

预应力对多晶铁冲击行为影响的微观模拟研究

任国武 张世文 范诚 陈永涛

Influence of prestress on shock behavior of polycrystalline iron via atomistic simulations

Ren Guo-Wu Zhang Shi-Wen Fan Cheng Chen Yong-Tao

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 196203 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.196203

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.196203>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I19>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

空位缺陷和相变对冲击压缩下蓝宝石光学性质的影响

Effects of vacancy point defects and phase transitions on optical properties of shocked  $\text{Al}_2\text{O}_3$

物理学报.2016, 65(14): 146201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.146201>

非对称冲击-卸载实验中纵波声速的特征线分析方法

Characteristic method to infer the high-pressure sound speed in a nonsymmetric impact and release experiment

物理学报.2016, 65(11): 116201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.116201>

冲击加载下液态水的结构相变

Structural transformation of liquid water under shock compression condition

物理学报.2014, 63(12): 126201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.126201>

钒的高压声速测量

Sound velocities of vanadium under shock compression

物理学报.2014, 63(2): 026202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.026202>

纳米多晶铜中冲击波阵面的分子动力学研究

Molecular dynamics investigation of shock front in nanocrystalline copper

物理学报.2013, 62(3): 036201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.036201>

# 预应力对多晶铁冲击行为影响的微观模拟研究\*

任国武 张世文 范诚 陈永涛†

(中国工程物理研究院流体物理研究所, 绵阳 621999)

(2016年4月6日收到; 2016年7月19日收到修改稿)

冲击加载铁动力学响应是当前冲击波领域金属材料塑性和相变行为研究最为关注的焦点之一. 本文采用分子动力学模拟方法开展预应力作用下冲击加载多晶铁的动力学行为研究. 模拟结果表明, 随着预应力的增加, 导致弹塑转变应力 (Hugoniot 弹性极限) 和冲击波速度提高, 符合已有的理论分析结果. 微观晶体结构表征则发现较大的预应力导致剪应力大于屈服应力, 塑性弛豫时间缩短, 加快多晶铁  $\alpha \rightarrow \epsilon$  相转变. 进一步通过与平面及柱壳纯铁冲击加载获得的自由面速度剖面对比分析, 证实了模拟结果.

**关键词:** 预应力, 多晶铁, 塑性, 相变

**PACS:** 62.50.Ef, 62.20.F-, 64.70.K-, 31.15.xv

**DOI:** 10.7498/aps.65.196203

## 1 引言

冲击加载导致金属材料的变形、相变以及层裂是冲击波物理领域基础研究的焦点, 其中金属铁是一种被广泛研究的代表性材料, 它在地球物理学以及工业应用中也是较为常见的. 已有的冲击实验研究<sup>[1-3]</sup>表明铁在大约 13 GPa 时将发生  $\alpha$  相 (BCC) 到  $\epsilon$  相 (HCP) 相的转变, 在一维平面冲击加载测得的自由面速度剖面上呈现典型的三波结构: 弹性波、塑性波和相变波. 相应的三波结构及微观物理机制也已被基于原子经验相互作用势的分子动力学 (MD) 模拟所再现, 比如 Gunkelmann 等<sup>[4-6]</sup> 和 Wang 等<sup>[7,8]</sup> 分别改进能准确描述铁弹塑转变及塑性到相变的经验作用势, 获得冲击加载单晶或多晶铁塑性与相变的物理机制关联, 系统地给出铁在相变前与塑性有关的晶体滑移特征. 然而注意到, 不论这些实验或 MD 的开展都仅限于一维平面应变条件.

随着加载技术的发展, 近年来冲击动力学行为研究已从一维平面加载扩展至多维加载状态, 比如 Kaul 等<sup>[9]</sup> 利用爆磁压缩装置 (HEMG) 开展了铝

柱壳的层裂损伤实验研究. 对于金属铁, 1987 年 Murr<sup>[10]</sup> 在研究 304 不锈钢时提到多轴的加载比单轴产生更多的相变马氏体. 内爆压缩金属铁柱或球壳<sup>[11,12]</sup> 的回收样品微观表征发现该样品中的孪晶比例比一维平板中的更为丰富. 从这些实验结果可以看出, 复杂应力状态对铁的塑性及相变行为有着重要的影响. 从力学状态来讲, 一维平面应变加载只针对的是主应力加载, 但对于柱面或球面加载, 不仅主应力变化, 偏应力也发生着变化, 但是当前实验上要精确且重复地执行非一维平面冲击加载是极其困难的. 针对上述此情形, 近来张世文等<sup>[13,14]</sup> 理论上提出了球面加载可近似为施加径向预应力后的平面应变加载, 并已通过预应力 LY12 铝合金样品冲击实验证实了该方法, 但还暂未应用到铁相变研究.

