

# 梯度分离对纳米晶Fe-W合金拉伸性能的影响

张 烽<sup>1</sup>, 彭贺阳<sup>1</sup>, 朱大胜<sup>1,2</sup>, 王云龙<sup>1</sup>

<sup>1</sup>南京工程学院机械工程学院, 江苏 南京

<sup>2</sup>新疆联海创智信息科技有限公司, 新疆 乌鲁木齐

收稿日期: 2026年3月17日; 录用日期: 2026年5月20日; 发布日期: 2026年5月28日

## 摘 要

晶界内部的晶粒状结构是通过等距缩放法检测到的部分偏析区域。基于该方法, 构建了具有梯度偏析的纳米晶Fe-W合金模型。通过分子动力学(MD)模拟研究了体心立方合金中溶质浓度(SC)分布如何更符合强度提升。模拟结果表明, 晶内SC较低的试样具有更高的流动应力水平、更多的位错活动以及更窄的非晶晶间膜(AIFs)。这一发现揭示了体心立方合金的内在变形机制如何受到异质性偏析梯度的显著影响。

## 关键词

铁-钨合金, 溶质浓度, 相变

# Gradient Segregation Effects on the Tensile Behaviors of Nanocrystalline Fe-W Alloys

Feng Zhang<sup>1</sup>, Heyang Peng<sup>1</sup>, Dasheng Zhu<sup>1,2</sup>, Yunlong Wang<sup>1</sup>

<sup>1</sup>School of Mechanical Engineering, Nanjing Institute of Technology, Nanjing Jiangsu

<sup>2</sup>Xinjiang Lianhai Chuangzhi Information Technology Co., Ltd., Urumqi Xinjiang

Received: March 17, 2026; accepted: May 20, 2026; published: May 28, 2026

## Abstract

The granular interior to the grain border is some of the segregated regions that are detected using the equidistance scaling method. Based on this method, the model of nanocrystalline Fe-W alloy with gradient segregation is crafted. The topic of how the solute concentration (SC) distribution in BCC alloys is more matched to the strength improvement is investigated using molecular dynamic (MD) simulation. The simulation outcomes demonstrate that specimens with lower intra-granular SC have greater flow stress levels, more dislocation activities, and narrower amorphous inter-granular films (AIFs). The discovery illustrates how the intrinsic deformation mechanism of BCC alloys is significantly impacted by heterogeneous segregation gradient.

## Keywords

### Fe-W Alloys, Solute Concentration, Phase Transition

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

随着工业化进程的快速发展,大量金属材料因磨损和断裂而失效。因此,提升金属材料的耐磨性和机械性能,对延长零部件及设备的使用寿命至关重要。非铁金属钨作为重要战略资源,其合金材料具有优异的性能。其中,Fe-W合金凭借高硬度和良好耐磨性,在军事工业、航空航天、科技等领域被广泛用作铍的替代合金。

大量可靠的研究[1]-[3]表明,合金化技术能有效提升金属性能,使其在保持高强度的同时兼具高延展性。合金成分的选择需综合考量技术参数与经济因素。在合金冶炼过程中,既要评估各类添加剂的成本,也要关注杂质元素的存在。过度合金化不仅会因金属元素回收困难而造成资源浪费,还会提高材料加工成本。简而言之,如何通过精准控制杂质元素的种类与含量,在控制成本与提升质量之间取得平衡,这正是生产优质金属材料的关键所在。

在合金凝固过程中,溶质原子常富集于晶界,从而形成晶界偏析[4][5]。理论模拟[6]-[8]和实验验证[9]-[11]表明,晶界处分离的溶质原子对合金力学性能具有强化作用。本研究采用等距缩放法,将有限的偏析区域扩展至晶界影响区(GBAZ),以深入探究晶界偏析对纳米金属材料力学性能的影响机制[6][12]-[14]。现有研究表明,原子偏析区越靠近晶界,其强化效应越显著。通过极端塑性变形技术实现晶界处的显著原子偏析,可进一步提升材料性能。

