

点缺陷类型和浓度对 α -Fe 塑性变形行为影响的分子动力学模拟

李翔^{1,2}, 尹益辉¹, 张元章¹

(1. 中国工程物理研究院 总体工程研究所, 四川 绵阳 621999)

(2. 西南科技大学 应用技术学院, 四川 绵阳 621010)

摘要: 为了深入认识点缺陷对 α -Fe 塑性变形行为的影响, 建立含点缺陷的 α -Fe 试样计算模型, 以点缺陷的原子浓度为变量, 开展试样单轴拉伸的分子动力学模拟。研究表明: 在相同的缺陷浓度下, 不同类型的点缺陷导致的晶格畸变程度不同, 因而试样发生塑性变形的难易程度就不同, 其中自间隙 Fe 原子导致的晶格畸变程度比空位大, 相应试样更容易发生塑性变形; 试样的塑性变形机制随点缺陷类型和浓度而变化, 进而使试样的应力-应变曲线特征发生显著变化; 对于本模拟中各浓度含空位的试样, 或含较低浓度自间隙 Fe 原子或 Frenkel 缺陷的试样, 塑性变形表现为拉伸应力诱发的相变和位错滑移混合的机制; 对于含较高浓度自间隙 Fe 原子或 Frenkel 缺陷的试样, 塑性变形以位错滑移和非晶化塑性变形为主且伴随有相变。本研究加深了有关点缺陷对金属变形机制影响的认识, 为后续分析多晶 α -Fe 材料的物理和力学性质奠定了有益的基础。

关键词: α -Fe; 点缺陷; 相变; 非晶化塑性变形

中图分类号: TL341

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2022)08-2881-11

不锈钢具有良好的力学性能和优良的加工性能, 是核工业中常用的结构材料, 广泛用于核反应堆部件中^[1,2]。如奥氏体不锈钢 316 和 316Ti 用于反应堆的包壳^[2], 国产低合金铁素体钢 A508-3 用于反应堆的压力容器^[3,4]; 低活化马氏体钢 (china low activation martensitic, CLAM)^[5]、氧化物弥散强化钢 (oxide dispersion strengthened, ODS)^[6] 是核聚变反应堆第一壁最有前景的候选结构材料之一。服役条件下, 核反应堆中的核结构材料不可避免地经受高能中子或其它高能粒子的辐照作用, 如裂变反应堆中的结构材料将受到 2 MeV 中子的辐照作用, 而核聚变反应中第一壁结构材料将承受 14 MeV 中子的辐照作用^[1]。金属材料因辐照而产生点缺陷, 产生机制之一是中子与材料中的元素发生嬗变反应而生成以氢、氦为主的杂质原子^[7]; 之二是高能中子引发级联碰撞导致核结构材料中的原子离位, 生成由一个空位和一个自间隙原子组成的 Frenkel 缺陷, 且其形成时间在皮秒量级^[7]。虽然由第二种机制即级联碰撞产生的大部分 Frenkel 缺陷会发生复合湮没或被尾间吸收^[7], 但因辐照损伤效应, 核结构材料中总是存在一定数量的稳定 Frenkel 缺陷,

特别是在材料辐照损伤表层, 且其浓度随着辐照能量的增加而增大^[8,9]。氢、氦会严重损害材料的结构和性能, 相关的研究和结果已较为深入^[10-15]。然而对于核结构材料中的 Frenkel 缺陷, 已有的研究主要集中在认识其形成、分布规律及对材料力学性能的影响上^[8,9,16-21], 还没有充分关注其对材料变形机制的影响。同样, 与 Frenkel 缺陷的研究情况类似, 已有的有关空位和自间隙原子的研究也是着重关注了它们对材料力学性能的影响, 而在对材料变形机制的影响方面还缺乏足够的认识^[19,20,22]。显然, 为了从微观尺度深入理解材料的辐照损伤效应, 以便准确评估结构的服役能力, 不仅要研究点缺陷对材料力学性能的影响, 也必须研究它们对材料变形机制的影响。

由前述可知, 经级联碰撞产生 Frenkel 缺陷的过程在皮秒量级, 受实验条件限制, 对这样短时间的过程很难开展实时的实验研究^[17], 且实际材料中总有位错、晶界和相界等缺陷, 与空位相比, 自间隙原子更容易迁移, 也更容易被这些缺陷吸收^[7,23], 进而“破坏” Frenkel 缺陷的完整性。这使得通过实验方法研究 Frenkel 缺陷对材料力学性能和变形机制的影响更加

收稿日期: 2022-02-23

基金项目: 国家自然科学基金 (11572298, 11702280)

作者简介: 李翔, 男, 1984 年生, 博士生, 中国工程物理研究院总体工程研究所, 四川 绵阳 621999, E-mail: lixiangmy@126.com

困难，在此基础上与空位缺陷和自间隙原子缺陷的实验对比研究更难开展。随着计算机软硬件技术的发展，分子动力学 (molecular dynamics, MD) 方法已成为在原子尺度研究材料特性的有力工具^[24-27]。针对辐照效应，研究者们通过 MD 方法已开展了金属级联碰撞及缺陷演化过程的相关研究^[8,9,16-18,28]，也开展了辐照后的缺陷对铌^[8]、锆^[19]、铁^[20,21]和钛^[22]力学性能影响的研究，取得了很多有意义的结果，如自间隙原子对材料力学性能的影响最大、Frenkel 缺陷的影响次之、空位的影响最弱等^[19,20]。尽管如此，有关空位、自间隙原子和 Frenkel 缺陷对材料力学性能产生影响不同的原因还缺乏足够关注，也没有充分认识这些点缺陷对材料变形机制的影响。近期 Lin 等^[20]采用 MD 方法的研究中，关注了不同点缺陷对 α -Fe 抗拉强度等力学性能指标的影响，但没有充分关注点缺陷类型和浓度对 α -Fe 变形行为影响的微观作用机制。事实上，空位和自间隙原子是金属材料中常见的点缺陷，通过 MD 方法在原子尺度对比研究空位、自间隙原子和 Frenkel 缺陷等点缺陷对材料微观结构影响的异同，将有助于深入认识这些点缺陷影响材料力学性能和变形行为的微观作用机制，从而为抗辐照新材料的研发提供理论支撑。Fe 作为铁基核结构材料的主要元素，研究空位、自间隙 Fe 原子和 Frenkel 缺陷等点缺陷对 α -Fe 变形行为影响的微观作用机制，无疑具有重要的科学意义和直接的工程价值。

本研究以点缺陷的原子浓度为自变量，建立了分别含空位、自间隙 Fe 原子和 Frenkel 缺陷的 α -Fe 试样计算模型，开展 MD 模拟研究。对试样施加位移载荷进行单轴拉伸，得到了含点缺陷 α -Fe 试样的工程应力-应变曲线，通过观察试样在拉伸至断裂过程中材料微观结构的演化过程，分析点缺陷类型和浓度对 α -Fe 试样塑性变形行为的影响规律和机制，结果表明：在点缺陷浓度相同的情况下，不同类型的点缺陷导致的晶格畸变程度不同，因而试样发生塑性变形的难易程度就不同；试样的塑性变形机制随点缺陷类型和浓度而变化，进而使试样的应力-应变曲线特征发生显著变化—对于含自间隙 Fe 原子或 Frenkel 缺陷的试样，随着缺陷浓度的增加，由有明显的上、下屈服点变为无明显屈服点，即材料弹性变形和塑性变形的分界由明确变得不明确，同时，试样的塑性屈服段和应变硬化段越来越短，试样的极限强度降低，拉断延伸率减小。

