

D04.极端条件材料与器件

分会主席：张保汉、杨李茗、朱嘉琦、邹勃、孙学峰、靳常青

D04-01

聚变极端条件下的金属材料

吕广宏

北京航空航天大学

聚变能源俗称人造太阳，具有清洁、安全、充足的特点，被认为是人类的终极能源。核聚变能开发对于中国能源发展尤其重要。以 2006 年国际热核聚变实验堆（ITER）计划为标志，核聚变能的研究已经进入了全球共同合作和研发的重要阶段。材料问题是聚变能源实现的关键问题，金属材料是聚变堆材料包括壁材料和结构材料的主要候选材料。金属材料面临高热、氢氦等离子体与中子辐照等聚变极端条件，其服役行为非常重要。本报告介绍聚变能源与聚变极端服役条件，并以报告人所在研究小组开展的钨基壁材料辐照行为方面研究工作为例，介绍聚变极端条件下的典型金属材料行为。

关键词：聚变极端条件，金属材料

D04-02

核能系统压力容器材料的辐照脆化机制

李正操

清华大学

D04-03

高功率微波强场材料研究进展

陈昌华¹，刘文元¹，孙钧¹，常超¹，苏建仓¹，白书欣²，吴平¹，万红²，柯昌凤¹

1.西北核技术研究所

2.国防科技大学空天科学学院

随着高功率微波（HPM）技术向高功率、小型化、长寿命、高可靠性方向发展，应用于高电压、强电磁场及复杂应用环境中的高功率微波强场材料已成为制约高功率微波技术发展的瓶颈。课题组从理论模拟和实验考核两方面分析探索了阴极、收集极、介质窗、绝缘子等高功率微波器件在强场条件下的作用或失效机制，对器件材料进行了功能化设计和研制。重点突破了炭基阴极材料制备和掺杂改性、收集极复合材料熔渗及界面性能优化、介质窗材料辐射聚合及聚合物表面物理刻槽和化学氟化改性、热塑性聚合物大尺寸成型等关键技术，取得了重大技术进展。

所研制的炭基复合阴极样件较现有 POCO 石墨阴极使高功率微波能量输出提高了 20%，并首次验证了碳纤维作为环形阴极的可行性；多层复合电子束收集极提高了材料的耐电子束轰击能力及导热和导电能力，工作寿命显著提升；周期线刻槽、氟化表面的交联聚苯乙烯高功率微波介质窗在几十纳秒脉宽下击穿阈值超过国内外公开报道的 1 倍以上；开发出直径达 1 m 以上的聚苯乙烯、聚苯醚、交联聚苯乙烯、聚酰亚胺等高性能聚合物材料，并实现了材料的批量化制备。

关键词：高功率微波，强场，掺杂，改性，刻槽，氟化

D04-04

液态难熔金属的静电悬浮与深过冷研究

杨尚京，胡亮，王磊，魏炳波

西北工业大学理学院应用物理系

深过冷液态金属熔体处于热力学亚稳状态，因此它在凝固过程中会出现与平衡条件完全不同的特征，比如枝晶生长速度的显著提高、固溶度的拓展以及亚稳相的生成。本文通过静电悬浮无容器处理技术研究了纯 Nb、纯 Zr、二元 Nb₉₀Zr₁₀ 和 Zr₉₀Ti₁₀ 匀晶合金的快速枝晶生长过程。实验中获得的最大过冷度分别为 446 K(0.16T_m)、388 K(0.18T_m)、498 K(0.19T_L)和 366 K(0.18T_L)，并且所测枝晶生长速度都随着过冷度的提高显著增大，在最大过冷度处，它们的枝晶生长速度分别达到 40.7 m/s、49.2 m/s、34.0 m/s 和 71.1 m/s。相比于纯金属 Zr，Ti 组元的加入使 Zr₉₀Ti₁₀ 合金的生长速度明显提高，而 Zr 组元在 Nb₉₀Zr₁₀ 合金中起相反的作用。基于无容器熔凝过程的温度变化及合金密度测定结果，分析表明 Nb₉₀Zr₁₀ 合金在深过冷快速凝固条件下形成了亚稳相。这可能是 Zr 组元对 Nb₉₀Zr₁₀ 合金枝晶生长速度的影响与 Ti 组元在 Zr₉₀Ti₁₀ 合金中的作用不同的原因。

关键词：静电悬浮，难熔金属，枝晶生长，亚稳相

D04-05

ReMoTaW 难熔高熵合金的组织与力学性能研究

魏琴琴, 沈强, 张建, 罗国强

武汉理工大学

难熔高熵合金具有严重的晶格畸变导致高的固溶强化和原子迟滞扩散, 因而具有高熔点、高强度、高硬度、耐高温软化和耐腐蚀等优异的特性, 成为发展新型高温高强合金的新方向和新思路。目前, 航空航天工业的不断发展要求高温结构材料具有更高的使用温度或者更高的高温强度, 突破传统高温合金最高使用温度低于 1200 °C 的局限, 因此探索一种由高熔点金属组成的在室温和 1400 °C 高温下仍具有优良综合性能的高熵合金势在必行。迄今为止, 已成功开发的耐高温高熵合金在室温性能和高温性能上不可兼得, 且在 1400 °C 仍具有较高压缩性能的高熵合金屈指可数。本文采用真空电弧熔炼法制备了一种新型的耐高温高熵合金 ReMoTaW, 研究了合金的组织结构以及室温和高温力学性能。结果表明, ReMoTaW 高熵合金由 BCC 固溶体基体, 富 Ta 固溶体以及富 Re 固溶体三相组成。合金的相偏析与二元合金相图中 Re 的有限固溶以及非平衡凝固过程中的熔点差异密切相关。室温下, ReMoTaW 高熵合金的抗压强度、断裂应变及硬度分别为 1451 MPa, 5.69% 和 640 MPa。经 1400 °C 退火处理后, 合金的组织结构无明显变化。在 1400 °C 下, ReMoTaW 高熵合金的抗压强度高达 936 MPa, 在合金压缩量为 40% 时仍未发生断裂, 表现出良好的综合力学性能。

关键词: 高熵合金, 组织结构, 相图, 力学性能

D04-06

空间特种功能涂层创新技术及应用

吴晓宏

哈尔滨工业大学

航天器在轨期间将经受真空、紫外、高低温以及高能辐射等空间环境。航天器构件在这种恶劣和特殊空间环境下服役, 既要满足力学性能, 还要满足热控、消杂光和抗辐照等特殊功能。以特殊功能为导向, 开展了航天器用轻质合金表面多功能膜设计、制备技术、功能调控及其应用研究, 构筑出耐磨、抗辐照、消杂光和热控等多功能一体化涂层。

关键词: 功能涂层, 航天器, 极端环境, 表面技术

D04-07

空间高性能 X 射线聚焦探测器技术研究

苏云

航天五院 508 所

D04-08

空间复杂辐射环境下的航天材料性能评价方法

沈自才

北京卫星环境工程研究所

航天材料在轨飞行期间将遭遇多组分多能谱的空间复杂辐射环境的作用, 进而导致其热物、光学、电学、力学等性能的退化甚至失效, 因此需要对其在轨性能退化进行地面模拟试验研究。文章针对在开展航天材料空间辐射效应地面模拟试验评价的过程中, 材料研制和保证人员往往不知道开展哪些辐射效应评估、用什么方法评估、如何选定关键试验参数以及试验参数如何使用等问题, 首先对空间辐射环境及效应进行了分析, 进而从带电粒子辐射效应、紫外辐射效应、综合辐射效应等角度, 给出了航天材料空间辐射效应地面模拟试验参数选取的原理、流程和方法, 在此基础上, 对真空度、温度以及原位测试等共性问题进行了讨论, 并给出了试验参数的选用建议。

关键词: 航天材料, 空间辐射环境, 效应, 评价方法

D04-09

卫星热控涂层现状及展望

刘刚, 曹康丽, 李瑜婧, 周博, 潘阳阳

上海卫星装备研究所

热控涂层是保证卫星正常工作, 延长其在轨工作寿命的重要温控手段。随着我国卫星设计水平的不断提升, 在轨可靠性

及寿命的提高，以及空间站、深空探测等项目的开展，对热控涂层进一步提出了高可靠、长寿命、功能性、轻量化等要求。目前，国内外热控涂层的发展主要以满足卫星在空间环境使用寿命及可靠性为主要目标，以智能化、轻量化作为发展方向，针对卫星的特殊功能及使用要求，发展具有特定功能的涂层以满足设计要求。本文就卫星热控涂层展开讨论，对其主要性能、发展现状以及未来的发展前景展望做出叙述。

关键词：热控涂层，空间环境，长寿命

D04-10

极端服役环境的航空材料技术

张博

北京航空制造工程研究所

随着我国航空装备高速发展，战场环境日益复杂，航空飞行器将面临诸如腐蚀、高能粒子辐照、超压、高温、高速、强冲蚀等极端服役环境，对航空材料技术提出了越来越高的要求。本文主要介绍航空超高强钢焊接结构的腐蚀与防护、防辐射透明材料以及高耐温橡胶材料等方面的技术研究。

目前我国装备力量逐步走向远洋，飞机从陆基发展到海基将面临来自海洋环境的腐蚀破坏问题。针对在海洋环境服役的航空超高强钢结构，分析了超高强钢电子束焊接接头的焊缝区、热影响区和近缝母材的微观组织，测试了各微区的电化学性能和耐腐蚀性能，研究了微观组织、电化学性能和耐腐蚀性能之间的相互影响关系，获得了航空超高强钢电子束焊接的最佳工艺和防护技术，并成功用于指导我国某型飞机超高强钢结构的电子束焊接工艺。

针对航空透明件在核射线辐射、超压、高热、强光等极端环境下的防护要求，开展了具有核射线吸收能力的含钨、铅特种航空有机透明材料的研究，利用蒙特卡罗法，计算了不同金属含量对热中子和 γ 射线的屏蔽能力，研究了金属元素含量对材料力学、光学及防核辐射性能的影响规律；构建了高当量爆炸源远场冲击模型，对透明件在力、热多场耦合条件下的爆炸冲击响应行为进行了模拟；同时，在强光、激光防护等方面开展了研究工作。

橡胶密封材料应用于飞机多个部位，是飞机各系统功能实现和保障必需的关键材料。在航空器飞行过程中，内部动力装置和外部环境均要求橡胶密封材料具备优异的耐高温性能。针对航空橡胶密封材料的应用需求，开展了耐高温橡胶材料的研究工作，包括橡胶热老化机理的分析，特种橡胶材料的结构设计及制备，硫化体系的研究，配方体系的研究等，并对耐高温橡胶的力学性能和热学性能进行了测试，综合性能良好。

D04-11

受限体系中 skyrmion 的直接观察与调控研究

田明亮

中科院强磁场科学中心

D04-12

拓扑绝缘体表面态的量子霍尔效应和普适电导涨落实验研究

宋凤麒

南京大学

拓扑绝缘体的体相能带具有一个奇异的拓扑数，其与真空邻接的界面存在一个表面态。此处介绍我们课题组在拓扑绝缘体表面态低温输运研究的两个结果。拓扑绝缘体实际材料中存在体相、表面平庸、表面拓扑载流子等多种输运组分，如何确认拓扑表面态的输运特征？我们在此展示三元拓扑绝缘体 $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ 器件拓扑表面态的普适电导涨落（UCF）的例子。包含四方面证据：1）在磁电阻曲线中观察到一系列不规则的可重复的量子噪音，其幅度为 e^2/h 量级。2）所有量子噪音只与磁场的垂直分量有关，这指出了信号的二维特征。3）施加一系列固定的平行场，量子噪声的特征和参数保持不变，这排除了准二维体态的贡献。4）信号幅度与拓扑态预言接近，并且随着磁场增加出现了一个量子平台。

我们优化生长了四元拓扑绝缘体 BiSbTeSe_2 的单晶样品，实现了主导的和低迁移率的表面态输运。其特征表现为量子霍尔效应的出现。我们在样品中观察到了量子霍尔效应的台阶，在 27.4 特斯拉的强场下，我们可以观察到多个霍尔平台。利用背门可以将下表面的朗道指数从 $1/2$ 调节到 $-5/2$ ，利用表面颗粒修饰则可以将上表面的朗道指数从 $-1/2$ 调节到 $1/2$ 。我们还进行了器件弱反局域化和 Shubnikov de Haas 振荡的分析，尝试探索 Co 纳米团簇修饰对拓扑器件的影响。

D04-13

极端条件下 ZnCr_2Se_4 和 NdSb 的新物态探索

杨昭荣
中科院强磁场科学中心

D04-14

应变硬化对马氏体不锈钢显微组织和力学性能影响

唐景凡, 廖恒成, 徐何婷
东南大学

对马氏体沉淀硬化不锈钢进行室温和超低温拉伸测试, 研究了该钢室温硬化和低温硬化后的超低温力学性能, 并通过金相检验(OM)、X射线衍射仪(XRD)、透射电子显微镜(TEM)检验手段进行了显微组织表征。研究表明, 低温拉伸的强度要明显高于室温拉伸, 深冷处理会存在残余奥氏体转变为马氏体, 低温硬化处理显示出比室温硬化更显著的硬化效应。
关键词: 超低温性能, 室温硬化, 低温硬化, 马氏体不锈钢, 显微组织

D04-15

热处理对 NiTi-Nb 共晶合金组织及相变的影响

尹慧林^{1,2}, 易勇¹, 马国华¹, 黄妹珂²
1.西南科技大学
2.中国工程物理研究院机械制造工艺研究所

NiTi-Nb 共晶合金因其共晶组织的特性, 在氢渗透, 能量阻尼和与镍钛结构的液相结合等领域得到了广泛的研究。众所周知, Ni-Ti-Nb 形状记忆合金因其较宽的相变滞后, 已广泛应用于航空、船舶、汽车等各个工业领域。然而, 国内外有关镍钛铌共晶合金的组织及相变的研究较少, 关于热处理对 NiTi-Nb 共晶合金组织和相变的研究更是鲜有报道。本文设计 Ni_{50-x}/2Ti_{50-x}/2-Nb_x (x=18,20,22) (at.%)三种组分的合金, 通过真空感应熔炼辅以石墨铸模冷却的方法制备其合金铸锭。采用扫描电镜 (SEM)、能谱 (EDS)、差式扫描量热仪 (DSC) 和 X 射线衍射 (XRD) 研究了 Ni_{50-x}/2Ti_{50-x}/2-Nb_x (x=18,20,22) (at.%)铸态合金经 750 °C、850 °C 和 950 °C 的热处理后的微观组织及相变特征。结果表明, 热处理对同一组分 NiTi-Nb 合金的组织几乎没有影响; 随着 Nb 含量的增高, NiTi-Nb 合金中 NiTi 基体相减少, 富 Nb 相增多; Ti₂Ni 析出相增多。随热处理温度的增高, NiTi-Nb 共晶合金马氏体开始转变温度降低, 而且 Ni₄₀Ti₄₀Nb₂₀ 合金经过 850 °C 热处理后的到了 104.14 °C 的相变滞后。XRD 结果显示, NiTi-Nb 合金存在 NiTi 相, 马氏体相和富 Nb 相, 在相变过程中只发生马氏体(B19') ↔ 奥氏体 (B2)的相转变。
关键词: NiTi-Nb 共晶合金, 组织, 相变特征。

D04-16

铁磁 FePt 纳米颗粒中的相互作用: 从超顺磁到超自旋玻璃

俞健, 王雪敏, 吴卫东
中国工程物理研究院

我们通过脉冲激光沉积技术成功制备出了 FePt/MgO 复合薄膜。通过此技术我们将小的 FePt 纳米颗粒 (d~6 nm) 均匀嵌埋进 MgO 基质中。反射式高能电子衍射(RHEED)原位监测了样品的生长过程, 证明了 FePt 为三维岛状生长, MgO 为良好的二维层状外延生长。X 射线衍射 (XRD) 分析结果进一步证实了 MgO 基质中 FePt 的存在, 并且经过退火 FePt 形成了有序的 L10 相。综合 RHEED、XRD 以及 HRTEM 的分析, 结果证明: 随着 FePt 沉积发数的增加, 纳米颗粒的密度增加, 颗粒间距减小 (2-10 nm)。为了研究样品的磁性质, 首先测量了不同脉冲发数样品的场冷-零场冷曲线 (ZFC-FC)。其结果表明随着脉冲发数的增加, 颗粒间距的减少造成磁性极化-极化作用, 从而其 ZFC 曲线峰位向高温区移动, 而 FC 曲线在低温段随着温度降低由单调递增变为平缓甚至略微下降, 这证明了随着脉冲发数的增加, 样品由超顺磁态变为了超自旋玻璃态。而交流磁化率测量则进一步确认了超自旋玻璃态的存在。综上所述, 我们可以通过改变 FePt 脉冲发数来调控样品中的磁性, 从而揭示其物理机制。
关键词: L10 FePt 纳米颗粒, 超顺磁, 超自旋玻璃态

D04-17

Superconductivity and quantum criticality in heavy fermion metals

袁辉球
浙江大学

D04-18

三维电子气在超强磁场下的奇异行为

朱增伟

华中科技大学

三维电子气在超强磁场中会发生怎样的异常物理现象，在极端条件下低载流子材料如何发生奇异行为，一直是凝聚态物理关注的问题。在这个报告里，我们将两种常见的“传统”半金属铋和石墨在远超它们量子极限下的角度依赖磁电阻的异常现象研究。在铋中，在一定有磁场强度下，我们发现超强磁场可以导致一个或者两个谷电子口袋清空。电子从迁移高的口袋到迁移率低的口袋，从而导致磁阻的迅速下降。在石墨中，我们发现高场下导致的相变可以用激子绝缘体的相图来解释。我们还会展示更多最近新的强磁场下的两种材料的数据。

D04-19

极低温下的超高迁移率二维电子气

林熙

北京大学

超高迁移率的二维电子气体是研究电子-电子相互作用的一个优秀平台。在极低温下，二维电子气可以随着磁场呈现出如分数量子霍尔效应、电子气泡相和各向异性相等有趣的物理。分数量子霍尔态大部分以奇数作为分母，通常而言可以用复合费米子理论统一理解。偶数分母的 $5/2$ 态无法用常规的理论直接解释，其波函数尚未有定论，但可能允许非阿贝尔统计存在并应用于拓扑量子计算。我将介绍我们课题组依托最低温度 6 mK 的测量环境，在 $1E7 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 量级的超高迁移率样品中开展的一系列输运实验，重点介绍 $5/2$ 态波函数的甄别工作和一个全新 $3/2$ 分数量子霍尔平台的发现。

关键词：极低温，分数量子霍尔效应

D04-20

超低温加载过程中马氏体不锈钢强化行为研究

许何婷，廖恒成，唐景凡

东南大学材料科学与工程学院

通过对超低温 ($-180 \text{ }^\circ\text{C}$) 反复高载荷加载处理后的马氏体时效不锈钢采用低温冲击、低温拉伸等试验方法，研究了该钢的低温力学性能，并通过金相检验(OM)、扫描电子显微镜(SEM)、透射电子显微镜(TEM)等检验手段进行了微观组织分析。结果表明，试验钢产生了明显的“应变硬化”现象，屈服强度增加 153-476 MPa。同时，试验钢随着加载载荷的增大，内部板条群界面增多，板条内出现位错亚结构，出现“细晶强化”现象，使塑性回升。

关键词：马氏体时效不锈钢，超低温性能，应变硬化，细晶强化

D04-21

冷却臂对球腔冷冻靶影响的计算模拟

康瑜，代云雅，廖其龙

西南科技大学

冷冻靶是实现惯性约束聚变(ICF)高能量增益的重要靶型。冷冻靶的制备对环境，设备，结构，制靶方法提出了很高的要求。冷却臂是冷冻靶系统的重要组成构件之一。通过它将冷源传导至铝套筒上，为得到均匀的氘-氘(DT)冰层提供所需的精确温度。我们最近的工作在于研究冷却臂对靶丸温度场的影响。在此次研究中，我们研究一种新型的靶型，拥有球型腔体。通过研究表明球腔冷冻靶相较于柱腔冷冻靶具有天然的结构优势，能够形成均匀的温度场。研究了球腔冷冻靶制备过程的传温方式，并对冷却臂进行了初步设计；通过使用有限体积法和计算流体动力学程序 Fluent 来模拟制备过程中的温度变化，控制温度输入以减少靶丸周围的温差，分析并整理了制备均匀 DT 冰层所需要的边界条件。

关键词：惯性约束聚变，冷冻靶，冷却臂，温差，Fluent

D04-22

新型碳基材料的计算设计

赵纪军

大连理工大学

Metallic carbon has received long-standing attentions for its fascinating applications in superconductivity, electronic devices and high-performance anode materials. Here we design two types of metallic carbon phases, namely O-type and T-type carbon, using self-assembling diamond nanostripes as building block and C=C bond as linkers. These O-type and T-type allotropes are energetically more favorable than most previously identified three-dimensional metallic carbon allotropes, while their stability is confirmed by a series of first-principles calculations. Excitingly, these all-carbon crystals not only exhibit ultrahigh Fermi velocity and anisotropic electrical conductivity, but also belong to superhard materials with good mechanical properties. The good electrical conductivity, high mechanical strength, tunable electronic properties might find applications in electromechanical systems and nanoelectronic devices.

