

单轴应变驱动铁 bcc—hcp 相转变的微观模拟*

邵建立[†] 何安民 段素青 王 裴 秦承森

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

(2009 年 8 月 17 日收到; 2009 年 10 月 12 日收到修改稿)

用分子动力学方法模拟了沿 $\langle 001 \rangle$ 晶向应变加载和卸载情况下单晶铁中体心立方 (bcc) 与六方密排 (hcp) 结构的相互转变, 分析了相变的可逆性和微结构演化特征. 微观应力的变化显示样品具有超弹性性质, 而温度变化表明在相变和逆相变过程中均出现放热现象. 相变起始于爆发式均匀形核, 晶核由块状颗粒迅速生长为沿 $\{011\}$ 晶面的片状分层结构; 而卸载逆相变则从形核开始就呈现片状形态, 且相界面晶面指数与加载相变完全一致, 表现出形态记忆效应. 在两 hcp 晶核生长的交界面易形成面心立方 (fcc) 堆垛层错. fcc 通过在 hcp 晶粒内合并和晶粒间位置调整, 最终形成贯穿 hcp 单晶的 fcc 结构. 卸载过程由 hcp 至 bcc 转变相对缓慢, 且 fcc 位置不再改变. 最后, 给出了上述相变可逆性的径向分布函数分析.

关键词: 结构转变, 铁, 分子动力学, 单轴应变

PACC: 6470K, 6250, 7115Q

1. 引 言

铁的固态含有三种常见晶体结构^[1], 体心立方结构 (bcc)、高温面心立方结构 (fcc) 和高压六方密排结构 (hcp). 其中, 铁由常态 bcc 晶体至高压 hcp 晶体^[2-4]的结构相变是凝聚态物理、材料科学和地球科学等领域极为关注的研究课题之一^[5-13]. 该相变属于热力学一级相变, 具有热效应和体积效应, 可导致材料力学性能发生显著变化. 实际中通常采用唯象模型对相变进行描述. 如 Andrews^[6]发展的描述多晶铁冲击相变的热力学状态方程. Boettger 和 Wallace^[7]基于亚稳态描述发展的相变动力学模型. 尽管相变过程可分为形核和长大两个阶段来描述, 但目前实验尚难以直接观测相变过程原子迁移的确定轨迹, 对于新相晶核如何形成和长大仍然没有完整的认识.

分子动力学 (molecular dynamics, MD) 是基于原子层次探讨材料微观变形机理的有效手段, 在材料科学领域得到极为广泛的应用. 近年来, 基于 MD 模拟对铁中由 bcc 至 hcp 的相变研究已取得较多进展^[14-25]. 如 2002 年, Kadau 等^[14, 15]通过大规模 MD 模拟实现了冲击诱导单晶铁中结构相变的微观模

拟, 观察到 hcp 相 (1000) 面是由 bcc 密排面 ($\bar{1}10$) (或 (110)) 沿 $[\bar{1}10]$ (或 $[110]$) 晶向的相对挪动形成. 2007 年, Kadau 等^[16]对纳米多晶铁进行了冲击加载模拟, 计算结果与实验数据符合得很好, 并阐明了一定数量 fcc 结构存在的可能性. 此外, Caspersen 等^[20]基于多尺度模拟研究了相变压力的分散性和滞后现象, 指出剪切形变对于相变发生和降低相变压力起到重要作用. 实验方面, Kalantar 等^[18]用 X 射线衍射的方法成功观察了铁相变的微观过程, Hawreliak 等^[19]则由 X 射线衍射结果确定了 hcp 晶粒中 2—15 nm 尺度的亚结构, 这些实验观测结果均与 Kadau 等给出的 MD 模拟完全一致.

最近, 我们开展了 MD 单轴加载下铁中相变的成核与生长形态研究^[22, 23], 获得了混合相的分层结构及微观应力分布特征. 实验中早已观察到铁中 bcc 至 hcp 结构相变的可逆性和滞后现象^[11]. 上述研究进展表明, 基于 MD 模拟探讨 (逆) 相变行为的微观变形机理和形态演化是完全可行的, 这对于深入认识相变的可逆性和动力学行为是十分有益的. 本文通过沿 $\langle 001 \rangle$ 晶向加卸载模拟获得了单晶铁中 bcc—hcp 相转变的微观过程. 根据力学量变化讨论了单晶铁的超弹性行为和相变的温升效应. 联合配位数和中心对称参数等方法分析了相变与逆相

* 中国工程物理研究院科学技术发展基金 (批准号: 2007A09001, 2008B0101008, 2009A0101004) 资助的课题.

