

DOI: 10.7512/j.issn.1001-2303.2025.10.02

# 高熵钎料制备 TiAl/Ni 基高温合金接头中半共格界面的强化作用

李昕悦, 傅孟春, 林盼盼\*, 林铁松, 何 鹏\*

哈尔滨工业大学 材料结构精密焊接与连接全国重点实验室, 黑龙江 哈尔滨 150001

**摘要:** 采用  $Ni_5Zr_5Sn_4Cu_2Hf_2FeCr$  高熵钎料, 通过接触反应钎焊实现了 TiAl 与 Ni 基高温合金之间的高强度连接。利用合金体系中元素性质的差异, 促进了高熵体系的相分离, 同时原子半径的匹配有利于在整个接头中广泛形成半共格界面。研究表明, 半共格界面通过周期性错配位错及其弹塑性协同调节机制, 有效释放了界面残余应力, 从而显著提升了接头力学性能: 室温剪切强度接近 TiAl 母材, 并在 650 °C 下仍保持高强度。原子尺度模拟与 RDF 分析进一步揭示, Ni 与 Cr-Mo-Fe 富集相的热力学分离倾向驱动了半共格界面的自发形成, 为焊缝微观结构的稳定性提供了关键机制。本研究阐明了半共格界面在高熵钎焊异种合金接头性能提升中的作用机制, 为先进结构材料连接中的微观组织设计提供了新的理论依据。

**关键词:** TiAl 合金; Ni 基高温合金; 高熵钎料; 半共格界面; 原子尺度模拟

**中图分类号:** TG425 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-2303(2025)10-0013-09

## Strengthening Effect of Semi-Coherent Interface on TiAl/Ni based Super-Alloy Brazing Joint Prepared by High Entropy Filler

LI Xinyue, FU Mengchun, LIN Panpan\*, LIN Tiesong, HE Peng\*

National Key Laboratory of Precision Welding and Joining of Materials and Structures, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China

**Abstract:** High-strength joining between TiAl and Ni-based superalloy was achieved by reactive brazing using a  $Ni_5Zr_5Sn_4Cu_2Hf_2FeCr$  high-entropy filler. The differences in element properties within the high-entropy system promoted phase separation, while atomic radius compatibility facilitated the widespread formation of semi-coherent interfaces across the joint. The results indicate that these semi-coherent interfaces, through periodic misfit dislocations and their elastoplastic cooperative regulation, effectively relieve residual stresses at the interface, significantly enhancing the mechanical performance of the joint: the room-temperature shear strength approaches that of the TiAl substrate and remains high at 650 °C. Atomic-scale simulations and radial distribution function (RDF) analyses further reveal that the thermodynamic separation tendency between Ni and Cr-Mo-Fe-rich phases drives the spontaneous formation of semi-coherent interfaces, providing a key mechanism for the stability of the weld microstructure. This study elucidates the critical role of semi-coherent interfaces in enhancing the performance of high-entropy brazed dissimilar alloy joints and offers new insights for microstructural design in advanced structural material joining.

**Keywords:** TiAl; Ni-based superalloy; high-entropy filler; semi-coherent interface; Atomic-scale simulation

**引用格式:** 李昕悦, 傅孟春, 林盼盼, 等. 高熵钎料制备 TiAl/Ni 基高温合金接头中半共格界面的强化作用[J]. 电焊机, 2025, 55(10): 13-21.

**Citation:** LI Xinyue, FU Mengchun, LIN Panpan, et al. Strengthening Effect of Semi-Coherent Interface on TiAl/Ni based SuperAlloy Brazing Joint Prepared by High Entropy Filler[J]. Electric Welding Machine, 2025, 55(10): 13-21.

收稿日期: 2025-08-28

基金项目: 国家自然科学基金项目(U21A20128, 52175302, U22A20185, 52305353); 黑龙江省自然科学基金项目(YQ2024E020)

通讯作者: 林盼盼, E-mail: pplin@hit.edu.cn; 何 鹏, E-mail: hepeng@hit.edu.cn.

## 0 引言

镍基高温合金因其优异的高温强度、抗蠕变性能和耐腐蚀性能,被广泛应用于航空发动机的燃烧室、涡轮叶片及盘件等关键部位,是目前最重要的高温结构材料之一<sup>[1-2]</sup>。然而,其较高的密度限制了进一步提升航空发动机推重比的潜力,成为制约发动机整体性能提升的重要瓶颈。相比之下,TiAl合金具有密度低(约为镍基高温合金的一半)、比强度高以及良好的抗氧化性能等优点,被认为是新一代高温轻质结构材料,是镍基高温合金的理想替代材料<sup>[3-5]</sup>。然而,TiAl合金固有的室温脆性和有限的塑性加工性严重制约了其在复杂构件中的大规模应用<sup>[6]</sup>。因此,若能实现TiAl合金与Ni基高温合金的可靠连接,制备兼具轻质高强与优异高温性能的复合构件,有望在保持结构可靠性的同时显著降低整体重量,提升航空发动机的推重比与工作效率<sup>[7-8]</sup>。

在现有的连接工艺中,钎焊由于能够在较低温度下实现复杂构件的连接,且界面结合紧密、接头质量较高,被广泛用于TiAl与Ni基高温合金的连接<sup>[9]</sup>。然而,由于两者间化学相容性差,在钎焊过程中容易生成大量连续的脆性金属间化合物(如Ti-Ni、Ti-Cr、Ti-Fe系化合物),这些硬脆相导致接头强度与延展性显著下降,是引起接头失效的根本原因<sup>[10-11]</sup>。因此,如何有效抑制脆性金属间化合物的生成,是实现TiAl/Ni基高温合金高可靠性连接的关键科学问题。

近年来,高熵合金(HEAs)凭借其高组元复杂度与化学惰性,在异种金属连接中的应用引起广泛关注。已有研究表明,高熵合金中较强的组元互混效应和“迟滞扩散效应”能够显著降低特定元素的活性,从而在界面处有效抑制金属间化合物的形成与粗化<sup>[12-14]</sup>。这使其成为异种合金钎焊过程中极具潜力的新型钎料候选。

