

# 高压物理学报

## AlCrFeCuNi高熵合金力学性能的分子动力学模拟

李健 郭晓璇 马胜国 李志强 辛浩

### Mechanical Properties of AlCrFeCuNi High Entropy Alloy: A Molecular Dynamics Study

LI Jian, GUO Xiaoxuan, MA Shengguo, LI Zhiqiang, XIN Hao

引用本文:

李健, 郭晓璇, 马胜国, 等. AlCrFeCuNi高熵合金力学性能的分子动力学模拟[J]. 高压物理学报, 2020, 34(1):011301. DOI: 10.11858/gywlb.20190762

LI Jian, GUO Xiaoxuan, MA Shengguo, et al. Mechanical Properties of AlCrFeCuNi High Entropy Alloy: A Molecular Dynamics Study[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2020, 34(1):011301. DOI: 10.11858/gywlb.20190762

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.11858/gywlb.20190762>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 高压氢气对6061铝合金力学性能的影响

Effects of High Pressure Hydrogen on Mechanical Properties of 6061 Aluminum Alloy

高压物理学报. 2017, 31(5): 505 <https://doi.org/10.11858/gywlb.2017.05.001>

#### TATB在高温下分解的动力学模拟

Decomposition of TATB at High Temperature Using *Ab Initio* Molecular Dynamics

高压物理学报. 2018, 32(1): 010106 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20170621>

#### 分子动力学方法在金属材料动态响应研究中的应用

Application of Molecular Dynamics Simulation to Dynamic Response of Metals

高压物理学报. 2019, 33(3): 030103 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20190750>

#### 微观尺度下金属/气体界面RM不稳定性自相似现象的分子动力学模拟

Microscale Self-Similarity Phenomenon of RM Instability on the Copper/Helium Interface with Molecular Dynamics Simulation

高压物理学报. 2019, 33(2): 022301 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20180606>

#### 两种状态钨合金球力学性能及损伤模式对比试验研究

Comparison of Mechanical Properties and Damage Mode of Tungsten Alloy Spheres in Two Different States

高压物理学报. 2018, 32(3): 034201 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20170682>

#### 压剪载荷作用下TB6钛合金的动态力学性能

Dynamic Behavior of TB6 Titanium Alloy under Shear-Compression Loading

高压物理学报. 2019, 33(2): 024206 <https://doi.org/10.11858/gywlb.20190713>

# AlCrFeCuNi 高熵合金力学性能的分子动力学模拟

李健<sup>1,2</sup>, 郭晓璇<sup>1,2</sup>, 马胜国<sup>1,2</sup>, 李志强<sup>1,2</sup>, 辛浩<sup>1,2</sup>

(1. 太原理工大学应用力学研究所, 山西 太原 030024;

2. 山西省结构冲击与材料强度重点实验室, 山西 太原 030024)

**摘要:** 高熵合金具有传统合金无法比拟的高强度、高硬度和高耐磨耐腐蚀性, 具有广阔的应用前景。为研究 AlCrFeCuNi 高熵合金 (High entropy alloy, HEA) 在轴向载荷作用下的力学性能, 采用分子动力学方法, 模拟高熵合金的实验制备过程并建立原子模型, 研究温度和 Al 的含量对 AlCrFeCuNi 高熵合金力学性能的影响, 从材料学角度分析了变形过程及其具有高塑性的原因。模拟结果表明, AlCrFeCuNi 高熵合金在拉伸载荷作用下依次经历弹性、屈服、塑性 3 个变形阶段。在屈服阶段, 开始出现孪晶和层错, 孪晶和层错的产生和生长是合金产生不均匀塑性变形的主要原因之一。高熵合金的杨氏模量和屈服应力随着 Al 含量的增加近似线性降低, 同时具有很强的温度效应, 温度越低, Al 含量越小, 其杨氏模量和屈服应力的下降幅度越大。

**关键词:** 高熵合金; 分子动力学; 拉伸力学性能; 温度效应; 铝含量

**中图分类号:** O344.3; O521.2

**文献标识码:** A

高熵合金 (High entropy alloy, HEA) 于 2004 年首先由 Yeh 等<sup>[1]</sup> 提出并命名, 一般可以定义为由 5 种或 5 种以上元素组元按等原子比或近似等原子比合金化形成的新材料, 每种元素占总原子数的 5%~35% 之间。随着人们对高熵合金的不断研究, 其组成元素的数量由开始的 5 种及 5 种以上放宽到 4 种及以上金属元素。高熵合金具有高强度<sup>[1]</sup>、高硬度<sup>[2]</sup>、耐腐蚀<sup>[3]</sup> 和耐摩擦<sup>[4]</sup> 等优异的力学、化学和热学性能, 在航空航天、船舶制造等工业材料上有较好的应用前景。传统的合金会由于金属种类的增加而导致其材料脆化<sup>[5]</sup>, 但高熵合金和以往的传统金属不同, 虽然是多种金属元素的杂乱混合, 却在物理、化学、力学等方面具有传统合金无法比拟的优异性能。

