

基于机器学习设计和制备高熵氮化物陶瓷

刘 娟^{1,2}, 田传进¹, 汪长安²

(1. 景德镇陶瓷大学材料科学与工程学院, 江西 景德镇 333403;

2. 清华大学材料学院, 新型陶瓷与精细工艺国家重点实验室, 北京 100084)

摘 要: 高熵陶瓷作为一种新兴的陶瓷材料自问世起就成为陶瓷领域的研究热点, 然而, 其巨大的成分设计空间也为基于实验和“试错法”的组分设计带来了挑战。近年来, 通过机器学习与实验探索相结合的方式为这一问题的解决带来新方法。基于此, 本研究建立了 4 个机器学习模型, 通过训练评估选出性能最好的梯度提升决策树模型($R^2=0.92$)并用于预测, 然后通过实验成功合成了单相的 $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ 高熵氮化物陶瓷, 验证了模型的准确性, 为高熵氮化物陶瓷的设计提供了新思路, 加快了新体系的发现。

关键词: 高熵陶瓷; 氮化物陶瓷; 机器学习; 材料设计; 模型预测

中图分类号: TQ175 文献标志码: A 文章编号: 0454-5648(2023)12-3095-07

网络出版时间: 2023-09-11



Design and Preparation of High-Entropy Nitride Ceramics via Machine Learning

LIU Juan^{1,2}, TIAN Chuanjin¹, WANG Chang'an²

(1. School of Materials Science and Engineering, Jingdezhen Ceramic Institute, Jingdezhen 333403, Jiangxi, China;

2. State Key Laboratory of New Ceramics and Fine Processing, School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: As one of emerging ceramic materials, high-entropy ceramics become a research hotspot in the field of ceramics. However, their compositional design has some challenges for component design based on experimentation and “trial and error”. In recent years, the combination of machine learning and experiments can provide an effective method to solve this problem. In this paper, four machine learning models were established, the best-performing gradient-boosting decision tree model ($R^2=0.92$) through training and evaluation was selected for prediction. A single-phase $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ high-entropy nitride ceramic was then synthesized based on the predication by the model. This effective approach can provide some ideas for the design of high-entropy nitride ceramic and discover new systems.

Keywords: high-entropy ceramics; nitride ceramics; machine learning; materials design; model forecast

20 世纪 90 年代末, “高熵”这一概念被中国台湾清华大学的叶均蔚教授提出^[1], 随后以多组元高熵合金的形式走进大家的研究视野中^[2]。高熵合金由 5 种或 5 种以上等量或近似等量的金属元素混合而成, 因其结构有序但化学组成无序的特性, 使得高熵合金具有不同于单组元材料的优异性能和灵

活的性能调控空间。“高熵”作为一种全新的材料设计理念, 极大地丰富了材料体系。

高熵陶瓷由高熵合金发展而来, 通常指由 5 种或 5 种以上金属阳离子以等物质的量或近等物质的量组成的多组元固溶体^[3]。近年来, 因其优异的性能和广阔的应用前景成为陶瓷领域的研究热点, 常

收稿日期: 2023-04-10。 修订日期: 2023-04-30。

基金项目: 国家自然科学基金(52173257)。

第一作者: 刘 娟(1996—), 女, 硕士研究生。

通信作者: 汪长安(1969—), 男, 博士, 教授。

Received date: 2023-04-10. Revised date: 2023-04-30.

First author: LIU Juan (1996—), female, Master candidate.

E-mail: liujuan017@163.com

Correspondent author: WANG Chang'an (1969—), male, Ph.D., Professor.

E-mail: wangca@mail.tsinghua.edu.cn

见的高熵陶瓷有高熵氮化物、高熵氧化物、高熵碳化物、高熵氧化物和高熵硼化物等。其中，高熵氮化物陶瓷多采用反应磁控溅射法进行制备薄膜材料，这种薄膜涂层材料通常表现出良好的耐腐蚀性、耐磨性和高温稳定性，在金属和高温防护等领域有着广泛的应用前景。Chen 等通过溅射法制备的 $(\text{VAlTiCrMo})\text{N}_x$ 涂层有着良好的钝化能力，高于 304 不锈钢，且由于氮的引入带来的晶格畸变提高了这一涂层的机械性能^[4]。Xing 等通过磁控溅射技术制备得到了 $(\text{NbTiAlSiZr})\text{N}_x$ 薄膜，研究表明，这一薄膜在 700 °C 高温条件下表现出很高的抗结晶能力，说明这一涂层在高温防护领域有着潜在应用价值^[5]。然而，实验探索中的复杂工艺仍是高熵氮化物陶瓷发展所面临的挑战^[6]。高熵氮化物陶瓷尚未探索的组分空间巨大，实验周期长，阻碍了新型体系的发现。

