

Al_xCoCrFeNi 拉伸力学性能的分子动力学模拟

张 荣, 祁文军*, 张 爽

(新疆大学机械工程学院, 新疆 乌鲁木齐 830047)

摘 要:采用分子动力学方法研究了 Al_xCoCrFeNi 高熵合金(HEAs)在单轴拉伸下的微观组织演变、变形机制和力学性能,重点研究了 Al 摩尔比 0.1 至 1.0 时 Al 含量、高温和高应变速率对 Al_xCoCrFeNi 力学性能的影响。研究表明:Al 摩尔比 0.1 至 1.0 时,常温环境下(300 K)屈服应力及应变随 Al 含量及温度的上升呈下降趋势。Al 含量的增加导致 HEAs 会在更小的应变处开始屈服,更早进入屈服阶段,从而使 HEAs 更容易变形,力学性能降低。在 300 ~ 1500 K 环境下随着温度的上升,位错逐渐减少,不同位错之间的相互作用减弱,无法形成固定位错阻碍材料运动,导致材料强度下降。Al_xCoCrFeNi 屈服应变、应力与应变速率变化呈正相关,且屈服应力对高应变速率敏感。

关键词:高熵合金;力学性能;分子动力学;单轴拉伸;温度

中图分类号: TG132.3

文献标志码: A

文章编号: 1004-7638(2022)06-0173-07

DOI: 10.7513/j.issn.1004-7638.2022.06.026

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



听
语
音
与
作
者
互
动
聊
科
研

Molecular dynamics simulation of tensile mechanical properties of Al_xCoCrFeNi

Zhang Rong, Qi Wenjun*, Zhang Shuang

(School of Mechanical Engineering, Xinjiang University, Urumqi 830047, Xinjiang, China)

Abstract: In this paper, the molecular dynamics method studied the microstructural evolution, deformation mechanism, and mechanical properties of Al_xCoCrFeNi high entropy alloy (HEAs) under uniaxial tension. The effects of Al content, high temperature, and high strain rate on the mechanical properties of Al_xCoCrFeNi at 0.1 to 1.0 molar ratio were investigated. The results show that when the molar ratio of Al is 0.1 to 1.0, the yield strain and stress at room temperature (300 K) decrease with the Al content and temperature increase. With the increase of Al content, HEAS will begin to yield at a minor strain and enter the yield stage earlier, which makes HEAS easier to deform and reduce the mechanical properties. At 300 – 1 500 K, with the increase in temperature, the dislocations gradually decrease, the interaction between different dislocations is weakened, and the fixed dislocations cannot be formed, which hinders the movement of materials and leads to the decline of material strength. Al_xCoCrFeNi yield strain and yield stress are positively correlated with the change of strain rate, and the yield stress is sensitive to high strain rate.

Key words: high entropy alloy, mechanical properties, molecular dynamics, uniaxial tension, temperature

收稿日期: 2022-04-29

基金项目: 新疆维吾尔自治区自然科学基金项目(2021D01C051)。

作者简介: 张荣, 1998 年出生, 男, 甘肃天水人, 硕士研究生, 主要研究领域为金属材料分子动力学研究, E-mail: 1335630194@qq.com; * 通讯作者: 祁文军, 1968 年出生, 女, 汉族, 新疆乌鲁木齐人, 教授, 硕士研究生导师, 主要研究领域为材料加工领域中的数字化设计与制造、智能制造关键技术研发与应用, E-mail: wenjuntsi@163.com。

0 引言

随着时代发展和科技进步,对航空航天、石油化工等工程领域应用的高温金属材料提出了更为严苛的要求。高熵合金(HEAs)因具有高熵效应、严重的晶格畸变效应、迟滞扩散效应,被认为是一种极具潜力的新型金属结构材料^[1-6]。

HEAs 元素的复杂性及其熔点的巨大差异,使其制备成本高,加工条件苛刻,亟待进一步的研究。目前,公开报道的 HEAs 种类与理论上的 HEAs 体系种类相差较大,需要采用理论模拟和计算避免 HEAs 纷繁复杂的成分试验研究。