高熵合金在各方面的优异性能激发了广大学者的研究兴趣, 从理论到实验再到数值模拟的研究层出不穷。数值模拟计算是对传统理论和实验方法的有力补充, 分子模拟技术在原子尺度揭示和预测材料的各项性能具有重要意义。Ko 等<sup>[6]</sup> 研究了碳含量对 CoCrFeMnNi 高熵合金微观组织的影响, 发现铸态的 CoCrFeMnNi 和 CoCrFeMnNiC<sub>0.1</sub> 合金均具有树枝状微结构, 晶粒尺寸随着碳含量的增加而减小。Xie 等<sup>[7]</sup> 采用分子动力学 (MD) 模拟方法研究在硅基上的 AlCoCrCuFeNi 高熵合金薄膜的生长, 研究了不同原子含量对生长的薄膜及其原子结构的影响, 从模拟结果可以观察到 HEA 的不同原子结构由原子数量、原子尺寸差异决定。Afkhama 等<sup>[8]</sup> 通过分子动力学模拟了 Al<sub>x</sub>CrCoFeCuNi 高熵合金在不同温度下的拉伸行为, 研究了该合金在室温、高温和各种应变速率下的变形行为和机理, 其拉伸试验结果表明: 随着温度的升高, 屈服应力显著下降; 该合金在所有测试条件下都表现出超塑性行为; 更重要的是, 铝含量的增加会导致屈服应力和弹性模量显著降低。Choi 等<sup>[9]</sup> 基于 Monte Carlo、分子动力学和分子静力学等原子模拟方法研究了单个元素对等原子 CoCrFeMnNi 高熵合金固溶硬化的影响, 预测了在 0 K 时密排六方 (HCP) 结构比面心立方 (FCC) 结构更稳定。Zhang 等<sup>[10]</sup> 使用熔化和快速淬火的方法构

\* 收稿日期: 2019-04-18; 修回日期: 2019-05-09

基金项目: 国家自然科学基金 (51501123, 11672199)

作者简介: 李健 (1994—), 男, 硕士研究生, 主要从事分子动力学研究. E-mail: lijian0980@link.tyut.edu.cn

通信作者: 辛浩 (1985—), 男, 副教授, 主要从事分子动力学研究. E-mail: xinhao@tyut.edu.cn

建 AlCrFeCuNi 原子模型,通过原子模拟方法从微观角度解释了 AlCrFeCuNi 系高熵合金在拉伸载荷作用下的力学性质及原子结构变化,结果表明 AlCrFeCuNi 系高熵合金不仅有很高的强度,还具有良好的可塑性。

目前已经研制出的 AlCrFeCuNi 系高熵合金在力学性能方面尤为突出,表现出高强度、高硬度、耐磨和抗高温等一系列独特性能;然而在制备过程和实际应用中,过高或过低的外界温度<sup>[11]</sup>、合金中某一元素含量的变化都可能导致其原子晶格结构和力学性能发生改变。本研究采用分子动力学方法,模拟轴向拉伸载荷作用下 AlCrFeCuNi 高熵合金的力学性能,并分析在拉伸载荷作用过程中的微观原子晶格结构变化,同时着重研究温度和 Al 含量对 AlCrFeCuNi 高熵合金力学性能的影响。

## 1 模型与势函数

目前常用的高熵合金实验制备方法一般为真空电弧熔铸法:在电弧炉内加入配比好的物料,然后经高温熔化浇铸到高温的铸型中,再经冷却、退火,最后切割成制品<sup>[12]</sup>。因此在本研究中,采用分子动力学方法模拟高熵合金的实验制备过程,进而建立模型,具体做法如下<sup>[13]</sup>:(1) AlCrFeCuNi 高熵合金中 5 种原子按所要求的比例随机分布在 FCC 晶体结构上,选取 Al、Cr、Fe、Cu 和 Ni 5 种单晶中晶格常数最大的一个作为 AlCrFeCuNi 高熵合金晶格常数,进行能量最小化和弛豫,采用共轭梯度算法进行几何结构优化,且使原子结构达到平衡;(2)模拟熔化阶段,体系中所有原子都以 0.04 K/fs 的速率加热到 1 500 K 并在该温度下进行一段时间的弛豫,以达到平衡;(3)模拟淬火阶段,同样以 0.04 K/fs 的速率降低体系温度,直到 300 K,并进行一段时间的弛豫以达到平衡。通过高温熔化再到冷却退火,用分子动力学方法模拟实验制备过程,从而建立 AlCrFeCuNi 高熵合金的分子动力学模型,如图 1 所示。

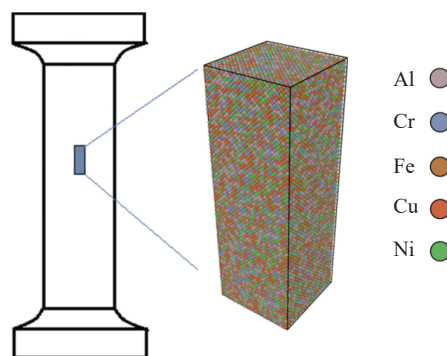


图 1 AlCrFeCuNi 高熵合金模型及原子示意图

Fig. 1 Model and atomic diagram of AlCrFeCuNi HEA

分子动力学方法使用的势函数是经验势,而经验势是否能准确描述原子间的相互作用决定了模拟结果的正确性。目前金属元素的势函数中,使用较为成熟的原子势是嵌入原子势(Embedded atom method, EAM),在 AlCrFeCuNi 高熵合金分子动力学模型的构建过程及之后的模拟计算中,采用嵌入原子势<sup>[14]</sup>描述 Cr-Fe-Ni 和 Al-Cu 之间的相互作用,形式如下

$$E_i = F_\alpha \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{i,j}) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha,\beta}(r_{i,j}) \quad (1)$$

式中:  $E_i$  是原子  $i$  的总能量;  $F$  表示嵌入能函数,是原子的电子密度  $\rho$  的函数;  $\phi$  表示对势相互作用;  $\alpha$  和  $\beta$  表示原子  $i$  和原子  $j$  的元素类型;  $r_{ij}$  表示原子  $i$  和原子  $j$  之间的距离。

