DOI: 10.3969/j.issn.1000-6826.2025.05.1281

高熵合金：能源领域的“多面手”新材料

High-entropy Alloys: the Versatile New Materials Powering the Energy Future

供稿|王家晟，张勇 / WANG Jiasheng, ZHANG Yong

内容导读

想象一种合金，它不是由一两种金属主导，而是由5种甚至更多种金属元素“平等”混合而成！这就是**高熵合金**（HEA），一种近年来材料科学领域的明星新秀。得益于这种独特的“多主元”配方，高熵合金展现出许多令人惊叹的性能组合，比如极强的抗破坏能力、优秀的耐极端环境特性以及可调控的物理化学性质。这些特质让它们在解决能源领域的诸多关键难题上大放异彩。

- **安全储氢：**高熵合金能像“海绵”一样高效地吸收和释放氢气，容量大、速度快，而且反复使用性能稳定，是未来安全储氢技术的强有力候选者。
- **高效催化：**在将水分解成氢气（电解水制氢）或燃料电池发电等反应中，高熵合金催化剂表现优异，效率甚至能超越昂贵的贵金属（如铂金），为低成本、高效率的清洁能源转换带来希望。
- **强力储能：**无论是锂电池的电极，还是超级电容器的核心部件，高熵合金都能显著提升设备的储电能力、充放电速度和循环寿命，让我们的电子设备和电动汽车拥有更强续航。
- **坚韧核材：**面对核反应堆中极端的高温、强辐射和腐蚀环境，高熵合金展现出卓越的耐受力和稳定性，是下一代核能系统理想的结构材料之选。

本文将带您深入了解高熵合金在这四大能源关键领域（储氢、催化、储能、核能）的最新研究进展和巨大潜力。虽然目前还面临成本、工艺优化等挑战，但高熵合金无疑为开发更高效、更可持续的未来能源技术，提供了令人兴奋的新材料选项。

在全球能源转型的关键时期，研发高效、可持续的能源解决方案成为科研与产业界的核心目标。能源领域的快速发展对材料性能提出极为严苛的要求，而传统材料往往难以满足复杂多变的工况需求。因此，新型材料的研发对于推动能源技术的突破至关重要。高熵合金（HEA）作为材料领域的新

作者单位：北京科技大学新金属材料国家重点实验室，北京　100083

兴力量，以其独特的多主元设计理念和卓越的综合性能[1–3]，为能源领域的创新发展带来新的契机[4–5]。与传统合金依赖 1~2 种主元素不同，高熵合金通常包含 5 种及以上主元素[6–7]，它通过高熵效应、扩散效应、晶格畸变效应和“鸡尾酒”效应的协同作用[8–10]，展现出优异的力学性能和功能特性[11–12]，这些特性使其在储氢、催化、储能以及核能利用等能源领域（如图 1 所示）的关键环节展现出巨大的应用潜力。本文聚焦于高熵合金在能源领域 4 个关键方向的研究现状，深入剖析其作用机制和性能优势，旨在为未来能源技术的突破提供新的材料选择和研究思路，助力实现全球能源可持续发展目标。

图 1　高熵合金在能源领域的潜在应用

高熵合金在储氢领域的应用

随着全球对清洁能源需求的急剧增长，氢能源因其高能量密度和零碳排放的特性，成为能源领域的重点发展方向。其中，固态储氢技术因兼具安全性和高效性备受关注，而高熵合金凭借独特的多组元协同效应、高混合熵赋予的结构稳定性以及可调控的晶格畸变特性，成为储氢材料领域的研究热点[13]。

提升储氢容量

高熵合金独特的结构和成分优势，使其在提升储氢容量方面展现出巨大潜力。Karlsson 等[14] 研究发现，HfNbTiVZr 高熵合金在 562、590 和 614 K 温度下表现出优异的储氢性能；在 1 MPa 氢气压强下，其最大储氢容量（质量分数）可达 2.1%；当压强提升至 5 MPa 时，储氢容量进一步提高至 2.7%，这种优异的储氢性能主要源于高熵合金中多种金属元素的协同效应。首先，多种元素的均匀混合增加了体系的混合熵，使合金更倾向于形成稳定的固溶体结构，为氢的吸附和解吸提供良好的基础；在氢气吸收和释放过程中，合金能够保持结构的相对稳定，减少因结构变化导致的储氢性能损失。其次，不同金属原子因尺寸和电子结构差异引发晶格畸变，增加了材料内部的缺陷和间隙，为氢原子扩散提供了更多通道；在储氢过程中，氢原子可以更快速地在合金中扩散，从而提高储氢性能。

改善储氢循环稳定性

循环稳定性是储氢材料实际应用中的关键性能指标，高熵合金凭借其特殊性能，在该方面表现突出。例如，Floriano 等[15] 设计的 TiZrNbCrFe 高熵合金在 303、353、373 和 473 K 等温度下，均展现出良好的储氢容量和可逆性，尤其在 473 K 下的储氢容量（质量分数）达到 1.9%，且在多次循环中表现出良好的可逆性，如图 2 所示。这得益于该高熵合金的体心立方结构及其良好的热力学稳定性，使其在循环过程中不易发生相变或结构坍塌，从而保证了储氢性能的稳定输出。同时，高熵合金中多种元素的协同作用增强了合金的抗腐蚀能力和结构稳定性。在氢气吸收和释放过程中，能够有效抵抗氢气的侵蚀，减少合金材料的降解和性能衰减，进一步提高循环稳定性。

优化储氢动力学性能

动力学性能反映了储氢材料在不同温度和压强下的氢气吸收和释放速率，而高熵合金能够为氢原子的快速扩散提供有利条件，有效优化储氢的动力学性能。Zhang 等[16] 研究的 TiZrNbTa 高熵合金在室温下表现出极快的氢气吸收速率，仅需 60 s 即可达到最大吸收量，这主要归因于合金的体心立方结构和晶格畸变效应。体心立方结构提供了较高的氢气扩散速率，而晶格畸变增加了材料内部的缺陷和间隙，为氢原子扩散提供了更多通道。在高温下，该合金的氢气吸收和释放速率得到进一步提高，表明其具有良好的高温动力学性能。

综上所述，高熵合金凭借独特的结构和性能优势，在储氢领域展现出显著的应用潜力。通过合理设计合金成分，优化制备工艺，可进一步提高高熵合金的储氢性能，使其在未来的能源存储领域发挥重要作用。

