

“负混合焓固溶体”概念为解决合金“强度-韧性倒置矛盾”提供新策略

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/25604.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！

“负混合焓固溶体”概念为解决合金“强度-韧性倒置矛盾”提供新策略。 北京时间2024年1月4日，北京工业大学/南方科技大学韩晓东教授团队在国际顶尖期刊Nature正刊以长文（Article）形式发表题为Negative mixing enthalpy solid solutions deliver high strength and ductility的研究成果。

研究首次提出负混合焓固溶体合金设计概念，在合金内引入多尺度异质结构，克服位错增殖能力差、位错密度低、加工硬化率低等问题，突破难熔多主元合金强度-韧性倒置矛盾关系，解决了该类合金室温塑性差的科学难题，获得强韧性居国际领先水平的难熔多主元合金。

安子冰（北京工业大学博士后）为第一作者，毛圣成研究员（北京工业大学）与韩晓东教授（北京工业大学/南方科技大学）为共同通讯作者。

兼具高强度与高韧性的金属结构材料是国家重大工程、航空航天、海洋工程等战略性装备的重要保证。但金属材料普遍存在强度与韧性相互制约的倒置矛盾关系，这严重限制了金属材料的工业应用。近年来研究者提出的体心立方结构难熔多主元合金，其在室温至高温的宽温域范围展示出超高的强度，是一种工程化应用潜力巨大的金属结构材料，但其存在致命缺陷，即室温拉伸塑性差。研究者通过显微结构设计提高了该合金的拉伸塑性，但以其屈服强度降低为代价，仍未从根本上打破强度与韧性的倒置矛盾。最关键的问题是，目前多主元合金设计大多依赖试错法，缺乏科学的合金设计准则为设计兼具高强度和大拉伸塑性的合金提供有效的理论保证。

为解决这一重大共性基础科学问题，韩晓东教授、毛圣成研究员与张泽院士、及合作者提出负混合焓固溶体（简称负焓固溶体）设计高强韧合金概念。混合焓是材料热力学状态的一个重要参数，反映不同原子间的化学亲和性，是衡量体系内能的重要参数。当合金的混合焓为零时，合金的显微结构由熵决定，其通常呈现出理想固溶体结构。加入负混合焓元素能够打破该理想固溶体结构，形成成分波动/局域有序等局域性的负焓化学亲和性团簇异质结构，作者称之为负焓固溶体结构。在负焓固溶体的基础上进一步降低混合焓，可将负焓固溶体结构调控为金属间化合物结构，甚至是非晶结构。基于该设计概念，作者在近理想固溶体—HfNbTiV合金中添加Al元素，调控合金的固溶体结构。因Al与其他合金元素Al-M（M=Hf, Nb, Ti, V）具有负的混合焓，促使多级纳米异质结构在合金内形成，从而制备出HfNbTiVAl₁₀负焓固溶体合金。多级纳米异质界面能够钉扎位错运动并促进位错以多系滑移和交叉滑移的方式进行运动和增殖，同时还能够作为晶内位错源，产生超高密度位错。合金的加工硬化能力获得明显提升，最终获得兼具高强度与大塑形的负混合焓多主元合金。该负焓固溶体合金设计准则在不同结构的多主元合金中获得了证实，为设计兼具高强度和大拉伸塑性的合金提供了一种新策略和理论基础，这一突破性进展也为打破金属

材料强度与韧性倒置矛盾关系提供了新思路，有望推动高强韧合金的发展。

HfNbTiVAl₁₀合金的屈服强度为~1390 MPa，延性达~20%（图1），其屈服强度与拉伸塑性的协同效果远超同类合金。该优异力学性能源于其具有跨亚纳米至上百纳米的多尺度化学成分波动结构（图2）。基于原子尺度成分分析，作者首次揭示出原子尺度混合熵及混合焓分布，发现混合焓在-3.20~-9.83 kJ/mol间的高度波动是其形成多尺度化学成分波动的关键。基于原位同步辐射拉伸实验，阐明该合金内位错密度随应变持续增加至高密度（ $\sim 5.15 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ ）保障了该合金高的、持续的加工硬化率（图3）。多尺度化学成分波动可以连续阻碍位错运动，促进位错以多系滑移和交叉滑移的方式运动和累积（图4），从而使应变硬化率在大应变范围内保持高水平。综合实验发现、理论计算与文献调研，发现合金屈服强度与混合焓存在线性关系，首次提出负混合焓强化机制。因此，负焓固溶体设计理念不仅可以提高合金强度，同时能够诱导形成多尺度的化学成分波动来提高韧性，是解决材料强度-韧性倒置的矛盾关系、高强韧合金设计的新策略。

