

## 封面文章

基于机器学习势的 NbTaTiZr 多主元合金  
压缩力学性质\*刘洪洋<sup>1)2)3)</sup> 陈博<sup>1)2)3)†</sup> 陈荣<sup>1)</sup> 康冬冬<sup>1)2)3)</sup> 戴佳钰<sup>1)2)3)‡</sup>

1) (国防科技大学理学院, 长沙 410073)

2) (国防科技大学, 极端条件物理及应用湖南省重点实验室, 长沙 410073)

3) (国防科技大学, 湖南省物态模拟与调控基础学科研究中心, 长沙 410073)

(2025 年 6 月 6 日收到; 2025 年 8 月 9 日收到修改稿)

难熔多主元合金因其优异的高温性能和潜在工程应用成为材料领域研究热点, 其中 NbTaTiZr 四元多主元合金在高应变率与极端温度下的变形机制与力学行为尚不明确. 为揭示该合金的原子尺度响应规律, 构建了 NbTaTiZr 四元机器学习势, 结合分子动力学模拟系统研究了晶体取向、应变率、温度及组分对合金压缩力学行为的影响. NbTaTiZr 在压缩时呈现出结构与力学响应的各向异性, 沿 [111] 晶向压缩时拥有最高屈服强度; 而沿 [110] 晶向压缩时的屈服强度最低, 在变形过程中更易产生孪晶; [100] 晶向主要通过局域无序及位错滑移协调变形, 主导位错类型为  $1/2 \langle 111 \rangle$ . 应变率提升至  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  时, 屈服强度显著增强且无序结构比例增大, 高应变率加载下通过抑制位错运动促进无序化转变. 该合金在 2100 K 高温下仍保持较高强度, Nb/Ta 元素占比增加可显著提升屈服强度, 而 Ti/Zr 元素则产生负面效应. 研究揭示了多主元合金力学行为的各向异性特征与无序化转变的应变率依赖性, 为设计高性能难熔合金提供理论依据.

**关键词:** 多主元合金, 等温压缩, 机器学习势, 力学性质**PACS:** 61.66.Dk, 02.70.Ns**DOI:** 10.7498/aps.74.20250738**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250738

## 1 引言

多主元合金作为近年来材料科学领域的重要突破, 通过引入 4 种或以上主要元素 (等摩尔/非等摩尔比) 极大拓展了组分设计空间, 为开发高性能合金体系提供了全新范式. 与传统合金不同, 多主元合金中元素的随机混合带来高构型熵, 可抑制金属间化合物形成, 有利于形成简单固溶体, 具有一些简单的晶体结构, 比如常见的面心立方 (face centered cubic, FCC) 和体心立方 (body centered

cubic, BCC). 其中, 含有 Nb, Mo, Ta, Ti, W, V, Hf, Zr<sup>[1-4]</sup> 等高熔点元素的难熔多主元合金, 多具有 BCC 相结构, 具有很高的熔点、屈服强度、抗蠕变性能、热稳定性和释能特性, 在高温下仍能保持优异的力学性质<sup>[5-8]</sup>, 有望在高温环境下得到广泛应用, 推动航空航天以及军事装备等领域的迅速发展<sup>[9]</sup>.

NbTaTiZr 难熔多主元合金因其组分特性与性能优势成为前沿研究热点. 该体系通过工艺优化<sup>[10,11]</sup> 显著提升材料性能, 基于第一性原理计算的强度与塑性预测为组分设计提供了理论支撑<sup>[12]</sup>. 实验研究表明, 该合金在准静态压缩下通过析出相

\* 湖南省科技创新计划 (批准号: 2021RC4026) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: chenbochain@nudt.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: jydai@nudt.edu.cn

诱导相变实现塑性变形能力的大幅提升<sup>[13]</sup>, 而霍普金森杆实验进一步揭示其在高应变率下兼具高强度、高塑性和低绝热剪切敏感性的独特动态力学响应<sup>[14]</sup>. 更具突破性的是, Nb, Ta, Ti, Zr 元素在高速冲击下的协同氧化释能效应, 使其在含能材料领域展现出特殊应用潜力, Wang 等<sup>[15]</sup>与 Lo 等<sup>[16]</sup>研究发现晶界处氧原子的快速扩散会形成非保护性复合氧化物, 这种氧化机制为能量释放提供了新途径. 关于 NbTaTiZr 体系的研究更多集中于实验研究, 传统实验手段难以实时解析动态加载过程中纳米尺度的结构演化, 且该体系缺乏分子动力学模拟研究, 制约着材料性能的深度优化与工程应用开发.

分子动力学模拟为揭示材料原子尺度力学行为提供了重要手段<sup>[17,18]</sup>, Li 等<sup>[4]</sup>通过机器学习势能面模型研究 NbMoTaW 的强化机制, 发现 Nb 原子在晶界位置的析出有利于合金的强化; Zhou 等<sup>[19]</sup>构建了 TiZrHfNbO 体系机器学习势能面模型, 发现添加 O 原子以后形成的有氧复合体显著提高了连续位错运动所需的临界剪应力, 揭示了有氧复合体对合金强度和塑性同时提高的机理, 弥补了实验观察上的不足. 然而, 现有研究多局限于经验势函数, 难以精确描述多主元体系的复杂相互作用<sup>[20-22]</sup>. 近年来, 基于机器学习的势能面模型为突破精度和效率的矛盾提供了新的途径, 通过拟合第一性原理数据, 可在保证计算效率的同时, 同时实现和密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 计算结果相当的精度<sup>[4,19,23-29]</sup>.

本文通过开发 NbTaTiZr 四元合金势能面模型, 系统研究了晶体取向、温度、应变率及组分对合金压缩力学行为的影响, 研究成果将增加我们对 NbTaTiZr 合金特性的认识, 加快高性能合金的开发.

## 2 研究方法

### 2.1 深度势能模型

本研究采用 DP-GEN (deep potential GENerator)<sup>[30]</sup> 软件探索多元合金构型空间, 构建深度势能 (deep potential, DP) 模型, 该方法已在不同体系中得到了广泛应用<sup>[31-34]</sup>. 初始结构包含 Ta/Ti/Zr/Nb 单质及其二元、三元和四元等摩尔比合金结构, 每种组分包括 BCC/FCC/HCC 三种相结构, 对于四元合金还包含无序结构 (升高到 4000 K, 然后快速冷却至 300 K 得到无序结构). 合金结构由从单质中随机替换原子得到, 原子在晶格中随机分布, 四元合金 BCC, FCC 以及 HCP 结构示意图如图 1 所示 (每个超胞结构包含 32 原子). 初始数据集采用 3 种变形策略采样构成: 1) 对 32 原子超胞随机施加 0.1 Å 原子位移扰动和对盒子施加  $\pm 20\%$  随机扰动; 2) 在 300—900 K,  $-5$ —20 GPa 范围内, 采集不同体积及热扰动的结构; 3) 同时改变 3 个方向盒子长度 ( $\pm 1\%$ ,  $\pm 2\%$ ,  $\pm 3\%$ ,  $\pm 4\%$ ,  $\pm 5\%$ ), 在 NVT 系综下采集不同热扰动结构 (300—900 K).

DP-GEN 迭代分三阶段实施: 首先收敛单质, 等摩尔比二元, 三元合金, 随后扩展至非等比二元, 三元体系, 最终探索四元合金. 每个组分包含 3 种相结构, 初始构型共计 14085 个 (单质 4 个, 二元 558 个, 三元 5580 个, 四元 13485 个). 探索的温度区间为 300—4000 K, 在 300—2100 K 温度范围内, 温度采样间隔为 300 K, 2400—4000 K 范围内, 温度采样间隔为 400 K. 压强采样范围是  $-5$ —40 GPa, 在  $-5$ —5 GPa 范围内, 压强采样间隔为 1 GPa, 而在 5—40 GPa 范围内, 压强采样间隔为 5 GPa. 为了确保每一轮迭代都能够采集到更多

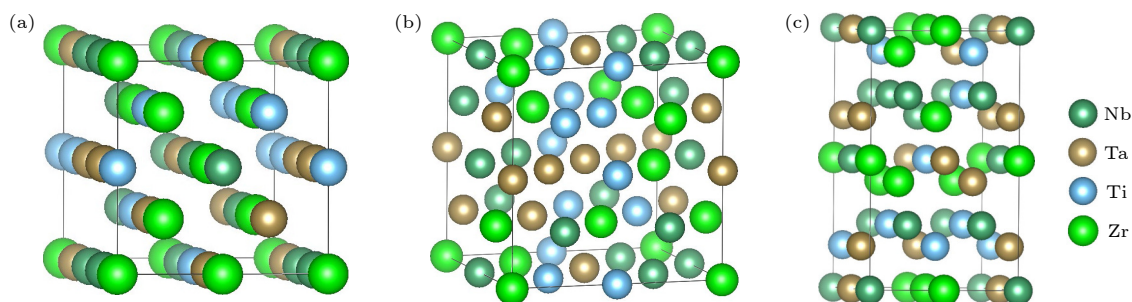


图 1 32 原子超胞 (a) BCC; (b) FCC; (c) HCP 结构示意图

Fig. 1. Schematic of 32-atom supercell: (a) BCC; (b) FCC; (c) HCP structure.