关键词：碳材料，新相

D04-23

富氢化合物的高压研究及其超导电性探讨

王霖

北京高压科学研究中心

D04-24

含能材料与极端条件

庞思平

北京理工大学

D04-25

负压缩材料的高压探索与机理研究

王凯，曾庆鑫，乔元存，邹勃

吉林大学 超硬材料国家重点实验室

近年来研究发现，一些特殊的材料在一定的压力范围内，会沿着晶体的特定方向出现反常的膨胀现象，称之为负压缩材料。负压缩材料可以用于制备具有高抗压性质的受压膨胀材料，在光纤通讯、地震压强传感器、声呐、航空、智能装甲以及人造肌肉等领域有着广阔的应用前景。相比正压缩材料，目前已知的负压缩材料数量极少、负压缩率绝对值也相对较小（通常在 -20 TPa^{-1} 以下）且对负压缩机理的认识有待深入。

我们课题组在该研究领域开展了一些探索性的研究工作。发现了最大负压缩率材料之一的 $\text{InH}(\text{BDC})_2$ ，相比传统的大负压缩率材料更安全便宜。通过高压下晶格参数变化计算可得出， $\text{InH}(\text{BDC})_2$ c 轴的压缩率为 -62.4 TPa^{-1} ，是到目前为止已知除钴氰酸银之外负压缩率最大的材料。而 $\text{InH}(\text{BDC})_2$ 相较于钴氰酸银更加安全廉价，具有更高的应用价值。同步辐射 X 光衍射分析表明该材料负压缩行为是源自晶体结构的闭合效应， β 石英结构是其具有大的负压缩率的根本原因。高压下夹角小的两个对苯二甲酸链之间的夹角会变得更小，从而导致 In-BDC-In 链在 c 轴方向上的投影变长而在 a、b 轴上的投影变短。已有的负压缩机理主要是晶体的酒架状结构和螺旋链状结构等。而我们对层状结构 $\text{Co}(\text{SCN})_2(\text{pyrazine})_2$ 的高压研究表明，随着压力增大 a 轴与 b 轴之间夹角 β 逐渐减小，导致分子层之间出现了层滑移的现象从而在 X3 方向上出现负压缩行为。第一性原理计算结果表明分子层滑移是由硫氰酸根的排斥作用导致的。本工作为寻找负压缩体系提供了新的机理，进一步打开了负压缩材料的设计思路。实验室首次发现酒架状非共价键结构具有负压缩性质。一般来说，高压下由共价键构成的酒架状结构会产生负压缩现象。而我们的研究发现， $\text{N-H}\dots\text{O}$ 氢键网络连接的一水草酸铵晶体 b 轴在 5.1 至 11.5 GPa 区间呈现负线性压缩特性。由于氢键本身是一种较弱的分子间相互作用，只有当压力超过临界压力（5.1 GPa）时， $\text{N-H}\dots\text{O}$ 氢键的强度才足以像共价键一样呈现机械响应。本工作对研究非共价键的压缩行为和新型负压缩材料的探索具有重要意义。

D04-26

$\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ 双钙钛矿化合物的超高压合成及 Mg 掺杂改性

甘慧，王传彬，沈强，张联盟

武汉理工大学

$\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ （简称 LNMO）是一种典型的双钙钛矿化合物，具有比传统钙钛矿化合物更为丰富的组成变化和更加优异的物理性能，研究价值和应用潜力大。但结构的特殊性导致其制备困难，常规的无压、热压或等离子活化烧结方法等，均难以

实现致密化。本文采用超高压合成这一极端条件制备 LNMO 双钙钛矿化合物，并通过 Mg 掺杂进一步提升其磁学性能。首先，研究了超高压合成条件对 Mg 掺杂 LNMO ($\text{La}_2\text{Mg}_x\text{Ni}_{1-x}\text{MnO}_6$) 双钙钛矿化合物的物相组成和显微结构的影响，在适宜的低温高压条件（压力 6GPa，温度 800°C）下实现了完全致密化。其次，利用 X 射线衍射、场发射扫描电子显微镜、X 射线光电子能谱、拉曼光谱和多功能物性测量系统等，系统研究了 Mg 掺杂量 ($x=0\sim 0.4$) 对其结构变化与磁性能的影响规律。结果表明：随着 Mg 掺杂量的增加， $\text{La}_2\text{Mg}_x\text{Ni}_{1-x}\text{MnO}_6$ 中 Mn^{2+} 与 Mn^{3+} 的比例基本不变，而单斜和六方两相的含量都发生了变化。相应地，其磁性能都有所改善，并在 $x=0.3$ 时表现出最大的饱和磁矩 ($\sim 47\text{emu/g}$)，拉曼光谱分析表明样品此时的对称拉伸最强，B 位有序度最高。这说明，LNMO 磁性能的主要受陶瓷结构 B 位有序度影响，而且其铁磁居里温度与化合物中单斜和六方两相的含量密切相关。

关键词： $\text{La}_2\text{NiMnO}_6$ 陶瓷，超高压合成，Mg 掺杂，磁学性能

D04-27

金刚石聚变靶腔的高温高压制备

贺端威

1. 四川大学原子与分子物理研究所
2. 高能密度物理教育部重点实验室

金刚石因具有高硬度、高原子密度、高热导率、高可加工精度、低原子序数等特性，被视为最具潜力的聚变靶腔材料之一。金刚石聚变靶腔的核心部分为毫米级直径的多晶金刚石空心球壳，制备工艺复杂、难度极大，但采用金刚石聚变靶腔，有利于实现燃料填充的高初始密度及服役时的高耦合率。美国劳伦斯利弗莫尔国家实验室等对金刚石聚变靶腔的制备研究已逾 30 年，见诸于报道的制备方法只要为化学气相沉积法，存在硬度低、碳的金刚石化不完全、金刚石球壳中碳氢聚合物含量高、晶粒尺寸难以控制等问题。我们开展了在高温高压条件下制备金刚石聚变靶腔的研究，利用自行开发的二级六-八大腔体静高压装置，首次获得了高硬度、高纯度、超细粒度纳米聚晶金刚石空心球壳，为高性能金刚石聚变靶腔的制备提供了新的技术途径。

D04-28

Visualization of The Ion Diffusion in NASICON Solid Electrolyte

朱金龙

北京高压科学研究中心

D04-29

金属卤素钙钛矿纳米材料的高压研究

肖冠军

吉林大学超硬材料国家重点实验室

压力是独立于温度和组分的重要热力学参量，可以有效地改变材料的原子排布、电子结构和原子（分子）间的相互作用。高压下纳米材料的研究，是将“高压”和纳米材料的“小尺度”两种“极端条件”有机地结合起来，有望发现一些新奇的物理化学现象和规律，获得具有优异性能的高压新材料。我们利用金刚石对顶砧进行精细的压力控制，探讨了不同形貌的全无机卤素钙钛矿铯铅溴纳米晶（铯铅溴纳米立方体和纳米线）及其体材料在高压下的结构稳定性、光学带隙和荧光寿命的精确调控。在相对较低的压力下 ($\sim 1.2\text{ GPa}$) 实现了带隙的窄化，更加靠近光伏应用的理想带隙。当压力超过 1.2 GPa 时，带隙突然开始宽化。其高压下的带隙调控主要由无机铅-溴八面体扭曲变形过程中的轨道相互作用所决定。压力下晶格收缩可以有效地减小无机八面体中的铅-溴键长，导致 Pb 的 6s 轨道和 Br 的 4p 轨道耦合增强，使得价带顶上移，带隙变窄；随着压力的继续升高，无机铅-溴八面体骨架发生扭曲变形，发生了电子相变，导带底转变为 Pb 的 6p 轨道和 Br 的 4p 轨道强耦合的贡献，导带底上移的程度大于其价带顶，从而导致带隙宽化。在此基础上，进一步探索了更接近于肖克利-奎伊瑟极限的立方相铯铅溴纳米晶的高压带隙调控及其微观物理化学机制，上述工作有助于深入了解卤素钙钛矿材料的结构稳定性与光学性质的依赖关系，为未来光伏光电器件的优化设计提供重要的科学参考。

关键词：高压，金属卤素钙钛矿，结构相变，带隙调控

D04-30

富硼材料的结构预测与性质研究

周向锋

南开大学

D04-31

准一维自旋链 $\text{Ba}_9\text{V}_3\text{Se}_{15}$ 的高压合成及物性研究

张俊, 望贤成, 赵建发, 靳常青

中国科学院物理研究所

我们在高温高压条件下发现并制备了由一维 VSe_6 自旋链组成的化合物 $\text{Ba}_9\text{V}_3\text{Se}_{15}$ 。粉末 X 射线精修结果显示 $\text{Ba}_9\text{V}_3\text{Se}_{15}$ 为六方晶体, 空间群为 $P-6c2$ (188), 晶格常数 $a = b = 9.5745(7) \text{ \AA}$, $c = 18.7814(4) \text{ \AA}$, $V = 1491.07(0) (\text{\AA}^3)$, $Z = 2$ 。在其晶体结构中, 沿着 c 轴方向 VSe_6 八面体通过共面方式形成三聚化的一维链, 这些一维链在 ab 平面呈三角晶格排布。邻近链之间的距离等于其晶格常数 a 。运输性能测试表明 $\text{Ba}_9\text{V}_3\text{Se}_{15}$ 为半导体, 带隙约为 0.2 eV 。在 10 Oe 磁场下, 零场冷测试表明 $\text{Ba}_9\text{V}_3\text{Se}_{15}$ 在 2.5 K 和 3.3 K 分别经历了亚铁磁转变和铁磁团簇玻璃转变。大于 50 Oe 的磁场将消除团簇玻璃转变。比热测试结果显示在低温区域, 磁比热正比于 $T^{1/2}$, 说明 $\text{Ba}_9\text{V}_3\text{Se}_{15}$ 中一维自旋链可以按照铁磁链中的自旋波理论进行描述。同时理论计算表明, 三聚化内部 V_2 和 V_1 之间反铁磁关联远大于三聚化单元之间 V_2 和 V_2 之间的铁磁关联, 所以 $\text{Ba}_9\text{V}_3\text{Se}_{15}$ 可以认为是由 $\text{V}(2)^{(1)}\text{V}(1)^{(1)}\text{V}(2)^{(1)}$ 重复单元形成的等效铁磁链。

关键词: 准一维结果, 自旋链

D04-32

高压下 Al-C 体系的结构相变研究

王林妍, 武英举, 梁笑微, 高国英

Yanshan University

Al_4C_3 作为 Al-C 体系中目前唯一实验合成的化合物, 是重要的陶瓷材料, 也是用于制备氮化铝 (AlN) 和具有金刚石相关结构陶瓷 ($\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Al}_4\text{C}_3\text{-AlN}$) 的原料, 在室温下同时具有高热导率与高电阻。此外, Al_4C_3 是 $\text{Al-Al}_4\text{C}_3$, $\text{Al-SiC-Al}_4\text{C}_3$, $\text{Al-Al}_3\text{Ti-Al}_4\text{C}_3$ 等复合材料和合金强化的增强材料。实验上利用金刚石对顶砧技术 DAC 对 Al_4C_3 样品加压至 50 GPa , 并没有观察到其发生相变或非晶化。截止到目前, 对于其他组分 Al-C 化合物的研究, 只有 Dai 等人对 AlC , Al_2C 和 Al_3C 单层的最稳定结构进行了预测, 其中 Al_2C 单层具有 1.05 eV 的带隙值和独特的能带结构, 是潜在的光催化和电子传输材料。因此, 在高压下, 很可能有其他成分并具有优异性能的 Al-C 化合物存在。

我们采用基于粒子群优化算法的晶体结构预测软件包 CALYPSO, 对 Al_2C 、 Al_4C_3 和 AlC 在 $0\text{-}400 \text{ GPa}$ 压力范围进行了详细地结构搜索, 探索其在高压下的新结构及其性质。在常压下, 我们成功预测出 Al_4C_3 的已知相 $R-3m$, 并发现其分别在 3 GPa 、 32 GPa 和 82 GPa 下发生从 $R-3m$ 相到 $Fd-3m$ 相、 $Pmcb$ 相、 $I-43d$ 相的转变。 Al_2C 在 0.3 GPa 压力下即可稳定存在, 随后发生从 $P6_3/mmc$ 相到 $P-3m1$ 相、 $C2/m-\alpha$ 相、 $C2/c$ 相、 $C2/m-\beta$ 相和 $P2/m$ 相一系列相变, 这些 Al_2C 高压相均为金属。此外, 我们发现 AlC 在大于 50 GPa 时才以 $P-1$ 相稳定存在, 随后在 59 GPa 相变为 $P6_3/mmc$ 相, 在 114 GPa 又进一步相变为 $P2_1/c$ 相。

同时, 我们还通过高温高压的实验方法, 研究了 Al_4C_3 的结构相变。我们首先研究了 $3\text{-}6 \text{ GPa}$ 、 $20\text{-}2000 \text{ }^\circ\text{C}$ 范围的相变情况, 但并没有观察到 Al_4C_3 相变发生。随后, 在 15 GPa 和 $1500 \text{ }^\circ\text{C}$ 条件下, X 射线衍射谱中出现完全不同于原料的特征峰, Al_4C_3 在此条件下发生相变。而且, 对比 XRD 特征峰, 我们发现在 15 GPa 压力下预测的六方结构与该实验结构相吻合。为了进一步探索更高压下的相变情况, 利用 DAC 加压至 60 GPa 、激光加热至 1000 K 出现新的特征峰, 表明 Al_4C_3 又一新相的出现。

关键词: 铝碳化合物, 高温高压, 结构相变

D04-33

压力下的电子化合物

缙慧阳

北京高压科学研究中心

D04-34

动态极端条件下材料的强度及微观结构演化

蔡洋, 罗胜年

顶峰多尺度科学研究所

由于国防、航空航天和交通运输等领域的切实需求, 材料在动态极端压力下的特性一直是材料研究的重点之一。而由于

动态过程的瞬时性以及原位实时测量的复杂性，人们对于加载过程中诸如材料强度和微观结构演化等问题的理解仍有待加深。与实验不同，分子动力学由于其极高的时间和空间分辨能力，是研究材料动态特性的理想工具。因而，我们采用大规模分子动力学模拟了典型材料铜和钽在动态加载时的响应。通过基于原子构型的 EBSD 分析、位错和孪晶变形分析以及 X 射线衍射信号模拟和解读等手段，我们发现：纳米粉末铜在压实过程中会沿加载方向产生<110>晶向的织构，而该织构主要是孪晶变形造成的；钽的变形方式受到加载路径的影响。在单次冲击、两次冲击及斜坡加载下，钽中的变形分别以无序态、位错和孪晶为主。此外，多晶钽在冲击下仍然有强度存在，且该强度可通过原位实时的 X 射线衍射测量推导得出，这也给动高压下的强度测量提供了全新的手段。

关键词：动态，高压，分子动力学，强度，织构，位错，孪晶

D04-35

极端条件下的固态氮

雷力

四川大学

在常温常压下以 $N=N$ 叁键结合的氮气是一种典型的非极性双原子分子气体。氮在高压下会发生压致解离行为，经历一系列固态相变，可形成多种固态分子氮相 (β 、 δ 、 ϵ 、 ζ 、 η 、 ι 、 θ 等) 和聚合氮相 (cg-N 和 LP-N 等)。以共价 N-N 单键结合的聚合氮被认为是一种理想的高能量密度材料 (HEDM)，具有重要的科学研究和应用价值。超高压下氮的压致解离与聚合氮的超高压合成是极端条件物理与材料研究的热点问题。在此次会议的报告中，我将介绍最近我们在四川大学极端条件拉曼光谱平台上开展的高压氮研究工作。借助自行搭建的激光加热金刚石压砧 (LHDAC) 系统，在超高压高温条件下 ($P_{max}=230$ GPa、 $T_{max}=3000$ K) 截获了所有曾经报道过的氮的高压亚稳相： β 、 δ 、 δ_{loc} 、 ϵ 、 ζ 、 ζ 、 η 、 ι 、 θ 、 λ 、 κ 、cg-N、LP-N 和非晶红氮。此外，我们还找到了若干聚合氮新相的重要证据。通过分析氮的高压拉曼光谱，我们发现，氮在高压下的固态相变是一种对称性破缺导致的位移型相变，氮的压致解离行为具有路径依赖性。本工作可加深我们对氮在高压下解离机制的认识，对新型全氮 HEDM 材料探索具有重要意义。

本工作得到国家自然科学基金(No. 11774247) 的支持。

关键词：固态氮，高压拉曼，激光加热金刚石压砧，压致解离，路径依赖

D04-36

斜坡加载下铍 I - II - III 相相变特性

种涛

中国工程物理研究院流体物理研究所

设计了一套与磁驱动斜坡加载实验装置 CQ-4 配套的样品预设温度系统，变温范围是室温~180 °C，利用此装置联合高精度速度测试系统完成了不同初始温度下铍的斜坡压缩相变实验，单发实验的加载段同时观测到含有 2 次 (I - II 和 II - III) 相变信息的速度波剖面。实验结果显示，随着铍的初始温度从室温提高到 148 °C，I - II 相变起始对应的特征拐点速度从 251.m/s 下降到 239.4m/s，II - III 相变起始对应的特征拐点速度也从 251.m/s 下降到 239.4m/s。

D04-37

激光加载极端高压 CH 状态方程的实验方法研究

孙亮，段晓溪，刘浩，袁永腾，张琛，杨为明，章欢，叶青，王哲斌，杨家敏，江少恩

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

材料在极端高压条件下的状态方程数据对 ICF 物理、天体物理、行星物理中的相关过程研究有着至关重要的作用。对于低 Z 材料的 TPa 超高压状态方程研究，目前激光平台上常用的方法是阻抗匹配方法。此方法限制因素很多，其中最关键的是，需要石英等标准材料的高压状态方程数据才能推导出待测材料的状态方程数据。因此，发展状态方程绝对测量技术，不需要标准材料数据，在一个发次中同时测量出状态方程的两个参数，显得尤为重要。在本文中，针对低 Z 材料，我们提出了基于准单色 X 光透视成像与 VISAR 联合诊断的激光装置平台状态方程参数绝对测量方法，其中包括在激光平台上的实验设计、排布与实验模拟结果。在实验模拟研究中，我们基于 2D 流体力学模拟程序与蒙特卡洛模拟方法研究了 X 光背光源的尺寸以及成像对比度等因素对 X 光透视法密度诊断的影响。这些结果可以对在神光 III 原型装置上开展的 CH 状态方程绝对测量实验研究中的数据分析、结果对比有着重要的作用。

关键词：CH 状态方程，激光加载物性，高压状态方程

D04-38

几种 Bi-系非中心对称材料的高温高压合成和物性研究

于润泽^{1,2}, Masaki Azuma², Hajime Hojo³, 靳常青¹

1.中国科学院物理研究所

2.Tokyo Institute of Technology

3.Kyushu University

PbZr_xTi_{1-x}O₃ (PZT) 由于其优越的介电和压电特性, 被越来越多的应用于医学成像、声传感器、声换能器、超声马达等工业领域。随着其应用范围和数量的不断扩大, Pb 对环境的潜在危害也越来越多的引起了人们的关注。因此寻找高性能的无铅或者低铅的压电材料成为了近几年材料研究领域一个非常热门的话题。考虑到 Bi³⁺和 Pb²⁺具有一样的孤对电子, 因此很自然的一个想法就是在 Bi 系中寻找高性能的无铅压电材料。在本研究中, 我们利用高温高压的方法合成了两类 Bi 系的具有非中心对称的极化材料: 和 PbTiO₃ 同构的 Bi₂ZnVO₆ 和 Bi₂ZnTi_{1-x}Mn_xO₆。研究发现 Bi₂ZnVO₆ 的 c/a 轴比是 1.26, 远大于 PbTiO₃ 的 1.06。点电荷法计算发现其极化强度是 126 μC/cm², 是目前发现的所有 PbTiO₃ 材料中具有最大的。同时发现在压力作用下在 6 GPa 左右发生了一个顺电相转变且伴随着 2.4% 的体积收缩。Bi₂ZnTi_{1-x}Mn_xO₆ 材料呈现了一个 Cc 结构, 这是和 PZT 的准同型相界 (MPB) 相 (Cm 结构) 的低温相同构的一个结构。理论计算其电极化强度是 95.8 μC/cm²。且其薄膜样品测试表明其有效介电常数 d₃₃ 是 10 pm/V。上述的研究工作为无铅压电材料的研究作出了有益的尝试。

D04-39

高压下的相变和功能材料设计

孙建

南京大学物理学院/固体微结构物理国家重点实验室

高压是合成新材料和调控材料物理性质的一种有效而干净的手段。用高压方法来探索新的拓扑态或者研究材料结构、拓扑性质以及其他性质正成为最近大家关心的课题。在本报告中, 我将介绍我们课题组近期在高压相变方面的一些工作, 通过第一性原理计算和实验的紧密合作, 对量子材料在高压下的行为有更深入的理解。另外, 我还将介绍一点我们近期在可用高压方法合成的功能材料设计方面的一些进展, 包括超硬材料、高能量密度材料和超导材料等。

D04-40

剪切载荷作用下纳米 Al/Cu 多层层状材料的形变和失效的界面效应

王桂吉¹, 吕超¹, 刘晓毅²

1.中国工程物理研究院流体物理研究所

2.顶峰多尺度研究所

The interface effects on deformation and failure of Al/Cu nanolaminates under shear loading are investigated by molecular dynamics and analytical methods, including interface orientations and repeat layer spacing. Interface orientations play a dominant role in dislocation evolution over repeat layer spacing. Interfacial stress affects nucleation and propagation of dislocations in nanolaminates, and is modeled with an analytical form. The yield and failure of Al/Cu nanolaminates are mainly controlled by dislocation evolutions in Al and Cu layers, respectively. In particular, when repeat layer spacing is less than 12 nm, the shear strength of Al(100)/Cu(100) nanolaminates decreases with decreasing repeat layer spacing due to the interaction between stacking faults and dislocations. For better shear performance, the minimum repeat layer spacing of Al/Cu nanolaminates is about 12 nm, and the interface orientations can be tailored.

关键词: 纳米多层层状材料, 剪切加载, 变形与失效, 界面效应, 分子动力学

D04-41

一维导体 Ba₃TiTe₅ 的高压超导电性

张俊, 贾雅婷, 望贤成, 靳常青

中国科学院物理研究所

We report the discovery of quasi one-dimensional compound Ba₃TiTe₅ and the superconductivity induced by pressure. Ba₃TiTe₅ was synthesized at high pressure and high temperature. It crystallizes into a hexagonal structure (*P6₃/mcm*) with the lattice constants

$a=b=10.1529 \text{ \AA}$ and $c=6.7217 \text{ \AA}$, which consists of infinite face-sharing octahedron TiTe_6 chains as well as Te chains. Ba_3TiTe_5 presents a semiconductor behavior under ambient pressure due to the Umklapp scattering effect in one dimensional conducting system. The superconductivity emerges above 16 GPa and reaches the maximum $T_c \sim 6 \text{ K}$ at about 36 GPa, where the electronic spin/charge density wave state is completely suppressed. When pressure further increases, the system develops towards Fermi Liquid state. At the same time, T_c monotonously decreases. Pressure reduces the adjacent distance between the conducting paths and then enhances the interchain hopping, which should play a key role in the pressure dependence of superconductivity. It is hinted that the superconductivity associates with the fluctuation of spin/charge density wave.

