



《材料热力学及应用》

《材料科学与工程学科硕士研究生用》

第五章 材料设计与热力学

5.1 材料设计与热力学 (1学时)

5.2 不锈钢材料热力学解析 (3学时)

5.3 镁合金材料热力学解析 (2学时)

5.4 其它新型材料热力学解析 (1学时)

5.1 材料设计与热力学

在以往的材料开发上，通常采用“试错法”来实现，即材料开发人员通过大量的实验和经验来选择材料的成分、稳定工艺参数。

材料科学研究面临的突出问题：

- (1) 由于研究对象的复杂性，现有理论模型无法突破局限性，对一些错综复杂问题的处理难以令人满意；
- (2) 虽然新的实验技术、仪器和设备不断涌现，在一定范围内为实验研究提供了新的途径，但大都极为昂贵。

材料制备中不容忽视的问题：具有一定组织和性能的多组元或多相材料的成分缺乏可预见性。相图常常作为确定材料制备工艺路线的唯一依据。

5.1 材料设计与热力学

对于多元、多相新兴材料，绝大多数情况下只能找到其构成元素间的二元相图，而三元和三元以上的多元相图非常有限。因此，对多组元合金制备时成分的确定相当缺乏理论指导，而试验尝试的方法盲目性较大，又非常耗时耗力。

传统材料研究方法存在很多局限性。对新材料研制，单纯依靠理论研究和实验尝试都不能保证科学性和高效性。

5.1 材料设计与热力学

20世纪60年代相计算(PHACOMP)技术在Ni基高温合金成分设计上的成功应用揭开了合金设计的序幕。

70年代出现的CALPHAD技术已经是在追求利用普遍适应性的热力学模型获得多元体系中所有物相(包括亚稳相)的特征函数，再通过严格的热力学理论，得到多元体系的所有物相的热力学性质，使材料设计由经验设计向科学设计转变。

5.1 材料设计与热力学

解释已有的实验现象，预测未知领域的情况

(1) 将相图和合金体系中各相的热力学参数作为重要依据来研制、开发新材料。

(2) 利用相图制订材料生产和处理工艺。

(3) 利用相图分析平衡态组织和推断非平衡态组织变化。

(4) 利用相图与性能关系预测材料性能。

(5) 利用相图进行材料生产过程中的故障分析。

用理论的方法，已有的热力学数据通过理论的数学或物理模型来发展计算相图尤为重要。

5.1 材料设计与热力学

传统的材料设计方案---炒菜式



元素周期表

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
H	He	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J