具有代表性的构型,采用蒙特卡罗和分子动力学相结合的方法进行采样,这种方法能够采集相同元素配比下不同元素占位的结构;同时,每条动力学轨迹(20 ps)间隔 0.5 ps 输出 1 个结构,确保前后两次输出的结构具有较大差异;并且,在迭代过程中通过动态调整力偏差置信区间,确保被标记的结构具有较大差异性(在 DP-GEN 迭代过程中,会对动力学轨迹输出的结构进行受力计算.若 4 个 DP 模型对相同构型受力值判断的最大差值大于置信区间的上限,则被判为失败构型;低于置信区间下限的构型则被判为准确构型,即当前模型具备描述该构型的能力,无需加入训练集中;只有落在置信区间内的构型才会可能被标记,补充到训练集中).采用 DeepMD-kit<sup>[35]</sup> 软件包拟合 DFT 数据,选择 *se\_atten*<sup>[36]</sup> 描述符,其在多元素体系中具有较高预测精度,能够降低计算量和训练成本.截断半径为 6 Å,嵌入网络为 (25, 50, 100),拟合网络为 (240, 240, 240),损失函数权重因子分别为能量 (0.02, 1),受力 (1000, 1),维里应力 (0.02, 1),学习率从初始的 0.001 经  $2 \times 10^5$  步衰减至  $1 \times 10^{-8}$ ,当准确构型达到 95% 时,认为迭代收敛.

采用 VASP (Vienna *ab initio* simulation package)<sup>[37-38]</sup> 软件包计算初始数据集和候选结构的能量,受力及维里应力,平面波基组的动能截断为 500 eV,电子结构优化收敛标准为  $10^{-7}$  eV.根据 Monkhorst-Pack 方法,布里渊区 *k* 点网格密度为  $0.2 \text{ \AA}^{-1}$ ,采用广义梯度近似 (GGA)<sup>[39,40]</sup> 下的 PBE 泛函描述交换关联作用.采用 vaspkit<sup>[41]</sup> 软件包计算合金的弹性常数,在计算结构弹性常数时,*k* 点密度,平面波基组动能截断以及电子结构收敛标准等参数均与构建数据集时 DFT 计算参数保持一致.

## 2.2 分子动力学模拟设置

首先建立了单质 Ta 的 BCC 超胞结构,随后根据配比将 Ta 原子随机替换为 Nb, Ti 和 Zr 原子.测试发现,基于不同随机数替换原子得到的初

始结构压缩结果较为一致,因此下文讨论不同因素对合金压缩力学性质的影响时,均不考虑原子随机占位的影响.沿 [100], [110] 和 [111] 三种晶向的扩胞系数依次为  $20 \times 20 \times 40$ ,  $12 \times 12 \times 24$  和  $12 \times 12 \times 24$ ,原子总数分别为 32000, 27648 和 27648.在对结构压缩之前,首先对其进行能量最小化,然后在 NPT (300 K, 0 GPa) 系综下弛豫 50 ps.压缩过程同样在 NPT 系综下进行,温度为 300 K,与压缩方向垂直的 *x*, *y* 方向压力保持为 0.采用 OVITO<sup>[42]</sup> 软件分析原子结构,采用公共近邻分析<sup>[43]</sup> 和位错分析<sup>[44]</sup> 算法表征晶体缺陷.

## 3 结果与讨论

### 3.1 势函数验证

图 2(a)–(c) 展示了训练集的能量,受力及维里应力的分布.由于是对不同的温压区间、不同的合金组分以及不同的结构进行采样,结构本身在能量、受力以及维里应力等物理量上就存在差异,加之迭代过程中标记结构的随机性,数据集在不同区间内的分布不均.图 2(d)–(f) 展示了训练得到的 DP 模型在整个训练集以及测试集上对能量、受力和维里应力的预测效果.在训练集上能量、受力和维里应力的均方根误差分别为 13.2 meV/atom, 202.7 meV/Å 和 40.6 meV/atom,表明所获得的 DP 模型具有较高的拟合精度;在测试集上,能量、受力和维里应力的均方根误差分别为 13.99 meV/atom, 228.71 meV/Å 以及 44.18 meV/atom,这表明 DP 模型具有较高的预测精度.

进一步通过计算合金的弹性常数和熔点验证势函数模型的准确性,结果如表 1 所示. DP 和 DFT 计算采用相同的结构,结果表明 DP 计算值与实验测量值(熔点)以及 DFT 计算值吻合较好,除剪切模量外,其余计算值相对误差 (DP 和 DFT 计算值差值绝对值与 DFT 的比值) 均小于 10%.

表 1 DP 模型预测值和 DFT 计算结与实验值的比较

Table 1. Comparison of DP model predictions with DFT calculations and experimental values.

Method	$T_m/K$	$C_{11}/\text{GPa}$	$C_{12}/\text{GPa}$	$C_{44}/\text{GPa}$	$B/\text{GPa}$	$G/\text{GPa}$	$\mu$	
NbTaTiZr	DP	2361	170	129	30	142	32	0.43
	Exp/DFT	2440 (3.2%)	179 (5.0%)	134 (3.7%)	33 (10%)	151 (6.0%)	27 (18.5%)	0.42 (2.4%)

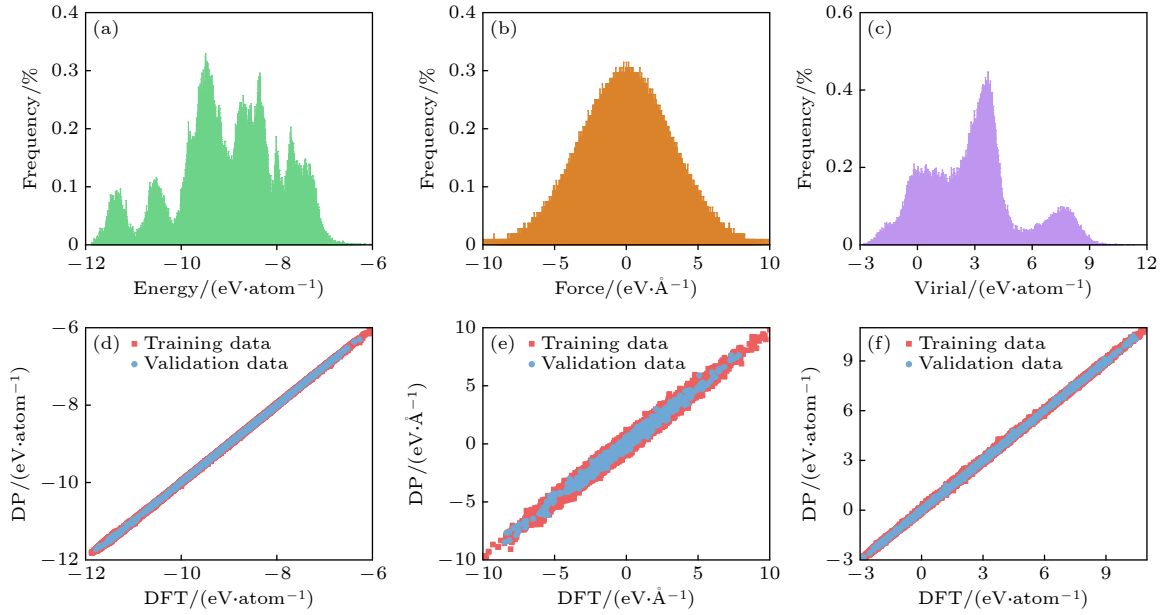


图2 训练集中 (a) 单原子能量、(b) 受力、(c) 维里应力的分布; DP 和 DFT 在 (d) 能量、(e) 受力、(f) 维里应力预测值的相关性  
Fig. 2. (a) Atomic energy, (b) forces, (c) distribution of virial stress; correlation between DP and DFT for (d) energy, (e) forces and (f) virial stress.

### 3.2 压缩力学性质

NbTaTiZr 合金沿 [100] 晶向下的压缩应力应变曲线如图 3(a) 所示. 在初始阶段, 压缩应力随着应变的增大近乎以线性比例增大, 当应变增大到约 15.78% 后, 应力发生突降, 这种应力达到峰值后随应变增大而急剧下降的现象在分子动力学模拟中较为常见 [45–47], 其机制在于弹性变形阶段累积的弹性应变能在此时释放, 导致应力下降. 将应力应变曲线的峰值压应力定义为材料的屈服强度, 结果为 10.8 GPa. 应力降到最低点后, 随着应变继续增大, 曲线呈现小幅回升并伴有轻微波动.

图 3(b) 为压缩过程中体积与单原子势能的变化规律. 在弹性阶段, 外界对体系做功导致能量升高, 应力突降点对应能量突降点, 表明此时弹性应变能的释放降低了体系总能量; 体积变化曲线显示, 压缩初期体系体积随应变增大而减小, 而在应力突降点附近, 体积突然增大, 表明结构发生膨胀并伴随应力松弛. 整个压缩过程的位错密度演化如图 3(c) 所示, 体系中主要的位错类型是  $1/2\langle 111 \rangle$ , 其次为少量  $\langle 100 \rangle$  位错, 这与 Zhang 等 [48] 研究趋势一致. 位错在应变值达到 15.78% 时开始形核, 随后位错密度逐渐增大, 位错密度变化趋势与应力应变曲线突降后的变化规律相吻合: 应力上升对应位

错密度增大, 应力下降则对应位错密度减小, 这表明位错滑移是该晶向下合金塑性变形的重要机制. 图 3(d) 呈现了压缩过程中相结构的变化, 弹性阶段已有少量 BCC 结构向无序结构转变, 在应变区间 15.8%—16.19% 内, BCC 相结构比例急剧下降, 同时无序结构比例急剧上升, 该应变区间与图 3(a) 中的应力突降区间高度一致, 表明从 BCC 相到无序结构的转变是导致应力大幅降低的主要原因. 之后, BCC 相结构比例逐渐回升, 无序结构比例相应下降, 这与应力应变曲线变化趋势一致. 为深入探究合金的微观结构演变, 图 3(e) 展示了 6 种不同应变条件下结构的径向分布函数 (radial distribution function, RDF). 在应变为 15.96% 时, 其 RDF 曲线较其他应变下的峰值较小, 且整体更为平缓, 表明此时体系中有大量原子处于无序态, 而其他应变下的 RDF 曲线都有多个尖锐峰, 说明对应结构中存在大量晶体有序结构.

