

# 化学短程有序在晶界处的作用及其对 $Al_{0.5}CoCrFeNi$ 合金拉伸和抗辐照性能影响的分子模拟

柴小松, 袁力军, 李光磊, 李婧, 李达

(西南交通大学 材料先进技术教育部重点实验室, 四川 成都 610031)

**摘要:** 多主元合金中的化学短程有序结构已被视作有效的合金强化手段, 而化学短程有序也会对晶界处元素分布产生影响。为研究其对合金性能的影响, 采用分子动力学方法研究了几种典型晶界处的化学短程有序对  $Al_{0.5}CoCrFeNi$  合金拉伸和抗辐照性能的影响。通过位错分析及点缺陷分析阐明了相关影响机理。结果表明, 错配度越高的晶界其晶界处的元素偏聚越明显。化学短程有序能够提升双晶的拉伸性能及抗辐照能力, 特别是对于含错配度较大晶界的双晶, 晶界能够有效吸收辐照产生的间隙原子。

**关键词:** 化学短程有序; 多主元合金; 晶界; 分子动力学

**中图分类号:** TG139

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1002-185X(2024)08-2267-08

多主元合金 (multi-principal element alloys, MPEAs) 表现出比传统合金更高的抗拉强度、延展性<sup>[1]</sup>以及更强的抗辐照性能<sup>[2]</sup>。MPEAs 的组成元素浓度通常都很高, 常常认为其具有极端的化学无序性, 不同类型的元素完全随机分布在晶格中, 亦即 MPEAs 的高熵效应。然而, 最近的理论计算和实验研究表明: 由于 MPEAs 中各元素之间的混合焓差异, 各元素分布并非完全随机, 而是具有某些特殊的有序倾向, 即化学短程有序 (chemical short-range-order, CSRO)<sup>[3]</sup>。CSRO 区别于长程有序, 常常发生在几个原子的尺度范围内, 在中心原子周围的几个原子层有明显的元素分布差异。CSRO 常常被认为对 MPEAs 有强化作用, 例如, CSRO 结构能增大位错滑移阻力进而强化 MPEAs 拉伸性能<sup>[5]</sup>以及阻碍点缺陷扩散提高 MPEAs 抗辐照性能<sup>[6]</sup>。

晶界在合金中扮演了十分重要的角色, 对材料失效有深远影响。已有的研究表明, MPEAs 在变形过程中位错的发射仍然发生在晶界处<sup>[5]</sup>, 这与传统合金一致, 是合金变形首先发生的地方。MPEAs 的晶界处往往也会存在一定的化学波动。例如, CuNiCoFe 合金中 Cu 在晶界处的偏聚有效降低了晶界处的间隙原子形成能和空位形成能差异, 有助于消除晶内点缺陷<sup>[8]</sup>; CoCrNi 合金中孪晶界和 CSRO 的复合作用能进一步强化合金<sup>[9]</sup>。这些研究均表明, MPEAs 晶界处的 CSRO

结构能够对合金的性能产生影响。

fcc 结构的  $Al_xCoCrFeNi$  合金因为其良好的抗辐照性能受到广泛的关注<sup>[2]</sup>, 有望成为下一代核用材料。而晶界处化学短程有序结构对 fcc 结构  $Al_xCoCrFeNi$  合金拉伸和抗辐照性能的影响尚不明确。因此, 拟采用几个含典型晶界的双晶模型来研究  $Al_{0.5}CoCrFeNi$  合金在晶界处的 CSRO 结构, 并通过微观缺陷分析其对合金变形及辐照行为的影响。选取  $Al_{0.5}CoCrFeNi$  这一成分是前期的研究表明, 对于 fcc 结构  $Al_xCoCrFeNi$  合金, Al 含量越高, CSRO 强化作用越明显<sup>[10]</sup>。

## 1 模型和方法

目前 MPEAs 被报道的典型晶界较少, 在本研究中, 根据错配度从低到高, 采用了常见的共格孪晶界  $\Sigma 3[101](11\bar{1})$ , 下文中简称 GB1; 对称倾斜晶界  $\Sigma 5[001](210)$ , 下文中简称 GB2; 扭转晶界  $\Sigma 5(010)$ , 下文中简称 GB3; 以及对称倾斜晶界  $\Sigma 11[110](332)$ , 下文中简称 GB4。其中, 孪晶界是 fcc 合金中常见的晶界; 而对称倾斜晶界  $\Sigma 5[001](210)$  和扭转晶界  $\Sigma 5[210]$  则是传统 fcc 合金常见的晶界, 也被用在本研究的模拟中;  $\Sigma 11[110](332)$  对称倾斜晶界则是在 MPEAs 中研究较多的晶界<sup>[11]</sup>。晶界模型的建立采用 AtomsK 软件<sup>[13]</sup>。

收稿日期: 2023-08-31

基金项目: 四川省重大科技专项 (2021ZDZX0001)

作者简介: 柴小松, 男, 1997年生, 硕士, 西南交通大学材料先进技术教育部重点实验室, 四川 成都 610031, E-mail: 1003818059@qq.com