对于还没有描述的剩余原子间相互作用的势函数,包括 Cr-Cu、Fe-Cu、Ni-Cu、Cr-Al、Fe-Al、Ni-Al 之间的势函数,在本研究中,采用 Morse 对势函数描述<sup>[10]</sup>。在已知 A、B 两类原子自身相互作用的内聚能  $D$ 、逆长度标度因子  $\alpha$  和平衡距离  $r_0$  的情况下,采用 Lorentz-Berthelot (L-B)<sup>[15]</sup>混合律估算 A 类原子与 B 类原子相互作用时的 Morse 参数。L-B 混合律如下

$$\begin{cases} D_{A-B} = \sqrt{D_A D_B} \\ \alpha_{A-B} = (\alpha_A + \alpha_B) / 2 \\ r_{0A-B} = \sqrt{\sigma_A \sigma_B} + \ln 2 / \alpha_{A-B} \\ \sigma_{A-B} = r_{0A-B} - \ln 2 / \alpha_{A-B} \end{cases} \quad (2)$$

式中:  $D_{A-B}$  表示 A、B 两类原子间的混合内聚能;  $\alpha_{A-B}$  表示混合后的晶格常数,  $r_{0A-B}$  表示原子 A 与原子

B 之间的平衡距离。表 1 列出了使用 L-B 混合律计算出的 Morse 势参数。

## 2 数值模拟

采用分子动力学方法,使用 LAMMPS 软件实现分子动力学模拟计算,计算流程大概分为 4 步:系统初始化;创建原子晶胞,建立模型;能量最小化和弛豫;模拟加载过程。模拟过程中采用周期性边界条件,用 EAM 和 Morse 对势描述模型中各类原子间的相互作用。创建的模型大小为  $20a \times$

$20a \times 60a$  ( $a$  为晶格常数),整个模型共有  $9.6 \times 10^4$  个原子。选取合适的时间步长既可以节省计算时间,又可以保证模拟的准确度,为了充分利用 CPU 工作效率,整个模拟过程的时间步长选取 1 fs。在模拟加载前,对整个体系进行能量最小化和系综弛豫,使整个模拟体系达到平衡状态。采用共轭梯度算法 (Conjugate gradient methods, CG) 进行能量最小化可以更精确地找到势能最低点,选择在等温等压系综 (NPT) 下进行充分弛豫。采用 Verlet 积分法求解分子动力学积分方程,使用 Nose-Hoover 热浴法控制体系温度。

加载过程中,除施加变形的  $z$  方向外,其他两个方向压力始终控制为零,通过 Nose-Hoover 热浴法进行温度控制,在 NPT 系综下,通过给模拟盒子施加一定的变形速率来实现模型加载过程。本研究中,应变率取为  $0.001 \text{ ps}^{-1}$  ( $10^9 \text{ s}^{-1}$ ),每隔一定的时间步施加应变,体系按设置条件弛豫放松,重新定位每个原子的位置,如此循环实现模型的准静态加载。

## 3 结果与分析

### 3.1 拉伸力学性能

AlCrFeCuNi<sub>1.4</sub> 高熵合金在常温 (300 K)、拉伸载荷作用下的应力-应变曲线如图 2 所示。从图中可以明显地观察到整个体系在拉伸载荷作用下经历了 3 个阶段的变形,分别为弹性变形阶段、屈服阶段和塑性变形阶段。在拉伸开始时,应力-应变呈直线关系,服从胡克定律,应力随应变线性变化,对应图 2 曲线中的线性部分,而变形表现为弹性变形,该阶段中若停止加载则变形随之消失,与单晶金属拉伸过程中的弹性变形一致。通过拟合应力-应变曲线中 0~0.05 应变段的斜率,可以得到该拉伸方向的杨氏模量  $E$ ,为 108.77 GPa,与其他学者的实验和模拟结果 118 GPa<sup>[8]</sup> 非常接近。

Afkhami 等<sup>[8]</sup> 研究得到 AlCrCoFeCuNi 高熵合金的屈服强度约为 3.5 GPa,明显低于本研究的 AlCrFeCuNi<sub>1.4</sub> 高熵合金屈服强度 10.3 GPa,可以证明 Co 元素的加入会明显降低该系高熵合金的强度。弹性阶段结束后,应力-应变曲线呈现非线性变化,曲线出现了断崖式的下降,对应出现应力峰值,材料开始进入屈服阶段。继续加载,曲线出现屈服平台,该阶段应力不增加或只小幅度上下波动,模型继续伸长变形,属于不均匀塑性变形阶段。

为了研究在拉伸载荷作用下 AlCrFeCuNi 高熵合金的微观结构变化,截取了在常温加载到不同拉伸应变时的原子结构图,如图 3 所示。通过共同近邻分析 (Common neighbor analysis, CNA) 能够观察到

表 1 Morse 势参数<sup>[10]</sup>

Table 1 Parameters of Morse potential<sup>[10]</sup>

| Atom pair | $D/\text{eV}$ | $\alpha/\text{\AA}^{-1}$ | $r_0/\text{\AA}$ |
|-----------|---------------|--------------------------|------------------|
| Cr-Cu     | 0.389 04      | 1.465 4                  | 2.628 9          |
| Fe-Cu     | 0.378 32      | 1.373 6                  | 2.645 4          |
| Ni-Cu     | 0.379 72      | 1.389 3                  | 2.618 2          |
| Cr-Al     | 0.345 41      | 1.368 5                  | 2.819 9          |
| Fe-Al     | 0.335 89      | 1.276 7                  | 2.837 6          |
| Ni-Al     | 0.337 13      | 1.292 4                  | 2.808 3          |

