

# 基于多变形机制的 CrMnFeCoNi 高熵合金应变率相关晶体塑性本构模型\*

王洪磊, 陈军红, 黄西成

(中国工程物理研究院总体工程研究所, 四川 绵阳 621999)

**摘要:** 高熵合金 (High-entropy alloys, HEAs) 在高应变速率、低温等极端条件下所呈现的显著强韧协同效应已被大量研究证实。然而, 现有晶体塑性模型虽能描述动态载荷下的宏观力学响应, 却较少能从物理机制层面对应变率效应进行量化, 且关键参数往往缺乏明确的物理意义, 制约了对该优异性能背后物理机制的深入揭示。基于多重变形机制构建的统一晶体塑性有限元 (Crystal Plasticity Finite Element, CPFE) 模型, 实现了对等原子比 CrMnFeCoNi 高熵合金在宽应变速率范围 ( $10^{-2}$ – $10^4$  s $^{-1}$ ) 内宏观塑性流动行为的合理预测。依据热弹-黏塑性理论, 推导了应变率敏感的塑性变形机制晶体学解析式, 并通过引入随离散时间步长更新的滑移系位错密度与运动阻力内变量, 定量表征了塑性变形过程中微观组织的演化动力学。结果表明: 应变速率主导的位错动力学特性和温度依赖的层错能 (通过调控孪晶/马氏体相变/位错滑移的竞争机制) 共同决定材料强韧协同效应的非线性演化规律, 并影响其宏观力学响应。针对 Cantor (CrMnFeCoNi) 合金研究构建的、用于描述极端条件下塑性变形机制的定量物理模型, 可为其它类似的面心立方结构高熵合金 (Face-centered cubic high-entropy alloys, FCC HEAs) 的建模提供可借鉴框架。

**关键词:** 高熵合金; 晶体塑性有限元; 动态力学性能; 塑性变形机制; 应变率相关; 形变孪晶; 马氏体相变

中图分类号: O346.3

国标学科代码: 1301520

文献标识码: A

## Strain-rate-dependent crystal plasticity constitutive modeling based on multiple deformation mechanisms for CrMnFeCoNi High-entropy alloys

WANG Honglei, CHEN Junhong, HUANG Xicheng

(Institute of System Engineering, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, Sichuan, China)

**Abstract:** High-entropy alloys (HEAs) exhibit pronounced strength–ductility synergy under extreme conditions such as high strain rates and cryogenic temperatures. However, existing crystal plasticity models, although capable of capturing macroscopic dynamic responses, rarely quantify strain-rate effects at the mechanistic level, and their critical parameters often lack explicit physical meaning. This limits the in-depth understanding of the physical mechanisms behind the excellent mechanical performance of HEAs. To address this issue, a physics-informed crystal plasticity finite element (CPFE) model was developed for equiatomic CrMnFeCoNi HEAs over a wide strain-rate range from  $10^{-2}$  to  $10^4$  s $^{-1}$ . Multiple deformation mechanisms were integrated into the model, and the model was implemented in a finite element environment. Based on a thermo-elasto-viscoplastic theory, strain-rate-sensitive crystallographic formulations were derived for the plastic deformation mechanisms, including dislocation slip, deformation twinning, and martensitic phase transformation. Two dislocation mechanisms, i.e., dislocation slip

\*收稿日期: 2026-05-31; 修回日期: 2026-10-02;

基金项目: 国家自然科学基金 (5230111); 国防基础科研核科学挑战计划专题 (TZ2025003);

第一作者: 王洪磊 (1986—), 男, 博士研究生. E-mail: wanghonglei@mail.ustc.edu.cn;

通信作者: 陈军红 (1987—), 男, 博士, 副研究员. E-mail: chenjh@lnm.imech.ac.cn.

and viscous drag, were considered to describe rate-controlled dislocation activity. Discrete internal state variables, updated at each time step, were introduced to track the evolution of dislocation density and dislocation-motion resistance on individual slip systems. In addition, the model incorporated the temperature dependence of stacking fault energy (SFE), adiabatic temperature rise, and the temperature dependence of the Hall-Petch relation. These components enabled quantitative characterization of the kinetic features of microstructural evolution and established a direct link between mesoscale microstructural evolution and macroscopic mechanical properties. Numerical simulations were performed for equiatomic CrMnFeCoNi HEAs across this wide strain-rate range. The model reasonably predicted the macroscopic plastic flow behavior and maintained consistent predictions of stress-strain responses and microstructural evolution. The results show that the nonlinear evolution of strength-ductility synergy under dynamic loading is jointly governed by strain-rate-dominated dislocation dynamics and SFE-regulated competition among dislocation slip, twinning, and transformation, which ultimately dictates the macroscopic mechanical responses of the alloy. By analyzing strain-rate sensitivity and work-hardening rate, the plastic stability during dynamic deformation was revealed. The simulation results validated the reliability of the model in capturing dynamic deformation mechanisms. It is concluded that the proposed framework provides a quantitative physical model for describing extreme deformation mechanisms in the Cantor (CrMnFeCoNi) alloy. It also offers a physically sound and transferable modeling framework for other face-centered cubic (FCC) HEAs and for the investigation and design of multi-principal element alloy systems with complex deformation mechanisms under dynamic deformation and temperature variation.

**Keywords:** High-entropy alloys; Crystal plasticity finite element; Dynamic mechanical properties; Plastic-deformation mechanisms; Strain-rate-dependent; Deformation twinning; Martensitic transformation

高熵合金 (High-entropy alloys, HEAs), 亦称多主元合金 (Multi-principal element alloys, MPEAs), 其晶格中不同元素呈化学长程无序而拓扑短程有序的排列, 构成了独特的原子堆垛结构<sup>[1-2]</sup>。该结构有助于协同提升材料的强度与塑性, 赋予其优异的综合力学性能<sup>[3]</sup>, 如卓越的断裂韧性<sup>[4]</sup>。这些特性使 HEAs 在高应变率等极端条件下展现出广阔的应用前景<sup>[5-6]</sup>。相比之下, 传统金属在高应变率下常面临塑性下降与失效风险。现有动态力学研究多集中于压缩加载<sup>[7-8]</sup>, 对于建立可靠的本构模型而言, 仅有压缩数据存在固有局限。压缩实验不可避免地受端面摩擦与试样鼓形化影响, 所测应力状态偏离理想单轴, 且该条件下的率依赖硬化行为未必能直接外推至拉伸状态。动态拉伸实验能够提供接近理想单轴应力状态, 同时可在宽应变率范围内直接测定应变率敏感系数与硬化规律, 是标定与验证本构模型不可或缺的补充。因此, 系统研究应变率对 HEAs 动态力学性能的影响, 尤其是动态拉伸行为, 是理解其应变率敏感性的关键, 也为揭示其在剧烈塑性变形中的强韧机制提供了重要途径。然而, 尽管已有部分研究<sup>[9-11]</sup>关注面心立方结构高熵合金 (Face-centered cubic high-entropy alloys, FCC HEAs) 的动态拉伸行为, 但针对宽应变率范围内的系统性研究仍缺乏, 制约了其在高应变率环境下的适应性设计。

以 Cantor 合金<sup>[12]</sup>为代表的 FCC HEAs, 其变形机制 (包括位错滑移、形变孪晶、马氏体相变及晶界活动) 对应变率极为敏感<sup>[9,11,13]</sup>, 这为机理认知带来根本挑战。高应变率条件下, 绝热升温、晶体缺陷的累积 (如位错、层错、孪晶界) 以及相变动力学成为主导因素, 这些因素以高度非线性方式依赖于应变率, 共同调控材料的宏观力学行为<sup>[13-14]</sup>。其中, 快速变形引起的温升不仅直接导致热软化, 还会显著改变应变硬化行为, 使得应变率效应与热效应紧密耦合, 从而显著增加了分离热贡献、阐明变形机理的难度。然而, 在高应变率加载过程中原位观测微观结构的时空演化 (如位错动态与孪晶行为) 仍存在关键挑战, 难以定量解耦各变形机制的瞬态贡献<sup>[15]</sup>。这一认知缺口凸显了发展实验与有限元模拟相结合的多尺度研究方法的迫切性, 以期揭示 Cantor 类合金在高应变率下强韧协同演变的内在物理本质<sup>[16]</sup>。

晶体塑性理论为物理机制导向的材料本构建模提供了有效途径, 可将多晶宏观力学响应与晶粒尺度变形机制及微观结构演化相关联, 适用于描述材料在高应变率下的力学行为, 并可揭示实验中

难以捕捉的微观演化过程<sup>[17]</sup>。基于此，目前发展的晶体塑性本构框架主要分为两类：一类是基于唯象幂律流动法则的应变率相关模型<sup>[18]</sup>，通过应变率敏感性指数（ $m$  值）表征宏观应变率相关性，计算效率高，被广泛用于 FCC 合金的动态响应模拟；另一类是基于位错动力学的物理机制导向模型<sup>[19]</sup>，通过追踪可动位错与林位错演化来预测硬化行为，具有更强的物理基础。然而，这两类模型在描述 Cantor 合金宽应变率范围内的塑性流动行为均存在明显不足。

对于唯象幂律流动模型<sup>[18]</sup>，往往需要对宏观力学性能曲线进行数学拟合。例如，采用幂律流动法则模拟 Cantor 合金的动态拉伸响应时，首先需要确定  $m$  值，同时还必须引入应变率相关的位错增殖和动态回复系数。这一做法本质上仍是现象学描述而非物理预测，并不包含多种塑性变形机制及其应变率相关耦合的物理图景。由此可见，唯象模型难以再现绝热温升引起的热软化与位错增殖硬化之间的动态竞争，最终导致宽应变率范围内的流变应力预测失真。因此，唯象模型虽具备较高的计算效率，但难以从物理本质上解释塑性变形的微观机制，限制了微观结构与性能关联的建立。

相较之下，位错动力学物理模型虽引入了位错密度演化方程，但位错运动从热激活机制向黏性拖曳机制的转变（即速率控制机制转变）在现有模型中很少体现<sup>[20]</sup>，同样会影响宽应变率范围内的流变应力预测精度。此外，现有模型多针对纯金属或稀固溶体，其假设的变形机制并不适用于 Cantor 合金。Cantor 合金具有低层错能，在高应变率下形变孪晶甚至马氏体相变会显著激活，并与位错滑移形成复杂的动态竞争与协同关系，现有模型尚未将这些变形机制耦合到应变率相关位错动力学框架中。

综上所述，目前仍缺乏一个能够对 Cantor 类合金在宽应变率范围内的复杂塑性流动行为实现物理一致描述的自洽晶体塑性建模框架。针对上述问题，基于经典晶体塑性理论，结合 Cantor 合金在高应变率下滑移、孪晶与相变耦合的塑性变形机制，采用物理机制导向的位错动力学模型与硬化规律，建立了综合考虑应变率相关滑移-孪生-相变竞争与微观组织演变的晶体塑性本构模型。具体而言，模型采用热激活与黏性拖曳双机制控制的滑移率方程，显式描述位错运动速率控制机制的转变；引入孪晶、相变形核与生长的应变率相关动力学模型，实现滑移、孪晶与相变三种变形机制竞争的物理描述；此外，模型还考虑了绝热温升对晶界滑移阻力、孪晶临界应力以及相变驱动力的影响。基于该模型，开展了 Cantor 合金的晶体塑性有限元模拟，揭示了位错滑移、孪晶与相变竞争及绝热温升效应共同主导强韧协同提升的机制。最后，通过对比高应变率下的动态拉伸实验数据，验证了模型的可靠性。

## 1 热弹-黏塑性晶体塑性模型

晶体塑性理论已发展出多种研究框架，在 Hill 与 Rice<sup>[21]</sup>、Asaro<sup>[22-23]</sup>等提出的晶体塑性模型基础上，针对高应变率加载条件，考虑弹性晶格畸变与塑性变形的各自贡献，并采用热激活与声子拖曳双机制控制的位错运动模型，确立了热弹-黏塑性晶体塑性本构关系。

有限应变下晶体的总变形梯度张量可以分解为：

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \quad (1)$$

式中： $\mathbf{F}^e$  和  $\mathbf{F}^p$  分别表示弹性与塑性变形梯度。塑性变形梯度的演化可以表示为：

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \mathbf{L}^p \mathbf{F}^p \quad (2)$$

式中： $\mathbf{L}^p$  为塑性速度梯度张量。为考虑 Cantor 合金中多种塑性变形机制对塑性变形的贡献<sup>[24-25]</sup>，则：

$$\mathbf{L}^p = (1 - f_{tw} - f_{tr}) \sum_{\alpha=1}^{N_s} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{n}^{(\alpha)} + \sum_{\beta=1}^{N_{tw}} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{s}^{(\beta)} \otimes \mathbf{n}^{(\beta)} + \sum_{\chi=1}^{N_{tr}} \dot{\gamma}^{(\chi)} \mathbf{s}^{(\chi)} \otimes \mathbf{n}^{(\chi)} \quad (3)$$

并且：

$$f_{\text{tw}} = \sum_{\beta=1}^{N_{\text{tw}}} f^{(\beta)}, \quad f_{\text{tr}} = \sum_{\chi=1}^{N_{\text{tr}}} f^{(\chi)} \quad (4)$$

