

Ti 含量和温度对 FeNiCrCoTi_x 高熵合金拉伸和压缩性能影响的分子动力学研究

白培康^{1,2}, 张 京¹, 李 婧^{1,3*}, 白家鸣³, 王梦璇¹, 王卓群¹

(1. 太原科技大学材料科学与工程学院, 山西 太原 030024; 2. 中北大学材料科学与工程学院, 山西 太原 030051;
3. 南方科技大学机械与能源工程系, 广东 深圳 518055)

摘 要:针对 FeNiCrCoAl、FeNiCrCoCu、FeNiCrCoMn 等高熵合金(HEA)力学性能的研究已得到广泛的开展,但掺杂 Ti 元素的高熵合金仍缺乏系统性研究。在该方向中,对 FeNiCrCoTi 系高熵合金的压缩力学行为及其原子尺度内在机制的关注度持续提升。研究通过分子动力学(MD)模拟,全面探究了 Ti 含量(4%~10%)与温度(100~500 K)对 FeNiCrCoTi 高熵合金拉伸和压缩力学性能的影响。研究结果揭示了高熵合金在力学响应中的拉压不对称性。在不同的 Ti 含量下, T3($x=0.3$)模型的性能最好, T3 模型的位错密度最高,导致位错之间缠绕、塞积,从而提高了抗拉强度。而在压缩载荷下, C2($x=0.2$)模型的性能最好,在 C2 模型中观察到高密度的位错形成了位错网络,最终导致合金抗压强度最高。合金的抗拉压强度随着温度的升高而单调递减,这是由于温度升高原子热运动加剧,降低了晶界阻碍作用,使位错克服晶格阻力,更容易移动,使得材料在较高温度下发生软化现象。综上所述,该研究为探究 FeNiCrCoTi HEA 的力学性能开启了一扇新的大门,为该材料在不同 Ti 元素含量和温度下的应用提供了理论依据。

关键词:高熵合金; 力学性能; 分子动力学模拟; 微观结构

中图分类号: TF823, TG139

文献标志码: A

文章编号: 1004-7638(2026)04-0021-14

DOI: 10.7513/j.issn.1004-7638.2026.04.003

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



听语音
与作者互动
聊科研

The influence of Ti content and temperature on the mechanical behavior of FeNiCrCoTi_x high-entropy alloys under tensile and compressive loads: A molecular dynamics simulation study

BAI Peikang^{1,2}, ZHANG Jing¹, LI Jing^{1,3*}, BAI Jiaming³, WANG Mengxuan¹, WANG Zhuoqun¹

(1. College of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China; 2. School of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, Shanxi, China; 3. Department of Mechanical and Energy Engineering, Southern University of Science and Technology, Shenzhen 518055, Guangdong, China)

Abstract: Extensive investigations have been conducted currently into the mechanical properties of high-entropy alloys (HEAs), such as FeNiCrCoAl, FeNiCrCoCu, FeNiCrCoMn, etc. While the HEAs doped with Ti element are still lack of systematic research. In this field, the compressive mechanical behavior and intrinsic mechanism in atomic scale of FeNiCrCoTi HEAs have attracted increasing atten-

收稿日期: 2026-02-04; 修回日期: 2026-03-24; 接受日期: 2026-04-03

基金项目: 国家自然科学基金青年基金(52305400); 高温合金及耐蚀合金 3D 打印零件工艺开发(2024132)。

作者简介: 白培康, 1969 年出生, 男, 山西忻州人, 博士, 教授, 研究方向为金属材料增材制造, E-mail: baipeikang@nuc.edu.cn; *通信作者: 李婧, 1992 年出生, 女, 山西吕梁人, 博士, 教授, 研究方向为高性能金属材料增材制造, E-mail: lij@tyust.edu.cn。

tion. Molecular dynamics (MD) simulations were used to comprehensively investigate how titanium content (4%~10%) and temperature (100~500 K) affect the FeNiCrCoTi_x HEA's tensile and compressive mechanical properties. The findings highlight a tension-compression asymmetry in the mechanical response of HEAs. Among the different Ti contents, the T3 ($x = 0.3$) model exhibits the best performance, which is linked to the highest dislocation density, facilitating dislocation entanglement and accumulation, thereby enhancing tensile strength. In contrast, under compressive loading, the C2 model ($x = 0.2$) demonstrates optimal performance. This phenomenon is attributed to the formation of dislocation network by high-density dislocations within the C2, which contributes to its highest compressive strength. Both tensile and compressive strengths of the HEAs exhibit a monotonic decrease as temperature rises, which is attributed to the intensified atomic thermal motion with increasing temperatures, weakening grain boundary resistance and facilitating dislocation motion across lattice barriers, thus softening the materials at elevated temperatures. Collectively, this investigation offers critical insights into the mechanical behavior of FeNiCrCoTi HEAs and provides a theoretical basis for material applications via Ti content and temperature control.

Key words: high-entropy alloys; mechanical properties; molecular dynamics simulations; microstructure

0 引言

航空航天与石油化工等工程领域对先进金属材料的需求日益增长。高熵合金凭借其高熵效应、严重晶格畸变及缓慢扩散特性,正成为极具前景的新型金属结构材料^[1-5]。自 Yeh^[6]首次提出该概念以来,高熵合金已引发广泛研究关注^[7-9]。然而相较于其广阔的理论成分空间,已报道的高熵合金种类仍显有限。由于成分复杂且元素熔点差异巨大,真空电弧熔炼或激光熔覆等制备方法往往成本高昂且技术难度大。此外,X射线衍射等传统表征技术难以充分探测相变、位错演化等原子尺度特征,严重制约了高熵合金研究进展。在此背景下,分子动力学(Molecular Dynamics, MD)可从微观探索内外因素对材料变形过程中的应力应变、势能、位错的影响,有助于从原子层面揭示宏观现象。越来越多的学者使用分子动力学方法来研究力学性能的微观机理^[10-15]。

Ti元素的掺入改变了高熵合金的内部原子排列,赋予其独特性能,并推动了对多种HEA体系的广泛研究^[16-28]。例如, Sun等^[29]通过分子动力学模拟研究了CoCrFeNi(Al_{0.3}Ti_{0.2})_x合金,发现随着Ti和Al含量的增加,其抗拉强度和弹性模量均随之提升。Cheng等人^[30]研究了FeCrNi基合金中Ti含量的影响,证明富Ti析出物可增强强度和刚度,但微小析出物尺寸可能增加断裂风险;Ti掺杂还降低了堆垛错位能并促进位错网络形成。Luo等人^[31]研究了FeNiCrCoTi_x高熵合金,发现Ti含量的增加会诱导晶格畸变,从而促进剪切变形区(STZ)的形成,有效阻碍了位错滑移。

对于高熵合金压缩力学性能的研究,主要聚焦于FeNiCrCoMn高熵合金。Gong等^[32]研究了FeNiCrCoMn_x HEAs在不同锰含量和环境温度下的塑性变形机制。结果表明,高熵合金的拉伸和压缩行为具有明显的不对称性。Qi等人^[33]研究了拉伸和压缩条件下等原子比FeNiCrCoMn HEAs在多晶和单晶模型中的微观结构和位错行为。他们的研究发现,屈服强度的降低与HCP结构的形成有关。此外,他们还比较了单晶和多晶模型之间的相变和位错演化。

尽管人们对高熵合金进行了广泛的研究,但对于FeNiCrCoTi_x HEA在不同Ti元素含量和温度下拉伸和压缩力学性能及微观结构的研究还很少。这主要是由试验条件的限制造成的,例如成本控制和狭窄的温度范围。笔者采用分子动力学方法深入研究了FeNiCrCoTi_x HEA的微观组织演变与力学性能的相关机理。对HEA变形过程中出现的微观位错和相结构变化进行了机理分析。提出了一种根据FeNiCrCoTi_x合金相结构变化确定弹性应变极限和塑性应变起点的方法,为研究合金的力学性能提供了一定的理论和分析指导。

1 模拟条件与方法

1.1 分子动力学仿真

利用大规模原子分子并行模拟器(LAMMPS)^[34]建立FeNiCrCoTi高熵合金模型,研究了合金在不同Ti含量和温度下的塑性变形行为。首先建立尺寸为7.4 nm×14.9 nm×7.4 nm的面心立方(FCC)晶体盒子模型,其中FeNiCrCoTi晶格常数为0.356 nm,共包含64 000个原子。如图1所示,HEAs由随机分布

在整个结构中的 Fe、Ni、Cr、Co 和 Ti 原子组成。在所有模拟中,沿 x 、 y 和 z 轴执行周期性边界条件,对应于 $[100]$ $[010]$ 和 $[001]$ 晶体方向。在所有模拟中应用的最大应变为 0.25。模拟单元沿 y 方向 (即 $[010]$ 方向) 施加拉伸和压缩载荷作用力,使得合金发生变形,应力张量在 x 和 y 方向上均为

零。每次模拟的时间步长为 0.001 ps,拉伸和压缩试样图示如图 2 所示。建立好模型后,使用 fire 松弛算法 (快速惯性松弛引擎) 进行能量最小化,其中能量停止容限等于 1×10^{-15} ,用于松弛随机 HEA 构型。模型结构在等温等压 NPT 下进行充分弛豫 25 ps。

