

分子动力学模拟在高熵合金研究中应用的进展与挑战

赵升 范博研 李中原

陇东学院智能制造学院

摘要：分子动力学模拟作为原子尺度研究的重要工具，在高熵合金多主元体系的研究中展现出显著优势。该方法通过构建包含多种元素的超晶胞模型，并采用嵌入原子势等力场精确描述原子间相互作用，从而能够系统模拟高熵合金的性能。本文系统阐述了分子动力学在高熵合金研究中的应用，重点剖析了分子动力学在力学性能研究和扩散行为研究领域的应用，其能从原子层面揭示高熵合金性能的微观机理，为材料设计与性能预测提供了关键理论依据，但目前仍在力场精度、计算尺度及时间尺度方面存在一定局限性。

关键词：分子动力学；高熵合金；力学性能；模拟计算

引言

高熵合金是一种由多种主要元素组成的多主元合金，成分通常具有高度的混乱度（entropy），在材料科学领域展现出独特的性能和广阔的应用前景。高熵合金的特性主要体现在其复杂的成分、结构特征以及优异的物理化学性能上，与传统合金相比，高熵合金通过引入多组元元素，打破了传统合金单一或少数几种元素主导的模式，在微观结构上形成了短程有序、长程无序的复杂排列，这种结构特点使得高熵合金在高温强度、抗氧化性、抗辐照性等方面表现出优势^[1-5]。

高熵合金凭借其卓越的高温强度、抗氧化性以及优异的抗辐照性能，在航空航天、核能装置和石油化工等关键领域展现出广阔的应用前景，被视为极具潜力的新一代高温结构材料。然而，其多元复杂的成分与微观结构也使得材料性能的形成机制难以通过传统实验手段在宏观层面得到充分揭示。要在原子尺度上深入解析高熵合金的变形、损伤及相稳定性等微观行为，发展能够模拟材料结构演化与性能间关联的理论方法显得至关重要。在此背景下，分子动力学模拟因其能够精确捕捉原子运动轨迹、揭示微观机理，已成为研究高熵合金材料性能不可或缺的理论工具。

1 分子动力学基本原理

分子动力学的理论基础建立在经典牛顿力学框架之上，通过求解原子体系的运动方程来模拟材料的微观行为。在分子动力学模拟中，每个原子被视为遵循牛顿第二定律的质点，运动轨迹由作用在原子上的力决定。通过数值积分方法（如 Verlet 算法）求解这一运动方程，即可获得原子随时间的运动轨迹^[6]。

力场是分子动力学模拟的核心要素，描述了原

子间相互作用的势能函数，常见的力场类型包括对势和多体势。对势仅考虑原子对之间的相互作用，如 Lennard-Jones 势和 Morse 势，适用于描述范德华力等短程相互作用。多体势则考虑了多个原子间的协同效应，如嵌入原子势（EAM）和修正的嵌入原子势（MEAM），能够更准确地描述金属键的复杂性^[7]。在高熵合金模拟中，由于多种元素共存，力场的选择尤为关键，需要确保能够准确反映不同原子间的相互作用特性。

温度控制常用的方法包括 Berendsen 热浴和 Nosé-Hoover 热浴。这些方法通过调节原子速度来维持体系在设定温度下的平衡状态，使得模拟结果能够反映真实的热力学条件。周期性边界条件的引入可以消除表面效应，使模拟体系更接近宏观材料的体相性质。

2 分子动力学在高熵合金力学性能研究中的应用

2.1 弹性性能模拟

分子动力学模拟是研究高熵合金弹性性能的重要方法之一，通过构建合理的原子模型并施加适当的边界条件，可以计算高熵合金的弹性模量、泊松比等关键力学参数。在模拟过程中，通常采用应变-能量法或应力-应变法来获取弹性常数矩阵。应变-能量法通过施加一系列微小应变，计算系统总能的变化来推导弹性常数；而应力-应变法则直接测量系统在应变下的应力响应。这两种方法各有优势，前者计算精度较高但计算量较大，后者计算效率更高但可能受统计波动影响。

高熵合金的弹性性能与其独特的微观结构密切相关。由于多主元混合效应，高熵合金往往表现出较高

基金项目：2025年甘肃省高校教师创新基金项目：基于深度学习的高压线路智能巡检机器人的研究（项目编号：2025B-215）；陇东学院横向科研项目：输电线路智能巡检机器人移动机构的研制（项目编号：HXZK2547）。

的弹性模量。分子动力学模拟可以揭示原子尺度的结构特征，如局部晶格畸变、化学短程有序等对弹性性能的影响机制。研究表明，高熵合金中不同原子间的尺寸差异会导致晶格畸变，这种畸变会阻碍位错运动，从而提高弹性模量。同时，化学短程有序的形成会改变局部原子键合状态，进一步影响材料的弹性响应。