进一步分析微观结构演变, 图 4 展示了不同应变下 NbTaTiZr 合金的位错形态与相结构分布. 位错线根据类型着色, 其中绿色代表  $1/2\langle 111 \rangle$  位错, 红色代表  $\langle 100 \rangle$  位错, 在应变为 15.78% 时, 位错开始形核. 随着应变增加, 位错密度逐渐升高, 同时位错线长度亦相应增长, 这与图 3(c) 中位错密度变化趋势一致. 图 4(a2)—(e2) 清晰呈现了相结构的分布, 在较低应变下, 可观察到局部区

域存在无序结构, 当应变增加至 15.96% 时, 体系中形成了大范围且分布相对均匀的无序结构区域,

此后, 随着应变继续增大, 无序原子比例逐渐减小, 逐渐转变为 BCC 结构.

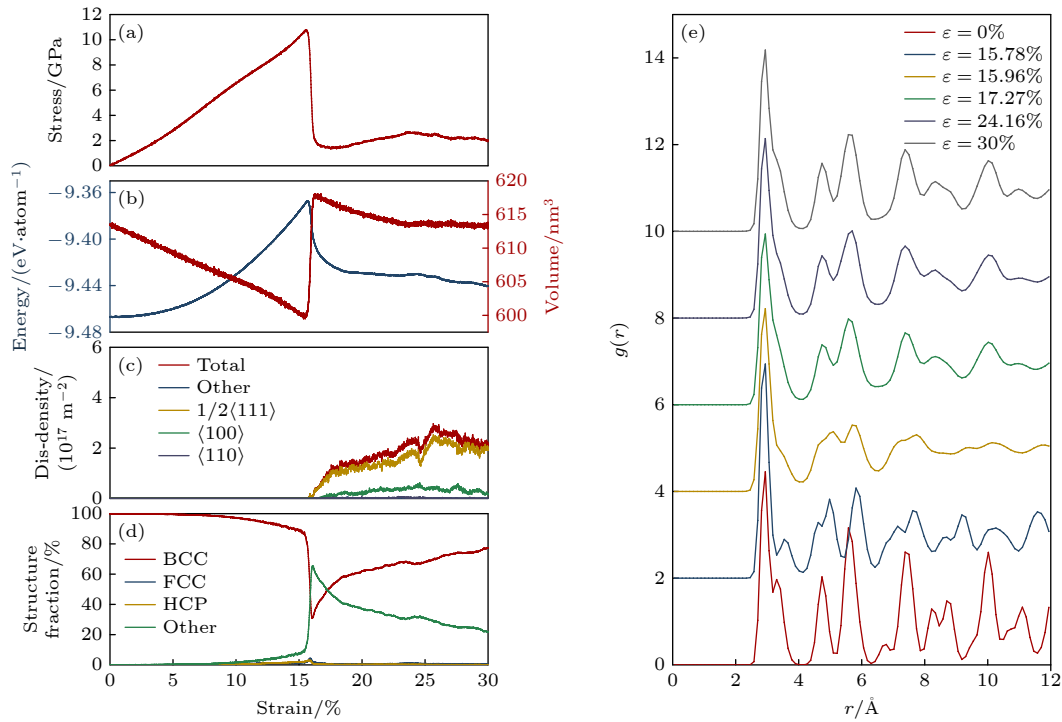


图 3 在 300 K,  $10^9 \text{ s}^{-1}$  条件下, NbTaTiZr 沿 [100] 晶向压缩的各性质随压缩应变的变化规律 (a) 压缩应力; (b) 能量和体积; (c) 位错密度; (d) 相结构. (e) 不同应变下的径向分布函数

Fig. 3. Evolution of properties for NbTaTiZr under uniaxial compression along the [100] crystalline orientation as a function of compressive strain at 300 K and a strain rate of  $10^9 \text{ s}^{-1}$ : (a) Compressive stress; (b) energy and volume; (c) dislocation density; (d) phase structure. (e) Radial distribution functions at different strain levels.

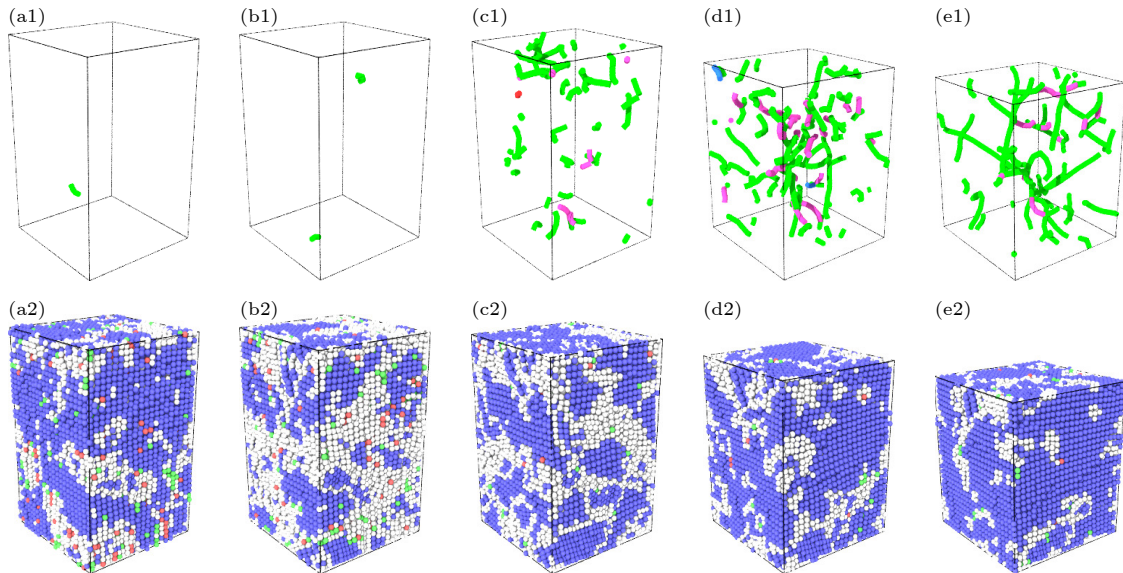


图 4 300 K,  $10^9 \text{ s}^{-1}$  沿 [100] 晶向压缩结构时, 应变分别为 15.78%, 15.96%, 17.27%, 24.16%, 30% 时的位错密度 (a1)–(e1) 和相结构分布 (a2)–(e2). 蓝色代表 BCC, 红色代表 HCP, 绿色代表 FCC, 灰色代表其他结构

Fig. 4. Dislocation density (a1)–(e1) and phase structure distribution (a2)–(e2) in NbTaTiZr under uniaxial compression along the [100] orientation at 300 K and a strain rate of  $10^9 \text{ s}^{-1}$ , shown at compressive strains of 15.78%, 15.96%, 17.27%, 24.16%, and 30%. Blue represents BCC, red represents HCP, green represents FCC, and grey represents other structures.

### 3.3 晶体取向对压缩力学性质的影响

合金的压缩力学行为通常表现出显著的晶体取向依赖性<sup>[45]</sup>, 深入理解这种取向相关的力学响应, 对于全面认识 NbTaTiZr 合金的压缩变形机制以及设计先进合金具有重要指导意义. 为此, 我们计算了该合金沿 [110] 和 [111] 晶向的压缩行为, 其应力应变曲线如图 5(a), (b) 所示. 结合图 3(a) 中 [100] 晶向的结果对比分析, 可以清晰观察到应力应变曲线呈现明显的各向异性, 具体而言, 沿 [111] 和 [100] 晶向压缩时, 应力应变曲线表现出相似的变化规律: 应力首先近乎线性增加至峰值, 随后发生突降, 而沿 [110] 晶向压缩, 应力状态的变化波动性显著小于另外两个方向, 沿 [110] 晶向压缩的屈服强度最低, 而沿 [111] 晶向的屈服强度最高. 图 5(c), (d) 展示了沿不同晶向压缩结构随应变的演变规律, 结合图 3(d) 综合分析, 沿 [100] 和 [111] 晶向压缩时, 结构变化规律较为相似, 无序结构都会出现一个非常明显的突变点, 且无序结构比例最大值要高于相同应变下 BCC 结构含量, 这个应变点也对应应力应变曲线的突降点. 而 [110] 晶向的无序结构含量始终低于 BCC 相结构比例, 没

有明显的增降点, 在结构达到屈服后, 其无序结构的比例仅在小范围内波动, 这与其应力应变曲线的变化趋势相一致.

从图 5(c) 可以发现, 沿 [110] 晶向压缩时, 无序结构含量不仅最低, 且其变化趋势与 [100] 和 [111] 晶向也存在显著差异, 这表明 [110] 晶向的变形机制可能和 [111], [100] 晶向有所不同. 为探究其微观机制, 图 6(a1)—(a4) 展示了 300 K 条件下沿 [110] 晶向压缩至不同应变时的微观结构. 在屈服点之前, 结构中仅出现零星分布的无序区域, 随着应变增大, 这些无序结构位点发生较大剪切变形, 使得变形较为局域. 同时, 变形孪晶开始形核、生长、孪晶界经历扩展、增殖、湮灭, 如图 6(a2)—(a4) 插图所示. 在结构上表现为无序原子比例的波动, 导致应力应变曲线在屈服点之后处于波动变化. 图 6(b1)—(b4) 展示了不同应变下的局部剪应变分布, 分析可见剪应变较大处与孪晶轮廓高度吻合, 证实了孪晶变形在该塑性变形中的主导作用.