基于此思路,本文设计并制备了一种Ni<sub>5</sub>Zr<sub>5</sub>Sn<sub>4</sub>

Cu<sub>2</sub>Hf<sub>2</sub>FeCr(原子比)高熵钎料,采用接触反应钎焊工艺实现了TiAl合金与Ni基高温合金的连接。结果表明,由于元素间表现出较好的原子尺寸匹配与晶格匹配关系,接头中广泛形成半共格界面。进一步透射电子显微镜(TEM)分析发现,这些半共格界面上分布有较为均匀的错位位错网络,一方面能够有效钉扎和阻碍位错运动,提升接头的高温强度。另一方面则通过应变调节降低了界面处的局部应力集中,使得接头在高温服役条件下更加稳定。得益于此,本研究获得了与TiAl母材抗剪强度相当的TiAl/Ni基高温合金异质接头,且在650℃高温条件下强度无明显衰减。该结果不仅验证了高熵中间层在异质合金可靠连接中的优势,也为未来钎料设计与复杂高温构件的轻量化制造提供了新的思路与理论依据。

## 1 试验材料和方法

试验母材为TiAl合金与Ni基高温合金,其化学成分如表1所示。高熵钎料采用真空电弧熔炼炉制备,成分为Ni<sub>5</sub>Zr<sub>5</sub>Sn<sub>4</sub>Cu<sub>2</sub>Hf<sub>2</sub>FeCr。钎焊前,使用电火花切割机将母材分别切割成4 mm×4 mm×3 mm与10 mm×10 mm×3 mm的金属块,使用砂纸打磨至表面光洁平整无氧化层。将高熵合金锭切割成薄片,尺寸4 mm×4 mm×1 mm,使用砂纸将其厚度磨至约200 μm,并在无水乙醇中超声清洗10 min。将备好的母材和中间层按照三明治样式装配。钎焊温度为1 190℃,保温时间为10 min,升温速度和降温速度均为10℃/min,为保证炉内温度与程序温度相匹配,在500℃下保温20 min。

采用场发射扫描电镜(SU5000,HITACHI)观察焊缝组织形貌,并采用其附带的能谱仪进行组织成分分析。采用透射电镜(Tecnai F20,FEI)确定焊缝中的相性质,透射电镜观测样品采用聚焦离子束(FIB)制备。采用电子万能试验机(AGXplus,SHIM

表1 母材组成成分(原子分数,%)

Table 1 Composition of the base metals (at. %)

Base metals	Ti	Al	Nb	B	Cr	Ni	Fe	Mo	Co	Si	Mn	W
TiAl	Bal.	46.54	1.99	0.14	2.04	—	—	—	—	—	—	—
Superalloy	—	—	—	—	23.54	Bal.	18.29	5.32	1.76	1.54	0.51	0.20

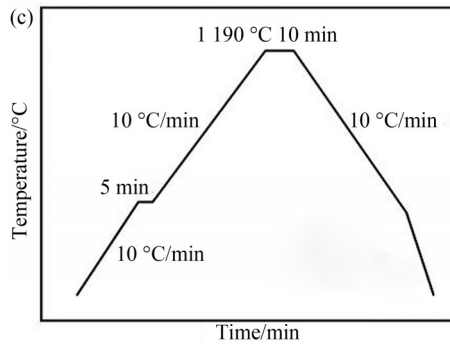


图 1 钎焊工艺流程

Fig. 1 brazing process chart

ADZU)测试接头常温与高温抗剪强度,压头下压速率为 0.5 mm/min。为保证抗剪强度值的准确性与可靠性,每个试验参数下测试 5 个试样后取平均值并计算标准差作为试验误差。

## 2 结果与讨论

### 2.1 接头组织与力学性能

在 1 190 °C 保温 10 min 的条件下获得的 TiAl/Ni 基高温合金接头显微组织如图 2 所示。整体来看,接头实现了无裂纹、无孔洞等宏观缺陷的稳固冶金结合,界面连续且结合良好(见图 2a)。沿接头厚度方向可以清晰区分出四个区域,分别为: I 区(扩散层)、II 区(TiAl 侧反应层)、III 区(颗粒沉淀相密集析出区)以及 IV 区(Ni 基高温合金侧反应层)。各区域的典型相成分由能谱分析(EDS)测定,结果如表 2 所示。

如图 2b 所示, I 区主要由厚度约 25  $\mu\text{m}$  的  $\text{Ti}_3\text{Al}$

层组成,该相由 TiAl 母材元素向钎料扩散反应生成,呈致密连续分布,保证了 TiAl 母材与焊缝的稳定过渡。II 区靠近 TiAl 侧,形成了一层约 5  $\mu\text{m}$  厚的  $\text{Ti}_2\text{NiAl}_3$  相,其间分布有间断块状的  $\text{TiNi}_2\text{Al}$  相及少量弥散析出的 (Cr, Ni, Fe, Mo)ss 相,显示出明显的元素反应特征与多相并存特征。

在 II 区之后的 III 区,组织中弥散析出大量颗粒状相(见图 2c),其中白色颗粒相(E 点)经 EDS 分析确认为 (Hf, Zr)ss,而黑色颗粒相(F 点)则为纳米/亚微米级 (Ti)ss。

IV 区位于 Ni 基高温合金母材一侧(图 2d),主要由 (Cr, Ni, Fe, Mo)ss、(Ni, Cr, Fe)ss 以及 (Ni)ss 三相共晶组织组成,同时伴有少量块状  $\text{TiNi}_2\text{Al}$  相析出。在该共晶基体上还均匀弥散分布着细小的 (Ti)ss 颗粒。这表明在高熵钎料与 Ni 基高温合金相互作用过程中, Ni, Cr, Fe, Mo 等元素的复杂互扩散与相分离共同驱动了多相共晶的形成。

