

# 分子动力学模拟研究单个刃型位错 对 NiAl 马氏体相变的影响\*

沙宪伟 张修睦 李 斌 李依依

(中国科学院金属研究所, 沈阳 110015)

**摘 要** 利用嵌入原子类型的势函数, 通过分子动力学模拟方法研究了单个刃型位错对 NiAl 热诱发和应力诱发马氏体相变的影响. 不受外力时, 单个刃型位错的应变区不能诱发马氏体形核; 位错在马氏体的长大过程中被继承, 并可在相变的驱动下逐渐运动. 拉应力作用下, 3R 结构的应力诱发马氏体首先在位错芯附近形核, 长大过程中先形成蝶状马氏体, 随后位错多余半原子面的中部也发生了马氏体形核. 刃型位错降低了应力诱发马氏体形核的激活能, 并在相变中起到了塑性协调作用.

**关键词** 马氏体相变, 刃型位错, 分子动力学模拟, 嵌入原子势, NiAl

近代的马氏体形核模型大多源于“应变核胚”理论. 应变核胚可以是复杂的缺陷或表面区域等, 它不需要在晶体学上接近马氏体, 但具有足以使马氏体形核的应变场<sup>[1]</sup>. 基于应变核胚理论, Olson 和 Cohen 提出了马氏体形核的位错模型, 认为特殊的位错组态可作为最初的形核区域(应变核胚). 当母相中预先存在一系列位错时, 如 fcc 至 bcc 相变中的堆垛螺位错, 位错分解后, 不全位错向一个方向移动, 组成层错, 就可作为马氏体的形核区域<sup>[2]</sup>. Kajiwara 则认为, 位错本身不是马氏体形核的有利位置, 预先存在的位错在形核中只起形状应变的塑性协调作用, 过多位错的引入将因加工硬化而阻碍马氏体形核<sup>[3]</sup>. Suezawa 和 Cook 发展了螺型位错应变区作为马氏体核胚的定量模型, 认为 Fe-30Ni(原子分数, %)合金中一个具有正常位错 10 倍强度的螺型位错, 足以在其应变场的特殊区域诱发相变<sup>[4]</sup>. Easterling 和 Tholen 发展了钢中马氏体相变的半定量应变核胚模型, 认为位错环内部的应变场可诱发马氏体形核<sup>[5]</sup>. 由于马氏体相变的速度非常快, 以实验来提示应变形核区尚有很多困难, 因此上述形核理论几乎都没有经过实验论证. 究竟何种组态的位错帮助马氏体形核, 何种组态不利于形核, 至今仍没有定论.

分子动力学方法可在原子尺度直接模拟马氏体相变的动态变化过程, 对深入研究相变的微观机制并检验各种理论模型具有重要意义<sup>[6]</sup>. 实验和分子动力学模拟研究都表明, B2 结构 NiAl 合金在一定条件下既可发生热诱发马氏体相变<sup>[7,8]</sup>, 又可发生应力诱发马氏体相变<sup>[9,10]</sup>. 本文采用多体势函数和三维原子几何模型, 通过分子动力学模拟分别研究了单个刃型位错对 NiAl 合金热诱发和应力诱发马氏体相变的影响.

\* 国家自然科学基金资助项目 59271019

收到初稿日期: 1996-11-29, 收到修改稿日期: 1997-02-20

本文通讯联系人: 沙宪伟, 沈阳(110015) 中国科学院金属研究所 15 室

# 1 模型与模拟方法

## 1.1 NiAl 合金的嵌入原子势

80 年代初以来, 各种描述原子间相互作用关系的多体理论得到了迅速发展, 其中基于密度泛函和准原子理论的嵌入原子法(Embedded atom method, EAM)既具有良好的物理背景, 又适合用于计算机模拟, 被广泛应用于固态材料性质的研究中<sup>[11]</sup>. Voter 和 Chen 等基于嵌入原子法的理论框架, 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<sup>[12]</sup> 来确定电子密度函数, 根据 Ni, Al, Ni<sub>3</sub>Al 和 NiAl 的弹性常数、空位形成能、双原子分子的键长、键能等实验数据拟合出 NiAl 合金的嵌入原子势, B2 结构 NiAl 合金弹性常数和结合能的实验值和计算值分别为 0.288 和 0.287 nm, 4.50 和 4.38 eV<sup>[13]</sup>. 利用该势函数进行的 NiAl 表面能计算<sup>[14]</sup> 以及马氏体相变模拟研究<sup>[7,10]</sup> 都取得了与实验基本一致的结果, 表明它较好地反映了 NiAl 合金中原子间相互作用关系的本质.

