

Symposium E06

Materials Genomes

材料基因组

2017年7月8-12日

分会主席:

张统一

上海大学材料基因组工程研究院

谢建新

北京科技大学

王崇愚

清华大学

陈立泉

中国科学院物理研究所

张金仓

上海大学材料基因组工程研究院

联系人:

刘轶

上海大学材料基因组工程研究院

电话: 18616846006

邮箱: cmc_mgi@163.com

吕文来

上海大学材料基因组工程研究院

电话: 15221170983

邮箱: cmc_mgi@163.com

E06. 材料基因组

分会主席：张统一、谢建新、王崇愚、陈立泉、张金仓

E06-01(K)

Towards a Genome for Advanced Two Dimensional Materials

Yuan Ping Feng^{1,2*} (冯元平), Jun Zhou¹, Jiajun Linghu¹, Miguel Dias Costa², Lei Shen^{3,4}, Kristin Persson^{5,6}, Shyue Ping Ong⁷

1. Department of Physics, National University of Singapore, Singapore
2. Centre for Advanced Two-Dimensional Materials, National University of Singapore, Singapore
3. Department of Mechanical Engineering, National University of Singapore, Singapore
4. Engineering Science Programme, National University of Singapore, Singapore
5. Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, CA, USA
6. Department of Materials Science and Engineering, University of California, Berkeley, CA, USA
7. Nanoengineering Department, Jacob School of Engineering, University of California, San Diego, CA, USA

Given the enormous interest and potential applications of two-dimensional (2D) materials and the importance of discovering more 2D materials, we are in process of developing a genome for advanced 2D materials. I will give an update on the progress of this project. To generate initial data for the 2D materials database, we screened all three-dimensional (3D) materials in the Materials Project database and identified a large number of potential layered materials by applying simple rules based on inter-atomic plane spacing and bonded clusters of atoms in the structure. Exfoliation energies of these materials are calculated to identify structures that can be exfoliated into 2D materials. High-throughput first-principles calculations are then performed to obtain properties of these 2D materials. Separately, high throughput computational screening was performed on >50 2D materials and >1000 heterojunctions. Based on their band alignments, close to 100 heterojunctions were predicted to have power conversion efficiency (PCE) higher than 15% and are therefore identified as promising candidates for ultra-thin excitonic solar cell applications. In particular, 17 of them have PCE > 20% which are expected to outperform existing devices.

E06-02(I)

Optimal dopant for Sb₂Te₃ phase-change materials for data storage

Zhimei Sun (孙志梅), Zhen Li, Zhou Jian

School of Materials Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China

Sb₂Te₃ exhibits outstanding performance among the candidate materials for phase-change memory, nevertheless, its low electrical resistivity and thermal stability hinder its practical application. Hence, numerous studies have been carried out to search suitable dopants to improve the performance, however, the explored dopants always cause phase separation and thus drastically reduce the reliability of phase-change memory. In this work, on the basis of ab initio calculations, we have identified yttrium (Y) as an optimal dopant for Sb₂Te₃, which overcomes the phase separation problem and significantly increases the resistivity of crystalline state by at least double that of Sb₂Te₃. The good phase stability of crystalline Y-doped Sb₂Te₃ (YST) is attributed to the same crystal structure between Y₂Te₃ and Sb₂Te₃ as well as their tiny lattice mismatch of only 1.1%. The significant increase in resistivity of c-YST is understood by our findings that Y can dramatically increase the carrier's effective mass by regulating the band structure and can also reduce the intrinsic carrier density by suppressing the formation of SbTe antisite defects. Y doping can also improve the thermal stability of amorphous YST based on

our ab initio molecular dynamics simulations, which is attributed to the stronger interactions between Y and Te than that of Sb and Te.

E06-03(I)

具有巨磁各向异性性能的有机-金属复合低维材料的高通量计算设计

赵纪军

大连理工大学三束材料教育部重点实验室

随着磁存储密度的不断提高,要求磁存储单元不断小型化,且具有较大的磁各向异性性能,以便在外界环境中能够稳定存储磁信息而不至于出现磁极化方向翻转。同时,从合成的角度,还希望材料具有较高的热力学稳定性,易于在实验上合成。近年来,本课题组基于非共线自旋极化密度泛函理论的高通量计算,设计了几类 5d 过渡金属原子与有机分子或二维有机网络复合的新型磁性材料,每个单元(含 1 个到 2 个过渡金属原子)的磁各向异性性能超过 60 meV。例如,我们将 5d 元素与茂环组合,获得了二茂-金属复合体,或三层茂环与两个金属原子的三明治结构。再如,我们利用 5d 单原子或二聚体修饰二维肽管网络,获得了具有较高居里温度的二维铁磁阵列。

E06-04(I)

基于第一性原理计算的高通量晶体结构预测

孙建

南京大学物理学院,固体微结构物理国家重点实验室

近年来,随着计算能力的提高,高通量计算在材料模拟中作用和优势逐渐显现。第一性原理计算由于在计算精度和耗时之间比较好的平衡,在材料模拟的各个领域内有广泛的应用。本报告将简单回顾我们用高通量的计算方法,在功能材料设计,特别是极端条件下的材料设计等方面的一些工作,通过第一性原理计算和实验的紧密合作,对材料在高压下的行为有更深入的理解。

E06-05(I)

材料基因工程技术的多尺度理论研究方法在新型核能材料服役行为研究中的应用

都时禹

Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering

众所周知,在现代核电体系中,核反应堆的安全性和效率与关键部件的材料学性能息息相关。因此,对于新型核燃料的结构设计、新型核包壳材料的发展都是目前核能领域的重点研究方向。在本次报告中,我们将讨论利用材料基因工程技术,尤其是多尺度理论研究手段,对二氧化铀、硅化铀,以及 MAX 相涂层-核包壳界面、FeCrAl 合金包壳结构和性能研究的最近进展。我们在工作中,预测了空隙对于 UO₂ 高温烧结下结构演化的影响机制,我们利用双晶粒模型的理论计算,发现孔隙率和孔隙尺寸会从气泡吸收和生长阻滞两个方面影响异常晶粒长大行为。接下来,我们采用第一性原理,计算了 U₃Si₂ 和 U₃Si₅ 体系的电子结构及相关性质,预测了硅化铀体系的弹性常数和各种力学模量,以及缺陷形成能。在新型核结构材料的研究方面,根据材料基因思想,我们研究了 MAX 相材料作为核包壳涂层与锆包壳的界面成分选择,并探讨了包壳涂层上的 He 原子捕获机理,发现了不同形状的 He 泡的形成机制。最后,我们应用材料基因的大数据方法,发现了 FeCrAl 等合金包壳材料的热学和力学行为与其成分之间的关联。本次交流报告的成果有望推动核能材料理论研究的发展。

E06-06(I)

基于第一性原理的相图计算在材料设计中的应用

陈亮

中国科学院宁波材料所

相图计算可以揭示多元体系在热力学条件下的反应以及相变过程，从而为实验提供有益的指导，随着计算机运算能力大幅提高以及相关程序的开发，相图计算在新型功能材料设计和开发中做出了很大的贡献。我们结合基于第一性原理的相图计算、集团展开和蒙特卡洛等方法，研究了 PtTiO_x 和 $\text{Co}_x\text{M}_{1-x}\text{P}$ 等材料的结构与电子结构，分析了该体系在不同条件下的相平衡以及热力学变化过程，预测了一些新型结构。此外，也解释和预测了这些新结构在氧化和还原条件下发生的相变行为，以及在气体吸附与催化中的应用。

E06-07(K)

先进材料及结构的跨尺度力学

魏悦广

北京大学工学院

先进材料因其高强高韧等优异性能在航空航天、现代工业、国防等高科技领域获得广泛应用。先进材料主要由微结构设计构造而成，其宏观力学行为表现出强烈的微结构依赖性，即跨尺度力学行为，而传统力学理论难以刻画该情况。如何从理论和实验上表征这种跨尺度力学行为、为建立先进材料及结构的标准规范建立科学基础以及有效地指导先进材料的设计制造等，是面临的核心科学问题和重大应用需求。报告人系统地介绍固体材料及结构的跨尺度力学研究方面的进展，主要内容包括：“自上而下”(Top-Down; 由宏观向微观过渡)的跨尺度力学理论和方法的建立以及最新研究进展；基于“自下而上”(Bottom-Up; 由微观向宏观过渡)的跨尺度力学模拟和实验测量的研究进展；关于“自上而下”跨尺度力学方法与“自下而上”跨尺度力学方法的关联；跨尺度力学理论和方法应用于刻画先进热障涂层的损伤演化及灾变以及跨尺度力学的其他相关研究简介；未来发展展望，等等。

E06-08(I)

二维范德华异质结高通量计算

程迎春

南京工业大学

自 2014 年石墨烯发现以来，二维材料逐渐引起大家的关注。二维材料可分为金属、磁体、半导体和超导体等，可谓性质各异。如果将不同性质的二维材料叠起来形成二维范德华异质结，这些异质结将表现出更加五彩缤纷的性质，有望应用于多种不同的器件。目前，实验和理论计算都有多种不同异质结的报道，然而，目前的研究都是零散的。针对二维材料结构的特点，本课题组开展了二维范德华异质结高通量设计与计算，构建了二维材料、二维异质结材料的数据库，并从中筛选出应用于不同领域的二维异质结。

E06-09(I)

尾气净化复合催化剂的精准设计与可控制备

单斌

华中科技大学

我国汽车产业在进入 21 世纪后获得快速发展，2016 年我国机动车产销量达到 2811 和 2802 万辆，连续 8 年成为全球最大的汽车产销国。汽车产业的快速增长及汽车保有量的持续增加带来了日益严重的城市交通拥堵和严城市环境污染问题，机动车尾气排放的严格治理势在必行。

负载型机动车尾气净化催化剂一般催化剂采用 Pt、Pd 和 Rh 等贵金属组分作为活性组份；载体的主要成分为具有高比表面积和优异的热稳定性的氧化物。调控贵金属-氧化物的界面相互作用对催化活性有着重要的影响。我们基于材料基因组的精准设计思想和基于原子层沉积技术的可控制备，系统研究了金属-氧化物界面上包括 CO 氧化、NO 氧化在内的基元反应的反应机理。

在活性氧化物表面催化方面，我们通过对活性位中心化学环境的筛选，发现莫来石型的 SmMn_2O_5 活性氧化物表面的二聚体结构能够提供更好的氧分解的活性位点；进一步通过微动力学方法，揭示了不同掺杂原子 (La, Ba, Sr) 对于 Eley-Rideal 和 Mars-van-Krevelen 两种不同活化机理的影响，为进一步优化这种新类型的氧化物活性提供了指导。在金属-氧化物复合体系方面，我们基于第一性原理方法理性设计了 $\text{Pt}/\text{SmMn}_2\text{O}_5$ 的界面结构，并预测了界面双功能反应活性位点能够有效解决 CO 在 Pt 表面的毒化问题。我们进一步利用原子层沉积方法，精确制备了预测的 $\text{Pt}/\text{SmMn}_2\text{O}_5$ 界面结构。由于界面的强相互作用，该结构表现出了优异的低温 CO 氧化活性，并且原位漫反射红外和 ^{18}O 同位素标记测试证明了与理论预测一致的界面反应机理。

该研究是材料基因组的研究方法在尾气净化催化剂研发中的探索和尝试应用。

E06-10(I)

材料基因组方法对锂电池中固态电解质材料研究的促进

王雪龙, 肖睿娟, 李泓, 陈立泉

中国科学院物理研究所

当前由于 CO_2 排放导致的全球变暖是全世界共同面对的环境问题，发展电动汽车和可再生能源技术以减少 CO_2 的排放成为当务之急。因此急需开发具有高能量密度、长循环寿命和更加安全的可充放电电池。全固态锂电池作为下一代锂电池的主要研究方向，已成为全球的研究热点。开发新的固态电解质是发展全固态锂电池的关键。材料基因组方法 (MGI) 是提高新材料研发和优化的有效方法。我们以 $\beta\text{-Li}_3\text{PS}_4$ 为例，通过 MGI 方法优化了该材料的综合性质。通过将基于密度泛函的模拟和基于键价的半经验计算结合，我们编写了离子输运性质评估的高通量自动运算流程。使用该运算流程，我们评估了 200 多种基于 $\beta\text{-Li}_3\text{PS}_4$ 结构的衍生化合物的离子输运性质。其中，氧掺杂和锌-氧共掺杂被预测为有效提高 $\beta\text{-Li}_3\text{PS}_4$ 离子电导率和相稳定性的方案，并通过实验得到了进一步验证。进一步的，通过综合氧化物固体电解质和硫化物固体电解质的优点，我们设计了一种全新的氧硫化物固体电解质 LiAlSO ，理论计算表明，这种结构中具有宽的能隙和势垒极低的锂离子通道，可以作为下一代固态锂电池的备选电解质材料。

E06-11(K)

多孔材料基因组计划初探

卢天健

西安交通大学

本文提出多孔材料基因组计划的概念。该计划与致密材料基因组计划有较强的类比性。原子的性质和排列包括晶体结构和缺陷决定了材料的内在性能，例如，fcc 和 bcc 结构通常比 hcp 结构有更好的延展性，fcc 相的扩散系数通常低于 bcc 相扩散系数等，因此晶体结构包含着大量有关材料性能的信息。与此类似，多孔材料的拓扑结构，包括孔结构构型、孔的分布形态和制造缺陷等信息，对多孔材料及其构成结构的宏观性能有着决定性影响。例如，随机多孔材料不是最佳承载材料但具有吸能、散热、吸声等特殊功能；相较于孔隙均匀的泡沫材料，孔隙连续变化的泡沫材料具有更高吸能能力；规则多孔材料如蜂窝结构具有优异的综合力学性能，金字塔结构具有优异的力学性能，同时其开孔的结构有利于承载-散热多功能一体化设计；利用不同多孔材料的功能互补原则、界面耦合约束机制和微孔构型设计理论，还可设计泡沫金属填充点阵金属的混杂多孔金属，该新型多孔金属兼具点阵金属的高强度和泡沫金属的高延展性，同时具有优异的抗爆炸毁伤能力。

E06-12(I)

Speeding up GW Calculations to Meet the Challenge of Fast and Accurate Excited States Calculations

Peihong Zhang

University at Buffalo, SUNY

Although the GW approximation is recognized as one of the most accurate theories for predicting materials excited states properties, large scale GW calculations remain a major challenge because of the unfavorable scaling of the computation cost and the convergence issue. In particular, under-converged calculations may lead to false predictions, compromising the predictive power of this highly successful method. Recently, we have developed an efficient and simple-to-implement method that can drastically accelerate fully converged GW calculations, enabling fast and accurate quasiparticle calculations for complex materials systems. A speed-up factor of nearly two orders of magnitude can be achieved for systems containing hundreds of atoms. Our method can be applied to GW calculations for bulk systems, 2D materials, as well as nanostructures, enabling fast and accurate screening for materials with desired excited states properties.

E06-13(I)

Electrons to Phases: An Integrated Computational Materials Engineering (ICME) Study of Mg Alloys

William Yi Wang^{1,2}, Jun Wang¹, Shilei Li³, Jian Zhu³, Bin Tang¹, Shunli Shang², Yi Wang², Kristopher A. Darling⁴, Hongchao Kou¹, Yandong Wang³, Xidong Hui³, Laszlo J. Keckes⁴, Jinshan Li¹, Zi-Kui Liu²

1. State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Shaan Xi 710072, China

2. Department of Materials Science and Engineering, The Pennsylvania State University, University Park, PA 16802, USA

3. State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

4. U.S. Army Research Laboratory, Aberdeen Proving Ground, MD 21005, USA

Here we show the strategies to strengthen Mg alloys through modifying the matrix by planar faults and optimizing the local lattice strain by solute atoms¹, thus, to develop advanced Mg alloys. On one hand, through utilizing the high-throughput first-principles calculations, a comprehensive study of effects of alloying elements (X) on the stacking fault (SF) energy, segregation energy, bulk modulus, shear modulus, Poisson's ratio, ideal shear stress, and bond strength has been completed, providing insights into the impact of X on the partial dislocation width in Mg^{1,2,3}. Here, the X includes Al, Ca, Cu, Fe, K, Li, Mn, Na, Sn, Sr, Si, Y, Zn, Zr. The anomalous shifts of the local phonon density of state of SFs⁴ and long periodic stacking ordered structures (LPSOs)⁵ toward the high frequency mode are revealed by HCP-FCC transformation, resulting in the increase of vibrational entropy and the decrease of free energy to stabilize the SFs and LPSOs. In views of the bonding charge density^{4,5,6}, the electronic density of states and the electron work functions⁷, the electronic redistributions caused by the fault layers and solute atoms are applied to reveal the electronic basis for the "strengthening" of Mg alloys. On the other hand, the transition of local atomic environment from HCP to FCC captured by *ab initio* molecular dynamic simulations is experimentally studied by a "fast-cooling plus annealing" approach. Two different annealing approaches under in-situ synchrotron X-rays and a high magnetic field⁸ respectively, are applied to reveal the contributions of heat, electrons and magnetic forces to the HCP-FCC transformations in high strength Mg-Zn-Y alloys^{9, 10}. The present work demonstrates that the data-driven integrated computational materials and Engineering (ICME) approach, which combines the bottom-up computational design and the top-down experimental engineering, is an effective approach to discover novel advanced materials.

E06-14(K)

高强钛铝合金的计算辅助设计

杨锐

中国科学院金属研究所

钛铝金属间化合物正在成为新型航空发动机的关键材料，钛铝低压涡轮叶片在大涵道比民用航空发动机上的应用对于发动机减重、减排和降噪均具有重要意义。新一代钛铝合金需要提高强度和应用温度，但强化的合金化方案通常也导致脆化。合金成分设计依赖于在对成分-显微组织-性能关系的透彻理解基础上的多参数优化。我们试图采用计算-数据库-实验相结合的材料基因工程方法研究该问题，对高强钛铝合金中具有特殊地位的 β - ω 相变过程及合金化效应进行计算预测并与实验结果进行对比。在钛铝合金中形成硼化物是调整晶粒尺寸、改善显微组织的重要方法，本报告也简要介绍我们对该问题研究的初步结果。

E06-15(I)

稀有金属材料的高通量微纳米力学性能表征

崔予文，常辉，周廉

南京工业大学

本文提出将扩散多元结技术与金属材料的实际热（机械）处理工艺相结合，以先进微区成分及微纳米力学性能表征技术高速地扫描挖掘材料在热处理加工状态下的相组成、微观组织和机械性能。该方法在 Ti、Co、Mg 等合金体系中得到了示范验证，高通量快速获得了相应各合金体系的成分-工艺-组织-微纳力学（含强度、模量、硬度、CRSS 及蠕变等）的定量关系图谱，并最终发展成为合金强化机制的新型定量研究工具，为材料基因工程理念下的新材料研发和设计提供了新的模式。

E06-16(I)

Virtual substrate method for nanomaterials characterization

Bo Da^{1,2,3}

1. Magnet Materials Group, Center for Materials Research by Information Integration, National Institute for Materials Science
2. Surface Chemical Analysis Group, Nano Characterization Unit, National Institute for Materials Science
3. Data Science Group, Center for Materials Research by Information Integration, National Institute for Materials Science

Characterization techniques available for bulk or thin-film solid-state materials have been extended to substrate-supported nanomaterials, but generally non-quantitatively. This is because the nanomaterial signals are inevitably buried in the signals from the underlying substrate in common reflection-configuration techniques. Here, we propose a virtual substrate method [1], inspired by the four-point probe technique [2] for resistance measurement as well as the chop-nod method [3] in infrared astronomy, to characterize nanomaterials without the influence of underlying substrate signals from four interrelated measurements. This method is an attempt to introduce general informatics idea into measurement technologies to extract and reconstruct those incomplete information (latent information) of target material hidden in individual measurement into complete information with physical meaning (manifest information) by applying lessons learned from several interrelated measurements. Implementing this method in secondary electron (SE) microscopy, a SE spectrum (white electrons) associated with the reflectivity difference between two different substrates can be tracked and controlled. The SE spectrum is used to quantitatively investigate the covering nanomaterial based on subtle changes in the transmission of the nanomaterial with high efficiency rivaling that of conventional core-level electrons. The virtual substrate method represents a benchmark for surface analysis to provide “free-standing” information about supported nanomaterials.

