
物理所等用材料基因工程方法发现高温非晶合金

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/4988.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

物理所等用材料基因工程方法发现高温非晶合金。在合金材料中，非晶合金(又称金属玻璃)是一类新型的多组元合金。它们有独特的无序原子结构、优异的力学和物理化学特性，吸引了材料科学和凝聚态物理等多个领域的关注。非晶合金既可以具有高达6.0 GPa、比普通钢材高出15倍的强度(如Co基非晶合金)，又可以像塑料一样进行超塑性加工。非晶合金的多组元特点提供了海量的元素配比，使得性能调控可以在极宽的成分范围实现，为非晶合金提供了广阔的应用场景。例如，软磁性能优异的铁基非晶合金已经广泛应用于变压器、高速电机等高附加值产品。然而，非晶合金的元素多样性所带来的成分复杂程度也严重阻碍了高性能新材料的设计和有效开发。60年来，全世界近百个研究组仅获得十多个可以大规模应用的非晶合金成分，大量具有特殊性能的非晶合金材料还没有被发现。

对非晶合金而言，最重要、最基本的参量是非晶形成能力，因为它直接决定了某种合金成分能形成多大尺寸的完全非晶态材料并表现出非晶合金特有的性能。探索非晶形成能力强的合金体系一直是非晶合金领域的核心科学问题，关系到非晶合金工程应用的关键技术难题。但是非晶合金的形成过程涉及物理、化学、材料等多学科交叉基础问题和多体相互作用，其复杂性使得现有的理论和计算模拟尚不能精确预测合金成分。多年来，非晶合金的开发始终停留在传统的“试错法”阶段，探索过程低效、漫长，致使非晶合金的材料创新面临重大挑战和瓶颈。

材料基因工程是近年来以加速材料研究和材料探索为主要目标的新理念，其中的高通量实验是在海量样品中直接优选新材料、获取实验大数据的基本手段。在高通量实验中，组合制备能够实现系列样品的平行合成，结合结构和性能的高通量表征，材料基因工程可在短时间内筛选出具有预期特性的新材料，大幅提高新材料研发的效率。

近日，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心柳延辉、汪卫华研究组和美国耶鲁大学、约翰霍普金斯大学、日本东北大学组成合作团队，采用材料基因工程理念开发了独特的高通量实验方法，在高性能非晶合金的成分设计和探索中取得突破，实现了非晶合金的快速筛选，研制出高温高强非晶合金材料新体系。高通量实验方法在非晶合金领域创造性的应用，有望突破成分多样性和复杂性造成的非晶合金材料探索所遇到的瓶颈，解决非晶合金的形成能力问题，实现非晶合金新材料的高效探索，获得更多高性能非晶合金材料，拓宽非晶合金在高技术领域的应用范围。

该团队充分利用已知的经验准则和物理量关联关系，设计了一个全新的、有可能具有强的非晶形成能力的Ir-Ni-Ta-(B)材料体系。但是，这些元素配比的排列组合千变万化，很难预测哪些具体成分有更强的非晶形成能力，用传统的“试错法”进行实验验证又耗时耗力。采用材料基因工程的思路，柳延辉、汪卫华团队用多靶磁控溅射共沉积技术制备出同时含有上千种合金成分的组合

样品，通过高通量结构表征初步确定了非晶形成成分范围。利用非晶合金的电阻率和非晶形成能力的关联，该团队进一步提出了用以判断非晶形成能力的高通量电阻测量方法，在Ir-Ni-Ta-(B)合金体系中确定了最佳的非晶形成成分范围，并获得了具有优异综合性能的高温块体非晶合金。

和以往的高通量实验方法相比，该团队提出的新方法具有高效性、无损性、易推广等特点。该方法不需要对组合样品进行任何预处理或后续处理，测试周期短，1-2小时即可在成千上万种合金中确定最佳的非晶形成成分范围；所用的测量和表征手段不会造成组合样品的损伤，在同一成分点可对多个物理参量进行测量，在建立物理参量的关联关系时能够确保精度；高通量电阻测量设备价格低廉，能被广大实验室接受，有利于更多研究团队开展高通量实验工作。