所有的分子模拟均在 LAMMPS (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator) 中进行。采用随机替代法对无序合金的模型进行建立。具体操作为, 建立一个完全为 Fe 的模型, 采用随机替代的方法, 建立原子比为 Al:Co:Cr:Fe:Ni=0.5:1:1:1:1 的随机模型; 为了减小随机带来的不合理分布, 建立 100 个随机模型, 取能量最小的模型作为最终的随机模型。拉伸方向为晶界的法向, 所有的模型建立后均采用共轭梯度法进行能量最小化, 无序合金的弛豫在 NPT 系综下进行, 3 个方向均为周期性边界条件, 温度控制为 300 K, 3 个方向的压强控制为 0。CSRO 合金通过混合 MD/MC (Molecular Dynamics/Monte Carlo) 方法建立。每个 MC 步交换指定数量的两种不同类型的原子。交换之后, 根据 Metropolis-Hastings 接受准则接受或放弃此次交换。Metropolis-Hastings 接受准则表达式如下:

$$\begin{cases} P = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} & \Delta E > 0 \\ P = 1 & \Delta E < 0 \end{cases} \quad (1)$$

式中,  $\Delta E$  表示为系统交换原子前后的能量差,  $P$  表示接受系统状态改变的概率。当  $\Delta E$  小于 0, 即交换后系统能量下降, 接受此次原子交换; 当  $\Delta E$  大于 0, 即交换后系统能量升高, 以  $e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$  的概率接受此次交换,  $k_B$  表示波尔兹曼常数,  $T$  表示计算体系能量时采用的温度。Metropolis-Hastings 接受准则简单而言就是以概率接受新状态, 当  $\Delta E > 0$  时, 随机生成  $(0, 1)$  区间内的数字, 若小于  $P$  则接受此次交换, 若大于  $P$  则拒绝此次交换,  $\Delta E < 0$  则直接接受交换。

在混合 MD/MC 弛豫中, 为了减少计算时间, 采用了 1/8 模型进行 MD/MC 混合弛豫。每 2000 个 MD 步尝试 10000 次原子交换, 总共弛豫 400000 步。单轴拉伸在 NPT 系综下进行, 拉伸方向为  $z$  方向,  $x$  和  $y$  方向控制压强为 0, 整体温度控制为 300 K, 3 个方向仍为周期性边界条件。应变速率设置为  $5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ , 总应变为 20%。级联碰撞模拟的初级离位原子 (primary knock-on atom, PKA) 能量为 10 keV。具体模拟参数如表 1 所示。

拉伸模拟选用 EAM 势函数, 势函数文件采用了 Farkas 等人开发的 Al-Co-Cr-Fe-Ni 势函数<sup>[14]</sup>, 作者讨论了合金体系中 Al 加入引起的晶内的化学短程有序, 适用于该合金体系的化学短程有序相关模拟。碰撞模拟的势函数选用 EAM(embedded atom method)和 ZBL (Ziegler-Biersack-Littmark) 混合势函数。碰撞模拟中一个重要的设置是可变时间步长的设置, 研究中最小时间步设置为 0.000001 ps, 最大为 0.001 ps。

表 1 模拟参数

Parameter	Value
$a_0/\text{nm}$	0.360
Model size/nm	GB1: ~22.1×25.0×25.5
	GB2: ~22.8×22.8×28.8
	GB3: ~24.2×21.6×24.2
	GB4: ~21.5×27.0×24.0
Atom count	GB1: 1200000; GB2: 1280000 GB3: 1080000; GB4: 1000800
Potential function	EAM <sup>[14]</sup> in tension EAM <sup>[14]</sup> and ZBL in irradiation
Temperature/K	300
Tensile velocity/ $\times 10^8 \text{ s}^{-1}$	5
PKA energy/keV	10
Distance between GB and PKA/nm	~3.0

## 2 结果与讨论

### 2.1 化学短程有序引起的晶界偏析

模拟中采用的晶界及晶界处 CSRO 引起偏聚的元素分布如图 1 所示。模拟中, 在晶界的法向采取周期性边界结构。图中展示了 CSRO 合金中元素按晶界法向分布的曲线。对于 GB2 和 GB4 这两种对称倾斜晶界, Fe、Al 在晶界附近发生了明显富集, 这之前研究以及别的学者的研究相似<sup>[15]</sup>。Ni、Cr 两种元素在晶界较为匮乏, Co 元素在晶界并未出现明显的元素偏聚分布。GB3 为扭转晶界, 在晶界附近有一定程度的偏聚, 仍为 Fe、Al 偏聚, 但不如 GB2 和 GB4 明显。GB1 为共格孪晶界, 错配度较低, 其晶界处的偏聚现象也不明显。

### 2.2 CSRO 对双晶拉伸性能的影响

#### 2.2.1 应力-应变曲线

图 2 为 4 种晶界模型的拉伸应力-应变曲线。首先, CSRO 合金的强度、弹性模量以及塑性阶段的流变应力均高于无序合金。GB1 的晶界法向为  $[11\bar{1}]$ , 对比  $[111]$  晶向的拉伸结果<sup>[10]</sup>,  $[111]$  晶向的 CSRO 合金屈服时应变为 5.13%, 应力为 11.41 GPa, 因此孪晶界的存在并未影响 CSRO 合金的强度; 而孪晶界强化了无序合金, 使其强度提高。GB2 和 GB3 的拉伸方向均为  $[010]$ , 根据前期的研究<sup>[10]</sup>, 单晶的  $[001]$  晶向拉伸屈服强度和应变率分别为 11.05 GPa 和 11.73%, GB2 和 GB3 的存在均弱化了合金, 其中 GB3 弱化程度较小。