[†] E-mail: shao_jianli@iapcm.ac.cn

变的微观结构和形态演化特征.

2. 模拟方法

原子间相互作用势是经典 MD 模拟的物理基础, 势函数形式及适配参数一般通过经验或半经验方法给出. 嵌入原子法 (embedded atom method, EAM) 多体势模型^[26,27] 可以很好地描述金属及合金中原子的相互作用, 其形式可表示为

$$U = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi(r_{ij}) + \sum_i F(\rho_i), \quad (1)$$

式中等号右侧 $\phi(r_{ij})$ 为原子 i 与 j 之间的静电作用势能, ρ_i 为原子 i 所在位置的电子密度, $F(\rho_i)$ 则为原子 i 在电子密度 ρ_i 处的嵌入能. 本文采用 Voter-Chen 型 EAM 势^[28], ϕ 和 ρ_i 可表示为

$$\phi(r) = D_M \{1 - \exp[-\alpha_M(r - R_M)]\}^2 - D_M,$$

$$\rho(r) = r^6 [\exp(-\beta r) + 2^9 \exp(-2\beta r)],$$

其中 $D_M = 0.6321$ eV, $\alpha_M = 13.43$ nm⁻¹, $R_M = 0.2092$ nm, $\beta = 62.62$ nm⁻¹, 分别对应 Morse 势中的势能深度、热能曲线最低点的曲率和平衡距离, 以及电子密度函数中的可调参数. 嵌入能 F 与电子密度 ρ 的函数关系根据 Rose 状态方程^[29] 给出 (使用参数 $a_0 = 0.287$ nm, $E_0 = 4.28$ eV, $B = 173$ GPa). 该势函数已在铁的高压结构相变研究中获得广泛应用^[14-16, 23-25].

初始原子构型设为 $50_{[100]} \times 50_{[010]} \times 70_{[001]}$ 个 bcc 晶胞 (共 35 万个原子), 沿三个晶向均设为周期性边界. 样品初始状态设置在正则系综下进行, 即使用速度标定法^[30] 将样品初始温度调节在 60 K, 同时调整晶格常数大小使系统稳定在零压, 此时的晶格常数 $a = 0.28725$ nm. 加载和卸载过程系统均处于单轴压缩状态 (一维应变、三维应力), 沿坐标轴方向没有剪切作用. 加载通过连续压缩 $\langle 001 \rangle$ 向晶格常数来实现, 相应的应变率为 9.0×10^8 (0.2 ns 沿压缩方向晶格常数收缩至 $0.82a$). 因此系统加载状态对应于体积连续变化的动态微正则 (NVE) 系综, 这与准静态压缩有所不同. 卸载模拟则在加载应变为 0.18 的微正则系综下弛豫 2 ps 后, 按相同应变率将压缩方向晶格常数还原至 a . 原子运动方程用速度 Verlet 算法^[31] 求解, 时间步长取 0.002 ps.

相变机理的微观描述, 需要对原子结构变化进行合理判断. 已有研究表明^[14], 单晶铁沿 $\langle 001 \rangle$ 晶

向加载的相变产物主要为 hcp 结构, 仅有少量的 fcc 结构以层错形式出现. 本文中, 一方面根据配位数 n_i 来判断原子 i 是否发生相变 (n_i 由最近邻原子数确定), 显然, $n_i = 8$ 表示原子 i 处于 bcc 结构, $n_i = 12$ 表示原子 i 处于 hcp/fcc 密排结构. 另一方面, 通过中心对称参数 c_i 的变化追踪原子的相变和逆相变过程. c_i 的计算公式如下^[32]:

$$c_i = \sum_{(j,j')} |\mathbf{R}_{ij} + \mathbf{R}_{ij'}|^2, \quad (2)$$

式中 (j, j') 表示以原子 i 为中心的 bcc 晶胞中的四组相对最近邻原子对. c_i 在理想晶格中接近零, 当晶格发生畸变时 c_i 值将大幅增加.