D04-42

梯度增压法实现微球超高压充气

张占文, 史瑞廷, 栾旭, 黄勇, 冯健鸿, 初巧妹
中物院八所

空心微球, 作为小直径球形容器, 在激光惯性约束聚变 (ICF) 实验和容器贮氢中都有较大的应用价值。作为 ICF 燃料靶丸, 目前可使用的压力最高达到 150-250 atm, 制备过程中为确保后续工艺安全性, 可能需要预先充气到 300-400 atm。而作为贮氢容器, 则希望燃料密度越高越好。

文中研究了采用干凝胶法制备空心玻璃微球 (HGM) 的耐外压强度和耐内压强度, 开展了小直径厚壁 HGM 阻气性能研究, 进一步研究了平衡时间、温度对 HGM 内气体压力的影响, 建立了采用梯度增压法 HGM 的高压充气工艺。实验结果表明, 厚壁 HGM 的抗压强度、抗张强度和对氙气的渗透系数都随着壁厚的增大而逐渐下降。与液滴法制备的 HGM 相比, 干凝胶法 HGM 的耐压强度提高近 50%, 抗张强度提高 5~6 倍, 室温下对氙气的渗透系数与液滴法 HGM 基本相当。通过梯度增压方法, 可在 HGM 球内充 500 atm 以上的燃料气体。

关键词: 梯度增压, 激光惯性约束聚变, 微球充气

D04-43

孔隙率对 PBXC-03 炸药状态方程影响实验研究

蔡进涛, 王桂吉, 赵锋, 谭福利, 赵剑衡
中国工程物理研究院流体物理研究所

磁驱动准等熵压缩加载下, 聚合物粘结炸药 (PBXs) 的加载压力可达数个 GPa 至近 20 GPa 而不发生明显化学反应, 可为固体炸药的状态方程研究提供有力的实验手段。为研究动态高压加载下孔隙率对炸药状态方程参数的影响, 利用固体炸药的磁驱动准等熵压缩加载实验技术, 开展了密度分别为 1.840 g/cm^3 , 1.830 g/cm^3 , 1.820 g/cm^3 的 PBXC-03 炸药在 15 GPa 峰值压力内的状态方程实验研究。实验在磁驱动装置 CQ-4 上进行, 单次实验可同时获得炸药样品 4 个 Lagrange 位置的动态响应结果。利用激光干涉测速技术, 实验获得了三种密度下不同厚度炸药样品的速度响应曲线, 利用波阻抗修正的迭代 Lagrange 数据处理方法, 获得了三种密度下炸药的 Lagrange 声速-粒子速度曲线及 Hugoniot 形式的状态方程参数。结果表明, 上述密度范围内, 仅 0.5% 的密度降低会导致该炸药 20% 以上的孔隙率增大, 随着炸药密度降低, 孔隙率增大, 炸药的声速显著降低, 炸药的状态方程参数也会发生明显变化。利用上述实验获得的炸药状态方程参数, 一维流体动力学模拟计算很好地再现了实验结果。上述研究结果将为固体炸药状态方程参数的孔隙率修正和炸药完全物态方程的构建提供模型和参数。

关键词: 固体炸药, 磁驱动准等熵加载, 状态方程, 孔隙率, 流体动力学模拟

D04-44

Chances of laser matter interaction for high performance optoelectronic films

王洪强
西北工业大学

D04-45

强激光下拓扑半金属材料的非线性光学效应

李志
南京理工大学

为了测量研究体系的介电函数, 电导率和磁化率, 通常需要较弱的外场来刺激研究对象。在弱外场情况下, 线性响应理

论通常是适用的，如著名的 Kubo 公式。随着激光的发现，外加交流电场的强度可以变得很大，足以从原子核直接激发电子。在强场作用下，非线性响应变得明显从而被实验观测。二阶非线性光学效应中，二次谐波（Second-harmonic generation）可以用于激光频率转换；而光电流（photocurrent）可应用于光电探测。通常非线性光学电导率的计算极其复杂，需要计算大量的位置矩阵元，很难简单判断决定非线性光学电导率的关键因素。另外，由于基态的 Bloch 波函数具有整体相位不确定性，非线性光学电导率的计算公式也应当满足规范不变性。

利用无散射的量子动能方程和模型哈密顿量计算，研究了 Weyl 半金属 TaAs 的非线性响应系数。通过理论推导发现在金属中存在三种不同的二次谐波机理，即非线性能带色散引起的 injection current，偏移矢量引起的 shift current 和以及 Berry 曲率引起的 anomalous current。通过数值计算发现，Weyl 半金属 TaAs 中非线性响应的主要来源是偏移矢量引起的 shift current，而其他两种机制引起的非线性响应非常的微弱。如果通过掺杂来调节费米面的位置，anomalous current 机制引起的非线性响应则可以得到大幅度的增强。相关的研究成果发表于 Phys. Rev. B 97 085201 (2018)。

D04-46

KDP 晶体退役元件的紫外损伤特性再分析

巨新

北京科技大学

D04-47

基于飞秒激光技术制备具有自洁净特性的微纳结构不锈钢仿生表面

姚彩珍

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

高能激光系统领域普遍使用不锈钢机械结构件，而不锈钢表面的污染物会影响其正常的环境服役行为。如何获得并维持不锈钢表面高洁净状态已经成为高能激光领域中极其重要而有意义的研究工作。一般清洗方法如表面活性剂喷淋、超声清洗等会耗费大量的人力物力，容易对工件造成损害，也极易对工人的身体造成伤害。本文以 304 不锈钢为具体研究对象，采用多学科交叉理论分析-实验验证的研究方法，模拟自然界中具有自洁净性能的生物表面，研究利用飞秒激光技术增强不锈钢表面自洁净性能这一关键基础科学问题。主要研究内容及结论：（1）在空气和真空中研究了 304 不锈钢的激光诱导损伤阈值（LIDTs），结果显示，在真空环境中，260 fs 激光辐照下的 LIDTs 高于 35 fs 激光辐照下的 LIDTs；（2）研究了激光通量和脉冲数对不锈钢表面微纳结构的影响规律，结果显示，在低通量下（ $<0.7 \text{ J/cm}^2$ 但高于样品损伤阈值），周期性波纹结构清晰，不锈钢表面呈疏水态；在高通量下（ $>1 \text{ J/cm}^2$ ），样品表面为昆虫复眼结构，不锈钢表面呈亲水态；（3）将样品浸入 1 wt% 氟硅烷溶液中进行处理，样品表面滚动角减小，接触角增大，表现为超疏水状态，XPS 分析表明主要与疏水基团有关；（4）对超疏水不锈钢表面的自洁净性能进行了验证。此项研究可为激光与不锈钢表面相互作用，以及微纳结构增强不锈钢表面自洁净性能提供科学依据和理论指导，为后续激光加工制备不锈钢仿生表面提供数据支撑，其应用还可拓展至生物医药、新能源、军事和航空航天等诸多领域。

关键词：飞秒激光，微纳结构，损伤阈值，超疏水，低表面能

D04-48

激光强化提升化学膜损伤性能可行性研究

蒋一岚¹，廖威¹，蒋勇²，周国瑞¹，袁晓东¹

1. 中国工程物理研究院激光聚变研究中心

2. 西南科技大学极端条件物质特性联合实验室

镀有增透膜的光学元件作为高功率固体激光装置的重要元件，其激光损伤阈值是影响激光装置负载能力的重要因素之一。本文主要对激光预处理的强化技术对于提升化学膜的抗激光损伤能力的可行性进行研究。利用 355 nm @8 ns 的高能固体激光器，对镀有单双层化学膜的熔石英光学元件，采用激光能量从低至高的方式进行光栅式扫描，处理之后的单、双层膜的抗激光损伤能力都得到了大幅提升，分别为近 20% 和 10%，若进一步优化处理参数，其抗激光损伤能力可以得到进一步的提升。且通过表征发现处理之后的膜层颗粒变得更加均匀，膜层表面的污染物得到有效的去除。综上所述，研究已证明激光强化处理可以有效提升单双层增透膜的抗激光损伤能力，为后期工程实际应用及工艺优化提供了参考。

关键词：激光强化处理，单双层化学膜，激光损伤阈值

D04-49

非临界相位匹配四倍频定向生长的 ADP 的非线性及损伤性能研究

连亚飞^{1,2}, 蒋晓东¹, 孙洵²

1.中国工程物理研究院激光聚变研究中心

2.山东大学晶体材料研究所

磷酸二氢铵 ($\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$, ADP) 晶体是一种光学性质优良的非线性光学晶体, 本工作采用点籽晶快速生长法在 Z 方向及非临界相位匹配 ($\theta=90^\circ$, $\Phi=45^\circ$) 方向生长了 ADP 晶体, 分别自两种晶体中切取 Z, X 及 ($\theta=90^\circ$, $\Phi=45^\circ$) 方向的尺寸 $50\text{ mm}\times 50\text{ mm}\times 10\text{ mm}$ 的晶片, 并测试了他们在 355 nm 激光辐照时的非线性吸收及非线性折射特性, 然后采用 1-on-1 及 R-on-1 模式测试了其在 355 nm 激光下的损伤阈值。结果表明, Z 向及定向 ADP 晶体在强激光辐照下均有非线性特性, 且非线性吸收表现为反饱和和吸收; 非线性折射率 n_2 为正, 呈自聚焦现象。通过理论拟合计算出各个晶面方向的非线性吸收系数 β , 非线性折射率 n_2 及三阶极化率 $\chi^{(3)}$, 并得到了其数值大小和晶面方向的排列关系为: ($\theta=90^\circ$, $\Phi=45^\circ$) $< X < Z$; 另外, 定向生长 ADP 的损伤阈值大于 Z 向生长 ADP 的损伤阈值。因此可知, 定向生长晶体的光学性能与 Z 向生长晶体相似, 而且非线性系数更低; ($\theta=90^\circ$, $\Phi=45^\circ$) 生长方向三阶非线性最低, 激光损伤阈值最高, 且晶体利用率大幅度提高, 可以实现 I 类非临界紫外倍频, 具有重要实用价值。

关键词: 定向生长, ADP 晶体, 非线性, 损伤阈值, 各向异性

D04-50

KDP 类晶体激光损伤机理和激光预处理技术

赵元安, 邵建达

中国科学院上海光学精密机械研究所

DKDP 晶体仍是我国 ICF 激光驱动器运行中的短板元件, 其激光损伤行为复杂, 不但与波长相关, 还表现出切向以及偏振方向的依赖特性。本报告将从 KDP 和 DKDP 晶体的典型激光损伤行为出发, 介绍应用于 ICF 激光系统中的一类切割 KDP 和二类切割 DKDP 晶体在强激光作用下的基本物理过程, 揭示了一类切割 KDP 在基频激光作用下的缺陷诱导损伤尺寸效应, 指导了连续过滤生长技术的控制核心; 实验验证了二类切割 DKDP 晶体在三倍频激光作用下的非线性吸收诱导损伤规律, 发现通过调控激光光子能量可以实现对电子缺陷态的调控, 为激光预处理技术的应用提供依据。

关键词: KDP 和 DKDP 晶体, 激光损伤, 缺陷, 激光预处理

D04-51

高时空分辨的纳秒脉冲激光损伤行为研究

马彬

同济大学

D04-52

熔石英材料特性对激光损伤性能的影响研究

黄进, 王凤蕊, 刘红婕, 吴之清, 蒋晓东, 郑万国

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

长期以来, 熔石英元件表面的激光诱导损伤备受关注, 机械抛光工艺的改进以及先进后处理技术的使用大幅度提高了熔石英表面的抗紫外激光损伤性能。在本研究中, 我们将研究焦点聚焦在熔石英材料内部, 探索了熔石英的体材料缺陷对体损伤阈值的影响。研究中收集了国内外典型的紫外熔石英材料, 并通过建立大能量体外聚焦测试的方法, 来更加科学的评价不同熔石英材料的体损伤阈值。在此基础上, 分别采用激光散射照明、红外吸收光谱以及二次离子质谱技术对这批熔石英材料的体内气泡度、羟基含量以及金属杂质含量进行了检测, 并利用光热共路干涉技术对 355 nm 紫外激光弱吸收特性进行了表征。基于相关性的统计研究结果表明, 对于高纯度合成石英而言, 金属杂质、羟基含量与体损伤阈值的 Spearman 相关性系数较低, 分别为 0.3 和 0.2, 紫外弱吸收系数与体损伤阈值有较高的相关性, 达到-0.72, 可用作评估熔石英材料抗紫外激光损伤性能的参考指标。此外, 研究还探讨了体损伤阈值对表面损伤阈值的影响, 结果表明没有显著的相关性。该系列研究结果对于高功率固体激光装置中紫外熔石英材料的选择具有重要的参考意义。

关键词: 熔石英, 紫外脉冲激光, 损伤, 缺陷, 相关性分析

D04-53

强激光用紫外光学元件的抗损伤性能提升途径

叶鑫, 孙来喜, 李昌朋, 邵婷, 杨李茗, 许乔, 郑万国

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

熔石英光学元件是 ICF 用驱动器中关键的元器件之一。根据国内外研究进展显示, 当前限制熔石英光学元件的抗损伤性能的主要因素是由于元件机械加工过程中所带来的亚表面缺陷层。当强激光加载熔石英光学元件上之后, 亚表面缺陷吸收激光从而发生热吸收, 熔融炸裂发生损伤。提升熔石英元件抗损伤性能的直接办法就是通过各种办法去除熔石英元件亚表面缺陷层。本文将综述当前常用的几种针对亚表面缺陷层的处理方法, 包括动态化学刻蚀技术, 干湿法刻蚀技术, 化学机械抛光技术和表面微纳结构场强调控技术等, 在抗损伤性能提升方面的研究进展和分析其未来应用前景。

关键词: 熔石英元件, 亚表面缺陷, 先进后处理技术, 抗损加固技术

D04-54

激光清洗去除介质膜光栅颗粒污染及对激光损伤阈值的影响

王静轩, 叶亚云, 姚彩珍, 廖威, 王海军

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

该研究提出一种利用激光清洗方法来去除介质膜脉冲压缩光栅表面的污染颗粒。使用一台调 Q 的 Nd:YAG 脉冲激光器用于光栅表面 SiO₂ 和 Al₂O₃ 颗粒。使用扫描电镜来表征不同激光参数下的去除效果。使用时间分辨成像技术来采集污染物脱附的动态过程。激光清洗流程前后光栅的激光损伤阈值变化情况也进行了研究。结果表明在合适的激光清洗参数下, 光栅表面的污染颗粒能够被有效去除且不损伤光栅结构。对于 SiO₂ 颗粒污染, 激光清洗阈值和激光损伤阈值分别为 1.47 J/cm² 和 3.51 J/cm², 对于 Al₂O₃ 颗粒污染, 激光清洗阈值和激光损伤阈值分别为 1.32 J/cm² 和 3.19 J/cm²。此外, 研究结果还表明, 经过激光清洗流程后, 光栅的激光诱导损伤阈值相比于清洗前有提高。

关键词: 激光清洗, 介质膜光栅, 激光诱导损伤

D04-55

熔石英元件表面损伤过程和损伤规律超快探测研究

邓青华

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在高功率激光装置中, 光学元件的损伤问题是限制了装置输出能量进一步增加的瓶颈。熔石英在高功率激光装置中主要应用于终端聚焦透镜和衍射光学元件, 工作于紫外波段。熔石英元件损伤的第一个问题是熔石英元件表面在远低于本征损伤阈值下发生损伤, 尤其是后表面损伤更为严重。熔石英损伤的另外一个问题是表面损伤的快速增长, 熔石英表面一旦发生损伤, 只要后续激光的辐照通量高于熔石英的损伤增长阈值, 其表面损伤点的尺寸会表现出指数增长特性。由于 ICF 装置的实际运行通量超过了熔石英的损伤增长阈值, 因此一旦元件表面出现损伤, 表面损伤将快速增长, 极大的制约了激光装置的总体性能。因而对熔石英元件的损伤过程和损伤规律进行深入研究具有重要的应用价值。

本文基于双脉冲序列超快探针光, 应用偏振分束技术对熔石英光学元件损伤过程进行分束阴影成像, 获得了同一个损伤事件中两个不同时刻的阴影图像, 更加精确地计算了动力学速度参量 (如等离子体膨胀速度、冲击波速度), 进一步完善了动力学参量测试精度。基于上述超快探测系统, 对熔石英元件表面缺陷、不同表面处理质量等对损伤产生和发展等过程的影响进行了比较探测研究, 得到了一系列有意义的结果, 对深化认识熔石英元件的损伤过程和损伤规律具有重要意义。

关键词: 损伤过程, 损伤规律, 超快探测

D04-56

高功率激光装置大口径熔石英元件激光损伤修复技术研究

张传超, 廖威, 张丽娟, 蒋晓龙, 陈静, 王海军, 栾晓雨, 袁晓东, 蒋晓东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

对于高功率激光装置, 面临的挑战之一是其运行在熔石英光学元件激光损伤阈值和损伤增长阈值之上, 即: 超阈值运行, 元件表面损伤不可避免, 一旦激光损伤发生, 在后续发次下, 损伤点呈指数性增长, 将导致严重的光散射和光调制现象, 最终导致元件失效。目前, 人们已经开展了大量的研究工作抑制损伤点的增长, 最常用的方法是采用 CO₂ 激光局域熔融或蒸发去除损伤点, 然而, CO₂ 激光去除损伤点后在熔石英元件表面引入严重的热副效应, 例如: 边缘凸起、再沉积碎片以及热残余应力等。这些修复副效应不仅会引起下游光调制, 而且会引起激光损伤再次发生。因此 CO₂ 激光损伤修复实用化必须

有效抑制或消除修复热负效应。本文系统研究了 CO₂ 激光修复熔石英损伤过程中热负效应的产生机制，发现熔石英局域假想温度升高是产生残余应力的物理基础。针对 CO₂ 激光熔融修复技术，采用激光退回抑制热残余应力；针对 CO₂ 激光蒸发修复技术，采用微秒 CO₂ 激光脉冲逐点快速气化剥离损伤材料，消除修复点存在的边缘凸起、再沉积碎片以及热残余应力。修复点的形貌、应力和激光损伤阈值检测结果指出本研究开发的修复技术有效地实现了损伤点修复，在高功率激光装置工程应用中有效延长了大口径熔石英元件的服役寿命。

关键词：高功率激光装置，熔石英光学元件，超阈值运行，激光损伤，损伤修复

D04-57

磁控溅射制备 HDC 薄膜的结构和力学性质研究

彭丽萍¹，王雪敏¹，吴卫东¹

1.中国工程物理研究院激光聚变研究中心

2.中国工程物理研究院激光聚变研究中心，等离子体物理重点实验室

采用磁控溅射技术，以热解石墨作为靶材，在 Si(100) 衬底上制备了高密度碳 (HDC) 薄膜。利用原子力显微镜 (AFM) 对薄膜的表面形貌进行分析，所制备的薄膜具有较好的表面平整性，较小的表面粗糙度，表面粗糙度均低于 2 nm，随着溅射功率的变化，其表面粗糙度变化不明显。利用 Raman 谱仪和 XPS 对薄膜的结构特性进行分析，结果显示薄膜中 SP² 杂化碳多于 SP³ 杂化碳。利用纳米压痕技术测试了薄膜的硬度，薄膜的硬度小于 20 GPa。采用称重法测试了所制备样品的密度，其结果为 2.65 g/cm³。结果表明：利用磁控溅射制备的 HDC 表面平整，具有较高的密度和硬度，可以作为 ICF 研究中烧蚀层的备选材料。

关键词：磁控溅射，高密度碳 (HDC)，Raman 光谱

D04-58

Ag/VO_x 纳米阵列的可控制备及应用研究

熊政伟，曹林洪

西南科技大学

近年来，钒的氧化物 (VO₂、V₂O₃、V₂O₅) 因其在相变过程中电学、磁学和光学等特性会发生可逆突变，从而在光开关、智能窗、存储器等领域具有广泛的应用而受到关注。与薄膜相比，VO₂ 纳米颗粒阵列将纳米尺寸效应和阵列的周期性结合在一起，成为了调控贵金属共振响应特性的新的研究热点。然而，就目前来讲，现有的制备 Au(or Ag)/VO₂ 纳米颗粒阵列的方法过程复杂，成本较高且制备过程中影响因素较多。因此，为了寻求较好的制备条件同时提高实验成功率，本文首先利用干法刻蚀制备出结构简单、尺寸大小可控的 PS 阵列，研究了不同刻蚀功率与时间条件下，PS 球形貌与大小的变化情况。进一步利用 PS 阵列为模板，制备了形貌与尺寸可控的 Ag 或者 VO_x 的纳米阵列，分别研究了 Ag 纳米阵列、钒氧化物 (VO_x) 纳米阵列以及 Ag/VO_x 复合材料的形貌以及光学性能。同时我们通过化学自组合法，制备了 Ag@SiO₂@VO₂ 球壳结构的复合材料。研究了不同合成参数下，不同 VO₂ 晶相相对复合材料光学性能的影响规律。

D04-59

去合金化法制备微米多孔铜的去合金过程及其力学性能

陈斐，王昊，邹丽杰，沈强，张联盟

武汉理工大学

多孔铜由于其展现出优异的物理和化学性能，并且价格低廉，有望取代多孔贵金属（如多孔金等），在催化、生物传感器、能源等领域展现巨大的应用潜力。本文利用电化学方法—塔菲尔外推法，研究不同烧结环境下制备的 Cu-Fe 两相合金在硫酸溶液中去合金化制备微米多孔铜的反应过程，并对不同孔隙率的微米多孔 Cu 块体试样进行拉伸性能研究。首先，采用等离子活化烧结制备系列 Cu-Fe 先驱体合金，然后采用化学去合金工艺去除 Cu-75 at.% Fe 先驱体合金中的 Fe 元素获得多孔 Cu 块体材料，并研究先驱体合金烧结工艺（烧结温度和时间）及去合金化工艺（去合金温度和腐蚀液浓度）对多孔 Cu 孔隙结构的影响。结果表明，当升温速率为 50 °C/min，保温温度为 800 °C 及保温时间为 5 分钟时，可以得到物相分布均匀的 Cu-Fe 先驱体合金；随去合金温度和腐蚀液浓度的提高，电流密度（即去合金速率）逐渐升高。综合考虑去合金速率和孔结构的均匀性，最佳去合金条件为 90 °C 和 5 wt.% 硫酸溶液浓度，在去合金化之后形成孔径 1-4 μm，孔隙率 73% 的微米多孔铜，其屈服应力、拉伸应力及弹性模量随着孔隙率增加而增加，而伸长量基本保持不变。

关键词：块体微米多孔铜，去合金过程，拉伸性能，形变过程

D04-60

强自旋轨道耦合材料 Sb₂S₃ 在高压下的超导电性

贾雅婷

中国科学院物理研究所

近年来,人们对 A₂B₃ 型化合物 Sb₂S₃ 进行了一系列的室温下的高压 x 射线衍射和拉曼测试,表明在 5 GPa 左右有一个二级同构相变或电子拓扑相变。我们发现了在高压下 Sb₂S₃ 单晶的绝缘体金属相变,拓扑电子相变,超导转变以及结构相变。我们在压力高达 98 GPa 的电输运实验发现,在 16.7 GPa 出现了绝缘体金属转变,在 35 GPa 出现了超导转变,转变温度随压力的增加而增大。在压力高达 50 GPa 的高压同步辐射表明在 15.1 GPa 出现了结构相变。

D04-61

(Sr_{1-z}Ca_z)_{1.6}Na_{0.4}CuO₂Cl₂ 体系 X 射线吸收谱 (XAS) 研究

赵建发,李文敏,曹立朋,于润泽,望贤成,刘青青,靳常青

中国科学院物理研究所

铜氧化物高温超导体自从被发现以来就一直受到人们的广泛关注。A₂CuO₂Cl₂(A=Ca,Sr)作为同构与铜氧化物高温超导体 La₂CuO₄ 的材料受到了持续不断的研究。例如我们组进行了高压下 (Ca_{2-x}Na_x) CuO₂Cl₂ 超导单晶的生长并进行了压力调控下的研究。相较于 La₂CuO₄ 体系,在 A₂CuO₂Cl₂ 体系中 Cu 与顶角 Cl 的距离显著拉长,形成一个拉伸的八面体,使得 CuO₂ 平面的准二维性显著增强,因此 A₂CuO₂Cl₂ 属于二维层状材料,适合超导机理研究。另外一方面,在 A₂CuO₂Cl₂ 中,顶角 Cl 取代了顶角 O,所有的 O 原子均位于 CuO₂ 平面内,结合 X 射线吸收谱 (XAS),可以研究在该体系中中空穴浓度的变化。

