arXiv:2602.04827v1 [cond-mat.mtrl-sci] 4 Feb 2026

随机难熔多主元合金中局部滑移阻力的原子尺度与数据驱动洞见

Wu-Rong Jian[1a,b], Arjun S. Kulathuvayal[c], Hanfeng Zhai[d], Anshu Raj[c], Xiaohu Yao[a,b], Yanqing Su[c], Shuozhi Xu[c], Irene J. Beyerlein[e,f]

[a]华南理工大学亚热带建筑科学国家重点实验室，中国广东广州 *510640*[b]华南理工大学工程力学系，中国广东广州 *510640*[c]俄克拉荷马大学航空航天与机械工程学院，美国俄克拉荷马州诺曼市 *73019-1052*[d]斯坦福大学机械工程系，美国加利福尼亚州斯坦福市 *94305*[e]加州大学圣塔芭芭拉分校机械工程系，美国加利福尼亚州圣塔芭芭拉市 *93106-5070*[f]加州大学圣塔芭芭拉分校材料系，美国加利福尼亚州圣塔芭芭拉市 *93106-5050*

摘要

难熔多主元合金（RMPEA）因其优异的高温强度以及在严苛环境中的应用前景而备受关注。然而，许多难熔多主元合金的成分各不相同且复杂，这给理解控制其塑性变形的变形机制带来了重大挑战。本研究通过原子尺度模拟，确定了12种体心立方（BCC）等摩尔难熔多主元合金中，刃型和螺型位错在{110}、{112}和{123}滑移面上的局部滑移阻力（LSR），以应对这些挑战。为阐明LSR与合金内在物理性质之间的关系，我们采用机器学习方法，系统分析成分变化对位错行为的影响。在此基础上，我们基于热激活理论建立了解析模型，用于预测难熔多主元合金的宏观屈服应力。结果表明，合金成分中六方密排（HCP）元素的比例超过50%时，不稳定堆垛层错能（USFE）和理想剪切强度（ISS）均显著降低，进而降低了螺型位错在三个滑移面上的局部应变响应。此外，较高的弹性各向异性（以泽纳比量化）会降低不稳定堆垛层错能、理想剪切强度和局部滑移阻力；而严重的晶格畸变（LD）会降低螺型与刃型位错局部滑移阻力比，同时提高 {110}与{112}以及 {110}与{123} 的局部滑移阻力比。通过将自编码器与随机森林模型相结合，我们分析了材料性能与局部滑移阻力之间的相关性，发现弹性常数和晶格畸变系数在决定局部滑移阻力方面起着最关键的作用。我们提出的热激活位错模型综合考虑了三个滑移面上刃型和螺型位错的贡献，能够可靠地预测体心立方难熔多主元合金的拉伸屈服应力。该框架为高性能应用中的合金设计与优化提供了坚实基础。

关键词：局部滑移阻力，难熔多主元合金，体心立方，原子尺度模拟，屈服强度

[1]通讯作者。电子邮箱：wurong@scut.edu.cn（Wu-Rong Jian）

1. 引言

与由单一主导元素组成的传统合金相比，含有三种或更多主要难熔元素的体心立方（BCC）难熔多主元合金（RMPEAs）因其优异的力学性能而受到材料科学家的广泛关注（Senkov等人，2018年），例如在高温下具有高屈服强度（Jian和Ren，2024年；Zhang等人，2025a）、较大的极限应变（Wang等人，2024b）以及显著的应变硬化（Wang等人，2025年）在高应变速率下，以及对辐照（Mo等人，2024年）和蠕变（Feng等人，2024年）具有优异抗性。要进一步提升难熔多主元合金的力学性能，就必须更深入地理解其塑性变形机制。由于位错是体心立方合金中塑性的主要载体（Anderson等人，2017年；Liu等人，2024年），全面理解难熔多主元合金中的位错滑移行为，对于制定策略以设计具有更高屈服强度的合金至关重要。

对于位错滑移而言，确定临界分解剪切应力（临界分解剪应力）至关重要；在该应力下，位错运动的能垒变为零，从而使位错能够在特定平面上滑移。在纯金属中，0 K时的临界分解剪应力被称为派尔斯应力（Peierls，1940年）。与纯金属相比，难熔多主元合金含有多种原子尺寸不同的元素，因而不可避免地表现出晶格畸变（Lee等人，2020年；Wang等人，2024a）。在这类化学与结构均呈非均质的材料中，空间上恒定的派尔斯应力这一传统概念不再适用。相反，由于化学成分和晶格应变的波动，位错滑移的局部阻力会随原子位点而变化。分子动力学模拟已阐明晶格畸变在调控多主元合金变形机制中的关键作用。具体而言，晶格畸变已被证明能够促进位错的形核：Jian等人（Jian等人，2020年）发现，它降低了CoCrNi中肖克莱不全位错形核所需的应变；Hua等人（Hua等人，2023年）则观察到，它对促进晶界处位错形核具有显著作用。此外，晶格畸变还会影响相稳定性；Wu等人（Wu和Shao，2023年）报道，在低温下，它有助于AlCuCoFeNi多主元合金发生面心立方-体心立方相变，同时阻碍层错的形核。此外，由晶格畸变形成的非均质能量景观迫使位错发生局部弯曲，沿阻力最小的路径前进，从而形成特征性的波浪状位错线（Li等人，2019年；Smith等人，2020年；Zheng等人，2023年）。与纯金属不同，在纯金属中，沿具有相同特征的平直位错线，位错运动的能垒保持均匀；而难熔多主元合金中晶格畸变的存在，则导致沿波浪状位错线的能垒发生变化。因此，在纯金属中沿位错线保持恒定的派尔斯应力，被认为在难熔多主元合金中会沿波浪状位错线发生变化。这种变化的产生，是因为由组成元素的特定排列及相关晶格畸变所支配的局部原子环境，改变了位错必须克服的底层周期势。

为了更好地表征难熔多主元合金中的 0 K 临界分解剪应力，并将其与纯金属中的派尔斯应力区分开来，研究者引入了局部滑移阻力（LSR）的概念（Wang等人，2020年；Xu等人，2021年）。与派尔斯应力类似，LSR 是指在给定滑移面上，晶体中一段直位错线段（约 1–2 nm）运动所需的 0 K 临界剪切应力。然而，

派尔斯应力是单一的材料常数，而 LSR 则是在局部和统计意义上定义的：对于给定的合金成分，需要在无序结构中的许多不同位置计算 LSR，每个位置都对应一种独特的局部原子构型。由此得到的 LSR 值分布反映了滑移阻力的空间非均匀性。举例来说，要表征特定成分难熔多主元合金中的滑移阻力，可以取 LSR 分布的平均值。重要的是，LSR 并非独立于派尔斯应力而存在；相反，它将派尔斯应力的概念推广到了非均匀材料。每个局部 LSR 值都可理解为经过局部修正的派尔斯应力，修正源于局部化学成分及其伴随的晶格畸变（LD）。合金元素偏析等因素会改变局部原子环境，从而直接影响位错滑移的局部能垒。这些影响并非简单地叠加在基准“纯金属”派尔斯应力之上；相反，LSR 体现了内禀晶格势与化学和结构无序对其扰动的综合结果。因此，LSR 是一种全面的描述量，能够在本质上反映难熔多主元合金中随空间变化的滑移阻力。

在体心立方纯金属中，屈服主要由螺位错控制；在同一滑移面上，螺位错的派尔斯应力是刃位错的数倍（Wang等，2021）。近期研究计算了多种体心立方难熔多主元合金的局部应变响应，包括一种三元合金（MoNbTi）（Wang等，2020年；Xu等，2021年）、五种四元合金（CrMoNbTa、CrNbTaW、MoNbTaV、MoNbTaW、NbTaTiV）（Romero等，2022；Nitol等，2024年），以及两种五元合金（NbTaTiVZr、MoNbTaVW）（Nitol等，2024年；Wang等，2024c）。这些研究考察了刃位错和螺位错在最常见滑移面（如{110}、{112}和{123}）上的局部应变响应。对于给定难熔多主元合金中的给定滑移面，螺型与刃型位错局部滑移阻力比通常为1至2（Romero等，2022），显著低于构成这些难熔多主元合金的体心立方纯金属元素中相应的派尔斯应力比；后者的比值范围为一个至两个数量级（Kang等，2012年；Wang等，2021）。这一发现表明，刃位错在体心立方难熔多主元合金的屈服过程中发挥着与螺位错相当的作用，这一结论得到了MoNbTi难熔多主元合金实验观察的支持（Wang等，2020年）。这些难熔多主元合金中包含六种体心立方元素，其中Cr的原子半径（128 pm）明显小于其余五种体心立方元素：钼（140 pm）、铌（147 pm）、钽（147 pm）、V（135 pm）和W（141 pm）（Zhang等，2015年）。Cr与其他体心立方元素之间显著的原子尺寸失配会导致晶格畸变明显增大。此外，在难熔多主元合金（如CrMoNbTa和CrNbTaW）中加入Cr原子，会直接导致平均局部滑移阻力较高，且局部滑移阻力值的分布更加分散（Romero等，2022）。

此外，这些合金中的位错滑移涉及滑移面两侧原子键的断裂与重组，这一过程类似于沿特定晶面剪切或使晶体的一半相对于另一半发生位移（Anderson等人，2017年）。这一过程中单位面积的能量代价由广义层错能（GSFE）表示，通常以曲线形式展示晶体两半相对位移时的能量变化（Vitek，2011年）。合金的理想剪切强度（ISS）可由GSFE曲线的最大斜率推得，该斜率对应沿滑移面位移时的最大剪切应力。

尽管取得了这些进展，现有研究结果仅适用于少数体心立方难熔多主元合金，因此其普遍适用性仍有待探讨。此外，为提高延展性，具有六方密排（HCP）晶体结构的金属元素（如钛和铪）日益被加入体心立方难熔多主元合金中（Zhang等人，2023年；Tsuru等人，2024年；Wang等人，2024b；Zhang等人，2025b）。然而，这些HCP元素对体心立方难熔多主元合金中LSR的影响仍缺乏深入认识。除晶格畸变（LD）和理想剪切强度（ISS）外，晶格参数、弹性常数、内聚能和不稳定堆垛层错能（USFE）等其他基本物理性质，也可能影响不同滑移面上刃位错和螺位错的LSR 值。这些本征性能对LSR 值的影响程度尚不明确。此外，原子尺度晶格阻力应力与宏观屈服强度之间的关系也有待系统研究，以便更好地阐明体心立方难熔多主元合金在宽温度范围内的塑性变形机制。

本研究通过分子静力学（MS）模拟，计算了共12种体心立方等摩尔难熔多主元合金在{110}、{112}和{123}滑移面上的 LSR 值，其中包括九种三元合金、一种四元合金和两种五元合金。随后采用机器学习（ML）方法，分析 LSR 值与各种难熔多主元合金基本物理性质之间的相关性。在此基础上，依据热激活理论建立了解析模型，用于预测体心立方难熔多主元合金的宏观屈服应力。研究发现，当难熔多主元合金成分中 HCP 元素的比例超过50%时，不稳定层错能和理想剪切强度都会显著降低，这也使得含铪或含钛合金在三个滑移面上的螺位错 LSR 值较低。此外，较高的弹性各向异性（以较大的泽纳比为指标）也会降低不稳定层错能、理想剪切强度和 LSR。严重的晶格畸变会降低这些合金中的螺型与刃型位错局部滑移阻力比，但会提高 {110}-to-{112} and {110}-to-{123}LSR 比值。通过将自编码器与随机森林模型相结合，我们揭示了材料性能与 LSR 之间的关系，并确定弹性常数和晶格畸变系数是影响 LSR 的最重要因素。所建立的热激活位错模型纳入了{110}、{112}和{123}晶面上的刃型与螺型位错，可对体心立方难熔多主元合金的屈服应力进行可靠预测。

2. 方法学

本研究中的所有模拟均通过大规模原子/分子大规模并行模拟器（LAMMPS）（Thompson等人，2022）完成。研究考察了12种难熔多主元合金，即NbTaTi、MoNbTi、HfNbTa、NbTiZr、HfNbTi、HfTaTi、TaTiZr、MoTaTi、MoNbTa、HfNbTaTi、HfMoNbTaTi和HfNbTaTiZr。这些合金中六种组元原子（Hf、Mo、Nb、Ta、Ti和Zr）之间的相互作用，采用近期由（Mubassira等人，2025）按照（Zhou等人，2004年）提出的策略构建的嵌入原子法（EAM）合金势进行描述。对于这一EAM势，不同原子种类之间的交叉项依据（Johnson，1989）提出的公式，通过对单元素势取平均来构建。这种合金势开发方法已广泛应用于以往的研究中（Maresca 和 Curtin，2020年；Xu等人，2022a）。

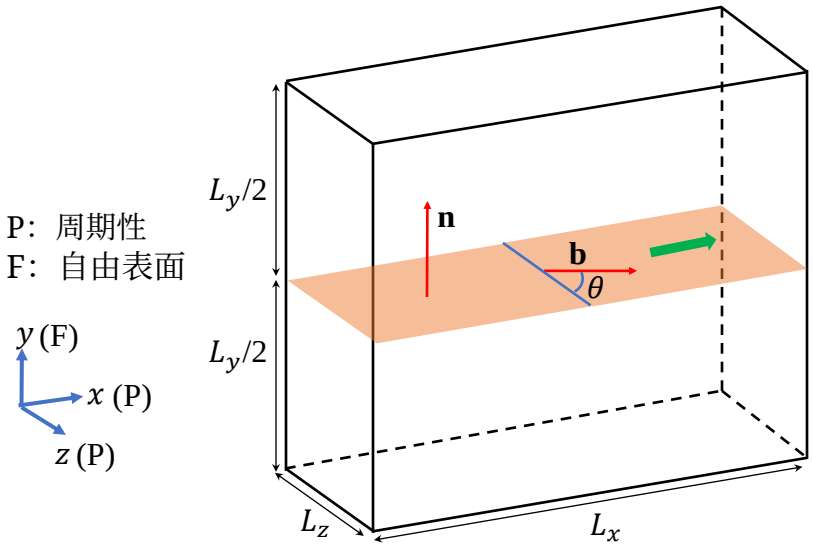


图 1：局部滑移阻力（LSR）计算示意图。位错线、其滑移面以及该面上的伯格斯矢量分别以蓝线、浅橙色平行四边形和红色箭头表示。位错线和其滑移面的法向分别沿z 轴和y 轴。对于刃位错，位错线与伯格斯矢量之间的特征角为 θ 90°；对于螺位错， 0°。

构建了由相同原子组成的单晶体心立方结构，其中 [100], [010], 和[001] 取向分别沿x、y和z轴排列，每个维度包含10个晶格。为获得所需的等摩尔组成，随后随机将部分原子替换为其他原子种类。接着，通过MS模拟确定难熔多主元合金的一些基本性质，包括晶格常数（a_0）、弹性常数（C_{11},C_{12},C_{44}）、泽纳比（$A_c = 2C_{44}/(C_{11}-C_{12})$）和内聚能（$E_{coh} = E_{total}/N_{atom}$）。通过径向分布函数g(r)的半峰全宽（FWHM）量化难熔多主元合金的晶格畸变；该函数定义为原子间距r处的第一最近邻壳层（Jian等人，2020a）。此处将晶格畸变系数定义为 δ = FWHM/a_0。此外，还构建了一个更大的类似单晶体心立方结构作为参照，其每个维度包含50个晶格，用于获取部分相同性质。

LSR计算基于另一种尺寸为50 nm（L_x） × 50 nm（L_y） × 1~2 nm（L_z）的单晶体心立方结构。在xy 横截面的中心插入刃位错或螺位错。如图1所示，x、y 和z 轴分别沿位错的滑移方向、滑移面的法向和位错线方向。LSR计算仅考虑在{110}、{112}和{123}晶面上滑移的刃位错和螺位错。对于涉及不同滑移面的原子构型，x、y和z 轴分别取不同的晶体学取向，具体如表1所示。在LSR计算中，沿x和z

表1：用于计算{110}、{112}和{123}滑移面LSR的原子构型的晶体学取向。

		{110}	{112}	{123}
Edge	x	[111]	[111]	[111]
	y	[1$\bar{1}$0]	[$\bar{1}\bar{1}$2]	[$\bar{1}\bar{2}$3]
	z	[11$\bar{2}$]	[1$\bar{1}$0]	[5$\bar{4}\bar{1}$]
螺型	x	[$\bar{1}\bar{1}$2]	[$\bar{1}$10]	[$\bar{5}$41]
	y	[1$\bar{1}$0]	[$\bar{1}\bar{1}$2]	[$\bar{1}\bar{2}$3]
	z	[111]	[111]	[111]

