

**材料是制造业的物质基础**,材料创新是颠覆性技术革命的核心,以至于人类文明的进程经常以所使用材料的类型作为时代的标志,如石器时代、铁器时代、青铜器时代等等。在当今世界里,依赖于科学直觉与试错的传统材料研究方法,已跟不上技术的快速发展。革新材料研发方法,加速材料从研究到应用的进程成为各国共同的需求。“材料基因组计划”(Materials Genome Initiative,简称 MGI)一种新型材料科学的研究模式,它以前所未有的大量数据为基础,深度融合人工智能与高通量实验和高通量计算,更快、更准、更高效地获得成分-结构-工艺-性能间的关系,实现材料的“按需设计”和全程数字化制造,从而加快材料从发现到应用的速度,降低成本。在此背景下,上海交通大学对接国家科技创新战略、顺应材料学科发展潮流,于 2015 年 4 月 20 日成立了材料基因组联合研究中心。

全面的学科覆盖和优秀的人才资源是上海交通大学开展材料基因研究的最大优势。组织学科交叉、发挥学科综合优势是联合研究中心最重要的使命。作为校级交叉学科服务平台,中心的具体任务是:1)做星探—发掘校内相关技术优势;2)做红娘—组织跨专业、跨领域团队组合;3)做教练—拓展研究新领域、新方向;4)做风投—支持预研,培育未来国家项目;5)做经纪—组织联合校内外团队申报国家和地方科研项目。为各专业的专家教授们提供尽可能的帮助,在发展中建立起新的交叉技术集群,形成学科增长点。

目前中心拥有成员 58 名,其中材料学院 37 名,其他学院 21 名,分别来自物理、数学、电信、化学化工、机械动力、致远学院、密西根学院、自然研究院、高性能计算中心、生物信息与生物统计系、计算机科学与工程系等单位。根据现有的人才基础和研究特长,设置了高通量材料计算、高通量制备与表征、数据库与材料信息学、集成计算材料工程等四个技术平台,确立了先进合金材料、热工艺过程、高分子材料、清洁能源材料、复合材料、功能材料等六个主要应用方向。今后,还将本着逐步聚焦、积极拓宽、稳健发展的原则,形成具有上海交大特色的研发方向,并不断扩展研究领域与合作对象。

在 2016-2017 学年中,上海交通大学材料基因组联合研究中心在学术合作交流,支撑、指导相关研究、组织重大项目、引进国内外专家等方面开展了诸多富有成效的工作,也取得了不少进展。今后一段时间,工作重点将放在如何切实发挥材料基因组研发方法对材料研究的引擎功能,加速从材料的研发到产业化的进程。

上海交通大学材料基因组联合研究中心

2017 年 7 月

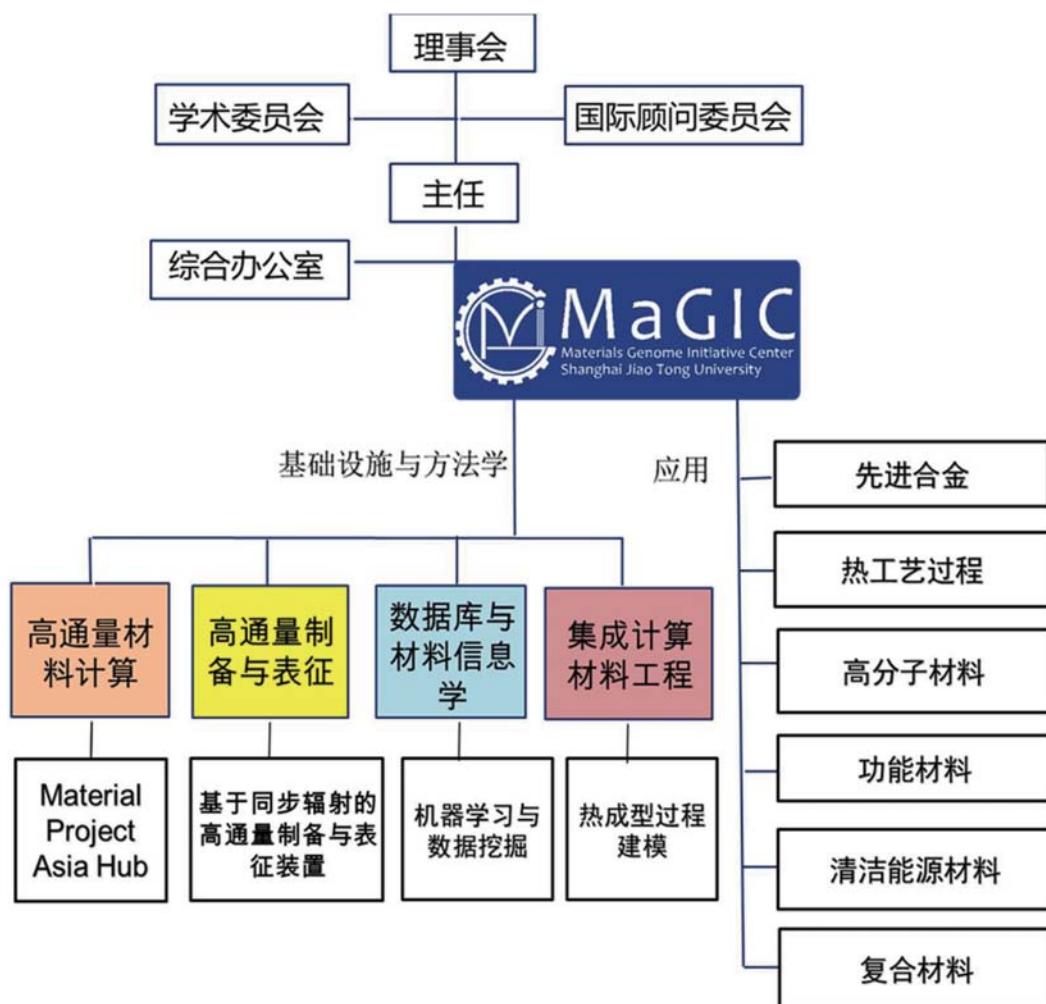
主任:汪 洪(材料学院)

常务副主任:曾小勤(材料学院)

副主任:张澜庭(材料学院)

过敏意(电信学院)

李大永(机动学院)



**鲍 华**

上海交通大学密西根学院助理教授,博士生导师。本科毕业于清华大学物理系,获得学士学位。毕业后在美国普渡大学机械工程学院继续深造,并获得博士学位。鲍华课题组主要从事微纳尺度传热的多尺度模拟研究,研究内容包括低维和纳米尺度的导热,复合材料中的导热,辐射传热,微电子器件冷却技术等。在 Physical Review B, Applied Physics Letters, International Journal of Heat and Mass Transfer 等学术期刊上发表论文 25 篇,Google Scholar 统计引用 480 余次。

**崔振山**

上海交通大学材料学院塑性成形技术与装备研究院、模具 CAD 国家工程研究中心教授,博士生导师。主要研究方向为,材料加工过程的力学问题与数值模拟技术、热变形金属微观组织演变及其预报。在国内外学术刊物与学术会议上发表论文 180 余篇,合作编著著作 1 部,获国家专利 10 项,获得上海市科技进步一等奖、冶金科技进步二等奖、上海市育才奖各 1 项。负责多项国家重点基础研究发展计划(973 项目)课题、国家自然科学基金、科技部重大科技专项子课题等国家级课题,以及与 TAKATA CORPORATION、宝山钢铁股份有限公司、上海重型机器厂有限公司等单位的多个国内外横向课题。

**陈 彬**

上海交通大学材料科学与工程学院高级工程师,博士。2010 年获上海交通大学 SMC- 晨星优秀青年教师(C 类),2014 年获上海交通大学 SMC- 晨星优秀青年教师(B 类)。主要从事电子显微学在材料科学中的应用,及镁合金、铝合金等先进金属材料的研究。主持国家自然基金一项“利用 HRTEM 和 in-situ TEM 研究 MgYZn 镁合金中 LPSO 的微结构及其强化机理”;主持国家重点研发计划项目“轻质高强镁合金集成计算与制备”子课题 1 项,参与国家重大科研仪器设备研制



专项“原子尺度超高时空分辨兆伏特电子衍射与成像系统”、973 计划“非晶体系的热力学、动力学微观特征和时空关联性基本物理问题研究”等。发表 SCI 收录论文 60 余篇。

**陈 娟**

上海交通大学材料科学与工程学院,轻合金研究所,助理研究员。日本大阪大学材料生产科学专业工学博士。研究方向:搅拌摩擦焊接及加工;镁合金材料组织设计及性能控制;合金功能薄膜。获得国家自然科学基金青年科学基金、上海市“浦江人才计划”等项目资助,作为项目骨干参与国家重点研发专项、国家“863”项目、国家自然基项目以及国际合作项目。在 Mater. Des., Mater. Sci. Eng. A, J. Compos. Mater., J. Mater. Process Tech., Mater. Lett., Mater. Charact., J Biomed. Mater. Res., Appl. Surf. Sci. 等期刊发表 SCI 学术论文多篇,授权专利 1 项,申请专利 8 项。

**陈接胜**

上海交通大学化学化工学院,教授。研究方向:1、无机合成与制备化学。利用不同主体和客体制备主客体复合体系,考察主体与客体间的相互作用以及复合体系的化学物理性质;通过熔融反应法,溶液法,电解法,真空沉积法,光诱导法、气体输运法以及水热和溶剂热法等制备具有特殊结构特征或化学物理性质的一维,二维及三维固体化合物。2、固体材料化学。在合成和制备基础上,揭示所获得新型固体化合物或材料的微观结构,研究它们的化学物理性质尤其是发光、电化学、催化或光催化性质,探索新型固体作为高性能电极材料和催化剂的用途。先后主持承担了国家杰出青年基金,国家自然科学基金委重点基金项目、重大研究计划培育基金项目,国家重点基础研究计划(973)课题项目和国际合作项目等的研究任务。英国皇家化学会会士(FRSC)Journal of Materials Chemistry A, Current Organic Chemistry 等国际顾问编委,Frontiers in Colloidal Materials and Interfaces 专业主编(Specialty Chief Editor)



### 东青

上海交通大学材料科学与工程学院,凝固科学与技术研究所,专职科研人员。研究方向:铝空气电池阳极材料的研发、铝合金凝固组织控制。主要从事铝空气电池阳极材料和合金凝固组织控制方面的研究。完成上海交通大学博士后科研启动基金1项,主持国家自然科学基金(青年基金)1项,参与完成973项目专题、国家自然科学基金等多个研究项目。



### 邓小铁

上海交通大学致远学院讲席教授,千人计划特聘专家。博士,ACM Fellow。主要科研方向为算法及博弈论,互联网经济,在线算法,并行计算。2008年因在博弈论算法的贡献获选ACM Fellow。近期兴趣包括算法博弈论研究,均衡和机制设计,互联网广告系统,云计算定价及资源分配,社交网络行为分析及推荐系统,交通及物流网络算法。作为项目负责人,曾承担十几项加拿大,香港,英国,及国家基金委科研项目,担任多种国际期刊编委。曾担任多个国际学术会议主席。并发起网络经济学国际三大洲(亚洲欧洲美洲)循环举办的全球性会议WINE。在算法博弈论方面及网络搜索的研究成果,被国际同行广泛引用。发表论文200余篇,被引用数千次。多次做国际学术会议特邀报告。曾获得IEEE理论计算机学术会议FOCS的最佳论文奖。应用方面获得多项美国专利及国家专利,曾担任主要互联网公司机制设计顾问。



### 段华南

上海交通大学材料科学与工程学院副教授,博士生导师。美国伍斯特理工学院博士,康奈尔大学博士后。研究方向为能源材料,高通量实验,功能薄膜。致力于研发新型固体锂离子电解质材料和纳电网极材料,同时探索薄膜沉积高通量实验方法在新型电解质材料高效研发中的应用。先后在国内外知名学术刊物



(ACS Comb. Sci., J. Power Sources, Sci. Reports, etc.)上发表论文50余篇。2014年获得上海交通大学晨星学者(B类)奖励;2006年在美国IMAPS新英格兰会议中获得“最佳文章奖”。

### 董安平

上海交通大学材料科学与工程学院,凝固科学与技术研究所,副教授。主要从事金属纯净化及高温材料精密成型研究。现主持国家自然科学青年基金、973专题和上海交通大学“新进青年教师启动计划”、上海交通大学校级特色实验项目及企业合作多项课题。作为主要研究人员先后完成国家自然科学基金项目(2006年)、美国能源部(DOE,2010年)、美国企业委托项目(2010年)和宝山钢铁股份公司技术开发项目(2项,2009年)的研究。



### 顾建锋

上海交通大学材料科学与工程学院,材料改性与数值模拟研究所教授,所长。研究方向:(1)材料微观结构与力学行为的多尺度模拟;(2)先进钢铁材料的微观组织与强韧化;(3)热处理工艺过程的数值模拟及其工程应用。主持973课题、重大专项课题、自然基金、上海市重大科技攻关等科研项目20余项,发表论文150余篇,获国家发明专利20余项,软件著作权4项,获国家科技进步二等奖1项,教育部技术发明一等奖1项。担任江苏省热处理及表面改性工程技术中心主任,上海市激光制造与材料改性重点实验室副主任,全国热处理学会副理事长。



### 过敏意

上海交通大学计算机科学与工程系主任,上海交通大学“致远”讲席教授,是教育部创新团队学术带头人。日本筑波大学计算机科学博士。国家杰出青年科学基金获得者,973计划首先科学家,2010年入选国家千人计划。在嵌入式与普适计算、并行与分



布计算、编译与程序优化等领域进行了深入系统的研究,在各种学术期刊、会议上发表了 300 多篇论文,著述英文著作 2 部。授权发明专利 20 余项。主持 973 计划、国家自然科学基金重点项目、863 项目等。曾担任两本国际期刊 IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems 和 IEEE Transactions on Computers 的编委。IEEE 著名系列国际会议 EUC、ISPA 的发起人,中国计算机学会常务理事,国家科技奖、教育部科技奖、国家自然科学基金、千人计划等评审专家。

### 郭芳威

上海交通大学材料科学与工程学院,人才创新基地,讲师。曼彻斯特大学(英国),陶瓷与玻璃材料专业,博士。研究方向:液体、气体和医用生物分离陶瓷膜制备及其力学性能研究、中低温隔热\阻燃陶瓷涂料制备及其隔热性能研究。已发表 SCI 文章 6 篇,获国家发明专利授权 2 项,获得国家基金和省市等科研经费资助 200 余万元。



### 管海兵

上海交通大学电子信息与电气工程学院副院长、上海交通大学特聘教授、上海市可扩展计算与系统重点实验室主任等职。国家杰出青年科学基金获得者,科技部中青年科技创新领军人才,社会服务方面现任中国云国家科技重点专项总体组专家、工信部/信标委大数据标准工作组专家、工信部产业转型升级专家组专家、上海市战略性新兴产业科技创新推进工作小组专委会专家等。主要研究方向是虚拟化和云计算、系统软件,先后主持了国家云计算服务创新示范工程项目、教育部科学技术研究重大项目、863 项目、上海市科技创新计划重大项目、新加坡国家研究基金会 CREATE 重大国际合作项目等 10 余项科研任务。管海兵教授在虚拟化计算系统的性能优化和可用性增强方面取得一系列的重要进展,近年来在本领域重要学术会议发表 30 余篇(如 ISCA、HPCA、VLDB、Eurosyst、SoCC、ATC、INFOCOM、Security、HPDC、ICDCS、MM、PPoPP、



DSN 等)、发表 IEEE/ACM Trans. 论文 20 余篇(如 TPDS、ToN、JSAC、TACO、TETC、TCC、TSC、Micro、TNSM 等),授权发明专利 30 余件。2014 年获国家科学技术进步二等奖。

### 金学军

上海交通大学材料科学与工程学院,相变与结构研究所,教授。美国 MIT 材料系和英国剑桥大学访问科学家,兼任马氏体相变国际顾问委员会委员;美国 TMS 学会相变委员会委员;“Ironmaking and Steelmaking”(SCI 期刊)编委;上海市热处理学会理事长;宝钢客座专家。研究方向:先进钢铁材料固态相变与组织调控、新型形状记忆材料。承担重点研发计划项目、973 课题、国家自然科学重点基金和国际合作项目等十余项。曾获三次“材料学院最受学生欢迎的教师”等荣誉称号;入选教育部新世纪优秀人才计划(2006 年)。近五年来,发表论文五十余篇(包括 6 篇 Acta Mater.),单篇(J Appl. Phys. 91 (2002) 8222)最高他引 130 余次,参编教材四部,申请专利六项。



### 靳丽

上海交通大学材料科学与工程学院,轻合金研究所,副教授。研究方向:金属材料微观组织设计、计算及性能控制、汽车、航空用镁合金材料设计与制造。重要学术贡献:镁合金组织设计与性能调控。主持国家自然科学基金(面上、青年)、上海市汽车工业委员会基金、通用汽车联合基金,并作为核心研究人员完成国家/民口 863 计划、国家科技支撑计划等 10 余项科研项目。在 Int. J. Plasticity (IJP)、Metallurgical and Materials Transactions A (MMTA) 等期刊发表相关 SCI 论文 40 余篇(单篇论文最高影响因子 5.9),单篇最高他引用 58 次。授权国家发明专利 7 项、申请(待审)专利 3 项。另外担任本科生课程《材料加工原理》中固态相变部分的主讲,担任研究生课程《材料失效分析》的主讲。2012 年被评为上海市科技启明星。同年获得上海交通大学优秀青年教师晨星计划(B)资助。



### 李大永

上海交通大学机械与动力工程学院教授。2000年获吉林工业大学博士学位,2007、2015年分别在美国福特汽车研究与创新中心和俄亥俄州立大学做访问研究。在镁、铝、高强钢等轻量化材料的塑性变形理论与成形工艺技术方面进行了大量的研究与开发工作,发表论文100多篇,授权发明专利15项。获得省部级科技进步一等奖2项,国家科技进步二等奖1项,以及上海国际工业博览会创新奖等。



### 吕晖

上海交大生物信息与生物统计系特聘教授/系主任,研究方向:生物信息,高通量组学数据分析,分子网络构建,生物大数据;生物医学信息与生物统计,疾病网络的表型与基因型分析。



### 金朝晖

上海交通大学材料科学与工程学院,上海交通大学轻合金精密成型国家工程研究中心,教授(2007至今)。1990年毕业于四川大学物理系固体物理专业(材料科学系);1993年获中国科学院金属研究所硕士学位;1996年获中国科学院金属研究所博士学位;2000年任中国科学院金属研究所研究员;2001~2007年,德国马普金属所及德国卡尔斯鲁厄理工学院访问学者。研究领域:电子原子尺度模拟计算。在纳米结构金属位错—晶界交互作用、晶界力学行为、晶体过热与熔化等方面取得了有国际影响力的研究成果。教学:负责并主讲“计算材料学”及“多尺度材料模拟与计算”。



### 孔令体

上海交通大学材料科学与工程学院,先进材料与凝固研究所,副研究员。研究工作侧重于应用第一性原理计算、原子尺度模拟方法(分子动力学模拟和蒙



特卡罗模拟)以及热力学方法对金属合金非平衡材料的微观结构、相变及其过程、表界面性能/行为等进行研究。主持、参与国家自然科学基金、国家973项目、科技部重点研发计划、上海市自然科学基金等项目多项。已发表论文详见:<http://www.researcherid.com/rid/C-7169-2011>。

### 李伟

上海交通大学材料科学与工程学院,相变与结构研究所,讲师。伯明翰大学冶金与材料专业博士。研究方向:不锈钢表面S相机制研究、先进高强钢的氢脆问题研究。在研项目:1.“不锈钢表面S相形成机制和外场下稳定性规律研究”NSFC, China (51201105) 2.汽车用高强钢氢致延迟断裂研究HIMI-TMC。代表性论文:1. Effect of tensile stress on the formation of S-phase during low-temperature plasma carburizing of 316L foil. Acta Materialia. 2011, 59 (14). 2. Atom Probe and M?ssbauer Spectroscopy Investigations of Cementite Dissolution in a Cold Drawn Eutectoid Steel. Journal of Materials Science & Technology. 2010, 26(9)



### 李新昊

上海交通大学化学化工学院特别研究员、博士生导师,上海市东方学者。1999-2009年在吉林大学学习,先后获理学学士和博士学位,主要从事有机无机复合纳米材料的合成及应用;2009-2012年在德国马克斯普朗克研究所胶体与界面研究所从事博士后研究(洪堡学者),主要研究新型碳基复合材料在能源相关领域的应用。2013年1月开始任上海交通大学化学化工学院特别研究员。主要研究方向包括对新型碳基材料(如石墨烯、氮化碳、氮化硼等)及纳米复合材料的制备,性能表征及在催化、光催化、电催化等领域的应用。



### 刘景全

上海交通大学研究员(自然科学类),博士生导师,“薄膜与微细技术”教育部重点实验室副主任,

“微米纳米加工技术”国家级重点实验室副主任。研究方向：1 生物医学微机电系统（可穿戴 / 可植入生物医学微机电系统、微流控芯片）。2 极端环境微传感器器与微执行器（深低温、高温、高压等环境）。3 微能源技术。4 微纳制造与装备。先后主持国家自然科学基金重点项目、国家重大专项、国家 863、上海市科委、总装和美国 Honeywell 公司的多项科研项目。申请国家发明专利 40 项，其中授权 20 项，在国内外期刊发表论文 50 余篇，参与编译专著 3 部。2007 年获上海市技术发明奖一等奖一项。



### 刘娟

上海交通大学材料科学与工程学院，塑性成形技术与装备研究院，副研究员。研究方向：材料加工过程的数值模拟；热加工过程中的微观组织模拟；镁合金锻造。负责并承担了国家自然科学基金“镁合金热锻成形三维加工图中最佳工艺范围的辨识方法”和国家重大专项“铸造、锻造宏 / 微观模拟软件研究开发与工程应用”等多个纵向课题的研究，作为主要技术负责人承担了宝钢股份、无锡叶片厂等企业的横向课题。获国家发明专利 1 项，发表论文 24 篇，其中 14 篇论文被 SCI/EI 收录。



### 吕维洁

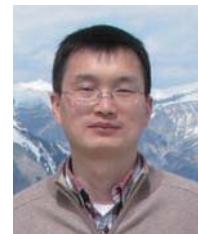
上海交通大学材料科学与工程学院，复合材料研究所，研究员。主持 973 课题 2 项，863 课题 1 项、自然基金重点项目 1 项，自然科学基金面上项目(3 项)等 30 多项省部级项目。获得国家自然科学二等奖、教育部新世纪优秀人才、上海市优秀学术带头人、上海市教委曙光学者、上海市科技启明星(跟踪)、全国优秀博士论文等奖励。主要从事钛基复合材料及稀有金属制备科学，组织、微结构与性能之间关系的研究，开发设计了简捷、低成本的工艺原位合成多元增强体混杂强化的钛基复合材料，通过多元多尺度多维度复合强化显著提升钛合金耐热性能，并在国家关键领域获



得应用。发表 SCI 论文 180 多篇，获国家授权发明专利 20 项。

### 罗卫东

上海交通大学物理与天文学院、自然科学院，特别研究员，博士生导师。本科毕业于北京大学物理学系，获学士学位；美国加州大学伯克利分校物理学博士。先后在美国范德比尔特大学、橡树岭国家实验室、加州大学伯克利分校、斯坦福大学等科研机构工作和访问；2012 年入选国家“青年千人”计划。其研究领域是凝聚态理论计算与量子材料设计，最近的研究项目包括：拓扑绝缘体、二维层状材料、过渡金属氧化物。



### 彭立明

上海交通大学材料学院，轻合金研究所，教授。长期从事于镁合金的基础和应用基础研究，重点进行镁合金的强韧化设计及其电子显微学以及镁合金的液态成型技术（如镁合金汽车轮毂和发动机关键部件的成型与应用技术）研究，探明了多种镁稀土合金体系的时效序列与相变模型、析出相与长周期有序结构的复合强化机制、微合金化元素增塑机制；研发了具有自主知识产权的高强高韧 JDM1 和高耐高温 JDM2 等多种新型镁稀土合金，将镁合金强度提高至 500 MPa 以上，工作温度提升至 300℃；研发了精密砂型低压铸造等多种镁合金液态成型技术，将新型合金与新工艺相结合成功用于汽车轮毂、发动机缸体、活塞、直升机机匣、航空座椅等关键部件的开发与生产，解决了部分汽车与武器装备的轻量化问题，尤其为美国通用汽车公司开发了全球首款全镁 V6 发动机缸体。



### 沈耀

上海交通大学材料科学与工程学院，相变与结构研究所，教授。近几年在位错理论与模拟(位错的派纳模型、位错穿越相界的阻力、及位错与其它晶体缺陷的相互作用)、微观结构演化的相场



模拟，纳米多层膜的微观结构在高温下的演化动力学模拟，纳米压痕力学，薄膜与基体间接合力的实验与模拟等方面进行了研究，另外采用了微弧氧化、化学镀、离子注入等表面工程方法进行了铝合金的防腐和耐磨，及燃料电池双极板用不锈钢表面性能改进，和多弧离子镀磁过滤装置的改进等方面的研究。负责国家自然科学基金项目二项。负责美国因特尔公司、美国通用汽车公司和日本大金公司等国际知名公司横向合作项目多项。目前主要进行位错和界面主导的材料微观过程的理论和实验研究。

### 钱炜慷

上海交通大学密西根学院助理教授，博士生导师。他 2006 年于清华大学自动化系获学士学位，2011 年于美国明尼苏达大学电子与计算机工程系获博士学位。其研究方向主要是计算机辅助设计集成电路和面向新技术的电路设计。他曾获 2009 年国际计算机辅助设计大会最佳论文提名和 2016 年国际逻辑与综合研讨会最佳论文提名。



### 疏 达

上海交通大学材料科学与工程学院，研究员。2001 年于上海交通大学获博士学位，2009~2010 年在英国牛津大学从事访问研究。先后承担参与 973、863、国家自然科学基金、上海市科委重大基础研究、上海市纳米技术专项等课题以及与宝钢、中国铝业等的产业化合作项目。研究方向：金属熔体纯净化与合金凝固组织控制。发明了大尺寸方形孔多级电磁净化方法及装置，并在铝工业应用。揭示了合金凝固过程中的溶质抑制形核效应，并建立了晶粒尺寸的预测模型。获得国家技术发明二等奖 1 项、上海市技术发明一等奖 2 项和中国有色金属工业科学技术二等奖 1 项。发表论文 100 余篇，H 因子 18，授权中国发明专利 23 项、美国专利 1 项。入选教育部新世纪人才计划和上海市青年科技启明星计划。



### 孙 弘

上海交通大学物理与天文学院，教授，副院长。所属研究机构理论物理及其交叉科学研究所。研究领域：第一性原理材料物理的计算研究。1987 年上海交通大学物理系获得博士学位。1987 年至今，上海交通大学物理系任教，1990 年破格晋升教授，1994 年获博士导师资格。1993 年至 1999 年，多次赴香港中文大学物理系 Yu Kin-Wha 教授小组合作访问；2000 年至 2002 年，赴美国加州大学物理系 (Berkeley) M. L. Cohen 和 S. G. Louie 教授领导的研究小组合作访问；2004 年至 2010 年，多次赴美国内华达州立大学物理系 (Las Vegas) Chen Changfeng 教授小组合作访问。



### 苏益士

上海交通大学材料科学与工程学院复合材料研究所，讲师。研究方向：金属基复合材料、材料基因计算、界面纳米力学等。2006 年、2008 年于天津大学机械工程学院分获工程力学学士学位、固体力学硕士学位；2011 年于法国特鲁瓦技术大学材料与力学专业获工学博士学位。2012 年于上海交通大学金属基复合材料国家重点实验室从事博士后研究。日本金属学会会员。目前主持国家自然科学青年基金、交大新进青年教师科研启动基金、交大材料基因组项目各 1 项；同时作为青年学术骨干承担国家重大基础研究“973”项目、国家自然科学重点基金、上海市材料基因组项目各 1 项；Compos. Struct., Mater. Sci. Eng. A, J. Compos. Mater., Mater. Des., Mater. Lett. Compos. Sci. Technol. 等发表 SCI 学术论文 20 余篇。



### 孙东科

上海交通大学材料科学与工程学院，博士后。研究方向：金属凝固微观组织形成的数值模拟、微尺度复杂流体的建模与模拟、格子玻尔兹曼方法及其工程应用等。在 Acta Mater.、Appl. Phys. Lett.、Biomicrofluidics、Comput. Math. Appl.、Int. J. Heat Mass Transfer 等期刊发表论文多篇。

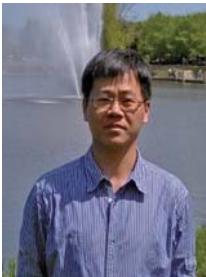


**孙 淮**

上海交通大学化学化工学院,教授。研究方向:用理论计算方法在微观到介观尺度上研究分子的结构与性质,解释和预测材料的宏观现象,从而促进新材料的开发。课题组研究主要是分子力学力场方法、分子动力学模拟方法和蒙特卡洛方法,并用以研究材料的物理化学性质。涉及的材料包括化工材料分子、表面活性剂分子溶液、高分子、沸石及新型微孔材料分子。课题组承担了多项国家自然科学基金项目,国家重点基础研究计划(973)项目及企业研发项目;强调理论联系实际,着力解决工业和实验中的问题,在美国工业流体模拟挑战赛(IFPSC)中取得了三次冠军。

**孙 锋**

上海交通大学材料科学与工程学院,高性能金属材料研究所,副研究员。主要从事高温金属间化合物的超塑性形变特性与组织演变研究。自2004年起与企业合作进行耐热钢、高温合金的组织与性能研究。在金属间化合物超塑性研究方面,在Gamma-TiAl体系中发现大晶粒超塑性,对其形变机制和组织演变规律进行了阐述,澄清了对金属间化合物大晶粒超塑性机理的争议,相关工作在第四届和第五届国际金属间化合物和先进材料研讨会上作邀请报告。在耐热钢高温性能方面,发展了蠕变性能的快速评定方法,尝试建立和组织相关的长期蠕变寿命预测模型,在指导汽轮机高温材料选材方面获得了应用。现为上海电站装备材料与大型铸锻件攻关联合体“材料高温长时性能测试与评定”推进工作组成员。

**汪 洪**

上海交通大学材料基因组联合研究中心主任,国家“千人计划”特聘专家,致远讲席教授,绿色建筑材料国家重点实验室副主任,国家玻璃深加工工程中心首席科学家。中国工程院、中国科学院“材料基因组计划”重



大咨询项目专家组成员。主持过多种先进节能镀膜玻璃与太阳能光热转换材料设计、开发与产业化;开展高通量材料制备与表征技术研究与应用。

**沈泳星**

上海交通大学密西根学院副教授、博士生导师,上海交通大学材料学院副教授(双聘)。2003年本科毕业于清华大学材料科学与工程系,2006及2008年分别获美国斯坦福大学机械工程硕士学位和材料科学与工程博士学位。



2008年7月至2011年3月在美国斯坦福大学任博士后,2011年4月至2014年1月在西班牙加泰罗尼亚理工大学任讲师、博士生导师,2014年1月起任职上海交通大学,同年入选第十一批“青年千人”计划。2015年至2017年主持1项国家自然科学基金青年科学基金项目。研究领域包括计算断裂力学、水力及无水压裂模拟、激光制造仿真等,在计算力学顶级期刊 Int. J. Num. Meth. Eng. 及 Comput. Meth. Appl. Mech. Eng. 上共发表论文9篇。已培养博士生1名,硕士生4名。

**王晓东**

上海交通大学材料科学与工程学院,相变与结构研究所,讲师。研究方向:先进高强度钢设计及微观组织表征、纳米材料微观组织表征。主持国家自然科学基金面上项目一项和横向项目两项。代表性论文:1. X.D. Wang, N. Zhong, Y.H. Rong, T.Y. Hsu (Z.Y. Xu), L. Wang. Novel ultrahigh-strength nanolath martensitic steel by quenching - partitioning - tempering process Journal of Materials Research, 24 (2009) 260-267. 2. X. D. Wang, B. X. Huang, Y. H. Rong. On the deformation mechanism of twinning-induced plasticity steel. Philosophical Magazine Letters. 88 (2008) 845-851. 3. X.D. Wang, B.X. Huang, L.Wang and Y.H. Rong. The design and characterization of microalloying high-strength TRIP steels. Metallurgical & Materials Transactions A , 39A (2008) 1-7.



