

(HfNbTaTiZr)C 高熵碳化物 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的稳定性及其对其力学行为的影响*

李传颖¹⁾²⁾ 付涛^{1)†} 彭向和^{1)‡}

1) (重庆大学工程力学系, 重庆 400044)

2) (华南理工大学土木与交通学院, 广州 510641)

(2025 年 11 月 23 日收到; 2025 年 12 月 7 日收到修改稿)

晶界特征及受载行为是影响多晶陶瓷强度与塑性的关键因素. 本文基于第一性原理计算研究了 (HfNbTaTiZr)C 高熵碳化物陶瓷 (high-entropy carbide ceramic, HECC) 及其组分二元过渡金属碳化物 (transition metal carbides, TMCs) 中 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的稳定性及其在外载下的力学响应. 结果显示: 各体系均存在 Open 与 Compact 型两类晶界, Open 型晶界能较低, 结构更稳定. 剪切变形下, 除 IVB 族 TMCs 的 Open 型晶界因形成 C—C 键而发生 TM—C 键断裂失效外, 其余体系均表现为晶界迁移. HECC 中 Open 型晶界的首次迁移应力高于 TMCs, 体现出多主元晶界的强化作用. 拉伸作用下, 含 Compact 型晶界的 TMCs 主要以石墨化方式失效, 而 HECC 同时出现石墨化与沿晶断裂. 对于 Open 型晶界, IVB 族 TMCs 因晶界过剩体积增大而屈服, VB 族 TMCs 则发生沿晶断裂, 两类机制在 HECC 中均可观察到. 值得注意的是, 含 Compact 型晶界 HECC 的屈服强度接近 TMCs 的峰值, 应力水平突破了理想状态下“短板效应”的限制. 本研究揭示了晶界结构与多主元效应在力学响应中的协同作用, 研究结果可为 HECC 的晶界调控与力学性能优化提供理论依据.

关键词: 高熵碳化物陶瓷, 晶界, 力学性能, 失效模式**DOI:** 10.7498/aps.75.20251590**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251590

1 引言

在过去二十年中, 高熵合金 (high entropy alloys, HEAs) 因其优异的物理和力学性能已成为物理、力学和材料领域的重要研究方向之一^[1-4]. 受高熵概念的启发, 近年来, 高熵陶瓷 (high entropy ceramics, HECs)^[5-7] 亦备受关注并迅速发展, 研究对象涵盖高熵氧化物^[8,9]、高熵硼化物^[10,11]、高熵氮化物^[12,13] 及高熵碳化物^[14-17] 等多个体系. 其中, 高熵碳化物陶瓷 (high-entropy carbide ceramics, HECCs) 因其高硬度、高强度、优异的抗热震性及

低热导率等物理与力学性能^[16,18-20], 在超高温环境下展现出广阔的应用潜力. 由于多主元效应, HECCs 的力学行为与传统二元过渡金属碳化物 (transition metal carbides, TMCs) 相比呈现显著差异^[7,21-23]. 然而, 支撑 HECCs 优异性能的微观机制尚未得到充分揭示.

晶界 (grain boundaries, GBs) 作为晶体材料中普遍存在的重要结构缺陷之一, 其几何构型、能量特征与变形模式对材料的断裂韧性、塑性及强度等关键性能有深刻影响^[24-31]. 近年来, 通过晶界工程提升材料力学性能的研究不断推进^[32-34]. 然而, 受限于晶粒取向的多样性和界面形貌的复杂性,

* 国家自然科学基金 (批准号: 12472211, 12272066, 11932004)、新重庆青年创新人才项目 (批准号: CSTB2025YITP-QCRCX0076) 和重庆市自然科学基金 (批准号: CSTB2022NSCQ-MSX0383) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: futao@cqu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: xhpeng@cqu.edu.cn

尤其在复杂晶体结构材料体系中,对晶界特征与力学性能之间的关联仍缺乏充分理解^[35-37].深入揭示晶界的本征物性及其在变形过程中的行为,对于优化微结构设计和提升材料力学性能具有重要意义^[37,38].目前,在实验层面上实现对单个晶界的分离与精准表征仍面临诸多挑战^[36,39],尤其是制备具有特定晶体取向的双晶样品往往需要复杂的加工工艺^[35].因此,现有实验研究多集中于对材料制备过程中随机形成的晶界进行观察与变形机理分析,而难以主动构建并系统研究特定取向的晶界.相比之下,原子尺度数值模拟方法(如第一性原理计算与分子动力学模拟)为晶界结构及其力学响应的研究提供了重要手段.此类方法不仅能够提供晶界的原子结构、化学键信息与能量特征,还可通过模拟外部载荷作用揭示晶界迁移、滑移等行为,从而分析晶界对强度、塑性和韧性等的影响机制,为高性能材料的定向设计和性能优化提供关键理论依据.

自Duffy和Tasker^[40]于1983年在岩盐结构NiO中首次报道 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界以来,该类晶界的几何构型与能量特征在MgO^[35,41-44]和TiN^[45-48]为代表的多种岩盐结构材料中得到系统研究.尤其是Wang等^[35]通过沿MgO单晶(310)晶面精确切割并采用双晶拼接技术构建了 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界,为认识其结构特征提供了关键实验依据.鉴于二元TMCs通常具有与MgO和TiN相同的晶体结构,由此推断在TMCs中形成稳定的 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界具有合理的物理基础.然而,目前关于盐岩结构TMCs晶界的研究相对有限^[49],且已有研究多聚焦于晶界结构和能量等本征属性^[41-47,50-53],对于盐岩结构陶瓷中晶界在原子尺度下的变形模式缺乏系统探讨,尤其是在新兴的HECCs中,多主元效应可能显著影响乃至改变晶界结构及其力学行为.

在本研究中,我们采用第一性原理计算系统地考察了(HfNbTaTiZr)C HECC及其组元二元TMCs(HfC, NbC, TaC, TiC和ZrC)中 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的本征性能及其力学行为,包括晶界的几何构型、能量特征以及在剪切和拉伸作用下的力学响应,该工作有望补充岩盐结构碳化物陶瓷晶界方面的研究空缺,也为理解晶界在陶瓷材料力学性能中的作用提供新的理论依据.所得结果可为进一步揭示多元微结构(如点缺陷、位错与晶界)协同影响下高熵碳化物陶瓷的塑性变形机制奠定基础.

2 数值模拟参数设置

本研究采用基于密度泛函理论(density functional theory, DFT)的第一性原理方法,采用VASP(Vienna *ab initio* simulation package)软件^[54]进行计算.计算中使用投影缀加波(projected augmented wave, PAW)赝势^[55],交换-关联能采用Perdew-Burke-Ernzerhof修正固体(PBEsol)^[56]泛函.参考前人研究^[22],平面波的能量截断设置为420 eV,能量和原子受力收敛标准分别为每个超胞 10^{-5} eV和0.05 eV/Å,第一布里渊区采用 $5 \times 3 \times 1$ 的Monkhorst-Pack k 点网格.

剪切和拉伸变形采用增量加载,每一增量步中剪切应变增量($\Delta\gamma_{yz}$)和拉伸应变增量($\Delta\epsilon_{zz}$)均取为0.01.在剪切模拟中,除 γ_{yz} 外,保持 γ_{xy} 和 γ_{xz} 为零,同时应力分量 σ_{xx} , σ_{yy} 和 σ_{zz} 充分弛豫至零,以避免轴向应力对目标剪应力的影响^[57].在拉伸模拟中,除 σ_{zz} 外, σ_{xx} 和 σ_{yy} 充分弛豫至零,以体现泊松效应的影响;同时保持 γ_{xy} , γ_{xz} 和 γ_{yz} 为零,从而确保整体变形边界条件与单轴拉伸一致,避免体系通过剪切形变释放应力.超胞结构与原子构型的可视化通过VESTA^[58]软件实现.

3 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界几何与能量特征

首先,基于重合点阵(coincidence site lattice, CSL)理论^[59],用Atomsk软件^[60]构建含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的MgO超胞,如图1所示.其结构特征与已有研究一致,可分为Open型和Compact型两类晶界结构单元^[44,51,61,62].晶界形成能(E_f)可按下式计算:

$$E_f = \frac{E_{GB} - E_0}{2A_{GB}}, \quad (1)$$

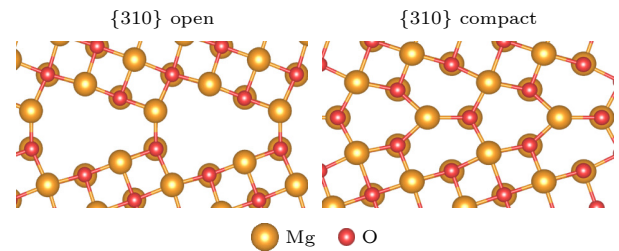


图1 MgO中 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界结构

Fig. 1. $\Sigma 5\{310\}[001]$ grain boundary structures in MgO.

