

中国科学院学部 科学与技术前沿论坛简报 第 92 次

学部工作局学术与文化处 编报
《中国科学》杂志社

2020 年 5 月 11 日

“非晶合金材料科学”论坛综述

一、国内外研究现状

作为兼具玻璃和金属、固体和液体特性的新型金属材料，非晶合金保持了金属材料性能的很多极限记录。比如，非晶合金是迄今为止最强的金属材料和最软的金属材料之一（最强的 Co 基非晶合金的强度高达创纪录的 6.0 GPa，最软的 Sr 基非晶合金的强度低至 300 MPa）。非晶合金是目前发现的最强的穿甲材料，最容易加工成型的金属材料，最耐蚀的金属材料，最理想的微纳米加工材料之一；非晶合金还具有遗传、记忆、软磁等特性。非晶合金不但是性能独特的新材料，同时也是研究材料科学和凝聚态物理中一些重要问题的模型体系。非晶合金材料的发展和应用把非晶结构、物理性能及相关物理问题的研究推向凝聚态物理和材料科学领域的前沿。

近 20 年来，国际上块体非晶合金材料领域主要是以材料开发研究为主，并在非晶新材料探索及形成规律、力学性能研究以及应用方面取得一系列重要进展。近年来，非晶合金中的基本科学问题受到物理学家和材料学家越来越多的关注，非晶合金领域科学和技术的有机结

合更加紧密，这将大大促进非晶合金领域的发展和深入。目前，非晶合金中最受关注的四大基本科学问题是：（1）玻璃转变的机制；（2）非晶合金的形变机制；（3）非晶合金的非平衡态亚稳特征；（4）非晶合金结构特征表征及其与性能、玻璃转变、形变之间的关系。非晶合金材料的快速发展和广泛应用迫切需要对这些基本问题进行深入研究。

近年来，在国家自然科学基金委员会、科技部和中国科学院的支持下，我国非晶合金研究取得了令人瞩目的进展，在基础研究与开发领域做出了一批有影响的工作。很多新的非晶合金体系被发现，如中国科学院物理研究所提出弹性模量模型和判据，并发现一系列具有功能特性的稀土基块体非晶合金新体系，这些结果已获得国际同行的认可，同时获得了国家自然科学基金二等奖；中国科学院物理研究所还提出提高非晶合金韧性的判据，并获得一系列大塑性非晶合金；北京航空航天大学和中国科学院金属研究所在 Al 基块体非晶合金上取得突破；北京科技大学在具有拉伸塑性的复合材料研究方面有很大的进展，并获得了国家自然科学基金二等奖；中国科学院金属研究所等在块体非晶合金高技术领域应用方面有所突破，等等。更重要的是，国内已经形成一支由 15 名杰出青年基金获得者、10 余名“千人计划”获得者和 30 多个研究组组成的非晶合金研究队伍，这些中青年研究人员和群体的研究水平已取得长足的进步，并具备了很好的实验条件。这些对于我国非晶研究的发展和突破都是难得的机遇。

二、论坛概况

2019 年 5 月 6~7 日，以“非晶合金材料科学”为主题的第 92 次科学与技术前沿论坛暨中国科学院 70 周年学术论坛在中国科学院学术会堂举行。论坛由中国科学院学部主办，中国科学院技术科学部、学部学术与出版工作委员会承办，中国科学院物理研究所和《中国科学》杂志社协办。中国科学院院士汪卫华担任论坛主席，中国科学院

技术科学部副主任沈保根院士代表技术科学部致辞。材料基因组工程领域专家王崇愚院士和谢建新院士，非晶领域著名学者戴兰宏、吕昭平、张涛、周少雄、李茂枝、柳延辉、王刚、张博等，以及来自中国科学院物理研究所、金属研究所、力学研究所、宁波材料技术与工程研究所，北京大学，清华大学，上海交通大学，北京航空航天大学，中国人民大学，北京科技大学，东南大学，大连理工大学等高校和科研单位的 80 余位优秀的中青年专家和学生参会，共商推动我国非晶材料及相关研究领域发展的建议。

三、论坛的目的、重要性和必要性

近 10 余年来，国内学者在块体非晶合金领域做出了重要贡献，发现了很多新的非晶合金体系，同时非晶合金作为软磁材料在电力电子器件方面的应用，以及块体非晶合金在高技术领域的应用等方面取得了重要突破。在这个非晶合金材料研究以及应用发展的关键阶段，迫切需要理清发展思路，提出关键科学问题和发展方向，做好战略规划，促进协同创新。本次论坛就是在这样的背景下提出的，旨在集聚国内本领域高水平专家，对非晶合金领域国内外发展的状况、趋势、前沿问题进行最广泛深入的探讨，凝练出非晶合金材料研究的最重要的关键科学问题，促进合作。本次论坛对全面提高国内非晶合金领域的原始创新能力，推动我国非晶合金材料和物理研究迈上新的台阶具有重要作用和意义。

