

基于机器学习势的Cu-Cr合金单轴拉伸变形机制的分子动力学模拟

王月昊

温州大学电气与电子工程学院, 浙江 温州

收稿日期: 2026年6月5日; 录用日期: 2026年7月3日; 发布日期: 2026年7月14日

摘 要

针对铜铬合金分子动力学传统经验势精度不足及第一性原理计算尺度受限的问题, 文章基于十六元高熵合金神经演化势(UNEP-v1)框架, 通过计算状态方程、声子色散、弹性常数及应力-应变响应, 验证了该势函数的精度接近密度泛函理论参考值。在此基础上, 沿[010]晶向对具有不同Cr含量的Cu-Cr合金进行了大规模单轴拉伸分子动力学模拟。结果表明, 随着Cr含量的增加, 合金的弹性模量与屈服强度显著提升。微观结构演化分析揭示, 在塑性变形阶段, 合金通过FCC相向BCC的局部相变来释放弹性应变能, 且变形主要由1/6 [112]型肖克利不全位错的形核与滑移主导。Cr原子的引入显著钉扎并限制了位错的运动, 从而大幅提高了驱动塑性变形所需的临界应力。研究不仅为Cu-Cr体系的大尺度原子模拟提供了可靠的势函数, 还从原子尺度深刻阐明了Cr的固溶强化机制, 为理解Cu-Cr合金的固溶强化阶段提供了基础物理图像。

关键词

铜铬合金, 分子动力学模拟, 微观变形机制, 机器学习势

Molecular Dynamics Simulation of the Uniaxial Tensile Deformation Mechanism of Cu-Cr Alloy Based on Machine Learning Potential

Yuehao Wang

College of Electrical and Electronic Engineering, Wenzhou University, Wenzhou Zhejiang

Received: June 5, 2026; accepted: July 3, 2026; published: July 14, 2026

Abstract

To address the insufficient accuracy of traditional empirical potentials in molecular dynamics simulations of Cu-Cr alloys and the spatiotemporal limitations of first-principles calculations, this study utilizes the sixteen-element high-entropy alloy neuroevolution potential (UNEP-v1) framework. By systematically calculating the equation of state, phonon spectrum, elastic constants, and stress-strain responses, the high consistency of the developed potential with density functional theory (DFT) reference values is rigorously validated. On this basis, large-scale uniaxial tensile molecular dynamics simulations are conducted on Cu-Cr alloys with various Cr concentrations along the [010] crystallographic direction. The results indicate that as the Cr concentration increases, both the elastic modulus and yield strength of the alloys are significantly enhanced. Microstructural evolution analyses reveal that during plastic deformation, the alloy releases elastic strain energy via local phase transformations from the FCC phase to a BCC phase, with the deformation predominantly governed by the nucleation and glide of $1/6$ [112]-type Shockley partial dislocations. The introduction of Cr atoms effectively pins and restricts dislocation motion, thereby substantially increasing the critical stress required to drive plastic deformation. This study not only provides a reliable interatomic potential for large-scale atomistic simulations of Cu-Cr systems but also profoundly elucidates the solid solution strengthening mechanism of Cr at the atomic scale, providing a fundamental physical picture for understanding the solid solution strengthening stage of Cu-Cr alloys.

Keywords

Cu-Cr Alloy, Molecular Dynamics Simulation, Microscopic Deformation Mechanism, Machine Learning Potential

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

微电子器件中更高的功率密度、轨道交通系统中更高的耐电压和抗电弧烧蚀能力等众多应用需求, 均需克服本征铜金属在强度、导电性和延展性之间固有的矛盾, 这促使人们对先进铜合金进行了大量的探索[1][2]。铬合金化是传统上提高铜强度的有效策略。如今, 铜铬(Cu-Cr)合金凭借其强度与导电性的卓越协同效应, 已成为关键应用中的重要结构-功能材料, 广泛应用于集成电路引线框架、高速铁路接触线、真空灭弧室触头以及高温电连接器等领域[3]-[5]。

Cu-Cr 合金的力学性能主要由纳米级 Cr 析出物引发的析出强化、位错强化和晶界细化所决定[6]。广泛的实验研究表明, 通过多道次轧制与梯度时效工艺可以有效调控析出相的尺寸和分布, 在保持电导率高于 65% IACS 的同时, 实现超过 600 MPa 的抗拉强度[7]。此外, 微量元素合金化(如添加 Ti、Zr、Ag、Si 以及 Y、Sc、Er 等稀土元素)已被证明能够抑制 Cr 析出物的粗化, 增强基体与析出物界面的共格性, 并显著提高合金的抗高温软化性能和应力松弛稳定性[8]。然而, 传统实验试错法受限于高昂的时间与经济成本, 并且在复杂的形变热处理过程中, 仍然难以实时捕捉位错-析出物相互作用、相变路径以及界面偏析的原子尺度动态演化过程[9]。尽管析出强化是 Cu-Cr 合金获得超高强度的最主要来源, 但在合金固溶处理阶段或特定低/中浓度成分下, Cr 原子的固溶强化同样是决定基体力学性能的基础因素。固溶强化作为析出强化的前置阶段, 其在总强度中的基础贡献及微观演化规律亟待阐明。