式中：\$f\_{\text{tw}}\$ 和 \$f\_{\text{tr}}\$ 分别表示所有孪晶系和马氏体相变系的总体积分数，\$N\_s\$、\$N\_{\text{tw}}\$、\$N\_{\text{tr}}\$ 分别表示滑移系 \$\alpha\$、孪晶系 \$\beta\$ 和马氏体相变系 \$\chi\$ 的数量，\$\mathbf{s}^{(\alpha)}\$ 与 \$\mathbf{n}^{(\alpha)}\$、\$\mathbf{s}^{(\beta)}\$ 与 \$\mathbf{n}^{(\beta)}\$、\$\mathbf{s}^{(\chi)}\$ 与 \$\mathbf{n}^{(\chi)}\$ 分别表示滑移系 \$\alpha\$、孪晶系 \$\beta\$ 和马氏体相变系 \$\chi\$ 的滑移方向及滑移面法线方向的正交单位向量，符号 \$\otimes\$ 表示两个向量的并矢积（外积）。

## 1.1 弹性变形方程

根据弹性本构关系，可定义第二 Piola-Kirchhoff 应力张量 \$\mathbf{S}\$，该应力在塑性构型中与弹性 Green-Lagrange 应变张量 \$\mathbf{E}^e\$ 功共轭：

$$\mathbf{S} = \mathbf{C} : \mathbf{E}^e \quad (5)$$

并且：

$$\mathbf{E}^e = \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e - \mathbf{I}) \quad (6)$$

式中：\$\mathbf{I}\$ 为二阶单位张量，\$\mathbf{C}\$ 为四阶各向异性弹性（刚度）张量，继承底层晶格的对称性。对于 FCC 晶格结构，弹性张量 \$\mathbf{C}\$ 取决于三个独立的弹性常数 \$C\_{11}\$、\$C\_{12}\$ 和 \$C\_{44}\$，而对于密排六方（Hexagonal close packed, HCP）晶格结构，弹性张量 \$\mathbf{C}\$ 的矩阵则由 \$C\_{11}\$、\$C\_{12}\$、\$C\_{13}\$、\$C\_{33}\$ 和 \$C\_{44}\$ 等五个独立的分量构成。此外，运算符“:”表示双点积，上标 T 表示张量转置操作。这些符号约定适用于后续所有张量表达式。

相应的 Cauchy 应力可以表示为：

$$\mathbf{S} = \mathbf{F}^{e-1} \det(\mathbf{F}^e) \boldsymbol{\sigma} (\mathbf{F}^{e-1})^T \quad (7)$$

式中：\$\det(\mathbf{F}^e)\$ 表示变形梯度 \$\mathbf{F}^e\$ 的雅可比行列式。

根据 Schmid 定律，与滑移系统相关的外加分切应力 \$\tau^{(\alpha)}\$ 表示为<sup>[26-27]</sup>：

$$\tau^{(\alpha)} = \mathbf{M}^p : (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{n}^{(\alpha)}) \quad (8)$$

式中：\$\mathbf{M}^p\$ 表示塑性构型中的 Mandel 应力，源于第二 Piola-Kirchhoff 应力张量 \$\mathbf{S}\$ 和弹性变形梯度 \$\mathbf{F}^e\$，满足与塑性速度梯度 \$\mathbf{L}^p\$ 的塑性功共轭关系<sup>[17]</sup>：

$$\mathbf{M}^p = \mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e \mathbf{S} \quad (9)$$

基于此，由塑性功表征的温度变化率可表示为：

$$\dot{\theta} = \frac{\eta(\mathbf{M}^p : \mathbf{L}^p)}{\rho C_p} \quad (10)$$

式中：\$\rho\$ 是材料质量密度，\$C\_p\$ 是比热容，\$\eta\$ 是 Taylor-Quinney 系数，表示转化为热的塑性功比例。高应变率（\$>10^3 \text{ s}^{-1}\$）下变形时间极短，向环境的热量散失可忽略，可认为 Cantor 合金处于近似绝热状态，所采用的参数取值为：\$\rho = 8027 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}\$，\$C\_p = 450 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}\$，\$\eta = 0.95\$。对于低应变率（\$<1 \text{ s}^{-1}\$），变形过程中热量有足够时间散逸至环境，故采用近似等温假设，此时取 \$\eta \approx 0\$。

## 1.2 位错动力学

### 1.2.1 位错运动

位错运动及演化过程是晶体滑移变形的核心过程。位错滑移运动的调控机制主要包括短程和长程两种相互作用。短程作用涉及位错在滑移过程中需克服诸如其他位错造成的局部障碍，该过程可借助晶格的热振动得以辅助完成，因此具有热辅助激活的特征。长程作用来源于位错与析出相、晶

界等缺陷所产生的长程应力场，此时位错的运动主要由声子拖曳效应主导<sup>[28]</sup>。基于此，位错平均滑移速度可表示为<sup>[28-31]</sup>：

$$\bar{v}^{\alpha} = \frac{\lambda_s^{\alpha}}{t_w^{\alpha} + t_r^{\alpha}} \quad (11)$$

式中： $\lambda_s^{\alpha}$  是材料内部长程作用的长度， $t_w^{\alpha}$  是位错在障碍处的平均等待时间，代表位错克服障碍的概率，该过程依赖于温度与应力辅助的热激活机制，可由 Arrhenius 方程描述<sup>[29]</sup>：

$$t_w^{\alpha} = \left[ \exp\left(\frac{\Delta G(\tau^{(\alpha)})}{k_B \theta}\right) - 1 \right] \nu_a^{-1} \quad (12)$$

式中： $\nu_a$  是有效尝试频率， $\Delta G$  是应力辅助激活能， $k_B$  是玻尔兹曼常数， $\theta$  是当前温度。

相应地， $t_r^{\alpha}$  为位错在障碍间的平均运行时间，表示位错在声子拖曳下的连续运动，即<sup>[28,32]</sup>：

$$t_r^{\alpha} = \frac{\lambda_s^{\alpha}}{v_r^{\alpha}} \quad (13)$$

并且：

$$v_r^{\alpha} = \frac{\tau_{\text{eff}}^{\alpha} b_s^{\alpha}}{B} \quad (14)$$

式中： $b_s^{\alpha}$  和  $\tau_{\text{eff}}^{\alpha}$  分别表示滑移系  $\alpha$  上的伯格矢量长度和有效长程分切阻力， $B$  是声子拖曳系数。

基于此，考虑应变率与温度效应的滑移系  $\alpha$  上的塑性剪切速率可由修正的 Orowan 方程描述<sup>[33]</sup>：

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \rho_m^{\alpha} b_s^{\alpha} v_0 \left\{ \exp\left[ \frac{Q_s}{k_B \theta} \left\langle 1 - \left( \frac{\tau_{\text{eff}}^{\alpha}}{\tau_*} \right)^{p_s} \right\rangle^{q_s} \right] - 1 \right\} + \frac{B v_0}{|\tau_{\text{eff}}^{\alpha}| b_s^{\alpha}} \left\{ \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \right\} \quad (15)$$

式中： $\rho_m^{\alpha}$  是滑移系  $\alpha$  上的可动位错密度， $v_0$  是位错参考速度， $Q_s$  是滑移激活能， $p_s$  和  $q_s$  是与障碍物形态相关的材料常数， $\langle \cdot \rangle$  表示麦考利括号(Macaulay brackets)定义为  $\langle x \rangle = (x + |x|)/2$ ，sgn 是符号函数用于考虑由滑移系  $\alpha$  上的外加分解剪应力  $\tau^{(\alpha)}$  的正负值所引起的正向与反向滑移方向。 $\tau_*$  表示热滑移阻力，来源于位错滑移过程中可通过热激活克服的局域化障碍（如局域成分波动、原子尺寸失配等），即短程分切阻力，可由基于热修正的 Peierls-Nabarro 模型描述<sup>[34]</sup>：

$$\tau_* = \tau_0 \exp\left(-\frac{2\pi\omega_0}{b_s} \psi \theta\right) \quad (16)$$

并且：

$$\tau_0 = \frac{2G(\theta)}{(1 - \mu(\theta))} \exp\left(-\frac{2\pi\omega_0}{b_s}\right) \quad (17)$$

式中： $\tau_0$  是 0 K 下的 Peierls 应力， $\omega_0$  是 0 K 下的位错宽度， $\psi$  是一个较小正常数。研究表明，若  $\omega_0/b_s$  取值在 0.4 到 2.1 之间，即可获得 Cantor 合金合理的晶格摩擦近似值，在本研究中，将  $\omega_0$  取值为  $1.172b_s$ ，并设定  $\psi = 0.00064$ 。 $G(\theta)$ 、 $E(\theta)$  是温度相关的剪切模量和杨氏模量，根据 Laplanche 等人<sup>[35]</sup>的研究，有：

$$G = 85 - 16/(\exp(448/\theta) - 1) \quad (18)$$

$$E = 214 - 35/(\exp(416/\theta) - 1) \quad (19)$$

而  $\mu(\theta)$  是温度依赖的泊松比, 可由式 (18)、(19) 确定。最终, 计算求得室温下的  $\tau_*$  为 37.8 MPa。此外, 式 (15) 中滑移系  $\alpha$  上位错滑移需克服的长程分切阻力  $\tau_{\text{eff}}^\alpha$ , 可以表示为:

$$\tau_{\text{eff}}^\alpha = \begin{cases} |\tau^{(\alpha)}| - \tau_{\text{pass}}^\alpha, & |\tau^{(\alpha)}| > \tau_{\text{pass}}^\alpha \\ 0, & |\tau^{(\alpha)}| \leq \tau_{\text{pass}}^\alpha \end{cases} \quad (20)$$

式中:  $\tau_{\text{pass}}^\alpha$  表示滑移系  $\alpha$  上的通过应力, 可以表示为:

$$\tau_{\text{pass}}^\alpha = \tau_f^\alpha + \tau_g \quad (21)$$

式中:  $\tau_f^\alpha$  和  $\tau_g$  分别表示受位错-位错相互作用和晶界强化控制的滑移抗力。这些抗力代表了非热垒, 即位错绕过长程障碍所需的最小应力。根据 Taylor 硬化定律<sup>[36]</sup>:

$$\tau_f^\alpha = G(\theta) b_s^\alpha \sqrt{\sum_{\alpha'=1}^{N_s} h^{\alpha\alpha'} \rho^{\alpha'}} \quad (22)$$

并且:

$$\rho^{\alpha'} = \rho_m^{\alpha'} + \rho_i^{\alpha'} \quad (23)$$

式中:  $h^{\alpha\alpha'}$  表示滑移系  $\alpha$  与  $\alpha'$  之间的交互作用矩阵,  $\rho^{\alpha'}$  表示滑移系  $\alpha'$  的总位错密度, 其中,  $\rho_m^{\alpha'}$  是可动位错密度,  $\rho_i^{\alpha'}$  是不可动位错密度。同时, 根据 Hall-Petch 关系<sup>[37-38]</sup>:

$$\tau_g = \frac{k_{\text{HP}}(\theta)}{\sqrt{d_g}} \quad (24)$$

并且:

$$k_{\text{HP}} = q_h + p_h \theta \quad (25)$$

式中:  $k_{\text{HP}}(\theta)$  是与温度相关的 Hall-Petch 系数,  $d_g$  是材料的平均晶粒尺寸,  $p_h$  和  $q_h$  是拟合参数。根据 Otto 和 Sun 等人的研究<sup>[39-40]</sup>取  $p_h = -0.12 \text{ MPa} \cdot \mu\text{m}^{0.5} \cdot \text{K}^{-1}$ ,  $q_h = 206.36 \text{ MPa} \cdot \mu\text{m}^{0.5}$ 。

### 1.2.2 位错演化

在冲击加载下, 高熵合金内部位错密度急剧增加。然而, 根据位错理论, 只有可动位错能够直接贡献于滑移系的剪切应变。基于此, 滑移系  $\alpha$  上的可动与非可动位错部分的密度演化过程如下:

$$\dot{\rho}_m^\alpha = \underbrace{\frac{|\dot{\gamma}^{(\alpha)}|}{b_s^\alpha A_s^\alpha}}_{\text{位错增殖}} - \underbrace{\frac{2(d_{\text{dips}} - d_{\text{anni}})}{b_s^\alpha} \rho_m^\alpha |\dot{\gamma}^{(\alpha)}|}_{\text{位错偶极子位错自发}} - \underbrace{\frac{2d_{\text{anni}}}{b_s^\alpha} \rho_m^\alpha |\dot{\gamma}^{(\alpha)}|}_{\text{湮灭}} \quad (26)$$

$$\dot{\rho}_i^\alpha = \underbrace{\frac{2(d_{\text{dips}} - d_{\text{anni}})}{b_s^\alpha} \rho_m^\alpha |\dot{\gamma}^{(\alpha)}|}_{\text{位错偶极子}} - \underbrace{\frac{2d_{\text{anni}}}{b_s^\alpha} \rho_i^\alpha |\dot{\gamma}^{(\alpha)}|}_{\text{位错相互湮灭}} \quad (27)$$