3. 计算结果与讨论

3.1. 应力与温度效应

根据维里 (Virial) 定理^[33], 我们计算出样品沿 $\langle 001 \rangle$ 晶向绝热压缩下的纵向应力 σ_{zz} 及剪切应力 τ_{xz} 与应变 ε ($\varepsilon = 1 - V/V_0$, V_0 为样品初始体积) 的关系, 如图 1 所示. 图 1(a) 中加载和卸载过程的应力分别在 T_S 和 T'_S 点出现明显突变. 微观结构分析表明图中 T_S 和 T'_F 对应样品从 bcc 至 hcp 结构转变的开始和结束, T'_S 和 T'_F 则对应卸载时的逆转变过程. 该结构转变属于以晶格畸变为主的一级相变, 相变过程伴有体积、熵等力学量的突变. 而在应变约束下应力分量的突变主要由系统亚稳态形核的动力学效应引起. 如正相变过程中, 应变量增加至 T_S 点前夕, 系统应力状态已超出热力学相变阈值而处于亚稳态. 当应变继续增加, hcp 相开始形核并自发生长, 铁的 bcc 晶格发生绝对失稳, 从而诱发力学量的突变. 从加载和卸载结果发现, 由于均匀形核阻力 (界面能和弹性应变能) 较大, 相变或逆相变形核在应变区间上表现出滞后效应 (相变应力区间比逆相变高出约 5 GPa). 尽管此相变存在滞后效应, 但从整个应变区间来看, 晶体结构表现出良好的可恢复性, 样品也因此表现出超弹性. 图 1(b) 中的结果还显示了相转变过程剪切应力的线性变化和超松弛状态, 这在文献 [22] 中已有过讨论, 这里不再赘述.

图 2 给出了加卸载过程温度 T 随应变的变化关系. 可以看到, 在加载过程中的 T_S 点和卸载过程中的 T'_S 点, 温度都出现跳跃式增加. 这是因为加载 hcp 和卸载 bcc 形核前夕样品中已积累较高的应变

能,也就是说 hcp 和 bcc 均通过亚稳态形核并释放部分应力而导致系统温度的升高. 加载过程 hcp 形核引起的温升明显高于卸载时 bcc 形核,表明前者比后者具有更高的形核势垒(下文还将介绍 hcp 形核需克服界面能和弹性应变能,而 bcc 形核主要克

服弹性应变能). 从系统加卸载全过程来看,加载过程的应力-应变曲线位于卸载过程上方(见图 1(a)),这暗示加载过程所施加的应变对系统的做功要大于卸载过程系统对外界的做功,剩余能量使系统经历加卸载后呈现温升效应.

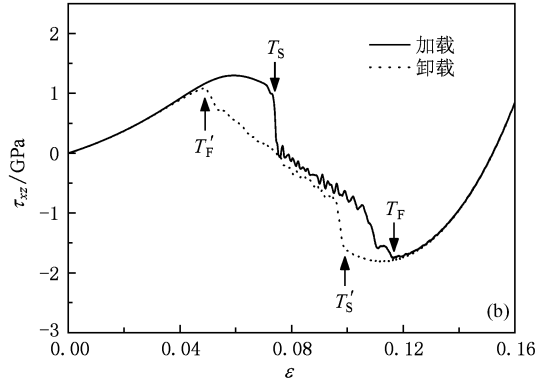
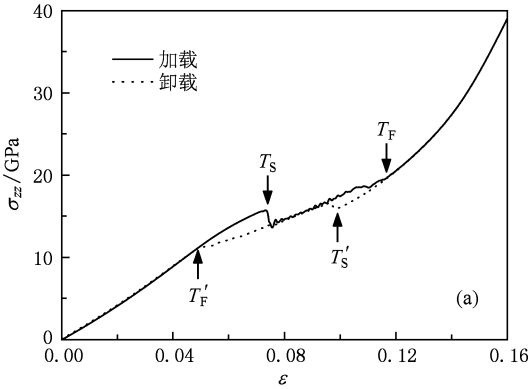


图 1 样品加载和卸载过程的应力-应变关系 (a) 纵向应力, (b) 剪切应力

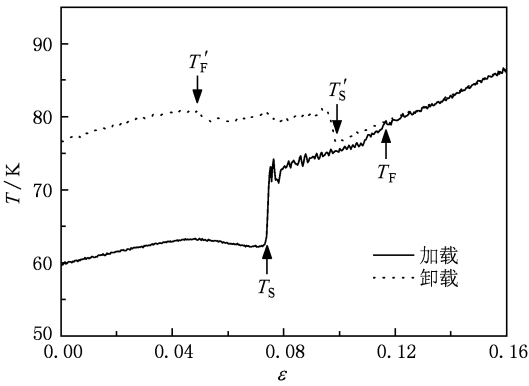


图 2 样品加载和卸载过程中温度-应变关系

观变形情况合理选取各参数值给出的结果是一致的.

