

Nghiên cứu sự ảnh hưởng của nhiệt độ và tốc độ biến dạng đến tổ chức tế vi của hợp kim CoCrFeMnNi nano tinh thể bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử

Trần Văn Nghĩa*, Nguyễn Văn Dương, Nguyễn Đình Chiến

Học viện Kỹ thuật Quân sự, 236 Hoàng Quốc Việt, Bắc Từ Liêm, Hà Nội, Việt Nam.

*Email: nghiatv@lqdtu.edu.vn

Nhận bài: 24/4/2024; Hoàn thiện: 12/6/2024; Chấp nhận đăng: 12/8/2024; Xuất bản: 25/8/2024.

DOI: <https://doi.org/10.54939/1859-1043.j.mst.97.2024.165-172>

TÓM TẮT

Trong bài báo này nhóm tác giả đã nghiên cứu sự ảnh hưởng của nhiệt độ và tốc độ biến dạng đến cấu trúc tế vi và cơ tính của hợp kim entropy cao CoCrFeMnNi bằng phương pháp mô phỏng động lực học phân tử. Có 3 nhiệt độ được lựa chọn là 300 K, 700 K và 1100 K. Kết quả nghiên cứu chỉ ra, giới hạn bền kéo và độ giãn dài tương đối của vật liệu sẽ giảm khi tăng nhiệt độ biến dạng, trong khi đó có thể quan sát thấy sự xuất hiện của một lượng nhỏ tinh thể lục giác xếp chặt (HCP) ở nhiệt độ tương ứng. Mặt khác, nhóm tác giả đã tiến hành nghiên cứu ảnh hưởng của tốc độ biến dạng đến cấu trúc của vật liệu ở các nhiệt độ khác nhau với các tốc độ biến dạng $1.0 \times 10^8/s$, $1.0 \times 10^9/s$, $1.0 \times 10^{10}/s$, kết quả nghiên cứu chỉ ra rằng, hình thái cấu trúc hạt tinh thể gần như không thay đổi trong suốt quá trình biến dạng, chỉ có giới hạn bền kéo và độ giãn dài tương đối của vật liệu sẽ tăng khi tăng tốc độ biến dạng.

Từ khóa: Hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi; Nhiệt độ biến dạng; Tốc độ biến dạng; Phương pháp động lực học phân tử.

1. MỞ ĐẦU

Vật liệu entropy cao (HEAs) là một khái niệm mới đang được các nhà nghiên cứu trên toàn thế giới dành sự quan tâm nghiên cứu lớn cả về lý thuyết lẫn thực nghiệm [1]. Nó là dạng một hợp kim nhiều nguyên tố (kim loại) đẳng mol (tỷ lệ phần trăm nguyên tử bằng nhau) của ít nhất 5 nguyên tố trở lên. Một đặc tính nổi bật nhất để phân biệt hợp kim Entropy cao so với các loại hợp kim nhiều nguyên tố khác đó là hợp kim này được tạo thành từ nhiều loại nguyên tố khác nhau nhưng lại có thể tạo thành cấu trúc tổ chức một pha đồng nhất, ví dụ có thể tạo thành tổ chức một pha FCC (lập phương tâm mặt), BCC (lập phương tâm khối), HCP (lục giác xếp chặt) hoặc là hỗn hợp của 2 pha. Dựa vào mục đích, yêu cầu sử dụng trong những trường hợp cụ thể, thông qua việc sử dụng các loại nguyên tố khác nhau, hoặc bằng cách thiết kế tỉ lệ thành phần thích hợp để thu được những loại hợp kim có tổ chức khác nhau, từ đó đạt được những tính chất mong muốn. Nếu trong nghiên cứu các loại hợp kim truyền thống chủ yếu tập trung theo hướng tạo thành dung dịch rắn, tăng độ bền và phải hi sinh một phần độ dẻo, thì đối với hợp kim Entropy cao, bằng cách thay đổi thành phần hóa học và thiết kế hợp lý tỉ lệ giữa các thành phần thì các đặc trưng cơ tính như độ bền và độ dẻo đều có sự cải thiện rõ rệt [2-8].

Khái niệm về hợp kim Entropy cao được đưa ra lần đầu tiên bởi Yeh và các cộng sự [1-3]. Trên cơ sở đó, hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi một pha FCC đã được chế tạo bởi nhóm nghiên cứu của Cantor [9]. Sau đó, một loạt các nghiên cứu đối với hợp kim này cho thấy, hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi có độ bền cao và độ dẻo tốt [7, 14-19]. Trong hơn một thập kỷ qua, những nghiên cứu đối với hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi chủ yếu sử dụng phương pháp thực nghiệm. Các nghiên cứu cho thấy, trong quá trình biến dạng, một lượng nhỏ tinh thể HCP sẽ được hình thành, cùng với đó có thể có sự xuất hiện của song tinh. Việc quan sát thấy tinh thể HCP và song tinh được cho rằng là do một bộ phận tinh thể FCC sẽ xảy ra sự sắp xếp lại ở vùng biên giới hạt từ đó hình thành nên tinh thể dạng HCP, hoặc dưới tác dụng của ứng suất kéo cơ chế trượt và song tinh sẽ là hai cơ chế chính của biến dạng dẻo, vì vậy, sau biến dạng, có thể quan sát được các dải trượt hoặc tổ chức song tinh. Tuy vậy, thực tế quan sát định hướng của hạt tinh thể cho thấy, định hướng của