References

[1] Da, B. *et al.* Virtual substrate method for nanomaterials characterization. *Nature Communication*, in press 2017.

[2] Miccoli, I., Edler, F., Pfnür, H., & Tegenkamp C. The 100th anniversary of the four-point probe technique: the role of probe geometries in isotropic and anisotropic systems. *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 223201 (2015).

[3] Glass, S. *Handbook of Infrared Astronomy*. (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999).

E06-17(I)

定位于材料基因组计划的多元合金互扩散系数数据库的高通量建立及应用

张利军

中南大学

多元合金的互扩散系数矩阵可全面表征任一合金元素的扩散能力。因此，获得多元商用合金不同元素随成分和温度变化的精准互扩散系数矩阵是进行合金设计的关键。本文首先概述当前合金互扩散系数的现状及用于互扩散系数测定的方法。由于传统 Matano-Kirkaldy 及其扩展方法效率低，文献中鲜有三元及更高元合金互扩散系数矩阵的报道。随后介绍了本研究小组最近基于 Fick 第二定律和原子移动性概念发展起来的新型数值回归方法及通用程序 **hitDIC** (**high-throughput Determination of Interdiffusion Coefficients**)，可用于任意组元合金精准互扩散系数矩阵的高通量测定。接着以几个代表性的二元、三元和四元合金为例详细阐述了新型数值回归法及 **hitDIC** 程序用于合金互扩散系数矩阵高通量测定以及测定结果的可靠性验证过程。最后介绍了新型数值回归法和扩散偶/扩散节技术结合方法在镍基高温合金 γ 和 γ' 相互扩散系数数据库高通量建立中的应用及进展。通过对比不同元素在镍基高温合金中的互扩散系数，初步提出新一代镍基高温合金中 Re 的可能替代元素及合金成分设计的关键，并指出镍基高温合金互扩散系数矩阵测定的下一步工作和互扩散系数矩阵高通量测定的发展方向。

E06-18(K)

基于扫描探针的高通量材料表征实验及大数据分析

李江宇

中国科学院深圳先进技术研究院

材料基因组方法要求发展高通量的材料实验表征技术及相应的数据分析手段，而扫描探针为快速表征微区成分梯度变化的材料提供了可能。本文以材料的力电耦合性能作为示例，运用一系列新型原子力显微技术，得到材料在一系列不同实验条件下的局域响应，并通过主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 等多元统计方法，提高信噪比，降低数据集的维度，提取关键的对应材料物性的关键物理信息，并探讨其在材料信息学中的应用。

E06-19(I)

基于同步辐射与中子衍射技术的材料力学行为高通量表征

王沿东

北京科技大学，新金属材料国家重点实验室

深入开展材料与工程部件微观力学行为研究，特别是原位形变过程中多尺度应力场演化及局域损伤过程，是建立微观组织—材料过程—性能/服役行为定量关系的关键。通过材料微观组织与力学行为高通量表征技术的研究，将加速新材料研发，提升工程部件服役评价可靠性，促进工程部件制造成本的降低，最终推动材料基因组研究计划的实施。本报告将汇报我们课题组在基于同步辐射与中子衍射技术，开展材料力学行为高通量表征研究的最新进展。工程材料多尺度微结构单元包括各种相、相分布、多尺度微观应力状态及晶粒择优分布（织构）。这些广义微观组织参量在使用过程中演化特征与工程部件服役行为密切相关。快速、无损、原位地检测出这些多尺度微观组织参量在制备与使用环境下的演化规律，一方面为发展

与验证跨尺度的各种热机械模型提供重要验证工具与基本实验数据；另一方面也可以揭示重要工程材料与部件在服役过程中的失效物理机制，从而提出质量控制关键微观参量。我们提出基于中子衍射技术，结合同步辐射源的高能 X 射线衍射、X 射线微束衍射技术等，实现三维体试样应力场及其它微观组织量的多级构建新方法，可以实现应力、温度等真实环境下（微米尺度）晶粒范围微应力/应变分布、晶粒取向演化的原位测量。由于中子具有高穿透能力，利用中子衍射技术可以无损测量大型（航空航天、核及轨道交通等行业）关键工程部件在制备与服役过程中形成的宏观与各类微观应力，为发展工程部件服役准确定量评估的新一代系统工程奠定基础。本报告将结合本课题组开展的 fcc、bcc、hcp 金属微观力学行为研究最新进展，呈现形变过程中多尺度应力场演化及疲劳导致的局域损伤行为。

E06-20(I)

陶瓷基因组：界面与扩散的博弈

顾辉

上海大学材料基因组工程研究院

与金属体系的单元素结构基础有所不同，无机非金属材料尤其是陶瓷体系的结构起点是二元化合物，阴阳离子的化学配比给其结构关系带来新的研究框架及基础问题。尤为突出的是掺杂固溶在二元、三元化合物中同时可以具有本征及非本征的结构特性，全范围的连续固溶体也非罕见。关注多元结构-成分关系的协同作用、制约与调制机制，这是相图与微结构研究的交汇领域，其中尤其是相界与晶界起到不可或缺的作用。因此，针对陶瓷及多元化合物体系开展跨尺度微结构关系研究，不但可以协同推进微观界面“自下而上”和宏观相图“自上而下”两种研究范式的碰撞和博弈，还可平行对比界面、扩散这两种介观动力学驱动力的竞争、博弈与互动，从而构成材料基因组学的一个典型的、“立体化”研究体系，并形成与芯片筛选式、以高通量计算与实验为主体的材料基因组技术及工程研究相参照的不同研究模式。

E06-21 (K)

基于材料基因组理念的新型 Co-V 基高温合金的设计与开发

刘兴军，王翠萍，阮晶晶，许伟伟

厦门大学材料学院

福建省材料基因工程重点实验室

随着国防科技的迅猛发展，新一代的航空航天飞机对其发动机涡轮叶片材料的承温能力提出了更高的要求。Ni 基高温合金由于熔点的限制，其服役温度已难于满足航空航天工业进一步发展的需求。寻找下一代新型高温合金以满足更高效航空发动机的需求是国内外学术界和产业应用领域共同关注的焦点。2006 年，石田清仁教授课题组在 Co-Al-W 合金中发现了具有 $L1_2$ 结构的 γ' -Co₃(Al,W)相，使得新型 Co 基合金依靠 γ' 相强化而获得优异的高温力学性能成为可能。而且，Co-Al-W 基高温合金的熔点比 Ni 基高温合金高出 50~100 °C，有望成为下一代高温结构材料。然而，新型 Co 基高温合金存在 γ - γ' 两相成分区过窄，合金的成分和组织稳定性不易控制等问题，因此开发新的 Co 基合金体系尤为重要。

本研究基于第一性原理计算方法、相图计算和相场组织模拟，系统研究和优化了新型 Co-V 基高温合金的成分、组织稳定性、热力学性质和弹性力学性能。针对合金化元素在 γ' 相中的择优占位情况及其对结构稳定性的影响开展研究工作，揭示了合金化元素对 γ' 相弹性性质的影响规律。通过相图计算建立和完善了新型 Co 基高温合金的热力学数据库，为合金成分设计提供理论基础。利用相场模拟研究了热处理工艺对合金微观组织的演化规律和微观组织控制方法。基于上述理论计算结果，本课题组采用合金法，结合电子探针、X 射线衍射、差示扫描量热仪和透射电镜测定了 Co-V-X (X: Ti, Ta, Mn, Mo)三元系实验相图，并对合金成分进行设计和优化。针对 Co-V 基合金中的相结构、稳定性、组织演变和力学性能等方面开展实验研究。实验结果表明，制备出的部分 Co-V 基高温合金的 γ' 相固溶温度和高温力学性能不仅高于 Co-Al-W 合金，也与商业化镍基高温合金 IN-939 相当。

E06-22(I)

轻合金单一热力学、热物性数据库及其应用

杜勇¹, 刘树红¹, 汪炯¹, 李凯¹, 孔毅¹, 蔡丹², 徐凯¹, 刘钰玲¹, 梁永鹏¹, 张宇慧¹, 刘辉新¹, 石辰莹¹

1. 中南大学粉末冶金国家重点实验室, 中德“微结构”联合实验室
2. 材料科学与工程学院, 桂林电子科技大学花江校区

铝合金、镁合金、钛合金和铜合金的性能优良,资源丰富,是广泛应用于航空、汽车、高铁等领域的轻质结构材料。在促进装备的轻量化方面,这些材料既相互竞争,又相互补充。轻合金工业生产的“工艺-结构-性能”之间是一个非常复杂的关系,单纯依靠实验来进行材料研究即耗时又费力。集成计算材料工程通过整合多尺度的模型和关键实验来设计材料组成及其相关制造工艺,能实现新材料的高效研发。高质量热力学、热物性数据库是实现可靠多元多相合金制备过程微观结构演变定量描述的有效途径。

目前,国内外科学家主要采用相图计算方法 (CALPHAD: CALculation of PHase Diagrams) 构建热力学和热物性数据库。研究者已分别建立了多元铝合金、镁合金、钛合金和铜合金的热力学数据库,但这些数据库往往仅局限于某一成分范围内。虽然国内外学者对材料热物性开展了大量研究,但目前缺乏系统的热物性性质数据库。

本工作通过集成关键实验、相图计算方法和第一性原理计算试图建立具有自主知识产权的通用铝合金、镁合金、钛合金和铜合金的轻合金单一热力学和热物性质(扩散系数、粘度、热导率、体积)数据库。目前,该数据库已包含铝合金、镁合金常用元素,铜合金的部分元素的热力学及热物性质。

该数据库可直接用于铝合金、镁合金凝固过程的微结构表征,也可跟相场模拟、透射电镜、三维原子探针相结合实现多元多相轻合金凝固及时效强化过程微结构演变的定量描述。

E06-23(I)

一个高通量材料集成计算平台简介

杨小渝

中国科学院计算机网络信息中心

目的: 材料基因工程强调新材料研发过程中的实验与计算和数据”三位一体“的结合。一些用于帮助新材料理论设计的方法和手段,如结构筛选,元素替代,性能与成分优化等,均涉及到高通量材料计算模拟。并在此数据积累的基础上,结合实验数据,通过机器学习/人工智能方法预测材料成分及其性质等。因此一个集成高通量计算和计算数据的平台,对帮助加快新材料的研发尤为重要。

方法: 我们研发了一个高通量材料集成计算平台 MatCloud。MatCloud 旨在降低 VASP 使用门槛,支撑材料基因工程。MatCloud 直接与计算集群相连,提供图形化建模工具,支持复杂计算流程设计等。实现了大规模第一性原理计算的作业在线提交和监控、结果分析,数据自动提取、数据的规范化加工、及数据的自动存储等功能。

结果: 目前 MatCloud3.0 已初步开放给用户测试用。用户无需下载任何软件和插件,只需网页浏览器,通过帐号、密码登陆 <http://matcloud.cn> 即可使用。用户需自带 VASP 软件版权。

结论: 通过研发一个将高通量计算、计算数据、以及计算资源相集成的图形化和网络化的信息平台,能有效方便用户开展高通量材料计算,统一集中管理不同用户愿意开放出来的计算数据,有利于倡导数据共享,从而帮助加快新材料的研发。

E06-24(I)

Thermoelectric Materials Design with Materials Genome Initiative Approach

朱虹

上海交通大学

Materials genome initiative to accelerate materials innovations through the integration of experiment, computation and data is becoming a global action. Within recent years, high-throughput computations have been applied to screen tens of thousands of materials to find better materials for batteries, solar cells, catalysts, and hydrogen storage. In this talk, I will first discuss the high-throughput computation softwares to generate, store and analyze large materials data sets. Next, I will show how such a combined effort lead to the discovery of a new family of thermoelectric materials with a measured zT of 0.8 as well as the finding that effective mass and fermi surface complexity factor correlates with the thermoelectric performance.

E06-25(O)

Ti-X (X = Cr, Hf, Mo, Nb, Sn, V, Zr) 二元系扩散系数研究

朱礼龙¹, 蔡格梅², 江亮¹, 金展鹏², 赵继成³

1. 粉末冶金国家重点实验室, 中南大学, 长沙, 湖南 410083
2. 材料科学与工程学院, 中南大学, 长沙, 湖南 410083
3. Department of Materials Science and Engineering, The Ohio State University, Columbus, OH 43210, USA

精准可靠的热力学和动力学数据库是指导新型结构钛合金和生物医用钛合金设计的关键基础。本文通过一组 Ti-TiAl-Cr-Hf-Mo-Nb-V-Zr 扩散多元系系统研究了 Ti-Cr、Ti-Hf、Ti-Mo、Ti-Nb、Ti-V 和 Ti-Zr 六个二元系的扩散行为。同时, 采用传统的固态扩散偶 (SSDC) 及最近发展的固液扩散偶 (SLDC) 研究了 Ti-Sn 二元系的扩散行为。利用电子探针 (EPMA) 获得 Ti-X (X = Cr, Hf, Mo, Nb, Sn, V, Zr) 扩散偶在相应扩散层中的浓度分布曲线, 并利用拟合浓度曲线的 Forward-Simulation 方法提取 Ti-X 体系中 β 相的相互扩散系数和杂质扩散系数。结果表明: 本研究测得的 26 组杂质扩散系数与文献数据吻合非常好, 并且测得的相互扩散系数也与文献数据一致。

E06-26(O)

C-Co-Fe-Ni-W 硬质合金体系的热力学研究

周鹏¹, Walter Lengauer², Christoph Buchegger², 彭英彪³, 杜勇³

1. 湖南科技大学材料科学与工程学院
2. 维也纳技术大学化学技术与分析所
3. 中南大学粉末冶金国家重点实验室

硬质合金是一种广泛应用于切削加工领域的多元多相材料, 开展多元硬质合金的相图热力学研究并建立相应的数据库, 将在未来设计新型硬质合金的过程中起到非常作用。本工作通过实验和 CALPHAD 方法对 C-Co-Fe-Ni-W 体系展开了系统的热力学研究, 并在此基础上开展了 WC-(Fe,Co,Ni)硬质合金的显微结构及性能研究。

通过热力学计算设计了 34 个 C-Co-Fe-Ni-W “模型合金”, 利用 DSC 对这些合金进行检测获得了该五元系关键相转变信息, 并细化了该五元系的热力学描述, 计算相图与实验数据吻合良好。并预测了 WC-(Fe,Co,Ni)硬质合金烧结区域的温度投影图。针对四组 WC-(Fe,Co,Ni)硬质合金样品的热力学计算与实验研究, 发现渗氮能够改变硬质合金中的碳势及其扩散行为, 从而对表面附近的微结构产生显著影响。

E06-27(O)

硫族类金刚石化合物通道及输运优化的高通量研究

席丽丽, 李鑫, 杨炯, 张文清

上海大学材料基因组工程研究院

类金刚石化合物是一类有发展前景的热电化合物, 近几年其研究得到了广泛关注。前期研究表明 Cu_2SnSe_3 , Cu_2Se 化合物中存在类似方钴矿材料框架的导电通道, 在通道外进行掺杂可以优化材料热导率及

载流子浓度而不改变材料的本征电输运特性，从而达到材料电热协同调控的目的。本工作通过第一性原理计算，结合高通量计算及数据挖掘技术，系统研究了 200 多种硫族类金刚石化合物的价带化学键特性及输运性能。研究发现，硫族化物价带顶基本是 d-p 反键或者非键态，价带顶附近输运主要由硫族元素的 p 电子态决定，分别形成以 S, Se, Te p 电子态为主导的导电通道。进一步分析表明 Cu 的 d 电子相对 p 电子更加局域对输运性能贡献较小。通过高通量分析方法对输运性能进行分析，发现同样载流子浓度下，塞贝克系数从高到低依次为 S, Se, Te 化物。而最优功率因子由于碲化物带边群速度较大，从高到低依次为 Te, Se, S 化物，这一结果与已有的实验比较吻合。S, Se, Te 的差别可以通过价带顶的电子离域化程度表示，这也决定了从 S—Se—Te 化合物性能的变化规律。这一研究为后面高通量设计提供了思路，对热电材料性能优化与设计提供理论基础。

E06-28(O)

基于特征单元的连铸坯凝固过程热模拟

仲红刚

1. 上海大学省部共建高品质特殊钢冶金与制备国家重点实验室
2. 上海大学材料基因组工程研究院

连铸钢坯冷却过程中绝大部分区域是由表面向中心的“顺序凝固”，但是其固液界面推进速率、固液界面前沿的温度和温度梯度是不断变化的。抽取从表面到中心的一个小的单元可基本代表铸坯的凝固过程，该单元可视为铸坯凝固特征单元。上海大学先进凝固技术中心（CAST）研制了连铸坯枝晶生长热模拟试验机，该装置采用水平单向凝固方法模拟连铸坯中特征单元的凝固过程，通过控制炉内温度梯度和电炉拉伸速率，实现连铸坯凝固过程固液界面温度梯度和枝晶生长速率的热模拟。

装置主要特点：（1）原位浇注，实现钢水与连铸结晶器接触时的激冷效果，从而模拟结晶器内的凝固过程；（2）枝晶水平方向生长，模拟铸坯凝固过程枝晶生长方向，消除重力影响；（3）温度梯度和枝晶生长速率的实时控制，模拟铸坯凝固过程不断变化的温度梯度和坯壳生长速率；（4）液淬功能，随时中止凝固过程，实现对铸坯凝固过程任意时刻凝固界面的观察和检测。

利用连铸坯枝晶生长热模拟试验机模拟了双相不锈钢、铁素体不锈钢、高碳钢等典型钢种的铸坯凝固过程，热模拟试样的凝固组织与连铸坯具有较高的相似性，能够反映连铸工艺参数对铸坯凝固组织的影响规律，可大为减少连铸工业试验次数，为新钢种制定连铸工艺提供了高效率、低成本的实验手段。同时，特征单元热模拟的凝固组织也为数值仿真提供了实验验证条件，为钢凝固组织预测模型的优化和发展提供了支持。

E06-29(K)

材料基因芯片技术发展趋势

项晓东

南方科技大学

E06-30(I)

组合材料芯片高通量制备与表征技术进展

刘茜

中国科学院上海硅酸盐研究所

组合材料芯片高通量制备与表征技术是材料基因组工程的三大核心之一，是当前加速新材料研发进程及传统材料改性升级的先进实验方法，是在现实空间获得材料筛选/优化数据和验证依据的基础平台核心技术，发展高通量制备与表征技术已成为材料创新和研发领域及新兴装备制造领域的热点，充满机遇和挑战。

本文综述了近几年国际无机功能材料组合材料芯片高通量制备与表征技术的进展，并选取两类典型高通量制备与表征技术展示示范应用的效果。

第一类：以粉体样品的高通量连续水热流合成 (High-throughput continuous hydrothermal flow synthesis) 制备技术为典型。该技术结合前躯体溶液混合系统，超临界水纯化系统及冷冻干燥系统于一体，适用于制备种类广泛的无机纳米粉体材料芯片（或称样品库），在优化筛选透明导电材料、燃料电池电极材料、光催化剂、LED 荧光粉等体系获得示范应用。

第二类：以基于甲醇氧化的低温燃料电池电催化剂的高通量表征技术为典型。该系列材料以含 Pt 的二元、三元、四元薄膜材料芯片（或称样品库，物理沉积方法制备）为特征，所发展的高通量表征技术涵盖荧光方法 (fluorescence method)、扫描电化学显微镜 (scanning electrochemical microscopy)、多通道微电极系统 (multichannel microelectrode systems)、多电极半电池测试 (multielectrode half cell) 以及多电极全电池 (multielectrode full cell) 测试方法等，展示了其在低温燃料电池高效电催化剂优化及筛选的示范应用。

E06-31(I)

Accelerated Discovery of Large Electro-Strains in BaTiO₃-based Piezoelectrics using Machine Learning and Optimization

Dezhen Xue (薛德祯)

State Key Laboratory for Mechanical Behavior of Materials, Xi'an Jiaotong University

Finding new materials with targeted properties with as few experiments as possible is a key goal of accelerated materials discovery. Machine learning and statistical design are being adapted for the design of new materials. The machine learning algorithms build an inference model relating the targeted property to materials descriptors. The choice of the next experiment or calculation solely based on the machine model predictions is prone to be suboptimal. Thus, optimization schemes are needed for decision making to guide experiments using uncertainties to explore the vast material descriptor space. We demonstrate experimentally that balancing the trade-off between exploration (using uncertainties) and exploitation (using only model predictions) gives the optimal criterion for the design of the next experiment, especially when the initial size of data is limited.

