

## 激光冲击下CoCrFeMnNi高熵合金微观塑性变形的分子动力学模拟

杜欣, 熊启林, 周留成, 阚前华, 蒋虽合, 张旭

### MICROPLASTIC DEFORMATION OF CoCrFeMnNi HIGH-ENTROPY ALLOY UNDER LASER SHOCK: A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

Du Xin, Xiong Qilin, Zhou Liucheng, Kan Qianhua, Jiang Suihe, and Zhang Xu

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.6052/0459-1879-21-468>

#### 您可能感兴趣的其他文章

##### Articles you may be interested in

#### WFeNiMo高熵合金动态力学行为及侵彻性能研究

DYNAMIC MECHANICAL BEHAVIOR AND PENETRATION PERFORMANCE OF WFeNiMo HIGH-ENTROPY ALLOY  
力学学报. 2020, 52(5): 1443-1453

#### 高熵合金的力学性能及变形行为研究进展

MECHANICAL PROPERTIES AND BEHAVIORS OF HIGH ENTROPY ALLOYS  
力学学报. 2020, 52(2): 333-359

#### 两种典型高熵合金冲击释能及毁伤特性研究

IMPACT ENERGY RELEASE AND DAMAGE CHARACTERISTICS OF TWO HIGH-ENTROPY ALLOYS  
力学学报. 2021, 53(9): 2528-2540

#### 基于分子动力学-格林函数法的微凸体接触数值分析

NUMERICAL ANALYSIS OF ASPERITY CONTACT MODEL BASED ON MOLECULAR DYNAMICS-GREEN'S FUNCTION METHOD  
力学学报. 2017, 49(4): 961-967

#### 基于分子动力学的氧化石墨烯拉伸断裂行为与力学性能研究

STUDY ON TENSILE FRACTURE BEHAVIOR AND MECHANICAL PROPERTIES OF GO BASED ON MOLECULAR DYNAMICS METHOD  
力学学报. 2019, 51(5): 1393-1402

#### 交变电场作用下单液滴蒸发的分子动力学模拟

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF SINGLE DROPLET EVAPORATION UNDER ALTERNATING ELECTRIC FIELD  
力学学报. 2021, 53(5): 1324-1333



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

# 激光冲击下 CoCrFeMnNi 高熵合金微观塑性变形的分子动力学模拟<sup>1)</sup>

杜 欣\* 熊启林<sup>†</sup> 周留成\*\* 阚前华\* 蒋虽合<sup>††</sup> 张 旭<sup>\*,2)</sup>

\* (西南交通大学力学与工程学院, 成都 610031)

<sup>†</sup> (华中科技大学航空航天学院, 武汉 430074)

\*\* (空军工程大学等离子体动力学重点实验室, 西安 710038)

<sup>††</sup> (北京科技大学新金属材料国家重点实验室, 北京 100083)

**摘要** 激光冲击强化技术可以有效地提高材料的疲劳寿命, 被广泛应用于航空航天领域. CoCrFeMnNi 高熵合金作为一种经典的高熵合金体系, 研究其激光冲击强化后的微观组织变化以及冲击动态响应对该材料未来在航空航天领域中的应用具有重要意义. 采用分子动力学方法, 对 CoCrFeMnNi 高熵合金进行了冲击模拟, 发现冲击时弹、塑性双波分离现象以及微结构演化具有明显的取向相关性. 沿 [100] 方向进行冲击时未出现双波分离结构, 并且塑性变形过程中会产生中间相; 而沿 [110] 与 [111] 方向冲击时产生了双波分离结构, 并且受冲击区域存在大量的层错以及无序结构, 高位错密度是产生无序结构的重要原因. 双波分离现象与可开动滑移系数有关, 而沿不同取向冲击时的 Hugoniot 弹性极限和发生塑性变形的临界冲击速度与其可开动滑移系的 Schmid 因子大小有关. 此外, 冲击诱导了梯度位错结构的产生, 位错密度沿冲击深度先增加后减小, 在沿原子密排方向冲击时产生了更高的位错密度. 冲击之后在模型两侧存在残余压应力, 芯部为残余拉应力, 残余应力的大小具有明显的取向相关性. 最后, 与具有相同尺寸及取向的纯 Ni 进行对比, 发现 CoCrFeMnNi 高熵合金在冲击过程中由于晶格畸变效应产生了较纯 Ni 更多的无序结构.

**关键词** 激光冲击, 高熵合金, 弹塑性双波分离, 取向相关性, 残余应力, 位错密度, 分子动力学

中图分类号: O34 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-21-468

## MICROPLASTIC DEFORMATION OF CoCrFeMnNi HIGH-ENTROPY ALLOY UNDER LASER SHOCK: A MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION<sup>1)</sup>

Du Xin\* Xiong Qilin<sup>†</sup> Zhou Liucheng\*\* Kan Qianhua\* Jiang Suihe<sup>††</sup> Zhang Xu<sup>\*,2)</sup>

\* (College of Mechanics and Engineering, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China)

<sup>†</sup> (College of Aerospace Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

\*\* (Science and Technology on Plasma Dynamics Laboratory, Air Force Engineering University, Xi'an 710038, China)

<sup>††</sup> (State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, University of Science and Technology, Beijing 100083, China)

**Abstract** Laser shock processing (LSP) can effectively improve the fatigue life of materials, which is widely used in

2021-09-12 收稿, 2021-11-05 录用, 2021-11-06 网络版发表.

1) 国家自然科学基金 (11872321, 11672251) 和新金属材料国家重点实验室开放基金 (2019-Z07) 资助项目.

2) 张旭, 教授, 主要研究方向: 多尺度力学. E-mail: xzhang@swjtu.edu.cn

引用格式: 杜欣, 熊启林, 周留成, 阚前华, 蒋虽合, 张旭. 激光冲击下 CoCrFeMnNi 高熵合金微观塑性变形的分子动力学模拟. 力学学报, 2021, 53(12): 3331-3340

Du Xin, Xiong Qilin, Zhou Liucheng, Kan Qianhua, Jiang Suihe, Zhang Xu. Microplastic deformation of cocrfemni high-entropy alloy under laser shock: a molecular dynamics simulation. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(12): 3331-3340

the aerospace field. CoCrFeMnNi high-entropy alloy is a classic high-entropy alloy system, so the studies on microstructure evolutions and shock wave responses after LSP play an important role in the application of this material in the aerospace field. The molecular dynamics method is used to simulate the shock of CoCrFeMnNi high-entropy alloy, and it is obtained that the elastoplastic two-wave separation phenomenon is related to the shock direction, showing obvious orientation-dependence. It is found that there is no two-wave separation structure when shocking along the [100] direction, and an intermediate phase will be produced in the process of plastic deformation. But, when shocking along the [110] and [111] directions, a two-wave separation structure is produced, and there are a large number of stacking faults and disordered structures in the impacted area, the high dislocation density is an important reason for the disordered structure. The phenomenon of two-wave separation is related to the number of active slip systems, the Hugoniot elastic limit and the critical impact velocity for plastic deformation when impacted along different orientations are related to the Schmid factor of the active slip systems. In addition, a gradient dislocation density structure is induced due to the shocking loading, the dislocation density first increases and then decreases along with the shock depth, and a greater dislocation density is produced when shocked in the close-packed direction. After the shock, there is residual compressive stress at the both ends of the model, the residual tensile stress is at the core of the model, and the magnitude of residual stress has obvious orientation dependence. Finally, compared with pure Ni with the same size and orientation, it is found that there are more disordered structures in CoCrFeMnNi high-entropy alloy than pure Ni during the impact process due to the lattice distortion effect.