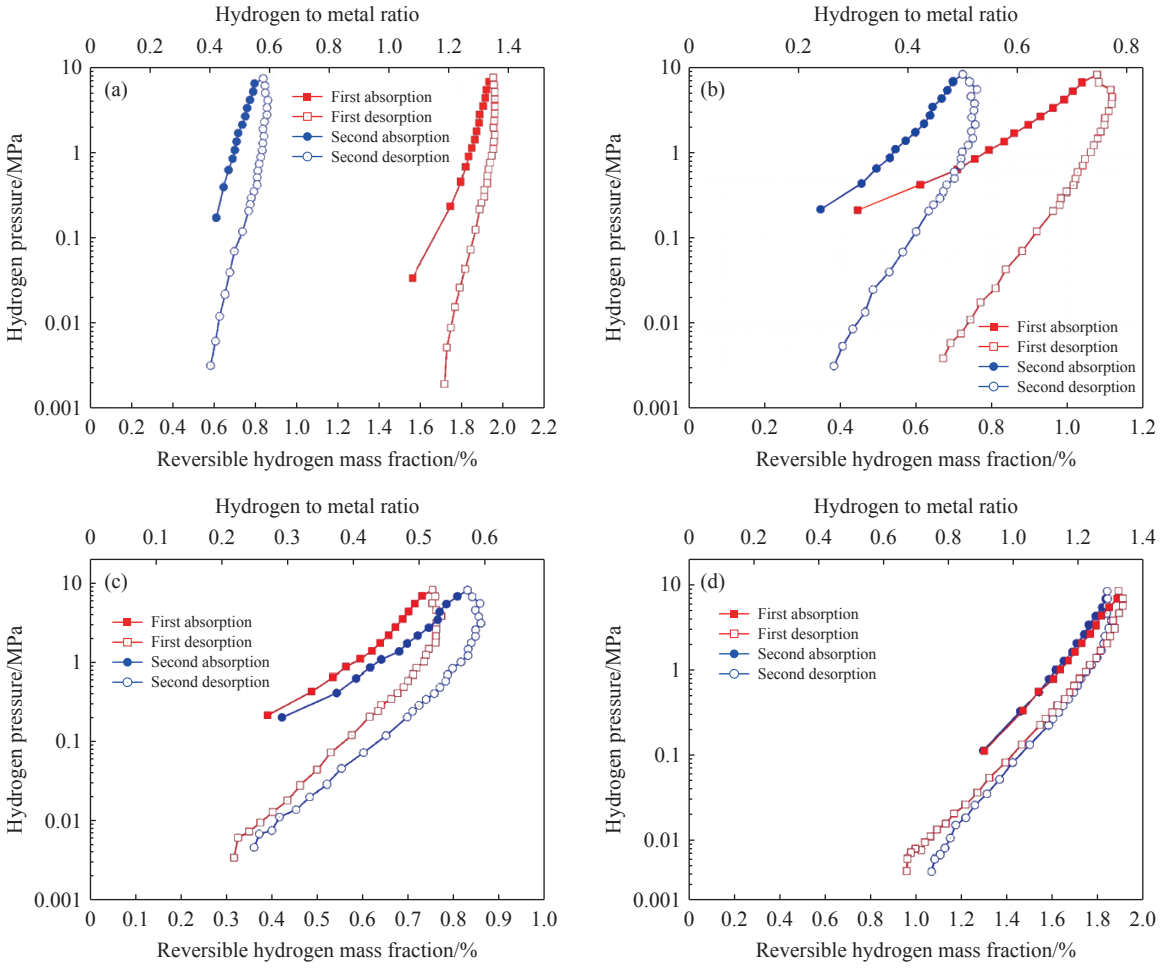

图 2　TiZrNbCrFe 合金在不同温度下的吸氢/脱氢压强–成分–温度双循环曲线[15]: (a) 303 K; (b) 353 K; (c) 373 K; (d) 473 K（可逆的氢质量分数函数体现材料实际吸放氢过程中，可参与可逆反应的氢含量多少，是从宏观可测量的氢量角度反映吸放氢性能；氢原子与金属原子的数量比强调氢与金属原子的比例关系，是从化学计量比层面揭示氢与材料中金属组分的微观作用规律。两者均为储氢合金的吸放氢性能研究中关键指标。）

高熵合金在催化领域的应用

催化反应在能源转化和利用过程中起着至关重要的作用。高熵合金凭借多主元组成和独特的电子结构，能够提供多种活性位点，从而在催化反应中表现出高效的催化性能[17]。与传统催化剂相比，高熵合金催化剂具有更高的活性、选择性和稳定性，能够显著提高催化反应的效率和产物质量[18]。

电催化领域

析氢反应

高熵合金在析氢反应（HER）中表现出色，部分催化剂性能可超越传统贵金属催化剂。Minamihara 等[19] 合成的超细 IrPdPtRhRu 高熵合金纳米颗粒在酸性介质中过电位仅 6 mV（对应面积活性 (*J*) 为 10 mA/cm^2），析氢反应活性远优于商业 Pt/C 催化剂，这得益于其尺寸效应和高熵效应。Li 等[20] 合成的 $Pt_{18}Ni_{26}Fe_{15}Co_{14}Cu_{27}$ 高熵合金纳米颗粒在碱性介质中的过电位为 11 mV（对应面积活性为 10 mA/cm^2），在 0.07 V 下与可逆氢电极相比，质量活性 (*Q*) 达到 10.96 A/mg（每毫克 Pt 对应的电流），如图 3 所示，其优异活性源于各金属组分在高效电子转移上的协同作用。非贵金属基高熵合金同样表现突出，Ding 等[21] 设计一种非等摩尔 FeCoNiCu 多主元合金（MPEAs）催化剂，用于水分解反应。该催化剂通过简单的物理冶金和化学脱合金法制备（如图 4 所示），其中 $(FeCoNi)_{70}Cu_{30}$ 催化剂在析氢反应中表现

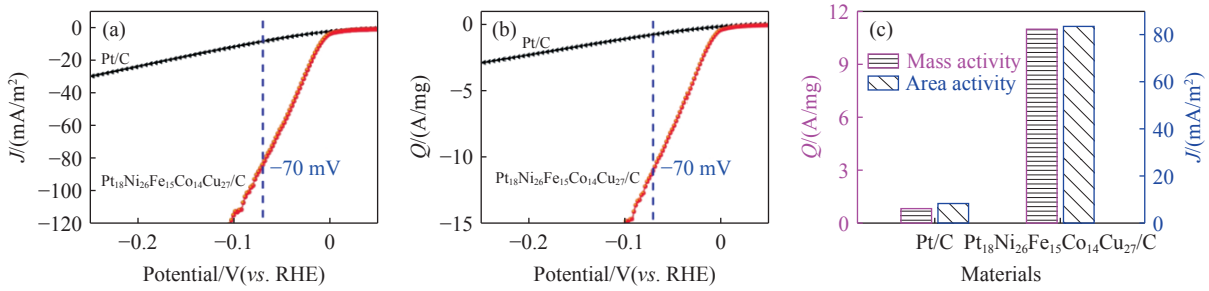

图 3　$Pt_{18}Ni_{26}Fe_{15}Co_{14}Cu_{27}/C$ 和 Pt/C 在 1 mol/L KOH 电解液中用于析氢反应的电催化性能：(a) 析氢反应极化曲线（几何面积）；(b) 归一化 Pt 载量（质量活性）的线性扫描伏安曲线；(c) 相对于可逆氢电极为−70 mV 时析氢反应的面积活性与质量活性对比[20]

卓越，在 10 mA/cm² 的面积活性下，过电位仅为 34 mV，Tafel 斜率为 48 mV/dec，同时在 500 mA/cm² 下仍能保持 24 h 长期耐久性和稳定性，如图 5 所示。

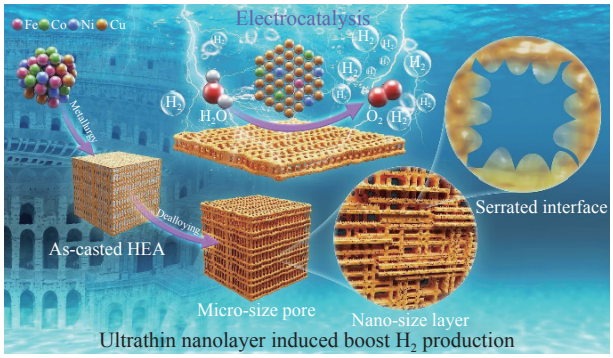

图 4　非均相多孔结构 Cu 电催化剂的制备与去合金化示意[21]

析氧反应

析氧反应（OER）作为水分解的关键半反应，面临反应机制复杂、过电位高的问题。高熵合金凭借多活性位点特性，成为极具潜力的析氧反应催化剂。Jin 等[22] 采用脱合金法制备的低 Ir 含量纳米多孔 AlNiCoIrMo 高熵合金，在 0.5 mol/L H_2SO_4 中的 Tafel 斜率低至 55.2 mV/dec，在 10 mA/cm² 下的过电位仅为 233 mV，性能优于商业 IrO_2 催化剂。Wang 等[23] 报道的纳米尺寸 CoNiCuMnAl@C 核壳结构电催化剂，在碱性介质中的 Tafel 斜率为 35.6 mV/dec，10 mA/cm² 下的过电位为 215 mV，且具有出色的耐久性。

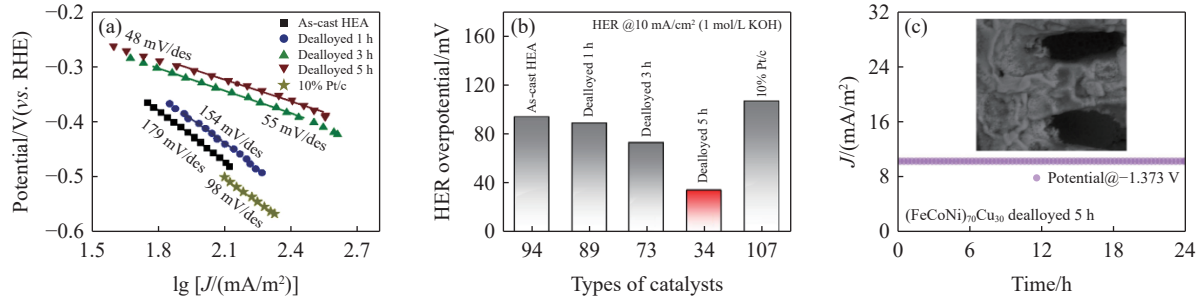

图 5　(a) $(FeCoNi)_{70}Cu_{30}$ 合金电极与 Pt/C 催化剂电极之间在 1.0 mol/L KOH 水溶液中不同脱合金时间下极化曲线对应电极的 Tafel 图；(b) 不同脱合金时间下 Pt/C 催化剂电极最低过电位对比；(c) 合金电极在 1.373 V 电压下 24 h 内的稳定性[21]

