

孔洞缺陷对 α -Fe 拉伸变形行为影响的分子动力学模拟

李翔¹, 尹益辉², 张元章², 李继承², 李洪祥³

(1 西南科技大学 制造过程测试技术教育部重点实验室, 四川 绵阳 621010)

(2 中国工程物理研究院 总体工程研究所, 四川 绵阳 621999)

(3 西南科技大学 土木工程与建筑学院, 四川 绵阳 621010)

摘要: 为深入研究孔洞缺陷对 α -Fe 试样拉伸变形行为的影响, 构建含不同大小孔洞缺陷的 α -Fe 试样计算模型, 并进行单轴拉伸应变下的分子动力学模拟。研究表明: 整体趋势上, 含孔洞缺陷试样的拉伸力学性能损减与孔洞尺寸正相关, 孔洞尺寸越大, 试样越容易进入塑性变形阶段; 含孔洞缺陷试样的杨氏模量、屈服应力、极限强度和拉断延伸率均随着孔洞半径的增大而减小; 试样的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; 随着孔洞半径的增大, 试样的应力-应变曲线特征发生显著变化——试样的塑性屈服段和应变硬化段越来越短, 应变硬化段甚至消失。本文的研究有助于深入认识孔洞缺陷对金属变形机制的影响, 为后续开展多晶 α -Fe 材料的物理和力学性质的分析研究奠定有益基础。

关键词: α -Fe; 孔洞; 相变; 位错滑移

中图分类号: TL341

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2017)0?-0??-0?

铁基核结构材料因其良好的力学特性和优良的加工性能, 在核反应堆部件中广泛使用^[1-4]。然而核反应堆结构部件在辐照、热、化学和应力等工况下服役, 经受多物理化学场作用^[1], 服役环境非常严酷, 其力学性能的好坏, 将直接影响到核设施的安全稳定性。已有的研究表明, 在高中子及其它高能粒子的辐照作用下, 核结构材料将产生缺陷, 纳米级的孔洞即是核结构材料经受长时间辐照后所形成的典型体缺陷, 由空位团演化而来^[5,6]。同时孔洞亦是材料制备加工过程中的固有体缺陷。Fe 作为铁基核结构材料的主要元素, 研究室温下 (300 K) 孔洞缺陷对 α -Fe 力学性能和变形行为影响的微观机制, 将有助于评估和预测铁基核结构材料在长期服役过程中性能的变化, 无疑具有重要的科学意义和直接的工程价值。

从微观层面开展纳米级孔洞缺陷对材料特性影响的研究, 将有助于为材料制备工艺提升和抗辐照新材料的研发提供理论支撑。近年来, 分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟方法已广泛用于在原子尺度研究材料的相关特性^[7,8]。研究人员已通过 MD 方法开展了孔洞缺陷对 α -Ti^[9]、Ni^[10]、Al₂Cu^[11]、含 Nb 单晶 γ -TiAl^[12] 等金属材料力学性能的研究, 研究表明: 杨氏模量^[9]、屈服强度^[9,12]、屈服应变^[9,12]和抗拉强度^[10,11]随着孔洞的增大而减小。崔新林等^[7,13]、邵建立等^[14]和 Wu 等^[15]通

过 MD 方法研究了冲击加载下含孔洞缺陷单晶铁的相变。王云天等^[16]研究发现单晶铁的抗拉强度随着温度的升高而降低, 其原因在于高温下孔洞更容易成核, 而孔洞的成核与生长将导致拉应力下降。吉建莎等^[17]在含有晶界的 α -Fe 中预制孔洞缺陷并在其晶界周围随机添加 He 原子, 对比孔洞缺陷位置在晶界面中心和在晶界上方试样的应力-应变曲线可知, 孔洞缺陷在晶界上方试样的断裂应力和断裂应变最低。Xu 等^[18]研究了 α -Fe 金属薄膜在拉伸加载中孔洞的长大过程, 研究表明: 孔洞的初始椭圆度和初始取向角对孔洞的长大和应力-应变响应有重要影响。Wang 等^[19]研究了含双孔洞的双晶 α -Fe 的微观力学特性, 研究发现不同的孔洞间距和晶界类型导致试样的断裂特性不同。Rawat 等^[20,21]研究了极端应变率下单晶铁中孔洞的演化和温度对孔洞演化的影响。同时也有研究者关注纳米晶铁^[22]和铁纳米线^[23]的拉伸变形行为。显然, 为了更加全面的认识孔洞缺陷对材料特性的影响, 不仅需要研究其对材料力学性能的影响, 而且还应该研究其对材料变形机制以及变形行为的影响。

