

一维应变加载下单晶铁结构转变的微观研究^{*}

邵建立[†] 何安民 秦承森 王 裴

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(2008 年 6 月 2 日收到, 2008 年 9 月 11 日收到修改稿)

采用嵌入原子势和分子动力学方法, 模拟了单晶铁在一维应变条件下由体心立方(bcc)转变为六角密排(hcp)结构的微观过程. 当应变加载至相变临界值时, hcp 相开始均匀形核并沿{011}晶面长大为薄片状体系. 弹性常数 C_{31} 和 C_{32} 在相变前被逐渐硬化, C_{33} 则在相变前出现软化行为; 当体系完全相变后, 上述各弹性常数显示开始随体积压缩而迅速硬化. 温度效应对晶格具有软化作用, 可削弱 C_{33} 的硬化和软化过程. 样品在压缩过程可出现孪晶结构, 孪晶结构使晶格发生剪切变形. 混合相中, hcp 相势能比 bcc 相高, 最大剪应力方向与 bcc 相反向; 系统的偏应力与 hcp 相质量分数近似呈线性关系.

关键词: 结构转变, 分子动力学, 一维应变

PACC: 6470K, 6250, 7115Q

1. 引 言

金属材料在一定的温度和压力条件下, 其内部组织或结构会发生变化, 从一种固态相转变为另一种固态相或多种固态相, 这被称为固态相变. 从热力学角度看, 金属的固态相变是某一固相在给定的热力学条件下通过结构或成分变化使体系自由能降低的过程. 固态相变可分为以下三种基本变化: 结构变化、成分的变化和有序程度的变化. 相变可引起材料宏观的物理及力学性能的突变, 对材料力学响应具有重大影响. 但相变现象是一个涉及物理、力学以及材料科学的跨学科问题, 也是一个从微观形核发展至宏观性质突变的跨尺度问题. 因此, 相变的实验观测和理论研究都是十分困难的.

铁在外界压力超过约 13GPa 时可发生典型的体心立方(bcc)结构向六角密排(hcp)结构的相变, 而且铁在地球物理研究中有着特殊地位, 因此其相变研究一直是高压物理和地球物理领域备受关注的课题. 1956 年, Bancroft 等^[1]首次在冲击实验中观察到铁的相变现象; 1962 年 Johnson 等^[2]由冲击实验给出了铁在压力-温度相图中的三相点; 随后 Jamieson 等^[3]根据 X 射线衍射的测量提出铁的高压相为 hcp

结构. 后来, 人们进行了大量关于铁的实验和理论研究^[4-11], 对铁相变的宏观行为有了较多了解. 在近年来的一些工作中, Boettger 和 Wallace^[9]给出了铁冲击相变过程的亚稳态及动力学行为的唯象模型; Yano 和 Horie^[10]使用二维离散元方法在晶粒尺度上研究了准静态加载和冲击加载下铁的相变行为; Bhattacharya 等^[11]分析了晶体的对称性与马氏体相变可逆性的关系.

然而, 人们对铁相变的微观机理及转变途径等问题的认识还不十分清楚, 还难以对相变的形核及动力学过程进行准确的理论描述. 随着近年来计算机技术的飞速发展, 分子动力学(MD)在科学研究中得到了广泛应用. Kadau 等^[12, 13]采用 MD 实现了铁冲击相变的微观模拟, 给出了铁冲击相变的微观图像. 2005 年 Kalantar 等^[14]用 X 射线衍射的方法成功地观察了铁的相变过程, 证明了 Kadau 等 MD 模拟结果的正确性. 2007 年 Kadau 等^[15]又对纳米多晶铁进行了冲击加载模拟, 相关结果与实验符合很好. 此外 Caspersen 等^[16]基于多尺度模型研究了剪应力对相变的贡献, 邵建立等^[17, 18]采用 MD 方法对单晶铁相变的动力学性质做了一些分析. 上述研究工作丰富了人们对结构相变微观本质和过程的认识, 同时也表明, 基于原子层次的确定性模拟的 MD 方法,

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

[†] E-mail: shao_jianli@iapcm.ac.cn

在探讨相变微观机制方面是目前较为有效的一种数值手段。

本文采用 MD 方法对单晶铁沿 [001] 晶向应变加载下 bcc-hcp 结构相变进行了模拟。揭示了相变在微观层次成核规律和形态特征；并对相变前的模量软化及温度效应、混合相中势能和剪应力的分布以及 hcp 相质量分数和力学量的关系等进行了分析，得到一些有意义的结论。