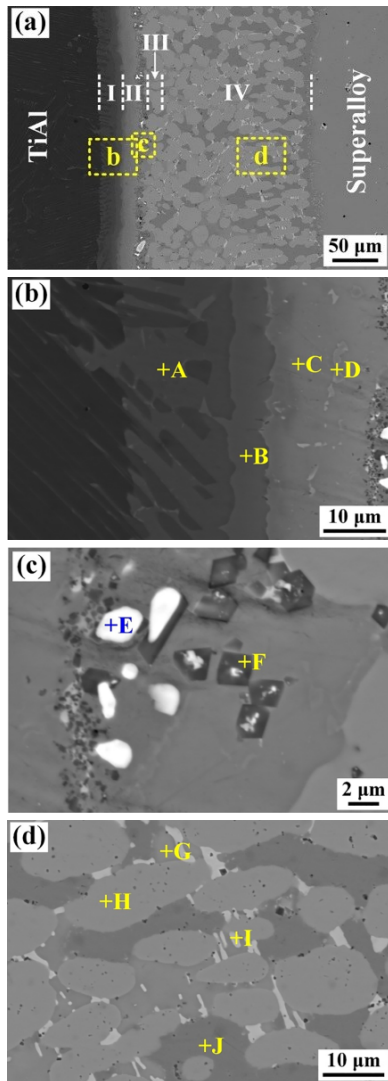
进一步通过对图 3 中典型区域的选区电子衍射 (SAED) 分析,对接头中的主要相进行了结构学验证。综合 SEM、EDS 与 SAED 的结果,接头的相组成为:  $\text{TiAl/Ti}_2\text{NiAl}_3+\text{TiNi}_2\text{Al}+(\text{Hf}, \text{Zr})\text{ss}+(\text{Ti})\text{ss}+(\text{Cr}, \text{Fe}, \text{Ni}, \text{Mo})\text{ss}+(\text{Ni})\text{ss}+(\text{Ni}, \text{Cr}, \text{Fe})\text{ss}/\text{Ni}$  基高温合金。由此可见,接头组织呈现出复杂的多层次、多相复合特征,不仅形成了连续的反应层,还伴随弥散析出的多种固溶体相和细小析出物,为接头的强韧化提供了显著的微观结构基础。

图 4 为接头在不同测试温度下的抗剪强度。其常温抗剪强度达到 498 MPa,与 TiAl 母材相当,表明

表 2 图 2 中各点的能谱分析结果(原子分数, %)

Table 2 EDS energy spectrum analysis results of each point in Fig. 2(at. %)

Point	Elements											Possible phases
	Ti	Al	Nb	Ni	Zr	Sn	Cu	Hf	Fe	Cr	Mo	
A	57.90	33.32	1.92	1.58	—	0.10	—	—	1.42	3.77	—	$\text{Ti}_3\text{Al}$
B	34.10	37.88	1.35	16.85	—	—	1.55	—	4.24	4.03	—	$\text{Ti}_2\text{NiAl}_3$
C	15.08	21.65	—	51.85	0.77	0.86	0.21	0.58	5.64	3.36	—	$\text{TiNi}_2\text{Al}$
D	2.41	1.71	—	18.01	—	—	—	—	22.06	45.00	10.81	(Cr, Ni, Fe, Mo)ss
E	18.51	1.28	—	7.53	14.47	—	—	45.52	4.13	6.54	2.02	(Hf, Zr)ss
F	61.78	1.11	2.94	6.07	2.88	—	—	3.20	5.70	12.03	4.30	(Ti)ss
G	16.35	17.67	0.46	51.69	1.71	1.85	0.59	1.00	4.32	3.91	0.45	$\text{TiNi}_2\text{Al}$
H	2.32	2.24	—	18.12	0.74	—	—	—	22.25	43.73	10.59	(Cr, Ni, Fe, Mo)ss
I	6.80	3.40	1.37	59.97	10.01	0.19	1.75	4.63	6.42	4.71	0.76	(Ni)ss
J	6.31	8.06	—	48.97	—	0.11	1.61	—	17.78	15.63	1.51	(Ni, Cr, Fe)ss



(a)总览图;(b-f)图2中标注的区域b~d的放大图像

图2 TiAl/Ni基高温合金接头典型微观组织

Fig. 2 Typical microstructure of the TiAl/Ni-based superalloy joint

该焊接接头在室温下具备良好的力学性能。更为重要的是,随着测试温度升高至 650 °C,接头的抗剪强度未出现明显下降,仍维持在较高水平,显示出优异的热稳定性与高温力学性能。推测其优异的力学性能来源于接头中大量的微纳米界面,在下一节中具体讨论。

### 3.2 接头中的半共格界面

为进一步揭示接头中大量异质界面对接头整体力学性能的微观调控机制,本研究基于高分辨透射电镜(HRTEM)图像和选区电子衍射(SAED)数据,对焊缝中的主要界面结构进行了系统分析。结果表明,半共格界面主要依靠三类机制实现应力协