本研究采用 MD 方法, 对含孔洞缺陷的 α -Fe 试样施加拉伸应变直至断裂, 研究孔洞缺陷对试样力学性能和塑性变形行为的影响规律, 获得试样的工程应力-应变曲线以及材料微观结构随拉伸应变的演化情况等, 结果表

收到初稿日期:

基金项目: 国家自然科学基金资助 (项目号 12072333) 西南科技大学科研基金资助成果 (项目号 23zx7129)

作者简介: 李翔, 男, 1984 年生, 博士, 西南科技大学制造过程测试技术教育部重点实验室, 四川 绵阳 621010,

E-mail: mylixiang@swust.edu.cn

明:整体趋势上,含孔洞缺陷试样的杨氏模量、屈服应力、极限强度和拉伸延伸率均随着孔洞半径的增大而减小;试样的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,但随孔洞半径的增大,试样的应力-应变曲线特征发生显著变化——随着孔洞半径的增大,试样的塑性屈服段和应变硬化段越来越短,应变硬化段甚至消失。

1 计算模型与方法

MD 的建模采用与课题组前期研究中类似的建模方法^[24]。首先,以单晶 α -Fe 为基体材料,建立计算模型,然后在其中中心位置删除一定半径范围内的 Fe 原子,进而构建含孔洞缺陷的计算模型,计算模型的相关参数如表 1 所示,含孔洞缺陷试样的模型如图 1 所示。显然,孔洞半径为 0.00 nm 的试样即是理想晶格的单晶 α -Fe 试样,简称理想试样。

表 1 计算模型参数

Table 1 Calculate model parameters

Parameter type	Parameter size
Sample size	$11.42 \times 11.42 \times 31.41 \text{ nm}^3$
α -Fe lattice constant a_0	2.855 Å
the number of Fe atoms in tensile deformation zone	320,000 个
Void position	(5.71, 5.71, 15.71) nm
Void radius	0.00 nm, 0.25 nm, 0.50 nm, 0.75 nm, 1.00 nm

MD 模拟采用经典的分子动力学软件, Ackland 等^[25]开发的 Fe-Fe 势函数用于描述 Fe 原子间的相互作用。如图 1 所示,直角坐标系的 x、y 和 z 轴分别对应于 MD 计算模型的两个晶向。本模拟中,首先设定模拟温度为室温 300 K,时间步长为 1 fs,采用三维周期性边界条件;其次进行能量最小化处理 and 150 ps 的弛豫;然后在 NVT 系综下,采用与课题组前期研究相同的拉伸模拟方法^[24],根据计算模型的规模,结合前人的研究结果^[26-28],

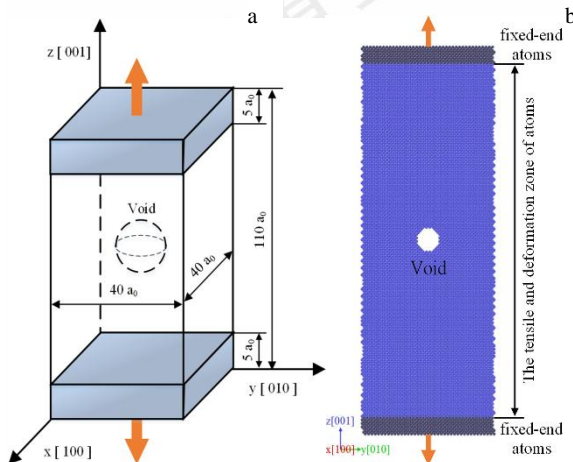


图 1 单轴拉伸试样的 MD 计算模型

(a) 坐标系与试样几何尺寸 (b) 试样 MD 计算模型

Fig.1 MD computational model of sample subjected to uniaxial tension

(a) Coordinate and geometry sizes (b) MD computational model

沿 z 轴方向以 $5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 的速率对计算模型固定端原子施加拉伸应变,直至模型断裂。

模拟结束后,利用 Dislocation Extraction Algorithm (DXA)^[29]分析拉伸过程中试样的变形区域内位错的形成情况,利用共近邻分析法 Common Neighbor Analysis (CNA)^[30]分析拉伸过程中试样的变形区域内晶体结构的演化情况。

2 结果与分析

2.1 含孔洞缺陷 α -Fe 试样的应力-应变曲线关系

对孔洞半径分别为 0.0 nm、0.25 nm、0.50 nm、0.75 nm 和 1.00 nm 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 2 所示,其中理想试样的应力-应变曲线也就是孔洞半径为 0.0 nm 时试样的应力-应变曲线。