科技的蓬勃发展，使得人工智能广泛应用于交通、航天、医疗和服务行业等领域^[7]。近年来，随着材料基因组计划的提出，人工智能在材料领域的应用备受关注，二者的协同发展显得尤为重要^[8]。机器学习作为人工智能实现的核心技术之一，为新材料的发现与设计提供了可能。基于机器学习模型，可以实现材料性能的预测和优化^[9–10]，甚至设计发现新材料^[11]。Zhao 等通过机器学习方法从选定的 16 个金属元素中预测了 132 个三元的去合金化体系，其中包含了去合金化体系从未报道过的元素，对设计新型纳米复合材料和纳米多孔材料具有指导意义^[12]。Raccuglia 等借助机器学习算法和材料基因工程的思想，通过计算机程序训练失败的或效果不理想的实验数据成功预测了新材料的合成，对有机

模板合成无机物的预测条件准确率达到 89%^[13]。Katubi 等将机器学习方法应用于太阳能电池的设计中，通过机器学习方法结合高通量筛选设计了超过 1 000 种易于合成的新型有机半导体^[14]。在传统的高熵陶瓷实验探索中，主要关注成分设计、单相形成能力、制备方法、基本性能等方面^[15]，实验工艺较为繁琐，且效率不高。机器学习技术的引入，改变了相对耗时的“试错法”，可以更加高效地探索未开发的高熵陶瓷成分空间^[16]。Sarker 等制定了一种 EFA 描述符，用于描述高熵材料的熵形成能力，从而找出具备单相形成可能的高熵材料^[17]。基于此描述符，Kaufmann 等利用机器学习建立随机森林模型^[18]，以 EFA 为目标预测值，成功预测了 70 种高熵碳化物的熵形成能力，对寻找最佳高熵陶瓷体系的实验设计具有指导作用。

本工作探索了机器学习辅助发现并设计高熵氮化物陶瓷，按照“建立数据集–数据集预处理–建立模型–模型优化与评估–模型应用”这一流程展开研究(见图 1)。在本研究中，以第一性原理计算得出的 56 种高熵氮化物组合的 EFA 作为目标值^[19]，在此基础上建立了 4 个机器学习模型，以这些组合包含元素的基本化学属性和物理性质作为描述符来建立数据集^[20]，在经过预处理后输入模型中，可以快速筛选出具有单相形成可能的高熵氮化物陶瓷，并通过误差指标来判断所建立模型的准确性，发现 4 个模型中 GBDT 的表现最好，可以进一步用来预测。由此可见，与传统的“试错法”实验相比，通过机器学习发现高熵陶瓷具有高效率、高准确率等优点，人工智能与材料科学的结合为高熵陶瓷提供了新的设计理念。

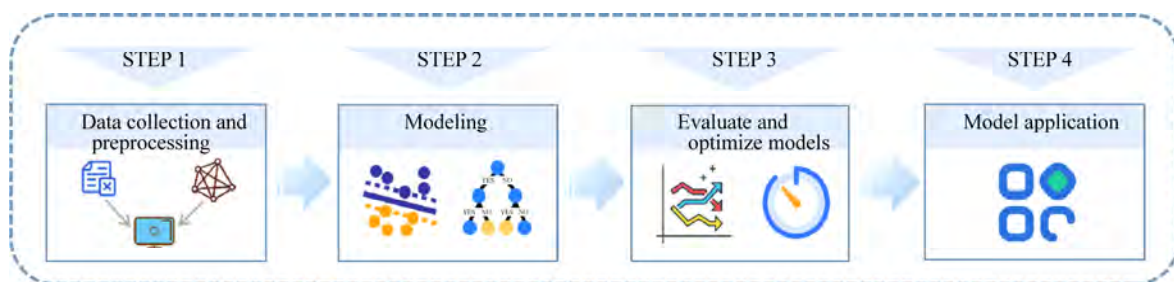


图 1 机器学习流程图

Fig. 1 Flowchart of machine learning

1 建立数据集

1.1 数据收集

数据集的建立是训练机器学习模型流程中最为

重要的一环，优秀的数据集能够有效提升模型预测的准确性，因此前期数据的收集尤为重要。根据已有的文献报道，Al、Si、Ti、V、Cr、Zr、Nb 和 Mo 等 8 种元素除 Si 以外，其阳离子均可以与氮形成岩

