC 粒子的添加显著细化了晶粒,增加了合金的小角度晶界占比,改善了合金的性能。打印态 Al-Mg-Si 合金的极限抗拉强度从 90 MPa 提升到了 Al-Mg-Si/TiB<sub>2</sub> 合金的 169 MPa 和 Al-Mg-Si/TiC 合金的 166 MPa,分别提高了 88%和 84%,延伸率从打印态 Al-Mg-Si 合金的 0.5%分别提高到了 Al-Mg-Si/TiB<sub>2</sub> 合金的 7.5%和 Al-Mg-Si/TiC 合金的 17.5%。经过热处理后 Al-Mg-Si/TiB<sub>2</sub> 合金和 Al-Mg-Si/TiC 合金的极限抗拉强度分别提高到了 300 MPa 和 350 MPa,延伸率从打印态 Al-Mg-Si/TiB<sub>2</sub> 合金的 7.5%提高到了 8.2%,而打印态 Al-Mg-Si/TiC 合金的延伸率却从 17.5%降到了 5.2%。TiB<sub>2</sub> 粒子和 TiC 粒子的加入使 Al-Mg-Si 合金的自腐蚀电流密度从 1.12 μA/cm<sup>2</sup> 降低到了 Al-Mg-Si/TiB<sub>2</sub> 合金的 0.81 μA/cm<sup>2</sup> 和 Al-Mg-Si/TiC 合金的 0.88 μA/cm<sup>2</sup>,表明 TiB<sub>2</sub> 粒子和 TiC 粒子的添加均改善了合金的耐腐蚀性能,且 TiB<sub>2</sub> 粒子对合金耐腐蚀性能的提升效果更好。T6 态的 Al-Mg-Si/TiC 合金的自腐蚀电流密度为 4.02 μA/cm<sup>2</sup> 高于 Al-Mg-Si 合金的 3.89 μA/cm<sup>2</sup> 和 Al-Mg-Si/TiB<sub>2</sub> 合金的 2.5 μA/cm<sup>2</sup>,表明 T6 热处理均降低了三种合金的耐腐蚀性能,且 TiC 粒子的引入还恶化了热处理之后的 Al-Mg-Si 合金的耐腐蚀性能。

## 固溶元素在增材制造专用镍基高温合金中的成分设计

张雪<sup>1,2</sup>、梁静静<sup>2</sup>、李金国<sup>2</sup>

1. 中国科学技术大学
2. 中国科学院金属研究所

裂纹的存在限制了增材制造镍基高温合金的发展，合金成分设计是解决增材制造镍基高温合金裂纹的有效途径。有大量研究结果表明，过多 $\gamma'$ 相形成元素会加剧裂纹的形成。这项研究通过调控固溶元素，解决增材制造镍基高温合金可打印性和使用性之间的矛盾。研究结果为增材制造镍基高温合金中固溶元素的成分设计提供理论基础。

设计多种不同固溶元素的合金，利用激光能量沉积技术制备样品。结合 Thermo-Calc 热力学计算软件，借助金相显微镜，扫描电镜，电子探针，EBSD 设备，透射电子显微镜对成型试样进行显微组织观察和表征分析。

得到以下结论：W 和 Mo 使合金在晶界处形成高熔点碳化物，阻碍凝固末期液体流动，促进凝固裂纹的形成。W 和 Re 扩大了凝固区间，同样加剧了凝固裂纹形成，同时促进 Al 和 Ti 在枝晶间的偏析，易形成共晶，进而促进液化裂纹的产生。固溶强化值  $>50\text{MPa}$ ，且  $W+Re<10\text{ wt.}\%$ ，可以保证合金可打印性；错配度的绝对值 $>0.34\%$ ，可以保证合金 $\gamma$ 相的方形度以及合金的强度；Md 值 $<0.96$ ，可以保证合金的组织稳定性。

## C 对一种增材制造镍基高温合金可打印性与力学性能的影响

陈少峰<sup>1,2</sup>、梁静静<sup>1</sup>、于皓<sup>2</sup>、徐伟<sup>2</sup>、李金国<sup>1,2</sup>

1. 中国科学院金属研究所
2. 东北大学

晶界强化元素 C 在铸造及变形高温合金中的研究已经比较成熟，但在增材制造高温合金中的作用仍存在较大争议。合理控制 C 元素在增材制造高温合金中的含量，可以有效提升晶界强度，抑制开裂，并提升力学性能。在这项研究中，通过调控 C 元素含量（0-0.15wt.%），采用 OM、EBSD、SEM 与 TEM 等手段，结合相关热力学计算，分析了 C 含量对一种专用增材制造镍基高温合金的可打印性和力学性能的影响。结果表明，在一定范围内，随着 C 含量的增加，合金的开裂敏感性先升高后降低，这与 C 元素对合金凝固过程的影响有关。另外，在热循环条件下，逐渐长大的碳化物填充了合金中的微孔，降低了合金孔隙率。得益于增材制造高的冷却速率，碳化物尺寸被控制在 2-5 $\mu\text{m}$ ，呈颗粒状弥散分布。室温及中温拉伸下，弥散分布的碳化物颗粒能有效地阻止位错运动，提高合金的强度。而在高温，由于碳化物与基体的变形不协调性导致碳化物界面处裂纹的萌生与扩展，导致性能降低。这些发现阐明了一定范围内 C 含量对合金可打印性和力学性能的影响，为后续合金设计中 C 含量的调控提供指导。

## 激光辅助/辊压增强的连续纤维自由曲面增材制造建模与机器人位姿控制方法

欧阳震、杨磊、闫春泽

华中科技大学

连续纤维增强热塑性复合材料（CFRTPC），因其轻质高强特性，已成为航空航天和交通船舶领域轻量化设计的首选金属替代材料。机器人辅助增材制造技术通过多自由度的纤维取向设计和随形增材，确保打印路径紧密遵循自由曲面的几何形状，从而可实现连续纤维束的灵活铺设，最大程度发挥其力学性能增强作用，为制造具有复杂几何形状、高刚度与优秀的强度重量比的构件创造了新机遇。

本单位开创性的研制了一种激光辅助/辊压增强工艺的机器人辅助增材制造系统（RLAM）。该技术制

备的构件显著降低孔隙率至 0.15%，克服了传统复材成形的局限性，具有实现大尺寸复杂 CFRTPC 的高性能增材制造的前景。然而，RLAM 的推广应用仍受到算法、软件和工艺开发的瓶颈限制。RLAM 与其他机器人轮廓跟踪应用场景相比具有更严格的工艺约束条件，尤其是在高精度路径生成、轨迹规划和力控制方面缺少深入研究，这使得 RLAM 难以自动匹配打印路径，导致曲面或多孔构件的外形和性能设计预测不准确。

本文一方面建立了开曲面、闭曲面和多孔结构连续纤维复材的路径生成方法，另一方面提出了一种基于 NURBS 插值的机器人运动位置和姿态同步控制方法，以实现连续纤维增材制造的高阶连续性、位姿同步性以及恒定线速度运动控制。实验结果表明，所提出的方法符合激光辅助/辊压增强预浸丝成形工艺的数学模型，可实现机器人轮廓跟踪运动的高阶连续性和位姿同步控制，并将线速度波动率限制在  $1 \times 10^{-2}$  以内。以上优势可以确保增材制造过程中各机器人关节可达性且避免机械冲击，同时尽可能保证热塑性预浸丝的恒定成形温度与压力，从而提高曲面或多孔增材制造构件的性能一致性。

### 基于合金成分优化设计抑制激光粉末床熔融难焊 Inconel 738 合金裂纹

许佳玉

兰州理工大学

Inconel 738 合金具有复杂的合金元素（尤其是高 Al 和 Ti 含量），在激光粉末床熔融（LPBF）过程中容易产生裂纹，严重制约了 LPBF 成形 Inconel 738 合金的应用与发展。本研究结合热力学模拟计算和实验，在 Inconel 738 合金在标准成分范围内的，提出了一种合金成分优化设计方法，研究了合金成分对合金可打印性和力学性能的影响。结果表明，LPBF 成形 Mod-Inconel 738 合金的缺陷率和平均缺陷体积分别比 LPBF 成形 Inconel 738 合金降低了 87.1% 和 81.1%。这主要是由于增加固溶强化元素含量以提高合金基体强度和减少微量元素含量以降低  $\gamma+\gamma'$  低熔点共晶相含量的综合作用所致。此外，Mod-Inconel 738 合金过冷度的增加降低了 LPBF 成形合金的晶粒长径比。同时，LPBF 成形的 Mod-Inconel 738 合金在水平和垂直方向上室温强度保持不变，但水平试样伸长率提高了 68.8%。该研究作为提高其他镍基高温合金的可打印性或可焊性提供了一种方法。

### 工艺参数对 LPBF-Fe11Cr8Ni5Co3Mo 马氏体不锈钢组织性能的影响

吴灵芝、尹海清、张聪、张瑞杰、王永伟、姜雪

北京科技大学

马氏体不锈钢因其高强度和良好的焊接性能广泛用于增材制造，Fe-Cr-Ni-Co-Mo 体系是一种新型廉价的超高强马氏体不锈钢。本文制备了打印态性能接近铸态性能的马氏体不锈钢，研究了不同工艺下选区激光熔化 Fe-Cr-Ni-Co-Mo 马氏体时效不锈钢的微观结构、晶粒取向、位错密度等对力学性能的影响。结果表明扫描速度主要影响熔池形貌及熔池内部胞状组织的晶粒尺寸，不同的工艺参数组合对应不同的致密度、位错密度以及晶粒取向，马氏体不锈钢打印件样品位错密度范围在  $1.33 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$  -  $2.05 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$  之间，平均晶粒尺寸主要分布在  $2.00 \mu\text{m}$  -  $2.36 \mu\text{m}$ ，平行于扫描方向（水平方向）晶粒的择优取向主要是  $\langle 111 \rangle$  取向，部分样品存在着  $\langle 001 \rangle$  取向；垂直于扫描方向（建筑方向）的晶粒取向均为弱的  $\langle 101 \rangle$  织构。其中激光功率为 200W，扫描速度为 1000mm/s，舱口间距为  $100 \mu\text{m}$ ，层厚为  $30 \mu\text{m}$ ，样品的致密度达到 99.89%，表现出更高的致密化效果。对强度的贡献依次是位错强化 > 织构强化 > 细晶强化 > 沉淀相强化，位错强化为打印态马氏体不锈钢样品的主要强化机制，占总屈服强度的 62%。