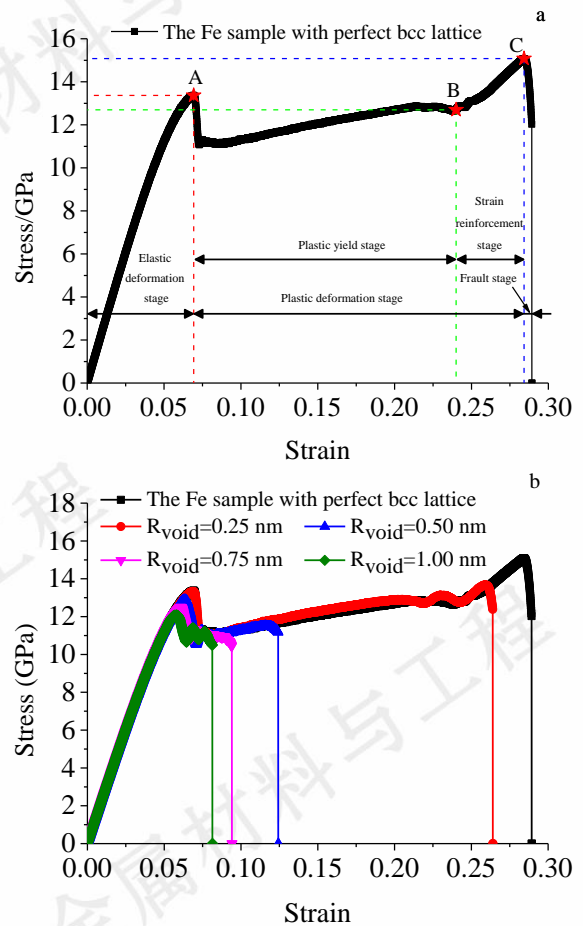


图 2 含孔洞缺陷 α -Fe 试样的应力-应变曲线

(a) 理想试样 (b) 含孔洞缺陷试样

Fig.2 Stress-strain curve of α -Fe with different radius of void (a) The sample with perfect lattice (b) The sample with void

由图 2(a)可知,MD 模拟所得试样的屈服应力和极限强度均远远高于宏观实验值,但其拉伸变形规律与宏观试样的拉伸变形规律一致,亦与 Zhang 等^[31]的 MD 模拟结果相似,由其工程应力-应变曲线可知,整个拉伸至断裂过程亦分为 4 个阶段^[32]:弹性变形、塑性屈服、应变硬化和断裂,即对应图 2(a)中的 OA 段、AB 段、BC

段和 C 点之后,且对应变为 0~0.03 的区间段进行线性拟合,得到杨氏模量 (Young's modulus) 为 241.38 GPa,比纯铁宏观实验测试得到的杨氏模量 211 GPa^[33]大 14.40%,其杨氏模量值偏大的原因已在课题组前期研究中阐述^[24],此处不在赘述。这些定性和定量结果表明,本研究所采用的 MD 模拟方法是可行的,计算结果是有效的。

由图 2(b)所示不同孔洞半径下试样的应力-应变曲线可知,随着孔洞半径的增大,试样的应力-应变曲线特性发生显著变化,当孔洞半径为 0.25 nm 时,试样在屈服之后有明显的塑性屈服段及应变硬化段,但随着孔洞半径的增大(如孔洞半径分别为 0.50 nm、0.75 nm 和 1.00 nm),几乎没有应变硬化阶段,且塑性屈服段越来越短,即随着孔洞半径的增大,应变硬化段逐渐消失,塑性屈服段逐渐减小。

2.2 孔洞对 α -Fe 试样力学性能的影响

同样对图 2(b)所示应变为 0~0.03 的区间段进行线性拟合,得到各试样的杨氏模量:采用上屈服点的应力作为屈服应力;取应力急剧下降前的最大值作为极限强度,与之对应的应变定义为断裂应变亦为材料的拉断延伸率;以上所得试样力学性能指标与孔洞半径的关系分别如图 3-图 5 所示。

由图 3 可知,整体趋势上,含孔洞 α -Fe 试样的杨氏模量随着基体中孔洞半径的增大而减小,这与含孔洞的钛^[9]、铝^[34]和金纳米薄膜^[35]的结论一致。由此可知,随着孔洞半径的增大,试样抵抗变形的能力下降。然在本文的研究中,孔洞在整个基体材料中的体积占比很小,故对试样杨氏模量的影响很小,如孔洞半径为 1.00 nm 的 α -Fe 试样的杨氏模量为 240.69 GPa,仅比理想试样的减小了 0.29%。