## 1.2 分子动力学模拟方法

模拟开始时, 系统具有理想的 B2 晶体结构, 三个轴分别沿  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 010 \rangle$ ,  $\langle 001 \rangle$  晶向, 大小为  $30a_0 \times 30a_0 \times 5a_0$  ( $a_0$  为 100 K 时 B2 结构 NiAl 的点阵参数). 所有原子的初始速度都是随机产生的, 但符合给定温度下的 Maxwell-Boltzmann 分布. 模拟开始时没有考虑热运动等因素造成的原子位移, 而且马氏体相变研究中往往需要考虑相变潜热的作用, 因此采用辐射冷却技术<sup>[15]</sup> 将系统温度维持在 100 K 左右, 当偏离该温度时要重新标定所有原子的运动速度, 使系统能在较短时间内回到给定温度. 系统在  $x$  和  $y$  轴方向具有自由表面, 以使系统中能存在不均匀形核中心而诱发马氏体相变; 在  $z$  轴方向则施加了周期性边界条件, 以使模拟结果能更接近实际材料的情况. 刃型位错的 Burgers 矢量  $\vec{b} = [100]$ . 由于系统在  $z$  轴方向具有周期性边界, 大小为  $5a_0$ , 因此将系统沿  $z$  轴均分为 5 层时, 任意一层的原子排布都能基本反映出原子的空间分布特点, 本文所有的原子分布图给出的都是其中中间一层的原子排列情况. 图 1a, b 分别给出了模拟开始时系统的原子分布图和径向分布函数(Radial distribution function

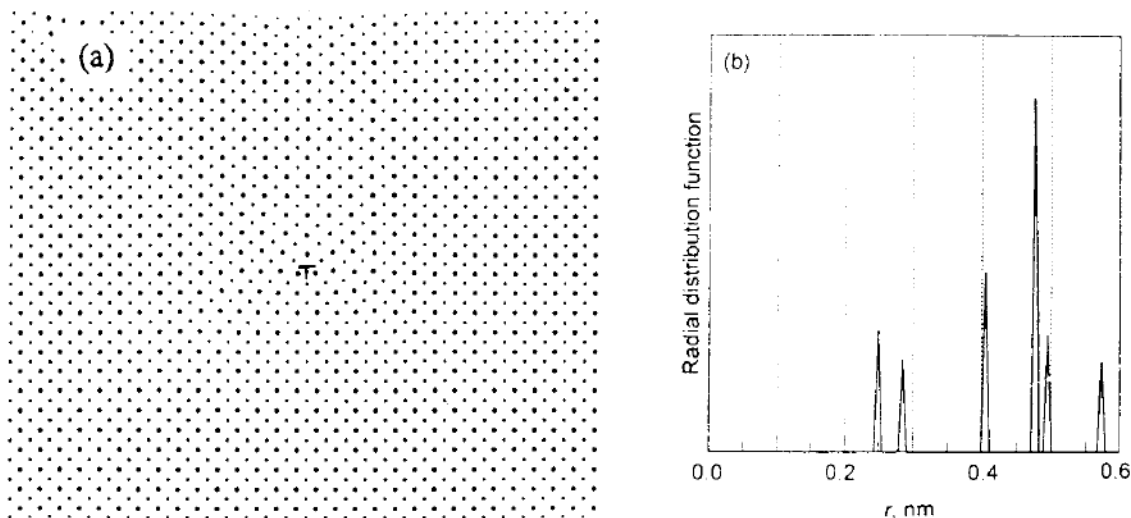


图 1 模拟开始时系统的原子分布图和径向分布函数

Fig.1 Starting atomic plot (a) and radial distribution function (b)

function, RDF), 此时所有原子的排列都比较规则, 刃型位错位于系统中下部; RDF 的每个峰都很尖锐, 且第一和第二个峰相距很近, 具有 bcc 类型结构 RDF 的普遍特征.

## 2 模拟结果与讨论

### 2.1 位错对热诱发马氏体相变的影响

首先研究了单个刃型位错的应变区诱发马氏体相变的可能性. 在 NiAl 热诱发马氏体相变的分子动力学模拟研究中发现, 由于 Ni 原子和 Al 原子振动性质的差异, 马氏体首先在两个纯 Ni 原子表面相交处形核, 具有四个纯 Al 原子表面的系统在模拟中始终未能发生相变<sup>[7]</sup>. 因此, 对存在单个刃型位错且具有四个纯 Al 原子表面的 NiAl 单晶进行模拟, 可以避免马氏体在表面等处形核, 而只研究位错应变区对形核的影响. 当刃型位错位于系统中下部时, 在 12000 步分子动力学模拟中系统始终保持该结构, 没有发生相变, 位错也没有运动. 如果位错位于其它位置, 模拟中位错都要逐渐运动, 产生滑移; 当位错运动出系统后, 在表面形成一个台阶. 上述所有模拟中, 单个刃型位错的应变区都未能诱发马氏体形核, 这与已有的理论分析相一致.