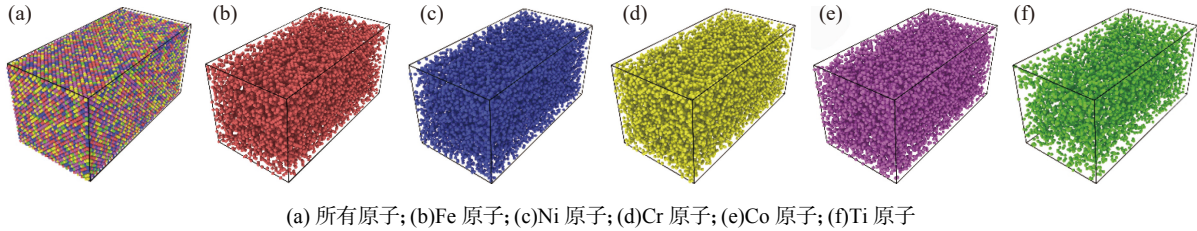


图 1 FeNiCrCoTi_x HEAs 中的原子分布

Fig. 1 Atom distributions in FeNiCrCoTi_x HEAs

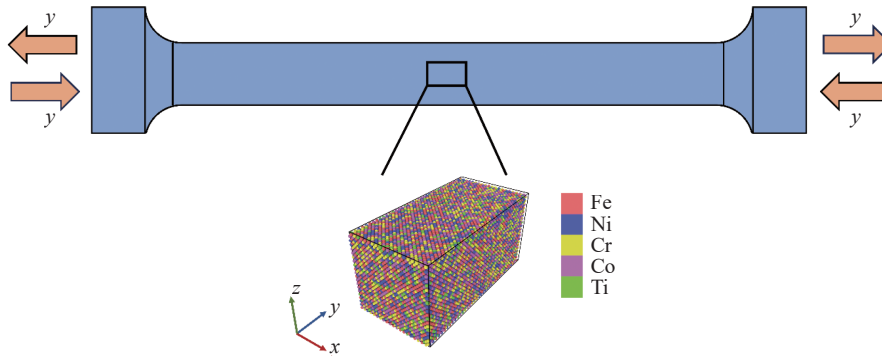


图 2 常规拉伸和压缩试样的图示

Fig. 2 Diagram of standard tensile and compressive specimens

为了方便描述,将 FeNiCrCoTi_x 高熵合金在拉伸作用下记为 T2、T3、T4、T5,压缩作用下记为 C2、C3、C4、C5,其中 T2、C2 为 FeNiCrCoTi_{0.2}; T3、C3 为 FeNiCrCoTi_{0.3}; T4、C4 为 FeNiCrCoTi_{0.4}; T5、C5 为 FeNiCrCoTi_{0.5},合金中各原子比例如表 1 所示。

表 1 拉伸和压缩载荷作用下合金模型原子比例

Table 1 Atomic proportions in alloy models under tensile and compressive loads

Tensile	Compression	Atomic content/%				
		Fe	Ni	Cr	Co	Ti
T2	C2	24	24	24	24	4
T3	C3	23.5	23.5	23.5	23.5	6
T4	C4	23	23	23	23	8
T5	C5	22.5	22.5	22.5	22.5	10

1.2 势函数的选择

对 FeNiCrCoTi HEA 的分子动力学模拟采用的是 EAM (嵌入原子势) 势函数^[35]。嵌入原子势的公式如式(1)所示。

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

式(1)中, E 为系统的总势能; F_i 为原子 i 的嵌

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} 为原子 i 和原子 j 之间的对势相互作用函数, r_{ij} 为原子 i 和原子 j 之间的距离。局部电子密度可通过式(2)计算。

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

其中 $f(r_{ij})$ 是原子 i 位置处的原子 j 对电子密度的贡献。

1.3 后处理分析

采用 OVITO 软件对模拟结果进行分析与可视化处理^[36]。通过共同邻居分析法 (CNA)^[37] 研究 FeNiCrCoTi_x 高熵合金模型中的六方最密堆积 (HCP)、体心立方 (BCC)、面心立方 (FCC) 及其他晶体结构,该方法可根据局部原子环境自动确定截断半径。在分子动力学 (MD) 模拟中,孪晶边界 (TB) 表示一层 HCP 板条 Encom 至少通过两个 HCP 层,本征堆积故障 (ISF) 属于两个连续的 HCP 层,而非本征堆积故障 (ESF) 指的是两个与孤立的

内部 FCC 层相邻的 HCP 层^[38]。采用位错提取法 (DXA)^[39] 默认参数检测位错及其他晶体缺陷。

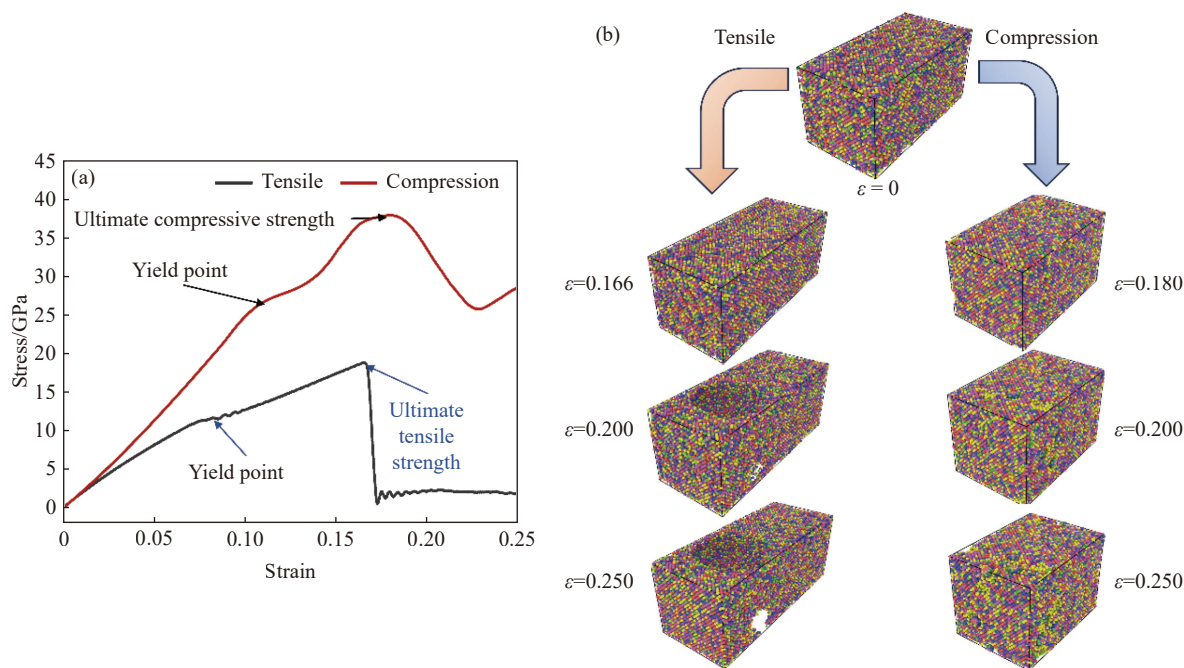
2 结果讨论与分析

2.1 FeNiCrCoTi_{0.5} 的单轴拉伸和压缩

对 FeNiCrCoTi_{0.5} 高熵合金 (T5 合金) 在 300 K 温度下、应变速率为 0.001/ps 时的拉伸与压缩响应进行了模拟。图 3(a) 展示了应力-应变曲线。在拉伸状态下, 合金表现出极限拉伸应变为 0.166、抗拉强度为 18.79 GPa。在压缩状态下, 其极限应变为 0.18, 抗压强度为 37.98 GPa。拉伸变形过程中, 应力在弹性阶段呈线性上升, 直至达到屈服点后发生应力震荡, 随后进入塑性变形阶段, 直至达到极限抗拉强度, 随后应力急剧下降。在压缩状态下, 应力首先达到峰值后进入平缓状态, 随后继续上升直至达到极限抗压强度, 应力下降。这些差异揭示了拉伸与压缩条件下截然不同的力学响应及变形

机制, 其中压缩性能优于拉伸性能。图 3(b) 展示了特定应变下的原子构型快照, 以阐明微观结构演变过程。

通过分析每种晶格结构中原子所占比例, 得到了合金在不同应变下的晶格结构演变 (图 4(a)(c)), 展示了拉伸与压缩原子结构比例的变化。在弹性变形过程中, 随着应变增加, FCC 相原子逐渐转化为非晶相。这一现象表明, 在弹性阶段局部原子失稳并开始积累, 为后续的塑性变形提供了结构基础。达到屈服点后, 拉伸与压缩响应呈现分化趋势。在拉伸状态下 (图 4(a)), FCC 相占比初始保持稳定, 但屈服后开始下降, 同时 BCC 及 Other 相结构占比上升。相反, 在压缩条件下 (图 4(c)), 当应变 $\varepsilon=0.12$ 时 FCC 相急剧下降, 表明 HCP 相更早形成。这种转变源于压缩应力下原子间距缩小, 原子堆积方式向更致密的 HCP 相结构转变, 以降低体系能量。



