

纳米多晶铁的冲击相变研究*

马文¹⁾²⁾ 祝文军^{2)†} 张亚林³⁾ 经福谦¹⁾²⁾

1) (国防科学技术大学物理系, 长沙 410073)

2) (中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室, 绵阳 621900)

3) (中国工程物理研究院计算机应用研究所, 绵阳 621900)

(2010年12月21日收到; 2011年2月24日收到修改稿)

利用分子动力学方法研究了不同晶粒度的纳米多晶铁在冲击压缩下的结构相变过程, 模拟结果表明: 纳米多晶铁的冲击结构相变(由体心立方(bcc)结构 α 相到六角密排(hcp)结构 ϵ 相)发生的临界冲击应力在15 GPa左右. 纳米多晶铁在经过弹性压缩变形后, 晶界导致的塑性变形开始发生, 然后大多数相变从晶界成核并最终发展为大规模相变. 不同变形过程在应力和粒子速度剖面上能得到清晰的体现, 并通过微观原子结构分析分辨. 冲击压缩后的微观结构以晶界原子和以fcc结构原子充当孪晶界的hcp原子为主. 晶粒度明显影响晶界变形及相变原子比例, 从而影响冲击波阵面的结构, 并初步分析了影响原因.

关键词: 冲击相变, 纳米多晶铁, 冲击波, 分子动力学

PACS: 64. 70. Nd, 61. 72. Mm, 62. 50. - p, 02. 70. Ns

1. 引言

铁是自然界分布最广泛的一种金属, 在工业、国防等领域有广泛的应用. 因此铁的物性研究是凝聚态物理、材料物理、地球物理等学科的重要研究内容. 铁随压力变化存在不同的晶体结构, 影响铁的物理性质. 基于冲击波阵面分析, Bancroft 等^[1]在1956年首次发现铁在冲击压缩下存在结构相变. 随后, 利用静高压加载结合X射线衍射技术证明这是铁由 α 相体心立方结构(bcc)到 ϵ 相六角密堆结构(hcp)的转变. 但是由于难以从实验上直接观察晶体结构动态变化过程, 长期以来除通过波剖面形状变化推得相变阈值压力外, 其相变机理只能通过相变初始结构及终态结构的几何特征进行猜测, 更无法了解晶体中存在的大量缺陷对其相变影响的规律^[2].

2005年, Kalantar 等^[3]首次利用瞬态激光X射线衍射技术原位观察到铁冲击下的发生相变后的原子结构, 为确定相变机理提供了直接的证据. 同时, Kadau 等^[4-6]利用分子动力学(MD)方法从原子尺度大规模并行计算模拟了单晶甚至多晶铁在冲

击加载下发生相变的过程, 获得了单晶铁和纳米多晶铁的 Hugoniot 关系, 其观察到的相变过程得到了原位诊断的支持, 将冲击相变研究从宏观尺度拓展到微观尺度.

在上述研究中, 已经发现冲击加载方向不同时, 单晶铁冲击波阵面结构表现出明显不同, 反映了单晶铁相变动力学过程的各向异性特征. 由于金属材料包含大量的缺陷, 例如杂质、孔洞和晶界等, 我们曾利用 MD 模拟研究了以孔洞为代表的缺陷对铁冲击相变的影响, 发现孔洞不影响相变机理, 但是会降低相变阈值, 并改变冲击波阵面结构^[7, 8]. 目前, 除了对单晶铁和带有孔洞的单晶样本的研究外^[5-11], 还缺少晶界缺陷对铁冲击相变机理的研究. 仅有的纳米多晶铁冲击相变 MD 模拟^[4]研究了其 Hugoniot 关系和物态方程, 但缺乏铁冲击相变过程中冲击波阵面等宏观信息与晶界微观变化的联系研究. 晶粒大小对材料的力学性质有很大影响, 包括材料强度和塑性变形过程等. 特别是在纳米金属材料中, 由于晶界所占比例高, 对材料动态变形的影响更为显著. 我们先前的研究已经证明了晶界对纳米多晶铝在冲击压缩下的塑性变形机理和冲击波阵面有很大的影响^[12, 13]. 但是到现在为

* 冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室基金(批准号: 9140C6702011104, 9140C6701010902)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: wjzhu@caep.ac.cn

止,晶界(或晶粒大小)如何影响纳米多晶铁的冲击相变,并且在冲击波阵面上如何体现仍然不清楚.