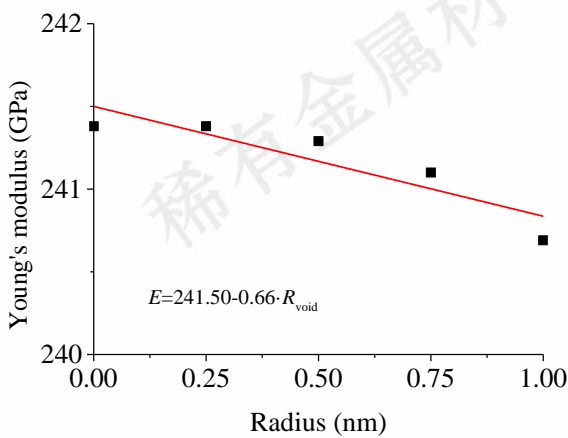


图 3 杨氏模量与孔洞缺陷的关系

Fig. 3. The relation between Young's modulus and the void defect

由图 4 可知,试样的屈服应力也随着孔洞半径的增

大而减小,且总体上呈线性关系。孔洞半径为 1.00 nm 的 α -Fe 试样的屈服应力为 12.07 GPa,比理想试样的减小了 9.66%。

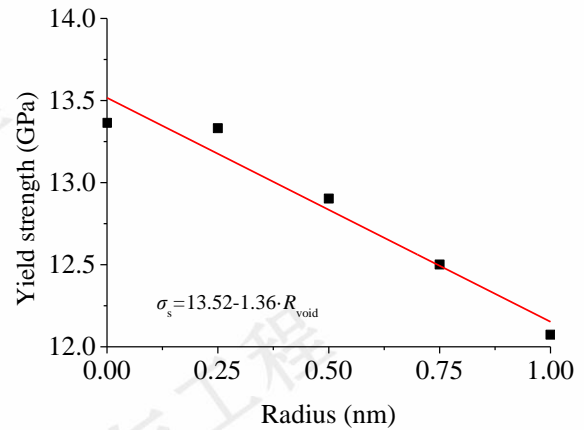


图 4 屈服应力与孔洞缺陷的关系

Fig. 4. The relation between the yield stress and the void defect

由图 5 可知,试样的极限强度和拉断延伸率也随着孔洞半径的增大而减小,且总体上也呈线性关系。孔洞半径为 1.00 nm 的 α -Fe 试样的极限强度为 11.20 GPa,比理想试样的减小了 25.73%,而拉断延伸率为 0.0763,比理想试样的减小了 73.15%。

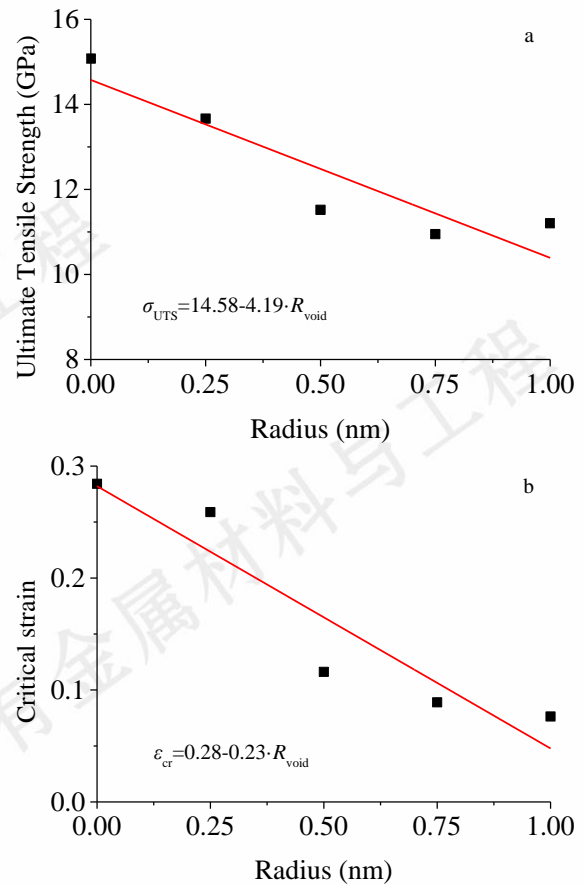


图 5 极限强度和拉断延伸率与孔洞缺陷的关系

Fig. 5. The relation between the ultimate tensile strength and the critical strain and the void defect

