

高通量方法在钎焊领域的应用现状

王星星^{1,2}, 何鹏², 李帅¹, 张墅野², 骆静宜³, 佐藤裕⁴

(1. 华北水利水电大学, 河南省高效特种绿色焊接国际联合实验室, 郑州, 450045; 2. 哈尔滨工业大学, 先进焊接与连接国家重点实验室, 哈尔滨, 150001; 3. 金华市金钟焊接材料有限公司, 金华, 321016; 4. 日本东北大学, 日本, 仙台, 980-8579)

摘要: 高通量方法作为“材料基因组技术”三大核心要素之一, 在材料成分设计、组织分析、性能优化、过程模拟等方面起着关键性作用。钎焊技术作为焊接与连接领域的重要分支之一, 是现代制造业中材料连接应用最广的方式。首先对高通量方法在钎焊领域的应用研究进行概述, 其次主要对近 5 年有关高通量制备钎料、软钎焊和硬钎焊领域高通量计算方面的最新研究进行高度归纳、总结, 最后提出了目前钎焊基因工程研究的局限性, 特别是高通量方法与钎焊技术有机组合方面存在的不足之处, 同时指明了高通量方法在钎焊领域应用研究发展的方向, 为未来实现钎焊 4.0、智能钎焊工厂等提供技术支撑和参考信息。

创新点: (1) 评述了国内外有关高通量方法在钎焊领域的最新研究报告与应用情况。

(2) 对于高通量研发高性能钎料、钎料性能高通量计算预测、钎缝界面演变行为高通量解析、发展高通量钎焊与特种连接新技术, 具有重要的理论指导意义。

关键词: 钎焊基因工程; 高通量方法; 分子动力学; 第一性原理

中图分类号: TG 454 **文献标识码:** A **doi:** 10.12073/j.hjxb.20200809001

0 序言

以材料设计与模拟为理论基石的材料基因工程, 在新材料研发过程中占有及其重要的地位。材料基因工程中的高通量方法, 在短时间内高效完成大批量样品制备与表征, 包括高通量制备、高通量计算、高通量表征、高通量数据库与数据传输, 其核心是将传统材料研究中的顺序迭代方法改为并行处理, 以量变引起材料研究效率的质变^[1-2]。

作为“材料基因组技术”三大要素之一, 高通量方法在材料成分设计、组织分析、性能优化、过程模拟等方面起着关键性作用^[1]。需要与“材料计算模拟”和“材料信息学/数据库”有机融合、协同发展、互相补充, 方可充分发挥其加速材料研发与应用的效能, 最终使材料科学走向“按需设计”的终极目标^[3-5]。钎焊是现代制造业中材料连接的重要方法之一, 借助材料基因组理念^[6], 高通量方法是否在钎

焊性能数值模拟^[7]、钎料高效可控制备、钎缝微观组织分析、钎焊材料物性数据库建立等方面起到举足轻重的关键作用, 值得思考与探索。

钎焊技术作为三大焊接技术的重要分支之一, 是在狭窄半封闭空间内瞬间实现熔化、润湿、铺展、填充、溶解、扩散、凝固和界面反应过程^[6], 使得钎焊过程异常复杂、影响因素多、随机性强, 国内外学者对钎焊界面状态变化、冶金反应及钎缝缺欠形成机理的研究仅限于个例, 尚未形成涵盖全部因素的表征模型, 在很大程度上凭经验判定, 难以确保接头的使用可靠性^[6, 8-9]。利用材料基因工程中的高通量方法^[10], 也许可解决上述难题, 故有必要开展钎焊基因工程及高通量制备的深入研究。

目前有关钎焊与高通量方法组合研究的报道较为零散, 缺乏综述性报道给以详细梳理, 因此文中全面阐述有关高通量方法在钎焊领域的应用研究, 对于未来实现钎焊基因工程、智能钎焊工厂提供理论依据和参考信息。

1 高通量方法在钎焊领域的应用概述

高通量方法在钎焊领域的应用以高通量制备

收稿日期: 2020 - 08 - 09

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (52071165); 河南省优秀青年科学基金项目 (202300410268); 中国博士后基金面上资助项目 (2019M662011); 新型钎焊材料与技术国家重点实验室开放课题 (SKLABFMT201901); 先进焊接与连接国家重点实验室开放课题 (AWJ-21M11)。

钎料、钎料及钎焊接头的高通量计算模拟分析为主,目前国内外学者发表的学术论文 20 余篇(包括期刊论文、会议论文、学位论文)、公开发明专利 21 项,主要有哈尔滨工业大学何鹏教授、北京科技大学黄继华教授、上海交通大学陈捷狮博士、太原

理工大学丁敏博士、上海大学贾延东及德国 Hartz 教授、乔治亚理工学院 Gao Feng 教授等研究组,但目前国内外有关钎焊材料与工艺方面,还未涉及高通量表征、高通量数据库与数据传输方面的研究。上述代表性的研究成果归纳、总结如表 1 所示。

