

## E06.材料基因组

分会主席：张统一、谢建新、汪卫华、段文晖、刘兴军

### E06-01(I)

#### 高通量计算和多尺度耦合

王崇愚

清华大学

### E06-02(I)

#### 深圳大科学装置-材料基因组平台

项晓东

南方科技大学

随着大数据和人工智能的兴起，材料科学的研究方式发生了巨大变革。为了缩短材料从研发到应用的周期，实现新材料按需设计的需求，基于高通量实验、高通量计算和人工智能的“中国版材料基因组计划”应运而生。本报告将围绕深圳材料基因组大科学装置平台已经取得的新技术和新方法展开介绍，以期让大家对材料基因组有一个更清晰和全面的认识。

### E06-03(I)

#### 集成计算材料工程用于新型高强铝合金设计

王俊升

北京理工大学

### E06-04(I)

#### 数据是材料基因工程当前的核心问题

汪洪

上海交通大学

材料基因组联合研究中心/材料科学与工程学院

数据技术是材料基因工程中真正具有革命性的核心元素。在材料的多样性与复杂性面前，目前材料数据的规模与质量还远不能满足数据科学的要求。要使材料科学真正进入科学探索的第四范式，必须首先解决材料数据匮乏这一全球性瓶颈问题。基于高通量实验与高通量计算的“数据工厂”可以批量产生系统性、一致性、综合性的高质量数据，而一种新型的数据构造将使这些数据符合可发现、可访问、可交互、可重复使用的 FAIR 原则，满足材料基因工程的需要。

### E06-05(I)

#### 基于 Ai 与材料基因组科学和工程探索新型锂电池材料

(Development of Novel materials based on MGI for Li-ion batteries)

潘锋 教授（千人）

北京大学深圳研究生院新材料学院

Email: [panfeng@pkusz.edu.cn](mailto:panfeng@pkusz.edu.cn)

锂电池作为能量密度最高的化学电源已经用作电动车的动力电池（ref.1）。为了加速新型锂电池材料的研发，特别是新型高能量密度和高稳定锂电池正极材料，我们已经基于于 Ai（人工智能）和材料基因组科学与工程,包括高通量的计算、高通量的制备和高通量的检测，及数据库系统进行研发。我们团队在北京大学深圳研究生院新材料学院建设具有一百多万个晶体结构的材料数据库，对已有的晶体结构进行于人工智能的机器学习、模拟和计算，构建材料的知识图谱。为了设计和制备具有 1000Wh/kg 能量密度下一代正极材料，我们对高镍层状正极材料和富锂锰基正极材料这两个材料体系构效关系开展研究，系统探讨过渡金属原子之间的相互作用，提出“结构基元”（晶体结构中的局域结构和由单一或不同电子结构的元素的组合关键基团）及其之间电子间的直接交换（电子局域与离域共轭(发现了 6 个 Mn 连成的环具有电子共享的“芳香性”，

ref.2 ) 和 TM-O-TM(TM 是过渡金属)超交换相互作用 (ref.3) 与所对应的锂离子高容量脱嵌过程中结构稳定性、磁性能和电化学性能之间的内在关联模型, 揭示它们与层状材料电化学性能的构效关系。

参考文献:

**Ref.1.** J. Lu., Z. Chen, Z. Ma, F. Pan\*, L. Curtiss\* and K. Amine\*, The Role of Nanotechnology in Enabling High Power and High Energy Battery Materials for Electrical Vehicle Application, *Nature Nanotechnology*,11, 1031-1038 (2016)

**Ref.2** Z. Hu , J. Zheng , C. Xin G. Teng, Y. Zuo, **F Pan\***; Inorganic Aromaticity of Mn<sub>6</sub>-Ring Cluster in Layered Li(Ni<sub>0.5</sub>Mn<sub>0.5</sub>)O<sub>2</sub>. The Journal of Physical Chemistry C 2018, DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b109

**Ref.3** J. Zheng , G. Teng, C. Xin , **F Pan\*** Role of Superexchange Interaction on Tuning of Ni/Li Disordering in Layered Li(NixMnyCoz)O<sub>2</sub>; J. Phys. Chem. Lett. 2017, 8, 5537-5542

#### **E06-06(I)**

##### **钛基合金形变与断裂机制的多尺度模拟**

(Multiscale simulation of the deformation and fracture mechanism in titanium based alloys)

徐东生

中国科学院金属研究所

钛基合金由于具有优异的力学、耐高温及耐蚀性能等而广泛应用于航空、航天、化工、医药等领域, 但由于其微观组织复杂, 其在不同条件下的形变与断裂机制仍不十分清晰。本研究采用多尺度模拟手段, 紧密结合实验研究, 针对航空用钛合金, 包括传统钛合金和有序的钛铝金属间化合物中存在的变形机制缺乏等问题进行研究, 揭示其形变及断裂的原子机制, 并探索开动新机制的可能性。采用电子、原子、微观组织及宏观模拟, 阐明不同条件下钛基合金中的孪晶、位错、超位错等变形的原子机制及特征, 预测不同合金元素对一些变形机制开动的的作用, 探索不同因素对微观组织形成的影响机制, 这些研究为新型钛合金的微观组织及力学性能控制奠定基础。

#### **E06-07(I)**

##### **The application of MGI and theoretical methods for some important nuclear materials**

Shiyu Du

Ningbo Institute of Materials Technology and Engineering

The Materials Genome Initiative has been widely acknowledged strategy for the development of new materials. In this presentation, our ongoing project of materials genome will be briefly introduced including some recent progresses for ATF materials design using multiscale calculation methods. We have studied the crystalline structures of some uranium silicides by first principle calculations. The impact of defects on the stability and lattice structure of uranium silicide is investigated and predictions on the performance in the reactor are discussed. The phase field studies are performed on the impact of pores on the grain growth of UO<sub>2</sub> fuels. As the promising ATF cladding material, SiC/SiC composites are studied in our group as well. Non-equilibrium Molecular Dynamics simulations are performed to study the mechanism for the mechanical failure of the coating-matrix and coating-fiber interfaces. It is found that the mechanical strength of interface is strongly dependent on the temperature of the system. At 700-1000K, the shear strength is significantly reduced due to the phase transition of the pyrolysis carbon coatings. Furthermore, the implanted He atoms are also determined as a major factor that influence the mechanical behavior. The existence of He atoms in the coating materials may cause a significant increase in shear strength and have a delaying effect on the high temperature failure.

#### **E06-08(I)**

##### **高通量集成计算软件及新一代高温合金研制**

许庆彦<sup>1</sup>, 王崇愚<sup>1</sup>, 张武<sup>2</sup>, 张平<sup>3</sup>, 李嘉荣<sup>4</sup>

1.清华大学

2.上海大学

3.北京应用物理与计算数学研究所

4.中国航发北京航空材料研究院

围绕单晶高温合金“研发周期缩短一半、研发成本降低一半”的目标，融合高通量计算（理论）关键技术，实现新材料研发由“经验指导实验”的传统模式向“理论预测、实验验证”的新模式转变，以提高新一代单晶高温合金的研发效率。本研究发展了多组元材料体系从微观到宏观的结构、物性和服役行为仿真的全链条多尺度集成计算方法及计算软件，发展了材料结构预测软件、计算热力学与动力学软件等。建立了通用的驱动软件环境，开发了可实现高通量并发式材料计算的软件。针对单晶高温合金等结构材料开展初步验证性应用，揭示制备过程中的成分-工艺-组织-性能之间的定性与定量关系。

#### E06-09(I)

##### 基于第一性原理的多尺度计算模拟在催化与分离材料设计中的应用

陈亮

中科院宁波材料所

多尺度计算模拟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，基于第一性原理的相图计算在新型功能材料，如储能材料和催化材料等研发方面做出了很大的贡献。最近我们利用结合第一性原理、集团展开和蒙特卡洛等方法的高通量相图计算模拟技术，快速筛选和设计出了金属氧化物与磷化物等材料用于气体吸附、分离与催化的功能材料，例如（1）设计了一系列双金属磷化物电催化制氢材料，从 200 余种不同组分和结构的材料中筛选出  $\text{Co}_0.5\text{Fe}_0.5\text{P}$  与  $\text{Al}_0.08\text{Co}_0.92\text{P}$ ，并提出一种电子传输补偿机理解释双金属磷化物金属中心与电催化活性之间的构效关系，实验合成也证实了这两种结构有非常优异的电催化制氢性能；（2）设计了一系列双金属氧化物材料，其中  $\text{Cu}_x\text{Ru}_{1-x}\text{O}_2$  作为酸性析氧电催化剂，在电流密度达到  $10 \text{ mA/cm}^2$  时其过电位仅为  $188\text{mV}$ ，表现出比商用  $\text{RuO}_2$  电催化剂更优异的电催化析氧活性和稳定性，通过密度泛函理论模拟计算发现，高能面上的三配位 Ru 原子在反应过程逐步被氧化从而大幅度降低 OER 的反应能垒，同时 Cu 掺杂可以调整  $\text{RuO}_2$  的电子结构，因此大幅度地提高其 OER 催化活性。

#### E06-10(I)

##### 高通量第一性原理计算筛选 $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ 相变存储材料的最佳掺杂元素

孙志梅

北京航空航天大学

基于  $(\text{GeTe})_m(\text{Sb}_2\text{Te}_3)_n$  (GST) 硫族化合物的相变存储器 (PCRAM) 是最具竞争力的下一代非易失半导体存储器，PCRAM 利用 GST 在晶相和非晶相之间的快速可逆相变实现数据存储，利用晶相和非晶相之间巨大的电阻率/光学性质差异实现数据读出。在诸多硫族化合物相变存储材料中， $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  的晶化速度最快，亦即 PCRAM 的操作速度最快，因而成为 PCRAM 的最佳候选材料之一。然而， $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  较低的电阻率和较差的热稳定性等特点阻碍了其实际应用。因此，寻找一种既可以提高晶态电阻率又能提高非晶态热稳定性的掺杂元素是提高  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  综合性能的有效途径。我们利用第一性原理高通量计算筛选出  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  的最佳掺杂元素是钪和铈，进一步的第一性原理计算和第一性原理分子动力学模拟研究表明，这两种掺杂元素不仅都能提高晶态电阻率，避免引入多余载流子，而且也都能显著提高非晶态的热稳定性，并详细探讨了其物理机理。该理论预测也得到了实验验证。本研究提供了一种可以用于设计先进相变存储材料和寻找性半导体掺杂体系的方法，解决了实验中因相分离导致器件失效的难点。

#### E06-11(I)

##### 机器学习加速材料性能预测

肖斌，金倩，吴雨沁，王成洁，刘轶\*

上海大学材料基因组工程研究院

上海大学物理系量子分子结构国际中心

\*E-mail: yiliu@shu.edu.cn

数据科学/信息学成为现代科学研究中继实验、理论和计算方法后的第四研究范式。本研究介绍将机器学习手段与计算和实验方法结合进行材料性能预测。具体案例包括（1）第一性原理计算结合机器学习预测高温合金的合金元素占位置换能。（2）实验与机器学习结合预测高熵合金的相结构和硬度。我们的结果证明了机器学习方法可以有效拓展计算和实验材料研究的应用范围，低成本加速材料性能预测和设计。

关键词：机器学习；数据挖掘；材料基因；材料性能预测

## E06-12(O)

### 稳定 MAX 相的高通量计算筛选

胡前库, 吴庆华, 周爱国, 王李波

河南理工大学材料科学与工程学院

MAX 相是一系列三元层状化合物的总称, 既具有陶瓷材料的高熔点、高硬度、抗热震性、耐腐蚀性等特点, 又像金属材料一样, 具有良好延展性、高导电/导热性、可机械加工性等特点, 是一种具有重要应用背景的结构陶瓷材料。MAX 相具有统一的化学式  $M_{n+1}AX_n$ , 其中 M 是早期过渡金属(Sc、Ti、V、Cr、Zr、Nb、Mo、Hf、Ta 等), A 主要是 III、IV 主族元素(Al、Si、P、S、Ga、Ge、As、Cd、In、Sn、Tl、Pb 等), X 是 C 或者 N,  $n=1、2、3$  等。MAX 相家族庞大、成员众多, 成分和结构连续可调。发展新成员, 将会继续丰富 MAX 相家族, 必将补充完善 MAX 相材料的物化性能和应用领域。

在本文中, 我们以 MAX 相中的  $M_2AX$  体系作为研究对象, 将组合化学的思想与第一性原理计算相结合, 高通量计算筛选  $M_2AX$  体系中存在的稳定相。

筛选结果显示: 在  $M_2AC$  体系中, 存在 62 种稳定相, 其中 21 种目前尚未合成; 在这 21 种尚未合成的  $M_2AC$  相中, 17 种为常温稳定相, 4 种为高温稳定相; 在尚未合成的  $M_2AC$  相中,  $Ta_2PC$ 、 $Sc_2SC$ 、 $Sc_2CdC$ 、 $Zr_2CdC$  形成能最低, 稳定性较高, 实验合成应相对较容易。在  $M_2AN$  体系中, 存在 27 种稳定相, 其中 22 种目前尚未合成; 在这 22 种尚未合成的  $M_2AN$  相中, 21 种为常温稳定相(其中  $Sc_2TiN$  和  $Ti_2CdN$  高温下会分解), 1 种  $Zr_2GaN$  为高温稳定相; 在尚未合成的  $M_2AN$  相中,  $Ti_2SN$  和  $Ti_2PN$  形成能最低, 稳定性较高, 实验合成应相对较容易。

## E06-13(O)

### 二氧化锆的高压相变行为第一性原理研究

姬德朋, 冯晶

昆明理工大学

利用 CASTEP 软件包, 本文对二氧化锆在 0~45GPa 压力范围内的相变行为开展了计算研究工作。计算结果表明, 随着压力的增加, 立方相二氧化锆、四方相二氧化锆和单斜相二氧化锆之间可以实现相互转化, 而且高压下立方相二氧化锆在三者中最为稳定。而当压力超过 30GPa 时, 二氧化锆有可能会生成一种新的结构, 斜方相二氧化锆, 其空间群为 Pbcm。斜方相二氧化锆的微观结构与立方相二氧化锆存在很大相似性, 尤其它们晶体结构内部 Zr 原子的空间分布几乎相同, 计算结果表明这种新型结构的二氧化锆高压相在高压下是可以实现与立方相二氧化锆之间的相互转变。

## E06-14(I)

### 锆氢化产物的有序结构预测及无序结构建模方法研究

宋海峰<sup>1,2</sup>, 朱雪燕<sup>1,2</sup>, 赵亚帆<sup>1,2</sup>, 田付阳<sup>3</sup>, 高兴誉<sup>1,2</sup>, 林德焯<sup>1,2</sup>

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

3.北京科技大学

氢化产物的形成是反应堆锆合金包壳材料吸氢致脆的关键一环, 因此研究不同条件下不同浓度锆化氢产物的结构和性质, 获得不同条件下氢化相变的路径, 对于评估工况下包壳材料的安全性至关重要。本工作首先通过第一性原理结构搜索方法系统研究了不同浓度  $ZrH_x$  ( $x=0.5, 1, 1.5, 2$ ) 的结构。我们找到了所有实验上已知的  $ZrH_x$  结构, 并发现了比实验结构更加稳定的新结构。通过分析锆化氢相变过程中锆基体的结构变化, 解释了  $\gamma \rightarrow \delta \rightarrow \epsilon$  相变的可能路径。利用准简谐近似方法, 我们发现在高温下  $\delta$ - $ZrH_{1.5}$  是最稳定的相, 而在低温下  $\epsilon$ - $ZrH_2$  是最稳定的相。我们推测, 快速冷却过程将促进  $\delta$ - $ZrH_{1.5}$  的形成, 而慢速冷却过程将促进  $\gamma$ - $ZrH$  的形成。此外, 在特定浓度下将存在无序固溶结构的  $ZrH_x$ 。在有限尺寸超胞内, 如何高效构建可合理表征多组元的无序固溶体系目前仍是个挑战。我们基于相似局部原子环境 (SLAE) 模型, 通过考虑原子间的双体和三体间关联的无序度, 开发了一种无序固溶结构建模方法。在该方法中, 我们实现了对完全无序固溶结构、部分无序固溶结构的建模, 并且可以支持存在近程有序的无序固溶结构的建模。测试表明, 该方法建模生成的结构与特殊准随机结构方法相当。

