

引用格式: 周鹤, 袁智勇, 罗灿飞, 等. 温度对 FeCoNiCrMn 高熵合金塑性变形影响的分子动力学研究[J]. 航空材料学报, 2026, 46(10): 96-106.
ZHOU He, YUAN Zhiyong, LUO Canfei, et al. Molecular dynamics research of temperature effect on plastic deformation of FeCoNiCrMn high-entropy alloy[J]. Journal of Aeronautical Materials, 2026, 46(10): 96-106.

温度对 FeCoNiCrMn 高熵合金塑性变形影响的分子动力学研究

周 鹤^{1,2}, 袁智勇¹, 罗灿飞¹, 万常海¹, 董翠翠¹, 陈晶晶^{1*}

(1. 南昌理工学院 机械表/界面摩擦磨损与防护润滑研究中心, 南昌 330044; 2. 南昌理工学院 南昌市 AI 无损表型测量技术与装备重点实验室, 南昌 330044)

摘要: 对单晶与多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶与多晶 Ni 这 4 种模型微结构演化受温度依赖性研究有助于理解塑性变形微观机制。本工作基于纳米压痕法, 重点比较分析极端低温(1 K)到极端高温(1300 K)变化对单晶与多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶与多晶 Ni 的塑性变形微结构演化、原子位移幅度、剪切变形、位错总长和 von Mises 应力分布的影响。结果表明: 从极端低温(1 K)升高到极端高温(1300 K), 单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶 Ni、多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 的最大载荷下降幅度分别为 37.69%、29.10%、55.06% 和 15.64%。由于多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 晶界存在缺陷, 晶界处高应力集中诱导位错在晶界边缘处形核与增殖。受纳米压痕载荷诱导的 4 种模型塑性变形微结构演化以堆垛层错、孪晶、非晶及相变转化协同作用为主; 单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金塑性变形产生类鼓包状结构, 限制位错滑移与扩张; 单晶 Ni 塑性变形产生的位错滑移现象较突出; 相比于多晶 Ni, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金塑性变形产生的无定型非晶层更厚, 位错总长更小, 这一趋势受极端低温到高温的变化影响小。多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 塑性变形均发生晶界的迁移与扩张, 为更细纳米晶结构的形成创造有利条件。这些研究结果在研发优异强韧化性能的高熵合金体系方面具有重要理论参考价值。

关键词: 极端温度; FeCoNiCrMn 高熵合金; 塑性变形; 纳米压痕; 分子动力学

doi: 10.11868/j.issn.1005-5053.2025.000233

CSTR: 32420.14.j.issn.1005-5053.2025.000233

中图分类号: V252.1

文献标识码: A

文章编号: 1005-5053(2026)10-0096-11

Molecular dynamics research of temperature effect on plastic deformation of FeCoNiCrMn high-entropy alloy

ZHOU He^{1,2}, YUAN Zhiyong¹, LUO Canfei¹, WAN Changhai¹, DONG Cuicui¹, CHEN Jingjing^{1*}

(1. Mechanical Friction Wear and Protective Lubrication Research Center on Surface/Interface, Nanchang Institute of Technology, Nanchang 330044, China; 2. Nanchang Key Laboratory of AI Non-destructive Phenotypic Measurement Technology and Equipment, Nanchang Institute of Technology, Nanchang 330044, China)

Abstract: Studies on the temperature dependence of microstructure evolution for four models, namely single crystal and polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloys as well as single crystal and polycrystalline Ni, help elucidate the microscopic mechanisms of plastic deformation. Based on the nanoindentation method, this work focuses on comparative analysis of the effects of temperature variation from an extremely low temperature (1 K) to an extremely high temperature (1300 K) on the plastic deformation microstructure evolution, atomic displacement magnitude, shear deformation, total dislocation length, and von Mises stress distribution of single crystal and polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloys, together with single crystal and polycrystalline Ni. The results show that when the temperature rises from 1 K to 1300 K, the maximum load decreases by 37.69%,

29.10%, 55.06%, and 15.64% for single crystal FeCoNiCrMn high-entropy alloy, single crystal Ni, polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy, and polycrystalline Ni, respectively. Defects exist at grain boundaries in polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy and polycrystalline Ni; high stress concentration at grain boundaries induces dislocation nucleation and proliferation at grain boundary edges. The plastic deformation microstructure evolution of the four models under nanoindentation loading is dominated by the synergistic effect of stacking faults, twins, amorphous phases, and phase transformation: plastic deformation of single crystal FeCoNiCrMn high-entropy alloy generates bulge-like structures that restrain dislocation slip and propagation; prominent dislocation slip is observed in plastically deformed single-crystal Ni. Compared with polycrystalline Ni, polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy forms thicker amorphous layers and exhibits shorter total dislocation length during plastic deformation, and this trend is weakly affected by temperature change from cryogenic to high temperature. Grain boundary migration and expansion occur in both polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy and polycrystalline Ni during plastic deformation, which facilitates the formation of finer nanocrystalline structures. These findings provide important theoretical references for developing high-entropy alloy systems with outstanding strength-toughness synergy.

Key words: extreme temperature; FeCoNiCrMn high-entropy alloy; plastic deformation; nanoindentation; molecular dynamics

相比于传统金属合金,高熵合金是具有 3 种或 3 种元素以上的多组元新型金属合金,具有高强度、高硬度、高耐磨性、耐蚀性、抗高温软化性、耐超低温性等优异性能^[1],是海军舰艇、航空发动机、核电装备、月球探测器等国防领域亟需的新型金属合金^[2]。对 FeCoNiCrMn 高熵合金克服强度和韧性不可兼得的强韧化机理研究^[3]、高熵合金塑性变形机制^[4]、高熵合金压缩与拉伸性能研究^[5-6]已成为前沿研究热点,引起国内外研究人员广泛关注。目前,FeCoNiCrMn 高熵合金是以 Ni 元素为基元,通过添加其他 4 种混合元素引发高晶格畸变,能有效克服高熵合金材料强度和韧性的矛盾。对 FeCoNiCrMn 高熵合金塑性变形机制研究主要采用精密仪器实验和分子动力学计算,由于采用精密仪器实验开展相关研究代价高昂,且在材料微结构动态演化的原子级分辨率成像方面面临关键技术挑战。然而,分子动力学尤其适合研究极端温度工况改变对高熵合金塑性变形微结构演化的差异化影响。

Zhao 等^[7]指出 AlCoCrFeNi 高熵合金受温度影响的微结构演变和力学性能间的构效关系。孟易辰等^[8]采用激光熔覆技术在 38CrMoAl 合金表面制备中高熵合金涂层,研究添加 Al、Si、Fe、Nb 元素对合金涂层物相、组织和元素分布的影响。Afkhani 等^[9]采用分子动力学模拟 $Al_xCrCoFeCuNi$ 高熵合金拉伸后的屈服应力,其随着温度升高而下降,高熵合金表现出超塑性行为。Ding 等^[10]研究不同温度高熵合金涂层组织和耐磨性,指出高熵合金涂层的显微硬度随温度升高而降低,经 750 °C 高温处理后,合金镀层的显微硬度和质量损失分别降