表 1 高通量方法在钎焊领域的代表性研究

Table 1 Representative study of high-throughput methods in the field of brazing

研究钎料类别	研究内容	作者	单位	文献
贵金属钎料	钎焊基因工程、智能钎焊理念提出	何鹏	哈尔滨工业大学	[6, 8]
AgCuNi	定向凝固高通量制备装置、楔形轧制	谢明	贵研铂业股份有限公司	[11-12]
AgCuTi	第一性原理研究钎料在 SiC 表面的润湿性	黄继华	北京科技大学	[13]
Ag72Cu	第一性原理计算 Ag 元素在 Ti2AlC 中元素取代倾向性和可行性	王国超	哈尔滨工业大学	[14]
Ag72Cu	分子动力学方法模拟钎料在铁基板的润湿特性	Hartz	德国多特蒙德大学	[15]
NiCrBSi	第一性原理分析 B、Si 元素对金刚石钎缝界面结合强度的影响	Zhang Jian	长沙理工大学	[16]
CuNiTi	CuTi 二元体系的电子轨道杂化	黄继华	北京科技大学	[17]
AlSi 梯度	梯度钎料高通量制备装置	贾延东	上海大学	[18]
Al12Si、Sn 基	与 SiC 界面的原子活性	韩雨彤	哈尔滨工业大学	[19]
SnZnCu	两靶磁控溅射共沉积制备软钎料	王刚	上海大学	[20]
Sn-3.5Ag	基于密度泛函理论的第一原理探索 Cu ₆ Sn ₅ 晶体结构中掺杂剂最有利的占据位置	Gao F	乔治亚理工学院	[21]
SnCu	密度泛函理论的第一性原理对 Cu/Cu ₃ Sn(010) 界面 Bi 的偏析进行了研究	Liu Z Q	中科院金属所	[22]
SnZn	第一性原理计算 Al ₂ O ₃ /Sn9Zn、Sn9Zn-1Al ₂ O ₃ -xCu 钎料界面电子性能	丁敏	太原理工大学	[23-24]
SnCu	基于密度泛函分子动力学方法, 计算母材原子在 Sn 轴方向的最优迁移路径、最小能量及相应的电子结构	陈捷狮	上海交通大学	[25-26]

2 钎料高通量制备研究现状

高端装备制造对高性能材料的需求迫切,尤其是对缩短研发时间与降低成本的需求,但是新材料研发有其固有的规律和时间要求^[4]。借助高通量制备可以解决加快新材料的研发速度,降低合金的研发成本等问题。高通量制备作为高通量试验技术的重要组成部分,是材料基因组技术能否有效进行的关键。目前国内外有关高通量制备技术在钎焊技术领域的应用研究现状,按照软、硬钎焊技术类别,可归纳为 AgCuNi 钎料、AlSi 梯度钎料、SnZnCu 钎料的高通量制备研究,具体如下。

昆明贵金属研究所谢明课题组开发出钎料高通量定向凝固制备装置(图 1),可单次完成不同成

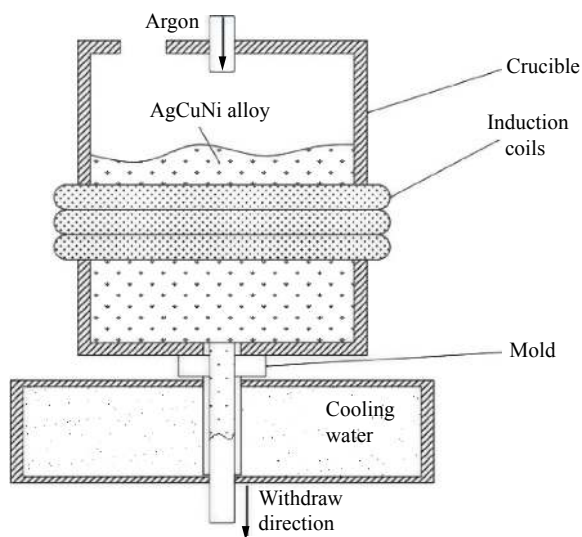


图 1 AgCuNi 钎料高通量定向凝固制备装置

Fig. 1 High-throughput preparation equipment of AgCuNi brazing alloys with directional solidification

分、工艺下钎料高通量制备^[11]. 在熔体温度 1 150 ℃、冷却水温度及水量 25 ~ 35 ℃, 400 L/h, 拉坯速度 0.5 mm/s, 氩气保护条件下, 定向凝固制备直径 25 mm 的 AgCuNi 棒材, Ni 含量 0.5% ~ 2% (质量分数) 经系列测试, 钎料性能参数如下: 抗拉强度 320 ~ 411 MPa, 断后伸长率 5.3% ~ 10.2%, 固相线温度区间 558 ~ 617 ℃, 液相线温度区间 549 ~ 586 ℃. 对 AgCuNi 楔形试样^[12] 轧制后发现: 高通量样品变形量从 33% ~ 80% 连续变化. 该方法不足之处是拉坯过程中容易产生裂纹、夹杂等缺陷, 成为制约钎料性能提升的瓶颈.