2. 势函数与模拟方法

2.1. 势函数

对于经典 MD，系统中每个粒子的运动都遵守牛顿力学定律。原子间相互作用势是进行 MD 模拟的重要基础，直接关系到模拟结果的正确性。Daw 和 Baskes 基于密度泛函理论提出了嵌入原子法 (EAM)^[19,20]，采用此方法可将任意排列的原子系统的总能量表示为

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

式中等号右侧 $\phi(r_{ij})$ 为原子 i 与 j 之间的静电作用势能， $F(\rho_i)$ 为原子 i 嵌入由系统中所有其他原子构成的电子云密度 ρ_i 中所需要的能量。EAM 势适用于描述金属键型的原子间相互作用，在金属及合金的结构、物性以及晶体缺陷等方面的研究中被广泛应用。

基于 EAM 进行分子动力学模拟，需要结合具体研究问题选择恰当的 $\phi(r)$ 和 $\rho(r)$ 的形式。本模拟采用 Voter-Chen 提出的金属铁的 EAM 势^[21]，该势函数在描述高压下铁的 bcc-hcp 结构转变方面取得了巨大成功^[12,13]。两体势 $\phi(r)$ 由 Morse 势表示为

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

电子密度函数 $\rho(r)$ 的形式为

$$\rho(r) = r^6 [\exp(-\beta r) + 2^9 \exp(-2\beta r)]. \quad (3)$$

这里 D_M 、 α_M 和 R_M 分别描述了 Morse 势中的势能深度、势能曲线最低点的曲率和平衡距离， β 为电子密度函数中的可调参数。根据 Rose 状态方程^[20]，铁的总能量可近似表示为

$$E_{\text{tot}} = -E_0(1 + a^*) \exp(-a^*). \quad (4)$$

这里

$$a^* = (a/a_0 - 1)(E_0/9B\Omega)^{1/2},$$

其中 a 为晶格常数； a_0 、 E_0 、 B 和 Ω 分别为平衡晶格

常数、结合能、体积常数和原子体积。显然，利用 (4) 式可获得总能量 E_{tot} 随晶格常数 a 的变化关系；联合 (1)(2)(3) 式则可数值定出任意晶格常数下原子 i 的 ρ_i 和相应的 F ，从而获得嵌入能 F 随电子密度的变化关系。由此，对系统处于任意原子构型的能量便可由 (1) 式求解。

本计算中所有参量的取值如下： $D_M = 0.6321$ eV， $\alpha_M = 13.43$ nm⁻¹， $R_M = 0.2092$ nm， $\beta = 62.62$ nm⁻¹， $a_0 = 0.287$ nm， $E_0 = 4.28$ eV， $B = 173$ GPa，截断半径为 0.4524 nm。由上述参数拟合出的嵌入能与电子密度的函数关系如图 1 所示。

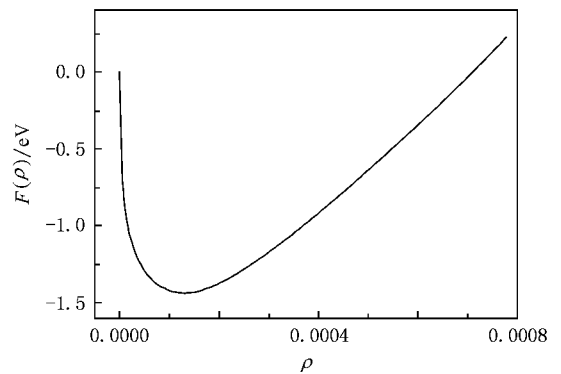


图 1 嵌入能 F 随电子密度 ρ 的变化

2.2. 模拟方法

本文工作在自行编制的 EAM 势 MD 程序上进行。初始构型选择单晶铁样品 A 和样品 B，样品 A 为 $5Q_{[100]} \times 5Q_{[010]} \times 7Q_{[001]}$ 个 bcc 晶胞（共 350000 个原子），B 为 $5Q_{[100]} \times 5Q_{[010]} \times 8Q_{[001]}$ 个 bcc 晶胞（共 501760 个原子）。取 x 、 y 和 z 轴分别沿 [100]、[010] 和 [001] 晶向，在整个计算过程中各方向均设为周期性边界，这里对边界效应和模拟尺寸效应暂不作讨论。进行一维应变加载前，采用速度标定法^[23]将样品 A 和样品 B 的初始温度分别设定为 60 和 300 K，并通过调节各自晶格常数使初态稳定在零压，此时样品 A 的晶格常数 $a = 0.28725$ nm，样品 B 的晶格常数 $a = 0.28827$ nm。加载方式为沿 [001] 晶向的等温压缩，即逐步缩短 [001] 晶向的晶格常数，并在每次压缩后采用正则系综模拟（即粒子数 N 、体积 V 和温度 T 保持不变）使样品弛豫至平衡态。原子运动方程的积分采用速度 Verlet 算法^[24]，时间步长取 0.002 ps。样品 A 和样品 B 的模拟时间分别为 160 和 220 ps。