温度是影响高熵合金弹性性能的重要因素。分子动力学模拟可以方便地研究温度效应，通过控制系统的热力学状态来模拟不同温度下的力学行为。随着温度升高，原子振动加剧，原子间平均距离增大，导致弹性模量普遍下降。这种温度依赖性可以通过分析原子间势能曲线的变化来理解。晶体取向也会对弹性性能产生影响，不同晶向上原子排列的差异会导致弹性各向异性^[8]。

在模拟高熵合金的弹性性能时，选择合适的势函数至关重要。常用的势函数包括嵌入原子势(EAM)、修正嵌入原子势(MEAM)和反应力场(ReaxFF)等。这些势函数能够较好地描述多组元合金中复杂的原子间相互作用。对于含有过渡金属元素的高熵合金，EAM势因其计算效率和准确性而被广泛采用。势函数的参数需要通过第一性原理计算或实验数据进行校准，以确保模拟结果的可靠性。

分子动力学模拟还可以研究缺陷对高熵合金弹性性能的影响。空位、位错、晶界等微观缺陷的存在会改变材料的弹性响应。通过构建包含特定缺陷的原子模型，可以定量分析缺陷浓度与弹性性能的关系。研究发现，缺陷通常会降低材料的弹性模量，但某些特殊类型的缺陷可能通过钉扎效应反而提高局部刚度。这种复杂的缺陷-性能关系正是分子动力学模拟的优势所在^[8]。

分子动力学模拟为理解高熵合金弹性性能的微观机制提供了有力工具。通过精确控制模拟条件和系统分析结果，可以获得与实验相符的弹性参数，并揭示微观结构与宏观性能的内在联系。未来随着计算方法的改进和计算资源的提升，分子动力学在高熵合金弹性性能研究中的应用将更加广泛和深入。

2.2 塑性变形机制

高熵合金的塑性变形机制是理解其优异力学性能的关键。分子动力学模拟为研究这类材料的微观变形行为提供了强有力的工具，能够从原子尺度揭示位错运动、孪晶形成等塑性变形过程的内在规律。通过模拟不同加载条件下的原子运动轨迹，可以深入分析高熵合金在塑性变形过程中的微观结构演变及其对宏观力学性能的影响。

在高熵合金的塑性变形过程中，位错运动是最主要的变形机制之一。分子动力学模拟可以清晰地展示位错形核、增殖和滑移的完整过程。由于高熵合金具有多主元混合的特点，晶格畸变效应，导致位错运动的阻力增大。这种晶格畸变效使得位错在高熵合金中的运动速度较传统合金更慢，从而提高了材料的强度。同时，高熵合金中不同元素之间的相互作用也会影响位错的运动路径，使得位错倾向于在特定滑移系上运动，这进一步影响了材料的塑性变形行为。

除了位错运动外，孪晶形成也是高熵合金塑性变形的重要机制。分子动力学模拟可以观察到在特定加载条件下，高熵合金中会形成纳米尺度的孪晶结构。这些孪晶界能够有效地阻碍位错的运动，起到强化材料的作用。同时，孪晶的形成还提供了额外的变形通道，有助于维持材料的塑性变形能力。这种孪晶诱导塑性(TWIP)效应是高熵合金兼具高强度和高塑性的重要原因^[9]。

高熵合金的强韧化机理可以从多个方面来解释。多主元混合导致的晶格畸变效应增加了位错运动的阻力，这是高熵合金高强度的重要来源。高熵合金中复杂的化学短程有序结构能够有效地阻碍位错的运动，进一步提高材料的强度。高熵合金中多种变形机制的协同作用，包括位错滑移、孪晶形成、相变等，使得材料在变形过程中能够保持较好的塑性变形能力。

分子动力学模拟还可以研究温度对高熵合金塑性变形机制的影响。随着温度的升高，原子的热振动加剧，位错运动的阻力减小，这会导致材料的强度降低。同时，高温下更容易发生位错的交滑移和攀移，这会改变材料的变形机制。通过模拟不同温度下的变形过程，可以深入理解温度对高熵合金力学性能的影响规律^[10]。

分子动力学模拟为研究高熵合金的塑性变形机制提供了原子尺度的视角，能够揭示位错运动、孪晶形成等微观变形过程与宏观力学性能之间的关系。这些研究不仅有助于理解高熵合金的强韧化机理，也为设计和优化新型高熵合金提供了理论指导。

3 分子动力学在高熵合金扩散行为研究中的应用

分子动力学模拟研究高熵合金扩散行为的过程如图所示，该过程涵盖了从模拟准备到结果分析的多个关键步骤，各步骤相互关联，共同揭示高熵合金扩散行为的微观机制。

分子动力学模拟是研究高熵合金扩散行为的有效手段，其中扩散系数的计算是理解原子迁移规律的核心环节。在分子动力学框架下，扩散系数通常通过均方位移(Mean Square Displacement, MSD)与时间的关

