

梯度 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金最佳强-塑协同的晶粒尺寸分布分子动力学模拟

侯兆阳, 李丹妮, 李元豪, 邹鹏飞, 赵 梦, 李克凡

(长安大学 理学院, 陕西 西安 710064)

摘 要: 在金属材料中引入梯度纳米 (gradient nano-grained, GNG) 结构, 可以弱化或消除强度和塑性的倒置关系, 而梯度晶粒尺寸的分布对调控强度和塑性的协同优化具有重要作用。本工作采用分子动力学模拟方法, 系统研究了梯度晶粒尺寸分布对 GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金力学特性、应变和应变分布、位错分布以及晶界运动等影响。结果表明, 当梯度晶粒尺寸区间位于反霍尔-佩奇关系 (inverse Hall-Petch, IHP) → 霍尔-佩奇关系 (Hall-Petch, HP) 过渡区 (9.6~19.2 nm) 时, 体系呈现最佳的强度与塑性协同提高。进一步分析表明, 当梯度晶粒尺寸区间处于 IHP→HP 过渡区 (9.6~19.2 nm) 时, 体系内局域应变和应力的梯度最为显著, 而且此时位错密度最大, 从而引起了强度与塑性的最佳匹配。当梯度晶粒尺寸区间处于 IHP 软化区时, 晶界活动对塑性变形起主导地位; 处于 HP 强化区时, 位错滑移成为塑性变形的的主要形式。

关键词: 梯度纳米晶; 晶粒尺寸范围; 力学行为; 变形机制; 分子动力学模拟

中图分类号: TG139

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2026)09-2317-08

1 引言

$\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 作为典型的单相面心立方结构 (face-centered cubic, fcc) 多主元合金 (HEA), 凭借其优异的塑性、良好的韧性以及显著的加工硬化能力, 近年来已成为颇具应用前景的结构材料^[1]。但 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金的在室温和高温下的强度往往较低, 这极大地制约了其在工程中的应用^[2]。

在多晶金属材料中, 晶粒的细化能显著增加晶界密度, 从而使材料达到非常好的强化效果, 但其拉伸塑性往往显著降低^[3-4]。实验表明, 当 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金的晶粒尺寸从 115 μm 下降到 7.9 μm 时, 其屈服强度从 199 MPa 提高到 366 MPa, 提升了 83.9%^[5]; 当晶粒尺寸进一步降低到纳米尺度时, 屈服强度高达 990 MPa, 但均匀延伸率只有 5.3%^[5-6]。近年来, 通过在金属材料中引入梯度纳米 (gradient nano-grained, GNG) 结构, 可以弱化或消除强度和塑性的倒置关系, 从而充分发挥纳米结构金属材料的应用价值^[7-12]。Fang 等^[13]采用表面机械研磨工艺, 在粗晶 Cu 棒材表面制备出了晶粒尺寸从 20 nm 逐渐增大到 300 nm 的梯度纳米结构, 实验结果表明, 其屈服强度最大值由粗晶的 63 MPa 提高至 129 MPa, 而塑性与粗晶 Cu 相当 (约 31%)。Lin 等^[14]通过电沉积法制备了晶粒尺寸从 29 nm 变化至 4 μm 的不同梯度率的梯度纳米

晶 Ni, 研究发现当梯度率 n 处于 0.53~3 附近时, 梯度结构展现出强度与延展性的最佳匹配。Pan 等^[15]通过循环扭转变形制备了具有梯度位错胞的 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金, 实验结果表明, 梯度位错胞结构显著提高了材料的屈服强度, 同时保持了良好塑性, 并产生了额外加工硬化效应。Ma 等^[16]采用扭转变形的制备方法制备了梯度纳米晶 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金, 梯度结构在保持可观均匀延伸率 (约 22.5%) 的同时, 展现出超过 1 GPa 的极限抗拉强度。然而, 由于实验上可控制备晶粒梯度结构仍然比较困难, 目前对最佳强-塑性协同的梯度结构特征及变形机制的认识仍比较有限^[17]。

随着计算技术的快速发展, 纳米尺度分子动力学 (molecular dynamics, MD) 方法、亚微米尺度离散位错动力学 (discrete dislocation dynamics, DDD) 方法和微米尺度晶体塑性有限元 (crystal plasticity finite element method, CPFEM) 方法被广泛应用于梯度纳米结构金属的模拟研究中, 模拟计算中不但可以构建实验中不易实现的各种梯度结构, 而且可以对其微观结构优化和强-塑化机理进行系统研究。其中 MD 方法不但可以从原子尺度出发获得宏观力学特性和应变响应信息, 而且还能实时追踪变形中微观结构组态的演化过程。大量 MD 模拟研究表明, 梯度纳米结构中的塑性变形首先发生在较小

收稿日期: 2025-09-28

基金项目: 国家自然科学基金 (52201103, 52401168)

作者简介: 侯兆阳, 男, 1980 年生, 博士, 教授, 长安大学理学院, 陕西 西安 710064, 电话: 029-82334891, E-mail: zhaoyanghou@163.com

晶粒中,然后向较大晶粒扩展^[18-19];而且还在梯度结构中发现了实验观察^[20]和应变梯度塑性理论预测^[21-23]的应力与应变梯度^[24-27]。部分模拟研究还表明,晶粒尺寸的梯度分布能够有效延缓材料软化现象的发生^[28-30]。目前,尽管对均匀纳米晶粒(homogeneous nano-grained, HNG)结构的 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金已有大量的MD模拟研究^[31-33],但较少涉及到具有最佳强-塑协同的GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金的晶粒梯度分布特征及强度-塑性协同增效机理。

