

Z.材料模拟、计算与设计

分会主席：赵纪军、刘利民、陈星秋、范晓丽、吕广宏

Z-01

相图、相变及合金设计

杜勇

中南大学粉末冶金国家重点实验室

材料学研究是对组织结构演变规律的不断理解及对组织结构与性能之间量化关系建立的探求过程。相图和相变是研究材料结构、性能及应用的重要基础。本文将以轻合金、硬质合金及耐磨涂层为例，介绍研究团队在相图、相变及合金设计领域取得的主要学术成就：

一、解决了构筑多元多相材料热力学/热物性数据库的系列重要科学问题，建立了国际上迄今最准确的铝合金和硬质合金的热力学/扩散系数数据库；耦合有序/无序相变理论、晶体结构及数值分析，国际上首次用一个热力学模型描述多元相的有序和无序状态；综合热力学、扩散及晶体结构，引入热力学因子，发现了描述线性化合物扩散生长的新模型，解决了扩散领域的一个国际难题；将电镜和三维原子探针等现代检测技术引入含纳米尺度相的相图测定，提高了实测相图的准确性；构筑的铝合金、硬质合金热力学/扩散系数数据库已全面替代欧美同期建立的数据库，已有波音、空客、苹果计算机公司、美国国家标准技术研究院、欧洲 HYDRO 铝业公司等 521 家科研机构用此数据库来设计新材料。

二、建立了耦合相图计算和相场方法模拟微结构演变的新方法，国际上首次建立了硬质合金及其耐磨涂层的计算材料工程，并开发出新型硬质合金及其耐磨涂层；建立了考虑扩散、对流及外场的相场模型用于描述结构演变；耦合相图计算和相变模拟及 TEM/3DAP 等关键实验，描述了凝固和固态相变过程的微结构演变，使微结构定量模拟前进了一步；用所建立的热力学数据库和计算流体力学同实验相结合实现了 CVD 耐磨涂层制备全过程的结构及性能控制；制备的多层 PVD TiAlN/TiAlSiN 纳米/非晶复合涂层刀片具有优良的综合力学性能。理论成果已在我国相关企业实行产业化，产品远销欧美多个国家。

Z-02

铁弹材料畴界的动力学规律及多功能特性研究

丁向东

西安交通大学

畴界工程 (domain boundary engineering) 是近 10 多年来兴起的一个方向。迄今为止，人们已经在铁性材料的畴界上发现了一些体材料所不具有的独特性能，如超导行为、高的离子移动能力、二维电子云在界面的聚集、多铁等。铁弹材料畴界的动力学规律及多功能特性的调控并不清楚。本文通过构建一个简单的势函数，1)建立了铁弹材料孪晶变形动力学行为随温度变化的统计学规律，发现：孪晶变形塑性阶段的统计学规律不仅满足人们熟悉的孤子运动，而且随着温度升高会从孤子运动转化为绝热雪崩效应转变，再到中温下的绝热-热激活混合效应，以及高温下的热激活行为，其原因来源于扭转的钉扎与脱钉扎行为与热激活行为的竞争。而对于孪晶变形屈服阶段，发现由于临界自组织行为的影响，其统计学规律一般满足绝热雪崩效应。2)提出了通过力场控制铁弹材料的孪晶密度进而调控材料多功能特性的新思路，揭示了多铁材料高频下机械损耗的本征原因：设计了一些畴界具有新型功能特性的铁弹材料。例如，提出了一种通过对低温铁弹态的铁弹材料施加力场进而获得密度更高且对温度更为稳定的畴界的方法，为畴界工程的实际应用提供了一条新的思路。又如，通过施加外加应变，可以调控铁弹材料的内部孪晶结构，进而影响材料的热物理性能，例如铁弹材料的热导率会随着外加应变的变化而呈现出和铁磁材料相似的滞后环，利用该效应可以调控热电材料的性能，并实现热记忆的功能；再如，发现铁弹材料的畴界由于应变梯度的存在而产生极化，而外加力场则可以驱动畴界以超声速的速度移动，从而实现高速铁电存储。此外，也发现了多铁材料在高频下会由于复杂铁弹畴结构的变化而引起材料的本征能量耗，揭示了多铁器件高频下机械损耗的内在原因。

Z-03

Icosahedral medium-range order and its effect on relaxation dynamics in CuZr metallic glass-forming liquids

Maozhi Li*

Renmin University of China

The correlation between structural relaxation and the medium-range structures formed by icosahedral cluster packing in CuZr metallic glass-forming liquids was studied via molecular dynamics simulations. It is found that the icosahedral medium-range structures play more important and controlling roles in the structural relaxation process of the metallic liquids. The relaxation times of

local structures depend exponentially on the connectivity of local structures. Scaling analysis based on percolation theory reveals that the size distribution of clusters formed by the central atoms of icosahedra at various temperatures follows a very good scaling law, which suggests that there would be a structural phase transition manifested by percolation of locally favored structures underlying the glass transition. Furthermore, it is revealed that when icosahedral short-range order (ISRO) extends to medium-range length scale by connection, the atomic configurations of ISROs will be optimized from distorted ones towards more regular ones gradually, which significantly lowers the energies of ISROs and introduces geometric frustration simultaneously. Both factors make key impacts on the drastic dynamic slow-down of supercooled liquids. Our findings provide direct structure-property relationship for understanding the nature of glass transition.

Z-04

国家重大安全领域的温稠密物质特性研究

张平

北京应用物理与计算数学研究所

高温高压条件下物质的热力学性质是凝聚态物理、等离子体物理、天体物理、惯性约束核聚变等领域的重要议题。温稠密物质的特征是强粒子耦合、部分量子简并，无论是实验探测还是理论建模都富具挑战。本报告系统展示了我们针对温稠密物质的热力学性质获得的理论结果。主要包括：i) 通过结合第一性原理分子动力学和无轨道分子动力学，我们获得了氢/氘的宽区状态方程；通过引入分子/原子流体运动的一阶量子修正，我们讨论了同位素核效应，并且发现了氢和氘在分子分解率方面的不同；ii) 计算获得了密度泛函电子输运系数，讨论了洛伦兹数在物质从强耦合、量子简并态向中等耦合、部分量子简并态转变过程中的变化及物理内涵；iii) 我们将我们的第一性原理宽区状态方程数据库和电子热导率应用于 ICF 一维内爆流体模拟，结果显示峰值密度和中子产额依赖于所采用的参数库；iv) 更进一步，我们发展了新的第一性原理分子动力学方法：ext-FPMD，将第一性原理分子动力学的可计算温度范围大幅度提高；v) 基于我们新发展的 ext-FPMD 方法，以 ${}^6\text{LiD}$ 为例，我们证明了无轨道分子动力学的温度适用范围由壳层结构中束缚电子的热离化过程所确定。

Z-05

Material informatics accelerates innovative design of environmental barrier coating candidates

王京阳

中国科学院金属研究所高性能陶瓷研究部

SiC_f/SiC ceramic matrix composites (CMCs) are the key high temperature structural materials in next generation gas turbines. Robust environmental barrier coating (EBC) is critically requested to protect CMC-components from severe high temperature oxidation and corrosion in extreme combustion environments. There are crucial challenges for the optimal choices of EBC candidates due to their complex and tunable crystal chemistry and performances. Highly efficient screening of advanced EBC materials would be promoted based on material informatics of candidates. Strategic material-genome initiative would also prevail to disclose mechanisms of property diversity and to further adopt novel concepts for the design of robust EBC for advanced SiC_f/SiC CMCs.

Z-06

Computational prediction of novel form of silicon structures

DuckYoung Kim*

HPSTAR

DANE, POSTECH

Computational study becomes critical to materials sciences not only to lead experimental synthesis but also to understand the underlying mechanism. Crystal structure prediction using density functional theory (DFT) is a popular tool to lead experimental synthesis and sometimes we need to employ cutting-edge computational approaches beyond standard DFT such as GW and DMFT to describe the electronic structure and related physical properties.

In this talk, I will present recent examples of crystal structure searching to find novel forms of silicon structures. We found computationally / experimentally new stoichiometry of silicon (Si_{24}) with possess an open-framework with a quasi-direct bandgap of 1.3 eV. Si_{24} potentially possess various applications such as photovoltaics, thermoelectricity, batteries. We also computationally predicted atomically flat two dimensional silicon structures with various thickness and I will discuss the trend of electronic structure with respect to the thickness. Furthermore, I will discuss various possible applications of crystal structure searching to materials science.

Z-07

Short-range order in Metallic glasses: Enough or not?

管鹏飞

北京计算科学研究中心

非晶合金，又称金属玻璃，是典型的由金属键主导的原子玻璃体系，其相对简单的微观结构为探索非晶态相关的基本物理问题提供了优良模型；非晶合金无序结构所带来的优异力学、物理和化学性能，也为其在各类新材料领域的应用提供了物性基础。因而，对非晶合金的研究不仅具备重要的科学意义，也具有重要的应用价值。与其他玻璃的形成一样，非晶合金是通过对高温合金熔体的快速冷却来抑制结晶过程，并在一定的温度时发生玻璃转变(glass transition)而形成。玻璃转变是与非晶合金的形成、微观结构与宏观物性等密切相关的物理过程，但其本质并不能通过传统的热力学相变理论来描述，是当前凝聚态物理和材料科学所面临的巨大挑战之一。近年来，人们在对非晶合金过冷液体的研究中发现，随温度的降低，其动力学行为变慢的同时也伴随着特殊局域结构特征（短程序）的演化，进而尝试构建过冷合金熔体中结构短程序与慢动力学之间的耦合关系，并将其理解为慢动力学的结构起源。基于计算模拟，我们发现了受限非晶合金过冷液体中慢动力学与其结构短程序（特征原子团簇）特征之间的退耦合；构建了慢动力学与原子构型相似度之间的耦合关系，并给出了由该相似度出发定义的静态关联长度在无论是受限、还是非受限体系中对慢动力学的普适描述，揭示了该静态关联长度在玻璃转变中的主导作用。研究表明控制非晶合金过冷液体慢动力学，乃至玻璃转变的结构因素并不是非晶几何结构的短程序，而是反映构型间空间关联的静态关联长度；为更全面地认识非晶合金的几何结构序、更深入地理解玻璃转变的本质提供了全新的视角。

Z-08

具有微结构的非晶合金的塑性变形的多尺度模拟

Guang-Ping Zheng

Hong Kong Polytechnic University

近年来，具有微结构的非晶合金越来越引起广泛的关注；大量的实验发现由非晶纳米颗粒组成的大块非晶合金与结构均匀的大块非晶合金的力学性能之间有显著的不同。多尺度模拟是研究此类新型非晶合金的力学性能与其微结构关系的有效手段。通过第一性原理计算，非晶纳米颗粒之间的界面的形成条件，如温度、压强等，与其原子结构的联系可以得到准确的表征。以 Fe-Si-B 非晶合金为例，计算结果表明，非晶纳米颗粒之间的界面原子结构显著影响这些具有微结构的非晶合金的力学性能；在低于玻璃化转变温度 50-80 °C 的温度进行热处理，得到的具有微结构的非晶合金的断裂应变较大。同时，第一性原理计算还为相场模型模拟此类新型非晶合金的塑性变形提供了可靠的模型参数和特征参量。通过相场模型模拟纳米结构非晶合金薄膜的塑性变形，发现剪切带在非晶纳米颗粒和它们之间的界面中的形成和传播会受到非晶纳米颗粒的大小 D 和它们之间的界面的原子结构的显著影响。这些相场模拟得到的结果可用来确定 $D=10\text{ nm}\sim 1000\text{ nm}$ 范围内，具有微结构的非晶合金的断裂强度与 D 的定量关系，并与纳米结构结晶固体的 Hall-Petch 关系进行比较。

Z-09

纳米孪晶金刚石中的位错行为

肖建伟¹，杨慧珍¹，吴小志²，Fatima Younus¹，李鹏¹，温斌¹，张湘义¹，王彦兵³，田永君¹

1. 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室，燕山大学，秦皇岛 066004

2. 物理学院，重庆大学，重庆 401331

3. Center for Advanced Radiation Sources, University of Chicago, Chicago, Illinois 60439, USA

为了理解纳米孪晶金刚石具有超高硬度的起源，本研究将位错与孪晶界的位错反应模式进行了分类。随后，通过分子动力学方法，对各类位错反应模式的反应热和能垒进行了计算。在此基础上，基于 Sachs 模型，对纳米孪晶金刚石的硬度进行了模拟，该模拟结果与实验结果吻合的很好。我们的研究表明，纳米孪晶金刚石的超高硬度归因于两个方面：其一就是由碳碳键的性质导致的金刚石具有超高的晶格摩擦力，其二是孪晶界引起的超高非热激活应力。而这些都是由于金刚石中较小的位错形核及移动激活体积所导致的。该研究工作对纳米孪晶金刚石的超高硬度提出了新的理解，对开发新的超硬材料有借鉴意义。

Z-10

Al_xCrMnFeCoNi (0 ≤ x ≤ 5) 高熵合金的弹性性能的第一性原理研究

张华磊
西安交通大学

利用第一性原理 EMTO-CPA 方法,系统地研究了具有体心立方结构和面心立方结构的顺磁性的 $\text{Al}_x\text{CrMnFeCoNi}$ ($0 \leq x \leq 5$)高熵合金的弹性模量。通过与存在的实验数据进行比较,表明所采用的研究方法能够准确地描述高熵合金的弹性常数。随着 Al 含量的增加,理论计算的晶格常数单调增加,然而弹性模量却呈现复杂的成分依赖性。研究发现体心立方结构和面心立方结构的高熵合金的弹性各向异性都非常高,这与传统合金体系的低弹性各向异性不同。此外,进一步研究表明只有考虑到强弹性各向异性时,根据 Cauchy 压力和 Pugh 比率判据得到的脆性/韧性转变才会一致。 CrMnFeCoNi 高熵合金的负 Cauchy 压力是由相对低的体积模量和 C_{12} 弹性常数造成的,反过来又与相对较低的内聚能一致。目前的研究结果与实验数据相结合表明研究的高熵合金具有异常金属特征。

Z-11

基于最大熵模型的体心、面心和六角结构高熵合金的弹性性质研究

郑淑敏^{1,2}, 王绍青^{1,2}

- 1.中国科学院金属研究所
- 2.中国科学技术大学材料科学与工程学院

高熵合金的研究已经有十二年的历史。高熵合金至少含有四种元素,多种元素的协同效应使得高熵合金兼具多种优点,例如低密度高温合金 $\text{AlNb}_{1.5}\text{Ta}_{0.5}\text{Ti}_{1.5}\text{Zr}_{0.5}$ 和高硬度耐高温的高熵合金二硼化物 $(\text{HfZrTaNbTi})\text{B}_2$ 等等。要得到一种理想的高熵合金需要大量的实验进行筛选,弹性性质便是筛选合金首要考虑的因素。实验测量弹性性质的数据时,需要使用没有缺陷,一致性好且足够大的合金样品。但高熵合金含有多种元素,金属元素很难分散均匀,符合测量条件的样品较难合成。现有的报道中,弹性性质相关的实验数据较少。第一原理计算可以准确高效地计算合金的弹性性质。高熵合金是多元无序合金,建立其第一原理模型是一个挑战。建立无序固溶体合金模型的常用方法有 EMTO-CPA (平均场) 和 SQS (特殊准随机结构模型),前者无法体现合金的局域环境,后者建立的模型破坏了高熵合金结构的对称性且无法建立成分比复杂的模型。

本工作采用了一种研究随机合金的新方法——最大熵模型(MaxEnt)方法建立了高熵合金的超胞结构。MaxEnt 方法的优点是,通过结构弛豫能够展现高熵合金中的晶格畸变,而且能够建立成分比复杂的合金模型。本工作建立了体心立方 $\text{AlNb}_{1.5}\text{Ta}_{0.5}\text{Ti}_{1.5}\text{Zr}_{0.5}$, 面心立方 NiFeCrCoMn , 六角 CoFeReRu 和 AlB_2 结构 $(\text{HfZrTaNbTi})\text{B}_2$ 的高熵合金模型,并成功计算了它们的弹性性质。立方晶体和六角晶体分别含有三个和五个独立的弹性常数。计算结果表明:晶胞的大小对计算结果的影响较大,较大的 MaxEnt 晶胞更准确,这是因为金属原子是均匀无序的分布在高熵合金块体中没有周期,小的晶胞无法代表高熵合金的无序结构,较大的晶胞能够降低周期结构的影响。 $(\text{HfZrTaNbTi})\text{B}_2$ 的体积模量大于五个独立的二硼化物 HfB_2 , ZrB_2 , TaB_2 , NbB_2 和 TiB_2 的值,展现了高熵合金的鸡尾酒效应。综上,MaxEnt 方法可有效地模拟高熵合金的多种结构,为高熵合金的发展起到了辅助作用。

Z-12

应变引起纯铁中马氏体相变的分子动力学模拟研究

欧小琴¹, 宋旻¹, Jilt Sietsma², Maria J. Santofimia²

- 1.中南大学粉末冶金研究院
- 2.Department of Materials Science and Engineering, Delft University of Technology, Mekelweg 2, 2628 CD Delft, The Netherlands

本文采用分子动力学模拟的方法研究外界应变对纯铁中 BCC 相在 FCC 母相中形核和长大过程的影响。该模拟的初始模型为一个完美 FCC 纳米单晶,其在 x 、 y 和 z 方向上的尺寸为 $21.95 \text{ nm} * 21.95 \text{ nm} * 21.95 \text{ nm}$,共包括 86,4000 个原子。本研究采用 EAM 势能,在 x 、 y 和 z 方向上均采用周期性边界条件。模拟结果表明,在未施加外界应变时,在 100 K 温度以下纯铁中单晶 FCC 相为亚稳相,不会发生 $\text{FCC} \rightarrow \text{BCC}$ 相变;然而,分别在 50 K 和 100 K 温度下,对 FCC 晶粒进行 $[100]_{\text{fcc}}$ 方向的拉伸应变将导致 BCC 相在 FCC 晶粒内部形核和长大。且 BCC 与 FCC 主要以 Nishiyama-Wassermann (NW) 和 Kurdjumov-Sachs (KS) 位相关系存在。BCC 相为片状 (plate-like) 形貌,一个 NW 位相的 BCC 晶粒分别在两个阔面 (coarse plane) 与另外两个 KS 位相的 BCC 晶粒相邻。在 50 K 温度下,BCC 和 FCC 之间的主要以 KS 位相关系存在;然而,在 100 K 温度下,BCC 和 FCC 之间的主要位相关系为 NW 位相。在 50 K 温度下,NW 位相的 BCC 晶粒逐渐消失,其相邻的两个 KS 位相的 BCC 晶粒进而发生合并长大现象 (coalescence)。BCC 晶粒的不断合并长大过程导致系统的最终结构为一个 KS 位相的 BCC 单晶粒。相反地,在 100 K 温度下,系统最终结构转变成一个 NW 位相的 BCC 单晶粒。

Z-13

铁弹畴壁上的不可动缺陷：缺陷处的畴壁形核

贺晓梅¹, Ekhard Karl Herman Salje^{1,2}, 丁向东¹, 孙军¹

1. 西安交通大学 金属强度国家重点实验室, 陕西, 西安, 710049
2. 剑桥大学 地球科学系, 英国

静态的点缺陷可以丰富的随机分布于铁弹畴壁上。点缺陷在畴壁上的相对浓度(N_d)与体系的平均缺陷浓度(C)满足幂律分布关系: $N_d \sim C^\alpha$, 其中 $\alpha = 0.4$ 。丰富度(N_d/C)范围在 50 倍($C = 10 \text{ ppm}$)至 3 倍($C = 1000 \text{ ppm}$)之间。通过分子动力学模拟方法观察发现, 缺陷在畴壁上相对浓度高的原因是点缺陷促进形核产生畴壁。动态的畴形核和畴翻转依赖于缺陷浓度, 其能量关系遵循幂律分布。屈服区间随着缺陷浓度的增加, 幂指数 ε 在~1.82 至 2.0 之间。塑性区间的幂指数 $\varepsilon=2.7$, 不依赖于缺陷浓度。

Z-14

钛合金微观组织及力学性质的第一原理研究

胡青苗¹, 曹烁¹, 朱佳林¹, 于慧^{1,2,3}, 江勇⁴, 杨锐¹

1. 中国科学院金属研究所
2. 东北大学材料科学与工程学院
3. 沈阳工业大学信息科学与工程学院
4. 中南大学材料科学与工程学院

第一原理方法已被广泛用来预测材料的性质, 解释材料性质的物理机制。然而, 工程合金成分及结构的复杂性使得其力学性质的第一原理研究存在较大困难。近年来, 我们采用第一原理方法, 尝试研究钛合金的微观组织及强韧性等力学性能。计算了钛合金固态相变过程中体相自由能变化及界面能消耗, 从相变热力学角度, 研究了相变体选择、析出相形貌、析出相异质形核等影响多相钛合金微观组织的关键因素; 计算了钛合金中各单相中位错滑移势垒和临界剪切应力、相界滑移势垒与断裂功, 从位错运动协调性及相界面可动性角度, 研究了钛合金的强韧性行为。相关第一原理研究有助于理解钛合金的成分—结构—微观组织—力学性能关系, 进而为钛合金的性能优化提供理论基础。

Z-15

钛基合金微观变形机制

王峰

中国科学院金属研究所

轻质高强的钛基合金是航空航天等领域的关键结构材料, 目前国内外已逐步发展基于材料基因组理念的研发模式, 但在钛基合金微观变形机理等方面的认识上还存在局限, 影响合金的优化设计。本工作针对力学行为, 从微观角度出发, 考察了金属及合金材料塑性变形中多种原子过程。相关结果系统展示了位错通过偶极型反应导致强化及其点缺陷形成过程, 揭示了塑性变形下局部晶体取向转变等新型相变和李晶机制, 对金属材料塑性行为的理论研究及新型钛合金的设计和性能评价起到一定推动和促进作用。在前期工作基础上建立钛基合金专用计算模拟平台, 借助多尺度模拟和高通量计算, 并结合实验表征, 开展钛基合金微观缺陷—微观组织—加工使役性能关系研究, 为改善力学性能提供有力支持, 服务于钛基合金优化设计。

Z-16

应力诱导面心立方和体心立方之间的新型相变机制

谢红献¹, 于涛³, 殷福星²

1. 河北工业大学机械学院力学系, 天津, 300132, hongxianxie@163.com
2. 河北工业大学材料学院, 天津, 300132, foxing2008@hotmail.co.jp
3. 钢铁研究总院功能材料研究所, 北京, 100081, ytao012345@163.com

1924 年, 贝因提出了著名的贝因相变机制。该机制认为沿[100]晶向压缩 FCC 晶体, 会导致其转变为 BCC 结构; 相反沿[100]晶向拉伸 BCC 晶体, 会导致其转变为 FCC 结构。我们用分子动力学模拟方法发现了一个有趣的现象: 和贝因相变机制相反, 沿[100]晶向拉伸 FCC 晶体会导致其转变为 BCC 结构, 沿[100]晶向压缩 BCC 晶体会导致其转变成 FCC 晶体。我们对该相变机制进行了深入研究, 发现该相变和材料的弹性常数随应力的变化有关, 当弹性常数 $C_{22}=C_{23}$ 时, FCC (BCC) 晶

体突然丧失稳定性,导致一个侧面突然收缩而另一个侧面突然扩张,从而导致相变的发生。并进一步研究了应变速率、温度,表面张力等因素对该型相变的影响。

Z-17

密排六方金属中晶体再取向行为的分子动力学研究

俎群^{1,2}, 汤笑之¹, 郭雅芳¹

1.北京交通大学

2.河北工业大学

对于密排六方金属来说,由于独立滑移系少,孪晶是其低温时一种主要形变机制,而 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶则是镁及镁合金中最为常见的孪晶形式。由于孪晶位错的存在以及与孪晶界的相互作用, $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶界允许小角度偏离 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶面。然而近期大量实验结果表明, $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶界与 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶面存在大角度的偏差。同时,亚微米尺度下的镁单晶实验观察到了一种类似于孪生的晶体再取向现象,转向晶粒与基体间呈现基面/柱面相互对应的关系,但不存在类似于孪晶的晶体学对称面。本文运用分子动力学方法研究了镁单晶中晶粒再取向行为。首先,研究给出镁单晶中再取向晶粒形核的原子曳步机制,并发现与再取向晶粒长大相关的基面/柱面(BP)界面迁移依赖于界面错配台阶的运动。三维模拟结果的分析表明,该错阶的运动更倾向于沿无晶格错配的 $[1\bar{2}10]$ 方向而不是错配方向 $[\bar{1}010]/[0001]$ 。此外,再取向晶粒与基体的界面可由BP界面与 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶界交替组成,也可由BP与PB面直接交替组成,不同类型界面可以通过界面错阶的滑移和堆积相互转化,因此导致孪晶界与传统孪晶面的偏离。当拉伸荷载沿a轴或其附近轴向加载时,还可以观察到类似 $\{10\bar{1}1\}$ - $\{10\bar{1}2\}$ 双孪晶的晶体再取向行为,两个转向晶粒间也存在BP界面。研究表明,由基面/柱面转化机制导致的晶粒再取向行为是密排六方金属镁中一种重要的塑性变形机制。

Z-18

常压及高压下 Si-C 体系结构与性质的探索

梁笑微, 王林妍, 邵灿灿, 高国英

燕山大学材料学院

众所周知,硅在常压下以金刚石结构稳定存在,是一种重要的半导体材料。碳是与硅同主族的元素,他们具有很多共同点,例如:相同的价电子和稳定结构(金刚石结构)等。尽管他们有很多相似之处,但是除了人们熟知的SiC外,有关其他成分的硅碳化合物的报道却很少。此外,*d*-Si是带隙约为1.17 eV的半导体,金刚石是具有5.5eV带隙的绝缘体。而SiC的带隙为2.4 eV,该值介于硅和碳带隙值之间。因此,我们通过调节Si和C的比例极有可能会获得具有1.1-1.4 eV(光电转换最优带隙值)的直接带隙的半导体。高压可以有效地改变物质内部原子间的相互作用,降低物质的反应势垒,形成具有新结构和新性质的新相,是合成新材料的重要技术手段。因此,压力可能是获取其他化学计量比硅碳化合物的有效途径。采用基于粒子群优化算法的结构预测与第一性原理相结合的方法,我们系统地探索了Si-C体系(以 Si_3C , Si_2C , Si_5C_3 , SiC, SiC_2 和 SiC_3 为例)在0-300 GPa范围内的稳定成分,晶体结构及新奇的性质。在较低压力下,我们发现了系列类金刚石结构的富硅组分的硅碳化合物,*I*-42*d*- Si_3C , *P*222₁- Si_2C 以及*I*₂3- Si_5C_3 。研究发现他们都具有半导体特性,其中*I*-42*d*- Si_3C 和*I*₂3- Si_5C_3 在常压下是带隙约为1.3eV的直接带隙半导体,带隙值在最佳光电转化效率带隙范围内。对于富碳化合物,亚稳态的 SiC_3 具有与许多化学分子类似的结构,例如:(2,2)*para*-cyclophane。这是第一次在固体中提出类似分子中的结构,因此在化学上具有重要的意义。该研究结果发表在JACS 135, 11651-11656 (2013)上。在高压下, SiC呈现NaCl结构,与之前的研究相符。通过对不同成分Si-C化合物的研究,我们发现,从1 atm到300 GPa, SiC一直是Si-C体系中最稳定的成分。富Si化合物 Si_3C , Si_2C 及 Si_5C_3 在一个小的压力范围内相对于单质稳定,并且在高压下都相变为Si和C都为6配位的结构,与SiC类似。其中 Si_3C 的高压相具有超导性。该研究结果发表在Chem. Mater. 30, 421-427 (2018)上。我们的研究探索了Si-C体系未知的成分以及高压相,丰富了硅碳体系在高压下的相图,并为寻找优异特性的硅碳化合物提供了方向。

Z-19

应用机器学习的力场探索碱金属的高压相变机制

赵龙, 丁向东, 宗洪祥

西安交通大学材料学院

对于第一主族的元素,在常温常压条件下一般属于简单的bcc金属结构,在压缩条件下,会转变为fcc结构,但是继续压缩时,一系列非常复杂的相结构出现,人们称之为Host-Guest结构。虽然说,目前人们通过实验已经证明了这种复杂结构

的存在，并且绘制出了碱金属的相图。对比我们发现，所有的碱金属相图都具有相同的变化趋势，有一个非常奇怪的熔化曲线，在熔化曲线上具有最小值，这些特征在一般普通的相同中完全不存在。虽然说碱金属相图人们已经研究了很长的时间，但是仍然存在着一些未解决的问题，比如从简单结构到复杂的 Host-Guest 结构的转变机制是什么？为什么其熔化曲线随压强增加具有负斜率？以及为什么存在最低点？等等。在本文中，我们利用基于机器学习方法构造的势函数，采用传统的分子动力学模拟方法，从原子尺度研究了从简单结构到复杂的 Host-Guest 的相变机制。我们发现，在高压下，fcc 简单结构转变为 Host-Guest 结构的机制不同于我们之前研究的马氏体相变机制一样。首先，在发生相变时，需要先形成类似于液相的结构，然后 Host-Guest 结构在类似液相结构中形核。在其过程中原子的移动路径几乎没有任何规律，并且相变过程相比马氏体相变非常缓慢。基于该相变的一些特征，从简单结构到复杂的 Host-Guest 的转变是重构相变。这是第一次从原子角度观察了重构相变的原子演变过程。

Z-20

Ginzburg-Landau 理论研究形状记忆合金点缺陷掺杂效应

杨媛超¹，薛德祯¹，周玉美¹，Turab Lookman²，丁向东¹，孙军¹

1. 西安交通大学

2. 美国洛斯阿拉莫斯国家实验室

点缺陷掺杂对形状记忆合金的各种性能产生影响。主要的三种掺杂效应包括相变温度的改变、力学性能的改变以及应变玻璃相变的产生。本工作通过在 Ginzburg-Landau 理论模型中引入与序参量耦合的局部膨胀应变，定义点缺陷作用强度和作用范围两个参量来描述不同的点缺陷掺杂。利用含时 Ginzburg-Landau 理论模拟，成功复现了上述三种点缺陷掺杂效应，为研究形状记忆合金中的缺陷掺杂效应提供了一个新的模型。

Z-21

利用层间工程调控二维材料物理性质及新兴磁性二维材料预测

季威

中国人民大学

本报告总结报告人研究组最近几年在二维材料层间相互作用模拟方面的工作。围绕黑磷、贵金属二硫族化合物，多层碲等中的类共价键展开展开，讨论层间耦合对材料光、电、磁、力等性质的调控¹⁻⁷。此外，还将讨论一种利用晶界调控 MoS₂ 同质结物性的方法。最后报告将讨论一系列磁性材料的层间耦合，掺杂调控，以及高 T_c 铁磁材料的预测等⁸。

Z-22

Design of 2D Monolayers for Energy Conversion and Storage

潘暉

Institute of Applied Physics and Materials Engineering, University of Macau

In this talk, I will present our recent work on the design of novel 2D monolayers for energy conversion and storage, including: (1) Design of 2D pentagonal monolayers for hydrogen production. A new family of 2D pentagonal MLs (penta-MLs) was proposed to be dynamically, mechanically, and thermally stable. (2) Design of 2D Janus transitional metal dichalcogenides for rechargeable-ion batteries and hydrogen production. (3) Investigation of MXenes for energy storage and hydrogen production. Our first-principles design showed that the MXenes can be efficient electrocatalysts for electrolysis of water and anodes for Li-ion battery. (4) Design of photocatalysts for solar-driven hydrogen production. By using MXene and VS₂ as co-catalysts, the photocatalytic efficiency of graphitic carbon nitride is dramatically improved due to the enhanced carrier mobility and electron-hole separation, and improved photocatalytic activity in the visible light region, which thus offers immense potential for application in solar energy conversion, water splitting, and a variety of solar-assisted photocatalysis.

Z-23

Electronic, magnetic and topological properties of two-dimensional transition metal carbides (MXenes): A first-principles study

Chen Si*, Jian Zhou, Zhimei Sun

School of Materials Science and Engineering, Beihang University

MXenes are a recently discovered large family of 2D early transition metal carbides that have shown great potential for a host of applications ranging from electrodes in batteries to sensors to reinforcements in polymers. Here, based on first-principles calculations, their electronic, magnetic and topological properties are systematically studied. First, we predict a ferromagnetic behavior in Cr₂C MXene. The ferromagnetism, arising from the itinerant Cr d electrons, introduces intrinsic half-metallicity in Cr₂C, with a half-metallic gap as large as 2.85 eV. Second, we find a new family of large-gap quantum spin Hall (QSH) insulators in Mo₂MC₂O₂ (M=Ti, Zr, Hf) MXenes which are dynamically stable, natively antioxidative and readily feasible for experimental synthesis. The topological orders in MXenes represent a new class of d band QSH phase in a triangular lattice, which greatly expands the scope of topological materials into new lattice structures. Finally, we show the potential of MXenes as Schottky-barrier-free metal contacts to 2D semiconductors such as blue phosphorene. The work functions of MXenes and the interfacial dipole induced by charge rearrangements at MXenes/semiconductors interfaces are found to be two underlying factors determining the magnitudes of Schottky barriers. These results extend the potential applications of MXenes into spintronics and electronics.