分子动力学(Molecular dynamics, MD)可从微观探索材料变形机制,并从原子层面揭示宏观现象。近年来,许多研究者采用分子动力学对 HEAs 材料的拉伸力学性能、微观结构演化等进行了大量的研究^[7-15]。Li 等^[7]采用分子动力学方法模拟单轴拉伸发现 AlCrFeCuNi_{1.4} 具有超高塑性,其微观机制是孪晶和层错的产生和生长提高了材料塑性。张路明等^[8]采用分子动力学模拟发现温度对 Al_xCoCrFeNi 的净效应类似于晶格畸变。Afkhami 等^[9]研究表明 Al_xCrCoFeCuNi 的屈服应力随着温度的升高而下降,合金均有超塑性行为。Li Jia 等^[10]研究表明,高冷却速率下(10¹⁴ K/s)AlCoCrCuFeNi HEAs 趋向形成强度低的玻璃组织,但是会产生稳定的应力流;低冷却速率下(10¹² K/s)AlCoCrCuFeNi HEAs 会出现结晶,强度较高,但是会出现“软化”。此外,对 CoCrFeMnNi^[11], AlCoCrCuFeNiSi^[13], AlCoCrCuFeNiMo^[12] 也有较多研究。

由于 AlCoCrFeNi HEAs 的优异性能^[13-16],研究者对其开展试验研究并取得了部分成果。Wang 等^[17]观察了 AlCoCrFeNi HEAs 准静态压缩和动态压缩下的应变硬化行为,发现合金具有高应变速率敏感性。Zhang 等^[18]观察了 AlCoCrFeNi HEAs 在低温段从 298 K 降温到 77 K 时的抗拉强度,发现其抗拉强度随着温度的下降而上升,延展性呈相反趋势。近年来,关于应变速率和温度对金属材料性能影响的研究较为深入,也对 HEAs 进行了部分探索,但物理试验中应变速率相对较低,并且在某些情况下涉及的温度范围很窄。随着高熵合金在航空航天、石油化工等工程领域的应用,对其在高温和高应变速率下的力学性能提出更高要求,但目前尚未见有关这方面的研究报道。

笔者采用分子动力学方法定量研究了 Al 摩尔比 0.1 至 1.0 时 Al 含量、高温和高应变速率下 Al_xCoCrFeNi HEAs 单轴拉伸时材料内部的微观结构演变、径向分布函数(Radial distribution function, RDF)变化与位错演化,进而揭示上述因素对宏观力学性能的影响机理,为新材料研发提供一定的理论指导,分子动力学的应用有助于提高新材料开发效率。

1 建模及仿真方法

采用 LAMMPS^[19] 软件建立 Al_xCoCrFeNi(x 为摩尔比, $x=0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$) 分子动力学模型。其中 Al_xCoCrFeNi 晶格常数为 $a=0.357\text{ nm}$ ^[20], 利用晶体学理论知识,首先建立尺寸为 $20a \times 40a \times 20a$ (a 为晶格常数)的体心立方(BCC)原子模型,按照计算好的比例将铝、钴、铬、铁和镍原子随机填充到原子模型中,建立 Al_{0.7}CoCrFeNi、Al_{1.0}CoCrFeNi 原子模型,如图 1 所示,在模型中, x, y 和 z 坐标分别为 [100], [010], [001] 晶向,模型原子总数为 64 000 个。然后通过替换 Al 原子的比例以及晶格类型(FCC),分别建立 Al_{0.1}CoCrFeNi、Al_{0.3}CoCrFeNi、Al_{0.5}CoCrFeNi 原子模型。在 x, y, z 方向均采用周期性边界条件,采用 Nose/Hoover 热浴法对系统进行温度控制,整个拉伸过程都执行 0.001 ps 的时间步长,采用 NPT 系综以 0.085 K/fs 的加热速率模拟 HEAs 在 300 ~ 2000 K 的熔化过程及淬火过程^[21],充分弛豫(20 ps)使体系总能量降到最低,确保系统在加载前达到平衡状态。弛豫完成后,采用 NVT 系综在 $Y=[010]$ 方向上对原子模型进行单轴拉伸,模拟过程中每隔 100 步记录原子在各方向的应力、势能、动能及原子位置。利用后处理软件 OVITO 对系统输出数据进行数据后处理,通过共近邻分析(CNA)和位错分析(DXA)分析原子的结构演变和位错变化。设置不同的拉伸温度分组讨论,研究温度对拉伸性能的影响,其中控制的温度分别为 300, 500, 700, 900, 1 000, 1 100, 1 300, 1 500 K。设置不同的应变速率研究应变速率对拉伸性能的影响。应变速率^[22] 及对应弛豫时间如表 1 所示。

在 Al_xCoCrFeNi HEAs 模型的后续相关计算中,采用嵌入原子势(Embedded-atom method, EAM)描述 Al-Co-Cr-Fe-Ni 之间的相互作用。嵌入原子势^[23] 的计算公式如式(1)(2)所示:

$$U = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \quad (2)$$

式中, U 为系统的总势能; F 为嵌入能函数, 是原子的电子密度 ρ 的函数; ρ_i 表示除原子 i 外其余原子在原子 i 处产生的电子云密度之和; ϕ_{ij} 为对势项; r_{ij} 为第 i 个原子与第 j 个原子之间的距离。