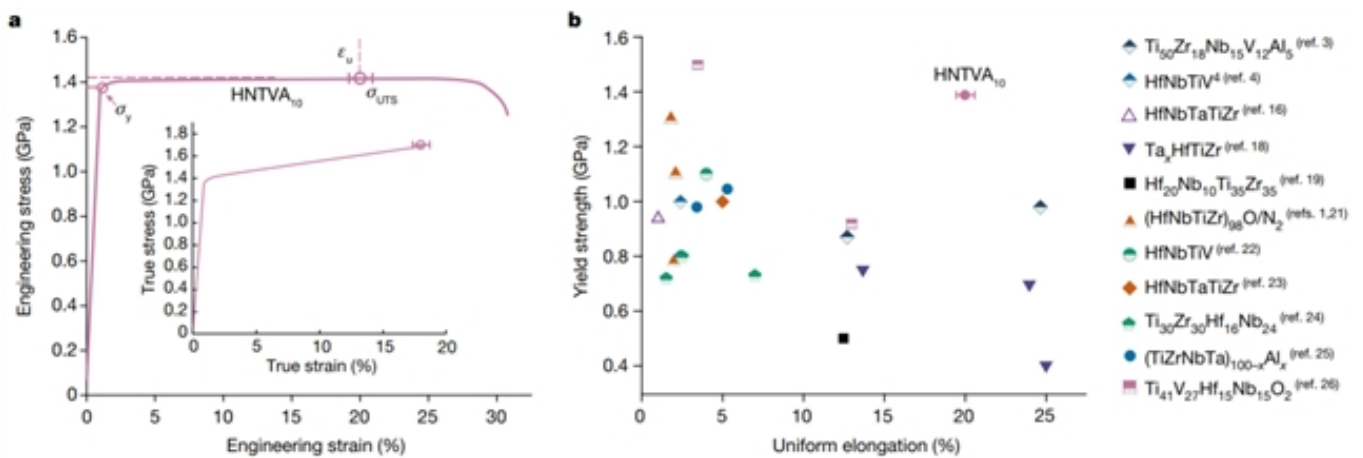


图1 拉伸应变-应变曲线。HfNbTiVAl₁₀合金展示出优异的屈服强度与均匀拉伸塑性，其综合力学性能超过同类难熔多主元合金。

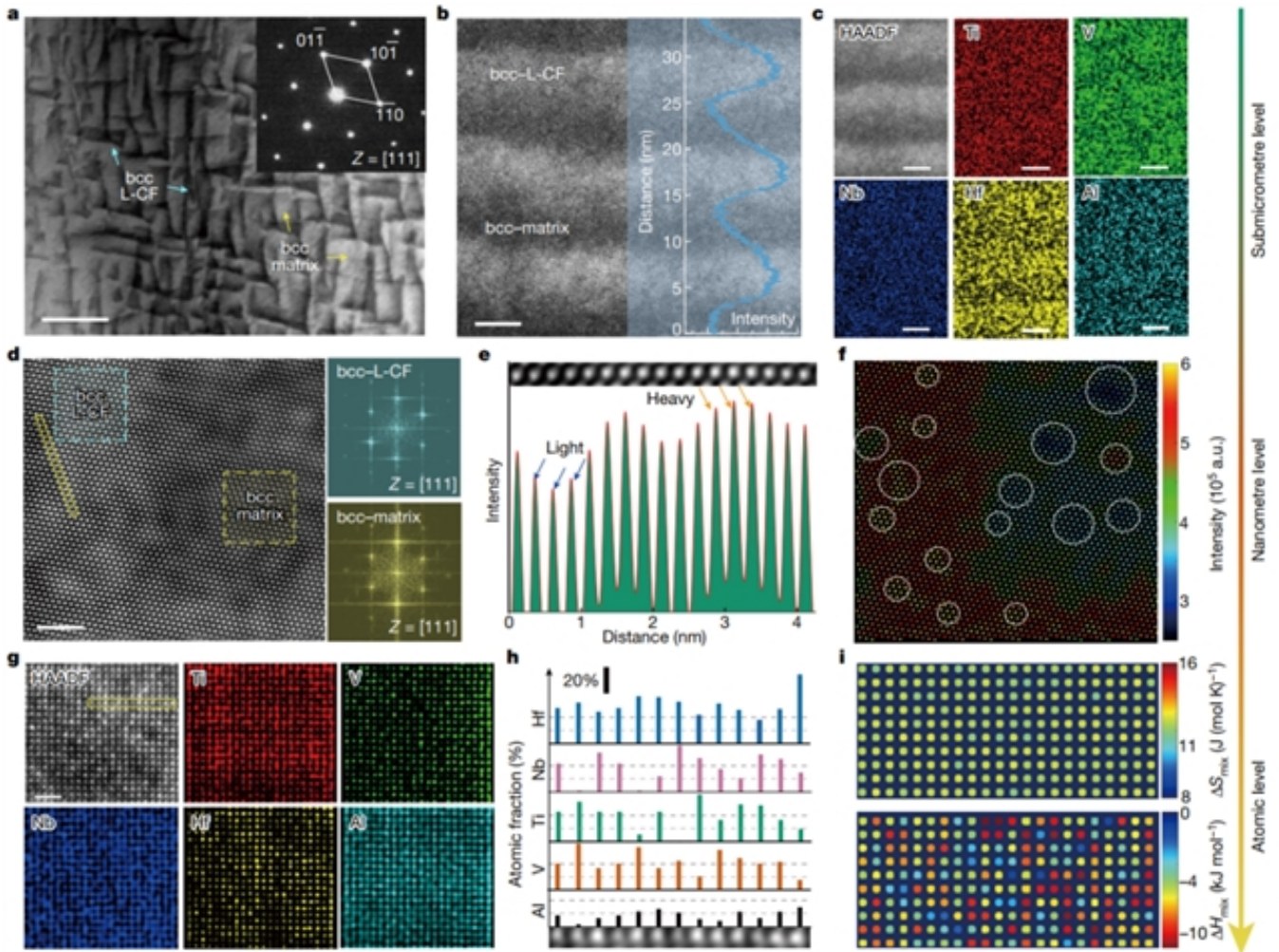


图2 负焓诱导多尺度的化学成分波动结构在HfNbTiVAl₁₀合金内形成。

