

Ni₃Al 素化增强增韧增硬的分子机制

张志伟^{1,2*}

¹ 中国科学院力学研究所, 非线性力学国家重点实验室, 北京, 100190

² 中国科学院大学, 工程科学学院, 北京, 100049

* E-mails: zhangzhiwei@imech.ac.cn

摘要 在材料科学和工程领域, 合金金属和纳米结构材料呈现出优异的力学和物理性能, 具有广阔的应用前景。众所周知, 合金化通常用于改善材料性能, 但对资源的依赖性相对更大, 不利于回收再利用。相反, 通过调整材料内部的固有缺陷, 即材料素化设计的纳米结构材料, 可**同时实现材料性能提升, 促进材料回收和再利用**。Ni₃Al 是 L1₂ 型结构的金属间化合物, 在航空航天工业中得到了广泛的应用。然而, 较低的塑性变形敏感性和较高的脆性开裂性严重限制了其工业应用。本研究中, 通过素化设计, 在 Ni₃Al 中引入超晶格内禀堆垛层错可显著地提高其强度和韧性。相较于孪晶, 超晶格内禀堆垛层错的增强增韧效果更为明显。含超晶格内禀堆垛层错和孪晶的纳米结构化 Ni₃Al 的强度分别与面缺陷特征尺寸的 1 次方和 1/2 次方成反比。此外, 也可以通过面缺陷如复杂堆垛层错和孪晶来实现 Ni₃Al 的硬化。面缺陷的尺寸效应和增强增韧增硬机理是由面缺陷对位错运动的阻碍作用和钉扎效应以及面缺陷的再生所主导的, 软/弱化效应主要归功于面缺陷的褪去和迁移。本研究可为航空航天高性能纳米结构材料的设计提供了新的思路。

关键词: 材料素化, Ni₃Al, 堆垛层错, 孪晶, 强韧性, 硬度

一、引言

长期以来, 材料性能的提升往往依赖于合金化, 但伴随的是材料成本不断攀升, 材料回收利用更加困难。而材料素化是有望解决这一问题的途径之一。素化通过跨尺度材料组织结构的调控来减少合金元素的使用, 同时实现材料性能提升, 促进材料回收和再利用^[1-3]。晶体中的面缺陷是素化设计的基本单元, 现有研究证实, 纳米尺度孪晶能有效的提升材料性能, 但其变形常常和堆垛层错的行为混合在一起, 对堆垛层错在缺陷调控中所起的作用却不甚明确^[4,5]。

Ni₃Al 是 L1₂ 型结构的金属间化合物, 因其具有优异的抗腐蚀、抗氧化、抗蠕变、高强度和耐高温性能, 在航空航天工业中得到了广泛的应用, 是航空发动机叶片以及涡轮叶片的主要材料。为了研究单晶(Single crystal, SC) Ni₃Al 的结构和力学性能, 国内外学者们进行了大量的实验和理论研究。然而, 其低塑性敏感性和较高的脆性开裂性严重限制了其工业应用^[6-8]。也有学者通过材料素化的概念来研究其性能, 通过模拟计算结果表明对于含有平行均匀分布孪晶界(Twinning boundary, TB)的 Ni₃Al 纳米线, 随着孪晶界间距的减小, 其强度、延性和断裂韧性会同时提高^[9]。Ni₃Al 的超晶格结构使其具有其它特殊的面缺陷, 如超晶格内禀堆垛层错(Superlattice intrinsic stacking fault, SISF)和复杂堆垛层错(Complex stacking fault, CSF)等^[10,11]。这使得 Ni₃Al 的变形机制也要复杂于一般的面心立方金属, 当然这也同时使得存在更多的微结构来调控和改善其力学性能。研究 Ni₃Al 中孪晶, 超晶格内禀堆垛层错和复杂堆垛层错的调控机理, 将有助于更好地理解纳米结构化 Ni₃Al 的力学性能与微观变形机制。