方向施加周期性边界条件（PBCs），而沿y方向设置无牵引边界。这种称为位错周期阵列（PAD）的构型已广泛用于此前涉及派尔斯应力（Jian等，2021年；Kang等，2012年）、位错迁移率（Cho等，2017年；Lunev等，2018年；Jian等，2020年）和LSR（Wang等，2020年；Xu等，2021年；Romero等，2022年）的原子尺度模拟中。沿y方向，靠近顶部和底部表面的两层原子被视为边界层。为启动位错运动，通过施加仅含一个非零分量的增量应变张量 $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ 使模拟胞发生变形。对于刃位错， $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ 设置为$|\Delta\varepsilon_{yx}| = 10^{-5}$；对于螺位错，则设置为 $|\Delta\varepsilon_{yz}| = 10^{-6}$。$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ 的其余分量均保持为零。此前研究已证实，这些设定足够小，可避免产生不可靠的结果（Xu等，2021年；Romero等，2022年）。每次应变增量后，使用共轭梯度法和快速惯性弛豫引擎对构型进行弛豫（Xu等，2021年）。在能量最小化过程中，边界层中的原子对于刃位错被限制沿x方向移动，对于螺位错被限制沿z方向移动，而所有其他原子均可沿任意方向弛豫。随着应变增加，位错发生滑移。使位错在一次应变增量内至少移动1 nm所需的最小剪切应力定义为LSR（τ_{lsr}）。本研究采用的相对较短的位错长度（1–2 nm）远短于纯体心立方金属中扭折对形核的典型临界长度（通常约为 ~10 nm（Hirth 和 Lothe，1982年））。然而，这里的基本目标有所不同：在难熔多主元合金中，LSR被明确地定义为使直位错段在特定局部原子环境中发生局部运动所需的临界剪切应力，从而有意将本征晶格摩擦与扭折对形成和传播的动力学过程区分开来。这种方法是LSR原子尺度研究中的标准做法，类似体系的既有研究也证明了这一点（Wang等，2020年；Xu等，2021年；Romero等，2022年；Wang等，2024年；Nitol等，2024年）。通过采用这一较短的位错段，我们可以直接探测由化学异质性和晶格畸变引起的原子尺度阻力，这正是本文关注的核心机制。这一设置使我们能够获得局域能垒的统计分布，同时排除长程线张力效应或扭折介导运动等复杂因素，从而为理解成分复杂性对位错滑移的作用提供清晰基线。为确保统计准确性，对于每种难熔多主元合金成分，上述性质和局部应变响应的所有计算均针对10个具有不同随机原子分布的样本进行，并报告平均值。

作为比较，还计算了体心立方钼、铌和钽的 Peierls 应力。

此外，我们采用边长为 27 nm 的立方原子构型，计算了 {110}、 {112} 和 {123} 晶面的广义层错能曲线。这些晶体学取向与用于刃位错 LSR计算的取向一致，如表1所示。在广义层错能曲线的计算中，仅沿 x 和 z 方向施加周期性边界条件。每个样品的上半部分沿 [111] 取向（x 轴）相对于下半部分位移 d，并将 d 从 0 变化至 $\sqrt{3}a_0/2$，以此获得广义层错能曲线。有关广义层错能曲线计算的更多细节，请参见我们此前的研究（Romero等人，2022）。每条广义层错能曲线均呈现单个峰值，其数值代表不稳定层错能（$\gamma_{usf} = \max[\gamma_{gsf}(d)]$）。根据广义层错能曲线，我们确定理想剪切强度（$\tau_{iss} = \max[\partial\gamma_{gsf}(d)/\partial d]$），该值由广义层错能曲线的最大斜率得出，对应于每个样品上半部分移动过程中的最大剪切应力（Xu等，2022b）。为确保具有良好的统计代表性，每种难熔多主元合金成分的广义层错能曲线、 γ_{usf}和 τ_{iss} 均取 20 个样品的平均值。

3. 结果与讨论

3.1. 难熔多主元合金的基本性质

为研究体心立方难熔多主元合金的基本性质与其LSR值之间的关系，计算了一系列体心立方难熔多主元合金的基本性质。这些性质包括晶格畸变系数（δ）、晶格参数（a_0）、弹性常数（C_{11}, C_{12}, C_{44}）、泽纳比（A_c）、内聚能（E_{coh}）、{110}、{112}和{123}晶面的USFE（$\gamma^{110}{}_{usf}$、 γ^{112}_{usf}、 $\gamma^{123}{}_{usf}$），以及相同晶面的ISS（$\tau^{110}{}_{iss}$、 τ^{112}_{iss}、 $\tau^{123}{}_{iss}$）。这些性质的平均值汇总于表2。

3.1.1. 广义层错能曲线

图2展示了12种难熔多主元合金在 {110}、 {112}和 {123} 滑移面上的平均广义层错能曲线。每条曲线均通过在相应滑移面上沿 [111] 取向（x轴）进行相对位移计算，位移范围为一个周期距离，该距离对应于伯格斯矢量的大小$b = \sqrt{3}a_0/2$。在此周期距离内，b，所有广义层错能曲线均呈现单一峰值，未观察到局部极小值或亚稳态。不同于纯金属相对于峰值完全对称的广义层错能曲线，难熔多主元合金的广义层错能曲线由于晶格畸变和化学不均匀性而呈现非对称性（Romero等人，2022）。

3.1.2. 不稳定层错能和理想剪切强度

图3(a) 和 (b) 展示了所有 12 种难熔多主元合金在 γ_{usf} 和 τ_{iss} 滑移面上的平均 {110}， {112}以及 {123} 滑移面上的结果。尽管这两者都是 0 K 下的理论量，且未考虑位错核心效应，不稳定层错能和理想剪切强度仍可作为衡量位错在施加应力作用下运动阻力的指标。当不稳定层错能和理想剪切强度均升高时，位错滑移会变得更加困难：较高的不稳定层错能会提高形核和运动的能量成本，而较高的理想剪切强度则意味着晶格在屈服前能够承受更大的剪切应力。因此，这两个因素的升高

Table 2: Mechanical properties of 12 RMPEAs from MS calculations. Lattice distortion coefficient: δ; Lattice parameter (Å): a_0; Elastic constants (GPa): C_{11}, C_{12}, C_{44}; Zener ratio: A_c; Cohesive energy (eV): E_{coh}; USFE ((mJ/m^2)): γ_{usf}^{110}, γ_{usf}^{112}, γ_{usf}^{123}; ISS (GPa): τ_{iss}^{110}, τ_{iss}^{112}, τ_{iss}^{123}.

Composition \ Values	δ	a_0	C_{11}	C_{12}	C_{44}	A_c	E_{coh}	γ_{usf}^{110}	γ_{usf}^{112}	γ_{usf}^{123}	τ_{iss}^{110}	τ_{iss}^{112}	τ_{iss}^{123}
NbTaTi	0.0126	3.295	196.24	124.39	66.37	1.85	−6.76	559.34	645.25	635.36	6.99	8.13	7.99
MoNbTi	0.0282	3.233	241.38	133.00	76.32	1.41	−6.43	742.35	857.21	845.89	7.44	8.38	8.32
HfNbTa	0.0371	3.383	201.27	132.08	68.54	1.98	−7.39	647.42	758.90	745.44	7.51	8.86	8.72
NbTiZr	0.0429	3.391	143.32	110.55	56.85	3.47	−6.31	459.61	537.78	529.89	5.17	6.03	5.95
HfNbTi	0.0400	3.386	146.02	115.97	65.41	4.35	−6.29	474.26	566.09	556.67	5.35	6.35	6.25
HfTaTi	0.0356	3.381	154.69	119.64	82.03	4.68	−6.45	511.04	610.78	599.62	5.81	7.03	6.93
TaTiZr	0.0387	3.385	153.52	116.17	71.84	3.85	−6.46	494.45	579.18	569.42	5.57	6.60	6.53
MoTaTi	0.0254	3.240	234.35	140.46	92.70	1.97	−6.59	786.30	910.26	897.48	8.45	9.87	9.76
MoNbTa	0.0260	3.243	308.55	158.28	76.84	1.02	−7.57	877.23	1016.40	1000.05	9.31	10.63	10.48
HfNbTaTi	0.0354	3.361	175.31	123.25	70.57	2.71	−6.73	553.96	653.34	641.87	6.46	7.62	7.53
HfMoNbTaTi	0.0374	3.310	205.97	141.21	82.20	2.54	−6.82	666.67	782.60	769.12	7.38	8.67	8.55
HfNbTaTiZr	0.0420	3.405	157.62	118.17	67.61	3.43	−6.69	522.79	615.94	605.31	5.82	6.88	6.80

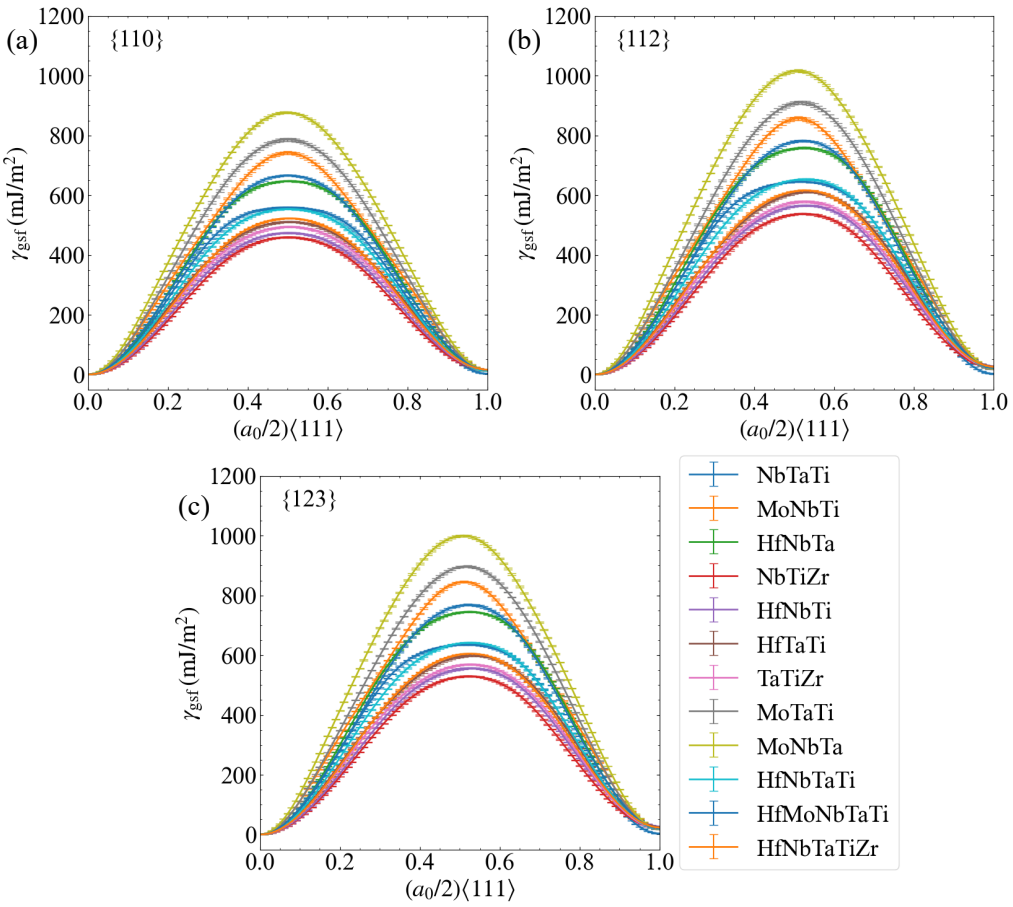


图2：基于 MS 模拟得到的 12 种难熔多主元合金在 (a) {110}、(b) {112} 和 (c) {123} 滑移面上的平均广义层错能曲线。每条曲线包含 101 个数据点；误差线表示每个数据点基于 20 个独立样本计算得出的标准差。

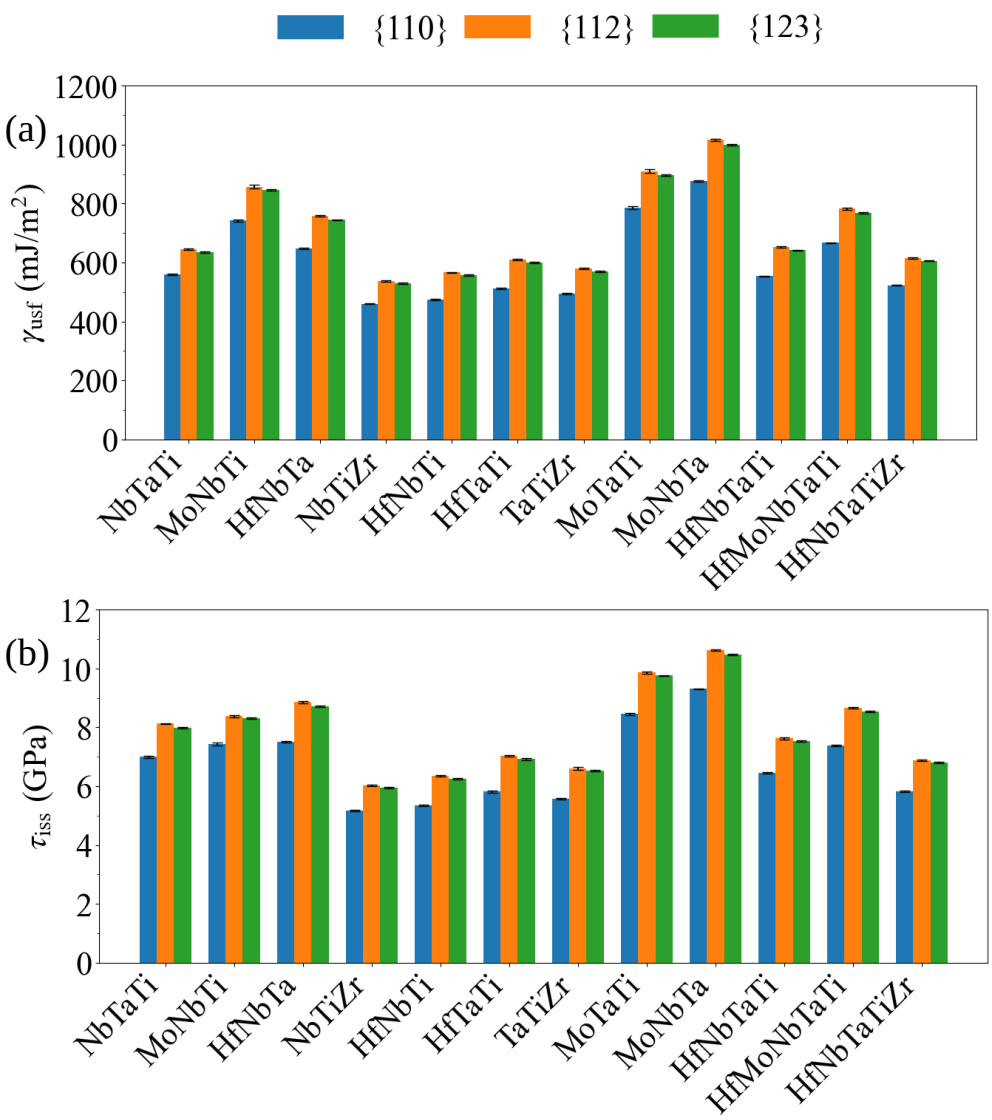


图3：12种难熔多主元合金在 {110}、 {112}和 {123} 滑移面上的(a)不稳定层错能（γ_{usf}）和(b)理想剪切强度（τ_{iss}）平均值。误差线表示根据每种难熔多主元合金的20个独立样本计算得出的标准差。

这会导致临界分解剪应力升高，因此是塑性变形阻力增大的表征。

在这12种难熔多主元合金中，各滑移面上不稳定层错能最高的四种成分始终是含钼成分，即按不稳定层错能递减顺序排列的 MoNbTa、MoTaTi、MoNbTi 和 HfMoNbTaTi（图3（a）和表2）。这表明钼元素在提高难熔多主元合金的不稳定层错能方面发挥着重要作用，从而可能增强其抵抗位错滑移的能力。从机理上说，这种增强源于钼是一种难熔金属，具有强方向性键合和较高的固有抗剪切变形能力。这些特性源自其较高的键强度，使相邻原子平面发生位移需要付出很大的能量代价，即具有较高的固有不稳定层错能。文献报道，纯钼在{110}晶面、{112}晶面和{123}晶面上的不稳定层错能分别为1458.05 mJ/m^2 、1689.03 mJ/m^2 和1657.93 mJ/m^2 （Xu等人，2020年）。如表3所示，其不稳定层错能远高于本研究考察的其他元素（铪、钛、锆、铌、钽）。钼加入难熔多主元合金后，其局部原子环境仍保持较高的抗剪切能力。因此，富钼区域会提高沿滑移面发生剪切位移的平均能量代价。这种影响在本研究考察的含钼成分（MoNbTa、MoTaTi、MoNbTi 和 HfMoNbTaTi）中尤为显著；较高的钼含量始终使其不稳定层错能在这12种合金中最高。因此，含钼难熔多主元合金不稳定层错能的提高，体现为钼本身较高的不稳定层错能。