### 一种实现与耐压性能解耦的宽频超流体特性的非对称五模超表面

何流、闫春泽

华中科技大学

五模材料作为一种超流体，在操纵水下声波方面展现出巨大的潜力。然而，根据色散曲线理论设计的五模材料的有效超流体特性范围差异很大。为了提高其超流体性能，需要牺牲抗压性能。这限制了它在深水中的应用。我们发现，超流体性能的差异是表面的周期性边界条件失效造成的，这种失效带来了弯曲模式和势能存储的增加。我们开发了一种方法来计算受这种边界效应影响的实际等效模量，并通过优化的均匀化模型进行了验证。受这种方法的启发，我们设计了一种非对称超表面，通过实现水与内部微结构之间完美的波传输来消除边界效应。这种超表面将超流体特性的有效范围扩大了一到两个数量级，并实现了与耐压性能解耦，从而使 PM 同时具有宽频和耐压性能。

### Al-Mg-Si 合金高性能电弧熔丝增材制造

黎凯、陈瑞凯、方学伟

西安交通大学，机械制造系统工程国家重点实验室

以 ZL114 为代表的 Al-Si-Mg 合金，被广泛应用于军工行业的大尺寸装备中。利用电弧熔丝增材制造 (wire arc additive manufacturing, WAAM) 技术可以高效率的成型、修复这些大尺寸构件。而目前适用于 WAAM 技术的 Al-Si-Mg 丝材面临着成型构件强度低、析出相不均匀难以调控的问题。本研究对比商业 ER4220 (对应于国内牌号 ZL114)，通过成分调控开发了新型 ZL114A 丝材 (丝材成分(wt.%): Si 7.927, Mg 0.953, Fe 0.045, Ti 0.301, Mn 0.007, Zr 0.045, Sb 0.226, 其余为 Al)，打印出了具有极高性能水平的铝合金构件，热处理后，其屈服强度可以达到  $299.2 \pm 1.3$  MPa, 抗拉强度可以达到  $376.5 \pm 8.1$  MPa, 并且延伸率还能够维持在  $6.9 \pm 0.3$  %，相较于 ER4220，屈服强度提升了约 20MPa，抗拉强度提升了约 50MPa。同时，本研究表明，热处理后析出的高密度均匀的纳米级  $\beta''$  是主要强化相，并且 Mn 的加入可以生成  $Al_6(Mn, Fe)$  相，抑制有害相的形成。但无论是 ER4220 还是 ZL114A，成型的构件都面临着孔隙缺陷多的问题，显著影响着其力学性能进一步提升。

### 激光粉末床熔融技术表面形貌的结构尺度效应研究

冯喆、谭华、林鑫、黄卫东

西北工业大学

激光粉末床熔融 (Laser powder bed fusion, LPBF) 技术制备跨尺度结构在航空航天等领域具有广阔的应用前景。然而目前 LPBF 成形表面质量和力学性能通常采用标准结构尺度试样进行评价，跨尺度结构的设计和制造并未充分考虑结构尺度效应所带来的重要影响，从而导致结构设计与实际成形件的功能/性能效果存在显著差异。因此本研究使用高性能  $TiB_2/AlSi10Mg$  复合材料制备标距直径为 0.2 mm 至 5.0 mm 的拉伸试样来探索 LPBF 技术的结构尺度效应，重点明晰结构尺度对表面粘粉和去除表面粘粉表面形貌的影响规律，揭示表面质量尺度效应的演化机理，同时获得不同结构尺度试样的力学性能，然后提出一种有效改善表面形貌尺度效应的控制策略。结果表明，对于内填充扫描策略，小尺度结构的表面形貌表现出显著的尺度效应，且去除表面粘粉的表面形貌能更好地反映实际表面质量，当标距直径从 0.2 mm 增加到 2.0 mm 时，表面粗糙度  $R_a$  从  $\sim 35.4 \mu m$  显著降低至  $\sim 17.5 \mu m$ ，降低  $\sim 51\%$ ，并伴随着表面起伏波动的明显改善。分析表明表面形貌的尺度依赖行为主要归因于不同结构尺度试样边缘区域中异常熔池的形成，这应该是热积累、单道末端熔池形貌、层内多道搭接以及层间连续旋转堆积等多种因素的耦合结果。此外，力学性能也表现出强烈的尺度相关性，当标距直径从 0.2 mm 增加到 2.0 mm 时，拉伸强度从  $\sim 238.9$  MPa 显著提高至  $\sim 368.2$  MPa，提高  $\sim 54\%$ ，其中，最小结构尺度试样拉伸强度仅有机械加工表面标准尺度试样的一半。值得注意的是， $R_a$  和拉伸强度在结构尺度超过 2.0 mm 后趋于稳定，因此 LPBF 技术结构尺度效应研究的阈值应为 2.0 mm。为了消除表面形貌和拉伸强度的结构尺度效应，本研究提出一种“内填充+轮廓”的扫描策略。由于轮廓扫描起到重熔效应的作用，不同结构尺度试样边缘区域均由沿成形方向规则分布的小熔池组成， $R_a$  和拉伸强度分别稳定控制在  $6.4\sim 9.2 \mu m$  和  $381.5\sim 406.9$  MPa。本研究的工作成果可为 LPBF 成形跨尺度结构在高技术领域的更广泛应用提供重要的理论指导作用。

## 激光能量密度对新型功能 FeCoNiCuMoSiBLaNdGd 的电磁屏蔽性能和微观结构演变的影响

汪芦婷、陈岁元

东北大学

本研究采用激光熔覆方法制备了新型多功能 FeCoNiCuMoSiBLaNdGd 合金。主要发现是在激光功率密度变化后获得了优异的饱和磁化强度 (Ms) 和电磁屏蔽 (EMI) 性能。我们将这主要归因于大量细化的  $\alpha$ -Fe 相和稀土相, 它们促进了介电损耗和欧姆损耗。在熔覆样品中, 精细的微观结构和纳米稀土相有助于形成细化的  $\alpha$ -Fe 相。更重要的是, 电磁屏蔽性能达到约 100 dB, 饱和磁化强度达到约 200 emu/g。本研究表明, 激光熔覆是制备高性能磁性功能合金的可行方法。

## 光固化 3D 打印先进陶瓷脱脂工艺的研究进展和展望

周士翔、刘桂宙、闫春泽、史玉升

华中科技大学

由于出色的加工精度和表面质量, 光固化增材制造技术在制备满足不同领域所需的复杂结构先进陶瓷构件时展现出极高的应用前景。调控热脱脂工艺参数是抑制光固化 3D 打印成形先进陶瓷缺陷产生并提升其性能的有效手段。然而, 由于光固化成形陶瓷生坯中有机粘结剂含量较高且组分复杂, 不仅热脱脂较为困难, 缺陷容易产生, 且难以在性能需求和脱脂效率间取得平衡, 极大限制了光固化 3D 打印先进陶瓷构件的结构和功能应用, 以及大规模工业化推广。本研究从材料、热脱脂过程和应用需求三个角度对光固化 3D 打印成形先进陶瓷的研究进展进行系统论述。首先, 系统概述了光固化陶瓷浆料中不同组分原材料对热脱脂行为的影响规律; 然后, 对热脱脂过程中脱脂机制, 分析表征手段和工艺设计三个重要议题进行了详细讨论; 最后, 归纳了不同应用场景下光固化 3D 打印陶瓷生坯热脱脂工艺的设计依据和原则。此外, 还论述了光固化 3D 打印先进陶瓷热脱脂工艺所面临的挑战以及未来的展望。本研究能够为光固化 3D 打印先进陶瓷热处理工艺的设计提供理论依据和快速参考, 极大推动其在学术和工业领域的快速发展。

## 基于激光压辊的连续碳纤维增强聚醚醚酮机器人辅助增材制造中的力学性能和约束补偿研究

王志豪、闫春泽

华中科技大学

近年来, 连续碳纤维增强聚醚醚酮 (Continuous Carbon Fiber Reinforced Polyetheretherketone, CCFRPEEK) 复合材料通过增材制造技术展现了其在定制生产和复杂结构制造中的巨大潜力。本研究使用机器人辅助激光增材制造装备, 探讨了热床温度、打印速度、打印压力、激光功率和扫描间距等工艺参数对 CCFRPEEK 复合材料力学性能的影响。结果表明, 在低速打印时, 激光和压力有助于提高复合材料的层间结合强度; 而在高速打印时, 由于激光照射时间短, 复合材料内外温差大, 导致内层 PEEK 熔化不完全或外层 PEEK 起火, 力学性能降低, 用喷嘴对复材预热可抑制此现象。热床有助于提高首层打印质量并抑制翘曲变形。此外, 针对六轴机械臂关节旋转角度约束问题, 开发了两轴变位机位姿补偿算法, 能够实现三维空间复杂曲线的一次性匀速打印。

## 电弧熔丝增材制造过程中热循环对 Al-Zn-Mg-Cu 合金组织与性能的影响

曾令鹏、陈继强

江西理工大学

电弧熔丝增材制造(WAAM)过程中逐层沉积形成独特的热循环输入, 对沉积材料产生原位热处理(IHT)效应。本文通过 WAAM 方法制备了添加 TiC 粒子改性的超高强 Al-Zn-Mg-Cu 合金, 研究了 WAAM 过程中热循环对合金组织与性能的影响。结果表明, 打印构件从底部到顶部的显微组织由细小的等轴晶组成, 且晶粒尺寸相差不大。但是由于不同的热历史, 在制造过程中观察到纳米级的初生第二相, 其尺寸和体积