Z-24

几种二维层状材料的电子结构、电声耦合及超导电性

王保田¹, 刘鹏飞¹, 郑晶晶¹, 王芳卫^{1,2}

- 1.中国科学院高能物理研究所
- 2.中国科学院物理研究所

从 2004 年实验上成功合成石墨烯以来, 层状材料受到了人们极大的关注。相比于三维体材料, 二维材料更容易调控。对于超导电性, 二维材料也具有一定的优势, 特别是对于实现拓扑超导, 在量子计算领域具有非常重要的意义。本报告中, 我们将介绍本课题组近年来在二维层状材料超导研究方面的进展。我们主要使用开源软件 QUANTUM-ESPRESSO 和 EPW 来计算石墨烯、拓扑超导 Bi₂Pd、单层碳化磷、MoS₂ 以及 Pb-TiSe₂ 的电子结构、电声耦合和超导电性。我们发现锂离子可以在石墨烯中诱导出超导电性, Bi₂Pd 具有明显的量子尺寸效应, 这两种体系都是单能隙超导体。我们首次预言了单层碳化磷是一种 BCS 超导体 (T_c~13 K), 它的超导转变温度可以通过应变或载流子掺杂来调控。我们预言了一种 MoS₂ 的新相, 发现它比 T 相稳定并且具有~16 K 的超导电性。我们发现通过加入 Pb 夹层, 1T-TiSe₂ 中的电荷密度波态可以得到有效抑制, 并且 Pb-TiSe₂ 在三维和二维形态下都具有超导电性。

Z-25

单层三磷化铟的可调磁性及其优异光吸收性能

缪奶华

北京航空航天大学

原子厚度的二维材料凭借着奇特的性质和广阔的应用前景受到了学术界的广泛瞩目。通过第一性原理计算和分子动力学模拟等方法, 我们预测了一种新型二维半导体材料——单层三磷化铟 (InP₃), 并系统研究了其相关性能。二维 InP₃ 晶体显示出高稳定性和实验合成的可行性。它具有与硅接近的间接带隙和高电子迁移率, 并可通过施加应变来调控。研究表明, 得益于其电子结构中的类墨西哥帽 (Mexican-hat-like) 能带和范霍夫奇点 (van Hove singularities), 单层 InP₃ 在空穴掺杂或引入缺陷的情况下显示出可调磁性和半金属性。通过电子掺杂, 二维 InP₃ 还会发生半导体-金属转变。而且, 单层 InP₃ 在可见光光谱范围内表现出超强的伴有激子效应的光学吸收性质。因此, 二维 InP₃ 有可能在电子、自旋电子和光伏等器件等诸多技术中得到应用。

Z-26

电场调控下的双层 InSe 及其在数据存储中的应用

萨百晟

福州大学

石墨烯面世以来, 二维材料的超胞厚度和其不同于块体材料的物理、化学性质使得它们在电子学领域具有广阔的应用前景。由于超高载流子迁移率和强烈抑制的电子-空穴对复合, 原子级厚度 InSe 在纳米电子器件中展现出显著的应用潜能。通过第一性原理计算, 我们系统地研究了不同堆垛结构的双层 InSe 晶体和电子结构。双层 InSe 的五种可能的堆垛结构可以分为两组: 具有较小的层间距及带隙的 S 组, 和具有较大层间距和带隙的 L 组。通过研究不同外加垂直电场作用下的能带结构, 我们发现双层 InSe 存在两个临界电场强度 E₁ 和 E₂, 当垂直电场强度小于 E₁ 时, 双层 InSe 的带隙保持稳定; 当垂直电场强度大于 E₁ 且

小于 E_2 时，带隙随电场强度增加而急剧减小；当垂直电场强度大于 E_2 时，双层 InSe 从半导体型转变为导体型。对电子结构的深入分析表明能带的反常变化来源于电场诱导的近自由电子气。基于双层 InSe 的带隙突变的特性，我们设计了一种基于双层 InSe 的数据存储设备模型，其中双层 InSe 的半导体本质产生高电阻的 OFF 态，而近自由电子气调控的金属导电态将产生低电阻的 ON 态。这项研究提出的调控二维材料电子结构的设计原理有望用于研究并设计基于二维材料的电子器件。

Z-27

Elemental and electronic chemical potentials controlled migration of dislocations in 2D transition metal dichalcogenides

Xiaolong Zou

Tsinghua-Berkeley Shenzhen Institute, Tsinghua University, Shen Zhen, 518055

Two-dimensional (2D) materials have attracted lots of attention recently, due to great potential in many applications. However, large-scale samples grown by chemical vapor deposition method inevitably contain large amounts of dislocations, which have significant influences on material properties. In this presentation, based on theoretical predictions on the structures of topological defects in 2D transition metal dichalcogenides (TMDs), I will discuss the effects of both elemental (μ_E) and electronic (μ_e) chemical potentials on the migration behaviors of dislocations. In both cases, the barrier height can be reduced by as large as 50%, which in turn leads to significantly enhanced plasticity. The underlying mechanism of the tuning of migration barriers is further discussed. The effective electro-chemical-mechanical coupling in 2D TMDCs could provide new opportunities in material engineering for potential applications.

Z-28

新型二维材料的预测与设计

管杰

东南大学

利用第一性原理密度泛函理论计算，预测了单层磷烯结构除了黑磷、蓝磷结构之外的两种可稳定存在的同素异形体结构。计算表明两种新二维磷烯结构均为半导体且带隙可随层内应力变化或者层数变化而调控，其中一种结构甚至可以在应力下实现金属-半导体转换。已知的这四种单层磷烯结构可以实现层内的完美连接而几乎不产生由于晶界处晶格失配而导致的扭曲能。这为二维材料在单层内实现金属-半导体异质结构提供了可能性。此外，用结合磷烯和石墨烯结构的方法预测了单层碳磷结构，在此结构中碳原子为 sp^2 杂化，磷原子为 sp^3 杂化，均形成三个共价键。用二维瓷砖模型的方法预测了 6 种不同的碳磷结构并分别研究了其稳定性和电学性质。研究发现不同的单层碳磷结构可以具有类似黑磷烯的半导体特征并且载流子迁移率有着显著的各向异性，也可以具有类似石墨烯的半金属特征。与石墨烯不同的是，碳磷结构具有各向异性的椭圆形狄拉克锥。同样，半导体特征的碳磷结构在施加层内应力下可以对其带隙大小进行调控，这是由其结构特征决定的。

Z-29

二维硒化锗体系的材料设计

毛宇亮

湘潭大学

在本次会议中，我将报告最近利用第一性原理计算方法开展二维硒化锗材料取得的一些进展。如通过第一性原理计算，揭示了运用激光减薄技术在 SiO_2/Si 基底上制备几个原子层到单原子层硒化锗二维材料的能带结构转变规律 (Adv. Funct. Mater. 28, 1704855, 2018)。研究了四种不同堆垛次序构成的双层硒化锗的结构、稳定性和电子性质，发现通过施加平面应变可以调节双层硒化锗的能带带隙，以及间接带隙和直接带隙之间带隙类型的转变 (Phys. Chem. Chem. Phys. 20, 6929, 2018)。通过第一性原理分子动力学计算，揭示了表面粗糙度等微结构特征引起高温退火实验中提升锡化锗光致发光量子效率的起源；通过计算设计了二维硒化锗与其它二维材料构成的异质结，并研究了其受应力和电场调控的规律；通过在二维锡化锗表面构造点缺陷，计算研究了其对有毒气体分子的吸附性能等。

Z-30

Universal descriptor for large-scale screening of high performance two-dimensional materials for energy storage and conversion

Jia Li

Graduate School at Shenzhen, Tsinghua University, Shenzhen 518055, People Republic of China

li.jia@sz.tsinghua.edu.cn

Since the discovery of graphene in 2004, two-dimensional (2D) materials have attracted immense interest due to their unusual electronic, optoelectronic, magnetic and mechanical properties. In addition, 2D materials have shown potential electrochemical applications. It is of great interest to search suitable 2D materials for certain applications, such as Lithium ion battery (LIB), hydrogen evolution reaction (HER) and oxygen reduction reaction (ORR). To achieve this goal, efficient screening techniques are critical for exploring different kinds of 2D materials. In this talk, I will introduce our work on the underlying mechanisms governing the electrochemical processes and some new descriptors to help the fast screening of high-performance LIB, HER and ORR materials. Our results offer useful theoretical insight to electrochemical properties on 2D materials which may facilitate the design of high-performance energy storage and conversion materials.

Z-31

Density functional study Weyl fermions and massless triply degenerate nodal points in MX-family (M= Ti, Zr, Hf and X= S, Se, Te)

Sami Ullah, Qing Xie, Jingxu Li, Ronghan Li, Hui Ma, Xing-Qiu Chen

中国科学院金属研究所

By first-principles of DFT approach, we identified a topological semimetals MX family (M= Ti, Zr, Hf and X= S, Se, Te), which have WC-type crystals structure and host the coexistence of Weyl fermions and triply degenerated nodal points. We have observed a pair of triply degenerated nodal point (TDNP), which differentiate MX family from other renowned topological semimetals candidate's. Moreover, the Weyl fermions also coexist with TDNPs in MX family at the same time near the Fermi level. These two different types of fermions coexist in ZrTe, MoP, WC, TaS and a pair of TDNP also recognized in the isostructural candidate θ -TaN. These TDNPs are protected by the C3 rotation and vertical mirror symmetry nearly the Fermi Level, and all the Weyl nodes are positions at the same energy level demanded by crystalline symmetry $D3h$.

Z-32

Modulation of electronic and magnetic properties of edge hydrogenated armchair phosphorene nanoribbons by transition metal adsorption

饶勇超¹, 俞松¹, 李顺方², 段香梅¹, 魏苏淮³

1. 宁波大学理学院

2. 郑州大学物理与工程学院

3. 计算科学中心

基于第一性原理计算, 我们对由 3d 过渡金属 (TM) 原子功能化的扶手椅磷烯纳米带 (APNR) 的电子和磁性进行了系统的研究。我们发现对 Mn, Co 和 Ni 来说, 中心空位是最有利的吸附位置, 而 Fe 优先占据边缘中空位置。所有的 TM 原子都与相邻的 P 原子结合, 其吸附能在 -4.29 eV 到 -1.59 eV 之间。同时, 吸附能与金属体相的内聚能之比较大, 表明 TM 原子在边缘氢化扶手椅磷烯纳米带 (H-APNRs) 上将优先选择的 2D 生长模式。根据 TM 原子是处于高自旋还是低自旋状态, 磁矩相对于其自由原子态减少约 $2-4\mu_B$ 。磁矩减少的原因主要是由于电子从 TM 的 4s 壳层转移到 3d 壳层。该研究结果表明, TM 原子吸附是化学 H-APNRs 功能化的一种可行方法, 吸附导致体系具有独特的电子和磁性性质, 从而在纳米电子学和自旋电子学具有潜在的应用。

Z-33

双金属界面塑性起源和调控机理

张瑞丰

北京航空航天大学材料学院, 电子邮件: zrf@buaa.edu.cn, 电话: 15701692845

在双金属纳米复合材料中, 各种类型界面结构和纳米尺寸效应决定着该类材料表现出来的优异力学性能。应用界面位错理论和先进的内应力平衡原子尺度模拟技术, 我们研究了一系列界面结构的错配位错结构, 并在此基础上揭示了两种界面位错形核机理和极端服役载荷条件下复合材料表现出的纳米尺寸效应。进一步研究结果表明, 低指数密排界面虽然具有较低界面滑移阻力, 但是具有较高的界面位错形核阻力; 与之相反, 高指数粗糙界面虽然具有较高的滑移阻力, 但是界面位错分解阻力相对较低, 因而表现出较低冲击塑性阻力。为了调和位错形核阻力和界面滑移阻力, 我们提出一种通过在界面上引入原子级台阶有效调控界面位错形核和界面滑移阻力的有效方案。另外, 针对冲击条件加载形式的系统对比性的研究发现, 纳

米多层膜材料表现出的差异化塑性行为可以归因为界面主导的塑性行为和层厚导致的协调效应,从而为界面工程和纳米设计提供了理论依据。

Z-34

钙钛矿体系界面电子态研究

冯宏剑

西北大学

界面效应的理论研究一直是凝聚态物理、材料物理化学和物理化学等领域的研究难点,国际上从事单相体系电子结构理论研究的小组相对较多,但从事界面电子态理论研究的小组非常之少。我们对钙钛矿体系的界面效应进行了系统深入的研究,阐释了如下几个方面的界面科学问题:揭示了有机无机杂化钙钛矿平面型异质结太阳能电池界面诱导的载流子输运机理和二极管整流效应以及钙钛矿体系的带隙调控机制;预测了铁电极化调控的钙钛矿异质结构体系的载流子定向传输机理;预言了铋基无铅双钙钛矿异质结具有优异电子传输和增强光电性能的物理机制,为设计制备新型无铅钙钛矿基太阳能电池提供了材料和物理基础;理论实验结合揭示了钙钛矿太阳能器件的真空光电流增强和界面调控机理。

Z-35

铁硒体系中的掺杂和界面效应

陈明星

湖南师范大学

近期新发现的铁基超导体-FeSe/SrTiO₃ 和(Li_{1-x}Fe_xOH)FeSe 受到了人们的广泛关注。生长在 SrTiO₃ 表面上的单层 FeSe 薄膜经过退火后其超导转变温度达 77 K,远远高于其块体的超导转变温度(低于 10 K)。而在层状的(Li_{1-x}Fe_xOH)FeSe 体系中,将少量的 Fe 掺入 LiOH 层不仅导致高达 40 K 的超导转变温度还观察到超导与磁性共存。在本报告中,我们将结合第一性原理和 k 投影方法研究 FeSe 与 SrTiO₃ 界面间的氧空位以及(Li_{1-x}Fe_xOH)FeSe 中的 Fe 掺杂对 FeSe 电子结构的影响。我们发现界面氧空位以及 Fe 杂质贡献的电荷不仅移动 FeSe 的费米能级,还会导致费米面附近 FeSe 能带结构的巨变:比如能带的宽度变窄,仅有原来的 60%。此外,我们还讨论了自旋轨道耦合、LiOH 层中 Fe 杂质不同磁序对 FeSe 电子结构的影响,并进一步与角分辨光电子谱实验进行比较。

Z-36

第一性原理界面热力学及其在合金材料优化设计中的应用

江勇

中南大学

以航空发动机热障涂层界面的计算研究为历史背景,介绍第一性原理界面热力学的发展和成熟。运用第一性原理界面热力学计算研究方法,结合现代电子显微表征的先进技术,深入研究纳米特征铁素体合金中纳米析出物的微结构及其界面结构和性质,从原子\电子尺度揭示纳米结构与该合金特殊氢吸收能力的相关性,阐明该合金对氢泡形成和控制的作用机制。通过这一类计算研究,可以为核反应堆用合金材料的未来选材和设计提供重要指导。

Z-37

金属材料吸附机理与功能化的基础研究

高旺

吉林大学

金属材料具有优良的物理化学性质,在催化、传感和分子检测等领域应用广泛。其中,金属材料表界面的吸附性质是其多样化的功能得以实现的基础之一。近年来,我们采用理论计算方法,以高性能分子检测和催化等为目标导向,系统研究了吸附材料的本征特性、缺陷结构和周围环境对其作用机理和性能提升的影响等基础科学问题。揭示了界面处不同相互作用的耦合效应及界面演化机制,在原子电子尺度上阐明了材料微观结构与其宏观性能的构效关系,据此通过界面调控以改善若干金属材料的分子检测和催化性能。

Z-38

First-principles study of β -Ti/ ω -Ti interface

Shuo Cao¹, Yong Jiang², Qing-Miao Hu¹, Rui Yang¹

1. Institute of metal research, Chinese Academy of Science, Shenyang 110016, China

2. School of Materials Science and Engineering & State Key Laboratory for Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083, China

The ω phase strengthens β -Ti alloys effectively as a precipitate phase but decreases the plasticity with increasing size dramatically. To understand the strengthening and embrittlement mechanism of ω phase in the β -Ti alloys, the property of the β/ω interface is demanded. In this regard, we calculated the interface energies (γ_{int}), cleavage energies (γ_{cl}), and generalized stacking faults energy surfaces of the β/ω interfaces with different orientations using a first-principles method based on density functional theory. The results indicate that the strong anisotropy of the interface energy explains the ellipsoid morphology of the ω phase with its major axis parallel to the $\langle 111 \rangle_{\beta}$ direction. The calculated cleavage energies and unstable stacking fault energies γ_{us} are determined. By comparing the γ_{cl}/γ_{us} ratio of both interfaces and those of the bulk ω and β phases, we conclude that the interfaces are prone to crack initiation than the bulk and contribute to the ω -embrittlement of the β -Ti alloy.

Z-39

以丙炔半氢化为例探讨钼纳米晶体在碳氢活化中的晶面效应

卞文逸, 李有勇

苏州大学

在基础科学领域和工业生产中, 通过炔烃选择性加氢制烯烃是一个非常重要的反应过程。通常情况下, 贵金属催化剂比如钼能够使反应在低温下进行, 但是这类催化剂对于产物烯烃的选择性较低。包含钼以及其它惰性金属例如金的二元催化剂能够有效地改善加氢反应的选择性。但是这类助剂的添加将会极大程度提高反应所需温度, 并且导致副产物的形成。基于密度泛函理论计算, 我们发现通过利用催化剂的晶面效应调整反应路径可以实现对丙炔的选择性加氢。在裸露{111}面的钼纳米粒子上, 过度加氢产物的形成在热力学上远不如目标产物丙烯稳定。然而在钼{100}晶面上, 过度加氢并没有得到抑制。随后的实验分析证明了我们的理论预测, 并发现钼{111}晶面对丙炔半氢化的目标产物丙烯的选择性高达 95%, 而反应只需在 35 °C 的低温下进行。我们的工作为设计新的炔烃半氢化催化剂提供了一种新颖、简便、有效的方法。

Z-40

金属载体催化剂在手性分离和选择加氢反应中的应用

刘伟

南京理工大学

金属载体与有机分子耦合时产生的界面会对材料的吸附、催化、电学、输运等性质起到决定性的作用。因此, 精确预测金属与分子间的微观结构是发展特殊需求的金属材料、实现功能设计和调控的重要前提条件。本报告将利用包含范德华力修正的第一性原理计算方法, 讨论以下两方面内容: (1) 研究了手性分子丝氨酸在 Cu(531)台阶面上的吸附行为, 揭示了界面形变与金属手性拆分能力之间的对应关系, 设计具有高普适性、高重复性和高活性的金属手性拆分剂; (2) 研究了异佛尔酮在七种过渡金属表面上反应路径, 提出了描述金属催化选择性的“内轨道展宽机制”, 并利用低活性金属载体获得了工业上所需要的不饱和醇。

Z-41

复杂相界面错配位错的定量分析

杨金波

中国科学院金属研究所

本报告提出一种新方法标定半共格界面上的错配位错, 即利用 g -标量确定位错的线方向、Burgers 矢量以及核结构。它适用于平面型和曲面型界面, 包括相界和晶界。对于平面型界面, 我们的分析结果和 Frank-Bilby 公式一致。但是, Frank-Bilby 公式不适用于曲面。 g -标量的成功在于它包含了局部点阵对应关系, 能克服原子在界面附近分布的非均匀性。本方法有助于理解复杂的变形和相变行为。

Z-42

Mg-Zn 合金中强化相析出机理研究

谢耀平¹, 马海涛¹, 袁蓉¹, 高慧², 胡丽娟¹, 李晓娣¹, 钱一辰¹, 戴中华¹, 汪志勇³, 侯柱锋⁴

1. 上海大学
2. 山东齐鲁师范学院
3. 重庆理工大学
4. 厦门大学

随着材料基因工程的开展, 通过计算方法预测添加元素在合金元素对合金强化的作用对设计合金有着日益重要的作用^[1]。提高镁合金强度是近年来镁合金领域的重要课题。我们一系列的研究工作^[1-3], 研究分析了 Mg-Zn 合金中的主要析出相 β_1 的结构、相稳定性、弹性性质、界面性质, GP 区的稳定性, 以及合金元素对 GP 区稳定性的影响; 揭示了 Mg-Zn 合金中析出相析出过程中的规律。由于析出相初期析出对合金的强化效果有着重要的作用, 我们发现 Ca, Ag 能显著提高 GP 区稳定性, 增加合金中析出相成核点密度; 而 Al 不能在 GP 区偏聚, 因此对析出相密度无影响。这解释了 Ca, Ag 能提升 Mg-Zn 合金中的析出强化效果, 而 Al 不能提升析出强化效果。因此, 我们证实通过考察 GP 区稳定性的方法来预测合金中析出相析出的难易程度, 进而判定合金元素对强化效果的影响是一种有效方法。

Z-43

A kinetic BGK scheme for the liquid-solid phase transition of alloys in the presence of melt convection

Dongke Sun^{*1}, Rui Du^{1,2}

1. School of Mechanical Engineering, Southeast University, Nanjing, Jiangsu 211189, China
2. School of Mathematics, Southeast University, Nanjing, Jiangsu 211189, China

The liquid-solid phase transition is commonly observed in nature and industry, which influences the morphologies, structures, properties of solidified matters and materials. A kinetic scheme based on the Bhatnagar-Gross-Krook (BGK) model is proposed to study the solidification of alloys in the presence of melt convection.

It extends the BGK-Boltzmann equation to model the heat transfer, melt convection and liquid-solid phase transition by implementing a general streaming-relaxation steps based on the Chapman-Enskog expansion. Three sets of distribution function are adopted to describe the evolution of the temperature, flow and phase fields. The DnQd lattice vectors are used to describe advancement of solid-liquid interface, coupling with a convective-diffusion equation for heat transfer during solidification. It offers a simple and effective geometrical relationship between growing velocity and lattice spaces. After model validation, the liquid-solid phase transition of alloys with melt convection have been investigated numerically. The results show that the present model provides an alternative numerical approach to study solidification of alloys with relatively fast efficiency, and it would like to facilitate the understanding the features of phase transition in a high-throughput way.

Z-44

热力学极值原理在 Fe-C 合金中块体转变的应用

李鑫, 况望望, 张建宝, 周青, 王海丰

西北工业大学先进润滑与密封材料研究中心

针对铁-碳合金中的扩散型相变, 热力学极值原理被成功应用于新模型的推导。在该模型中, 跨界面扩散和界面迁移对相变的影响均被考虑, 其中跨界面扩散由新相到界面再从界面到母相两步构成。与传统的局部平衡模型和强制碳平衡模型相比, 新模型能够预测块体转变发生在两相区中的情形。将其应用于等温相变, 发现当初始成分在 T0 线附近时, 相变模式不受跨界面扩散的影响, 而初始成分靠近 α 相与两相区的边界时, 相变模式受跨界面扩散的影响。由于碳原子的扩散系数较大, 块体转变中形成的浓度峰的宽度远大于原子间距, 并且扩散控制的相变速度要比界面扩制的相变速度快。根据新模型, 对于连续降温过程中的相变, 扩散转变阶段、块体转变阶段和软碰撞阶段将会出现, 其中扩散转变阶段与块体转变阶段的界限出现在两相区中。这与超低碳铁-碳合金的实验结果相吻合。该工作有助于理解和控制扩散型相变, 对改善钢铁的性能亦有帮助。

Z-45

金属钯储氢: 稳定的钯氢化合物以及氢在钯晶格中的占位研究

龙德兵, 孟冬雪, 程阳, 黎明锴, 何云斌

湖北大学

氢是自然界中最简单,质量最轻,含量最丰富的元素,它在大气中的含量很少,主要是以 H_2O 的形式储存在水中。氢气由于是可替代化石燃料的清洁能源,因而得到全世界的极大关注。氢由于面临着储存和运输安全方面的难题,因而并未得到广泛的利用。寻找安全可靠,吸氢密度大的储氢材料是解决氢能源利用困难的迫切问题。过渡金属储氢的研究一直是人们研究的一个热点话题。在 Ni, Cu, Rh, Pd, Ag, Ir, Pt, Au 这些金属中, 尤属 Pd 的储氢效果最好, 在常温常压下, 它的吸氢比能够达到 0.7。

本文采用了多组元团簇展开法结合基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算,研究了钯氢化合物 PdH_x 的中间基态的稳定结构: PdH , $PdH_{2.67}$, $PdH_{2.75}$ 和 PdH_3 。分析了这些结构中氢原子在 Pd 晶格中的占位情况。氢原子由于原子半径和原子质量很小,因此它会进入到 Pd 晶格中的间隙中去。Pd 金属是面心立方(FCC)结构,它有两种晶格间隙位,分别是 O 位和 T 位。对于 PdH , 氢原子占据 O 位;而对于 $PdH_{2.67}$ 和 $PdH_{2.75}$, 氢原子则是一部分占据了 O 位,另一部分占据了 T 位。对于 PdH_3 这种结构, Pd 晶格的间隙位则是全部被氢原子所填满。

电子结构性质表明,氢原子的吸入并没有改变 Pd 原有的金属特性,未发生从金属向半导体的相转变。我们分别从热力学稳定性和动力学稳定性两个方面对岩盐矿(RS)结构和闪锌矿(ZB)结构的 PdH 进行了比较,发现 ZB- PdH 在热力学上是更加稳定的,而在动力学上则是 RS 结构更加稳定。

Z-46

不同错配度下 Ni-Ni₃Al 体系中 Cr 的占位行为及其对 O 的占位行为的影响的第一原理研究

吴玉喜^{1,2}, 代兵^{1,2}, 侯介山³, 李秀艳³

- 1.冶金减排与资源综合利用教育部重点实验室(安徽工业大学)
- 2.冶金工程与资源综合利用安徽省重点实验室(安徽工业大学)
- 3.中国科学院金属研究所

为了探究 Ni-Ni₃Al 合金体系中 Cr 的抗氧化机理,本文通过构造两个理想的具有不同晶格错配度类型的团簇模型,使用第一性原理计算方法研究了 Cr 在 Ni-Ni₃Al 合金体系中的点阵占位倾向和相偏聚倾向以及 Cr 和晶格错配度对体系中的 O 的占位行为的影响,发现:Cr 的添加能够增加 Ni-Ni₃Al 合金体系的稳定性;虽然 Cr 在 Ni₃Al 相中时倾向于占据 Ni 原子点阵而非 Al 原子点阵,但是当同时存在 Ni 相和 Ni₃Al 相时, Cr 优先倾向于偏聚到 Ni 相中而不是 Ni₃Al 相中;错配度的存在和改变基本上对 Cr 的相偏聚倾向和点阵占据倾向没有影响;Cr 的添加不影响 Ni-Ni₃Al 体系中的 O 对富 Ni 的宽松的间隙位置的占位偏好,但会降低 O 的杂质形成能,特别是偏聚到 Ni 相区域的 Cr 对 O 的杂质形成能的降低效果最强,这种降低有利于提高合金体系中的 O 含量,促进 Ni-Ni₃Al 体系中形成致密的氧化物保护膜,这可能是 Cr 的抗氧化机制之一。

Z-47

孪晶界对镁的阳极溶解影响的第一性原理计算研究

马会, 陈伟亮, 刘敏, 王长罡, 陈星秋*, 董俊华*, 柯伟
中国科学院金属研究所

大量研究表明变形镁合金中会产生各种变形缺陷,这些缺陷会加速镁合金的腐蚀行为。而且,对于密排六方结构的镁来说,塑性变形下的孪生模式通常比其他缺陷更容易发生。然而,迄今为止很难研究纯粹的孪晶界对镁合金腐蚀行为的影响。因此,我们通过第一性原理计算,利用我们提出的金属阳极溶解第一原理计算模型^[1]从理论上研究了孪晶界对腐蚀环境中镁金属的阳极溶解行为的影响。研究发现三种孪晶界(TB1{10-11}/[10-1-2], TB2{10-12}/[10-1-1]和 TB3{10-13}/[-3032])均会加速纯镁的阳极溶解速率,从而增加其自腐蚀电流密度约 1.18~1.82 倍。这个事实与现有的实验观察到的结果很好的一致。从物理的角度来说,主要是因为特定表面上孪晶界的存在增加了原子的表面能量密度,这意味着与不含孪晶界的表面相比,在各种孪晶界的表面处的原子变得不稳定。我们的计算也发现孪晶界几乎不会影响含孪晶界表面的功函数。另外,我们计算发现一些合金元素(As, Cd, Hg, Zn 和 Sn)与孪晶界的作用可以降低相应的阳极溶解速率,从而可能提高镁合金的耐腐蚀性。

Z-48

钨表面点缺陷扩散的原子模拟

郝剑楠¹, 金硕¹, 徐海濂², 舒小林¹, 吕广宏¹

- 1.北京航空航天大学
- 2.田纳西大学

氢气的滞留将严重降低钨的热导率和溅射阈值,并产生高浓度的杂质。辐照实验中观测到的钨表面形貌改变和起泡现象

依赖于等离子体的剂量和表面取向等。而表面原子结构的改变是弗兰克尔缺陷在热流的驱动或位错环运动的影响下扩散的结果。因此,对于未来聚变堆拟采用的钨基壁材料,揭示氢氦等离子体辐照情况下点缺陷在表面扩散的演化机制显得尤为重要。本文采用第一原理和分子动力学计算钨(100), (110)和(111)表面单吸附原子和空位的扩散势垒,其中扩散路径是由 SEAKMC 代码中的 Dimer 算法给出的。在(100)面上,针对两种缺陷我们给出了至少三种可能的高能垒路径,包括新的空位扩散机制。而在(110)面上,除了低能扩散路径,还发现了一种新的空位扩散机制。此外,分析了(111)表面缺陷可能的扩散路径。进一步,我们考虑表面吸附氢原子与钨本征缺陷扩散的相互影响,结果初步显示,氢原子能够促进表面空位的扩散。以上研究将有助于理解离子辐照及表面退火时材料形貌的演化的初级过程。

Z-49

D406A 高强度钢筒形件旋压成形数值模拟

李凯迪¹, 刘德贵², 李金山¹, 唐斌¹, 寇宏超¹

- 1.西北工业大学
- 2.中国航空制造技术研究院

筒形件强力旋压是一种综合了锻造、挤压、拉伸等工艺特点的先进加工工艺,已被广泛应用于国防军工和航空航天领域。本文基于旋压成形工艺的特点,在有限元软件环境下建立了 D406A 高强度钢筒形件旋压成形的三维弹塑性有限元模型,并对旋压成形变形机理以及旋压工艺参数对旋压变形的影响进行了分析。结果表明,旋轮进给速度过小的话会导致毛坯内径增大、尺寸精度降低,尤其是薄壁筒形件;如果进给速度过大则会产生较大的旋压力使旋压过程稳定性降低。随着芯模转速的增大,应变率和成形不稳定性增大,另一方面,转速过大导致的剧烈摩擦会产生更大的毛坯表面张力。旋轮圆角半径过大的话会导致旋轮轨迹的重叠部分增大从而提高旋压效率,但是旋压力会增大并使成形质量降低;旋轮圆角半径过小的话会产生切削现象,从而得到较差表面质量的工件。通过正交试验与多因素方差分析得到了第一道次旋压的最优工艺参数组合:进给速度为 50 mm/min,芯模转速为 40 rad/min,旋轮圆角半径为 10 mm。

Z-50

碳纳米结构独特的力磁耦合效应

张助华

南京航空航天大学

本报告介绍我们关于碳、硼氮等纳米结构力-电-磁耦合效应的研究进展。首先我们发展了预测碳纳米管力-电-磁耦合的紧束缚理论。通过该理论计算,发现在拉伸、扭转应变和磁场的耦合作用下,应力可使碳纳米管发生顺磁性-反磁性的转变 [APL, 90, 053114 (2007)]。基于双层石墨烯纳米带吸附 Si(001)表面,第一原理计算发现底层纳米带与基底成键而导致其边缘磁性消失,而第二层纳米带与底层纳米带的相互作用减弱使得其边缘磁性完好存在。通过对该系统施加偏压,发现石墨烯纳米带边缘磁化随电场强度线性地变化。该磁电效应源于一种新的机制:偏压驱动的电荷调制石墨边缘态自旋分裂导致,不同于传统的磁电机制和最近报道的基于自旋屏蔽效应导致的磁电耦合 [PRL, 103, 187204 (2009)]。最后,我们还将介绍在碳纳米锥中实现超强的赝磁场。基于连续介质力学分析发现碳纳米锥在简单加载下可在石墨烯网格中产生可严格定义的应变梯度,并且施加仅 2% 的垂直应变可以实现高达 600 T 的赝磁场。该机电耦合归功于圆锥体独特的拓扑结构(submitted)。

Z-51

硼基团簇的结构流变性: 亚纳米坦克履带、指南针、类地月系统

翟华金

山西大学分子科学研究所纳米团簇实验室

硼基纳米团簇具有独特的动力学结构流变性质。报告涵盖本实验室近期在这一方向的相关量子化学理论研究结果。包括:(1) 新型汪克尔分子马达--拉长结构亚纳米硼团簇(B_{10}^- , B_{10} , B_{15}^+)类比坦克履带;(2) 模型团簇 $B_{10}C$ 动力学性质迥异的两个异构体用于揭示亚纳米坦克履带的动力学机理及其调控;(3) 复合团簇 Mg_2B_8 亚纳米指南针;(4) 三明治团簇 Be_6B_{11} 的双重动力学结构流变特性(公转与自转),该团簇可视为亚纳米类地月系统,将后者几何尺度微缩 18 个数量级。电子离域与 π/σ 芳香性是动力学结构流变性的决定因素。

Z-52

二维纳米材料对生物分子结构影响的理论模拟研究

李伟峰

山东大学物理学院

在生命科学和医学等领域,一些纳米物质以其特殊的化学结构、优异的表面性质和纳米尺寸,成为潜在的新型药物载体和分子影像探针,为药物靶向运输和精准治疗提供了新的解决途径。同时,纳米材料负面生物效应逐渐被人们关注。研究发现纳米材料并不完全是有益的,它们在生物分子水平上影响着生物学行为,表现出生物毒性。基于经验力场的分子动力学模拟,在纳米生物效应的分子机制研究中有很大优势。在研究中,我们探索了一系列纳米材料(石墨烯、氮化石墨烯等)材料与蛋白质、DNA等生物大分子的相互吸附的动力学过程和热力学规律。通过分析纳米—生物界面的作用特征和吸附力来源,总结了纳米影响生物分子结构变化的分子机制。另外,还分析了石墨烯材料的空位缺陷等结构对石墨烯生物效应的调控作用。提出通过纳米微观结构设计改变生物分子的吸附行为,从而实现纳米材料生物功能化的方法。

Z-53

Electronic and transport features of zigzag phosphorene nanoribbons with nonmetallic atom terminations

孙琳¹, 汪浩², 李默³

1.中南大学

2.深圳大学

3.美国佐治亚理工学院

Using the first-principles method based on the density-functional theory, electronic properties of zigzag phosphorene nanoribbons (ZPNRs) terminated with nonmetallic (NM) atoms such as H, C, F, N, O, S and Si in addition to a pristine case are studied systematically. Three possible cases are considered, namely, ZPNRs with symmetrical edge terminations, asymmetrical edge terminations, and the half-bare edge case. It is shown that the pristine ZPNRs show metallic behavior. For ZPNRs terminated with C, O, S and Si atoms, they are always metals regardless of the termination cases. While ZPNR terminated with H, F, and N, the electronic nature either a metal or a semiconductor depends on the termination cases. The results with calculating the edge formation energy show that the ribbons with C, F, N, O, S and Si atom edge modifications are more stable than the H-terminated ZPNR. The results indicate that the introduction of NM atoms at edge(s) can effectively modulate the electronic and the transport properties of ZPNRs. These novel electronic properties suggest that PNRs is a promising candidate for future nanoelectronic and optoelectronic applications.

Z-54

二维材料与金属接触的界面性质**

郭颖^{1*}, 潘峰¹, 叶萌², 王洋洋², 张涵², 张修营², 吕劲^{2*}

1.陕西理工大学, 陕西汉中, 723001

2.北京大学, 北京, 100871)

*guosophia@163.com, jinglu@pku.edu.cn

自2004年二维材料石墨烯被发现以来,二维材料由于结构简单、具有独特的物理性质而备受研究者的青睐,我们第一次系统的用第一性原理理论研究了锡烯/铋烯/ML GaN与常见的几种金属接触的表面结构特点、电子特性和量子输运特性。

锡烯与金属电极接触后的六边形结构保持较好,但是褶皱高度变化较大。锡烯的褶皱高度在Au、Al、Ag和Cu的表面增加了,而在Ni、Pd、Pt和铱Ir的表面变成和石墨烯类似的平面结构。锡烯与金属接触以后,由于结构的变化和能带的杂化,使锡烯的能带与本征能带完全不同。全电子分布图更进一步说明了,锡烯与八种金属间形成了共价键;平均静电势能图(AEP)表明在锡烯与金属接触的界面没有隧穿势垒,分波态密度图显示,锡烯与金属接触以后费米面附近有明显的电子态,说明锡烯被金属化了。因此,在垂直方向上锡烯和这八种金属是很好的欧姆接触。

铋烯铋烯 β 相具有大于0.4 eV的带隙,高的载流子迁移率和好的室温稳定性而具有制作成为逻辑器件的潜能。单层铋烯 β 相与体金属(Ti, Al, Ag, Au, Pd和Pt)接触,铋烯的六角形结构保持不变(除了Ti电极外),但在竖直方向与体金属电极之间的相互作用很强,在界面处形成金属诱导态,从而导致器件的有效沟道长度变短。在水平方向上,与Ir/Ag/Ti电极形成n型肖特基接触;与Pt/Al/Au电极形成p型肖特基接触。若用二维材料石墨烯作为电极,铋烯FET器件的有效沟道长度不会变短,而且界面为近似的p型欧姆接触(肖特基势垒为0.06 eV)

单层GaN在2017年被Joshua A. R.课题组利用石墨烯封装的技术制备出来,文献报道有单层类石墨烯平面(planar GaN)和褶皱六角形(buckled GaN)两种结构。与体金属(Ti, Sc, Al, Ag, Au,和Pt)接触后,planar GaN与体金属电极之间的相互作用

用很强，在竖直方向形成欧姆接触，而水平方向分别与 Sc 和 Pt 电极形成 n 型和 p 型欧姆接触。而 buckled GaN 与体金属电极之间的相互作用很弱，但可喜的是与金属 Au 和 Pt 电极在垂直和水平方向都形成了 p 型欧姆接触。

Z-55

基于中国国家网络的计算材料云平台

乔楠

北京并行科技股份有限公司

超算云服务是基于中国高性能计算环境与云计算技术，结合自身在高性能计算领域多年的研发与经验而打造的能够提供各大超算与数据中心的计算资源、优化网络、应用与工具、软件与服务的一站式平台，为科研科技工作者提供高效便捷式计算服务。

Z-56

新材料的第一性原理设计和预测

杨利明

华中科技大学

With the vast development of computer science and technology and the invention of various computational algorithms, based on high performance computing architecture, the first principles theoretical calculations and computational simulations are widely applied in various aspects. In this talk, I will introduce the utilization of first-principle simulations on molecular assembly, materials design, and reaction mechanism via several typical examples. I) we design a new type of sandwich compounds by combining the high level ab initio calculations and the global minimum structure search, and propose two new concepts and a universal scheme for assembly and stabilization of atomic clusters, which open up new methods for molecular assembly. II) A series of highly stable two-dimensional planar hexacoordinated materials are predicted, which open up a new sub-branch of 2D materials. III) A series of porous materials (MOFs and COFs) were architected by coordinated and ordered self-assembly design computationally, and the band engineering of porous materials were used to control the band gap and optical response. Based on the designed MOFs, it is synthesized and used for CO₂ capture to present a new mechanism for efficient carbon capture. IV) we designed a class of single atom catalyst, i.e., transition metal embedded graphene, for efficient CO oxidation. Our work will shed light on the future progress of relevant fields both experimentally and theoretically.