已有研究表明^[13]沿[001]晶向加载时,晶格主要是由 bcc 结构转变为 hcp 结构,只有很少量的 fcc 结构以层错形式出现在 hcp 结构中.当然,沿其他晶向加载时可产生较多的 fcc 结构.本文亦沿[001]晶向加载,新相主要为 hcp 相.各原子由 bcc 至 hcp 结构的转变过程可由其配位数(CN)来判断,bcc 相原子的 CN 数为 8,hcp 相原子的 CN 数为 12.本文计算中原子配位数 CN 由距离在 0.275 nm 以内的最近邻原子数给出.对于整个样品的结构转变过程,可通过径向分布函数 $g(r)$ 进行描述, $g(r)$ 为距离一个原子为 r 时找到另一个原子的概率.如果在半径 r 到 $r + \Delta r$ 的球壳内的粒子数为 $n(r)$,则有^[25]

$$g(r) = \frac{V}{N} \frac{n(r)}{4\pi r^2 \Delta r}. \quad (5)$$

(5) 式描述了以某一原子为中心,其他原子按距离的分布情况,可反映出晶体中原子的排布规则.

相变过程的应力分析通过压应力张量计算得出,计算公式如下^[26,27]:

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left(\sum_i m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} + \sum_i \sum_{j>i} r_{ij\alpha} f_{ij\beta} \right). \quad (6)$$

(6) 式等号右端第一项和第二项分别表示原子的动量流和 virial 项对应力张量的贡献,其中 m 为原子质量, v 为原子速度, f 则为两原子间的作用力. α 和 β 为坐标轴.

3. 结果与分析

3.1. 应力-应变关系

图 2 给出样品 A 和样品 B 的应力 σ_{zz} 与应变 ϵ ($\epsilon = 1 - V/V_0$, V_0 为模拟体系的初始体积)的变化,图中 T_S 和 T_F 分别表示相变开始点和结束点,向上和向下箭头分别对应样品 A 和样品 B 的计算结果.从图 2 可见,bcc 相以及混合相中 σ_{zz} 与 ϵ 都近似呈线性关系,而系统完全相变后 σ_{zz} 随 ϵ 的增长呈现明显的非线性特征,表明相变后的样品经历一个很强的应变硬化过程.相变前样品 A 和样品 B 对应的 σ_{zz} 值分别达 15.0 和 14.8 GPa,由此得出相变的应力阈值对温度依赖性不大.当加载应力 σ_{zz} 超过上述阈值时,hcp 相开始形核,体系的应力状态得到松弛,应力 σ_{zz} 的值出现明显下降(图 2).