为此,本工作采用MD模拟方法深入探究了GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金中,不同晶粒尺寸梯度分布对其力学行为与变形机制的影响,重点分析了梯度晶粒尺寸分布处于反霍尔-佩奇(inverse Hall-Petch, IHP)关系区、霍尔佩奇(Hall-Petch, HP)关系区和IHP→HP过渡区时,材料强度-塑性协同效应之间的差异,研究结果可为设计和制备高性能GNG多主元合金提供理论支撑与实验指导。

2 模型搭建和计算方法

采用Voronoi剖分方法构建了不同晶粒尺寸梯度分布的 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金。如图1所示,在尺寸为 $90.0\text{ nm}\times 30.0\text{ nm}\times 15.0\text{ nm}$ 的模拟盒子中构建了三维GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 结构,其中,白色代表晶界无序原子,绿色代表fcc晶格原子。沿 x 轴方向从表层晶粒尺寸最小值 $d_{\min}=6.0\text{ nm}$ 增加至中心区域最大值 $d_{\max}=12.0\text{ nm}$,整个体系晶粒总数为136个。以晶粒尺寸区间 $6.0\sim 12.0\text{ nm}$ 的梯度结构为基体,均匀缩放1.0、1.2、1.4、1.6、1.8和2倍,得到6种不同梯度晶粒尺寸区间的GNG结构: $6.0\sim 12.0\text{ nm}$ 、 $7.2\sim 14.4\text{ nm}$ 、 $8.4\sim 16.8\text{ nm}$ 、 $9.6\sim 19.2\text{ nm}$ 、 $10.8\sim 21.6\text{ nm}$ 和 $12.0\sim 24.0\text{ nm}$ 。这6个梯度结构具有相同的晶粒总数、晶体学取向、初始晶界形态及各成分原子比例,它们的平均晶粒尺寸依次为8.2、9.9、11.5、13.2、14.9与16.6 nm;随着模型尺寸的增大,体系中的原子总数从3 501 413增至28 010 274,各梯度结构模型的详细参数如表1所示。根据之前的模拟计算结果可知, $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金由HP强化向IHP软化转化的临界晶粒尺寸约为 12.0 nm ^[30-32];所以在这6个梯度结构中,包含了IHP软化

区、IHP→HP过渡区以及HP强化区。此外,根据相关文献[34-35]的实验结果,模拟计算中fcc结构 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 合金晶格常数设定为 0.359 nm 。通过原子取代法引入Al、Ni、Cr、Co及Fe元素,最终得到原子浓度分别为2.4%、24.4%、24.4%、24.4%与24.4%的随机固溶体。

本研究中MD模拟借助于开源软件LAMMPS^[36]计算, AlCoCrFeNi 合金体系中的原子间的相互作用,选用Farkas与Caro^[37]提出的修正嵌入原子法(modified embedded atom method, MEAM)势函数描述。采用Velocity-Verle算法对牛顿运动方程进行数值积分,时间步长为2 fs。

在单轴拉伸模拟前,首先采用共轭梯度算法对初始结构进行能量最小化处理,确保初始构型处于全局势能最低状态;随后在300 K温度下等温运行100 ps,以使体系处于热力学平衡状态。等轴拉伸过程模拟中,在 x 、 y 、 z 3个方向均施加周期边界条件,在300 K温度下沿 y 轴(垂直于晶粒梯度方向 x 轴)以 $1.0\times 10^8\text{ s}^{-1}$ 的应变速率进行单轴拉伸。在整个拉伸变形过程中,采用Nose-Hoover热浴的方法进行控温。

在MD模拟计算后,采用公共近邻分析(common neighbor analysis, CNA)法^[38]对体系中各种微观结构组态进行表征,采用位错提取算法(dislocation extraction algorithm, DXA)^[39]对变形过程不同类型位错进行识别和分析,借助可视化软件OVITO^[40]进行微观结构可视化,其中fcc、hcp和无序结构原子分别标记为绿色、红色和白色。

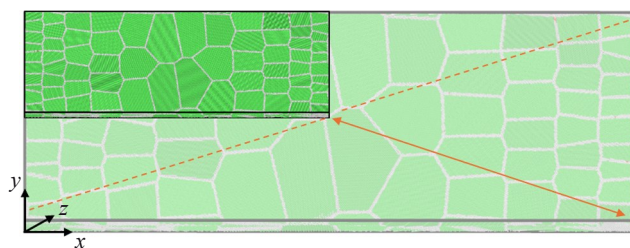


图1 采用比例缩放构建的GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金微观结构
Fig.1 Microstructures of GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ HEA constructed by proportional scaling method

表1 不同梯度晶粒尺寸区间下GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金的结构参数

Table 1 Detailed parameters of six GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ HEAs corresponding to different gradient grain-size ranges