**吴玉娟**

上海交通大学材料科学与工程学院,轻合金研究所,助理研究员,专业材料加工工程,硕士生导师,担任中国镁合金青年工作委员会常务委员和《精密成形工程》通讯编委。2009年获上海交通大学博士学位,之后在机械与动力工程学院从事博士后工作,2012年起留校工作。在镁合金析出相、长周期堆垛有序结构(LPSO)等微结构表征和强韧化机制等方面开展了长期研究工作,与美国波音公司等合作开发了400MPa级高强度铸造镁合金和500MPa级高强度耐热阻燃变形镁合金。主持国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项“轻质高强镁合金集成计算与制备”项目“镁合金关键特征结构与合金设计准则”课题、国家自然科学基金、中国博士后科学基金特别项目和面上项目等7项。目前已发表SCI论文32篇。2016年获上海市自然科学奖二等奖1次,2012年获“全国博士后材料科学与工程学术论坛”优秀论文奖。参与了《大辞海》和《英汉现代机电小词典》2部专著编写。

**汪晓平**

上海交通大学材料基因组联合研究中心客座研究员。宁波英飞迈材料科技有限公司研发总监。从事高通量组合材料芯片制备和表征设备的开发。获中国科学院物理研究所理学博士。担任清华大学物理系博士后研究员期间,从事强关联电子体系和拓扑绝缘体的角分辨光电子能谱(ARPES)研究。目前在英飞迈负责可与实时表征功能结合的逐点逐步升温制备设备开发。曾任职于国际知名仪器公司 Scienta Omicron 负责中国区的技术服务,并参与德国和瑞典总部角分辨光电子能谱设备的整体设计。

**王宇杰**

上海交通大学物理与天文系,凝聚态物理研究所,特别研究员。1995年清华大学物理系获学士学位。2001年在麻省理工学院师从 Prof. Birgeneau 获得物理学博士学位。博士毕业后在美国阿贡国家实

验室从事博士后和助理研究员研究。近年来主要从事同步辐射医学影像和软物质物理研究。研究组的主要研究兴趣是基于同步辐射技术为主要实验手段的实验软凝聚态物理和同步辐射应用。入选教育部新世纪优秀人才计划和上海市浦江人才计划。在 Nature Physics, Nature Communications, PRL 等一流杂志上发表文章 40 余篇。

**王乐耘**

上海交通大学材料科学与工程学院,轻合金研究所,特别研究员。2007年本科毕业于清华大学材料科学与工程系,2011年博士毕业于美国密歇根州立大学,先后就职于美国阿贡国家实验室与德国 GKSS 研究所(洪堡学者)。主要研究方向为:同步辐射材料表征、镁合金强韧化、基于数据科学的合金设计等。目前作为负责人承担国家自然科学基金面上项目、科技部重点研发计划子课题、上海市浦江人才计划等纵向课题。在 Acta Materialia, Scripta Materialia, Metallurgical and Materials Transactions A 三种金属材料权威期刊上共发表论文 11 篇,累计他引 300 余次。2015 年获得美国材料协会(ASM)颁发的具有近百年历史的 Henry Marion Howe 最佳论文奖。

**叶 兵**

上海交通大学材料科学与工程学院,轻合金研究所,副研究员。美国新墨西哥矿业和科技学院,材料工程系,工学博士,美国西北大学博士后。一直从事轻合金材料的制备与加工,包括高强铝合金开发、耐热铸造铝合金、钛合金相变超塑性、稀土镁合金热变形机制等研究。负责国防 973 项目子课题铸造铝合金 xxx 强化基础研究,负责国家重点研发计划课题:高性能镁 / 铝合金材料的基础研究(2016YFB0301001),参与国家重点研发计划课题高通量材料实验大数据采集与加工技术。负责和参与多项美国通用、波音公司和国家自然基金课题,在 Acta Mater 等国际期刊发表



SCI 论文 40 余篇,申请专利 20 余项,中文核心期刊《热加工工艺》编委。

### 文敏华

上海交通大学高性能计算中心,工程计算专员。2009 年中国科学技术大学获学士学位,2012 年上海交通大学获硕士学位,研究方向为高性能计算,负责工程计算和 GPU 计算相关的代码优化,负责交大的 HPC Seminar 培训。该系列培训自 2009 年创办以后,每年组织 6 次 HPC 培训,培训师生已超过 2000 人。2014 年作为领队指导上海交大学生参与世界大学生超算竞赛(ASC14)并夺得全球总冠军,2016 年获得 ASC16 亚军。



### 邢 辉

上海交通大学材料科学与工程学院,凝固科学与技术研究所,助理研究员。研究方向:材料组织与性能。参与了国家重点基础研究(973 计划)项目子课题,国家自然科学基金重点项目,国家自然科学基金项目,上海市科委基础研究重点项目等多项研究任务。



### 余 宁

上海交通大学材料科学与工程学院。2004 年于日本京都大学能源科学研究所获博士学位,2005 年至 2007 年在日本东北大学大学院系统智能、航空工学科任博士后研究员。博士期间通过实验分析结合物理建模对强瞬态导热机制及其对材料力学行为的影响展开了深入研究,对基于不同于传统导热机制的非傅立叶导热模型的力学行为进行了描述,相关成果有助于指导超短激光加工和高密度能束加工的过程。之后获日本 21 世纪 COE 项目研究基金资助,在日本东北大学从事博士后工作,研究能源材料开发、主要包括中低温固体氧化物燃料电池的结构和力学行为,对 Perovskite 型氧化物新型电解质材料的物理特性进行了深入探索。



### 姚建国

上海交通大学电子信息与工程学院,副教授,2000 年至 2010 年在西北工业大学获得学士、硕士与博士学位。2007 年至 2009 年,作为联合培养博士在加拿大 McGill 大学学习。2011 年至 2012 年,在加拿大 McGill 大学和蒙特利尔大学工学院从事联合博士后研究。2015 年入选德国洪堡学者、上海市青年科技启明星计划。在云计算、工业大数据等领域进行了深入系统的研究,在国际期刊 Proceedings of the IEEE、IEEE/ACM Transactions (TPDS、TACO、TIE、TSC 等),以及 VLDB、INFOCOM、HPDC、ICDCS 等知名国际会议上发表论文 40 余篇,主持国家自然科学基金 2 项以及教育部博士点基金、上海市自然基金、上海市国际合作项目等 7 项,担任 INFOCOM 2014-2017、ICDCS 2015 等知名国际会议 TPC,以及 MIDDLEWARE 2016、ICAC 2016 宣传主席。



### 赵冰冰

上海交通大学材料科学与工程学院高性能金属材料研究所,讲师。2005 年起进入德国亚琛工业大学金属物理与物理冶金研究所(IMM)从事晶界动力学和热力学的相关研究,主要参与了晶界迁移速率的研究工作,承担德国科学基金会(DFG)测量晶界三联结点能量值的项目。2010 年获第四届再结晶与晶粒长大(ReX&GG IV)会议 Best Poster Prize。2011 年获亚琛工业大学 Borchers-Plakette 奖章。



### 杨 眇

上海交通大学计算机科学与工程系,仿脑计算与机器智能研究中心,讲师。于 2003 年及 2009 年分别获上海交通大学计算机专业本科及博士学位,2007 年至 2009 年赴美国加州大学河滨分校计算机系联合培养,2012



年至 2013 年任美国加州大学河滨分校计算机系研究助理,主要从事机器学习、数据挖掘以及生物信息学等交叉学科研究,包括生物图像与序列的特征识别与预测、海量数据的高效学习、高性能机器学习和建模方法等。在 Bioinformatics 等国际期刊发表 SCI 论文 20 余篇。主持科研项目包括国家自然科学基金青年基金项目、上海市自然科学基金、教育部留学回国人员启动基金等。

### 张 镛

上海交通大学数学科学学院,特别研究员,中组部青年千人。在多尺度分析与建模领域,特别是在非均匀尺度不可分离介质的数值均匀化和晶体固体缺陷的原子/连续耦合方法领域作出开创性的工作,在 Communications on Pure and Applied Mathematics, SIAM Journal on Numerical Analysis 等高水平期刊上发表论文 20 余篇,获中组部青年千人计划、国家自然科学基金、英特尔高等教育研究基金等资助,数值计算与计算机应用编委。



### 张 杰

上海交通大学材料科学与工程学院,复合材料研究所,助理研究员。西北工业大学,航空宇航制造专业,硕博连读。法国特鲁瓦技术大学 机械系统与材料专业,博士。法国国家科学与应用研究院 机械专业,博士后。2009-2013,材料在不同应力状态下的热粘塑性和损伤行为的模型开发和三维自适应有限元网格重构平台开发,以及他们在材料成形和裂纹扩展等动态的过程模拟中应用;2013-2014,基于有限元模型的机械系统可靠性研究;2014 至今,金属基复合材料的强韧化和断裂机理研究。



### 曾小勤

上海交通大学材料基因组联合研究中心副主任,材料科学与工程学院教授。中国材料研究学会理事 / 青年工作委员会副主任,科技部重点研发计划“材料基因工程与平台”专项指南专家。主要研究致力于解决镁的氧化燃烧、强韧化等基础科学问

题,将基础理论研究成果转化到实际应用。在相关领域累计发表 SCIE 收录论文 201 篇,近五年来累计他引 1718 次,单篇最高引用 183 次,有两篇文论被 ESI 收录为高被引 highly cited paper 论文 1%。参与撰写《镁基轻质合金理论基础及其应用》《镁合金科学与技术》,申请发明专利 102 项,已授权 56 项。曾获国家科技进步二等奖 1 次、教育部技术发明二等奖 1 次和上海市技术发明一等奖等奖励 2 次,被授予教育部“新世纪人才”和上海市“曙光学者”、“科技启明星”等。获国家和省部级科技奖励 9 次和人才计划奖励 5 次,2011 年获得国际著名镁研究机构 Helmholtz-Zentrum Geesthacht 颁发的镁研究奖。



### 祝国珍

上海交通大学材料科学与工程学院,相变与结构研究所,讲师。加拿大麦克马斯特大学,材料科学与工程系,博士。研究方向:表面和界面的高分辨表征和能带结构分析、纳米材料的组织表征和性能分析、高分辨电子显微学和分析电子显微学。1. Bonding and structure of a reconstructed (001) surface of SrTiO<sub>3</sub> from TEM G.-z. Zhu, G. Radtke & G. A. Botton, Nature, 490 (2012): 384-387 2. Atomic-level 2-dimensional chemical mapping and imaging of individual dopants in a phosphor crystal G.-z. Zhu, S. Lazar, A. P. Knights & G. A. Botton, Physical Chemistry Chemical Physics, 15(2013): 11420- 11426 3. A “thickness” series: weak signal extraction of ELNES in EELS spectra from surfaces G.-z. Zhu & G. A. Botton, Microscopy and Microanalysis, 20 (2014): 649-657.



### 张澜庭

上海交通大学材料科学与工程学院,教授。1991 年毕业于上海交通大学,分别在 1994 年和 1997 年于上海交通大学获硕士和博士学位。1999-2003 年在日本京都大学从事博士后研究工作。上海市有色金属学会理事,中国金属学会会员。

2003 年获美国第 132 届 TMS 年会墙报类论文一等奖,2005 年获上海市首届浦江人才计划资助,2006 年当选第六届上海交通大学教学新秀,2010 年被评选为上海交通大学“三育人”先进个人。主要从事高温材料、能源转换相关材料和计算材料学方面的研究,研究方法包括实验和计算模拟的手段。自 1991 年起对金属间化合物结构和功能应用进行研究,研究了硅系金属间化合物作为超高温结构材料应用的性能;在日本主要从事热电、储氢等新能源材料的基础研究。目前以高温材料和磁性材料为主要研究方向。项目来源包括国家自然科学基金,上海市科委重大、重点项目以及国际合作项目。已发表学术论文 80 余篇,包括 *Acta Materialia*, *Scripta Materialia*, *Physical Review B*, *Journal of Applied Physics* 等,公开专利 5 项。



### 姚 斌

上海交通大学计算机科学与工程系,副教授。研究方向:空间和文本数据管理,分布式数据处理,数据安全与隐私保护。学术论文:发表高质量论文 24 篇,其中包括中国计算机学会(CCF)推荐 A 类国际学术期刊和会议 14 篇。科研项目:主持国家自然科学基金青年项目 1 项;参与国家 973 计划 1 项,863 计划 1 项;参与国家自然科学基金面上项目 2 项,海外合作项目 1 项;参与上海市科委和企业各类项目 6 项。知识产权:作为第一申请人申请 22 项国家发明专利,10 项软件著作权。



### 邹建新

上海交通大学材料科学与工程学院教授、博士生导师,国家重点研发计划首席科学家,上海市曙光学者,浦江人才,法国洛林大学客座教授,2016 年教育部青年长江学者奖励计划。1996 至 2007 年就读于大连理工大学及法国梅斯大学,获双博士学位,之后在加拿大英属哥伦比亚大学从事博士后研究工作。回



国后围绕镁基能源和结构材料开展了深入研究,主持并完成了上海市浦江人才计划、上海市教委创新重点项目、总装部国防重大专项子课题等,目前负责材料基因组国家重点研发计划项目“轻质高强镁合金集成计算与制备”,国家自然科学基金面上项目 2 项、上海市基础研究重点项目、总装重大专项等,参与教育部创新引智基地等项目。在 *Adv Mater*, *Science* 专刊, *J of Materials Chemistry A*, *Acta Mater*, *Scripta Mater* 等国际知名期刊上发表 SCI 收录论文 95 篇,被他引超过 1300 次(h 影响因子=24)。已授权国家发明专利 7 项(排名第一),参加国内外学术会议 30 余次,其中做邀请报告 11 次,任分会主席 4 次,曾获 IFAM2015 会议青年科学家奖,唐立新教育基金会优秀学者及上海市优秀硕士论文指导教师等奖励。

### 朱新远

上海交通大学化学化工学院,教授,博士生导师。上海交通大学分析测试中心,副主任。金属基复合材料国家重点实验室,副主任。研究方向:1、高度支化聚合物的可控制备及功能化。2、生物医用高分子材料。主持国家杰出青年科学基金、国家自然科学基金、教育部新世纪优秀人才计划、上海市青年科技启明星、上海市青年科技启明星(跟踪)、上海市曙光计划、霍英东基金等多项研究课题。学术兼职:*J. Macromol. Sci.*, *Pure Appl. Chem.* 编委。单壁碳纳米管表征国际标准评审专家。国家自然科学基金委化学学部会评专家。



### 张 鹏

上海交通大学材料科学与工程学院特别研究员。美国加州大学戴维斯分校,化学系,博士。美国加州大学圣塔芭芭拉分校,化学工程系,博士后助理研究员。研究方向为纳米复合结构及其催化性能研究和光电转化材料及其性能研究。2009 年上海市自然科学奖一等奖第五完成人。



朱 虹

上海交通大学密西根学院助理教授。2012 年获得美国康涅狄格大学材料科学与工程博士，后在麻省理工学院从事博士后研究，主要研究方向为运用材料模拟、高通量计算、数据挖掘和能带、缺陷及界面工程设计优化先进能源和电子材料。在 Physical Review Letters, Physical Review B, Nano Letters, Acta Materialia, Journal of Materials Chemistry, Journal of Physical Chemistry C, Applied Physics Letters, 等期刊上发表论文多篇。



赵晓峰

上海交通大学材料学院特别研究员，2007 年毕业于英国曼彻斯特大学，获得材料学博士，毕业后一直在曼彻斯特大学从事涂层方面研究，目前的主要研究方向包括(1)航空发动机及地面燃气轮机热障涂层；(2)核反应堆包覆型燃料颗粒。研究集中在涂层微观结构与性能，以及涂层的失效机理，在 Acta Mater., Script Mater. 等期刊发表论文近 60 篇，国际材料大会邀请报告近 20 次，2012 年入选中组部青年千人计划及上海市东方学者。





## 国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项 “基于同步辐射光源和先进中子源的高通量材料表征技术与装置” 项目立项

国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项 2017 年度项目申报结果近日揭晓，由上海交通大学作为项目牵头单位，材料科学与工程学院组织策划，上海交通大学材料基因组联合研究中心主要骨干参与，并联合中国科学院上海应用物理研究所、北京科技大学、东莞种子科学中心、上海大学等 9 家单位参与的“基于同步辐射光源和先进中子源的高通量材料表征技术与装置”项目通过专家答辩和财务评审，获得 1818 万元中央财政资助。为材料设计和工艺优化快速提供大量实验数据是材料基因组工程实现“双减半”目标的关键，其中高通量表征是目前亟需解决的技术瓶颈之一。本项目拟基于同步辐射光源高亮度和高时空分辨率特性，建立在可控温度下组合材料样品成分、结构的高通量原位实时表征装置；通过先进中子源聚焦，加大中子实验通量，并实现衍射与成像双模式结合，对磁性和轻元素分布进行高通量表征；开发激光热处理及瞬间测温技术，实现原位热物性实时测量；并结合其他表征技术，快速构建多种时间尺度下成分 - 温度 - 结构 - 性能间映射关系，形成材料基础物理性能数据库。上海交通大学材料基因组联合研究中心将以本项目为契机，整合现有科研资源，联合外部优势力量，努力推进材料基因组研究方面的交叉学科研究发展，提升科技创新能力。

## 国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台” 重点专项“基于理性设计的高端装备制造业用特殊钢研发”项目立项

由上海交通大学作为项目牵头单位，材料科学与工程学院组织策划，上海交通大学材料基因组联合研究中心主要骨干参与，并联合西北工业大学、钢铁研究总院、马鞍山钢铁股份有限公司、北京交通大学、东北大学、北京科技大学、上海大学、中国科学院金属研究所、宝山钢铁股份有限公司等 9 家单位申报的国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项“基于理性设计的高端装备制造业用特殊钢研发”项目，已通过工业和信息化部立项，项目经费 1816 万元，执行周期 4 年。该项目拟紧密结合我国国民经济发展和国防安全的重大需求，从材料基因组研究思想出发，建立基于特殊钢组织性能控制单元的强韧化模型与设计方法，构建特殊钢合金基础和应用数据库和高通量计算平台，实现  $10^2$  量级并发式计算和  $10^5$  量级样品筛选，结合  $10^2$  量级块体材料高通量制备和关键性能高效评价技术，完善应用数据库并优化特殊钢成分和加工工艺；深度融合第一原理、CALPHAD 计算和多物理场耦合方法合构建特殊钢多层次复杂组织的理性设计体系，形成高通量计算 - 高通量实验 - 数据库组织性能预测 - 典型构件示范应用的全链条材料研发新模式，大幅缩短高品质特殊钢研发周期，降低研制成本。本项目选择 400km/h 高铁车轴钢和 -163℃ 低 Ni 超低温钢作为特殊钢集成计算体系的应用示范对象。前者属于非焊接结构钢，后者属于焊接结构钢；前者服役于动载工况，后者服役于静载工况；前者是要求抗疲性能的代表，后者是要求低温断裂性能的典范。研制两种特殊钢技术难度很大，尤其是确保超高周疲劳寿命与超低温高强韧性关键性能，在多元成分体系中通过热力耦合相变精确调控获得多层次复杂组织，揭示复杂组织与关键性能之间相关性规律极具挑战性。本项目拟解决以下重大科学问题：1) 基于成分 / 工艺 - 组织 - 性能关系的特殊钢理性设计原理及计算设计平台的建立；2) 揭示材料数据库、高通量计算软件及多场耦合计算模型间数据传递及耦合机制；3) 阐明超低温钢高强韧组织调控规律和高铁车轴钢超高周疲劳性能控制原理。

## 国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项 “高通量并发式材料计算算法和软件”项目立项

由清华大学作为项目牵头单位,上海交通大学材料基因组联合研究中心主要骨干参与,并联合上海大学、北京市计算中心、北京应用物理与计算数学研究所、中科院力学所、北京航空材料研究院、钢铁研究总院等 10 家单位单位申报的国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项“高通量并发式材料计算算法和软件”项目,已通过工业和信息化部立项,项目经费 1725 万元,执行周期 4 年。该项目将在借鉴国内外高通量计算平台的基础上,通过自主开发,建立面向镍基高温合金材料的高通量并发式材料计算算法和软件,实现 5000 量级的并发式高通量计算,并在镍基高温合金的开发中进行验证性应用。我校团队主要参与项目子课题“高通量并发式集成计算主体算法及有自主知识产权软件系统”的研发,承担其中高通量并发计算算法的发展及软件实现,探究提升并发效率的途径,及完善高通量计算的容错、纠错机制与算法。

## 第三届堆积问题国际会议成功举办



8月29日-9月1日，由上海交通大学材料基因组联合研究中心和中国科学院物理研究所联合主办的2016年“第三届堆积问题国际会议”(<http://xray.sjtu.edu.cn/conference/>)在上海富豪东亚酒店成功召开，本次会议由上海交通大学物理与天文系王宇杰研究员、自然科学研究院张洁研究员和中国科学院物理研究所厚美瑛研究员共同组织。本次会议是继2012年第一届爱尔兰都柏林、2014年第二届德国埃朗根“堆积问题国际会议”后，以“Packing: across length scales”为主题讨论与堆积问题相关的国际前沿问题和学术动态。吸引了来自中国、中国香港、中国台湾、美国、日本、德国、法国、英国、印度、荷兰、西班牙、澳大利亚等10多个海内外国家和地区、40多个单位的130多名专家和优秀青年学者参加。

29日上午，会议主席王宇杰研究员致欢迎词。王宇杰研究员首先对各位专家学者莅临会议表示感谢，并从2008年奥运会“水立方”国家游泳中心外墙设计参考了著名的Weaire-Phelan堆积结构为例，引出举办堆积问题系列会议的起源。介绍了本次会议邀请的专家学者来自与堆积问题相关的跨越宏观、介观以及微观等不同空间尺度的多个学科领域，指出本次会议旨在能够提供一个契机使得与会人员如会议主题“Packing: across length scales”所希望的那样跨越各自研究领域的窠臼，交汇在堆积问题上，获得灵感的碰撞，思想的交流。最后预祝会议取得圆满成功。

在为期四天的会议中，Robert Behringer教授、厚美瑛研究员、李静海院士、Patrick Charbonneau教授、汪卫华院士分别代表五个专题方向作大会报告。另有40多位来自剑桥大学、耶鲁大学、东京大学、中国科学院、清华大学、北京大学和上海交通大学等单位的知名学者作专题报告。会议围绕堆积问题和无序固体结构的主题，就颗粒阻塞相变、硬球体系玻璃化转变、玻璃化转变几何阻挫效应、非球堆积、受剪切堆积、胶体堆积、金属玻璃堆积、堆积结构研究实验技术、堆积工程应用等议题，以口头报告和海报的形式汇报了当前堆积问题的最新动态。大会共有口头报告52个，海报30余张。

9月1日下午，张洁研究员主持会议闭幕式，做总结陈词。堆积问题国际会议常任秘书英国亚伯大学Adil Mughal教授介绍了堆积问题国际会议的办会宗旨，及由美国耶鲁大学Corey O’Hern教授主办的2018年第四届会议的筹备情况，并代表参会人员对本届会议圆满举办表达了诚挚的谢意。最后会议宣布了最佳海报奖获奖人，为香港科技大学张会军、清华大学陈晟、中科院物理所王超3人颁发了最佳海报奖奖状及奖金。会议得到了上海交通大学物理与天文系、自然科学研究院的资助。尤其是得到了王孝群教授和蔡申瓯教授的大力支持。来自物理与天文系的十余名研究生、本科生作为会议工作人员，以周到的服务为会议的圆满举办提供了有力保障，获得了中外与会人员的一致好评。



# “中国科学仪器设备与试验技术发展高峰论坛 – 材料基因组工程高通量合成与表征学术报告会”参会简报



2016年9月21日,由中国工程院化工、冶金与材料工程学部主办的2016中国科学仪器设备与试验技术发展高峰论坛 - 材料基因组工程高通量合成与表征学术报告会于北京国际会议中心举行。本次大会主席、中国工程院院士王海舟,上海市材料基因研究院院长、中国科学院院士张统一,来自美国、日本、澳大利亚和国内当前活跃在高通量材料制备与表征研究一线的专家学者共50多人参加了会议。报告厅里座无虚席,旁边还加了座位。20余位报告人分别介绍了国内外在高通量实验方法及采用该方法在材料研究上取得的进展。我校此次有三篇报告受邀参会。汪洪教授介绍了由我校材料学院和物理系教授组成的同步辐射高通量表征团队通过国内外合作,采用高通量同步辐射X射线衍射对铁钴镍三元合金材料芯片进行成分结构表征,初步实现了X射线对晶体结构相组成的快速表征以及基

于机器学习的自动分析,得到了与传统方法相同的三元系相图的等温截面,与会者反应十分热烈;邢辉报告了透射电镜中使用软件控制的纳米束衍射图谱的高通量扫描以及自动数据采集与分析的结果,获得广泛好评;张鹏也首次报告了由我校材料基因组联合研究中心支持建设的高通量光电催化表征装置的运行实况以及初步材料研究结果,引起了听众的极大兴趣。组合材料芯片技术发明人,国家“千人计划”专家项晓东博士评价说,三个报告反映了我校在近一年中高通量实验方面所取得的切实进展,充分体现出我校在材料基因组研究上的务实风格,也展示了我校材料基因组联合研究中心的出众实力。王海舟院士对会议结果十分满意,特别指出:这次有多个报告汇报了国内取得的最新研究成果,说明我国材料基因组研究已经从初期的概念研讨进入实际开展阶段,令人欣喜。

# 北京航空航天大学孙志梅教授应邀来联合研究中心 (MaGIC)访问交流



9月27日上午,北京航空航天大学材料科学与工程学院ICME中心主任孙志梅教授应上海交通大学材料基因组联合研究中心邀请,在材料A楼500号姚征报告厅作了主题为“Understanding the Structure and Fast Reversible Phase Transition of

Chalcogenide Materials for Data Storage”(相变存储材料结构与可逆相变机理的理论研究)的学术报告。来自材料学院的三十多位师生参加了报告会。会议由材料基因组联合研究中心副主任张澜庭教授主持。

孙教授首先简单介绍了北航(ICME中心)的研究方向及特色:从分子、原子以及电子层次上理解材料物理与化学性质,结合实验验证,把先进材料多尺度模拟与设计应用到材料学和材料物理与化学等各学科,缩短新型材料的设计和投入应用周期。

接着,孙教授系统讲解了她在2006-2008年在德国工作期间,以第一性原理分子动力学计算为工具,对硫属半导体 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 无定形-晶态结构与快速可逆相变的机理方面的一系列研究,展示了第一性原理计算在研究材料相变过程中的独特优势。 $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ 可应用于相变随机存取存储器(PRAM),被认为是最有前途的下一代非易失性存储材料。

当天下午,孙教授与材料基因组联合研究中心的老师们就第一性原理分子动力学位错模拟、低维结构热导计算等相关领域进行了面对面交流。上海交通大学材料基因组联合研究中心汪洪教授向孙志梅赠送了印有交大徽印的咖啡杯和联合研究中心2015-2016年度报告留作纪念,双方表示未来将展开实质性合作。

# 清华大学王崇愚院士应邀访问上海交通大学材料基因组联合研究中心(MaGIC)并举办讲座



新学期伊始,上海交通大学材料基因组联合研究中心(MaGIC)于9月28日在材料学院A楼500姚征报告厅举办了材料基因组研究系列讲座的第七场讲座,邀请中国科学院技术科学部院士、清华大学/钢铁研究总院的王崇愚教授,做了题为“材料基因组中基础性研究,挑战性与机遇”的报告。材料基因组联合研究中心主任汪洪教授等50多位来自

材料学院、密西根学院的师生参加了讲座。由材料基因组联合研究中心副主任张澜庭教授主持。

王崇愚院士是我国材料基因组计划的积极倡导人和推动者之一,主要从事晶格缺陷电子结构与材料组分设计的基础性研究。在近2小时的讲座中,王崇愚院士从材料基因的研究背景和基本概念谈起,阐述了由数据科学代替数据库,实现低耗,高效按需设计是人类梦寐以求的理想。接着从理论基础、计算模型、作业设计以及最新研究案例等几个方面详述了建立实验-计算(包括理论)-数据库相融合、协同的研究方式,对多元复杂体系的结构-性能关系进行分析预测的研究进展。报告条理清晰,深入浅出,师生们纷纷表示受益匪浅。报告会最后,听众师生纷纷向王院士请教,王院士逐一耐心解答,现场讨论气氛热烈。

当天中午和下午,王院士分别与来自电信学院、密西根学院、材料学院、高性能计算中心的多位老师进行了交流座谈,认真了解了联合研究中心在材料基因组各相关学科上的发展情况。汪洪教授向王崇愚院士赠送了印有交大徽印的咖啡杯和材料基因组联合研究中心2015-2016年度报告留作纪念。王院士兴奋地表示此行非常高兴能与这么多不同学科的老师进行交流,学术上收获颇丰,显示了上海交大围绕材料基因组工程领域进行跨学科交叉的广度和深度。

# 第四届分子模拟国际大会顺利召开

(4<sup>th</sup> International Conference on Molecular Simulation)

在上海交通大学材料基因组联合研究中心的大力支持和积极参与下,第四届分子模拟国际大会(The 4th International Conference on Molecular Simulation)于10月24日-26日在上海交通大学徐汇校区和毗邻的皇冠假日酒店顺利举行。大会由上海交通大学主办,北京化工大学协办,上海交通大学化学化工学院、材料学院和生命学院联合承办,中国国家自然科学基金委、中国石油化工集团公司支持,中国化学会、中国材料学会计算材料委员会和中国药学会药物化学委员会冠名支持;英特尔,戴尔,华三(原惠普)宝洁等公司赞助。来自21个国家和地区的450余名学者学生参会。会议以英文为工作语言,旨在推进化学、材料、生物、医药、工程学等多学科融合,促进我国科研人员在此领域与国际学术界和工业界的交流合作。ICMS 2016的召开不仅对于分子模拟学术发展有着促进作用,更重要地是增强学术界和工业界对于分子模拟技术应用的交流沟通,不断拓展分子模拟研究领域的范围,积极探索和探讨分子模拟的未来发展和前景,ICMS 2016会议得到了国内外的高度评价。

上海交通大学副校长吴旦教授出席并在开幕式上致辞,热烈欢迎来宾并简要介绍了上海交通大学历史和发展现状。美国科学院院士 William Goddard 教授、英国皇家学会院士 Daan Frenkel 教授、美国工程院院士 Keith Gubbins 教授、德国卡尔斯鲁厄理工学院 Peter Gumbsch 教授、北京大学徐俊杰教授、北京化工大学汪文川教授、北京大学高毅勤教授、清华大学李隽教授、复旦大学徐昕教授、华东理工大学刘洪来教授等全球知名的专家学者们出席大会,同时会议吸引了来自中石化、巴斯夫公司、宝洁、丰田汽车等工业界从事分子模拟应用的专家学者。大会开幕式由第四届国际分子模拟大会组委会主席、上海交通大学化学化工学院孙淮教授主持。



吴旦教授在大会开幕式上致欢迎辞。吴旦教授说道,随着计算机模拟技术的深入发展,分子模拟越来越受到学术界和工业界的广泛关注。当前大力倡导“大众创业、万众创新”,知识创新和技术创新已经成为推进中国科技实力提升和产业升级的必要条件。大会专注于分子模拟的学术研究和工业应用,旨在以基础研究创新来驱动化学、医药等产业

和的发展。会议在促进分子模拟领域的学术发展的同时,还将为学术界与工业界增进对分子模拟技术应用的交流提供良好的平台。

国际分子模拟大会主席、北京化工大学汪文川教授致开幕词。汪文川表示,近十年来,在亚太区域,特别是我国,在不断重视科技研究和产业开发的趋势下,我国的科技研究人员在分子模拟领域做出了优秀的科研成果,也取得了显著的进步。此次会议的召开,标志着亚太地区已成为继欧美之后,又一个重要的分子模拟研究中心。大会于 26 日下午闭幕,清华大学李隽教授、德国卡尔斯鲁厄理工学院 Peter Gumbsch 教授等作大会报告,北京大学徐筱杰教授致闭幕词。

大会围绕模拟方法、软物质、固态物质、生物医药、纳米材料以及和工业应用安排了 196 个口头报告和 126 个墙报展示。会议特别邀请了国际知名科学家到会作了 12 次大会报告和 13 次主题报告。学术报告不仅在广度上包括了分子模拟的各个应用领域的前沿工作,与会嘉宾更在深度上着重讨论了分子模拟技术在方法发展、模拟化学反应、催化过程、药物开发和材料设计方面的最新进展。作为 ICMS 系列会议的一贯传统,分子模拟领域的重要学术期刊 Molecular Simulation 将为 ICMS 2016 出版特刊,邀请在本次会议上的优秀研究成果通过同