非晶合金是亚稳态金属材料，在一定的温度下会发生老化或转变为晶态合金，丧失非晶态的优异性能。因此，非晶合金的服役温度需要在其玻璃转变温度之下。目前，绝大部分非晶合金的服役温度在300 左右，这导致其应用在很多领域受限。该团队采用材料基因工程理念研发的Ir-Ni-Ta-(B)非晶合金在高温力学性能、热稳定性、加工成型性能、耐蚀性、抗氧化等方面表现出前所未有的综合优势。Ir-Ni-Ta-(B)非晶合金的玻璃转变温度超过800 ，比目前工程应用最为广泛的钴基非晶合金高出400 。在常温下，Ir-Ni-Ta-(B)非晶合金的强度约为5.1 GPa，是普通钢材的10倍以上，即使在超过700 的高温条件下，Ir-Ni-Ta-(B)非晶合金仍能保持3.7 GPa的强度，远远超过传统的高温合金和高熵合金的强度。

除了高温强度，Ir-Ni-Ta-(B)高温非晶合金还表现出优异的热稳定性，在玻璃转变温度以上具有超塑性，可通过超塑性成型工艺被加工成各种形状的高精密零部件。此外，Ir-Ni-Ta-(B)非晶合金还具备耐蚀和抗氧化的特点，可在王水中浸泡数月而不被腐蚀，在高温环境中也难以被氧化，说明用这些新型非晶合金制成的零部件不仅能在高温条件下服役，而且能在恶劣环境中使用。Ir-Ni-Ta-(B)高温非晶合金展现出的综合性能打破了非晶合金只能在常规环境中使用的限制，为设计开发新型高温材料提供了新的视角。

非晶合金自被发现以来由于其高性能而在能源、通讯、航天、国防等高新技术领域得到广泛应用，被认为是继钢铁、塑料之后的新一代工程材料。该团队发展的高通量实验方法颠覆了非晶合金领域60年来“炒菜式”的材料研发模式，证实了材料基因工程在新材料研发中的有效性，为解决非晶合金新材料探索效率低的难题开辟了新的途径，同时也为新型高温、高性能合金材料的设计提供了新的思路。相信在不久的将来，更多、性能更优异的非晶合金材料将不断涌现出来。

博士研究生李明星是这项工作的第一作者，研究员柳延辉是通讯作者。上述研究工作得到国家重点研发计划(2017YFB0701900)、“973”项目(2015CB856800)、国家自然科学基金项目(11790291, 61888102)、中科院前沿科学重点研究计划(QYZDY-SSW-JSC017)和先导B专项(XDB30000000)、北京材料基因工程高精尖创新中心、国家杰出青年科学基金(51825104)等的支持。

