
我国科学家发现金属中存在一种比孪晶界更稳定的界面

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/36666.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！

我国科学家发现金属中存在一种比孪晶界更稳定的界面

。提高金属强度是长期以来材料领域的核心研究目标，通过结构细化到纳米尺度形成高密度界面是金属的一种主要强化途径。近几十年来，世界各国一直致力于探索稳定的界面结构，发展制备技术，持续细化金属结构。2004年卢柯研究员团队利用稳定的低能孪晶界在金属铜中获得纳米孪晶结构，使铜的强度提升10倍以上并保持高导电性，从而引发了世界各国对纳米孪晶结构的研究热潮，近年来在各类合金、半导体和陶瓷材料中均实现了纳米孪晶强化。然而，当孪晶层片厚度低于约10纳米时，孪晶结构失稳导致材料软化，结构无法进一步细化。如何突破尺寸极限持续提升金属强度成为一项重大难题。

近期，辽宁材料实验室与中国科学院金属研究所联合研究团队发现，金属中存在一种比孪晶界更稳定的界面--“负能界面”（negative-excess-energy interface, NEI）。在含有Mo的Ni过饱和固溶体合金中，面心立方与密排六方晶格之间的共格界面具有负过剩能，比孪晶界能量更低，可以获得极高的界面密度，平均界面厚度小于1 nm，达到了材料中的界面密度极限。极高密度“负能界面”具有本征稳定性，可有效阻碍位错及界面运动，完全抑制材料的塑性变形，从而将材料强度提升至接近理论极限。不同于传统金属强化方法通常会导导致弹性模量的下降，“负能界面”在提高强度的同时显著提升材料的弹性模量。这种“负能界面”强化机制适用于多种合金体系。

这一重要发现标志着金属材料的结构调控进入到亚纳米尺度，这种极限尺度稳定界面能够改变晶格的原子键合状态，从而大幅度提升性能，为下一代高性能金属材料的设计开辟了全新的维度。

李秀艳研究员和卢柯研究员领导的研究团队利用电化学沉积制备出Ni-Mo非晶态合金，在非晶晶化过程中Ni原子形成面心立方晶格，Mo原子由于扩散速率低被随机捕获，形成Ni(Mo)过饱和固溶体，大幅度降低了Ni晶格的层错能，导致形成极高密度孪晶和层错等面缺陷以释放弹性应变。Ni(Mo)过饱和固溶体中孪晶界和层错界占比高达29%，面缺陷间的平均层片厚度为0.7 nm，即3-4个原子层。晶粒间界面弛豫形成平直的低指数晶面。系统分析表明，晶粒内部形成面心立方(ABCABC堆垛)和密排六方(ABAB堆垛)混合的调制结构，ABCABC/ABAB共格界面的稳定性高于共格孪晶界，这与过去普遍认为的共格孪晶界是面心立方晶格中最稳定界面不同。通过密度泛函理论计算发现，ABCABC/ABAB界面过剩能呈负值，范围在-8.7至-19.5 mJ/m²之间，说明界面的原子键合强度高于相邻晶格相。