为研究 NiAl 马氏体长大过程中刃型位错的变化特点, 在具有两个纯 Ni 和两个纯 Al 原子表面的系统中构造了单个刃型位错, 并对该系统进行 12000 步分子动力学模拟. 图 2 给出了 1200、4000、8000 和 12000 步模拟后系统的 RDF. 1200 步时系统的 RDF 与模拟开始时基本类似, 峰的位置没有改变, 只是由于热扰动使每个峰都发生了宽化, 当模拟时间进一步增加时, B2 结构 RDF 的第二个峰逐渐降低, 同时在 0.34 和 0.38 nm 附近产生了两个新峰, 新峰的高度逐渐上升. 这是由于系统中发生了马氏体相变引起的, 两个新峰分别是马氏体的第二和第三个峰, 马氏体的第一个峰与奥氏体的第一个峰位置相同. 随着相变的不断进行, 马氏体的含量逐渐增加, 奥氏体的含量逐渐减少, 从而造成了系统 RDF 的上述变化.

RDF 的变化特点表明, B2 结构奥氏体点阵中基本没有距离在 0.335—0.38 nm 间的原子对, 即使由于热运动产生了该范围的原子对, 数量也非常少, 而且是随机分布的; 马氏体点阵中则大量存在着相距 0.335—0.38 nm 的原子对. 如果将系统中所有距离在上述范围内的原子对之间加以连线, 这些连线将出现在马氏体区域, 因此它们有助于研究马氏体的形核和长大过程. 图 3a—d 分别给出了 1200、4000、8000 和 12000 步模拟后系统的原子分布图, 并将所有相距 0.335—0.380 nm 的原子对之间加以连线, 即给出了键连线原子

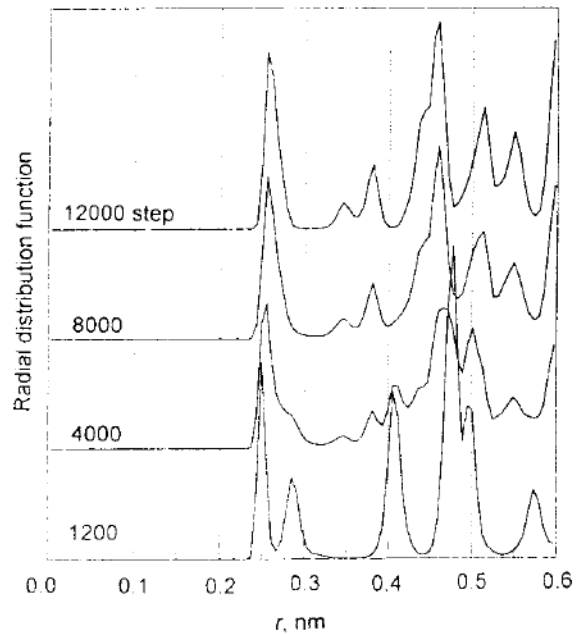


图 2 热诱发马氏体模拟中系统径向分布函数的变化示意图

Fig.2 The evolution of radial distribution functions in the simulation of thermally induced martensitic transformation