Grain-size range/nm	HP relationship	Average grain size/nm	Dimension	Total number of atoms
6.0-12.0	IHP	8.2	$90.0\text{ nm}\times 30.0\text{ nm}\times 15.0\text{ nm}$	3 501 413
7.2-14.4	IHP→HP	9.9	$108.0\text{ nm}\times 36.0\text{ nm}\times 18.0\text{ nm}$	6 050 184
8.4-16.8	IHP→HP	11.5	$126.0\text{ nm}\times 42.0\text{ nm}\times 21.0\text{ nm}$	9 607 344
9.6-19.2	IHP→HP	13.2	$144.0\text{ nm}\times 48.0\text{ nm}\times 24.0\text{ nm}$	14 341 518
10.8-21.6	IHP→HP	14.9	$162.0\text{ nm}\times 54.0\text{ nm}\times 27.0\text{ nm}$	20 419 553
12.0-24.0	HP	16.6	$180.0\text{ nm}\times 60.0\text{ nm}\times 30.0\text{ nm}$	28 010 274

3 结果和讨论

3.1 梯度晶粒尺寸区间对力学性能的影响

图2给出了不同晶粒尺寸区间(6.0~12.0 nm、7.2~14.4 nm、8.4~16.8 nm、9.6~19.2 nm、10.8~21.6 nm和12.0~24.0 nm)下,GNG Al_{0.1}CoCrFeNi多主元合金拉伸的应力-应变响应曲线。由图2可见,在弹性阶段,不同晶粒尺寸区间下的应力-应变曲线基本重合,说明晶粒尺寸分布对其弹性模量影响较小。在弹性变形阶段之后,应力-应变曲线开始偏离线性关系,梯度结构开始发生塑性变形;应力-应变曲线达到峰值应力后逐渐下降,材料进入屈服阶段。屈服强度被定义为材料发生屈服现象时抵抗微观塑性变形的应力极限。在工程应用中,通常将产生0.2%非弹性应变对应的应力作为屈服强度;在MD拉伸模拟中,GNG Al_{0.1}CoCrFeNi多主元合金在应力达到最大值时开始出现屈服现象,因此其屈服强度取应力-应变曲线的峰值应力。由图2可见,随着梯度晶粒尺寸区间晶粒尺寸的增大,材料的屈服强度持续提升;当梯度晶粒尺寸区间增大到IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时,屈服强度的增加变得非常缓慢。

由图3中平均流变应力(7%~20%应变下应力的平均值)随梯度晶粒尺寸区间平均晶粒尺寸的变化关系,可见,平均流变应力在IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时具有极大值。

为了进一步衡量不同梯度结构的强-塑协同性,我们

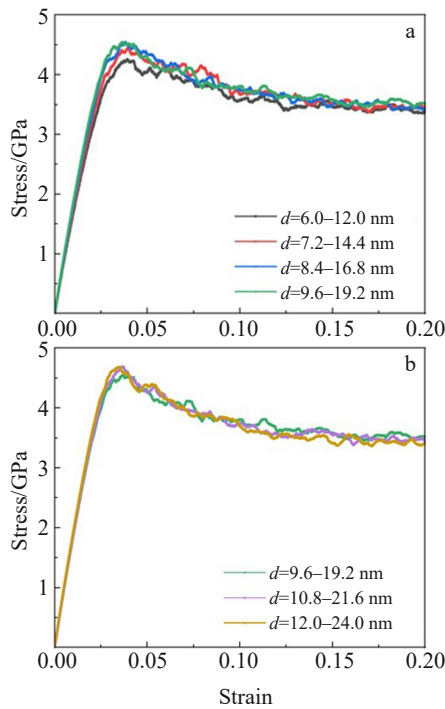


图2 GNG Al_{0.1}CoCrFeNi多主元合金在6种梯度晶粒尺寸范围下拉伸的应力-应变曲线

Fig.2 Stress-strain curves of GNG Al_{0.1}CoCrFeNi HEAs with six gradient grain-size ranges under uniaxial tensile loading

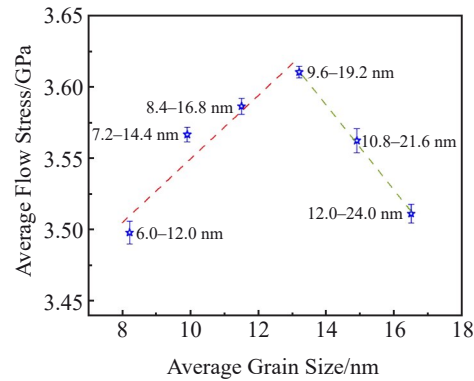


图3 不同梯度晶粒尺寸区间下 GNG Al_{0.1}CoCrFeNi 多主元合金的平均流变应力

Fig.3 Relationship between average flow stress and average grain size of GNG Al_{0.1}CoCrFeNi HEAs with different gradient grain-size ranges

将屈服强度 σ_y 和平均流变应力 σ_m 的乘积 σ_{YM} 作为其定量衡量指标,如图4所示。可见,随着梯度晶粒尺寸区间晶粒尺寸的增大, σ_{YM} 经历了先增大后减小的变化过程;当晶粒尺寸处于IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时,体系的 σ_{YM} 具有最大值。由此表明,此时材料不但具有较高的初始强度,还具有优异的应变硬化能力,这使得它在变形后能迅速提高流变应力,抵抗局部集中变形,从而将推迟颈缩现象的发生而提升材料的均匀延伸率。GNG Al_{0.1}CoCrFeNi多主元合金的强度和塑性对梯度晶粒尺寸的分布具有较高敏感性,当梯度晶粒尺寸处于IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时,体系具有最佳的强度-塑性协同效应。