**Key words** laser shock, high-entropy alloy, elastoplastic two-wave separation, orientation-dependent, residual stress, dislocation density, molecular dynamics

## 引言

激光冲击强化技术利用激光穿过约束层, 作用于烧蚀层产生大量等离子体, 等离子体继续吸收激光能量发生爆炸从而产生冲击波作用于金属表面. 当冲击波峰值压力大于材料的屈服强度时, 激光冲击使材料发生超高应变率 ( $>10^6 \text{ s}^{-1}$ ) 的塑性变形, 造成材料表面出现残余压应力分布并且发生表面晶粒细化<sup>[1-3]</sup>. 与传统的机械处理技术相比, 激光冲击强化后材料的粗糙度得到很好的改善, 并且磨损寿命和疲劳强度得到了提高<sup>[4-5]</sup>. 因此, 目前激光冲击强化技术已经在航空工业中得到广泛应用<sup>[3]</sup>.

高熵合金是具有多个化学主元 (通常大于 4 种) 的新型结构材料<sup>[6]</sup>, 多主元并未使高熵合金变脆, 反而表现出更好的性能, 例如高硬度、高强度、良好的塑性、出色的热稳定性和耐腐蚀性<sup>[7-11]</sup>. 这些优异的性能使得高熵合金在工程中的潜在适用性受到了广泛关注. CoCrFeMnNi 作为一种典型的高熵合金, 最早由 Cantor 等<sup>[12]</sup> 在 2004 年提出, 所以也称为“Cantor 合金”, 其晶体结构为面心立方, 在室温 (300 K), 低温 (77 K) 和超低温 (15 K) 下具有出色的强度和塑性变形能力<sup>[13-15]</sup>. 这些优异的性能使得 CoCrFeMnNi 高熵合金未来有望在天然气运输、航

空航天等领域运用. 由于激光冲击强化技术已广泛应用于航空航天等领域, 所以研究 CoCrFeMnNi 高熵合金的激光冲击强化有重要的意义<sup>[16]</sup>.

分子动力学模拟是基于经典牛顿力学对原子或者分子的运动进行模拟的方法, 有助于揭示材料在原子尺度上的力学行为和变形机理<sup>[17]</sup>. 利用分子动力学来模拟激光冲击, 可以直观观察到冲击过程中以及冲击之后材料微观组织的演化过程. 许多学者针对激光冲击强化问题, 开展了分子动力学相关研究. 例如, Meng 等<sup>[18]</sup> 研究了激光冲击波在 Al-Cu 合金中的传播过程, 发现温度会影响扩展位错的形成和演化, 并且弹、塑性波速度随温度的升高而减小. Xiong 等<sup>[19]</sup> 研究了铜单晶受冲击压缩的弹塑性双波结构, 指出由冲击波引起的缺陷形态表现出明显的晶体取向依赖性. 陈亚洲等<sup>[20]</sup> 发现在激光冲击下纯钛内部产生了孪生变形, 变形孪晶生长经历了沿垂直加载方向生长、无序生长、形成孪晶栅 3 个过程, 得到了弹塑性波分离的双波结构. 徐高峰等<sup>[21]</sup> 研究了激光冲击纯钛的温度效应, 指出在深冷条件下 (77 K), 冲击波的速度高于常温条件, 能够产生稳定的弹、塑性双波结构, 产生的高密度堆垛层错钉扎了位错, 从而实现材料强化. Germann 等<sup>[22]</sup> 发现在某些冲击方向下, 在波阵面附近由于原子面间的

弹性振动产生了独立的波列. Bringa 等<sup>[23]</sup>发现激光冲击产生的高应力会阻碍晶界运动, 限制了材料的软化. 上述研究都采用分子动力学模拟方法, 分析了冲击波传播过程以及冲击波作用于材料的微观机理. 然而, 目前针对 CoCrFeMnNi 高熵合金激光冲击强化的分子动力学模拟鲜见报道, 这限制了从原子尺度上理解 CoCrFeMnNi 高熵合金激光冲击过程中的微观结构演化、冲击波响应.

针对以上问题, 利用分子动力学模拟软件 LAMMPS<sup>[24]</sup>, 对单晶 CoCrFeMnNi 高熵合金进行了激光冲击的分子动力学模拟. 通过位错提取算法 (dislocation analysis, DXA) 以及共邻分析方法 (common neighbor analysis, CNA) 来分析不同冲击方向下微结构演变过程<sup>[25-27]</sup>, 并且通过粒子速度以及冲击波波速来分析不同冲击方向下的冲击波特性, 此外分析了冲击后残余应力与位错密度沿冲击深度的分布.

### 1 原子模型与加载方式

为研究冲击时双波结构以及微结构演化的取向相关性, 利用 AtomsK 软件<sup>[28]</sup>分别建立尺寸为  $74.7 \text{ nm} \times 13.3 \text{ nm} \times 7.5 \text{ nm}$ , 取向为  $x = [100]$ ,  $y = [010]$ ,  $z = [001]$ ,  $x = [110]$ ,  $y = [\bar{1}10]$ ,  $z = [001]$  和  $x = [111]$ ,  $y = [1\bar{1}0]$ ,  $z = [11\bar{2}]$  的 3 个单晶 CoCrFeMnNi 高熵合金模型 (晶格常数  $a = 3.595 \text{ \AA}$ ), 其中  $x$  方向为  $[100]$  取向的单晶模型如图 1 所示. 此外, 作为对比分析, 建立了与 CoCrFeMnNi 高熵合金具有相同尺寸及取向的纯 Ni 模型. 在冲击之前, 采用 NPT 系综使体系在 300 K 下弛豫 50 ps 来达到热力学平衡, 弛豫时,  $x$ ,  $y$  和  $z$  方向采用周期性边界条件, 时间步长为 1 fs. 冲击加载时, 冲击方向 ( $x$  方向) 为自由边界条件并采用 NVE 系综.

CoCrFeMnNi 高熵合金的分子动力学模拟采用 Choi 等<sup>[29]</sup>提出的第二近邻修正嵌入原子 (2NN MEAM)

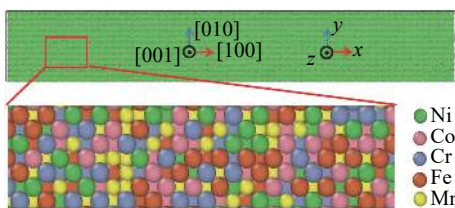
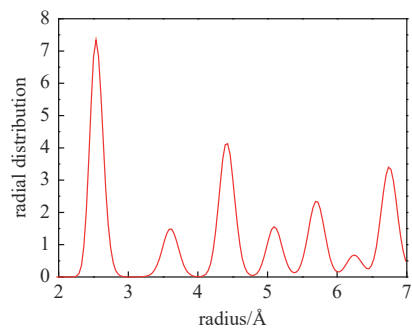