四、论坛报告

1. 汪卫华院士：非晶中超长时间尺度的动力学行为和模式

非晶态固体兼有固体和液体的特性，被认为是常规物质的第四态。由于结构无序，无法适用传统的固体物理理论框架，因此对其本质、形成机理、物性、形变及结构稳定性的研究是相当困难的科学问题。

报告简要介绍了非晶合金的发展史，指出非晶材料研究的每一轮

高潮均由新的制备技术革命引起，并认为目前的智能制造和材料基因组理念和技术极有可能会引起第四轮非晶研究的高潮。报告提出非晶合金新材料的探索既可以从传统的成分、结构和尺度这些维度进行开发，也可以从能量域、空间域及时间域开展，而从时间域的动力学进行调控已经成为非常重要的手段。随后介绍了在非晶材料领域中发现的各种长时间尺度的动力学行为与模式，开展非晶合金中长时间动力学行为研究的新方法，包括可以缩短材料研究时间尺度的超重力离心机技术和研究超短时间尺度动力学行为的自由电子激光技术。进一步介绍了非晶合金动力学行为的结构起源，以及它们与非晶性能之间的关联。通过这些研究表明，非晶合金的能量态、堆积模式与性能均可以通过研究其动力学行为进行理解，并且非晶合金的力学与物理性能与其动力学模式有着密切的关联，这对改善乃至设计非晶合金性能具有重要意义。

2. 戴兰宏研究员：非晶合金剪切带研究进展

剪切带现象广泛存在于自然界及工业过程中。本征上，具有特征厚度的变形局部化剪切带是一种远离平衡态的动态耗散结构，其涌现与演化是一类典型的由材料内部多种速率依赖耗散过程高度非线性耦合控制的时空多尺度问题。非晶合金（也称金属玻璃）由于其独特的短程有序、长程无序的原子堆积结构，具有一系列优异的力学、物理、化学性能，成为当前最具发展潜力的新型结构材料之一，在国防、空天、能源等战略领域显示出广阔的应用前景。然而，该材料在外载激励下极易形成厚度为几十纳米尺度的剪切带，导致材料发生宏观脆性灾变破坏，从而严重地限制此类材料走向工程应用。另一方面，这种纳米尺度剪切带到底如何从材料底层涌现以及如何演化诱致断裂，仍然是该领域尚未完全破解的重大难题之一。

报告介绍了非晶合金剪切带在过去几十年的研究进展，主要包括非晶合金剪切带涌现的物理起源，剪切带的热软化和自由体积软化机

制之争，材料内在结构、尺寸因素及外在试验条件因素对剪切带失稳的影响；剪切带演化动力学，剪切带的韧性、厚度和影响区，多重剪切带行为及竞争机制；通过材料本征属性，如预处理、成分设计与复合材料设计，以及外部因素，如加载约束、尺寸调制实现对剪切带的控制。最后，对非晶合金剪切带研究给出建议，包括：（1）获取剪切带演化中原子团簇运动的精细物理图像；（2）发展高时空分辨率的剪切带表征实验技术；（3）构建非晶合金流变本构关系；（4）发展跨时空尺度数值模拟技术；（5）实现剪切带诱导的自锐及其工程的应用。

3. 吕昭平教授：高熵非晶合金研究现状与展望

高熵非晶合金是兼具高熵合金多主元的成分特征和非晶合金长程无序的原子结构堆垛特性的一种新型无序合金。由于其独特的成分和结构特征，高熵非晶合金显示出一系列独特的物理、化学和力学性能，并引起了广泛的关注。

报告介绍了高熵非晶合金当前的研究进展，主要包括高熵非晶合金在成分、结构和性能方面的特性及相关研究进展。同时介绍了课题组近年来在高熵非晶方面开展的系列工作，提出高熵非晶合金领域亟待解决的几个科学问题：（1）如何理解高熵效应对高熵非晶形成的影响？依据“混乱法则”，高熵效应有利于非晶结构的形成。然而，研究发现高熵非晶相对于传统非晶具有较差的非晶形成能力（GFA）。同时，研究还发现高熵非晶的 GFA 与其热稳定性之间存在异常关系。（2）高熵合金中的高熵效应和缓慢扩散效应对高熵非晶合金的结构与热力学性质的影响如何？初步研究表明，相对于传统非晶，高熵非晶具有更加均匀的原子堆垛结构。同时，高熵非晶的过冷液体具有异常小的过剩比热容。这些现象的物理本质值得进一步深入研究。（3）高熵非晶的异常热稳定性：与常规非晶合金不同，高熵非晶差热分析（DSC）曲线上的第一个放热峰不是晶化导致的，而是过冷液相区发生了原子结构的有序化。而且，高熵非晶具有异常缓慢的纳米晶化动力学特征。