分数取决于位置。在力学性能方面，截面的显微硬度从底部到顶部先上升后下降的趋势，在接近顶部位置(150mm)处达到最大值 143HV1，极限抗拉强度表现为底部位置抗拉强度小于顶部位置，在底部位置(20mm)处抗拉强度只有 300MPa，在顶部位置(150mm)处的抗拉强度达到了 386MPa。

### **Effect of electromagnetic composite field on the microstructure of TC4 titanium alloy during laser melting deposited**

Tao Fu, Lechun Xie, Wei hao Li, Yan Wen, Yongjian Wu, Hongxin Sun  
Wuhan University of Technology

Ti-6Al-4V(TC4) alloy is widely used in aerospace, automobile, shipbuilding, medical and many other fields because of its light weight, high specific strength, corrosion resistance and many other advantages, Laser melting deposition (LMD) is an advanced manufacturing technology, which can not only print materials quickly, but also meet the requirements of high-precision parts manufacturing. At present, titanium alloys by laser melting deposition (LMD) still have problems such as anisotropy and micro-nano defects. Electromagnetic filed adjustment has the advantages of high efficiency, easy operation, energy saving and consumption reduction. so it has been favored by many scholars. In this work, the microstructure of TC4 titanium alloy was characterized and analyzed by laser melting deposition under electromagnetic composite field, and the results showed that the initial LMD-TC4 sample contained many coarse  $\beta$  columnar crystals, and there were basket structures and cluster structures inside, After electromagnetic adjustment, the equiaxial trend of columnar crystals became more and more obvious, and needle-like  $\alpha$  phases were precipitated in the  $\beta$  phase, and the number of cluster structures near the grain boundary increased. The Electron Back Scatter Diffraction (EBSD) results showed that the maximum texture strength of the sample after electromagnetic filed adjustment was significantly reduced, and the grain orientation became uniform. At the same time, the average grain size has also been reduced to a certain extent, indicating that electromagnetic filed adjustment can play an important role on grain refinement.

### **超高层间剪切强度连续碳纤维增强 PETG 的增材制造**

王文波  
武汉理工大学

连续碳纤维增强复合材料 (CCFRC) 因其优异的力学性能和化学性能以及较小的比重而广泛应用于航空航天、轨道交通、公路交通等领域。近年来，连续纤维复合材料的增材制造引起了各行业的广泛兴趣。然而，增材制造的 CCFRC 零件的机械强度在纵向方面仍然存在不足。本文开发了基于商业 FDM 的改进设备，将连续碳纤维增强 PETG 用于 CCFRC 的增材制造。针对重叠路径过多、喷嘴太尖、连续纤维牵引力不足、打印基座调平不足、预浸丝潮湿等问题，对设备进行了改进。为了提高 CCFRC 层间粘结强度，本文探讨了不同网格间距和打印速度对试件层间剪切强度的影响。结果表明，较小的填充间距可以打印具有较高 ILSS 的零件，而打印速度太大或太小都会导致更大的孔隙率，从而降低零件的 ILSS。舱口间距对样品的层间剪切强度影响较大。优化后，在网格间距 0.8mm、打印速度 2mm/s 的参数下，生产的样品最大层间剪切强度和最大相对密度达到 27.41Mpa 和 99.47%。

### **增材制造具有大可恢复应变的稳定超弹性 NiTi 形状记忆合金**

颜安、蔡淮锶、李泓臻、卢海洲、杨超  
华南理工大学

本文报道了用激光粉末床熔合(LPBF)增材制造 Ni51.2Ti48.8 (at.%)形状记忆合金(SMA)具有大可恢复应变的稳定超弹性。微观结构分析表明, LPBFed SMA 样品具有粗大的柱状和细小的胞状两种不同晶粒带的非均匀微观结构。其中粗柱状晶粒区占主导, 含量高达~79 vol.%, 位错密度相对较低。相比之下, 胞状晶粒内的位错密度高, 但含量低, 约为 21 vol.%。特别是, 所有 LPBFed 非均匀 SMA 样品都具有强(100)织构, 强度高达 40.2-56.1, 并伴有均匀的 Ti4Ni2O 纳米沉淀物。恒应力循环压缩表明, 在 1200 MPa 高加载条件下, 具有 79 vol.%粗柱状晶粒区和 52.8(100)织构的 LPBFed 试样在 15 ~ 30 次循环下表现出稳定的超弹性, 可恢复应变大, 为 5.71%。这种大的可恢复应变优于各种方法制备的 NiTi SMA。稳定的超弹性主要是由于在循环加载过程中, 强织构(100)具有抗塑性变形的和均匀共格 Ti4Ni2O 纳米沉淀物对位错运动的钉住作用。同时, 大的可恢复应变源于高含量柱状晶粒区对新位错的高容错能力。这项工作可以为高性能 NiTi sma 的设计提供重要见解, 并通过增材制造进一步加速其工程应用。

### Optimization of Residual Stress in Laser Melting Deposition of TC4 Titanium Alloy Using In-situ Electromagnetic Fields

Weihao Li<sup>1,2</sup>, Tao Fu<sup>1,2</sup>, Jian Zhou<sup>1,2</sup>, Haoxing Wang<sup>1,2</sup>, Yan Wen<sup>1,2</sup>, Lechun Xie<sup>1,2</sup>

1. Hubei Key Laboratory of Advanced Technology for Automotive Components

2. Hubei Collaborative Innovation Center for Automotive Components Technology

Ti-6Al-4V(TC4) alloys are prized in aerospace for their high strength, corrosion resistance, and temperature tolerance. Additive manufacturing offers the ability to create complex geometries with reduced material waste and shorter production cycles. However, laser melting deposition (LMD) TC4 faces anisotropic properties and cracks due to energy power and cooling rates. This paper proposes electromagnetic field-assisted forming to improve stress distribution during LMD. Induction heating reduces thermal stress and residual stress, while electromagnetic stirring refines grain structure and enhances mechanical properties.

Residual stress mechanisms in LMD TC4 are analyzed, and electromagnetic optimization is explored. Using ANSYS, a three-field coupling model (temperature, stress, electromagnetic) was simulated to study residual stress distribution and the impact of electromagnetic forces.

Single-track multi-layer experiments were conducted to observe and analyze the grain structure within the manufactured TC4 parts. X-ray diffraction was used to measure the residual stress on the workpiece surface, and the electrolytic corrosion method was employed to measure the depth-wise residual stress.

The study results indicate that the electromagnetic optimization technique leads to a more uniform residual stress distribution in LMD TC4 parts, effectively reducing stress concentration. The simulation results closely matched the experimental findings. Additionally, electromagnetic optimization significantly refined the dendrite structure, enhancing the mechanical properties of the TC4 workpieces.

This research provides a theoretical foundation and technical support for further optimizing the LMD process, facilitating the application of this technology in manufacturing high-performance complex TC4 components.

### 连续碳纤维复材增材制造负泊松比结构压缩行为和机理研究

周磊

武汉理工大学

负泊松结构因其独特的机械特性, 在工程应用中广泛应用。本研究基于重入式结构, 设计了一种新的负泊松比结构。采用 FDM 技术增材制造了连续碳纤维增强复合材料负泊松比结构, 并采用交叉打印的方式, 提高相邻单胞间的结合质量以及成形精度, 从而提高负泊松结构的力学性能。通过压缩实验, 分析了两种负泊松比结构的能量吸收能力, 并通过电子扫描显微镜揭示其损伤类型和机理。结果表明, 新的结构比传统结构具有更好的力学性能, 其质量比吸能提高了 100%, 屈服强度提高了 14%, 弹性模量提高了

45%。研究表明,通过改进单元设计和打印路径优化,可以提高连续碳纤维增强复合材料负泊松比结构的力学性能,研究结果可为进一步改进提供指导。

### 基于 CMT 技术的电弧增材制造 Al-Zn-Mg-Cu 合金组织与性能研究

王玉文、陈姬、陈茂爱、宿浩、武传松

山东大学

由于 Al-Zn-Mg-Cu 合金中添加元素含量高,容易产生裂纹和孔洞缺陷,导致电弧增材制造 Al-Zn-Mg-Cu 合金工艺面临着严峻的挑战。为了优化堆积工艺,揭示电弧模式对 Al-Zn-Mg-Cu 合金微观组织和力学性能的影响机理,三种冷金属过渡(CMT)电弧模式用于电弧增材制造 Al-Zn-Mg-Cu 合金工艺中。使用电子显微镜和高速摄像机评估 CMT 电弧模式对堆积件成形精度和电弧/熔滴过渡行为的影响。基于多种表征技术定量分析了晶粒形貌、晶体结构和析出相的特征。结果表明:在 CMT 和脉冲 CMT 模式(C+P)条件下,由于电流电压波形异常和堆积件侧壁溢出/弯曲现象,堆积件的成形精度恶化;在变极性 CMT 模式(C+A)条件下,由于极性变化对熔池的产生了强烈的搅拌作用,扩大了成分过冷区,以及该模式具备的极低热输入,因此实现了最细的晶粒尺寸。CMT 和 C+P 模式条件下,晶界附近形成了连续且粗大的析出相,而在 C+A 模式条件时的析出相弥散分布且细小。此外,孔洞缺陷的数量和大小在 C+A 模式条件下也有所减少。组织优化和缺陷抑制是 C+A 模式条件下堆积件力学性能提高的主要原因。最终,直接堆积态 Al-Zn-Mg-Cu 合金 C+A 模式条件下获得了较好的抗拉强度(~278.15 MPa)和延伸率(~6.50%)。在 C+A 模式组织优化的基础上,进行后处理热处理工艺,进一步提高力学性能。与直接堆积态条件下的析出相大小和类型相比,热处理样品的晶粒内部析出了高密度的纳米级(~5 nm)亚稳态  $\eta'$  相,形成了强烈的析出强化作用。实施热处理工艺后,试样的显微硬度分布均匀,达到了~180 HV0.2,并且拉伸性能和延伸率均显著提高,分别达到  $524.68 \pm 7.31$  MPa 和  $7.10 \pm 2.09\%$ 。