盐 B1 结构^[21], 而 Si 又可以与其他元素结合形成单相高熵氮化物^[5]。因此本研究在训练模型阶段选取这 8 种元素与氮元素结合, 得到 56 个样本 ($8! / 5! 3! = 56$), 预测阶段的数据集在此基础上增加了 W 元素, 并通过 Magpie 收集了这些元素的基本化学、物理性质, 如电负性、元素主族序列、价电子数目等^[22], 得到了组成数据集的特征值^[18], 使得每一个样本都能转换为 1 组特征值输入到模型中, 数据集的目标值 EFA 通过已发表的工作获得^[19]。

1.2 数据预处理

在初始数据集中, 对每个样本点的数据运用了以下 6 种统计学方法进行处理: 均值、平均绝对偏差、极差、最大值、最小值和众数, 从而得到了一组含有 107 个变量的特征值, 将近样本点数量的 2 倍, 因此在数据预处理阶段选用 Lasso 回归进行变量筛选, 进一步提升模型预测阶段的准确性。

Lasso 筛选变量作为一种正则化技术, 能够对变量进行有效筛选, 在回归问题中具有广泛应用, 这种方法可以抑制过拟合情况的发生, 从而提高模型预测的准确性。在本研究中, 每一组特征值包含了较大数目的变量, 且变量之间存在一定的相关性, 容易出现变量共线性问题, 在训练机器学习模型过程中造成过拟合, 对预测效果影响较大, 因此选择 Lasso 回归进行变量筛选。

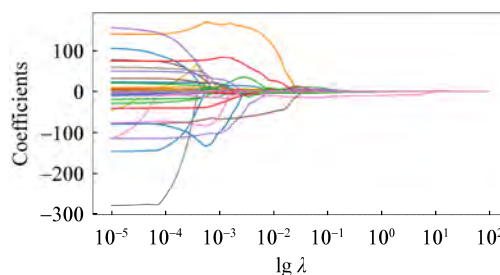
Lasso 回归在一般线性回归的基础上加入了正则项, 在保证最佳拟合误差的同时使得参数尽可能的“简单”, 其中正则项选用 L1 范数:

$$Q(\beta) = \|y - X\beta\|^2 + \lambda \|\beta\|_1 \quad (1)$$

其中: β 为参数向量; y 为观测向量, X 为设计矩阵; λ 为收缩参数, 其控制了 LASSO 回归模型的复杂度, λ 越大对变量较多的线性模型的惩罚力度就越大, 从而最终获得一个变量较少的模型, 使得

模型更具有泛化性, 同时可以解决线性回归中不可逆情况。正则化技术通过对模型参数进行调整(数量和大小), 降低模型的复杂度, 从而抑制过拟合的发生。

图 2 为 Lasso 回归模型。由图 2 可见, 每一条曲线代表了每一个自变量系数的变化轨迹, 纵坐标为本研究中 Lasso 回归对每一个变量计算得出的系数, 横坐标为 $\lg \lambda$ 值, 通过选择合适的 λ 做阈值来决定留下哪些变量的系数, 做出筛选。随着 $\lg \lambda$ 的增加, 相关系数越晚收敛于零, 对应的变量就越重要。



λ is shrinkage parameters.