3.2 梯度晶粒尺寸区间对应变和应力分布的影响

探究变形过程中局域应变和应力的空间分布及演变规律,对于阐明晶粒尺寸梯度分布对GNG Al_{0.1}CoCrFeNi多主元合金强-塑协同效应及变形机制的影响至关重要。图5给出了GNG Al_{0.1}CoCrFeNi多主元合金塑性变形时,

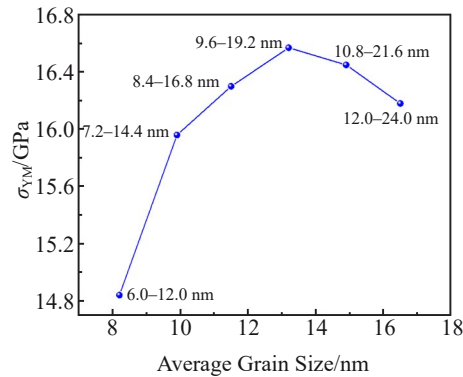


图4 不同梯度晶粒尺寸区间下 GNG Al_{0.1}CoCrFeNi 多主元合金的强-塑协同参数 σ_{YM}

Fig.4 Strength-ductility synergy parameter σ_{YM} of GNG Al_{0.1}CoCrFeNi HEAs with different gradient grain-size ranges

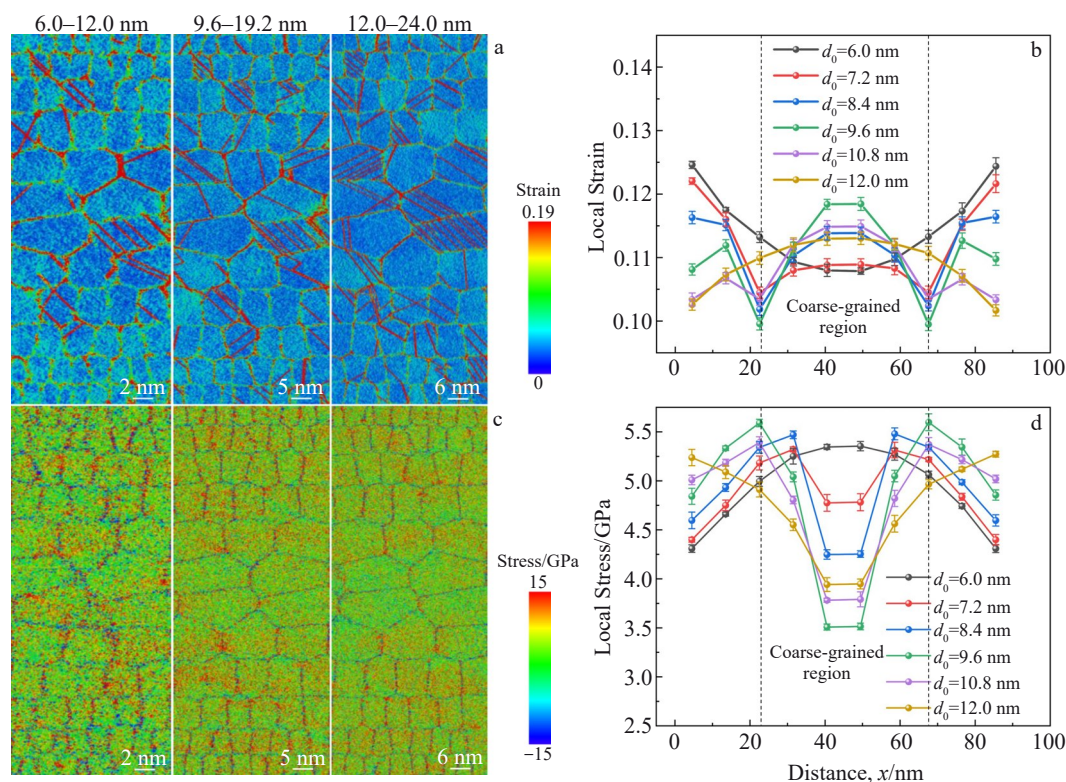


图5 不同梯度晶粒尺寸区间下GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金的局域应变和应力分布

Fig.5 Distributions of local strain and stress in GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ HEAs with different gradient grain-size ranges: (a) nephograms of local strain in GNG structures; (b) distribution of local strain along the direction of structural gradient (x direction); (c) nephograms of local stress in GNG structures; (d) distribution of local stress along the direction of structural gradient (x direction)

局域应变和应力沿晶粒尺寸梯度方向(x 方向)的空间分布特征。如图5a和5b所示,局域应变在不同梯度晶粒尺寸区间下均呈现梯度分布,但沿结构梯度方向(x 方向)呈现不同的分布特征。当梯度晶粒尺寸区间处于IHP软化区(6.0~12.0 nm)时,应变分布呈现中部粗晶区较小、表层细晶区较大的特征;随着梯度晶粒尺寸区间向较大晶粒尺寸偏移,进入IHP→HP过渡区(7.2~14.4 nm)时,中部粗晶区的局域应变显著增大,而粗晶与细晶之间过渡晶粒的局域应变则显著降低,如图5b中红色曲线所示。随着梯度晶粒尺寸区间进一步向着更大晶粒尺寸偏移,中心粗晶区的局域应变持续增大,而过渡晶粒的局域应变随之减小,形成明显的应变梯度,同时表层细晶区的局域应变开始下降,如图5b中蓝色曲线所示。当梯度晶粒尺寸区间达到(9.6~19.2 nm)时,中部粗晶与过渡晶粒之间的局域应变差值达到最大,如图5b中的绿色曲线;但当梯度晶粒尺寸区间进一步偏移至HP强化区(10.8~21.6 nm)时,粗晶区的局域应变开始减小,过渡晶粒的局域应变则有所增加,二者之间的应变差值随之缩小,呈现出与此前相反的变化趋势,此阶段表层细晶区的局域应变仍持续下降,如图5b中紫色曲线所示。而当梯度晶粒尺寸区间完全进入HP区(12.0~24.0 nm)时,如图5b中黄色曲线所示,其应变分布特征与IHP区观察到的结果则完全相反。