本文基于张世文等<sup>[13,14]</sup> 提出的复杂应力状态下金属冲击行为研究的思路, 利用分子动力学方法开展预应力作用下多晶金属铁的冲击变形及相变行为研究. 模拟着重于探索预应力对 Hugoniot 弹性极限、塑性以及相变行为的影响. 研究结果有助于对柱或球面加载金属铁相变的微观物理认识.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11272006, 11272297) 和中物院发展基金 (批准号: 2014B0201018) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: 13404005190@163.com

## 2 模拟方法

开源的LAMMPS程序<sup>[15]</sup>被用于实施整个动力学模拟. 铁的相互作用势选择由Gunkelmann等<sup>[5]</sup>修改Ackland早年发展的Finnis-Sinclair (FS)作用势. 修改后的作用势给出 $\alpha \rightarrow \epsilon$ 相转变压力为13.95 GPa且较准确地描述铁发生的塑性和相变行为. 利用该作用势Gunkelmann等<sup>[6,7]</sup>已开展多晶铁冲击加载后导致的位错或孪晶成核以及相变份额与冲击强度的关系, 符合实验诊断或微观表征结果.

整个模拟的多晶体系通过Voronoi方法构建, 有60个晶粒, 空间尺度为 $14 \times 14 \times 70 \text{ nm}^3$ , 原子数总共约120万个. 冲击加载方向为Z方向, X, Y为周期性方向, 同时也是施加预应力的方向. 为平衡该体系, 首先应用共轭梯度法实现能量最小化, 然后利用高温退火方法, 控制整个多晶体系的温度由610 K降低到10 K, 得到的微观结构如图1所示. 低温的选择是提高对塑性特征的识别, 弱化温度效应. 然后分别沿X和Y方向同时施加相同的预应力P, 平衡时间为50 ps, 导致模拟体系沿X和Y方向同时收缩. 这种方法类似于实验上施加的径向预应力<sup>[13]</sup>, 不同大小的预应力对应为不同的径向应变, 在球面加载条件下代表着不同的球面半径. 最终利用动量镜像方法实现对多晶铁样品沿Z方向的冲击加载. 为避免预应力对初始微观结构的影响, 预应力P选择为0, 0.5, 0.75和1.0 GPa, 远小于利用该作用势给出的Hugoniot弹性极限约10 GPa. 冲击加载过程采用非平衡动力学方法, 加载速度 $U_p = 0.6 \text{ km/s}$ 并保持恒定, 已足够导致铁发生相变, 冲击波前沿呈现三波结构特征.

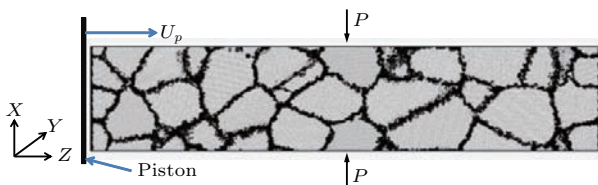


图1 退火多晶铁模型图

Fig. 1. Schematic model of annealed polycrystalline iron.

模拟结果分析主要是通过划分整个模型沿Z方向为多个小盒子, 分别平均计算每个盒子的物理量, 以此得到这些物理量沿加载方向在

某个时刻的空间剖面. 在此模拟中主要计算粒子速度 $v_z$ 、纵向应力 $p_{zz}$ 和剪切应力 $p_{\text{shear}}$ , 其中 $p_{\text{shear}} = 1/2 * (p_{zz} - 0.5 * (p_{xx} + p_{yy}))$ . 剪切应力 $p_{\text{shear}}$ 在不考虑非对角项的情形下近似等于von-Mises应力. 局域原子结构图主要利用可视化软件OVITO<sup>[16]</sup>的CNA方法, 通过计算每个原子周围的近邻数判断在加载阶段整个体系的HCP, FCC, BCC以及其余原子, 进一步计算相变比例等物理量. 需要提醒的是, 由于该作用势给出的HCP或FCC结构焓接近, 导致高压作用下它们基本同时形成, 为此, 这里的相比统计是指所有的HCP加上FCC原子, 统称为密堆积原子(CP), 其中FCC是HCP相的堆垛层错, 在文献<sup>[11]</sup>中已有说明.