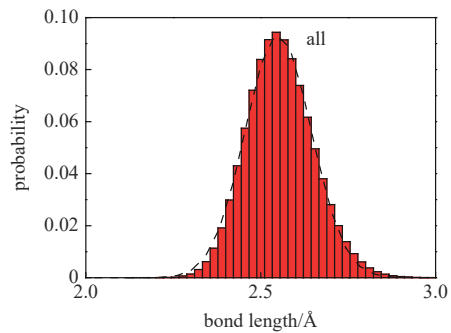
图 1  $x$  方向为  $[100]$  取向的单晶 CoCrFeMnNi 高熵合金原子模型  
Fig. 1 Atomistic model of single crystal CoCrFeMnNi high-entropy alloy with  $[100]$  orientation in  $x$  direction

势函数, 该势函数已被用于模拟 CoCrFeMnNi 高熵合金的循环变形、压痕、温度以及应变率效应<sup>[30-33]</sup>. 基于该势函数构建的高熵合金模型径向分布函数如图 2(a) 所示, 可以看出其径向分布呈现平滑分布的特征, 这与传统的面心立方结构 (face-centered cubic, FCC) 合金径向分布函数中表现出的单峰特征有所不同, 体现了高熵合金的晶格畸变效应<sup>[34-35]</sup>. 此外, 在该势函数下构建的 CoCrFeMnNi 高熵合金原子模型的所有第一近邻键对的键长满足高斯分布, 如图 2(b) 所示.



(a) 径向分布函数

(a) The radial distribution function



(b) 第一近邻所有键对的键长分布以及高斯分布拟合 (虚线)

(b) The bond length distribution of all bond pairs in the first nearest neighbor and the fitted Gaussian distribution (dotted line)

图 2 径向分布函数与第一近邻所有键对的键长分布

Fig. 2 The radial distribution function and the bond length distribution of all bond pairs in the first nearest neighbor

在分子动力学模拟中, 有 3 种方法产生冲击波: (1) 收缩性边界条件法, 通过收缩边界产生由两侧向内部传播的冲击波, 常用在流体冲击波的模拟; (2) 对称碰撞法, 通过将材料与飞片发生碰撞来产生冲击波; (3) 活塞法, 通过将边界处一定层数的原子作为活塞来诱导冲击波的产生<sup>[1]</sup>. 在本文中采用活塞法来进行激光冲击的分子动力学模拟, 取  $x$  方向边界处三层原子作为活塞, 其中活塞原子速度为  $U_p$ , 产生的冲击波速度为  $U_s$ . 只有冲击波引起的应力大于其 Hugoniot 弹性极限, 才会使材料产生动态塑性



变形,从而有可能产生弹性波和塑性波分离的双波结构. 材料的 Hugoniot 弹性极限  $\sigma_{\text{HEL}}$  可表示为<sup>[19]</sup>

$$\sigma_{\text{HEL}} = \frac{1-\nu}{1-2\nu}\sigma_Y \quad (1)$$

式中,  $\nu$  为泊松比,  $\sigma_Y$  为屈服应力. 由于弹、塑性双波结构的产生, 冲击强化材料分为 5 个区域, 即活塞区、塑性区、弹塑性区、弹性区和未受冲击区<sup>[19]</sup>, 如图 3 所示.

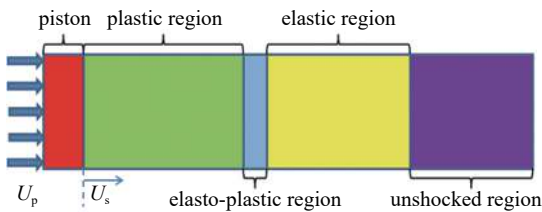


图 3 活塞法冲击强化材料的结构分区示意图  
Fig. 3 Schematic diagram of the piston method

## 2 结果与分析

### 2.1 粒子速度

以 1.2 km/s (高于 Hugoniot 弹性极限) 对单晶沿 3 个方向进行冲击加载, 冲击总时间为 5 ps, 并沿冲击方向进行分层处理, 取每层质心位置作为冲击距离<sup>[36]</sup>. 在高应变率下, 局部区域的粒子速度由原子的平移和热运动这两部分构成, 而大多情况下, 原子的热运动速度是其运动速度<sup>[37]</sup>. 所以, 将除去质心速度后的平均粒子速度作为局部区域内的粒子速度, 得到 1 ps 和 5 ps 时的粒子速度剖面图, 如图 4 所示. 在冲击时间为 1 ps 的冲击初期, 由于受冲击区域较浅, 导致沿各冲击方向冲击都未有明显的弹、塑性双波分离现象. 在冲击时间为 5 ps 时, 沿 [100] 方向冲击时曲线并未出现台阶段, 即并未出现弹塑性双波分离现象, 而沿 [110] 和 [111] 方向冲击时产生了弹性波与塑性波分离的双波结构. 这是由于 [100] 方向有更多的滑移系 (8 个滑移系) 激活, 导致滑移更容易发生, 以至于有更显著的塑性变形, 造成塑性波的传播加快, 从而引起弹、塑性波的分离不明显. 而在 [110] 密排方向 (4 个滑移系激活) 和 [111] (6 个滑移系激活) 冲击时塑性波较当前冲击方向下的弹性波波速慢, 表现出了明显的弹、塑性双波分离现象. 但是, 当冲击速度提升到一定程度之后, 沿 [110] 以及 [111] 冲击时的塑性波将追赶上弹性波, 从而也不再表现出弹、塑性波分离的双波结构<sup>[38]</sup>.

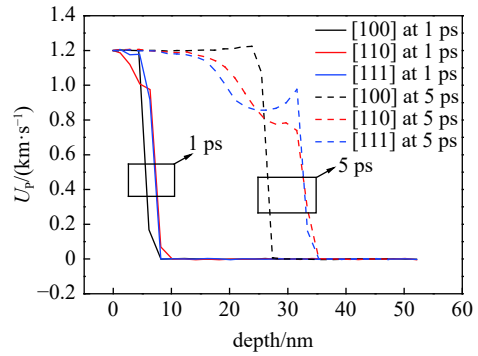


图 4 粒子速度剖面图  
Fig. 4 Particle velocity profile

由图 4 可以明显观察到沿不同方向进行冲击时的冲击波波速的差异. 在沿 [100] 方向进行冲击时其塑性波波速明显快于其余方向. 沿 [110] 方向进行冲击时其塑性波波速略快于沿 [111] 方向进行冲击时的塑性波波速, 这与 [110] 方向为其密排方向有关. 但是, 沿 [111] 方向进行冲击时, 由于弹性波的单独扰动, 使得原子面在波前附近处弹性振动, 导致附近粒子速度上升, 从而产生了独立的波列<sup>[23]</sup>. CoCrFeMnNi 高熵合金表现出的弹塑性双波分离现象和原子面弹性振动的取向效应与目前所研究的 Cu 和 Al 等面心立方结构金属结果一致<sup>[2,39]</sup>. 此外, 可以看出沿 [111] 方向进行冲击时产生塑性波的临界冲击速度 (约 0.9 km/s) 大于 [110] 方向 (约 0.8 km/s). 临界冲击速度的差异与可开动滑移系的 Schmid 因子大小有关. 沿 [111] 方向加载时 Schmid 因子为 0.272, 而 [110] 方向的可开动滑移系 Schmid 因子为 0.408, 所以沿 [111] 方向进行冲击时所需要的外加应力更大, 导致了其临界冲击速度大于 [110] 方向. 但是, 由于沿 [100] 方向冲击时的粒子速度剖面图未表现出弹、塑性双波分离现象, 所以不能从中判断出 [100] 冲击方向下塑性变形发生的临界冲击速度.