1 计算模型与方法

1.1 分子动力学模型

未受辐照时，核结构材料内的原子按照固定的规

律排列，辐照时级联碰撞会导致点阵原子离位，产生 Frenkel 缺陷，破坏原有的原子排列规律，如图 1 所示^[7]。因此，为了表征辐照产生的点缺陷，参考梁力等^[22]的建模方法，采用如下的方法建立 MD 计算模型。

MD 建模采用 AtomsK^[29] 软件，模拟采用 LAMMPS^[30] 软件。首先，建立如图 2 所示理想晶格的单晶 α -Fe 试样的计算模型，试样大小为 $30a_0 \times 15a_0 \times 110a_0$ ，其中 a_0 为 α -Fe 的晶格常数， $a_0=0.2855$ nm，并在 z 轴方向的上、下端各取 10 层原子 (即 5 个晶胞) 作为试样“夹头”固定端，其余原子所在区域作为标距段—拉伸变形区，变形区的 Fe 原子总数为 90 000 个。然后，分别采用不同的方法在理想晶格的单晶 α -Fe 试样中，构建不同类型的点缺陷，生成含点缺陷的计算模型。对于空位缺陷，在理想晶格 α -Fe 试样中的拉伸变形区，随机删除一定比例的 Fe 原子，留下的空位即为空位缺陷。对于自间隙 Fe 原子缺陷，在拉伸变形区原子的晶格间隙中，随机添加一定比例的 Fe 原子，这些添加的 Fe 原子即为自间隙 Fe 原子缺陷。对于 Frenkel 缺陷，在拉伸变形区先随机删除一定比例的 Fe 原子，留下相应的空位；再在其余原子的晶格间隙中，随机添加同等数目的 Fe 原子，形成自间隙原子；这些随机成对分布的空位和自间隙原子便形成 Frenkel 缺陷。

在较低温度下，空位和自间隙原子复合的几率很小，稳定 Frenkel 缺陷浓度的饱和值也仅在 1.000% 左右^[7,31]，因此本研究对各类型点缺陷都考虑了 0%、0.125%、0.250%、0.500%、0.750% 和 1.000% 共 6 种原子浓度，其中原子浓度是指拉伸变形区中点缺陷数

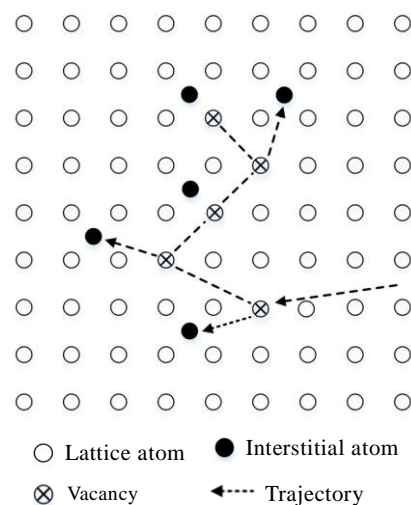


图 1 级联碰撞产生点缺陷的示意图

Fig.1 Schematic of the point defects produced in cascade collisions

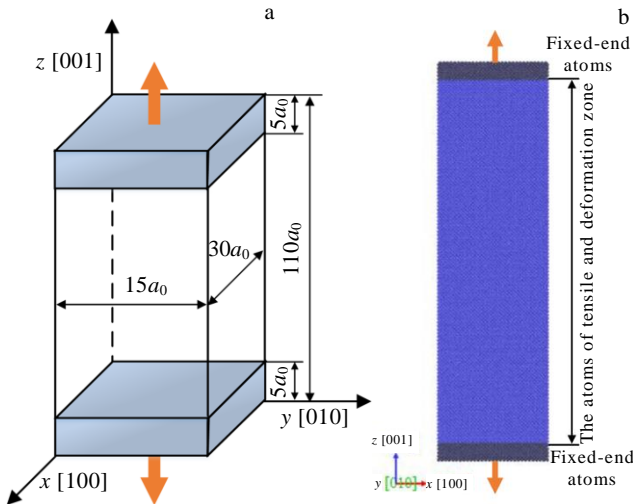


图 2 单轴拉伸试样的 MD 计算模型

Fig.2 MD computational model of sample subjected to uniaxial tension: (a) coordinate and geometry sizes and (b) MD computational model

目与变形区原有 Fe 原子总数之比。显然, 点缺陷浓度为 0% 的试样即是理想晶格的单晶 α -Fe 试样。

1.2 计算与数据处理过程

MD 计算模型中 Fe-Fe 间的相互作用势采用 Ackland 等^[32]开发的势函数。模型的 3 个晶向[100]、[010]和[001]分别对应图 2 中直角坐标系的 x 、 y 和 z 轴, 且 3 个方向均施加周期性边界条件, 模拟温度保持在 300 K, 时间步长为 1 fs。计算模拟过程中, 首先通过共轭梯度法对 MD 模型进行能量最小化, 使其达到较为稳定的构型; 然后对模型进行 150 ps 的弛豫, 使其处于相对稳定状态; 最后在 NVT 系综下, 沿 z 轴方向在试样的“夹头”固定端施加位移载荷, 进行拉伸模拟。由于应变率对材料力学性能的影响, 主要表现为材料的极限强度和断裂应变随应变率的增加而增大, 即应变率强化效应, 而在中、低应变率下的影响则不显著, 因此拉伸应变率应控制在中、低应变率范围^[22]。根据文献[24], 在 MD 模拟中应变率在 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 及以上时才属于高应变率, 因而结合前人的研究成果^[33-35]和本计算模型的规模, 模拟中采用 $5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 的应变率拉伸, 直至模型断裂。

本研究采用相同的拉伸应变率, 对试样进行拉伸模拟, 得到各自的工程应力-应变曲线。由于在应力超过材料的极限强度后, 材料已失稳, 之后的应力或应变数据无实际意义, 因此在给出的应力-应变曲线中没有显示材料失稳后的部分, 并直接取与极限强度对应的应变为断裂应变, 即材料的拉断延伸率。模拟结束

后, 利用可视化软件 OVITO^[36]中的 dislocation extraction algorithm (DXA)^[37]模块分析拉伸过程中各试样中位错的形成情况, 利用共近邻分析法(common neighbor analysis, CNA)^[38]分析拉伸过程中变形区域内晶体结构的演化情况。

2 结果与分析

2.1 建模和计算的合理性验证及点缺陷对 α -Fe 试样应力-应变曲线特征的影响

对点缺陷浓度分别为 0%、0.125%、0.250%、0.500%、0.750% 和 1.000% 的 α -Fe 试样施加拉伸应变, 计算所得工程应力-应变曲线如图 3 所示, 其中理想晶格 α -Fe 试样的应力-应变曲线也就是点缺陷浓度为 0% 时试样的应力-应变曲线。