Z-57

固体材料热物性的第一原理计算和多尺度模拟

鲍华

上海交通大学

热导率是材料重要的物性之一。近年来随着微纳尺度传热理论研究的深入，使得通过第一原理计算来预测晶体材料本征热导率成为可能，包括通过第一原理提取力常数，进而获取晶格热导率；以及通过电子声子耦合的计算来获取电子热导率。另外一方面，对于复合材料、多孔介质等更为复杂的体系来说，则要考虑材料热导率的尺度效应，以及界面热阻等因素，因而需要通过多尺度模拟来研究其热输运物性。本次报告主要介绍在晶体材料、复合材料热物性方面的一些研究成果。

Z-58

功能材料物理化学性质的计算与调控

郭伟

北京理工大学物理学院

功能材料及器件的物理化学性质经常受到缺陷以及表面、界面微结构的显著影响，对这些因素的研究和模拟对于提高材料和器件的性能、稳定性等指标有重要意义。这里我们通过第一性原理计算研究了合金和半导体材料的电子结构、材料性能与缺陷、表面、界面等外在因素的关系。在合金催化性能调控方面，我们利用 DFT 结合 KMC 的多尺度动力学模拟方法预言了一种能使氨气分解催化活性提高 2~3 个数量级的亚单层“缺陷” Ni/Pt 合金表面，定量解析了活性位之间的协同效应应对实现多功能催化的作用。半导体方面，我们通过 DFT 计算预测了稀土掺杂 CaTiO₃ 的稳定生长条件和掺杂构型与价态，

这些因素的调控将影响材料的荧光特性；而在 CuInS_2 半导体中，计算表明改变 $[\text{Cu}]/[\text{In}]$ 比率引入的复合缺陷对材料的能带和光吸收、发光性质有重要影响。此外，我们通过理论计算 $\text{Sr}_2\text{CoMoO}_6$ (SCMO) 与 BaTiO_3 (BTO) 的异质节，阐明了它们的电磁耦合机制：两端 BTO 的电极化性质可以有效改变中间 SCMO 中 Co 原子 3d 轨道的占据情况，从而对 SCMO 的电学、磁学性质产生显著影响。这种异质节多铁电耦合效应有望在未来存储器件中发挥作用。

Z-59

团簇展开法在材料特性与新材料开发上的应用

黎明锴, 龙德兵, 孟冬雪, 程阳, 何云斌

湖北大学

ZnO 及其它 II-VI 族半导体材料由于其优异的性能而在光电、压电、热电、铁电等诸多领域被广泛应用。自上世纪 90 年代 ZnO 薄膜在室温下发生光泵浦激发近紫外激光发射的现象被报道后, ZnO 作为新型的光电信息功能材料引起了研究热潮。II-VI 等价离子掺杂的三元、四元 ZnO 合金半导体对于开发波长可调的光电器件具有非常重要的意义, 而对于掺杂过程中所出现的晶格畸变、掺杂元素含量限制、禁带宽度非线性变化、热力学稳定性等问题仍需亟待解决和进一步研究。我们采用了第一性原理计算结合团簇展开法系统地研究了 $\text{Be}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 、 $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 、 $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 、 $\text{ZnO}_{1-x}\text{S}_x$ 、 $\text{ZnO}_{1-x}\text{Se}_x$ 、 $\text{ZnO}_{1-x}\text{Te}_x$ 、 $\text{ZnS}_{1-x}\text{Se}_x$ 、 $\text{CdS}_{1-x}\text{Se}_x$ 以及 $\text{Be}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}_{1-y}\text{S}_y$ 、 $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}_{1-y}\text{S}_y$ 和 $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}_{1-y}\text{S}_y$ 等 II-VI 族 ZnO 三元、四元合金固溶体的电子结构与热力学性质。

由于磁性合金的性质主要取决于其原子结构和磁序。因此, 理解这些合金体系的中间态结构以及磁相图就显得尤为重要。对于磁性元素, 我们将其视为两种不同的原子分别具有自旋向上和自旋向下的两种磁矩。继而构建晶胞模型, 通过多组元团簇展开法研究了合金体系的原子和磁性构型。从理论上对 $\text{Mg}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}$ 合金的反铁磁相图进行了重新的检验。并预测出了在高 Mg 含量下会出现一种反铁磁态的稳定结构, 而不是由反铁磁和顺磁态两种结构组成的一种简单的混合态。我们所采用的这种方法显著地减少了在寻找中间态结构和相图上的计算时间, 为磁性材料的磁序与磁相图的研究提供了高效的理论研究方法。

氢气由于是可替代化石燃料的清洁能源, 因而得到全世界的极大关注。氢由于面临着储存和运输安全方面的难题, 因而并未得到广泛的利用。寻找安全可靠, 吸氢密度大的储氢材料是解决氢能源利用困难的迫切问题。我们采用了多组元团簇展开法结合基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算, 研究了钯氢化合物 PdH_x 的中间基态的稳定结构, 分析了这些结构中氢原子在 Pd 晶格中的占位情况。电子结构性质表明, 氢原子的吸入并没有改变 Pd 原有的金属特性, 未发生从金属向半导体的相转变。此外还分别从热力学稳定性和动力学稳定性两个方面对岩盐矿(RS)结构和闪锌矿(ZB)结构的 PdH 进行了比较, 发现 ZB-PdH 在热力学上是更加稳定的, 而在动力学上则是 RS 结构更加稳定。

Z-60

基于 MAPS 软件的锂电池性能多尺度研究

郑宏

北京泰科博思科技有限公司, kevin_zheng@tech-box.com.cn

分子模拟技术已经普遍应用于新能源材料设计研究中。MAPS 作为完整的多尺度材料设计平台, 完美的整合了图形技术和分子模拟技术, 给新能源材料设计工作者提供了高效、友好的操纵分子模拟技术的环境。用户在 MAPS 平台上可有效控制 VASP、Quantum Espresso、LAMMPS、ReaxFF 等先进的分子模拟技术完成复杂的新能源材料设计和过程模拟工作。如, 描述锂电池中最受关注的 SEI 膜的生成和作用机理研究; 微孔炭电极与电解液相互作用(提供描述电极材料与电解液之间的力场优化服务); 材料界面的力学和热导性质预测; SEI 膜的合理性验证研究; ReaxFF 方法描述氧载流子在电极材料中的扩散行为及含能材料的反应过程研究等。MAPS 提供丰富的化合物热力学性质描述功能和强大的拟合功能, 应用于 QSPR 模型建立研究, 进行新型催化剂设计工作。

同时 MAPS 还提供高效的机器学习和材料基因组计划实现必须的完整的流程设定平台。

Z-61

碘氧化的新型二维多孔 COF 材料的导电机理研究

张秋菊

二维材料的独特新奇特性使其在电子、催化、能源存储转化以及化学传感等方面具有良好的应用前景。实验发现, 氢一直无法穿透传统的膜材料但可以穿透单分子二维材料如石墨烯和 BN 层, 通过第一性原理结合 Gaussian 计算, 我们比较了石墨烯, 55-77 缺陷石墨烯, BN 和 B 的单分子膜对氢同位素的穿透速率的影响机理, 预测了 α -B 材料具有最优穿透性能, 提出了零点振动能是决定同位素穿透速率的关键因素。2017 年, 一种新型二维多孔共价有机骨架(COF)结构 sp^2 -c-COF 被合

成, 实验通过采用 TFPPy 和 PDAN 获得了 sp^2 -C 杂化共轭 π 结构, 并且观测到碘氧化对其电导率具有明显提高, 可增大 12 个数量级。通过采用 DFT-HSE06 方法, 我们计算了碘氧化前后的电荷 (包括电子和空穴) 迁移率, 发现 sp^2 -C-COF 因为价带顶和导带底的局域性, 能带比较平滑, 导致有效质量偏大, 得到的电子或空穴迁移率很低, 从而导致实验测得的电导率很低。我们提出了一种碘氧化的离子机理, 从电离能和 Bader 电荷分析研究了碘氧化 COF 共轭离域 π 电子形成碘负离子的可能性, 计算了碘负离子和 COF 正离子的电子和空穴迁移率。结合 LAMMPS 的 MSD 模拟, 计算得到离子迁移率为 $13.6 \times 10^{-2} \text{ S m}^{-1}$, 与实验值非常接近。我们根据锂电池的器件导电机制, 以碘氧化的 sp^2 -c-COF 作为电极, 设计了导电器件, 发现其电荷运动与典型的 LiPF_6 非常接近, 这表明离子迁移在该体系中是可行的。

Z-62

基于原子层沉积表面反应机理的前驱体设计与筛选

方国勇, 徐丽娜

温州大学化学与材料工程学院

前驱体是原子层沉积 (Atomic Layer Deposition, ALD) 技术成功的前提和关键。目前, 适合 ALD 技术的前驱体相当缺乏, 发展有效的 ALD 前驱体是当前原子层沉积技术发展的重要方向。从理论计算的角度对 ALD 前驱体进行设计和筛选是一种高效经济的途径。其依据通常是基于量子化学计算获得前驱体的配键强度、生成能、螯合能、热稳定性和水解活性等信息, 进而预测前驱体的相对稳定性和反应活性。但这些方案忽略了前驱体与表面的空间结构和相互作用等信息, 有时会给出错误的预测。近期, 我们提出了基于 ALD 反应机理来预测前驱体与表面之间真实的反应活性, 包括吸附能、脱附能、表面反应能和活化能等信息, 统称为前驱体的表面活性 (Surface Reactivity), 而这正是 ALD 技术的本质所在。本文以 Si 前驱体氨基硅烷的设计为例, 全面阐述了基于表面反应活性的前驱体设计与筛选思想, 为 ALD 前驱体设计指明了新的方向。

Z-63

纳米晶 W-In 体系的第一性原理计算研究

王奇, 唐法威, 宋晓艳, 刘雪梅, 王海滨

北京工业大学

纳米晶金属材料与同成分传统粗晶材料相比具有独特的物理化学特性, 然而, 纳米材料通常稳定性较差, 易发生晶粒组织失稳快速生长, 导致纳米材料优异性能的大幅度削弱甚至丧失。已有研究发现, 某些溶质元素的添加可产生晶界偏聚效应, 从而提高纳米多晶材料的热稳定性。本文以钨基合金为例, 利用基于第一性原理计算的晶界偏聚模型, 系统研究了 W-In 体系在不同溶质浓度下的晶界偏聚行为和键合特征, 从电子结构层面揭示了 W-In 体系的稳定化机制。模型计算首次得到了 W-In 体系中溶质晶界偏聚能随 In 溶质浓度的变化规律, 揭示了平均偏聚能和晶界相对体积变化随溶质浓度的反相关关系。结合态密度和键布居分析, 可知 In 原子由晶内偏聚到晶界, 键性发生显著变化, W-In 键由晶粒内部的离子键转变为晶界区域的强共价键。当溶质浓度一定时, 溶质偏聚能力和体系结构的稳定性与偏聚前后费米能级处的电子态密度状态存在直接对应关系。本研究为纳米晶钨基合金材料的设计研发提供了新的理论依据。

Z-64

分子动力学模拟与模型结合研究填料(石墨烯,碳纳米管)接枝分子链对尼龙纳米复合材料导热性能的影响

高洋洋¹, 张立群¹, Florian Muller-Plathe²

1.北京化工大学

2.德国达姆斯塔特工业大学

导热性能是聚合物纳米复合材料一种非常重要的性能, 它能大大提高材料的使用范围。在这个工作里, 通过利用反转非平衡分子动力学模拟方法, 我们首先使用全原子模型考察了石墨烯接枝分子链对尼龙纳米复合材料导热性能的影响。结果表明石墨烯尼龙界面热导与接枝分子链密度成正比; 但是随着接枝长度的上升, 它先上升然后逐渐趋于饱和。然而, 接枝分子链显著地破坏了石墨烯的平面共轭结构, 石墨烯本身的热导显著下降。我们利用经验方程描绘了材料界面热导与接枝密度和接枝长度的关系。由于接枝引起界面热导的上升和石墨烯本身热导的下降, 通过结合 EMA 模型, 我们发现石墨烯尼龙纳米复合材料热导在中等接枝密度下达到最大值。其次, 我们考察了碳纳米管间导热率与接枝密度, 接枝长度和管间距离的关系。我们提出了一个热环流模型定量描述了三者之间的关系。最后我们考察了碳纳米管接枝位置和外加拉伸场对材料导热性能的影响。结果表明纳米管末端接枝比侧面接枝更能提高材料的导热率。材料的导热各向异性、碳纳米管的取向度和接枝密度可以用一个经验方程来描绘。本工作有助于提高对接枝法改善聚合物填料复合材料热导的认识, 为制备高热导率的聚合物复合材料提供新的思路。

Z-65

渗透汽化膜限域传递机理分子动力学模拟研究进展

邹修洋^{1,2}, 李梅生¹, 周守勇¹, 赵宜江¹, 钟璟²

1. 淮阴师范学院化学化工学院

2. 常州大学石油化工学院

随着计算机的快速发展, 分子模拟技术越来越广泛应用于渗透汽化研究。通过分子模拟技术模拟渗透汽化过程膜结构变化、热力学数据、复合膜层间或膜层与溶剂分子间的相互作用能以及动力学数据等方面, 用于分析限域传递机理。分子动力学模拟可以用于研究单溶剂分子在膜内吸附与扩散行为, 并且可以通过吸附和扩散数据预测溶剂的通量; 也可以用于混合溶剂分子在膜材料上的吸附, 研究膜材料的选择性。此外, 模拟过程提供分子层面的渗透汽化过程细节图, 从图中可以了解溶剂分子的优先吸附位点、溶剂分子在膜层内扩散形式、膜材料溶胀或柔韧性等特点, 应用于预试验, 可有效筛选制膜材料, 设计膜孔径、亲疏水性、膜厚等性质, 减少实验次数, 降低研究成本。

Z-66

Pressure induced topological phase transition in layered Bi₂S₃

Yuanping Feng^{*1}, Ming Yang², Yongzheng Luo¹, Minggang Zeng³, Lei Shen¹, Yunhao Lu⁴, Jun Zhou¹, Shijie Wang², Iam Keong Sou⁵

1. National University of Singapore, Singapore

2. Institute of Materials Research and Engineering, Singapore

3. Data Storage Institute, Singapore

4. Zhejiang University, China

5. The Hong Kong University of Science and Technology, China

A large bulk band gap and tunable Dirac carriers are desired for practical device applications of topological insulators. However, most known topological insulators are narrow gap materials and the manipulation of their Dirac surface states is limited by residual bulk charge carriers originating from intrinsic defects. Based on results of first-principles calculations, we predict that a layered hexagonal structure of Bi₂S₃ is stable, and it becomes a topological insulator under a moderate compressive pressure of about 5.3 GPa. Interestingly, we find that the strength of the spin-orbit interaction in Bi₂S₃ can be effectively enhanced by the applied pressure. This leads to an increased inverted band gap with pressure, which can reach 0.4 eV with a pressure of 13.7 GPa. Compared to Bi₂Se₃, intrinsic defects are suppressed in Bi₂S₃ under both cation- and anion-poor growth conditions.

Z-67

Large Scale GW calculations for 3D and 2D systems

Peihong Zhang

Department of Physics, University at Buffalo, SUNY, Buffalo, NY 14260, USA

Although the GW approximation is recognized as one of the most accurate theories for predicting materials excited states properties, scaling up conventional GW calculations for large systems remains a major challenge due to complication of the convergence issue and the unfavorable scaling of the computational cost with respect to the system sizes. We have developed an innovative method that can drastically accelerate fully converged GW calculations, enabling fast and accurate quasiparticle calculations for complex materials systems. A speed-up factor of nearly two orders of magnitude is achieved for an MgO system containing 256 atoms (1024 valence electrons) with a negligibly small numerical error of ± 0.03 eV.

GW calculations for 2D materials pose additional challenges because of the analytical behavior of the 2D dielectric function, which requires an extremely dense k-point sampling of the Brillouin zone to converge the calculated electron self-energy. To this end, we have also developed a combined subspace sampling and analytical integration technique that effectively reduces the computational cost of 2D GW calculation by another one to two orders of magnitude. We have applied our new methods to calculate the GW quasiparticle band structures of several 2D materials, including recently synthesized C₂N and C₃N.

Z-68

Mechanism of Charge Separation and Exciton Structure in Carbon Nitride and Graphene Quantum Dots

Rui-Qin Zhang
Department of Physics, City University Hong Kong, Hong Kong SAR
Beijing Computational Science Research Center, Beijing
E-mail: aprqz@cityu.edu.hk

Graphene quantum dots (GQDs) and Carbon nitride quantum dots (CNQDs), the latest addition to the carbon material family that promise numerous novel applications in optical sensing, photo-catalysis, bio-sensing, and photovoltaics. However, understanding the photocatalytic capability of CNQDs compared to the graphene quantum dots (GQDs) have not been investigated thoroughly. In this work, through time-dependent density functional tight binding (TD-DFTB) calculations, it is revealed that due to the ground state frontier molecular orbitals (FMOs) localization, CNQDs have superior carrier charge separation, sensitive to the size of the QD. Strong localization of the FMOs and excited state charge separation was observed in the first excited state due to the relaxation of the structure. The exciton structure reveals spatial confinement to the stretched C-N bonds independent of the size of the QDs while there is no such exciton structure found for GQDs. The optical absorption and emission of CNQDs is sensitive to size and does not show strong variations in the shape of the QD. Our approach provides an explanation for the origin of the enhanced photocatalytic performance of CNQDs over graphene quantum dots (GQDs) and their characteristic exciton localization.

Z-69

Band Structure Engineering and Defect Control of Oxides for Energy Applications

Su-Huai Wei
Beijing Computational Science Research Center, Beijing 100193, China

Metal oxides play an essential role in modern optoelectronic devices because they have many unique physical properties such as structure diversity, superb stability in solution, good catalytic activity, and simultaneous high electron conductivity and optical transmission. Therefore, they are widely used in energy related optoelectronic applications such as photovoltaics and photoelectrochemical (PEC) fuel generation. In this talk, I will discuss the band structure engineering and defect control of oxides for energy applications. In particular, I will highlight our study on (i) the fundamental properties of the transparent conducting oxides (TCOs); (ii) band structures and defect properties for the n-type TCOs; (iii) how to achieve simultaneously high transparency and conductivity in n-type TCOs; (iv) why p-type TCOs are difficult to achieve; (v) how to modify the band structure or design new materials to achieve p-type TCOs or even bipolarly dopable TCOs; (vi) the origin of the high-performance of amorphous TCOs; and (vii) band structure engineering of bulk and nano oxides for PEC water splitting. Based on the understanding above, we hope to clarify some key issues and the challenges facing the rational design of novel oxides and propose new and feasible strategies or models to improve the performance of existing oxides or designing new oxides that are critical for the development of the next-generation energy related applications.

Z-70

Disorder-related Thermal Transport in Part-crystalline Part-liquid Materials

Wenqing Zhang
Department of Physics, Southern University of Science & Technology, Shenzhen, China

The multi-component materials of chemical bond hierarchy, exhibiting the part-crystalline part-liquid (PCPL) state, have recently been proposed to be emerging candidate of thermoelectric materials. These materials contain at least two different types of sublattices, one crystalline and another one strongly disordered or liquid-like, leading to extremely low lattice thermal conductivity. This talk presents a survey on the general characteristics of the thermal transport in the PCPL materials. We also develop a molecular dynamics (MD) approach to simulate the complex thermal transport process. We compare the results in Green-Kubo method and Boltzmann transport theory to elucidate the thermal conductivity of PCPL materials by using empirical interatomic potentials fitting to the liquid-like thermoelectrics like Cu_2Se . The contribution to thermal transport from each structural component, i.e. the rigid-crystalline, strongly disordered, and/or liquid-like parts, are respectively analyzed. Relationship to the minimum thermal conductivity is also discussed.

Z-71

Band Structure Engineering of Strained Two-dimensional Materials

钟建新

湘潭大学物理与光电工程学院

Email: jxzhong@xtu.edu.cn

In this talk, I will introduce our recent progress on tuning the electronic band structures of two-dimensional materials by first-principles calculations, including graphene, boron-nitride, MoS₂, and topological insulator systems. Experimental efforts in this research direction will be also discussed.

Z-72

氢键铁电体的第一性原理设计

吴梦昊

华中科技大学

氢键具有饱和性和方向性，使得氢键体系可能因此产生铁电性质。我们将在报告中介绍本组近几年来关于氢键铁电/多铁体系的一系列第一性原理设计，包括羟化二维材料，功能化有机纳米线，碳氮有机物，羟基氧化物等。它们都具有可观的极化和高于室温的居里温度，有些还同时具有磁性和多铁耦合。其中一些金属羟基氧化物和氧化物之间的可逆转化已被实验证实，其良好的晶格匹配使外延生长成为可能。由金属羟基氧化物和一些常见的金属氧化物(例如 TiO₂, SnO₂ 和 CrO₂)组成的异质结可以构造各种器件, 如铁电场效应晶体管和铁电隧道结。

Z-73

低维单质材料中的铁电性和反铁电性

陆赞豪

浙江大学

铁电材料，特别是二维体系中的铁电性，在过去几年引起了人们的浓厚兴趣。然而，几乎所有报道的铁电材料都是由不同种类的原子组成的化合物。据我们所知，单元素材料的铁电性从未在文献中报道过。在这里，虽然很违反常识，但我们基于第一性原理计算，揭示了一系列单质二维体系及表面体系中的自发极化和本征铁电性及反铁电性。这些单元素材料的铁电居里温度可能高于室温，因此它们有望实现具有广泛应用前景的超薄铁电器件。于此同时，我们也构建一个通用模型来理解和搜索中新型二维铁电和反铁电材料。

Z-74

铁掺杂氧化镁中压致自旋转变的研究

王贤龙

中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所

铁掺杂氧化镁不但是重要的功能材料也是下地幔中重要的矿物，对铁掺杂氧化镁物性的充分理解能够加深对过渡金属氧化物和下地幔性质的认识。我们采用第一性原理方法研究了泛函形式、空位缺陷和铁原子分布对铁掺杂氧化镁中压致自旋转变行为的影响。研究结果显示杂化泛函可以很好的描述铁原子的自旋转变压力，并且氧化镁中的空位缺陷会显著的影响铁原子的价态、自旋态和 Fe-O 键长。结合第一性原理方法、团簇展开方法和蒙特卡洛方法，在包含约 1 万个原子的超胞中研究了高温高压下氧化镁中铁原子的分布状态，发现在 900 K 以下 FeO 和 MgO 倾向于相分离的状态，而在 900 K 以上铁在 MgO 中是均匀分布的，分析发现铁原子的分布状态会使铁自旋转变发生在一个较大的压力范围之内，我们的模拟结果能够和实验很好的吻合。表明铁原子分布状态和温度效应的共同作用会使铁掺杂氧化镁在下地幔温压条件下的自旋转变发生在一个很宽的压力范围内。

Z-75

硬磁-软磁复合薄膜材料的磁性和磁各向异性第一性原理研究

袁宏宽，韩小翠

西南大学物理科学与技术学院

具有高垂直磁各向异性(perpendicular magnetic anisotropy, PMA)的磁性材料是构建“磁随机存储器 (STT-MRAM)”高密度磁信息储存器和“磁隧道结(MTJs)”自旋电子学器件至关重要的组成部分,因为高 PMA 值不但能显著提升记录介质的面记录密度和热稳定性,而且能大幅降低 MTJs 电流诱导磁化翻转所需的临界电流密度,进而降低器件的功耗。我们构建了硬磁-软磁复合的多层膜结构模型: MgO|FePt|TM 多层膜; MnGa|Fe₂CoAl 超晶格模型,通过改变薄膜的面内应力、调节层间磁序耦合等方式,利用第一性原理方法计算了体系的磁性和 PMA 值。研究发现:合适的软磁复合可将 FePt 硬磁体系的 PMA 值提升至原来的 2 倍,过渡金属软磁在 FePt 薄膜界面处诱导的 PMA 值要比 FePt 块体值高 3 倍; MnGa|Fe₂CoAl 可表现出较高稳定性的反铁磁序排布, MnGa 硬磁具有的高 PMA 值可在复合材料体系中得以保持。

Z-76

铁电准同型相界处的畴结构以及压电性能的相场模拟。

柯小琴

西安交通大学

铁电准同型相界由于其较高的压电性能而备受关注,近年来由于开发无铅压电材料的需求,揭示准同型相界处高压电性能的机理变得尤为重要。但是目前对准同型相界(四方和三角的相界)处发现的单斜相是如何产生的,以及单斜相在高压电性能方面所起的作用都还不清楚。我们通过相场模拟方法成功复现了铁电准同型相界处的畴中畴纳米畴结构,并发现,在很小的极化各向异性下,纳米单斜畴会出现在四方长程畴中,并且该单斜相可以被长程静电能以及弹性能所稳定。另外,我们发现,该单斜相在外加的小电场作用下,即可发现较大角度的极化旋转,从而说明准同型相界处的大压电性能主要是由于极化旋转而不是畴壁移动的贡献。

Z-77

基于原子力显微技术的压电材料非线性动力学分析

明文杰¹, 潘锴^{1*}

1.湘潭大学材料科学与工程学院,湘潭,湖南,中国 411105

(*E-mail: kpan@xtu.edu.cn / hbingwenjie@163.com)

压电材料因其优异的力电耦合性能在微电子材料领域具有极大的应用前景,随着纳米技术的快速发展,压电材料和器件的微型化,迫切需要来能够在纳米尺度表征其局域的力电耦合性能。原子力显微技术(AFM)具有高的空间分辨率已经广泛用于表征导电探针与样品间纳米尺度力电耦合交互作用。然而由于探针几何形状复杂性,特别是带电探针与压电材料间复杂的力电交互作用,使得基于导电探针与压电材料间的非线性动力学解析分析相当困难。而现有的有限元研究方法通常也只是把压电材料等效为弹性材料,忽略其力电耦合效应,而且无法建立材料力电性能与 AFM 动力学信号的直接关联。基于此,我们建立一种新的有限元模型来模拟导电探针与压电样品间的复杂非线性动力学行为。我们通过实验测量的自由共振频率来拟合悬臂模型的几何尺寸,并进一步探究了测试条件与材料本征力电耦合性能对 AFM 共振频率的影响,结果表明压电系数对共振频率的影响不可忽略。而且基于 AFM 振幅和频率响应可以反演出材料的本质力电参数。这为压电材料局域力电耦合定量分析提供了新思路。

Z-78

铁电材料的经典唯象理论模型

马文辉

汕头大学物理系

铁电材料中经典唯象理论模型的最初提出距今已有七十年的历史了,近十多年来很多的相关重要研究工作或多或少涉及各种计算机模拟,比如相场模拟,这些方法大大拓展了经典的唯象理论模型并取得了很大的成功。现在运用经典唯象理论开展的研究越来越少,甚至似乎有一种观点认为经典的唯象模型太简单了;但同时近年来一些从事第一性原理计算的研究却渐渐关注在工作中结合使用经典的唯象模型。新铁电材料的实验研究积累了大量的但是分散的数据;需要系统的自由能系数拟合和材料参数研究才能建立起新材料中适用的唯象模型,从而使得研究者可以对新材料的结构和性能进行分析和预测,并使得进一步结合各种计算机模拟(比如相场模拟)作更深入的研究成为可能。总之,现在似乎的确有必要作一个回顾和反思。本报告主要是提出问题,供大家交流讨论。希望藉此引起相关同行的关注,并促进理论和实验工作者更紧密的协作。此外,也将结合以上的考虑介绍本研究在对铁电氧化物及固溶体,薄膜和纳米结构等运用经典唯象理论模型方面已开展的一些工作及未来的设想。

Z-79

锕系固态离子物理氧化态的第一性原理计算及应用

敖冰云, 邱睿智

中国工程物理研究院材料研究所

锕系元素具有典型的多氧化态特征, 本质上源自锕系元素 5f 电子复杂的电子结构和成键行为。原则上, 锕系原子可以失去外层的 3-7 个价电子, 形成的锕系离子形式氧化态介于 III-VII 之间。然而, 形式氧化态并非一个严格的物理量, 不利于我们真正理解锕系元素的物理和化学行为。本报告中, 我们运用第一性原理 DFT+U 方法, 计算了七种锕系元素(Th → Cm) 固体化合物中锕系离子的物理氧化态, 重点探讨了锕系固体离子的最高物理氧化态, 特别是铀的最高物理氧化态。结果表明, 锕系固体离子最高物理氧化态的变化规律与 5f 电子离域→局域转变密切相关, 铀的最高物理氧化态处在临界点上。铀的最高物理氧化态为 Pu^V, 出现在 PuO₂F 和 PuOF₄ 固体化合物中。我们将锕系固态离子物理氧化态的概念推广至一些实际问题的研究, 比如铀表面氧化层的组成和结构。结果表明, 铀表面氧化层结构并非是简单的 Pu/Pu₂O₃/PuO₂ 类三明治结构, Pu/Pu₂O_{3-x}/Pu₂O₃/PuO_{2-x}/PuO₂ 类梯形结构可能是更合理的氧化层结构。其中, PuO_{2-x} 系列非化学计量铀氧化物中 Pu 以 III 和 IV 氧化态共存。

Z-80

单氧化铀稳定性的理论研究

邱睿智, 王鑫, 张永彬, 敖冰云, 刘柯钊

中国工程物理研究院材料研究所

单氧化铀 (PuO) 是否存在一直是铀科学关心的问题之一, 它的解决一直受限于热化学数据的缺乏。这里我们进行第一性原理计算研究了 Pu₂O₃ + Pu → 3 PuO 这个反应, 发现常压下这个反应是吸热的, 即说明 PuO 是热力学上不稳定的。另外, 我们还说明稍高的压强可以将 PuO 稳定下来, 稳定机制为 Pu-5f/6d 轨道和 O-2p 轨道的加强杂化。通过采用准随机结构来模拟固溶体 Pu-C-O, 我们进一步说明杂质 C 也可以将 PuO 稳定下来, 稳定机制为更强 Pu-C 键的形成。

Z-81

Ab initio study of native defects in LiTi₂O₄

Jianchuan Wang*, Yong Du

State Key Laboratory of Powder Metallurgy, Central South University

Lattice defects are commonly in electrode materials and may affect their structural stability and electrochemical behavior. Here we use *ab initio* calculations based on density functional theory to investigate native cation defects in spinel LiTi₂O₄, an alternative negative electrode material for lithium ion batteries. We consider vacancies (V_{Li} and V_{Ti}), interstitials ((Ti)_i and (Li)_i), anti-site defects (Li_{Ti} and Ti_{Li}), Frenkel defects and defect pairs, such as V_{Li}-(Ti)_i, V_{Ti}-(Li)_i, V_{Li}-V_{Li}, Li_{Ti}-Ti_{Li}. Our calculations show that Li interstitial, Ti interstitial and Li Frenkel defects are dominant in LiTi₂O₄ with formation energies are less than 0.5 eV, while cation vacancies and Ti-Frenkel defect are hardly to form due to their high formation energies (larger than 2.0 eV). Surprisingly, the formation energy of Li interstitial (-0.54 eV) is negative, hinting that the lithiation process of LiTi₂O₄ is thermodynamically spontaneous in the early stage. The much low formation energy for Li-Frenkel (0.03 eV) suggests that lattice Li are much sensitive to environment and would be unstable when temperature or chemical environment is changed. This may account for the experimental finding that intercalation of additional Li into LiTi₂O₄ results in migration of lattice Li from 8a to 16c sites, giving an ordered rocksalt type product. We also find that some single native defects have tendency to clustering. V_{Li} prefer to cluster with (Ti)_i, V_{Ti} prefer to cluster with (Li)_i, and Li_{Ti} prefer to combine with Ti_{Li}. But Li vacancies are prone to distribute in the lattice randomly.

