

## Z.材料模拟、计算与设计

分会主席：赵纪军、孙志梅、马琰铭、刘轶、李默、吕广宏

### Z-01

#### Inverse Design and Computational Studies of Novel Solar Energy Materials

龚新高

复旦大学 200433

With the rapid development of the modern computational techniques, computational studies on the condensed matter, including understanding physical mechanism, simulating specific dynamics processes and designing desired materials, have played a more and more important role. A direct design of materials with desired properties, so-called inverse design, has been a long-standing dream in computational materials science.

In this talk, I will first show our newly developed algorithm for the inverse design of materials (IM2ODE: Inverse Design of Materials by Multi-Objective Differential Evolution). As an example, I will demonstrate how we can obtain a direct-gap elemental semiconductor phase that is proper for the solar energy absorbers with this package. The band offset is a fundamental property in designing of solar cell. However, both the theoretical prediction and experimental determination are not trivial. I will talk about our new algorithm on the calculation of band offset, comparison shows that the new algorithm has obvious advantages over previous methods.

### Z-02

#### 功能导向的新材料设计

张立军

吉林大学 130012

近年来，基于计算机数值模拟的材料设计研究日趋成为加速新材料开发进程的有效途径。由于材料模拟方法的发展和计算机运算速度的跃变，我们可以在接受的时间内完成对成千上万候选材料结构的计算，这为材料设计的顺利开展创造了条件。开展以优化某种特定功能为目的的材料设计研究可以指导实验快速找到性能优异的功能材料，同时有助于加深对材料“结构—性质”对应关系的物理解。

通过发展高效而可靠的材料设计方法，包括高通量计算方法和全局智能优化方法（如粒子群优化算法）结合第一性原理电子结构计算，我们以关键功能为导向，围绕光伏材料、光电信息材料、透明导电薄膜、超硬材料、电子化合物材料等重要体系，探索性地开展了材料设计研究。在这里我将和大家分享一下我们在这些题目中所得到的初步研究结果、有待解决的难题以及面临的挑战。

关键词：新材料设计；结构预测；新能源材料；功能材料

### Z-03

#### 基于第一性原理的高通量材料模拟在能源材料设计中的应用

朱虹

上海交通大学密西根学院 200240

随着计算机能力以及理论模拟方法的进步，运用高通量材料计算模拟快速搜索、发现或优化材料的性能已成为可能。自 2011 年—美国材料基因组计划启动以来，高通量材料计算模拟作为该计划的一个重要组成部分已取得了一定的成果—实现了材料多种性能理论模拟的高通量化，建立了庞大的材料计算性能数据库（例如，MIT 和 Berkeley 实验室的 Materials Project, Duke 大学的 Aflow），与此同时也积累了对这些海量材料性能进行挖掘和计算机学习，获得材料的优化原理，甚至是逆向设计预测新材料的经验。迄今为止，基于第一性原理的高通量材料计算模拟已被用于包括离子电池、太阳能电池、光催化、超级电容器、热

电等新能源领域相关的材料开发。本报告将主要讨论国内外在运用第一性原理高通量计算设计新能源材料方面取得的一些最新进展。

关键词：高通量材料模拟，能源材料

## Z-04

### 计算材料学在锂离子电池研发中的应用

施思齐

上海大学 200444

锂离子电池目前已成为国际竞争的热点，很多专家认为锂离子动力电池就如同今天的石油一样具有重要的战略意义。关于计算材料学在锂离子电池材料行业的应用，国际上是从 1998 年麻省理工学院 Ceder 等于《nature》上发表题为“使用第一性原理计算来指导锂离子电池正极材料的合成”开始的。国内从 2001 年开始攻读博士学位以来，本人在也做了一些工作。为加速动力锂离子电池的研发，将计算材料学和实验有机结合起来地深入理解锂离子电池所涉及的基础科学问题是非常必要的，主要包括电池材料的体相/表面/界面结构与离子输运之间的构效关系、多电子转移的微观机理、锂离子在电极/SEI 与 SEI/电解质界面的热力学和动力学行为。本报告将着重结合本人和合作伙伴开展的一些工作介绍近些年来在这方面的主要进展，并对今后计算材料学在锂离子电池研发中扮演的角色进行了展望。

关键词：锂离子电池，计算材料学

## Z-05

### 新型二维有机可见光催化剂的设计及其光催化性能研究

蒋雪<sup>1,2</sup>, 王鹏<sup>1,2</sup>, 赵纪军<sup>1,2</sup>

1. 大连理工大学三束改性教育部重点实验室，大连 116024

2. 大连理工大学物理与光电工程学院，大连 116024

在石墨烯研究热潮的带动下，其它二维层状材料也相继被合成，并在包括催化剂在内的诸多领域取得了实质性的研究进展。现有的二维可见光催化剂多为无机材料；而价格更低廉、制备工艺更简单、机械柔性更好的二维有机材料却鲜有报道。我们以二维有机可见光催化剂为研究目标，通过第一性原理计算，基于能带工程和逆向设计的研究思路，即通过设计和控制前驱体、合成方式、官能团及其堆积模式，调控一系列二维有机骨架结构（COF）的能隙、光吸收、导带/价带能级等参数，评估其在可见光催化领域应用的可行性和最优结构。最终，我们发现若干具有特定组分，特定构造模式的二维有机骨架结构能够在可见光下分解水产氢，是一种潜在的新型可见光催化材料。我们的理论预测不仅识别出无机可见光催化剂的有机替代物，而且对于推动二维有机材料的深入研究，探索其它二维有机光电功能材料具有一定的理论指导意义。

关键词：二维有机材料；第一性原理；可见光催化剂；能带工程

## Z-06

### CALYPSO 结构预测方法及其在材料结构设计上的应用

王彦超, 马琰铭

吉林大学超硬材料国家重点实验室 130012

根据材料性质开展功能材料的设计一直是材料科学领域的热点问题。而材料的宏观性质往往与其微观结构密切相关。因此确定材料的微观结构是开展功能材料设计的基础。实验上可以通过多种方法来确定材料的结构。但实验测量往往受到样品的纯度、衍射信号强弱、实验条件不足等限制。此时，有必要通过理论方法来确定材料的结构，进而开展功能材料的设计。但是，由于材料结构势能面的复杂性导致在只给定材料化学组分的条件下，从理论上确定材料的结构一直是一个极具挑战的难题。我们研究组基于粒子群多目标群智优化算法以及多种结构处理方法，发展了 CALYPSO 结构预测方法[1-2]，在此基础上开发了拥有自主知识产权的同名结构预测软件包（www.calypso.cn）。CALYPSO 软件包对学术研究是免费使用的，目前已经被国内外近 1000 个用户签订协议使用，发表高水平论文 150 多篇。利用 CALYPSO 方法和软件可以预

测三维晶体，零维的团簇或孤立分子[3]，二维层状材料[5]、表面重构[4]以及二维材料的吸附等体系的微观结构，并可以根据需要进行功能材料（超硬材料等）的结构设计。目前 CALYPSO 方法已经应用到如层状材料，高压超导，超硬材料等功能材料设计研究领域并取得了成功。

关键词：CALYPSO，结构设计

## Z-07

### Inverse Design of Inorganic Electrides

Yunwei Zhang, Hui Wang, Yanchao Wang, Yanming Ma

State Key Laboratory of Superhard Materials, Jilin University

Electrides, in which all of or part of the valence electrons occupy interstitial regions in the crystal and behave as anions, have been synthesized at ambient or high-pressure conditions. Their loosely bound anionic electrons markedly differ from those nearly free electrons in metals or trapped electrons at specific sites such as F-centres, that make electrides good candidates for electro-active materials.

Motivated by potential applications, we report a developed methodology to systematically design electrides for given chemical systems. The new approach is based on the swarm-intelligence CALYPSO algorithm on structure prediction

and requires only the chemical compositions to predict the pre-defined descriptor for electride phases, from which the energetically preferable electrides are readily accessible. In contrast to the traditional ground state structure prediction method where the total energy was solely used as the fitness function, here we adopted the degree of interstitial electron localization as the fitness function in combination with the first-principles calculation to select the optimal solutions for a description of given chemical systems.

Here, we conducted a large-scale search for new binary electrides with various stoichiometries. A series of energetically favorable electrides have been predicted and an experimentally known two-dimensional electride  $\text{Ca}_2\text{N}$  has been successfully reproduced. The result suggested that our approach is reliable and can be widely applied into design of new electrides.

关键词：Functional materials design, electrides, ambient or high-pressure conditions

## Z-08

### CuGaS<sub>2</sub> 同一第 VA 元素的非补偿性共掺杂以实现中间带

韩苗苗<sup>1,2</sup>, 曾雉<sup>1,2</sup>

1. 中国科学院合肥物质科学研究院

2. 中国科学技术大学

中间带从 1997 年被提出以后，最近 3 年成为成为高效电池的研究热点之一。部分填充的中间带作为跳板，能够实现三光子吸收过程，从而增加光电流，又当中间带是孤立的时，不会影响相应的输出电压，最终获得高效的电池效率。因此，寻找合适的母体材料和掺杂原子以期得到优良的中间带材料具有重要的意义。不同种元素组合的 n-p 非补偿性共掺杂的方法已经被证实是一种有效的在宽禁带半导体中产生中间带的方法。这里，我们提出了一种不同的 n-p 非补偿性共掺的方法。将 CuGaS<sub>2</sub> 作为母体材料，同一第 VA 元素（N、P、As 或 Sb）作为掺杂元素，同时替换 Ga 和 S 原子以实现 n-p 非补偿性共掺杂。

研究表明，同一第 VA 元素 Ga 和 S 位非补偿性共掺杂确实可以在带隙中产生部分填充的孤立的中间带。中间带由 VA-p、S-3p 和 Cu-3d 的杂化态贡献。中间带的电荷密度主要集中在掺杂原子和近邻的 S 和 Cu 原子上。此外，掺杂后由于中间带的存在光吸收有所增强。我们还进一步分析了掺杂后的稳定性问题，结果表明，P、As 或 Sb 共掺可以得到稳定的材料化学势生长区间，而 N 却不能。贫 Ga 的环境有利于中间带材料的生长。

因此，P、As 或 Sb 非补偿性共掺的 CuGaS<sub>2</sub> 很有希望应用在光伏领域。此外，这种共掺杂的方法也许可以应用在其他需要可控掺杂的功能材料中。

关键词：非补偿性共掺杂 中间带 态密度 形成能

## Z-09

### 贝里相位与拓扑量子材料设计

姚裕贵

北京理工大学物理学院 北京 100081

在凝聚态领域，量子力学贝里相位理论已成功地应用到材料中电子波包运动、反常霍尔效应、铁电极化、量子霍尔效应、 $Z_2$  拓扑绝缘体、量子反常霍尔效应等相关物性的研究中。本报告将首先介绍固体中的贝里相位理论以及诱导的相关效应，特别是其在拓扑绝缘体中的应用；然后介绍拓扑不变量  $Z_2$  和陈数的第一性原理计算方法，以及近年来我们组在新型二维拓扑材料（如硅烯、铋烷及类似体系、 $\text{BiBr}_4$  等）理论设计方面的工作；最后探讨在上述材料中实现量子自旋霍尔效应、量子反常霍尔效应、量子谷霍尔效应和拓扑超导电性等新奇量子现象的可能性。

关键词：贝里相位，拓扑绝缘体，量子自旋霍尔效应，量子反常霍尔效应，拓扑超导

## Z-10

### 拓扑半金属 $\text{Na}_3\text{Bi}$ 的结构稳定、拓扑相变和超软变形

陈星秋

中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室 110016

自旋-轨道耦合效应对电子能带结构激发一种反转效果，会导致奇妙的拓扑性质，拓扑绝缘体的出现就是这种性质体现，也是当前材料和凝聚物理的前沿学科。与绝缘体不同，金属材料能带结构十分复杂，该效应必然会对金属能带产生影响，问题是反转拓扑能带能否从金属的常规能带中区分出来。基态时， $\text{Na}_3\text{Bi}$  就是一类重要的拓扑 Dirac 半金属材料，即导带和价带刚好接触在两个离散的点，导致一个零能隙，被称为石墨稀的三维版本。增大压力到 0.8GPa， $\text{Na}_3\text{Bi}$  发生相变到一个立方结构，具有与  $\text{HgTe}$  相似的拓扑半金属，具有非常特殊的弹性力学性质，沿着对角四方的弹性变形具有超软液态的特点，可以快速可逆地实现从拓扑半金属到拓扑绝缘体的转变。

关键词：拓扑金属、弹性变形、能带理论、第一原理计算

## Z-11

### Adsorption and Reactivity of $\text{CO}_2$ coadsorbed with $\text{H}_2\text{O}$ on Rutile (110) Surface

Li-Min Liu

Beijing Computational Science Research Center 100084

**Abstract:** The conversion of  $\text{CO}_2$  using sun-light source has the potential to produce useful fuels or valuable chemicals while decreasing  $\text{CO}_2$  emission from the use of fossil fuels. Here, we use the first principles combining with periodic continuum solvation model to explore the adsorption and reactivity of  $\text{CO}_2$  coadsorbed with  $\text{H}_2\text{O}$  species on the rutile (110) surface in the water environment.

关键词：第一性原理

## Z-12

### 超化学计量钪氧化物形成机制的电子结构计算研究

敖冰云

表面物理与化学重点实验室 621907

随着核能技术的大力发展，人们迫切需要了解锕系材料的基本性质。研究人员已经给出了很多锕系材料结构和热力学等宏观数据，但是对于全面理解锕系材料的性质还远远不够。由于锕系材料实验表征的困难性，理论和模拟方法被寄予厚望。然而，锕系材料复杂的晶体结构、相对论效应、自旋-轨道耦合作用及强关联

电子特征等性质的存在，理论计算同样面临严峻的挑战。特别是铀，其 5f 电子处于离域和局域的临界点，电子结构异常复杂，被认为是元素周期表中最复杂的元素。在众多奇特性质中，铀的化学价态存在很多未解之谜，特别是固态铀氧化物的最高化学价态。长期以来，具有+4 价的铀的二氧化铀一直被认为是其最高价态的氧化物，因而  $\text{PuO}_2$  也被作为铀贮存的标准。然而，2000 年美国科学家在 *Science* 上报道他们发现了更高价态的铀氧化物  $\text{PuO}_{2+x}$ ，这一发现对于氧化物贮存提出了更高要求。随后，各国研究人员在超化学计量铀氧化物是否会形成以及形成机制上开展了广泛的研究，但是仍存在很大的分歧。理论研究也仅仅限于  $\text{PuO}_{2+x}$  基态性质电子结构计算以及可能的形成机制的初步探索。本文采用 DFT+U 为主的电子结构计算方法，研究了  $\text{PuO}_2$  与一系列可能的氧化剂的反应行为，提出了一些新见解。结果表明， $\text{H}_2\text{O}$  对于超化学计量铀氧化物的形成起到关键作用， $\text{PuO}_2(\text{OH})_x$  是超化学计量铀氧化物最可能的存在形式，以往被广泛探讨的  $\text{PuO}_{2+x}$  只能作为中间产物。

关键词：铀；强关联电子体系；密度泛函理论；超化学计量氧化物

## Z-13

### $\alpha$ 铀的弹性、电子、光学以及热力学性质的第一性原理计算

任志勇<sup>1</sup>, 罗超<sup>2</sup>

1. 表面物理与化学重点实验室
2. 中国工程物理研究院

目的：为了获得  $\alpha$  铀的晶格常数、平衡态体积、弹性常数、电子能带结构、光学常数以及热力学性质等，为实验研究奠定理论基础。

方法：基于密度泛函的第一性原理，准谐德拜模型。

结果：采用第一性原理成功获得了  $\alpha$  铀的晶格常数、平衡态体积、弹性常数、电子能带结构以及光学常数等性质；同时利用准谐德拜模型计算了压强从 0~100GPa、温度从 0~1200K 下  $\alpha$  铀的相关热力学性质。

结论：晶格常数和弹性常数与实验和其他第一性原理计算结果符合较好。通过弹性常数以及其他多晶弹性模量的计算发现， $\alpha$  铀表现出各向异性以及脆性行为。 $\alpha$  铀中费米面附近以 f 电子占据为主。压强为 100GPa 时  $\alpha$  铀结构保持稳定。相同温度下，体积模量和德拜温度随压强增加；相同压强下，体积模量和德拜温度随温度减小。到 300K 时，膨胀系数  $\alpha$  增加较快，此后趋于平稳；相同温度下， $\alpha$  随压强增加而减小。从 0 到 800K，热容随温度迅速增加；T1000K 时， $C_v$  趋于杜隆-珀蒂极限。

关键词：铀；第一性原理；弹性常数；电子结构；光学常数；热力学性质

## Z-14

### 碳硅烯和石墨炔狄拉克锥能带结构成因：密度泛函和紧束缚近似理论研究

秦绪明<sup>1,2</sup>, 刘轶<sup>2</sup>, 迟宝倩<sup>1</sup>, 李小武<sup>1</sup>

1. 东北大学理学院材料物理与化学研究所 辽宁 沈阳 110819
2. 上海大学物理系和上海材料基因组工程研究院

具有狄拉克锥 (Dirac Cone, DC) 能带结构的体系通常具有极高的电子迁移率，因而在纳米电子器件中具有潜在应用。除了石墨烯和硅烯被发现具有 DC 外，碳硅烯和石墨炔体系也被发现有 DC 特征。本工作结合密度泛函理论和紧束缚理论计算，以碳硅烯  $g\text{-SiC}_3$  和  $g\text{-Si}_3\text{C}$  以及  $\alpha$  石墨炔为例探讨了狄拉克锥能带结构的形成机制。我们提出基于相邻碳原子环之间耦合的“圈耦合”机制解释碳硅烯  $g\text{-SiC}_3$  或  $g\text{-Si}_3\text{C}$  的狄拉克锥成因。 $\alpha$  石墨炔的狄拉克锥形成可归因于类似的“圈组合”机制。这些机制的理解为设计新型费米狄拉克系统提供理论依据。

关键词：狄拉克锥 碳硅烯 石墨炔 密度泛函理论 紧束缚近似

## Z-15

### Tc-P 共掺杂单层 MoS<sub>2</sub> 光电特性的第一性原理计算

范梦慧, 谢泉

贵州大学大数据与信息工程学院 550025

目的: 采用第一性原理的赝势平面波方法, 对比研究了未掺杂和掺杂过渡金属 Tc、非金属 P 及 Tc-P 共掺杂的单层 MoS<sub>2</sub> 的电子结构和光学性质的影响, 使之能为单层 MoS<sub>2</sub> 用于制备各种器件提供理论依据。

方法: 采用基于密度泛函理论的第一性原理的赝势平面波方法进行计算, 计算由 CASTEP(Cambridge serial total energy package)软件包完成。计算中选取的原子价电子分别为 Mo:4s<sup>2</sup>4p<sup>6</sup>4d<sup>5</sup>5s<sup>1</sup>, S:3s<sup>2</sup>3p<sup>4</sup>, 首先采用 BFGS (Broyden, Fletcher, Goldfarb and Shannon)算法对体系进行几何优化, 得到稳定的结构体系。在优化稳定的结构体系下分别计算不同类型掺杂的能带结构、电子态密度和光学性质。

结果: 掺杂有效改变费米面附近的电子结构, 使得导带向低能方向偏移, 并且带隙由 K 点转化为点, 形成点的直接带隙半导体。掺杂 P 带隙值变小, 形成 p 型半导体; 掺杂 Tc 带隙变宽, 形成 n 型半导体; Tc-P 掺杂, 由于 p 型和 n 型半导体相互调制, 单层 MoS<sub>2</sub> 转变为性能更优的本征半导体; 掺杂使光跃迁强度减小, 且向低能方向偏移。

结论: 对单层 MoS<sub>2</sub> 实施 Tc-P 共掺杂, 能有效调制单层 MoS<sub>2</sub> 的光电性能。

关键词: 电子结构; 光学性质; 第一性原理; 掺杂; MoS<sub>2</sub>

## Z-16

### ZrX(X=Ti, Hf, Sc)固溶体系力学性质的第一原理研究

黄孙超<sup>1,2</sup>, 曾雉<sup>1</sup>

1. 中国科学院固体物理研究所材料物理重点实验室
2. 安徽大学物理与材料科学学院

合金工艺广泛地应用在国防、人类生活等各个领域。对材料的合金化一方面可以改善材料的物理化学性质, 另一方面, 也可以丰富材料的物理化学特性。近年来锆基合金引起了核领域和生物领域的广泛关注。为了丰富锆基材料的力学性质并深入了解锆在合金化时力学性能的变化规律和机制, 我们系统地研究了锆钛、锆钪和锆铪三种二元固溶体系的力学性能。

本文采用准无序结构模型 (Special quasi-random structures), 为锆基二元固溶体系分别构建成分为 0.25, 0.5, 0.75 的无序结构, 同时用密排六方格子来研究单质的力学性能以及采用包含 16 个原子的超胞来研究固溶极限合金。基于以上结构, 利用第一性原理计算了固溶体系的弹性常数、体弹模量和泊松比等力学性质。

研究表明, 锆和钪或者铪在形成合金时, 它们的弹性常数、弹性模量、杨氏模量、泊松比等物理量都随合金元素的摩尔比成线性变化, 同时由合金化引起的晶格畸变和弹性常数的对称性偏移度都很小。当锆和钛形成合金时, 合金的力学韧性显著比锆和钛单质的力学韧性好, 并当钛的摩尔分数比大约为 0.44 时, 合金的力学韧性最好。通过数据分析和物理分析, 我们发现, 锆钛、锆钪、锆铪体系的体弹模量随合金元素的摩尔比的变化关系可以很好地用下列函数描述:

$$y = B_{Zr}(1-x) + B_X x + (x+x_2)F$$

其中  $x$  是合金元素的摩尔分数,  $B_{Zr}$  是锆的体弹模量  $B_X$  是合金元素的体弹模量,  $y$  是  $Zr_{(1-x)}X_x$  合金的弹性模量,  $F$  是和合金体系有关的一个常数。基于这样一个函数, 我们可以得到整个成分区间的体弹模量, 为以后的研究打下基础。

总而言之, 锆的弹性常数、弹性模量、杨氏模量、泊松比等物理量可以通过和钪和铪等形成合金来线性剪裁。锆的力学韧性可以通过和钛形成合金来显著改善。

关键词: 合金、固溶体、SQS、弹性常数、体弹模量、力学韧性

## Z-17

### Using dispersion-corrected DFT to predict and interpret free energies of self-assembled monolayer formation from organic solvent

Jeffrey Reimers

Shanghai University Sydney Technology University

Dispersion-corrected density-functional (DFT) theory coupled with dispersion-corrected self-consistent reaction field (SCRf) methods for treating solvation are shown to adequately describe the free-energies of formation of various polymorphs of some tetraalkylporphyrin self-assembled monolayers (SAMS) on graphite in phenyloctane and octanoid-acid solutions at room temperature. Calculated free-energies are compared to ones implied from high-resolution scanning-tunnelling microscopy (STM) measurements of the SAMS, images whose intricate structural details are reproduced by the calculations. Dispersion interactions are treated using the D3 approximation, making the binding of the porphyrins to the graphite surface more stable by 100-200 kcal mol<sup>-1</sup> (5-10 eV) compared to standard DFT results. This strong attraction is essentially cancelled by desolvation and entropy effects, the subtleties of which control the observed polymorphism. While DFT and SCRf calculations are well established to describe much of chemistry in the gas phase and in solution, our demonstration that modern methods can quantitatively describe complex processes such as SAM polymorphism indicates the dawning of a new era in which all types of condensed-phase and biomolecular chemical processes will yield to a-priori computational techniques.

关键词: DFT SCRf SAMS STM

## Z-18

### 材料基因组研究与“赝立方”类金刚石结构热电材料的设计

张文清

1. 上海大学材料基因组工程研究院, 上海
2. 高性能陶瓷和超微结构国家重点实验室, 中国科学院上海硅酸盐研究所, 上海

长期以来, 热电材料科学研究主要集中在具有高对称性立方结构。高对称的晶体结构通常在价带顶或导带底具有高度简并或多能谷结构特点, 因而具有良好的电输运性能。类金刚石结构化合物由金刚石结构衍生而来, 由金属或半导体元素以类似碳元素的 sp<sup>3</sup> 杂化键构成的四面体堆积而成。由于构成元素的原子半径和化学价态不同, 材料的晶格发生扭曲, 从金刚石的立方结构转变为非立方结构; 同时, 晶格扭曲导致热导率低。当构成元素的种类和原子比例改变时, 材料的禁带宽度也随之发生变化, 其值覆盖 1eV 以下的窄带半导体和几个 eV 的宽禁带半导体或绝缘体。类金刚石结构化合物的本征低热导率和可调控的电学性能使其有望成为优异的热电材料, 其结构特点为研究在非立方结构实现高热电性能提供了绝佳的平台。

我们以非立方黄铜矿结构(四方结构)类金刚石化合物为例, 通过基于材料基因组工程的理论计算并结合实验, 提出了“赝立方”微观结构思路来筛选和设计具有非立方结构的新型热电化合物。“赝立方”微观结构设计思路是指部分长程有序离子晶格构成立方或者接近立方的框架, 来实现带边高度简并(能带收敛), 提高电输运性能; 而其他部分扭曲的离子晶格在短程上形成具有不同键长、键角和排列方式的不规则四面体, 可以造成强烈的声子散射而降低晶格热导率。“赝立方”微观结构设计思路可实现电输运和热输运的协同调控, 因此可获得高的热电优值, 为探索高热电性能的非立方结构材料体系提供了新的研究思路和指导工具。

关键词: 热电材料, 材料基因组

## Z-19

### 有机太阳能电池的形貌预测和效率预测

李有勇, 杜春苗, 纪玉金

苏州大学 功能纳米与软物质研究院

体相异质结太阳能电池的活性层的形貌对有机太阳能电池器件(OPV)的效率至关重要。目前只能通过静态的 2D TEM 观测 OPV 活性层的形貌。我们利用耗散粒子动力学(DPD)来确定 OPV 活性层的形貌, 我们证明 DPD 是预测 OPV 活性层的形貌的一种有效方法。基于预测的 OPV 活性层的形貌, 我们利用图论来预测 OPV 的效率。具体来说, 我们研究了聚 P3HT 和 PCBM 的太阳能电池。我们发现, 当材料的体积分数为 0.4~0.5 时 PCBM/P3HT 将显示连续的形态和最佳的效率, 与实验结果相一致。我们的研究表明, P3HT/PCBM 的形态和效率存在一个最佳的温度(413K), 和淬火实验的结果相吻合。同时我们得到的形貌中的域的大小与 TEM 分析结果相一致。我们发现, 溶剂添加剂对 PCBM/P3HT 的 BHJ 太阳能电池的去

溶剂化过程起着关键的作用，提高了相分离的程度和提高了活性层的形貌。我们的方法提供了预测太阳能电池的动态三维形貌和效率的直接方法，可通过优化不同的参数，提高器件的效率。

关键词：太阳能电池，形貌预测，效率预测

## Z-20

### 太阳能电池材料的缺陷物理研究

陈时友

华东师范大学 极化材料与器件教育部重点实验室 200241

近年来  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$  和  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  等多元半导体引起广泛关注，成为光伏材料研究的热点。与简单一元 (Si、Ge) 和二元 (II-VI 和 III-V) 族半导体不同，这些多元半导体中存在多种类、高浓度的缺陷和缺陷簇，对其电学、光学性质和光伏性能可能产生重要影响。通过第一性原理计算，我们对  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$  和  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  等多元体系的本征点缺陷和缺陷簇进行了理论预测，发现了多种高浓度缺陷及缺陷簇，计算了其离化能级位置。主要结论包括：(1)  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$  中的主要缺陷是阳离子替位缺陷，决定着其本征的 p 型导电性，而钙钛矿结构的  $\text{CsSnI}_3$  和  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  中，主要缺陷是空位或者间隙。(2) 在  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$  和  $\text{CsSnI}_3$  中，有高浓度的离化施主缺陷，在带隙中产生深能级，形成电子-空穴的复合中心，限制了其少子寿命，而在  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  中，高浓度缺陷都是浅能级或者不在带隙中产生缺陷态。(3) 在所有这些多元半导体的晶格中，都存在高浓度的中性缺陷簇，由相互补偿的受主和施主组成，如  $\text{V}_{\text{Cu}}+\text{Zn}_{\text{Cu}}$ ,  $2\text{Cu}_{\text{Zn}}+\text{Sn}_{\text{Zn}}$ ,  $\text{V}_{\text{CH}_3\text{NH}_3}+\text{V}_{\text{I}}$ ,  $\text{V}_{\text{Pb}}+2\text{V}_{\text{I}}$ ，这些缺陷簇将引起能带带边的移动，甚至成为载流子的陷阱。根据上述结果，我们分析了不同缺陷对光伏性能的良好和恶性影响，揭示了这些多元半导体光伏性能的微观限制机制。

关键词： $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , 缺陷, 计算

## Z-21

### Catalytic Activity of $\text{WS}_2$ , $\text{MoS}_2$ and $\text{VS}_2$ monolayer for Electrochemical Hydrogen Evolution

Xiaoli Fan<sup>1</sup>, shiyao Wang<sup>1</sup>, Yurong An<sup>1</sup>, Woonming Lau<sup>2</sup>

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

2. Chengdu Green Energy and Green Manufacturing Technology R&D Center

Finding earth-abundant and inexpensive materials to catalyze the electrochemical hydrogen evolution reaction (HER) is critical for turning hydrogen into a competitive clean energy source. Breakthrough-discoveries of high activity toward HER have been reported using two-dimensional transition metal dichalcogenides (TMDs),  $\text{MS}_2$  (M=Mo, W, V). Here we performed a comprehensive investigation on the basic sets of  $\text{MS}_2$  single-layer materials based on the ab-initio calculations to lay a theoretical framework on the promising results in  $\text{MS}_2$  monolayers. Our calculations indicate that the metallic ZT- $\text{WS}_2$  is actually worse than the semiconductor ZT- $\text{MoS}_2$  in catalysis HER although ZT- $\text{WS}_2$  is the best reported for TMDs. We show that both 1H and 1T phase of  $\text{VS}_2$  monolayer are HER active. We further show that the catalytic activity of  $\text{MS}_2$  monolayers for HER reduces with the increase of hydrogen coverage. Importantly, we find the HER performance of 1T- $\text{VS}_2$  is best at lower hydrogen coverage, but 1H- $\text{VS}_2$  is best when the coverage is larger, and strain is most helpful for  $\text{WS}_2$  in improving catalytic performance. For the first time, we report that spin-polarization is relevant in HER activity.