首先验证建模和计算结果的有效性。为此, 先分析图 3a 所示理想晶格 α -Fe 试样的应力-应变曲线。为了后续叙述方便, 对该图中曲线上的各特征点进行了编号。图 3a 表明, 理想晶格 α -Fe 试样在整个拉伸变形过程中, 总体上包括弹性变形阶段、塑性变形阶段和断裂阶段, 弹塑性过渡区有明显的上、下屈服点, 塑性变形阶段又可分为塑性屈服阶段和应变硬化阶段, 符合体心立方金属的拉伸变形规律^[39]。显然, 理想晶格 α -Fe 试样的屈服强度和极限强度均远远高于宏观实验值, 其主要原因在于宏观试样中不可避免地含有各种缺陷, 使得材料的实际强度远低于理论强度, 而该 MD 模拟结果相当于材料没有任何缺陷时的理论强度。对图 3a 中应变为 0~0.03 (相对宏观实验, MD 模拟中试样的弹性应变区间更大, 为了获取相对准确的杨氏模量, 取应变区间为 0~0.03 的数据点进行线性拟合, 下同) 的区间段进行线性拟合, 得到杨氏模量为 241.18 GPa, 比纯铁宏观实验测试的杨氏模量 211 GPa^[40]大 14.30%, 其偏大的原因也如上所述。尽管如此, 整条应力-应变曲线的形状与宏观体心立方金属的应力-应变曲线形状高度一致, 亦与 Zhang 等^[21]采用 MD 模拟所得铁的拉伸变形规律相似, 并且计算所得杨氏模量超过宏观实验值也不到 15%, 这些表明本研究所采用的拉伸计算方法和选用的拉伸应变率是可行的, 计算结果是有效的。再提取图 3 中同一力学性能指标的数据, 绘制如图 4 所示散点图, 其中对图 3 中有明确屈服点的曲线采用上屈服点的应力作为屈服强度, 而对于没有明确屈服点的曲线则采用 $\sigma_{0.2}$ 作为屈服强度。由图 4 可得如下规律: (1) 相同点缺陷浓度下, 自间隙 Fe 原子对试样力学性能的影响最大, Frenkel 缺陷的影响次之, 空位的影响最小; (2) 整体趋势上, 含点缺陷试样的杨氏模量、屈服强度、

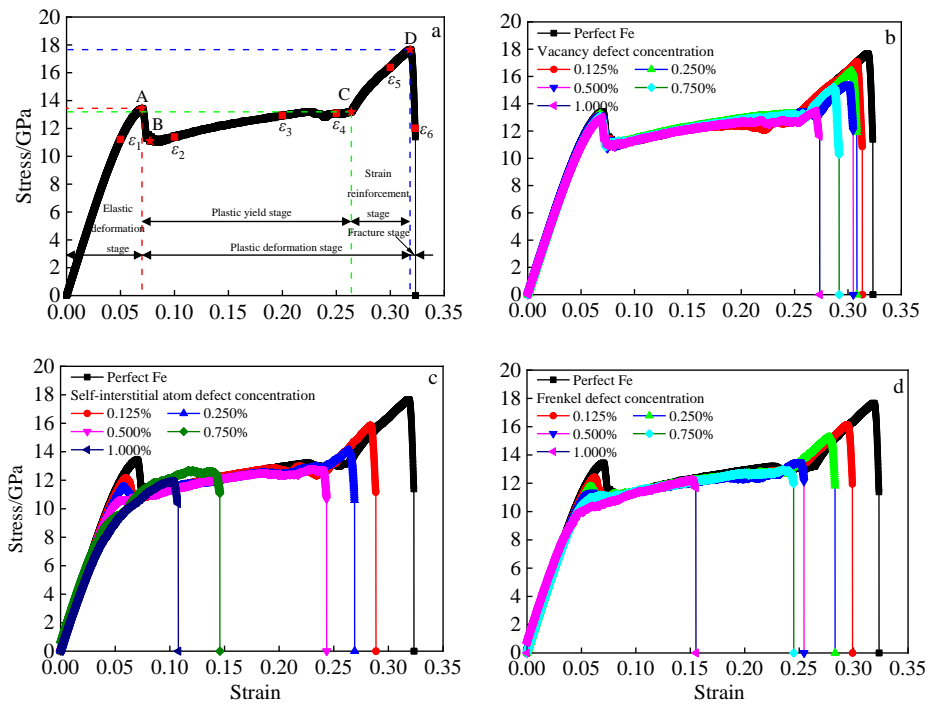


图 3 含点缺陷 α -Fe 试样的应力-应变曲线

Fig.3 Stress-strain curve of α -Fe sample with different types of point defects: (a) perfect lattice, (b) vacancy, (c) self-interstitial Fe atom, and (d) Frenkel defect

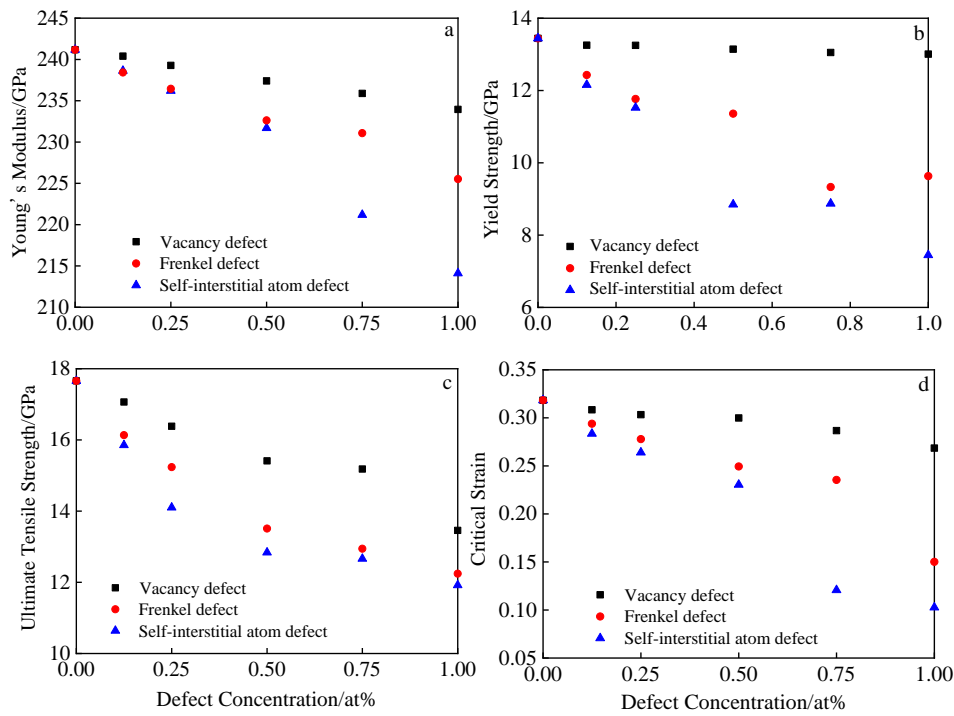


图 4 α -Fe 试样的力学性能随不同类型点缺陷浓度的变化

Fig.4 Change of the mechanical properties of the α -Fe sample with the point defect concentration of various types: (a) Young's modulus, (b) yield strength, (c) ultimate tensile strength, (d) critical strain

极限强度和拉断延伸率均随着点缺陷浓度增大而减小。将以上有关点缺陷类型和浓度对 α -Fe 试样力学性能的影响规律与 Li 等^[19]所得点缺陷对铝的力学性能和 Lin 等^[20]所得点缺陷对铁的力学性能的影响规律比较, 可知它们完全一致。这种影响规律的一致性, 也定性表明本研究针对含不同类型和浓度的点缺陷试样所构建的计算模型和所采用的模拟方法是合理可行的, 计算结果是可信的。