### 2.2 局部应力

冲击加载时的应力状态可以反映冲击波特性以及微观组织变化, 在这里计算了冲击 1 ps, 5 ps 时各区域的正应力  $\sigma_{xx}$ 、最大分切应力  $\sigma_{\text{shear}}$ 、等效应力  $\sigma_{\text{vm}}$ , 如图 5 所示. 其中, 最大分切应力  $\sigma_{\text{shear}}$  和冯·米塞斯等效应力  $\sigma_{\text{vm}}$  可表示为<sup>[1]</sup>

$$\sigma_{\text{shear}} = \frac{1}{2} \left( \sigma_{xx} - \frac{\sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{2} \right) \quad (2)$$

$$\sigma_{\text{vm}} = \sqrt{\frac{1}{2} [(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{yy})^2]} \quad (3)$$

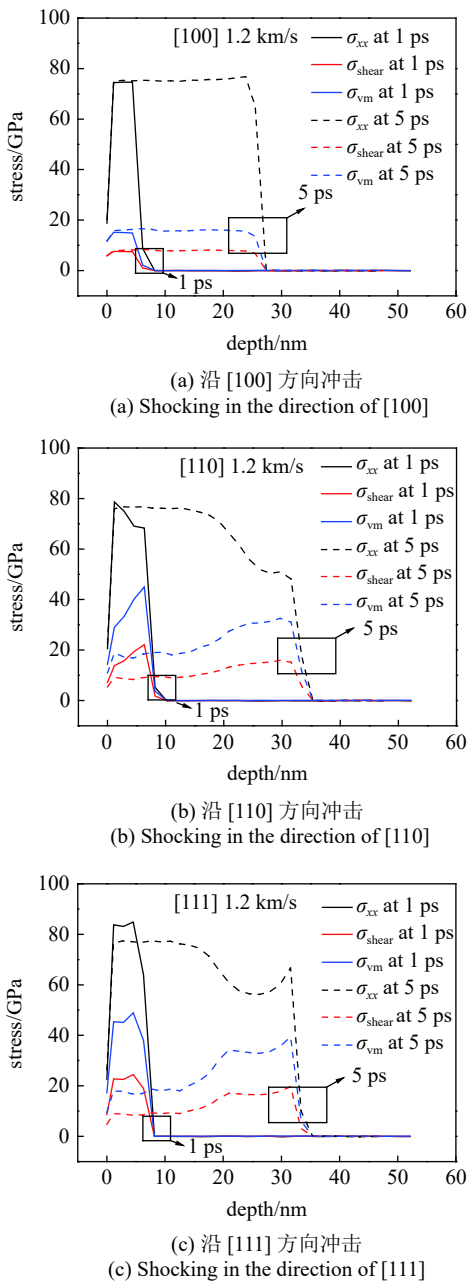


图 5 局部应力  
Fig. 5 Local stress

从图 5 可以看出, 沿 [100] 方向进行冲击时, 首先出现弹性先驱波, 正应力、最大分切应力、冯·米塞斯等效应力在波前附近急剧下降, 未表现出弹、塑性双波分离现象. 其余方向下正应力随着深度的增加有明显的台阶出现, 表明弹塑性双波已分离, 此时台阶只存在弹性波的扰动. 而最大分切应力和冯·米塞斯等效应力在靠近冲击表面处较小, 这是由于受到冲击载荷的作用, 材料未表现出明显的泊松效应, 导致材料处于静水应力状态<sup>[19]</sup>. 正应力、最大分切应力和冯·米塞斯等效应力在波前的急剧下

降表明了模型中受冲击区域向未受冲击区域的转变. 沿 [111] 方向进行冲击时, 波前附近的局部应力增加同样表示着由于原子面之间的弹性振动导致出现的独立的波列.

沿 [100], [110], [111] 3 个方向进行冲击时压力分布情况如图 6 所示. 可以看出, 在沿 [111] 方向进行冲击时其 Hugoniot 弹性极限 (Hugoniot elastic limit, HEL) 大于 [110] 方向, 这同样与 [111] 方向可开动滑移系的 Schmid 因子大小有关. 但是, 由于沿 [100] 方向进行冲击时的压力分布同样未表现出弹、塑性双波分离现象, 所以不能直观获得其 Hugoniot 弹性极限<sup>[19]</sup>.

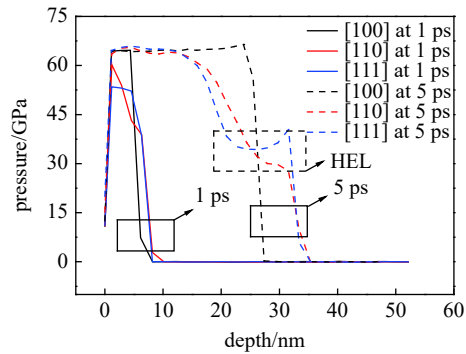


图 6 压力分布  
Fig. 6 Pressure distribution

### 2.3 微观结构演变

采用位错提取算法 (DXA) 分析位错密度沿深度方向的分布, 如图 7 所示. CoCrFeMnNi 高熵合金冲击过程中沿深度方向位错密度先增后减, 表现出明显的位错密度梯度分布. 在冲击表面附近处位错密度先增加, 是由于在在冲击表面附近处最大分切应力较小. 较小的最大分切应力造成位错诱导的塑性变形受限, 从而影响冲击表面附近的位错成核以及增殖, 使得位错密度呈现沿深度方向先增加后减小的梯度分布. 分析位错密度的大小以及峰值出现的位置可以看出, 在 [110] 冲击方向下位错密度峰值所对应的深度最深, 沿 [100] 方向进行冲击会有更多的滑移系开动, 但是其位错密度最小. 其中, 由于 [110] 冲击方向为密排方向, 所以其塑性波传播速度略快于 [111] 冲击方向, 导致其位错密度峰值所对应的深度最深. 而 [111] 冲击方向较 [110] 冲击方向拥有更多的可开动滑移系, 所以其塑性区域的位错密度大于 [110] 冲击方向的位错密度. 此外, CoCrFeMnNi 高熵合金由于晶格畸变降低了位错成核的能垒<sup>[40]</sup>, 导致了高熵合金冲击过程中的位错密度大于纯 Ni.

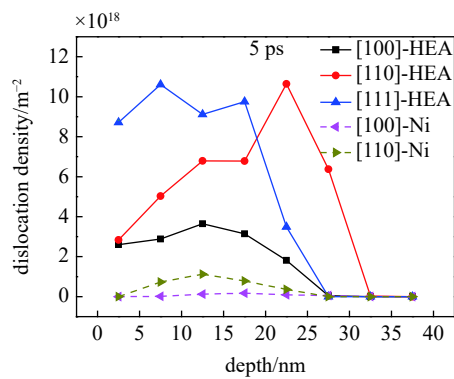


图 7 位错密度分布

Fig. 7 Dislocation density distribution

但是, 在纯 Ni 中以 1.2 km/s 沿 [111] 方向进行冲击时只出现了弹性波, 未发生塑性变形. 在纯 Ni 中沿 [111] 方向以 1.2 km/s 进行冲击未产生塑性变形反映出了在此冲击方向下的临界冲击速度大于 [100] 和 [110] 方向, 这与在 CoCrFeMnNi 高熵合金在 [111] 方向下拥有更高的临界冲击速度相同. 同样, 在纯 Ni 的冲击加载过程中也产生了沿冲击深度方向先增后减的梯度位错密度.