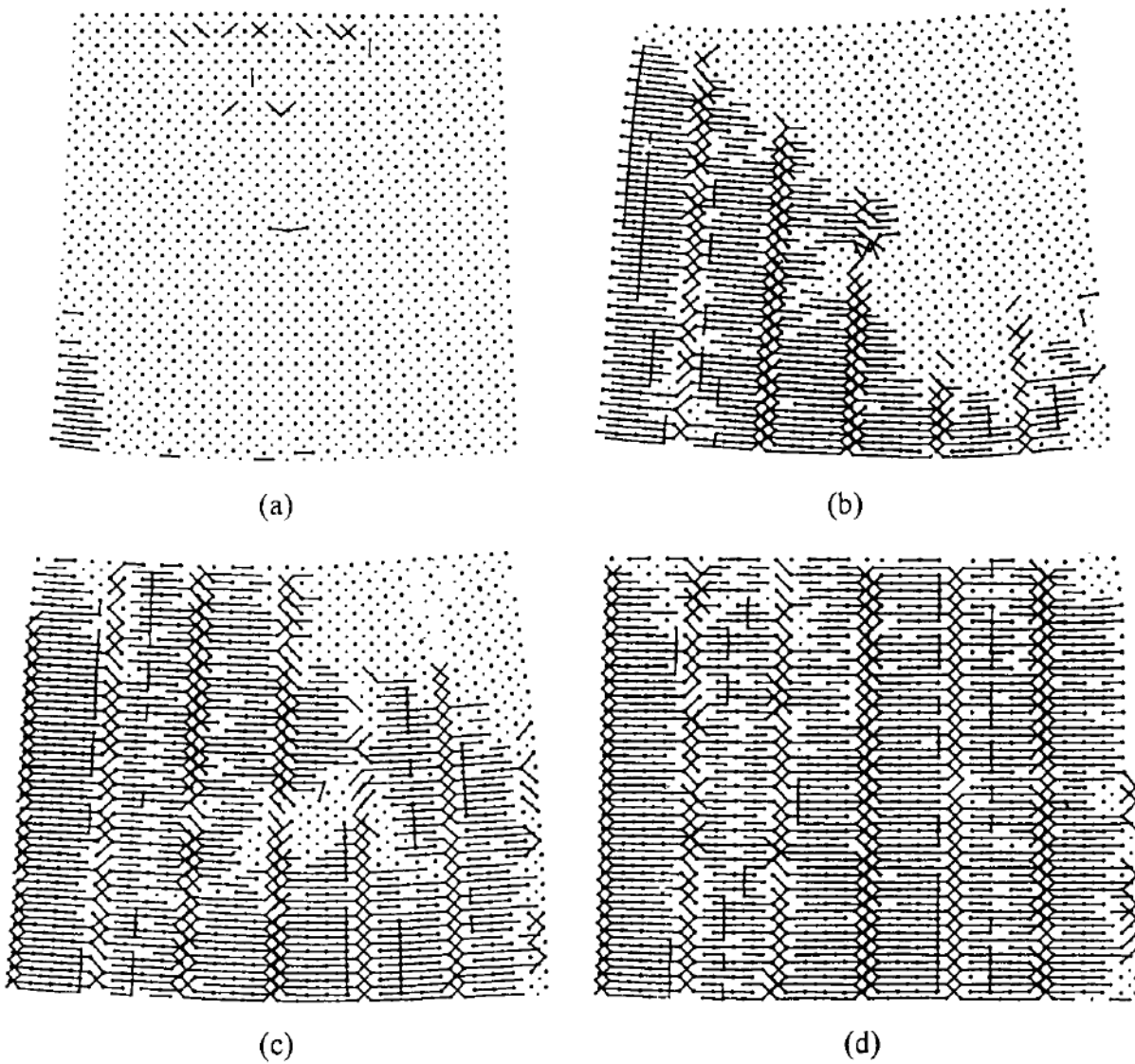


图 3 热诱发马氏体相变模拟中 1200, 4000, 8000 和 12000 步时系统的键连线原子分布图

Fig.3 Atomic bond plots at step 1200 (a), 4000 (b), 8000 (c) and 12000 (d) in the simulation of thermally induced martensitic transformation

分布图. 虽然 1200 步时系统的 RDF 基本保持了 B2 结构的特征, 但此时两个纯 Ni 原子表面相交处已出现较多键连线, 分布较集中, 表明马氏体已在该处形核. 马氏体形核后开始逐渐长大, 到 4000 步时, 系统左下部大部分区域已转变为马氏体. 单个刃型位错的应变区未能诱发马氏体形核, 位错结构在马氏体的长大过程中被继承. 从 8000 步时系统的原子分布图可看到, 随着马氏体的进一步长大, 在相变的驱动下, 位错逐渐运动. 位错运动造成了位错周围存在较大的畸变区, 且残留有部分奥氏体. 到 12000 步模拟结束时, 系统内大部分区域已转变为马氏体; 此时刃型位错已运动出系统, 在表面形成一个台阶.

对马氏体的 RDF 和原子的空间分布特征进行分析后可知, 马氏体具有 3R 结构. 这与实验<sup>[8]</sup>以及无位错系统的模拟<sup>[7]</sup>都是一致的. 与奥氏体相比, 马氏体在  $c$  轴方向伸长约 20%, 在  $a$  轴方向上缩短约 7%. 模拟中系统沿  $\langle 100 \rangle$  方向伸长, 其它方向上则变短. 由于系统在  $z$  轴方向具有周期性边界, 而马氏体在该轴方向上的点阵参数比奥氏体小, 因此必须通过一定的点阵不变切变完成不变平面应变, 才能使相变后形成的马氏体仍在该方向上匹配. 模拟中

马氏体内垂直于 $\langle 100 \rangle$ 方向上每隔 3—4 个原子层就出现有规律的带状结构, 这就是通过孪生切变方式完成不变平面应变而形成的孪晶畴亚结构。

对不存在位错的 NiAl 合金进行的 12000 步分子动力学模拟中, 3R 结构马氏体也是在两个纯 Ni 原子表面相交处形核, 但系统右上角周围较大范围始终没有发生相变<sup>[7]</sup>。将本文模拟结果与之对比后发现, 刃型位错在马氏体的长大过程可以被继承, 并促进了马氏体的进一步长大; 同时刃型位错又可以在相变的驱动下逐渐运动。

## 2.2 位错对应力诱发马氏体相变的影响

不受外力时, 存在单个刃型位错且具有四个纯 Al 原子表面的 NiAl 单晶中没有发生相变, 位错也没有运动。因此, 对该系统在外加拉应力作用下的行为进行模拟, 可以从研究刃型位错在应力诱发马氏体相变中的作用。对系统中垂直于  $x$  轴且靠近自由表面的两层原子施加随时间线性增加的拉应力, 开始时应力为 0, 每一步模拟后应力都增加 0.0725 MPa。共对该系统进行了 13000 步分子动力学模拟。