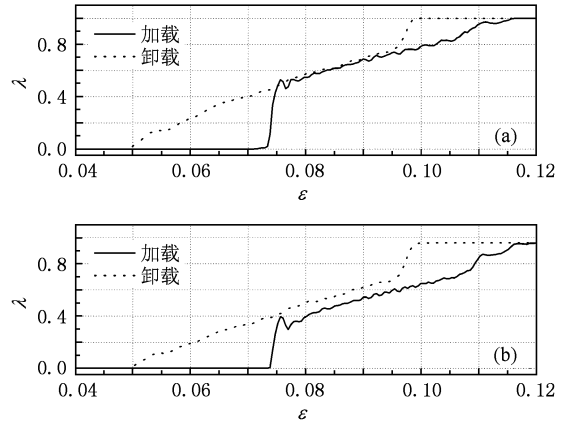


图 3 加卸载过程相变质量分数的变化 (a) 配位数统计结果, (b) 中心对称参数统计结果

3.2. 相变与逆相变形核、生长

上述过程的微观结构统计如图 3 所示,实线和虚线分别对应加载相变和卸载逆相变过程的 hcp 相质量分数 λ ,其中图 3(a)和(b)分别为基于配位数和中心对称参数判断的结果. 图中结果显示,两种方法给出的定性规律是一致的,模拟系统的相变在晶体结构转变上完全可恢复,相变与逆相变均由爆发式形核开始,之后新相生长随应变大致呈线性关系. 相变进行完全后中心对称参数给出的新相质量分数略低于 1,这是由于非 hcp 结构原子的存在(hcp 相中形成了少量 fcc 结构). 本文中发生相变或逆相变时中心对称参数的临界判据分别取 0.016 或 0.012 nm^2 ,配位数统计的临界半径取为 2.75 nm . 需要说明,计算结果受各参数临界值影响,但根据微

基于中心对称参数的统计,我们给出加载过程 hcp 相形核及生长的微观形态,如图 4 所示. 当施加应变至相变临界时,样品中发生 hcp 相均匀形核(见图 4(a)),并迅速长大为片状系统(见图 4(c)). 随着应变进一步增加,这些片状 hcp 微晶以增加厚度的方式使样品全部相变. hcp 相形成片状颗粒表明生长过程两相界面能较小,弹性应变能起主导作用,这符合切变共格相变的一般特征. 样品中晶向关系为 hcp 相(1000)面对应 bcc 密排面(110). 样品最终形成沿 bcc 相(101)晶面的片状分层结构,且在(101)垂直的(101)晶面产生切变并表

现为晶面浮凸.

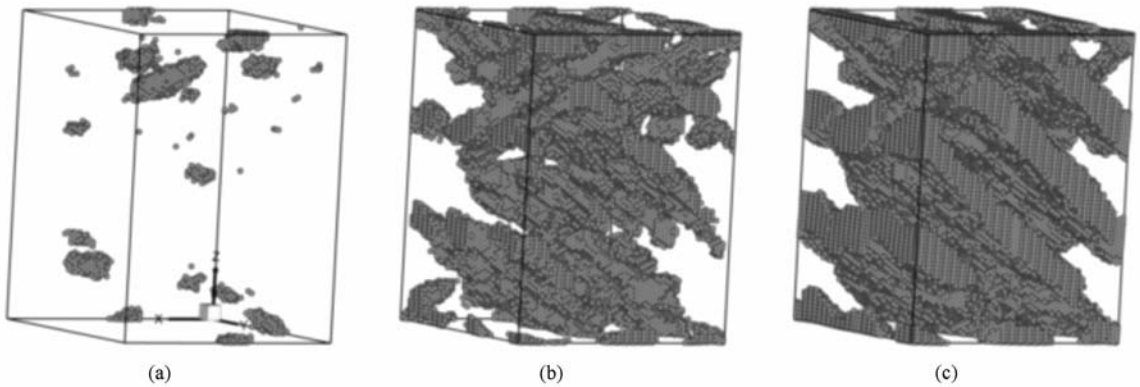


图4 样品加载过程 hcp 形核与生长过程 (a) $\varepsilon = 0.0738$, (b) $\varepsilon = 0.07425$, (c) $\varepsilon = 0.07515$

从相变微观过程可知,单轴应变条件下所形成的 hcp 晶格同样处于形变状态,并不具有理想状态或者压力状态下的对称性.也就是说,从 hcp 至 bcc 的转变过程失去了在等价晶面族形核的任意性.图 5 给出了 bcc 相形核生长的颗粒形态,其中层错结构 fcc 所在晶面即 bcc 相密排面 $(1\bar{1}0)$. 可以看到,

bcc 相沿 $(10\bar{1})$ 晶面开始形核生长,与正相变的相边界相同.由此可知,逆相变过程两相颗粒边界的晶面指数与相变过程完全一致.与正相变所不同的是, bcc 相从开始形核就表现出片状形态特征(见图 5(a)),表明弹性应变能在 bcc 形核过程开始就发挥了主导作用.