其中 E_{GB} 和 E_0 分别为含晶界超胞和完备超胞的能量; A_{GB} 为晶界面积. 因周期性边界条件的设置, 超胞中含 2 个等价晶界, 因此分母包含因子 2. 表 1 列出了 MgO $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的 E_f 计算结果及与已有文献结果的对比. 结果表明, Open 型晶界的 E_f 低于 Compact 型, 说明前者结构更稳定, 且计算结果与先前研究接近^[44], 从而验证了本文建模与计算方法的可靠性.

表 1 MgO 的 $\Sigma 5\{310\}[001]$ Open/Compact 晶界形成能 (E_f)

Table 1. E_f of $\Sigma 5\{310\}[001]$ Open/Compact GB in MgO.

$\Sigma 5\{310\}[001]$ GB	$E_f / (\text{J} \cdot \text{m}^{-2})$
Open	1.612, 1.64 ^[44]
Compact	1.838, 1.89 ^[44]

实验结果表明, (HfNbTaTiZr)C HECC 及其组分二元 TMCs (HfC, NbC, TaC, TiC 和 ZrC) 均表现为岩盐晶格结构^[63-67], 因此参考 MgO 晶界构型^[35], 采用 AtomsK 软件^[60] 构建了含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的 (HfNbTaTiZr)C HECC 和二元 TMCs 超胞. 其中, Open 型晶界超胞包含 160 个原子, Compact 型晶界超胞包含 152 个原子, (HfNbTaTiZr)C 中 5 种过渡金属原子数的名义比约为 1:1:1:1:1. 在周期性边界条件下, 每个超胞样本包含两个晶界, 为便于描述, 将位于超胞中心的晶界记为 GB I, 另一处晶界记为 GB II, 见图 2(a). 以往研究表明, 高熵体系中的原子分布对其能量特征及变形机制具有重要影响^[68-71]. 基于这一认识, 本文构建了三种不同原子分布的 (HfNbTaTiZr)C 超胞 (记为 HECC¹,

HECC² 和 HECC³). 其中, HECC¹ 和 HECC² 的金属原子在晶界及晶内呈随机分布, 以表征高熵体系中的化学无序. 相比之下, HECC³ 则在晶界区域根据金属原子所在族进行元素偏聚设计, 该设计基于不同族 TMCs 在键合特征与力学响应方面的差异^[22,72-77], 旨在揭示晶界附近成分偏聚对其能量状态与力学行为的影响. 具体而言, 在 HECC³ 中, 将 IVB 族金属原子 (Hf, Ti, Zr) 富集于 GB I (图 2(a) 中绿色区域), 而将 VB 族金属原子 (Nb, Ta) 富集于 GB II (图 2(a) 中黄色区域).

图 2(b) 和图 2(c) 展示了能量优化后 (HfNbTaTiZr)C HECC 及二元 TMCs 超胞中 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的形貌. 与先前的报道一致^[44,51,61,62], 该晶界可分为 Open 型和 Compact 型. Open 型晶界结构 (图 2(b)) 与 MgO^[42,61] 及 TiN^[47] 的对应晶界一致; Compact 型晶界则表现为不规则六边形结构单元, 如图 2(c) 所示, 该特征与 30 GPa 下 MgO^[78] 和 300 K 下 TiN^[48] 的 Compact 型晶界相同. 值得注意的是, 碳化物体系在 0 K 和零应力状态下即可呈现这一 Compact 型晶界, 而 MgO 在相同条件下则表现出不同的晶界构型 (图 1(b)), 表明碳化物与 MgO 及 TiN 晶界结构特性上存在本征差异. 图 2(d) 给出了 (HfNbTaTiZr)C HECC (包括 HECC¹, HECC² 和 HECC³) 与二元 TMCs 的 E_f , 可见, 除 TaC 外, 其余体系中 Open 型晶界的 E_f 均低于 Compact 型晶界, 说明 Open 型晶界更加稳定, 具有与 MgO 一致的 E_f 规律^[44,62], 而 Compact 型晶界为亚稳态.

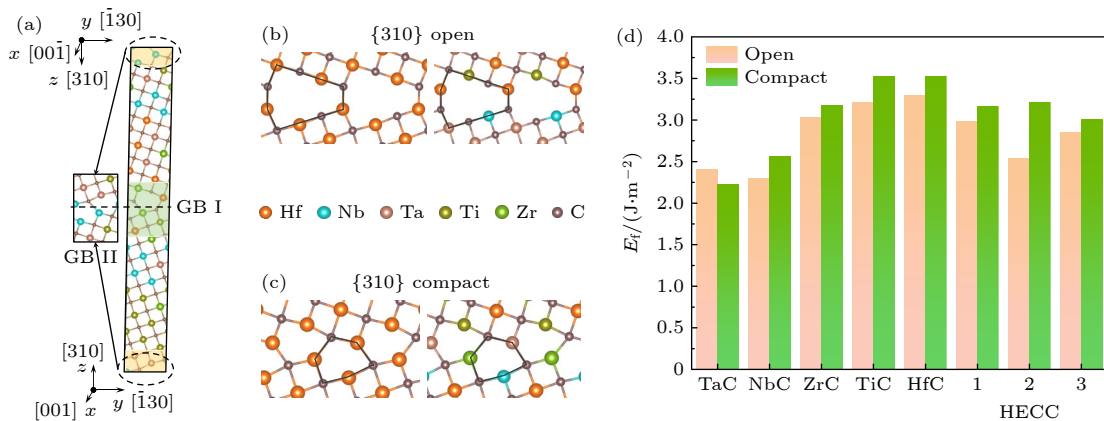


图 2 (a) 含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的超胞 (以 (HfNbTaTiZr)C 为例); (b) Open 型与 (c) Compact 型晶界结构; (d) 二元 TMCs 以及 (HfNbTaTiZr)C 的晶界形成能 E_f

Fig. 2. (a) Supercells containing $\Sigma 5\{310\}[001]$ grain boundary (taking (HfNbTaTiZr)C as an example); (b) Open and (c) Compact GB structures; (d) grain boundary formation energies (E_f) of (HfNbTaTiZr)C and its binary TMCs.

4 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的力学行为

4.1 剪切

4.1.1 Compact 型晶界

在二元 TMCs 和三种不同分布原子的 HECCs 中, Compact 型晶界在剪切作用下均表现出晶界迁移行为, 分别以 HfC 和 HECC¹ 为例, 图 3(a) 给出了其剪切应力-应变 (τ - γ) 曲线, 其中的应力下降对应于晶界迁移. 图 3(b) 给出了 HfC 中的晶界迁移. 在 $\gamma = 0.00$ 时, GB I 处标记为 2 的 C 原子与标记为 1 的 Hf 原子成键; 随着剪切应变增加, 该 C 原子逐渐向上移动, 并在 $\gamma = 0.05$ 时转而与标记为 3 的 Hf 原子成键, 表现为晶界向下迁移; 进一步, 在 $\gamma = 0.10$ 时, GB I 处标记为 4, 5, 6 的原子间化学键发生断裂并重组, 晶界再次向下迁移. 此迁移模式与 TiN 中 $\Sigma 5\{310\}[001]$ Compact 晶界在剪切作用下的迁移行为一致^[48]. 由于二元 TMCs 体系具有高度的组分均匀性与晶体对称性, GB II 中的断键与重组与 GB I 几乎同时发生, 如图 3(b), 其两个晶界在迁移过程中表现为同步且相向的变

形特征.

在剪切作用下, (HfNbTaTiZr)C 中的 Compact 型晶界同样发生晶界迁移, 但与二元 TMCs 不同, 其两个晶界在变形过程中不再同步运动. 接下来以 HECC¹ 为代表进行说明, 图 3(a) 中 $\gamma = 0.04$ 处出现的轻微剪切应力下降, 对应于 GB II 迁移, 即标记为 7, 8, 9 的原子之间的键断裂与重组. 具体而言, 如图 3(c) 所示, 当 $\gamma = 0.00$ 时, GB II 处标记为 8 的 Zr 原子与标记为 7 的 C 原子成键; 当 $\gamma = 0.04$ 时, 该 Zr 原子转而与标记为 9 的 C 原子成键, 从而实现晶界迁移. 而在此应变范围内, GB I 未发生明显变化. 随后, 当 $\gamma = 0.06$ 与 $\gamma = 0.13$ 时, GB I 与 GB II 中分别由原子 4, 5, 6 和原子 13, 14, 15 的键断裂与重组驱动晶界迁移, 从而体现出 HECC 内部晶界迁移事件的非同步性. (HfNbTaTiZr)C 中晶界迁移不同步的原因主要包括两方面: 1) 多主元引入的成分无序与晶格畸变降低了结构对称性, 使不同晶界处的局部环境差异显著; 2) 局部键合强度差异导致断裂与重组能垒不同, 弱键更易断裂并触发迁移, 而强键则需更高应力才能发生重排.