## E06-15(I)

### 集计算材料工程在先进轻质金属合金中的示例研究

王毅, 李金山, 邹程雄, 张颖, 唐斌, 王军, 樊江昆, 薛祥义, 寇宏超  
西北工业大学

近年来, 随着计算机技术的发展, 集成计算材料设计通过跨尺度和多学科交叉融合在数据库的建立、新材料设计和关键部件研发方面取得了众多原创性的成果, 同时也促进了计算材料学在材料科学研究领域的全面发展。材料基因组计划的提出, 为科学家和工程师们进行材料研究和制造提供一套全新的专业数据分享和分析的基础设施和知识库<sup>1</sup>。其中包含材料基本性质的“材料基本模块”将是该计划实施和完善的关键。基于密度泛函理论的第一原理计算正在成为该模块中的一项关键技术, 它不仅能够为物理现象提供深刻的理解, 还能够定量的预测单个相的热力学、动力学和力学性质<sup>1</sup>。目前, 材料物性基本模块已成功应用于新型轻质高强合金<sup>2,3</sup>和高温合金<sup>4,5</sup>的研发过程中。通过集成计算材料工程的方法, 可系统的研究合金的结构遗传与转变<sup>6</sup>、弹性<sup>7</sup>、塑形<sup>8</sup>、晶界<sup>9</sup>、堆垛层错<sup>8,10</sup>、反相畴界<sup>5</sup>、硬度<sup>3,11</sup>、抗蠕变性能等基本性质, 为新型轻质金属合金的设计提供大量的重要数据。

参考文献:

- 1 刘梓葵, 科学通报 58 (35), 3618 (2013)
- 2 Zhou, B.-C., Wang, W. Y., Liu, Z.-K., et al., in ICME for Metals: Concepts and Case Studies, edited by M. F. Horstemeyer (John Wiley & Sons, 2018), pp. 237; Wang, W. Y. et al., J. Mater. Sci. 53, 7493(2018); Mater. Res. Lett. 5, 415 (2017)
- 3 Wang, W. Y. et al., Scripta Mater. 120, 31 (2016)
- 4 Wang, W. Y. et al., Acta Mater. 145, 30 (2018)
- 5 Manga, V. R. et al., Acta Mater. 82, 287(2015)
- 6 Wang, W. Y. et al., Acta Mater. 97, 75 (2015)
- 7 Shang, S. L. et al., J. Mater. Chem. A 3, 8002 (2015)
- 8 Shang, S. L. et al., Acta Mater. 67, 168 (2014)
- 9 Wang, W. Y. et al., Mater. Chem. Phys. 162, 748 (2015)
- 10 Wang, W. Y. et al., J. Alloy. Compd. 586, 656 (2014)
- 11 Wang, W. Y. et al., JOM 67, 2433 (2015)

## E06-16(O)

### Atomic Movement Mechanisms of Polymorphic Deformation-Induced Martensitic Transformations in Steels

杨许生<sup>1,2</sup>

- 1.香港理工大学工业及系统工程学系
- 2.香港理工大学深圳研究院

Due to its extreme science merits and engineering significance, martensitic transformation has been intensively investigating since the late 19<sup>th</sup> century. However, the underlying atomic movements for the transition from face-centered cubic fcc-g austenites to body-centered cubic (bcc-a)/tetragonal (bct-a) martensites have been obscured by the difficulty in directly observing key microstructural signatures.

This presentation reports the examination of a strain/microstructure-gradient AISI 304 stainless steel by surface mechanical attrition treatment (SMAT), which allows us to capture all the key interphase regions generated during the fcc) → e(hcp) → aϕ(bcc)/a(bct) deformation-induced martensitic transformations (DIMITs). In particular, high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM) observations and atomistic simulations successfully confirm the atomic arrangements and crystalline defects (including lattice rotation, transition lattices, and excess reverse shear-shuffling, etc.), thereby providing the sufficient evidence for the collective movement of atoms during these polymorphic DIMITs.

## E06-17(O)

### 基于材料信息学预测高速压制生坯密度的新方法

张凯琦, 尹海清, 姜雪, 邓正华  
北京科技大学

高速压制 (HVC) 是一种压制速度 $\leq 10$  m/s 可获得高密度压制材料先进的压制技术。这种技术已经应用于各种金属粉末, 并且已经通过实现铁基粉末的密度水平大于  $7.5\text{g/cm}^3$  而得到验证。对生坯密度进行快速准确的预测具有非常重要的实际意义, 特别是对于试验和错误的昂贵且耗时的材料设计。在本文中, 我们提供了一种机器学习方法来预测生坯密度, 使用相关的材料特征参量, 包括化学成分, 粉末特性和压制能量。我们尝试用实验数据集来建立四种模型, 进行适当的模型选择, 分析得出多层感知器模型因其具有高相关系数和低误差值的卓越预测性能而工作良好。之后应用这个模型, 用特定的工艺参数预测 9 种材料的生坯密度。对于每种材料, 预测的密度与实验结果非常一致, 误差小于 2%。因此, 该方法在实验的结果上对预测准确性也得到肯定。

#### **E06-18(I)**

##### **基于机器学习的高熵合金设计与优化**

宿彦京

北京科技大学

#### **E06-19(I)**

##### **高通量超导研究新进展/Recent progress on high throughput superconductivity research**

金魁

中国科学院物理研究所

To get the electronic phase diagram of cuprates in a more efficient way, we employed high-throughput synthesis technique to deposit the so-called combinatorial films, e.g.  $\text{La}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$  with  $x$  from 0.10 to 0.19 on a single substrate of 1 cm in length. On the basis of high efficiency screening techniques, a quantitative relation between the doping level and the superconducting transition temperature ( $T_c$ ) was able to be identified for the first time in the electron-doped cuprates.

We also initiated a high throughput research on FeSe to establish the lattice- $T_c$  library, by which we are able to fabricate film sample with gradient  $T_c$  on centimeter substrate via single deposition. We find that more conduction electrons benefit  $T_c$ , and the subsequent modification on selective orbital bands by the lattice modulation should have a significant effect on the conduction electrons.

Finally, I will briefly introduce the Center for Materials Genome Initiative (MGI) at Huairou in Beijing. We are eager to see more high-throughput experiments in accelerating the material researches in the near future.

#### **E06-20(O)**

##### **微透镜阵列的高通量可控制备**

林银银, 丁叶凯

上海大学材料基因组工程研究院

Micro lens and microlens array (MLA) have wide applications in various fields, including light-emitting devices, sensors, fiber-coupling devices, vertical cavity surface emitting lasers (VCSEL), microfluidic system and so on. The demand of MLA with precise shaping features has increased over the last few decades.

In this work, we research a tailored sliding method for high-throughput fabricating droplet arrays with low consumption and the utilization of a sliding method to create MLA with confined position and size. We describe a controllable sliding method for fabricating millions of isolated femto- to nanoliter-sized droplets with defined volume, geometry and position and a speed of up to 375 kHz. In this work, without using a superhydrophobic or superoleophobic surface, MLAs are instantly formed on the patterned substrate by sliding a strip of liquid along the substrate, which exhibit good ability to focus light. Because both shape and size of the final microlens can be controlled by the pre-pattern and the speed of sliding, it is possible to define MLAs with different imaging properties.

#### **E06-21(O)**

##### **高通量组合薄膜技术在 FeSe 物性研究中的应用**

冯中沛

中国科学院物理研究所

在铁基超导体中, FeSe 具有最为简单的化学组分和晶体结构, 但不同调控手段下的 FeSe 所对应的  $T_c$  可以发生由 8.5K 到几十 K 的变化, 研究该显著超导电性增强过程中的物理机制势必能为铁基高温超导机理研究提供重要的参考信息。分别改变 FeSe 的晶格结构和电子结构均可实现  $T_c$  的变化, 但是  $T_c$ 、晶格结构和电子结构三者之间的准确联系目前依然没有得到一个很好的共识。因此, 我们基于脉冲激光薄膜沉积技术并结合高通量研究手段对 FeSe 薄膜进行了精细与系统的研究, 并取得了如下进展: 1) 成功在十二种衬底上制备出高质量的单一组分 FeSe 薄膜样品, 首次实现  $T_{c0}$  由小于 2K 到 14K 的连续调控; 2) 对不同单一组分 FeSe 薄膜进行了结构表征、输运测量和角分辨光电子能谱实验, 获得  $T_c$  与电子结构之间的关系, 但由于实验误差的存在,  $T_c$  与晶体结构之间准确的依赖关系仍无法获得; 3) 成功制备出  $T_c$  连续变化的 FeSe 组合薄膜样品, 并基于高通量测量技术获得  $T_c$  与晶格结构的准确关系; 4) 基于上述实验结果并结合第一性原理计算成功阐明了 FeSe 薄膜超导电性演变过程中  $T_c$ 、晶格结构和电子结构三者之间的联系。

#### **E06-22(I)**

##### **高通量块体材料制备方法、技术和装置研究进展**

王子, 吴宏宇, 罗思华, 朱礼龙, 黄再望, 江亮  
粉末冶金国家重点实验室, 湖南长沙, 410083  
中南大学粉末冶金研究院, 湖南长沙, 410083

围绕高性能结构材料的成分设计、制备工艺和应用服役中的关键问题, 发展高通量块体材料制备方法、技术和装置以数量级地提高样品制备合成的效率, 结合先进的表征技术和高通量表征的实验方法, 可以实现高效地建立材料成分-工艺-组织-性能关系。针对高温合金, 我们研发扩散多元节、梯度热机械处理等高通量材料制备方法制备成分和组织在不同微区实现变化的样品; 我们采用用电子探针、电子背散射衍射等分析技术表征样品的微区成分和晶体结构, 发展基于飞秒激光的时域热反射分析技术表征试样微区热导率和热容等热物性, 结合纳米压痕、显微硬度等测试方法表征试样微区的硬度等力学性能, 并且通过对高性能合金的高通量实验来验证高通量微区热物性和力学性能表征技术; 我们发展描述高温合金组织性能关系的计算模型。通过集成高通量材料制备方法、材料表征和材料计算技术, 发展形成的高通量块体材料高通量制备技术和装置不但能高效获得材料成分、工艺、组织、性能的数据和关系, 而且能在高性能合金的研发得到示范应用。

#### **E06-23(I)**

##### **材料基因工程数据库建设的挑战与实践**

Challenge and Strategy for Constructing the Materials Database for Genome Engineering

尹海清, 姜雪, 张聪, 张瑞杰, 刘国权, 曲选辉  
北京科技大学, 北京, 100083

材料基因组计划的提出和材料基因工程的实施, 是材料数据库成为材料界的热点话题。材料数据库的建设在国内外已有几十年乃至近百年的历史, 我国在本世纪初建设了国家级的材料数据库。但在大数据时代背景下的材料基因工程数据库, 以低成本高效地发现新材料、改善材料现有材料为根本建设需求, 无论从材料数据内容、数据库功能以及各方面应用, 都有了新的内涵和更为严苛的要求。本文从材料信息学和数据科学的视角, 从材料基因工程数据库的特点与需求、数据来源与分类、数据存储检索与共享、材料数据的深度应用以及人才培养等多方面, 对新形势下材料数据库的建设实施进行讨论。

关键词: 材料基因工程, 数据库, 材料设计, 材料信息学, 数据科学

#### **E06-24(O)**

##### **基于数据挖掘的无铅钙钛矿压电陶瓷材料电学特性研究**

纪晓波, 畅东平, 连正亨, 陆文聪  
上海大学

钙钛矿结构氧化物是一类奇特多变、性能丰富的功能材料。其中, 锆钛酸铅 (PZT) 系列压电陶瓷因具有高压电常数、高机电耦合系数以及较高的居里温度等优点一直占据着压电器件的统治地位。然而由于其所含的有毒金属元素铅会对人体健康和环境造成危害, 世界各国相继出台了限制含铅材料使用法令。因此, 开发对环境友好、性能优良的能够替代 PZT 的无铅压电陶瓷材料是当今材料科学领域的主要课题之一。

本工作借助于多种机器学习算法,对从大量文献中搜集整理得到的含铅和无铅钙钛矿压电材料组分、结构和性能数据进行了系统分析,构建了基于材料特征参数(如离子种类、掺杂浓度)的“组分-性能”强泛化关系模型;以特征参数为自变量构建多维搜索空间,借助关系模型通量预测了多维空间中所有实验点的性能数据;并结合高效全局优化算法,筛选出潜在的性能提高的实验优化点。

#### E06-25(O)

##### 金属的冲击响应与结构破坏:基于原子模拟的取向分析与 X 射线衍射表征

王亮<sup>1</sup>, 张兴明<sup>1</sup>, 邓磊<sup>1</sup>, 汤剑锋<sup>1</sup>, 肖时芳<sup>2</sup>, 邓辉球<sup>2</sup>, 胡望宇<sup>3</sup>, 罗胜年<sup>4</sup>

- 1.湖南农业大学理学院
- 2.湖南大学物理与微电子科学学院
- 3.湖南大学材料科学与工程学院
- 4.顶峰多尺度科学研究所

材料内部的微观结构演化、变形和破坏,决定了其宏观力学响应和性能,因此从实验上对材料的微观结构实时分析和表征,有着重要的科学意义。目前,实验上主要是通过对回收样品,利用 SEM 和 TEM 对材料微观结构进行表征来间接反映材料的变形机理。然而,这种研究模式无法直接获得材料在动态加载过程中的结构演化行为,无法有效区分不同加载条件对材料变形机理的影响。分子动力学(MD)模拟方法,在分析材料的动态结构演化方法,有着天然的优势,既可以实现对材料塑性行为及其力学响应进行实时分析,又可以对材料内部的位错、层错及晶界等微结构信息进行直接测量。然而,分子动力学模拟结果的准确与否,仍需要从实验上对其进行验证。因此,利用实验语言,即结合实验表征方法,分析分子动力学结果,是目前材料模拟研究的重要内容之一。为此,基于分子动力学模拟结果,我们发展了取向分析方法和基于 GPU 加速的 X 射线衍射成像方法,可以对模拟的结构进行有效实时表征。通过研究几种典型金属材料(FCC 金属铜和铝, BCC 金属钽, HCP 金属钛以及 CuZr 玻璃)在冲击载荷下的力学响应和结构变形,探讨了材料微观结构变形的演化规律和变形机理,揭示了金属缺陷,加载方式以及晶体结构与金属变形模式的影响。冲击载荷下,纳米晶铝、钽中晶界、晶体取向对孪晶变形都有明显的影响,孪晶在生长过程中促进了晶粒的细化,并导致明显的晶界迁移。加载模式的改变,纳米晶金属的变形模式也随之改变。在金属钽中,在高速冲击作用下(~2 km/s),结构无序化与再结晶是晶粒细化是材料的主要变形模式;而在二次冲击载荷下,晶界诱导的位错形核和运动是主要的塑性行为;利用斜坡加载方式,孪晶变形则是最主要的塑性机理。在 HCP 钛中,冲击作用下孪晶变形和  $\alpha \rightarrow \omega$  相变是材料的主要塑性变形模式,导致晶粒取向发生改变,且材料的变形行为呈现出明显的取向依赖性。在 CuZr 金属玻璃中,在高速冲击作用下,冲击熔化而非结晶导致 SRO 向 MRO 的转变。利用取向分析方法和 X 射线衍射成像方法,很好的反映和描述了材料微观结构的实时演化过程,同时为理解和分析实验结果提供了有效的理论指导。

#### E06-26(I)

##### 高通量热力学计算与微观组织模拟的直接耦合

陈双林<sup>1</sup>, 孙东科<sup>2</sup>, 吕杜超<sup>1</sup>, 曹伟生<sup>1</sup>, 朱军<sup>1</sup>, 张传<sup>1</sup>, 张帆<sup>1</sup>, 王云志<sup>3</sup>

- 1.CompuTherm LLC
- 2.东南大学
- 3.The Ohio State University

材料的微观组织模拟与宏观性能预判都离不开热力学相平衡的信息。CALPHAD 方法的发展,提供了一条准确、快速获得多元多相体系材料的热力学性质和相平衡关系的有效途径。微观组织模拟往往需要在大规模离散时空中进行求解,需要即时获得多维状态空间中的热力学相平衡信息。目前,研究者大多采用伪二元系、伪三元系法、预算表格法、预多项式拟合法等完成热力学计算与微观组织模拟的结合。这些方法均是从预置的结果中获取近似值代入微观组织模拟求解器进行计算,尽管降低了整体的计算量,但未能实现多元多相热力学计算与微观组织模拟技术的耦合。这不但成为阻碍包含微观组织模拟在内的材料加工过程模拟发展的瓶颈问题,也制约了材料模拟技术在实际多元多相材料体系中的广泛应用。针对这一问题,我们在多元多相平衡计算引擎 PanEngine 的基础上,增加了一个新的高通量热力学相平衡计算与数据管理模块“PanDataNet”,用于高通量计算和管理多元多相热力学、相平衡数据,为微观组织模拟和宏观性能预判准确、快速、即时地提供必要信息。我们已将此模块成功地与相场模拟方法相结合,从根本上解决了微观组织模拟与多元多相平衡计算的直接耦合的问题。PanDataNet 在材料模拟领域具有广泛的应用价值,将成为推动包含微观组织模拟在内的材料模拟技术发展的有效工具。