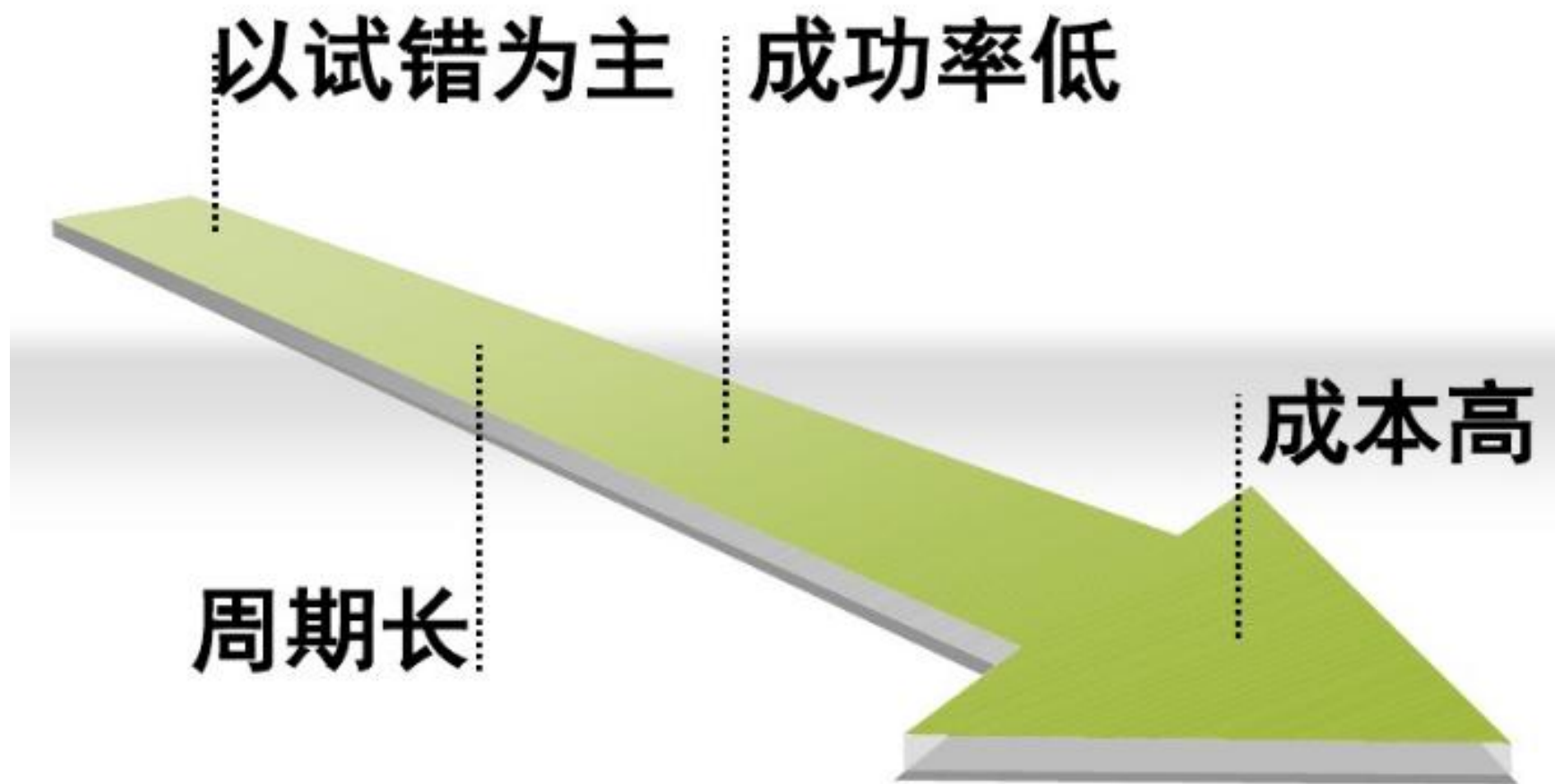
酸、甜、苦、辣……

强度、塑性、抗腐蚀性……



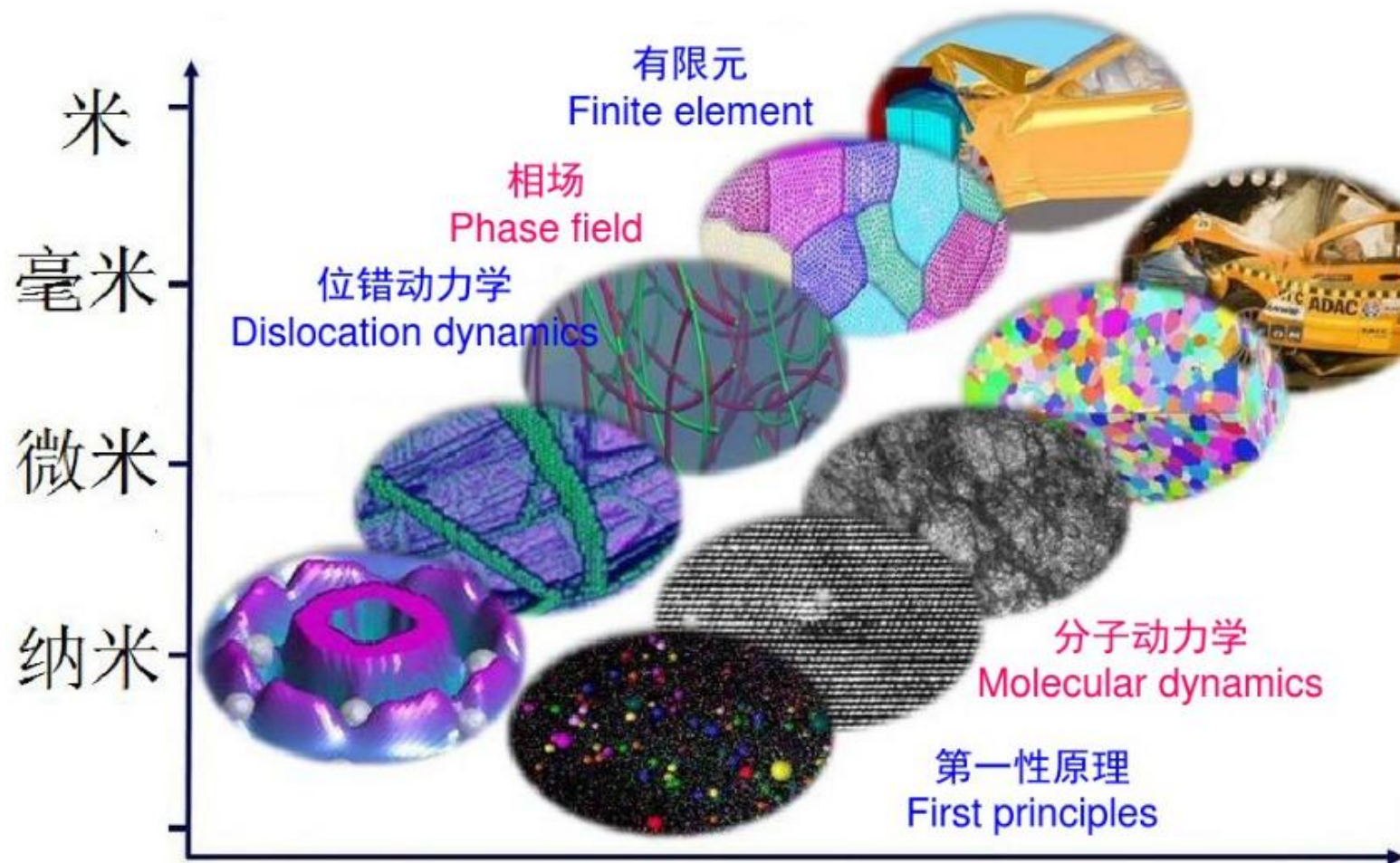
5.1 材料设计与热力学

炒菜式---局限性



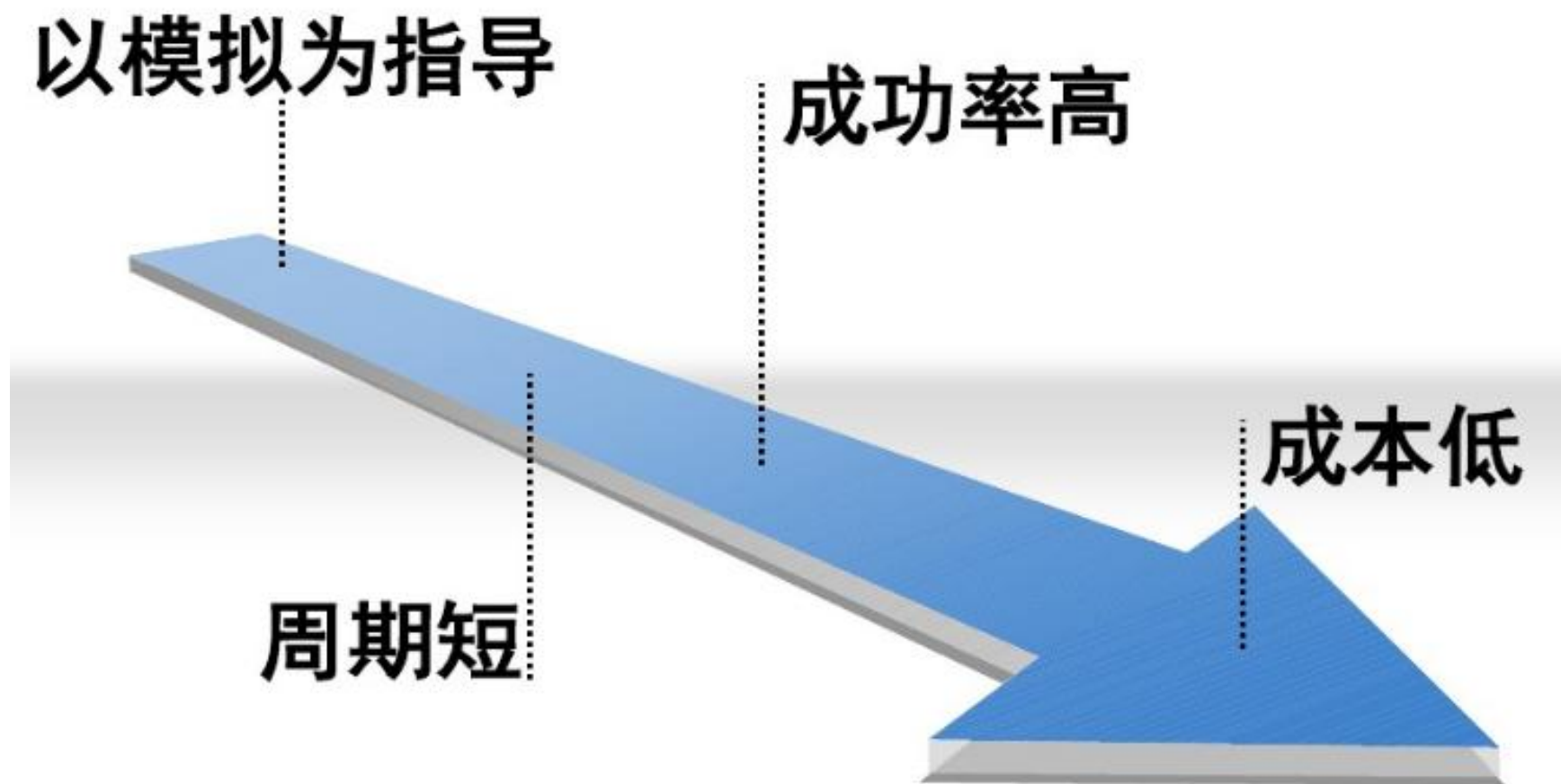
5.1 材料设计与热力学

以模拟为指导的设计



5.1 材料设计与热力学

以模拟为指导的设计



5.1 材料设计与热力学

从理论出发，重新认识和设计新材料