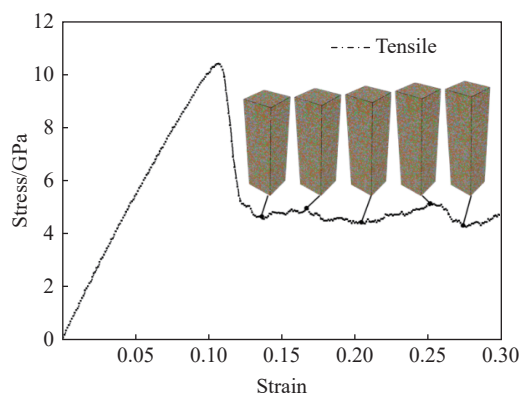


图 2 拉伸应力-应变曲线

Fig. 2 Stress-strain relations under uniaxial tensile loading

不同拉伸应变下的微观原子结构, 图中以不同颜色区分不同的原子结构: 绿色代表 FCC 原子, 红色代表 HCP 原子, 蓝色代表 BCC 原子, 而白色代表不满足任何基本原子结构的无序原子。

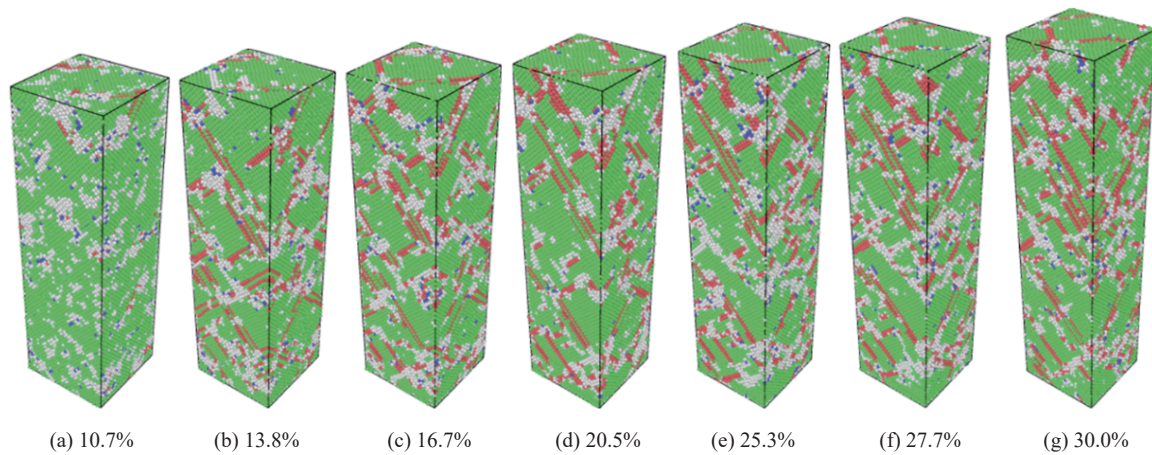


图 3 不同拉伸应变下的微观结构  
Fig. 3 Micro-structure of HEA under different strains

图 3(a) 为 10.7% 应变下的原子状态, 对应弹性阶段结束开始进入屈服阶段, 此时 AlCrFeCuNi 高熵合金的原子晶体结构大部分为 FCC 结构, 有少量 BCC 和 HCP 结构原子, 同时出现无规则排列的无序原子。图 3(b) 对应于 13.8% 拉伸应变下的原子结构图, 可以明显看到层状的 HCP 结构原子, 且以  $45^\circ$  和  $135^\circ$  方向排列。在材料学中, 一般认为 FCC 密排面原子错排层大于两层是孪晶结构, 小于或等于两层的认为是堆垛层错, 孪晶和层错的形成会加强材料的塑性性能。从图 3(a) 到图 3(b), 孪晶和层错的形成导致模型出现应力松弛, 对应应力-应变曲线在该阶段出现应力骤降, 且下降速率与体系孪晶和层错的形成速度有关。图 3(c)~图 3(g) 对应应力-应变曲线出现屈服平台、材料出现不均匀塑性变形阶段。该阶段内, 孪晶和层错不断产生、生长、消失, 如此循环导致了屈服平台的出现, 应力小幅度上下波动, AlCrFeCuNi 高熵合金产生不均匀的塑性变形。

### 3.2 温度对力学性能的影响

在加载过程中, 通过改变模拟温度得到 AlCrFeCuNi 高熵合金在不同温度下的应力-应变曲线和拉伸力学性能。从图 4 可以看出, 体系温度从 100 K 上升到 1 000 K 的过程中, 模型都经历了同样的弹性—屈服—不均匀塑性变形过程, 应力-应变曲线的总体趋势一致。随着温度的不断升高, 弹性模量、屈服应力和对应的屈服应变都呈减小趋势, 且温度越高, 屈服阶段应力从峰值处下降到屈服平台的速率越慢。与 AlCrCoFeCuNi 高熵合金的应力-应变曲线<sup>[8]</sup>不同的是, 该曲线在屈服阶段有明显的下降过程, 从原子尺度可以解释为孪晶和层错的出现比较突然, 当达到上屈服点时会出现明显的应力下降, 说明 Co 元素对合金在拉伸过程中出现的孪晶和层错有较大影响。从能量角度来讲, 温度越高, 原子热运动增加, 导致结构不稳定, 强度降低。

为了量化结果, 表 2 给出了不同温度下 AlCrFeCuNi<sub>1.4</sub> 高熵合金的杨氏模量、屈服应力和对应的屈服应变。由表 2 可知: 随着温度的增加, AlCrFeCuNi<sub>1.4</sub> 高熵合金的杨氏模量从 100 K 的 115.273 GPa 下