hạt hầu như không thay đổi. Vì thế, đến nay cơ chế chính xác của việc hình thành các dạng tổ chức khác nhau trong quá trình biến dạng của loại vật liệu này vẫn chưa được làm rõ [16, 20].

Trong những năm gần đây, việc ứng dụng phần mềm mô phỏng động lực học phân tử LAMMPS trong nghiên cứu vật liệu đang có sức hút rất lớn đối với các nhà nghiên cứu vật liệu. Khi sử dụng phần mềm mô phỏng này, ta có thể tiến hành mô phỏng những mô hình có kích thước lớn hoặc rất lớn (ở cấp độ phân tử), khi mà số lượng nguyên tử trong một mô hình mô phỏng có thể đạt đến hàng trăm nghìn thậm chí là hàng triệu nguyên tử. Hơn nữa, LAMMPS còn cho phép nhập các dữ liệu mô hình mô phỏng được xây dựng từ phần mềm chuyên dụng bên thứ 3 như AtomsK, Moltemplate,... đồng thời, các thông số của mỗi loại nguyên tử cũng có thể được thiết lập rất dễ dàng, do vậy, việc xây dựng mô hình mô phỏng tương đối thuận tiện, đơn giản và trực quan, [15, 18, 20].

Trong nghiên cứu này, nhóm tác giả sẽ tiến hành mô phỏng đối với mẫu hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi có tổ chức dạng đa tinh thể cấp nano. Dựa vào kết quả thu được làm nền tảng để tiến hành phân tích, dự đoán, giải thích cơ chế chuyển đổi pha và sự thay đổi cơ tính của vật liệu này dưới ảnh hưởng của các tham số môi trường thường thấy như nhiệt độ, áp suất, hay thông số công nghệ như tốc độ biến dạng,...

2. PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG VÀ MÔ HÌNH

2.1. Phương pháp mô phỏng

Sử dụng mô hình mô phỏng động lực học phân tử LAMMPS để tiến hành mô phỏng quá trình biến đổi tổ chức, cơ tính của mẫu mô hình hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi một pha FCC. Sau khi mô hình được tạo thành, tiến hành tích thoát ứng suất đối với mẫu thử theo hai bước: Bước thứ nhất sẽ cấp cho nguyên tử một vận tốc ban đầu theo phân bố ngẫu nhiên ở 300 K, sau đó tiến hành ổn định hóa (năng lượng tự do cực tiểu hóa); bước thứ hai sẽ tiến hành tích thoát ứng suất theo hệ đẳng nhiệt - đẳng áp ở 300 K trong vòng 200 ps;

Tiếp theo sẽ tiến hành gia nhiệt theo hệ đẳng nhiệt – đẳng tích cho mẫu để nâng nhiệt đến các khung nhiệt độ 300 K, 700 K và 1100 K. Đối với các mẫu này lần lượt tiến hành mô phỏng thử kéo theo phương trục Y với các tốc độ biến dạng tương ứng là $1.0 \times 10^8/s$; $1.0 \times 10^9/s$; $1.0 \times 10^{10}/s$, bước nhảy thời gian là femto giây (10^{-15} s). Kết quả mô phỏng sẽ được trực quan hóa và xử lý phân tích bằng phần mềm chuyên dụng OVITO[11].

Mô hình hàm thế năng MEAM là một trong những dạng hàm số thích hợp nhất dùng để mô tả sự tương tác theo dạng liên kết kim giữa các nguyên tử. Do vậy, trong thí nghiệm này, nhóm tác giả dẫn dùng hàm thế năng do nhóm nghiên cứu của W. Mi. Choi và các cộng sự phát triển [20].