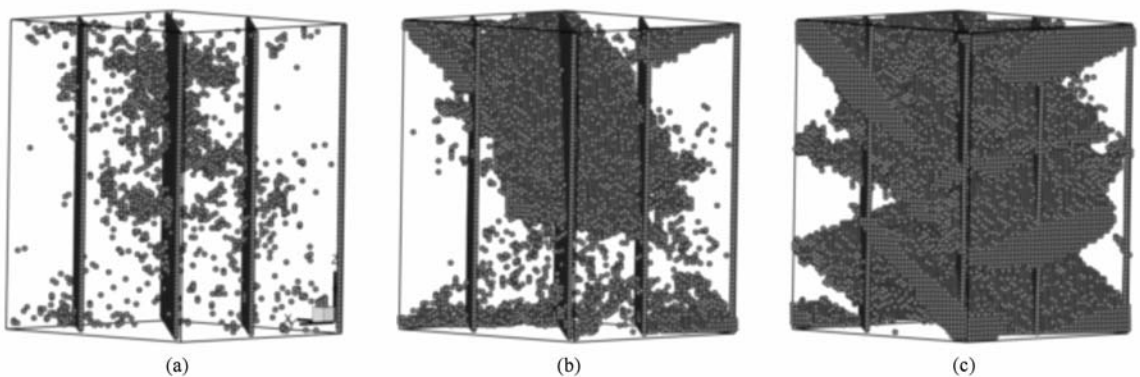


图5 样品卸载过程发生 bcc 形核生长过程 (a) $\varepsilon = 0.079$, (b) $\varepsilon = 0.0781$, (c) $\varepsilon = 0.0763$

3.3. 相变过程的微观结构分析

层错与孪晶界为生成的 hcp 结构中的两种缺陷.受模拟尺寸的限制,本文模拟只观察到层错结构.图 6 给出相变过程中 hcp 相内 fcc 层错形成和演化的微观过程,由 (010) 晶面原子排列显示,其中深灰色原子表示 fcc 原子,灰色区域表示 hcp 相原子,浅灰色则表示 bcc 相原子.层错实际上是滑移面相同的 hcp 晶粒相遇时的边界,当两侧原子滑移不能协调一致时,便留下 fcc 结构.从图 6 可以看到, fcc 层错不仅能在同一 hcp 晶粒内迁移合并(见图 6(a)—(c)),还可以在晶粒间调整为沿同一晶面(见

图 6(d), (e)). 应变变量 $\varepsilon = 0.0747$ 时(见图 6(a)中矩形框内区域),两 hcp 晶粒在相遇界面形成两片 fcc 结构.随加载持续,上方 fcc 发生向左侧移动,与下方 fcc 在 hcp 晶粒内合并为完整层错结构(见图 6(b)).而不同 hcp 晶粒中 fcc 结构则可通过移动调整为沿同一晶面.图 6(c)中结果显示矩形区域内的 fcc 结构与其下方 fcc 结构不对应同一晶面,因此在图 6(d)中矩形区域内 fcc 开始发生向左侧移动,直至上下两 hcp 晶粒中 fcc 结构对应同一晶面,如图 6(e)中结果所示.在卸载过程中,仅观察到 fcc 结构随 hcp 相边界收缩而减小,未见 fcc 的位置变化.