低 4.3% 和 11.9%。Guo 等^[11]以 CrFeCoNiMn 高熵合金为例,以优化弹性模量和极限剪切应力两种力学性能为目标,开发具有高强度高刚度的材料设计方法。Gali 等^[12]对 CrMnFeCoNi 和 CrFeCoNi 合金在 196~1000 °C 的力学性能进行研究,表明强度表现出显著的温度依赖性下降。Huang 等^[13]采用从头计算方法,研究 FeCrCoNiMn 高熵合金的层错能随温度的变化规律,表明在室温下观察到孪晶,并预测在低温下六方相的产生。Qiao 等^[14]研究 AlCoCrFeNi 高熵合金极端低温下的压缩力学性能,结果表明-196 °C 极端低温条件下,高熵合金屈服强度和断裂强度远高于 25 °C 室温条件,展现出优异的低温力学性能。陈晶晶等^[15]系统研究单晶和多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金力学性能,指出多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金的力学性能显著低于单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金。黄伟玲等^[16]研究多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金塑性变形,研究表明该高熵合金出现无定型非晶化,并产生位错堆垛形核,两者均随压深增加而逐渐增多。Chen 等^[17]合成 CoCrFeNiPd、CoCrFeNiMn 两种高熵合金,指出前者屈服强度高于后者,抗拉强度相当。Wu 等^[18]研究 TRIP 效应对 CoNiFeAlCu 高熵合金单轴应变拉伸变形行为的影响,结果表明,高熵合金受载发生面心立方 (face-centered cubic, FCC) 向体心立方 (body-centered cubic, BCC) 结构转化的相变,导致强度和延展性同时提高。Zhang 等^[19]通过低温变形和退火在 CoCrFeNi 高熵合金中引入“预孪晶”,引起室温拉伸性能测试中的多重变形机制,结果表明,在 5% 以上的应变下,除位错滑移外,由于“预孪晶”产生高流动应力,形成微裂纹和变形孪晶。

基于国内外高熵合金领域进展,目前在高熵合金摩擦磨损、拉伸性能、塑性变形机制、抗冲击性能等方面已取得一定进展,但采用理论计算研究温度对 FeCoNiCrMn 高熵合金塑性变形微结构演化的影响却鲜有报道。因此,本工作系统研究不同温度影响单晶与多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶与多晶 Ni 的塑性变形微观演化规律,揭示单晶与多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金塑性变形机制的差异性,研究结果为研发强韧化高熵合金应用于核电包壳管、航空发动机、月球探测仪等领域提供理论依据。

1 分子动力学计算

1.1 模型建立

图 1 为单晶与多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶与多晶 Ni 4 种分子动力学模型,4 种模型的 x 、 y 、 z 轴晶向分别为 $[100]$ 、 $[010]$ 和 $[001]$ 。4 种物理模型的尺寸均为 $L_x=L_y=L_z=18\text{ nm}$ 。图 1 的单晶高熵合金 FeCoNiCrMn 建模是在单晶 Ni 模型基础上建立,用 Fe、Co、Cr、Mn 元素随机替代 Ni 元素,保证每种元素的原子百分比含量各占 20%。单晶 Ni 晶格常数为 0.359 nm 。采用 AtomsK 软件对多

晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 进行建模,晶粒数为 10。建立的 4 种物理模型中, x 、 y 轴采用周期性边界条件(periodic boundary conditions, PBC), z 轴采用固定非周期性边界条件(fixed no periodic boundary conditions, FBC)。4 种模型空间结构均划分为固定层、恒温层和牛顿层。采用虚拟压头压痕 4 种模型,虚拟压头半径 R 为 4 nm 。采用共轭梯度算法优化模型晶体结构,运用朗之万控温法对恒温层原子控温。4 种模型均基于 NVE 系综求解牛顿运动力学方程,时间步长取为 10^{-15} s ,充分弛豫 $6\times 10^{-10}\text{ s}$ 。采用 LAMMPS 软件进行分子动力学计算^[20]。

在纳米压痕的分子动力学模拟中,虚拟压头被视为无原子的球形体,它排斥与其接触的所有原子,相互作用表达式如式(1):

$$V(r) = \begin{cases} k(R-r)^3, & r < R \\ 0, & r > R \end{cases} \quad (1)$$

式中: K 为压头刚度,取值为 0.1 eV/nm^3 ; R 为虚拟压头半径; r 为虚拟压头与其最近邻原子中心之间的距离。

1.2 势函数描述

基于 MEAM 势函数描述多晶 FeCoNiCrMn 高

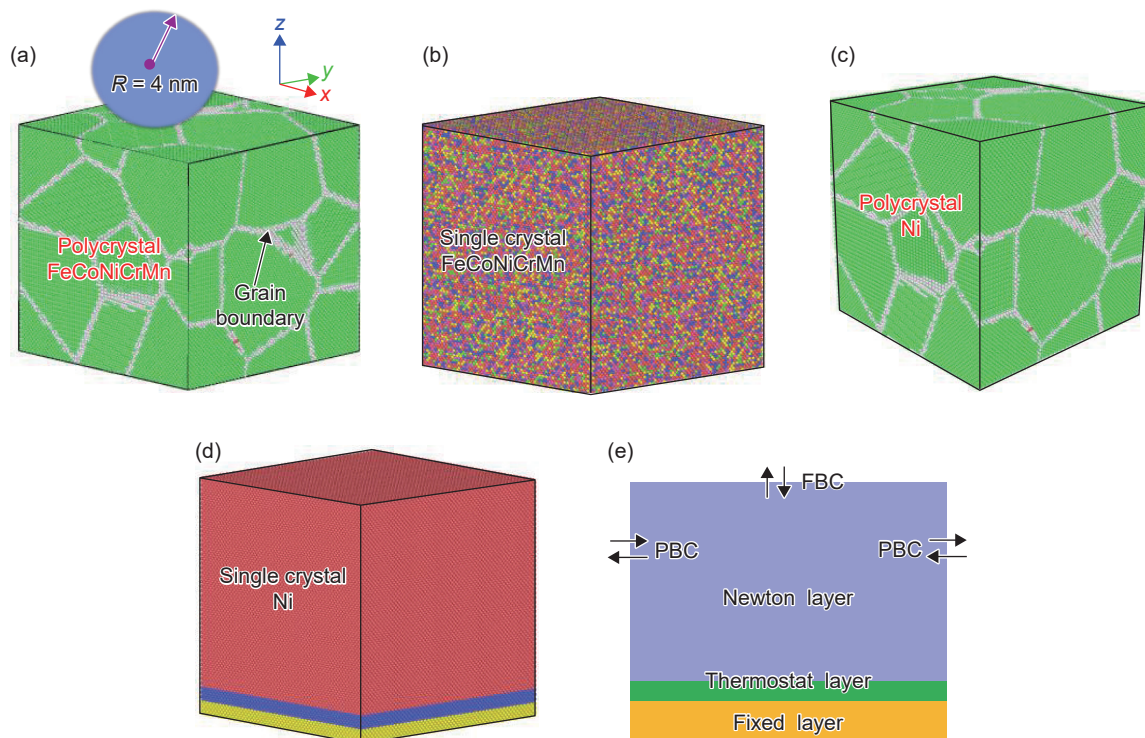


图 1 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金(a)、单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金(b)、多晶 Ni(c)和单晶 Ni(d)的分子动力学模型及模型空间结构划分(e)

Fig. 1 Molecular dynamics models of polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy (a), single crystal FeCoNiCrMn high-entropy alloy (b), polycrystalline Ni (c), and single crystal Ni (d) as well as division of model spatial structure (e)

