

金属之光

3

中国科学院金属研究所
2014年 第3期 (总第154期)

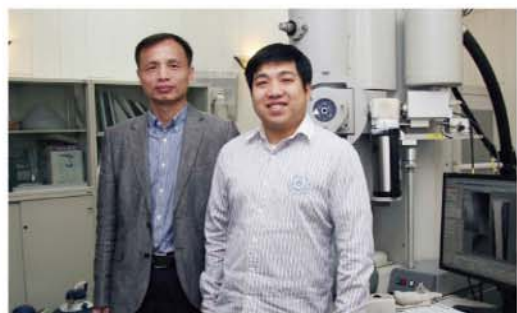
INSTITUTE OF METAL RESEARCH, CHINESE ACADEMY OF SCIENCE

结构陶瓷功能化课题组



体心立方金属中变形诱发相变研究取得新进展

体心立方 (bcc) 结构的金属和合金被人类广泛地应用在生产和生活当中。它们最主要的优点是在很宽的温度范围内和很大的应变状态下都表现出很高的强度，因此体心立方金属的变形行为一直以来都是物理学家和材料学家所关注的问题。但是体心立方金属的微观变形机制比较复杂，到目前为止人们对它的了解还很不透彻。金属的塑性变形通常是由位错主导的，此外也有孪晶的变形方式。在某些合金（例如相变致塑 (TRIP) 钢和形状记忆合金）中，应力诱发相变也是一种有效的变形方式，但是到目前为止还没有实验能够阐明体心立方金属在外力作用下通过相变进行塑性变形的机制。特别是纯钼 (Mo)，它在熔点以下只具有体心立方结构，实验上还没有发现它存在其它的晶体结构形式。因此，类似 Mo 这样的单质金属是否会在塑性变形时发生结构相变也是科研人员所关注的一个问题。

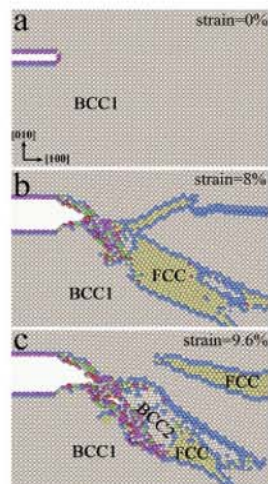


杜奎研究员（左）和王崧副研究员（右）

最近，沈阳材料科学国家（联合）实验室固体原子像研究部杜奎研究小组与钛合金研究部王崧副研究员等科研人员合作，通过原位透射电镜观察和定量应变分析，结合分子动力学计算，揭示了金属 Mo 在应力加载下由 $\langle 001 \rangle$ 取向的 bcc 晶粒通过面心立方结构 (fcc) 的中间相转变到 $\langle 111 \rangle$ 取向的 bcc 晶粒，实现

了 15.4% 的拉伸应变。这一研究揭示了单质金属在高应力条件下的应力诱发相变变形机制。

研究表明，原位拉伸加载时，在纯 Mo 中裂纹尖端处发生了 $\text{bcc1} \rightarrow \text{fcc} \rightarrow \text{bcc2}$ 的相变，部分 $\langle 001 \rangle_{\text{bcc}}$ 取向的晶粒 (bcc1) 通过 fcc 中间相转变到 $\langle 111 \rangle_{\text{bcc}}$ 取向 (bcc2)，相当于晶格转动了 54.7° 。在拉伸应力卸载后，部分 bcc2 晶粒和 fcc 相逆转变回原始的 bcc1 晶粒。通过定量电



子显微学分析，探测到拉伸应力加载时裂纹尖端的局部剪切应力达到约 8 GPa，正是由于如此大的局部应力才驱动了 $\text{bcc1} \rightarrow \text{fcc}$ 的结构相变。这说明了即使是 bcc 结构非常稳定的难熔金属 Mo，当内部产生局部应力集中，而其它变形方式又受到抑制时，也会产生结构相变。在塑性变形时，应力诱发相变可以部分地释放材料内部的应力集中，从而协调材料的变形，阻止微裂纹的萌