为了克服实验的尺度限制, 计算模拟已成为揭示 Cu-Cr 合金变形机制的重要手段。密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)在预测相稳定性和弹性常数方面具有极高的精度, 但受限于其 $O(N^3)$ 的计算复杂度, 只能局限于小原子体系和皮秒时间尺度的模拟[10]。传统的分子动力学(Molecular Dynamics, MD)能够触及更大的时空尺度, 但其依赖的经验势函数往往缺乏准确描述多组分缺陷能量学和析出动力学所需的化学保真度。近年来, 机器学习势函数(Machine Learning Potentials, MLP), 如 Behler-Parinello 神经网络势、高斯近似势(Gaussian Approximation Potentials, GAP)、频谱邻域分析势(Spectral Neighbor Analysis Potential, SNAP)、矩张量势(Moment Tensor Potential, MTP)、深度势能(Deep Potential, DP)和原子簇展开势(Atomic Cluster Expansion, ACE), 以及神经演化势(Neuroevolution Potential, NEP)等, 为这一问题提供了解决思路[11]-[17]。通过利用深度学习提取高维描述符, NEP 结合了 DFT 级别的精度和 MD 级别的效率, 使得百万原子级别的模拟成为可能, 从而能够定量捕捉位错动力学、析出物钉扎效应和非平衡塑性行为。与 DFT 以及嵌入原子势(Embedded-Atom Method, EAM)等经验势相比, NEP 在计算效率和化学精度之间实现了最佳平衡, 使其成为探究 Cu-Cr 合金多尺度力学响应的理想工具[18]。UNEP-v1 是基于 16 元单质金属及其任意合金体系开发的用于高熵合金的 NEP 势函数, 在多种物理性质上具备接近密度泛函理论的精度, 且泛化能力强, 能够精准预测多主元复杂合金(如 MoTaVW)的相稳定性和力学行为[19]。NEP89 则是为开发覆盖元素周期表中的 89 种元素通用势函数而进行的一次尝试[20]。

在本研究中, 通过对比状态方程、声子色散、弹性系数和应力-应变行为, 验证了 UNEP-v1 和 NEP89 在 Cu-Cr 合金体系中的适用性。随后, 将 UNEP-v1 势应用于研究不同 Cr 含量合金化对 Cu 抗拉强度提升的微观机制。这项工作证明了 NEP 框架在准确模拟 Cu-Cr 体系方面的能力。

2. 计算方法

为了探究 Cr 合金化提升 Cu 抗拉强度的微观机制, 采用 GPUMD 软件对 Cu-Cr 合金进行了单轴拉伸变形过程的分子动力学模拟[21]。同时, 使用 OVITO 软件对变形过程中的相变行为与微观结构演化进行了可视化与分析[22]。

在进行单轴拉伸变形模拟之前, 通过计算状态方程、声子色散曲线、弹性常数以及应力-应变行为, 对 NEP 势函数的适用性和准确性进行了系统验证。

计算了 UNEP-v1 及 NEP89 势函数预测体系的状态方程(Equation of State, EOS)。具体而言, 通过对平衡晶胞进行均匀缩放以改变其体积, 并利用 NEP 力场计算不同体积下对应的系统能量, 从而拟合出能量随体积变化的曲线。随后, 将该结果与基于维也纳第一性原理模拟程序(Vienna Ab-Initio Simulation Package, VASP)的密度泛函理论计算结果进行了对比。DFT 计算采用了广义梯度近似(Generalized Gradient Approximation, GGA)下的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)泛函[23] [24]。Cu 和 Cr 的平面波截断能均设置为 520 eV, 并采用以 Γ 点为中心的 $16 \times 16 \times 16$ k 点网格对布里渊区进行采样。

在声子色散曲线的计算方面, 基于 UNEP-v1 和 NEP89 势函数, 结合 Phonopy 软件包, 通过构建超胞并计算原子间的二阶力常数(Hessian 矩阵)来获取声子谱[25]。具体步骤为: 首先对原胞进行结构优化, 随后构建足够大的超胞, 利用 NEP 势函数计算超胞中所有原子发生微小位移后的受力情况, 进而提取原子间力常数, 最终通过对角化动力学矩阵得到声子色散关系。为了进行对比验证, 还采用 Parlinski-Li-Kawazoe 方法, 通过 VASP 计算能量和原子受力来获取第一性原理声子谱。在此过程中, Cu 和 Cr 的平面波截断能分别设置为 440 eV 和 400 eV。计算原子间力常数时, 采用了有限差分法, 位移步长设置为 0.01 Å, 每个方向进行 2 次位移计算。Cu 和 Cr 分别采用了包含 108 个原子和 128 个原子的超胞模型, 且 k 点网格仅采用 Γ 点。

在 DFT 计算弹性常数时, 主要基于应力 - 应变关系进行推导。通过对优化后的晶胞施加多组独立的微小应变, 利用 VASP 计算相应的应力响应, 通过线性拟合获取完整的独立弹性常数矩阵(C_{ij}) [26]。该部分计算的平面波截断能设置为 400 eV, k 点网格密度设置为 $16 \times 16 \times 16$ 。对于 NEP 势函数, 使用相似的方法通过 Calorine Python 程序包计算弹性常数[27]。

此外, 还对比了 UNEP-v1、NEP89 与 DFT 计算得到的应力 - 应变行为。首先, 使用 VASP 获取了纯 Cu 的应力 - 应变关系: 构建了一个包含 4 个原子的体心立方(Face Center Cubic, FCC)晶胞, 并沿[001]晶向施加单轴拉伸变形。在变形过程中, 保持 c 轴长度不变, 允许 a 轴和 b 轴自由弛豫, 并提取沿 zz 方向的应力。随后, 同样采用 GPUMD 程序包结合 UNEP-v1 和 NEP89 势函数计算了 Cu 的应力 - 应变关系, 具体做法是直接计算 VASP 弛豫后对应结构的 zz 方向应力。对于纯 Cr 的应力 - 应变关系, 利用了相同的研究方法, 仅将模型替换为包含 2 个原子的体心立方(Body Center Cubic, BCC)晶胞。