行评审进而发表在本次特刊上。ICMS 2016 的召开不仅对于分子模拟学术发展有着促进作用,更重要地是增强学术界和工业界对于分子模拟技术应用的交流沟通,不断拓展分子模拟研究领域的范围,积极探索和探讨分子模拟的未来发展和前景,ICMS 2016 会议得到了国内外的高度评价。

会议得到参会人员的普遍赞誉。会后加州理工学院 William Goddard 教授来信中表示,这是分子模拟研究领域的一次盛会,当今中国已经具有强大的研究实力并且在持续提高,本次大会无论是汇报的分类还是项目的交流,都很用心,青年人的汇报和墙报展示也非常精彩。剑桥大学 Daan Frenkel 教授说,这次大会达到非常高的国际水平,无疑将推动该领域研究的前进,中国青年学者的高质量学术报告让我印象深刻。分子模拟领域的重要学术期刊 Molecular Simulation 的主编 Nick Quirke 教授赞赏 ICMS 2016 会议的组织筹备十分优秀,学术水平很高,并且认为 ICMS 系列会议已经成为分子模拟研究领域世界范围内的重要学术会议。ICMS 2016 的成功举行不仅仅是组委会和工作人员日以继夜奋战的成果,也是分子模拟研究领域的一次跨越,更是中外学者在科学理论和方法的交流上的深度合作,未来,分子模拟研究能够带给人们更多惊喜的改变,让生活更美好。

# 2017 年国家重点研发项目基于大科学装置的高通量制备与表征关键技术与装置申请研讨会



12月7日，2017年国家重点研发项目《基于大科学装置的高通量制备与表征关键技术与装置》申请研讨会在南方科技大学材料科学与工程系召开。南方科技大学项晓东教授、上海交通大学材料科学与工程学院张澜庭教授主持会议。

会议为期一天，与会专家针对高通量组合材料制备与表征关键技术发展历史与现状、应用领域和成功案例进行了深入的研讨。会议共进行了12场报告，报告结束后，与会专家学者进行了深入的研讨。

# 同步辐射材料基因组实验线站建设研讨会



2016年12月8日，同步辐射材料基因组实验线站建设研讨会在南方科技大学召开，会议深入研讨了材料基因组实验线站建设的相关科学意义、建

设目标、关键技术路线等问题。南方科技大学材料科学与工程系项晓东教授、中国科学院北京综合研究中心姜晓明主任、上海交大材料基因组联合研究中心汪洪主任主持会议。南方科技大学陈十一校长莅临会议，并和与会专家们进行了亲切会谈。

为提高材料研发速度、降低成本，实现材料按需设计，以高通量实验、高通量计算、数据库三要素为核心的材料基因组工程计划已经成为中美及世界诸多国家，在材料科学技术领域争相占领制高点的国家战略规划。建设基于大科学装置尤其同步辐射光源的高通量表征专用实验线站是系统地快速获取大量材料数据的关键和有效手段，是实现材料基因组工程三要素高度融合的基础。将要建设的北京高能先进光源，其能量为6GeV、束流发射度为 $0.05\text{nm}\cdot\text{rad}$ ，是目前最先进的第三代同步辐射光源，是发展高通量衍射、高通量成像等材料基因组专用实验线站的理想光源。高效利用北京高能先进光源实现材料高通量表征，必将大幅推进材料学、物理学等诸多领域的发展，最终实现材料基因组计划。

# 2016 年上海交通大学材料学术年会成功召开



2016 年 12 月 14 日 , 上海交通大学材料学术年会在李政道图书馆成功召开。本次会议由上海交大

材料学院主办 , 上海交大材料学院院长孙宝德教授、副院长曾小勤教授和来自校内外 250 多位师生到场参加。

孙宝德院长在开幕致辞中指出 , 加强校内材料领域的学术交流是开展校内学科交叉合作、协同创新的前提 , 举办材料学术年会的意义在于加强校内相互了解、活跃交大材料研究领域的学术氛围 , 期望把材料学术年会办成交大材料领域高水平的学术会议 , 促进交大材料学科的长足发展。

曾小勤教授主持年会 , 他首先介绍了此次年会的主题和意义 , 之后介绍了报告人有关情况等。

在每一个报告之后 , 现场人员纷纷与报告人进行互动交流 , 现场气氛热烈 , 尤其是会议上午开到 12:30 、下午开到 17:00 时 , 依然交流热烈 , 无人提前退场。本次会议展现了上海交大在 “ 材料制备与表征 ” 、 “ 高通量计算 ” 、 “ 材料加工成型 ” 的科学前沿和研究特色 , 为校内材料领域科研人员搭建了学术交流平台 , 促进该领域研究技术人员之间的互动合作 , 会议反响很好 , 大部分师生都认为本次会议交流的内容比较前沿、比较新。

大会最后 , 曾小勤进行了总结 , 他希望材料年会能越办越好 , 并鼓励研究人员和企业技术专家更多的参与 , 促进不同学科以及产学研的交叉发展。

本次会议特邀华东师范大学黄荣博士、浙江大学青年千人余倩博士分别作了《氧化物异质界面原子结构及磁电性能》和《异质元素调控材料力学性能的原位电镜表征》等 12 个的报告 , 12 位教授分别从 “ 材料制备与表征 ” 、 “ 高通量计算 ” 、 “ 材料加工成型 ” 等方面开展报告。

# 上海交通大学材料基因组联合研究中心年度报告会



2017年1月6日，上海交通大学材料基因组联合研究中心年度报告会在陈瑞球楼114召开。中国工程院丁文江院士、上海交通大学科学技术发展研究院孙丽珍副院长、计划项目办公室刘萍主任、材料科学与工程学院孙宝德院长、联合研究中心常务副主任曾小勤副院长以及材料基因组联合研究中心主任汪洪教授等80多位来自材料学院、机动车学院、电信学院、密西根学院、化工学院、物理与天文系和自然研究院的师生参加了会议。

报告会由曾小勤教授主持。首先，联合研究中心学术委员会主任丁文江院士在对材料基因组成立近两年来取得的初步成果表示祝贺，指出材料基因组工程的意义在于要实现“两个一半”：研究周期缩短一半、应用周期缩短一半。成立材料基因组联合研究中心的初衷是希望通过搭建的跨学科、跨团队的平台提高整体学术水平。通过全校合力，为上海建设具有全球影响力的科创中心贡献力量，在国

家层面上发出“交大的声音”。接着，校科研院孙丽珍副院长代表学校肯定了联合研究中心成立快两年来工作成效显著，虚拟平台的组织模式产生了良好的效果，并指出学校将在组织和经费政策上支持材料基因组工作。孙宝德院长代表学院对关心支持联合研究中心建设的专家和领导表示感谢，祝贺研究中心在全体老师的共同努力下召开了年度报告会获得阶段性成果。希望以“两个一半”为目标，瞄准应用，让材料研究成果能更早投入到应用领域。随后，联合研究中心主任汪洪教授代表联合研究中心回顾了联合研究中心2016年度的工作和做题为“大数据范式下的材料研究新模式”的报告，给在座师生带来材料基因组研究的新动向新思考。

接着，报告会分“研究进展”、“研究总结”和“立项论证”三个模块，由19位来自全校各学院的教师就各自项目的研究成果进行了汇报与交流。联合研究中心在2016年中重点建设了高通量计算平台和计算热力学、动力学软件平台；在组合材料芯片的同步辐射表征、

电化学表征、透射电子显微镜等高通量表征技术上获得了显著进展；在铝合金微通道管材挤压成形的集成计算材料工程上形成了一个完整案例。联合研究中心还获得了2016年国家重点研发专项“材料基因工程关键技术与支撑平台”中一个项目牵头、一个子课题负责和一个项目参与的成绩；在2017年该专项申请中，共有三个项目牵头，二项子课题负责和一项参与。人才方面，有一人获评青年长江学者，一人获评上海市启明星(C类)，一人获上海市杨帆计划资助。

汪洪教授在报告会结束时的总结中指出，今年的报告比去年更加丰富。希望每年报告的数量、质量都能不断增加。希望再经过两年的努力，发挥交大整体竞争优势，建立新的跨学科技术集群，材料基因组工程的研究形成新的学科增长点，并将结果最终实现应用。此次报告会为基因组翻开2017年的新篇章。

# 上海交通大学材料基因组联合研究中心成员赴美国访问交流



2017年4月24日至28日,上海交通大学材料基因组联合研究中心汪洪教授、李大永教授、鲍华副教授赴美国密西根大学PRISMS (Predictive Integrated Structural Materials Science) 中心,Argonne

国家实验室APS(Advanced Photon Source)中心,美国西北大学CHiMaD (Center for Hierarchical Materials Design)研究中心,以及美国Lawrence Berkeley国家实验室的Material Project研究中心进行交流和访问。

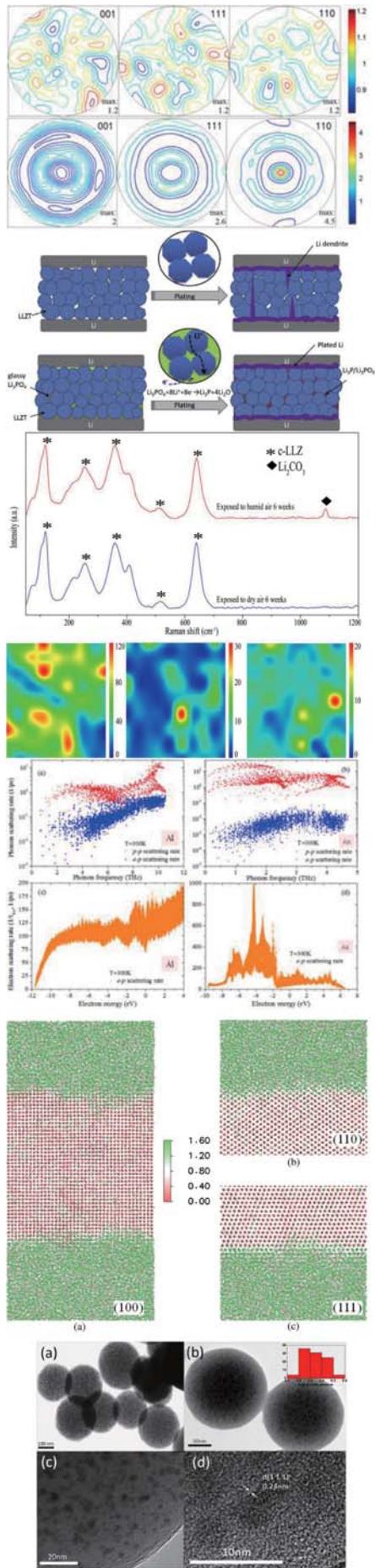
在PRISMS中心,代表团首先参观了负责人John Allison教授的实验室。在研讨中,汪洪教授首先介绍了上海交通大学材料基因组联合研究中心的历史、近两年的发展状况、以及今后的发展,李大永教授和鲍华副教授分别介绍了基因组联合研究中心在ICME和Material Project Asia Hub的筹备与建设情况。并和Liang Qi、Katsuyo Thornton教授等探讨了第一原理计算、相场法等镁合金设计和研究方案,双方共同探讨了联合申请科研项目的可行性和具体方案。

在Argonne国家实验室,在Xianghui Xiao研究员的陪同下参观了APS各个线站的材料表征和测试实验室。上海交通大学材料基因组联合研究中心三位教师就基因组中心的建设和相关科研进展做学术报告,并和Argonne国家实验室材料生长,第一原理计算等多个课题组进行了学术讨论。

在西北大学CHiMaD研究中心,联合研究中心三位教师首先简要的介绍了中心的建设和相关科研进展。CHiMaD的负责人Peter Voorhees, Greg Olson分别介绍了CHiMaD中心的建设和运行情况,以及中心科研方面的总体介绍。之后中心三位教师分别和Michael Bedzyk, Mark Hersam, Harold Kung等西北大学教授就x射线衍射、跨维度材料、催化剂等研究领域进行了探讨。下午听取了CHiMaD研究中心六位相关领域的教授的研究介绍并就此进行交流。

在Lawrence Berkeley国家实验室,中心三位教师和Material Project的负责人Kristin Persson和Gerbrand Ceder就Materials Project Asia Hub的建设情况进行了探讨。Persson和Ceder教授也就团队组成,网站建设等方面,对上海交通大学材料基因组联合研究中心提供了宝贵的建议。

# 上海交通大学材料基因组联合 研究中心 2016 研究进展报告



上海交通大学材料基因组联合研究中心于2015年4月20日在上海交通大学闵行校区正式成立，中心聘请美国材料基因组建议人、交大访问讲习教授Gerbrand Ceder教授担任联合研究中心首席科学家，筹建Materials Project的亚洲中心“Asia Hub”，标志着上海交通大学材料基因组联合研究中心工作的全面启动。

全面的学科覆盖和优秀的人才资源是上海交通大学开展材料基因研究的最大优势。而组织学科交叉、发挥校内学科综合优势是上海交通大学材料基因组联合研究中心的最重要的使命之一。通过对与材料基因组研究直接相关的人才挖掘，目前中心拥有成员50名，其中材料学院32名，其他学院18名，分别来自物理、数学、电信、化学化工、机械动力、密西根学院、自然研究院、高性能计算中心等单位。根据现有的人才基础和研究特长，我们设置了高通量计算、高通量实验、数据库与数据挖掘、集成计算材料工程等四个技术平台，确立了先进高温合金、先进高强钢、轻质高强金属及复合材料、生物医药材料、清洁能源材料等五个主要应用方向。今后，还将本着积极拓宽、稳健发展的原则，不断扩展研究领域与合作对象，加速发展材料基因组研究。

迄今，我们开展了第一性原理计算、扩散多元节设计新型高温材料、镁合金板材温热变形机制、高通量光电催化表

征装置、锂电池固体电解质材料、成分空间连续分布的材料芯片制备、材料高通量计算对热电材料性能预测、复合材料的结构建模和力学性能研究、以及材料基因组数据库建设等项目研究。其中有近十个非材料专业的团队参与到实质性的跨学科合作研究当中。中心在校科研院的支持下，为材料基因组技术相关的预研提供了部分资金支持，使一批有想法、有基础、有希望、有潜力的项目得以尽快启动。2016年，我们资助了14个项目，总金额达到215万元，并较快地取得了一些初步成果。在高

通量计算方面，材料基因组联合研究中心于 2016 年 4 月 1 日在我校高性能计算中心的超级计算机上成功运行了 Materials Project-Asia Hub 高通量计算软件系统，成为全国最早实现高通量自动计算的单位之一，2016 年 10 月 1 日，又成功运行了第二代高通量计算代码 MatMethod。中心成员将第一性原理计算以及几何建模技术运用于能源材料以及结构材料的研究，为结构和组成设计提供了思路；高通量实验方面，中心成员成功研发了高通量光电催化表征系统样机，可用薄膜样品的光电催化以及电催化性能的高通量表征；基于大科学装置利用组合材料芯片快算测定三元相图的等温截面取得了阶段性突破，2016 年 3 月，中心成员在美国 Argonne 同步辐射光源首次完成组合材料芯片高通量表征实验，实现每秒 1 个数据点，高出之前发表数据一个数量级，大大提升了三元相图的研究效率，同时运用机器学习技术，初步建立了大批量 X 光衍射谱图自动识别归类流程，数据处理速度与数据获取速度相匹配，识别准确度超过人工。在数据库方面，中心成员建立了铝基复合材料的结构 - 性能关系的数据库及其共享平台，形成系统的数据积累和具体应用，预期可实现该类铝基复合材料的设计引领和加速，并在我国若干重大工程领域实现应用验证。在 2016 年内，研究中心成员已经发表了包括 Science, Adv.Mater. 等在内的 39 篇学术论文，申请国家发明专利一项。

为了加强与国内外材料基因组领域的同行的交流和学习，中心举办了以材料基因组研究为主题的上海交通大学材料学年会，并定期举办《材料基因组专题系列讲座》，邀请了加州大学伯克利分校的 Gerbrand Ceder 教授和 Persson 博士、清华大学王崇愚院士、上海大学鲁晓刚教授、密歇根大学的齐月副教授、北京航空航天大学孙志梅教授、马里兰大学高铁仁博士、美国麻省理工的王琰博士等材料基因组相关领域的专家就材料基因的研究理念和研究方法展开学术交流和讨论，有力增强了对国际材料基因研究前沿的认识，增进了国内外学术合作。8 月 29 日，中心成员在上海成功主办第三届堆积问题国际会议。10 月 24 日，中心成员主办的第四

届国际分子模拟大会在上海顺利召开。

2016 年内，中心成员积极参加了一系列国内外的学术会议。9 月 21 日，中心成员参加“中国科学仪器设备与试验技术发展高峰论坛—材料基因组工程高通量合成与表征学术报告会”，中心成员介绍了由我校材料学院和物理系教授组成的同步辐射高通量表征团队通过国内外合作，采用高通量同步辐射 X 射线衍射对铁钴镍三元合金材料芯片进行成分结构表征，初步实现了 X 射线对晶体结构相组成的快速表征以及基于机器学习的自动分析，得到了与传统方法相同的三元系相图的等温截面，与会者反应十分热烈；报告了透射电镜中使用软件控制的纳米束衍射图谱的高通量扫描以及自动数据采集与分析的结果，获得广泛好评；还首次报告了由我校材料基因组联合研究中心支持建设的高通量光电催化表征装置的运行实况以及初步材料研究成果，引起了听众的极大兴趣。反映了我校在近一年中高通量实验方面所取得的切实进展，充分体现出我校在材料基因组研究上的务实风格，也展示了我校材料基因组联合研究中心的出众实力。9 月 26 日，中心成员参加 2016 年国际材料趋势高峰论坛，在材料基因组论坛分别作关于高通量相图构建与铝合金微通道管材挤压成形中的材料集成计算工程特邀报告，此外，11 月 26 日 -12 月 2 日，中心成员参加了在美国举行的 MRS 秋季会议，作了关于高通量相图构建与钙钛矿太阳能电池的报告，引起了广泛关注。2017 年 4 月 24 日至 28 日，中心部分成员赴美国密西根大学 PRISMS (PRedictive Integrated Structural Materials Science) 中心，Argonne 国家实验室 APS (Advanced Photon Source) 中心，美国西北大学 CHiMaD (Center for Hierarchical Materials Design) 研究中心，以及美国 Lawrence Berkeley 国家实验室的 Material Project 研究中心进行交流和访问。带来材料基因组研究的前沿动态，促进校内外相关学科的交流合作。

由上海交通大学材料基因组联合研究中心组织策划，由材料科学与工程学院以及其他相关学院与单位的骨干参与，积极申报和参与了国家十三五材料基因组重点研发专项的申请。科技部 2016 年

材料基因组工程国家重点研发专项公布评审结果，其中由以上海交通大学作为项目牵头单位，联合浙江大学、大连理工大学等 17 家单位，申请“材料基因工程关键技术与支撑平台”重点专项“轻质高强镁合金集成计算与制备”，获批经费 2000 万元，执行周期 2016-2020 年。同时参与中国航空工业集团公司北京航空材料研究院牵头的“新型镍基高温合金组合设计与全流程集成制备”项目以及由北京科技大学作为牵头单位负责申报的国家重点研发计划项目“材料基因工程专用数据库和材料大数据技术”。这些都为材料基因研究的进一步发展提供了坚实的经费支持与合作基础。在科技部 2017 年材料基因组工程国家重点研发专项申报中，利用上海交通大学具有多学科交叉的优势。“材料基因组联合研究中心”联合了在高通量制备与表征、同步辐射与中子衍射实验、机器学习、智能分析等方面处于国内领先地位的团队，积极组织参与申报。材料基因组有两个牵头项目成功申报。总立项金额 3631 万元。此外，中心还积极参与了上海材料基因工程研究院牵头的上海市材料基因组平台建设项目。

上海交通大学材料基因组联合研究中心在学

术合作交流，项目开展支撑、重大项目申请上已经开展了诸多富有成效的工作。鉴于前期项目在理论研究以及高通量实验方面已经取得了初步成果，我们拟在后期项目设计中加强理论研究成果与高通量实验的衔接，加快材料创新研究速度，同时提升机器学习暨数据挖掘等大数据技术对材料基因组研究的支持作用。针对目前存在的不同领域之间的研究内容以及方向的沟通和理解困难的问题，拟加强研究中心的成员之间的内部交流与沟通学习，积极开展引智工程，邀请国内外知名专家来访交流，切实提升材料基因组研发方法对材料研究的引擎功能，加速从材料的研发到产业化的进程，为中国材料产业的跨越发展探出一条新路。



上海交通大学材料基因组联合研究中心

2017 年 5 月

# 基于第一性原理二维材料热导率计算的误差分析 以及金属中电子 – 声子耦合的热传输

作者：鲍华<sup>a</sup>, 谢涵<sup>a</sup>, 童贞<sup>a</sup>

<sup>a</sup> 上海交通大学密西根学院, 上海交通大学

Email: hua.bao@sjtu.edu.cn

基于密度泛函(DFT)和晶格动力学理论,通过第一性原理计算和数值求解玻尔兹曼方程对二维材料热导率的计算进行了误差分析,同时研究分析了金属中电子、声子的热传输特性。我们发现计算二维材料硅烯的热导率对力的精度(或者说三阶力常数的精度)要求更高。同时发现在不同类型的金属中,电声耦合对其声子热导率的影响强度是不同的并且这种影响随着温度增加而减弱。另外发现在纳米金属中,声子是对其热导率贡献的主要能量载子。

关键字：第一性原理；力常数；电声耦合；声子热导率；电子热导率。

## 一、基于第一性原理二维材料热导率计算的误差分析

通过第一性原理计算和数值求解玻尔兹曼方程来计算材料热导率的方法目前已经被广泛应用于各种材料。而新型的二维材料由于其独特的光学、电学和热学性质,被认为具有广泛的应用前景。自从二维材料石墨烯开始获得科学界的关注以来,第一性原理的方法也被直接应用于计算各种二维材料的热导率,既包括石墨烯,也包括其他二维材料如硅烯、磷烯、过渡金属硫化物等。通过文献调研我们发现了一个问题:对于同一个二维材料来说,不同文献中同样使用第一性原理和玻尔兹曼方程方法得到的热导率结果有较大差异,最大的甚至可能相差好几倍。因而我们认为针对这种计算方法做一个误差来源分析很有必要。

在一个具有周期性的晶体结构中,体系的势函数在平衡位置附近的泰勒展开式为:

$$V = V_0 + \frac{1}{2!} \sum_{ij} \Phi_{ij} u_i u_j + \frac{1}{3!} \sum_{ijk} \Psi_{ijk} u_i u_j u_k + \dots , \quad (1)$$

其中  $V_0$  是体系处于平衡位置时的势能。在平衡位置时原子受力为零,因而在此公式中没有一阶项。 $\Phi_{ij}$  是二阶力常数, $\Psi_{ijk}$  是三阶力常数。 $u$  是原子的位移。通过玻尔兹曼方程我们可以推导出以下计算热导率的公式(只考虑声子):

$$\kappa_l^{\alpha\beta} = \sum_{\lambda} c_{ph,\lambda} v_{\alpha,\lambda} v_{\beta,\lambda} \tau_{\lambda}, \quad (2)$$

其中  $\alpha$  和  $\beta$  代表  $x, y$  或者  $z$  三个方向。 $\lambda$  代表不同的声子模式。 $c_{ph}$ ,  $v$  和  $\tau$  分别是声子热容、声子群速和声子弛豫时间。声子的这些性质可以通过简谐晶格动力学和非简谐晶格动力学方法以二阶力常数和三阶力常数作为输入计算得到。因为此方法所需要的输入只有二阶和三阶力常数,所以我们认为误差的主要来源是二阶和三阶力常数算得不够精确。两者相比,三阶力常数对热导率的影响相对来说更大,所以在这里我们主要研究三阶力常数的精度对计算出的热导率数值的影响。学界之前发表的工作大都是通过第一性原理得到二阶和三阶力常数,然后计算出热导率。第一性原理可以准确得描述体系总能量,但是它也存在数值精度不高的问题,通过第一性原理计算得到的三阶力常数通常需要一些微小的修正。而除了可以通过第一性原理之外,我们也可以通过经典作用势来计算体系的总能量。经典作用势计算出的总能量反映物理体系的准确性虽然不一定有第一性原理计算的结果高,但是由于经典作用势的数值精度很高,所以我们可以使用经典作用势来研究数值精度对热导率数值结果的影响。一般来说,在使用第一性原理获得力常数的过程中,我们都是先移动某些原子的位置,计算原子受力(总能量的负梯度),然后通过有限差分法使用原子受力计算出二阶和三阶力常数。所以在用经典作用势时,我们也以计算出的力的精度(force accuracy)来表征三阶力常数的精度。

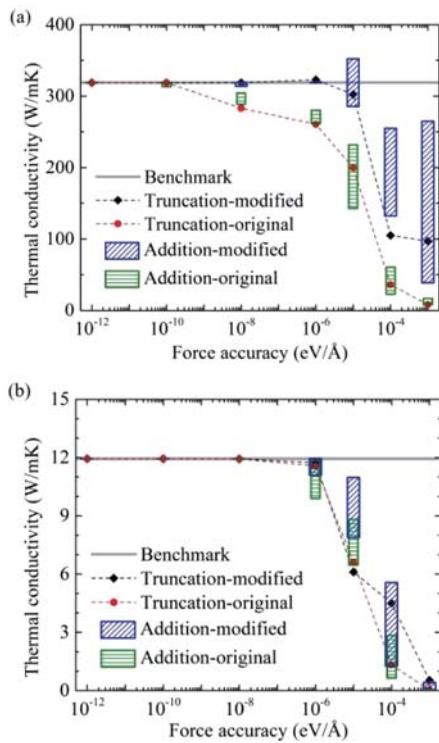


图 1 计算得到的热导率与力的精度的关系 (a) 用 Tersoff 作用势计算出的晶体硅的热导率 (b) 用优化后的 SW 作用势计算出的硅烯的热导率

我们分别用 Tersoff 作用势和专门针对硅烯优化过的 SW 作用势来计算晶体硅和硅烯的热导率。首先我们通过非常认真仔细的计算尽量减小二阶和三阶力常数的数值计算误差, 然后用这些力常数计算出一个热导率的结果。在经典作用势框架内这个结果可以被认为是准确值, 因而这个值也被用作对标值(benchmark)。然后我们通过把力在小数点后面某一位进行截断(truncation)或者生成一些随机的小量加到力上面(addition)来模拟三阶力常数有误差的情况。随机加小量针对每个精度我们都做了五组结果, 在图 1 中以竖条显示。图中的 original 表示生成的有误差的三阶力常数没有经过任何处理就被用来计算热导率, modified 表示得到的三阶力常数用了和第一性原理情况下同样的修正方法做了微小的修正。

如果我们认为在标定值的  $\pm 15\%$  范围内都算是预测得比较好的结果的话: 针对(a)晶体硅(b)硅烯, 我们需要力的精度至少达到(a) $10^{-5}$  eV/Å(b) $10^{-6}$  eV/Å 而且使用修正后的三阶力常数来计算热导率才能得到一个比较好的结果。可以从这个结果中看出相

对三维材料晶体硅来说, 计算二维材料硅烯的热导率对力的精度(或者说三阶力常数的精度)要求更高。这个结果对于解释第一性原理计算出的二维材料热导率的差异具有一定参考意义。

## 二、基于第一性原理的金属中电子-声子耦合的热传输

近些年来, 基于第一性原理的半导体材料中的声子性质以及热导率的研究已经取得了重大进展。然而, 金属中的声子传输的相关研究还很少有触及到, 这主要归因于金属中声子对热导率的贡献很弱以及电子-声子耦合作用模型的计算过程的复杂性。即使电子是金属热传输和电传输中主要的能量传输载流子, 声子在点子的传输中仍扮演着重要的角色。在中等适当温度以及高温的情况下, 电子的传输将会受到电子-声子散射的限制。另外, 电子-声子耦合在激光加热, 拉曼测量热导率实验以及金属-绝缘体界面的热电传输等很多电声非平衡热传输过程中都有很重要的作用。因此, 对金属中电子以及声子的热传输的研究是很有必要的, 尤其是电子-声子耦合作用对热导率的影响。

在本工作中, 我们主要是通过第一性原理以及求解玻尔兹曼传输方程的方法计算了金属铝(Al)和金(Au)中的声子热导率( $k_p$ ), 在计算过程中考虑了声子-声子( $p-p$ )以及电子-声子( $e-p$ )的相互作用。另外, 我们也计算了仅仅考虑电子-声子( $e-p$ )作用下的电子热导率( $k_e$ )。

关于声子热传输, 我们主要考虑  $p-p$  以及  $e-p$  散射过程。类似于前面的计算方法, 通过对平衡位置的能量进行泰勒展开得到二阶力常数以及三阶力常数。从而可以得到三声子散射过程中  $p-p$  的散射率:

$$\frac{1}{\tau_{\lambda}^{pp}} = \frac{\pi \eta}{16N} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} |V_{\lambda \lambda_1 \lambda_2}|^2 \left\{ \left[ (n_{\lambda_1}^o + n_{\lambda_2}^o + 1) \delta(\omega_{\lambda} - \omega_{\lambda_1} - \omega_{\lambda_2}) + (n_{\lambda_1}^o - n_{\lambda_2}^o) \right] \times [\delta(\omega_{\lambda} + \omega_{\lambda_1} - \omega_{\lambda_2}) - \delta(\omega_{\lambda} - \omega_{\lambda_1} + \omega_{\lambda_2})] \right\}, \quad (3)$$

其中  $\lambda$  表示声子模,  $N$  是声子模总数量,  $\eta$  是约化普朗克参数,  $n$  是波色爱因斯坦分布函数,  $\omega$  是声子频率,  $\delta$  是 Dirac 函数,  $V_{\lambda \lambda_1 \lambda_2}$  是三声子散射矩阵元。另外, 基于费米黄金定则(FGR), 可以得到  $e-p$  的散射率:

$$\frac{1}{\tau_{\lambda}^{ep}} = \frac{2\pi}{\eta} \sum_{k,i,j} |g_{jk+q,k}^{\lambda}|^2 (f_{ik} - f_{jk+q}) \times \delta(\epsilon_{ik} - \epsilon_{jk+q} + \eta\omega_{\lambda}) \quad (4)$$

其中  $g$  是  $e-p$  作用矩阵元,  $f$  是费米 - 狄拉克分布函数,  $k$  是电子波矢,  $i$  和  $j$  是电子能带指数,  $\epsilon$  是电子能量。另外,  $e-p$  作用矩阵元表示电子在声子  $\lambda$  的微扰下由初态  $|i,k]$  散射到末态  $|i,k+q]$ , 定义如下:

$$g_{jk+q,k}^{\lambda} = \sqrt{\frac{\eta}{2\omega_{\lambda}}} \langle \psi_{jk+q} | \partial U_{\lambda} | \psi_{ik} \rangle \quad (5)$$

其中  $\psi$  表示基态波函数,  $\partial U_{\lambda}$  表示对在声子  $\lambda$  微扰下基态能量的一阶导。在获得以上的  $p-p$  和  $e-p$  散射率之后, 最后通过马蒂森定则得到声子的弛豫时间,

$$\frac{1}{\tau_{\lambda}^p} = \frac{1}{\tau_{\lambda}^{pp}} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^{ep}} \quad (6)$$

最后便可以通过式(1)得到声子的热导率  $k_p$ 。

关于电子热传输, 我们主要考虑  $e-p$  散射过程。同样根据费米黄金定则, 可以得到电子的弛豫时间:

$$\frac{1}{\tau_{km}} = \frac{2\pi}{\eta} \sum_{k'n} \sum_{\lambda} |g_{nk'mk}^{\lambda}|^2 \left\{ (n_{\lambda} + f_{k'n}) \delta(\epsilon_{km} + \eta\omega_{\lambda} - \epsilon_{k'n}) \delta_{k+q-k'} \right. \\ \left. + (n_{\lambda} + 1 - f_{k'n}) \delta(\epsilon_{km} - \eta\omega_{\lambda} - \epsilon_{k'n}) \delta_{k-q-k'} \right\} \left( 1 - \frac{v_{km} v_{k'n}}{|v_{km}| |v_{k'n}|} \right) \quad (7)$$

其中  $\eta$  是约化普朗克参数,  $g$  是  $e-p$  作用矩阵元,  $n$  是波色爱因斯坦分布函数,  $f$  是费米 - 狄拉克分布函数,  $\omega$  是声子频率,  $k$  表示电子对应的波矢以及  $m$  表示能带指数,  $v$  表示电子速度。另外, 通过求解玻尔兹曼传输方程, 可以得到电子的热导率:

$$k_e^{\alpha\beta} = \sum_m c_e v_m^{\alpha} v_m^{\beta} \tau_{km} \quad (8)$$

其中  $c_e$  表示电子比热容,  $v$  表示电子速度,  $\tau$  表示电子弛豫时间,  $k$  表示电子对应的波矢以及  $m$  表示能带指数。在得到电子弛豫时间后, 便可以通过式(8)获得电子热导率  $k_e$ 。