表3：体心立方铪、体心立方钛、体心立方锆、体心立方钼、体心立方铌和体心立方钽在三种滑移面上的不稳定层错能（mJ/m^2）和理想剪切强度（GPa），由分子静力学模拟计算得出。体心立方钛、体心立方锆、体心立方钼、体心立方铌和体心立方钽的数据取自我们此前的研究（Xu等人，2020年；Wang等人，2021年）。

元素	γ_{usf}^{110}	γ_{usf}^{112}	γ_{usf}^{123}	τ_{iss}^{110}	τ_{iss}^{112}	τ_{iss}^{123}
体心立方铪	336.07	392.55	385.30	1.93	1.68	4.91
体心立方钛	343.11	390.68	386.08	3.92	4.70	4.66
体心立方锆	325.46	369.17	363.33	3.73	4.41	4.38
体心立方钼	1458.05	1689.03	1657.93	33.10	58.40	19.30
体心立方铌	604.87	697.23	684.71	14.10	24.50	8.10
体心立方钽	751.11	868.30	852.26	8.74	10.14	9.94

此外，对于所有三种滑移面，三个最低的不稳定层错能和理想剪切强度值始终遵循相同的顺序，即 NbTiZr ＜ HfNbTi ＜ TaTiZr。将范围扩展到不稳定层错能和理想剪切强度各自的五个最低值后，还包括 HfTaTi 和 HfNbTaTiZr，但它们的具体排名因滑移面而异。值得注意的是，这五种成分中每一种的HCP元素百分比都超过50%，这表明，较高比例的HCP元素能够降低体心立方难熔多主元合金中的不稳定层错能和理想剪切强度。为进一步说明这一点，表中列出了体心立方铪、体心立方钛、体心立方锆以及另外三种传统体心立方金属在三类滑移面（{110}、{112}和{123}晶面）上的不稳定层错能和理想剪切强度。表3与传统体心立方金属（钼、铌、钽）相比，铪、钛和锆的体心立方相表现出显著更低的不稳定层错能和理想剪切强度。因此，体心立方难熔多主元合金成分中超过50%的HCP元素比例，能够显著降低不稳定层错能和理想剪切强度。

除达到最高值和最低值的难熔多主元合金外，理想剪切强度值的排序与不稳定层错能值的排序并不一致（图3（b）和表2）。这些观察结果表明，成分对理想剪切强度的影响比对不稳定层错能的影响更为复杂，且可能并非由单一元素主导。这种差异的一个原因是，理想剪切强度涉及整个材料体积的弹性变形，而不稳定层错能则与晶体中跨越单个晶体学平面的原子键断裂有关。

由于体心立方晶体结构的内在特性，在体心立方合金，尤其是难熔多主元合金中实验测量层错能（SFE）面临着巨大挑战。正如传统冶金理论所指出的（Hirth 和 Lothe，1982年），体心立方材料通常具有较高的层错能，导致位错分位之间的间距极窄（通常小于 1 nm），并因此有效地合并为完全位错。这一基本特性使得在传统体心立方体系中，几乎不可能通过高分辨率透射电子显微镜（HRTEM）直接观察扩展层错。本研究采用广义层错能曲线的计算方法，遵循该领域已确立的方法学（Vitek，2011年；Wang等人，2021年），其中原子尺度模拟是理解剪切阻力机制的主要工具。因此，本研究给出的不稳定层错能和理想剪切强度应被视为滑移阻力的理论替代指标，而非可通过实验观测的量。尽管利用透射电子显微镜技术测量体心立方金属中的位错密度已有进展（Meng等人，2021年），但由于位错分位之间的间距可忽略不计，直接观察体心立方型难熔多主元合金中的扩展层错在技术上仍不可行。这一局限凸显了采用计算方法研究这些新型合金体系中位错机制的必要性。

3.1.3. 泽纳比

表2 列出了12种难熔多主元合金的平均弹性常数（C_{11}, C_{12} 和C_{44}）及泽纳比（A_c）。泽纳比定义为$2C_{44}/（C_{11} - C_{12}）$，通常用于评估立方晶体的弹性各向异性程度。数值为1表示材料是各向同性的；偏离1越大，则表明各向异性越强。所研究的12种难熔多主元合金的泽纳比介于1至5之间。

考虑到晶格畸变（δ）、不稳定层错能（γ_{usf}）和理想剪切强度（τ_{iss}）对位错滑移（Xu等人，2021年；Romero等人，2022）的重要性，我们在图4 中研究了它们与泽纳比之间的关系。如图4（a）所示，当泽纳比介于1至3.5之间时，泽纳比与晶格畸变系数呈正相关；超过这一范围后，泽纳比进一步增大与晶格畸变不再相关。相比之下，随着泽纳比从1增至3.5，不稳定层错能和理想剪切强度均降低，并在更高数值时趋于平稳，这表明弹性各向异性增强可能会降低位错滑移的阻力。

此外，泽纳比 A_c 随 HCP元素百分比变化的关系也显示在 图5 中。可以观察到，泽纳比随 HCP元素百分比增加而迅速增大，这表明立方晶体的弹性各向异性程度也相应增强。根据 图4(b–c) 的结果，USFE 和理想剪切强度均随泽纳比增大而降低。因此，HCP元素百分比的增加会使 USFE 和

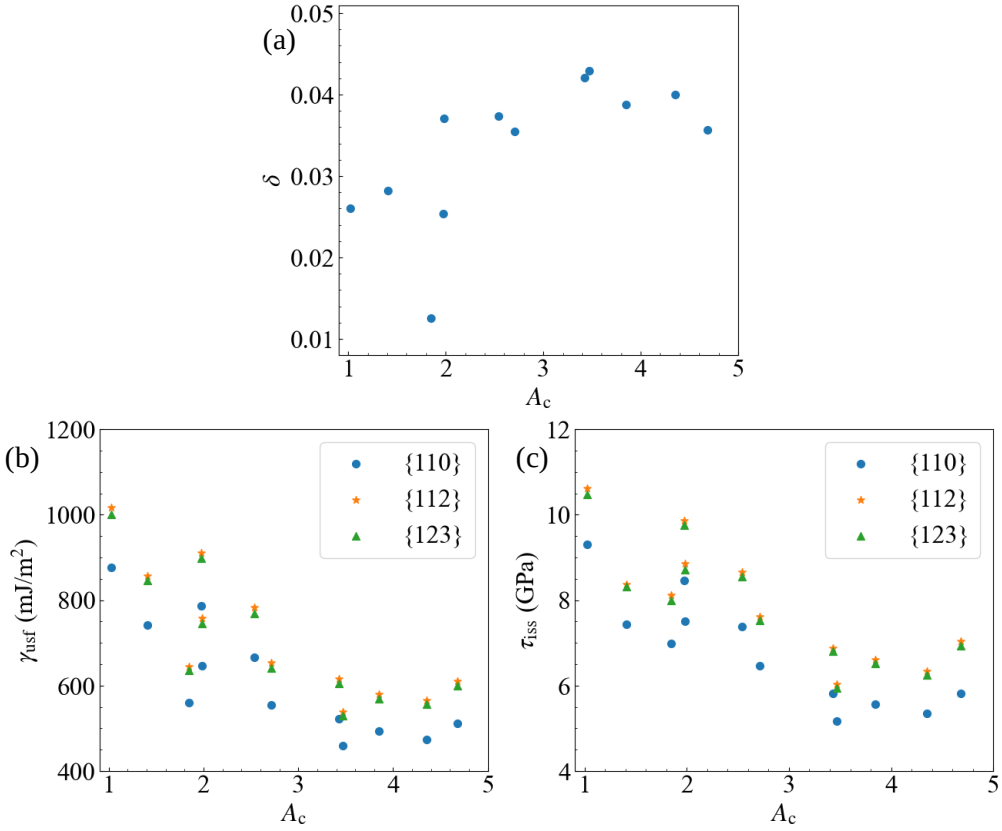


图4：12种难熔多主元合金中，(a) 晶格畸变系数（δ）、(b) 不稳定层错能（γ_{usf}）和 (c) 理想剪切强度（τ_{iss}）随泽纳比（A_c）的变化。{110}、 {112}和 {123} 分别代表三个滑移面。

理想剪切强度也随之降低，这同样归因于弹性各向异性的增强。

3.2. 难熔多主元合金的局部应变响应

*3.2.1. 12*种难熔多主元合金中的*LSR*分析

如第2节所述，我们计算了每种难熔多主元合金成分的10种独立原子构型中，沿 {110}、{112}和 {123} 滑移面滑移的刃位错和螺位错的 LSR 值。这些 LSR 值的分布在不同合金成分之间存在显著差异。图6（a）和（b）展示了两个代表性案例中 LSR 值的统计分布：在研究的12种难熔多主元合金中，晶格畸变系数最小的 NbTaTi 合金（δ = 0。0126），以及晶格畸变系数最大的 NbTiZr 合金（δ = 0。0429）。直接比较两者可见，其统计离散性有所不同。对于低畸变的 NbTaTi 合金，刃位错的 LSR 分布相对狭窄且集中，而

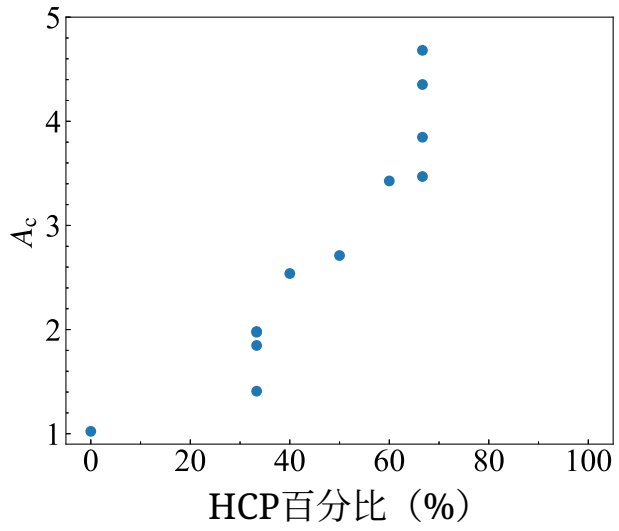


图5：12种难熔多主元合金的泽纳比（A_c）随密排六方元素百分比的变化。HfNbTa（33.33，1.98）和 MoTaTi（33.33，1.97）的数据点几乎重叠。

在三个滑移面上，螺位错的 LSR 分布则更加分散。相反，在高畸变的 NbTiZr 合金中，这一趋势发生了变化：刃位错的 LSR 分布相对更宽、更加分散，而螺位错的分布则更为集中。难熔多主元合金中的位错运动受到位错周围局部原子环境中原子成分和构型，以及相关局部能垒的影响（Xu等人，2021年；Romero等人，2022）。由于晶格畸变会直接影响这些能垒，我们假设 LSR 分布的统计离散性与晶格畸变密切相关。

为探究这种关系，我们绘制了所有12种难熔多主元合金中，三个滑移面上刃型位错和螺型位错的 LSR 值变异系数（COV）与晶格畸变系数（δ）的关系，见图7。COV 定义为标准差与均值之比，是衡量 LSR 分布离散程度的归一化指标；COV 越高，表明变异性越大。结果表明，当 δ 从 0.01 增加到 0.35 时，LSR 值的 COV 基本保持不变。然而，当 δ = 0超过0.35 时，COV 显著增大，这表明晶格畸变系数过大会导致三个滑移面上的 LSR 变异增大，且刃型位错和螺型位错均如此。

所有 12 种难熔多主元合金成分在三个滑移面上的 10 个样本的平均 LSR 值见图 8 和表 4。为便于比较，表 4 中还列出了体心立方钼、铌和钽的刃位错与螺位错在相同三个滑移面上的派尔斯应力表 4。在所有难熔多主元合金中，NbTaTi 合金在三个滑移面上的刃位错 LSR 值均最低，分别为 443.03 兆帕、514.18 兆帕和 340.94 兆帕，对应的滑移面为 {110}、 {112} 和{123}。相比之下，HfMoNbTaTi 合金在 {110} 滑移面上的刃位错 LSR 值最高（1543.22 兆帕），而 MoNbTa 成分记录的

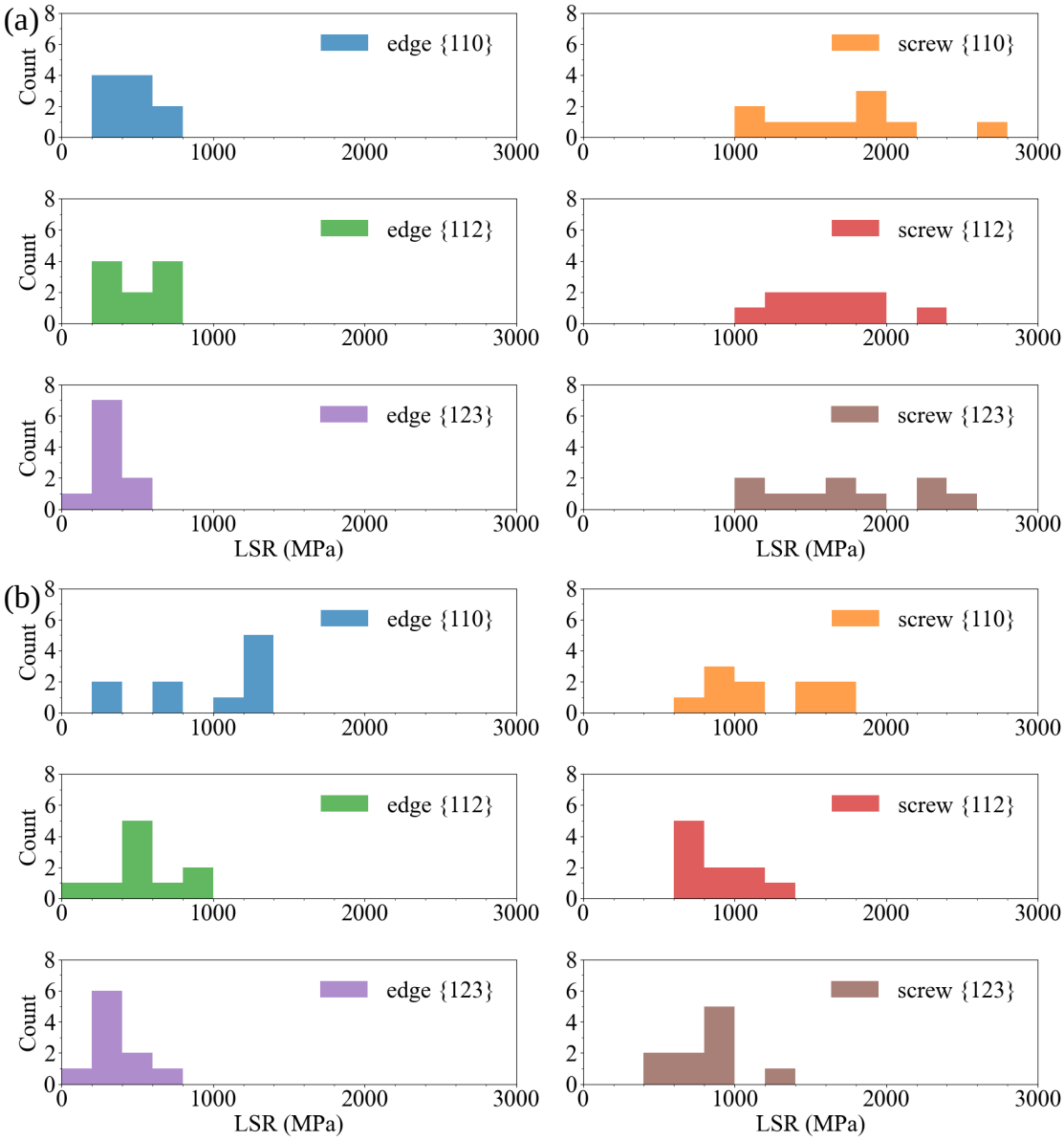


图6：(a) NbTaTi 和 (b) NbTiZr 难熔多主元合金的 LSR 值统计分布。对于每种合金，结果基于 10 个独立原子构型给出，并分别绘制了 {110}、{112} 和 {123} 滑移面上刃位错与螺型位错的分布。

Table 4: The LSR values (MPa) of edge and screw dislocations on the {110}, {112}, and {123} planes for 12 RMPEAs from MS calculations. The Peierls stresses (MPa) of BCC Mo, Nb and Ta from MS calculations are also shown for comparison.