利用 X 射线吸收谱学测试手段,系统测量了名义配比为(Sr_{1-z}Ca_z)_{1.6}Na_{0.4}CuO₂Cl₂ (Z=1, 0.7, 0.5, 0.3, 0) 系列材料,我们对该系列材料详细测量了 O K-edge 和 Cu L-edge X 射线吸收光谱 (XAS) 实验。实验发现,随着 Sr 元素比例的提高,A 位离子半径显著增大,由此导致了体系中铜氧面内空穴浓度逐渐减少,具体体现为在 O K 吸收边测试中,O K 吸收边之前两个前置峰出现显著变化:能量较低的峰随着 Sr 元素比例的提高而逐渐减弱;能量较高的峰 (upper Hubbard band) 随着 Sr 元素比例的提高而逐渐增强。在 Cu L 边吸收谱测试中,随着 Sr 含量的增加,Cu²⁺的吸收峰展宽变弱,证明体系的空穴浓度减小,与 O K-edge XAS 实验结果一致。

D04-62

压力诱导的电子化合物 Ca₂N 从金属态到半导体态的转变

唐虎^{1,2}, 万彪^{1,2}, 高波¹, Yoshinori Muraba^{3,4}, 秦琴¹, 颜丙敏¹, 陈鹏², 胡清扬¹, 张东舟⁵, 吴来磊², 王明智², 肖红¹, 缙慧阳^{1,6*}, 高发明⁶, 毛河光^{1,7}, 细野秀雄^{3,4*}

1.北京高压科学研究中心,北京,100094

2.亚稳材料国家重点实验室,燕山大学,秦皇岛,066004

3.Materials Research Center for Element Strategy, Tokyo Institute of Technology, 4259 Nagatsuta-cho, Midori-ku, Yokohama, Kanagawa 226-8503, Japan

4.Laboratory for Materials and Structures, Institute of Innovative Research, Tokyo Institute of Technology, Mailbox R3-4, 4259 Nagatsuta-cho, Midori-ku, Yokohama 226-8503, Japan

5.Hawai'i Institute of Geophysics and Planetology, School of Ocean and Earth Science and Technology, University of Hawai'i at Manoa, Honolulu, Hawaii 96822, USA

6.环境与化学工程学院,燕山大学,秦皇岛,066004

7.Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington, 5251 Broad Branch Road NW, Washington, DC 20015, USA

电子化合物是一类特殊的离子化合物,独立的电子作为其负离子。由于其独特的电子和催化性能而受到了广泛的关注,特别是无机电子化合物的发现以来。然而,到目前为止对于该体系的研究主要被局限于常压环境,极端条件下的电子化合物的电子状态的研究是缺乏的,例如高压环境。因此,这里我们利用原位同步辐射 XRD 和原位电阻测试以及计算模拟,研究了压力诱导的层状电子化合物 Ca₂N 从金属到半导体的转变。实验和理论共同揭露了在压缩条件下, Ca₂N 经历了三个相转变:从常压的 R $\bar{3}m$ 结构到 Fd $\bar{3}m$ 结构到 I $\bar{4}2d$ 结构再到 Cc 结构。负极电子的状态也从层状转变到了链状再到球状,电

子化合物电子维度从二维转变到一维再到零维。 Ca_2N 金属到半导体转变的高压电阻行为正是由于负极电子状态的转变，在高压条件下，负极电子被囚禁在零维的空间内，从而表现出了高压半导体特性。我们的结果演示了电子化合物 Ca_2N 在高压条件下电子结构的转变，也可能为高压条件合成新型的电子化合物提供思路。

D04-63

高压下聚苯乙烯的折射率和极化率研究

张旭平，王桂吉，罗斌强，谭福利，赵剑衡，孙承纬

中国工程物理研究院流体物理研究所

为理解聚苯乙烯离解相变、非金属绝缘到导电流体转变的主导驱动因素和校核材料模型，有待开展聚苯乙烯离解压力起始阶段的折射率、极化率、电介质性质及其影响关系的研究。采用磁驱动冲击加载技术，实验获得了聚苯乙烯在离解起始压力附近的折射率。结合完全物态方程、Lorentz-Lorenz 方程、单振子模型，获得了聚苯乙烯的有效极化率、禁带宽度。聚苯乙烯的有效极化率从常态下的 $1.28 \times 10^{-23} \text{cm}^3$ 下降到 30GPa 压力时的 $0.98 \times 10^{-23} \text{cm}^3$ 。最低能量间隙则在 20GPa 以上小于 2eV，即小于很多半导体材料的禁带宽度。在聚苯乙烯离解后有效极化和最低能量间隙对温度上升比和密度或压力的变化更敏感。

D04-64

强电场调控下单层和双层 MoS_2 的二维超导

符亚军

西南科技大学

二维材料由于其独特的性质，引起了人们的广泛关注。借助二维材料这一平台，人们开始探索其新奇的物理现象和潜在的器件应用。本工作主要利用离子液体（Ionic liquid）作为介质材料，对单层和双层 MoS_2 样品的载流子浓度进行调控，并研究其输运性质。通过离子液体引入浓度高载流子，在单层和双层 MoS_2 中观察到金属-绝缘体转变和超导现象，通过 BKT 模型拟合证实了其二维超导的性质。本工作进一步在低温下，通过研究 MoS_2 超导中的涡旋运动包括热激活蠕动和量子蠕动两种模式；并结合第一性原理计算和拉曼光谱研究发现在离子液体引入载流子的过程中（重掺杂）引起的声子软化对 MoS_2 的二维超导性质有较大影响。

D04-65

氢同位素气体的声速定标方法研究

马小军，唐兴，高党忠，王宗伟，王琦

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

气体声速是一个基本的热物性参数，也是目前可测量的精度最高的热物性参数之一。近 30 年来，基于 Helmholtz 球共鸣器的气体声速测量技术在激光核聚变靶丸氘氚燃料气体密度测量以及气体比热比、气体普适常数、波尔兹曼常数等诸多热物性参数测量中得到了非常广泛的应用。目前，大量的氢、氘热物理实验数据可以利用，与之相反，由于氚的放射性，氚的热物理实验数据鲜有报道，如何从氢、氘声速数据定标得到氚的声速数据需要进一步研究。鉴于此，本文提出了一种基于多量子参数校准的声速定标方法，该方法根据不同数量的分子间相互作用力不同的物理本质，对不同阶次的声速维里系数进行不同的校准。数值模拟结果表明，与 NIST 数据相比，在气体密度较低的情况下，基于经典对比状态原理（CLCS）和量子对比状态原理（QLCS）的 D_2 声速与实验数据一致性较好；随着气体密度的增加，分子间的相互作用变得不可忽略，利用 CLCS 方法得到的数据大于 NIST 数据；与此相反，利用 QLCS 方法得到的在高密度情况下 D_2 声速总是小于 NIST 数据，其原因可归结为 QLCS 方法中单量子修正项的过校准。利用本文所建立的多量子参数定标方法，在 0~1500 atm 范围，推导值与 NIST 数据的一致性较好。上述结果表明，利用多量子参数校准方法，可获得更为准确的氢同位素声速数据，有利于获得更高的靶丸内气体密度测量不确定度。

D04-66

甲烷浓度对惯性约束聚变用金刚石微球性能的影响

汪建¹，杜凯¹，刘磊¹，姚裕贵^{1,2}，王涛¹

1.中物院激光聚变研究中心

2.北京理工大学

金刚石具有优异的物理化学性能，其高透过率、高原子密度、高强度及高的热导率等特性，使其可作为烧蚀层材料应用于惯性约束聚变实验中。本文以甲烷和氢气为气源，采用微波等离子体化学气相沉积法在硅球芯轴上沉积金刚石薄膜纸杯微球。利用拉曼光谱、扫描电子显微镜及 X 射线照相技术对样品的化学组成、表面形貌、球形度、膜厚均匀性及密度进行了表征。研究了碳源浓度对金刚石微球表面及化学组成的影响。结果表明，晶粒尺寸随碳源浓度有显著变化，碳源浓度增加，晶粒尺寸由微米量级变为纳米量级，而密度仅有少许降低。在低至 1% 甲烷浓度下，晶界和择优生长面有二次形核位形成。碳源浓度对球形度和膜厚均匀性的影响极微。

关键词：惯性约束聚变，微波等离子体化学沉积，金刚石

D04-67

钛酸钡陶瓷镀铜工艺研究

曹林洪，陈晓宇

西南科技大学

钛酸钡陶瓷在电容器领域广泛应用，其电极材料一般为银，但银价格较贵，相关企业希望以贱金属铜来取代银，降低电容器产品成本。本论文针对钛酸钡陶瓷电容器电极贱金属化，开展了钛酸钡陶瓷化学镀铜工艺研究。实验中对陶瓷基体表面预处理进行改进，使用超声波辅助除油；同时对镀液中的相关参数进行优化，并运用扫描电子显微镜、X 射线衍射等对其进行表征。

(1) 钛酸钡陶瓷片的预处理包括除油、粗化、敏化和活化四个步骤。粗化是 20% 质量浓度的氢氟酸浸泡陶瓷片 2 min；敏化活化在陶瓷片表面沉积一层催化结晶中心，呈胶体状，使得化学镀能够自发进行。

(2) 钛酸钡陶瓷表面化学镀铜溶液的最佳配方为：五水硫酸铜 16 g/L，甲醛 16 g/L，EDTA 二钠 14 g/L，酒石酸钾钠 18 g/L，温度为 40 °C，氢氧化钠 14 g/L，PH 为 12.5，添加剂亚铁氰化钾和 2,2'-联吡啶均微量。在最优工艺条件下，镀层表面平整、呈淡粉红色、有金属光泽，铜晶粒大小均匀，排列紧致；镀层结合力较好。镀层成分为纯铜，镀层为面心立方结构；镀层物理性能较好，导电性能优良，结合力较好。

(3) 添加剂亚铁氰化钾和 2,2'-联吡啶都能显著改善镀层外观形貌镀层表面更加光亮、连续，微观上铜晶粒明显细化，大小更为均匀、致密；能在一定程度上提高镀层的导电性能，对镀层结合力的影响不明显；能提高镀层的择优取向程度；能提高镀液稳定性，延缓镀液自然分解的时间。

通过上述实验，探索出一条表面致密光亮、平整度高、各项物理性能均优异的铜膜可控沉积途径，并且为电容器陶瓷企业陶瓷电极贱金属化提供较了参考。

关键词：化学镀铜，添加剂，钛酸钡，正交实验

D04-68

钨箔片材冷轧制备及其参数表征

李朝阳，王衍斌，刘艳松，易泰民

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

钨及其合金具有高密度、高强度、高硬度等特点，在武器装备中有着重要应用。钨材料的状态方程研究对于研究钨材料在极端条件下的动态响应有着重要的意义。在状态方程研究过程中需要制备具有微米级厚度的具有块体材料密度的金属钨箔膜。

本文采用冷轧的方法对钨的片材原料开展了制备微米厚度钨箔膜的制备工作。主要研究了轧制工艺参数对于钨箔膜的成品率以及表面质量等影响。实验研究使用的钨片材原料为纯度 99.9%，尺寸为 0.1 mm×10 mm×20 mm。进行冷轧时，需要首先使用轴承钢材质的轧辊进行冷轧，通过多道次的轧制后，厚度可以变化至 0.04 mm 左右时需要进行中间热处理以消除冷轧过程中的加工应力，热处理后的钨箔可更换硬质合金轧辊继续轧制，轧制钨箔膜的成品率较高。直接使用硬质合金轧辊轧制厚度为 0.1 mm 的原料会造成较大的道次压下率，但是钨箔膜的边缘撕裂严重，轧制过程中会造成较严重的碎裂和分层现象。

通过 XRD 和 EBSD 等测量手段对轧制钨箔膜的晶体结构趋向、晶粒尺寸变化等进行测量表征，研究发现经过轴承钢轧辊轧制变形率为 50% 左右的钨箔膜晶粒尺寸已经得到了显著的细化，并沿轧制方向有较明显的取向，晶粒的细化使得钨的塑性增强，增加了其延展能力。

片材轧制钨箔膜的最小厚度可以轧制至 5 微米左右，箔膜面积可以在 10 mm×10 mm 以上。钨箔的表面粗糙度在 100 nm 以下。轧制钨箔膜的晶粒尺寸细化至纳米量级。

关键词：钨箔膜，冷轧，状态方程

D04-69

以超原子为基元构建人工材料或器件的理论研究

王志刚

吉林大学 原子与分子物理研究所

作为能够部分展现原子属性，甚至有希望实现新特性的超原子团簇，其带来了构建新型功能材料乃至器件的重要途径。在本报告中，结合自身开展的超原子尤其是高角动量超原子团簇的结构特性认识，以及相关功能和组装特性等方面研究的体会，希望可以概括性论述相关研究中的一些基本理论和实验方面问题，并对超原子作为功能基元的自下而上发展前景有所预见。

D04-70

基于 X 射线投影法的靶丸内表面形貌测量技术研究

王宗伟，马小军，王琦

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在惯性约束聚变研究中，靶丸作为燃料容器是最关键的靶零件之一。靶丸的各项参数直接影响聚变物理过程，其中靶丸内表面的形貌与内爆对称性、燃料质量混合等物理问题密切相关。靶丸内表面的表征研究，目前还局限于光探针法的轮廓测量，该方法适用于透明靶丸和局部轮廓测量，而非透明、全内表面的形貌测量才更具普遍意义。为此，开展了基于高分辨 CT 为测量手段的靶丸内表面测量方法研究，该方法基于微焦点 X 射线投影技术，通过优化成像参数，建立亚像素分辨的靶丸圆心提取算法及边缘轮廓提取算法，实现了全内表面形貌的重建。开展了调制靶丸测量对比实验，与光学轮廓仪测量结果一致。实验分析结果表明，该方法能够实现靶丸内表面在模数 1~30 范围内，分辨力 0.3 μm 的形貌测量。

关键词：惯性约束，靶丸，内表面形貌

D04-71

ICF 用 GDP 靶丸表面的高精密抛光技术研究

刘艳松，何小珊，陈果

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

辉光放电聚合物（GDP）靶丸是激光惯性约束聚变（ICF）研究的首先靶丸之一，其表面粗糙度过大会导致压缩过程中的流体力学不稳定性增加和压缩效率下降，从而使物理实验达不到所需的物理条件。GDP 靶丸通常采用等离子体增强气相沉积的方法镀制，当 GDP 厚度过厚时，表面粗糙度也随之增加。美国国家点火装置（NIF）所需的 GDP 靶丸其直径为 2 mm，壁厚约 190 μm ，这种较厚的 GDP 靶丸除了表面粗糙度差外，还存在一些孤立表面点状缺陷（高度几百纳米，直径尺寸几到几十微米）。目前，单纯的改变沉积工艺受限于沉积过程中的阴影效应和微球间的撞击效应等已经难以解决缺陷和表面粗糙度大的问题，因此急需开展新的抛光技术探索来解决这类问题。

然而，常规的微球抛光方法极易压碎微球或者产生较大的机械划痕，难以实现脆性 GDP 空心微球高精密抛光。本工作设计了一种利用标准球透镜微球和二氧化硅纳米颗粒对 GDP 微球表面进行精密抛光的装置。通过利用白光干涉仪、扫描电子显微镜和 X 射线光电子能谱分析等技术探究了抛光工艺参数对 GDP 表面粗糙度和孤立突起缺陷的影响情况，分析了抛光过程中突起状缺陷去除的过程及相关机理，从而初步实现了脆性 GDP 空心微球表面的高精密抛光技术，实现了 GDP 微球表面孤立突起状缺陷的去除以及表面粗糙度降低。在此基础上，进一步探究了抛光过程中 GDP 微球表面杂质含量和氧含量的变化情况。

最终，实现了直径约 2 mm GDP 微球表面的高精密抛光，使厚壁 GDP 微球表面孤立状缺陷得到有效去除，表面粗糙度降低至 10 nm 水平。这一工作的开展将有效解决由于 GDP 表面粗糙度过大导致的物理实验结果不理想的问题，为相关物理实验研究打下了的技术基础。

关键词：惯性约束聚变，辉光放电聚合物靶丸，抛光，表面粗糙度，突起状缺陷

D04-72

微量气体状态方程法玻璃靶丸保氮性能无损监测与评估

冯建鸿，王宗伟，马小军，初巧妹，张占文，史瑞廷，黄勇，陈雪

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

空心玻璃微球（HGM）具有耐压强度高、球形度好、壁厚均匀、表面粗糙度低、制备工艺成熟等特点，是惯性约束聚

变 (ICF) 物理实验中广泛应用的一种燃料容器。随着美国国家点火 (NIF) 计划的深入开展, ICF 分解物理实验对空心玻璃靶丸需求持续增长, 可提供 15 MeV 单能质子背光源 D^3He 充气靶丸就是其中重要的一类物理实验靶丸。光学检测法是表征玻璃靶丸内气体压力的重要手段, 如干涉条纹移动法、拉曼散射光谱法、低温露点法、垂直扫描干涉定位法、干涉条纹形状分析法、白光垂直扫描干涉法等。这些光学检测技术具有各自的优越性和局限性, 难以满足物理实验玻璃靶丸氦压参数检测精度要求。因此, 需要进一步开展实现空心玻璃微球中氦气体含量无损精密检测方面的研究。

本文运用气体状态方程原理, 通过有效跟踪检测微量气体容器中玻璃靶丸外压变化, 分析检测玻璃靶丸内氦气含量, 回归曲线参数法获得玻璃靶丸保氦半寿命, 实现了微量气体状态方程法玻璃靶丸保氦性能无损监测与评估, 克服了白光干涉等光学方法对靶丸透明度的要求, 提升了氦气检测限与置信度, 相应工作及主要结果如下:

1. 建立了微量气体容器状态方程法玻璃靶丸内外氦气压力监测的理论模型, 并对回归曲线参数法获得玻璃靶丸保氦半寿命进行了理论计算公式推导。

2. 240 h 室温跟踪监测充 80 atm 氦气的 HGM 玻璃靶丸的内外压力结果显示自研微型气体容器氦压检测装置气密性满足平衡压力有效获取要求, 微量气体状态方程法玻璃靶丸保氦性能无损监测原理上、技术上均可行。随时间增长, 玻璃靶丸内压值呈指数关系先快速下降-再缓慢下降-最后逐步缓慢趋向平衡气压值的变化规律。这主要是由于随时间流逝, 玻璃靶丸内氦气以气体渗透方式逐步漏出玻璃靶丸壳层, 其内压值逐步降低, 决定其气体渗透速度变化率关键因素 $P_i - P_o$ 值也相应降低并逐步趋近于零的缘故。

3. 以壁厚 2.1 μm 、3.4 μm 的 HGM 以及 0.1 μm 的 Al + 3.2 μm 的 HGM 样品室温保氦跟踪结果显示微量气体状态方程法可实现透明玻璃靶丸 (HGM) 及不透明玻璃靶丸 (Al-HGM) 保氦性能有效跟踪监测, 保氦性能薄壁 HGM < 厚壁 HGM < Al-HGM。工作曲线进行最小二乘法函数回归拟合保氦半寿命 $t_{1/2}$ 值的相应标准偏差 R^2 分别为 0.97、0.82、0.97, 这说明回归曲线法保氦半寿命 $t_{1/2}$ 值计算不确定较低。

关键词: 状态方程法, 玻璃靶丸, 氦, 无损测量

D04-73

气袋靶支撑环大深径比微孔电火花铣削加工

谢军, 张昭瑞, 黄燕华, 蒋柏斌, 张海军, 李国, 宋成伟

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在间接驱动惯性约束聚变实验中, 为防止黑腔高 Z 等离子体过早聚心, 腔内需要填充一定压强的气体, 激光将与数毫米的大尺度等离子体发生相互作用。物理实验一般采用气袋靶或充气腔靶, 与充气腔靶相比, 气袋靶的设计为开放位形, 利于诊断设备的架设和实验结果的分析。国外文献报道气袋靶主要由支撑环、端口薄膜以及充气管等部分组成, 支撑环宽度 0.4mm, 外径 $\Phi 4.5mm$, 内径 $\Phi 2.75mm$, 在侧面连接充气管, 孔径 $\Phi 0.2mm$ 。由于支撑环厚度、孔径尺寸小、深径比大, 且纯钛为难加工材料, 采用常规的机械加工方法难以实现; 电火花加工是一种特种加工方法, 电极与工件之间不存在宏观切削力, 可实现支撑环这类小尺寸、低刚度、大深径比零件的加工。

神光 II 物理实验采用杂质较少的纯钛做支撑环, 外径 $\Phi 3.2mm$ 、内径 $\Phi 1.6mm$ 、厚度 400 μm , 充气孔直径 $\Phi 200\mu m$ 。微孔加工设备为微细电火花铣床; 采用钨钢实心电极, 直径 $\Phi 150\mu m$; 介电质为含 C、H 的烷烃。加工中采用分层铣削方式, 控制分层厚度, 将电极放电控制在底部, 避免侧面放电造成电极直径变小; 电极螺旋进给且旋转, 使加工切屑及时排除。

从气袋靶支撑环微充气孔及剖面扫描电镜图看出, 支撑环充气孔入口直径 199 μm , 其加工误差小于 1 μm , 出口直径与入口直径相差小于 2 μm , 孔的直径一致性较好, 内表面平滑, 锥度小。在微小孔电火花加工中, 由于放电间隙十分微小, 电蚀产物的排除是非常困难的。从而降低电火花加工质量, 这是因为电蚀产物分散在加工间隙内会强烈地降低击穿强度、容易产生二次放电、对放电状态和加工孔的形状造成不利影响。当电蚀产物及时的排除时, 微小孔电火花的加工状态得到改善, 电极径向方向放电得到有效控制, 从而使孔的直径一致性变好。从电蚀产物的扫描电镜表面形貌图看出, 当排屑流畅时, 切屑几乎呈完整的球形, 相反则切屑形状不规则, 呈片断状。

采用电火花铣削加工技术, 在纯钛支撑环上加工出直径 $\Phi 199\mu m$, 深径比 4:1 的微充气孔, 直径一致性较好, 锥度小。通过对电蚀产物的表面形貌分析可知, 电火花铣削是排屑流程, 加工过程稳定, 切屑迅速冷凝, 形成球状。