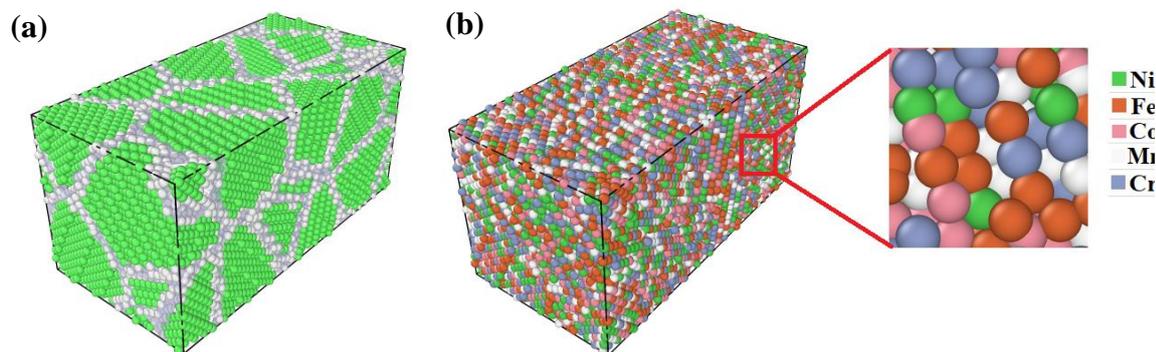
2.2. Mô hình nghiên cứu

Thành phần hóa học của hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi được cho trong bảng 1.

Bảng 1. Thành phần hóa học của hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi.

| Nguyên tố | Co | Fe | Cr | Ni | Mn |
|-----------|-----|-----|-----|-----|-----|
| Tỉ lệ mol | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 0.2 | 0.2 |

Sử dụng phần mềm chuyên dụng AtomsK để xây dựng mô hình mẫu đa tinh thể (định hướng của các hạt tinh thể là ngẫu nhiên, như được thể hiện trên hình 1a) của hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi một pha FCC. Mẫu thử có kích thước 5 nm * 10 nm * 5 nm với hơn 37000 nguyên tử, được thiết lập thành dạng hợp kim Entropy cao (hợp kim 5 nguyên Co, Cr, Fe, Ni, Mn đẳng mol) với phân bố nguyên tử ngẫu nhiên theo cả ba chiều không gian, như trên hình 1b. Kiểu mạng của hợp kim là kiểu mạng FCC có hằng số mạng bằng 0.3593 nm. Để tiến hành thử kéo, một suất biến dạng với tốc độ biến dạng nhất định được đặt theo trục Y (ứng suất trên các hướng còn lại được cố định không đổi) để tiến hành thử kéo mẫu ở các nhiệt độ 300 K, 700 K và 1100 K.



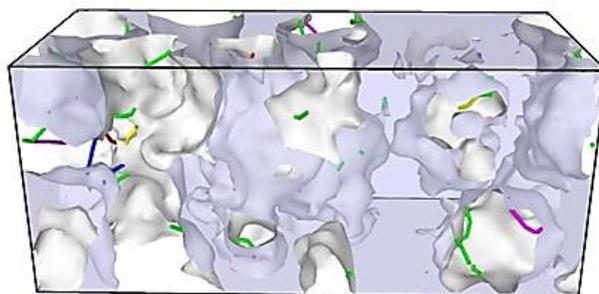
Hình 1. Mô hình nghiên cứu:
(a) Mô hình ở chế độ hiển thị đa tinh thể; (b) Mô hình HEA ở chế độ hiển thị nguyên tố.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Ảnh hưởng của nhiệt độ

3.1.1. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến cấu trúc tổ chức của vật liệu

Nhiệt độ có ảnh hưởng rất lớn đến tổ chức của vật liệu trong quá trình thử kéo. Khi tiến hành thử kéo, dưới tác dụng của nhiệt độ và ứng suất, một bộ phận hạt tinh thể sẽ xoay theo một góc nhất định, từ đó hình thành nên cấu trúc tổ chức pha lục giác xếp chặt HCP. Tuy vậy, tỉ lệ tương đối nhỏ. Khi mẫu gần bị kéo đứt, một lưới lệch có mật độ lệch dày được tạo ra, xung quanh vùng lưới lệch có mật độ dày này, trường ứng suất sẽ rất lớn và do vậy sẽ xảy ra hiện tượng chảy cục bộ, tạo thành vết nứt tế vi và sau đó vết nứt phát triển nhanh dẫn đến phá hủy mẫu, như trên hình 2.

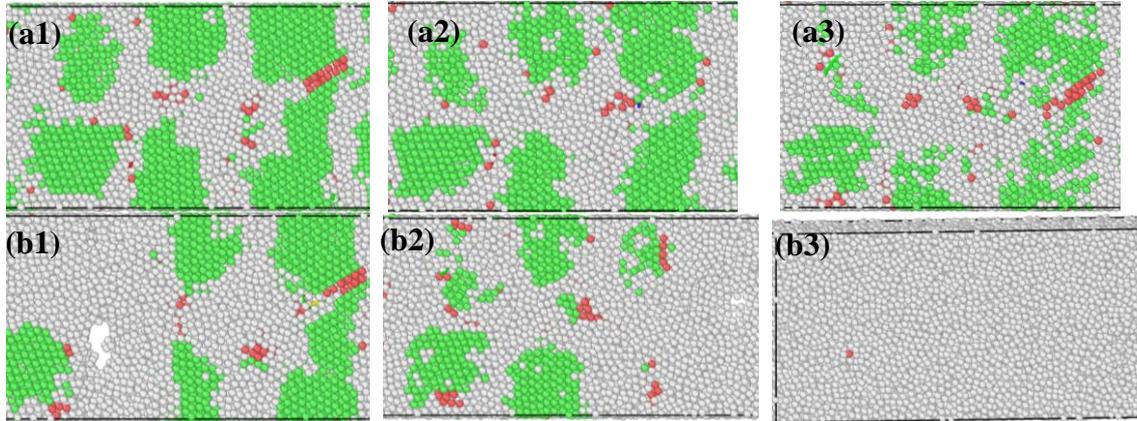


Hình 2. Cấu trúc lưới lệch và phân bố đường lệch trong mẫu.

