



## 单晶铁沿[101]晶向冲击过程中面心立方相的形成机制

马通 谢红献

Formation mechanism of face-centered cubic phase in impact process of single crystal iron along [101] direction

Ma Tong Xie Hong-Xian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 69, 130202 (2020) DOI: 10.7498/aps.69.20191877

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191877>

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

### 您可能感兴趣的其他文章

#### Articles you may be interested in

铁冲击相变的晶向效应

Orientation effect of alpha-to-epsilon phase transformation in single-crystal iron

物理学报. 2017, 66(14): 146201 <https://doi.org/10.7498/aps.66.146201>

单晶Ce冲击相变的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of shock-induced isostructural phase transition in single crystal Ce

物理学报. 2020, 69(11): 116202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200323>

层错四面体对单晶铜层裂行为影响的分子动力学研究

Effect of stacking fault tetrahedron on spallation of irradiated Cu via molecular dynamics study

物理学报. 2020, 69(3): 036201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191425>

高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长影响的分子动力学研究

Molecular dynamics simulation of effect of temperature on void nucleation and growth of single crystal iron at a high strain rate

物理学报. 2019, 68(24): 246102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190920>

Fe合金FCC-BCC原子尺度台阶型马氏体相界面迁移行为的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation of migration behavior of FCC-BCC atomic terrace-step phase boundary in iron-based alloy

物理学报. 2020, 69(13): 136102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191903>

速度对聚四氟乙烯摩擦系数影响的分子动力学模拟

Effect of velocity on polytetrafluoroethylene friction coefficient using molecular dynamics simulation

物理学报. 2019, 68(17): 176801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190495>

# 单晶铁沿 [101] 晶向冲击过程中 面心立方相的形成机制\*

马通 谢红献†

(河北工业大学机械工程学院, 天津 300401)

(2019 年 12 月 11 日收到; 2020 年 4 月 12 日收到修改稿)

铁的冲击相变过程是科研工作者们关注的热点领域之一. 铁沿 [100] 晶向冲击时会发生体心立方相到密排六方相的转变; 而沿 [101] 晶向冲击时, 相变产物除了密排六方相之外还出现一定量的面心立方相. 人们已经明确了体心立方到密排六方相的转变机制, 然而对于面心立方相的形成机制问题至今还在探索. 本文通过分子动力学方法模拟了体心立方单晶铁沿 [101] 晶向的冲击过程, 模拟结果显示体心立方相将转变为高压密排结构 (密排六方相和面心立方相); 并分析了面心立方相的形成机制: 在冲击过程中, 单晶铁沿 [101] 和  $\bar{1}01$  晶向突然收缩, 同时沿 [010] 晶向突然扩张, 从而导致体心立方到面心立方相的转变. 此外, 本文进一步研究了不同应力状态下单晶铁的相变机制, 发现沿 [101] 晶向单轴压缩以及沿 [101] 和  $\bar{1}01$  晶向双轴压缩时铁将发生体心立方到面心立方相的转变; 而沿 [101] 和 [010] 晶向双轴以及三轴压缩时将会发生体心立方到密排六方相的转变. 最后进一步计算了三个相的吉布斯自由能随压力的变化, 并对冲击模拟结果进行了能量分析, 给出了沿 [101] 晶向冲击条件下高压密排相产生的原因.

**关键词:** 分子动力学, 相变, 冲击, 铁

**PACS:** 02.70.Ns, 05.70.Fh

**DOI:** 10.7498/aps.69.20191877

## 1 引言

铁作为最重要的结构材料, 人们对其结构及力学性能进行了广泛的研究. 铁具有体心立方 (BCC)、密排六方 (HCP) 和面心立方 (FCC) 三种相结构, 在一定条件下三种相之间会发生相互转变, 从而影响其力学性能, 因此铁的相变成为人们的研究热点之一. Bancroft 等<sup>[1]</sup>发现在冲击加载条件下, 当压力达到 13 GPa 时铁将发生结构相变; 该研究引起了科学工作者的持续关注, 并对相变过程进行了深入研究. 1998 年, Wang 和 Ingalls<sup>[2]</sup>利用 X 射线吸收精细结构技术分析了铁的 BCC 到 HCP 的相变, 并给出了三种可能的相变机制. 第一

种机制由两个步骤组成: BCC 铁先沿 [001] 晶向被压缩, 同时沿  $[1\bar{1}0]$  方向扩张, 使 (110) 面变成密排面, 然后由相邻密排面相对滑移形成 HCP 相. 第二种机制同样包括两个步骤: 第一步 (112) 面沿  $[11\bar{1}]$  方向剪切形成密排面, 第二步与第一种机制相同 (由相邻密排面相对滑移形成 HCP 相). 第三种机制包含三个步骤: 第一步和第二种机制相同, 在形成密排面后, BCC 相转变为中间态 FCC 相, 最后 FCC 相再转变成 HCP 相. 第三种相变机制同前两种机制相比, 最明显的区别是产生了中间态 FCC 相. 目前人们对于铁的冲击相变机制仍然存在争议, 争论的焦点是冲击相变过程是否会产生 FCC 相. Kalanar 等<sup>[3]</sup>通过原位 X 射线衍射技术, 初步证实了单晶铁沿 [001] 晶向冲击时会发生

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11875015, 51571082) 和河北省自然科学基金 (批准号: A2019202196) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hongxianxie@hebut.edu.cn

BCC-HCP 相变. Hawreliak 等<sup>[4]</sup>通过 X 射线衍射实验和非平衡分子动力学模拟对单晶铁沿 [001] 晶向冲击进一步分析,发现 BCC-HCP 相变通过上面所述的第一种机制实现. 对于多晶铁的冲击, Yaakobi 等<sup>[5]</sup>通过扩展 X 射线吸收精细结构 (EXAFS) 技术证实了多晶铁在冲击加载下也会发生 BCC-HCP 相变. 2011 年 Hawreliak 等<sup>[6]</sup>通过 X 射线原位衍射法分析激光冲击压缩多晶铁过程中,也证实了多晶铁在冲击条件下会发生 BCC-HCP 相变,并提出在相变过程中可能会出现 FCC 相. Kadau 等<sup>[7]</sup>用分子动力学方法研究了铁沿 [001] 晶向冲击压缩过程,结果显示发生了 BCC-HCP 相变. 之后他们又模拟了沿 [101] 晶向的冲击过程,发现相变产物中除了 HCP 相,还出现了大量 FCC 相<sup>[8]</sup>. 他们进一步分析及模拟了多晶铁的冲击加载过程,认为试验中用扩展 X 射线吸收精细结构谱技术不能有效区分 HCP 和 FCC,并认为相变终产物应该为 HCP 和 FCC 相的混合物<sup>[9]</sup>. 马文等<sup>[10]</sup>通过分子动力学模拟,证实了多晶铁的冲击相变产物中确实存在 FCC 相. Wang 等<sup>[11]</sup>也使用分子动力学方法模拟了单晶铁的单轴压缩过程,类似地, [001] 方向压缩会发生 BCC-HCP 相变,而在 [101] 方向加载条件下发现了大量的 FCC 相. 2014 年 Gunkelmann 等<sup>[12]</sup>在多晶铁的冲击模拟过程中也发现了大量 FCC 相. 最近邵建立等人通过分子动力学方法模拟了单晶铁的压缩过程,结果表明在一维压缩 ([001]) 条件下,相变产物主要为 HCP 相,而二维压缩 (沿 [010] 和 [001] 方向) 以及三维压缩条件下都出现大量 FCC 相<sup>[13,14]</sup>.