Z-82

基于三维周期性极小面的多孔材料的设计

郑销阳^{1,2}, 易勇², 杜凯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

增材制造（3D 打印）技术的发展为多孔材料的设计与制备带来了卓越的贡献。本文设计了节点连接数分别为 3、4、6、8 的四种基于三维周期性极小面的拓扑结构密度可调多孔材料（Gyroid, G; Schwarz Diamond, D; Schwarz Primitive, P; iWp, W），并系统地分析了其微观结构参数（相对密度，比表面积，韧带/孔径）和力学性能参数（杨氏模量，泊松比，屈服强度）。基于其参数化建模的特点，我们结合数值分析和有限体模拟，分析了这些结构基于相对密度的尺度方程。此外，我们采用光固化技术打印出了不同参数下的其中一种拓扑构型，并且采用单轴压缩实验印证了其有效杨氏模量和屈服强度与计算模拟的吻合性。有限体法模拟表明这些拓扑结构的有效刚度和强度与其相对密度呈幂指数关系。结果表明，P 型结构呈现拉伸主导的变形机制，并具有最高的力学性能；而其余三种结构具有相对柔软的弯曲主导变形机制。本文不但阐释了这些多孔材料的结构-性能关系，还为其应用提供了有效的指导。

Z-83

镍基高温合金 γ' 相演变和蠕变性能的相场模拟

杨敏，张军，苏海军，刘林

西北工业大学

本文利用相场法模拟了镍基单晶高温合金蠕变过程中的微观组织演变，并给出了相应的蠕变曲线预测。所用的相场模型中考虑了 γ 通道塑性和蠕变损伤机制对微观组织演变和蠕变性能的影响。模拟的蠕变温度为 1293 K，应力从 160 到 240 MPa 变化。模拟结果表明：当 γ'/γ 共格错配度为负时，拉伸蠕变过程中 γ' 相沿垂直于外加应力轴的方向发生定向粗化，形成 N 型筏化。随着蠕变应力增加， γ' 相定向粗化的进程加快且 γ' 筏结构更加规则有序。当 $\sigma \geq 200$ MPa 时，部分 γ' 相发生劈裂，进而形成连续的 γ 塑性变形通道。模拟的蠕变应变曲线显示： $\sigma=160$ MPa 时合金的蠕变寿命最长， $\sigma=200$ MPa 时合金的蠕变寿命居中，而 $\sigma=240$ MPa 时蠕变寿命最短，这与实验结果具有很好的一致性。

Z-84

钛合金微观组织三维建模与晶体塑性有限元模拟

杨睿萌，薛祥义，李雨恬，唐斌，张梦琪，李金山，寇宏超

西北工业大学

晶体塑性有限元方法可以在细观尺度上模拟材料的各种塑性变形行为，是一种预测材料宏观力学性能的重要方法。本文基于 Voronoi 图原理分别建立了钛合金等轴组织、双态组织、全片层组织模型，在组织模型基础上结合率相关滑移为主的晶体塑性本构模型模拟了钛合金不同组织类型的拉伸变形行为，并与实验获得的应力应变曲线结果进行对照，验证了模型的准确性。研究表明本文所建立的钛合金不同组织类型的多晶集合体模型是可靠的，基于此可系统研究晶粒尺寸、相比例、片层宽度等组织因素对材料力学性能的影响。

Z-85

Ti-7333 合金晶体塑性有限元数值模拟与参数标定

张梦琪，李金山，唐斌，杨睿萌，寇宏超，樊江昆

西北工业大学

晶体塑性本构关系描述了晶体内部的不均匀变形，是细观尺度内研究材料力学行为的有效方法。与实际材料相近的组织模型和准确的晶体塑性本构参数是实现合金性能预测的重要前提。本研究选取一种新型高强韧近 β 钛合金 Ti-7Mo-3Nb-3Cr-3Al 为研究对象，将晶体塑性有限元（CPFE）模拟与实验手段相结合，对 Ti-7333 合金的晶体塑性本构参数进行了标定。首先基于 Voronoi 图法建立多晶模型，通过拟合拉伸试验曲线对晶体塑性本构参数进行优化，同时讨论了各个参数对拉伸应力-应变曲线的影响；基于拟合获得的本构参数，建立单晶纳米压痕模型，对该合金纳米压痕试验进行晶体塑性有限元模拟，纳米硬度模拟值与真实结果符合较好，进一步验证了本构参数的可靠性。

Z-86

TA16 钛合金方形管绕弯回弹的数值模拟研究

刘聪，闫晓东

有研科技集团有限公司

钛合金管在航空航天领域应用越来越广泛。TA16 钛合金方形截面管环形件旋转绕弯后，卸载会产生显著的回弹现象，严重影响管件尺寸和形状精度。在实际生产中，往往用“试错法”建立特定工艺参数下的回弹数据库，以此来进行对回弹的补

偿和控制。本文基于 ABAQUS/explicit 和 ABAQUS/standard 平台建立了 TA16 方形钛管弯曲和回弹的三维弹塑性有限元模型。通过不同弯曲半径、弯曲角度、弯曲温度等工艺参数进行钛管弯曲和回弹过程的数值模拟, 研究其对卸载后钛管回弹率的影响。相同工艺参数下, 经过数值模拟得到的回弹率与实验测量值相比, 误差在 10 % 以内, 一致性较好。利用钛管在弯曲过程中应变分布的模拟结果, 比较卸载前后管壁单元的绝对最大主应变值, 可以得到在不同工艺参数的条件下, 回弹率和钛合金环形件圆度之间的关系。

Z-87

镁中拉伸孪晶的自由表面热激活型核

汤笑之¹, 俎群², 郭雅芳¹

1. 北京交通大学

2. 河北工业大学

本文采用势能曲面探索技术计算了镁中拉伸孪晶借由原子曳步机制在自由表面形核时其胚胎结构所需的热激活能。其激活能大小在一定的单轴拉伸应力范围内与体位错形核的激活能处于同一量级。孪晶胚胎以基柱界面为主要晶界结构。基柱界面在随后的孪晶生长中转变为传统共格孪晶界。本文证明了镁中的拉伸孪晶无需借助除完美自由表面以外的任何晶体缺陷结构或缺陷间的交互作用即可形核。这是继原子曳步机制被证明在拉伸孪晶形核阶段占主导作用以来孪晶胚胎首次作为独立个体被计算其能量参数。本文结果有助于增进对密排六方金属变形行为的了解以及改进其合金设计思路。

Z-88

T2AlNb 基合金高温硬化和软化机制研究

张菁丽, 罗媛媛, 吴金平, 郭荻子, 赵彬, 赵圣泽, 杨帆

西北有色金属研究院 陕西西安 710016

基于热模拟压缩实验为基础, 研究了 T2AlNb 基合金的高温变形行为。修正了原始流变应力曲线, 建立了该合金热变形时的加工硬化阶段和软化阶段的本构模型; 分析了第二相对 T2AlNb 基合金温变形行为的影响, 特别是高速变形时 T2AlNb 基合金流变应力曲线的多峰现象与第二相的关系; 推导了多峰曲线的临界位错密度计算公式, 认为当位错密度降到临界值时, 金属的硬化软化达到一个短暂的平衡。

Z-89

超声场中 Al-Bi 偏晶合金液相分离过程的数值模拟研究

吴文华, 翟薇, 魏炳波

西北工业大学

偏晶合金是一类具有重要工业应用前景的材料, 可以广泛应用于电触头材料、超导材料及自润滑材料等领域。但是, 常规条件下偏晶合金在液相分离和凝固过程中会产生偏析甚至分层现象, 严重限制了其应用。因此, 如何制备具有均匀弥散结构的偏晶合金成为广泛关注的热点问题。

本文在液态 Al-10wt%Bi 偏晶合金中引入功率超声作用, 数值计算了合金熔体中的声压和声流分布特征。并在此基础上构建了超声场中 Al-10wt%Bi 偏晶合金的液相分离模型, 系统研究了功率超声对液相分离过程中的传热、传质以及第二相液滴生长特征的作用规律。结果表明, 在液态 Al-10wt%Bi 偏晶合金中施加频率为 20 kHz、振幅为 15 μm 的超声时, 熔体中的声压随着传播距离的增大而急剧衰减。最大声压为 3.38 MPa, 位于超声变幅杆下端面处。发生空化效应的区域集中于变幅杆下端面附近, 其体积分数仅为 0.9%。同时, 超声的声流效应会导致熔体中形成两个关于中心轴对称的漩涡。声流速度比重力引起的 Stokes 沉降速度高 1~2 个数量级, 最大可达到 130 mm/s, 且其流动方向与 Stokes 沉降的方向相反。因此, 在熔体中施加超声能够明显减弱第二相液滴在底部的聚集, 使其在熔体中的分布更加均匀, 从而有效抑制由液相分离导致的宏观偏析。超声作用下, 第二相液滴数密度相较于静态下的增长了近 5 倍, 而液滴直径减小到原来的 1/3, 这说明超声能提高液相分离过程中第二相液滴的形核率, 并且促进第二相液滴的细化。本文的研究证实超声场能有效抑制偏晶合金液相分离过程中的严重偏析, 改善偏晶合金凝固组织形态并提高其力学性能, 这为工业上生产具有优良性能的偏晶合金提供了新的方法。

Z-90

基于有限元模拟的不同 Q 值对 Zr-4 合金管材皮尔格轧制组织演变影响研究

储林华¹, 宋鸿武², 高博¹, 罗倩倩¹

1. 国核宝钛铝业股份公司

2. 中国科学院沈阳金属研究所

本文试验观察研究了核用 Zr-4 合金管材皮尔格轧制过程中的晶体结构演变情况。不同极图 (PF) 和 Kearns 因子检测结果表明, 小延伸率下, 随加工 Q 值增大, 基极图 (PF) 倾向于朝径向方向旋转; 延伸率较大时, 旋转方向有所不同, 甚至相反方向。试验采用粘塑性自洽 (VPSC) 模型对其微观机理进行了分析, 数值模拟结果表明, 基极图 (PF) 的旋转既与变形方式有关, 也与变形量大小有关。它们共同决定了不同滑移系和孪晶的活性。在小延伸率下, 变形方式以柱面滑移和孪晶拉伸为主。随延伸率增加, 基面和锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移开动逐渐增大。最终, 试验还建立了一种考虑 Q 值和延伸率共同影响的 Kearns 因子数值模拟预测模型。

Z-91

CaO-SiO₂-Nd₂O₃ 渣系活度计算模型

智文科, 王飞, 邓勇, 谷旭鹏, 王强

昆明理工大学

基于分子共存和离子共存理论, 建立了 CaO-SiO₂-Nd₂O₃ 渣系的活度计算模型, 研究了 CaO/SiO₂ 摩尔比, Nd₂O₃ 摩尔分数和温度对渣系活度的影响。结果表明, 随着 CaO/SiO₂ 比的增加, Nd₂O₃ 的活性明显降低。随着 Nd₂O₃ 摩尔分数的增加, CaO-SiO₂ 的活度显著降低。此外, 温度对不同组分的活性影响不显著。

Z-92

The Nature of Excess Electrons and their Roles in the Photocatalytic Activity of Reduced TiO₂

Wen-Jin Yin¹, Bo Wen¹, and Li-Min Liu²

1. Beijing Computational Science Research Center, Beijing 100084, China

2. Beihang University, Beijing 100083, China

Titanium dioxide (TiO₂), as a typical visible-light photocatalyst, attracts great attentions from both the theory and experiment. The defect TiO₂ is the vital topic of the semiconductor materials both because of the fundamental important of excess electrons and the widely applications. In this talk, we will summary the most recent progress on the understanding of the aspect and its applications of excess electrons in the reduced TiO₂. We will firstly discuss the origin of the excess electrons and why the excess electrons behave different behaviors on the rutile and anatase TiO₂ from the different aspects. At the end, the effect of the excess electrons on the photoactivity, such as the interaction between the excess electrons and the adsorbate in both vacuum and liquid, will be discussed [1-3].

Z-93

过渡金属硫化物析氢性能的理论研究与设计

张妍宁¹, 李胜文^{2,1}

1. 电子科技大学

2. 中物院成都科学技术发展中心

过渡金属硫化物及其衍生/复合材料由于具有优异的半导体、光、电和磁性能, 在磁学、光伏、催化、储能、生物医药等众多领域有着广泛的用途。从原子尺度对过渡金属硫化物进行结构、电子性质以及表面构型和分子吸附的理论研究, 可以深入认识和了解材料性能, 从微观的角度理解物理化学机理, 并进一步为材料的设计提供指导和帮助。近年来, 我们运用基于密度泛函理论的第一性原理计算, 系统研究了常用硫化物, 例如 Fe-、Co-和 Ni-S 块体材料和表面的基本性质, 以及不同缺陷和掺杂对材料结构稳定性、磁性和电子性质的影响。同时, 我们从理论上分析了影响 CoS₂ 常见表面的析氢位点和析氢性能, 及其主要影响因素。研究发现催化性能 (析氢自由能) 的提升可以通过: 改变位点的配位数---结构调整, 使得吸附位点的不饱和度增加或减少, 从而对 H 原子吸附增强或减弱; 在不改变位点配位数的情况下改变其电子性质---电子调控, 使得费米面附近的电子态更加局域, 峰度适中。进一步地, 我们将研究结果应用到过渡金属硫化物中另一种热门材料, Ni₂S₃ 及其 Sn 掺杂化合物的析氢性能调控中, 取得了不错的效果。

Z-94

有机无机钙钛矿材料作为光催化产氢催化剂的机理研究

王璐
苏州大学

以 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 为代表有机无机钙钛矿材料由于其显著的光电转化效率使其在光电领域尤其是太阳能电池方向有着巨大的潜力。有机无机钙钛矿材料的高效光电转化效率主要来源于其材料本身的长载流子寿命和低激子束缚能等,而这些性质导致的有效的电子/空穴分离和载流子迁移也是作为光催化材料的必要条件。最近,实验上实现了在饱和碘化氢溶液中利用 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 作为光催化剂进行产氢反应^[1],但是 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 作为光催化剂的反应机理并不清楚,其只是作为光吸收材料,还是同时作为反应物参与了产氢反应尚未明确。

我们通过理论计算首次在国际上揭示了有机无机钙钛矿 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 表面光催化产氢的反应机理,提出 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 材料在产氢催化反应中不仅仅作为可见光吸收材料,而且还作为反应物参与了 HER 产氢反应^[2]。该反应可以分为两步完成。首先,表面 CH_3NH_3^+ 离子中与 N 相连的一个 H 原子跑到 Pb 原子上并与其成键,形成 PbH 氢化物中间体,与此同时,溶液中的质子 H^+ 将 CH_3NH_2 分子修复为 CH_3NH_3^+ 离子。第二步为 CH_3NH_3^+ 离子中的一个 H 与 PbH 中的 H 相结合生成 H_2 ,同时表面被溶液中质子 H^+ 修复。这种由 Pb 和 CH_3NH_3^+ 参与协助完成的两步催化反应机理被命名为 PbAAA (Pb-Activated Amine-Assisted) 光催化产氢机理。该催化机理也将适用于其他有机无机钙钛矿材料,开启了其作为光催化剂的潜在应用。

Z-95

钯催化 C-H 活化和 C-C 偶联反应的机制研究

党延峰¹, 胡文平¹, 汪志祥²

1. 天津大学

2. 中国科学院大学

钯活化的 C-H 活化和 C-C 偶联反应由于具备“原子经济”、“绿色”和合成简捷等优点,一直以来备受合成化学家的青睐,其已成为合成有机化合物的重要方法,尤其在共轭有机分子材料的制备领域得到广泛应用。传统的 Pd 催化偶联反应(Heck、Negishi、Suzuki 偶联反应)是通过 Pd(0)/Pd(II)氧化还原循环完成的,而 Pd 催化的 C-H 活化和 C-C 偶联反应(如: $\text{R-H} + \text{R}'\text{-X} \rightarrow \text{R-R}' + \text{HX}$)的催化机制却存在很大科学争议,它可能在不同的氧化还原循环下进行[Pd(0)/Pd(II)、Pd(II)/Pd(0)或 Pd(II)/Pd(IV)],也可能包含双核金属催化过程[Pd(II)/Pd(III)或 Pd(II)/Pd(IV)的双金属催化过程]。针对此前沿领域的关键科学问题,在先前对传统偶联反应研究的基础上,我们运用理论化学方法研究了这类钯催化的 C-H 活化和 C-C 偶联反应中的典型,通过对 Pd 催化剂不同催化循环的探索,明确了这类偶联反应的活性催化剂和单核 Pd(II)/Pd(IV)催化机制,并证明了与晶体研究一致的催化活性中间体。我们的研究提出了一种基于氢键作用的新型的外层 C-H 键断裂模式,补充了原有的内层 C-H 键活化机理,并指出 C-H 键活化是整个催化循环的决速步,该结论与动力学同位素效应的研究结果一致($k_H/k_D = 8.1$)。同时对于 Pd(II)/Pd(IV)催化循环的阐明不仅解决了该前沿领域的争端,而且丰富了对“钯催化交叉偶联反应”的认识[Pd(0)/Pd(II) vs. Pd(II)/Pd(IV)],在钯催化的交叉偶联反应领域具有重大意义。综上所述,我们从微观和分子水平上,通过深入研究钯催化的 C-H 活化和 C-C 偶联反应及其相关过程中化合物结构性质关系和基本规律等若干关键科学问题,使化学家从多个角度认识化学反应的微观作用本质,为完善和设计构筑具有特定功能的新催化剂和化学反应提供理论依据。

Z-96

基于氢迁移反应路径的新型复合电解水纳米催化剂的理论模拟与设计

林海平, 樊星, 王璐, 李有勇

苏州大学

新型高效析氢反应(HER)催化剂的设计与研发对于电解水制氢产业的发展具有十分重要的意义,是目前国际能源研究领域的重点课题之一。然而,由于氢原子在 Pt 表面的吸附自由能已经非常接近于零,基于传统的“Sabatier 规则”而设计的催化剂材料很难显著超越目前的商用 Pt/C 催化剂。近期,通过理论计算与实验合成相结合,我们报道了基于“Volmer-氢迁移-Heyrovsky”路径的新型 HER 催化反应机理,并据此设计了 Rh/Si 串联复合催化剂,成功地在工业制氢条件下(交换电流大于 $1000\text{mA}/\text{cm}^2$),将 HER 过程中电能向化学能的转化效率提高了 7.8% (相比于 40% w.t. Pt/C)。在此基础之上,我们通过理论模拟对复合催化剂进行了结构性改进,发展了包括 Os/Si 和 Rh-Au-Si 在内的一系列二元和三元新型复合 HER 催化剂,成功地将 HER 过程的能量转化效率(与 Pt/C 催化剂相比)提高了 10% 以上。在 OER 反应催化机理的研究方面,我们将首次报道基于新型氢迁移路径而设计与发展的氧化钨与碳氮复合材料的新型催化剂,该催化剂具有良好的催化稳定性,是中性条件下的高效 HER 与 OER 电极反应的双功能催化剂,其 OER 反应效率为目前报道的最优值。

Z-97

钙钛矿热力学稳定性新规律

孙庆德^{1,2}, 尹万健^{1,2}

1.苏州大学

2.苏州大学能源与材料创新研究院

有机无机杂化钙钛矿太阳能电池的实验室光电转换效率已经超过 22%，已达到产业化薄膜太阳能电池（CdTe, CuIn_xGa_{1-x}Se₂）的水平。当前，稳定性成为阻碍钙钛矿产业化的最大问题。近百年来，材料的容忍因子（tolerance factor）一直是人们衡量钙钛矿稳定性最重要判据（descriptor）。

我们利用第一性原理计算的方法研究 138 种钙钛矿材料的热稳定性（分解能）与材料结构与组分的关系，发现：（1）容忍因子作为钙钛矿稳定性判据，其准确度只能达到 70%；（2）结合容忍因子（ t ）和八面体因子（ μ ），构造出的 t - μ 二维稳定性图，可以将稳定钙钛矿与不稳定钙钛矿很好的区分出来，理论结果与已有的实验结果高度吻合；（3）分解能和 $(\mu+t)^\eta$ 有明显的线性关系，其中 η 为材料堆积比，以该因子作为判据，可将稳定性判断准确度提高到 90%。

基于上述稳定性规律，我们发现卤化物的稳定性普遍比硫族化合物，特别是氧化物要差。因此，我们系统研究了一类 A₂M(III)M(V)O₆ [其中 A = (Ca/Sr/Ba); M(III) = (Sb³⁺/Bi³⁺); M(V) = (V⁵⁺/Nb⁵⁺/Ta⁵⁺)] 的氧化物钙钛矿作为太阳能电池的可能性。我们发现这类氧化物均呈现直接带隙材料，带隙值为 0.3~3.8 eV; 通过合金的办法可以调控带隙达到最优带隙值范围 (1.0~1.6 eV); 进一步的光学计算表明该类合金可具有较强的光吸收率，为稳定钙钛矿太阳能电池提供了一种可能的材料。

Z-98

柔性高温纳米介电复合材料中电热耦合击穿的相场模型

沈忠慧¹, 王建军², 林元华¹, 南策文¹, Long-Qing Chen², 沈洋¹

1.清华大学

2.宾夕法尼亚州立大学

聚合物基介电复合材料因其高能量密度在静电储能领域受到越来越多的关注，但是介电电容器中的热效应仍是一个挑战。本文构建了电热耦合介电击穿的相场模型，系统研究了实际电容器配置中，热效应对聚合物基电介质其介电性能的影响，例如介电损耗的增加和击穿强度的降低。尽管提高聚合物纳米复合材料的导热性和降低其电导率均可以缓解热效应，但研究表明降低电导率更为有效。这项工作希望不仅能够引起人们对聚合物基电介质中热效应的关注，而且还为缓解热击穿提供一些基本指导。

Z-99

硫族化合物热电性能的理论探讨

张永胜

中国科学院合肥物质科学研究院固体所

提高热电材料的热电转换效率（或 ZT 值）是其商业化进程中一个重要环节。以往的实验和理论研究发现硫族化合物通常具有较好的热电性能，然而我们发现还有大量的硫族化合物的热电性能没有得到相应的研究。我们基于形变势理论定义并验证了能用来表征材料电学性能的参数 Chi，其可以通过理论模拟的能带结构计算得到。此外我们通过已建立的 Gruneisen 参数（Gamma）和弹性模量之间的关系，可以快速有效的求解表征热学性能的参数 Gamma。这解决了以往高通量计算工作中的常数时间近似和忽略非简谐效应的问题。应用表征电学和热学性能的参数（Chi 和 Gamma），我们高通量计算研究了 200 多种已知的二元硫族半导体化合物的热电性质。通过比较这些化合物的 Chi 和 Gamma 值，我们除了正确的预测出以往实验和理论研究过的 15 种 P 型 13 种 N 型热电材料外，还预测出了 7 种 P 型 10 种 N 型的新型二元硫族热电材料。为实验提供了更多的研究和验证对象。此外对于两种廉价的含硫的三元矿物化合物[CuMS₂ (M=Sb, Bi)]的热电性能进行了详细的探讨，这两种化合物的热导率都很低，尤其是 CuBiS₂ 的热导率极低。我们的理论计算发现，CuSbS₂ 中的 Sb 位的孤对电子是造成其低热导率的主因；而对于 CuBiS₂ 材料，这种化合物同时表现出 Bi 位的孤对电子和 Cu 离子的近自由振动行为，它们的协同作用使其具有了极低的热导率。

Z-100

Theoretical and modeling design on both cathode and anode material system of lithium-sulfur battery

Qianfan Zhang¹

1.School of Materials Science and Engineering, Beihang University, Beijing, China

Email:qianfan@buaa.edu.cn

Rechargeable lithium batteries are widely used in many applications owing to their high energy density, long lifetime and lightweight design. However, the current electrodes in consumer electronics market possess a limited theoretical specific capacity (~300 mAh/g), which cannot fulfill the increasing energy demands of modern society. Sulfur has the theoretical specific capacities of 1673 mAh/g, and meanwhile, with low cost and toxicity, which makes the lithium-sulfur battery attractive for commercial applications. Despite the considerable advantage, the successful implementation of lithium-sulfur batteries has been hindered by a series of obstacles, including poor cycle life, low Coulombic efficiency and low active material utilization. The theoretical study on the interactions inside both cathode and anode material system should be carried out, which is very important to understand the fundamental mechanism and provide the pathway for the further optimization of lithium-sulfur battery's performance. Using *ab-initio* computation scheme, the nano-material systems in both cathode and anode have been systematically investigated. The studies focus on the interaction between lithium-sulfur species and anchoring materials in cathode, while on the interaction between protective film and metal in anode, in order for their theoretical designs, and meanwhile, reveal the mechanism in the atomic level by analyzing the electronic structure.

Z-101

Designer materials for sustainable energy applications

Guosheng Shao*

1.Zhengzhou University

2.Zhengzhou Materials Genome Institute

It is of great importance to develop new energy materials based on sustainable resources cost-effectively, in order to address the pressing energy crisis and mitigate environmental problems associated with the use of fossil fuel. Here we demonstrate a designer approach for theoretical formulation and practical delivery of novel energy materials, covering solar cells and metal ion batteries. We firstly discuss about case studies on materials and device design for solar cells, covering alternative transparent conducting oxides and band-engineered oxides/silicides as new active pv films. We then present results on key materials for metal ion batteries, including new classes of solid electrolytes for lithium ion batteries and cathodes and electrolytes for tri-ion Mg-Li-Cl batteries.

Z-102

Na⁺在 NASICON 结构固体电解质 Na₃Zr₂Si₂PO₁₂ 中的协同运输机制研究

王达, 邹喆义, 施思齐

上海大学材料科学与工程学院, 上海 200444

dwd0826@shu.edu.cn; sqshi@shu.edu.cn

具有 NASICON (NAtrium SuperIonic CONductor) 结构的 Na₃Zr₂Si₂PO₁₂ 在室温下具有较高的离子电导率 (~10⁻⁴ S cm⁻¹), 并且其与金属钠接触时能形成较为稳定的界面, 因此常被用作室温钠离子固态电解质材料。Na₃Zr₂Si₂PO₁₂ 具有较多的传导离子可占据位置, 传导离子在这些位置之间将涉及到多个离子的协同运输。本报告将主要介绍 Na⁺在 Na₃Zr₂Si₂PO₁₂ 体相中的协同运输机制, 以及改变 Na⁺浓度对其离子电导率的影响。我们通过晶体结构分析以及理论计算预测了 Na₃Zr₂Si₂PO₁₂ 单斜相存在一个新的 Na 位, 并通过中子粉末衍射结果证明了该位置的存在; 通过键价和计算以及分子动力学模拟研究了单斜相中可能存在的 Na⁺运输通道, 并发现单斜相 Na⁺运输呈各向异性, Na⁺沿 bc 平面的扩散系数要高于沿[101]方向; 第一性原理轻推弹性带计算表明单斜相中 Na⁺运输确实存在各向异性, Na⁺浓度增加促进了 Na⁺在 bc 平面内协同运输并降低了运输势垒。

Z-103

锂-硫电池体系中多硫化锂结构的高精度量子力学方法表征

赵焱

武汉理工大学

锂-硫电池有非常高的能量和功率密度, 有着很好的应用前景, 是电池领域的研究热点。锂-硫电池存在的主要问题之一是在充-放电过程中, 会有多硫化锂 Li₂S_x (2≤x≤8) 中间产物生成, 其易溶于电解液, 这些 Li₂S_x 由于浓差效应在两极之间穿梭, 使得

电化学反应不完全,同时造成正负极活性材料的损失和电解液的消耗,这种现象被称为锂-硫电池的“穿梭效应”。解决“穿梭效应”的主要方法是找到合适的正极 S 载体材料,来吸附 Li_2S_x 从而抑制其扩散。近些年,人们尝试用密度泛函方法来辅助证明载体材料对 Li_2S_x 的吸附性能,或是基于密度泛函方法来设计更优的载体材料。密度泛函方法对锂-硫电池发展起到了重要的推动作用。目前已报道的相关文献里有许多关于 Li_2S_x 结构的密度泛函研究,但由于一些常用密度泛函(如 PBE)本身的局限,许多文献报道的最稳定结构都不一致,使得不同的报道缺乏可比性。本研究将密度泛函动力学和高精度波函数方法相结合,确定了最稳定的 Li_2S_x 结构及其异构体的相对能量,给 Li_2S_x 的相关计算奠定基础,并将得到的高精度能量数据库用于了密度泛函的评价。

Z-104

碱金属电池电解液稳定性及负极保护策略研究

陈翔,张强

清华大学

碱金属电池(锂/钠金属电池)由于具有超高的能量密度,而被认为是理想的下一代储能器件。但是,碱金属负极反应活性很强,与常规有机电解液之间存在着显著的界面反应,引起电解分解、产气。这极大地阻碍了碱金属电池的实际应用。我们结合第一性原理计算与原位光学显微观测技术,探究常规有机电解液(PC, DOL, DME, TEGDME 等)在碱金属负极表面产气现象的机理,发现离子-溶剂配合物的生成,能极大地促进电解液的分解。离子-溶剂复合物相对于纯溶剂,具有能级更低的最低未占据轨道,因而更容易被还原。基于这一机理认识,我们进一步提出了电解液设计与筛选策略以及稳定碱金属负极保护策略。

Z-105

基于第一性原理的锂空气电池阴极催化剂研究

杨影影,秦圆,王旭东,姚曼

大连理工大学

锂空气电池具有较高的理论能量密度,其实际可用能量密度与汽油相当,在电动汽车和其他高能量存储设备中具有潜在的应用。然而,锂空气电池存在着充电速度慢,倍率性能低和循环寿命短等诸多问题,它们严重制约着锂空气电池的实际应用。这些问题可归结为充放电过程中缓慢的 ORR/OER 动力学过程引起的较大的过电势。过渡金属碳化物作为锂空气电池阴极催化剂表现出良好的电化学催化性能。本文采用第一性原理方法,模拟了过氧化锂在 TiC 及其氧化表面的解离路径,对比计算结果发现氧化 TiC 表面促进了氧离子的电荷转移和键长演化,加速了氧离子的氧化,具有更低的过氧化锂分解电压和氧气释放势垒,表明氧化 TiC 表面是潜在的锂空气电池催化界面组成,验证了实验结果。另外,系统地计算了 ORR 和 OER 在 3d 过渡金属碳化物表面的反应路径,通过对比 ORR 和 OER 过电势,发现 TiC 具有最好的催化活性,并构建了催化活性与材料本征性质之间的关联性,确定了良好的催化剂应该具有低的 Li 和 LiO_2 吸附能,高的表面能,适中的氧的结合能,这些材料本征性质可能是潜在的催化活性描述符。基于上述研究,我们提出的表面修饰策略与影响催化活性的材料本征性能的观点将有助于高效的锂空气电池阴极催化剂的设计与筛选。

Z-106

Li_2RuO_3 富锂正极材料充放电过程结构相变及其对电化学性质的影响

郑锋¹, 郑时尧², 杨勇², 吴顺情^{1*}, 朱梓忠¹

1.厦门大学物理学系 厦门 361005;

2.厦门大学固体表面物理化学国家重点实验室 厦门 361005

Email: wsq@xmu.edu.cn

相比于传统的层状氧化物(LiMO_2),富锂正极材料($\text{Li}_{1+x}\text{M}_{1-x}\text{O}_2$)因具有更高的容量而受到人们的广泛关注。实验发现这些额外的容量是通过阴离子的氧化还原来实现的。但是阴离子的氧化还原通常会带来氧气的释放,降低整体结构稳定性从而引发循环过程中的容量下降。理论研究表明,阴离子的氧化还原主要是取决于特殊的氧构型(Li-O-Li)所带来的一个孤立的氧轨道,而过渡金属的轨道与孤立氧轨道的相对能量位置将决定氧的氧化程度,从而最终影响氧环境的稳定性。然而,在充放电过程的结构相变往往会改变氧的构型,进而影响氧的氧化还原以及材料的电化学特性。因此,研究富锂材料的结构演化过程对于理解其电化学机理就显得尤为重要。这里我们以 Li_2RuO_3 为例,通过第一性原理探索其充放电过程结构相变过程以及对电化学性质的影响。计算结果表明,深层脱锂后的过渡金属迁移将会改变氧的配位环境,使得电子结构发生重构,

最终稳定了氧的环境。我们的研究解释了 Li_2RuO_3 在实验循环过程中容量保持的原因。然而计算也发现这种反位相变同样会到来一些不利的因素，比如导致电压衰减，降低 Li 的扩散速率。

Z-107

有机无机钙钛矿材料的表面缺陷结构

刘云霞

苏州大学

$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ 具有非常引人注目的优点，然而其固有不稳定性仍然是 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ 太阳能电池工业生产和应用中一个不可避免的技术障碍。我们课题组与日本冲绳科学技术学院大学的 Yabing Qi 课题组通过高分辨 STM 和理论计算相结合的方式，首次确定了正交晶系 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ 钙钛矿的最稳定表面是甲胺 (CH_3NH_3) 分子和 Br 原子暴露的 (010) 重构表面 (J. Am. Chem. Soc., 2015, 137, 16049-16054)。其中观察到的表面缺陷很可能是 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ 钙钛矿的本征缺陷，可能在 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ 的分解中有着重要作用。我们利用 DFT 和 STM 模拟相结合的方法对 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ 表面缺陷结构进行了系统的研究。

通过第一性原理计算，我们发现无缺陷的 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ (010) 表面与常见的环境小分子 (H_2O , O_2 等) 的相互作用非常弱，是一个化学性质比较稳定的结构。之后，我们对 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ (010) 表面可能出现的缺陷和掺杂等缺陷构型进行了系统的研究，通过缺陷形成能和 STM 模拟图像的对比分析，发现在真空和有水环境下， $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ (010) 表面最有可能出现的缺陷结构分别是 Br 原子单空位缺陷和 Br-MA 双空位缺陷。研究还发现水溶液的存在可以显著降低缺陷的形成能。在溶液环境中，空位缺陷附近的甲胺分子会与环境中的极性分子形成较强的氢键作用，导致了缺陷附近表面原子的错位，这与杂化钙钛矿材料在潮湿的环境中会迅速分解的现象是一致的。因此，我们有理由认为，钙钛矿表面的卤素空位缺陷结构是钙钛矿材料发生分解的重要源头。这个结论与近期 Park 等报道的 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ 能够与 HI 水溶液中的 I 负离子进行动态交换，从而可以在有水的环境下稳定存在，并且进行光催化 HI 析氢的实验现象完全吻合的 (Nature Energy 2016, 2, 16185)。

此外，我们发现当使用不包含针尖效应的 Tersoff-Hamann 方法进行 STM 模拟计算时，得到的 Br 原子空位缺陷的模拟图像是一个亮点，与 STM 实验观察并不吻合。而当我们考虑 W 针尖的电子轨道对 STM 图像的贡献时，Br 原子空位缺陷的图像为一个暗点，与实验结果完全相符，再一次论证了 STM 的理论模拟中，STM 针尖对电子输运计算的重要性。

Z-108

肼 (N_2H_4) 在二维无金属 SiC_3 siligraphene ($g\text{-SiC}_3$) 上的吸附和分解机理

郑方方, 董慧龙, 李有勇

苏州大学功能纳米与软物质研究院

肼 (N_2H_4) 是一种含氢量为 12.5 wt.% 的高能分子，其分解反应可以释放出能量，该过程主要是由金属表面催化的。在这里，我们首先报道了碳基纳米材料作为 N_2H_4 分解催化剂的潜力，系统地研究了 N_2H_4 在 SiC_3 硅烯 ($g\text{-SiC}_3$) 上的吸附和分解机理。通过密度泛函理论 (DFT) 研究，我们计算了 $g\text{-SiC}_3$ 表面上 N_2H_4 (具有三种不同构象 *gauche*, *cis*, *anti*) 的吸附能。结果发现 N_2H_4 分子化学吸附在 $g\text{-SiC}_3$ 上，其中反式构型 ($\alpha\text{-SiC}_3$) 被证实是最稳定的。接下来我们模拟了 $g\text{-SiC}_3$ 催化的两种不同的 N_2H_4 分解机理，即分子内分解和分子间分解。通过分析基元步骤的反应能和能垒，揭示了 N_2H_4 在 $g\text{-SiC}_3$ 上的最佳分解途径起始于 N_2H_4 的初始 N-N 键断裂形成 NH_2 中间体。然后吸附的 N_2H_x ($x = 1-4$) 片段与 NH_2 发生逐步脱氢反应，最终形成 N_2 和 NH_3 作为产物，即分子间分解机理。研究表明最佳分解途径的决速步骤是 $^*\text{N}_2\text{H}_3 + ^*\text{NH}_2 \rightarrow ^*\text{NNH}_2 + ^*\text{NH}_3$ (* 表示 $g\text{-SiC}_3$ 表面)，这与广泛研究的 N_2H_4 在金属表面的分解途径不同。这项作为 N_2H_4 分解的无金属碳基催化剂的理论和实验研究提供了新的见解。

Z-109

石墨表面分子自组装的形成及稳定性特征的多尺度模拟

秦圆, 杨影影, 王旭东, 姚曼

大连理工大学

分子自组装是构筑纳米结构的一种重要方法，研究各种弱相互作用及环境因素对自组装过程的影响有利于从本质上理解自组装问题，在此基础上实现对自组装过程的调控。通过组合的密度泛函理论/分子力学/分子动力学的理论模拟方法，与扫描隧道显微技术 (STM) 实验观测图像结合，研究了寡聚对苯撑乙烯 (AS-OPV) 以及 5-(苯氧基)-间苯二甲酸 (BIC) 衍生物在高定向热解石墨表面的自组装。针对单独使用实验手段不能精确辨识的自组装结构中各原子的空间排列，实现对上述体

系原子构型的精确确定。通过分析体系中可能共存且发挥协同效应的弱相互作用如氢键、范德华力、静电力等，了解自组装形成的主要驱动作用以及手性自组装结构形成的原因。在 AS-OPV 自组装体系中，分子间的氢键、范德华力、静电力、 π - π 堆积作用均有利于自组装结构的形成，而其中范德华力的贡献较大。在 BIC 自组装体系中，氢键作用的强弱是影响手性自组装结构形成的主要原因。此外，考虑到外界因素对自组装结构的影响，模拟了不同温度下自组装结构的形成及其稳定性，发现 AS-OPV 自组装体系可以在 248~373K 的温度范围内稳定存在，并进一步模拟出可能形成的自组装结构及 STM 图像。这项工作提供了一种研究自组装精确原子构型和弱相互作用的有效方法，同时也为自组装的形成及稳定性提出了合理的解释，对于使用理论模拟手段预测自组装结构及 STM 图像开发了新的途径。

Z-110

Degradation of the effective thermal conductivity in irradiated fuels – A mesoscale modeling approach

Linyun Liang*, Guang-Hong Lu

School of Physics & Nuclear Energy Engineering, Beihang University, Beijing, 100191, China

Development of uranium alloys as a potential nuclear fuel has attracted much attention in more demanding nuclear reactor applications. Thermal conductivity being one of the important property is essential to predicting the most important fuel performance. Thermal conductivity is a strongly microstructure dependent property. The fission-induced microstructural changes such as vacancy clusters, gas bubbles, grain subdivision, and second-phase precipitation all significantly affect the thermal conductivity of the fuel. Therefore, it is very important to understand and predict the thermal conductivity changes with various fission conditions.