关键词：transition metal dichalcogenides; Catalytic activity; Hydrogen evolution; Hydrogen Coverage; First-principles calculation

## Z-22

### 锂空气电池的析氧反应界面催化机理研究与微观结构设计

刘建军

中国科学院上海硅酸盐研究所 200050



高比能量锂空气电池是未来大容量纯电动汽车潜在的动力电源技术之一，然而由于充放电动力学速率低限制了其实际性能的提高，导致其充电过电位高、循环性能差、电流密度低、电极材料不稳定、电解质分解等问题。发展高活性充电析氧反应的催化剂，提高反应速率是锂空气电池的研究热点。本报告主要是利用第一性原理热力学计算研究廉价的过渡金属氧化物、碳化物、氮化物、石墨烯等体系对充电反应的固-固界面催化作用机理，建立催化剂表面结构、界面结构、电荷转移特征、吸附能等对催化活性影响的相关规律，揭示高活性析氧反应催化剂的特征结构，通过催化剂的表面微观结构设计与晶体结构预测发展新型高活性的催化剂，改善电池电化学性能。本研究不仅解决锂空气电池中充电反应动力学速率低等基本科学问题，而且为“材料基因组”研究建立典范，为筛选高活性催化剂提供理论指导。

关键词：锂空电池，第一性原理计算，电催化，析氧反应

## Z-23

### 固液界面预熔化及其在浸润与材料夹杂物领域中的应用

杨洋<sup>1</sup>, Brian B. Laird<sup>2</sup>, Mark Asta<sup>3</sup>

1. 华东师范大学物理学系

2. University of Kansas, Department of Chemistry

3. University of California, Berkeley, Department of Materials Science and Engineering

目的：界面预熔化在诸多重要的自然界现象中扮演关键角色，如土壤霜胀、冰川运动等。在冶金领域中，晶界预熔化是铸造过程中热裂现象的重要原因之一。我们通过计算研究预言自然界存在固体表面和晶界预熔化之外的第三类预熔化[Phys.Rev.Lett. 2013, 110, 096102]，即固液界面中的预熔化。这类界面预熔化需要预熔物质和液相物质不互溶。我们将报道固液界面预熔化的独特性质以及其在浸润和材料夹杂物领域中的重要应用。

方法：分子动力学结合嵌入原子势的方法。构建并精细表征平衡态的异质 Al-Pb 固液界面的结构性随温度的变化行为，使用结构序参量和化学序参量计算预熔化层的厚度，证明预熔化的发生。构建在预熔化发生温度下的液滴浸润体系，测量预熔化对液滴铺展动力学以及平衡浸润形状的影响。构建在预熔化发生温度下的 Al 单晶中的液相 Pb 夹杂物体系，测量界面输运以及夹杂物质心运动。

结果：在液滴浸润模拟中，发现液滴铺展行为可以良好的使用动力学模型拟合，预熔化相变的发生并没有改变接触线的微观能量耗散机制，在小尺寸液滴体系中，平衡浸润形状展现出奇特的四相平衡结构。在液相夹杂物模拟中，我们发现纳米尺度的液相 Pb 夹杂物在 Al 单晶中进行布朗运动，界面预熔化的发生大大提高了夹杂物随机行走的扩散系数。

结论：固液界面预熔化是在表面预熔化与晶界预熔化之外的自然界中第三类界面预熔化。这类界面预熔化可能在夹杂物的清除以及表面结构改性等领域存在应用价值。虽然实验上还未直接观测到，我们认为这类界面预熔化可能会广泛存在于不互溶的二元合金体系，以及冰与液烃形成的界面中。

关键词：固-液界面，预熔化相变，分子动力学模拟，浸润，夹杂物

## Z-24

### 高性能合金的第一性原理研究

张华磊<sup>1</sup>, Levente Vitos<sup>2</sup>, B őrje Johansson<sup>2</sup>

1. 西安交通大学前沿科学技术研究院

2. 瑞典皇家工学院

目的：具有良好机械性能、耐腐蚀性能、高强度和高韧性等优异性能的高性能结构材料一直是材料领域的研究热点之一，优化合金组元及其配比是得到高性能材料的关键。如何利用第一性原理计算来优化合金成分，为开发和制造高性能合金提供理论指导是本文的目的。

方法：采用精确的 Muffin-Tin 轨道 (Exact Muffin-Tin Orbitals, EMTO) 和相干势近似 (Coherent Potential Approximation, CPA) 相结合的方法是目前国际上计算无序和有序合金的弹性常数的最优方法。先进的第一性原理合金理论 EMTO-CPA 方法，能够精确地描述组元成分连续变化的无序合金，是设计和筛选工程合金的理想工具。

结果: 通过选取传统的铁基合金无序体系为研究对象, 系统地研究了铁基合金的电子结构、单晶弹性模量、多晶弹性模量及脆性、韧性等机械性能, 计算得到的弹性模量的成分依赖性的变化规律与实验结果一致, 表明了 EMTO-CPA 方法研究铁基合金的弹性模量是可行的和可靠的。对于不同掺杂元素对铁基合金弹性模量的影响规律, 分别从体积效应、晶格稳定性和电子结构方面考察了合金化效应的机理。

结论: 第一性原理 EMTO-CPA 方法具有普适性, 所得到的经验将能够对未来的其它高性能合金 (譬如高熵合金, 口香糖金属, 以及高温合金等) 的设计提供帮助和指导。

关键词: 高性能合金, 弹性性能, 机械性能, 第一性原理计算, EMTO-CPA 方法

## Z-25

### 金属钨、钼、铁和钒中的杂质效应

刘悦林

烟台大学 264005

核聚变能被视为人类的终极能源, 然而它的最终实现很大程度上取决于可控热核聚变装置托卡马克以及未来反应堆中关键材料问题的解决。核聚变反应装置面对等离子体材料 (PFM) 和结构材料 (SM) 的选择尤为关键。PFM 和 SM 分别为托卡马克装置中直接面对等离子体的材料和起机械支撑作用的材料, 它们不断受到来自等离子体运行过程中各种粒子如氢同位素、氦粒子和中子等的轰击、瞬态高能量沉积或热冲击以及电磁辐射和电磁力的作用。这些作用将造成材料的辐照效应和严重损伤, 导致材料中缺陷的产生、迁移和聚集, 引起材料的肿胀和变形。同时, 碳、氮以及氧等在材料中作为固有杂质也将影响 PFM 和 SM 的性能。因此 PFM 和 SM 与氢同位素、氦、碳、氮以及氧等杂质的相互作用是制约可控核聚变能最终实现商业应用的关键工程技术问题之一。

钨/钼和铁/钒以其良好的热和力学性能被认为是核聚变托卡马克装置中面对等离子体材料和结构材料最有前途的候选材料。近期, 我们采用第一原理结合热力学统计模型的方法系统研究了氢同位素、氦、碳、氮以及氧等杂质与金属钨/钼/铁/钒的相互作用, 给出了这些杂质在金属中基本物理特性, 为核聚变反应装置中 PFM 和 SM 候选材料的设计、制备及最终应用提供了有效的理论参考依据。

关键词: 聚变材料, 杂质效应, 第一原理, 热力学统计模型

## Z-26

### Ni-Co 基高温合金的计算热力学及动力学研究

鲁晓刚

1. 上海大学材料学院

2. 上海大学材料基因组工程研究院

自上世纪六十年代发展起来的计算热力学从早期的计算不同成分、温度、压力等条件下材料的热力学性质和相图、相平衡为主, 逐渐向动力学领域扩展, 建立起有机集成了计算热力学理论的以扩散相变模拟、形核析出模拟和相场模拟为特色的计算动力学方法。同时, 结合实验数据、第一性原理计算、统计学方法及经验半经验理论, 运用 Calphad 优化评估技术, 建立适用于多元多相材料的热力学、动力学、物理性质以及力学性能等材料设计基础数据库。

本工作在计算热力学、动力学方法的框架内进行 Ni-Co 基高温合金的计算热力学、动力学研究, 建立了实用的材料设计基础数据库。

关键词: 计算热力学, 计算动力学, 基础数据库, Ni-Co 基高温合金

## Z-27

### 新型锆合金设计及强韧化研究

张新宇, 马明臻, 刘日平

燕山大学亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室 066004

锆及其合金具有中子吸收截面小、抗辐照、耐腐蚀等特点，在核工业和化工业中具有非常重要的应用价值。但除此之外，锆合金作为结构材料在其它领域几乎没有任何应用。由于具有抗辐照和良好的耐腐蚀性等特点，锆合金作为结构材料在航天机构活动件和废水、废气、废化学液体等处理方面具有重要的应用潜力和巨大的需求。基于第一性原理方法对锆及锆基体系的力学性质、电子结构、相变以及热力学性质等开展了较为系统的研究工作。研究过程发现 Zr 合金中存在特殊的 d 原子键型，这种特殊的电子结构使对应的合金表现出特殊的物理化学性质，有可能是理解 Zr 合金各种特性并进而设计新型 Zr 合金的关键。另外引入轻合金元素 B、C、N 进行锆合金体系设计及力学性能研究。成功制备出几种锆合金体系，通过调控成分和热处理工艺，体系具有很好的综合力学性能，有望作为新型的结构材料使用，为拓宽锆合金的应用范围奠定了基础。

关键词：锆合金，结构材料，强韧化，第一性原理

## Z-28

### Nb-Si-Ti 超高温合金相图和相平衡研究

王金三

中国航空工业集团公司北京航空材料研究院 100095

目的：新一代高推重比的航空发动机（推重比达到 12-15）对材料的承温能力提出了更高的要求，叶片用材料的承温能力需要达到 1200-1400°C，已经超越了目前在航空发动机上应用最广泛的 Ni 基高温合金的极限。而 Nb-Si-Ti 超高温合金具有熔点高、密度低和高温强度良好等特点，有望成为新一代的高推重比发动机叶片材料。本研究工作以开发新型 Nb-Si-Ti 超高温结构材料为目标。

方法：本文主要使用相图计算方法（CALPHAD）。该方法通过建立体系中各组元的热力学模型来计算相图和热化学性质。CALPHAD 技术评估二元和三元等低组元系的实验数据并建立的相应的热力学模型，再以此为基础结合少量多元系实验数据预测接近实体材料成分的多元合金相平衡、相分数、各组元的活度、相变驱动力等性质。目前，CALPHAD 方法已经成为国际范围内多元体系合金设计最有效的方法之一。

结果：本文使用相图热力学计算方法研究了航空发动机叶片用 Nb-Si-Ti 三元超高温合金体系。计算了 Nb-Si 二元相图、Nb-Ti 二元相图、Si-Ti 二元相图和 Nb-Si-Ti 三元相图，相应的相平衡关系，Nb-Si-Ti 液态合金的凝固路径，以及 Nb-Si-Ti 合金中各相的成分分数随温度的变化。

结论：本文的计算结果可对 Nb-Si-Ti 合金向多元体系发展提供基础的研究思路，并对相应体系的航空发动机叶片用超高温结构材料的设计与制备提供基础的指导信息。

关键词：航空发动机叶片；Nb-Si-Ti；相图；相平衡；热力学

## Z-29

### Nb、Cu、Zr 掺杂对 NiTi 合金马氏体相变温度和热滞影响的第一性原理计算

杨小兰, 马蕾, 尚家香

北京航空航天大学材料科学与工程学院 100191

NiTi 基形状记忆合金具有独特的形状记忆效应和超弹性，优异的力学性能以及良好的生物相容性，在航空航天、现代工业及生物医学等领域得到了广泛应用。实验研究表明合金元素掺杂对 NiTi 合金的相变温度及热滞起着关键性作用。第三元素对马氏体相变温度的影响机制及内在本质还需进一步研究。

采用基于密度泛函理论（DFT）在广义梯度近似下的平面波赝势方法，对  $\text{Ni}_{24}\text{Ti}_{24-x}\text{Nb}$ 、 $\text{Ni}_{24-x}\text{Cu}_x\text{Ti}_{24}$  和  $\text{Ni}_{24}\text{Ti}_{24-x}\text{Zr}$  的相稳定性和结构特性进行了计算。马氏体相变温度用奥氏体与马氏体两相能量差来表征，能量差越大，相变温度越高；相变过程中两相晶格参数之比越接近于 1，热滞越趋向于 0。

计算结果表明： $\text{Ni}_{24}\text{Ti}_{24-x}\text{Nb}$  体系晶格参数、体积随着 Nb 掺杂浓度的增加而增大。掺杂浓度小于 10.4at.% 时，马氏体单斜相 B19' 更稳定，奥氏体与马氏体两相能量差由于 Nb 掺杂而减小，降低了马氏体相变温度。

$\text{Ni}_{24-x}\text{Cu}_x\text{Ti}_{24}$  体系晶格参数、体积随着 Cu 掺杂浓度的增加而增大。Cu 掺杂对马氏体相变温度影响不大，马氏体稳定相由单斜 B19' 相向正交 B19 相转变，并降低了热滞。 $\text{Ni}_{24}\text{Ti}_{24-x}\text{Zr}$  体系晶格参数、体积随着 Zr 掺杂浓度的增加而增大。Zr 掺杂提高了马氏体相变温度，单斜 B19' 相为马氏体稳定相，增加了体系热滞。从理论上讨论了  $\text{Ni}_{24}\text{Ti}_{24-x}\text{Nb}$ 、 $\text{Ni}_{24-x}\text{Cu}_x\text{Ti}_{24}$  和  $\text{Ni}_{24}\text{Ti}_{24-x}\text{Zr}$  体系电子结构对马氏体相变影响的微观机制。

关键词: NiTi 合金, 第一性原理, 马氏体相变温度, 热滞

### Z-30

#### 第一性原理分子动力学模拟研究 $Mg_{95-x}Zn_xCa_5$ 非晶态合金的结构与电子性能和成分的关系

李舜宁, 刘剑波, 李家好, 王江, 柳百新

清华大学材料学院先进材料教育部重点实验室 100084

可降解的生物体植入材料, 由于其避免了取出植入物所需的二次手术而受到了研究者的广泛关注。镁锌钙金属玻璃基于其良好的生物相容性和优于传统晶态镁合金的抗腐蚀性能, 在近年来逐渐成为关于体内支架类植入材料的研究热点。为了进一步提高镁锌钙金属玻璃的稳定性和抗腐蚀性, 我们有必要对其原子尺度的结构性质以及原子间的成键特性有更深入的了解。为此, 我们采用了第一性原理分子动力学方法, 模拟了镁锌钙金属玻璃的微观结构并分析其化学键特性。研究表明,  $Mg_{95-x}Zn_xCa_5$  ( $x = 21, 25, 29, 33$ ) 中锌原子的配位多面体以二十面体和类二十面体居多, 并且会随着锌含量的增加而增加。在锌含量较高时, 这些锌的配位多面体会相互连通, 从而提高了非晶态结构的稳定性。通过对电子结构的分析, 我们发现锌原子和其周围的镁、钙原子之间存在部分离子键的特性。镁、钙原子将一定量的电子转移到锌原子上, 使锌原子带上负电荷, 从而在一定程度上导致了锌原子间的排斥。不同成分下, 非晶体系的原子结构特征和原子间的离子键特性将共同决定金属玻璃的结构稳定性。另一方面, 在锌含量较高的成分下, 合金中的锌原子形成了一个贯穿整个空间的网络结构。由于体系中的电子倾向于聚集在锌原子周围, 锌原子网络的形成将为电子提供一个连续的传导通道, 从而导致金属表面的均匀腐蚀, 促进了致密氧化膜的形成。这些研究结果为理解镁锌钙金属玻璃抗腐蚀机制提供了一个初步的线索。

关键词: 第一性原理分子动力学; 金属玻璃; 生物材料; 微观结构

### Z-31

#### 降低铝合金层错能的第一性原理研究

刘凌虹, 陈江华, 凡头文, 张勇, 袁定旺

湖南大学材料科学与工程学院, 高分辨电镜中心 410082

在辐照、高温淬火以及塑性形变等极端条件下, 铝合金中会出现大量层错。一般认为铝的层错能很高, 且很难降低。本研究希望找到一种合理的方法降低铝合金的层错能, 为提高铝及其他高层错金属的力学性能提供一个研究思路。

本工作利用第一性原理研究了温度及杂质浓度对铝内、外禀层错能的影响。分别考虑了本征缺陷、替位式溶质原子以及间隙原子这三类常见杂质。并通过电荷结构分析解释了在这些 Al 合金中层错能降低的物理机制。

结果表明, 本征缺陷很难降低铝的层错能, 然而, 在低温情况下, Ge, Y, Sr, Sc 等替位式溶质原子以及 C, N, H 等间隙原子能有效降低铝的层错能。

研究表明, 在一定条件下, Al 合金的层错能可以降低至  $45\text{mJ/m}^2$  以下, 显著增加了在 Al 合金中发生孪晶的可能性。

关键词: 层错能; 固溶体; 第一性原理能量计算; 铝材

### Z-32

#### 金属镁层错能的第一性原理研究

丁志刚, 李爽, 刘伟, 赵永好

南京理工大学材料科学与工程学院纳米结构材料中心 210094

层错能是表征材料变形机理的重要参数, 其数值的大小与位错的运动方式密切相关, 并直接影响材料的力学性能。

利用包含了范德华力修正的密度泛函理论, 我们系统讨论了金属镁沿着不同滑移系滑移时的层错能。

对于基面滑移，讨论了范德华力对四种典型的单一层错结构和多层层错结构层错能的影响，并分别讨论了沿(-1 2 -1 0)和(1 0 -1 0)两个方向滑移时的广义层错能曲线，从而获得了基面滑移的稳定层错能和不稳定层错能。对于非基面滑移，考虑到不同原子层之间距离是不相等的，沿不同面滑移引起的层错能也是不等的。通过计算比较不同面滑移的广义层错能曲线从而寻找到更合适的非基面滑移系。我们的计算结果还表明，范德华力对稳定层错能和不稳定层错能都有一定的影响。上述模拟结果有助于进一步分析层错对金属材料，尤其是密排六方金属力学性能的影响。

关键词：镁 层错能 第一性原理

### Z-33

#### Phase-field simulation of surfacial and volumetric defects in metallic glasses

GUANGPING ZHENG

Department of Mechanical Engineering and Shenzhen Research Institute, Hong Kong Polytechnic University, Hung Hom, Kowloon, Hong Kong, China

Phase-field simulation method is developed to investigate the plastic deformation in metallic glasses (MGs), which is typically localized. The simulation is based on the concept of volumetric deformation defects where the atom's local excess volume is defined as the volume of its Voronoi cell subtracted from the averaged volume of Voronoi icosahedrons of the same species in the stable and un-deformed glassy alloy. The surface deformation defects could be similarly defined with the Voronoi cell where surface atoms are involved in the construction of such cell. We show here with two case studies, i.e., plastic deformations of MG nanowires and nano-porous MGs, that the shear banding in MGs can be well captured and quantitatively measured by the phase-field simulation. (1) In MG nanowires, size effects on plastic deformation are found to be associated with their surfacial defects. Necking instead of shear banding is the dominant deformation mode in MG nanowire with diameter  $d$  fracture strength and the exponents are consistent with those of two-dimensional avalanche models for fracture. (2) In porous MGs with micro- or nano-sized pores and an array of pores, the effect of pore on plastic and thermo-plastic deformation is systematically investigated by defining the deformation defects on the pore surfaces. The relations between the patterned pores and shear-banding modes are successfully simulated, in consistent with experimental results. These case studies demonstrate that it is viable in engineering MGs with nano-sized surfacial defects for improving their ductility.

关键词：Metallic glasses; Deformation defects; Nanowires; Porous metallic glasses

### Z-34

#### Understanding glass formation from the atomic structure perspective in metallic glasses

Xiongjun Liu, Zhaoping Lu

State Key Lab for Advanced Metals & Materials, University of Science & Technology Beijing, Beijing 100083, P. R. China

Up to date, atomic packing nature of metallic glasses which lack periodic translational ordering remains mysterious although it has been extensively investigated over the last decades. As a result, the structural mechanism of glass formation is still unclear in metallic glasses, particularly the atomic structure response for the dynamic arrest during glass transition and the atomic structure-GFA (glass forming ability) relationship. In this talk, we will report our recent progresses in this regard with the help of computer simulations. Firstly, a universal structural description on atomic packing nature in metallic glasses will be presented; it is found that atomic packing in all metallic glasses can be well described by the combination of spherical periodic order (SPO) and local translational symmetry (LTS). Secondly, we revealed that glass formation is virtually the development process of one-dimension LTS ordering. The LTS ordering clusters form a percolating network that serves as the "backbone" of the rigid glass solid when the temperature approaches glass transition temperature, resulting in the frozen-in dynamics accompanying the glass transition. The percolation occurred via pinning different LTS clusters together, which only needs to adjust a small

amount of “joint” atoms in-between them and therefore the thermal energy consumption is very low. Thirdly, investigation of the dynamic evolution of structural heterogeneity indicates that good glass formers have not only the predominant structure with a large packing density at its liquid state but also excellent heritability of structural heterogeneity during cooling. There exists a solid correlation between the heritability of the structural heterogeneity and the GFA in metallic glasses. Our findings shed new insights into understanding of the nature of atomic structures and glass formation in metallic glasses.

关键词: Metallic glass; Atomic structure; Structural heterogeneity; Glass transition; Glass forming ability

### **Z-35**

#### **基于 ANSYS 的砂型铸造过程温度场和应力场的数值模拟**

张文苹, 张云鹏

西安理工大学材料科学与工程学院 710048

目的: 铸造过程的温度场、热应力场的数值模拟对于优化铸造工艺设计、防止缩孔、缩松、热裂纹等缺陷, 降低残余应力, 提高铸件质量起着重要作用。

方法: 研究建立了三维温度场、热应力场的有限元模型, 以及温度场中初始条件、边界条件、潜热处理的数学模型。根据铸造过程热应力场特性, 建立了铸件凝固过程中凝固以后阶段的热弹塑性模型本构方程, 并分析了材料高温力学性能参数、铸件/铸型边界条件等, 采用间接法进行热应力计算, 即首先进行热分析, 然后将求得的节点温度作为体载荷施加在应力分析中。

结果: 开发了基于 ANSYS 软件的温度场、热应力场分析方法。对典型圆盘铸件、应力框铸件进行三维温度场、热应力场有限元分析。研究结果表明圆盘铸件、应力框铸件的模拟结果和定性的理论分析相同, 出现应力集中部位与实际吻合。

结论: 基于 ANSYS 软件对铸件的温度场及应力场的有限元分析是可行的, 可依据 ANSYS 数值模拟分析结果优化铸造工艺或铸件结构, 提高铸件质量。

关键词: 温度场; 应力场; ANSYS; 有限元分析; 数值模拟

### **Z-36**

#### **Phase-field modeling of microstructure evolution during solidification with gas bubble nucleation and growth**

Lifei Du, Lianli Wang, Bin Zheng

Xi'an University of Science and Technology

The microstructure evolution during solidification of pure metal with gas bubble nucleation and growth is modeled by the phase-field method. Interface microstructure formation in the presence of gas bubble is simulated and discussed. A pressure correction equation is implemented to study the effect of pressure difference between the bubbles and melts. Results indicate that: if the pressure inside the bubble is larger than the pressure in the liquid phase, the gas atoms not only diffuse inside the gas bubble and but also can be ejected from the bubble, which makes the volume of gas bubble increase slightly; if the pressure inside the bubble is smaller than the pressure in the liquid phase, more gas atoms diffuse inside the gas bubble and less gas atoms are ejected from the bubble, which induces the volume of gas bubble increase largely.

关键词: modeling and simulation; microstructure; gas bubble; pressure correction; solidification

### **Z-37**

#### **TMS-113 镍基高温合金凝固、固溶及时效全过程微结构演变的实验测定及相场模拟**

曹东甲, 塔娜, 张利军, 杜勇

中南大学粉末冶金国家重点实验室, 中德“微结构”联合实验室, 长沙, 410083 410083

材料制备过程中微结构演变的定量描述是材料设计的核心。近年来基于精准热力学和扩散动力学数据库的相场模拟是对微结构演变进行定量描述一种行之有效的办法。

本工作选取第三代镍基高温合金 TMS-113(Ni-6.56Al-11.9Co-2.9Cr-0.1Hf -1.99Mo-6.0Re-5.96Ta-5.96W, wt.%)作为研究对象,采用 XRD、金相、SEM/EDX, EPMA、TEM 等技术相结合对其凝固、固溶及时效过程的微结构进行细致的实验测定。基于文献报道的热、动力学数据库,采用建立在多相场基础上的 MICRESS(MICROstructure Evolution Simulation Software)对 TMS-113 合金凝固、固溶及时效过程的微结构演变进行二维的相场模拟。

为了提高模拟效率,本工作在充分考虑凝固过程枝晶生长发生软碰撞的基础上提出了一种新的基本模拟单元。该模拟单元能完整地重现凝固过程枝晶生长的形貌演变特征。将相场模拟结果与实测数据进行对比,对相场模拟的数值参数进行调整实现了 TMS-113 合金凝固、固溶及时效全过程微结构演变的定量描述。此外,本工作还将所获得的热物性及数值参数直接应用于另一镍基超合金 DD90 制备过程微结构演变模拟,通过与实验结果对比,证实了本工作所获得的这套热物理参数在镍基超合金微结构模拟中的通用性。

本工作为镍基高温合金制备工艺的优化及新型镍基高温合金的设计提供了重要的理论指导。

关键词: 镍基高温合金; 微结构; 相场模拟; MICRESS

## Z-38

### 反相畴在 Ni-Al 体系中 $\gamma'$ 相演变过程中作用机制的相场研究

杨敏<sup>1</sup>, 韦华<sup>2</sup>, 张军<sup>1</sup>, 金涛<sup>2</sup>, 刘林<sup>1</sup>, 孙晓峰<sup>2</sup>

1. 西北工业大学凝固技术国家重点实验室

2. 中国科学院金属研究所高温合金研究部

考虑  $\gamma'$  相弹性各向异性及其  $L1_2$  有序结构形成的四种反相畴作用,

利用连续相场方法研究了弹性应变场作用下 Ni-Al 二元体系中  $\gamma'$  相演变过程。

通过引入三个长程有序参量  $\eta_i(i=1,2,3)$  表征  $L1_2$  三种有序结构,研究四种平衡反相畴结构对  $\gamma'$  相长大、粗化过程的影响;分析了  $\gamma'$  相弹性各向异性对其演变过程影响,计算了方向和方向  $\gamma'$  相成分场随时间的变化、含有四种反相畴的  $\gamma'$  相平均粒子尺寸随时间的变化,考察了反相畴对  $\gamma'$  相形貌、尺寸的影响。

结果表明:在弹性应变场作用下,  $\gamma'$  相演化过程经历了球状→正方状→蝶状以及筏化过程。 $\gamma'$  相弹性各向异性的正负显著地影响  $\gamma'$  相的空间分布和  $\gamma/\gamma'$  界面移动速率,即负弹性各向异性情况下,  $\gamma'$  相沿方向分布,且  $\gamma/\gamma'$  界面沿方向的迁移速率大于方向;正弹性各向异性情况下,  $\gamma'$  相沿方向分布,且  $\gamma/\gamma'$  界面沿方向的迁移速率大于方向。反相畴结构明显地影响  $\gamma'$  相形貌演变,在一定程度上减缓了  $\gamma'$  相的长大、粗化,即在负弹性各向异性情况下,随着演变时间延长,非方向的相邻两个不同畴结构  $\gamma'$  相相界面逐渐转向方向,形貌上表现为“L”或“T”形,在随后的筏化阶段  $\gamma'$  相在形态上表现为不连续。

关键词: 相场方法;  $L1_2$  有序结构; 弹性各向异性; 反相畴;

## Z-39

### 六方小面向结构螺旋生长的界面各向异性、表面吸附以及动力学效应的相场法研究

董祥雷, 邢辉, 陈长乐, 段培培, 金克新

西北工业大学 710129

利用定量相场模型模拟了六方晶系小面向的螺旋生长过程,研究了各向异性、表面吸附、动力学过程等对螺旋形成机理、表面形貌、台阶扩散速率、螺旋间距的影响规律。结果表明,较大的各向异性有利于界面的推进,从而促进螺旋生长,但是由于潜在的曲率效应,各向异性导致了模型收敛性的降低。随着表面吸附率的增强,台阶扩散速率增加,螺旋间距降低。此外,表面吸附诱导界面曲率的变化,从而显著地影响了模型收敛性。对于动力学效应,随着界面粘附动力学系数的增加,小面向结构表现出向各向同性转变的形貌趋势,表明了动力学过程通过改变热力学平衡态调制界面曲率的作用。螺旋间距表现出随动力学系数的增加而显著降低的特性,反应了动力学作用通过台阶扩散速率定量控制螺旋的形成机制与生长过程。对于生长动力学机制,小面向与各向同性螺旋生长表现出略为不同的生长特性,其中小面向生长由于界面作用而处于亚稳态,因此相较于稳定的界面平衡态,其生长动力学机制表现出削弱的动力学过程依赖性。

关键词：螺旋生长，各向异性，动力学效应，相场方法

## Z-40

### 合金凝固高效率多晶定量相场模型及模拟

陈云, 亓欣波, 李殿中, 康秀红

中国科学院金属研究所 110016

采用多相场模型模拟多个不同取向的晶粒生长时，往往需要求解多个序参量的控制方程，计算量特别庞大，计算效率也很低。而在多晶相场模拟时，晶体取向的空间分布在晶体和液体之间或者晶体与晶体之间均可以看作是不连续变化的，进而可用明锐界面模型来描述。因此，在本文中，将二维的相场模型与界面前沿追踪方法相结合，建立了一个新的多晶相场模型。在这一模型中，采用 Karma 提出的合金单晶定量相场模型来描述界面的演化过程，而每个晶粒的取向则由界面前沿追踪方法来计算。由于仅需一个序参量就可以描述任意多个晶粒的生长过程，因此该模型要比常用的多相场模型的计算效率高很多。为检验模型的准确性，首先，模拟测试了过冷熔体中不同取向单个等轴晶的生长过程，测试结果显示，不同取向的等轴晶稳态生长速度完全相同，表明所使用的界面前沿追踪方法可以准确地计算晶体的取向。其次，模拟了合金过冷熔体中数个等轴晶的生长，并对多晶粒生长过程进行了分析和表征，同时将计算时间与多相场模型进行了对比。模拟结果表明，所建立的多晶相场模型不仅可以准确模拟早期自由生长和软碰撞阶段多晶生长动力学，而且计算效率比多相场模型高很多，尤其是模拟大量晶粒的生长。此外，当在模型中考虑晶粒之间的取向差对自由能的贡献时，模型即可扩展至多晶的直接碰撞生长过程。该研究得到了国家自然科学基金的资助（Grant No. 51401223）。

关键词：相场，界面前沿追踪，多晶生长，合金，凝固

## Z-41

### 铝基非晶合金相关体系热力学和动力学研究

黄帅雄, 刘立斌, 章立钢, 李显

中南大学 410083

铝基非晶态合金具有拉伸断裂强度高、热稳定性能好以及优良的耐腐蚀、耐磨性能等特性。这种高强度低密度材料在航空和交通等领域将备受青睐。但铝基非晶合金形成能力差的特点限制了其应用。利用相图热力学数据库并结合结晶动力学，通过体系中不同成分合金的等温冷却转变曲线及制得非晶所需的临界冷却速率的计算来探讨铝基非晶的形成能力。本文运用平衡合金法及相图计算软件研究了 Al-Co-Gd 和 Al-Co-Y 三元体系的相关关系，得到了自洽的热力学参数并用于非晶形成能力的计算。具体工作内容如下：

1. 通过平衡合金法对 773K 下 Al-Co-Gd 体系中的 Co<sub>5</sub>Gd 相进行验证，并确定了其存在。根据文献报道的相关相图信息，运用 CALPHAD，优化了 1173K 和 773K 下的 Al-Co-Gd 等温截面，并将计算的 Al<sub>0.5</sub>Co<sub>0.5</sub>-Gd 液相线温度与文献进行对比。用 Scheil 模型研究了 Al-Co-Gd 典型铸态样的非平衡凝固过程。通过利用热力学参数以及动力学方程，计算得到了时间-温度-相转变曲线（TTT 曲线）及相应合金的临界冷却速率，对比了不同成分合金的非晶形成能力大小。
2. 通过平衡合金法测得 Al-Co-Y 体系在 1173K 及 873K 下的部分相关关系，并发现成分比接近 1: 2: 2 的 AlCo<sub>2</sub>Y<sub>2</sub> 新相。根据实验结果及相关文献数据，运用 CALPHAD，优化了 1173K 和 873K 下的 Al-Co-Y 等温截面。

关键词：铝基非晶，CALPHAD,平衡合金法

## Z-42

### 应用 Peierls-Nabarro 模型研究纯镁中全位错对称倾侧小角度晶界

凡头文, 陈江华, 刘凌虹, 袁定旺, 张勇, 伍翠兰

湖南大学材料科学与工程学院，高分辨电镜中心，410082 410082



对称倾侧小角度晶界对超细晶镁合金的强度和延展性有着重要的影响,同时影响回复,再结晶,加工硬化,晶粒生长和超细晶粒的大小等。本文希望找到一种合理的模型,很好地给出其应力场和能量变化特征,特别是在位错芯区的变化,弥补传统线性模型的不足,促进相关实验的发展。

本文应用结合 Peierls-Nabarro 点阵化模型与第一性原理计算的广义层错能的方法详细研究了基面(0001)、柱面(10-10)和锥面(10-11)全位错对称倾侧小角度晶界的应力场和应变场分布,位错线能、晶界能以及位错芯能量的变化特征。

结果表明,所有面的应力场和应变场均随晶界中位错距离的减小或者随晶界角度的增加而呈收缩的特征,因而场梯度增加,但最大应力保持不变与单个位错相同。广义层错能越小或位错半峰宽越大收缩越快。应变场梯度的增加将导致对晶体中位错阻碍作用增加,而应力场梯度变大将导致位错芯区膨胀或压缩更厉害,增加溶质原子与位错尺寸相互作用。位错线能量随位错间距离变化可分为三个区间,位错间距大于至 300 变化很小(~10%),从 300 到 100 变化非常快(~70%),小于 100 时降低速度变慢,变化量约为 20%,此时位错芯区的能量约占位错线总能的一半。位错移动的 Peierls 力几乎不随位错间距离的变化而变化。研究表明,晶界中位错的相互作用将导致位错的应力场、应变场收缩,位错线能降低,但却不改变位错的 Peierls 力。