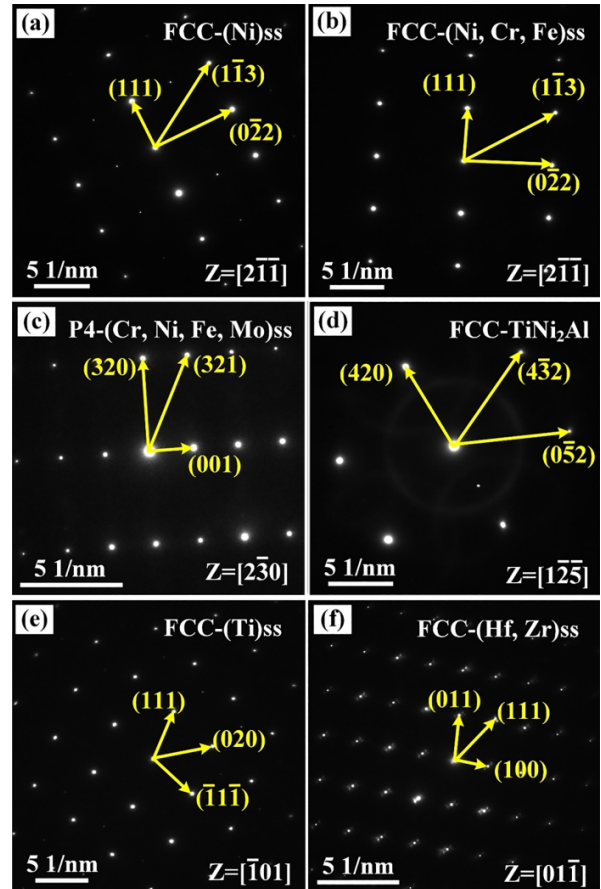


Fig. 3 接头界面产物的SAED衍射斑点图

Fig. 3 SAED patterns of the interface products

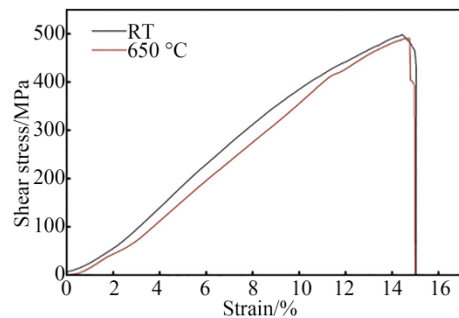


图4 不同试验温度下接头抗剪强度

Fig. 4 Shear strength of the joints at different testing temperatures

调:(1)周期性错配位错的形成与滑移;(2)局部晶格旋转以减小残余错配;(3)层错结构在高能位点的引入与扩展。上述机制协同作用,使界面在承受较高局域残余应力的同时仍能保持结构连续性,从而保证了接头的整体稳定性和力学可靠性。

图 5a 所示为 TiNi<sub>2</sub>Al 与 (Cr, Ni, Fe, Mo)ss 之间的界面。测得 TiNi<sub>2</sub>Al (220) 晶面间距为 2.11 Å, 而 (Cr, Ni, Fe, Mo)ss 的 (-43-1) 晶面间距为 1.72 Å。

两者晶向关系为  $\text{TiNi}_2\text{Al}[1-10]//(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}[11-1]$ , 晶面夹角为  $19.0^\circ$  (见图 6a2)。该界面表现为中等失配并伴随较大的晶向取向差异, 晶格失配率约为 14.6%。显微结构表明, 界面处存在大量高密度错配位错及粗糙化界面形貌, 这些缺陷结构在很大程度上缓解了应力集中, 避免了因高应力积累而导致的开裂。同时,  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}$  一侧靠近界面区域呈现规则分布的位错阵列, 其内部亦可见高密度位错, 这不仅有助于释放界面错配应变, 还显著提升了  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}$  相的局域强度。

图 5b 为  $\text{TiNi}_2\text{Al}$  与  $(\text{Ni})\text{ss}$  之间的异质界面。 $\text{TiNi}_2\text{Al}(032)$  晶面间距为  $1.90 \text{ \AA}$ ,  $(\text{Ni})\text{ss}(101)$  晶面间距为  $2.33 \text{ \AA}$ 。晶体取向关系为  $\text{TiNi}_2\text{Al}[6-23]//(\text{Ni})\text{ss}[100]$ ,  $\text{TiNi}_2\text{Al}(130)$  平行于  $(\text{Ni})\text{ss}(100)$ , 两者夹角约为  $9.5^\circ$ 。计算得到晶格失配度约为 19.0%, 表明该界面处晶格错配较为严重。值得注意的是, 在  $\text{TiNi}_2\text{Al}$  相内部可以观察到大量面内层错带。考虑到  $\text{TiNi}_2\text{Al}$  为有序金属间化合物, 其滑移体系受限, 层错的形成可被视为一种重要的应变协调机制。这些层错不仅分散了因晶格错配和角度偏差导致的局部剪切应力, 同时提升了界面的热稳定性和抗裂纹扩展能力, 使接头整体韧性得以改善。

图 5c 展示了  $(\text{Hf, Zr})\text{ss}$  与  $(\text{Ni})\text{ss}$  之间的界面。测得  $(\text{Hf, Zr})\text{ss}(200)$  晶面间距为  $2.59 \text{ \AA}$ ,  $(\text{Ni})\text{ss}(111)$  晶面间距为  $2.11 \text{ \AA}$ 。晶体取向关系为  $(\text{Hf, Zr})\text{ss}[0-11]//(\text{Ni})\text{ss}[0-11]$ ,  $(\text{Hf, Zr})\text{ss}(111)$  平行于  $(\text{Ni})\text{ss}(111)$ 。尽管  $(\text{Hf, Zr})\text{ss}(200)$  与  $(\text{Ni})\text{ss}(111)$  晶面间距存在较大差异, 但由于两者晶面夹角约为  $67^\circ$ , 在  $(\text{Ni})\text{ss}(111)$  法向方向上,  $(\text{Hf, Zr})\text{ss}(200)$  晶面的投影晶格间距约为  $1.02 \text{ \AA}$ , 实现了双周期近似匹配, 失配率仅为 5.71%。这说明该界面能够在特定方向上实现半共格配对, 从而降低界面能量并形成低能稳定界面结构。

图 5d 为  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}$  与  $(\text{Ni})\text{ss}$  之间的界面。实测  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}(022)$  晶面间距为  $2.04 \text{ \AA}$ , 而  $(\text{Ni})\text{ss}(111)$  晶面间距为  $2.10 \text{ \AA}$ 。晶体取向关系为  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}[-12-2]//(\text{Ni})\text{ss}[01-1]$ , 且  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}(022)$  平行于  $(\text{Ni})\text{ss}(200)$ , 晶面夹角约为  $62^\circ$ 。在  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}(022)$  法向方向上,  $(\text{Ni})\text{ss}(111)$  的投影晶面间距约为  $0.99 \text{ \AA}$ , 每两

个  $(\text{Ni})\text{ss}$  晶格周期可与一个  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}$  晶面周期形成近似匹配, 失配率仅为 2.99%。IFFT 图像显示界面条纹连续且未见明显错配位错阵列, 说明应变主要通过弹性变形方式调节。这类近似共格界面有助于降低界面能, 并减少微裂纹萌生的可能性, 从而提升界面稳定性。

综合来看, 接头中的各类异质界面存在普遍的晶格错配和取向差异, 其中多数界面夹角较大, 给界面稳定性带来显著挑战。然而, 在特定方向上, 晶格投影的近周期性仍可实现半共格配对。通过高密度错配位错阵列、界面粗糙化、层错及局部弹性畸变等多种错配适应机制, 界面结构完整性得以保持。这些半共格界面的形成不仅避免了微裂纹的快速扩展, 还在接头中建立了多尺度的应变调节网络, 为接头强度和韧性的提升提供了关键保障。