Composition \ Values	τ_e^{110}	τ_s^{110}	τ_e^{112}	τ_s^{112}	τ_e^{123}	τ_s^{123}	$\frac{\tau_s^{110}}{\tau_e^{110}}$	$\frac{\tau_s^{112}}{\tau_e^{112}}$	$\frac{\tau_s^{123}}{\tau_e^{123}}$	$\frac{\tau_e^{110}}{\tau_e^{112}}$	$\frac{\tau_s^{110}}{\tau_s^{112}}$	$\frac{\tau_e^{110}}{\tau_e^{123}}$	$\frac{\tau_s^{110}}{\tau_s^{123}}$
NbTaTi	443.03	1731.11	514.18	1616.89	340.94	1737.92	3.91	3.14	5.10	0.86	1.07	1.30	1.00
MoNbTi	797.49	2016.97	1085.82	1634.26	795.84	1776.54	2.53	1.51	2.23	0.73	1.23	1.00	1.14
HfNbTa	777.59	1394.83	708.49	1104.07	592.07	1032.13	1.79	1.56	1.74	1.10	1.26	1.31	1.35
NbTiZr	956.74	1226.94	556.23	877.68	344.02	811.20	1.28	1.58	2.36	1.72	1.40	2.78	1.51
HfNbTi	617.74	1021.31	590.82	994.67	413.33	674.14	1.65	1.68	1.63	1.05	1.03	1.49	1.51
HfTaTi	912.06	1013.25	758.30	1012.44	549.66	740.18	1.18	1.34	1.35	1.13	1.00	1.56	1.37
TaTiZr	1138.82	1414.79	732.28	1098.29	474.18	842.95	1.24	1.50	1.78	1.56	1.29	2.40	1.68
MoTaTi	922.53	1975.66	1185.92	1686.38	736.58	1742.48	2.14	1.42	2.37	0.78	1.17	1.25	1.13
MoNbTa	949.41	2320.54	1303.57	1645.52	798.93	1977.64	2.44	1.26	2.48	0.73	1.41	1.19	1.17
HfNbTaTi	884.90	1155.84	637.74	1062.53	624.89	1220.25	1.31	1.67	1.95	1.39	1.09	1.42	0.95
HfMoNbTaTi	1543.22	2017.60	878.73	1772.92	772.36	1395.88	1.31	2.02	1.81	1.76	1.14	2.00	1.45
HfNbTaTiZr	923.91	1084.82	659.58	1021.67	458.90	782.21	1.17	1.55	1.70	1.40	1.06	2.01	1.39
Mo	50.40	3611.46	459.9	2683.79	130.39	3052.18	71.66	5.84	23.41	0.11	1.35	0.39	1.18
Nb	7.53	920.2	99.5	854.01	4.70	773.03	122.20	8.58	164.47	0.08	1.08	1.60	1.19
Ta	13.13	3224.5	274.09	2024.29	29.86	2204.2	245.58	7.39	73.82	0.05	1.59	0.44	1.46

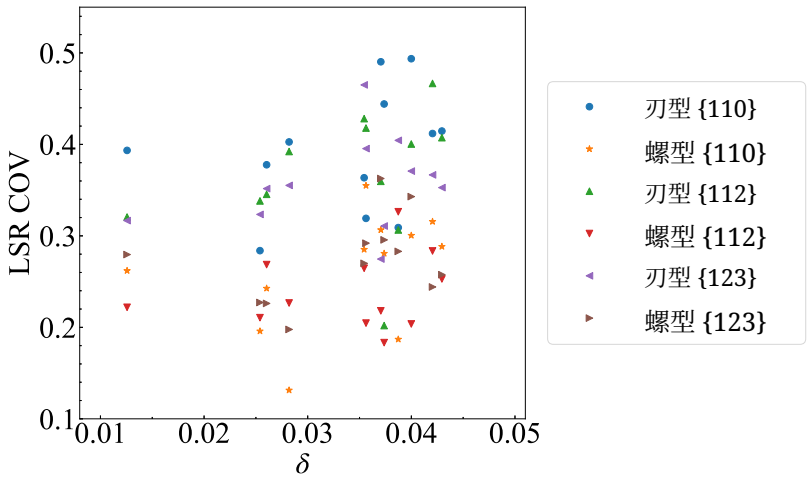


图7：12 种难熔多主元合金中， {110}、 {112} 和 {123} 滑移面上的 LSR 值变异系数随晶格畸变系数（δ）的变化。

刃位错在{112}和{123}滑移面上的 LSR 值最大，分别为 1303.57 兆帕和 798.93 兆帕。对于螺位错，不同滑移面上的最低 LSR 值出现在不同的难熔多主元合金中：HfTaTi 的{110}滑移面（1013.25 兆帕）、NbTiZr 的{112}滑移面（877.68 兆帕）以及 HfNbTi 的{123}滑移面（674.14 兆帕）。此外，MoNbTa 合金在{110}和{123}滑移面上的螺位错 LSR 值最高，分别为 2320.54 兆帕和 1977.64 兆帕。HfMoNbTaTi 合金在{112}滑移面上的螺位错 LSR 值也最大（1772.92 兆帕）。如表 4所示，与难熔多主元合金相比，体心立方纯金属钼、铌和钽的刃位错 LSR 值明显更低，而螺位错 LSR 值更高。

总体而言，NbTaTi 成分在三个滑移面上导致刃型位错的 LSR 最弱，而含 BCC元素的 MoNbTa 成分则使 MoNbTa 和 HfMoNbTaTi 合金中的刃型位错和螺型位错均具有最强的 LSR。相比之下，含铪、钛或锆且 HCP元素比例较高（超过 50%）的合金在所有三个滑移面上均表现出较低的螺型位错 LSR 值。具体而言，{110}、{112} 和 {123} 滑移面上螺型位错的最低 LSR 值分别出现在 HfTaTi、NbTiZr 和 HfNbTi 中。

从原子尺度模拟中获得的 LSR 值是否有效、可靠，确实取决于局部化学环境（包括溶质偏析和原子排列）对位错滑移内禀阻力的影响。关键在于，本研究的方法不依赖于任何关于“纯金属”派尔斯应力与溶质效应之间是否具有可加性或存在相互作用的先验假设。相反，我们直接根据难熔多主元合金中真实化学无序结构的原子尺度能量景观计算 LSR。在模拟中，一段短（1–2 nm）的位

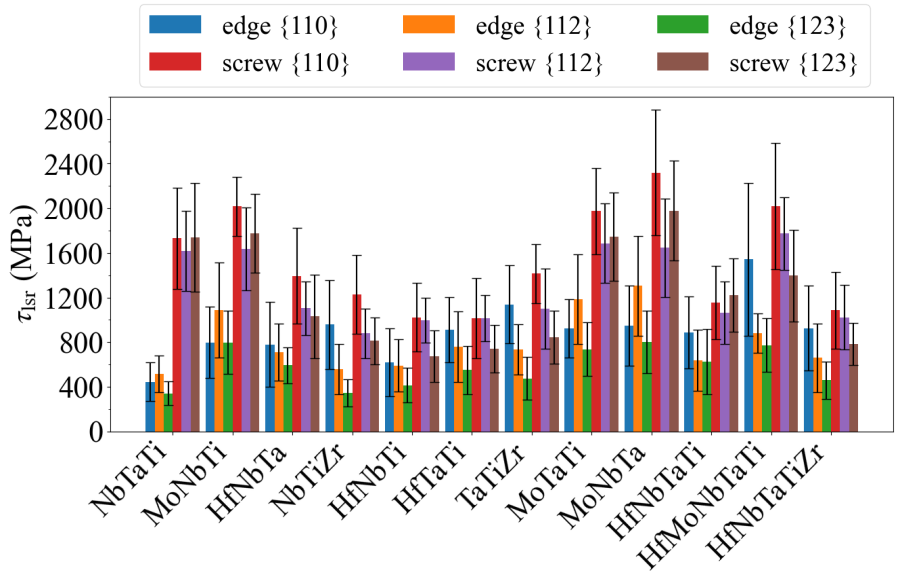


图 8：12 种难熔多主元合金中 {110}、{112} 和 {123} 滑移面的平均 LSR 值。

错线段嵌入完全随机的固溶体构型中，并针对许多不同的局部原子环境计算移动该线段所需的临界应力。因此，得到的 LSR 值分布天然涵盖了溶质原子的空间变化影响，包括局部偏析对位错线能垒的影响。由于我们明确采样了位错在随机难熔多主元合金中可能遇到的局部原子构型，因此 LSR 值可直接衡量有效的局部晶格摩擦，无需假设存在一种独立的“派尔斯应力”，再由溶质效应对其进行修正。通过这种方式，基于模拟得到的 LSR 为难熔多主元合金中的内禀滑移阻力提供了可靠且具有原子尺度依据的描述符。

3.2.2. LSR 与基本性质

基于第 3.1 小节对难熔多主元合金基本性质的分析，图中绘出了所有 12 种难熔多主元合金成分的平均 LSR 值与其晶格畸变系数（δ）、泽纳比（A_c）、不稳定层错能（γ_{usf}）和理想剪切强度（τ_{iss}）之间的关系，见图 9。为便于比较，图 (a) 和 (b) 中还加入了体心立方纯金属（钼、铌、钽）的数据点，并以派尔斯应力代替 LSR 值。如图 9(a) 所示，尽管难熔多主元合金中刃位错的晶格畸变系数（）与 LSR 值之间不存在明显的线性相关性，但螺位错的 LSR 值总体上随δ增大而降低。加入体心立方纯金属的数据（ δ）后，这一趋势更加明显。类似地，图 9(b) 显示，在难熔多主元合金中，三个滑移面上的 LSR 值均随泽纳比（A_c）增大而降低，但不同位错类型和滑移面的下降速率有所不同。加入体心立方纯金属的数据后，这一趋势仅在螺位错中仍然存在，而在刃位错中则不再存在。这一发现

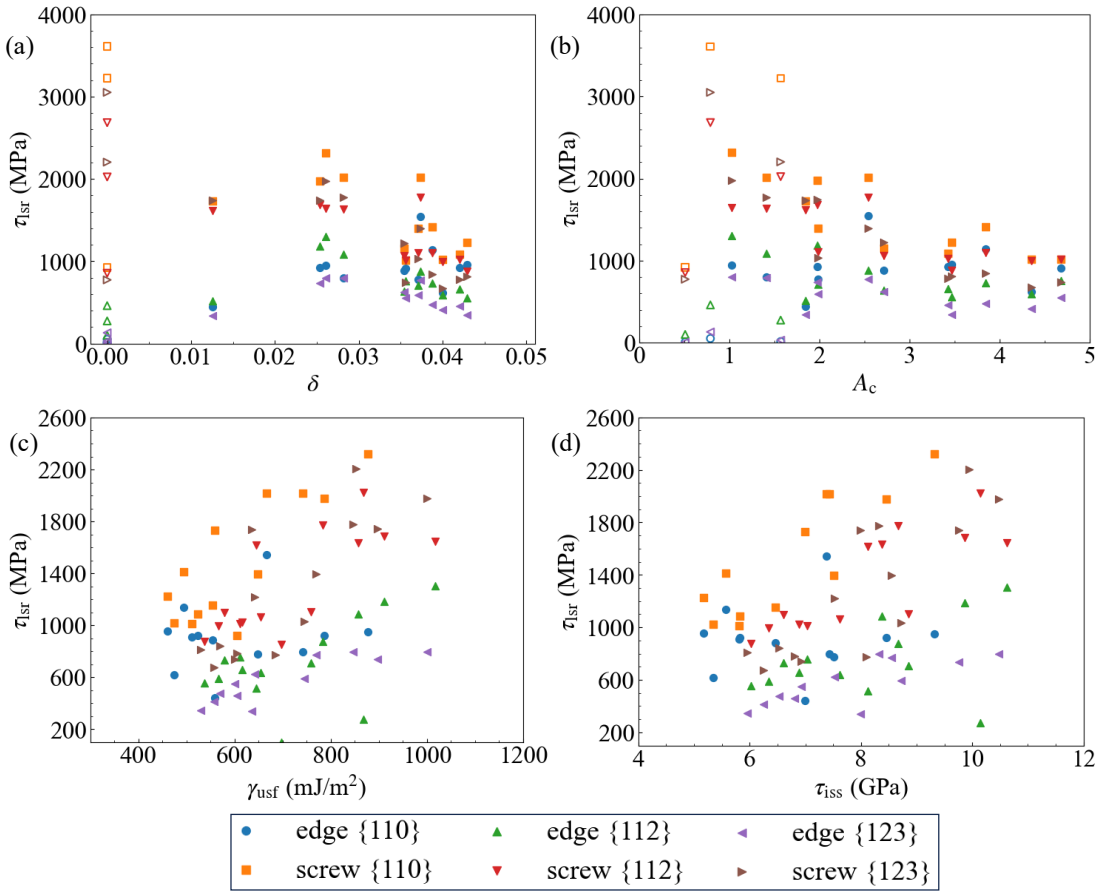


图 9：12 种难熔多主元合金中 {110}、{112} 和 {123}滑移面上的平均 LSR 分别作为 (a) 晶格畸变系数（δ）、(b) 泽纳比（A_c）、(c) 不稳定层错能（γ_{usf}）和 (d) 理想剪切强度（τ_{iss}）的函数。(a) 和 (b) 中的空心符号表示体心立方纯金属（钼、铌、钽）的数据点，此时适用的是派尔斯应力而非 LSR 值。

表明，与难熔多主元合金相比，体心立方纯金属中螺位错和刃位错的迁移机制差异更为显著。此外，如图4(b) 和 (c) 所示，在难熔多主元合金的三个滑移面上，不稳定层错能（γ_{usf}）和理想剪切强度（τ_{iss}）均与泽纳比呈负相关。因此，图 9(c) 和 (d) 显示，LSR 值与不稳定层错能和理想剪切强度均呈正相关。这表明，较高的不稳定层错能和理想剪切强度对应着较高的 LSR，凸显了除δ和A_c之外，还有多种因素会影响难熔多主元合金中的 LSR。

基于上述结果，图 8中观察到的现象——难熔多主元合金成分中HCP元素的比例超过50%后，三个滑移面上的螺型位错的LSR 值均显著降低——可以从以下几个方面进行分析。首先，

HCP元素的引入导致USFE（γ_{usf}）和理想剪切强度（τ_{iss}）降低，从而直接降低了体心立方难熔多主元合金中螺型位错运动的能垒，这与图 9（c）和（d）所示的结果一致。以LSR量化的晶格滑移阻力，本质上与滑移面的能量景观密切相关。在热激活滑移框架下，较低的 γ_{usf} 会降低位错滑移的能量代价（Romero等人，2022），这与螺型位错需要克服的较低Peierls 能垒相对应。因此，0 K下移动位错所需的临界应力降低，进而使LSR降低。同样，较低的 τ_{iss}代表可持续的最大晶格应力较低，意味着完整晶格抵抗剪切的内禀强度降低（Romero等人，2022），从而降低位错运动的临界应力。其次，图 5显示，随着HCP元素百分比上升，A_c 急剧增大，反映出立方晶体弹性各向异性的相应增强。如图 9（b）所示，三个滑移面上的LSR 值均随泽纳比（A_c）增大而呈下降趋势。因此，较高的HCP元素百分比会降低所有所考察滑移面上的LSR，这一效应同样可归因于弹性各向异性的增强。综上，这些机制联系解释了在HCP元素比例较高且富含铪、钛或锆的难熔多主元合金中观察到的螺型位错特征性较低的LSR 值。

图 9 表明，LD、泽纳比、不稳定层错能和理想剪切强度对决定 LSR 值起着重要作用。这些发现也凸显了控制难熔多主元合金中 LSR 的机制十分复杂，说明要全面理解并预测这些合金中的位错行为，必须考虑多种因素。

3.2.3. 塑性各向异性

除 LSR 外，我们还考察了塑性各向异性，其特征是不同类型 LSR 值之间的比值。如图 10 (a)所示，随着体心立方难熔多主元合金中 LD 系数（δ）增加，各滑移面上的螺型与刃型晶格滑移阻力比逐渐降低。加入体心立方纯金属的派尔斯应力数据（$\delta = 0$）后，这一趋势更加明显。由于其在 {110} 和 {123} 滑移面上的螺型与刃型派尔斯应力比极高（表 4），为便于在清晰的尺度上观察这一趋势，图 (a) 中未显示相应的数据点。具体而言，随着 δ 升高，难熔多主元合金的螺型与刃型晶格滑移阻力比从约 3–5 降至 1–2，表明随着 LD 加剧，不同类型位错之间的塑性各向异性减弱。先前的一项研究在某些难熔多主元合金的 {110} 晶面上也报告了类似的 LSR 现象（Wang等人，2024c）。在此，我们证实这一现象也适用于更高指数的晶面。严重 LD 条件下螺型与刃型 LSR 比值降低，源于刃型和螺型位错芯与化学无序晶格相互作用的方式存在根本差异。体心立方难熔多主元合金中的螺位错芯具有非平面三维结构，因此对局部剪应力场高度敏感。在难熔多主元合金中，随机原子分布会形成空间波动应力场。这种非均匀性会产生局部扭矩，为螺位错段的前进提供其他能量更低的路径，从而降低其平均临界应力。相比之下，刃位错的平面位错芯不太容易利用这些局部波动来寻找更容易通过的路径。因此，随着 LD 增加，螺型位错的阻力相较于刃型位错下降得更显著，导致螺型与刃型