图 3 分别给出了弹性常数 C_{31} 和 C_{33} 随应变 ϵ

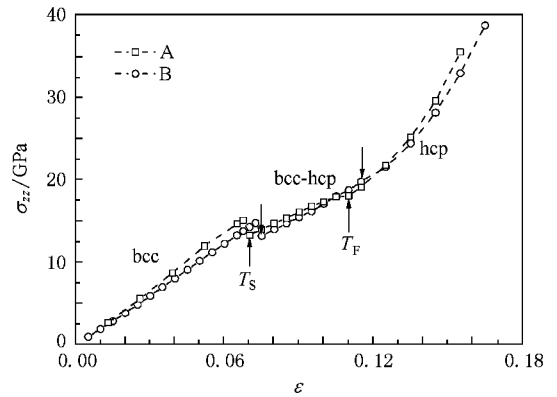


图 2 样品 A(60 K)和样品 B(300 K)的应力-应变关系

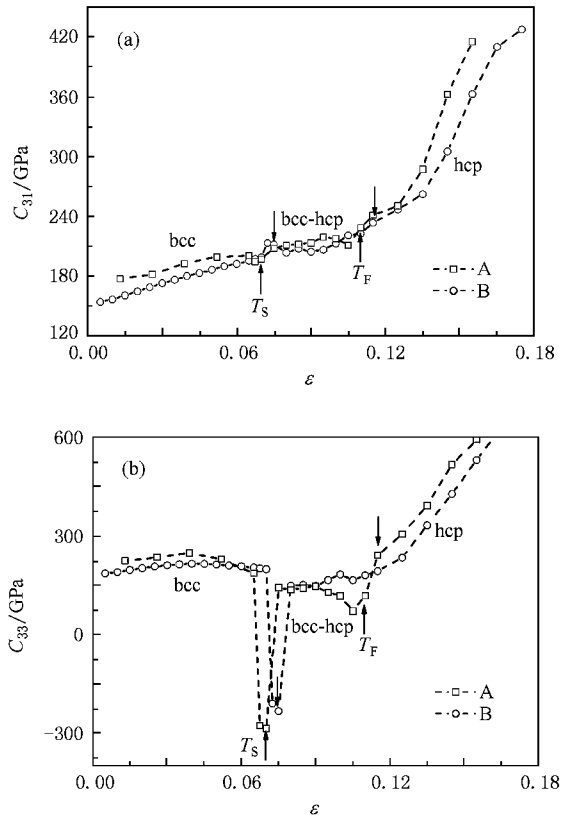


图 3 弹性常数-应变关系 (a) C_{31} , (b) C_{33}

的变化.从图 3(a)可见,弹性常数 C_{31} 在 bcc 相随应变 ϵ 持续增加,而相变后则随 ϵ 呈现出迅速增加趋势,也就是弹性常数 C_{31} 和 C_{32} 在相变前后一直保持硬化趋势.从图 3(b)可见, C_{33} 在 bcc 相中经历了一个先增加后减小的过程,表明相变发生前出现晶格软化现象,这是应变诱导结构相变预效应的一种表现.从图 3 还可发现,样品 A 的弹性常数比样品 B 偏高,表明温度对弹性常数具有软化作用.同时,温

度效应也减弱了样品 B 相变前 C_{33} 的硬化和软化过程,但相变开始前不同温度模型的 C_{33} 值接近, C_{31} 和 C_{32} 值的情况也类似. 上述分析表明,沿 $[001]$ 晶向的一维应变加载过程,温度效应对弹性常数具有软化作用,但在相变阈值附近弹性常数的变化主要由应变决定,对温度已不敏感.

3.2. hcp 相形核机理与形态

图 4 给出 hcp 相形核及生长过程的三维立体图像.从图 4 可以看出,当体系的应变量增加至相变临界值时,样品 A 和样品 B 中均发生 hcp 相(CN 数不小于 12 的区域)均匀形核,并长大为片状体系.随着应变量增加,这些片状 hcp 亚晶粒以增加厚度的方式使样品全部相变.新相的几何形态依赖于相变阻力,包括界面能和弹性应变能,后者起主要作用时易使新相形成片状以降低弹性应变能.本模拟中铁的结构转变为典型的切变共格相变,界面能较小,弹性应变能起主导作用,因此 hcp 相呈现出片状形态.此外,样品 A 和样品 B 的片状 hcp 亚晶粒分别沿着 (011) 和 $(0\bar{1}\bar{1})$ 晶面形成.由此推知,本模拟中相变的惯习面为除 $(\bar{1}10)$ 和 (110) 以外的 4 个等价 $\{011\}$ 晶面.

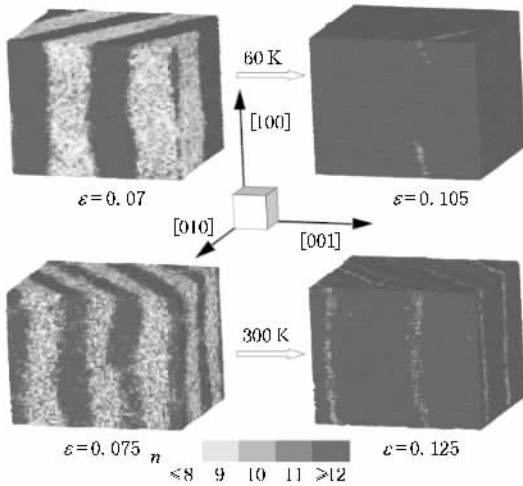


图 4 样品 A 和样品 B 形核生长过程的三维图像

原子滑移规律如图 5(a) 所示,图中圆圈和圆点分别表示样品 A (001) 晶面相变前后的点阵,晶格从 bcc 至 hcp 相的转变是在 $[001]$ 晶向受压缩的同时,相邻两层 (110) 或 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 晶面沿 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 或 $[110]$ 晶向的相对滑移而完成.这表明单晶铁沿 $[001]$ 晶向等温应变加载下的结构相变在微观机制上与冲击加载是相同的^[12].图 5(b) 示出 (110) 晶面的点阵畸变,图

中虚线和实线分别表示相变前和相变后的 $(01\bar{1})$ 晶面的投影.从图 5(b) 可见,相变过程中相界面沿 (011) 晶面且为不变平面,中心位置的 (011) 晶面形成中脊面 $(01\bar{1})$ 晶面则出现晶面浮突现象,显然 $(01\bar{1})$ 晶面的浮突发展至样品边界便呈现出表面浮突现象.这正是切变共格型相变的主要特征之一,与宏观上对马氏体相变的表面浮突和惯习面的观察一致.