图 4 给出了 6000、6700、7000、7300、7800 和 13000 步模拟后系统的 RDF, 随着模拟时间的不断增加, B2 结构 RDF 的第二个峰逐渐下降; 同时在 0.35 和 0.38 nm 左右又产生了两个新峰, 新峰的高度逐渐上升。这表明, 该系统在模拟过程中发生了应力诱发马氏体相变。图 5a—f 分别给出了 6000、6700、7000、7300、7800 和 13000 步模拟后系统的键连线原子分布图。6000 步时位错芯周围已出现较多的键连线, 分布较集中, 具有一定的规律性, 表明该处已发生了马氏体相变; 此时外加拉应力约为 435 MPa, 可近似认为这就是应力诱发马氏体形核所需的临界拉应力。应力诱发马氏体首先在位错芯附近形核, 表明刃型位错在马氏体形核中可能具有重要作用。从 6700 步系统的原子分布图可看出, 马氏体开始长大后先形成典型的蝶状马氏体, 两个翼片分别沿切应力最大的 $\langle 110 \rangle$ 和 $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ 方向, 两翼相交于首先形核的位错芯区域。通过两个翼片的不断增厚, 马氏体迅速长大。到 7000 步时, 系统上部大部分区域已转变为马氏体, 而且在位错多余半原子面的中部发生了另一变体马氏体的形核。7300 步时的原子分布图表明, 系统上部大部分区域转变为马氏体后, 马氏体继续沿切应力最大的 $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ 和 $\langle \bar{1}10 \rangle$ 方向长大, 形成两片不同取向的马氏体变体; 在位错多余半原子面中部形核的马氏体也逐渐长大, 此时已与沿 $\langle \bar{1}\bar{1}0 \rangle$ 方向长大的左下片变体相接触。在随后的模拟中, 两片马氏体变体不断增厚, 在位错多余半原子面中部形核的马氏体也继续长大。到 7800 步时, 位错多余半原子面中部形核的马氏体已开始与沿 $\langle \bar{1}10 \rangle$ 方向长大的右下片变体相接触, 刃型位错在相变的驱动下也开始运动。在拉应力、热运动以及系统内

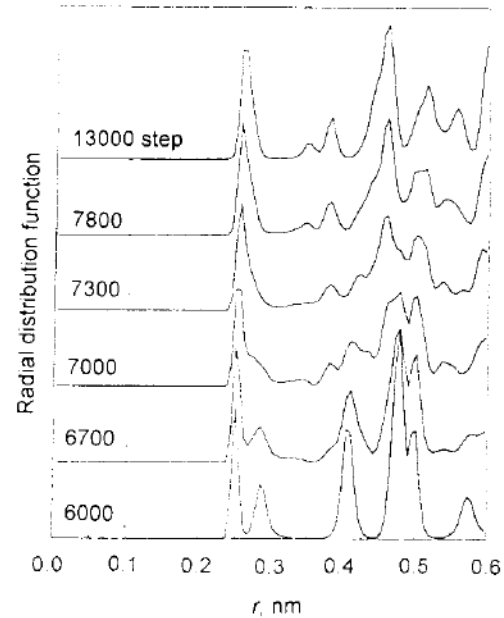


图 4 应力诱发马氏体模拟中系统径向分布函数的变化示意图

Fig.4 The evolution of radial distribution functions in the simulation of stress induced martensitic transformation