沿 [100] 方向进行冲击时拥有最小的位错密度是由于其产生了体心立方 (body-centered cubic, BCC) 中间相, 导致了更少不全位错形核, 如图 8 所示. 图中 3 个及以上蓝色原子层表示为 BCC 中间相, 绿色原子为 FCC 结构, 红色原子为密排六方 (hexagonal close-packed, HCP) 结构. 围绕两个或多个 FCC 原子层的一层 HCP 原子层是一个孪晶界, 两个相邻的 HCP 原子层构成内层错, 两个 HCP 原子层夹一层 FCC 原子层构成外层错, 白色原子部分表示无序结构<sup>[28]</sup>. 在冲击过程中材料内塑性波传播的区域产生了大量的层错以及无序结构<sup>[27]</sup>. 此外, 在冲击过程中产生了大量的扩展位错, 进一步提高位错滑移的阻力, 从而促进位错的进一步增殖. 高密度位错使周边晶格发生畸变, 导致原子排列呈无序化, 产生了无序结构. 从缺陷在材料内的分布深度可以看出在沿 [110] 方向冲击时塑性波传播快于 [111] 方向.

将 CoCrFeMnNi 高熵合金与纯 Ni 在冲击时间为 5 ps 时受冲击区域内的微结构进行对比, 如图 9 所示. 可以看出, 由于高熵合金中存在的晶格畸变效应, 使得其在冲击过程中更容易发生晶格失配<sup>[40]</sup>. 导致了在高熵合金中产生的无序结构含量高于纯 Ni, 但在 [100] 冲击方向下高熵合金产生的 BCC 中间相含量低于纯 Ni.

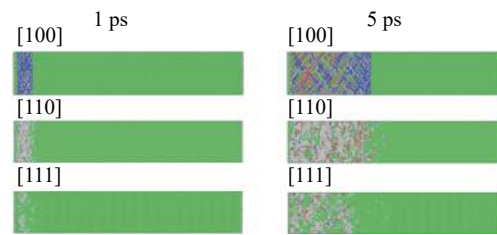


图 8 采用共邻分析方法分析微观组织变化

Fig. 8 Microstructure evolutions by CNA

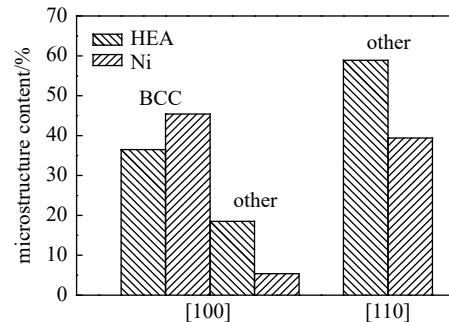


图 9 冲击时间为 5 ps 时 CoCrFeMnNi 高熵合金与纯 Ni 受冲击区域内微结构含量

Fig. 9 The microstructure content in the impact area of CoCrFeMnNi HEA and pure Ni at 5 ps

FCC 晶胞中的面心原子和与之相邻的 FCC 晶胞中的面心原子以及共边顶角原子和共面的面心原子可以构成一个体心四方 (body-centered tetragon, BCT) 结构, 如图 10 所示. 图中绿色直线构成了两个相邻的 FCC 晶胞, 蓝色直线构成了一个 BCT 晶胞.

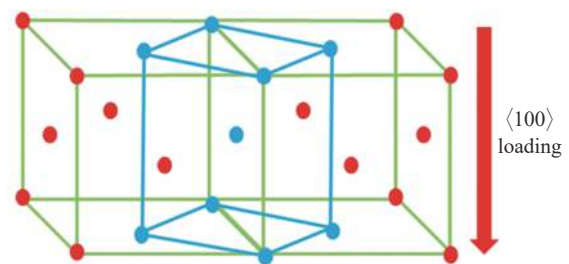


图 10 FCC 结构中的 BCT 结构示意图

Fig. 10 Schematic diagram of BCT structure in FCC structure

在沿 [100] 方向进行冲击时, 由于冲击波高压作用导致 FCC 结构中 BCT 晶胞的高度从  $a$  压缩至与其横向长度相同的  $\sqrt{2}a/2$  ( $a = 3.595 \text{ \AA}$ , 为 CoCrFeMnNi 高熵合金的晶格常数), 使得 BCT 结构转变为 BCC 结构, 进而表现出 FCC 结构向 BCC 中间相转变的现象<sup>[39]</sup>. 在沿 FCC 结构的  $\langle 100 \rangle$  晶向方向进行加载时, FCC 结构在冲击波作用下是否稳定可通过修正的 Born 稳定性准则来判断, 即<sup>[41]</sup>

$$M_1 = (C_{11} + 2C_{12})/3 + P/3 > 0 \quad (4)$$



$$M_2 = C_{44} - P > 0 \tag{5}$$

$$M_3 = (C_{11} - C_{12})/2 - P > 0 \tag{6}$$

式中,  $M_1$  为自旋稳定准则,  $M_2$  为剪切稳定准则,  $M_3$  为 Born 稳定准则,  $P$  为压力,  $C_{ij}$  为完美晶体的弹性常数. 局部压力沿冲击深度方向分布如图 11 所示, 可以看出, 在受冲击区域的压力超过了 Born 稳定准则的临界压力, 但是未达到剪切稳定准则的临界压力. 因此, 在沿 [100] 方向进行冲击加载时 FCC 结构中的 BCT 结构不稳定并转变为 BCC 中间相. 由于裂纹尖端的应力集中, 使得这种压力相关的相转变机制也出现在裂纹扩展的分子动力学模拟中<sup>[42-43]</sup>.

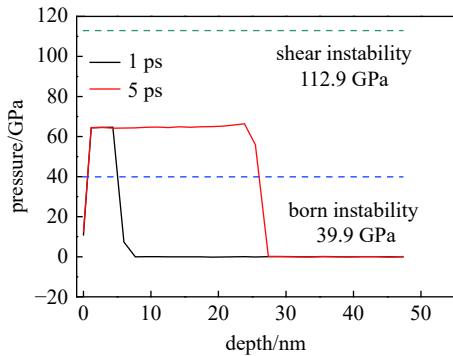
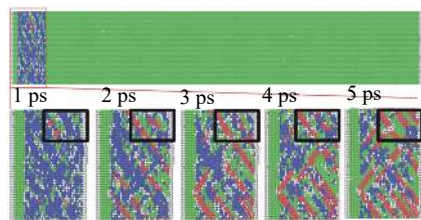
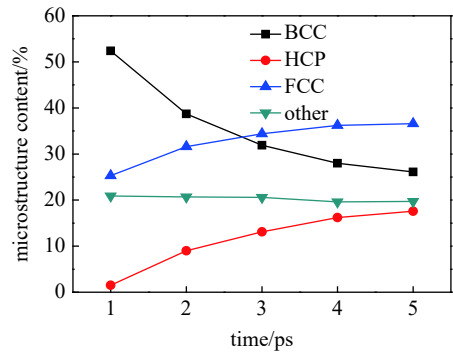


图 11 沿 [100] 方向冲击时压力分布  
Fig. 11 Pressure distribution at [100] shocking direction

为了探究高熵合金沿 [100] 方向冲击时 BCC 中间相的演化情况, 提取冲击为 1 ps 时受冲击区域的微结构在随后冲击过程中的演化情况, 如图 12 所示. 可以看出, BCC 中间相在随后的冲击加载过程中会逐渐转变为 FCC 结构, 并且有部分 FCC 结构会转变为 HCP 结构 (层错). BCC 相在结构上不稳定并且两相间能垒随着压缩应力的减小而减小, 导致了在随后的冲击加载过程中部分 BCC 相转变回 FCC 结构<sup>[41]</sup>. 高位错密度以及位错芯区域原子严重错排, 导致了在冲击过程中产生了大量无序原子.