GB4 偏聚最强烈, 元素偏聚使晶界处出现了一定数量的 hcp 相 (如图 1a 所示), 这种晶界的强度也最低。其次元素偏聚程度较为强烈的是 GB2, 也存在最低的强度。GB3 的元素偏聚程度较低, 其强度下降不明显, GB1 不存在元素偏聚, 其强度未下降, 甚至由

于孪晶界的存在,强化了无序合金。其他学者研究了 CrCoNi 合金中的孪晶界和 CSRO 的耦合作用对合金强度的影响<sup>[9]</sup>,结果表明,孪晶界和 CSRO 均能强化合金,这与本研究的结果相符合。

### 2.2.2 相结构及缺陷分析

首先,采用位移分析和共邻近分析方法分析了双晶拉伸过程中原子位移及相变情况。

图 3 为 GB4 拉伸过程的相变及位移云图。图 4 和图 5 分别为 GB2, GB3 和 GB1 位错爆发时刻的缺

陷分布及对应的原子位移云图。由图 3 可知,晶界处的层错原子在载荷作用下发生滑移(图 3a 和 3b),最后终止于另一个晶界(图 3c)。GB4 的晶界区域本身存在一定的层错原子(图 1a),这部分原子更容易滑动,吸收了载荷下的主要应变(图 3d)。与之相反的是 GB1 孪晶界,在拉伸过程中,孪晶界并未充当合金变形的位错源,也不是合金原子应变的主要位置(图 5);这与其他学者的研究相符,垂直于孪晶界的载荷不易使得孪晶界失效<sup>[16]</sup>。

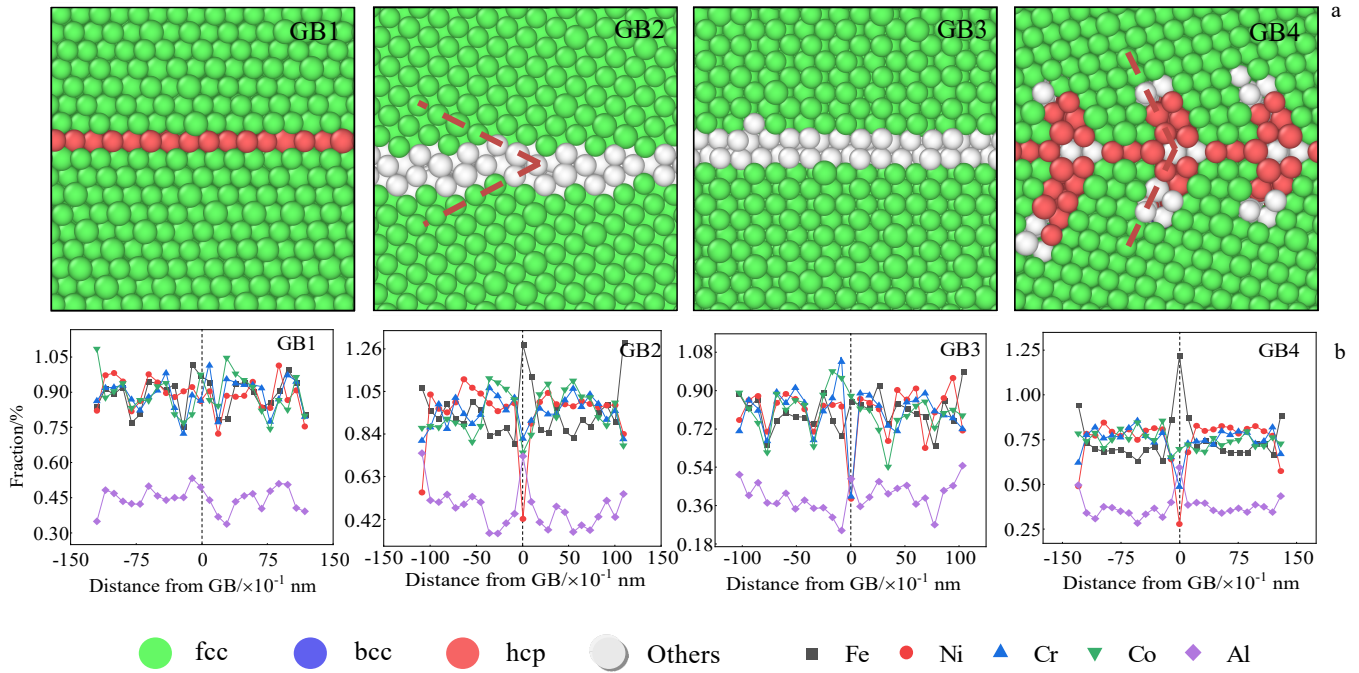


图 1 4 种双晶的晶界原子示意图与具有 CSRO 结构的 4 种双晶的元素分布

Fig.1 Grain boundary atoms of the four bicrystals (a) and element distribution of four bicrystals with CSRO structure (b)