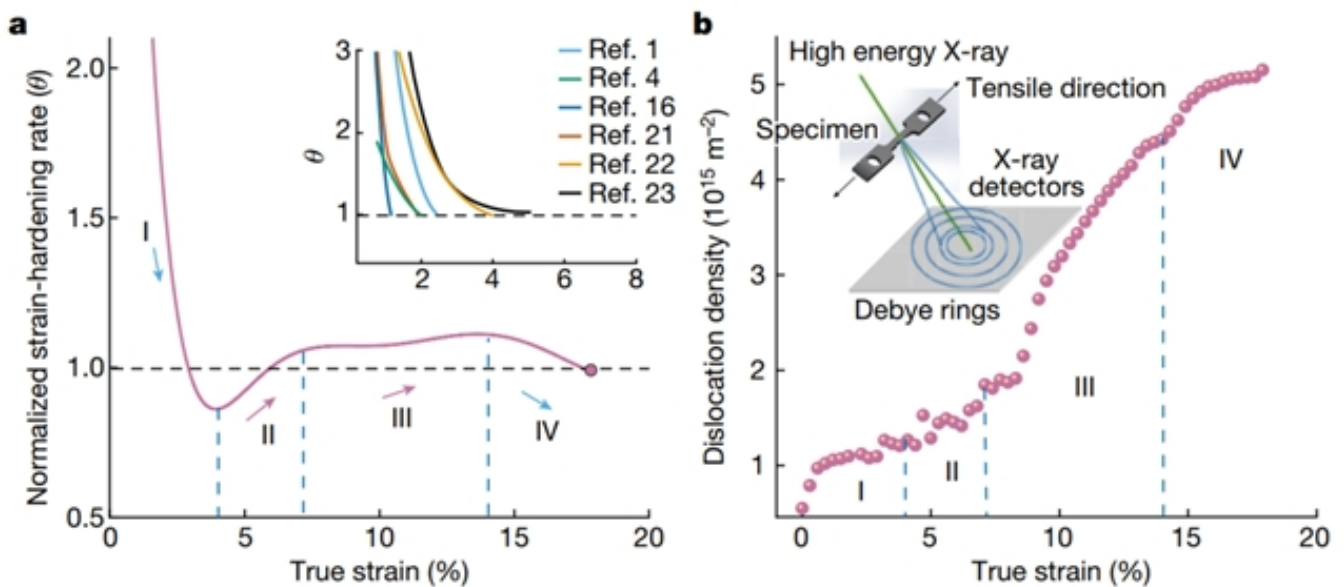


图3 原位同步辐射拉伸实验揭示出位错密度随应变持续增加的演化规律，保障合金在宽应变范围内的高加工硬化率。

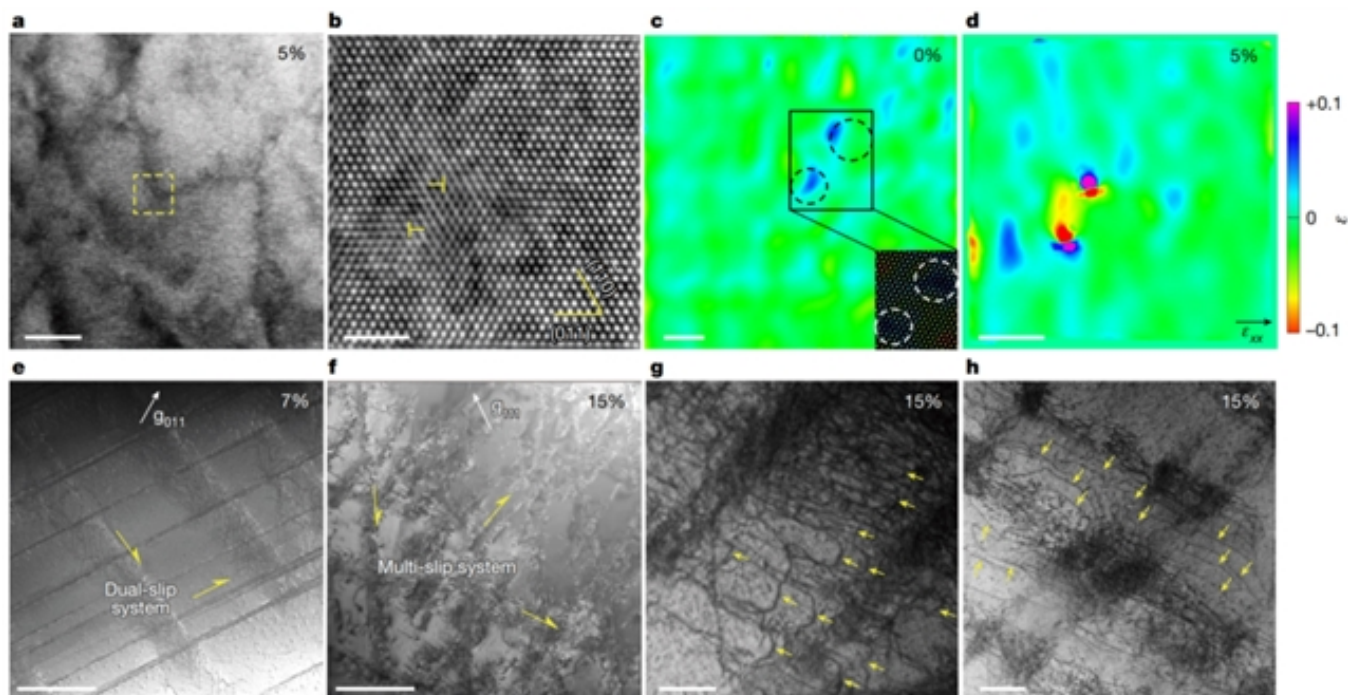


图4 多尺度化学成分波动结构促进位错的多系滑移和交叉滑移，实现位错的增殖。

上述成果获得国家重点研发专项、国家自然科学基金委基础科学中心项目、卓越青年科学家、国家自然科学基金委面上项目、北京市科技新星、111引智计划、中国博士后基金、香港基金等项目的支持及北京工业大学大型仪器共享管理平台的设备支持。（来源：科学网）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06894-9>

作者：韩晓东等 来源：《自然》

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