## E06-27(I)

### 高通量材料集成计算和数据管理云平台 MatCloud: 现状, 未来和挑战

杨小渝

中国科学院计算机网络信息中心

高通量材料集成计算和数据管理云平台 MatCloud 上线运行(<http://matcloud.cnica.ac.cn>)已有近一年时间, 目前注册用户截至目前已突破 600, 注册单位近 300 家, 申请专利 4 件, 软件著作权 4 件, 举办用户培训 5 次, 已基本支持 10000 次级的高通量计算。MatCloud 直接和计算集群和材料计算数据库相连, 用户通过浏览器直接可开展材料计算并实现了材料计算数据的自动采集和规范化加工(商业软件用户需自带版权)。使用过程中, 不少用户对 MatCloud 提出了更多的需求和建议, 希望 MatCloud 支持更多的功能。在这里我们向大家介绍 MatCloud 的现状, 未来展望, 和面临的挑战。我们希望更多用户使用 MatCloud 并提出意见反馈, 共同促进我国材料基因工程的发展。

## E06-28(I)

### 材料数据及数据管理

钱权 研究员

上海大学材料基因组工程研究院

材料数据连同高通量实验和高通量计算, 是材料基因组工程的重要组成部分。本报告将结合上海材料基因工程数据库建设, 从材料数据的自身特点出发, 重点讨论材料数据的规范化表示、多源异构材料数据的无模式存储、数据的高效检索、异构材料数据的集成与融合、数据的版权保护、数据共享以及数据的深度利用等。

## E06-29(O)

### 铯中辐照空洞异性生长行为的相场模拟

韩国民<sup>1,2</sup>, 王涵<sup>1,2</sup>, 林德焯<sup>1,2</sup>, 朱雪燕<sup>1,2</sup>, Shenyang Hu<sup>3</sup>, 宋海峰<sup>1,2</sup>

1.中物院高性能数值模拟软件中心

2.北京应用物理与计算数学研究所

3.Pacific Northwest National Laboratory

基于三维空洞相场模型研究了表面能异性和扩散异性对于铯中辐照空洞生长行为的影响。模型中, 表面能通过分子动力学计算, 表面能异性基于球谐函数引入。模型假设空位沿 C 轴方向具有较大迁移率, 而间隙原子沿基面内具有较大迁移率。模拟结果表明: (1) 铯中辐照空洞呈多面体形貌, 与 Wulff 理论分析吻合; (2) 不考虑扩散异性时, 空洞沿基面内生长; (3) 考虑扩散异性时, 铯辐照空洞出现了沿基面方向收缩, 沿垂直基面方向生长的异性生长行为。上述结论与实验结果相吻合, 铯中空洞异性生长行为主要与扩散异性有关。

## E06-30(O)

### 用于高效二氧化碳捕获的先进多孔材料的理论设计与模拟

田子奇

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

控制温室气体排放是当前能源和环境领域的热点课题, 多孔材料因其大比表面积和丰富的改性潜力, 被认为是可能的高效二氧化碳吸附剂。我们围绕多孔无定形碳和有序框架化合物两类多孔材料进行了理论模拟计算, 展现了数据驱动的材料设计理念。对于氮掺杂的多孔无定形碳体系, 我们从一系列小分子碎片化合物出发, 通过高精度量子力学计算, 考察了不同氮杂位点的热力学稳定性, 指出吡啶形和吡咯形氮位点相对于石墨烯形更加稳定, 并结合 XPS 光谱与实验进行了比对。量化计算同时表明, 热力学较不稳定的氮杂位点却对应着更强的二氧化碳吸附能力, 因此在实验中烧结多孔碳吸附剂时需要适当控制温度。另一方面, 我们研究了一类能够高选择性高容量吸附二氧化碳的金属有机框架(MOF)体系——CPM-33 族 MOF。在这类 MOF 中不存在强吸附位点, 但仍然具有极高的二氧化碳吸附量。我们采用巨正则蒙特卡洛计算重现了不同气体在这类 MOF 中的吸附等温线, 发现客体分子的引入将一个强吸附位点分割为两个较强吸附位, 从而显著提高了气体吸附量。我们筛选了不同金属中心, 获得了与实验一致的结果。我们进而将客体分子增加吸附位点的思路拓展到共价有机框架

(COF) 体系, 显示调控微孔环境可望有效增强多孔材料的气体吸附能力。

#### **E06-31(I)**

##### **轻合金的热力学、热物性数据库及其应用**

杜勇<sup>1</sup>, 刘树红<sup>1</sup>, 刘钰玲<sup>1</sup>, 徐凯<sup>1</sup>, 刘立斌<sup>2</sup>

- 1.中南大学粉末冶金研究院
- 2.中南大学材料科学与工程学院

铝合金、镁合金和钛合金的性能优良,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、镁合金和钛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、镁合金和钛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, 也可与相场模拟、透射电镜、三维原子探针相结合实现多元多相有色合金凝固及时效强化过程微结构演变的定量描述。

#### **E06-32(O)**

##### **钛合金硬度的理论计算及实验验证**

林成<sup>1</sup>, 黄土星<sup>1</sup>, 尹桂丽<sup>1</sup>, 赵志伟<sup>1</sup>, 赵永庆<sup>2</sup>

- 1.辽宁工业大学
- 2.西北有色金属研究院

钛及钛合金由于具有比强度高、耐腐蚀、生物相容性好以及优秀的高温性能等优点, 逐渐成为新兴的结构材料。本文以二元钛合金硬度为研究对象, 以固体与分子经验电子理论(EET)为理论基础, 计算了二元 $\alpha$ 、 $\beta$ 钛合金以及平衡态的二元 $\alpha+\beta$ 、亚稳 $\beta$ 钛合金的硬度, 并设计相关实验进行验证。研究结果如下:

- (1) 基于 EET, 提出了二元 $\alpha$ 钛合金硬度的理论计算方法, 并且, 在 Ti-x Al、Ti-x V 和 Ti-x Zr 三个合金体系中对计算方法进行验证, 合金硬度的理论计算值与实验值的平均误差分别为 4.67%、5.27%和 3.85%。
- (2) 基于 EET, 提出了二元 $\beta$ 钛合金硬度的理论计算方法, 并且, 在 Ti-x Fe、Ti-x V 和 Ti-x Mo 三个合金体系中对计算方法进行验证, Ti-x Fe、Ti-x V 和 Ti-x Mo 系合金硬度的理论计算值和实验值的平均误差分别为 2.72%、4.16%和 2.3%。
- (3) 基于 EET, 提出了二元 $\alpha+\beta$ 钛合金平衡态硬度的理论计算方法, 并且, 用 Ti-3Fe、Ti-6V 和 Ti-6Mo 三种 $\alpha+\beta$ 钛合金硬度的理论计算值和实验值符合较好, 平均误差为 4.69%。
- (4) 基于 EET, 提出了二元亚稳 $\beta$ 钛合金平衡态硬度的理论计算方法, 并且, 用 Ti-7Fe、Ti-18V 和 Ti-11Mo 三种亚稳 $\beta$ 钛合金对计算方法进行验证, 合金硬度的理论计算值与实验值之间的平均误差为 7.57%。

#### **E06-33(I)**

##### **薄膜材料高通量实验技术研究进展**

向勇, 吴帅, 闫宗楷, 张晓琨  
电子科技大学

材料基因工程是近年来兴起的材料研发领域的新思想和新方法, 其实质是通过高通量材料计算、高通量实验和数据库技术的有机结合实现新材料从研发到应用过程的高速推进。其中, 高通量实验技术作为材料基因工程的关键工具而受到广泛关注。正所谓“工欲善其事, 必先利其器”, 然而, 我国的材料基因工程才起步不久, 高通量材料合成装备的缺乏严重阻碍了高通量实验技术的发展, 因此开发新的高通量实验设备是实现高通量实验技术飞速发展的基础和前提。本文基于材料基因工程发展背景, 系统介绍了由本团队自主设计开发的高通量镀膜实验装备, 涵盖一套基于液相沉积技术的高通量组合化学水

浴沉积系统、一台基于物理气相沉积方法的高通量磁控溅射和一台高通量电子束蒸发设备。详细讨论了高通量薄膜组合材料芯片制备过程中的关键技术问题和解决方案，如薄膜沉积速率及均匀性控制、薄膜厚度梯度控制等，并基于上述设备开展了面向太阳能电池、锂电池、薄膜电子器件领域多种关键材料的高通量实验制备与评价。最后，对高通量实验技术发展面临的机遇与挑战进行了分析和总结，以期为我国材料基因工程的稳步发展提供有益参考。

#### E06-34(I)

##### 新型钙钛矿材料的筛选：从经验规律到人工智能

尹万健<sup>1</sup>，孙庆德<sup>1</sup>，李珍珠<sup>1</sup>，徐其琛<sup>1</sup>，侯柱锋<sup>1,2</sup>

1.Soochow University

2.NIMS, Japan

稳定性是钙钛矿太阳能电池产业化的最后一道瓶颈，因而成为当前该领域研究的关键科学问题。尽管如此，在过去的一个世纪里，钙钛矿稳定性判断仍然依赖于人类的经验规律，即结构容忍因子(tolerance factor)。

本报告将汇报我们最近一年来在钙钛矿结构稳定性方面的研究进展。我们首先通过第一性原理高通量计算，计算了 138 种钙钛矿材料的分解能。我们发现稳定性与结构容忍因子  $t$  的关联性不强，并进一步依据 Pauling 第一法则引入八面体因子  $\mu$  和材料堆积比  $\eta$ ，构造出新的稳定性 descriptor  $(\mu + t)^{\eta}$ ，该 descriptor 与热力学稳定性线性相关。作为稳定性 descriptor， $(\mu + t)^{\eta}$  对任何两个钙钛矿之间的相对稳定性预测准确度接近 90%，大大高于结构容忍因子的 70% [1,2]。

我们进一步结合机器学习和第一性原理计算方法，提出了比经验规律更加准确的钙钛矿稳定性判断策略。我们首先计算 354 种卤化物钙钛矿的分解能，建立分解能和组离子半径之间的机器学习模型，进一步将相对稳定性预测准确度提高到 95%，并据此模型研究了 14190 种卤化物双钙钛矿的稳定性。机器学习结果准确确定了近千种稀土金属卤化物钙钛矿的稳定性，并进一步提出了改善混合钙钛矿稳定性的元素成分和浓度配比的实验建议[3]。

参考文献：

[1] Qingde Sun and Wan-Jian Yin\*, JACS 139, 14905-14908 (2017)

[2] Fazel Shojaei, Wan-Jian Yin, preprint arXiv:1803.05604.

[3] Zhenzhu Li, Qichen Xu, Qingde Sun, Zhufeng Hou, Wan-Jian Yin, preprint arXiv:1803.06042.

#### E06-35(I)

##### 智能的材料数据挖掘平台与应用

陆文聪\*，张庆，畅东平

上海大学材料基因组工程研究院，上海市宝山区上大路 99 号，200444

\*Email: [wclu@shu.edu.cn](mailto:wclu@shu.edu.cn)

近年来，材料数据挖掘研究在加快新材料研发过程发挥了重要作用。尽管数据挖掘商用软件和开源软件的应用越来越广泛，但目前还没有针对材料数据库和材料高通量筛选研究的在线建模平台。为此，我们在国家重点研发计划项目“材料基因工程专用数据库和材料大数据技术”（所属专项：材料基因工程关键技术与支撑平台）的支持下，开发了智能的材料数据挖掘平台，旨在推进材料数据库与数据挖掘技术的融合应用，分享材料数据挖掘算法和模型，降低材料研究者们使用机器学习算法的成本，使材料设计者能通过直观的图形界面递交相应的任务，并获取对材料设计有参考意义的结果，包括基于数据挖掘模型的新材料高通量筛选结果。

本平台不仅含有我们自主编写的常用材料数据挖掘算法，还有基于 Scikit-Learn（机器学习算法开源包）的二次开发，使得用户能够通过图形界面直接调用其内部的算法。目前该平台已成功应用于钙钛矿材料居里温度的高通量筛选研究工作，在变量筛选、模型选择和参数优化上初步体现了“智能化”的功能，进一步的在线智能化辅助材料设计功能还在开发中。

关键词：数据挖掘平台；机器学习；材料基因组工程；钙钛矿材料

#### E06-36(O)

##### 铀钕合金梯度材料的高通量实验研究

张雷，莫文林，张德志，法涛

中国工程物理研究院材料研究所

铀元素具有放射性、高密度以及良好的金属特性，在核工业领域有非常广泛的应用。合金化是改善铀的力学性能和抗腐蚀性能的有效途径。合金化元素的添加能够改善铀合金的抗腐蚀性能并增加强度，同时也会使铀被稀释，导致合金密度的下降，对核性能带来负面影响。因此，如何选择合适的合金元素比例，既可以改善铀合金的综合性能，又不会使合金的密度过低而影响核性能，是铀合金研发中亟需解决的问题。由于铀合金的放射性，单纯利用实验手段探索新合金的代价过大。因此我们借鉴材料基因工程的思想，采用扩散偶的方式制备了铀铈合金梯度材料，并通过同步辐射光源的微区 X 射线分析方法对样品的结构和成分进行了高通量表征，初步建立了铀铈合金的高通量筛选方法，为进一步的新合金研究奠定了基础。

#### **E06-37(O)**

##### **Cu-2.3Ni-0.5Si 合金高能 X 射线原位实验研究**

华艳红，聂志华，谭成文，于晓东

北京理工大学

时效强化型 Cu-Ni-Si 合金具有高强度、高导电性的特点，广泛应用于电子通信行业，主要用作集成电路中的引线框架材料，成为近些年来各国的研发重点。作为电路板中承载芯片的主要材料，引线框架的力学性能在很大程度上影响着电路板的使用寿命，因此研究 Cu-Ni-Si 合金在拉伸变形过程中的宏观和微观变形机制具有重大意义。

本论文利用高能 X 射线这一高通量材料表征技术，对冷轧后不同时效制度下 Cu-2.3Ni-0.5Si(质量分数)合金进行了原位实验研究，得到了形变热处理后 Cu-Ni-Si 合金在原位拉伸中的微观应力-应变演变规律，探究了不同时效时间对 Cu-Ni-Si 合金内部各晶面的变形机制，明确了纳米析出相在 Cu-Ni-Si 合金发生拉伸过程中对材料微观力学性能起到的作用。

#### **E06-38(I)**

##### **数据挖掘技术在材料设计应用中的探索**

于金鑫<sup>1,2</sup>，郭顺<sup>2</sup>，姜青山<sup>2</sup>，王翠萍<sup>1</sup>，刘兴军<sup>3,1</sup>

1.厦门大学材料学院及福建省材料基因工程重点实验室

2.中国科学院深圳先进技术研究院

3.哈工大（深圳）材料基因与大数据研究院

将数据挖掘等人工智能方法融入材料设计中是目前材料学科的发展方向之一。通过将已有数据进行整合并采用机器学习算法进行分析可以获得定量描述材料成分-工艺-性能关系的数学模型进而为材料的设计提供数据支撑，大大节省成本、缩短研发时间。本文采用数据挖掘分别对功能材料和传统结构材料的设计进行了探索。

金属玻璃因其优异的强度、硬度和良好的耐蚀性等受到了广泛的关注。目前，金属玻璃的研究热点仍然是如何提高其玻璃形成能力和塑性。本文通过采用机器学习算法，对文献中记载的金属玻璃相关数据进行了数据挖掘，建立了定量描述金属玻璃成分和力学性能关系的数学模型。通过模型对特定体系的成分进行了优化，并通过实验进行验证。

与功能材料相比，传统结构材料受工艺影响较大。因此目前大部分采用数据挖掘技术的文章都回避了工艺。本文采用先进的机器学习算法对上海梅山钢铁股份有限公司提供的热轧钢数据进行了尝试。通过模型，可以获得各元素含量、各工艺参数与钢性能间关联性的强弱及正负，研究发现碳当量和粗轧炉温温度对钢的性能影响最大。同时，研究了合金含量和碳当量对钢材性能的影响。研究发现，增大合金含量的上限可以使钢获得更高的强度与韧性；碳当量与钢的强度线性相关，每增加 1% 的碳当量钢的屈服强度平均提高 800MPa。通过模型，可以根据钢材的性能要求反向设计钢的成分和加工工艺，为钢材设计提供指导。