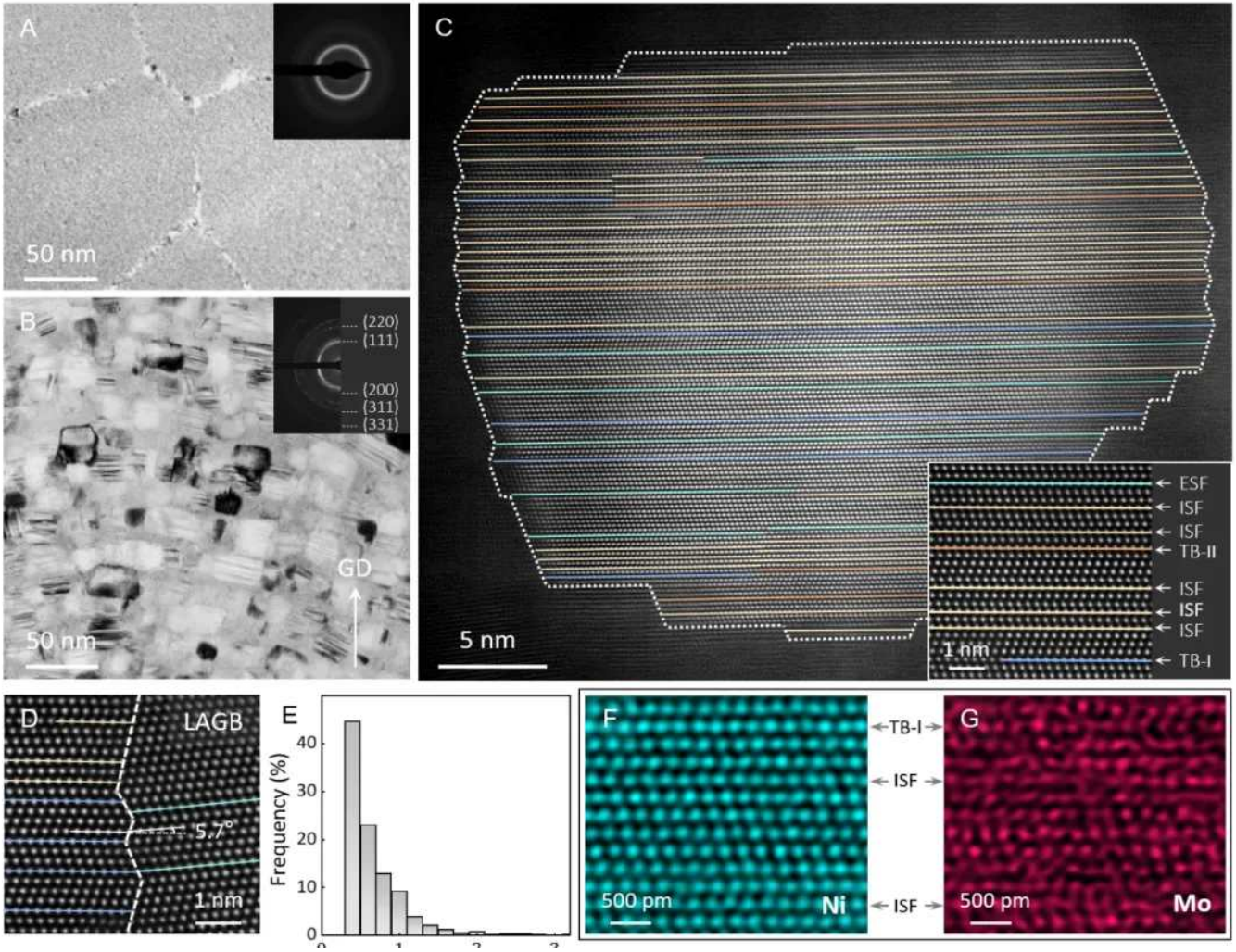


图1. Ni(26 at.%Mo)过饱和固溶体的微观结构。

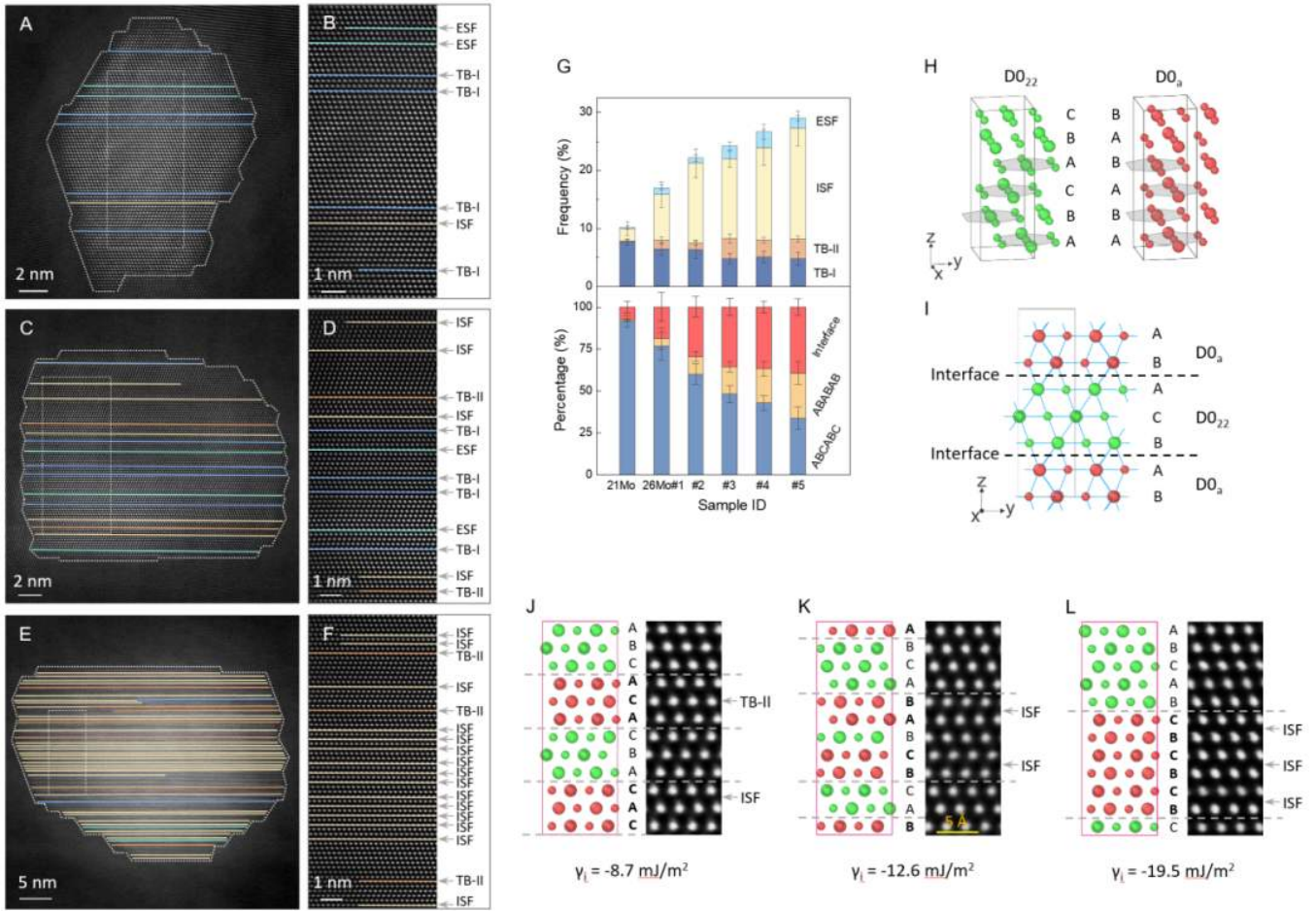


图2. Ni(Mo)过饱和固溶体的亚纳米“负能界面”。

微柱压缩实验测量表明，亚纳米“负能界面”Ni(Mo)固溶体在加载过程中出现完全可逆的弹性变形，塑性变形被有效抑制，最高屈服强度高达5.08 GPa，远高于纳米晶及纳米孪晶镍基合金。这种强化机制与已知的纳米晶和纳米孪晶材料强化机制完全不同。Ni(Mo)固溶体的杨氏模量随界面密度升高显著增加，最高可达254.5 GPa，远超相同成分的非晶和金属间化合物，甚至高于部分氧化物陶瓷材料。杨氏模量的提升可能与亚纳米“负能界面”附近原子尺度应变以及电子局域化有紧密相联。亚纳米“负能界面”Ni(Mo)合金的强度/杨氏模量比为1/40~1/50，接近理论强度，强度接近部分陶瓷材料。在其他材料体系也发现了亚纳米“负能界面”强化效应。