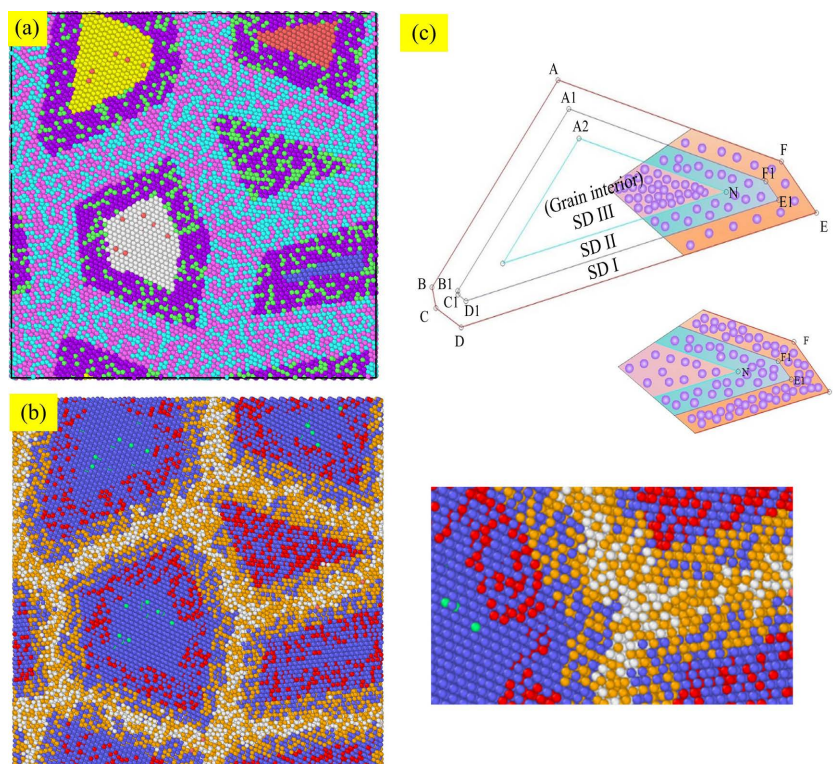
但在制备过程中,采用剧烈塑性变形来实现晶体中原子的均匀分布具有挑战性,由于晶体内部及晶界处原子浓度分布不均,常会出现梯度偏析现象。分子动力学模拟能够从原子尺度上模拟探针与材料的相互作用过程,分析位错的形核与扩展规律,并提供压痕过程中所有原子的瞬态信息,从而在原子尺度上详细获取材料的塑性变形、缺陷演化及相变行为[15][16]。Yang [17]通过机械合金化研究了Fe-M(M=Al、Nb、Si)的非晶态与固溶体特性。Zhong [18]研究了Fe-Mo系统的非晶形成范围。然而,关于Fe-W[19][20]二元体系的研究较少,尤其是晶界偏析结构的研究。因此,本研究构建了一个在体心立方基体中具有梯度偏析的纳米晶Fe-W合金模型,并探讨了梯度偏析对其拉伸行为的影响。通过分子动力学模拟研究了具有溶质梯度分布的纳米晶Fe-W合金的拉伸变形行为,并分析了拉伸过程中的微观结构演变、位错形核和滑移。

## 2. 模拟方法

采用Voronoi镶嵌法构建所需的晶体模型,并将边界条件设置为周期性。该模型在可视化软件OVITO[21]中打开并进行后续分析。构建的晶胞模型尺寸为 $30 \times 30 \times 1.8$ 纳米,Voronoi种子数设置为5,晶胞内约含135,000个原子。计算得出构建晶胞的平均晶粒尺寸约为8.5纳米。图1(a)展示了具有梯度偏析结构的Fe-W合金模型的原子结构。相应的原子结构通过公共邻近分析(CNA)在图1(b)中呈现。蓝色原子具有体心立方( $\text{bcc}$ )结构;白色原子为不规则排列的原子。为更清晰地观察各区域中杂质原子Fe的作用机制,图1(b)的部分放大图中通过不同颜色区分了各区域中的Fe原子。