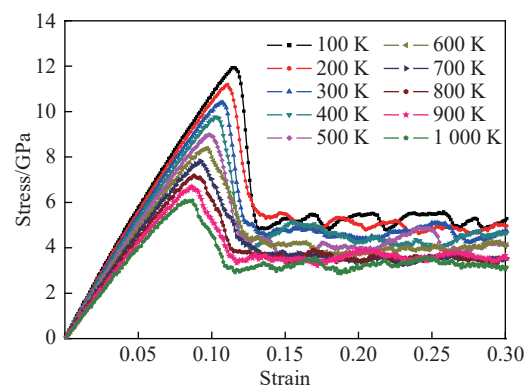


图 4 不同温度下的拉伸应力-应变曲线  
Fig. 4 Stress-strain relations under uniaxial tensile loading at different temperatures

表 2 不同温度下的拉伸力学性能

Table 2 Mechanical properties under uniaxial tensile loading at different temperatures

| Temperature/<br>K | Young's modulus/<br>GPa | Yield stress/<br>GPa | Yield<br>strain | Temperature/<br>K | Young's modulus/<br>GPa | Yield stress/<br>GPa | Yield<br>strain |
|-------------------|-------------------------|----------------------|-----------------|-------------------|-------------------------|----------------------|-----------------|
| 100               | 115.273                 | 11.954               | 0.115           | 600               | 96.507                  | 8.383                | 0.097           |
| 200               | 112.251                 | 11.197               | 0.111           | 700               | 92.532                  | 7.838                | 0.092           |
| 300               | 108.768                 | 10.390               | 0.107           | 800               | 88.503                  | 7.147                | 0.088           |
| 400               | 103.950                 | 9.765                | 0.103           | 900               | 84.382                  | 6.652                | 0.087           |
| 500               | 101.228                 | 8.975                | 0.099           | 1 000             | 80.808                  | 6.060                | 0.086           |

降到 1 000 K 的 80.808 GPa, 减小了 29.899%; 此外屈服应力也从 11.954 GPa 下降到 6.060 GPa, 减小了 49.306%。这表明体系温度从 100 K 升高到 1 000 K 对材料的拉伸力学性能影响较大。为了更明显地观察材料的拉伸力学性能随温度的变化趋势, 选取不同温度下的杨氏模量和拉伸强度, 如图 5 所示。可见 AlCrFeCuNi<sub>1.4</sub> 高熵合金的杨氏模量和拉伸强度随温度的升高近似呈线性降低。

### 3.3 Al 含量对力学性能的影响

采用同样的方法构造 Al<sub>x</sub>CrFeCuNi 高熵合金分子动力学模型, 其中各元素的原子比为  $x : 1 : 1 : 1 : 1$ ,  $x$  分别取为 0.2、0.5、1.0、2.0、4.0, Al<sub>x</sub>CrFeCuNi 高熵合金中 Al 原子的摩尔分数  $\eta_{\text{Al}}$  和各元素的原子数  $n$  如表 3 所示。

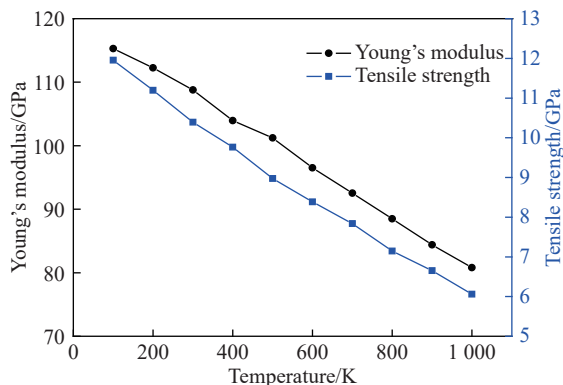


图 5 不同温度下杨氏模量和拉伸强度的变化趋势

Fig. 5 Young's modulus and tensile strength at different temperatures

表 3 Al<sub>x</sub>CrFeCuNi 高熵合金中 Al 百分含量和各元素原子个数Table 3 The number of different kinds of atoms of Al<sub>x</sub>CrFeCuNi

| $x$ | $\eta_{\text{Al}}/\%$ | $n(\text{Al})$ | $n(\text{Cr})$ | $n(\text{Fe})$ | $n(\text{Cu})$ | $n(\text{Ni})$ |
|-----|-----------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| 0.2 | 4.76                  | 4 515          | 23 151         | 22 920         | 22 980         | 22 434         |
| 0.5 | 11.11                 | 10 929         | 21 528         | 21 423         | 21 165         | 20 955         |
| 1.0 | 20.00                 | 19 428         | 19 338         | 19 419         | 18 870         | 18 945         |
| 2.0 | 33.33                 | 32 238         | 16 071         | 16 284         | 15 666         | 15 741         |
| 4.0 | 50.00                 | 47 988         | 12 000         | 12 336         | 12 078         | 11 598         |

由于高熵合金在性能上的鸡尾酒效应, 不同 Al 含量的 Al<sub>x</sub>CrFeCuNi 高熵合金的力学性能差异较大。在不同温度下, 对不同 Al 含量的 Al<sub>x</sub>CrFeCuNi 高熵合金进行分子动力学拉伸模拟, 图 6 给出了在温度  $T=100, 300, 600, 800, 1\,000$  K, Al 含量  $x=0.2, 0.4, 1.0, 2.0, 4.0$  条件下的应力-应变曲线。从图 6 中可知: 在每个温度下, Al<sub>x</sub>CrFeCuNi 高熵合金都经历了弹性变形阶段、屈服阶段和塑性变形阶段, 杨氏模量和屈服应力随着 Al 含量的增加而降低; 不论在高温还是低温下, 每条曲线从弹性阶段结束到塑性阶段开始都经历了一个明显的下降过程, 且下降速率和下降的高度随着材料中 Al 含量的增加而降低; 同时, 随着 Al 含量的增加, 峰值应力对应的应变也在降低, 表明拉伸载荷作用下材料会在更小的应变处开始屈服, 更早地进入塑性阶段。Al 含量的增加会导致合金从 FCC 相向 BCC 相转变, 这一转变增加了合金的自由体积含量, 活化剪切带, 使其更容易产生变形, 进而导致合金的相关力学性能降低。