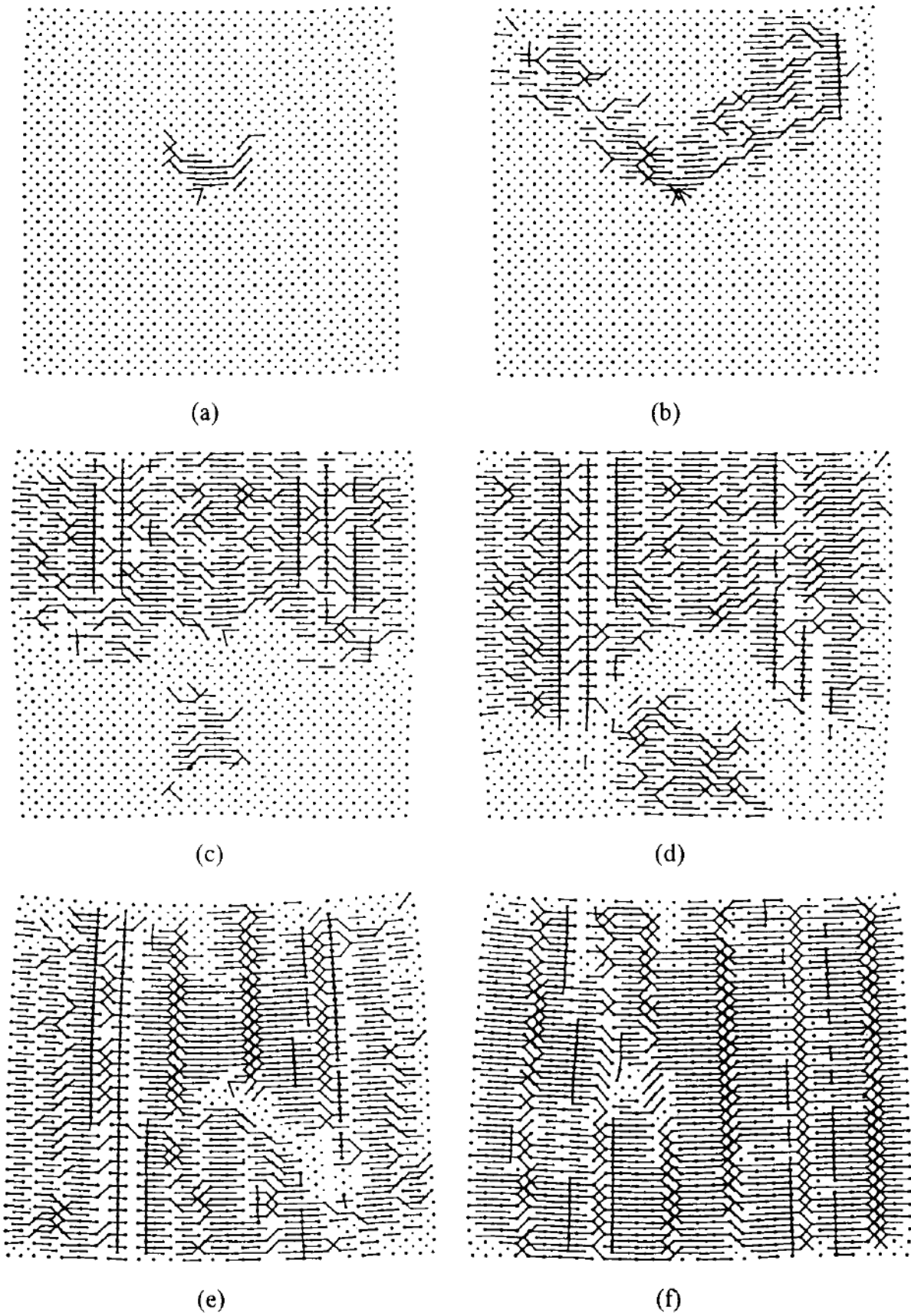


图 5 应力诱发马氏体相变模拟中 6000, 6700, 7300, 7800 和 13000 步时系统的键连线原子分布图

Fig.5 Atomic bond plots at step 6000 (a), 6700 (b), 7000 (c), 7300 (d), 7800 (e) and 13000 (f) in the simulation of stress induced martensitic transformation



应力等因素共同作用下,不同取向的马氏体变体间可以相互转化和合并. 到 13000 步模拟结束时,系统内大部分区域已转变为单一变体的马氏体. 应力诱发马氏体相变过程中同样以孪生切变方式完成不变平面应变,在马氏体内形成了孪晶畴亚结构.

与不存在位错的 NiAl 合金中发生的应力诱发马氏体相变<sup>[10]</sup>相比,马氏体都具有 3R 结构,模拟结束都形成了单一变体的马氏体. 但本文模拟中应力诱发马氏体首先在位错芯附近形核,形核所需的临界拉应力仅为无位错系统的 60%左右;马氏体的长大过程也不相同. 这表明,刃型位错的存在影响了应力诱发马氏体的形核和长大过程.

为进一步研究位错在应力诱发马氏体相变中的作用,分别选取蝶状马氏体一翼和位错芯周围的部分区域,计算了 3000 至 13000 步模拟中这些区域内原子的平均应变随时间的变化过程,所得结果如图 6 所示. 在蝶状马氏体(图 6a)的翼片上,应变  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$  从 6500 步左右开始

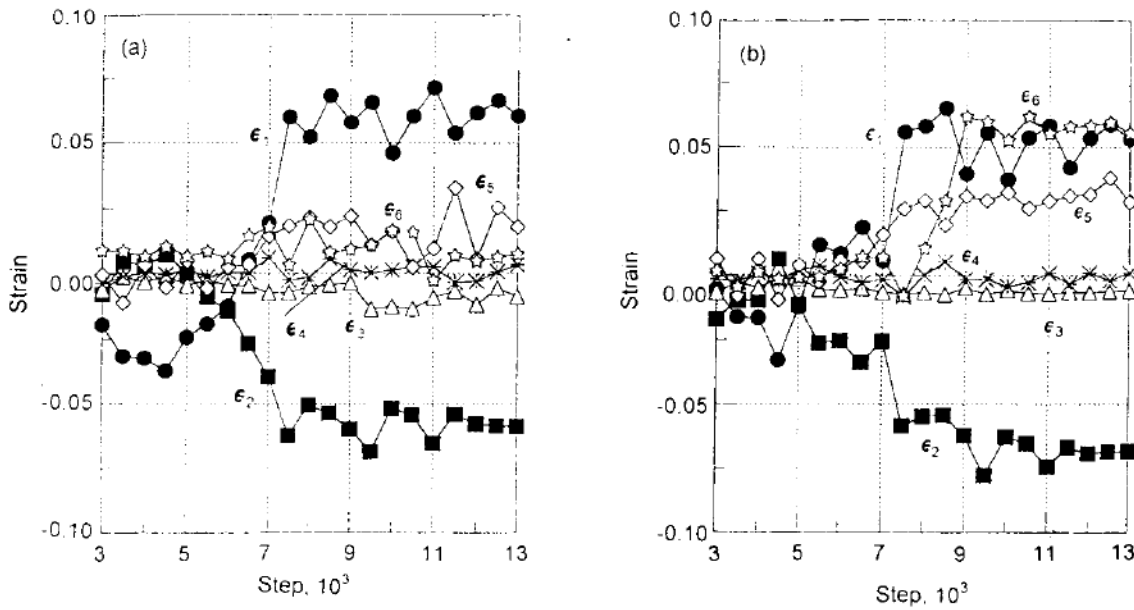


图 6 蝶状马氏体一翼和位错芯区域原子平均应变随时间变化图

Fig.6 The average strain in one wing of the butterfly martensite (a) and dislocation core (b) vs simulation time