## 3 模拟结果与分析

平衡后施加预应力P得到的沿垂直于加载方向的应变 $\epsilon$ 以及所有CP原子占整个体系的比例 $f_{\text{equib}}$ 如表1所列. 在冲击加载前初始应变最大为 $\epsilon = 0.7\%$ , 基于Gunkelmann<sup>[4]</sup>给出的应力-应变关系, 此时沿X和Y方向的变形仍处于弹性范围, 不会出现塑性特征, 因此统计的CP原子比例非常小, 最大为 $f_{\text{equib}} = 0.54\%$  ( $P = 1.0 \text{ GPa}$ ), 注意到有如此少量CP原子数主要来源于晶界. 因此, 通过统计CP原子数 $f_{\text{equib}}$ 表明施加的预应力对冲击加载前的多晶结构几乎没有影响.

图2给出了 $t = 8.0 \text{ ps}$ 时刻施加不同预应力后沿冲击加载方向的速度、纵向应力和剪切应力的空间剖面图. 对于预应力 $P = 0 \text{ GPa}$ , 从速度剖面上来看呈现两个拐点, 对应的速度分别约为0.15 km/s和0.45 km/s, 符合模拟结果<sup>[5]</sup>. 这些拐点表明多晶铁发生从弹性、塑性直到相变过程的转变, 即实验所确认的三波结构特征. 由于相变波速小于塑性波速, 又小于弹性波速, 导致冲击波阵面前沿展宽. 随着施加的预应力增加, 从图2(a)给出的速度剖面来看, 冲击波阵面速度也在增加, 在表1中给出了弹性段的冲击波速度 $S_{\text{elastic}}$ . 预应力 $P = 0 \text{ GPa}$ 时, 得到的 $S_{\text{elastic}} = 6.17 \text{ km/s}$ , 稍微高于实验结果. 当 $P = 1.0 \text{ GPa}$ 时,  $S_{\text{elastic}}$ 达到了6.8 km/s. 这个趋势符合基于冲击波理论导出的弹性前驱波速度随着预应力增加而增加以及实验验证结果<sup>[13]</sup>. 在 $P = 0, 0.5$ 和 $0.75 \text{ GPa}$ 时, 塑性到相变的拐点差异不大, 三波结构特征还较明显, 波阵

面展宽, 但是  $P = 1.0$  GPa 时, 冲击波前沿变得陡峭, 源于相变冲击波追赶上了塑性波.

图 2(b) 给出了纵向应力  $p_{zz}$  分布. 随着预应力的增加, 弹塑转变压力  $P_H$  (弹性 Hugoniot 极限) 与图 2(a) 相对应的第一拐点逐渐增加, 如表 1 所列. 在  $P = 0$  GPa 时  $P_H = 7.92$  GPa, 近似地符合在小尺度多晶铁样品实验测得的 5.0 GPa, 差异的原因在于微观模拟上加载应变率远高于实验情形. 但是随着预应力增加,  $P_H$  也在增加. 由于 Hugoniot 弹性极限代表着弹塑转变发生时的压力, 也就是位错从晶界处开始成核的阈值, 因此  $P_H$  的增加, 意味着在预应力作用下位错成核需要更高的 Hugoniot 弹性极限. 对于塑性到相变的转变压力, 该作用势给出的值为大约 23 GPa, 在图 2(b) 也可看出, 对  $P = 0, 0.5$  和  $0.75$  GPa, 这个转变压力变化很小, 但是当  $P = 1.0$  GPa 时, 该值与相变压力值相当, 因此导致相变波追赶上了塑性波, 整个冲击波前沿变得陡峭. 需要说明的是塑性到相转变的压力远大于实验给出的 13 GPa, 主要是源于模拟的时间和空间尺度远小于实验情形.