氧还原反应

在燃料电池的氧还原反应（ORR）中，传统 Pt 基催化剂成本高、稳定性低；而高熵合金因丰富的元素组合和连续的吸附能分布，成为理想的候选材料。Li[24] 等通过脱合金法合成一系列低 Pt 负载纳米多孔高熵合金，其中 AlCuNiPtMn 高熵合金在酸性介质中的质量活性比 Pt/C 高 16 倍；Tao 等[25] 通过低温法合成 PtPdIrRuAg 超薄高熵亚纳米带，在碱性介质中的质量活性高达 4.28 A/mg，远超商业 Pt/C 催化剂。同时，非贵金属基高熵合金在氧还原反应中表现也很优异。Löffler 等[26] 通过共溅射法制备的 CrMnFeCoNi 催化剂，在电催化氧还原反应中的活性优于 Pt/C；添加第 6 种非贵金属元素（如 Nb 或 Mo）形成的 CrMnFeCoNiNb 和 CrMnFeCoNiMo，

也展现出良好的应用前景。

光催化领域

降解有机污染物

Wang 等[27]研究发现，$(Ni_{40}Fe_{30}Co_{20}Al_{10})_{90}Ti_{10}$ 高熵合金粉末对亚甲基蓝降解效果显著。球磨态的高熵合金粉末在可见光下 180 min 内可完全降解亚甲基蓝，相比均匀退火态的高熵合金粉末优势明显，如图 6 所示。这主要是因为混合结构促进了电子在相界面的转移，且 β 相晶格畸变严重，增强了催化活性（如图 7 所示），同时堆垛层错和孪晶界的激活使其具有良好的循环稳定性。NbTaZrMoW 高熵合金在紫外线照射下的光降解率约为 58.77%，是其高熵氧化物（$ZrNbTaMoWO_x$）的 2 倍[28]。高熵合金较高的光催化活性归因于其较大的比表面积、高应变和缺陷含量，在机械合金化过程中，高熵合金产生的晶格应变和缺陷充当催化活性位点，而其高熵氧化物在氧化过程中因内部区域重结晶，导致缺陷和晶格应变减少，光催化活性随之降低。

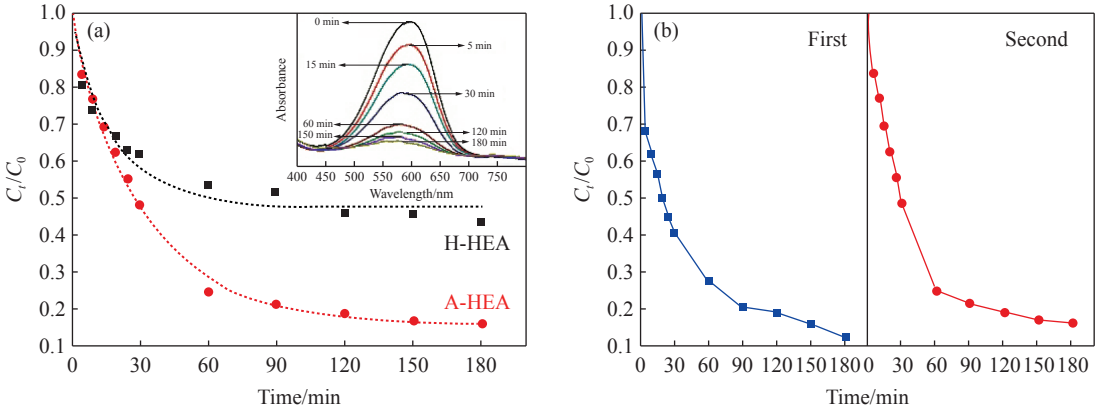

图 6　(a) 亚甲基蓝降解率与辐照时间的关系；(b) 球磨态高熵合金在可见光照射下的循环实验[27]（H-HEA 均为退火富 Ni HEA 粉末，A-HEA 研磨太富 Ni HEA 粉末；C_t 为反应进行至 t 时目标污染物的瞬时浓度；C_0 为反应开始时目标污染物的初始浓度；First 和 Second 分别代表球磨态的两次循环；6(a) 插图为球磨态高熵合金对亚甲基蓝降解的吸光度曲线）

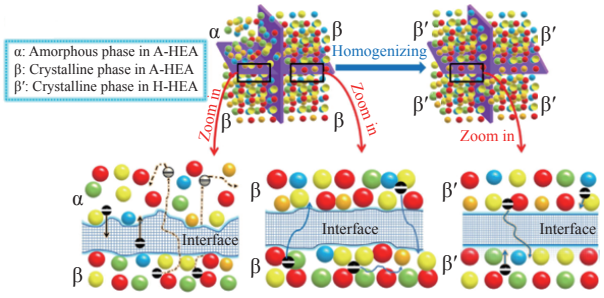

图 7　球磨态和均匀退火态高熵合金的相界面示意图[27]

光催化产氢

Xiang 等[29]将 PtFeNiCoCu 高熵合金纳米晶作为助催化剂与硫化镉（CdS）量子点复合，显著提升光催化产氢性能。优化后的 HEA/CdS 样品光催化产氢速率达到 7.15 mmol/(g·h)，是纯硫化镉量子点的 13 倍。分析 d 带中心可知，高熵合金中的 Pt 原子是析氢的活性位点，其催化活性高于纯 Pt。此外，高熵合金与硫化镉量子点的复合拓展了光吸收范围（从 475 nm 延伸至 484 nm），且显著促进硫化镉中光生载流子的分离，这对提高光催化活性至关重要。Wang 等[30]选用 PtCuFeNiCo 高熵合金作为共催化剂，与中空硫化镉复合制备 ZnCdS/PtCuFeNiCo 纳米结构光催化剂，如图 8 所示。通过密度泛函理论计算证实，PtCuFeNiCo 高熵合金具有适宜的 d 带中

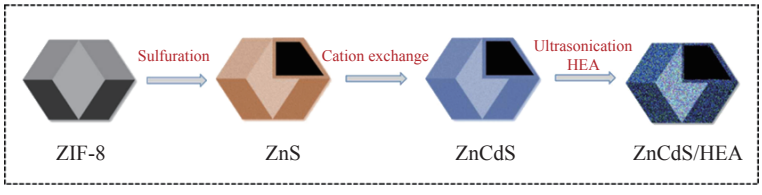

图 8　ZnCdS/HEA 的制备方案[30]（ZIF-8 为沸石咪唑酯骨架材料-8）

心（如图 9(a) 所示）和最低的吉布斯自由能（如图 9(b) 所示），催化产氢活性优异。高熵合金在硫化镉上均匀分布，ZnCdS/HEA-7（HEA 占 ZnCdS/HEA 总质量的 7%）的产氢活性达到 5.99 mmol/(g·h)，分别为硫化镉的 11.7 倍和 ZnCdS/1%Pt（Pt 占 ZnCdS/Pt 总质量的 1%）的 3.6 倍，且循环稳定性良好，如图 10 所示。这归因于硫化镉与高熵合金的协同作用增强了光吸收能力，肖特基异质结促进了光生载流子的高效分离和转移，高熵合金提供了丰富的催化活性位点并提升了表面反应活性，如图 11 所示。

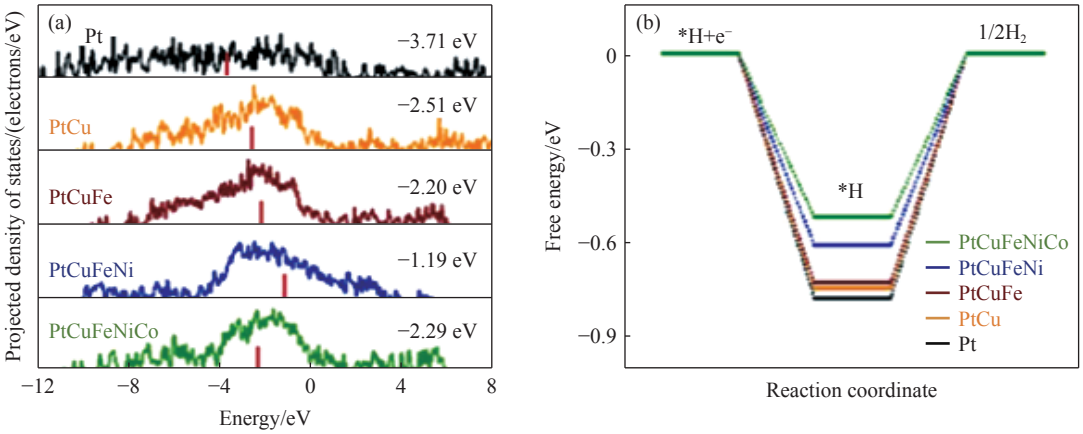

图 9　密度泛函理论计算[30]：(a) Pt、PtCu、PtCuFe、PtCuFeNi 和 PtCuFeNiCo 的 *d* 带光谱；(b) 氢吸附的吉布斯自由能