根据张[6]提出的等距缩放方法, 将整个晶粒划分为三个独立分区(SD), 如图 1(c)所示。灰色线与紫色线围成的区域标记为 SD I, 灰色线与蓝色线围成的区域标记为 SD II, 蓝色线内部区域则标记为晶粒。为确保变形前后多边形的完整性, 将变形区域的顶点替换为交点。为满足必要的变形要求(如图 1 所示), 需确保缩放前后 Voronoi 边的单位向量之和为 0。

$$\frac{\overline{AB}}{|\overline{AB}|} + \frac{\overline{A_1B_1}}{|\overline{A_1B_1}|} = 0 \quad \frac{\overline{AB}}{|\overline{AB}|} + \frac{\overline{A_1B_1}}{|\overline{A_1B_1}|} = 0 \quad (1)$$



**Figure 1.** (a) Atomic model of the gradient segregation structure in Fe-W alloy; (b) Corresponding CNA rendering and local magnified view; (c) Segregated regions with different Fe concentrations  
**图 1.** (a) Fe-W 合金梯度偏析结构的原子模型; (b) 对应 CNA 渲染及局部放大图; (c) 不同 Fe 浓度的分隔区域

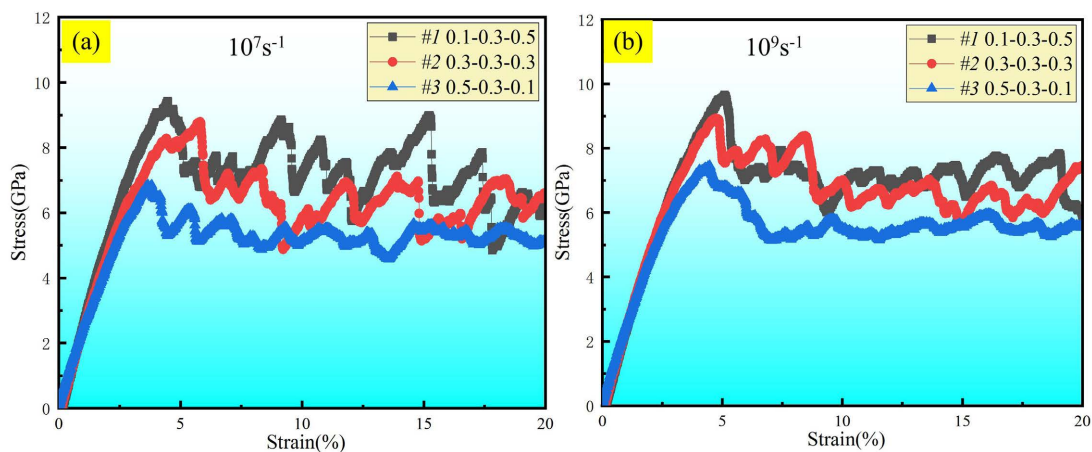
在图表命名规则中, 本文将模拟单元 1 标记为#1, 其余依次类推。“0.1-0.3-0.5”表示晶体中溶质体积分数为 0.1, 晶界处溶质体积分数为 0.5, 即溶质浓度从晶体向晶界递增, 反之亦然。“0.3-0.3-0.3”则表示此时晶粒内溶质分布均匀。此时, 具有均匀溶质分布的模拟单元可作为参考对象。

Fe 与 W 的相互作用采用嵌入原子法(EAM)势描述。LAMMPS [22]可模拟该模型。通过共轭梯度算法对模拟结构的能量进行最小化处理, 以获得稳定的模拟结构。其次, 采用恒温器对 500 皮秒的 NPT 系统进行弛豫。按照上述步骤, 沿 Y 轴在不同拉伸速率下进行拉伸测试。使用 OVITO 输出相应的应变和法向应力, 便于开展后续理论研究。