一个多世纪以来，材料科学家已经能够计算化合物相应的结构、电子态以及力学性质所呈现出来的实验数据。已成为发展、选择和设计材料的基石。

基于量子力学计算，通过密度泛函理论（DFT）获得，可计算材料电子结构，提供材料原子尺度的性质。

计算数据库不仅能够提供材料系统的信息，还能够提供实验室并没有被合成出来材料的信息。为新材料的发现提供一些背景和方向信息。

5.1 材料设计与热力学

DFT数据库的一项流行的应用便是热力学稳定性分析，对于一组给定的化学元素，在低温下稳定的组成和结构分析能够被确定下来。数据库规模在稳定增长。新的系统包含了新的晶体结构和组成，理论计算方面，更多的是希望能够确定有用的材料的信息。

1. 数据表示法 (DATA REPRESENTATION)

理论数据，相对于实验数据，具有易分辨和易重复的优势。DFT计算就是侧重于原子数量和所有原子位置，外加一些其他因素就可以描述一个复杂系统。

2. 数据质量 (DATA QUALITY)

计算材料科学用一系列代码来解决DFT本征方程，但需要用不同的数值方法。计算元素晶体状态方程，可以建立不同的代码之间的协议。对更复杂的材料性质的计算仍然是一大挑战，并且精度需要估计。但不幸的是，不同代码之间输出不同，以至于困难更大。这个问题正在被欧洲联盟卓越中心的新材料发现实验室解决。