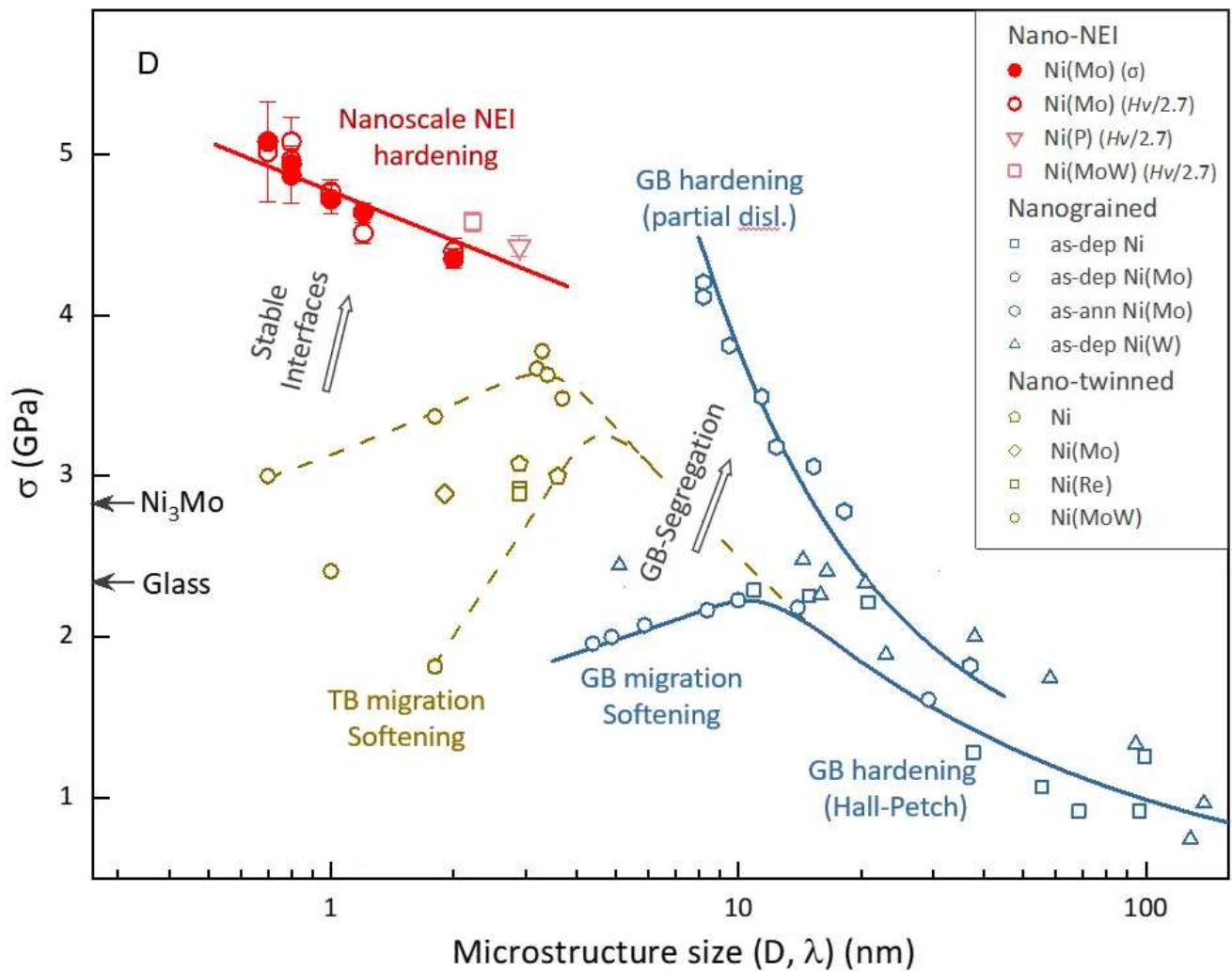