E06-32(I)

Materials Genome Initiative Approach to the development of new functional thin film materials

Fang Mao^{1*} (毛昉), Tomas Nyberg², Urban Wiklund², Anna M. Andersson³, Ulf Jansson¹

1. Department of Chemistry–Ångström Laboratory, Uppsala University, Uppsala, Sweden

2. Department of Engineering Sciences, Uppsala University, Uppsala, Sweden

3. Insulation and Materials Technology, ABB AB, Corporate Research, Västerås, Sweden

The main objective of this work is to demonstrate the strength of the material genome initiative approach (also called combinatorial material science) as a high throughput method to explore and/or optimize new functional thin films. We have constructed a combinatorial experimental platform, including a combinatorial sputtering system, which can deposit thin films with large composition gradients in a single experiment. The friction coefficients as well as the electrical contact resistances can rapidly be measured in home-built instruments directly on the gradient films. Following a series of automatic evaluation methods, such as X-ray photoelectron spectroscopy (XPS), X-ray diffraction (XRD), Raman spectroscopy, nanoindentation, and four-point electrical resistance screening, were employed to determine the chemical composition, structure and properties of the thin films in a rapid and high through-out way.

In the present study, we demonstrate the concept to use the combinatorial approach to rapidly screen Ag-based alloy thin films for sliding electrical contact applications. The aim is to select better material with

enhanced tribological properties than Ag but also keep low electrical contact resistance. It is challenging since tribological and electrical properties are partly contracting. A rapid material screening and systematic study of the composition-structure-property relationship of the Ag-X alloys (X=Nb, Cr, W, Zr, Al) were carried out. Results show a complicated pattern of solid solutions, immiscible multiphase of alloys, or even amorphous phases for some compositions. An important result is that hexagonal phase in Ag-Al alloys can significantly reduce the friction coefficient and wear rate of Ag, in contrast, the other phases showed similar high friction and wear as pure Ag. The reason for the low friction can be attributed to the easy-shearing planes parallel to the sliding direction in the hexagonal structure.

The combinatorial approach was also applied in this work to rapidly identify the optimal deposition parameters for reactive sputtering of a complex AgFeO₂ oxide with a narrow synthesis window. The AgFeO₂ is a member belonging to the large delafossite family ABO₂ (A= Cu, Ag, Pd, Pt; B=Fe, Co, Ni, Cr, Al, Mn, etc), which received considerable attention due to their potential applications as transparent conducting oxides, photocatalysts, luminescent materials, batteries and thermoelectric materials, etc. Cu-based delafossite thin films have been studied intensely. However, to our knowledge, almost no studies have been previously published on sputtering of single phased Ag-based delafossites thin film. In this work, we demonstrate the combinatorial deposition of delafossite AgFeO₂ thin films using co-sputtering of silver and iron targets in a reactive Ar-O₂ mixture atmosphere. Rapid screenings of XRD, XPS, XRF, and Raman were employed to determine the chemical composition and phase structure. Our results show that a (00l) textured and single-phase AgFeO₂ film has been successfully deposit by the combinatorial reactive sputtering without post-annealing for the first time. The process window is very narrow and strongly dependent on deposition temperature, sputtering power, pulse frequency, O₂ flow rate, working pressure, etc.

E06-33(O)

基于高通量实验的新型钴基高温合金凝固组织演化规律

郭敏¹, 卫娜¹, 黄太文¹, 刘林¹, 张军¹, 冯强², 傅恒志¹

1. 西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072
2. 北京科技大学新金属材料国家重点实验室, 北京 100083

高通量制备与表征技术是材料基因组计划的三大技术要素之一, 可加速材料研发应用进程。本文以新型 γ' 相强化钴基合金 Co-Al-W-Ti-Ta 为对象, 采用液态金属冷却高温度梯度定向凝固设备, 通过 1 μ m/s~100 μ m/s 生长速率 (或抽拉速率) 范围内的阶梯跃增变速生长, 制备具有不同凝固组织的组合单晶合金, 以对钴基单晶合金凝固组织进行高通量研究。通过该高通量制备实验, 实现合金试棒凝固的冷却速率在 0.014K/s~1.4K/s 范围内变化, 试棒凝固组织出现平界面、胞晶、胞枝、枝晶不同生长方式的凝固组织特征, 一次枝晶间距由 216 μ m 变化到 108 μ m, 二次枝晶间距由 201 μ m 变化到 48 μ m。结果表明, 合金平胞转变速率在 1 μ m/s~2 μ m/s 之间, 胞枝转变速率在 2 μ m/s~5 μ m/s 之间。当生长速率为 5、20、50、100 μ m/s 时, 一次枝晶间距分别为 205、200、132、108 μ m, 二次枝晶间距分别为 201、90、51、48 μ m。通过对该组合试样的成分和显微组织分析, 快速建立了合金凝固冷却速率与合金元素偏析、析出相的关系。

E06-34(O)

Microstructures and Mechanical Properties of Fe-12Mn-9Al-1.2C-3Ni Steel prepared by near-rapid Solidification

张鉴磊

上海大学材料科学与工程学院

低密度 Fe-Mn-Al-C 钢不仅具有优异综合力学性能而且密度显著降低，引起了汽车行业的广泛关注。该合金体系的密度取决于 Al 元素的含量，但较高的铁素体元素 Al 含量将导致体素体含量增加、以致塑性降低。相关研究表明，亚快速凝固可以直接制备性能优良的低密度高强钢，工艺简单而且可以克服传统方法中的一些缺陷，是一种有前途的制备方法。

本工作采用离心浇铸方法制备凝固亚稳 Fe-12Mn-9Al-1.2C-3Ni 合金 2.5mm 薄板，利用扫描电子显微镜(SEM)、光学显微镜(OM)和拉伸机研究奥氏体元素 Ni 对中锰高铝双相低密度钢亚快速凝固薄板组织和力学性能的影响。

结果发现 3%Ni 元素添加并不能明显提高合金薄板中奥氏体含量和力学性能，合金薄板中组成相仍然为亚稳的奥氏体和铁素体，奥氏体为主要组成相，铁素体均匀分布于奥氏体基体中。薄板热处理组织演化发现，与不加 Ni 的亚快速凝固薄板相比 Fe-12Mn-9Al-1.2C-3Ni 亚快速凝固薄板的组织热稳定性变差。

分析显示，对于亚快速凝固合金组织调控而言，不仅要考虑其热力学因素，动力学过程对其组织有更重要的影响。

E06-35(O)

稀土功能材料的理论设计与实验研究

孟君玲, 刘孝娟, 张莉芳, 姚芬, 孟健

中国科学院长春应用化学研究所

稀土元素因其独特的 4f5d 电子层而拥有特殊的光、电、磁等性能。本文利用稀土离子的镧系收缩效应以及其 4f5d 电子结构的近连续变化趋势，研究稀土功能材料的微观原子/电子结构与宏观光、电、磁性能的关系，建立材料微观组织结构与宏观性能的桥梁，推动材料基因组的进程。

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，通过理论预测优先，实验验证在后的设计思想，开展了一系列稀土功能材料的研究，最终获得稀土离子在宏观光、电、磁性能上的作用机理。旨在取代原有的以实验和经验为主的材料研发理念。

首先，我们采用第一性原理计算研究了一系列含稀土的 SOFC 阴极材料中 B 位阳离子反位无序和 A 位缺电子取代效应对电化学性能的影响。理论研究发现，B 位反位无序以及 A 位离子的缺电子取代均能够有效地降低材料的氧空位形成能，提高电极材料的导电性能。随后，我们以微观的理论预测为基础，系统的合成了一系列钙钛矿氧化物，并且进行了全面的物理化学性质表征，验证了理论计算的预测。其次，我们对 BaLaGa₃O₇: Nd, Tb 稀土激光晶体中的各种缺陷，4f5d 电子结构以及吸收光谱进行了系统的研究，提出了该体系的发光机理并给出了其他稀土离子参与发光的理论预测。第三，我们利用稀土离子的镧系收缩效应，研究了一系列铁电性和铁磁性可调的 R₂CoMnO₆/La₂CoMnO₆ (R = Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm) 多铁超晶格。其中，化学压（稀土离子半径的近连续减小）使体系的极化强度和磁性呈现准连续的升高。最后，我们对负热膨胀材料 LaCu₃Fe₄O₁₂ 中的结构相变、磁转变、电荷转移以及自旋态的翻转进行了系统的研究。

综上所述，通过理论预测，揭示了稀土离子的微观电子/原子结构与材料宏观光、电、磁性能的关系。同时，根据上述理论预测，可以进行实验上的可控制备，大大节省了新材料研发的周期。

E06-36(O)

三元系 PMnN-PZT 铁电薄膜性能的微观机理研究

张涛

西安科技大学理学院

随着微型器件技术和微纳米技术的发展，传统的铁电薄膜材料已不能满足日益快速的发展需求。对 PZT 基铁电薄膜进行掺杂改性，以期获得性能更加优异的铁电薄膜，尤其是多元系铁电薄膜优异性能的微观机理成为铁电薄膜领域的研究热点。

本工作主要采用基于密度泛函理论的第一性原理方法对 PZT 掺杂 $\text{Pb}(\text{Mn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ (PMnN) 的三元系 PMnN-PZT 铁电薄膜构建理论模型, 并对 PMnN-PZT 的几何结构和电子结构进行理论研究, 得到未掺杂以及掺杂不同比例 PMnN 的 PZT 的态密度、能带结构, 研究了 PMnN 添加对 PZT 的改性规律, 得到的结论主要如下: 适当比例 PMnN 的添加能改变薄膜的晶格参数, 但却不改变 PZT 的晶相, PMnN 的添加比例不应超过 10%。此外, 通过对多种掺杂比例的 PMnN-PZT 的总态密度和分波态密度图的对比分析, 得出随着 PMnN 掺杂浓度的增加, Mn、Nb 倾向于替代 Zr、Ti 位置, 使得结构发生畸变, 低能部分逐渐向高能量的方向移动, 高能部分逐渐向低能量的方向移动, 带宽减小, PMnN-PZT 体系的导电性能是逐渐增加。

E06-37(K)

Materials Informatics and Big Data: Realization of 4th Paradigm of Science in Materials Science

Ankit Agrawal

1. Department of Electrical Engineering and Computer Science, Northwestern University
2. McCormick School of Engineering and Applied Science, Northwestern University

In this age of “big data”, large-scale experimental and simulation data is increasingly becoming available in all fields of science, and materials science is no exception to it. Our ability to collect and store this data has greatly surpassed our capability to analyze it, underscoring the emergence of the fourth paradigm of science, which is data-driven discovery. The need to use of advanced data science approaches in materials science is also recognized by the Materials Genome Initiative (MGI), further promoting the emerging field of materials informatics.

In this talk, I would present some of our recent works employing state-of-the-art data analytics for exploring processing-structure-property-performance (PSPP) linkages in materials, both in terms of forward models (e.g. predicting property for a given material) and inverse models (e.g. discovering materials that possess a desired property). Some examples include developing models for predicting fatigue strength of steel alloys, data driven discovery of stable compounds, and microstructure optimization of a magnetostrictive Fe-Ga alloy. I will also demonstrate some online web-tools we have developed that deploy machine learning models to predict materials properties.

Such data-driven analytics can significantly accelerate prediction of material properties, which in turn can accelerate the optimization process and thus help realize the dream of rational materials design. The increasingly availability of materials databases along with groundbreaking advances in data science approaches offers lot of promise to successfully realize the goals of MGI, and aid in the discovery, design, and deployment of next generation materials.

E06-38(I)

材料智能管理系统的构建及应用

王卓¹, 王礞¹, 鲁晓刚²

1. 成都材智科技有限公司
2. 上海大学材料基因组工程研究院

2011 年美国奥巴马总统提出的材料基因组计划(MGI), 旨在比原先至少快两倍的时间开发和制造先进材料, 而成本仅为原先的几分之一, 这促使了材料信息学的快速发展。

材料信息学是信息学技术在材料学中的应用, 材料信息的智能管理分析是现代材料信息数据库的核心内容, 也是材料基因组的三大内涵之一, 为材料数据提供数据管理、分析和维护功能。

开发基于本体, 架构灵活的材料智能信息管理分析系统, 是促进材料研发的有效工具, 也是“材料基因组”计划对材料信息学的要求。

本文介绍了材料智能信息管理系统的基本框架, 以及材料知识搜索引擎与材料数据库建设进展, 并以

MatX 系统为例介绍了计算/实验数据的融合处理技术，材料设计全流程多维数据的整合管理与分析利用，在材料研发制造中的应用案例等。

E06-39(I)

非晶合金的高通量制备与表征

柳延辉

中国科学院物理研究所

与其他领域相比，金属材料性能的提升相对缓慢。尽管如此，金属材料已经是现代社会中不可或缺的一类材料。由于各行业对高性能材料的需求日益增加，金属材料的成分变得越来越复杂。这种复杂的化学成分构成了一个巨大的相空间，使得传统的材料开发方法难以在这样的空间内有效发现能满足需求的新型材料。非晶合金是一种典型的多组元合金材料，其无序原子结构赋予它们很多突出的力学、物理、化学性能。除了具有金属的特性，它们还结合了玻璃的特点，例如可通过热塑成型的方法将其加工成复杂的形状。然而，在过去几十年中，非晶合金材料的探索严重依赖于传统的“试错法”，新材料的开发效率难以满足现有需求，迫切需要新的材料开发方法，缩短研发周期。本报告将以非晶合金为例，针对这种材料的特性，介绍相关的组合制备方法和高通量表征技术，通过这些方法和技术，我们可以在短时间内制备包含大量不同成分合金的材料库，并快速筛选出性能最好的合金成分。

E06-40(I)

基于微流控技术的高通量材料制备平台

巫金波，张源，林银银，吴忠胜

上海大学材料基因组工程研究院

高通量实验是“材料基因组计划”必不可少的重要部分，20 世纪 90 年代中期，美国劳伦斯伯克利国家实验室的项晓东和 Schultz 发展和完善了现代高通量组合材料实验方法，率先展示了高通量实验的巨大潜力，随后高通量组合材料研究方法在较大范围被材料科技工业领域接受，适用的材料形态从最初的薄膜形态扩展至液体、胶体、块体、粉末等多种形态。进入 21 世纪，高通量实验与材料模拟计算、数据库充分融合，使各自的效果倍增，进入一个新的发展阶段。然而高通量材料实验技术本身也需要创新与发展，开发一系列更精准、更快速、空间密度更高、消耗更低的制备表征一体化技术平台。微流控技术可以把生物、化学、医学分析等领域涉及的样品制备、反应、分离、检测等基本操作单元集成到一块平方厘米的芯片上，具有“微”和“全”的特点。目前微流控技术的应用主要集中在化学生物分析、合成等。除了上述应用外，微流控芯片还可应用于粉体材料的高通量制备，是一种较前沿的而且行之有效的合成策略。它是利用微流控芯片平台上尺寸在几十到几百微米的微管道或者液滴作为反应器，与传统实验室方法相比具有所占空间小、试剂用量少、反应时无气体污染、反应分析速度快、集成度高、自动化程度高及工作效率高等优点。本报告将回顾微流控技术在高通量材料实验的应用，结合目前研究前沿及实验进展，阐述微流控芯片构建粉体材料的高通量制备、表征到在线实时性能表征的一体化平台原理，探讨微流控芯片成为下一代高通量“材料基因”测序芯片的可能性。

E06-41(K)

基因组数据库：从生物到材料

郭毅可

1. 上海大学计算机工程与科学学院
2. 上海大学材料基因组工程研究院

本报告将以独特的视角介绍生物基因与材料基因之间在数据层面的异同点。结合实例介绍大数据时代，生物基因组工程与材料基因组工程在面对海量数据时，如何高效进行数据收集、组织、存储与检索，以及

如何利用机器学习、数据挖掘、可视化分析等技术进行大数据分析、挖掘与知识获取。

E06-42(I)