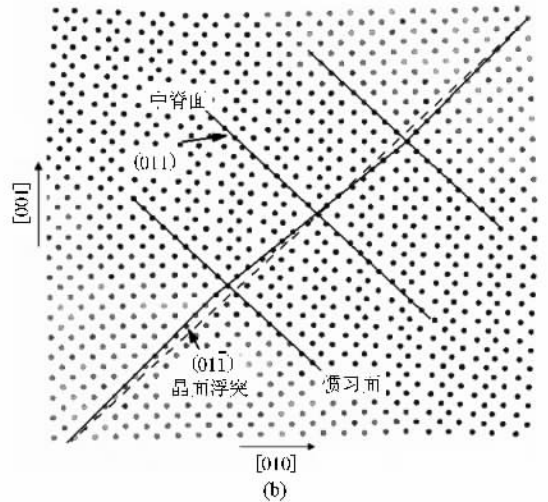
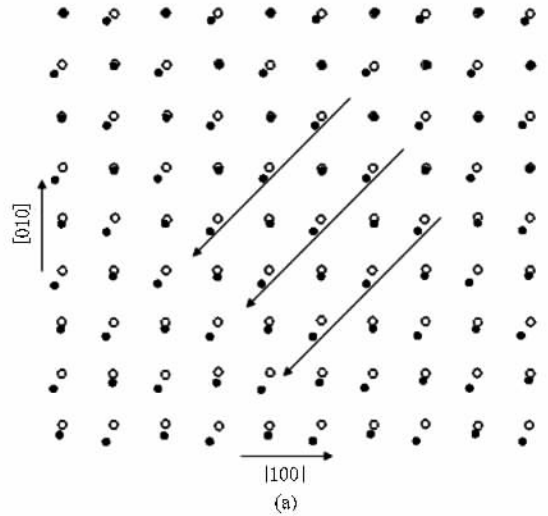


图 5 样品 A 形核过程的原子滑移 (a) (001) 晶面点阵, (b) (110) 晶面点阵

样品 A 和样品 B 完全相变后的点阵特征如图 6 所示.样品 A 为相对规则的 hcp 晶体,点阵在 (001) 晶面的投影显示出点阵排列的周期性,见图 6(a).样品 B 由于孪晶的形成,点阵投影趋于沿 $[100]$ 晶向形的线状分布,见图 6(b),这是由于晶格结构沿 $[100]$ 晶向出现了如图 6(c) 的切变.显然,这种晶格