式中： $A_s^\alpha$ 是位错平均自由程，表示可动位错在晶格中运动直至遇到障碍物（如晶界、位错-位错交互作用、孪晶形成以及马氏体相形成）所经过的平均距离且满足<sup>[24]</sup>：

$$\frac{1}{A_s^\alpha} = \underbrace{\frac{1}{d_g}}_{\text{晶界}} + \underbrace{\frac{1}{i_s} \sqrt{\sum_{\alpha'=1}^{N_s} h^{\alpha\alpha'} \rho^{\alpha'}}}_{\text{位错相互作用}} + \underbrace{\sum_{\beta=1}^{N_{\text{tw}}} h^{\alpha\beta} \frac{f_{\text{tw}}^{(\beta)}}{t_{\text{tw}}(1-f_{\text{tw}})}}_{\text{形变孪晶}} + \underbrace{\sum_{\chi=1}^{N_{\text{tr}}} h^{\alpha\chi} \frac{f_{\text{tr}}^{(\chi)}}{t_{\text{tr}}(1-f_{\text{tr}})}}_{\text{马氏体相变}} \quad (28)$$

式中： $i_s$ 表示控制可动位错与林位错之间平均间距的无量纲比例因子， $t_{\text{tw}}$ 和 $t_{\text{tr}}$ 分别表示对应孪晶和马氏体片层的平均厚度， $h^{\alpha\beta}$ 表示滑移系 $\alpha$ 与孪晶系 $\beta$ 之间的交互作用矩阵， $h^{\alpha\chi}$ 表示滑移系 $\alpha$ 与马氏体相变系 $\chi$ 之间的交互作用矩阵。同时，式（26）、（27）中的 $d_{\text{dips}}$ 和 $d_{\text{anni}}$ 分别表示两个位错形成稳定偶极子构型所需临界距离和相互湮灭临界距离且满足<sup>[41-42]</sup>：

$$d_{\text{dips}} = \frac{G(\theta)b_s^\alpha}{8\pi(1-\mu(\theta))|\tau^{(\alpha)}|} \quad (29)$$

$$d_{\text{anni}} = D_{\text{anni}} b_s^\alpha \quad (30)$$

式中： $D_{\text{anni}}$ 为控制湮灭距离的拟合参数。

### 1.3 孪晶与相变动力学

大量研究已证实，形变孪晶是 Cantor 高熵合金在低温、高速冲击等极端条件下至关重要的塑性变形机制<sup>[9,11,43-44]</sup>。近期研究进一步揭示，在高应变率~~动态剪切加载条件下~~，Cantor 高熵合金中会出现一种由缺陷密度介导的分级变形路径。该路径通过 $\{111\}$ 面上的协调堆垛层错与孪晶扩展，诱发应变局部化的密排六方（HCP）结构域。当缺陷密度达到临界值时，这些区域会失稳并转化为非晶<sup>[13]</sup>。这种相变硬化与晶体无序化耗能的协同效应，最终共同提升了该材料的强度与韧性。通常情况下，形变孪晶过程受晶体学约束的剪切局部化控制。基于此，宏观孪晶体积分数演化率可以表示为：

$$\dot{f}^{(\beta)} = \frac{\dot{\gamma}^{(\beta)}}{\gamma_{\text{tw}}} \quad (31)$$

式中： $\dot{\gamma}^{(\beta)}$ 是孪晶系 $\beta$ 的局部晶体学剪速率， $\gamma_{\text{tw}}$ 是特征孪晶应变。类似地，马氏体相变系 $\chi$ 的局部晶体学剪速率 $\dot{\gamma}^{(\chi)}$ 与宏观马氏体相变体积分数 $\dot{f}^{(\chi)}$ 演化率遵循：

$$\dot{f}^{(\chi)} = \frac{\dot{\gamma}^{(\chi)}}{\gamma_{\text{tr}}} \quad (32)$$

式中： $\gamma_{\text{tr}}$ 是马氏体相变的特征剪切应变。同时，孪晶与马氏体体积分数的演化速率分别满足<sup>[41]</sup>：

$$\dot{f}^{(\beta)} = (1 - f_{\text{tw}} - f_{\text{tr}}) V^\beta \dot{N}_{\text{tw}}^\beta, \quad (33)$$

$$\dot{f}^{(\chi)} = (1 - f_{\text{tw}} - f_{\text{tr}}) V^\chi \dot{N}_{\text{tr}}^\chi \quad (34)$$

式中： $V^\beta$ 和 $V^\chi$ 分别是新生孪晶片层与马氏体条带的体积分数满足：

$$V^{(\beta,\chi)} = \frac{\pi}{4} \left( A_{\text{tw,tr}}^{(\beta,\chi)} \right)^2 t_{\text{tw,tr}} \quad (35)$$

式中： $t_{tw}$ 和 $t_{tr}$ 分别是孪晶片层与马氏体条带的平均厚度， $A_{tw}^\beta$ 和 $A_{tr}^\chi$ 分别表示孪晶界与马氏体条带在生长过程中被微观障碍物阻挡前所穿越的平均距离且满足：

$$\frac{1}{A_{tw}^\beta} = \frac{1}{i_{tw}} \left( \frac{1}{d_g} + \sum_{\beta'=1}^{N_{tw}} h^{\beta\beta'} \frac{f_{tw}^{(\beta')}}{t_{tw}(1-f_{tw})} \right), \quad (36)$$

$$\frac{1}{A_{tr}^\chi} = \frac{1}{i_{tr}} \left( \frac{1}{d_g} + \sum_{\chi'=1}^{N_{tr}} h^{\chi\chi'} \frac{f_{tr}^{(\chi')}}{t_{tr}(1-f_{tr})} \right) \quad (37)$$

式中： $h^{\beta\beta'}$ 和 $h^{\chi\chi'}$ 分别是不同孪晶系和马氏体相变系之间的交互作用矩阵， $i_{tw}$ 和 $i_{tr}$ 是无量纲尺度因子。

此外，式（33）和（34）的孪晶与马氏体形核率，即 $\dot{N}_{tw}^\beta$ 和 $\dot{N}_{tr}^\chi$ 满足：

$$\dot{N}_{tw,tr}^{(\beta,\chi)} = \dot{N}_0 P_{ncs,(tw,tr)} P_{tw,tr} \quad (38)$$

式中： $\dot{N}_0$ 是单位时间内潜在形核点密度。 $P_{ncs,(tw,tr)}$ 是位错运动中不发生交滑移的概率，以确保持续的位错塞积与应力集中，分别满足<sup>[45]</sup>：

$$P_{ncs,tw} = 1 - \exp \left( -\frac{V_{cs}}{k_B \theta} (\tau_r - \tau^{(\beta)}) \right), \quad (39)$$

$$P_{ncs,tr} = 1 - \exp \left( -\frac{V_{cs}}{k_B \theta} (\tau_r - \tau^{(\chi)}) \right) \quad (40)$$

式中： $V_{cs}$ 是交滑移激活体积， $\tau_r$ 是在无外施剪切应力作用下，使两个不全位错接近至临界距离 $x_c$ 以形成孪晶核所需的内应力满足<sup>[46-47]</sup>：

$$\tau_r = \frac{G(\theta) b_s}{2\pi} \left( \frac{1}{(x_0 + x_c)} + \frac{\cos(\pi/3)}{x_0} \right) \quad (41)$$

并且肖克利不全位错之间的平衡间距满足：

$$x_0 = \frac{G(\theta) b_s^2}{\Gamma_{sf}(\theta) 8\pi} \frac{2 + \mu(\theta)}{1 - \mu(\theta)} \quad (42)$$

式中： $\Gamma_{sf}(\theta)$ 是温度相关的层错能。式（39）和（40）的作用于孪晶系 $\beta$ 与马氏体相变系 $\chi$ 的分切应力 $\tau^{(\beta)}$ 和 $\tau^{(\chi)}$ 分别可表示为：

$$\tau^{(\beta)} = \mathbf{M}^p : (\mathbf{s}^{(\beta)} \otimes \mathbf{n}^{(\beta)}) \quad (43)$$

$$\tau^{(\chi)} = \mathbf{M}^p : (\mathbf{s}^{(\chi)} \otimes \mathbf{n}^{(\chi)}) \quad (44)$$

此外，式（38）中形核后扩展形成孪晶片层或马氏体条带的概率 $P_{tw,tr}$ 分别满足<sup>[24,41]</sup>：

$$P_{tw} = \exp \left( -\left( \frac{\hat{\tau}_{tw}}{\tau^{(\beta)}} \right)^{p_{tw}} \right), \quad (45)$$

$$P_{tr} = \exp \left( -\left( \frac{\hat{\tau}_{tr}}{\tau^{(\chi)}} \right)^{p_{tr}} \right) \quad (46)$$

式中： $p_{tw}$  和  $p_{tr}$  是拟合参数，孪晶与马氏体相变的临界分切应力  $\hat{\tau}_{tw}$  和  $\hat{\tau}_{tr}$  分别满足<sup>[25]</sup>：

$$\hat{\tau}_{tw} = \frac{\Gamma_{sf}(\theta)}{3b_p} + \frac{3G(\theta)b_p}{L_{tw}} + \frac{E_{tw}}{3b_p} \exp\left(-\frac{d_g}{d_r}\right), \quad (47)$$

$$\hat{\tau}_{tr} = \frac{2\sigma^{\gamma/\varepsilon}(\theta)}{3b_p} + \frac{3G(\theta)b_p}{L_{tr}} + \frac{h\Delta G^{\gamma \rightarrow \varepsilon}(\theta)}{3b_p} + \frac{E_{tr}}{3b_p} \exp\left(-\frac{d_g}{d_r}\right) \quad (48)$$

式中： $b_p$  是不全位错的伯格矢量长度， $L_{tw}$  和  $L_{tr}$  分别是构成新孪晶核与马氏体核的不可动不全位错长度， $E_{tw}$  和  $E_{tr}$  分别是表征形变孪晶与马氏体相变能垒的拟合参数， $\sigma^{\gamma/\varepsilon}(\theta)$  是温度相关的面心立方基体与密排六方两相之间的单位面积界面能， $\Delta G^{\gamma \rightarrow \varepsilon}(\theta)$  是温度相关的面心立方基体向密排六方相变过程中的摩尔吉布斯自由能， $h$  为密排六方晶核的高度， $d_r$  为参考晶粒尺寸。采用热力学方法<sup>[48-49]</sup>计算得到室温下的热力学参数分别为： $\Gamma_{sf} = 23.5 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$ ， $\sigma^{\gamma/\varepsilon} = 5.77 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$ ， $\Delta G^{\gamma \rightarrow \varepsilon} = 203.59 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ 。此外，由于 HCP 马氏体与 FCC 基体具有相近的堆积密度，该相变体仅伴随有微小的体积变化<sup>[50]</sup>。此类体积变化对总塑性变形的影响较弱<sup>[25]</sup>。因此，模型暂不考虑 FCC $\rightarrow$ HCP 相变所引起的体积变化。

#### 1.4 晶体塑性有限元(CPFE)模型

采用晶粒生长算法构建了包含 100 个随机取向晶粒且具有几何周期性的多晶代表体积单元 (Representative volume element, RVE)，通过 UMAT 有限元子程序进行数值求解，获得多晶体材料在边界载荷的作用下的力学响应。为节约计算成本，本研究选用  $18 \times 18 \times 18$  网格 (5832 个单元)，该模型在计算成本与数值精度间取得平衡，既超出已验证范围下限的保守裕度，又保持计算可操作性，符合在单轴拉伸条件下多晶 RVE 建模标准对数值保真度的要求<sup>[25]</sup>。最终生成的有限元模型如图 1 所示。

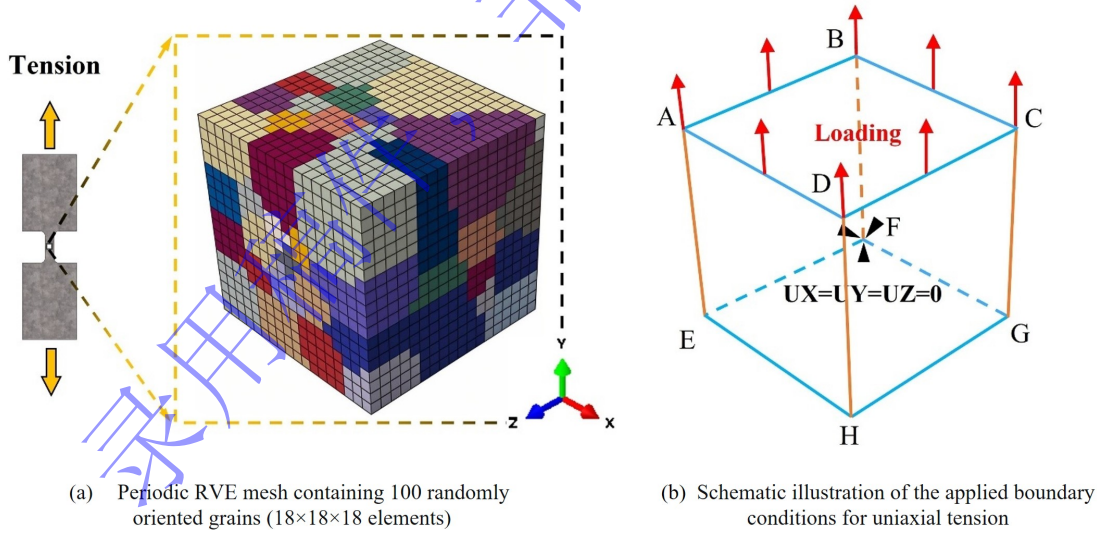


图 1 多晶 RVE 有限元模型及边界条件示意图

Fig.1 Finite element model and boundary conditions of the polycrystalline RVE

#### 1.5 本构参数

基于 Hill 方法计算得到 Cantor 合金的晶体弹性参数如表 1 所示，而其在各应变率下模拟所采用的本构参数则归纳于表 2。

表 1 Cantor 高熵合金模拟研究中所采用的奥氏体与马氏体相单晶弹性常数

Table 1 Single-crystal elastic constants for the austenite and martensite phases used in the