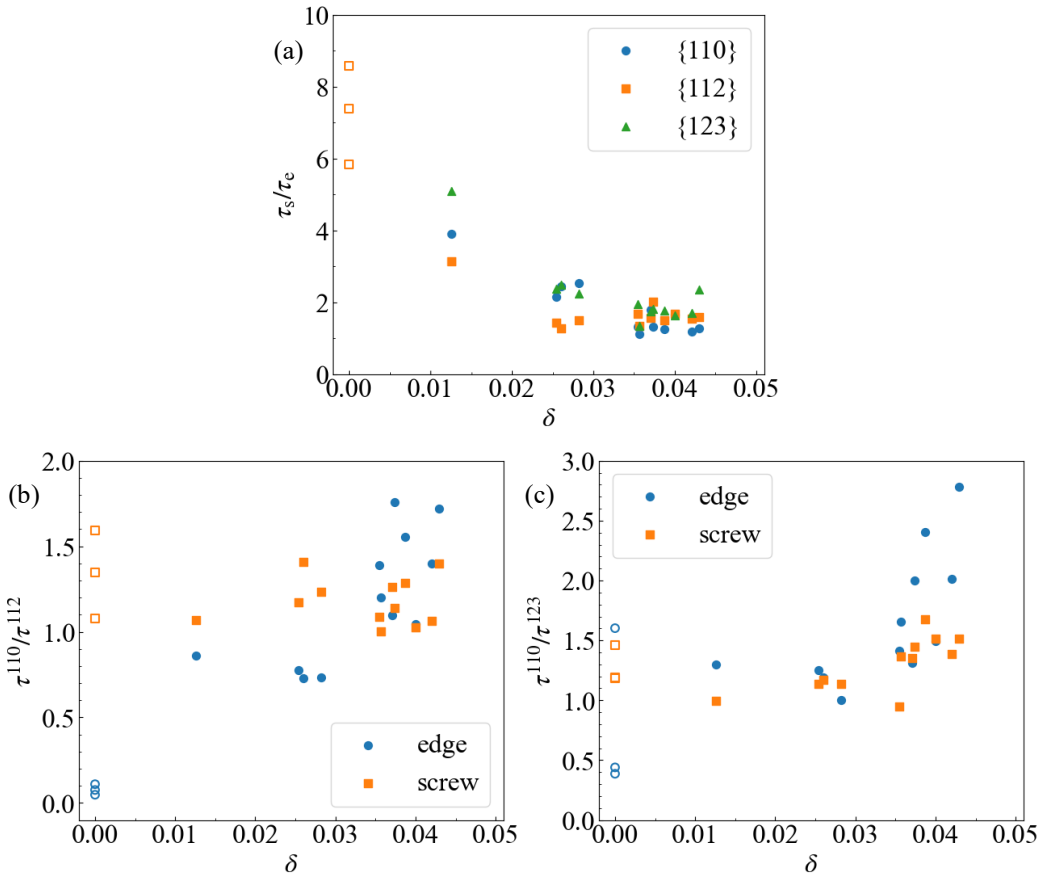


图 10：(a) 三个滑移面上的螺型与刃型晶格滑移阻力比，(b) 刃型与螺型位错的 {110} 与 {112} 的 LSR 比值以及 (b) {110} 与 {123} 的 LSR 比值，作为晶格畸变系数（δ）的函数，在 12 种难熔多主元合金中绘制。空心符号表示体心立方纯金属（钼、铌、钽）的数据点，此时适用派尔斯应力而非 LSR 值。鉴于体心立方纯金属在 {110} 和 {123} 滑移面上派尔斯应力的螺型与刃型比值极高（表 4），相应的数据点未在 (a) 中显示。

LSR 比值。

作为衡量各向异性的另一种指标，图 10(b) 展示了刃位错和螺位错的 {110} 与 {112} 的 LSR 比值。在难熔多主元合金中，随着晶格畸变系数增大，刃位错的 {110} 与 {112} 比值从约 0.7 上升至 1.8，而螺位错的比值则在 1.0 至 1.5 范围内波动。这两种趋势在体心立方纯金属中也成立（$\delta = 0$）。这表明，在晶格畸变较弱时，刃位错在 {110} 滑移面上的运动比在 {112} 滑移面上更容易被激活。然而，随着晶格畸变加剧，这一趋势会逆转，转而有利于 {112} 滑移面。要理解这种逆转，可以考察体心立方晶体中固有的滑移阻力层级，以及晶格畸变对其的调制作用。在理想的体心立方晶格中（$\delta = 0$），由于 {110} 晶面的面间距更大（$d_{110} = a/\sqrt{2}$，而 {112} 晶面为 $d_{112} = a/\sqrt{6}$）、平面原子密度更高，且沿〈111〉方向的原子形貌更平滑，刃位错（$b = a/2\langle 111\rangle$）在 {110} 晶面上的派尔斯应力低于在 {112} 晶面上的派尔斯应力。这些因素使 {110} 晶面上的能量景观更平缓，从而有利于滑移。然而，随着晶格畸变增大（以 δ量化），原子尺寸失配会随机引入原子间距和键强度的局部波动。对这类扰动更敏感的是对称性较低、面间距变化更大的 {112} 晶面。晶格畸变可能形成局部“软”通道，使面间距有效增大或抗剪阻力降低，从而降低 {112} 晶面相对于 {110} 晶面的局部 LSR。因此，在 δ较高时， {110} 晶面的固有优势会被 {112} 晶面上的无序诱导软化所克服，导致 LSR 比值逆转。相比之下，无论晶格畸变系数如何变化，螺位错在 {112} 滑移面上的激活始终略易于在 {110} 滑移面上。此外，随着晶格畸变系数增大至约 0.03，难熔多主元合金中刃位错和螺位错的 {110} 与 {123} 的 LSR 比值均在约 1.0 至 1.4 之间波动（图 10(c)）。超过这一阈值后，随着 δ进一步增大，刃位错和螺位错的比值分别迅速升至约 2.8 和 1.6。总体而言，体心立方纯金属的数据也遵循这些趋势。这表明，在难熔多主元合金的晶格畸变不大时，对于刃位错和螺位错，位错运动在 {123} 滑移面上略易于在 {110} 滑移面上被激活。随着晶格畸变加剧，这种偏好对于刃位错而言会显著增强。随着晶格畸变增大，{110} 与 {112} 以及 {110} 与 {123} 的 LSR 比值也随之增大；对此可以从不同晶体学平面上的原子堆积来理解。与原子堆积更密集的 {110} 晶面相比，{112} 和 {123} 等高指数晶面具有较低的面内原子密度（结构更“开放”），使位错能够在畸变晶格中“找到”更容易通过的路径。因此，在晶格畸变较大时，这些晶面上的滑移相对而言比 {110} 晶面更容易发生。

这些发现表明，晶格畸变系数会显著影响难熔多主元合金的塑性各向异性。具体而言，严重的晶格畸变会使更多位错在高指数滑移面上激活，尤其是刃型位错。这凸显了晶格畸变与塑性各向异性之间复杂的相互作用，也进一步表明，控制这些合金中位错行为的因素具有多面性。

4. 定量分析

上述结果与讨论表明，LSR 与难熔多主元合金的基本性质及其合金成分在定性上相关。为进一步探究这种关系，我们首先采用机器学习方法进行定量分析。此外，我们提出一种热激活位错模型，利用三种最常见滑移面——{110}、{112} 和 {123}——上的 LSR 值，定量预测拉伸屈服强度。

4.1. 机器学习分析

我们训练自编码器来重构输入数据，并使用解码器扩充有限的材料参数数据集（例如 C_{ij}、E_{coh}、a_0, 等），以便开展进一步分析。基于这个增强数据集，我们随后应用随机森林模型，揭示 LSR 与难熔多主元合金的材料本征性质及成分之间的关系。本研究选择随机森林算法进行统计和定量分析，是因为它具备若干关键优势，能够契合我们数据集的特定特征和研究目标。首先，随机森林算法能够自然地处理包含多种特征类型的数据集，无缝整合连续的材料性能（例如 C_{44}， δ）与分类成分数据。其次，该算法通过准确率平均下降值等指标提供稳健的特征重要性排序，这对于识别支配 LSR 的主要物理参数至关重要。此外，随机森林算法采用集成方法，汇总众多决策树的预测结果，因此本身具有较强的抗过拟合能力。考虑到与特征空间相比，我们通过原子模拟生成的数据集规模相对有限，这一特性尤为宝贵。机器学习分析框架如 图 11所示。

4.1.1. 自编码器模型训练

如图 11(a)所示，我们简要概述自编码器的训练流程。训练前，我们通过进行 25 次重采样迭代来扩充现有数据集，每次迭代抽取 10 个样本。随后，将所有数值重新缩放至 10^2 的量级，再进行分析。之后，我们使用预处理数据训练自编码器。其目标是重构输入数据。自编码器的训练流程可简洁地表示为：

$$\hat{\mathbf{D}} = \left(\underbrace{\mathcal{L}^{\mathbb{N}} \circ \mathcal{L}^{\mathbb{N}/2} \circ \mathcal{L}^{3}}_{\text{Decoder}} \circ \overbrace{\boldsymbol{\xi}}^{\text{Eigenspace}} \circ \underbrace{\mathcal{L}^{3} \circ \mathcal{L}^{\mathbb{N}/2} \circ \mathcal{L}^{\mathbb{N}}}_{\text{Encoder}} \right) \mathbf{D}, \tag{1}$$

其中，我们可以将$\mathbf{D} \equiv \left(\left[\delta, a_0, C_{ij} \right.$表示为整体数据，则$E_{\mathrm{coh}}, \boldsymbol{\gamma}^{i}_{\mathrm{usf}}, \boldsymbol{\tau}^{i}_{\mathrm{iss}} \left. \right], \left[\boldsymbol{\tau}^{i}_{\mathrm{lsr}} \right] \right)$为

$\hat{}\mathbf{D} \equiv \left(\left[\hat{}\delta、\ \hat{}a_0, \hat{}C_{ij}、\ \hat{}E_{\mathrm{coh}}、\ \hat{}\boldsymbol{\gamma}^{i}_{\mathrm{usf}}、\ \hat{}\boldsymbol{\tau}^{i}_{\mathrm{iss}} \right]、\ \left[\hat{}\boldsymbol{\tau}^{i}_{\mathrm{lsr}} \right] \right)$为重构数据。 $\mathcal{L}$表示编码器和解码器中的各层。 $\boldsymbol{\xi}$ 是潜在空间层，我们选择取 $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^3$。此外，我们将编码器和解码器的维度均选为 $\mathbb{N} = 256$。自编码器将材料参数压缩为潜在表示，解码器则对该表示进行解压以重构原始数据。自编码器训练 10^5 个轮次。该

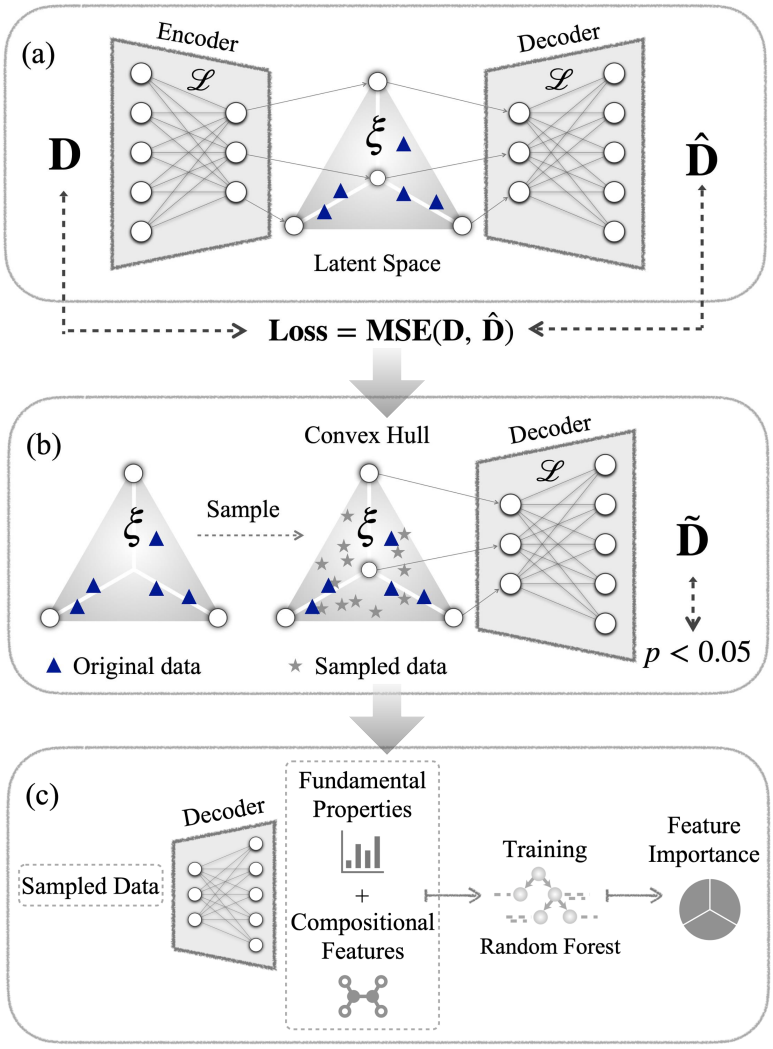


图11：机器学习分析框架示意图：(a) 自编码器模型架构，(b) 数据增强工作流程，以及 (c) 基于随机森林的特征重要性分析。

训练后的自编码器能够捕捉材料参数，并以高精度重新生成新数据，在**D** 与ˆ**D**之间达到0.99的决定系数（R^2）。这表明三个潜在维度足以捕捉整体数据结构。

4.1.2. 数据增强

自编码器模型训练完成后，我们假设潜在空间中的表示位于一个凸包内。通过对潜在空间进行采样，我们可以生成额外的数据集以进行数据增强，如图11（b）所示。用于机器学习统计

分析的参数包括 12 项基本性质（δ, a_0,C_{11},C_{12},C_{44}, E_{coh}, γ^{110} usf，γ^{112}_{usf}, γ^{123} usf，τ^{110} 理想剪切强度，τ^{112}_{iss}，以及 τ^{123} 理想剪切强度），以及 6 项成分相关特征（铪、钛、锆、铌、钼和钽）。我们从该凸包中随机采样 1000 个点，并使用训练好的解码器生成新的数据集，记为 $\tilde{D}$。随后，我们对生成的数据集进行筛选，仅保留具有统计显著结果（$p < 0.05$）的数据集；其中，p 值表示在零假设下，观测到至少与结果同样极端的数据的概率。不同材料参数之间的数据相关性见第 4.1.3 节。

4.1.3. 数据相关性

为了将难熔多主元合金的成分信息纳入由其基本性质构成的特征空间，需将合金成分分解为其组成元素。随后，根据元素的原子序数$Z(E_i)$（以合金中所有元素的原子序数之和进行归一化），将该元素在合金中的存在情况表示为加权分数（$F(E_i)$）：

$$F(E_i) = \frac{Z(E_i)/n}{\Sigma_{j=1}^{n}(Z(E_j)/n)}, \tag{2}$$

其中，n 表示合金中的元素数量，$i \in \{1,.....n\}$。

本研究的特征空间包括难熔多主元合金的十二种基本性质（δ，a_0,C_{11},C_{12},C_{44},E_{coh}，$\gamma^{110}{}_{usf}$，γ^{112}_{usf}，$\gamma^{123}{}_{usf}$，$\tau^{110}{}_{iss}$，τ^{112}_{iss}和 $\tau^{123}{}_{iss}$），以及该合金的六种成分相关特征（钛、锆、铌、钼、铪和钽）。如图2所示，广义层错能曲线中的误差线表明，标准差可以忽略不计，平均不到相应广义层错能数值的1%。鉴于观测到的离散程度极小，因此不将这种变异性视为机器学习模型的重要特征，也不将广义层错能数据的离散度作为此处的输入特征。对于所含元素少于六种的合金，将任何缺失元素的加权分数设为零，以生成成分特征。随后利用这一扩充后的特征空间进行训练，增强数据集涵盖了三种滑移面上的六类刃/螺位错。

这项机器学习分析聚焦于特征重要性，以确定在三个滑移面上显著影响刃位错和螺位错 LSR 值的基本性质或合金元素。如图11(c)所示，此处采用随机森林算法。在进行特征重要性分析之前，使用特征空间训练每个目标变量，以评估预测置信度（以R^2 分数表示）及相关不确定性。