(a) 采用 CNA 方法分析微结构演化, 其中下方组图为红色矩形区域内微结构在加载过程中的放大  
(a) The evolution of the microstructure by CNA, the lower group of pictures shows the enlarged view of the microstructure in the red rectangular area during the loading process



(b) 红色矩形区域内微结构含量变化曲线  
(b) The curve of the microstructure change in the red rectangular area

图 12 高熵合金中沿 [100] 冲击方向下微结构演化  
Fig. 12 Microstructure evolution at [100] direction in HEA

### 2.4 冲击后残余应力与位错密度

将模型两端固定, 中心区域采用 NVE 系综使冲击波在模型内充分传播, 以达到保载的目的, 保载过程中冲击波经历了多次反射的过程. 沿 [100] 方向冲击后保载过程中冲击波的传播造成微结构变化的情况如图 13 所示. BCC 中间相的产生与冲击波的继续传播以及反射密切相关, 在塑性波进一步传播时的波前附近会产生 BCC 中间相, 而在冲击波已传播过的区域中, BCC 中间相会转变为 FCC 结构以及层错. 并且, 在冲击波到达模型另一端的固定端时会发生反射, 造成该区域内的压力增加, 从而产生大量的 BCC 中间相. 但是, 随着冲击波的衰减, 后续产生的 BCC 中间相含量减少, 甚至在保载完成后不存在 BCC 中间相, 只存在层错以及无序结构.

当全局应力达到平稳水平时认为保载完成, 随后取消模型两端约束, 在 NVE 系综下弛豫以达到卸

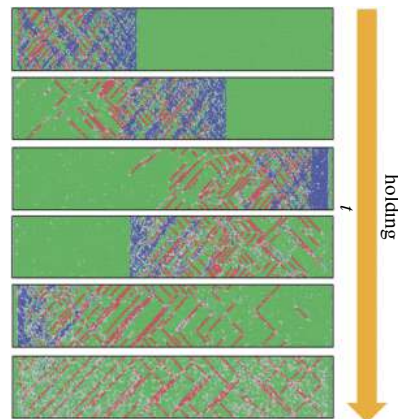


图 13 沿 [100] 方向冲击后保载过程的微结构演化  
Fig. 13 The microstructure evolution of the holding process after shocking in the direction of [100]



载的目的, 当全局应力为零时认为卸载完成<sup>[44]</sup>. 卸载后获得冲击方向残余应力分量  $\sigma_{xx}$  随冲击深度的变化情况如图 14 所示. 可以看出, 在冲击表面为残余压应力, 芯部为拉应力. 由于冲击波的反射, 造成了残余应力表现出了双向冲击的分布情况<sup>[45]</sup>. 沿单晶 [100] 方向冲击时芯部的残余拉应力最大. 沿 [111] 方向冲击时较 [110] 方向拥有更多的可开动滑移系, 导致 [111] 方向受冲击区域的塑性变形更加剧烈, 造成在 [111] 方向冲击表面的残余压应力大于 [110] 方向. 虽然沿 [100] 方向进行冲击时可开动滑移系最多, 但中间相的产生导致了冲击后冲击表面附近的残余压应力小于沿 [111] 方向冲击后的残余压应力. 值得注意的是, 冲击以及保载过程中的约束层原子对残余应力的大小产生了一定的影响<sup>[46]</sup>.

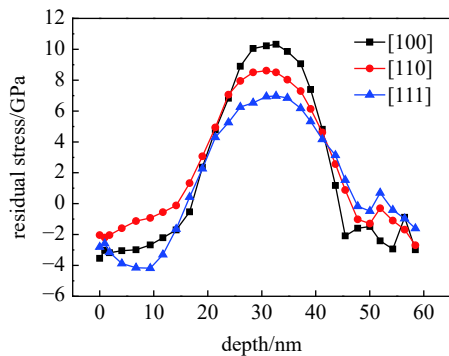


图 14 残余应力  $\sigma_{xx}$  沿深度分布曲线

Fig. 14 The evolution curves of residual stress  $\sigma_{xx}$  with the depth

分析卸载之后位错密度沿冲击深度分布情况如图 15 所示. 可以看出, 卸载之后位错密度同样表现出沿深度先增加后减小的梯度分布情况. 但是, 由于冲击波的反复反射导致塑性变形中缺陷的动态回复, 造成了卸载后的位错密度大小较冲击过程中的有所减小. 此外, 由于 [110] 方向下产生了较多的无序结构, 造成位错在无序结构处钉扎, 使冲击波反射

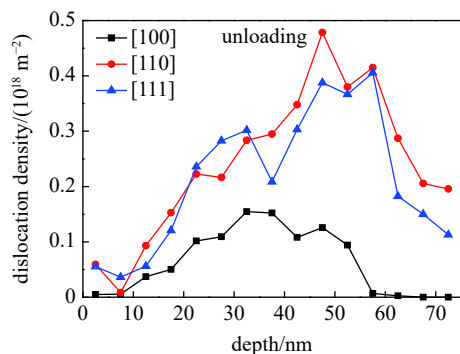


图 15 卸载后位错密度分布

Fig. 15 Dislocation density distribution after unloading

后位错的反向运动受阻, 以至于位错动态回复更难发生, 导致卸载之后 [110] 方向下的位错密度略大于 [111] 方向下的位错密度.

激光冲击强化会产生梯度位错密度、梯度残余应力以及梯度晶粒尺寸 3 种梯度结构. 梯度位错密度可以使材料强度得到有效提高<sup>[47-49]</sup>; 梯度晶粒尺寸可以保持材料的应变强化能力<sup>[50-53]</sup>. 梯度残余应力可以降低疲劳裂纹的发生几率和抑制裂纹的扩展, 从而延长零件的服役寿命<sup>[45, 54-55]</sup>. 但限于分子动力学模拟的尺寸限制, 在这里无法获得晶粒细化的模拟结果. 以上研究成果可对分析实际工程中的冲击波传播特性和冲击波对材料的加工应用进行理论指导.

### 3 结论

基于 Atomsk 和 Lammmps 软件对 CoCrFeMnNi 高熵合金进行了激光冲击的模拟, 研究了不同冲击方向下冲击过程中的冲击波的传播特性、局部应力的分布情况、微观结构的变化以及冲击后的残余应力和位错密度分布情况, 并将 CoCrFeMnNi 高熵合金冲击过程微结构演化与纯 Ni 进行对比, 获得以下主要结论.