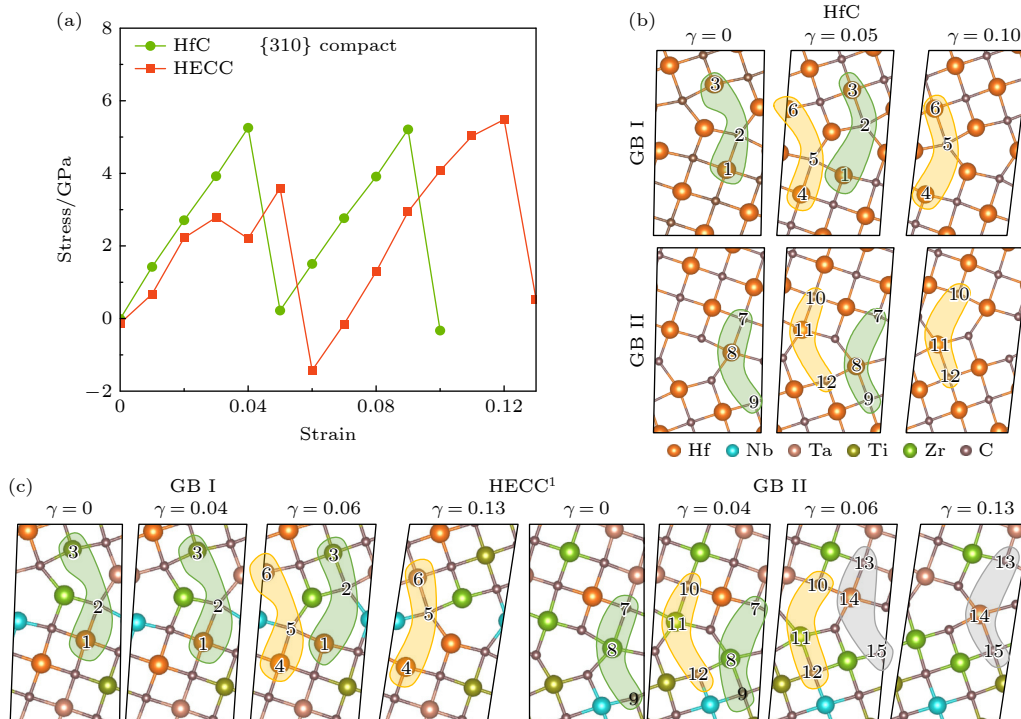


图 3 (a) 含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ Compact 型晶界的 HfC 和 HECC¹ 的 τ - γ 曲线; (b) HfC 和 (c) HECC¹ 剪切耦合晶界迁移过程, 其中原子运动轨迹通过标签加以追踪

Fig. 3. (a) τ - γ curves of HfC and HECC¹ containing $\Sigma 5\{310\}[001]$ Compact GB. Illustration of shear-coupled GB migrations in (b) HfC and (c) HECC¹, with atom movement traced by labels.

4.1.2 Open 型晶界

对含 Open 型晶界的二元 TMCs 和 (HfNbTaTiZr)C HECCs 超胞施加剪切变形时, 可观察到两种不同的变形模式, 其差异与金属原子所属族密切相关. 图 4(a) 给出了代表性的 τ - γ 曲线, 其中 TiC 代表 IVB 族 TMCs, HECC¹ 则代表 VB 族 TMCs 和三种不同原子分布的 (HfNbTaTiZr)C. 对于 TiC, 如图 4(b), 随着剪切应变 γ 的增加, GB I 上由黑色空心圆标记的两个 C 原子逐渐靠近, 并在 $\gamma = 0.08$ 时形成 C—C 键, 导致晶界结构发生变化并引发第一次应力突降 (图 4(a)). 在此过程中, GB II 并未同时发生类似的结构变化, 这是因为两者在原子排布上的反对称性: 在 GB I 处形成 C—C 键的相应位置, 在 GB II 中由蓝色空心圆标记的 Ti 原子占据. 尽管 Ti 原子在 $\gamma \leq 0.08$ 时逐渐靠近, 但金属原子间无法形成共价键, 从而导致 GB I 和 GB II 的变形不同步. 随后, 在 $\gamma = 0.12$ 时, GB II 处对应的 C 原子对形成 C—C 键 (图 4(b), 黑色空心圆标记), 引发第二次应力突降 [图 4(a)]. C—C 键形成后, 其稳定的键合模式限制了晶界的后续变形. 最终, 在 $\gamma = 0.22$ 时 Ti—C 键 (“×”标记) 断裂, 超胞在高应力下发生屈服 (图 4(a)).

与 TiC 不同, 在 NbC, TaC (VB 族 TMCs) 和三种不同原子分布的 (HfNbTaTiZr)C 中, Open 型晶界在剪切过程中主要通过原子间键的断裂与重组实现剪切耦合晶界迁移, 而未观察到 C—C 键形成. 以 HECC¹ 为例, 其应力突降 (图 4(a)) 均与

晶界迁移相对应. 如图 4(c) 所示, 当 $\gamma \leq 0.08$ 时, 标记为 1 的 Ta 原子与标记为 2 的 C 原子成键; 在 $\gamma = 0.09$ 时, 该键断裂, Ta 原子转而与标记为 3 的 C 原子成键 (红色空心圆标记), 从而完成一次晶界迁移. 值得强调的是, 由于第一性原理计算对超胞原子规模上的限制, 本文构建的模型在 y 方向仅包含一个完整晶界单元. 为更清晰地展示晶界结构的演化过程, 我们在结构可视化时依据周期性边界条件进行了扩胞处理. 因此, 图 4(c) HECC¹ 超胞中左侧的 Ta 原子与标记 1 的 Ta 原子事实上属于同一原子在相邻周期单元中的映射, 这一点在理解晶界结构及其变形时需加以注意. 另一方面, 不同于 NbC 和 TaC 中的同步相向迁移, HECC¹ 中的晶界迁移表现为非同步特征.

在二元 TMCs 和 (HfNbTaTiZr)C HECCs 中, 未形成 C—C 键的现象与此前关于碳化物陶瓷 $\Sigma 5\{210\}[001]$ 晶界的研究 [22] 一致: 在 IVB 族碳化物中, 当晶界处 C—C 原子距离缩短时更容易形成 C—C 键; 而在 VB 族碳化物中, 则未观察到类似现象. 这一差异源于不同族金属元素的价电子浓度差异及同族元素相似电子结构 [22,72,73,77,79], 使得 IVB 族碳化物更倾向通过形成 C—C 键实现变形, 最终因 TM—C 键断裂而破坏; 相比之下, VB 族碳化物则以晶界迁移为主. 未来可结合剪切过程中实时电子结构、态密度等, 深入揭示不同族金属原子在与碳原子成键特征上的本征差异如何影响晶界的剪切响应与失稳机制. 此外, 在 (HfNbTaTiZr)C 中,

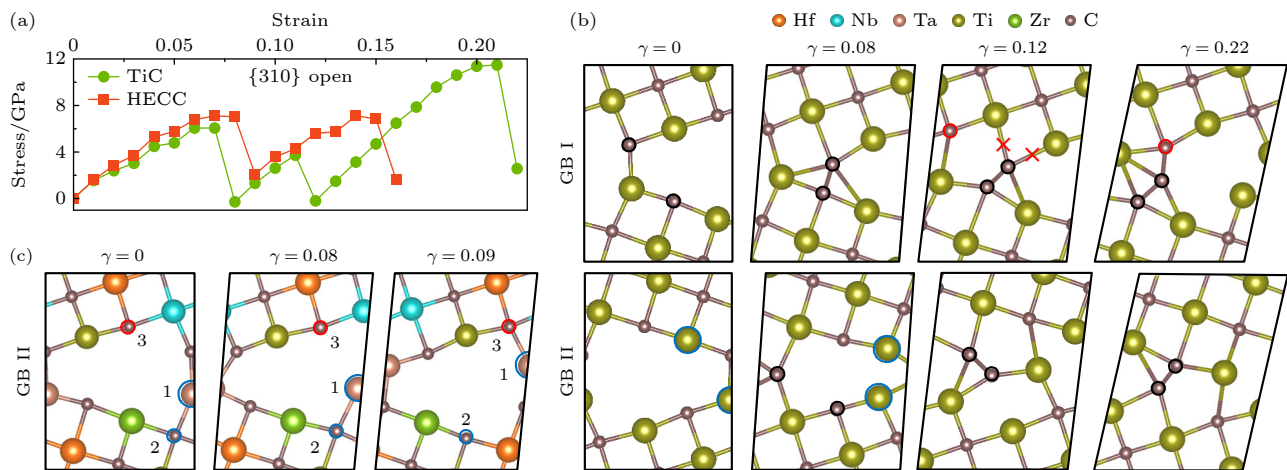


图 4 (a) 含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ Open 型晶界 TiC 与 HECC¹ 的 τ - γ 曲线; (b) 由 Ti—C 键断裂导致 TiC 超胞屈服; (c) HECC¹ 中的剪切耦合晶界迁移, 其中原子运动轨迹通过标签加以追踪

Fig. 4. (a) τ - γ curves of TiC and HECC containing $\Sigma 5\{310\}[001]$ Open GB; (b) the yield of TiC induced by Ti—C bond rupture; (c) shear-coupled GB migration in HECC¹, with atomic movement indicated by labeled atoms.