We have developed a mesoscale model to calculate the degradation of the effective thermal conductivity in irradiated alloys caused by the fission-induced gas bubbles and grain subdivision. The phase-field approach is employed to generate the grain structures of the fuels with gas bubbles. Based on the phase-field microstructures, the thermal conductivities of the fuel can be predicted by the developed mesoscale model. The predicted values of effective thermal conductivities are consistent with available experimental data. Correlations of the thermal conductivity of alloys with respect to bubble volume fraction or grain boundary coverage are derived. The effects of the fission density, grain subdivision, and grain size on the thermal conductivities of alloys are discussed. The current study provides not only a better understanding of the effect of microstructure change on the thermal conductivity of the fuel, but also the important thermophysical data for engineering scale fuel performance modeling.

Z-111

力学与电化学交互作用下不锈钢亚稳态点蚀生长动力学的介观尺度模拟

王海涛, 韩恩厚

中国科学院金属研究所

点蚀是不锈钢主要的腐蚀损伤形式，具有极大的隐蔽性和突发性，尤其是在加载情况下，点蚀还是应力腐蚀和腐蚀疲劳裂纹的主要萌生源，对承力结构寿命有着至关重要的影响。点蚀的形成通常可分为三个阶段：点蚀萌生，亚稳态生长和稳态生长。亚稳态生长是点蚀的过渡阶段，在一定条件下亚稳态点蚀能发生再钝化停止生长，或进入到稳态生长最终导致不锈钢的破坏。我们采用元胞自动机模型耦合有限元分析研究了力学与电化学交互作用下不锈钢亚稳态点蚀生长以及亚稳态点蚀到稳态点蚀转变的机理。元胞自动机模型考虑了金属/钝化膜/电解液体系，实现了不锈钢的电化学阳极溶解、钝化、盐膜水解和氢离子扩散，在蚀坑生长过程中使用有限元方法实时分析了蚀坑表面的应力和应变分布，再通过 Gutman 模型计算蚀坑表面各个微区的局部应力和应变对阳极溶解电流的影响，以此作为元胞自动机模拟力化促进作用的边界条件。研究结果显示蚀坑口钝化膜破损时间的增加、蚀坑口钝化膜破损程度的降低、氢离子扩散系数的减小均能使得亚稳态点蚀转变为稳态点蚀，并且在相同条件下，应力作用下的亚稳态点蚀比无应力下的亚稳态点蚀更容易进入到稳态生长，而亚稳态点蚀间的交互作用也会促使蚀坑进入到稳态生长，同时点蚀稳定积的分析显示模拟结果与实验结论相一致。

Z-112

Visco-Plastic Self-Consistent modeling of Mg-Ca alloy to predict the mechanical responses and texture evolution

Alireza Maldar*, Gaoming Zhu, Leyun Wang, Xiaolin Zeng

National Engineering Research Center of Light Alloy Net Forming, Shanghai Jiao Tong University

Ca as an alloying element in magnesium alloys can create some features as well as rare earth elements, such as improving deformation anisotropy by the weakening of texture. Lack of studies to understand the effects of Ca on the plasticity of magnesium

alloys is an obstacle for developing their applications. The viscoplastic self-consistent (VPSC) modeling is a reliable method for simulating and studying texture evaluation and mechanical response during deformation of low-symmetry polycrystals. In this study, VPSC modeling has been used to understand the deformation behavior in Mg-1 %wt Ca alloys. Compression and tension tests have done at room temperature on two different initial texture and then data used to calibrate the hardening parameters of VPSC. The simulations reveal a good accuracy to predict both the macroscopic stress-strain response and the evolving texture. The critical resolved shear stress (CRSS) has been calculated for five different slip system and results show that the CRSS of {10-12} twinning is very low, lower than basal slip while twinning is not dominant. Results of deformation mode activities modeling confirmed that addition of Ca into Mg alloys can facilitate prismatic slip.

Z-113

双相钢热处理过程中显微组织和碳分布演变的模拟研究

安栋¹, Sung-Il Baik^{2,3}, 潘诗琰⁴, 朱鸣芳¹, Dieter Isheim^{2,3}, Bruce W. Krakauer⁵, David N. Seidman^{2,3}

1.东南大学材料科学与工程学院, 南京 211189, 中国

2.Department of Materials Science and Engineering, Northwestern University, Evanston, IL 60208, USA

3.Northwestern University Center for Atom Probe Tomography (NUCAPT), Evanston, IL 60208, USA

4.南京理工大学材料科学与工程学院, 南京 210094, 中国

5.AO Smith Corporate Technology Center, Milwaukee, WI 53224, USA

研究钢板热处理过程中显微组织和溶质分布对深入理解工艺-组织-性能间的关系有重要意义。我们建立了模拟低碳双相钢热处理过程中显微组织和碳浓度场演变过程的二维元胞自动机(Cellular Automaton, CA)模型。该模型考虑了奥氏体的连续形核、由界面迁移率和局部碳浓度差驱动的转变、溶质碳原子的再分配及扩散。应用该模型模拟了双相钢在两相区(800 °C)等温过程中的铁素体-奥氏体相变、随后空冷过程(6 °C/s)中的奥氏体-铁素体相变和马氏体相变以及 400 °C 回火 20 min 过程中的马氏体分解。模拟结果表明, 在等温过程中铁素体-奥氏体相变模式由初期的界面控制逐渐转变为扩散控制, 呈现出混合控制模式。等温 5 min 后, 铁素体和奥氏体中碳浓度分别达到其各自的平衡值。在随后的冷却过程中, 随奥氏体-铁素体相变进行, 铁素体和奥氏体中碳分布逐渐变得不均匀。相比于较大的奥氏体晶粒, 较小的奥氏体晶粒具有较快的转变动力学以及较高的碳浓度。当温度降至 500 °C 以下, 奥氏体-铁素体相变基本停止, 当温度进一步降至马氏体相变开始(M_s)温度, 未分解的奥氏体转变为富碳的马氏体。CA 模拟的空冷试样中的显微组织及马氏体碳浓度分别与扫描电镜和三维原子探针分析结果吻合良好。空冷试样经回火后, 马氏体不断分解, 铁素体基体中碳浓度逐渐升高。应用 CA 模拟结果可合理解释低碳双相钢试样经不同热处理后呈现不同的屈服强度和屈服平台的实验现象。

Z-114

局域能和局域应力在铝和铜的倾侧与扭转晶界的拉伸过程中的应用

王昊¹, 香山正憲², 田中真悟², 椎原良典³

1.上海大学材料科学与工程学院

2.日本産業技術総合研究所

3.日本东京大学

基于 PAW 和 GGA 的局域能和局域应力被成功的运用到了铝和铜的倾侧与扭转晶界的拉伸过程的分析中。局域能和局域应力通过对能量和应力密度在 Bader 划分的区域积分得到, 其中通过 Bader 划分方法解决了薛定谔方程中动能项的规范依赖问题。晶界处的局域能和局域应力的特性依赖于材料的成键本质。

我们研究了所有原子的局域能和局域应力在第一原理拉伸过程中的变化。在铝倾侧晶界处, 每个位置(界面、back、团块处)的成键在拉伸过程中每个阶段呈现出不同的局域能和局域应力, 这是由于铝原子的 *sp* 电子对局部环境的高敏感导致了每个原子在每个拉伸阶段的行为严重依赖于局部环境的变化。铜倾侧晶界有更高的拉伸强度, 并且在到达最高拉伸强度前, 在团块区域出现了{111}<112>切向滑移导致了层错的出现。这是由于相比于铝, 铜有更小的理想切变强度和层错能, 而且是由界面处高度积累的局域能和局域应力引起。在铝扭转晶界, 通过以前通用的 coincidence-site lattice (CSL)方法构建的 50 个原子的晶胞, 被局域能分析证明在晶胞尺寸上的不足。50 个原子的晶胞在拉伸过程中能量一直上升到表面能而没有关键点存在。我们提出一个包含 70 个原子的新晶胞, 其在拉伸过程中的关键点可以清晰的观察到。同时, 70 个原子的晶胞的局域能和局域应力分析提供了更深的理解。

Z-115

金属铝的宽区多相物态方程理论研究

赵艳红, 刘海风, 张弓木

北京应用物理与计算数学研究所

物态方程是描述物质压力、密度或比容、温度、内能等热力学状态量之间关系的函数, 在数值模拟中发挥着重要作用。金属材料在强激光、超高速撞击等形式的载荷作用下, 将发生固液气三态的转变, 此时单一相区的物态方程已难以描述如此宽的热力学状态变化。

本文采用第一原理方法, 计算了金属铝的固相物态方程和液相的冷压、冷能; 依据熔化曲线的实验数据, 由液相和固相在熔化曲线上压力和 Gibbs 自由能相等, 自洽迭代求解了铝的液相热压、热能, 获得了固液两相物态方程的参数; 气相物态方程采用 Young-Alder 形式进行描述, 建立了一套固液气多相物态方程模型。

采用此模型计算了金属铝的等温压缩线、雨贡纽线和熔化线等, 均与实验值符合较好。表明此物态方程可合理描述金属铝在宽广热力学空间的热力学状态。有望在超高速碰撞等现象的数值仿真中发挥积极作用。

Z-116

基于层间界面不连续度对热导率影响的等离子喷涂层状热障涂层微观组织结构设计

邱世毅¹, 吴臣武², 马岳¹, 郭洪波¹

1.北京航空航天大学材料科学与工程学院

2.中国科学院力学研究所

采用等离子喷涂 (APS) 技术制备典型层状微观组织结构热障涂层, 通过研究其微观结构中的孔隙、裂纹、层间界面对热导率的影响规律, 引入涂层层间界面的不连续度, 利用有限元模拟的分析方法, 建立层间界面不连续裂纹随机分布的微观结构模型, 探究涂层层间界面不连续度对热导率影响的规律, 数值模拟热导率结果与实验结果有较好的吻合。探究结果表明:

1) 随着层间界面不连续度的增加, 涂层热导率降低; 2) 层间不连续性裂纹交替分布的组织结构, 涂层的热导率最低, 因为传热路径最长; 3) 在层间不连续性裂纹交叠分布的组织结构中, 裂纹分布越分散, 热导率越大, 但增大的趋势趋于平缓; 4) 涂层总厚度一定, 随着单层层厚的增大, 涂层热导率增大。最后, 基于探索得到的层间界面不连续度和层厚对热导率的影响规律, 对 APS 层状热障涂层的微观组织结构进行最优化设计, 得到热导率最低的层状组织结构热障涂层, 为发展高性能热障涂层提供理论参考。

Z-117

裂纹对热循环过程中大气等离子体喷涂热障涂层 TGO 层附近应力影响的有限元数值模拟研究

王亮, 杨加胜, 倪金星, 钟兴华, 邵芳, 赵华玉, 陶顺衍, 庄寅

中国科学院上海硅酸盐研究所

大气等离子体喷涂热障涂层在热循环过程中的失效通常是由于涂层内部热应力累积造成的, 但归根结底是由于热生长氧化层 (Thermally Grown Oxide, TGO) 的不断生长及 TGO 周围处裂纹的扩展造成的。依据大气等离子体喷涂制备的 8wt.% Y_2O_3 部分稳定的 ZrO_2 涂层的微结构特点, 将打底层与陶瓷层界面之间生成的 TGO 层的几何形貌视为具有一定振幅和波长的正弦曲线。采用有限元模拟计算的方法研究了陶瓷层内部的横向裂纹和纵向裂纹对热循环过程中热障涂层内部 TGO 层应力影响的规律。研究表明, 热障涂层内部应力集中取决于纵向裂纹和横向裂纹所在的位置, 如果裂纹位于 TGO 层的波峰上方, 与横向裂纹相比, 纵向裂纹更能有效地部分释放掉 TGO 层附近的应力集中。当存在一个横向裂纹, 最大拉应力位于 TGO/BC 界面的波峰处, 而最大压应力则位于 TGO 层的内部拐角处。当存在一个垂直裂纹, 应力集中倾向于出现在裂纹尖端处。并且横向裂纹和纵向裂纹的存在对 TGO 处应力影响的规律明显不同。此外, 纵向裂纹所处的位置对最大应力的分布也具有一定的影响。垂直裂纹与 TGO 对应力集中彼此之间有相互耦合的作用。对横向裂纹来说, 如果其位于 TGO 层的波峰之下 (位于陶瓷顶层内部并且靠近 TGO 层), 与横向裂纹位于 TGO 层的波峰之上相比, 裂纹尖端同样呈现出应力集中效应。对可能会发生扩展的裂纹的断裂力学参数, 单裂纹的扩展模态以及大气等离子体喷涂热障涂层在高温热循环条件下的失效机制也进行了有限元的计算与系统的分析与讨论。将热障涂层的陶瓷层视为线弹性材料, 采用弹簧振子模型对横向裂纹和纵向裂纹引起涂层的失效机制进行了解析。研究表明热障涂层在高温热循环条件下的失效机制主要为: 位于陶瓷层内部纵向裂纹垂直向陶瓷层/TGO 界面方向扩展, 在靠近陶瓷层/TGO 界面大约 1~2 个片层厚度处形成横向裂纹, 横向裂纹沿着界面方向横向扩展到达涂层边缘处, 最后引起涂层剥落失效。

Z-118

高速高通量热力学与相平衡计算

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

1.CompuTherm LLC

2.东南大学

3.The Ohio State University

热力学与相平衡计算是材料性能计算模拟的基础。通常的材料性能模拟需要调用百万次以上的点的相平衡信息。大量地调用热力学与相平衡计算使得材料性能模拟变得非常的缓慢。因此,热力学与相平衡计算成为材料性能模拟过程中一个不可逾越的关键问题。目前解决这个问题的方法有:预算表格法、预多项式拟合法、伪二元系、伪三元系法等。这些方法均是从预置的结果中获取近似值作为性能模拟所需要的相平衡性质。虽然这些方法降低了整体的相平衡计算量,但未能真正地实现多元多相热力学、相平衡计算与材料性能模拟技术的直接耦合。这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,增加了一个新的高速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数据,为材料性能模拟准确、快速、即时地提供必要相平衡性质的信息。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问题。我们期待 PanDataNet 在材料性能模拟领域得到广泛的应用,成为材料模拟技术发展的有效工具。

Z-119

Ni-Ti-X (X=Cu, Hf)体系相图热力学研究

金波¹, 鹿行旭², 刘树红¹, 杜勇¹

1.中南大学粉末冶金国家重点实验室

2.University of Connecticut

Ni-Ti-X (X=Cu, Hf)为 NiTi 基形状记忆合金体系,研究其相图及热力学性质对于形状记忆合金的设计开发具有重要意义。本工作通过实验测定和 CALPHAD 方法对这两个体系的相图热力学进行了研究。在实验方面,利用 XRD 和 EPMA 测定了 1173.15 K 下 Ni-Ti-Cu 体系 3 个三相区以及 1 个两相区,并结合已有的文献数据构筑了该体系 1173.15 K 等温截面。利用 XRD 和 EPMA 测定了 1173.15 K 下 Ni-Ti-Hf 体系 5 个三相区以及 6 个两相区,在 1273.15 K 下测得了 7 个三相区以及 9 个两相区,并构建了相应的 1173.15 K 和 1273.15 K 等温截面,其中 NiTi₂ 相在 Ni-Ti-Hf 三元系中有较大的溶解度范围。以实验结果为基础,结合文献数据,利用 CALPHAD 方法获得了一套描述 Ni-Ti-X (X=Cu, Hf)体系的热力学参数。获得的热力学参数可以合理地描述已有的实验信息。

Z-120

压力下 Mg-Al-Sn 合金枝晶生长动力学和微观偏析的相场法模拟

尚闪, 韩志强

清华大学

通过耦合压力下三元镁合金的热力学模型,建立了描述三元镁合金压力下凝固的相场模型。该相场模型用于研究压力对挤压铸造 Mg-Al-Sn 合金凝固过程枝晶生长热力学、动力学以及两种溶质微观偏析的影响。模拟与实验研究表明,施加的压力增大凝固驱动力,从而增大枝晶生长速度,得到比常压下更加发达的枝晶;另外,压力增大形核率,这两者对晶粒尺寸具有相反的作用。对于单晶粒或者周围没有其他晶粒干扰的晶粒的生长,枝晶在 85 MPa 下的生长速率比常压下更大,二次臂更加发达;然而,对于受形核影响的多晶粒的生长,由于晶核数量增多,在 85 MPa 下形核和生长的晶粒尺寸比常压下更小。无论在常压还是压力下,枝晶的生长速率随着 Sn 含量的增加而降低,压力对该趋势没有明显影响。压力提高了固液界面前沿的溶质截留和枝晶间的溶质富集程度,这两者对溶质的微观偏析具有相反的作用。基于此机制,溶质 Al 的微观偏析随着压力的增大而加剧,然而,溶质 Sn 的微观偏析几乎不受压力的影响。

Z-121

激光立体成形 Ti-6Al-4V 热力耦合行为有限元分析及实验验证

鹿旭飞^{1,2}, 林鑫^{1,2}, Michele Chiumenti³

1.西北工业大学凝固技术国家重点实验室

2.西北工业大学金属高性能增材制造与创新设计工业和信息化部重点实验室

建立一个激光立体成形 Ti-6Al-4V 合金的三维热力耦合模型，并利用不同扫描策略的单道 40 层单臂墙实验校验模型。利用验证模型对材料力学属性进行敏感性分析，结果表明热膨胀系数和弹性极限对应力场结果影响显著。基于优化的力学参数讨论了激光立体成形热应力场的演化行为，发现应力和变形在第一层沉积过程及冷却阶段迅速增殖，冷却阶段的变形增量和应力增量对残余应力场的贡献分别为 70% 和 60%。另外，分析表明控制基材初始温度和冷却速率可以减轻变形及残余应力。因此，分析了不同预热方式及冷却速率对热应力场的影响，结果表明增加基板整体预热温度并减小冷却速率能有效减缓变形和残余应力。

Z-122

磁流变弹性体微观结构调控及宏观物理性质计算分析

刘太祥¹，许阳光²

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总体工程研究所

磁流变弹性体是一种磁敏智能材料，其物理性质（例如储能模量、导电性、导热性等）可以通过外加磁场进行调控。一般而言，该材料可以通过将微米级磁敏颗粒掺杂到非磁敏基体中而制备得到。磁流变弹性体的宏观物理性质与其内部磁敏颗粒聚集形成的三维微观结构密切相关，本报告将介绍磁流变弹性体宏观物理性质与其内部微观磁敏颗粒聚集结构之间的关系。研究中，首先应用颗粒动力学方法，对磁流变弹性体在预结构制备过程中其内部磁敏颗粒聚集结构受外加磁场调控的过程进行了模拟分析，揭示了多种三维微观结构形成的机理。然后，基于得到的多种微观结构，应用有限元分析方法，对磁流变弹性体宏观物理性质进行了计算分析，给出了不同宏观物理性质所依赖的微观结构形式。该研究对于进一步设计多功能的磁流变弹性体材料具有较好的参考意义。

Z-123

相场法模拟亚共析钢的膨胀曲线

黄淋，张瑞杰

北京科技大学

在本研究中，我们用相场法模拟了两个不同成分亚共析钢的冷却过程。得到了和实验吻合得不错的模拟结果。包括奥氏体到铁素体再到珠光体转变的微观组织形貌、奥氏体向铁素体转变的相分数随温度变化曲线、以及冷却过程中的热膨胀曲线。特别是对线膨胀曲线的研究，我们用两种方法计算出膨胀曲线。我们不仅用耦合了弹性应力场的相场法计算出膨胀曲线，还用 thermo-calc 计算出膨胀曲线。将两者结果进行了对比，发现相场法模拟的结果与实验值更接近。为了解释这个结果，我们将两个方法进行对比，具体阐述了两种方法是如何计算膨胀曲线的，解释了相场法模拟结果更好的原因。

Z-124

凝聚态体系中激发态载流子的非绝热分子动力学模拟

赵瑾

中国科学技术大学物理系

凝聚态体系中激发态载流子的超快动力学过程对太阳能转化、电荷输运等微观过程有着至关重要的影响。从时间、空间、能量和动量等多个尺度来研究激发态载流子的超快过程是一个充满挑战的科学问题。最近几年，我们结合最小面跳跃方法与含时密度泛函，发展了基于平面波基组的 Hefei-NAMD 程序包，可以从第一性原理的角度对激发态载流子的超快过程进行描述。该程序包不仅可以从时间、空间、动量、能量等多个角度研究激发态载流子超快动力学，同时还可以研究激发态载流子与声子、极化子等准粒子以及缺陷、杂质、分子吸附等外界环境的相互作用。我们利用该程序包研究了二维异质结之间的超快电荷转移过程，分子与氧化物表面的超快电荷转移过程，半导体内部的电子空穴复合过程以及光激发自旋极化空穴流的寿命等物理问题。

Z-125

新型半导体光电材料的理论设计

张立军

吉林大学

Semiconductor materials are widely used in many optoelectronic applications such as solar cell, photo-detector, light-emitting diode, photocatalysis, etc. Discovery of new optoelectronic semiconductors via rational design is of crucial importance for making breakthrough enhancement of materials performance in applications. With dramatically increasing computing capability of supercomputers and continuously developed computational algorithms, people can resort to materials simulation to explore the properties of thousands of potentially useful materials in a fraction of time that the real experiments might take. This makes theoretical design of functional materials with desired properties in computers come true. In this talk depending on time I will present our recent work on computational materials by design for optoelectronic semiconductor systems (e.g., solar absorbers, transparent conductors, low-dimensional semiconductors, etc.). I will also share our concerns about the challenges and potential solutions for realizing the truly sense of materials by design.

Z-126

Dirac semimetal in type IV magnetic space group

Gang Xu*

Huazhong university of science and technology

Analogues of the elementary particles, Dirac fermions in condensed matter have received extensive attention for both scientific interest and device applications. In this work, we generalize the concept of Dirac semimetal (DSM) to the magnetic space groups (MSGs), and define a new category of DSM in type IV MSGs, which is protected by the antiunitarity of the product of the inversion symmetry and the nonsymmorphic time-reversal symmetry. Moreover, we propose the interlayer antiferromagnetic (AFM) EuCd_2As_2 as a promising candidate with only one pair of Dirac points at the Fermi level. Many exotic topological states, such as the triple point semimetal and the AFM topological insulator holding of the half-quantum Hall effect, can be derived from such AFM DSMs by breaking certain symmetry, providing an ideal platform to study topological phase transitions. Our results extend the range of DSM, and open a new way to study the interplay between the DSM and other exotic topological states

Z-127

偏离中心的镜面对称保护的节点线半金属材料: BaLi_2Si

周攀

湘潭大学

近年来, 拓扑半金属由于其内在的拓扑性质和很多非传统的物理现象而吸引人们很大的关注。现今人们主要提出了三类半金属: Dirac 半金属、Weyl 半金属和节点线半金属(当然还包括其各种衍生类半金属, 例如节点链等等)。这些半金属的存在很多情况下都是基于特定的对称性所保护的。在本工作中, 在忽略自旋轨道耦合的基础上, 我们第一次提出了在实验已制备的 BaLi_2Si 材料中可以实现偏离中心的镜面对称保护的节点线半金属, 通过第一性原理计算, 我们发现在三个相互垂直的 \mathbf{k} 空间平面上形成了三个节点线结构。并且这些能带交叉点正好位于费米能级附近。通过算符推演, 我们可以知道这些节点线半金属来源于布里渊区中心点的能带反转和第一布里渊区边界相反镜面本征值的强制简并。在考虑自旋轨道耦合后, BaLi_2Si 可以转变成偏离中心的镜面对称保护的拓扑晶格绝缘体, BaLi_2Si 为未来研究偏离中心镜面对称保护的拓扑现象提供了一个很好的平台。

Z-128

$\text{W}_x\text{Mo}_{1-x}\text{S}_2$ 二维合金材料电子结构性质和热学性质的第一性原理研究

孟冬雪, 龙德兵, 程阳, 黎明锴

湖北大学

二维过渡金属硫化物(TMDs)具有许多类似甚至优于石墨烯的特性, 由于其独特的电、光学性质和功能, 在光催化、光电子器件等方面有很广阔的研究价值和应用前景。过渡金属硫化物 MoS_2 、 WS_2 具有与石墨烯类似的独特二维层状结构, 同时还具备热稳定性和化学稳定性高等特点, 所以近年来对两种材料的合金化合物 $\text{W}_x\text{Mo}_{1-x}\text{S}_2$ 合金的研究引起了广泛的关注, 在实验研究上, 其制备方法的研究、外界条件变化对材料性质影响的研究以及带隙调控等的研究都取得了研究成果。虽然在实验的基础上还有一些辅助的理论计算, 但是对于 $\text{W}_x\text{Mo}_{1-x}\text{S}_2$ 合金随 W 含量变化体系的结合能变化、能带结构变化以及热

力学性质变化等还没有系统的理论计算研究，所以我们利用理论计算手段，可以从原子尺度深入了解钨钼硫化物 $W_xMo_{1-x}S_2$ 的电学、光学和热力学性质，为其实验上的研究提供理论支持，并且进而可以为其在电子学（传感器、柔性电子器件）、能量科技（太阳能、储氢和电池）和先进工程材料等领域的研究打下良好的理论基础。

本文采用了团簇展开法结合基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算，研究了钨钼硫化物 $W_xMo_{1-x}S_2$ 的中间基态的稳定结构： $W_{1/3}Mo_{2/3}S_2$ ， $W_{1/2}Mo_{1/2}S_2$ 和 $W_{2/3}Mo_{1/3}S_2$ 。通过基于密度泛函理论的第一性原理计算，我们得到了 $W_xMo_{1-x}S_2$ 合金的带隙随掺杂的 W 含量的增加而变化的规律，电子态密度和能带偏移很清楚地反映了体系的价带顶和导带底的变化，从而很好地解释了带隙变化的原因。对体系形成能的计算，发现 $W_xMo_{1-x}S_2$ 合金的形成能均为负值，说明 $W_xMo_{1-x}S_2$ 很容易形成固溶体。对体系进行热学性质的计算，可以通过研究随 W 含量变化对热导系数，塞贝克系数以及电导系数的影响，从而得到衡量体系能量转换效率的品质因数 ZT。

Z-129

具有优异光伏性质的单层二硫化钼半导体新相结构的研究

徐美玲¹，王彦超¹，陈中方²，陈悦³，马琰铭¹

1. 吉林大学
2. 波多黎各大学化学学院
3. 香港大学物理和电子工程学院

单层 MoS_2 是柔性光伏材料的候选者，然而本身带隙较大 (~ 2 eV) 导致其光伏效率低。尽管增加层厚可以减小带隙，但会诱发直接带隙向间接带隙转变，反而不利于提高光伏效率。本文中，我们使用基于群智理论的 CALYPSO 结构搜索方法预测到 MoS_2 的一个新相 ($1T_d$)，带隙值为 1.27 eV, 接近最佳光学带隙值。多层的 $1T_d$ 相由于层间极弱的相互作用而仍然保留着直接带隙的性质。理论计算的光伏效率高达 33.3 %。其他五种单层过渡金属硫族化物的 $1T_d$ 相也是直接带隙的半导体，带隙值在 1.10-1.34 eV 之间。我们计算发现通过离子注入法可以合成出 $1T_d$ 结构。一旦 $1T_d$ 被合成，将会引领整个过渡金属硫族化物柔性太阳能电池的发展。

Z-130

基于第一性原理对 Au 掺杂 ZnO 薄膜电子结构及热电性质影响的研究

刘杉^{1,2}，李国建¹，刘诗莹^{1,2}，贾宝海^{1,3}，朴勇俊^{1,2}，王强¹

1. 东北大学材料电磁过程研究教育部重点实验室 沈阳 110819
2. 东北大学材料科学与工程学院 沈阳 110819
3. 东北大学冶金学院 沈阳 110819

Au 作为薄膜生长衬底在制备 ZnO 纳米结构中起着重要作用，因此深入地了解 Au 元素在制备 ZnO 薄膜热电材料过程中的作用具有重要意义。基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，研究了 Au 掺杂对 ZnO 薄膜材料电子性质及热电性质的影响。结果发现 Au 掺杂后，Au 的 5d 轨道电子与 O 的 2p 轨道电子会产生强烈杂化，进而引起局域态密度的引力中心向低能级移动，导致带隙减小，费米能级比未掺杂时提高了 0.4 eV。同时由于 Au 杂质能级的引入，导带底的能带变得窄而平缓，电子有效质量由未掺杂时的 $0.282 m_0$ 增加至 $0.516 m_0$ 。这些变化导致塞贝克系数由未掺杂时的 $-25.383 \mu V/K$ 提高至 $-115.929 \mu V/K$ 。另外，掺杂浓度为 3.125% 时功率因子达到 $1.89 \times 10^{-4} W/m K^2$ 。上述研究表明，Au 作为掺杂元素可以极大地提高 ZnO 薄膜热电性能且掺杂浓度需控制在一定范围内，本研究结果对于在 Au 作用下制备高质量 ZnO 纳米热电材料具有很重要的理论指导意义。

Z-131

基于缺陷工程的过渡族金属掺杂 MoS_2 性能调控

王怡人¹，曾丽婷²，宜佳宝²

1. 中南大学材料科学与工程学院
2. 澳大利亚新南威尔士大学

利用第一性原理计算，我们研究了一系列过渡族金属掺杂单层 MoS_2 的电磁等特性。通过考虑体系中不同的缺陷以及缺陷复合体的形成，可以实现室温铁磁性。我们的计算发现，未掺杂的 MoS_2 及其本征点缺陷都是非磁性的。Mn, Fe, Co 和 Ni 的加入，可以取代体系中的 Mo 位置，形成取代位的点缺陷，并且产生局域磁矩，使得体系表现出铁磁性。通过计算发现，

该铁磁性来源于过渡族金属原子的 d 电子与周围的 S 原子的 p 电子之间的 p-d 杂化作用。考虑到实际制备过程中, 本征点缺陷的存在无法避免, 在过渡族金属掺杂时, 有可能形成缺陷复合体。利用热力学计算, 我们得到了不同缺陷以及缺陷复合体在不同 S 分压下的形成能。计算发现在 S 分压较高的环境下过渡族金属掺杂会容易形成($\text{TM}_{\text{Mo}} + \text{TM}_{\text{Mo}}$)缺陷复合体。以 Mn 掺杂为例, 形成的($\text{Mn}_{\text{Mo}} + \text{Mn}_{\text{Mo}}$)中两个 Mn 原子倾向于取代两个临近位置的 Mo, 并且为体系引入 $2.0\mu_{\text{B}}$ 的磁矩。通过不同掺杂浓度的计算, 发现 Mn 掺杂产生的总磁矩与掺杂浓度无关。我们的研究说明过渡族金属掺杂 MoS₂ 可以用于制备高质量的二维稀磁半导体, 并且为其制备和应用提供了理论指导。

Z-132

摩尔定律的下限在哪里?

吕劲

1. 北京大学
2. 人工微结构与介观物理国家重点实验室
3. 量子物质科学协同创新中心

摩尔定律正逼近其物理极限。未来的场效应晶体管要求沟道长度要在 10 nm 以下。2D 材料具有极薄的厚度, 门的静电控制能力增强, 纯的 2D 材料表面一般没有悬挂键, 不容易形成载流子的陷阱态, 有利于载流子的传输。因此 2D 材料是未来亚 10 nm 晶体管的具有竞争力的候选沟道材料之一。门长 1 nm, 沟道长度 4 nm 2D MoS₂ 晶体管已经制备出来了, 并显示了几乎理想的亚阈值摇摆, 尽管开电流不如人意。一个基本问题自然产生了: 按照现在国际半导体技术线路图的要求, 如果选用合适的 2D 材料, 究竟能把摩尔定律延续到什么尺度呢?