3. 结果与讨论

3.1. 基本物理性质预测

为了验证 UNEP-v1 势函数的准确性, 计算了一系列基本物理性质。图 1 分别展示了 Cu 和 Cr 在平衡体积 80%至 105%范围内的能量 - 体积曲线。在整个测试的体积范围内, NEP 势函数预测的状态方程曲线与 DFT 结果高度吻合, 表明 UNEP-v1 势函数能够准确描述 Cu-Cr 合金在宽范围体积应变下的能量演化行为, 而 NEP89 势函数则与 DFT 数值偏差较大。

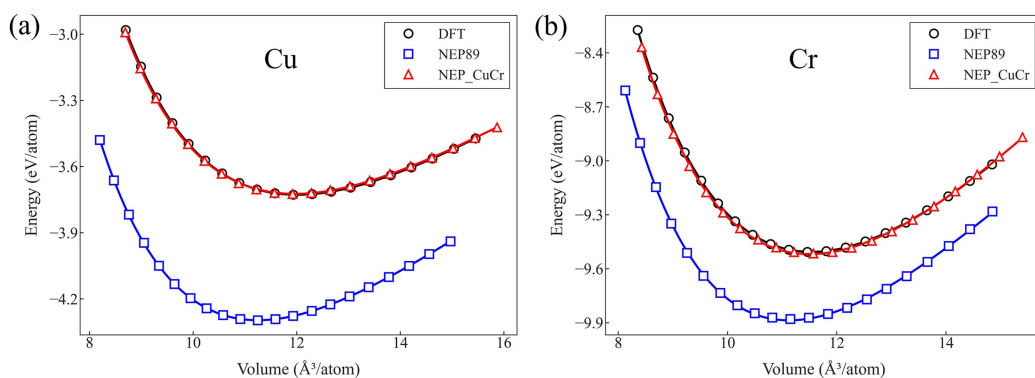


Figure 1. Equation-of-state plots from UNEP-v1, NEP89, and DFT calculations: (a) Copper; (b) Chromium
图 1. UNEP-v1、NEP89 和 DFT 计算的状态方程图: (a) 铜; (b) 铬

除了静态的状态方程外, 还通过对比声子色散曲线来验证晶格的动力学性质。图 2 展示了由 UNEP-v1 计算得到的 Cu 和 Cr 的声子色散曲线, 并将其与 NEP89 及 DFT 的计算结果进行了对比。结果显示, UNEP-v1 预测的声子色散精度高于 NEP89, 且没有出现虚频, 这证实了该势函数能够准确描述原子间的力常数。

Cu 和 Cr 都是立方晶系, 其弹性性质可由三个独立的弹性常数完全描述: C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} 。在本研究中, 利用 NEP 势函数预测了不同 Cr 浓度下 Cu-Cr 合金的弹性常数, 结果汇总于表 1 中。为了评估 NEP 势函数的预测精度, 将计算值与 DFT 参考数据进行了系统对比。结果表明, NEP 势函数预测的弹性常数与 DFT 计算结果吻合良好。所有弹性常数的相对误差均控制在 10%以内。

此外, 利用 DFT 计算确定了包含 4 个原子的超胞的应力 - 应变曲线, 并将其与 NEP 势函数的结果进行了对比。如图 3 所示, 基于 UNEP-v1 势函数的应力 - 应变响应与 DFT 参考值高度吻合, 而 NEP89

势函数无法正确描述力学行为。UNEP-v1 对力学性质的准确复现确保了其适用于模拟 Cu-Cr 合金中的变形机制，如位错和断裂。

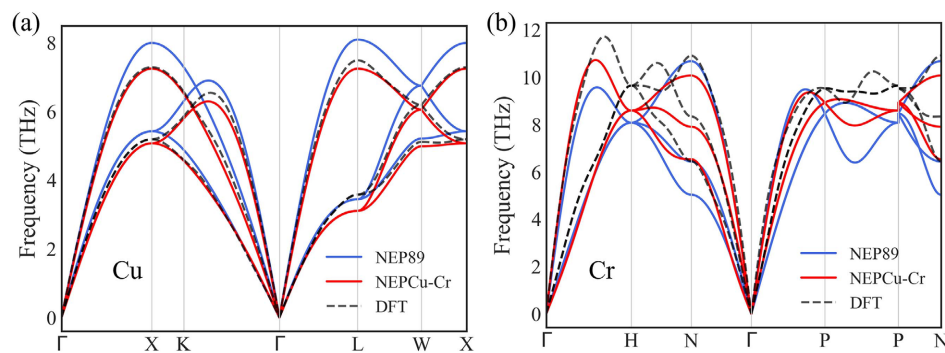


Figure 2. Phonon dispersion curves calculated using UNEP-v1, NEP89, and DFT: (a) Copper; (b) Chromium
图 2. UNEP-v1、NEP89 和 DFT 计算的声子色散图: (a) 铜; (b) 铬

Table 1. The calculated elastic constants C_{ij} (GPa), bulk modulus B (GPa), shear modulus G (GPa), young's modulus E (GPa) and poisson's ratio ν of Cu by UNEP-v1 and DFT

拉伸性能参数	UNEP-v1	DFT
C_{11}	169.19	172.32
C_{12}	125.84	116.17
C_{44}	81.20	83.31
B	140.29	134.88
G	57.39	53.92
E	129.36	142.73
ν	0.34	0.32