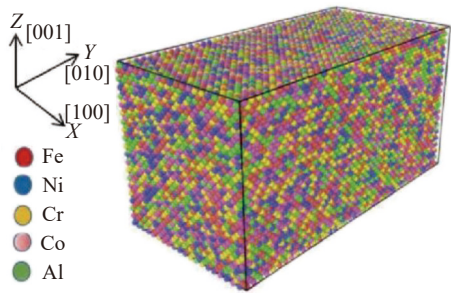


图 1 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 模型及原子示意
Fig. 1 Model and atomic structure of $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs

表 1 HEAs 应变速率及弛豫时间
Table 1 tensile strain rate and relaxation time of HEAs

拉伸应变速率/ s^{-1}	弛豫时间/ps
10^8	5 000
5×10^8	2 500
10^9	500
5×10^9	250
10^{10}	50
2×10^{10}	25

2 结果与分析

2.1 拉伸力学性能

图 2 为 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 原子模型在温度为 300 K、应变速率为 $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 下 Y 方向单轴拉伸的应力-应变曲线。截取 4 个节点的原子结构图, 其中绿色代表 FCC 结构, 蓝色代表 BCC 结构, 红色代表 HCP 结构, 白色代表 Other 原子。从图 2 可知, $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 原子模型的拉伸变形经历了弹性变形、屈服、塑性变形三个阶段。拉伸初始阶段, 应力-应变服从广义胡克定律, 对 0 ~ 14.9% 应变段应力-应变曲线数据拟合, 得杨氏模量 E 为 105.46 GPa。该应变段原子结构以 BCC(蓝色)为主, 并出现少量的 FCC(绿色)和有序原子(白色), 表明弹性变形阶段相比较单一。继续增加载荷, 应变达到 14.9% 时, 应力达到极大值 15 GPa, FCC 和 Other 原子显著增

加, 并出现少量的层状 HCP 相, 各原子堆层较均匀。随后应力随应变增大大幅下降, 材料进入不均匀塑性变形阶段, 原子模型出现了大量非晶化, 此时以 Other 原子为主, 原子模型的内应力得到释放, 导致材料强度出现断崖式下跌。进一步变形过程中, Other 原子、FCC、BCC、HCP 之间相互转化, BCC 原子数目先减少后增加, 层状 HCP 相增加, 并且主要沿着 45° 以及 135° 方向排列。FCC 密排面原子错排层大于两层是孪晶结构, 小于或者等于两层是堆垛层错, 孪晶和层错的产生可以加强材料的塑性。孪晶和层错的形成会导致原子模型出现应力松弛, 致使应力大幅降低, 且下降速率与原子模型中孪晶和层错的产生速度有关。此外, 研究人员对 AlCrFeCuNi ^[7] 与 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ ^[8] 的实验研究发现了孪晶与层错, 这与本研究模拟结果一致, 说明本研究的建模及仿真方法正确。

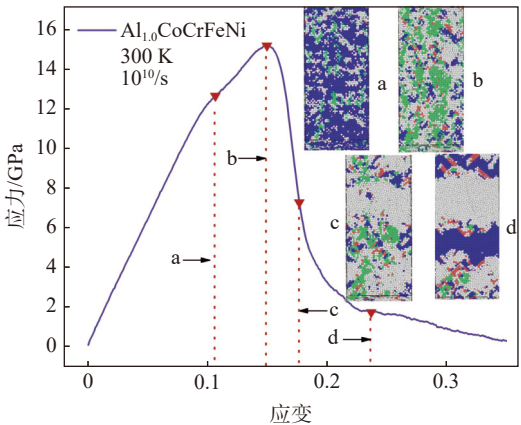


图 2 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 拉伸应力-应变曲线
Fig. 2 Stress-strain relations of $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ under tensile loading

图 3 为 300 K 时不同应变率下 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 高熵合金的径向分布函数和不同晶格含量变化曲线。在图 3(a)中可以看出, 屈服应变之前 ($0 < \epsilon \leq 14.9\%$), 每个峰值随着应变的升高而逐渐减小, 这表明高熵合金的晶体结构被持续破坏。在达到屈服应变之后 ($14.9\% < \epsilon \leq 23\%$), 材料的振幅随着应变增大而逐渐增加, 这表明在这个阶段, 晶体结构开始恢复。由图 3(b)中可知, 初始弹性变形阶段 ($0 < \epsilon \leq 5\%$), 原子模型保持着有序的 BCC 结构, 原子模型中只有极少数的 BCC 结构的原子转变为非晶态; 达到屈服应变之后, 高熵合金发生塑性变形, 并且大量 BCC 结构的原子转变为其他晶格, 这表明高熵合金的塑性变形与材料的相变有关。