随着温度的提高, Al<sub>x</sub>CrFeCuNi 高熵合金的杨氏模量和屈服应力显著下降。表 4 详细给出了在不

同温度下 5 种 Al 含量的  $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$  高熵合金在拉伸载荷作用下的杨氏模量和屈服应力, 为了更为直观地研究其变化规律, 依据表中数据作图 7 和图 8。

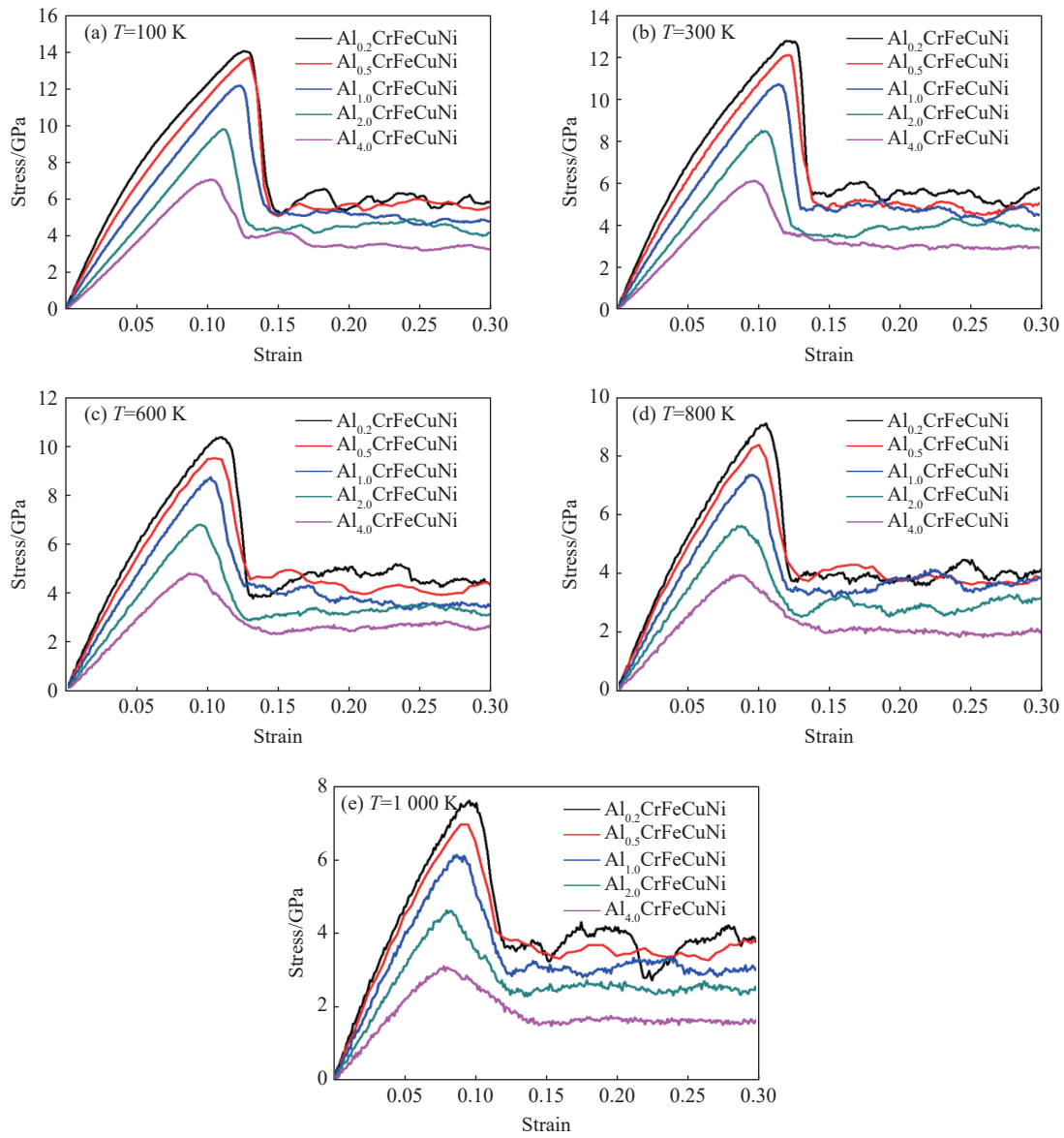


图 6 不同温度下  $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$  高熵合金的拉伸应力-应变曲线

Fig. 6 Stress-strain relations of  $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$  under uniaxial tension loading at different temperatures

表 4  $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$  高熵合金在不同温度下的杨氏模量和屈服应力

Table 4 Young's modulus and yield stress of  $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$  at different temperatures and different Al concentrations

| $T/\text{K}$ | Young's modulus/GPa |         |         |         |         | Yield stress/GPa |         |         |         |         |
|--------------|---------------------|---------|---------|---------|---------|------------------|---------|---------|---------|---------|
|              | $x=0.2$             | $x=0.5$ | $x=1.0$ | $x=2.0$ | $x=4.0$ | $x=0.2$          | $x=0.5$ | $x=1.0$ | $x=2.0$ | $x=4.0$ |
| 100          | 165.61              | 141.06  | 116.39  | 87.83   | 70.94   | 14.05            | 13.68   | 12.19   | 9.82    | 7.08    |
| 300          | 150.16              | 132.42  | 110.13  | 83.28   | 65.87   | 12.83            | 12.15   | 10.70   | 8.51    | 6.16    |
| 600          | 126.82              | 112.77  | 97.55   | 74.98   | 58.55   | 10.36            | 9.52    | 8.68    | 6.78    | 4.81    |
| 800          | 112.70              | 104.47  | 89.96   | 70.05   | 51.08   | 9.08             | 8.37    | 7.32    | 5.61    | 3.94    |
| 1 000        | 99.06               | 93.09   | 77.37   | 60.94   | 43.13   | 7.57             | 6.96    | 6.16    | 4.61    | 3.10    |