基于以上研究,铁冲击过程中的 BCC-HCP 相变机制已经明确. 然而分子动力学模拟结果显示,单晶铁沿 [101] 晶向冲击过程和多晶铁的冲击过程中都会出现大量的 FCC 相, FCC 相产生的原因及机制目前还不明确,需要进一步去研究探索. 本文通过分子动力学方法模拟了 BCC 铁沿 [101] 晶向的冲击加载过程,模拟结果显示除了 HCP 相外,还出现了大量的 FCC 相;并进一步仔细研究了 FCC 相的形成机制及原因.

## 2 模拟方法

用 LAMMPS<sup>[15]</sup> 软件模拟了 BCC 铁沿 [101] 晶向的冲击过程,铁原子间作用力由 Chamati 等<sup>[16]</sup>提出的 EAM 势函数描述,该势函数的详细表达

形式及相关参数可参考原始文献. 为了研究冲击过程中 FCC 相的形成机制,构造了两个模型:模型一为冲击加载模型,模型的 X, Y 和 Z 轴分别沿 [101], [010] 和  $\bar{1}01$  晶向 ( $150\sqrt{2}a_0 \times 90a_0 \times 60\sqrt{2}a_0$ ,  $a_0$  为 BCC 铁的晶格常数),共包含 324 万个铁原子,如图 1 所示. 模型沿 Y 和 Z 方向施加周期边界条件, X 方向施加自由边界条件. 初始温度设置为 10 K,模拟过程中使用 NVE 系综. 沿 X 方向冲击加载,冲击速度为 1.05 km/s<sup>[8]</sup>. 通过活塞法<sup>[17]</sup>产生冲击波,该方法已经被广泛使用<sup>[18-20]</sup>. 为了模拟不同应力状态下铁的压缩相变过程,另外构建了一个较小的体材料模型 (模型二). 模型的 X, Y 和 Z 轴分别沿 [101], [010] 和  $\bar{1}01$  晶向 ( $40\sqrt{2}a_0 \times 40a_0 \times 30\sqrt{2}a_0$ ),共包含 192000 个原子. 初始温度为 10 K,三个方向都施加周期性边界条件. 加载方式通过 NPT 控制压强实现,加载应力速率为 2.5 GPa/ps. 模拟过程中的时间步长设置为 0.001 ps. 模拟结果通过公共近邻法分析原子结构<sup>[21]</sup>,并用 OVITO<sup>[22]</sup> 软件进行可视化处理. 本文冲击应力通过先求得每一个原子上的应力,然后沿冲击方向将模型分为 100 层,最后对每层原子应力取平均得到该层的应力. 而压缩应力在得到每一个原子上的应力后对体系中所有原子应力取平均,作为整个体系的应力.

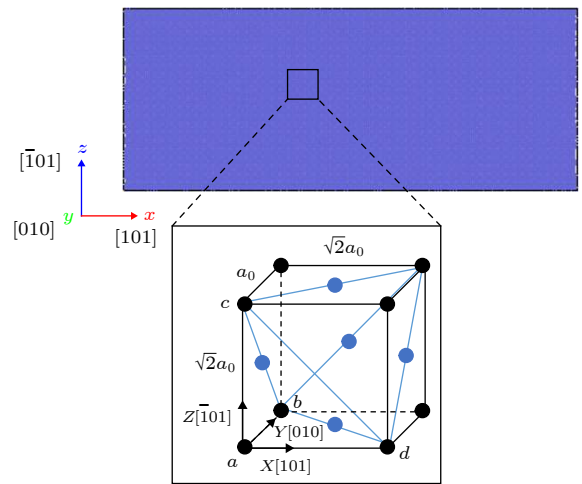


图 1 BCC 铁冲击初始模型  
Fig. 1. Initial model of BCC iron impact.

## 3 模拟结果

### 3.1 沿 [101] 晶向冲击模拟

图 2(a) 给出了单晶铁 (模型一) 沿 [101] 方向冲击过程中不同时刻 X, Y 和 Z 方向压应力沿

X方向的分布情况. 从图 2(a) 中可以看出: 冲击波前所到位置的 X 方向应力从 0 迅速增加到大约 25 GPa(即相变初始压力), 与之前的实验和模拟结果都保持一致 [12,23–26]. 同时 Y 方向和 Z 方向的应力从 0 分别增加到大约 13 GPa 和 4 GPa. 此时单晶铁开始发生相变. 当相变过程结束后, 该部分的 X 方向应力继续升高到大约 53 GPa, 而 Y 和 Z 方向的应力都升高到大约 40 GPa 左右. 图 2(b) 给出了 8 ps 时刻模型的原子结构分析结果. 从图 2(b) 中可以看出大部分相变产物为 HCP 相 (红色部分), 其中少部分变成了 FCC 相或者 HCP 相中的层错 (绿色部分), 这与前人的研究结果一致 [8,12].

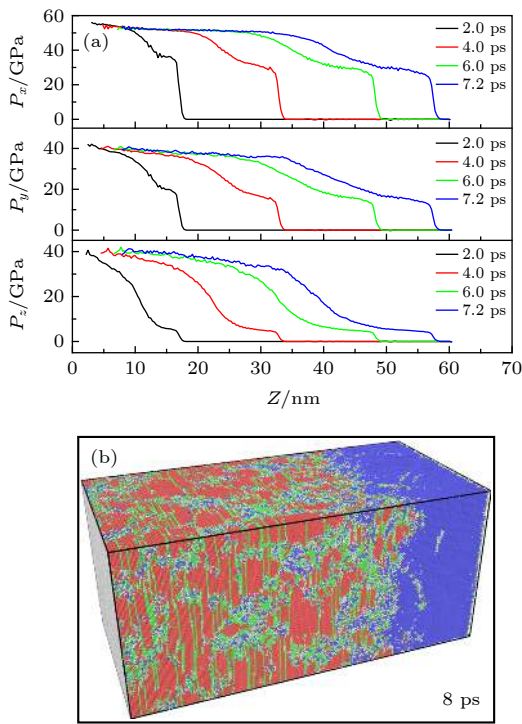


图 2 单晶铁沿 [101] 方向的冲击压缩过程 (冲击速度为 1.05 km/s) (a) 冲击过程中不同时刻模型中的压应力; (b) 8 ps 时刻的模型, 图中蓝色、红色分别代表 BCC 和 HCP 相, 绿色代表 FCC 相或者 HCP 相的层错

Fig. 2. The simulation of a single crystal iron model which was impacted along [101] crystal direction (the impact speed was 1.05 km/s): (a) The stress in the impacted sample at different times; (b) the impacted sample at 8 ps. Blue and red parts represent BCC and HCP phase, respectively; green part represents FCC or stacking fault of HCP phase.

为了进一步确定图 2(b) 中绿色部分的原子结构, 图 3 给出了冲击后模型在 (101) 面内的投影并对其局部进行了放大. 可以看到绿色区域的原子有两种不同的结构: 第一种结构和 A 区域内的原子

结构相同, 在该部分中 BCC 相的 (101) 晶面转变为 FCC 相的 (100) 晶面; 因此 A 区域内的原子确实发生了 BCC 到 FCC 的结构相变. 而 B 区域仅为一层原子厚度的密排晶面, 且该层和 HCP 的基面 (1000) 晶面保持平行, 因此该部分区域可以看作 HCP 相中的层错, 而非 FCC 相.

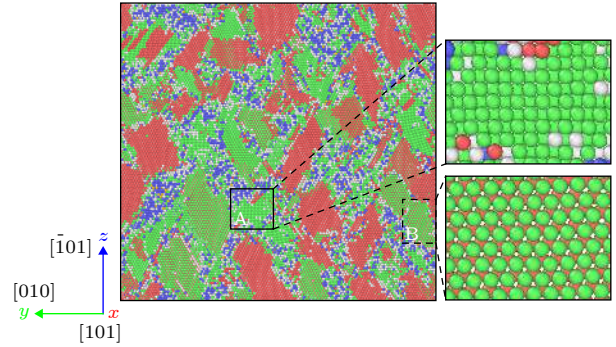


图 3 冲击后模型向 X 轴 ((101) 面) 的投影 (蓝球、红球和绿球分别代表位于 BCC 相、HCP 相和 FCC 相 (或 HCP 相中的层错) 中的铁原子)

Fig. 3. The atoms' configuration on the (101) plane after impactation (blue, red and green balls represent the iron atoms in BCC phase, HCP phase and FCC phase (or stacking fault of HCP), respectively).

