

2018 年度湖南省科学技术奖推荐公示内容

自然科学奖二等奖

项目名称

低模量合金设计理论及其在生物钛合金中的应用

推荐单位意见

该项目是湘潭大学的教师研究多年完成的成果。针对植入体钛合金与人体骨骼的弹性模量等力学性能不匹配严重制约其临床应用的瓶颈问题,历时近十年,在低模量合金设计理论、生物钛合金成分设计、组织优化等方面的开展了系统研究,取得了富有开拓性的成果。开创了一系列颇具特色的合金模量设计理论,开发了 Ti-Nb-Mo-Sn 形状记忆合金体系,实现了 β 钛合金的弹性模量调控,阐明了钛合金的成分、显微组织结构与弹性模量的关系,分析了成分、微观结构对 β 钛合金的变形机制影响机理,为低弹性模量 β 钛合金成分设计及组织优化提供理论依据。截至 2017 年底,研究成果共发表 SCI 和 EI 收录论文 51 篇,其中在 Phys. Rev. B、J. Mater. Chem. B、Mater. Sci. Eng. A、Mater. Design、J. Mechan. Behav. Biomed. Mater. 等具影响力的期刊上发表 27 篇。8 篇代表性论文 SCI 被引总频次 213, SCI 他引总频次 178 次,单篇最高 SCI 他引 40 次。获湖南省优秀博士学位论文 1 篇,优秀硕士学位论文奖 1 篇,湖南省自然科学优秀学术论文一等奖 1 项。学校对该项目按要求进行了公示,公示期内无异议,同意推荐该项目申报为湖南省自然科学奖二等奖。

项目简介

本项目围绕介入医疗器械领域亟待解决的植入体材料与人体硬组织力学不相容等临床应用的关键瓶颈问题,系统开展了低模量合金设计理论、生物钛合金成分设计、组织优化等方面的研究。主要科学发现如下:

1. 发展了扑电荷密度的合金模量设计理论。材料负泊松比值与其弹性各向异性因子相关,其负泊松比等模量参数随合金的组元呈现出明显的元素周期律排列,并与组元功函数存在较强关联;基于拓扑电荷密度分析,解释了合金中基元功函数、拓扑成键电荷流及模量之间的关联本质,为实现金属材料的微观结构、模量设计提供了理论依据。主要论文被机器学习设计新材料方法创始人美国洛斯阿拉莫斯实验室 T. Lookman 和西北大学的 J. M. Rondinelli 等人重点关注该研究,近三年论文多次引用我们结果 (Sci. Rep. 2015, 5:13285; Sci. Rep. 2016, 6:19660), 受到国际同行的广泛认可和高度评价。

2. 发展了低弹性模量 β 钛合金成分设计理论。建立了 β 钛合金的弹性模量与合金元素的价电子数、原子半径、d-电子轨道理论中两个参数 B_o 、 M_d 值之间的关联,进一步完善了基于 d-电子轨道理论的低弹性模量 β 钛合金设计理论。主要论文被 Scripta Mater.、Mater. Sci.

Eng. A、Mater. Sci. Eng. C、Mater. Design 等国际重要杂志引用，受到国际同行的广泛关注。

3. 实现了 β 钛基形状记忆合金体系开发及组织优化。设计出了 Ti-Nb-Mo-Sn 形状记忆合金体系，分析了 Sn 元素含量对 Ti-Nb-Mo-Sn 形状记忆的变形机制，通过非晶化、多孔化、第二相强化、晶粒细化等手段对 Ti-Nb-Mo-Sn 形状合金组织优化，实现了弹性模量调控，制备出具有优异超弹性能的纳米晶 β 钛基形状记忆合金。主要论文被 Prog. Mater. Sci.、Acta Mater. 等国际重要杂志引用，受到国际同行的广泛关注。

研究成果共发表 SCI 和 EI 收录论文 51 篇，其中在 Phys. Rev. B、J. Mater. Chem. B、Mater. Sci. Eng. A、Mater. Design、J. Mechan. Behav. Biomed. Mater.等具影响力的期刊上发表 27 篇。8 篇代表性论文 SCI 被引总频次 213，SCI 他引总频次 178 次，单篇最高 SCI 他引 40 次。获湖南省优秀博士学位论文 1 篇，优秀硕士学位论文奖 1 篇，湖南省自然科学优秀学术论文一等奖 1 项。研究成果得到了国内外学者在 Prog. Mater. Sci.、Adv. Mater. Acta Mater. 等国际 Top 学术刊物引用和高度评价。