由于多主元协同效应与其引起的晶格畸变和变形后的残余应变,晶界处难以形成 C—C 键.但若合理利用不同族 TMCs 的变形机制差异,有望诱导“钉扎效应”的出现,提升材料的塑性变形能力^[22].

含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的二元 TMCs 和 (HfNbTaTiZr)C 超胞 (以 HECC¹ 为代表) 在剪切作用下所得 τ - γ 曲线汇总于图 5. 含 Compact 型晶界的 HECC¹ 和二元 TMCs 的变形模式均表现为剪切耦合晶界迁移,其 τ - γ 曲线如图 5(a). HECC¹ 的最高迁移应力为 5.48 GPa, 接近二元 TMCs 的最大迁移应力 6.18 GPa. 先前的研究^[80] 指出, 在无缺陷且 0 K 的理想条件下, (HfNbTaTiZr)C 的理想强度因晶格畸变等本征缺陷而显著低于二元 TMCs, 表现为“短板效应”. 然而, 当引入点缺陷或晶界等单一缺陷后, (HfNbTaTiZr)C 能突破“短板效应”限制, 并表现出强度对缺陷的不敏感性^[21,22,80]. 由此可推测, 在实际应用中, 当多种缺陷共同存在时, (HfNbTaTiZr)C 有望展现出优于二元 TMCs 的综合力学性能. 对于 Open 型晶界, 二元 TMCs 和 HECC¹ 超胞在剪切作用下所得 τ - γ 曲线如图 5(b), 体系主要出现两种变形模式: 在 IVB 族二元 TMCs 中, 晶界处先形成 C—C 键并通过断键失效 (图 4(b)), 因此具有较高的失效力; 而在 (HfNbTaTiZr)C 及 VB 族二元 TMCs 中, 则主要通过晶界迁移实现变形 (图 4(c)). 从图 5(b) 可见, HfC 应力峰值较低, 仍处于晶界迁移阶段; 在更大应变下, 随着晶界处 C—C 距离进一步缩短, 最终会形成 C—C 键并因 Hf—C 键断裂而屈服. 此外, 在首次晶界迁移过程中, HfC, NbC 和 TaC 的迁移应力均低于 HECC¹ (图 5(b)), 这表明多主元效应有望提升 (HfNbTaTi

Zr)C 的晶界迁移应力, 从而实现塑性变形能力与强度的协同提升.

4.2 拉伸

4.2.1 Compact 型晶界

对含 Compact 型晶界的 (HfNbTaTiZr)C 及其二元 TMCs 超胞的单轴拉伸模拟结果表明, 多主元的引入使得 (HfNbTaTiZr)C 的变形模式与其二元 TMCs 具有显著不同. 图 6(a) 给出了以 HfC 为代表的二元 TMCs 和以 HECC¹ 为例的 (HfNbTaTiZr)Cs 的应力-应变 (σ - ε) 曲线. 对于 HfC, 随着 ε 的增加, σ - ε 曲线先呈稳定上升; 当 $\varepsilon > 0.07$ 时, 曲线逐渐平缓并出现波动. 对应的晶界结构的演化见图 6(b): 当 $\varepsilon = 0.08$ 时, 初始不规则的六边形晶界结构转变为类石墨烯的六元环结构; 在随后的加载过程中, 该六元环结构向晶内扩展, 最终遍布整个超胞, 表现为典型的“石墨化”现象. 与二元 TMCs 体系不同, (HfNbTaTiZr)C 在拉伸过程中除发生石墨化外 (如: HECC³), 还表现出沿晶断裂行为 (如: HECC¹ 和 HECC²). 如图 6(c) 所示, 以 HECC¹ 为例, 变形过程中, GB II 基本保持稳定, 而 GB I 在 $\varepsilon = 0.08$ 时出现 Zr—C 键断裂 (“×” 标记), 随后在 $\varepsilon = 0.14$ 时 Ta—C 键断裂, 导致超胞整体失效.

4.2.2 Open 型晶界

含 Open 型晶界的 (HfNbTaTiZr)C 和二元 TMCs 超胞的拉伸屈服模式与金属元素所在族密切相关. 图 7(a) 展示 IVB 族 ZrC、VB 族 TaC 以及 HECCs (以 HECC¹ 和 HECC³ 为例) 的 σ - ε 曲

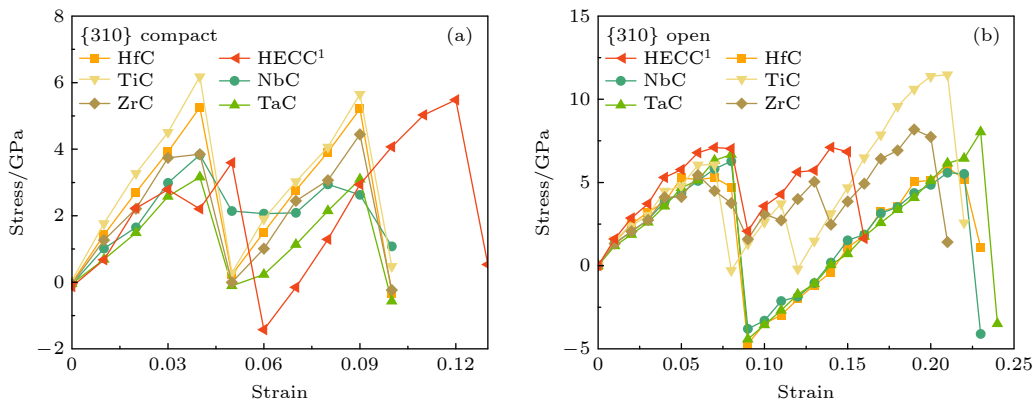


图 5 包含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ (a) Compact 型和 (b) Open 晶界的 TMCs 与 HECC¹ 的 τ - γ 曲线

Fig. 5. τ - γ curves of TMCs and HECC¹ containing $\Sigma 5\{310\}[001]$: (a) Compact and (b) Open GBs.

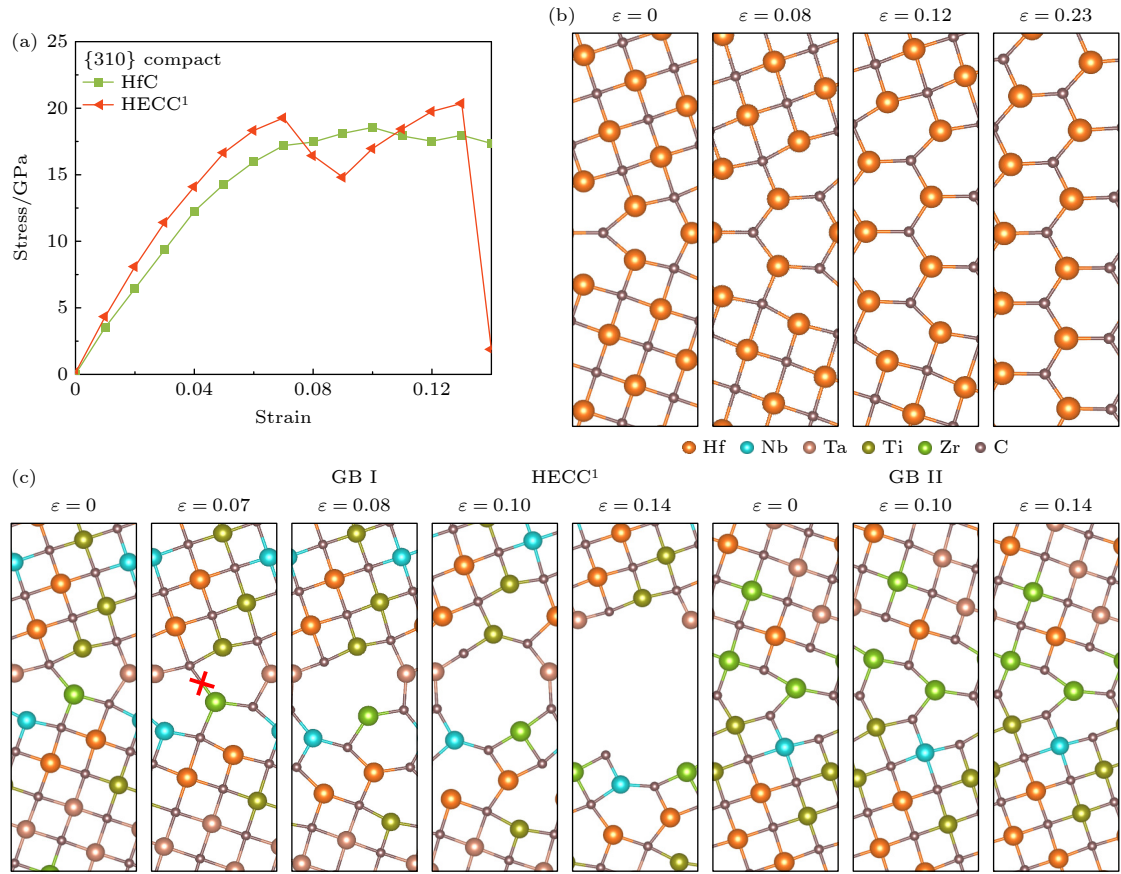


图 6 (a) 含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ Compact 型晶界 HfC 与 HECC¹ 的 σ - ϵ 曲线; (b) HfC 中由石墨化引起的超胞失效; (c) HECC¹ 中由沿晶断裂导致的超胞失效

Fig. 6. (a) σ - ϵ curves of HfC and HECC¹ containing $\Sigma 5\{310\}[001]$ Compact GB; (b) failure of HfC induced by graphitization; (c) failure of HECC¹ resulting from intergranular fracture.