系来确定。根据爱因斯坦关系，三维体系中扩散系数D可表示为MSD随时间变化斜率的六分之一，这一关系为定量分析高熵合金中原子扩散提供了理论基础。

高熵合金中多主元的特点使得扩散行为呈现出复杂特征。模拟过程中需要构建包含多种元素的超胞模型，并通过合适的势函数描述原子间相互作用。在模拟扩散行为时，通常采用NPT或NVT系综，通过控制温度来研究热激活过程对扩散的影响。温度升高会增加原子的振动幅度和空位浓度，从而促进扩散过程^[11]。

成分变化对扩散系数的影响同样。在高熵合金中，不同元素的原子尺寸、电负性等差异会导致晶格畸变，进而影响扩散路径和能垒。Cu原子在CoCrFeNiCu合金中的扩散系数高于其他元素，这与其较小的原子半径和较弱的键合强度有关。通过调整元素比例，可以调控合金的扩散特性，这对设计具有特定性能的高熵合金具有重要意义^[12]。

模拟过程中还需要考虑统计误差和系统误差的影响。由于扩散是随机过程，需要足够长的模拟时间以获得可靠的统计结果。同时，势函数的准确性直接决定模拟结果的可靠性，因此需要针对具体合金体系进行势函数验证。边界条件的设置也会影响扩散系数的计算，周期性边界条件虽然能减小尺寸效应，但仍需保证模拟盒子尺寸远大于相关长度尺度。

分子动力学模拟不仅可以计算体扩散系数，还能研究晶界扩散等短程扩散行为。通过构建包含晶界的多晶模型，可以分析晶界结构对扩散的影响。高熵合金中成分复杂的晶界往往表现出与晶内不同的扩散特性，这对理解合金的时效行为和高温稳定性具有重要价值。分子动力学模拟为揭示高熵合金中扩散行为的微观机制提供了独特视角，为合金设计

4 结语

近年来，分子动力学方法在高熵合金研究中取得了进展，为理解其复杂的物理和力学行为提供了重要理论支持，分子动力学通过模拟原子尺度的运动和相互作用，能够揭示高熵合金在结构、性能及行为方面的独特性。现有研究表明，分子动力学已被广泛应用于高熵合金的力学性能、扩散行为及多尺度建模等方面。

在高熵合金的力学性能研究方面，分子动力学模拟揭示了高熵合金在弹性、塑性及断裂行为中的独特机制。通过模拟不同温度和取向下的拉伸和压缩变形行为，研究者发现高熵合金的力学性能表现出尺寸依赖性和温度敏感性。分子动力学还被用于研究高熵合

金在动态加载条件下的性能表现，例如冲击波作用下的应变率效应及孔洞对拉伸性能的影响。

尽管分子动力学在高熵合金研究中取得了诸多成果，但仍存在一些局限性和挑战。分子动力学模拟的计算成本较高，限制了其在大尺度和长时间模拟中的应用。目前常用的力场模型在描述高熵合金的复杂相互作用时仍存在一定的局限性，尤其是在处理多组元体系的化学序和晶格畸变时^[13]。分子动力学在模拟高熵合金的长期扩散行为及辐照损伤累积过程时仍面临较大挑战。分子动力学作为研究高熵合金的重要工具，未来仍将在其基础理论研究和工程应用中发挥重要作用。通过不断改进模拟方法和拓展研究范围，分子动力学有望为高熵合金的设计、制备及性能优化提供更加全面的理论指导。求解运动方程的过程涉及时间离散化和数值积分。模拟时间被划分为若干微小的网络通信长（通常在飞秒量级），在每个时间步内计算原子的位置和速度。Verlet算法是常用的积分方法之一，它通过泰勒展开近似计算原子位置，具有较好的能量守恒特性。其他方法如速度Verlet算法和蛙跳算法也常被采用，各有其计算效率和精度上的优势。

参考文献：

- [1] 仵举博.Al的添加对Al_xCoCrFeNi高熵合金结晶过程的影响[J].力学研究,2024,13(2):9–16.
- [2] 杨思华,李承泽,张宇峰,等.AlCrFeNi₂Cu_x高熵合金组织及性能[J].沈阳工业大学学报,2019,41(4):390–394.
- [3] Chen W,Fu Z,Fang S,et al.Alloying behavior, microstructure and mechanical properties in a FeNiCrCo0.3Al0.7 high entropy alloy[J].Materials&Design,2013,51:854–860.
- [4] Chuang M H,Tsai M H,Wang W R,et al.Microstructure and wear behavior of Al_xCo1.5CrFeNi1.5Ti_y high-entropy alloys[J].Acta Materialia,2011,59(16):6308–6317.
- [5] 隋艳伟,陈霄,戚继球,等.多主元高熵合金的研究现状与应用展望[J].功能材料,2016,47(5):50–54.
- [6] Zhao L,Gao J S,Xu C M.Methods and applications of molecular simulation in catalyst research[J].Petroleum science and technology,2006,24(12):1395–1415.
- [7] Johnson R A.Alloy models with the embedded-atom method[J].Physical Review B,1989,39(17):12554.
- [8] He,Yezeng,et al.Molecular dynamics simulations of primary cascade damage in FeCoCrNiCu high-entropy alloys.Journal of Alloys and Compounds