参考文献：

1. E. Perim, D. Lee, Y. Liu, et al. Nat. Commun.7 (2016) 12315-12324.

2. A. Agrawal, P. D. Deshpande, A. Cecen, et al. IMMI. 3 (2014) 8-27.

#### **E06-39(O)**

##### **高通量扫描纳米束衍射技术的数据分析处理**

吴彪<sup>1,2</sup>，刘梅<sup>1,2</sup>，邢辉<sup>1,2</sup>，张澜庭<sup>1,2</sup>，汪洪<sup>1,2</sup>

1.上海交通大学 材料科学与工程学院，上海 200240

2.上海交通大学 材料基因组联合研究中心，上海 200240

快速、大量地获取有关多晶样品的晶体结构、晶粒取向分布信息对于进一步理解材料的结构-组织-性能关系非常重要。本文在透射电子显微镜（TEM）的纳米束衍射（NBD）技术的基础上，发展了一种自动、快速地表征纳米多晶材料晶体结构和晶粒取向分布的新技术——扫描纳米束衍射（SEND）。为了自动批量处理所得到的谱图（ $\sim 10^3$ 量级），我们发展了相应的对中、分类及可视化方法。例如，采用基于加强相关系数最大化（ECC）算法的技术对谱图进行自动对中处理，消除实验中的漂移，提高机器分类准确度。比较了不同分类算法的效果，并探讨了与对应明场衍射衬度像的异同，证明本方法适用于细小复杂组织结构的分析。

关键词：纳米束衍射；高通量；聚类分析

联系人：吴彪 1903214207@qq.com

#### **E06-40(I)**

##### **高通量第一原理计算方法在合金结构搜索和材料设计中的应用**

杨小宝

华南理工大学物理与光电学院

新材料的理论研究主要包括结构搜索和材料设计,需要解决两类主要问题: 1.什么结构是稳定的?2.什么结构具有需要的性能?在本报告中,我们通过两个方面讲述理论计算在纳米材料研究中的应用:

1) 基于结构识别的全局搜索和材料设计的方案。对于石墨烯团簇,我们提出了有效描述体系电子性质的模型,实现了基于性能的结构搜索,并将该方法推广到其他相关体系。对于半导体固溶体,我们考虑了不同浓度对应的可能结构,并进行了高通量第一原理计算,根据形成焓解释了实验中稳定结构的浓度分布。[RSC Adv 7, 37881 (2017), Sci. Rep. 7, 16211(2017), ACS Photonics 4, 2556 (2017), J. Chem. Phys.148, 014306 (2018)]

2) 硼纳米体系的研究。稳定的硼平面纳米结构是三角晶格碎片加上合适比例的空位,对应的是硼原子和空位形成的“合金”结构,我们确定了不同尺寸下稳定的硼团簇结构,并讨论了在不同衬底下硼平面结构的演化,预测了一系列具有半导体特性的硼平面单层结构,为硼纳米结构研究提供新的思路,有可能使其成为媲美石墨烯的新型材料。[J. Chem. Phys. 142,214307(2015),Nano Research 9, 2616(2016),J. Phys.Chem.C121,11950 (2017),J. Am. Chem. Soc. 139, 17233(2017)]

#### **E06-41(I)**

##### **多元合金互扩散系数矩阵及原子移动性参数数据库的自动化获取**

张利军, 钟静

中南大学粉末冶金国家重点实验室

获取多元合金精准的互扩散系数矩阵甚至原子移动性参数数据库是进行高效合金设计的关键。本文首先概述当前多元合金互扩散系数矩阵及原子移动性参数数据库的现状 & 获取方法。随后介绍本研究小组近年来基于 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计算软件 HitDIC (High-throughput Determination of Interdiffusion Coefficients, <https://hitdic.com>)。接着详细介绍 HitDIC 的最新进展,包括: ①通过引入机器学习技术,如 MCMC (Markov chain Monte Carlo) 和统计测试等,实现了 HitDIC 获取互扩散系数矩阵的自动化过程; ②基于层次优化策略和高效并行计算技术,也实现了合金原子移动数据库的自动化获取。最后展示了镍基高温合金和高熵合金面心立方相互扩散系数矩阵及原子移动性参数数据库的自动化获取,并进一步分析新一代镍基高温合金中 Re 的可能替代元素与合金成分设计的关键,以及高熵合金的缓慢扩散效应。

感谢国家重点研发计划(资助号: 2016YFB0301101)及国家自然科学基金面上项目(资助号: 51474239)的支持。

#### **E06-42(O)**

##### **基于人工神经网络的原子多体势研究**

吴妃锋, 单斌

华中科技大学先进材料设计实验室

分子动力学模拟在原子尺度上应用十分广泛,势函数对计算结果起着决定性作用而受到了人们的广泛关注。于是,人们一直在不断尝试开发出高精度高效率的势函数。势能面(PES)是描述任何系统的基本量,它通常是关于原子坐标的能够提供势能及其导数原子相互作用力的高维函数。对于多原子系统,这个函数可能十分复杂,设计合理的函数形式十分困难。

神经网络具有灵活的函数形式，也有论文表明它可以无限趋近于任意的函数，这成为拟合 PES 的基础。我们通过一系列努力引入对称函数构建了神经网络势，它可以运用于所有类型体系的预测（只要它的训练集包含了该类型），并基于 Cu 体系进行了神经网络势的搭建，其预测结果与参考计算 DFT 平均相差 0.01eV 每个原子。神经网络势应该会逐步替代其他的势函数，神经网络相比其他势函数能够更加细腻的刻画原子间的相互作用，而且对于那些不能简单的使用某一种成键关系的体系，神经网络势可以不考虑其中的作用关系而直接构建。

#### E06-43(O)

##### 多组元铜合金精准相图热力学和扩散动力学数据库的开发及其在铜合金设计中的应用

汤颖<sup>1,2</sup>, Qing Chen<sup>2</sup>

1.河北工业大学 材料科学与工程学院, 天津, 300131

2.Thermo-Calc Software, Råsundavägen 18, SE-169 67 Solna, Sweden

采用 CALPHAD 方法并结合实验测定、第一性原理计算及理论预测，本工作建立了包含 29 个元素的多组元铜合金精准相图热力学 (TCCU) 和扩散动力学 (MOBCU) 数据库。采用所建立的相图热力学数据库可以对多元铜合金进行相图、相分数、液相面以及热力学性质等计算，而通过扩散动力学数据库可以得到铜合金中液相和 FCC\_A1 相的精准扩散系数。此外，通过耦合热力学和动力学数据库并采用 DICTRA 和 TC-PRISMA 软件包可以对多元铜合金中扩散控制相变过程如凝固过程、形核析出过程等进行精准动力学模拟。随后，本工作给出了上述数据库在不同铜合金中的应用实例。结果表明：模拟计算结果同实验结果相吻合，证明所建立的热力学及动力学数据库精确、可靠。本工作所建立的铜合金相图热力学数据库以及扩散动力学数据库可望为新型铜合金的设计提供理论基础和支撑，以加速高性能铜合金的发展。

#### E06-44(O)

##### 合金微观组织-力学性能集成模拟的初探

徐广龙, 崔予文

南京工业大学材料科学与工程学院

随着材料基因组计划的实施，合金“成分设计-微观组织的调控-力学性能的预测”已经成为材料高通量计算领域的主线。报告回顾了计算相图热力学(CALPHAD)、扩散动力学、相场方法、连续位错动力学等计算方法在能量表达式与动力学方程上异同点，阐述了以“能量平衡”串联各计算分支的热动力学基础。在此基础上，分别以近  $\beta$  钛合金中  $\alpha$  相的析出和回溶例证 CALPHAD 与扩散动力学的耦合应用；以 Fe 基形状记忆合金中马氏体相变和力学行为例证 CALPHAD 与相场方法的耦合应用；以 Q&P 钢的组织演化例证连续位错动力学模拟与热动力学(半)定量化的朗道相场方法集成应用，并对未来“微观组织-力学性能”的精确模拟与调控作出展望。

#### E06-45(I)

##### 纳米晶固溶体合金体系稳定性的多尺度耦合计算

宋晓艳, 唐法威, 王奇, 刘东

北京工业大学

\*Email: [xysong@bjut.edu.cn](mailto:xysong@bjut.edu.cn)

与传统成分的传统粗晶合金材料相比，纳米晶合金常具有更优越的力学性能和功能特性。然而，在实际应用中，纳米晶合金的组织稳定性是其批量制备加工和规模化工程应用的主要瓶颈。因此，纳米晶合金微观组织稳定性的影响因素及其调控机理的研究至关重要。本研究围绕纳米晶合金晶粒组织稳定性的科学问题，构建了跨层次、多尺度耦合计算模型。从理论上分析预测了纳米晶固溶体合金的内禀特性、热稳定性以及不同条件下的稳定性强化机制，基于计算结果优选出兼顾高稳定性和使用性能的材料体系，为纳米晶合金材料的设计研发提供了理论依据和可行途径。

针对弱偏聚纳米晶固溶体合金体系，构建了第一性原理/热力学耦合模型。以 Cu-Zn 纳米晶体系为例，计算和分析了溶质偏聚行为随电子结构、溶质浓度、晶粒尺寸和温度的变化关系。发现偏聚能随溶质浓度呈非单调变化趋势，吉布斯自由能变化特点预示在特定溶质浓度和温度条件下，通过初始晶粒尺寸范围的调控可获得具有良好热稳定性的纳米晶组织。针对强偏聚元素的特点，采用真实原子模型构建了适用于强偏聚纳米晶固溶体合金体系的热力学模型。以 W-Sc 纳米晶体系为例，计算揭示了强偏聚体系中存在吉布斯自由能随晶粒尺寸变化的三类规律和对应的热稳定性机制。开展了系列实验，验证了模

型预测结果，在高温条件下获得了具有超高热稳定性的 Cu-Zn 和 W-Sc 纳米晶固溶体合金，具有重要的实际应用潜力。

关键词：纳米晶固溶体合金；多尺度耦合模型；高温稳定性；强偏聚体系；弱偏聚体系

#### **E06-46(I)**

##### **锂离子电池离子电导率描述因子的多层级过滤式特征分析方法**

刘悦，郭碧茹，赵天酩，王达，施思齐

上海大学

由于对锂离子电池固态电解质化合物微观结构的认知尚未清晰，难以通过直接测量或具体计算公式获得可能影响离子电导率的候选描述因子。本文首先从化合物的晶体参数、电负性、原子半径、原子间距等角度出发，实现了对影响离子电导率的候选描述因子的定性定量分析，构建用于机器学习的锂离子电池固态电解质材料数据集。其次，针对数据集中特征存在的稀疏性、不相关性和冗余性问题，本文提出了多层级过滤式特征分析方法。该方法综合目前已有特征选择方法的优缺点，采取集成式的特征选择算法对影响固态电解质离子电导率的特征进行多层级过滤式的特征选择。在多层级过滤中，逐层通过稀疏性评估、不相关性评估和冗余性评估进行特征选择，并根据每层特征选择的结果采用序列后向法生成特征子集，以迭代的方式使用模型验证和调整每层过滤中的阈值来获取当前最优或次优特征子集。实验证明该方法可以有效地剔除原始特征集中存在稀疏性、不相关性和冗余性特征以获取最优或次优特征子集，提高模型预测精度，并且在一定程度上解决了领域专家在离子电导率预测建模中特征选择难的问题。

#### **E06-47(O)**

##### **合金相析出动力学的多维度研究**

李永胜，朱礼慧，闫志龙

南京理工大学

基于二维和三维相场模拟以及 TEM 和三维原子探针实验，研究合金相分解微观组织和动力学演化。通过实验数据与模拟比较来修正模拟参数，从而进行高通量相场模拟，获得定量相分解动力学。

以 Fe-Cr 基合金和 Ni 基高温合金为例，研究了不同温度、成分条件下二维和三维相场模拟、以及 TEM 和 3DAPT 实验高分辨组织，通过在相场自由能中加入外应变，系统研究 Fe-Cr 基合金富 Cr 纳米尺度  $\alpha'$  相的初始分离速率、分离机制和粗化动力学行为，以及 Ni-Al 合金沉淀相的动力学演化。将二维和三维模拟结果与实验比较，发现三维模拟结果与实验更接近；三维原子探针(3DAPT)和透射电子显微镜(TEM)实验与三维相场模拟的数据对比表明，模拟与实验数据具有相似的演化规律，据此修正模拟参数，可进行三维高通量定量模拟研究。对 Fe-Cr 基合金的研究结果表明： $\alpha'$  相的分离表现出明显的形核、长大和粗化为主的三阶段， $\alpha'$  相的粗化速率不仅与浓度有关，还与相分解机制有关，非经典形核与长大机制下的粗化速率更快。随着温度的升高，外加应变会更明显加快早期相分离的速率，且压应变对相分解速率和组织取向影响显著。通过 Ni-Al 合金的实验和模拟结果，获得序参数场的扩散系数以及实空间模拟时间。

#### **E06-48(O)**

##### **过渡金属离子在统一半导体材料及宽禁带化合物电子结构尺度的应用**

屈冰雁，王雷\*，周如龙

合肥工业大学 材料科学与工程学院 合肥市屯溪路 193 号

\*Email: leiw03@126.com TEL: 13225608692

认识无机化合物功能材料的性能，对材料电子结构的理解和对离子本身性质的认识非常重要。基于这个目的，本课题组近年来一直从事众多发光材料、光催化材料电子结构的整理和分析工作，构建了一个系统完善的数据库，主要侧重稀土离子的光谱分析、过渡金属离子光谱的分析、不同离子的杂质能级、化合物能级结构的认识和理解上。在长期的电子结构研究中发现，杂质离子的能级位置影响材料的发光性能。材料的对称性影响离子的光谱行为。两者结合，可以为认识和理解材料的性质提供更加有意义的帮助。比如，通过过渡金属离子的光谱，可以在同一尺度下确定大多数化合物的价带顶和导带低的位置。通过相关方法，已界定了包括铝酸盐、磷酸盐、硅酸盐、硼酸盐、氟化物、以及很多二元氧化物在内的近 700 种化合物的价带顶和导带低的位置。相关研究成果为设计和预测不同材料的发光、光催化、电学不同性质提供直接参考和帮助。

本项目受国家自然科学基金（Grant No: 51302059 和 11404085）以及安徽省自然科学基金（Grant 1708085ME121）资助。

## E06-49(I)

### 高通量扩散多元结技术

崔予文

南京工业大学

本研究提出将扩散多元结技术与金属材料的实际热处理工艺相结合，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 和 Mg 等轻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。

## E06-50(I)

### 螺旋梯度连铸高通量制备方法的研究

李静媛<sup>1</sup>，金充<sup>1</sup>，谢建新<sup>2</sup>

1.北京科技大学材料科学与工程学院

2.北京科技大学新材料技术研究院

本文介绍一种采用普通熔炼铸造方式开发的合金高通量制备新方法、新技术和新装置。其制备过程是将多种原料粉末通过自动调节的送料器逐步送入混合料斗，然后流入熔腔；熔腔内放置有紧贴内壁的螺旋杆，混合粉顺着螺旋杆缝隙旋转流下并逐步熔化；最后经底部结晶器凝固后拉出。通过该技术可制备出成分连续梯度分布的合金棒材试样，试样组元数目不限、成分变化梯度不限。并且，所制出的合金棒材为常规试样尺寸，其组织性能与工业化生产接近，可以满足拉伸、冲击等对试样尺寸有要求的材料力学、腐蚀、物理性能测试的要求。初步试验表明，通过该设备可制备出合金元素成分梯度 0-15% 的 Al-Zn-Mg 合金棒材，满足了硬度、腐蚀、热处理等实验测试的要求。未来，通过改进熔腔和螺旋杆的材质，有望实现所有常规合金、高熵合金、高温合金等各类试样的高通量制备，实现多组分新材料体系的发现、快速筛选和性能优化。

## E06-51(O)

### Al-Si-La 三元系 600°C 和 800°C 等温截面相关关系

涂浩，杜巨峰，苏旭平

常州大学材料科学与工程学院

通过电子探针分析和 X 射线粉末衍射相结合的方法建立了 Al-Si-La 三元体系在 0-50 at.% La 范围内的 600°C 和 800°C 等温截面。在这项工作中共有三个三元化合物被确认，并且暂时标记为  $\tau_1$ 、 $\tau_2$  和  $\tau_3$ 。三个三元化合物 ( $\tau_1$ - $\tau_3$ ) 在 600°C 被发现。 $\tau_1$  的成分范围为 43.3at.%-61.5at.% Al, 5.0at.%-21.3at.% Si, 33.5at.%-35.5at.% La。只有一个三元化合物  $\tau_1$  在 800°C 被确认。 $\tau_1$  相横跨 43.6at.%-62.6at.% Al, 4.1at.%-22.5at.% Si, 33.1at.%-35.2at.% La。在 600 和 800°C，Al 在  $\text{LaSi}_2$  中的溶解度分别为 39.9at.% 和 41.3at.%。Si 在  $\text{Al}_2\text{La}$  中的溶解度不管在 600 还是 800°C 下都非常小。