二、主要结论

2.1 面缺陷增强增韧尺寸效应及分子机理

纳米结构化 Ni_3Al 纳米线的力学性能显著依赖于面缺陷及其间距，即面缺陷特征尺寸，如图 1 所示。在 SISF- Ni_3Al 和 TB- Ni_3Al 纳米线中，SISF 和 TB 都实现了增强增韧作用。当 SISF 的特征尺寸从 10.7 nm 减少到 0.9 nm 时，SISF- Ni_3Al 纳米线的抗拉强度从 16.76 GPa 增加到 18.84 GPa，增幅为 12.4%。在相同的特征尺寸范围内，TB- Ni_3Al 纳米线的抗拉强度从 16.10 GPa 增加到 18.63 GPa，增幅为 15.70%。当面缺陷 SISF 和 TB 的特征尺寸分别小于 6.4 nm 和 2.1 nm 时，其 SISF- Ni_3Al 纳米线和 TB- Ni_3Al 纳米线的抗拉强度都超过了 SC- Ni_3Al 纳米线的抗拉强度。与此同时，SISF- Ni_3Al 纳米线和 TB- Ni_3Al 纳米线的抗拉强度与面缺陷特征尺寸满足 Hall-Petch 关系，并且分别与其特征尺寸的 1 次方和 1/2 次方成反比。当面缺陷的特征尺寸分别小于 2.7 nm 和 2.1 nm 时，SISF- Ni_3Al 纳米线和 TB- Ni_3Al 纳米线的均匀伸长率都要大于 SC- Ni_3Al 纳米线的均匀伸长率，即 SISF 和 TB 这两种面缺陷在实现增强的同时也实现了增韧效果。

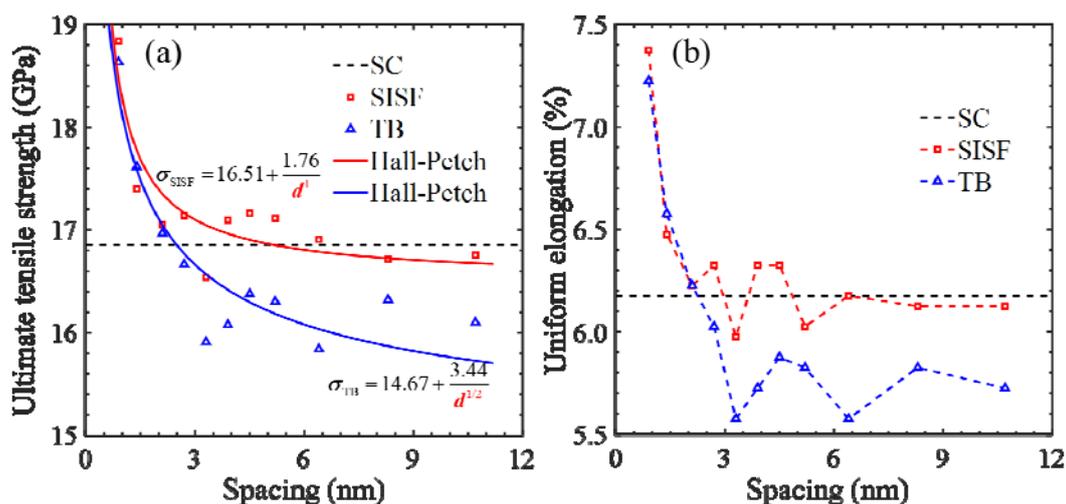


图 1 纳米结构 Ni_3Al 纳米线力学性能的尺寸效应 (a) 抗拉强度, (b) 均匀伸长率

2.2 面缺陷增硬尺寸效应及分子机理

如图 2 所示，纳米结构 Ni_3Al 的硬度和塑性区体积显著依赖于面缺陷的特征尺寸。在特征尺寸的临界值，硬度接近最大值，而塑性区体积接近最小值。超过这个值，因塑性区受到面缺陷的限制，其硬度遵循 Hall-Petch 关系。但在临界值以下，由于面缺陷不能约束塑性区的扩展，呈现反 Hall-Petch 关系。硬度是材料抵抗塑性变形的一种量度，塑性区体积越小，硬度就越高，这也就解释了塑性区体积和硬度之间的相反趋势。面缺陷具有硬化和软化效应，前者指面缺陷对位错传播的阻碍、位错钉扎和 CSFs 的再生。后者是 TBs 迁移和退孪晶以及 CSFs 的褪去。具体来说，对于 TB- Ni_3Al ，TB 特征尺寸小于 5.2 nm 时，软化机制主导了塑性区的变形。TB 特征尺寸超过 5.2 nm，硬化机制是塑性变形的主导因素。但 CSF 的软/硬化机理与 TB 不同，特征尺寸的临界值为 2.1 nm，