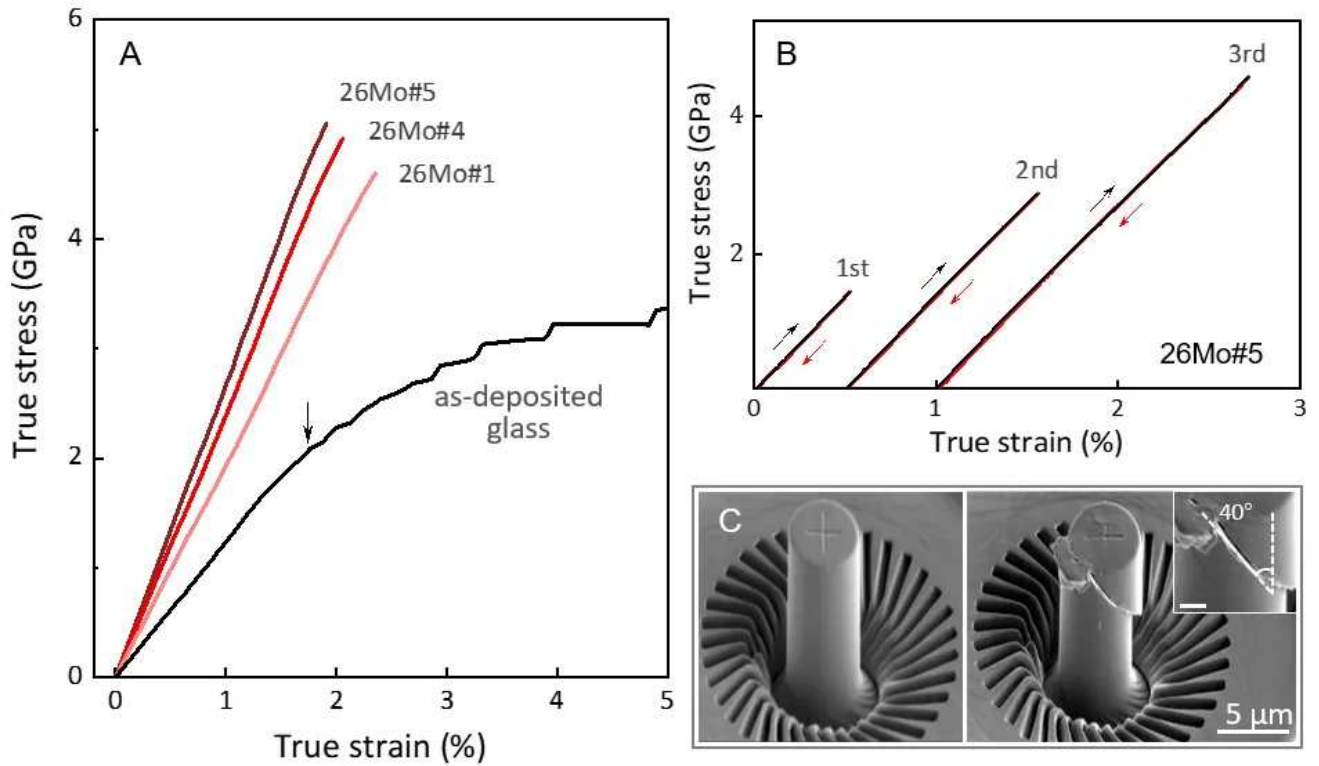