在与实验亚 5 nm 器件结果吻合基础上, 我们用第一原理的量子输运方法模拟了几种 2D 材料(V 族烯, VI 族烯(Tellurene), 3-6 族烯 (In_2Se_3), $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$) 的亚 5 nm 场效应晶体管, 预测了基于 2D 材料的摩尔定律的下限尺寸。

Z-133

非线性光学材料的单原子响应理论

邓水全, 程曦月

中国科学院福建物质结构研究所

非线性光学材料利用二阶或高阶非线性效应实现激光频率转换, 在激光制导、激光雷达、3D 打印、核聚变和光计算机等领域得到了广泛应用。在过去的几十年中, 中科院福建物构所在非线性光学材料的合成和晶体生长等方面取得了令人瞩目的研究成果, 至今仍然引领着世界相关领域的发展方向。在此过程中, “阴离子基团理论”曾发挥了重要的启示作用。但是, 随着军事及工业化对新一代光电材料提出的高功率、高抗损伤、新波段等要求, 就需要对相关材料的作用机理有更精准的认识(J. Am. Chem. Soc. 2013, 135, 4215; Chem. Mater. 2014, 26, 5773; J. Mater. Chem. C 2014, 2, 530)。在此背景下, 我们提出了具有普遍适用性的部分响应理论方法, 创新性地建立了原子尺度的非线性光学单原子响应理论。利用该理论结合第一性原理计算, 首次定量分析了材料中单个原子对倍频效应的贡献, 揭示了长期被忽略的非占据态轨道对倍频效应的重要作用, 从全新的角度诠释了非线性光学倍频效应, 为这类材料的设计合成提供了新的、可靠的数值标准。相关研究成果发表于 Angew. Chem. Int. Ed. 2018, 57, 3933, 并被编辑选为 VIP 文章。

Z-134

含有四面体基元的深紫外非线性光学材料的设计研究

杨志华

中国科学院新疆理化技术研究所, 新疆乌鲁木齐市北京南路 40-1 号

E-mail: zhyang@ms.xjb.ac.cn, Tel: (86)-991-3810816

在紫外和深紫外非线性光学材料的探索中, 含有四面体基元 (BO_4 , PO_4) 的化合物常因其小的微观超极化率、弱的光学各向异性使得只含有四面体阴离子基元化合物普遍存在倍频小、双折射率小等问题。但是四面体基元不具有显著的结构各向异性, 更易于构成三维网络结构, 有利于大尺寸的晶体生长。如何能够保持四面体基元的优势, 避免其弊端, 设计出能同时满足大带隙、大倍频、合适双折射率要求的新材料, 是本文主要研究内容。

四面体基团在结构各向异性特点不明显, 但还是存在大双折射率的中心对称的化合物。基于此问题, 我们提出一种响应电荷密度分布近似方法 (REDA 模型), 发现双折射率与响应电荷密度分布因子成正相关。在倍频效应方面, 通过 berry phase

等方法分析了四面体基元非线性光学材料倍频效应的来源机制。在此基础上,我们对四面体基元筛选组合,筛选出 $(\text{BO}_3\text{F})^{4-}$ 、 $(\text{BO}_2\text{F}_2)^{3-}$ 、 $(\text{BOF}_3)^{2-}$ 、具有 zipper 排列的 PO_4 基元等系列优势基元。通过对优势模块设计组装,设计出相位匹配波长达到深紫外波段的新非线性光学材料。

Z-135

Eu²⁺激活氮化物荧光粉发光带宽与发光中心配位环境的第一性原理研究

罗倪^{1,2}, 程曦月¹, 黄艺东³, 邓水全¹

- 1.中国科学院福建物质结构研究所结构化学国家重点实验室
- 2.中国科学院大学
- 3.中国科学院福建物质结构研究所中科院光电材料化学与物理重点实验室

窄带宽的稀土发光材料对制备出低色温、高显色指数的暖白光 LED 器件具有重要作用。为了寻找发光带宽与材料微观结构关系,我们统计了近年来报道的十多种 Eu^{2+} 激活氮化物荧光粉 ($\text{A}_x\text{B}_y\text{C}_z\text{N}_n$ (A=Ca/Sr/Ba, B=Li/Mg, C=Al/Si)) 的半高宽和发光中心 Eu^{2+} 与 N 配位的局域环境特征,发现激活剂 Eu^{2+} 掺杂浓度较低 (约为 0.1-5 mol%), 并具有高配位数 (≥ 7) 时, 荧光粉的发光带较窄。另外, 当其他非激活剂阳离子存在分数占位或者激活剂存在多种配位环境时, Eu^{2+} 高配位数的荧光粉也有可能使发光带宽化。在统计研究的基础上, 我们采用第一性原理计算方法, 考虑 4f 电子的强关联效应以及自旋耦合效应, 研究了 $\text{SrLiAl}_3\text{N}_4:\text{Eu}^{2+}$ 、 $\text{SrMg}_3\text{SiN}_4:\text{Eu}^{2+}$ 、 $\text{CaLiAl}_3\text{N}_4:\text{Eu}^{2+}$ 等的能带结构, 态密度及稀土离子局域环境的部分电荷密度, 发现 Eu^{2+} 与周围 N 形成高配位 EuN_8 多面体, 且 Eu^{2+} 能量最高的两条 4f 轨道能量差值约为 0.15 eV。我们的研究结果提出了从电子尺度筛选窄带荧光粉的可能判据, 并将在下一步工作拓展研究系列 Eu^{2+} 激活氮化物荧光粉的电子结构特征。

Z-136

基于光子晶体对 BGO 闪烁体光提取效率影响的模拟研究

唐文¹, 刘应都¹, 吴强², 刘方圆¹, 杨艳丽¹

- 1.湘潭大学材料科学与工程学院
- 2.同济大学物理科学与工程学院

为进一步提高 BGO 闪烁体光提取效率, 在 BGO 闪烁体表面利用自组装制备单层 SiO_2 微球周期阵列, 并通过原子层沉积在单层 SiO_2 微球周期阵列共形沉积一层 GaN。通过严格耦合波理论研究闪烁体和光子晶体的相互作用, 揭示光子晶体提高闪烁体发光性能的机理。模拟结果表明: 在 BGO 闪烁体表面引入直径为 360 nm 的单层 SiO_2 微球阵列使光提取效率提高 113%; 在单层 SiO_2 微球阵列的基础上, 引入高折射率的 GaN 共形层可进一步提高光提取效率, 当 GaN 的厚度为 70 nm 时光提取效率提高幅度最大, BGO 闪烁体的光提取效率提高了 158%。

Z-137

单层 InSe 的多体效应与晶体管性能极限

王洋洋¹, 费瑞祥³, 吕劲²

- 1.中国空间技术研究院钱学森空间技术实验室
- 2.北京大学
- 3.圣路易斯华盛顿大学

目前主流 CMOS 技术即将发展到 7 纳米技术节点。在 5 nm 技术节点以下, 传统硅晶体管面临着严重短沟道效应和高成本投入的双重严峻挑战, 因此很难继续。“摩尔定律”可能面临终结。2015 年国际半导体路线图 (ITRS) 明确指出, 信息技术进入后摩尔定律时代 (“More Moore”、“More than Moore”和 “Beyond CMOS”)。在 “More Moore” (深度摩尔) 层次, 三维集成构架和新材料将用于未来晶体管的发展。二维半导体材料被认为是构建亚 7 nm 晶体管的理想材料: 其超薄甚至单原子层的厚度保证了器件栅极优异的静电控制能力; 表面平整无悬挂键, 减少了界面陷阱; 纵向可高密度集成。最近, 1-10 nm 栅极长度的二维 MoS_2 晶体管已经通过多种方法在实验室被制备出来。但开态电流只有几到几百 $\mu\text{A}/\mu\text{m}$ 量级, 远不能满足 ITRS 的需求。另一种二维明星材料黑磷在空气中不稳定。因此需要寻找其它二维沟道材料。单层和多层的 InSe 具有 $10^3 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 的电子迁移率, 和黑磷晶体管相当。由于其优异的光学性质, 二维 InSe 已经被广泛用于光电器件应用, 但是其电学器件的应用探索还十分有限。石墨烯作电极、hBN 夹层的单层 InSe 晶体管已经被制备出来。但由于较大的接触电阻和界面散射, 开关比只有 10^2 。因此, 单层 InSe 晶体管的性能极限仍然未知, 首先进行第一性原理模拟来进行研究十分必要。

我们利用第一性原理 GW 和 BSE 方法研究了单层 InSe 的多体效应。单层 InSe 的能隙为 2.60 eV。水平极化的光学能隙为 2.50 eV，相应的激子束缚能为 0.58 eV。我们用第一性原理输运理论模拟了亚 7 nm 的 n 型和 p 型单层 InSe 晶体管的性能极限。单层 InSe 晶体管的性能要优于单层 MoS₂ 晶体管。n 型和 p 型单层 InSe MOSFET 在栅极长度低至 3 nm 时仍可以满足 ITRS 高性能器件的需求，在栅极长度分别低至 5 和 3 nm 时仍可以满足 ITRS 低功耗器件的需求。因此，二维 InSe 是非常具有竞争性的下一代晶体管沟道材料。

Z-138

低维纳米材料的吸附与摩擦行为研究

陈韵

吉林大学材料科学与工程学院

低维纳米材料具有优良的物理化学性质，在分子检测、催化以及纳米机械领域具有广泛的应用前景。其中，对于低维纳米材料表面吸附与摩擦性质的研究是纳米器件功能化得以实现的基础之一。近年来，我们采用理论计算方法，以高性能纳米器件为目标导向，系统研究了低维纳米材料的本征特性（介电性质、几何结构、尺寸等）以及位向关系等因素分别对于其吸附、摩擦行为机理的影响等基础科学问题，揭示了低维纳米材料的物理吸附机理以及原子尺度下材料的摩擦机理及其运动演变机制，从而在理论上加深了对于范德华力本质的理解，同时为高性能纳米器件的设计提供了理论依据。

墙展

Z-P01

Electronic structures and optical properties of IV A elements doped 3C-SiC from density functional calculations

Xuefeng Lu*, Tingting Zhao, Junqiang Ren, Peiqing La, Xiaobing Yan

Lanzhou University of Technology

Electronic structures and optical properties of IV A elements (Ge, Sn and Pb) doped 3C-SiC are investigated by means of the first principles calculation. The results reveal that the structure of Ge-doped system is more stable with a lower formation energy of 1.249 eV compared with those of Sn- and Pb-doped 3C-SiC systems of 3.360 and 5.476 eV. Doping of the IV A elements can increase the band gap, and there is an obvious transition from indirect band gap to direct band gap. Furthermore, charge difference density analysis prove that the covalent order of bonding between the doping atoms and the C atoms is Ge-C > Sn-C > Pb-C, which is fully verified by population values. Due to the lower static dielectric constant and loss, the service life of 3C-SiC dramatically improved in production practice. Moreover, lower reflectivity and absorption peaks in the visible region, implying its wide application foreground in photoelectric devices. Through the analysis of EELS, the doped systems may present the nature of the semiconductors, which is in line with the results of the dielectric constant.

Z-P02

几种密排六方结构金属中晶格再取向路径的第一原理研究

周刚, 王皞, 徐东生, 杨锐

中国科学院金属研究所

金属结构材料中变形主要依靠位错和孪晶的方式进行，而相对体心和面心结构金属来说，具有密排六方结构的金属中可供位错开动的滑移系较少，因此孪晶是重要的协调变形方式。晶格再取向不同于传统的变形方式，这种新方式依靠局部转变成核使基体和孪晶之间成 90° 的位向关系，产生一个基面/柱面 (B/P) 界面。本工作采用第一原理方法系统研究了不同密排六方结构金属中晶格再取向的转变路径，并在 Ti 和 Mg 中详细讨论了部分合金化元素的影响。结果表明：（1）在不同密排六方结构金属中，基面/柱面界面的形成需要不同的激发能，其中 Mg 的激发能最低，而 Os 最高；（2）镁合金中，合金元素主要影响纯剪切变形部分，而钛合金中，主要影响原子重排部分；（3）当存在一定剪切变形量或原子重排量时，合金元素对后续的激发能具有复杂影响。

Z-P03

非中心对称 WC 型材料中声子外尔点

李江旭^{1,2}, 谢庆^{1,3,4}, Sami Ullah^{1,3}, 李荣汉^{1,2}, 李殿中¹, 李依依¹, Seiji Yunoki⁴, 陈星秋¹

- 1.中国科学院金属研究所
- 2.中国科学技术大学
- 3.中国科学院大学
- 4.日本理化研究所

基于第一性原理计算, 我们预测了在非中心对称 WC 型材料的声子系统中, 广泛存在着外尔点。在三维倒空间中, 沿着 $K(1/3, 1/3, 0)$ 到 $H(1/3, 1/3, 1/2)$ 之间的声子能带的交点全部都是外尔点。这些外尔点具有非零的拓扑荷 (topological charge)。拓扑荷为+1 和-1 的外尔点分别是贝里曲率 (Berry curvature) 的源 (source) 和汇 (sink)。在晶格表面上, 我们观察到了开放的表面弧 (surface arcs), 这些表面弧总是连接着两个相反拓扑荷的外尔点。

通过对称性分析, 构造了一阶和二阶 $k \cdot p$ 模型来描述这些外尔点。在这些外尔点附近 0.002 \AA 范围内, xy 面内的声子谱是各向同性的, 一阶 $k \cdot p$ 模型就能够很好的描述这类外尔点。如果在这个范围内, xy 面内的声子谱具有绕 z 轴的重三重旋转对称性 (C_{23} rotation symmetry), 那么需要二阶 $k \cdot p$ 模型来描述这类外尔点。另外通过理论计算, 我们预测对于用二阶 $k \cdot p$ 模型来描述的外尔点, 当模型参数满足一定条件, 在该外尔点附近还存在三个具有相反拓扑荷的外尔点, 通过 Wilson-loop 方法求拓扑荷时, 根据半径的变化可以得到中心点的拓扑荷 $c(\pm 1)$, 也可能得到四个外尔点的拓扑荷 $-2c(\mp 2)$ 。利用第一性原理计算, 我们在 WC 型材料中发现了这一现象, 从而证实了在这类外尔点附近还存在三个具有相反拓扑荷的外尔点。我们的研究结果将推进对于 WC 型材料的声子拓扑的实验研究。

Z-P04

U-Nb 合金纽扣锭凝固过程相场模拟研究

邬军¹, 莫文林¹, 莫川¹, 唐县娥¹, 张鹏国¹, 张小鹏¹, 苏斌¹, 王震宏¹, 陈云², 罗超¹

- 1.中国工程物理研究院材料研究所
- 2.中国科学院金属研究所

U-Nb 合金具有耐腐蚀性好、密度高、延展性好、可热处理强化等特点, 是核工程领域重要的结构和功能材料。凝固过程是 U-Nb 合金热加工过程的重要环节, 涉及传热、溶质扩散、对流、大量晶粒生长等多尺度、多物理问题, 直接影响合金的成分偏析、晶粒形貌、晶粒尺寸等, 进而影响 U-Nb 合金的性能。开展 U-Nb 合金凝固过程的实验需要特别的辐射防护措施, 使在线、实时观察的实验研究变得十分困难, 这极大的限制了对 U-Nb 合金凝固行为、晶粒生长机制的理解。

本文在材料基因组思想框架下, 基于热力学的数据库, 建立了多尺度、多物理的凝固相场模型, 开展了 U-Nb 合金凝固过程组织演化和成分偏析的模拟。采用并行、自适应网格、非线性处理等先进的数值计算方法, 实现了多晶粒、大尺度的模拟, 再现了电弧熔炼纽扣锭的金相组织结果。模拟结果显示, 随着冷却速率的增加, 一次枝晶臂明显变细, 二次枝晶臂更加发达, 偏析越小; 随着 Nb 含量的增加, 凝固的成分过冷明显, 枝晶臂越发达。这些模拟与金相实验观察到的结果完全一致。

Z-P05

门可调的单层 MX₂ 1T'-2H 面内相接触界面性质

刘士琦, 李菁桢, 吕劲
北京大学

基于平面内 1T/1T' (金属电极) - 2H (半导体沟道) 异质结的二维 TMDS 场效应晶体管最近受到了广泛关注。实验显示出这样的构造会明显减小接触电阻, 增强门电极的调控能力, 从而改善器件的性能。但是, 器件的良好导电性的内在原因亟待研究。我们通过第一性原理的量子输运模拟, 首次系统的研究了以 1T' 相作电极, 2H 相作沟道的单层 MoS₂, WS₂, MoSe₂, WSe₂, MoTe₂ 晶体管的界面性质。在这种体系里, 界面处的金属诱导态深入到肖特基势垒处, 连接了电极和沟道的价带/导带, 因而形成了较小的和可调的有效肖特基势垒高度, 进而可以在合适的门压调控下达到欧姆接触。针对实验上观察到的相接触晶体管出现较小的接触电阻, 我们的研究给出了合理的解释, 我们的分析和讨论对未来的实验有指导意义。

Z-P06

Mo-Ni-W 三元系相图测定及热力学计算

汤梅芳, 王仕民, 李晗, 杜勇
中南大学粉末冶金国家重点实验室

Ti(C,N)基金属陶瓷是一种重要的工业用合金,其中 Mo-Ni-W 作为金属陶瓷的一个子体系有着广泛应用。这种金属陶瓷通常用 Ni 作为粘结相,加入一定量 Mo 和 W 的碳化物可以强化粘结相进而提高金属陶瓷的整体性能。因此对该三元系进行热力学研究对于开发新型金属陶瓷材料有着重要的意义。本工作采用平衡合金法和 CALPHAD (Calcalton of Phase Diagram) 技术,对 Mo-Ni-W 三元系的相关关系进行了实验测定和热力学计算。主要研究工作如下:(1)使用电弧熔炼制备了不同成分的合金样品,并于 900°C 进行均匀化退火处理,后通过 X-射线衍射分析和电子探针显微分析测定了晶体结构与相成分,最终实验测定了 Mo-Ni-W 三元系 900°C 等温截面。该等温截面中存在三个三相区: bcc+MoNi+MoNi₃, (Mo,W)Ni₄+MoNi+MoNi₃ 和 bcc+NiW+(Mo,W)Ni₄。(2)通过分析铸态样品的凝固组织,测定了 Mo-Ni-W 三元系的液相面投影图,该投影图中只存在一个零变量反应: L=fcc+bcc+MoNi。(3)基于已有的热力学性质和相图的实验数据,结合 Mo-Ni、Mo-W 和 Ni-W 三个二元系的热力学参数,利用 CALPHAD 技术,对 Mo-Ni-W 三元系进行了热力学优化,获得了一套能自洽地描述其热力学性质和相关关系的模型参数。本研究工作中获得的 Mo-Ni-W 三元体系的相平衡实验结果以及优化获得的热力学模型参数,能为 Ti (C,N) 基金属陶瓷的设计与开发及性能的研究提供一定的理论参考。

Z-P07

同心双环 B₁₉⁻平面团簇: 内层(6σ + 2π) 和外层 (14σ + 10π) 四重芳香性

李蕊, 翟华金

山西大学分子科学研究所

具有同心双环结构的 C_{2v} B₁₉⁻团簇被视为具有芳香性的分子尺度汪克尔引擎。然而,到目前为止 B₁₉⁻团簇的动力学流变行为在分子轨道和成键层面的机理尚未得到明确解释。我们通过正则分子轨道和适应性自然密度划分 (AdNDP) 等方法进行了深入的成键分析,并辅以自然键轨道分析和轨道成分计算。结果显示,内环有三个离域 σ 轨道和一个离域 π 轨道,外环有七个离域 σ 轨道和五个离域 π 轨道,其 σ 和 π 电子计数均符合芳香性(4n + 2)休克尔规则。以上成键分析表明 B₁₉⁻团簇具有独特的四重同心芳香性,可以充分解释该团簇的动力学结构流变性。本成键图像与文献中现有结果有显著差别。

Z-P08

三元 CBe₅H₄⁺团簇: 平面五配位碳 17 电子体系

冯林雁¹, 郭谨昌^{1,2}, 翟华金¹

1.山西大学分子科学研究所

2.忻州师范学院

自从上世纪 70 年代 Hoffmann 提出平面四配位碳概念之后,化学研究者开始探索稳定平面四配位碳结构的策略,并将平面四配位碳化学拓展到平面高配位碳化学,尤以平面五配位碳研究工作居多。本课题基于平面五配位碳的成功实例 CAI₅⁺团簇,利用元素周期表中 Al 与 Be 的斜对角关系和 Al/BeH 等电子特性,设计 17 电子平面五配位碳 CBe₅H₄⁺团簇。该团簇是通过 Be₅ 环和外围桥氢键来稳定中间的五配位碳,形成类星形结构。采用全局结构搜索,发现具有 C_{2v} 对称性的平面五配位类星形结构是势能面上的全局极小。在 CCSD(T)单点水平下该结构比四面体构型的低能量异构体低 54 kcal/mol。我们并在 B3LYP/def2-TZVP 水平下对 18 电子中性异构体 CBe₅H₄ 进行优化。势能面分析表明四面体构型是中性全局极小。因此,17 电子和 18 电子体系的结构和稳定性有很大差别,18 电子计数并不足以使团簇结构保持平面性。那么平面五配位和四面体这两种异构体在竞争时,是什么因素起了主导作用?基于分子轨道分析表明 C-Be-Be-H σ 共轭在稳定四面体结构中扮演关键角色。四面体结构相当高的电离势也反映中性团簇的特殊稳定性,其阳离子稳定性则显著降低。后者决定平面结构阳离子 17 电子体系的稳定性。

Z-P09

Point defects in group III-nitrides by first-principles calculation

高寅露, 孙丹, 赵纪军

大连理工大学

本文基于密度泛函理论 (DFT) 研究了 III-V 族氮化物 (GaN, AlN, InN) 中的本征点缺陷。针对中性以及不同带电的点缺陷体系,我们着重研究了其结构变化、形成能、电子性质以及点缺陷的迁移性质,同时,给出了不同电子态的电离势。氮化物有着较宽的带隙,无论是 n 型还是 p 型掺杂,本征缺陷的自补偿效应极大地降低了氮化物的掺杂效率。本文的结果表明在 p 型氮化物半导体材料中, N 空位有着较低的形成能,作为浅受主的补偿中心,引入了施主能级,而在 n 型氮化物半导体

中，阳离子空位更加稳定。N 的间隙缺陷最终都形成 N-N 的劈裂结构，在 InN 中，N-N 键长只比 N₂ 分子中大 1.8 %。不同的阳离子间隙呈现出不同的结构特点。同时我们也对比研究了中性空位及间隙缺陷的迁移性质，在纤锌矿结构的氮化物中，我们认为平行于 c 轴以及垂直于 c 轴的迁移路径是等价的。我们的计算结果表明，氮空位的迁移势垒高达 3.37 eV，因此我们认为在低温下，N 空位的迁移率很低。与 N 空位相比，间隙需要克服的势垒要小得多，在 AlN 中迁移势垒仅为 1.24 eV。

Z-P10

单层碲烯金属接触

严嘉欢，张修营，吕劲

北京大学

由于二维原子层厚度的半导体优异的门控性和表面无悬挂键等优点，使得二维材料在下一代电子器件中成为非常有竞争力的沟道材料。碲烯，实验上可获得的 VI 族二维碲元素，凭借其半导体器件大的开关比，高的载流子迁移率和明显的空气稳定性，已经吸引了广泛的注意。我们首次用第一性电子结构计算和量子输运模拟系统地研究了单层碲烯场效应晶体管（以一系列常见的体金属和二维石墨烯做电极）的界面特性。我们的实验给出，当碲烯晶体管沿 a 方向传输时，以钪和金做电极，形成 n 型肖特基势垒，以铜、镍、银、铂和钨做电极时，形成 p 型肖特基势垒；当沿 b 方向传输时，以钪做电极，形成 n 型肖特基势垒，以金、铜、镍、银、铂和钨做电极时，形成 p 型肖特基势垒。费米钉扎因子分别是 0.15（a 方向）和 0.09（b 方向）。值得注意的是，以石墨烯做电极时，两个方向都形成 p 型欧姆接触。我们的研究对单层碲烯器件的界面特性提供了深刻地分析并对单层碲烯器件电极地选择给出了很好的参考。

Z-P11

CO 分子在 Fe(100) 的独特键合机制

李佶彪

长江师范学院

从高到低的覆盖度下，CO 分子都可以以极度倾斜的方式吸附于 Fe(100) 表面，这种吸附构型被认为是 Fe(100) 面天然地俘获的 CO 解离的前驱态，在有关 CO 断键的催化反应中具有重要的意义。在本墙报中，我们将通过电子的三个属性，即电荷、自旋、轨道视角给这一独特构型提供一个完整的分子键合图像。从自旋和轨道的视角看，这种前驱态以反铁磁耦合的方式与金属表面发生键合作用，突出地表现为自旋向下的 2p 轨道磁性。有趣的是两个 1p 轨道则有不同的命运：位于垂直平面内的 1p 轨道丧失了轨道对称性，而另一个 1p 轨道仍然保持了其分子特性。鉴于部分 1p 键打开，垂直平面内的 1p 轨道支持 1p \rightarrow 2p* 机制，而另一个 1p 轨道则没有明显的 1p \rightarrow 2p* 激发。从电荷的视角看，局部 ¹Fe^C-C-O 构型支持一个特别的电荷转移机制：表面金属电子转移到了分子上，同时与碳原子直接键合的金属原子也成了电子受体，然而局部 ¹Fe^C-C-O 构型下面的金属原子电荷都显著地被消耗了。无论是金属侧还是分子侧，s 电子都可以成为轨道排斥和离域性的一个很好的判据。有趣的是分子中的碳原子和氧原子表现出完全相反的电子相互作用倾向：碳原子一端表现为吸引作用而氧原子一段表现为排斥作用。

Z-P12

Tunable negative permittivity and magnetic performance of yttrium iron garnet/polypyrrole metacomposites at the RF frequency

Chuanbing Cheng*, Runhua Fan, Zidong Zhang

Shandong University

Polypyrrole (PPy) composites incorporating yttrium iron garnet (YIG) particles were prepared by an in-situ oxidative polymerization method. The effects of YIG particle loading level on the radio-frequency (RF) electromagnetic properties of the YIG/PPy composites were systematically investigated. A negative permittivity behavior combined with metal-like conduction was observed in the composites, which is due to the low frequency plasmonic state of free electrons in the formative conducting PPy networks. Drude model was used to give a good description of the dielectric response. As YIG loading increases, plasma frequency, at which the permittivity changed from negative to positive, shifted to a lower frequency, and the magnitude of negative permittivity also become smaller. In addition, the permeability of the composites shown a relaxation-type frequency dispersion, which was attributed to the combined effect of magnetic resonance of YIG particles and diamagnetic response of PPy conducting networks. The work paved the way for exploiting regulation mechanism of negative permittivity, benefiting the practical application of polymer metamaterials.

Z-P13

GaN(0001)表面水吸附的第一性原理研究

李仕琪, 赵纪军

辽宁省大连市大连理工大学物理学院

我们采用第一性原理密度泛函理论研究了两种终端的 GaN (0001) 面水吸附的结构, 得出了水覆盖度从 1/16ML 到 11/16ML 的稳定吸附构型, 计算了吸附能, 水分子最稳定吸附位为 Ga 顶位。对两种面的结果进行了比较。结合第一性原理热力学, 计算出相图, 确定不同覆盖度下最稳定水吸附相, 揭示半导体材料表面受水分子化学势的影响。通过对比吸附前后表面功函数, 能带等电子性质, 得出水吸附对 GaN(0001)面电子性质的影响。

我们的计算给出了水在这种半导体表面的吸附图像, 在相关的纳米工程中有重要应用。这些吸附模型也将固体界面原子尺度上的性质和实验观测到宏观现象联系起来。

Z-P14

静电悬浮液滴振荡形态研究与传热过程分析

李明星, 邹鹏飞, 蔡晓, 王海鹏

西北工业大学理学院

静电悬浮是开展材料无容器处理的重要途径, 静电场中液态金属悬浮行为与材料属性的相关性是其中重要的研究内容。本文通过静电悬浮实验结合数值模拟技术对液滴振荡行为进行了系统研究。

通过静电悬浮实验获取 Zr 液滴的二阶、三阶振荡, 对液滴的振荡形态进行拟合, 发现液滴瞬态偏差幅度呈正弦函数变化。建立了静电场与流场耦合作用的液滴振荡模型, 对液滴的 2~5 阶振荡进行系统分析。归纳出悬浮液滴的振荡频率与液滴半径、表面张力和密度之间的关系, 数值模拟与理论分析、实验结果十分吻合。金属液滴的悬浮稳定性是实验成功的关键因素, 根据平衡态液滴的形变量与液滴密度、表面张力之间的关系, 定义与液滴密度、表面张力相关的无量纲形变因子。以此量化悬浮金属液滴的悬浮稳定性, 并与模拟结果相互验证。针对实验中悬浮液滴内部温度场难以测量的不足, 采用有限体积数值方法计算了静电悬浮条件下轴对称形态的金属液滴的传热过程, 获得合金液滴内部的温度分布、温度梯度及冷却速率等传热信息。

Z-P15

稀磁单层中的巨挠曲磁电效应

沈宇皓, 宋俞茜, 童文旖, 沈心蔚, 龚士静, 段纯刚

华东师范大学

植根于自旋自由度的自旋电子学具有理论和技术两方面的重要性。关于电控制这种自由度的一些奇异特性的发展激励着努力对具有对电场敏感的磁响应的磁性体系的研究。在这里, 我们预测一个典型的稀磁单原子 Mn 掺杂 MoS₂ 中的巨挠曲磁电效应。结合晶格弯曲和磁性掺杂, 通过第一性原理计算表明, 在外加电场下, 磁响应和磁各向异性可以被大大放大。进一步的研究发现这种效应源于单个磁性杂质原子其依赖于轨道的响应。物理上, 电诱导的轨道极化引起了 Mn-3d 轨道波函数空间分布的变化, 这对于其在弯曲晶格中的轨道杂化的变化是敏感的。因此, 可以通过外部电场控制相应的 3d 能级在费米能级附近移动。我们的研究结果为柔性器件的功能二维材料设计开辟了一条新途径。

Z-P16

Co-Ti 二元体系的实验测定和热力学计算

吴立颖¹, 潘亚飞², 曾银平¹, 李晗¹, 杜勇¹

1.中南大学粉末冶金国家重点实验室

2.合肥工业大学

本工作从实验测定和热力学计算对 Co-Ti 二元体系进行了研究。为了研究该体系中的相关关系, 通过真空电弧熔炼制备了 15 个关键合金。合金在 1000 °C 退火 30 天后通过 X 射线衍射 (XRD) 和电子探针 (EPMA) 进行物相和成分分析, 检测到所有化合物。通过差示扫描量热法 (DSC) 方法测定了富钛端的液相线与固相线和整个成分范围内的零变量反应温度, 结果表明, 在 1170 °C ± 10 °C 发生了共晶反应 $L + TiCo_3 = C36(Co_{2+x}Ti_{1-x})$ 。用热力学模型表示出体系中的每个物相的吉布斯自由能。根据评估的 Co-Ti 体系实验数据和本工作所得到的实验结果, 利用 Thermo-Calc 软件对 Co-Ti 二元体系进行热力学优化, 获得了一套自洽的热力学参数。通过比较计算结果与实验数据, 可看出本工作得到的热力学参数可以很好地描述实验结果。

Z-P17

水分子在 Ni(001)金属表面的润湿行为

杨鑫

清华大学深圳研究生院

水分子与金属表面的相互作用在电催化, 金属腐蚀行为及生命科学中都扮演了非常重要的角色, 这使它在几十年来受到了广泛的研究。水与金属界面的研究一直以来都伴随着表面探测技术的发展而同步发展, 在这些表面探测技术中, 密度泛函理论计算的应用极大地促进了这一领域的研究。在 Ru(0001)面上的双水层模型是最先提出的水分子在金属表面的润湿模型, 在这一模型中两种不同高度的水分子组成了规则的氢键网络。双水层模型同时还被认为是其他金属密排面(面心立方金属(111)面和密排六方金属(0001)面)上的稳定结构。尽管已经有了许多水在密排金属表面上的润湿行为研究, 在开放表面如面心立方(001)面和(110)面上的研究依然较少。通过第一性原理计算, 我们系统研究了水在面心立方金属 Ni(001)面上的润湿行为, 我们发现了一种新的蜂巢型氢键网络水层模型可以润湿整个金属 Ni(001)表面。金属表面水层的声子色散关系以及较低的形成能都证明了这一结构的热力学稳定性。从能量的角度看, 水分子之间氢键及水与金属的相互作用都有效降低了水层的形成能; 从动力学的角度看, 水分子在 001 表面上极低的迁移势垒保证了水分子团簇和水链可以迅速聚集成水层。电子结构计算表明, 相较 Ni(001)表面上的单个水分子, 水层中 1/4 的水分子 $1b_1$ 轨道升高, 其他 3/4 降低, 从而导致 1/4 水分子与金属表面的作用加强, 其他水分子被削弱, 以此组成了一个致密的氢键网络。Cu(001)表面的计算表明, 这一水层同时还可能在 Cu(001)上存在。

Z-P18

Failure assessment of nuclear graphite component in TMSR

Yantao Gao*, Derek Tsang

Shanghai institute of applied physics, Chinese Academy of Sciences

Aim: Molten salt reactor (MSR) is considered as one of the Generation IV nuclear power systems due to its intrinsic security characteristics. In thorium molten salt reactor nuclear energy system (TMSR), graphite is designed as a structural and neutron-moderator material. Super fine-grained graphite (such as T220 manufactured in Sinosteel AMC, NG-CT-50 manufactured in FangDa Carbon New Material Co., Ltd) is supposed to be used to prevent molten salt infiltration. As graphite is a kind of brittle material, the failure assessment of nuclear graphite components is significantly important. Probabilistic failure analysis is widely used to assess nuclear graphite components. Recently, M. P. Hindley has developed a approach for predicting failure in NBG-18 nuclear graphite components in a nuclear core design for Pebble Bed Modular Reactor. For super fine-grained graphite in TMSR, the maximum grain size is about 20 micrometers and the fracture toughness (KIC) is about $0.98 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$. The existing assessment methodology of nuclear graphite is not available. An improved method should be developed to perform failure analysis of graphite components in TMSR.

Method: A modified assessment approach based on ASME BPVC-III-5_2017 will be presented. The new approach takes a new parameter, KIC, into account and abandon the parameter, grain size, which is not unrealistic for super fine-grained graphite as the amount of computer is enormous if we use conventional method.

Result: The developed code has been verified and can be used as design and failure assessment of super fine-grained graphite components in TMSR.

Z-P19

Pressure-driven structural evolution of YB₆ under high pressure

Jiayun Wang, Quan Li, Yanming Ma

Jilin University

The superconductor yttrium hexa-boride (YB₆) has the highest critical temperature (T_c) among the MB₆ family, but it was predicted to drop at high pressure with phonon model imaginary. Here, we have systematically performed in first-principles calculations to explore the phase transitional behavior of YB₆ at pressure ranging from 0 to 60 GPa by CALYPSO method. Beyond the stability field of the synthesized CsCl type $Pm\bar{3}m$ phase, two novel phases with space groups $Cmcm$ and $I4/mmm$ are identified as ground states under high pressure. Our theoretical calculations show that both new phases are metallic from their energy band structures.

Further electron-phonon coupling analyses indicate they are superconductivity with the superconducting critical temperature about 2.0 K and 3.7 K for $Cmcm$ and $I4/mmm$ under their stable pressure range, respectively.

