

马氏体在位错偶上形核长大的 分子动力学模拟研究*

李斌 张修睦 李蓉 李依依

(中国科学院金属研究所, 沈阳 110015)

摘要 应用分子动力学方法和 NiAl 合金的嵌入原子势 (EAM), 模拟研究了位错偶上马氏体形核长大的过程和微观机理. 计算结果表明, 马氏体形核的位置与位错应力场的分布有关. 马氏体总是在位错偶应力场中的一些特殊位置优先形核, 因为这些位置的应力状态有利于完成从奥氏体向马氏体转变的点阵畸变. 在马氏体长大过程中, 在相变应变的驱动下, 其中一根位错逐渐向下滑移, 起到了塑性协调的作用.

关键词 马氏体相变, 位错偶, 位错应力场, 分子动力学, 嵌入原子势

中图分类号 TG111

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION ON MARTENSITIC NUCLEATION AND GROWTH AT AN EDGE DISLOCATION DIPOLE

LI Bin, ZHANG Xiumu, LI Rong, LI Yiyi

Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015

Correspondent: ZHANG Xiumu, professor, Tel: (024)23843531-55362, Fax: (024)23891320,

E-mail: xmzhang@imr.ac.cn

Manuscript received 1997-09-12, in revised form 1997-12-23

ABSTRACT Molecular dynamics simulation has been performed to investigate martensite nucleation and growth at an edge dislocation dipole employing embedded atom method (EAM) type interatomic potential. The results indicate that the stress field of the dislocation dipole has important effect on the martensite nucleation and growth. The calculation of the stress distribution of the dislocation dipole shows that martensitic nucleation was preferentially initiated at the sites in the stress field where the stress state assists the lattice deformation of martensitic transformation. The two dislocations moved apart gradually, driven by transformation strain during the growing process of the martensite. The slip of the dislocation plays a role of plastic accommodation.

KEY WORDS molecular dynamics simulation, edge dislocation dipole, EAM potential, martensitic nucleation and growth, stress field

关于马氏体形核的机理, 至今还存在许多争议. 许多著名学者提出了各种各样的理论模型, 如 Magee 的应变核胚理论, Clapp 的局域软模理论等^[1,2], 这些理论都十分强调晶体缺陷对马氏体形核的作用, 可是都不能给出具体的形核图象. Olson 和 Cohen 提出马氏体形核的缺

* 国家自然科学基金资助项目 59771036

收到初稿日期: 1997-09-12, 收到修改稿日期: 1997-12-23

陷层错化模型,即预先存在的4—5个适当间隔的点阵位错可作为形核缺陷^[3];而Kajiwara则认为位错不是马氏体形核的有利位置,位错在马氏体形核中只起形状应变的塑性协调作用^[4];Easterling和Tholen计算了马氏体在位错环内部形核时的情形,结果表明位错环内部的应变可以降低马氏体形核的能垒^[5].上述理论在现有条件下都难以通过实验来验证,位错等晶体缺陷对马氏体形核究竟起什么作用,至今还没有统一的结论.

八十年代初以来,各种经验或半经验的多体模型得到迅速发展,特别是基于有效介质理论和准原子近似的嵌入原子法(EAM)既克服了两体势的缺陷,又在模拟中不致于使计算量增加太多,因而被广泛应用于材料性质的研究中^[9,10]. Voter和Chen等基于嵌入原子法的理论,采用Morse类型势函数描述中性原子间的静电相互作用,并结合描述金属结合能普适关系的Rose理论来确定电子密度函数,进而由Ni, Al, Ni₃Al以及NiAl的点阵常数、空位形成能等实验数据拟合出Ni-Al合金的嵌入原子势^[11]. Clapp等人将分子动力学模拟方法应用于马氏体相变的研究中,取得了很多有意义的结果^[9-11]. 分子动力学可以直接在原子尺度上模拟马氏体相变的全过程,从而能提供许多难以用实验手段来获得的有用信息. 本文利用分子动力学方法和嵌入原子势,模拟研究了一个位错偶上马氏体形核长大的过程和微观机理.