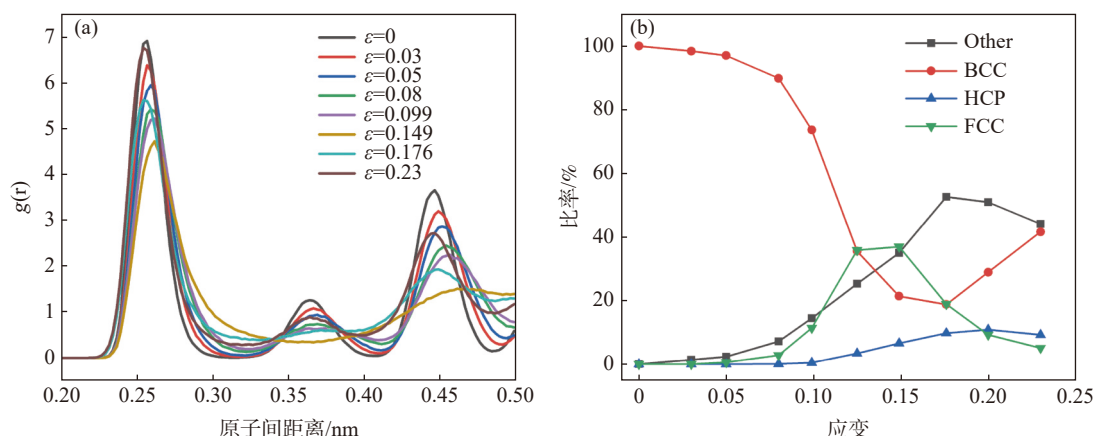


图3 (a) $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 在单轴拉伸过程中不同应变下的 RDF, (b) BCC, HCP, FCC 以及 Other 原子数目随应变的变化
Fig. 3 (a) The RDF of $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEA at different strains during uniaxial tension, (b) changes of the numbers of BCC, HCP, FCC and Other atom clusters with strain

图4为不同拉伸应变状态下 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 的位错演化。由图4可以看出, $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ 在拉伸载荷作用下出现的位错类型包括: $1/2\langle 110 \rangle$ 位错, $1/3\langle 100 \rangle$ 位错, $1/3\langle 111 \rangle$ 位错, $1/6\langle 110 \rangle$ 位错, $1/6\langle 112 \rangle$ 位错以及一些无法识别的位错, 表示为 Other 位错。在应变为 $0 < \varepsilon \leq 11.3\%$ 的拉伸阶段, $1/6\langle 112 \rangle$ 位错出现, 并随着应变的进行开始增多; 当应变为 $11.3\% < \varepsilon \leq 14.9\%$ 时, 位错总长度急剧下降, 结合图3(b)进行对比分析, 此时 FCC 结构原子急剧增加, 说明 FCC 结构有助于减少位错的生成, 提升材料强度; 在应变为 $14.9\% < \varepsilon \leq 19.6\%$ 拉伸阶段, $1/2\langle 110 \rangle$ 位错, $1/3\langle 100 \rangle$ 位错, $1/3\langle 111 \rangle$ 位错, $1/6\langle 110 \rangle$ 位错开始增加, 位错与位错之间相互缠绕, 由于位错和滑移现象已经启动, 使得应力急剧变化, 最后趋于平缓。

2.2 Al 含量对 $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ 拉伸力学性能的影响

为了研究 Al 含量对 $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ HEAs 拉伸

力学性能的影响, 建立一系列 $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ HEAs 原子模型, x 分别取为 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0, 设置温度为 300 K, 以 $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 应变速率分别对不同 Al 含量的原子模型进行 Y 向单轴拉伸, 如图5所示。

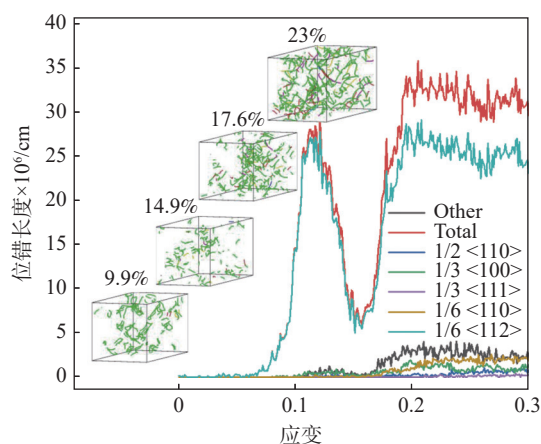


图4 不同拉伸应变下 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 的位错演化
Fig. 4 Dislocation evolution of $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs under different strains