为了进一步分析 HCP 相和 FCC 相的形成机制, 图 4 给出了冲击过程中从 BCC 到 HCP 相以及从 BCC 相到 FCC 相转变过程中原子结构的变化过程. BCC-HCP 相变可以由图 4(a) 中三层原子面描述, 第一层和第三层原子面的原子运动完全一致, 为了方便分析, 我们取第一层和第二层原子作为研究对象. 如图 4(b) 和图 4(c) 所示, 在 3.8 ps 以前, 冲击波还没有传播到该区域, 原子的相对位置及距离保持不变, 此时原子第一近邻 (即  $d_{0-1}, d_{0-2}, d_{0-4}$  和  $d_{0-5}$ ) 大约为 0.250 nm, 第二近邻 (即  $d_{0-3}$  和  $d_{0-6}$ ) 大约为 0.287 nm. 当应力波到达该区域后, 第二近邻距离因受压急剧减小; 5.6 ps 时, 第二近邻距离被压缩到和第一近邻间距近似相等, 这时 (101) 面被压缩为密排面. 然后相邻密排面产生相对滑动, 到 6.6 ps 时已经形成 HCP 结构. 这种 BCC-HCP 相变机制和前人的结果一致 [27–35]. 图 4(d) 给出了冲击过程中从 BCC 到 FCC 的相变过程; 并在图 4(e) 中进一步给出了铁原子沿 X, Y 和 Z 三个方向单位周期长度  $a_x, a_y$  和  $a_z$  随时间的变化 ( $a_x, a_y$  和  $a_z$  的初始长度分别为  $\sqrt{2}a_0, a_0$  和  $\sqrt{2}a_0, a_0$  为 BCC 铁的晶格常数). 从图 4(d) 和图 4(e) 中可以看到: 3.8 ps 以前, 冲击波没有传

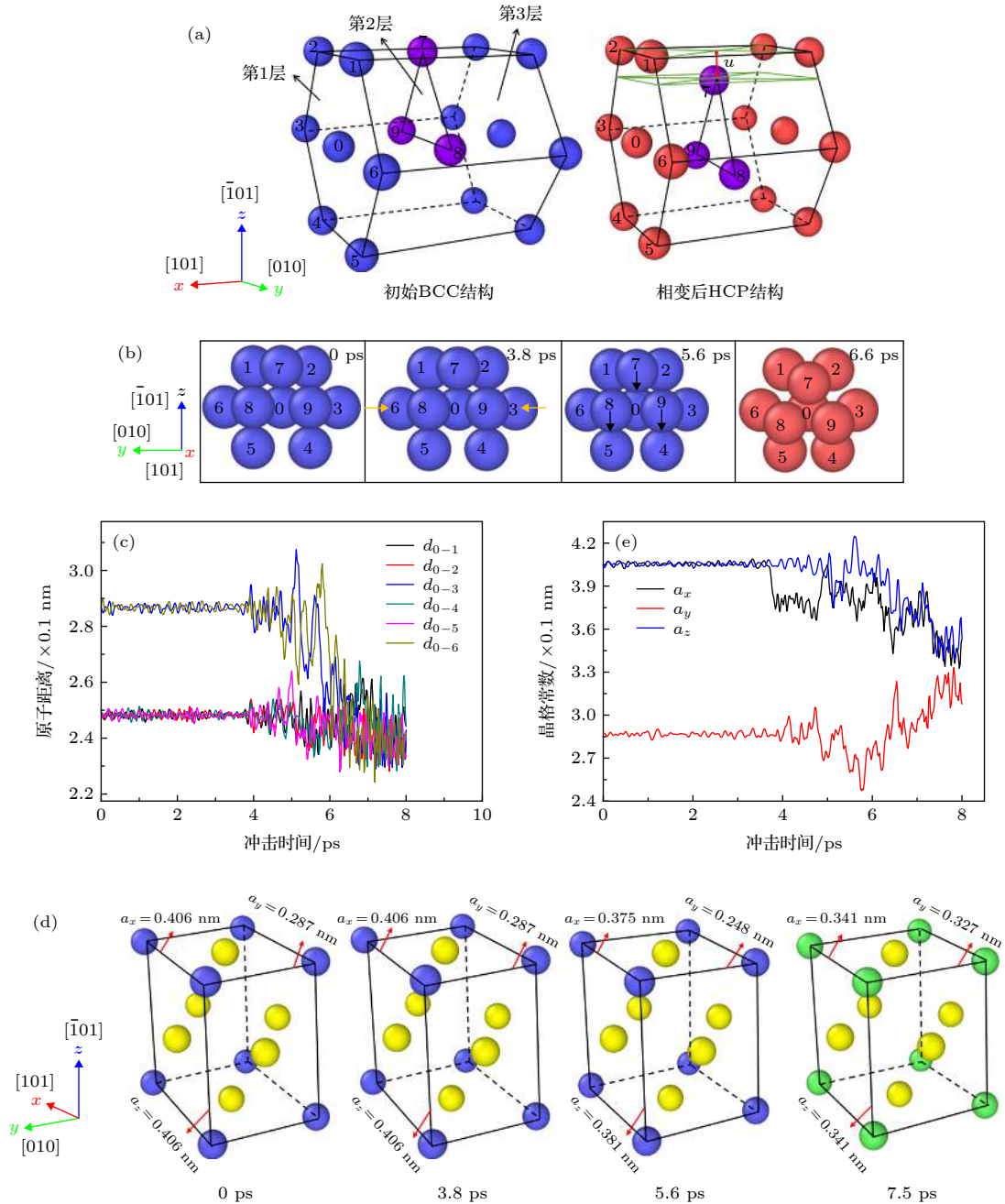


图4 BCC铁沿[101]晶向冲击条件下HCP和FCC相的形成机制 (a)一个结构单元的BCC-HCP相变机制;(b)(101)面的原子运动规律(黄色箭头代表(101)面原子收缩方向,黑色箭头代表(101)面相对滑移方向(1—6号原子和7—9号原子分别对应(a)中的第一层和第二层原子面; $u$ 为(101)面相对滑移距离.);(c)原子间距离随冲击时间的变化;(d)BCC-FCC相变机制(为了方便观察,将结构单元中的面心原子设置为黄色);(e)晶格常数随冲击时间的变化

Fig. 4. The formation mechanisms of HCP and FCC phase under impact of BCC iron along [101] direction: (a) The BCC-HCP phase transition mechanism of a structural unit; (b) the atomic motion of (101) plane (yellow arrow represents the contraction direction of (101) plane, and black arrow represents the relative sliding direction of (101) plane (atoms 1—6 and 7—9 correspond to the first and second atomic planes in (a) respectively;  $u$  is the relative sliding distance of (101) plane); (c) the change of atomic distance with impact time; (d) BCC-FCC phase transition mechanism (set the face center atom in the structural unit to yellow for easy observation); (e) the change of lattice constant with impact time.

播到该位置,三个方向的单位周期长度保持不变,晶体为BCC结构.3.8到5.6 ps阶段,三个方向都略微收缩;5.6 ps后,[101]和 $\bar{1}01$ 方向急剧收缩,而[010]方向突然扩张,最终导致 $a_x : a_y : a_z = 1 : 1 : 1$ ,

完成BCC到FCC相变.