## E06-52(O)

### Ti-Nb-(Zr, Cr)体系富 Ti 端体心立方相的互扩散和原子移动性

陈伟民

暨南大学先进耐磨蚀及功能材料研究院

准确的互扩散信息数是生物金属材料制备和热处理工艺制定和优化的重要参考。本工作首先通过扩散偶技术和 Matano-Kirkaldy 方法确定了 1273K 温度下 Ti-Nb-Zr 和 Ti-Nb-Cr 体系富 Ti 端体心立方相的三元扩散系数。随后，基于本工作所获得的三元互扩散系数和文献所报道的 Ti-Nb-Zr 和 Ti-Nb-Cr 体系二元系扩散系数和原子移动性参数以及 Ti-Nb-Zr-Cr 体系的热力学数据库，借助 DICTRA (Diffusion Controlled TRAnsformation) 软件程序包优化获取了一套自洽的 Ti-Nb-Zr 和 Ti-Nb-Cr 体系体心立方相的原子移动性参数。并且，为了验证该原子移动性的准确性，本工作将实验所获得的扩散性质（包括互扩散系数、成分分布曲线、互扩散通量和扩散通道等）与基于本工作优化得到的原子移动性参数所计算或者模拟出来的结果进行详细的对比。本工作所获得的 Ti-Nb-Zr 和 Ti-Nb-Cr 体系体心立方相的原子移动性参数能够计算出准确的富 Ti 端较宽成分范围内的互扩散系数矩阵。

## E06-53(I)

### 基于液滴阵列微流控技术的高通量材料筛选平台

巫金波

上海大学

通过高通量技术快速地筛选出所需要的材料是材料基因组工程研究的目的之一。高通量材料实验技术开发一系列更精准、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、材料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。利用微流控芯片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。但是目前大部分微流控芯片是封闭式平台，无法与大部分的表征技术（扫描电镜、原子力显微镜、XRD 等）联用。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，介绍基于表面张力限制的开放式高通量液滴阵列微流控材料制备平台，其通量达到 10kHz，一次制备样品数达到数万个，阐述微流控芯片构建金属有机框架 MOF 材料、钙钛矿量子点材料的高通量制备及表征的一体化平台原理，实现制备一批，表征一批，实现按需设计及制备。

参考文献：

- [1] Jinbo Wu, et al, Anal. Chem., 2012, 84, 9689–9693.
- [2] Jinbo Wu\*, et al, Adv. Mater. Interfaces, 2017, 4, 1600801.
- [3] Jinbo Wu\*, et al., Chin. Phys. B. 2018, 27, 2, 029202.
- [4] Jinbo Wu\*, et al., RSC Adv., 2018, 8, 3680 – 3686.
- [5] Jinbo Wu\*, et al., Anal. Chem., 2018, 90, 4303–4309.
- [6] Jinbo Wu\*, et al., Appl. Surf. Sci., 2018, 442, 189-194.

## E06-54(I)

### 基于材料基因组工程的稀土永磁材料的成相规律研究

王江

桂林电子科技大学

稀土永磁材料广泛应用于工业自动化、智能制造及节能环保等重要领域。稀土永磁产业主要依赖于 Nd、Pr、Dy、Tb 元素的消耗，进一步加剧了储量丰富的 La、Ce 等元素的过剩。因此，如何对 La、Ce 等高丰度稀土元素的高效利用是稀土永磁材料领域的共性难题。

采用材料基因组工程的高通量多元扩散节技术，利用 X 射线衍射（XRD）、电子探针显微分析（EPMA）和示差扫描量热法（DSC）等多种表征手段，实测 Ce-Fe-B、La-Fe-B、Pr-Fe-B 等三元合金的晶体结构、相成分、相平衡关系以及成相规律。在系统地评估分析文献实验数据和热力学优化计算结果的基础上，结合本工作实测的数据，采用相图热力学计算方法（CALPHAD），优化确定了稀土 RE-Fe-B 合金体系中二元系以及部分三元系（Ce-Fe-B、La-Fe-B、Pr-Fe-B）的热力学模型参数，外推构建了 La-Ce-Pr-Nd-Fe-B 多元合金体系的相图热力学数据库。基于所构建的热力学数据库，采用希尔（Scheil）凝固模拟方法，对高丰度稀土 RE-Fe-B 永磁合金进行凝固过程模拟，获得关键永磁合金凝固过程的非平衡凝固路径、各相体积分数以及多种元素的在各相中的分布，为高效建立成分-晶体结构-组织结构-磁性能的构效关系提供了重要的热力学依据。

## E06-55(O)

### 光催化材料的并行合成与高通量表征

孙松\*，高琛

中国科学技术大学国家同步辐射实验室、能源材料化学协同创新中心，安徽合肥，邮编 230029

\*Email: suns@ustc.edu.cn

利用光催化技术将太阳能转化为高品质的化学能是解决能源危机和环境污染最具潜力的手段之一[1]。开发高效、稳定的半导体光催化剂材料是光催化研究的核心。然而，由于光催化过程十分复杂，其中的反应机理和动力学尚不明确，已开发的光催化材料的活性仍然较低，难以满足应用需求。材料基因组学方法是解决这一问题的有效途径。我们发展了一些光催化

材料的并行合成方法和技术,并建立了相应的高通量表征平台,在此基础上,成功开发了一些高效光催化剂。主要包括:研制了组合溶液喷射合成仪,可用于多类型、多组分反应前驱液的多通道精确输送[2];发展了阵列式溶液燃烧合成技术[3];发展了气相降解光催化剂的同步辐射红外显微光谱表征技术[4];获得了用于降解液、气相有机污染物和分解水的 $\text{YAlO}_3$ 、 $\text{CaIn}_2\text{S}_4$ 和多离子共掺 $\text{TiO}_2$ 等高效光催化剂[5]。

关键词:光催化;降解污染物;水分解;组合溶液喷射;红外显微;溶液燃烧

参考文献:

- [1] A.Fujishima, K.Honda, *Nature*, 1972, 238, 37.
- [2] 专利号: CN200410065794.6, CN200420108904.8.
- [3] C. Gao, et al, *Journal of Combinatorial Chemistry*, 2005, 7, 942-946; 2009, 11, 523.
- [4] S.Sun, et al, *ChemCatChem*, 2014, 6, 2535.
- [5] J. Ding, et al, *Journal of Materials Chemistry A*, 2016, 4, 12630; *Appl. Catal. B: Environ*, 2018, 224, 322.

## E06-56(O)

### 高通量梯度材料制备方法

徐玉召<sup>1</sup>, 李静媛<sup>1</sup>, 赖慧颖<sup>1</sup>, 张源<sup>1</sup>, 祁明凡<sup>1</sup>, 谢建新<sup>2</sup>

- 1.北京科技大学材料科学与工程学院
- 2.北京科技大学新材料技术研究院

本文介绍一种高通量梯度材料制备新装置,将多种原料粉末通过自动调节送料器送入混合料斗,然后流入圆筒状熔腔;熔腔内有螺旋杆,混合粉末通过螺杆旋转推进送料,熔腔外有加热系统逐步使混合粉融化;最后经圆筒底部结晶器凝固拉出。通过该设备实现高通量多组元梯度分布的金属块体制备,缩短了材料从成分设计、熔炼制备进程,降低成本,提高材料制备效率,后续还可以对其进行挤压、轧制等变形处理。通过初期试验该设备可制备出成分梯度分布 Al-Mg 合金棒材,可以实现硬度、热处理、腐蚀等实验要求。后期进一步优化设备材质,实现多组元合金体系开发。

## E06-57(I)

### 第一原理研究稀土钽酸盐的相变机理及陶瓷孪晶形成机制

冯晶

昆明理工大学

采用高温原位 XRD 和 Raman 表征稀土钽酸盐材料的高温相变,HRTEM 发现了相变过程中形成的陶瓷孪晶。采用第一原理构建了稀土钽酸盐的两种晶体结构,四方相和单斜相,通过朗道自由能的计算分析发现相变起源于正反两个方向的驱动力,并具有相同相变自由能的绝对值,同时第一原理计算表明,相变发生时金属原子仅仅发生微调,仅氧原子迁移了较大的距离,理论计算相变发生温度为 1430°C,实验测试相变点为 1426 +/- 7 °C,计算与实验非常吻合。

## E06-58(I)

### 第一性原理高通量计算平台与材料应用案例

First-Principles High-throughput Repository in Shanghai University and Case Studies in Materials

杨炯<sup>1</sup>, 席丽丽<sup>1</sup>, 骆军<sup>2,1</sup>, 刘斌<sup>2</sup>, 朱文浩<sup>3</sup>, 张文清<sup>4,1</sup>

- 1.上海大学 材料基因组工程研究院
- 2.上海大学 材料学院
- 3.上海大学 计算机学院
- 4.南方科技大学 物理系

高通量材料设计是材料科学领域的一个新兴的研究方向,合理利用高通量的手段,可以大幅度加快新材料的研发速度。在上海大学,我们开发了第一性原理高通量计算平台 Materials Informatics Platform (MIP),为各个材料研究方向提供晶体结构在线查询以及高质量的第一性原理计算服务。在热电材料领域,鉴于目前的热电高通量研究手段难以准确计算体系的电子和声子高阶相互作用,我们开发了考虑电子弛豫时间的电输运算法,并部署于 MIP 平台。利用该算法,我们预测了一系列高性能的类金刚石结构的硫族化合物。其中,一个不属于任何材料数据库的全新化合物  $\text{Cd}_2\text{Cu}_3\text{In}_3\text{Te}_8$  被实验实现,其高温热

电优值超过 1.0。该算法与平台的结合还被用于其它类型热电材料的设计。此外，MIP 正被利用于更多材料性质的计算以及新体系预测。

#### E06-59(I)

##### 特种防护材料基因数据库：相图与材料设计

常可可

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

面向国家核能安全和海洋强国的重大战略需求，特种防护涂层材料基因数据库的建设势在必行。相图是“材料设计的索骥图”，而涂层的制备过程中，系统一般远离平衡态，获得的相为亚稳相，传统 CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams, 相图计算) 方法的应用遇到了一定的挑战[1,2]。本报告工作通过集成 CALPHAD、第一性原理计算和高通量镀膜实验的方法，研究涂层材料的亚稳和稳态相图，计算结果得到了实验验证[1,3]。由此，初步建立了相关材料体系的相图与性能数据库，通过组分-制备工艺-组织结构和性能的关系，指导合金和陶瓷涂层的设计[4]。本工作基于材料基因工程的思想，有望促进高性能防护材料的高效率研发、应用于核燃料包壳系统和海洋工程装备领域。

参考文献：

- [1] K. Chang, et al., Estimation of the activation energy for surface diffusion during metastable phase formation, *Acta Mater.* 98 (2015) 135-140.
- [2] W. Zhang\*, D.M. Cupid, P. Gotcu, K. Chang\*, D. Li, Y. Du, H.J. Seifert, High-Throughput Description of Infinite Composition-Structure-Property-Performance Relationships of Lithium-Manganese Oxide Spinel Cathodes, *Chem. Mater.* 30 (2018) 2287-2298.
- [3] K. Chang, et al., Modeling of metastable phase formation diagrams for sputtered thin films, *Sci. Technol. Adv. Mater.* 17 (2016) 210-219.
- [4] K. Chang, et al., Theory-guided bottom-up design of the FeCrAl alloys as accident tolerant fuel cladding materials, *J. Nucl. Mater.* (2018) submitted.

#### E06-60(O)

##### 新型钴基高温合金热/动力学数据库和相场法的耦合设计探索

卢勇<sup>1,2</sup>, 王翠萍<sup>1,2</sup>, 黄剑洪<sup>1</sup>, 刘兴军<sup>3,1,2</sup>

1. 厦门大学厦门大学材料学院

2. 福建省材料基因工程重点实验室

3. 哈尔滨工业大学(深圳)材料科学与工程学院

随着航空工业的迅猛发展，对发动机涡轮叶片材料的承温能力提出了更高的要求，开发新型  $\gamma'$  相强化钴基高温合金成为目前的研究热点。基于材料基因理念的组织设计对新型钴基高温合金的综合性能和承温能力的提升具有重要意义。本研究通过耦合热/动力学数据库和相场法，建立了针对  $\gamma/\gamma'$  两相组织演化的相场动力学模型，并基于热/动力学数据库和相场计算软件，开发了任务调度和资源管理系统，开展了 Co-X(X:Ti,Ta)合金时效过程中组织演化的高通量模拟。通过对不同条件下组织模拟结果的自动化分析和筛选，初步建立了初始成分、两相错配度和时效温度等工艺条件对  $\gamma/\gamma'$  两相的形貌、体积分数、粗化速率、筏化行为等的量化联系。本研究所采用的研究方法为新型钴基高温合金的高通量设计及成分-组织-工艺的量化关系研究提供了借鉴。

致谢：本研究得到了国家重点研发计划(2017YFB0702901)的支持，在此表示由衷的感谢。

#### E06-61(O)

##### ATF 包壳材料高通量计算设计初步研究

龚恒风<sup>1</sup>, 王宗国<sup>2</sup>, 徐伟<sup>1</sup>, 刘彤<sup>1</sup>, 李锐<sup>1</sup>

1. 中广核研究院有限公司

2. 中国科学院网络信息中心

进入二十一世纪以来，科研人员逐渐意识到依赖于试错的传统材料研究方法已明显跟不上工业快速发展的步伐，甚至

可能成为制约技术进步的瓶颈。因此,亟需革新材料研发方法,加速材料从研发到应用的周期。基于“材料基因组计划(MGI)”的核心思想结合计算材料理论方法的研究思路正是适合于新材料研究的正确技术路线。本研究以事故容错(Accident Tolerant Fuel,ATF)包壳材料铁铬铝(FeCrAl)合金为研究对象,借助高通量材料自动流程平台 Matcloud 开展材料组分与结构筛选设计研究工作。基于基体元素替代掺杂是研究合金材料的一种常见手段。通过替代晶体结构中一种或多种元素的某一个或多个点阵,研究不同掺杂元素和不同掺杂浓度对材料物理和力学性质的影响。本研究主要采用掺杂方式,分别用不同浓度的Cr和Al替代基本元素Fe,建立不同浓度条件下可能存在的FeCrAl构型。对所有可能存在的构型开展结构优化粗筛工作,接着对筛选出的结构进行静态计算发现存在23种可能的结构类型。针对23种可能的结构进一步进行力学常数的计算,最终发现其中只有7种结构是稳定构型,并且独立的六个弹性常数均符合Bron标准。最后分析计算获得材料体模量(B)、剪切模量(G)、杨氏模量(E)和泊松比( $\sigma$ )参数表明筛选出的材料组分和构型力学性能均良好,能够指导实验开展相关材料样品制备工作。基于量子力学第一性原理的高通量计算流平台开展材料组分和结构设计筛选,不仅为后续包壳材料的辐照与腐蚀研究提供了参数输入,而且也奠定了新材料高通量设计研究的基础。

## E06-62(O)

### 纳米晶硬质合金室温和高温变形行为的分子动力学模拟研究

方婧,刘雪梅,王海滨,宋晓艳

北京工业大学

研究高温条件下WC-Co硬质合金的力学行为和力学性能的影响因素及其微观机制,对理解硬质合金的组织结构与性能之间的关系规律、设计制备高性能材料和高寿命耐磨部件具有重要的科学意义和指导价值。然而,受限于目前的实验设备观测水平,对于WC-Co硬质合金这种典型复合材料在高温下的力学行为和变形机理缺乏系统的研究,特别是在原子尺度对纳米多晶硬质合金室温和高温力学行为尚无微观机制的量化认识。

基于此,本研究采用分子动力学方法,在原子尺度上建立复相组织多晶模型量化研究WC-Co硬质合金在不同温度下的力学行为及其微观组织随温度的变化规律,分析受力过程中以位错为主的晶体缺陷的形成及其演变过程。给出了WC平均晶粒尺寸的较准确计算方法,并导出了WC和Co中位错运动的派纳力随温度变化的函数关系。统计分析了多晶组织中WC和Co两相内的位错密度,对比分析了室温和高温条件下WC和Co对多晶复合材料塑性变形的贡献。本工作较全面揭示了纳米晶硬质合金的高温变形机制,根据模拟结果提出了纳米晶硬质合金多晶块体以晶界滑移和晶粒转动为主导的高温塑性变形机制。

## E06-63(I)

### 高通量航宇新材料的计算发现

曾庆丰,张立同,成来飞

西北工业大学材料学院超高温结构符合材料重点实验室

为了缩短先进材料进入市场应用的时间,高通量概念已被引入最近的材料基因组计划(MGI)项目。本报告回顾了我们的近期通过进化算法和第一性原理计算相结合的算法探索先进结构功能材料的研究进展。基于这些方法,使用大约100个CPU计算核心发现了许多新奇的化合物,每类化合物的计算发现耗时大约一个月。这些案例包括超高温陶瓷、介电陶瓷和电池材料等。通过这样的系统筛选很容易建立它们的结构与性能关系。因此,可以通过改变这些化合物的化学计量比和/或拓扑来调整其“结构-功能”特性。

To shorten the time-to-market of advanced materials, the high throughput concept has been introduced into the recent Materials Genome Initiative (MGI) project. This report reviewed our recent work on exploring advanced structural-functional materials through hybrid evolutionary algorithms together with first-principle calculations. With these approaches, many novel compounds were discovered each in cost of around one month of computation time using about 100 CPU cores. Examples include ultra-high temperature ceramics, dielectric ceramics, and battery materials and so on. The structure-property relationship of these materials can be easily constructed by such systematic screening. Consequently, the structural-functional properties can be tuned by varying the stoichiometry and/or topology of these compounds.