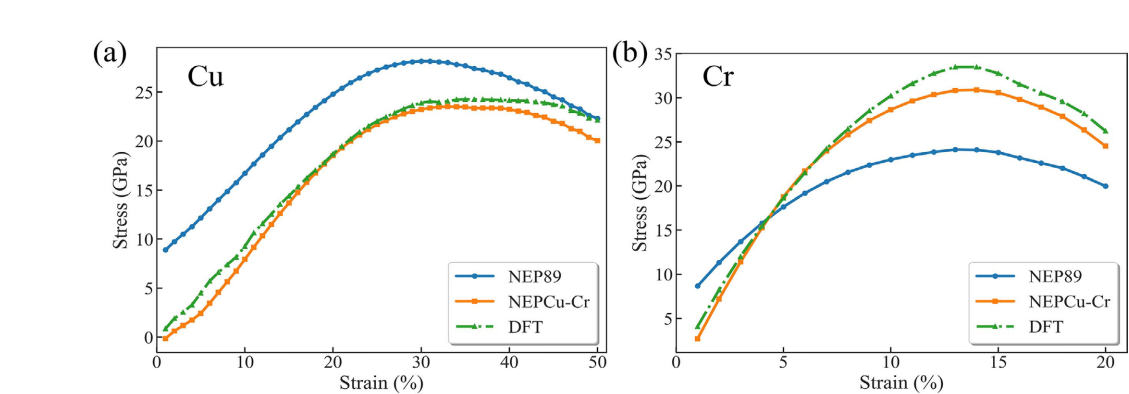


Figure 3. Stress-strain curves for 4-atom supercells calculated using UNEP-v1, NEP89, and DFT: (a) Copper; (b) Chromium
图 3. UNEP-v1、NEP89 和 DFT 计算的 4 原子超胞的应力 - 应变曲线: (a) 铜; (b) 铬

3.2. 分子动力学拉伸模拟

采用 UNEP-v1 机器学习势函数,对 Cu-Cr 合金沿[010]晶向进行单轴拉伸变形模拟。首先,利用 OVITO

软件构建初始模型：以纯铜的面心立方原胞为基础，沿三个晶向分别扩展 15、25 和 15 倍，构建尺寸为 $50 \times 83 \times 50 \text{ \AA}^3$ 的超胞模型，体系共包含 22,500 个原子。随后，使用合金理论自动化工具包(Alloy-Theoretic Automated Toolkit, ATAT)构建准随机结构(Special Quasirandom Structures, SQS)模型，Cr 原子含量分别设置为 0%、10%、20%、30%、40%和 50% [28]。模型的三个坐标轴分别与晶体学方向[100]、[010]和[001]保持对齐。

具体的模拟流程如下：

在所有三个方向上均施加周期性边界条件。拉伸模拟的时间步长设置为 1 fs，体系温度维持在 300 K。初始阶段，系统在等温等压(Isothermal-Isobaric Ensemble, NPT)系综下采用 Berendsen 热浴进行 10 ps 的结构弛豫，以消除初始构型中的内应力并达到热力学平衡。待模型达到平衡态后，再次采用 NPT 系综进行拉伸模拟，其中压力控制采用随机晶胞缩放(Stochastic Cell Rescaling, SCR)方法。在拉伸过程中，x 轴和 z 轴方向的压力保持为 0 GPa，即维持横向自由弛豫，同时沿 y 轴(即[010]晶向)以 $6 \times 10^{-4} \text{ \AA/step}$ 的恒定速率施加应变，共计拉伸 50,000 步，对应的有效应变率为 $6 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 。

需要指出的是，在实验条件下，典型的应变率通常为 10^{-4} s^{-1} 量级，远低于分子动力学模拟中所采用的应变率。然而，这种差异源于两种方法的研究尺度不同：实验应变率能够捕捉宏观物理过程，而分子动力学模拟所采用的高应变率则能够在有限的计算时间内有效揭示原子尺度的变形机制与微观演化规律，二者在各自适用的尺度上均具有重要的科学价值。

为了评估 Cr 含量对 Cu-Cr 合金力学性能的影响，对具有不同 Cr 浓度的合金模型沿[010]晶向进行了单轴拉伸模拟，所得的应力 - 应变曲线如图 4 所示。所有合金的应力 - 应变曲线在初始阶段均呈现出近乎线性的关系，表明材料在弹性变形阶段严格遵循胡克定律。当应变达到约 18%时，弹性阶段积累的弹性应变能集中释放，导致应力出现骤降。此时的峰值应力即对应于材料的屈服强度。进入塑性变形区后，曲线呈现轻微上升并伴随微小的应力波动，这反映了塑性变形过程中位错、形变孪晶以及界面相互作用之间的复杂协同效应。

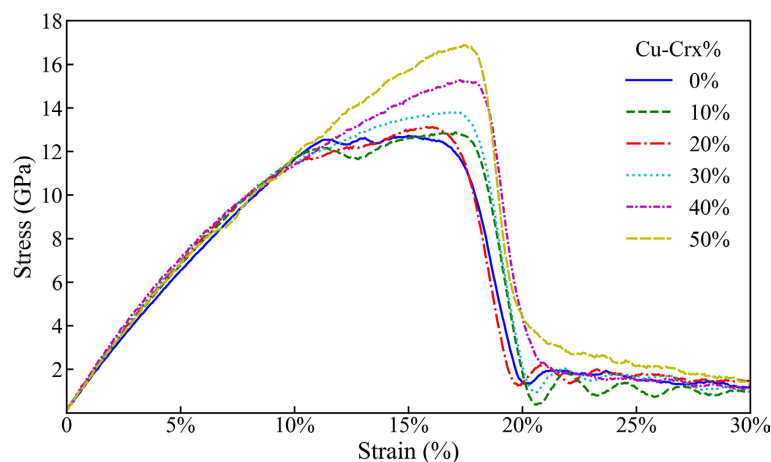


Figure 4. Strain-stress of Cu-Cr alloy under uniaxial tensile stress along the [010] direction at 300 K and 10^9 s^{-1} strain rate