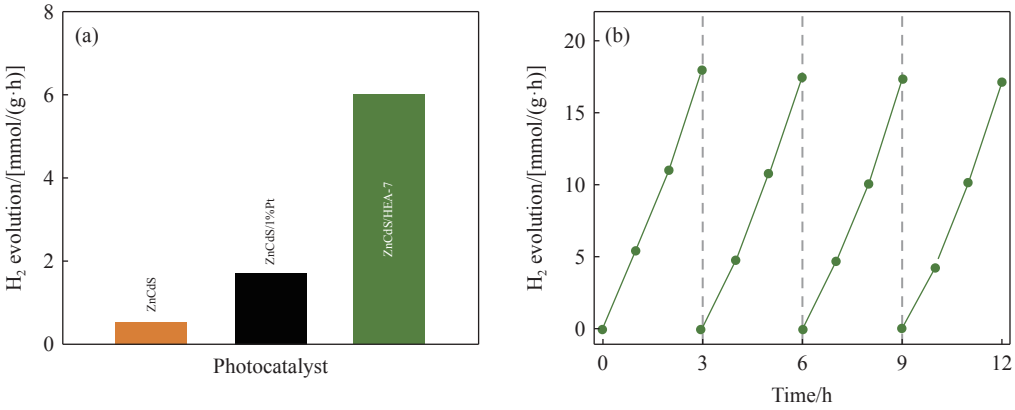

图 10　(a) ZnCdS、ZnCdS/1% Pt 和 ZnCdS/HEA-7 的产氢活性与 (b) ZnCdS/HEA-7 的循环曲线[30]（ZnCdS/HEA-7 表示 HEA 占 ZnCdS/HEA 总质量的 7%；ZnCdS/1% Pt 表示 Pt 占 ZnCdS/Pt 总质量的 1%）

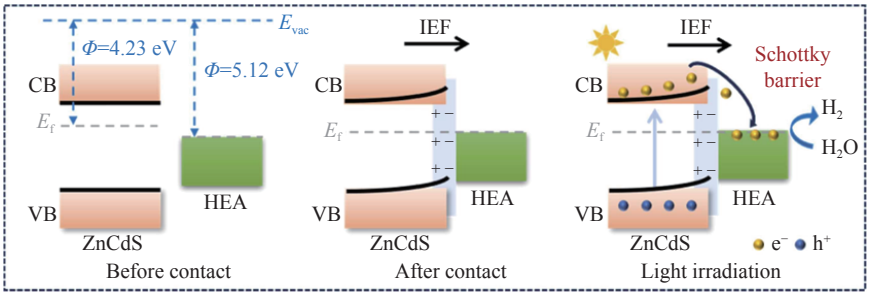

图 11　电荷载流子转移示意[30]（E_f 为费米能级；E_{vac} 为真空能级；Φ为功函数；CB 为导带；VB 为价带；IEF 为内建电场）

综上所述，高熵合金凭借独特的多主元组成和电子结构，在电催化和光催化领域均展现出卓越的性能，为高效催化反应提供了新的解决方案，有望成为未来催化技术的重要发展方向[31]。

高熵合金在储能器件中的应用

随着对高性能储能器件需求的不断增加，高熵合金凭借其独特性能在锂离子电池和超级电容器领域展现出巨大的应用潜力[32]。

锂离子电池领域

高熵合金作为负极材料

高熵合金独特的结构特性，如晶格畸变和“鸡尾酒”效应，使其在锂存储方面表现出色。Li 等[33] 研究发现，通过对 GeP 基高熵合金进行元素筛选，构建 $InZnGeP_3$ 等合金体系，能显著提升锂存储性能。该合金展现出高可逆容量，在 400 mA/g 下循环 650 次后，容量保持在 1293 mA·h/g；在 2000 mA/g 下循环 1500 次后，容量仍可达 904 mA·h/g，且在高质量活性下具有良好的倍率性能，20000 mA/g 时容量为 453 mA·h/g。这种优异性能源于其高锂离子亲和力、快速的电子和锂离子传输速率，以及在充放电过程中有效缓解体积变化的能力。高熵结构促进了电子的离域化，增强了电子传导能力；晶格畸变则为锂离子扩散提供了更多通道，降低了扩散能垒，使锂离子能够快速嵌入和脱出。此外，在充放电过程中，电极结构的稳定性对电池性能至关重要。高熵合金的晶格畸变和高熵效应可有效抑制电极在循环过程中的体积膨胀和收缩，维持电极结构的完整性。以 $InZnGeP_3$ 为例，较低的弹性模量使其能够更好地承受锂离子插入和脱出时产生的应力，减少结构破坏，从而保证电池的长循环稳定性。在多次循环后，该合金电极的体积膨胀率较低，电极完整性良好，这是其能够实现稳定锂存储的重要原因之一。高熵合金中多种元素的协同作用，还能增强电极与电解液之间的界面稳定性，进一步提升电池的整体性能。

高熵合金用于构建无阳极电池

无阳极电池因具有高能量密度的优势而备受关注，但锂枝晶生长问题严重制约其实际应用。Wang 等[34] 通过在碳纤维表面原位合成超薄（约 20 nm）的 NiCdCuInZn 高熵合金紧密层，并负载高熵合金纳米颗粒（HEA/C）（见图 12），有效解决了这一难题。理论计算结果表明（如图 13 所示），该结构提供了多个锂离子传输路径和丰富的活性位点，活性位点的梯度吸附能（−3.18~ −2.03 eV）促进锂的选择性结合，为均匀的锂成核提供了低势垒，从而抑制锂枝晶的生长。HEA/C 在不对称电池中（5 mA/cm^2 和 1 mA·h/cm^2），锂电镀/剥离过程的可逆性高达 2000 次循环，库仑效率达到 99.6%；而在对称电池中，能在 60 mA/cm^2 和 60 mA·h/cm^2 的条件下稳定循环超过 7200 h（如图 14 所示），显著提升电池的安全性和稳定性。一方面，其均匀的锂沉积特性减少了“死锂”的形成，避免电池内部短路的风险；另一方面，高熵合金的独特结构增强了电极与电解液之间的界面稳定性，抑制了副反应的发生。在实际应用中，使用 HEA/C 宿主的无阳极全电池在 1 C 电流下循环 160 次后，平均库仑效率达到 99.5%（如图 15 所示），展现出良好的应用前景。此外，该结构还能有效降低电池的极化，提高充放电效率，进一步提升电池的整体性能。

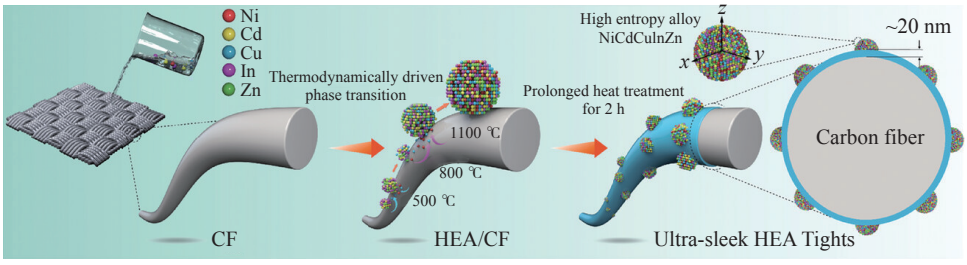

图 12　负载高熵合金纳米颗粒的超薄高熵合金紧密层的制备过程示意图[34]（CF 为碳纤维）

高熵合金作为锂金属电池的界面层

在锂金属电池中，构建高熵合金界面层可有效改善电池的界面性能。Xu 等[35] 通过机器学习辅助设计，确定了由 Al、Zn、Fe、Co、Ni 按照原子比为 7∶5∶4∶3∶1 的比例组成的高熵合金作为界面层材料。该高熵合金界面层具有高强度、致密性和平整

