宁波市青年科技创新奖公示

 (2024年度)

被提名人基本情况

|  |  |
| --- | --- |
| 提名者 | 中国科学院宁波材料技术与工程研究所 |
| 姓 名 | 常可可 | 性 别 | 男 | 联系电话 | 18658201120 |
| 证件类型 | 身份证 | 证件号码 | 320305198611200837 |
| 国 籍 | 中国 | 民 族 | 汉 | 政治面貌 | 中共党员 |
| 院 士 | 否 | 当选时间 |  |
| 从事专业 | 材料学 | 最高学历 | 研究生 | 最高学位 | 博士 |
| 技术职称 | 研究员 | 职 务 | 实验室副主任 |
| 学科分类名称 | 1 | 材料表面与界面 | 代 码 | 43010 |
| 2 | 材料失效与保护 | 代 码 | 43020 |
| 3 | 复合材料 | 代 码 | 43055 |
| 工作单位 | 名 称 | 中国科学院宁波材料技术与工程研究所 |
| 通讯地址 | 浙江省宁波市镇海区庄市街道中官西路1219号 |
| 联 系 人 | 庞琳 | 联系电话 | 15545156609 |
| 受高等教育情况：(1) 2010-12至2013-07，德国亚琛工业大学RWTH Aachen University，材料学，博士 (2) 2008-09至2010-09，中南大学，材料学，硕士 (3) 2004-09至2008-06，中南大学，材料化学，学士(4) 2001-09至2004-06，徐州市第七中学，高中 |

被提名人的主要科学技术成就和贡献

随着我国油气钻采和科学钻探“向地球深部进军”，深地深海钻探装备关键运动部件长期处于高温、磨损、腐蚀交互的苛刻环境中，材料损伤的多因素耦合效应愈发显著，导致关键部件失效问题频发。采用沉积、喷涂或焊接等表面工程技术，在部件表面形成氮化物基、碳化物基、金属基复合材料强化层，是摩擦副延寿的重要途经之一。然而，上述防护材料在制备过程中通常处于热力学非平衡态、形成亚稳相结构，在苛刻环境中服役时表界面相结构处于亚稳、动态演变的过程中，结构性能难以精准调控和优化，基于热力学平衡或稳定态的单一理论计算方法难以满足多元复杂化和多功能一体化新型表面防护材料体系的研发需求。

被提名人自2017年加入中国科学院宁波材料技术与工程研究所以来，一直致力于苛刻环境服役材料结构设计与工程应用技术研究，取得了一系列创新成果：建立了集成计算、实验和数据库的研究策略，阐释了防护材料制备过程中的亚稳成相规律，揭示了力、热、电化学协同作用下的表面结构演变机理；突破了单一计算方法定性化模拟的局限，实现了表面结构形成和演变的定量化模拟；发展了系列耐磨耐蚀防护材料新体系并应用于钻探关键装备，保障了深地深海钻探重大工程的顺利实施。主持国家重点研发计划项目、国家自然科学基金优青/联合重点/面上/青年项目、中国科学院抢占科技制高点专项任务等；累计发表学术论文120余篇（被引4600余次）；担任科技部“十四五重点研发计划”指南编制专家，中国机械工程学会摩擦学分会青工委副主任、表面工程分会青年学组副主任，中国机械工程、Surf. Coat. Technol.、Mater. Res. Lett.期刊青年编委，先后入选中国科学院人才计划、浙江省特聘专家、中国科学院特聘研究员；获中国腐蚀与防护学会科学技术一等奖、“温诗铸枫叶奖”、美国陶瓷学会“Spriggs相平衡奖”、J. Mater. Inform.期刊“最佳论文奖”等荣誉奖励。

被提名人的主要科学技术成就和贡献如下：

**（1）通过耦合高通量实验、第一性原理计算和相图计算方法，发现了亚稳相结构形成数据的阿伦尼乌斯关系，提出了表面扩散激活能计算模型，发展了亚稳相形成图高效定量模拟的新方法。**

定量预测制备过程中的成相规律是防护材料新体系研发的关键。在气相沉积过程中，系统处于非平衡态且一般获得亚稳相，基于相平衡的传统热力学计算方法不能直接用于亚稳相图的模拟，需综合考虑动力学因素，在阐明亚稳相形成机理的基础上，开发新的计算模型。被提名人在大量数据分析的基础上，发现了亚稳相结构形成规律符合阿伦尼乌斯关系，并在爱因斯坦表面扩散方程的基础上，提出了新的临界扩散模型。通过模型计算，发现当增加基体温度或降低沉积速率时，扩散距离会增加，此时更加容易形成稳定相；当扩散距离到达某一临界值时，会生成第二相，此时的温度为临界温度；因此临界扩散距离决定了亚稳相的形成。为了求解临界扩散距离，被提名人引入“亚稳固溶度”的概念，并通过第一性原理计算或相图计算获得亚稳固溶度的数值。由此，率先提出了一种亚稳相结构形成规律定量描述的新方法，即通过耦合相图计算、第一性原理计算和高通量磁控溅射镀膜实验的方法对材料的亚稳相进行表面扩散模拟，相关计算仅需要一个高通量镀膜实验作为基础数据，突破了单一理论计算方法定性模拟的局限性，实现了成相规律的定量描述，丰富和发展了苛刻环境服役材料筛选、成分设计和工艺优化理论。