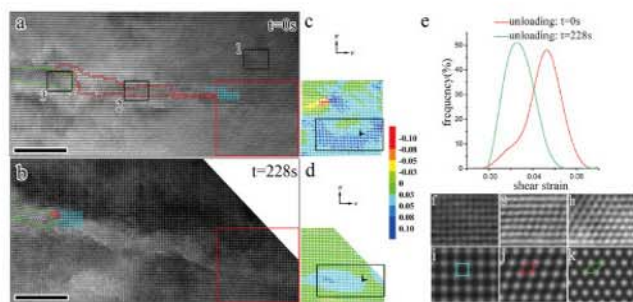


图3应力卸载后裂纹尖端的晶体结构变化和定量应变分析。蓝色、红色和绿色圆点标记了 bcc1、fcc 和 bcc2 相的原子。LADIA 应变分析显示了伴随逆相变的应力释放

生和扩展，最终为改善体心立方金属的塑性做出贡献。此外， $\text{bcc1} \rightarrow \text{fcc} \rightarrow \text{bcc2}$ 相变所对应的 54.7° 晶格转动也为金属变形时的晶粒扭转提供了一条新途径。

该研究得到了国家自然科学基金、科技部 973 计划项目的资助。

相关论文已于 3 月 7 日在线发表于《自然-通讯》上 (Nature Communications 5:3433 (2014), DOI: 10.1038/ncomms4433)。

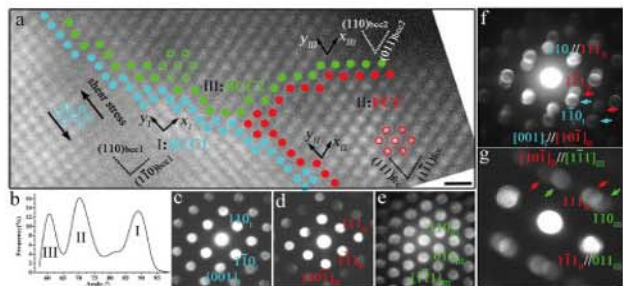


图1纯Mo裂纹尖端的三种不同的晶体结构或取向。高分辨扫描透射电子显微像中，蓝色、红色和绿色的圆点分别标示出 $\langle 001 \rangle$ -bcc1、 $\langle 110 \rangle$ -fcc 和 $\langle 111 \rangle$ -bcc2 取向的原子

金属所在高能量密度锂硫电池研究方面取得进展

单质硫作为锂硫二次电池正极材料的理论比容量高达 1675mAhg^{-1} ，与金属锂构成的二次电池体系理论比能量密度可达 2600Wh/kg ，是商业钴酸锂/石墨锂离子电池（理论能量密度 360Wh/kg ）的7倍，同时单质硫价格低廉、产量丰富、安全无毒、环境友好，故锂硫电池被认为是很有发展前景的新一代电池。

然而锂硫电池面临三个主要挑战：单质硫是电子和离子的绝缘体；在充放电过程中硫易形成溶于电解液的锂多硫化物而使活性物质流失，形成较厚的 Li_2S_2 和 Li_2S 绝缘层，阻碍活性物质的进一步扩散和反应；在充放电过程中硫发生体积膨胀和收缩会使电极材料的结构发生变化，与金属集流体发生脱离，导致循环过程中容量快速衰减、硫利用率低。因此锂硫电池的正极是限制其应用的重要瓶颈和亟待解决的难题。这些问题可通过形成碳硫复合电极材料来加以解决，但会降低整个电池的能量密度，只有碳硫复合电极材料中硫含量超过70wt%才具有应用价值。

从2010年开始，沈阳材料科学国家（联合）实验室先进炭材料研究部针对以上挑战，利用碳材料优越的导电性、良好的化学稳定性和热稳定性、大的比表面积、丰富的孔结构和表面官能团，在微观尺度上进行了碳硫复合材料的设计，将硫限制在纳米炭材料的微孔、缺陷及表面活性位，有效增加了硫的导电性并限制了多硫离子的溶解，获得了一系列高性能碳硫复合电极材料，显著提升了锂硫电池的性能。特别是最近该团队从实际应用出发，在宏观尺度上提出了独特的锂硫电池三明治正极结构的思路，即利用轻质石墨烯集流体替代传统的铝箔，将纯硫涂覆到石墨烯集流体上，与涂覆石墨烯的隔膜组成三明治正极结构。石墨烯集流体具有较高的表面粗糙度和柔性层状堆叠结构，前者可以提供与活性电极材料良好的电接触（明显优于传统铝箔集

