

冲击加载下孔洞诱导相变形核分析*

邵建立[†] 王 裴 秦承森 周洪强

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(2007 年 1 月 15 日收到, 2007 年 6 月 18 日收到修改稿)

用分子动力学方法模拟了冲击加载(沿 [001] 向)下单晶 Fe 中孔洞诱导相变形核及生长过程, 并分析了初始温度对这一生长过程的影响. 数值模拟显示: 1) 相变形核首先出现在孔洞周围的(110)和($\bar{1}\bar{1}0$)面上, 并分别沿 $[\bar{1}\bar{1}0]$, $[\bar{1}10]$ 和 $[110]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 向生长成片状, 之后核的生长方向则变为沿 $[111]$ 向, 形成“V”形板条状新相颗粒. 2) 在相同冲击压力下, 初始温度为 300 K 时在新相晶核边缘出现许多核胚, 生成的新相颗粒比 60 K 时明显减小. 这些现象表明, 孔洞诱导相变形核及生长过程沿着特定晶向进行, 而初始温度的升高可以分散孔洞对相变形核的诱导作用. 统计了孔洞周围应力体积张量及能量的分布, 对相变形核及生长过程进行了初步分析.

关键词: 相变, 孔洞, 分子动力学

PACC: 8130K, 6710Q, 7115Q

1. 引 言

马氏体相变是典型的切变共格型相变, 即基体原子集体有规律的近程迁移形成新相, 新相与母相保持共格的关系. 冲击相变则是指物质在冲击下发生的结构和物态变化的临界现象. Fe 在冲击高压下发生的马氏体相变已为人们所熟知, 该相变在微观上表现为原子排列方式从体心立方(bcc)变为六方密排(hcp)结构. 早在 1956 年, Bancroft 等人根据冲击波形的测量得到 Fe 发生结构相变的冲击压力为 13 GPa^[1]; 2005 年, Kalantar 等人^[2]用纳秒 X 射线衍射方法实现了对 Fe 的冲击相变微观过程的观察, 其观察结果与 Kadau 等人^[3]采用大规模非平衡分子动力学模拟的结果是一致的.

随着近年来计算机技术的飞速发展以及人们对原子间相互作用势愈加准确的描述^[4-8], 分子动力学模拟成为一种研究材料动态性质和结构变化的重要方法^[3, 9-15], 其中 1991 年 Robertson 等人^[9]首次实现了对冲击波分裂现象的模拟, 2002 年 Kadau 等人^[3]成功实现了冲击压缩下单晶 Fe 中发生马氏体相变微观过程的模拟. 实际中, 相变往往率先发生在母相中某些有利形核的位置(如晶界、位错、空穴等晶体缺陷处), 崔新林等^[14]分析了不同冲击压力下

单晶 Fe 中纳米孔洞诱导结构相变及其微观机理. 但至今对非均匀形核、生长过程的规律性认识以及温度等因素对形核过程影响的分析还很缺乏.

本文模拟了冲击加载下单晶 Fe 中含有直径为 2.5 nm 的孔洞, 初始温度分别为 60 和 300 K 的非均匀相变形核及生长过程. 观察到孔洞周围的新相晶核的生长沿着特定晶向进行, 且随初始温度升高, 所生长成的新相晶粒减小并在晶粒边缘出现诸多细小的核胚. 通过计算波后的应力体积张量和能量分布, 对上述相变形核、长大规律进行了初步分析.

2. 计算方法与模型

本文采用 Voter-Chen 型 Fe 的嵌入原子法(EAM)势函数^[6], 该势函数可以较好地描述压力驱动下 Fe 的力学性质和结构相变行为^[3], 其形式可写为

$$U_{\text{tot}} = (1/2) \sum_{i, j (i \neq j)} \phi(r_{ij}) + \sum_i F(\bar{\rho}_i), \quad (1)$$

式中 r_{ij} 是原子 i 与原子 j 之间距离, ϕ 表示两体相互作用势, F 表示将原子 i 埋入在电子密度为 $\bar{\rho}_i$ 的位置上所必需的能量. 两体势 ϕ 采用 Morse 势, 密度的形式为

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

* 国家自然科学基金与中国工程物理研究院联合基金重点项目(批准号:10476027)和中国工程物理研究院科学技术发展基金(批准号:2007A09001)资助的课题.