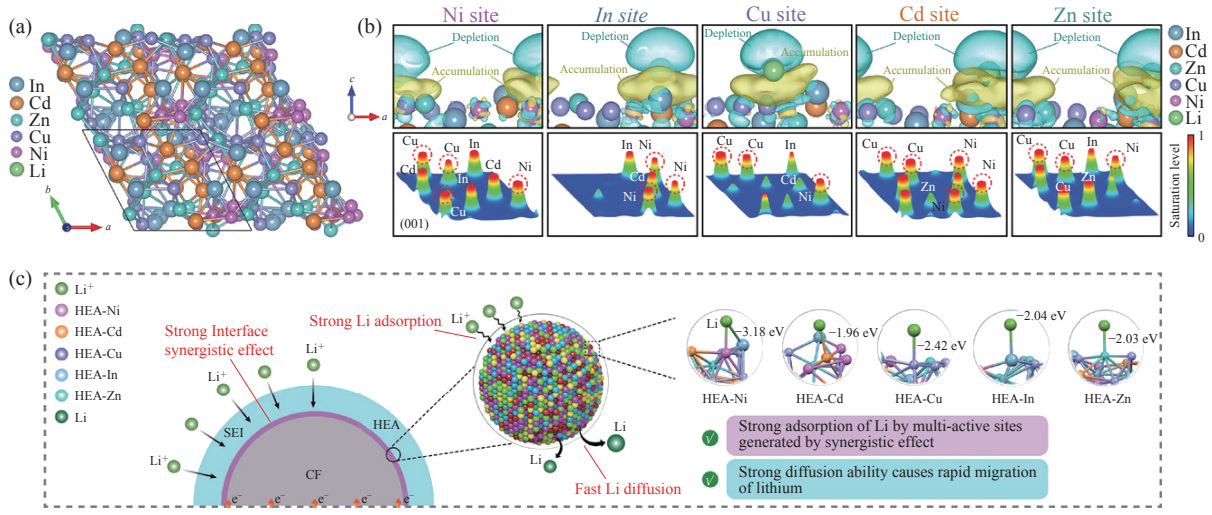

图 13　(a) 几何优化后高熵合金俯视图；(b) HEA-Ni/Cd/Cu/In/Zn 位点锂吸附结构侧视图的差分电荷密度；(c) HEA/C 上锂吸附和扩散示意[34]

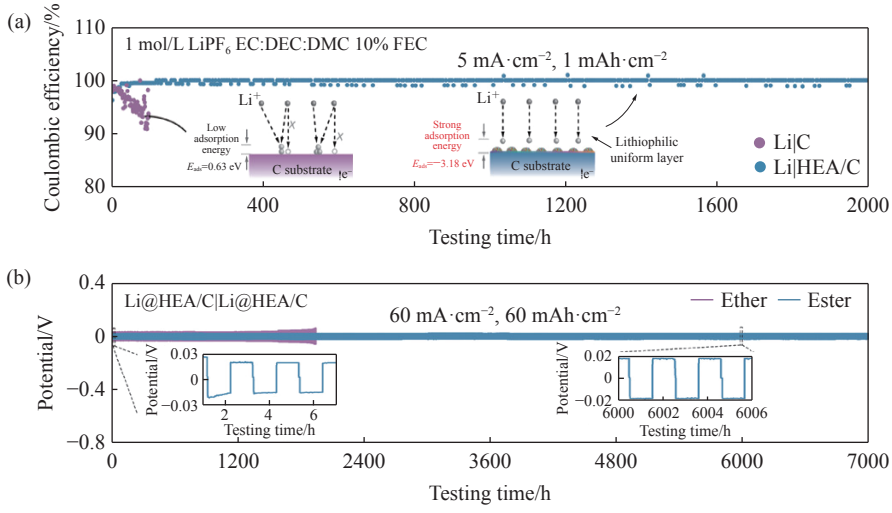

图 14　(a) 在 5 mA/cm² 和 1 mA·h/cm² 下，沉积于 HEA/C 和 C 的锂的库仑效率；(b) 采用 Li@HEA/C 阳极的对称电池在 60 mA/cm²和 60 mA·h/cm²下的循环稳定性[34]（EC 为碳酸乙烯酯；DEC 为碳酸二乙酯；DMC 为碳酸二甲酯；FEC 为氟代碳酸乙烯酯）

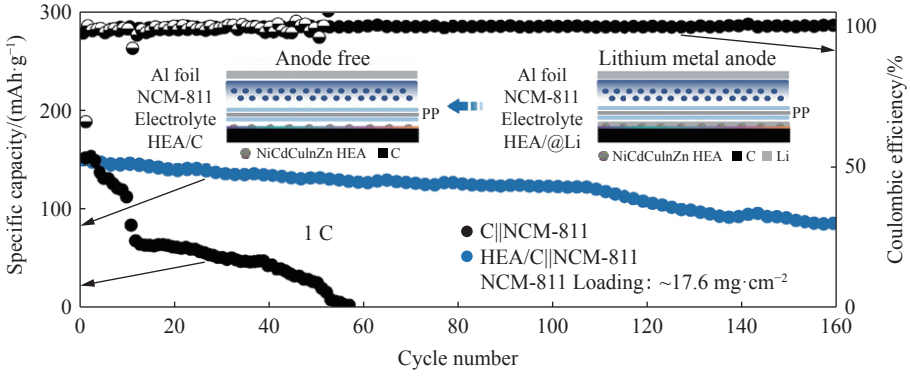

图 15　无阳极电池与 NCM-811 耦合的全电池在 1 C 下的循环性能[34]（NCM-811 表示其组成中镍（Ni）、钴（Co）、锰（Mn）的原子比例为 8:1:1）

性，能有效抑制锂枝晶生长，诱导锂的均匀沉积。在 Li||Li 对称电池中，使用 HEA@Li 组装的电池在 1 mA/cm^2 和 1 mA·h/cm^2 的条件下可稳定循环 2400 h；在 Li||$LiFePO_4$ 全电池中，300 次循环后放电容量保持率＞90%，平均库仑效率为 99.67%。高熵合金界面层对电池内部的离子传输和副反应抑制起到关键作用，其丰富的活性位点和合适的元素组成促进锂离子的快速传输，降低了电荷转移电阻；同时，该界面层能够抑制锂金属与电解液之间的副反应，减少气体产生，形成更有利于锂离子传输的固体电解质界面。X 射线光电子能谱结果（图 16）显示，在 HEA@Li 界面形成的固体电解质界面中，LiF 和 Li_2O 的含量较高，有助于锂离子快速转移，并抑制枝晶锂的生长，从而提高电池的性能和稳定性。高熵合金界面层还能增强电极的力学性能，进一步提升电池的可靠性。

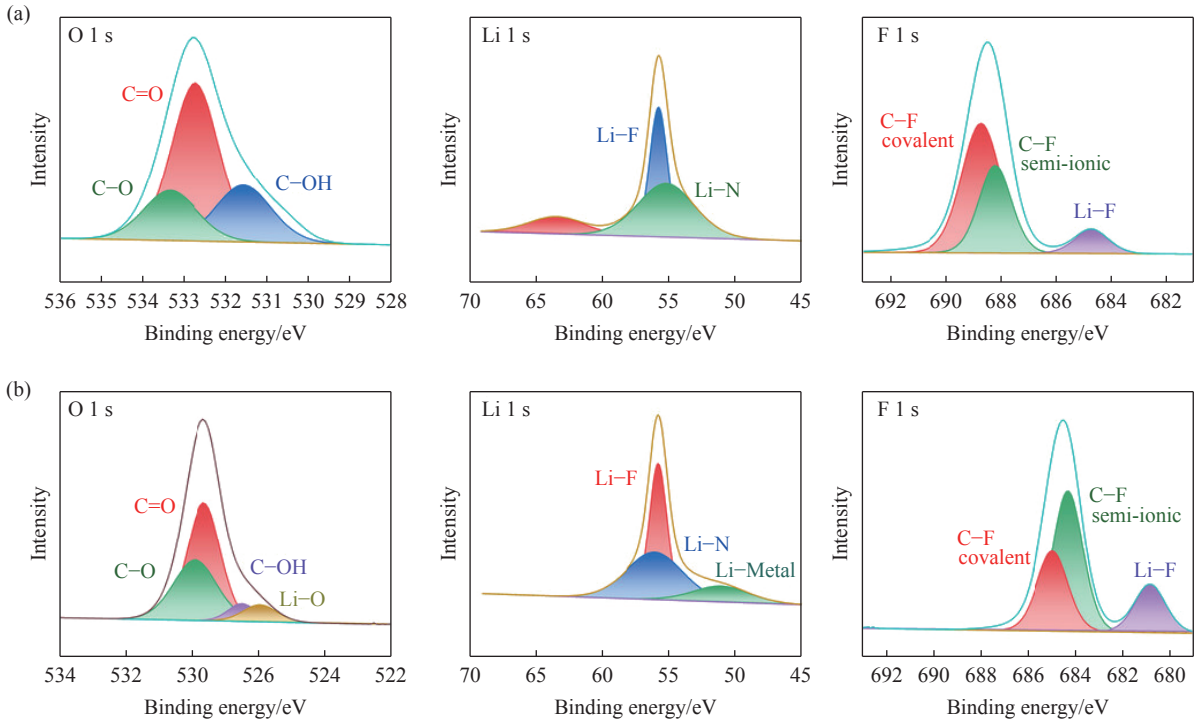

图 16　(a) 裸锂和 (b)HEA@Li 界面形成的固体电解质 X 射线光电子能谱表征结果[35]