与沿 [100] 晶向压缩结果相似, 沿 [111] 晶向的压缩变形机制同样以位错滑移和局域无序化为主, 不同应变下的位错组态和相结构分布如图 7 所示.

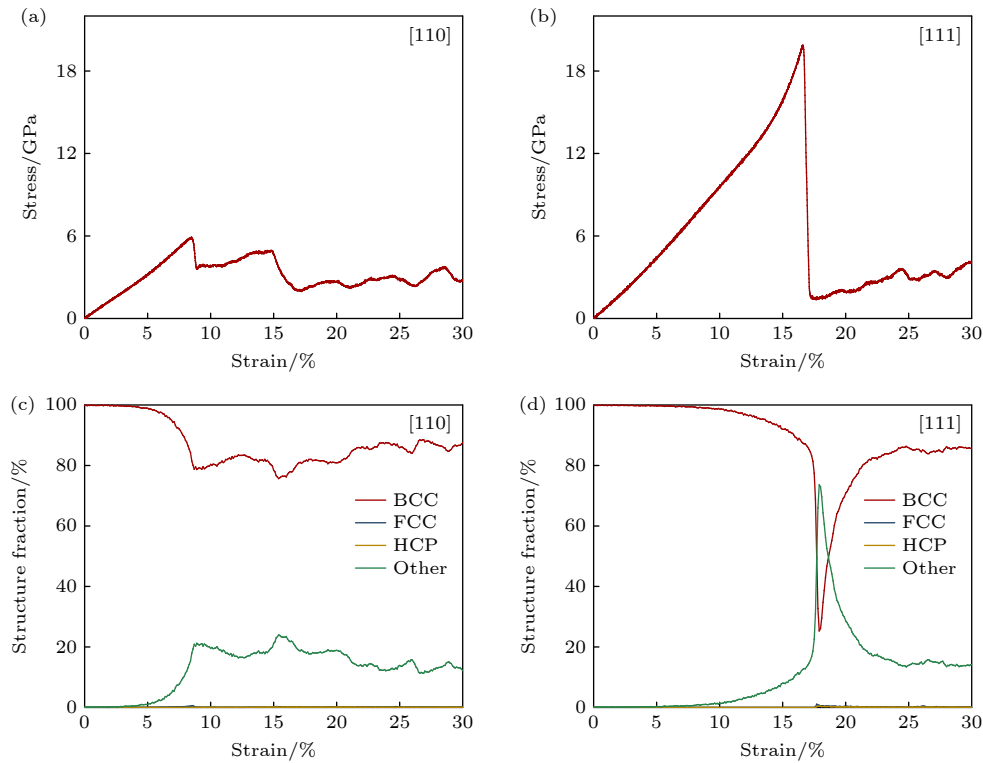


图 5 沿不同晶向压缩的应力应变曲线 (a), (b) 和相结构的变化规律 (c), (d) (a), (c) 沿 [110] 晶向; (b), (d) 沿 [111] 晶向  
Fig. 5. Stress-strain curves (a), (b) and structural evolution (c), (d) under uniaxial compression along the different orientations: (a), (c) [110] orientations; (b), (d) [111] orientations.

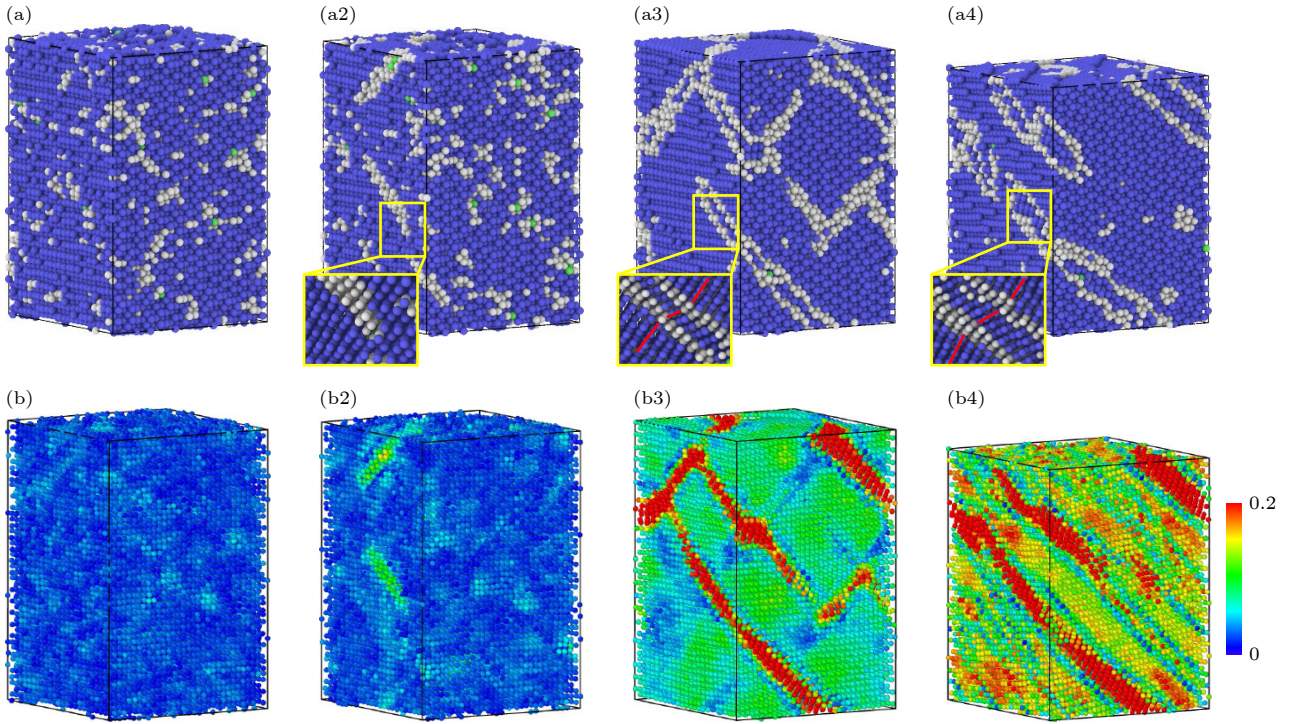


图 6 300 K,  $10^9 \text{ s}^{-1}$  条件下沿 [110] 晶向压缩, 应变不同时原子结构 (a1)—(a4) 和剪应变分布 (b1)—(b4) (a1), (b1) 8.3%; (a2), (b2) 8.6%; (a3), (b3) 8.9%; (a4), (b4) 14.9%

Fig. 6. Atomic structures (a1)—(a4) and shear strain distribution (b1)—(b4) in NbTaTiZr under uniaxial compression along the [110] orientation at 300 K and  $10^9 \text{ s}^{-1}$  for varying strains: (a1), (b1) 8.3%; (a2), (b2) 8.6%; (a3), (b3) 8.9%; (a4), (b4) 14.9%.

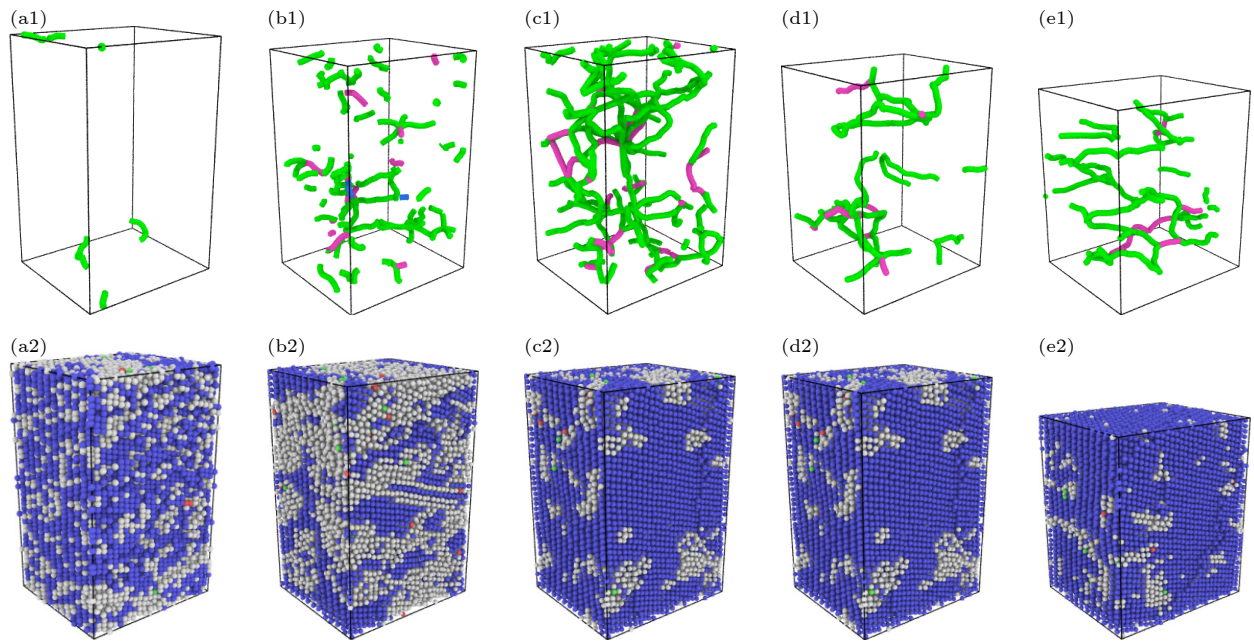


图 7 300 K,  $10^9 \text{ s}^{-1}$  沿 [111] 晶向压缩结构时, 应变分别为 16.7%, 17.4%, 18.7%, 24%, 30% 时的位错密度 (a1)—(e1) 和相结构分布 (a2)—(e2), 其中蓝色代表 BCC, 红色代表 HCP, 绿色代表 FCC, 灰色代表其他结构 (a1), (a2) 16.7%; (b1), (b2) 17.4%; (c1), (c2) 18.7%; (d1), (d2) 24%; (e1), (e2) 30%

Fig. 7. Dislocation density (a1)—(e1) and phase structure distribution (a2)—(e2) in NbTaTiZr under uniaxial compression along the [111] orientation at 300 K and a strain rate of  $10^9 \text{ s}^{-1}$  for varying strains, and blue represents BCC, red represents HCP, green represents FCC, and grey represents other structures: (a1), (a2) 16.7%; (b1), (b2) 17.4%; (c1), (c2) 18.7%; (d1), (d2) 24%; (e1), (e2) 30%.