线. 对于 ZrC(IVB 族 TMCs), 当 $\epsilon = 0.08$ 时, 拉伸应力下降, 表明超胞进入屈服阶段, 对应的晶界结构如图 7(b) 所示, 其中, 晶界处 Zr—C 键的变化以红色阴影标示. Zr—C 键断裂后, 随着拉伸进行, 晶界过剩体积持续增加 (图 7(b)), $\epsilon = 0.10$, 应力随之下降 (图 7(a)), 超胞屈服. 对于 TaC(VB 族 TMCs), 其失效模式则有所不同. 如图 7(c) 所示, 当 $\epsilon = 0.11$ 时, 晶粒内部的 Ta—C 键首先断裂; 在 $\epsilon = 0.12$ 时, 晶界处 Ta—C 键进一步断裂, 引发超胞沿晶断裂. 由于二元 TMCs 具有较高的结构对称性和组分均匀性, 其两个晶界在拉伸过程中表现为同步变形.

在 (HfNbTaTiZr)C 中, 多主元的引入打破了组分均匀性和结构对称性, 使得两个晶界的变形不同步. 首先, 以 HECC¹ 为例, 如图 7(d) 所示, 当 $\epsilon = 0.09$ 时, GB I 处发生 Hf—C 键断裂导致失效, 而 GB II 的变形有限, 并最终恢复至初始状态. 然而, 对于 HECC³, 由于 IVB 族 TMs 富集于 GB I, 而

VB 族 TMs 富集于 GB II, 两处晶界表现出族特征主导的失效机制: VB 族 TMCs 失效主要源于晶界处 TM—C 键断裂, 且所需应力较高 (图 7(a)). 因此, 如图 7(e) 所示, 在拉伸过程中 VB 族富集的 GB II 始终保持结构稳定; 而 GB I 在 $\epsilon = 0.07$ 时出现 Ti—C 键断裂 (红色阴影标示), 并在 $\epsilon = 0.09$ 时, 另一 Ti—C 键断裂 (黄色阴影标示). 在此过程中, GB I 的过剩体积持续增加, 导致应力不断下降. 该特征与 IVB 族二元 TMCs 的变形模式一致 (图 7(b)), 但不再具备二元体系的变形同步性.

含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的 (HfNbTaTiZr)C 及其二元 TMCs 的 σ - ϵ 曲线汇总于图 8. 当含 Compact 型晶界时, 二元 TMCs 的失效模式均为石墨化; 而 (HfNbTaTiZr)C 则同时出现石墨化 (HECC³) 和沿晶断裂 (HECC¹ 和 HECC²) 两种模式. 图 8(a) 中 (HfNbTaTiZr)C 的 σ - ϵ 以 HECC¹ 为例, 结果表明: HECC¹ 失效前最大应力可达 20.36 GPa, 仅略低于二元 TMCs 中最高的 TiC(21.49 GPa),

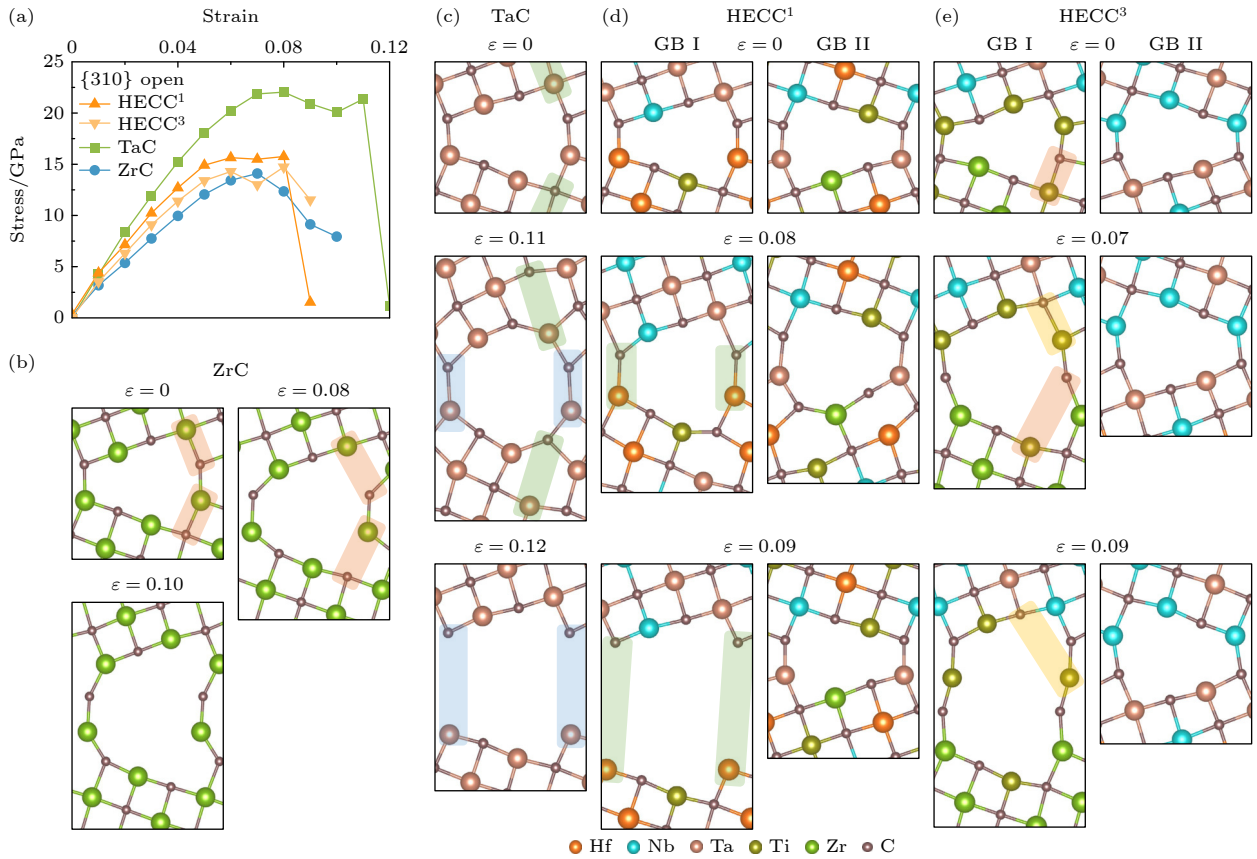


图 7 (a) 含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ Open 型晶界 TMCs 与 $(\text{HfNbTaTiZr})\text{C}$ 的 σ - γ 曲线; (b) 由过剩体积增大引起的 ZrC 屈服; (c) TaC 中发生沿晶断裂; (d) HECC¹ 中的沿晶断裂和 (e) HECC³ 的过剩体积增大
 Fig. 7. (a) σ - γ curves of TMCs and $(\text{HfNbTaTiZr})\text{C}$ with $\Sigma 5\{310\}[001]$ Open GBs; (b) the yield of ZrC caused by the increase in excess volume; (c) intergranular fracture in TaC; (d) intergranular fracture in HECC¹ and (e) increase in excess volume in HECC³.

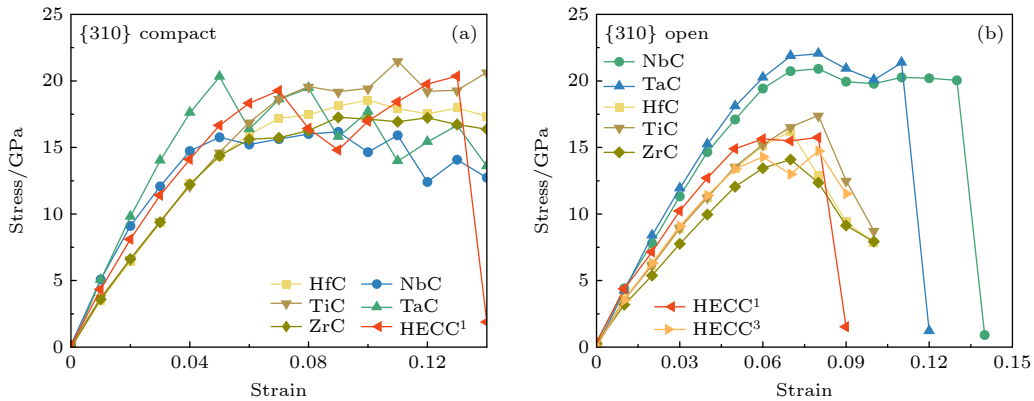


图 8 含 $\Sigma 5\{310\}[001]$ (a) Compact and (b) Open 型晶界的 $(\text{HfNbTaTiZr})\text{C}$ 及其二元 TMCs 的 σ - γ 曲线
 Fig. 8. σ - γ curves of $(\text{HfNbTaTiZr})\text{C}$ and its binary TMCs and with $\Sigma 5\{310\}[001]$: (a) Compact and (b) Open GBs.