超级电容器领域

超级电容器是一种具有高功率密度和快速充放电能力的储能器件[36]，高熵合金的高导电性和良好的电化学稳定性使其成为超级电容器电极材料的理想选择[37]。

提升超级电容器的电容性能

高熵合金凭借特殊的结构和性能优势，在超级电容器电极材料领域展现出卓越的电容性能提升潜力。Xu 等[38] 制备的 FeNiCoMnMg 高熵合金纳米颗粒负载于碳纳米纤维的电极材料，在 6 mol/L KOH 电解液中表现出色，当前驱体浓度为 5 mmol/L 时，比电容高达 203 F/g，如图 17 所示。这种优异的电容性能主要源于高熵合金中多种金属元素的协同效应。首先，多种元素的均匀混合提升了体系混合熵，使合金更倾向于形成稳定的固溶体结构，为电荷存储提供良好的基础，在充放电过程中保持结构相对稳定，减少因结构变化导致的电容损失。其次，不同金属原子的尺寸和电子结构差异引发晶格畸变，增加了材料内部的缺陷和间隙，为离子扩散提供了更多通道，从而加快超级电容器充放电时的离子扩散速度，提高电容性能。此外，Shen 等[39] 制备的高熵合金纳米颗粒/超交联聚合物基碳复合材料，在 1 mol/L KOH 电解液中的比电容高达 495.4 F/g。在该复合材料中，高熵合金纳米颗粒表面的金属氧

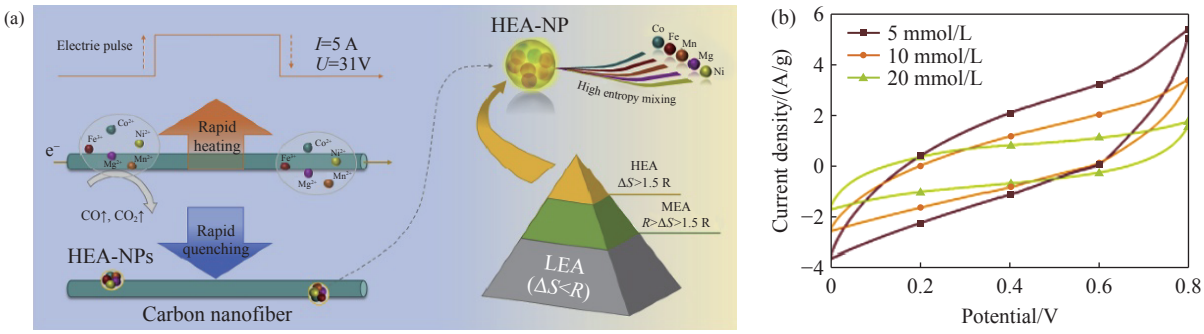

图 17　(a) 通过化学传输烧结方法在碳纳米纤维基底制备高熵合金纳米颗粒的过程示意；(b) 不同前驱体浓度下的循环伏安曲线[38]（*R* 为原子半径；Δ*S* 为合金形成时对应混合熵；NPs 为纳米颗粒）

化物层不仅为电子和离子传输提供了导电通道，还增加了材料的表面活性位点。同时，高熵合金中各金属元素的固有特性发挥了协同作用，与金属氧化物层和多孔碳性质的超交联聚合物基碳相互配合，共同促进电荷的存储和传输，进而实现高比电容。

改善超级电容器的循环稳定性

循环稳定性是衡量超级电容器性能的重要指标之一，而高熵合金特殊的结构和性能特点能够有效抑制循环过程中常见的电极结构变化和性能衰减问题，在改善超级电容器循环稳定性方面具有显著效果。Kong 等[40] 制备的 AlCoCrFeNi 高熵合金电极在 3000 次循环后，电容保持率仍高达 97%，这得益于该高熵合金的纳米多孔结构及其良好的电化学稳定性。纳米多孔结构提供了较大的比表面积，增加了电极与电解液的接触面积，有利于电荷的存储和传输，且在循环过程中结构稳定，不易发生坍塌或变形。高熵合金中多种元素的协同作用增强了电极的抗腐蚀能力，在充放电过程中有效抵抗电解液的侵蚀，减少电极材料的溶解和脱落，进一步提升循环稳定性。

优化超级电容器的倍率性能

倍率性能反映了超级电容器在不同充放电速率下的性能表现，而高熵合金能够为离子和电子的快速传输提供有利条件，有效优化超级电容器的倍率性能。例如，Lal 等[41] 制备的嵌入碳纳米管的 AlCoCrFeNi 高熵合金纳米颗粒复合材料，作为固态对称器件的电极材料时，在不同充放电速率下都能保持较好的性能。碳纳米管的引入进一步增强了材料的导电性，与高熵合金的特性相结合，为电子和离子的传输提供了高效路径。在高充放电速率下，该复合材料能够快速响应，实现电荷的快速存储和释放，展现出良好的倍率性能。

综上所述，高熵合金在储能器件中展现优异的性能，未来需进一步优化其制备工艺，降低成本，以推动其在储能领域的广泛应用。

高熵合金在核能领域的应用

随着核能技术的不断发展，核反应堆对结构材料的要求日益严苛。高熵合金因独特的高熵特性，在极端环境下展现出卓越的性能，有望成为核反应堆结构材料的理想选择[42]，在核能领域备受关注。

提升核反应堆结构材料的辐照耐受性

在核反应堆的应用中，高熵合金需要经受高能中子、离子和电子持续轰击的极端辐照环境。研究表明，高熵合金在辐照环境下表现出优异的辐照耐受性。Zhang 等[43] 研究 CrMnFeCoNi 高熵合金（Cantor 合金）及其衍生合金在不同辐照条件下的辐照响应，研究发现 Cantor 合金在高能电子、重离子和氦离子辐照下表现出较强的抗辐照诱导偏析能力，元素在晶界处的偏析程度较低，与传统 Fe–Ni–Cr 合金[44] 相近；其位错环尺寸较小但数量密度高（如图 18(a)~18(d) 所示），位错环密度的排序为 CrMnFeCoNi＞ CrFeCoNi=FeCoNi＞ FeNi，其中 CrMnFeCoNi 的位错环密度约比 FeNi 高一个数量级；FeNi、FeCoNi、CrFeCoNi 和 CrMnFeCoNi 中位错环的平均直径分别为 76、42、51 和 24 nm，且成分更复杂的合金中具有更高比例的层错位错环[45]，使其在辐照环境下原子扩散更缓慢，有效抑制辐照诱导偏析，减少空洞等有害缺陷形成。另外，该合