因此，有望通过高熵非晶的晶化制备均匀分布的新型高熵块体纳米结构材料。

4. 李茂枝教授：利用机器学习方法探索非晶合金材料中的关键科学问题

非晶合金材料的理论模型和计算机模拟对推动关键科学问题的研究发挥着举足轻重的作用。近两年来，机器学习方法正在多个研究领域掀起一场革命，也为新材料的研发和创新提出了全新的思路和研究范式。2016年5月，*Nature* 刊文指出，那些曾经被废弃的“失败”实验数据中隐藏着重要的信息，而机器学习能够充分挖掘隐藏在大量成功和“失败”的数据背后有价值的信息，并建立数据之间的关联性，从而帮助研究人员更加高效地预测新材料的构成。机器学习这一新的研究范式为解决非晶合金材料领域的关键瓶颈问题提供了新的途径和契机，从而摆脱传统的试错模式，这将有力推动非晶合金材料的基础研究和应用开发。

报告介绍了机器学习方法及其在非晶合金材料科学领域的研究进展。利用机器学习方法，对影响二元非晶合金形成能力的诸多因素进行了系统研究，建立了合金成分与性能之间的关联，并对可能的新材料进行了预测。相关结果表明，机器学习方法在非晶合金材料等领域具有重要的应用前景。

5. 柳延辉研究员：非晶合金的高通量制备与表征

非晶合金往往由多个组元构成，这给成分和性能优化带来巨大的挑战。材料基因工程是最近发展起来的新方法，高通量实验是材料基因工程的主要组成部分之一。通过高通量制备和表征，不仅可以加快非晶合金新材料的探索效率，而且在高通量表征中所获得的大量实验数据还可以帮助人们理解非晶合金中的科学问题。

报告首先对比了非晶合金与传统金属材料的发展历史，提出制约非晶合金工程应用的最大问题还是其形成能力。报告指出，传统的试

错方法已无法满足新型非晶合金成分体系的开发，基于材料基因组理念采用高通量制备与表征技术可以实现新材料的快速筛选，获取理想的材料成分，具有多快好省等优势。随后报告介绍了研究组利用磁控溅射技术与相关高通量表征技术，实现了具有高温、高强、高稳定性新型 Ir-Ni-Ta 块体非晶合金的制备，充分展示了高通量方法在探索非晶合金新材料中的重要作用。

6. 周少雄教授：铁基非晶合金成份与原子团簇丰度和热稳定性的关联性

铁基非晶软磁合金作为战略新兴产业的基础材料之一，广泛应用于智能制造、智能电网、新能源汽车、信息技术和航空航天等领域。目前铁基非晶合金元器件向着更小、更轻、更高效的方向发展，要求开发更高饱和磁感应强度的铁基非晶合金。由于要提高饱和磁感强度必须增加铁含量，这就导致了铁基合金的非晶形成能力和非晶合金结构热稳定性的明显下降。因此，开发兼备更强非晶形成能力和更高饱和磁感强度的新型铁基非晶合金既是新机遇，同时也带来了新挑战。

报告介绍了可以通过对合金熔体的原子团簇结构进行调控，来解决铁基非晶合金中铁含量提升造成的非晶形成能力和非晶合金结构热稳定性下降问题。原子堆积密度与原子团簇具有的旋转对称性成正比，因为旋转对称性越高，围绕中心原子的配位原子数就越多，原子团簇的堆积密度也越高。因此，增加高原子堆积密度原子团簇的丰度，是提高熔体非晶形成能力和非晶合金热稳定性的有效方法。研究表明，熔体中不同构型原子团簇的丰度与合金成分有关，合金成分越接近某种高旋转对称构型原子团簇对应的不同种类原子之间的数量比例，该构型原子团簇的丰度越大。