[†] E-mail: shao_jianli@iapcm.ac.cn

其中 β 为可调参数. 嵌入能 F 通过拟和 Fe 的晶格常数、结合能、体积模量的实验值来具体确定.

计算模型选取 $50a \times 50a \times 80a$ (共 399308 个原子) 的单晶 Fe (bcc), a 为晶格常数. 孔洞设在距离右端自由表面约 $35a$ 处, 孔洞直径为 2.5 nm, 如图 1 所示. 采用速度标定法^[16] 设置了温度分别为 60 K 和 300 K 的两种初态, 并通过调节晶格常数的大小使初态压力为零. 撤销对温度的控制并将系统弛豫 2 ps. 之后, 采用“动量反射”的方法沿 z 方向加载冲击波^[17], 并沿 x, y 方向施加周期性边界条件. 本文中 x, y, z 坐标轴分别沿 $[100]$ $[010]$ $[001]$ 向. 运动方程的求解采用速度 Verlet 算法^[18], 计算时间步长为 0.001 ps.

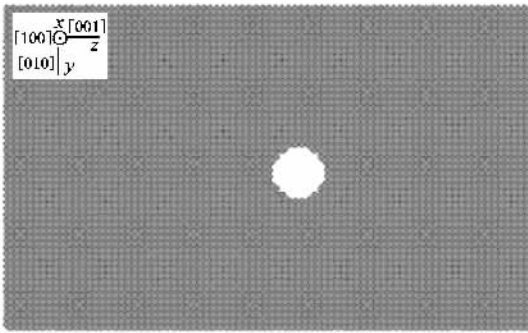


图 1 靠近孔洞中心的 2 层 (100) 面

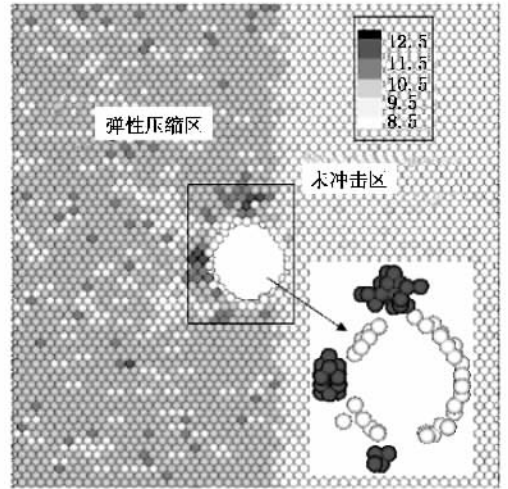


图 2 孔洞在 $(\bar{1}10)$ 面形核的微观结构

图 3 (a) 给出新相晶核在单晶 Fe 样本中的生长过程. 结果显示新相晶核在 (110) 和 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面的生长出现分叉现象. 为了更加清楚地说明这一形核生长过程的规律以及初始温度对该过程的影响, 对靠近孔洞中心的 6 层 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面在初始温度分别为 60 K 和 300 K 时新相晶核的生长过程进行了观察和分析, 见图 3 (b) 和 (c). 图 3 (b) 显示孔洞上方的新相晶核首先沿 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 向生长, 然后分裂为沿 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 向而最终生成“V”形板条状新相颗粒, 且在生长过程中新相晶核边界保持相对光滑; 当初始温度升高为 300 K 时 (见图 3 (c)), 新相晶核边界变得很粗糙, 并在晶核边缘出现诸多较小的分散的核胚, 这些核胚阻碍了新相晶核的连续生长, 最终生成尺寸较小的新相颗粒. 上述现象表明晶核的生长沿着特定晶向进行, 且初始温度的升高可以分散孔洞对相变的诱导作用.

3. 结果分析

3.1. 相变形核及生长过程

图 2 (a) 给出初始温度为 60 K, 活塞速度为 0.36 km/s 在样本中产生的弹性压缩波经过孔洞时的微观结构. 图中颜色灰度代表相应原子配位数的值, 图中右边浅色 (配位数为 8) 区域为波前状态, 左边颜色较深 (配位数为 10) 的区域为冲击压缩状态. 对本文模拟来说, 孔洞诱导 Fe 马氏体相变的惯习面 (马氏体总是在母相的一定晶面上开始形成, 此面即马氏体转变中的惯习面, 通常以平行于惯习面的母相晶面指数表示, 参见文献 [19]) 为 (110) 和 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 密排面. 图 2 给出了冲击波经过孔洞时 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面 (取距离孔洞中心最近的 6 层) 的微观结构. 发现当冲击波传播至图 2 所示时刻, 伴随孔洞塌缩, 在孔洞左边、上边及下边区域的原子率先在 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面上形成高压相晶核 (hcp, 配位数为 12).