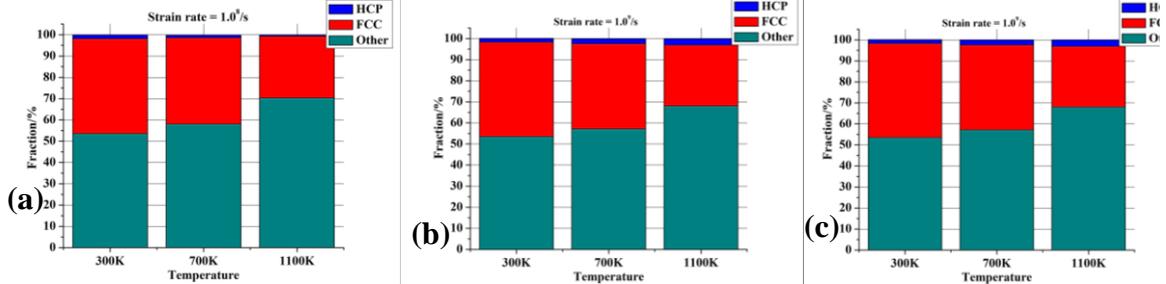
Kết quả mô phỏng trong hình 3 biểu thị tổ chức của mẫu khi thử kéo ở các nhiệt độ lần lượt là 300 K, 700 K và 1100 K với tốc độ biến dạng $1.0 \times 10^9/s$, trong đó, màu xanh biểu thị pha FCC, màu đỏ biểu thị HCP, màu trắng biểu thị tổ chức không trật tự. Các hình 3(a1), 3(a2), 3(a3) là các mẫu trước khi thử kéo, các hình 3(b1), 3(b2), 3(b3) là tổ chức của mẫu khi mẫu chuẩn bị phá hủy ở cùng một tỉ lệ phóng đại. Có thể thấy, ở nhiệt độ càng cao, hạt tinh thể bị thu nhỏ càng nhiều, tỉ lệ nguyên tử bị xô lệch và thoát khỏi vị trí có trật tự càng nhiều và càng nhanh. Điều này dự báo rằng giới hạn bền kéo của mẫu sẽ giảm khi tăng nhiệt độ, tuy vậy, độ dẻo tương đối sẽ tăng.

Từ hình 4 có thể nhận thấy, tỉ lệ giữa các pha FCC, HCP và khuyết tật (biên giới hạt) tinh thể có sự phụ thuộc rõ rệt vào nhiệt độ. Khi tăng nhiệt độ thì tỉ lệ khuyết tật tăng lên, đồng thời, khả năng tạo thành pha HCP có xu hướng giảm. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với thực tế rằng, khi tăng nhiệt độ, số lượng nguyên tử nằm ở vùng biên giới hạn sẽ tăng lên, số lượng nguyên tử trong hạt sẽ giảm, kích thước hạt tinh thể sẽ giảm. Hơn nữa, trong mô hình này, nhóm tác giả sử dụng mô hình tinh thể hạt nano, có kích thước rất nhỏ, tỉ lệ nguyên tử nằm trên vùng biên giới hạt vốn dĩ rất nhiều, cộng thêm đặc tính cố hữu của vật liệu nano là hiệu ứng bề mặt rất rõ ràng, tức những nguyên tử nằm gần vùng biên giới hạt có hoạt độ rất lớn, rất nhạy cảm với nhiệt độ, do vậy, khi

gia nhiệt, những nguyên tử này có xu hướng nhanh chóng bị hoạt hóa, giao động nhiệt lớn và lệch hẳn khỏi vị trí cân bằng và do đó đánh mất cấu trúc sắp xếp có trật tự vốn có của tinh thể.