其次分析不同类型和浓度点缺陷对试样应力-应变曲线特征的影响。由图 3b 可知, 在空位浓度由 0% 增大到 1.000% 时, 试样的应力-应变曲线特征均符合体心立方金属的拉伸变形规律, 即空位浓度不影响试样应力-应变曲线的形状特征。比较图 3c 和图 3d 可知, 自间隙 Fe 原子和 Frenkel 缺陷对试样应力-应变曲线特征的影响类似, 主要表现为两点: 一是低浓度的含自间隙 Fe 原子试样 (如 0.125% 和 0.250%) 和低浓度的含 Frenkel 缺陷试样 (如 0.125%、0.250% 和 0.500%) 的应力-应变曲线特征与各浓度含空位试样的类似。二是相对低浓度试样, 当自间隙 Fe 原子浓度较高时 (如 0.500%、0.750% 和 1.000%) 或 Frenkel 缺陷浓度较高时 (如 0.750% 和 1.000%), 试样的应力-应变曲线特征产生了显著变化, 且浓度越高, 变化越明显, 由理想晶格的典型体心立方金属特征变得越接近于典型面心立方金属特征, 突出表现为试样应力-应变曲线的上、下屈服点间距越来越小, 直至无明显屈服点, 即材料弹性变形和塑性变形的分界由明确变得不明确; 同时, 试样的塑性屈服段和应变硬化段越来越短, 试样的极限强度降低, 拉断延伸率减小。

最后在文献[19,20]的基础上, 本节进一步分析不同类型点缺陷对试样力学性能影响程度不同的原因。这里以 Frenkel 缺陷浓度为 1.000% 的试样为例进行分析, 该试样中同时存在相同浓度的自间隙 Fe 原子和空位, 其横截面处的原子应力分布情况如图 5 所示, 比较其中自间隙 Fe 原子和空位引起的局部应力, 明显可见前者比后者大, 表明自间隙 Fe 原子导致的晶格畸变程度比空位更大。而正如级联碰撞后由于自间隙原子与空位的复合会造成稳定 Frenkel 缺陷的数量减少一样, 就具有相同初始缺陷浓度的 Frenkel 缺陷来说, 由于在 MD 模拟的弛豫和拉伸过程中也会发生自间隙 Fe 原子和空位的复合, 因而 α -Fe 试样中的实际 Frenkel 缺陷浓度比初始值低, 相应地, 其引起的晶格畸变程度就介于相同初始浓度自间隙 Fe 原子和空位引起的晶格畸变程度之间。结合这些不同类型点缺陷所导致的晶格畸变情况和所产生的对试样力学性能的影响情况, 可知点缺陷对试样力学性能的影响程度与晶格畸

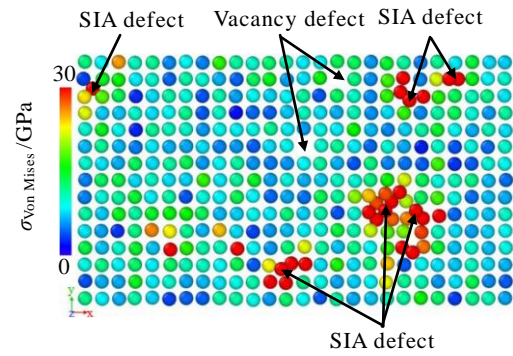


图 5 不同类型点缺陷周围 Fe 原子的应力分布情况

Fig.5 Stress distribution of Fe atoms around different types of point defects (note: the SIA is short for self-interstitial atom, the same below)

变程度正相关, 即点缺陷导致其周围原子产生晶格畸变, 并形成局部高应力点, 这些局部的高应力点使得塑性变形更容易发生, 这与氢对钨塑性变形的影响机制一致^[41]。依据这些结果可判断, 不同类型点缺陷导致晶格畸变程度的不同, 是其对试样力学性能产生不同程度影响的主要原因, 亦是试样发生塑性变形难易程度不同的原因。

2.2 α -Fe 试样拉伸至断裂过程中晶体结构的演化

本节通过 CNA 方法观察试样拉伸至断裂过程中变形区内晶体结构的演化过程, 从微观层次认识在较高自间隙 Fe 原子或 Frenkel 缺陷浓度下, 试样的应力-应变曲线特征发生显著变化的原因。图 6 各子图分别是理想晶格以及空位、自间隙 Fe 原子和 Frenkel 缺陷浓度为 1.000% 的 α -Fe 试样在不同拉伸应变时的晶体结构。结合图 3 中的应力-应变曲线可知, α -Fe 试样的晶体结构随着应变的增大而变化。除了因点缺陷存在而导致的无序原子即非晶化原子外, 在弹性变形阶段各试样拉伸变形区的原子为 bcc 晶体结构。含空位的 α -Fe 试样的晶体结构在塑性屈服阶段逐渐由最初的 bcc 结构转变为 fcc 结构, 在应变硬化阶段大部分已转变为 fcc 结构, 如图 6b 所示。这与如图 6a 所示理想晶格 α -Fe 试样的晶体结构变化情况类似。含自间隙 Fe 原子或含 Frenkel 缺陷的 α -Fe 试样的晶体结构, 在整个塑性变形阶段仅有少量的原子由 bcc 结构转变为 fcc 结构, 分别如图 6c 和图 6d 所示。在塑性变形阶段后期, 试样中都产生有 hcp 结构原子, 如图 6b~6d 所示, 其中含空位试样中 hcp 原子的形成情况与理想晶格试样中的类似, 而含自间隙 Fe 原子或含 Frenkel 缺陷试样中 hcp 原子仅在局部区域少量出现。最后, 当