综上所述,含孔洞缺陷 α -Fe 试样的杨氏模量、屈服应力、极限强度和拉断延伸率均随着孔洞半径的增大而

减小,但减小程度不尽相同。如由表 2 所示,孔洞缺陷对 α -Fe 试样杨氏模量的影响较小,而对屈服应力、极限强度和拉伸延伸率的影响较大。

表 2 含孔洞缺陷 α -Fe 试样力学性能

Table 2 Mechanical properties of α -Fe samples with the void defects

Mechanical property index	Void radius/nm				
	0.00	0.25	0.50	0.75	1.00
Young's modulus/GPa	241.38	241.38	241.29	241.10	240.69
Loss of the Young's modulus /%	0	0	-0.04	-0.12	-0.29
Yield stress/GPa	13.36	13.33	12.90	12.50	12.07
Loss of the yield stress /%	0	-0.22	-3.44	-6.46	-9.66
Ultimate tensile strength/GPa	15.08	13.67	11.52	10.95	11.20
Loss of the ultimate tensile strength /%	0	-9.35	-23.61	-27.39	-25.73
Critical strain	0.2842	0.2589	0.1162	0.0890	0.0763
Loss of the critical strain /%	0	-8.90	-59.11	-68.68	-73.15

注:力学性能损减= ((含孔洞缺陷试样的值-理想试样的值)/理想试样的值)*100%

2.3 晶体结构和缺陷的演化及塑性变形机制分析

为进一步从微观层面探究分析孔洞缺陷对 α -Fe 试样拉伸变形行为影响的内在机理,选取两个具有代表性的含孔洞 α -Fe 试样进行分析,通过 CNA 方法,获得含孔洞 α -Fe 试样变形区域内的晶体结构随拉伸应变的演化情况,所得结果如图 6 所示。

由图 6 可知,对于含孔洞 α -Fe 试样,在弹性变形阶段,其拉伸变形区均呈现出 BCC 晶体结构的特征;然而在塑性变形阶段,由于拉伸应力的作用,其拉伸变形区发生不同程度的相变,具体而言,部分 BCC 结构的原子转变为 FCC 结构,并且在塑性变形阶段的后期还观察到 HCP 结构的原子生成;当试样完全断裂后,除了靠近断口的区域外,拉伸变形区的晶体结构重新恢复为 BCC 结构特征。对于孔洞半径为 0.25 nm 的试样, FCC 结构的区域随着应变的增大而增大,在塑性变形后期大部分原子已转变为 FCC 结构,仅留存有少量 BCC 结构原子,且有 HCP 结构原子出现,并观察到堆垛层错,但裂纹并未首先在孔洞边缘处萌发,如图 6(a)所示;而对于孔洞半径为 1.00 nm 的试样,在拉伸应力作用下,孔洞周围首先发生相变,但 FCC 结构仅在局部区域出现,且有少量的 HCP 结构原子在孔洞周围出现,裂纹亦在孔洞边缘

处萌发,如图 6(b)所示。

实验^[36,37]和 MD 模拟^{[22] [31] [36] [38]}中均观察到,试样进入塑性变形后,将产生应力诱发相变机制,在本研究中即发生 BCC 晶体结构重组为 FCC 结构。然而,值得注意的是生成的 FCC 结构是亚稳定的(BCC 相的自由能低于 FCC 相的,即体系中 BCC 相更稳定)^[37]。因此,当含孔洞 α -Fe 试样拉伸至断裂后,其内部应力得以释放,使得生成的亚稳定的 FCC 结构重新恢复为稳定的 BCC 结构,如图 6 所示。这一现象与课题组先前的研究结果^[24]及 Wang 等^[36]、Ivanisenko 等^[37]和 Latapie 等^[38]的研究结果相符。同时,由图 6 可知,孔洞尺寸对应应力诱发相变机制有直接影响,在本文的模拟中,相对于孔洞半径为 0.25 nm 的试样,孔洞半径为 1.00 nm 的试样,其孔洞尺寸相对较大,孔洞边缘处的应力更高,因而应力诱发相变机制首先在孔洞周围区域发生,如图 6(b)所示。这与前期的研究结果吻合^[24],即当其他变形方式受到抑制,为了释放内部应力和协调塑性变形,将发生相变。同时,由图 7 可知,在相同的拉伸应变下,孔洞半径为 1.00 nm 的试样,其孔洞周围区域的原子应变大于孔洞半径为 0.25 nm 的试样,亦表明孔洞半径为 1.00 nm 试样的孔洞边缘处应力更高,更容易诱发相变机制。