低于这个值，软化机制（CSF 的褪去）主导塑性变形，超过 2.1 nm 后，变形主要受硬化机制的影响，如 CSFs 阻碍位错的传播、位错钉扎和 CSFs 的再生。

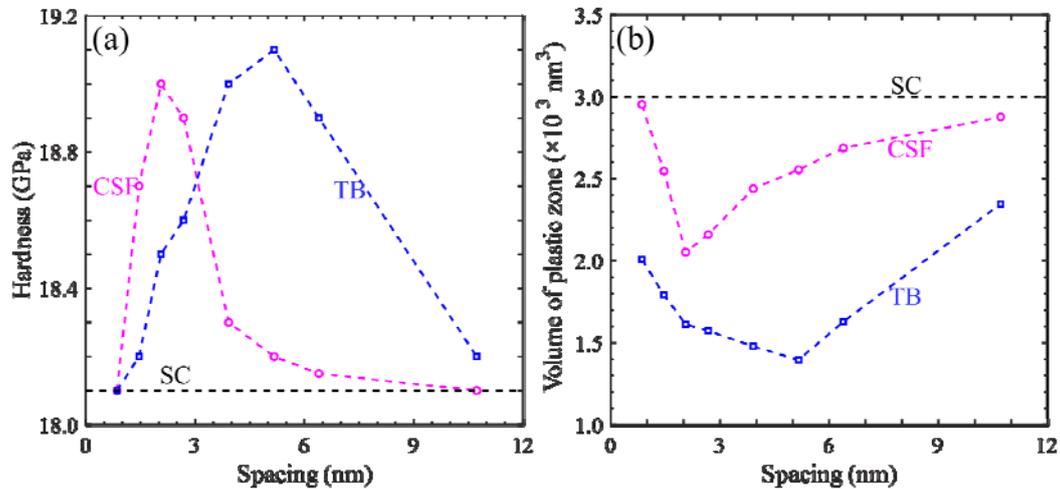


图2 纳米结构化Ni₃Al的压入硬度/塑性区体积与面缺陷特征尺寸之间的关系

参 考 文 献

- 1 I.A. Ovid'Ko, R.Z. Valiev, Y.T. Zhu, Review on superior strength and enhanced ductility of metallic nanomaterials, *Prog. Mater. Sci.* 94 (2018) 462~540
- 2 B.K. Reck, T.E. Graedel, Challenges in Metal Recycling, *Science* 337 (2012) 690~695
- 3 X.Y. Li, K. Lu, Improving sustainability with simpler alloys, *Science* 364 (2019) 733~734
- 4 Q. Huang, D.L. Yu, B. Xu, W.T. Hu, Y.M. Ma, Y.B. Wang, Z.S. Zhao, B. Wen, J.L. He, Z.Y. Liu, Y.J. Tian, Nanotwinned diamond with unprecedented hardness and stability, *Nature* 510 (2014) 250~253
- 5 Y.T. Zhu, X.Z. Liao, X.L. Wu, Deformation twinning in nanocrystalline materials, *Prog. Mater. Sci.* 57 (2012) 1~62
- 6 P. Jozwik, W. Polkowski, Z. Bojar, Applications of Ni₃Al based intermetallic alloys-current stage and potential perceptivities, *Materials* 8 (2015) 2537~2568
- 7 X.X. Yu, C.Y. Wang, The effects of alloying elements on generalized stacking fault energies, strength and ductility of γ' -Ni₃Al, *Mater. Sci. Eng. A* 539 (2012) 38~41
- 8 L.G. Sun, G. Wu, Q. Wang, J. Lu, Nanostructural metallic materials: Structures and mechanical properties, *Mater. Today* 38 (2020), 114~135
- 9 Y.J. Wang, K. Tsuchiya, L.H. Dai, Size-dependent plastic deformation and failure mechanisms of nanotwinned Ni₃Al: Insights from an atomistic cracking model, *Mater. Sci. Eng. A* 649 (2016) 449~460
- 10 Y.F. Wen, J. Sun, J. Huang, First-principles study of stacking fault energies in Ni₃Al intermetallic alloys, *T. Nonferr. Metal. Soc.* 22 (2012) 661~664
- 11 Z.W. Zhang, C. Fu, J. Wang, P. Xiao, F.J. Ke, C.S. Lu, Hardening Ni₃Al via complex stacking faults and twinning boundary, *Comput. Mater. Sci.* 188 (2021) 110201