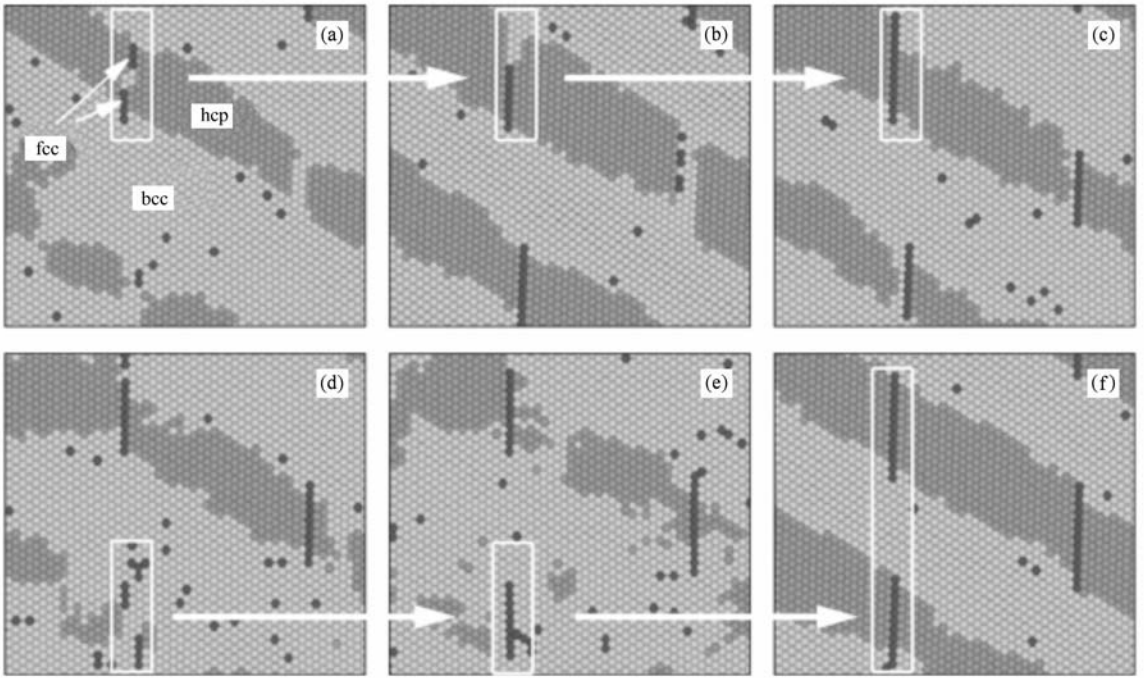


图 6 相变过程中 hcp 相内层错结构 fcc 形成和演化的微观结构 (a) $\varepsilon = 0.0747$, (b) $\varepsilon = 0.0756$, (c) $\varepsilon = 0.0765$, (d) $\varepsilon = 0.07695$, (e) $\varepsilon = 0.0774$, (f) $\varepsilon = 0.08055$

上述层错的形成和演化,可通过原子 fcc/hcp 结构的相互转化反映,如图 7(a)所示(以选定的三个原子为例).当应变量超过 0.075 时,1 号原子的中心对称参数值迅速增加至 0.025 nm^2 ,此时发生了从 bcc 至 hcp 的结构转变;2 号原子中心对称参数值在增加一段时间后又快速减小至 0,表明该原子在完成 hcp 转变后,又转变为 fcc 结构;而 3 号原子的中心对称参数值则在起伏之后保持在 0 附近,表

明该原子由 bcc 直接转变为 fcc 结构.对于卸载过程,如图 7(b)所示,所有原子的中心对称参数均减小至 0,表明了原子构型的可恢复性.但从 1 号原子的卸载过程可以看出,hcp 至 bcc 转变过程较为缓慢(应变区间比加载约高出五倍).同时,终态处于 fcc 结构的原子中心对称参数将一直维持在 0 附近,表明此处 fcc 结构直接转变为 bcc 结构,而没有在 hcp 晶粒发生移动.

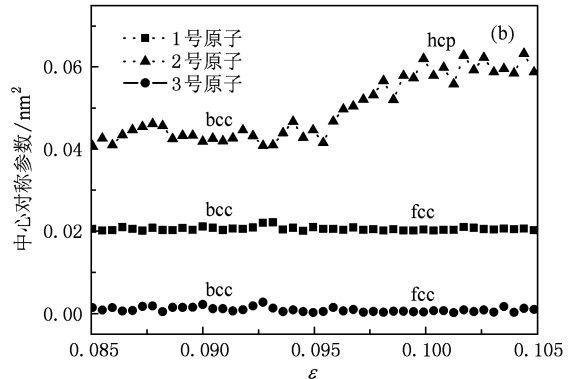
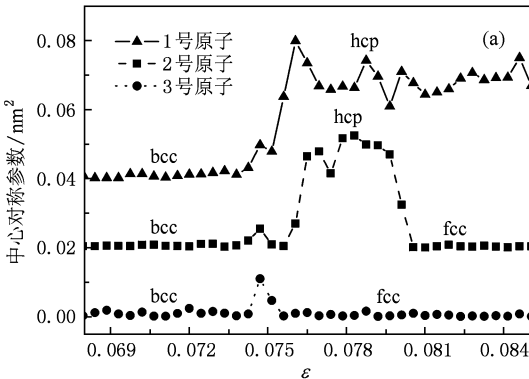


图 7 不同原子的中心对称参数的变化 (a)加载,(b)卸载

3.4. 径向分布函数分析

径向分布函数反映了以某原子为中心其他原

子按距离的分布情况^[34],是表征系统微观结构变化的主要方法之一.图 8(a)和(b)分别给出系统加载和卸载过程的径向分布函数 $g(r)$ 变化(应变量 ε 范