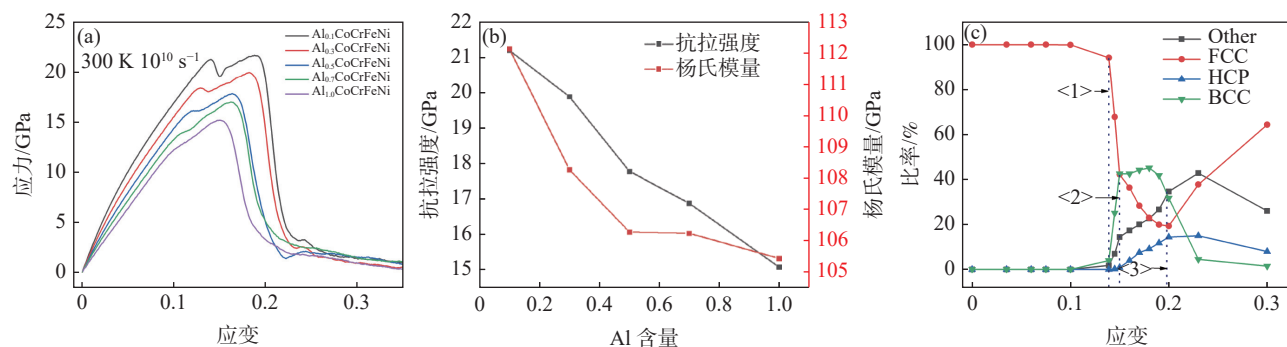


图5 (a) $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ 应力-应变曲线, (b) $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ 屈服应力和杨氏模量曲线, (c) $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 中 FCC, HCP, BCC 以及 Other 原子数目随应变的变化
Fig. 5 (a) The stress-strain curve of $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ HEAs, (b) The Young's Modulus and yield stress of $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ HEAs as a function of Al concentration, (c) variation of the numbers of FCC, HCP, BCC and Other atom clusters with strain of $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$

从图 5(a)中可以看出, $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ 的拉伸过程都经历弹性、屈服、塑性变形阶段,从图 5(b)中可以看出,屈服应力和杨氏模量随着 Al 含量的增加而降低,每条曲线从弹性阶段到塑性阶段都经历了一个明显的下降过程,且下降速率随着 Al 含量的增加而降低。结合微观结构可知,随着 Al 含量的增加,原子模型会在更小的应变处开始屈服,更早进入屈服阶段。其中 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 在初始弹性阶段($0 < \varepsilon \leq 13.9\%$),每个原子都围绕在平衡位置运动,原子模型保持了 FCC 的有序结构,但是只有极少数的原子由于较高的表面能而发生相变,转变为 BCC 结构。在屈服阶段($13.9\% < \varepsilon \leq 15\%$),FCC 原子数量急剧下降,同时 BCC 原子以及 Other 原子数量急剧上升,应力-应变曲线呈下降趋势,这表明激烈的相变导致原子模型内部原子平衡遭到破坏。随着应变继续增

大,BCC 原子和 Other 原子增加速率减缓,HCP 原子逐渐增加,应力再次上升,说明部分原子重新回到平衡位置,形成新的有序晶格结构,这使得应力出现短暂的上升过程。这种现象与 Koh 等人^[24]的研究相吻合,说明该高熵合金具有较好的塑性。

2.3 温度对 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 拉伸力学性能的影响

为了探究温度对 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 拉伸性能的影响,改变拉伸加载时的模拟温度,采用了 300 K 到 1 500 K 等 8 种不同的变形温度,设置同样的应变速率为 $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$,对 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 进行 Y 轴单轴拉伸。图 6(a)为不同温度下 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 的应力-应变曲线,图 6(b)为不同温度下 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 的屈服强度曲线以及杨氏模量变化曲线,图 6(c)为不同温度下 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 的位错总长度变化曲线。