因此,本文采用 MD 方法模拟了冲击压缩下不同晶粒度纳米多晶铁的冲击相变过程.通过分析压缩过程中样本中冲击应力、流应力和粒子速度等宏观信息及样本的相变前后的原子结构图,给出了纳米多晶铁相变过程中波阵面结构和微结构演化的对应关系;并分析了相变微区域中晶界结构、应力、温度对相变的影响,从而初步地说明了晶界对纳米多晶铁冲击相变过程及晶粒大小对冲击波阵面的影响机理.

2. 计算模拟方法

本文用来模拟冲击相变的纳米多晶铁样本(参

表 1 本文模拟样本的详细参数

| 样本 | 晶粒数 | 平均晶粒大小 /nm | 总原子数 | 密度 /% | 尺寸/ nm ³ |
|----|------------|------------|---------|-------|---------------------|
| 1 | 16 × 2 × 2 | 6 | 1130541 | 96.6 | 96 × 12 × 12 |
| 2 | 16 × 2 × 2 | 10 | 5335009 | 96.9 | 160 × 20 × 20 |

纳米多晶铁原子间的相互作用采用 Voter-Chen 的嵌入原子法 (embedded atom method, 简记为 EAM)^[18],该势的形式为

$$E_{\text{tot}} = \sum_i^N F(\rho_i) + \sum_{i<j}^N \phi(r_{ij}), \quad (1)$$

其中 E_{tot} 是总势能,等式右边第 1 项是嵌入能,是 i 原子处于其他所有原子产生的电子密度中的势能;第 2 项是对势,是 i 原子和 j 原子间的相互作用能.我们先前的研究^[7, 8]证明此势能很好的描述单晶铁的常态性质和冲击压缩下的相变.一方面是因为由它得到的相变阈值与实验非常接近,另一方面用它获得的高压物态方程与实验符合得也比较好^[4].因此,这个势函数广泛地用于了 MD 模拟研究铁的冲击相变^[4-11].但是此 EAM 势得到的位错形成能比相变能还要高,因而在模拟过程中无法观察到位错发射带来的塑性行为,所以也无法研究位错发射和传播对相变过程的影响.

3. 计算结果与讨论

图 1 和图 2 分别显示了纳米多晶铁样本 1 和 2 在 $U_p = 700$ m/s 冲击压缩下应力和粒子速度剖面(由 X 方向上 2 倍晶格常数宽盒子内所有原子的速

数见表 1)是用 Voronoi 方法生成^[14],经过弛豫使其接近实验制备的纳米多晶铁样品^[15].通过记录某一晶粒度(10 nm)样本的初始晶粒取向等参数,来生成另一样本(6 nm)的初始结构,从而得到具有相同初始织构的两个样本用来对比模拟研究.样本的最长方向作为冲击方向,并记为 X 方向,其他两个垂直的方向分别记为 Y 和 Z 方向.冲击压缩由活塞法^[8, 16]来实现,也就是在 X 方向的左边取几层原子作为活塞以给定速度 U_p 推动整个样本产生右向速度为 U_s 的冲击波,通过改变 U_p 来得到不同的冲击压缩条件.在 X 方向采用自由边界条件,在 Y 和 Z 方向采用周期性边界条件,以实现冲击压缩的一维应变条件.模拟采用的并行 MD 程序对纳米多晶金属的适用性已经过了广泛的验证^[13, 17],时间步长取 1 fs,初始温度设为 1 K.

度和应力的统计平均得到),其中冲击应力 σ_{xx} 为沿 X 方向的正应力; σ_{vm} 表示剪切应力,其定义为

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

定义粒子速度从 0 上升到 95% 之间的波剖面为冲击波阵面(shock front),如图 1 和图 2 中标号为 1 和 4 黑线之间的部分所示.从图 1(b)和图 2(b)所示的粒子速度剖面可以看出,样本 1 在 14 ps 的冲击波阵面宽度大于其在 8 ps 时的宽度;样本 2 在 24 ps 时的冲击波阵面宽度也大于其在 14 ps 的宽度.但样本 1 的冲击波阵面在 14 ps 与样本 2 在 14 ps 时基本相同.也就是说随着冲击距离(或加载时间)的增大,冲击波阵面发生了展宽,冲击波阵面是不稳定的.这是因为对 $U_p = 700$ m/s 的弱冲击来讲,塑性波要比弹性波慢,因此波阵面会发生展宽.事实上这是弱冲击波的共性,由材料的物态方程所决定,实验上也有类似的结果^[12, 19].我们还模拟了更高 U_p 时的冲击压缩过程,随着 U_p 的升高,塑性波速度加快,最终当 U_p 达到某一临界速度时,塑性波可以追赶上弹性波而形成稳定的冲击波.对比图 1 和图 2 我们发现,样本 1 和 2 在相同的冲击加载条件下宏观应力和粒子速度剖面大体是相同的,虽然由