Cantor high-entropy alloy simulations

| 晶格  | 弹性常数 (GPa)                                                 | 弹性矩阵                                                                                                                                                                                                                |
|-----|------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| FCC | $C_{11}^A = \frac{3K(1-\mu_{001})}{(1+\mu_{001})} = 188.7$ | $\begin{bmatrix} C_{11}^A & C_{12}^A & C_{12}^A & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11}^A & C_{12}^A & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11}^A & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44}^A & 0 & 0 \\ & & & & C_{44}^A & 0 \\ & & & & & C_{44}^A \end{bmatrix}$ |
|     | $C_{12}^A = \frac{3K\mu_{001}}{(1+\mu_{001})} = 115.6$     |                                                                                                                                                                                                                     |
|     | $C_{44}^A = C_{12}^A - (C_{11}^A - C_{12}^A) = 120.3$      |                                                                                                                                                                                                                     |
| HCP | $C_{11}^M = 248.3$                                         | $\begin{bmatrix} C_{11}^M & C_{12}^M & C_{13}^M & 0 & 0 & 0 \\ & C_{12}^M & C_{13}^M & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{13}^M & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{33}^M & 0 & 0 \\ & & & & C_{44}^M & 0 \\ & & & & & C_{44}^M \end{bmatrix}$ |
|     | $C_{12}^M = 111.9$                                         |                                                                                                                                                                                                                     |
|     | $C_{13}^M = 59.8$                                          |                                                                                                                                                                                                                     |
|     | $C_{33}^M = 300.4$                                         |                                                                                                                                                                                                                     |
|     | $C_{44}^M = 47.6$                                          |                                                                                                                                                                                                                     |

注: (1)  $\mu_{001} = 0.38$  为<001>晶向的泊松比,  $C_{12} - C_{44} = -4.8\text{MPa}$  为 Cauchy pressure<sup>[41]</sup>

(2)  $K$  为体积模量, 由剪切模量  $G$  和杨氏模量  $E$  确定

表 2 Cantor 高熵合金模拟研究中所采用的本构参数

Table 2 Constitutive parameters of Cantor high-entropy alloy employed for the simulation using the model presented

| 参数描述      | 位错滑移参数                                                                                            | 形变孪晶参数                                                       | 马氏体相变参数                                                      |
|-----------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
| 系统数量      | $N_s = 12$                                                                                        | $N_{tw} = 12$                                                | $N_{tr} = 12$                                                |
| 伯格矢量      | $b_s = 2.55 \times 10^{-10} \text{ m}$ <sup>[52]</sup>                                            | $b_p = 1.47 \times 10^{-10} \text{ m}$                       | /                                                            |
| 晶粒尺寸      | $d_g = 35 \mu\text{m}$ <sup>[9]</sup>                                                             | /                                                            | /                                                            |
| 参考晶粒尺寸    | $d_r = 20 \mu\text{m}$ <sup>[25]</sup>                                                            | /                                                            | /                                                            |
| 微结构特征尺寸   | /                                                                                                 | $t_{tw} = 15 \text{ nm}$ <sup>[52]</sup>                     | $t_{tr} = 40 \text{ nm}$ <sup>[43]</sup>                     |
| 激活能/特征能垒  | $Q_s = 1.81 \times 10^{-19} \text{ J}$ <sup>[53]</sup>                                            | $E_{tw} = 10 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$ <sup>[25]</sup> | $E_{tr} = 23 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$ <sup>[25]</sup> |
| 交滑移激活体积   | $V_{cs} = b_s^3 \text{ m}^3$ <sup>[24-25]</sup>                                                   | /                                                            | /                                                            |
| 速度/概率指数   | $p_s/q_s = 1.15 / 1.0$ <sup>[24]</sup>                                                            | $p_{tw} = 5$ <sup>[24,54]</sup>                              | $p_{tr} = 8$ <sup>[24-25]</sup>                              |
| 位错参考速度    | $\dot{\epsilon} \leq 1 \text{ s}^{-1}, v_0 = 1 \times 10^{-4} \text{ ms}^{-1}$ <sup>[24-25]</sup> | /                                                            | /                                                            |
|           | $\dot{\epsilon} > 1 \text{ s}^{-1}, v_0 = 1 \times 10^6 \text{ ms}^{-1}$ <sup>[28]</sup>          |                                                              |                                                              |
|           | $1.0 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1} / \rho_0^\alpha = 2.5 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$           |                                                              |                                                              |
| 初始位错密度    | $2.2 \times 10^3 \text{ s}^{-1} / \rho_0^\alpha = 5.0 \times 10^{13} \text{ m}^{-2}$              | /                                                            | /                                                            |
|           | $5.0 \times 10^3 \text{ s}^{-1} / \rho_0^\alpha = 1.0 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$              |                                                              |                                                              |
|           | $2.0 \times 10^4 \text{ s}^{-1} / \rho_0^\alpha = 3.5 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$              |                                                              |                                                              |
| 平均自由程控制系数 | $i_s = 30$ <sup>[55]</sup>                                                                        | $i_{tw} = 10$ <sup>[24]</sup>                                | $i_{tr} = 3$ <sup>[24]</sup>                                 |
| 湮灭距离控制系数  | $D_{anni} = 1.0$ <sup>[56]</sup>                                                                  | /                                                            | /                                                            |
| 拖曳系数      | $B = 1.5 \times 10^{-4} \text{ pa} \cdot \text{s}$ <sup>[57]</sup>                                | /                                                            | /                                                            |

|        |                                                   |                                                |                                      |
|--------|---------------------------------------------------|------------------------------------------------|--------------------------------------|
| 临界形核尺寸 | /                                                 | $x_c = 1.0 \times 10^{-9} \text{ m}^{[24-25]}$ | $h = 1.05 \text{ nm}^{[24-25]}$      |
|        |                                                   | $L_{tw} = 215 \text{ nm}$                      | $L_{tr} = 106.3 \text{ nm}$          |
| 交互作用矩阵 | $h^{\alpha\alpha'} = [0.122, 0.122, 0.625, 0.07,$ | $h^{\alpha\beta} = [0, 0.042]^{[54]}$          | $h^{\alpha\chi} = [0, 0.042]^{[54]}$ |
|        | $0.137, 0.122]^{[58]}$                            | $h^{\beta\beta'} = [0, 0.468]^{[54]}$          | $h^{\chi\chi'} = [0, 0.468]^{[54]}$  |

## 2 结果与讨论

### 2.1 流动应力的应变率敏感性

为验证所构建的晶体塑性有限元模型的预测能力，开展了 Cantor 合金应变率相关力学响应的模拟研究，并将模拟结果与实验结果进行对比。如图 2 所示，在  $2,200 \text{ s}^{-1}$  应变率下，模拟得到的工程应力-应变曲线与 He 等<sup>[9]</sup>报道的实验数据高度吻合。在  $5,000 \text{ s}^{-1}$  应变率下，模拟结果与 Chen 等<sup>[59]</sup>报道的压缩实验数据亦吻合良好，表明 Cantor 合金在动态加载下具有良好的拉压对称性。在已验证的应变率范围 ( $10^{-2}$  至  $10^3 \text{ s}^{-1}$ ) 内，Cantor 合金表现出显著的正应变率敏感性，流动应力随应变率升高而系统性增加，证实了材料固有的正向应变率依赖性。模拟结果同时表明动态拉伸变形过程中材料具有优异的应变硬化能力，如图 3 所示。值得注意的是，应变硬化率曲线表明绝热温升的影响有限<sup>[9]</sup>，动态加载条件下硬化行为的一致性印证了这一点。这一现象与传统 TWIP 钢形成鲜明对比，后者在高应变率 ( $>10^3 \text{ s}^{-1}$ ) 下会出现显著的热软化<sup>[18]</sup>。He 等<sup>[9]</sup>的理论计算表明， $2,200 \text{ s}^{-1}$  应变率下 Cantor 合金动态拉伸试样的最高绝热温升为 96 K。相应地，模型在  $2,200 \text{ s}^{-1}$  应变率下获得的动态拉伸绝热温升为 98 K，曲线变化趋势与其理论计算结果一致，如图 4 中  $2,200 \text{ s}^{-1}$  曲线所示。类似地，在类 Cantor 合金  $\text{Al}_{0.3}\text{CrFeCoNi}$  中，即便在  $10^4 \text{ s}^{-1}$  高应变率和 0.5 真应变的极端压缩条件下，计算得到的温升也仅为 109 K<sup>[60]</sup>。需要特别指出的是，Cantor 合金的层错能具有敏感的温度依赖性，这种依赖性直接影响孪晶与马氏体相变的临界分切应力（式 (47)、(48)）。如图 5 所示，在  $2,200 \text{ s}^{-1}$  应变率下，随绝热温升的累积，层错能 ( $\Gamma_{sf}$ ) 由初始  $23.5 \text{ mJ}\cdot\text{m}^{-2}$  升至约  $36.6 \text{ mJ}\cdot\text{m}^{-2}$ ，升高约 55.7%。孪晶临界分切应力 ( $\hat{\tau}_{tw}$ ) 由  $222.3 \text{ MPa}$  升至  $245.7 \text{ MPa}$ ，升高约 10.6%，而相变临界分切应力 ( $\hat{\tau}_t$ ) 则由  $369 \text{ MPa}$  降至  $355.4 \text{ MPa}$ ，降低约 3.6%。这一演化规律表明，温升引起的层错能升高对孪晶的激活构成抑制效应，却在一定程度上降低了相变的能垒。若未能准确考虑此影响，将导致对孪晶机制真实贡献的评估出现偏差，并提前预测其出现<sup>[16]</sup>。

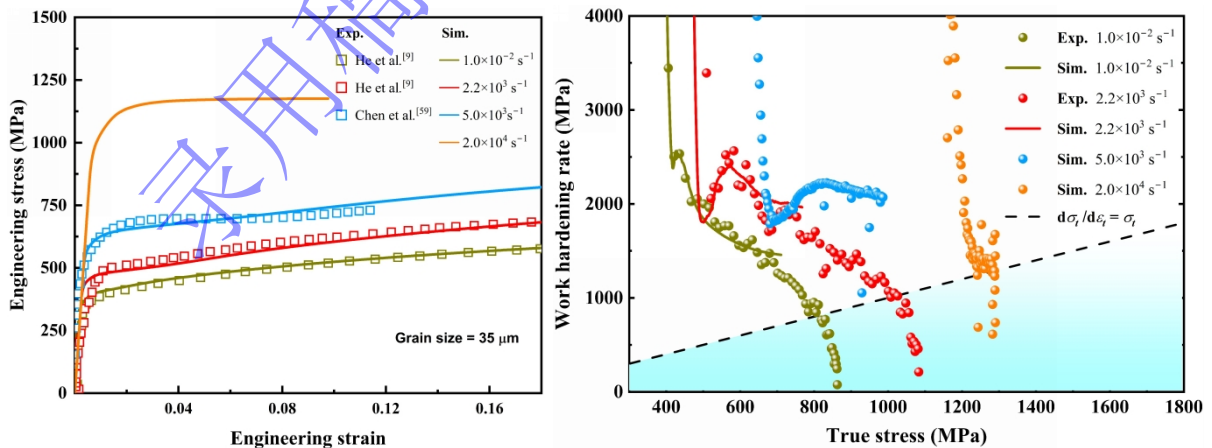


图2 不同应变率下 Cantor 高熵合金单轴拉伸工程应力-应变曲线的模拟与实验对比

Fig.2 Comparison between simulated and experimental engineering stress-strain curves of the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at various strain rates

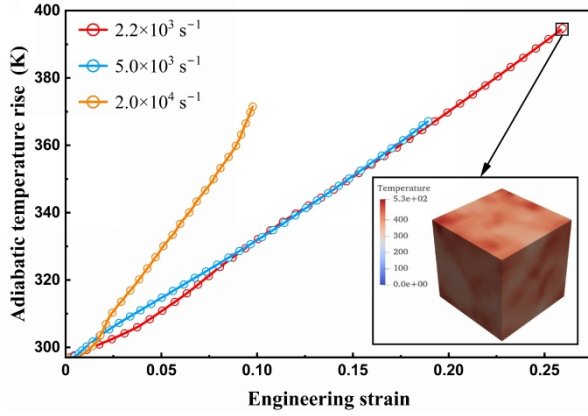


图4 不同应变率下 Cantor 高熵合金单轴拉伸绝热温升模拟曲线

Fig.4 Simulated temperature rise of the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at various strain rate