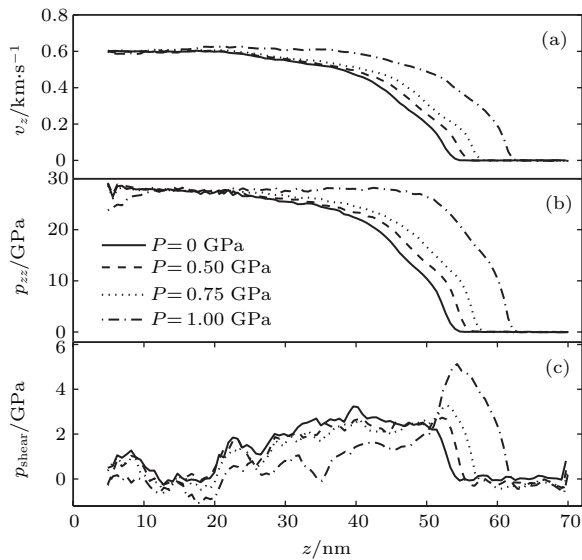


图 2 不同预应力下的剖面图 (a) 速度  $v_z$ ; (b) 纵向应力  $p_{zz}$ ; (c) 剪切应力  $p_{shear}$   
 Fig. 2. Profile plots under various prestressed conditions: (a) Velocity  $v_z$ ; (b) longitudinal stress  $p_{zz}$ ; (c) shear stress  $p_{shear}$ .

与塑性响应有关的剪切应力  $p_{shear}$ , 展示在图 2(c) 中, 靠近冲击波前的第一峰值代表着弹塑转变发生的位置, 因此预应力的增加导致该位置前移且峰值也增加, 表明位错成核容易形成且需要更高的剪切应力, 但是在塑性区域的宽度上,

$P = 1.0$  GPa 小于另外三种情形, 说明塑性弛豫时间很短. 在  $z = 40$  nm 左右的位置, 代表塑性流动的剪切应力小于另外三种情形, 表明这些位置的多晶结构已进入实现  $\alpha \rightarrow \epsilon$  相转变, 源于纵向压力  $p_{zz}$  的值仍然达到了相变压力值. 这在后续给出的相变份额随时间演化的图中可以看出.

表 1 不同预应力作用下给出加载前的变形  $\epsilon$ 、相变比例  $f_{equib}$  以及加载后弹性段的冲击波速  $S_{elastic}$ , Hugoniot 弹性极限  $P_H$

Table 1. Under various prestressed conditions, deformation strain  $\epsilon$ , phase transition ratio  $f_{equib}$ , shock speed  $S_{elastic}$  and Hugoniot elastic limit  $P_H$  are shown.

$P/\text{GPa}$	$\epsilon/\%$	$f_{equib}/\%$	$S_{elastic}/\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$	$P_H/\text{GPa}$
0	0	0.46	6.2	7.92
0.5	0.31	0.48	6.4	9.661
0.75	0.51	0.52	6.5	10.91
1.0	0.70	0.54	6.8	17.87

图 3 展示与图 2 同一时刻对应的微观结构图. 利用上述图 2 给出的弹塑转变及塑性到相转变拐点, 在图 3 中可发现: (a) 弹性段内晶体结构保持为 BCC; (b) 超过 Hugoniot 弹性极限进入塑性段, 有少量起源于晶界的塑性位错生成; (c) 超过相变压力点整个晶粒内部的 BCC 原子 ( $\alpha$  相) 基本转变为 CP 原子, 以 HCP 原子 ( $\epsilon$  相) 为主. 塑性位错或相变的发生导致剪切应力  $p_{shear}$  急剧下降, 如图 2(c) 所示. 因此塑性位错的发生先于相变行为. 然而随着预应力的增加, 弹性段的区域基本没有变化, 但是塑性段的区域明显变窄, 导致多晶铁较快地发生相转变, 如图 3(d) 中所示的相变区域宽度.

在图 1 模型中选择一个片层区域, 统计该区域内的相变原子比例随时间的演化, 如图 4 所示. 初始时刻, 该片层的 BCC 比例大约为 0.76. 从图 4 可以看出, 随着时间的增加, 相变原子的比例  $f_{cp}$  增加的趋势为: 缓慢-迅速-缓慢, 最终到达约 0.55. 预应力的增加导致冲击波传播速度加快, 相转变过程提前. 但是很明显当预应力  $P = 1.0$  GPa 时, 相比例  $f_{cp}$  上升速度更快, 但最终相比例也趋于 0.55. 对于较小的预应力, 相转变时间即  $f_{cp}$  从 0 到最大值 0.55 为 10 ps, 然而较大预应力 ( $P = 1.0$  GPa) 相转变时间变短, 大约 7 ps. 因此随着预应力的增加, 从相变原子比例随时间的变化可以看出, 相转变时间缩短, 相转变速度加快, 但最终的相比例是相同的.