基于本体的异构材料数据集成与语义检索

钱权^{1,2}, 赵帅¹, 张瑞^{1,2}

1. 上海大学材料基因组工程研究院
2. 上海大学计算机工程与科学学院

材料数据与高通量实验、高通量计算一起并称为材料基因组的三大关键要素。随着材料数据的不断增长,数据的集成与共享十分迫切,已逐渐成为材料信息学领域的研究热点。传统异构数据库集成中的联邦数据库与数据仓库等技术,由于缺乏语义描述,很难在语义层面进行数据的深度融合。本文提供一种自动化语义融合技术,通过自动抽取数据库模式将其映射成语义本体,并以此本体为融合基础。其他异构数据库通过关系代数、有根图等手段将其映射到基础本体中,实现基于本体的融合和数据集成。并在此基础上采用 SPARQL 实现语义检索。论文以国际上著名的第一性原理计算数据库 OQMD 和 Materials Project 为融合实验对象,验证了该方法的可用性和有效性。

E06-43(I)

钙钛矿高温压电陶瓷的材料基因组学设计

于剑

东华大学功能材料研究所

航空发动机和燃气轮机、核反应堆、石油测井、石油化工管道等设备在线监测需要能在 200~500°C 环境温度下实时工作的压电传感器,用于振动监测、无损检测、流量或液气泄露等监控。目前,高温压电传感器使用的材料是钨青铜结构的偏铌酸铅(工作温度 254°C)和 Bi 层状结构的钛酸铋压电陶瓷(工作温度 482°C)。由于偏铌酸铅和钛酸铋压电陶瓷材料的压电活性较低,当下只是暂且解决了有无问题。要提高高温压电传感器的灵敏度、分辨率和稳定性,需要研发与偏铌酸铅、钛酸铋等陶瓷材料居里温度相当、具有更高压电响应的铁电压电陶瓷新材料。与大通量计算和大通量实验方式不同的是,在材料方案设计阶段进行的数据挖掘可以有效降低计算和实验工作的通量,达到降低实验成本、缩短研发周期、提高研发效率的目的。本报告将与大家分享我们如何通过数据挖掘和实验验证,快速完成 BiFeO_3 、 $\text{Bi}(\text{Zn}_{1/2}\text{Ti}_{1/2})\text{O}_3$ 和 $(\text{Pb},\text{Ba})\text{TiO}_3$ 是构建结晶学结构相界、 $T_C \geq 500^\circ\text{C}$ 钙钛矿结构铁电固溶体的最佳组元的方案设计;如何通过组分调控在该固溶体中构建结构相界,获得与偏铌酸铅、钛酸铋体系居里温度相当、压电性能更优的新材料。特别是,它们表现出优异的压电响应时间和温度老化稳定性,向高温压电电子学商用迈出坚实的步伐。

E06-44(K)

组合材料芯片方法快速构建 Fe-Co-Ni 相图

邢辉^{1,2}, 赵冰冰^{1,2}, 王宇杰^{1,3}, 闫宁宁⁴, 高铁仁⁵, Yang Ren⁶, Xiaoyi Zhang⁶, 李金东^{1,3}, 张澜庭^{1,2}, 汪洪^{1,2,4}

1. 上海交通大学材料基因组联合研究中心
2. 上海交通大学材料科学与工程学院
3. 上海交通大学物理与天文学院
4. 中国建筑材料科学研究总院
5. 美国马里兰大学材料科学与工程系, 美国阿贡先进光源

有别于传统的“一次实验,一个样品”方法,我们制备了厚度为 100 纳米且具有连续成分分布的 Fe-Co-Ni 组合材料芯片,并在三个不同温度下进行了等温晶化处理。随后采用同步辐射光源微束对样品组分与结构

进行了高通量衍射逐点扫描。曝光时间控制在每幅谱图 1 秒钟左右。实验所得大量谱图采用层次化聚类算法进行自动处理并构建组分-相分布图。最终生成的相图与 ASM 合金相图数据库所报道的对应等温截面图相一致，从而验证了本研究所用方法在相图测定方面的有效性与高效性。

E06-45(I)

坩埚下降法在掺杂硅酸铋闪烁晶体高效筛选中的应用

徐家跃

上海应用技术大学材料科学与工程学院

硅酸铋 ($\text{Bi}_4\text{Si}_3\text{O}_{12}$, BSO) 晶体具有优良的机械性能及化学稳定性, 密度高、衰减快, 被认为是一种很有潜力的双读出量能器材料[1-2]。从相图上看[3], $\text{Bi}_4\text{Si}_3\text{O}_{12}$ 是稳定的一致熔融化学物, 熔点为 1030°C 。它和重要的闪烁晶体 $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ (BGO) 同属立方晶系, 闪铋矿结构, 晶格常数为 10.272 \AA 。因此, 人们有理由相信, 采用价格便宜的 Si 代替 Ge 制成的 BSO 晶体能够取代昂贵的 BGO 晶体, 在闪烁领域得到更广泛的应用。但是, 深入研究发现, BSO 晶体生长和应用存在两大难题: (1) BSO 与 BGO 具有完全不同的析晶行为: 由于 Bi_2O_3 与 SiO_2 两者在密度、熔点等方面的巨大差异, 极易出现组分分凝现象, 给 BSO 晶体生长带来极大困难; (2) BSO 晶体虽然衰减时间比 BGO 快, 但它的光输出只有 BGO 的 $1/5$, 如何提高光输出是实现 BSO 晶体应用的关键。掺杂是提高 BSO 晶体闪烁性能的重要途径。但掺杂什么样的离子、掺杂量与闪烁性能的关系, 是一个系统研究课题。本工作我们采用坩埚下降法生长技术, 一炉同时生长多根不同掺杂离子、不同掺杂量的晶体, 实现了掺杂离子的快速高效筛选, 取得了一些有意义的结果:

(1) 采用多坩埚的下降法生长技术, 同时生长了 Tm^{3+} 、 Yb^{3+} 、 Ho^{3+} 、 Ce^{3+} 、 Gd^{3+} 、 Eu^{3+} 、 Dy^{3+} 等 10 余种稀土离子掺杂 BSO 晶体, 研究了它们的光谱特性, 发现 Dy^{3+} 掺杂能显著提高 BSO 晶体的光输出 (Light Yield)。(2) 同一炉生长 Dy_2O_3 掺杂浓度分别为 0.1、0.2、0.3、0.4、0.5、1、2、3、4、5 mol% 的 BSO 晶体, 发现浓度低于 0.4 mol% 的掺杂能够提高 BSO 晶体的光输出, 但是更高浓度掺杂却会降低晶体的光输出。我们认为, 这可能是双发光中心竞争所致。(3) 高浓度掺杂能够显著抑制 BSO 晶体生长中的偏析现象, 掺杂浓度到 3 mol% 以上时晶体尾部富 SiO_2 残余完全消失。一般来说, 上述下降法晶体生长周期在 2 周。如果没有采用多坩埚技术, 这些工作量可能需要 2-3 年, 而多坩埚技术可以将有效稀土离子的筛选周期缩短到 3-5 个月。本实验结果充分显示多坩埚下降法生长技术在功能晶体材料筛选中的独特作用和无限潜力。

参考文献

[1] AKCHURIN N, BEDESCHI F, CARDINI A, et al. A comparison of BGO and BSO crystals used in the dual-readout mode [J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A. 2011, 640(1): 91-98.

[2] XIAO XUEFENG, XU JIAYUE, XIANG WEIDONG. Progress on Scintillation Crystal for Dual-readout Calorimeter[J]. Journal of Inorganic Materials, 2013, 28 (4): 347-357.

[3] FEI YITING, FAN SHIJI, SUN RENYING, et al. Study on phase diagram of Bi_2O_3 - SiO_2 system for Bridgman growth of $\text{Bi}_4\text{Si}_3\text{O}_{12}$ single crystal [J]. Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials, 2000, 40(2000):183-188.

E06-46(I)

利用纳米尺度成分不均匀调控马氏体相变

朱家明¹, 张统一², 王云志¹

1. 西安交通大学前沿科学技术研究院微观组织模拟中心

2. 上海大学材料基因组工程研究院

马氏体相变是一种典型的一级相变, 伴随着自催化形核和快速长大。马氏体相变通常在很窄的温区或应力范围内完成, 导致在应用中控制马氏体相变的发生变得十分困难。利用相场模拟, 我们将展示如何通

过在母相中引入纳米尺度的成分调制来调控马氏体相变。成分的空间起伏引起马氏体稳定性和相变应变在空间产生调制,从而使影响马氏体相变的动力学过程,使之从一级相变转变为类高阶的连续相变。这一独特的马氏体相变特征能够有效的减小甚至是消除相变滞后并产生准线性超弹性行为和极低表观杨氏模量。

E06-47(I)

金属和合金各向异性阳极溶解的第一原理计算模型

马会^{1,2}, 陈星秋^{*1}, 李荣汉¹, 王寿龙¹, 董俊华^{*1}, 柯伟¹

1. 中国科学院金属研究所
2. 中国科学技术大学, 材料科学与工程学院

腐蚀, 一个受多重因素影响的复杂问题, 一直以来都是材料科学中存在的最大挑战之一。大量的实验研究发现金属和合金的腐蚀行为具有各向异性, 但是目前为止还没有一个具体有效的机制或理论来解释材料的这种各向异性腐蚀现象。我们从腐蚀电化学基本原理出发, 利用第一性原理建模, 计算材料表面的功函数及表面能, 并结合创新性提出的表面能量密度等参数, 建立了第一原理计算参数与阳极溶解反应的电极电位、交换电流密度之间关系的表达式, 发展了基于第一原理的典型金属和合金电化学腐蚀中各向异性阳极溶解行为的计算模型。该模型已对镁合金进行验证, 计算得出镁的不同晶面电化学极化曲线与实验结果基本一致。

该计算模型不仅能够快速高效地预测纯金属不同表面在腐蚀环境中的极化曲线, 而且能够判别材料晶体缺陷(空位、晶界等), 表面吸附及大量的合金元素等对其极化曲线的影响, 从而可以为实验合成耐腐蚀性材料提供坚实的理论依据。

E06-48(K)

基于材料基因组技术探索新型锂电池材料

潘锋

北京大学深圳研究生院

锂电池是目前能量密度最高的化学电源。锂电池固态化的优点是可以避免液态电解质泄漏和燃烧导致的电动汽车动力电池的安全问题, 其挑战是如何改善界面的电子与锂离子的传输, 提高电池的能量和功率密度。通过基于材料基因组技术, 通过高通量的计算、高通量的制备和高通量的检测, 及数据库系统, 加速新型锂电池材料的研发, 特别是新型固态锂电池材料和电池的研发。通过在自主搭建 GPU 和 CPU 相结合的计算硬件平台上, 开发相关计算程序软件包, 发展基于第一性原理方法, 开发大规模并行计算程序, 计算锂离子在固相材料(超容量磷酸铁锂类纳米材料、多元金属氧化物、固态电解质)和固相界面上(正极/固态电解质, 负极/固态电解质)传输性能。

建立从原子到电池的跨尺度多物理场模型, 对电池的特性进行仿真模拟, 与高通量实验与测量结果结合, 建立结构化的数据库系统, 利用数据回归和机器学习算法进行数据挖掘分析, 研究其构效关系, 加速预测和设计新的固态锂电池材料。从中优选出性能优秀的材料和电池结构。研发组合化学及超临界合成方法, 高通量制备多元金属氧化物正极材料和固态电解质, 电化学原子逐层沉积技术高通量制备锂合金负极。用增材制备技术(3D 打印)高通量制备极片和电池。研发基于光谱学、XRD、形貌的检测技术、电化学多道并行检测技术, 高通量进行材料、极片及全电池的性能的表征。研发新型高容量的正负极和固态电解质材料及制备达到高性能固体电池的要求。

E06-49(I)

Peculiar Size-Dependent Band Structure and Electronic Property of MS₂-Monolayer Nano-polygons

Xiao-Li Fan^{1*}, Yu-Rong An¹, Zhi-Fen Luo¹, Woon-Ming Lau^{2,3*}

1. State Key Laboratory of Solidification Processing, School of Material Science and Engineering, Northwestern

Polytechnical University

2. School of Energy Science & Engineering, University of Electronic Science & Technology

3. Center for Green Innovation, School of Mathematics and Physics, University of Science & Technology Beijing

Nano-polygons comprising a molecular monolayer of transitional metal dichalcogenides (referred therein as MS_2 -mNT, with $M=Mo, W, \text{ or } V$) are emerging novel nanomaterials having versatile edge-structures and fascinating size-dependent properties. With first-principles calculations, we find a new strategy for developing high-performance catalysts for hydrogen evolution reaction (HER) via controlling the morphology and size of nano-polygons of monolayer transition-metal dichalcogenides. Additionally, we have articulated some peculiar nature of the most stable MS_2 monolayer Nano-triangles(mNTs). These most stable mNTs are all edge-terminated by M atoms stabilized with one S atom per M atom. Specifically, for $M=V$, MS_2 -mNTs of all sizes are metallic with overlapping spin-polarized valence and conduction bands. For $M=Mo$ or W , MS_2 -mNTs are not spin-polarized, and the mNT property changes periodically with k (k =number of M atoms per edge of the mNT). More importantly, we show such periodic changes in electronic property can be practically manipulated via atomic edge-engineering; for example, MS_2 -mNTs ($M=Mo$ or W) of all k can be made semiconducting, by slightly depleting the S-passivation.

E06-50(O)

HPHN 碳量子点的结构及其荧光性能的研究

宋雪旦, 张晓露, 郝策, 邱介山

大连理工大学

碳量子点作为一种新型荧光纳米材料被广泛应用于荧光探针, 生物传感器, 催化剂和超级电容器等领域。碳量子点的性质与其结构密切相关, 但由于碳量子点的结构多样, 难以通过调控结构预测其性质, 在某种程度上制约了碳量子点的应用。本研究使用纯有机物 9-Hydroxyphenalene (HPHN) 制备碳量子点, 通过碳量子点的紫外吸收光谱、激光光散射、高倍透射电镜, 和 HPHN 的晶体结构得到 HPHN 碳量子点的结构。量子点的粒径分布在 4.85nm 左右, 含氧官能团大部分都朝向表面并呈现定向有序排列。此外, 通过荧光滴定实验, 得到铜离子对量子点的荧光猝灭能力最强, 其检测极限为 0.34nM。并通过实验和理论计算相结合, 阐明 HPHN 碳量子点的发光机理和铜离子使量子点的荧光猝灭机理。

E06-51(O)

脉冲电流的电磁“基因”对金属凝固组织的细化研究

张云虎, 仲红刚, 宋长江, 翟启杰

1. 上海大学材料科学与工程学院
2. 上海大学材料基因组工程研究院

脉冲电流在金属熔体中引起的强制流动对金属凝固组织的细化起重要作用。本文着重研究脉冲电流的强度和频率这两个外部电磁“基因”对强制流动以及对应的凝固组织细化的影响。从流动测量结果可以看出, 脉冲电流强度和频率的增加都可以不同程度的提高流动强度。为了能够表示电流强度和频率对流动强度的贡献, 从能量角度提出等效电流参数, 建立等效电流强度和流动强度的关系, 在计算电流强度和频率对等效电流强度贡献的同时, 得出两者对流动强度的影响。通过进行对应的凝固实验, 发现脉冲电流强度和频率的提高都可以提升脉冲电流的凝固细晶效果。通过已建立的脉冲电流强度、频率和流动强度的关系, 可以发现流动强度和凝固组织细化具有很好的对应关系。综上所述, 本文研究表明可以通过改变脉冲电流强度和频率来控制强制流动, 进而达到调控凝固组织的目的。

E06-52(K)

材料基因工程数据库和数据技术

文成, 姜雪, 张岩, 宿彦京

北京科技大学新材料技术研究院

数据库和数据技术是材料基因工程的重要组成部分, 它支撑高通量计算和高通量实验的数据需求, 另一方面通过高通量实验和高通量计算可以极大地丰富数据库, 与数据挖掘和机器学习技术相融合, 发现新知识、新规律, 服务于新材料的设计。

本文综述了材料数据库的相关发展和特点, 以及数据挖掘技术在材料科学研究和新材料探索中的应用, 以数据挖掘技术在高熵合金中的应用为例, 分析了不同数据技术的应用范围和特点。

E06-53 (I)

材料磁性的大数据挖掘与机器分类

陆俊

中国科学院物理研究所磁学国家重点实验室

磁性是所有材料的基本物性, 由于材料本征的结构参数与测量条件的影响变量超过 20 个, 磁性测量结果的挖掘与分类在材料基因库内相比成分、结构及其他物性要复杂得多, 作者根据自己在磁测量技术、磁性材料与软件开发方面多年的交叉研究积累, 提出利用自动回归的方法, 挖掘出测量与材料参数, 能有助于材料磁性在材料基因库内更加有效的分类管理。报告首先概述磁性材料基因计划的进展情况, 指出磁性测量结果挖掘与分类方面碰到的挑战; 然后对比分析纯数学参数拟合与适当引入磁性构效关系模型含具有基本普遍物理意义的参数回归方法; 随后用公开报道的大量磁性测量结果对挖掘与分类模型进行测试验证; 最后展望未来, 设想直连材料基因库无需科学家干预分析过程的磁性测量仪器概念。

E06-54 (I)

材料科学数据与基于 MGI 思想的材料创新方法

尹海清¹, 姜雪^{1,2}, 张瑞杰¹, 张聪¹, 刘国权¹, 曲选辉²

1. 北京科技大学钢铁共性技术协同创新中心, 北京科技大学, 北京, 100083
2. 北京科技大学新材料技术研究院, 北京科技大学, 北京, 100083

数据科学是继理论研究、实验和计算以外的科学发现的第四范式。材料数据科学在材料基因组计划提出后逐步形成基于材料数据的科学体系、研究方法和在材料创新中的发现和应用。材料数据科学的基础架构包括第一层的材料数据体系, 形成材料知识的数字化表达体系, 第二层的材料数据的全生命周期管理, 从材料数据的描述、收集、质量评价、存储、共享、传输到删除, 以及第三层的数据挖掘与知识提取, 这是最具挑战同时也吸引越来越多的研究者将其应用在材料设计、预测和工艺优化上。本文详细介绍了目前材料数据挖掘的典型成功案例, 并基于不同金属粉末的高速压制工艺的实验数据, 包括成分、原料、压制参数(能量、次数、能量组合方式等)等进行数据挖掘, 构建粉末高速压制的压制模型, 基于该模型, 预测粉末的生坯密度, 准确性可达到 95% 以上。

E06-55(I)

机器学习在材料发现与设计中的应用

刘悦^{1,2}, 施思齐^{2,3}

1. 上海大学计算机工程与科学学院
2. 上海大学材料基因组工程研究院
3. 上海大学材料科学与工程学院

设计和发现具有良好性能的新材料是材料研究领域的热点之一, 其关键在于如何在实验早期阶段对材

料属性进行评估预测，以快速筛选出具有良好性能的候选材料。传统的实验测量方法过程复杂且发生在材料研究的后期阶段，无法加速材料研究的进程。而计算模拟方法在效率上相对于实验测量有了很大的提升，但目前可以通过计算得到的属性较少。机器学习可以利用经验数据挖掘材料属性变化规律，在实验早期阶段对材料属性进行预测，是材料属性研究领域一种新兴的面向数据的研究方法。在过去的近十年里，机器学习方法已经广泛地应用于各类材料属性的预测，已经成为计算材料领域智能数据分析和预测的重要工具。本报告将综述机器学习在材料发现与设计中的研究现状，旨在帮助读者了解这个研究领域。首先总结材料机器学习方法的范式和基本步骤，对主流算法进行分类和对比；然后较为全面地综述机器学习在材料宏观与微观属性预测以及新材料组分与结构预测中的应用现状；最后总结该领域的重点、难点问题和对策，并且展望未来可能的研究热点。