流体），后者可有效缓冲单质硫在充放电过程中的体积膨胀，从而保证持久稳定的电接触。同时石墨烯集流体对硫及多硫化物具有良好的吸附能力，在电化学反应过程中可以减少由于多硫化物溶于电解液而造成的活性物质流失。石墨烯复合隔膜中的石墨烯层也可以有效抑制溶解的多硫离子的穿梭效应，降低了电池由于穿梭效应造成的不可逆容量，使电池的库仑效率在长期循环过程中始终接近100%，而且循环稳定性显著提高；同时由于该石墨烯层具有良好的导电性，可以作为前置集流体增加与电极材料的电接触，进一步降低了电池的内阻，保证了电池具有快速充放电性能。此外，他们在研究中首次利用X射线三维成像技术观察了多硫化物的扩散过程，证明了三明治结构设计的优势（图1）。他们以工业化生产的石墨烯为原料通过连续工艺制备了石墨烯集流体和石墨烯复合隔膜，并且其组装方法与现有的锂离子电池制造工艺可以兼容，具有进一步放大和产业化的前景。

相关研究工作分别发表在国际学术期刊 *Adv. Mater.*, 2014, DOI: 10.1002/adma.201302877(被选为 Back cover), *ACS Nano*, 2013, 7, 5367 – 5375, *Energy Environ. Sci.*, 2012, 5, 8901 – 8906, 并申请了3项中国发明专利。上述工作得到了国家自然科学基金委、科技部和中科院等有关项目的资助。

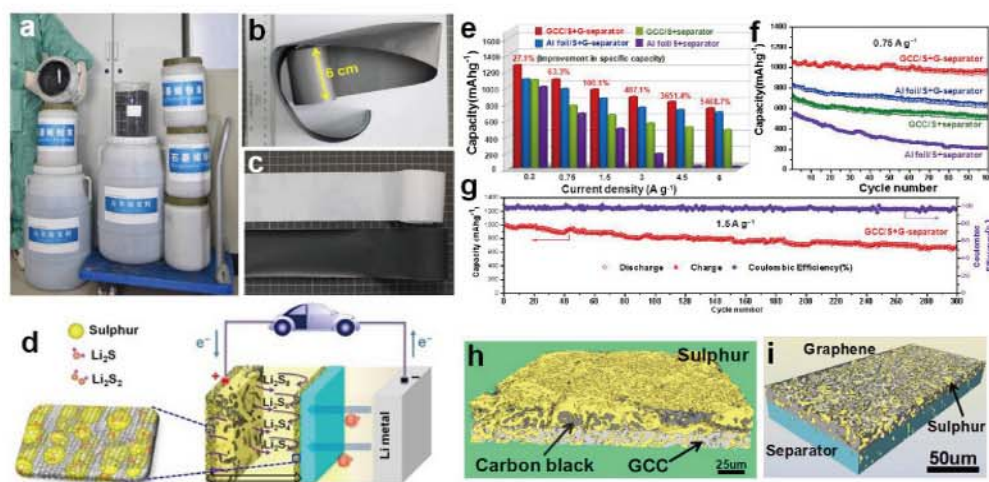


图1 a: 大量制备的石墨烯原料; b: 连续石墨烯集流体; c: 涂覆有石墨烯的连续隔膜; d: 三明治锂硫正极结构的示意图; e: 不同电池构造的锂硫电池的倍率性能; f-g: 循环稳定性; h-i: 三维X射线成像分析硫在硫正极及石墨烯复合隔膜中的分布

聚焦：结构陶瓷功能化课题组

——探索具有超低晶格热导率的高温陶瓷

低热导率陶瓷在航空发动机的热障涂层及航天领域隔热和超级绝热部件有重要的应用，是飞行器以更高的效率和速度安全飞行的保障。目前已经发展出几类成熟的高性能低热导率隔热陶瓷，如氧化钇稳定氧化锆（YSZ）以及多孔（微米至纳米孔）的氧化硅、氧化铝和氧化锆等，部分满足了实际需求，但它们仍存在各自的性能缺点，难以同时满足耐高温、超级隔热和高比强度的更高性能需求，发展新的高性能隔热体系迫在眉睫。科研人员采用“试错法”已经探索了上百种候选材料，但目前的研究方法很难获得量化的准确结果，对完全实现低热导率陶瓷合理选材的目标缺乏指导性。本领域的未来发展趋势是采用量化预测和选材的研究路线，重点在熔点高、成分和晶体结构复杂的陶瓷材料中寻找候选体系。