基于上述方法，被提名人与合作者通过第一性原理计算、相图计算、高通量实验获得了Ti-Al-N、V-Al-N等典型氮化物材料在不同沉积速率、温度和成分条件下的亚稳相结构形成图，计算预测的相形成规律与实验结果高度一致。同时，通过进一步考虑实验过程中的动力学因素，将材料制备过程中的残余应力纳入模型中，预测得到的元素临界固溶度范围与已有文献数据高度一致。例如，与近30年国内外学者实验测定的Al在Ti-N中的临界固溶度范围（0.40 < xmax < 0.90）相比，传统热力学方法预测的xmax范围仅能覆盖部分实验数据（0.50 < xmax < 0.79），而被提名人开发的新模型能够准确、定量预测出该体系中Al的临界固溶度（0.42 < xmax < 0.90），充分体现了该模型的准确性、先进性和实用性。

此外，针对传统模型忽略快速冷却和缓慢冷却条件下系统能量变化差异的问题，被提名人提出了一种基于T0曲线的热力学新解释，可以有效解决非晶形成能力的预测难题，拓宽了T0曲线在相形成预测中的应用范围。同时，针对传统调幅分解研究集中在二元或三元体系中，多元体系研究难度大的问题，被提名人提出了一种调控多元体系调幅分解的新策略，通过计算多元体系在不同温度下的吉布斯自由能曲面及其二阶导数，揭示了元素、温度对调幅分解相形成区域的影响规律。

研究成果发表于Acta Mater.、Scr. Mater.、J. Mater. Sci. Technol.、J. Mater. Inf.等期刊，被北京航空航天大学、上海大学、北京科技大学等高校以及美国、德国、法国、瑞典、奥地利等国家的同行引用，作为研究亚稳相结构形成与演变规律、预测亚稳相形成图、指导新体系研发的重要依据之一。其中，上海大学张统一教授（中国科学院院士）引用评价为“通过数据驱动集成材料分析、预测和发现将加速涂层材料研究”；美国科罗拉多矿业大学G. Brennecka教授引用评价为“选择新材料的机制，耦合计算和高通量实验理解亚稳性”；俄罗斯科学院V. Lutsyk教授引用评价为“集成计算和实验的新思路，提升了研究效率”。

**（2）采用多尺度计算方法，实现了服役过程表面相结构的动态演变模拟，阐明了元素改性对多元复杂材料体系在不同环境下表面相结构演变的作用规律，揭示了高温、磨损、腐蚀多因素损伤机理。**

材料与环境的相互作用是表界面原子与环境因子间的动态耦合过程，仅凭实验表征难以全面揭示服役过程的相结构演变机理，因此需要借助理论模拟来阐明相结构演变发生、发展过程的热/动力学本质。被提名人与合作者采用微纳尺度原位表征与多尺度理论计算（第一性原理计算、相图计算、数值模拟）相结合的方法，探明了碳化物基复合材料在高温、应力作用下的相变规律，发现了多相复合材料体系存在一个表面相结构转变与服役性能突变的临界温度，该临界温度取决于材料表面脱碳导致的硬度下降和表面氧化导致的韧性提升之间的微观竞争机制。同时，进一步结合第一性原理分子动力学模拟，阐明了氮化物基复合材料在高温和腐蚀介质协同作用下的动态相变过程，提出了基于动态相变可靠预测的多元防护材料自组装界面结构调控方法，实现了材料在动态服役过程中力学性能与摩擦学性能的协同强化。

此外，针对第一性原理静态滑动势能面模拟等主流方法难以兼顾滑动摩擦过程中的热扰动及内应力因素、经典分子动力学模拟难以捕捉精细的动态电子相互作用的难题，被提名人与合作者发展了一种基于第一性原理分子动力学模拟和机器学习力场加速的慢生长滑动摩擦模拟新方法，可在无先验参数情况下定量给出与实验高度吻合的动摩擦力和摩擦系数，同时考虑环境因子与界面原子动态耦合机制，实现了结构演变的起源和发展过程，为苛刻环境结构动态演变模拟研究提供了全新思路。