于样本 1 和 2 的长度不同导致所对比的冲击压缩终态时刻不同,从图 2(b)中可以看出样本 2 在 14 ps 时的冲击波后粒子速度与 24 ps 时基本相同,其波后应力状态也相同. 图 1(b) 也给出了相同的结论,也就是说冲击波后的应力状态与冲击波的传播距离(或传播时间)没有关系. 通过详细的观察我们可以发现,冲击相变完成后样本 2(24 ps 时)的冲击应力要比样本 1(14 ps 时)约平均低 2—3 GPa. 样本 2 的终态冲击应力(约 28GPa)与 Kadau 等^[4]的纳米多晶铁模拟结果基本相同. 通过进一步的分析知道,样本 2 在 14 ps 和 24 ps 时发生相变的原子比例都要比样本 1 在 14 ps 时多(详见表 2),这说明样本 2 相变速率快,更多的 bcc 原子转变成 hcp 结构,使得更多的能量转换为相变潜热,造成终态应力相对样本 1 低. 这是由于样本 1 的晶粒较小导致晶界原子所占的比例大,晶界受到较小的剪切应力(低于相变需要的剪切应力)就会发生滑移等塑性过程. 所以这部分晶界原子不容易发生相变,从而导致发生相变的比例相对于样本 2 较小. 另外样本 2 的冲击波阵面宽度明显比样本 1 宽,一方面是因为冲击波在样本 2 中传播的时间比样本 1 中长,导致冲击波阵面随时间展宽. 另一方面是因为小晶粒晶界主导的塑性运动比大晶粒剧烈,也需要更多的时间,同时需要更多的时间使更多的 bcc 原子转变成 hcp 原子.

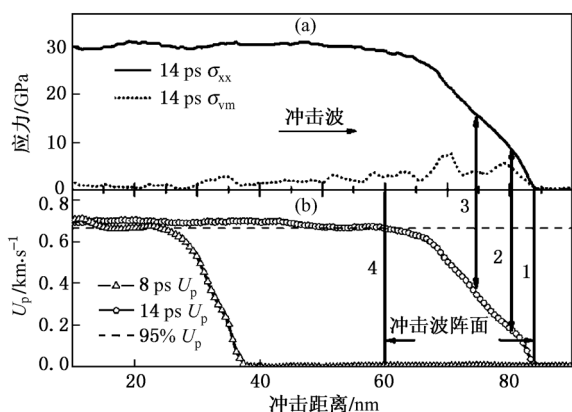


图 1 纳米多晶铁样本 1 经 14 ps 冲击压缩 ($U_p = 700$ m/s) 后的应力剖面 and 不同时刻的粒子速度剖面图. 黑线 1, 4 标示出冲击波阵面的位置, 线 2 表示弹塑性转变点, 线 3 表示晶界导致的塑性与相变之间的转变点

图 1 和 2 中冲击波阵面部分体现了样本 1 和 2 在冲击压缩时的力学响应,我们可以从中看到冲击相变的发生过程. 首先是材料受到压缩时的弹性响应(线 1 到 2 之间), 粒子速度和应力基本线性上

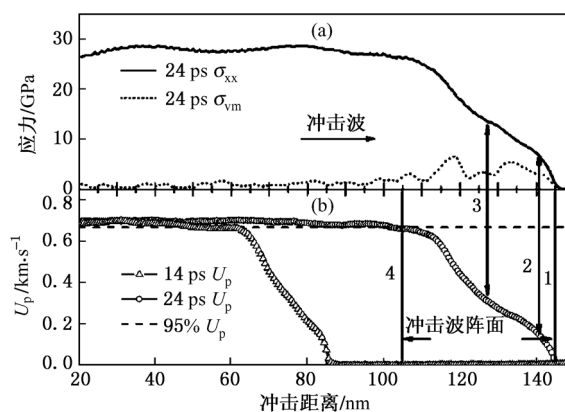


图 2 纳米多晶铁样本 2 经 24 ps, $U_p = 700$ m/s 冲击压缩后的应力剖面 and 不同时刻的粒子速度剖面图. 黑线 1, 4 标示出冲击波阵面的位置, 线 2 表示弹塑性转变点, 线 3 表示晶界导致的塑性与相变之间的转变点