圆形条形图的六个扇区分别展示了六个目标变量（三个滑移面上刃位错和螺位错的 LSR 值）的重要特征（图12）。特征重要性通过置换分析进行量化，其中平均准确率下降分数用于衡量各特征对目标变量的影响。图中展示了最重要的特征，即平均准确率下降分数最高的特征；每个条形的高度表示其重要性大小。

图12 表明，τ^{110}_{e}和 τ^{123}_{s}的主导特征是 γ^{112}_{usf}；对于 τ^{110}_{s}、τ^{112}_{e}和 τ^{112}_{s}，则为 δ；对于 τ^{123}_{e}，则为元素铪。当考察元素组成在

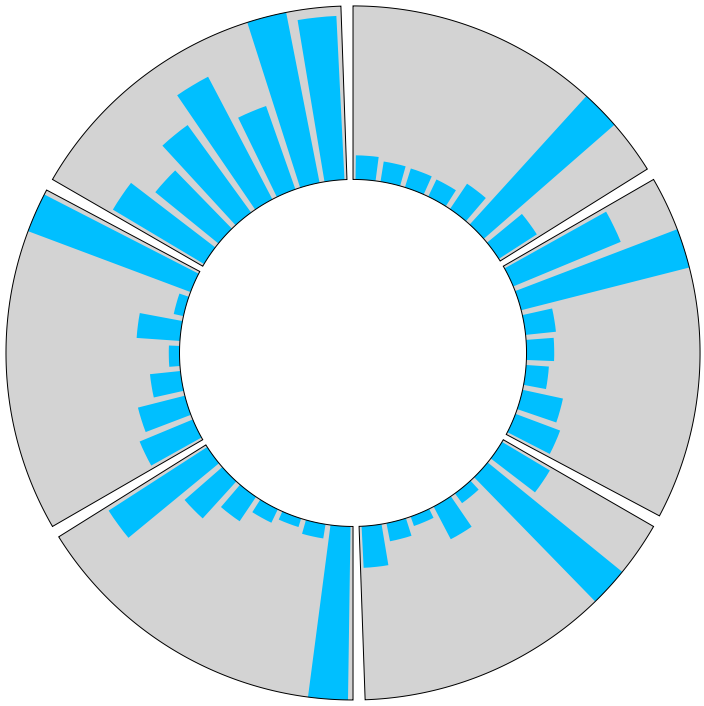


图12：针对 12 种难熔多主元合金的基本性质及合金中元素的加权分数进行的特征重要性分析，评估了六个目标变量（边位错和螺型位错在三个滑移面上的 LSR 值）。饼图中的每个扇区对应一个目标变量，条形表示按平均准确率下降分数排序的特征重要性。每个扇区内条形的高度均以特征重要性最高的条形为基准进行归一化。

合金中的影响时，元素铪的存在是影响所有LSR 值的关键因素。同样，钼或铌也发挥着重要作用，会影响除 τ_s^{110}和 τ_e^{123}之外的所有LSR 值。就基本性质而言，弹性常数C_{44} 对几乎所有LSR 值都至关重要，但 τ_s^{123}除外。晶格常数a_0 也会直接影响大多数LSR 值，但 τ_e^{110}和 τ_s^{110}除外。有趣的是，δ 被证明是所有LSR 值的决定性因素。

弹性常数C_{44} 可直接衡量材料抵抗剪切变形的能力。在原子尺度上，移动位错所需的应力（纯金属中的派尔斯应力，或难熔多主元合金中的 LSR）与剪切模量有内在联系。较高的C_{44} 意味着晶格更坚固，且沿剪切方向的原子键更强。这种增强的坚固性会提高位错滑移的能垒，因为位错芯能随剪切模量增大而升高（Hirth 和 Lothe，1982年），同时也会提高理想剪切强度（ISS）。理想剪切强度是晶格失稳前所能承受的剪切应力理论上限。 表2 显示C_{44}与 τ_{iss}大致呈正相关。因此，C_{44} 可作为滑移面的内在“硬度”的基本描述参数

，因此它是决定 LSR 的重要参数。

难熔多主元合金中的晶格畸变源于组成元素之间的原子尺寸失配。晶格畸变系数 δ通过径向分布函数量化，用于衡量这种局部原子无序的程度。晶格畸变对局部滑移阻力的主导影响可通过若干相互关联的机制来理解。晶格畸变会为位错形成空间起伏的势能场，导致不稳定层错能和 Peierls 能垒发生局部变化。位错必须穿行于这些“崎岖”的能量景观中，遭遇局部钉扎点，从而影响位错运动所需的平均应力（即局部滑移阻力）。此外，非均匀的局部原子环境会使位错芯发生不均匀畸变。对于体心立方难熔多主元合金中的螺型位错，其位错芯非平面且呈扩展状，严重的晶格畸变会进一步使位错芯结构局域化或发生改变，进而影响位错迁移率。这一点反映在图10（a）中：严重的晶格畸变会降低螺型与刃型位错局部滑移阻力比，表明其对螺位错迁移率有显著影响。此外，较大的晶格畸变 δ 会显著提高局部滑移阻力的变异系数（变异系数）（图7），证实晶格畸变是局部滑移阻力值统计离散性的主要来源。位错在不同位置所经历的起伏不定的原子环境，会导致局部阻力值范围很广，而 δ则量化了这些起伏的幅度。此外，晶格畸变对不同滑移系的影响也各不相同。图10（b-c）显示，严重的晶格畸变会提高 {110}-对{112} 和 {110}-对{123}的局部滑移阻力比，促进高指数晶面的活动。这是因为晶格畸变破坏了晶体场的对称性，改变不同晶面上的相对能垒，进而改变塑性滑移的各向异性。

铪含量因其较大的原子半径而显著影响晶格畸变。富铪成分往往会增强局部应变场并改变层错能，进而影响多个滑移系中的位错芯结构和 LSR 值。此外，广义层错能（GSFE）曲线的峰值，即不稳定层错能，与位错滑移的能垒相关。较高的不稳定层错能通常意味着晶格对滑移的阻力更大，因此，在位错运动受固有键断裂过程支配的体系中，它是影响 LSR 的主要因素。

此外，LSR 还可能取决于位错移动一个晶格周期时，其弹性应变能和芯能的变化。位错芯能和弹性应变能构成位错的形成能，这些能量通常取决于螺型/刃型特征、伯格斯矢量、弹性刚度和弹性各向异性的程度。在难熔多主元合金中，位错形成能会随位置和滑移面而显著变化。在本研究的原子尺度方法中，采用完全弛豫的位错构型作为初始态来计算 LSR。LSR 计算会自然地捕捉位错在晶格中移动时，局部原子环境内位错芯结构及其相关应变能的变化。因此，计算得到的 LSR 值已反映总能量的所有贡献，包括位错移动时芯能和线能的变化。尽管分离研究 LSR 所涉及的各个位错的形成能，并探究其与 LSR 的关系，是一项很有意义的工作，但我们认为这是未来研究的一个绝佳方向。

Table 5: The tensile properties of 7 RMPEAs reported in the literature. Grain size: d; Loading temperature: T; Strain rate: $\dot{\varepsilon}$; Yield strength: σ_{Y}.

Composition	d (μm)	T (K)	$\dot{\varepsilon}$ (s^{-1})	σ_{Y} (MPa)
NbTaTi (Wang et al., 2019)	341	300	5×10^{-4}	478
HfNbTa (Wang et al., 2019)	215	300	5×10^{-4}	847
HfNbTa (Sun et al., 2023)	17	300	1×10^{-3}	989
NbTiZr (He et al., 2023)	0.208/0.231/0.91/1.6/4.0/7.1/11.4/21.6	300	8.3×10^{-4}	1045/1042/826/876/768/754/768/745
HfNbTi (He et al., 2023)	0.512/1.253/2.215/2.428/7.13/8.86/19.24	300	8.3×10^{-4}	909/783/763/794/739/714/730
HfTaTi (He et al., 2023)	0.788/1.121/1.765/3.474/5.658/12.125	300	8.3×10^{-4}	976/928/926/862/828/808
HfNbTaTi (Wang et al., 2019)	340	300	5×10^{-4}	663
HfNbTaTi (Sun et al., 2023)	27	300	1×10^{-3}	843
HfNbTaTi (He et al., 2023)	0.344/0.511/1.603/2.076/4.399/6.908/9.43	300	8.3×10^{-4}	1114/1108/944/890/880/923/839
HfNbTaTiZr (Mills et al., 2023)	100	300/1073/1473	1×10^{-2}	964/444/30
HfNbTaTiZr (Juan et al., 2016)	38/81/128	300	1×10^{-3}	958/944/940
HfNbTaTiZr (Chen et al., 2021)	40	673/773/823	1×10^{-3}	817/819/734
HfNbTaTiZr (Chen et al., 2021)	40	573/673/723/773	2×10^{-4}	806/735/689/698
HfNbTaTiZr (Chen et al., 2021)	40	573/673/723/773	5×10^{-5}	854/759/718/722

4.2. 屈服强度模型与 *LSR* 的比较

4.2.1. 现有实验数据

LSR 的概念对于理解难熔多主元合金的强度至关重要；然而，LSR 适用于纳米尺度，而强度是在宏观尺度上测量的。为弥合长度尺度差距并将 LSR 与材料强度联系起来，我们尽可能收集了原子尺度计算中所研究难熔多主元合金的拉伸屈服强度实验数据。这里我们只关注拉伸屈服强度，而非压缩屈服强度，因为难熔多主元合金的拉伸性能更直接地反映了现实应用对抗断裂性、延展性和高温稳定性的需求。如表5所汇总，这些数据涵盖了多种难熔多主元合金（NbTaTi、HfNbTa、NbTiZr、HfNbTi、HfTaTi、HfNbTaTi 和 HfNbTaTiZr），晶粒尺寸范围广泛（从数百纳米到数百微米），温度范围为 300 K 至 1473 K，应变速率范围为（5×10^{-5} s^{-1} 至 1×10^{-2} s^{-1}）。测得的拉伸屈服强度从数十兆帕到数千兆帕不等。此外，对于在相同条件下测试的给定多主元合金成分，增大晶粒尺寸或升高温度通常会导致拉伸屈服强度下降。

4.2.2. 与解析模型的比较

在难熔多主元合金中，位错运动受热能、施加应力和 LSR（类似于纯金属中的派尔斯应力）之间相互作用的支配。热激活位错运动通过克服能垒而进行，施加应变率 $\dot{\varepsilon}$ 可通过类阿伦尼乌斯方程与绝对温度T 以及局部位错运动的激活焓 ΔH 相关联（Lim 等人，2015年）：

$$\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{k_B T}\right), \tag{3}$$

其中， $\dot{\varepsilon}_0$ 和 k_B 分别为参考应变率和玻尔兹曼常数。对于体心立方难熔多主元合金， $\dot{\varepsilon}_0$ 通常取为 10^4 s^{-1} （Ghafarollahi 和 Curtin，2022；He 等，2023年）。本研究考虑了 {110}、 {112} 和 {123}滑移面上的刃位错和螺位错，共六种类型。这些位错标记为（i = 1、2、...、5、6），其中（1） {110} 滑移面上的刃位错；（2） {110}滑移面上的螺位错；（3）{112} 滑移面上的刃位错；（4） {112} 滑移面上的螺位错；（5） {123}滑移面上的刃位错；以及（6） {123} 滑移面上的螺位错。对于弹性交互作用或线张力激活焓模型，激活焓通常写为（Kocks 等人，1975年）：

$$\Delta H_i(\tau) = \Delta H_{0,i}\left(1 - \left(\frac{\tau_i}{\tau_{\mathrm{lsr},i}}\right)^p\right)^q, \tag{4}$$

其中 $\Delta H0_{,i}$、 τ_i 和 $\tau_{\mathrm{lsr},i}$ 分别表示第i_{th} 条位错局部运动的平均能垒、施加的分解剪应力以及第i_{th} 条位错的平均 LSR 值。指数 p 和 q 控制能垒的形状，通常满足 $0 \leqslant p \leqslant 1$ 和

$1 \leqslant q \leqslant 2$。对于体心立方难熔多主元合金，通常使用 $p = 1$ 和 $q = 3/2$（Ghafarollahi 和 Curtin，2022；Kubilay 等人，2021年）。将 方程 3 与 方程 4 相结合，可以推导出

$$\tau_i = \tau_{\mathrm{lsr},i}\left(1 - \left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\Delta H_{0,i}}\ln\frac{\dot{\varepsilon}_0}{\dot{\varepsilon}}\right)^{\frac{2}{3}}\right). \tag{5}$$

实验结果表明，在体心立方难熔多主元合金中，位于 {110}、 {112}和 {123} 滑移面上的刃型位错和螺位错均会共同影响整体屈服行为（Wang等人，2020年）。因此，可以使用 Hall–Petch 型方程估算屈服应力：

$$\sigma_{\mathrm{Y}} = K_{\mathrm{HP}}\, d^{-\frac{1}{2}} + M\sum_{i=1}^{6}\tau_i a_i, \tag{6}$$

其中，K_{HP} 为 Hall–Petch 系数，fi为平均晶粒尺寸，d ，M 为 Taylor 因子（体心立方难熔多主元合金通常取 2.733（Ghafarollahi 和 Curtin，2022；He 等人，2023年）），而a_i表示依赖于滑移系的交互作用系数（fi（$i = 1, \ldots, 6$）。

不同于将a_i视为常数的传统假设，这里利用高斯过程回归将交互作用系数建模为依赖于具体情境的量。这种方法更具优势，因为它能够捕捉位错交互作用随热机械条件变化而呈现的复杂非线性依赖关系，而不局限于单一的平均行为。具体而言，交互作用系数fi a_i（ζ）构造成一个包含 6 个元素的向量a（ζ），其取决于局部情境向量 $\zeta = [T、\ \dot{\varepsilon}、\ d],$，以捕捉温度、应变率和晶粒尺寸对位错交互作用的影响。其构造示意图见图13。

He其中，输入上下文向量为 $\zeta = [T、\ \dot{\varepsilon}、d]$。高斯协方差核定义为 s:

$$k(\zeta,\zeta') = \tilde{\sigma}^2\exp\left(-\frac{1}{2}\sum_{m=1}^{3}\frac{(\zeta_m - \zeta'_m)^2}{\ell_m^2}\right), \tag{7}$$

其中，$\tilde{\sigma}^2$ 为核方差，$\mathrm{l} = (\mathrm{l}_1, \mathrm{l}_2, \mathrm{l}_3) = (\mathrm{l}_T, \mathrm{l}_{\dot{\varepsilon}}, \mathrm{l}_d)$ 为自动相关性确定（ARD）长度尺度，分别对应温度 T、应变率 $\dot{\varepsilon}$ 和晶粒尺寸d。 ζ 和 ζ' 表示两个不同的上下文向量，$k(\zeta,\zeta')$则量化相应材料及其加载条件（T、 $\dot{\varepsilon}$、d）之间的相似性。核$k(\zeta,\zeta')$可使用随机傅里叶特征（RFF）近似：

$$k(\zeta,\zeta') \approx \phi(\zeta)^{\top}\phi(\zeta'), \tag{8}$$

其中 $\phi(\zeta) = \sqrt{2/D}\cos(W\zeta + b)$。矩阵$W = W_{\mathrm{base}}\,\mathrm{diag}(\mathrm{l}^{-1})$的构造使得$W_{\mathrm{base}} \in \mathbb{R}^{D\times 3}$ 具有从$\mathcal{N}(0,1)$采样的独立同分布元素，并且在第d_{th} 行，$W_d \sim \mathcal{N}(0, \mathrm{diag}(\mathrm{l}^{-2}))$表示采样频率，这些频率抽取自均值为零、协方差为$\mathrm{diag}(\mathrm{l}^{-2})$的多元正态分布。缩放因子$\mathrm{diag}(\mathrm{l}^{-1})$对采样频率施加ARD加权。向量$b \sim \mathcal{U}(0, 2\pi)$包含所抽取的随机相位

来自 $[0, 2\pi)$上的均匀分布。ARD长度尺度l控制模型对每个输入维度的敏感度：较小的l_m会提高对第m_{th} 个输入的敏感度，而较大的l_m则会降低该敏感度。随后对 $\phi(\zeta)$施加线性变换 $\eta = \text{Lin}(\phi(\zeta))$，产生与滑移系对应的六个独立分量。最后，通过施加Sigmoid激活函数将各分量限制在$(0, 1)$内，得到完整的相互作用向量$a(\zeta) = [a_i(\zeta)]$ 。