关键词: 倾侧晶界; 广义层错能; 镁合金; 位错; Peierls 力

## Z-43

### 普碳钢奥氏体动态再结晶的元胞自动机模拟

马璇<sup>1,2</sup>, 郑成武<sup>2</sup>, 李殿中<sup>2</sup>, 张兴国<sup>1</sup>

1. 大连理工大学材料学院
2. 中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室

本文采用 2D 元胞自动机方法(CA)对普碳钢奥氏体动态再结晶的微观组织演变进行了模拟研究。

所建 CA 模型以动态再结晶物理模型为基础,包含对热变形、再结晶形核与生长、动态变形晶粒形貌演化等过程的模拟,能定量描述动态再结晶流动应力曲线、再结晶转变动力学、晶粒尺寸演化、多轮次再结晶微观组织行为等特征,模拟结果与经验物理冶金模型的预报结果及实验结果吻合良好。

结合模拟结果,进一步探讨了应变速率及初始奥氏体晶粒尺寸对动态再结晶形核长大过程及再结晶晶粒分布情况的影响规律,从晶粒演化的角度解释了初始晶粒细化造成动态再结晶流动应力由单峰向多峰转变的机理及稳态晶粒尺寸的形成。

关键词: 元胞自动机, 动态再结晶, 奥氏体, 介观模拟

## Z-44

### 高指数面 Pt 纳米粒子的结构稳定性、热稳定性以及结构演化

曾祥明, 黄娆, 邵桂芳, 文玉华, 孙世刚

厦门大学 361005

高指数面的 Pt 纳米粒子由于其表面具有高密度的低配位原子,表现出了优越的电化学活性,因此得到了广泛的研究。

我们应用原子模拟的方法系统的研究了由不同高指数面所围成的 Pt 多面体纳米粒子的结构稳定性、热稳定性以及形状演化。这些多面体分别是由{hk0}面围成的二十四面体;由{hkk}面围成的偏方三八面体;由{hkk}面围成的三八面体。

计算结果表明,由{221}面组成的三八面体具有最好的结构稳定性和热稳定性;相反的,由{410}面围成的二十四面体具有最差的结构和热稳定性。这些纳米粒子的形状稳定性从高到低遵从地顺序一般是:三八面体>二十四面体>偏方三八面体。对于由不同高指数面围成的相同形状的多面体,它们的结构稳定性、热稳定性以及形状稳定性从高到低都符合{2k1}>{3k1}>{4k1}的规律。进一步的分析表明,表面上高配位原子占据的比例较高时有利于增强纳米粒子的热稳定性和形状稳定性。

这些结果表明 Pt 纳米粒子的稳定性和催化活性可以通过改变它们的形状和表面结构来进行调节。这不仅有利于研究者更深入地理解高指数面纳米粒子的表面结构和热力学稳定性，而且对实验上设计合成高催化活性和良好稳定性的高指数面贵金属纳米粒子具有重要的指导意义。

关键词：纳米粒子，催化剂，高指数面，原子模拟

## Z-45

### 点缺陷在应变玻璃转变中的作用

王栋, 王云志

西安交通大学 710054

应变玻璃态是在形状记忆合金中发现的一种新的局部晶格应变被冻结的无序态。应变玻璃转变的出现和形状记忆合金中的点缺陷的加入有关，点缺陷的引入阻碍了正常的马氏体相变，并有利于玻璃态马氏体的形成。应变玻璃转变还表现出不同于正常马氏体转变的特性（纳米畴结构、频率弥散特性、小的热滞等），这些特性表明应变玻璃转变在基础研究和新材料开发上的巨大潜力。然而关于应变玻璃转变的机制的研究还不完善，特别是点缺陷的类型如何影响应变玻璃转变，这一问题限制了新型应变玻璃合金的开发设计。因此，本工作通过相场动力学的方法，在 TiNi 形状记忆合金中引入不同强度、类型的点缺陷，研究点缺陷对于正常 R 相变和 B19/B19' 相变的影响。

通过对比缺陷所产生的 Von Mises 应变与相变应变之间的关系引入一个缺陷强度系数，模拟发现随着缺陷强度系数的增加，体系逐渐由正常的马氏体相变转变为连续的玻璃化转变并伴随着热滞后的减小，而温度-缺陷强度相图的建立暗示诱发应变玻璃转变所需要的缺陷强度是相变应变强度的 7 倍。

本工作揭示诱发应变玻璃转变所需要的缺陷强度和类型，以及要诱发应变玻璃转变所需要的缺陷强度大小，解释了实验中无法发现 B19 或 B19' 应变玻璃态的物理本质。研究工作为预测可能出现应变玻璃转变的合金体系提供了思路。

关键词：马氏体相变；应变玻璃转变；点缺陷；相场动力学

## Z-46

### 多级增强陶瓷基复合材料微观结构模型与力学参数预测

栾坤

中国科学院上海硅酸盐研究所 200050

本文以多级增强陶瓷复合材料为研究对象，对其多级增强结构和准静态力学性能进行测试与表征。该复合材料包括三个结构增强层级：微观结构、细观结构和宏观结构。其中，微观增强机制主要增强结构为碳纳米管，细观增强机制增强结构为碳纤维，宏观增强机制主要增强结构为具有交织结构纤维束。基于不同结构层次下材料力学本构关系和结构形态，采用分析模型和数值模型两种理论体系，用于计算准静态力学加载下材料响应过程，揭示其力学损伤变形机理与理论表征温度场下力学响应行为，阐释材料组成和结构与性能之间关系。并对复合材料在准静态力学加载下，材料失效模式、损伤容限、变形机理和力学参数进行理论评估和预测，提出材料性能改进和结构优化方案。

关键词：多级增强复合材料；力学性能；碳纳米管；有限元模型；周期性边界条件

## Z-47

### Multi-scale Computer Simulations of Reactor Materials: Challenges and Opportunities

Fei Gao

Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences, University of Michigan, Ann Arbor, Michigan 48109, USA

Rising global energy demand and its adverse environmental impact, especially greenhouse gas emissions, have led to renewed interest in nuclear energy. The increased use of nuclear power poses challenges for reactor materials and immobilizing high-level nuclear waste to meet environmental, non-proliferation, and security concerns. Reactor

materials, such as SiC and ferritic steels, and ceramic nuclear waste forms, such as pyrochlore compounds, will suffer radiation damage either from high-energy neutrons or from the alpha-decay of actinides and become structurally unstable.

Specifically, recent developments of multiscale simulations of radiation effects and materials performance in a fission or fusion environment, including ab initio calculations, self-consistent accelerated molecular dynamics, advanced kinetic Monte Carlo (KMC) methods, and phase field modeling, will be discussed. I will focus on one of the applications of multiscale modeling to study He behavior and materials performance in a fusion environment. These simulations provide important knowledge related to the binding properties and the relative stability of small He clusters, nucleation of He bubbles, the emission of self-interstitial atoms and dislocation loops from He clusters, as well as their interactions with microstructural features. Further, I will discuss how the atomic-level results can be used to inform mesoscale methods to study the growth of helium bubbles and their effects on the mechanical properties of RAF/M steels.

## Z-48

### 核能材料理论研究的近期进展——从核燃料到核包壳

都时禹

中国科学院宁波材料技术与工程研究所 315201

核能是世界广泛应用的能源模式。因此对于商业堆中最广泛使用的二氧化铀 ( $\text{UO}_2$ ) 和实验堆中采用的硅化铀的理论研究极为重要。另外,近年来新型包壳的开发受到人们的广泛关注。作为铅包壳管涂层的 MAX 相材料,以及作为第四代核反应堆包壳候选材料的碳化硅纤维增强复合材料 ( $\text{SiC}_f/\text{SiC}$ ),逐渐成为研究的热点。

在本次报告中,我们将汇报本课题组利用计算机仿真的方法在二氧化铀、硅化铀,以及 MAX 相涂层-核包壳界面及其  $\text{SiC}_f/\text{SiC}$  基体涂层界面等方面的研究进展。我们在工作中,我们利用直接计算方法,预测了  $\text{UO}_2$  的热导率等关键热学性质,计算了晶界热阻对于核燃料热传输性质的影响。同时,我们在工作中发现了  $\text{UO}_2$  的热导率具有特殊的各向异性,为新型核燃料的设计提供了重要理论依据,是近年来核燃料体系的重要发现。我们采用第一性原理,计算了  $\text{U}_3\text{Si}_2$  体系的电子结构的相关性质,分析了该核燃料体系的稳定机理,也预测了  $\text{U}_3\text{Si}_2$  的弹性常数和各种力学模量,以及缺陷形成能。在核包壳材料的研究方面,我们重点研究了 MAX 相材料作为核包壳涂层与传统铅包壳最稳定的界面结构和界面结合能,并探讨了包壳涂层上的 He 原子捕获机理。同时,我们也对 MAX 相的二维衍生材料---MXene 材料进行了一系列的计算工作。在  $\text{SiC}_f/\text{SiC}$  复合材料计算方面,我们发现了  $\text{SiC}_f/\text{SiC}$  复合材料中由于类石墨型裂解碳涂层内  $\text{sp}^3$  杂化碳原子成分显著降低而导致的高温失效的重要机制。我们发现,在 700-1000K 时,界面切变强度和涂层中  $\text{sp}^3$  碳原子数目同时显著下降,说明此类  $\text{SiC}_f/\text{SiC}$  复合材料高温下的界面失效机理在于涂层中  $\text{sp}^3$  杂化碳原子转化为  $\text{sp}^2$  杂化。这些理论计算的结果对于核用  $\text{SiC}_f/\text{SiC}$  复合材料的制备具有重要的借鉴意义。

总之,我们的报告内容将覆盖我们在核燃料和核包壳材料的一系列研究成果。希望通过本次交流报告,为从事核能材料研究的同僚提供新的思路。

关键词: 二氧化铀, 碳化硅复合材料, MAX 相涂层

## Z-49

### 金属钨中辐照点缺陷对晶界耦合运动的双重效应

牛亮亮<sup>1</sup>, 张颖<sup>1</sup>, 吕广宏<sup>1</sup>, 高飞<sup>2</sup>

1. 北京航空航天大学

2. 密歇根大学安娜堡分校

晶界耦合运动是金属多晶材料,特别是纳米材料体内重要的塑性形变机制。最近,晶界耦合运动作为聚变环境下面对等离子体候选材料钨中一种可能的自修复机制受到广泛关注。然而,体心立方金属中晶界耦合运动的微观机制尚不清晰,辐照点缺陷对晶界耦合运动的影响尚无系统研究。

本文通过分子动力学、分子静力学与 NEB 相结合的方法，系统研究了钨中两种典型晶界（小角与大角）耦合运动的微观机制与辐照点缺陷在其中起到的双重（抑制或促进）作用。

我们发现，晶界耦合运动以结构单元旋转的方式进行，运动模式符合 Cahn 等提出的几何理论模型；而点缺陷对其影响较为复杂，它取决于点缺陷在晶界区域的具体分布、点缺陷的浓度、点缺陷的类型、温度和晶界的类型等条件。

具体来说，杂质点缺陷 He 可极大降低晶界的运动能力；本征点缺陷（空位与自间隙原子）对于大角晶界的耦合运动起到“润滑”效应，而对于小角晶界则可能起到阻碍或“润滑”效应。本研究为聚变条件下利用晶界耦合运动提高钨基材料的抗辐照/自修复性能提供了重要的参考依据。

关键词：晶界耦合运动，钨，点缺陷，抑制，润滑

## Z-50

### 离子轰击作用对金属钛内氦泡破裂释放影响的分子动力学研究

梁力, 马明旺, 谈效华, 向伟, 王远, 程焰林

中国工程物理研究院电子工程研究所 621999

近年来随着核聚变技术的发展，有关氢及其同位素尤其是氦在金属中贮存方面的基础研究与工程应用日益引起广泛关注。氦在金属内贮存的过程中，通过  $\beta$  衰变，将闭壳层原子  $^3\text{He}$  引入到金属体内。含氦金属材料面临离子轰击等外界环境作用时，会表现出诸多不同的特性。

由于金属 Ti 由于具有吸氢密度高，室温平衡压低和吸放氢速率快等优点，在贮氢材料及核聚变技术领域已得到广泛应用。本文以金属 Ti 作为研究对象，利用分子动力学方法对离子轰击作用下金属 Ti 内 He 泡的破裂释放规律进行了研究。

首先，为了对比分析携能离子对 He 泡破裂释放的影响，研究了静置条件下 He 泡在金属 Ti 内不同深度处的状态，得到 He 泡的形状随其深度的变化规律。然后对金属 Ti 内 He 泡被携能离子正碰的演化过程进行模拟，得到不同深度处 He 泡从金属 Ti 内释放所需要的初级移位原子的临界能量及不同轰击能量下 He 原子的释放速率，发现携能离子轰击加速了金属 Ti 中 He 泡的破裂释放。

通过对离子轰击作用下金属 Ti 内 He 泡的破裂释放规律的分子动力学研究，初步阐述了金属 Ti 体内 He 泡在离子轰击作用下的释放机制。

关键词：离子轰击，氦泡，分子动力学

## Z-51

### 界面位错形核的原子机理及冲击塑性的尺寸效应

张瑞丰

北京航空航天大学材料科学与工程学院 100191

高性能纳米复合材料中存在着多类型、多尺度的异质界面结构。特定界面类型的出现和纳米尺寸效应成为决定该类材料优异性能的关键性因素。为此研究人员急需从原子尺度理解界面类型和纳米尺寸导致的强化效应，从而有的放矢地调控特定界面类型和纳米结构的形成，进而改善材料的力学性能和服役行为。应用原子级界面位错分析技术和大尺度非平衡分子动力学模拟方法，通过对不同类型异质界面的设计建模，揭示了不同界面类型对界面位错形核的支配作用以及在冲击载荷作用下纳米多层膜材料表现出的塑性的尺寸效应。研究表明：原子级平界面虽然具有较低的界面能和界面剪切强度，但是具有很好的冲击塑性阻力；与之相反，粗糙界面由于存在指向界面外的位错分解，因而表现出较低冲击塑性阻力。在冲击载荷条件下，纳米多层膜材料的塑性行为表现出明显的尺寸效应：当膜层厚度低于 20 纳米左右，分位错优先在界面处形核，然后向膜层内部扩展；在膜层厚度在 5 纳米左右时，材料的冲击塑性阻力表现出强尺寸效应。进一步研究发现：位错在不同膜层间传输不仅需要考虑界面位错特征，而且需要结合晶体学匹配原则加以解释和理解。

关键词：分子动力学模拟，冲击，金属基纳米复合材料，塑性，位错

## Z-52

## 密排六方金属的塑性变形机制

郭雅芳, 俎群, 汤笑之

北京交通大学土建学院力学系 100044

由于密排六方晶体结构的金属独立滑移系少, 滑移和孪晶是其低温时的主要形变机制。本文运用分子动力学方法研究了不同取向镁单晶在拉伸与压缩条件下的滑移和孪晶的竞争机制。研究表明, 在不同加载方向条件下, 初始缺陷都是在表面形核。但随着加载方向的不同, 初始塑性变形机制以及随后的微观结构演化行为不同。拉伸载荷条件下, 孪晶、滑移、晶体再取向以及柱面/基面转换是主要的塑性变形机制, 而且孪晶和柱面/基面转换机制只出现在沿或接近于 a-轴或 c-轴加载条件时。而压缩载荷条件下, 基面、柱面和锥面滑移是主要初始塑性变形机制, 在不同取向压缩载荷条件下都没有观察到孪晶存在。此外, 塑性变形机制的不同导致不同取向的镁单晶屈服强度不同, 沿 a-轴或 c-轴加载时的最大屈服应力明显高于沿其它方向加载时的屈服应力值。

关键词: 分子动力学; 滑移; 孪晶; 镁单晶

## Z-53

### 有限形变理论与非晶态合金力学性能的尺寸效应

汪浩

深圳大学纳米表面科学与工程研究所 518060

非晶态合金由于其独特的长程无序结构, 有着优异的力学、物理和化学性能。目前的一个研究热点在于其力学性能的尺寸效应,

而问题的解决有赖于对其微观形变机制的深入理解。本文从理论计算与数值模拟出发, 结合实验观测, 从原子尺度到连续介质

尺度上系统研究了非晶合金的弹、塑性形变及屈服过程。通过基于连续介质力学的有限形变理论, 得到了非晶合金在形变后应

力、弹性模量等力学参量的变化; 通过原子尺度的分子动力学模拟, 探索微观原子结构及其对非晶合金纳米线力学性能的影响;

由以上结论, 结合基于纳米压痕仪的微区力学性能测试, 提出了关联原子运动特征尺寸的概念, 认为其对于解释非晶合金力学

性能的尺寸效应有着关键作用。

关键词: 非静态合金; 力学性能; 屈服强度; 尺寸效应

## Z-54

### 应变速率诱导金刚石薄膜及 Cu 纳米线相变机制研究

谢红献

河北工业大学 300130

应变速率正如温度、成分、尺寸一样, 是研究材料性能的一个维度, 在其它条件相同的情况下改变加载应变速率对材料的力学性能及变形机制都有显著的影响。本报告主要讲述我们课题组最近用分子动力学模拟计算得到的两个有趣的成果: 应变速率诱导金刚石薄膜及 Cu 纳米线相变机制。众所周知金刚石薄膜是脆性材料, 受到拉伸时金刚石薄膜的失效方式一般呈脆性断裂; 然而我们研究发现当应变速率达到一定值时, 金刚石薄膜不会发生脆性断裂而是转变成没有任何缺陷的石墨结构。人们对铜纳米线在拉伸条件下的变形机制做过广泛研究, 一般认为其变形机制有两种: 在较低应变速率下其变形机制为位错 (或孪晶) 滑移机制, 而在较高应变速率下为应变速率诱导熔化机制。而我们的模拟结果发现了 Cu 纳米线的一种新的变形机制——FCC-BCC-HCP 相变机制。本报告将对这两种新型相变机制作详细的讲解及深入的探讨。

关键词: 应变速率, 分子动力学, 相变

## Z-55

## Ni 基单晶合金中微量杂质元素对 Ni/Ni<sub>3</sub>Al 相界的脆化作用及其相互影响

彭平

湖南大学 410082

采用第一原理计算方法, 调查了杂质元素 P, S, N, C, O, H 在 Ni 基单晶超合金  $\gamma/\gamma'$  相界区域的存在许可及其择优占位下对  $\gamma/\gamma'$  相界断裂强度与断裂模式的影响, 特别是在不同合金化与掺杂等局域结构环境下的改变, 并从几何、能态、电子与价键结构上对其作用机制进行了分析。研究表明: 以气态形式存在的 N, O, H 不易掺杂到  $\gamma/\gamma'$  相界, 而其固态原子则很容易被掺进界面区域; P, S, C 优先以置换形式出现在  $\gamma/\gamma'$  相界内, 而不是占据其中的八面体间隙。合金化环境下, Re 添加不会引起杂质元素如 S, P 在相界中择优占位趋势的改变, 但 S, P 诱导的相界脆化会因此发生变化。Re 合金化与掺杂之间的近距离强排斥作用并不利于掺杂相界脆性的改善, 但有些占位与分布, 如 Re 与掺杂元素分别位于界面原子层两端时, 合金化的增韧效果则比较好, 有些甚至比无掺杂时 Re 合金化的强化效果还好。至于掺杂元素之间的影响, 如 P 和 S, 由于不同掺杂之间的关联能类型在相界  $\gamma$  与  $\gamma'$  区域存在区别, 复合掺杂对杂质元素的占位趋势有影响, 但不论哪种占位与分布, 相间断裂都发生在不同掺杂原子层之间的界面区域, 并且断裂强度相对于单独掺杂进一步恶化。

关键词: Ni 基高温单晶合金; Ni/Ni<sub>3</sub>Al 相界; 微量杂质元素, 择优占位, 脆化, 相互影响

## Z-56

### 密排六方单晶单轴压缩过程中的形变孪生

熊凯, 张逸阳, 顾剑锋

上海交通大学材料科学与工程学院 200240

**摘要:** 为了研究密排六方晶体的弹塑性转变, 采用分子动力学模拟 Mg、Ti、Zr 和 Co 单晶沿  $[2\ -1\ -1\ 0]$  方向单向压缩过程中的孪生过程。压缩过程中超过弹性极限后, 观察到两种新的形变孪生模式。在 Ti、Zr 和 Co 单晶压缩过程中观察到  $(2\ -1\ -1\ 0)[0\ 1\ -1\ 0]$  孪生, 而 Mg 单晶压缩过程中出现  $(2\ -1\ -1\ 0)[0\ 0\ 0\ 1]$  型孪晶。对这两种孪生模式的原子尺度变形机制进行分析。

关键词: 密排六方晶体; 变形孪生; 单轴压缩

## Z-57

### 拉伸作用下 Ni/Ni<sub>3</sub>Al 界面微孔洞扩展的分子动力学研究

商品, 李春

西北工业大学力学与土木建筑学院工程力学系 710072

镍基单晶高温合金因其优异的高温力学性能, 目前广泛应用于现代航空发动机涡轮叶片等关键部位。一般来说, 金属材料的失效、断裂等宏观力学行为与其结构中存在的微缺陷(如掺杂、裂纹、孔洞)密切相关, 因此有必要对含有微缺陷的结构材料的力学性能进行研究。本文选取含有微孔洞的 Ni/Ni<sub>3</sub>Al ( $\gamma/\gamma'$ ) 二维薄膜为研究对象, 采用分子动力学方法, 选取嵌入原子势(Embedded Atom Method, EAM)为势函数, 对  $\gamma/\gamma'$  薄膜结构进行沿  $[001]$  方向的单轴拉伸, 研究了含有微孔洞缺陷的  $\gamma/\gamma'$  薄膜的温度效应和尺寸效应。研究结果表明:  $\gamma/\gamma'$  薄膜在拉伸作用下, 位错开始形核于孔洞附近, 随着拉伸的进行, 位错向薄膜边缘运动; 对于含有孔洞缺陷的  $\gamma/\gamma'$  薄膜结构来说, 孔洞直径小于 1 nm 时, 拉伸作用促使孔洞体积逐渐变小直至最后消失, 而直径大于 1 nm 的孔洞, 拉伸过程中孔洞体积逐渐增大, 最终导致  $\gamma/\gamma'$  薄膜从孔洞处断裂。在沿  $[001]$  方向进行单轴拉伸时, 孔洞周围的原子沿  $(111)$  面运动, 形成明显的滑移系, 这是因为  $(111)$  面是面心立方结构晶体的密排面, 产生滑移所需的能量最低; 随着温度的升高, 含有孔洞的  $\gamma/\gamma'$  薄膜的屈服应力降低, 温度由 300 K 升高到 1100 K 时, 屈服应力由 6.23 GPa 降低至 2.45 GPa, 这是由于原子在高温下更容易偏离平衡位置, 在外部载荷条件下更容易发生塑性变形, 导致屈服应力下降。当  $\gamma/\gamma'$  薄膜结构的原子数由 6264 增大到 40314 时, 在 300 K 温度条件下, 单轴屈服应力由 6.23 GPa 降低到 3.75 GPa, 即体系的屈服应力随着  $\gamma/\gamma'$  薄膜尺寸的减小而增大。本文的理论研究结果可为镍基单晶合金针对提高其力学性能的材料设计提供有益参考, 并为含缺陷纳米薄膜材料的拉伸实验研究提供理论依据。

关键词：镍基单晶合金  $\gamma/\gamma'$ 界面 单轴拉伸 温度效应 尺寸效应

## Z-58

### 紫铜合金压缩变形流变应力行为与预测

黄树海, 陈强, 夏祥生, 舒大禹

西南工程技术研究所 400039

为了掌握紫铜合金塑性压缩变形对流变应力的影响, 在变形温度为  $20^{\circ}\text{C}\sim 900^{\circ}\text{C}$ , 应变速率  $0.001\text{s}^{-1}\sim 1\text{s}^{-1}$  的条件下, 采用 Gleeble-1500 热模拟机, 对紫铜合金的热压缩变形行为进行了研究, 结果表明, 紫铜合金流变应力随应变速率的增加而增大、变形温度的升高而降低, 具有加工硬化、动态回复、动态再结晶、二次加工硬化等特征, 热变形激活能与变形温度、应变速率相关, 其平均热变形激活能为  $303.8\text{KJ/mol}$ 。在此基础上, 本文建立了三种包含应变的流变应力预测模型, 基于  $\alpha$ 、 $Q$ 、 $\ln A$ 、 $n$  等参数的流变应力预测模型, 与变形温度、应变速率、变形程度相关, 多参数拟合的累计误差对流变应力的预测精度影响较大; 基于  $\sigma$ 、 $\varepsilon$ 、 $T$  本构关系的流变应力预测模型和基于 GA+BP 的流变应力预测模型, 与微观变形机制关联度小, 预测精度高, 其中基于 GA+BP 的流变应力预测模型与真实应力曲线吻合度非常高, 对于指导合金热加工具有重要的参考意义。

关键词：紫铜；热压缩变形；变形激活能；流变应力预测

## Z-59

### 增强采样方法在模拟凝聚相反应中的研究

孙准, 程涛, 辛亮, 荆志峰, 沈喆, 向衍

上海交通大学化学化工学院 200240

凝聚相化学反应是一个涉及大量反应物分子、产物分子、中间体和自由基的多体碰撞、活化和反应、由大量基元反应组成的多通道的过程, 用已有的理论和实验方法难以得到完整的微观机理。而基于反应力场的分子动力学 (MD) 方法是一个可能的解决方案。但是, 如何在有限的模拟时间里得到具有统计意义的充足的采样是一个尚待解决的关键问题。采用增强采样方法是解决这一关键问题的有效途径。本报告将介绍我们在增强采样方法研究中的进展。

我们分别研究对比了加速分子动力学 (AMD) 方法, 副本交换动力学 (REMD), 广义系综采样方法和亚稳动力学 (Metadynamics) 方法。

开发了基于反应力场的加速分子动力学方法, 并成功应用于模拟氢气的燃烧反应。该方法能够准确还原高温下 ( $2998\text{K}$ ) 氢气燃烧反应的动力学信息, 并能够预测较低温度下 ( $798\text{K}$ ) 的反应动力学信息, 加速倍率约为  $0.42\times 10^{12}$ 。建立并验证了基于温度的反应副本交换动力学 (T-RERMD) 方法, 并将其应用于沸石体系的成核机理研究。进而研究了如何使用基于哈密顿量的反应力场副本交换动力学 (H-RERMD) 方法进一步提高采样效率。作为一种广义系综采样方法, 副本交换方法中很多可调参数对模拟效率有着重要的影响, 如何设置这些参数仍然是存在争议的话题。使用 Ising 模型, 证明了广义系综的势能分布从根本上决定了副本交换方法的效率。而在广义系综确定后, 提高交换频率总是能够提高模拟效率。亚稳动力学 (Metadynamics) 是在模拟时通过提升自由能局部低点从而减小自由能位垒, 达到加速模拟的效果。我们应用亚稳动力学方法, 以表征表面活性剂分子之间结合程度作为反应坐标, 对表面活性剂水溶液体系自组装进行了初步的研究, 有效地加速了对该体系自组装反应过程的采样。

这些只是初步进展, 但已体现出了明显的优势。

关键词：分子动力学；反应力场；加速分子动力学；副本交换动力学；亚稳动力学；广义系综采样方法

## Z-60

### 纳米药物传输系统的分子动力学研究

汪秀南<sup>1</sup>, 张法达<sup>1</sup>, 刘轶<sup>2,1</sup>, 徐京城<sup>1</sup>, 李生娟<sup>1</sup>

1. 上海理工大学材料科学与工程学院

2. 上海大学物理系和上海材料基因组工程研究院

传统癌症治疗中的化学药物疗法存在选择性差和毒副作用强等缺点，药物传输系统可以有效提高靶向性、生物相容性和体内滞留时间，在传统抗癌药物、蛋白质药物和光动力学治疗用光敏剂的输运方面存在潜在应用。以纳米材料为载体的药物传输系统(DDS)以其高搭载效率、靶向输送和可控释放等优点备受瞩目。我们对以石墨烯和树形大分子为载体材料的抗癌药物传输系统进行了分子动力学模拟研究，系统考察了石墨烯片大小和树形大分子代数及其表面功能化、药物分子的种类、数目以及搭载方式对 DDS 的热力学稳定性和动力学扩散的影响，为设计开发新型纳米药物传输系统提供理论依据。

关键词：药物传输系统 抗癌药物 石墨烯 树形大分子 分子动力学模拟

## Z-61

### 钨纳米团簇的分子动力学模拟

郝剑楠, 张雪松, 王琛浩, 许珂, 舒小林, 吕广宏

北京航空航天大学物理科学与核能工程学院, 北京市海淀区学院路 37 号 100191

钨因其高熔点, 高热导, 抗离子辐照等特性, 是目前最有可能应用于各种核聚变反应装置的面对等离子体材料(PFMs)。受核聚变反应热流、中子流和不稳定的瞬态大束流等离子作用, 钨材料表面原子发生溅射, 钨中氢/氦泡破裂, 小块钨脱离基体形成灰尘, 进入到等离子体中, 造成辐射能量损失, 将使等离子体更加难以控制。本文主要利用分子动力学 LAMMPS 程序模拟小尺寸的钨团簇结构, 和以其为基础的线状和环状结构, 分析其热力学稳定性, 以能量、应力及对称性为依据, 得到与贵金属相似的正二十面体非晶基态结构等结论, 并结合一套衍射分析代码解析其结构特征, 以便为实验上检测相关结构提供参考。

关键词：钨, 纳米团簇, 热力学, 分子动力学

## Z-62

### 六角密堆金属钛中空位团簇化过程的原子尺度模拟

何燕<sup>1,2</sup>, 周刚<sup>1,3</sup>, 王峰<sup>1</sup>, 徐东生<sup>1</sup>, 杨锐<sup>1</sup>

1. 中国科学院金属研究所
2. 沈阳师范大学物理科学与技术学院
3. 大连理工大学材料学院

空位及其团簇在辐照和塑性变形等过程中有重要作用, 由于相关研究较少, 近年来六角金属中的点缺陷行为受到了广泛关注。空位团簇自身及其与运动位错等缺陷的相互作用直接影响材料的多种物理和力学性能。对于六角结构的金属钛, 冲击加载和质子辐照实验均表明空位团簇的存在及其与屈服强度等的相关性, 然而空位团簇如何影响性能, 目前还缺少深入理解, 特别是不清楚六角金属中空位团簇的初始演化原子过程。结合第一原理计算、原子间作用势和激发弛豫算法, 系统考察了金属钛中空位团簇的可能构型及不同构型间的相互转变, 给出不同尺寸下空位团簇的稳定和亚稳构型, 空位团簇合并分解和迁移的激发能垒等关键参数;

发现在团簇化初期空位数量较少时, 空位倾向于在基面聚集成空位盘, 随着空位数增加, 空位盘的平均形成能降低, 迁移能增加, 但对于个别亚稳空位团, 迁移能始终保持较低, 从而具有较强的可动性, 影响空位团簇化过程;

空位团与运动位错等缺陷产生强烈交互作用直接影响力学行为, 特别是空位盘可长大成为空洞, 进而在应力作用下形成微裂纹, 影响疲劳断裂行为。

关键词：原子模拟; 力学性能; 钛; 空位; 团簇

## Z-63

### 锌锰铁氧体中原子占位行为和性能的计算模拟

吴波<sup>1</sup>, 陈祖华<sup>1</sup>, 胡康明<sup>1</sup>, 吴育锋<sup>1</sup>, 郑福南<sup>2</sup>, 黄锦涛<sup>2</sup>

1. 福州大学
2. 厦门 TDK 有限公司



组成元素在亚点阵上的占位有序化行为既是一个基础问题，又是一个重要的技术问题，在材料成分设计和性能优化中具有重要作用。

本文基于亚点阵模型，采用材料热力学理论和第一性原理计算方法，从理论上研究了  $Mn_xZn_{1-x}Fe_2O_4$  尖晶石铁氧体中阳离子在亚点阵 A 位和 B 位上的占位有序化行为随热处理温度和成分的变化规律。

结果表明：阳离子在亚点阵上的占位有序化行为随热处理温度和成分发生变化。Mn 离子占据 8a 亚点阵，Fe 离子占据 16d 亚点阵，Zn 离子倾向于占据 8a 亚点阵。随着温度的升高，Fe 离子倾向于占据 8a 亚点阵，Mn 离子倾向于占据 16d 亚点阵，而 Zn 离子的占位不受温度的影响。对于成分  $Mn_xZn_{1-x}Fe_2O_4$  ( $x=0-1$ )，计算模拟获得的阳离子占位分布数据 1500K 以下均与文献中的中子衍射试验结果吻合。当富 Fe 时，过量的 Fe 离子倾向于占据 8a，但 Mn 离子含量不影响 Fe 离子占位行为。