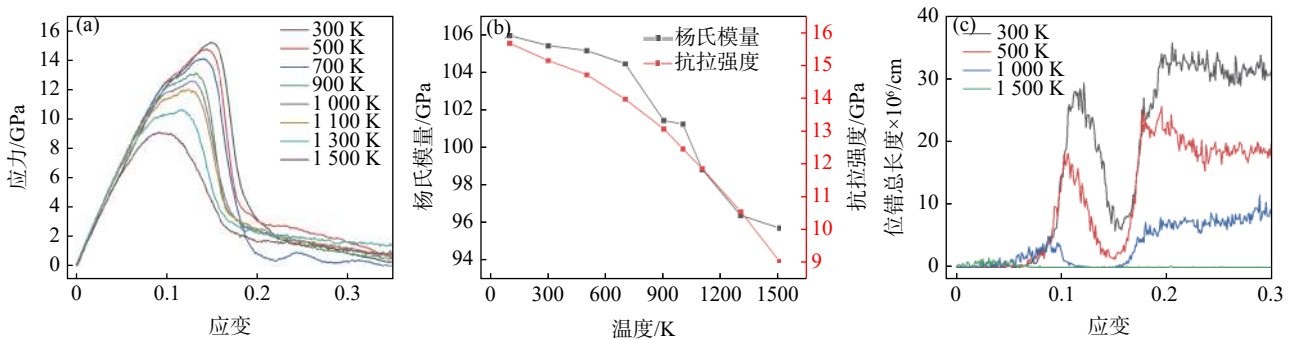


图 6 不同温度下 (a) $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 应力-应变曲线, (b) 屈服应力曲线, (c) 位错总长度变化曲线

Fig. 6 (a) The stress-strain curve, (b) the Young's modulus and the yield stress, (c) variation curve of total dislocation length of $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ at different temperatures

从图 6(a)中可以看出,不同温度下,原子模型应力-应变曲线的变化趋势基本相似,但随着温度升高,屈服应力及对应屈服应变、杨氏模量逐渐降低,其量化结果见图 6(b)。可以看出,杨氏模量从 300 K 时的 105.5 GPa 减小到 1 500 K 时的 95.8 GPa,减小了 9.19%;屈服应力从 15.17 GPa(300 K)降到 9.12 GPa(1 500 K),降幅为 39.88%,且绝对斜率增大。这一趋势很好理解,温度的升高导致原子热运动加剧,原子之间的键被破坏,晶体结构易变形,合金会“软化”,强度降低。从图 6(c)可以看出,位错随着温度的升高逐渐减少,不同位错之间的相互作用减弱,无法形成固定位错阻碍材料运动,导致材料强度下降。

2.4 应变速率对 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 拉伸力学性能的影响

为了研究高应变速率对拉伸变形机制的影响,对比了低应变速率($\dot{\varepsilon} \leq 1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$)、中应变速率($1 \times$

$10^9 \text{ s}^{-1} < \dot{\varepsilon} \leq 1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$)与高应变速率($\dot{\varepsilon} > 1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$)的不同影响,采用了从 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 到 $2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 等 6 种不同的应变速率,对 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 在 300 K 下进行 Y 方向单轴拉伸。图 7(a)是不同应变速率下 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 的应力-应变曲线,图 7(b)是不同应变速率下 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 的屈服应力曲线,图 7(c)是不同应变速率下 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 的位错总长度变化曲线。

从图 7(a)中可以看出,300 K 时初始弹性阶段,6 种不同应变速率的 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 应力和应变曲线基本重合,均呈线性增加,说明初始弹性阶段对应变速率不敏感而进入屈服阶段后,屈服应力和应变随应变速率的增加而增加。在低应变速率($\dot{\varepsilon} < 1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$)和中应变速率($1 \times 10^9 \text{ s}^{-1} \leq \dot{\varepsilon} \leq 1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$)下,当应力达到抗拉强度后急剧下降;而高应变速率($\dot{\varepsilon} > 1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$)下,当应力达到抗拉强度后,应力-

应变曲线下下降相对缓慢,表现出较好的塑性。从图 7(b)和 7(c)中可以看出,材料在不同应变速率下均表现出屈服应力随应变速率增大而增大,表明应变速率对 $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ 的屈服强度有明显影响。低应变速率的曲线斜率为 1.02,中应变速率的曲线斜率为 1.07,且中低应变速率拉伸初始阶段位错增长趋势基本重合,说明中低应变速率对材料在初始阶段拉

伸无明显影响;当应变速率大于 10^{10} s^{-1} 时曲线斜率最大为 2.36,即应变速率对材料的屈服应力及抗拉强度有明显影响,说明 $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ 对高应变速率敏感。此外,当应变速率为 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时,位错总长度最大,说明高应变速率和低应变速率都不利于位错的生成。