熵合金中 5 种元素之间的相互作用, 该势函数在描述高熵合金塑性变形的微结构演化中具有显著优势^[21-22], 总能量计算方法如式(2)所示:

$$E = \sum_i F_i \left(\bar{\rho}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) \right) \quad (2)$$

式中: E 为总能量; F_i 为第 i 个原子受到的力; ρ_i 为电子密度; ϕ_{ij} 为第 i 个和第 j 个原子间对势; r_{ij} 为第 i 个和第 j 个原子间距离。基于 EAM 势函数^[23]描述单晶和多晶 Ni 塑性变形微观特征, 总能计算如式(3)所示:

$$\sigma_{\text{Mises}} = \sqrt{3(\tau_{xy}^2 + \tau_{yz}^2 + \tau_{xz}^2) + \frac{1}{2}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2]} \quad (4)$$

式中: τ_{xy} 、 τ_{yz} 和 τ_{xz} 分别表示切应力张量分量; σ_{xx} 、 σ_{yy} 和 σ_{zz} 分别表示正应力张量分量。采用剪切应变

$$\eta_i^{\text{Mises}} = \sqrt{\frac{6\eta_{xy}^2 + 6\eta_{yz}^2 + 6\eta_{xz}^2 + (\eta_{xy} - \eta_{yy})^2 + (\eta_{yy} - \eta_{zz})^2 + (\eta_{zz} - \eta_{xx})^2}{6}} \quad (5)$$

式中: η_{xy} 、 η_{yz} 、 η_{xz} 、 η_{xx} 、 η_{yy} 和 η_{zz} 分别表示剪切应变分量。

2 结果与分析

2.1 载荷-位移曲线

图 2 为单晶与多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶与多晶 Ni 的载荷-位移曲线随温度变化的影响规律, 可以看出, 纳米压痕初期, 载荷与位移呈线性关系; 纳米压痕中后期, 载荷与位移呈非线性关系。纳米压痕的载荷-位移曲线中, 存在两个阶段: 一个是虚拟压头下压接触模型; 另一个是压头沿着模型 z 轴正方向卸载过程。在分子动力学模拟时, 观察到载荷会首次突然下降(图 2(b)箭头), 这是实验法纳米压痕金属材料中常见的 pop in 现象, 该现象指的是载荷与位移呈线性关系后的载荷突然下降, 表明此阶段开始发生塑性变形。由图 2 可知, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 的最大载荷均低于单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和单晶 Ni, 此结论与文献 [15] 一致, 主要原因是多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 存在晶界缺陷, 晶界的缺陷处更容易产生高应力, 导致受载时极易萌生裂纹, 最终引起多晶材料服役力学性能急剧下降, 文献 [6] 指出多晶高熵合金受拉伸载荷作用时, 晶界处更易产生裂纹空洞现象, 导致多晶材料区域应力比单晶材料集中。随着温度从低温到高温变化, 由于温度软化 4 种材料晶体结构, 导致多

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i E_i(\rho_i) \quad (3)$$

式中: E_{tot} 为总能量; $E_i(\rho_i)$ 为第 i 个原子的嵌入势。运用 EAM 势函数对单晶 Ni 展开 300 K 下的拉伸性能测试, 得到弹性模量为 175 GPa, 与实验值 (180 GPa) 相比, 误差在允许范围内, 间接验证了势函数的可靠性。

1.3 应力与应变描述

采用 von Mises stress 描述材料受载产生的应力集中^[24], 应力 σ_{Mises} 表示为式(4):

公式描述接触区应变度^[25], 应变 η_i^{Mises} 表示为式(5):

晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、多晶 Ni、单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和单晶 Ni 的最大载荷呈逐渐下降趋势, 表明温度上升会极大降低 4 种材料的服役力学性能。图 3 为不同温度下 4 种模型的最大载荷, 可以看出, 相比于低温 (1 K), 高温 (1300 K) 条件下, 单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶 Ni、多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 的最大载荷下降幅度分别为 37.69%、29.10%、55.06% 和 15.64%。由此可见, 相比于单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金最大载荷下降幅度更大; 相比于单晶 Ni, 多晶 Ni 最大载荷下降幅度更小, 表明多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金最大载荷随温度变化的敏感性较强, 有强烈的温度依赖性, 文献 [26] 也探讨了 CoCrFeNiMn 高熵合金从低温 (93 K) 到高温 (1073 K) 的宽温域力学性能变化, 结果表明温度升高, 极大地降低高熵合金的屈服强度, 与本工作的理论计算结果一致。

2.2 原子位移幅度与剪切变形

图 4 为不同温度下纳米压痕后的单晶和多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶和多晶 Ni 表面形貌变化, 由图可知, 温度极大地影响压痕后的原子位移幅度, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 的原子位移幅度范围比单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和单晶 Ni 的位移幅度范围要广, 且多晶材料更易形成多方向的滑移带。相比于单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和单晶 Ni, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 中心接触区的原子位移幅度较低。随着温

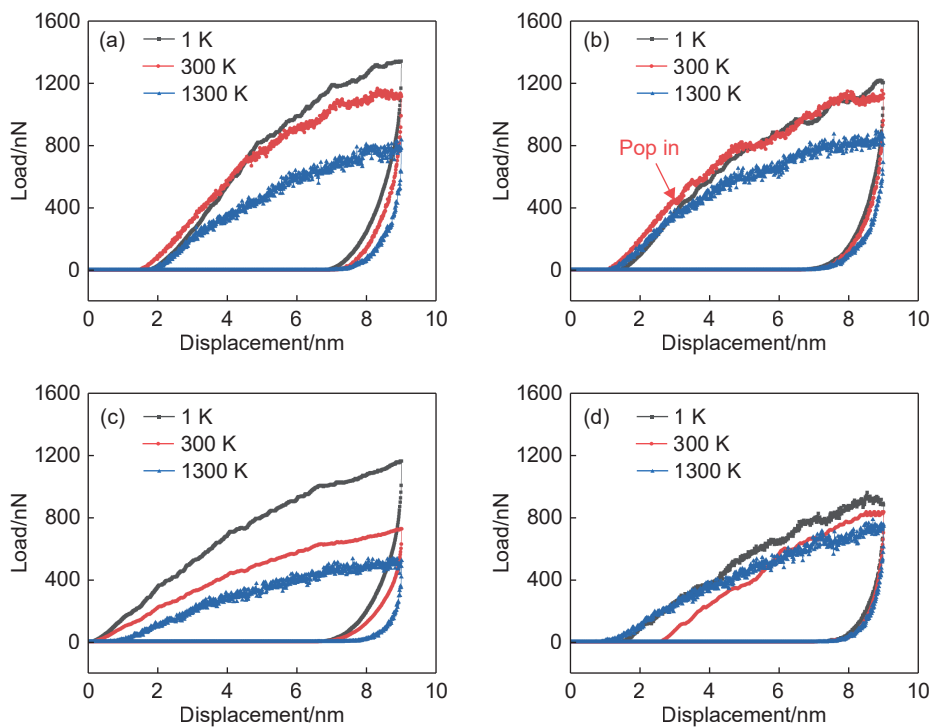


图 2 4 种模型不同温度下载荷-位移曲线 (a)单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金; (b)单晶 Ni; (c)多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金; (d)多晶 Ni