### 3. 结果与讨论

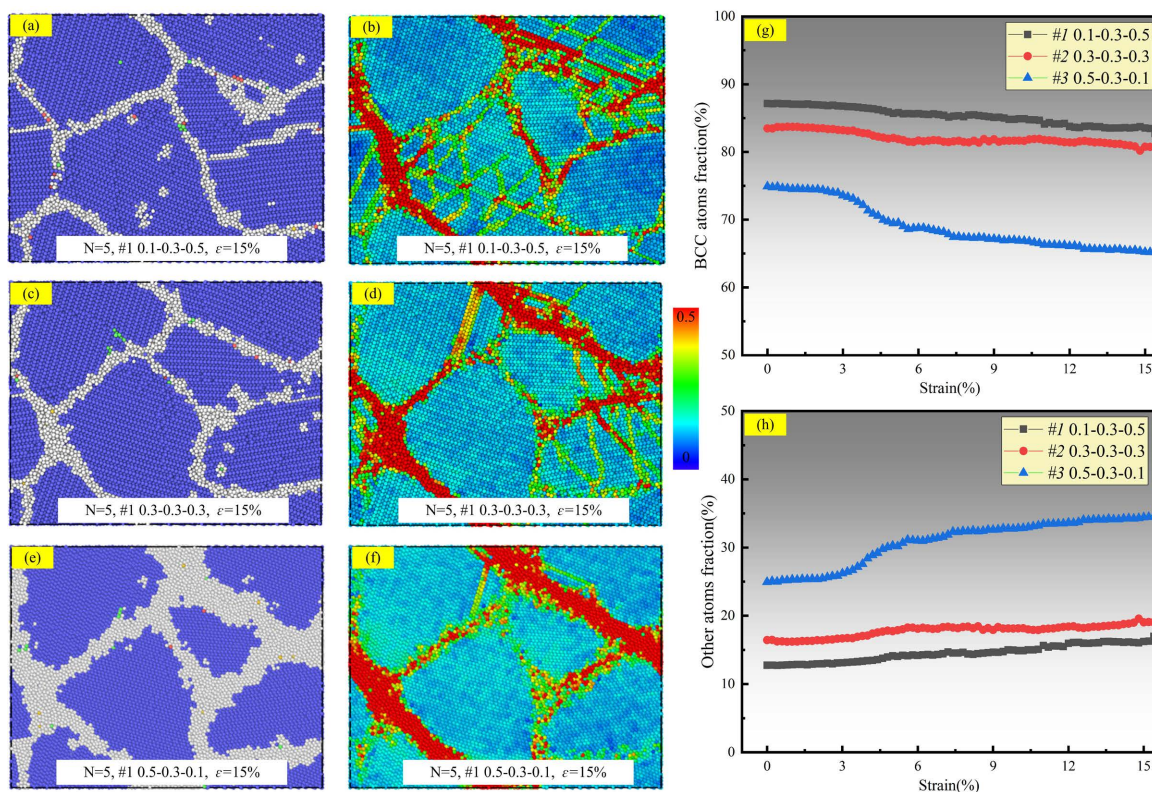
图 2(a), 图 2(b)展示了三种不同偏析状态试样在拉伸试验中的应力 - 应变曲线。清晰可见明显的溶质原子偏析模式, 三种试样的应力响应存在显著差异。值得注意的是, 这种差异在不同应变速率下表现

相似。如图 2 所示，试样#1 (黑色曲线)的应力水平最高，而试样#3 (蓝色曲线)的应力水平最低。实验结果表明，试样#3 中晶界附近高密度的合金原子能够有效降低总应力。关于内在变形机制的深入分析将在后续内容中展开。



**Figure 2.** Stress-strain curves of tensile tests for three groups of samples under different segregation conditions: (a)  $\dot{\epsilon} = 10^7 s^{-1}$ ; (b)  $\dot{\epsilon} = 10^9 s^{-1}$