### 可降解丝素蛋白骨修复支架的 3D 打印研究

汤钦菊、王卉

苏州大学

骨缺损的修复和功能重建,已成为国内外重要的研究课题。目前使用不同类型的材料进行 3D 打印构建支架,并进行修饰以诱导特定的生物反应成为骨修复的研究的热点<sup>[1]</sup>。由于合成聚合物显示出较低的生物相容性和细胞粘附位点的数量,因此使用天然聚合物在骨缺损修复的研究中占有独特优势。因此本次研究制备纯丝素水凝胶墨水,采用气动挤出 3D 打印技术制备丝素蛋白支架,通过干燥后处理提高打印分辨率及机械强度。

具体制备过程为溴化锂溶解脱胶丝,透析后制备再生 SF 水溶液,通过浓缩再稀释形成孵化液(DSF),孵育后形成具有纳米纤维的 SF 水凝胶(Stiff gel)。破碎处理后形成的具有一定流动性的微凝胶(Micro gel)用于挤出式 3D 打印,制备的支架在经过干燥后处理后可均匀收缩,压缩力学强度也大幅提升。

本文制备的丝素水凝胶墨水具有良好的可打印性和形状保真度,打印支架在干燥后处理后有望在提高打印支架的分辨率的同时提高支架材料力学性能,使得打印骨支架在结构,力学性能方面与人体松质骨相匹配,增加其在骨修复支架领域应用的可能性。

参考文献:

[1] Koons G L, Diba M, Mikos A G. Materials design for bone-tissue engineering[J]. Nature Reviews Materials, 2020, 5(Suppl. 2).

基于多区域、多层、多尺度相场计算(M3-PFC)的激光定向能沉积 Fe / Ni 基复合材料结晶成核和生长行为预测

历彦泽、顾冬冬  
南京航空航天大学

激光定向能沉积(LDED)是基于粉末进料技术, 具有在空心结构内部制造复杂结构的能力。创新地应用任意拉格朗日-欧拉(ALE)方法, 从介观计算流体力学(CFD)热模型中导出熔池自由表面轮廓  $F(x, y, t)$  和温度分布  $T(x, y, t)$  的时间插值函数。这些插值函数不是简单地集成, 而是专门设计用于在微观结构相场中为晶体凝固的增长提供量化的推动力, 从而对相场模型的计算域进行实时调整。建立了考虑 Marangoni 流与相场双向耦合的多区域、多层、多尺度相场计算(M3-PFC), 考虑了多层沉积内部元素的输运和前期固化材料。将多层沉积热力学集成到 M3-PFC 中, 实现了利用 LDED 工艺预测多层枝晶演化。研究了 Marangoni 流动对 M3-PFC 沉积在 316L 基体上的多层 C276 微观结构演变的影响。结果表明, 等轴晶和柱状晶的形核发生在熔池的顶部和中下部。柱状晶和等轴晶均优先沿 Marangoni 流动的反方向产生, 阻碍了反方向的枝晶生长。(N+1)层的部分重熔是由(N+2)层中产生的热力学引起的, 促进了(N+1)层中液相的再凝固。然而, 经过周期性加热, 第 N 层没有发生液固转变。第(N+1)层中部分重熔组织通过竞争生长形成更宽的柱状晶体, 这些柱状晶体转变为平面晶体, 并被确定为第(N+2)层成核的初始凝固条件。柱状晶体生长以第(N+1)层的平面晶体为核, 在第(N+2)层中占据优势。微柱压缩试验结果表明, 柱状晶的抗压强度为 1102.78 MPa, 等轴晶的抗压强度更高, 为 1464.34 MPa。

### 退火温度对激光粉末床熔化成形镍基粉末高温合金组织和性能的影响

王耀、任晓娜、陈志培、葛昌纯  
北京科技大学材料科学与工程学院

对激光粉末床熔化成形 FGH4096M 镍基粉末高温合金进行不同温度的退火处理, 通过 SEM、EBSD 等分析了合金的微观组织结构, 并对其进行了拉伸测试, 进而探究退火工艺对激光粉末床熔化成形 FGH4096M 镍基粉末高温合金中显微组织的演变及力学性能的影响。结果表明: 随着退火温度的升高, 成形态合金中胞状组织和柱状晶组织出现了消失的趋势, 并当退火温度为 900°C 时, 发现有大量  $\gamma'$  相析出; 其硬度值也在逐渐升高, 抗拉强度和屈服强度均呈现上升趋势, 但其断后延伸率均为 5%。这一研究成果为激光粉末床熔化成形镍基粉末高温合金性能的提升提供了有效的数据支撑。

### 铜合金液滴金属喷射打印过程中组分输运的物理机制的数值模拟

李铭镨、李军  
上海交通大学

纯铜及铜合金由于良好的导电、导热、耐腐蚀性和较高强度, 被广泛应用于航空、电力、冶金等领域。面对应用端日渐复杂的结构、功能和性能需求, 3D 打印技术在制备结构复杂、功能集成的铜金属零部件如火箭发动机燃烧室、压铸模具等方面具有广阔的应用前景。然而, 纯铜及铜合金对近红外激光(波长 1064nm)的高反射率及自身高导热率, 给铜金属的激光增材制造带来了严峻挑战。金属喷射打印是近年发展起来的一种新型 3D 打印技术, 因其无需昂贵的激光设备、定制粉材等优点, 以及感应加热的加热方式特别适合铜和铜合金的打印。液滴是金属喷射打印中的最小单元, 在沉积凝固时熔体经历了铺展、回缩、震荡等过程, 但目前关于对流输运溶质的物理机制尚不明确。本研究基于流体体积(VOF)法, 建立了液滴沉积的组分输运模型, 模型深入考虑了每种成分的对流、扩散, 实现了溶质和溶剂的混合和传输的模拟, 并通过立柱打印实验进行验证和优化。结合所建模型针对调幅分解强化型合金 Cu15Ni8Sn(牌号 C72900)进行模拟和实验, 开展了合金凝固中溶质再分配对制备均匀固溶体的影响的研究, 探究了不同工艺参数, 如熔滴温度、基板温度、打印频率等工艺参数对 Sn 元素成分分布的影响, 以期金属喷射打印 Cu15Ni8Sn 合金提供理论认识和指导。

### 3D 打印不同互锁单元锁子甲结构的适体性防护

葛佳辉<sup>1</sup>、晁振龙<sup>1</sup>、姜龙涛<sup>1,2</sup>

1. 哈尔滨工业大学材料科学与工程学院
2. 哈尔滨工业大学先进焊接与连接国家重点实验室

本研究针对现代军事环境中士兵防护需求,旨在解决高灵活度部位防弹装甲的适体性与防护效能矛盾。通过融合生物仿生学(鱼鳞、犏独鳞片)与锁子甲设计理念,开发新型防弹结构,以突破现有装备局限。研究采用钛合金、铝合金和光敏树脂为 3D 打印材料,设计方架、八面桁架和圆架互锁单元,并通过准静态压缩实验、动态冲击测试(采用分离式霍普金森压杆技术)以及有限元分析仿真分析评估其力学性能和能量吸收能力。结果表明,圆架单元在准静态条件下表现出最高的比能量吸收能力,归因于其均匀受力的结构特性,避免了应力集中导致的结构局部失效;而八面桁架单元在动态冲击下展现出最佳的吸能效果,得益于在高速应变下杆主要受压缩应力,八面桁架单元应力状态柔性系数更大所以其变形吸能效果好。不同材料的互锁单元均显示出相似的准静态能量吸收趋势,验证了结构设计对多种材料的广泛适用性。此外,圆架单元组成的锁子甲在适体性方面表现最优,能更好地贴合复杂曲面。本研究通过结合分段装甲与拓扑互锁锁子甲设计,不仅突破了传统防弹装甲在强度与适体性之间的限制,而且揭示了不同互锁单元在静态与动态条件下的能量吸收差异,为高适体性防护装备的设计提供了新思路。

### 激光选区熔融制备高强度复杂形状微型电机部件

薛志强<sup>1</sup>、杨卫明<sup>1</sup>、马严<sup>1</sup>、方萌<sup>1</sup>、张响<sup>2</sup>、刘海顺<sup>2</sup>、赵玉成<sup>1</sup>

1. 中国矿业大学力学与土木工程学院
2. 中国矿业大学材料与物理学院

增材制造技术利用高能激光束按照预设的路径逐层熔化粉未来搭建结构,可以实现微型复杂零件的制备。其中激光选区熔融技术(SLM)成形精度高,成形样品力学性能好,被广泛用于复杂结构金属零件的制备。然而当前研究在微型的复杂几何形状磁性功能零件的 SLM 制备方面的实践仍然很少,因此本工作针对微型无人机的电机,利用 SLM 制备了一批复杂几何形状 Fe-80%Ni 微型电机铁芯模型,并研究了退火对其微观结构、磁学性能以及力学性能的调控机理。样品在退火前后表现出单一的 FCC FeNi<sub>3</sub> 相,晶粒分布均匀,且与粉末原料尺寸对应。细小的晶粒导致 SLM 样品屈服强度远大于电弧炉冶炼(EAF)制备的 Fe-80%Ni,铸态下的拉伸屈服强度达到了 690 MPa。退火后的 SLM 样品不均匀残余应力大幅释放,磁性有明显改善,饱和磁化强度 115 emu/g,有效磁导率上升到 214。退火后的 SLM 样品力学与磁学综合性能优异,表明了 SLM 技术可以在增强材料性能的同时充分发挥制作微型复杂形状磁性器件的能力,为 SLM 在微型无人机电机制作中的应用提供参考。