Fig. 2 Load-displacement curves of the four models at different temperatures (a) single crystal FeCoNiCrMn high-entropy alloy; (b) single crystal Ni; (c) polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy; (d) polycrystalline Ni

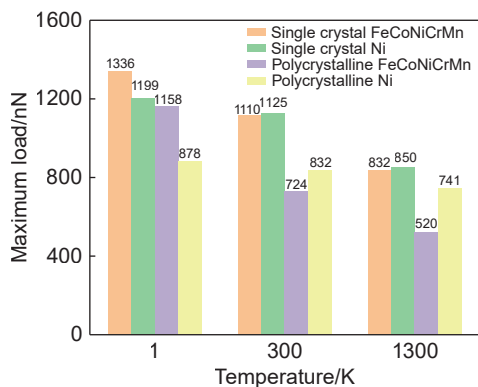


图 3 不同温度下 4 种模型的最大载荷

Fig. 3 Maximum load of four models at different temperatures

度从极端低温到高温变化, 高温易导致原子间键合力下降, 会产生更多间隙原子。4 种模型的原子位移幅度范围更广, 压痕后的紧密接触区产生的凹坑面积也更大。相比于单晶和多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金, 单晶和多晶 Ni 的紧密接触区原子位移幅度更加剧烈。同时, 可以看出, 多晶材料受高温影响, 表面更易产生随机粗糙斑点。图 5 为不同温度下 4 种模型纳米压痕后的剪切变形变化, 由图可知, 在极端低温 (1 K) 下, 相比于单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、Ni 合金, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 受到晶界缺陷的影响, 产生更多滑移带, 且

紧密接触区域正中心的剪切变形也更加剧烈, 主要原因可能是晶粒间的晶界存在构成纳米限域空间, 造成剪切变形局域化加剧。在极端高温 (1300 K) 下, 相比于单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和单晶 Ni, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 被压痕表面产生的剪切变形辐射区域更广。

2.3 微结构演化

为深入研究温度对单晶与多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶与多晶 Ni 纳米压痕塑性变形微结构演化的影响, 模拟单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和单晶 Ni 的微结构动态演化过程, 如图 6 所示。由图 6(a-1)~(a-3) 可知, 在极端低温 (1 K) 下, 单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金受载诱导产生类鼓包状结构, 阻碍位错滑移。然而, 图 6(b-1)~(b-3) 表明, 相比于单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金, 单晶 Ni 受载诱导产生的塑性变形范围更广, 产生的堆垛层错也较多, 位错容易被激活, 朝着多方向滑移运动, 以适应塑性变形加剧。另外, 对于单晶 Ni 塑性变形, 随压痕位移 d 增加, 位错环经历萌芽、生长、增殖和脱落 4 个动态过程。单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金的位错形核处有较大应力 (图 6(a-1)~(a-3)), 单晶 Ni 堆垛形核区的应力较单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金低 (图 6(b-1)~(b-3))。由图 6 可知, 单晶

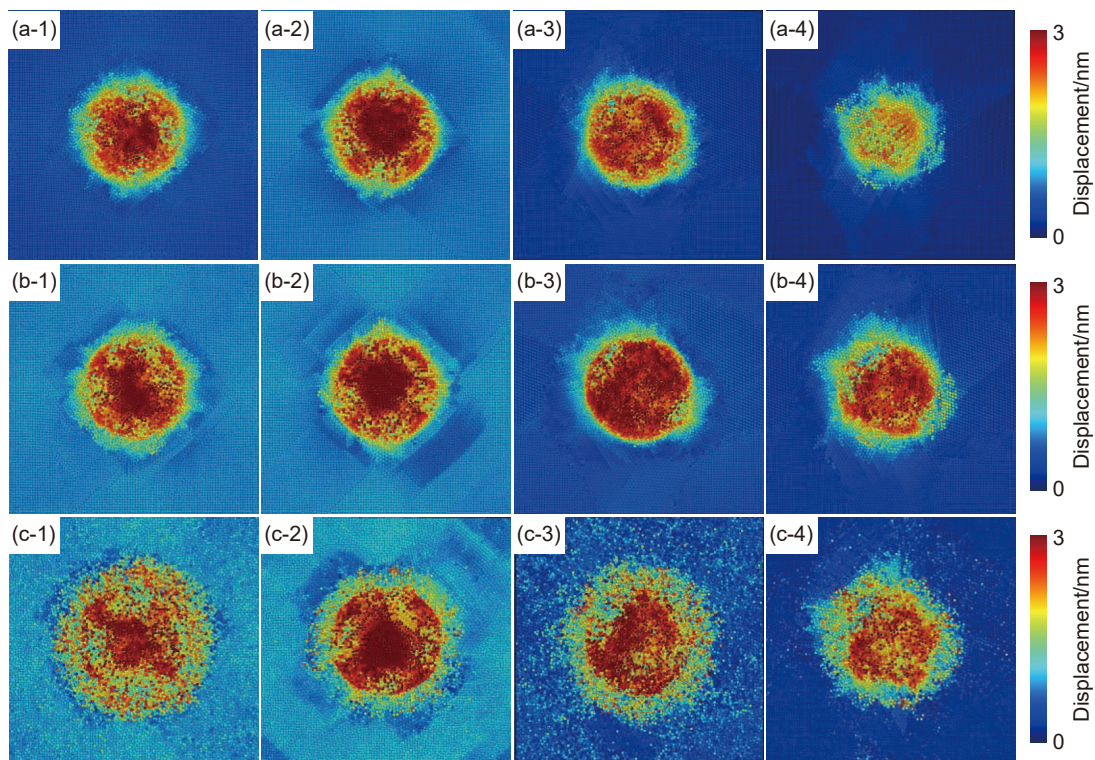


图 4 不同温度下 4 种模型纳米压痕后表面形貌 (a) 1 K; (b) 300 K; (c) 1300 K; (1) 单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金; (2) 单晶 Ni; (3) 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金; (4) 多晶 Ni

Fig. 4 Surface morphologies of four models after nanoindentation at different temperatures (a) 1 K; (b) 300 K; (c) 1300 K; (1) single crystal FeCoNiCrMn high-entropy alloy; (2) single crystal Ni; (3) polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy; (4) polycrystalline Ni