5.1 材料设计与热力学

DFT数据库的一项主要的应用便是热力学稳定性分析，对于一组给定的化学元素，在低温下稳定的组成和结构分析能够被确定下来。

DFT数据库规模在稳定增长，既是因为新的系统包含了新的晶体结构和组成，也是因为理论计算方面，更多的是希望能够确定有用的材料信息。

5.1 材料设计与热力学

材料基因组与相图计算

DFT数据库的一项主要的应用便是热力学稳定性分析，对于一组给定的化学元素，在低温下稳定的组成和结构分析能够被确定下来。

DFT数据库规模在稳定增长，既是因为新的系统包含了新的晶体结构和组成，也是因为理论计算方面，更多的是希望能够确定有用的材料信息。

5.1 材料设计与热力学

材料基因组与相图计算

美国总统奥巴马 2011 年 6 月提出的材料基因组计划,不但在美国且在国际上引发了越来越广泛的反响。材料基因组概念起源于近半个世纪之前,一大批材料工程师意识到计算材料科学已经达到了一个可作为强大的实用工具的阶段。从 Kaufman 和 Bernstein 于 1970 年发表了其开创性著作,使得相图计算技术迅速发展,成为一项可推广工业应用的成熟技术。CALPHAD 技术的发展不仅使相平衡与相图的计算成为可能,而且还可进行复杂材料在真实条件下的动力学模拟。

5.1 材料设计与热力学

材料基因组与相图计算

目前的数据库往往是基于陈旧的数据和估计值, 它们的广度和质量在实际应用中远远达不到要求。且经费资助机构不太情愿支持像评估和编辑材料工程数据库此类的基础性研究, 而生命科学领域的情况却大不相同, 大量的人力物力投入到编制人类基因组数据库的工作中。因为人们知道在生命科学领域里, 一旦人类基因组数据库完成, 将可以用来提高人类健康, 例如治愈顽症和开发新的更有效的药物。

5.1 材料设计与热力学

材料基因组与相图计算

2004 年国家研究委员会(NRC)在其“加速技术转变”的报告中明确地阐述了物理科学的学术价值体系普遍压制了工程数据库的创建,而生命科学却推进了历史上最伟大的工程数据库——人类基因组计划的实施。用于支持计算材料工程的基础数据库计划可以建立起物理科学和工程之间的有效联系,这种联系将同生命科学/医药的模式一样富有成效。”

2008 年 NRC 在关于集成计算材料工程(ICME)的报告中进一步强调了数据库的重要性。

5.1 材料设计与热力学

材料基因组与相图计算

遗憾的是,在美国材料基因组计划里并没有非常精确地定义材料基因组这个概念(http://www.whitehouse.gov/sites/default/files/microsites/ostp/materials_genome_initiative-final.pdf),只是在报告的第 4 页模糊地阐述道:“基因组是一组以 DNA 语言编码的信息,可作为有机体的生长和发展的蓝图。当把基因组这个词应用在非生物语境中,则意味着面向更大目标的基础2013 年 12 月 第 58 卷 第 35 期3634 性构造单元。”