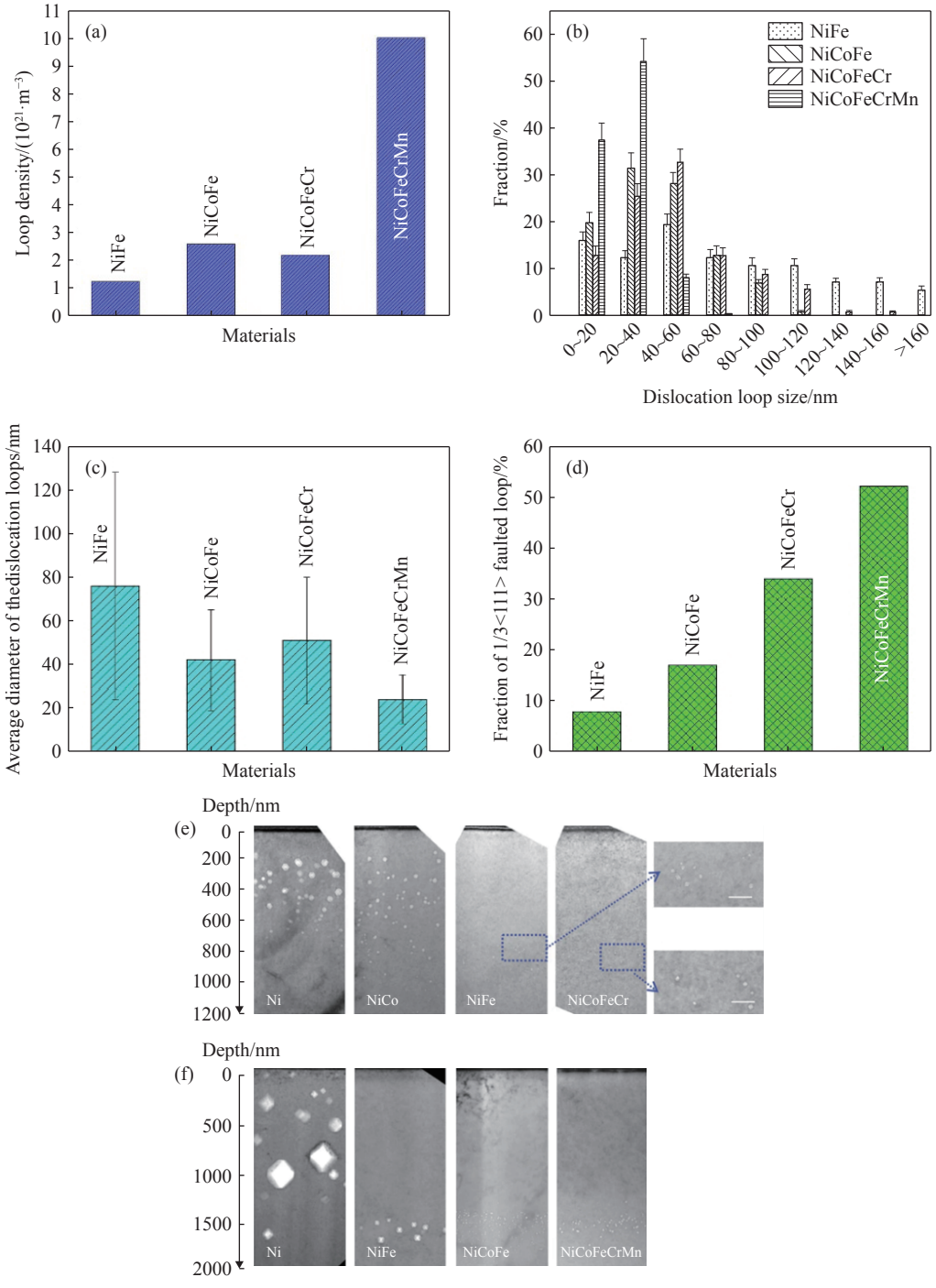

图 18　在 773 K 下辐照至 (38±5) dpa 的 CrMnFeCoNi 合金中的位错环密度 (a), 位错环尺寸分布 (b), 位错环平均直径 (c), 1/3<111>层位错环比例 (d)[45]; (e) 用 1.5 MeV 镍离子辐照至 3×10^{15} cm^{-2} 的不同材料的横截面透射电子显微镜图像; (f) 用 3 MeV 镍离子辐照至 5×10^{16} cm^{-2} 的不同材料的横截面透射电子显微镜图像[46]

金肿胀程度较低（如图 18(e)~18(f) 所示），整体抗空洞肿胀能力的排序为 Ni<CoNi<FeNi≤CrFeCoNi<FeCoNi≤CrMnFeCoNi[46]，且更能抵御氦气泡生长。FeCrV 基高熵合金同样在高剂量辐照下，表现出较低的辐照硬化程度[47]。

改善核反应堆结构材料的热稳定性

核反应堆的运行环境通常涉及高温条件，因此结构材料的热稳定性至关重要。高熵合金由于复杂

的组成和高熵特性，在高温条件下表现出优异的热稳定性。He 等[48] 研究 CrFeCoNi 合金在 1250 keV 电子辐照下的热稳定性，发现即使在高温（673 K）和高剂量（1 dpa）条件下，合金仍能维持面心立方结构，且未出现明显的相变或分解。Kumar 等[49] 采用 3 或 5.8 MeV 镍离子辐照，研究 $Cr_{18}Mn_{27}Fe_{27}Ni_{28}$ 合金在不同温度（室温至 973 K）和剂量（最高达 10 dpa）下的辐照行为，结果表明，该合金在高温下表现出良好的热稳定性，且在高剂量辐照下未出现明显的相变或分解。因此，高熵合金在高温和高剂量辐照条件下仍能保持其结构和性能的稳定性，适用于核反应堆的极端环境。

优化核反应堆结构材料的抗腐蚀性能

核反应堆中的结构材料不仅需要承受高温和辐照环境，还需在腐蚀性介质中保持良好的性能。高熵合金凭借多元素组成和高熵特性，表现出优异的抗腐蚀性能。Xia 等[50] 研究 FeCrCuTiV 高熵合金在不同制备工艺下的腐蚀行为，结果表明，采用激光熔化沉积技术制备的合金具有更优异的抗腐蚀性能，这主要归因于其更均匀的微观结构和较少的富 Cu 相。Cui 等[51] 研究 $FeCrVTi_x$ 中熵合金的腐蚀行为，发现添加适量的 Ti 可以显著提高合金的抗腐蚀性能。Ti 的添加不仅细化了晶粒，还能通过在钝化膜中富集 TiO_2 和 V 氧化物，进一步提高材料的抗腐蚀性能。这些研究结果表明，高熵合金通过优化元素组成和微观结构，可以显著提高其在腐蚀性环境中的性能，适用于核反应堆的复杂工况。

综上所述，高熵合金凭借其优异的辐照耐受性、热稳定性和抗腐蚀性能，在核能领域展现出巨大的应用潜力。未来研究应深入探索高熵合金在不同辐照条件下的行为机制，并通过实验和计算模拟相结合的方法，开发出更适配核能应用的高性能材料[52]。

结束语

高熵合金作为一种新型合金材料，在能源领域具有广泛的应用前景，在氢储存、催化反应、储能器件和核能领域的潜在应用，展现了其独特的性能优势和巨大的应用价值。然而，高熵合金在能源领域的应用仍面临一些挑战，如材料成本较高、制备工艺有待优化以及长期性能稳定性不足等。未来研究需进一步深入探索高熵合金的性能机制，优化材料组成和结构，以提高其在能源领域的应用性能和经济性。随着研究的不断深入和技术的不断进步，高熵合金有望在能源领域发挥更加重要的作用，为能源的可持续发展提供有力支撑。

参考文献

[1] Zhang Y, Zuo T T, Tang Z, et al. Microstructures and properties of high-entropy alloys. *Prog Mater Sci*, 2014, 61: 1
[2] Wang H, He Q F, Gao X, et al. Multifunctional high entropy alloys enabled by severe lattice distortion. *Adv Mater*, 2024, 36(17): Art No. e2305453
[3] Wu Y Q, Liaw P K, Li R X, et al. Relationship between the unique microstructures and behaviors of high-entropy alloys. *Int J Miner Metall Mater*, 2024, 31(6): 1350
[4] Ren J T, Chen L, Wang H Y, et al. High-entropy alloys in electrocatalysis: From fundamentals to applications. *Chem Soc Rev*, 2023, 52(23): 8319
[5] Schweidler S, Botros M, Strauss F, et al. High-entropy materials for energy and electronic applications. *Nat Rev Mater*, 2024, 9: 266
[6] George E P, Raabe D, Ritchie R O. High-entropy alloys. *Nat Rev Mater*, 2019, 4(8): 515
[7] Zhang Y. High-entropy materials: A brief introduction. Singapore: Springer Singapore, 2019: 1
[8] Tsai M H, Yeh J W. High-entropy alloys: A critical review. *Mater Res Lett*, 2014, 2(3): 107
[9] Hsu W L, Tsai C W, Yeh A C, et al. Clarifying the four core effects of high-entropy materials. *Nat Rev Chem*, 2024, 8(6): 471
[10] Han L L, Zhu S Y, Rao Z Y, et al. Multifunctional high-entropy materials. *Nat Rev Mater*, 2024, 9(12): 846
[11] Li W D, Xie D, Li D Y, et al. Mechanical behavior of high-entropy alloys. *Prog Mater Sci*, 2021, 118: Art No. 100777
[12] Gao M C, Miracle D B, Maurice D, et al. High-entropy functional materials. *J Mater Res*, 2018, 33(19): 3138
[13] Xia S Q, Yang W P, Zhang Y. Prediction of the optimal hydrogen storage in high entropy alloys. *Mater Chem Phys*, 2024, 328: 130010
[14] Karlsson D, Ek G, Cedervall J, et al. Structure and hydrogenation properties of a HfNbTiVZr high-entropy alloy. *Inorg Chem*, 2018, 57(4): 2103
[15] Floriano R, Zepon G, Edalati K, et al. Hydrogen storage properties of new A_3B_2-type TiZrNbCrFe high-entropy alloy. *Int J Hydrog Energy*, 2021, 46(46): 23757
[16] Zhang C, Song A N, Yuan Y, et al. Study on the hydrogen storage properties of a TiZrNbTa high entropy alloy. *Int J Hydrog Energy*,