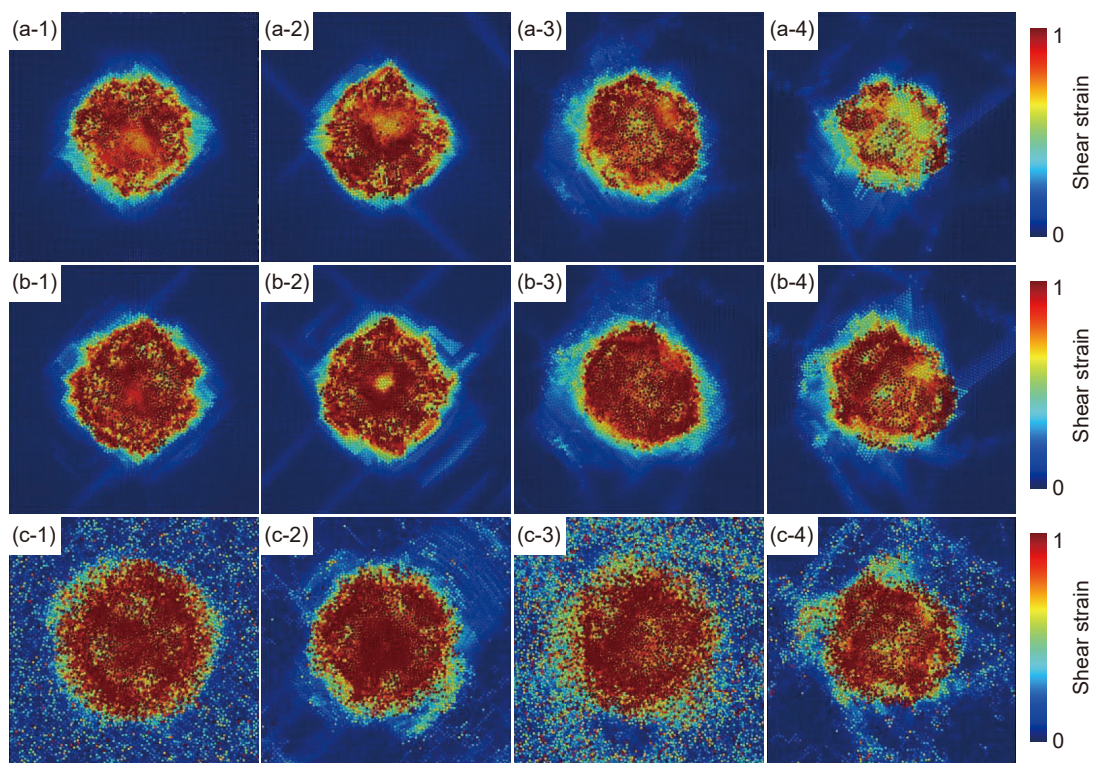


图 5 不同温度下 4 种模型的剪切变形 (a) 1 K; (b) 300 K; (c) 1300 K; (1) 单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金; (2) 单晶 Ni; (3) 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金; (4) 多晶 Ni

Fig. 5 Shear deformation of four models at different temperatures (a) 1 K; (b) 300 K; (c) 1300 K; (1) single crystal FeCoNiCrMn high-entropy alloy; (2) single crystal Ni; (3) polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy; (4) polycrystalline Ni

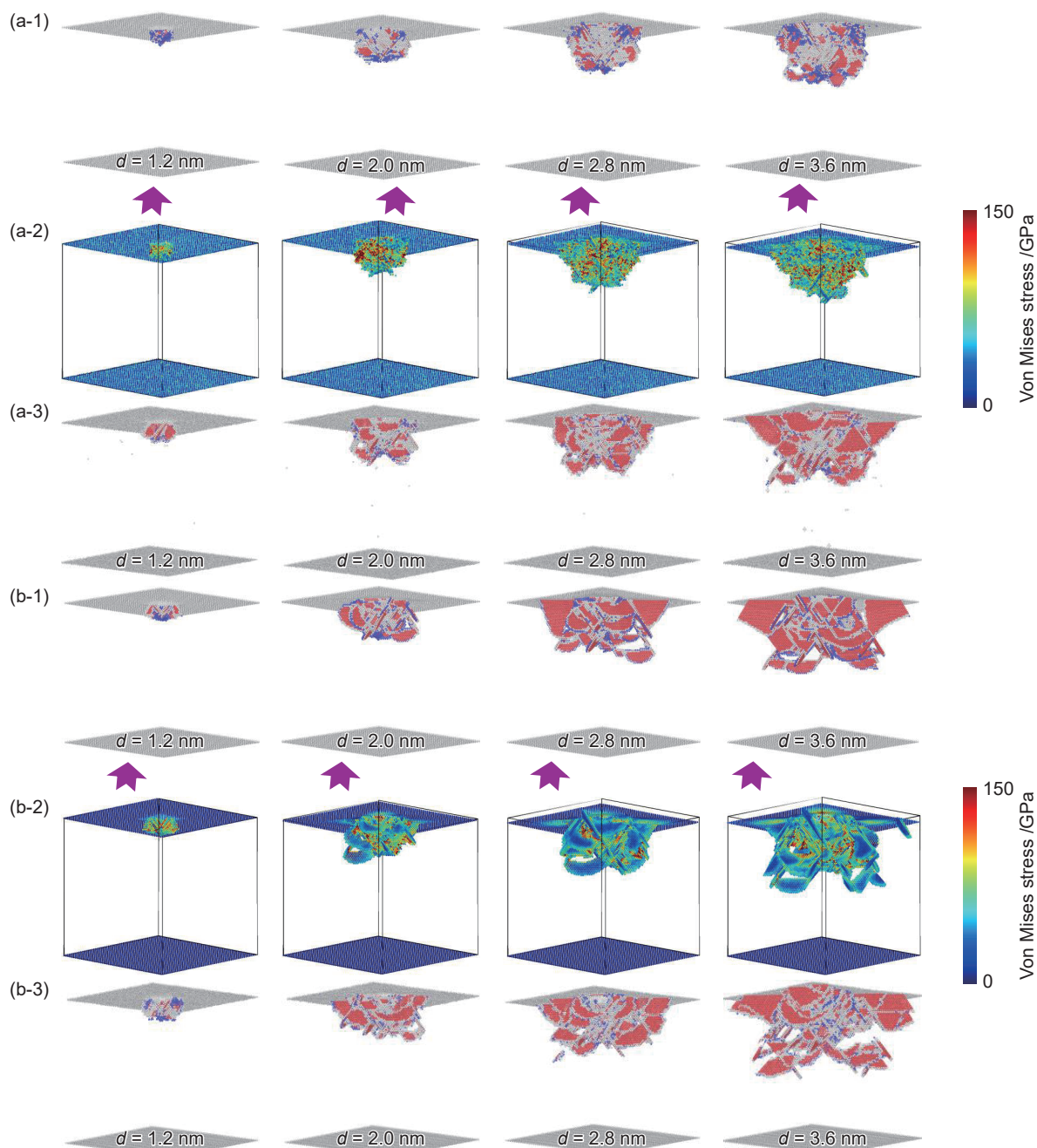


图6 单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金(a)和单晶 Ni(b)1 K 下微结构演化(1)、对应应力分布(2)和 300 K 下微结构演化(3)

Fig. 6 Microstructure evolution at 1 K (1), corresponding stress distributions (2), and microstructure evolution at 300 K (3) of single crystal FeCoNiCrMn high-entropy alloy (a) and single crystal Ni (b)

FeCoNiCrMn 高熵合金和单晶 Ni 被压的正下方晶格畸变严重化, 导致此区域高应力富集, 而应力增加, 直接影响位错萌生、滑移等。

图 7 为极限低温 (1 K) 下多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 受载产生的微结构动态演化过程。由图可知, 受载后的多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 表面形成无定型非晶层, 且非晶原子数随压痕位移增加而增多。多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金亚表层的非晶层数比多晶 Ni 多, 且在非晶层表面产生位错堆垛形核, 发生面心立方结构向体

心立方结构转变的相变过程。无论多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金还是多晶 Ni, 受载产生的微结构特征主要以堆垛层错、孪晶、非晶及面心立方结构向体心立方结构转变的相变转化为主, 且堆垛层错和孪晶产生主要靠近晶界处, 因为晶界处的应力增加直接驱动原子层结构发生错排。在压痕初期, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 的晶粒来自图 7 中①~④4 个区域, 在压痕位移 d 为 2.8 nm 时, 出现晶粒细分的纳观现象, 紧密接触区的晶粒②细分为晶粒⑤和晶粒⑥。在多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 中, 晶粒

