
局部化学涨落对多主元合金动态力学响应获揭示

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/16260.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！

局部化学涨落对多主元合金动态力学响应获揭示。华南理工大学土木与交通学院教授姚小虎团队联合太原理工大学教授王志华、美国加州大学圣芭芭拉分校教授Irene J. Beyerlein团队，揭示局部化学涨落对多主元合金动态力学响应的影响。相关研究近日在线发表于《材料学报》。

多主元合金利用多种元素带来的较高的构型熵、晶格畸变和迟滞扩散等效应，突破了传统合金的设计思路，在抗腐蚀、抗疲劳以及高压高应变的极端环境中表现出较优异的性能。由多主元合金内部化学成分涨落引起的晶格畸变和化学短程序，是这类新型合金的典型特征之一，且对于缺陷演化和材料失效有重要的影响。

姚小虎团队此前已通过恒定应变速率下的原子模拟，证实了局部化学涨落对中熵合金缺陷演化的重要影响，并与准静态实验结果进行了对比。然而，它们在冲击载荷下对材料变形和层裂机制的作用尚待研究。由于局部化学涨落的影响范围在纳米量级，实验上对晶格畸变和化学短程序在动态加载中的原位表征很难实现，大尺度分子动力学模拟在预测和阐明它们对动态响应的影响和相应机理方面有独特的优势。

研究人员通过原子模拟和晶体结构分析手段，对晶格畸变和化学短程序在冲击加载下不同变形阶段的作用、各阶段之间变形机制的相关性以及由此引发的层裂破坏机理进行探讨。研究揭示了晶格畸变导致中熵合金的雨贡纽弹性极限表现出异常的各向异性。此外，晶格畸变可以通过减缓位错滑移而提高孪晶形成的可能性。在层裂阶段，化学短程序诱发的晶格失配引起较大的局部拉伸应变，导致孔洞倾向于在相应区域形核。孔洞的成核与扩展与局部微观结构密切相关。

该研究工作使用混合蒙特卡洛/分子动力学方法以及大规模的分子动力学模拟，以晶格畸变和化学短程序作为切入点，对单晶和多晶CoCrNi在冲击加载下的力学行为、缺陷演化和层裂破坏特征进行了研究。

该研究有助于通过调控多主元合金的局部化学环境，改善其在极端条件下的力学性能。

该研究工作得到国家自然科学基金杰出青年基金和面上项目基金的支持。华南理工大学博士生谢卓成为该论文第一作者，合作者包括美国加州大学圣芭芭拉分校博士生简武荣（共同通讯作者）、博士Shuozhi Xu，以及华南理工大学教授张晓晴。（来源：中国科学报朱汉斌）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117380>

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在

正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。
作者：姚小虎等 来源：《材料学报》

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](http://www.iikx.com)转发