客观评价

1. 发展了扑电荷密度的合金模量设计理论。以 B2 相化合物为模型，结合独特的电荷密度拓扑与几何分析方法，计算 144 种金属间化合物的各类模量，通过收集该体系拉胀理论数据，发现该类材料负泊松比值与其弹性各向异性因子相关，并与组元功函数存在较强关联。基于拓扑电荷密度分析，解释了合金中基元功函数、拓扑成键电荷流及模量之间的关联本质机器学习设计新材料方法创始人美国洛斯阿拉莫斯实验室 T. Lookman 和西北大学的 J. M. Rondinelli 等人重点关注该研究，近三年论文多次引用我们结果 (Sci. Rep. 2015, 5:13285; Sci. Rep. 2016, 6:19660)。南洋理工大学 L. Chen 教授在 Adv. Mater.综述等文章中 6 次引用我们的工作(Adv. Mater. 2016, 28:8079, AIP Advances 2014, 4:127116)。以 Ti-22Nb 合金为基，采用第一性原理计算和实验相结合的方法，研究了第三种无毒合金化元素对 β 钛合金的弹性模量和相稳定性等性能的影响规律。发现合金元素的价电子数和原子半径是影响相稳定性的因素，高的价电子数或小的原子半径合金化元素可以显著增大合金的相稳定性； β 钛合金的弹性模量与 d-电子轨道理论中两个参数 Bo、Md 值有着较强的关联性，合金的 Md 值越高或者 Bo 值越低，其弹性模量就越低。日本筑波大学 S. Miyazaki 教授重点关注该研究，近三年论文多次引用我们结果 (Scripta Mater., 2015, 103:37-40; Mater. Sci. Eng. A, 2015, 644:85-89; Mater. Sci. Eng. C, 2015, 48:11-20)。澳大利亚伊迪丝科文大学 S. Ehtemam-Haghighi 教授在 TiNbFe 合金系中发现弹性模量类似结果 (Mater. Design, 2016, 97: 279-286)。基于 d-电子理论的相稳定图，我们设计出了 Ti-Nb-Mo-Sn 形状记忆合金体系，并研究了 Sn 元素含量对 Ti-Nb-Mo-Sn 形状合金的变形机制、超弹性等性能影响规律。日本筑波大学 H.Y. Kim 教授重点关注该研究，近三年论文多次引用我们结果 (Scripta Mater., 2014, 72-73:29-32; Mater. Sci. Eng. A, 2015, 644:85-89; J. Mechan. Behav. Biomed. Mater., 2017, 65: 716-723)。美国科罗拉多矿业学院 T.C.

Lowe 教授认为 TiNbMoSn 形状记忆合金具有较大潜在的应用价值 (*Prog. Mater. Sci.*, 2017, 88:232-280)。进一步对 Ti-7.5Nb-4Mo-1Sn 合金的超弹性训练和评发现该合金具有非常优异且稳定的超弹性能印度科学研究院 D. Banerjee 教授认为该合金极具用潜力(*Acta Mater.*, 2013, 61: 844-879)。同时, 该论文被评为湖南省 2014 年度自然科学优秀学术论文一等奖。通过压痕法结合剪切带形貌表征, 分析主体元素为钛体系的金属玻璃剪切带夹角与退火工艺间的关系, 发现退火弛豫可影响该体系合金的压力敏感因子。退火温度可增加其原子间的摩擦, 减少内部自由体积, 从而调控其模量。该工作已被 *Adiabatic Shear Localization: Frontiers and Advances* (2nd ed, by B. Dodd and Y.L. Bai), Elsevier, 2012 专著收入。通过热机械处理对 β 钛合金的微观结构进行优化, 分析了 β 钛合金微观结构与变形机理的关系, 发现适量的第二相(α 、 ω 相)颗粒和晶粒细化均显著提高 β 钛合金的马氏体相变诱发应力和超弹性能, 从而调控其弹性模量; 其中晶粒尺寸与马氏体相变诱发应力之间关系满足 Hall-Petch 公式, κ 为 $0.27 \text{ MN/m}^{3/2}$ 。伊朗德黑兰大学 A. Zarei-Hanzaki 教授大篇幅引用我们的工作解释微观结构对钛合金超弹性的影响(*Mater. Sci. Eng. A*, 2017, 703: 513-520), “Zhang et al. investigated the effects of β phase grain sizes on the SIM formation. They reached to the point that ...”, “... Zhang et al. the precipitation of nano-sized α and ω precipitates in the β phase accompanied by fine subgrain structure of the matrix could well improve the superelasticity of β Ti alloys.”。对该部分成果已获发明专利保护(ZL201210592054.2)。