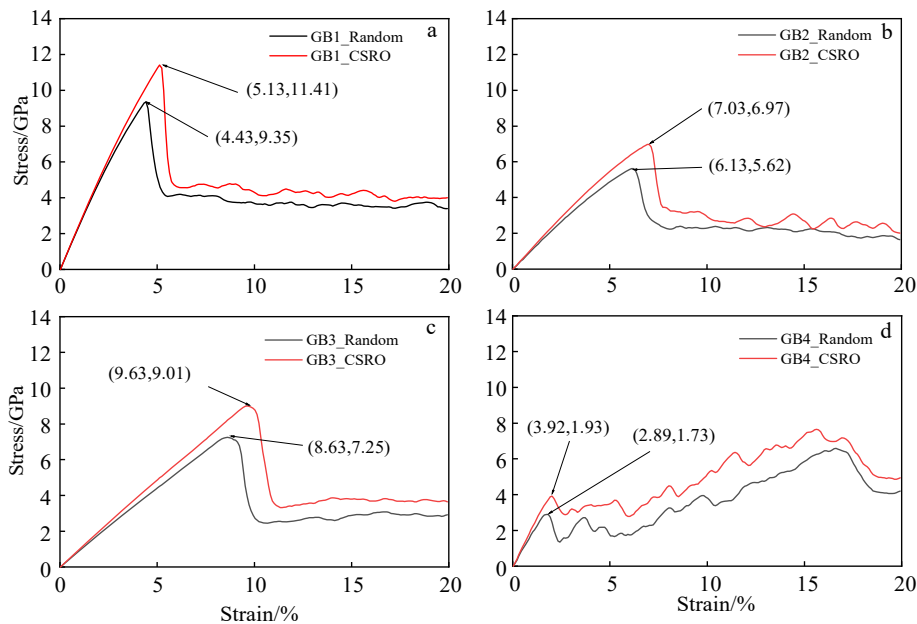


图 2 GB1、GB2、GB3 和 GB4 的拉伸应力-应变曲线

Fig.2 Tensile stress-strain curves of GB1 (a), GB2 (b), GB3 (c), and GB4 (d)

另外,GB2 和 GB3 的原子位移云图介于 GB1 和 GB4 之间,GB2 更接近 GB4,GB3 更接近 GB1 (图 4)。GB2 的原子位移大部分集中在晶界部分,其晶界影响宽度较大(图 4b);GB3 的晶界也具有较大的原子位移,但仅

集中在晶界中的一个原子面(图 4d)。GB2 和 GB3 的缺陷发展不像 GB4 一样在初期即存在位错,这两种晶界倾向于在变形过程中,晶界附近聚集越来越多的非晶原子,增加晶界厚度(图 4a 和 4c),最后位错也是在晶界上爆发。

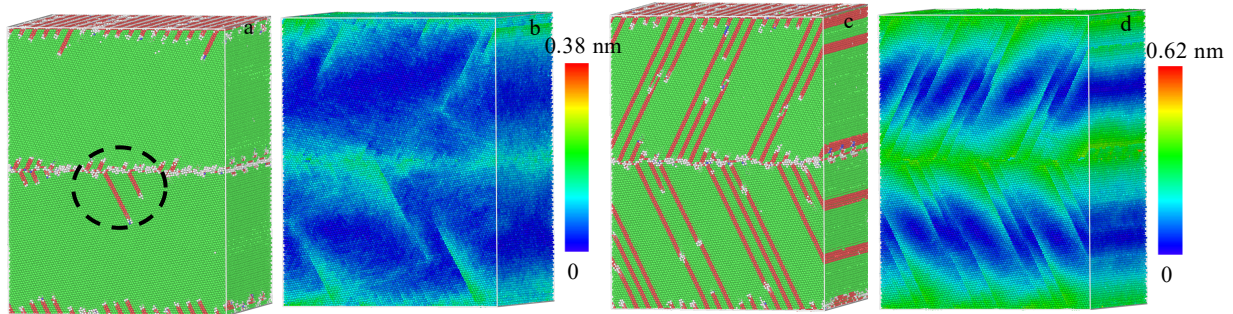


图 3 GB4 拉伸过程中的相组成图及对应的位移云图

Fig.3 Phase composition (a, c) and corresponding atomic displacement contours (b, d) at  $\epsilon=2\%$  (a-b) and  $\epsilon=4\%$  (c-d) in GB4 tensile process

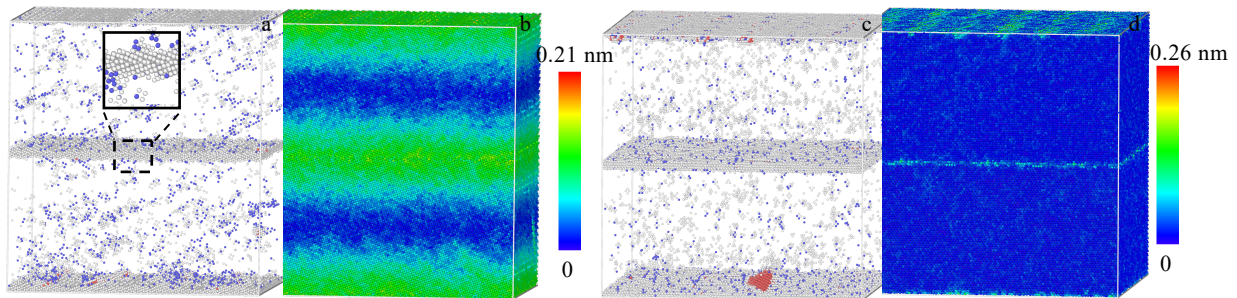


图 4 GB2, GB3 位错爆发时刻的缺陷分布及对应的原子位移云图

Fig.4 Defect distribution maps (a, c) and corresponding atomic displacement contours (b, d) at GB2 dislocation burst time (a-b) and GB3 dislocation burst time (c-d)