研究成果发表于Acta Mater.、Mater. Horiz.、J. Mater. Sci. Technol.等期刊，发展的耦合多尺度计算的服役过程表面相结构动态演变模拟方法得到了国内外同行的积极评价。研究论文被哈尔滨工业大学、北京工业大学、西北工业大学等高校、中国科学院多个研究所以及美国、新加坡、澳大利亚、加拿大等国家的同行引用，作为研究多元复杂材料表面相结构演变规律、揭示表面损伤机理的重要依据之一。其中，哈尔滨工业大学周玉教授（中国工程院院士）引用评价为“很好地揭示了材料表面损伤行为与力学性能之间的强相关性”；中国科学院物理所汪卫华研究员（中国科学院院士）引用评价为“发现了大塑性变形等方法可以诱导金属玻璃的产生”；北京工业大学聂祚仁教授（中国工程院院士）引用评价为“发现了金属相晶粒细化或形成弥散纳米颗粒可实现材料表面服役性能提升”。

**（3）构建了金属基、氮化物基、碳化物基多元材料数据库，提出了基于相图相变计算的多元复杂体系设计与制备工艺优化策略，发明了系列耐磨耐蚀合金/氮化物涂层材料、强韧耐磨碳化物基复合材料，为深地深海苛刻环境服役钻探装备关键部件提供了高可靠防护。**

面向深地深海等苛刻服役环境，现役简单体系防护材料性能已接近使役极限，而新型多元材料成分结构更为复杂，仅凭实验“试错”难以实现抗热、耐磨、耐蚀等多个目标性能的协同提升。以海洋环境抗热耐蚀NiXAlY涂层材料研发为例，被提名人与合作者采用多组元协同设计方法对在高温环境易与NaCl和H2O快速反应的Cr/Cr2O3进行调控，考虑了不同元素固溶度变化与40多种复杂三元相结构，建立了NiXAlY多元数据库，提出了基于相图相变计算的多元涂层材料成分与结构设计方法，通过相图、氧势图、布拜图（电势-pH相图）计算来设计元素种类与含量，在综合考虑相结构、力学性能、耐高温、耐蚀性能的基础上，构建了相结构-关键性能变化预测图。进一步结合理论计算和关键实验从10余种合金化元素中筛选出Si、Ta、Mo等能够有效改善Cr元素在海洋环境中“毒化”效应的替代元素，预测得到的最佳成分区间涂层材料在干燥和湿热条件下的耐蚀性能均提升了5倍以上。同时，通过构建碳化物基多元材料数据库，综合考虑了碳化钛基金属陶瓷复合材料中W、Mo、V、Ta、Zr等典型难熔金属元素在高温过程中的溶解-析出及调幅分解行为，提出了基于陶瓷颗粒“芯-环”结构与调幅分解层状结构、以及金属粘结剂纳米沉淀析出结构的强韧性能协同提升方法，发展了基于布拜图预测与微区电化学实验验证的耐腐蚀多元多相复合材料设计技术，研制出的新型金属陶瓷复合材料较同类型商业牌号韧性提升15%、腐蚀电流密度下降1个数量级以上。

此外，针对碳化硅基复合材料烧结致密化难度高的问题，被提名人与合作者通过构建RE-Si-C多元体系数据库，系统探讨了稀土碳化硅复合材料结构形成与演变机制，指导了多元烧结助剂的成分设计，在有效降低碳化硅陶瓷烧结温度的同时提升了陶瓷颗粒的界面结合强度，抗弯实验表明陶瓷界面强度高于碳化硅基体本征抗弯强度。由此，实现了碳化物基复合材料烧结工艺的优化。

研究成果发表于J. Am. Ceram. Soc.、J. Mater. Sci. Technol.、Corros. Sci.等期刊，得到清华大学、西北工业大学、东北大学等高校、中国科学院多个研究所以及美国、俄罗斯、瑞典、加拿大、波兰等国家学者的广泛引用和积极评价。其中，中国科学院上海硅酸盐研究所董绍明研究员（中国工程院院士）将材料数据库评价为“分析SiC陶瓷表面相形成和相演变规律的重要依据”；印度理工学院B. Murty教授（印度科学院院士、印度工程院院士）引用评价为“基于数据库设计的新型轻质高强材料硬度提升30%”。相关材料设计与应用技术授权发明专利9项，登记软件著作权2项。研制的新型金属基、氮化物基、碳化物基复合材料体系规模应用于深地深海钻井平台顶驱机械密封、活塞杆，以及井下动力钻具径向轴承、扶正器等关键运动部件，服役寿命超过500小时，解决了苛刻环境服役部件表界面加速损伤失效难题，有力支撑了深地塔科1井、深地川科1井等钻探重大工程的顺利实施。

综上所述，被提名人在苛刻环境服役材料表界面结构设计、环境作用机制以及跨尺度结构调控方面取得一系列原创性成果，得到了国内外同行的高度肯定与广泛引用，为多功能一体化材料结构与性能定向设计、多因素损伤机理与苛刻环境表面防护技术研发提供了理论和技术基础，具有重要的工程应用价值。