图 2 Lasso 回归模型

Fig. 2 Lasso regression model

图 2 还可以看出, 不同的变量在给定的 λ 范围内, 随着 λ 的增大其系数发生的变化, 为了筛选出最有意义的特征值, 保留了系数没有变为零的变量和在 λ 值不断增大时系数才变为零的变量。在选定最佳的 λ 做为临界值后, 共筛选出 14 个变量。

图 3 为基于最佳 λ 值做出的特征重要性可视化, 横坐标表示回归系数, 纵坐标代表了筛选后留下的具体特征值。由图 3 可以看出, 特征值 E.P.B.A. m.n.f.w.m 即元素的门捷列夫数的特征重要性最高, 这一发现对之后高熵氮化物陶瓷的组分设计具有指导意义。表 1 为这些特征值所代表的具体含义。

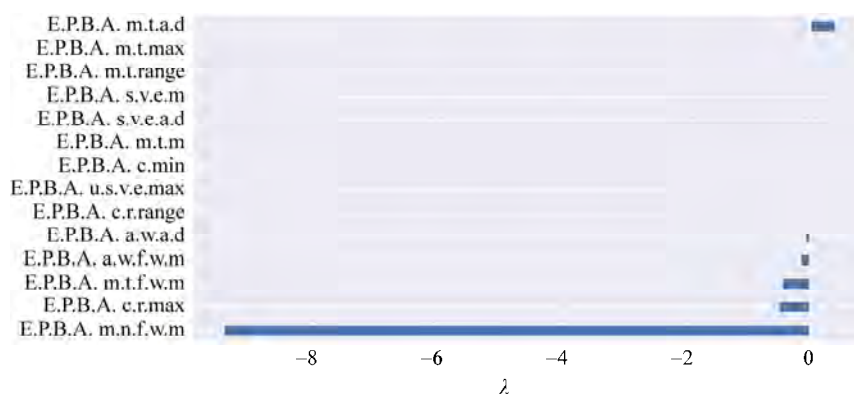


图 3 特征重要性可视化

Fig. 3 Visualization of feature importance

表 1 筛选后的特征值^[18]
Table 1 Filtered features^[18]

Feature	Description
E.P.B.A. m.t.a.d	Average deviation of the melting temperature for the composition
E.P.B.A. m.t.max	Maximum melting temperature of all the elements in the composition
E.P.B.A. m.t.range	Range of melting temperature of all the elements in the composition
E.P.B.A. s.v.e.m	Mode of the s-valence electrons for the composition
E.P.B.A. s.v.e.a.d	Average deviation of the s-valence electrons for the composition
E.P.B.A. m.t.m	Mode of the melting temperature for the composition
E.P.B.A. c.min	Minimum column of all the elements in the composition
E.P.B.A. u.s.v.e.max	Maximum unfilled s-valence electrons of all the elements in the composition
E.P.B.A. c.r.range	Range of covalent radius of all the elements in the composition
E.P.B.A. a.w.a.d	Average deviation of the atomic weight for the composition
E.P.B.A. a.w.f.w.m	Fraction-weighted mean of the atomic weight for the composition
E.P.B.A. m.t.f.w.m	Fraction-weighted mean of the melting temperature for the composition
E.P.B.A. c.r.max	Maximum covalent radius of all the elements in the composition
E.P.B.A.m.n.f.w.m	Fraction-weighted mean of the Mendelev number for the composition

2 模型与方法

2.1 建立模型

本工作中建立了 4 个机器学习模型，分别为随机森林(RF)、K 最近邻(KNN)、支持向量回归(SVR)和梯度提升决策树(GBDT)。其中：RF 模型的原理是基于集成算法的思想，通过集成大量决策树来预测目标变量；KNN 模型的基本思想是通过特征空间中“最接近”的训练样本对新数据进行分类，其中，K 的取值决定模型的性能；SVR 模型则是通过找到最佳拟合曲线来拟合数据，从而根据输入的特征值进行预测；GBDT 模型基于多个弱决策树的结果，根据其准确性进行加权，最后组合创建强决策树做出最终预测。模型建立后，将预处理过的数据集以 4:1 的比例分割为训练集和验证集输入到模型中，其中，训练集占数据集总量的 80%，用于训练模型；剩余 20%的数据做为测试集，用来确定超参数，并通过评价模型的性能来选出最优模型。