如图5c和5d所示,GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金中应力分布随梯度晶粒尺寸区间的变化趋势与应变分布的变化趋势刚好相反:随着梯度晶粒尺寸区间向较大晶粒尺寸方向偏移,中部粗晶的应力呈现先减小、后增大的变化特征;过渡晶粒的应力则呈现先增大、后减小的变化趋势;而细晶区域呈逐步增大的变化趋势。在IHP软化区(6.0~12.0 nm)时,中部粗晶处的应力值较高,表层细晶处的应力值较低;进入HP强化区(12.0~24.0 nm)时,应力分布特征则完全相反,中心粗晶处的应力值较低,表层细晶处的应力值较高。值得注意的是,当梯度晶粒尺寸范围处于IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时,中部粗晶与过渡晶粒之间的局域应力差值达到最大值。

由上述对局域应变和应力分布特征的分析可见,当梯度晶粒尺寸区间处于IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时,体系的应变和应力梯度处于最大值;同时结合图3的分析可知,此时的梯度晶粒结构具有最优的强-塑协同效应。由此可见,梯度GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金在IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时的最佳强-塑协同,与体系中最大的应变和应力梯度密切相关。

3.3 梯度晶粒尺寸区间对位错特征的影响

为了讨论梯度晶粒尺寸区间对体系中位错特征的影响,这里选取IHP软化区(6.0~12.0 nm)、IHP→HP过渡区

(9.6~19.2 nm)和HP强化区(12.0~24.0 nm)3种特征梯度结构进行讨论。图6给出了这3种梯度结构拉伸达到15.0%应变时体系中位错的分布特征,其中,Shockley部分位错、Stair-rod和Hirth位错分别用绿色、紫色和黄色表示,其他类型位错用红色表示。由图6a和6d可见,梯度晶粒尺寸区间处于IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时,体系中位错密度明显高于IHP软化区(6.0~12.0 nm)和HP强化区(12.0~24.0 nm);而处于IHP软化区的梯度结构,位错密度最低。根据应变梯度塑性理论^[21-23],当材料中存在非均匀塑性变形时,即应变梯度,为了协调不同区域之间的变形,必须引入几何必需位错(geometrically necessary dislocations, GNDs),GNDs的密度 ρ_{GND} 与应变梯度 η 成正比: $\rho_{\text{GND}} \propto \eta/b$,其中 b 为伯氏矢量。结合对图3、图5和图6的分析可知,当梯度晶粒结构处于IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时,该结构梯度产生最大的应变和

应力梯度,为了协调这种不兼容,系统将持续发射和积累GNDs,从而导致该梯度区间下的总体位错密度达到最大。由图6a和6d还可以发现,当梯度晶粒尺寸区间处于IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)时,体系不仅有大量的Shockley不全位错,还存在相当数量的Stair-rod位错和Hirth位错。这些位错通常是不全位错在晶界处发生反应、交截或分解的产物,这类反应生成的位错往往难以运动,会稳定地存在于结构中,进一步提高了位错的存储效率和加工硬化率,从而同时提升了强度和塑性。

同时,如图6b、6c和6e所示,通过对比中部粗晶区与表层细晶区的位错分布特征可见,对于梯度晶粒尺寸区间处于IHP→HP过渡区(9.6~19.2 nm)和HP强化区(12.0~24.0 nm)时,它们中部粗晶区的晶粒尺寸分别为19.2和24.0 nm,均大于强化→软化转变的临界晶粒尺寸 d_c (约12.0 nm),此时位错滑移为塑性变形的