迅速增大,且  $\epsilon_2 < 0$ ,  $\epsilon_1 > 0$ , 7500 步后应变  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$  基本保持不变,其余各应变分量在模拟中始终较小;该区域就在 6500 步左右开始转变为马氏体,这表明应变  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$  在应力诱发马氏体相变中可能具有重要作用. 从图 6b 可知,在位错芯区域内,应变  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$  在 6000 步左右开始达到临界值,7000 步时又迅速增大,至 7500 步以后变化较小;应变  $\epsilon_5$  自 7000 步开始逐渐增加,  $\epsilon_6$  应变在 7500 步左右也开始迅速增大,应变  $\epsilon_5$  和  $\epsilon_6$  在 9000 步后都与  $\epsilon_1$  应变大小相仿;应变  $\epsilon_3$  和  $\epsilon_4$  在模拟中始终较小. 以上分析表明,应变  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$  在应力诱发马氏体形核中起了关键作用:在拉应力作用下,应变  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$  逐渐增加;当拉应力增至一定值时,  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$  达到临界值,同时系统的应变能达到临界值,从而使奥氏体能够克服能垒而转变为马氏体. 应变  $\epsilon_1$  和  $\epsilon_2$  符号相反,而切应变  $(\epsilon_1 - \epsilon_2) / 2$  代表沿  $(110) \langle \bar{1}10 \rangle$  方向切变量的大小,这说明应力诱发马氏体可能是通过沿  $(110) \langle \bar{1}10 \rangle$  方向的切变形核的. 位错芯区域在转变为马氏体后具有较大的  $\epsilon_5$  和  $\epsilon_6$  应变,表明刃型位错在相变过程中可能起了形状应变的塑性协调作用.

如果假设应力诱发马氏体在 6000 步时开始形核, 则可计算出形核原子的平均应变为:  $\varepsilon_1 \cong -0.0083$ ,  $\varepsilon_2 \cong -0.0253$ ,  $\varepsilon_3 \cong -0.0057$ ,  $\varepsilon_4 \cong -0.0007$ ,  $\varepsilon_5 \cong 0.0055$ ,  $\varepsilon_6 \cong 0.0023$ . 立方晶系材料应变能的计算公式为<sup>[16]</sup>

$$\begin{aligned} f(\varepsilon) = & \frac{1}{2} C_{11} (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_3^2) + C_{12} (\varepsilon_1 \varepsilon_2 + \varepsilon_2 \varepsilon_3 + \varepsilon_1 \varepsilon_3) + \frac{1}{2} C_{44} (\varepsilon_4^2 + \varepsilon_5^2 + \varepsilon_6^2) + \\ & \frac{1}{6} C_{111} (\varepsilon_1^3 + \varepsilon_2^3 + \varepsilon_3^3) + \frac{1}{2} (C_{112} (\varepsilon_1^2 \varepsilon_2 + \varepsilon_2^2 \varepsilon_1 + \varepsilon_1^2 \varepsilon_3 + \varepsilon_3^2 \varepsilon_1 + \varepsilon_2^2 \varepsilon_3 + \varepsilon_3^2 \varepsilon_2) + \\ & C_{123} \varepsilon_1 \varepsilon_2 \varepsilon_3 + \frac{1}{2} C_{144} (\varepsilon_1 \varepsilon_4^2 + \varepsilon_2 \varepsilon_5^2 + \varepsilon_3 \varepsilon_6^2) + \frac{1}{2} C_{166} (\varepsilon_1 \varepsilon_5^2 + \varepsilon_1 \varepsilon_6^2 + \varepsilon_2 \varepsilon_4^2 + \\ & \varepsilon_2 \varepsilon_6^2 + \varepsilon_3 \varepsilon_4^2 + \varepsilon_3 \varepsilon_5^2) + C_{456} \varepsilon_4 \varepsilon_5 \varepsilon_6 + \lambda C_{ijkl} \varepsilon^4 \end{aligned}$$