2.2 模型优化与评价

建立模型后，为了达到其最佳预测效果，本研

究中采用均方误差 MSE、平均绝对误差 MAE、均方根误差 RMSE、平均绝对误差 MAPE 和拟合优度 R^2 来评估，并对各模型的参数进行调整。

表 2 为机器学习模型对测试集的 MSE、MAE、RMSE、MAPE、 R^2 和调优参数。由表 2 可以看出，GBDT 模型的 MSE、MAE、RMSE 和 MAPE 值最小， $R^2=0.92$ ，最接近于 1，说明 GBDT 模型预测的结果最稳定。通过设置参数 Random_state=2 100，使得运行结果具有重复性；设置 Max_depth=3，使得决策树最大深度为 3；通过设置 Learning_rate=0.1 和 N_estimators=100 来控制模型的迭代，这 2 个参数共同决定了模型的拟合效果。

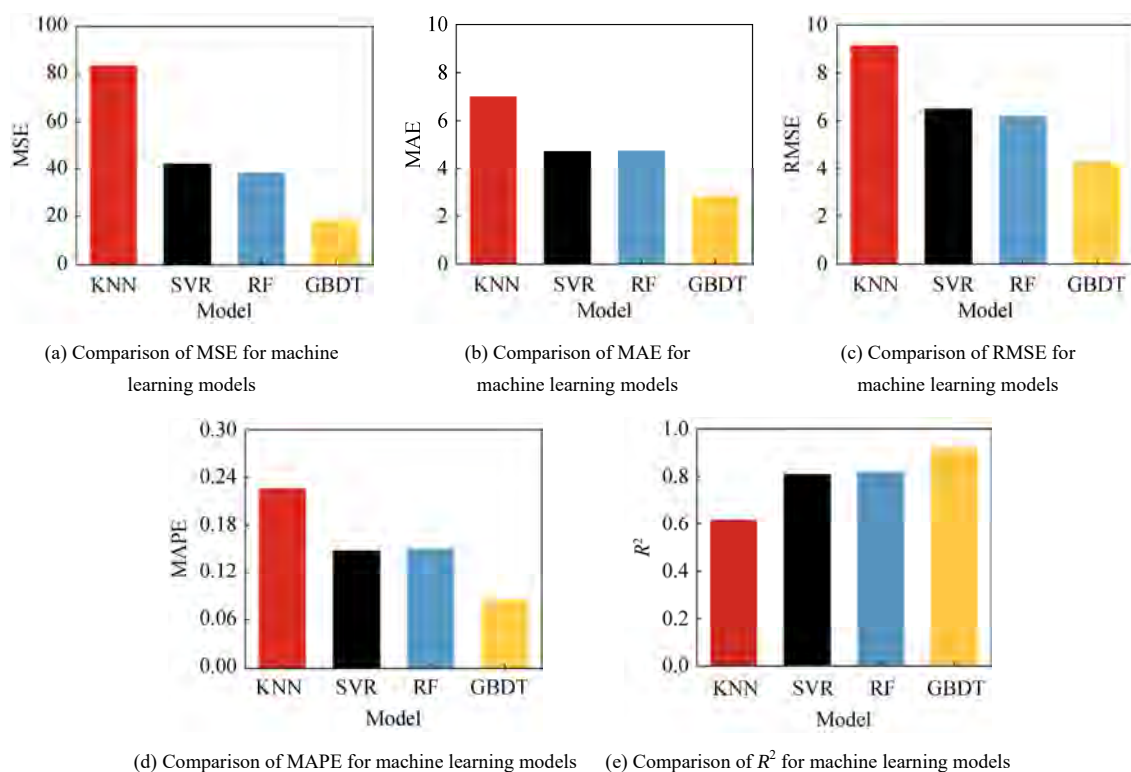
图 4 为 4 个模型在 5 个误差指标上的对比图。由图 4 可以看出，GBDT 在各项指标上均优于其他模型。因此，本工作进一步研究了 GBDT 模型的预测。

2.3 模型应用

通过训练好的 GBDT 模型预测了 70 种高熵氮化物组合的 EFA 值，其中，大于 50 (eV/atom)⁻¹ 的组合方式有 27 种。在已发表的文献[18]中报道，EFA 的值越大，则认为其形成单相的能力越强。

表 2 机器学习模型对测试集的 MSE、MAE、RMSE、MAPE、 R^2 和调优参数
Table 2 MSE、MAE、RMSE、MAPE、 R^2 and tuning parameters of the machine learning model on the test sets