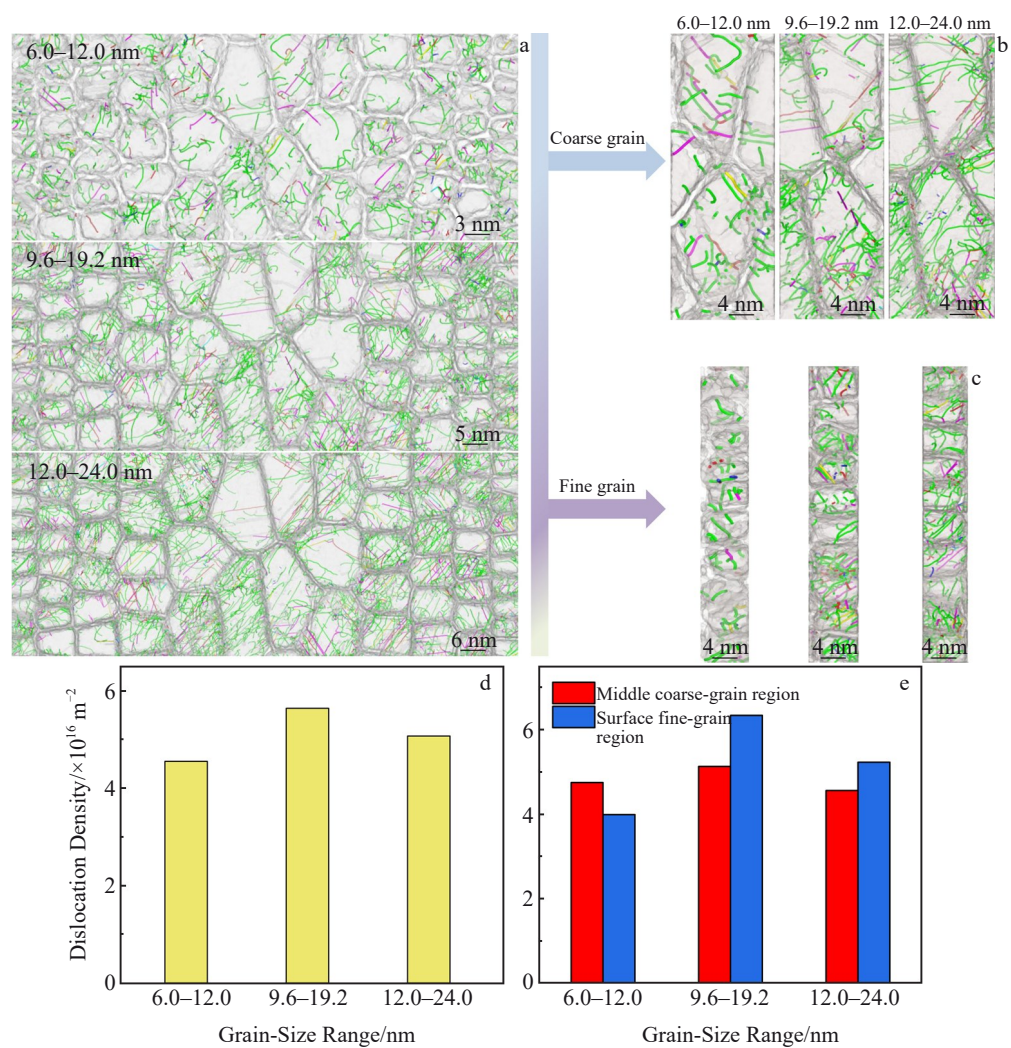


图6 3种梯度晶粒尺寸区间下GNG Al_{0.1}CoCrFeNi多主元合金中位错分布特征

Fig.6 Dislocation distribution characteristics in GNG Al_{0.1}CoCrFeNi HEAs with three gradient grain-size ranges: (a) dislocation distributions of the overall structure; (b) dislocation distributions in middle coarse-grain region; (c) dislocation distributions in surface fine-grain region; (d) statistical histogram of dislocation density of the overall structure; (e) statistical histogram of dislocation density in middle coarse-grain and surface fine-grain regions

而表层细晶的晶粒尺寸均小于 d_c , 晶界活动为塑性变形的机制。从而, 当梯度晶粒尺寸区间处于 IHP→HP 过渡区和 HP 强化区时, 中部粗晶区的位错密度高于表层细晶区的位错密度。对于梯度晶粒尺寸区间处于 IHP 软化区 (6.0~12.0 nm) 时, 中部粗晶区的晶粒尺寸 (12.0 nm) 和表层细晶的晶粒尺寸均小于 d_c , 晶界活动为塑性变形的机制; 从而当梯度晶粒尺寸区间 IHP 软化区时, 表层细晶中的位错密度高于中部粗晶中的位错密度。

3.4 梯度晶粒尺寸区间对晶界活动的影响

大量实验^[13-15,41]表明, 梯度纳米结构细晶区内的晶界对其塑性行为起着关键作用。晶界原子的活动, 如晶界迁移和滑移, 是导致非仿射塑性位移的主要原因^[26-28,42-43]。非仿射位移的大小可通过以下表达式定量评估:

$$D_{\min}^2 = \min_{J_i} \sum_{j=1}^{N_i} |d_{ij} - J_i d_{ij}^0|^2 \quad (1)$$

式中, N_i 为原子 i 的近邻原子总个数, d_{ij}^0 为未变形构型中原子 i 和原子 j 之间的原始距离向量, d_{ij} 为它们当前的距离向量, 变形张量 J_i 反映了局部仿射变形, 由参考构型得到每个粒子的邻近粒子, 计算它们的相对变形, 得到中心粒子的局部变形梯度张量 J_i 。

图 7 给出了不同梯度晶粒尺寸区间下 GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金在拉伸变形过程的晶界迁移行为, 其中, 灰色原子表示初始晶界位置, 绿色原子表示在 15% 应变下的晶界, 红色箭头表示晶界迁移的方向。如图 7a~7c 中红色箭头所示, 当梯度晶粒尺寸区间处于 IHP 软化区 (6.0~12.0 nm) 时, 在中部粗晶和表面细晶中晶界均呈现活跃的迁移与旋转; 当梯度晶粒尺寸区间处于 HP 强化区 (12.0~24.0 nm) 时, 整个晶界基本保持稳定, 只有表层细晶中晶界呈现微弱的迁移。由图 7d 进一步可见, 随着梯度晶粒尺寸区间向着较大晶粒尺寸偏移, $D_{\min}^2$ 呈持续下降的趋势; 特别的是, 当梯度晶粒尺寸区间处于 IHP→HP 过渡区 (9.6~19.2 nm) 时, $D_{\min}^2$ 的下降速度开始变得缓慢。由此表明当梯度晶粒尺寸区间处于 IHP 软化区, 晶界原子迁移对塑性变形起着关键的作用, 而当梯度晶粒尺寸区间处于 HP 强化区, 晶界迁移对塑性变形的贡献较小, 此时位错滑移已成为塑性变形的形式。