图3 不同应变率下 Cantor 高熵合金单轴拉伸加工硬化率曲线的模拟与实验对比

Fig.3 Comparison between simulated and experimental work hardening curves of the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at various strain rates

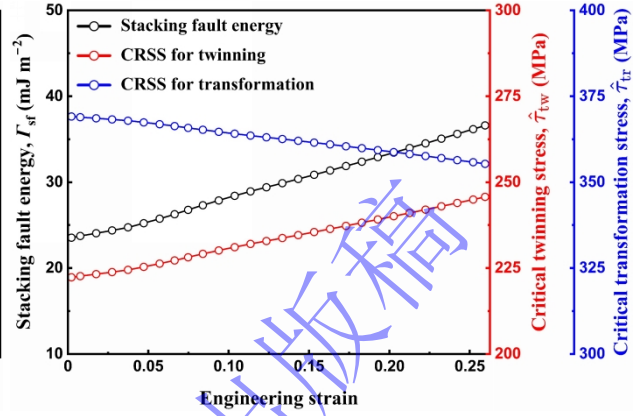


图5 2,200 s<sup>-1</sup>应变率下 Cantor 高熵合金层错能、孪晶临界分切应力及马氏体相变临界分切应力的演化

Fig.5 Evolution of stacking fault energy and critical shear resolved stresses for twinning and martensitic transformation in the Cantor high-entropy alloy under a strain rate of  $2.2 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$

## 2.2 应变率对塑性变形机制的影响

为探究上述宏观应变率敏感性及相关硬化机制的内在原因,开展了 Cantor 合金不同应变率下微观结构演化研究,并分析了位错动力学特性、孪晶以及相变体积分数的变化。如图6所示,不同应变率下可动位错速度随分切应力的演化曲线表明,在  $2,200 \text{ s}^{-1}$  和  $5,000 \text{ s}^{-1}$  应变率下,位错速度随分切应力单调递增后缓慢下降,呈现出热激活滑移主导向黏性拖曳主导转变的趋势。当应变率升高至  $20,000 \text{ s}^{-1}$  时,曲线快速攀升后急剧下降。整个应变率范围内的位错速度在后期均呈下降趋势,但  $20,000 \text{ s}^{-1}$  时应变率下降更为显著。这一现象可能归因于高应变率下高应力诱发大量孪晶及相变的形核及生长,孪晶界和相界对位错运动产生强烈的钉扎效应,同时极高位错密度累积(图7)以及晶格畸变引起的声子拖曳增强共同抑制了位错平均速度。上述机制使得 Cantor 合金在高应变率后期呈现负速率敏感性,变形主导机制由位错-孪晶逐渐转变为位错-孪晶-相变交互作用。

如图7所示,整个变形过程中不同应变率下位错密度随真应变的演化规律表明,初始位错密度是决定屈服应力及后续流动应力的关键因素。初始位错密度对屈服应力的贡献十分显著,

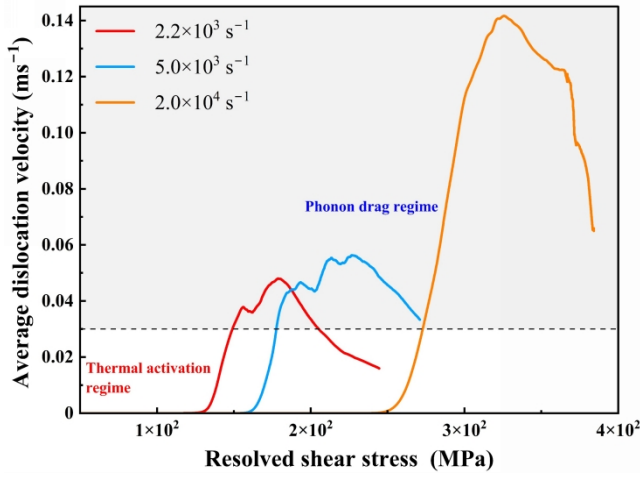


图 6 不同应变率单轴拉伸下 Cantor 高熵合金的位错滑移速度随分切应力变化曲线

Fig.6 Dislocation glide speed-shear stress curves of Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at various strain rates

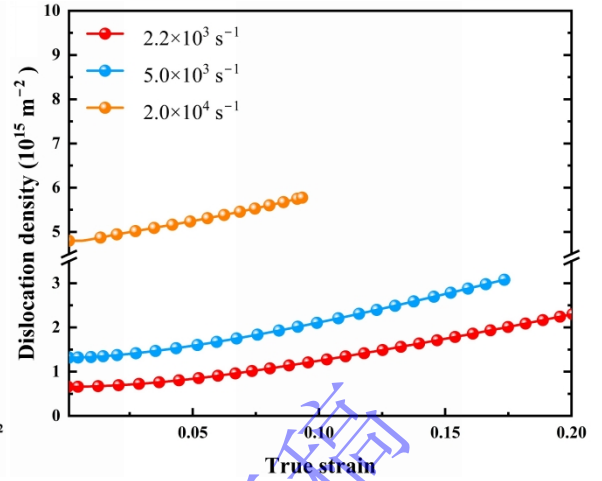


图 7 不同应变率单轴拉伸下 Cantor 高熵合金总位错密度随真应变的演化

Fig.7 Evolution of the total dislocation density with true strain in the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at various strain rates

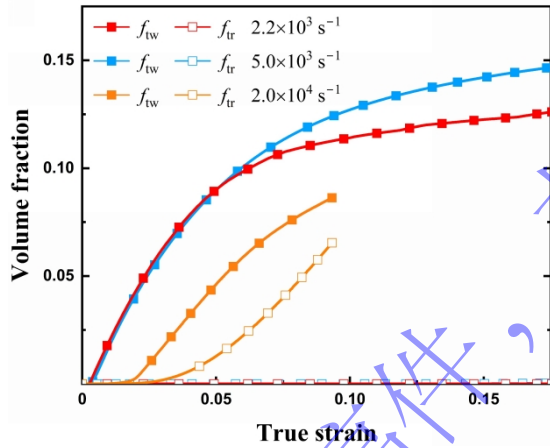


图 8 不同应变率单轴拉伸下 Cantor 高熵合金的孪晶与相变体积分数随真应变的演化

Fig.8 Evolution of twin and phase transformation volume fractions with true strain in the Cantor alloy under uniaxial tension at various strain rates

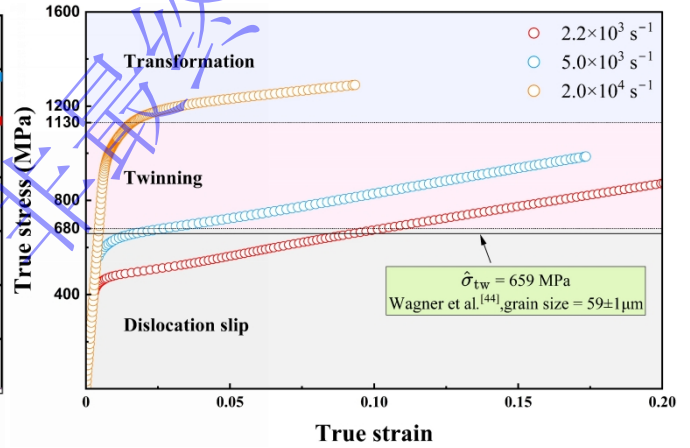


图 9 不同应变率下 Cantor 高熵合金拉伸力学响应与变形机制分区

Fig.9 Mechanical responses and deformation mechanism regimes of the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at various strain rates.

主要体现在屈服阶段的位错密度峰值。相比之下，流动应力阶段在不同位错密度下呈现相对一致的变化趋势，且演化速率随应变率提高呈现渐进式增长，不同于屈服应变阶段的急剧上升。此外，位错密度的演化表现出正应变率依赖性，表明更高应变率通过抑制动态回复促进位错增殖，从而提升位错密度。综上所述，Cantor 合金因晶格畸变导致能量景观崎岖，位错运动需反复克服高而窄的局部能垒，交滑移与攀移被强烈抑制。高应变率下变形时间极短，正负位错相遇抵消的几率大幅降低，湮灭过程被“冻结”，从而引发爆发式位错增殖与快速塞积，形成超高密度位错群。这一机制使泰勒硬化贡献远超传统金属，并迫使位错速度维持在次声速区，最终显著提升高应变率下的屈服强度。

在塑性流动阶段，不同应变率下孪晶与马氏体相变体积分数的演化呈现出显著的机制差异。如图 8 所示，在  $2,200\text{ s}^{-1}$  和  $5,000\text{ s}^{-1}$  应变率下，孪晶在变形早期即被激活并持续增长后趋于饱和，而马氏体相变在整个动态变形过程中均未出现。当应变率升高至  $20,000\text{ s}^{-1}$  时，孪晶依然相对较早的被激活，而马氏体形核则明显滞后。后续变形中，孪晶和马氏体体积分分数均持续增长，且两者存在竞争关系。近期 Ming 等<sup>[43]</sup>的研究已证实 Cantor 合金在极端低温条件下的马氏体相变机制。HCP 晶粒内形成高密度  $\{0001\}$  基面层错与  $\{10\bar{1}1\}$  纳米孪晶，并激活非基面位错滑移以协调多方向应变，温度依赖的层错能及其热力学涨落是两种变形机制动态竞争与协同的内在原因。在高应变率加载条件下，上述变形机制的激活路径取决于外加应力。如图 9 所示，在  $2,200\text{ s}^{-1}$  和  $5,000\text{ s}^{-1}$  应变率下，应力水平位于  $680\sim 1130\text{ MPa}$  区间仅满足孪晶激活条件，故相变缺失。而在  $20,000\text{ s}^{-1}$  应变率下，应力水平升高跨越至  $1130\text{ MPa}$  阈值，相变得以触发并与孪晶形成竞争。

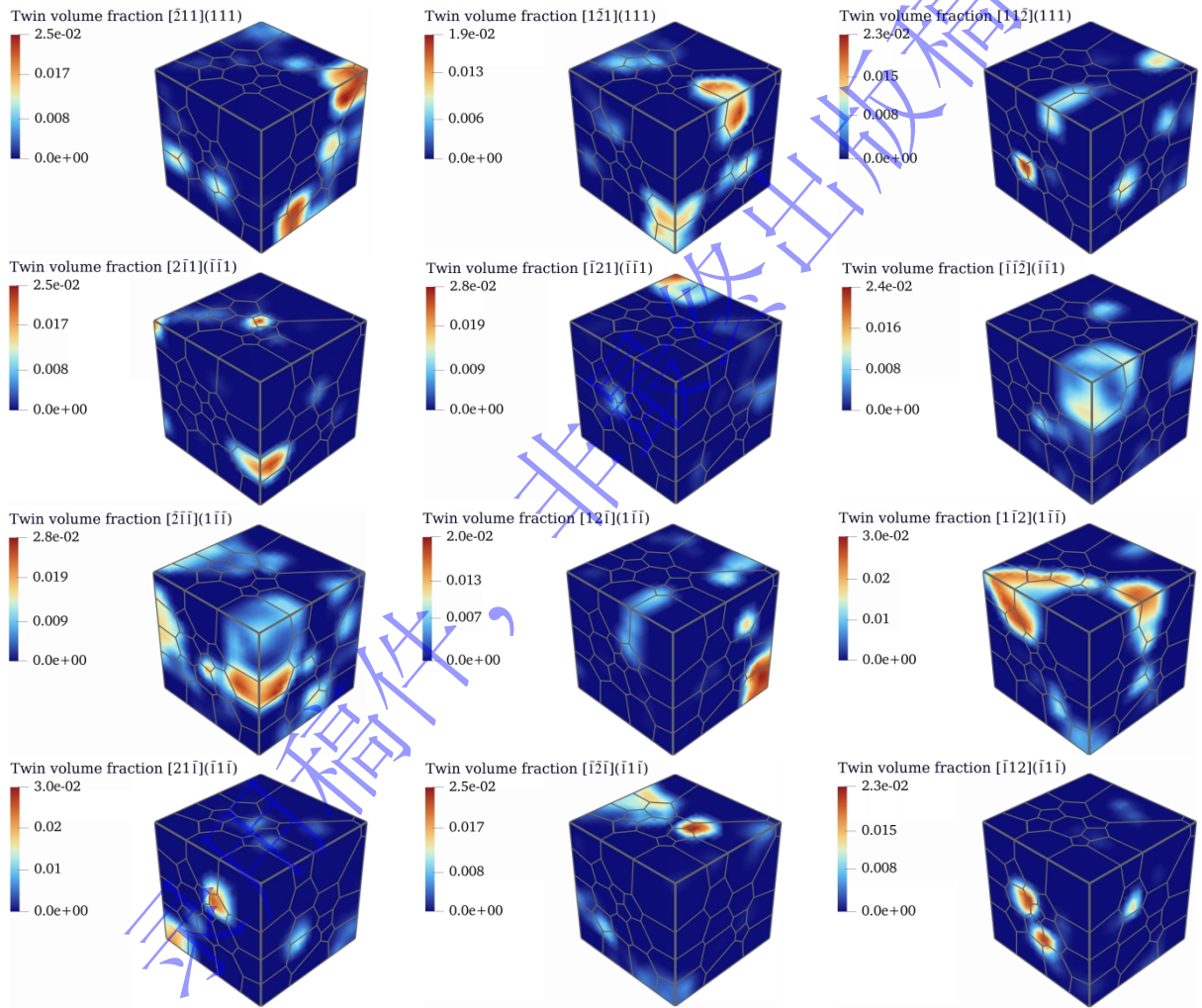


图 10  $2,200\text{ s}^{-1}$  应变率下 Cantor 高熵合金  $\{111\}\langle 112\rangle$  孪晶系统的体积分数及空间分布（拉伸真应变  $\varepsilon_t = 0.018$ ）