围为 0—0.18, 间隔为 0.009). 样品初始为 bcc 晶格, 左侧第一和第二个峰分别表示原子最近邻 ($r/a = \sqrt{3}/2$, 8 个原子) 和次近邻 ($r/a = 1$, 6 个原子). 样品相变前处于弹性压缩阶段, 晶格常数沿 $[001]$ 晶向减小, 原子的次近邻分布沿不同晶向发生变化, 这导致峰的位置逐渐向左偏移, 并出现峰的分裂现象, 见图 8(a) 中虚线区域. 随应变继续增加, $(\bar{1}10)$

晶面发生沿 $[\bar{1}10]$ 晶向的交替挪动, 形成 hcp 相, 第二个峰逐渐消失同时其右侧出现新峰. 卸载后的径向分布函数与加载前保持一致, 显示了整体结构完全恢复至 bcc 结构, 但变化的具体路径存在差异. 如图 8(b) 虚线所示区域, 第二个峰的形成过程没有出现分裂现象, 其原因在于卸载过程 hcp 至 bcc 结构转变是随应变而相对缓慢进行的.

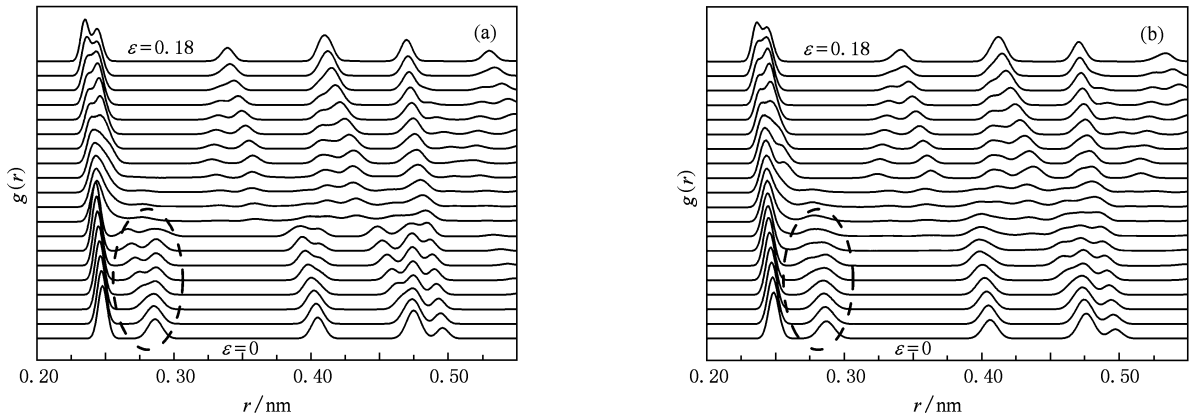


图 8 加载和卸载过程中径向分布函数的变化 (a) 加载, (b) 卸载

4. 结 论

通过分子动力学模拟, 我们给出单轴应变加载卸载过程单晶铁 bcc—hcp 结构相互转变的微观过程, 并使用中心对称参数、配位数等技术分析了相变的可逆性和微结构演化. 受模拟规模的限制, 样品没有形成孪晶. 模拟结果表明, 应力的变化具有超弹性行为, 而由于形核势垒, 相变与逆相变均发生爆发式形核, 并伴有显著温升效应. 相变与逆相变过程均形成片状系统分布特征, 且相界面的晶向关系

沿 $\{101\}$ 族同一晶面表现出形态及其晶体取向的记忆效应. fcc 层错出现在晶核交界面, 并通过位置迁移最终形成 hcp 相的完整层错. 逆相变完成后样品的晶体结构完全恢复为初始状态. 上述结论揭示了理想单晶沿 $\langle 001 \rangle$ 晶向压缩相变与逆相变的一些基本性质. 由于实际材料中晶体缺陷以及加载过程应力的复杂性等因素^[25], 相变往往以非均匀形核开始, 导致实际发生相变的微观机理和生长形态比本文讨论复杂, 影响甚至改变相变机理的诸多因素还需要进一步研究.

[1] Young D 1991 *Phase Diagrams of the Elements* (Berkeley, CA: University of California Press) p177
 [2] Bancroft D, Peterson E L, Minshall S 1956 *J. Appl. Phys.* **27** 291
 [3] Takahashi T, Basset W A 1964 *Science* **145** 483
 [4] Jamieson J C, Lawson A W 1962 *J. Appl. Phys.* **33** 776
 [5] Birch F 1952 *J. Geophys. Res.* **57** 227
 [6] Andrews J 1973 *J. Phys. Chem. Solids* **34** 825
 [7] Boettger J C, Wallace D C 1997 *Phys. Rev. B* **55** 2840
 [8] Ekman M, Sadigh B, Einarsdotter K, Blaha P 1998 *Phys. Rev. B* **58** 5296