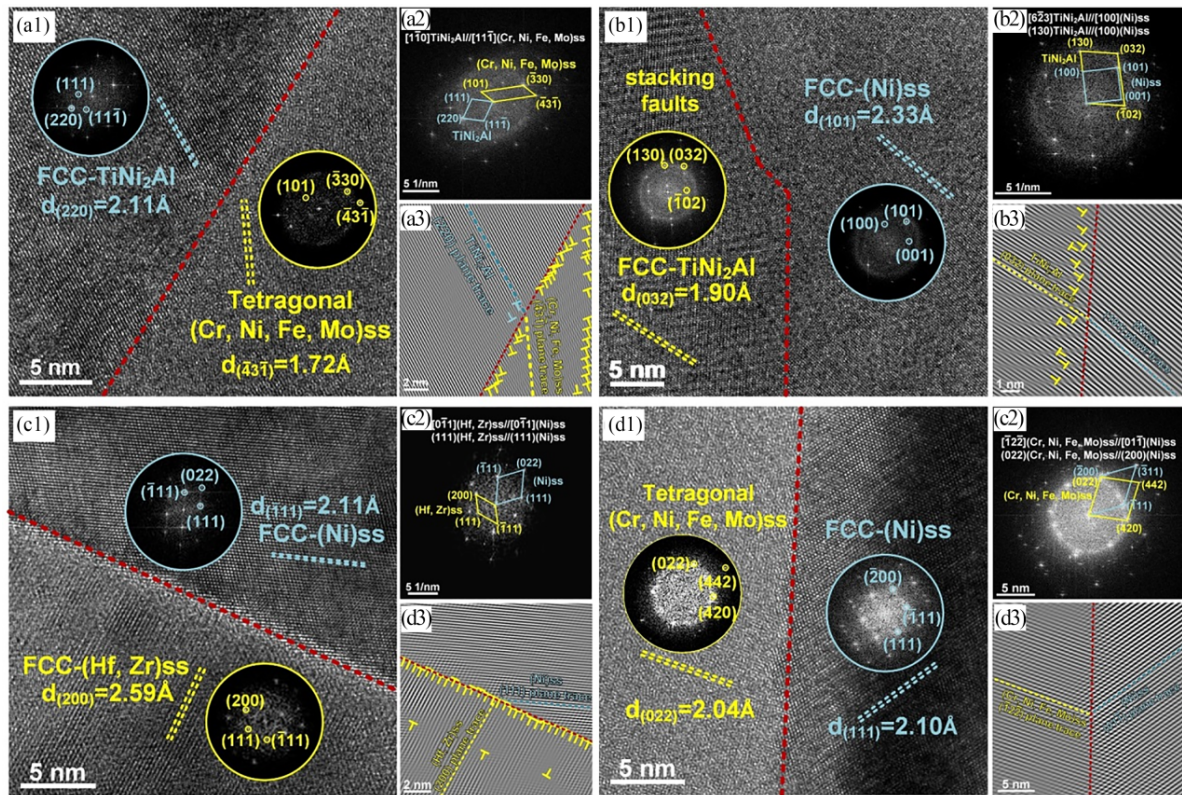
### 3.3 半共格界面的应力调节与错配位错行为

为深入理解异质界面的应力协调机制, 进一步结合几何相位分析(GPA)结果、理论应力计算以及位错结构分析, 明确界面错配应力的释放行为, 开展量化分析。图 6a 为  $\text{TiNi}_2\text{Al}$  与  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}$  之间异质界面及 IFFT 图像。界面可观察到清晰的周期性错配位错分布, 实测位错间距约  $0.63 \text{ nm}$ 。基于几何-力学近似模型, 采用下式计算界面理论剪切应力大小:

$$\tau = \frac{E}{(1-\nu)^2} \cdot \epsilon_{\text{misfit}} \cdot \sin\theta \cos\theta$$

式中  $E$  为弹性模量;  $\nu$  为泊松比;  $\epsilon_{\text{misfit}}$  为界面晶格失配率;  $\theta$  为晶面夹角。代入参数计算得界面理论剪应力为  $10.79 \text{ GPa}$ , 显示该界面处潜在应力水平极高。然而, GPA 分析表明剪应变主要集中在  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}$  一侧, 整体应变水平较小, 界面实际应力明显低于理论值。为验证错配位错的几何合理性, 进一步采用 Frank-Bilby 方程估算理想错配位错间距  $d$ 。依据晶格失配率及  $(\text{Cr, Ni, Fe, Mo})\text{ss}$  的柏格矢量 ( $b \approx 0.487 \text{ nm}$ ), 得到理论位错间距为  $3.34 \text{ nm}$ , 显著大于实测值。由此可见, 界面通过高密度位错排布实现了应变协调, 有效避免了显微裂纹的形成。

图 6b 为  $\text{TiNi}_2\text{Al}$  与  $(\text{Ni})\text{ss}$  之间异质界面及 IFFT 图像。界面存在规则排列的错配位错, 实测位错间距约为  $0.70 \text{ nm}$ 。界面理论剪应力计算为  $5.84 \text{ GPa}$ ,



(a<sub>1</sub>-a<sub>3</sub>) TiNi<sub>2</sub>Al/(Cr, Ni, Fe, Mo)ss 界面; (b<sub>1</sub>-b<sub>3</sub>) TiNi<sub>2</sub>Al/(Ni)ss 界面; (c<sub>1</sub>-c<sub>3</sub>) (Hf, Zr)ss/(Ni)ss 界面;  
(d<sub>1</sub>-d<sub>3</sub>) (Cr, Ni, Fe, Mo)ss/(Ni)ss 界面

图5 接头中的半共格界面: HRTEM 图像、SAED 图显示的取向关系和 IFFT 图显示的位错和取向关系

Fig. 5 Interface structures of main phases in the joint: HRTEM images, SAED-derived orientation relationships, and IFFT-revealed dislocations and orientation relationships at

显示该界面在原子尺度具有较高的潜在残余应力水平。GPA 分析结果表明剪应变主要集中在 TiNi<sub>2</sub>Al 一侧, 整体应变水平较低, 界面实际应力显著低于理论值。依据晶格失配率及 TiNi<sub>2</sub>Al 的柏格矢量 ( $b \approx 0.484 \text{ nm}$ ), 采用 Frank-Bilby 方程估算理论位错间距为 2.55 nm, 显著大于实测值。但同时, 在 TiNi<sub>2</sub>Al 内部可观察到明显的层错带结构, 有助于分散和释放局部应力。该界面通过高密度错配位错与层错协同调节应变, 提升了接头的塑性韧性与裂纹扩展抗力。