代表性论文专著目录

序号	论文专著名称/ 刊名/作者	影响 因子	年卷页码	发表 时间	通讯 作者	第一 作者	国内作者	SCI 他引 次数	他引 总次 数	知识 产权 是否 归 国内 所有
1	Extreme Poisson's ratios and their electronic origin in B2 CsCl-type AB intermetallic compounds/PHYSICAL REVIEW B/X.F. Wang, Travis E. Jones, W. Li, Y.C. Zhou	3.836	2012年85卷134108	2012年04月01日	Travis E. Jones, Y.C. Zhou	X.F. Wang	王秀锋, 李文, 周益春	19	19	是
2	Ab initio calculations on elastic properties in L12 structure Al3X and X3Al-type (X¼ transition or main group metal) intermetallic compounds/Solid State Communications/T. Tian, X.F. Wang, W. Li	1.554	2013年156卷69-75页	2012年10月29日	X.F. Wang, W. Li	T. Tian	田甜, 王秀锋, 李文	19	19	是

3	Effect of ternary alloying elements on microstructure and superelasticity of Ti - Nb alloys/Materials Science & Engineering A/D.C. Zhang Y.F. Mao, Y.L. Li, J.J. Li, M. Yuan, J.G. Lin	3.09 4	2013年 559卷 706 - 710	2012年 09月 11日	J.G. Lin	D.C. Zha ng	张德闯, 毛咏发, 李永亮, 李俊杰, 袁明, 林建国	36	39	是
4	Effect of Sn addition on the microstructure and superelasticity in Ti - Nb - Mo - Sn Alloys/Jurnal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials/D.C. Zhang, S. Yang, M. Wei, Y.F. Mao, C.G. Tan, J.G. Lin	3.11	2012年3卷 156-165页	2012年 05月 04日	J.G. Lin	D.C. Zha ng	张德闯, 杨莎, 魏萌, 毛咏发, 檀朝桂, 林建国	30	33	是
5	Shape memory and superelastic behavior of Ti - 7.5Nb - 4Mo - 1 Sn alloy/Materials and Design/D.C. Zhang, J.G. Lin, W.J. Jiang, M. Ma, Z.G. Peng	4.36 4	2011年32卷 4614- 4617页	2011年 03月 21日	J.G. Lin	D.C. Zha ng	张德闯, 林建国, 蒋文娟, 马懿, 彭柱根	16	16	是
6	Effect of relaxation on pressure sensitivity index in a Zr-based metallic glass/Materials Science & Engineering: A/G.S. Yu, J.G. Lin, M. Mo, X.F. Wang, F.H. Wang, C.E. Wen	3.09 4	2007年460- 461卷58- 62页	2007年 01月 02日	J.G. Lin	G.S. Yu	喻更生, 林建国, 马懿, 王秀锋, 王锋华	25	28	是
7	Preparation of porous Ti35Nb alloy and its mechanical properties under monotonic and cyclic loading /Transactions of Nonferrous Metals Society of China/LIN Jan-guo, ZHANG Yun-fei, MA Mo	1.34 2	2010年20卷 390-394页	2010年 03月 07日	LIN Jan- guo	LIN Jan- guo	林建国, 张云飞, 马懿	21	21	是
8	Influences of recovery and recrystallization on the superelastic behavior of a b titanium alloy made by suction casting/Jurnal of Materials Chemistry B/D. C. Zhang J.G. Lin, Cuie Wen	4.54 3	2014年2卷 5972 - 5981 页	2014年 07月 27日	J.G. Lin	D. C. Zha ng	张德闯, 林建国	3	3	是
合计								169	178	