应变在 16.7%—17.4% 内 (图 7(a1), (b1)), 位错线短且呈零散分布, 应变增大到 18.7% 时 (图 7(c1)), 位错线变长, 此后, 随着应变的增大, 位错发生湮灭, 位错线密度降低. 应力状态从屈服点突降的过程中, 出现了明显的无序化转变 (图 7(b2)), 屈服之后, 大部分无序结构又转变为 BCC 结构, 剩余少量零星分布的无序原子.

结合 3.2 节结果可以发现, NbTaTiZr 合金沿不同晶向的压缩力学性质存在显著的各向异性. 沿 [110] 晶向压缩屈服强度最低, 沿 [111] 晶向压缩强度最高, [100] 屈服强度居中. 这可能和不同晶向原子间距有关, [110] 晶向原子间距最大, [111] 晶向原子间距最小, [100] 晶向原子间距居中. 较大的原子间距, 原子间相互作用较弱, 而较小的原子间距, 导致原子间相互作用增强, 从而表现出更高的屈服强度, 在 BCC 金属 Mo 也呈现出类似规律 [49].

### 3.4 应变率对压缩力学性质的影响

应变率是影响材料压缩力学行为的关键因素 [50–52], 为研究其效应, 计算了低于 ( $10^8 \text{ s}^{-1}$ ) 和高于 ( $10^{10} \text{ s}^{-1}$ )  $10^9 \text{ s}^{-1}$  应变率条件下 NbTaTiZr 合金

的压缩力学行为, 相应的应力应变曲线如图 8(a), (b) 所示. 随着应变率的增大, 合金的屈服强度也逐渐增加,  $10^8 \text{ s}^{-1}$  条件下, 屈服强度为 10.2 GPa,  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  条件下, 屈服强度为 13.8 GPa, 3 种应变率加载下的应力应变曲线的线性段几乎重合, 即弹性模量几乎不受应变率的影响. 增大应变率可以提高合金的屈服强度在  $\text{Co}_{25}\text{Ni}_{25}\text{Fe}_{25}\text{Al}_{7.5}\text{Cu}_{17.5}$  [50],  $\text{FeNiCrCoCu}$  [51],  $\text{FeNiCrCoAl}$  [53] 等体系中也有发现. 当应力到达屈服点后, 继续增大应变, 应力-应变曲线出现突然下降的趋势, 在此后的加载过程中, 低应变率 ( $10^8 \text{ s}^{-1}$ ) 加载条件下出现了锯齿流动, 而高应变率 ( $10^{10} \text{ s}^{-1}$ ) 条件下则没有; 前面研究表明, 在压缩过程中  $1/2 \langle 111 \rangle$  是合金中最为重要的位错类型, 图 8(b) 展示了不同应变率条件下的  $1/2 \langle 111 \rangle$  型位错密度变化,  $10^8 \text{ s}^{-1}$  和  $10^9 \text{ s}^{-1}$  加载条件下位错密度较为接近, 而当应变率增至  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  时, 位错几乎消失.

进一步分析压缩过程中的相结构变化可以发现, 在结构屈服后合金中无序结构都会突然增加, 只有在  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  应变率条件下, 无序结构会一直保持高比例. 在另外两种应变率条件下, 无序结构都会随着应变的增大, 再次转变为 BCC 结构.

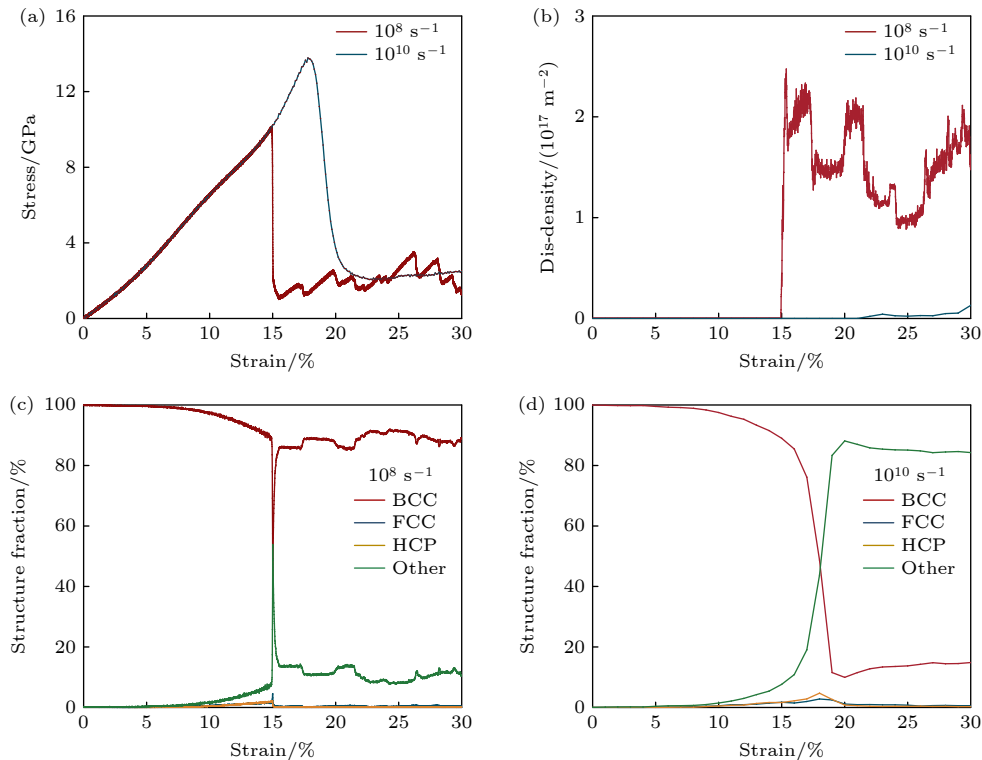


图 8 (a), (b)  $10^8 \text{ s}^{-1}$  和  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  应变率下的应力应变曲线和位错密度; (c), (d)  $10^8 \text{ s}^{-1}$  和  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  应变率下相比例随应变的变化  
Fig. 8. (a), (b) Stress-strain curves and dislocation density at strain rates of  $10^8 \text{ s}^{-1}$  and  $10^{10} \text{ s}^{-1}$ ; (c), (d) phase proportion versus strain at  $10^8 \text{ s}^{-1}$  and  $10^{10} \text{ s}^{-1}$ .

图 9(a) 展示了 [100], [110] 和 [111] 3 种晶向在不同应变率条件下的屈服强度. 所有的应变率条件下, 沿 [111] 晶向压缩的屈服强度始终处于最高, 而沿 [110] 晶向压缩的屈服强度始终最小. 为定量表征无序化程度, 取应变范围为 20%—30% 内无序原子比例的平均值作为该应变率下的无序结构比例, 图 9(b) 为 3 种不同应变率下沿 3 种不同晶向的无序结构含量. 分析可见, 无序结构的比例随应变率的增大而逐渐增大, 表明高应变率显著促进了合金向无序态的转变<sup>[50]</sup>. 在  $10^9$ — $10^{10}$   $s^{-1}$  范围内, 屈服强度以及无序结构的含量增长速度明显高于低应变率区间 ( $10^8$ — $10^9$   $s^{-1}$ ).  $10^8$   $s^{-1}$  和  $10^{10}$   $s^{-1}$  加载应变率下的  $1/2 \langle 111 \rangle$  位错密度演化如图 9(c)—(d) 所示, 位错密度同样表现出明显的各向异性以及应变率敏感性, [110] 晶向在高达  $10^{10}$   $s^{-1}$  条件下, 仍然存在位错, 但较  $10^8$   $s^{-1}$  应变率下结构相比有所减少, 而 [111] 晶向压缩结果与 [100] 晶向结果相似,  $10^{10}$   $s^{-1}$  应变率下几乎不存在  $1/2 \langle 111 \rangle$  型位错.

图 10 通过原子排布及位错线分布展示了不同晶向和应变率下的结果: 在较低应变率 ( $10^8$   $s^{-1}$ ), 3 种晶向下的无序原子比例均较低, 且无序原子主

要附着于位错线附近, 远离位错的区域则相对较少. 然而, 当应变率提高至  $10^{10}$   $s^{-1}$  时, 3 种晶向下无序结构大量增加, 无序原子不仅仅依附在位错线周围, 在无位错区域也广泛存在. 这表明高应变率条件下, 变形机制发生了转变: 高应变率通过抑制位错的形成和增殖, 进而促进了非位错主导的、更均匀的无序结构的产生.