升,两个样本对应的粒子速度和应力基本相同,分别约为 0.1 km/s 和 7 GPa; 然后当剪应力出现第一个拐折时(线 2 所示位置), 样本中的晶界开始滑移或使晶粒转动,形成晶界主导的塑性运动,释放剪切应力使剪应力下降,随着晶界运动的逐渐困难,剪应力又开始上升,样本逐渐硬化;紧接着当剪切应力集中到材料不能承受时,更大规模的晶界变形出现来释放剪应力,对应图中的线 2 到 3 之间;进一步受到冲击压缩时,相变开始成核长大,对应线 3 的位置,随着剪应力的增大、集中,在达到峰值后大规模相变发生,对应线 3 到 4 之间;最后相变基本完成,剪切应力释放完毕后波动很小并保持在一个固定数值左右. 与纳米多晶铝的冲击波阵面^[12, 13]相比,纳米多晶铁中晶界导致的塑性行为与其他塑性过程的区别并不是很明显,这是因为 Voter-Chen 势描述的体心立方结构中位错形成能比相变能量高得多,无法描述铁中位错形成和运动过程. 这种冲击波阵面的分段性在微观的原子结构图上也能体现,如图 3 和图 4 所示,图中标号 1, 2, 3 和 4 的白线与图 1 和图 2 中标记的黑线相对应. 从图 3 和图 4 中我们可以发现,线 1 到 3 之间的区域只有 bcc 和晶界结构的铁原子,这是由于晶界的变形在这种视图下不能清晰地体现,可参考文献[12]中的图 2; 线 3 到 4 之间的前半部分只有少量的 bcc 铁相变为 fcc 铁和 hcp 铁,而线 3 到 4 之间的后半部分有大量的 hcp 和 fcc 铁,反过来却只有少量的 bcc 铁,说明了大规模结构相变的发生. 从图 3 和图 4 我们可以观察到相变完成后的原子结构,一个显著的特点是大量的 fcc 结构原子充当了 hcp 结构的孪晶界,晶界

经过冲击压缩后发生了明显的移动和变形,并有少量新晶界形成,这种晶界塑性变形与未发生冲击相变的纳米多晶铝不同.对比图3和图4,发现两种晶粒大小不同的样本的相变结构也不完全相同,特别是晶界的变形和孪晶结构的大小和位置.通过详细对比图1和图3,或图2和图4中线2到3之间应力剖面 and 原子结构,我们可以确定相变发生在线3附近,所以相变阈值应该在15 GPa左右,这与他人MD

模拟得到的单晶和多晶样本的相变阈值相差不大^[6,7],也与实验得到的相变阈值(13GPa)符合得比较好^[1].研究证明缺陷的存在能降低相变阈值^[7],我们模拟的样本除了包含晶界缺陷外,缺乏实验样品中位错,孔洞等更多的缺陷,这造成了MD得到的相变阈值略比实验值高;另一方面,MD模拟中的高应变率也是得到高相变阈值的一个可能因素.

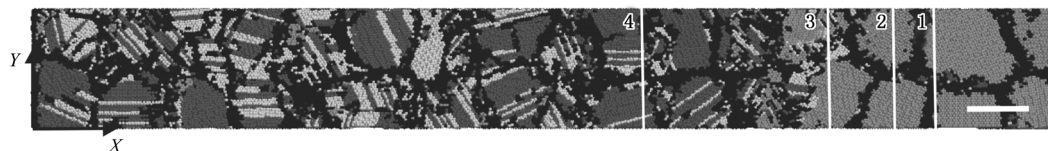


图3 样本1经过14 ps冲击压缩($U_p = 700$ m/s)后的原子结构图,白线1,2,3和4与图1中的黑线相对应,白色线段长为5 nm.黑色代表晶界和其他混乱结构原子,深灰色表示具有hcp结构的原子,白色代表是面心立方fcc结构原子,而浅灰色表示未相变的bcc原子