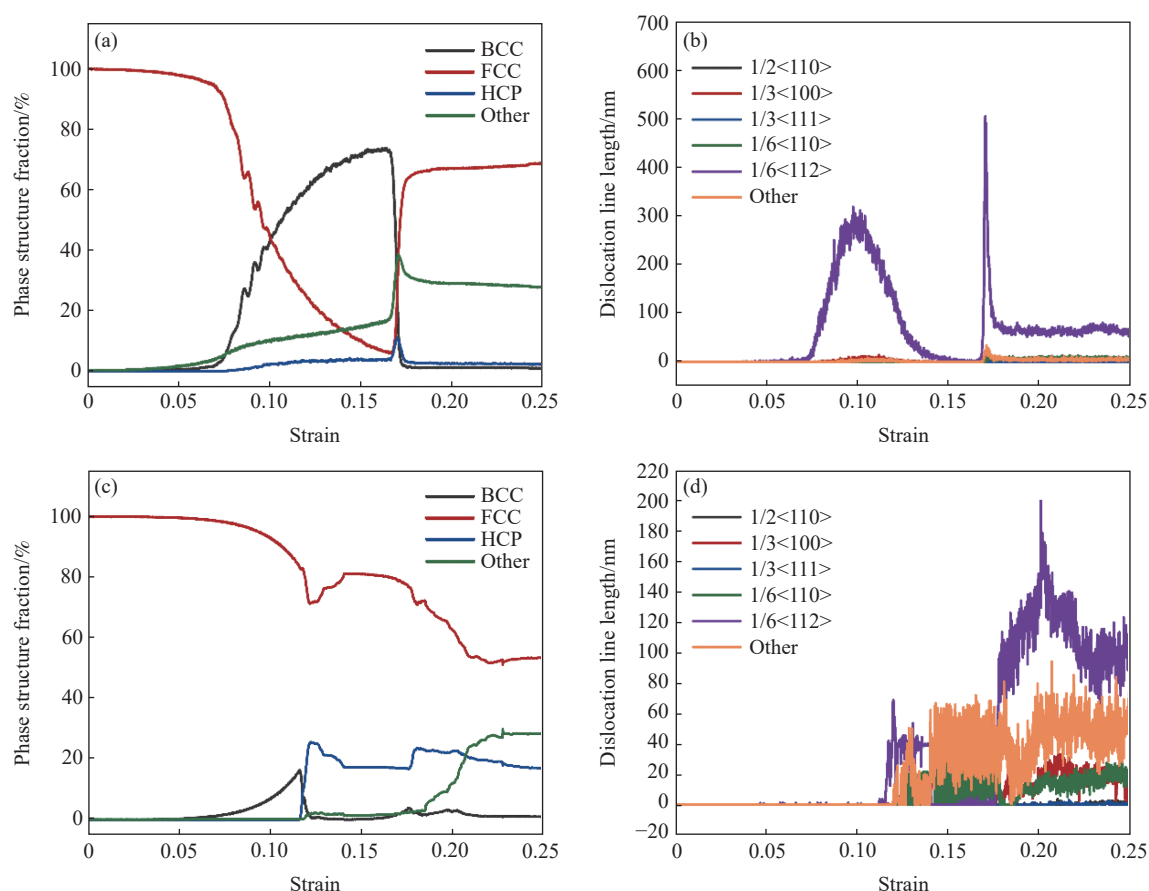
(a) FeNiCrCoTi_{0.5} HEA 在 300 K、应变率为 0.001/ps 的单轴拉伸和压缩载荷下的应力-应变曲线; (b) 拉伸和压缩下不同应变的原子快照

图 3 FeNiCrCoTi_{0.5} 高熵合金在单向拉伸和压缩载荷下的应力-应变曲线和不同应变的原子快照

Fig. 3 Stress-strain curves and atomic snapshots of FeNiCrCoTi_{0.5} high-entropy alloy under uniaxial tensile and compressive loading

图 4(b)(d) 分别展示了拉伸与压缩条件下位错长度随应变的变化过程。在屈服前, 材料中没有位错形成。当达到屈服点时, 两种载荷模式下均首先形成 Shockley 位错 ($1/6\langle 112 \rangle$), 随后其他类型位错开始成核。两种情况下位错密度均呈现波动, 压缩状态下波动更为显著。这是由于压缩过程中内部应

力分布更为复杂, 导致位错成核、运动及相互作用呈现更复杂且不稳定的特性, 从而宏观上表现为位错线长度曲线的剧烈波动。此外, HEA 的晶体各向异性特性在压缩状态下促进位错堆积并引发更复杂的位错活动, 使得位错演化曲线的波动幅度较拉伸状态更为剧烈。



(a) 单轴拉伸时晶格结构比例演化; (b) 拉伸时位错长度演化; (c) 压缩时晶格结构比例演化; (d) 压缩时位错长度演化

图4 300 K, 应变速率为 0.001/ps 条件下, FeNiCrCoTi_{0.5} 高熵合金在单向拉伸和压缩过程中的相分数和位错长度演化
Fig. 4 Phase fraction and dislocation length evolution of FeNiCrCoTi_{0.5} HEA during uniaxial tension and compression at 300 K with a strain rate of 0.001/ps

从图4的组合图中可以明显看出, 在达到屈服应力后, 在两种加载条件下, 晶体结构都发生了明显的变化。在两种加载条件下, Shockley 不全位错占主导地位。位错运动会诱导局部原子重排, 促使 FCC 相结构向其他结构转变; 反之, 新形成的相也会影响位错的滑移行为, 共同决定了合金的宏观力学行为。这些观察结果表明, HEA 的塑性变形与相变和位错活动密切相关, 它们在拉伸和压缩下表现出不同的行为。

2.2 Ti 含量对拉伸和压缩力学性能的影响

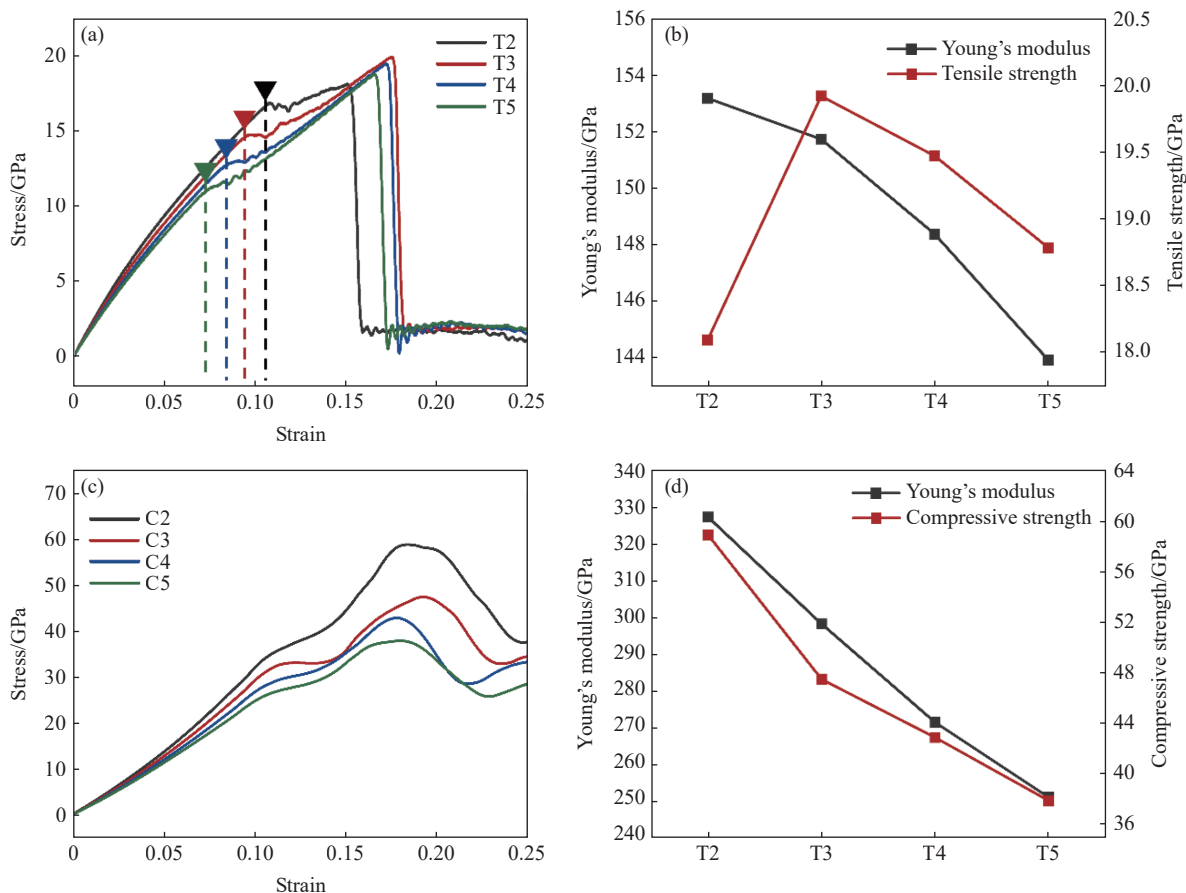
图5展示了不同 Ti 含量单轴拉伸和压缩下的应力-应变曲线和抗拉强度与杨氏模量曲线, 模拟温度为 300 K、应变速率为 0.001/ps。如图5(a)所示, T3 展示了更优越的拉伸性能, 弹性变形阶段应力随着应变逐渐增大, 应力应变服从广义胡克定律。从整体过程来看, 应力-应变曲线呈现“之”字形, 这种现象符合 Zheng 等^[40] 研究结果, 并且与 Koh 等^[41] 的研究相吻合。而在图5(c)中观察到, C2 展示了更优越的压缩性能。结果表明, 两种加载条件下的塑