### 激光粉末床熔融 Fe45Mn35Co10Cr10 合金组织与力学性能研究

耿赵文  
中南大学

对于大多数结构材料服役场景仍略显不足,提升其屈服强度是亟待解决的关键问题。激光粉末床熔融技术具有成形精度高、表面粗糙度好及样品致密度高等优势,具有比 L-DED 技术更快的冷却速度,能诱导部分元素偏析形成尺寸更小的胞状结构,有利于进一步提升奥氏体相稳定性。同时,50~100 μm 的小直径光斑可以极大的降低熔体收缩产生的残余应力,降低应变诱导形成马氏体相占比。美国空军实验室、加利福尼亚大学、韩国材料科学研究所、日本东北大学等研究机构和高校率先开展了 CoCrFeNiMn[209, 210]、AlCoCrFeNi[211]等多种高熵合金 L-PBF 技术成形研究,在成形工艺、组织调控和热处理加工工艺方面积累了大量的技术储备。中南大学李瑞迪等使用 L-PBF 技术成形了 Fe50Mn30Co10Cr10,相变释放打印过程

中的热应力，残余应力从奥氏体稳态高熵合金中的拉应力转变为亚稳高熵合金中的压应力，但样品断后伸长率仅 25%，屈服强度仅 300 MPa。本工作使用 L-PBF 成形了 Fe45Mn35Co10Cr10。系统研究 LPBF-FM 样品打印参数-致密度、显微组织结构及室温静态拉伸力学行为，揭示 L-PBF 成形 Fe45Mn35Co10Cr10 室温塑性变形机制及其对  $\gamma$  相晶体学取向依赖性。进一步对其动态拉伸变形行为进行表征分析，阐明在动态载荷服役中， $\gamma$  相晶体学取向、 $\gamma$  相孪晶占比及  $\epsilon$  相孪晶类型演变机制。为 L-PBF 成形 FeMnCoCr 亚稳高熵合金在动态载荷场景服役应用拓展提供理论支撑。

### 基于同轴高温计的 L-PBF 成形熔池温度在线监测和温度场模拟

丁明路、刘壮壮  
北京科技大学

L-PBF 成形过程中的熔池温度对组织的生长，缺陷的产生有着直接的影响，熔池温度的监测和模拟一直以来都是 L-PBF 工艺研究的重要方向。为了实现对熔池温度的在线监测，本研究使用和成形光路同轴安装的高温计获取熔池的辐射强度，再使用纯 Ni、纯 Ti 等固定熔点的纯金属粉末进行成形实验，寻找各金属熔点对应的辐射强度，获取辐射强度 R 和温度 T 的数据集，使用 Stefan-Boltzmann 公式对 R 和 T 进行拟合，获得 R-T 的对应关系，实现由熔池辐射强度向熔池温度的转换。使用有限元模拟不同工艺参数下的熔池温度场，基于实时监测得到的熔池温度对温度场模型进行校正，从而得到准确的温度场分布模型。本研究基于同轴安装的高温计和有限元模拟实现了对 L-PBF 成形过程熔池温度的在线监测以及与工艺参数相关联的熔池温度分布的获取，为进一步研究熔池冷却速率、温度梯度、组织生长等问题提供了指导。

### 钽酸盐涂层显微结构特征与失效机制研究

陈琳  
昆明理工大学

铁弹性稀土钽酸盐由于具有高韧性、高工作温度、高热膨胀系数和低热导率等优点被广泛作用热障涂层进行研究，通过喷雾造粒的方式制备钽酸盐球形粉体，通过大气等离子喷涂的方式成功在镍基合金表面制备钽酸盐涂层，并对其晶体结构、显微组织、力学性质和热考核条件下的失效机制进行研究。结果显示钽酸盐涂层的断裂韧性与 YSZ 相当，在水冷热震、抗燃气热冲刷和空冷热疲劳等条件下钽酸盐的失效主要是由于粘结层的氧化形成热生成氧化物 (TGO) 所产生界面应力过大导致的，因此在后续研究中进一步优化界面是研究的主要内容。

### 层流等离子体淬回火：一种用于钢轨可控改性的快速表面热处理技术

彭科铭  
四川大学

等离子体选区淬火技术通过在表层制备离散分布的马氏体硬化区，可以提升钢轨的耐磨性，但硬化区在钢轨服役过程中会出现严重的裂纹和剥落，该现象可能与其组织和硬度相关。为了调控硬化区的组织和硬度，本研究提出了一种层流等离子体淬回火技术，该技术利用层流等离子体束依次完成淬火、回火热处理，以获得理想的硬化区组织和硬度。层流等离子体淬火首先被用于在钢轨表面制备出高硬度的马氏体硬化区，层流等离子体回火再对每个硬化区进行处理以进一步改变其组织和硬度。为了精准控制硬化区的回火温度，对层流等离子体回火过程开展了数值模拟，确定了层流等离子体回火的工艺参数，进而研究了回火温度对淬火区组织和硬度的影响。结果表明：随着回火温度从马氏体相变开始温度升高到奥氏体化温度，硬化区的针状马氏体析出碳化物并转变为回火马氏体，硬化区的硬度从 800 HV 降低到 450 HV。除此之外，层流等离子体淬回火技术处理每个硬化区的总时间通常不足 2 s。经层流等离子体淬回火处理后的钢轨钢，硬化区的严重裂纹和剥落现象得到消除，并且耐磨性仍然高于未处理钢轨钢。总体上，层流等离子体淬回

火是一种用于快速调控钢轨表层组织和硬度的新型表面热处理技术，该技术在根据钢轨服役工况来平衡其耐磨性和滚动接触疲劳抗性方面具有良好的应用前景。

### 特种材料熔炼装置用钽、钛、锆表面渗硼制备及性能研究

赵满圆、闫晓东、叶蔚

有研工程技术研究院有限公司

核工业领域中，核材料是发展核能的重要关键资源，而核材料的熔炼、分离、提纯是核能工业持续发展的重要前提。钽、钛、锆凭借其较高的熔点、良好的耐腐蚀性能、优异的抗辐射性能和良好的机械加工性能而广泛应用于航空航天、核工业、发动机和武器装备等领域，但由于其在高温下的硬度、耐腐蚀性及抗氧化性较差，限制了其在特种材料熔炼装置领域的发展。本文以纯钽、锆、钛作为基体，采用固体渗硼法对其进行表面改性，探索改善纯钽、锆、钛表面处理工艺。结果表明，钽、锆、钛表面均能形成均匀致密的渗硼层，渗硼温度、时间和渗剂配方对渗硼层质量均有影响，表面渗硼厚度在 15~22 $\mu\text{m}$  之间。钽渗硼层由 TaB<sub>2</sub> 相、Ta<sub>3</sub>B<sub>4</sub> 相和 TaB 相组成；钛渗硼层由 TiB<sub>2</sub> 相和 TiB 相组成；锆渗硼层由 ZrB<sub>2</sub> 相和 ZrB 相组成。其中，钽渗硼层与基体结合力最大，为 27.1N，钛和锆渗硼层与基体结合力相近。

对渗硼后的样品进行熔融金属铈腐蚀，钛和锆渗硼腐蚀后样品融化，渗硼层未能对金属基体起到有效的保护作用；钽渗硼腐蚀后表面产生白色层状腐蚀开裂，渗层内部出现部分点状腐蚀，腐蚀部分占渗层总厚度的 10%；腐蚀速率为 0.0885 $\mu\text{m}/\text{h}$ ，相比钽基体降低 30%，表明渗硼层可对钽基体起到有效的保护作用。

### 涡轮叶片叶尖小尺寸微米 cBN 颗粒/ $\delta$ -Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub> 涂层高温氧化及常温磨损行为研究

张世怡、谷文双、张澳、裴志亮、宫骏

中国科学院金属研究所

采用电沉积和包埋渗铝两步法制备了一种小颗粒 cBN/ $\delta$ -Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub> 涂层，该涂层获得了较好的高温抗氧化性和常温耐磨性能。氧化实验结果表明，即使温度达到 1050 $^{\circ}\text{C}$ ， $\delta$ -Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub> 包覆的 cBN 颗粒仍基本保持完整且与金属基质结合良好。cBN 颗粒失效的原因则是其与金属元素发生界面反应，生成 AlN、TiN，同时  $\alpha$ -Cr 容易在颗粒周围析出。此外，常温下的磨损试验表明复合涂层的磨损机制结合了磨粒磨损与黏着磨损，因此 cBN 颗粒的加入可以通过其自身优越的强度和硬度增强磨粒磨损，从而降低涂层的磨损率。

### 揭示高温下 Re 和 Hf 的相互作用机理对 ReHf-NiAl 涂层性能的影响

范莲君<sup>1,2</sup>、李伟<sup>1</sup>、张文璐<sup>1,2</sup>、姜肃猛<sup>1</sup>、宫骏<sup>1</sup>、孙超<sup>1</sup>

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学

利用电镀及电弧离子镀技术制备了 Re-NiAl、Hf-NiAl 和 ReHf-NiAl 涂层，并研究了 Re 和 Hf 之间的相互作用。在 ReHf-NiAl 涂层中，Re 和 Hf 共析出，经过退火后，ReHf 共掺杂涂层中的共沉淀相被证实为 Hf<sub>5</sub>Re<sub>24</sub> 和 Hf<sub>5</sub>Al<sub>3</sub>。这些沉淀物的形成进一步减缓了氧化皮的生长速度。Re 对 Hf 的分散和细化防止了尖晶石的形成。讨论了 Re 和 Hf 在退火和氧化过程中的相互作用机制。