图 4. Cu-Cr 合金在 300 K 和 10^9 s^{-1} 应变速率下沿[010]方向单轴拉伸的应力 - 应变曲线

Cr 含量对 Cu-Cr 合金的力学性能具有显著影响。如图 4 所示，合金的屈服强度和杨氏模量均随 Cr 浓度的增加而明显提高。在弹性变形阶段(应变 < 10%)，所有成分的曲线斜率基本一致，说明少量至中等

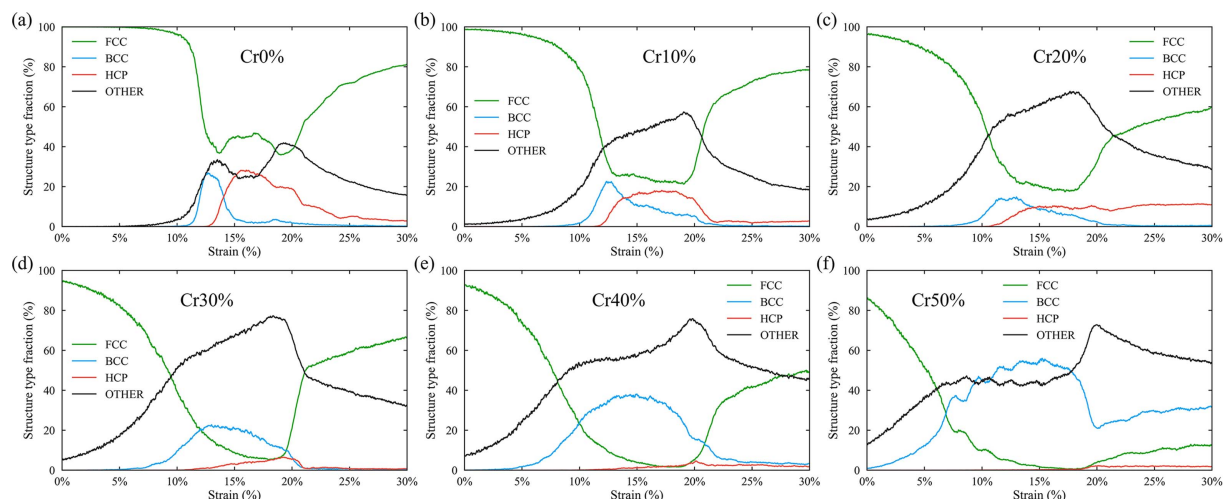


Figure 5. Phase structure fraction distribution of Cu-Cr alloy subjected to uniaxial tension along the [010] direction at 300 K and a strain rate of 10^9 s^{-1} : (a)~(f) Cr content increasing from 0% to 50%

图 5. Cu-Cr 合金在 300 K 和 10^9 s^{-1} 应变速率下沿[010]方向单轴拉伸，相结构占比分布：(a)~(f) Cr 含量从 0%增加至 50%

浓度的 Cr 溶质原子对 Cu 基体的弹性模量影响有限，这符合固溶体在低应变下以晶格弹性畸变为主的变形特征。而当应变超过 10% 进入塑性阶段后，曲线呈现明显的成分依赖性分化：随着 Cr 含量从 0 at.% 增至 50 at.%，抗拉强度从纯 Cu 的 12.54 GPa 提升至 50 at.% Cr 合金的 16.88 GPa，增幅达 30% 以上。这一趋势证实了 Cr 原子作为溶质强化相的有效性，其强化效率在高浓度区间($\geq 30\%$)尤为显著。同时，杨氏模量也略微增长，从 157.41 GPa 提升至 160.64 GPa。曲线在应变 18%~20% 区间均出现应力骤降，标志着宏观断裂的发生。但高 Cr 合金在断裂前的应力平台更高、波动更剧烈，表明其断裂过程伴随更复杂的能量耗散机制。这一现象可能与高浓度 Cr 诱导的微观结构异质性有关，需结合原子尺度演变进一步阐释。

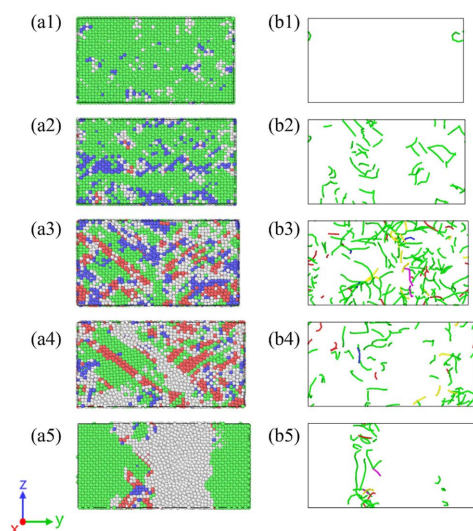


Figure 6. Phase structure (a1)~(a5) and dislocation density (b1)~(b5) distributions of Cu-Cr 10% alloy under uniaxial tensile stress along the [010] direction at 300 K and 10^9 s^{-1} strain rate, with compressive strains of 10.54%, 11.59%, 13.92%, 18.13%, and 21.68%, respectively