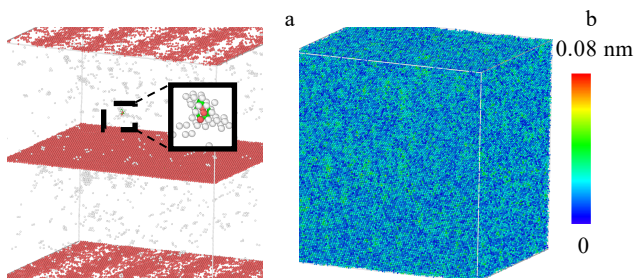


图 5 GB1 位错爆发时刻的缺陷分布及对应的原子位移云图

Fig.5 Defect distribution (a) and corresponding atomic displacement contour (b) at GB1 dislocation burst time

正如上所述,GB1 拉伸下的动力学响应接近单晶,而 GB4 与单晶差距最大,已有的工作详细地研究了 CSRO 对单晶  $Al_{0.5}CoCrFeNi$  拉伸动力学响应的影响<sup>[10]</sup>。因此,选定 GB4 研究晶界存在情况下 CSRO 对  $Al_{0.5}CoCrFeNi$  拉伸动力学响应的影响。

GB4 的变形过程分为初始的弹性变形阶段、平行层错扩展阶段以及各方向位错爆发阶段。主要关注了后面 2 个阶段的缺陷演变情况。在合金的平行层错扩展阶段,无序合金和 CSRO 合金中的位错线分布如图 6a 和 6b 所示。合金中的位错大部分为肖克莱不全位错。无序合金中的长直肖克莱不全位错比 CSRO 合金更加弯曲。这表明无序合金中层错的扩展不是协调进行的,可能在某些薄弱处扩展较为剧烈。图 6c 和 6d

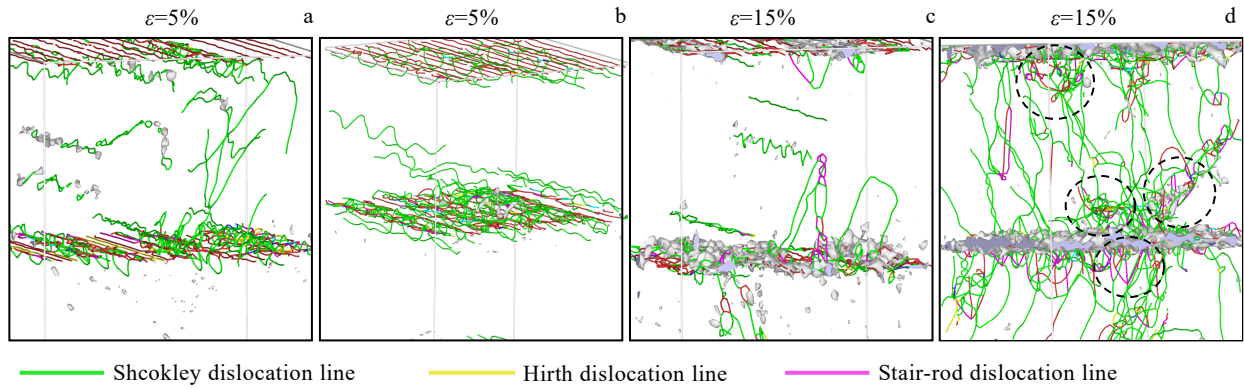


图 6 GB4 拉伸过程中不同阶段对应的位错线分布

Fig.6 Distribution of dislocation lines corresponding to different stages of GB4 tensile process: dislocation lines of random alloy (a, c) and CSRO alloy (b, d) in parallel fault expansion stage (a-b) as well as various orientation fault burst (c-d)

为各方向位错爆发阶段的位错线图示, 此时两种合金出现了大量的压杆位错。CSRO 合金中存在比无序合金更加多的压杆位错, 具有很多位错缠结 (图中标注处)。CSRO 中的位错缠结可以阻碍位错运动, 达到强化合金的目的。

### 2.3 化学短程有序对双晶辐照性能的影响

首先, 采用 Wigner-Seitz 缺陷分析算法提取了双晶在辐照过程中 Frenkel 对的演变曲线, 如图 7 所示。双晶模型辐照模拟中 Frenkel 对的演变与单晶模型相似, 都经历从爆发到峰值, 直到最后趋于热稳定。在 Frenkel 对爆发阶段, 两种合金的演变趋势几乎一致, 只是两种合金达到的离位峰不一致, GB3 和 GB4 中无序合金的离位峰远高于 CSRO 合金, 而 GB1 和 GB2 中两种合金的离位峰则差距不大。在缺陷复合阶段, CSRO 合金的缺陷复合速率明显高于无序合金。

对于孪晶界 GB1 而言, 无序合金和 CSRO 合金同样具有很高的缺陷复合率 (均为 96%), 这与单晶的辐照模拟相似。然而, 对于 GB2、GB3 和 GB4 这 3 个晶界, 无序合金却表现出极低的缺陷复合率, 分别为 54%、78%和 79%; 而 CSRO 合金则较高, 分别为