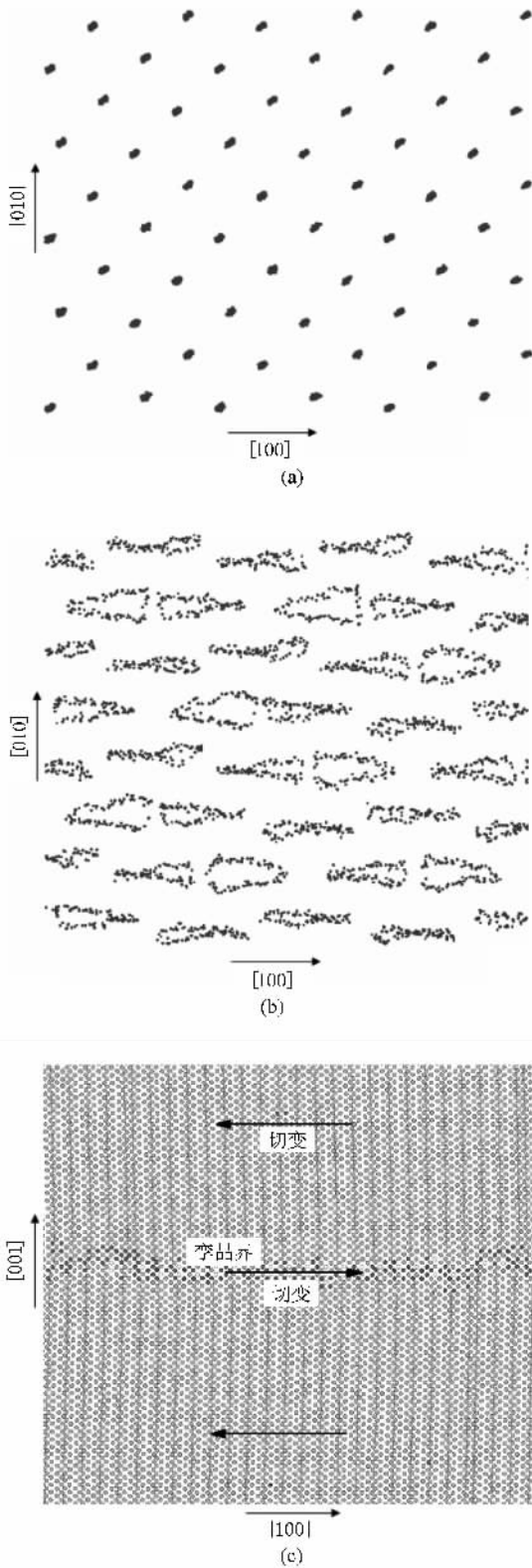


图6 样品相变后的点阵 (a)样品 A (001)晶面;(b)样品 B, (001)晶面;(c)样品 B (010)晶面

切变在(010)晶面产生浮突,发展至晶体边界亦可在样品表面出现一定程度的倾动。

3.3. 体系相变过程的结构分析

本模拟中体系的结构特征由径向分布函数来描述. 图7给出了体系在不同压缩状态对应的径向分布函数 $g(r)$. 对于理想晶格, 第1个峰和第2个峰(由圆圈表示)分别对应着原子最近邻数为12和次近邻数为6. 图7(a)显示, 当体系沿[001]晶向压缩, 峰的位置逐渐向左偏移并出现峰的分裂现象, 如 $\epsilon = 0.065$ 对应的 $g(r)$. 这是因为沿[001]晶向的晶格常数减小, 原子的次近邻分布沿不同晶向发生变化, 即压缩方向原子的次近邻位置被拉近. 当 $\epsilon = 0.07$ 时晶格失稳, ($\bar{1}10$)晶面出现局部的横向滑移并形成 hcp 相, 在图中表现为箭头指向位置产生新的峰值. 此时体系为混合相, 原来的第2个峰值依然明显. 随着体系的进一步压缩, 第2个峰值逐渐消失, hcp 相特征的两个峰值增加, 体系也完全进入 hcp 相. 样品 B 的径向分布函数变化规律与样品 A 相同, 见图7(b). 不过, 由于温度效应, 样品 B 中晶格振动相对剧烈, 各峰比样品 A 明显展宽, 其中初始

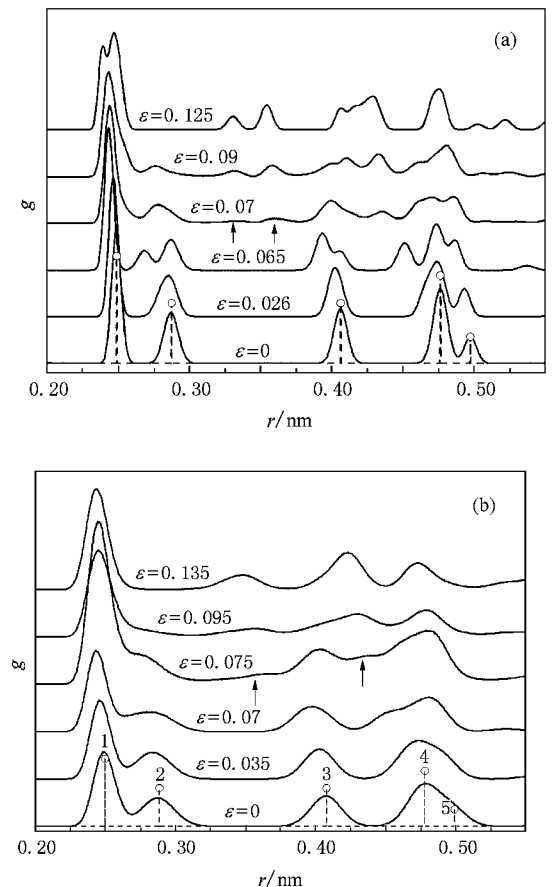


图7 径向分布函数的变化 (a)样品 A (b)样品 B

状态的第 5 个峰值已消失,且压缩过程温度掩盖了一些细小峰值的变化.

3.4. 相变过程的力学特征

以样品 A 为例,对混合相中势能和应力的分布进行了统计和分析.统计结果如图 8(a)所示,当应变 $\varepsilon = 0.07$ 时,相变发生,同时体系势能分布出现分岔,hcp 相以更高的势能出现,而由于相变引起的体积效应,bcc 相势能则有所减小.图 8(b)给出了(001)晶面上最大剪应力-体积张量 $\tau_m V$ ($\tau_m = [(\sigma_{zz} - (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2)]/2$) 的分布.从图 8(b)可以看出,混合相中 bcc 相剪应力为正值,而 hcp 相剪应力则为负值.也就是样品中的 hcp 相呈现出超应力松弛状态,同样由于相变体积效应,bcc 相应力得到一定松弛.