E06-56(I)

面向 MGI 的稀土数据库建设与应用

宋晓艳，刘东，刘雪梅，王海滨，侯超

北京工业大学材料科学与工程学院

介绍北京工业大学开展的面向材料基因组工程需求的稀土单质和 Sm-Co 基稀土化合物数据库的构建工作，以及在多元多相稀土永磁合金设计与制备方面的应用。经过 10 余年的研究，发展形成了嵌入成分-工艺-组织结构-性能内在科学关联的 MGI 专用稀土基础数据库，涵盖：（1）成分及名称数据，包括稀土单质及 Sm-Co 类化合物的常用命名方式；（2）工艺数据，包括材料来源和制备工艺及相关参数；（3）性能数据，包括室温和变温性能数据（物性、热力学性质、相变特性、力学性能、功能特性等）；（4）晶体结构数据，包括结构化的晶胞参数、晶体结构类型、半结构化原子占位信息等，以及系列晶胞结构图像文件等；（5）热力学计算数据，包括热容、热膨胀系数、焓、熵、自由能等随成分、温度、晶粒尺寸变化的函数关系等。基于构建的稀土数据库，建立了跨尺度的第一原理/热力学计算耦合模型，针对 Sm-Co 基多元合金体系进行了系列计算，以数据库-模型-计算预测为指导，设计开发出高性能的新型高温用纳米晶稀土永磁合金。

E06-57(O)

Sm-Co 多元合金材料基因组数据库及其信息管理系统

刘东，宋晓艳，刘雪梅，王海滨，侯超

北京工业大学

Sm-Co 体系永磁合金具有较好的耐高温特点，为了提高其高温磁性能，人们做了大量的探索。通过材料基因工程的方法对以往的数据加以深度挖掘，将加速高温永磁合金的研究。由于大量的研究数据被发表在期刊、学位论文或研究者自己保存，整合和管理这些离散数据从而形成基础数据库是材料基因工程中的基础环节，由于永磁合金性能的复杂性和工艺特殊性，目前尚无适于整合及查询该类材料基础数据的数据库。

本研究首先利用 MySQL 构建了材料基因工程专用 Sm-Co 多元合金数据库，收录了制备工艺及其参数、物相及成分组成、晶体结构、性能及数据来源，并对数据之间的关联建立索引。在工艺方面，通过树形数据结构解析了材料的制备过程及其具体工艺参数，增强了数据关联并减少了冗余。在性能方面，对涉及到的性能进行分类，定义了性能参照表，规范了性能采集的命名、单位制。在数据来源方面，融合了对文献数据的采集解析和对实验数据的跟踪管理。

基于该数据库，结合 PHP 和 AJAX 建立了 B/S 模式的 Sm-Co 多元合金基础信息管理系统，实现了多用户实时信息采集及查询。系统经过多次优化后，将信息采集从文献解析和实验管理开始，通过引导式的方式逐渐完成数据录入和关系的建立，系统的业务逻辑逐渐贴近用户在解析文献和管理实验时的实际过程，

数据的采集工作更加专注于对知识本身的提取，弱化对信息的整理过程，并通过实时的数据查询避免重复性工作。系统架构具备可扩展性，为进一步深化信息采集、数据查询以及 Web 应用提供了空间。

对于整合得到的 Sm-Co 多元合金基础数据，利用 XML 或 JSON 对材料基本信息进行标准化表述，使其更加适于材料基因工程应用。同时，利用该数据库及其信息管理系统从材料的成分、工艺、性能等多方面进行数据查询及处理，为进一步对其规律揭示、知识发现以及合金设计奠定了基础。此外，其建设方法及应用程序具有较大的普适性，在钙钛矿型材料等其他材料体系中也取得了成功应用。

E06-58(O)

基于人工神经网络与遗传算法的超超临界机组用镍基高温合金设计

王锦程，王琰，李俊杰，王志军

西北工业大学

镍基高温合金由于具有优良的高温力学性能及抗腐蚀性能而广泛用于航空航天发动机、工业燃气轮机、超超临界机组等关键部件。但其所含元素众多、相组成复杂、服役性能要求高，使用传统的合金设计方法进行设计存在成本高、周期长等缺点。近年来人工智能技术的兴起，为研发新型智能算法进行合金设计带来新契机。本文以 700℃超超临界机组用镍基高温合金设计为研究对象，通过收集大量已有镍基高温合金的实验数据，分析各个元素、晶粒度、相组成及析出相尺寸对合金性能的影响，筛选出合理的变量组成与数据库逻辑结构，制定统一的数据库规范标准，建立了镍基高温合金“成分—组织—性能”数据库，并以此数据库为基础，结合人工神经网络算法与遗传算法开发出了相应合金设计程序。针对 700℃超超临界机组镍基高温合金用对 γ 相、 γ' 相、 γ/γ' 错配度、晶粒尺寸、强化相尺寸等组织参量及 750℃下的蠕变持久寿命与高温屈服强度两个力学性能，建立了合金组织性能预测及成分优化模型。利用所建立的合金设计程序，进行了一些已知成分、组织、性能但不在所建立数据库中的合金的性能预测，并与实验数据或文献记载数据进行对比，误差大小在合理范围内。最后结合遗传算法，根据目标性能与加工成本的要求，对 700℃超超临界机组用新型镍基高温合金的成分进行了优化，预测出了符合预期的合金成分，并进行了实验验证，实验结果表明预测合金基本符合预期目标。

E06-59(K)

高通量分子模拟预测软材料热力学性质

孙准，曹风雷，龚正

上海交通大学

和基于第一性原理针对具有高对称性固体材料的高通量计算对比，软物质高通量计算具有更大的挑战。其中关键问题是需要用基于统计力学原理的分子模拟方法；除了计算量超大，更需要可以准确描述分子间相互作用的普适力场。用高通量计算可以发现并解决系统性的问题，不断提高预测的可靠性和准确性，从而实现用计算数据补充和取代实验数据的愿望。为此我们在已开发的力场基础上，开发了一个可以用来完成高通量分子模拟计算的程序，并以有机溶剂分子、离子液体及二元混合物三类 292 种分子体系的热力学性质为目标，完成了 6549 个数据点的计算，通过和实验数据对比验证了计算方法和力场。同时，我们构建了一个以互联网为基础的数据库平台，通过网络分享计算和实验数据。

E06-60 (I)

材料图像特征提取的复分析方法

丁广太^{1,2}，彭红¹，张惠然^{1,2}，韩越兴¹，钱权^{1,2}，付建勋^{2,3}

1. 上海大学计算机工程与科学学院
2. 上海大学材料基因组工程研究院
3. 上海大学材料科学与工程学院

图像低层特征尺度不变性和特征提取准确性问题的研究是材料图像分析的基础。基于复分析的 Cauchy 型积分理论, 研究材料图像函数的局部解析性, 将图像特征提取问题转化为图像函数的解析性的奇异性检测问题, 进而提出图像分析算法, 是本文解决材料显微组织结构以上问题的主要思路。本文旨在完善复分析理论在材料显微组织结构分析中的方法体系, 研究复滤波模板的检测图像局部奇异性及其表现方向的能力, 及其在材料图像分析中的应用。

首先, 研究以围道积分路径的几何形态和属性体现的图像空间尺度属性, 以各阶 Cauchy 型积分值构造的特征向量定义图像局部解析性。其次, 研究图像函数解析性的数值计算方法, 并设计基于复分析思想的通用特征提取算法。最后, 对几种陶瓷、铸铁材料图像和高温激光扫描共聚焦显微图像序列进行分析, 结合材料图像的特点, 研究材料显微组织结构图像的解析性与特征提取算法效率之间的关系, 通过数据实验验证本文提出的理论设想。

数据实验基本支持本文的设想。

本文尝试统一各种能够表达空间尺度属性的材料显微组织结构图像的低层特征提取方法, 方法可行。

E06-61(I)

数据挖掘在金属氧化物界面设计与优化中的应用

孙文明¹, 刘静¹, 汪洪^{1,2}

1. 绿色建筑材料国家重点实验室, 中国建筑材料科学研究总院
2. 材料科学与工程学院, 上海交通大学

在材料基因组工程研究背景下, 材料设计和优化工作对于加快新材料研发速度至关重要, 如何建立良好的定量结构-性能关系研究 (Quantitative Structure-Property Relationship, 简称 QSPR) 模型已成为该研究领域热点问题之一。我们前期研究表明 ZnO-ZrO₂ 界面强度较弱, 而在 ZnO 中引入掺杂原子、扩张其晶格常数降低界面错配可作为提升界面强度的途径。本文基于密度泛函理论计算收集了三十余 Zn_{0.9275}M_{0.0625}O 样本的原子参数、物化性质参数及晶格常数, 研究其内在联系。密度泛函理论计算和一些经典的数据挖掘方法如偏最小二乘法 (Partial Least Squares, 简称 PLS), 人工神经网络 (Artificial Neural Network, 简称 ANN) 及支持向量回归 (Support Vector Regression, 简称 SVR) 等都被用于晶格常数计算与建模。研究表明: Zr、Hf 及 Y 掺杂可显著扩张晶格常数降低界面错配度, 且掺杂后界面结构偏析显著; 同时, 在数据挖掘所建立的模型中, SVR 算法建立的模型对晶格常数预测与泛化能力要优于 PLS 和 ANN 模型, SVR 有助于所需新材料的设计或筛选。

E06-62(K)

材料高性能计算方法的发展及应用

宋海峰^{1,2}, 高兴誉^{1,2}, 赵亚帆^{1,2}, 林德焯^{1,2}, 方俊^{1,2}, 王涵^{1,2}

1. 北京应用物理与计算数学研究所
2. 中物院高性能数值模拟软件中心

目的: 为快速高效计算锆材料在辐照条件下的原子离位阈能和腐蚀条件下的氢化物组分与机构, 需要发展高性能的第一原理计算方法和结构搜索算法。

方法: 基于密度泛函理论, 发展了三级并行方法, 高扩展的 FFT 方法和电子步加速和离子步自适应技术等第一原理计算技术。基于 Basin Hopping 算法, 发展了结构生成、重复结构识别和高通量计算等技术, 提升结构搜索效率。

结果: 利用上述方法, 开展锆材料的原子离位阈能计算, 在天河 2 号计算机上耗时约 19 小时完成了 800 个过渡金属锆原子 (包含 9600 个价电子)、1 皮秒的分子动力学模拟, 一次任务 40P 次浮点计算, 共 80 个任务 3.2E 次浮点计算。实现了锆氢化物 42 种组分, 30000 个结构的搜索, 找出了最优结构。

结论: 模拟预测了包壳材料锆的辐照离位阈能, 获得与实验最为接近结果, 给出不同晶向离位阈能的

大小关系；成功找到了 4 种实验结构，并发现了一种尚未被报导的可能的稳定 Zr_2H 结构，有待实验验证。

E06-63(I)

钢铁材料中强化相的性质计算与设计

冯晶

昆明理工大学材料科学与工程学院

强化相（硬质相）作为抗磨钢铁的重要组成部分，对抗磨钢铁的性能至关重要。由于抗磨钢铁中强化相的晶体结构和组成元素复杂、尺寸小，相关的物理化学性质数据很难定量获取，造成无法针对性的进行强化相的选择与成分控制。因此，本文以目前先进的抗磨钢铁中典型的强化相为研究对象，采用第一性原理计算结合微观结构和性能表征方法，建立强化相模型，研究多元强化相的力学和热学性质。为建立抗磨钢铁中硬质相结构与性质数据库提供部分有价值的数据库，从而为硬质相种类与性能的选择和调控提供部分指导，为提高已有抗磨钢铁材料性能、设计新型抗磨钢铁材料奠定基础。Mo、W 以及 W+B 共掺可以提高 $h-Cr_7C_3$ 型多元碳化物的韧性。 $Cr_3Fe_3Mo_{0.5}W_{0.5}C_2B$ 同时具有好的力学性能和高热膨胀系数，达到 $8 \times 10^{-5}/K$ ，与钢铁基体热膨胀匹配。对于三元 $Fe_{6-x}M_xC$ ($M=W/Mo$) 相，当原子比 $Fe/(Fe+M)$ 大于 50% 后，弹性模量急剧下降。 Fe_2W_4C 和 Fe_3Mo_3C 的高温力学性质优于 Fe_2Mo_4C 和 Fe_3W_3C 。 Fe_2Mo_4C 和 Fe_3W_3C 的热膨胀系数达到 $0.6 \times 10^{-5}/K$ 。对于四元 $(Fe,W,Mo)_6C$ 相，当原子比 $16.7\% < Fe/(Fe+Mo+W) < 50\%$ 时，整体化学键强，能够获得较高的弹性模量和熔点。

E06-64(I)

材料基因工程中的力学思考

申胜平

西安交通大学航天航空学院，机械结构强度与振动国家重点实验室

基于材料基因工程的材料设计，需要考虑多物理场耦合作用下过程相关的微结构演化，需要发展多物理场作用下多尺度力学化学耦合理论。本报告介绍我们围绕功能材料性能的多场耦合和跨尺度分析，以高温材料和挠曲电效应为例，在力学化学耦合理论，跨尺度多场耦合理论及相关计算方法和实验研究方面的一些研究和思考。

E06-65(I)

Integrated Computational Materials Engineering for Precipitation Modeling of Multi-Component Alloys

Weisheng Cao, Fan Zhang, Shuanglin Chen, Chuan Zhang, Jun Zhu, Duchao Lv

CompuTherm LLC

Introduction: Precipitation hardening or age hardening provides one of the most widely used mechanism for strengthening many structural materials. Extensive amount of research has been devoted to simulate the microstructural evolution and the correlated hardening responses during the precipitation of different types of intermetallic phases. However, precipitation is a highly complex process and could involve simultaneous occurrence of nucleation, growth and coarsening. Accurate modeling of the precipitation process requires a synchronous consideration of all these contributions. Moreover, the necessary phase equilibrium information and mobility data must be constantly updated during the simulation. Therefore, such a simulation necessitates a smooth integration of thermodynamic calculation, kinetic simulation and property modeling of the material. Nevertheless, most of previous modeling efforts have been focusing on only one or two aspects of the problem and an integrated framework coupling reliable thermodynamic calculation, kinetic simulation and property prediction of multi-component systems for industrial applications is rarely available. In the present study, we

introduce a practical and scientifically sound modeling approach for precipitation simulation of multi-component alloys under the framework of Integrated Computational Materials Engineering (ICME).

Methodology: The comprehensive framework proposed in the present study for precipitation modeling of multi-component alloys covers Calphad modeling of thermodynamic properties and mobility data, simulation of microstructural evolution based on multi-level kinetic models, and estimation of the correlated age hardening behavior. Specifically, 1) the Calphad modeling provides mobility data and thermodynamic properties, *e.g.*, phase composition, phase fraction, chemical driving force and so on; 2) the microstructure modeling will utilize this information in its kinetic models to simulate the microstructural evolution. In order to account for the simultaneous nucleation, growth and coarsening in multi-component and multi-phase alloys, two theoretical models are adopted. The first one is the so-called Fast-Acting model, which is developed based on the Langer and Schwartz theory and can predict the evolution of particle number density and average size. The other one is the more advanced KWN model, which is based on the Kampmann and Wagner's work. This model predicts the full evolution of particle size distribution (PSD) in addition to the average quantities. 3) The obtained microstructure information will serve as key inputs for estimation of mechanical properties according to the proposed precipitation hardening model that, in connection with the simulated PSDs, considers a combined effect of the shearing (small & weak particles) and by-passing (big & strong particles) mechanisms for particle strengthening.

Results: In this presentation, we will demonstrate the application of this modeling tool to commercial multi-component alloy systems. First, the modeling approach was used to investigate: i) the early stages of precipitation in Ni-5.2Al-14.2Cr in at.% aged at 600°C using the KWN model; ii) the coarsening behavior of a Rene88DT alloy using the Fast-Acting model; iii) the precipitation behavior of an IN100 alloy under a multi-step heat treatment using the KWN model. The modeling tool was also used to study the age hardening behavior of several AA6xxx alloys as well as the commercial AA6061 alloy under isothermal ageing or reheating conditions and the simulation results were compared with the experimental data. The comparisons distinctly suggest that the proposed modeling approach is able to reasonably reproduce the hardening or softening responses to the artificial ageing and the reheating processes.

Conclusions: In summary, an integrated computational thermodynamics/kinetics approach was used to simulate microstructural evolution and mechanical properties of materials undergoing precipitation hardening. Even though in the early stage, this study shows the promise of using an integrated modeling framework to comprehend the relationship between the chemistry/processing - structure - properties. The approach has been demonstrated by the precipitation simulation of a number of multi-component Ni-based superalloys in terms of microstructural evolution and the prediction of ageing hardening behavior of a series of AA6xxx Al alloys in terms of mechanical properties. The results presented here provide reasonable confidence for using such an approach to complex alloys for technological applications.