一种封装用高硅铝合金结构梯度材料高通量制备装置及方法^[18], 主要用于制备 AlSi 梯度合金钎料, 钎料抗拉强度 180 ~ 260 MPa, 热导率 139 ~ 170 W/(m·℃), 热膨胀系数 $(12.1 \sim 17.4) \times 10^{-6}$ (25 ~ 200 ℃), 制备的合金致密度更高, 组织更加细化, 合金具有优异的综合性能, 该方法仅适用小批量制备, 与工业实际规模化生产还有一定差距.

上海大学王刚课题组^[20] 发明了两靶共溅射沉积方法制备 Sn-Zn-Cu 钎料 (图 2), 一次性可制备 10 种不同组分的钎料, 靶材为 Sn-9Zn 合金和纯 Cu 金属, 钎料成分为 Cu 含量 20.2% ~ 20.3%, Sn 含量 74.38% ~ 92.77%, Zn 含量 4.5% ~ 7.5%. 钎料熔化温度区间: 204 ~ 218.5 ℃, 但制备的钎料中存在微量 Cu₂O 和 ZnO 氧化物.

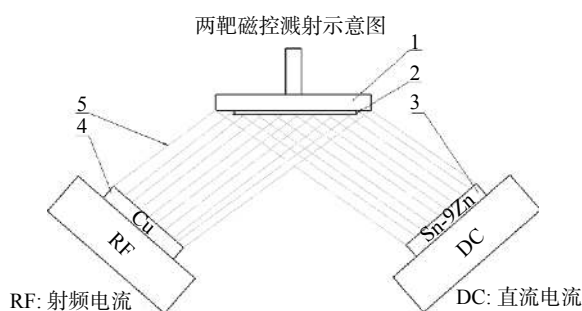


图 2 SnZnCu 钎料两靶磁控溅射方法
Fig. 2 Two-target magnetron sputtering method of SnZnCu solders

3 钎焊领域高通量计算

对于材料性质的研究, 理论计算与模拟具有极强的理论指导性及其预见性, 能够较好的解释试验结果, 并对试验中的不足提出改进, 进一步指导试验^[3, 27-28]. 理论模拟计算研究材料性能最常用的方

法主要有密度泛函理论、分子动力学、第一性原理. 将上述三种高通量计算方法应用到钎焊领域, 可获得预想不到的研究结果.

3.1 硬钎焊领域

硬钎焊作为钎焊领域一个重要分支, 国内外学者采用第一性原理、分子动力学等高通量计算方法对银钎料、镍钎料、铜钎料中的二元电子结构、电荷密度、原子置换等进行了系统研究, 但有关钎料整体电子结构、钎焊性能方面的数值模拟、三维钎焊过程, 目前还鲜有涉及, 有待后续进行深入研究.

王国超^[14] 使用 BAg-8 钎料钎焊 Ti₂AlC 和铜, 利用第一性原理, 从热力学角度揭示了 Ag 在 Ti₂AlC 中是通过 Al 空位优先成片的置换, 形成 Ti₂(Al, Ag)C 固溶体, 从而保持了 Ti₂AlC 陶瓷结构的稳定性; Ti-Ag 键取代 Ti-Al 键, 键合强度的减弱降低了体系稳定性; 从原子尺度发现 Ag 在 Ti₂AlC 中形成圆盘状的富 Ag 固溶体, 证实了第一性原理计算结果. 但是有关 Ti-Ag-Al 之间的键合强度未涉及.

Yang 等人^[13] 借助第一性原理计算研究 Ag(111)/SiC(111) 界面和 Ag(111)/TiC(111) 界面的界面特性, 研究 Ag-Cu-Ti 钎料在 SiC 陶瓷表面的优异反应润湿性, 如图 3 所示. 结果表明, Ag(111)/SiC(111) 界面和 Ag(111)/TiC(111) 界面具有 C 端基结构和 TL 堆叠序列, 显示出最高的界面稳定性. Ag(111)/SiC(111) 界面和 Ag(111)/TiC(111) 界面的化学键主要通过 SiC(或 TiC) 板中第一层 C 原子之间的相互作用和 Ag 板中的第一层 Ag 原子形成. Ag(111)/SiC(111) 界面的界面能远大于 Ag(111)/TiC(111) 界面的界面能, 这表明 AgCuTi 钎料与 SiC 母材之间形成 TiC 反应层, 对提高 AgCuTi 钎料在 SiC 陶瓷上的润湿性起到积极作用. 但是有关 Ti-Ag-Cu-Si 之间的界面能未涉及, 可能是计算软件本身的缺陷.