3.2. 对相变形核及生长过程的分析

首先, 对孔洞周围原子的滑移状态进行了分析. 追踪 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面上原子位置历史发现, 相变区域的原子主要是沿 111 密排方向滑移, 并在滑移区形成晶格的剪切畸变, 如图 4 (a) 所示, 同时相邻 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面上原子的上述滑移幅度不同, 晶格的这种畸变过程构成了相应区域相变发生的微观机理; 而在孔洞上下边缘, 由于原子沿 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 和 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 向滑移的对称性, 则不同 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面的原子主要沿 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 向的相对滑移而完成相变, 该区域原子的滑移过程与文献 [14] 中描述相变机理相同. 图 4 给出了原子滑移过程应力

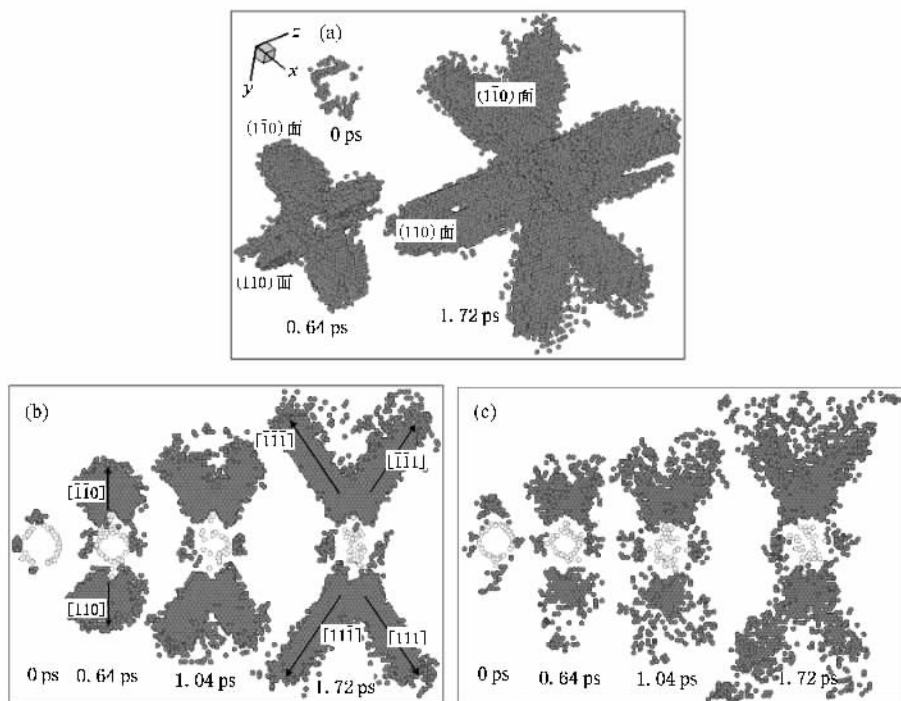


图 3 形核生长过程. 其中(b)和(c)为(110)面形核及生长过程 (a)60 K (b)60 K (c)300 K

体积张量 $\sigma_s V$, $\sigma_{zz} V$ 及 $\sigma_{xx} V$ 的分布, 其中 σ_s 为最大剪应力 $\sigma_{zz} - (\sigma_{xx} + \sigma_{yy})/2$, V 为原子体积. 这里主要关心晶格畸变产生的应力与应变的分布, 略去了原子的动量流对应力的贡献. 图 4(a) 显示出形核区域应力状态与其他区有明显不同, 即形核区域的纵向压应力小于横向压应力. 由图 4(b) 和(c) 还可以看到, 在孔洞附近如 1, 2, 3, 4 所示的密排方向出现了 $\sigma_{zz} V$ 值偏低和 $\sigma_{xx} V$ 值偏高的分布(见 1, 2, 3, 4 区域). 由此可推知(忽略相变时 V 的变化)相变形核

的生长过程是在孔洞塌缩引起的“纵向拉应力”和“横向压应力”的超应力松弛状态.