### 辐照下二硫化钼缺陷形成及摩擦学行为的分子动力学研究

石焯然<sup>1</sup>、周青<sup>1</sup>、王海丰<sup>1</sup>、柴立强<sup>2</sup>

1. 西北工业大学材料学院先进润滑与密封材料研究中心
2. 中国科学院兰州化学物理研究所固体润滑国家重点实验室

由于其独特的层状结构赋予的优异摩擦学特性，二硫化钼 (MoS<sub>2</sub>) 为在 高能辐照环境中探索润滑保护

材料提供了一条充满前景的途径。在这项研究中，我们利用分子动力学模拟对多层 MoS<sub>2</sub> 在辐照下的缺陷行为进行了全面研究。我们研究了 MoS<sub>2</sub> 在辐照过程中的能量转移和结构演变，包括弗兰克尔缺陷和复杂缺陷团簇的形成。随着入射动能的增加，结构损伤程度一开始上升，然后下降，在入射动能达到 2.5 keV 时达到顶峰。此外，我们还探讨了退火对缺陷修复的影响，并进行了单轴拉伸和层间剪切模拟，为了深入了解缺陷演变及其对机械和摩擦学性能的影响提供了宝贵的见解。这项研究揭示了辐照导致 MoS<sub>2</sub> 结构完整性和机械性能受损的原子机制，为其在核反应堆和航空航天工业中的重要应用提供了关键指导。

### 环氧树脂改性对聚酰胺酰亚胺涂层抗空蚀性能的影响

张梓轩<sup>1,2</sup>、侯国梁<sup>1</sup>、万宏启<sup>1</sup>、马俊凯<sup>1</sup>、冶银平<sup>1,2</sup>、周惠娣<sup>1,2</sup>、陈建敏<sup>1,2</sup>

1. 中国科学院兰州化学物理研究所 固体润滑国家重点实验室
2. 中国科学院大学 材料与光电技术学院

空蚀是局部高压和热引起的一种极端条件下的材料损伤现象，广泛存在于泵等过流部件中，严重制约着零部件服役寿命。由于航空航天轻量化要求涉及的轻合金耐受温度较低，常在解决空蚀损伤的聚酰胺酰亚胺 (PAI) 中添加环氧树脂 (EP) 以降低固化温度，然而这对空蚀性能的影响尚不清楚。针对该问题，分别制备了纯 PAI 涂层 (P-280) 和不同含量 EP 改性的 PAI 涂层 (P-200 和 P-170)，通过加速空蚀试验对比研究了样品的空蚀性能，采用 XPS、TGA、纳米压痕、SEM 等表征分析了样品的力学和热学性能以及空蚀作用下的力/热响应行为和涂层空蚀前后的形貌，剖析了损坏机理。结果表明，添加 EP 可使 PAI 的固化温度显著下降 80~110 °C，但韧性由 P-280 的 8.21 mJ m<sup>-3</sup> 逐渐降低到 P-170 的 3.18 mJ m<sup>-3</sup>，造成涂层在空化载荷冲击下更易发生疲劳开裂。同时，添加 EP 后的 PAI 的热稳定性也明显劣化，空蚀 30 min 后 P-170、P-200 和 P-280 样品材料失重 5% 所对应的温度下降幅度约为 15.24%、14.82% 和 9.05%，进一步加速涂层表面力学性能劣化及空蚀损坏。因此，P-200 和 P-170 在加速空蚀 30 min 后的质量损失分别为 1.7 和 3.6 mg，是 P-280 的 2.1 和 4.5 倍。综合考虑涂层的固化温度和耐空蚀性能，P-200 更适合在轻合金部件表面应用。本研究通过探究不同涂层的综合性能与空蚀性能之间的关系，为 PAI 涂层的研发提供了新思路。

### 大气等离子喷涂智能自修复热障涂层厚度优化及界面残余应力的有限元计算

赵伟玲、王亮

中国科学院上海硅酸盐研究所

与传统热障涂层 (TBCs) 相比，智能自修复热障涂层在高温服役条件下具有启动智能自修复机制，抑制裂纹扩展的能力，从而延长涂层的高温服役寿命。本文采用热力耦合有限元模拟方法，结合理想点法对智能自修复大气等离子喷涂热障涂层的厚度进行优化研究。当陶瓷层厚度为 0.26mm，自修复层厚度为 0.04mm 时，智能自修复热障涂层既能满足低残余应力要求，又能保证高隔热性能。由于各层间的热失配残余应力是导致涂层系统剥落和分层失效的关键因素。基于此，本文进一步考虑界面的形貌特性，利用计算微观力学系统研究界面不同几何特征对界面处残余应力的影响规律。结果表明，TC/TAZ 界面与 TAZ/BC 界面波峰波谷的应力相互影响，裂纹倾向于在 TAZ/BC 界面处萌生。本文深入探讨了涂层因残余应力导致的失效机理，为智能自修复热障涂层界面调控及制备工艺优化设计提供了全面的理论指导。

### 超声波固结冷喷涂 CuCrZr/W 复合涂层中微孔快速愈合机制

宋万里<sup>1</sup>、张诚<sup>1</sup>、谢迎春<sup>2</sup>、柳林<sup>1</sup>

1. 华中科技大学
2. 广东省科学院新材料研究所

微孔愈合是提高冷喷涂涂层性能的关键，但目前仍缺乏有效的微孔快速愈合策略。本研究提出通过超

声波固结技术实现冷喷涂 CuCrZr/W 复合涂层中微孔的快速愈合新策略, 并对超声波固结后的复合涂层的微观组织演变与愈合机制进行分析。W 颗粒沉积过程中将引起相邻 CuCrZr 颗粒的剧烈塑性变形, 从颗粒界面到远处依次形成非晶层、绝热剪切区及胞状晶区, 在颗粒回弹过程中易在 W 颗粒底部形成月牙形微孔。超声波固结 1s 即可将微孔宽度从几百纳米迅速缩小至几十纳米。分析表明, 在超声波固结过程中, 微孔周边的 CuCrZr 产生高应变率和快速升温, 导致 CuCrZr 的局部塑性流动, 促进微孔快速愈合。由于颗粒界面存在梯度应变和温度, 颗粒界面附近材料的塑性流动以晶粒旋转为主, 随着距离的增加, 塑性流动逐渐以晶粒旋转合并和晶界扩散为主。经超声波固结处理后, 颗粒界面附近的 CuCrZr 仍保持局部梯度晶粒分布, 且复合涂层与基体间的剪切强度提高了 24%。该研究为快速愈合冷喷涂涂层中的微孔提供了切实有效的策略。

### 冷喷涂 NiCoCrAlY 涂层沉积行为有限元模拟计算及其性能实验研究

王亮、吴倩、赵伟玲、李嘉雪、杨群

中国科学院上海硅酸盐研究所

热障涂层的高温服役性能很大程度上取决于其粘结层的质量, 而粘结层的性能又受到其化学组成和制备工艺等影响, 本文主要采用有限元显示动力学数值模拟方法系统研究了冷喷涂过程中颗粒的沉积动力学行为。通过改变颗粒的冲击速度、颗粒尺寸, 获取颗粒完全沉积在基材后的温度、等效塑性应变的变化, 颗粒和基体的变形特征, 分析预测颗粒沉积的临界速度范围, 进而指导实际制备工艺。模拟计算结果表明: 当颗粒冲击的临界速度达到 600 m/s 时, 颗粒能够有效沉积在基体上。冷喷涂(Cold Spraying, CS)和超音速火焰喷涂(High Velocity Oxygen Fuel, HVOF)制备的涂层都具有较好的结合强度, 通过对两种涂层在三点弯曲过程中的原位声发射信号进行比较分析, 发现 HVOF 喷涂制备的涂层在三点弯测试中表现出更好的抗弯性能。通过对特征信号波形进行快速傅里叶变换和小波包变换, 发现两种工艺制备的涂层试样的变形状态及裂纹扩展模态与声发射信号频率呈现对应的关系。其典型的声发射信号大致分为三类, 分别为 I 型、II 型和 III 型信号, 分别代表着基体变形、表面垂直裂纹和剪切型界面裂纹的发生。对氧化后的两种涂层样品进行表截面形貌、物相和残余应力分析, 发现在 900 °C 和 1100 °C 的氧化过程中, CS 和 HVOF 制备的涂层生成的氧化物有所不同, 在更高的氧化温度下, 硬而脆的尖晶石相更容易生成。HVOF 制备的涂层在短时间内会生成更多尖晶石相。CS 和 HVOF 制备的涂层的 TGO 层均随着氧化时间的增加而有所增厚。CS 和 HVOF 工艺制备的涂层残余应力的区别表较小, 在 900 °C 时, HVOF 制备的涂层存在有  $\theta$  相和  $\alpha$  相, 温度过高和氧化时间过长, 会伴随着  $\theta$  相向  $\alpha$  相的转变。氧化温度越高, 涂层表面残余应力越大。

### 表面等离子共振增强石墨烯基二维异质结光催化抗菌性能

王珍高、宁成云

华南理工大学

**引言:** 虽然石墨烯基二维异质结的光响应抗菌已经得到认可, 但要获得一种同时具有可见光响应、有效电荷分离和强氧化还原能力优点的高效光催化抗菌体系仍然是一个挑战。因此, 构建一个合适的异质结可以被认为是解决这些挑战的最有希望的方法之一。

**材料与方法:** 将石墨烯、PVP、甘露醇、 $\text{Bi}(\text{NO}_3)_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  和 NaCl 混合。基于水热反应, 氯氧化铋( $\text{BiOCl}$ ) 纳米片在石墨烯表面原位生长获得氯氧化铋/石墨烯异质结 ( $\text{BiOCl}@G$ )。将细菌悬浮液与光催化剂共混合在玻璃瓶中, 在  $\lambda \leq 420 \text{ nm}$  或  $\lambda \geq 420 \text{ nm}$  的模拟太阳光照射下进行光催化抗菌实验。所有密度泛函理论 (DFT) 计算均采用 Vienna Ab initio 模拟程序包 (VASP) 进行。平面波基组的截止能量为 500 eV, K 采样中使用  $3 \times 3 \times 1$  的 Monkhorst-Pack 网格 (计算总态密度 (DOS) 和差电荷密度时使用  $3 \times 11 \times 1$ 。所有原子均完全弛豫, 能量收敛公差为每原子  $10^{-5} \text{ eV}$ , 每个原子上的最终力  $< 0.05 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{-1}$ 。采用 COMSOL Multiphysics 计算石墨烯表面的电磁场。受激价电子发生共振振荡, 使反射光强度降低, 由于衰减波与表面等离子体之间的共振能量转移而产生 SPR。