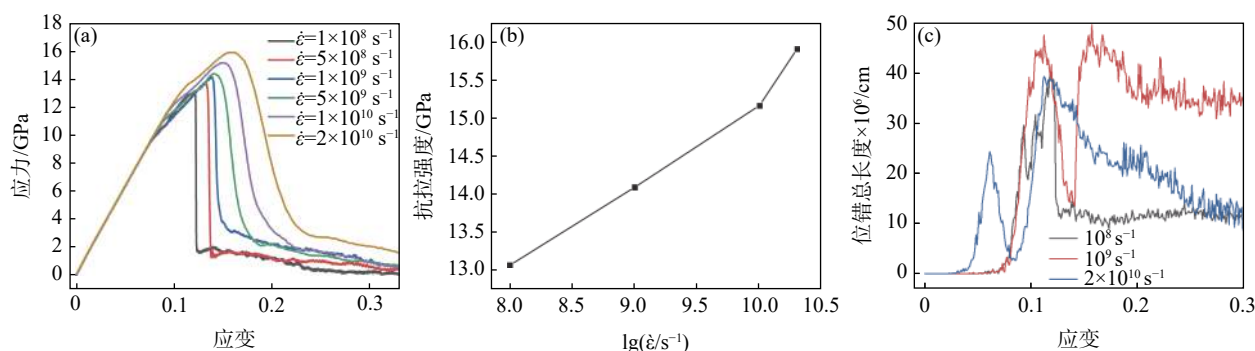


图 7 不同应变速率下 (a) $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 的应力-应变曲线, (b) 屈服应力曲线, (c) 位错总长度变化曲线

Fig. 7 (a) The stress-strain curves, (b) the yield stress, (c) variation curve of total dislocation length of $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ at different strain rates

3 结论

基于分子动力学,建立单轴拉伸模型,研究了常温和常规应变速率下 $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ HEAs 不同 Al 含量对其力学性能的影响, $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 在高温和高应变速率下的力学行为和变形机理,对 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 在单轴拉伸过程中的力学行为以及不同因素对 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 拉伸力学性能的影响进行了研究,包括 Al 含量($x=0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1.0$),不同的拉伸速率($10^8 \sim 2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$),不同的温度($300 \sim 1500 \text{ K}$),得到如下结论:

1)在常温(300 K)条件下,分析径向分布函数 RDF 以及不同晶格原子数量变化,证实了随着应变的增加, $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 由原来单一的 BCC 结构向 FCC、HCP 和 Other 原子相变,这表明高熵合金的塑性变形与材料的相变有关。

2)常温(300 K)和中应变速率(10^{10} s^{-1})下,Al 摩尔比 0.1 至 1.0 时, $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ HEAs 屈服应力随 Al 含量上升呈下降趋势。随着 Al 含量的增加,会导致 HEAs 更容易发生变形,更早进入屈服阶段,力学性能降低。

3)在 $300 \sim 1500 \text{ K}$ 条件下, $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 的屈服应力同样随温度的升高呈下降趋势。其内部原因位错随着温度的升高逐渐减少,不同位错之间的相互作用减弱,无法形成固定位错阻碍材料运动,导致材料强度下降。

4)常温(300 K)环境下,应变速率对 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ 屈服应力和抗拉强度有明显影响,高应变速率(应变速率大于 $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$)时屈服应力和抗拉强度明显增大,说明 $\text{Al}_{1.0}\text{CoCrFeNi}$ HEAs 具有高应变速率敏感性。此外,高应变速率和低应变速率都不利于位错的生成。

参考文献

- [1] Yeh J W, Chen S K, Lin S J, *et al.* Nanostructured high - entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes[J]. *Advanced Engineering Materials*, 2004, 6(5): 299-303.
- [2] Zou Y, Maiti S, Steurer W, *et al.* Size-dependent plasticity in an $\text{Nb}_{25}\text{Mo}_{25}\text{Ta}_{25}\text{W}_{25}$ refractory high-entropy alloy[J]. *Acta Materialia*, 2014, 65: 85-97.
- [3] Yang C C, Chau J, Weng C J, *et al.* Preparation of high-entropy AlCoCrCuFeNiSi alloy powders by gas atomization