关键词: 气袋靶, 大深径比, 微孔, 电火花铣削

D04-74

具有高比表面积的 Ni 气凝胶用于储氢研究

周小草^{1,2}, 易勇², 王朝阳¹, 付志兵¹

1.中国工程物理研究院激光聚变研究中心

2.西南科技大学

具有高比表面积和多级孔结构的纳米多孔金属在储氢,电催化和燃料电池领域有着很好的应用前景。在本文中,提出了一种通过使用 SiO₂ 气凝胶作为模板,即通过化学镀将 Ni 沉积到 SiO₂ 气凝胶模板中,然后在温和条件下用 NaOH 溶液去除模板,CO₂ 超临界干燥,制备出具有高比表面积的纳米多孔 Ni 的新方法。详细研究了化学镀时间和温度等制备条件对纳米多孔镍的结构和磁性的影响,最终获得比表面积高达 120.5 m²/g 并且具有特殊三维纳米花状结构的纳米多孔镍,其孔的大小从大孔到微孔都有所分布,主要集中在介孔。将该具有特殊结构的纳米多孔 Ni 用于储氢研究,结果发现,在室温,氢气压力为 4.5 MPa 的条件下,样品的氢吸附量为 0.45 wt%,该结果表明,具有高比表面积和多级孔结构的纳米多孔 Ni 将在储氢领域有着理想的应用前景。此外,基于该实验基础,也为其他具有高比表面积和多级孔结构的纳米多孔金属材料在储氢领域的应用提供一种新的思路。

关键词: 纳米多孔 Ni, 高比表面积, 氢吸附

D04-75

多级孔结构碳气凝胶用于高压水系超级电容器

刘西川, 袁磊, 米睿, 付志兵, 钟铭龙, 王朝阳, 唐永建

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

能量密度低是制约超级电容器广泛应用的主要障碍。根据能量密度公式: $CV^2/2$, 提升材料能量密度和器件输出电压是提升超级电容器能量密度的两种方式。高压水系电解液的应用在提升性能和降低成本方面具有广泛的发展潜力。本文以碳气凝胶作为研究基础对其进行进一步的改性和孔结构设计: 1) 掺入三聚氰胺在碳气凝胶材料中引入氮元素并利用其高温分解得到微米级孔道; 2) 加入表面活性剂 PEO-PPO-PEO 稳定气凝胶初始结构, 同时高温分解后在材料内形成多孔通道; 3) 采用二氧化碳活化技术对材料进行进一步刻蚀, 在材料中产生大量微孔(直径 <2nm); 最终得到具有多级孔结构的掺氮碳气凝胶。将其作为超级电容电极材料, 采用高浓度的“盐包水”水系电解液, 可将水系超级电容器的输出电压提升至 2.4 V, 能量密度可达 30 Wh/kg。

关键词: 超级电容器, 孔结构设计, 掺氮碳气凝胶, 多级孔结构, 高压水系电解液

D04-76

自组装介孔饼状氧化钨的制备及其在超级电容器中的应用

贾金志^{1,2}, 周秀文¹, 曹林洪², 刘旭东¹

1.中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 四川绵阳 621900

2.西南科技大学材料科学与工程学院, 四川绵阳 621900

层状的六方氧化钨(h-WO₃)具有质子插入型赝电容性能,是一种很有前景的电化学储能材料。当前研究重点在于 h-WO₃ 的实心纳米结构上,但其不利于电解质交换和质子的插入。本研究中,我们采用无添加剂的水热合成法成功制备出有序介孔自组装饼状 h-WO₃ 材料,从而解决了这一问题。研究表明该新型 h-WO₃ 在 2 mV s⁻¹ 的扫描速率下电容最高可达 702.5 F g⁻¹; 且扫描速率从 2 增加到 50 mV s⁻¹ 时电容保持率为 44.7%; 同时,该材料在 4000 次循环后比电容几乎没有衰减,表明它具有优异的电化学性能。基于对电荷存储机制的分析,进一步表明优异的电化学性能与其有序介孔饼状结构有关。该方法制备的 h-WO₃ 材料具有优异的电化学性能,在高性能能量存储设备应用上将有着极大的应用前景。

关键词: 超级电容器, 六方氧化钨, 饼状, 有序介孔

墙展

D04-P01

真空温压制高纯铍靶材研究

陈龙, 罗江山, 张吉强

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

铍因其散射截面大,适用于制造核物理中的核靶材。但因铍的塑形低,加工难度大,常采用粉末冶金加工方法。

而在制备高纯铍靶材的过程中，由于制粉和热压过程都很容易引入杂质，故而采用低速制粉和真空温压相结合的方式，可大大减少杂质扩散的问题。当温度为 550 °C、压力 350 MPa、恒压 30 min 的条件下，可以获得致密度 97%的高纯铍靶材。

关键词：铍靶材，高纯，真空温压，致密度，显微硬度

D04-P02

热场加载作用下钨材料微纳尺度变形与断裂过程研究

周民杰，杨奇，李佳，曾勇

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

微纳尺度结构与性能关系是新型材料研究重要内容，其背后的巨大推动力来自对功能部件 / 器械小型化的强劲需求。由于传统的材料物理性能测试工具和方法已无法满足对微纳材料进行精密测试的要求，并且微纳功能材料通常在多场耦合乃至极端条件下服役，这些特性要求研究工作者持续不断地寻找和研发新的工具以期实现对微纳材料的可控制备、高通量观测、操控和定量测量。因此，基于材料研究需求，开展微纳尺度结构与物性精密测量研究，将对先进功能材料发展产生积极推动作用。此外，在服役环境下深入理解材料结构参数与物理特性的关系是掌握材料行为的关键，因此要求系统研究材料在多场耦合乃至极端条件作用下的应变与服役性能。本项目基于钨材料开展电子显微热场加载方法与材料微介观结构演化过程原位表征研究，以深入理解热场作用下钨材料微纳尺度变形与断裂过程。针对炉式热场加载方法，研究建立了手工研磨样品预处理工艺与参数，更利用冷台技术提高了样品预处理质量；针对芯片式热场加载方法，研究建立了聚焦粒子束微加工样品预处理工艺与参数。成功获得高质量测试样品，样品薄区厚度小于 100 纳米，薄区区域达微米量级，接点良好，满足外场加载条件。开展了热场作用下钨材料微结构演变原位表征测试，利用漂移校正与过程记录，在线观察到缺陷迁移、位错交联、晶粒形状改变、孔洞\空洞形成与长大、材料断裂等实验现象；统计分析了不同温区钨材料缺陷尺寸与缺陷密度。研究结果表明，热场作用下钨材料微结构演变存在间隙原子或单空穴的移动、空穴一杂质基团的分解、空穴移动、孔洞形成等多种机制，而最终发生断裂主要基于微孔聚合机制。本项研究为下一步深入探索多场耦合或极端条件作用下材料结构演化的物理机制打下了基础。

关键词：热场加载，电子显微，变形，断裂

D04-P03

脉冲激光辐照诱导的 SrTiO₃ 单晶表面导电性的产生与调制

张兆亭，金克新

西北工业大学

本文利用氟化氩激光辐照在 (100) 钛酸锶单晶上实现了表面金属导电性，这种导电性强烈地依赖于真空度和辐照激光的能量密度。X 射线光电子能谱结果表明这种导电行为主要起源于氧缺陷。另外，利用激光辐照得到的金属表面为电极，辐照后钛酸锶单晶的门控输运特性也被系统地研究。实验表明辐照后的钛酸锶单晶对于波长为 360 nm 的紫外光呈现了持久的光电导效应。在 $T = 20\text{ K}$ 时，电阻的相对变化达到最大值，大约为 45%。电门控效应则可以调控辐照后的钛酸锶进入不同的电阻态。 $T = 20\text{ K}$ 时，在正 100 V 的背电压下，样品呈现高阻态，其中电阻的相对变化约为 178.2%。而在负 100 V 的背电压下，样品表现出低阻态，电阻的相对变化约为 41.4%。这些特性为激光辐照氧化物在光电子器件以及开关器件中的广泛应用提供了可能。

关键词：二维电子气，SrTiO₃，输运特性

D04-P04

表面熔覆玻璃涂层对熔石英抗激光损伤性能的影响

李昌朋，陈姝帆，叶鑫，吴卫东，蒋晓东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

熔石英的抗激光损伤性能是高通量激光装置发展过程中的研究热点，而损伤主要是由杂质污染物或微裂纹等缺陷通过增强激光吸收或降低机械性能来引发的。常见的 HF 刻蚀技术可以有效地去除熔石英表面的缺陷层，减少微裂纹数量并钝化微裂纹尖端，从而大幅提高熔石英的损伤阈值，但在深度刻蚀时会导致粗糙度增大、面型劣化，反而会降低熔石英的抗激光损伤性能。本文拟在 HF 深度刻蚀的基础上，通过 PECVD 在熔石英表面沉积一层无定形的二氧化硅颗粒，并同时用高温等离子焰使其熔融形成玻璃涂层。HF 深刻蚀可以彻底去除杂质污染物和较小的微裂纹，同时钝化并暴露较大的微裂纹，而熔覆的玻璃涂层可以通过流动性来修复和填补微裂纹，改善面型，并最终大幅度提升其损伤阈值。实验结果表明，表面熔覆玻璃涂层可以将深刻蚀熔石英的 0% 和 100% 损伤阈值分别从 12.6 J/cm² 和 19.5J/cm² 提高到 17.0 J/cm² 和 29.5J/cm²，同时还表

面粗糙度从 10.9 nm 降低到 1.2 nm。表面熔覆玻璃涂层在高阈值光学元件的制备上具有一定的应用前景。

关键词：玻璃涂层，表面熔覆，激光损伤阈值，HF 深刻蚀，PECVD

D04-P05

γ 射线辐照法制备金属铂掺杂碳气凝胶及其储氢性能研究

钟铭龙，付志兵，米睿，袁磊，杨曦，刘西川，王朝阳

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

碳气凝胶是由溶胶-凝胶化学方法制得的一种新型多孔材料，具有低密度、连续孔结构和高比表面积等特点，是一种潜在的储氢材料。由于碳和氢的结合能较低，目前研究人员报道的碳气凝胶室温下的储氢量都低于氢能源的应用需求。为了解决这个问题，研究人员向碳气凝胶中掺入贵金属粒子，利用氢溢流效应可提高碳气凝胶室温储氢量。目前有多种方法可用于将贵金属粒子掺入碳气凝胶中，但都存在一些缺点和不足。本文报道了利用 γ 射线辐照这种特殊的方法制备贵金属铂掺杂碳气凝胶，通过对制得样品结构表征发现 γ 射线辐照后碳气凝胶中不仅有尺寸为几百纳米的球形铂颗粒，还有尺寸为几纳米的铂纳米粒子。研究了金属铂掺杂碳气凝胶的储氢性能，结构表明在室温和 50 bar 条件下金属铂掺杂碳气凝胶的吸氢量达到了 0.78 wt%，这个值远高于纯碳气凝胶的吸氢量。

关键词： γ 射线辐照，铂掺杂，碳气凝胶，储氢

D04-P06

尺寸可控的多孔聚合物模板及微纳米线阵列的研制

杨波¹，牛高¹，李洋²

1. 中国工程物理研究院激光聚变研究中心
2. 西南科技大学

在超短超强脉冲激光与物质相互作用的研究中，为了不断提高 X 射线源的品质，获取高时空分辨率和高激光吸收转化率，金属纳米线阵列材料以及编码阵列复合材料等是极具潜力的高时空分辨 X 射线强辐射源材料。如何控制微纳米线阵列的结构尺寸，使其按照一定规律进行组装、复合，对于深入研究材料形貌与物性间的关系，最终实现按照人们的意愿设计和组件功能微纳米器件具有重要意义。本实验采用多级集束热拉伸技术，以 PS 为芯层材料，PMMA 为外层材料，组成预制棒，制备包埋微纳米线有序阵列结构的 PMMA/PS 复合丝。经切片、选择性溶解后获得多孔阵列 PMMA 模板。采用该方法成功研制出多种孔径和孔间距参数的多孔六边形阵列模板以及多孔编码阵列模板。利用该模板，采用电化学沉积法，成功制备出大间距的 Cu 微纳米线/管阵列材料以及长度超过 30 μm 的 Cu/PMMA 编码阵列复合材料。该技术具有低成本、高重现性和可设计性的特点，为多孔模板以及金属微纳米线阵列结构材料的研制提供了一个有效途径。

关键词：多孔聚合物模板，集束热拉伸，尺寸控制，微纳米线阵列，编码阵列

D04-P07

高真空下掠角溅射沉积制备自组装的多孔 TiO₂ 纳米柱阵列的光催化活性

张建波，史鹏军，李喜波，罗江山

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在高真空条件下，利用掠角溅射沉积技术和随后在 450 °C、Ar/O₂ 混合气氛下制备了多孔的、分离的和倾斜的 TiO₂ 纳米柱阵列。首先通过 500 nm 直径 SiO₂ 球自组装密排的模板对沉积的基底进行修饰。扫描电子显微镜 (SEM) 图像显示的多孔柱状纳米结构是由掠角沉积 (OAD) 中原子的几何阴影效应和表面扩散形成的。X 射线衍射 (XRD) 测量表明，退火处理的 OAD 薄膜通常是金红石型和锐钛矿型 TiO₂ 多晶型的混合相。UV-Vis 光谱证实了不同基底的形态诱导的吸收和带隙调谐。分离的一维纳米柱阵列具有特定大孔隙的表面积有利于光催化降解中的电荷分离。与致密薄膜相比，掠角溅射沉积制备的自组装多孔 TiO₂ 纳米柱阵列通过分解甲基橙 (MO) 溶液实现了增强的可见光诱导的光催化活性。通过使用模式基底的设计良好的周期性阵列结构的多孔 TiO₂ 薄膜已经证明在 UV-Vis 区域具有显著增加的吸收边缘和较窄的光学带隙，预计将有利于在光伏和光催化等领域的应用。

关键词：TiO₂ 纳米柱阵列，掠角沉积，光催化活性

D04-P08

PtSe₂ 纳米薄片的手性反常运输研究

李兆国

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

当外磁场出现时,狄拉克半金属的狄拉克点会沿着外磁场方向分解为手性相反的两个外尔点。如果电流方向与外磁场方向平行,则能够在狄拉克半金属材料中观察到由手性反常引起的负磁阻现象。PtSe₂材料已经被理论和实验证明为第二类狄拉克半金属,本文研究了PtSe₂纳米薄片的低温磁输运性质。当电流方向平行于磁场方向时,实验观察到了在PtSe₂薄片器件中的负磁阻现象。而且该负磁阻现象对电流和磁场方向之间的夹角和温度异常敏感,当夹角和温度超过一定阈值时,负磁阻现象完全消失。理论分析认为PtSe₂薄片中的负磁阻现象是由狄拉克费米子的手性反常效应引起。

D04-P09

液相法制备的 γ -Al₂O₃/SrTiO₃二维电子气及电输运特性

李铭, 金克新

西北工业大学

由于氧化物界面的二维电子气(2DEG)具有新奇的导电、超导、铁磁以及持久光电导的特性,引起了广大研究者的关注。例如,高迁移率的 γ -Al₂O₃/SrTiO₃二维电子气的成功制备,具有应用到下一代全氧化物电子器件中的潜力。以往制备氧化物界面主要是利用脉冲激光沉积或分子束外延等技术,然而,这些技术涉及了高能量和非平衡态生长条件,容易引入缺陷,发生原子扩散,而降低二维电子气样品的质量。本文首次采用低能耗、工艺简单的溶液旋涂技术来制备高电子迁移率的 γ -Al₂O₃/SrTiO₃二维电子气。通过系列表征发现制备得到的Al₂O₃薄膜由两部分组成:靠近界面3 nm左右的 γ 相Al₂O₃层和无定形相Al₂O₃层。为了探讨不同晶相的Al₂O₃层对二维电子气的影响,分别制备了90.12 nm、70.35 nm、52.41 nm和31.22 nm厚度的Al₂O₃薄膜,发现薄膜厚度对二维电子气的电输运特性没有明显的影响。主要归功于在相同的制备条件下形成的 γ -Al₂O₃层厚度一致。因此, γ -Al₂O₃层属于二维电子气形成的决定层,与无定形相Al₂O₃层无关。在20 k和常温下, γ -Al₂O₃/SrTiO₃二维电子气具有较高的霍尔迁移率,分别达到4924.4 cm² V⁻¹ s⁻¹和38.0 cm² V⁻¹ s⁻¹。本研究结果为制备高迁移率的电子器件提供了新的制备方法,扩大了全氧化物界面的应用范围。

关键词: 二维电子气, γ -Al₂O₃/SrTiO₃, 溶液旋涂, 电输运特性

D04-P10

光纤激光烧蚀二维编织复合材料的试验研究及数值建模

张家雷, 王伟平

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

复合材料烧蚀行为研究不仅对高性能轻质结构件的设计具有重要意义,也为激光加工工艺提供了参考。本文开展了光纤激光烧蚀二维编织复合材料的试验研究和数值建模工作。通过试验研究了编织复合材料的烧蚀模式,获得了复合材料前表面瞬态温度场随辐照时间的变化规律。为了深入研究烧蚀机理,基于复合材料细观力学方法建立了激光烧蚀编织复合材料的一维计算模型,考虑了环氧树脂的热分解动力学,模拟了激光辐照下编织复合材料的热响应。结果表明,当激光功率密度为102 W/cm²量级时,二维编织复合材料环氧树脂基体非常容易发生熔化和烧蚀,碳纤维形貌变化不明显,但失去环氧树脂约束的复合材料力学性能将会大幅下降;计算模型给出了复合材料前后表面温度数据,与试验值比较吻合。在激光辐照下,编织复合材料前后表面温差较大,前表面能够达到2000 °C,而后表面最高温度在200~500 °C之间。

关键词: 激光, 编织复合材料, 烧蚀, 试验研究, 数值建模

D04-P11

铜掺杂低密度二氧化硅气凝胶制备研究

罗炫, 高银, 杨睿慧, 方瑜, 张庆军

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

具有较高比表面积、高孔隙率、低密度等性质的纳米金属掺杂低密度气凝胶是在催化、吸附和光反应等领域具有广泛应用的一类功能性多孔材料。在ICF物理实验中,其不仅能改善RT流体力学不稳定性,也可以用来吸收超热电子,以控制烧蚀层对X射线的吸收。本文以醋酸铜与正硅酸甲酯的共溶胶凝胶化反应,并结合高温超临界干燥技术获得了纳米Cu掺杂低密度SiO₂气凝胶。讨论了催化剂用量、铜含量以及水量等条件对铜硅复合溶胶-凝胶体系凝胶时间的影响,确定了制备铜掺杂气凝胶的催化剂用量,最大掺铜比例以及所需水量;最终获得了密度低于40 mg/cm³,比表面积高于390 m²/g的红棕色

Cu 掺杂低密度 SiO₂ 气凝胶。表征结果表明铜纳米颗粒均匀包含于 SiO₂ 气凝胶三维网络结构中，其结构为六方晶系单质铜。该研究为 ICF 所需纳米金属掺杂低密度多孔靶材料的制备提供了技术支撑。

关键词：二氧化硅气凝胶 纳米铜掺杂 溶胶凝胶 高温超临界干燥

D04-P12

Z 箍缩铝套筒负载的研制

朱晔

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

Z 箍缩研究最初是从薄膜套筒状负载的理论计算开始的，但是由于驱动器能量较低，需要套筒壁厚度在微米或亚微米量级。然而超薄金属（铝）薄膜强度低，工程上难以制备出与驱动器耦合的金属薄膜柱状套筒，制约了 Z 箍缩研究的发展。基于工程上制备可行性，研究者设计出了丝阵负载和带阵负载来代替套筒负载。并进行了大量相关研究。近年，随着驱动器能量的不断提高，以及丝阵和带阵负载本身存在的角向和径向不均匀性、先驱等离子体等问题，研究者重新提出了套筒负载实验的需求。本文通过结构设计和装配工艺设计，提出了一种超薄金属铝薄膜套筒的制备方法。采用激光裁剪的方法获得铝箔样品，表面粗糙度平均值约 700 μm，铝箔平均厚度约 2.03 μm。然后通过芯轴成型的方法制备出无支撑自适应铝薄套筒，自适应量 2~3 mm。该套筒负载成功应用于聚龙一号装置物理实验，铝薄膜在靶室真空环境中基本保持初始状态，静态观测无明显新增变形，负载技术指标满足实验要求。

关键词：Z 箍缩，铝套筒，自适应

D04-P13

碳气凝胶粉末的制备及其超级电容器器件性能研究

袁磊¹，王朝阳¹，付志兵¹，全雪萍²

1.中国工程物理研究院激光聚变研究中心

2.西南科技大学

超级电容器又称电化学电容器（ES），是 20 世纪末随着电动车行业的发展而迅速发展起来的一类新型储能器件。具有比传统电容器高得多的能量密度和比电池大得多的功率密度，集高能量密度、功率密度、长循环寿命（大于 100000 次）、充放电速度快（几 ms）、循环效率高（大于 99%）等特性于一身。因此，超级电容器作为后备电源、主电源、驱动电源等有着广泛的应用前景。碳气凝胶作为一种新型纳米多孔材料，具有很高的比表面积（400~4000 m²/g），由 R.W.Pekala 等首先发现，碳气凝胶具有高中孔含量和高导电率、可直接成型、密度变化范围广、不需要粘结剂等优点，是制备超级电容器的理想电极材料。然而，传统的碳气凝胶生产周期长，工艺过程繁琐，导致其生产成本增高。如何缩短制备周期，降低生产成本是气凝胶研究领域的当务之急。本项目生产工艺采用自上而下直接构建微米级碳气凝胶粉末，该工艺生产的碳气凝胶粉末由于其颗粒较小，能够耐受常压干燥的应力，仍能保持碳气凝胶的多孔网络结构，避免长周期、高危险性的超临界干燥方式，有利于碳气凝胶商业化应用。该工艺的具体过程如下：酚醛树脂聚合前的反应水溶液在搅拌作用下形成均匀的乳状液，加热聚合形成有机气凝胶微球，通过离心分离、清洗、常温常压干燥、碳化及活化等过程，制备出满足超级电容器器件用的碳气凝胶粉末产品。

将活化碳气凝胶粉末和 YP-50F 分别组装成 50F 的小型器件，其中活化碳气凝胶与 YP-50F 质量比（1：1）混合后其器件容量最高为 67.21F，高于 YP-50F 的 63.58F，高于活化碳气凝胶粉末的 51.45F。此结果表明电容器件的容量不仅同材料的比表面积、振实密度有关，同样和材料的压实密度有关，压实密度越大，单位电芯长度活性物质的含量越高，其器件容量也越高。因此，通过调整碳气凝胶粉末粒子的级配，提高其压实密度，进而发挥碳气凝胶高比表面积和高电导率的优势。

关键词：碳气凝胶粉末，超级电容器，振实密度，压实密度

D04-P14

Al-Ni 纳米合金的低温电阻特性研究

郑海涛^{1,2}，雷海乐¹

1.中国工程物理研究院激光聚变研究中心

2.西南科技大学材料科学与工程学院

使用自主研发的电磁感应加热-自悬浮定向流法制备出 Al、Ni 和 Al-Ni 合金纳米粉末，并使用真空热压设备将纳米粉末压制成纳米晶块体。利用自主研制的低温热电测量系统研究了 Al-Ni 纳米合金的电阻率随温度（8 K-300 K）的变化规律。