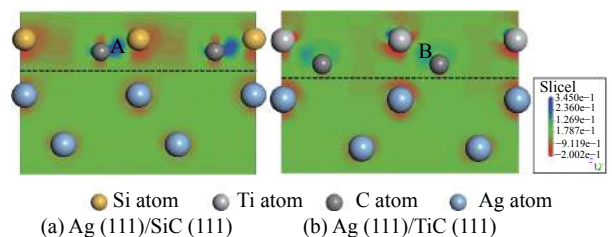


图 3 Ag(111)/SiC(111) 界面和 Ag(111)/TiC(111) 界面的电荷密度差分布

Fig. 3 Charge density differences of Ag (111)/SiC (111) and Ag (111)/TiC (111) interface.(a) Ag (111)/SiC (111); (b) Ag (111)/TiC (111)

Hartz-Behrend 等人^[15]采用分子动力学模拟方法对钎焊过程固/液界面的润湿及铺展行为进行了定量分析. 分子动力学模拟能够定量反映纯铜、纯银、AgCu28 钎料在铁基板上的润湿情况, 与试验结果较为吻合. 但是该研究没有考虑钎料与基体之间复杂的界面传质和反应行为.

Zhang 等人^[16]通过第一性原理研究了 Cr, B, Si 对 Ni-Cr-B-Si 钎料钎焊金刚石界面结合强度和粘着转移的影响规律. 研究发现, Cr 对镍/金刚石界面具有较强的包覆能力, 相对于 B 和 Si, Cr 对镍/金刚石界面具有较强的包覆能力. Cr 有效地提高了界面结合强度, 镍/金刚石界面的拉伸模拟试验进一步验证了 Cr 对镍/金刚石界面性能具有强化作用, 镍/金刚石界面 Cr 和 C 原子之间强烈的离子键决定了镍基钎料钎焊金刚石界面具有高结合能. 有关 Cr, B, Si 对钎焊金刚石界面的耦合作用机理还有待深入研究.

Yang 等人^[17]采用超软赝势密度泛函的第一性原理系统研究 Ag-Cu-Ti 和 Cu-Ni-Ti 钎料中 Cu-Ti 体系金属间化合物的电子结构 (电子轨道杂化、电子分布情况), 如图 4 所示. 对于 Cu-Ti 金属间化合物, 负信息熵表明它们从降解到纯金属在热力学上是稳定的, 建立了 Cu 含量和信息熵之间的定量表达式. Cu-Ti 金属间化合物的力学性能与共价键强度正相关, 而热物理性能同时受离子特性和共价特性的影响, 其中离子特性起主导作用. 但有关 Ag-Cu-Ti 和 Cu-Ni-Ti 三元体系的电子结构, 目前还未涉及.

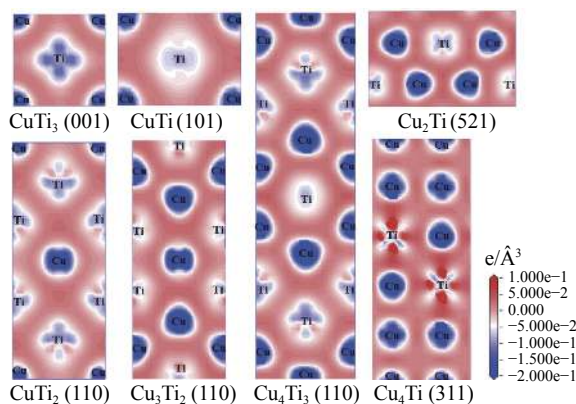


图 4 CuTi 二元体系金属间化合物的电荷密度差图
Fig. 4 Calculated difference charge density for Cu-Ti binary system intermetallic compounds

3.2 软钎焊领域

软钎焊领域, 钎焊学术界运用密度泛函理论的

第一性原理和分子动力学方法研究母材与钎料的界面结合机制、元素偏析、原子最佳占据位置及颗粒/钎料的界面特性、原子的最小能量, 均取得了一些重要的理论结果, 对于调控无铅焊点界面组织、提高焊点可靠性具有重要的指导意义.

韩雨彤^[19]运用第一性原理研究 Al/SiC, Al-12Si/SiC, Sn/SiC, Sn-1.0Al/SiC 的界面结合机制. 探究 Al 钎料与 SiC 界面的结合, 模拟计算 Sn 基钎料与 SiC 陶瓷界面结合. 界面的结合主要是 Al-C 离子共价键和 Si-C 共价离子键的作用, 界面上 Al 原子活性被抑制, Al-C 原子间仍成键, 但不形成化合物 Al_4C_3 , 界面的结合主要来自于 Si-C 间的相互作用. 结合模拟计算设计试验实现了 SiC 陶瓷的低温钎焊, 并验证理论计算的可靠性. 有关 Si 元素在 Al-12Si/SiC, Al 元素在 Sn-1.0Al/SiC 中的影响还未解析清楚, 有待研究.