性行为的不同可能是材料的晶体结构和位错演化所造成的。图5(b)(d)展示了杨氏模量和抗拉压强度的变化, 在拉伸载荷下, T3 的抗拉强度最高, 杨氏模量随着 Ti 含量的增加而下降, 这是由于 Ti 原子半径大于 Fe、Ni、Cr、Co 原子的半径, 产生了晶格畸变, 并且随着 Ti 含量的增加晶格畸变程度加剧, 从而削弱了合金抵抗弹性变形的能力。在压缩载荷下, 杨氏模量和抗压强度都呈现了下降趋势。两组数据的比较表明, 在拉伸载荷作用下, 杨氏模量下降了 7%, 抗拉强度下降了 11%。在压缩载荷作用下, 杨氏模量下降了 30%, 抗压强度下降了 56%, 相比之下 Ti 含量对 HEA 的压缩性能影响更大。

图6用 CNA 方法显示了不同 Ti 含量的 FeNiCrCoTi_x HEAs 在拉伸载荷作用下的原子相结构。图6(c)显示了断裂前 HEAs 的相结构, 显示了大量的 BCC 相结构的原子。这是因为, 在塑性变形过程中, FCC 相晶格结构逐渐失稳, 累积的弹性能需要通过相变的方式释放, 部分原子会通过转变为 BCC 等其他相结构再降低体系能量, 以实现内部稳定。

Argon 等人^[42]表明相结构的转变旨在降低材料内部急剧增加的弹性能,使 HEA 趋向于更稳定的状态。从图 6 中 Ti 含量 $x=0.2$ 的 HEAs 中观察到,随着应变的增加,HEAs 在变形过程中产生了大量的滑移面。这些滑移面由 HCP 相原子(红色)组

成。这是因为面心立方结构材料在特定的变形方式下会发生从 FCC 相到 HCP 相的转变。断裂后,如图 6(d) 所示,HEAs 内部的弹性能量以断裂的方式释放,不同断裂区的 FCC 转变为 Other 相结构原子(灰色)和 FCC 相结构原子(绿色)。



(a) 拉伸时的应力-应变曲线; (b) 拉伸时的杨氏模量和抗拉强度; (c) 压缩时的应力-应变曲线; (d) 压缩时的杨氏模量和抗压强度

图 5 在温度 300 K、应变速率为 0.001/ps 的条件下,不同 Ti 含量下 FeNiCrCoTi_x HEAs 的力学性能

Fig. 5 Mechanical responses of FeNiCrCoTi_x HEAs with different Ti contents at 300 K and a strain rate of 0.001/ps

图 7 用 CNA 方法显示了不同 Ti 含量的 FeNiCrCoTi_x HEAs 在压缩载荷作用下的原子相结构。在压缩载荷作用下,Ti 有助于稳定 HCP 结构。当受到连续的强压缩时,原子远离初始位置,原子中出现球形非晶团簇。随着应变的继续增加,无序球状非晶团簇逐渐增多,材料进入屈服阶段,应力随应变的增加而迅速减小。

通过对比图 5(a) 中的特征点与图 8(a1)~(d1) 中的对应原子构型可知,在屈服前原子维持着有序的 FCC 结构。随着应变增大,少量表面原子因表面能升高而转变为其他结构。达到屈服应力后,FCC 原子数量急剧减少,表明晶格结构稳定性因剧烈相变而破坏,进入了塑性变形阶段。初始 BCC 结构的形成应变随 Ti 含量增加而降低,这归因于 Ti 的大

原子尺寸增加了晶格畸变能,与图 6 一致,使局部结构更容易失稳坍塌,从而降低了相变所需要的能量。该现象促进局部结构坍塌和非晶相形成。此类晶格不稳定性可改变高熵合金的整体力学响应。此外,FCC 结构比例随应变先下降后回升,最终趋于稳定,这与累积弹性能的释放相关。屈服前,在压缩状态下微观结构仍以 FCC 为主(图 8(a2)~(d2))。屈服后出现 HCP 和 BCC 相,临近压缩应变极限时,随着 Ti 含量的增加,FCC 相比比例下降,而 HCP 及 Other 相比比例上升。非晶团簇的增多促使弱晶面形成,这些晶面可作为裂纹萌生与扩展的通路^[43],从而削弱整体强度。该趋势与图 5(c) 一致,其中 C2 表现出最高的抗压强度。

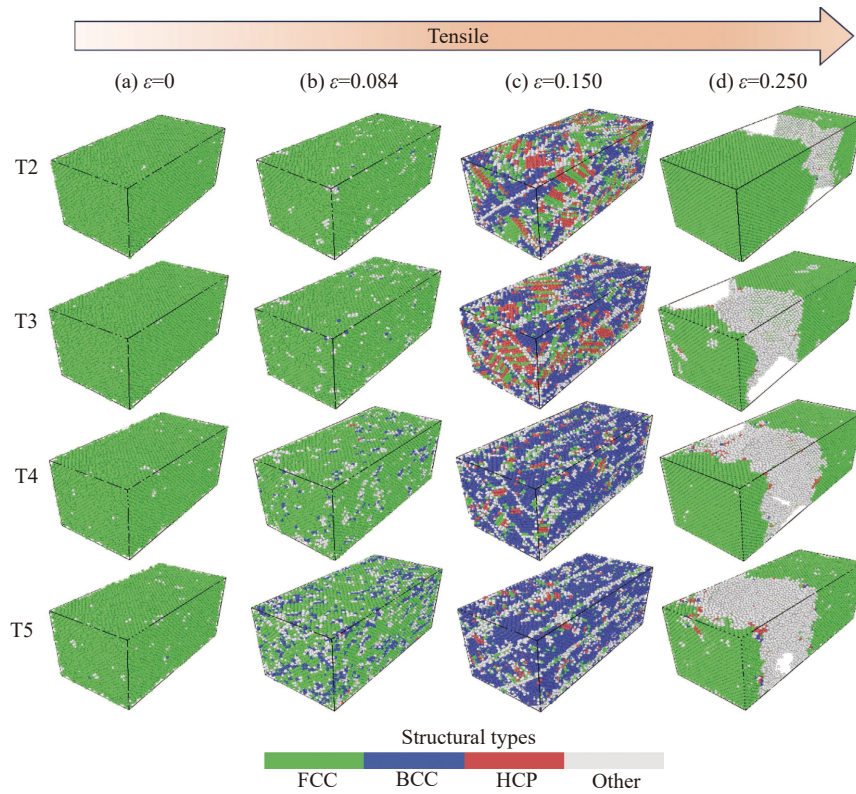
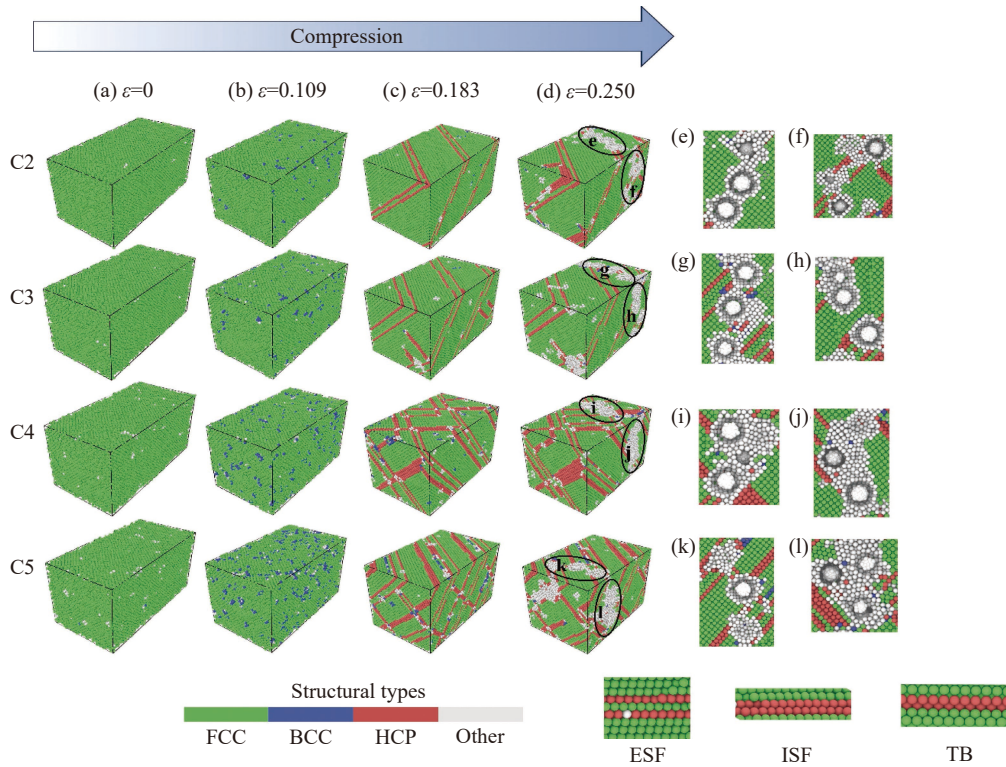
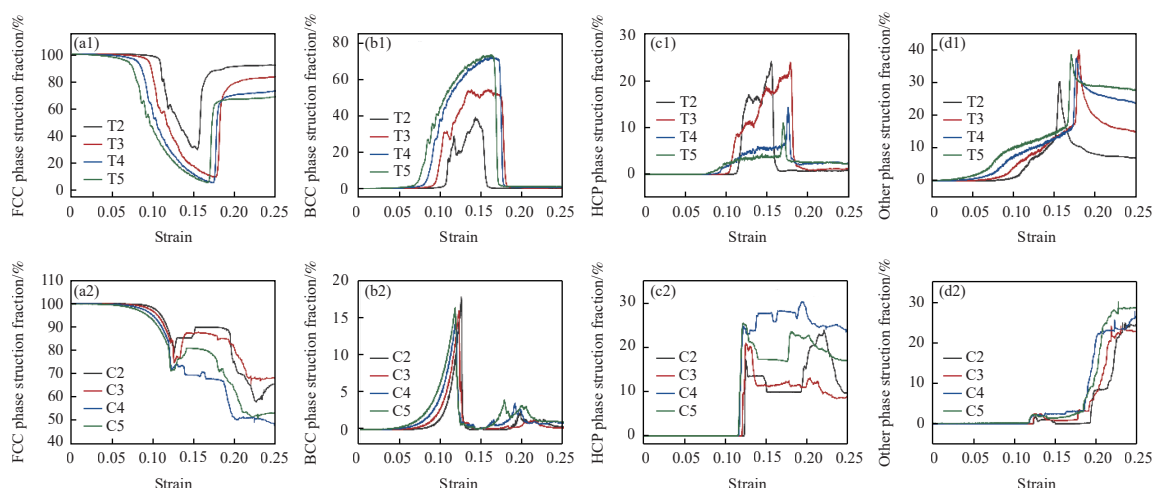