表明 HECC¹ 拉伸强度突破了“短板效应”的制约. 含 Open 型晶界的 $(\text{HfNbTaTiZr})\text{C}$ (以 HECC¹ 和 HECC³ 为例) 和二元 TMCs 的 σ - ε 曲线见图 8(b). 其中, IVB 族二元 TMCs 因晶界过剩体积持续增加而屈服, 而 VB 族二元 TMCs 则以沿晶断裂为主. 在 $(\text{HfNbTaTiZr})\text{C}$ 中, 这两种机制均可观察

到. 尽管 HECC¹ 和 HECC³ 的失效应力不高, 但仍突破了“短板效应”的限制. 相较于理想条件 (0 K、无缺陷), $(\text{HfNbTaTiZr})\text{C}$ 拉伸强度明显低于任一二元 TMCs^[80], 表现为强度的“短板效应”. 但在引入 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界后, 在多主元效应与晶界耦合作用下, HECC 拉伸强度均不再为最低, 表明其

突破了“短板效应”的约束. 考虑到晶界是实际材料中最常见的结构缺陷之一, 在其与点缺陷、位错协同作用下, (HfNbTaTiZr)C 有望展现出更优异的综合力学性能^[21].

5 讨论

本文所讨论的“短板效应”主要源于在理想条件下 (0 K、无缺陷、完美晶体) 开展的第一性原理模拟^[80]. 在该前提下, 多主元体系中较大的晶格畸变会引入局部键合强度波动, 使局部弱键区域更容易成为初始破坏位置, 从而在原子尺度上呈现类似“短板”的力学行为. 与此同时, 本文的计算也显示, HECC 的变形过程相较二元 TMCs 更易表现为局部破坏, 而非均匀变形.

这种“短板效应”主要反映的是理想晶体在原子尺度下的行为, 不一定能直接与实验中的宏观强度趋势对应. 尽管二元 TMCs 的理想强度在实际条件下难以实现, 但对于 HECC 而言, 由于显著的晶格畸变效应, 其理想强度仍具有重要参考价值, 可用于评估其能达到的强度上限. 已有大量实验研究表明, HECC 的实际力学性能通常优于相应的二元 TMCs^[16,81-83]. 模拟与实验之间的差异可能与以下几点因素有关.

1) 模拟与实验的尺度差异. 实验样品通常包含多种微结构, 而第一性原理计算受体系尺寸限制, 难以全面涵盖这些复杂的微结构因素.

2) 缺陷与晶格畸变之间的协同强化效应. 实验材料中广泛存在点缺陷、位错、层错、晶界等缺陷, 而已有研究显示在多主元晶格畸变的背景下, 这些缺陷可能促进强度和韧性的提升^[65,84,85]. 相比之下, 第一性原理计算中缺陷种类与浓度有限, 难以体现上述协同增强效应.

3) 缺陷引入后模拟行为的变化. 我们的前期研究也表明, 一旦在模拟体系中加入单一点缺陷, 相比理想状态, 二元 TMCs 的强度显著降低, 而 HECC 的强度则表现出对点缺陷的不敏感性, 甚至不降反升, 并突破“短板效应”的限制^[21].

综上, 实验中 HECC 表现出的优异力学特性, 应主要归因于多尺度微结构与晶格畸变之间的耦合强化机制, 而非理想条件下的“短板效应”. 然而, 通过系统对比理想条件^[80]以及引入微扰、点缺陷^[21]、晶界^[22]后 TMCs 和 HECC 的力学响应, 更

全面地理解多主元引入后体系力学行为的演化规律. 从理想状态的“短板效应”, 到引入缺陷后 HECC 反而展现出更优的力学性能^[22], 这一现象同样表明: 晶格畸变与微结构耦合所带来的强化, 可能是 HECC 获得卓越力学性能的关键因素.

6 结论

本文基于第一性原理计算, 系统探讨了 (HfNbTaTiZr)C 高熵碳化物陶瓷 (HECC) 及其过渡金属组元的碳化物 (TMCs: HfC, NbC, TaC, TiC 和 ZrC) 中 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的本征物性与结构特征及在剪切和拉伸作用下的力学响应.

1) 各体系中的 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界均存在两种几何构型 (Open 型和 Compact 型), 计算所得 Open 型晶界的形成能低于 Compact 型晶界, 为更稳定的晶界结构.

2) 在剪切作用下, (HfNbTaTiZr)C 及其二元 TMCs 的 Compact 型晶界均发生剪切耦合晶界迁移. 对于 Open 型晶界, IVB 族 TMCs 在变形过程中易形成 C—C 键, 抑制晶界迁移, 使其以 TM-C 键断裂而屈服, 呈现较高的剪切屈服强度但塑性有限; 而未形成 C—C 键的 IVB 族 TMCs 与 (HfNbTaTiZr)C 则以剪切耦合晶界迁移为主, 具备较好的塑性. 值得强调的是, (HfNbTaTiZr)C 中 Open 型晶界的初始迁移应力超过 TMCs, 体现出多主元效应的强化效果.

3) 在拉伸作用下, 当存在 Compact 型晶界时, 二元 TMCs 因石墨化失效, 而 (HfNbTaTiZr)C 同时呈现石墨化和沿晶断裂两种机制, 其失效力与二元 TMCs 峰值相近. 在 Open 型晶界体系中, IVB 族 TMCs 因过剩体积增加而屈服, VB 族 TMCs 则因沿晶断裂而失效, 这两种变形机制在 (HfNbTaTiZr)C 中均可观察到. 尽管其屈服强度未超过二元 TMCs 峰值, 但明显地突破“短板效应”的限制.

总体而言, 本研究揭示了高熵碳化物陶瓷的 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界结构、元素族属性与力学行为之间的内在联系. 多主元效应能够调控晶界迁移方式与失效机制, 有望协同地改善材料的强度-塑性特性, 研究结果可为高熵碳化物陶瓷的晶界设计与力学性能优化提供理论依据与设计思路.