本文中涉及到的尖晶石材料的弹性常数满足力学稳定性。与可得到的实验值吻合较好。随着 Mn 离子含量的增加，体积弹性模量变化较小，其压缩性能稳定。当 Mn 离子含量小于 0.5，随 Mn 离子含量的增加，其剪切模量和杨氏模量增加。当 Mn 离子含量大于 0.5，随 Mn 离子含量的增加，其剪切模量和杨氏模量减少。除  $MnFe_2O_4$  外，其他尖晶石化合物都是本征脆性的。

关键词：锰锌铁氧体，占位有序化行为，弹性，亚点阵模拟，第一性原理计算

## Z-64

## Z-65

### 有限尺寸液固界面的热力学和动力学行为

吴凌康, 徐贲, 李丘林, 刘伟

清华大学材料学院

对于无限尺寸液固界面，在熔点时液固相处于稳定共存状态。但对于有限尺寸的界面，即使在平衡温度，液固相也是不能稳定共存的。研究中，我们发现有限尺寸界面失稳时，界面形貌服从高斯分布。同时，我们还预测了界面的失稳时间，并从 MD、FDM 模拟中得到验证。在体系失稳前，我们将经典形核理论和毛细涨落法结合起来，计算了 Al 在不同温度下的界面能及其各向异性。结果显示，随着温度的下降，取向平均界面能变化不明显，但界面能各向异性逐渐增加。

关键词：有限尺寸液固界面，涨落，失稳，界面能

## Z-66

### HfC 表面性质的密度泛函计算以及 O 吸附对电子功函数的影响

王健<sup>1</sup>, 王绍青<sup>1</sup>

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国科技大学

3. 辽宁科技大学

HfC 是一种纳米电子器件中常用的阴极材料，但对于其表面性质，实验并没有给出一个详尽的描述。我们利用第一原理密度泛函理论详尽地计算了 HfC 多个表面(100,110,111,210,311,310)的电子功函数和表面能，并讨论了不同表面的电子功函数和表面能之间的关系。我们发现电子功函数和表面能呈现粗糙的反比例关系。对于(111)和(311)面，讨论了其以不同元素作为终结面的稳定性，得到了与实验一致的结果。HfC 暴露到空气中时易受到 O<sub>2</sub> 的侵蚀，我们讨论了不同覆盖率的 O 原子对 (111)表面电子功函数的影响。我们发现当覆盖率比较低时，O 原子的吸附使得表面的电子功函数降低。我们从电子的角度解释了这种反常现象出现的原因。

关键词：密度泛函 表面能 电子功函数 偶极矩

## Z-67

### HfC-SiC 氧化的热力学研究

李辉<sup>1,2</sup>, 孙国栋<sup>1</sup>, 张文雪<sup>1</sup>, 许磊<sup>1</sup>, 罗至利<sup>1</sup>

1. 长安大学材料科学与工程学院, 西安 710064

2. 西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072

采用平衡热力学方法研究了 HfC-SiC 的氧化机理, 分析了氧气含量  $O_2$ 、温度  $T$  和总压  $p$  三个因素的影响。结果表明, 氧含量主要影响残余 C-O 产物的类型和含量, 温度主要影响 Hf 和 Si 的固相产物晶型, 压强主要影响 C 的气相产物类型和含量。在低温区 ( $T^\circ\text{C}$ ) 和高温区 ( $1699.85^\circ\text{C} \leq T^\circ\text{C}$ ), HfC 中的 Hf 会分别氧化生成单斜相和四方相氧化铪。在低温区 ( $T^\circ\text{C}$ ) 和氧含量较少) 时, HfC 中的 C 元素以石墨态剩余, 随氧含量增加 C 逐步氧化为 CO 和  $\text{CO}_2$ ; 在高温区 ( $T \geq 1273.0^\circ\text{C}$ ), HfC 中的 C 和 Hf 同时被氧化; 由此提出了 HfC 中 Hf 和 C 分别氧化的机理模型。本文计算结果与相关实验报的和理论计算结果一致, 可为 HfC-SiC 在高温下的实际应用提供理论指导。

关键词: HfC-SiC; 氧化; 热力学

## Z-68

### 钢中夹杂物漂浮诱发通道偏析形成新机制: 高分辨透射 X 射线三维表征和多相流数值模拟

曹艳飞, 陈云, 李殿中

中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室 110016

传统理论认为钢锭中宏观偏析形成的驱动力主要有热溶质自然对流、凝固收缩流和晶体沉降运动。然而, 近年来随着钢铁纯净化冶炼技术的不断发展, 通过对不同吨位钢锭的实物解剖发现, 钢锭中的通道偏析与氧化物为基的轻质夹杂物团簇密切相关, 由此发现了宏观偏析形成的一种新的驱动力, 即夹杂物漂浮。

本文通过对夹杂物的实验表征和宏观偏析数值模拟, 详细研究了钢中通道偏析的演化过程, 深入分析了夹杂物驱动通道偏析形成的机制和条件。

首先, 运用高分辨透射 X 射线三维成像技术, 对解剖的高氧含量 500kg 钢锭通道偏析区域的夹杂物进行了详细表征, 结果表明, 偏析通道发展过程中存在着明显的夹杂物聚集和长大现象。然后, 基于这一微观表征结果, 并结合自然对流驱动下的经典宏观偏析模型, 建立了考虑夹杂物作用的欧拉-拉格朗日多相流宏观偏析模型。通过对小型验证件的系列模拟结果发现, 具有一定尺寸和足够量的夹杂物在钢液凝固过程中的漂浮可以改变局部液体的流动形式, 使糊状区失稳, 从而诱发偏析通道的产生。这样, 在熔体对流、夹杂物漂浮和凝固的共同作用下, 最终宏观尺度的偏析通道得以形成。

此过程很好地解释了通道偏析三维表征分析结果, 得到的诱发通道偏析初始形成所必须的夹杂物尺寸和含量与实验结果基本一致。最后, 利用所建立的多相流模型模拟了 500kg 钢锭中的宏观偏析, 再现了 A-型通道偏析的形成, 验证了新模型的准确性, 同时确认了所提出的夹杂物漂浮驱动通道偏析形成机制的正确性。

关键词: 通道偏析, 夹杂物, 多相流, 钢锭, 凝固

## Z-69

### 考虑液相自然对流和枝晶运动的合金凝固过程的相场模拟

亓欣波, 陈云, 李殿中

中国科学院金属研究所 110016

合金凝固过程中, 溶质和温度分布不均匀导致的自然对流能够影响溶质场和温度场的分布, 同时使生长的晶体发生位移。此外, 由于形成的晶体与液体密度之间也往往存在差别, 自身的浮力也会使其发生上浮或者下沉运动, 进而改变其生长行为。因此, 凝固过程中的自然对流和晶体运动都会对晶体的生长动力学有着显著的影响。然而目前对凝固过程的介观尺度模拟研究主要集中在纯扩散、自然对流和强制流动对枝晶生长的影响, 同时考虑枝晶运动的报道却很少。

本文基于 Karma 薄界面合金凝固定量相场模型, 同时耦合流体动力学和固相晶粒运动动力学, 建立了一个综合考虑熔体自然对流与枝晶运动相互作用的二维晶体生长相场模型, 并利用并行自适应有限元方法求解模型的控制方程。

基于所建立的模型，进行了一些计算测试。首先研究了界面层宽度对一个轻质球形颗粒的自由上浮过程的影响，结果显示当界面层宽度小于一定值时，颗粒稳态上浮速度开始收敛于一恒定值。其次模拟了单个合金等轴晶凝固过程中密度差驱动的熔体自然对流和固定角速度下枝晶转动现象。

测试结果表明该模型能够很好地计算液体流动、晶粒运动和晶体生长及这些物理过程之间的相互作用，确认了该模型研究液体流动和固相运动共同作用下合金多晶生长过程的有效性。该研究得到了国家自然科学基金的资助（Grant No. 51271184）。

关键词：自然对流，枝晶运动，两相流，相场模型

## Z-70

### **Phase Separation and Crystallization Behaviors of Fluorosilicate Glasses: How to Grow Fluoride Nano-crystals from Fluorosilicate Glass Matrices?**

Xusheng Qiao<sup>1</sup>, Junjie Zhao<sup>1</sup>, Ronghua Ma<sup>1</sup>, Jun Gao<sup>1</sup>, Jincheng Du<sup>2</sup>, Xianping Fan<sup>1</sup>

1. State Key Laboratory of Silicon Materials, School of Materials Science and Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China

2. Department of Materials Science and Engineering, University of North Texas, Denton, Texas 76203-5017, U.S.

Fluorosilicate glasses can be well luminescence-functionalized with their high lanthanide solubility and controllable nano-size fluoride crystallization. Such materials also have great advantages which combine the features of both silicate glass and fluoride crystals. Here we report a study on phase separation and crystallization behaviors of  $\text{SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3/\text{AlF}_3\text{-BaO/BaF}_2\text{-Na}_2\text{O/NaF}$  (SABN) glasses. The structure of SABN glasses were simulated using molecular dynamics (MD) simulations with effective partial charge potentials and a combination of canonical (NVT) and microcanonical (NVE) ensembles. The  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{AlF}_3$ ,  $\text{BaO/BaF}_2$  and  $\text{Na}_2\text{O/NaF}$  substitution effects on cation local environments were analyzed by studying the partial pair distribution functions, bond angle distributions, coordination number and its distribution. Change of the medium-range structures were characterized by  $Q_n$  distributions and network connectivity, cation-cation distributions and their aggregation, as well as the preference of modifiers around the glass former cations. It was found that high fluorine content led a heterogeneous structure containing both silicate glass matrix and fluoride glass matrix, with microstructure similar to spinodal phase separation. The phase separation domains mainly composed of  $\text{AlF}_3\text{-BaF}_2\text{-NaF}$  with sizes up to several nanometers were observed to distribute and interlace within silicate glass matrix based on the simulated structures. These structure features are in good agreement with structural information from solid state NMR studies. Significance of these structure features on the properties and glass-ceramic formation will be discussed.

关键词：Fluorosilicate; Glass; Simulation; Crystallization; Phase-separation

## Z-71

### **First-principles study of oxygen adsorption and diffusion on gamma-TiAl(110) surface**

Yang Jiao<sup>1</sup>, Yan Song<sup>2</sup>, Jianhong Dai<sup>2</sup>, Lujun Huang<sup>1</sup>, Lin Geng<sup>1</sup>

1. School of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, P.O.Box433, Harbin 150001, China

2. School of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology at Weihai, 2 West Wen hua Road, Weihai 264209, China

First-principles calculations were performed to study the adsorption and diffusion behaviors of oxygen on gamma-TiAl(110) surface. The adsorption energies of oxygen atom on various sites are evaluated to search the stable adsorption configurations of oxygen atom on the gamma-TiAl(110) surface. Our calculations show the oxygen atom prefers to adsorb at the Ti-rich environment, such as the oct-Ti(octahedral-Ti) under the surface. The nudged elastic band method(NEB) were used to study the diffusion behavior of oxygen atom. This diffusion on the surficial layer is limited by the interactions between O and Al atoms. The diffusion of oxygen atom from surficial into inner layers of TiAl is mainly controlled by the O-Al and O-Ti interactions, but weakly depends on the atomic environments. The

diffusion is obstructed by the atomic layer, especially Al atomic layer, and therefore it is difficult that oxygen diffuses from the Al atomic layer to the Ti atomic layer than that in the opposite direction.

关键词: first-principles; TiAl-based alloy; oxidation; surface; diffusion

## Z-72

### Ni, Cr, Mn 对 Si 和 Al 在 Fe/Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 界面偏聚行为的影响: 第一性原理研究

董楠<sup>1,2</sup>, 张彩丽<sup>1,2</sup>, 刘慧<sup>1,2</sup>, 王剑<sup>1,2</sup>, 韩培德<sup>1,2</sup>

1. 太原理工大学材料科学与工程学院
2. 新材料界面科学与工程教育部重点实验室

目的: 耐热钢由于具有良好的高温强度、抗氧化和抗腐蚀性能被广泛应用于航空发动机和工业燃气轮机的热锻部件。耐热钢优异的高温抗氧化性与基体表面保护性氧化膜的形成和结合相关, Si、Al 是近年来耐热钢中常加的合金元素, 添加有利于优化合金组织和氧化层结构, 使耐热钢的耐蚀性及抗氧化性得到改善, 因此从原子层次深入理解 Si, Al 对氧化物结合及材料耐蚀性的影响具有实际指导意义。

方法: 本研究主要应用第一性原理计算方法分析 Si、Al 原子在 Fe(111)/Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001)界面的偏聚行为和对界面结合强度的影响, 并研究界面处 Ni, Cr, Mn 原子对 Al, Si 原子界面偏聚行为的影响。

结果: 分离功和偏析热的计算结果表明, Si、Al 原子在界面时与界面 O 原子的结合加强, 进一步增强界面结合, 但两者均不易偏聚到界面。界面处 Ni 原子能抑制 Al 和 Si 原子的偏聚; Cr 原子能促进 Al 在界面的偏聚而抑制 Si 原子的偏聚; Mn 原子作为增强剂, 能同时有效地促进 Al 和 Si 在界面的偏聚, 增强界面结合。

结论: 界面处 Cr 原子能促进 Al 在界面的偏聚, 利于 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 复合氧化膜的形成; Mn 原子能促进 Al 和 Si 在界面的偏聚, 利于 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/SiO<sub>2</sub> 和 Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 复合氧化膜的形成, 从而改善耐热钢的抗氧化性和抗腐蚀性。

关键词: Fe(111)/Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001)界面; 偏聚; 合金元素; 第一性原理

## Z-73

### 基于第一性原理对热障涂层中 NiPtAl 和 MCrAlY 粘结层表面氧化铝生长差异的研究

王逸群, 宋鹏, 季强, 廖红星, 陆建生

昆明理工大学材料科学与工程学院 650093

采用基于密度泛函理论的赝势平面波第一性原理方法解释 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的生长差异对 NiPtAl 和 MCrAlY 作为粘结层的 EB-PVD 热障涂层不同寿命的影响原因。

使用 CASTEP 软件对以上材料表面 Al 偏聚能以及生成 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 后的界面能等进行计算。

计算得出两种 Pt 浓度的 NiPtAl 涂层中表面有 O 吸附时 Al 表面偏聚能相似但小于在 MCrAlY 中的偏聚能。同时 NiPtAl 比 MCrAlY 作为粘结层的热障涂层在生成 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 层后具有较小的晶格变形和较低的界面能。

NiPtAl 氧化产生的氧化铝趋向于同一晶向。涂层中 Pt 是影响 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 生长的重要因素。

计算进一步证明了 Pt 能够提高 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 的粘结性能和热障涂层寿命, 从而抵消 Pt 的高成本在工业上的应用。

关键词: 热障涂层 氧化铝 铂 偏聚 界面能

## Z-74

### Growth morphology of LaPO<sub>4</sub> nanocrystals investigated from experiment and theoretical calculation

Xiaoyan Wang<sup>1</sup>, Zhongju Zhang<sup>1</sup>, Luo Zhang<sup>2</sup>, Xin Wang<sup>2</sup>

1. College of Chemistry and Chemical Engineering, Ocean University of China
2. Institute of Material Science and Engineering, Ocean University of China

The morphologies of the materials have strong effect on their performance in particular applications, leading an urgent problem to study by experiment and theoretical calculation. In our experiment, we synthesized nano-particles of LaPO<sub>4</sub> successfully by typical hydrothermal method in acidic condition. The morphology, preferred orientation

and crystal facets are characterized by scanning electron microscopy (SEM), selected-area electron diffraction (SAED) and high resolution transmission electron microscopy (HR-TEM). Combining the experimental findings, surface energies of several low-index surfaces were calculated using density functional theory methods (DFT). The theoretical calculation on the slabs surface energies was performed to simulate the shape of nano-particles by the Wulff construction. The experimental results indicate that  $\text{LaPO}_4$  prepared in this work shows rod-like structure along [001] orientation. The relevant crystal facets are selected by simulating various possible growth morphologies and characterization data. According to Wulff law, the equilibrium shape of clava with large length-diameter ratio is achieved, which is consistent with experimental results to a great extent. This investigation is meaningful to the further study of growth mechanism and morphology transformation.

关键词: Morphology; first-principle theory;  $\text{LaPO}_4$

## Z-75

### First-principles study of the $\text{Mg}(0001)/\text{Mg}_2\text{Si}(111)$ interfacial properties

Yangfang Liao<sup>1,2</sup>, Quan Xie<sup>1</sup>

1. Guizhou university

2. Guizhou normal university

In order to understand the relation between work of adhesion and the electronic structure of a  $\text{Mg}(0001)/\text{Mg}_2\text{Si}(111)$  interface, the  $\text{Mg}(0001)/\text{Mg}_2\text{Si}(111)$  interfaces were studied by first-principles calculations based on density functional theory (DFT). The ideal work of adhesion ( $W_{\text{ad}}$ ) and interface energy ( $\gamma_{\text{int}}$ ) were calculated for six different interfacial structures, taking into account both Si- and Mg-terminations of  $\text{Mg}_2\text{Si}(111)$  surfaces, and three different stacking sequences. The interfacial electronic structures including charge density distribution and difference, and density of states (DOS) were simulated to determine the nature of  $\text{Mg}(0001)/\text{Mg}_2\text{Si}(111)$  bonding. The results show that for  $\text{Mg}_2\text{Si}(111)$  surface the Mg-terminated surfaces are more stable than Si-terminated surfaces. The electronic structure not only reveals the metallic feature for the Mg-terminated surfaces and semiconducting property for the Si-terminated surfaces, but also indicates the existence of covalent bonding in  $\text{Mg}_2\text{Si}(111)$  surfaces. For the interface, the Si-terminated top-site interface is the most stable interface, yielding the highest  $W_{\text{ad}}$  and the lowest  $\gamma_{\text{int}}$ . In addition, the calculated interface energies show that an interdiffusion layer will form on the  $\text{Mg}(0001)/\text{Mg}_2\text{Si}(111)$  interface.

关键词:  $\text{Mg}(0001)/\text{Mg}_2\text{Si}(111)$ interface, first-principles, work of adhesion, electronic structure

## Z-76

### Al-Cu-Nd 三元系相关系测定与热力学优化

白卫民, 谭明玥, 许金宝, 章立钢, 刘立斌

中南大学材料科学与工程学院 410083

铝合金具有比重轻、强度高以及耐蚀性好等优异成绩及其在航空航天中的应用, 引起了国际材料界以及工业界的广泛关注。研究发现, 在铝合金中加入 Nd 元素可改善合金的机械性能与非晶形成能力。通过研究 Al-Cu-Nd 体系的热力学性质和相关系可以为材料成分优化和性能的提高提供了大量可靠的数据, 同时也是预测非晶材料非晶形成能力的重要基础。

本研究利用 XRD、SEM/EDX 技术准确测定了 Al-Cu-Nd 三元系在 673K 温度下的部分相关系; 实验证实了 6 个化学计量比化合物的存在, 分别为:  $\tau_1\text{-Al}_8\text{Cu}_4\text{Nd}$ ,  $\tau_2\text{-Al}_9\text{Cu}_8\text{Nd}_2$ ,  $\tau_3\text{-Al}_6\text{Cu}_7\text{Nd}$ ,  $\tau_4\text{-Al}_{2.4}\text{Cu}_{8.6}\text{Nd}$ ,  $\tau_5\text{-Al}_3\text{CuNd}$ ,  $\tau_6\text{-AlCuNd}$ ; 实验测定了 9 个三相区和四个两相区, 绘制了 Al-Cu-Nd 三元系 673K 下部分等温截面。结合实验结果和文献信息, 对 Al-Cu-Nd 体系进行了热力学优化, 获得了一套能合理描述各相 Gibbs 自由能的热力学参数。

关键词: 相图; Al-Cu-Nd 体系; XRD; 电子显微技术

## Z-77

### 钨中自间隙原子团簇的迁移和转向-分子动力学研究

王金龙, 牛亮亮, 舒笑林, 张颖

100191

作为未来核聚变堆中最具潜力的面对等离子体材料, 钨基材料将受到 14.1MeV 高能中子与 H/He 离子的多重辐照, 产生大量的 Frenkel 缺陷(自间隙原子和空位)。由于其高移动能力, 自间隙原子及其团簇随着时间的演化会极大降低材料的力学性能。因此, 揭示自间隙原子及其团簇的能量与动力学特性就显得尤为关键。本文利用分子静力学、分子加速动力学和 NEB 相结合的方法系统研究了钨中不同尺寸自间隙原子团簇的最稳定构型及其迁移与转向的能垒。研究表明: (I) 基态自间隙团簇总是沿方向分布, 团簇尺寸和对称性对其能量稳定性具有重要影响; (II) 自间隙团簇可在低温下沿方向进行一维快速扩散, 势垒不超过 0.07 eV, 且势垒值与团簇尺寸并无严格关联; (III) 自间隙团簇转向势垒较高, 仅在高温下频繁发生, 且势垒值与团簇尺寸成正相关。例如, 1 个自间隙原子的转向能垒为 0.66 eV, 2-5 个自间隙原子的转向能垒为 1.2-1.6 eV, 而 6-7 个自间隙原子的转向能垒则超过 2.7 eV。本文研究结果将为辐照条件下钨中间隙型缺陷的形成与演化提供重要的参考依据。

关键词: 自间隙团簇, 迁移, 转向

## Z-P01

### Band structure and spin polarization of Heusler alloy $\text{Co}_2\text{MnSi}_{1-x}\text{Z}_x$ (Z=B, P, As): An ab initio calculation

康路

北京科技大学数理学院 100083

### Band structure and spin polarization of Heusler alloy $\text{Co}_2\text{MnSi}_{1-x}\text{Z}_x$ (Z=B, P, As): An ab initio calculation

L. Kang<sup>1</sup>, W. Q. He<sup>1</sup>, Y. J. Zhang, X. Q. Ma<sup>1,2@</sup>, Z. H. Liu<sup>1,2</sup>, F. Y. Meng<sup>1,2</sup>

1. Department of Physics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, P.R. China

2. Beijing engineering center for weak magnetic field testing and application, Beijing 100083, P.R. China

We used Vienna ab initio simulation package (VASP) to investigate the spin polarization and band structures of Heusler alloy  $\text{Co}_2\text{MnSi}_{1-x}\text{Z}_x$  (Z=B, P, As;  $x=0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$ ). Through the first principle calculations, it is shown that Fermi level can be controlled to move up-down in band gap by doping other elements with different valance to Si. The lattice parameters have a linear shift with the concentration of same kind of Z element and are in good agreement with experimental values for the alloys available for experimental data. The magnetic moments of unit cell for these compounds versus the valance electron number have a linear trend, which is in good agreement with Slater-Pauling behavior. The spin polarization and Fermi level of the alloys may be adjusted by doping elements of different valance[1,2]. It will move to the bottom of conduction band when Z is P or As which has five valance electrons and move to the top of valance band when Z is B. From the results of calculation we infer that compounds with formula  $\text{Co}_2\text{MnSi}_{1-x}\text{P}_x$  and  $\text{Co}_2\text{MnSi}_{1-x}\text{As}_x$  will have lower temperature dependence and may have a stable half-metallic character, therefore, have a better electronic properties and high spin polarization when x is around 0.125.

## Z-P02

### 磁性半金属 $\text{Mn}_2\text{Z}$ (Z=P, As, Sb, Bi) 的第一性原理研究

高波

北京科技大学 100083

半金属(half-metal)材料因其在自旋电子学器件和极化输运理论的潜在利用价值日益受到关注和研究<sup>1,2</sup>。本工作用第一性原理 GGA 近似的方法计算了  $\text{Mn}_2\text{Z}$  (Z=P, As, Sb, Bi) 化合物的晶格常数、能带结构、磁性和态密度, 并结合分子杂化轨道理论讨论了 sp 元素对 Half-Heusler 化合物的磁性、能隙、态密度分布、自旋的影响。研究发现, 平衡晶格常数与原子序数成正比。平衡晶格常数从 P 的 5.3802Å 增加到 Bi 的 6.1997Å。

计算得到  $Mn_2Z$  ( $Z=P, As, Sb, Bi$ ) 的总磁矩都近似为  $1\mu_B$ 。四种合金都遵循 Slater-Pauling 法则。我们的计算给出了  $Mn_2Z$  ( $Z=P, As, Sb, Bi$ ) 四种合金中  $Mn_1$  和  $Mn_2$  的磁矩, 两者成反向排列, 且均随  $Z$  的原子序数增大而增大,  $Z$  的磁矩影响较小。

对能带结构的计算表明,  $Mn_2Z$  合金在平衡晶格常数处自旋向上能带具有金属性, 自旋向下能带具有半导体性质, 合金表现出明显的半金属性。

$Mn_2Z$  合金能带结构和带隙同时受过渡族元素  $Mn$  的  $3d$  电子层和  $sp$  元素  $p$  电子层的影响。与大部分 Half-Heusler 合金不同的是  $Mn_2Z$  合金中  $Z$  原子的  $p$  电子层在费米面以上接近费米面处的态密度影响作用随  $Z$  的原子序数增加逐渐变大, 并且影响带隙的大小, 使得带隙逐渐减小, 到  $Mn_2Bi$  时, 带隙变得非常小。总磁矩主要依靠  $Mn_1-3d$  态和  $Mn_2-3d$  态的贡献,  $Z$  原子由于其高度对称性, 基本没有作用。因此可以通过掺杂来改变能隙, 同时可实现金属材料、半导体材料与半金属材料之间的转换。还可能得到自旋无能隙材料。

## Z-P03

### 几种六角金属晶格再取向的第一原理研究

周刚, 王峰, 徐东生, 杨锐

中国科学院金属研究所 110016

六角结构金属中的位错的滑移系数数量较少, 影响了其塑性和加工性能。近期实验和模拟研究显示, 六角金属中存在一种新的类孪晶变形方式, 然而目前尚不清楚其原子过程和激发能垒等关键参数。

本研究采用基于 VASP 软件的第一原理方法结合 CINEB 技术, 计算这种变形方式下不同六角结构金属 ( $Be, Ti, Zr$  和  $Mg$ ) 中的晶格通过直接的取向转变形成孪晶时所需克服的能垒。

结果表明, 这几种六角结构金属的  $c/a$  比越接近理想值, 塑性变形时晶格再取向所需要克服的能垒越低。

关键词: 六角金属; 塑性变形; 晶格再取向; 第一原理

## Z-P04

### Fe 对 Al-Mg-Si-Cu 合金组织性能影响

蒙毅<sup>1</sup>, 崔建忠<sup>2</sup>, 朱远志<sup>1</sup>

1. 北方工业大学

2. 东北大学

目的: 系统考察 Fe 元素及其含量对 Al-Mg-Si-Cu 合金组织性能的影响, 获得几种含 Fe 的 Al-Mg-Si-Cu 合金, 使其塑性在满足工业生产要求的前提下, 具有极高的强度。并系统阐述 Fe 对 Al-Mg-Si-Cu 合金性能提高的强化机理。

方法: 采用低频电磁半连续铸造技术, 制备含 Fe 量依次为 0.15 wt.%、0.35 wt.% 和 0.6 wt.% 的 Al-Mg-Si-Cu-Cr-Zr-Ti 合金, 利用金相显微镜考察含 Fe 量对铸态组织的影响, 利用扫描电子显微镜及透射电子显微镜考察 Fe 元素及其含量对析出相析出行为及合金再结晶行为的影响。通过常温力学性能测试, 获得几种强度极高、塑性满足要求的 Al-Mg-Si-Cu 合金。

结果: 采用在 Al-Mg-Si-Cu-Cr-Zr-Ti 合金中添加一定量的 Fe, 形成了球状或棒状  $Al(CrFe)Si$  相。Fe 含量的增加会促进合金半连续铸锭中羽毛晶组织的形成, 有利于铸造缺陷 (气孔、疏松) 数量的降低。当含 Fe 量达到 0.601 wt.% 时, 合金铸锭组织中出现了明显的羽毛晶组织。合金中 Fe 含量的增加, 促进了椭球状  $DO_{22}$  型  $Al_3Zr$  相细小弥散的析出, 其与  $Al(CrFe)Si$  相的共同作用进一步显著抑制合金再结晶, 还进一步促进了  $Q'$  相的析出。Fe 含量为 0.356 wt.% 时, 合金挤压棒 T6 态的抗拉强度和屈服强度可以分别达到 503MPa 和 478MPa, 伸长率为 12.25%。当 Fe 含量为 0.601 wt.% 时, 合金挤压棒 T6 态的抗拉强度和屈服强度可以分别达到 520MPa 和 503MPa, 伸长率为 10.38%。

结论: 获得了可应用于工业生产的、抗拉强度达到 500MPa 级的 Al-Mg-Si-Cu 合金, 是目前报道的强度最高的 Al-Mg-Si-Cu 合金。

关键词: Al-Mg-Si-Cu 合金, Fe, 力学性能, 微观组织

## Z-P05

### 第一性原理计算研究 SnO<sub>2</sub> (110)表面对 NO 的气敏机理

王小风<sup>2</sup>, 陈艳平<sup>1</sup>, 裴金亮<sup>1</sup>, 胡季帆<sup>1</sup>, 秦宏伟<sup>1</sup>

1. 山东大学物理学院
2. 大连理工大学盘锦校区基础教学部

利用第一性原理研究 SnO<sub>2</sub>(110)面对 NO 气体的气敏机理,从微观角度理解不同氧化或还原程度的 SnO<sub>2</sub>(110)表面对 NO 的气敏性。计算结果显示, SnO<sub>2</sub>(110)表面对 NO 的气敏性强烈依赖于环境中的氧含量:当环境中的氧含量相当大的情况下, NO 分子与吸附在 SnO<sub>2</sub>(110)表面的 O-或 O<sub>2</sub>-相互作用,形成[NO<sub>2</sub>]结构的物质,并伴随着电荷从 NO 分子到 SnO<sub>2</sub>(110)表面的转移;当环境中的氧含量不太大的情况下, NO 分子与 SnO<sub>2</sub>(110)的表面氧相互作用,形成[NO<sub>2</sub>]结构的物质,并伴随着电荷从 NO 分子到 SnO<sub>2</sub>(110)表面的转移;当环境中氧含量相当低的情况下, NO 分子与还原的 SnO<sub>2</sub>(110)的表面(移除表面桥位氧)相互作用,并伴随着电荷从 NO 分子到 SnO<sub>2</sub>(110)表面的转移。以上的计算结果均与试验结果相吻合。

关键词: 气敏材料; SnO<sub>2</sub>; DFT; NO

## Z-P06

### 遗传算法结合第一性原理方法研究团簇结构

黄晓明<sup>1</sup>, 梁晓庆<sup>1</sup>, 赛琳伟<sup>2</sup>, 赵纪军<sup>1</sup>

1. 大连理工大学
2. 河海大学常州校区

团簇科学是物理学和化学两大学科的一个交汇点,近年来,已成为材料科学新的生长点。获得团簇的稳定结构是理论研究其性质的前提,确定团簇基态结构是一个极其复杂的全局优化问题,是当前纳米团簇研究的难点所在。

遗传算法是基于达尔文生物进化论的种群优化算法,早期的遗传算法应用经验势方法优化团簇,缺点是优化精度低,依赖于已有参数。本课题组发展了遗传算法结合第一性原理方法对团簇的基态结构进行全局搜索和模拟设计,我们使用这一方法研究了多种体系的团簇结构。包括纯金属体系 Ga<sup>1</sup>, Na<sup>2</sup>, Ca<sup>3</sup>, 金属掺杂硅团簇 Na-Si<sup>4</sup>和 V-Si<sup>5</sup>, 合金体系(Au-Ag<sup>6</sup>和 Sn-Pt<sup>7</sup>)以及金属氧化物(WO<sub>3</sub>)<sub>n</sub><sup>8</sup>。通过与实验数据的对比,这一方法可以高效地获得准确的最低能量结构,适用于多种复杂合金团簇体系,具有优越的可移植性。

关键词: 团簇, 遗传算法, 第一性原理

## Z-P07

### 开发用以模拟电子激发态动力学的声子扰动法

汪日平, 刘利民

北京计算科学研究中心 100094

本项研究提出一种新方法模拟凝聚态物质中热电子弛豫这样一种复杂而基本的激发态动力学过程。由于热电子弛豫过程决定着热电子的寿命,人们对这个过程的认识深度及模拟能力将最终决定人们能够多大程度设计更好的纳米电子器件。以往,能够对这一过程进行第一性原理实时模拟的方法只有非绝热分子动力学。然而,那个方法存在着诸多问题,比如,计算量很大,不能分析各个声子模对电子弛豫的贡献。为此,本研究提出一种能够在很多场合取代它的新方法:声子扰动法。这个方法通过动态声子场与静态电子结构之间的量子相互作用来计算电子势能面之间随时间演化的非绝热耦合系数,并由此利用含时密度泛函理论和势能面跳跃算法来描述电子弛豫过程。这个种方法的理论严格计算量小,它将开启对大体系种长时间激发态运动的模拟。由于它分析了各个声子模对电子弛豫的贡献,它将开辟一个通过调节声子模来调制电子激发态动力学的新方向。