1 模拟方法

1.1 模拟过程中的结构识别

标准化学计量比NiAl合金具有BCC B2结构,当发生马氏体相变时,B2结构的奥氏体转变成为FCT L1₀结构的马氏体.要确定L1₀结构的点阵参数,必须要知道该结构单胞的 c/a 值.面心立方点阵可以被视为体心正方点阵,此时,标准的面心立方结构 $c/a=1.414$.类似地,体心立方点阵可以被视为 $c/a=1$ 的体心正方点阵.在形状记忆合金中发生马氏体相变时,单胞的体积变化非常小,约为 10^{-4} ,可以认为单胞的体积不变.由等体积近似可以计算出不同 c/a 的体心正方结构的能量随 c/a 的变化关系,对应着最低能量的 c/a 即是L1₀马氏体的 c/a 值,因而可以唯一地确定马氏体结构的点阵参数,并且计算出该结构中单胞内所有近邻原子之间的距离.本文采用键连线原子分布图来识别模拟过程中系统结构的变化,即将马氏单胞内位于第二和第三近邻的原子对加以连线,而由于奥氏体单胞内没有这个距离范围的原子对,因此有键连线的区域即表示马氏体.

1.2 模拟的初始条件

如图1a所示,在模拟开始时,系统具有理想的B2晶体结构,模拟盒的大小为 $30 a_0 \times 30 a_0 \times 5 a_0$ (a_0 为100 K时B2结构的点阵参数),三个轴分别沿[100], [010]和[001]方向.在 x 和 y 方向上为自由表面,而在 z 方向上施加了周期性边界条件,即相当于系统在 z 方向上为无限大,使模拟更接近于宏观体材料的情况.在系统的中上部区域构造了两个互相平行但符号相反的刃型位错,即一个位错偶.然后在极低温条件下进行弛豫,达到稳定后再进行相变模拟.模拟的时间步长为 2.5×10^{-15} s,温度为100 K.

在模拟开始前系统的两个自由表面上的纯Ni原子面被移掉.模拟研究^[12,13]表明,由于Ni原子和Al原子的振动性质的差异,热诱发马氏体首先在两个纯Ni原子表面的交界处形核,而在四个纯Al原子表面的条件下,如果系统中不存在位错或仅存在单个刃型位错时^[14],系统中都没有热诱发马氏体相变发生.因此利用图1a所示的边界条件就可以排除其它因素而只研究位错偶对马氏体相变的影响.

2 模拟结果和讨论

2.1 系统微观结构的变化

图 1b-f 为模拟过程中第 3500, 4500, 4800, 5400 和 6300 步时系统的键连线原子分布图。由图可见, 当模拟进行到 3500 步 (图 1b) 时, 少量键连线出现在位错偶的正中上方区域, 分布较规则, 这些体心正方单胞的伸长轴大致沿着 y 轴方向。这表明马氏体已经在该位置形核。如果改变位错偶在 y 方向上的位置, 发现马氏体总是在位错偶的正中上方或正中下方区域形核, 说明马氏体的形核与位错偶的应力场有密切的关系。从图中还可以看到微孪晶亚结构, 这表明在形核的早期阶段即已发生点阵不变切变。到第 4500 步 (图 1c) 时, 在上表面附近也有马氏体开始形核。随着模拟的继续进行, 到第 4800 步 (图 1d) 时, 原有的马氏体核不断长大并已相互接触, 合并为一个马氏体变体, 此时两条位错线的相对位置基本保持不变。当模拟继续进行到 5400 步 (图 1e) 时, 位错偶上方的奥氏体已全部转变成为马氏体, 形成一个倒三角形区域, 两条边各与上表面大约成 45° 。从图中还可见, 右边的位错线已稍微向下错开。随着模拟时间的延长, 右边的位错线继续向下滑移, 到第 6300 步 (图 1f) 时, 两条位错线的相对位置已经错开, 马氏体也随之向下长大。而由于两条位错线相对位置的变化, 马氏体的形貌也发生了变化, 右边位错线上方的部分区域为奥氏体, 左边位错线上方原来形成的马氏体局部已经收缩。