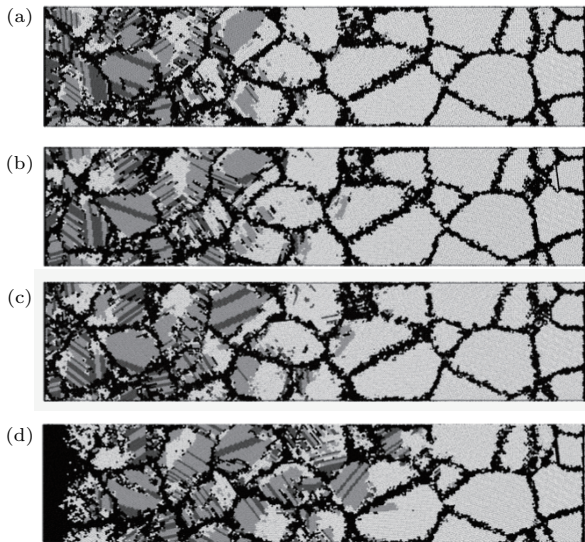


图3 时间  $t = 8.0$  ps 时刻不同预应力的微观结构图 (a)  $P = 0$  GPa; (b)  $P = 0.5$  GPa; (c)  $P = 0.75$  GPa; (d)  $P = 1.0$  GPa; 其中, 浅灰代表 HCP 原子, 深灰代表 FCC 原子, 白色代表 BCC 原子, 黑色代表晶界和无序原子

Fig. 3. Microscopic views with various prestresses at  $t = 8.0$  ps: (a)  $P = 0$  GPa; (b)  $P = 0.5$  GPa; (c)  $P = 0.75$  GPa; (d)  $P = 1.0$  GPa. Grey is for HCP atoms, deep grey is for FCC atoms, white is for BCC atoms and black is for grain boundary and disordered atoms.

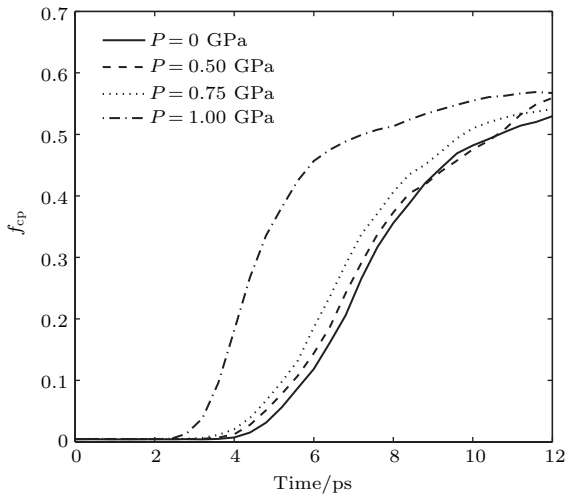


图4 不同预应力下密堆原子 (CP) 的比例  $f_{cp}$  随时间的变化

Fig. 4. Phase transition ratio  $f_{cp}$  is changed with the time under different prestresses.

从以上展示的结果来看, 预应力  $P$  从 0.75 GPa 到 1.0 GPa 时与从 0.5 GPa 到 0.75 GPa 时, 冲击波前沿及相转变特征存在较大的差异. 尽管压力值差只有 0.25 GPa 以及冲击加载前相比比例统计差异也很小, 主要的原因是每个晶粒都受到纵向和

切向应力作用. 已有动态加载时  $\alpha \rightarrow \varepsilon$  相变模型<sup>[11]</sup> 预测  $\varepsilon$  相来源于  $\alpha$  相的压缩和切向移动. 而这里模拟形成稳定相时冲击加载方向的压力达到了 28 GPa, 切应力在  $P = 1.0$  GPa 时已达到了 5.1 GPa, 大于该作用势给出的位错释放 von-Mises 应力 (3.22 GPa<sup>[5]</sup>), 因此导致预应力  $P = 1.0$  GPa 时铁的塑性弛豫时间短, 从而更快地发生  $\alpha \rightarrow \varepsilon$  相转变. 然而预应力  $P = 0, 0.5$  和 0.75 GPa 时的剪切应力靠近 von-Mises 应力, 塑性弛豫时间较长, 如图 2(c) 所示. 但是也能看出预应力的增加并不导致 Hugoniot 弹性极限线性增加, 基于弹性理论建立 Hugoniot 弹性极限与预应力呈线性关系<sup>[13]</sup> 只适合于较小的预应力.