主要完成人情况

姓名	排名	职务	职称	工作单位	完成单位	对本项目技术创造性贡献
林建国	1	无	教授	湘潭大学	湘潭大学	作为项目负责人, 提出总体研究思路、制定研究方案、协调研究工作的开展, 完成部分研究工作。分析了合金化元素对 β Ti-Nb 合金

						的相稳定性及弹性模量的影响机理；设计了 Ti-Nb-Mo-Sn 形状记忆合金体系；分析主体元素为钛体系的金属玻璃剪切带夹角与退火工艺间的关系，发现退火温度可增加其原子间的摩擦，减少内部自由体积，从而调控其模量；分析热机械处理过程中微观结构演变规律及对变形机理的影响，发现适量的 α、ω 相颗粒和晶粒细化均显著提高 β 钛合金的马氏体相变诱发应力和超弹性能。是第 3-8 表性论文的通讯作者。本人在该研究中的工作量占本人工作量的 60% 。
张德闯	2	无	副教授	湘潭大学	湘潭大学	分析了合金化元素对 βTi-Nb 合金的相稳定性及弹性模量的影响机理；设计出了 Ti-Nb-Mo-Sn 形状记忆合金体系；分析热机械处理过程中微观结构演变规律及对变形机理的影响，发现适量的 α、ω 相颗粒和晶粒细化均显著提高 β 钛合金的马氏体相变诱发应力和超弹性能。对应对应“重要科学发现”的第 2、第 3 项、第 4 项。是第 3-5, 7-8 篇代表性论文的第一作者。本人在该研究中的工作量占本人工作量的 60% 。
王秀锋	3	无	副教授	湘潭大学	湘潭大学	参与了合金模量设计及其拓扑电荷密度分析。计算 144 种金属间化合物的各类模量，通过收集该体系拉胀理论数据，发现该类材料负泊松比值与其弹性各向异性因子相关。对应“重要科学发现”的第 1 项。是第 1- 篇代表性论文的第一作者。本人在该研究中的工作量占本人工作量的 70% 。参与了合金模量设计及其拓扑电荷密度分析。以 B2 相化合物为模型，结合独特的电荷密度拓扑与几何分析方法，计算 144 种金属间化合物的各类模量，通过收集该体系拉胀理论数据，发现该类材料负泊松比值与其弹性各向异性因子相关。对应“重要科学发现”的第 1 项。是第 1 - 2 篇代表性论文的第一作者。本人在该研究中的工作量占本人工作量的 70% 。
檀朝桂	4	科技处副处长	讲师	湘潭大学	湘潭大学	分析了合金化元素对 βTi-Nb 合金的相稳定性及弹性模量的影响机理；设计出了 Ti-Nb-Mo-Sn 形状记忆合金体系；分析热机械处理过程中微观结构演变规律及对变形机理的影响，发现适量的 α、ω 相颗粒和晶粒细化均显著提高 β 钛合金的马氏体相变诱发应力和超弹性能。对应“重要科学发现”的第

						2、第3项、第4项。是第3-5，7-8篇代表性论文的第二作者。本人在该研究中的工作量占本人工作量的40%
喻更生	5	无	副教授	湘潭大学	湘潭大学	分析主体元素为钛体系的金属玻璃剪切带夹角与退火工艺间的关系，发现退火温度可增加其原子间的摩擦，减少内部自由体积，从而调控其模量；对应“重要科学发现”的第4项。是第6篇代表性论文的第一作者。本人在该研究中的工作量占本人工作量的40%。

完成人合作关系说明

项目完成人属于同一课题组，第一完成人是第二、第三、第四和第五完成人的博士生或硕士生导师。第二完成人于2008年9月加入项目组攻读硕博连读研究生，博士毕业后留校工作，在第一完成人课题组继续本项目的研究工作。第三、第四和第五完成人一直是林建国教授课题组成员，并在项目组工作至今，与林建国教授一起从事本项目相关的低模量生物钛合金理论设计、成分和组织优化等方面的研究工作。完成人项目主要合作方式采用方案设计、系统论证，合作完成科研项目，合作发表学术论文等方式。各完成人之间的合作成果体现在代表性论文上。