Model	MSE of test set	MAE of test set	RMSE of test set	MAPE of test set	R^2 of test set	Tuning parameters
KNN	83.64	7.00	9.14	0.22	0.62	n_neighbors=3
SVR	42.29	4.72	6.50	0.14	0.81	Kernel='rbf', Gamma=.001, C=100
RF	38.34	4.74	6.19	0.15	0.82	Random_state=1 050, Max_depth=6, N_estimators=100
GBDT	18.50	2.82	4.30	0.08	0.92	Random_state=2 100, Max_depth=3, Learning_rate=0.1, N_estimators=100



MSE is mean squared error; MAE is mean absolute error; RMSE is root mean squared error; MAPE is mean absolute percentage error; R^2 is R-squared.

图 4 机器学习模型的评估指标对比图

Fig. 4 Comparison of evaluation metrics for machine learning models

表 3 GBDT 模型预测结果

Table 3 Prediction results of GBDT model

Composition	EFA/(eV·atom) ⁻¹	Composition	EFA/(eV·atom) ⁻¹	Composition	EFA/(eV·atom) ⁻¹
AlTiCrMoWN ₅	60	SiTiZrNbWN ₅	61	TiVNbMoWN ₅	63
SiVNbMoWN ₅	60	AlCrNbMoWN ₅	63	SiTiCrNbWN ₅	64
SiTiVMoWN ₅	61	AlTiNbMoWN ₅	63	TiVCrNbWN ₅	68

FA is entropy-forming ability.

表 3 为由 GBDT 模型筛选出的 EFA 达到 $60(\text{eV}/\text{atom})^{-1}$ 的 9 种组合方式,其中: $(\text{AlTiCrMoW})\text{N}_x$ 体系已有文献报道^[23]。由此可证明,在本研究中所建立的机器学习模型对发现新的高熵氮化物陶瓷具有一定的意义和参考价值。

2.4 实验合成

基于特征重要性的排序结果,我们发现元素的门捷列夫数与熵形成能力值存在负相关关系。因此,在过渡元素中选取了门捷列夫数较小的 Ti、V、Zr、Nb、Hf 作为高熵氮化物陶瓷的组成元素。首先输入到训练好的 GBDT 模型中对 EFA 进行预测,得到结果为 $73(\text{eV}\cdot\text{atom})^{-1}$,由此可得出这一组合单相形成的可能性很大;然后设计实验,通过热压烧结成功合成了单相的高熵氮化物陶瓷 $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ 。

图 5 为混合后的 5 种氮化物粉末和 $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ 陶瓷的 XRD 谱。由图 5 可见,在热压烧结后得到了单一的岩盐结构相,其中,氧化锆杂相的形成原因是由于球磨过程使用了氧化锆的球磨罐和球磨子引入。烧结前的粉末由 5 种独立的 XRD 衍射峰组成,经 1800°C 热压烧结后这 5 种衍射峰融合在一起,形成了单一相的岩盐结构。

图 6 为热压烧结制备的 $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ 陶瓷的表面 SEM 照片以及其相应的 EDS 元素面分布。由图 6 可以看出,5 种元素组分(Ti、V、Zr、Nb、Hf)在微米尺度均匀分布,没有明显偏聚。结合 XRD 物相分析,由此可见,基于机器学习模型设计的 $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ 陶瓷可以验证本研究建立的 GBDT 模型具有良好的泛化能力和准确性。