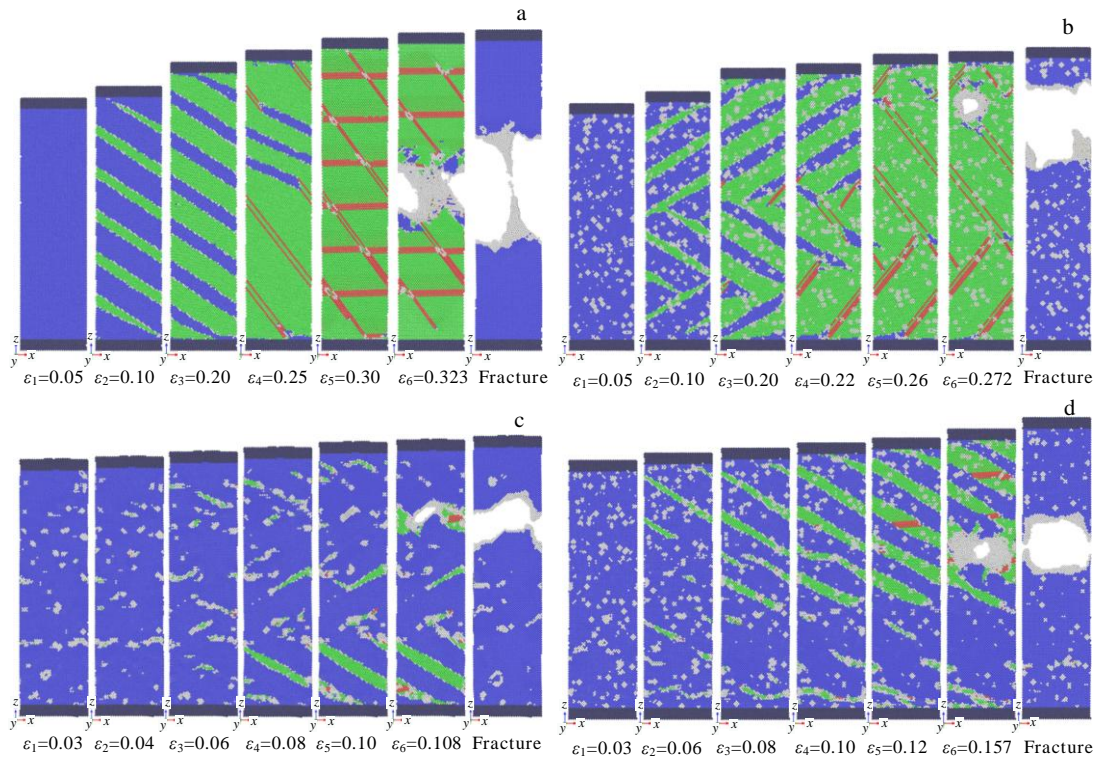


图 6 含不同点缺陷 α -Fe 试样不同拉伸应变时的晶体结构

Fig.6 Crystal structure of the α -Fe sample with different point defects at different tensile strain (blue represents the bcc atoms, green represents the fcc atoms, magenta represents the hcp atoms, white represents the boundary or disordered atoms, and black represents the fixed-end atoms): (a) perfect lattice, (b) vacancy concentration 1.000%, (c) self-interstitial Fe atom concentration 1.000%, and (d) Frenkel defect concentration 1.000%

拉伸应力超过极限强度时，试样中开始出现裂纹，随后裂纹扩展，试样断裂。在试样完全断裂后，除断口附近区域外，拉伸变形区的晶体结构大部分又恢复为 bcc 结构。

为了进一步分析点缺陷类型和浓度对 α -Fe 试样晶体结构的影响，对变形区内晶体结构的演化情况进行统计分析，以定量认识晶体结构随应变的变化情况，所得结果如图 7 所示。图 7 中各子图分别是理想晶格以及含空位、含自间隙 Fe 原子和含 Frenkel 缺陷浓度分别为 0.125% 和 1.000% 时 α -Fe 试样在拉伸至断裂过程中 bcc 结构、fcc 结构、hcp 结构和其它类型结构占比随应变的变化曲线，图中同时画出了相应试样的应力-应变曲线。由图 7a~7d 可知，在缺陷浓度较低时，含不同类型点缺陷试样中晶体结构类型随应变的变化规律与理想晶格试样的变化规律总体上类似。由图 7e~7g 可知，在缺陷浓度较高时，含空位试样中晶体结构类型随应变的变化规律与理想晶格或空位浓度较低时的对应规律总体一致，但含自间隙 Fe 原子或含 Frenkel 缺陷试样中晶体结构类型随应变的变化规律与理想晶格或相应类型缺陷在浓度较低时的对应规律

显著不同。由此可知，在缺陷浓度较高时，试样中晶体结构类型随应变的变化规律与缺陷类型有关。这与图 3 所示不同类型和浓度点缺陷对 α -Fe 试样应力-应变曲线特征的影响规律对应一致。归纳这方面的影响可知，与缺陷浓度较低时相比，当缺陷浓度较高时，含自间隙 Fe 原子或含 Frenkel 缺陷试样的应力-应变曲线特征和晶体结构均变化显著，而含空位的试样则变化都不明显。

2.3 3 种点缺陷对 α -Fe 试样塑性变形机制影响的对比分析

对比分析图 7a~7e 中所示应力-应变曲线和晶体结构类型占比-应变曲线，可见对于理想晶格试样、各类缺陷浓度较低时的试样以及空位浓度较高时的试样，除了因点缺陷存在而导致的无序原子外，在弹性阶段（即 OA 段）晶体结构类型几乎没有任何变化，一直保持为 bcc 结构，而在塑性屈服阶段（即 AB 段）和应变硬化阶段（即 BC 段）bcc 结构原子的占比急剧下降，fcc 结构原子的占比急剧上升，但在最后的断裂阶段（即 C 点之后）大部分原子又恢复为 bcc 结构。特别是在塑性变形阶段后期，这些试样中还出现了