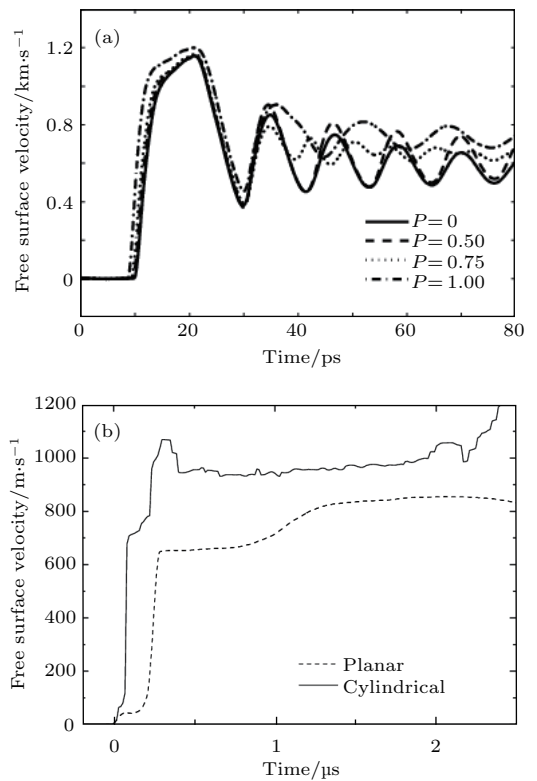


图5 自由面速度剖面 (a) 不用预应力作用下的模拟结果; (b) 实验测得的平面和柱面纯铁冲击加载后结果

Fig. 5. Free-surface velocity profiles: (a) Simulations conducted here; (b) experimentally planar and cylindrical shock loading.

进一步地, 我们给出了不同预应力条件下的冲击波自由面速度, 如图 5(a) 所示. 从该图可以看出, 随着预应力的增加, 铁发生相变的速度拐点也在逐渐增加. 图 5(b) 则展示了平面<sup>[3]</sup> 和柱面冲击加载纯铁后测得的自由面速度剖面, 呈现标准的三波结构特征. 可以很清晰地看出柱面加载导致了弹塑转变, 相变速度拐点也增加, 定性符合数

值模拟结果. 但模拟给出相变处的速度值大于实验值, 原因在于目前采用的作用势给出了较高相转变压力.

## 4 结 论

本文针对非一维平面冲击加载下金属铁的冲击动力学行为, 利用球面加载近似为施加径向预应力后平面加载的思路, 开展了预应力对冲击加载多晶铁的塑性及相变行为的微观动力学模拟. 模拟结果表明, 随着预应力的增加冲击波前速度、Hugoniot 弹性极限等也相应地增加. 与微观结构的组合分析表明, 在此情形下位错从晶界处的成核需要更高的冲击压力, 但也意味着塑性弛豫时间变短, 导致铁更容易发生  $\alpha \rightarrow \varepsilon$  相转变. 进一步通过与实验测得的平面和柱面纯铁冲击加载后自由面速度对比分析, 定性地证实了模拟结果. 这些模拟给出的微观分析为非一维平面冲击加载铁的回收样品微观表征提供了指导.