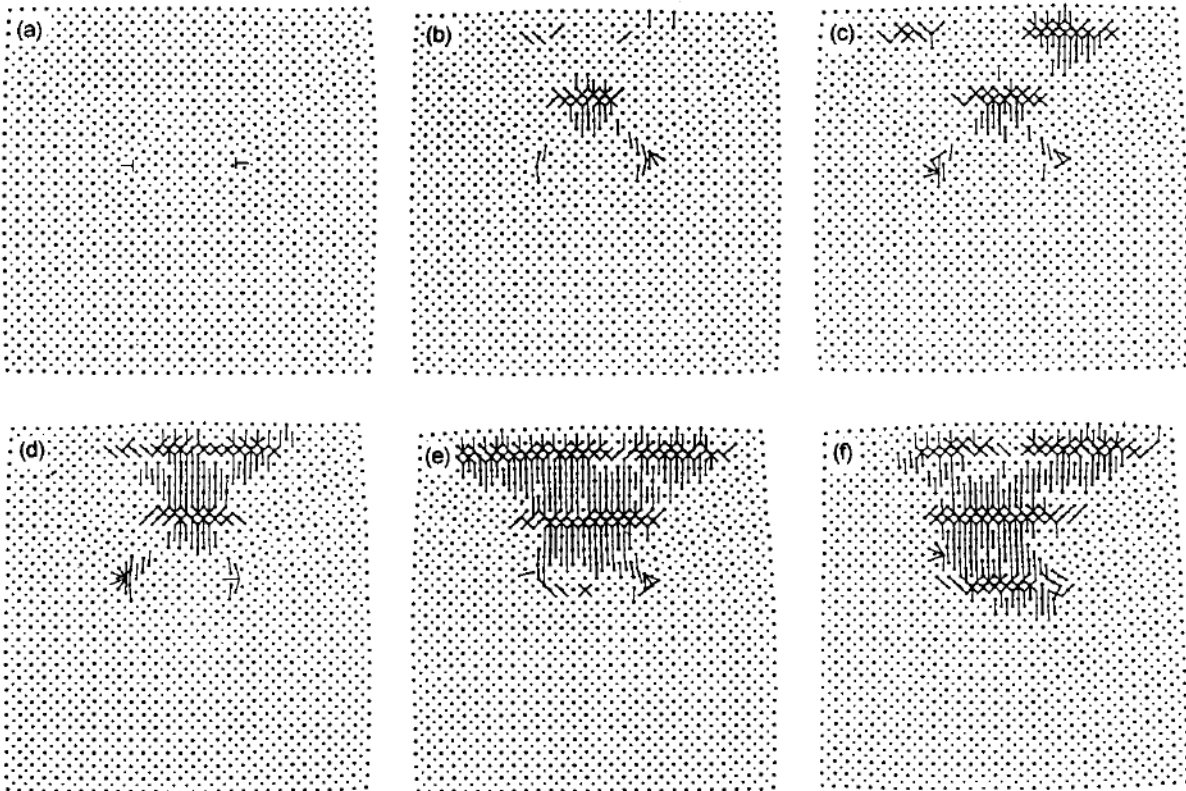


图 1 位错偶上马氏体形核长大的过程

Fig.1 Martensite nucleation and growth at an edge dislocation dipole

(a) dislocation dipole (b) step 3500 (c) step 4500 (d) step 4800 (e) step 5400 (f) step 6300

2.2 位错偶应力场的计算

根据单个刃型位错应力场的表达式 (相对于位错的坐标系)

$$\sigma_{xx} = -D \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$\sigma_{yy} = D \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}$$

$$\sigma_{zz} = \gamma(\sigma_{xx} + \sigma_{yy})$$

其中

$$D = \frac{\mu b}{2\pi(1-\gamma)}$$

由图 2, 可求得位错偶产生的应力场为

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -D_1 \frac{(y-5a_0)[3x^2 + (y-5a_0)^2]}{[x^2 + (y-5a_0)^2]^2} - D_2 \frac{(y+5a_0)[3x^2 + (y+5a_0)^2]}{[x^2 + (y+5a_0)^2]^2} \\ &= \frac{-\mu b_1}{2\pi(1-\gamma)} \frac{(y-5a_0)[3x^2 + (y-5a_0)^2]}{[x^2 + (y-5a_0)^2]^2} + \frac{-\mu b_2}{2\pi(1-\gamma)} \frac{(y+5a_0)[3x^2 + (y+5a_0)^2]}{[x^2 + (y+5a_0)^2]^2} \end{aligned}$$