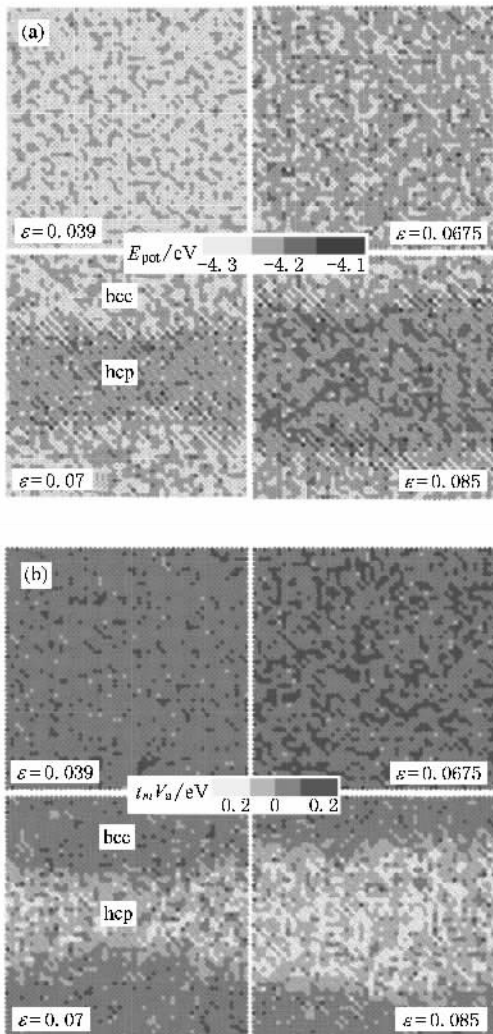


图 8 样品 A(001)晶面势能和剪应力-体积张量分布 (a)(001)晶面势能 (b)剪应力-体积张量

图 9 给出混合相平均应力 $\bar{\sigma}$ 及偏应力 s_z 随相变质量分数 λ 的变化. hcp 相的势能统计是对最近邻原子数 $n \geq 12$ 的原子求平均值获得, bcc 相则是以 $n \leq 10$ 的原子求平均值获得, $n = 11$ 的原子视为两相的界面. 从图 9(a)可见,伴随相变形核的发生,样品 A 和样品 B 中平均应力有所下降,之后呈现出随 λ 近似呈线性增长. 偏应力 s_z 的变化则从相变形核开始,至新相晶核的生长过程均与相变质量分数 λ 保持线性关系,即 $\lambda \propto -s_z$,如图 9(b)所示.

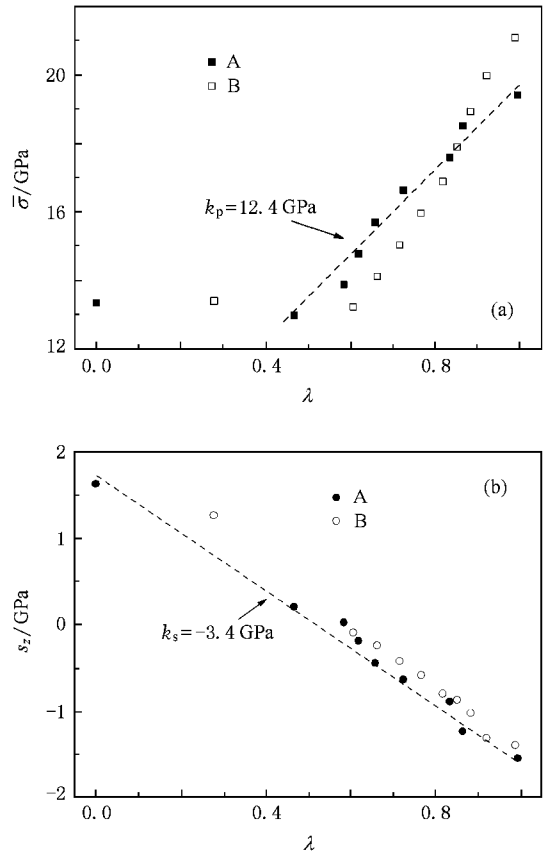


图 9 平均应力和偏应力与 hcp 相质量分数 λ 的关系 (a)平均应力与 λ 的关系 (b)偏应力与 λ 的关系

4. 结 论

本文详细介绍了 MD 方法模拟一维应变加载(沿[001]晶向)下单晶铁发生 bcc-hcp 结构转变的微观过程.对这一结构转变的微观机制、形态及力学性质做了相应分析.(1)hcp 相以片状体系存在,惯习面为除(110)和(110)以外的 4 个等价{011}晶面.(2) C_{33} 在相变前出现软化行为,相变完成后随应变增加各弹性常数迅速被硬化.(3)温度效应减弱 C_{33}