E06-66(I)

空间模拟环境中液态钛基合金的热物理性质研究

周凯, 王海鹏, 魏炳波

西北工业大学

空间模拟环境中合金熔体的热物理性质研究是空间材料科学和快速凝固科学的重要课题之一, 为发展凝固理论与研发新材料提供必不可少的基础数据。目前这些基础数据还十分匮乏, 尤其是对于高温高活性的钛基合金, 实验难度极大, 使其达到深过冷并测定其亚稳热物理性质更是一个巨大挑战。本研究以航空航天用关键钛基合金为研究对象, 利用电磁悬浮实验技术模拟空间环境, 克服高温高活性等不利因素影响, 实现 10 余种钛基合金熔体的深过冷与快速凝固, 主要进展如下: 采用非接触测量方法定量测定稳态与亚稳态钛基合金熔体的表面张力、比热等关键热物理性质, 结合分子动力学方法计算宽广温度范围内合金熔

体的热物理性质与液态结构，初步建立钛基合金的关键热物理性质数据库，为钛基合金研发奠定坚实的理论与实验基础。研究空间模拟环境中稳态与亚稳态钛基合金熔体的非平衡凝固过程，阐明合金熔体凝固过程与过冷度之间的作用规律。测定快速凝固样品的热扩散系数、热膨胀系数、热导率等重要热物理性质。探索钛基合金“过冷度—液态热物性—凝固过程控制—固态热物性—高性能”的相关规律。

E06-67(O)

TiO₂ 中合金元素的占位与扩散机理的第一性原理研究

代建红, 宋岩

哈尔滨工业大学(威海)

由于轻质、高比强度、生物相容性好等优点，钛合金在生物医用及航空航天等领域均具有广泛的应用潜力。钛合金表面常覆盖氧化物薄膜，氧化物的成分、结构和组织等对钛合金的服役性能具有重大的影响。

本文采用第一性原理计算方法研究了钛合金中常见的合金元素 B, C, Si, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Y, Zr, Nb, Mo, Pd, Ag, Sn, Hf, Ta, W, Pt, La, Ce 在 TiO₂ 的金红石和锐钛矿结构中的占位性能。

根据合金体系的稳定性，筛选出合金元素如 Si, Nb, Hf, Ta, La, Ce 等，进一步分析其在 TiO₂ 中的扩散路径及势垒，并从电子结构角度分析讨论合金元素的占位和扩散的微观机理。

本文的研究将有利于理解钛合金中合金元素的分布及扩散机理。

E06-68(O)

二维范德华异质结氮化硼/磷烯的电子结构和光学性质的理论研究

胡涛, 任伟

上海大学物理系, 量子与分子结构国际中心

磷烯由于其独特的物理性质吸引了人们广泛的研究兴趣。但是，磷烯有一个重大缺陷，那就是在空气气氛下的容易被氧化。为此，我们可使用化学惰性的氮化硼对其进行包裹，从而保护它的结构和性质。通过采用基于密度泛函理论的第一性原理模拟，我们发现磷烯的电子结构和光学性质被很好地保持。与单层的磷烯相比，添加一层氮化硼使得它的能隙增大了 0.15 eV，上下各添加一层氮化硼，能隙增大了 0.31 eV。而继续增多氮化硼的层数，能隙没有进一步发生明显变化。有趣的是，之前报道的磷烯的各向异性有效质量，并没有因为添加氮化硼而改变性质，电子和空穴的有效质量有少许增大，但依然保持各向异性。同样地，在碳化硼的保护下，各向异性的光学性质也得到保持。因此，我们发现使用氮化硼对磷烯进行包裹和保护是一种非常优异的方法，磷烯的独特性质得到更好的应用。

E06-69(K)

Transferability and Applicability of High Temperature Creep and Fracture Properties from Small Specimen Testing

Shan-Tung Tu (涂善东), Jianping Tan, Weize Wang

华东理工大学

For decades small specimen testing techniques have been developed in full swing and proven to be applicable in the assessment of materials degradation and have a great potential for high-throughput screening of materials. However, in the life assessment of high temperature materials and structures, the accuracy of conversion will be greatly dependent on the transferability of the mechanical properties obtained from small specimen to the standard large specimen and actual engineering components. The present work examines the transferability of creep properties obtained from small bending specimens and small punch specimen to the standard specimen. The influence factors such as stress level, large deformation, and dimensional errors are

discussed. Possible errors are demonstrated. The transferability of creep crack growth rates obtained from small cracked specimen is also examined. Constraint effect on the creep fracture is studied. Constraint factor is introduced to the modification of the crack growth rates from the small specimens.

E06-70(I)

材料基因组：模拟与实验研究橡胶纳米复合材料

刘军, 张立群

北京化工大学

本报告主要介绍采用计算机模拟与实验相结合研究橡胶纳米复合材料取得的系列进展, 包括纳米颗粒分散随界面相互作用的变化、分子链与纳米颗粒界面物理化学作用、纳米颗粒对橡胶分子链的力学增强与体系粘弹性的调控。分别考察了球形、一维纳米杆与二维纳米片的情形。特别对于石墨烯片, 我们考察了分子链插入片层的插层动力学, 系统研究了温度、链长、分子链柔顺性的影响。同时也研究了分子链的官能化与石墨烯表面接枝对分散的影响。研究发现, 相对于各向异性纳米颗粒, 分子链末端官能化对提高球形纳米颗粒分散更显著。相对于中心接枝(center-grafting), 石墨烯边缘接枝(edge-grafting)能更有效提高其分散程度与力学性能。对接枝分子链的位置、长度、密度与柔顺性进行了研究。另外, 我们考察了聚合物/石墨烯界面区分子链的结构与动力学, 期望澄清界面区玻璃化层是否存在。最后介绍了利用力学可回复性的纳米弹簧或单层石墨烯片, 能有效降低体系的滞后损失。类似于热塑性嵌段聚合物所形成的均匀相分离, 我们采用纳米颗粒交联分子链末端构造的理想网络, 呈现出优良的动静态力学性能, 该复合材料为下一代节能轮胎的发展提供了方向。

E06-71(I)

VO₂ 结构-性能关系的第一性原理计算研究

崔苑苑¹, 陈兰丽¹, 严六明², 任清华², 施思齐¹, 高彦峰^{1*}

1. 上海大学材料科学与工程学院

2. 上海大学理学院

VO₂ 具有“半导体-金属”相变特性, 能够随温度变化自动调节近红外光透射率和电阻, 可应用于热开关、光学传感器、信息存储器件、智能窗以及非制冷焦平面等方面, 是一种备受关注的热致变色材料。VO₂ 的热致变色性能源于其独特的电子结构和原子结构, 即 V-3d 电子强关联作用和 V-V 键的排列方式。本报告总结了课题组基于密度泛函理论的第一性原理方法, 从体材料、本征点缺陷、表面/界面三个角度出发, 研究 VO₂ 结构-性能关系的最新进展。我们首先计算了 29 种过渡金属元素掺杂对 VO₂ 体材料原子结构的影响, 发现掺杂后 VO₂ 晶格体积膨胀以及晶格常数 β 角减小, 与相变温度的降低密切相关; 其次, 发现在 VO₂ 本征点缺陷中, 氧空位可增加 VO₂ 的电子浓度, 降低相变温度, 使 R 相 V-V 链呈二聚化, M 相带隙变窄, 近红外吸收增强; 再次, VO₂/贵金属界面行为研究发现电荷从贵金属向 VO₂ 表面转移, 表面偶极矩增强, 通过调整 V 和贵金属原子的比例, 能够改变 VO₂ 的表面功函数, 从而调控相变温度。本研究结果不仅有助于分析和预测 VO₂ 材料的性能, 而且为制备新型 VO₂ 材料提供理论指导和设计依据。

E06-72(K)

Computational Design of Metalloborophenes and the Embryo Clusters

Jun Li (李隽)

Department of Chemistry, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Atoms and molecules were recognized to be the elemental constructing units of chemical matters in the early 19th century as outlined by John Dalton's atomic theory (1805) and Amedeo Avogadro's molecular theory (1810). In the last century, clusters consisting of a group of atoms were viewed as an intermediate regime between

atoms/molecules and materials. Carbon-based cluster science has aroused significant interest, leading to extensive investigations on fullerenes, carbon nanotubes (CNTs), graphane, graphene, graphyne/graphdiyne, and so on. Boron as the immediate neighboring element of carbon in the Periodic Table cannot form such clusters with similar structures [1]. We have recently found that there are general analogues between carbon and boron clusters with different structures and properties [2-7]. In this talk we will present our recent research on the computational design of boron clusters as motifs of borophenes and metallo-borophenes using density functional theory (DFT) and Tsinghua Global Minimum (TGMin) program [8].

References

- [1] A.-C. Tang, Q.-S. Li, C.-W. Liu, J. Li, "Symmetrical Clusters of Carbon and Boron", *Chem. Phys. Lett.* 1993, 201(5, 6), 465-469.
- [2] H.-J. Zhai, B.-K., J. Li, L.-S. Wang, "Hydrocarbon Analogues of Boron Clusters: Planarity, Aromaticity, and Antiaromaticity", *Nature Mater.* 2003, 2(12), 827-833.
- [3] Z. A. Piazza, H.-S. Hu, W.-L. Li, Y.-F. Zhao, J. Li, L.-S. Wang, "Planar Hexagonal B₃₆ as a Potential Basis for Extended Single-atom Layer Boron Sheets", *Nature Commun.* 2014, 5, 3113.
- [4] H.-J. Zhai, Y.-F. Zhao, W.-L. Li, Q. Chen, H. Bai, H.-S. Hu, Z. A. Piazza, W.-J. Tian, H.-G. Lu, Y.-B. Wu, Y.-W. Mu, G.-F. Wei, Z.-P. Liu, J. Li, S.-D. Li, L.-S. Wang, "Observation of an All-Boron Fullerene", *Nature Chem.* 2014, 6(8), 727-731.
- [5] W.-L. Li, Y.-F. Zhao, H.-S. Hu, J. Li, L.-S. Wang, "[B₃₀]⁻: A Quasipolar Chiral Boron Cluster", *Angew. Chem. Int. Ed.* 2014, 53(22), 5540-5545.
- [6] W.-L. Li, Q. Chen, W.-J. Tian, H. Bai, Y.-F. Zhao, H.-S. Hu, J. Li, H.-J. Zhai, S.-D. Li, L.-S. Wang, "The B₃₅ Cluster with a Double-Hexagonal Vacancy: A New and More Flexible Structural Motif for Borophene", *J. Am. Chem. Soc.* 2014, 136(35), 12257-12260.
- [7] W.-L. Li, T. Jian, X. Chen, T.T. Chen, G. V. Lopez, J. Li, L.S. Wang, "The Planar CoB₁₈⁻ Cluster as a Motif for Metallo-Borophenes", *Angew Chem. Int. Ed.* 2016, 55, 7358-7363.
- [8] X. Chen, Y.-F. Zhao, L.-S. Wang, J. Li, "Recent Progresses of Global Minimum Searches of Nanoclusters with a Constraint Basin-Hopping Algorithm in the TGMin Program", *Comp. Theore. Chem.* 2017, 1107, 57-65.

E06-73(I)

基于材料结构基因的合金成分设计新方法

董闯, 王清, 李晓娜

大连理工大学

我们常用的工程合金, 例如不锈钢、高温合金、黄铜、等, 虽然具有明确的牌号, 但是人们一直不理解其成分的结构根源, 极大制约了实用型合金设计方法的推出。本报告从澄清工业合金成分来源的角度, 试图回答这一重大科学和工程问题。我们首先根据工业合金均基于固溶体的现实, 阐述固溶体的化学近程序结构特征, 通过引入自行发展的团簇加连接原子的结构模型, 把短程序理想地描述为第一近邻的团簇和次近邻的连接原子两个部分, 从而构建出[团簇](连接原子)_x的成分通式。进而分析了面心立方和体心立方固溶体结构, 指出仅存在数种合理的稳定局域结构, 从而构建出类似于分子式的稳定固溶体局域结构单元和相应成分式, 进而我们指出, 这些结构单元就是决定材料关键性能的结构基因, 各种合金只不过是数种结构基因单元的体现。我们还证实, 现有工业合金牌号如黄铜和白铜系列, 其成分极好地满足了团簇成分式, 说明其成分均源于少数几种反映化学近程序的局域结构基因单元。最后, 我们列举若干新合金研发例子, 从而为研发工业合金指出一种新的基于材料结构基因的实用成分设计方法。

E06-74(I)

CeO₂ 中 4f5d 电子的成键特性研究

刘孝娟, 孟君玲, 张莉芳, 孟健
中国科学院长春应用化学研究所

稀土被人们誉为现代及未来工业必不可少的“工业维生素”和新材料的“宝库”，是世界公认的战略元素和高技术元素。作为一种不可再生的稀有资源，被广泛应用于军事、电子、环保、航天和其他尖端技术中，与高新技术和国防科技的发展息息相关。未来五年，国家“十三五”提出新的“创新、协调、绿色、开放、共享”发展理念，鼓励组织国际大科学计划和大科学工程。针对稀土功能材料，其应用技术的提高迫在眉睫。因此，应加快实现稀土功能材料基因组计划。

其中稀土离子中 4f5d 电子的成键特性是最应该被系统研究和明确的科学问题，因为一切与稀土相关的功能材料均同稀土与周围离子的成键特性息息相关。首先我们研究了 CeO₂ 中 4f5d 电子的成键特性。采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，考虑 4f5d 电子的强关联作用，并计入 4f5d 电子的自旋轨道耦合效应，系统的分析了 4f5d 电子随外界晶体场强度的变化规律，4f 及 5d 轨道的劈裂、成键及电子占据情况。发现在平衡位置附近，4f 轨道上电子分布稳定；但从较大变化范围看，4f 轨道上电子对外界的相应比较敏感。具体为：平衡位置时，CeO₂ 中的 Ce 上 4f 轨道呈现 4f⁰⁺ 电子组态，4f5d 间存在较强的杂化，与 O 的 2p 轨道化合成键，体系为绝缘体。从平衡位置逐渐缩小 Ce-O 距离时，不仅有电子的交换相互作用，同时 Ce-Ce 及 O-O 的核间排斥作用增大，使得体系的总能量急剧升高。另外原来强的 4f5d 电子间杂化变小，最后消失，Ce-O 间成键是通过 Ce4f-O2P 和 Ce5d-O2p 分别成键，同时体系发生绝缘体-金属转变；从平衡位置逐渐增大 Ce-O 距离时，Ce 上发生一系列 Ce⁴⁺Ce³⁺Ce²⁺Ce 的转变，体系也发生绝缘体到金属的转变。所有的这些系统的理论结果为将来设计合成 Ce 相关的光、电、磁及催化性能材料提供最基本的理论指导。

E06-75(I)

纳米润滑膜在激光加热下的热损耗行为计算模拟

李蓓^{1,2}, 雷安琪^{1,2}, 赵广辉², 刘韩星², Wong Chee How³

1. 材料科学与工程学院, 武汉理工大学, 洪山区珞狮路 122 号, 430070, 武汉, 中国
2. 材料基因工程研究中心, 武汉理工大学, 洪山区珞狮路 122 号, 430070, 武汉, 中国
3. 机械与航空学院, 南洋理工大学, 南洋大道 50, 639798, 新加坡

理解聚合物薄膜在激光加热下的性能和行为，对维持微纳米器件的稳定性和可靠性至关重要。例如，机械硬盘中采用仅为分子层厚的全氟聚醚为硬盘润滑剂，以降低飞行磁头和快速旋转磁盘间的摩擦和磨损。近十年来，业界提出热辅助磁存储技术，使用飞秒脉冲激光，快速加热高稳定性磁性复合材料，使其温度在几个纳秒内从室温升至居里温度 (> 600 K)，从而达到 50 Terabit/in² 的磁存储密度。然而，目前商业可用的全氟聚醚润滑膜在飞秒脉冲激光加热下会发生挥发、分解和扩散等一系列严重的损耗行为。因此，本文将使用分子动力学模拟方法，从微观尺度出发研究纳米级润滑膜在近接触磁头磁盘面间、激光照射下的纳米级热传递过程，并系统地探讨润滑膜在激光加热下的热力学非稳定行为及其机制，从而为新型润滑膜的设计和生產提供理论依据和清晰系统的指导。

E06-76(K)

Computational Design of Functional Semiconductor Materials

张立军

吉林大学材料科学与工程学院

Functional semiconductor materials are widely used in many applications such as electronics, optoelectronics, thermoelectrics, quantum information, etc. Discovery of new semiconductors via rational design is of crucial importance for making breakthrough enhancement of materials performance in applications. With dramatically increasing computing capability of supercomputers and continuously developed computational algorithms, people

can resort to materials simulation to explore the properties of thousands of potentially useful materials in a fraction of time that the real experiments might take. This makes theoretical design of functional materials with desired properties in computers come true. In this talk I will present our recent work on computational materials by design for several functional semiconductor systems [1-8] (e.g., solar absorbers, transparent conductors, low-dimensional semiconductors, etc.). These have been done by using high-throughput electronic structure calculations or artificial intelligence guided structure searches. I will also share our concerns about the challenges and potential solutions for realizing the truly sense of materials by design.

References:

- [1] Lijun Zhang et al., Nano Lett. 12, 984 (2012).
- [2] Lijun Zhang et al., Nature Commun. 4, 2396 (2013).
- [3] Lijun Zhang* et al., Nano Lett. 15, 88 (2015).
- [4] Lijun Zhang* et al., Chem. Mater. 29, 2459 (2017).
- [5] Lijun Zhang* et al., Chem. Mater. 29, 524 (2017).
- [6] Lijun Zhang* et al., J. Am. Chem. Soc. 139, 2630 (2017).
- [7] Lijun Zhang* et al., J. Am. Chem. Soc. 10.1021/jacs.7b02120 (2017).
- [8] Lijun Zhang* et al., J. Am. Chem. Soc. 10.1021/jacs.7b01815 (2017).

E06-77(I)

Computational Simulation of Supported Nanocatalysts under Realistic Conditions

Jianguo Wang (王建国)

College of Chemical Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou

Supported noble metal catalysts have played an important role in the conversion of energy and resources. Computational simulations ranging from quantum chemistry density functional calculations, molecular dynamic have been widely used to investigate the reaction mechanisms and the relationship between structure and properties of nanocatalysts. However, there are still huge gaps between computational simulations and realistic experiments. During the recent years, we try to computational simulate the nanocatalysts by consideration of realistic conditions in order to reduce the pressure and materials gap.

E06-78(O)

电场控制纳米杆在聚合物基体中导电网络的形成

高洋洋, 张立群

北京化工大学先进弹性体研究中心

当将纳米杆填料加入聚合物基体中能有效的提高材料的导电性能。本研究目的是考察纳米杆填充聚合物纳米复合材料的导电性能在电场作用的变化。当材料置于电场下时, 纳米杆填料会发生诱导极化。一端带正电, 另一端带负电。这样纳米杆会沿着电场方向排列, 同时纳米杆带不同电荷末端相互吸引而搭接在一起。材料导电性能表现出各向异性, 这与电场强度与诱导电荷大小相关。

我们主要采用分子动力学模拟方法, 采用典型的珠璜模型描绘聚合物纳米复合材料的一般特性。

在电场作用下, 纳米杆受到电场的静电力使得材料导电概率下降; 而纳米杆带不同电荷末端产生静电相互作用提高了材料导电概率。同时, 材料沿着电场方向的导电概率上升, 垂直于电场方向的导电概率下降。因此, 材料导电概率的上升与下降取决于静电力与静电相互作用的大小。材料导电概率, 静电力和静电相互作用可以用一个半经验方程描绘。同时, 材料逾渗值, 静电力和静电相互作用也可以用一个半经验方程描绘。

我们可以充分利用外加电场来有效的控制纳米杆在聚合物基体中形成导电网络, 为制备导电复合材料

提供新的思路。

墙展

E06-P01

Extraordinarily Strong Interlayer Interaction and high-electron-mobility in 2D Layered PtS₂ and PtSe₂

Jingsi Qiao^{1,2}, Yuda Zhao², Peng Yu³, Shu Ping Lau², Liu Zheng³, xieyu Zhou¹, Wei Ji¹, Yang Chai²

1. Department of Physics, Renmin University of China, Beijing 100872, China

2. Department of Applied Physics, The Hong Kong Polytechnic University

3. School of Materials Science and Engineering, Nanyang Technological University

The crystal structure and physical properties of two-dimensional transition metal dichalcogenides (TMDs) are substantially dependent on the filling of *d* orbitals of transition metal. While the properties of group-6 TMDs have been extensively investigated, the group-10 TMDs with the richest *d* electrons remain relatively unexplored. We present experimental and theoretical studies on two new members of group-10 TMD - PtS₂ and PtSe₂. We found the indirect bandgap of PtS₂ can be drastically tuned from 1.6 eV (monolayer) to 0.25 eV (bulk counterpart). Furthermore, we reveal a layer-dependent semiconductor-to-semimetal evolution from few-layer to bulk PtSe₂. Meanwhile, the interlayer mechanical coupling of these materials is almost isotropic. Such unusual electronic and vibrational properties in group-10 TMD can be understood as a result of strongly interlayer interaction from the *p_z* orbit hybridization of S atoms.