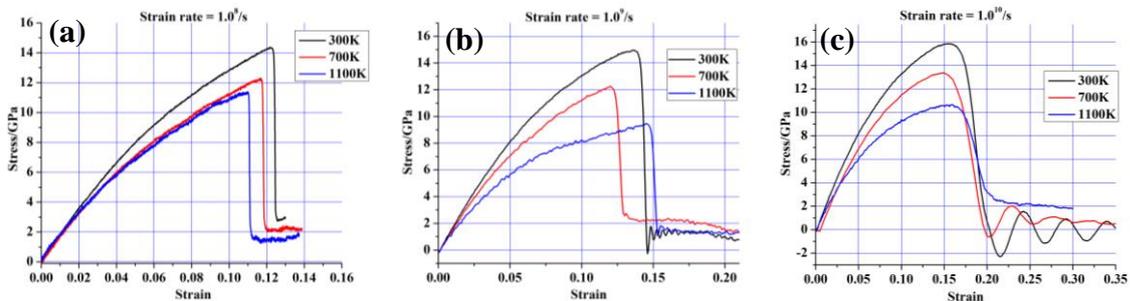
Hình 3. Cấu trúc tổ chức của vật liệu trong quá trình thử kéo: (a) Mẫu trước khi kéo; (b) Mẫu trước khi đứt.



Hình 4. Sự phân bố của tỉ lệ khác pha trong mẫu thử kéo.

3.1.2. Ảnh hưởng của nhiệt độ đến cơ tính của vật liệu

Tốc độ biến dạng có ảnh hưởng rõ rệt đến cơ tính của vật liệu. Hình 5 biểu thị giản đồ thử kéo với các nhiệt độ khác nhau đối với tốc độ biến dạng khác nhau. Khi tốc độ biến dạng không đổi, nhiệt độ càng cao thì giới hạn bền kéo càng nhỏ, ví dụ, với tốc độ biến dạng không đổi là $1.0 \times 10^9/s$ (hình 5b) thì khi tiến hành kéo ở 300 K giới hạn bền kéo cao nhất có thể đạt được đến 15 Gpa, khi tăng nhiệt độ đến 700 K thì giới hạn bền kéo giảm nhanh xuống còn 12 Gpa, và khi nhiệt độ đến 1100 K thì giới hạn bền kéo chỉ còn khoảng 9.5 Gpa. Ngược lại, độ giãn dài tương đối trước khi đứt càng lớn. Kết quả này hoàn toàn trùng khớp với kết quả phân tích tổ chức của mẫu được thể hiện trong hình 3.



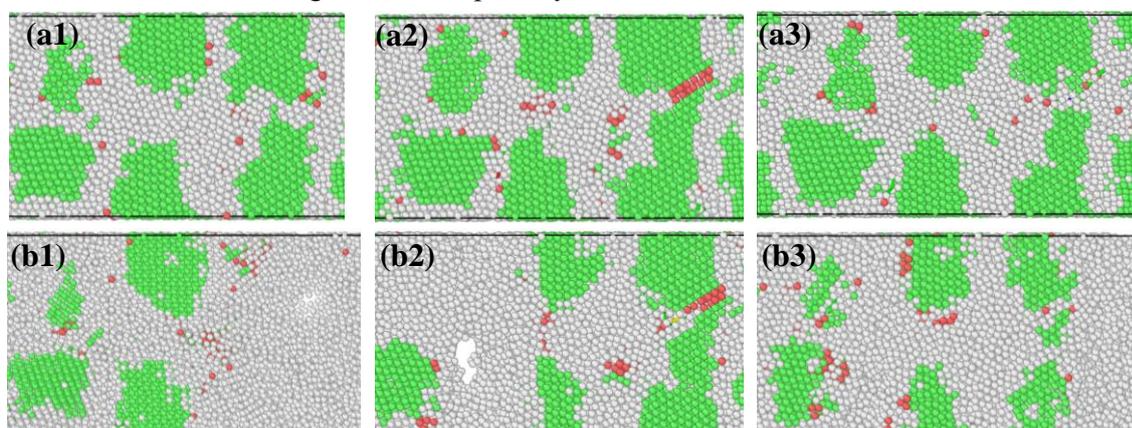
Hình 5. Giản đồ kết quả thử kéo ở các nhiệt độ khác nhau với mỗi tốc độ biến dạng.

3.2. Ảnh hưởng của tốc độ biến dạng

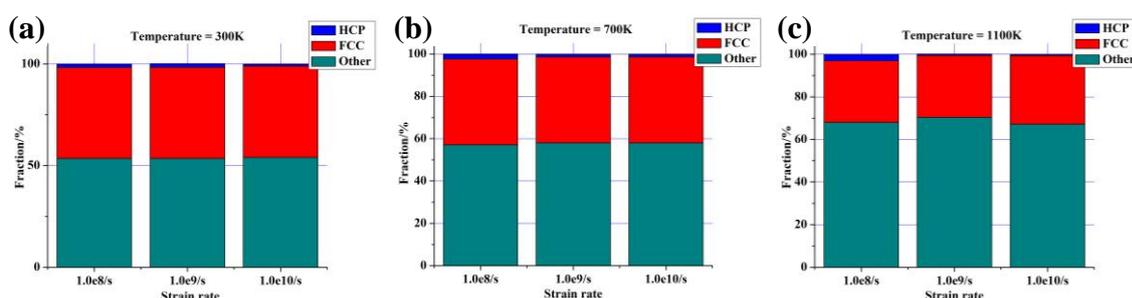
3.2.1. Ảnh hưởng của tốc độ biến dạng đến cấu trúc tổ chức của vật liệu