相关研究结果最近发表在《自然》(Nature)上。

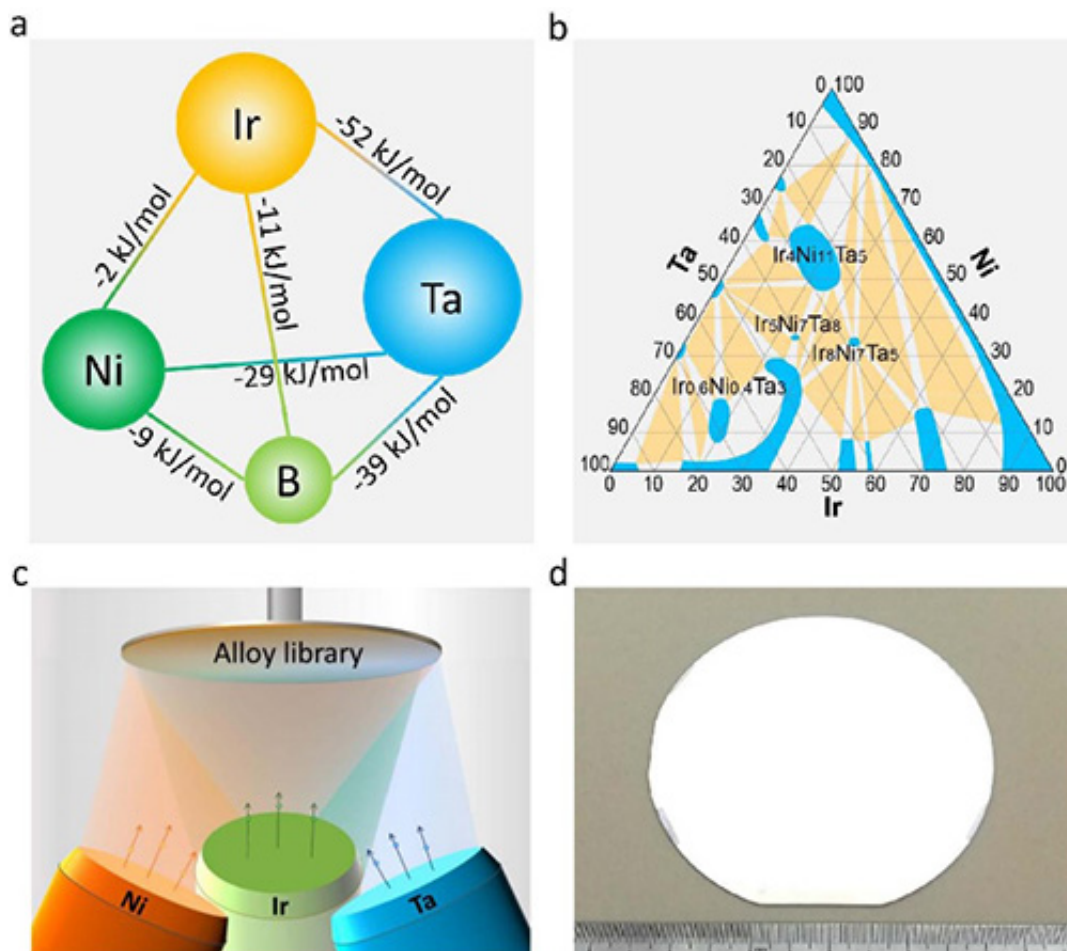


图1. Ir-Ni-Ta-(B)高温非晶合金的设计以及高通量实验方法。该方法一次可实现1000个成分点以上的快速制备和表征，比传统非晶合金探索方法效率高1000倍以上。