本研究也存在一定局限性, MD 模拟的纳米尺度模型和极高的应变率 ($1.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$) 与宏观实验条件存在差异, 这可能导致我们观察到一些在准静态实验中不占主导地位的变形机制。另外, 本研究中的势函数已被证明能较好地描述 fcc 结构高熵合金的基本力学行为, 但其对缺陷能、堆垛层错能等关键参数描述的精确度, 仍可能对定量结果产生影响。但这些研究结果可为设计和制备高性能 GNG 多主元合金提供理论支撑与实验指导。

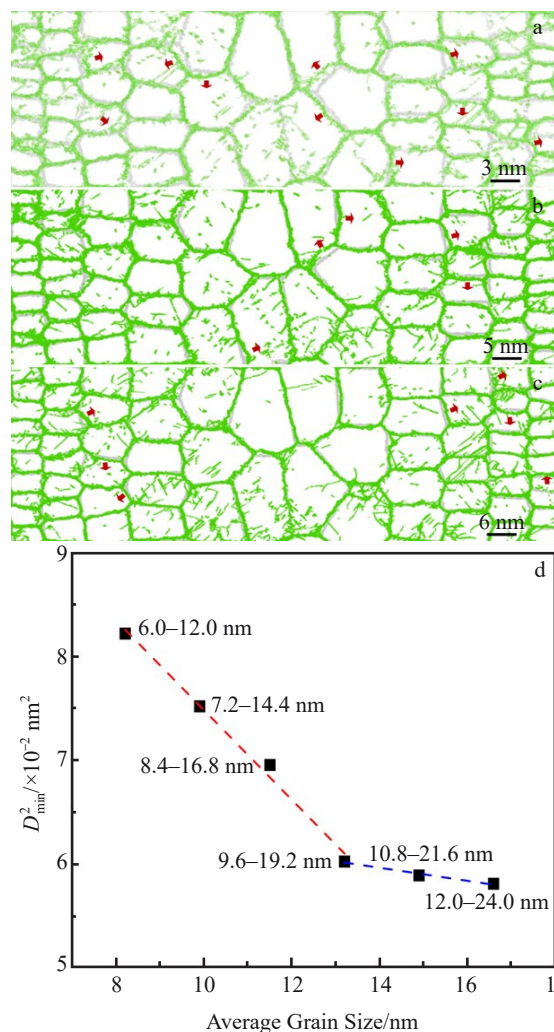


图 7 不同梯度晶粒尺寸区间下 GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金在拉伸变形过程晶界的迁移行为

Fig.7 Grain boundary migration processes of GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ HEAs with grain-size ranges of 6.0–12.0 nm (a), 9.6–19.2 nm (b), and 12.0–24.0 nm (c) during uniaxial tension; variation of non-affine displacement with average grain size at 20.0% tensile strain (d)

4 结论

1) 梯度晶粒尺寸区间显著影响 GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金的强度和塑性, 当梯度晶粒尺寸区间处于 IHP→HP 过渡区 (9.6~19.2 nm) 时, 体系呈现最佳强度和塑性协同。

2) 梯度晶粒尺寸区间对 GNG $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 多主元合金的局域应变和应力分布有显著影响, 特别是当梯度晶粒尺寸区间处于 IHP→HP 过渡区 (9.6~19.2 nm) 时, 体系内局域应变和应力的梯度最为显著, 此时体系中的位错密度最大, 这种局域应变和应变的不均匀分布, 对材料强-塑协同起着关键作用。

3) 当梯度晶粒区间的平均尺寸小于 IHP→HP 过渡区 (9.6~19.2 nm) 时, 随着平均晶粒尺寸的增加, 晶界的

非仿射位移 $D_{\min}^2$ 快速减小,晶界活动对塑性变形起主导地位;当平均晶粒尺寸大于IHP→HP过渡区时,非仿射位移 $D_{\min}^2$ 下降速度明显放缓,晶界迁移对塑性变形的贡献较小,此时位错滑移已成为塑性变形的形式。