高性能陶瓷研究部结构陶瓷功能化课题组结合理论模拟和实验探索，建立了一种集成化的低热导率高温陶瓷本征晶格热导率的预测和评价方法，在指导先进隔热材料的选材方面取得了重要成果。课题组通过分析固体传热机理，基于减小声子传播的平均自由程的思想总结了设计低热导率高温陶瓷新体系的基本原则，提出了化学成分、化学键强度非均匀性和晶体结构等理论判据；然后建立了基于第一原理密度泛函计算来准确预测高温陶瓷晶格热导率随温度变化的理论方法，对于性能未知的高温陶瓷新材料，完全不依赖于实验数据结果，就能够揭示材料的成分和晶体结构特点等对晶格热导率的影响，实现超低热导率高温陶瓷的预测和优化设计。课题组先后开展了稀土磷酸盐（ $REPO_4$ ）、稀土 $A_2B_2O_7$ 焦绿石、稀土硅酸盐（ RE_2SiO_5 和 $RE_2Si_2O_7$ ）、四元稀土 $RE-Si-O-N$ 化合物（ $RE_4Si_2O_7N_2$ 、 $RESiO_2N$ 、 $RE_2Si_3O_3N_4$ 、 $RE_3Si_5N_9O$ 和 $RE_5Si_3O_{12}N$ ）、稀土铝酸盐（ $REAlO_3$ 、 $RE_3Al_5O_{12}$ 和 $RE_4Al_2O_9$ ）和 $MAl_2Si_2O_8$ （ $M=Mg$ 、 Ca 、 Sr 和 Ba ）等高温陶瓷体系晶格热导率的量化理论预测，找到了一些具有极低热导率的高温陶瓷新材料（作为参考，其晶格热导率低于致密YSZ、 $La_2Zr_2O_7$ 和 $LaPO_4$ 等低热导率陶瓷），指导了探索新型低热导率高温陶瓷的实验制备及性能研究。

在理论预测的基础上，课题组掌握了具有自主知

识产权的稀土硅酸盐、稀土铝酸盐和稀土 $RE-Si-O-N$ 化合物致密体材料的制备技术，成功制备出几十种材料体系并获得了它们的综合性能，发现了其中一些陶瓷具有耐高温和低热导率的特点。经过筛选确定出几种耐高温（熔点高于 1800°C 、高温刚性在 1600°C 保持室温值80%以上、韧脆转变温度高于 1400°C ）低热导率稀土硅酸盐陶瓷，它们在耐高温隔热材料领域有重要的应用前景。在实验探索的过程中，课题组对测量得到的热扩散系数进行了理论分析和数学处理，建立了排除缺陷和热辐射等因素对热扩散测量影响的合理方法，获得了本征晶格热导率的准确实验数据，与理论预测结果符合得非常好，实现了量化评价高温陶瓷晶格热导率的科学目标。

在集成化选材获得结果的指导下，课题组探索了不同孔结构稀土硅酸盐多孔材料的制备、结构和性能，重点在发泡凝胶注凝——原位反应烧结工艺方面获得突破，发展出具有耐高温（ $>1400^\circ\text{C}$ ）、高强度（ $>14\text{MPa}$ ）、高孔隙率（ $>85\%$ ，多级孔结构）的超低热导率多孔高温陶瓷，为满足下一代耐高温、高比强隔热材料的战略需求提供了新的候选体系。

结构陶瓷功能化课题组自2006年建立以来，面向航天和核能系统应用的高性能陶瓷，以原子尺度的模拟和预测为指导，突破了单相/致密体材料、薄膜、多孔材料（多级孔结构）及近净成形复杂形状工件的制备技术，探索和发展了高损伤容限、耐高温、抗辐照、抗高温水蒸气腐蚀、超级隔热的（下转第五版）



课题组负责人王京阳研究员



● 3月20日，德国西门子中央研究院（Corporate Technology, Siemens AG）材料专家Ulrich Bast博士及西门子中国研究院材料验证与涂层研发部李长鹏博士访问金属所。



● 3月13日，中国航天科工集团副总经理刘石泉等一行5人到金属所调研科研及生产情况。刘石泉副总经理充分肯定了金属所在材料研究领域取得的丰硕成果，并与相关人员就今后进一步拓展合作领域进行了交流。