图 6c 为 (Hf, Zr)ss 与 (Ni)ss 之间异质界面及 IFFT 图像。界面存在规则排列的错配位错, 实测位错间距约 0.77 nm。界面理论剪应力为 5.12 GPa。GPA 应变分布结果显示, 剪应变在界面两侧分布相近, 表明应力在 (Hf, Zr)ss 与 (Ni)ss 之间较为均衡地传导, 整体应变水平显著低于理论值。依据晶格失配率及 (Ni)ss 的柏格矢量 ( $b \approx 0.258 \text{ nm}$ ), 采用

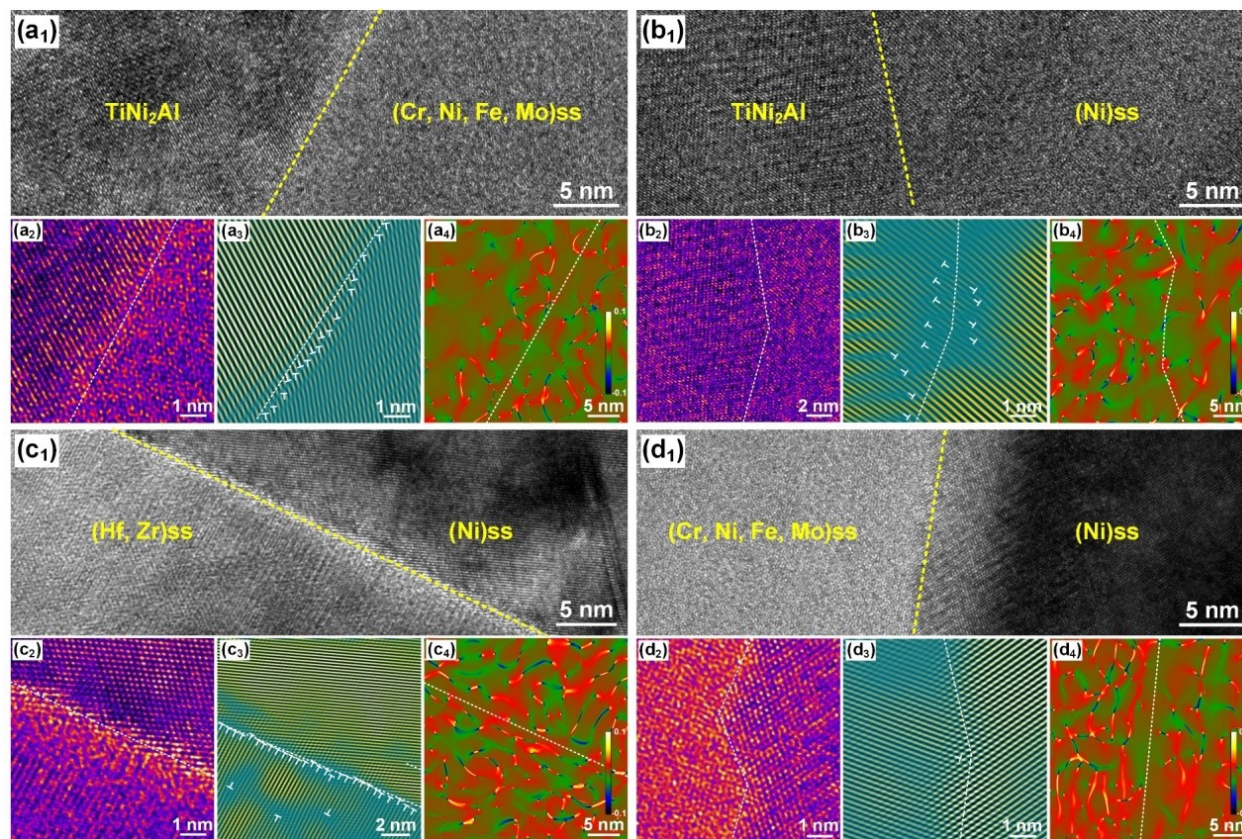
Frank-Bilby 方程估算理论位错间距为 4.52 nm, 显著大于实测值。这表明界面错配调节机制较为复杂, 可能同时受到双周期匹配关系、局部畸变及界面结构因素的影响。(Ni)ss 一侧还可观察到明显的层错结构, 这些层错可能由界面错配应力诱导形成, 在分散局部应变、释放残余应力方面发挥作用。

图 6d 为 (Cr, Ni, Fe, Mo)ss 与 (Ni)ss 之间异质界面及 IFFT 图像。界面整体平直, 晶体排列连续, 结晶性良好。在界面区域未观察到明显的错配位错阵列。界面理论剪切应力为 2.97 GPa, 而 GPA 结果显示剪应变在界面两侧分布相近, (Cr, Ni, Fe, Mo)ss 侧略高, 整体应变水平显著低于理论值。依据 (Cr, Ni, Fe, Mo)ss 的柏格矢量 ( $b \approx 0.463 \text{ nm}$ ) 及晶格失配率, 估算理论位错间距约为 15.48 nm, 大于图像可视范围, 这解释了界面未显示明显位错阵列的原因。(Ni)ss 中存在明显的层错结构, 可能是界面错配应力诱导形成的位错分裂产物。这些层错可有

效缓解局部应力集中,提升材料的变形协调能力与界面韧性。综上,该异质界面虽然未形成显著错配位错,但通过良好的晶格配对关系、(Ni)ss中的层错结构以及高弹性容忍度共同实现应力调节。

综上,接头中不同界面的应力释放机制存在显著差异。高失配界面多通过高密度错配位错及层

错协同作用实现应力调节,而低失配界面则主要依赖于准共格晶格匹配和局部弹性调节。整体而言,这些多样化的错配适应机制有效维持了界面完整性,避免了裂纹的快速萌生和扩展,从而为焊接接头在高温和复杂服役环境下的力学稳定性提供了坚实基础。