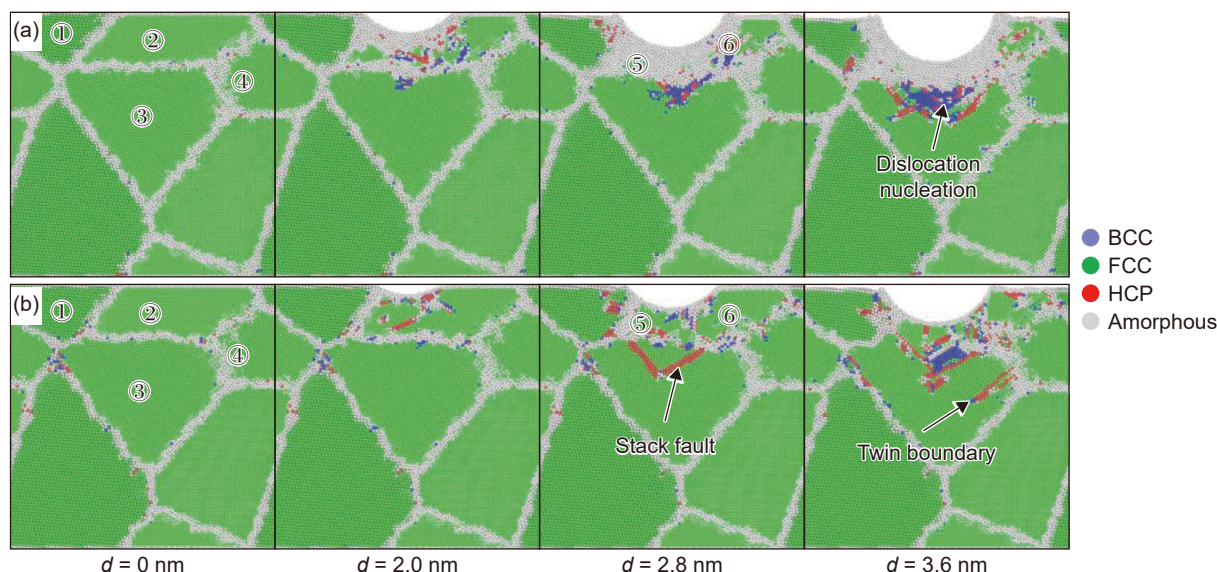


图 7 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金(a)和多晶 Ni(b)的微结构演化随压痕位移的变化

Fig. 7 Microstructural evolution of polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy (a) and polycrystalline Ni alloy (b) with the indentation displacement

①、③、④形状保持不变。无论多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni, 对于较大晶粒, 受载后均会分成更细的纳米晶结构。相比于多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金, 多晶 Ni 受载产生的非晶原子数较少。

进一步研究多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 受载产生的相变结构类型数, 图 8 为多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 受温度影响的相变结构类型数随压痕位移的变化。由图 8 可知, 受

载产生的相变结构类型主要以 BCC、HCP、非晶为主。随着压痕位移增加, BCC、HCP、非晶数逐渐增多, 增加幅度最大的为非晶数。在极端低温 (1 K) 下, 相比于多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金, 多晶 Ni 产生的 BCC 结构和 HCP 结构更多, 但产生的非晶数相对较低。然而, 在极端高温 (1300 K) 下, 相比于多晶 Ni, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金的 BCC 结构更少, 而 HCP 结构却更多。从极端低温 (1 K) 到极

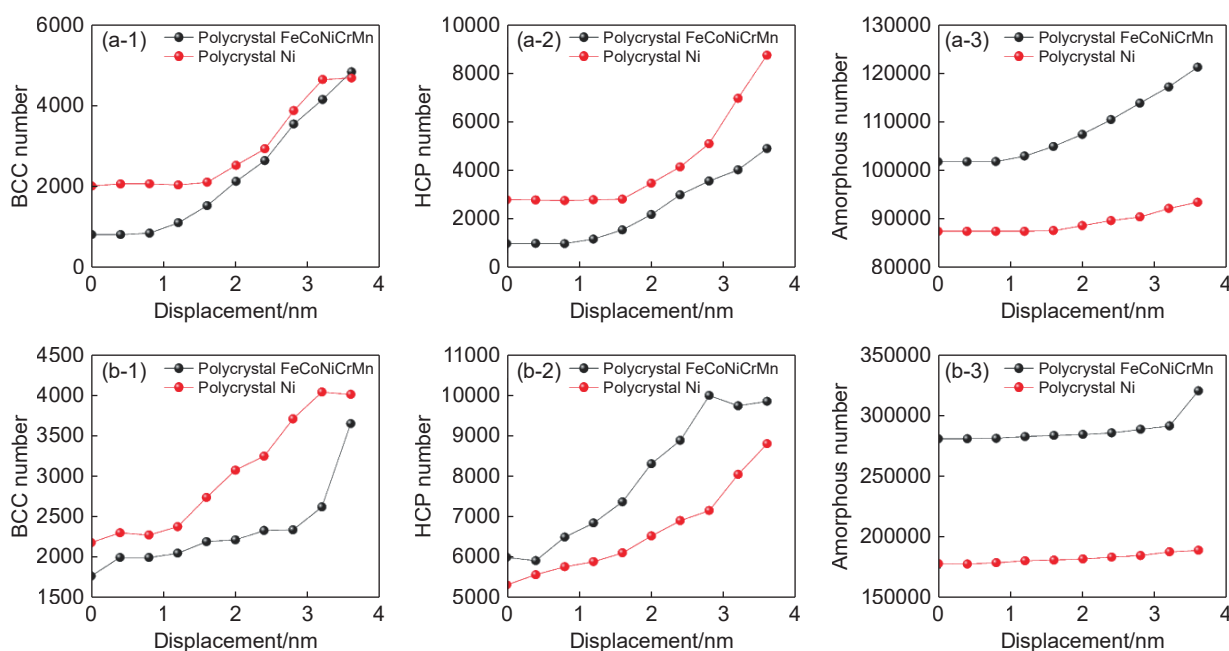


图 8 1 K(a)和 1300 K(b)下多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 相变结构类型数随压痕位移的变化
(1)体心立方; (2)HCP; (3)非晶

Fig. 8 Variation of the number of phase transformation structure types with indentation displacement for polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy and polycrystalline Ni at 1 K(a) and 1300 K(b) (1) BCC; (2) HCP; (3) amorphous

端高温(1300 K), 无论多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni, BCC 结构和 HCP 结构随温度升高逐渐下降, 而非晶数随温度升高而增多。

为深入研究多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 受载产生的微结构信息, 图 9 为多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 受温度影响的位错分布特征。由图 9 可知, 纳米压痕下, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 受载产生的位错主要以 Shockley 分位错为主, 其次为非晶结构和 $1/2 \langle 110 \rangle$ 的分位错。产生的位错集中分布于晶界缺陷处, 并沿着晶

界增殖。然而, 随着温度达到极端高温(1300 K), 非晶结构和 $1/2 \langle 110 \rangle$ 的分位错逐渐减小, 但仍然以 Shockley 分位错为主。由图 10 可知, 温度变化显著影响位错总长的产生, 随着温度从低温到高温变化, 位错总长逐渐减小, 减小幅度较大。相比于多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金, 多晶 Ni 的位错总长增加。相比于极端低温, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 的位错总长在极端高温下的降幅分别为 66.78% 和 55.41%, 可见, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金受载产生的位错总长降幅较大。