关键词: 电子激发态动力学, 声子扰动, 非绝热跃迁



## Z-P08

### 基于缺陷石墨烯的高灵敏度一氧化碳气体传感器：范德华力的交互作用

姜颖达, 李爽, 刘伟, 赵永好

南京理工大学材料学院纳米结构材料中心 210094

气体传感器在环境和安全领域有着极其重要的应用，但是仍然存在着结合力弱、灵敏度低和选择性差等一系列问题。因此，开发高灵敏度、廉价并具有可逆性的气体传感器是至关重要的。

利用包含了多种不同范德华力修正方法的密度泛函理论，我们研究了一氧化碳气体分子与石墨烯之间的相互作用。

一氧化碳气体分子与纯石墨烯之间有着较低的吸附能，几乎没有电荷转移，是物理吸附；相反地，缺陷石墨烯对一氧化碳气体分子结合力较强，同时改变了系统的电子性质和磁性质，是化学吸附。同缺陷石墨烯相比，五型石墨烯与一氧化碳气体分子的结合力较弱。

通过计算比较不同类型石墨烯对一氧化碳气体分子的吸附能，从而寻找到合适的一氧化碳气体传感器。由于缺陷石墨烯的高灵敏度，我们认为缺陷石墨烯更适合作为气体传感器。

关键词：传感器 一氧化碳 石墨烯 范德华力 第一性原理

## Z-P09

### 高熵合金 $\text{Al}_x\text{CrMnFeCoNi}$ 的弹性模量的第一性原理研究

孙逊, 张华磊

西安交通大学前沿科学技术研究院 710054

实验上观察到高熵合金  $\text{CrMnFeCoNi}$  是一种单相 fcc 结构的合金，具有良好的低温抗断裂性，目前尚不明确为什么等摩尔比的五种不同晶体结构的元素会形成单相 fcc 结构的合金，这限制了高熵合金的开发设计。本工作采用第一性原理合金理论 EMTO-CPA 方法，以高熵合金  $\text{CrMnFeCoNi}$  为研究对象，计算合金各个组成元素含量变化对其总能的影响，研究了具有 fcc 结构和 bcc 结构的高熵合金  $\text{Al}_x\text{CrMnFeCoNi}$  的总能和弹性常数随 Al 含量增加的变化趋势。

通过计算 fcc 和 bcc 结构的  $\text{CrMnFeCoNi}$  的相稳定性，结果表明，Mn、Fe、Co、Ni 四种元素有利于稳定 fcc 相，而 Cr 元素倾向于稳定 bcc 相。研究还表明高熵合金  $\text{Al}_x\text{CrMnFeCoNi}$  随着 Al 摩尔含量的增加从单相 fcc 结构向单相 bcc 结构发生转变。fcc 相的杨氏模量和剪切模量均随着 Al 摩尔含量增加而降低，bcc 相的杨氏模量和剪切模量均随着 Al 摩尔含量增加而升高。

本工作表明高熵合金  $\text{CrMnFeCoNi}$  能形成单一的 fcc 结构并不是单一元素主导的结果，而是各元素共同作用的结果，其中除了 Cr 元素，其它的四元素 Mn、Fe、Co、Ni 均有稳定 fcc 相的作用。Al 元素含量的不同能使高熵合金  $\text{Al}_x\text{CrMnFeCoNi}$  发生结构转变，并且影响高熵合金  $\text{Al}_x\text{CrMnFeCoNi}$  的弹性性能。研究工作为探索单相高熵合金的结构性能以及弹性性能提供了新思路和新方法。

关键词：第一性原理计算，高熵合金，相转变，弹性常数，EMTO-CPA 方法

## Z-P10

### 矿化剂对 Cr - Fe 系无钴黑色料合成影响的研究

梁翠玲

景德镇陶瓷学院 333000

为了使无钴黑色料的制作工艺更为简化，烧成温度范围更为宽泛，实验在原有配方的基础上添加了适量的矿化剂，研究了添加有矿化剂的 Cr-Fe 系无钴黑色料的合成工艺条件。

在固相法合成条件下，以  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  和  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  为实验原料，分别添加矿化剂（氧化锶、偏钒酸铵、氧化钇），通过调整  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  和  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  之间的比例，得到多种色调的黑色料。实验重点研究了有矿化剂（氧化锶、偏钒酸铵、氧化钇）加入后，不同的烧成制度与原料配比等因素对 Cr-Fe 系无钴黑色料发色的影响。

通过差热分析、XRD 和 SEM 测试分析，讨论了实验中采用的 3 种矿化剂分别对 Cr-Fe 系无钴黑色料合成的影响机理，实验制得的 Cr-Fe 系无钴黑色料晶相主要为刚玉型固溶体  $(\text{Fe}_{0.6}\text{Cr}_{0.4})_2\text{O}_3$  和  $\text{Cr}_{1.3}\text{Fe}_{0.7}\text{O}_3$ ，呈

色稳定，烧成温度范围宽泛。把制得的色料与一定量的熔剂混合，涂到白色瓷盘上，进行彩烤，得到的釉上彩黝黑自然，有光泽，符合市场要求。通过综合分析，实验中最有助于 Cr-Fe 系无钴黑色料发色的矿化剂为氧化锆，并得到在此实验条件下的最佳烧成制度。

关键词：固相法；无钴黑色料；合成条件；矿化剂

## Z-P11

### 金属镍中间隙位错环强化的原子尺度模拟研究

王峰<sup>1</sup>, 张悦<sup>2</sup>, 于德军<sup>2</sup>

1. 中国科学院金属研究所
2. 鞍山师范大学

透射电镜等实验观测显示，柏氏矢量相反的平行位错（位错偶）和棱柱型位错环大量存在于面心金属的疲劳过程中，可能对位错微结构的形成有重要作用，然而对于位错偶演变和棱柱环的产生及其与位错的相互作用等微观过程，目前缺少原子尺度的细致研究。

基于原子尺度模拟和嵌入原子势，首先考察金属镍中不同条件下位错偶转变的原子尺度过程，进而模拟加载过程，考察间隙棱柱环的形成及其与位错的相互作用。

结果显示，依赖于位错偶类型、位错间的相对位置和温度等条件，直接的位错湮灭可形成多种晶体缺陷，包括空位及其团簇、间隙性位错环、层错偶极子、层错四面体等。产物中的间隙型棱柱位错环与运动位错存在强烈相互作用，取决于两者的相对位置，棱柱环对位错施加弹性拖拽或附着于位错形成割阶，进而导致位错后续滑移临界应力的系统性改变，尤其是被棱柱环附着后位错的滑移临界应力可增至通常派纳力的 10 倍以上。

以上结果揭示了位错相互作用的复杂原子过程，为理解强化机制和设置相关介观宏观模型参数提供了可靠信息。

关键词：金属；塑性；位错；硬化；原子模拟

## Z-P12

### 点缺陷引起的应力场在应变玻璃转变中的作用机制

梁传鑫, 王栋, 王昭, 王云志

西安交通大学前沿院 710054

应变玻璃转变是在铁弹体系中发现的一种类玻璃化转变过程，这种玻璃化转变过程有着不同于正常马氏体转变的一些特性，如纳米级的微小畴的形成，动态力学的频率依赖性，小的热滞，冻结过程等等，并且产生了重要的性能，如超弹性窄滞后、不变模量、因瓦特性等等。点缺陷在应变玻璃转变中起着重要作用，点缺陷产生的应力场抑制了正常马氏体转变，进而导致了在空间随机分布的不同取向的纳米马氏体畴。但是，如何定量的描述缺陷在应变玻璃转变中的作用，特别是不同类型的缺陷所产生的应力场分布如何影响应变玻璃转变仍然不清楚。

我们利用分子动力学与相场动力学相结合的方法定量研究不同类型缺陷对马氏体相变和应变玻璃转变的影响。在分子动力学中通过建立相应温度下的合金原子构型，利用能量优化的方式计算原子平衡位置的应力分布，引入不同类型和浓度的缺陷，计算获得其应力场分布，并作为输入参数引入相场动力学模型中，定量的描述点缺陷对应变玻璃转变的影响。

通过分子动力学模拟，我们获得了 NiTi 合金中不同类型（Ni, Fe, Mn, Co）、不同浓度点缺陷所产生的应力场分布，研究发现应力场分布范围随着浓度的增加逐渐变大，缺陷类型影响应力场的值以及分布范围。通过将应力场引入相场模型，我们模拟里不同浓度和缺陷类型下的马氏体相变，发现了应变玻璃转变的临近成分，研究结果与实验一致。

本工作通过分子动力学和相场模拟相结合的方法研究了点缺陷在应变玻璃转变中的作用，揭示缺陷类型和缺陷浓度对局部应力场的影响，发现了应变玻璃转变所需要的缺陷状态。研究工作为定量设计新型应变玻璃合金体系提供了新的思路和方向。

关键词：应变玻璃转变；点缺陷应力场；相场动力学；分子动力学

## Z-P13

### 晶体衍射的数值模拟

许珂, 郝剑楠, 舒小林, 金硕  
北京航空航天大学 100191

具有平移对称性的完整晶格在一定波长的电磁波照射下会形成与之对应的衍射图样, 通过布拉格公式或倒格矢理论可以得到其中的对应关系。而这种对应关系在晶体存在缺陷时却难以获得。通过数值方法模拟晶体具有特定类型及浓度的缺陷时的衍射现象, 可以获得相应的衍射图样, 进而得出其中的对应关系。这种对应关系为分析和测量晶体中的缺陷存在及其类型提供了行之有效的途径。本文采用了 fortran 代码编写了构建晶体衍射的模拟程序, 对多种完整晶格进行了模拟, 模拟结果与理论计算结果符合。使用该程序探讨了部分缺陷(空洞、晶界等)与其衍射图样的对应关系。

关键词: 晶体衍射 晶体缺陷 数值模拟

## Z-P14

### Ni-W 二元体系的扩散行为研究

朱礼龙<sup>1,2</sup>, 魏昌东<sup>3</sup>, 江亮<sup>1,2</sup>, 赵继成<sup>3</sup>, 金展鹏<sup>4</sup>

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

研究了 Ni-W 二元体系中 Ni 和 W 元素的扩散系数随温度和成分的变化关系。

本文通过扩散多元节 (diffusion multiple, DM) 方法制备了含 Ni-W 二元扩散偶的试样, 并分别将它们在 1000°C、900°C 和 800°C 的温度下进行长时间的扩散退火处理。利用电子探针 (electron probe micro-analyzer, EPMA) 测定 Ni-W 扩散偶形成的扩散层中 Ni 和 W 两种元素的浓度分布曲线。

根据获得的浓度曲线, 利用一个融合了 Boltzmann-Matano 方法、Sauer-Freise 方法、Hall 方法、Wagner 方法以及改进的 forward-simulation 方法的 MatLab 程序来提取 Ni 和 W 元素的互扩散系数及杂质扩散系数。通过将本文获得的扩散系数与文献中报道的数据进行比较, 结果表明改进的 forward-simulation 方法在提取互扩散系数及杂质扩散系数方面具有很好的可靠性。

关键词: 扩散多元节; Ni-W 二元扩散偶; 互扩散系数; 杂质扩散系数; forward-simulation 方法

## Z-P15

### 剪切应变下磷烯的直接-间接带隙转变与各项异性降低的电子起源

萨百晟  
福州大学 350108

单层黑磷也称做磷烯, 由于其具有出色的各项异性光电性质和电学性质而收到了广泛关注。我们通过第一性原理方法, 系统性地研究了磷烯在受到剪切应变下发生的直接-间接带隙转变与各项异性降低, 并阐明了其电子起源。通过晶格动力学计算发现, 黑磷可以在受到 10% 的剪切应变下仍然保持稳定。黑磷可以在受到 5% 的剪切应变后由直接带隙半导体转变为间接带隙半导体, 并且伴随着其各项异性的显著降低。我们通过对声速、有效质量和电荷密度的分析, 从电子起源的角度理解了黑磷发生直接-间接带隙转变与各项异性降低的原因。我们认为黑磷在剪切应变下的的这种特性可以用作纳米电子器件的开关元件。

关键词: 磷烯; 应变; 带隙转变

## Z-P16

### Mg-X-RE 系列镁合金典型长周期堆垛有序相结构建模及形成预测的第一原理研究

马尚义<sup>1</sup>, 李建超<sup>1</sup>, 刘利民<sup>2</sup>, 王绍青<sup>1</sup>

1. 中国科学院金属研究所

## 2. 中国工程物理研究院北京计算科学研究中心

镁合金中存在的长周期堆垛有序相 (LPSO) 能极大提高镁合金的综合力学性能。作为研究 LPSO 相形成机制和强化机制的基础, 寻找 LPSO 相的形成规律, 我们以  $X_6RE_8(Mg)$ 、 $X_6RE_6(Mg)$  团簇为基础, 在 85 种镁合金体系  $Mg-X-RE$  ( $X=Al, Zn, Cu, Ni, Co$ ;  $RE=Sc, Y, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu$ ) 中尝试构建了典型 14H LPSO 相的晶体学模型  $Mg_{142}X_{12}RE_{16}$  和  $Mg_{146}X_{12}RE_{12}$ , 并借助第一原理计算方法对  $Mg-X-RE$  镁合金中 LPSO 相形成及其稳定存在的可能性进行了预测。计算结果表明, 在  $Mg-X-RE$  ( $RE=Y, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu$ )、 $Mg-X-Sc$  ( $X=Zn, Cu, Ni$ )、 $Mg-X-Ce$  ( $X=Ni, Co$ )、 $Mg-X-RE$  ( $X=Zn, Al$ ;  $RE=Nd, Pm$ ) 镁合金体系中有可能存在 LPSO 相。预测结果与已知实验结果基本一致。本研究从第一原理计算的能量角度建立了系列镁合金中 LPSO 相微观结构和形成的清晰描述, 为寻找镁合金 LPSO 相的形成规律提供了新的视角, 将有助于镁合金 LPSO 相形成机制的研究, 同时还有益于高性能新型镁合金材料的成分优化和设计。

关键词: 镁合金; 长周期堆垛有序相; 团簇结构; 稳定性

### Z-P17

#### Fe<sub>2</sub>(MoO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> 的制备与表征及其负膨胀性质的第一性原理研究

柴丰涛<sup>1,2</sup>, 陈丽江<sup>1</sup>, 施思齐<sup>2</sup>

1. 浙江理工大学
2. 上海大学

采用水热合成法制备出  $Fe_2(MoO_4)_3$  材料, 并用高温 XRD、TG-DSC 对产物进行表征, 证实样品在 510°C 附近发生低温单斜相和高温正交相之间的可逆相变, 正交相表现出负膨胀特征。基于密度泛函理论的第一性原理方法计算了与电学性能相关的电子态密度、电荷密度等性质, 与晶格振动相关的声子谱和声子态密度等性质, 并进一步分析了结构特性、电子性质和晶格振动行为。计算结果表明  $Fe_2(MoO_4)_3$  的带隙为 1.66eV, 为 P 型半导体; Fe-O 键趋向于离子键特性, Mo-O 之间存在较强的共价结合; 晶格振动行为方面, Mo、Fe 和 O 各元素在弯曲振动区对格波的振动都有贡献; 而在伸缩振动区, Mo-O 的联立振动行为起决定作用, Fe 的影响归为高阶微扰效应。与 Fe、Mo 相连的氧原子表现出明显的各向异性的不同振动频率, 并造成  $FeO_6$  八面体和  $MoO_4$  四面体的非均匀扭曲和转动, 这些结果对探索  $Fe_2(MoO_4)_3$  的负膨胀机理具有推动作用。

关键词: 负膨胀,  $Fe_2(MoO_4)_3$ , 声子谱, 第一性原理计算

### Z-P18

#### CO<sub>2</sub> capture and conversion

殷文金, 刘利民

北京海淀区东北旺西路 10 号中关村软件园二期 北京计算科学研究中心 (100094) 100094

The conversion of CO<sub>2</sub> by the virtue of sun-light has the great potential to produce the useful fuels or valuable chemicals while decreasing CO<sub>2</sub> emission from the traditional fossil fuels. Here, we use the first-principles calculations combined with the periodic continuum solvation model (PCSM) to explore the adsorption and reactivity of CO<sub>2</sub>

关键词: CO<sub>2</sub> capture

### Z-P19

#### Mg<sub>2</sub>Si 和 Al<sub>2</sub>CuMg 析出相与铝合金电化学腐蚀关联性的第一性原理研究

覃一发, 王绍青

中国科学院金属研究所, 沈阳材料科学国家(联合)实验室 110016

通过广义梯度近似的密度泛函方法, 我们计算了铝合金中常见的  $Mg_2Si$  与  $Al_2CuMg$  两相各晶面的电子逸出功, 研究了逸出功与这两相局部腐蚀行为的关联性。结果表明, 表面截止元素能够显著影响这两相的逸出

功大小。镁原子暴露在最外层时，这两相各个晶面的逸出功都很低，接近纯金属镁的逸出功；如果截止原子电负性较高，例如硅，逸出功则较高。表面截止情形复杂多样，因而这两相的逸出功的范围较大，导致铝合金中这两相的颗粒与铝基体的伏特电势差值可正可负，在铝合金局部腐蚀中充当阴极或阳极甚至中途发生极性的逆转。我们的工作是第一原理计算在电化学问题上的新颖应用。

关键词：第一性原理 铝合金局部腐蚀 电子逸出功

## **Z-P20**

### **New Manifold Two-dimensional Single-layer Structure of Zinc-blende Compounds**

童传佳, 刘利民

北京计算科学研究中心 100094

Two-dimensional (2D) materials open up tremendous opportunities for attractive applications in next-generation flexible and transparent nanoelectronic devices. In this work, 81 single layer structures are systematically examined for the 27 zinc-blende (ZB) materials with the constitutional formula MX by density functional calculations. The calculated results reveal that the stable configurations in various MX compounds are correlated with the atomic radius and electronegativity difference of constituent elements X and M. The atomic and electronic properties of novel materials are greatly depended on the stable phase structures. The stable single-layer ZB structures exhibit versatile electronic properties thus such 2D materials are potential photocatalysts for water-splitting.

关键词：2D zinc-blende photocatalyst

## **Z-P21**

### **Two-dimensional square-pyramidal VO<sub>2</sub> with tunable electronic**

唐振坤, 刘利民

北京计算科学研究中心 100094

In this work, the electronic properties of two dimensional (2D) square-pyramidal vanadium dioxide (S-VO<sub>2</sub>) are explored based on first-principle calculations. The results reveal that the monolayer S-VO<sub>2</sub> is an ideal flexible platform to manipulate the magnetic properties by either biaxial compressive strain or surface modification. Although the ground state of the pristine S-VO<sub>2</sub> is a direct semiconductor with antiferromagnetic (AFM) coupling between two nearest V atoms, the monolayer S-VO<sub>2</sub> becomes ferromagnetic (FM) under a biaxial compressive strain. Furthermore, the monolayer S-VO<sub>2</sub> can be tuned from nonmagnetic semiconductor to magnetic semiconductor and even to half-metal through surface modification.

关键词：magnetic properties, electronic structures, square-pyramidal vanadium dioxide.

## **Z-P22**

### **第一性原理扶手椅型石墨烯/石墨烷(AGA/GNRs)异质结构纳米带的电学和磁学性能**

张文雪, 李涛

长安大学 710061

本文用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法，系统的研究了扶手椅型石墨烯/石墨烷(AGA/GNRs)异质结构纳米带的电学和磁学性能。计算结果表明，13-扶手椅型石墨烯纳米带(13-AGNR)，13-扶手椅型石墨烯纳米带群(13-AGNR)和混合扶手椅型石墨烯/石墨烯纳米带(AGA13-X/GXNRs)都是直接半导体(13, 13-x 和 x 表示纳米带宽度)。AGA13-X/GXNRs 在费米能级附近的能带结构主要由石墨烯部分决定，并且AGA13-X/GXNRs 界面上原子的电荷转移很强烈。具有边缘悬空键的 AGA7/G6NR 缺陷对其磁学性能产生了明显的影响。这些多样的、可协调的电子和磁学性能能够为制造新颖的纳米电子器件提供理论指导。

关键词：第一性原理，异质结构，纳米带

## Z-P23

### 铜锆界面能的第一原理研究

何成<sup>1</sup>, 黄锐赞<sup>1</sup>, 张文雪<sup>2</sup>

1. 西安交通大学
2. 长安大学

铜基纳米线或者薄膜材料可以用来作为金属基柔性材料。然而, 纯铜纳米线或者薄膜在实际应用时, 其在弯曲应力作用下电子传输的稳定性以及抵抗弯曲作用的次数仍难以满足商业需要。铜锆非晶纳米多层薄膜具有良好的力学性能, 其有望成为突破纯铜纳米线性能制约瓶颈的一种可行方法。铜锆界面对于铜锆非晶纳米多层薄膜传输性质有着巨大的影响。因此, 我们采用第一性原理密度泛函方法, 集中研究铜锆不同界面的界面能和界面的电子结构性质。发现铜(111)/Zr(001)界面能最低, 界面能为 1.41J/m<sup>2</sup>, 这一结果与理论计算很接近, 证明了我们用第一性原理方法研究铜锆非晶纳米多层的可靠性, 为我们进一步研究非晶纳米多层薄膜传输性质提供了很好的基础。

关键词: 多层膜; 界面能; 铜锆

## Z-P24

### 弯曲碳纳米管的结构和物理性质

刘立钊<sup>1</sup>, 赵纪军<sup>2</sup>

1. 大连理工大学盘锦校区 基础教学部
2. 大连理工大学 三束材料改性教育部重点实验室

随着碳纳米管的发现, 各种新颖的弯曲碳纳米管也相继被合成出来, 并表现出独特的性质, 具有重要的研究意义。基于弯曲碳纳米管结构的实验表征, 我们搭建了相应的结构模型, 并采用半经验的紧束缚模型以及第一性原理方法研究了它们的物理性质。在碳纳米管中引入五元环和七元环可以形成不同类型的弯曲碳纳米管, 包括碳纳米环、之字形碳纳米管、碳纳米线圈【1】。五元环和七元环的存在带来不同于碳纳米管的力学、电学、稳定性等性质。例如, 碳纳米环中的五元环和七元环可以增强其化学活性, 有利于异质元素的掺杂, 并可以通过掺杂调控碳纳米环的导电性【2】。之字形碳纳米管呈现出显著的机电耦合性质特性, 在外加拉伸应变下可以发生半导体—金属或金属—半导体的转变【3】。另外, 碳纳米线圈的三维螺旋结构使其呈现出超弹性, 可以承受较大的拉伸和压缩形变, 表现出很好的柔韧性【4】。也正是因为碳纳米线圈的超弹性, 使得它在形变下能保持其键长基本不变, 从而保证了电学性质的稳定性【5】。总的来说, 弯曲碳纳米管具有众多完全不同于碳纳米管的独特性质, 它们不仅丰富了碳纳米管家族的结构, 更是拓展了碳纳米管的应用领域。

关键词: 弯曲碳纳米管; 碳纳米环; 之字形碳纳米管; 碳纳米线圈

## Z-P25

### 外延氧化石墨烯结构和稳定性的第一性原理研究

周思, 赵纪军

大连理工大学 116024

氧化石墨烯(GO)具有可调控的电学、力学、和热学性质、非线性光学、以及固有荧光等优越的物理特性, 在微电子学器件、光电器件、储能材料、传感器等领域展现出广阔的应用前景。GO 的制备主要是采用 Hummers 法氧化石墨、再剥离氧化石墨层, 所得的产物具有复杂的化学结构, 其含氧量、以及含氧官能团的种类、数目和空间分布取决于制备方法和过程。目前实验上仍未实现对 GO 结构的有效控制, 主要原因在于对 GO 原子结构及其随外界环境变化的认识尚不全面。

本项工作采用第一性原理计算和蒙特卡罗模拟方法, 研究了外延氧化石墨烯(EGO)的结构特性和化学稳定性。EGO 薄膜由 Hummers 法直接氧化生长在 SiC 衬底上的石墨烯制得。研究表明, 这种 EGO 薄膜保留了石墨烯的碳原子骨架, 具有均匀的层状结构, 及较少的缺陷和空洞。室温下, EGO 显示出亚稳定性, 含氧官能团在碳原子层上扩散和重组, 彼此间结合并生成水分子, 使 EGO 发生自发还原现象。这种重组过程使 EGO 形

成非均匀氧化的层面结构,提高了体系的热力学和动力学稳定性,从而达到平衡。高度氧化的碳原子层区域富含羟基,易与水分子形成氢键网络,少量的水分子即可使层间距达到 9 埃。这些研究结果表明,外延氧化石墨烯的原子结构和化学稳定性对比传统氧化石墨烯存在一定差异;利用缓和的淬火过程是调控 EGO 原子结构、避免缺陷产生的一种潜在方法。

关键词: 氧化石墨烯,第一性原理计算,蒙特卡罗模拟

## Z-P26

### 沸石表面离子吸附的密度泛函研究

刘一璠<sup>1</sup>, 刘轶<sup>2,1</sup>, 翟冬<sup>3</sup>, 赵亮<sup>3</sup>, 徐京城<sup>1</sup>, 张晶<sup>1</sup>, 罗德炳<sup>1</sup>

1. 上海理工大学材料科学与工程学院
2. 上海大学物理系和上海材料基因组工程研究院
3. 中国石油大学(北京)重质油国家重点实验室

通过对沸石进行酸或碱处理可以获得梯级孔道沸石,提高催化效率。

本工作利用密度泛函计算对沸石溶解物种和添加剂在沸石表面的吸附能力进行了评估。

研究发现无论是溶解还是未溶解表面上,含硅溶解物种比含铝物种吸附能力更强。含硅和含铝物种在溶解表面的吸附都强于未溶解表面。含镓的添加剂离子在溶解和未溶解表面的吸附能力都比含硅或铝的物种弱,其中在溶解表面的吸附强度相对较强。

这些结果可为控制沸石介孔形成和设计孔导向剂提供理论依据。

关键词: 沸石 酸处理 碱处理 吸附 密度泛函计算

## Z-P27

### 核聚变堆关键结构材料的第一性原理研究

赵纪军

大连理工大学三束材料改性教育部重点实验室 116024

核聚变能是解决未来人类能源问题的重要途径。聚变堆材料问题,特别是高能强流中子辐照环境下的结构材料问题,是制约聚变能实现的瓶颈之一。近年来,我们针对聚变堆关键结构材料(低活化马氏体钢、钒合金),采用第一性原理方法(包括 EMTO 和平面波赝势法)系统地研究了多元合金的成分-物性关系,金属基体中杂质的滞留和扩散行为,氢/氦与空位缺陷的相互作用和协同效应,金属基体中氢泡和氦泡形成的微观机理等问题。上述研究,为聚变堆的材料选取和深入理解材料辐照损伤效应的微观物理机制,提供了基础理论依据。

关键词: 核聚变堆, 结构材料, 第一性原理

## Z-P28

### 沸石酸处理中溶解和吸附过程的密度泛函研究

张晶<sup>1</sup>, 刘轶<sup>2,1</sup>, 翟冬<sup>3</sup>, 赵亮<sup>3</sup>, 徐京城<sup>1</sup>, 刘一璠<sup>1</sup>

1. 上海理工大学材料科学与工程学院
2. 上海大学物理系和上海材料基因组工程研究院
3. 中国石油大学(北京)重质油国家重点实验室

梯级孔道沸石兼具微孔和介孔结构,能同时提供反应位点和扩散通道,因而提高催化效率。通过对沸石进行酸处理可获得介孔结构,但分子水平上的介孔形成机制尚不清楚。

本文对沸石酸处理中的溶解和吸附过程进行了密度泛函计算研究。

我们的计算发现酸溶解过程中脱铝要比脱硅反应速率限制步骤的能量壁垒更低。而且从沸石骨架上溶解下来的含硅和含铝物种更容易在溶液中团聚,而不是吸附回沸石表面。

我们的计算研究加深了在分子水平上对“酸溶铝”物理化学过程的理解,为优化沸石酸处理工艺、控制介孔形成提供了理论依据。

关键词：沸石 酸处理 溶解 吸附 密度泛函计算

## Z-P29

### 飞机刹车虚拟仿真制动材料摩擦模型研究

陈梦樵, 刘文胜, 马运柱\*, 刘根山

中南大学粉末冶金国家重点实验室 410083

飞机刹车虚拟仿真依赖于系统各部分数学模型, 所建模型的准确程度直接决定了仿真的精确度, 其中制动材料的摩擦模型影响了输出刹车力矩大小。系统模型可以通过分析各部分的动力学特性等建立, 而摩擦模型是由制动材料特性决定的, 难以获得精确数学模型。本文通过研究飞机制动过程摩擦表面特性, 探讨了速度、压力、温度等外部条件对摩擦性能的影响, 引入第三体模型建立低速低压工况下摩擦系数数学模型。通过分析制动材料组织结构, 用不同工况下的实验数据进行了模型参数拟合, 表征了制动材料的摩擦系数与速度、压力及温度的关系。系统仿真结果表明, 所建立的摩擦模型能够真实的反映出制动材料摩擦性能, 使得系统仿真的精度得到了提高。

关键词：系统仿真；制动材料；摩擦模型；第三体模型

## Z-P30

### 点阵式图案化存储交换耦合材料的微磁学模拟

仲子宜<sup>1,2</sup>, 王子军<sup>3</sup>, 吴平平<sup>1,2</sup>

1. 厦门工学院 材料科学与工程系
2. 厦门工学院 先进材料研究实验室
3. 中国原子能科学研究院

近二十年的研究表明, 交换耦合效应在垂直磁记录技术应用方面, 具有很强的潜力。而点阵式图案化存储(Bit Patterned Media)交换耦合材料, 是未来磁记录领域发展的主要趋势。

本文依据微磁学理论, 通过高斯-赛德尔(Gauss-Seidel)迭代方法求解朗道-栗弗席兹-吉尔伯特方程(Landau-Lifshitz-Gilbert, LLG)得到交换耦合作用下的磁畴结构与磁滞回线。我们研究了多种不同形状, 不同结构的 FePt/Fe 交换耦合的点阵图案, 并计算了相关的磁滞回线与磁学性质。

我们发现涡旋态的磁畴结构广泛存在于点阵图案中, 同时我们可以通过外场下的磁畴结构, 磁化矢量状态及分布来解释点阵图案的磁滞回线。我们可以通过人工的调整结构与硬软磁百分比等方式来修改点阵图案的磁滞回线。

本工作开启了一种新的途径来设计交换耦合控制下的点阵式图案化储存结构以实现纳米尺度下高存储密度设备。

关键词：交换耦合, 磁存储, 微磁学, 模拟

## Z-P31

### Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 高压相的结构预测及性能研究

崔琳, 胡盟, 王倩倩, 何巨龙

亚稳材料科学与制备国家重点实验室, 燕山大学, 秦皇岛, 066004 066004

我们拟在高压下寻找 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 潜在的高压相。

我们采用吉林大学马琰铭教授所带领的研究组开发的 CALYPSO 程序, 对 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 进行不同压力下的最低能量的结构搜索, 并选取具有较低能量的结构进行结构优化, 稳定性判定及力学性能的预测。

我们成功找到一种能够在常压下稳定存在的 Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 高压相, 其结构是由 SiN<sub>6</sub> 八面体相互连接而成, 所有的 Si 原子都具有六配位, 具有 Pbcn 的空间群, 属于正交晶系, 我们将其命名为 o-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, 其相变压力点为 193 GPa。在常压下其带隙宽度为 3.36 eV, 硬度为 36.1 GPa, 略高于  $\alpha$ 、 $\beta$  和  $\gamma$  三相的硬度。o-Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 是一种潜在的氮化硅高压相, 具有较高的硬度, 是一种宽带隙半导体。

关键词：Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> 高压相；宽带隙半导体；硬度



## Z-P32

### 铝合金中的织构对裂纹尖端塑性影响的有限元模拟

刘冉, 刘家菊, 黄晖, 王为, 荣丽, 聂祚仁

北京工业大学材料学院 100022

建立三维晶体模型, 通过调用 Abaqus 中率相关子程序, 模拟了 5xxx 系铝合金中裂纹尖端塑性区的分布, 分析了晶体取向对裂尖塑性区、应力值以及裂纹张开位移和 J 积分的影响。结果表明, 裂尖塑性区、应力值、裂尖张开位移与晶粒取向密切相关, 当材料具有单织构时, Cube、S 织构具有较强的抵抗裂纹扩展的能力, 而 Goss、Brass 织构具有较差的抵抗裂纹扩展的能力; 当材料具有双织构时的裂纹尖端塑性区、Mises 屈服应力、及 CTOD 值相比较单织构而言均有所降低, 说明增加取向差角可以增强抵抗裂纹扩展的能力, Cube-X 双织构的 CTOD、J 积分和 S22 在最低水平, Cube 与其他织构之间的晶面扭转角较大, 说明较大的晶面扭转角, 可阻碍裂纹扩展或促进裂纹偏转, 从而降低裂纹扩展速率。