(a<sub>1</sub>-a<sub>4</sub>) TiNi<sub>2</sub>Al/(Cr, Ni, Fe, Mo)ss 界面; (b<sub>1</sub>-b<sub>4</sub>) TiNi<sub>2</sub>Al/(Ni)ss 界面; (c<sub>1</sub>-c<sub>4</sub>) (Hf, Zr)ss/(Ni)ss 界面;  
(d<sub>1</sub>-d<sub>4</sub>) (Cr, Ni, Fe, Mo)ss/(Ni)ss 界面

图 6 半共格界面的微观结构及应变分析: HRTEM 图像, 放大后的 HRTEM 图像, IFFT 显示的错配位错, 以及 GPA 应变分布  
Fig. 6 Microstructure and strain analysis of semi-coherent interfaces at major phase interfaces: HRTEM images, magnified filtered HRTEM images, misfit dislocations revealed by IFFT, and GPA strain distributions at

### 3.4 半共格界面的形成机制

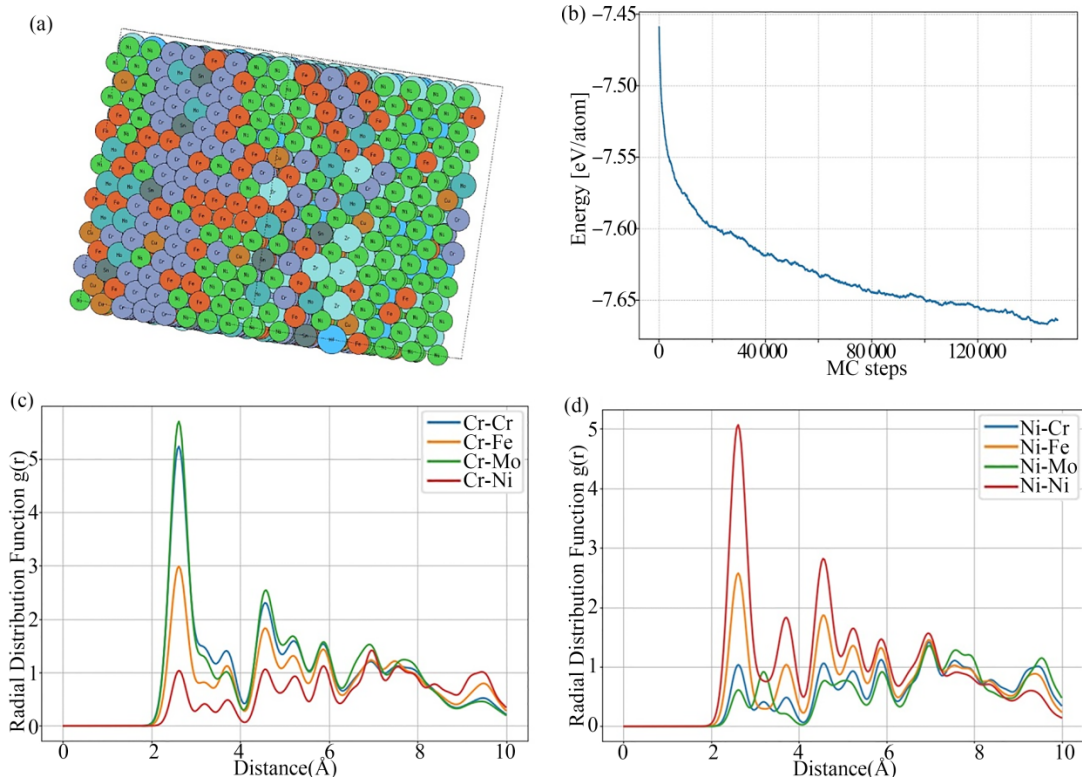
在明确了焊缝中界面的结构特征及其应力调节方式后,本研究进一步探讨了半共格界面的形成机制。值得注意的是,在焊缝区域内,(Cr, Ni, Fe, Mo)ss/(Ni)ss 界面显示出最大的面积分布,这表明该界面在接头整体稳定性和力学性能中起关键作用。半共格界面的形成并非偶然,而是与焊缝中合金元素的相分离倾向密切相关,它代表了不同富集相之间在原子尺度上达到最小化自由能的局部组织安排,是理解焊缝微观演化和热力学驱动机制的

核心环节。

为了揭示(Cr, Ni, Fe, Mo)ss/(Ni)ss 半共格界面形成的本质,本研究采用蒙特卡罗(Monte Carlo, MC)方法结合机器学习势函数(MACE, Machine-learning Accelerated Computational Energies)对焊缝中合金体系进行了原子尺度模拟。模拟温度设定为 1 190 °C,对应焊接过程中高熵中间层的实际温度条件。在该温度下,高熵合金中间层处于亚稳固-液共存状态,元素能够充分扩散与重新分布,从而形成动态平衡的原子组态。MC 方法通过不断交

换体系中不同元素的原子位置,模拟多组元合金在有限温度下的组态演化,能够高效探索高温下体系可能出现的多种成分分布。而MACE势函数作为能量评价工具,可在接近第一性原理的精度下计算每一组态的能量,从而克服传统经验势在复杂高熵体系中描述不足的问题。两者结合的优势在于,MC提供了强大的组态遍历能力,能够捕捉多组元

体系在高温下可能出现的微观结构,而MACE保证了能量计算的准确性,使模拟结果更接近真实热力学平衡状态。经过长时间步的演化,体系逐渐收敛,获得的稳定组态如图7a所示,其对应的收敛能量曲线如图7b所示。该稳定结构为后续RDF分析及半共格界面形成机制研究提供了可靠的原子尺度基础。



(a)原子结构模型;(b)Cr-Cr、Ni-Ni、Fe-Fe与Mo-Mo配对的RDF曲线;(c)Cr-X(X=Ni, Mo, Fe)配对的RDF曲线;  
(d)Ni-X(X=Cr, Mo, Fe)配对的RDF曲线

图7 Monte Carlo+MACE模拟结果:原子结构与不同元素配对的RDF分析

Fig. 7 Monte Carlo + MACE simulation results: atomic structure and RDF analysis of different elemental pairs