## 参考文献

- [1] Barker L M, Hollenbach R E 1974 *J. Appl. Phys.* **45** 4872
- [2] Jensen B J, Gray III G T, Hixson R S 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 103502
- [3] Chen Y T, Tang X J, Li Q Z 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 046401 (in Chinese) [陈永涛, 唐小军, 李庆忠 2011 物理学报 **60** 046401]
- [4] Gunkelmann N, Bringa E M, Kang K, Ackland G J, Ruestes C, Urbassek H M 2012 *Phys. Rev. B* **86** 144111
- [5] Gunkelmann N, Bringa E M, Tramontina D R, Ruestes C J, Suggit M J, Higginbotham A, Wark J S, Urbassek H M 2014 *Phys. Rev. B* **89** 140102
- [6] Gunkelmann N, Tramontina D R, Bringa E M, Urbassek H M 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 085901
- [7] Wang K, Xiao S, Deng H, Zhu W, Hu W 2014 *Int. J. Plast.* **59** 180
- [8] Wang K, Zhu W, Xiao S, Chen K, Deng H, Hu W 2015 *Int. J. Plast.* **71** 218
- [9] Kaul A M, Ivanovsky A V, Atchison W L, et al. 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 023516
- [10] Murr L E 1987 *Metallurgical Effects of Shock and High-strain-rate Loading: Materials as High Strain Rates* (Amsterdam: Elsevier) p34
- [11] Wang S J, Sui M L, Chen Y T, Lu Q H, Ma E, Pei X Y, Li Q Z, Hu H B 2013 *Sci. Rep.* **3** 1086
- [12] Xiao B, Chen Y T, Sui M L 2015 *J. Chin. Electr. Microsc. Soc.* **34** 401 (in Chinese) [肖博, 陈永涛, 隋曼龄 2015 电子显微学报 **34** 401]
- [13] Zhang S W, Liu C L, Li Q Z, Liu Q 2008 *Chin. J. Theor. Appl. Mech.* **40** 535 (in Chinese) [张世文, 刘仓理, 李庆忠, 刘乔 2008 力学学报 **40** 535]
- [14] Zhang S, Liu C, Ren G, Li Q 2015 *Combust. Expl. Shock Waves* **51** 1
- [15] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [16] Stukowski A 2000 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012

# Influence of prestress on shock behavior of polycrystalline iron via atomistic simulations\*

Ren Guo-Wu Zhang Shi-Wen Fan Cheng Chen Yong-Tao<sup>†</sup>

(Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China)

( Received 6 April 2016; revised manuscript received 19 July 2016 )

## Abstract

Plasticity behavior and phase transition of metal Fe subjected to shock loading have attracted considerable attention in shock physics community, in particular for underlying relationship between them. Experimental examinations and atomistic simulations on shocked Fe have displayed a three-wave structure: elastic wave, plastic wave and transformation wave. However, these studies are primarily limited to the one-dimensional planar case. Recently, owing to the rapid development of experimental techniques, investigating dynamic property of shocked metal has extended to the multi-dimensional loading conditions, such as cylindrical or spherical shocks. In this regard, fruitful findings are achieved, for example, twinning ratio in polycrystalline Fe under implosive compression is found to be much higher than that under planar shock, implying that the the complex stress state plays a critical role.

In this paper, we explore the effects of prestress on plasticity and phase transition of shocked polycrystalline iron. The imposed prestress normal to the impact direction in one-dimensional planar shocking represents the varying deviatoric stress, and does not nearly affect the principal stress. The utilized empirical potential for iron could describe the plasticity dislocation and phase transition very well. The simulations show that as the prestress increases, the shock speed at elastic stage and Hugoniot elastic limit increase, which is in accordance with the theoretical analyses based on shock wave theory and experimental measurement. Meanwhile the plastic wave speed increases more quickly and catches up with the transformation wave more easily, resulting in a steep shockwave front. Atomistic snapshots show that plasticity dislocation stemming from the grain boundary precedes phase transition, where most of BCC atoms are transformed into the HCP atoms and shear stress significantly decreases. Further observations from these images find that plastic zone becomes narrower with increasing prestress, representing a shorter plastic relaxation time, which accelerates the completion of  $\alpha \rightarrow \varepsilon$  phase transition. This rapid phase transition process is also indicated by quantitatively evaluating the ratio of transitioned closed packed atoms as a function of evolution time. The origin based on the atomistical prediction model of Fe phase transition is attributed to the fact that higher prestress gives rise to the larger von-Mises stress for easier dislocation emission while lower one cannot. But the final transformed atoms are independent of prestress. Additionally, the measured free surface velocity profiles from planar and cylindrical impact loading validate the simulations conducted here. These findings will help to understand experimentally the microscopically dynamic evolution of Fe, imposed by complex stress state.

**Keywords:** prestress, polycrystalline iron, plasticity, phase transition

**PACS:** 62.50.Ef, 62.20.F-, 64.70.K-, 31.15.xv

**DOI:** 10.7498/aps.65.196203

\* Projected supported by the National Science Foundation of China (Grant Nos. 11272006, 11272297) and the Science and Technology Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2014B0201018).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: 13404005190@163.com