Trong quá trình kéo, những hạt tinh thể có định hướng ban đầu xác định thì về cơ bản sẽ vẫn giữ định hướng này trong suốt quá trình kéo cho đến khi phá hủy xảy ra. Chỉ có vùng biên giới hạt (khuyết tật mạng) được mở rộng dần dần do các nguyên tử gần vùng biên giới hạt này sẽ dễ bị kích thích bởi ứng suất kéo và rời khỏi vị trí cân bằng trật tự. Do vậy, về cơ bản không quan sát được hiện tượng chuyển pha xảy ra mà chỉ xảy ra sự thay đổi về kích thước của hạt tinh thể, cụ thể ở đây là các hạt tinh thể sẽ thu nhỏ dần.

Khi ở cùng một điều kiện nhiệt độ 300 K, dưới tác động của các tốc độ biến dạng khác nhau, thông qua biểu đồ thống kê tỷ lệ các pha, được thể hiện trong hình 7 có thể thấy, tốc độ biến dạng có ảnh hưởng không nhiều đến tỷ lệ phân bố của các pha. Có hai khả năng khả dĩ cho hiện tượng này. Thứ nhất là, tốc độ biến dạng được sử dụng có giá trị lớn, do vậy, các hạt tinh thể chưa kịp xoay định hướng lại để hình thành các pha mới. Thứ hai là, điều kiện biên khi tiến hành mô phỏng được thiết đặt là thử kéo theo một chiều (hướng trục y), về cơ bản ứng suất trên các chiều của trục x và z là gần như không đổi, do vậy các hạt tinh thể chỉ biến dạng theo cơ chế gia tăng khoảng cách giữa các nguyên tử theo hướng y, trong khi các hướng còn lại được giữ không đổi. Điều này có thể thấy càng rõ trong hình 6, ở đó hình dạng và định hướng của các hạt về cơ bản không thay đổi từ khi bắt đầu biến dạng cho đến lúc phá hủy.



Hình 6. Cấu trúc tổ chức của vật liệu trong quá trình thử kéo với các tốc độ biến dạng khác nhau: (a) Mẫu trước khi kéo; (b) Mẫu trước khi đứt.



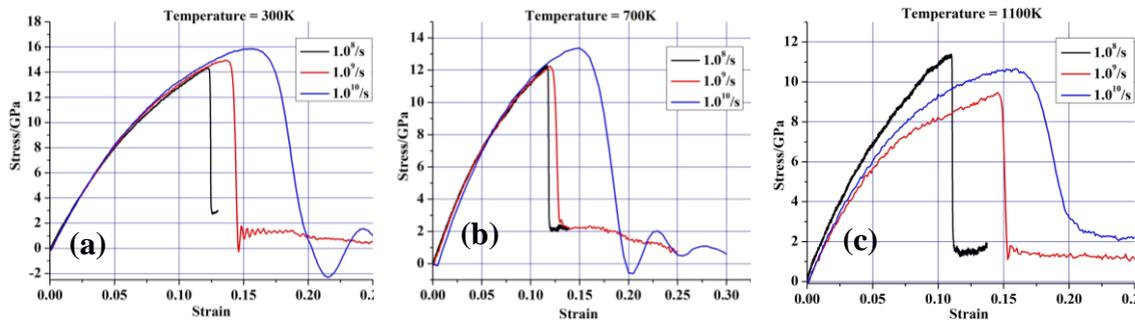
Hình 7. Sự phân bố tỉ lệ các pha trong mẫu thử kéo ở các tốc độ biến dạng khác nhau.

Một điểm cần lưu ý là: Mẫu thí nghiệm sử dụng trong bài báo này có khoảng 37000 nguyên tử, đây là một thử thách cho phép tính mô phỏng. Do năng lực của phần cứng máy tính có hạn, tiến hành mô phỏng cho một mẫu có kích thước lớn hơn nữa (khoảng vài chục nanomet trở lên) sẽ gặp rất nhiều khó khăn. Do vậy, khi tiến hành xây dựng mẫu thử, các hạt tinh thể được thiết kế với kích thước rất nhỏ, và do việc xây dựng hạt là ngẫu nhiên cho nên sẽ có những hạt tinh thể có kích thước chỉ vài nm thậm chí là chỉ vài Astrons. Do vậy, chúng sẽ rất nhạy cảm với bất kỳ tác động của nhiệt độ hoặc ứng suất nào.