从能量观点来看, 由于孔洞塌缩使周围晶格产生畸变, 从而相应区域的原子储存了畸变能, 使得在这些区域形核的激活能降低, 或者说, 由于晶格畸变使相应原子获得了附加能量而使相变容易进行. 图 5(a) 和(b) 给出了初始温度分别为 60 K 和 300 K 的波后势能分布. 从图 5(a) 可以看到孔洞塌缩导致 (110) 面相应密排方向区域的原子势能明显高于其

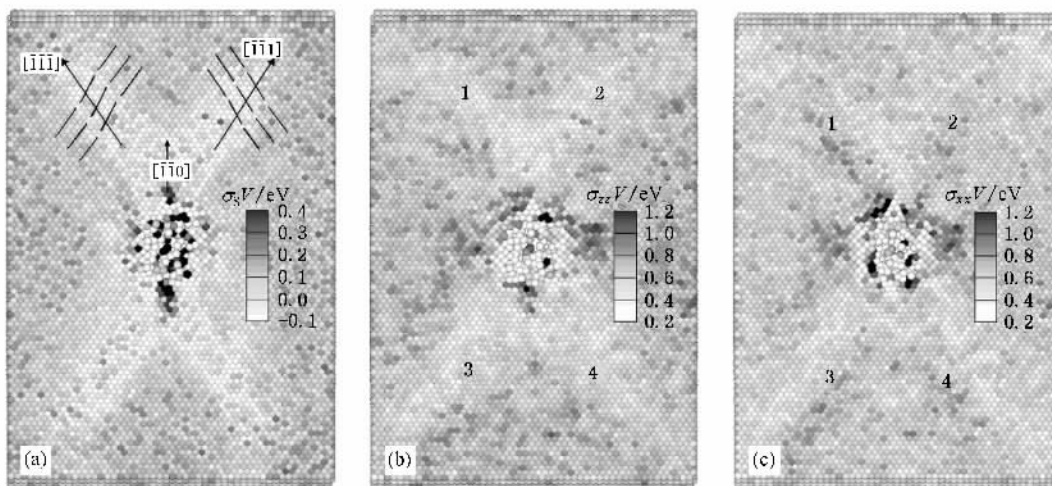


图 4 (110)面上的应力体积张量分布 (a) $\sigma_s V$ (b) $\sigma_{zz} V$ (c) $\sigma_{xx} V$

他位置,使这些区域的原子越过了相变势垒而完成相变(见图 3(b)).对于图 5(b)中情况,由于初始温度的升高,孔洞周围引起势能分布的方向依赖性减

弱且势能起伏较大,这使得在新相晶核周围形成许多细小的核胚,这些分散的核胚阻止了新相晶核的进一步连续生长.

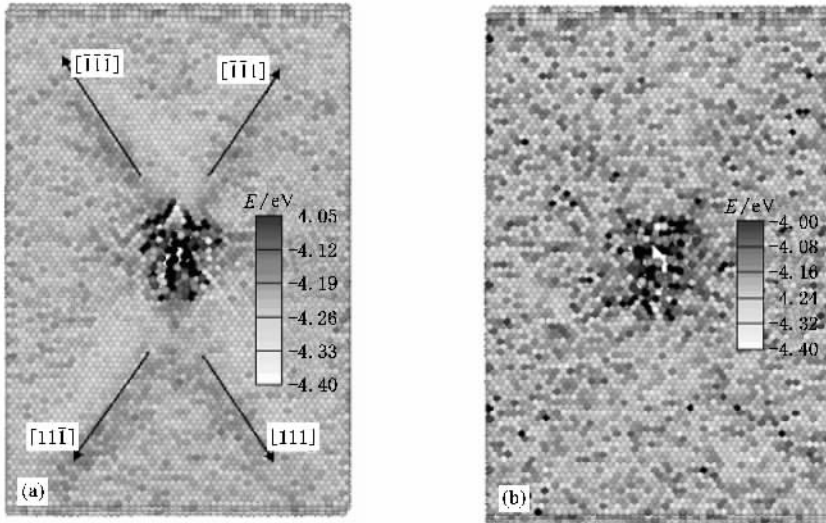


图 5 ($\bar{1}\bar{1}0$)面上的势能分布 (a)60 K (b)300 K

4. 结 论

本文用分子动力学方法模拟了不同初始温度下 Fe 中孔洞诱导相变形核及生长过程,模拟结果表明:1)冲击加载下首先在孔洞周围的 (110) 和 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 密排面上形核并分别沿 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 向和 $[110]$ 、

$[\bar{1}\bar{1}0]$ 向生长,之后新相晶核开始分裂为沿 (110) 和 $(\bar{1}\bar{1}0)$ 面上的 111 向进一步生长,这一生长过程是由于孔洞塌缩引起相应密排方向的晶格畸变促进了相变的发生.2)随着初始温度升高,孔洞诱导形核颗粒减小;从能量观点来看,这是由于较高的初始温度使孔洞周围形成的势能起伏较大,生成较多细小的分散的核胚而阻止了新相晶核的连续生长.