通常在 Cu 基板和 Sn 基焊料之间的界面处形成含有一定量 Co 或 Ni 的 Cu_6Sn_5 金属间化合物, 发现 Co 或 Ni 添加剂占据 Cu_6Sn_5 晶体结构中的 Cu 原子亚晶格. Gao 等人^[21]研究发现: 对于浓度高达 27.3%(原子分数)的 Ni 和 Co 原子均倾向于取代 Cu_6Sn_5 结构中的 Cu, 并形成热力学更稳定的 $(Cu, Ni)_6Sn_5$ 和 $(Cu, Co)_6Sn_5$ 相. 相比之下, Ni 在稳定 Cu_6Sn_5 相方面比 Co 更有效. 在较低浓度条件 (9.1%) 下, Ni 或 Co 原子优选占据 4e Cu 亚晶格; 在较高浓度 (27.3%) 下, Ni 原子可能位于 4e+8f2Cu 亚晶格上; 但有关 Co, Ni 复合添加对 Cu 原子亚晶格的行为还未阐明.

Pang 等人^[22]使用密度泛函理论的第一性原理对 Cu/Cu₃Sn(010) 界面 Bi 的偏析进行了研究, 如图 5 所示. 分析表明, Bi 偏析使 Cu/Cu₃Sn(010) 界面的附着能降低了约一半, 由于 Bi 原子半径大, 导致界面键合从 Cu-Cu 和 Cu-Sn 转移到 Cu-Bi 和 Sn-Bi. 采用粘附能量标准引入了五种初始结构. 其中 Cu 板界面 Cu 原子沿 Cu₃Sn 中 Cu-Cu 键方向定位的所谓“Cu-Cu”结构被认为最佳能量结构, 此时粘附能量为 1.96 J/m² 时; 当粘附能量低至 1.06 J/m² 时, 被确定是最可能的分离位点; 同时发现尺寸效应在脆化中起决定性作用.

太原理工大学丁敏课题组采用第一性原理计算研究了 Sn-9Zn-xAl₂O₃ (x = 0-1) 界面结构和电子性能^[23]. Al₂O₃/Sn9Zn 界面能的数值相对稳定在 -1.15 ~ -0.23 J/m² 之间. 与普通的 Sn-9Zn 焊料相

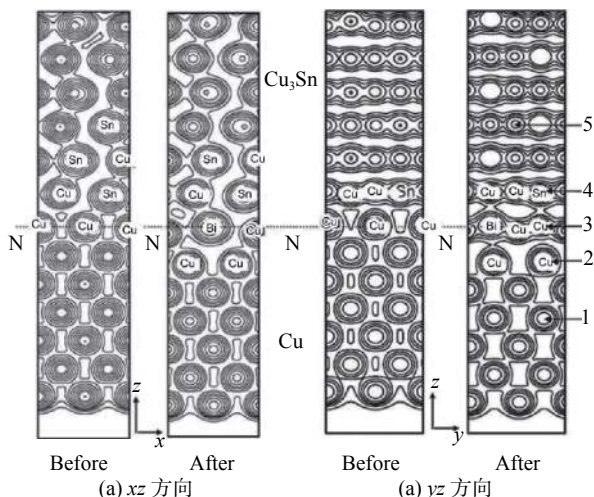


图 5 Bi 元素偏析前后体系电荷密度在不同方向的分布
Fig. 5 Projected charge density distributions before and after Bi segregation at different. (a) xz plane; (b) yz plane

比, 掺入 Al_2O_3 纳米颗粒可抑制 Sn-Zn 共晶中粗枝晶的生长, 并在合金凝固过程中细化焊料的晶粒. 随着 Al_2O_3 纳米粒子含量增加, 复合焊料的显微硬度和拉伸强度升高. 其次添加 Cu 元素, 分析 Sn9Zn-1 Al_2O_3 -xCu ($x=0, 1.5\%, 4.5\%, 6\%$) 无铅焊料中 Cu 和 Al_2O_3 颗粒对焊接 6061 铝合金的影响规律^[24], 基于密度泛函理论第一性原理的 Materials Studio 软件, 计算 Al_2O_3 /Sn9Zn 界面的界面结构、界面能、接触角和电子结构, 如图 6 所示.

计算表明, Sn9Zn-1 Al_2O_3 -4.5Cu 和 Sn9Zn-1 Al_2O_3 -6Cu 呈现稳定的结构; 当 Cu 元素含量为 4.5% 时, 焊缝中出现大量细小 Cu_5Zn_8 相, $\text{Al}_4\text{Cu}_3\text{Zn}$ 固溶体层最薄、最平坦. 与 Sn9Zn-1 Al_2O_3 焊料相比, 采用 Sn9Zn-1 Al_2O_3 -4.5Cu 焊料时, 润湿面积和抗剪强度分别提高了 27.12% 和 75.6%, 归因于 Cu_5Zn_8 第二相的强化机制. 该方法建议后续可进行大范围推广, 应用至硬钎焊领域.