关键词: 晶体取向、塑性区、裂尖张开位移、J 积分

## Z-P33

### 镁合金 ECAP 成形过程有限元分析及工艺参数优化

彭必友, 李文泽, 夏怡文, 陈世雄, 潘仁元, 谢朵朵

西华大学 610039

等径角挤压(Equal Channel Angular Pressing, ECAP)是通过细晶强化改善镁合金综合力学性能最有效的深度塑性变形(Severe Plastic Deformation, SPD)工艺。本文选择挤压态 AZ31 镁合金为研究对象, 首先利用有限元法对不同温度(225°C、250°C、275°C 和 300°C)、不同挤压道次(1~4 道次)下的 AZ31 镁合金 ECAP 变形过程进行模拟分析, 讨论 AZ31 镁合金在变形过程中的材料流动、挤压载荷、温度场分布、应力应变状态以及变形均匀性的情况。然后利用设计加工的模具制备块体细晶 AZ31 镁合金试样, 对其进行试验验证。结果表明:(1)有限元模拟的等效应变与理论计算结果吻合度高, 验证了有限元模拟的有效性。(2)变形时, 材料会发生不均匀流动, 且在经转角变形区时, 其靠近内转角的流动速率小于外转角的流动速率。

(3)变形的初始阶段, 试样受到三向压应力的作用而处于压应力状态; 通过主要变形区后, 试样的大部分区域一直处于压应力状态, 而靠近内转角处的材料变为拉应力状态, 温度越低, 拉应力值越大, 造成缺陷的可能性越大, 在 200°C 变形时, 材料会发生锯齿形断裂, 进一步验证了本文所建立的有限元模型的可靠性, 同时解释了材料发生断裂的原因。(4)试样的剪切变形发生在主要变形区内(模具转角处), 靠近内转角获得的等效应变要大于外转角; 金相试样横截面上不同区域的晶粒细化效果与有限元分析得到的等效应变分布趋势一致, 靠近内转角处的晶粒尺寸明显小于外转角处, 分布也更加均匀; 材料获得的等效应变直接影响晶粒的细化效果。

关键词: 等径角挤压, AZ31, 有限元分析, 深度塑性变形

## Z-P34

### Cd 掺杂 ZnO 单层的电子结构及光学性质研究

谭昌龙<sup>1</sup>, 徐殿双<sup>1</sup>, 张琨<sup>1</sup>, 田晓华<sup>1</sup>, 蔡伟<sup>1</sup>

1. 哈尔滨理工大学

2. 哈尔滨工业大学

ZnO 是一种重要的宽禁带半导体材料, 在发光二极管、太阳能电池、光催化等领域应用广泛。二维 ZnO 单层由于其特殊的结构及性质在纳光电器件中有潜在应用, 因此受到研究者的重视。Cd 掺杂是调控 ZnO 体材料的能带及光电性质的有效途径, 然而有关 Cd 掺杂 ZnO 单层的研究尚未见报道。本文采用第一性原理的方法, 研究了 Cd 掺杂 ZnO 单层的几何结构、能带结构、态密度和光学性质。

计算采用基于密度泛函理论的平面波赝势方法, 交换关联能采用广义梯度近似(GGA)中的 Perdew-Burke-Ernzerhof 形式, 同时采用库仑作用能(+U)来描述相应电子的库仑排斥作用。平面波截断能量

为 360eV, Monkhorst-Pack 网格的特殊 K 点取为  $4 \times 4 \times 1$ 。ZnO 单层模型选用的是  $3 \times 3 \times 1$  和  $4 \times 4 \times 1$  的超胞, 真空层为 15Å。用 Cd 原子取代 Zn 原子来实现 Cd 掺杂。

计算结果表明, 完全弛豫的 ZnO 单层具有类石墨烯的平面结构。采用 GGA+U 的方法计算本征 ZnO 单层的禁带宽度为 4.05eV, 与实验值接近, 远高于不加 U 的计算结果。由能带计算结果可知, 随 Cd 含量增加, ZnO 单层的禁带宽度变小, 当 Cd 含量为 11.1at.% 时, Cd 掺杂 ZnO 单层的禁带宽度为 3.69eV, 这为调控其禁带宽度提供了方法。光学性质计算发现, Cd 的掺入导致介电函数虚部和吸收系数峰值向低能端移动, 光谱出现红移。另外, Cd 掺杂使 ZnO 单层在可见光区域的吸收系数明显增大。

综上, 本文采用第一性原理的方法, 研究了 Cd 掺杂 ZnO 单层的和光学性质。研究发现, 采用 GGA+U 的方法可以精确预测本征 ZnO 单层的禁带宽度。此外研究表明, 掺杂 Cd 是调控 ZnO 单层的禁带宽度(变小)的有效途径。值得注意的是, Cd 掺杂增强了 ZnO 单层在可见光区域的光吸收系数。上述研究对于促进 ZnO 单层在光电子及光催化领域的应用有理论指导价值。

关键词: ZnO 单层; 电子结构; 光学性质; 第一性原理

## Z-P35

### Ni-Mn-Sn 磁性形状记忆合金光学性质的第一性原理研究

谭昌龙<sup>1</sup>, 张琨<sup>1</sup>, 田晓华<sup>1</sup>, 王振华<sup>1</sup>, 蔡伟<sup>2</sup>

1. 哈尔滨理工大学
2. 哈尔滨工业大学

Ni-Mn-Sn 磁性形状记忆合金合金具有磁控形状记忆效应、大的磁热和磁电阻效应, 是一种重要的功能材料, 成为当前材料领域的研究热点。光学性质是材料物性的重要方面。然而目前, 关于 Ni-Mn-Sn 磁性形状记忆合金光学性质的研究报道较少。本文采用第一性原理的方法, 研究了 Ni-Mn-Sn 合金马氏体相与奥氏体相的晶体结构、电子结构和光学性质, 阐明了相结构对光学性质的影响规律及物理本质。

计算采用基于密度泛函理论的平面波赝势方法, 交换关联能采用广义梯度近似中的 Perdew-Burke-Ernzerhof 形式, 对电子采用自旋极化处理。自洽计算收敛条件为每次迭代之间的能量差小于  $1.0 \times 10^{-5}$  eV/atom, 公差偏移、每个原子上的力、应力偏差分别小于  $1.0 \times 10^{-3}$  Å,  $3.0 \times 10^{-2}$  eV/Å 和  $5.0 \times 10^{-2}$  GPa。平面波截断能量为 300eV, Monkhorst-Pack 网格的特殊 K 点取为  $8 \times 8 \times 8$ 。

计算表明,  $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{37.5}\text{Sn}_{12.5}$  合金马氏体相较奥氏体相更稳定。当 Ni-Mn-Sn 合金由立方结构奥氏体转变为马氏体时, 在费米能级处自旋向下的态密度峰明显削弱, 这是由于 Ni 3d 与占据 Sn 位的 Mn 3d 之间的杂化所致。光学性质计算发现, 马氏体相变主要改变介电函数虚部, 对介电函数实部影响很小。在低频区域, 马氏体相的吸收系数比奥氏体相的大, 而在较高的频率区域, 马氏体相的吸收系数比奥氏体相的小。Ni-Mn-Sn 合金马氏体相与奥氏体相之间存在较大的光学反射率差, 其机理在于马氏体相变对 Ni 3d 态的影响所致。综上, 本文采用第一性原理的方法, 首次阐明了 Ni-Mn-Sn 合金马氏体相与奥氏体相的光学性质, 揭示了相结构对光学性质的影响规律及物理本质。Ni-Mn-Sn 合金两相间较大的光学反射率差, 对于拓宽其在光学方面的应用提供了理论指导。

关键词: 磁性形状记忆合金; Ni-Mn-Sn; 第一性原理; 光学性质

## Z-P36

### 含氮泡的镍纳米丝拉伸特性研究

龚恒风<sup>1,2</sup>, 王呈斌<sup>1,2</sup>, 张伟<sup>1,2</sup>, 任翠兰<sup>1,2</sup>, 怀平<sup>1,2</sup>, 朱志远<sup>1,2</sup>

1. 中国科学院上海应用物理研究所
2. 中国科学院微观界面与探测重点实验室

本文通过分子动力学模拟方法研究了应变速率、温度、纳米丝横截面, 氮泡尺寸大小和氮泡中氮与空位比例分别对镍纳米丝拉伸特性的影响。

研究表明, 随着应变速率的增加, 镍纳米丝的弹性模量和屈服应力增加。在较高温度下, 镍纳米丝的弹性模量和屈服应力降低。随着氮泡尺寸的增加或纳米丝横截面的减小, 弹性模量逐渐增加, 屈服应力增强, 而屈服应变则缓慢减小。随着氮原子与空位的比例增加, 镍纳米丝的弹性模量和屈服应力降低。

因此，氦泡的存在明显加速了镍材料的断裂趋势。

关键词：纳米丝 氦泡 拉伸应力

### Z-P37

#### 利用波尔兹曼-相场模型研究含流场的共晶生长

杨玉娟<sup>1,2</sup>, 李俊杰<sup>2</sup>, 王锦程<sup>2</sup>

1. 同济大学机械与能源工程学院
2. 西北工业大学凝固技术国家重点实验

目的：利用复合的晶格波尔兹曼-相场模型研究流场作用下的共晶生长。考察流场对共晶生长过程的影响。方法：其中用相场法研究共晶生长，利用晶格格点气波尔兹曼动力学模型研究流场的作用。通过在温度场和溶质场方程中引入平流项考虑流场对溶质场和温度场的作用。在固相和液相界面处通过回弹法考虑流场。结果：模拟结果表明，流场对共晶生长过程影响显著，共晶生长向迎流方向生长。此外研究了 Al-Cu 合金中流场对层片共晶和棒状共晶组织的影响。研究表明，在不同初始层片间距下，共晶生长发生振荡现象，而且振荡方向偏向流场方向。

结论：流场对共晶生长过程影响显著，共晶生长向迎流方向生长。

关键词：波尔兹曼-相场模型，共晶生长，流场，Al-Cu 合金

### Z-P38

#### 铜团簇沉积在 Si(001)和 Si(111)衬底表面的理论模拟研究

龚恒风<sup>1</sup>, 李公平<sup>2</sup>, 吕炜<sup>3</sup>, 王鲁闽<sup>4</sup>, 张世旭<sup>2</sup>

1. 中国科学院上海应用物理研究所-堆材料与工程技术部
2. 兰州大学核科学与技术学院
3. 密西根大学机械工程系
4. 密西根大学核能工程与放射科学系

本文通过分子动力学模拟方法研究了 Cu 团簇分别沉积在 Si(001) and Si(111)衬底上成膜特性。

采用嵌入原子势 (Embedded-Atom Method, EAM), SW (Stillinger-Weber, SW)势函数和 Mores 势函数分别描述模拟体系中 Cu-Cu 原子, Si-Si 原子和 Cu-Si 原子之间的相互作用。

在 Si(111)衬底上，当沉积 Cu 团簇的入射动能在 0.1eV/atom 到 1.0eV/atom 时，团簇呈现非常好的均匀性和延展性，且在衬底表层没有硅化物形成。当 Cu<sub>13</sub> 团簇和 Cu<sub>19</sub> 团簇的入射动能均增至 3.0eV/atom, Cu<sub>147</sub> 团簇的入射动能增至 1.6eV/atom, 在衬底表层开始有硅化物出现。随着团簇入射动能的增加，团簇在 Si(111)面上的延展性优于在 Si(001)面上的延展性。

因此，研究表明团簇沉积形成薄膜的质量不仅取决于团簇本身大小和团簇入射能量，而且还取决于衬底的晶体取向。

关键词：团簇 入射动能 晶体取向

### Z-P39

#### 杂质的非局域和局域电化学效应对石墨烯化学活性的影响

巩朋来<sup>1</sup>, 曾雉<sup>1,2</sup>

1. 中国科学研合肥物质研究院固体物理研究所
2. 中国科学技术大学

目的：为了揭示 B、N 掺杂石墨烯的化学活性，以及理解 B、N 引起的电化学效应和弹化学效应，我们研究了 H 吸附在 B、N 掺杂石墨烯上的稳定性。

方法：利用基于密度泛函理论计算材料电子结构。我们模拟的超胞大小尺寸是 17.06 埃×17.26 埃，超胞的尺寸选用的比较大以避免超胞镜像中的非局域电荷的影响。真空层达 12 埃，这样可以忽略层间相互作用。我们研究吸附构型分为两类，即，扶手椅路径(AP)和锯齿形路径(ZP)。H 在 B、N 掺杂石墨烯的吸附能的

增强是电荷效应、应变效应的结果。可以通过石墨烯-应变曲线估算 B、N 掺杂石墨烯中应变对 H 稳定性的贡献，进而我们可以推出电化学效应对 H 稳定性的贡献。

结果：吸附 H 的稳定性依赖于吸附位置和距 B、N 的距离 R。H 的稳定性大小随 R 的增加表现出有规律的衰减振荡，直到逼近 0.82eV（H 在石墨烯上的吸附能），衰减的范围至少达 9 埃。B、N 单掺杂石墨烯的载流子分布具有长程衰减的特点，而 BN 共掺杂的石墨烯的载流子极大的被削弱，载流子分布具有短程局域分布的特点。此外，B、N 杂质诱导的应变对与 H 的稳定增加仅仅在 40meV 以内。最后，B 促进 H 向石墨烯电荷转移，而 N 促进石墨烯向 H 电荷转移。

结论：B、N 对石墨烯注入掺杂电荷，其中非局域的掺杂电荷来源于非局域的苯环共振，而局域的掺杂电荷则束缚在 B、N 杂质周围。在 B、N 单掺杂石墨烯中，非局域和局域的掺杂电荷都会存在；而在 B、N 双掺杂石墨烯中，非局域的掺杂电荷将会受到极大地抑制。这些在石墨烯中非局域分布的掺杂电荷增强了吸附 H 的稳定性，影响范围距 B、N 杂质中心至少 9，然而分布在 B、N 杂质周围的局域掺杂电荷仅仅在 B、N 附近(约 2)对吸附 H 有可观的增强作用。我们的结果还澄清了 B、N 杂质引起的应变对于吸附 H 的稳定性增强几乎没有影响。

关键词：石墨烯 电化学 掺杂

## Z-P40

### 铝锂合金搅拌摩擦焊接数值模拟及实验研究

高恩志, 尹治利, 刘春忠

沈阳航空航天大学 材料科学与工程学院 110136

本文对 5A90 铝锂合金搅拌摩擦焊过程进行了数值模拟及实验研究。

基于计算流体力学理论，建立 5A90 铝锂合金搅拌摩擦焊的三维热流耦合模型。分析了不同工艺参数（焊接速度、搅拌针旋转速度）对温度、材料流动、应变速率的影响规律。

数值结果表明，搅拌针旋转速度比焊接速度对温度场和应变率的作用更明显，此外，搅拌针周围金属呈现不对称金属流动，导致前进侧出现较高的峰值温度及应变率。实验研究表明，在搅拌针旋转速度 1200rpm，焊接速度为 200mm/min 时焊缝组织晶粒细小且无缺陷形成。

模拟结果与实验结果吻合。

关键词：搅拌摩擦焊 热流耦合模型 铝锂合金

## Z-P41

### ZrB<sub>2</sub> 高压相的第一性原理研究

凌飞飞, 于栋利, 黄权, 高宇飞, 罗坤

燕山大学 066004

自从硼化镁高温下的超导性能被发现了以后，物理学界人士逐渐对具有相似类型结构的硼化物产生了极大的兴趣，尤其是过渡金属硼化物。其中 ZrB<sub>2</sub> 是一种较为典型的具有此种类型结构的超高温陶瓷材料，但近年来关于 ZrB<sub>2</sub> 的研究主要围绕于 ZrB<sub>2</sub> 复合材料，关于其高压行为的研究非常少，本文主要是想利用第一性原理预测 ZrB<sub>2</sub> 的高压行为。

本文利用 Materials Studio 软件 CASTEP 板块，对 ZrB<sub>2</sub> 进行加压计算，并进行弹性分析、能带及态密度分析。

计算发现，在 0-300GPa 范围内，ZrB<sub>2</sub> 没有发生相变，计算其弹性常数，表明其满足 Born 稳定性规则，具有力学稳定性。同时对其进行能带和态密度分析发现，随着压力的升高，费米能级附近的态密度逐渐增大，同时 4d 轨道逐渐展宽，导电性增强。

通过第一性原理计算，在 0-300GPa 内没有发现 ZrB<sub>2</sub> 的高压相，但随着压力的升高，其导电性得到了增强。

关键词：ZrB<sub>2</sub> 高压 第一性原理

## Z-P42

### 钛-钢复合板熔焊对接数值模拟

张敏, 谢威威, 樊庆仰, 李继红  
西安理工大学 710048

本文以钛合金、镍基合金材料为 TA1/X80 复合板熔焊对接过渡层材料, 对各层焊缝的温度场、应力场及变形场进行了数值模拟分析, 针对于复合板焊接及冷却分析情况, 合理的简化了几何模型, 有效的进行了网格划分, 选定了合适的热源模型; 并对复合板进行了熔焊对接。结果表明: 四层焊接时应力集中在过渡层钛合金层及镍基合金层, 这两层过渡层在焊缝中属于薄弱区域; 各层对应的焊缝处均为最大变形处, 每层冷却完的变形均比每层焊完的变形有所减小, 且整个过程变形量都很小, 焊前需对其做反变形处理。该研究为钛-钢复合板焊接材料的选择及工艺的制定提供了依据。

关键词: TA1/X80; 过渡材料; 数值模拟;

## Z-P43

### 樟脑磺酸掺杂聚苯胺系统的激发态氢键动力学理论研究

张亚红, 段玉平, 刘进

大连理工大学材料科学与工程学院 116085

本论文采用第一性原理研究樟脑磺酸 (CSA) 掺杂聚苯胺 (PANI) 系统中所形成的氢键, 模拟过程中分别用 Ph<sub>2</sub>NH (DPA)、苯胺阳离子 (ICPA)、二甲亚砜 (DMSO) 代替聚苯胺以及樟脑磺酸的作用官能团。运用密度泛函理论 (DFT) 进行氢键系统基态优化, 与此同时, 应用含时密度泛函理论 (TDDFT) 对低能激发态的电子激发能以及振子强度进行计算。通过优化后稳定结构及能量分析可知在樟脑磺酸掺杂聚苯胺系统中形成了 S=O...H-N 式氢键。氢键的形成使形成处的键长得到了拉伸, 氢键作用越强引起的键长拉伸越明显。Ph<sub>2</sub>NH 与二甲亚砜 (DPA-DMSO) 氢键复合体被激发到具有最高振子强度的 S<sub>2</sub> 态, 同时苯胺阳离子与二甲亚砜氢键复合体 (ICPA-DMSO) 被激发到 S<sub>3</sub> 态。文章最后进行了前线分子轨道分析及电子密度转移的讨论, 在 HOMO 到 LUMO 的轨道跃迁过程中电子从苯环转移到醌环, 在氢键系统中只有 DPA 与 ICPA 激发到相应的激发态, DMSO 保持其电子基态。

关键词: 聚苯胺; 氢键; DFT; 激发态

## Z-P44

### 基于锻造的 AP1000 压水堆主管道 316LN 不锈钢材料数据库的建立与应用

王胜龙<sup>1</sup>, 杨滨<sup>1,2</sup>, 张铭显<sup>1</sup>, 武焕春<sup>1</sup>

1. 北京科技大学新金属材料国家重点实验室
2. 北京科技大学钢铁共性技术协同创新中心

316LN 超低碳控氮奥氏体不锈钢 (316LN 钢) 因为其优良的力学性能、可焊接性能以及耐晶间应力腐蚀性而被应用在 AP1000 压水堆核电站一回路主管道上。但是该钢种常温下组织为单相奥氏体, 在热处理时无相变, 因此无法通过热处理的方式细化晶粒, 只能通过锻压变形打碎晶粒使其发生再结晶的方式使晶粒细化。

研究 AP1000 主管道在锻造过程中的微观组织演变规律多采用有限元数值模拟软件 Deform-3D, 但是该软件自带数据库并不包含 316LN 钢。

本研究通过耦合 316LN 钢的物理性能参数、流动应力应变数据和再结晶动力学方程, 系统地建立了 316LN 钢的材料数据库, 成功地实现了材料数据库与 Deform-3D 有限元模拟软件的无缝集成, 并对其可靠性进行了验证。

不仅为后续有限元数值模拟的展开做好了铺垫, 也丰富了 Deform 的数据库, 为相关工程技术人员和科技工作者提供参考。

关键词: 316LN 奥氏体不锈钢; Deform 有限元模拟软件; 材料数据库

## Z-P45

### 钛/钢复合板爆炸焊接数值模拟

张敏, 刘娟娟, 褚巧玲, 蔡俊清, 李继红  
西安理工大学 710048

本文利用有限元软件数值模拟 TA1/Q235 复合板爆炸焊过程。由数值模拟结果显示, TA1/Q235 钢爆炸焊接过程中, 大概在  $78\mu\text{s}$  时复板开始与基板发生碰撞; 通过对复合板界面压力场的模拟计算, 发现压力场在爆轰进行的过程中其接触处是正的压应力, 而爆炸结束后的一段时间里由于受稀疏波的影响, 其复合板受拉应力, 即负的压应力。通过选取离起爆点不同位置的五个点的 Z 向位移可以看出, 其最终位移都大于基板和复板的间隙  $1.1\text{cm}$ , 说明基复板的焊接情况良好。除此之外, 复板的运动速度经历了先增大后减小的过程, 这是由于爆轰产物与金属的强度综合作用的结果。

关键词: TA1/Q235; 等效应力; 压力场; 位移; 速度场

## Z-P46

### 超低碳贝氏体钢焊缝熔池微观组织的数值模拟

张敏, 李露露, 徐蔼彦, 薛覃, 李继红  
西安理工大学 710048

基于元胞自动机法建立新的模型, 模拟超低碳贝氏体钢焊缝熔池凝固过程, 并实现固相溶质浓度和液相溶质浓度的分离。模型考虑了不同过冷度对枝晶生长形貌的影响, 模拟了具有不同择优取向角的单、多个等轴晶以及柱状晶向等轴晶转变过程。模拟结果表明, 过冷度越大, 枝晶生长速度越快, 微观偏析越严重, 生长所需时间越短; 晶体取向主要影响二、三次枝晶臂的生长, 从而影响枝晶形貌。

关键词: 元胞自动机, 焊缝熔池, 枝晶形貌, 溶质浓度

## Z-P47

### 第一性原理方法研究 LiF 晶体的结构、声子和热力学性质

侯海军

1. 盐城工学院材料工程学院
2. 怀化学院物理与信息工程系
3. 四川师范大学物理与信息工程学院

采用局域密度近似的赝势平面波方法研究了 LiF 晶体的结构、电子、声子及热力学性质。理论研究得到的晶格常数、弹性常数、体弹模量及其一阶导数和实验值及已报道过的理论值吻合的很好。LiF 晶体具有较大的带隙  $8.72\text{ eV}$ 。采用线性响应方法计算得到了 LiF 晶体的声子散射、声子态密度及波恩有效电荷数。通过群论的方法研究了 LiF 晶体在  $\Gamma, X, L$  点的声子频率。由声子态密度研究了 LiF 晶体的自由能、焓、熵及热容, 获得的结果和实验值及其他理论值吻合的很好。

关键词: LiF, 结构, 声子, 热力学性质

## Z-P48

### 新型氮化铝亚稳结构及性能研究

刘超

燕山大学材料科学与工程学院 066004

同种物质在高压下存在至少 5 种以上的新结构, 而结构影响物质的性质。氮化铝 AlN 实验上存在三种结构: 密排六方型的纤锌矿结构 wurtzite, 闪锌矿结构 zincblende 和岩盐矿结构 rocksalt。我们希望通过理论研究来找到氮化铝潜在的新型结构。

我们通过 CALYPSO 程序产生大量的氮化铝新结构, 然后通过 material studio 软件中的 castep 模块对这些新结构进行热力学稳定性, 机械稳定性和动力学稳定性三方面的分析。通过三方面稳定性分析, 我们筛选出新型亚稳结构。最后我们通过焓压图研究了氮化铝 AlN 不同结构之间的相变关系, 并且研究了他们的电学, 力学和热学等性能。

通过第一性原理研究, 我们提出 4 种潜在的新型氮化铝亚稳结构, 他们都满足弹性稳定性判据和动力学稳定性条件。常压下他们的焓值介于铅锌矿和岩盐矿之间。通过计算氮化铝不同结构在 0 到 20 GPa 下的焓值, 研究焓压图我们发现, 这 4 种新型亚稳结构在一定压力下都会转变为岩盐矿结构。研究这 4 种亚稳相的能带结构图发现, 它们都是直接带隙半导体。基于经验公式计算发现氮化铝随着结构不同, 硬度不同, 但是都具有较高的硬度值。硬度最小为 13.4 GPa, 最大为 34.3 GPa。德拜温度的计算揭示了氮化铝不同相的德拜温度介于 850 K 到 1153 K 之间。

我们通过 CALYPSO 程序结合 material studio 软件, 成功找到 4 种新型氮化铝亚稳结构。这些结构极大地丰富了氮化铝的电学, 力学, 热学等方面的性能, 扩充了氮化铝材料的应用范围。

关键词: 氮化铝; 亚稳结构; 电学; 力学; 热学

## Z-P49

### 高压下 $\text{Al}_3\text{Ti}$ 一维长周期结构相稳定性及弹性性能的研究

唐平英, 黄国华, 谢清连, 黄津梨

广西高校新型电功能材料重点实验室, 广西师范学院 530023

一维长周期  $\text{Al}_3\text{Ti}$  由于其新颖的结构引起了人们特别的关注, 但其严重的脆性和差的延展性阻碍了  $\text{Al}_3\text{Ti}$  的实际运用。压强可以引发相变并改变材料的物理化学性能, 同时高压下材料行为的深入研究对更好地掌握结构与力学性能的内在关联具有重要的意义。

我们通过第一性原理计算系统研究了高压下七种  $\text{Al}_3\text{Ti}$  一维长周期结构的相稳定性和弹性性能, 这七种结构包含了  $\text{D0}_{22}$ ,  $\text{D0}_{23}$ ,  $\text{D0}_{24}$ ,  $\text{D0}_{25}$ ,  $\text{D0}_{26}$ ,  $\text{D0}_{27}$  和  $\text{D0}_{28}$ 。

计算得到的焓差表明高压下七种  $\text{Al}_3\text{Ti}$  一维长周期结构都会相变为  $\text{L1}_2$  结构。随着反相边界周期参数  $M'$  的增加,  $\text{Al}_3\text{Ti}$  的焓值先减小后增加, 其中  $\text{D0}_{23}$  的焓值是最小的。相反地,  $\text{Al}_3\text{Ti}$  的相变压强却随着  $M'$  的增加先增加后减少, 相应地  $\text{D0}_{23}$  具有最大的相变压强。随着压强的增加, 弹性常数以及弹性模量  $B$ ,  $G$  和  $E$  都单调增加, 同时还拟合得到了其随压强变化的二阶函数。有趣的是, 泊松比随压强的变化趋势非常类似于  $B/G$  比值随压强的变化趋势。 $B/G$  比值和柯西压力都表明高压下这些一维长周期结构呈现出脆性。

可见压强在  $\text{Al}_3\text{Ti}$  相变及改变  $\text{Al}_3\text{Ti}$  各种力学性能方面起着非常关键的作用, 对高压下  $\text{Al}_3\text{Ti}$  一维长周期结构相稳定性及弹性性能的第一性原理研究可为改善  $\text{Al}_3\text{Ti}$  性能起到一定的理论指导作用。

关键词: 相变; 一维长周期结构; 弹性性能; 高压

## Z-P50

### 钨中自间隙原子与空位的自修复机制

秦诗瑶, 金硕, 周洪波, 张颖, 吕广宏

北京航空航天大学, 物理科学与核能工程学院, 北京 100191 100191

聚变材料钨在中子辐照下会产生大量 Frenkel 缺陷, 造成辐照损伤。Frenkel 缺陷的复合行为对材料辐照损伤的自修复起着关键的作用, 然而其复合机理尚不清楚。

应用第一性原理方法, 计算了钨中一个 Frenkel 对 (自间隙原子与空位) 在 18 种不同构型下的复合情况。考虑自间隙原子在钨中沿着方向可以自由扩散, 按照空位距离自间隙原子所在的连线的距离把以上 18 种构型分为: 空位在连线上、空位距连线第一、二、三近邻。计算结果表明自间隙原子可以与其所在的连线上的全部空位自动复合; 在自间隙原子与距其所在的连线上的第一近邻空位情况中, 5 种构型可以自动复合, 2 种构型均需要克服 0.06 eV 的势垒达到复合; 自间隙原子与距其所在的连线上的第二近邻空位均不能自动复合, 需要分别克服 0.067 eV, 0.07 eV 和 0.0003 eV 的势垒达到复合; 在自间隙原子与距其所在的连线上的第三近邻空位情况中, 有 2 种构型可以自动复合, 3 种构型不能自动复合, 需要分别克服 0.12 eV, 0.024 eV 和 0.02 eV 的势垒达到复合。

我们通过计算从微观角度深入理解钨辐照损伤的自修复机理, 为改善钨材料的抗中子辐照性能提供理论指导和参考依据。

关键词: 钨, 空位, 自间隙原子, 第一性原理方法

## Z-P51

### 非金属掺杂锐钛矿型 TiO<sub>2</sub> 的电子结构的研究

王园, 王景州, 马静, 周剑平, 陈晓明

陕西师范大学 710119

为了研究非金属掺杂对锐钛矿型 TiO<sub>2</sub> 电子结构的影响, 进而揭示非金属掺杂导致锐钛矿型电子结构变化的本质原因。

采用了基于第一性原理的广义梯度近似下的投影缀加平面波方法研究了掺杂不同非金属元素(B、C、N 以及 F) 的锐钛矿相 TiO<sub>2</sub> 的晶体结构、杂质形成能、电子结构、磁性等性质。

研究发现随着掺杂元素的电负性的增加杂质形成能减小, 电负性还决定了杂质态能级在能带中的位置, F 电负性大于氧元素, 杂质态能级主要分布在价带中的低能量区域, B、C、N 电负性比氧元素小, 杂质态能级位于价带顶以上区域。研究还发现了电荷平衡后, 随着杂质电负性和氧元素电负性的接近, 杂质态能级更靠近价带顶。此外, N 掺杂和 C 掺杂可引起 TiO<sub>2</sub> 的电子结构产生自旋极化, 并分别形成 1.0 $\mu$ B 和 2.0 $\mu$ B 的局域自旋磁矩。

因此, 非金属掺杂是提高锐钛矿型 TiO<sub>2</sub> 可见光光催化活性的有效途径。

关键词: 第一性原理; 非金属掺杂; 锐钛矿型 TiO<sub>2</sub>; 电子结构

## Z-P52

### 第一性原理计算揭示 ABX<sub>3</sub> (A=CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>, Cs; B=Sn, Pb; X=Cl, Br, I) 系列材料带隙的本质

袁野<sup>1,2</sup>, 徐闰<sup>1</sup>, 徐海涛<sup>1</sup>, 洪峰<sup>1</sup>, 徐飞<sup>1</sup>, 王林军<sup>1</sup>, 段纯刚<sup>2</sup>

1. 上海大学材料学院

2. 华东师范大学极化材料与器件教育部重点实验室

在 ABX<sub>3</sub> (A=CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>, Cs; B=Sn, Pb; X=Cl, Br, I) 系列材料的理论研究中, 带隙附近的电子结构依然存在争议, 除此之外还有很多问题也是亟待解决的。因此, 本文的主要研究目的就是 ABX<sub>3</sub> 系列材料进行系统性的理论研究, 从而对带隙附近的电子结构给出明确的观点, 探索该系列材料的带隙变化规律并给予理论解释。

本文使用第一性原理计算的方法, 通过密度泛函理论下的 Perdew-Burke-Ernzerhof 交换关联泛函和 Heyd-Scuseria-Ernzerhof 混合泛函分析了立方相钙钛矿 ABX<sub>3</sub> 系列材料。

本文计算了 ABX<sub>3</sub> (A=Cs, CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>; B=Sn, Pb, Sr, Cd, Zn, Mg; X=Cl, Br, I) 系列材料的晶格常数、能带结构和态密度, 对比了不同 B 或 X 元素导致材料总态密度的不同, 分析了价带顶和导带底位置的变化, 并从电子结构的角度解释了变化的原因。本文还研究了该系列材料的不同晶格常数下的禁带宽度值, 规律与实验相符, 进而从理论上分析了禁带宽度变化规律形成的原因。

研究表明, 该系列材料的价带顶是由 B 的 s 电子和 X 的 p 电子杂化的反键态构成的, 导带底是由 B 的 p 电子和 X 的 p 电子的  $\pi$  反键态构成的。本文还系统性地总结了价带顶, 导带底和禁带宽度随 B 和 X 离子变化而变化的规律。给出了部分 ABX<sub>3</sub> 材料的自然带偏移。研究还表明, 本文中所研究的 ABX<sub>3</sub> 钙钛矿材料的禁带宽度随着晶格常数的增大而增大, 这一现象与实验结果是一致的。

关键词: 第一性原理, ABX<sub>3</sub>, 带隙, 电子结构

## Z-P53

### 氧吸附诱导的 CoNi(111)合金表面成分偏聚的密度泛函理论研究

吁艳林, 王立根, 肖伟, 黄国杰

北京有色金属研究总院 100088

CoNi 合金析氢电极的表面成分决定了其催化活性。然而, 氧原子的吸附却能够改变合金的表面成分, 因此, 研究吸附诱导的表面成分变化具有重要的理论和实际意义。

本文运用周期性自洽迭代密度泛函理论研究了 Co 合金元素在 CoNi(111)合金表面的偏聚现象。



对于没有氧吸附的情况, 我们的结果显示 Co 元素不会偏聚到合金表面, 这同实验结果及其它理论计算结果相吻合。在有氧原子吸附的情况下, 我们研究了表面偏聚同氧覆盖度之间的关系, 发现氧吸附超过 1/3 层时 Co 元素会偏析到合金的表面。

我们进一步分析了表面的原子和电子结构、电荷转移及成键特征, 揭示了氧吸附诱导的合金表面偏析的深层次物理本质。

关键词: 密度泛函理论; 吸附; CoNi 合金; 偏聚

#### Z-P54

##### **Adaptive cluster expansion approach for predicting the structure evolution of graphene oxide**

Xi-Bo Li, Li-Min Liu

北京计算科学研究中心

An adaptive cluster expansion (CE) method is used to explore surface adsorption and growth processes. Unlike the traditional CE method, suitable effective cluster interaction (ECI) parameters are determined, and then the selected fixed number of ECIs is continually optimized to predict the stable configurations with gradual increase of adatom coverage. As an application, the adsorption and growth of oxygen atoms on one side of pristine graphene was carefully investigated using this method in combination with first-principles calculations. The calculated results successfully uncover the structural evolution of graphene oxide for the different numbers of oxygen adatoms on graphene. The aggregation behavior of the stable configurations for different oxygen adatom coverages is revealed for increasing coverages of oxygen atoms. As a targeted method, adaptive CE can also be applied to understand the evolution of other surface adsorption and growth processes.