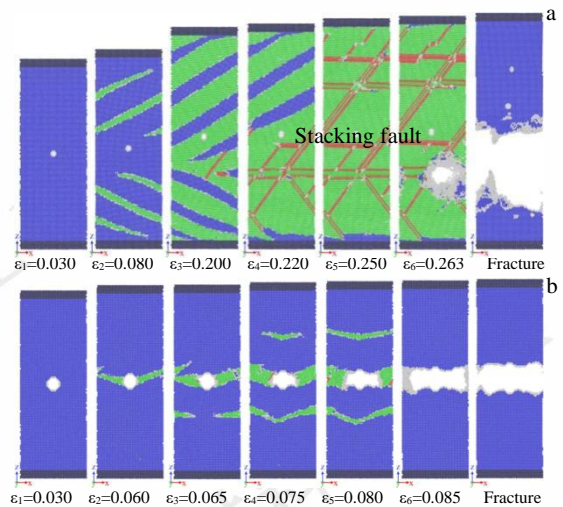


图 6 不同拉伸应变时含孔洞 α -Fe 试样的晶体结构(蓝色代表 BCC 结构原子,绿色代表 FCC 结构原子,桔红色代表 HCP 结构原子,白色代表边界或无序原子,黑色代表固定端原子,下同)

(a) 孔洞半径为 0.25 nm (b) 孔洞半径为 1.00 nm

Fig. 6 Crystal structure of the α -Fe sample with void under 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, the same below)

(a) The sample with a void radius of 0.25 nm (b) The sample with a void radius of 1.00 nm

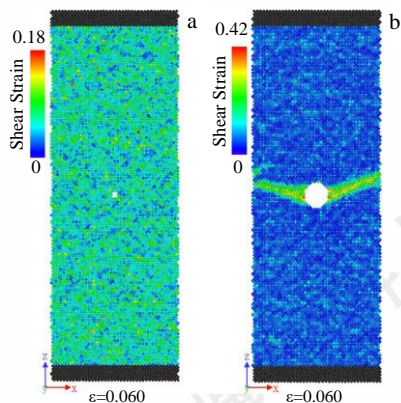


图 7 含孔洞 α -Fe 试样的原子应变

(a) 孔洞半径为 0.25 nm (b) 孔洞半径为 1.00 nm

Fig. 7 Atomic strain of the α -Fe sample with void

(a) The sample with a void radius of 0.25 nm

(b) The sample with a void radius of 1.00 nm

为进一步分析含孔洞 α -Fe 试样的塑性变形机制,通过 DXA 方法分析拉伸过程中材料内部位错缺陷的演化情况。对于孔洞半径为 0.25 nm 的试样,在塑性变形阶段后期,材料内部出现了以 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 为主的不全位错,如图 8(a)所示。然而对于孔洞半径为 1.00 nm 的试样,孔洞作为位错源,位错首先在孔洞周围形核,

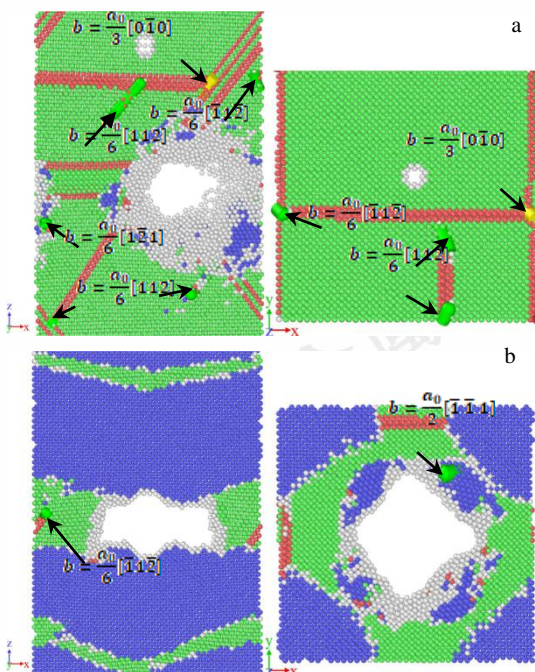


图 8 含孔洞缺陷 α -Fe 试样中形成的位错局部图

(a) 孔洞半径为 0.25 nm (b) 孔洞半径为 1.00 nm

Fig. 8 Local diagram of the dislocation formed in the

sample of α -Fe with void defect

(a) The sample with a void radius of 0.25 nm (b) The

sample with a void radius of 1.00 nm

在整个塑性变形过程中出现多种类型的位错,如在相变区域出现 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 的不全位错和在非相变区域出现 $1/2\langle 111 \rangle$ 的全位错等,如图 8(b)所示;随着应变的增大,孔洞周围出现裂纹,裂纹进一步扩展后,试样断裂,如图 9 所示。