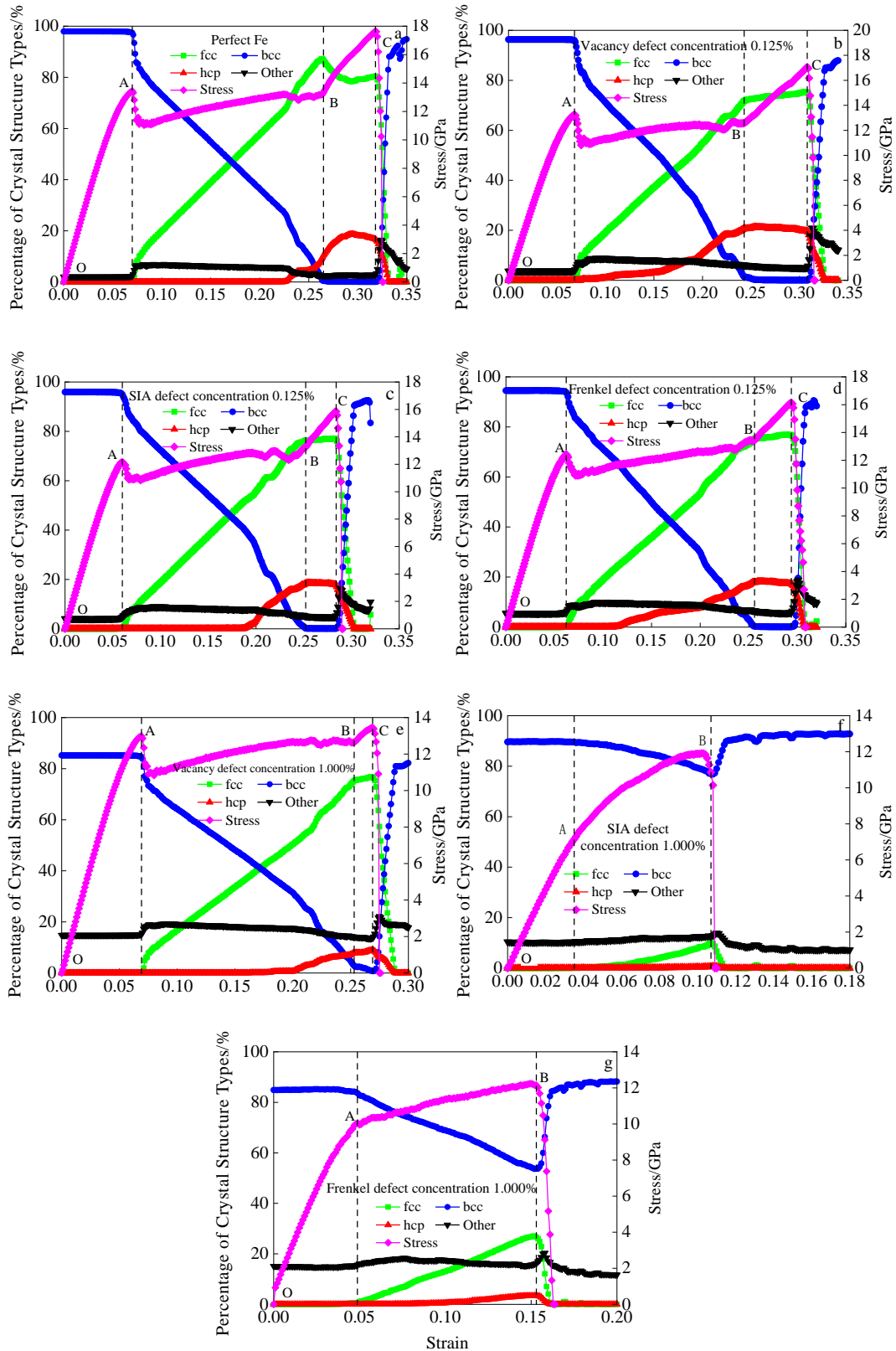


图 7 α -Fe 试样中晶体结构类型随应变的变化

Fig.7 Change of crystal structure type with strain in the α -Fe sample containing different point defects: (a) perfect lattice, (b) vacancy concentration 0.125%, (c) self-interstitial Fe atom concentration 0.125%, (d) Frenkel defect concentration 0.125%, (e) vacancy concentration 1.000%, (f) self-interstitial Fe atom concentration 1.000%, and (g) Frenkel defect concentration 1.000%

hcp 结构原子和相应的不全位错 (如 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley), 并形成如图 8 所示的堆垛层错, 且在应变硬化阶段 (即 BC 段), hcp 结构原子占比上升达到最大值, 同时位错的密度相比塑性屈服阶段 (即 AB 段) 增加, 使得晶体材料中应力场不断增大, 位错运动相对困难, 进而产生应变强化^[39], 致使拉伸应力呈上升强化趋势。

结合图 6 和图 7 分析可知, 试样进入塑性变形阶段后晶体结构由 bcc 转变为 fcc 的原因主要是由于在拉应力作用下, 材料发生塑性变形, 其内部产生应力集中, 但其它变形方式受到抑制 (如位错的产生和滑移、孪生等), 故此, 为了释放内部的应力和协调塑性变形, 晶体结构就从 bcc 结构重组为 fcc 结构, 即发生相变^[42,43]。这一现象与 Zhang 等^[21]有关 α -Fe 的 MD 模拟结果一致, 也在纳米晶铁^[44,45]的 MD 模拟和钨^[42]的 MD 模拟与原位拉伸实验中观察到, 亦与 Ivanisenko 等^[43]通过实验观察到的严重塑性变形的珠光体钢中出现剪应力诱发铁素体 (bcc 结构) 转变为奥氏体 (fcc 结构) 的逆马氏体相变情形一致。此外, 试样断裂后除缺口位置外, 大部分区域的晶体结构又恢复为 bcc 结构, 主要原因是室温下拉伸应力诱发相变而生成的 fcc 相是亚稳定的 (体系中 fcc 相的自由能高于 bcc 相)^[43], 当试样断裂后, 材料内部的应力得以释放, 亚稳定的 fcc 结构就又变为 bcc 结构。这一现象亦与 Wang 等^[42]、Ivanisenko 等^[43]和 Latapie 等^[44]的研究结果一致。通过这些分析可知, 试样在整个拉伸至断裂过程中发生了 bcc-fcc-bcc 的转变, 其原因先是拉应力引起塑性变形, 塑性变形协调发展后释放应力, 从而使晶体结构重组; 然后在断裂后应力得以释放, 内部能量降低, 从而使亚稳定相向稳定相发展^[42,43]。

由以上分析可知, 本模拟中各浓度的含空位试样、低缺陷浓度的含自间隙 Fe 原子或含 Frenkel 缺陷试样的应力-应变曲线特征和晶体结构类型随应变的变化规律都与理想晶格 α -Fe 试样的类似, 其塑性变形的微观机制亦与理想晶格 α -Fe 试样的相同, 都表现为相变和位错滑移混合的机制。

由图 7f 和图 7g 可知, 整体趋势上, 高浓度下含自间隙 Fe 原子或含 Frenkel 缺陷试样中的晶体结构类型随应变的变化规律相似。以含自间隙 Fe 原子浓度为 1.000% 的试样为例进行分析, 在图 7f 中所示应力-应变曲线关系的弹性阶段 (即 OA 段), 由于试样中存在浓度较高的自间隙 Fe 原子, 造成了局部原子无序化而成为非晶化原子, 即使在应变为零时其占比也可达 10%。这一点与晶体材料在辐照后由于点缺陷的积累增多而诱发的晶态向非晶态转变的认识一致^[46-52]。有

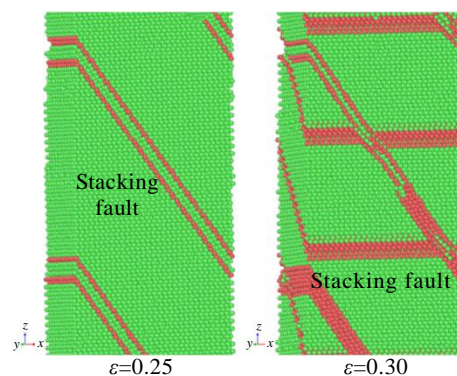


图 8 理想晶格 α -Fe 试样中 hcp 结构原子形成的堆垛层错局部图

Fig.8 Local diagram of the stacking fault formed by hcp atoms in the sample of perfect lattice α -Fe

研究表明局部原子非晶化后会降低材料的力学性能^[51], 当非晶化原子浓度达到临界值后将会促发非晶化塑性变形^[52]。为了进一步分析自间隙 Fe 原子对试样塑性变形行为的影响机制, 对应变为零时, 自间隙 Fe 原子浓度为 1.000% 的试样进行 DXA 分析, 并提取相应的原子应力分布图, 结果如图 9 所示。由图 9a 可知, 拉伸加载前, 试样中已存在初始的位错缺陷, 而由图 9b 可知, 局部非晶化原子的应力场明显高于 bcc 结构原子的应力场。这种试样中存在初始位错缺陷及促发非晶化塑性变形的事实, 正是导致塑性变形阶段 (即 AB 段) 晶体结构类型随应变的变化规律显著不同的原因, 亦是试样的应力-应变曲线特征发生显著变化的原因。与之不同, 图 7c 中, 由于自间隙 Fe 原子浓度低, 仅为 0.125%, 引发的局部非晶化原子数量少, 且并无初始位错缺陷, 因此试样中晶体结构类型随应变的变化规律与理想晶格试样中的类似。图 7g 中含 Frenkel 缺陷试样的晶体结构类型随应变的变化规律与图 7f 中含自间隙 Fe 原子试样的情形类似, 所不同的是在高 Frenkel 缺陷浓度下, 试样在塑性变形阶段 (即 AB 段), 由于相变产生的 fcc 结构原子的占比相对图 7f 中的要高, 在后期还有一定量的 hcp 结构原子, 如图 6d 所示 hcp 结构原子同样以堆垛层错的形式出现, 这主要是由于在弛豫和拉伸过程中自间隙 Fe 原子和空位的复合, 造成稳定 Frenkel 缺陷数量减小, 其影响也就相应减弱。

为了进一步分析点缺陷浓度对试样塑性变形机制的影响, 对晶体结构类型占比进行量化对比分析。同样以含自间隙 Fe 原子的试样为例, 在图 7f 所示的含自间隙 Fe 原子浓度为 1.000% 的试样中, 其塑性变形