Z-P20

Ti 基合金体系扩散动力学数据库的建立

魏振帮¹, 卢勇¹, 杨水源¹, 韩佳甲¹, 王翠萍¹, 刘兴军^{2,1}

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. 哈尔滨工业大学(深圳)材料科学与工程学院

Ti 基合金具有高强度、低密度等特性, 使其在航空航天、船舶、汽车工业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。尤其在 Ti 合金凝固, 固态相变等过程的研究中, 反映扩散行为的动力学数据是必不可少的重要参数。由于 Ti 合金极易氧化, 扩散偶制备难度较大, 导致了 Ti 基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 Ti 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 Den-Broeder 法与 Boltzmann-Matano 法^[3]分别计算获得了 Ti 基二元及三元系合金的互扩散系数。同时, 利用 CALPHAD 方法, 对 Ti, Al, V, Co, Mo, Nb, Ni 等元素所组成的部分二元及三元系中 BCC 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, 初步建立了 Ti 基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, 为计算模拟 Ti 基合金的凝固、析出、长大等过程提供理论基础。

Z-P21

氢在锆中溶解和扩散行为的第一原理研究

王子祺, 李宇浩, 李中柱, 周洪波, 吕广宏
北京航空航天大学

锆(Zr)及锆合金已被广泛用作核裂变堆的燃料包壳材料和结构材料。但在核反应堆工况条件下, Zr 合金会吸收大量氢(H), 导致严重的 H 致脆性问题。Zr 本身具有极强的吸 H 能力, 由于 H 在 Zr 合金中固溶度非常有限, 一旦 H 浓度超过固溶度就会形成脆性氢化物 ZrH_x ($1.5 < x < 1.66$) 并沉淀析出, 进而破坏晶粒完整性, 产生微裂纹或体积增大, 严重影响材料的力学性能和服役寿命。因此, Zr 合金的 H 脆问题一直是制约其长时间服役的瓶颈问题之一。

我们采用第一原理计算与热力学模型相结合的方法, 系统研究了本征 Zr (α -Zr) 中 H 的溶解、扩散行为及其与空位的相互作用。结果表明, H 在本征 Zr 中最稳定占位为四面体间隙位置(TE), 对应的溶解能为 -0.45 eV。如此低的溶解能表明 H 极易溶解在本征 Zr 中。此外, H 在 TE 间的扩散路径可以分为两类, 即 $TE \rightarrow BT \rightarrow TE$ 和 $TE \rightarrow OC \rightarrow TE$, 其扩散能垒分别为 0.12 eV 和 0.42 eV。需要指出的是, 虽然第一条扩散路径的能垒更低, 但由于此时 H 被两个最近邻的 TE 所捕获(即 H 只能在两个 TE 间来回扩散), 其对 H 在 Zr 中的扩散系数贡献极小。因此, H 在本征 Zr 中的有效扩散能垒为 0.42 eV, 与实验结果基本一致。更重要的是, H 在 Zr 空位中的溶解能(-0.66 eV)略低于其在本征 Zr 中的溶解能, 说明空位能够捕获 Zr 中游离的 H 原子。捕陷能计算结果表明单空位至多能够容纳 8 个 H 原子。通过 Polanyi-Wigner 方程, 我们进一步计算了不同升温速率下 H 在 Zr 单空位中的最大脱附温度。结果显示, 在室温下(300 K)单空位所捕获的所有 H 原子都将脱附, 即 H 难以在 Zr 缺陷处聚集。

Z-P22

高铝玻璃微观结构的第一性原理研究

钱怡潇¹, 宋斌², 龚海明¹, 赵高凌¹, 韩高荣¹

1. 浙江大学材料科学与工程学院
2. 浙江大学物理学系

高铝硅酸盐玻璃具有良好的机械性能、热稳定性、热膨胀系数, 被广泛地应用于电子触摸屏领域。基于第一性原理的分子动力学模拟是研究材料组分、结构与性能之间关系的有效手段之一。为探究微观结构对高铝硅酸盐玻璃性能的影响, 本文采用第一性原理的计算方法, 选取 $SiO_2-Al_2O_3-B_2O_3-Na_2O-MgO$ 玻璃体系, 模拟玻璃熔体急速冷却的过程。模拟统计了高铝硅酸盐玻璃的 Si-O 键键长为 0.163 nm, Al-O 键键长为 0.175 nm, B-O 键键长为 0.1395 nm, 与实验值拟合较好。键角研究表明 O-Si-O 键角为 108.5 度, O-Al-O 键角为 105.5 度, O-B-O 键角为 118.5 度, 与实验值拟合较好; Si-O-Si 峰值强度最大, Si-O-Al

强度较大, Si-O-B 强度最低, $[\text{SiO}_4]$ 和 $[\text{AlO}_4]$ 组成了无规则的玻璃骨架, 使得玻璃的强度增大, 而三配位的硼呈平面结构, 周围有较大的空隙, 使得玻璃具有一定的韧性; 并且发现, $[\text{AlO}_4]$ 结构之间出现共棱现象。桥氧数目越多表示玻璃结构越稳定, 玻璃网络结构可用 Q^n 表征, 代表每个四面体有几个桥氧, 模拟结果表明: 高铝硅酸盐玻璃体系中, 以 Q^3 , Q^4 为主, 结构较为稳定。

Z-P23

FCC 金属银中两种 FL 交滑移机制的竞争

李克强^{1,2}, 张振军¹, 闫婧欣^{1,2}, 杨金波^{1,2}, 张哲峰^{1,2}

- 1.中国科学院金属研究所
- 2.中国科学技术大学

FCC 金属的交滑移行为在其变形过程中具有十分重要的作用。比如说, FCC 金属单晶体加工硬化第二阶段的动态回复, 弥散强化中位错绕过第二相粒子以及疲劳中驻留滑移带和位错胞的产生等等。通常认为, FCC 金属的交滑移机制主要有两种, 一种是两根分位错束集在一起, 称为 FE 机制; 还有一种是借助位错反应完成交滑移过程, 称为 FL 机制, 其中根据交滑移面与原滑移面的关系又可细分为锐角机制和钝角机制。前人的研究结果表明由于锐角机制所需的激活能较低, 所以 FL 交滑移主要通过锐角的形式发生, 然而也有实验结果证实了钝角机制的存在。然而到目前为止, 并没有一套详细的理论解释这一现象。因此, 本研究主要针对 FL 机制通过分子动力学模拟手段和位错弹性理论在 FCC 金属银中进行了初步的探索。模拟结果表明: 在交滑移即将发生时, 根据原滑移面上两根分位错的间距不同, 会产生钝角和锐角两种机制的竞争。具体来说, 当两分位错的间距较大时, 位错之间的交互作用较弱, 此时锐角机制对应的激活能远低于钝角机制的激活能; 然而随着两分位错间距的减小, 位错之间的交互作用增强, 对应锐角机制的激活能增加, 而钝角机制的激活能降低, 最终导致钝角机制的发生。同时我们根据位错弹性理论建立了相关的理论模型, 很好地解释了模拟的结果。而在前人理论的研究中却忽略了上述位错之间的交互作用, 因此未能全面地解释 FL 交滑移机制。因此我们在考虑 FL 交滑移机制时, 应该全面考虑位错之间的交互作用。

Z-P24

Re-Cr-X(X: Ru, Mo)各三元系相图的实验研究与热力学计算

李玲玲¹, 刘虎¹, 罗辉¹, 杨水源¹, 张锦彬¹, 黄艺雄¹, 王翠萍¹, 刘兴军^{2,1}

- 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.哈尔滨工业大学(深圳)材料科学与工程学院

随着航空工业的不断发展, 对 Ni 基高温合金的性能提出了更严格的要求。合金化是提高 Ni 基高温合金综合性能的重要途径, 其中 Cr、Mo、Re、Ru 等是常用的合金化元素。Re 元素的添加是第二代和第三代 Ni 基单晶高温合金的一个最突出的特征。Re 元素能显著提高单晶涡轮叶片的高温蠕变强度, 但过量 Re 极易产生 TCP 脆性相危害合金的高温性能。含 Re 的 Ni 基多元合金的相平衡信息对 Ni 基高温合金的开发具有重要的指导意义, 然而 Re-Cr-X(X: Ru, Mo)各三元系相图尚未见研究报导。本研究开展 Re-Cr-X(X: Ru, Mo)各三元系相图的实验研究和热力学计算, 为 Ni 基高温合金热力学数据库的建立提供基础理论信息。

本研究采用合金法, 通过显微组织观察、电子探针成分分析和 X 射线衍射分析等技术对 Re-Cr-X(X: Ru, Mo)的相图进行了实验测定, 从而绘制了 Re-Cr-X(X: Ru, Mo)在 1100 °C 和 1200 °C 时的等温截面相图。实验结果表明, 在 1100 °C 和 1200 °C 等温截面相图中, 化合物相 Cr_2Re_3 、 Cr_2Ru 、 Mo_2Re_3 均具有较大的固溶度, 并且在全成分范围内未发现三元化合物相。本研究进一步利用 CALPHAD 方法并结合上述实验结果, 对 Re-Cr-X(X: Ru, Mo)各三元系的相图进行了热力学计算, 计算结果和实验数据取得了良好的一致性。

Z-P25

基于机器学习的固态电解质筛选

刘芬芬¹, 朱焱麟¹, 张晓琨¹, 刘蕊蕊², 向勇¹

- 1.电子科技大学

固态电解质具有安全性好、有效抑制锂枝晶、可与金属锂负极搭配等优点, 是下一代锂电池关键组成部分。目前, 其商业化使用仍然存在许多技术瓶颈, 其中最重要的一点是其离子电导率低于传统电解液。同时, 传统的固态电解质材料研发主要基于经验与实验相结合的“试错法”, 研究周期长, 结果存在一定偶然性。针对上述情况, 本文提出一种将机器学习用于固

态电解质材料筛选的新方法。首先，我们收集了已发表的实验数据以及诸如 Materials Project 等网络数据库计算的含锂材料化学式、形成能、氧化分解电压、能带结构、原子坐标等数据，并以此为基础建立了材料数据库；其次，通过分析上述数据，筛选出稳定性好、电子电导率低、电化学窗口宽的备选材料；再次，获取已发表的、具有较高离子电导率固态电解质材料构效关系，采用逻辑回归算法建立了材料离子电导率筛选模型；最终，我们筛选出一系列具备结构稳定、电子电导率小于 4.0×10^{-6} S/cm、工作电压大于 4 V、室温离子电导率大于 10^{-4} S/cm 等性能的固态电解质备选材料。

Z-P26

体心立方金属中六边形位错网的屈服准则

夏子雅^{1,2}, 张振军¹, 闫婧欣^{1,2}, 杨金波^{1,2}, 张哲峰^{1,2}

- 1.中国科学院金属研究所
- 2.中国科学技术大学材料科学与工程学院

反常滑移一直被视为体心立方金属低温变形的一个典型特征。然而，人们一直无法很好地理解这一反常现象。TEM 观察发现，反常滑移面上总是出现六边形位错网（HDN）结构。很显然，找到一个能够描述这种六边形位错网一般屈服行为的准则，对于更好地理解反常滑移具有重要意义。本工作通过原子模拟的方法首次提出了体心立方金属钼中六边形位错网的椭圆屈服准则。该屈服准则包含丰富的内容，如滑移区分区，六边形位错网运动的原则以及同一屈服点在完全屈服与不完全屈服状态的转变。其中六边形位错网的运动原则很好地解释了反常滑移迹线上没有固定的“dead band”这一现象。

Z-P27

决定晶体中位错结构与 Burgers vector 的基本准则

闫婧欣^{1,2}, 张振军¹, 李克强^{1,2}, 夏子雅^{1,2}, 杨金波^{1,2}, 张哲峰^{1,2}

- 1.中国科学院金属研究所
- 2.中国科学技术大学材料科学与工程学院

自位错的概念提出以来，前人开展了大量透射电镜和原子模拟试验，发现位错核结构和 Burgers vector 控制着位错的滑移与增殖行为，并主导了晶体的塑性变形。因此，位错核结构与 Burgers vector 的研究已成为探究塑性变形机制的切入点。目前，广泛被接受的确定位错核结构与 Burgers vector 理论有两种：一是根据经典硬球模型，认为晶格对称性是决定位错结构最重要的因素，因而 Burgers vector 具有晶格平移矢量的形式；二是基于晶格周期性，Peierls 提出了晶体势能函数，Burgers vector 可表示为连接晶体势极小值点间的矢量，随后 Vitek 发展了二元晶体势，即 γ -surface，位错的 Burgers vector 也被广泛确定为连接 γ -surface 极小值点间的矢量。本研究利用几种 Fe-Al 势，应用分子动力学方法研究了 B2-FeAl 中 [111]位错的核结构和分位错的 Burgers vector。基于晶格对称性，[111]位错应为两重结构，即两个[111]/2 位错与中间的反相畴界区； γ -surface 计算结果表明，[111]位错具有三重结构特征，按照 $\mathbf{b}=\mathbf{b}_1+\mathbf{b}_2+\mathbf{b}_3$ 分解成三个分位错及两片层错，分位错的 Burgers vector 对应于连接 γ -surface 极小值点的三个矢量。然而原子模拟结果表明，对于不同势函数，[111]位错弛豫后既可表现为三重结构，又可能具有两重结构特征，且位错的 Burgers vector 会发生连续变化，这就标志着判定位错结构与 Burgers vector 的两种经典理论的失效。基于此，我们提出了定量测定位错结构与 Burgers vector 的统一准则（EM 准则），即通过体系能量最小化确定位错的 Burgers vector。相关计算表明，由体系能量最小化所确定的位错核结构和 Burgers vector 与原子模拟的结果完全一致，并且该准则能很好地预测和解释原子模拟中 B2-FeAl 位错核结构与 Burgers vector 连续转化的现象，这也证明了体系能量优化在判定 Burgers vector 中的决定性作用。此外，我们发现 EM 准则还适用于其他 B2 合金、FCC 和 L1₂ 合金中位错结构的定量研究。进一步的模拟结果表明，位错结构的连续转化对其运动行为，特别是交滑移行为具有重要影响，还可能改变位错在裂纹尖端的形核激活能，且对 B2 合金的脆性断裂行为也有重要影响。

Z-P28

Effect of temperature on electronic properties of NiO: Insights from a many-body method

Rusong Li*, Shi-qi Huang, Du-qiang Xin, Jin-tao Wang, Zhi-jian Wang
Xijing University

We perform a first principle calculation for temperature effect on electronic properties of NiO using a many-body method combining local density approximation (LDA) with dynamical mean field theory (LDA+DMFT method). Band gap and density of states (DOS) are in good agreement with XPS+BIS experimental value and other theoretical result. Calculated hybridization functions

indicate that Ni $d-e_g$ state strongly hybrid with O p state at $T=116\text{K}$. In order to compare with experimental angle-resolved photoemission spectrum (ARPES), we also calculate momentum-resolved electronic spectrum function, implying that obvious electronic excitation mainly results from Ni $d-t_{2g}$ states at temperature $T=232\text{K}$, spectrum functions between -0.5eV and 0.0eV are almost symmetric about P and Γ point, respectively. Finally, we analyze temperature effect on electronic properties of NiO at temperatures $T=58\text{K}$, 116K , 145K , 232K and 464K , not only Ni $d-e_g$, $d-t_{2g}$ states, but also five d components. Results show that temperature changes mainly affect valence states of DOS and hybridization function, in particular high-lying states close to Fermi level, and also obviously alter electronic excitation distribution and spectrum shape in electronic spectrum function.

Z-P29

层状金属碳化物制备机理与半导体性能的理论研究

查显弧, 周洁, 黄庆, 都时禹

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

二维层状金属碳化物 MXene 材料由于其丰富的化学元素和优异的物理性能, 近几年获得越来越多的关注, 在储能、电磁屏蔽、核素吸附、催化、生物显影等多个领域展现出应用前景。迄今为止, 大部分 MXene 结构都是通过选择性刻蚀含铝的 $M_{n+1}AX_n$ 相获得 (其中 M 指过渡族金属, A 指 A 族元素, X 指碳或氮, n 为自然数, 常取值为 1 到 3)。在本报告中, 我们提出了一种制备 MXene 材料的新方法: 通过选择性刻蚀一类新型的 $(MC)_n(Al_3C_2)_m$ 或 $(MC)_n\{[Al(A)]_4C_3\}_m$ 三元或四元碳化物获得。基于此方法, 实验上成功合成了 $Zr_3C_2T_x$, $Hf_3C_2T_x$ 和 $ScCOH$ 三种新型 MXene 结构, 在理论上对其实验制备机理以及 MXene 本征结构、电学和力学性能进行了探讨。此外, 在本报告中, 理论上考察了 MXene 材料在半导体器件方面的应用。研究表明, 五种 MXene 结构 $Sc_2CT_2(T=F, OH)$, $M_2CO_2(M=Ti, Zr, Hf)$ 具有适中的半导体能带带隙。因此, 我们进一步考察了这些材料作为半导体器件应用的关键性能载流子迁移率和热导。结果表明, $Sc_2CT_2(T=F, OH)$ 都呈现出优异的电子迁移率和导热性能。室温下 Sc_2CF_2 锯齿型方向的电子迁移率高达 $5.03 \times 10^3\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, 而其扶手椅型方向上的室温晶格热导甚至高于传统金属良导体银的热导, 高达 $472\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ 。对于 $M_2CO_2(M=Ti, Zr, Hf)$ 体系, 三种结构都呈现出超高的空穴迁移率, 数值高达 $10^4\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ 量级。以上研究的半导体型 MXene 都有望应用于半导体电子器件材料。此外, 在 $Sc_2C(OH)_2$ 和 Sc_2CO_2 两种结构的中间态中存在双极性磁性半导体体系, 可应用于自旋电子器件材料。

Z-P30

半金属 TiF_3 : 一种有潜力的锂离子自旋电池的负极材料

王君茹, 李峰, 杨博, 刘小标, 赵明文

山东大学中心校区物理学院

高表现的可充电的电池, 例如锂离子电池, 作为现代社会必不可少的一部分。许多材料被利用作为有潜力的负极材料, 到目前为止, 知道的负极材料都是没有磁性的, 也就是说没有电子自旋效应。自旋电池作为自旋电子器件重要组成部分, 因为其可以产生自旋电子流正引起人们极大地兴趣。在这儿, 我们对自旋电池提出了一种简单的策略, 通过在传统的锂离子电池中引进半金属的负极材料。半金属是一种在一个自旋方向表现为金属, 另一个自旋方向表现为绝缘体的材料, 它可以过滤电流成一个单一的自旋轨道, 因此是理想的电子自旋器件。利用第一性原理计算, 我们证明了一种有潜力的半金属负极材料, TiF_3 晶体, 它在锂离子插入后拥有稳定的铁磁性和半金属性。同时在 TiF_3 晶体中有低的锂离子扩散势垒 ($0.16-0.37\text{eV}$) 和中等容量 (256mA h g^{-1})。半金属和锂离子电池的结合为自旋电池提供了一个新途径。

Z-P31

Fractal Characterization of Relative Movement Modes in Simulated Friction and Wear Tests

Wei Jiang^{*1}, Cuicui Ji², Dandan Zhang¹, Huaxing Xiao¹, Yuntian Dai¹, Zhirong Huang¹

1.School of Mechanical and Automobile Engineering, Changzhou Institute of Technology

2.School of Mechanical and Electrical Engineering, Hohai University

The selection of the relative movement mode between the friction pairs in simulated friction and wear test is a crucial factor for the characterization and evaluation of metallic material properties. In this study, three kinds of commonly used metal materials (0Cr18Ni9 stainless steel, 2A12 aluminum alloy and HPb59-1 brass) were applied for the simulated friction and wear tests with four different modes of relative motion, including unidirectional, reciprocating, circular and multi-directional cross-shear (CS). The corresponding surface topography and statistical parameters such as surface roughness R_a were obtained by OLYMPUS super-depth microscope.

Based on the fractal theory, fractal parameters such as fractal dimension D , scale coefficient C and characteristic roughness Ra^* were calculated to characterize the surface topography and the results indicate that, although the relative motion modes between the friction pairs varies, the disparity of surface roughness Ra is not obvious. The fractal dimension D of the unidirectional and multi-directional CS simulated friction and wear tests is the minimum and maximum respectively, which reflects that the fractal dimension D is scale independent and can characterize the complexity of the surface morphology. The characteristic roughness Ra^* can characterize the surface topography more comprehensively and sensitively with the combination of fractal dimension D and scale coefficient C . This research will enrich the foundation of materials science and provide a theoretical basis for tribological design.

Z-P32

锂离子在层状硒化铟里的吸附与迁移

张修营¹, 李斯白², 李菁桢¹, 吕劲¹

1.北京大学物理学院

2.北京大学深圳研究生院

二维硒化铟由于其高电子迁移率而引起了广泛的关注。本研究中, 我们使用从头计算, 系统地研究了锂离子在层状硒化铟内部的吸收和扩散, 以探索硒化铟作为锂离子电池电极材料的可能性。首先, 我们发现锂离子吸附在块体和单层硒化铟上的结合能范围为 2.40 至 3.65 eV, 这足以说明锂化后的硒化铟结构的稳定性, 并且还保证锂离子电池的高速装载过程。其次, 硒化铟的结构不因锂原子的插入而发生很大结构变形, 最大的结晶尺寸变化仅为 3.7%。第三, 锂离子在块体硒化铟内部的扩散和单层硒化铟表面的扩散的扩散势垒分别为 0.02~0.06 eV 和 0.18~0.24 eV。因此, 以硒化铟做阳极的锂离子电池, 锂离子在电极中的扩散速度将是石墨烯阳极材料的 10^2 倍。所以说, 硒化铟做阳极的锂离子电池具有高速率容量。最后, 吸收锂离子之后, 硒化铟会从原来的半导体转化为金属, 使得硒化铟电极具有良好的导电性。所有这些优点以及观察到的高电子迁移率使得硒化铟可以成为理想的锂离子电池阳极材料。

Z-P33

How do FeSi mesoscopic crystal growth: a quasi-static process from first principle calculation

Huiyu Jiang*, Xuelei Tian, Xiaohang Lin

Shandong University

In order to investigate the behaviors of FeSi mesoscopic crystal in liquid state Al-Si alloy, we have performed a quasi-static growth process model of FeSi intermetallic compound from first-principles calculations. In this work, the low-index surfaces of FeSi are studied. The chemical potential of constituents is considered while we calculated the surface energy, in order to describe different environments. In this case, the shape of mesoscopic crystal changes with respect to the chemical potential. Based on the wulff construction, a quasi-static growth model is built to describe the transition state of growth processes.

Z-P34

First principles calculation of sensing mechanism of SnO₂/ZnO nanofibers as CH₃OH sensors

Wei Tang*, Xuejian Du

School of physics and electronics, Shandong Normal University

The possible sensing mechanisms of methanol on SnO₂/ZnO composite nanofibers were investigated by density functional theory in order to make the methanol adsorption and desorption process clear. Zn doped SnO₂ model was adopted to approximate the SnO₂/ZnO structure because of the calculation power limitations. Calculation results showed that when exposed to methanol, the methanol would react with bridge oxygen O_{2c}, planar oxygen O_{3c} and pre adsorbed oxygen vacancy on the lattice surface. The -CH₃ and -OH of methanol molecule would both lose one H atom. The lost H atoms bonded with oxygen at the adsorption sites. The final products were HCHO and H₂O. Electrons were transferred from methanol to the lattice surface to reduce the resistance of semiconductor gas sensitive materials, which is in agreement with the experimental phenomena. More adsorption models of other interfering gases, such as ethanol, formaldehyde and acetone will be built and calculated to explain the selectivity issue from the perspective of adsorption energy, transferred charge and density of states in the future work.

Z-P35

锡烯在铜(111)表面生长的理论研究

吴曦, 李佳
清华大学深圳研究生院

石墨烯的成功极大促进了第四主组二维材料的研究进程, 其中, 锡烯因为其卓越电子性质, 被预言为最有前景的拓扑材料之一。目前, 已有实验报道使用分子束外延方法成功在 Bi_2Te_3 上合成了单原子层锡烯结构。目前大部分有关锡烯的理论研究集中在其性质上, 缺乏有关其制备和生长机理的理论研究。本研究将使用密度泛函理论计算的方法来探索石墨烯生长常用基底 $\text{Cu}(111)$ 作为锡烯外延生长衬底的可能性, 以及锡烯在 $\text{Cu}(111)$ 表面的生长机理。在研究锡烯在 $\text{Cu}(111)$ 衬底上稳定结构的时候, 发现平面状的锡烯结构最稳定, 使用分子动力学模拟的方法获得了平面状的锡烯六元环结构, 从而证明平面状锡烯的稳定性。并且在分子动力学研究中, 我们发现了一个单原子层锡的亚稳四方相。在研究 $\text{Cu}(111)$ 表面稳定锡烯结构生长的时候, 发现金属锡原子和 $\text{Cu}(111)$ 衬底之间存在极强的相互作用, 因此 $\text{Cu}(111)$ 衬底上锡烯的边界能极低, 并且锡原子迁移势垒和锡烯边界生长势垒也较低, 说明锡烯在 $\text{Cu}(111)$ 衬底上生长速度较快, 但是生长锡烯结构较难剥离。根据计算的锡烯边界能, 通过 Wulff 熟化机理我们可知, $\text{Cu}(111)$ 衬底上锡烯最终能够形成由 zigzag 边界组成的标准六角形岛状结构。最终, 通过对比 Au、Ag、Cu 和 Ni 四种常见衬底, 我们发现 $\text{Cu}(111)$ 衬底比较适合通过外延生长获得六角锡烯结构。

Z-P36

High Performance Sub-10 nm Bilayer $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ Transistors

Jie Yang^{*1}, Ruge Quhe², Jing Lv¹

- 1.PKU
- 2.BUPT

Due to high carrier mobility and excellent air stability, two-dimensional (2D) semiconducting $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ is considered as a potential channel candidate for the next-generation field effect transistor (FETs). Though the fabricated bilayer (BL) and few layers $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ FETs exhibit a large current on/off ratio ($> 10^6$) and a near-ideal subthreshold swing value (~ 65 mV/dec), the performance limit of ultra-short-channel $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ FET is obscure. Here we simulate the ballistic performance upper limit of sub-10 nm BL $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ metal-oxide-semiconductor FETs (MOSFETs) for the first time by using *ab initio* quantum transport simulations. The optimized BL $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ *n*-type MOSFETs can fulfill the high performance requirements on on-state current, delay time and power dissipation of the International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) in 2028 until the gate length is scaled down to 5 nm. Therefore, Moore's law can be extended to 5 nm by utilizing BL $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ as the channel.

Z-P37

La-Sn 体系相图热力学研究

李晓静, 刘树红, 杜勇
中南大学

La 是稀土储氢合金中的主要稀土元素, 在稀土储氢合金中添加 Sn 元素, 可以显著提高合金的储氢性能, 因而研究 La-Sn 体系的相图热力学信息对于改善合金的储氢性能具有重要意义。文献中已有几个研究小组采用不同的模型对 La-Sn 体系进行了热力学优化, 但是在模型选择和热力学参数上仍有改进的必要性。本工作采用 CALPHAD 方法重新对 La-Sn 体系的相图热力学信息进行了严格评估。在此基础上, 分别采用置换溶液模型和缔合溶液模型来描述液相, 并考虑温度对热力学性质的影响, 重新获得了描述 La-Sn 体系的热力学参数。基于热力学参数计算的 La-Sn 体系相图及热力学性质, 能够合理地描述实验数据。

Z-P38

相场法研究 Ni-Al 间作用势对 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Cr}_{11}$ 合金 L_{10} 预析出相的影响

董卫平, 汪彬, 王琳琳, 宫宁宁
浙江师范大学

采用微观相场法研究了 $\text{Ni}_{75}\text{Al}_{14}\text{Cr}_{11}$ 合金第一个近邻到第四个近邻 Ni-Al 原子间相互作用势对 L_{10} 预析出相沉淀过程的影响。结果表明, 随着第三近邻 Ni-Al 原子间相互作用势的增大, L_{10} 预析出相和 L_{12} 最终相都将提前沉淀。随着第四近邻 Ni-Al 原子间相互作用势的增大, L_{10} 预析出相和 L_{12} 最终相都将会推迟沉淀。而相反的, L_{10} 预析出相和 L_{12} 最终相将会推迟析出如果第三近邻 Ni-Al 原子间相互作用势下降, 将会提前析出如果第四近邻 Ni-Al 原子间相互作用势下降。与上述两种情况

相比, 不管是增大还是减小原子间作用势, 第一近邻原子间相互作用势对 L_{10} 预析出相沉淀过程的影响都较小, 而第二近邻原子间相互作用势的影响最小。体积分数曲线的结果也表明, 第三近邻和第四近邻 Ni-Al 原子间相互作用势将极大的影响 L_{10} 预析出相、 L_{12} 沉淀相的析出时间和两种相的最终体积分数。相比其他近邻, 第三个近邻原子间相互作用势增大将会大幅促进 L_{10} 预析出相体积分数增大而降低 L_{12} 相的最终体积分数, 相反第三个近邻原子间相互作用势减小将会促进 L_{12} 相沉淀析出。

Z-P39

First-principles study of the structure of water layers on flat and stepped metal electrodes

Xiaohang Lin*

Shandong university

On the basis of periodic density functional theory (DFT) calculations, we have addressed the geometric structures and electronic properties of water layers on flat and stepped metal surfaces including Au/Ag/Pb surfaces. In contrast to late d-band metals, on Pb(111) the energy minimum structure does not correspond to an ice-like hexagonal arrangement at a coverage of 2/3, but rather to a distorted structure at a coverage of 1 due to the larger lattice constant of Pb. At stepped metal surfaces, the water layers are pinned at the step edge and form a complex network. The thermal stability of the water layers has been studied by using ab initio molecular dynamics simulations (AIMD) at a temperature of 140 K in order to compare with the experimental data of Ibach's research. Whereas the water layers on flat surfaces are already unstable at this temperature, the water layers on some stepped surfaces exhibit a higher stability because of stronger water-water interactions. The vibrational spectra of the water layers at the stepped surfaces show a characteristic splitting into three modes in the O-H stretch region, which show a good agreement with experimental data.

Z-P40

First-principles study for nanoparticle quasi-static growth model in FeAl intermetallic

Lin Song*

School of material science & engineering, Shandong University

The first-principle method based on density functional theory (DFT) is used to calculate energies of different surfaces and different terminated (Al-terminated and Fe-terminated) in every surfaces of FeAl intermetallic. The bulk structure of FeAl has been addressed, which shows unique metal band in thermodynamically stable. Obviously, FeAl intermetallic has a wide range of in the phase diagram, therefore, the chemical potential of the constituents enters the surface energy. The most stable surface structure is determined by the minimum of the free energy. Subsequently, the surface energy distribution of different components structure can be obtained. Finally, growth models and order of FeAl have been built by above data based on the Wulff's method. Two stable shapes including simple structure and dodecahedron structure have been determined and the barrier of the model evolution have also been concluded.

Z-P41

高通量筛选高性能的母体 Half-Heusler 热电材料

郭淑萍, 贾甜甜, 冯真真, 张永胜*

中科院合肥物质研究院固体所

热电材料可以实现热能和电能直接转换, 缓解能源危机, 具有重要的研究意义。Half-Heusler(HH) 化合物因其良好的热稳定性、机械性能和矿藏丰富等优点是良好的热电材料。其中, FeNbSb 和 ZrNiSn 分别是代表性的 p 型和 n 型母体材料, 由于其具有良好的热电性能被人们广泛研究。但是它们本征的高热导率阻碍了其实际应用。目前已有高通量工作搜索了具有本征低热导率的 HH 材料, 但是忽略了电学性质的影响。本工作结合了电学性质和本征低热导率来寻找具有良好热电性能的 HH 母体材料。我们分别用态密度有效质量和能带有效质量表征 Seebeck 系数和电导率。把有效质量的概念应用到高通量研究中, 高通量搜索了 96 种 HH 材料, 来筛选电学性质和热学性质比 p 型 FeNbSb 和 n 型 ZrNiSn 更优的 HH 热电材料。最终我们找到 4 种 p 型和 3 种 n 型具有高电学性能和本征低热导率的良好 HH 母体材料, 通过分析了这 7 种化合物的热电性能, 为后期调控这些母体 HH 材料的热电性能提供了研究基础, 也为实验提供了更多的研究体系。

Z-P42

含三嗪结构的无定形多孔聚合物空间结构搭建算法的研究

宋策^{1,2,3}, 胡方圆^{3,4}, 王锦艳^{2,3}, 蹇锡高^{1,2,3}

- 1.大连理工大学数学科学学院
- 2.大连理工大学化工学院高分子材料系
- 3.辽宁省高性能树脂工程技术研究中心
- 4.大连理工大学材料科学与工程学院

多孔有机聚合物因其具有高比表面积、良好的化学稳定性等优点,可广泛应用于气体分离、催化、能量存储等领域。多孔有机聚合物包括具有结晶态的共价有机框架材料 (covalent organic framework, COFs) 以及无定形结构的多孔有机聚合物,如共轭微孔聚合物 (conjugated microporous polymers, CMPs)、多孔芳香骨架化合物 (porous aromatic frameworks, PAFs) 等。无定形结构的多孔有机聚合物不同于结晶态聚合物,其在空间结构上不具有长程的周期有序性,并且测试表征手段难以对这类聚合物的空间结构给予精确的描述。但分子模拟可以解决上述问题,通过模拟可获悉分子层面的结构信息,从而弥补实验表征技术的不足,提升对无定形材料空间结构的认识。本文针对一类含三嗪环结构的多孔有机聚合物的空间结构设计了一种新型搭建算法,将反应单体和三嗪环当作两类构筑单元,借助分子动力学模拟技术,通过模拟这两种构筑单元的逐步连接,得到聚合物的无定形结构模型。利用 Materials Studio 软件,计算得到该模型的比表面积、孔体积等微观结构参数。研究表明,模拟计算值与实验实测值吻合度高,验证了该结构模型的可靠性,确立了本文提出的结构搭建算法的有效性,该模型的建立为此类单体的聚合提供了重要的理论依据。

Z-P43

Development of the reactive force field for Co-based superalloys

郭静², 肖斌², 王小梦², 刘轶^{1,2*}

- 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

我们拟开发面向钴基高温合金的 ReaxFF 反应力场,它根据键级参数判断化学键的形成和断裂,常用于大规模凝聚态体系的分子动力学模拟。本工作介绍力场开发的初步结果,包括基于第一性原理计算的钴基高温合金状态方程及反应力场的拟合结果对比,利用反应力场对钴基合金的拉伸/压缩的力学行为进行了研究,并与第一性原理计算结果对比验证。

Z-P44

密度泛函理论研究应变和空位对氧化铬电子结构的影响

米志杉

北京科技大学

本研究利用第一性原理密度泛函理论研究了对氧化铬晶体分别施加应变和掺杂空位及其在应变和空位共同作用下的电子结构变化规律。结果表明,拉应变可减小氧化铬晶体禁带宽度,然而压应变增加了禁带宽度,并且平面双轴应变相比垂直平面的应变对电子结构有更大的影响。对于空位缺陷,我们发现铬空位和氧空位均在禁带中引入了额外的能级,且存在铬空位缺陷时,氧化铬晶体的禁带宽度减小很多。这是由于铬空位导致导带靠近费米能级从而减小了带隙。拉应变减小带隙主要是由于导带底的 t_{2g} (d_{xy} , d_{xz} , d_{yz}) 和 $d_{x^2-y^2}$ 轨道靠近费米能级,而压应变增加带隙是由于 d_{xy} , d_{xz} , d_{yz} 和 $d_{x^2-y^2}$ 轨道远离费米能级。另外,应变和空位对氧化铬磁矩也产生了不小的影响。有趣的是,在平面双轴拉应变 5%-8% 范围时,氧化铬中氧空位出现迁移。

Z-P45

铬掺杂对 α -Fe₂O₃ 薄膜电子结构和功函数的影响

李小龙^{1,2}, 陈丽^{2*}, 刘洪梅², 米志杉¹, 时长民², 乔利杰^{1*}

- 1.北京科技大学腐蚀与防护中心,北京
- 2.临沂大学凝聚态物理研究所,山东临沂

E-mail: chenli@lyu.edu.cn; lqiao@ustb.edu.cn

利用局域密度泛函理论,采用 LDA+U 方法,研究了铬掺杂对铁截止面的 α -Fe₂O₃ (001) 薄膜性质的影响。我们发现铬在 α -Fe₂O₃ 薄膜中的掺杂位置和掺杂浓度都能对电子结构和功函数有显著的影响。计算结果表明,当 α -Fe₂O₃ 薄膜中次外层的铁

原子被铬原子取代后,体系能量最低。对比没有掺杂的 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 薄膜,铬掺杂不仅导致带隙减小,而且功函数增加了 0.9 eV。位于费米面以下氧原子的 p_x/p_y 的电子态密度减小,导致体系费米能降低,这和功函数的增加密切相关。当铬的掺杂浓度从 4.2% 增加到 16.7% 时,功函数先增加后减小。当铬的掺杂浓度为 8.3% 时,功函数达到最大值,6.61 eV。这些结果表明,铬在 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ (001) 薄膜中的掺杂能提高腐蚀势,有利于提高钢的抗腐蚀性能。