95%、93%和 92%。

根据以上分析, 晶界对无序合金和 CSRO 合金辐照过程中的缺陷复合率影响极大; 为了辨析影响的来源, 继续探究了辐照过程中间隙原子和空位缺陷的演变快照。图 8 是 GB4 辐照过程中间隙原子和空位原子的演变快照。

无论是无序合金还是 CSRO 合金, PKA 运动到晶界附近受到了明显阻碍, 间隙原子运动到晶界处被吸收, 留下了空位分布在晶内 (图 8b 和 8d)。CSRO 合金晶界具有比无序合金晶界更强的间隙原子阻碍作用, 比较图 8c 和 8a, CSRO 合金的离位峰沿晶界分布相比无序合金更加扁平。PKA 入射方向为晶界法向 (如 8a 中箭头所示), 比较 8b 和 8d, 无序合金的 PKA 穿过晶界后还运动了一段距离, 而 CSRO 合金的 PKA 被阻碍在了晶界附近。有文献表明, MPEAs 中 CSRO 结构的存在使得 GB 处的间隙原子和空位的偏聚倾向降低<sup>[8]</sup>, 进而导致间隙原子更容易留在晶内与空位复合; 本节的模拟结果与之相符, CSRO 双晶有更高的缺陷复合率。图 9 为 GB1 辐照过程中的间隙原子和空位缺陷的演变快照, 从图中并不能看出孪晶界轮廓, 对间隙原子没有明显的阻碍作用。

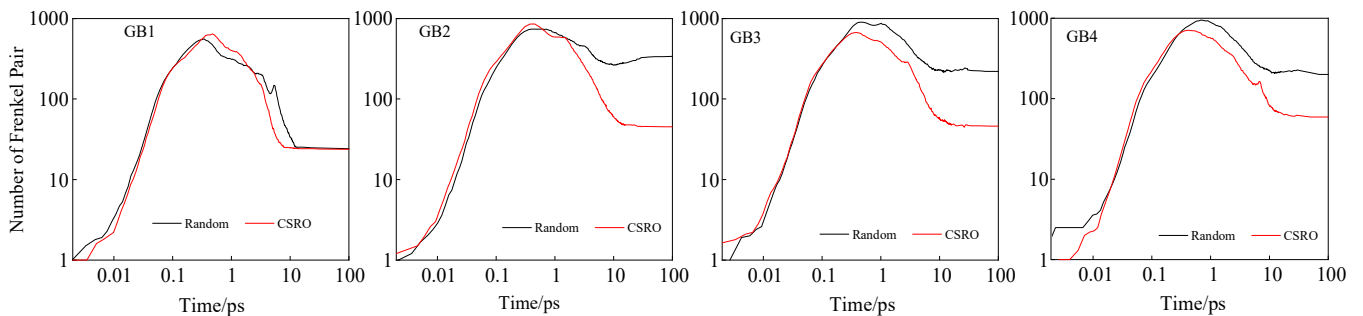


图 7 双晶中 Frenkel 对的演变曲线

Fig.7 Evolution of Frenkel pairs in bicrystals

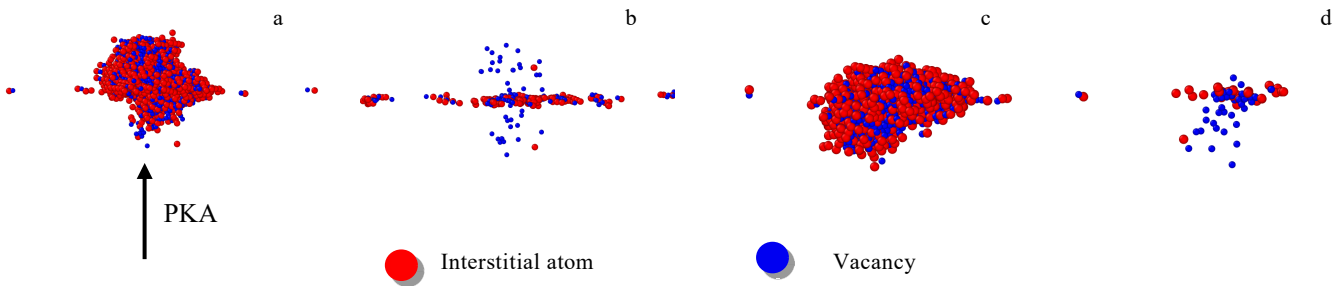


图 8 GB4 辐照过程中无序合金和 CSRO 合金的的离位峰和稳定存活缺陷

Fig.8 Dislocation spike (a) and stable survival defect (b) of the random alloy as well as dislocation peak (c) and stable survival defect (d) of CSRO alloy during GB4 irradiation