图 6. Cu-Cr 10% 合金在 300 K 和 10^9 s^{-1} 应变速率下沿[010]方向单轴拉伸，相结构(a1)~(a5)和位错密度(b1)~(b5)分布，压缩应变分别为 10.54%、11.59%、13.92%、18.13% 和 21.68%

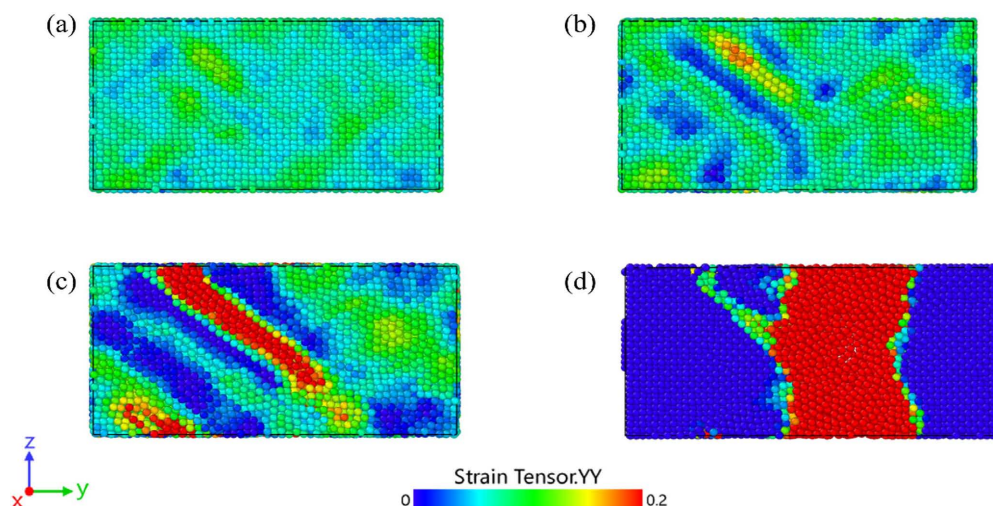


Figure 7. Shear strain distribution of yy strain tensor of Cu-Cr 10% alloy under uniaxial tensile stress along the [010] direction at 300 K and 10^9 s^{-1} strain rate, with compressive strains of (a) 10.54%, (b) 13.92%, (c) 18.13%, and (d) 21.68%, respectively

图 7. Cu-Cr 10%合金在 300 K 和 10^9 s^{-1} 应变速率下沿[010]方向单轴拉伸的 yy 方向剪切应力分布, 压缩应变分别为(a) 10.54%、(b) 13.92%、(c) 18.13%、(d) 21.68%

图 5 的相结构含量统计揭示了 Cr 含量对变形过程中晶体结构稳定性的调控作用。对于纯 Cu, 晶格在 10%应变前保持纯 FCC 结构, 随后迅速转变为无序结构, 对应于颈缩和断裂的开始。随着 Cr 含量增加, 初始态中 FCC 含量降低, 无序结构比例上升, 表明 Cr 原子的随机固溶破坏了 Cu 基体的长程周期性, 引入局部晶格畸变与化学短程有序。在塑性变形阶段, 高 Cr 合金中 BCC 结构分数在应变 10%~20% 区间出现明显峰值, 而 FCC 比例同步下降。这一现象可能源于 Cr 原子在变形驱动下发生短程扩散与团簇, 形成富 Cr 的 BCC 有序区域。BCC 相的生成能有效阻碍位错, 贡献额外的相变强化效应。

为进一步阐明 Cu-Cr 合金塑性变形的微观机制, 本研究选取 Cu-10 at.% Cr 合金作为典型代表, 系统分析了不同应变水平下的位错密度演化与相结构分布特征, 如图 6 所示。图中位错线按类型进行颜色标记: 绿色代表 $1/6[112]$ 型 Shockley 不全位错, 蓝色代表 $1/2[112]$ 型全位错, 紫色代表 $1/6[100]$ 型 Stair-rod 位错, 黄色代表 $1/3[100]$ 型位错, 红色代表其他位错。当应变达到 10.54%时, 体系内开始出现位错形核现象。随着应变的进一步增加, 位错密度逐渐上升, 位错线总长度也随之增长。图 6(a1)~(a5)呈现了相结构的空分布特征。在低应变阶段, 局部区域可观察到少量无序结构; 当应变增至 13.92%时, 体系内形成分布相对均匀的大范围无序区域; 随后, 随着应变继续增大, 无序原子占比逐渐降低, 体系逐步恢复为 FCC 结构。这一相变-回复过程表明, 合金在塑性变形初期通过局部结构无序化释放弹性应变能, 随后在应力驱动下重新有序化, 体现了塑性变形的典型特征。

图 7 展示了拉伸过程中原子剪切应力的分布与演化规律。在屈服点之前, 结构中仅存在少量剪切变形区域; 随着应变达到约 10%, 剪切带以 45° 方向萌生, 与最大剪应力方向一致, 标志着塑性流动的开始; 随着变形继续, 多条剪切带合并形成主剪切带, 应变高度集中, 大量局部变形区域相继出现, 对应于形变孪晶的形核与生长; 最终主剪切带演化为宏观裂纹, 两侧区域因弹性卸载呈现低应变状态。上述微观结构演化特征与宏观应力-应变曲线的波动行为高度吻合, 共同揭示了 Cu-Cr 合金在单轴拉伸载荷下“弹性储能→局部相变/位错形核→塑性流动→结构回复”的多阶段变形机制。