Fig.10 Volume fraction and spatial distribution of  $\{111\}\langle 112\rangle$  twinning systems in the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at a strain rate of  $2,200\text{ s}^{-1}$  (true strain  $\varepsilon_t = 0.018$ )

进一步地，在  $2,200\text{ s}^{-1}$  应变率下，图 10 显示大部分孪晶系在真应变为 0.018 附近被成功激活，晶粒间的相互作用在晶界处引起应力集中，使得孪晶即使在施加应力低于临界孪晶应力时也能形核，且有助于在原本不利于孪晶形核的晶粒中形成孪晶。这与 He 等<sup>[9]</sup>在  $2,200\text{ s}^{-1}$  应变率下的动态拉伸实验早期观察到的大量形变孪晶一致，饱和孪晶体积分数约为 12%，这些孪晶通过 TWIP 效应增强了加工硬化并延缓了颈缩。

如图 11~14 所示,  $20,000 \text{ s}^{-1}$  应变率下相变在真应变为 0.045 附近形核, 此时总位错密度约为  $5.2 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$  (图 7), 低于 Zhao 等<sup>[13]</sup>根据相变自由能垒理论计算的相变位错密度阈值  $8.0 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ 。然而, 图 11~14 中所有马氏体相变系的局部位错密度累计已明显跨越该理论阈值。这一结果表明, 实际变形过程中的非均匀成核具有显著的空间选择性, 局域高密度缺陷簇的演化而非全局水平主导了相变的触发时机。

值得关注的是, 图 11~14 同时揭示可动位错与不可动位错的空间分布呈现高度一致性。这一现象归因于模型模拟的  $20,000 \text{ s}^{-1}$  应变率下变形时间极短 (真应变 0.045 对应窗口仅约  $2 \text{ } \mu\text{s}$ ), 位错源在极短时间内被“同时”激活, 正负位错湮灭几率大幅降低, 湮灭过程被“冻结”, 引发爆发式增殖与快速塞积。可动位错尚未充分运动即被后续位错、孪晶界及相变界面钉扎, 迅速转化为不可动位错, 运动均呈现局域钉扎主导的“粘滞”特征, 可动与不可动位错的空间分布难以分辨。两者云图分布的高度一致, 本质上是短时限下爆发式增殖与快速钉扎的共同结果, 也是滑移-孪晶-相变耦合变形机制的直接体现。

此外, 图 11 和图 14 直接显示相变形核的空间分布与局部位错活动的高值区域在空间上趋于重合。这一空间相关性表明, 位错密度的局域热点与相变形核位置具有高度一致性, 是应变诱导的非均匀缺陷场 (局部位错塞积) 驱动相变机制的直观证据。图 12 和图 13 中这种相关性较弱, 主要因为相变形核的空间分布还受到层错和孪晶带活动的影响。

图 8 显示, 在  $20,000 \text{ s}^{-1}$  应变率下, 孪晶与相变体积分数均接近 10%, TWIP 与 TRIP 效应协同作用, 显著提升了 Cantor 合金的高应变率强韧性。综上所述, 相变既是极端塑性变形下形变孪晶的后继机制, 同时又与之存在竞争关系, 充分体现了 Cantor 合金在极高应变率下变形机制的复杂性。

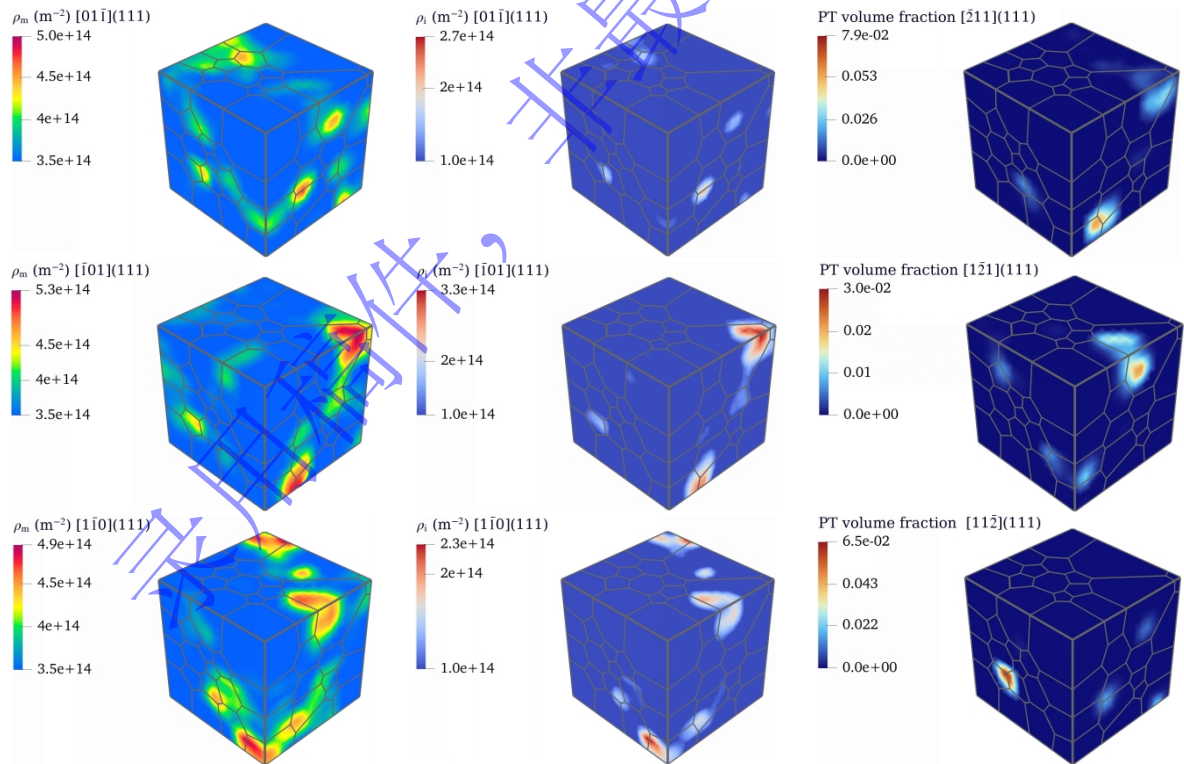


图 11  $20,000 \text{ s}^{-1}$  应变率下 Cantor 高熵合金(111)<110>滑移系可动位错密度 ( $\rho_m$ )、不可动位错密度 ( $\rho_i$ ) 和(111)<112>相变系统相变体积分数及空间分布 (拉伸真应变  $\varepsilon_t=0.045$ )

Fig.11 Spatial distributions of mobile dislocation density ( $\rho_m$ ) and immobile dislocation density ( $\rho_i$ ) for the (111)<110> slip systems, and volume fraction for the (111)<112> transformation systems in the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at a strain rate of  $20,000 \text{ s}^{-1}$  (true strain  $\varepsilon_t = 0.045$ )

爆 炸 与 冲 击  
Explosion and Shock Waves

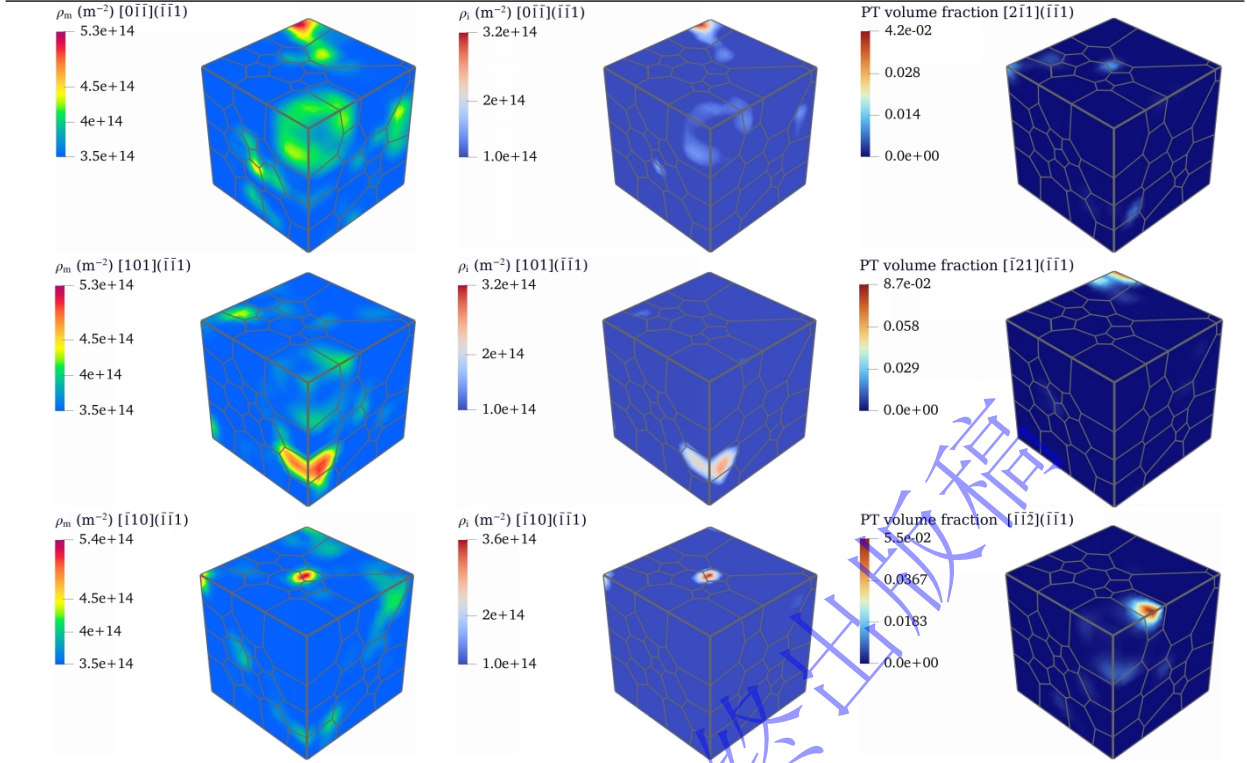


图 12 20,000 s<sup>-1</sup> 应变率下 Cantor 高熵合金 $(\bar{1}\bar{1}1)\langle 110 \rangle$ 滑移系可动位错密度 ( $\rho_m$ )、不可动位错密度 ( $\rho_i$ ) 和 $(\bar{1}\bar{1}1)\langle 112 \rangle$ 相变系统相变体积分数及空间分布 (拉伸真应变  $\varepsilon_t=0.045$ )

Fig.12 Spatial distributions of mobile dislocation density ( $\rho_m$ ) and immobile dislocation density ( $\rho_i$ ) for the  $(\bar{1}\bar{1}1)\langle 110 \rangle$  slip systems, and volume fraction for the  $(\bar{1}\bar{1}1)\langle 112 \rangle$  transformation systems in the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at a strain rate of 20,000 s<sup>-1</sup> (true strain  $\varepsilon_t = 0.045$ )

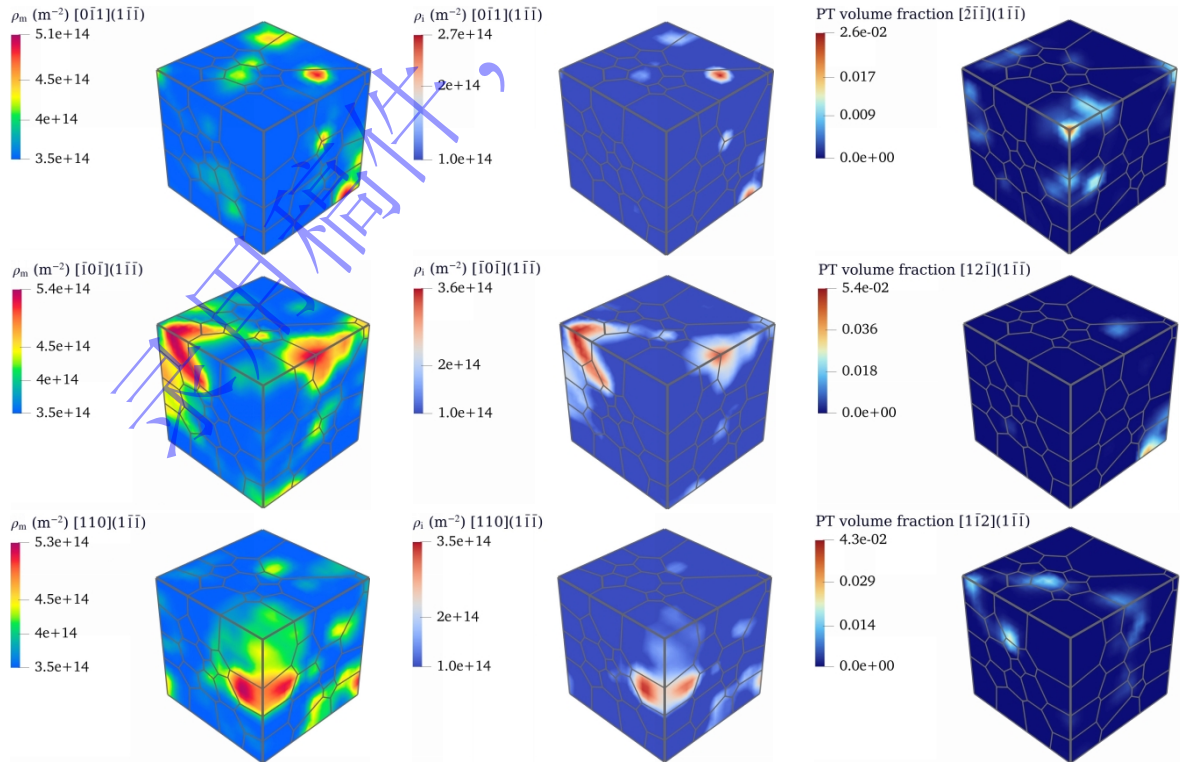


图 13 20,000 s<sup>-1</sup> 应变率下 Cantor 高熵合金( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )<110>滑移系可动位错密度 ( $\rho_m$ )、不可动位错密度 ( $\rho_i$ ) 和( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )<112>相变系统相变体积分数及空间分布 (拉伸真应变  $\varepsilon_t=0.045$ )