### 3.5 组分对压缩力学性质的影响

调整组分对合金的力学性质有显著影响<sup>[54]</sup>, 分别计算了在 300 K,  $10^9$   $s^{-1}$  条件下增大, 减小 Nb, Ta, Ti 和 Zr 元素含量的压缩力学响应, 增大或者减小元素含量是相对于等摩尔比体系而言 (每种元素含量为 25%), 增大或减小的比例为 10%. 当增加某一元素时, 另外 3 种元素总含量降低, 但依然保持等摩尔比. 为了简化形式, 将每单独减小或增大元素含量的化学式依次写为  $Nb_{0.15}$ ,  $Nb_{0.35}$ ,  $Ta_{0.15}$ ,  $Ta_{0.35}$ ,  $Ti_{0.15}$ ,  $Ti_{0.35}$ ,  $Zr_{0.15}$ ,  $Zr_{0.35}$ , 依次表示减小或增大 10% 的 Nb, Ta, Ti, Zr 元素的化学式. 所对应的应力应变曲线如图 11 所示, 所有情况下, 应力都是先随着应变的增大线性增大, 达到屈服点

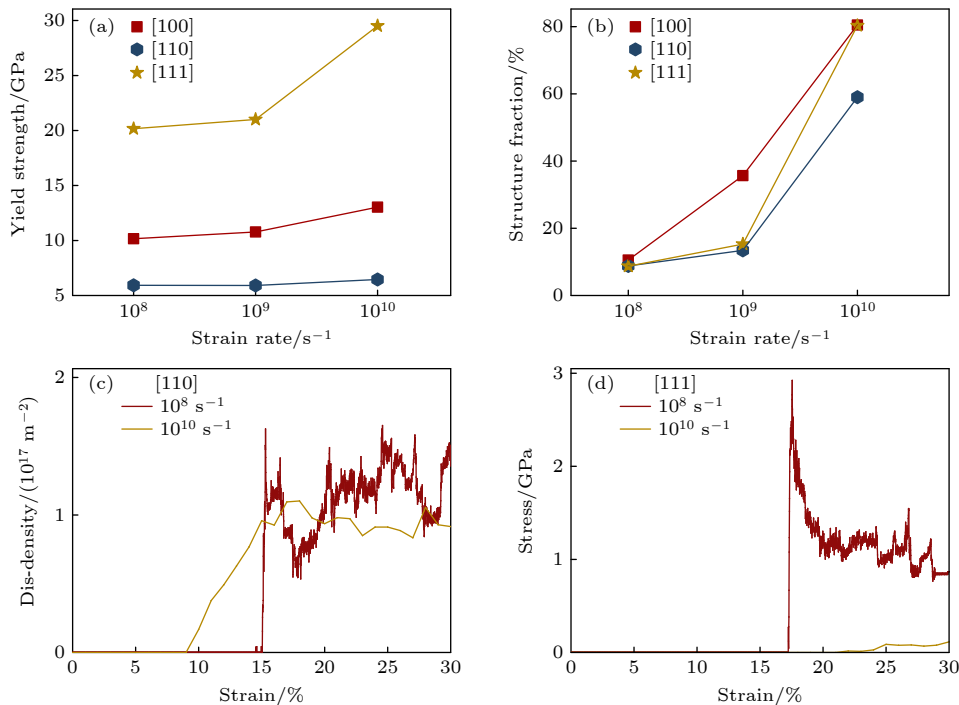


图 9 [100], [110] 和 [111] 晶向在  $10^8$   $s^{-1}$ ,  $10^9$   $s^{-1}$ ,  $10^{10}$   $s^{-1}$  应变率条件下的屈服强度 (a) 和无序结构比例 (b);  $10^8$   $s^{-1}$ ,  $10^{10}$   $s^{-1}$  应变率条件下 [110] 晶向 (c) 和 [111] 晶向 (d) 的位错密度随应变的变化

Fig. 9. Yield strength (a) and disordered structure proportion (b) under [100], [110], and [111] crystal orientations at strain rates of  $10^8$   $s^{-1}$ ,  $10^9$   $s^{-1}$ , and  $10^{10}$   $s^{-1}$ ; dislocation density versus strain for [110] orientation (c) and [111] orientation (d) at strain rates of  $10^8$   $s^{-1}$  and  $10^{10}$   $s^{-1}$ .

之后, 弹性应变能突然释放, 导致应力突然降低, 随后开始塑性变形. 增大 Nb 或 Ta 含量能明显提

高合金的屈服强度以及弹性模量, 而增大 Ti 或 Zr 含量则起相反作用.

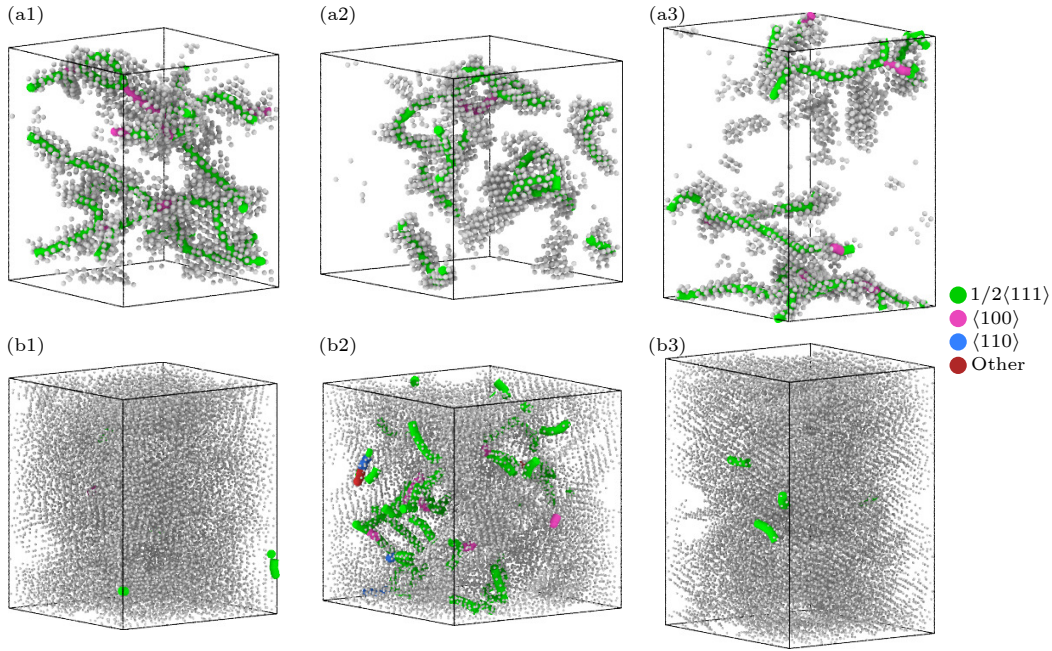


图 10 应变为 28% 时, 位错组态在应变率  $10^8 \text{ s}^{-1}$  (a1)–(a3) 和  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  (b1)–(b3) 下的分布, 灰色原子表示无序原子 (a1), (b1) [100] 晶向; (a2), (b2) [110] 晶向; (a3), (b3) [111] 晶向

Fig. 10. Dislocation configurations at 28% strain under strain rates of  $10^8 \text{ s}^{-1}$  (a1)–(a3) and  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  (b1)–(b3), and the gray atoms indicate disordered atomic configurations: (a1), (b1) [100] crystallographic orientations; (a2), (b2) [110] crystallographic orientations; (a3), (b3) [111] crystallographic orientations.

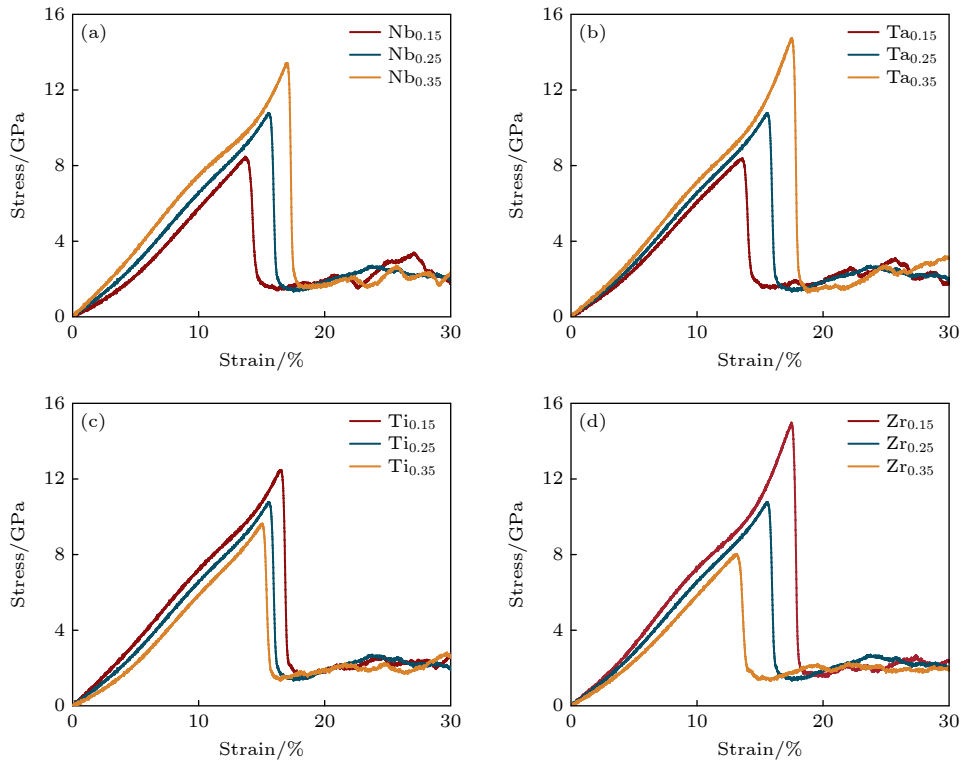


图 11 不同元素含量的压缩应力应变曲线 (a) Nb, (b) Ta, (c) Ti, (d) Zr

Fig. 11. Compressive stress-strain curves for different content of element: (a) Nb, (b) Ta, (c) Ti, (d) Zr.