[9] Herper H C, Hoffmann E, Entel P 1999 *Phys. Rev. B* **60** 3839
 [10] Wang F M, Ingalls R 1998 *Phys. Rev. B* **57** 5647
 [11] Taylor R D, Pasternak M P, Jeanloz R 1991 *J. Appl. Phys.* **69** 6126
 [12] Bhattacharya K, Conti S, Zanzotto G, Zimmer J 2004 *Nature* **428** 55
 [13] Yaakobi B, Boehly T R, Meyerhofer D D, Collins T J B 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 075501
 [14] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2002 *Science* **296** 1681
 [15] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2005 *Phys. Rev. B* **72** 064120

- [16] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Albers R C, Wark J S, Higginbotham A, Holian B L 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 135701
- [17] Friák M, Šob M 2008 *Phys. Rev. B* **77** 174117
- [18] Kalantar D H, Belak J F, Collins G W, Colvin J D, Davies H M, Eggert J H, Germann T C, Hawreliak J, Holian B L, Kadau K, Lomdahl P S, Lorenzana H E, Meyers M A, Rosolankova K, Schneider M S, Sheppard J, Stölken J S, Wark J S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 075502
- [19] Hawreliak J A, Kalantar D H, Stölken J S, Remington R A, Lorenzana H E 2008 *Phys. Rev. B* **78** 220101 (R)
- [20] Caspersen K J, Lew A, Ortiz M, Carter E A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 115501
- [21] Liu J B, Johnson D D 2009 *Phys. Rev. B* **79** 134113
- [22] Shao J L, Duan S Q, He A M, Qin C S, Wang P 2009 *J. Phys.: Condens. Matter* **21** 245703
- [23] Shao J L, He A M, Qin C S, Wang P 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5610 (in Chinese) [邵建立、何安民、秦承森、王 裴 2009 物理学报 **58** 5610]
- [24] Cui X L, Zhu W J, Deng X L, Li Y J, He H L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5545 (in Chinese) [崔新林、祝文军、邓小良、李英俊、贺红亮 2006 物理学报 **55** 5545]
- [25] Lu Z P, Zhu W J, Liu S J, Lu T C, Chen X R 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2083 (in Chinese) [卢志鹏、祝文军、刘绍军、卢铁城、陈向荣 2009 物理学报 **58** 2083]
- [26] Daw M S, Baskes M I 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1285
- [27] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [28] Harrison R J, Voter A F, Chen S P 1989 “*Embedded Atom Potential for bcc Iron*” in *Atomistic Simulation of Materials Beyond Pair Potentials* (New York: Plenum Press) p219
- [29] Rose J H, Smith J R, Guinea F, Ferrante J 1984 *Phys. Rev. B* **29** 2963
- [30] Hoffmann K H 1996 *Computational Physics* (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag) p268
- [31] Swope W C, Andersen H C, Berens P H, Wilson K R 1982 *J. Chem. Phys.* **76** 637
- [32] Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11085
- [33] Allen M P, Tildesley D J 1987 *Computer Simulations of Liquids* (Oxford: Oxford University Press) p46
- [34] Andrew R L 1996 *Molecular Modeling: Principle and Practice* (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag) p357

Atomistic simulation of the bcc—hcp transition in iron driven by uniaxial strain*

Shao Jian-Li[†] He An-Min Duan Su-Qing Wang Pei Qin Cheng-Sen

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

(Received 17 August 2009; revised manuscript received 12 October 2009)

Abstract

The bcc—hcp structural transition in single crystal iron under $\langle 001 \rangle$ uniaxial strain has been investigated by molecular dynamics simulation. The reversibility and the morphological characteristics are discussed. The stress history indicates a super-elastic deformation in the sample, while the change of temperature shows the heat release during both hcp and bcc nucleation. A laminated structure of bcc and hcp along $\{011\}$ planes is obtained, where the phase boundaries for the bcc to hcp and hcp to bcc transition are found along the same plane, implying the memory effect of morphology. Stacking faults (fcc) can be formed at the interface between hcp nuclei. For the bcc to hcp transition, we observed the mergence of the stacking faults in an hcp grain and the position adjustment between hcp grains. No migration of stacking fault is found during the hcp to bcc transition. In addition, the bcc—hcp transition structure is analyzed by the radial distribution function.

Keywords: structural transition, iron, molecular dynamics, uniaxial strain

PACC: 6470K, 6250, 7115Q

* Project supported by the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant Nos. 2007A09001, 2008B0101008, 2009A0101004).

[†] E-mail: shao_jianli@iapcm.ac.cn