Fig.13 Spatial distributions of mobile dislocation density ( $\rho_m$ ) and immobile dislocation density ( $\rho_i$ ) for the ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )<110> slip systems, and volume fraction for the ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )<112> transformation systems in the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at a strain rate of 20,000 s<sup>-1</sup> (true strain  $\varepsilon_t = 0.045$ )

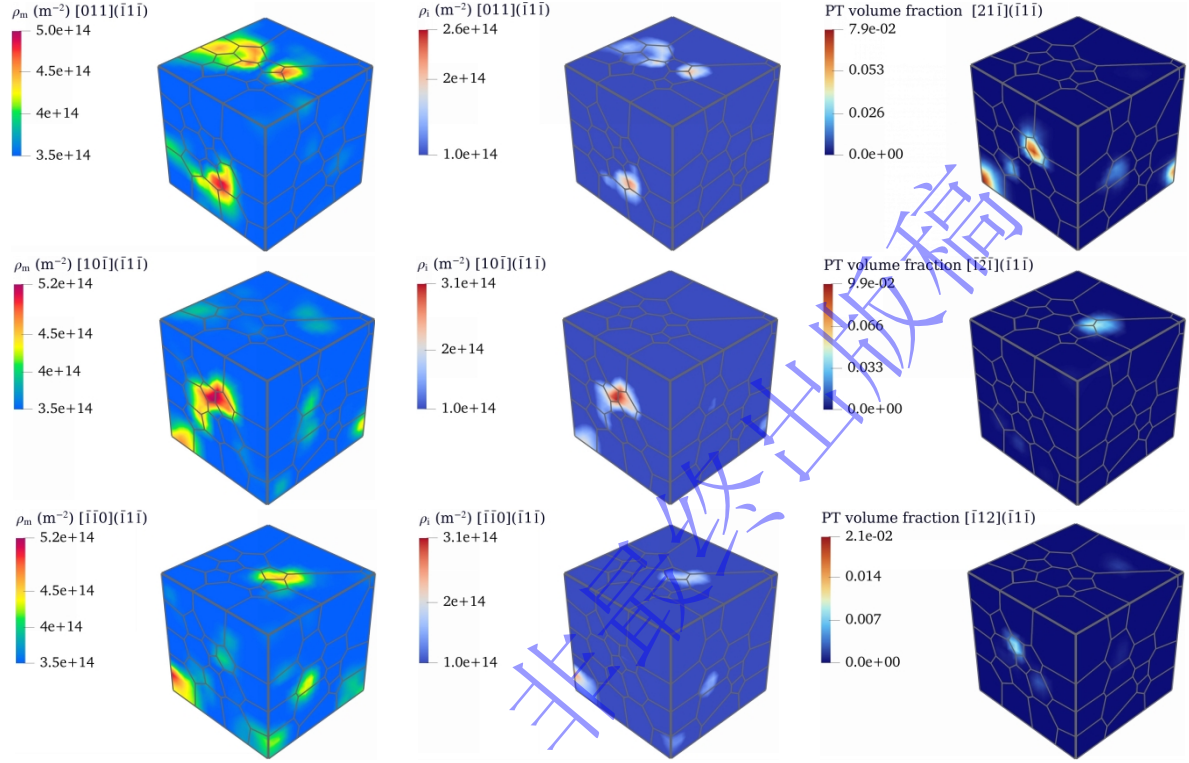


图 14 20,000 s<sup>-1</sup> 应变率下 Cantor 高熵合金( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )<110>滑移系可动位错密度 ( $\rho_m$ )、不可动位错密度 ( $\rho_i$ ) 和( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )<112>相变系统相变体积分数及空间分布 (拉伸真应变  $\varepsilon_t=0.045$ )

Fig.14 Spatial distributions of mobile dislocation density ( $\rho_m$ ) and immobile dislocation density ( $\rho_i$ ) for the ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )<110> slip systems, and volume fraction for the ( $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ )<112> transformation systems in the Cantor high-entropy alloy under uniaxial tension at a strain rate of 20,000 s<sup>-1</sup> (true strain  $\varepsilon_t = 0.045$ )

### 2.3 屈服应力的应变率敏感性

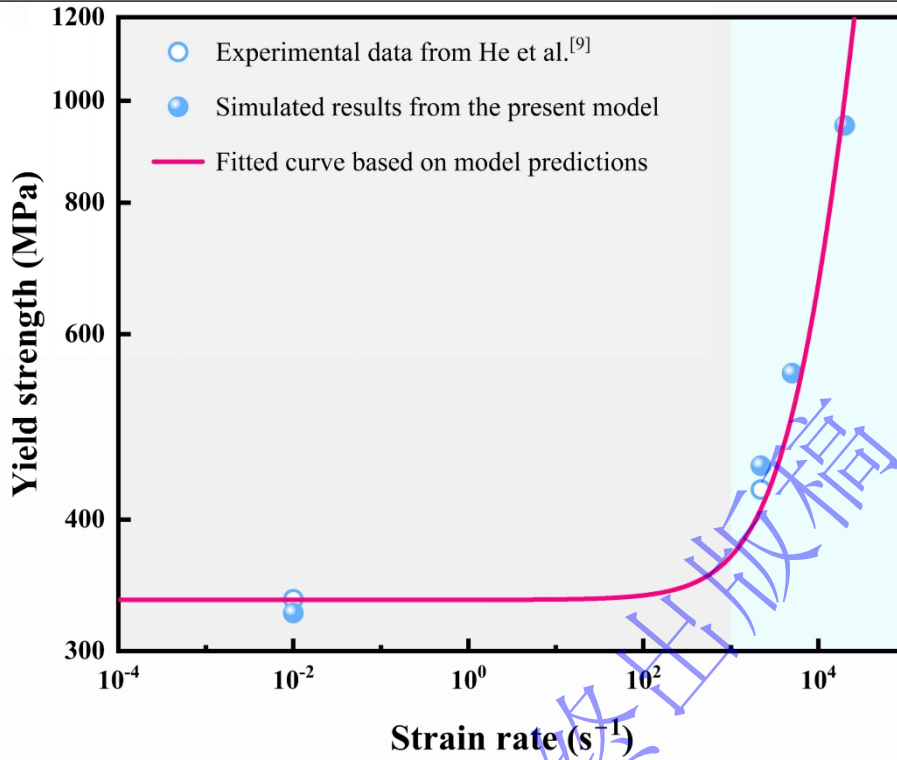


图 15 Cantor 高熵合金屈服应力应变率依赖性

Fig.15 Dependence of yield stress on strain-rate in Cantor high-entropy alloy

基于上述模型, 进一步分析了 Cantor 合金屈服应力随应变率的演化规律。如图 15 所示, Cantor 合金在应变率  $10^{-2} \sim 10^4 \text{ s}^{-1}$  区间内的屈服应力应变率敏感性揭示了一个根本的机理转变。位错运动机制从经典的热激活逐渐转变为声子拖曳主导<sup>[61]</sup>。在  $10^{-2} \sim 10^3 \text{ s}^{-1}$  的应变率区间, 热激活机制为主导, 应变率敏感性相对较弱。而当应变率超过  $10^4 \text{ s}^{-1}$  这一阈值时, 极短的变形时间尺度从动力学上抑制了热激活过程, 明显削弱了其对位错滑移的促进作用。此时, 位错运动逐渐由非热激活的黏性拖曳机制主导, 导致应变率敏感性显著上升。

### 3 结论

本文以 Cantor 高熵合金为研究对象, 基于晶体塑性理论构建了一个考虑多变形机制的晶体塑性模型框架, 并成功将该模型嵌入有限元环境。计算结果与宽应变率范围内的实验数据吻合良好, 表明模型能够准确描述该合金的宏观力学响应。主要研究结果如下:

(1) 该合金的屈服应力表现出显著的应变率敏感性。在跨越  $10^4 \text{ s}^{-1}$  这一临界应变率时, 应变率敏感指数出现显著提升, 这归因于位错运动的主导机制从热激活向黏性拖曳的转变。

(2) 应变率主导的位错动力学特性与层错能的温度依赖性共同决定了孪晶、马氏体相变与位错滑移等变形机制的竞争关系。在  $2.2 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$  应变率下, 孪晶在变形初期激活, 成为该应变率范围内的重要塑性变形机制, 并通过 TWIP 效应增强加工硬化。晶粒间的相互作用在晶界处引起应力集中, 使得即使外加应力低于临界孪晶应力时也能形成孪晶。

(3) 在  $2.0 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$  应变率下, 局部位错塞积诱发马氏体相变, TRIP 效应随之启动, 成为继 TWIP 效应之后的另一关键强化途径。TRIP 效应与 TWIP 效应协同, 共同增强了材料的强韧性。高应变率下的马氏体相变依赖于高密度晶体缺陷累积, 这些缺陷储存的能量显著提高了 FCC 相的自由能, 使其达到相变所需的自由能水平, 从而触发相变。与较低应变率相比 ( $2.2 \times 10^3 \text{ s}^{-1} \sim 5.0 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$ ), 高应变率下应变硬化率的预测结果仍未出现显著降低, 表明材料的绝热软化效应有限。这种滑移-孪晶-

相变 (Slip-TWIP-TRIP) 机制的动态竞争与转换, 是材料在动态加载下获得强韧协同效应的物理本质。上述认识对于理解 Cantor 合金在极端变形条件下的行为以及设计具有优异抗冲击性能的材料具有重要意义。

本研究尚未在当前晶体塑性理论框架中考虑应变率相关的损伤机制及局部失效行为。后续工作将引入相应的断裂准则及损伤演化律, 以期实现对该合金在宽应变率范围内失效行为的有效预测。

## 参考文献

- [1] CANTOR B, CHANG I T H, KNIGHT P, et al. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, 375: 213-218. DOI: 10.1016/j.msea.2003.10.257.
- [2] YEH 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. DOI: 10.1002/adem.200300567.
- [3] 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(1): 4953. DOI: 10.1038/s41467-021-25264-5.
- [4] GLUDOVATZ B, HOHENWARTER A, CATOOR D, et al. A fracture-resistant high-entropy alloy for cryogenic applications [J]. *Science*, 2014, 345(6201): 1153-1158. DOI: 10.1126/science.1254581.
- [5] HUANG A, FENSIN S J, MEYERS M A. Strain-rate effects and dynamic behavior of high entropy alloys [J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2023, 22: 307-347. DOI: 10.12794/metadc1808354.
- [6] TANG Y, WANG R, XIAO B, et al. A review on the dynamic-mechanical behaviors of high-entropy alloys [J]. *Progress in Materials Science*, 2023, 135: 101090. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2023.101090.
- [7] DU M, WANG L, LIANG X P, et al. Quasi-static and dynamic deformation behavior of eutectic FCC/Laves high entropy alloy fabricated by powder metallurgy [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2026, 949: 149445. DOI: 10.1016/j.msea.2025.149445.
- [8] HUANG J H, YU Z H, GUO Y C, et al. Deformation mechanisms and impact-induced energy release behavior of TiZrNbW refractory high-entropy alloy [J]. *Intermetallics*, 2026, 197: 109461. DOI: 10.1016/j.intermet.2026.109461.
- [9] HE J, WANG Q, ZHANG H, et al. Dynamic deformation behavior of a face-centered cubic FeCoNiCrMn high-entropy alloy [J]. *Science Bulletin*, 2018, 63(6): 362-368. DOI: 10.1016/j.scib.2018.01.022.
- [10] ZHANG T W, MA S G, ZHAO D, et al. Simultaneous enhancement of strength and ductility in a NiCoCrFe high-entropy alloy upon dynamic tension: Micromechanism and constitutive modeling [J]. *International Journal of Plasticity*, 2020, 124: 226-246. DOI: 10.1016/j.iplas.2019.08.013.
- [11] QIAO Y, CHEN Y, CAO F H, et al. Dynamic behavior of CrMnFeCoNi high-entropy alloy in impact tension [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2021, 158: 104008. DOI: 10.1016/j.ijimpeng.2021.104008.
- [12] CANTOR B. Multicomponent high-entropy Cantor alloys [J]. *Progress in Materials Science*, 2021, 120: 100754. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2020.100754.
- [13] ZHAO S, LI Z, ZHU C, et al. Amorphization in extreme deformation of the CrMnFeCoNi high-entropy alloy [J]. *Science Advances*, 2021, 7(5): eabb3108. DOI: 10.1126/sciadv.abb3108.
- [14] TSAI S P, TSAI Y T, CHEN Y W, et al. High-entropy CoCrFeMnNi alloy subjected to high-strain-rate compressive deformation [J]. *Materials Characterization*, 2019, 147: 193-198. DOI: 10.1016/j.matchar.2018.10.028.
- [15] 陈森, 侯琪玥, 王倩男, 等. 基于同步辐射的强冲击荷载下原位诊断技术及其应用研究进展[J]. *高压物理学报*, 2023, 37(5): 050104. DOI: 10.11858/gywllxb.20230747.
- CHEN S, HOU Q Y, WANG Q N, et al. Progress on synchrotron based in-situ dynamic X-ray diagnostics and its applications [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2023, 37(5): 050104. DOI: 10.11858/gywllxb.20230747.