参考文献 References

- [1] Yan X L, Li M Y, Liu H M *et al. Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2025, 35: 2045
- [2] Xiong F, Wu Y, Liu X J *et al. Scripta Materialia*[J], 2023, 232: 115495
- [3] Zhang Y, Zuo T T, Tang Z *et al. Progress in Materials Science*[J], 2014, 61: 1
- [4] Tian Q W, Zhang G J, Yin K X *et al. Intermetallics*[J], 2020, 119: 106707
- [5] Wu S W, Wang G, Yi J *et al. Materials Research Letters*[J], 2017, 5(4): 276
- [6] Li J H, Lu K J, Zhao X J *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2022, 131: 185
- [7] Ma E, Zhu T. *Materials Today*[J], 2017, 20(6): 323
- [8] Zhao Yonghao(赵永好), Mao Qingzhong(毛庆忠). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2022, 58(11): 1385
- [9] Zhao Yanchun(赵燕春), Lv Zhi(吕志), Ma Huwen(马虎文) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2024, 53(4): 1195
- [10] Moniri S, Yang Y, Ding J *et al. Nature*[J], 2023, 624(7992): 564
- [11] He Q F, Wang J G, Chen H A *et al. Nature*[J], 2022, 602(7896): 251
- [12] Wang H, Yang P Y, Zhao W J *et al. Nature Communications*[J], 2024, 15(1): 6782
- [13] Fang T H, Li W L, Tao N R *et al. Science*[J], 2011, 331(6024): 1587
- [14] Lin Y, Pan J, Zhou H F *et al. Acta Materialia*[J], 2018, 153: 279
- [15] Pan Q S, Zhang L X, Feng R *et al. Science*[J], 2021, 374(6570): 984
- [16] Ma S G, Li Y J, Li S *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2022, 829: 142165
- [17] Li X Y, Lu L, Li J G *et al. Nature Reviews Materials*[J], 2020, 5: 706
- [18] Li W B, Yuan F P, Wu X L. *AIP Advances*[J], 2015, 5: 087120
- [19] Fang Q H, Li L, Li J *et al. Computational Materials Science*[J], 2018, 152: 236
- [20] Wan T, Cheng Z, Bu L F *et al. Scripta Materialia*[J], 2021, 201: 113975
- [21] Ashby M F. *Philosophical Magazine*[J], 1970, 21(170): 399
- [22] Gao H, Huang Y, Nix W D *et al. Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 1999, 47(6): 1239
- [23] Huang Y, Gao H, Nix W D *et al. Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2000, 48(1): 99
- [24] Sun J, Ye H F, Tao J *et al. Journal of Physics D: Applied Physics*[J], 2019, 52: 365304
- [25] He C Y, Yang X F, Chen H *et al. Materials Today Communication*[J], 2022, 31: 103198
- [26] Xu L, Huang Z F, Shen Q *et al. Materials & Design*[J], 2022, 221: 110929
- [27] Zhou K, Zhang T, Liu B *et al. Computational Materials Science*[J], 2018, 142: 389
- [28] Cao P. *Nano Letters*[J], 2020, 20: 1440
- [29] Gan K F, Yan D S, Zhang Y *et al. Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2023, 176: 105305
- [30] Li Y H, Hou Z Y, Nan K H *et al. Journal of Materials Science*[J], 2025, 60: 4035
- [31] Jiang J, Chen P W, Qiu J L *et al. Materials Today Communications*[J], 2021, 28: 102525
- [32] Jiang J, Sun W F, Luo N *et al. Materials Chemistry and Physics*[J], 2023, 300: 127556
- [33] Zheng W, Han J Z, Duan X *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2022, 51(9): 3230
- [34] Shivam V, Shadangi Y, Basu J *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2020, 832: 154826
- [35] Fourmont A, Gallet S L, Politano O *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2020, 820: 153448
- [36] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1
- [37] Farkas D, Caro A. *Journal of Materials Research*[J], 2020, 35: 3031
- [38] Faken D, Jónsson H. *Computational Materials Science*[J], 1994, 2(2): 279
- [39] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2012, 20: 085007
- [40] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18: 015012
- [41] Wang J J, Tao N R, Lu K. *Acta Materialia*[J], 2019, 180(14): 231
- [42] Falk M L, Langer J S. *Physical Review E*[J], 1998, 57(6): 7192
- [43] Cao P H, Short M P, Yip S. *Proceedings of the National Academy of Sciences*[J], 2017, 114(52): 13631

Molecular Dynamics Simulation of Grain-Size Range for Optimal Strength-Ductility Synergy in Gradient Nano-Grained $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ High-Entropy Alloy

Hou Zhaoyang, Li Danni, Li Yuanhao, Zou Pengfei, Zhao Meng, Li Kefan
(School of Sciences, Chang'an University, Xi'an 710064, China)

Abstract: The introduction of gradient nano-grained (GNG) structure into metallic materials is recognized as an effective strategy to mitigate or eliminate the strength-ductility trade-off. The distribution of grain sizes within the gradient structure plays a critical role in modulating the strength-ductility synergy. In this study, the influences of the gradient grain-size distribution on the mechanical characteristics, strain and strain distributions, dislocation distribution, and grain boundary migration were investigated using molecular dynamics simulations. The results demonstrate that an optimal strength-ductility synergy is achieved when the gradient grain-size range lies within the transition region between the inverse Hall-Petch (IHP) and Hall-Petch (HP) regimes (9.6–19.2 nm). Further analysis indicates that within the IHP-HP transition zone (9.6–19.2 nm), the gradients of local strain and stress are the most pronounced, and the dislocation density reaches a maximum, leading to an optimal balance between strength and ductility. When the gradient grain-size range falls within the IHP softening regime, the plastic deformation is predominantly governed by grain boundary-mediated mechanisms. In contrast, when the gradient grain-size range is located in the HP strengthening regime, dislocation slip becomes the primary mode of plastic deformation.

Key words: gradient nano-grain; grain-size range; mechanical behavior; deformation mechanism; molecular dynamics simulation

Corresponding author: Hou Zhaoyang, Ph. D., Professor, School of Sciences, Chang'an University, Xi'an 710064, P. R. China, Tel: 0086-29-82334891, E-mail: zhaoyanghou@163.com