Z-P46

氢在钯铜合金中的溶解度、扩散系数和透氢率

刘柳成,王继伟,贺跃辉,龚浩然

PdCu 二元合金不仅对氢气具有较高的选择性和渗透性,而且,在使用的过程中具有良好的热稳定性、优良的抗硫性能、适中的机械性能、以及较宽的工作温度。因此,PdCu 二元合金被普遍认为是一种用于氢分离和纯化的优良金属薄膜。本文采用第一性原理计算分别研究了氢在 BCC PdCu、FCC PdCu 和 FCC Pd 中的溶解度、扩散系数以及透氢率。计算研究表明氢在 PdCu 合金以及纯 Pd 中的溶解度是由氢在各个间隙位置的结合能和振动频率来决定的。此外,氢在 PdCu 和纯 Pd 中的扩散系数相对大小主要受扩散激活能的影响。在同一温度下,透氢率的降序是:FCC Pd \rightarrow BCC PdCu \rightarrow FCC PdCu;同时,膜厚度的不同是导致实验上 BCC PdCu 与 FCC Pd 透氢率相对高低不同的基本原因。本文的计算结果不仅和实验观察相一致,同时也为氢在 PdCu 和纯 Pd 中的内在行为机制提供了深入的理解。

Z-P47

点缺陷调控 AgBiSe₂ 的电子结构来优化其热电性能

冯真真,张小丽,贾甜甜,郭淑萍,张永胜*

中科院合肥物质研究院固体所

热电材料可以实现热能和电能之间的相互转化,其转换效率可以用无量纲的 ZT 值来衡量, $ZT=S^2T/\kappa$,其中 S、和 κ 分别代表塞贝克系数、电导率和热导率。ZT 值越大,热电转换效率越高。目前报道的热电材料转换效率较低,寻找具有较低热导率的材料并优化其热电性能是提高热电材料转换效率的一个重要方法。AgBiSe₂ 具有极低的热导率(300 K 下热导率为 0.45 W/mK),因此可以作为一种常温热电材料。之前的实验研究发现 AgBiSe₂ 是本征 p 型半导体,而有的实验组测得 AgBiSe₂ 是本征 n 型半导体。通过计算 AgBiSe₂ 的本征点缺陷的形成能关于费米能的变化,我们发现富 Se 条件下,Ag 空位的形成能最低;而富 Ag 情况下,Ag 空位和 Ag_{Bi} 反位缺陷是 AgBiSe₂ 的主导本征缺陷。这两种缺陷是材料的受主本征点缺陷,导致 AgBiSe₂ 是本征 p 型半导体。通过分析 AgBiSe₂ 的能带结构发现,第二和第三价带顶与价带顶的能量差分别是 0.05 eV 和 0.1 eV,这三条价带的能谷简并度能达到 18。我们通过两种方法调控 AgBiSe₂ 的能带结构。一是通过引入本征 Ag 空位缺陷,直接使材料的费米能级移动到 -0.1 eV,增大材料的功率因子。二是通过分析 AgBiSe₂ 的成键发现,价带顶主要是 Se-p 和 Ag-d 反键态贡献,由于 Se-p 对导带影响也比较大,我们可以调节 Ag-d。分析 Ag-d 在价带顶的权重,发现 Ag-d 轨道在 VBM 处和 VB2 贡献比 VB3 大,可以改变 VBM1 和 VBM2 向下移动。成键作用越弱,形成的成键分子轨道上移,而反键分子轨道下移。由于价带顶是由 Se-p 和 Ag-d 反键态贡献的,所以需要减小分子间的成键作用,即增大原子轨道的能量差。Cu/Ru/Rh/Pd-d 与 Se-p 能量差比 Ag-d 与 Se-p 能量差大,可以减弱成键强度,降低反键轨道的能量。通过合适的掺杂浓度,调控 AgBiSe₂ 的价带使三条价带顶到同一能量水平。即我们应用本征点缺陷直接移动费米面以及有目的性的选择外来原子掺杂的方法调控 AgBiSe₂ 的价带结构,增大了材料的能谷简并度,进而提高材料的热电性能。

Z-P48

聚变材料钨中多种类型空位型缺陷与氢行为的大尺度动力学蒙特卡洛模拟

孟超,金硕,吕广宏

北京航空航天大学

钨被认为是聚变装置中最有前景的等面对等离子体材料,研究其微结构在聚变环境下的演化十分重要,这其中包括钨的氢致起泡现象。氢在钨中很容易扩散,并聚集在大型缺陷如晶界位错中,但同时氢也会被空位与自间隙等点缺陷捕获形成聚集。

目前,实验上从 300-1000 K 都很容易观测到氢泡的形成。随着温度的升高,氢泡的个数会下降,但伴随着尺寸的上升。而另一方面,与此相应的计算方面结果却很少,特别在模拟方面,还没有观测到空位中氢聚集成团后发射出自间隙原子或其它能使得空位团簇尺寸增大的机制。

为了探究氢的聚集与钨中成泡的规律, 本文对多种尺寸的空位型缺陷存在的条件下, 氢在钨中的扩散以及被空位捕获的行为进行了模拟。我们采用的是第一原理与分子动力学提供参数的动力学蒙特卡洛方法 (OKMC), 模拟得到了不同温度下以及不同初始氢-空位比例情况下, 氢在空位及其团簇中的聚集和脱附过程。其中第一原理计算钨中单空位与氢相互作用关系时我们考虑了零点振动能 (ZPE) 的修正项; 较大尺寸的空位团簇与氢的相互作用关系, 我们采用遗传算法结合分子动力学计算得到的。通过动力学蒙特卡洛方法在大尺度时间下的模拟, 我们发现某一温度下, 随着空位团簇的增大, 其内所能容纳的氢的数目也会随之上升, 但相较于未考虑 ZPE 的数目略有下降。对于同一大小的空位团簇, 其中捕获的氢的数目会随着初始氢数目增加而增加, 但会模拟温度的升高而降低。此外, 我们还对相同浓度但不同大小的初始空位, 在不同氢浓度下以及不同温度下, 其对氢的捕获行为进行了模拟。得到的结果显示, 空位捕获氢的过程会存在饱和。在初始氢浓度打到饱和和所需之前, 所有的氢都处于捕获状态。而此浓度会随着温度的升高而迅速降低, 但随空位团簇的增大而降低的效果不明显。

Z-P49

Sachs 模型研究纳米孪晶铜的屈服强度

肖建伟¹, 杨慧珍¹, 刘赫雄¹, Fatima Younus¹, 温斌¹, 张湘义¹, Yanbin Wang²

1.State Key Laboratory of Metastable Materials Science and Technology, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China

2.Center for Advanced Radiation Sources, University of Chicago, Chicago, Illinois 60439, USA

纳米孪晶铜的力学性质是一个非常重要的科学问题。通过分子动力学模拟, 计算得到了硬位错滑移模式以及软滑移模式的临界分切应力。基于 Sachs 模型和分切应力, 得到了不同孪晶厚度下纳米孪晶铜的屈服强度, 并与实验数据符合的很好。结果表明, 非共轭孪晶界沿着孪晶界滑移导致孪晶界湮灭, 引起纳米孪晶铜软化。高剪切模量, 低层错能的纳米孪晶材料, 其软化的临界孪晶厚度越小。这项工作对纳米孪晶铜的力学行为提出了新的理解, 并有助于开发新的超硬材料。

Z-P50

二硼化钛跟二硼化锆中的拓扑狄拉克点-网费米子

冯幸¹, 岳长明², 宋志达², 吴泉生^{3,*}, 温斌^{1,*}

1.State Key Laboratory of Metastable Materials Science and Technology, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China

2.Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, and Institute of Physics, Chinese Academy of Science, Beijing 100190, China

3.Theoretical Physics and Station Q Zurich, ETH Zurich, 8093 Zurich, Switzerland

根据第一性原理计算和有效模型分析, 当自旋轨道耦合作用被忽略时, 我们发现一种拓扑狄拉克点-网费米子存在于二硼化钛跟二硼化锆中。以二硼化钛为例, 一些由空间反演对称性跟时间反演对称性共同保护的新型拓扑态出现在了拓扑点-网结构中, 其中包括三重简并点, 拓扑点-链结构, 和点-环结构等。另外, 类似于单层和双层石墨烯中的线性交叉型和二次散射型二维表面狄拉克点分别出现在了二硼化钛的硼原子终止 (001) 表面和钛原子终止 (001) 表面上。

Z-P51

Ti-55531 合金 β 锻本构关系及热加工图的建立

潘浩

西北有色金属研究院

为优化 Ti-55531 合金 β 相区锻造工艺以提高合金的损伤容限性能, 本文通过 Gleeble-3800 热模拟试验机对 Ti-55531 合金在 β 相区进行了应变速率为 0.001s⁻¹~1s⁻¹, 温度为 860°C~950°C 的等温压缩试验, 获得了流变应力曲线, 对 Ti-55531 合金在实验条件下热变形行为及流变应力变化规律进行了研究, 通过对实验数据进行拟合得到了适用于应变量为 0 至 0.7 范围内任意值的 Ti-55531 合金本构方程。构建了不同应变下 Ti-55531 合金热加工图, 基于加工图理论分析了不同应变条件下应变速率敏感因子、功率耗散因子及失稳区的区别与联系。

Z-P52

第一性原理: 锗、锡、铅的掺杂对金属铝的结构及电子性质的影响

彭明军

昆明理工大学

基于密度泛函理论, 通过第一性原理计算, 研究了 Ge, Sn 和 Pb 掺杂 Al 的几何性质, 杂质形成能和电子结构。其中平面波截断能是 450 eV, 每个原子的总能量收敛值是 2×10^{-5} eV, 原子间的位移矢量、最大作用力和应力偏差分别不小于 0.0002 nm、 5×10^{-6} eV 和 0.1 GPa。三种掺杂体系的结构和能量表明, Ge 掺杂铝的杂质形成能最小, 结构最稳定。Ge 的杂质形成能是 -2.4070 eV, 系统释放的热量最多, 而掺杂 Pb 以后, 体系会吸收热量。与纯铝相比, 直接围绕杂质的中心铝的电荷分布从正方形变为三角形。这种现象导致中心铝沿[110]方向没有共价键。电荷差分密度则表明 Al 和 M (M = Ge, Sn 和 Pb) 之间的相互作用是共价键合。从电子密度可以看出, Al-Ge 体系具有最强的共价键合, 其次是 Al-Sn, 最后是 Al-Pb。因此, Al-M (M = Ge, Sn 和 Pb) 的稳定性是 Al-Ge > Al-Sn > Al-Pb。此外, 根据密立根布居分析, 发现由于杂质元素的掺入, Al_I 之间存在较强的共价作用, 而 Al_I 与 Al_{II} 之间的共价键是最强的。

Z-P53

Two-Dimensional Tetragonal Titanium Carbide: A High-Capacity and High-Rate Battery Material

樊冬

浙江工业大学材料科学与工程学院

High-performance electrode materials are critical for the development of next-generation energy conversion and storage systems. Herein, we report a theoretical design of novel two-dimensional materials, namely tetragonal titanium carbide and nitride (tetr-TiC and tetr-TiN) on the basis of ab initio calculations. State-of-the-art calculations show that tetr-TiC and tetr-TiN deliver the intrinsic metallic nature, high thermal stability, and satisfactory lithium-ion storage and rate capability. More importantly, compared to previously known Ti₃C₂ and Ti₂C sheets, the proposed new material has lower Li diffusion barrier, higher theoretical capacity, and lower average open circuit. Combining such advanced features, the proposed tetragonal TiC is a promising candidate for future lithium-ion batteries, supercapacitors, and fuel cells.

仅发表论文

Z-PO-01

A Study on flow stress behavior of Ti-6Al-4V-0.11Ru titanium alloy under different hot deformation conditions

LIU Qiang^{1,2}, HUI Songxiao¹, YE Wenjun¹, SONGSheng-yin², YU Yang¹

1.State Key Laboratory for Fabrication & Processing of Nonferrous Metals, Beijing General Research Institute for Nonferrous Metals, Beijing 100088

2.State Key Laboratory for Performance and Structural Safety of Petroleum Tubular Goods and Equipment Materials,

CNPC Tubular Goods Research Institute, Xi'an, Shaanxi 710077

The hot deformation behavior of Ti-6Al-4V-0.11Ru titanium alloy were investigated by isothermal single-pass compression on Gleeble-3500 thermal simulator under the condition of the deformation temperature ranging from 800 °C to 1100 °C, the strain rate ranging from 0.01 s⁻¹ to 10 s⁻¹. The deformation behavior and microstructure are analyzed. The results reveal that the peak stress of Ti-6Al-4V-0.11Ru titanium alloy increases with decreasing the deformation temperature and increasing the strain rate. The hot compression deformation of Ti-6Al-4V-0.11Ru alloy can be represented by Arrhenius model. The constitutive equation of Ti-6Al-4V-0.11Ru alloy under hot compression deformation is calculated by a linear regression analysis. Thermal deformation simulation can provide basis for choosing hot working parameters of Ti-6Al-4V-0.11Ru titanium alloy.

Z-PO-02

Effect of Strengthened Hole on the Fatigue Life of 2024-T3 Aluminum Alloy

Hong Huang*, Qingyun Zhao, Fenglei Liu

China aviation manufacturing technology research institute

Split-sleeve cold expansion processing was employed on the 2024-T3 aluminum alloy plate. Fatigue lives were compared according different expansion, and then the relationship of fatigue life and expansion was analyzed. Residual stresses were measured with different expansion, and the fatigue fractograph was analyzed by SEM. The results show that the split-sleeve cold expansion can obtain longer life compared with the non strengthened hole. The maximum fatigue life increased to 12 times with 6 % expansion. When over 6 % expansion, fatigue life began to decrease. The split-sleeve cold expansion can form beneficial residual compressive stress, and deferred the fatigue crack initiation. The fatigue fractograph shows quasi-cleavage fracture.

Z-PO-03

铂族金属结构物性及弹性力学行为的第一性原理研究

孙莹洁, 熊凯, 张顺猛, 毛勇

云南大学材料科学与工程学院

铂族贵金属材料具有优异的高温力学性能, 在能源、宇航工业等领域有广泛的应用。了解铂族金属的电子结构及力学性质是研究其微观变形机理和设计新材料的基础和前提。为了探究铂族金属弹性力学性质的物理起源, 本文基于密度泛函理论第一原理计算系统研究了铂(Pt)、钯(Pd)、锇(Os)、铱(Ir)、铑(Rh)、钌(Ru)等铂族金属的晶格参数、电子结构、弹性常数 C_{ij} 、杨氏模量 E 、体模量 B 和 Poisson 比等性质。研究结果表明: Pt 和 Pd 为塑性材料, Ir, Ru, Os 和 Rh 表现出明显的脆性。对比研究发现, Os 的杨氏模量($E=618.57$ GPa), 剪切模量($G=248.50$ GPa), 体模量($B=403.68$ GPa)较大, 抵抗弹性变形能力较强, 各向异性较小($A_Z=0.9569$)。Pd 的杨氏模量($E=118.10$ GPa), 剪切模量($G=42.87$ GPa), 体模量($B=160.33$ GPa)较小, 抵抗弹性变形的能力较弱, 各向异性较大($A_Z=2.416$)。

Z-PO-04

门可调的单层 MX₂ 1T'-2H 面内相接触界面性质

刘士琦, 李菁楨, 吕劲

北京大学

基于平面内 1T/1T' (金属电极) - 2H (半导体沟道) 异质结的二维 TMDS 场效应晶体管最近受到了广泛关注。实验显示出这样的构造会明显减小接触电阻, 增强门电极的调控能力, 从而改善器件的性能。但是, 器件的良好导电性的内在原因亟待研究。我们通过第一性原理的量子输运模拟, 首次系统的研究了以 1T' 相作电极, 2H 相作沟道的单层 MoS₂, WS₂, MoSe₂, WSe₂, MoTe₂ 晶体管的界面性质。在这种体系里, 界面处的金属诱导态深入到肖特基势垒处, 连接了电极和沟道的价带/导带, 因而形成了较小的和可调的有效肖特基势垒高度, 进而可以在合适的门压调控下达到欧姆接触。针对实验上观察到的相接触晶体管出现较小的接触电阻, 我们的研究给出了合理的解释, 我们的分析和讨论对未来的实验有指导意义。

Z-PO-05

Research on stability controlling technology of endless strip production in RIZHAO STEEL

Peng Tian^{*1}, Yonglin Kang¹, Jingtao Zhu², Zhe Qin², Fan Wang¹

1. university of science and technology beijing

2. Rizhao Steel Holding Group CO., LTD

The equipment and technology characteristics of endless strip production (ESP) line in RIZHAO STEEL were analyzed. The stability control technology in the headless continuous casting process was introduced from the aspects of the level fluctuation, the casting speed, the frequency of steel leakage and the surface quality of the slab. The stability control technology in endless rolling process was described from the rolling length, the performance distribution, the temperature hitting rate and the dimensional accuracy. The whole process stability control technology was discussed from the yield rate, the production organization, the accident rate, energy saving and emission reduction. The productive practice of ESP shows that the longest continuous casting reached 12 heats (3640 tons) in 2017, on a monthly basis over this year, the longest rolling length was 155.1 km, the qualified rate of products was up to 99.73 %, the yield rate was up to 97.51 %, and the monthly ratio of ultra-thin strip steel with less than 1.2 mm thickness reached 40.57%, at the same time, its energy consumption was less than 27.26 kgce/ton and its accident rate was below 2.02 %. These data indicated that the stability control technology of ESP is beneficial to the low cost and high precision and green manufacturing of ultra-thin broadband steel and the technological development of hot rolling instead of cold cooling and the endless rolling.

Z-PO-06

The foundation and study of the lattice inversion potential for Platinum

Song Chen*

kunming institute of precious metals

The lattice cohesive curve of Platinum is investigated through first-principles calculations. The double-exponential function to fit the curve is presented. The inversion pair potential curve is generated through Chen's inversion method. The accurate pair potential function is obtained

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

Z-PO-07

高强刚扭力梁液压成形有限元仿真分析

仇泉泉, 康永林
北京科技大学

为了提高零件性能, 响应汽车轻量化的要求, 本文采用 (FEM) 有限元分析方法, 开展了 780 MPa 高强钢扭力梁液压成形工艺的研究, 通过研究不同的加载路径对扭力梁的壁厚分布和成形精度的影响, 确定合理的工艺参数。结果表明, 在扭力梁的成形过程中, 在过渡区壁厚变化较大, 中间成形区壁厚变化不明显, 当补料量为 35mm, 补料时的内压力区间为 30-70 MPa 时, 为合理加载路径, 壁厚减薄较小, 成形精度较高。

Z-PO-08

A Mathematical Model for Macro-segregation Formation during Popular Continuous Casting Process

Haibo Sun^{*1}, Zheng Li¹, Liejun Li¹, Baohua Nie¹

1.Foshan University

2.South China University of Technology

Objectives: A coupled electromagnetic-thermal-solute transportation model, aimed to better understand the macro-segregation formation in the strand during popular continuous casting (CC) process, has been developed with the aid of 2D-3D hybrid method.

Methods: The thermal-solute transportation phenomenon in the CC strand was simulated by the computation fluid dynamic code Fluent. The electromagnetic force distribution in the EMS working region calculated via finite element code ANSYS was imported into the Fluent code as the momentum source term through coordinate interpolation algorithm.

Results and Conclusions: Based on the model validation by industrial tests, it is shown that a fluctuant segregation profile is presented at the strand cross section owing to the circulation flows at the solidification front. Under the action of solute redistribution, the segregation degree of solute element C at strand center increases from 1.0 to 1.18, which causes that the liquidus temperature of local center molten steel is reduced from 1726 K to 1709.91 K for the given steel, GCr15, as the solidification proceeds during CC process. The discontinuous, non-frozen band induced by the undulant solute distribution along the strand radial direction is proven to be one of the main reasons that lead to the center porosity formation in the final solidification stage for the bloom CC process.

Z-PO-09

单向拉伸下 fcc 金属元素中空位行为的第一性原理研究

冯宇超^{1,2}, 陈星秋¹, 李殿中¹, 李依依¹

1.中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家研究中心

2.中国科学技术大学材料科学与工程学院

利用第一性原理计算, 我们探究了当 fcc 金属元素 (Al, Cu, Ag, Au, Pb) 处于不同程度的单向拉伸 (1%, 2%, 3%, 4%, 5%) 时的空位的形成及扩散行为。通过 CI-NEB 的方法, 得到了能量随空位扩散的趋势图, 并由此得到空位形成能及空位扩散能。我们发现当 fcc 金属元素处于不同程度的单向拉伸 ($\leq 5\%$) 时, 空位扩散沿着拉伸方向时的空位扩散能量总是大于当空位垂直于拉伸方向扩散时的扩散能量。基于此, 我们得出: 在 fcc 金属元素中, 空位更容易沿着垂直于拉伸的方向扩散。我们还计算了 Al 在不同程度拉伸时沿着不同扩散路径下的扩散系数以及自扩散 Al 原子在扩散初态及过渡态时的差分电荷密度, 计算得到的结果证明了之前的结论。除此之外, 通过定义在 fcc 晶体中自扩散原子的扩散窗口, 我们发现了空位扩散能以及扩散窗口的面积之间的严格的线性关系, 并由此提出: 在 fcc 元素中, 空位的扩散能力可以理解为自扩散原子穿过扩散窗口的难易程度。最后基于此, 我们引进了处于单向拉伸下的 fcc 晶体模型, 能够在不进行任何 DFT 计算的前提下预测当 fcc 金属元素处于不同程度的单向拉伸时的空位扩散能。

Z-PO-10

翼舵热-力耦合计算分析方法

卢琦, 赵山杉

中国运载火箭技术研究院研究发展中心

航天飞行器在大气中高速飞行, 翼舵会受到气动热和气动力的同时作用, 为了保证翼舵设计的安全可靠, 需要针对翼舵开展热-力耦合的计算分析。本文通过商业有限元软件, 根据建立好的翼舵有限元网格模型, 通过施加修正的热流条件和约束条件, 采用顺序耦合方法计算出翼舵在飞行弹道条件下的温度场、热-力耦合条件下的应力场和位移, 全面介绍了翼舵热-力耦合有限元分析方法。本方法可有效地分析在高速飞行下的热-力耦合环境对翼舵的真实响应, 为翼舵设计提供了可靠的技术手段。

Z-PO-11

相场法模拟对镁合金晶粒异常长大影响因素的模拟研究

吴艳, 余庆

武汉轻工大学

本文通过相场模型模拟研究了真实时空下退火过程中镁合金晶粒异常长大影响因素, 从而寻求控制晶粒发生二次再结晶的可能方法。模拟结果表明: 局域界面能及界面能动性的变化均能导致某些特定取向的晶粒发生异常长大。如果某一特定取向的晶粒具有低的局域界面能, 或者 j 具有高的局域界面能动性, 就可能实现晶粒的异常长大现象。但是, 如果局域界面不高于基体界面能的 0.98, 或局域界面能动性不高于基体界面能动性的 2 倍, 则在显微组织不能出现晶粒的异常长大现象。

Z-PO-12

Microstructure Characterization and Mechanical Analysis of Electron Beam Manufactured Ti6Al4V for Biomedical Application

Di Chen*

Shanghai Jiao Tong University

Ti6Al4V has been widely used in medical treatment because of its good mechanical properties and biocompatibility, and the electron beam melting (EBM) has increasingly shown great potential for orthopedic implant in recent years because it is a fast, economical and efficient way to meet patients' requirements. The relationship between microstructure and hardness of EBM-built Ti6Al4V have been systematically investigated in this work. Its microstructures consists of columnar prior β grains delineated by wavy grain boundary α , the volume fraction of α phase is determined to be 88.61 %. Moreover, α' martensite was observed in laminar samples while all α' martensite in block samples has decomposed into α and β phases. The hardness of the samples prepared by EBM is measured, it is found that the hardness of the block samples does not change significantly from the edge to the core, and the hardness stay the same in different stacking height. The hardness of laminar samples is 12 % higher than that of block samples for the microstructures is finer and the brittle α' formats because of the faster cooling rate than that of the block samples.

Ti6Al4V has been widely used in medical treatment because of its good mechanical properties and biocompatibility, and the electron beam melting (EBM) has increasingly shown great potential for orthopedic implant in recent years because it is a fast, economical and efficient way to meet patients' requirements. The relationship between microstructure and hardness of EBM-built Ti6Al4V have been systematically investigated in this work. Its microstructures consists of columnar prior β grains delineated by wavy grain boundary α , the volume fraction of α phase is determined to be 88.61%. Moreover, α' martensite was observed in laminar samples while all α' martensite in block samples has decomposed into α and β phases. The hardness of the samples prepared by EBM is measured, it is found that the hardness of the block samples does not change significantly from the edge to the core, and the hardness stay the same in different stacking height. The hardness of laminar samples is 12% higher than that of block samples for the microstructures is finer and the brittle α' formats because of the faster cooling rate than that of the block samples.

Z-PO-13

θ - α Al₂O₃ 相变机理研究

黄渊超¹, 陈星秋², 彭晓³

1.中国科学院金属研究所, 金属腐蚀与防护实验室

2.中国科学院金属研究所, 材料科学国家研究中心

3.南昌航空大学, 材料科学与工程学院

金属间化合物 M-Al (M=Ni、Fe) 等因在高温下能够生长保护性的 Al_2O_3 膜, 而可用作航空发动机某些零部件的高温防护涂层。然而当温度低于 1100°C 时, 所形成的是 γ 和 (或) θ 等亚稳态的 Al_2O_3 膜。它们会发生向稳态 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 转变。这一转变过程长则显著降低 Al_2O_3 膜的抗高温氧化性能: (1) 氧化速度快; (2) 氧化膜因相变伴随的体积收缩而引发裂纹。但是, 目前对于 $\theta\text{-}\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 相变机理尚不清楚。

$\theta\text{-Al}_2\text{O}_3$ 属于单斜晶系, 它是由面心立方 (f.c.c) 氧晶格以及占据在八面体间隙和四面体间隙的 Al 离子构成。而 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 属于六方晶系, 主要是由近密排六方 (h.c.p) 氧晶格和占据了 $2/3$ 的八面体间隙的 Al 离子构成。通过第一性原理计算研究提出 $\theta\text{-}\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 相变主要分为两步进行: (1) 通过堆垛层错实现氧晶格由 f.c.c 到 h.c.p 的转变; (2) Al 离子移动到八面体间隙位置形成蜂窝结构。并且, 大量实验研究表面 $\theta\text{-}\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 相变过程中 $\theta\text{-Al}_2\text{O}_3$ 存在一个临界尺寸, 只有 $\theta\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的尺寸大于临界尺寸相变才能进行。结合所提出的两步法 $\theta\text{-}\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 相变机理并结合传统的形核理论表明, $\theta\text{-}\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 相变是一个形核长大的过程, 只有当 $\theta\text{-Al}_2\text{O}_3$ 堆垛层错的达到一定得层数, 才能形成一个热力学稳定的晶核。这就是相变过程中 $\theta\text{-Al}_2\text{O}_3$ 存在临界尺寸的原因。利用第一性原理计算理论上计算所得 $\theta\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的临界尺寸和实验结果一致。这也进一步验证了两步法 $\theta\text{-}\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 相变机理的正确性。

Z-PO-14

基于第一性原理计算 (α 、 β 、 γ) -LiAlSi₂O₆ 的各向异性弹性和热导率

寿宏伟

昆明理工大学

基于密度泛函理论, 我们用第一性原理计算了 (α 、 β 、 γ) -LiAlSi₂O₆ 的结构性质, 弹性常数和弹性模量以及弹性性质和热导率各向异性。从得到的结合力大小以及形成焓的能量表明, 三种结构的 LiAlSi₂O₆ 都是能量稳定的, 但 $\alpha\text{-C2/c}$ 型 LiAlSi₂O₆ 是最稳定的相。基于单晶弹性常数, 我们计算了三种结构的弹性性质, 其中包括体积模量, 剪切模量和杨氏模量 (B, G 和 E), 泊松比 ν 和显微硬度 HV。 $\alpha\text{-C2/c}$ LiAlSi₂O₆ 具有最大的 G, E 和 HV 值。同时用弹性各向异性指数、表面构造和弹性模量投影表征了材料的各向异性。从中可以发现, 所有 LiAlSi₂O₆ 都显示各向异性弹性, 其顺序为 $\alpha\text{-P2}_1/\text{c} > \gamma > \beta > \alpha\text{-C2}/\text{c}$ 。Long's 和 Cahill 模型也讨论了 LiAlSi₂O₆ 的热导率及其各向异性, 结果表明 LiAlSi₂O₆ 都具有作为绝缘材料的潜力。

Z-PO-15

碳化钨超薄膜介电常数的尺寸效应及其各向异性

王磊¹, 陈星秋¹

1.中国科学院金属研究所

2.中国科学技术大学材料科学与工程学院

透明导电电极具有高的电导率以及透光率, 这使其成为触摸屏面板, 太阳能电池以及有机发光二极管等先进光电器件的重要组成部分。但是常规的透明导电电极金 (1064°C), 银 (962°C) 等由于其熔点比较低, 限制了其在高温环境中的应用。而碳化钨 (WC, 2870°C) 因其具有很高的熔点, 使其在高温环境中应用成为了可能。我们应用第一性原理密度泛函理论计算了 WC (0001) 超薄薄膜光学性质。在考虑带内和带间电子跃迁的情况下, 计算结果显示 WC 超薄薄膜的介电函数 ϵ_2 具有明显的量子尺寸效应。我们发现 WC 超薄薄膜平面内等离子体频率随着厚度增加而减小, 并且光学介电常数张量具有各向异性以及厚度依赖关系。随着厚度增加白光下的透光率呈现指数下降, 并且当厚度为 3 nm 的碳化物薄膜透光率可达 75%。计算结果表明不同的终端类型透光率不同, 具体表现为相同厚度碳终端的透光率比钨终端透光率高 3% 左右。但是, 对于高温光电器件的设计而言, 具有较低的表面等离子体共振以及表面等离子体极化因子成为限制 WC 薄膜应用的关键因素。考虑对其进行掺杂以提高其等离子体光子学性能。

Z-PO-16

Mg-RE (稀土) 合金体系中的扩散行为研究

杨丽¹, 袁媛^{1,2}, 曾子豪¹, 陈涛¹, 吴佳佳¹, 汤爱涛^{1,2}

1.重庆大学材料科学与工程学院

2.国家镁合金材料工程技术研究中心

镁合金因其较高的比强度、比刚度、低的弹性模量、优良切削加工性能等，在航天航空、交通汽车、军事工程等领域具有广泛的应用前景及潜力。稀土元素的加入可以显著提高镁合金的强度，高温蠕变性能，引起了学者广泛的关注。本工作研究了镁稀土合金体系的扩散行为。制备了一系列 Mg-RE 二元体系在 500 °C、470 °C、440 °C 下的固/固扩散偶 (Mg/Gd、Mg/Mg-20Y、Mg/Mg-10Er、Mg/Mg-20Ce)，采用 x 射线衍射 (XRD)，扫描电镜 (SEM) 和电子探针定量分析 (EPMA) 确定了扩散区物相组成和成分曲线，计算了对应的中间生成相的抛物线生长常数，并采用 Wagner 公式计算了积分互扩散系数外推了扩散激活能。通过对镁稀土体系的第二相扩散动力学研究，为镁稀土合金体系的扩散动力学数据库的建立提供了必要的实验数据信息，有利于相应的动力学数据库的建立，分析镁合金第二相析出，以指导合金设计和工艺设计。

Z-PO-17

基于 Arrhenius 方程预测一种 HSLA 钢高温流变行为

高志玉, 李岩帅, 张倩, 樊献金, 康宇

辽宁工程技术大学材料科学与工程学院

基于 Gleeble-3800 热力模拟试验机研究了一种含硼高淬透性 HSLA 钢的热压缩变形行为。热压缩实验的温度范围是 1123-1423 K，应变速率范围是 0.01-10 s⁻¹，工程应变量为 70 %。根据热压缩实验结果，研究了实验钢的高温变形行为，建立了实验钢考虑应变效应的 Arrhenius 型本构方程，应用于预测实验钢的高温流变行为。

结果表明，实验钢的流变应力取决于应变速率与变形温度。变形温度降低或应变速率增加，流变应力增大。采用本文提出的本构方程所预测的实验钢流变应力与实验结果符合较好，能够较准确的反映出实验钢的高温变形行为。但是，在应变速率较大（如 10 s⁻¹、1 s⁻¹）且变形温度较低（如 1123 K、1173 K）时，预测偏差较大。使用统计学参量对本构方程的流变应力预测能力进行评估，包括相关系数 (*R*)、平均绝对相对误差 (*AARE*)、平均均方根误差 (*RMSE*)、归一化平均偏差 (*NMBE*) 和相对误差 (δ)。经分析计算，本构方程的 *R*、*AARE*、*RMSE* 和 *NMBE* 分别为 0.99035、5.40%、9.60 MPa 和 -2.75%。根据本文考虑应变效应的 Arrhenius 型本构方程所预测的流变应力与实验值的相对误差在 -22.37% ~ 7.28% 之间。此外，流变应力预测值与实验值相对误差在 ±10 % 以内的占 81 %。统计分析结果表明，本文所提出的本构方程能够较准确的描述实验钢在给定变形工艺参数下的高温流变行为。

Z-PO-18

氢饱和和硅重构的 6H-SiC (0001) 表面缺陷团簇的演化机制

汪婷婷, 徐紫巍, 张相召, 刘桂武, 乔冠军

江苏大学

阐明表面缺陷团簇的形成机制对功能材料的电子性能调控起重要的作用。本论文中，我们利用第一性原理的方法分析氢饱和的和 $(\sqrt{3} \times \sqrt{3}) R 30^\circ$ 硅重构的 6H-SiC (0001) 表面上从单缺陷到缺陷团簇的形成机制与演化路径。计算所得形成能结果表明在两种表面上硅缺陷 (VSi) 倾向于在最表面的第一 Si-C 双原子层出现，这主要归因于其具有低的形成能和晶格畸变程度。同时单独的 Si 和 C 缺陷倾向于演化成碳硅双缺陷 (VSiVC)。另外，我们系统计算和比较了两种表面上不同缺失原子数目和不同空间结构的缺陷团簇 V_n (n 代表缺失的 Si/C 原子数目) 的形成能，从中发现了缺陷团簇形成的最低能量路径。当缺失原子数目小于等于 6 时，缺陷团簇倾向于在最表层上进行二维扩展，然而当缺失原子数目大于 6 时，缺陷团簇会纵向延伸至内部的 Si-C 原子双层。由最低能量路径所得的拟合曲线显示一定数目的缺陷团簇的形成能与缺失 Si/C 原子数目的平方根存在正比关系，这就意味着在碳化硅表面缺陷团簇的演化主要满足二维扩展模式。另外，具有高对称性的缺陷团簇具有更低的形成能，因此更易存在。

Z-PO-19

MF_n 型超卤素团簇的第一性原理研究

吴苗苗, 张翔, 张博然, 马向东

中国矿业大学 (北京)

本文对过渡金属元素 Mo, W, Sc, Ti 与卤素原子 F 相互作用所形成的团簇结构进行了第一性原理计算模拟研究。通过分别对 MoF_n, WF_n, ScF_n, TiF_n (n=1-7) 稳定团簇的电子亲和能以及垂直电离能的研究发现：对于 MoF_n, WF_n (n=1-7) 团簇结构，当相应金属原子结合 F 原子的个数达到六个以后，其电子亲和能大于 3.6 eV，表现出超卤素的特性；对于 ScF_n, TiF_n (n=1-7) 团簇结构，当相应金属原子结合 F 原子的个数达到四个以后，其电子亲和能大于 3.6 eV，表现出超卤素的特性；研究结果为实验研究合成新的超卤素结构提供了一定的理论指导。