Chen 等人^[25-26] 采用基于密度泛函理论分子动力学方法, 计算母材 M ($M=\text{Cu}, \text{Ni}, \text{Ag}, \text{Au}, \text{In}$) 原子在 Sn 轴方向的最优迁移路径、最小能量及相应电子结构, 确定无铅焊点中母材溶解的原因. 研究认为, 吸附阶段, M 原子倾向吸附在 Sn 表面空位处, 容易吸附在 Sn(001)(c 方向) 的空位处; 真正决定 M 原子的迁移速率的是渗透阶段, 在 3 个步骤中拥有最高的能量势垒; 电场引起迁移能减低的原因是电流密度增加, 加剧了 M 与 Sn 体间的电荷转移和再分配, 扩宽原子扩散通道, 有利于原子迁移. 但有关上述 Cu, Ni, Ag, Au, In 原子的二元及以上复合

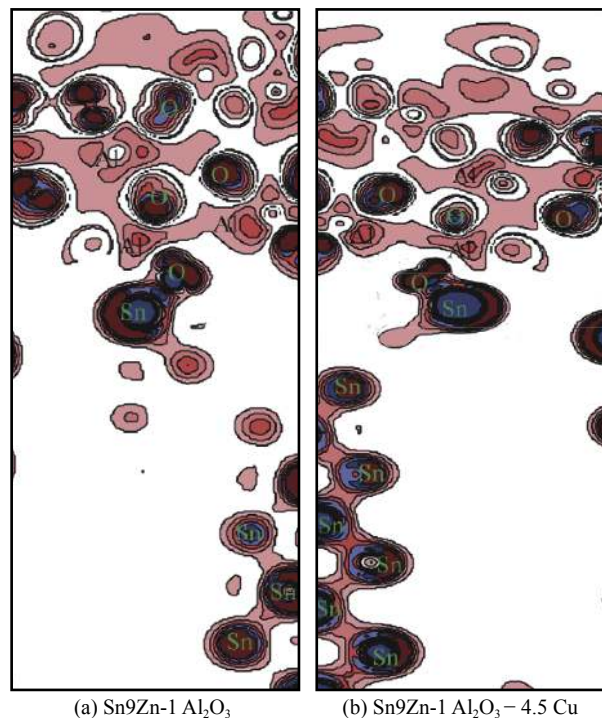


图 6 不同结构的电荷密度差分的轮廓图
Fig. 6 Contours plane of charge density difference for different structures. (a) Sn9Zn-1 Al_2O_3 ; (b) Sn9Zn-1 Al_2O_3 -4.5Cu

作用机制还未阐明.

4 存在问题

有关高通量方法在钎焊领域应用的研究还存在以下问题.

(1) 硬钎焊领域, 采用高通量计算中的第一性原理方法对钎料中某一金属元素与母材、金属间化合物的电子结构 (电子轨道杂化、电子分布情况) 及热力学性能进行了分析, 同时借助分子动力学方法定量分析钎焊过程固/液界面的润湿及铺展行为, 但研究仅限于单金属、二元体系金属间化合物, 对于钎料整体与母材、三元及以上合金体系的电子结构及热力学特性还未涉及, 有待进一步研究.

(2) 软钎焊领域, 运用密度泛函理论的第一性原理或分子动力学方法研究母材与钎料的界面结合机制、界面元素偏析、晶体结构中原子最佳占据位置及纳米颗粒/钎料的界面特性、母材原子在钎料原子轴方向的最小能量及电子结构, 但仅计算了某一金属原子的位置替代、界面结合、成键、最小能量及相应的电子结构及颗粒界面能, 有关整个钎料在钎焊过程中的模拟仿真、三维电子结构等还未研究.

(3) 由于钎焊过程复杂、影响因素繁多,高通量制备钎料的方法、工艺还不统一,无法实现整个钎料体系的高效、快速制造,缺乏通用的钎料高通量制造平台或装备。

5 结束语

鉴于上述存在的系列问题,未来有关高通量方法在钎焊领域的应用可重点关注以下几个方向。

(1) 由于高通量制备方法和装备不统一,呈现多种钎料对应多种不同的高通量制备方法工艺、装备,需构建适用于所有钎料体系的高通量制备方法和装备,同时制定相应的国家、行业标准,规范钎料的高通量制造生产。