本研究中分子动力学模拟所采用的应变率($6 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$)比典型宏观实验应变率(约 10^{-4} s^{-1})高出十余个数量级。这种极高的应变率对位错动力学和相变机制具有显著影响。在位错动力学方面, 高应变率极大

地压缩了热激活辅助位错克服局部势垒(如 Peierls-Nabarro 力及溶质原子应力场)的时间,导致位错形核和运动需要更高的临界外加应力。这正是本模拟获得的绝对屈服强度与抗拉强度(12~16 GPa 量级)远高于实验宏观拉伸强度(通常为数百 MPa 量级)的物理根源。在相变机制方面,极高的加载速率抑制了长程扩散控制的热力学平衡相变,促使系统通过非平衡的切变机制(如局部马氏体相变或无序化)来快速耗散弹性能。

此外,在控温方法的选择上,本研究在弛豫阶段采用 Berendsen 热浴以实现快速的结构平衡,而在拉伸阶段维持 300 K 的恒温条件。然而,在高速塑性变形过程中,局部剪切带内会产生剧烈的绝热温升。强耦合的恒温算法会人为且过快地抽走这部分塑性耗散功转化的热量,从而在一定程度上抑制了局部热软化对剪切带扩展的促进作用。尽管如此,在当前的计算资源限制下,该控温策略仍能有效捕捉 Cu-Cr 合金在原子尺度下的本征变形机制与相对强化趋势,其定性结论依然具有重要的物理参考价值。

4. 结论

本文基于神经演化势(UNEP-v1)框架,系统评估了其在 Cu-Cr 合金体系中的适用性,并采用大规模分子动力学模拟深入研究了不同 Cr 浓度对 Cu-Cr 合金单轴拉伸变形机制的影响。主要研究结论如下:

1) 通过系统对比状态方程、声子色散曲线、弹性常数及应力-应变响应,验证 UNEP-v1 势函数与 DFT 参考值高度吻合,且晶格动力学稳定,无虚频。其预测精度和力学描述能力显著优于 NEP89 势函数,为 Cu-Cr 体系的大尺度、高保真度原子模拟提供了可靠的力场基础。

2) 拉伸模拟表明,Cr 元素的合金化能有效提升 Cu 的力学性能。随着 Cr 浓度的增加(0 at.%~50 at.%),合金的抗拉强度和杨氏模量均显著提高。其中,抗拉强度从纯 Cu 的 12.54 GPa 大幅提升至 50 at.% Cr 合金的 16.88 GPa,增幅达 30%以上,证实了 Cr 原子作为溶质强化相的高效性。

3) 微观结构演化揭示,Cu-Cr 合金的塑性变形主要由 1/6 [112]型 Shockley 不全位错的形核与滑移主导,并伴随 45°剪切带的萌生、合并与宏观裂纹的演化。在塑性阶段,合金通过 FCC 相向无序态及局部富 Cr 的 BCC 相转变来释放弹性应变能。Cr 原子的随机固溶不仅引入了局部晶格畸变,还显著钉扎了位错并阻碍了剪切带的扩展,从而大幅提高了驱动塑性变形所需的临界应力。

参考文献

- [1] Wang, G., Liu, H., Song, K., Zhou, Y., Cheng, C., Guo, H., *et al.* (2022) Aging Process and Strengthening Mechanism of Cu-Cr-Ni Alloy with Superior Stress Relaxation Resistance. *Journal of Materials Research and Technology*, **19**, 3579-3591. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2022.06.060>
- [2] Zhou, S., Lei, Q., Yin, J., Liu, W., Yan, X., Hu, H., *et al.* (2025) Effect of Si Addition on the Microstructure and Mechanical Properties of a Cu-Cr-Ag Alloy with High Strength and Electrical Conductivity. *Materials Science and Engineering: A*, **934**, Article 148310. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2025.148310>
- [3] Liu, S., Bo, X., Liu, Z. and Geng, Y. (2024) Investigation of Vacuum Arc Ignition Characteristics and Erosion Morphology Microstructure Characteristics of CuCr55 Electrode Contact Materials. *AIP Advances*, **14**, Article 085203. <https://doi.org/10.1063/5.0222915>
- [4] Zhou, K., Zhao, Y., Dong, H., Mao, Q., Jin, S., Feng, M., *et al.* (2024) Fractal Structure and Nano-Precipitates Break Comprehensive Performance Limits of CuCrZr Alloys. *Nano Today*, **56**, Article 102234. <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2024.102234>
- [5] Pan, S., Yu, J., Han, J., Zhang, Y., Peng, Q., Yang, M., *et al.* (2023) Customized Development of Promising Cu-Cr-Ni-Co-Si Alloys Enabled by Integrated Machine Learning and Characterization. *Acta Materialia*, **243**, Article 118484. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.118484>
- [6] Ma, M., Xiao, Z., Meng, X., Li, Z., Gong, S., Dai, J., *et al.* (2022) Effects of Trace Calcium and Strontium on Microstructure and Properties of Cu-Cr Alloys. *Journal of Materials Science & Technology*, **112**, 11-23. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2021.08.080>
- [7] Li, J., Ding, H., Li, B., and Wang, L. (2021) Microstructure Evolution and Properties of a Cu-Cr-Zr Alloy with High Strength and High Conductivity. *Materials Science and Engineering: A*, **819**, Article 141464. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2021.141464>