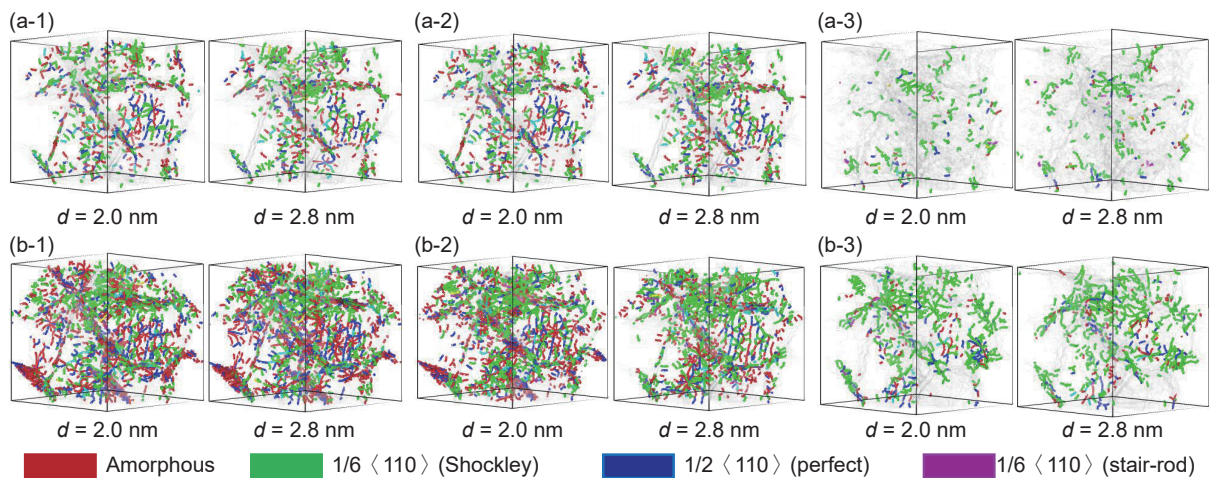


图 9 不同温度下多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金(a)和多晶 Ni(b)的位错分布 (1) 1 K; (2) 300 K; (3) 1300 K

Fig. 9 Dislocation distributions of polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy (a) and polycrystalline Ni (b) at different temperatures (1) 1 K; (2) 300 K; (3) 1300 K

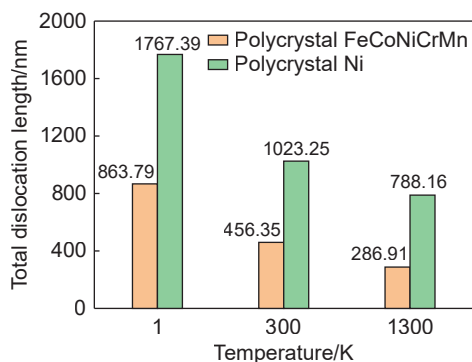


图 10 不同温度下多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 的位错总长

Fig. 10 Dislocation distributions of polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy (a) and polycrystalline Ni (b) at different temperatures

2.4 应力分布特征

图 11 为多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 在极端低温(1 K)下的应力分布。可以看出, 多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 在晶界处存在高应力集中, 而应力集中会削弱材料力学性能。晶界边缘处高应力集中, 导致晶界边缘的位错更易发

生并增殖。在压痕的亚表层也容易高应力集中, 亚表层应力集中程度与非晶数的产生数目呈明显的正相关。多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金晶粒内部的应力集中普遍高于多晶 Ni, 原因在于多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金由 5 种元素构成, 容易产生高晶格畸变, 晶格产生严重扭曲, 形成的间歇缺陷更大, 更易集中高应力, 这也是多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金承载性随极端温度改变敏感性强的主要原因。同时, 图 11 中应力集中程度与图 7 中微结构演化特征呈现明显的一致性, 说明缺陷越多, 应力越集中。

3 结论

(1) 随着温度从极端低温(1 K)升高到极端高温(1300 K), 单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金、单晶 Ni、多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 的最大载荷都逐渐下降, 下降幅度分别为 37.69%、29.10%、55.06% 和 15.64%。

(2) 单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金受载产生类鼓

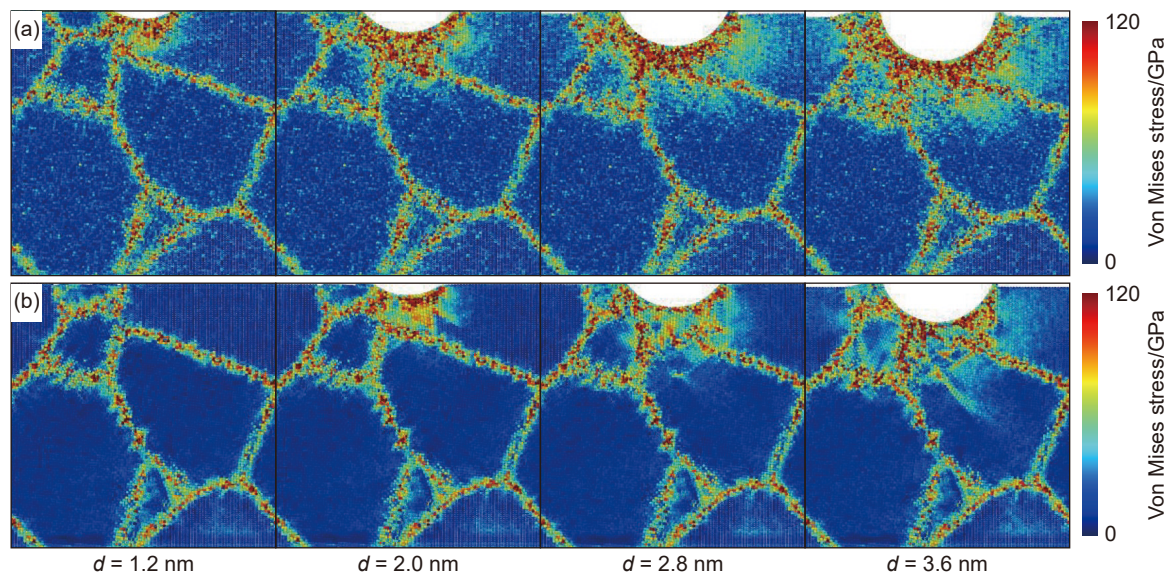


图 11 1 K 下多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金(a)和多晶 Ni(b)的应力分布

Fig. 11 Stress distributions of polycrystalline FeCoNiCrMn high-entropy alloy (a) and polycrystalline Ni (b) at 1 K

包状结构,位错滑移被阻滞,单晶 Ni 塑性变形的位错滑移程度较单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金更剧烈。应力集中是位错滑移的直接驱动力,单晶 Ni 和单晶 FeCoNiCrMn 高熵合金受纳米压痕载荷诱导作用,晶格严重扭曲,以致于亚表层更易集中应力。

(3)多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 受载产生的塑性变形微结构演化主要以堆垛层错、孪晶、非晶及相变转化为主,且堆垛层错和孪晶主要靠近晶界处。在较大的晶粒范围内,多晶材料的晶界发生迁移和扩张,缩小其晶界范围,易形成更细的纳米晶结构。