**图 2.** 不同偏析条件下三组样品的拉伸试验应力 - 应变曲线: (a)  $\dot{\epsilon} = 10^7 s^{-1}$ ; (b)  $\dot{\epsilon} = 10^9 s^{-1}$

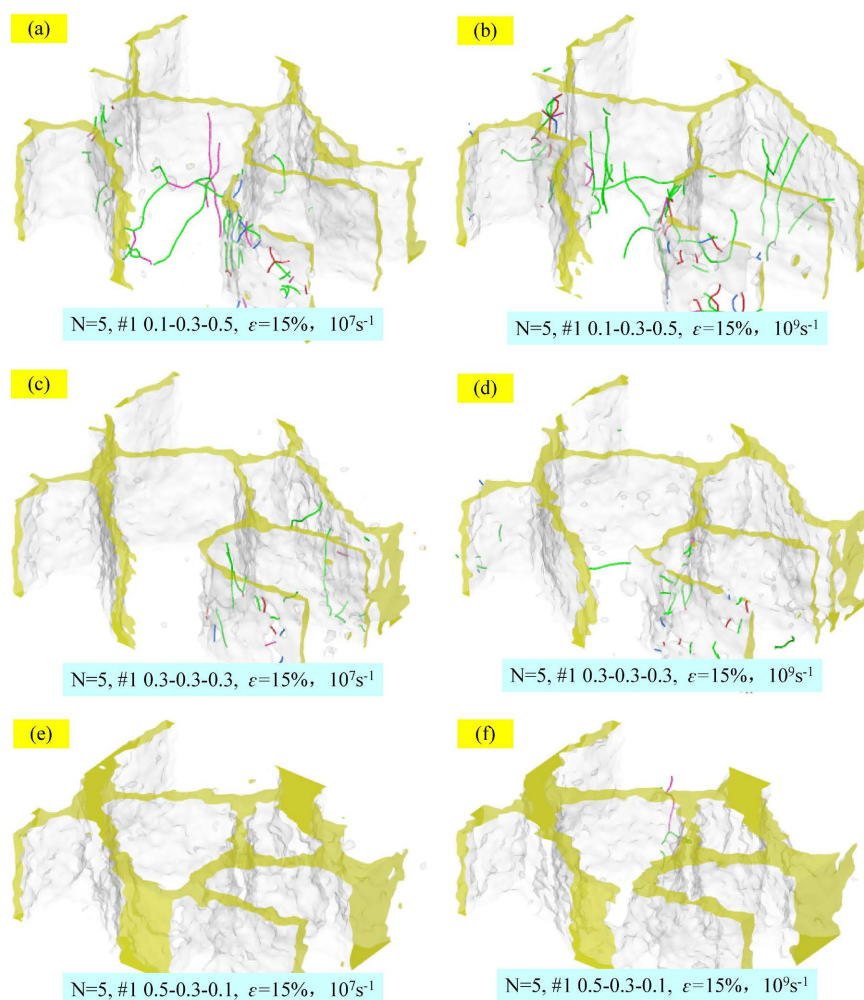


**Figure 3.** (a)~(f) show the atomic structure and shear strain evolution process of samples with different segregation gradients under a strain condition of 15%. (g)~(h) Based on CNA, the volume fraction of each structural atom can be derived as the strain increases

**图 3.** (a)~(f) 在应变条件 15% 下，具有不同偏析梯度样品的原子结构与剪切应变演变过程。(g)~(h) 根据 CNA，随着应变的增加，可推导出各结构原子的体积分数

图 3(a)、图 3(c)和图 3(e)分别展示了在相同应变(15%)下使用 CNA 渲染技术的三种不同溶质偏析浓度样品的原子结构演变过程。模拟结果显示,随着拉伸应力的增加,非晶粒间膜(AIFs)逐渐增厚。通过 OVITO 推导出三种样品在不同应变水平下各结构原子的相关比例,并绘制于图 3(g)~(h)中。原始体心立方结构主要转变为不规则原子(如 AIFs 和完全位错)。在 15%应变下具有不同偏析梯度的样品中,图 3(b)、图 3(d)和图 3(f)分别呈现了相应的原子应变扩展。深蓝色表示原子积累的剪切应力较少,而红色则表明塑性变形主要发生在晶界影响区附近。此外,不同的偏析梯度模式对变形机制有显著影响。对于样品#1“0.1-0.3-0.5”,在晶粒内部可观察到更明显的剪切应变。这一结果的原因在于更多溶质原子在晶界偏析可使 AIFs 增厚,从而限制位错的发射。此处,主要的塑性变形机制归因于晶界滑移。