● 3月4日，中航工业沈飞召开2014年厂际劳动竞赛工作会议，金属所精密管材研究部获得二等功。在前两次竞赛表彰中，精密管材研究部已获得两次三等功、两次二等功。



● 2月26日，中国科学院科技促进发展局严庆局长、高技术处付广义副处长在中国科学院沈阳分院马越红副院长陪同下到金属所调研。



● 1月24日，金属所控股企业沈阳中科三耐新材料股份有限公司正式登陆全国中小企业股份转让系统（北京证券交易所），成为金属所投资企业中第一家正式进入全国性资本市场的高技术公司。



● 金属所2014年度“先进炭材料杯”职工研究生棋牌赛落下帷幕，此次比赛共分三个项目，分别是中国象棋、围棋和桥牌，来自18个分会的60余名职工以及部分研究生参加了比赛。

科研之初体验

朱若林

前段时间，开始经历科研的磕磕碰碰，作为一名科研的菜鸟，我经常问同学一个问题：“你眼中的科研像什么呢？”他们的回答各有千秋，每个人的经历不同，对科研就有了不同的看法。

有同学说：“科研就像炒菜，要是炒得不好吃就加入不同的调料，选用不同的火候，需要不断的尝试，才能炒出一盘好菜。”有同学说：“科研就像练功，而且是练龙爪手、易筋经、大力金刚掌之类的武功，那些都是少林功夫。不仅需要刻苦的练习，还要有色即是空的觉悟，不断的像参禅一样去琢磨，才有可能把这种功夫练好。”也有同学开玩笑说：“科研就像坐牢，整天呆在实验室里，没有自由。”……

从我的经历来讲，搞科研更像是看电视剧，有着各种悬念，剧情起伏跌宕，让人想不透。只是看电视时出人意料的剧情让我们着迷，起到引人入胜的效果；而搞科研时碰到意外情况则通常让我们无语，令人避之不及。

下室接触的第一个实验是做紧凑拉伸试样的疲劳预裂纹，前几个试样做的还不错，可是后面四五个试样就都做废了，一般都是从失败中慢慢积累经验走向成功，这条常理用到我身上就不灵验。好不容易把问题解决，做完实验，心里正高兴着，可是第二天去卸夹具时，竟然发现疲劳机机身带电，孰不知前一天做实验时还好好的。当或主动或被动的被电了好几次后，我被告知电压高达150V，到现在还心有余悸。

后来师兄教我做高温高压循环水中试样的裂纹扩展实验，安装个试样，调下水环境就得一两天的时

间，正常情况下一做就得耗时两三个月。一直在祈祷实验过程中不要出问题，否则可能前功尽弃。但祈祷显然不起作用，几天后出现数据采集错误，发现试样与釜体短路，不明白短路的过程和原因，只好更加仔细地重新安装试样，确保每个环节都没问题。可是第二天相同问题再次出现，这次我们用万用表二极管档测试试样是否和高压釜体导通，结果竟然发现正向导通，反相不导通的二极管单向导通的现象。可我们只是在检测一种金属和另一种金属是否接触的简单问题，根本就不存在二极管，此时剧情可谓扑朔迷离。唯一清楚的是，要是谁能用两种金属制备出二极管来，他一定会成为一名物理学界的大牛。

各种尝试无果后，我们心灰意冷，关掉了数据采集系统。等吃完晚饭回来，不抱希望地重新测试，却惊喜的发现实验奇迹般的好了。最后我们才搞明白，一切的根源在于设备的老化。单向导通也只是金属在腐蚀性溶液中钝化和万用表内的电源对它电解导致的。从遇到问题到搞明白前后花了20多天的时间，实验没有进展，这是多么痛的领悟。这类意外情况还遇到太多太多，经常是哭笑不得，各种无奈。

无法预知、想不通或许才是科研的真谛。科研总是磕磕碰碰，但还好一直有师兄的指导，每当碰到貌似解决不了的问题时，师兄总会说：“你要相信，任何问题，只要你足够用心的话，总有解决的办法。”慢慢的我也开始相信了，科研碰壁时，需要用这句话来自我激励。

只有懂得，才会慈悲

夏天

清晨5点，沈城尚未苏醒，朦胧灰白的天空一如上班族惺忪的睡眼，不愿开始冰冷酷寒的一天。我很少看到这个时间点的沈城，如果不是为了抢实验资源，今天我还会一睁眼就看到灿烂的冬日暖阳。

房间内还一片漆黑，我蹑手蹑脚地起床洗漱，洗刷间那片柔和的灯光在占统治地位的黑暗中愈发温暖。那灯光微小，却又倔强，给畏惧寒冷的我一丝勇气。时空瞬间转换，儿时父亲在冬天外出打工临走前