We further investigated the electrical characteristics and stability of these promising 2D materials experimentally and theoretically. The field-effect electron mobility of PtS₂ and PtSe₂ can reach up to 100 and 210 cm²/Vs at room temperature respectively, which are almost comparable with that of black phosphorus. In addition, PtS₂ and PtSe₂ are not easily oxidized by Oxygen and hydrophobic. The morphology of them exhibit slight difference after ~ one-year air exposure, demonstrating excellent air stability. These excellent properties of 2D group-10 TMD make them very promising candidate materials for future applications in electronics and optoelectronics. [1-2]

[1] Yuda Zhao, Jingsi Qiao, Peng Yu, Zhixin Hu, Ziyuan Lin, Shu Ping Lau, Zheng Liu, Wei Ji and Yang Chai. *Advanced Materials* 28, 2399–2407 (2016)

[2] Yuda Zhao, Jingsi Qiao, Zhihao Yu, Peng Yu, Kang Xu, Shu Ping Lau, Wu Zhou, Zheng Liu, Xinran Wang, Wei Ji and Yang Chai. *Advanced Materials* 29, 1604230 (2017)

E06-P02

Hf-N 及 Hf-C-N 体系的热力学研究

庞梦德¹, 彭英彪², 周鹏³, 杜勇¹

1. 中南大学, 粉末冶金国家重点实验室, 湖南长沙 410083

2. 湖南科技大学, 冶金与材料工程学院, 湖南株洲 412007

3. 湖南科技大学, 机电工程学院, 湖南湘潭 411201

HfN_x 因其优良的电学和力学性质, 被广泛应用于电子器件及切削刀具等领域。在建立硬质合金数据库时, Hf、C、N 均是其中重要的合金元素。因此, 对 Hf-N 及 Hf-C-N 体系进行热力学研究具有重要意义。

本工作采用 CALPHAD 方法对 Hf-N 及 Hf-C-N 体系进行了详细的热力学评估和优化。

Hf-N 二元系包含了液相、气相、Hcp 相、Fcc 相 (HfN_x)、Bcc 相以及两个线性化合物 Hf₄N₃ 和 Hf₃N₂, 文献中有相关的相图以及热容、形成焓等热力学性质实验数据的报道。值得一提的是, 由于 Fcc 相中 N 的

固溶度可以达到 52 at. %，本工作采用了(Hf, Va)₁(N, Va)₁ 模型来对其进行描述。通过 Thermo-Calc 软件进行热力学优化，获得了一系列自洽的热力学参数。

基于这些热力学参数计算的 Hf-N 体系相图及热力学性质，能够很好地吻合相关的实验数据。在 Hf-N 二元系的基础上，本工作首次优化了 Hf-C-N 三元系，计算得到的 1150 °C 等温截面与实验测定的结果基本一致。

E06-P03

基于粗糙集理论晶系分类模型与分析

戴东波¹，周冀超¹，李盛洲¹，韩越兴¹，徐燕²，张惠然^{1,3}

1. 上海大学计算机工程与科学学院
2. 上海电力学院数理学院
3. 上海大学材料基因组工程研究院

晶系是晶体材料的一个重要属性，描述了晶体材料的内在结构，对于进一步表征晶体材料的物理性质和性能具有重要作用。本文从基于第一性原理计算所得的晶体材料数据出发，采用机器学习算法构建对晶体材料晶系的预测模型（DM-RS-DT），实现有效的晶体材料晶系分类。

本文在传统晶体材料学和传统机器学习方法的基础上，通过字典标记法将晶体材料数据转化为字符特征，然后使用粗糙集理论对特征进行约简并放入决策树中学习，最后采用反向翻译法将决策树的结果转换成基于原始结构属性分类的决策树，获得最终的晶体材料晶系分类。

实验结果表明，DM-RS-DT 模型对晶体材料晶系的预测效果较好，达到 90% 以上，并且通过对晶体材料数据的特征进行皮尔森相关系数衡量可以看出——density、symbol、point_group 以及 hall 特征与晶系有较大关系，特别是 point_group 属性，相关系数高达 1.23，很大程度上决定了晶体材料的晶系。

DM-RS-DT 模型中采用的决策树算法构建了可视化的结构属性决策条件，把传统机器学习中经常出现的“黑盒”问题转化为“白盒”问题，更加清晰地描述了晶体材料数据中的特征与晶系之间的对应关系。通过这个模型，不仅可以帮助材料研究者快速划分未知材料的晶系，而且可以建立起结构参数与晶系之间的对应关系，对于材料研究人员进一步建立起从晶体材料结构、物理属性与晶系三者之间的内禀关系具有一定的参考价值。

E06-P04

锂离子导体包覆 NCM 正极材料

刘波¹，王善禹²，张文清¹，杨继辉²

1. 上海大学材料基因组工程研究院
2. 美国华盛顿大学材料科学与工程系

大量的实验已证明锂离子电池正极材料与电解液自发的发生化学反应形成界面层，将会损耗锂离子，导致容量衰减；同时形成界面层具有高的界面电阻，不利于锂离子的输运，这是锂离子电池正极材料退化机制的主要原因之一。为了解决这个问题，采用包覆是实验上最简单有效的提高正极材料的电化学性能的一种方法。考虑锂离子导体材料作为高镍正极材料 (NCM) 的表面包覆层，例如 LiTaO₃, LiNbO₃, Li₂SiO₃, Li₂ZrO₃, Li₂TiO₃, LATP, LLZO 等等。这一类锂离子导体材料的共同特征是金属离子仅有一个稳定不变的价态，电子绝缘和较好的离子导电性。从这些锂离子导体材料中，通过第一性原理计算筛选出满足包覆层的条件的最优的锂离子导体材料：一是锂离子导体材料与正极材料有着最小的锂化学势差，从而抑制包覆层面锂离子的损耗，形成最小的界面电阻；二是锂离子导体有着好的离子导电性，锂离子的输运最好具有三维的网络通道；三是锂离子导体材料和正极材料最好有着相同的空间群，都是层状结构，晶格匹配度好；四是锂离子导体材料中阴离子能够强有力地吸引锂离子。否则，高电压正极材料下，包覆层将容易损耗锂离子。因此，氧化物的锂离子导体比硫化物的锂离子导体更满足包覆层的条件。

E06-P05

磁场驱动功能梯度纳米复合材料的设计与模拟

黄厚兵¹, 施小明¹, 王正直², 马星桥¹

1. 北京科技大学物理系
2. 武汉大学工程力学系

磁场驱动功能梯度纳米复合材料能够通过局部调制来获得力学梯度, 尤其在界面或者表面, 其设计类似自然生物材料。如何通过磁场来调制是获得良好力学性能的关键, 尤其是如何定量调制磁性颗粒浓度分布显得尤为重要, 为此我们希望通过求解磁性颗粒漂移扩散方程来模拟二维情况下磁场驱动磁性颗粒演化, 研究磁性颗粒在外加磁场作用下的运动, 通过梯度分布的纳米复合材料, 而获得良好的力学性能。

我们通过解析解求柱状永磁体的磁场和磁力分布, 利用有限体积法求解线性漂移扩散方程, 考虑一般界面两端无磁性颗粒通量作为界面边界条件, 改变磁力大小演化方程或者使用非均匀磁力分布演化方程。

模拟结果显示磁性颗粒累积会随着时间演化而改变, 不同大小的均匀磁力会导致不同的稳定颗粒浓度梯度, 磁力小时颗粒浓度变化非常小, 磁力适中会形成较好的浓度梯度, 从而形成良好的力学梯度。磁力过大会破坏浓度梯度分布。非均匀磁力会导致界面浓度各向异性, 并导致力学各向异性。同时, 我们研究了磁性颗粒的尺寸效应, 发现在一定尺寸范围内, 尺寸越大, 磁力驱动效果越好, 相反小尺寸颗粒($\sim 10\text{nm}$)需要较大磁力驱动,

有限体积法被用于漂移扩散方程求解, 并且得到了不同磁力导致的磁性颗粒浓度分布, 通过与实验对比, 发现能通过模拟较好的解释实验结果并一定程度预测力学性能, 我们的研究为设计功能梯度纳米复合材料提供了很好的方法。

E06-P06

Mn-H 和 Mg-Mn-H 体系相图热力学的研究

梁永鹏, 刘树红, 杜勇

中南大学粉末冶金国家重点实验室

Mg-Mn-Ni 系合金因其优异的储氢性能而被认为是具有发展前景的储氢材料体系。研究 Mg-Mn-Ni-H 体系的相图及热力学性质对于储氢材料的研究开发与应用具有重要意义。

本工作采用 CALPHAD 方法研究了 Mg-Mn-Ni-H 体系中子体系 Mn-H 和 Mg-Mn-H 的相图热力学性质。其中, Mn-H 体系的气相采用理想溶液模型进行描述, 4 个固溶体相 ($\alpha\text{-Mn}$ 、 $\beta\text{-Mn}$ 、 $\gamma\text{-Mn}$ 、 $\delta\text{-Mn}$) 以及具有六方结构的 ϵ 氢化物都采用了双亚点阵模型进行描述, 而液相则采用了置换溶液模型进行描述。

利用优化获得的热力学参数, 本工作计算了不同大气压下的 Mn-H 相图, Mn-H 体系的相关系以及 H 在 Mn 中的溶解度随着压强和温度的变化在相图中得到合理地描述。在此基础上, 结合文献中已报道的 Mg-H 和 Mg-Mn 体系的参数, 本工作对 Mg-Mn-H 三元体系进行了热力学优化。利用获得的描述 Mg-Mn-H 体系的热力学参数进行计算能够合理地解释 773 K 和 973 K 时 H 在 Mg-Mn 合金中的溶解度行为。同时, 本工作还对 550 K、1 个大气压下 Mn-Mn-H 体系的等温截面进行了合理地预测。

通过比较发现, 计算结果与大部分实验数据合理吻合, 本工作获得了一系列完整自洽的热力学参数。

E06-P07

沸石酸性位催化性能的多重组合“基因”

翟冬^{1,2,3}, 刘轶^{1,2}, 赵亮³, 高金森³

1. 上海大学物理系和量子与分子结构国际中心
2. 上海大学材料基因组工程研究院
3. 中国石油大学(北京)重质油国家重点实验室

沸石固体酸催化剂的催化性能与其酸性位的稳定性、可接触性和酸强度等性质密切相关。

本研究基于第一性原理计算揭示关联沸石催化性能的“基因”，定量分析沸石中质子酸位的能量稳定性、空间可接触性和酸强度，并提出综合评价方法（SAS 方法）。该方法分别使用相对能量和去质子化能对酸性位稳定性和酸强度进行评价。对于空间可接触性，提出了局部可接触面积概念来评价。

利用 SAS 方法系统评价了 MFI 型沸石中各种桥羟基、窝羟基和表面羟基酸性位的性质。结果表明，这些酸性位的可接触性受羟基的取向影响，酸强度按照“桥羟基>窝羟基>表面羟基”的次序依次减弱，沸石孔道限域和氢键作用会增强酸强度。

本研究提出的 SAS 方法可为优化设计沸石中的催化活性位或其他类似催化体系提供多重组合基因的评价依据和设计准则。

E06-P08

AlN 纳米薄片对有害气体 CO、SO₂ 和 NO₂ 吸附的筛选性计算研究

欧阳天虹，钱钊，刘相法

山东大学材料科学与工程学院材料液固结构演变与加工教育部重点实验室

我们通过密度泛函理论（DFT）分别计算了本征、具有碳原子掺杂以及氮原子空位缺陷的六方氮化铝纳米薄片的基态结构、能量及电子结构，进而探究了它们的气体传感性能。我们选用 DFT-D2 Grimme 方法计算发现碳原子和氮原子空位缺陷均能使六方氮化铝纳米薄片吸附一氧化碳的吸附能提高，吸附一氧化碳前后材料的能隙变化幅度也发生改变。基于以上结果，我们认为具有碳原子掺杂或氮原子空位缺陷的六方氮化铝纳米薄片是一种检测一氧化碳的传感器候选材料。此外，我们还探究了空位缺陷对六方氮化铝纳米薄片吸附二氧化硫和二氧化氮两种有害气体的影响。结果显示氮原子空位缺陷、铝原子空位缺陷和氮铝双原子空位缺陷的出现均能使氮化铝纳米薄片吸附二氧化硫和二氧化氮的吸附能提高，其中带有氮铝双原子空位缺陷的氮化铝纳米薄片吸附二氧化硫与二氧化氮时均能使被吸附气体解离。同时我们还计算了多种不同吸附体系的差分电荷密度图，得到了不同的吸附体系中气体分子与基体材料的成键情况。进而研究了不同体系的电子态密度，结果显示空位缺陷对氮化铝纳米薄片吸附二氧化硫或二氧化氮前后的能隙变化亦具有影响。通过计算不同体系的功函数，发现相比于本征氮化铝吸附体系，带有空位缺陷材料吸附体系的功函数有一定程度的变化。研究认为带有空位缺陷的六方氮化铝纳米薄片能够作为二氧化硫和二氧化氮的气体传感器或过滤器的候选材料。

E06-P09

Electron beam induced selectively linear etching of monolayer black phosphorus

Yuhao Pan, Wei Ji

中国人民大学

Defects and edges are of vital importance to physical and chemical properties of a certain two-dimensional material. Finding a way to control the formation of defects or edges precisely is a long-standing challenge due to synthesis technology limitation. Here, using density functional theory molecular dynamics (DFT-MD) method, we propose a possible mechanism to create a special chain vacancy in monolayer black phosphorus by electron beam of which the edges (zigzag-edge) are not the most stable one. To compare the dynamical stabilities of the phosphorus atoms under electron beam, we assess the cross sections for the displacement as a function of electron energy by employing the McKinley-Feshbach formalism. Furthermore, the band structure and partial charge density are calculated to show the special electronic properties of this chain vacancy. Above all, this work presents an efficient way to predict how vacancies are formed under electron beam in 2D materials.

E06-P10

尺寸效应调控全无机钙钛矿 CsPbX₃ 立方相稳定性

杨凤, 王聪, 季威
中国人民大学物理系

在太阳能电池应用中, 全无机钙钛矿材料 CsPbI_3 的热力学稳定性一直是一个被关注的问题。在体材料中, 具有合适直接带隙的立方相 (Cubic Phase) CsPbI_3 需要在 300°C 以上才较带隙过大的正交相在热力学上更稳定。因此, 室温下的 CsPbI_3 立方相仅是一个亚稳相, 这一直是困扰 CsPbI_3 一类材料应用的一个关键问题。理论计算表明, 立方相具有更低的表面能。因此, 将 CsPbI_3 制备成纳米材料时, 有望使得立方相成为室温稳定相。

具体地, 项目采用基于密度泛函理论的第一性原理计算, 研究了这两个相在不同维度下的体相和表面的竞争机制, 预测了立方相和正交相的相变温度随外界温度和 CsPbI_3 维度和尺寸的关系, 并计算了通过外界压力调控相变的临界压力。

研究发现, 在 300 K 时, CsPbI_3 纳米晶的相变尺寸在 $7.8\sim 18\text{ nm}$ 之间; 纳米线的相变边长在 $3.0\sim 10\text{ nm}$ 之间; 纳米片的相变厚度在 $1.3\sim 4.8\text{ nm}$ 之间。当这些受限低维体系的尺寸小于上述数值后, 表面效应使得立方相成为室温热力学稳定相, 其稳定性将大幅提高。将 I 替换为 Br 后, 对应的相变尺寸分别为: $14\sim 71.9\text{ nm}$ 、 $9.7\sim 48.3\text{ nm}$ 和 $5.4\sim 24.6\text{ nm}$ 。

通过对比分析发现, 不同维度下, 表面与体相的比例不同, 因而相变的尺寸大小不同。维度越低, 表面所占的比例越大, 因此相变尺寸越小。同时, 进行卤素替换后, 同一维度下相变尺寸亦有不同。将 I 替换为 Br 后, 相变尺寸明显变大。这为实验得到低温稳定的立方相 CsPbX_3 提供了理论参考。

E06-P11

Straintronics in two-dimensional in-plane heterostructures of transition-metal dichalcogenides

魏巍^{1,2}

1. 山东大学物理学院
2. 山东大学国家重点实验室晶体材料研究所

针对 $\text{MoSe}_2/\text{MoS}_2$, $\text{MoS}_2/\text{MoSe}_2$, $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ 和 $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ 的二维过渡金属硫族化合物所构成的横向异质结构, 由于其本征的应力可以通过两种成分的晶格失配调控产生, 这就在一定程度上影响了其电子结构。因此可以通过本征的应力可以减少或者降低非金属 p 和金属 d 轨道的耦合, 这样就可以改变在高对称点 K 点的成键态和反键态的电子态的劈裂。

运用基于密度泛函理论的第一性原理, 在考虑到自旋轨道耦合效应之后, 价带处的能带劈裂将会进一步导致在高对称点的带边的移动, 并且改变带隙的变化例如间接到直接带隙的转变。有趣的是, 强烈的杂化态存在于过渡区域。

我们发现对于横向异质结, 施加应力对于自旋轨道耦合作用引起的价带边的能带劈裂是没有影响的, 但是杂化态的范围决定了能带劈裂的程度。另外, 过渡区的电子转移对于带隙仍有一定的影响。施加应力之后, 二维过渡金属硫族化合物的键强也会降低。

由于对于独立的过渡金属表现出对应力的不同抵抗性, 因此电子态的杂化在带边振幅的移动起了重要作用。这种情况之下的 K 点的带边向上或者向下的移动就会导致带隙的减小或者增加以及产生间接到直接带隙的转变。因此, 在二维过渡金属所构成的横向异质结就需要考虑能带序列的问题, 这对输运和光学性质具有重要的意义。

E06-P12

基于机器学习的材料属性缺失数据的插补方法

胡红青¹, 张惠然^{1,2}, 郑伟达², 韩越兴¹, 丁广太^{1,2}, 戴东波¹, 钱权^{1,2}

1. 上海大学计算机工程与科学学院
2. 上海大学材料基因组工程研究院

传统的材料研究是从实验出发进行测量获取性能数据，成本较高、效率较低。将材料领域知识结合机器学习方法建立计算模型则能降低成本、提高研究效率。然而，通常情况下得到的原始数据往往是不完整的，如果直接删掉不完整数据会造成实验数据集过小，影响模型的学习效果。利用机器学习进行缺失值的插补则可以增扩实验数据集。

本工作使用 245 条 ABX_3 型钙钛矿数据，利用各属性间的内在联系，使用预测均值匹配法 (PMM) 和随机回归插补法对缺失属性进行多重插补，然后利用基于多分类算法模型对钙钛矿材料进行晶系分类来进行插补结果的验证。其中预测均值匹配法是多重插补方法的一种，其基本思想是对于一个具有缺失值的变量，用其他变量的数据对这个变量进行拟合，再用拟合出来的多组预测值对缺失值进行填补，以反映被插补的缺失数据的不确定性；随机回归插补法则是在回归插补的基础上加上随机性，增加缺失值的随机性，以改善缺失值分布过于集中的缺陷；验证插补模型主要是通过建立晶系分类模型，横向比较插补前和插补后的数据集的晶系分类结果。

比较插补模型的计算数据与原始值，相关性可达到 70% 左右；通过建立的晶系分类模型进行验证，结果表明利用插补后的数据集的分类结果要优于原始数据集，从而进一步证明了基于属性插补的机器学习模型的有效性。

本文的实验证明机器学习方法能够解决材料数据属性缺失的插补问题，研究同时也有助于材料研究者挖掘材料属性，以及发现材料属性与类别之间的关系，有利于加速材料研发。

E06-P13

Diverse low symmetric stacking orders in large-scale uniform domains of bilayer MoSe₂

Cong Wang¹, Hongjun Liu², Jinglei Chen², Guanyong Wang⁴, Jinfeng Jia⁴, Chuanhong Jin³, Maohai Xie², Wei Ji¹

1. Beijing Key Laboratory of Optoelectronic Functional Materials & Micro-Nano Devices

2. Physics Department, The University of Hong Kong, Pokfulam Road, Hong Kong,

3. State Key Laboratory of Silicon Materials, Key Laboratory of Advanced Materials and Applications for Batteries of Zhejiang Province, Department of Materials Science and Engineering, Zhejiang University

4. Key Laboratory of Artificial Structures and Quantum Control (Ministry of Education), Department of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University

Interlayer stacking was recently discovered a new degree of freedom to modify various physical properties of 2D materials. State-of-the-arts studies on this issue focus on twisted or hetero-bilayers due to fabrication difficulties, which cannot reveal the intrinsic role of a certain stacking order on its physical, e.g. electronic, properties. Homogenous domains with stacking orders other than the most stable one are thus yet to be investigated.