7. 张涛教授：Fe-P-C-B 系非晶合金及其磁阻电机铁芯应用

Fe 基软磁非晶合金具有高磁导率、低矫顽力、相对高的饱和磁化强度和低的磁芯损耗等优异软磁性能，但由于其热处理引起的弛豫脆

性也很大程度上限制了应用范围。开发出饱和磁化强度更高且没有热处理弛豫脆性的 Fe 基非晶合金,不仅能够进一步扩大其在配电变压器中的应用范围,而且能够用于电机铁芯,有效地提高其效率、降低能耗。

报告介绍了 Fe-P-C-B 系非晶合金形成、性能及其在磁阻电机铁芯应用方面的研究结果。研究发现,提高 Fe 含量不仅能够提高饱和磁化强度,Fe 含量达到一定浓度时淬态非晶合金薄带由脆性变为韧性。当 Fe 含量大于 80 at.%时,弛豫后薄带不发生脆性转变,仍保持高的韧性。这种高 Fe 含量的非晶合金饱和磁化强度约为 1.7 T,超过了 Fe-Si-B 非晶合金的软磁综合性能。利用该合金体系设计制作的磁阻电机铁芯尺寸显著减小,与永磁电机相比,在油田抽油机等非匀速动力输出条件下能耗降低 20%,显示出很好的节能效果,并解决了硅钢磁阻电机存在的其他问题。

8. 王刚教授: 非晶合金的断裂——从基础研究到应用

非晶合金在形变中表现出的脆性断裂是限制其大规模工程应用的主要瓶颈,提高非晶合金的塑性变形能力是突破这一瓶颈的关键。聚焦非晶合金的变形和断裂问题,当前存在以下三个亟需解决的问题:

(1) 非晶合金变形的结构起源尚缺乏清晰而全面的认识,特别是非晶合金受到外界力和热的影响下,其原子层开动机制不明晰;(2) 无序结构导致非晶合金以局域剪切方式发生形变,使得非晶合金变形过程中呈现出无规律性的间歇性锯齿流变行为,依赖于长程序的传统晶体物理理论和模型不再适用于非晶固体的塑变机理,阻碍了对变形机制和局部损伤的全面认识;(3) 由于非晶合金的玻璃本质,非晶合金往往呈现脆性断裂。对非晶固体断裂机理认识的缺失,阻碍了非晶合金强韧化方法的发展。

针对非晶合金塑性变形过程复杂、缺乏本征模型的难题,以非晶合金锯齿形塑性变形特征为突破口,将统计和动力学分析的数学方法

引入非晶合金变形研究，揭示了非晶合金变形动力学行为与塑性变形能力的关系，发展了调控塑性变形过程的方法。通过对断面形貌的三维分析，揭示了非晶合金从变形过程中产生的剪切带到裂纹尖端萌生的演变规律，建立了断面形貌和韧性的关联关系。开展了非晶合金在辐照和高速撞击等极端条件下的构件服役行为表征，揭示了重离子辐照对非晶合金结构的调控作用和高速撞击下的构件响应行为。最后，介绍了非晶合金在空间环境等极端条件下的构件应用前景。

9. 张博教授：非晶合金在空间环境下的研究与应用

非晶合金材料特有的优异力学与物理性能，使其在空间环境中具有重要的应用前景。然而关于非晶合金在太空环境中的相关研究和应用才刚刚起步。

基于此，报告介绍了国内外最新和最前沿的非晶合金材料在空间环境下的相关研究成果，为未来非晶合金材料空间研究和应用提供了新的思路。基于非晶合金材料独特的结构、性能和制备特点以及太空环境的特殊性（包括宇宙射线和高能辐射离子，低温、微重力、高真空等环境），分析了非晶合金材料在空间环境下应用的具体优势。比如，已有实验研究发现 Zr 基非晶合金在 -200°C 时仍具有优异的塑性和断裂强度，且非晶合金均匀的微观结构和光滑的表面使其具有超强的抗辐照能力，能够大幅度延长太空探测器的可靠性和使用寿命。另外，非晶合金材料基本科学问题的研究需要空间环境，比如在微重力环境下非晶合金材料的制备和玻璃化转变等关键问题的研究。通过空间微重力环境可以获得地面上无法获得的极端研究条件，从而拓展和突破人们对非晶关键科学问题的认识。结合美国、日本、德国以及中国等国家在非晶合金材料空间物理研究和应用领域的最新成果以及已经提出的空间研究计划等内容，报告为未来非晶合金的空间研究和应用提出了建议。