[1] Bancroft D , Peterson E L , Minshall S 1956 *J. Appl. Phys.* **27** 291
 [2] Kalantar D H , Belak J F , Collins G W *et al* 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 075502
 [3] Kadau K , Germann T C , Lomdahl P S , Holian B L 2002 *Science* **296** 1681
 [4] Daw M S , Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
 [5] Finnis M W , Sinclair J E 1984 *Philos. Mag.* **A 50** 45
 [6] Harrison R J , Voter A F , Chen S P 1989 *Atomistic Simulation of Materials Beyond Pair Potentials* (New York : Plenum Press) p219
 [7] Li R W , Pan Z Y , Huo Y K 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 7 (in Chinese) [李融武、潘正瑛、霍裕昆 1996 物理学报 **45** 7]
 [8] Wang F H , Li C L , Li X J , Jing F Q 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 114 (in Chinese) [王藩侯、杨传路、李西军、经福谦 2000 物理学报 **49** 114]
 [9] Robertson D H , Brenner D W , White C T 1991 *Phys. Rev. Lett.* **67** 3132
 [10] Kadau K , Entel P , Lomdahl P S 2002 *Comput. Phys. Commun.* **147** 126

[11] Latapie A , Farkas D 2003 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **11** 745
 [12] Liang H Y , Wang X X , Wu H A , Wang Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2308 (in Chinese) [梁海弋、王秀喜、吴恒安、王宇 2002 物理学报 **51** 2308]
 [13] Chen J , Jing F Q , Zhang J L , Chen D Q 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2386 (in Chinese) [陈军、经福谦、张景琳、陈栋泉 2002 物理学报 **51** 2386]
 [14] 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]
 [15] 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]
 [16] Hoffmann K H 1996 *Computational Physics* (Berlin Heidelberg : Springer-Verlag) p268
 [17] Holian B L , Lomdahl P S 1998 *Science* **280** 2085

- [18] Swope W C , Andersen H C , Berens P H , Wilson K R 1982 *J. Chem. Phys.* **76** 637
- [19] Bilby B A , Christian J W 1956 *The Mechanism of Phase Transformation in Metals* (London : Inst. Metals) p121

Study of nucleation of void-induced phase transformation under shock compression ^{*}

Shao Jian-Li[†] Wang Pei Qin Cheng-Sen Zhou Hong-Qiang

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

(Received 15 January 2007 ; revised manuscript received 18 June 2007)

Abstract

Molecular dynamics simulations have been used to study the nucleation and growth of void-induced phase transformation of single crystal Fe under shock-wave loading along the $[001]$ direction and effects of initial temperature on the process. It was found that : 1) phase transformation nucleates firstly on the (110) and $(\bar{1}\bar{1}0)$ planes around the void and grows along the $[\bar{1}\bar{1}0]$, $[\bar{1}10]$ and $[110]$ $[\bar{1}\bar{1}0]$ directions , respectively , and then grow along 111 directions of the (110) and $(\bar{1}\bar{1}0)$ planes , and ultimately “ V ” shaped grains form ; 2) under the same shock compression , grains at initial temperature 300 K are smaller than those at 60 K , and at the same time , many embryos appear around the grains. These phenomena indicate that void-induced phase transformation nucleates and grows along certain directions , and increasing the initial temperature can diversify the action. Finally , we calculate the statistics of pressure-volume tensor and energy distributions , and give a preliminary analysis of the nucleation and growth of phase transformation.

Keywords : phase transformations , void , molecular dynamics

PACC : 8130K , 6710Q , 7115Q

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China and Chinese Academy of Engineering Physics (Grant No. 10476027) and the Foundation for Development of Science and Technology of Chinese Academy of Engineering Physics , China (Grant No. 2007A09001).

[†] E-mail : shao_jianli@iapcm.ac.cn