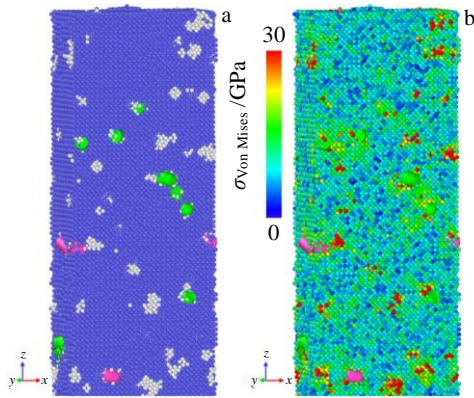


图 9 含自间隙 Fe 原子缺陷的 α -Fe 计算模型局部图 (缺陷浓度为 1.000%)

Fig.9 Local diagram of α -Fe computational model with self-interstitial Fe atom defects (defect concentration of 1.000%): (a) the initial dislocation defect in the computational model (the dislocation is enlarged, green and magenta lines represent $1/2\langle 111 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ type dislocation, respectively) and (b) atomic stress distribution

阶段 (即 AB 段), bcc 结构原子的占比最低可达 76% 左右, 由相变产生的 fcc 结构原子的比例最大也仅为 10% 左右, 且 hcp 结构原子占比很小; 而在图 7c 所示含自间隙 Fe 原子浓度为 0.125% 的试样中, 由相变产生的 fcc 结构原子的比例最大达到 77%, 而 bcc 结构原子的比例几乎下降到为 0。正如前面所说, 试样在拉伸变形过程中, 当其它变形方式受到抑制时, 为了释放内部应力和协调塑性变形, 就会发生相变; 而在较高浓度下含自间隙 Fe 原子或 Frenkel 缺陷试样中, 由于存在初始位错及局部非晶化原子的数量多, 在塑性变形阶段会优先以位错滑移和非晶化塑性变形混合机制为主。可见, 这里的量化数据进一步支持了这一认识。

综合以上分析可知, 对于含空位的 α -Fe 试样, 不论空位浓度大小, 试样的应力-应变曲线特征和晶体结构类型随应变的变化规律都基本不变; 对于含自间隙 Fe 原子的 α -Fe 试样, 随着自间隙 Fe 原子浓度的增大, 相对低缺陷浓度试样, 较高缺陷浓度试样的应力-应变曲线特征和晶体结构类型随应变的变化规律都发生了显著改变; 对于含 Frenkel 缺陷的 α -Fe 试样则与含自间隙 Fe 原子试样的情形类似。同时可知, 点缺陷类型不同, 引起的晶格畸变程度就不同, 试样发生塑性变形的难易程度就不同。在相同浓度时, 自间隙 Fe 原子导致的晶格畸变程度比空位导致的大, 试样更容易发生塑性变形; 同样, 自间隙 Fe 原子导致的局部非晶化

程度也比空位导致的更高, 更容易促发非晶化塑性变形; Frenkel 缺陷导致的晶格畸变和局部非晶化及其对塑性变形的影响情况均与自间隙 Fe 原子的相应情况类似。

3 结 论

1) 采用 MD 方法和软件, 建立了分别含空位、自间隙 Fe 原子和 Frenkel 缺陷的 α -Fe 试样的 MD 计算模型, 以缺陷的原子浓度为变量, 开展拉伸载荷下系列试样的 MD 模拟, 获得了各试样的工程应力-应变曲线和晶体结构类型随应变的变化情况。

2) α -Fe 试样中相同浓度的自间隙 Fe 原子导致的晶格畸变程度比空位导致的更大, 相应试样更容易发生塑性变形; 自间隙 Fe 原子导致的局部非晶化程度比空位导致的更高, 当缺陷浓度较大时, 更容易促发非晶化塑性变形。

3) 空位浓度变化对试样应力-应变曲线特征的影响很小, 应力-应变曲线上存在明显的上、下屈服点; 随着自间隙 Fe 原子或 Frenkel 缺陷浓度增大, 试样应力-应变曲线上的上、下屈服点间距越来越小, 直至无明显屈服点, 即材料弹性变形和塑性变形的分界限由明确变得不明确, 同时, 试样的塑性屈服段和应变硬化段越来越短, 试样的极限强度降低, 拉断延伸率减小。

4) α -Fe 试样在拉伸至断裂后的整个过程中, 晶体结构产生了 bcc-fcc-bcc 的转变, 反映了拉应力引起塑性变形、塑性变形协调发展使得内部应力降低、断裂后应力释放引起能量降低、能量降低使得亚稳定的晶体结构趋于稳定的过程机制。

5) 点缺陷类型和浓度导致 α -Fe 试样的应力-应变曲线特征发生显著变化的根源在于晶体结构变化及其相应的材料塑性变形机制变化—3 种点缺陷在低浓度时, 试样的塑性变形为相变和位错滑移混合的机制; 含高浓度空位缺陷试样的塑性变形机制亦是如此; 而含较高浓度自间隙 Fe 原子试样或含较高浓度 Frenkel 缺陷试样中存在初始位错缺陷, 且局部原子的非晶化程度也相对较高, 更容易促发非晶化塑性变形, 因而试样的塑性变形以位错滑移和非晶化塑性变形机制为主且伴随有相变机制。

参考文献 References

- [1] Hao Jiakun(郝嘉琨). *Fusion Reactor Materials*(聚变堆材料)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 14
- [2] Liu Jianzhang(刘建章). *Nuclear Structure Materials*(核结构材料)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 197
- [3] Lin Yun(林 贇), Tong Zhenfeng(佟振峰), Ning