图 6 FeNiCrCoTi_x HEA 在 300 K、应变速率为 0.001/ps, 拉伸载荷作用下不同应变时的快照
Fig. 6 Snapshots of FeNiCrCoTi_x HEA with different strains at 300 K under tensile loading at a strain rate of 0.001/ps



(a) ~ (d) 不同应变水平下的原子构型快照; (e) ~ (l) 局部非晶团簇的放大图

图 7 FeNiCrCoTi_x HEAs 在 300 K、应变速率为 0.001/ps 下的压缩变形行为
Fig. 7 Compressive deformation behavior of FeNiCrCoTi_x HEAs at 300 K and a strain rate of 0.001/ps

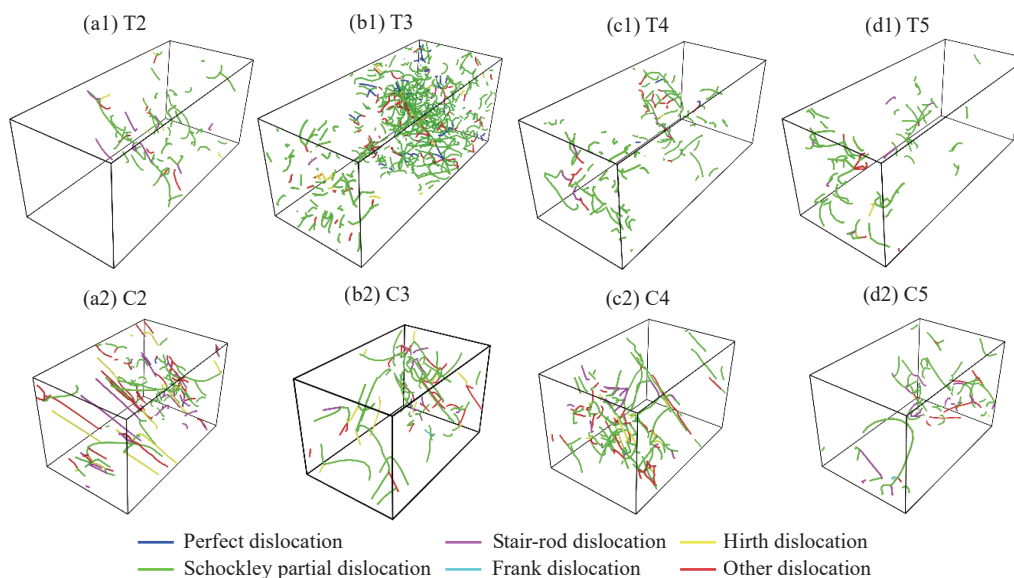


(a1) ~ (d1) 拉伸载荷作用下的相分数演化; (a2) ~ (d2) 压缩载荷作用下的相分数演化

图 8 FeNiCrCoTi_x HEA 在 300 K、应变速率为 0.001/ps 下各相百分比随应变变化曲线Fig. 8 Evolution of phase fractions with strains in FeNiCrCoTi_x HEA at 300 K and a strain rate of 0.001/ps

用 DXA 方法研究了 $\varepsilon=0.25$ 时拉伸和压缩载荷作用下不同 Ti 含量下的位错演化快照, 如图 9 所示。在拉伸模型中, Shockley 位错在所有情况下占主导地位。在 T3 模型中, 位错密度最高, 产生了位错积塞、缠结, 从而提高了合金抗拉强度, 与图 5(a) 所示一致。在压缩模型下, 在 C2 模型中观察到高密度的位错, 并且有更多的 Hirth 位错。

Hirth 位错是一种不可移动的位错, 它的存在阻碍了位错的运动并促进了位错网络的形成, 最终导致合金抗压强度最高。此外, 可以清楚地看到, 在压缩载荷下, 位错线较长且位错类型丰富, 而在拉伸载荷下, 主要观察到较短的 Shockley 位错。这表明拉伸载荷和压缩载荷之间的位错演化具有明显的不对称性。



(a1) ~ (d1) 拉伸载荷作用; (a2) ~ (d2) 压缩载荷作用

图 9 FeNiCrCoTi_x HEA 在 300 K、应变速率为 0.001/ps 和达到抗拉强度、抗压强度时的位错演化快照Fig. 9 Dislocation evolution snapshots in FeNiCrCoTi_x HEA at 300 K and a strain rate of 0.001/ps and at the tensile and compressive strength points

2.3 温度对拉伸和压缩力学性能的影响

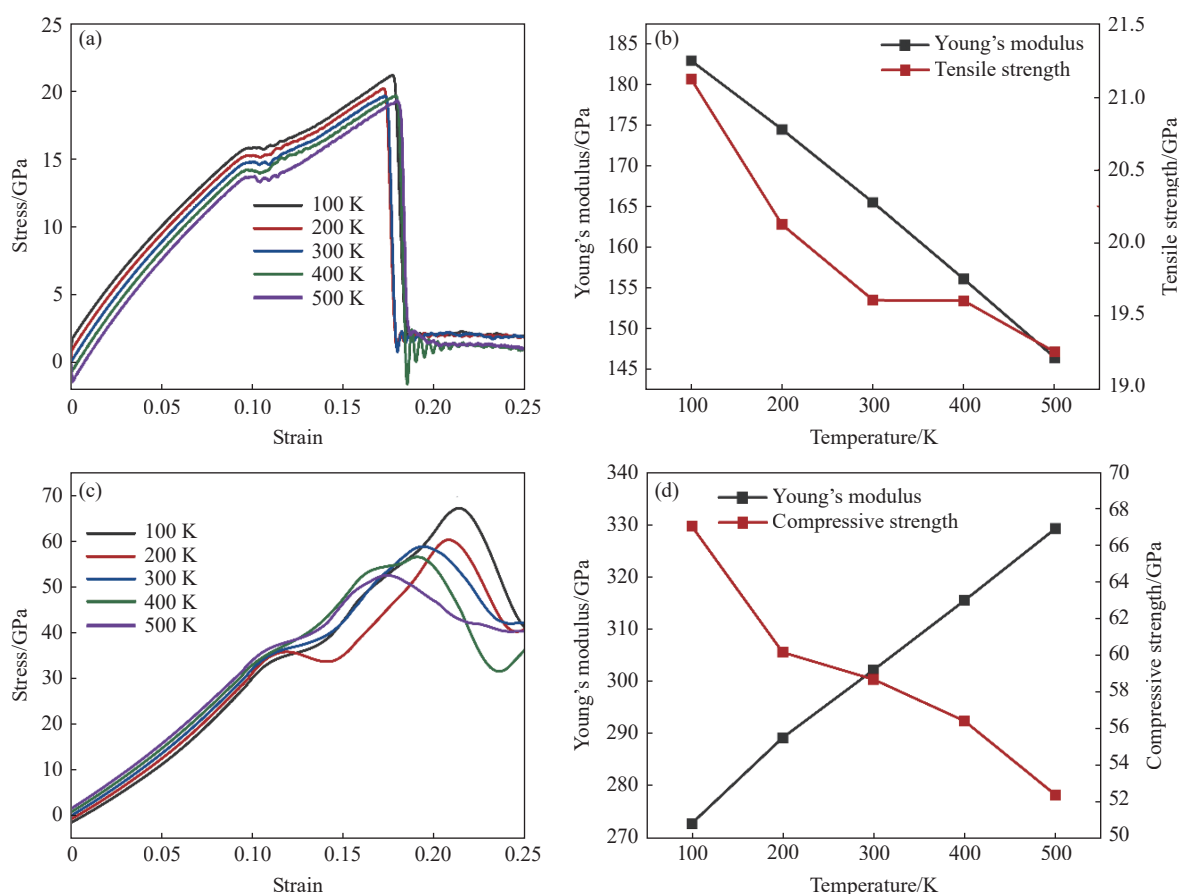
根据上节研究 Ti 元素含量对 HEA 拉伸和压缩

性能的影响得知, 在 $x=0.3$ 的情况下 FeNiCrCoTi_x (即: T3 模型) 拉伸性能最好, 在 $x=0.2$ 的情况下

FeNiCrCoTi_x(即: C2 模型) 压缩性能最好。在此基础上, 继续研究温度对拉伸和力学性能的影响, 下文中所提到的拉伸模型均为 T3, 压缩模型均为 C2。