径向分布函数(RDF, Radial Distribution Function)是表征多组元合金中原子对空间分布特征的重要统计量。RDF不仅能够定量反映某类原子对在不同距离处出现的概率,还能够通过相对于随机分布的偏离揭示元素间的化学亲和性和热力学相互作用。RDF分析在高熵体系中具有重要意义,其峰值高度反映原子间的短程有序程度,峰位则指示原子配对的平均最近邻距离,而峰形宽度与区域内局部结构无序度相关。因此,通过对模拟所得平衡结构进行RDF分析,可以直观且定量地揭示焊缝中元素的局部分布、相分离趋势及其热力学驱动机制。

对于Cr-X配对, Cr-Cr与Cr-Mo配对峰在约2.6 Å处, Cr-Cr与Cr-Mo的第一近邻峰高度显著增强,峰面积也远高于理想随机固溶体的预期值。这说明Cr与Mo之间存在强烈的短程有序效应,二者更倾向于互为邻近原子。这种结合强度的增强意味着Cr-Mo配对能够有效降低局部的化学势,从而在热力学上驱动它们团簇化。因此, Cr-Mo富集是(Cr, Ni, Fe, Mo)<sub>ss</sub>形成的根本热力学动力。与Cr-Cr、Cr-Mo相比, Cr-Ni的第一近邻峰明显减弱,峰高度显著低于其他配对。这表明Cr与Ni之间的化学亲和性不足,甚至存在一定的热力学排斥效应。

由于Cr-Ni配对概率低于随机分布,体系会自发减少二者的接触,以降低混合自由能。这种排斥作用直接导致Ni富集区域与Cr-Mo-Fe富集区域的分离。Cr-Fe与Cr-Mo的峰形部分重叠,表明Fe与Cr、Mo具有类似的配对偏好。这说明Fe在Cr-Mo团簇中能够以较低能量固溶,起到辅助稳定Cr富集相的作用。换言之,Fe的存在不仅没有破坏Cr-Mo团簇,反而增强了其稳定性。后续的Ni-X的RDF分析将进一步说明Ni富集相的局部结构特征及其对界面形成的贡献,为焊缝中半共格界面的微观演化提供完整的热力学视角。

Ni-Ni配对的RDF第一近邻峰位于约2.6 Å,峰值明显最高,远高于Ni-Cr、Ni-Fe与Ni-Mo配对。这表明Ni原子间存在显著的自聚倾向,易形成局部Ni富集区域,为(Ni)<sub>ss</sub>固溶体的稳定形成提供了热力学基础。相比之下,Ni-Fe配对的第一近邻峰峰值中等,但高于Ni-Cr和Ni-Mo,说明Fe可在Ni富集区部分溶解并参与局部固溶体的稳定,但其作用相对有限,不会成为主要团簇。

Ni-Cr配对的第一近邻峰较低,显示Ni与Cr之间存在明显的热力学排斥作用。这种排斥是Ni-Cr分离的重要驱动力,使Ni富集区与Cr富集区趋向自发分离。类似地,Ni-Mo配对峰值较低,峰位置约3 Å,表明Ni与Mo的亲合力较弱,Mo更倾向于与Cr、Fe富集形成Cr-Mo-Fe相,而与Ni接触较少,从而进一步促进相分离。总体而言,Ni-X配对差异揭示了焊缝中局部相分离的热力学本质:Ni-Ni强配对倾向驱动Ni富集形成稳定(Ni)<sub>ss</sub>区域,而Ni与Cr、Mo的排斥作用则为Cr-Mo-Fe富集相的自发分离提供动力。Ni-Fe配对的中等峰值则在一定程度上缓冲了局部应力和化学失配,对固溶体局部稳定性起辅助作用。

这种原子级的热力学差异直接为半共格界面的形成奠定了基础。在焊缝中,Ni富集区域与Cr-Mo-Fe富集区域通过有限的晶格匹配和局部应变调节,可自发形成低能半共格界面。这种界面在降低体系总自由能的同时,也保证了接头在宏观力学负荷下的稳定性和韧性。此外,Ni与Cr、Mo的相互排斥为界面应变调节提供了空间,使位错、层错以及微观旋转等结构调节机制得以实现,从而进一步

增强半共格界面的稳定性。通过结合MC+MACE模拟与RDF分析,本研究不仅阐明了焊缝中元素分布的热力学驱动力,也揭示了半共格界面自发形成的原子机制,为理解高熵中间层钎焊TiAl/Ni基高温合金接头的微观强化机制提供了系统的理论支撑。

综上所述,Cr-X与Ni-X的RDF分析清晰展示了焊缝中元素的局部热力学偏好:Cr-Mo富集相的形成主要由强短程有序效应驱动,而Ni-Ni团簇的形成则源于自聚倾向。Ni-Cr、Ni-Mo排斥进一步促使相分离,而Ni-Fe和Cr-Fe则提供辅助稳定作用。元素间热力学偏好的差异通过晶格匹配和应变调节机制共同驱动半共格界面的形成,为焊缝微观结构的稳定性和力学性能提供原子尺度解释。

### 3 结论

(1)本研究使用设计的NiZrSnCuHfFeCr新型高熵钎料通过接触反应钎焊获得了高强度的TiAl/Ni基高温合金异质接头。

(2)接头室温剪切强度达498 MPa、650 °C下强度无明显衰减,其优异力学性能主要归因于焊缝中大量半共格界面在提升接头强度与高温稳定性方面的作用。

(3)接头中大量半共格异质界面通过错配位错网络、取向匹配与层错等多种机制实现界面应变调节与结构稳定性提升,显著增强了界面结合强度。

(4)Cr-X与Ni-X原子配对的热力学差异驱动了焊缝中Ni富集区与Cr-Mo-Fe富集区的自发分离,并通过晶格匹配与应变调节形成低能半共格界面,为接头的微观稳定性和力学性能提供原子尺度基础。

#### 参考文献:

- [1] 熊华平,毛建英,陈冰清,等. 航空航天轻质高温结构材料的焊接技术研究进展[J]. 材料工程,2013:1-12. XIONG H P, MAO J Y, CHEN B Q, et al. Research Advances on the Welding and Joining Technologies of Light-mass High-temperature Structural Materials in Aerospace Field[J]. Journal of Materials Engineering, 2013(10):1-12.
- [2] Lavery N P, Jarvis D J, Voss D. Emission mitigation po