- [8] Cai, H., Li, Y., Liu, S., Zeng, T., Huang, Y., Gong, S., *et al.* (2024) Ameliorating the Microstructure and Properties of a Cu Cr Alloy by Introducing a High-Temperature Short-Time Treatment into the Thermo-Mechanical Process. *Materials Characterization*, **217**, Article 114463. <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2024.114463>
- [9] Xiong, H., Ma, Y., Zhang, H. and Chen, L. (2022) Design of Cu-Cr Alloys with High Strength and High Ductility Based on First-Principles Calculations. *Metals*, **12**, Article 1406. <https://doi.org/10.3390/met12091406>
- [10] Zhang, J., Zhang, Y., Wang, A., Liang, T., Mao, Z., Su, B., *et al.* (2023) Insight into the Influence of Alloying Elements on the Elastic Properties and Strengthening of Copper: A High-Throughput First-Principles Calculations. *Metals*, **13**, Article 875. <https://doi.org/10.3390/met13050875>
- [11] Behler, J. and Parrinello, M. (2007) Generalized Neural-Network Representation of High-Dimensional Potential-Energy Surfaces. *Physical Review Letters*, **98**, Article 146401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.146401>
- [12] Bartók, A.P., Payne, M.C., Kondor, R. and Csányi, G. (2010) Gaussian Approximation Potentials: The Accuracy of Quantum Mechanics, without the Electrons. *Physical Review Letters*, **104**, Article 136403. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.136403>
- [13] Thompson, A.P., Swiler, L.P., Trott, C.R., Foiles, S.M. and Tucker, G.J. (2015) Spectral Neighbor Analysis Method for Automated Generation of Quantum-Accurate Interatomic Potentials. *Journal of Computational Physics*, **285**, 316-330. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2014.12.018>
- [14] Novikov, I.S., Gubaev, K., Podryabinkin, E.V. and Shapeev, A.V. (2021) The Mlip Package: Moment Tensor Potentials with Mpi and Active Learning. *Machine Learning: Science and Technology*, **2**, Article 025002. <https://doi.org/10.1088/2632-2153/abc9fe>
- [15] Wang, H., Zhang, L., Han, J., *et al.* (2018) Deepmd-Kit: A Deep Learning Package for Many-Body Potential Energy Representation and Molecular Dynamics. *Computer Physics Communications*, **228**, 178-184. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2018.03.016>
- [16] Drautz, R. (2019) Atomic Cluster Expansion for Accurate and Transferable Interatomic Potentials. *Physical Review B*, **99**, Article 014104. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.014104>
- [17] Fan, Z., Zeng, Z., Zhang, C., Wang, Y., Song, K., Dong, H., *et al.* (2021) Neuroevolution Machine Learning Potentials: Combining High Accuracy and Low Cost in Atomistic Simulations and Application to Heat Transport. *Physical Review B*, **104**, Article 104309. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.104309>
- [18] Daw, M.S. and Baskes, M.I. (1984) Embedded-Atom Method: Derivation and Application to Impurities, Surfaces, and Other Defects in Metals. *Physical Review B*, **29**, 6443-6453. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.6443>
- [19] Song, K., Zhao, R., Liu, J., Wang, Y., Lindgren, E., Wang, Y., *et al.* (2024) General-Purpose Machine-Learned Potential for 16 Elemental Metals and Their Alloys. *Nature Communications*, **15**, Article No. 10208. <https://doi.org/10.1038/s41467-024-54554-x>
- [20] Liang, T., Xu, K., Lindgren, E., Chen, Z., Zhao, R., Liu, J., *et al.* (2025) NEP89: Universal Neuroevolution Potential for Inorganic and Organic Materials across 89 Elements. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2504.21286>
- [21] Xu, K., Bu, H., Pan, S., Lindgren, E., Wu, Y., Wang, Y., *et al.* (2025) Gpumd 4.0: A High-Performance Molecular Dynamics Package for Versatile Materials Simulations with Machine-Learned Potentials. *Materials Genome Engineering Advances*, **3**, e70028. <https://doi.org/10.1002/mgea.70028>
- [22] Stukowski, A. (2010) Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with Ovito—The Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, **18**, Article 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>
- [23] Kresse, G. and Furthmüller, J. (1996) Efficient Iterative Schemes for *Ab Initio* Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set. *Physical Review B*, **54**, 11169-11186. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
- [24] Blöchl, P.E. (1994) Projector Augmented-Wave Method. *Physical Review B*, **50**, 17953-17979. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.50.17953>
- [25] Togo, A. (2023) First-Principles Phonon Calculations with Phonopy and Phono3py. *Journal of the Physical Society of Japan*, **92**, Article 012001. <https://doi.org/10.7566/jpsj.92.012001>
- [26] Wang, V., Xu, N., Liu, J.C., Tang, G. and Geng, W.T. (2021) Vaspkit: A User-Friendly Interface Facilitating High-Throughput Computing and Analysis Using Vasp Code. *Computer Physics Communications*, **267**, Article 108033. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108033>
- [27] Lindgren, E., Rahm, M., Fransson, E., Eriksson, F., Österbacka, N., Fan, Z., *et al.* (2024) Calorine: A Python Package for Constructing Andsampling Neuroevolution Potential Models. *Journal of Open Source Software*, **9**, Article 6264. <https://doi.org/10.21105/joss.06264>
- [28] Van De Walle, A., Tiwary, P., De Jong, M., Olmsted, D.L., Asta, M., Dick, A., *et al.* (2013) Efficient Stochastic Generation of Special Quasirandom Structures. *Calphad*, **42**, 13-18. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2013.06.006>