通过以上的计算方法, 我们计算了金属 Al 和 Au 的声子以及电子热导率。首先, 我们给出了声子以及电子的散射率的关系, 如图 2 所示。从图中可以看出金属 Al 中的  $p-p$  和  $e-p$  散射率的大小相差 1~2 个数量级, 而 Au 中两者相差 3~4 个数量级。这样就使得金属 Al 中的  $e-p$  散射对声子热导率的影响更大, 后面给出的声子热导率也说明了这一点。

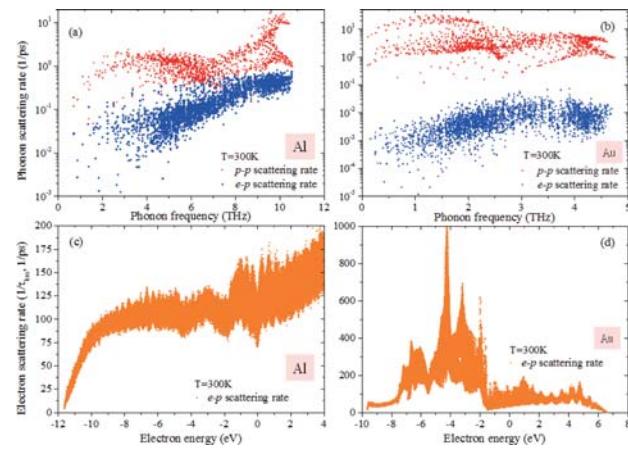


图 2 金属 Al 和 Au 中的声子、电子的散射率。(a)Al 的声子散射率, 包括  $p-p$  和  $e-p$  的散射率; (b)Au 的声子散射率, 包括  $p-p$  和  $e-p$  的散射率; (c) Al 的电子散射率,  $e-p$  的散射率; (d) Au 的电子散射率,  $e-p$  的散射率

进一步, 我们分别计算了金属 Al 和 Au 的声子以及电子热导率, 如图 3 所示。

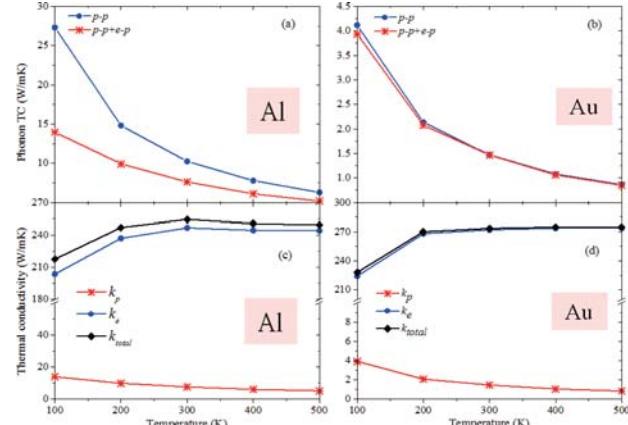


图 3 金属 Al 和 Au 中声子( $k_p$ )、电子( $k_e$ )以及总( $k_{total}$ )的热导率随温度的变化关系。(a)Al 的声子热导率; (b)Au 的声子热导率; (c) Al 的电子热导率; (d) Au 的电子热导率

从图 3(a)中可以看出, 金属 Al 中电子 - 声子间耦合作用对声子热导率的影响随着温度的增加而减小, 主要是因为随着温度的升高, 声子的数量会增加。另外, 电声耦合的影响在低温时更显著, 主要是因为在低温时  $p-p$  散射变得更弱, 而  $e-p$  没有明显的影响。对比图 3(a)和图 3(b), 金属 Al 中的电声耦合对声子热导率的影响很显著, 而金属 Au 中电声耦合作用对其声子热导率的影响几乎可以忽略。这主要是因为在费米能附近, 金属 Al 中的电子态密度远大于金属 Au 中的电子态密度, 这样就是的 Al 中的电声耦合作用发生的概率更大, 从而导致对声子热导率的影响更大。同时从图 3(c)和图 3(d)中可以

看出金属中电子是主要的能量载流子，并且声子热导率对总的热导率的影响主要是体现在温度较低的情况下。

最后，我们计算了能量载子(声子、电子)不同平均自由程对热导率的贡献，其结果如图 4 所示。

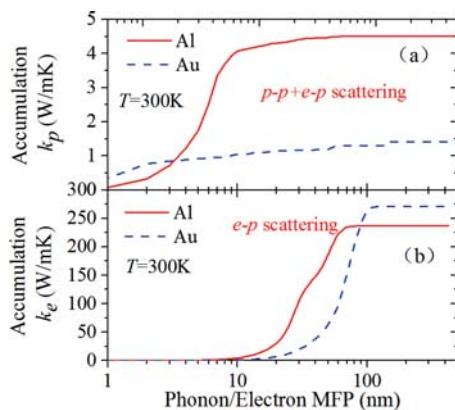


图 4 金属 Al 和 Au 中声子、电子的热导率与平均自由程的变化关系。(a)金属 Al 和 Au 的声子热导率与平均自由程的关系;(b)金属 Al 和 Au 的电子热导率与平均自由程的关系

从图 4 中可以看出，声子对声子热导率的贡献主要来自于平均自由程在 1-10 nm 范围内的声子，而电子对电子热导率的贡献主要来自于平均自由程在 20-100 nm 范围内的电子。这告诉我们两个信息  
(1)金属中声子的平均自由程远小于电子的平均自

由程；(2)在纳米金属结构中，对热导率贡献的主要能量载子是声子。

以上关于金属中电子 - 声子耦合作用对其热传输特性的研究让我们更清楚的了解到金属中各个能量载子对热导率的贡献，对其热传输的物理机制更加的深入地得到了了解。同时这些结果有助于我们更好地将金属材料应用到工艺、工业当中，尤其是金属纳米结构材料的应用。而且，已经实现的考虑电声耦合作用的热传输问题的求解方法有助于我们未来继续研究非平衡态下的能量传输问题。

本文作者衷心感谢国家自然科学基金（批准号 51676121）以及上海交通大学材料基因组联合研究中心的资助。

## 参考文献

- [1] Xie H, Gu XK, Bao H. How does the accuracy of interatomic force constants affect the prediction of lattice thermal conductivity. Computational Materials Science (under revision).
- [2] Jain, Ankit, and Alan JH McGaughey. Thermal transport by phonons and electrons in aluminum, silver, and gold from first principles. Physical Review B 93.8 (2016): 081206.

# 面向基因组需求的数据库综合平台建设

作者:姚斌,上海交通大学计算机科学与工程系

Email:yaobin@cs.sjtu.edu.cn

针对面向基因组需求的数据平台的数据收集问题、实时存储计算问题、数据挖掘分析问题,分别研究了对应的解决方案。将三者综合,设计了大数据平台的系统架构,以此来进行数据平台的构建,支持基因组的研究和应用需求。

关键字:数据平台;数据收集;实时存储;数据挖掘。

面向基因组需求的数据平台主要聚焦于以下三个问题的解决方法。第一,对多源异构的海量数据的收集问题。基因组数据往往不只是分布在一个固定的数据库中,而是来源于多个数据库,并且数据库的种类可能不同,数据库中存储的格式和命名标准也不统一,这使得数据的收集工作变得非常苦难。第二,对大规模数据的实时存储和计算问题。基因组数据量巨大,并且会不断增长,而基因组研究和应用在大多数情况下需要快速地访问数据和计算结果,这就对数据存储和实时计算有很高的要求。第三,对数据的挖掘和分析问题。基因组研究的一个重要部分就是从数据角度,对现有的基因组数据进行挖掘和分析,来得到新的知识和规律,从而辅助实验研究。然而,现有的分布式挖掘算法非常有限,挖掘工具可用性不高,因此需要针对基因组研究的具体需求,开发新的挖掘工具和挖掘算法。

针对这三个问题,我们分别有以下的研究进展。对于数据收集问题,我们设想利用 Apache Scoop 来进行数据收集工作。Scoop 是一款开源的数据传输工具,主要用于在 Hadoop(主要是 Hive, Hadoop 中的类 SQL 数据仓库)与传统的关系型数据库(如 mysql 和 postgresql 等)之间进行数据的高效传递。Scoop 可以将一个关系型数据库中的数据导进到 Hadoop 的 HDFS 中,也可以将 HDFS<sup>[1]</sup>的数

据导进到关系型数据库中,这个传递过程中,它会按照统一的标准来对数据做转换,因此不需要额外处理数据格式转换问题。

对于数据的存储和计算问题,我们设想是结合利用 Hadoop 和 Spark<sup>[3]</sup>来构建存储系统。Hadoop 是一个比较流行的分布式系统基础架构,是一个开发和运行处理大规模数据的分布式平台。它有一个分布式文件系统 HDFS 来对数据进行存储和访问,有一个分布式计算框架 MapReduce<sup>[2]</sup>来对数据进行计算。Spark 是一个类 MapReduce 的通用并行计算框架,专门用来对那些分布式存储的大数据进行处理的工具,它并不会进行分布式数据的存储,所以必须和其他的分布式文件系统进行集成才能运作。Spark 因为其处理数据的方式不一样,相比 MapReduce 计算效率大大提高。MapReduce 是分步对数据进行处理的,从集群中读取数据,进行一次处理,将结果写到集群,从集群中读取更新后的数据,进行下一次的处理,将结果写到集群,等等。反观 Spark,它会在内存中以接近“实时”的时间完成所有的数据分析,首先从集群中读取数据,然后完成所有必须的分析处理,最后将结果写回集群。这样的处理方式,使得 Spark 的批处理速度比 MapReduce 快近 10 倍,内存中的数据分析速度则快近 100 倍,而且 Spark 更适合对流数据的实时处理。所以,我们这样来构建基因组数据的存储系统,用 Hadoop 负责数据存储和资源管理,用 Spark 负责一体化、多元化的不同规模的数据计算。

对于数据挖掘和分析问题,我们在现有的分布式挖掘算法和工具的基础上,结合基因组数据的特征和应用需求,基于前面实现的存储系统,进行二次开发,得到新的分布式挖掘算法,并将其应用到前面的存储系统上,构建新的挖掘工具。

结合以上三点,我们设计了“面向基因组需求

的数据库综合平台”的系统架构,如图 1 所示。最底层是多种类型的基因组数据,包括结构化、半结构化和非结构化的数据。这些数据通过数据同步收集工具(如 Sqoop)存储到 Hadoop 的分布式文件系统 HDFS 中,并通过 Hadoop 的分布式计算框架 MapReduce 来进行计算调用。基于 Hadoop 平台完成这些功能:通过 Spark 的内存计算特性达到“实时”计算性能,通过 Hbase、Hive 等综合管理数据,通过 Mahout 来进一步开发数据挖掘算法和工具。在此之上设计平台接口,使其能够支持多种编程语言,如 Java、C++ 和 SQL 等,上层的基因组应用就可以通过这些接口来完成对平台中数据的访问和计算。这样就构成了一个完整的数据平台,它成功地解决了前面的三个问题。

### 参考文献

[1] Dhruba Borthakur. The hadoop distributed file system:

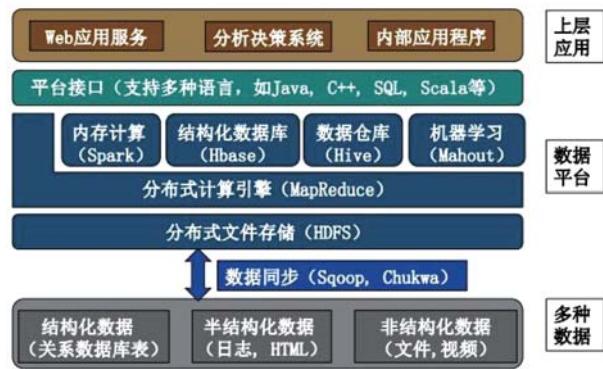


图 1 面向基因组需求的大数据平台架构设计图

Architecture and design. Hadoop Project Website 2007.

- [2] Jeffrey Dean, Sanjay Ghemawat. MapReduce: simplified data processing on large cluster. OSDI. 2004.
- [3] Matei Zaharia, Mosharaf Chowdhury, Michael J. Franklin, Scott Shenker, Ion Stoica. Spark: cluster computing with working sets. HotCloud 2010:95:10-10.

# 纯铜的多晶体塑性 – 动态再结晶的集成建模与分析

作者:李大永<sup>a,b</sup>,周国伟<sup>b</sup>,李子涵<sup>b</sup>

<sup>a</sup>材料基因组联合研究中心,上海交通大学

<sup>b</sup>机械与动力工程学院,上海交通大学

Email:dyli@sjtu.edu.cn

本研究提出一种基于粘塑性自洽晶体塑性模型的塑性变形与动态再结晶的集成计算方法,实现材料在热变形过程中的变形、动态再结晶和织构演化的耦合模拟分析。将模型应用于纯铜在不同变形条件下的热压缩变形的计算,预测热变形中的力学行为,晶粒尺寸演化及再结晶现象。

关键字:动态再结晶;晶体塑性;纯铜;晶粒尺寸;织构。

动态再结晶(DRX)是一种在金属发生热塑性变形时伴生的一种重要现象,常出现在中低层错能或者低动态回复率的金属中,如纯铜,黄铜等。由于再结晶的发生,新的再结晶晶粒会产生,这些新晶粒会影响材料的微观结构,织构及力学行为(如应力软化)。在热加工中可以利用动态再结晶来提升材料成形性能,改善制件品质。

在本研究中,将粘塑性自洽模型(VPSC)与动态再结晶理论(DRX)相结合,用以集成计算纯铜的塑性变形,织构演化以及再结晶过程。VPSC采用了位错密度演化准则来解释变形以及晶粒取向的演化,并为再结晶计算提供了每个晶粒的位错密度信息。晶粒的分布情况与晶粒尺寸通过 DRX 准则中的成核判据与生长法则加以计算。本研究工作主要创新点是提供了一种 VPSC-DRX 的计算研究方法,可以考虑晶粒信息及演化的前提下,同时计算塑性变形,DRX 现象与织构演化。实验对比数据数据来源于 Blaz 等人纯铜压缩的工作。

位错滑移是金属塑性变形中的主要机制,变形过程中位错密度的演化导致了材料的硬化和软化,位错密度  $\rho$  随应变的演化可以分为两部分:加工硬

化导致的位错密度增加与回复导致的位错密度湮灭:

$$\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial \gamma^\alpha} = k_1^\alpha \sqrt{\rho^\alpha} - k_2^\alpha (\dot{\epsilon}, T) \rho^\alpha$$

其中  $\alpha$  代表  $\alpha$  滑移模式,位错密度增长率  $k_1$  为与应变率和温度无关的材料参数,位错的移除率  $k_2$  则由变形条件决定是温度的函数。

采用了基于位错密度的简化硬化模型:

$$\tau_{cr}^s = \tau_0^\alpha + \chi b^\alpha \mu \sqrt{\rho^\alpha}, s \in \alpha$$

其中  $\tau_0^\alpha$  为初始滑移抗力,  $\chi$  为描述位错交互作用的系数,通常  $0 < \chi < 1$ ;  $b^\alpha$  为  $\alpha$  滑移模式下的位错 Burgers 矢量,  $\mu$  为剪切模量。

动态再结晶模型需要包含两部分:成核,包括成核标准与成核率;生长,再结晶晶粒的长大。动态再结晶发生需要一定的变形量,当晶粒内部所有滑移模式密度之和达到临界位错密度  $\rho_c$  时,可以认定其具有发生动态再结晶的条件。本研究中采用的成核率法则为:在一个时间增量步  $\Delta t$  内有  $k$  个晶粒满足条件,则生成的新晶粒期望个数  $N$  为:

$$N = \sum_{i=1}^k p_i = \sum_{i=1}^k \dot{n} S_i \Delta t = \sum_{i=1}^k C(T) \dot{\epsilon}^\alpha S_i \Delta t$$

其中  $C(T)$  为与温度相关的参数,  $\alpha=0.9$  表示成核率  $\dot{n}$  与应变率  $\dot{\epsilon}$  成近似线性关系,  $S_i$  为晶粒  $i$  的表面积。

新生晶粒具有较低的位错密度,在变形中会逐渐长大,原始晶粒会被吞噬而消失。在本工作中晶粒  $i$  的生长速度  $V_i$  为:

$$\begin{aligned} V_i &= M(T) \tau (\bar{\rho} - \rho_i) \\ \bar{\rho} &= \sum_i \rho_i WGT(i) \\ \tau &= 0.5 \mu b^2 \end{aligned}$$

其中  $M(T)$  为晶界迁移率,  $WGT(i)$  为晶粒  $i$  的体积权重分数,  $\tau$  为  $\alpha$  滑移模式下相应的位错线能。

所建立的 VPSC-DRX 模型计算流程图如图 1

所示。

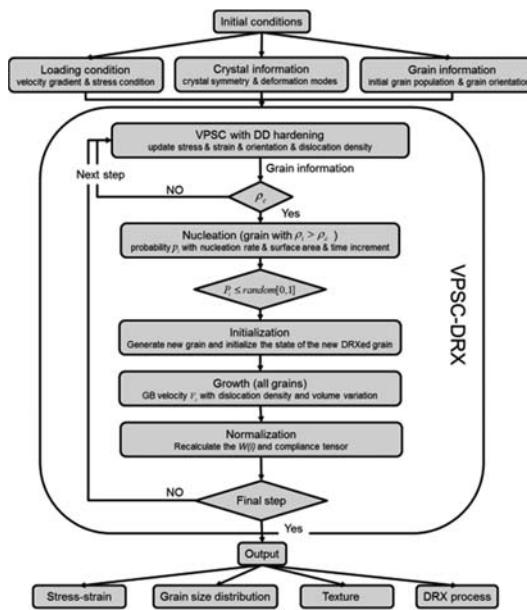


图 1 VPSC-DRX 模型计算流程图

图 2 所示为采用 VPSC-DRX 模型在 725K 到 1075K 温度范围内的计算应力应变曲线及与实验的对比,VPSC-DRX 模型的预测结果很好的反映了实验的现象。随着温度升高,峰值应力与稳态应力会出现地更早,同时曲线形状会有单峰逐渐转变多峰,这一实验现象也能被模型很好地捕捉到。图 3 显示了不同温度下再结晶百分数与平均晶粒尺寸的演化,其中 775K 计算与实验的百分数保持趋势一致。随着变形温度升高,平均晶粒尺寸增加,温度低于 875K 时,由于产生了细小的新生再结晶晶粒,平均晶粒尺寸随应变急剧下降;温度高于 875K 时,由于再结晶进程的加速,平均晶粒尺寸演化产生明显的波动。图 4 展示了在应变为 1.0 时,不同温度下的晶粒尺寸分布情况。可知在 725K,由于较低的晶粒生长率,因此初始晶粒并未完全被消耗,但是其所占体积分数并不显著。当温度升高至 775K 以上时,母晶消失,新生再结晶晶粒呈现出一个非常宽的分布范围。图 5 所示为不同条件下的各个组织情况的对比研究,可见所有变形下的终了组织都是接近随机组织。当不考虑再结晶时,终了组织呈现出一种典型的压缩组织,而正是因为再结晶的加入,使得所有温度下的不同组织都表现为随机组织。同样的由于考虑再结晶,使得整体组织强度会

较不考虑再结晶时有明显的降低。

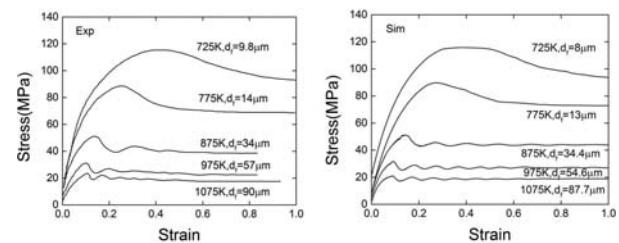


图 2 不同温度下纯铜实验应力应变曲线与计算应力应变曲线对比

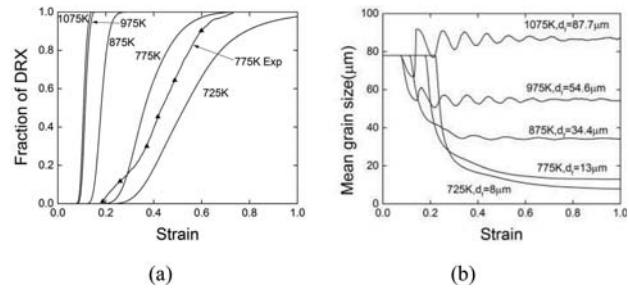


图 3 不同温度下再结晶百分数及晶粒尺寸演化结果

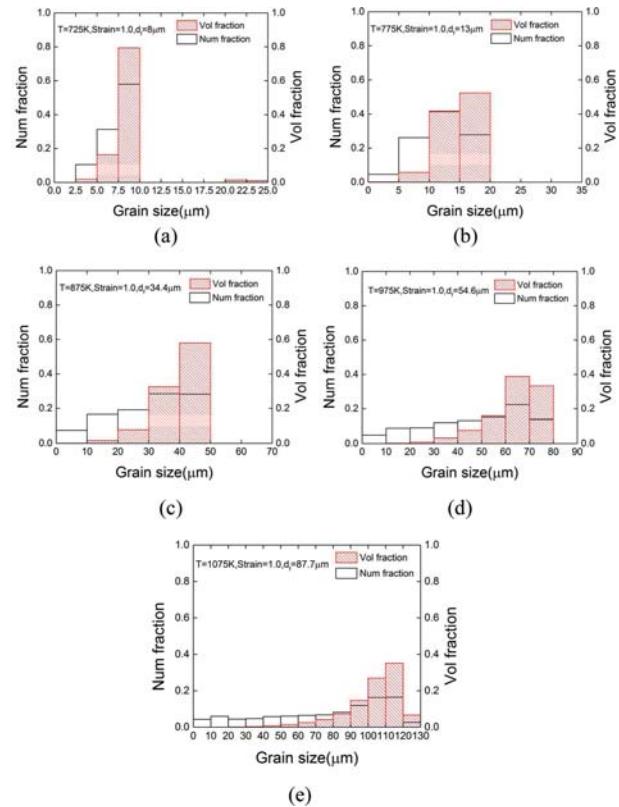


图 4 不同温度下晶粒尺寸数量百分数与体积百分数

不同初始晶粒尺寸对于力学行为和再结晶行为的影响同样可以用 VPSC-DRX 模型分析。图 6 显示的是 775K 与 875K 时不同初始晶粒尺寸对于应

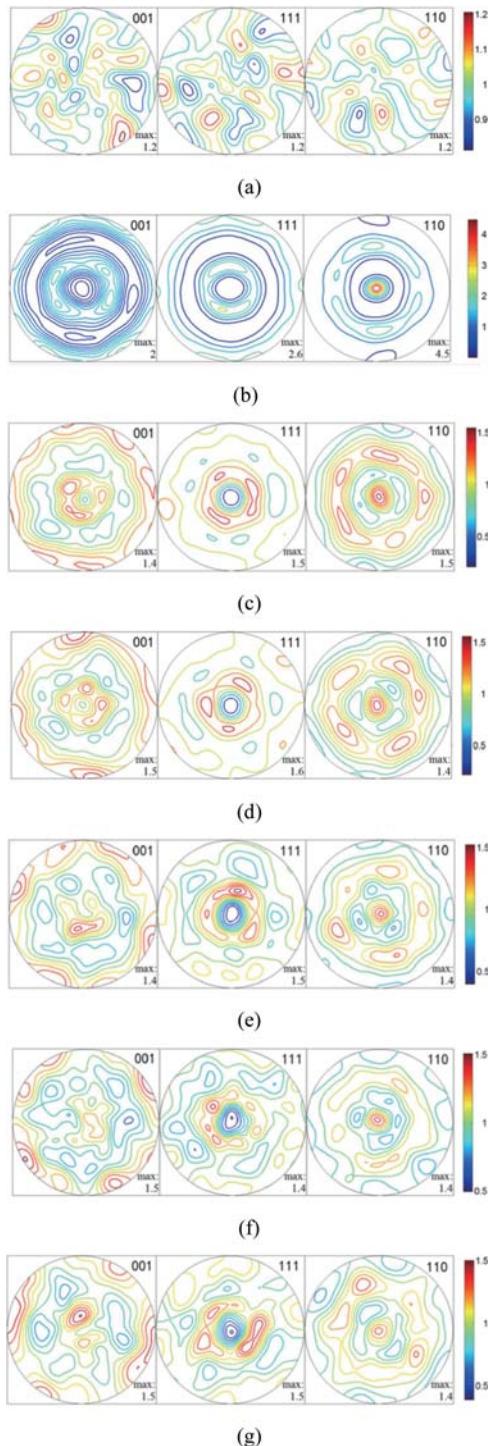


图 5 不同条件下的织构情况:(a) 初始织构, 应变一时的织构;(b)725K 时无再结晶织构,(c)725K 时织构,(d)775K 时织构,(e)875K 时织构,(f)975K 时织构,(g)1075K 时织构

力应变曲线的影响, 初始晶粒尺寸影响峰值应力与峰值应变, 但是并不影响最终的稳态应力与终了晶粒尺寸, 计算结果很好地反映了这种特性。当初始晶粒尺寸减小时, 应力曲线呈现出多峰形状; 当增大时应力波动逐渐消失。图 7 为再结晶百分数以及平均晶粒尺寸随应变的演化情况。由图可见, 当初

始晶粒尺寸减小时, 再结晶速率会明显加速, 但初始晶粒尺寸不会影响变形终了时的晶粒尺寸大小。

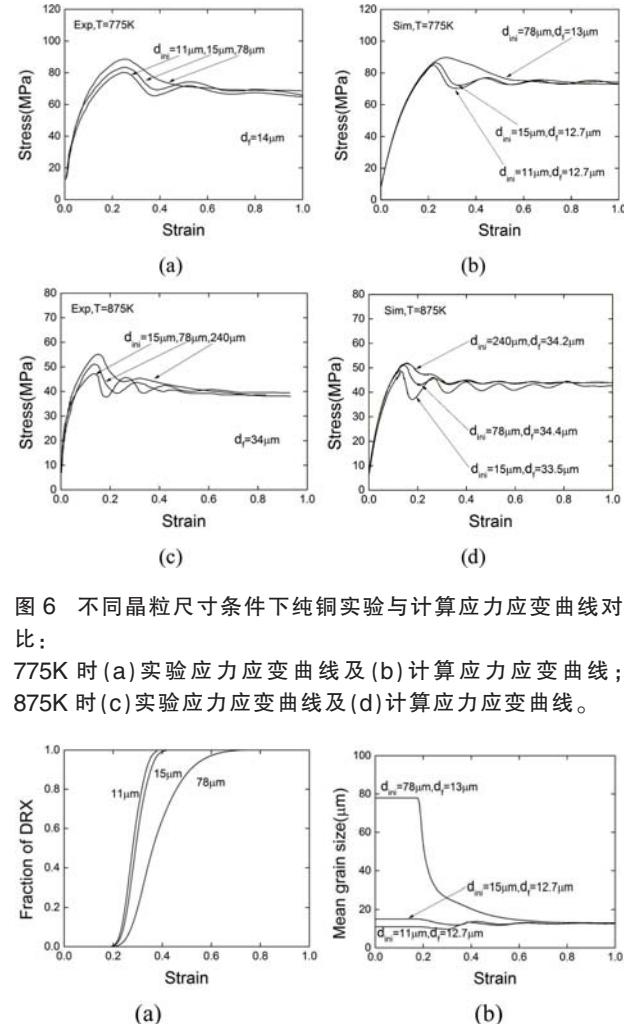


图 6 不同晶粒尺寸条件下纯铜实验与计算应力应变曲线对比:  
775K 时 (a) 实验应力应变曲线及 (b) 计算应力应变曲线;  
875K 时 (c) 实验应力应变曲线及 (d) 计算应力应变曲线。

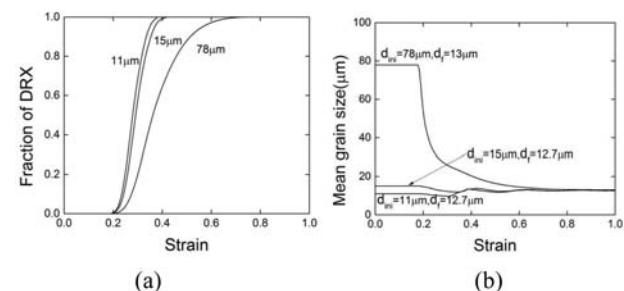


图 7 不同初始晶粒尺寸条件下再结晶百分数及晶粒尺寸演化结果

此外, 初始组织的选择, 以及加载条件的不同都能影响力学行为以及再结晶进程。初始组织的影响(图 8 所示), 以 Brass、S、Goss、Cube 及随机组织为例: 当在小应变下, 不同的初始组织会使得应力应变曲线有明显不同, 当应变增大, 所有组织的结果都朝着同一稳态应力发展; 而初始组织对于再结晶百分数的演化毫无影响。不同加载路径的影响(图 9 所示): 在变形初期, 不同变形模式(压缩、拉伸与剪切)之间有一定差异, 随着应变的增大, 最终三者稳态应力之间仅存在 5MPa 以内的微小差异; 而再结晶百分数演化之间并无显著区别。

本研究工作主要是提出了一种基于粘塑性自洽模型的塑性变形与动态再结晶的集成计算方法,

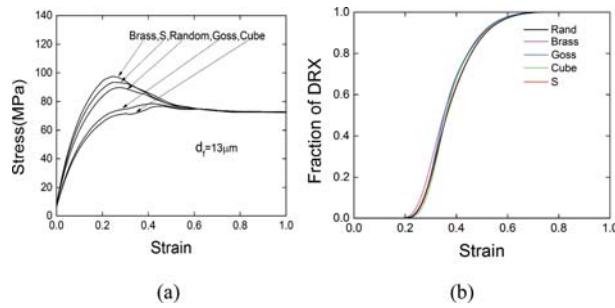


图 8 不同初始织构条件下应力应变曲线及再结晶百分数演化结果

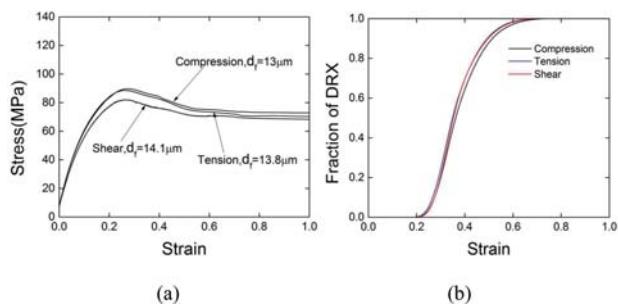


图 9 不同变形模式件下应力应变曲线及再结晶百分数演化结果

并用纯铜的热压缩实验结果进行验证。该 VP-SC-DRX 模型可以准确地描述纯铜热压缩实验中的力学行为以及再结晶现象,分析各种条件对于再结晶过程的影响。

本文作者感谢国家自然科学基金项目(No. 51675331)资助。

### 参考文献

- [1] Blaz L, Sakai T, Jonas JJ. Effect of initial grain size on dynamic recrystallization of copper. Metal Science 1983; 17: 609-616.
- [2] Beyerlein IJ, Tomé CN. A dislocation-based constitutive law for pure Zr including temperature effects. International Journal of Plasticity 2008; 24: 867-895.
- [3] Zhou G, Li Z, Li D, Peng Y, Zurob HS, Wu P. A polycrystal plasticity based discontinuous dynamic recrystallization simulation method and its application to copper. International Journal of Plasticity 2017; 91: 48-76.