研究表明：Al-Ni 纳米合金由于形成有序晶相而与 Al、Ni 纳米晶一样，电阻率随温度的降低而降低。

关键词：Al-Ni 合金，电子/磁子-电子散射，低温电阻率

D04-P15

反应磁控溅射 Be₂C 薄膜中溅射功率对组成、结构和性能的影响

湛治强，何玉丹

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

采用直流反应磁控溅射沉积技术，以甲烷为反应气体、金属铍为溅射靶、K9 玻璃为衬底，在不同的溅射功率下制备了 Be₂C 薄膜。对溅射功率对薄膜组成、结构、和性能的影响展开了研究。随着溅射功率的增加，薄膜中 Be 含量逐渐增加同时碳含量减小，但 Be₂C 始终是薄膜中唯一的结晶相。特别地，溅射功率为 150 W 时获得了无择优取向、晶粒细小、Be/C 比接近化学计量比的 Be₂C 薄膜。AFM 和 SEM 表明 Be₂C 薄膜有着光滑的表面和均匀的微结构。光学研究证实了 Be₂C 薄膜在可见和近红外区域高的透过率，这有利于 Be₂C 靶丸的光学表征和红外均化。此外，本研究极大地提高了 Be₂C 薄膜的沉积速率~300 nm/h。本研究代表了 Be₂C 薄膜研究中的一大进步，也会促进 Be₂C 靶丸制备技术的发展。

关键词：反应溅射，Be₂C 薄膜，ICF 烧蚀层，参数影响

D04-P16

低密度 ZrB₂ 多孔薄膜制备技术研究

李宁，邢丕峰，杨蒙生，易泰民，柯博，郑凤成

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

本文研究了基于共沉积-去合金化法及倾斜沉积法的低密度 ZrB₂ 多孔薄膜制备技术。以 ZrB₂ 和 Al 作为溅射靶，采用直流磁控溅射共沉积方法制备了 ZrB₂-Al 薄膜，探讨了溅射功率、气体压力、温度等对薄膜物相、结晶特性的作用规律。同时研究了倾斜角度、基片预处理对倾斜沉积法制备多孔 ZrB₂ 薄膜的表面形貌与孔隙率的影响。研究发现，基于共沉积技术镀制的 ZrB₂-Al 薄膜呈非晶态，腐蚀后表面随机分布着大量深孔，但对提高薄膜孔隙率的作用有限。而采用倾斜沉积法可望得到相对密度可调的多孔薄膜。

关键词：多孔薄膜，ZrB₂

D04-P17

超细铍粉制备工艺研究

张吉强，陈龙，金雷，何玉丹，罗炳池，李恺，李文琦，罗江山

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

采用高纯二叔丁基铍乙醚配合物在惰性气体保护下在正十二烷中热解制备了超细铍粉。铍粉颗粒近球形，粒径分布窄，形成较好的正态分布。溶剂热解温度 198 °C、202 °C、206 °C、210 °C、214 °C、230 °C 对应铍粉的最大概率粒径分别为 1.6 μm、1.8 μm、1.4 μm、1.3 μm、1.2 μm、0.4 μm，铍粉粒径随热解温度升高而减小。文献中冲击研磨制备的铍粉粒径分布范围为 2 μm~33 μm，最大概率粒径为 8 μm。X 射线衍射 (XRD) 分析表明该铍粉中只存在铍单质相，没有杂质相 BeO、BeC、Fe、Al 等的衍射峰。热解温度为 194 °C、206 °C、214 °C、230 °C 对应的平均晶粒尺寸分别为 19.8 nm、19.4 nm、21.0 nm、21.5 nm。通过电感耦合等离子体发射光谱 (ICP-AES) 和电感耦合等离子体质谱 (ICP-MS) 分析测定该铍粉金属杂质含量为 11.5 ppm-14.0 ppm，传统粉末冶金法制备的铍的 ICP 检测金属杂质总含量为 329 ppm。

关键词：粒径分布，铍，超细，二叔丁基铍乙醚配合物

D04-P18

磁场对热蒸发条件下沉积在 K9 基片上 Be 薄膜生长及性能的影响

李恺，罗炳池，李文琦

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

磁场能无接触地将能量传递至物质微观粒子中，改变原子和分子的排列、迁移、晶格匹配、相生长等行为。金属铍(Be)涂层由于其特殊的烧蚀特性，是 ICF 中重要的靶丸材料，本文采用热蒸发法在 K9 基片上制备了 Be 薄膜，分析了外加磁场对 Be 薄膜的生长特性及性能的影响，为相关靶丸制备提供参考。选取 1120 °C 作为蒸发温度，放入 K9 基片作为衬底，背景真空 5×10^{-5} Pa，蒸发时间为 3 小时，蒸发源距离基片 90 mm，采用 NdFeB 环形永磁体作为磁场源，磁场强度约 0.5 T，磁场方向向上。实验结果表明，施加磁场后沉积在 K9 基片上的 Be 薄膜晶粒有所细化，但效果不如沉积在 Si 片（前期研究结

果)上 Be 晶粒细化显著,同时薄膜内部结构变化,其柱状晶生长被打断,变为很多小颗粒的堆积生长,表面粗糙度变差。施加磁场后,Be 薄膜出现少量 BeO 物相,同时背景噪音增加,(101)晶面主衍射峰的半高宽明显宽化,说明 Be 薄膜晶粒细化的同时发生氧化。XPS 刻蚀结果表明 O 含量随刻蚀深度增加,其量逐渐减少,而金属 Be 含量逐渐增加,说明 Be 薄膜在表面氧化较严重,随薄膜内深度的增加,氧化逐渐弱化。同时 Be 薄膜内部 Be 及 O 成分的电子结合能大于薄膜表面上相应成分的电子结合能,这与 Si 片(前期研究结果)上 Be 薄膜 Be 及 O 成分表面及内部的电子结合能相对峰位相反。在施加磁场后,Be 薄膜由于氧化生成 BeO 及薄膜内孔洞增多造成对电子的散射增强,其方块电阻由 $0.13 \Omega/\square$ 升至 $1.06 \Omega/\square$,导电性能下降。采用纳米探针测量了 Be 薄膜的硬度及弹性模量,其值分别为 5.17 GPa 和 111.83 Gpa,与无磁场作用时相差不大,说明 Be 薄膜虽然晶粒细化但在结构上变得疏松,反映在力学性能上变化不明显。

关键词: Be 薄膜,热蒸发,磁场,生长特性,性能

D04-P19

金泡沫的线性磁电阻效应

曾勇,李兆国

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

金属泡沫的电学输运性质研究不但在基础研究领域具有重大意义,而且对其在传感器、催化等应用领域也具有指导意义。在本工作中,通过化学模板去合金化的方法,制备了低密度的金泡沫,并对其磁输运性质进行了研究。在零磁场条件下,金泡沫的电阻随温度降低而逐渐减小,表现出金属运输的行为。在低温条件下,随着磁场增加,金泡沫的磁电阻首先随磁场强度的平方演化,然后转变为随磁场强度线性变化。分析表明,该现象可由经典线性磁电阻理论解释。一般认为,经典的线性磁电阻是由材料的迁移率涨落或电流的扭曲分布效应引起的,金泡沫中线性磁电阻的具体物理原因仍在研究中。

D04-P20

硅片的太赫兹透过特性研究

邹蕊娇

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在工业生产中,硅片的制作往往是大面积的,不均匀的,这会影响硅片的质量(电阻率,载流子浓度等)。传统的硅片电阻率测量多采用四探针法,该方法会对硅片造成损伤。本文利用 QCL-THz 全息成像系统,实现了硅片的太赫兹透过率表征。对不同电阻率的硅片测试的结果表明:硅片的电阻率会影响其在太赫兹波段的透过,硅片的载流子浓度增加,透过率减小。利用太赫兹波可以无损的区分不同阻值的硅片,同时还能利用太赫兹波实现对硅片均匀性的测量。

关键词:硅片,电阻率,载流子浓度,太赫兹波

D04-P21

空心微球泡沫金低温有效热导率的回归分析

刘念

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

兼具开孔和闭孔泡沫材料特征的空心微球结构泡沫金属,由球内密闭孔隙以及烧结球体之间的间隙构成。该类材料具有低密度、低热导率的特点,在隔音、绝热、催化以及电磁屏蔽方面有广泛应用。高原子序数低密度泡沫金材料在惯性约束聚变(ICF)物理实验中具有重要作用:作为壁腔材料,能够有效提高激光-X 光转换效率和抑制等离子体膨胀,可以获得较高的黑腔辐射温度。在制冷工程制冷功率一定的情况下,泡沫金的低温热导率将直接决定柱腔内壁的温度差是否满足靶物理设计要求。

对随机堆积结构泡沫金材料进行建模和热导率计算。在大量计算结果分析中发现对于同一几何参数下的模型,其计算结果也会存在偏差。分析认为:由于随机模型规模的限制,使得小球随机得到的位置对计算结果产生影响。利用机器学习中各种回归模型对有限元计算结果进行回归拟合,减小由于每次建模小球分布差异造成的计算结果不一致,得到了比较稳定的计算结果。

关键词:泡沫金属,有效热导,空心微球,机器学习,回归分析

D04-P22

梯度掺杂 Be 薄膜 Cu 热扩散阻挡层研究

李文琦

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

梯度掺杂 Be 靶丸由于 X 射线透明度低、密度高、烧蚀速率高等优点，有利于提高内爆速度和抑制 Rayleigh-Taylor 不稳定性增长，已成为惯性约束聚变首选的烧蚀材料。由于要阻挡超热电子对 Be 靶丸内部 DT 冰层的预热和抑制烧蚀界面 RT 不稳定性增长，需要对 Be 靶丸内层进行梯度 Cu 掺杂。要想阻挡 Cu 的扩散，必须选择一种材料，它和 Cu 完全不浸润、不混溶，或者扩散激活能特别大。采用直流磁控溅射技术和反应磁控溅射技术制备了 BeO、Be₂C 和类石墨碳膜 (GLC) 三种不同类型的阻挡层。在 350 °C +26 h+N₂ 下，研究了 Cu 元素从 Be(Cu)掺杂层往纯铍层扩散的问题。实验发现，BeO 和 GLC 膜均能有效阻挡 Cu 的扩散，但 BeO 阻挡层厚度比 GLC 膜更薄。BeO 的阻挡效果最佳，厚度仅需 0.58 nm 就能阻止 Cu 从高浓度层向纯 Be 层扩散。Be₂C 膜阻挡效果较差，经退火处理后，密度变化引起薄膜内应力增加，普遍出现开裂现象。因此，它不适合作为 Be 薄膜的 Cu 扩散阻挡层。

关键词：阻挡层，掺杂

D04-P23

荧光成像技术探测熔石英元件亚表面缺陷

李洪路¹，曹林洪^{1,2}

1.中国工程物理研究院激光聚变研究中心

2.西南科技大学材料科学与工程学院

本文介绍了一种先进的探测熔石英亚表面缺陷的一种方法，荧光成像无损探测法。该方法相比 HF 酸刻蚀与弱吸收这两种检测方法操作简单，检测周期短并且不会对熔石英光学元件造成任何伤害从而节约了成本，这是该方法相对于其他检测方法最突出优点。当 355 nm 激光脉冲辐照熔石英光学元件此时亚表面缺陷受到激光照射后会发出荧光，把发出的荧光信号用 CCD 相机收集起来并分析从而进一步得出荧光缺陷。利用损伤测试平台测出熔石英光学元件的损伤数据，用相关软件把损伤数据进行拟合进一步求出损伤阈值。用 FPM-1000 轮廓仪测出熔石英的粗糙度。实验结果表明熔石英光学元件损伤阈值与荧光缺陷的多少成反比，与熔石英光学元件的粗糙度没有明显的关系。

关键词：荧光无损探测，HF 酸刻蚀，弱吸收，粗糙度

D04-P24

“纳米装填”制备固体高含氢硼氢化锂复合材料及其成型研究

杨曦，付志兵，钟铭龙，米睿，袁磊，王朝阳

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

低 Z 元素氢化物（氘氟化物）的氢（氘）含量很高，并且在常温下为固体状态，在激光、Z-箍缩或重粒子驱动的聚变研究中应用可能较大，可以有效降低成本和提供更大的工艺选择空间。同时，高含氢固体材料也可以用于研究超强激光场中的中子产生问题。

在这些极端条件物理实验研究中，固体氢化物需要制成特定形状，尤其是空心球壳；而且物理实验要求尺寸较小，一般为毫米或者微米量级。微型球壳成型困难。Yu.A.Merkuliev 等采用高温液滴炉的方法制备，已制出了 ND3BD3 的空心微球，但成球率低，对设备要求很高，仪器昂贵，工艺参数复杂难以控制，成品球壳容易结晶，内部缺陷较多。

经过调研和研究，我们发展了一种“纳米装填”工艺来使固体氢化物成型：将高孔隙率、轻质元素构成的多孔材料制成所需形状，以此为模板，将氢化物填入，形成特定形状的高含氢复合材料。其工艺简单，对设备要求低。

碳气凝胶成分单一，由轻质元素碳构成，具有高孔隙率、为纳米孔隙网络结构的特点；并且易成型，可以制成柱形、片形、实心球、空心球等各种形状。硼氢化锂的氢含量为 18.5 wt%，氢原子密度达 7.3×10^{22} H atoms/cm³，熔融状态下不易分解。因此选择碳气凝胶作为多孔骨架，将 LiBH₄ 填入模板，已制备出圆柱形、片形、球形、空心球壳等形状的硼氢化锂/碳气凝胶复合材料，硼氢化锂含量达 80%以上。

纳米网络骨架使硼氢化锂纳米化，并限制材料晶粒长大，有利于提高复合材料的储氢性能；同时，复合材料内部结构较为一致，有利于改善材料结构，提高其加工性能。因此，纳米装填制备的复合材料性能相比硼氢化锂有较大提高，对其各方面应用更有利。

关键词：硼氢化锂，碳气凝胶，纳米装填

D04-P25

ZnO/Si 蛾眼 p-n 异质结复合结构的制备：抗反射、增强电荷分离和光催化性能

易早¹，陈喜芳¹，曾宇¹，李鑫¹，唐永建^{1,2}

- 1.西南科技大学
- 2.四川省军民融合研究院

本论文通过湿法刻蚀<100>晶面单晶硅制备金字塔型硅，然后在此金字塔微结构表面利用磁控溅射沉积籽晶层，后续通过水热法生长氧化锌纳米棒，形成蛾眼复合异质结构。此材料的复合结构具有优异的抗反射性能，并在可见-近红外光波段具有优异的陷光特性，能充分吸收由各个角度入射的光，最低反射率达到0.81%，能有效提高光子吸收数量。此外，由于有效的异质结结合面积增大，提高了载流子的分离效率，复合微纳结构具有优异的光电转换性能。此结构的表面结构，巨大的比表面积与有效的异质结结合面积赋予了材料超亲水性、优异的气敏特性和光催化性能。基于上述特性，此微纳异质结构可应用于太阳能电池、传感器、发光器件和光催化领域。

关键词：ZnO/Si 蛾眼复合异质结构，陷光结构，电荷分离，超亲水性，光催化性能

D04-P26

基于分布反馈光栅太赫兹量子级联激光器的制备及性能

王雪敏^{1,2}，沈昌乐¹，蒋涛¹，湛志强¹，邹蕊娇¹，樊龙¹，彭丽萍¹，吴卫东¹

- 1.中国工程物理研究院激光聚变研究中心
- 2.中国工程物理研究院激光聚变研究中心，等离子体物理重点实验室

太赫兹量子级联激光器 (THz QCL) 作为一种紧凑的、相干的固体连续辐射太赫兹射源，是目前理想的太赫兹本振源。作为本振源，THz QCL 需要单一的空间模式、稳定的输出功率以及激光频率位于目标谱线附近(约几 GHz)，因此，THz QCL 的单模化就非常重要。本研究通过一阶光栅结构的设计、基于分布反馈腔的光栅结构微加工、器件性能测试等的研究，获得了 3.1 THz、2.9 THz 和 2.5 THz 分布反馈光栅 THz QCL。器件输出功率水平达到国际先进水平：最高脉冲输出功率达到 260 mW、连续波输出功率实测达到 20 mW。器件输出频率具有良好的单模性。这种输出性能良好的 THz QCL 可作为太赫兹接收机的本振源。

关键词：太赫兹，量子级联激光器，分布反馈光栅

D04-P27

二维 Mg₂C 单层材料的能带应力相变

孟令彪

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

由于维度的量子约束，二维材料具有许多明显不同于三维材料的奇特物理性质，使得无论是基本认识还是潜在应用都受到越来越多关注。基于密度泛函理论计算与粒子群优结构搜索方法，我们详细计算与研究了二维 Mg₂C 单层材料的电子结构性质。计算显示二维 Mg₂C 单层材料由非常规的 Mg-C 6 配位键组成，为准平面二维体系。在无约束情况下材料呈现为弱金属，应力作用可诱导 3 个不同的电子结构相变：在压应力下，能带交叠增大，金属性增强；在拉应力下，能带交叠变小，金属性减弱；当拉应力达到某一临界点拉伸时，带隙为零，体系呈变为 Dirac 型半金属，即电子空穴散关系是线性的，表现为零质量；随后进一步拉伸，出现带隙，材料变成常规半导体。晶格动力学计算与分子动力学模拟预测二维 Mg₂C 单层材料具有很高的动力学与热力学稳定性。粒子群优结构搜索方法显示体系为整个势能面的能量最低结构，具有很高的可制备性。独特的电子结构特性显示材料将有广泛的潜在应用前景。

关键词：密度泛函理论计算，Mg₂C 单层，能带相变，Dirac 半金属

D04-P28

辐照法制备 WO₃/BC 及其电化学性能研究

杨帆，贾金志，米睿，付志兵，王朝阳，唐永建

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

本文采用辐照法成功的制备出了氧化钨与竹炭的混合物 (WO₃/BC)。通过使用 X 射线衍射 (XRD)，场发射扫描电镜 (FESEM) 和透射电镜 (TEM)，分别对其形貌和结构进行了表征。同时，其电化学性能采用循环伏安 (CV)，恒流充放电 (GCD) 以及阻抗 (EIS) 进行了测试。实验结果表明，由于具有双电层性能的竹炭与赝电容二水氧化钨的结合，使得混合材料具有明显的协同作用，且具有较高的比电容量和稳定的循环性能。在 6 M KOH 电解质中，电流密度为 0.5 A g⁻¹ 电压窗口为 -1 V - 0 V 的条件下，WO₃/BC 的比电容量达到 391 F g⁻¹，而竹炭的比电容仅仅为 108 F g⁻¹。此外，在 10,000 次循环后，比电容保持率为 82%。这项结果表明 WO₃/BC 材料在超级电容器的应用方面是非常有前景的。

关键词：超级电容器，辐照法，WO₃/BC

D04-P29

基于光热弱吸收研究熔石英近表面缺陷分布特性

石兆华, 王凤蕊, 吴之清, 黄进, 周晓燕, 夏汉定, 邓清华, 邵婷, 叶鑫, 孙来喜, 刘红婕
中国工程物理研究院激光聚变研究中心

熔石英由于具有极低的紫外吸收、高化学稳定性、优异的抗激光损伤性能等特性而广泛应用于高功率激光驱动系统。随着激光驱动器输出通量的不断提升, 熔石英元件的激光损伤问题越发显著, 成为现阶段影响激光器稳定运行及负载能力进一步提升的障碍。目前学界认为吸收是引发熔石英元件损伤的主要原因! LLNL 历时十几年的熔石英损伤诱导前驱的相关研究也同样表明: 损伤源于原子尺度缺陷对亚带隙激光的吸收。因此, 通过对熔石英元件缺陷吸收特性的研究可以推测其损伤性能。

光热共路干涉(PCI)吸收是在激光光热透镜技术的基础上的改进型仪器, 样品对泵浦光的吸收引起材料折射率的变化, 导致探测光经过吸收点区域后发生点衍射干涉, 材料热吸收强弱引起干涉相移不同, 通过检测探测光强的变化反推样品材料的热吸收特征。PCI 系统具有非接触和无损、高灵敏度、高稳定性、操作简便等优点, 适用于薄膜和光学材料缺陷吸收特性的检测和分析。我们基于光热共路干涉吸收仪统计研究了不同工艺熔石英元件的表面吸收, 并分析其吸收性缺陷分布规律及相应吸收与激光损伤之间的定量关系, 结果表明熔石英表面吸收与激光损伤存在较高的相关性。

D04-P30

聚 α -甲基苯乙烯分子量对热降解行为的影响

陈苗^{1,2}, 张占文¹, 王红斌¹, 黄勇¹, 史瑞廷¹, 易勇²

1. 中国工程物理研究院激光聚变研究中心
2. 西南科技大学 材料科学与工程学院

聚 α -甲基苯乙烯(PAMS)芯轴热降解法是制备激光惯性约束聚变(ICF)用靶丸的重要方法之一。PAMS 的热降解行为对靶丸质量至关重要。采用快速热解气相色谱-质谱法(Py-GC-MS)和热重分析技术(TG/DTG)分析了不同分子量 PAMS 的热降解产物和热降解温度, 通过 Arrhenius 方程计算了不同分子量 PAMS 的等温降解活化能。结果表明: 分子量对 PAMS 热降解产物的影响可以忽略不计, 不同分子量 PAMS 的热降解产物中单体产率均接近 100%; PAMS 的热降解温度介于 240°C-450°C 之间, 并且主要热降解温度随 PAMS 的分子量的增加而降低; 不同分子量 PAMS 的活化能随热降解率增加而增加。在相同降解率下, 活化能随分子量的减小而增加。

关键词: 聚 α -甲基苯乙烯, 热降解, 分子量, 活化能

D04-P31

三维拓扑硼

董校, 何新玲, 周向锋
南开大学物理科学学院

碳是自然界中最受关注的元素之一, 具有许多优越性质的同素异形体(典型代表: 石墨烯, 石墨和金刚石等)。例如, 石墨烯是单原子层二维 Dirac 材料; 而石墨是多层堆垛的石墨烯组成(层间作用是范德华力); 高温高压下, 石墨可相变为立方金刚石(钻石), 它是自然界最硬的物质。与碳类似, 硼元素也能形成一系列的亚稳相。2014 年, 南开大学周向锋教授等人理论预测了硼单质中第一个具有各向异性二维 Dirac 硼烯(Pmmn-B8)。类比于石墨烯、石墨和金刚石之间的相变关系, 很自然的产生了一个有意思的疑问: 多层 Pmmn-B8 的结构和性质如何? 通过手动构筑双层硼烯模型, 并沿堆垛方向“加压”, 在理论上获得了三维固体单质硼(Pnnm-B16)。Pnnm-B16 由 Pmmn-B8 通过 AB 堆垛方式形成, 且 AB 层间形成多中心 B-B 化学键。基于第一性原理计算, Pnnm-B16 的电子结构显示: 与 Pmmn-B8 相比, “加压”并未改变 Pnnm-B16 拓扑半金属性质, 但不同于 Pmmn-B8 的两重简并 Dirac 费米子(不考虑自旋), Pnnm-B16 是由两重简并和四重简并能带交叉点耦合而成的新型拓扑 nodal line 半金属, 其低能色散行为较好的符合闵可夫斯基度规理论。Pnnm-B16 的新颖电子性质丰富了拓扑材料的定义和分类, 具有重要的理论和应用前景。