**结果与讨论:** 通过简便、可扩展的软化学脱落途径制备了一种氧化氯化铋/石墨烯二维异质结光响应

抗菌剂(BiOCl@G), 并评估了石墨烯基 SPR 效应对抗菌率的贡献。石墨烯为 BiOCl 纳米片提供了均匀分布的衬底, 促进了载流子的分离。在波长小于 420 nm 的光照射下, BiOCl 上的电子被激发到导带, 迅速转移到石墨烯上, 并在共轭结构中扩散。由于波长大于 420 nm 的光照射引起的 SPR 效应而加速了传输速率。SPR 效应改善 BiOCl 催化氧生成更多 ROS, 显著增强光催化抗菌活性。

密度泛函理论计算表明, 石墨烯中的大  $\pi$  键受到 BiOCl 中 Bi 原子的强烈影响, 导致 BiOCl@G 界面处石墨烯的电荷分布减小, Bi 原子的带电性增大。在价带顶处, 态密度 (DOS) 明显增强。与 BiOCl 相比, 石墨烯在 BiOCl@G 的带隙处贡献了部分电子, 表明 BiOCl@G 具有较窄的带隙, 可被光照射快速激发。因此, 异质结构将有助于电子的转移, 导致 BiOCl 与石墨烯接触时电子密度较高。利用 COMSOL 模拟定量揭示了石墨烯对电场集中的增强效应。石墨烯表面周围的电场极大增强, 电场分布类似于水波。BiOCl 中的激发载流子在石墨烯和 BiOCl 产生的内置电场的作用下快速传输到石墨烯表面。由于低载流子密度、高电子迁移率和强等离子体极化子限制的综合作用, 传输的载流子沿等离子体波长超快速传播。

**结论:** 我们通过自下而上的生长方法开发了基于石墨烯的具有表面等离子共振增强光催化抗菌的二维异质结, 并且非常深入和系统地讨论石墨烯对二维异质结光催化抗菌的贡献。

参考文献

[1] Z. Wang, G. Liu, W. Chen, et., Chem. Eng. J. 2023, 460, 141720.

[2] Y. Fan, Z. Wang, W. Ren, et., ACS Appl. Mater. Interfaces 2022, 14, 36966.

## 高温超临界二氧化碳腐蚀环境对合金表面作用机制

李开洋、张乃强

华北电力大学

布雷顿循环利用高温超临界二氧化碳 (S-CO<sub>2</sub>) 作为工质, 构建超高参数、超高效率、结构紧凑的动力循环系统, 在燃煤火电、核电、太阳能热发电等领域具有良好的应用前景。在高温 S-CO<sub>2</sub> 环境中, 合金金属构建部件表面往往会形成一层腐蚀产物, 并影响合金后续的腐蚀行为。本研究报道了多种铁基、镍基候选材料 (铁素体/马氏体耐热钢、奥氏体不锈钢、高温镍基合金) 在高温 S-CO<sub>2</sub> 环境中的表面腐蚀产物生成情况, 系统研究了温度、压强、时间、工质流动速率、杂质气体等因素的影响, 揭示了 S-CO<sub>2</sub> 环境下的表面同时发生氧化、碳化耦合腐蚀行为, 并从合金成分设计、化学环境控制等角度提出了合理抑制碳化腐蚀的方法, 同时综合抗腐蚀性能、价格、耐用温度、力学性能、已有服役历史等考虑, 给 S-CO<sub>2</sub> 系统选材提供建议。

## 难熔中熵合金氮化物涂层的设计及腐蚀摩擦学性能研究

张存修<sup>1</sup>、王笙伊<sup>1</sup>、孙德恩<sup>1</sup>、Sam Zhang<sup>1,2</sup>

1. 西南大学

2. 哈尔滨工业大学

摩擦消耗了全世界三分之一的一次能源, 80% 的机器零部件都是因磨损而失效, 而这种情况在海洋环境下变得更加严重和复杂。与陆地情况下的摩擦不同, 机械运动部件在海洋环境下会同时遭受摩擦磨损和电化学腐蚀, 加剧材料的退化, 严重时可能造成设备停机。表面涂层技术是提高机械运动部件在海洋环境下使用寿命和服役性能的重要手段之一, 本文采用磁控溅射技术在 SS304 基体上成功制备了耐腐蚀和抗磨性一体的 TiZrMoN<sub>x</sub> 中熵合金氮化物涂层。研究了不同氮含量涂层在模拟海水中的静态电化学腐蚀和动态摩擦腐蚀行为, 从化学成分、组织结构、力学性能和磨损形貌等方面探讨了摩擦磨损机理。同时, 通过分析磨痕形貌和磨损后记录的开路电位, 量化了再钝化动力学, 评价了磨损对再生钝化膜的影响。结果表明, 随着氮含量的增加, 涂层的相结构出现由 BCC→BCC+FCC→FCC 转变, 力学性能逐渐增强。在静态条件下, 组织结构、致密度、晶界和表面化学状态是影响涂层电化学腐蚀性能的主要因素。在动态条件下, 机械性能和表面完整性显著影响涂层的腐蚀摩擦学性能。相较于金属涂层, 氮化物涂层的溶解-修复-再钝化

速率较弱，对摩擦腐蚀的敏感性较低。此外，我们对涂层的总腐蚀磨损量中各分量占比进行了量化，其中低氮含量涂层的腐蚀磨损量主要来自于纯磨损，较高氮含量涂层的腐蚀磨损量主要来自于腐蚀磨损协同作用。

### **Microstructural Evolution of HVOF-Sprayed and Inductively Remelted FeCoNiCrMoBSi High-Entropy Alloy Coatings**

Shengwei Wang

Shanghai University

This study explores an innovative approach combining High-Velocity Oxygen Fuel (HVOF) spraying and subsequent induction remelting, utilizing self-fluxing alloy powders for the efficient, large-scale production of high-quality coatings. Specifically, the microstructural evolution of FeCoNiCrMoBSi high-entropy alloy (HEA) coatings applied to the outer surface of TP347H boiler tubes is comprehensively characterized using X-ray diffraction (XRD), electron probe microanalysis (EPMA), transmission electron microscopy (TEM), electron backscatter diffraction (EBSD), and nanoindentation techniques. The results reveal that severe plastic deformation occurs in the powder particles of the HVOF-sprayed coating, leading to partial amorphization. Subsequent induction remelting promotes the formation of a thin oxide scale on the coating surface. Furthermore, this process induces self-fluxing effects, wherein Si interacts with surface metal oxides to generate protective silicates, which work alongside a Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> layer to shield the molten HEA coating from atmospheric oxidation. A small proportion of Si forms SiO<sub>2</sub>, aiding in internal pore filling and markedly reducing porosity from 17.50% to 7.63%, while B tends to form dispersed MoB<sub>2</sub> particulates by reacting with Mo within the coating matrix. The presence of distinct interdiffusion layers at the coating-substrate interface indicates strong metallurgical bonding. Nanoindentation testing provides further insights into the resultant microstructural changes. These findings advance the fundamental understanding of the HVOF spray-assisted induction remelting coating process and provide valuable guidance for the composition design of FeCoNiCrMoBSi self-fluxing alloy powders and the synergistic optimization of processing parameters to enhance the performance of HEA coatings.

### **结构功能一体化非晶复合涂层的设计与性能研究**

褚振华

上海海洋大学

与传统的晶态合金材料相比，非晶合金具有优良特性，如良好加工特性、高强度、优良软硬磁性、良好耐腐蚀性等。将非晶合金作为涂层材料，应用于材料表面技术领域，即采用现代先进喷涂技术制备大面积厚度可控的非晶涂层，既可突破非晶合金尺寸上的限制，又可充分发挥非晶合金优异的性能，起到防护作用，或形成特种物理化学性能，拓展非晶材料的应用范围。就非晶涂层而言，可采用添加第二相的方法来改善非晶性能。然而制备得到组织均匀、成分可控的复合涂层是一难点。如涂层中非晶和陶瓷相比例不可控，性能波动较大。因此，实现添加第二相成分比例可控且能均匀分布于基体，对提高非晶涂层的耐磨性具有重要意义。此外，随着现代科学技术的发展，电子产品在为人们带来方便的同时也由于辐射出的电磁波而给人们的健康、安全等造成负面影响。军事方面，各种军用电子设备，如飞机、舰船及地面军事装备辐射出的电磁波若被敌方采集便会泄露军事机密。因此，电磁波吸收材料的研究与开发，在智能制造大力发展的今天，不管在民用还是军用都具有重要的研究意义及价值。因此开发一种满足海洋复杂工况下具有高耐蚀性能，且兼具良好的吸波性能的涂层材料，具有重要的应用和科学价值。