# 基于 MEMS 的微加热器阵列研究

作者:刘景全 田姣姣

微米纳米加工技术国家级重点实验室,电院 微纳电子学系

上海交通大学

Email:jqliu@sjtu.edu.cn

本文主要针对材料基因工程中高通量材料制备和性能测试系统的发展需求,提出基于 MEMS 的微加热器阵列研究,构建具有微区加热功能的智能化材料基因组芯片。该加热器在 Si 衬底上以 Pt 作为加热丝,通过背部深硅刻蚀形成  $\text{SiO}_2$  和  $\text{Si}_3\text{N}_4$  封闭膜作为绝缘层。并且对单个微加热器的性能进行了测试。

关键字:MEMS;微加热器阵列;Pt 加热丝;高通量材料;Comsol 温度场仿真, $\text{SiO}_2$  和  $\text{Si}_3\text{N}_4$  封闭膜,基因组芯片。

材料基因工程主要包括三大系统:材料超级计算系统、高通量材料制备和性能测试系统、材料性能数据库与信息平台系统。高通量实验工具的研发是实施材料基因组计划必不可少的重要部分。高通量材料的性能表征分为很多方面,例如:高通量微区结构和成分表征、高通量微区光学性能表征、高通量微区电磁学性能表征、高通量微区热力学性能表征、高通量微区电化学性能表征、高通量微区力学性能表征、高通量催化性能表征等。微加热器阵列因其具有集加热和测温功能于一体的独立单元,广泛应用于高通量微区的热力学性能表征。并且加热器温度可达到 500°C 以上,升温速率快,灵敏度高使得该集成芯片具有较好的普适性,而且可以在一个基片上形成不同微小温区。在一些功能性材料的研究中,如气体敏感材料对工作温度要求高,不同的工作温度对传感器的灵敏度有很大影响。基于以上测试需求,同时也为提升高通量实验工具的模块化、功能化和智能化。本项目提出基于 MEMS 技术的微加热器阵列研究。构成具有微区加热功能的智

能化材料基因组芯片。将来也可以将更多的功能集成,如应力测试、电化学性能等。构建智能化的材料基因芯片平台。

该阵列是以铂作为加热单元,因其具有很好的热敏特性并且电阻比较小。由于衬底采用的是半导体单晶硅材料,其热隔离和电绝缘性比较差。当给极板加上电压时,通过热传导散失的热量就会很大,导致功耗大大提高。为了解决这个问题,在设计过程中我们采用  $\text{SiO}_2$  和  $\text{Si}_3\text{N}_4$  的复合薄膜进行电绝缘和热隔离。其基于 MEMS 的微加热器阵列结构示意图如图 1。

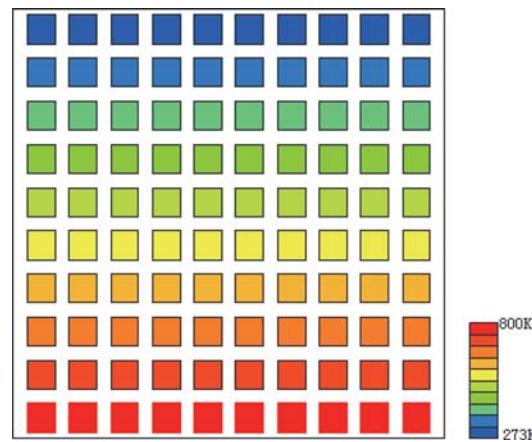


图 1 MEMS 加热器阵列结构(10\*10 个)示意图

加热器的加工流程大致如下,先是在硅片双面热氧化形成厚度为 2 $\mu\text{m}$  的氧化硅薄膜,再在正面用 PECVD 沉积厚度为 300nm 的氮化硅薄膜。沉积好薄膜后用反应离子磁控溅射机进行 Pt 的溅射,溅射 Pt 前先溅射 25nm 的 Ni 作为粘附层,增加结合率,再溅射 300nm 厚的 Pt。溅射好 Pt 后图形化,然后再在可是好的 Pt 上 PECVD 沉积一层 200nm 厚的氮化硅,然后刻蚀氮化硅露出极板。最后进行背部二氧化硅刻蚀以及深硅刻蚀,形成隔热效果很好的封闭膜。

为了使得加热区域有很好的温度一致性,并且

尽量减小电阻节约功耗,在电阻丝的设计过程中采用并联以及内宽外窄的同心圆结构。并且通过Comsol 仿真得出符合条件的优化结果。其仿真结果如图 2 所示。

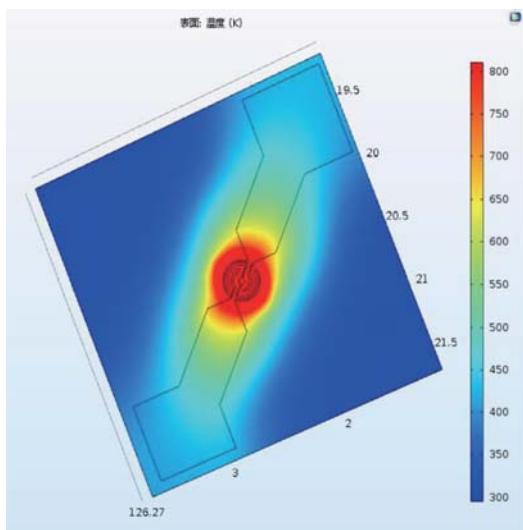


图 2 单个加热器 温度仿真结果

通过前期的设计仿真确定加热丝形状,然后进行流片得出 MEMS 的微加热器阵列。流片结果图如图 3 所示。

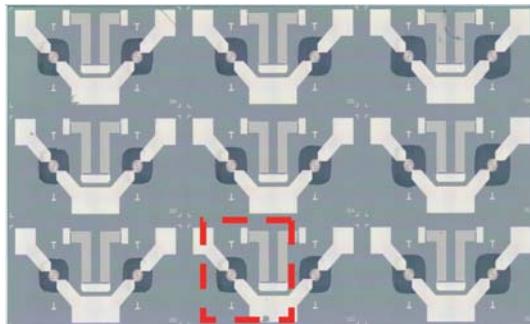


图 3 加热器流片结果

目前制作的加热器阵列中单个微加热器小于 2 毫米 \*2 毫米(红框内),阵列数为 3\*6 个,加热丝温度可以 0-550°C。制作好加热器后,取单个微加热器进行性能测试,主要是进行了高温下的关断试验。取单个微加热器粘合到底板上打线后进行简单的实验平台搭建。在加热器两端通电压,不断增大电压直到加热丝发红,然后待电流稳定后关断电源,

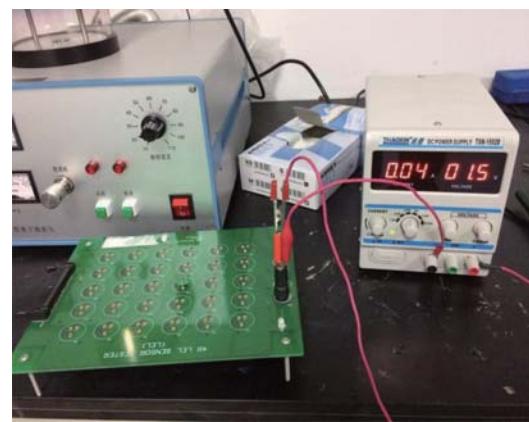


图 4 测试平台的搭建

过几秒再通电,如此重复 10 次,性能也保持完好。充分证明了器件在高温下仍有很好的稳定性。实验平台的搭建和测试过程如图 3.

该加热器阵列可以很好的应用到材料基因工程中合成材料的热力学性能检测,也可以在加热器表面涂上催化剂,运用惠斯通原理可以检测合成材料的催化性能。将来还可以有更多的功能集成,使得该集成芯片有很好的发展前景。越来越多的测试功能的集成也使得材料基因工程中对合成材料的性能检测更加精确和高效。

#### 参考文献

- [1] S.M.Lee , D.C.Dyer, J.W.Gardner. Design and optimisation of a high-temperature silicon micro-hotplate for nanoporous palladium pellistors. *Microelectronics Journal* 34 (2003) 115-126.
- [2] M.GALL. The Si planar Pellistor a Low-power Pellistor Sensor in Si Thin-film Technology. *Sensor and Actuators B* 4(1991)533-538.
- [3] Samuel K.H. Fung, Zhenan Tang, Peter W.Cheung. Thermal analysis and design of a micro-hotplate for intergrated gas-sensor applications. *Sensor and Actuators A* 54 (1996) 482-487.
- [4] G.Sberveglieri. Recent developments in semiconducting thin-film gas sensors. *Sensor and Actuators B* 23 (1995) 103-109.

# 颗粒增强金属基复合材料复合构型与拉伸失效研究

作者:苏益士,俞洋,李志强,欧阳求保,郭强,范根莲,谭占秋,郭萃萍,张杰,张荻  
金属基复合材料国家重点实验室,上海交通大学  
Email:zhangdi@sjtu.edu.cn;suyishi@sjtu.edu.cn

颗粒增强铝基复合材料是被广泛应用的重要工程材料,而复合材料中的复合构型,界面行为与损伤行为对其力学性能有重大影响。本文模拟了 14vol% SiCp/Al 复合材料的单轴拉伸失效行为,结果表明:网格尺寸、单元种类、复合构型和材料损伤等对复合材料拉伸行为起重要作用。

关键字:SiCp/Al 复合材料;结构建模;颗粒形状;界面性能;损伤行为

颗粒增强金属基复合材料被广泛应用。本文中,我们模拟和研究了 14vol% SiCp/Al 单轴拉伸损伤行为,Al 基体和 SiCp/Al 复合材料的 2D 拉伸结构模型可通过我们开发的结构建模系统建立。SiC 颗粒的尺寸、形状、组分、位置和分布在这些模型中可以随机控制。我们植入了力学性能、颗粒 - 金属界面性质和组分材料损伤行为来模拟单轴拉伸过程。从结果得出,网格尺寸、元素种类、模型种类和 Al 基体的拉伸损伤行为对力学性能有重大影响,同样,模型稳定性、模型尺寸、界面性质、损伤行为、颗粒形状、颗粒尺寸、颗粒构造和尺寸匹配也有一定影响。我们可以挖掘出 SiCp/Al 拉伸变形和损伤机制,来优化构型设计和开发出新型金属基复合材料。

本文中,我们选用了平均直径 13  $\mu\text{m}$  不规则 SiC 颗粒和 Al-Zn-Mg-Cu 合金作为增强体颗粒和基体。多面体型 SiC 颗粒均匀分布在内。同时,14vol% SiCp/Al 2D 微观结构模型通过我们开发的结构建模程序建立,SiC 的尺寸、形状、成分、位置和分布可根据其统计尺寸被随机控制。同时,14vol% SiC/Al

单轴拉伸试样从复合材料切割出来,标距段直径 5 mm,长度 25mm,夹持端直径 8 mm,长度 15 mm,总长 67 mm。试验在三个相同的试样上进行,室温下,应变速率  $5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ 。为了建模和模拟 14vol% SiC/Al 的单轴拉伸损伤行为,建立了缩小化的 Al 基体和 SiC/Al 复合材料的模型。

对于 14vol% SiC/Al 和 Al 基体的损伤的数值模拟,需要弹塑性力学性质。SiC 和 Al 的弹性模量为分别为 427 和 71.7 GPa,而泊松比分别为 0.17 和 0.33,Al 基体的屈服强度和抗拉强度等于 503 和 572 MPa。此外,图 1(b) 展示了 Al 基体带有损伤行为的单轴拉伸应力 - 应变关系。由于热失配和应变梯度理论产生颗粒 - 金属界面的残余应力,SiC 的存在可能使 14vol% SiCp/Al 中 Al 基体的 36.1 MPa 的屈服应力增加。考虑到 2D 和 3D 颗粒尺寸的不同,有一个放大因子  $(2d_{\text{SiC}}/3)^{1/6}$  可用来提供 2D 模型中 Al 基体屈服应力的增加,对于 SiCp/Al 损伤 / 失效界面,粘接界面模型被广泛运用,来展示损伤开动和传播,界面强度设为  $t$ ,裂纹位移为  $\delta$ 。对于 SiCp/Al 复合材料,根据我们之前的工作,粘接界面强度为 326 MPa,裂纹扩展  $\delta_f$  为 0.6  $\mu\text{m}$ 。为了模拟和简化 SiCp/Al 复合材料的拉伸失效行为,我们考虑了韧性损伤准则,对 SiCp 和 Al 基体都适用。对于本文中的 SiCp 和 Al 基体,断裂应变设为 0.5 和 1.3  $\mu\text{m}$ 。基于 SiCp/Al 复合材料中组分的力学性能,14vol% SiCp/Al 拉伸断裂的数值过程可通过有限元代码 ABAQUS/Standard 建立。

在所有的模拟工作中,我们选用了大体的线性 2D 固体模型 CPS3,来网格化 Al 基体和 SiCp/Al 复合材料的拉伸结构模型。考虑到计算成本和精确度之间的平衡,我们运用一个全局化的网格尺寸 1.3  $\mu\text{m}$ ,在 Al 基体和 SiCp/Al 复合材料的拉伸结构模型上来生成精细的网格。通过这种方法,在我们的

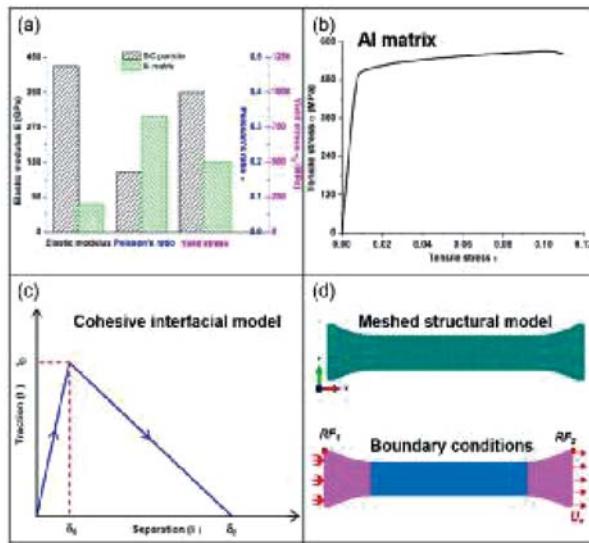


图 1 14vol% SiCp/Al 复合材料力学性能和边界条件:(a) 弹塑性性能,(b)拉伸应力-应变关系,(c)损伤界面模型和(d)边界条件

分析中每一个 Al 基体和 SiCp/Al 复合材料的拉伸结构模型可以建立 40000 单元。对于施加的载荷和边界条件,我们画出了 Al 基体和 SiCp/Al 复合材料的拉伸结构模型在 XY 坐标系。

基于 Al 基体和 SiCp/Al 复合材料的 2D 结构模型单轴拉伸过程,我们得到了许多数值结果,例如:位移  $U_x$  和反应力  $RF_x$ 。对于每一个 Al 基体和 SiCp/Al 复合材料的 2D 结构建模,单轴拉伸应变  $\epsilon$  可以通过位移  $U_x$  呈现。为了准确地给出 Al 基体和 SiCp/Al 复合材料的拉伸应力应变关系,以及网格尺寸,元素类型,模型类型和破坏行为的影响,我们首先研究了铝基体的拉伸应力应变关系。图 2(a)提出实验和铝的数值拉伸应力 - 应变关系,改变网目尺寸,全局网格大小不等,从 6.5 到 0.65 mm, ( $d_{SiC}/2, d_{SiC}/3, d_{SiC}/4, d_{SiC}/5, d_{SiC}/10$  和  $d_{SiC}/20$ , 单元数量范围从 1808 到 172576 (分别为 1808, 4044, 7144, 10790, 43164 及 172576)。对于铝基体的数值拉伸应力应变关系不同网格尺寸下,所有的拉伸应力 - 应变曲线均符合,它们也与铝的拉伸应力应变关系很好地吻合。因此,适当的全局网格尺寸 1.3  $\mu\text{m}$  ( $d_{SiC}/10$ ) 优先应用。为了进行铝基体和 SiCp / 铝复合材料二维结构模型的单轴拉伸过程,我们不确定应该使用二维平面应力单元 CPS3 还是平面应变单元 CPE3。从实验和数值的拉伸应力 - 应变关系的

CPS3 和 CPE 3AI 基体矩阵(图 2(b)),我们可以确定平面应力单元 CPS3 适用于我们的分析,因为 CPE3 和其他两者之间存在很大差异。

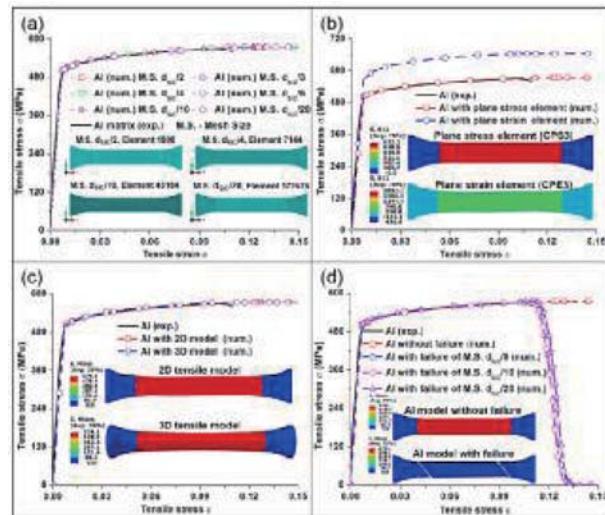


图 2 不同(a)网格尺寸,(b)元素类型,(c)模型类型和(d)失效行为下的铝基体拉伸应力-应变关系

在研究了网格尺寸、单元类型的影响,模型类型和铝基体的拉伸力学性能的破坏行为后,我们将继续评估模型的稳定性,影响的模型尺寸、界面性质和对 14vol% SiCp/Al 复合材料拉伸力学行为的破坏行为。虽然 SiCp / Al 复合材料的二维结构模型的建立和 SiC 颗粒分布在数值模拟和实验的样品几乎是独一无二的,但是不确定 14vol% SiCp/Al 复合材料的拉伸应力 - 应变关系和不同的微观结构特征是否有关。图 3(a)提供了 6 个单轴拉伸应力 - 应变关系 14vol% SiCp/Al 复合材料,其中 SiC 颗粒分布不一致(等效应力分布在  $\epsilon = 0.02$ )和 SiCp 基体完全贴合。不同结构模型所提供的 SiCp/Al 复合材料的单轴拉伸应力 - 应变关系基本上彼此接近。结果表明,SiCp Al 复合材料的拉伸结构模型有良好稳定性和效率。同时,图 3(b)提供了 14vol% SiCp/Al 复合材料下模型尺寸  $D = 50, 100$  和  $150 \mu\text{m}$  (其中  $D$  是表面积的宽度)下,拉伸应力 - 应变关系不同。另外,对 14vol% SiCp/Al 复合材料完全粘接的界面几乎是独一无二的,这是非常有用的。

颗粒形状的影响(如多边形和圆形颗粒)和大小(例如  $d_{SiC} = 6.5, 13$  和  $26 \mu\text{m}$ )对拉伸力学性能(如弹性模量、屈服应力和抗拉强度)的 14vol %

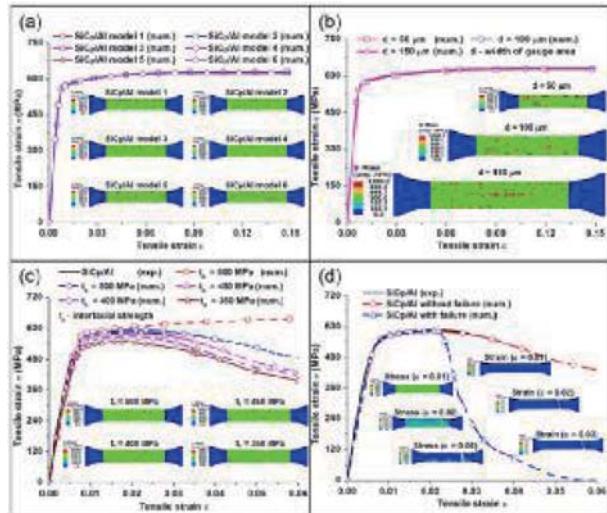


图 3 不同(a)模型稳定性,(b)模型尺寸,(c)界面行为和(d)破坏行为下的 14vol% SiCp/Al 复合材料拉伸应力-应变关系

SiCp/Al 复合材料分别进行了研究，其中至少有 10 个重复的数值模拟的应力 - 应变关系是在每种情况下进行。也就是说，它提供了每个颗粒形状或颗粒大小的拉伸 / 拉伸复合材料的拉伸力学性能的 10 个结果的统计结果。图 4(a)提出了多边形和圆形 SiCp 的 14vol% SiCp/Al 复合材料中实验和数值的拉伸力学性能。

对于 14vol % SiCp/Al 复合材料的弹性模量，由多边形和圆形颗粒的结构模型预测小于实验。同时，由多边形和圆形的 SiC 颗粒的结构模型所提供的屈服应力大于实验结果，而所产生的屈服应力与圆形的 SiC 颗粒的结构模型是稍微大于由多边形颗粒的结构模型给出的结果。实验拉伸强度大于所提出的结构模型与多边形的 SiC 颗粒，而它是稍微小于所提供的结构模型与圆形 SiCp。图 4(b)提出等效应力和应变分布的拉伸应变  $\epsilon = 0.02$ ，其中使用了多边形和圆形  $d_{\text{SiC}} = 13 \mu\text{m}$ 。

本文作者衷心感谢国家自然科学基金(Nos.

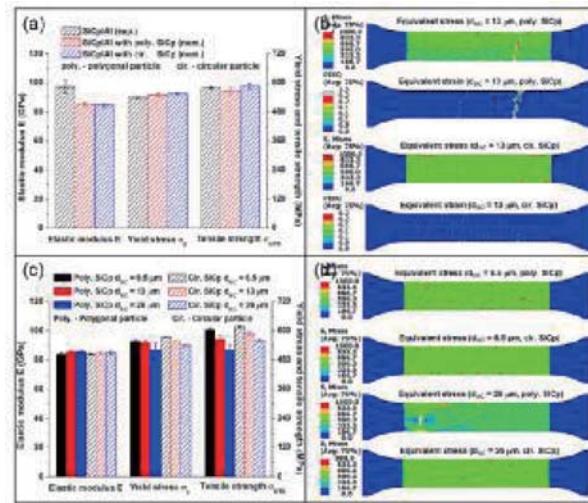


图 4 14vol % SiCp/Al 复合材料的拉伸力学性能(弹性模量、屈服应力和抗拉强度):(a) 不同颗粒形状 ( $d_{\text{SiC}}=13 \mu\text{m}$ ),(c) 不同颗粒尺寸 ( $d_{\text{SiC}}=6.5, 13$  和  $26 \mu\text{m}$ ) 和在  $\epsilon = 0.02$  时的等效应力-应变分布:(b) 不同颗粒形状,(d) 不同颗粒尺寸

51501111,51131004), 国家“973”项目(No. 2012CB123456)和上海科委(Nos.14DZ2261200)与上海交通大学材料基因联合中心的大力支持。

## 参考文献

- [1] A. Mortensen, J. Llorca, Annual Review of Materials Research, 40 (2010) 243-270.
- [2] D.J. Lloyd, International Materials Reviews, 39 (1994) 1-23.
- [3] J. Zhang, Q. Ouyang, Q. Guo, Z. Li, G. Fan, Y. Su, L. Jiang, E.J. Lavernia, J.M. Schoenung, D. Zhang, Composites Science and Technology, 123 (2016) 1-9.
- [4] Y. Su, Q. Ouyang, W. Zhang, Z. Li, Q. Guo, G. Fan, D. Zhang, Materials Science and Engineering: A, 597 (2014) 359-369.

论文投稿在《Composite Structures》上，目前正在审稿中。

# 多通道光电催化表征装置研究

作者:张鹏<sup>a</sup>

<sup>a</sup>金属基复合材料国家重点实验室,上海交通大学

Email: pengzhang2010@sjtu.edu.cn

**摘要:**多通道光电催化表征装置是上海市科委材料基因组工程支持的关于高通量表征系统的建设任务,该系统可以适用于光电催化、电催化、电化学腐蚀、导电性能领域的高通量表征任务。

**关键字:**高通量表征;光电催化;电催化;电化学。

如何加速研发进程并降低成本是长期以来科技工作者关注的关键问题。运用高通量的方法,对材料进行快速、自动化表征,能够大大加速材料的研究进展,缩短开发周期。

近年来,国内外对电极材料的快速表征与筛选技术展开了积极的探索,有效地促进了新型电极材料的研发和后续应用。例如组合光电化学技术,将光电化学、组合理论、计算机辅助设计和机械自动化结合于一体,大幅度提高合成、表征和筛选效率,减少人力、时间和资金的消耗,具有广阔的应用前景。2005年,加州大学圣巴巴拉分校的 McFarland 小组首次报导了利用自动化移动平台来序列合成和表征光电转化产氢材料( $Zn_{1-x}Co_xO$  薄膜),大大提高了合成和表征效率[1]。与此同时,德克萨斯大学奥斯汀分校的 Bard 小组提出了一种快速筛选双金属电催化氧还原反应催化剂的方法[2]。Reddington 等利用组合光电化学的概念成功实现了直接甲醇燃料电池阳极电催化剂的高通量合成和筛选,在 2-3 周内完成了 10 个科研工作者需要 1 年试验才能完成的工作量,大大提高了效率[3]。近来,Stahl 小组报导了利用气敏荧光剂可以有效、直观地筛选析氧电催化剂的优劣,为高通量筛选析氧电催化剂提供了新的思路[4]。这种组合筛选设备的设计和研制引起了学术界和工业界的共同兴趣。近年来,

美国加州理工学院[5]、Symyx Technol 公司[6],德国 Ruhr-University[7],相继报导了光电转化材料和电催化剂的快速筛选技术,进一步推动了高通量表征技术在电化学方面的发展。国内研究人员利用组合技术对电化学材料性能的表征和筛选也进行了积极的探索。[8-10]。

由于光电催化材料、电催化材料、电极镀层材料等等的催化性能、耐腐蚀性能和导电性能都是采用电化学的表征方法,而且样品都是做成电极或者薄膜的形式。结合我们已有的研究成果以及技术积累,我们拟搭建 16 通道的光电催化表征系统其示意图如下:

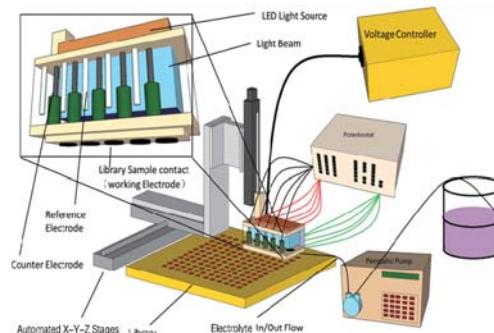


图 1 高通量光电催化表征系统示意图

该高通量电化学表征系统可以同时对 16 个光电催化薄膜样品进行扫描表征。开发的高通量电化学测试系统可以实现快速筛选,也可以对单个样品进行细致全面的表征和评价。这个系统包括(1)位移平台、(2)电化学探头、(3)液体传输系统、(4)电化学系统、(5)模拟光系统以及(6)系统软件。位移平台可以自动控制电化学探头的移动位置,定位待测样品。电化学探头是由对电极和参比电极组装而成的电化学电池,而工作电极是位于样品台上的待测电极样品。电化学池底部附近装有进气口,可以进行气氛控制,比如通入氢气、氧气、或者氮气等以适应不同的测试需要。在电化学池中央底部有固定

面积( $\sim 1\text{cm}^2$ )的开孔,与待测样品之间通过电解质溶液直接接触,并通过O形圈密封以防漏液。液体传输系统使用自动填充和抽空电化学池中的电解液,而电解液可以根据测试需要预先准备好。电化学系统主要是电化学工作站,可以进行循环伏安、恒电压、恒电流、阻抗等各种电化学测试。而整个电化学过程可以使用外部氙灯光源通过光纤引入待测样品上方的固定位置处。光源可以控制斩波频率实现斩波循环伏安或者暗电流以及持续光照条件下的电化学过程。整个自动化表征的过程,包括运行顺序、时间长短控制等,都可以通过一套软件进行统一调控。

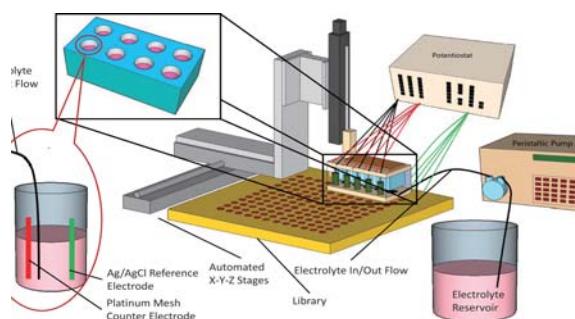


图2 高通量多通道电化学表征系统示意图

为了适应不同检测材料的需要,我们可以通过对样品台以及电化学池进行进一步的改装。例如为了适应高通量实验(如小型的组分连续的样品芯片表征)的需要,我们设计并建造小型化多通道电化学池系统,如图2所示,可以同时扫描8/16个样品。而单个小电化学池的底端孔洞的直径可以减小到2mm。如此不但可以同时测试8/16个电极样品,将测试速度提高8/16倍,而且可以满足小型样品芯片的高通量快速表征的需要。

高通量电化学测试系统适用于电化学以及电催化相关的材料的高通量表征。该系统适应多个单片样品以及成分连续分布的样品芯片的高通量表征的需求,将大大减轻材料测试的人力,为材料的表征提供了更加方便的测试手段,大大加快材料的开发速度。



图3 单通道光电催化表征系统照片

目前本课题已经采购了多通道电化学工作站以及定制了多通道电化学工作站,系统的建设正在按计划顺利进行当中。可望在2018年顺利完成整个系统的搭建任务,同时为光电催化、电催化、镀层材料等提供高通量表征的支持。为材料基因组的研究工作提供帮助。同时,单通道的自动化光电催化以及电催化表征系统已经可以正常工作,如图3所示,欢迎有需求的课题组合作研究。

本文作者衷心感谢国家自然科学基金(Nos. 51672174)、中国上海科学技术委员会(Nos. 16DZ2260602)以及上海交通大学材料基因组联合创新研究中心的大力支持。

## 参考文献

- [1] J. Comb. Chem., 2005, 7 (2), 264
- [2] J. Electrochem. Soc., 2006, 153(6), E99
- [3] Science, 1998, 280, 1735
- [4] Energy Environ. Sci. 2014, 7, 2376
- [5] ACS Combi. Sci., 2014, 16, 120-127
- [6] Angew. Chem.In. Ed. 1999, 38, 484-488
- [7] Nanotechnology, 2017, 28, 185604
- [8] Applied Catalysis B, 2017, 200, 372
- [9] ACS Appl. Mater. Interfaces, 2015, 7, 18560
- [10] Energy Environ. Sci. 2011, 4, 1020

## 发表成果:

- 1.Nanotechnology 27 (2016) 455605 (7pp)
- 2.电化学性能检测系统和光电化学性能检测系统,申请号:201710021848.6

# 材料显微组织演变的相场法模拟

作者:郭巍,李伟,金学军

上海交通大学材料科学与工程学院

## 相场模拟一:碳元素在马氏体与奥氏体间的配分

图 1(a)中,中间的方形区域是奥氏体,基体是马氏体。在模拟的初始状态,奥氏体与马氏体的碳成份相同。由于碳在奥氏体与马氏体间的化学势不同,随着模拟的进行,碳由马氏体向奥氏体中扩散。图 1(a)所示为  $t = 15\text{s}$  时碳元素的分布。由图 1(a)可见,碳元素在奥氏体中的分布不均匀。对于奥氏体而言,由于奥氏体是正方形,所以在奥氏体四个角的区域,碳浓度升高的快;在四条边的区域,碳深度升高的慢。对于马氏体,在与奥氏体四条边接触的部分,碳浓度下降的快;在与奥氏体四个角接触的部分,碳浓度下降的慢。这种碳浓度变化的不均匀是由奥氏体的几何形状引起的。由此可见,残余奥氏体的几何形状,对碳在残余奥氏体内部的分布具有重要影响。图 1(b)所示为沿图 1(a)中虚线的碳浓度分布。图 1(b)相当于一个一维扩散的计算结果。图 1(a)所示的由于奥氏体几何形状而引起的碳成分不均匀,无法由图 1(b)的一维条件得到。

因此,二维或三维的配分模拟很有必要。

图 1 所示模拟结果的合金成份为  $\text{C} = 0.1\text{wt.\%}$ ,  $\text{Mn} = 0.4\text{wt.\%}$ ,  $\text{Si} = 0.3\text{wt.\%}$ ,  $\text{V} = 0.2\text{wt.\%}$ ,  $\text{Nb} = 0.1\text{wt.\%}$ 。在中间方形奥氏体区域,合金成份为马氏体区域的 2 倍。温度为  $1073\text{K}$ ,压强为  $1.0\text{E}05\text{ Pa}$ ,系统的尺寸为  $33 \times 33\mu\text{m}$ 。计算扩散所需的热力学驱动力和动力学系数来自于利用 CALPHAD 方法建立的热力学和动力学数据库。

## 相场模拟二:内应力对第二相粒子形貌的影响

在固态相变中,新相与母相间晶格常数的差异会在材料内部引起很强的内应力场。内应力场会对第二相粒子的形貌产生重要的影响。图 2 所示为第二相粒子分别在无内应力场和有内应力场条件下的形态。图 3 所示模拟结果的初始形状均为圆形。在没有内应力场的情况下(图 3a),第二相粒子的形状保持为圆形。在有内应力场的情况下(图 3b),第二相粒子的形状发生了明显的改变。图 3 所示模拟结果的基体相和新相均为立方晶系。新相的晶格常数是基体相晶格常数的 1.04 倍。基体相和新相的弹性模量分别为  $C_{11}=232\text{GPa}$ ,  $C_{12}=153\text{ GPa}$ ,  $C_{44}=117\text{ GPa}$  和  $C_{11}=205\text{ GPa}$ ,  $C_{12}=180\text{ GPa}$ ,  $C_{44}=36\text{ GPa}$ 。