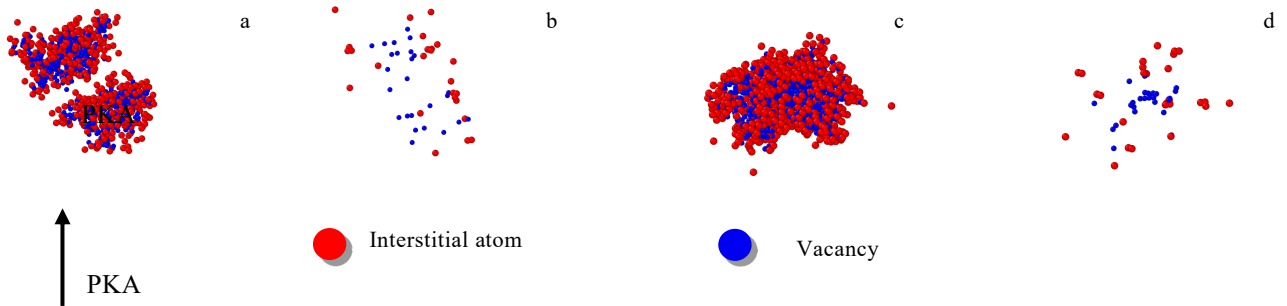


图 9 GB1 辐照过程中无序合金和 CSRO 合金的离位峰和稳定存活缺陷

Fig.9 Dislocation spike (a) and stable survival defect (b) of the random alloy as well as dislocation spike (c) and stable survival defect (d) of CSRO alloy during GB1 irradiation

为了评价无序合金和 CSRO 合金中原子移动的难易程度,统计了辐照模拟过程中每个 PKA 移动的最终距离(从开始碰撞至弛豫稳定),如图所示。最终距离的定义如下:

$$D_{PKA} = \sum_{n=1}^N (x_{PKA}^n - x_{PKA}^{n-1})^2 + (y_{PKA}^n - y_{PKA}^{n-1})^2 + (z_{PKA}^n - z_{PKA}^{n-1})^2 - D_0 \quad (2)$$

式中,  $N$  表示模拟最终的时间步;  $x, y, z$  表示 PKA 的坐标;  $D_0$  表示原子处于平衡时的振动。

对于 4 种晶界, CSRO 合金的最终运动距离小于无序合金;表明 CSRO 合金中自间隙原子的运动会更加困难。也就是 CSRO 结构能限制自间隙原子的运动,进而强化合金的抗辐照能力。前面的分析表明, GB1 的辐照和拉伸行为更接近单晶;并且 GB1 的 PKA 移动距离大于其余晶界(图 10),表明晶界对自间隙原子移动的限制作用。提取了最终弛豫稳定的无序与 CSRO 的 GB4 的位移云图(图 11),结果很明显能看

到, CSRO 合金能将原子移动有效地限制在 PKA 入射的晶粒内,而无序合金中晶界另一侧的晶粒内则有一部分原子有较大的位移量。

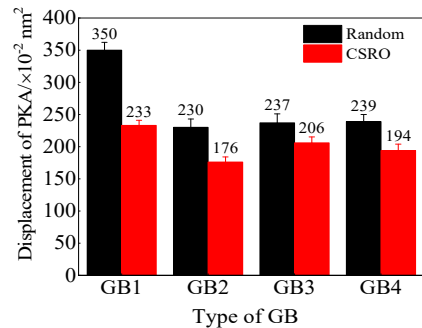


图 10 4 种双晶辐照过程 PKA 的最大位移

Fig.10 Maximum displacement of PKA in four bicrystals irradiation processes

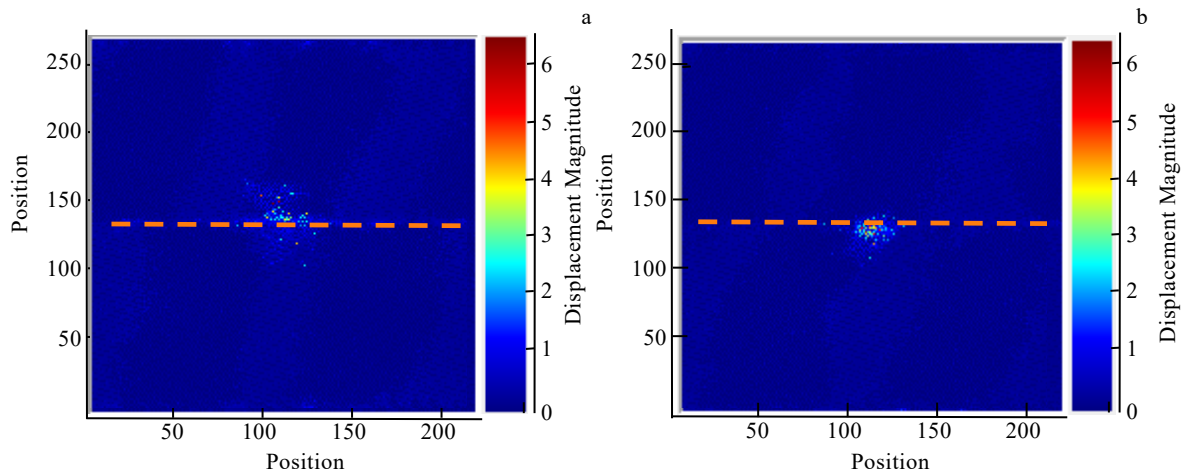


图 11 无序合金与 CSRO 合金的 GB4 的位移云图 (图中虚线为晶界, PKA 入射方向参考图 8)

Fig.11 GB4 displacement contours of random alloy (a) and CSRO alloy (b) (the dashed lines in the figure are the GB, and the incidence direction of PKA is referred in Fig.8)