- process[J]. *Materials Chemistry and Physics*, 2017, 202: 151–158.
- [4] Yao M J, Pradeep K G, Tasan C C, *et al.* A novel, single phase, non-equiatomic FeMnNiCoCr high-entropy alloy with exceptional phase stability and tensile ductility[J]. *Scripta Materialia*, 2014, 72-73: 5–8.
- [5] Zhang L, Yu P, Cheng H, *et al.* Nanoindentation creep behavior of an $\text{Al}_{0.3}\text{CoCrFeNi}$ high-entropy alloy[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2016, 47(12): 5871–5875.
- [6] Zhao Chendong, Li Jinshan, Liu Y, *et al.* Optimizing mechanical and magnetic properties of AlCoCrFeNi high-entropy alloy via FCC to BCC phase transformation[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2021, 73: 83–90.
- [7] Jia Li, Fang Qihong, Liu Bin, *et al.* Mechanical behaviors of AlCrFeCuNi high-entropy alloys under uniaxial tension via molecular dynamics simulation[J]. *RSC Advances*, 2016, 6(80): 76409–76419.
- [8] Zhang Luming, Ma Shengguo, Li Zhiqiang, *et al.* Molecular dynamics simulation of mechanical properties of $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ high entropy alloy[J]. *Journal of High Pressure Physics*, 2021, 35(5): 22–30.
(张路明, 马胜国, 李志强, 等. $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ 高熵合金力学性能的分子动力学模拟[J]. 高压物理学报, 2021, 35(5): 22–30.)
- [9] Afkham Y, Bahramyan M R. Tensile properties of AlCrCoFeCuNi glassy alloys: A molecular dynamics simulation study[J]. *Materials Science & Engineering A*, 2017, 698: 143–151.
- [10] Li Jia, Chen Haotian, Li Sixu, *et al.* Tuning the mechanical behavior of high-entropy alloys via controlling cooling rates[J]. *Materials Science & Engineering A*, 2019, 760: 359–365.
- [11] Kawamura M, Asakura M, Okamoto N L, *et al.* Plastic deformation of single crystals of the equiatomic CrMnFeCoNi high-entropy alloy in tension and compression from 10 K to 1273 K[J]. *Acta Materialia*, 2021, 203(supplement): 116454.
- [12] Zhu J M, Zhang H F, Fu H M, *et al.* Microstructures and compressive properties of multicomponent AlCoCrCuFeNiMo_x alloys[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2010, 497: 1–2.
- [13] Sharma A, Balasubramanian G. Dislocation dynamics in $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ high-entropy alloy under tensile loading[J]. *Intermetallics*, 2017, 91: 31–34.
- [14] Liu Y X, Cheng C Q, Shang J L, *et al.* Oxidation behavior of high-entropy alloys $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ ($x=0.15, 0.4$) in supercritical water and comparison with HR3C steel[J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2015, 25(4): 1341–1351.
- [15] Gawel Richard, Rogal Łukasz, Dąbek Jarosław, *et al.* High temperature oxidation behaviour of non-equiatomic AlCoCrFeNi high entropy alloys[J]. *Vacuum*, 2021, 184: 109969.
- [16] Kemény Dávid Miklós, Miskolczi Pálfi Nikolett, Fazakas Éva. Examination of microstructure and corrosion properties of novel AlCoCrFeNi multicomponent alloy[J]. *Materials Today: Proceedings*, 2021, 45(6): 4250–4253.
- [17] Wang C T, He Y, Guo Z, *et al.* Strain rate effects on the mechanical properties of an AlCoCrFeNi high-entropy alloy[J]. *Metals and Materials International*, 2021, 27: 2310–2318.
- [18] Zhang Y, Yang X, Liaw P K. Alloy design and properties optimization of high-entropy alloys[J]. *JOM: The Journal of the Minerals, Metals & Materials Society*, 2012, 64(7): 830–838.
- [19] Steve Plimpton. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1–19.
- [20] Antonaglia J, Xie X, Tang Z, *et al.* Temperature effects on deformation and serration behavior of high-entropy alloys (HEAs)[J]. *JOM*, 2014, 66(10): 2002–2008.
- [21] Zhang Ping, Li Yuantian, Zhang Jinyong, *et al.* Effect of Si addition on hot corrosion behavior of AlCoCrFeNi high entropy alloys[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2021, 50(10): 3640–3647.
(张平, 李远田, 张金勇, 等. Si对AlCoCrFeNi高熵合金热腐蚀行为的影响[J]. 稀有金属材料与工程, 2021, 50(10): 3640–3647.)
- [22] Jiang J, Chen P, Qiu J, *et al.* Microstructural evolution and mechanical properties of $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ high-entropy alloys under uniaxial tension: A molecular dynamics simulations study[J]. *Materials Today Communications*, 2021, 28: 102525.
- [23] Farkas D, Caro A. Model interatomic potentials and lattice strain in a high-entropy alloy[J]. *Journal of Materials Research*, 2018, 33(19): 3218–3225.
- [24] Koh S J A, Lee H P, Lu C, *et al.* Molecular dynamics simulation of a solid platinum nanowire under uniaxial tensile strain: Temperature and strain-rate effects[J]. *Physical Review B*, 2005, 72(8): 85414.