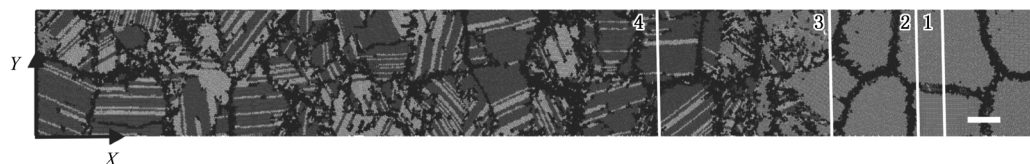


图4 样本2经过24 ps冲击压缩($U_p = 700$ m/s)后的原子结构图,白线1,2,3和4与图2中的黑线相对应,白色线段长为5 nm.原子标识同图3

表2给出了冲击相变发生前后不同结构原子数占总原子数的比例,统计范围从最左侧到线1之间.可以看出样本1在相变发生前晶界所占的比例就接近46%,而样本2的比例较小约为32%.王宏涛等^[20]曾指出纳米多晶材料的晶界体积比可以用 $V_g \approx 2.91\delta/d$ 描述,其中 δ 为晶界厚度, d 为平均晶粒大小.假设晶界厚度为1.2 nm,据此得到样本1的晶界体积比为43.7%,样本2为34.9%,与我们通过键对分析方法得到的原子数比相符合,这也从另一方面说明所模拟的纳米多晶铁样本非常接近真实材料.经过冲击压缩后,结合图3和图4可以看出冲击波阵面后方的bcc原子几乎全部相变为fcc或hcp,未发生相变的bcc原子集中在冲击波阵面内部.而晶界原子的比例在相变前后变化不大,也就是说晶界原子本身并不会相变成为hcp相.相比而言,样本2中发生 $\alpha \rightarrow \epsilon$ 相变的原子比例更大,达到36%,这也是为什么图2(a)中的冲击应力比图1(a)中的稍低的原因,因为使更多的原子发生相变需要更多的能量.

表2 样本1和2冲击压缩相变前后原子所占比例

| 样本 | 时间/ps | hcp/% | fcc/% | bcc/% | 晶界/% |
|----|-------|-------|-------|-------|------|
| 1 | 0 | 1.1 | 0.4 | 52.1 | 46.4 |
| 1 | 14 | 28.6 | 16.4 | 9.1 | 45.9 |
| 2 | 0 | 0.6 | 0.2 | 70.0 | 29.2 |
| 2 | 24 | 36.3 | 18.4 | 13.5 | 31.8 |