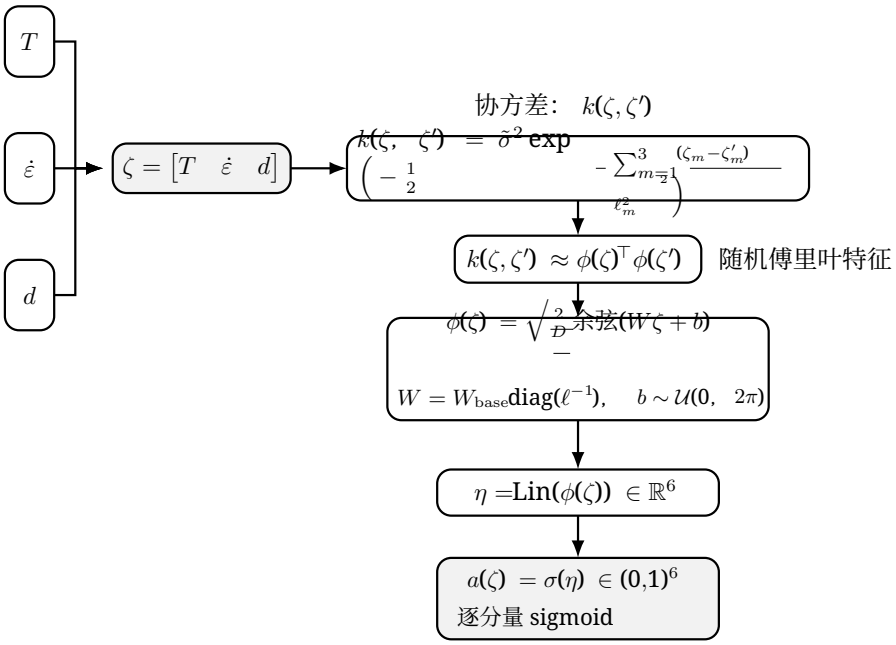


图13：示意图展示了如何通过高斯过程回归，将相互作用系数 a_i 建模为依赖于上下文的量。符号 $a(\zeta)$ 和 $a_i(\zeta)$ 可互换使用，其中 $a(\zeta) = [a_i(\zeta)]$ 定义了二者之间的关系。整体输入和输出以灰色标示。

通过这一扩展，体心立方难熔多主元合金屈服强度的理论表达式变为

$$\sigma_{\text{Y}} = K_{\text{HP}}\, d^{-\frac{1}{2}} + M \sum_{i=1}^{6} \tau_{\text{lsr},i} \left[1 - \left(\frac{k_{\text{B}} T}{\Delta H_{0,i}} \ln \frac{\dot{\varepsilon}_0}{\dot{\varepsilon}} \right)^{\frac{2}{3}} \right] a_i(\zeta). \tag{9}$$

此处，LSR（$\tau_{\text{lsr},\ i}$）是指在 0 K 下移动位错所需的非热应力。它决定了强度的上限。LSR 越高，潜在的强化能力越强。方括号中的项 $[1 - (...)^{2/3}]$ 表示热辅助效应。随着温度 T 升高，该项减小，从而降低了移动位错所需的有效应力 τ_i ，而这部分应力由外加载荷提供；尽管 $\tau_{\text{lsr},\ i}$ 本身保持不变。表5中的实验数据 表明，强度随温度升高而降低，这是热激活效应压过非热晶格摩擦的典型表现。高 LSR 能提高整体强度上限，因此值得追求，

热激活因子随温度升高而衰减得更快。因此，表5中 σ_Y 随 T 变化的趋势 表5 与高 LSR 相符。

通过对方程 9 拟合综合实验数据（σ_Y、d、T、 $\dot{\varepsilon}$）和原子尺度输入（τ_{lsr}、$_i$），可以确定模型参数（K_{HP}、 $\Delta H0$、$_i$以及核化分布 $a_i(\zeta)$）。校准完成后，该模型能够在宽范围的晶粒尺寸、温度和应变速率下提供预测能力，从而可与实验屈服应力进行直接比较。该模型中的温度依赖性通过两种主要机制被显式纳入。首先，方程 5 中的热激活项刻画了施加的分解剪应力 τ_i 随温度 T 升高而发生的基本降低。其次，该模型通过上下文相关系数 $a_i(\zeta)$ 考虑热条件对位错交互作用的影响；这些系数被表述为温度 T 的函数，并同时与应变率 $\dot{\varepsilon}$ 和晶粒尺寸 d 相关。

我们的热激活框架与针对螺位错控制塑性建立的模型具有共同的基本物理基础，例如 Curtin 等人提出的模型（ Maresca 和 Curtin，2020 年；Ghafarollahi 和 Curtin，2022）。两种框架都将屈服描述为遵循阿伦尼乌斯定律的应力辅助热激活过程，其中位错运动的能垒因施加应力而降低。关键区别在于所考虑的具体机制和位错。Curtin 等人建立的框架（Maresca 和 Curtin，2020年；Ghafarollahi 和 Curtin，2022）建立在随机合金中自发扭折螺位错的概念之上。合金强度由这些本征扭折的滑移以及交叉扭折在 {110} 面上的脱钉所控制。相比之下，我们的模型明确纳入了三个主要滑移面上刃位错和螺型位错的共同贡献（{110}，{112}，{123}）。在我们的表述中，激活焓与 LSR 直接相关；LSR 是一个统计分布量，用于刻画由化学无序和晶格畸变引起的原子尺度阻力。该表述使模型能够考虑高指数面上的刃位错对屈服有显著贡献的情形，这在化学成分复杂的难熔多主元合金中尤为相关。

图14将方程 9 的理论预测值与七种难熔多主元合金的实验测得屈服强度进行了比较。尽管实验数据来自不同实验室的不同研究，但预测值与测量值吻合良好。此处使用表5中列出的所有实验屈服强度数据来校准模型参数。这包括拟合合金特定的 Hall–Petch 系数 K_{HP}、所考虑位错类型对应的六个平均激活焓$\Delta H0,_i$ ，以及上下文相关交互核的超参数。通过最小化均方误差，将方程 9 拟合到整个数据集。具体而言，损失函数定义为实验测得的屈服强度与模型预测值之间差值的平方和。鉴于此处研究的特定难熔多主元合金成分可用实验数据点相对有限，我们使用完整数据集进行校准，以确保参数估计稳健，同时也承认这无法进行正式的留出验证。该模型具有很强的物理信息驱动特征，拟合得到的参数$\Delta H0,_i$ 和 K_{HP}分别列于表 A.1 和 A.2 中，且均处于物理上合理的范围内（He 等，2023）。我们将这一框架视为一种经过校准的预测工具，可用于所研究条件范围内的插值。未来，随着更大规模数据集的积累，将能够进行严格的样本外

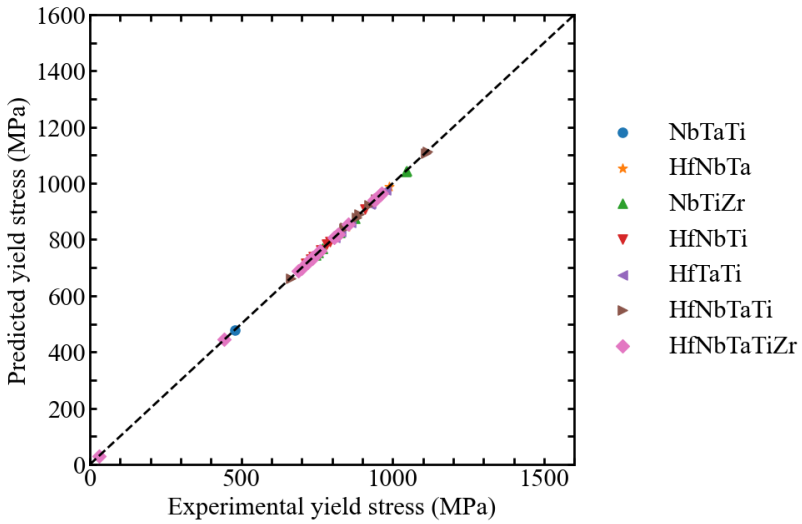


图14：七种难熔多主元合金理论屈服强度预测与实验测量值的比较。

测试。

如图 A.1所示，当将六个相互作用系数 a_i（见方程 9）设为单一参数，而非依赖上下文的函数时，预测准确度会显著下降，尽管结果仍与实验数据基本吻合。这一结果可以理解，因为不同加载条件下，不同合金体系中不同滑移面上的不同类型位错之间的相互作用过于复杂，无法通过六个恒定的相互作用系数充分描述。作为替代方案，基于高斯过程的依赖上下文的函数形式可确保$a_i(\zeta)$ 随T、 $\dot{\varepsilon}$和d平滑变化，从而降低过拟合风险。

根据 表 A.1 和 表 4中的数据可以观察到，激活焓（ΔH_0）与不同位错类型和滑移面上的 LSR 值之间存在复杂且不均匀的相关性。这一趋势源于二者共同受本征晶格摩擦和位错芯结构的影响。较高的 ΔH_0 值表明位错运动的能垒较高，通常意味着引发塑性变形所需的 LSR 也较高。例如，在 NbTaTi 合金中，位于 {110} 面上的螺位错具有较高的 ΔH_0（4.3317 eV），且 LSR 也相应较高（1731.11 兆帕），证实其具有很强的滑移阻力。相反，较低的 ΔH_0 值通常对应较低的 LSR 值，例如 NbTaTi 合金中位于 {123} 面上的刃位错（1.9835 eV），其 LSR 值较低（340.94 兆帕），表明位错迁移率更高。然而，这种相关性并非在所有体系中都严格呈线性关系。HfNbTaTiZr 合金便是一个例子：其位于 {112} 面上的刃型位错具有最高的 ΔH_0 值（5.9575 eV），但 LSR 仅处于中等水平（659.58 兆帕），这反映出局部化学环境、固溶强化效应，以及不同难熔多主元合金中位错芯响应随合金成分变化而产生的复杂影响。

这些合金通过理论拟合得到的霍尔-佩奇系数 K_{HP} 列于表 A.2，范围为 150.30 至 186.23 兆帕 $\cdot\ \mu m^{-0.5}$，与实验结果一致（He 等，2023）。值得注意的是，对于任何特定的位错类型，K_{HP} 与平均本征滑移阻力参数（ΔH_0 或 LSR）之间都不存在直接相关性。例如，HfTaTi 的 K_{HP} 最高，为 186.23 兆帕 $\cdot\ \mu m^{-0.5}$，但其 ΔH_0 处于中等水平（刃位错的范围为 1.7027 至 3.2618 eV，螺位错的范围为 2.1156 至 4.0068 eV），平均 LSR 值也处于中等水平（刃位错的范围为 549.66 至 912.06 兆帕，螺位错的范围为 740.18 至 1013.25 兆帕）。这表明，当本征晶格摩擦并非极高时，晶界可能成为阻碍位错运动的相对有效屏障，从而增强霍尔-佩奇强化的贡献。因此，K_{HP} 的变化很可能受复杂的晶界相关因素支配，例如位错形核、传递以及滑移系各向异性，而非仅由位错滑移的本征性能决定。

这一发现表明，热激活位错模型能够在宽广的晶粒尺寸、温度和应变速率范围内，准确描述体心立方难熔多主元合金的屈服行为。与体心立方纯金属不同，在体心立方纯金属中，螺型位错主要控制塑性变形（Lim 等人，2015年），在体心立方难熔多主元合金中，最常见滑移面上的刃型和螺型位错（{110}，{112}，{123}）共同控制变形机制。因此，所提出的模型为理解和预测体心立方难熔多主元合金的屈服强度提供了可靠框架，有助于其在各种应用中的设计与优化。尽管人们认识到，传统 EAM 势在描述某些体心立方金属中的螺位错芯时存在局限性，但本研究采用的原子间势（Mubassira 等人，2025）专为难熔多主元合金开发，并通过层错能和弹性常数的密度泛函理论（DFT）数据进行了验证，从而为计算得到的 LSR 提供了可靠的原子尺度基础。更重要的是，方程 9所表达的热激活框架并不依赖于特定的原子间势；它以通用的位错尺度参数（LSR、激活焓和相互作用系数）为基础构建。如果获得了更准确的 LSR 值，无论这些值来自基于密度泛函理论的弹性带推挤计算，还是来自改进的机器学习势，都可以直接用于方程 9 而无需改变模型结构。只要底层的位错介导屈服机制仍然成立，这种方法就能推广至其他合金体系以及精度更高的数据。

4.3. 对合金设计的启示

本研究获得的认识为设计具有优异力学性能的下一代难熔多主元合金确立了一条清晰且基于机制的路径。核心设计理念是在保持足够塑性通道的同时，最大化合金对位错滑移的本征抗力。这可通过战略性化学设计来实现高且空间均匀的LSR，从而直接针对我们机器学习分析所识别的关键描述符：剪切模量（C_{44}）、晶格畸变系数（δ）以及特定元素的加权分数。

具体而言，这导向一种多管齐下的策略。首先，应通过引入原子尺寸失配较大的元素（例如铪和铌）来最大化严重晶格畸变，从而提高塑性。其次，可将其与高比例的HCP元素（以获得延展性）以及钼、钽等强BCC元素战略性地结合，以提升关键本征性能（例如C_{44},、不稳定层错能、理想剪切强度），从而形成具有高局部应变响应的BCC基体，并进而获得较高的本征强度上限。第三，尽管本研究聚焦于单相BCC合金，仍可引入热稳定的共格或半共格二次相（例如B2相、拉弗斯相），通过析出机制提供额外的非热强化并钉扎晶界，从而以霍尔-佩奇晶粒细化补充基体强度。

为高效实施该策略，本工作所建立的原子尺度信息驱动的数据驱动框架为成分选择与性能预测提供了实用工具。我们的模型构建了一种强有力的闭环设计范式。设计者可首先将已识别的描述符（C44、 δ、元素比例）作为定量目标，用于候选成分的高通量计算筛选。对于最具潜力的候选成分，可通过既定模拟方案确定关键原子尺度输入参数（例如 LSR 值）。随后将这些参数输入热激活屈服强度模型，以预测其在广泛热机械条件（T、 $\dot{\varepsilon}$、d）下的宏观性能。最后，对合成合金的实验验证可提供新数据，用于迭代提升模型精度，从而形成良性循环，加速发现在不牺牲延展性的前提下实现优异高温强度的合金。

5. 结论

在本工作中，我们开展原子尺度模拟，计算了12种难熔多主元合金中刃位错和螺型位错在三个最常见滑移面（{110}、 {112}、{123}）上的局部滑移阻力，并确定了这些多组元合金的基本性质。我们采用机器学习方法分析这些 LSR 值与难熔多主元合金基本性质之间的关系。随后，建立了热激活位错模型，用以预测难熔多主元合金在宽范围晶粒尺寸、温度和应变速率下的屈服应力。主要发现总结如下:

- 成分中密排六方元素的比例较高（超过 50%）会降低体心立方难熔多主元合金的不稳定层错能（USFE）和理想剪切强度（ISS）。此外，弹性各向异性增强（表现为泽纳比升高）也会降低 USFE 和 ISS。

- 体心立方难熔多主元合金中的局部应变响应受多种因素影响。泽纳比增加，同时不稳定层错能和理想剪切强度降低，会使 LSR 值减小。此外，含铪、钛或锆且 HCP 元素含量超过 50% 的合金，在所有三个滑移面上的螺型位错均表现出较低的 LSR 值。

- 当 $\delta > 0.03$ 时，严重的晶格畸变会降低螺型与刃型位错局部滑移阻力比，但会提高 {110}-to-{112} 和 {110}-to-{123} 的 LSR 比值，从而影响塑性各向异性 y 在这些合金中。

- 合金成分中铪的存在会显著影响三个滑移面上刃型位错和螺位错的 LSR 值，而钼或铌则会影响几乎所有 LSR 值，唯独不影响 τ^{110}s 和 τ^{123}e。

- 弹性常数$C44$、晶格畸变和晶格常数 $a0$ 始终是影响位错 LSR 值的重要参数。

- 采用热激活位错模型，可有效预测体心立方难熔多主元合金的宏观屈服强度；该模型考虑了最常见滑移面（{110}、{112}、{123}）上的刃型位错和螺位错。这证实，低指数和高指数滑移面上的各种位错类型共同决定了体心立方难熔多主元合金的屈服行为。

数据和代码可用性

支持本研究的数据和代码可通过以下网址公开获取：https://github.com/wrj2018/LSR_2024。

致谢

本研究使用了由美国国家科学基金会资助（编号：CNS-1725797）购置并由科学计算中心（CSC）管理的计算设施。CSC 得到了加州纳米系统研究所和加州大学圣塔芭芭拉分校材料研究科学与工程中心（MRSEC；NSF DMR 2308708）的支持。S.X. 感谢美国国家科学基金会（DMREF-2522655）的资助。X.Y. 感谢国家自然科学基金委员会（编号：12232006）的资助。W.J. 感谢国家自然科学基金委员会（编号：U2441214）的资助。