BCC金属相变终产物和其所处的应力状态密切相关.2007年Guo等<sup>[36]</sup>用分子动力学方法研究了BCC金属裂纹尖端应力诱发相变过程,发现

{100}⟨100⟩和{110}⟨100⟩裂纹尖端只发生了 BCC-FCC 相变, 而 BCC-FCC 和 BCC-HCP 两种相变都发生在{111}⟨100⟩裂纹尖端. 结果表明相变的终产物取决于不同晶向的局部应力状态. 冲击载荷作用下, 在晶体内部会产生复杂的应力分布, 可能正是因为局部不同的应力状态导致不同相变的发生. 为了进一步分析应力状态对 BCC 铁相变机制的影响, 我们分别模拟了 BCC 铁在单轴压缩、双轴压缩、以及三向压缩等不同加载条件下的相变机制.

### 3.2 沿 [101] 晶向单轴压缩

图 5 为 BCC 铁 (模型二) 沿 [101] 晶向单轴压缩下的相变过程. 从图 5(a) 可以看出单晶铁发生了 BCC-FCC 的整体均匀相变, 所以取其一个结构单元对相变过程进行分析. 图 5(b) 给出了单轴压缩过程中三个方向 ( $X$ ,  $Y$  和  $Z$ ) 的应力、单个原子总能量以及单位周期长度  $a_x$ ,  $a_y$  和  $a_z$  随加载时间

的变化. 可以看到在压缩过程中  $X$  方向应力随时间线性增加, 而侧向应力 ( $Y$  和  $Z$ ) 都近似为零; 当压缩到 6.8 ps 时,  $X$  方向的应力达到了临界值 15.6 GPa. 初始状态三个方向晶格常数  $a_x = a_z = \sqrt{2}a_0 = 0.406$  nm,  $a_y = a_0 = 0.287$  nm (为面心四方结构), 对应能量的最低点  $-4.278$  eV/atom. 在 0—6.8 ps 内,  $a_x$  逐渐减小至 0.363 nm,  $a_y$  逐渐增大至 0.313 nm,  $a_z$  略微减小至 0.396 nm, 该过程中能量升高至  $-4.196$  eV/atom; 在 6.8—6.9 ps 内,  $a_x$  和  $a_z$  急剧减小, 而  $a_y$  急剧增加, 最终导致  $a_x : a_y : a_z = 0.342 : 0.342 : 0.387 = 1 : 1 : 1.31$ , 形成晶格畸变的 FCC 相. 6.9 ps 时刻对应的模型仍然存在应力 ( $\sigma_x = 12.2$  GPa), 并且该时刻的能量达到最大值 ( $-4.151$  eV/atom), 所以该 FCC 相并不稳定. 在 6.9—7 ps 内,  $a_x$  继续减小至 0.287 nm,  $a_y$  继续增加至 0.398 nm, 而  $a_z$  突然增加至 0.398 nm. 在 7 ps 时刻对应局部能谷 ( $-4.273$  eV/atom), 表

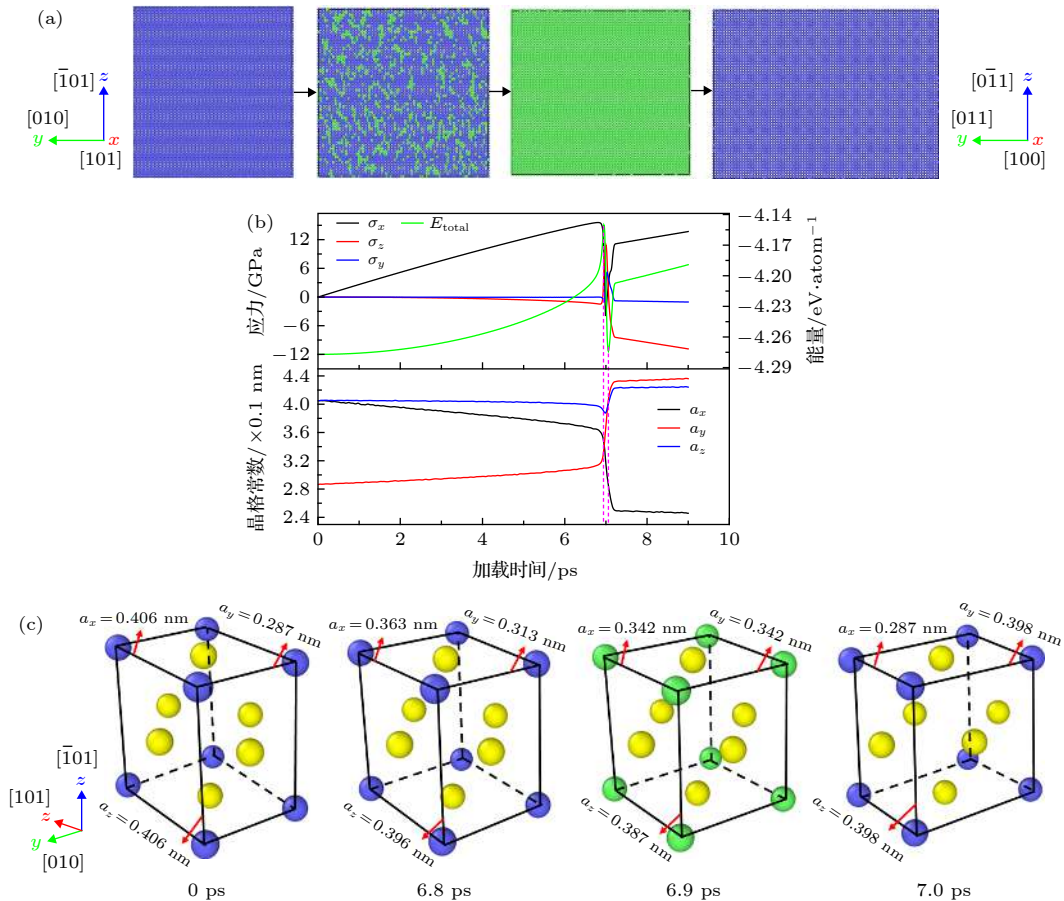


图 5 BCC 铁沿 [101] 晶向在单轴压缩下的相变机制 (a) 压缩过程中的三个快照; (b) 应力、晶格常数以及单个原子能量 ( $E_{total}$ ) 随加载时间的变化; (c) 一个结构单元的相变过程 (为了方便观察, 将结构单元中的面心原子设置为黄色)

Fig. 5. The transformation mechanism of BCC iron under uniaxial compression along [101] direction: (a) Three snapshots during compression (b) the variation of stress, lattice constant and energy of single atom ( $E_{total}$ ) with loading time; (c) the phase transition process of a structural unit (set the face center atom in the structural unit to yellow for easy observation).

明 FCC 相转变为稳定的 BCC 相. 整个过程中 BCC-FCC-BCC 的晶向对应关系为  $[101]_{\text{bcc}} \parallel [100]_{\text{fcc}} \parallel [100]_{\text{bcc}}$ ;  $[010]_{\text{bcc}} \parallel [010]_{\text{fcc}} \parallel [011]_{\text{bcc}}$ ;  $[\bar{1}01]_{\text{bcc}} \parallel [001]_{\text{fcc}} \parallel [0\bar{1}1]_{\text{bcc}}$ . 图 5(c) 给出了一个结构单元的相变过程. 在该过程中的 FCC 相属于中间态, 初始的 BCC 结构 (B1) 经过 FCC 相变最终得到转晶向的 BCC 结构 (B2), 在 7 ps 后即为 B2 结构的压缩过程.