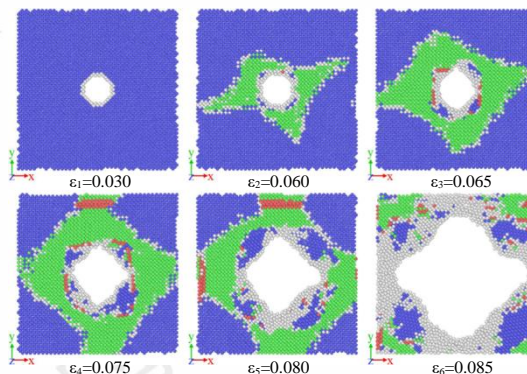


图 9 不同拉伸应变时孔洞缺陷的演化 (α -Fe 试样中孔洞初始半径为 1.00 nm)

Fig. 9 Evolution of void defect at different tensile strains

(The sample with an initial void radius of 1.00 nm)

由以上分析可知,对于含孔洞缺陷的 α -Fe 试样,不论孔洞大小如何,塑性变形均表现为拉伸应力诱发的相变和位错滑移混合的机制,但相变区域随着孔洞尺寸的增大而减少。

3 结论

采用分子动力学方法和软件,模拟含孔洞缺陷 α -Fe 试样的拉伸变形,得到各试样的工程应力-应变曲线、晶体结构和孔洞缺陷的演化情况。通过分析可得到如下结论:

(1) 整体趋势上,含孔洞 α -Fe 试样拉伸力学性能的损减与孔洞尺寸正相关,孔洞尺寸越大,试样越容易进入塑性变形阶段;含孔洞试样的杨氏模量、屈服应力、极限强度和拉断延伸率均随着孔洞半径的增大而减小。

(2) 孔洞缺陷对 α -Fe 试样工程应力-应变曲线特征有显著影响,随着孔洞尺寸的增大,试样的塑性屈服段和应变强化段越来越短,应变硬化段甚至消失。

(3) 单轴拉伸作用下,含孔洞 α -Fe 试样的塑性变形机制为相变和位错滑移相混合的机制。

本文的研究有助于深化认识和理解有关孔洞缺陷对 α -Fe 试样力学特性和塑性变形机制的影响,为进一步分析和研究多工况下多晶 α -Fe 材料的物理和力学特性提供有益的基础支撑。

参考文献 References

[1] Hao Jiakun(郝嘉琨). Fusion reactor materials(聚变堆材料)[M].