2020, 45(8): 5367

[17] Zhang S Y, Liu S Q, Yang D L, et al. High-entropy catalysts for electrocatalytic reduction reaction. *J Alloys Compd*, 2024, 1009: Art No. 176970

[18] Shi Z L, Wang L, Huang Y P, et al. High-entropy catalysts: New opportunities toward excellent catalytic activities. *Mater Chem Front*, 2024, 8(1): 179

[19] Minamihara H, Kusada K, Wu D S, et al. Continuous-flow reactor synthesis for homogeneous 1 nm-sized extremely small high-entropy alloy nanoparticles. *J Am Chem Soc*, 2022, 144(26): 11525

[20] Li H D, Han Y, Zhao H, et al. Fast site-to-site electron transfer of high-entropy alloy nanocatalyst driving redox electrocatalysis. *Nat Commun*, 2020, 11(1): Art No. 5437

[21] Ding Z Y, Chen Z Y, Liu X Y, et al. Ultrathin heterogeneous nanolayer structure of FeCoNiCu multi-principal element alloy for robust water electrolysis. *Chem Eng J*, 2025, 506: Art No. 160016

[22] Jin Z Y, Lü J, Jia H L, et al. Nanoporous Al–Ni–Co–Ir–Mo high-entropy alloy for record-high water splitting activity in acidic environments. *Small*, 2019, 15(47): Art No. e1904180

[23] Wang S Q, Huo W Y, Fang F, et al. High entropy alloy/C nanoparticles derived from polymetallic MOF as promising electrocatalysts for alkaline oxygen evolution reaction. *Chem Eng J*, 2022, 429: Art No. 132410

[24] Li S Y, Tang X W, Jia H L, et al. Nanoporous high-entropy alloys with low Pt loadings for high-performance electrochemical oxygen reduction. *J Catal*, 2020, 383: 164

[25] Tao L, Sun M Z, Zhou Y, et al. A general synthetic method for high-entropy alloy subnanometer ribbons. *J Am Chem Soc*, 2022, 144(23): Art No. 10582

[26] Löffler T, Meyer H, Savan A, et al. Discovery of a multinary noble metal-free oxygen reduction catalyst. *Adv Energy Mater*, 2018, 8(34): Art No. 1802269

[27] Wang T, Wang Y Z, Wang N R, et al. Development of a novel $(Ni_{40}Fe_{30}Co_{20}Al_{10})_{90}Ti_{10}$ high-entropy alloy with excellent photocatalytic performance. *Mater Lett*, 2021, 283: Art No. 128817

[28] Zakir O, Guler O, Idouhli R, et al. Enhanced photocatalytic abilities of innovative NbTaZrMoW high-entropy alloys (HEAs): A comparative analysis with its high entropy oxide (HEO) counterpart. *J Mater Sci*, 2024, 59(26): 12050

[29] Xiang X L, Cheng B, Zhu B C, et al. High-entropy alloy nanocrystals boosting photocatalytic hydrogen evolution coupled with selective oxidation of cinnamyl alcohol. *Chin J Catal*, 2025, 68: 326

[30] Wang J, Niu X Y, Wang R, et al. High-entropy alloy-enhanced ZnCdS nanostructure photocatalysts for hydrogen production. *Appl Catal B*, 2025, 362: Art No. 124763

[31] Zhang W T, Wang X Q, Zhang F Q, et al. Frontiers in high entropy alloys and high entropy functional materials. *Rare Met*, 2024, 43(10): 4639

[32] Mei Y, Chen J, Deng W, et al. Recent developments on high-entropy materials in electrochemical energy storage. *J Chin Ceram Soc*, 2022, 50(1): 174

[33] Li X W, Wang J H, Yang L F, et al. Element screening engineering for high-entropy alloy anodes: Achieving fast and robust Li-storage with optimal working potential. *Adv Mater*, 2024, 36(48): Art No. 2409278

[34] Wang J, Wang Y, Lu X M, et al. Ultra-sleek high entropy alloy tights: Realizing superior cyclability for anode-free battery. *Adv Mater*, 2024, 36(11): Art No. 2308257

[35] Xu C X, Zhao T, Wang K, et al. Machine learning assisted design of high-entropy alloy interphase layer for lithium metal batteries. *Adv Funct Mater*, 2025: Art No. 2425487

[36] Khan H A, Tawllbeh M, Aljawrneh B, et al. A comprehensive review on supercapacitors: Their promise to flexibility, high temperature, materials, design, and challenges. *Energy*, 2024, 295: Art No. 131043

[37] Hussain I, Lamiel C, Ahmad M, et al. High entropy alloys as electrode material for supercapacitors: A review. *J Energy Storage*, 2021, 44: Art No. 103405

[38] Xu X, Du Y K, Wang C H, et al. High-entropy alloy nanoparticles on aligned electronspun carbon nanofibers for supercapacitors. *J Alloys Compd*, 2020, 822: Art No. 153642

[39] Shen E H, Song D X, Chen Q B, et al. Spontaneously forming oxide layer of high entropy alloy nanoparticles deposited on porous carbons for supercapacitors. *ChemElectroChem*, 2021, 8(1): 260

[40] Kong K, Hyun J, Kim Y, et al. Nanoporous structure synthesized by selective phase dissolution of AlCoCrFeNi high entropy alloy and its electrochemical properties as supercapacitor electrode. *J Power Sources*, 2019, 437: Art No. 226927

[41] Lal M S, Sundara R. High entropy oxides-a cost-effective catalyst for the growth of high yield carbon nanotubes and their energy applications. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2019, 11(34): 30846

[42] Xia S Q, Wang Z, Yang T F, et al. Irradiation behavior in high entropy alloys. *J Iron Steel Res Int*, 2015, 22(10): 879

[43] Zhang Z R, Armstrong D E J, Grant P S. The effects of irradiation on CrMnFeCoNi high-entropy alloy and its derivatives. *Prog Mater Sci*, 2022, 123: Art No. 100807

[44] Allen T R, Busby J T, Was G S, et al. On the mechanism of radiation-induced segregation in austenitic Fe–Cr–Ni alloys. *J Nucl Mater*, 1998, 255(1): 44

[45] Lu C Y, Yang T N, Jin K, et al. Radiation-induced segregation on defect clusters in single-phase concentrated solid-solution alloys. *Acta Mater*, 2017, 127: 98

[46] Lu C Y, Niu L L, Chen N J, et al. Enhancing radiation tolerance by controlling defect mobility and migration pathways in multicomponent single-phase alloys. *Nat Commun*, 2016, 7: Art No. 13564

[47] Xu Z H, Xu S, Zhao F Q, et al. FeCrV-based multi-component alloys

with the auspicious potential as advanced nuclear energy materials: A comprehensive review. *J Alloys Compd*, 2025, 1017: Art No. 179086

[48] He M R, Wang S, Shi S, et al. Mechanisms of radiation-induced segregation in CrFeCoNi-based single-phase concentrated solid solution alloys. *Acta Mater*, 2017, 126: 182

[49] Kumar N A P K, Li C, Leonard K J, et al. Microstructural stability and mechanical behavior of FeNiMnCr high entropy alloy under ion irradiation. *Acta Mater*, 2016, 113: 230

[50] Xia S Q, Xia Z X, Zhao D, et al. Microstructure formation mechanism and corrosion behavior of FeCrCuTiV two-phase high entropy alloy prepared by different processes. *Fusion Eng Des*, 2021, 172: Art No. 112792

[51] Cui J H, Sun J R, Cheng Z Y, et al. Effects of precipitated phase on the synergy of corrosion resistance and mechanical properties for $FeCrVTi_x$ medium-entropy alloys. *Corros Sci*, 2023, 224: Art No. 111508

[52] Cheng Z Y, Sun J R, Gao X, et al. Irradiation effects in high-entropy alloys and their applications. *J Alloys Compd*, 2023, 930: Art No. 166768

作者简介：王家晟（1998—），男，山西省大同人，北京科技大学新金属材料国家重点实验室在读博士研究生。主要研究方向高熵能源材料。通信地址：北京市海淀区学院路30号北京科技大学；E-mail：D202420018@xs.ustb.edu.cn。

通信作者：张勇（1969—），男，北京市人，北京科技大学新金属材料国家重点实验室教授。主要研究方向高熵材料。通信地址：北京市海淀区学院路30号北京科技大学；Email：drzhangy@ustb.edu.cn。