### 3.3 沿 $[101]$ 和 $[\bar{1}01]$ 同时压缩

图 6 为 BCC 铁 (模型二) 沿  $[101]$  和  $[\bar{1}01]$  晶向同时压缩时的相变过程. 在该应力状态下仍然会发生 BCC-FCC 的整体相变, 如图 6(a) 所示. 图 6(b) 显示了压缩过程中三个方向 ( $X$ ,  $Y$  和  $Z$ ) 的应力、单个原子能量以及单位周期长度  $a_x$ ,  $a_y$  和  $a_z$  随加载时间的变化 ( $X$  和  $Z$  方向的应力曲线重合,  $a_x$  和  $a_z$  曲线重合). 由图 6(b) 可以看到,  $Y$  方向

应力近似为零, 压缩到 3.6 ps 时刻, BCC 铁达到临界应力 8.7 GPa. 初始状态三个方向晶格常数  $a_x = a_z = \sqrt{2}a_0 = 0.406 \text{ nm}$ ,  $a_y = a_0 = 0.287 \text{ nm}$  (为面心四方结构), 对应能量的最低点  $-4.278 \text{ eV/atom}$ . 在 0—3.6 ps 内,  $a_x$  和  $a_z$  逐渐减小至  $0.374 \text{ nm}$ ,  $a_y$  逐渐增加至  $0.316 \text{ nm}$ , 该过程中能量升高至  $-4.166 \text{ eV/atom}$ ; 在 3.6—3.8 ps 内,  $a_x$  和  $a_z$  急剧减小, 而  $a_y$  同时急剧增加, 最终导致  $a_x : a_y : a_z = 0.354 : 0.354 : 0.354 = 1 : 1 : 1$ ; 3.8 ps 时刻正好对应局部能谷 ( $-4.171 \text{ eV/atom}$ ), 但是该时刻三个方向的应力并不为零 ( $\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = 5.34 \text{ GPa}$ ). 继续压缩, FCC 相转变为存在晶格畸变的 BCC 相. 图 6(c) 中显示了一个结构单元的相变过程. 与单轴压缩相比, 相变后的 FCC 晶胞没有发生晶格畸变, 而且相变临界应力较低. 因此  $[101]$  和  $[\bar{1}01]$  双向压缩更有利于 BCC-FCC 相变的发生.

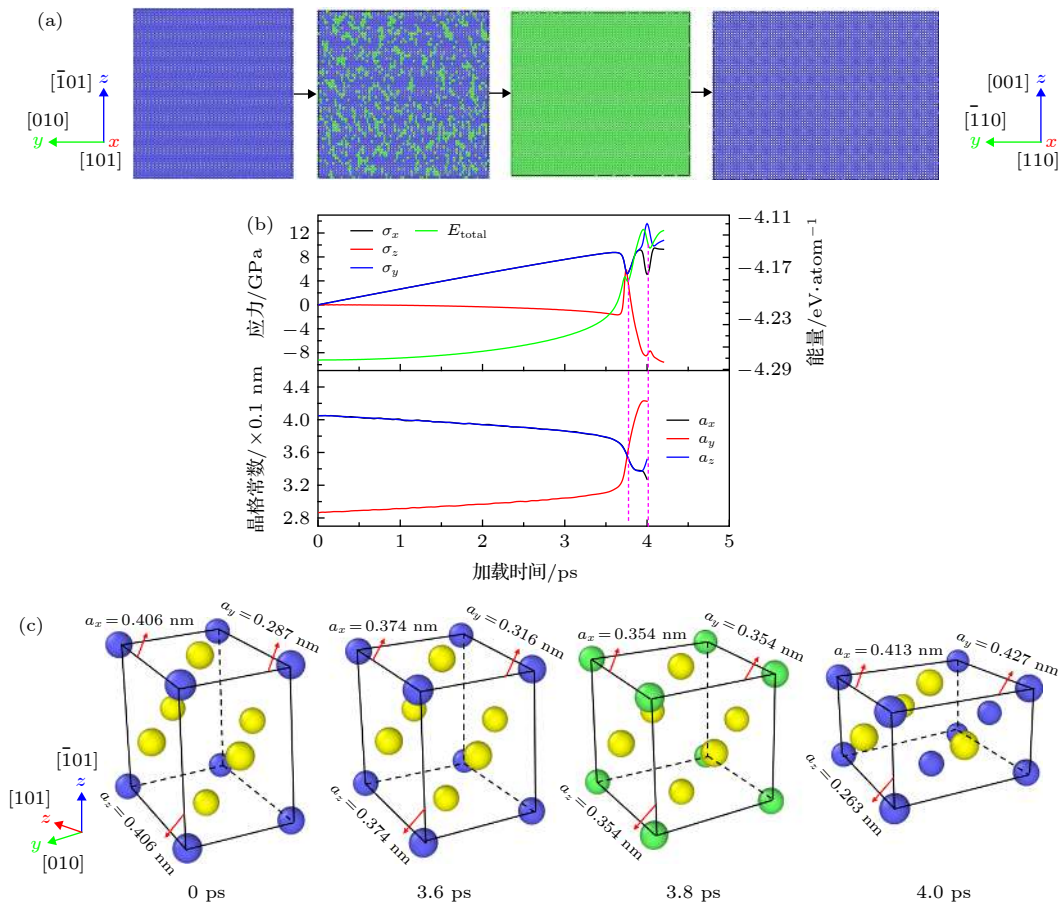


图 6 BCC 铁沿  $[101]$  和  $[\bar{1}01]$  方向同时压缩下的相变机制 (a) 压缩过程中的三个快照; (b) 应力、晶格常数以及单个原子能量随加载时间的变化; (c) 一个结构单元的相变过程 (结构单元中的面心原子设置为黄色)

Fig. 6. The phase transformation mechanism of BCC iron under simultaneous compression along  $[101]$  and  $[\bar{1}01]$  directions: (a) Three snapshots during compression; (b) the variation of stress, lattice constant and energy of single atom with loading time; (c) the phase transition process of a structural unit (set the face center atom in the structural unit to yellow for easy observation).

### 3.4 沿 [101] 和 [010] 同时压缩

图 7 为 BCC 铁 (模型二) 沿 [101] 和 [010] 晶向同时压缩下的相变过程. 从图 7(a) 可以看出单晶铁发生了 BCC-HCP 的整体相变. 图 7(b) 显示了压缩过程中应力、单个原子总能量以及原子距离随加载时间的变化. 可以看到在整个过程中,  $Z$  方向应力大致为零, 压缩到 10 ps 时刻, BCC 铁达到临界应力 25.6 GPa. 初始状态的原子距离分别为:  $d_{0-1} = d_{0-2} = d_{0-4} = d_{0-5} = 0.247$  nm,  $d_{0-3} = d_{0-6} = 0.287$  nm, 对应能量的最低点  $-4.278$  eV/atom. 在 0—9 ps 内,  $d_{0-3}$  和  $d_{0-6}$  (第二近邻距离) 逐渐减小至 0.247 nm,  $d_{0-1}, d_{0-2}, d_{0-4}$  以及  $d_{0-5}$  (第一近邻距离) 保持不变, 导致 (101) 面变成密排面, 该过程中能量升高为  $-4.148$  eV/atom; 在 9—10.1 ps 内,  $d_{0-3}$  和  $d_{0-6}$  仍然减小至 0.245 nm,  $d_{0-1}, d_{0-2}, d_{0-4}$  以及  $d_{0-5}$  仍然保持不变, 同时 7 号、8 号以及 9 号原子和相邻密排面之间产生相对滑移, 该过程中能量上升至  $-4.155$  eV/atom; 在 10.1—10.5 ps 内,  $d_{0-3}$  和  $d_{0-6}$  急剧减小至 0.239 nm,  $d_{0-1}, d_{0-2}, d_{0-4}$  以及  $d_{0-5}$  增加至 0.259 nm, 最终得到晶格畸变的 HCP

相, 10.5 ps 正好对应局部能谷 ( $-3.865$  eV/atom), HCP 相处于亚稳态. 与之相对应的相变过程在图 7(c) 中给出, 其中  $d_{1-2}, d_{0-3}, d_{0-6}, d_{4-5}$  和  $d_{8-9}$  变化保持一致.