参考文献

- [1] Yeh J W, Chen S K, Gan J Y, Lin S J, Chin T S, Shun T T, Tsau C H, Chang S Y 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35A** 2533
- [2] Miracle D B, Senkov O N 2017 *Acta Mater.* **122** 448
- [3] Ding Q Q, Zhang Y, Chen X, Fu X Q, Chen D K, Chen S J, Gu L, Wei F, Bei H B, Gao Y F, Wen M R, Li J X, Zhang Z, Zhu T, Ritchie R O, Yu Q 2019 *Nature* **574** 223
- [4] Yu X L, Chen Q J, Cui X, Ouyang D L 2025 *Nat. Commun.* **16** 2828
- [5] Zhang R-Z, Reece M J 2019 *J. Mater. Chem. A* **7** 22148
- [6] Sangiovanni D G, Tasnadi F, Harrington T, Oden M, Vecchio K S, Abrikosov I A 2021 *Mater. Des.* **204** 109634
- [7] Huang S S, Zhang J, Fu H J, Xiong Y X, Ma S H, Xiang X P, Xu B, Lu W Y, Zhang Y W, Weber W J, Zhao S J 2024 *Prog. Mater. Sci.* **143** 101250
- [8] Anand G, Wynn A P, Handley C M, Freeman C L 2018 *Acta Mater.* **146** 119
- [9] Jana S S, Banerjee R, Maiti T 2025 *J. Mater. Chem. A* **13** 27050
- [10] Gild J, Zhang Y Y, Harrington T, Jiang S C, Hu T, Quinn M C, Mellor W M, Zhou N X, Vecchio K, Luo J 2016 *Sci. Rep.* **6** 37946
- [11] Yang Y, Liang S Y, Bi J Q, Hou H L, Qiao L J, Liu S S, Wang T, Gong H Y, Qian Z, Shi J W, Li W Q 2025 *J. Am. Ceram. Soc.* **108** e20503
- [12] Yan X H, Liaw P K, Zhang Y 2021 *Metall. Mater. Trans. A* **52** 2111
- [13] Li J C, Chen Y J, Zhao Y M, Shi X W, Wang S, Zhang S 2022 *J. Alloys Compd.* **926** 166807
- [14] Yan X L, Constantin L, Lu Y F, Silvain J-F, Nastasi M, Cui B 2018 *J. Am. Ceram. Soc.* **101** 4486
- [15] Zhou J Y, Zhang J Y, Zhang F, Niu B, Lei L W, Wang W M 2018 *Ceram. Int.* **44** 22014
- [16] Ye B L, Wen T Q, Nguyen M C, Hao L Y, Wang C-Z, Chu Y H 2019 *Acta Mater.* **170** 15
- [17] Cao Z N, Sun J L, Meng L T, Zhang K G, Zhao J, Huang Z F, Yun X L 2023 *J. Mater. Sci. Technol.* **161** 10
- [18] Yu D, Yin J, Zhang B H, Liu X J, Reece M J, Liu W, Huang Z R 2021 *J. Eur. Ceram. Soc.* **41** 3823
- [19] Ye B L, Wen T Q, Liu D, Chu Y H 2019 *Corros. Sci.* **153** 327
- [20] Ye B L, Wen T Q, Huang K H, Wang C Z, Chu Y H 2019 *J. Am. Ceram. Soc.* **102** 4344
- [21] Li C Y, Fu T, Hu H, Weng S Y, Peng X H 2025 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **17** 36960
- [22] Li C Y, Fu T, Shen X, Hu H, Weng S Y, Yin D Q, Peng X H 2024 *Surf. Interf.* **52** 104982
- [23] Zhu Y J, Guan L, Duan C Q, Zhang J X, Yan Z K, Wen L C, Wang Z H, Sun X X, Yao Y L, Guo X Q, Zhang R, Zhao B 2025 *J. Mater. Sci. Technol.* **224** 302
- [24] Perrin A E, Schuh C A 2021 *Annu. Rev. Mater. Res.* **51** 241
- [25] Meiners T, Frolov T, Rudd R E, Dehm G, Liebscher C H 2020 *Nature* **579** 375
- [26] Frolov T, Olmsted D L, Asta M, Mishin Y 2013 *Nat. Commun.* **4** 1899
- [27] Wang Z Q, Wu H H, Wu Y, Huang H L, Zhu X Y, Zhang Y J, Zhu H H, Yuan X Y, Chen Q, Wang S D, Liu X J, Wang H, Jiang S H, Kim M J, Lu Z P 2022 *Mater. Today* **54** 83
- [28] Julie S, David C, Wasekar N P, Parida P K, Ghosh C 2024 *Surf. Interf.* **46** 103938
- [29] Zhu Q, Cao G, Wang J W, Deng C, Li J X, Zhang Z, Mao S X 2019 *Nat. Commun.* **10** 156
- [30] Rajabzadeh A, Momprou F, Legros M, Combe N 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 265507
- [31] Tatami J, Yasuda K, Matsuo Y, Kimura S (Sōmiya S, et al. Ed.) 1998 *Materials Science and Engineering Serving Society* (Amsterdam: Elsevier Science B.V.) pp69–72
- [32] Wang C Y, Qin M D, Lei T J, He Y B, Kisslinger K, Rupert T J, Luo J, Xin H L 2021 *J. Eur. Ceram. Soc.* **41** 5380
- [33] Wang B W, Pan C L, Jin Z Y, Zhu H M, Lu C, Hufenbach J K, Li X Q, Kosiba K 2025 *Virtual Phys. Prototy.* **20** e2515238
- [34] Hu H, Fu T, Wang S Y, Li C Y, Weng S, Yin D Q, Peng X H 2025 *Int. J. Plast.* **185** 104219
- [35] Wang Z C, Saito M, McKenna K P, Gu L, Tsukimoto S, Shluger A L, Ikuhara Y 2011 *Nature* **479** 380
- [36] Patala S, Mason J K, Schuh C A 2012 *Prog. Mater. Sci.* **57** 1383
- [37] Cantwell P R, Frolov T, Rupert T J, Krause A R, Marvel C J, Rohrer G S, Rickman J M, Harmer M P 2020 *Annu. Rev. Mater. Res.* **50** 465
- [38] Kumar N, Choudhuri D, Banerjee R, Mishra R S 2015 *Int. J. Plast.* **68** 77
- [39] Trahanovsky M E 2012 *Bicrystal-array Fabrication* (Berkeley: University of California)
- [40] Duffy D M, Tasker P W 1983 *Philos. Mag. A* **47** 817
- [41] Verma A K, Karki B B 2010 *Am. Mineral.* **95** 1035
- [42] Sun X-Y, Cordier P, Taupin V, Fressengeas C, Karki B B 2017 *Eur. J. Mineral.* **29** 155
- [43] Bean J J, Saito M, Fukami S, Sato H, Ikeda S, Olmo H, Ikuhara Y, McKenna K P 2017 *Sci. Rep.* **7** 45594
- [44] Hirel P, Carrez P, Cordier P 2022 *Acta Mater.* **240** 118297
- [45] Cottom J, Bochkarev A, Olsson E, Patel K, Munde M, Spitaler J, Popov M N, Bosman M, Shluger A L 2019 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11** 36232
- [46] Popov M N, Bochkarev A S, Razumovskiy V I, Puschnig P, Spitaler J 2018 *Acta Mater.* **144** 496
- [47] McKenna K P 2018 *J. Appl. Phys.* **123** 075301
- [48] Zhang L, Wang L, Yu W S, Shen S P, Fu T 2019 *Ceram. Int.* **45** 5531
- [49] Dai F-Z, Sun Y J, Ren Y X, Xiang H M, Zhou Y C 2022 *J. Mater. Sci. Technol.* **101** 234
- [50] Karki B B, Ghosh D B, Verma A K 2015 *Am. Mineral.* **100** 1053
- [51] Yokoi T, Yoshiya M 2018 *Physica B*: **532** 2
- [52] Yu R, He L L, Ye H Q 2003 *Acta Mater.* **51** 2477
- [53] Yu R, Zhan Q, He L L, Zhou Y C, Ye H Q 2002 *Acta Mater.* **50** 4127
- [54] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [55] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [56] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [57] Li C Y, Fu T, Li X L, Hu H, Peng X H 2023 *Phys. Rev. B* **107** 224106
- [58] Momma K, Izumi F 2011 *J. Appl. Crystallogr.* **44** 1272
- [59] Wolf D (Buschow K H J, et al. ed) 2001 *Encyclopedia of Materials: Science and Technology* (Oxford: Elsevier) pp3597–3609
- [60] Hirel P 2015 *Comput. Phys. Commun.* **197** 212
- [61] Yokoi T, Ikawa K, Nakamura A, Matsunaga K 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 10118
- [62] Yokoi T, Arakawa Y, Ikawa K, Nakamura A, Matsunaga K 2020 *Phys. Rev. Mater.* **4** 026002
- [63] Feng L, Chen W-T, Fahrnholtz W G, Hilmas G E 2021 *J. Am. Ceram. Soc.* **104** 419
- [64] Zhang W, Chen L, Xu C G, Lu W Y, Wang Y J, Ouyang J

- H, Zhou Y 2021 *J. Mater. Sci. Technol.* **72** 23
- [65] Oses C, Toher C, Curtarolo S 2020 *Nat. Rev. Mater.* **5** 295
- [66] Sangiovanni D G, Mellor W, Harrington T, Kaufmann K, Vecchio K 2021 *Mater. Des.* **209** 109932
- [67] Akrami S, Edalati P, Fuji M, Edalati K 2021 *Mater. Sci. Eng., R* **146** 100644
- [68] Qian C, Zhang X Q, Chen X Y, Su L J, Chen R, Wen J S, Wu B 2025 *Surf. Interf.* **72** 107071
- [69] Song W Y, Lu Y J, Wang C Y, Xu J H, Liu X, Ma B, Wang Y M, Wu B 2024 *J. Alloys Compd.* **1002** 175455
- [70] Zhang C B, Qian C, Ye Z A, Zhao P H, Chen R, Wu B, Qiao Y, Weng L J, Su L J, Xie T L, Sa B S, Liu Y, Wang C X 2025 *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* **35** 2320
- [71] He Q F, Tang P H, Chen H A, Lan S, Wang J G, Luan J H, Du M, Liu Y, Liu C T, Pao C W, Yang Y 2021 *Acta Mater.* **216** 117140
- [72] Yu H, Bahadori M, Thompson G B, Weinberger C R 2017 *J. Mater. Sci.* **52** 6235
- [73] Yu X X, Weinberger C R, Thompson G B 2016 *Comput. Mater. Sci.* **112** 318
- [74] Aleman A, Zaid H, Cruz B M, Tanaka K, Yang J M, Kindlund H, Kodambaka S 2021 *Acta Mater.* **221** 117384
- [75] Rowcliffe D J, Hollox G E 1971 *J. Mater. Sci.* **6** 1261
- [76] Kiani S, Yang J-M, Kodambaka S 2015 *J. Am. Ceram. Soc.* **98** 2313
- [77] Li C Y, Fu T, Hu H, Duan M Y, Weng S Y, Peng X H 2024 *Phys. Rev. B* **109** 134110
- [78] van Driel J, Schusteritsch G, Brodholt J P, Dobson D P, Pickard C J 2020 *Phys. Chem. Miner.* **47** 11
- [79] De Leon N, Yu X X, Yu H, Weinberger C R, Thompson G B 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 165502
- [80] Li C Y, Fu T, Hu H, Peng X H 2022 *Phys. Rev. B* **105** 224102
- [81] Zhang J, Xu B, Xiong Y X, Ma S H, Wang Z, Wu Z G, Zhao S J 2022 *npj Comput. Mater.* **8** 5
- [82] Peng C, Gao X, Wang M Z, Wu L L, Tang H, Li X M, Zhang Q, Ren Y, Zhang F X, Wang Y H, Zhang B, Gao B, Zou Q, Zhao Y C, Yang Q, Tian D X, Xiao H, Gou H Y, Yang W G, Bai X D, Mao W L, Mao H-k 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 011905
- [83] Wang Z, Li Z-T, Zhao S-J, Wu Z-G 2021 *Tungsten* **3** 131
- [84] Zhao S J 2021 *J. Am. Ceram. Soc.* **104** 1874
- [85] Liu Y W, Ma M D, Wang W, Tang H F, Yu H L, Zhuang L, Xie P B, Chu Y H 2025 *Adv. Funct. Mater.* **35** 2416992