5.1 材料设计与热力学

材料基因组与相图计算

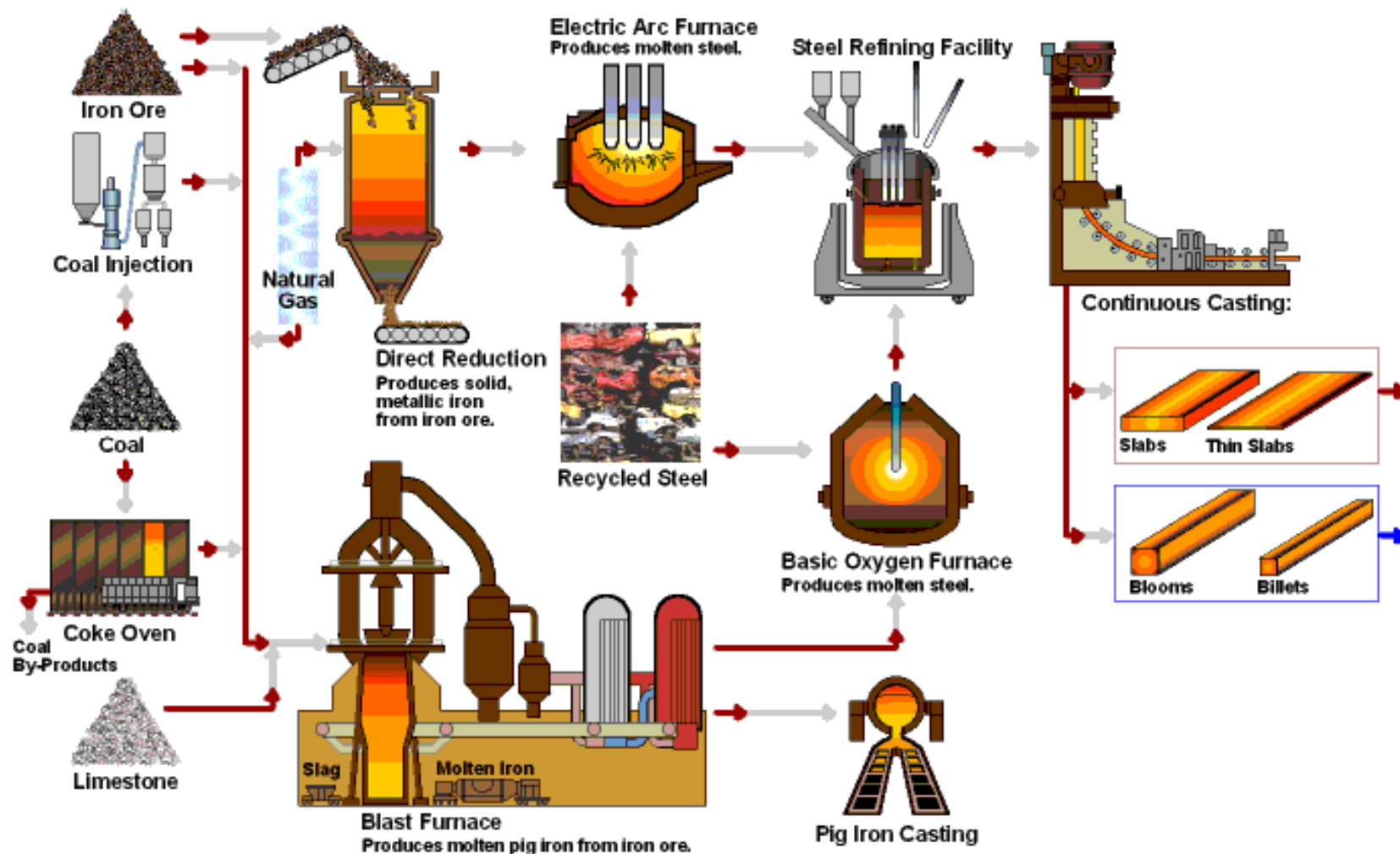
一方面可以认为材料基因组计划是一个相当广泛的建立材料创新体系(包括计算、实验工具和数据资料)的结合体;

另一方面,材料基因组计划旨在通过注重材料结构、性质和服役性能来加速材料的开发,希望把新材料的实用化速度从目前的10~20年缩短为2~3年。

因此,材料基因组计划的工作必须研究实际材料,并涉及新的实验、高质量的量子力学计算以及对实验和计算数据的仔细评估。

5.2 不锈钢材料热力学解析

发 展



5.3 镁合金材料热力学解析

镁合金应用基础及新材料

为了降低二氧化碳的排放，对交通工具减重的需求越来越强烈。同时，为了配合可持续发展的战略目标，需要寻求新型结构材料来替代传统结构材料（钢铁、铝合金）以减缓对它们的开采。在这样的前题下，密度仅为钢铁材料1/4而且储量丰富的镁合金受到人们广泛的关注。然而，由于镁合金面临着塑性较低和强度较低的双重问题，以致其使用量远不及钢铁和铝合金。