式中,  $\varepsilon$  是用 Voight 符号表示的六个 Lagrangian 应变分量,  $C_{ij}$ ,  $C_{ijk}$  和  $C_{ijkl}$  分别代表二阶、三阶和四阶弹性常数. 本文模拟中应力诱发马氏体形核的临界应变较小, 因此可以忽略四阶以上项对应变能的贡献. Shao 等<sup>[17]</sup> 利用 NiAl 合金的嵌入原子势, 计算了标准化学计量比 NiAl 合金的各二阶和三阶弹性常数 (单位为  $10^{11} \text{ J/m}^3$ ) 分别为:  $C_{11} = 2.17$ ,  $C_{12} = 1.61$ ,  $C_{44} = 1.71$ ,  $C_{111} = -40.1$ ,  $C_{112} = -6.22$ ,  $C_{123} = -6.11$ ,  $C_{144} = -9.88$ ,  $C_{166} = -8.71$ ,  $C_{456} = -9.19$ , 各二阶弹性常数与已知实验数据符合较好. 将弹性常数和形核的临界应变代入上式, 则可计算出刃型位错芯处应力诱发马氏体形核的激活能约为  $7.5 \times 10^7 \text{ J/m}^3$ <sup>[10]</sup>. 在没有位错的系统中, 应力诱发马氏体形核的激活能约为  $1.0 \times 10^8 \text{ N/m}^2$ . 这表明, 刃型位错的存在降低了应力诱发马氏体形核的激活能.

### 3 结 论

(1) 不受外力作用时, 单个刃型位错的应变区不能诱发马氏体形核; 刃型位错在马氏体的长大过程可以被继承, 并可促进马氏体的进一步长大; 在相变的驱动下, 刃型位错可逐渐运动.

(2) 在对系统施加了随时间线性增加的拉应力后, 发生了 B2 结构奥氏体转变为 3R 结构马氏体的相变. 应力诱发马氏体首先在位错芯附近形核, 长大过程中先形成蝶状马氏体, 位错芯位于两翼相交处. 随后位错多余半原子面的中部也发生了马氏体形核. 在拉应力、热运动和系统内应力等因素共同作用下, 不同取向的马氏体在长大过程中可以逐渐转化和合并.

(3) 单个刃型位错降低了应力诱发马氏体形核的激活能, 而且在相变中起到了形状应变的塑性协调作用.

感谢美国 Connecticut 州立大学的 P.C. Clapp 教授和 J. Rifkin 教授提供了分子动力学模拟的源程序.

### 参 考 文 献

- 1 Magee C L. *Metall Trans*, 1971; 2: 2419
- 2 Olson G B, Cohen M. *Metall Trans*, 1976; 7A: 1897, 1905, 1915
- 3 Kajiwara S. *Metall Trans*, 1986; 17A: 1701
- 4 Suezawa M, Cook H E. *Acta Metall*, 1980; 28: 423



- 5 Easterling K E, Tholen A R. *Acta Metall*, 1976; 24: 333
- 6 Yu Z Z, Clapp P C. *Metall Trans*, 1989; 20A: 1617
- 7 沙宪伟, 张修睦, 陈魁英, 李依依. *金属学报*, 1996; 32: 685
- 8 Schryvers D. *Philos Mag*, 1993; A68: 1017
- 9 Martynov V Y, Enami K, Khandros L G, Nenno S, Tkachenko A V. *Phys Met Metallogr*, 1983; 55: 136
- 10 沙宪伟, 张修睦, 李依依. *钢铁研究学报*, 1997; 9(6):
- 11 Daw M S, Baskes M I. *Phys Rev*, 1984; B29: 6443
- 12 Rose J H, Smith J R, Guinea F, Ferrante J. *Phys Rev*, 1984; B29: 2963
- 13 Chen S P, Srolovitz D J, Voter A F. *J Mater Res*, 1989; 4: 62
- 14 沙宪伟, 张修睦, 陈魁英, 李依依. *金属学报*, 1996; 32: 1184
- 15 Heermann D W. *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics*. 2nd ed., Berlin: Springer-Verlag, 1990: 147
- 16 Clapp P C. *Phys Status Solidi*, 1973; B57: 561
- 17 Shao Y. PhD Thesis, University of Connecticut, 1993

## MOLECULAR DYNAMICS STUDY ON THE INFLUENCE OF SINGLE EDGE DISLOCATION ON MARTENSITIC TRANSFORMATIONS IN NiAl

*SHA Xianwei, ZHANG Xiumu, LI Bin, LI Yiyi (Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015)*

(Manuscript received 1996-11-29, in revised form 1997-02-20)

**ABSTRACT** Via embedded atom type potential, molecular dynamics simulation has been performed to study the influence of single edge dislocation on both thermally and stress induced martensitic transformations in a stoichiometric NiAl B2 alloy. If no external force is applied to the system, the strain field of single edge dislocation can not nucleate martensites. Edge dislocation can be inherited during the growth processes of thermally induced martensite, and can also migrate toward the surface with the help of the transformation. When a tensile force is applied, stress induced martensite with 3R structure can initially nucleate near the dislocation core. Butterfly martensite appeared first during the growth process, and then another martensitic variant nucleated in the middle of the dislocation. Edge dislocation can reduce the activation energy for stress induced martensitic nucleation, and it also plays a role of plastic accommodation in the transformation processes.

**KEY WORDS** martensitic transformation, edge dislocation, molecular dynamics simulation, embedded atom type potential, NiAl

---

*Correspondent: SHA Xianwei, Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015*