图 10 展示了 FeNiCrCoTi_x 高熵合金在 100 ~ 500 K 温度范围内的拉伸与压缩应力-应变响应, 并给出了对应的杨氏模量和抗压强度。如图 10(a)(c) 所示, 该合金在 100 K 时展现出卓越的力学性能。在拉伸载荷作用下, 低温下的高强度归因于变形机制的转变, 位错滑移受到机制的抑制作用, 纳米孪晶成为主导的变形机制^[44]。纳米孪晶既能有效地阻碍位错运动, 又可以为塑性变形储备一定的能量, 从而实现了抗拉强度的提升。随着温度升高,

抗压强度逐渐降低, 屈服应变值向较低方向偏移, 反映出明显的热软化现象。从微观角度看, 高温促进原子运动并加剧位移, 导致合金强度减弱, 并在应力-应变曲线上引入细微波动。图 10(b)(d) 分别展示了 T3(拉伸) 与 C2(压缩) 合金的杨氏模量及强度随温度变化曲线。在 100 ~ 500 K 范围内, 拉伸状态下杨氏模量降低约 25%, 抗拉强度降低约 10%; 压缩状态下杨氏模量升高约 21%, 抗压强度降低约 28%。这些结果表明温度对压缩性能的影响远大于拉伸性能。数据清晰揭示了温度对 T3 和 C2 合金力学行为的影响。此外, 在整个温度范围内, 塑性变形中明显的拉伸-压缩不对称性始终存在^[45-46]。



(a) 拉伸应力-应变曲线; (b) 拉伸时的杨氏模量和抗拉强度; (c) 压缩应力-应变曲线; (d) 压缩时的杨氏模量和抗压强度

图 10 不同温度下 FeNiCrCoTi_x 高熵合金的力学性能

Fig. 10 Mechanical properties of FeNiCrCoTi_x HEAs at different temperatures

在应变 $\epsilon=0.25$ 时, 图 11 和图 12 显示了在不同环境温度 ($T=100, 200, 300, 400, 500$ K) 下拉伸和压缩加载条件下的 OVITO 可视化结果。在拉伸载荷作用下, 随着应变的增加, 稳定的 FCC 相大量转

变为 BCC 和 HCP 相, 最后转变为 FCC 相和 Other 相, 这一趋势在图 13 也能清楚的观察到。随着温度的升高产生了而更多的 Other 相, 这表示温度升高促进了非晶的形成。

如图 11 所示,在压缩载荷作用下,随着应变的增加,逐渐出现了 HCP 和 Other 相。在较低的温度下,有限的原子热运动有助于保持晶体结构的有序状态。然而,随着温度的增加,增强的热运动和原子扩散导致晶体结构不稳定,无序度增加,促进了非晶相的形成。环境温度的变化以相似的方式影响两种载荷条件下的 HEA。

在图 11(c) 和图 12(c) 中能够观察到,随着温度的升高产生了更多的 Other 相原子结构,导致原子位移显著增加,使得原子偏离平衡位置,并且晶格畸变导致相分离或亚稳态相的形成,使得这些“软相”成为强度的瓶颈,最终导致合金强度下降^[47]。

如图 12(a) ~ (d) 所示,在达到屈服应力之前原

子保持有序的 FCC 结构,随着应变的增大, FCC 结构原子转变为大量的 BCC 和少量的 HCP 和 Other 相。在拉伸变形过程中, BCC 结构原子的峰值强度随着温度的升高而逐渐减小 (如图 12(b) 所示)。同时抗拉强度也有所降低。这一现象与低温下纳米孪晶主导的变形机制密切相关,低温抑制了原子扩散,孪晶界与位错相互作用提高了抗拉强度。结合图 13(a2) ~ (d2) 可知, FCC 相首次达到最低值的时候 HCP 和 BCC 相首次达到峰值,并且随着温度的增加,出现 BCC 相的应变逐渐提前,这是由于温度升高,原子热运动和原子扩散使得相变过程加速,相变路径被激活,导致了晶体结构的不稳定性和无序状态。

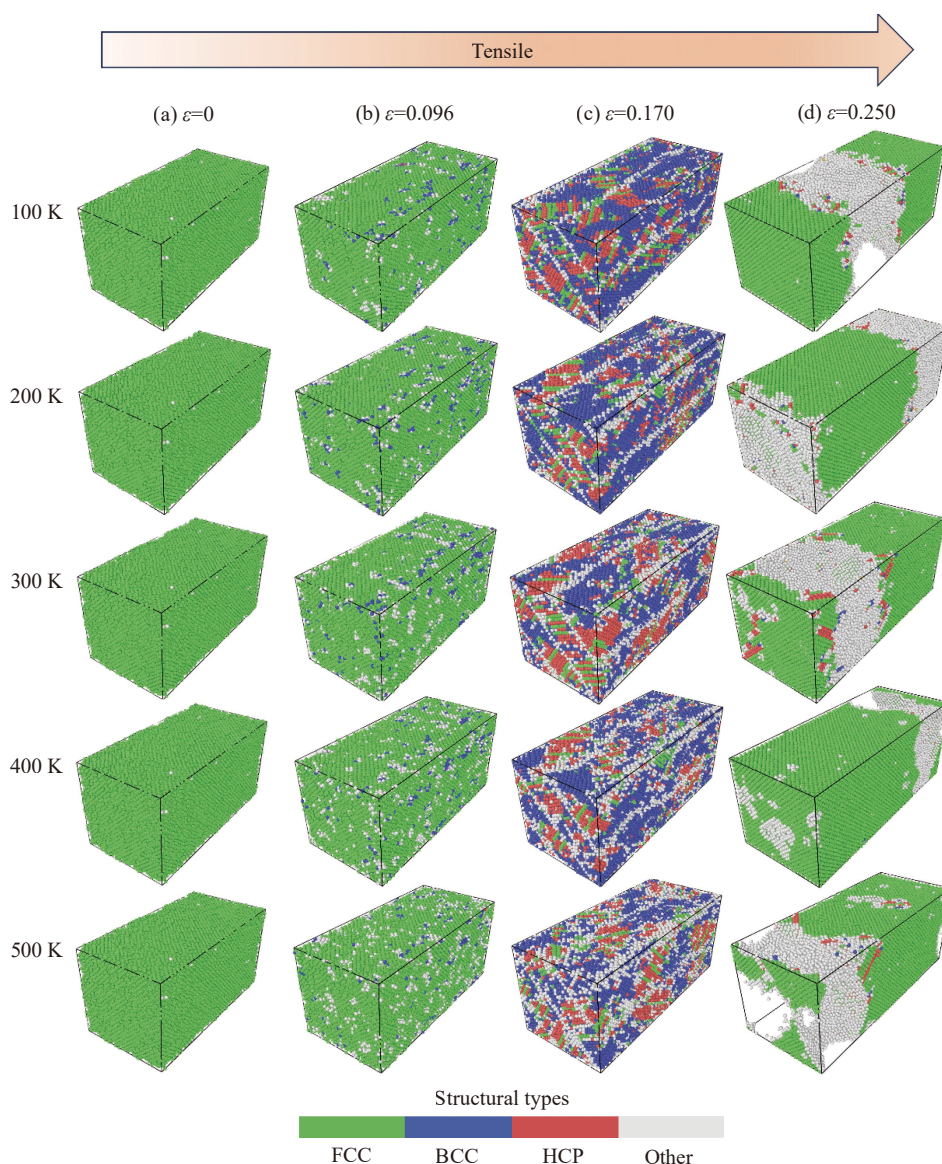
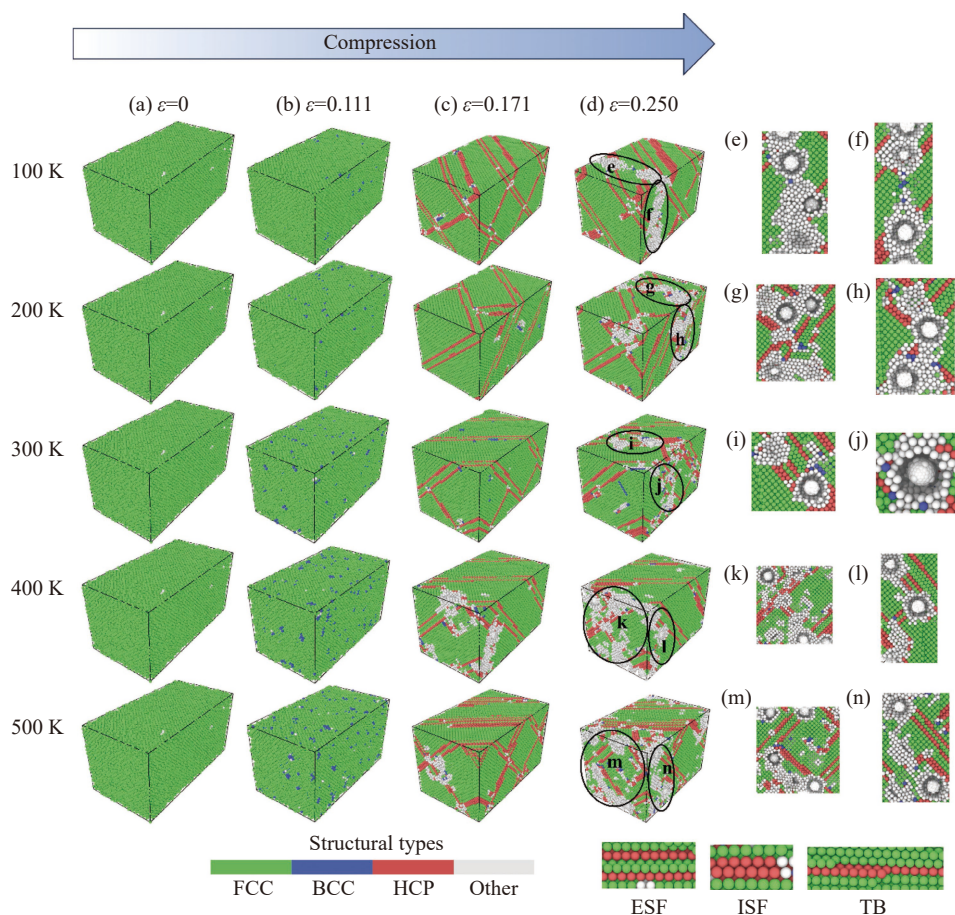