5.3 镁合金材料热力学解析

镁合金应用基础及新材料

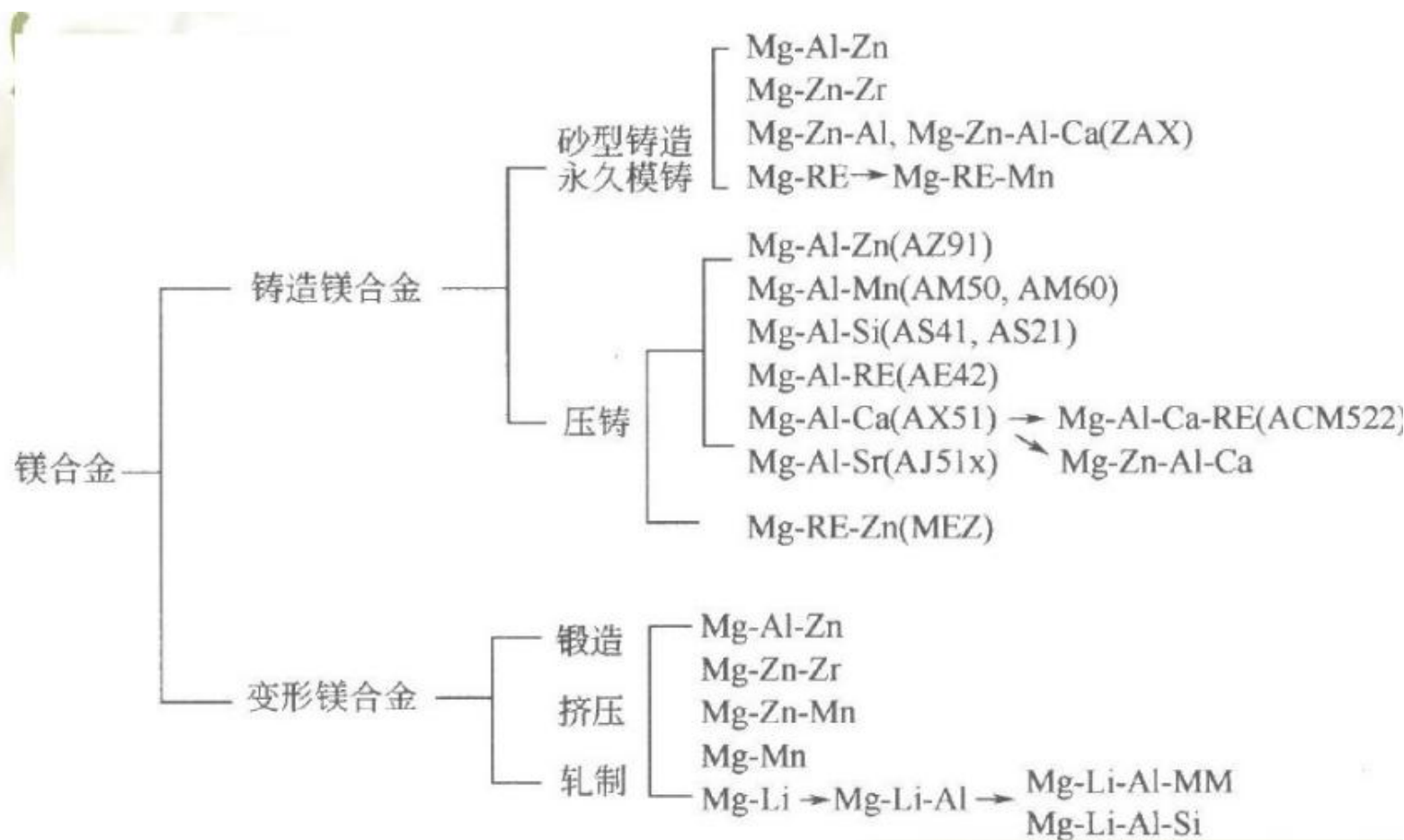


图2-2 镁合金的分类