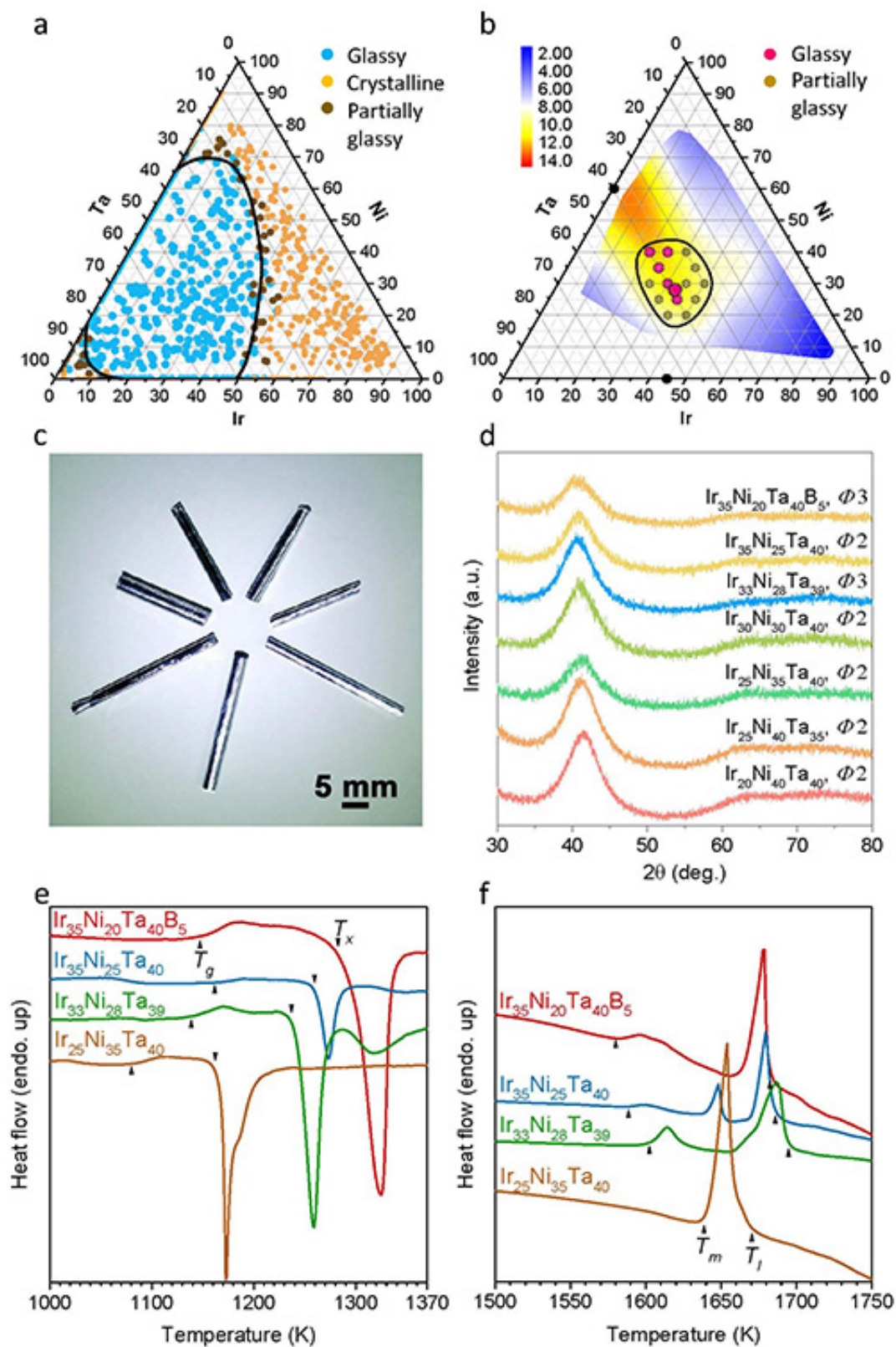


图2. Ir-Ni-Ta三元合金体系的非晶形成范围、电阻随成分的变化、块体非晶形成范围及其玻璃转变温度、晶化温度和熔化行为。

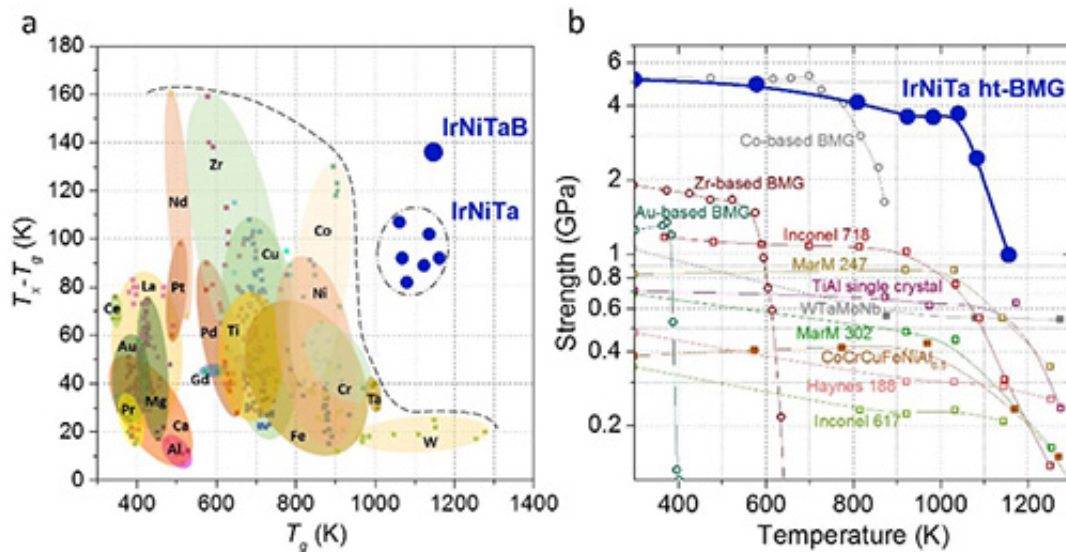


图3. Ir-Ni-Ta-(B)高温非晶合金和其他合金材料在玻璃转变温度、热稳定性以及力学性能方面的对比。