- Beijing: Chemical Industry Press, 2007:11
- [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), Ning Guangsheng(宁广胜), Zhang Changyi(张长义) et al. *Atomic Energy Science and Technology*[J], 2016, 50(2): 204
- [4] Lin Yun(林贇), Tong Zhenfeng(佟振峰), Ning Guangsheng(宁广胜), et al. *Nuclear Power Engineering*[J], 2017, 038(suppl.): 74
- [5] Yu Jinnan(郁金南). *Material irradiation effect(材料辐照效应)* [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 1
- [6] Wang Longbao (王隆保), Luo Shunzhong(罗顺忠), Peng Shuming(彭述明). *Helium in metals and metal tritides(金属和金属氦化物中的氦)* [M]. Harbin: Harbin Engineering University Press, 2015:
- [7] Cui Xinlin(崔新林), Zhu Wenjun(祝文军), He Hongliang(贺红亮) et al. *Chinese Journal of High Pressure Physics* [J], 2007, 21(4): 6
- [8] Li Yuancai(李源才), Jiang Wugui(江五贵), Zhou Yu(周宇). *Rare Metal Materials and Engineering*[J],2020, 49(7): 2372
- [9] Ding Jun(丁军), Wang Jian(汪建), Huang Xia(黄霞) et al. *Materials Reports* [J], 2018, 32(18): 3171
- [10] Li Yuancai(李源才), Jiang Wugui(江五贵), Zhou Yu(周宇). *Acta Metallurgica Sinica* [J],2020, 56(5): 776
- [11] Liu Xiaobo, Xiong Zhen, Fang Zhou et al. *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2019, 48(9): 2745
- [12] Kou Peipei(寇佩佩), Feng Ruicheng(冯瑞成), Li Haiyan(李海燕) et al. *Materials Reports*[J], 2020, 34(7): 14140
- [13] Cui Xinlin(崔新林), Zhu Wenjun(祝文军), Deng Xiaoliang(邓小良) et al. *Acta Physica Sinica* [J], 2006, 55(10): 5545
- [14] Shao Jianli(邵建立), Wang Pei(王裴), Qin Chengsen(秦承森) et al. *Acta Physica Sinica* [J], 2008, 57(2): 1254
- [15] Wu Li, Wang Kun, Xiao Shifang et al. *Computational Materials Science*[J], 2016, 122: 1
- [16] Wang Yun Tian(王云天), Zeng Xiang Guo(曾祥国), Yang Xin(杨鑫). *Acta Physica Sinica*[J], 2019, 68(24)
- [17] Ji Jiansha(吉建莎), ZHANG Xiaoxun(张效迅), YU Juan(喻娟) et al. *Atomic Energy Science and Technology*[J], 2016, 50(11): 2034
- [18] Xu Shuozi, Su Yanqing. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2016,24(8): 085015
- [19] Wang Jin, Huang Yuan, Li Chong et al. *Physica B: Condensed Matter*[J], 2017, 521: 275
- [20] Rawat Sunil, Raole P M. *Computational Materials Science*[J], 2018, 154: 393
- [21] Rawat Sunil, Chaturvedi Shashank. *Philosophical Magazine*[J], 2021, 101(6): 657
- [22] Yuan Fu Ping. *Science China: Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2012, 55(9): 1657
- [23] Li Lili. *Applied Physics A*[J], 2017, 123(6):450
- [24] Li xiang(李翔), Yin Yihui(尹益辉), Zhang Yuanzhang(张元章). *Rare Metal Materials and Engineering* [J], 2022, 51(08): 2881
- [25] Ackland G J, Mendeleev M I, Srolovitz D J et al. *Journal of Physics Condensed Matter*[J], 2004, 16(27): S2629
- [26] Lee Woei Shyan, Lin Chi Feng. *Materials Science and Engineering A*[J], 2001, 308(1-2): 124
- [27] Gao N, Perez D, Lu G H et al. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2018, 498: 378
- [28] Wang Jin(王瑾), Yu Liming(余黎明), Li Chong(李冲) et al. *Acta Metallurgica Sinica*[J], 2019, 55(2): 274
- [29] Stukowski Alexander, Bulatov Vasily V, Arsenlis Athanasios. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* [J], 2012, 20(8): 85007
- [30] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2012, 20(4): 045021
- [31] Zhang Meng, Chen Juan, Sun Kun et al. *Materials Chemistry and Physics*[J], 2020, 241: 122414
- [32] 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, 2007:60
- [33] Martienssen Werner, Warlimont Hans. *Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data*[M]. New York: Springer Berlin Heidelberg, 2005: 132
- [34] Liang Hua(梁华), Li Maosheng(李茂生). *Chinese Journal of Computational Physics* [J], 2019, 36(2): 211
- [35] Liu Jialin, Fan Xiaofeng, Gu Changzhi et al. *Computational Materials Science*[J], 2021, 189 (1-2): 110255
- [36] Wang S J, Wang H, Du K et al. *Nature Communications*[J], 2014, 5: 3433
- [37] Ivanisenko Yu, MacLaren I, Sauvage X et al. *Acta Materialia*[J], 2006, 54(6): 1659
- [38] Latapie A, Farkas D. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2003, 11(5): 745

Molecular dynamics simulation of the effects of void defect on the tensile

deformation behavior of single-crystal α -Fe

Li Xiang¹, Yin Yihui², Zhang Yuanzhang², Li Jicheng², Li Hongxiang³

(1. Key Laboratory of Testing Technology for Manufacturing Process, Ministry of Education, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

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

(3. School of Civil Engineering and Architecture, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

Abstract: In order to investigate further the effects of void defect on the plastic deformation behavior of α -Fe under tensile load, the molecular dynamic models of the α -Fe samples with the void defects are established and related simulations under uniaxial tension are carried out for a series of models in the void radius of 0 nm, 0.25 nm, 0.50 nm, 0.75 nm and 1.00 nm, respectively. The engineering stress-strain curve and the variations of crystal structure types and defects of each sample with tensile strain are obtained. The results show that overall, the deterioration of tensile mechanical properties of the sample with void is positively related to the void size. The larger the void size is, the easier it is for the sample to enter the plastic deformation stage. Overall, Young's modulus, yield stress, ultimate tensile strength and tensile elongation of the samples containing void decrease with increasing of the radius of the void. The plastic deformation mechanism is of a mixture of the tensile stress-induced structural phase transition and the dislocation slip. However, the characteristics of stress-strain curves change significantly with increasing of the radius of the void, and the plastic yield stage and strain hardening stage of the sample become shorter, the strain hardening stage even vanishes. The research deepens the understanding of the effects of void defect on the mechanical properties and plastic deformation mechanisms of metals and lays a useful foundation for the subsequent analysis and study of the physical and mechanical properties of polycrystalline α -Fe materials under various conditions.

Key words: α -Fe; void defect; Phase transition; Dislocation slip

Corresponding author: Li Xiang, Ph. D., Key Laboratory of Testing Technology for Manufacturing Process, Ministry of Education, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, P. R. China, E-mail: mylixiang@swust.edu.cn