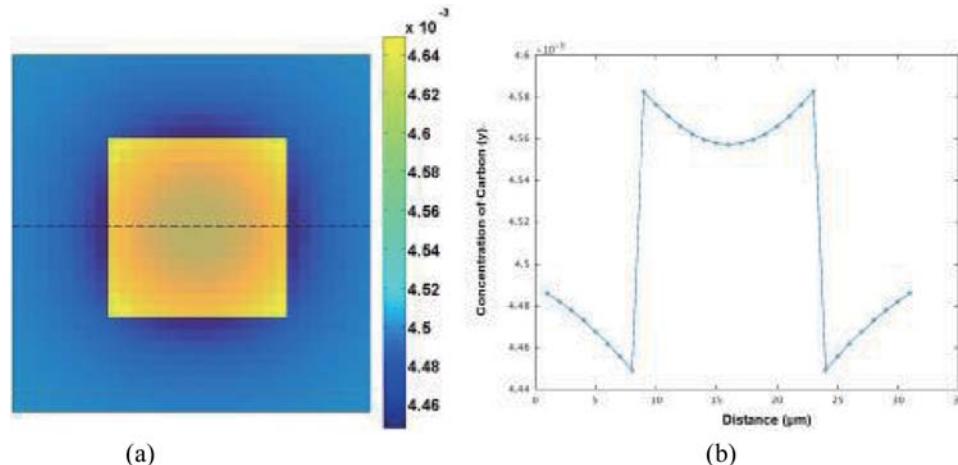


图 1:(a) 成份为  $\text{C}=0.1\text{wt.\%}$ ,  $\text{Mn}=0.4\text{wt.\%}$ ,  $\text{Si}=0.3\text{wt.\%}$ ,  $\text{V}=0.2\text{wt.\%}$ ,  $\text{Nb}=0.1\text{wt.\%}$  的合金在  $T=1073\text{K}$ ,  $P=1.0\text{E}05\text{ Pa}$  的条件下进行碳配分,  $t=15\text{s}$  时, 碳成份的分布。中间方形区域为残余奥氏体, 基体为马氏体。(b) 碳成份沿(a)中虚线的分布。

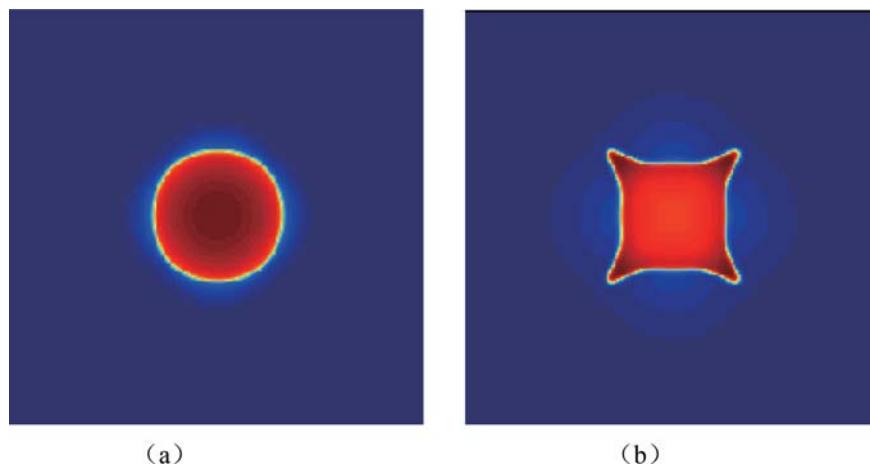


图 2 内应力场对第二相粒子形貌的影响。(a)无内应力作用。(b)有内应力作用。

# 分子模拟数据库(MSD)阶段进展报告

作者:孙淮<sup>a</sup>,曹风雷<sup>a</sup>,龚正<sup>a</sup>

<sup>a</sup> 化学化工学院,上海交通大学

Email:huaisun@sjtu.edu.cn,

**摘要:**近期我们完成了分子模拟数据库第一阶段的计划。完成了模拟计算方法的建立和软件开发,计算了三大类 292 个体系的性质。构建了网络共享平台 <https://sun.sjtu.edu.cn/msd>。使用者可以访问、查询、下载和分享计算和实验数据。初步结果表明,模拟方法基本可行,可以开始实施高通量计算。

**关键字:**网络共享数据库;软物质;分子模拟;热力学性质;动力学性质。

**正文:**材料是工业发展的物质基础,当前我国关键材料的对外依存度极高,严重制约着我国在一系列材料密集型的新兴产业的发展。“材料基因组计划”的逐步形成、展开和实施可以增强我国在先进材料研究、开发和应用的综合能力,为国家创新驱动战略提供持续动力。高通量计算和大数据分析是“材料基因组”的重要研究手段和出发点。硬材料已形成了高通量计算系统(比如 Material Project<sup>[1]</sup>),但是在软材料方面还是空白。软物质材料的计算和基于第一性原理计算硬材料的方法有本质不同。至今在国际上还没有提出一个完整的适用于软物质材料的高通量计算方案和数据共享平台。

在各方大力支持下,我们开始了软物质材料高通量计算方案和数据共享平台的研究工作,目前完成了这一阶段的计划。软物质材料高通量计算的基础是分子力场和分子模拟技术。以有机溶剂分子、离子液体及二元混合物三类 292 种有实验数据的分子体系为目标,完成了模拟计算方法的建立和软件开发,通过计算包括热力学、动力学性质验证了方法。同时,构建了一个以互联网为基础的共享平台和数据库。使用者可以通过网络访问、查询和下

载数据或模拟计算文件,分享计算和实验数据。初步结果表明,模拟方法基本可行,可以开始实施高通量计算。分子模拟共享平台和数据库测试版对内开放,征集意见,请点击 <https://sun.sjtu.edu.cn/msd> 进入。

力场是分子模拟的基础。本课题的基础是课题组在分子力场开发方面长期积累的经验和力场参数,方法和程序。分子力场主要是在课题组已发表了的 TEAM 全原子力场<sup>[2]</sup>,和可迁移的粗粒化力场基础上继续拓展。

选择三大类 292 种有 实验数据的分子,采用分子动力学方法模拟计算了热力学、动力学性质,包括 P-V-T 状态函数、蒸发焓、热容、扩散系数、气液相平衡、水合自由能等性质。具体计算公式如下所示:

P-V-T 状态函数

$$\rho = \frac{m}{V}$$

蒸发焓:

$$H_v = H_{gas} - H_{liq} = -E_{inter} + RT$$

等压热容

$$\alpha_p = \frac{1}{kT^2} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)$$

扩散系数

$$D = \frac{1}{3N} \langle v(t_0)v(t_0 + t) \rangle_{t_0} dt$$

水合自由能:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{n_i} \frac{1}{1 + \exp(\ln(n_i/n_j) + \beta \Delta U_{ij} - \beta \Delta A))} \\ & - \sum_{j=1}^{n_j} \frac{1}{1 + \exp(\ln(n_j/n_i) - \beta \Delta U_{ji} + \beta \Delta A))} \\ & = 0 \end{aligned}$$

高通量计算的关键是设计自动化、智能化的高

通量模拟计算控制程序,在计算过程中减少人为因素的干扰,并且使每一个计算结果都合理、可靠。高通量计算流程包括输入、建模、模拟、检验和输出五大模块,如图 1 所示。输入模块设置体系的组成和计算的条件。建模模块生成分子模拟用的三维模型。模拟模块控制在超级计算机上运行,而检验模块是得以保证模拟计算的顺利进行并得到合理结果的关键。输出模块主要是根据需要完成数据分析,以图表形式输出。

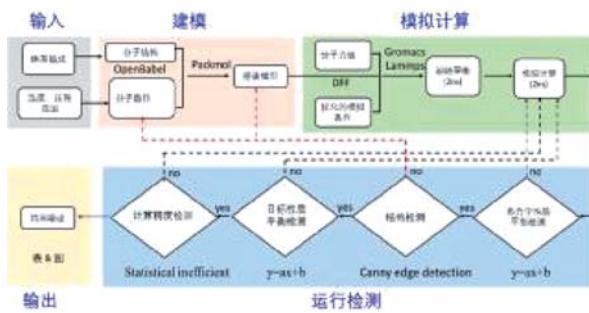


图 1 自动化模拟计算流程图

模拟计算得到的性质数据将公开发布在网络共享平台,共享平台框架如图 2 所示。平台的开发将以交互式的互联网用户界面为重要端口,其中将提供分子模拟的图形供用户使用。分子模拟所需的参数将通过数据库形式存储并提供调用,参数设置完成的分子模拟将提交至相应的分子模拟软件包进行计算。模拟计算结果会根据用户设置进行数据分析以及可视化的处理,处理和分析完成的数据一方面将作为最终模拟结果提供给用户,另一方面也会作为某一分子体系的模拟结果存储于性质数据库。负责平台的开发和维护的人员将对模拟计算结果进行审核,并作相应的改进和修正。

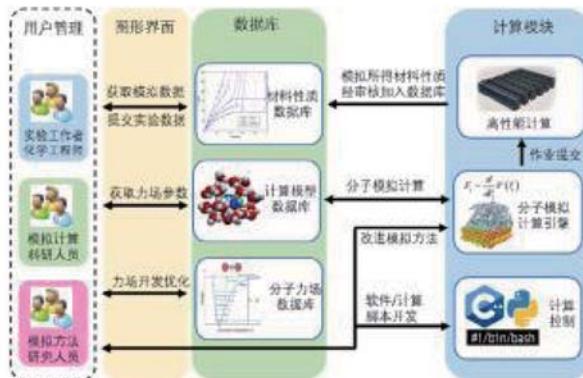


图 2 高通量软物质模拟高性能计算平台的框架和基本流程

按上述基本框架,网站(<http://sun.sjtu.edu.cn/msd>)主体建设已接近完成,可以通过分子名称,分子式等搜索浏览分子。检索分子的各项性质。已初步实现分子性质的在线高通量自动计算。另外论坛已可以使用,用户可以发表一般性的讨论,索取计算数据,或提供反馈。图 3 显示的分子性质页面的截图。



图 3 MSD 网站分子性质页面

高通量部分计算的结果如下:

#### 溶剂分子体系

选择了 25 种,NIST 网站<sup>[3]</sup>上有详细实验数据的分子为目标,计算了密度、蒸发焓、等压热容、等容热容等性质,温度范围从 90.0 - 400.0 K,压强从 0.1 - 30.0 MPa,共产生 11250 个数据点。模拟值与实验值对比结果如图 4 所示。

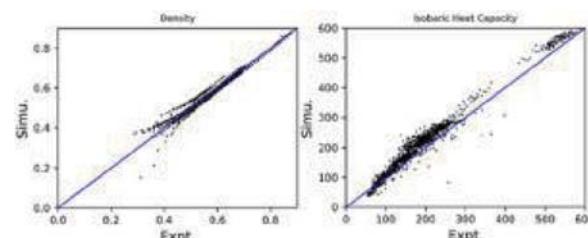


图 4 烷烃分子不同温度、压强下,密度、热容的模拟与实验比较

#### 离子液体

计算了 49 个离子液体的密度和自扩散系数。图 5 给出了计算值和文献中已有的实验值的对比。

#### 二元混合体系相平衡

该部分采用实验室开发的粗粒化力场<sup>[4,5]</sup>计算,

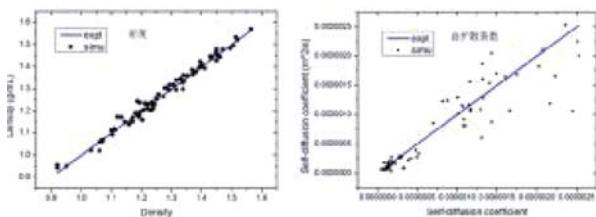


图 5 离子液体的密度与自扩散系数实验值比计算值的对比

涉及 CO<sub>2</sub> 与直链烷烃的混合体系, 烷烃分子从 C<sub>5</sub> 到 C<sub>20</sub>, 温度范围为 277- 420 K, 压强范围为 0.3-25 MPa。共计算了 840 个数据点, 其中 290 个数据有实验数据进行比较验证, 另个 550 个数据点为预测, 以弥补实验数据的不足。与实验值的比较如图 6 所示。

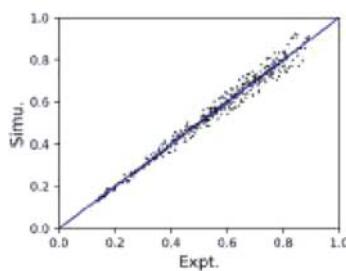


图 6 二元混合体系模拟计算与实验数据的比较

所有的计算采用 Xeon E5 2683 V4 16 核 CPU (不开启超线程)。机时耗费总结如表 1 所示。初期研究计算了 25 种溶剂分子的 PVT 性质, 计算作业数为 1250 个, 耗费机时 7.5 万核时, 产生了 11250 个数据点; 离子液体 49 种, 计算作业数 980 个, 耗费机时 12 万核时, 产生数据点 1470 个; 二元混合体系的相平衡性质研究了 16 个体系, 计算作业数 840 个, 耗费机时 134 万核时, 产生了 1680 个数据点; 水合自由能计算了 202 个体系, 计算作业数 202 个, 耗费机 5 万核时, 产生数据点 202 个。共计研究了 292 个体系, 计算了 3572 个作业, 耗费 37.9 万核时, 产生了 14602 个数据点。

综上所述, 我们初步完成了分子模拟数据库 (MSD) 网站和数据库的建设工作, 用户已经可以通过网络访问、查询、搜索、下载及共享实验和计算

表 1 各种体系性质计算耗费的机时

体系	性质	种类数量	作业数	机时 (万核时)	数据
溶剂分子	PVT 性质	25	1250	7.5	11250
离子液体	密度	49	490	2	490
	扩散系数		490	10	980
二元混合物	相平衡	16	840	13.4	1680
	水合自由能		202	5	202
合计		292	3572	37.9	14602

数据。计算了三大类 292 体系的热力学、动力学性质, 通过与实验值比较, 验证分子力场, 计算方法和高通量计算方案, 产生了 14602 个数据点, 数据已上传到 MSD 网站。下一步, 在现有工作的基础上, 拟计算 5000 多个分子体系的热力学、动力学性质, 产生约 354 万个数据点。

本文作者衷心感谢国家自然科学基金 (Nos. 21403138, 21473112, 21673138, 21603141, 21604054), 国家重点基础研究项目 (973 项目, No. 2014CB239702) 和上海交通大学材料基因组研究院的大力支持。

#### 参考文献

- [1] Material Project <https://materialsproject.org/>
- [2] Jin Z, Yang C, Cao F, et al. Hierarchical atom type definitions and extensible all - atom force fields. *Journal of Computational Chemistry*, 2016, 37: 653-664.
- [3] NIST Chemistry WebBook, <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- [4] Cao F, Sun H. Transferability and Nonbond Functional Form of Coarse Grained Force Field-Tested on Linear Alkanes, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2017, 11: 4760-4769.
- [5] Cao F, Sun H. Transferability and Nonbond Functional Form of Coarse Grained Force Field – Tested on Linear Alkanes. *Journal of chemical theory and computation* 2015, 11: 4760-4769.

# 基于透射电镜的高通量表征技术 ——扫描纳米束衍射

作者:邢辉,博士,讲师,上海交通大学材料基因组研究中心。

Email:xinghui@sjtu.edu.cn

**摘要:**本研究利用材料基因组高通量表征的思想,开发了一种在普通 TEM 上可以实现自动、快速地表征纳米多晶材料晶粒取向面分布的新技术——扫描纳米束衍射 (SEND),弥补了传统的 EBSD 技术分辨率相对较低的缺点。

获得多晶材料的晶粒取向面分布信息对于进一步理解工程材料的性能非常重要。广泛使用的技术是基于扫描电子显微镜(SEM)的背散射电子衍射技术(EBSD),其可以达到对晶体取向的自动表征和定量研究,但缺点是相对低的分辨率和对样品表面的要求非常高。近年来,对纳米结构材料的研究需求不断增加,因此研发一种更高分辨率的成像技术来快速探测纳米多晶材料的晶体取向分布信息是十分必要的。基于透射电子显微镜(TEM)的纳米束衍射(NBD)技术可以通过直径为几个纳米的电子束获得电子衍射花样<sup>[1]</sup>,在表征晶体结构和晶粒取向方面具有非常高的分辨率,但其尚不能实现自动连续的采谱和分析。本研究正是以材料基因组高通量表征的思想,在 NBD 技术的基础上,通过硬件升级和软件开发,发展了一种在普通 TEM 上可以实现自动、快速地表征纳米多晶材料晶体取向面分布的新技术——扫描纳米束衍射(SEND)。

该技术的原理是通过编写开发 Digital Micrograph 软件控制 TEM 电子束移动,使纳米尺寸的电子束在样品上进行逐点扫描,扫描的区域大小、扫描步长等都可以选择;并在每一个扫描点,TEM 的 CCD 相机自动拍摄和记录一张电子衍射花样,最终在样品的扫描区域获得一组电子衍射照片(获取  $1 \times 10^3$  张电子衍射照片的时间为 5 分钟)。然后通过机器学习方法编写的数据分析处理软件,实现对实验

获取的大量电子衍射照片进行自动聚类分析,最终可以得到样品的晶体取向分布图,同时还可以获取晶粒取向差的定量信息。此技术分辨率(空间分辨率 $\leq 2\text{nm}$ )大大高于安装在扫描电镜上的 EBSD 技术(实际分辨率仅为亚微米级)。此 SEND 技术还可与 TEM 的明、暗场技术相结合使用,因此比扫描透射电子显微镜(STEM)上的 NBD 技术更具有优势<sup>[2]</sup>。

本文中 SEND 技术在纳米多晶金颗粒上进行了应用。实验是在 JEOL 2100 LaB 6 TEM 上完成。由于使用 10 micron 的聚光镜光阑和一个附加的聚光镜迷你透镜,电子束的直径可达到 2nm(FWHM)<sup>[3]</sup>。研究结果如图 1 所示,选用 7nm 的步长逐点扫描一块大小为 210nm×210nm 的样品区域(图 1(a))

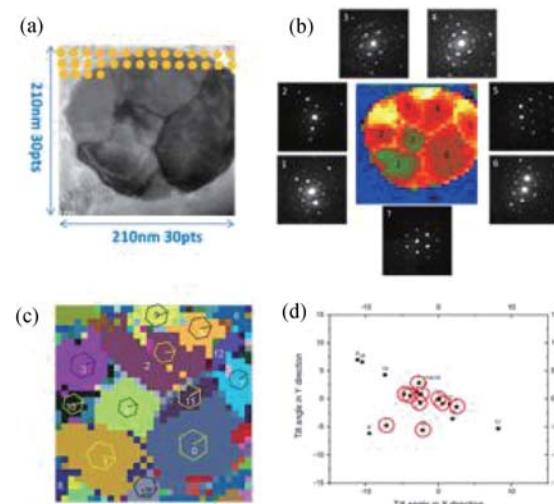


图 1 (a) 纳米多晶金颗粒的 TEM 明场像,黄色小点标记的是部分扫描点的位置,每一扫描点处都由透射电镜 CCD 相机自动记录下一张纳米束电子衍射照片。(b)借助软件自动分析处理整组 900 张衍射照片后再成像等到的初始晶粒取向分布图,以及各晶粒对应的平均衍射花样图。(c)分析处理得到的晶粒取向分布图,显示所有晶粒均偏离 [111] 轴一定角度,图中六边形中横线标注的是  $g(2-20)$  方向。(d)各晶粒之间偏转的角度的定量结果,每一点代表的是各个晶粒偏离 [111] 轴的 X、Y 方向角度。(Micron, 2015, (71):39–45)

中黄色点代表部分扫描点), 共记录  $30 \times 30 = 900$  个数据点, 每个数据点均获得一张衍射照片 (如图 1(b))。通过后续软件自动分析处理 900 张衍射照片的数据包可以获得纳米多晶金颗粒的取向分布图 (如图 1(c)), 并定量探测到纳米结构中微小的取向差(如图 1(d))。

致谢:感谢上海材料基因组工程研究院及上海交通大学材料基因研究中心对本项目的支持。

### 参考文献

- [1] J. Tao, D. Niebieskikwiat, M. Varela, W. Luo, M. A. Schofield, Y. Zhu, M. B. Salamon, J. M. Zuo, S. T. Pantelides and S. J. Pennycook, Physical Review Letters, (2009) 103, P. 097202.
- [2] K. J. Ganesh, M. Kawasaki, J. P. Zhou and P. J. Ferreira, Microscopy and Microanalysis, (2010), 16, P. 614.
- [3] J. M. Zuo, M. Gao, J. Tao, B. Q. Li, R. Twiegsten and I. Petrov, Microscopy Research and Technique, (2004) 64, P. 347.

# 高通量计算在新型热电材料研究中的应用

作者:朱虹,博士,特别副研究员,上海交通大学密西根学院,  
上海交通大学材料基因组联合研究中心。  
Email:hong.zhu@sjtu.edu.cn

材料基因组方法为新型热电材料的开发提供了新的契机。四万多种材料的热电性能被理论预测,最低热导率、费米面复杂因子可作为有效热电筛选条件,最后我们对理论预测的几种热电材料进行了合成及测试。

热电材料的设计是一个复杂的多变量优化问题——即降低热导率、增加塞贝克系数和提高电导率,材料基因组的研究方法有望加速新型热电材料的研发。

针对 Materials Project 的晶体结构数据库,我们对 48770 化合物的热电性能进行了高通量计算。图 1 描述了数据库中热电性能分布,例如最高功率因子对应的载流子类型、各向同向性、禁带宽度、最高功率因子等。我们发现理论预测的塞贝克系数与实验值符合的较好,而理论预测的功率因子的准确性较差(主要由于载流子弛豫时间被简化为常数),基于 Clarke 或 Cahill 模型预测的最低热导率与实验获得的最低热导率有很强的相关性,因此可用于预测经过有效声子工程后材料可获得的最低热导率。

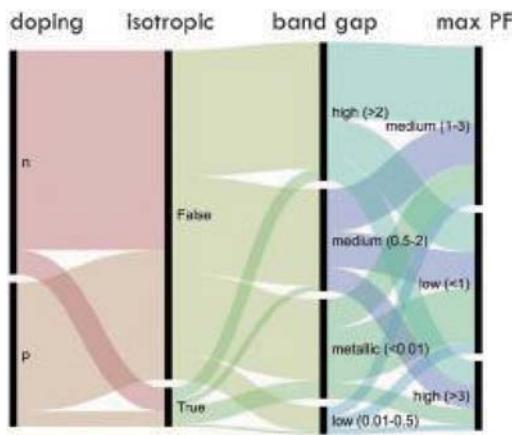


图 1:48770 化合物的数据流图<sup>1</sup>

考虑功率因子对载流子弛豫时间的依赖性,以及所导致的功率因子不准确性,我们计算了对载流子散射机制不敏感的状态密度有效质量,  $m_s^*$ , 和电导有效质量,  $m_c^*$ , 并发现费米面的拓扑特征或复杂因子  $(m_s^*/m_c^*)^{3/2} = N_v^* K^*$  与热电性能有很强的相关性(如图 2 所示),其中  $N_v^*$  为能带简并度,  $K^*$  为各向异性参数。因此相较于功率因子,费米面复杂因子或可作为更可靠的热电筛选条件。

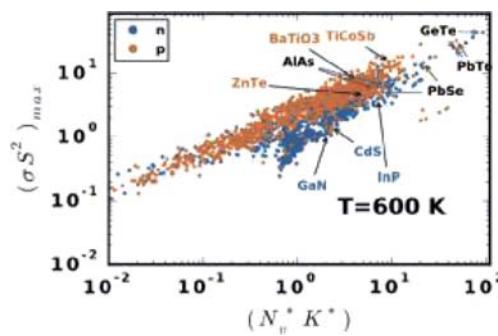


图 2:立方晶体材料最大功率因子与费米面复杂因子关联<sup>2</sup>

通过结合高通量计算、数据库和实验,针对理论预测有较高热电性能、热力学稳定性、可掺杂的几种新型热电材料进行了实验合成及测试,其中包括如图 3 所示的具有高能带简并度的  $XYTe_2$  ( $X$ : Y, Tm;  $Y$ : Cu, Ag) 化合物。 $TmAgTe_2$  在  $T > 600K$  的

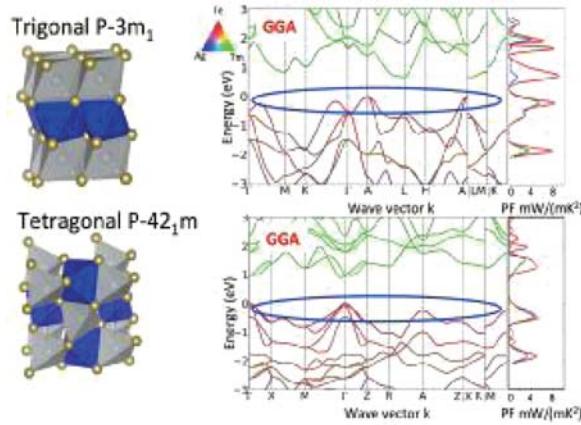


图 3: 具有高能带简并度的  $XYTe_2$  ( $X$ : Y, Tm;  $Y$ : Cu, Ag) 化合物<sup>3</sup>

实测热导率为 0.2-0.3W/mK, 目前 p 型获得的 zT 值为 0.45。 $\text{YC}_{\text{u}}\text{Te}_2$  具有更高的空穴浓度, 其 zT 值为 0.75。

### 参考文献

- [1] Wei Chen et al, Understanding Thermoelectric Properties from High-Throughput Calculations: Trends, Insights, and Comparisons with Experiment, *J. Mater. Chem. C* 4, 4414 (2016).
- [2] Z.M. Gibbs et al, Effective mass and Fermi surface com-

plexity factor from ab initio band structure calculations, *npj Computational Materials* 3, 8 (2017).

- [3] H. Zhu et al, Computational and experimental investigation of  $\text{TmAgTe}_2$  and  $\text{XYZ}_2$  compounds, a new group of thermoelectric materials identified by first principles high-throughput screening, *J. Mater. Chem. C* 3, 10554 (2015).

# 石榴石型锂离子固体电解质的研发

**作者简介:**段华南,上海交通大学材料学院副教授,博导,美国伍斯特理工学院博士,康奈尔大学博士后。研究方向为能源材料,高通量实验,功能薄膜。致力于研发氧化物体系的新型固态锂离子电解质材料,同时探索薄膜沉积高通量实验方法在新型电解质材料高效研发中的应用。先后在国内外知名学术刊物 (ACS Comb. Sci., J. Power Sources, Sci. Reports, etc.) 上发表论文 50 余篇。2014 年获得上海交通大学晨星学者(B 类)奖励;2006 年在美国 IMAPS 新英格兰会议中获得“最佳文章奖”。

联系方式:Email:hd1@sjtu.edu.cn

**摘要:**安全、稳定、高离子传导率的固态锂离子电解质是全固态锂电池技术的关键与难点。本项目针对含锂石榴石这一极具前景的氧化物固态电解质体系,在上年基础上对其空气稳定性和对锂枝晶的抑制作用做了较为深入的研究。

针对石榴石型锂离子固体电解质这一热门备选材料,上一年我们通过完善制备方法,提高工艺的稳定性,制备出的固态电解质室温离子传导率为  $4 \times 10^{-4} \text{ S cm}^{-1}$ ,在室温至 90°C 之间样品的激活能为 0.37 eV。本年度工作首先进一步研究了石榴石型固体电解质 Li<sub>2</sub>La<sub>3</sub>Zr<sub>2</sub>O<sub>12</sub>(LLZO) 在空气条件下的稳定性反应机理。此外,针对文献普遍报道的,采用 LLZO 后对称电池仍然存在锂枝晶引起的短路现象,我们尝试采用第二相掺杂来抑制电化学循环过程中锂枝晶的生长。这些工作为下一步石榴石型固体电解质的应用打下了坚实基础。相关工作具体介绍如下:

## 1) LLZO 的空气稳定性研究

通过实验揭示 LLZO 暴露在空气中时,LLZO 与空气中的水汽、二氧化碳反应形成碳酸锂的机理。如图 1 所示,通过将刚制备的 0.5 mol Ta 元素掺杂的 LLZO(0.5Ta-LLZO) 分别放置在干燥的空气和潮湿的空气中。6 个星期后,发现放置在干燥空气中的 LLZO 表面并没有形成碳酸锂,相应的锂离子传导率变化可以忽略;相比而言,6 周后,放置在潮湿

空气中的 LLZO 表面则形成了一层碳酸锂,相应的其锂离子传导率也出现了明显的下降。若将放置在潮湿空气中的 LLZO 样品表面打磨,则发现 LLZO 表面的碳酸锂已经全部被磨去了,其锂离子传导率又恢复到了以前的水平。

为了进一步研究空气条件下水汽对 LLZO 表面 Li<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 形成的作用机制,将 LLZO 浸泡在去离子水中一段时间。如图 2 所示,LLZO 浸泡在去离子水中一段时间后,LLZO 与水之间发生 Li<sup>+</sup>/H<sup>+</sup> 交换反应,在 LLZO 表面形成了一层 LiOH·H<sub>2</sub>O。将浸泡过的 LLZO 样品干燥后,再放置在空气中,发现 LLZO 表面的 LiOH·H<sub>2</sub>O 吸收空气中的 CO<sub>2</sub> 形成 Li<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>。因此,其反应机理如图 3 所示,LLZO 暴露在空气

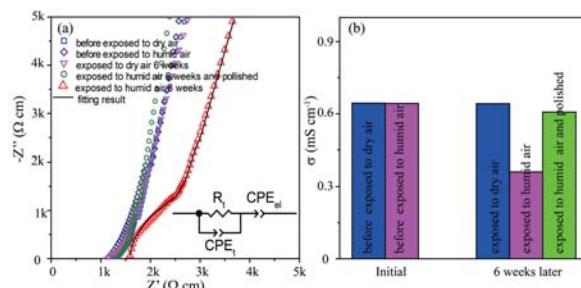


图 1 (a)0.5Ta-LLZO 在放置在干燥和潮湿空气中 6 周前后阻抗谱的对比;(b)分析(a)得到的锂离子传导率的对比

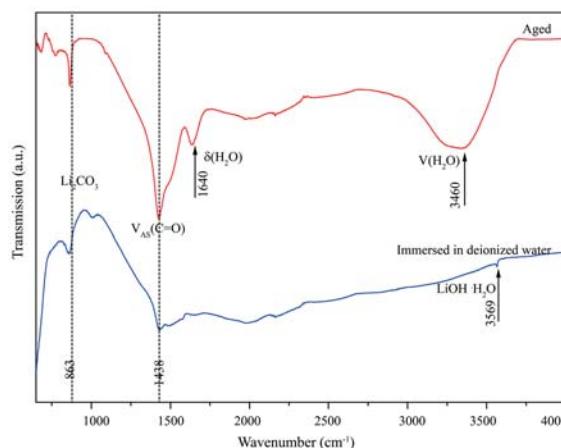


图 2 0.5Ta-LLZO 固态电解质样品在去离子水中放置一周,干燥后表面的红外光谱图(蓝色);之后又在空气中放置一周的样品表面红外光谱图

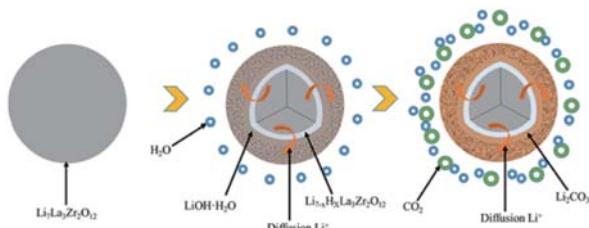


图 3 0.5Ta-LLZO 在空气条件下表面碳酸锂的形成机理图

中,首先和水之间发生  $\text{Li}^+/\text{H}^+$  交换并形成  $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$  和  $\text{CO}_2$  反应再形成的  $\text{Li}_2\text{CO}_3$ 。 $\text{LiOH}\cdot\text{H}_2\text{O}$  是重要的中间产物,会加速表面  $\text{Li}_2\text{CO}_3$  的形成。