### 3 结 论

1) 对于错配度很低的共格孪晶界  $\Sigma 3$  [101] ( $11\bar{1}$ ), 并未发现 CSRO 合金在晶界处有明显的元素偏析现象。含有该晶界的双晶的拉伸性能、力学响应、CSRO 对其的强化作用以及该双晶在辐照过程中的缺陷演变行为均与单晶类似。

2) 对于错配度较高的  $\Sigma 11$  [110](332)晶界, CSRO 合金在晶界处发现了明显的元素偏析现象, 主要为 Fe 和 Al 的富集。高的错配度还导致了晶界处存在一定的肖克莱不全位错, 和相应的层错源, 在拉伸过程中, 层错源作为薄弱处率先滑动, 导致了该晶界低的拉伸强度。在塑性变形阶段, CSRO 合金中高的压杆位错密度和位错纠缠强化了合金, 使之具备比无序合金更高的流动应力。另外, 该双晶的无序合金在辐照中有远高于单晶的 Frenkel 缺陷对及较低的缺陷复合率, 而 CSRO 合金中则具有较低的 Frenkel 缺陷对和较高的缺陷复合率, CSRO 合金高的抗辐照性能来自 CSRO 结构和晶界对自间隙原子移动的阻碍作用的耦合强化。

3)  $\Sigma 5$  [001](210)和  $\Sigma 5$  (010)2 个晶界介于共格孪晶界  $\Sigma 3$  [101] ( $11\bar{1}$ )和  $\Sigma 11$  [110](332)晶界之间, 2 个晶界均具有一定程度的化学元素偏析。拉伸过程中, 晶界率先失效, 之后的力学响应与单晶类似, 其辐照行为与  $\Sigma 11$  [110](332)晶界类似, CSRO 结构同样大幅提升了两种晶界的抗辐照性能。

#### 参考文献 References

[1] Zhang Yong, Zuo Tingting, Tang Zhi *et al. Progress in Materials Science*[J], 2014, 61: 1

- [2] Xia S Q, Yang X, Yang T F *et al. JOM*[J], 2015, 67(10): 2340
- [3] Ding Jun, Yu Qin, Asta Mark *et al. Proceedings of the National Academy of Sciences*[J], 2018, 115(36): 8919
- [4] Zhang Ruopeng, Zhao Shiteng, Ding Jun *et al. Nature*[J], 2020, 581(7808): 283
- [5] Jian Wurong, Xie Zhuocheng, Xu Shuozhi *et al. Acta Materialia*[J], 2020, 199: 352
- [6] Fan Zhao, Xing Bin, Cao Penghui. *Acta Materialia*[J], 2022, 237: 118159
- [7] Sun Shuo, Yang Yang, Han Chenxu *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2022, 127: 98
- [8] Zhao Shijun. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2021, 887: 161314
- [9] Xi Yongzhi, Yang Xiaofeng, Yin Xunlu *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2023, 935: 168093
- [10] Yuan Lijun, Tao Ran, Wen Pengcheng *et al. Physica B: Condensed Matter*[J], 2023, 649: 414447
- [11] Utt Daniel, Stukowski Alexander, Albe Karsten. *Acta Materialia*[J], 2020, 186: 11
- [12] Li Q, Mo J W, Ma S H *et al. Acta Materialia*[J], 2022, 241: 118410
- [13] Hirel Pierre. *Computer Physics Communications*[J], 2015, 197: 212
- [14] Farkas Diana, Caro Alfredo. *Journal of Materials Research*[J], 2020, 35(22): 3031
- [15] Babicheva Rita, Jarlöv Asker, Zheng Han *et al. Computational Materials Science*[J], 2022, 215: 111762
- [16] Zhang Luming, Xin Hao, Zhao Dan *et al. Frontiers in*

- Materials*[J], 2022, 9: 849051
- [17] Zhao Xing, Lu Cheng, Tieu Anh Kiet *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2017, 687: 343
- [18] Xing Bin, Wang Xinyi, Bowman William J *et al. Scripta Materialia*[J], 2022, 210: 114450

## Molecular Simulation of Chemical Short-Range Order at Grain Boundaries and Its Effect on Tensile Property and Radiation Resistance of Al<sub>0.5</sub>CoCrFeNi Alloy

Chai Xiaosong, Yuan Lijun, Li Guanglei, Li Jing, Li Da

(Key Laboratory of Advanced Technologies of Materials (Ministry of Education), Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China)

**Abstract:** The chemical short-range ordered structure in multi-principal element alloys has been regarded as an effective strengthening method. It also can affect the distribution of elements at grain boundaries. In order to study the effect on the properties of Al<sub>0.5</sub>CoCrFeNi alloy, the effects of chemical short-range order at several typical grain boundaries on the tensile property and radiation resistance of Al<sub>0.5</sub>CoCrFeNi alloy were studied by molecular dynamics method. The relevant influence mechanism was explained by dislocation analysis and point defect analysis. The results show that the segregation of elements at grain boundaries is more obvious with higher mismatch degree. Chemical short-range order can improve the tensile properties and radiation resistance of bicrystals, especially for bicrystals with large mismatched grain boundaries, which can effectively absorb radiation and produce interstitial atoms.

**Key words:** chemical short-range order; multi-principal element alloy; grain boundary; molecular dynamics

---

Corresponding author: Li Da, Ph. D., Associate Professor, key Laboratory of Advanced Technologies of Materials (Ministry of Education), Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, P. R. China, E-mail: hardfacing@home.swjtu.edu.cn