(1) 激光冲击强化诱导的弹塑性双波分离现象表现出了明显的取向效应. [100] 方向拥有更多的可动滑移系, 在沿 [100] 方向进行冲击时, 滑移更容易发生, 塑性变形更容易. 这导致了在 [100] 冲击方向下塑性波传播速度变快, 从而未出现双波结构. 而沿 [110] 和 [111] 方向进行冲击加载时, 可动滑移系较少, 其塑性变形也更困难, 进而导致了弹、塑性双波分离的现象.

(2) 沿 [100] 方向进行冲击时产生了 BCC 中间相, 中间相在后续的塑性变形过程中演变为 FCC 结构、层错与少量的无序结构. 在沿 [110] 以及 [111] 方向进行冲击时会产生大量的无序结构, 这是由于高密度位错以及位错芯区域原子错排, 使得原子排列呈无序化.

(3) CoCrFeMnNi 高熵合金由于晶格畸变效应使得位错更容易形核, 导致在冲击过程中产生了较纯 Ni 更高的位错密度以及更多的无序结构.

(4) 由于冲击波产生的塑性变形不均匀, 导致在卸载后模型两端产生残余压应力, 芯部产生残余拉应力. 并且, 卸载之后的位错密度同样呈现沿深度先增加后减小的梯度分布情况.

## 参 考 文 献

- 1 贾唯. 激光冲击强化金属镍的微观形变实验与模拟研究. [硕士学位论文]. 江苏: 江苏大学, 2018 (Jia Wei. Experiment and simulation research micro-deformation of metal nickel treated by laser shock peening. [Master Thesis]. Jiangsu: Jiangsu University, 2018 (in Chinese))
- 2 鲁金忠. 激光冲击强化铝合金力学性能及微观塑性变形机理研究. [博士学位论文]. 江苏: 江苏大学, 2010 (Lu Jinzhong. Investigation of laser shock processing on the mechanical properties and micro-plastic deformation mechanism of LY2 aluminum alloy. [PhD Thesis]. Jiangsu: Jiangsu University, 2010 (in Chinese))
- 3 何卫锋, 李翔, 聂祥樊等. 钛合金薄壁构件激光冲击残余应力稳定性研究. *金属学报*, 2018, 54(3): 411-418 (He Weifeng, Li Xiang, Ni Xiangfan et al. Study on stability of residual stress induced by laser shock processing in titanium alloy thin-components. *Acta Metallurgica Sinica*, 2018, 54(3): 411-418 (in Chinese))
- 4 汪军, 李民, 汪静雪等. 激光冲击强化对 304 不锈钢疲劳寿命的影响. *中国激光*, 2019, 46(1): 0102003 (Wang Jun, Li Min, Wang Jingxue, et al. Effects of laser shock processing on fatigue life of 304 stainless steel. *Chinese Journal of Lasers*, 2019, 46(1): 0102003 (in Chinese))
- 5 罗开玉, 周阳, 鲁金忠等. 激光冲击强化对 316 L 不锈钢熔覆层微观结构和性能的影响. *中国激光*, 2017, 44(4): 0402005 (Luo Kaiyu, Zou Yang, Lu Jinzhong, et al. Influence of laser shock peening on microstructure and property of cladding layer of 316 l stainless steel. *Chinese Journal of Lasers*, 2017, 44(4): 0402005 (in Chinese))
- 6 Yeh JW, Lin SJ, Chin TS, et al. Formation of simple crystal structures in Cu-Co-Ni-Cr-Al-Fe-Ti-V alloys with multiprincipal metallic elements. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2004, 35(8): 2533-2536
- 7 Klimova MV, Semenyuk AO, Shaysultanov DG, et al. Effect of carbon on cryogenic tensile behavior of CoCrFeMnNi-type high entropy alloys. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 811: 152000
- 8 Qiu J, Jin T, Xiao GS, et al. Effects of pre-compression on the hardness of CoCrFeNiMn high entropy alloy based an asymmetrical yield criterion. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 802: 93-102
- 9 Shang XL, Wang ZJ, He F, et al. The intrinsic mechanism of corrosion resistance for FCC high entropy alloys. *Science China-Technological Sciences*, 2018, 61(2): 189-196
- 10 吕昭平, 雷智锋, 黄海龙等. 高熵合金的变形行为及强韧化. *金属学报*, 2018, 54(3): 1553-1566 (Lü Zhaoping, Lei Zhifeng, Huang Hailong, et al. Deformation behavior and toughening of high-entropy alloys. *Acta Metallurgica Sinica*, 2018, 54(3): 1553-1566 (in Chinese))
- 11 李建国, 黄瑞瑞, 张倩等. 高熵合金的力学性能及变形行为研究进展. *力学学报*, 2020, 52(2): 333-359 (Li Jianguo, Huang Ruirui, Zhang Qian, et al. Mechanical properties and behaviors of high entropy alloys. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2020, 52(2): 333-359 (in Chinese))
- 12 Cantor B, Chang IT, Knight P, et al. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. *Materials Science and Engineering A*, 2004, 375-377: 23-218
- 13 Gali A, George EP. Tensile properties of high- and medium-entropy alloys. *Intermetallics*, 2013, 39: 74-78
- 14 Gludovatz B, Hohenwarter A, Catoor D, et al. A fracture-resistant high-entropy alloy for cryogenic applications. *Science*, 2014, 345(6201): 1153-1158
- 15 Naeem M, He HY, Zhang F, et al. Cooperative deformation in high-entropy alloys at ultralow temperatures. *Science Advances*, 2020, 6(13): eaax4002
- 16 Huang TD, Jiang L, Zhang CL, et al. Effect of carbon addition on the microstructure and mechanical properties of CoCrFeNi high entropy alloy. *Science China*, 2018, 61(1): 117-123
- 17 Peng J, Li L, Li F, et al. The predicted rate-dependent deformation behaviour and multistage strain hardening in a model heterostructured body-centered cubic high entropy alloy. *International Journal of Plasticity*, 2021, 145: 103073
- 18 Meng XK, Zhou JZ, Huang S, et al. Properties of a laser shock wave in Al-Cu alloy under elevated temperatures: A molecular dynamics simulation study. *Materials*, 2017, 10: 73
- 19 Xiong QL, Shimada T, Kitamura T, et al. Selective excitation of two-wave structured depending on crystal orientation under shock compression. *Science China*, 2020, 63(11): 114611
- 20 陈亚洲, 周留成, 何卫锋等. 冲击加载下纯钛微观塑性变形的分子动力学模拟. *中国激光*, 2016, 43(8): 0802014 (Chen Yazhou, Zhou Liucheng, He Weifeng et al. Molecular dynamics simulation of plastic deformation of pure titanium under shock loading. *Chinese Journal of Lasers*, 2016, 43(8): 0802014 (in Chinese))
- 21 徐高峰, 周建忠, 孟宪凯等. 深冷环境下激光冲击波在单晶钛中的传播及位错扩展特性. *中国激光*, 2017, 44(6): 0602005 (Xu Gaofeng, Zhou Jianzhong, Meng Xiankai, et al. Propagation and dislocation development properties of laser shock waves in monocrystalline titanium under cryogenic environment. *Chinese Journal of Lasers*, 2017, 44(6): 0602005 (in Chinese))
- 22 Germann TC, Holian BL, Lomdahl PS, et al. Orientation dependence in molecular dynamics simulations of shocked single crystals. *Physical Review Letters*, 2000, 84(23): 5351-5354
- 23 Bringa EM, Caro A, Wang YM, et al. Ultrahigh strength in nanocrystalline materials under shock loading. *Science*, 2005, 309(16): 1838-1841
- 24 Plimpton SJ. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117: 1-19
- 25 Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the open visualization tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2009, 18: 015012
- 26 Faken D, Jönsson H. Systematic analysis of local atomic structure combined with 3D computer graphics. *Computational Materials Science*, 1994, 2(2): 279-286
- 27 Stukowski A, Bulatov VV, Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2012, 20(1): 085007
- 28 Hirel P. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files. *Computer Physics Communications*, 2015, 197: 212-219
- 29 Choi WM, Jo YH, Sohn SS, et al. Understanding the physical metallurgy of the CoCrFeMnNi high-entropy alloy: an atomistic simulation study. *Npj Computational Materials*, 2018, 4(1): 1
- 30 Du X, Lu XC, Suang SY, et al. Cyclic plasticity of CoCrFeMnNi high-entropy alloy (HEA): A molecular dynamics simulation. *International Journal of Applied Mechanics*, 2021, 12(1): 2150006
- 31 Qi YM, Chen XH, Feng ML. Molecular dynamics-based analysis of the effect of temperature and strain rate on deformation of nanocrystalline CoCrFeMnNi high-entropy alloy. *Applied Physics A-Materials*

