
力学所在化学无序中熵合金位错形核机制研究中取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/9944.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！

新近快速涌现的多主元高/中熵合金颠覆了由一种或两种金属主元构筑的传统合金设计理念，因其具有高强韧塑性、抗辐照、耐冲击等一系列优异的力学性能，在空天、能源等领域显示出广阔应用前景。然而，受困于多种金属主元在拓扑周期性晶格随机占位所引起的复杂局部原子环境和化学短程序的影响，作为塑性变形重要载体的位错如何在高/中熵合金形核与演化仍为难解之谜。近期，中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室冲击动力学与新型材料力学性能课题组在这方面取得新进展。

研究人员以三元Ni-Co-Cr中熵合金体系为研究对象，首先采用分子动力学模拟，结合过渡态理论，考察了位错形核过程中原子的演变情况，发现位错形核过程中伴随着局部fcc-bcc的结构转变，这类bcc缺陷原子作为位错形核的前驱体，促进位错的形成。进一步研究发现这类bcc缺陷多集中为Cr原子。

为进一步确定这一bcc诱导的位错形核机制，研究人员利用蒙特卡洛方法建立准随机原子模型，进行第一性原理单轴拉伸计算。结果再一次表明，位错形核前总是伴随着bcc原子的产生，且这些bcc原子以Cr元素为主，验证了位错形核过程中bcc团簇的关键作用。

进一步，通过电子结构计算确定了位错形核过程中bcc缺陷结构产生的电子起源。研究发现，Cr元素表现出明显的电子局域化行为，这一局域化行为使得Cr原子键的变形协调性降低，容易产生应力集中。而且，Cr原子周围原子密度较低，导致Cr原子键抗变形能力较低。Cr原子特殊的电子结构，导致变形过程中周围电子结构的坍塌，从而形成bcc结构，进一步促使位错的形核。

该研究结合经典分子动力学、过渡态理论和第一性原理计算，获得了电子-原子-缺陷团簇-位错形核之间的关联图谱，有效解析了中高熵合金位错形核的起源与演化机制，为深刻理解高/中熵合金塑性变形的微观机制及高性能合金材料设计提供线索。

该工作以Novel atomic-scale mechanism of incipient plasticity in a chemically complex CrCoNi medium-entropy alloy associated with inhomogeneity in local chemical environment 为题近日在线发表在金属材料领域期刊Acta Materiala 上。力学所特别研究助理曹富华是论文第一作者，研究员王云江、戴兰宏为通讯作者。此项研究得到国家自然科学基金委重大项目、国家自然科学基金委基础研究中心项目、中科院战略性先导专项等支持。

[论文链接](#)

图1 Ni-Co-Cr中熵合金体系单轴压缩加载位错形核演变过程a1-d1
原子结构演变，其中绿色为fcc结构，蓝色为bcc结构，红色为hcp结构；a2-d2
原子中心对称参数的演变 a3-d3 原子位移矢量图 a4-d4 原子非仿射均方位移

图2 (a) bcc 结构中Cr Co Ni原子百分数随变形过程的变化 (b)原子间键长随变形的演变 (c) 过渡态理论计算位错形核最低能量路径中能量和结构的演变（其中绿色代表fcc结构，蓝色为bcc结构，红色为hcp结构）

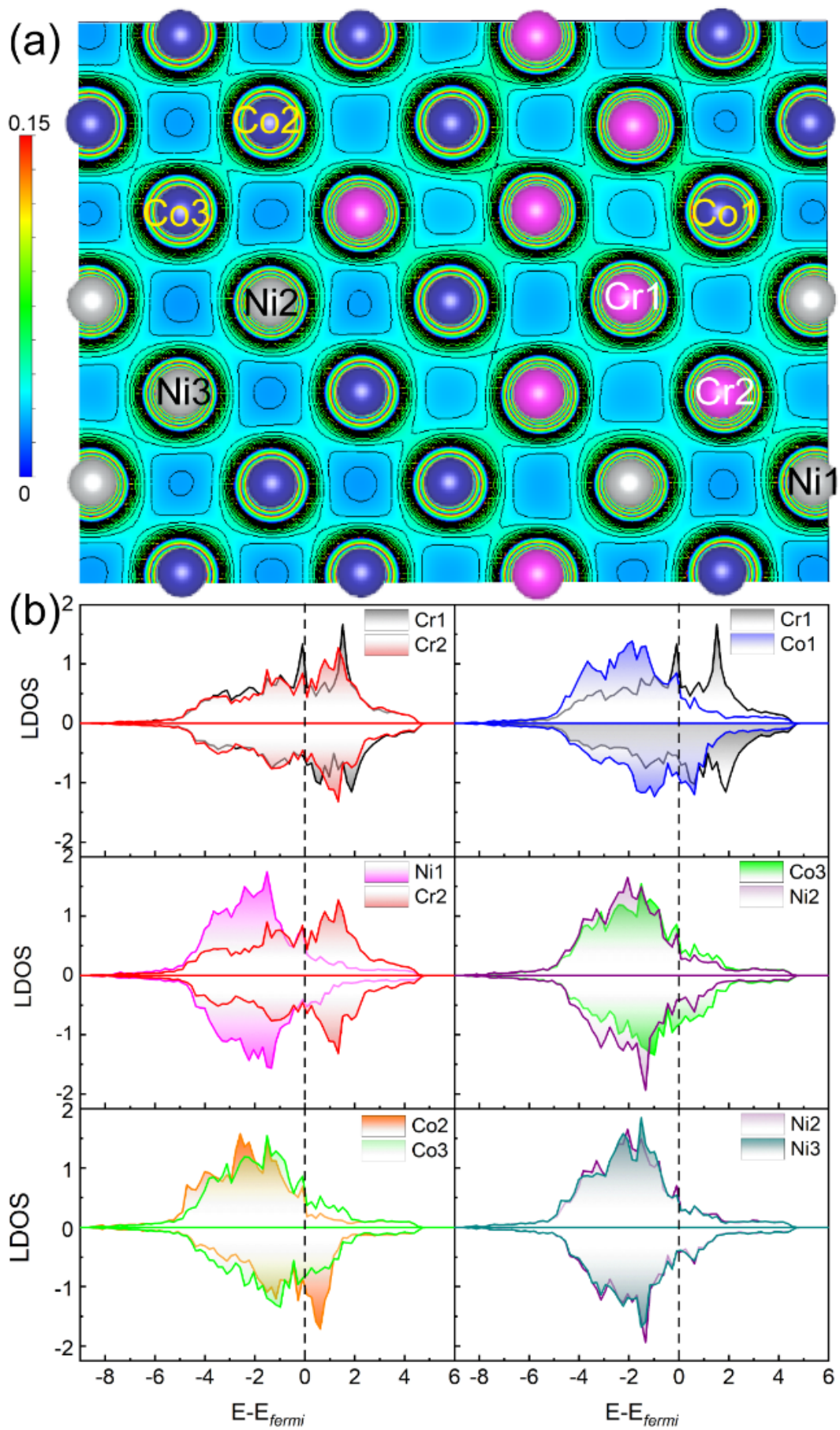


图3 Ni-Co-Cr中熵合金电子结构

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](http://www.iikx.com)转发