### 3.5 沿 [101]、[010] 和 $[\bar{1}01]$ 三个方向同时压缩

图 8 为 BCC 铁 (模型二) 沿 [101], [010] 以及  $[\bar{1}01]$  三个晶向同时压缩下的相变过程. 在该应力状态下仍然会发生 BCC-HCP 的整体相变, 如图 8(a) 所示. 图 8(b) 给出了在压缩过程中应力、单个原子总能量以及原子距离随加载时间的变化. 由图 8(b) 可以看到: 初始状态的原子距离分别为:  $d_{0-1} = d_{0-2} = d_{0-4} = d_{0-5} = 0.247$  nm,  $d_{0-3} = d_{0-6} = 0.287$  nm,  $d_{1-5} = 0.405$  nm, 对应能量的最低点  $-4.278$  eV/atom. 在 0—11.2 ps 内,  $d_{0-3}$  和  $d_{0-6}$  (第二近邻距离) 逐渐减小至 0.274 nm,  $d_{0-1}, d_{0-2}, d_{0-4}$  以及  $d_{0-5}$  (第一近邻距离) 逐渐减小至 0.237 nm, 该过程中能量升高至  $-4.158$  eV/atom; 在 11.2—12.5 ps 内,  $d_{0-3}$  和  $d_{0-6}$  减小为 0.250 nm, 然而仍然没有转变为密排面; 在 12.5—13.5 ps 内,

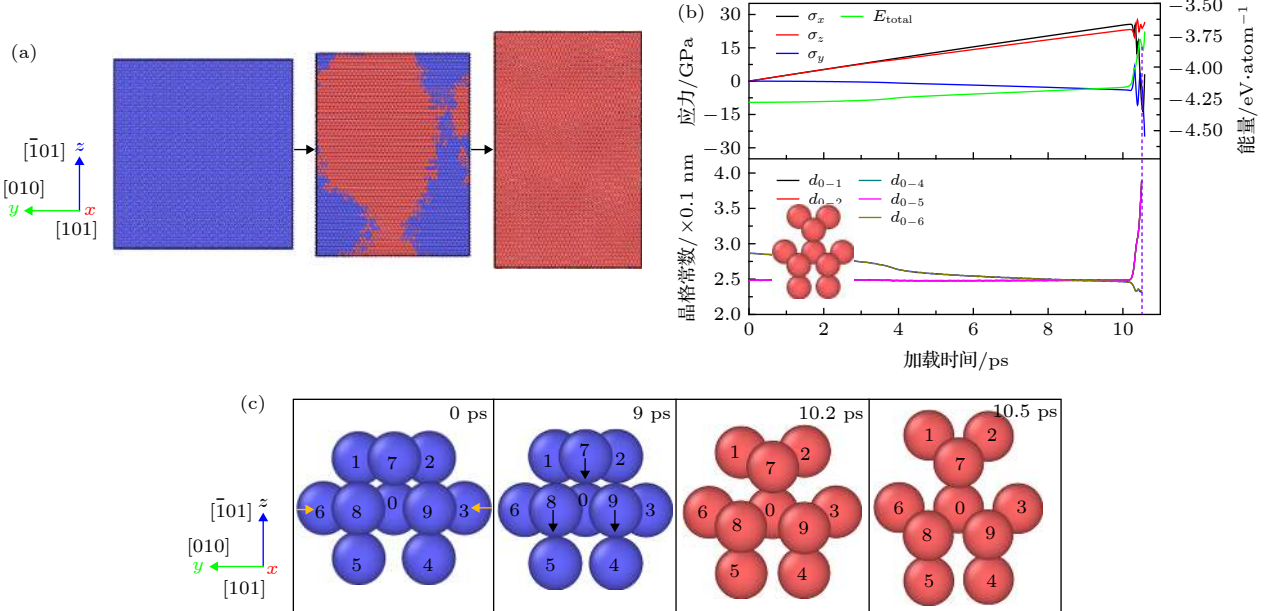


图 7 沿 [101] 和 [010] 方向同时压缩下 BCC 铁的相变机理 (a) 压缩期间的三个快照 (蓝色和红色球分别代表 BCC 相和 HCP 相的铁原子); (b) 应力、原子距离以及单个原子能量随加载时间的变化 (原子距离与 (c) 中原子相对应); (c) BCC-HCP 相变机制 (黄色箭头代表 (101) 面原子收缩方向, 黑色箭头代表 (101) 面相对滑动方向)

Fig. 7. The transformation mechanism of BCC iron under simultaneous compression along [101] and [010] directions: (a) Three snapshots during compression (blue and red spheres represent the iron atoms of BCC and HCP phases respectively); (b) the variation of stress, atomic distance and energy of single atom with loading time (the atomic distance corresponds to the atom in (c)); (c) BCC-HCP phase transformation process (yellow arrow represents the contraction direction of (101) plane, and black arrow represents the relative sliding direction of (101) plane).

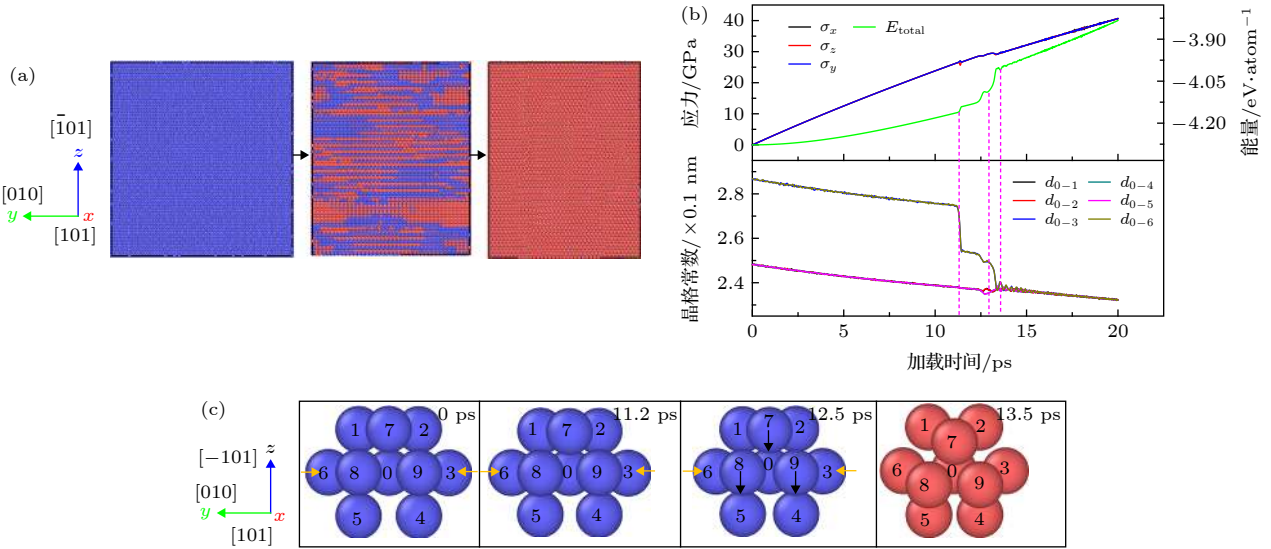


图 8 BCC 铁在三轴压缩下的相变机理 (a) 压缩过程中的三个快照 (蓝色和红色的球分别代表 BCC 相和 HCP 相的铁原子); (b) 应力、原子距离以及单个原子能量随加载时间的变化 (原子距离与 (c) 中原子相对应); (c) BCC-HCP 相变机制 (黄色箭头代表 (101) 面原子收缩方向, 黑色箭头代表 (101) 面相对滑移方向)

Fig. 8. The phase transformation mechanism of BCC iron under triaxial compression: (a) Three snapshots during compression (blue and red spheres represent the iron atoms of BCC and HCP phases respectively); (b) the variation of stress, atomic distance and energy of single atom with loading time (the atomic distance corresponds to the atom in (c)); (c) BCC-HCP phase transformation process (yellow arrow indicates the contraction direction of (101) plane atom, and black arrow indicates the relative sliding direction of (101) plane atom).