- [16] WANG H L, ZHAO J F, LIANG Y X, et al. A critical review of mechanisms and constitutive description for dynamic deformation of high-entropy alloys: Status and challenges [J]. *International Materials Reviews*, 2026, 71(4): 297-326. DOI: 10.1177/09506608251409495.
- [17] ROTERS F, DIEHL M, SHANTHRAJ P, et al. DAMASK—the Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale [J]. *Computational Materials Science*, 2019, 158: 420-478. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.04.030.
- [18] GUO X, MAO N, KONG T, et al. Strain rate-dependent plastic behavior of TWIP steel investigated by crystal plasticity model [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2024, 891: 145986. DOI: 10.1016/j.msea.2023.145986.
- [19] SUN X, ZHOU K, LIU C, et al. A crystal plasticity based strain rate dependent model across an ultra-wide range [J]. *International Journal of Plasticity*, 2024, 180: 104056. DOI: 10.1016/j.ijplas.2024.104056.
- [20] AN W, YANG J P, LIU C Z, et al. Effect of twinning on shear localization of  $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$  high-entropy alloy at high strain rates: Experiment and crystal plasticity modeling [J]. *International Journal of Plasticity*, 2025, 189: 104339. DOI: 10.1016/j.ijplas.2025.104339.
- [21] HILL R, RICE J R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1972, 20(6): 401-413. DOI: 10.1016/0022-5096(72)90017-8.
- [22] ASARO R J. Crystal plasticity [J]. *Journal of Applied Mechanics*, 1983, 50(4b): 921-934. DOI: 10.1115/1.3167205.
- [23] ASARO R J. Micromechanics of crystals and polycrystals [J]. *Advances in Applied Mechanics*, 1983, 23: 1-115. DOI: 10.1016/S0065-2156(08)70242-4.
- [24] WONG S L, MADIVALA M, PRAHL U, et al. A crystal plasticity model for twinning- and transformation-induced plasticity [J]. *Acta Materialia*, 2016, 118: 140-151. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.07.032.
- [25] ZHANG X, LU X, ZHAO J, et al. Temperature effect on tensile behavior of an interstitial high-entropy alloy: crystal plasticity modeling [J]. *International Journal of Plasticity*, 2022, 150: 103201. DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.103201.
- [26] MARK H, POLANYI M, SCHMID E. Vorgänge bei der Dehnung von Zinkkristallen: I. Mitteilung: Allgemeine Beschreibung der Erscheinungen und Untersuchungsmethoden [J]. *Zeitschrift für Physik*, 1923, 12(1): 58-77. DOI: 10.1007/BF01328082.
- [27] MARK H, POLANYI M, SCHMID E. Vorgänge bei der Dehnung von Zinkkristallen: II. Mitteilung. Quantitative Festlegung des Dehnungsmechanismus [J]. *Zeitschrift für Physik*, 1923, 12(1): 78-110. DOI: 10.1007/BF01328083.
- [28] REGAZZONI G, KOCKS U F, FOLLANSBEE P S. Dislocation kinetics at high strain rates [J]. *Acta Metallurgica*, 1987, 35(12): 2865-2875. DOI: 10.1016/0001-6160(87)90285-9.
- [29] AUSTIN R A, MCDOWELL D L. A dislocation-based constitutive model for viscoplastic deformation of FCC metals at very high strain rates [J]. *International Journal of Plasticity*, 2011, 27(1): 1-24. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.03.002.
- [30] LUSCHER D J, MAYEUR J R, MOURAD H M, et al. Coupling continuum dislocation transport with crystal plasticity for application to shock loading conditions [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 76: 111-129. DOI: 10.1016/j.ijplas.2015.07.007.
- [31] SHAHBA A, GHOSH S. Crystal plasticity FE modeling of Ti alloys for a range of strain-rates. Part I: A unified constitutive model and flow rule [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 87: 48-68. DOI: 10.1016/j.ijplas.2016.09.002.
- [32] KOCKS U F, ARGON A S, ASHBY M F. Thermodynamics and kinetics of slip [M]. New York: Pergamon Press, 1975: 85-89.
- [33] OROWAN E. Zur Kristallplastizität. I. [J]. *Zeitschrift für Physik*, 1934, 89: 605-613. DOI: 10.1007/BF01341478.
- [34] WU Z, BEI H, PHARR G M, et al. Temperature dependence of the mechanical properties of equiatomic solid solution alloys with face-centered cubic crystal structures [J]. *Acta Materialia*, 2014, 81: 428-441. DOI: 10.1016/j.actamat.2014.08.026.

- [35] LAPLANCHE G, GADAUD P, HORST O, et al. Temperature dependencies of the elastic moduli and thermal expansion coefficient of an equiatomic, single-phase CoCrFeMnNi high-entropy alloy [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2015, 623: 348-353. DOI: 10.1016/j.jallcom.2014.11.061.
- [36] TAYLOR G I. The mechanism of plastic deformation of crystals. Part I.—Theoretical [J]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 1934, 145(855): 362-387. DOI: 10.1098/rspa.1934.0106.
- [37] HALL E O. The deformation and ageing of mild steel: II characteristics of the Lüders deformation [J]. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, 1951, 64(9): 742-746. DOI: 10.1088/0370-1301/64/9/302.
- [38] PETCH N J. The cleavage strength of polycrystals [J]. *The Journal of the Iron and Steel Institute*, 1953, 174: 25-28.
- [39] OTTO F, DLOUHÝ A, SOMSEN C, et al. The influences of temperature and microstructure on the tensile properties of a CoCrFeMnNi high-entropy alloy [J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(15): 5743-5755. DOI: 10.1016/j.actamat.2013.06.018.
- [40] SUN S J, TIAN Y Z, LIN H R, et al. Temperature dependence of the Hall–Petch relationship in CoCrFeMnNi high-entropy alloy [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 806: 992-998. DOI: 10.1016/j.jallcom.2019.07.357.
- [41] STEINMETZ D R, JÄPEL T, WIETBROCK B, et al. Revealing the strain-hardening behavior of twinning-induced plasticity steels: Theory, simulations, experiments [J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(2): 494-510. DOI: 10.1016/j.actamat.2012.09.064.
- [42] KUSOV A A, VLADIMIROV V I. The theory of dynamic annihilation of dislocations [J]. *Physica Status Solidi (B)*, 1986, 138(1): 135-142. DOI: 10.1002/pssb.2221380114.
- [43] MING K, LI B, BAI L, et al. Dynamically reversible shear transformations in a CrMnFeCoNi high-entropy alloy at cryogenic temperature [J]. *Acta Materialia*, 2022, 232: 117937. DOI: 10.1016/j.actamat.2022.117937.
- [44] WAGNER C, LAPLANCHE G. Effect of grain size on critical twinning stress and work hardening behavior in the equiatomic CrMnFeCoNi high-entropy alloy [J]. *International Journal of Plasticity*, 2023, 166: 103651. DOI: 10.1016/j.ijplas.2023.103651.
- [45] GROH S, MARIN E B, HORSTEMEYER M F, et al. Multiscale modeling of the plasticity in an aluminum single crystal [J]. *International Journal of Plasticity*, 2009, 25(8): 1456-1473. DOI: 10.1016/j.ijplas.2008.11.004.
- [46] MAHAJAN S, CHIN G Y. Formation of deformation twins in fcc crystals [J]. *Acta Metallurgica*, 1973, 21(10): 1353-1363. DOI: 10.1016/0001-6160(73)90085-0.
- [47] GOTTSTEIN G. *Physical Foundations of Materials Science* [M]. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2004: 252-254. DOI: 10.1007/978-3-662-09291-0.
- [48] OLSON G B, COHEN M. A general mechanism of martensitic nucleation: Part I. General concepts and the FCC→HCP transformation [J]. *Metallurgical Transactions A*, 1976, 7(12): 1897-1904. DOI: 10.1007/BF02659822.
- [49] CURTZE S, KUOKKALA V T, OIKARI A, et al. Thermodynamic modeling of the stacking fault energy of austenitic steels [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(3): 1068-1076. DOI: 10.1016/j.actamat.2010.10.037.
- [50] KIREEVA I V, CHUMLYAKOV Y I, SARAIEVA A A, et al. Giant shape memory effect of the  $\bar{1}44$ -oriented FCC CrMnFeCoNi high-entropy alloy single crystals with FCC↔HCP martensitic transformation [J]. *Scripta Materialia*, 2023, 235: 115621. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2023.115621.
- [51] KAWAMURA M, ASAKURA M, OKAMOTO N L, et al. Plastic deformation of single crystals of the equiatomic Cr-Mn-Fe-Co-Ni high-entropy alloy in tension and compression from 10 K to 1273 K [J]. *Acta Materialia*, 2021, 203: 116454. DOI: 10.1016/j.actamat.2020.10.073.
- [52] LAPLANCHE G, KOSTKA A, HORST O M, et al. Microstructure evolution and critical stress for twinning in the CrMnFeCoNi high-entropy alloy [J]. *Acta Materialia*, 2016, 118: 152-163. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.07.038.

- [53] LAPLANCHE G, BONNEVILLE J, VARVENNE C, et al. Thermal activation parameters of plastic flow reveal deformation mechanisms in the CrMnFeCoNi high-entropy alloy [J]. *Acta Materialia*, 2018, 143: 257-264. DOI: 10.1016/j.actamat.2017.10.014.
- [54] WANG T, LI C, HU Y X, et al. Correlation between microstructure and anisotropic mechanical behavior of Fe-riched FeCoCrNiMn high-entropy alloy prepared via laser powder bed fusion: Experimental and crystal plasticity finite element analysis [J]. *Additive Manufacturing*, 2025, 110: 104927. DOI: 10.1016/j.addma.2025.104927.
- [55] MADIVALA M, SCHWEDT A, WONG S L, et al. Temperature dependent strain hardening and fracture behavior of TWIP steel [J]. *International Journal of Plasticity*, 2018, 104: 80-103. DOI: 10.1016/j.ijplas.2018.02.001.
- [56] LI C, CAO F, CHEN Y, et al. Crystal Plasticity Model Analysis of the Effect of Short-Range Order on Strength-Plasticity of Medium Entropy Alloys [J]. *Metals*, 2022, 12(10): 1757. DOI: 10.3390/met12101757.
- [57] LI L, CHEN Z, TEI S, et al. Analysis of the temperature-dependent plastic deformation of single crystals of quinary, quaternary and ternary equiatomic high- and medium-entropy alloys of the Cr-Mn-Fe-Co-Ni system [J]. *Science and Technology of Advanced Materials*, 2024, 25(1): 2376524. DOI: 10.1080/14686996.2024.2376524.
- [58] KUBIN L, DEVINCERE B, HOC T. Modeling dislocation storage rates and mean free paths in face-centered cubic crystals [J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(20): 6040-6049. DOI: 10.1016/j.actamat.2008.08.012.
- [59] CHEN H, YANG X, GU D, et al. Unusual deformation substructure and strain hardening in an additively manufactured CoCrFeMnNi high entropy alloy under high-velocity impact loading [J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2026, 241: 35-51. DOI: 10.1016/j.jmst.2025.02.087.
- [60] LI Z, ZHAO S, DIAO H, et al. High-velocity deformation of Al<sub>0.5</sub>CoCrFeNi high-entropy alloy: remarkable resistance to shear failure [J]. *Scientific Reports*, 2017, 7(1): 42742. DOI: 10.1038/srep42742.
- [61] 潘昊, 王升涛, 吴子辉, 等. 基于晶体塑性理论研究铝材料高压高应变率下的强度特性[J]. *爆炸与冲击*, 2019, 39(2): 023102. DOI: 10.11883/bzycj-2018-0084.
- PAN H, WANG S T, WU Z H, et al. On strength of aluminum under high pressure and high strain rate based on crystal plasticity theory [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2019, 39(2): 023102. DOI: 10.11883/bzycj-2018-0084.

(责任编辑 爆炸与冲击)