本文研究了制备非晶复合涂层的工艺，并分析了涂层的耐蚀性能及海洋环境下的防污损性能。

## 核燃料棒表面水溶性防护涂层的制备与性能研究

雷雅萍  
南昌大学

锆合金核燃料包壳管作为堆芯放射性的第二屏障,在装配过程中容易被固定网格划伤。为了保护核包壳管在穿过骨架插入过程中可能受到的损伤,使用具有优良耐划伤性能的水溶性涂层来保护核包壳管,然后将涂层冲洗掉,以防止妨碍组件的正常运行。针对以上问题,以聚丙烯酸酯乳液为基础添加中和剂和填料制备核燃料棒表面水溶性耐刮擦防护涂层并进行性能研究。本研究以甲基丙烯酸甲酯(MMA)和苯乙烯(St)为硬单体,丙烯酸丁酯(BA)为软单体,制备聚丙烯酸酯乳液。研究单体比例、乳化剂用量、乳化剂复配比例对乳液及其涂层性能的影响,对制备的聚丙烯酸酯进行红外光谱、差示扫描量热仪、粒径、激光共聚焦分析表征。结果表明,单体  $m(\text{BA})/m(\text{St})$  的比例为 1:1,质量分数为 1%且 SDS 与 OP-10 的质量比为 3:2 的复合乳化剂,可以制得到各项性能好的乳白色带蓝光的乳液,且乳液成膜性能良好。研究乙醇胺改性对聚丙烯酸酯涂层水溶解性能的影响,得出了乙醇胺的最佳用量为 15 wt%。通过扫描电镜、差示扫描量热分析仪、水接触角等对乙醇胺改性的聚丙烯酸酯进行性能表征。SEM 结果显示,乙醇胺改性的聚丙烯酸酯涂层划痕处相较于未改性的涂层更加致密;乙醇胺的用量为 15%时涂层水接触角从 66.35°减小到 42.71°,涂层 90 °C水洗后水中无絮状物。研究改性纳米 TiO<sub>2</sub> 对涂层性能的影响,通过粒径对改性前后的纳米 TiO<sub>2</sub> 进行表征,结果显示,相较于未改性的纳米 TiO<sub>2</sub> 在水中的分散,KH570 改性纳米 TiO<sub>2</sub> 的粒径从 1.88 μm 减少到 0.054 μm,研究 KH570 改性的纳米 TiO<sub>2</sub> 加入到聚丙烯酸酯乳液中,通过 SEM、耐刮擦性能表征。结果显示,纳米 TiO<sub>2</sub> 的加入能明显改善涂层的机械性能,涂层耐刮擦性能最优。

## 钛合金表面紫外/近红外双光响应涂层的构建及抗菌性能研究

伞宏瞻<sup>1,2</sup>、赵婉誉<sup>1</sup>、田萌萌<sup>1</sup>、杨志波<sup>1</sup>、胡津<sup>2</sup>

1. 河南理工大学
2. 哈尔滨工业大学

钛及钛合金是目前骨科领域临床应用最广泛的植入材料,但制约其长期服役性能的最大障碍是植入体相关感染(IAI)。传统的植入体表面抗菌策略(涂覆溶出型抗菌剂和构建特殊的表面形貌)对 IAI 虽具有一定的预防效果,但均存在抗菌性能随时间衰退和无法精确控制的缺陷。光刺激响应策略以其在时间和空间上的可控性、非侵入性、广谱抗菌及不易诱导细菌产生耐药性等优点而逐渐受到骨科领域研究者的关注。

因此,本文通过阳极氧化法在 Ti6Al4V 表面制备了多孔 TiO<sub>2</sub> 涂层,并在涂层中引入上转换材料(UCNPs,  $\beta\text{-NaYF}_4:\text{Tm}/\text{Yb}@\text{SiO}_2$ ),使涂层兼具紫外/近红外双光响应抗菌功能。采用 XRD、SEM、EDS、XPS 研究涂层的相组成、晶体结构、形貌和掺杂情况。调控 UCNPs 的掺杂量(在电解液中浓度为 0.5 g/L-1.5 g/L),并利用紫外光降解有机染料表征涂层的紫外光抗菌性能,通过涂层近红外光照下的活性氧释放动力学和光热转换效率分析涂层的近红外光动力和光热抗菌活性。最后,以小鼠前成骨细胞 MC3T3-E1 对涂层的体外生物相容性进行评价。

研究表明:阳极氧化涂层由管状 TiO<sub>2</sub> 组成,涂层中检测到上转换材料所含的 Si、Y、Tm 等元素。在 360 nm 的紫外光照下,涂层表现出光催化活性。掺杂 UCNPs 后,试样在波长 980 nm 的近红外光照下的活性氧释放能力显著提高,且光热性能略有提升,在 3 min 的近红外光照下,试样温度均能升高至 55°C 以上。由此证实,涂层具有优异的光动力和光热抗菌活性,随着涂层中 UCNPs 浓度的升高,抗菌活性逐渐提高。在 7 天的体外细胞培养过程中,掺杂少量 UCNPs(电解液中浓度为 0.5 g/L)的涂层未表现出细胞毒性,但随 UCNPs 含量的升高,涂层表面存活细胞数量显著降低。

综上,通过阳极氧化法制备的 UCNPs 掺杂 TiO<sub>2</sub> 涂层具有紫外/近红外双光响应抗菌性能,实现了钛合金材料在植入前后的 IAI 预防和光治疗,且较低的掺杂量不会使涂层产生细胞毒性。

## 激光熔覆 NiCrBSi 合金涂层的组织与性能调控

王灿明、程浩东、张韵秋、王硕、辛志鹏、唐乃洋  
山东科技大学

激光熔覆 Ni60 涂层具有高的硬度和耐磨蚀性，是工业中应用最广泛的镍基合金之一。然而，由于激光熔覆快速加热和冷却的特点，熔覆后的 Ni60 涂层易开裂，给工程应用带来了较大的困难。Ni60 涂层通常由枝晶状的镍基固溶体、Cr 的硼化物和碳化物、Ni<sub>3</sub>Si 以及 Ni-B-Si 三元共晶组织构成。大量富 Cr 的硼化物和碳化物相析出，提高了涂层硬度和耐磨性。在涂层残余应力作用下，硬质相和合金相界面易产生应力集中，当界面应力超过其强度极限时产生局部开裂现象。为改善涂层性能，大量研究主要集中在两个方面：一是加入强碳化物形成元素如 Ta、Ti、Nb 等，通过固溶强化和析出相强化提高涂层性能，二是加入陶瓷颗粒如 WC、Cr<sub>3</sub>C<sub>2</sub>、TiC 等，提高涂层中硬质相的含量。然而，上述方法在提高硬度和耐磨性的同时，也增大了涂层的裂纹敏感性。如在涂层中加入能够促进固溶相生成的合金元素，则有助于减少块状析出相的生成，减少其裂纹敏感性。基于这一思路，本文探讨了 Fe 含量及包覆纳米 TiC 陶瓷颗粒对激光熔覆 Ni60AA 合金涂层组织与性能的影响。

在 Ni60AA 中分别加入 5wt.%、10wt.%、15wt.%、20wt.%、25wt.%、30wt.%、34wt.% 的 Fe，采用激光熔覆制备涂层后，对其组织、结构和性能进行了详细的分析和探讨。结果表明，随着 Fe 含量的增加，激光熔覆 Ni 基合金涂层组织从椭球状  $\gamma$ -FCC+ 较大的块状富铬相+ $\gamma$ -FCC/(Ni<sub>3</sub>B+Ni<sub>3</sub>Si) 三元共晶组织 (Ni60AA) 逐渐转变为  $\gamma$ -FCC/(Cr, Fe)<sub>7</sub>C<sub>3</sub> 共晶组织 (Ni60AA+25wt.%Fe)，涂层中大的块状析出相逐渐消失，Cr 元素的分布更加均匀。不含 Fe 的 Ni60AA 涂层表现出最优的耐蚀性，加入 5wt.%Fe 后，涂层耐蚀性显著降低，但进一步增大 Fe 的含量，涂层耐蚀性逐渐提高，当 Fe 含量为 25wt.% 时涂层耐蚀性上升到极大值。Fe 元素的加入有助于细化合金涂层组织，抑制硬质相析出，提高 Cr 元素在涂层中分布的均匀性，有助于提高涂层的耐蚀性。但 Fe 含量过高，过量 Fe 的氧化物参与钝化膜的形成，涂层耐蚀性降低。加入 25wt.%Fe 的涂层具有和 Ni60AA 相近耐蚀性，耐磨性良好且显微硬度远高于基体。随着涂层中固溶相含量的增多、析出相减少也降低了其裂纹敏感性。为进一步优化涂层组织，研究了纳米 TiC 颗粒加入对激光熔覆镍基合金涂层组织和性能的影响。通过粉体复合化学镀 Ni-P@TiC 和 Ni-B@TiC、混合球磨的方法在 NiCrFeSiB 粉末表面包覆一层 TiC，然后用于制备激光熔覆涂层。涂层的物相主要由  $\gamma$ -Ni 和 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>/ $\gamma$ -Ni 共晶组成。Ni-B@纳米 TiC 改性的涂层中出现了微观上的双峰组织特征，纳米 TiC 颗粒分布在部分晶界处，有效地阻止了晶粒长大，TiC 密集区域的晶粒大小明显小于其他部分，涂层的裂纹敏感性进一步降低，并改善了其耐磨蚀性能。该研究为降低高速激光熔覆涂层裂纹敏感性，促进镍基合金涂层在磨蚀性环境中的应用提供了一个新途径。

### 金属双极板流道辊压成形尺寸精度评价研究

刘哲文、赵富强  
太原科技大学

金属双极板是燃料电池核心部件之一，其成形尺寸精度直接影响电池性能。辊压成形工艺具有可连续化、效率高的优点是金属双极板成形的主要路线之一。本文以 0.1mm 厚 316L 不锈钢为研究对象，首先，对比不同辊压模具参数对流道尺寸精度的影响。发现增大模具圆角半径会提高流道深度和拔模角的尺寸精度，在此基础上，建立金属双极板流道尺寸精度评价方法，以多流道深度和拔模角的尺寸精度为评价准则，对不同模具圆角半径成形的流道进行评价，优选出模具圆角半径为 0.20mm 为最佳模具参数，最终得到尺寸精度高的流道。