## 2) 第二相掺杂 LLZO 对锂枝晶的抑制

针对采用 LLZO 后对称电池仍然存在锂枝晶引起的短路现象,研究第二相掺杂对锂枝晶的抑制作用。掺有  $\text{Li}_3\text{BO}_3$  (LBO),  $\text{Li}_4\text{SiO}_4$  (LSO) 和  $\text{Li}_3\text{PO}_4$  (LPO) 第二相的 0.5Ta-LLZO 样品通过 XRD 检测物相,结果如图 4 所示。可以看出,在预烧粉初步成相之后加入少量熔融第二相均能获得较纯的立方相含锂石榴石。这是由于加入的第二相量相对较少,且在  $1140^\circ\text{C}$  烧结后基本熔化成为玻璃相。

由于与金属 Li 的界面电阻最小,我们选择了 LPO 作为主要研究对象。图 5 显示了电流密度为  $100 \mu \text{A}\cdot\text{cm}^{-2}$  时,掺杂 LPO 前后样品的电流电压脉冲图。从图中可以看出,未掺杂样品电压平台曲线波动较大,在循环 33 后完全短路;而掺杂  $\text{Li}_3\text{PO}_4$  第二相的 0.5Ta-LLZO 稳定充放电 66 h。

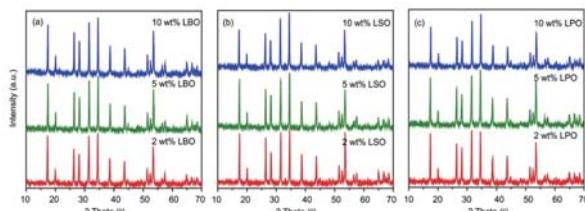


图 4 掺杂第二相的 0.5Ta-LLZO 电解质物相分析:(a) LBO,(b)LSO,和(c)LPO

循环前后掺杂  $\text{Li}_3\text{PO}_4$  第二相的含锂石榴石 SEM 如图 6(a)所示。图 6(a)可以看出含锂石榴石循环前后晶粒完整,P 元素的面扫描显示玻璃态  $\text{Li}_3\text{PO}_4$  第二相主要存在晶界处。图 6(b)给出了 LPO 掺杂 0.5Ta-LLZO 样品循环前后 P 元素的 XPS 图谱。对比循环前,循环后的样品在  $126\sim129 \text{ eV}$  位置出现了一个宽峰,该峰对应着  $\text{P}^{3-}$  特征,这说明在

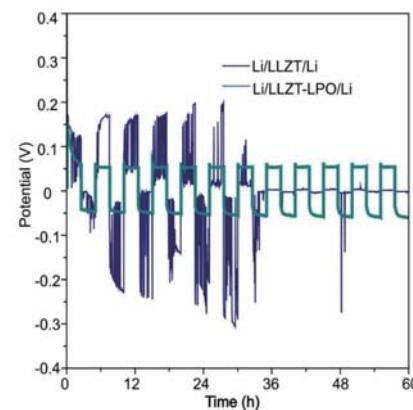


图 5 添加  $\text{Li}_3\text{PO}_4$  第二相前后的含锂石榴石与金属锂对称电池恒流脉冲对比

LLZT-LPO 中,以玻璃态形式存在于含锂石榴石晶界处的  $\text{Li}_3\text{PO}_4$ ,在锂剥离与沉积过程中,可能与锂离子、电子发生了氧化还原反应, $\text{P}^{5+}$  部分还原为  $\text{P}^{3-}$ 。即可能发生了如下反应:



$\text{Li}_3\text{P}$  为  $\text{Li}^+$  导体,其锂离子电导率为  $10^{-4} \text{ S}\cdot\text{cm}^{-1}$ 。因此我们推测,原位反应生成的、少量存在于含锂石榴石晶界位置的  $\text{Li}_3\text{P}$ ,可以作为锂离子传输通道,抑制过量的锂离子局部堆积形核而生成锂枝晶。

## 参考文献

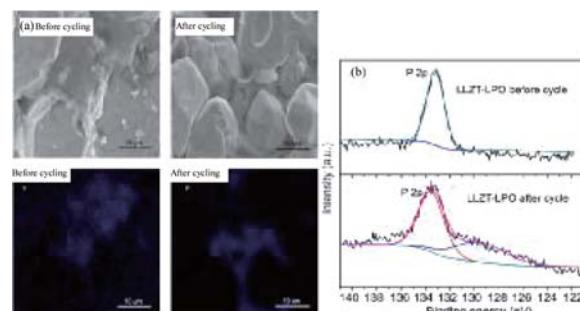


图 6 (a)LPO 掺杂 0.5Ta-LLZO 样品循环前后的 SEM 与 P 元素面分布图;(b)石榴石样品循环前后 P 元素的 XPS 图谱

- [1] Wenhao Xia, Biyi Xu, Huanan Duan\*, Xiaoyi Tang, Yiping Guo, Hongmei Kang, Hua Li, Hezhou Liu, "Reaction mechanisms of lithium garnet pellets in ambient air: the effect of humidity and  $\text{CO}_2$ ", Journal of the American Ceramic Society (2017) 1-8.
- [2] Biyi Xu, Wenlong Li, Huanan Duan\*, Haojing Wang, Yiping, Guo, Hua Li, Hezhou Liu, "Li<sub>3</sub>PO<sub>4</sub>-added garnet-type  $\text{Li}_{6.5}\text{La}_3\text{Zr}_{1.5}\text{Ta}_{0.5}\text{O}_{12}$  for Li-dendrite suppression", Journal of Power Sources 54 (2017) 68-73.

# 机器学习在材料芯片衍射谱图分类中的应用

作者:张澜庭<sup>a</sup>,赵冰冰<sup>a</sup>,王宇杰<sup>b</sup>,李金东<sup>b</sup>,汪洪<sup>a</sup>

<sup>a</sup>上海交通大学材料基因组联合研究中心

材料科学与工程学院

<sup>b</sup>上海交通大学物理天文系,凝聚态物理研究所

Email:lantingzh@sjtu.edu.cn

高通量材料制备和表征是材料基因组工程的重要组成部分,以组合材料芯片为代表的高通量制备技术结合同步辐射光源的强大表征能力,是实现材料成分、结构和性能等多参量的快速、准确、系统表征的基础。此处以三元相图测定为目标,简要介绍机器学习材料芯片衍射谱图分类中的应用。

系统性地建立材料成分、结构、工艺参数与性能之间的关联关系,即构建材料“相图”,是材料科学与工程的中心任务之一。传统的相图测定方法受制于扩散力学,是一项漫长而艰苦的过程,以三元合金相图为例。通过传统实验方法测定相图需要分别研究各成分在不同温度下的成相情况,并基于对大量实验数据的汇编,在以平面内为成分变量、法向轴为温度变量的三维空间中绘制相界。完成一个相图通常需要收集数千次实验的数据,汇集多个研究小组历经数年努力的成果。

以组合材料芯片【1】为代表的高通量制备技术受集成电路芯片与基因芯片启发,在一块基底上,通过精妙设计,以任意元素为基本单元,组合集成并且快速表征多达  $10\text{-}10^8$  种成分、结构、物相等,实验通量的大幅度提高带来研究效率的根本转变。同步辐射光源具有高亮度和高时空分辨率的特性,在基于组合材料芯片技术的材料相图测定中,基于同步辐射辐射的高通量表征尤其重要。一般的实验室光源亮度和光斑尺寸难以实现高通量和跨尺度表征,只有同步辐射才能提供实时表征所需的射线通量,再结合激光逐点逐步加热技术,有望实现一块芯片、一次实验、一个相图的构想【2】。

这里我们尝试了“单芯片方法”构建 Fe-Co-Ni 三元系等温截面相图。完整覆盖 Fe-Co-Ni 三元系目标材料体系成分的组合材料样品通过离子溅射的方法制备,因为成分由各组分薄膜厚度之比决定,采用精密掩模装置,使用连续移动的掩模挡板,可以方便地制备完整覆盖三元成分空间的组合材料芯片叠层前驱体。实验在中国建筑材料研究总院的高真空离子束溅射组合材料芯片制备系统(HTC-IBD)上完成。沉积的组合芯片样品封装于石英管中置于马弗炉内分别在 500、600、700°C 进行等温晶化处理 2 h。然后对芯片覆盖的成分空间进行微束 X 射线物相表征。

微束 X 射线物相表征在美国 Argonne 国家实验室的 APS/ANL 11-ID-D 线站上进行,X 射线为 15.5 keV( $=0.07999 \text{ nm}$ )的单色光,光子通量为  $2 \times 10^{12} \text{ ph/s}$ ,束斑垂直方向尺寸  $45 \mu\text{m}$ ,水平方向尺寸  $100 \mu\text{m}$ ,使用 Dectris Pilatus3 2M 面探测器接收衍射信号。测试在室温大气中进行,样品置于 X-Y 步进样品台上,X 射线以  $10^\circ$  或  $15^\circ$  入射,水平方向扫描步长为  $600 \mu\text{m/step}$ ,垂直方向步长为  $500 \mu\text{m/step}$ ,曝光时间为  $1 \text{ s/step}$ 。我们能够在极短的时间内获取大量成分点的 XRD 数据。但是对于大量 XRD 数据的处理而言,采用人工分析耗时费力,因此需要引入机器学习方法实现相区的自动划分。

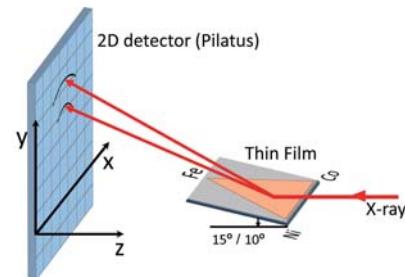


图 1 组合材料芯片高通量衍射实验示意图

本项目对同步辐射光源上获得的 Fe-Co-Ni 组合材料芯片高通量 X 射线衍射图谱进行基于 Cosine 相关系数的层次聚类分析(图 2)。提取 XRD 的衍射谱图中的峰位为特征向量,包括去噪声与本底扣除、寻峰、峰位归类,根据如下 Cosine 相关系数计算的谱图间距离进行层次聚类分析。

$$D_{cosine}(\mathbf{Pm}, \mathbf{Pn}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (\mathbf{Pm}_i \cdot \mathbf{Pn}_i)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n \mathbf{Pm}_i^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n \mathbf{Pn}_i^2}} \quad (1)$$

$Pm_i$  和  $Pn_i$  是  $\mathbf{Pm}$  和  $\mathbf{Pn}$  谱图的第  $i$  个向量 (峰位)。

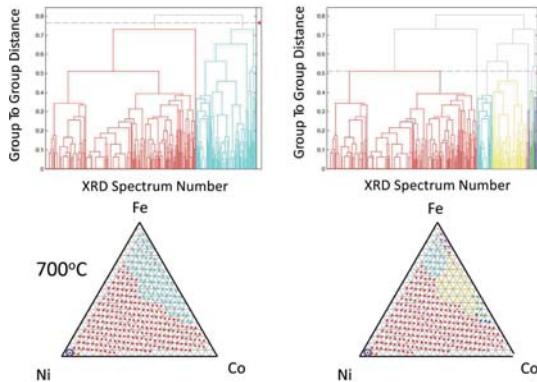


图 2 基于 Cosine 相关系数的层次聚类分析结果

利用基于衍射峰位信息的高通量相图测定流程分别对 500℃、600℃ 和 700℃ 等温晶化处理的 Fe-Co-Ni 三元系进行了聚类分析,即可在 Fe-Co-Ni 成分空间中绘制出三元相图的等温截面,机器学习聚类结果与人工绘制相图吻合较好(图 3)。证明将机器学习用于组合材料芯片的高通量表征的数据

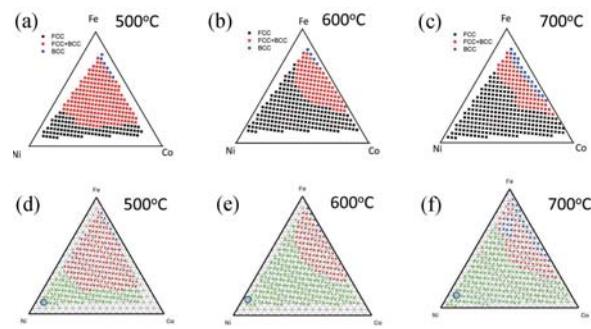


图 3 Fe-Co-Ni 系等温截面(a-c)人工分类结果;(d-f)机器学习层次聚类结果

分析,能可靠地测定三元相图的等温截面,与传统方法相比在研究效率上有明显提升,并且可以推广到其它体系。

对本项目贡献的有:组合材料芯片制备由汪洪在中国建筑材料研究总院完成;同步辐射表征由王宇杰在美国 Argonne 国家实验室完成;层次聚类分析数据处理由赵冰冰和李金东完成。

### 参考文献

- [1] X. -D. Xiang, X. Sun, G. Briceño, Y. Lou, K. Wang, H. Chang, W. G. Wallace-Freedman, S. -W. Chen, P. G. Schultz. A combinatorial approach to materials discovery. *Science*, 1995, 268(5218): 1738-1740.
- [2] Xiao-Dong Xiang, Gang Wang, Xiaokun Zhang, Yong Xiang, Hong Wang, Individualized pixel synthesis and characterization of combinatorial materials chips, *Engineering*, 2015, 1(2), 225-233.

# 扩散多元节方法在新型高温材料设计中的应用

作者:赵冰冰,博士,讲师,上海交通大学材料科学与工程学院高性能金属研究所,上海市先进高温材料及其精密成形重点实验室。

Email:zhao.bb@sjtu.edu.cn

以新型高温合金(含铝奥氏体耐热钢)的设计为具体对象,在热力学模拟计算的基础上,构建扩散多元节的高通量实验与表征系统,依据微区相平衡及动力学的研究,将实验与理论计算模型相结合,加速材料的设计。

“扩散多元节”方法<sup>[1]</sup>为赵继成教授在金展鹏院士发明的三元扩散偶的基础上所开发,其基本想法是利用扩散实验形成的固溶体和化合物相的成分变化/梯度来实现微区能测试,从而快速测定相图和扩散动力学数据,可以高效地获得成分-相-性能的关系。扩散多元节将多个不同金属块紧密贴合在一起进行高温热处理,促使金属间相互扩散形成固溶体或者金属间化合物,是高通量实验制备块体合金的主要方法。利用扩散多元节方法,在样品界面附近区域切片可得到大量组分连续渐变的合金,加速新型材料的设计。

高温材料设计的一个重要方面是搜寻多种合金元素高温稳定相的化学成分空间,以及其相平衡的热力学。前期研究表明<sup>[2]</sup>,新型氧化铝保护层自发形成的奥氏体(Alumina-Forming Austenitic, AFA)耐热钢中加入3%左右的铜元素,可在蠕变过程中形成具有L1<sub>2</sub>有序结构的析出相,该析出相的主要成分为镍、铜、铝(图1)。L1<sub>2</sub>有序结构的析出相是高温合金中有效的高温强化方法,受制于其形成的化学成分范围了解不足的限制,L1<sub>2</sub>析出相仅在镍基合金中得到了充分应用,而在铁基、钴基等合金中无法实现,影响了这些合金的高温应用范围。根据一些计算的结果和实验中获得的片段信息,通过设计扩散多元节实验的方法可以快速有效地搜寻在

铁基、钴基等合金中形成高温稳定的L1<sub>2</sub>析出相的化学成分空间,以及其相平衡的热力学,从而可以指导设计新型的L1<sub>2</sub>析出相强化的铁基、钴基高温合金。

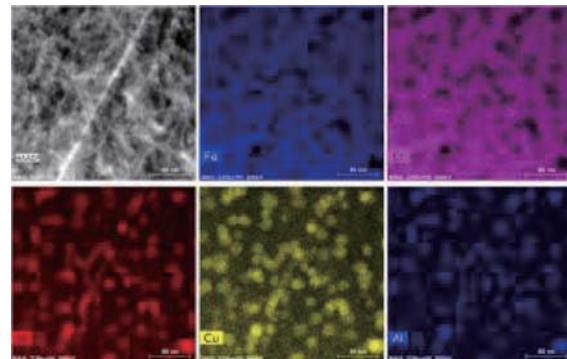


图1 含铜AFA耐热钢700°C/150MPa蠕变50小时后成分分布

本项目通过带动力学模块的热力学计算软件模拟,选定所要研究合金的成分范围和扩散实验的温度、时间等条件,设计和制备了Fe-Ni-Al-Cu-Mn-Ti扩散多元节样品,图2。

该扩散多元节样品经过1100°C/120 h等温处理后,在AFA耐热钢的预期服役温度700°C下进行120 h等温处理。图3为等温处理实验后的相边界形貌,其中NiAl-Ni、NiAl-NiTi、NiAl-NiCu、NiAl-NiMn边界均已经转变为具有有序结构的L1<sub>2</sub>相。

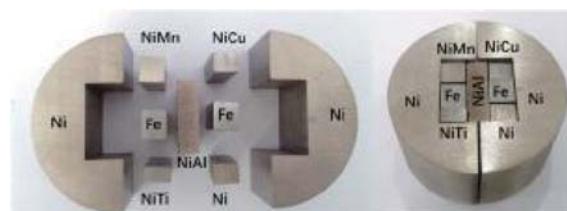


图2 Fe-Ni-Al-Cu-Mn-Ti扩散多元节样品

实验证明,Ti、Cu、Mn元素对L1<sub>2</sub>析出相的形成均有促进作用。Ti在铁基高温合金中,可以稳定L1<sub>2</sub>析出相的尺寸,但对抗腐蚀性能有一定的不利。Ni-Cu-Al三元系500°C-700°C等温截面相图<sup>[3]</sup>表明,

Cu 在 Ni<sub>3</sub>Al 相的固溶度可以高达 28%，而在 NiAl 相的固溶度只有 15% 左右。高温时，Cu 可以占据 Ni<sub>3</sub>Al 中 Ni 的晶格位置。热力学计算结果显示 Mn 对 L<sub>1</sub><sub>2</sub> 析出相形成有一定的促进作用，其影响还需进一步的实验验证。

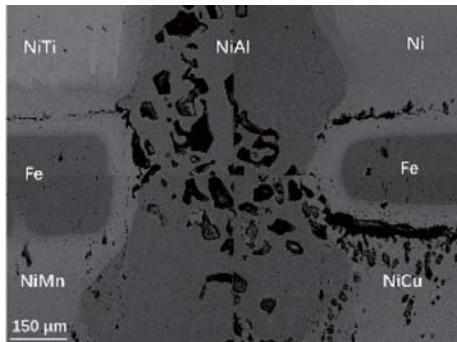


图 3 扩散多元节样品经服役温度 700℃下 120h 等温处理后的相边界面貌

扩散多元节方法形成的组分连续渐变的合金，

提供了搜寻多种合金元素高温稳定相的化学成分空间。对所得扩散多元节样品进行微区成分和相组成分析，可以构建 NiAl 相、L<sub>1</sub><sub>2</sub> 相等高温强化相的平衡关系。根据多步实验，提取的相转变热力学、动力学参数，可改善热力学模拟计算模型性，为下一步的合金设计提供指导。

### 参考文献

- [1] 赵继成, 材料基因组计划中的高通量实验方法, 科学通报, 2013, 58 卷, 35 期, 3647-3655.
- [2] B. Zhao, J. Fan, Y. Zhao, X. Dong, F. Sun, L. Zhang, Formation of L<sub>1</sub><sub>2</sub>-ordered precipitation in an alumina-forming austenitic stainless steel via Cu addition and its contribution to creep/rupture resistance. Scripta Materialia, 2015, 109, 64-67.
- [3] A.Prince, Aluminium-copper-nickel, Ternary Alloys, 1991, 4, 597-629.

# 金属玻璃中剪切转变事件的变形行为:模型及预测

作者:孔令体,博士,副研究员,上海交通大学材料科学与工程学院  
Email: konglt@sjtu.edu.cn

一般认为剪切转变区是金属玻璃的基本变形单元。理解剪切转变区中剪切转变事件发生的微观机制对于认识金属玻璃的宏观变形行为具有重要意义。我们从势能曲面的角度出发,发展了剪切转变事件最小能量路径在不同宏观应变下的变化模型,并通过分子模拟的手段验证了该理论模型。更进一步,结合激活事件搜索技术以及该模型,我们成功预测了模拟得到的非晶模型在剪切变形中发生的剪切转变事件。

自 1959 年发现金属玻璃以来,其独特结构带来的新颖力学性能吸引人们的广泛关注。由于不具长程有序、无位错类变形单元,理解、描述其力学行为存在较大的挑战。尽管人们已提出不少力学模型,如自由体积模型、剪切转变区模型、协同转变模型等,但其微观力学变形机制迄今尚无清晰认识。其中一个重要问题是如何理解剪切转变事件的激活能与宏观应力或者应变之间的关系。已有模型,比如 Erying 模型结合 Eshelby inclusion 假定激活能与应力呈线性关系,可以看做关联函数泰勒展开的一级近似,较为粗糙。Maloney 等人基于 Catastrophe theory 唯象地描述激活能与应力之间应呈现非线性关系  $Q \sim (\sigma_c - \sigma)^{3/2}$ 。但无一可准确预测剪切转变事件发生的临界应变点和空间位置。我们基于对势能曲面演化的分析,提出并验证了剪切转变事件最小能量路径(MEP)在宏观应变下的变化模型,结合热激活事件搜索技术,进一步预测并验证了非晶模型在绝热剪切变形过程中发生的剪切转变事件。

不失一般性,我们从简单剪切变形入手。从弹性能变化的角度出发,通过力学推导发现,MEP 上相对能量变化主要是沿 MEP 上各构型的应力不同导致的弹性能的增量不同的结果,并可以用下面的

公式来描述

$$E(x, \gamma) = E(x, \gamma_0) + V \Delta\tau(x, \gamma_0)(\gamma - \gamma_0) + f(\gamma), \quad (1)$$

其中  $x$  是反应路径坐标,  $\gamma$  是宏观应变,  $\gamma_0$  是初始宏观应变,  $V$  是系统体积,  $\Delta\tau(x, \gamma_0) = \tau(x, \gamma) - \tau(x_{\text{min}}, \gamma_0)$  是  $\gamma_0$  时 MEP 上各构型应力与初始能量极小值点构型的应力差值,  $f(\gamma)$  是其他仅与应变有关的能量项。

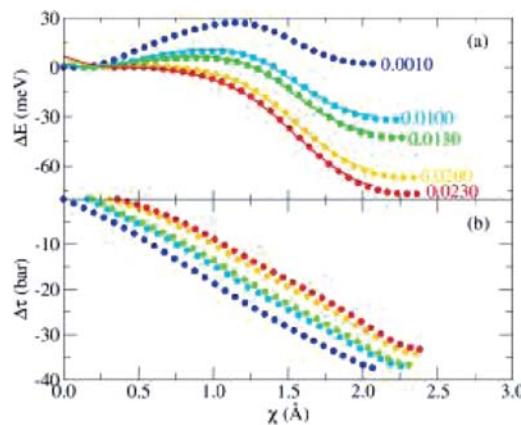


图 1 (a) 不同宏观切应变下的第三个剪切转变事件的 MEP 能量变化,圆点是通过 NEB 计算得到结果,实线是基于切应变 0.0010 的 MEP 信息和公式(1)预测的最小能量路径的能量变化结果。(b)NEB 计算得到的不同应变下的沿 MEP 的应力变化

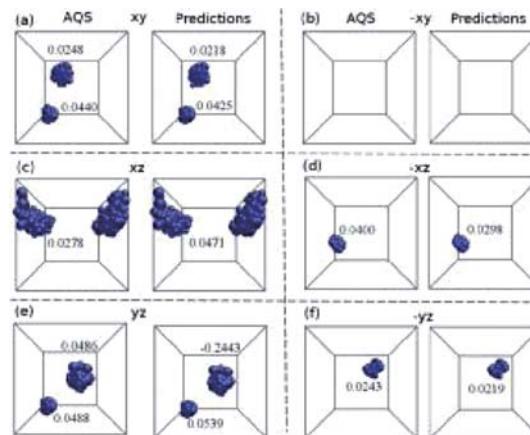


图 2 绝热准静态剪切中发生的事件与预测结果对比。原子根据其原子 von-Mises 应变着色,初始无变形构型为参照构型,只显示了 von-Mises 应变大于 0.01 的原子。对于每一个切应变方向,左边的是绝热准静态剪切表征的剪切变形,右边是基于 ART 预测的结果。预测和模拟得到的剪切事件应变诱发点被标注在了各个事件周围

为了验证该模型,我们通过分子动力学,采用嵌入原子势(EAM)构建了Cu<sub>64</sub>Zr<sub>36</sub>非晶模型(10000原子,10<sup>9</sup> K/s冷却速率)。通过对非晶模型进行绝热准静态剪切变形,以及微动弹性带方法(NEB)我们获得了剪切变形过程中首先发生的三个剪切转变事件在不同切应变下的 MEP 能量和应力变化信息。对于第三个剪切转变事件,我们对比了模拟得到的最小能量路径与基于公式(1)预测的最小能量路径变化如图 1(a)所示,可以看到预测结果与模拟结果吻合得很好。注意图 1(b)中,沿最小能量路径各构型与坐标呈线性关系,如果我们假设应力变化沿最小能量路径为线性变化,并近似能量沿最小能量路径为三次函数,那么,我们可以得到公式(1)的近似解析表达式

$$E(\tilde{x}, \gamma) = -2Q_{\gamma_0} \tilde{x}^3 + 3Q_{\gamma_0} \tilde{x}^2 + V\tilde{x}\Delta\tau_0(\gamma - \gamma_0) + g(\gamma), \quad (2)$$

其中  $Q_{\gamma_0}$  是宏观应变为  $\gamma_0$  时的激活能,  $\tilde{x} = x/x_{s,\gamma_0}$  是约化反应路径坐标。通过公式(2)我们可以进一步解出激活能为 0 的应变点,激活能随应变的关系以及其他与最小能量路径相关的其他物理量

$$\Delta\gamma_c = -\frac{3Q_{\gamma_0}}{2V\Delta\tau_0} \quad (3)$$

$$Q(\gamma) = Q_{\gamma_0} \left(1 - \frac{\Delta\gamma}{\Delta\gamma_c}\right)^{3/2} \quad (4)$$

其中  $\Delta\tau_0 = \tau_{s,\gamma_0} - \tau_{m,\gamma_0}$  是宏观应变  $\gamma_0$  时鞍点构型和初始能量极小值点的构型之间切应力差值。需要指出的是公式(4)和 Catastrophe theory 中的结论是一致的,但我们认为该公式的成立在于沿最小能量

路径能量变化可以用三次函数近似,应力变化可以用线性函数近似,即 Catastrophe theory 的结论是公式(1)的特例在一定条件下成立。从模拟的结果上来看,我们通过绝热剪切过程搜索到的前三个剪切转变事件都近似满足上述结论。但文献[1]中我们也给出了不满足公式(2)假设条件的剪切转变事件例子。因此,在分析剪切转变事件时,尽量按照公式(1)来分析,公式(2)及其推论可以在仅知道鞍点和初始能量极小值点构型的情况下粗略地预测其应变下的响应情况。

基于上述理论,加上势能曲面热激活事件搜索技术让预测非晶在变形过程中发生的剪切转变事件成为了可能。在同样的非晶模型下,我们利用激活弛豫技术(Activation relaxation technique)搜索了 200000 个激活事件,并基于上述理论预测了各个事件在 6 个宏观绝热简单剪切变形方向(xy,-xy,yz,-yz, xz,-xz) 下的诱发应变点,并把预测发生应变点在 5% 以下的事件的构型以及应变点与绝热剪切变形模拟中得到的结果进行了对比,如图(2)所示。可以看出,我们的理论不仅是有效的,而且也提供了一种从势能曲面对应变的响应来理解金属玻璃变形的一种新的框架。

## 参考文献

- [1] Bin Xu et al., Strain-dependent activation energy of shear transformation in metallic glasses, Physical Review B, 2017, 95, 144201

# 基于超晶格结构的磁性材料设计

作者:罗卫东,博士,特别研究员,上海交通大学物理与天文学院、自然科学院。  
Email:wdluo@sjtu.edu.cn

我们构建了两类超晶格结构  $\text{TiO}_2/\text{MnO}_2$  和  $\text{ZnSe}/\text{MnSe}$ , 运用第一性原理方法研究其电子性质, 着眼于发现新的铁磁绝缘体(铁磁半导体)。 $\text{TiO}_2/\text{MnO}_2$  超晶格是铁磁金属, 通过原子替换可能获得铁磁半导体; $\text{ZnSe}/\text{MnSe}$  超晶格可以存在亚稳态的铁磁绝缘体态。

自然界中反铁磁绝缘体比较多, 而铁磁绝缘体非常少。后者包括氯化钠结构的  $\text{EuO}$  和  $\text{EuS}$ [1], 及钙钛矿结构的  $\text{BiMnO}_3$ [2]。 $\text{EuO}$  和  $\text{EuS}$  的铁磁性主要来源于稀土元素 Eu 中局域的 4f 轨道的强自旋能量劈裂。 $\text{BiMnO}_3$  的磁性与 Bi 原子中的 6s 孤对电子及 Mn 原子的轨道序密切相关。

基于由非磁绝缘体和反铁磁绝缘体构建的超晶格结构, 我们运用第一性原理密度泛函理论计算来研究其电子性质。主要研究了两类超晶格结构: 基于金红石结构的  $\text{TiO}_2/\text{MnO}_2(001)$  超晶格, 及基于闪锌矿结构的  $\text{ZnSe}/\text{MnSe}(001)$  超晶格, 如图 1 所示。

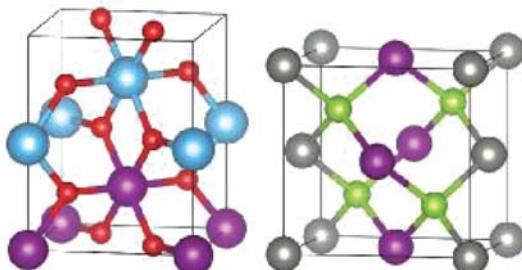


图 1 构建超晶格结构: 基于金红石(rutile)结构的  $\text{TiO}_2/\text{MnO}_2$  超晶格(左); 基于闪锌矿(zincblende)结构的  $\text{ZnSe}/\text{MnSe}$  超晶格(右)

运用第一性原理密度泛函理论计算了  $\text{TiO}_2/\text{MnO}_2$  超晶格的电子性质, Mn 原子具有局域磁矩, 其铁磁态的能带结构如图 2 所示。其费米能处

没有带隙, 是铁磁金属。Mn 原子的一部分自旋上电子位于价带, 另一部分位于紧靠费米能的两条导带。而自旋下电子全部位于导带。

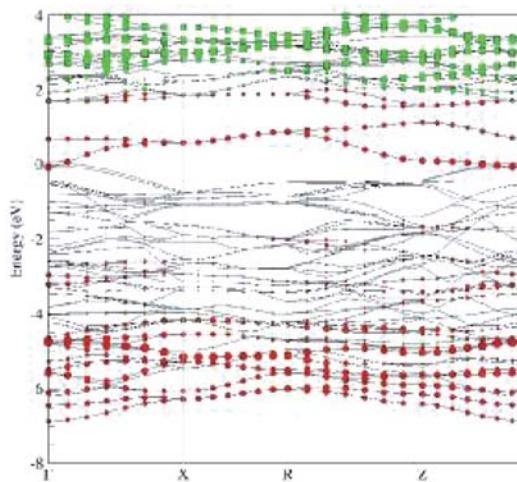


图 2  $\text{TiO}_2/\text{MnO}_2$  超晶格的电子能带结构(费米能设为零)。红色圆圈代表自旋上电子波函数在 Mn 原子处的投影, 绿色方块代表自旋下电子波函数在 Mn 原子处的投影

尽管第一性原理计算表明  $\text{TiO}_2/\text{MnO}_2$  超晶格是铁磁金属, 但在其费米能往上约 1eV 处有一个完全的带隙。如果能通过原子替换的方式把费米能上移到该带隙处, 就可以实现完全的带隙, 可能获得铁磁半导体。

对于  $\text{ZnSe}/\text{MnSe}(001)$  超晶格, 通过计算其电子性质, 发现其中 Mn 原子具有局域磁矩, 其铁磁态的能带结构如图 3 所示。Mn 原子的自旋上电子全部位于价带, 而自旋下电子全部位于导带, 这是带隙约为 1eV 的铁磁半导体。但进一步对该超晶格的磁性进行研究, 发现铁磁态是亚稳态, 反铁磁态的能量更低。

除了超晶格的母体结构和化学组分之外, 超晶格结构的其它性质也值得关注, 如超晶格中各层的厚度和比例, 各层组分的晶面方向等。我们计划逐一考察这些性质对磁性的影响。

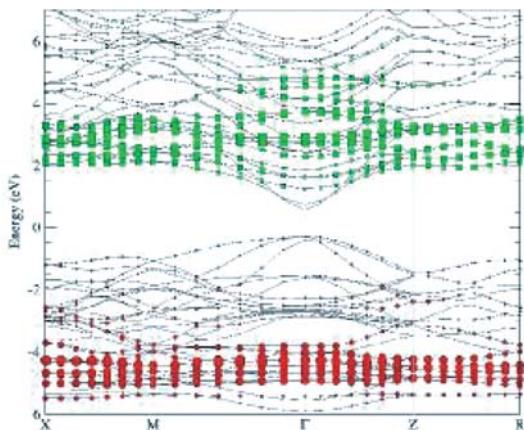


图 3 ZnSe/MnSe 超晶格的电子能带结构。红色圆圈代表自旋上电子波函数在 Mn 原子处的投影，绿色方块代表自旋下电子波函数在 Mn 原子处的投影

### 参考文献

- [1] L. Passell et al., Neutron scattering from the Heisenberg ferromagnets EuO and EuS, Phys. Rev. B, 1976, 14, 4897.
- [2] R. Seshadri and N.A. Hill, Visualizing the Role of Bi 6s “Lone Pairs” in the Off-Center Distortion in Ferromagnetic  $\text{BiMnO}_3$ , Chem. Mater., 2001, 13, 2892.