从图 7 中可以得到, 随着温度的升高,  $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$  高熵合金的拉伸杨氏模量和屈服应力都近似呈线性下降趋势, 与前述研究结果以及 Afkhami 等<sup>[8]</sup>研究的  $\text{AlCrCoFeCuNi}$  高熵合金基本吻合。这证明  $\text{AlCrFeCuNi}$  高熵合金具有强烈的温度效应, 其力学性能会随着温度的升高而产生近似线性下降的变化; Al 含量越少, 随着温度的升高, 杨氏模量和屈服应力的下降幅度越大。

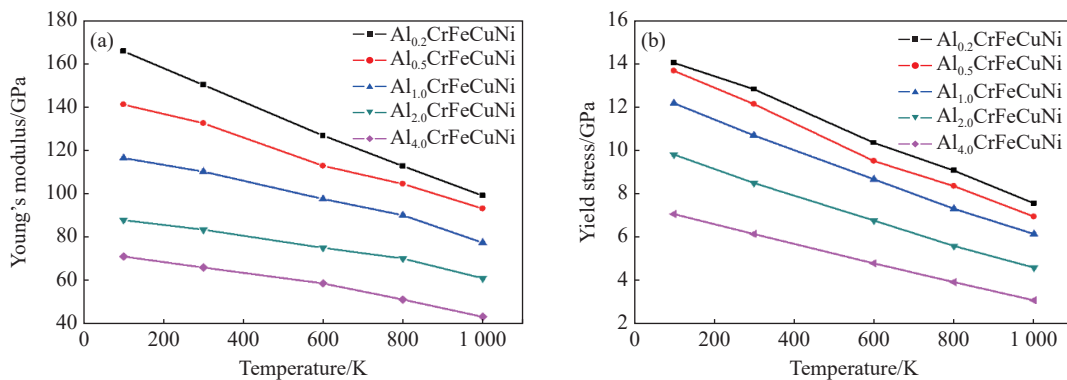


图 7 不同温度下的杨氏模量 (a) 和屈服应力 (b)

Fig. 7 Young's modulus (a) and yield stress (b) at different temperatures

从图 8 可以看出,  $\text{AlCrFeCuNi}$  高熵合金的杨氏模量和屈服应力都随着 Al 含量的增加而降低, 且温度越低, 下降幅度越大。

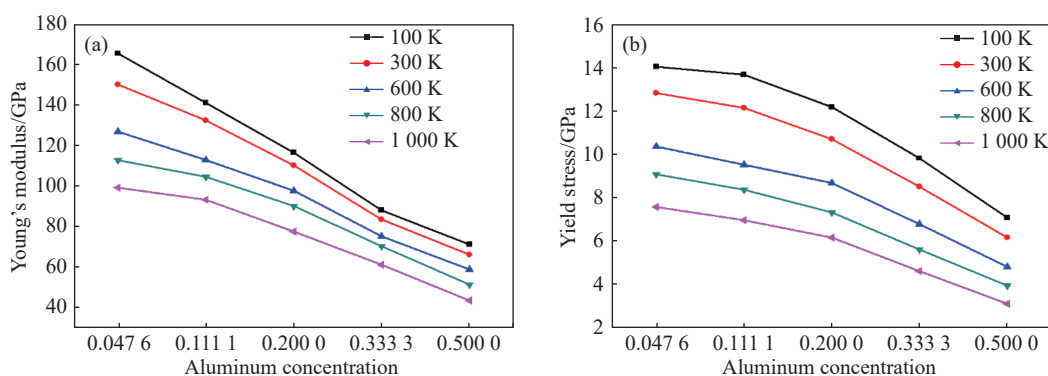


图 8 不同 Al 含量下的杨氏模量 (a) 和屈服应力 (b)

Fig. 8 Young's modulus (a) and yield stress (b) at different Al concentrations

## 4 结 论

通过模拟高熵合金的实验制备过程构造了  $\text{AlCrFeCuNi}$  高熵合金的分子动力学模型, 使用 EAM 嵌入势和 Morse 势描述原子间相互作用, 采用分子动力学模拟方法, 通过改变模拟盒子大小实现对模型的拉伸加载, 研究了  $\text{AlCrFeCuNi}$  高熵合金的力学性能, 得到以下结论。

(1)  $\text{AlCrFeCuNi}_{1.4}$  高熵合金在拉伸载荷作用下均经历 3 个变形过程, 分别为弹性变形阶段、屈服阶段和不均匀塑性变形阶段。  $\text{AlCrFeCuNi}_{1.4}$  高熵合金在拉伸过程中表现出超高塑性, 从原子结构的变化来看, 孪晶和层错的产生和生长是其高塑性的主要原因之一。

(2) 分析了温度对  $\text{AlCrFeCuNi}_{1.4}$  高熵合金拉伸力学性能和变形行为的影响。随着模拟温度的不断升高,  $\text{AlCrFeCuNi}_{1.4}$  高熵合金的弹性模量、抗拉强度等力学性能均显著减小。这是由于体系温度升高会加剧原子的热运动, 更容易造成结构失稳。