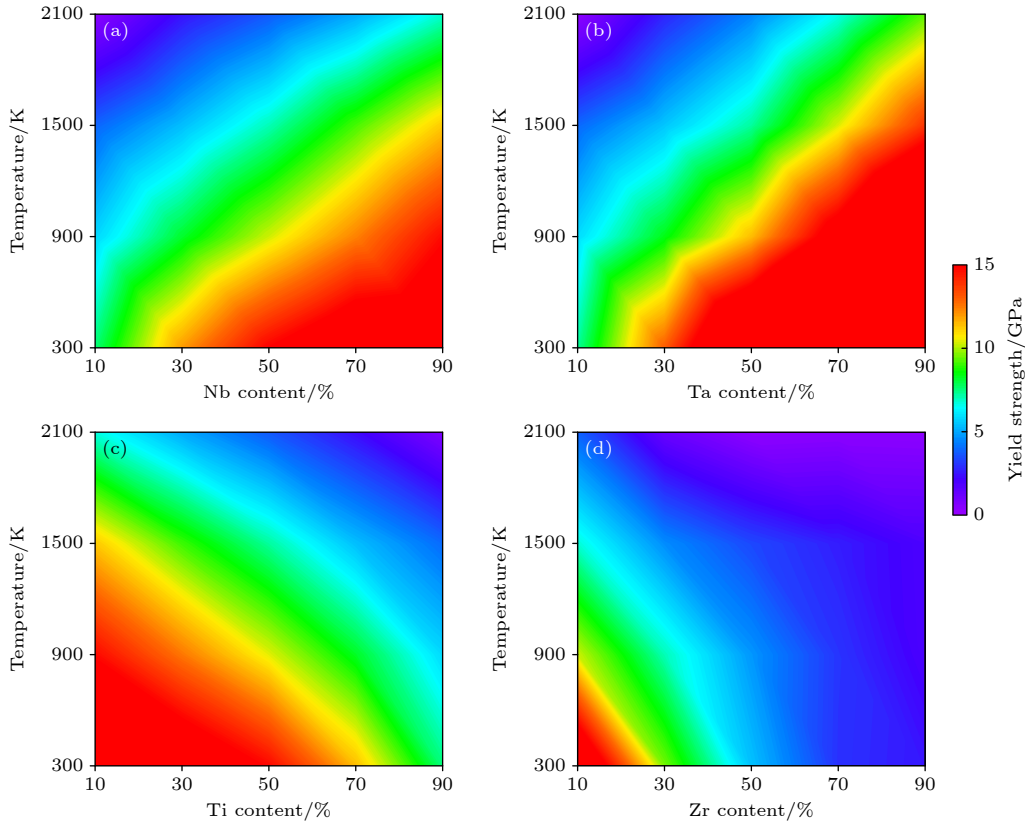


图 12 300—2100 K 温度范围内改变单一元素含量对屈服强度的影响 (a) Nb; (b) Ta; (c) Ti; (d) Zr

Fig. 12. Effects of varying the content of a single element on yield strength across the 300—2100 K temperature range: (a) Nb; (b) Ta; (c) Ti; (d) Zr.

为系统研究组分效应以及不同温度下合金屈服强度的变化, 补充计算了 300—2100 K (300 K, 900 K, 1500 K, 2100 K 共 5 个温度点) 范围内沿 [100] 晶向的压缩力学响应. 同样, 当改变某一元素比例时, 其余 3 种元素保持等摩尔比, 该元素含量依次为 10%, 30%, 50%, 70%, 90%, 相应的其余 3 种元素含量总和为 90%, 70%, 50%, 30%, 10%. 图 12 为不同组分下的屈服强度云图, 可以发现随着温度的升高, 所有组分下合金的屈服强度都会降低, 这是由于温度升高, 导致原子热运动加剧, 原子迁移概率增大, 降低了合金的屈服强度. 在整个组分空间变化上, 增大 Nb 含量, 保持 Ta, Ti, Zr 这 3 种元素等摩尔比, 可以提高合金的屈服强度, 单独增大 Ta 元素含量也是相同规律. 在高温条件下, 增大 Ta 元素含量对屈服强度的提高效果略强于增大 Nb 元素含量的增强效果. 而增大 Ti 含量, 保持 Nb, Ta, Zr 这 3 种元素为等摩尔比, 则会降低合金的屈服强度, 与单独增大 Zr 元素含量呈现相同的规律. 后续将研究同时改变多种元素比例对合金压缩力学性质的影响.

## 4 结 论

本研究通过构建高精度机器学习势函数, 研究了 NbTaTiZr 四元难熔多主元合金在压缩载荷下的变形机制与力学响应规律: 发现在  $10^9 \text{ s}^{-1}$  加载应变率和 300 K 条件下, 沿 [100] 晶向压缩时体系通过 BCC 相向无序态转变释放弹性应变能, 位错以  $1/2 \langle 111 \rangle$  型为主; 进一步分析表明其力学行为具有显著各向异性, [111] 晶向展现出最高屈服强度, 而 [110] 晶向最低, 沿 [110] 晶向压缩, 结构通过变形孪晶协调变形, 研究还发现应变率从  $10^8 \text{ s}^{-1}$  增至  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  时, 屈服强度显著提高, 同时结构中无序结构比例也显著提高, 证实高应变率通过抑制位错运动促进无序化转变. 值得注意的是, 该合金在 2100 K 高温下仍保持优异强度, 增大 Nb/Ta 元素含量可显著提高合金屈服强度, 但增大 Ti/Zr 元素含量则产生负效应.

## 参考文献

- [1] Senkov O N, Wilks G B, Miracle D B, Chuang C P, Liaw P K 2010 *Intermetallics* 18 1758