附录 A。

表 A.1：拟合得到的局部运动平均能垒 $\Delta H_{0,\,i}$（单位：eV），适用于i_{th}型位错在方程 9中的运动。这些位错标记为（i = 1，2，……，5，6），其中（1）为滑移面上的刃位错，（2）为滑移面上的螺位错，（3）为滑移面上的刃位错，（4）为滑移面上的螺位错，（5）为滑移面上的刃位错，（6）为滑移面上的螺位错。

成分	$\Delta H_{0,1}$	$\Delta H_{0,2}$	$\Delta H_{0,3}$	$\Delta H_{0,4}$	$\Delta H_{0,5}$	$\Delta H_{0,6}$
NbTaTi	4.0704	4.3317	2.7891	3.6344	1.9835	2.7206
HfNbTa	3.2532	2.9563	3.8605	2.8993	3.5755	2.3528
NbTiZr	4.2213	5.6719	3.2275	3.6783	2.9467	3.3532
HfNbTi	5.2102	1.7932	2.2484	2.3665	4.8176	3.2876
HfTaTi	2.6356	2.1156	1.7027	2.3867	3.2618	4.0068
HfNbTaTi	2.6496	3.5209	3.2088	3.1779	2.2332	2.7168
HfNbTaTiZr	5.3470	3.0537	5.9575	1.6802	2.9012	1.6174

表 A.2：拟合的霍尔-佩奇系数 K_{HP} (单位：兆帕 $\cdot\mu m^{-0.5}$) 对应方程 9。

	NbTaTi	HfNbTa	NbTiZr	HfNbTi	HfTaTi	HfNbTaTi	HfNbTaTiZr
K_{HP}	171.16	177.00	150.30	165.24	186.23	154.29	160.98

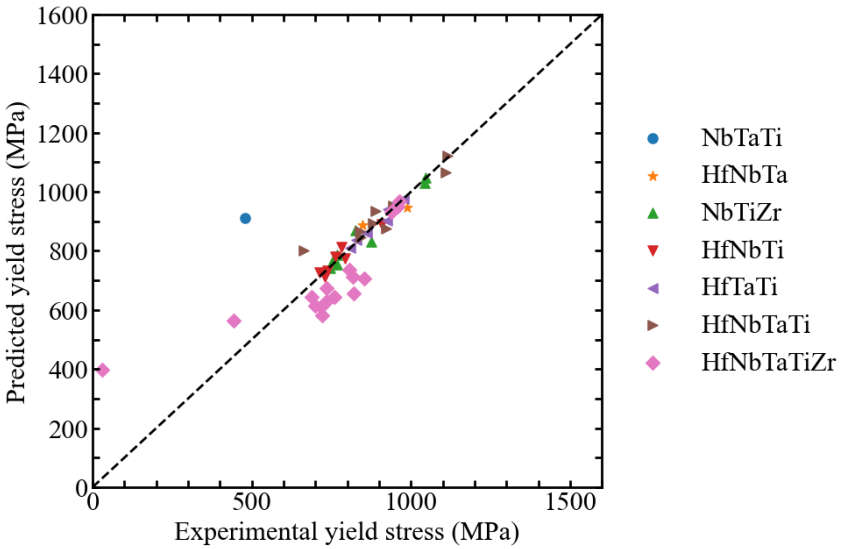


图 A.1：六个相互作用系数被设为$_i$ 方程 9 中的单一参数而非依赖上下文的函数时，七种难熔多主元合金理论屈服强度预测与实验测量值的比较。

参考文献

Peter M Anderson、John P Hirth 和 Jens Lothe。《style id='1'>位错理论。剑桥大学出版社，2017年。Shuying Chen、Weidong Li、Fanchao Meng、Yang Tong、Hua Zhang、Ko-Kai Tseng、Jien-Wei Yeh、Yang Ren、Fei Xu、Zhenggang Wu 等。HfNbTaTiZr高熵合金中流变锯齿的温度和应变速率依赖性。《style id='3'>《材料科学快报》，200：113919，2021年。Jaehyun Cho、Jean-François Molinari 和 Guillaume Anciaux。面心立方铝中不同位错特征角和温度下的位错迁移率定律。《style id='5'>Int. J. Plast.，90：66–75，2017年。

Junyi Feng、Binghao Wang、Yintao Zhang、Peilei Zhang、Changxi Liu、Xiaoli Ma、Kuaishe Wang、Lechun Xie、Ning Li 和 Liqiang Wang。采用激光粉末床熔融技术制备的 Ti-Ta-Nb-Mo-Zr 难熔高熵合金的高温蠕变机制。《style id='1'>Int. J. Plast.，181：104080，2024年。

Alireza Ghafarollahi 和 William A Curtin。体心立方非稀释合金和高熵合金的螺型位错控制强度。*Acta Materialia*，226:117617，2022。

Qian He、Shuhei Yoshida 和 Nobuhiro Tsuji。体心立方难熔高熵/中熵合金中的特征强化机制。《材料科学快报》，231:115442，2023。

JP Hirth 和 J Lothe。位错理论。威立，1982年。

Dongpeng Hua、Qing Zhou、Yeran Shi、Shuo Li、Ke Hua、Haifeng Wang、Suzhi Li 和 Weimin Liu。揭示 ⟨110⟩ CoCrNi中熵合金中对称倾斜晶界的变形机制。*Int. J. Plast.*，171:103832，2023年。

Wei Jian 和 Lu Ren。HfNbTaTiZr难熔高熵合金取向依赖塑性变形的研究：原子尺度考察。*Int. J. Plast.*，173:103867，2024年。

Wu-Rong Jian、Zhuocheng Xie、Shuozhi Xu、Yanqing Su、Xiaohu Yao 和 Irene J Beyerlein。晶格畸变和化学短程有序对 CoCrNi中熵合金变形机制的影响。*Acta Materialia*，199:352–369，2020年。

Wu-Rong Jian、Min Zhang、Shuozhi Xu 和 Irene J Beyerlein。铜中刃位错的动力学及其与空洞相互作用的原子尺度模拟：一项比较研究。《材料科学与工程建模与仿真》，28(4):045004，2020年。

Wu-Rong Jian、Shuozhi Xu 和 Irene J Beyerlein。模型设计对于铌中派尔斯应力原子尺度计算的重要性。《计算材料科学》，188:110150，2021年。

RA Johnson. 嵌入原子法合金模型。*Phys. Rev. B*，39(17):12554，1989年。

Chien-Chang Juan、Ming-Hung Tsai、Che-Wei Tsai、Wei-Lin Hsu、Chun-Ming Lin、Swe-Kai Chen、Su-Jien Lin 和 Jien-Wei Yeh. 通过晶粒细化同时提高难熔高熵合金的强度和延展性。*Materials Letters*，184:200–203，2016年。Keonwook Kang、Vasily V Bulatov 和 Wei Cai. 体心立方晶体中位错的特殊取向和分面运动。美国国家科学院院刊，109(38):15174–15178，2012年。Ulrich Fred Kocks、Argon As 和 Ashby Mf. 滑移的热力学与动力学。*Progress in Materials Science*，19:1–289，1975年。RE Kubilay、A Ghafarollahi、F Maresca 和 WA Curtin. 体心立方高熵合金中刃位错运动的高能垒。*npjComput. Mater.*，7(1):112，2021年。Chanho Lee、Yi Chou、George Kim、Michael C Gao、Ke An、Jamieson Brechtl、Chuan Zhang、Wei Chen、Jonathan D Poplawsky、Gian Song 等. 难熔高熵合金中晶格畸变增强的屈服强度。*Advanced Materials*，32(49):2004029，2020年。Qing-Jie Li、Howard Sheng 和 Evan Ma. 局部化学有序使位错路径粗糙化，从而强化多主元合金。*Nature Communications*，10:3563，2019年。Hojun Lim、LM Hale、JA Zimmerman、CC Battaile 和 CR Weinberger. α-Fe 中位错塑性的多尺度模型：纳入温度、应变率和非施密德效应。*Int.J.Plast.*，73:100–118，2015年。Changxi Liu、Yingchen Wang、Yintao Zhang、Lai-Chang Zhang 和 Liqiang Wang. 增材制造的 TiNbTaZrMo 难熔高熵合金的变形机制：胞状结构的作用。*Int. J. Plast.*，173:103884，2024年。AV Lunev、SV Starikov、TN Aliev 和 VI Tseplyaev. 理解 UO2 中 1/2⟨110⟩ {110} 螺位错的热激活滑移：分子动力学分析。*Int. J. Plast.*，110: 294–305，2018年。Francesco Maresca 和 William A Curtin. 难熔体心立方高熵合金在高达 1900K 时高强度的机理起源。*Acta Materialia*，182:235–249，2020年。Francesco Maresca 和 William A Curtin. 从稀合金到“高熵”合金的随机体心立方合金螺型位错强化理论。*Acta Materialia*，182:144–162，2020年。Yang Meng、Xinhua Ju 和 Xiaopeng Yang. 使用透射电子显微镜测量位错密度。*Mater. Charact.*，175:111065，2021年。Leah H Mills、Megan G Emigh、Carolina H Frey、Noah R Philips、Sean P Murray、Jungho Shin、Daniel S Gianola 和 Tresa M Pollock. HfNbTa-TiZr 多主元合金的温度依赖拉伸行为。*Acta Materialia*，245:118618，2023年。

Yang Mo、Yanxiang Liang、Wei Guo、Yiming Tian 和 Qiang Wan。化学短程有序对 HfNbTaTiZr 高熵合金抗辐照性能的影响：原子尺度模拟。*Int.J.Plast.*，183：104155，2024年。Subah Mubassira、Mahshad Fani、Anshu Raj、Cliff Hirt、Richard S. Brinlee、Amin Poozesh、Wu- Rong Jian、Saeed Zare Chavoshi、Chanho Lee 和 Shuozhi Xu。化学短程有序及其对非稀随机合金特定性能的影响。《计算材料科学》，248：113587，2025年。Mashroor S Nitol、Marco J Echeverria、Khanh Dang、Michael I Baskes 和 Saryu J Fensin。用于理解 VNbTaTiZr难熔高熵合金变形行为的新型修正嵌入原子法原子间势。《计算材料科学》，237：112886，2024年。

R. Peierls. 位错的尺寸。物理学会会报，52(1):34，1940。

Rebecca A Romero、Shuozhi Xu、Wu-Rong Jian、Irene J Beyerlein 和 CV Ramana。四种难熔多主元合金局部滑移阻力的原子尺度模拟。*Int. J.Plast.*，149：103157，2022。Oleg N Senkov、Daniel B Miracle、Kevin J Chaput 和 Jean-Philippe Couzinie。难熔高熵合金的发展与探索——综述。*J.Mater. Res.*，33(19)：3092–3128，2018。Lauren TW Smith、Yanqing Su、Shuozhi Xu、Abigail Hunter 和 Irene J Beyerlein。局部化学有序对难熔多主元合金中 Frank–Read 源激活的影响。*Int.J.Plast.*，134：102850，2020。Zepeng Sun、Kai Xiong、Chengchen Jin、Shunmeng Zhang、Lei Guo、Haijun Wu、Junjie He、Li Wu、Kunchuan Wang、Yingwu Wang 等。通过实验与计算设计具有超塑性的低模量 (HfNbTa) 1-xTix 多主元元素合金，用于生物医学应用。*Mater. Sci. Eng. A*，876：145137，2023。Aidan P Thompson、H Metin Aktulga、Richard Berger、Dan S Bolintineanu、W Michael Brown、Paul S Crozier、Pieter J In't Veld、Axel Kohlmeyer、Stan G Moore、Trung Dac Nguyen 等。LAMMPS——一种灵活的模拟工具，可在原子、介观和连续尺度上进行基于粒子的材料建模。*Comput. Phys. Commun.*，271：108171，2022。Tomohito Tsuru、Shu Han、Shutaro Matsuura、Zhenghao Chen、Kyosuke Kishida、Ivan Iobzenko、Satish I Rao、Christopher Woodward、Easo P George 和 Haruyuki Inui。导致难熔高熵合金呈现脆性与延性特征的内在因素。*Nature Communications*，15 (1)：1706，2024。V Vitek。晶体缺陷的原子级计算机建模，重点关注位错：过去、现在与未来。*Progress in Materials Science*，56(6)：577–585，2011。

Fulin Wang、Glenn H Balbus、Shuozhi Xu、Yanqing Su、Jungho Shin、Paul F Rottmann、Keith E Knipling、Jean-Charles Stinville、Leah H Mills、Oleg N Senkov 等。难熔多主元合金中多种位错路径。*Science*，370(6512)：95–101，2020。H Wang、PY Yang、WJ Zhao、SH Ma、JH Hou、QF He、CL Wu、HA Chen、Q Wang、Q Cheng 等。晶格畸变赋予高熵金属间化合物更高的强度和塑性。***Nature Communications***，15(1)：6782，2024a。Ruixin Wang、Yu Tang、Yuanlin Ai、Shun Li、Li'an Zhu 和 Shuxin Bai。通过多重异质结构，在宽应变率范围内强化并增塑难熔高熵合金。*Int.J. Plast.*，173：103882，2024b。Ruixin Wang、Yijing Fan、Rong Chen、Yan Fang、Yujie Chen、Peng Wang、Hui Wang、Yu Tang 和 Shuxin Bai。通过 B2 有序化和调幅分解，提升动态载荷下难熔高熵合金的应变硬化能力及强度-塑性协同效应。*Int. J. Plast.*，第 104482 页，2025。

Shao-Ping Wang、Evan Ma 和 Jian Xu。《具有拉伸塑性的新型三元等原子难熔中熵合金：铪与钛进入 NbTa 基固溶体》。《*Intermetallics*》，107：15–23，2019年。

Tianyi Wang、Jiuyin Li、Mian Wang、Chengzhi Li、Yanqing Su、Shuozhi Xu 和 Xiang-Guo Li。《揭示难熔多主元合金中的位错强化》。《*npjComput. Mater.*》，10(1)：143，2024c。

Xiaowang Wang、Shuozhi Xu、Wu-Rong Jian、Xiang-Guo Li、Yanqing Su 和 Irene J Beyerlein。利用基于机器学习的原子间势研究难熔体心立方金属的广义层错能和派尔斯应力。《计算材料科学》，192:110364，2021年。Yong-Chao Wu 和 Jian-Li Shao。高应变速率下高熵合金中 FCC-BCC 相变诱导抗拉强度和延展性同步提升。*Int. J. Plast.*，169: 103730，2023年。Shuozhi Xu、Emily Hwang、Wu-Rong Jian、Yanqing Su 和 Irene J Beyerlein。两种难熔多主元合金广义层错能的原子尺度计算。*Intermetallics*，124:106844，2020年。Shuozhi Xu、Yanqing Su、Wu-Rong Jian 和 Irene J Beyerlein。等摩尔比 MoNbTi 多主元合金中的局部滑移阻力。***Acta Materialia***，202:68–79，2021年。Shuozhi Xu、Saeed Zare Chavoshi 和 Yanqing Su。利用小型原子模型计算多主元合金基本结构参数。《计算材料科学》，202: 110942，2022a。

Shuozhi Xu、Wu-Rong Jian 和 Irene J Beyerlein。两种基于铪铌钽钛的五元难熔多主元合金的理想简单剪切强度。*APL Mater.*，10(11)，2022b。B. Zhang、M.C. Gao、Y. Zhang 和 S.M. Guo。六元难熔高熵合金 CrXMoNbTaVW。*Calphad*，51:193–201，2015年。ISSN 0364-5916。JW Zhang、Z Li、Y Ma、NN Guo、JY Liu、SD Yuan、Z Ma 和 H Yang。难熔高熵合金：高温性能与变形机制专题综述。*Mater.Charact.*，页码 115250，2025a。Shuting Zhang、Xin Ding、Xuefeng Gao、Ruirun Chen、Wenchao Cao、Yanqing Su 和 Jingjie Guo。通过异质结构诱导断裂模式转变，实现 Ti-V-Zr 中熵合金强度与延展性的双重提升。*Int.J.Plast.*，160:103505，2023年。Yansong Zhang、Huaming Wang、Junwei Yang、Yanyan Zhu、Jia Li、Zhuo Li、Bing Su、Bingsen Liu 和 Chunjie Shen。通过设计多尺度异质结构策略，提高轻质难熔高熵合金的应变硬化率和均匀拉伸延性。*Int.J.Plast.*，185:104237，2025b。Hui Zheng、Lauren TW Fey、Xiang-Guo Li、Yong-Jie Hu、Liang Qi、Chi Chen、Shuozhi Xu、Irene J Beyerlein 和 Shyue Ping Ong。对 MoNbTi 和 TaNbTi 多主元合金中短程有序与位错滑移的多尺度研究。*npj Comput. Mater.*，9(1):89，2023年。X. W. Zhou、R. A. Johnson 和 H. N. G. Wadley。气相沉积 CoFe/NiFe 多层膜中错配能增加型位错。*Phys.Rev.B*，69:144113，2004年。