(2) 高通量计算需要弄明白三元及以上钎料整体的电子结构、三维钎焊过程,为实际钎焊工艺提供理论基础和技术支撑。

(3) 亟需将钎料实验数据进行整合、梳理、归类,建立含有多种软、硬钎料热力学性能、钎焊性能的高通量数据库和软件,实现各数据之间的耦合传输、高效验证,为高通量计算钎料、钎焊接头的组织性能提供科学依据。

(4) 将高通量制备、高通量计算、数据库和软件有机整合,未来可开展钎焊 4.0 的研究,如钎料过程手机 App 或电脑远程控制、智能钎焊工厂等卡脖子热点课题的研究。

参考文献

- [1] 王海洋,汪洪,丁洪,等.材料的高通量制备与表征技术[J].*科技导报*,2015,33(10):31-49.
Wang Haizhou, Wang Hong, Ding Hong, *et al.* Progress in high-throughput materials synthesis and characterization[J]. *Science & Technology Review*, 2015, 33(10): 31-49.
- [2] 赵继成.材料基因组计划中的高通量实验方法[J].*科学通报*,2013,58(35):3647-3655.
Zhao Jicheng. High-throughput experimental tools for the materials genome initiative (in Chinese)[J]. *China Science Bull (Chin Ver)*, 2013, 58(35): 3647-3655.
- [3] Zhang Y, Guo J M, Chen J H. On the stacking fault energy related deformation mechanism of nano crystalline Cu and Cu alloys: a first-principles and TEM study[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 776: 807-818.
- [4] 孙巧艳,杜勇,刘立斌,等.高性能钛合金的关键“基因”及高通量实验与计算技术的应用[J].*中国材料进展*,2018,37(4):297-303.
Sun Qiaoyan, Du Yong, Liu Libin, *et al.* Key material genome of titanium alloys and application of high-throughput experiment and computation[J]. *Materials China*, 2018, 37(4): 297-303.
- [5] 向勇,闫宗楷,朱焱麟,等.材料基因组技术前沿进展[J].*电子科技大学学报*,2016,45(4):634-649.
Xiang Yong, Yan Zongkai, Zhu Yilin, *et al.* Progress on materials genome technology[J]. *Journal of University of Electronic Science and Technology of China*, 2016, 45(4): 634-649.
- [6] 何鹏,林盼盼.基于材料基因组理念的钎焊材料开发与智能钎焊技术创新系统工程[J].*材料导报*,2019,33(1):156-161.
He Peng, Lin Panpan. The Systematic project involving brazes development and intelligent brazing technology innovation: a materials genome perspective[J]. *Materials Reports*, 2019, 33(1): 156-161.
- [7] SEKULIĆ D P. Modeling of the sequence of phenomena in brazing[C]//*Advances in Brazing: Science, Technology and Applications*, Wood head Publishing Series in Welding and Other Joining Technologies, 2013: 55-81.
- [8] 何鹏,张玲.智能钎焊技术进展[J].*焊接学报*,2017,38(4):124-128.
He Peng, Zhang Lin. Development of intelligent brazing technology[J]. *Transactions of the China Welding Institution*, 2017, 38(4): 124-128.
- [9] 李红,袁俊丽,栗卓新,等.纳米连接过程的分子动力学模拟研究进展[J].*中国机械工程*,2019,30(4):486-493.
Li Hong, Yuan Junli, Li Zhuoxin, *et al.* Process of molecular dynamics simulation of nanojoining processes[J]. *China Mechanical Engineering*, 2019, 30(4): 486-493.
- [10] Swiler T P, Hoehman R E. Molecular dynamics simulations of reactive wetting in metal-ceramic systems[J]. *Acta Materialia*, 2000, 48: 4419-4424.
- [11] 陈永泰,谢明,胡洁琼,等.一种三元扩散偶高通量制备和热处理方法:中国,201910794666.1[P].2019-8-27.
Chen Yongtai, Xie Ming, Hu Jieqiong, *et al.* A high-throughput preparation and heat treatment method of Ternary diffusion couple: CN Patent, 201910794666.1[P]. 2019-8-27.
- [12] 陈永泰,谢明,王松,等.Ag-6Cu-1Zn-0.5Ni合金变形行为的高通量研究[J].*贵金属*,2019,40(S1):35-39.
Chen Yongtai, Xie Ming, Wang Song, *et al.* High throughput study on deformation behavior of Ag-6Cu-1Zn-0.5Ni alloy[J]. *Precious Metals*, 2019, 40(S1): 35-39.
- [13] Yang J, Zheng Y, Huang J H, *et al.* First-principles calculations on wetting interface between Ag-Cu-Ti filler metal and SiC ceramic: Ag(111)/SiC(111) interface and Ag(111)/TiC(111) interface[J]. *Applied Surface Science*, 2018, 462: 55-64.
- [14] 王国超. Cu-Ag-Ti₂AlCu 钎焊体系结构稳定性及其连接机理研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学博士学位论文,2015.
Wang Guochao. Research on structural stability and joining mech-