- [2] Senkov O N, Scott J M, Senkova S V, Miracle D B, Woodward C F 2011 *J. Alloys Compd.* **509** 6043
- [3] Senkov O N, Senkova S V, Woodward C, Miracle D B 2013 *Acta Mater.* **61** 1545
- [4] Li X G, Chen C, Zheng H, Zuo Y X, Ong S Y P 2020 *npj Comput. Mater.* **6** 10
- [5] Senkov O N, Wilks G B, Scott J M, Miracle D B 2011 *Intermetallics* **19** 698
- [6] Senkov O N, Scott J M, Senkova S V, Meisenkothen F, Miracle D B, Woodward C F 2012 *J. Mater. Sci.* **47** 4062
- [7] Shittu J, Rietema C J, Juhasz M, Ellyson B, Elder K L M, Bocklund B J, Sims Z C, Li T T, Henderson H B, Berry J 2024 *J. Alloys Compd.* **977** 11
- [8] Guo Z H, Chen C, Tu Y L, Tang E L 2024 *Chin. J. High Pressure Phys.* **38** 102 (in Chinese) [郭孜涵, 陈闯, 涂益良, 唐恩凌 2024 高压物理学报 **38** 102]
- [9] Luo X P, Li X H, Tang Z M, Li Z G, Chen S, Wang Y, Yu Y Y, Hu J B 2024 *Chin. J. High Pressure Phys.* **38** 064101 (in Chinese) [罗小平, 李绪海, 唐泽明, 李治国, 陈森, 王媛, 俞宇颖, 胡建波 2024 高压物理学报 **38** 064101]
- [10] Xiang T, Cai Z Y, Du P, Li K, Zhang Z W, Xie G Q 2021 *J. Mater. Sci. Technol* **90** 150
- [11] Wang H, Niu Z Y, Chen C G, Chen H Q, Zhu X Y, Zhou F, Zhang X B, Liu X J, Wu Y, Jiang S H 2022 *Mater. Charact.* **193** 112265
- [12] Wu Y N, Zhang Y, Li Z Y, Liu Z, Zhao E J, Liu J S 2024 *J. Mater. Res. Technol.* **30** 8854
- [13] Wang R X, Tang Y, Li S, Zhang H, Ye Y C, Zhu L A, Ai Y L, Bai S X 2019 *Mater. Des.* **162** 256
- [14] Wang R X 2018 *M.S. Thesis (Changsha: National University of Defense Technology)* (in Chinese) [王睿鑫 2018 硕士学位论文 (长沙: 国防科技大学)]
- [15] Wang R X, Tang Y, Li S, Ai Y L, Li Y Y, Xiao B, Zhu L A, Liu X Y, Bai S X 2020 *J. Alloys Compd.* **825** 154099
- [16] Lo K, Murakami H, Glatzel U, Yeh J, Gorsse S, Yeh A C 2022 *Int. J. Refract. Met. Hard Mater* **108** 105918
- [17] Liu Z T, Chen B, Ling W D, Bao N Y, Kang D D, Dai J Y 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 037102 (in Chinese) [刘泽涛, 陈博, 令伟栋, 包南云, 康冬冬, 戴佳钰 2022 物理学报 **71** 037102]
- [18] Wen P, Tao G 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 246101 (in Chinese) [闻鹏, 陶钢 2022 物理学报 **71** 246101]
- [19] Zhou X Y, Wu H H, Wu Y, Liu X J, Peng X Y, Hou S, Lu Z P 2024 *Acta Mater.* **281** 120364
- [20] Li J, Feng H, Chen Y, Li L, Tian Y Y, Tan F S, Peng J, Chen H T, Fang Q H 2020 *Chin. J. Solid Mech.* **41** 16 (in Chinese) [李甲, 冯慧, 陈阳, 李理, 田圆圆, 谭福盛, 彭静, 陈浩天, 方棋洪 2020 固体力学学报 **41** 16]
- [21] Ferrari A, Körmann F, Asta M, Neugebauer J 2023 *Nat. Comput. Sci.* **3** 221
- [22] Wen T Q, Zhang L F, Wang H, Weinan E, Srolovitz D J 2022 *Mater. Futures* **1** 022601
- [23] Qiu R, Zeng Q Y, Han J S, Chen K, Kang D D, Yu X X, Dai J Y 2025 *Phys. Rev. B* **111** 064103
- [24] Chang X J, Chen B, Zeng Q Y, Wang H, Chen K G, Tong Q C, Yu X X, Kang D D, Zhang S, Guo F Y, Hou Y, Zhao Z X, Yao Y S, Ma Y M, Dai J Y 2024 *Nat. Commun.* **15** 8543
- [25] Chang X J, Kang D D, Chen B, Dai J Y 2025 *Chin. Phys. Lett.* **42** 053704
- [26] Guo F Y, Chen B, Zeng Q Y, Yu X X, Chen K G, Kang D D, Du Y, Wu J H, Dai J Y 2023 *J. Chem. Phys.* **159** 204702
- [27] Wu L P, Li T 2024 *J. Mech. Phys. Solids* **187** 105639
- [28] Wang T Y, Li J Y, Wang M, Li C Z, Su Y Q, Xu S Q, Li X G 2024 *npj Comput. Mater.* **10** 143
- [29] Xiao R L, Wang Q, Qin J Y, Zhao J F, Ruan Y, Wang H P, Li H, Wei B 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 085102
- [30] Zhang Y Z, Wang H D, Chen W J, Zeng J Z, Zhang L F, Wang H, Weinan E 2019 *Comput. Phys. Commun.* **253** 107206
- [31] Yang F H, Zeng Q Y, Chen B, Kang D D, Zhang S, Wu J H, Yu X X, Dai J Y 2022 *Chin. Phys. Lett.* **39** 116301
- [32] Han J, Zeng Q Y, Chen K, Yu X, Dai J Y 2023 *Nanomaterials* **13** 1576
- [33] Zeng Q Y, Chen B, Kang D D, Dai J Y 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 187102 (in Chinese) [曾启昱, 陈博, 康冬冬, 戴佳钰 2023 物理学报 **72** 187102]
- [34] Gao T Y, Zeng Q Y, Chen B, Kang D D, Dai J Y 2024 *Acta Metall. Sin.* **60** 1439 (in Chinese) [高天雨, 曾启昱, 陈博, 康冬冬, 戴佳钰 2024 金属学报 **60** 1439]
- [35] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [36] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci* **6** 15
- [37] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [38] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [39] Zeng J Z, Zhang D, Lu D H, et al. 2023 *J. Chem. Phys.* **159** 054801
- [40] Zhang D, Bi H R, Dai F Z, Jiang W R, Liu X Z, Zhang L F, Wang H 2024 *npj Comput. Mater.* **10** 94
- [41] Wang V, Xu N, Liu J C, Tang G, Geng W T 2019 *Comput. Phys. Commun.* **267** 108033
- [42] Stukowski A 2009 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [43] Stukowski A 2012 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 045021
- [44] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 085007
- [45] Liu X R, Chang L, Ma T H, Zhou C Y 2023 *Mater. Today Commun.* **36** 106523
- [46] Santos-Florez P A, Dai S C, Yao Y, Yanxon H, Li L, Wang Y J, Zhu Q, Yu X X 2023 *Acta Mater.* **255** 119041
- [47] Pan Y, Fu T, Duan M Y, Li C Y, Hu H, Peng X H 2024 *ACS Appl. Nano Mater.* **7** 8121
- [48] Zhang Q, Huang R R, Zhang X, Cao T Q, Xue Y F, Li X Y 2021 *Nano Lett.* **21** 3671
- [49] Hu Y Q, Ding S H, Xu J F, Zhang Y H, Wu W W, Xia R 2023 *J. Mater. Res. Technol.* **25** 285
- [50] Wu Y C, Shao J L 2023 *Int. J. Plast.* **169** 103730
- [51] Wang Q, Gong J H, Chen W Q, Tian Y 2024 *Mater. Today Commun.* **38** 108187
- [52] Wang J, Ma Q L, Cheng H P, Yu H C, Zhang S X, Shang H C, Zhang G Q, Wang W B 2023 *Materials* **16** 5126
- [53] Jiang J, Chen P W, Qiu J L, Sun W F, Saikov I, Shcherbakov V, Alymov M 2021 *Mater. Today Commun.* **28** 102525
- [54] Li J, Guo X X, Ma S G, Li Z Q, Xin H 2021 *Chin. J. High Pressure Phys.* **35** 9 (in Chinese) [李健, 郭晓璇, 马胜国, 李志强, 辛浩 2021 高压物理学报 **35** 9]

## COVER ARTICLE

# Deformation mechanisms and compressive response of NbTaTiZr alloy via machine learning potentials\*

LIU Hongyang<sup>1)2)3)</sup> CHEN Bo<sup>1)2)3)†</sup> CHEN Rong<sup>1)</sup>  
 KANG Dongdong<sup>1)2)3)</sup> DAI Jiayu<sup>1)2)3)‡</sup>

1) (*College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*Hunan Key Laboratory of Extreme Matter and Applications, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

3) (*Hunan Research Center of the Basic Discipline for Physical States, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

( Received 6 June 2025; revised manuscript received 9 August 2025 )

## Abstract

Refractory multi-principal element alloys (RMPEAs) have become a hotspot in materials science research in recent years due to their excellent high-temperature mechanical properties and broad application prospects. However, the unique deformation mechanisms and mechanical behaviors of the NbTaTiZr quaternary RMPEA under extreme conditions such as high temperature and high strain rate are still unclear, limiting its further design and engineering applications. In order to reveal in depth the dynamic response of this alloy on an atomic scale, this study develops a high-accuracy machine learning potential (MLP) for the NbTaTiZr quaternary alloy and combines it with large-scale molecular dynamics (MD) simulations to systematically investigate the effects of crystallographic orientation, strain rate, temperature, and chemical composition on the mechanical properties and microstructural evolution mechanisms of the alloy under compressive loading. The results show that the NbTaTiZr alloy exhibits significant mechanical and structural anisotropy during uniaxial compression. The alloy exhibits the highest yield strength when loaded along the [111] crystallographic direction, while it shows the lowest yield strength when compressed along the [110] direction, where twinning is more likely to occur. Under compression along the [100] direction, the primary deformation mechanisms include local disordering transitions and dislocation slip, with  $1/2 \langle 111 \rangle$  dislocations being the dominant type. When the strain rate increases to  $10^{10} \text{ s}^{-1}$ , the yield strength of the alloy is significantly enhanced, accompanied by a notable increase in the proportion of amorphous or disordered structures, indicating that high strain rate loading suppresses dislocation nucleation and motion while promoting disordering transitions. Simulations at varying temperatures indicate that the alloy maintains a high strength level even at temperatures as high as 2100 K. Compositional analysis further indicates that increasing the atomic percentage of Nb or Ta effectively enhances the yield strength of the alloy, whereas an increase in Ti or Zr content adversely affects the strength. By combining MLP with MD methods, this study elucidates the anisotropic characteristics of the mechanical behavior and the strain rate dependence of disordering transitions in the NbTaTiZr RMPEA under combination of high strain rate and high temperature, providing an important theoretical basis and simulation foundation for optimizing and designing novel material under extreme environments.

**Keywords:** multi-principal-element alloys, isothermal compression, machine learning potential, mechanical properties

**PACS:** 61.66.Dk, 02.70.Ns

**DOI:** [10.7498/aps.74.20250738](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250738)

**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250738](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250738)

\* Project supported by the Science and Technology Innovation Program of Human Province, China (Grant No. 2021RC4026).

† Corresponding author. E-mail: [chenbochain@nudt.edu.cn](mailto:chenbochain@nudt.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [jydai@nudt.edu.cn](mailto:jydai@nudt.edu.cn)

## 基于机器学习势的NbTaTiZr多主元合金压缩力学性质

刘洪洋 陈博 陈荣 康冬冬 戴佳钰

### Deformation mechanisms and compressive response of NbTaTiZr alloy via machine learning potentials

LIU Hongyang CHEN Bo CHEN Rong KANG Dongdong DAI Jiayu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 196102 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250738

CSTR: 32037.14.aps.74.20250738

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250738>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 镍钴铬多主元合金高温高压相图与相变动力学模拟

Kinetic simulation of phase diagram and phase transitions in NiCoCr multi-principal element alloy at high temperature and high pressure

物理学报. 2025, 74(8): 086101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250097>

#### 体心立方多主元合金中原子应变的计算模拟

Computational simulation of atomic strain in body-centered cubic multi-principal element alloys

物理学报. 2025, 74(8): 086102 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250128>

#### 机器学习的量子动力学

Quantum dynamics of machine learning

物理学报. 2025, 74(6): 060701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20240999>

#### 单层MoSSe力学性质的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation study on mechanical properties of Janus MoSSe monolayer

物理学报. 2023, 72(4): 046201 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221815>

#### 机器学习结合固溶强化模型预测高熵合金硬度

Machine learning combined with solid solution strengthening model for predicting hardness of high entropy alloys

物理学报. 2023, 72(18): 180701 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230646>

#### 单层Janus MoSSe在不同手性角单轴拉伸应变下力学性质的第一性原理研究

First-principles study of mechanical properties of Janus monolayer MoSSe under uniaxial tensile strains at different chiral angles

物理学报. 2025, 74(16): 166201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250437>