图 4(a)~(f)展示了不同梯度样品的位错分布情况,清晰呈现了不同拉伸应变速率下的位移活动特征。位错分析(DXA)表明:样品#1“0.1-0.3-0.5”的位错数量更多且晶界面(AIFs)更薄,而样品#3“0.5-0.3-0.1”的溶质浓度较低。在样品#3“0.5-0.3-0.1”中仅观察到少量位错,且剪切应变主要集中在晶界区域。由于位错发射效应,样品#1 和#2 的晶界及晶内区域均发生形变。通过 DXA 函数可确定位错类型,结果显示大部分弹出的位错段属于  $1/6\langle 112 \rangle$ 肖克利位错。



**Figure 4.** (a)~(f) Dislocation distribution under different gradient scenarios at 15% strain under different tensile strain rates

**图 4.** (a)~(f) 不同拉伸应变速率下 15%应变时不同梯度场景下的位错分布

## 4. 结论

通过分子动力学模拟评估了弥散梯度对 Fe-W 合金力学特性的影响。根据分析模型, 具有较小晶内溶质浓度的体心立方样品具有更高的流动应力水平、更窄的非晶晶间膜(AIFs)以及更强的位错行为。而在晶界附近溶质浓度增加的样品中, 结果则相反。因此, 通过调节 Fe-W 合金中的溶质浓度梯度可以提高其强度, 这为在航空和机械等高强度部件中制造 Fe-W 合金奠定了坚实的材料基础。这些发现为研究具有体心立方原子结构的超高强度合金开辟了新途径。

## 致 谢

本项目获得以下资助: 国家自然科学基金(项目编号: 52005248、52105191)、南京理工大学科研基金(项目编号: CKJA202101)以及江苏省自然科学基金(项目编号: BK20201031)。

## 数据可用性

本研究期间生成和/或分析的数据集可根据合理要求向通讯作者获取。

## 利益冲突

作者声明, 其不存在任何已知的可能影响本论文所报告工作的竞争性经济利益或个人关系。

## 参考文献

- [1] Jian, Y., Huang, Z., Xing, J., Sun, L., Gao, Y. and Zheng, Q. (2019) Investigations on the Mechanical Properties and Three-Body Wear Behavior of Pure Fe<sub>2</sub>B Intermetallic with Different Chromium Additions. *Wear*, **418**, 273-280. <https://doi.org/10.1016/j.wear.2018.10.011>
- [2] Sankaranarayanan, S., Jayalakshmi, S. and Gupta, M. (2011) Effect of Addition of Mutually Soluble and Insoluble Metallic Elements on the Microstructure, Tensile and Compressive Properties of Pure Magnesium. *Materials Science and Engineering: A*, **530**, 149-160. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2011.09.066>
- [3] Nwaeju, C.C., Edoziuno, F.O., Adediran, A.A., Tuaweri, T.J. and Saravana Kumar, M. (2021) Grain Characteristics and Mechanical Properties of As-Cast Cu-10%Al Alloy: Effects of Alloying Additions. *Results in Engineering*, **12**, Article ID: 100295. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2021.100295>
- [4] Bobylev, S.V., Enikeev, N.A., Sheinerman, A.G. and Valiev, R.Z. (2019) Strength Enhancement Induced by Grain Boundary Solute Segregations in Ultrafine-Grained Alloys. *International Journal of Plasticity*, **123**, 133-144. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2019.07.013>
- [5] Ebner, A.S., Jakob, S., Clemens, H., Pippan, R., Maier-Kiener, V., He, S., *et al.* (2021) Grain Boundary Segregation in Ni-Base Alloys: A Combined Atom Probe Tomography and First Principles Study. *Acta Materialia*, **221**, Article ID: 117354. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117354>
- [6] Zhang, F., Li, G., Zhu, D. and Zhou, J. (2020) Grain Size Effect on the Mechanical Behaviors in Nanocrystalline Cu-Ag Alloy with Grain Boundary Affect Zone Segregation. *Materials Letters*, **278**, Article ID: 128406. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2020.128406>
- [7] Yinben, H., Xiangyi, X., Tiebang, Z., Rui, H. and Jinshan, L. (2016) Grain Boundary Segregation and Mechanical Properties of an Aged Ni-20CR-18W-1Mo Superalloy at Different Temperatures. *Rare Metal Materials and Engineering*, **45**, 3043-3049. [https://doi.org/10.1016/s1875-5372\(17\)30051-6](https://doi.org/10.1016/s1875-5372(17)30051-6)
- [8] Kaur, N., Deng, C. and Ojo, O.A. (2021) Atomistic Simulation of Grain Boundary Migration Induced by Non-Equilibrium Solute Distribution. *Materialia*, **15**, Article ID: 101005. <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2021.101005>
- [9] Xu, W., Liu, X.C., Li, X.Y. and Lu, K. (2020) Deformation Induced Grain Boundary Segregation in Nanolaminated Al-Cu Alloy. *Acta Materialia*, **182**, 207-214. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.10.036>
- [10] Wu, Y.F., Zhong, Y.M., Xu, W. and Li, X.Y. (2022) Deformation Induced Grain Boundary Segregation and Thermal Stability of Nanolaminated Al-Zn-Mg-Cu Alloy. *Materials Letters*, **315**, Article ID: 131930. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2022.131930>
- [11] Somekawa, H., Egusa, D. and Abe, E. (2020) Grain Boundary Plasticity in Solid Solution Mg-Li Binary Alloy. *Materials Science and Engineering: A*, **790**, Article ID: 139705. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.139705>