图 11 FeNiCrCoTi_x HEA 在应变速率为 0.001/ps, T4 拉伸载荷作用下不同应变时的快照

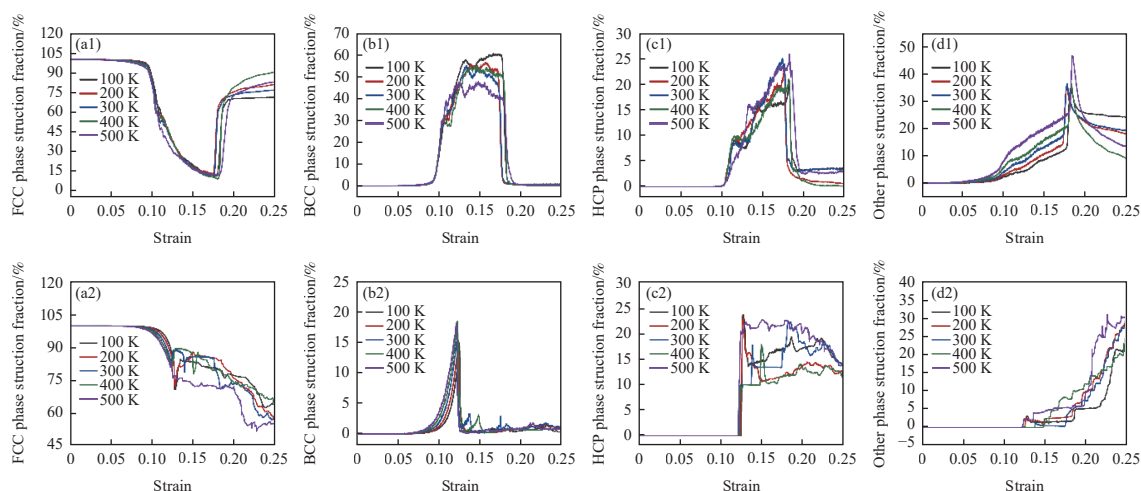
Fig. 11 Snapshots of FeNiCrCoTi_x HEA at different strains during tensile loading at a strain rate of 0.001/ps and T4



(a)~(d) FeNiCrCoTi_x HEA 在应变速率为 0.001/ps, C2 压缩载荷作用下不同应变时的快照; (e)~(n) 高熵合金中非晶团簇放大图

图 12 在应变速率为 0.001/ps、压缩载荷作用下不同温度时 C2 高熵合金的微观结构演化

Fig. 12 Microstructural evolution of C2 high-entropy alloy at different temperatures under compressive loading at a strain rate of 0.001/ps



(a1)~(d1) T3 在拉伸载荷作用下的相分数演化; (a2)~(d2) T3 在压缩载荷作用下的相分数演化

图 13 FeNiCrCoTi_x HEA 在应变速率为 0.001/ps、不同温度下各相百分比随应变变化曲线

Fig. 13 Phase fractions as a function of strain for FeNiCrCoTi_x HEA at a strain rate of 0.001/ps and different temperatures

图 14 是不同环境温度下应变 $\varepsilon=0.25$ 时 T3 和 C2 HEA 的位错演化的快照。由图 14 可以清楚地

观察到, 在拉伸和压缩载荷作用下, 位错数目都随着温度的升高而减少。从微观角度看, 这种温度软化

效应主要是由于较高的温度为晶体提供了更多的能量,原子热运动加剧,降低了晶界阻碍作用,使位错克服晶格阻力,更容易移动,从而导致合金软化,因

此 T3 和 C2 模型的抗拉压强度随着温度的升高而单调递减。

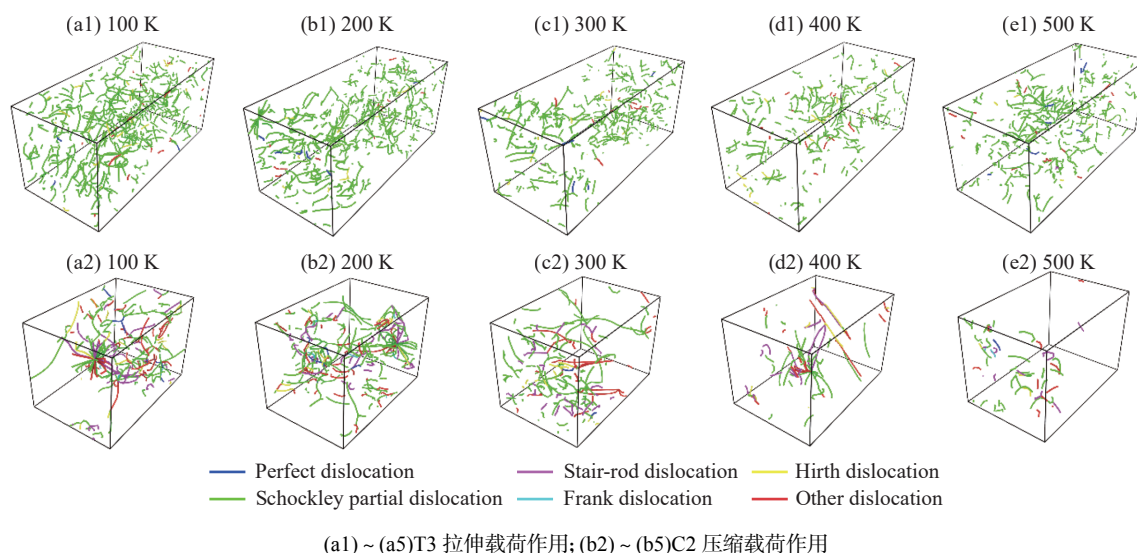


图 14 FeNiCrCoTi_x HEA 在应变速率为 0.001/ps 和达到抗拉强度、抗压强度时不同温度下的位错演化快照

Fig. 14 Snapshots of dislocation evolution of FeNiCrCoTi_x HEA with temperatures at a strain rate of 0.001/ps and at the tensile and compressive strength points

结合这些观察结果和图 13 所示的相结构,很明显,随着温度从 100 K 上升到 500 K, HEA 逐渐形成更多的非晶态结构,这不利于位错的形成,从而进一步减少了高温下位错的产生。总之,虽然在两种加载条件下,温度的升高导致位错密度的降低,但仍然可以观察到拉伸下的位错演化保持更均匀。此外,升高的温度有利于动态回复或再结晶,导致形成无位错的晶粒,进一步减少位错数量。

3 结论

通过分子动力学模拟研究了 FeNiCrCoTi_x HEAs 在不同 Ti 含量 ($x=0.2, 0.3, 0.4, 0.5$)、环境温度 (100、200、300、400、500 K) 下的塑性变形机制,并对应力-应变曲线、相结构以及位错等进行了分析,结论如下:

1) HEA 的拉伸和压缩行为具有明显的不对称性。

2) 在不同的 Ti 含量下,拉伸和压缩载荷下的屈服强度和屈服应变呈现不同的变化趋势。HEA 在

拉伸载荷作用下, T3($x=0.3$) 模型的性能最好,具有最高的位错密度,导致位错之间缠绕、塞积,从而提高了抗拉强度。而在压缩载荷下, C2($x=0.2$) 模型的性能最好。在 C2 模型中观察到高密度的位错,并且有更多的 Hirth 位错,这些 Hirth 位错阻碍了位错滑移,并且形成了位错网络,最终导致合金抗压强度最高。

3) 随着温度的升高,原子热运动加剧,降低了晶界阻碍作用,使位错克服晶格阻力,更容易移动,从而导致合金软化,因此 T3 和 C2 模型的抗拉压强度随着温度的升高而单调递减。尤其是在拉伸载荷作用下,在低温下更容易发生孪生变形,孪生变形增加了合金中 BCC 原子的数量,从而提高了合金的抗拉强度。

总体而言, Ti 含量和温度对高能合金的塑性变形机制有复杂的影响。拉伸和压缩载荷之间的不对称性对位错行为和晶体结构的演化起着至关重要的作用。

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]. Adv Eng Mater, 2004, 6(5): 299-303.
- [2] Zou Yu, Maiti S, Steurer W, et al. Size-dependent plasticity in an Nb₂₅Mo₂₅-Ta₂₅W₂₅ refractory high-entropy alloy[J]. Acta Mater, 2014, 65: 85-97.