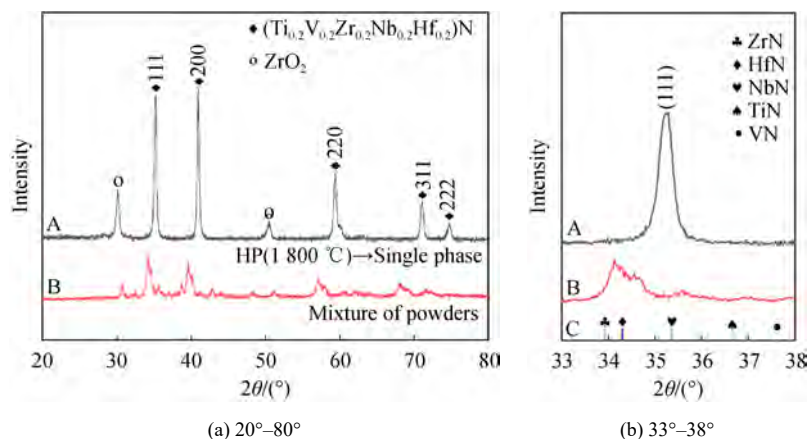
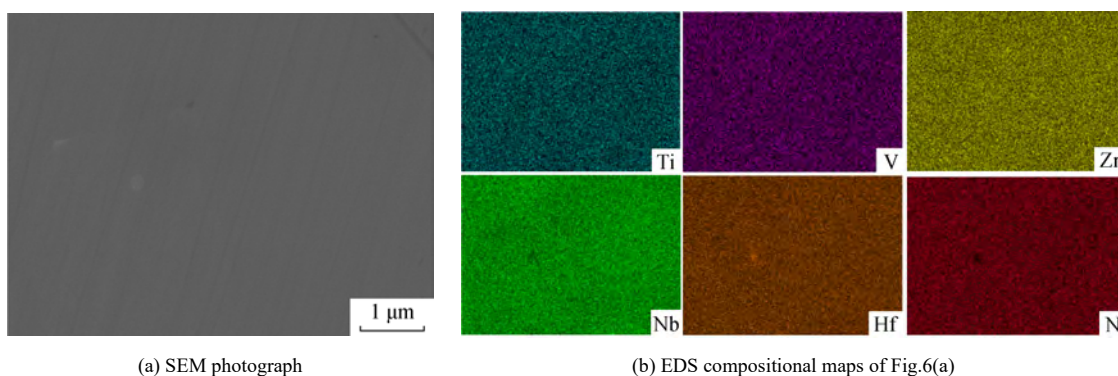


图 5 热压烧结前后 $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ 陶瓷的 XRD 谱
Fig. 5 XRD characterizations of $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ samples before and after hot pressing



(a) SEM photograph (b) EDS compositional maps of Fig.6(a)

图 6 $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ 陶瓷表面 SEM 照片以及 EDS 分布结果
Fig. 6 SEM image and EDS compositional maps of the $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ surface

3 结论

1) 针对原始数据集中特征值数目较多, 本研究采用了 Lasso 回归对特征值进行筛选, 从筛选出的特征值发现组成元素的熔点对模型影响较大。

2) 对进行特征筛选后的数据集使用了 4 种 ML 模型(KNN、SVR、RF、GBDT)进行训练, 结果显示, GBDT 训练的模型表现最好: 其 R^2 为 0.92, MSE 为 18.50, MAE 为 2.82, RMSE 为 4.30, MAPE 为 0.08, 均优于其他 3 个模型。

3) 在训练好的模型上进行了预测, 结果显示, EFA 大于 $60 (\text{eV} \cdot \text{atom}^{-1})^{-1}$ 的高熵氮化物组合方式有 9 种, 其中, $(\text{AlTiCrMoW})\text{N}_x$ 体系已被文献报道, 验证了模型预测的可靠性, 并通过模型的预测设计了高熵氮化物陶瓷的组成成分, 且通过实验成功合成单相 $(\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2})\text{N}$ 陶瓷, 为高熵氮化物陶瓷体系提供了新的设计思路。

参考文献:

[1] YEH J W, CHEN S K, LIN S J, et al. Nanostructured high-entropy

alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes[J]. Adv Eng Mater, 2004, 6(5): 299–303.

[2] DAI J H. Structure and toughening mechanical properties of multi principal component high entropy alloy[J]. Therm Sci, 2021, 25(6 Part A): 4019–4025.

[3] 谢鸿翔, 项厚政, 马瑞奇, 等. 高熵陶瓷材料的研究进展[J]. 材料导报, 2022, 36(6): 61–68.

XIE Hongxiang, XIANG Houzheng, MA Ruiqi, et al. Mater Rep (in Chinese), 2022, 36(6): 61–68.

[4] CHEN R, CAI Z B, PU J B, et al. Effects of nitriding on the microstructure and properties of VAlTiCrMo high-entropy alloy coatings by sputtering technique[J]. J Alloys Compd, 2020, 827: 153836.

[5] XING Q W, XIA S Q, YAN X H, et al. Mechanical properties and thermal stability of $(\text{NbTiAlSiZr})\text{N}_x$ high-entropy ceramic films at high temperatures[J]. J Mater Res, 2018, 33(19): 3347–3354.