早起的情景一下子浮现在脑海，一样冰冷的夜，一样柔和倔强的灯光。

那时，父母还年轻；那时，他们有嗷嗷待哺的孩子，肩扛上养老下养小的重担；那时，他们为扑朔迷离备受怀疑的“美好未来”打拼，孤注一掷，皆大欢喜还是鸡飞蛋打，这需要坚持的勇气。那份责任和压力是如何的承重。生活的清苦容不得你抱怨，除了裹紧棉衣融入冰天雪地之中，他们别无选择。时至今

日，当自己长大成人，有了责任，才猛然间懂得了父母的那份艰辛，还有那份孤独。

我们都是滚滚历史长河中最微不足道的水滴，绵延不绝的人类像一场歌剧，悲欢离合喜怒哀乐。残酷的是，我们与父母各自在舞台上做主角的时间是错开的。当你长大了，能够懂得他们的欢喜和哀愁时，他们却已经垂垂老矣，并转身朝着台下走去。如果时间

可以穿越，我想为他们鼓掌喝彩，像知音一样在他们最需要认可的时候给予精神上的鼓励。

走在去实验室的路上，看到川流不息的车流和身穿厚重棉衣奔波的人们，忽然感慨，每一个平凡的人都不简单，都曾经历各自人生的苦难。只有懂得，才会心怀感恩，也只有懂得，才会慈悲为怀。



孙晓英

小感 ——风下一叶

时光匆匆，
在岁月的车辙里，
滚来滚去。

某年某月某日，
你遇见了谁，
又在那时那刻，
和谁画上了别离？

时间的光影，
是明媚如春，
沁人心脾，
还是寒冷孤寂？

是谁？
执念地不肯忘记梦想的初始，
妄图将现实圈在虚幻的梦里？

是谁？

不断地默认生活雕刻的肆意，
丢弃了原本那份单纯的希冀？

是谁？
在挣扎地逃离生活的创伤，
而脸上却满是虚假的笑意？

是谁？
妄图冲破虚幻的牢笼，
而锁上的心如何恣意？

是谁？又是谁？
在茫茫的人海里，
给予你微暖，
却转身离去，
不容喘息？

是谁？忘记了谁？
是生活太过匆忙，

还是我们太过自私？
不肯说声谢谢，
便暮然的离去？

这，
世界，
很是离奇。

于是，
我们，
深埋了自己。

后记：曾经看过一句话：有些人来过我们的生命，给我们上了一课，便匆匆离去。感谢那些曾经给予我温暖的人们，也许我不曾表达道谢，但点点滴滴都凝在我心。

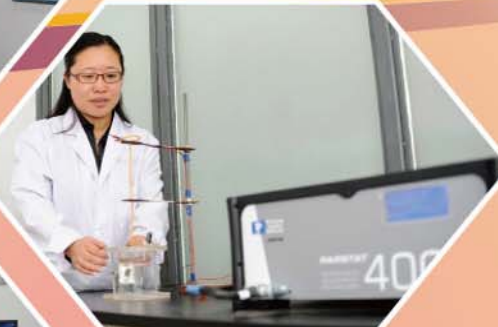
（上接第三版）先进陶瓷材料。课题组近年发表140多篇SCI学术论文，被SCI刊物他引2000多次，H-index统计因子为30，已申请或授权专利10多项。学术负责人王京阳研究员在国际会议上作了邀请报告30余次，20余次任分会的组织者及主席，2012年获得美国陶瓷学会颁发的“Global Star Award”，还曾先后获得2005年辽宁省自然科学一等奖、2010年国家

工业和信息化部科技进步一等奖和2011年度国家科学技术进步二等奖等奖励。目前，他担任美国陶瓷学会工程陶瓷部Secretary-elect及Award Committee Member，中国硅酸盐学会特陶专业委员会以及测试专业委员会、物理学会内耗与力学谱专业委员会、中国材料研究会青年委员会等学术组织的理事。

三月，我们的节日

巾帼风采 Show

岗位建功



多彩英姿



中国科学院金属研究所
INSTITUTE OF METAL RESEARCH, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

主 编：杨锐 副 主 编：谭若兵 张健
责任编辑：刘言



联系电话：024-23971507

E-mail: yanliu@imr.ac.cn

通信地址：沈阳市文化路72号 / 邮编：110016

homepage: <http://www.imr.cas.cn>