(4)多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金和多晶 Ni 受载产生的位错主要以 Shockley 分位错为主,其次为非晶结构和 $1/2 \langle 110 \rangle$ 的分位错。晶界缺陷集中高应力,诱导晶界边缘产生更多位错,随温度从低温到高温,位错总长逐渐减少。多晶 FeCoNiCrMn 高熵合金受载产生的位错总长较多晶 Ni 少,且不受温度的影响。

参考文献:

- [1] Fu W J, Huang Y J, Sun J F, et al. Strengthening CrFe-CoNiMn_{0.75}Cu_{0.25} high entropy alloy via laser shock peening[J]. *International Journal of Plasticity*, 2022, 154: 103296.
- [2] Tran N D, Saengdeejing A, Suzuki K, et al. Stability and thermodynamics properties of CrFeNiCoMn/Pd high entropy alloys from first principles[J]. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 2021, 42(5): 606.
- [3] Li C, Xue Y F, Hua M T, et al. Microstructure and mechanical properties of Al₃Si_{0.2}CrFeCoNiCu_{1-x} high-entropy alloys[J]. *Materials and Design*, 2016, 90: 601-609.
- [4] Du X, Lu X C, Shuang S Y, et al. Cyclic plasticity of CoCrFeMnNi high-entropy alloy (HEA): a molecular dynamics simulation[J]. *International Journal of Applied Mechanics*, 2021, 13: 2150006.
- [5] Wan C K, Yuan J C, Li L X, et al. Dynamic compression of dendritic high-entropy alloy Al_{0.5}CoCrFeNi with various microstructures: experiments and constitutive modeling[J]. *Materials Science & Engineering A*, 2025, 930: 148117.
- [6] 陈晶晶, 占慧敏, 吴昊, 等. 纳米晶 CoNiCrFeMn 高熵合金的拉伸力学性能[J]. *材料研究学报*, 2023, 37(8): 614-624.
Chen J J, Zhan H M, Wu H, et al. Tensile mechanical performance of high entropy nanocrystalline CoNiCrFeMn alloy[J]. *Chinese Journal of Materials Research*, 2023, 37(8): 614-624.
- [7] Zhao C D, Li J S, Liu Y D, 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, 86: 117-126.
- [8] 孟易辰, 褚胤闰, 石岳林, 等. 激光熔覆 CoCrNi 系中高熵合金的摩擦学和电化学性能研究[J]. *稀有金属材料与工程*, 2025, 54(4): 983-992.
Meng Y C, Chu Y R, Shi Y L, et al. Tribological and electrochemical properties of CoCrNi-based medium and high entropy alloys prepared by laser cladding[J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2025, 54(4): 983-992.

- [9] Afkham Y, Bahramyan M, Mousavian R T, et al. Tensile properties of AlCrCoFeCuNi glassy alloys: a molecular dynamics simulation study[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2017, 698: 143-151.
- [10] Ding L, Wang H X, Quan X M. Microstructure and abrasion resistance of laser cladding CoCrFeNiTiNbB_{1.25} high-entropy alloys coatings treated by aging[J]. *Science of Advanced Materials*, 2021, 13(8): 1479-1487.
- [11] Guo T, Wu L P, Li T. Machine learning accelerated, high throughput, multi-objective optimization of multiprincipal element alloys[J]. *Small*, 2021, 17(42): 2102972.
- [12] Gali A, George E P. Tensile properties of high- and medium-entropy alloys[J]. *Intermetallics*, 2013, 39: 74-78.
- [13] Huang S, Li W, Lu S, et al. Temperature dependent stacking fault energy of FeCrCoNiMn high entropy alloy[J]. *Scripta Materialia*, 2015, 108: 44-47.
- [14] Qiao J W, Ma S G, Huang E W, et al. Microstructural characteristics and mechanical behaviors of AlCoCrFeNi high-entropy alloys at ambient and cryogenic temperatures[J]. *Materials Science Forum*, 2011, 688: 419-425.
- [15] 陈晶晶, 邱小林, 李柯, 等. 纳米晶 CoNiCrFeMn 高熵合金力学性能的原子尺度分析[J]. *物理学报*, 2022, 71(19): 199601.
- Chen J J, Qiu X L, Li K, et al. Mechanical performance analysis of nanocrystalline CoNiCrFeMn high entropy alloy: atomic simulation method[J]. *Acta Physica Sinica*, 2022, 71(19): 199601.
- [16] 黄伟玲, 陈晶晶. 多晶 CoNiCrFeMn 高熵合金塑性变形原子尺度分析[J]. *材料导报*, 2021, 35(24): 24107-24112.
- Huang W L, Chen J J. Atomic mechanism of plastic deformation for poly-crystalline CoNiCrFeMn high entropy alloy[J]. *Materials Reports*, 2021, 35(24): 24107-24112.
- [17] Chen S, Aitken Z H, Pattamatta S, et al. Simultaneously enhancing the ultimate strength and ductility of high-entropy alloys via short-range ordering[J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 4953.
- [18] Wu Y C, Shao J L. FCC-BCC phase transformation induced simultaneous enhancement of tensile strength and ductility at high strain rate in high-entropy alloy[J]. *International Journal of Plasticity*, 2023, 169: 103730.
- [19] Zhang Z, Jiang Z H, Xie Y H, et al. Multiple deformation mechanisms induced by pre-twinning in CoCrFeNi high entropy alloy[J]. *Scripta Materialia*, 2022, 207: 114266.
- [20] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- [21] Dong B, Wang X M, Zhu Z L. Study on the mechanical performance and microstructure of FeCoCrCuNi high-entropy alloy with crack and void by molecular dynamics simulations[J]. *Journal of Atomic and Molecular Physics*, 2020, 37: 591.
- [22] Fang Q H, Chen Y, Li J, et al. Probing the phase transformation and dislocation evolution in dual-phase high-entropy alloys[J]. *International Journal of Plasticity*, 2019, 114: 161-173.
- [23] Foiles S M, Baskes M I, Daw M S. Embedded-atom-method functions for the FCC metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys[J]. *Physical Review B*, 1986, 33(12): 7983-7991.
- [24] Guo J, Chen J J, Wang Y Q. Temperature effect on mechanical response of c-plane monocrystalline gallium nitride in nanoindentation: a molecular dynamics study[J]. *Ceramics International*, 2020, 46(8): 12686-12694.
- [25] Chen J J, Wu H, Bai S H, et al. Response of mechanical properties and subsurface damage in β -SiC to temperature and crystal plane during nanoindentation simulation[J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2023, 165: 107651.
- [26] Wang K Y, Cheng Z J, Liu C Y, et al. Deformation behavior and strengthening mechanisms of high-entropy alloys under high strain rate across wide temperature ranges[J]. *International Journal of Plasticity*, 2025, 189: 104321.

收稿日期: 2025-12-16; 录用日期: 2026-03-05

基金项目: 国家自然科学基金(62563030); 江西省教育厅科学技术研究项目(GJJ2402616, GJJ2502610)

通讯作者: 陈晶晶(1989—), 男, 硕士, 副教授, 研究方向为机械表/界面摩擦磨损与防护润滑, 联系地址: 江西省南昌市经开区英雄大道南昌理工学院机电工程学院(330044), E-mail: chenjingjingfzu@126.com

(本文责编: 陈 卉)