图3. 亚纳米“负能界面”Ni(Mo)过饱和固溶体的强度-结构尺寸关系。

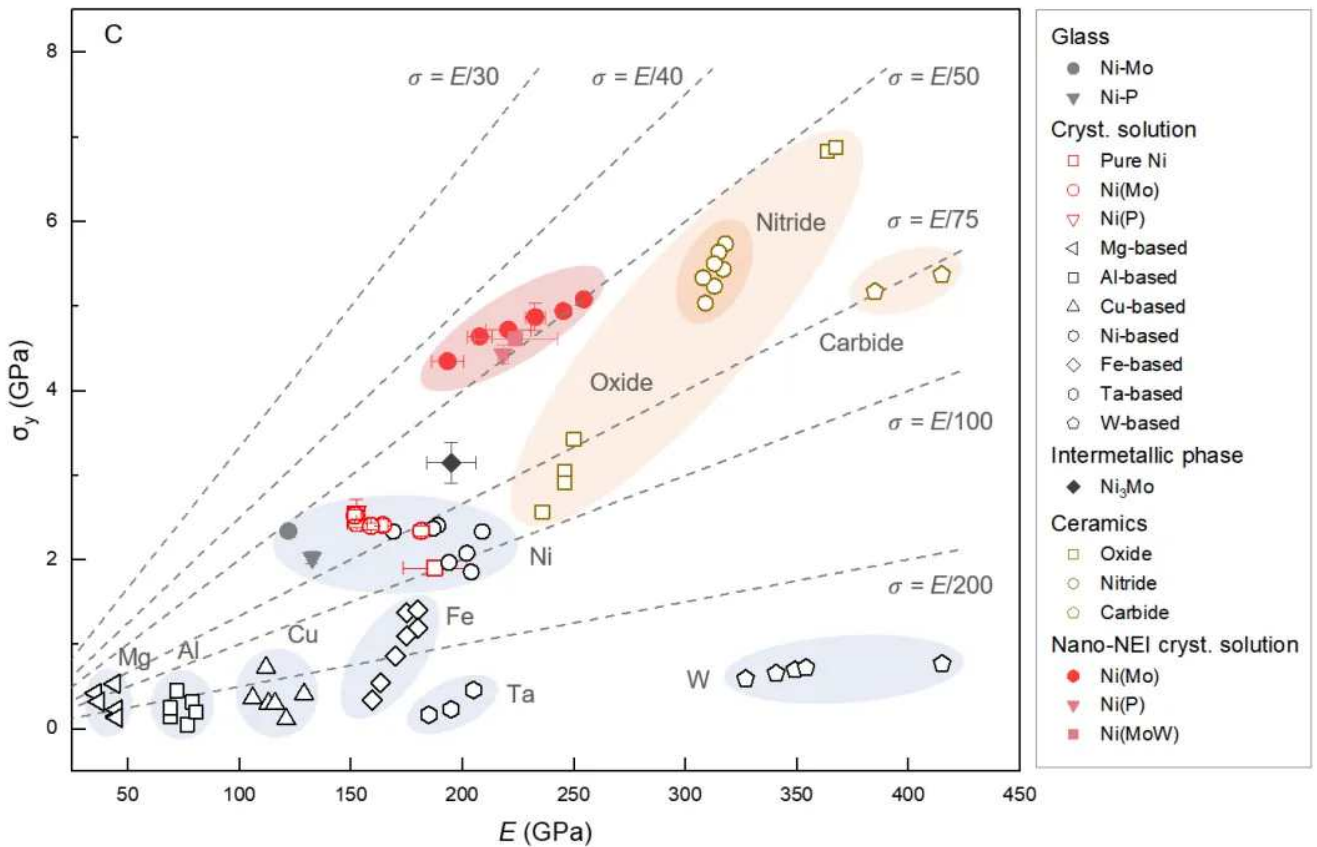
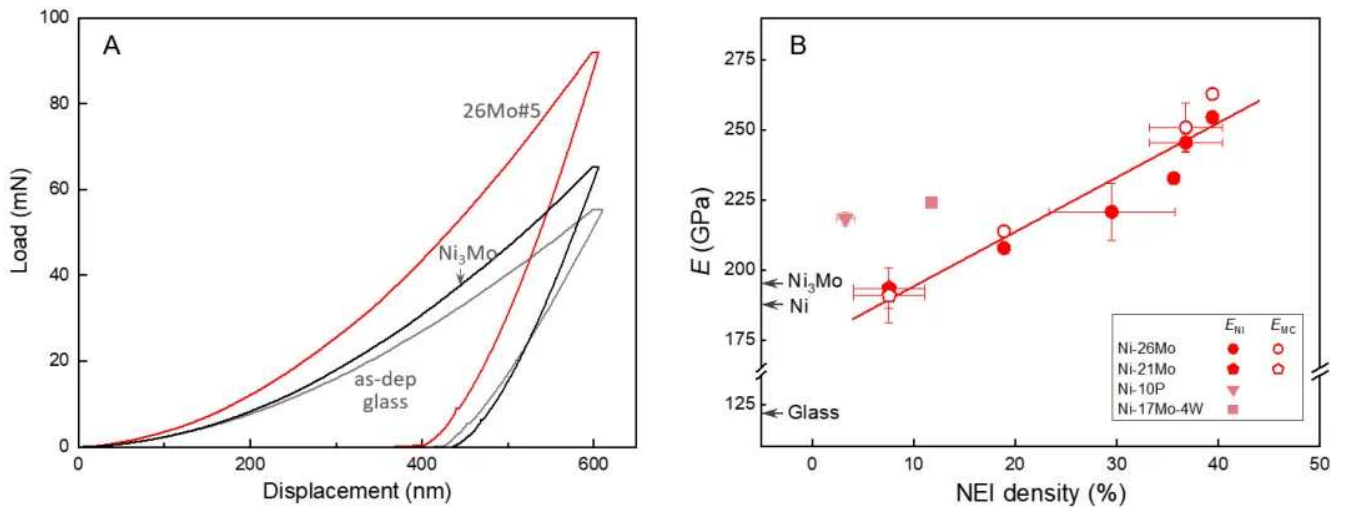


图4. 亚纳米“负能界面”Ni(Mo)过饱和固溶体的杨氏模量。

该成果发表在2025年11月6日出版的Science周刊上。

来源：辽宁科技微信公众号

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