## E06-64(I)

### 利用高通量计算和机器学习研究材料中点缺陷形成能与原子环境的关联

程影星, 祝令刚, 王冠杰, 周健, 孙志梅  
北京航空航天大学

点缺陷是材料中最常见的一种缺陷类型, 对材料尤其是功能材料的性能有较大的影响。本文提出了基于材料基因工程思想研究点缺陷形成的框架, 框架包括点缺陷结构的自动构造、点缺陷形成能的高通量计算以及利用神经网络对缺陷形成能进行预测和分析, 并建立缺陷形成能与周围原子环境的关联。本研究开发的软件包同时适用于晶态和非晶态材料的缺陷研究。这里我们选用相变型信息存储材料 GeTe 中 Ge 空位的形成为例进行研究。GeTe 可以通过晶态与非晶的快速转变实现信息的存储, 其中晶态和非晶态具有较大的电阻差异可用于表征逻辑信号 1 和 0。大量研究发现 Ge 空位对 GeTe 相变过程有重要影响。另一方面, GeTe 的晶态、非晶结构中差异较大的原子环境意味着可以产生大量不同的 Ge 空位, 大的样本数量也为高通量计算和机器学习提供了必要的输入。

我们首先利用第一原理分子动力学方法研究了 GeTe 非晶到晶态的相变过程, 并提取了模拟过程中的原子结构, 提取结构中包含初始的非晶态、晶化后的晶态, 以及非晶与晶态的界面; 接着利用程序自动识别出所提取结构中的不等价 Ge 原子, 并自动产生空位结构; 然后将产生的结构文件, 以及第一原理计算需要的其它文件作为输入提交到第一原理高通量计算平台; 计算完成后利用程序提取形成能以及 Ge 空位周围的原子环境等信息; 最后利用神经网络对形成能数据进行分析 and 预测, 并对空位形成能与原子环境的管理进行了研究。通过研究我们确定了对 Ge 空位形成能影响较大的原子分布在缺陷周围 4.5 埃范围内, 通常包括 6-8 个原子。最后通过电子结构计算分析了缺陷与周围原子的成键, 进一步验证了缺陷与周围距离 4.5 埃以上的原子无明显键合形成。

本文提出的利用高通量计算和机器学习研究 GeTe 中点缺陷形成能与原子环境关联的研究思路和软件包同样适用于其它材料的点缺陷研究。

## E06-65(O)

### 基于 BP 神经网络算法铝合金熔体粘度预测模型的研究

高原, 廖恒成, 锁晓静

东南大学 材料科学与工程学院, 江苏省先进金属材料高技术重点实验室 南京 211189

基于 BP 神经网络算法, 将铝合金中合金元素质量分数和温度作为模型输入, 将粘度值作为模型输出, 将文献中的铝合金熔体粘度作为训练数据, 构建了铝合金熔体粘度预测模型。对比了不同训练算法和不同隐含层神经元数目对该模型预测精度的影响, 并用遗传算法优化了 BP 神经网络的初始权值阈值。优化的模型对测试样本的预测误差均在 5% 以内, 具有很高的预测精度。基于上述粘度预测模型, 开发了铝合金熔体粘度预测软件。利用该软件研究了铝合金熔体粘度的温度依赖性, 与文献数据吻合得很好。该软件可预测了多元铝合金熔体的粘度。

## E06-66(O)

### The electronic, mechanical and thermodynamic properties of the Ni-Y compounds by first-principle calculations

Yunxuan Zhou<sup>1</sup>, Pei Yan<sup>1</sup>, XiaoYu Chong<sup>2</sup>, Jing Feng<sup>1</sup>

1.Faculty of Materials Science and Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, P.R. China

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

A systematic investigation concerned with the structure, elastic, and thermodynamic properties of Ni<sub>17</sub>Y<sub>2</sub>, Ni<sub>5</sub>Y, Ni<sub>7</sub>Y<sub>2</sub>, Ni<sub>3</sub>Y, Ni<sub>2</sub>Y, NiY, Ni<sub>2</sub>Y<sub>3</sub> and NiY<sub>3</sub> in the Ni-Y system is executed by means of first-principles calculation with the Generalized Gradient Approximation (GGA) approaches. The calculated cohesive energy and formation enthalpies of these alloys, the Ni<sub>17</sub>Y<sub>2</sub> have the lowest cohesive energy and NiY has the lowest formation enthalpy with -7.09 kJ/mol and -0.494 eV/atom, respectively. The elastic stiffness tensor and associated macroscopic elastic properties of these Ni-Y compounds including bulk modulus, shear modulus, Young's modulus and Poisson's ratio are calculated. The elastic constants show that these alloys are mechanical stable, and Ni<sub>5</sub>Y has the largest bulk modulus, shear modulus, Young's modulus, the values are 181.71 GPa, 79.75 GPa and 208.70 GPa, respectively. The anisotropic mechanical properties of the Ni-Y compounds are explored using the anisotropic index, three-dimensional (3D) surface contours and the planar projections on (001) and (110) planes of the Young's modulus. The effects of different concentrations of yttrium elements of Ni-Y compounds on the mechanical properties are estimated by using Vogit-Reuss method. The density of states

and chemical bonding between Ni and Y are found to be the key ingredient on the thermodynamic properties of these compounds. What's more, this work would be significant for understanding the further application of Ni-Y compounds in the future.

#### E06-67(I)

##### 机器学习辅助快速材料设计

薛德祯<sup>1</sup>, 袁瑞豪<sup>1</sup>, 丁向东<sup>1</sup>, 孙军<sup>1</sup>, Turab Lookman<sup>2</sup>

- 1.西安交通大学
- 2.美国洛斯阿拉莫斯国家实验室

传统的材料开发方式往往依赖于试错法或者经验。但是随着材料成分、微观结构等复杂性的增加,传统的方法不再适用。如何利用尽可能少的实验来有效的提升新材料的性能是亟需解决的问题。机器学习技术被认为可以从大量材料科学的数据中通过算法搜索隐藏于其中的信息,进而实现材料性能的快速优化。本工作提出了一个基于主动学习技术的材料设计方法,并且比较了不同的实验设计策略,发现平衡考虑预测值与不确定性的策略在材料开发中更加高效。进而将上述设计方案应用于加速设计开发新型压电材料中,通过一个由数据采集、统计模型、实验设计、结果反馈组成的循环回路,实现对材料目标性能的快速优化。区别于以往以预测结果为导向的实验设计,上述循环最大的不同之处在于利用预测结果的不确定性(uncertainty)进行实验设计,仅仅通过三组实验就成功开发了一种具有高电致应变的无铅压电材料。这一主动学习的思路有望被应用于新材料的快速研发过程中。

#### E06-68(I)

##### Uncertainty quantification in the estimation of bulk modulus

王鹏

北京航空航天大学

Bulk modulus is a key parameter describing a material's response to external stress and has been widely used in material discovery and design. Due to experimental challenge and uncertainty associated with data and fitting models, it is often difficult to obtain an accurate measurement or numerical estimation of a material's bulk modulus. In this Letter, we propose a novel numerical framework to address such challenge. Based on the generalized polynomial chaos expansion (gPC) method, our approach does not hold any physical assumptions and is mathematically rigorous and versatile. We demonstrate the accuracy and efficiency of the proposed method by estimating the bulk modulus of Ti<sub>3</sub>SiC<sub>2</sub>. The gPC approach is found to be relatively insensitive to uncertainty associated with the data set, such as its size and spacing, but more sensitive to the data range. In cases of small volume change (< 10%), only three samples (energies at the initial equilibrium volume and at the two boundaries) are required to obtain an accurate estimation of the bulk modulus.

#### E06-69(O)

##### 基于晶格结构相似性筛选层状铜-硫族化合物热电材料

高彦华, 张睿智

西北大学物理学院

具有相似晶格结构的化合物通常具有相似的性质,因此可以通过组分相似和拓扑相似预测未知的材料性质并搜索新材料。随着“材料基因组计划”的实施,材料发现逐渐转化为数据驱动的第四范式<sup>[1]</sup>。我们以层状铜-硫族化合物为例,使用 Inorganic Crystal Structure Database (ICSD), Materials Project 和从文献中提取的材料热电性质,给出了一种利用晶格相似性发现新材料的方法。层状铜-硫族化合物,其中包括 BiCuSeO<sup>[2]</sup>,是一类有前景的热电材料,且具有多样性的晶格结构。我们在 ICSD 中选出 145 个含有 Cu-Ch (Ch=S,Se,Te)四面体网络的层状材料<sup>[3]</sup>,然后根据元素组成、拓扑结构等信息对其进行了分类。即首先根据 Cu-Ch 四面体连接方式(如共棱或共顶点)的不同将其分为四大类;对于化合物数量较多的第一大类,再根据层之间插层元素(如碱金属、稀土或金属氧化物)的不同细分为三小类。对于具有相似晶格结构的每一大类或小类,从理论与实验两个方面考察其热电性能,即通过在文献中查找该类中已有实验报道的材料,并在 Materials Project 中查找该类中化合物的电子结构,以判断该类中具有潜在高性能热电材料的可能性。最后尝试从密度泛函理论计算和实验上验证筛选结果。

参考文献:

- [1] Agrawal A & Choudhary A (2016) APL Materials 4(5):053208.  
[2] Zhao L-D, et al. (2014) Energy & Environmental Science. 7(9):2900-2924.  
[3] Zhang R-Z, Chen K, Du B, & Reece MJ (2017) J. Mater. Chem. A 5(10):5013-5019.

#### **E06-70(O)**

##### **基于数据挖掘技术的阻燃镁合金起燃温度研究**

邓正华<sup>1</sup>, 尹海清<sup>1</sup>, 石鑫<sup>2</sup>

1. 北京科技大学
2. 重庆三峡学院

镁合金以其优异的性能而闻名, 然而镁合金在熔炼和浇注过程中的氧化、燃烧甚至爆炸等问题使其进一步的广泛应用受到了限制。目前, 合金化阻燃法是最有效的方法, 即将合金元素添加到镁合金中以形成紧凑的保护层。在本文中, 我们提供了一种机器学习方法来合金化阻燃镁合金的起燃温度, 使用相关的特征, 包括化学成分, 阻燃元素添加量、阻燃元素氧化物致密系数、阻燃元素氧化吉布斯自由能等。我们尝试使用 5 种模型对实验数据集进行训练和选择。最后得出多层感知器模型比其他模型的相关系数更高, 误差更小。然后应用这个模型来预测镁合金的起燃温度。预测的起燃温度与实验结果非常一致, 误差小于 5%。

#### **E06-71(O)**

##### **多组元 fcc 相铜合金扩散及原子移动性数据库**

刘钰玲, 刘辉新, 刘树红, 杜勇

中南大学, 粉末冶金国家重点实验室, 湖南长沙 410083

铜合金扩散动力学的研究有助于我们了解微观组织演变, 优化工艺参数, 设计一种新型的 Cu 合金。本工作通过计算方法 (包括第一原理, 半经验函数和 DICTRA 建模) 和实验方法的集成研究了多组元 Cu 合金 (Ag-Al-As-B-Be-Bi-Ca-Ce-Co-Cu-Cr-Fe-H-In-Mg-Mn-Nb-Ni-O-P-Pb-S-Se-Si-Sn-Te-Ti-Y-Zn-Zr) 的扩散行为并建立了多组元 Cu 合金 fcc 相原子移动性数据库。在严格文献数据评估基础上, 补充关键实验研究了 Co-Mn, Cu-Ni-Sn 以及 Cu-Ni-Ti 合金 fcc 相的扩散行为。采用扩散偶实验结合 EPMA 分析计算了 Co-Mn, Cu-Ni-Sn 以及 Cu-Ni-Ti 随成分变化的扩散系数。随后, 采用 CALPHAD 方法, 根据当前实验结果和文献数据优化获得了这些体系 fcc 相的原子移动性参数。通过对比实验数据和本工作预测的扩散行为, 进一步验证了当前建立的 Cu 合金原子移动性数据库的可靠性。此外, 当前建立 Cu 合金原子移动性数据库的所采用的方法具有普遍性, 同样适用于其他合金体系。

#### **E06-72(O)**

##### **利用机器学习预测对应不同化学成分的晶体结构**

吴哲宇<sup>1,3</sup>, 惠健<sup>1,2</sup>, 张文浩<sup>1,2</sup>, 张澜庭<sup>1,2,4</sup>, 汪洪<sup>1,2</sup>

1. 上海交通大学 材料科学与工程学院, 上海 200240
2. 上海交通大学 材料基因组联合研究中心, 上海 200240
3. 上海交通大学 致远学院, 上海 200240
4. 上海市先进高温材料及其精密成型重点实验室, 上海 200240

材料的晶体结构是材料的重要性质, 一直以来都引起研究人员的广泛关注。由于晶系种类的复杂性, 仅凭借化学组成来预测其晶系结构十分困难。本文利用机器学习的方法进行数据挖掘, 首先将元素周期表数字化构成 112 维向量, 其次计算出属于不同化学成分的 145 个特征数值, 根据现有的晶体结构数据库化学元素与晶系分类对应关系, 通过监督学习算法进行成分-晶体结构的预测。采用“交叉检验”、“查全率、查准率”比较的方法检验模型, 结果显示模型的预测正确率达到 80% 以上。本文还对比了不同的机器学习算法如“决策树”、“随机森林”、“神经网络”等在此问题上的表现, 分析得到该问题的最优机器学习算法。该方法在实践过程中将整个元素周期表进行了数字化, 提高了解决实际问题的灵活性。因此对例如“预测非晶形成能力”、“预测晶体多层膜扩散结构”等课题也具有十分重要的指导意义。

关键词: 晶系结构; 数据挖掘; 监督学习

联系人: 吴哲宇 Tonywu@sytu.edu.cn

## E06-73(I)

### 材料 4.0 时代下的材料数字化研发平台应用实践

王卓, 王礴

成都材智科技有限公司 (MatAi)

在材料 2.0 时代, 材料系统研究开始形成, 从概念化到系统试验论证、实验室原型到真实环境、原型测试和验证、生命周期评价、最终结果交付及产品制造。在材料 3.0 时代, 计算材料科学, 组合材料科学, 采用基于量子化学和物理原理的材料计算设计开始出现。材料 4.0 时代, 随着大规模材料数据被采集整理, 材料信息学的迅速发展, 使得新材料设计和性能的预测, 全生命周期评价成为可能。本文介绍了在材料 4.0 时代背景下的 MatAi 材料数字化研发平台的构建, 其内涵包括了材料大数据与知识库、集成计算、数字化测试、人工智能、全生命周期管理等, 以全新的数字化手段促进材料基因组背景下的新材料快速发现与成本降低。

## E06-74(O)

### 基于支持向量回归的铝合金收缩性的预测模型

赵宝军, 廖恒成, 锁晓静

东南大学

精确、快速预测铸造铝合金的收缩性能, 可降低生产成本, 提高铝合金开发效率和资源利用率。本文利用粒子群优化-支持向量回归(Support Vector Regression, SVR)算法, 建立基于铝合金化学成分预测铝铸件宏观收缩率的预测模型, 并比较了支持向量回归与 BP 神经网络(BPNN)的预测效果。结果表明, 与 BPNN 相比, SVR 算法模型具有鲁棒性强、精确度高、泛化能力强等优点, 研究结果可为铝合金铸造方法和工艺提供一定的指导。

