

高熵合金与非晶材料分论坛侧记

文 / 中国科学院宁波材料技术与工程研究所 王家宁 宋丽建

高熵合金与非晶材料是近几十年通过现代冶金凝固技术开发出来的新型高性能金属材料。由于其独特的设计理念和复杂的成分结构，高熵合金与非晶材料不仅具有优异的力学性能、抗辐射性能、耐磨、耐腐蚀、耐高温等性能，而且还可以作为研究材料科学和凝聚态物理中一些重要问题的模型体系。高熵合金与非晶材料的研究一方面聚焦于结构无序、不均匀性等物理问题前沿，促进固体物理和材料科学理论的发展；另一方面则专注于材料性能的提升和应用，在国防军工、精密仪器、电子信息等领域具有极大的发展潜力和应用前景。总而言之，高熵合金与非晶材料的发展对材料的基础研究和现代合金工业化应用和发展都具有重大的推动作用。



2021年10月18日，“2021新材料国际发展趋势高层论坛——高熵合金与非晶材料论坛”在宁波市香格里拉酒店召开。本次会议由北京科技大学新金属材料国家重点实验室、中国科学院宁波材料技术与工程研究所、中国科学院物理研究所、东莞宜安科技股份有限公司、美国田纳西大学、西安稀有金属材料研究院和《中国材料进展》杂志社共同承办。会议由中国科学院宁波材料技术与工程研究所王军强研究员、东南大学沈宝龙教授、大连理工大学王清教授和西北工业大学乔吉超教授担任主持，分论坛共邀请了包括西安交通大学马恩教授、大连理工大学董闯教授等在内的16名国内知名专家学者分别从结构、性能、合金成分开发设计等方面作了学术报告，内容涵盖了大部分高熵合金与非晶材料相关的重要研究领域，与会专家和代表进行了热烈的讨论和交流。

研究热点一：合金微观结构



马恩教授

西安交通大学马恩教授 首次对中熵合金是否存在纳米级CSRO给出了肯定答案，并详细介绍了如何通过衍射谱、化学映射等证实VCoNi中存在CSRO。通过理论模拟计算发现：CSRO来源于不同原子对（V-Co和V-Ni）的最近邻偏好和V-V原子对的回避。此外，GPA应变图谱证实了拉伸变形过程中CSRO与位错发生强烈交互作用，表明CSRO对塑性变形和强化、应变硬化具有重要贡献。该研究首次通过实验证实了中熵合金化学短程有序及其与位错的交互作用，对理解高熵合金的基本微结构特征以及设计高性能的高熵或中熵合金具有重要意义。

大连理工大学董闯教授 从工业合金的角度出发，介绍了传统工业合金的成分载体，利用团簇加连接原子模型统一了传统合金和高熵合金的结构描述，认为高熵合金并非全新的结构，而是传统合金朝着高度合金化发展的结果，与传统合金有着结构联系。他指出，后续研究可以集中在中心-壳层连接位置多元化、结构单元的空间堆垛和超团簇结构单元等方面。



乔吉超教授

西北工业大学乔吉超教授 针对非晶合金的力学性能与微观结构非均匀性的本征关联问题，利用高温压缩松弛实验和拉伸应变率实验研究了TiZrHfCuNiBe高熵非晶的高温变形机制。结果发现：临近玻璃化转变温度时，高熵非晶的激活体积小于传统非晶，表明高熵非晶比传统非晶更加均匀；高熵非晶在过冷液相区具有较低的缺陷浓度，不利于其原子迁移，促进了非晶的形成。

中国科学院宁波材料技术与工程研究所高萌研究员 针对目前非晶合金的脆性难题，提出了一个基于流变单元的裂纹尖端塑性区模型，定量地理解了由结构弛豫导致的韧脆转变现象。同时，在微观上提出了一个基于流变单元的提升拉伸塑性的新方案——应力场标量化。此外，还利用静态力学测量模块表征了金属玻璃微纳尺度粘弹性的不均匀性。这些研究成果为进一步提升非晶合金的塑性变形能力提供了理论支持。