- [12] Li, G., Wang, R., Li, F., Zhu, D. and Zhang, F. (2022) Investigation on the Mechanical Properties of Nanocrystalline Ni-W Alloy with Segregated GBZ. *Applied Physics A*, **128**, Article No. 525. <https://doi.org/10.1007/s00339-022-05656-0>
- [13] Zhi, Y., Tang, Q., Zhang, F. and Guo, A. (2022) Exploring the Effectiveness of Different Factors on the Performance of Bimodal Cu-Ag Alloys. *Applied Physics A*, **128**, Article No 327. <https://doi.org/10.1007/s00339-022-05473-5>
- [14] Pan, S., Guan, Z. and Li, X. (2021) Unusual Thermal Performance in Cu-60Ag by WC Nanoparticles. *Materials Science and Engineering: B*, **265**, Article ID: 115010. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2020.115010>
- [15] Zhang, Y. and Jiang, S. (2017) Investigation on Dislocation-Based Mechanisms of Void Growth and Coalescence in Single Crystal and Nanotwinned Nickels by Molecular Dynamics Simulation. *Philosophical Magazine*, **97**, 2772-2794. <https://doi.org/10.1080/14786435.2017.1352108>
- [16] Borovikov, V., Mendeleev, M.I. and King, A.H. (2018) Effects of Ag and Zr Solutes on Dislocation Emission from  $\Sigma 11(332)[110]$  Symmetric Tilt Grain Boundaries in Cu: Bigger Is Not Always Better. *International Journal of Plasticity*, **109**, 79-87. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2018.05.009>
- [17] 杨君友, 吴建生, 曾振鹏, 等. Fe-M(M = Al, Nb, Si)的机械合金化研究[J]. 上海交通大学学报, 1997(9): 144-147.
- [18] 陈红梅, 欧阳义芳, 钟夏平, 等. 铁基二元合金非晶形成范围的理论研究[J]. 广西大学学报(自然科学版), 2002(4): 325-329.
- [19] El-Eskandarany, M.S., Sumiyama, K. and Suzuki, K. (1997) Crystalline-to-Amorphous Phase Transformation in Mechanically Alloyed Fe<sub>50</sub>W<sub>50</sub> Powders. *Acta Materialia*, **45**, 1175-1187. [https://doi.org/10.1016/s1359-6454\(96\)00205-4](https://doi.org/10.1016/s1359-6454(96)00205-4)
- [20] Povstugar, I.V., Yelsukov, E.P. and Butyagin, P.Y. (2003) Initial Stage of Mechanical Alloying in Fe(80)x(20) (X = Mo, W) Systems. *Colloid Journal*, **65**, 358-365. <https://doi.org/10.1023/a:1024267025328>
- [21] Stukowski, A. (2009) Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO—The Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **18**, Article ID: 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
- [22] Plimpton, S. (1995) Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, **117**, 1-19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>