## E06-75(O)

### 高丰度稀土永磁合金 RE-Fe-B 相图热力学数据库构建

姚青荣, 王江

桂林电子科技大学

本工作主要针对高丰度稀土永磁材料, 通过合金法结合扩散偶技术制备合金样品, 采用 XRD、EPMA 等现代测试手段测定了 800 °C 下 RE-Fe-B 三元系的相平衡关系及 Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B-Ce<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B 等赝二元系合金体系的相平衡关系和各相热力学稳定性。通过对化合物的固溶度、晶体结构的确认和精修, 获得稀土化合物晶体结构及体系相平衡信息, 揭示了 RE-Fe-B 体系的相关性及成相规律。通过收集和严格评估文献报道的实验相图数据和体系热力学信息, 采用 CALPHAD 技术耦合本工作的实验测定结果, 完成了 RE-Fe-B (RE=La, Ce, Pr, Nd, Sm) 体系中二元系和部分三元系的相图热力学优化, 为下一步建立 RE-Fe-B 体系合理的相图热力学数据库奠定了坚实的基础。

## E06-76(O)

### 超轻质多元合金的设计与高通量探索

贾岳飞, 王刚

上海大学材料研究所微结构重点实验室

基于高熵合金的设计思路, 即合金成分位于多元相图中心或内部区域, 选取一系列低密度元素 Al, Li, Mg, Ca, Si, Zn, Cu 和 Y, 设计并探索了一系列新型超轻低模量合金。同时, 采用高通量的实验设计理念, 设计并使用多孔型熔炼坩埚, 于高纯氩气保护下进行感应熔炼制备。在新设计的这些合金中, Al<sub>15</sub>Li<sub>38</sub>Mg<sub>45</sub>Ca<sub>0.5</sub>Si<sub>0.5</sub> 的密度低至 1.46±0.05 g cm<sup>-3</sup>, 同时绝大多数的密度也仅在 1.40-1.80 g cm<sup>-3</sup> 之间。新设计的这一系列合金, 铸态下便具有相对较高的强度, 为 443MPa-710MPa, 而且 Al<sub>15</sub>Li<sub>38</sub>Mg<sub>45</sub>Ca<sub>0.5</sub>Si<sub>1.5</sub> 和 Al<sub>15</sub>Li<sub>39</sub>Mg<sub>45</sub>Ca<sub>0.5</sub>Si<sub>0.5</sub> 具有相对较好的压缩塑性, 它们的压缩应变超过 50%。同时, 该系列合金的杨氏模量均低于 35GPa。微观组织分析结果表明, 多数合金是复杂的多相结构, 以体心立方结构的固溶体为主, 并包含一部分金属间化合物。Al<sub>15</sub>Li<sub>38</sub>Mg<sub>45</sub>Ca<sub>1</sub>Si<sub>1</sub> 的相组成以 BCC 固溶体为主, 包含 AlLi 相和位于晶粒内部的一些微纳米尺度的颗粒。然而 Al<sub>19.9</sub>Li<sub>30</sub>Mg<sub>35</sub>Si<sub>10</sub>Ca<sub>5</sub>Y<sub>0.1</sub> 的相组成相比之下较为复杂, 包含大量无序固溶体和金属间化合物。

关键字: 超轻合金; 高熵合金; CCA; 高通量; 微观组织; 相组成; 低模量

## 墙展

### E06-P01

#### 一种多相相场计算框架 Phi++

吴平平

厦门工学院

相场计算方法是一种普遍用于材料介观尺度计算模拟的计算方法。相场计算有诸多好处，例如可以避免追踪界面，计算参数普遍有物理意义等等，这些优势使得相场计算方法在近年来获得了很大的关注。为了对于不同的具体问题来说，相场计算需要设立不同的序参量来描述材料的微观结构。近年来，一些包含复杂微观结构，可以实现多功能用途的材料受到了广泛的关注，这类材料往往需要使用多重序参量相场模拟技术来实现。作者建立了一个广义的相场计算框架 Phi++，该框架使用基于矩阵计算的 Octave 语言编写，将各类序参量变量融合在这个相场框架下来实现同时预测各类组织结构特征。这里列出了三个应用举例：多晶铁磁性形状记忆合金、孔洞多铁复合材料以及导电高分子球晶结构。通过这些实例可以看到，该框架下的相场模型可以很好的模拟带有多重序参量的复杂材料结构问题，效果非常理想。

### E06-P02

#### 基于深度学习的材料图像虚拟边界检测方法

赖传滨

上海大学

材料的性能和结构之间关系的揭示，有助于通过材料的已知成分和组织结构对其性能进行预测，反之亦然。材料的微观图像能够反映材料的内部结构信息，因此，对微观图像的分析是研究材料结构特征的重要手段。传统的材料图像分析主要由低效的人工完成，近年来，计算机图像处理技术逐渐被应用在材料图像分析中，成为辅助研究材料结构与性能之间定量关系的一种重要方法。其中，一个至关重要的问题便是图像分割，因为只有对图像进行了有效、准确的分割，才能进一步测定图像中不同组织结构的各项数据。边界检测技术是一种很常用的图像分割手段。目前，现有的边界检测方法处理的对象大多都是具有实体的边界，即区域间存在的明显界线。然而很多材料图像中不同的区域之间存在的没有实体的分界区域，本文称之为“虚拟边界”(Virtual Boundary)。虚拟边界不是简单的直线或某种特定形状，且虚拟边界和区域之间的界线不清晰，有的虚拟边界甚至和区域相连通，因此很难通过现有的边缘检测技术将其准确地检测出来。本文将虚拟边界检测任务转换为二分类任务，并提出一种基于卷积神经网络的虚拟边界检测模型，称之为 Virtual Boundary Net(VBN)。该模型对 VGG16 深度学习模型进行了简化，并采用了 dropout 以及 Adam 算法等优化策略。VBN 以图像中每个像素为中心所取的图像块作为输入，然后输出该图像块所属的类别并据此判断中心像素是否属于虚拟边界。在模型的训练过程中，本文选取了两种具有虚拟边界的材料图像：15 张陶瓷共晶  $\text{HfB}_2\text{-B}_4\text{C}$  图像和 18 张钛合金  $\text{TiAl}$  图像，并以像素为中心提取图像块作为训练样本。最后，本文在预留的测试图像上进行了检测实验，结果表明该模型能够准确、有效地对材料图像中的虚拟边界进行检测，是一种替代低效率人工分析方法的有效手段。

### E06-P03

#### 基于复杂网络的 $\text{TiB}_2\text{-Ti}$ 复合材料图像分割

宋磊磊

上海大学

在陶瓷烧结过程中，掺杂物部分残留在微结构中，发生固溶或形成新相，促成并孕育复相微结构，影响其强度和韧性。针对超高温陶瓷中的  $\text{TiB}_2\text{-TiC}$  复合材料，因粉体制备过程中 WC 磨球的磨损及其一定程度的混入，造成两相分布极不均匀。要实现  $\text{TiB}_2\text{-TiC}$  材料复相微结构特性的识别与提取，离不开图像分割。在本研究中，由于  $\text{TiB}_2\text{-TiC}$  复合材料图像中纹理特性非常复杂，传统的图像分割方式很难实现，因此我们将复杂网络中的聚类思想引入到图像分割中来。随着近年来复杂网络理论的发展，基于图的模式识别技术已经有了很大的改进。根据复杂网络理论，顶点簇的识别可视为社区识别过程，而社区的识别过程则可以看成一种聚类过程。由于数据聚类与图像分割相关，所以图像分割也可以通过复杂网络进行。

在本研究中，首先是通过一个预处理的过程。利用机器学习中的聚类算法，如 K-Means，初步提取特征区域；然后对这些特征区域网格化和结点化的处理；之后，再定义复杂网络中的结点之间的连接关系并建立网络拓扑结构，在建立网络的过程中，节

点之间的连接受节点连接半径参数以及节点连接密度参数的影响，取不同的参数阈值则对应于不同的网络连接拓扑结构；接着，计算出最佳的阈值参数，从而获得最佳的拓扑结构；最后通过得到的拓扑结构再利用图像分割中的算法得到分割图像。

经过一系列的实验，结果表明了该方法的有效性。利用上述的方法可以成功的分割出了热压烧结法制备的 TiB<sub>2</sub>-TiC 复合材料图像中的灰白色密集区域，即富 TiC 相区。

#### E06-P04

##### 不同材料表面电催化氮还原反应的理论研究

郭浩然<sup>1,2</sup>，田子奇<sup>2</sup>，李白海<sup>1,\*</sup>

1.电子科技大学材料与能源学院，四川省成都市高新西区西源大道 2006 号，邮编：611731

2.中国科学院宁波工业技术研究院，浙江省宁波市镇海区中官西路 1219 号，邮编：315201

氨是最重要的化工产品之一，是合成化肥和众多精细化学品的重要原料。长期以来工业上大规模合成氨的方法是 Haber-Bosch 法，生产过程需要高温高压等严苛条件，每年消耗的能量约占世界能源总供给的 1~2%，因此低能耗高效合成氨是科学上的重要课题。近年来，在相对温和条件下电化学催化氮还原已经取得了一定进展。我们采用密度泛函理论计算，研究了一系列金属氧化物及二维材料表面发生的氮还原反应过程，分析了表面电荷分布及能带结构对氮还原反应的影响，并根据理论计算结果提出了改进材料的催化性能的可能途径。

关键词：电催化，氮还原反应，密度泛函计算，能带结构

#### E06-P05

##### 钴基高温合金置换能的第一性原理计算与数据挖掘研究

##### First-principles calculations and data mining of substitution energy in Co-based superalloy

肖斌<sup>2</sup>，吴雨沁<sup>1</sup>，金倩<sup>1</sup>，刘轶<sup>\*1,2</sup>

1.上海大学材料基因组工程研究院，上海大学（200444）

2.上海大学物理系量子与分子结构国际中心，上海大学（200444）

\*E-mail: [YiLiu@shu.edu.cn](mailto:YiLiu@shu.edu.cn)

镍基高温合金主要由面心立方 Ni 形成的  $\gamma$  相及  $[\text{L1}]_2$ - $[\text{Ni}]_3\text{Al}$  形成的  $\gamma'$  相固溶体组成，其中合金元素对于镍基高温合金相的稳定性具有非常重要的作用。本研究将第一性原理计算和数据挖掘方法结合对镍基高温合金元素置换能进行预测。通过第一性原理计算得到获得合金元素置换能，同时采用元素的基础性质和合金体系的局部结构特征作为描述因子建立数据模型，对镍基高温合金置换能进行预测。结果表明机器学习方法可与第一性原理计算结合，加速材料性能预测和设计。

关键词：镍基高温合金，数据挖掘，第一性原理计算，合金元素，置换能

#### E06-P06

##### 面向镍基高温合金的反应力场开发

##### Development of the reactive force field for Ni-based superalloy

杜婉<sup>1</sup>，李慧<sup>1</sup>，孙浚晔<sup>1</sup>，刘轶<sup>\*1,2</sup>

1.上海大学材料基因组工程研究院，上海市（200444）

2.上海大学物理系量子与分子结构国际中心，上海市（200444）

\*E-mail: [YiLiu@shu.edu.cn](mailto:YiLiu@shu.edu.cn)

ReaxFF 是一种基于键级的可描述化学反应的分子力场，常用于大规模复杂凝聚态体系的分子动力学模拟。本研究介绍了开发适用于 Ni 基高温合金的新一代反应力场的初步工作。具体研究内容包括：（1）通过第一性原理计算，构建力场开发的训练集。（2）基于该训练集，拟合新的反应力场。（3）使用该力场研究镍基高温合金的拉伸和压缩等行为，并与第一性原理计算结果作对比，初步验证力场的适用性。

关键词：ReaxFF 反应力场，Ni 基高温合金，分子动力学

#### E06-P07

##### 纳米金属多层膜低温扩散的高通量研究方法

惠健<sup>1,2</sup>, 李伟喆<sup>1,3</sup>, 赵杰<sup>1,3</sup>, 马海乾<sup>1,3</sup>, ZhangXiaoyi<sup>4</sup>, 任杨<sup>4</sup>, 张澜庭<sup>1,2,5</sup>, 汪洪<sup>1,2</sup>

1.上海交通大学 材料科学与工程学院, 上海 200240

2.上海交通大学 材料基因组联合研究中心, 上海 200240

3.上海交通大学 致远学院, 上海 200240

4.美国阿贡国家实验室, 芝加哥 60439

5.上海市先进高温材料及其精密成型重点实验室, 上海 200240

本文通过连续掩膜高通量离子束溅射的方法制备了成分空间连续分布的 NiTiCu 三元合金纳米多层膜组合材料芯片, 研究了在低温下不同热处理时间 (2h, 40h, 100h, 10d), 纳米多层膜低温扩散过程中的晶体结构变化以及多层膜内部元素分布情况。等温热处理后的纳米多层膜, 在同步辐射光源进行了逐点微区 XRD (x 射线衍射) 和 XRF (x 荧光光谱) 表征同时获得 2000 多个组合材料芯片结构跟成分数据点, 通过机器学习分级聚类将所得成分空间连续分布的谱图自动聚类分析。筛选出低温扩散后的非晶区域, 通过二次离子质谱仪对该区域数据点进行深度剖析。实验结果表明, 纳米多层膜部分成分在低温热处理过程中会从晶体结构逐渐向非晶结构演变, 低温长时间金属原子在纳米层内部逐渐扩散均匀, 从而形成非晶, 该实验方法可快速筛选出材料相图中的非晶区域, 对加速非晶合金材料研究进展意义重大。

关键字: 组合材料芯片; 高通量; 纳米多层膜; 低温扩散; 非晶

联系人: 惠健 (hj20151107@sjtu.edu.cn)

## E06-P08

### Ni 基高温合金体系扩散动力学数据库的建立

王翠萍<sup>1</sup>, 秦诗洋<sup>1</sup>, 林远靖<sup>1</sup>, 卢勇<sup>1</sup>, 刘兴军<sup>2,1,\*</sup>

1.厦门大学材料学院及福建省材料基因工程重点实验室, 福建厦门 361005

2.哈尔滨工业大学(深圳)材料科学与工程学院, 广东深圳 518055

\*lxj@xmu.edu.cn

Ni 基高温合金具有高强度、耐腐蚀性、蠕变强度和疲劳性能, 在航空航天、船舶等领域得到了广泛的应用。目前, 热力学与动力学数据库已成为材料成分设计、组织模拟及性能研究的重要基础。反映扩散行为的动力学数据是 Ni 基高温合金设计过程中必不可少的重要参数。由于扩散偶制备过程繁琐, 导致了 Ni 基高温合金的动力学数据相对缺乏。

本研究制备了一系列扩散偶, 通过电子探针 (EPMA) 等表征手段, 对合金元素在 Ni 基高温合金中的扩散行为进行了研究。基于实验所得不同扩散偶的浓度-距离曲线, 采用 Whittle-Green 法<sup>[1]</sup>计算了部分 Ni 基三元系合金的互扩散系数。同时, 利用 CALPHAD 方法, 对 Ni-Ti-X (X: Nb, Mo) 和 Ni-Co-X (X: Ta, Mo) 三元系中 FCC 相的动力学参数进行了优化与计算, 计算结果与实验结果取得了良好的一致性, 基于本实验室研究数据及文献数据<sup>[2]</sup>, 初步建立了 Ni 基高温合金多元系合金的扩散动力学数据库。基于本研究的动力学数据库, 可以计算预测一系列扩散偶的浓度-距离曲线及扩散路径, 为 Ni 基高温合金的凝固、析出、长大等研究提供理论基础。

参考文献:

1. D. Whittle and A. Green. Scripta Metal. 8 (1974) 883-884.

2. C.E. Campbell, W.J. Boettinger and U.R. Kattner. Acta Mater. 50 (2002) 775-792.

致谢: 本研究获得了国家自然科学基金促进海峡两岸科技合作联合基金(U1605243)的经费资助

## E06-P09

### 通过磷掺杂或空位的表面修饰制备 MXene (Ti<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>) 的高活性和高电导率 HER 催化剂

王硕<sup>1,2</sup>, 吴阳<sup>1,\*</sup>, 张秋菊<sup>2,\*</sup>

1 辽宁大学化学学院, 辽宁省沈阳市崇山中路 66 号, 邮编: 110030

2 中国科学院宁波工业技术研究院, 浙江省宁波市镇海区中官西路 1219 号, 邮编: 315201

\*wuyang@lnu.edu.cn; zhangqj@nimte.ac.cn

探索具有高电导率和高活性的 HER 催化剂是可再生能源发展的首要任务。氧基碳化钛 (Ti<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>) 作为典型的 MXene 之一, 在较低的氢覆盖率下显示出良好的 HER 自由能, 而大约 1.0eV 的大带隙限制了其在 HER 性能中的导电性。通过掺杂