- als Science & Processing, 2020, 126(7): 529
- 32 Shuang SY, Lu SJ, Zhang B, et al. Effects of high entropy and twin boundary on the nanoindentation of CoCrNiFeMn high-entropy alloy: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, 2021, 195(1): 110495
- 33 胡远啸, 双思垚, 王冰等. CrMnFeCoNi 高熵合金纳米晶温度相关的拉伸行为研究. *固体力学学报*, 2020, 41(2): 109-117 (Hu Yuanxiao, Shuang Siyao, Wang Bing, et al. Temperature-dependent tensile behavior of nanocrystalline CrMnFeCoNi high-entropy alloy. *Acta Mechanica Solida Sinica*, 2020, 41(2): 109-117 (in Chinese))
- 34 Liu SY, Lu SJ, Wei YJ. The Gaussian distribution of lattice size and atomic level heterogeneity in high entropy alloys. *Extreme Mechanics Letters*, 2017, 11: 84-88
- 35 Zhang Q, Huang RR, Zhang X, et al. Deformation mechanisms and remarkable strain hardening in single-crystalline high-entropy-alloy micropillars/nanopillars. *Nano Letters*, 2021, 21: 3671-3679
- 36 刘海, 李启楷, 何远航. 高速冲击压缩梯恩梯的分子动力学模拟. *力学学报*, 2015, 47(1): 174-179 (Liu Hai, Li Qikai, He Yuanhang. Molecular dynamics simulations of high velocity shock compressed TNT. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2015, 47(1): 174-179 (in Chinese))
- 37 Xiong QL, Shimada T, Kitamura T, et al. Atomic investigation of effects of coating and confinement layer on laser shock peening. *Optics and Laser Technology*, 2020, 131(10): 106409
- 38 Chen YZ, Zhou LC, He WF, et al. Molecular dynamics simulation of the plastic behavior anisotropy of shock-compressed monocrystal nickle. *European Physical Journal B*, 2017, 90(1): 10-16
- 39 王志龙, 罗开玉, 刘月等. 超高应变率力学效应下多晶铜的微观塑性变形分子动力学模拟. *中国激光*, 2015, 42(7): 0703005 (Wang Zhilong, Luo Kaiyu, Liu Yue, et al. Molecular dynamics simulation of plastic deformation of polycrystalline Cu under mechanical effect with ultrahigh strain rate. *Chinese Journal of Lasers*, 2015, 42(7): 0703005 (in Chinese))
- 40 Xie ZC, Jian WR, Xu SZ, et al. Role of local chemical fluctuations in the shock dynamics of medium entropy alloy CoCrNi. *Acta Materialia*, 2021, 13: 117380
- 41 Xiong QL, Kitamura T, Li ZH, et al. Transient phase transitions in single-crystal coppers under ultrafast lasers induced shock compression: A molecular dynamics study. *Journal of Applied Physics*, 2019, 125(19): 194302
- 42 Zhang BW, Zhou LC, Sun Y, et al. Molecular dynamics simulation of crack growth in pure titanium under uniaxial tension. *Molecular Simulation*, 2018, 44(15): 1252-1260
- 43 Shi XS, Feng XT, Zhang BW. Research on microstructure deformation mechanism of crack tip in titanium under tension along different orientations. *Molecular Simulation*, 2020, 46(6): 440-447
- 44 李晓雁. 纳米晶 Al 薄膜 Bauschinger 效应的分子动力学模拟. *金属学报*, 2014, 50(2): 219-225 (Li Xiaoyan. Atomistic simulations of bauschinger effect in nanocrystalline aluminum thin films. *Acta Metallurgica Sinica*, 2014, 50(2): 219-225 (in Chinese))
- 45 Li W, Chen HT, Huang WY, et al. Effect of laser shock peening on high cycle fatigue properties of aluminized AISI 321 stainless steel. *International Journal of Fatigue*, 2021, 147(15): 106180
- 46 Li WB, Yuan FP, Wu XL. Atomistic tensile deformation mechanisms of Fe with gradient nano-grained structure. *AIP Advances*, 2015, 5(8): 087120
- 47 熊健, 魏德安, 陆宋江等. 位错密度梯度结构 Cu 单晶微柱压缩的三维离散位错动力学模拟. *金属学报*, 2019, 55(11): 1477-1486 (Xiong Jian, Wei Dean, Lu Songjiang, et al. A three-dimensional discrete dislocation dynamics simulation on micropillar compression of single crystal copper with dislocation density gradient. *Acta Metallurgica Sinica*, 2019, 55(11): 1477-1486 (in Chinese))
- 48 Zhang X, Xiong J, Fan HD, et al. Microplasticity and yielding in crystals with heterogeneous dislocation distribution. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2019, 27(7): 074003
- 49 Pan QS, Zhang LX, Feng R, et al. Gradient-cell-structured high-entropy alloy with exceptional strength and ductility. *Science*, 2021, 374: 6570
- 50 Lu XC, Zhao JF, Wang ZW, et al. Crystal plasticity finite element analysis of gradient nanostructured TWIP steel. *International Journal of Plasticity*, 2020, 130: 102703
- 51 Zhao JF, Pan XL, Li J, et al. Laser shock peened Ti-6 Al-4 V alloy: Experiments and modeling. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2022, 213: 106874
- 52 Lu XC, Zhang X, Shi MX, et al. Dislocation mechanism based size-dependent crystal plasticity modeling and simulation of gradient nano-grained copper. *International Journal of Plasticity*, 2019, 113: 52-73
- 53 Zhao JF, Kan QH, Zhou LC, et al. Deformation mechanisms based constitutive modelling and strength-ductility mapping of gradient nano-grained materials. *Materials Science and Engineering*, 2019, 742: 400-408
- 54 李毅. 梯度结构金属材料研究进展. *中国材料进展*, 2016, 35(9): 658-665 (Li Yi. Research progress on gradient metallic materials. *Materials China*, 2016, 35(9): 658-665 (in Chinese))
- 55 Li XT, Zhao JF, Zhou X, et al. Revealing the inhibition mechanism of grain size gradient on crack growth in gradient nano-grained materials. *International Journal of Solids and Structures*, 2019, 172-173: 1-9