

力学所等在中熵合金化学短程有序研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/13677.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！

近年来，物理冶金研究的新热点和新舞台聚焦在由多种主要合金元素组成的合金材料上，也称为高熵（或中熵）合金（high-entropy alloys and medium-entropy alloys，以下简称HEA），涌现出一些新的科学问题，展现出优异的力学和物理性能。

与化学无序的传统合金不同，HEA包含等原子比或近等原子比的多种主要合金元素，不同或相同原子彼此相遇的几率大，会产生化学相互作用，原子相互之间倾向于吸引或排斥，即近邻原子间有偏好地选择回避或聚集，会形成化学短程有序（chemical short-range order, CSRO），因此，CSRO是高熵合金本征的微结构属性。CSRO的尺度小，一般在亚纳米尺度的原子第一近邻和次近邻原子层内，并对强化、应变硬化和塑性行为等力学性能发挥重要作用。然而，直接看到CSRO并非易事，难点在于CSRO尺度小、组成元素间原子序数相差小和衍射强度太弱。利用透射电子显微镜（TEM）技术，学界迄今尚未有清晰证据可信地表明高熵合金CSRO的存在，也不清楚CSRO元素分布特征和原子堆垛构型。

近日，中国科学院力学研究所武晓雷研究组、西安交通大学马恩研究组和清华大学朱静研究组合作，通过TEM实验和计算模拟，首次给出了中熵合金存在CSRO以及CSRO与位错交互作用的直接观察证据。相关研究成果以*Direct observation of chemical short-range order in a medium-entropy alloy*为题，于2021年4月28日在线发表在*Nature*

上。研究人员利用配备能量过滤（GIF）系统的双像差矫正透射电子显微镜，综合运用选区和微区电子衍射、高角环形暗场（HAADF）高分辨成像及其傅氏变换（FFT）和反傅氏变换（IFFT）、能量过滤暗场成像、原子尺度的化学元素面分布（EDS-Mapping）测试等研究手段，在中熵VCoNi合金中清晰地看到了化学短程有序（CSRO），获得了CSRO的电子衍射证据及其尺寸、组成元素及占位和三维构型的信息。

研究人员从三方面观察并证实了CSRO的存在。首先，在面心立方VCoNi中熵合金[112]晶带轴的选区、微区及HAADF高分辨傅氏变

处存在超点阵衍射，选区和傅氏变换衍射谱中超点阵衍射都是直径较大的晕圆（diffuse disk），表明在正空间所对应的结构是三维尺度非常小的颗粒，即CSRO区域。利用超点阵衍射的能量过滤暗场像与HAADF高分辨图像的反傅氏变换成像，都观察到均匀分布的CSRO，平均尺寸为0.5 nm，面积分数为20%。其次，元素面分布测试表明，CSRO在相邻{113}面上具有富V/富（Co/Ni）/富V三明治式的元素分布和占位特征。结合原子占位分析和点阵应变的原子尺度几何相分析（GPA），给出了CSRO周期性晶格应变以及正空间的晶体结构。第三，设计并利用空间分布关联系数来分析在不同距离时元素间倾向于聚集（相关系数为正）还是互斥（负），发现相邻原子柱中V-V倾向于规避，而V-Co和V-Ni倾向于相邻，证实了在(111)面上倾向于形成富V-

贫V（即富Co/Ni）-富V的排列。进一步通过构建主动学习（active learning）团簇展开（cluster expansion）模型及其蒙特卡洛模拟，研究人员发现，V-V规避和V-Co/Ni近邻可降低能量是CSRO形成的驱动力。此外，GPA应变图谱证实了拉伸变形过程中CSRO与位错发生强烈交互作用，表明CSRO对塑性变形和强化、应变硬化的重要贡献。

该研究首次直接实验证实了中熵合金化学短程有序及其与位错的交互作用，为理解高熵合金的基本微结构特征以及设计高性能的高熵合金提供了新思路。论文的共同第一作者分别为陈雪飞（力学所博士研究生）、王琦（表面物理与化学重点实验室博士）和程志英（清华大学材料学院高级工程师）。研究工作得到国家重点研发计划、国家自然科学基金委基础科学中心项目和中科院战略性先导科技专项的资助。

[论文链接](#)

图1.中熵VCoNi合金化学短程有序的选区、微区衍射、能量过滤暗场像，高角环形暗场高分辨成像及其傅氏变换和反傅氏变换以及尺寸分布

图3.化学短程有序与位错的交互作用以及拉伸变形前后短程有序区域应变演化

研究团队单位：力学研究所

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](https://www.iikx.com)转发