P 或 S 来部分替代表面 O，不同氢覆盖度下的平均自由能( $\Delta G_{\text{H}}$ )就会接近于零，通过使带隙变窄至低于 0.3eV，电导率也得到显著改善。电荷分析表明，在一定程度上掺杂 P 或 S 可引起电子扩散到 VBM，并因此导致 O-2pz 与 H-1s 轨道的反应。O-2pz 轨道的表面重叠代替 O-2px 将增强与氢的结合强度，并因此降低 HER 自由能。在掺杂 P 或 S 之后，能量转移到 Ti-3d 的费米能级有助于降低带隙和提高导电性。为了评估空位对 HER 性能的影响，创建了不同掺杂密度下的表面氧或磷空位，这不仅提高了平均自由能和电导率，还导致了水分解离解的低反应势垒( $< 0.2 \text{ eV}$ )。我们的研究表明，通过磷或硫对 MXene 端基氧原子的修饰以及空位可以有效地提高 HER 催化活性和电导率，预计这将扩展它们在电催化和能量转换中的潜在应用。

关键词：MXene，氢吸附自由能，带隙，掺杂，空位

## E06-P10

### 基于统计理论的概率依赖的析出相强化模型

李甲<sup>1,2</sup>，方棋洪<sup>1,2</sup>

1.湖南大学汽车车身先进设计制造国家重点实验室，长沙 410082

2.湖南大学机械与运载工程学院工程力学系，长沙 410082

经典析出强化模型包括位错切割析出相机制和位错绕过析出相机制，依赖于通过实验观察获得的析出相平均尺寸和体积分数。然而，多数合金体系中存在单峰或多峰尺寸分布的析出相。尽管析出相尺寸大于决定切割或者绕过的临界尺寸，位错依然可以通过切割析出相的方式穿过。因此，我们提出了一个基于统计理论的概率依赖的析出相强化模型，可以更准确地预测析出相的强化贡献量。与经典析出强化模型相比，我们的模型与实验结果更加吻合，特别是对于大尺寸的析出相。这是由于经典析出强化模型忽略析出相尺寸分布效应及概率依赖的绕过机制效应。该结果为准确预测析出强化合金的屈服强度提供一个理论框架，且具有普遍适用性。

关键词：析出相；合金；统计理论；概率；强化模型；

## E06-P11

### 基于物理的 $\sigma$ 相二元摩尔体积建模

刘微<sup>1</sup>，刘轶<sup>1,2,\*</sup>

1.上海大学，材料基因组工程研究院，上海，200444，中国

2.上海大学，材料科学与工程学院，上海，200444，中国

本工作对  $\sigma$  相摩尔体积的影响因素及影响规律进行了系统研究，并最终建立了基于物理的摩尔体积模型。首先利用 EMTO-CPA 方法，根据实验占位分数及假想的有序、无序状态下的占位情况，计算了 19 个  $\sigma$  相二元系的摩尔体积。结果表明  $\sigma$  相摩尔体积既受到原子混合又受到占位分数的影响，并揭示了影响规律。其次，利用 CALPHAD 方法结合第一性原理计算，建立了  $\sigma$  相二元系热力学-摩尔体积集成数据库。在建模过程中，根据化合物能量模型，采用 5 个亚点阵模型对  $\sigma$  相进行描述，对于热力学模型直接采用第一性原理计算的 32 个  $\sigma$  相端际化合物的形成能，对于体积模型采用相对实验数据归一化后的第一性原理计算的 32 个  $\sigma$  相端际化合物的摩尔体积。利用该集成数据库首先计算得到化合物的平衡占位分数数据，进而获得该占位情况下化合物的摩尔体积。该模型既考虑了原子混合又考虑了占位分数对摩尔体积的影响，可以较好的拟合并预测稳定及亚稳的  $\sigma$  相摩尔体积。

## E06-P12

### Zr-Fe-Cu 体系热力学优化及非晶形成能力预测

邹楠<sup>1</sup>，陆海进<sup>1,2</sup>，顾培文<sup>3</sup>，王佳赟<sup>3</sup>，沈剑韵<sup>4</sup>，何燕霖<sup>1</sup>，李麟<sup>1</sup>

1.上海大学材料科学与工程学院，上海 200444；

2. Department of Materials Science and Engineering, University of Wisconsin-Madison, Madison, Wisconsin 53706, USA;

3.上海核工程研究设计院，上海 200233；

4.北京有色金属研究院，北京 100088；

基于第一性原理计算的结果，采用 CALPHAD 方法对 Zr-Fe-Cu 三元系进行热力学优化，获得一套自洽的热力学参数。计算了 Zr-Fe-Cu 三元系在 853, 973, 1273, 1373, 1473K 下的等温截面以及 1873K 下的液相混合焓( $x_{\text{Cu}}/x_{\text{Fe}}=1/3, 1/1, 3/1$ )，与

文献报导的实验数据符合良好。此外，结合三种热力学判据，利用优化后的 Zr-Fe-Cu 体系热力学参数对其全成分范围内的非晶形成能力进行预测。Zr-Fe-Cu 体系的热力学优化工作可对添加 Cu 的新型锆合金的成分设计和热处理工艺提供指导，同时也对 Zr-Fe-Cu 体系的非晶制备有着重要意义。

关键词：热力学优化；CALPHAD 方法；第一性原理计算；锆合金；非晶形成能力；

#### E06-P13

##### Co-Mn-Mo 三元系 fcc 相互扩散系数的研究

吴雪婷

上海大学材料基因组工程研究院，上海，200444

本研究利用扩散偶法和 EPMA 技术，基于 Sauer-Freise 方法拟合得到了 Co-Mn、Co-Mo 体系 fcc 相中的互扩散系数。在此基础上，结合文献中现有的各类扩散系数数据（包括实验和半经验数据），优化得到了 Co-Mn、Co-Mo 合金 fcc 相中精准的原子移动性参数。利用所得参数计算得到的各扩散系数与实验数据基本一致，且模拟得到的成分曲线与实验测定值吻合较好。此外，在总结前人工作的基础上，本研究依据经验方法近似给出了 Mn-Mo 二元系 fcc 相的原子移动性参数。在确定 Co-Mn、Co-Mo、Mn-Mo 二元系动力学参数的基础上，本研究利用扩散偶法，基于 Whittle-Green 方法，得到了 Co-Mn-Mo 三元系 fcc 相的互扩散数据，并通过优化确定了该三元系 fcc 相中的原子移动性参数。利用所得参数计算得到的该三元系 fcc 相中的扩散系数，与实验数据吻合较好，且得到的扩散成分曲线与实验实际情况基本一致。因此，本研究最终获得的 Co-Mn-Mo 三元系原子移动性参数具有较高的准确性，可为 Co 基动力学数据库的建立提供参考。

关键词：Co-Mn-Mo 三元系，扩散偶，扩散系数，原子移动性参数

#### E06-P14

##### 单相扩散偶模拟与 Kirkendall 面的计算

夏成辉<sup>1</sup>，鲁晓刚<sup>1,2\*</sup>

1.上海大学材料科学与工程学院，上海 200444

2.上海大学材料基因组工程研究院，上海 200444

\*E-mail:xglu@t.shu.edu.cn

用间断有限元方法 (LDG) 实现菲克第二定律二元系与三元系的求解。计算了二元系常系数渗碳模型的数值解与精确解、二元系变系数模型的数值解与构造的精确解的绝对误差与收敛阶，可以发现此方法有很高的精度、计算结果与理论相符合，并且验证了程序的正确性，再将这个方法拓展到三元系。然后结合 CALPHAD 方法计算扩散系数等，实现单相扩散偶的扩散模拟。此外，结合 Kirkendall 面相关知识，用计算的方法追踪定位 Kirkendall 面，再与图解法确定的 Kirkendall 面的结果进行对比，发现这两个方法的结果非常接近。所以这套程序也可以实时地追踪 Kirkendall 面的位置。

关键词：间断有限元(LDG)，CALPHAD，扩散偶，Kirkendall 面

参考文献：

[1] Xia C, Li Y, Wang H. Local discontinuous Galerkin methods with explicit Runge - Kutta time marching for nonlinear carburizing model. *Math Meth Appl Sci.* 2018;1-15. <https://doi.org/10.1002/mma.4898>

#### E06-P15

##### 机器学习在 EMTO-CPA 计算中的应用—Ni-Co-X 体系 Fcc 相形成能的集成计算

熊文浩<sup>1</sup>，吴军明<sup>2</sup>，刘悦<sup>2</sup>，施思齐<sup>1,3</sup>，鲁晓刚<sup>1,3</sup>

1.上海大学材料基因组工程研究院，上海 200444；

2.上海大学计算机科学与工程学院，上海 200444；

3.上海大学材料科学与工程学院，上海 200444；

在合金相图绘制过程中，形成焓这一参量非常重要，因而实现对形成焓的高精度、高效率预测也极为关键。近几年来，基于机器学习的高通量计算模型在材料领域的应用发展迅速，为合金形成能的预测提供了新思路。本研究首先通过 EMTO-CPA 计算了 Ni-Co-X (Al, Cu, Cr, Mo) 子二元系和三元系合金 Fcc 相形成能数据，其中二、三元系形成能数据的描述因子分别为二元系合金成分和三元系合金成分，构建了用于机器学习的形成能数据集。其次，由于二元系和三元系的性

能描述因子个数不匹配,难以直接通过二元系数数据预测三元系形成焓,因而本研究采用“补零法”对所有的二元系数数据进行数据格式转换,该转换方式将二元系转变为三元系,进而采用多项式回归分析方法构建模型来预测三元系形成焓,并以模型准确率为优化准则通过最优化算法搜寻最优的二元系组合,这可能为寻找一种新的二元-三元形成能对应关系提供了依据。最后,本研究结合已有的几何方法(Kohler)对已给定对应关系的二元-三元系计算数据,其描述因子为三种不同二元系合金成分、形成焓以及三元系合金成分,同样利用多项式回归分析方法学习建模,采用交叉验证方法得到了可靠稳定的模型,并评估了模型在未知样本上的预测性能。实验结果表明,无论是二元直接预测三元系数据还是给定对应关系后二元预测三元,多项式回归方法预测的形成能值与EMTO-CPA计算值符合的较好,因此该模型为多元合金热力学性质的预测提供了一种有效的方法,为建立合金形成能数据库提供了一种低成本,方便,快捷,准确的方法,从而为构筑精确的Ni-Co基相图提供可靠数据。

关键字:相图;高通量集成计算;形成焓;机器学习

## E06-P16

### 结合机器学习对镍基合金中温蠕变模型的验证及完善

王治超<sup>1</sup>,唐爱华<sup>2</sup>,刘悦<sup>2</sup>,施思齐<sup>1</sup>

1.上海大学材料科学与工程学院,上海 200444;

2.上海大学计算机工程与科学学院,上海 200444;

镍基合金因具有良好的高温蠕变、疲劳、拉伸等性能,常被用于航空发动机和工业燃气轮机的涡轮叶片材料,对其蠕变寿命的预测十分重要,但目前蠕变理论的研究中仍有很多未知,现有模型多存在限定范围。为能在无实验数据的条件下高效预测材料蠕变寿命,本文以“位错蠕变”及“晶界滑移蠕变”为主体,从 $\gamma'$ 体积分、自扩散系数、温度、应力、层错能、剪切模量、晶格尺寸、第二相颗粒大小及间距等11个基本影响因素出发,基于镍基合金中温最小蠕变速率模型,对最小蠕变速率这一蠕变寿命重要表征量进行定量分析,进一步拓展到蠕变寿命的准确预测,并验证其合理性。首先使用TC热力学计算和微观属性计算公式得到微观属性数据(层错能、晶格常数、剪切模量、扩散系数和相体积分数),利用模型获得计算结果并与实验结果对比,同时整理出完整的计算步骤和必需参数,结合计算机编程,自动化计算过程,实现了批量化操作,获得了由基础条件推导稳态蠕变速率的有效途径。其次,为突破基础模型在适用范围上的极大限制,本文针对不同压力,不同晶粒尺寸范围,对公式做出了划分,指出了对不同材料所需调整的参数。最后,基于一组完整的数据,提取出公式中单个影响因子,采用机器学习的方法逐层分析模型各个层面的属性,从纯数据的角度观察公式的单个要素、影响方式及蠕变形式对结果的影响是否符合基本理论,侧面验证了模型的合理性和准确性,同时证明了基于机器学习的计算模型预测蠕变寿命的可行性。后续拟从收集系列数据和相关模型入手,寻求获取难以计算得到的基础数据的方法,同时进一步针对不同条件,对公式做出更为详细准确的完善。

关键词:镍基合金;中温最小蠕变速率;蠕变寿命预测;机器学习;

## E06-P17

### 基于机器学习的多尺度镍基单晶高温合金蠕变寿命预测

唐爱华<sup>1</sup>,王治超<sup>2</sup>,刘悦<sup>1</sup>,施思齐<sup>2</sup>,鲁晓刚<sup>2,3</sup>

1.上海大学计算机工程与科学学院,上海 200444;

2.上海大学材料科学与工程学院,上海 200444;

3.上海大学材料基因组工程研究院,上海 200444;

蠕变断裂寿命是评价镍基单晶高温合金优劣的一个重要参数。在设计合金时对蠕变断裂寿命的预测极为重要,但现有材料领域预测蠕变断裂寿命的方法存在其自身适用范围,存在争议。而基于机器学习的计算模型为蠕变寿命预测提供了新思路。但依然存在以下两个问题:首先,影响蠕变断裂寿命的因素不仅有成分、温度和应力等宏观属性,还有晶格常数和层错能等微观属性,而微观属性数据通常难以获得,传统机器学习预测蠕变断裂寿命的模型少有涉及微观属性;其次,传统的蠕变机器学习模型未考虑合金不同体系不同外部环境下的蠕变机制不同的问题。针对上述问题,本文提出基于聚类的最优回归集成学习模型跨尺度预测镍基单晶高温合金蠕变断裂寿命的方法。首先,针对缺少微观数据的问题,本文利用TC热力学计算和微观属性计算公式得到微观属性数据(层错能、晶格常数、剪切模量、扩散系数和相体积分数),从而定性定量地刻画了影响蠕变断裂寿命的微观描述因子,并结合宏观因子(成分、条件、热处理)构建用于机器学习的跨尺度描述蠕变寿命的样本集;其

次,依据合金的宏观、微观多尺度的特性以及外部环境因素,采用聚类将其聚成不同的合金类;最后,基于聚类划分的结果,针对不同性能的合金类以预测精度为学习目标采用集成学习方法为每类合金构建适合的模型。最终,本文通过实验比较了只有宏观属性的数据集和拥有多尺度属性的数据集在同一回归模型(SVR)上预测蠕变断裂寿命的准确度,验证了结合宏观因子和微观因子的多尺度因子能够更准确地描述蠕变断裂寿命;进一步,通过分别利用单一的回归模型(SVR、随机森林和高斯过程回归)和基于聚类的最优回归集成模型在同一份数据集上做蠕变断裂寿命预测,结果显示后者的预测精度更高,证明了利用相适应的模型去描述不同体系的合金蠕变机制的思路具有更高的适用性。

关键字:机器学习;镍基单晶高温合金;蠕变寿命预测;多尺度计算;

## E06-P18

### 镍基高温合金置换能的第一性原理计算与数据挖掘研究

#### First-principles calculations and data mining of substitution energy in Ni-based superalloy

肖斌<sup>2</sup>, 吴雨沁<sup>1</sup>, 金倩<sup>1</sup>, 刘轶<sup>\*1,2</sup>

1.上海大学材料基因组工程研究院, 上海大学(200444)

2.上海大学物理系量子结构和分子结构国际中心, 上海大学(200444)

\*E-mail: [YiLiu@shu.edu.cn](mailto:YiLiu@shu.edu.cn)

镍基高温合金主要由面心立方形成的 $\gamma$ 相及 $L1_2$ - $Co_3(Al,W)$ 形成的 $\gamma'$ 相固溶体组成,其中合金元素对于镍基高温合金相的稳定性具有非常重要的作用。本研究将第一性原理计算和数据挖掘方法结合对镍基高温合金元素置换能进行预测。通过第一性原理计算得到获得合金元素置换能,同时采用元素的基础性质和合金体系的局部结构特征作为描述因子建立数据模型,对镍基高温合金置换能进行预测。结果表明机器学习方法可与第一性原理计算结合,加速材料性能预测和设计。

关键词:镍基高温合金,数据挖掘,第一性原理计算,合金元素,置换能

## 仅发表论文

## E06-PO-01

### 热力学计算技术在高温合金成分设计中的应用

王金三

中国航发北京航空材料研究院

基于热力学计算方法,并使用相应的镍基高温合金数据库,研究了几种典型镍基高温合金,分析了合金成分设计与微观组织稳定性以及加工工艺性能密切相关的一系列参数,包括合金的初熔温度、密度、 $\gamma'$ 相体积分、 $\gamma/\gamma'$ 相错配度、TCP相含量、热加工窗口以及糊状区区间等。