在1000K高温条件下，Ir-Ni-Ta-(B)非晶合金和其它高温合金相比仍然保持优异的力学性能。

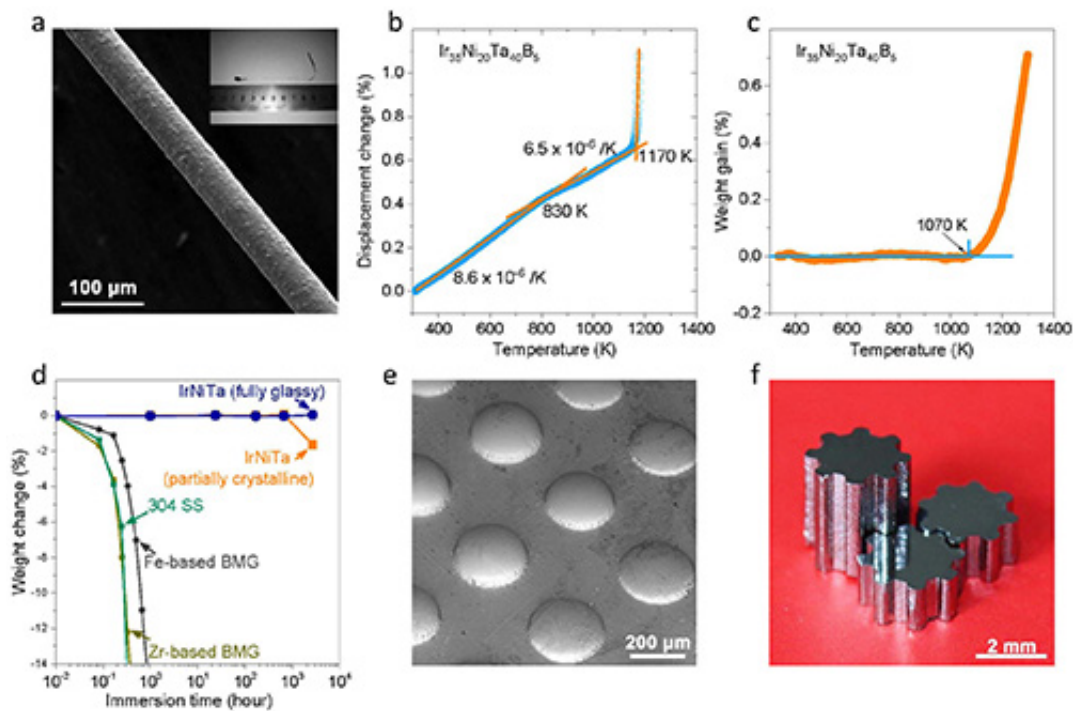


图4. Ir-Ni-Ta-(B)高温非晶合金具有低膨胀系数、抗氧化、耐腐蚀的特点，并且能通过超塑性成型工艺进行高精度加工。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发