董闯教授



高萌研究员

研究热点二：高熵合金的成分开发和性能调控



孟军虎研究员

中国科学院兰州化学物理研究所孟军虎研究员 指出，高熵合金的出现对解决传统金属基自润滑材料服役温度低、环境工况适应性差等问题提供了新思路。利用设计制备得到的自润滑耐磨高熵合金实现了合金强韧-耐磨-自润滑功能一体化，显示出了良好的应用前景，为新一代高性能金属基自润滑耐磨材料的研制提供了技术支撑。



李志明教授

中南大学李志明教授 介绍了近几十年合金强韧化机制的探索和发展，并分享了在新型高熵合金强韧化方面开拓的新思路，具体包括纳米双析强化、晶界引入纳米级非晶相强化和多层晶体-非晶结构等。最后，介绍了团队在抗氢脆、抗腐蚀性、低温高温性能、低密度、磁性能等方面的研究进展。



王清教授

大连理工大学王清教授 从高熵合金共格的角度出发，利用团簇式成分设计方法调整BCC和B2两相之间的点阵错配，获得球形和方形纳米粒子的共格析出，从而得到具有优异力学性能和软磁性能的合金成分体系。利用相场方法模拟了BCC/B2共格组织的演化过程。该研究为发展高性能新型高熵合金开辟了新的途径。



李工教授

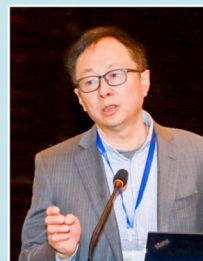
燕山大学李工教授 从序和熵的角度出发，总结了目前多组元体系高熵金属-非金属-聚合物及复合材料的研究进展。提出通过元素添加可以成功调控制备出轻质高强高熵合金和热电玻璃；采用再结晶和部分重熔发展的半固态高熵合金成型工艺有望推动高熵合金复杂形状加工的工业化应用。



王军强研究员



沈宝龙教授



李毅研究员



马明臻教授



丁俊教授



王琦副研究员

研究热点三：非晶合金力学性能的研究

东南大学沈宝龙教授 针对目前铁基软磁非晶合金室温初塑性差的难题，提出利用冷热循环调控能量状态的方法提高铁基块体非晶合金的塑性形变能力。通过添加Cu元素可以改善初始样品的不均匀结构，扩大冷热循环效果，从而降低循环温度、节约能源。最后他指出，能量高低不是决定铁基软磁非晶合金初塑性的唯一标准，回春区域的分布、大小和软硬区的协同作用都是影响初塑性的重要因素。

中国科学院金属研究所李毅研究员 认为实现块体非晶合金的加工硬化行为是目前非晶合金乃至所有无定形材料领域的核心科学问题。基于此，总结了团队近期非晶加工硬化的研究进展，演示了非晶合金在室温下预置缺口可以抑制剪切带的产生，提出三维应力状态下非晶表现出独特的机械变形行为，并分析了其硬化机制。

燕山大学马明臻教授 认为目前室温脆性的解决办法主要有两种：外来相的引入和原位内生第二相，而原位内生第二相在提高韧性的同时还具有界面无污染的优点。原位内生第二相的引入使树枝晶内部产生晶格扭曲和位错堆积，提高综合力学性能。

西安交通大学丁俊教授 利用微纳米样品进行“拉-压”实验，发现非晶硅呈现出“拉强压弱”行为，并通过分子动力学模拟解释了非晶硅反常拉压不对称性的物理起源。通过SW、EDIP、ML这3种势函数对非晶硅进行模拟，发现非晶硅的拉压不对称性与其键的特性具有关联性，即压应力降低剪切面的剪切模量，容易发生塑性形变，而拉伸则提升剪切模量，难以发生塑性形变。相关研究对硅在光伏电池、液晶显示、柔性电子器件、微机电系统等领域的应用提高了重要理论支撑。

中国工程物理研究院材料研究所王琦副研究员 结合前沿的深度学习方法，设计出新型深度图神经网络架构，根据原子类型和位置信息，对非晶合金的塑性变形行为进行高精度预测。同时，通过设计结构搜索和多目标优化算法，可以实现面向目标力学性能的非晶结构逆向设计。该研究对理解非晶合金结构性能关联的科学问题具有指导意义。