# 密排六方金属中 $\langle a \rangle$ 位错交滑移机理的原子尺度模拟

作者:金朝晖,博士,教授,上海交通大学轻合金精密成型国家工程研究中心  
Email:jinzh@sjtu.edu.cn

针对 HCP 金属 Ti 柱面  $\langle a \rangle$  型螺位错滑移“锁定 - 解锁”现象,采用分子动力学(MD)模拟和微动弹性带(NEB)方法,研究了该类位错从柱面到锥面再回到柱面的双重交滑移过程,揭示了位错核结构演化机理,解释了位错碎片形成等实验现象。

密排六方金属(HCP)的塑性,很大程度上取决于  $\langle a \rangle$  位错在基面和非基面的滑移。一般而言,  $\langle a \rangle$  型螺位错的滑移不会仅局限于同一类滑移面。在适当的外加载荷和温度下,它们会从原先的滑移面,过渡到一个新的滑移面,即发生所谓的交滑移。

在不同的 HCP 金属中,常见的  $\langle a \rangle$  型螺位错滑移会优先选择不同的滑移面,例如,Mg、Be 等是基面,而 Ti、Zr 等则是柱面。原因一般归结为:(1)晶体的各向异性;(2)位错核结构和能量。虽然在 Ti 和 Zr 中,  $\langle a \rangle$  位错均倾向于柱面滑移,但滑移方式迥异。在 Zr 中,柱面滑移均匀稳定;而在 Ti 中,  $\langle a \rangle$  型螺位错是间歇式滑移(jerky glide),静止很长时间,然后急速跳跃到下一位置,跃迁过程时间极短。这种也被称为“锁定 - 解锁”(locking-unlocking)的位错滑移现象,在过去 30 年中得到极大关注。困扰人们多年的物理机制,最近才由原位透射电镜实验结合第一性原理计算得以澄清。Clouet 等发现[1],在 Ti 中,当  $\langle a \rangle$  位错处于柱面时,位错核芯结构能量较高但较容易滑移;当它处于锥面时,位错核芯结构最稳定但滑移相对较难,位错将被“锁定”。因此,位错在柱面与锥面的核芯结构转变,是位错“锁定 - 解锁”现象的根源。

但他们的计算及实验并没有揭示当锁定于锥面的  $\langle a \rangle$  位错被解锁时,会诱发位错交滑移(cross-slip)的可能性。我们的分子动力学观测结果

表明,位错以锥面为“中转站”,滑移既可以保持在原来的柱面,也可以通过交滑移到新的柱面(图 1a)。具体选择哪一种可能路径,和施加应力、应变速率及温度等因素相关。

利用微动弹性带技术,可以得到发生交滑移时位错核心结构转变的直接证据(图 1b),还能精确测定位错解锁导致交滑移所需的临界能量( $\sim 7.7$  meV)。位错核稳定性情况也与第一性原理计算预期结果一致。

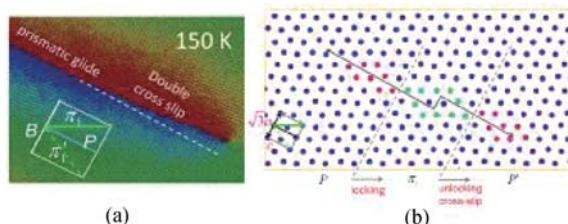


图 1 (a)Ti 中  $\langle a \rangle$  螺位错滑移时重复出现的“锁定 - 解锁”与双交滑移现象(MD);(b)从柱面到锥面再到另一个柱面的双交滑移路径;原子依据近邻原子分析方法着色;锥面位错核结构具有纳米孪晶结构特征(NEB)

金属 Ti 的塑性行为极其复杂。例如,近期实验观测证实[2],  $\langle a \rangle$  螺位错会在其滑移过的区域留下位错碎片或者残骸。而我们的模拟结果表明,位错“锁定 - 解锁”和交滑移机理是位错残骸形成的关键环节(图 2)。

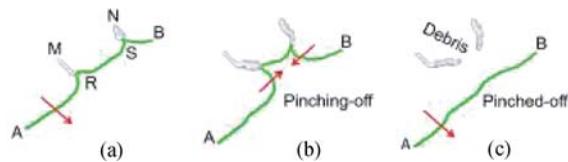


图 2 Ti 中  $\langle a \rangle$  螺位错发生双交滑移会导致位错残骸留在基体里(MD)。过程依次为:(a)形成位错割阶(jogs);(b)一对刃位错偶极子的横向扩展和湮灭;(c)不可动位错割最终被切除掉(位错残留)

位错核的稳定性源自电子结构。在分子动力学模拟中所采用 MEAM 势函数,能够较合理地反映原子成键的角度特征。我们发现,不同滑移面上  $\langle a \rangle$

位错核的相对稳定性,能够从广义层错能计算上得到体现[3],这对预测不同 HCP 金属及合金中位错滑移行为,有理论指导意义。

综上所述,从柱面到锥面的位错核芯结构转变,是 Ti 中螺位错“锁定 - 解锁”现象的根源所在。经验势模型(MEAM)可以很好的描述 Ti 中位错核的稳态及亚稳结构。广义层错能计算可用来预测位错发生交滑移的趋势。本研究还解释了 Ti 中位错割阶、位错残骸形成等现象,拓展了人们对 HCP 金属及其合金塑性行为的理解。

结合本研究,澄清 Mg 合金中位错滑移及交滑

移机理,以及溶质原子制约材料塑性和强度的规律,将是我们后续工作的重点。

### 参考文献

- [1] E. Clouet, D. Caillard, N. Chaari, F. Onimus, D. Rodney, Dislocation locking versus easy glide in titanium and zirconium. *Nature materials*, Nat. Mater. 14 (2015) 931-936.
- [2] J. Kacher, I.M. Robertson, In situ TEM characterisation of dislocation interactions in  $\alpha$ -titanium. *Philos. Mag.* 96 (2016) 1437-1447.
- [3] X.M.Su, Z.H. Jin, Locking-Unlocking and Cross-Slip of Screw Dislocations in Hexagonal Close-Packed Metal Titanium (paper under review).

# 扫描透射电镜技术在材料微区成分和结构分析中的应用

作者:陈彬

上海交通大学材料科学与工程学院

Email:steelboy@sjtu.edu.cn

以 Zr-Cu-Al 合金为研究对象,利用扫描透射电镜技术结合埃尺度电子衍射技术对其进行合金成分和电子衍射图的采集,实现对材料纳米尺度空间分辨的高通量、高精度微观结构和化学成分的定量测量。

本课题的研究是基于陈明伟教授在过去几年已成功开发了埃尺度电子衍射 (Angstrom Beam Electron Diffraction, ABED) 的高空间、高精度材料表征技术[1],该技术已成功用于非晶重要结构单元二十面体团簇的空间构型表征以及纳米多孔金属表面原子重构[2]。在前期工作基础上,已成功开发了具有扫描功能的埃尺度电子衍射与分析技术[3],该技术结合高敏感超快电子直接成像方法,可实现具有纳米尺度空间分辨的高通量、高精度材料微观结构和化学成分的定量测量。本课题在利用扫描透射电镜技术的基础上,结合了电子衍射、电子能量损失谱、X 射线能谱等高空间分辨、高精度材料表征技术,通过扫描透射电镜技术实现电子束在样品上的移动,通过电子衍射获得材料的结构信息,通过电子能量损失谱(EELS)或 X 射线能谱(EDS)

获得材料的成分信息,通过它们的结合可以获得材料一个区域的微观结构和化学成分的信息。通过超小孔径光阑,实现对材料达到纳米尺度空间分辨的高通量、高精度微观结构和化学成分的定量测量。

本研究以 Zr-Cu-Al 合金为研究对象,利用扫描透射电镜技术结合 EDS 和埃尺度电子衍射技术对其进行合金成分和电子衍射图的采集,实现对材料纳米尺度空间分辨的高通量、高精度微观结构和化学成分的定量测量。例如对合金某区域进行 1000 点以上的 EDS 能谱分析和电子衍射采集,图 1 是对 Zr-Cu-Al 合金 EDS 的 mapping 分析。

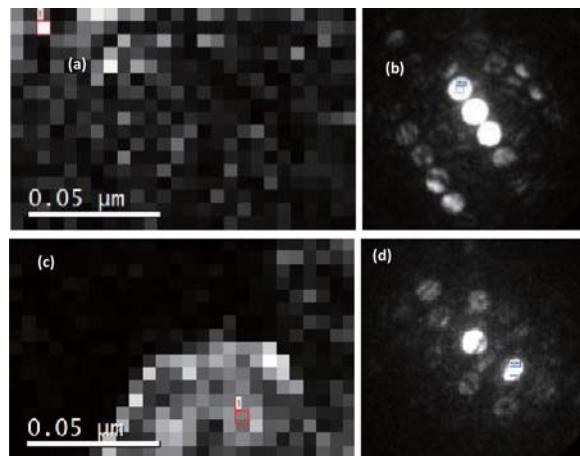


图 2 对富 Zr 相进行电子衍射的 mapping 分析  
(a)、(c)电子衍射的 mapping 图及(b)、(d)对应点提取的电子衍射图

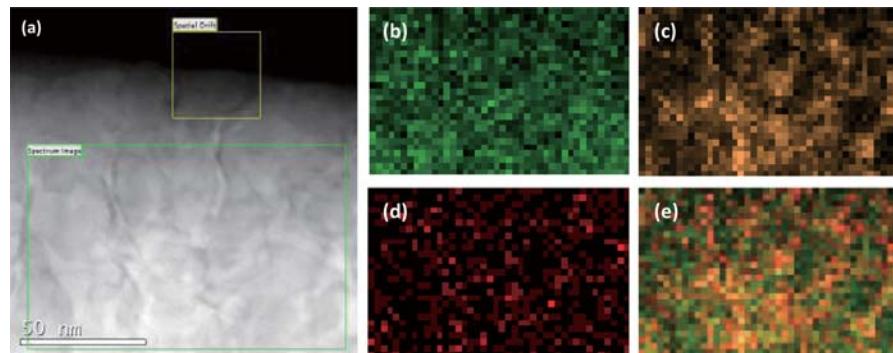


图 1 对 Zr-Cu-Al 合金进行成分面分布 EDS 的 mapping 分析  
(a)STEM 相貌图及对图中方框部位的(b)Zr 元素;(c)Cu 元素;(d)Al 元素;(e)三中元素混合分布图

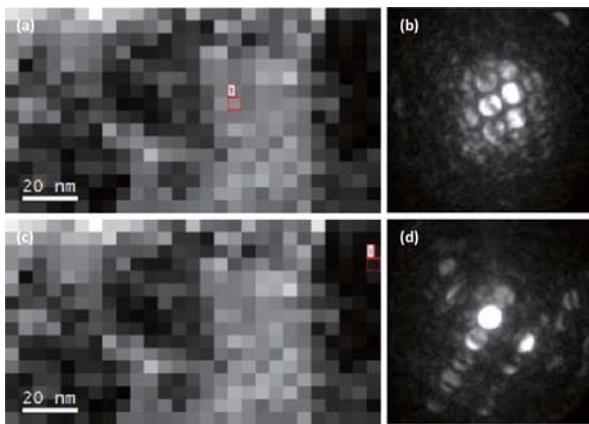


图 3 对富 Cu 相进行电子衍射的 mapping 分析  
(a)、(c)电子衍射的 mapping 图及(b)、(d)对应点提取的电子衍射图

通过对图 1 的分析,发现 Zr-Cu-Al 合金中主要有富 Zr 相和富 Cu 相为主。对能谱分析中获得的富 Zr 相区域,提取已经采集的电子衍射图,可以获得一系列电子衍射图,可以进行微观结构的分析,如图 2 所示。

同样的,我们对能谱分析中获得的富 Cu 相区

域,提取已经采集的电子衍射图,也可以获得一系列电子衍射图,可以进行微观结构的分析,如图 3 所示。

实验证明,利用扫描透射电镜技术结合埃尺度电子衍射技术,可以对材料进行 EDS、EELS 和电子衍射图的批量采集,从而实现对材料纳米尺度空间分辨的高通量、高精度微观结构和化学成分的定量测量,是非常高效的材料研究手段。

### 参考文献

- [1] Hirata A, Guan P, Fujita T, et al. Direct observation of local atomic order in a metallic glass [J]. Nature materials, 2011, 10(1): 28-33.
- [2] Hirata A, Kang L J, Fujita T, et al. Geometric frustration of icosahedron in metallic glasses [J]. Science, 2013, 341(6144): 376-379.
- [3] Hirata A, Chen M. Angstrom-beam electron diffraction of amorphous materials[J]. Journal of Non-Crystalline Solids, 2014, 383: 52-58.

# 发表文章、专利及会议报告名录

发 表 文 章	1	H. Zhu et al, Computational and experimental investigation of TmAgTe2 and XYZ2 compounds, a new group of thermoelectric materials identified by first principles high-throughput screening, <i>Journal of Materials Chemistry C</i> , 3 (2015)10554-10565
	2	V. Ziae-Rad, L. Shen, J. Jiang, and Y. Shen. Identifying the crack path for the phase field approach to fracture with non-maximum suppression. <i>Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering</i> , 312 (2016) 304-321
	3	V. Ziae-Rad and Y. Shen. Massive parallelization of the phase field formulation for crack propagation with time adaptivity. <i>Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering</i> , 312(2016) 224-253
	4	S. Zahiri, C. Shao, Y. Shen, and H. Bao. Collocation meshfree method to solve the gray phonon Boltzmann transport equation. <i>Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals</i> , 70(5) (2016) 459-471
	5	Y. T.He, F. M.Wang, C. R. Li, Z. B.Yang, J. Zhang, Y. L.Li, Effect of Mg content on the hot ductility of wrought Fe-36Ni alloy with Ti addition. <i>Materials Science and Engineering A</i> , 673 (2016)99-107
	6	C. H.Liu, L.Jin, J.Dong, F. H.Wang, The use of the fracture initiation parameter F1 to predict microcrack nucleation at grain boundaries in Mg-2%Gd alloy. <i>Materials and Design</i> , 111 (2016) 369-374
	7	Y. Li, W. Li, J.C. Hu, H.M. Song, X.J. Jin. Compatible strain evolution in two phases due to epsilon martensite transformation in duplex TRIP-assisted stainless steels with high hydrogen embrittlement resistance, <i>International Journal of Plasticity</i> , 88 (2016) 53-69
	8	Y. J. Wang, Granular packing as model glass formers, <i>Chinese Physics</i> ,26(2017) 1-9
	9	C. J. Xia, J. D. Li, B. Q. Kou, Y. X. Cao1, Z. F. Li, X. H. Xiao, Y. N. Fu, T. Q. Xiao, L. Hong, J. Zhang, W. Kob, and Y. J. Wang, Origin of Non-cubic Scaling Law in Disordered Granular Packing, <i>Physical Review Letters</i> , 118 (2017) 238002
	10	W. Chen et al, Understanding Thermoelectric Properties from High-Throughput Calculations: Trends, Insights, and Comparisons with Experiment, <i>Journal of Materials Chemistry C</i> , 4(2016) 4414-4426
	11	Z. M. Gibbs, F. Ricci, G. Li, H. Zhu, K.Persson, G.Ceder, G.Hautier, A. Jain,Effective mass and Fermi surface complexity factor from ab initio band structure calculations,npj Computational Materials 3 (2017) 8
	12	Y. Liu, X.Gu, W. Qi, H. Zhu, H. Shan, W. Chen, P. Tao, C. Song, W. Shang,Enhancing the Photocatalytic Hydrogen Evolution Performance of a Metal/Semiconductor Catalyst through Modulation of the Schottky Barrier Height by Controlling the Orientation of the Interface, <i>ACS Applied Materials &amp; Interfaces</i> 9 (2017)12494-12500
	13	B. Y. Xu,H. N.Duan, H. Z. Liu, C. A. Wang, S. W.Zhong, Stabilization of garnet/liquid electrolyte interface using superbase additives for hybrid Li batteries, <i>ACS Applied Materials &amp; Interfaces</i> , 9 (2017) 21077-21082
	14	B. Y. Xu,W. L. Li, H. N.Duan, H. J. Wang, Y. P. Guo, H. Li, H. Z. Liu, Li3PO4-added garnet-type Li <sub>6</sub> .5La <sub>3</sub> Zr <sub>1.5</sub> Ta <sub>0.5</sub> O <sub>12</sub> for Li-dendrite suppression, <i>Journal of Power Sources</i> , 54 (2017) 68-73.
	15	W. H. Xia, B. Y. Xu, H. N.Duan, X. Y. Tang, Y. P.Guo, H. M. Kang, H. Li,H. Z. Liu, Reaction mechanisms of lithium garnet pellets in ambient air: the effect of humidity and CO <sub>2</sub> , <i>Journal of the American Ceramic Society</i> ,100 (2017) 2832-2839

发表文章	16	Y. Liu, X. Gu, W. Qi, H. Zhu, H. Shan, W. Chen, P. Tao, C. Song, W. Shang. Enhancing the Photocatalytic Hydrogen Evolution Performance of a Metal/Semiconductor Catalyst through Modulation of the Schottky Barrier Height by Controlling the Orientation of the Interface. <i>ACS Applied Materials &amp; Interfaces</i> , 9 (2017) 12494-12500
	17	U. Aydemir, J. H. P?hls, H. Zhu, G. Hautier, S. Bajaj, Z. M. Gibbs, W. Chen, G. Li, YCuTe2: a member of a new class of thermoelectric materials with CuTe4-based layered structure, <i>Journal of Materials Chemistry A</i> , 4 (2016) 2461-2472
	18	B. B. Zhao, J. F. Fan, Z. Chen, X. P. Dong, F. Sun, L. T. Zhang, Evolution of precipitates in a Cu-containing aluminia-forming austenitic steel after short-term mechanical tests, <i>Materials Characterization</i> , 125 (2017) 37-45
	19	L. Wang, Z. Zheng, H. Phukan, P. Kenesei, J.-S. Park, J. Lind, R.M. Suter, T.R. Bieler, Direct measurement of critical resolved shear stress of prismatic and basal slip in polycrystalline Ti using high energy X-ray diffraction microscopy, <i>ActaMaterialia</i> , 132(2017) 598-610
	20	M. M. Chiaramonte, Y. Shen, and A. J. Lew. Mapped finite element methods: High-order approximations of problems on domains with cracks and corners. <i>International Journal for Numerical Methods in Engineering</i> , 111 (2017) 864-900
	21	Y. Shen, C. Wu, and Y. Wan. Universal meshes for a branched crack. <i>Finite Elements in Analysis and Design</i> , 129 (2017) 53-62
	22	H. Xie, X. Gu, H. Bao, Effect of the accuracy of interatomic force constants on the prediction of lattice thermal conductivity, <i>Computational Materials Science</i> , 138 (2017) 368-376
	23	G. W. Zhou, Z. H. Li, D. Y. Li, Y. H. Peng, Hatem S. Zurob, P. D. Wu. A polycrystal plasticity based discontinuous dynamic recrystallization simulation method and its application to copper, <i>International Journal of Plasticity</i> 91 (2017) 48-76
	24	W. Rong, Y. J. Wu, Y. Zhang, M. Sun, J. Chen, L. M. Peng, W. J. Ding. Characterization and strengthening effects of $\gamma'$ precipitates in a high-strength casting Mg-15Gd-1Zn-0.4Zr (wt.%) alloy. <i>Materials Characterization</i> , 126 (2017) 1-9
	25	W. Rong, Y. Zhang, Y. J. Wu, M. Sun, J. Chen, Y. Wang, J. Y. Han, L. M. Peng, W. J. Ding, Effects of Zr and Mn additions on formation of LPSO structure and dynamic recrystallization behavior of Mg-15Gd-1Zn alloy. <i>Journal of Alloys and Compounds</i> , 692 (2017) 805-816
	26	Y. Wang, W. Rong, Y. J. Wu, L. M. Peng, J. Chen, W. J. Ding. Effects of Mn addition on the microstructures and mechanical properties of the Mg-15Gd-1Zn alloy. <i>Journal of Alloys and Compounds</i> , 698 (2017) 1066-1076
	27	Y. Dong, R. Wunderlich, J. Biskupek, Q. P. Cao, X. D. Wang, D. X. Zhang, J. Q. Jiang, H. J. Fecht, Co content effect on elastic strain limit in ZrCuNiAlCo bulk metallic glasses. <i>Scripta Materialia</i> , 137 (2017) 94-99
	28	A. S. Azkar, Y. Su, S. Y. Liu, Y. D. Wu, et al, Structural stability of high entropy alloys under pressure and temperature. <i>Journal of Applied Physics</i> , 121 (2017) 235901
	29	Q. Yu, X. D. Wang, Y. Su, Q. P. Cao, Y. Ren, D. X. Zhang, J. Z. Jiang, Liquid-to-liquid crossover in the GaIn eutectic alloy. <i>Physical Review B</i> , 95 (2017) 224203
	30	T. T. Debela, X. Wang, Q. Cao, D. Zhang, J. Jiang. Comparative study of crystallization process in metallic melts using ab initio molecular dynamics simulations. <i>Journal of Physics-Condensed Matter</i> , 29 (2017) 185401
	31	Q. Yu, A. S. Ahmad, K. St?hl, X. D. Wang, Y. Su, K. Glazyrin, et al. Pressure-induced structural change in liquid GaIn eutectic alloy. <i>Scientific Reports</i> , 7 (2017) 1139
	32	C. Wang, Q. P. Cao, X. D. Wang, D. X. Zhang, U. Ramamurthy, R. L. Narayan, J. Z. Jiang, Intermediate Temperature Brittleness in Metallic Glasses. <i>Advanced Materials</i> , 29 (2017) 1605537
	33	C. Wang, Q. P. Cao, X. D. Wang, D. X. Zhang, S. X. Qu, J. Q. Jiang, Time-dependent shear transformation zone in thin film metallic glasses revealed by nanoindentation creep. <i>Journal of Alloys and Compounds</i> , 696 (2017) 239-245

发表文章	34	H. G. Liao, P. H. Fu, L. M. Peng, J. Li, S. Q. Zhang, G. Q. Hu, W. J. Ding. Microstructure and mechanical properties of laser melting deposited GW103K Mg-RE alloy. Materials Science and Engineering A, 687 (2017) 281-287
	35	H. H. Ge, F. L. Ren, J. Li, X. J. Han, M. X. Xia, J. G. Li, Four-Phase Dendritic Model for the Prediction of Macrosegregation, Shrinkage Cavity, and Porosity in a 55-Ton Ingot. Metallurgical and Materials Transactions A, 48 (2017) 1139-1150
	36	C. F. Fang, Z. H. Wen, X. T. Liu, H. Hao, G. Q. Chen, X. G. Zhang, Microstructures and mechanical properties of Mg <sub>2</sub> Sn-nanophase reinforced Mg-Mg <sub>2</sub> Sn composite. Materials Science and Engineering A, 684 (2017) 229-232
	37	C. F. Fang, G. X. Liu, H. Hao, X. G. Zhang, Effects of particle distribution on microstructural evolution and mechanical properties of TiB <sub>2</sub> /AZ31 composite sheets. Materials Science and Engineering A, 684 (2017) 592-597
	38	F. F. Wang, Q. X. Ma, W. Meng, Z. Q. Han, Experimental study on the heat transfer behavior and contact pressure at the casting-mold interface in squeeze casting of aluminum alloy. International Journal of Heat and Mass Transfer, 112 (2017) 1032-1043
	39	R. He, J. F. Jin, Y. P. Zong, Effects of Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> Particles on Grain Growth of AZ31 Magnesium Alloy at Elevated Temperatures by Phase Field Simulation. International Conference on Materials Science and Engineering Application. (2017) 216-221
	40	F. Yu, W. A. Han, X. T. Li, H. Hao, Effect of calcium addition on microstructure, casting fluidity and mechanical properties of Mg-Zn-Ce-Zr magnesium alloy. Journal of Rare Earths, 35 (2017) 503-509
	41	S. J. Zhang, R. G. Li, H. J. Kang, Z. N. Chen, W. Wang, C. L. Zou, T. J. Li, T. M. Wang, A high strength and high electrical conductivity Cu-Cr-Zr alloy fabricated by cryorolling and intermediate aging treatment. Materials Science and Engineering A, 680 (2017) 108-114
	42	Y. Li, W. Li, N. Min, W. Liu, X. Jin, Effects of hot/cold deformation on the microstructures and mechanical properties of ultra-low carbon medium manganese quenching-partitioning-steels, ActaMaterialia 139 (2017) 96-108
	1	H. Wang, An International Workshop on the Genome of Stone-based Civil Infrastructure Materials, Sponsored by US National Science Foundation National Center for Materials Service Safety (NCMS), and Tsinghua University, Tiangong Mansion, University of Science and Technology, "Status and Prospect of Materials Genome Initiative in China" June 8-9, 2016 Beijing, China
会议报告	2	H. Zhu, 9th International Conference on Computational Nanoscience and New Energy Materials, CNNEM-2016, "Thermoelectric Materials Design Through High-Throughput Computations" June 2016, Shanghai University
	3	Y. X. Shen, European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS), "Hydraulic fracturing simulation with a phase field approach: A preliminary study", June 10, 2016, Crete Island, Greece
	4	Y. X. Shen, 12th World Congress on Computational Mechanics (WCCM), "An error-estimate-free mesh refinement and coarsening method for the phase field approach to fracture", July 27, 2016, Seoul, Republic of Korea
	5	Y. X. Shen, 12th World Congress on Computational Mechanics (WCCM), "Hydraulic fracturing simulation with a phase field approach: A preliminary study", July 27, 2016, Seoul, Republic of Korea
	6	Y. X. Shen, 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM), "Universal meshes for a branched crack", August 22, 2016, Montréal, Québec, Canada
	7	汪洪,中国科学仪器设备与试验技术发展高峰论坛(PFIT'2016)材料基因组高通量合成与表征报告会,“成分空间连续分布的Fe-Co-Ni材料芯片高通量制备与表征”2016年9月21日,北京

会议报告	8	张鹏,中国科学仪器设备与试验技术发展高峰论坛(PFIT'2016)- 材料基因组高通量合成与表征报告会,“高通量光电化学 / 紫外 - 可见光吸收表征系统” 2016 年 9 月 21 日,北京
	9	邢辉,中国科学仪器设备与试验技术发展高峰论坛(PFIT'2016)- 材料基因组高通量合成与表征报告会,“高通量扫描纳米束衍射表征及其在高熵合金疲劳断裂中的应用” 2016 年 9 月 21 日,北京
	10	徐比翼,夏文豪,郑鸿鹏,陈挺,刘河洲,段华南,第三届青岛储能技术论坛暨第二届全国固态电池技术及材料基因组方法应用研讨会,“含锂石榴石固态电解质的研究进展及与材料基因组思想的结合” 2016 年 9 月 17 日 -19 日,山东青岛
	11	李大永,2016 新材料国际发展趋势高层论坛,“集成材料计算工程(ICME)在铝合金微通道管材热挤压成形的应用” 2016 年 9 月 24~26 日,中国·南京
	12	汪洪,2016 新材料国际发展趋势高层论坛,“Fe-Co-Ni 材料芯片的同步辐射高通量表征” 2016 年 9 月 24~26 日,中国·南京
	13	Y. X. Shen, Chinese Conference on Computational Mechanics in Conjunction with International Symposium on Computational Mechanics (CCCM-ISCM) , “Energy-based adaptive mesh refinement and coarsening for the phase field approach to dynamic fracture”, October 18, 2016, Hangzhou, China
	14	H. Wang, MRS Fall Meeting, “Fe-Co-Ni phase diagram construction by combinatorial materials chip approach”, December 4, 2016, Boston, USA
	15	汪洪,北京材料基因组工程与中子技术,香山科学会议第 584 次学术讨论会,“中子散射在材料科学与工程中的应用” 2016 年 12 月 13~14 日,北京
	16	Y. S. Su, 2017 EMN Summer Meeting, “Structural Modeling and Mechanical Behavior of Nanocarbon Reinforced Aluminum Matrix Composites Inspired by Nacre” May 4 2017, Havana, Cuba
	17	H. Wang, 2nd CACES Research Symposium Joint Institute of UM-SJTU, “China Materials Genome - A New Paradigm for Materials Research” May 20 2017, Shanghai
	18	Y. S. Su, 6th Annual World Congress of Advanced Materials, “Composite Structural Modeling and Mechanical Behavior of Nanocarbon Reinforced Aluminum Matrix Composites” June 14, 2017, Xi'an
	19	Y. X. Shen, 14th International Conference on Fracture (ICF) , “Phase field modelling of brittle fracture in thin shells accounting for cracks partly through the thickness” June 21, 2017, Rhodes, Greece
	20	Y. X. Shen, VIII International Conference on Adaptive Modeling and Simulation (ADMOS) , “An error-estimate-free mesh refinement and coarsening method for the phase field approach to fracture” June 27, 2017, Verbania, Italy
	21	B. B. Zhao, X. P. Dong, F. Sun, L.T. Zhang, 2017 ASME Turbomachinery Technical Conference & Exposition (TURBO2017), “Introduction of L12-ordered precipitation to alumina-forming austenitic heat-resistant steels with low Ni content” June 30 2017, Charlotte, US
	22	Y. X. Shen, 14th United States National Congress on Computational Mechanics (USNCCM), “The successive node snapping scheme: A method to obtain conforming meshes for propagating cracks and line defects” July 18 2017, Montréal, Québec, Canada
	23	H. Zhu, C-MRS Meeting, “Thermoelectric Materials Design with Materials Genome Initiative Approach” July 10 2017, Yinchuan
	24	Y. S. Su, 21th International Conference of Composite Materials, “Simulation of compressive behaviour of graphene (Gn) reinforced aluminium matrix composite micropillars” August 20, 2017, Xi'an

专 利	1	吴玉娟, 容伟, 王英, 张宇, 彭立明, 陈娟, 丁文江. 高强度高 Gd 含量的变形镁合金及其制备方法, 中国: 20160680301.2, 2016.
	2	吴玉娟, 程晓伟, 彭立明, 韩靖宇, 陈娟, 刘保良, 丁文江. 铸造镁合金的真空吸铸装置. 中国: 201610757429.4, 2016.
	3	吴玉娟, 赵倩, 彭立明, 刘保良, 王科, 袁灵洋, 丁文江. 适用于非均匀壁厚复杂铸件的多点定向挤压铸造方法. 中国: 201710488116.8, 2017.
	4	陈娟, 韩靖宇, 彭立明, 吴玉娟, 郑飞燕, 丁文江. 镁合金中含细小 LPSO 结构的细晶复合组织的制备方法. 中国: 201710391725.1, 2017.
	5	罗岚, 刘勇, 王雨, 郭锐, 丁岩. 一种用于金属 3D 打印的多组分实时控制精密送粉系统. 中国: 201610323445.2, 2016.
	6	罗岚. 一种高通量制备镁合金块体样品的方法. 中国: 201611028212.6, 2016.
	7	刘文才, 肖旅, 吴国华, 田莹, 邹文兵, 李中权, 丁文江. 适于砂型铸造的镁锂合金及其制备方法. 中国: 201610705675.5, 2016.
	8	刘文才, 吴国华, 赵炯, 丁文江. 高强度铸造镁锂合金及其制备方法. 中国: 201610704314.9, 2016.

附:

材料基因组相关论文标注要领(根据需要选择):

#### 1. 作者单位标注

上海交通大学材料基因组联合研究中心, 上海 200240

Materials Genome Initiative Center, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240

#### 2. 致谢标注

本文受上海交通大学材料基因组联合研究中心资助。

This paper is (partly) supported by the Materials Genome Initiative Center, Shanghai Jiao Tong University.

有国家/地方项目号的按其规定标注, 注意顺序要求。