(3) 在不同温度下研究不同 Al 含量的  $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$  高熵合金在拉伸载荷作用下的力学性能, 发现杨氏模量和屈服应力随着 Al 含量的增加而降低。  $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$  高熵合金具有很强的温度效应, 其杨氏

模量和屈服应力随着温度的升高而降低,且下降趋势接近线性。温度越低,Al 含量越小,杨氏模量和屈服应力的下降幅度越大。

## 参考文献:

- [1] YE H 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] CHEN W, FU Z, FANG S, et al. Alloying behavior, microstructure and mechanical properties in a FeNiCrCo<sub>0.3</sub>Al<sub>0.7</sub> high entropy alloy [J]. *Materials & Design*, 2013, 51(5): 854–860.
- [3] CHUANG M H, TSAI M H, WANG W R, et al. Microstructure and wear behavior of Al<sub>x</sub>Co<sub>1.5</sub>CrFeNi<sub>1.5</sub>Ti high-entropy alloys [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(16): 6308–6317.
- [4] LEE C P, CHEN Y Y, HSU C Y, et al. Enhancing pitting corrosion resistance of Al<sub>x</sub>CrFe<sub>1.5</sub>MnNi<sub>0.5</sub> high-entropy alloys by anodic treatment in sulfuric acid [J]. *Thin Solid Films*, 2008, 517(3): 1301–1305.
- [5] GREER A L. Confusion by design [J]. *Nature*, 1993, 366(6453): 303–304.
- [6] KO J Y, SONG J S, HONG S I. Effect of carbon addition and recrystallization on the microstructure and mechanical properties of CoCrFeMnNi high entropy alloys [J]. *Korean Journal of Metals and Materials*, 2018, 56(1): 26–33.
- [7] XIE L, BRAULT P, THOMANN A L, et al. Molecular dynamics simulation of Al-Co-Cr-Cu-Fe-Ni high entropy alloy thin film growth [J]. *Intermetallics*, 2016, 68: 78–86.
- [8] AFKHAMA Y, BAHRAMYANA M, MOUSAVIANA R T, et al. Tensile properties of AlCrCoFeCuNi glassy alloys: a molecular dynamics simulation study [J]. *Materials Science & Engineering*, 2017, 698: 143–151.
- [9] CHOI W M, JO Y H, SOHN S S, et al. Understanding the physical metallurgy of the CoCrFeMnNi high-entropy alloy: an atomistic simulation study [J/OL]. *NPJ Computational Materials*, 2018. [2019–04–18]. <https://www.nature.xilesou.top/articles/s41524-017-0060-9>
- [10] ZHANG Y, WANG X, LI J, et al. Deformation mechanism during high-temperature tensile test in an eutectic high-entropy alloy AlCoCrFeNi<sub>2.1</sub> [J]. *Materials Science & Engineering A*, 2018, 724: 148–155.
- [11] 吴树森, 柳玉起. 材料成型原理 [M]. 北京: 机械工业出版社, 2008.
- [12] PI J H, PAN Y, ZHANG H, et al. Microstructure and properties of AlCrFeCuNi<sub>x</sub> (0.6≤x≤1.4) high-entropy alloys [J]. *Materials Science & Engineering A*, 2012, 534: 228–233.
- [13] HU W Y, ZHANG B W, HUANG B Y, et al. Analytic modified embedded atom potentials for HCP metals [J]. *Journal of Physics Condensed Matter*, 2001, 13(6): 1193.
- [14] JIA L, FANG Q H, LIU B. Mechanical behaviors of AlCrFeCuNi high-entropy alloys under uniaxial tensile via molecular dynamics simulation [J]. *Rsc Advances*, 2016, 6(80): 76409–76419.
- [15] IMAFUKU M, SASAJIMA Y, YAMAMOTO R, et al. Computer simulations of the structures of the metallic superlattices Au/Ni and Cu/Ni and their elastic moduli [J]. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1986, 16(7): 823–829.

## Mechanical Properties of AlCrFeCuNi High Entropy Alloy: A Molecular Dynamics Study

LI Jian<sup>1,2</sup>, GUO Xiaoxuan<sup>1,2</sup>, MA Shengguo<sup>1,2</sup>, LI Zhiqiang<sup>1,2</sup>, XIN Hao<sup>1,2</sup>

(1. *Institute of Applied Mechanics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China;*

2. *Shanxi Key Laboratory of Material Strength and Structural Impact, College of Mechanics,  
Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China*)

**Abstract:** High entropy alloy (HEA) has high strength, high hardness, high wear resistance and corrosion resistance which traditional alloys do not have, and has broad application prospects. The mechanical properties of AlCrFeCuNi high Entropy Alloy (HEA) under axial loading were also studied in this paper. Molecular dynamics method was used to simulate the experimental preparation process of HEA and establish an atomic model. The mechanical properties of AlCrFeCuNi HEA at different temperatures and Al concentrations were studied. The deformation process and the reasons for its high plasticity were analyzed from the point of view of material science. The simulation results show that the AlCrFeCuNi HEA undergoes elastic deformation, yield and plastic deformation stages under tension loads. In the yield stage, the appearance and growth of twins and stacking faults are one of the main reasons for the uneven plastic deformation of the alloy. The analysis shows that the Young's modulus and yield stress of the HEA decrease linearly with the increase of Al concentration. The HEA have strong temperature effect. The lower the temperature, the smaller the Al concentration, and the greater the decrease in Young's modulus and yield stress.

**Keywords:** high entropy alloy (HEA); molecular dynamics; tensile mechanical property; temperature effect; aluminum concentration