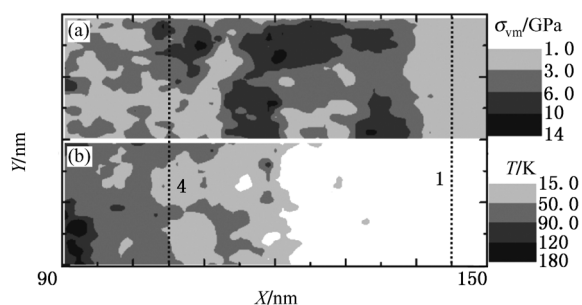


图5 样本2经过24 ps冲击压缩($U_p = 700$ m/s)后在冲击波阵面附近的流应力(a)和温度(b)分布,虚线1和4标示出了冲击波阵面的位置

为了进一步了解晶界在冲击相变过程中的影响,我们详细考察了样本2(图4所显示的XY面)在

冲击波阵面上的流应力和温度场分布,如图 5 所示. 冲击应力和粒子速度的在冲击波阵面上的分布同样可以得到,但其展示的信息同图 2 基本一致,也即材料响应冲击压缩时的阶段性;与纳米多晶铝、铜^[12, 13, 17]中由晶界塑性导致的冲击波阵面分段类似,在此不再赘述. 从图 5(a)中我们可以看出,剪应力在冲击波阵面内相对较高,大多是相变成核的位置. 对比图 4 可以看出 σ_{vm} 特别高的位置有的是晶界,有的是晶粒内部,所以相变可能在晶界附近成核,也可能在晶粒内部成核. 通过连续观察不同时刻的原子结构图发现相变大多在晶界附近成核长大,晶粒内部成核只占少数. 事实上,由于前期的晶界塑性变形可以释放一定的剪切应力,所以在未发生相变的区域内,晶粒内部的剪应力要高于晶界处. 正是由于这种剪应力的不均匀导致了相变更容易在晶界附近成核,所以晶界是诱发相变的有效载荷,正如传统非均匀相变理论认为大多数的材料缺陷诸如位错、孔洞等都是诱发塑性变形的有效载荷. 然而,晶界上的原子大多并不会相变成 hcp 原子,真正发生相变的还是具有正常 bcc 结构的铁原子,这也可以从图 3, 图 4 和表 2 中看到. 所以对纳米材料而言,与传统材料的相变过程有所不同,并不是缺陷比例越高相变比例也越高. 这是因为缺陷在传统材料中相变成核后有足够的空间发展;而对纳米材料,虽然晶界比例高会导致相变成核数量大,但是成核后向晶粒内部发展时,一方面容易与其他位置成核的相变相遇,另一方面由于晶粒本身比较小使得相变很容易就扩展到整个晶粒内部而受到对面晶界的阻碍减缓,直到相变在这个晶界成核并向下一个晶粒扩展. 所以晶粒小的反而相变比例低,相变速率也因晶界的阻碍而降低. 因此,最终的结果是具有正常 bcc 结构原子越多的样本相变比例越高. 相变完成后,剪应力大多被释放,使得冲击波阵面后方($X < 105$ nm)流应力趋于均匀. 相比而言,图 5(b)所示的温度场均匀性比较好,由于冲击压缩前的初始温度设为接近零,冲击后的温度并不是很高,但是伴随冲击过程中的温度升高达到 100 K($X < 105$ nm),甚至更高. 在线 4 和 1 之间并接近 4 的区域温度升高明显,正好对应图 4 中开始发生大规模相变的区域,所以相变刚开始时温度升高不明显. 这说明在这

种初始温度条件下冲击波阵面内影响冲击相变的原因并不包括温度,但大规模冲击相变会引起温度的升高,相变成核却不能带来温度的显著升高,加载强度越高温度升高也越大.

综合对上述两个纳米多晶铁样本的冲击压缩过程分析,我们可以得到纳米多晶铁响应冲击压缩过程的宏观及微观图像. 纳米多晶铁在受到冲击压缩时,先开始弹性响应,然后晶界在积累到一定能量后开始滑移旋转等一系列塑性行为,接着在流应力集中的位置相变开始成核长大,最后大规模相变发生使得几乎全部 bcc 铁相转变为 hcp 和 fcc 铁相. 这在宏观上体现为冲击波剖面的阶段性,在微观上可通过结构分析清晰地观察到相变成核和大规模相变发生,也可以通过微区域的应力和粒子速度分布看到. 晶粒度会明显影响到冲击相变后的比例,晶粒越大相变后的 hcp 相原子所占比例越大. 冲击相变完成后大量的 fcc 结构原子充当了 hcp 新相的孪晶界,并出现少量的新晶界. 由于本文采用的势函数不能描述铁的位错发射等塑性过程,所以冲击波阵面上仅能体现出晶界相关的塑性与相变,与真实铁材料的三波结构存在一定差异,但可以预见如果势函数能准确地描述,则可以得到更为准确的宏观冲击波阵面.

4. 结 论

通过 MD 模拟研究揭示了纳米多晶铁冲击相变过程中的波剖面信息,并使用键对分析方法分析了原子微结构的演化规律. 模拟结果显示,纳米多晶铁的冲击波剖面体现了材料对冲击压缩的响应机理,经历完弹性变形后,冲击波阵面上随应力的增加先是晶界开始变形,然后在流应力集中的位置相变成核最后发生大规模的相变使 bcc 铁转变为 fcc 和 hcp 铁. 微结构的演化也能体现出这一过程,并发现 fcc 原子大量充当 hcp 新相的孪晶界. 晶粒大小也会影响到铁的相变结果,晶粒越大相变为 hcp 相的比例越大,消耗的能量越大,造成相变后的冲击应力相比较低. 研究结果有助于在原子尺度上深刻理解纳米材料的冲击波阵面形成原因,建立铁冲击相变的宏观响应和微观机理联系.