3.2.2. Ảnh hưởng của tốc độ biến dạng đến cơ tính của vật liệu

Khi tiến hành thử kéo với các tốc độ biến dạng khác nhau, kết quả thu được được biểu thị qua hình 8. Có thể thấy rằng, khi tốc độ biến dạng tăng, độ bền kéo và độ biến dạng cũng tăng theo. Với tốc độ biến dạng lớn nhất là $1.0 \times 10^{10}/s$ thì giá trị độ bền kéo lớn nhất có thể đạt được đến 16Gpa ở nhiệt độ thử kéo là 300 K. Đồng thời có độ biến dạng lớn hơn rõ rệt so với khi thử kéo ở tốc độ biến dạng $1.0 \times 10^9/s$ và $1.0 \times 10^8/s$.

Kết quả thí nghiệm này trái với cảm quan thông thường rằng khi ở tốc độ biến dạng nhỏ, mẫu thử sẽ bền hơn và có tính dẻo tốt hơn. Tuy vậy, trong thí nghiệm mô phỏng này tốc độ biến dạng được sử dụng rất lớn, kết hợp mô hình nguyên tử là gần lý tưởng do vậy kết quả thử kéo ở trên đạt được từ sự tính toán trạng thái ứng suất tức thì của mỗi nguyên tử. Trên thực tế, đường cong ứng suất – biến dạng của quá trình thử kéo thu được là đường cong biểu thị ứng suất – biến dạng biểu kiến của mẫu thử kéo thô đại. Trong quá trình mô phỏng, tốc độ biến dạng nhanh sẽ vượt quá thời gian đáp ứng (độ trễ) của sự thay đổi trạng thái ứng suất. Do vậy, ứng suất tính toán thu được cũng lớn hơn nhiều so với ứng suất biểu kiến thu được khi thí nghiệm thực tế với các mẫu thô đại.



Hình 8. Giảm đồ kết quả thử kéo ở các tốc độ biến dạng khác nhau với mỗi nhiệt độ.

Một điểm cần đặc biệt chú ý là trong kết quả thử kéo được biểu thị trong hình 8 ở trên, khi tiến hành thử kéo với tốc độ biến dạng $1.0 \times 10^{10}/s$ thì sau khi mẫu đứt, đường cong ứng suất xuất hiện hiện tượng ứng suất âm.

4. KẾT LUẬN

Kết quả mô phỏng đối với mẫu hợp kim Entropy cao CoCrFeMnNi một pha FCC với phần mềm mô phỏng động lực học phân tử LAMMPS chỉ ra:

Nhiệt độ có ảnh hưởng lớn đến tổ chức của vật liệu, tỉ lệ giữa các pha FCC, HCP và khuyết tật tinh thể có sự phụ thuộc rõ rệt vào nhiệt độ. Khi tăng nhiệt độ thì tỉ lệ khuyết tật tăng lên, đồng thời khả năng tạo thành pha HCP có xu hướng giảm. Trong khi đó, giới hạn bền kéo và độ biến dạng của vật liệu sẽ giảm khi tăng nhiệt độ biến dạng.

Với các tốc độ biến dạng khác nhau ở $1.0 \times 10^8/s$, $1.0 \times 10^9/s$, and $1.0 \times 10^{10}/s$, những hạt tinh thể có định hướng ban đầu xác định thì về cơ bản sẽ vẫn giữ định hướng này trong suốt quá trình kéo cho đến khi phá hủy xảy ra. Chỉ có vùng biên giới hạt (khuyết tật mạng) được mở rộng dần dần do các nguyên tử gần vùng biên giới hạt này bị kích thích rời khỏi vị trí cân bằng trật tự, hiện tượng chuyển pha không xảy ra mà chỉ xảy ra sự thay đổi về kích thước của hạt tinh thể, trong khi đó giới hạn bền kéo và độ biến dạng của vật liệu của vật liệu sẽ tăng khi tăng tốc độ biến dạng.

Những kết quả này thu được đối với các mẫu có kích thước nhỏ, do vậy, kết quả chỉ mang tính chất cơ sở định hướng cho các thí nghiệm với mẫu có kích thước lớn hơn trong các nghiên cứu tiếp theo.