Stability of $\Sigma 5\{310\}[001]$ grain boundary in (HfNbTaTiZr)C high-entropy carbide and its influence on mechanical performance*

LI Chuanying¹⁾²⁾ FU Tao^{1)†} PENG Xianghe^{1)‡}

1) (Department of Engineering Mechanics, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

2) (School of Civil Engineering and Transportation, South China University of Technology, Guangzhou 510641, China)

(Received 23 November 2025; revised manuscript received 7 December 2025)

Abstract

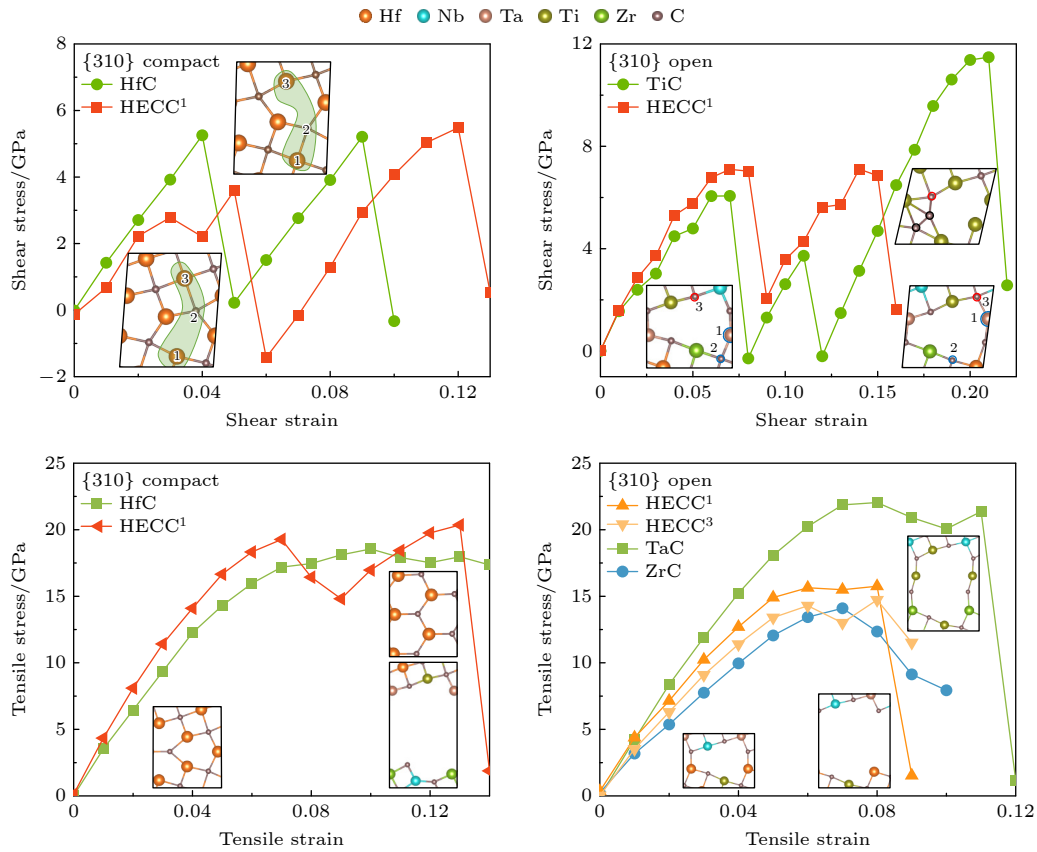
The characteristics of grain boundaries (GBs) and their mechanical responses under external loading are very important in governing the strength and plasticity of polycrystalline ceramics. In this study, first-principles calculations are used to investigate the stability of $\Sigma 5\{310\}[001]$ GBs in (HfNbTaTiZr)C high-entropy carbide ceramic (HECCs) and its constituent binary transition-metal carbides (TMCs), as well as their mechanical behaviors under shear and tensile deformations. The results show that the $\Sigma 5\{310\}[001]$ GBs in all systems are classified as “Open GB” and “Compact GB” according to their morphologies, with the Open GB exhibiting lower GB formation energy, thereby possessing greater structural stability. Under shear deformation, all carbides display shear-coupled GB migration, except for the Open GBs in group IVB TMCs, where the formation of C—C bonds induces supercell failure through the rupture of TM—C bonds. Furthermore, the initial migration stress of Open GB in the HECC is higher than that in binary TMCs, highlighting the strengthening effect introduced by multicomponent GBs. Under tensile deformation, binary TMCs containing

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12472211, 12272066, 11932004), the New Chongqing Youth Innovation Talent Program, China (Grant No. CSTB2025YITP-QCRCX0076), and the Natural Science Foundation of Chongqing Municipality, China (Grant No. CSTB2022NSCQ-MSX0383).

† Corresponding author. E-mail: futao@cqu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: xhpeng@cqu.edu.cn

Compact GB primarily fail through graphitization, whereas the HECC exhibits both graphitization and intergranular fracture. For the Open GB, group IVB TMCs yield due to increased excess volume of GB, while group VB TMCs undergo intergranular fracture; both failure mechanisms coexist in the HECC. Notably, the HECC containing Compact GBs exhibits yield strength comparable to the peak strength of binary TMCs, exceeding the “weakest-link” limit typically associated with ideal condition (0 K and defect-free). Overall, this study elucidates the synergistic roles of GB and multicomponent effects in governing mechanical responses in HECC, indicating that the interplay between multicomponent effects and defects may be the basis for the exceptional mechanical performance of high-entropy materials. These findings provide theoretical guidance for GB engineering and mechanical optimization in HECCs, and they offer insights into exploring their mechanical behaviors under complex defect interactions.



Keywords: high-entropy carbide ceramics, grain boundary, mechanical property, failure mode

DOI: [10.7498/aps.75.20251590](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251590)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251590](https://cstr.net.cn/32037.14.aps.75.20251590)

(HfNbTaTiZr)C高熵碳化物 $\Sigma 5\{310\}[001]$ 晶界的稳定性及其力学行为的影响

李传颖 付涛 彭向和

Stability of $\Sigma 5\{310\}[001]$ grain boundary in (HfNbTaTiZr)C high-entropy carbide and its influence on mechanical performance

LI Chuanying FU Tao PENG Xianghe

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 050807 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251590

CSTR: 32037.14.aps.75.20251590

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251590>

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

纳米晶CoNiCrFeMn高熵合金力学性能的原子尺度分析

Mechanical performance analysis of nanocrystalline CoNiCrFeMn high entropy alloy: atomic simulation method

物理学报. 2022, 71(19): 199601 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220733>

三维超声场调控 $(\text{FeCoNiCrMn})_{92}\text{Mo}_8$ 高熵合金组织演变与力学性能

Three-dimensional ultrasounds modulated solidification microstructure and mechanical property of $(\text{FeCoNiCrMn})_{92}\text{Mo}_8$ high-entropy alloy

物理学报. 2025, 74(17): 174302 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250657>

冲击下铁的各向异性对晶界附近相变的影响

Influence of iron anisotropy on phase transition near grain boundary under shock

物理学报. 2024, 73(3): 036201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231081>

运动晶界与调幅分解相互作用过程的相场法研究

A phase-field study on interaction process of moving grain boundary and spinodal decomposition

物理学报. 2022, 71(7): 078101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211973>

亚禁带光照对CdZnTe晶体中晶界电场分布的影响

Influence of sub-bandgap illumination on electric field distribution at grain boundary in CdZnTe crystals

物理学报. 2022, 71(22): 226101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220896>

电流处理调控CoCrFeNi高熵合金纤维的组织结构与力学性能

Optimizing microstructure and mechanical properties of CoCrFeNi high-entropy alloy microfibers by electric current treatment

物理学报. 2025, 74(13): 138102 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250518>