- anism of Cu-Ag-Ti₂AlC brazing system[D]. Harbin: Dissertation for the Doctoral Degree in Engineering: Harbin Institute of Technology, 2015.
- [15] Hartz-behrend K, Bach F W, M Hwald K, *et al.* Classical molecular dynamics simulations (MD) of wetting phenomena in brazing processes[R]. Aachen: DVS-BER ICHTE, 2014.
- [16] Zhang J, Xu Q, Hu Y L, *et al.* Interfacial bonding mechanism and adhesive transfer of brazed diamond with Ni-based filler alloy: First-principles and experimental perspective[J]. Carbon, 2019, 153: 104 – 115.
- [17] Yang J, Huang J H, Zheng Y, *et al.* First-principles calculations on structural energetics of Cu-Ti binary system intermetallic compounds in Ag-Cu-Ti and Cu-Ni-Ti active filler metals[J]. Ceramics International, 2017, 43: 7751 – 7761.
- [18] 贾延东, 王刚, 易军, 等. 封装用高硅铝合金结构梯度材料高通量制备装置及方法: 中国, 201610287138.3[P]. 2016–5–4.
- Jia Yandong, Wang Gang, Yi Jun, *et al.* Device and method for high-throughput preparation of structural gradient material of high silicon aluminum alloy for package: CN patent, 201610287138.3[P]. 2016–5–4.
- [19] 韩雨彤. SiC 陶瓷与 Al 基和 Sn 基钎料钎焊界面结合特性的模拟计算 [D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学硕士学位论文, 2016.
- Han Yutong. A first principle calculation of Al based and Sn based solder with SiC ceramic interfacial bonding[D]. Harbin: Dissertation for the Master Degree in Engineering: Harbin Institute of Technology, 2016.
- [20] 贾延东, 耿川, 王刚, 等. Sn-Zn-Cu 焊料的高通量制备方法: 中国, 201910557829.4[P]. 2019–6–25.
- Jia Yandong, Geng Chuan, Wang Gang, *et al.* High-throughput preparation of Sn-Zn-Cu solders: CN patent, 201910557829.4[P]. 2019–6–25.
- [21] Gao F, Qu J M, Takemoto T. Additive qccupancy in the Cu₆Sn₅-based intermetallic compound between Sn-3.5Ag solder and Cu studied using a first-principles approach[J]. Journal of Electronic Materials, 2010, 39: 426 – 432.
- [22] Pang X Y, Liu Z Q, Wang S Q, *et al.* First-principles Investigation of Bi Segregation at the Solder Interface of Cu/Cu₃Sn(010)[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2010, 26(12): 1057 – 1062.
- [23] Xing W Q, Yu X Y, Li H L, *et al.* Microstructure and mechanical properties of Sn-9Zn-xAl₂O₃ nanoparticles (x=0 –1) lead-free solder alloy: first-principles calculation and experimental research[J]. Materials Science & Engineering A, 2016, 678: 252 – 259.
- [24] Lu Y, Ma L, Li S Y, *et al.* Effect of Cu element addition on the interfacial behavior and mechanical properties of Sn9Zn-1Al₂O₃ soldering 6061 aluminum alloys: First-principle calculations and experimental research[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2018, 765: 128 – 139.
- [25] Chen J S, Ye C H, Yu C, *et al.* The micro-mechanism for the effect of Sn grain orientation on substrate consumption in Sn solder joints[J]. Computational Materials Science, 2015, 108: 1 – 7.
- [26] Chen J S, Xu M J, Jin Y J, *et al.* Effect of electric field and Sn grain orientation on Cu consumption in Sn/Cu solder joint[J]. Computational Materials Science, 2014, 95: 166 – 171.
- [27] 李红, 张续, 黄海新, 等. 钎焊过程数值模拟研究进展 [J]. 北京工业大学学报, 2017, 43(6): 956 – 963.
- Li Hong, Zhang Xu, Huang Haixin, *et al.* Progress in the Numerical Simulation of Brazing Process[J]. Journal of Beijing University of Technology, 2017, 43(6): 956 – 963.
- [28] 倪雪辉, 罗辉庭, 叶剑辉. 铝合金换热器集流管隔板钎焊表面污染分析 [J]. 压力容器, 2018, 35(8): 58 – 62.
- Ni Xuehui, Luo Huiting, Ye Jianhui. Analysis and prevention of surface pollution of aluminum alloy heat exchanger and baffle brazed surface[J]. Pressure Vessel Technology, 2018, 35(8): 58 – 62.

第一作者: 王星星, 博士, 副教授; 主要从事特种钎焊材料设计、新材料及异种材料连接教学和科研工作; Email: paperwxx@126.com.

通信作者: 何鹏, 博士, 教授, 博士研究生导师; Email: hepeng@hit.edu.cn.

(编辑: 郑红)