- [3] 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 Mater, 2014, 72-73: 5-8.
- [4] Zhang Lijun, Yu Pengfei, Cheng Hu, et al. Nanoindentation creep behavior of an Al_{0.3}CoCrFeNi high-entropy alloy[J]. Metall Mater Trans A, 2016, 47: 5871-5875.
- [5] Zhao Chendong, Li Jinshan, Liu Yudong, et al. Optimizing mechanical and magnetic properties of AlCoCrFeNi high-entropy alloy via FCC to BCC phase transformation[J]. J Mater Sci Technol, 2021, 86: 117-126.
- [6] Yeh J, Chen S, Lin S J, et al. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes[J]. Adv Eng Mater, 2004, 6(5): 299-303.
- [7] Chen Weiping, Fu Zhiqiang, Fang Sicong, et al. Alloying behavior, microstructure and mechanical properties in a FeNiCrCo_{0.3}Al_{0.7} high entropy alloy[J]. Materials and Design, 2013, 51: 854-860.
- [8] Chuang Minghao, TSAI Minghung, Wang Woeiren, et al. Microstructure and wear behavior of Al_xCo_{1.5}CrFeNi_{1.5}Ti_y high-entropy alloys[J]. Acta Mater, 2011, 59(16): 6308-6317.
- [9] Shen Yixi, Spearot D. Mobility of dislocations in FeNiCrCoCu high entropy alloys[J]. Model Simul Mater Sc, 2021, 29: 085017.
- [10] Huang E W, Yu D J, Yeh J, et al. A study of lattice elasticity from low entropy metals to medium and high entropy alloys[J]. Scripta Mater, 2015, 101: 32-35.
- [11] Cao Ronggen, Deng Chuang. The ultra-small strongest grain size in nanocrystalline Ni nanowires[J]. Scripta Mater, 2015, 94: 9-12.
- [12] Osetsky Y N, Bacon D J. Atomic-scale mechanisms of void hardening in bcc and fcc metals[J]. Philos Mag, 2010, 90(7-8): 945-961.
- [13] Osetsky Y N, Bacon D J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals[J]. Model Simul Mater Sc, 2003, 11: 427.
- [14] Veiga R G A, Goldenstein H, Perez M, et al. Monte Carlo and molecular dynamics simulations of screw dislocation locking by Cottrell atmospheres in low carbon Fe-C alloys[J]. Scripta Mater, 2015, 108: 19-22.
- [15] Mendelev M I, Kramer M J, Ott R. Molecular dynamics simulation of diffusion in supercooled Cu-Zr alloys[J]. philos Mag, 2009, 89: 109-126.
- [16] Bomarito G F, Lin Y, Waener D H. An atomistic modeling survey of the shear strength of twist grain boundaries in aluminum[j]. Scripta Mater, 2015, 101: 72-75.
- [17] Smith T M, Hooshmand M S, Esser B D, et al. Atomic-scale characterization and modeling of 60 dislocations in a high-entropy alloy[J]. Acta Mater, 2016, 110: 352-363.
- [18] Wang Z, Gao M C, Ma S G, et al. Effect of cold rolling on the microstructure and mechanical properties of Al_{0.25}CoCrFe_{1.25}Ni_{1.25} high-entropy alloy[J]. Mater Sci Eng A, 2015, 645: 163-169.
- [19] Tang Zhi, Senkov O N, Pariosh C M, et al. Tensile ductility of an AlCoCrFeNi multi-phase highentropy alloy through hot isostatic pressing (HIP) and homogenization[J]. Mater Sci Eng A, 2015, 647: 229-240.
- [20] Munitz A, Salhov S, Hayun S, et al. Heat treatment impacts the microstructure and mechanical properties of AlCoCrFeNi high entropy alloy[J]. J Alloy Compd, 2016, 683: 221-230.
- [21] Dqbrowa J, Kucza W, Cie'slak G, et al. Interdiffusion in the FCC-structured Al-Co-Cr-Fe-Ni high entropy alloys: experimental studies and numerical simulations[J]. J Alloy Compd, 2016, 674: 455-462.
- [22] Licavoli J J, Gao M, Sears J S, et al. Microstructure and mechanical behavior of high-entropy alloys[J]. J Mater Eng Perform, 2015, 24: 3685-3698.
- [23] Gludovatz B, Hohenwarter A, Catoop D, et al. A fracture-resistant high-entropy alloy for cryogenic applications[J]. Science, 2014, 345: 1153-1158.
- [24] Zou Yu, Maiti S, Steurer W, et al. Size-dependent plasticity in an Nb₂₅Mo₂₅Ta₂₅W₂₅ refractory high-entropy alloy[J]. Acta Mater, 2014, 65: 85-97.
- [25] Li Anmin, Zhang Xiyan. Thermodynamic analysis of the simple microstructure of AlCrFeNiCu high-entropy alloy with multi-principal elements[J]. Acta Metall Sin-Engl, 2009, 22(3): 219-224.
- [26] Ma S G, Jiao Z M, Qiao J W, et al. Strain rate effects on the dynamic mechanical properties of the AlCrCuFeNi₂ high-entropy alloy[J]. Mater Sci Eng A, 2016, 649: 35-38.
- [27] Tasan C C, Deng Y, Pradeep K G, et al. Composition dependence of phase stability, deformation mechanisms, and

- mechanical properties of the CoCrFeMnNi high-entropy alloy system[J]. Jom-US, 2014, 66: 1993-2001.
- [28] Shun Taotsung, Du Yuchin. Age hardening of the $\text{Al}_{0.3}\text{CoCrFeNiC}_{0.1}$ high entropy alloy[J]. J Alloy Compd, 2009, 478: 269-272.
- [29] Sun Zhihui, Zhang Jie, Gao Xinxin, et al. Tensile mechanical properties of CoCrFeNiTiAl high entropy alloy via molecular dynamics simulations[J]. Intermetallics, 2022, 142: 107444.
- [30] Cheng Wei, Zhao Hongliang, Luo Zichao, et al. Atomic-scale investigation of Ti element regulating the mechanical and tribological performance of FeCrNi MEA[J]. Tribol Int, 2025, 207: 110604.
- [31] Luo Zelong, Wu Lianjun, Ma Lian, et al. Molecular dynamics simulations of mechanical properties and phase structure for CoCrFeNiTi, high-entropy alloys[J]. Mater Today Commun, 2025, 43: 111789.
- [32] Gong Zheyu, Yang Lixiao, Cao Yong, et al. The influence of Mn content, temperature, and strain rate on the mechanical behavior of FeNiCrCoMn high-entropy alloys under tensile and compressive loads: A molecular dynamics simulation study[J]. Mater Today Commun, 2025, 46: 112532.
- [33] Qi Yuming, Zhao Min, Feng Miaolin. Molecular simulation of microstructure evolution and plastic deformation of nanocrystalline CoCrFeMnNi high-entropy alloy under tension and compression[J]. J Alloy Compd, 2021, 851: 156923.
- [34] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. J Comput Phys, 1995, 117(1): 1-19.
- [35] Farkas D, Caro A. Model interatomic potentials for Fe–Ni–Cr–Co–Al high-entropy alloys[J]. J Mater Res, 2020, 35: 3031-3040.
- [36] Wu Yonglong, Tan Jing, Li Xinmin, et al. Molecular dynamics study on friction of high-entropy alloy FeNiCrCoCu[J]. Mater Today Commun, 2023, 37: 107107.
- [37] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool[J]. Model Simul Mater Sci Eng, 2010, 18: 015012.
- [38] Jiang Shan, Zhang Hongwu, Zheng Yonggang, et al. Atomistic study of the mechanical response of copper nanowires under torsion[J]. J Phys D Appl Phys, 2009, 42: 135408.
- [39] Li Duo, Wang Fengchao, Yang Zhenyu, et al. How to identify dislocations in molecular dynamics simulations?[J]. Sci China Phys Mech, 2014, 57: 2177-2187.
- [40] Zheng Wei, Han Junzhao, Duan Xing, et al. Mechanical properties of $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ high entropy alloy based on molecular dynamics study[J]. Rare Metal Mat Eng, 2022, 51: 3230-3235.
- [41] Koh S, 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]. Phys Rev B, 2005, 72: 85414.
- [42] Argon A S, Kuo H Y. Plastic flow in a disordered bubble raft (an analog of a metallic glass)[J]. Mater Sci Eng, 1979, 39(1): 10.
- [43] Hanan J. Amorphous metal sandwich composites with unprecedented strength[C]//Composites at Lake Louise (CALL 2015). Lake Louise, 2015: 8-12.
- [44] Yang Zhibiao, Lu Song, Tian Yanzhong, et al. Theoretical and experimental study of phase transformation and twinning behavior in metastable high-entropy alloys[J]. J Mater Sci Technol, 2022, 99: 161-168.
- [45] Zhou Kai, Liu Bin, Shao Shaofeng, et al. Molecular dynamics simulations of tension–compression asymmetry in nanocrystalline copper[J]. Phys Lett A, 2017, 381: 1163-1168.
- [46] Yang Zailin, Zhang Guowei, Zhao Jianwei, et al. Molecular dynamics simulations of void effect of the copper nanocubes under triaxial tensions[J]. Phys Lett A, 2016, 380: 917-922.
- [47] Lee C, Song G, Gao M, et al. Lattice distortion in a strong and ductile refractory high-entropy alloy[J]. Acta Mater, 2018, 160: 158-172.