关键词: 狄拉克硼烯, Pnnm-B16, 加压, 三维拓扑硼, 第一性原理

D04-P32

脉冲激光沉积制备非晶碳微球的表面形貌和结构特征

阎大伟, 彭丽萍

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

采用脉冲激光沉积技术，以铜球为沉积芯珠，以高纯石墨为靶材，利用铜球在反弹盘中跳动翻滚实现在微球上均匀镀非晶碳薄膜。利用扫描电子显微镜观察了薄膜的表面形貌，利用 Raman 光谱分析技术研究了非晶碳薄膜的结构特征。结果显示激光能量对薄膜的表面形貌和结构特征有明显的影响，高激光能量情况下制备的薄膜表面比较致密光滑，并且其 Raman 光谱分析显示其具有较高的 sp³ 含量。

关键词：脉冲激光沉积，非晶碳薄膜，Raman 光谱

D04-P33

膨胀法封口膜力学性能表征

朱方华，徐嘉靖，张伟，魏红，尹强

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在目前的柱腔充气靶设计中，为了保持足够的内爆均匀性，其柱腔内均填充有一定的低密度、低原子序数气体，而充填气体的压力应根据物理实验的需要进行调控。由于柱腔激光注入口的封口膜的厚度在亚微米级别，常规力学性能测试的设备无法对物理实验关心的薄膜耐压情况进行直接的表征。

本研究通过模拟封口膜在充气过程中的实际受力情况建立了一套利用膨胀法测量封口薄膜膨胀尺寸及力学性能的装置。利用该套装置，可直接测量封口薄膜在不同厚度、不同直径条件下的耐压情况，为相关柱腔充气靶充填气体压力设计提供直接的测试数据。除此之外，还可以通过记录薄膜的膨胀程度和充入气体压力之间的关系，建立薄膜的应力-应变曲线，从而获得薄膜的弹性模量、断裂伸长率、拉伸强度等信息，为新靶型的设计和薄膜材料选择提供理论依据。

关键词：充气靶，封口膜，膨胀程度

D04-P34

KDP 晶体紫外激光诱导损伤过程时间分辨阴影成像研究

夏汉定，邓青华，耿锋，黄进，蒋晓东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

紫外强激光辐照下 KDP 晶体的损伤问题严重制约了大型高功率固体激光装置的输出通量和晶体使用寿命。对激光诱导损伤发展瞬态过程的清晰认识是解决损伤问题的关键基础。本报告采用纳秒激光加载-皮秒激光探测的时空分辨动力学阴影成像技术，对 KDP 晶体表面损伤和体损伤爆发过程进行了动态成像，获得了损伤爆发阶段等离子体微爆、裂纹、冲击波、颗粒喷溅及吸收弛豫等动力学参量特征及对应时间尺度。结果表明，不同损伤阈值的 KDP 晶体损伤动力学参量特征差异较大，KDP 晶体的体损伤（近表面及体内）为激光诱导损伤的关键因素。

关键词：KDP 晶体，激光诱导损伤，时间分辨阴影成像

D04-P35

缓蚀微铸法制备多维度组合氧化钨/碳气凝胶复合材料及其在超级电容器中的应用

刘旭东^{1,2}，盛光敏²

1.中国工程物理研究院激光聚变研究中心

2.重庆大学

在电化学能量储存领域，氧化钨电极材料已被认为特别适合极小空间内的储能应用，而将金属氧化物复合入多孔碳已经吸引了人们的广泛关注。二者复合后，电容性能的增效通常只在少量掺入金属氧化物时才能实现。为了解决此问题，本文提出了一种缓蚀微铸的方法，以氧化钨纳米颗粒/碳气凝胶为前驱体，通过简单而巧妙的烧结工艺的调控，可以在 800-1000 °C 的温度区间可控地获得具有不同形貌特征的多维度组合氧化钨/碳气凝胶复合材料（如纳米棒及纳米颗粒混合形态的氧化钨/碳气凝胶，氧化钨纳米棒外裹嵌入纳米颗粒的多孔碳，交联的氧化钨纳米棒网格等）。更重要的是，此方法还能同步调控氧化钨的价态。得益于巧妙的多维度组合结构设计，当氧化钨掺杂量从 35 wt% 提高至 55 wt% 时，复合材料的比容量并未降低。

关键词：氧化钨，超级电容器，多维度组合

D04-P36

DVB 泡沫内衬薄膜的制备与研究

刘小林

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在 ICF 间接驱动的靶丸研究中，低密度泡沫内衬有着重要作用。本文根据 Melo 近似方程，利用液环运动在圆柱体内旋涂了均匀的液膜，然后通过紫外光固化得到 DVB（二乙烯基苯）内衬薄膜，最后利用二氧化碳超临界干燥技术得到 DVB 泡沫内衬薄膜。在旋涂过程中重力和剪切力相互作用使液膜成型，惯性与表面张力影响涂膜层的稳定性；在固化过程中粘度变化及转速影响薄膜的均匀性。本文研究了粘度、转速、光照时间、膜厚等因素对泡沫内衬薄膜均匀性的影响。通过加入苯乙烯使粘度在固化过程中随时间呈线性变化，添加 30 wt% 苯乙烯在 80 rpm 和 1.5 h 光照下可制备出 100 μm 厚度均匀的 DVB 泡沫内衬薄膜。另外，添加不同质量比苯乙烯可在不同转速和光照时间下得到不同厚度的均匀 DVB 泡沫内衬薄膜。本文利用 CFD(计算流体力学)对涂膜过程进行模拟，其结果与实验结果基本吻合。

关键词：液环运动，水平旋转，涂膜，数值模拟

D04-P37

激光加载 Fe 高压结构相变研究

刘浩

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

材料在强冲击压缩条件下，原子间距急剧变小，导带和价带宽度增加，内壳层电子轨道可能叠加，使得原子内的电子行为更像自由电子，这一效应强烈的改变了电子行为并在高压下使材料经历了复杂的相变过程产生了复杂的相结构。铁是高压条件下研究的最广泛的材料之一，具有高度的社会和科学价值。基于神光 III 原型激光装置和 X 射线衍射技术，建立了原位 (in-situ) 动态 X 射线衍射诊断用于铁在高压下的结构相变研究。动态 X 射线衍射技术可用在高压下测量物质密度、鉴定物相结构和测量织构等。实验布局为 Debye 相机结构，实验样品使用的是多晶铁薄膜样品，分别在前后表面设置激光烧蚀材料和诊断窗口材料。使用 VISAR 测量样品自由面运动速度，结合诊断窗口材料高压状态方程获得铁样品的压强历史。动态 X 射线衍射的重要部件脉冲 X 射线源使用纳秒激光器打靶产生，选用铁作为靶材料，能点是铁的 He- α (~ 6.7 keV) 特征线。实验样品的衍射信号使用胶片或者 IP 板记录。动态 X 射线衍射技术测量衍射角的典型精度为 $\sim 0.05^\circ$ 。

关键词：激光加载，动态 X 射线衍射，高压结构相变

D04-P38

Silicon clathrates for photovoltaics predicted by a two-steps crystal structure search

Juefei Wu, Hao Gao, Kang Xia, Dingyu Xing, Jian Sun

Nanjing University

Diamond-Si(D-Si)被广泛应用与光电领域，但是，D-Si 本身的能带结构限制了其光电转化效率。最近的实验表明，一种新型的笼状 Si-24 被成功合成，这种结构的 Si 具有准直接带隙，具有良好的光电转化效率。鉴于 Si-24 的合成过程，我们基于第一性原理计算，提出了一种“两步法”，对可能用于光电工程的新型结构单质 Si 进行了研究。首先，我们对含有客体原子的硅化合物，在高压条件下进行结构搜索，接下来，将客体原子剥离，得到多孔结构的单质硅。我们将钾元素作为客体原子，确认了四种可能应用与光电工程的单质硅。部分预测的新型硅单质的带隙接近 Shockley-Queisser 极限，同时，光吸收率远高于 D-Si，部分结构的吸收率甚至高于 CuInSe₂。我们认为，这四种结构的笼形单质硅，能在一定条件之下合成，并最终应用于光电工程领域。

关键词：Silicon clathrate，光吸收率，光电工程

D04-P39

辐照法制备 RuO₂/BC 及其电化学性能研究

韩文静，杨帆

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

本文采用辐照法成功制备了氧化钌与竹炭的混合物 (RuO₂/BC) 并研究了其电化学性能。通过使用 X 射线衍射 (XRD)，场发射扫描电镜 (FESEM) 和透射电镜 (TEM)，对 RuO₂/BC 的结构和形貌进行了表征。采用循环伏安 (CV)，恒流充放电 (GCD) 以及阻抗 (EIS) 测试了其电化学性能。实验结果表明，由于具有双电层性能的竹炭与赝电容氧化钌的结合，使得混合材料具有明显的协同作用，混合材料具有较高的比电容量和稳定的循环性能。

D04-P40

化学修饰的蓝磷纳米条带电子结构性质的研究

倪爽

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在过去的几年中，二维材料如石墨烯、硅烯等由于其出色的物理化学性质而得到广泛的研究；最近，基于磷的二维材料由于实验上制备成功而得到广泛关注。本文通过第一性原理计算了蓝磷纳米条带被化学修饰后的电子结构性质。在本项工作中，我们研究了蓝磷纳米条带被不同的化学修饰基团，如 H、F、Cl、S、O、SH、OH 等进行边界修饰的情况并考虑了不同的条带宽度对电子结构性质的影响。DFT 的模拟结果表明：低于扶手椅型的纳米条带，所有的边界修饰包括对称的和不对称的都导致最终材料成为半导体；而对于锯齿型的纳米条带，依据修饰基因的种类以及对称性的不同，最终材料既可以形成半导体也可以形成金属。这些理论研究对于未来依据蓝磷的纳米电子器件的研究提供了理论指导。

关键词：化学修饰，纳米条带

D04-P41

ZnO 超快闪烁晶体气相生长研究

樊龙

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

ZnO 超快闪烁体具有超快时间响应，在脉冲 α 粒子、 γ 射线、中子等的探测和诊断中具有重要的应用前景。对熔体布里奇曼装置进行改造，设计开发了一种新型的气相体系晶体生长设备，采用气相法获得了 ZnO 超快闪烁单晶体。对 ZnO 超快闪烁单晶体进行了性能分析，结果表明：单晶成分略微富锌，退火后室温载流子浓度约 $3.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ，晶体高分辨 X 射线摇摆谱半高宽宽度约为 $90''$ 。

关键词：ZnO 超快闪烁晶体，气相生长，性能分析

D04-P42

金纳米片表面等离子激元性质调控研究

徐习斌

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

纵横比变化对金纳米片表面等离子激元性质调控具有显著作用，纳米片中出现多种等离子激元共振模式，并伴有强局域电场分布。电磁波不同入射极化方向在金纳米片中激发出不同等离子激元共振模式，超薄纳米片高吸收强度及强局域电场分布在系统研究高阶共振模式方面表现出优越性。纳米片局域增强电场集中分布于纳米片边角区域，沿纳米片棱边以及转角处出现强局域电场分布，并具有传播特性。纳米片侧面亦呈现出表面等离子激元共振模式，这种情形在超薄纳米片中尤为突出，表面等离子激元在侧面与前后表面耦合作用显著。高阶表面等离子激元共振模式局域电场分布存在相互作用区域，表明多极电场分布存在耦合作用。吸收峰及局域电场分布结果线束纳米片纵横比变化对可见-近红外区域电磁波传播性能具有显著调控作用。

关键词：贵金属纳米颗粒，表面等离子激元，边角共振效应，局域增强电场

D04-P43

基于 X 射线掠入射侧倾法的 Be₂C 薄膜应力研究

李佳，何玉丹，周民杰，杨奇，曾勇

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

碳化铍 (Be₂C) 的密度、硬度、弹性模量以及泊松比处于金刚石和金属铍之间，其优异的力学性质均衡了铍和金刚石的性质，作为惯性约束核聚变 (inertial confinement fusion, ICF) 优异的潜在靶丸烧蚀材料之一，可以为 ICF 靶丸提供足够的机械强度，以及比铍和 CH 靶丸更高的燃烧效率。本文利用 X 射线掠入射侧倾法对不同生长温度下的 Be₂C (220) 薄膜进行应力分析。此 Be₂C 薄膜采用直流反应磁控溅射法在 Si 和 SiO₂ 基底上生长，在低温下 (60 °C) 生长的 Be₂C 呈现非晶态，在高温生长状态 (>300 °C) 下随着温度增加，其晶粒尺寸增加。X 射线掠入射侧倾法利用掠入射减小 X 射线在薄膜中的穿透深度以增加 X 射线在薄膜中的有效衍射体积，结合侧倾法分析以降低对准确的无应力状态下的晶格间距依赖。通过对 SiO₂ 基底上不同生长温度的 Be₂C 进行分析，得到其生长温度增加，其应力增加。对于 2 μm 的薄膜，生长温度 600 °C 的薄膜应力最大可达 $737 \pm 48 \text{ MPa}$ ，这个温度下有的薄膜出现部分翘曲脱落，应力得到部分弛豫；厚度 20 μm 的 Be₂C 薄膜表面开裂，其应力完全弛豫。生长温度 700 °C 的 2 μm 厚 Be₂C 薄膜表面均略有细裂纹，应力也得到部分弛豫。Si 基底上生长的薄膜表面均有开裂或细纹，应力得到部分弛豫。不同材料的热膨胀系数不同，生长完成降温后薄膜和基底的热收缩错配引起了等双轴残余应力。生长

温度越高,生长完成后的应力越大,但应力过大则其表面出现翘曲或裂纹,残余应力将获得部分弛豫。单晶 Si 的线性热膨胀系数大于 SiO₂ 的,降温后形成的与薄膜的收缩错配更大,因此 Si 表面的 Be₂C 薄膜更易开裂而应力部分弛豫。因此,选择和薄膜材料的热膨胀系数相近的材料作为基底,可以减小热收缩错配引起的等双轴残余应力。综合不同温度下 Be₂C 晶粒尺寸的变化,在 SiO₂ 基底上 600 °C 下生长 Be₂C 的晶粒尺寸最优,也能够保持应力未发生弛豫的状态。

关键词: X 射线掠入射侧倾法, 应力弛豫, 热收缩错配

D04-P44

Ar 离子间歇性刻蚀对 GDP 薄膜结构与表面形貌的影响

张玲^{1,2}, 陈果², 何小珊², 唐永建², 何智兵²

1.西南科技大学

2.中国工程物理研究院激光聚变研究中心

随着 ICF 研究的深入,对大厚度 GDP 薄膜的表面粗糙度要求越来越高。基于降低 GDP 薄膜表面粗糙度的迫切性,本文提出了利用 Ar 离子刻蚀来控制等离子体状态,从而控制薄膜的生长模式,进而降低薄膜表面粗糙度的新方法。利用质谱 Ar 离子刻蚀前后的等离子体(C₄H₈/H₂与 C₄H₈/H₂/Ar)的组分与离子能量分布情况进行了对比分析,研究了 Ar 离子的引入对 C₄H₈/H₂ 等离子体状态的作用机制。研究发现,加 Ar 后,等离子体的能量从 7.8 eV 提高到了 11.8 eV,等离子体的离子化率也明显增加,这说明 Ar 离子能够有效抑制等离子体中的二次聚合反应。与此同时,对比分析了 Ar 离子刻蚀前后,GDP 薄膜的化学组分、表面形貌以及表面粗糙度的变化情况。研究表明,经过 Ar 离子刻蚀后,薄膜表面的鼓包、凸起等缺陷得到了有效控制。通过进一步调整 Ar 离子间歇性刻蚀的周期,当 Ar 离子间歇性刻蚀周期为 60 min/15 min 时,成功将 80 μm 厚的 GDP 薄膜的表面粗糙度从 220 nm 降至 34 nm。

关键词: GDP 薄膜, Ar 离子间歇性刻蚀, 表面形貌, 表面粗糙度

D04-P45

适用于极端狭小空间的高性能声表面波传感器的研制

舒琳, 吴卫东, 王雪敏, 阎大伟, 罗跃川, 王进

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

针对传统的声表面波传感器是通过粘结剂与被测试件进行集成,而导致的传感器工作寿命短,稳定性差,易脱落等问题,本论文通过采用两步法制备工艺在金属结构件表面沉积出了高质量 ZnO 压电薄膜,并在 ZnO/金属衬底结构上设计、制备声表面波谐振器以作为传感器功能单元,实现声表面波传感器与金属结构件的无胶集成。同时,通过在 ZnO 薄膜与金属衬底间制备多层复合超声阻挡薄膜结构,提高传感器的 Q 值及其灵敏度。研究结果表明,这种集成的声表面波传感器的 Q 值达到 5218,能够在室温至 400 °C 的复杂、极端条件下长时间工作,具有良好的传感性能与稳定性。这种传感器在应力应变、温度、气敏等领域中具有广阔的应用前景。

关键词: 声表面波, 传感器, ZnO, 无胶集成

D04-P46

一种由机器学习加速晶体结构搜索方法预测的新奇超硬钨氮化合物

夏康, 孙建

南京大学

过渡金属氮化物因具有高的硬度和良好的热稳定性而有很大的应用前景和价值。但是迄今为止稳定的超硬过渡金属氮化物还没有被合成。这里我们运用自己课题组发展的机器学习加速的晶体结构搜索程序,设计出一种超硬的过渡金属氮化物 h-WN₆,它有可能在 65GPa 左右的高压下合成,而且卸压到常压下还能稳定存在。这种 h-WN₆ 是由单键的扶手椅状的氮六元环组成,表现出离子特性,化学式可以写为 W_{2.4}+N_{62.4}-。它是小带隙半导体,0 GPa 下带隙约为 1.6 eV。它随着压力升高表现出反常的能隙扩展。有意思的是,这种 h-WN₆ 是目前最硬的过渡金属氮化物(维氏硬度约 57 GPa),同时有很高的熔点(约 1900 K)。另外,高的质量(3.1 kJ/g)和体积(28.0 kJ/cm³)能量密度使这种富氮的化合物成为一种潜在的高能量密度材料。这些预测验证了我们设计超硬轻元素过渡金属化合物的设计思路,未来可能激发人们实验上去合成这类超硬和高能量密度材料。

关键词: 钨氮化合物, 机器学习加速晶体结构搜索, 超硬, 高能量密度

D04-P47

Ce 离子对掺镱光纤预制棒辐照效应的影响研究

周晓燕, 倪力, 夏汉定, 高聪, 王瑜英, 林傲祥, 吴卫东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

采用稀土螯合物和改进化学气相掺杂法 (MCVD) 制备了一系列掺镱光纤预制棒, 经过不同剂量的辐照, 并测试了这些样品辐照后的吸收谱、荧光谱、上转换发光光谱和荧光寿命。辐照前后, 未掺 Ce 离子的光纤预制棒, 辐照后在 480 nm 和 545 nm 处有较强的宽吸收峰; 掺杂 Ce 离子的光纤预制棒, 辐照在 400 nm 后的吸收峰强度和辐照前并无明显变化, 说明在辐照过程中铈离子可以俘获电离电荷, 可有效抑制玻璃中辐致色心的形成, 提高样品的抗辐照能力。辐照之后的样品荧光强度略有上升, 荧光寿命有所下降, 说明 Yb 离子的配位结构在辐照下有一定的团簇。室温下辐照过的样品经过 24 小时之后出现一定的漂白现象。

关键词: 掺镱光纤预制棒, 改进化学气相沉积工艺, 吸收谱, 荧光寿命, 上转换发光, 元素分析, 折射率

D04-P48

超导小球在弱磁场下的受力计算与模拟

李晓佳

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

本文用解析方法计算了电流线圈所产生的磁场分布, 并采用微扰法给出了一阶近似下超导小球在磁场中的受力表达式。该方法首先忽略磁场梯度, 计算超导小球在均匀磁场中的磁化偶极; 其次, 忽略小球直径, 将其视为点偶极子, 计算其在非均匀磁场中的受力。与此同时, 采用有限元软件模拟了与上述电流分布相对应的永磁体的磁场分布与超导小球在该磁场中的受力, 得到了与解析计算几乎相同的结果, 充分验证了计算方法的可靠性。作为计算方法的应用, 设计了一种可用于激光聚变实验的超导靶丸磁悬浮支撑方式, 给出了具体的永磁体排布方式以及相应的磁场分布和势能分布图像。新的支撑方式不但可以提供更好的对称性, 而且可以实现更加精确的靶丸位置调控。最后, 采用阻尼谐振子模型估算了悬浮的小球在氦气环境下达到稳定的回复时间。

关键词: 超导小球, 磁场分布, 受力, 靶丸支撑

D04-P49

PLD 方法制备 Cu@Cu₂O 球壳结构纳米颗粒及其光学性质

尹泓卜, 赵妍, 王雪敏, 吴卫东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

氧化亚铜(Cu₂O) 是一种直接带隙的半导体材料, 其禁带宽度在 2.0-2.2 eV 之间。因其廉价、无毒、对可见光区有较高的吸收而被认为是一种比较具有希望的太阳能电池材料。由于金属核及半导体壳的接触, 金属@半导体球壳结构的纳米颗粒不仅会表现出两种材料组份的简单复合性质, 还会在此基础上同时表现出新颖的性质。本文通过调节氧气的分压, 以 PLD 方法, 在 MgO (100) 基片上制备了一系列的 Cu@Cu₂O 球壳纳米颗粒。原位 XPS 测试表明样品中同时存在单质 Cu 和一价 Cu。TEM 和 SEM 被用来表征样品的微观结构和形貌, 结果表明, 随着氧压增大, 颗粒的平均尺寸略有增加, 且其 Cu₂O 壳层厚度基本保持不变, 这增大了纳米颗粒的吸收截面。同时在紫外可见吸收谱 (UV-vis) 上表现由表面等离子激元效应带来的红移和增强, 为调节对可见光区到红外光区的光吸收提供了可能。

关键词: 氧化亚铜, 球壳结构, 表面等离子激元

D04-P50

ZrTe₅ 晶体的拓扑性质研究

吕洋洋, 李啸, 陈延彬, 姚淑华, 周健, 陈延峰

南京大学

ZrTe₅ 是一种准一维层状材料, 最近理论工作预言它是一种新的拓扑绝缘体。其中, 单层 ZrTe₅ 是一种二维拓扑绝缘体 (带隙为 400 meV), 具有拓扑非平庸的能带结构, 而多层 ZrTe₅ 则位于有可能是强或者弱拓扑绝缘体, 在压力及温度条件下可能会发生拓扑相间的转变。因此该材料具有丰富的物理内涵和潜在的应用价值。然而关于体块 ZrTe₅ 材料的拓扑性质实验上的结果非常混乱。包括 Dirac 半金属、弱拓扑绝缘体、强拓扑绝缘体均有报道。因此十分有必要对这个材料体系的拓扑