[6] XIANG H M, XING Y, DAI F Z, et al. High-entropy ceramics: present status, challenges, and a look forward[J]. J Adv Ceram, 2021, 10(3): 385–441.

[7] 杨福康. 计算机人工智能技术的应用与发展研究[J]. 无线互联科技, 2022, 19(23): 81–83.

YANG Fukang. Wirel Internet Technol (in Chinese), 2022, 19(23):

- 81–83.
- [8] RAMPRASAD R, BATRA R, PILANIA G, et al. Machine learning in materials informatics: recent applications and prospects[J]. *NPJ Comput Mater*, 2017, 3: 54.
- [9] YUE D, FENG Y, LIU X X, et al. Prediction of energy storage performance in polymer composites using high-throughput stochastic breakdown simulation and machine learning[J]. *Adv Sci*, 2022, 9(17): e2105773.
- [10] LI W X, YANG T N, LIU C S, et al. Optimizing piezoelectric nanocomposites by high-throughput phase-field simulation and machine learning[J]. *Adv Sci*, 2022, 9(13): e2105550.
- [11] JIN Y B, HE L S, WEN Z H, et al. Intelligent on-demand design of phononic metamaterials[J]. *Nanophotonics*, 2022, 11(3): 439–460.
- [12] ZHAO C H, CHUNG C C, JIANG S Y, et al. Machine-learning for designing nanoarchitected materials by dealloying[J]. *Commun Mater*, 2022, 3: 86.
- [13] RACCUGLIA P, ELBERT K C, ADLER P D F, et al. Machine-learning-assisted materials discovery using failed experiments[J]. *Nature*, 2016, 533(7601): 73–76.
- [14] KATUBI K M, SAQIB M, MARYAM M, et al. Machine learning assisted designing of organic semiconductors for organic solar cells: high-throughput screening and reorganization energy prediction[J]. *Inorg Chem Commun*, 2023, 151: 110610.
- [15] 张国军, 王玉金. 无序的新境界: 高熵陶瓷[J]. *无机材料学报*, 2021, 36(4): 337–338.
- ZHANG Guojun, WANG Yujin. *J Inorg Mater (in Chinese)*, 2021, 36(4): 337–338.
- [16] ZHANG J, XIANG X P, XU B, et al. Rational design of high-entropy ceramics based on machine learning – A critical review[J]. *Curr Opin Solid State Mater Sci*, 2023, 27(2): 101057.
- [17] SARKER P, HARRINGTON T, TOHER C, et al. High-entropy high-hardness metal carbides discovered by entropy descriptors[J]. *Nat Commun*, 2018, 9(1): 4980.
- [18] KAUFMANN K, MARYANOVSKY D, MELLOR W M, et al. Discovery of high-entropy ceramics via machine learning[J]. *NPJ Comput Mater*, 2020, 6: 42.
- [19] HUANG H Y, SHAO L H, LIU H Z. Prediction of single-phase high-entropy nitrides from first-principles calculations[J]. *Phys Status Solidi B*, 2021, 258(8): 2100140.
- [20] WARD L, AGRAWAL A, CHOUDHARY A, et al. A general-purpose machine learning framework for predicting properties of inorganic materials[J]. *NPJ Comput Mater*, 2016, 2: 16028.
- [21] LEWIN E. Multi-component and high-entropy nitride coatings—a promising field in need of a novel approach[J]. *J Appl Phys*, 2020, 127(16): 160901.
- [22] 崔志强, 罗颖, 张云蔚. 通过机器学习设计新型超导材料[J]. *硅酸盐学报*, 2023, 51(2): 411–415.
- CUI Zhiqiang, LUO Ying, ZHANG Yunwei. *J Chin Ceram Soc*, 2023, 51(2): 411–415.
- [23] 张旭. (TiAlCrMoW) N_x 多主元氮化物涂层的制备及摩擦学性能研究[D]. 西安: 西安理工大学, 2021.
- ZHANG Xu. Title: preparation and tribological properties of (TiAlCrMoW) N_x multi-principal element nitride coatings (in Chinese, dissertation). Xi'an: Xi'an University of Technology, 2021.