Here, we controllably introduce domain boundaries into MoSe₂ bilayers by molecular beam epitaxy. This boundary results in an in-plane misfit to the lattice of MoSe₂, which forms various large-scale low-symmetric stacking orders and stabilized by the stronger layer-layer attraction compared with the repulsion induced by shifting the MoSe₂ layer from its most stable stacking. Eight stacking orders were observed from our transmission electron microscopic images and the detailed geometries of them were identified by our density functional theory calculation among 16 considered orders. A linear relation between the interlayer distance and the difference of stacking energy. These observed stacking orders develop various relative positions in energy for the valence states at G and K, showing stacking dependent bandgaps and valence band tail states in the measured scanning tunneling spectroscopy. These results substantially extend the knowledge of stacking order in modifying electronic structures.

E06-P14

Big-data applications in modern semiconductor manufacturing

Tyler Tang¹, Randy Kang², Kary Chien², Harvey Chen³, Frank Yang¹

1. Metrology Development, SMIC Advanced Technology Research & Development Corporation

2. Quality and Reliability, Semiconductor Manufacturing International Corporation

3. Fab Enhancement, Semiconductor Manufacturing International Corporation

Objective: Semiconductor manufacturing, as the foundation of electronic industry, has become the key technology milestone of a nation's development strategy. As manufacturing technology continues to revolutionize, huge amount of data is generated every day in modern semiconductor factories. The data contains useful information waiting to be "mined". In this paper, we introduce several examples regarding how data-mining techniques can help make use of these manufacturing data to help enhance fab efficiency.

Methods: The methods we use in this work include advanced statistical techniques such as partial least square-discriminant (PLS-DA) analysis as well as time serial predictive analysis. Physical meanings are incorporated into the model by engineering experiences.

Results: For one application scenario, by using Orthogonal PLS-DA, We identify key equipment tool parameters that result in manufacturing defects. We produce a new virtual parameter that combines the key parameters' effect on the defect, which will decrease engineers' work load efficiency. For another, we use big-data enhanced technology to improve current advanced process control for the Chemical Mechanical Polishing department.

Conclusions: This pioneer work uses several real-industry examples to demonstrate that advanced "data-mining" methods can be used in modern semiconductor fab production to enhance production efficiency.

E06-P15

基于异常环拓扑结构的轻质超硬类金刚石材料

Light-weight superhard diamond-related materials based on exceptional ring topology

迟宝倩¹⁻⁵, 刘轶^{3,4}, 李小武^{1,2}, 秦绪明^{1,4}, 赵新洛³

1. 东北大学理学院

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

3. 上海大学物理系和量子与分子结构国际中心

4. 上海大学材料基因组工程研究院

5. 沈阳理工大学理学院

Ring topology (RT) is defined as minimal closed rings to characterize the connection features of given atoms so that RT can distinguish the structures of allotropes bearing the same local bonding features beyond the nearest neighbors, e.g. four-fold coordination in diamond-related materials. Two novel diamond allotropes with less common 5-8 membered ring topologies were predicted by the first-principles calculations in this work. These orthorhombic carbon structures, denoted as oC12 and oP12 carbons, respectively, are three dimensional networks connected solely via sp^3 hybridized C-C bonds but their atoms are arranged in a non-hexagonal ring topology different from the conventional diamond. They can be constructed by superimposing Octagon-Pentagon Graphene monolayer consisting of (5-8)-membered rings connected along a straight or a zigzag path. The oC12 and oP12 carbons are predicted to be semiconductors with indirect band gaps > 3.0 eV. Compared with diamond the postulated oC12 and oP12 carbons are ~20% softer in hardness but ~10% lighter in mass densities due to their larger internal channels associated with the octagon rings, implying their potential applications as light-weight superhard materials. Our work suggest that tuning the ring topology of diamond-related materials provides a design strategy to balance the mechanical properties and densities often required in the development of light-weight structure materials.

E06-P16

碳氮二维材料孔道中混合气体分离的计算机模拟

胡晖, 邓声威*, 王建国

浙江工业大学化工学院

碳氮二维材料作为一种类石墨烯半导体材料在催化分离等领域展现了广阔的应用前景。基于质子交换膜燃料电池阴极催化剂层的内部工作环境, 本研究通过结合密度泛函理论计算和分子动力学模拟, 考察了无机小分子在二维材料孔道内的扩散情况。结果表明, 在合适的孔道尺寸下, 氧气、二氧化碳和一氧化碳通过碳氮孔道的难度依次增大, 而分子动力学模拟得到的分子运动情况也验证了这一结论。此外, 通过调节孔道尺寸, 碳氮二维材料实现了阴极催化剂层内常见混合气体的有效分离。

参考文献:

[1] de Silva, S. W., et al. "Strained graphitic carbon nitride for hydrogen purification." *Journal of Membrane Science* 528 (2017): 201-205.

[2] Zhu, Lei, et al. "C₂N: an excellent two-dimensional monolayer membrane for He separation." *Journal of Materials Chemistry A* 3.42 (2015): 21351-21356.

E06-P17

基于三维原子探针的含碳 Fe 基体系的热、动力学实验和理论研究

谌思宇, 鲁晓刚

上海大学材料科学与工程学院

通过制备多组 Fe-Al-Mn-C 四元合金、扩散偶样品, 采用电子探针 EPMA 方法测定含碳 Fe 基扩散偶及合金的各相成分, 再用 3DAP 进行碳含量校正, 并对合金微结构及微量元素在晶界、相界的偏聚现象进行分析, 为含碳体系的热、动力学优化提供可靠的实验数据。运用第一性原理计算, 结合 partitioning model 和五亚点阵简化模型来描述 κ 相的晶体结构, 并进行热力学优化。借助 3DAP 和 TEM 研究 Fe-Al-Mn-Si-C 合金中相平衡和 κ 相析出行为, 分析对高强轻质钢性能影响。

E06-P18

Fe-Co-Ni 三元合金相图及互扩散系数测定

夏成辉, 鲁晓刚

上海大学材料科学与工程学院

熔炼 Fe、Co 和 Ni 及其合金, 然后进行封管 (充氩气, 下同) 均匀化, 随后把 Fe 和 Ni 扩散偶, 封管后分别放在 800 和 1000°C 下保温 5 天, 取出水淬, 再与 Co 组成 “品” 字形扩散偶, 然后封管分别放在 800 和 1000°C 保温 30 天及 10 天, 最后取出水淬。用 XRD 确定三个合金 (这里是纯金属, 实际上很多时候是合金, 下面统一称为合金) 交接处附近的相。用 EPMA (电子探针) 测定三个合金交接处附近的成分, 得到的成分曲线中会有成分的跳跃, 即为各温度下对应的相图中相边界的成分。测定互扩散系数的扩散偶方法与上面 Fe/Ni 扩散偶相同。每对扩散偶扩散完成后对应一条成分曲线, 一对相交的成分曲线可以得到这个成分 (相交处的成分) 下的相在这个温度下的互扩散系数。

仅发表论文

E06-PO01

镁合金板材晶体塑性一再结晶集成计算

李子涵, 周国伟, 李大永, 彭颖红

上海交通大学，机械与动力工程学院

为了分析动态再结晶的发生对 AZ31B 板材性能的影响，以及计算在 AZ31B 变形过程中不同温度以及不同变形方向（RD 方向拉伸、压缩以及 ND 方向压缩）时力学行为，织构演化和微观结构的演化。

本文基于动态再结晶与多晶体塑性理论，引入基于位错密度演化的硬化方程和再结晶形核、长大理论，建立了晶体塑性-再结晶集成计算模型(VPSC-DRX 模型)。

VPSC-DRX 准确实现了 AZ31B 板材的塑性变形、织构演化和动态再结晶的耦合模拟，并利用该模型分析了板材变形中动态再结晶过程及其对变形机制的影响。

具体结论如下：

- (1) VPSC-DRX 模型可以将晶体信息考虑到计算中去，其中包括了晶体结构，变形模式以及晶体取向。同时变形演化过程中，模型计算中还包含了晶粒尺寸的影响。通过 VPSC-DRX，在不同温度下的 AZ31B 板材变形过程（RD 方向拉伸、压缩，及 ND 压缩）中的应力-应变曲线，晶粒尺寸演化和织构演化都能被准确预测。
- (2) DRX 的引入会对不同滑移模式的开动率演化有显著影响，但是不会对主导变形机制的类型产生影响，同时温度并未显著改变主导的滑移机制。
- (3) 动态再结晶的发生导致变形后织构强度略微发生下降，VPSC-DRX 模型很好的预测了织构随变形的演化。母晶和新生再结晶均会朝向最终织构逐渐变化，但由于新生晶粒的分布更加弥散，其织构强度更低，这也使得总体织构与实验测得织构强度更加接近。

E06-PO02

梯度控速降低涡轮盘锻造过程残余应力方法研究

王彦菊

中国航发北京航空材料研究院

涡轮盘在锻造过程中会引入残余应力，残余应力直接影响后续装配及其涡轮盘的疲劳寿命，而锻造过程中的工艺参数，包括锻造速度/锻造温度/摩擦等直接影响最终盘件的残余应力分布，为了降低涡轮盘的残余应力，提高盘件的服役寿命，本文对涡轮盘锻造过程中锻造速度与残余应力的影响规律进行研究。

采用数值模拟与工艺试验相结合，建立高温合金涡轮盘在锻造过程中的数值分析模型，通过计算分析多种锻造速度下的涡轮盘锻造残余应力分布来获得其影响关系规律，建立一种梯度控速降低涡轮盘残余应力的方法。

计算结果表明，通过涡轮盘锻造过程中的梯度控速可以有效降低盘件的残余应力，降低设备损耗，提高盘件的疲劳服役寿命，根据所研究的涡轮盘特征，设计并优化其锻造过程中的梯度控速范围。

结果证实，通过优化的梯度控速方法可以大幅度降低涡轮盘的残余应力，提高了盘件的变形误差以及疲劳寿命，是一种切实可行的降低高温合金涡轮盘锻造过程残余应力的方法。

E06-PO03

变形高温合金 GH4066 材料热变形本构模型

王彦菊

中国航发北京航空材料研究院

金属的流动应力是金属抵抗形状变化和永久变形的能力，决定了金属塑性变形性能，是表征金属压力加工性能的一个基本量，也是制定合理的变形工艺规程所必不可少的重要参数。目前，针对新型镍基变形高温合金材料 GH4066 的热变形行为的研究还较少，只有正确确定材料在不同变形条件下的流动应力变化规律，才能获得高质量的产品。然而，建立高温下金属材料的流动应力模型是一项相对复杂的工作。

为了建立该材料的本构关系方程，利用 Gleeble-3800 对新型变形高温合金 GH4066 进行热模拟压缩试验。研究了压缩量为 60%，应变速率分别为 0.0003, 0.001, 0.01, 0.1, 1, 10S^{-1} ，变形温度分别为 800°C ，

900°C, 1000°C, 1100°C, 1150 °C条件下试样的热变形行为。并采用双曲正弦形式修正的 Arrhenius 法来构建合金的本构模型。

通过试验结果分析,发现变形高温合金材料 GH4066 在热压缩变形过程中发生了动态再结晶,分析了温度、应变速率对动态再结晶的影响,并通过金相试验得到了验证。

误差分析表明,所建立的本构模型能较好地反映出该材料的高温流变特性。

E06-PO04

First principle calculation of helium in La₂Zr₂O₇: structural and electronic effects, formation energy and mechanical

Chenguang Liu, Xiao Liu, Yuhong Li

Lanzhou University

Zirconate pyrochlore, which shows good durability and stability, has been proposed as a candidate ceramic waste-form for the immobilization of long-lived transuranic elements such as Pu, Np, Am and Cm. Due to α -decay, He atoms will accumulate and cause the host matrix to swell or reach a critical He concentration sufficient for bubble nucleation. This work provides the result of the interaction of He with La₂Zr₂O₇ pyrochlore. Density functional theory (DFT) has been employed to determine the solution energy of a variety of interstitial sites in La₂Zr₂O₇. The results show that the octahedral interstitial site is the most stable helium interstitial site. The electronic structures of the He-La₂Zr₂O₇ systems have been analyzed. The change of bonding nature has been found when helium interstitials exists. Helium accumulation could create mechanical stress that lead to cracking and influence the stability of waste form, thereby we investigate the mechanical properties of the He-La₂Zr₂O₇ systems. To predict the effect of helium interstitials on radiation tolerance, the cation anti-site defect formation energies have been calculated by DFT and it is shown that the value of these energies are decline when helium interstitials are present. From this, we can infer that helium interstitials can increase the radiation tolerance of La₂Zr₂O₇ pyrochlore.

E06-PO05

烧结钕铁硼晶界扩散法在材料芯片高通量制备中的应用

余兴^{1,2}, 冯光^{1,2}, 赵雷^{1,2}, 王海舟^{1,2}

1. 钢铁研究总院

2. 北京市金属材料表征重点实验室

烧结钕铁硼晶界扩散法通常是在烧结完成的钕铁硼磁体表面附着 Dy 或 Tb 等重稀土元素的化合物,并在富钕相熔点以上的高温进行扩散处理,使 Dy、Tb 等重稀土元素通过磁体的晶界渗入磁体内部。分别对烧结钕铁硼晶界扩散的表面附着方式、扩散条件、扩散元素的深度分布、磁体微观结构等方面进行了论述。在对上述烧结钕铁硼晶界扩散研究的基础上,提出经一次热处理过程、在一块样品中,实现烧结钕铁硼材料的高通量制备连续变化的材料芯片。在晶界扩散处理过程中,存在重稀土元素在晶界的扩散过程和在主相晶粒内部的扩散与取代过程。可以通过适当调整扩散处理的温度与时间,利用在晶界的扩散过程和在主相晶粒内部的扩散过程这两种扩散速度的差异,以及对表面附着稀土/非元素化合物的厚度、种类、组合(单一或混合)等因素的控制,从而得到沿扩散方向由表及里、在不同的深度位置具有不同成分-结构-性能的微区单元,从而达到通过晶界扩散法高通量制备烧结钕铁硼材料芯片的目标。

E06-PO06

The foundation and study of the lattice inversion potential for Rhodium

Xianli Ren, Song Chen, Ming Xie, Song Wang, Jieqiong Hu, Saibei Wang, Jinghong Chen, xianyue Wu

The lattice cohesive curve of Rhodium is investigated through first-principles calculations. The double-exponential function to fit the curve is presented. The inversion pair potential curve is generated through Chen's inversion method. The accurate pair potential function is obtained through fitting by the new double-exponential function. The phonon spectra are calculated through using the inversion potential data, the EAM (embedded atom method) potential theory and first principle method respectively to verify the reliability of the inversion potential. The method combining Boltzmann statistics equation with accuracy fitting of lattice cohesive energy curve is proposed to calculate the thermal expansion coefficient. In addition, the bulk modulus and Grüneisen constant in the room temperature are calculated. The results are in good agreement with experiment results, which implies that the inversion potential is effective and accurate.

E06-PO07

锗铅合金能带结构与发光效率调控的第一性原理研究

黄文奇, 杨虹

北京信息科技大学

随着信息产业的发展,海量的信息数据对集成电路的性能提出了更高的要求。当前,集成电路随着摩尔定律的发展已趋近物理极限,而将现有成熟的硅基微电子技术和光电子技术结合,实现硅基光电集成,已成为解决此问题的研究趋势。目前,与硅基微电子集成工艺兼容的 IV 族合金半导体—锗铅(GePb),由于其理论预测可以由间接带隙向直接带隙结构转变,从而实现高效发光。因此,GePb 合金已成为当前硅基光电集成技术领域的热点材料。然而由于 Ge 与 Pb 之间的相互固溶度很低且 Pb 在生长过程中容易分凝等原因,GePb 合金很难获得高质量高 Pb 浓度的单晶。并且 Pb 浓度越高,GePb 的温度稳定性越差,这极大限制了其在硅基光电集成领域的应用。因此,如果能在降低 GePb 合金材料中 Pb 组分浓度的同时,获得直接带隙结构或提高发光效率,将极大的促进 GePb 合金材料的应用。

针对 GePb 合金的组分调控、应变调控两种常用的能带调控手段,本论文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法结合超胞模型、能带反折叠方法和 GGA+U 带隙修正方法,系统的研究了弛豫 GePb 合金,双轴应变 GePb 合金的晶体结构、能带结构和光学性质。

计算结果表明,弛豫 GePb 的直接带隙组分转变点为 3.3%。随着组分浓度的增加,GePb 的发光增益系数迅速增加。GePb 在 (111) 双轴应变的帮助下,其直接带隙转变组分可以进一步降低至 2.1%。发光增益计算表明,适中的 (111) 压应变更有利于增强 GePb 的直接带隙发光。对于生长在 (111) Ge 缓冲层上的完全压应变 GePb,其直接带隙转变组分预测为 2.7%。随着 Pb 组分的增加,其发光增益迅速增大。

因此,对于 GePb 合金的生长,选择 (111) 晶向不仅可以降低它们获得直接带隙所需的 Pb 组分,同时还可以提高它们的发光增益。