的硬化和软化过程,但对相变的应力阈值(在 15 GPa 附近)影响不大。(4)300 K 模型在压缩过程中出现孪晶结构,孪晶可诱发晶格切变。(5)混合相中,hcp

相处于超应力松弛状态,样品的偏应力随 hcp 相质量分数的变化呈线性关系。

- [1] Bancroft D , Peterson E L , Minshall S 1956 *J. Appl. Phys.* **27** 291
- [2] Johnson P C , Stein B A , Davis R S 1962 *J. Appl. Phys.* **33** 557
- [3] Jamieson J C , Lawson A W 1962 *J. Appl. Phys.* **33** 776
- [4] Barker L M , Hollenbach R E 1974 *J. Appl. Phys.* **45** 4872
- [5] Papantonis D , Bassett W A 1977 *J. Appl. Phys.* **48** 3374
- [6] Taylor R D , Pasternak M P , Jeanloz R 1991 *J. Appl. Phys.* **69** 6126
- [7] Wang F M , Ingalls R 1998 *Phys. Rev. B* **57** 5647
- [8] Hasegawa H , Pettifor D G 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 130
- [9] Boettger J C , Wallace D C 1997 *Phys. Rev. B* **55** 2840
- [10] Yano K , Horie Y 2002 *Int. J. Plast.* **18** 1427
- [11] Bhattacharya K , Conti S , Zanzotto G , Zimmer J 2004 *Nature* **428** 55
- [12] Kadau K , Germann T C , Lomdahl P S , Holian B L 2002 *Science* **296** 1681
- [13] Kadau K , Germann T C , Lomdahl P S , Holian B L 2005 *Phys. Rev. B* **72** 064120
- [14] 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 , Stölklen J S , Wark J S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 075502
- [15] 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
- [16] Caspersen K J , Lew A , Ortiz M , Carter E A 2004 *Phys. Rev. Lett.* **93** 115501
- [17] Shao J L , Wang P , Qin C S , Zhou H Q 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5389 (in Chinese) [邵建立、王 裴、秦承森、周洪强 2007 物理学报 **56** 5389]
- [18] Shao J L , Wang P , Qin C S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1936 (in Chinese) [邵建立、王 裴、秦承森 2009 物理学报 **58** 1936]
- [19] Daw M S , Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [20] Daw M S , Baskes M I 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1285
- [21] 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
- [22] Rose J H , Smith J R , Guinea F , Ferrante J 1984 *Phys. Rev. B* **29** 2963
- [23] Hoffmann K H 1996 *Computational Physics* (Berlin , Heidelberg : Springer-Verlag) p268
- [24] Swope W C , Andersen H C , Berens P H , Wilson K R 1982 *J. Chem. Phys.* **76** 637
- [25] Andrew R L 1996 *Molecular Modeling : Principle and Practice* (Berlin , Heidelberg : Springer-Verlag) p357
- [26] Irving J H , Kirkwood J G 1950 *J. Chem. Phys.* **18** 817
- [27] Allen M P , Tildesley D J 1987 *Computer Simulations of Liquids* (Oxford : Oxford University Press) p46

Microscopic studies of structural transition in iron under one-dimensional strain *

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

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics ,Beijing 100088 , China*)

(Received 2 June 2008 ; revised manuscript received 11 September 2008)

Abstract

Molecular dynamics simulation employing an embedded-atom-method potential is performed to investigate the body-centered cubic (bcc)-hexagonal close-packed (hcp) structural transition in single crystal iron induced by isothermal compression along [001] direction. Above the critical strain of transition , homogeneous nucleation of hcp phase appears and grows into flakes along the (011) face. The elastic constants C_{31} and C_{32} harden during the compression in bcc phase , while C_{33} undergoes a softening prior to the transition ; all the elastic constants increase rapidly with compression after the system entering the hcp phase. Increasing temperature can weaken the hardening and softening process of C_{33} , but affect the stress threshold of transition only weakly. Hcp twins are formed at 300 K , leading to the shear of crystal lattice. For the mixed phase , the potential of hcp phase is greater than that of bcc phase , hcp phase shows an over-relaxation of the stress , and the longitudinal partial stress keeps linearly decreasing with hcp mass fraction throughout the transition.

Keywords : structural transition , molecular dynamics , one-dimensional strain

PACC : 6470K , 6250 , 7115Q

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

[†] E-mail : shao_jianli@iapcm.ac.cn