五、共识和建议

与会专家针对制约非晶材料发展的科学问题、非晶领域重点发展方向和制定相应的发展路线图等进行了充分的讨论。讨论的内容主要包括：（1）非晶合金熔体的结构特征；（2）非晶成分结构、制备加工、性能与使役行为；（3）非晶涂层在能源与化工领域的应用现状；（4）纳米多孔结构材料；（5）非晶合金在特殊环境中的应用；（6）如何充分利用先进实验技术、大科学装置去发现更多非晶合金领域的新现象；（7）如何从能量态这一新维度去理解非晶合金材料；（8）功能非晶材料带来的新增长点；（9）如何充分利用材料基因组理念与方法来推动新材料的探索；（10）利用结构非均匀性实现磁性非晶合金的软磁与力学性能调控；（11）块体非晶合金在电子产品上的应用；（12）玻璃理论方面的研究等。

论坛达成的共识和建议如下：

1. 聚焦非晶合金领域的关键科学问题，在研究中提出有高度的科学问题。
2. 关注高性能非晶材料的开发，将材料领域的新技术、新方法与新理念运用到非晶合金材料的探索中。
3. 重点关注具有显示度的应用，包括航天、国防军工、电子信息等领域。
4. 注重与凝聚态物理、机械加工等学科的交叉，充分利用现有的大科学装置进行非晶合金的研究。
5. 加强非晶合金功能特性研究，国内学者领衔非晶合金在能源、环境方面的应用研究，有望成为非晶合金应用的新突破点。
6. 关注非晶合金动力学问题研究，非晶合金中存在跨越多个尺度的结构演化动力学，是研究非平衡态物理的理想模型材料。

六、与国外同领域研究的比较

与国际比较，无论从基础研究角度，还是产业化应用方面，中国非晶合金领域的研究已经取得了长足的发展，多个方向与国际水平相

当，甚至已经处于领跑位置，从人才、政策、资金方面都具有良好的发展态势。国内非晶合金领域具有比较完善和强大的研究队伍，形成了包括中国科学院院士、“杰出青年科学基金”获得者、“长江学者”特聘教授、“千人计划”专家、“百人计划”入选者、“优秀青年科学基金”获得者、“新世纪优秀人才”等多层次人才梯队。国家在重大政策方面给与了大力支持，比如国家《“十三五”发展规划》和《中国制造2025》将非晶软磁合金列为电力装备关键性材料，国家自然科学基金委员会也将非晶合金列为重点支持方向。众多民营企业在非晶合金新材料、新技术、新产品研发方面投入了大量资金。因此，中国非晶领域面临非常好的发展机遇，未来3~5年有望引领世界非晶合金研究的发展。国家自然科学基金委员会材料一处郑雁军主任在总结时提到，国内非晶合金领域基础科研和产业化应用都做得非常好，非晶合金作为结构材料和功能材料都具有重要应用和广阔发展前景，希望将来加强与物理、化学、技术、产业化等领域的合作，加强国际领先优势。

七、论坛的特色和创新之处

学科交叉是本次论坛的主要特色。论坛由汪卫华院士组织，邀请了材料基因组领域王崇愚院士、谢建新院士、沈保根院士参加并主持了相关报告和讨论。对于推动非晶合金与材料基因组计划的融合，借鉴材料基因组计划中新的材料研发理念和技术加快非晶合金领域的发展具有重要意义。会议邀请了国内非晶合金领域9位著名科学家做主旨报告，报告覆盖了从基础研究到产业化应用等多个方面，全面概括了非晶合金的重要研究进展，并对存在的关键科学技术问题做了剖析。在之后的讨论过程中，与会的80余名学者围绕报告内容和其他重要发展方向开展了深入、热烈的讨论。讨论内容不但立足非晶合金学科本身，而且关注其他学科领域的发展，多位专家都极力倡导交叉融合。本次会议将推动非晶合金领域在“新思路、新技术、新方法、新概念、新材料、新应用”等多个方向产生突破。

过去 20 年,非晶合金领域前沿物理科学问题和新材料研发等基础研究取得了很多显著成果,但应用方面相对滞后。本次会议邀请多位专家介绍了非晶合金作为软磁材料、结构材料和化学催化剂等方面的应用进展,将是国内非晶合金领域基础研究和应用研究齐头并进的标志性事件,引领非晶合金领域转向以应用需求为牵引的新时期。

(作者:王军强,中国科学院宁波材料技术与工程研究所研究员;柯海波,松山湖材料实验室研究员;霍军涛,中国科学院宁波材料技术与工程研究所副研究员;丁大伟,中国科学院物理研究所副主任工程师;汪卫华,中国科学院院士,中国科学院物理研究所研究员)

联系方式:中国科学院学部工作局学术与文化处, 010-59358366