关键词: Graphene oxide

#### Z-P55

##### **基于流变学理论的 TRIP600 钢本构模型研究**

孙蓊泉, 牛闯, 尹衍军, 滕胜阳

北京科技大学冶金工程研究院 100083

TRIP 钢在成形过程中容易发生开裂, 主要是由于发生残余奥氏体向马氏体的转变, 导致外力与变形不协调。其力学行为不仅有传统的弹性变形和塑性变形, 还表现出与时间相关的粘性性质, 因此在对其进行本构建模时有必要考虑时间因素对变形行为的影响作用。利用流变模型既可以通过不同构件的组合准确、合理地描述 TRIP 钢的软、硬相性质, 还可以通过各个构件弹性、塑形及粘性系数的变化与组合描述 TRIP 钢在变形过程中残余奥氏体向马氏体转变的行为特性, 即 TRIP 效应。

本文基于流变学理论, 通过蠕变和应力松弛实验, 建立应力和应变随时间的变化关系, 并通过数据拟合和方程求解, 对 TRIP600 的流变学本构模型进行了研究和探讨。

应用流变学中 Bingham 模型对数据进行拟合求解, 最终建立了 TRIP600 分别在蠕变和松弛实验条件下的本构方程。

结果表明, TRIP600 在发生塑性变形时所表现出的粘塑性性质可以用流变学模型来表征, 所建立的模型可为 TRIP 钢实际冲压过程中的应力应变控制提供参考和指导。

关键词: 弹粘塑性, 流变学, 本构方程, TRIP 效应

#### Z-P56

##### **异质固-液界面中界面层横向结构的计算研究**

梁洪涛<sup>1</sup>, Brian B.Laird<sup>2</sup>, 杨洋<sup>1</sup>

1. 华东师范大学物理学系

2. University of Kansas, Department of chemistry

目的: 固-液界面结构的一个重要特征是界面液相的分层, 此纳米尺度的结构特性与材料的润滑、浸润、凝固等众多性质相关。最近的研究发现界面层液相物质的横向结构具有更加丰富的变化, 如短程结构有序化、亚稳态长程结构有序、合金化等。人们逐渐认识到这些横向结构的尺度和热涨落动力学是固-液界面热力学、动力学以及它们的各向异性的重要物理基础。本研究旨在探索固相台阶对界面层液相横向结构的影响。

方法: 应用分子动力学模拟 750K 单台阶 Al-Pb 固-液平衡界面。统计分析界面层液相的横向平均密度分布、基于台阶边界涨落的本征密度分布和浓度分布。统计溶解在界面层 Pb 中的 Al 的团簇的尺寸以及二维对关联函数。

结果: 我们发现台阶边界处有大量片状 Al 团簇脱离固相, 并溶解到液相区内。界面层液相的 Al 的浓度接近 20%, 比相同温度下块体 AlPb 合金相图数值高出 2 个数量级。对关联函数表明界面层液相中 Al 和 Pb 并非均匀混合, 而是以 Al 团簇颗粒的形式与液相 Pb 混合。平均密度分布和本征密度分布表明液相结构为短程无序。

结论: 750K 的 Al 台阶对固-液界面的界面层液相的结构没有直接影响, 而是起到‘溶质源’的角色。大量的 Al 溶解进入界面层液相中, 平衡浓度远高于块体合金相图的理论数值, 其原因可能是固液界面的界面应力以及其各向异性所致。

关键词: 异质固液界面; 界面层结构; 分子动力学模拟; Al-Pb 合金;

## Z-P57

### 液液界面本征结构的计算研究

杨洋<sup>1</sup>, Brian B. Laird<sup>2</sup>

1. 华东师范大学物理学系

2. University of Kansas, Department of Chemistry

目的: 液液界面在一系列重要应用领域扮演着核心角色, 如电化学、表面活性剂及纳米颗粒的自组装。液液界面和液汽界面一样, 存在毛细波涨落致使局域界面结构很难在实验上精确测量。近年来分子模拟技术成为人们去除毛细波涨落而直接测量液液界面本征结构的重要手段。经典毛细波涨落理论假设界面平均密度分布等于本征密度和界面涨落分布概率的卷积, 这个假设是否成立至今仍存在争议。本研究旨在精确测量 AlPb 合金的液液界面的本征密度和平均密度分布, 精确检验这个假设。

方法: 应用分子动力学结合嵌入原子势的方法, 构建平衡态的 Al-Pb 液液界面。使用分格法确定液液界面的位置, 统计界面位置的空间分布概率, 计算本征密度分布。

结果: Al-Pb 液液界面的本征密度展现出液相物质在界面处的密度涨落, 涨落的行为非常接近相应液体的对关联函数, 这一结果符合经典毛细波理论预言以及之前液汽界面和液液界面的研究工作。毛细波理论中的卷积假设被证明在本研究体系中完美成立。

结论: Fernandez 等在其最近的研究中[Phys.Rev.Lett. 2013, 111, 096104]提出在 LJ 液汽界面体系中密度卷积假设不成立。本研究结果与 Fernandez 等人的工作不相符的主要原因可能在于 LJ 液体的饱和蒸汽压较低, 界面处存在较多的原子交换导致本征密度的计算具有较大不确定性。而本研究使用的合金液液界面体系的互溶度几乎可以忽略不计, 局域界面清晰、尖锐, 更加接近理论假设的条件。

关键词: 液液界面, 本征结构分析, 分子动力学模拟

## Z-P58

### 双量子点与拓扑超导纳米线混合结构中 Majorana 费米子的散粒噪声

刘亚梅, 郭建宏

首都师范大学 100048

本文考虑两个量子点分别与具有强 Rashba 自旋-轨道耦合作用的半导体纳米线两端的 Majorana 费米子耦合, 其中纳米线与 S-波超导体接触而形成拓扑超导纳米线, 并且量子点与金属电极构成串联测量回路。利用粒子数表象下的量子主方程方法, 我们研究了该水平模型中的电子输运特性, 特别是电子的散粒噪声谱。

我们发现, Majorana 费米子对通过量子点的运输电流影响显著,没有 Majorana 费米子耦合的隧穿电流和存在耦合的电流与噪声谱差别明显: 没有 Majorana 费米子耦合时稳态电流差为零; 而存在 Majorana 费米子耦合时稳态电流差明显不守恒, 并且随着隧穿率的增大呈现非对称分布, 在对称偶何处减小为零, 随量子点与 Majorana 费米子耦合强度的增大而达到最大峰值, 最后趋于稳定。另一方面, 存在 Majorana 费米子耦合时, 电子散粒噪声谱的相干振荡信号明显减弱, 但是零频噪声却显著增强。这明显不同于没有 Majorana 费米子耦合时双点和三点模型中的电子运输特征。进一步, 随着隧穿率的变化, 电子在量子点与半导体纳米线之间的相干振荡越来越弱。综上所述, 运输电流差结合电子散粒噪声可以揭示半导体与拓扑超导体混合结构中是否存在 Majorana 费米子。

关键词: Majorana 费米子、稳态电流、散粒噪声

## Z-P59

### 钴纳米环阵列磁特性研究

叶晴莹, 陈水源, 陈书昉, 宋铭霞, 王婉芳, 刘劲尧, 胡冰琳, 黄志高

福建师范大学物理与能源学院, 福建省量子调控与新能源材料重点实验室 350117

本论文研究钴纳米环阵列的磁化动力学特征。

利用蒙特卡洛 (Monte Carlo) 方法结合快速傅立叶变换微磁学方法 (FFTM), 模拟不同几何参数对钴纳米环阵列磁特性的影响。

研究表明: 当纳米环之间距离较远时, 由于环间的相互作用较弱, 系统的磁化行为类似于单个纳米环的磁化行为; 当纳米环之间的距离较近时, 由于环与环之间的相互作用较强, 纳米环阵列的磁特性明显区别于单个纳米环; 同时, 相同圆心距的近距离纳米环, 其微观磁化行为随着纳米环的宽度的变化而有着显著的变化, 产生这一现象的主要原因是系统的能量竞争。

模拟结果符合实验事实, 对磁性纳米环的实验研究及实际应用具有很好的理论参考意义。

关键词: Monte Carlo 方法; 钴纳米环阵列; 磁特性; 自旋组态

## Z-P60

### 第一性原理研究过渡金属中氦-氦的相互作用

张朋波<sup>1</sup>, 赵纪军<sup>2</sup>

1. 大连海事大学

2. 大连理工大学

目的: 中子辐照损伤是核材料领域长期研究的课题, 材料中嬗变生成的氦元素将聚集形成氦泡, 引起材料肿胀和脆化, 然而微观的物理机制尚不清楚。本工作的目的是研究过渡金属中氦-氦的相互作用, 考察氦泡形成的机理。

方法: 第一性原理计算

结果: 我们系统研究了过渡金属 (V, Nb, Ta, Cr, Mo, W, and Fe) 中氦-氦和氦-金属的相互作用。我们系统计算了氦-氦结合能随氦-氦距离的变化, 发现第六主族体心立方金属 (Cr, Mo, W) 中氦-氦具有较强的吸引作用 (0.7–1.11 eV), 而第五主族体心立方金属 (V, Nb, and Ta) 具有较弱的吸引作用 (0.06–0.17 eV)。结构分析显示和接近的氦-氦对是最稳定构型。此外, 我们发现间隙氦原子存在能显著活化空位的形成, 这个现象在第六主族金属更明显。对于空位缺陷, 单个氦喜欢占据空位中心 (除了钒), 而氦-氦对是最稳定了构型[1]。

结论: 第六主族金属中氦-氦具有较强的吸引作用, 这意味着嬗变形成的氦杂质可以通过直接自捕获的形式进行聚集。

关键词: 第一性原理, 过渡金属, 氦效应

## Z-P61

### NiTi 合金表面稳定性的第一性原理研究

李永成<sup>1</sup>, 王福合<sup>1</sup>, 尚家香<sup>2</sup>

1. 首都师范大学物理系
2. 北京航空航天大学材料科学与工程学院

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理的方法，系统地研究了 NiTi 合金 B2 相的三个低指数表面的表面能，解离能及价键特性。

根据表面能和表面弛豫的结果，可以得到在大部分 Ti 的化学势范围内，非极性的 (110) 表面最稳定，且在表面最外层中 Ti 原子比 Ni 原子高出 0.3 $\text{\AA}$ 。但在富 Ni 条件下，以 Ni 为终端的极性 (001) 表面最稳定。同时还发现，对于极性的 (001) 和 (111) 表面，在整个 Ti 的化学势范围内，Ni 终端表面比相应的 Ti 终端表面更稳定。另外，通过比较 NiTi 和纯金属的表面性质，发现极性 (001) 表面的层间距比极性 (111) 表面的层间距大，但是在大部分 Ti 的化学势范围内，(001) 表面的表面能和解离能均比 (111) 表面的相应值大。该对应关系与纯金属中的情况相反。最后通过分析原子结构及价键特性对该现象作了解释。

关键词：第一性原理，NiTi，表面能，解离能，电子结构

## Z-P62

### 体心立方铁中晶界的自间隙原子发射机制

汤笑之, 郭雅芳

北京交通大学土木建筑工程学院力学系 100044

目的：探索体心立方铁中对称倾斜晶界诱发的自间隙原子发射机制。近五年内，《科学》与《自然》杂志曾分别单独报道过类似的缺陷湮灭机制。

方法：原子模拟中的自动能垒攀爬方法(the Autonomous Basin Climbing method), 以及转换态理论(Transition State Theory)。用来比较发射机制与空位迁移的激活能垒。

结果：发射过程中的原子轨迹以及势能形貌(Potential Energy Landscape) 被揭示出来。在合理的温度下，晶界可有效的吸收其 1.5 纳米范围内的空位。但纳米层状结构对空位的迁移和自间隙原子的发射都有抑制作用。

结论：1、晶界的局部能量与应力分布对点缺陷湮灭机制的激活能垒有关键影响，使其分布在 0.3 eV 至 1.2 eV 之间；2、从几何与能量角度分析，《科学》与《自然》杂志曾分别单独报道过的类似现象可被认为是同一种机制，区别仅由体心立方与面心立方的晶格特性差异所引起。

关键词：缺陷湮灭，晶界，势能形貌，反应速率

## Z-P63

### 选择性轨道外加场法计算汞硫族化合物的能带结构及表面态性质

蔡佳

华东师范大学 200241

自从量子自旋霍尔效应首次在 (Hg, Cd) Te 量子阱中被发现以来，人们认为类似于 HgTe 这种具有“反带”结构的性质，是拓扑绝缘体形成的前提条件。传统的半导体材料中，导带的最低点都是由阳离子的 s 轨道电子所占据，即  $\Gamma_6$ ，而价带的最高点则是由阴离子 p 轨道电子所占据。由于重原子存在较强的自旋轨道相互作用，原本的一条带被劈裂成两条带，即  $\Gamma_8$ 、 $\Gamma_7$ 。而在具有“反带”结构的材料中， $\Gamma_6$  与  $\Gamma_8$  的能量值恰好相反，汞硫族化合物则是典型的具有“反带”结构的材料。对于汞硫族化合物，密度泛函理论却不能计算出正确的能带顺序，只有利用精度更高的杂化泛函才能得到。但是由于杂化泛函需要巨大的计算量，对于表面态性质的计算显得非常吃力。所以我们采用了一种新的方法——选择性轨道外加场，可以得到与杂化泛函相同的结果，并对表面态性质进行研究。

根据密度泛函理论，采用投影缀加平面波的方法，交换关联势使用局部密度近似，并且在非静态计算中考虑了自选轨道耦合作用。在此基础上，我们通过选择性轨道外加场方法，引入一个只有特定原子、特定轨道可以感受到的势，得到新的哈密顿量方程，从而运用 VASP 软件包进行求解。

同杂化泛函计算的结果相对比，我们对 HgS、HgSe 和 HgTe 分别计算，通过改变外加势场的大小，我们可以调整电子轨道占据的状态，从而得到其带有电子轨道投影的能带结构。我们发现利用选择性轨道加场的

方法可以得到与杂化泛函计算几乎吻合的结果,并且带隙的大小与理论值和实验值都非常接近。结果表明: HgS 是传统的半导体,不具有反带的性质,而 HgSe 和 HgTe 则为反带结构的半导体。在计算 HgTe 的表面态性质时,我们发现随着薄膜厚度的增加,表面态的能带结构发生明显变化,最终带隙减为 0,变成拓扑表面态。

利用选择性轨道加场法,可以正确的计算出汞硫族化合物的能带顺序,大大减少了计算量,并且对 HgTe 表面态的计算,得到了由非拓扑到拓扑的转变。

关键词: 拓扑绝缘体、能带结构、选择性轨道加场

## Z-P64

### 钨中(110)扭转晶界能量与结构的分子静力学模拟

冯亚鑫, 尚家香

北京航空航天大学材料学院 100191

本文应用分子静力学模拟了不同扭转角下钨(110)扭转晶界的能量与结构。模拟结果表明了钨(110)扭转晶界晶界能随扭转角的变化关系。且根据晶界中位错的存在形式,扭转晶界可分为三种类型:低角度晶界、过渡晶界和高角度晶界。在低角度晶界中,三个柏氏矢量分别为  $1/2[111]$ ,  $1/2[-1-11]$ 及 $[001]$ 的螺位错组成了一个完整的位错网络。位错网络中网格的大小和形状会随着扭转角的增加而变化。在过渡晶界中,晶界结构和位错的较为混乱且位错未形成网络。高角度晶界可再细分为三种情况:特殊晶界由于具有低 $\Sigma$ 值和高对称性往往具有较低的晶界能和稳定的构型。特殊晶界附近的晶界在局部区域晶界结构接近相应的特殊晶界,这在一定程度上降低了它们的晶界能。普通的高角度晶界原子构型呈现出周期性图案,其晶界能接近一个稳定值。在高角度晶界中未发现位错。

关键词: 扭转晶界, 钨, 分子静力学, 结构与能量, 位错

## Z-P65

### Fe、Si 成分比对 Fe<sub>3</sub>Si 合金相组成的影响

马瑞

贵州大学 550025

Fe<sub>3</sub>Si 合金为软磁材料,在电力、电讯和电子工业中有着广阔的应用前景。负电阻温度系数特性使其有可能成为新型的电阻材料,极好的抗腐蚀性能也可将其用作结构材料。现有 Fe<sub>3</sub>Si 合金的研究多集中于 Fe<sub>75</sub>Si<sub>25</sub> 成分合金,而关于其他 Fe、Si 成分比合金的研究鲜有报道。

按原子比配制 Fe<sub>100-x</sub>Si<sub>x</sub>(x=10, 20, 25, 30)混合粉,采用机械合金化方法制备合金粉末,并将球磨后的合金粉末置于真空炉中 873K 保温 30min。采用 X'PertProMPD 多功能 X 射线衍射仪分析粉末试样的相结构变化,利用 Thermo-Calc 软件计算合金中各相的 Gibbs 自由能。

随球料比的增加,机械合金化合金粉末均生成  $\alpha$ -Fe(Si)固溶体。退火处理后,Fe<sub>90</sub>Si<sub>10</sub> 和 Fe<sub>80</sub>Si<sub>20</sub> 球磨粉末仍为  $\alpha$ -Fe(Si)相,Fe<sub>75</sub>Si<sub>25</sub> 球磨粉末生成 Fe<sub>3</sub>Si 相出现,而 Fe<sub>70</sub>Si<sub>30</sub> 球磨粉末生成 Fe<sub>3</sub>Si 相和 Fe<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> 相。Fe<sub>75</sub>Si<sub>25</sub> 合金在 1173K 含有 FeSi 相和 Fe<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> 相,此时 Fe<sub>5</sub>Si<sub>3</sub> 相的 Gibbs 自由能低于 FeSi 相。当温度下降至 650K,合金由 FeSi 相和 bcc 相构成,且 FeSi 相具有更低的 Gibbs 自由能。Fe<sub>75</sub>Si<sub>25</sub> 合金成分具有生成单一 Fe<sub>3</sub>Si 相的热力学特征。

关键词: Fe<sub>3</sub>Si 合金, 相组成, Gibbs 自由能

## Z-P66

### 交换弹性 FePt/Fe 薄膜磁结构的微磁学模拟

王子军

中国原子能科学研究院 102413

目的: 硬铁磁/软铁磁双层复合薄膜中发现的交换弹性耦合现象,在高密度磁存储和微型永磁体等方面有潜在的应用。对复合薄膜磁化反转过程的深入了解,有助于提高并优化薄膜材料的磁学性能。

方法: 本文利用自由能最小原理, 基于微磁学模拟基本思想, 使用 Gauss-Seidle 映射方法来求解朗道-栗弗席兹-吉尔伯特(Landau-Lifshitz-Gilbert,LLG)方程, 研究了平行薄膜平面交换耦合 FePt/Fe 双层复合薄膜在可逆磁化区间的磁极化矢量反转过程。

结果: 模拟给出了交换弹性耦合 FePt/Fe 双层薄膜可逆磁化区间磁化反转过程的细节, 包括磁滞回线, 在磁化反转过程中不同外场下相对应的薄膜内部的磁畴结构, 磁极化矢量的分布, 磁极化矢量旋转的角度等, 在本文中具有详细的分析与讨论。

结论: 模拟结果显示, 在磁化反转的过程中, 各相薄膜磁极化矢量的大小没有明显变化。在可逆磁化区间, 软磁相磁化动力学过程以磁极化矢量的旋转为主, 而硬磁相也参与了磁化反转过程。磁极化矢量沿平行薄膜平面从上到下逐渐转动, 形成手性的旋磁结构, 而且越接近薄膜界面, 磁极化矢量转动梯度越大。

关键词: 交换弹性耦合; 磁化反转; 磁滞回线; 磁畴结构

## Z-P67

### 氧在 NiTi (110) 表面吸附的第一性原理研究

李永成<sup>1</sup>, 王福合<sup>1</sup>, 尚家香<sup>2</sup>

1. 首都师范大学物理系
2. 北京航空航天大学材料科学与工程学院

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 研究了干净 NiTi(110)表面的自偏析效应及氧的覆盖度从零增加到一个单层时, 氧原子吸附对 NiTi(110)表面自偏析效应的影响, 并构建了表面氧化相图。对于干净的 NiTi(110)表面, Ni 反位的表面偏析比 Ti 反位在表面的偏析要容易, 且含有一个 Ni 反位的缺陷形成能的值是负值, 说明 Ni 原子很容易偏析于 NiTi(110)表面。但当氧原子在各表面吸附时, 氧原子更倾向于吸附在表面近邻多 Ti 的位置。氧原子吸附后与周围原子的电子结构计算结果表明, O-Ti 的相互作用比 O-Ni 的相互作用强, 从而导致表面吸附氧原子以后, Ti 反位偏析比 Ni 反位偏析更容易。从构建的表面相图可以看出, 在低氧化学势的条件下, 无氧原子吸附的干净表面是最稳定的; 随着氧化学势的增加, 在富 Ni 条件下, 吸附 0.5ML 氧原子的无缺陷 NiTi(110)表面变得最稳定, 之后吸附 0.75ML 氧原子的 NiTi(110)-Ti 表面变得最稳定。而在富 Ti 环境下, 随着氧化学势的增加, 首先是吸附 0.5ML 氧原子的 NiTi(110)-Ti 表面变得最稳定, 之后吸附 0.75ML 氧原子的 NiTi(110)-2Ti 表面变得最稳定。随着氧化学势的进一步增加, 在整个 Ti 的化学势范围内, 吸附 1.0ML 氧原子的 NiTi(110)-2Ti 表面变得最稳定。说明在氧原子吸附以后, Ni 反位缺陷不会出现于 NiTi(110)表面, 氧原子的吸附会导致 Ti 原子的全表面偏析, 形成纯 Ti 表面层, 有利于 Ti 原子的选择性氧化, 从而在 NiTi(110)表面的初始氧化过程中形成 Ti 的氧化层, 提高 NiTi 合金的生物相容性, 阻止 Ni 离子的进一步扩散。

关键词: 第一性原理, NiTi 形状记忆合金, 自偏析, 表面吸附, 相图

## Z-P68

### 相分离型熔体表征及分离过程研究

王丽, 齐玉, 王胜海

山东大学(威海)机电与信息工程学院 264209

一些合金在液相区存在不混溶间隙(Miscibility gap), 或亚稳合金在冷却过程中产生液相分离, 我们把在液相中和在冷却过程中产生相分离的合金均称为液相分离型合金。这类合金在常规凝固条件下固态组织会由于重力作用而出现分层, 使得其工业应用受到限制。近年来利用电磁悬浮熔炼法、落管法、雾化法、熔融玻璃净化法和快速淬火法等方法均可制备出有特殊结构的相分离合金。未来在自润滑轴承材料、电子封装材料、铅焊球的包裹材料、电子器件材料(如含 Ga 的合金)等方向上具有广泛的应用前景。目前我们对该类合金的共性缺乏认识, 缺乏原子尺度上对相分离过程的了解。

本文基于 G. Bonny 的 EAM 作用势, 采用分子动力学模拟的方法研究了 Fe-Cu 合金熔体的液液相分离过程。Fe<sub>50</sub>Cu<sub>50</sub> 合金熔体的偏偶分布函数曲线表明熔体中同类原子间具有较强的相互作用。Cu-Cu 和 Fe-Fe 的配位数大约为 11, 远大于 Fe-Cu。在模拟的所有成分范围内, 合金体系的混合焓是正值; Bhatia-thornton 结构因子中的  $S_{CC}(q)$  在较小的  $q$  值处急剧增加, 这都是合金熔体存在相分离趋势的典型特征。Fe<sub>75</sub>Cu<sub>25</sub> 熔体

的结构和动力学参数表明该合金系发生液液相分离现象，受形核生长机制控制，在富 Fe 基体分布着富 Cu 液滴。过冷度越大，液滴的形核率和生长率越高。通过相关长度可以得出液液相分离的临界温度大约为 1523K。实际上，液滴形成时的温度高于临界温度。偏偶分布函数和配位数都表明，在临界温度时，没有发生突然的结构变化。以上研究从原子尺度上表征了金属熔体的相分离过程。

关键词：液-液相分离 混合焓 结构参数 分子动力学模拟

## Z-P69

### SCM435 钢奥氏体区碳原子的扩散行为

徐东<sup>1</sup>, 郑冰<sup>1</sup>, 高新亮<sup>2</sup>, 朱苗勇<sup>3</sup>

1. 河北工程大学
2. 燕山大学
3. 东北大学

摘要：为了得到并模拟脱碳时高温奥氏体中碳原子的扩散行为，本文研究了奥氏体区 900~1200℃ 时 SCM435 钢的脱碳过程，发现脱碳层存在一个显著的峰值，之后快速降低，其脱碳层厚度与温度之间并非线性关系。为了更加清楚的描述碳的扩散行为，在此基础上建立了 SCM435 钢二维扩散数学模型，其结果表明：900℃ 时 SCM435 钢的碳扩散系数为  $2.4 \times 10^{-12} \text{m}^2/\text{s}$ ，随着温度的升高到 1100℃，其碳扩散系数升高到  $3.85 \times 10^{-11} \text{m}^2/\text{s}$ 。但随着 SCM435 钢的温度升到 1150℃ 时，其碳扩散系数反而降到  $2.2 \times 10^{-11} \text{m}^2/\text{s}$ 。当温度达到 1200℃ 时，其碳扩散系数再次缓慢上升到  $2.3 \times 10^{-11} \text{m}^2/\text{s}$ 。通过回归计算发现，在 900~1100℃ 的温度范围内，SCM435 钢的扩散系数与温度的关系完全吻合 Arrhenius 方程，这个温度段具有统一的扩散常数与扩散激活能，并得到 SCM435 钢在该温度区间的扩散常数为  $6.62 \times 10^{-4} \text{m}^2/\text{s}$ ，扩散激活能为 189.5 kJ/mol。

关键词：SCM435 钢；扩散行为；模拟；碳扩散系数；激活能

## Z-P70

### 高功率 CO<sub>2</sub> 激光焊接薄板接头组织性能与变形控制研究

何祖娟, 陶海燕, 王泽明, 兰光友

中国核动力研究设计院第四研究所 610200

采用高功率 CO<sub>2</sub> 激光焊机对 0.8mm 厚专用 304L 不锈钢薄板进行高速施焊，同时控制焊接变形。

利用激光金相显微镜观察焊接接头显微组织，万能试验机测定焊接接头力学性能，采用 MARC 有限元分析软件对焊接变形进行模拟分析，在此基础上针对性设计开发薄板焊接工装。

结果表明：焊缝熔池边缘为枝状奥氏体晶粒，向内过渡为胞状奥氏体晶粒，中心为等轴奥氏体晶粒；焊缝室温与 350℃ 中温拉伸性能与母材相当，抗拉强度分别可达 691MPa 和 470MPa。

焊接数值模拟结果与实际变形趋势吻合良好；设计开发的专用工装能有效将焊接变形减小 84.6%。

关键词：薄板；CO<sub>2</sub> 激光焊接；组织性能；变形控制

## Z-P71

### 第一性原理研究第三元素对铁在铜基体中溶解度的影响

王宇飞, 高海燕, 韩延峰, 戴永兵, 王俊, 孙宝德

上海交通大学 200240

通过加入第三种合金元素来改善铁在铜基当中的溶解度，是提高铜铁合金电导率的一种重要方法，但该方法却很难再实验中实现。我们使用第一性原理计算的方法，通过计算形成焓、振动自由能从而得到在第三种元素添加，对铁在铜基体中溶解度的影响。计算结果和现有的实验值、其他计算值吻合的较好。进一步对电荷密度和态密度的计算，阐明了第三元素能够改善铁溶解度的原因。

关键词：溶解度，形成焓，振动自由能，铁，铜

## Z-P72

## 含微量杂质元素硅的铝熔体结构研究

吕新雨, 王俊, 疏达, 孙宝德

200241

高纯铝和高性能铝合金对杂质元素硅含量都有严格的要求。为了更好的研究铝熔体中杂质元素硅的高效去除方法, 本文用分子动力学方法研究了含微量杂质元素硅的铝熔体的结构。文中研究了不同温度、不同硅含量的铝-硅熔体的径向分布函数, 原子团簇的构型及结构稳定性, 铝硅原子间电子密度分布, 杂质元素硅的扩散系数, 及杂质元素在体系中的密度分布。研究表明, 随着温度的升高, 杂质元素硅的配位数逐渐降低, 团簇的尺寸减小; 温度对径向分布函数的影响较小; 杂质元素的扩散系数逐渐增加。随着体系中硅含量的增加, 杂质元素硅在体系中不同方向的分布具有明显不同的规律, 其中沿着[0 0 1]方向分布呈现明显的递增规律。

关键词: 杂质元素; 分子动力学; 原子团簇; 熔体结构

## Z-P73

### Al-Zn-Mg-Cu 合金过饱和固溶体第二相粒子的析出动力学

刘园, 李文君, 蒋大鸣

哈尔滨工业大学 材料学院 150000

利用差示量热法(DSC)并结合 JMA 方程与双峰分离法对过饱和 7050 铝合金固溶体中第二相粒子的析出动力学进行分析和计算。研究结果发现: GP I 区 353K,  $\eta'$ 相 492 K 和  $\eta$ 相 510 K 的激活能分别为 103.8, 195.1 和 571.9 kJ/mol, 常数  $k_0$  分别为  $10^{13}$ ,  $4.8 \times 10^{16}$  and  $7.9 \times 10^{56}$  /s, 同时得到了其相应的组织转变动力学方程。