Lời cảm ơn: Nhóm tác giả xin trân trọng gửi lời cảm ơn đến quỹ nghiên cứu khoa học BTTM đã hỗ trợ một phần kinh phí cho nghiên cứu này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. J.W. Yeh. “Alloy Design Strategies and Future Trends in High-Entropy Alloys”. *Jom.*, 65, 1759–1771, (2013).
- [2]. J.W. Yeh *et al.* “Nanostructured High-Entropy Alloys with Multiple Principal Elements: Novel Alloy Design Concepts and Outcomes”. *Advanced Engineering Materials.*, 6, 299–303, (2004).
- [3]. J.M. Wu, S.J. Lin, J.W. Yeh, S.K. Chen, Y.S. Huang, H.C. Chen. “Adhesive wear behavior of $Al_xCoCrCuFeNi$ high-entropy alloys as a function of aluminum content”. *Wear.*, 261, 513–519, (2006).
- [4]. Z. Fu, L. Jiang, J.L. Wardini, B.E. Macdonald, H. Wen, W. Xiong, *et al.* “A high-entropy alloy with hierarchical nanoprecipitates and ultrahigh strength”. *Science Advances.*, 4, 102 - 109, (2018).
- [5]. Shahmir. H *et al.* “Microstructure and properties of a $CoCrFeNiMn$ high-entropy alloy processed by equal-channel angular pressing”. *Materials Science and Engineering: A.* 705, 411–419, (2017).
- [6]. Y. Shi *et al.* “Corrosion-Resistant High-Entropy Alloys: A Review”. *Metals.*, 7, 43 - 53, (2017).
- [7]. S. Sun, Y. Tian, X. An, H. Lin, J. Wang, Z. Zhang. “Ultrahigh cryogenic strength and exceptional ductility in ultrafine-grained $CoCrFeMnNi$ high-entropy alloy with fully recrystallized structure”. *Materials Today Nano.*, 4, 46–53, (2018).
- [8]. O. E. Atwani, N. Li, M. Li, A. Devaraj, J.K.S. Baldwin, M.M. Schneider, *et al.* “Outstanding radiation resistance of tungsten-based high-entropy alloys”. *Science Advances.*, 5, 68 - 96, (2019).
- [9]. B. Cantor, I. Chang, P. Knight, A. “Vincent. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys”. *Materials Science and Engineering: A.*, 9, 213– 218, (2004).
- [10]. A.Gali, E.George. “Tensile properties of high- and medium-entropy alloys”. *Intermetallics.*, 39, 74–78, (2013).
- [11]. A. Stukowski. “Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO– the Open Visualization Tool”, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering.* 18, 012 - 018, (2009).
- [12]. B. Gludovatz, A. Hohenwarter, D. Catoor, E.H. Chang, E.P. George, R.O. Ritchie. “A fracture-resistant high-entropy alloy for cryogenic applications”. *Science.*, 345, 1153–1158, (2014).
- [13]. Z. Zhang *et al.* “Nanoscale origins of the damage tolerance of the high-entropy alloy $CrMnFeCoNi$ ”. *Nature Communications*, 6, 223 - 232, (2015).
- [14]. N.L. Okamoto *et al.* “Size effect, critical resolved shear stress, stacking fault energy, and solid solution strengthening in the $CrMnFeCoNi$ high-entropy alloy”. *Scientific Reports.*, 6, 103-112, (2016).
- [15]. G. Laplanche, A. Kostka, O. Horst, G. Eggeler, E. George. “Microstructure evolution and critical stress for twinning in the $CrMnFeCoNi$ high-entropy alloy”. *Acta Materialia.*, 118, 152–163, (2016).
- [16]. Q. Ye, K. Feng, Z. Li, F. Lu, R. Li, J. Huang, *et al.* “Microstructure and corrosion properties of $CrMnFeCoNi$ high entropy alloy coating”. *Applied Surface Science.*, 396, 1420–1426, (2017).
- [17]. T.N. Lam, Y.S. Chou, Y.J. Chang, T.R. Sui, A.C. Yeh, S. Harjo, *et al.* “Comparing Cyclic Tension-Compression Effects on $CoCrFeMnNi$ High-Entropy Alloy and Ni-Based Superalloy”. *Crystals.*, 9, 411- 420, (2019). .
- [18]. J. Gu, M. Song. “Annealing-induced abnormal hardening in a cold rolled $CrMnFeCoNi$ high entropy alloy”. *Scripta Materialia.*, 162, 345–349, (2019).
- [19]. M. Naeem, H. He, S. Harjo, T. Kawasaki, F. Zhang, B. Wang, *et al.* “Extremely high dislocation density and deformation pathway of $CrMnFeCoNi$ high entropy alloy at ultralow temperature”. *Scripta Materialia.*, 188, 21–25, (2020).
- [20]. W.M. Choi, Y. H. Jo, S. S. Sohn *et al.* “Understanding the physical metallurgy of the $CoCrFeMnNi$ high-entropy alloy: an atomistic simulation study”. *Computational Materials.*, 1, 60-68, (2018).

ABSTRACT

Investigating the effect of temperature and strain rate on the microstructure of nanocrystalline CoCrFeMnNi high-entropy alloy by molecular dynamics method

The effect of temperature and strain rates on the microstructure development of a typical polycrystalline CoCrFeMnNi high entropy alloy was studied in molecular dynamics. Four typical temperatures of 300 K, 700 K, and 1100 K were selected. The results revealed that the peak stress and the tow stress decreased with the increases in formation temperatures, while the extent of twinning was found to be responsive to the temperatures. Furthermore, three strain rates of $1 \times 10^8/s$, $5 \times 10^8/s$, and $1 \times 10^9/s$ were chosen to explore the influence of strain rate on the microstructural behavior of the material at 300 K. It was found that both peak stress and tow stress increased with the strain rates.

Keywords: CoCrFeMnNi high entropy alloy; Temperature; Strain rates; Molecular dynamics method.