- Guangsheng(宁广胜) *et al. Nuclear Power Engineering*(核动力工程)[J], 2017, 38(S): 74
- [4] Lin Yun(林 贇), Ning Guangsheng(宁广胜), Zhang Changyi(张长义) *et al. Atomic Energy Science and Technology*(原子能科学技术)[J], 2016, 50(2): 204
- [5] Zhu Yanyong, Wan Farong, Gao Jin *et al. Science China: Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2012, 55(11): 2057
- [6] Chen Tianyi, Kim Hyosim, Gigax Jonathan G *et al. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*[J], 2017, 409: 259
- [7] Yu Jinnan(郁金南). *Material Irradiation Effect*(材料辐照效应)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 1
- [8] Parashar Avinash, Singh Divya. *Computational Materials Science*[J], 2017, 131: 48
- [9] Ma Xiaoqiang(马小强), Yang Kunjie(杨坤杰), Xu Yuqiong(徐喻琼) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2020, 56(2): 249
- [10] Liu P P, Han W T, Yi X O *et al. Fusion Engineering and Design*[J], 2018, 129: 221
- [11] Zhao Dongwei(赵东伟), Yu Wenshan(郁汶山), Shen Shengping(申胜平). *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*(力学学报)[J], 2017, 49(3): 605
- [12] Zhang Yuanzhang, Yin Yihui, Zhao Fengpeng *et al. Steel Research International*[J], 2019, 90(8): 1
- [13] Xiang Xin(向 鑫), Chen Changan(陈长安), Jiang Chunli(蒋春丽). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2011, 40(9): 1610
- [14] Li Ruixiang(李瑞祥), Zhou Wei(周 韦), Ran Guang(冉 广) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2018, 47(1): 378
- [15] Luo Laima, Xu Mengyao, Zan Xiang *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2019, 48(8): 2406
- [16] Wang Ning, Deng Huiqiu, Hu Nengwen *et al. Science China: Technological Sciences* [J], 2012, 42(4): 473
- [17] Yao Man(姚 曼), Cui Wei(崔 薇), Wang Xuding(王旭东) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2015, 51(6): 724
- [18] Cao Han(曹 晗), He Xinfu(贺新福), Wang Dongjie(王东杰) *et al. Atomic Energy Science and Technology*(原子能科学技术)[J], 2019, 53(3): 487
- [19] Li Yingying, Chen Hong, Chen Yuting *et al. Nuclear Materials and Energy*[J], 2019, 20: 100 683
- [20] Lin Pandong, Nie Junfeng, Liu Meidan. *Applied Physics A: Materials Science and Processing*[J], 2021, 127(7): 1
- [21] Zhang Meng, Chen Juan, Sun Kun *et al. Materials Chemistry and Physics*[J], 2020, 241: 122 414
- [22] Liang Li(梁 力), Ma Mingwang(马明旺), Tan Xiaohua(谈效华) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2015, 51(1): 107
- [23] Shim Jae Hyeok, Sang Chul Kwon, Kim Whung Whoe *et al. Journal of Nuclear Materials*[J], 2007, 367-370: 292
- [24] Wang Yuntian(王云天), Zeng Xiangguo(曾祥国), Yang Xin(杨 鑫). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2019, 68(24): 246 102
- [25] Shao Yufei(邵宇飞), Meng Fanshun(孟凡顺), Li Jiuhui(李久会) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2019, 68(21): 216 201
- [26] Li Yuancai(李源才), Jiang Wugui(江五贵), Zhou Yu(周 宇). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(7): 2372
- [27] Xue Chun(薛 春), Yang Qianhua(杨千华), Chu Zhibing(楚志兵) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(5): 1812
- [28] Hu Nengwen, Deng Huiqiu, Xiao Shifang *et al. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*[J], 2013, 303: 72
- [29] Hirel Pierre. *Computer Physics Communications*[J], 2015, 197: 212
- [30] Plimpton Steve. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1
- [31] Barbu A, Martin G. *Solid State Phenomena*[J], 1992, 30-31: 179
- [32] Ackland G J, Mendeleev M I, Srolovitz D J *et al. Journal of Physics Condensed Matter*[J], 2004, 16(27): S2629
- [33] Lee Woei Shyan, Lin Chi Feng. *Materials Science and Engineering A*[J], 2001, 308(1-2): 124
- [34] Gao N, Perez D, Lu G H *et al. Journal of Nuclear Materials*[J], 2018, 498: 378
- [35] Wang Jin(王 瑾), Yu Liming(余黎明), Li Chong(李 冲) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2019, 55(2): 274
- [36] Stukowski Alexander. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(1): 15 012
- [37] Stukowski Alexander, Bulatov Vasily V, Arsenlis Athanasios. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2012, 20(8): 85 007
- [38] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2012, 20(4): 045 021
- [39] Pan Jinsheng(潘金生), Fan Yudian(范毓殿). *Physical Foundation of Nuclear Materials*(核材料物理基础)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 112

- [40] Martienssen Werner, Warlimont Hans. *Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data*[M]. New York: Springer Berlin Heidelberg, 2005: 132
- [41] Yu Xingang, Gou Fujun, Tian Xia. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2013, 441(1-3): 324
- [42] Wang S J, Wang H, Du K *et al. Nature Communications*[J], 2014, 5: 3433
- [43] Ivanisenko Yu, MacLaren I, Sauvage X *et al. Acta Materialia*[J], 2006, 54(6): 1659
- [44] Latapie A, Farkas D. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2003, 11(5): 745
- [45] Yuan Fuping. *Science China: Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2012, 55(9): 1657
- [46] Motta Arthur T. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1997, 244(3): 227
- [47] Zu Xiaotao(祖小涛), Zhu Sha(朱 莎), Zhang Chuanfei(张传飞) *et al. Chinese Journal of Materials Research(材料研究学报)*[J], 2003, 17(2): 210
- [48] Yang Zhiqing(杨志卿), Jin Zhixiong(金志雄), Chen Ji(陈吉) *et al. Acta Metallurgica Sinica(金属学报)*[J], 2001, 37(9): 897
- [49] Xie Qiurong, Zhang Jian, Yin Dongmin *et al. Chinese Physics B*[J], 2015, 24(12): 126 103
- [50] Liu J, He G, Hu J *et al. Journal of Nuclear Materials*[J], 2019, 513: 226
- [51] Mao Keyou S, Massey Caleb P, Gussev Maxim N *et al. Acta Materialia*[J], 2021, 15: 101 016
- [52] Zhao Shiteng, Li Zezhou, Zhu Chaoyi *et al. Science Advances*[J], 2021, 7(5): 1

Molecular Dynamics Simulation of the Effects of Point Defect Type and Concentration on Plastic Deformation Behavior of α -Fe

Li Xiang^{1,2}, Yin Yihui¹, Zhang Yuanzhang¹

(1. Institute of Systems Engineering, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China)

(2. School of Applied Technology, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

Abstract: In order to investigate the effects of vacancies, self-interstitial Fe atoms and Frenkel defects on the plastic deformation behavior of α -Fe under tensile load furtherly, the molecular dynamic models of the α -Fe samples with different types of the point defects were established and related simulations under uniaxial tension were carried out for a series of point defect atomic concentration of 0%, 0.125%, 0.250%, 0.500%, 0.750% and 1.000%. The stress-strain curves was obtained, the dislocation generation and the crystal structure evolution of each α -Fe sample were observed and analyzed by the dislocation extraction algorithm and the common neighbor analysis, and the following understandings were concluded. Different types of point defects can lead to different lattice distortion and related plastic deformation. Both the lattice distortion and related plastic deformation caused by self-interstitial Fe atoms are greater than those caused by vacancies at the same defect concentration. The changes of plastic deformation mechanisms induced by point defect types and concentrations make the characteristics of stress-strain curves change, i.e. the greater the concentration of self-interstitial Fe atom or Frenkel defect is, the less the distance between the upper and lower yield points on a stress-strain curve is, even vanishes, while the vacancy concentration has no such influence. Specifically, both the local amorphization and the related amorphization plastic deformation caused by self-interstitial Fe atoms are higher than those caused by vacancies. For the samples with low concentration of each of the three types point defects or for the samples with high concentration of vacancies, the plastic deformation is of a mixture of the tensile stress-induced phase transformation and the dislocation slip, while for the samples with higher concentration of self-interstitial Fe atoms (such as 0.500%, 0.750% and 1.000%) or with higher concentration of Frenkel defects (such as 0.750% and 1.000%), the plastic deformation is dominated by both the dislocation slip and the amorphization plastic deformation and accompanied by a little phase transition. The research deepens the understandings of the effects of point defect on the plastic deformation mechanism of metals and lay a useful foundation for the subsequent analysis of the physical and mechanical properties of polycrystalline α -Fe materials.

Key words: α -Fe; point defect; phase transformation; amorphization plastic deformation mechanism

Corresponding author: Yin Yihui, Ph. D., Professor, Institute of Systems Engineering, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, P. R. China, E-mail: yinyh@caep.cn