$d_{0-3}$  和  $d_{0-6}$  在逐渐减小为 0.238 nm 的过程中 7 号、8 号以及 9 号原子和相邻密排面之间产生相对滑移 (滑移距离  $u \approx 0.069$  nm). 在整个过程中, 能量曲线在 11.2, 12.5 s 和 13.5 ps 出现三个突变点, 前两个对应  $d_{0-3}$  和  $d_{0-6}$  在该时刻的突变, 第三个突变点则对应 HCP 相变的完成. 相变临界压力为 30 GPa, 相变过程显示在图 8(c) 中. 相变完成后, 继续加压到 40 GPa, 晶体结构分析发现铁仍然稳定于 HCP 相. 相变发生时能量没有局域极小值, 而是随压力的增加线性升高, 这是因为 HCP 所受到的压力继续增大, 弹性应变能升高所致.

### 3.6 讨论

根据热力学基本原理, 等温等压条件下吉布斯自由能较低的相比较稳定, 因此相变发生时, 总是从吉布斯自由能较高的相转变为吉布斯自由能较低的稳定相. 图 9 给出了铁的 BCC, FCC 和 HCP 相的吉布斯自由能随静水压力的变化. 零压下 BCC 相的自由能最低, 即 BCC 相最稳定. 三相的自由能都随着压力的升高而升高, 当压力超过 32.7 GPa 时, HCP 相的自由能低于 BCC 相的自由能; 当压力超过 33.6 GPa 时, FCC 相的自由能也低于 BCC 相的自由能, 且 FCC 相自由能近似

等于 BCC 相的自由能. 三向静水压缩 BCC 相, 随着压力逐渐升高, 当达到 32.7 GPa 时, 将发生 HCP 相变, 并随着压力继续升高 HCP 相处于稳定状态. 因为 FCC 相变压力高于 HCP 相变压力, 因此在静水压缩过程中不会发生 FCC 相变. 这和我们的动力学模拟结果一致 (当静水压达到 30 GPa 时发生从 BCC 到 HCP 的相变, 并在高压下 HCP 相处于稳定状态, 且不发生 FCC 相变).

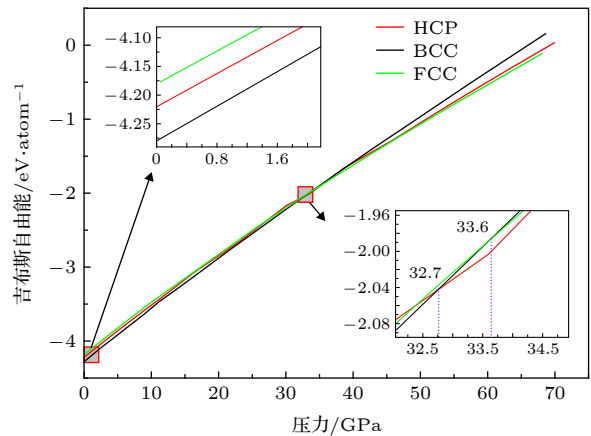


图 9 铁 BCC, HCP 和 FCC 相吉布斯自由能随静水压力的变化

Fig. 9. Gibbs free energies of BCC, HCP and FCC phases change with pressure.

结合动力学模拟及能量分析, Fe 沿 [110] 晶向冲击条件下相变 (HCP 相和少量的 FCC 相) 发生的原因可以理解如下. 图 2(a) 显示冲击波前区域  $[\bar{1}01]$  方向的平均压应力很小, 该处的 Fe 近似处于沿 [101] 和 [010] 双向压缩状态, 当冲击波前通过后, 该区域沿  $[\bar{1}01]$  方向的压力迅速增加, 该区域近似处于三向静水压缩状态. 本工作 3.4 部分的动力学模拟结果显示, 当冲击波前到达时所产生的沿 [101] 和 [010] 的双向压力, 将诱发从 BCC 到 HCP 的相变. 而波前通过后产生的三向静水压力将使 HCP 相处于高压稳定状态. 波前区域总体平均应力处沿 [101] 和 [010] 双向压缩状态, 但不排除波前的个别小区域处于沿 [101] 单向压缩或沿 [101]、 $[\bar{1}01]$  双向压缩状态. 根据本工作 3.2 和 3.3 部分的动力学模拟结果, 此时将会出现 FCC 相变. 冲击波前通过后该区域处于三向静水压状态, 吉布斯自由能分析表明, 高压条件下 FCC 相和 HCP 相的吉布斯自由能近似相等, 都大于 BCC 相的自由能, 从而阻止 FCC 相进一步向 BCC 相的转化, 使 FCC 相在高压下处于稳定状态, 并和 HCP 相共存. 因此, 沿 [101] 方向冲击压缩 BCC 铁最终会产生如图 2(b) 所示的高压密排相 (大量 HCP 相加少量 FCC 相).

## 4 结 论

本文用分子动力学方法研究了 BCC 铁沿 [110] 方向冲击条件下的相变过程. 结果显示, 在冲击载荷作用下, BCC 相转变为密排相, 其中包含大量 HCP 和部分 FCC 产物. 在冲击过程中, FCC 相的形成机制主要是由于 BCC 铁的 [101] 和  $[\bar{1}01]$  的方向突然收缩, 而 [010] 的方向突然膨胀, 使晶格常数在三个方向上的比值达到  $a_x : a_y : a_z = 1 : 1 : 1$ , 实现 BCC 相向 FCC 相的转变. 本文通过设置不同加载方式进一步分析了不同应力状态下的相变机制, 结果表明 BCC 铁的相变机制取决于应力状态, 沿 [101] 晶向单轴压缩以及沿 [101] 和  $[\bar{1}01]$  晶向双轴压缩两种情况发生 BCC-FCC 相变, 相对而言双轴压缩得到的 FCC 相更稳定, 如果继续压缩都会发生从 FCC 到 BCC 的相变. 而沿 [101] 和 [010] 双轴压缩以及三轴压缩两种情况会发生 BCC-HCP 相变. 两种应力状态下的相变机制都是 (101) 面先被压缩成密排面, 然后通过密排

面相对滑移形成 HCP 结构, 区别在于双轴压缩条件下 (101) 晶面先被压缩成密排面, 密排面被压缩的同时相邻密排面之间产生相对滑移, 从而得到晶格畸变的亚稳态 HCP 相; 而三轴压缩条件下, (101) 面先被压缩到一定程度, 在没有形成密排面之前, (101) 面被压缩的同时相邻 (101) 面之间产生相对滑移, 最终形成稳定的高压 HCP 相. 最后我们计算了三个相的吉布斯自由能随压力的变化, 并对冲击模拟结果进行了深入分析, 给出了沿 [101] 晶向冲击条件下高压密排相产生的机制.