而 $b_2 = -b_1$, 故可得

$$\sigma_{xx} = \frac{\mu b_1}{2\pi(1-\gamma)} \left\{ \frac{(y+5a_0)[3x^2 + (y+5a_0)^2]}{[x^2 + (y+5a_0)^2]^2} - \frac{(y-5a_0)[3x^2 + (y-5a_0)^2]}{[x^2 + (y-5a_0)^2]^2} \right\}$$

同理可得

$$\sigma_{yy} = \frac{\mu b_1}{2\pi(1-\gamma)} \left\{ \frac{(y-5a_0)[x^2 - (y-5a_0)^2]}{[x^2 + (y-5a_0)^2]^2} - \frac{(y+5a_0)[x^2 - (y+5a_0)^2]}{[x^2 + (y+5a_0)^2]^2} \right\}$$

由于马氏体形核的位置总是在 $y=0$ 处,

令 $y=0$, 可得

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{10\mu b_1 a_0 (3x^2 + 25a_0^2)}{2\pi(1-\gamma)(x^2 + 25a_0^2)^2} \\ \sigma_{yy} &= \frac{-10\mu b_1 a_0 (x^2 - 25a_0^2)}{2\pi(1-\gamma)(x^2 + 25a_0^2)^2} \end{aligned}$$

而当 $x=0, y=0$ 时,

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\mu b_1}{2\pi(1-\gamma)} \frac{2}{5a_0} \\ \sigma_{yy} &= \frac{\mu b_1}{2\pi(1-\gamma)} \frac{2}{5a_0} \end{aligned}$$

在 $x=\pm 5a_0, y=0$ 处 $\sigma_{yy}=0$.

从以上计算结果可以作出位错偶应力场的空间分布, 如图 3 所示. 由于在 z 方向施加了周期性边界条件, 故只考虑 σ_{xx} 和 σ_{yy} 的作用. 在虚线框所包围的区域内, 晶体受到 σ_{xx} 和 σ_{yy} 双向拉伸应力的作用, 这种应力状态不利于点阵沿 x 方向, 即模拟中马氏体单胞的伸长轴方向伸长. 而在 $x=\pm 5a_0, y=0$ 处, 点阵只受到 σ_{xx} 单向拉伸应力的作用, 而这种应力状态有利于完成从奥氏体向马氏体转变的点阵畸变, 所以马氏体总是优先在该处形核. 在马氏体长大以后所形成的倒三角形区域, 正好就是位错偶应力场中 $\sigma_{xx} > 0, \sigma_{yy} < 0$ 的区域.