- [1] Bancroft D, Peterson E L, Minshall S 1956 *J. Appl. Phys.* **27** 291
- [2] Asay J R, Chhabildas L C 2003 *High-Pressure Shock Compression of Solids VI* edited by Horie Y, Davison L, Thadhani N N (New York: Springer)
- [3] 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
- [4] 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
- [5] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2002 *Science* **296** 1681
- [6] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2005 *Phys. Rev. B* **72** 064210
- [7] Cui X L, Zhu W J, He H L, Deng X L, Li Y J 2008 *Phys. Rev. B* **78** 024115
- [8] 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、李英骏、贺红亮 2006 物理学报 **55** 5545]
- [9] Shao J L, Qin C S, Wang P 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1936 (in Chinese) [邵建立、秦承森、王 裴 2009 物理学报 **58** 1936]
- [10] Shao J L, Qin C S, Wang P, Zhou H Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5389 (in Chinese) [邵建立、秦承森、王裴、周洪强 2007 物理学报 **56** 5389]
- [11] Shao J L, Qin C S, Wang P, Zhou H Q 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1254 (in Chinese) [邵建立、秦承森、王 裴、周洪强 2008 物理学报 **57** 1254]
- [12] Ma W, Zhu W J, Jing F Q 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 121903
- [13] Ma W, Zhu W J, Chen K G, Jing F Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 016107 (in Chinese) [马 文、祝文军、陈开果、经福谦 2011 物理学报 **60** 016107]
- [14] Chen D 1995 *Comput. Mater. Sci.* **3** 327
- [15] Ma W, Zhu W J, Zhang Y L, Chen K G, Jing F Q, Deng X L 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 4781 (in Chinese) [马 文、祝文军、张亚林、陈开果、邓小良、经福谦 2010 物理学报 **59** 4781]
- [16] Deng X L, Zhu W J, He H L, Wu D X, Jing F Q 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4767 (in Chinese) [邓小良、祝文军、贺红亮、伍登学、经福谦 2006 物理学报 **55** 4767]
- [17] Chen K G, Zhu W J, Ma W, Deng X L, He H L, Jing F Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1225 (in Chinese) [陈开果、祝文军、马 文、邓小良、贺红亮、经福谦 2010 物理学报 **59** 1225]
- [18] Harrison P, Voter A F, Chen S P 1989 in *Atomic Simulation of Materials* Edited by Vitek V, Srolovitz D J (New York: Plenum Press)
- [19] Gupta Y M, Winey J M, Trivedi P B, Lalone B M, Smith R F, Eggert J H, Collins G W 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 036107
- [20] Wang H T, Yang W 2004 *Adv. Mech.* **34** 314 (in Chinese) [王宏涛、杨 卫 2004 力学进展 **34** 314]

Shock-induced phase transformation in nanocrystalline iron*

Ma Wen¹⁾²⁾ Zhu Wen-Jun^{2)†} Zhang Ya-Lin³⁾ Jing Fu-Qian¹⁾²⁾

1) (*Department of Physics, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

3) (*Institute of Computer Application, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

(Received 21 December 2010; revised manuscript received 24 February 2011)

Abstract

The shock-induced phase transformation of nanocrystalline iron with different grain sizes is investigated by using molecular dynamic simulations. The critical shock stress for shock-induced phase transformation (from body-cubic centered α phase into hexagonal-close packed ϵ phase) of nanocrystalline irons is about 15 GPa. Under shock compression, the nanocrystalline irons first experience elastic deformation, then plastic deformation purely caused by grain boundaries, after that phase transformation nucleated mostly at the grain boundaries, and finally nucleation areas expanding into the entire samples. These processes can be reflected by the stress profile and the particle velocity profile, and also be distinguished by local atomic structures analyses in the corresponding areas. The microstructures of the shocked samples consist of grain boundary and hexagonal-closed packed new phase with the face-cubic centered atoms as the twin boundary. The grain size obviously influences the deformation of grain boundary and the microstructure after shock compression, and turns to change the profiles of stress or velocity. The mechanism is primarily analyzed.

Keywords: phase transformation, nanocrystalline iron, shock wave, molecular dynamics

PACS: 64.70.Nd, 61.72.Mm, 62.50.-p, 02.70.Ns

* Project supported by the Science and Technology Foundation of National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, China (Grant Nos. 9140C6702011104, 9140C6701010902).

† Corresponding author. E-mail: wjzhu@caep.ac.cn