## 参考文献

- [1] Bancroft D, Peterson E L, Minshall S 1956 *J. Appl. Phys.* **27** 291
- [2] Wang F M, Ingalls R 1998 *Phys. Rev. B* **57** 5647
- [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] Hawreliak J, Colvin J D, Eggert J H, Kalantar D H, Lorenzana H E, Stölken J S 2006 *Phys. Rev. B* **74** 184107
- [5] Yaakobi B, Boehly T R, Meyerhofer D D, Collins T J B, Remington B A, Allen P G, Pollaine S M, Lorenzana H E, Eggert J H 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 075501
- [6] Hawreliak J A, El-Dasher B, Lorenzana H, Kimminau G, Higginbotham A, Nagler B, Vinko S M, Murphy W J, Whitcher T, Wark J S, Rothman S, Park N 2011 *Phys. Rev. B* **83** 144114
- [7] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2002 *Science* **296** 1681
- [8] Kadau K, Germann T C, Lomdahl P S, Holian B L 2005 *Phys. Rev. B* **72** 064120
- [9] 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
- [10] Ma W, Jing F Q, Zhang Y L, Zhu W J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 066404 (in Chinese) [马文, 经福谦, 张亚林, 祝文军 2011 物理学报 **60** 066404]
- [11] Wang B T, Shao J L, Zhang G C, Li W D, Zhang P 2009 *J. Phys. Condens. Matter* **21** 495702
- [12] 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
- [13] Shao J L, Wang P, Zhang F G, He A M 2018 *J. Phys. Condens. Matter* **30** 255401
- [14] Shao J L, Wang P, Zhang F G, He A M 2018 *Sci. Rep.* **8** 7650
- [15] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [16] Chamati H, Papanicolaou N I, Mishin Y, Papaconstantopoulos D A 2006 *Surf. Sci.* **600** 1793
- [17] Holian B L, Lomdahl P S 1998 *Science* **280** 2085
- [18] Shao J L, Wang P, Qin C S, Zhou H Q 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1254 (in Chinese) [邵建立, 王裴, 秦承森, 周洪强 2008 物理学报 **57** 1254]
- [19] Cui X L, Li Y J, Zhu W J, Qi M L, Wang H Y, He H L, Liu

- J J 2009 *Chin. J. High Pressure Phys.* **23** 37 (in Chinese) [崔新林, 李英骏, 祝文军, 祁美兰, 王海燕, 贺红亮, 刘建军 2009 高压物理学报 **23** 37]
- [20] He A M, Shao J L, Qin C S, Wang P 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5667 (in Chinese) [何安民, 邵建立, 秦承森, 王裴 2009 物理学报 **58** 5667]
- [21] Stukowski A 2012 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 045021
- [22] Stukowski A 2010 *Modell Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [23] Smith R F, Eggert J H, Swift D C, Wang J, Duffy T S, Braun D G, Rudd R E, Reisman D B, Davis J P, Knudson M D, Collins G W 2013 *J. Appl. Phys.* **114** 223507
- [24] Amadou N, Resseguier T D, Brambrink E, Vinci T, Mounaix A B, Huser G, Morard G, Guyot F, Miyanishi K, Ozaki N, Kodama R, Koenig M 2016 *Phys. Rev. B* **93** 214108
- [25] Gunkelmann N, Tramontina D R, Bringa E M, Urbassek H M 2014 *New J. Phys.* **16** 093032
- [26] Amadou N, de Resseguier T, Dragon A, Brambrink E 2018 *Phys. Rev. B* **98** 024104
- [27] Shao J L, Qin C S, Wang P 2008 *Acta Metall. Sin.* **44** 1085 (in Chinese) [邵建立, 秦承森, 王裴 2008 金属学报 **44** 1085]
- [28] Dewaele A, Denoual C, Anzellini S, Occelli F, Mezouar M, Cordier P, Merkel S, Véron M, Rausch E 2015 *Phys. Rev. B* **91** 174105
- [29] Xie H X, Yu T, Fang W, Yin F X, Khan D F 2016 *Chin. Phys. B* **25** 126201
- [30] Cui X L, Zhu W J, He H L, Deng X L, Li Y J 2008 *Phys. Rev. B* **78** 024115
- [31] He H L, Zhu W J, Deng X L, Li Y J, Cui X L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5545 (in Chinese) [贺红亮, 祝文军, 邓小良, 李英骏, 崔新林 2006 物理学报 **55** 5545]
- [32] Cui X L, Zhu W J, He H L, Deng X L, Li Y J 2007 *Chin. J. High Pressure Phys.* **21** 433 (in Chinese) [崔新林, 祝文军, 贺红亮, 邓小良, 李英骏 2007 高压物理学报 **21** 433]
- [33] Dremov V V, Ionov G V, Sapozhnikov F A, Smirnov N A, Karavaev A V, Vorobyova M A, Ryzhkov M V 2015 *EPJ Web Conf.* **94** 04023
- [34] Djohari H, Milstein F, Maroudas D 2009 *Phys. Rev. B* **79** 174109
- [35] 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
- [36] Guo Y F, Wang Y S, Zhao D L, Wu W P 2007 *Acta Mater.* **55** 6634

# Formation mechanism of face-centered cubic phase in impact process of single crystal iron along [101] direction\*

Ma Tong Xie Hong-Xian<sup>†</sup>

(School of Mechanical Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300401, China)

(Received 11 December 2019; revised manuscript received 12 April 2020)

## Abstract

The impact phase transformation of body-centered-cubic iron is one of the hotspots in current research. Many studies demonstrated that when iron is impacted along the [100] direction, body-centered-cubic phase will transform into hexagonal close-packed phase; while when it is impacted along the [101] direction, a certain amount of face-centered-cubic phase will also appear besides hexagonal close-packed phase. The transformation from body-centered-cubic to hexagonal close-packed phase has been clarified, however, the transformation from body-centered-cubic to face-centered-cubic phase still needs further exploring. In the present work, molecular dynamics simulation is used to study the phase transformation of body-centered-cubic iron impacted along the [101] direction. The results show that the body-centered-cubic phase will transform into a close-packed structure including hexagonal close-packed phase and face-centered-cubic phase). The formation mechanism of face-centered-cubic phase is as follow. In the loading process, single crystal iron suddenly contracts along the [101] and  $\bar{1}01$  directions, and expands along the [010] direction, leading to the transformation from body-centered-cubic phase to face-centered-cubic phase. The formation mechanism of hexagonal close-packed phase can be divided into two stages: first, (101) plane is compressed into close-packed plane, then hexagonal close-packed phase is obtained by the relative sliding of adjacent close-packed planes. To further investigate the formation mechanism of the close packed structure, the effect of stress state on the phase transformation of body-centered-cubic iron is further studied. Under one-dimensional (along the [101] direction) or two-dimensional loading (along [101] and  $\bar{1}01$  directions), the body-centered-cubic iron transforms into face-centered-cubic iron. In the loading process the lattice constants along the three dimensions are monitored. When the transformation from body-centered-cubic phase to face-centered-cubic phase finishes, the ratio of lattice constants along three directions is 1:1:1.31 under one-dimensional loading; while the ratio of lattice constants is 1:1:1 under two-dimensional loading. Obviously, the body-centered-cubic phase transforms into distorted face-centered-cubic phase under one-dimensional loading. Under two-dimensional (along the [101] and [010] direction) and three-dimensional loading (along the [101], [010] and  $\bar{1}01$  direction), the body-centered-cubic phase transforms into hexagonal close-packed phase. Gibbs free energy value for each of BCC, HCP and FCC phase is calculated. The calculation results show that the BCC phase is stable under low pressure, while the HCP and FCC phase are stable under high pressure. Finally, based on Gibbs free energy and the effect of stress state on the phase transformation, the phase transformation mechanism of body-centered-cubic iron under [101] impaction is investigated, and a reasonable explanation for the phase transformation is obtained.

**Keywords:** molecular dynamics simulation, phase transformation, impact, iron

**PACS:** 02.70.Ns, 05.70.Fh

**DOI:** 10.7498/aps.69.20191877

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11875015, 51571082) and the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. A2019202196).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [hongxianxie@hebut.edu.cn](mailto:hongxianxie@hebut.edu.cn)