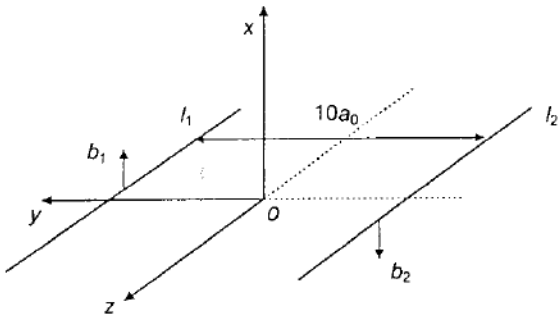


图 2 位错偶示意图

Fig.2 Model for dislocation dipole

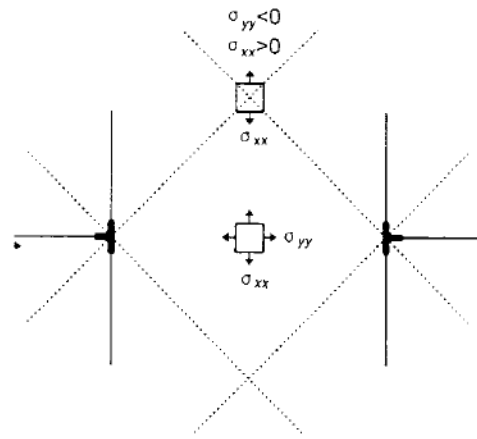


图 3 位错偶应力场的空间分布示意图

Fig.3 Distribution of stress field of the dislocation dipole

从键连线原子分布图中可见, 随着马氏体的长大, 右边的位错线逐渐向下滑移. 在下滑过程中, 由于位错应力场的作用, 在两条位错线之间的部分区域又诱发了新的马氏体形核. 为分析该位错滑移的驱动力, 计算了该位错线左下方的一个原子在模拟过程中纵向位移的变化, 如图 4 所示. 前 3000 步的模拟是系统的弛豫过程, 原子的位移从零很快增加使原子到达平衡位置. 随着模拟的进行, 原子的位移逐渐减小, 这表明随着马氏体的长大, 系统内的应变越来越大, 使原子不断向下移动, 而这个位移破坏了相变前位错线周围原子之间的平衡. 马氏体形核时, 其单胞沿一个方向伸长, 并沿另外两个方向缩短, 因此将产生相变应变. 要松弛这个应变, 只能依赖于位错线向下滑移. 从图 4 可见, 大约在 5400 步左右, 原子的位移又逐渐增加, 表明在位错线滑移过后, 该原子又逐渐向平衡位置运动. 以上分析表明, 在相变应变的驱动下, 位错线逐渐向下滑移, 起到了塑性协调的作用.

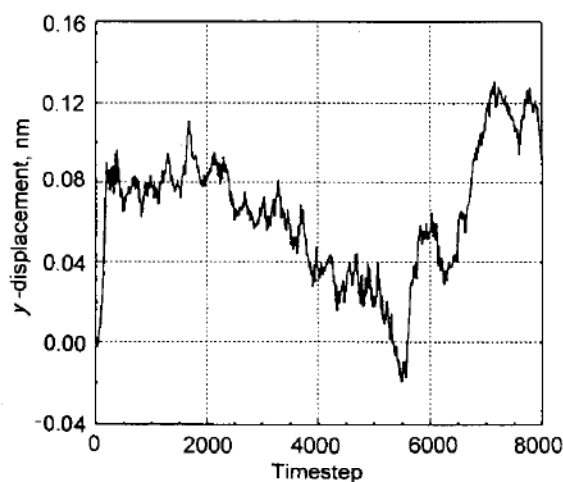
图 4 位错线 l_2 左下方原子的纵向位移随模拟时间的变化

Fig.4 Longitudinal displacement of the atom near the dislocation

在单个刃型位错对马氏体相变影响的分子动力学模拟中^[14],发现当有外加应力作用时,位错的存在使应力诱发马氏体形核的临界应变能下降了33%左右.上述结果也表明,位错对马氏体的形核与长大具有重要影响.

3 结 论

(1) 位错对于马氏体的形核长大具有重要作用,对于某些位错组态,其应力场中的特殊区域可以作为马氏体形核的有利位置,这些区域的应力状态有利于完成从奥氏体向马氏体转变的点阵畸变.

(2) 可动位错在相变应变的驱动下产生滑移,有利于马氏体的长大,同时起到了塑性协调的作用.

参 考 文 献

- 1 Magee C L. *Metall Trans*, 1971; 2: 2419
- 2 Clapp P C. *Phys Status Solid*, 1973; 57(B): 561
- 3 Olson G B, Cohen M. *Metall Trans*, 1976; 7A: 1897, 1905, 1915
- 4 Kajiwara S. *Metall Trans*, 1986; 17A: 1701
- 5 Easterling K E, Tholen A R. *Acta Metall*, 1976; 24: 333
- 6 Daw M S, Baskes M I. *Phys Rev Lett*, 1983; 50: 1285
- 7 Daw M S, Baskes M I. *Phys Rev*, 1984; 29B: 6443
- 8 Chen S P, Scrolovitz D J, Voter A F. *J Mater Res*, 1989; 4: 62
- 9 Clapp P C, Rifkin J. *Mat Res Soc Proc*, 1984; 21: 643
- 10 Yu Z Z, Clapp P C. *Metall Trans*, 1989; 28: 685
- 11 Rifkin J, Clapp P C. *J Phys Colloq*, 1982; C4: 157
- 12 沙宪伟, 张修睦, 陈魁英, 李依依. 金属学报, 1996; 32: 685
(Sha X W, Zhang X M, Chen K Y, Li Y Y. *Acta Metall Sin*, 1996; 32: 685)
- 13 沙宪伟, 张修睦, 李依依. 材料研究学报, 1997; 11: 280
(Sha X W, Zhang X M, Li Y Y. *Chin J Mater Res*, 1997; 11: 280)
- 14 沙宪伟, 张修睦, 李斌, 李依依. 金属学报, 1997; 33: 1
(Sha X W, Zhang X M, Li B, Li Y Y. *Acta Metall Sin*, 1997; 33: 1)