关键词: 差示量热法; 7050 铝合金; 动力学; 激活能

## Z-P74

### 热力学计算优化 Al-Zn-Mg-Cu 合金成分

刘园, 蒋大鸣, 李文君

哈尔滨工业大学 材料学院 150000

利用 Jmat-Pro 热力学相图计算软件模拟 Al-Zn-Mg-Cu 合金的凝固路径以及该合金中 MgZn<sub>2</sub> 和 Al<sub>2</sub>CuMg 相生成数量和生成温度随 Zn、Mg 和 Cu 含量变化的关系曲线。Zn 元素含量应选取标准的中限(6.4wt%)、Mg 元素含量应取标准的上限(2.5wt%)、Cu 元素含量应取标准下限(2.0wt%)。在上述成分范围内, 经模拟计算, 合金凝固组织中 MgZn<sub>2</sub> 相的生成数量可达 5% 以上, 同时, Al<sub>2</sub>CuMg 相的数量可控制在 0.5% 以下。

关键词: Al-Zn-Mg-Cu 合金; 热力学计算; 成分优化

## Z-P75

### 氧化相析出形态对 Cu-Ni-M 合金抗氧化性能的影响

郑月红<sup>1</sup>, 李晓娜<sup>1,2</sup>, 张坤<sup>1</sup>, 董闯<sup>1,2</sup>

1. 大连理工大学材料科学与工程学院, 三束材料改性教育部重点实验室

2. 大连理工常州研究院有限公司

Cu 合金抗氧化性能的提高通常是添加适量的抗氧化元素, 在合金表面形成具有保护性的氧化膜, 但该方法添加元素的含量高, 合金相组成复杂, 且在确定抗氧化 Cu 合金成分时缺乏理论的指导, 也没有关注添加元素的比例对抗氧化性能和氧化相析出形态的影响。

本文基于稳定固溶体团簇模型对白铜合金进行合金化, 将合金中 Cu 含量固定为 72.22 at.%, 改变 M 与 Ni 的比例设计了 Cu-Cu<sub>12</sub>-[M<sub>x/(12+x)</sub>Ni<sub>12/(12+x)</sub>]<sub>5</sub>(M=Si, Cr, Cr+Fe) 系列成分。通过 50~1000℃ 变温和 850℃/31h 恒温氧化, 研究了氧化相析出形态对 Cu-Ni-M 合金抗氧化性能的影响。

变温氧化结果表明 Cu-Ni-Si 合金并不是靠形成致密 Si 的氧化层来提高抗氧化能力; Ni-Cr 同时加入时, 其抗高温氧化能力主要与外氧化层中是否形成连续的 Cr 氧化层有关。恒温氧化时在低于文献报道的 Cr 含量



(>15at. %), 弥散的 Cr 即可形成连续的保护性富 Cr 氧化膜。用 Fe 元素替代 Cu-Ni-Cr 合金中 1/2 的 Cr, 形成 Cu-Ni-(Cr+Fe) 系列合金, Fe 和 Cr 相比较, 不能够起到优先氧化, 生成保护性氧化皮的作用, 且在恒温氧化时, 该系列合金的析出相氧化物呈现垂直于基体生长的柱状结构明显降低了抗氧化性能。综上可知, 添加的第三组元 M 不同时, 氧化相的析出形态对 Cu-Ni-M 合金抗氧化机制及性能都有影响。  
关键词: 铜合金, 氧化, 团簇模型, 扫描电子显微镜

## Z-P76

### 医用 Zr-Nb-Mo 合金单晶弹性常数的 CALPHAD 建模

梁佳思, 王星, 王芳, 章立钢, 刘立斌

湖南省长沙市中南大学材料科学与工程学院 410083

利用 CALPHAD 方法建立了 Nb-Mo、Zr-Mo 二元系 BCC 结构单晶弹性常数随温度和成分变化的模型。通过第一性原理计算, 得到了 0 K 下 Zr-Mo 合金不同成分下的基态结构、晶格常数、形成焓及弹性常数。结合已报道的实验和第一性原理计算数据, 采用最小二乘法确定了 CALPHAD 模型的参数, 最终建立自洽的 Zr-Nb-Mo 三元系单晶弹性常数数据库。为了设计低模量的 Zr-Nb-Mo 合金, 采用 Hill 平均方法预测了 Zr-Nb-Mo 合金全成分范围内成分-多晶弹性性质, 确定了与人体骨骼模量相匹配的合金成分范围。CALPHAD 与第一性原理计算相结合为低模量医用合金的快速设计提供了一种有效方法。

关键词: CALPHAD; 弹性常数; 第一性原理计算; Zr-Nb-Mo

## Z-P77

### Size dependent bond length of metallic clusters by considering bond number

Hui Li<sup>1</sup>, Shaoqi Chu<sup>1</sup>, Jia Wang<sup>1</sup>, Tianshu Zhu<sup>2</sup>, Haojie Xiao<sup>1</sup>, Haixia Zhang<sup>1</sup>, Ming Li<sup>1</sup>

1. Taiyuan University of Technology

2. Huaibei Normal University

In this study, size-dependent bond length of metallic clusters is established by introducing bond number. This model, free of any adjustable parameters, can be utilized to predict the change rule of bond length with size. If the atomic structure of a cluster is known, the size and shape-dependent bond number can be obtained. The cubooctahedral structure is taken for simplicity to describe the shape and geometrical characteristic of metallic clusters. It is found that the bond length decreases with the decreased size of metallic clusters, which is due to the structure relaxation and enhanced single bond energy. The theoretical predictions are consistent with the evidences of the simulations for Au and Ag clusters. This confirms the validity of taking cubooctahedron structure, even if the simulated Au and Ag clusters are not cubooctahedron ones. This can be expected to other metallic clusters even with other atomic structures.

关键词: bond length; metallic clusters; shape dependent; size dependent

## Z-P78

### 固体与分子经验电子理论中键距差 (BLD) 法的改进

林成<sup>1</sup>, 尹桂丽<sup>1</sup>, 赵永庆<sup>2</sup>

1. 辽宁工业大学

2. 西北有色金属研究院

“固体与分子经验电子理论”(简称 EET) 因计算简便实用而被广泛应用到材料科学领域, 但是 EET 的发展进程仍比较缓慢。这与该理论的键距差 (BLD) 法计算精度低且严重依赖实验值有很大关系。最近, 作者在 EET 统计值计算的基础上, 将迭代自洽方法引入到 EET 的 BLD 方法中, 提出了自洽键距差 (SCBLD) 方法, 提高了 EET 计算结果的计算精度, 改进了 EET 的 BLD 法。本文将详细介绍该种改进方法提出背景、方法框架及改进方法的验证和考核情况。

关键词: EET; 自洽键距差法; 电子结构

## Z-P79

### 异质固-液界面台阶自由能的计算研究

梁洪涛<sup>1</sup>, Brian B.Laird<sup>2</sup>, 杨洋<sup>1</sup>

1. 华东师范大学物理学系
2. University of Kansas, Department of chemistry

目的: 台阶自由能是界面形核与晶体生长的关键参数, 但是关于固-液界面中台阶自由能的直接测量研究几乎为空白。由于固-液界面处在材料内部, 实验上直接观测固-液界面性质十分困难。原子模拟技术经过 20 多年的发展已经成为研究固-液界面性质的主要手段。本研究旨在发展基于原子模拟的固-液界面台阶自由能的计算方法。

方法: 应用分子动力学结合嵌入原子势的方法, 构建温度为 750K 的单台阶 Al-Pb 固-液界面平衡态体系。使用局域结构序参量表征台阶固相原子和近邻液相原子, 计算台阶边界的精确形状。根据经典毛细波理论, 台阶自由能从通过台阶边界波动的震动谱精确获得。

结果: 我们发现 750K 光滑(111) Al-Pb 固-液界面中的台阶具有粗糙的边界结构。Al 台阶边界波动的震动谱的平均震幅与波数之间的关系完美符合经典毛细波理论预言。当前体系的台阶自由能具有高度各向同性。已有透射电子显微镜观测 Al 单晶内部液相 Pb 夹杂物的平衡态形状可以间接获得的当前体系的台阶自由能, 我们的计算结果与该实验结果符合良好。

结论: 我们验证了一维台阶结构的涨落行为完美遵守经典毛细波理论, 并首次成功应用并拓展 Hoyt-Asta-Karma 的毛细波涨落方法到固-液界面台阶结构体系。获得了台阶自由能的精确测量。本工作可以推广到更多体系台阶自由能的计算, 如不同温度、浓度条件下的固-液界面台阶以及表面台阶等。

关键词: 固液界面; 台阶自由能; 分子动力学模拟; Al-Pb 合金;

## Z-P80

### Ag(110) 表面上苯分子吸附结构和低频振动模的范德华密度泛函计算及非弹性隧道探测研究

袁定旺<sup>1,2</sup>, Zhumin<sup>2</sup>, Wilson Ho<sup>2</sup>, Ruqian Wu<sup>2</sup>

1. 湖南大学, 材料科学与工程学院, 湖南长沙, 410082
2. Department of Physics and Astronomy, University of California, Irvine, California 92697-4575, USA

研究有机分子和金属表面的相互作用对于调控表面物理化学过程至关重要, 比如吸附、催化反应、滑移摩擦及外延生长等。化学惰性表面上, 单分子低能振动激发谱的测量是当前研究的难点。

通常, 表面上分子受限振动模在 15meV 以下, 传统的实验手段(如红外反射吸收光谱)难以表征该振动模式。最新发展起来的单分子非弹性隧道探测(ItProbe)技术是表征弱相互作用的一种有力实验手段。理论上, 包含 van der Waals(vdW)相互作用的密度泛函理论提供了一种处理物理吸附分子低频振动的理论方法。

结合范德华密度泛函计算和扫描隧道显微镜测量,

本文研究了 Ag(110)表面上苯分子的吸附结构和振动模式。苯分子和 Ag(110)表面间的相互作用主要长程的范德华力。通过吸附能计算和非弹性隧道探测, 发现苯分子吸附在 Ag(110)表面的短桥位。苯分子的吸附能及低频振动模式的计算数值与所采取的电子密度泛函形式密切相关。优化范德华泛函所得到的计算结果和 STM 实验观测一致。理论上首次确定了银表面上苯分子的四个低频振动模, 即两个受限转动模和两个受限的平动模。实验观测到两个受限的转动模分别为 6.6 和 1.27meV。本文提供了一种确定惰性表面上物理吸附分子振动性质的有效方法。

关键词: 苯分子, 吸附, 振动模式, 密度泛函, STM 测量

## Z-P81

### Effect of cooling rate on the morphologies and crystal defects of Sr-modified eutectic Si

Jing Zhang<sup>1</sup>, Huashun Yu<sup>2</sup>, Suk Bong Kang<sup>3</sup>, Jae Hyung Cho<sup>3</sup>, Guanghui Min<sup>2</sup>

1. Jiangsu University of Science and Technology
2. Shandong University
3. Seoul National University

### 3. Korea Institute of Materials Science

Eutectic Al-Si alloy was modified by Al-Sr master alloy in different cooling rates. The effect of cooling rate on the morphologies and crystal defects of Sr-modified eutectic Si was analyzed by OM, SEM, TEM. The results show that the morphologies of unmodified eutectic Si display as plate shape with micro-steps on the surface. However, the modified eutectic Si converts to fibrous shape with Sr addition. Furthermore, twins generate in the Sr-modified Si by TEM observation. Additionally, the cooling rate has an effect on the density and the characteristic of twins in eutectic Si. At a low cooling rate (~15.3K/s), just one set of (111) twin can be produced by Sr addition. As cooling rate increasing (to ~ 20.9K/s), although the density of the (111) twin gets larger and the interplanar spaces between twins get smaller, there still one main set (111) twin in the Sr-modified Si. Keeping on increasing the cooling rate to 38.4 K/s, two crossed sets of (111) twins can be observed. However, the density of the two sets twins are of big difference: one dense set and one sparse set. Therefore, the characteristic of twins in Sr-modified eutectic Si is affiliated with the cooling rate.

关键词: Al-Si alloys; Twins; Modification

#### Z-P82

##### **Thermodynamic calculations of the rare earth permanent magnets: Fe-RE binary systems**

Taili Chen<sup>1</sup>, Jiang Wang<sup>1,2</sup>, Maohua Rong<sup>1,2</sup>, Guanghui Rao<sup>1,2</sup>, Huaiying Zhou<sup>1,2</sup>

1. School of Material Science and Engineering, Guilin University of Electronic Technology, Guilin, 541004, China

2. Guangxi Key Laboratory of Information Materials, Guilin University of Electronic Technology, Guilin, 541004, China

The rare-earth (RE) permanent magnetic materials with excellent magnetic properties (e.g. Nd-Fe-B, Sm-Fe-N magnets) have been widely used in many industries, such as wind power, hard disk, and especially hybrid/electric vehicles [1,2]. Generally, Nd-Fe-B-based magnets with heavy rare earth (RE) elements (e.g. Dy, Tb) have better energy product and coercivity [3]. For the balanced utilization of rare earth elements, the investigation of effects of light rare earth elements (e.g. La, Ce, Pr) on microstructure and magnetic properties of Nd-Fe-B magnets is still necessary. Specifically, the information of phase relations and thermodynamic properties of Fe-RE binary systems is useful to understand better the crystal structure, phase relationships, and phase transformations of the rare-earth permanent magnets and then to design alloy composition and sintering process.

In this work, the experimental data of phase equilibria and thermodynamic properties of the Fe-RE binary systems (RE=La, Ce, Pr, Nd) in the published literature were reviewed firstly. Based on available phase equilibria data and thermodynamic data, the Fe-RE binary systems were then assessed thermodynamically using the CALPHAD method. Thermodynamic parameters to describe the Gibbs energies of the phases in the Fe-RE binary systems were re-optimized based on the latest experimental data [4,5]. The calculated results show the good agreements with the reported experimental data. However, further experiments are still performed, which are on the basis of the development of thermodynamic database of the novel RE-Fe-B based permanent magnets.

关键词: Permanent magnets, Fe-RE binary systems, Thermodynamic calculation, CALPHAD

#### Z-P83

##### **First-Principle Study of Lead Iodide Perovskite Tetragonal and Orthorhombic Phases for Photovoltaics**

Wei Geng

Beijing Computational Science Research Center

Methylammonium lead iodide perovskite,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , has attracted particular attentions because of its fast increase in efficiency as solid-state solar cells. We performed first-principles calculations with non-local van der Waals (vdW) correlation to investigate the crystal structures, electronic and optical properties of  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . The calculated results show that the distribution of methylammonium ions, which further changes the vdW interaction

and hydrogen bonds of organic and inorganic matrices, plays a vital role in both the geometry stability and electronic structure. The vdW correlation is critical to provide appropriate descriptions on the interaction between the organic and inorganic part. The phase transform from orthorhombic to tetragonal phase causes the decrease of band gap and the red shift of optical absorption coefficient.

关键词: DFT,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , van der Waals interaction, electronic property

#### **Z-P84**

##### **First-Principles Study of Methanol Oxidation into Methyl Formate on Rutile $\text{TiO}_2(110)$**

Bo Wen, Li-Min Liu

Beijing Computational Science Research Center

The detailed oxidation of methanol into methyl formate on perfect and defect rutile  $\text{TiO}_2(110)$  surfaces was explored based on first-principles calculations. Based on the calculated energy barriers of elementary steps, a pathway was identified for methanol oxidation on both surfaces. The reaction proceeds through a direct coupling of methoxy and formaldehyde to produce the intermediate hemiacetal, which leads to methyl formate. Kinetics of elementary steps further shows that methanol dissociation at surface oxygen vacancy greatly changes the reaction rates of the sequential reaction steps on the defect surface, making them quite different from those occurring at the  $\text{Ti}5c$  sites on both surfaces. In addition, small diffusion barriers of formaldehyde demonstrate that it can move freely from the adsorption sites to the reactive sites on the surfaces to produce the hemiacetal. These findings may provide insights into the complete oxidation mechanism for methanol on  $\text{TiO}_2$ , and demonstrate a green and benign route for the synthesis of ester directly from alcohols or from alcohols and aldehydes.

关键词: First-principles,  $\text{TiO}_2$ , methanol, catalysis

#### **Z-P85**

##### **First-Principles Study of Lead Iodide Perovskite Tetragonal and Orthorhombic Phases for Photovoltaics**

wei Geng, le zhang, yanning zhang, Woon-ming lau, limin liu

北京计算科学研究中心

Methylammonium lead iodide perovskite,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , has attracted particular attention because of its fast increase in efficiency as solid-state solar cells. We performed first-principles calculations with the nonlocal van der Waals (vdW) correlation to investigate the crystal structures and electronic and optical properties of  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . The calculated results show that the distribution of methylammonium ions, which further changes the vdW interaction and hydrogen bonds of organic and inorganic matrixes, plays a vital role in both the geometry stability and the electronic structure. The vdW correlation is critical to provide appropriate descriptions of the interaction between the organic and the inorganic parts. The phase transformation from orthorhombic to tetragonal phase causes the decrease of the band gap and the red shift of the optical absorption coefficient

关键词: 第一原理计算, 能带

#### **Z-P86**

##### **Electric field and Strain tunable band gap and carrier mobilities in the monolayer black phosphorous**

Tengfei Cao

Beijing Computational Research Center

Electric field and in-plane strain are used to tailor the electronic structures of the monolayer Black Phosphorus (M-BP). Upon the application of the electric field, the band gap of M-BP is greatly reduced and semiconductor-metal transition happens under certain field intensity. The field impact on the carrier mobility of M-BP is anisotropic with the mobility along the zigzag direction being increased and that in the armchair direction being greatly reduced. Tensile strain under small magnitude enlarges the band gap of M-BP and starts to reduce the

band gap when it becomes to be relatively large. The anisotropic electron mobility in the M-BP can also be reversed by the tensile strain with the electron mobility in the zigzag direction becoming to be larger than that in the armchair direction. For the M-BP under tensile strain, its electronic structure becomes be more efficiently modulated by the electric field. The compression only reduces the band gap of M-BP and has little impact on the carrier mobility. For the M-BP under compression strain, its electronic structure can hardly be altered by the electric field.

关键词: Electric field, Strain, Band gap, carrier mobility, black phosphorous

## Z-P87

### 氮化硼纳米管吸附稀有气体原子第一性原理计算

温述龙<sup>1</sup>, 黄整<sup>2\*</sup>, 常红燕<sup>2</sup>, 潘敏<sup>1\*</sup>, 赵勇<sup>1</sup>

1. 西南交通大学磁浮技术与磁浮列车教育部重点实验室, 西南交通大学超导与新能源研究开发中心, 成都 610031
2. 西南交通大学物理科学与技术学院, 成都 610031

利用吸附剂对稀有气体进行吸附、分离已成为一种重要的应用方法。本文采用第一性原理的密度泛函理论 (DFT) 方法, 选取氮化硼纳米管 (BNNTs) 作为吸附剂, 对该结构吸附稀有气体元素的几何结构、电子结构以及电荷密度等性质进行了计算研究。结果表明, 稀有气体原子对 BNNTs 上的 B 原子具有吸引作用, 对 N 原子具有排斥作用, 且 Ar 原子的吸附最稳定, 吸附位为 B 原子顶位, 吸附能为 -0.568 eV; 其次, 所有元素的吸附能均符合  $E_{Ar} < E_{Ne} < E_{Kr} < E_{He} < E_{Xe}$ ; 另外, 所有稀有气体元素中只有 Xe 原子在 BNNTs 上的吸附能为正值, 表明以 BNNTs 为基础的吸附分离系统可以很好的把 Xe 原子和其它稀有气体原子分离开。

关键词: 氮化硼纳米管 吸附 稀有气体原子 第一性原理

## Tellurium Hydrides at High Pressures: High-temperature Superconductors

xin zhong

1. State Key Laboratory of Superhard Materials, Jilin University, Changchun 130012, China.
2. Faculty of Chemistry, Northeast Normal University, Changchun 130024, China.
3. College of Materials Science and Engineering, Jilin University, Changchun 130012, China

Observation of high-temperature superconductivity in sulfur hydrides at megabar pressures has generated an irresistible wave on searching for new superconductors in other compressed hydrogen-rich compounds. An immediate effort is towards exploration of the relevant candidate of tellurium hydrides, where tellurium is isoelectronic to sulfur but it has a heavier atomic mass and much weaker electronegativity. The hitherto unknown phase diagram of tellurium hydrides at high pressures was investigated by a first-principles swarm structure search. Four energetically stable and metallic stoichiometries of  $H_4Te$ ,  $H_5Te_2$ ,  $HTe$  and  $HTe_3$  were uncovered above 140 GPa, showing a distinct potential energy map of tellurium hydrides with those in sulfur and selenium hydrides. The two hydrogen-rich  $H_4Te$  and  $H_5Te_2$  species adopt ionic structures containing exotic quasi-molecular  $H_2$  and linear  $H_3$  units, respectively. Strong electron-phonon couplings associated with the intermediate-frequency H-derived wagging and bending modes make them good superconductors with high  $T_c$  in the range of 46-104 K.

关键词: High-temperature Superconductors, First principle, Crystal structure prediction, Tellurium hydrides

## First-principles study on the Electronic Structure and bulk properties of cubic Boron Nitride

Qiaoling Chen<sup>1</sup>, Jianhong Gong<sup>1</sup>, Jun Gao<sup>1</sup>, Li Wang<sup>1</sup>, Bin Xu<sup>2</sup>

1. School of Mechanical, Electrical and Information Engineering, Shandong University, Weihai, Weihai 264209, China
2. School of Materials Science and Engineering, Shandong Jianzhu University, Jinan 250101, China

Cubic boron nitride has been a promising candidate for new superhard materials and expected to show high thermal and chemical stability compared with diamond. In the present work, the structural, electronic and elastic properties of cubic boron nitride (c-BN) have been studied by first-principles calculations. Upon geometry optimization, structural parameters, band structure, density of state (DOS) and elastic constants of c-BN were determined using the density functional theory (DFT). The lattice constant is 3.615 accepted shortcoming of DFT. The DOS pattern illustrate that the valence band of c-BN is chiefly contributed by nitrogen atom while the conduction band is primarily ascribed to boron atom. The computations of elastic properties prove that c-BN is brittle.

关键词: first-principles; cubic boron nitride(c-BN); bulk properties; electronic structure; elastic properties

### **The foundation and study of a new type of lattice inversion potential for Copper**

Xianli Ren, Song Chen, Ming Xie, Song Wang, Aikun Li, Jieqiong Hu, Saibei Wang, Muyang Li

Sate Key Laboratory of Advanced Technologies for Comprehensive Utilization of Platinum Metal, Kunming Institute of Precious Metals, Kunming 650106, China

The lattice cohesive curve of Copper is investigated through first-principles calculations. The double-exponential function to fit the curve is presented. This new type function performs well in the overall fitting comparing with the common function including Rose function, L-J function and Morse function. The thermal expansion coefficient, elastic modulus and Grüneisen constant are calculated based on the fitting function and parameters. The results are in good agreement with experiment data, which implies that the calculation results and new fitting function are effective and accurate. The inversion pair potential curve is generated through Chens 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 embedded atom method (EAM) potential theory and first principle method respectively to verify the reliability of the inversion potential. The tendency of these curves is consistent, which indicates that the inversion potential can reflect the interaction between atoms efficiently. Meanwhile, inversion potential method needs less time in the computation comparing with the EAM potential method, pointing out the inversion method has great advantage in the amount of computation.

关键词: Copper; First-principles; Accurate inversion potential; Lattice inversion

### **Experimental investigation and thermodynamic re-assessment of the La-Mn binary system**

chaofan zhu<sup>1</sup>, Jiang Wang<sup>1,2</sup>, Maohua Rong<sup>1,2</sup>, Shidong Lin<sup>1</sup>, Guanghui Rao<sup>1,2</sup>, Huaiying Zhou<sup>1,2</sup>

1. School of Material Science and Engineering, Guilin University of Electronic Technology

2. Guangxi Key Laboratory of Information Materials, Guilin University of Electronic Technology

The rare-earth (RE)-transition metal compounds have been investigated because of their interesting magnetic properties. Especially, the stable intermetallic compounds in the RE-Mn-X(X=Si, Ge etc) have been attracted special attention mainly due to the interesting interplay between the 3d and 4f magnetism and the strong dependence of the magnitude of the Mn moment and the magnetic state of the Mn sublattice on the Mn-Mn interatomic distances [1,2]. Especially, the ternary compounds in the La-Mn-X ternary systems have been investigated to show interesting magnetic properties. For example, LaMn<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> compound has magnetocaloric effect and magnetoresistive effect [3,4], while LaMn<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> compound also displays magnetoresistance [5]. As the key sub-binary system of the La-Mn-Ge/Si ternary systems, the information of crystal structure, phase equilibria, thermodynamic properties in the La-Mn binary system is indispensable to explore the La-Mn-X alloys with better magnetic properties.

In this work, the La-Mn binary system was firstly investigated experimentally by means of differential thermal analysis (DTA) and X-ray diffraction (XRD) techniques, and then thermodynamic assessment of this binary system was performed using the CALPHAD method, based on the critical review of the reported experimental information.

关键词: magnetic properties; La-Mn system; CALPHAD method

### **Effects of vanadium intergranular segregation on L12/FCC interface in Ni-Al-V**

Weiping Dong<sup>1</sup>, Byeong-Joo Lee<sup>2</sup>, Zheng Chen<sup>3</sup>

1. College of Engineering, Zhejiang Normal University (ZNU), Jinhua, 321004, PR China

2. Department of Materials Science and Engineering, Division of Advanced Nuclear Engineering, Pohang University of Science and Technology (POSTECH), Pohang, 790-784, Republic of Korea

3. State Key Laboratory of Solidification Processing, School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University (NPU), Xi'an, 710072, PR China

Since the interatomic potentials of Ni-Al-V ternary system are available, in this paper, the Microscopic Phase-field method and Atomistic simulation based on the second nearest-neighbor modified embedded-atom method (2NN MEAM) potential formalism were employed to study the interfacial properties of Ni-Al-V alloys. It is found that the elements of alloy have different preferences of segregation or depletion on (100) fcc/L1<sub>2</sub> interface. Vanadium atoms segregate while aluminum atoms deplete on (100) fcc/L1<sub>2</sub> interface. And this vanadium segregation and aluminum depletion affect the interfacial properties which will lower the interfacial energy and increase the work of separation. The results of the Microscopic Phase-field method match well with the results of the Atomistic computation based on the 2NN MEAM method. The applicability of the atomistic approach to an elaborate alloy design of advanced Ni-based superalloys through the investigation of the effect of alloying elements on interfacial is discussed.

关键词: Modified embedded-atom method; Microscopic Phase-field method; Atomistic simulation; Vanadium segregation Interfacial properties

### **The kinetics of dynamic recrystallization of 18 Ni maraging steel**

Ni Li, huan zhang

College of materials and metallurgy

The dynamic recrystallization behavior in 18 Ni maraging steel was investigated by hot compression tests at the temperature in the range from 900 °C to 1100 °C and strain rate in the range from 0.001s<sup>-1</sup> to 1s<sup>-1</sup>. Based on the flow curves from the tests, the effect of temperature and strain rate on the dynamic recrystallization behavior were analyzed. The strain hardening rate versus stress curves were used to determine the critical (strain), the peak stress (strain), the saturated stress and the steady stress. With the assistance of the process parameters, constitutive equations were obtained and the activation energy were determined to be 413544.96J/mol. The dependence of the characteristic values on Zener-Hollomon was found. The dynamic recrystallization kinetics model of the tested steel was constructed and the validity was confirmed based on the experimental results.

关键词: 18 Ni maraging steel; dynamic recrystallization; flow stress; recrystallization kinetics model

### **The Crystal Structure of Al<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>Nd Ternary Compound**

Degui Li<sup>1</sup>, Liuqing Liang<sup>1</sup>, Ming Qin<sup>1</sup>, Lei Hu<sup>1</sup>, Changsheng Qin<sup>1</sup>, Shuhui Liu<sup>1</sup>, Bing He<sup>1</sup>, Peilin Qing<sup>1</sup>, Chenzhong Jia<sup>1</sup>, Lingmin Zeng<sup>2</sup>

1. Baise University

2. Guangxi University

In order to research and develop new alloy materials in Al-Cu-Nd system, the high-purity Al<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>Nd ternary compound was prepared with the stoichiometric amounts of elemental constituents by arc melting under argon atmosphere. The X-ray powder diffraction data of Al<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>Nd have been collected by using the Rigaku Smart Lab X-ray powder diffractometer and all X-ray diffraction peaks of Al<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>Nd compound were indexed successfully with the hexagonal structure. The Rietveld refinement results of the X-ray powder diffraction pattern for the Al<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>Nd showed that the Al<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>Nd compound is the hexagonal structure, space group P6/mmm (No.191) with  $a = 5.2397(1)$ ,  $V = 99.34$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 1$  and the density is 6.501 g/cm<sup>3</sup>, and the intensity ratio RIR is 1.26.

关键词: Al<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>Nd, X-ray powder diffraction, Crystal Structure, Rietveld refinement

### **Ab initio simulation: the local melt structure of the rare earth elements Fe, V, Ti and Si in liquid Al**

Jian yang<sup>1</sup>, Jiao Zhang<sup>1,2</sup>, Yongbai Dai<sup>1,2</sup>, Jianbo Ma<sup>1</sup>

1. Shanghai Key Lab of Advanced High-Temperature Materials and Precision Forming, ShanghaiJiaoTongUniversity
2. State Key Laboratory of Metal Matrix Composites, ShanghaiJiaoTongUniversity

In this study, the rare earth elements Ce, Er and Yb were chosen as solute atoms to be analyzed. The structure of molten Al, the local structure around solute atoms and the diffusion of the solute atoms were studied using ab initio molecular dynamics simulations. The results showed that the minimum addition of a solute (1 atom) does not significantly influence the structure of liquid Al as a whole. However, the local structure around foreign atoms varies dramatically for the different solute species. The local structure around those rare earth element atoms shows the higher compact than the other common alloying metal elements, leading to its lower diffusion coefficient. In summary, the close packing and stable local structure around the solute atoms can affect their diffusion. In addition, we suggest that more rare earth elements should be investigated to corroborate the results of this study.

关键词: AIMD; Melt structure; Rare earth elements

### **X-Ray Powder Diffraction Data of a New Compound AlCrNi<sub>3</sub>Pr**

Shuhui Liu<sup>1</sup>, Liuqing Liang<sup>1</sup>, Degui Li<sup>1</sup>, Changsheng Qin<sup>1</sup>, Bing He<sup>1</sup>, Lingmin Zeng<sup>2</sup>

1. college of materials science and engineering; Baise University
2. school of materials science and engineering; Guangxi University

Rare earth-transition metal(R-T) intermetallics have been well used because of their excellent properties. The X-ray diffraction patterns of many new phases in the R-T system have not been extensively studied. A new compound AlCrNi<sub>3</sub>Pr was prepared by arc melting using non-consumable tungsten electrode under argon atmosphere, then annealed at 1023K for 30 days, the X-ray powder diffraction data of AlCrNi<sub>3</sub>Pr was collected on a Rigaku SmartLab X-ray powder diffractometer. The powder pattern was indexed and refined on a hexagonal structure, space group P6/mmm (No.191) with  $a=b=5.05530(9)\text{\AA}$ ,  $c=4.07633(6)\text{\AA}$ ,  $V=90.22\text{\AA}^3$ ,  $Z=1$ ,  $\rho_x=7.2879\text{g cm}^{-3}$ , the Smith-Snyder FOM  $F_{30}=279.1(0.0044, 32)$  and the intensity ratio  $RIR=1.23$ .

关键词: AlCrNi<sub>3</sub>Pr, X-ray powder diffraction

### **Heat Transfer Coefficient Affecting Law for Hot Rolled Strip during Ultra Fast Cooling**

Lian-yun Jiang, Chun-jiang Zhao, Cun-long Zhou, Li-feng Ma, Qing-xue Huang

Taiyuan University of Science and Technology

Heat transfer coefficient is an important parameter to express the cooling capacity and some factors, such as spraying distance, water temperature, nozzle flux and spraying angle can affect heat transfer coefficient. Heat transfer coefficient affecting law on these factors will be conducted in this paper for designing ultra fast cooling equipment and setup ultra fast cooling process parameters. Strip cooling process with different parameters will be simulated by finite volume method and heat transfer coefficient can be obtained. Some conclusions were obtained by analysis: heat transfer coefficient can be decreased greatly with increase of spraying distance when the spraying distance was less than 0.3m, but heat transfer coefficient can be decreased slightly with increased of spraying distance after the spraying distance up to 0.3m. Heat transfer coefficient will be increased with increase of nozzle flux and they present linear relationship. Initial water temperature can affect heat transfer coefficient in the impinging jet zone obviously. Cooling water can not be evaporated in the wall jet zone when the initial water temperature was less than 40°C. Spraying angle can also affect heat transfer coefficient and the optimal angle was 70°, the suitable angle was 70~90°.

关键词: heat transfer coefficient; spraying distance; initial water temperature; nozzle flux; spraying angle