性质进行系统的研究。本文采用气相运输法生长了大尺寸的 ZrTe₅ 晶体,结构和成分测试表明得到的晶体具有良好的单晶质量,有利于研究其拓扑运输性质。电阻温度曲线和霍尔系数-温度曲线的拟合以及扫描隧道谱显示 ZrTe₅ 晶体的能隙应不小于 50 meV,即体块 ZrTe₅ 是一个拓扑绝缘体。而高质量的单晶样品使得我们在 2 K 温度下,晶体不同晶面上最大磁场仅为 9 T 时就观察到 8 阶的量子振荡。通过朗道扇图和位相提取技术发现:ZrTe₅ 晶体 b 面的载流子只有平庸的零贝利位相,Shubnikov-de Haas (SdH) 振荡来自体态平庸的薛定谔电子;而 c 面的载流子具有 π 贝利位相, SdH 振荡来源于表面态的狄拉克电子。这说明体块的 ZrTe₅ 单晶是弱拓扑绝缘体,而不是 Dirac 半金属或强拓扑绝缘体。同时,我们与南京大学李绍春研究组合作,利用扫描电子隧穿谱在表面台阶处观测到了清晰的边缘态和体态绝缘的态密度。扫描电子隧穿谱研究的结果与输运得出的结论一致。我们的工作澄清了体块 ZrTe₅ 的拓扑性问题。

关键词: ZrTe₅, 单晶, 拓扑绝缘体, 运输性质, SdH 振荡

D04-P51

2.9THz QCL 器件中反常电输运特性

王新明, 俞健, 王雪敏, 沈昌乐, 蒋涛, 吴卫东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

THz 量子级联激光器 (QCL) 作为一种紧凑的、相干的固体连续太赫兹辐射源,具有响应速度快、体积小、便于集成等优点,具有潜在的应用价值。我们对 QCL 器件在极低温强磁场下的输运特性进行研究。在恒流模式下测量其 V-I 曲线,电压与电流具有二次性,即一个电压对应于两个电流值,而在恒压模式下测量其 I-V 曲线,电流并没有发生震荡现象,而是在某一电压下发生跳跃现象,意味着在器件中存在某种未知缺陷导致电阻呈现非线性跳跃式变化,根据测量的电流与温度随时间变化曲线,说明这种变化是由热激发效应引起的,同时结合器件本身结构推测器件界面处存在微小应力失配造成的缺陷势垒引起电流的突变。不同磁场下的 V-I 曲线,随磁场的增大,电阻迅速增大,突变点与磁场呈平方关系,说明自旋电子穿越缺陷势垒时输运特性与磁场密切相关。通过磁场下电流、温度与时间关系曲线推算出 QCL 器件不同磁场下的热导率,热导率随磁场增大而增大,与电导率的下降相反,说明自旋电子极化后与声子间相互作用减弱。

D04-P52

碳纳米管改性超轻 TAC 气凝胶的制备

方瑜

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

纤维素具有良好的生物相容性、生物降解性、且无毒、无污染,是天然的环保材料,纤维素气凝胶是以纤维素为原料制备的气凝胶,具有气凝胶材料特有的纳米级多孔结构和高的孔隙率等特性,是一种新型的气凝胶材料,在某些方面的性能超越了以硅气凝胶为代表的无机气凝胶和聚合物基气凝胶,其中三醋酸纤维素 (TAC) 因其密度低、孔径较其他聚合物多孔材料低一个量级以上等优点而具有很好的应用前景。但制备过程中凝胶的收缩和强度较低阻碍了其密度进一步降低。碳纳米管具有理想的一维结构,其独特的结构赋予其优良的性质,其与聚合物结合制备的复合材料性能优异,一直备受人们关注。将碳纳米管作为改性材料加入到 TAC 纤维素气凝胶中有望促进 TAC 气凝胶密度的降低和强度的增加。以 1,4-二氧六环和异丙醇为溶剂,加入一定量的三醋酸纤维素 (TAC),加热搅拌使之完全溶解,加入碳纳米管后将溶液进行超声处理使碳纳米管均匀分散在溶液中,然后将溶液注入模具。自然冷却后,溶液体系自然凝胶,最后进行二氧化碳超临界干燥获得密度低至 1 mg/cm³ 的碳纳米管掺杂改性的 TAC 气凝胶。该气凝胶有望在高能量密度物理中研究中作为极限低密度材料获得应用。

D04-P53

退火温度对铝铜复合芯轴铜防护层性能的影响

赵利平, 邢丕峰, 郑凤成, 易泰民, 高莎莎, 柯博, 李翠, 李宁, 杨蒙生

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

美国国家点火装置(NIF)高性能转化腔制备使用的是铝铜复合芯轴,即采用磁控溅射的技术在铝模芯上制备铜防护层。铝铜复合芯轴是整个 NIF 高性能转化腔制备的基础,铜防护层的性能对其质量有着非常关键的影响。其表面质量、残余应力、与基底结合强度等性能直接关乎黑腔性能及稳定。表面残余应力过大导致 Cu 防护层产生空洞、裂痕或脱落,进而影响其上涂层的制备、结构稳定性、寿命及脱模成品率。本研究运用磁控溅射技术在铝模芯上沉积了厚度不小于 5 μm 的铜防护层,并在不同温度下进行退火处理,利用白光干涉仪、XRD 分别研究退火前后样品表面质量、微结构与残余应力变化。

结果表明：随退火温度升高，样品晶粒尺寸(亚晶粒)由原来的 6.8 nm 增加到 23.8 nm，表明粗糙度稍有增加；Cu(111)择优取向系数 $\delta\text{Cu}(111)$ 不断减小，200 °C 退火后表面残余应力最低。铝铜复合芯轴铜防护层退火温度选择在 200 °C，并应用于黑腔制备流程中。

D04-P54

脉冲激光沉积制备石墨烯薄膜的形核过程研究

王进，吴卫东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

石墨烯因其优异的电学和光学性质在能源、航空、电子器件等方面有着广泛的应用前景。本文采用脉冲激光沉积法(PLD)，以热解石墨为靶材，详细研究了石墨烯在单晶 Cu(111)基片上的形核过程。通过拉曼光谱、扫描电镜(SEM)、透射电镜和选区电子衍射(SAED)对石墨烯的微观形貌和结晶度进行表征。研究发现，石墨烯首先在 Cu 基片表面的台阶处形核，这是由于表面台阶减小了石墨烯形核的生长动能。并发现高温增加表面碳粒子的迁移，有利于增加石墨烯的结晶质量。同时发现在形核阶段碳粒子趋向形成多成石墨烯颗粒而不是大面积的石墨烯片。

关键词：石墨烯，脉冲激光沉积，形核

D04-P55

HF 酸刻蚀熔石英过程中材料的不均匀去除以及其对表面形貌的影响

李源^{1,2}，严鸿维²，姚彩珍²，袁晓东²，杨李茗³，巨新¹

1.北京科技大学

2.中国工程物理研究院激光聚变研究中心

3.精密光学工程研究中心

HF 酸刻蚀熔石英光学元件，能够去除加工再沉积层和亚表面缺陷层材料，从而有效提高激光聚变装置中使用的熔石英光学元件的激光诱导损伤阈值。然而在刻蚀作用下，熔石英元件的表面形貌却容易发生退化，使刻蚀效果大打折扣。本实验中检测了表面划痕在刻蚀过程中的形貌演化过程，观察到了刻蚀过程中材料去除的不均匀性。在不均匀的刻蚀作用下，划痕迅速展宽而深度却几乎不变。这个结果使得亚表面划痕缺陷逐渐变得平滑，降低了对入射激光的散射和光增强作用。本文基于实验结果，引入矢量法解释刻蚀的不均匀性，修正了有限差分刻蚀模型。对划痕的模拟结果与实验结果相互吻合。

D04-P56

三维开闱式盒型电极探测器的设计优化与电学特性研究

刘曼文

湘潭大学

本文研究一种新型的三维探测器，即三维开闱式盒型电极探测器。在这种探测器中，沟槽电极可以贯穿刻蚀至探测器的整个厚度，完全消除在传统的三维沟槽电极探测器中的低电场区域。通过比较仿真结果，我们可以得到最优设计。研究探测器的电学性能是非常重要的，尤其是决定探测器在强辐照环境下的工作性能时，像大型粒子对撞机或者超大型粒子对撞机中的辐射环境。我们用 silvaco 中的 TCAD 来模拟探测器的电学性能，如电场强度，电势分布，I-V 特性，C-V 特性，电荷收集性能，全耗尽电压等。通过分析，我们发现三维开闱式盒型电极探测器中的电场和电势分布都很均匀，新型探测器的电荷收集性能符合设计要求，我们可以得出探测器能够在强辐照环境下正常工作的结论。

关键词：三维开闱式盒型电极探测器，电场分布，电荷收集效率

D04-P57

新型方形三维沟槽电极探测器的电学特性研究

王明洋

湘潭大学

硅探测器拥有灵敏度高，响应速度快，抗辐照性能强等优点，主要用于辐照探测，在高能物理实验、航空航天、军事、医疗等领域应用广泛。在强辐照环境中，传统探测器的性能受到严重的影响，甚至不能工作。为提高强辐照环境下探测器的工作性能，本文提出一种新型方形三维沟槽电极探测器。通过对器件的仿真，模拟探测器在不同辐照下的各项电学特性，如探测器的漏电流

与外加电压的关系、不同辐照对全耗尽电压的影响、电场分布等性质等，以期待在这些研究的基础上对探测器进行优化。

关键词：三维沟槽探测器，漏电流，全耗尽电压

D04-P58

多铁材料 BiFeO_3 在高压下的相变

李亚培, 颜丙敏, 高波, 唐虎, 王彦超, 缙慧阳

北京高压科学研究中心

吉林大学超硬材料国家重点实验室

BiFeO_3 是迄今为止发现的唯一在室温以上表现出铁电性和磁性的材料，其铁电转变温度是 1100 K,反铁磁转变温度为 640 K。 BiFeO_3 具有存在磁电亲合效应的特性，该材料中共存的铁电性和（反）铁磁性之间可以互相调控。由于其优越的特性， BiFeO_3 一直备受研究者的青睐。我们利用高压同步辐射 X 射线衍射研究了 BiFeO_3 的高压下相变行为。结果表明：室温下空间群为 R3C 的 BiFeO_3 在 6 GPa 转化为正交晶系 $\text{Ima}2$ 结构，在 18 GPa 又转化为正交晶系 Pnma 结构。并进一步分析了 BiFeO_3 高压相的对称性以及所涉及的转变机制。

D04-P59

$\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}/\text{ZnO}$ 异质结带阶调控的机理研究

陈杰, 王雪敏, 赵妍, 吴卫东

中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 等离子体物理重点实验室

本研究通过控制锌镉氧 (ZnCdO) 靶中的 Cd 掺杂浓度，采用脉冲激光沉积技术在蓝宝石衬底上制备了一系列的 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}$ 薄膜和 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}/\text{ZnO}$ 异质结。利用 X 射线衍射 (XRD) 分析了 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}$ 薄膜结构；采用 X 射线光电子能谱 (XPS) 确定了 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}$ 薄膜中的 Cd 含量，并测量了不同 Cd 含量下 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}$ 薄膜的 Zn 2p 结合能 (EZn 2p) 和价带值 (EV)；通过紫外可见透射谱和反射谱计算了 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}$ 薄膜的光学带隙。结合 EZn 2p、EV 和光学带隙，得到了不同 Cd 含量下的 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}/\text{ZnO}$ 异质结的价带（导带）带阶。详细讨论了 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}$ 薄膜结构和 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}/\text{ZnO}$ 异质结带阶随 Cd 含量变化的机理。结果表明，调节 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}$ 薄膜中的 Cd 含量可以准确调控 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}/\text{ZnO}$ 异质结带阶。该研究为 $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}/\text{ZnO}$ 超晶格的设计提供数据参考。

关键词： $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}$ 薄膜， $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{O}/\text{ZnO}$ 异质结，光学带隙，价带（导带）带阶

D04-P60

高压下电子化合物 Ca_5P_3 的相变研究

秦琴

北京高压科学研究中心

电子化合物材料是一种具有独特结构的阴离子化合物，其结构形成晶体腔限制多余的电子，电子具有阴离子的性质。阴离子电子的存在与在费米能级附近形成具有弱电子-声子相互作用的新能态有关。自从 2003 年首次报道室温和空气稳定的无机电子 $[\text{Ca}_{24}\text{Al}_{28}\text{O}_{64}]^{4+}(4e^-)$ 以来，电极的研究已经从笼状结构大大扩展到二维和一维材料，如 $[\text{Ca}_2\text{N}]^+e^-$ ， $[\text{Y}_2\text{C}]^{1.8+}1.8e^-$ 和 Mn_5Si_3 型材料，许多材料在高压下观察和预测到了电子的存在，但与理论相比，一维材料实验研究相对较少[9-10]。

我们通过原位同步辐射 X 射线衍射得到了 Ca_5P_3 的一系列实验数据，对 XRD 数据进行了结构精修，结果表明 Ca_5P_3 具有与 Mn_5Si_3 相同的结构，说明 Ca_5P_3 可能是一维电子化合物。运用粒子群算法的密度泛函理论 (DFT) 计算，对压力诱导的 Ca_5P_3 结构和电子演化进行了研究，获得了材料能带结构，能隙宽度、电子态密度等随着压力变化的依赖关系。利用 DAC 技术与高压下原位光谱学方法，探究样品的晶体结构、晶格振动以及声子状态等物理特性，结合实验和计算揭示 Ca_5P_3 在压缩过程中经历相的结构转变。

D04-P61

高压下 BaFe_2S_3 的结构相变和电子性质的第一性原理研究

孔攀龙^{1,2}

1.北京高压科学研究中心

2.长江大学物理与光电工程学院

BaFe₂S₃ 作为铁基自旋梯材料，是“123”体系铁基超导体的代表化合物。2015 年，Takahashi 等人通过实验研究发现在 11 GPa 时，BaFe₂S₃ 的基态结构 *Cmcm* 会发生 mott 相变，同时伴随着产生 14 K 的超导电性。这一研究引发了科学界的高度关注。本文采用 CALYPSO 晶体结构预测方法结合基于密度泛函理论的第一原理计算，搜索了 BaFe₂S₃ 在 0-100 GPa 压力范围内可能存在的稳定结构。结果表明：BaFe₂S₃ 的基态结构为 *Cmcm*，这与以往实验上报道的基态结构相符，说明我们用此方法预测 BaFe₂S₃ 的稳定结构的适用性。随着压力的增大，在 31.6 GPa 时 BaFe₂S₃ 相变为 *P222*₁ 相，接着在 47.4 GPa 时相变为 *Imm2* 相，最后在 57 GPa 时相变为 *C2/m* 相。利用声子谱和弹性常数，我们分析了 *Cmcm*、*P222*₁、*Imm2* 和 *C2/m* 相在给定压力下的稳定性，结果显示它们都是动力学和力学稳定的。从能带、态密度和电子局域密度函数的分析结果可知，它们都具有金属性且伴随着较强的共价键。文章首次预测了 BaFe₂S₃ 在压力诱导下的晶体结构相变，并研究了它们的稳定性和电子性质，为以后对 BaFe₂S₃ 的研究起到很好的参考及指导作用。

D04-P62

乙炔锂 Li₂C₂ 的高压聚合及高压诱导的导电性提高

王丽娟

北京高压科学研究中心

乙炔锂是一种预测有超大容量的电池电极材料。然而其导电性差、氧化聚合可逆性差、锂离子不能被全部释放。乙炔锂在高压下的电阻率测量表明在 40 GPa 乙炔锂的电导性相对于常压下提高了 10⁹ 量级，而且是不可逆的。我们运用高压实验结合同步辐射，拉曼，红外，质谱和理论计算等多种手段研究了高压下乙炔锂的结构和相应的化学反应。乙炔锂在高压下先聚合成 Li₂C₂-*Cmcm*-ribbon 相，接着在退压过程中分解成富碳相 Li₃C₄ 和富锂相 Li₄C₃ 说明具有很高的电化学活性，而且这些相是非晶化的。高压下的聚合导致导电性的提高。气相-质谱分析进一步证实了乙炔锂在加压过程发生聚合反应降压过程中发生分解反应。我们的结果表明高压极端条件对修饰碳骨架，驱动不饱和 C²⁻ 聚合以及提高 Li-C 化合物的导电性提供了有效的手段。乙炔锂在高压下所具有的高导电性在卸压后依然保持到常压表明乙炔锂可以作为锂电池的候选材料。

D04-P63

工作气压对微球表面 Al-W 多层膜形貌与微结构的影响

许华，刘艳松，何小珊，何智兵

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

在惯性约束聚变研究 (ICF) 中，金属涂层作为空心微球靶材的重要保护层，具有增强耐冲击性和抑制内爆过程的流体力学不稳定性等性能。与单层金属膜相比，多层金属膜具有更优异的综合性能，因此在空心微球上制备高-低 Z 多层金属膜成为 ICF 靶制备中重要的研究内容。

本文采用磁控溅射技术在不同工作气压条件下，在 GDP 空心微球表面制备 Al-W 多层膜，并对 Al-W 多层膜的形貌、微结构开展了研究。实验采用双靶交替溅射的方法制备 Al-W 多层膜，涂层镀制过程中，采用旋转托盘结合敲击装置，使微球保持持续、随机运动。利用扫描电镜 (SEM)、原子力显微镜 (AFM)、X 射线衍射仪 (XRD)、多波束光学系统 (MOS) 等仪器表征了多层金属膜的形貌与微结构，探讨了工作气压变化对 Al-W 多层金属膜形貌与微结构的影响规律。

实验结果表明：

(1) 涂层过程中，微球能保持良好的随机运动，使多层膜厚度在约 2.5 μm 时，厚度均匀性达 90% 以上。随着工作气压增加，多层膜中铝膜层的沉积速率呈下降的趋势，钨膜层沉积速率呈现出先增大后减小的趋势。

(2) 多层膜中的铝膜层作为缓冲层显著改善了钨膜层内的残余应力。随工作气压的增大，多层膜结构的致密度下降，最外层钨膜层的颗粒形貌由三角锥状转变为金字塔形，多层膜的表面粗糙度呈现出先减小后增大的变化趋势。当工作气压为 0.5 Pa 时，表面粗糙度值低至 196.5 nm，残余应力最小。

D04-P64

空心二氧化硅纳米颗粒构筑的涂层折射率调控与性能研究

严鸿维，邹鑫书，陶朝友，晏良宏，杨科，刘太祥，吕海兵

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

溶胶凝胶二氧化硅减反涂层在激光装置的透射类光学元件上有重要应用，可以减少因元件表面菲涅尔反射造成的激光传输能量损失和杂散光影响。为满足光学元件宽带增透和多波长增透的需求，折射率渐变涂层是最理想的实现途径，采用不

同折射率的涂层进行组合也是一种较好的方案，这些都对涂层折射率调控提出了迫切需求。

自然界中可用于制备减反涂层的材料本体折射率一般都在 1.35 以上，要获得低折射率涂层，需要对涂层结构进行调控，提高涂层孔隙率是一种有效的途径。已有研究表明，化学蚀刻、相分离、模板法、倾斜角沉积等方法都可以有效地制备低折射率多孔膜层^[1-4]。然而，高的煅烧温度、昂贵的仪器设备、复杂的制备过程等限制了这些方法在光学元件上的应用。

通过调研分析和研究，我们发展了一种温和的溶胶凝胶路线用于制备低折射率透明涂层。采用正硅酸乙酯和十三氟辛基三甲氧基硅烷作为反应前驱体，以氨水作为催化剂，一步合成了表面具有含氟功能基团的空心二氧化硅纳米颗粒。利用合成的二氧化硅胶体以浸渍提拉方式制备涂层，通过控制胶体中两种前驱体的比例，涂层折射率可以在 1.07-1.16 之间调控，其疏水角最高可以达到 162°。通过涂层结构和纳米颗粒表面性质调控，本方法可以得到具有优异的超疏水、自清洁、热稳定、化学稳定等性能的二氧化硅涂层。

仅发表论文

D04-PO-01

Ag/PMMA 微发泡纳米复合材料的制备及压缩性能研究

袁欢，熊远禄，沈强，罗国强，刘立胜

武汉理工大学

随着航空航天技术的不断发展，对航空防护材料提出了密度低、强度高、稳定性好等性能要求。如何制备轻质高强的泡沫材料，使其在航空极端条件下起到防冲击、隔音隔热的作用，是目前急需解决的关键技术问题。本文采用原位合成和反溶剂沉淀的方法将 Ag 纳米粒子均匀分散到 PMMA 基体中，并通过超临界二氧化碳发泡技术制备了 Ag/PMMA 微发泡纳米复合材料，研究了发泡工艺对其微观形貌与压缩性能的影响。结果表明，平均粒径为 13.5 nm 的 Ag 纳米粒子可以促进发泡过程中的泡孔成核。Ag/PMMA 微发泡纳米复合材料比纯 PMMA 泡沫材料具有更均匀的泡孔结构，更小的泡孔尺寸和更高的泡孔密度。当发泡温度为 110 °C，发泡压力为 20 MPa，发泡时间为 10~300 s 时，Ag/PMMA 微发泡纳米复合材料的泡孔密度为 $5.8 \times 10^7 \sim 1.3 \times 10^9$ cells/cm³，相对密度为 0.017~0.277，其压缩强度最高可达 11 MPa。综上，Ag/PMMA 微发泡纳米复合材料有望成为新型的轻质高强的航空防护材料。

D04-PO-02

高压下单层 MoSe₂ 激子与晶格振动调控研究

李芳菲，付鑫鹏，黄晓丽，黄艳萍，周强，崔田

吉林大学超硬材料国家重点实验室

类石墨烯结构的层状过渡金属硫族化合物（TMDs）具有卓越的光学属性和电学属性，在光电子、电学等领域拥有广阔的应用前景，引起了学术界的广泛关注。由于层间耦合效应，当层数从体材料减少至单层时，其能带结构发生由间接带隙到直接带隙的转变。较弱的介电屏蔽作用、较大的载流子有效质量以及较强的量子限域效应，使得单层 TMDs 表现出强烈的激子特性，激子结合能可达数百 meV 量级，远高于其它半导体量子阱中发现的激子结合能。本文以单层 MoSe₂ 和 MoSe₂-WSe₂ 异质结为主要研究对象，利用高压微区荧光光谱和高压微区拉曼光谱作为主要研究手段，研究了压力调制作用下的激子和晶格振动演化过程，发现在不同传压介质中单层 MoSe₂ 的荧光峰具有不同的压力变化特征，由于压力诱导下的电荷注入效应，实现了对单层 MoSe₂ 中性激子和负电激子的高压调控。在金刚石衬底单层 MoSe₂-WSe₂ 异质结的高压微区荧光光谱研究中，发现了层间耦合辅助的激子体系重整化现象，MoSe₂-WSe₂ 异质结首先由非均匀耦合向均匀耦合双层异质态转变，出现三维层间激子态，在高压下继而发生导带底 K-Λ 交互转变，出现 MoSe₂ 层负电激子态。