

# Fe 合金 FCC-BCC 原子尺度台阶型马氏体相界面迁移行为的分子动力学模拟研究\*

韦昭召<sup>1)</sup> 马骁<sup>2)†</sup> 柯常波<sup>2)</sup> 张新平<sup>2)</sup>

1) (五邑大学智能制造学部, 江门 529020)

2) (华南理工大学材料科学与工程学院, 广州 510640)

(2019 年 12 月 16 日收到; 2020 年 4 月 18 日收到修改稿)

两相界面的原子尺度结构对相界面迁移行为具有重要影响. 高分辨透射电子显微分析表明钢中马氏体相界面具有高度为若干原子层间距的台阶结构, 然而目前 Fe 合金马氏体相变的模拟研究工作中绝大多数使用非台阶型相界面结构作为模拟初始模型. 本文基于拓扑模型和相变位错理论构建了 Fe 合金 FCC/BCC 台阶型相界面初始模型, 采用分子动力学模拟方法研究了 Fe 合金马氏体相界面的迁移行为. 研究表明, 当两相界面具有约束共格匹配关系及台阶结构时, 体系发生 FCC  $\rightarrow$  BCC 马氏体相变并呈现典型的非扩散切变特征; 相变过程中 FCC/BCC 宏观尺度相界面沿其法线方向以  $(4.4 \pm 0.3) \times 10^2$  m/s 的速度迁移, 且相界面在迁移过程中始终保持稳定的台阶结构和相对平直的宏观界面形貌特征; 相变位错的滑移速度高达  $(2.8 \pm 0.2) \times 10^3$  m/s, 相变位错阵列沿台阶面的协同侧向滑移不仅是马氏体台阶结构宏观相界面迁移的微观机制, 也是马氏体相变宏观形状应变的主要来源; 采用分子动力学模拟方法获得的 Fe 合金马氏体相变晶体学特征参量与拓扑模型的解析解数值非常接近, 相变产生的整体宏观形状应变由平行于相界面的剪切应变和垂直于相界面的法向应变两部分组成.

**关键词:** 相变位错, 相界面迁移, 分子动力学模拟, 马氏体相变拓扑模型

**PACS:** 61.72.Lk, 68.35.-p, 87.10.Tf, 81.30.Kf

**DOI:** 10.7498/aps.69.20191903

## 1 引言

Fe 合金中的马氏体相变对钢铁材料微观组织和服役性能具有重要影响, 一直是物理冶金领域倍受关注的研究方向. 厘清马氏体相变物理本质及与之密切相关的物相界面迁移行为有助于精确设计材料微观组织, 进而实现材料性能的量化调控<sup>[1-4]</sup>. 掌握相变过程中物相界面在原子尺度上的动态演变规律是阐明材料相变微观机制的关键所在, 然而在转变速率极高的非扩散切变型马氏体相变过程

中, 即便使用高分辨原位实验等手段亦难以表征马氏体相界面前沿原子的动态迁移过程. 因此, 马氏体相变原子尺度物相界面迁移行为及微观机制方面的研究仍缺乏直接的实验观察与数据, 目前已有的工作大多关注材料相变前后物相界面结构的显微分析和基于相变晶体学模型的理论研究等.

Fe 基合金母相与马氏体相之间的相界面称为惯习面, 其晶面指数随合金成分和凝固条件等的变化主要分布在  $\{575\}_{\text{FCC}}$  和  $\{252\}_{\text{FCC}}$  及  $\{259\}_{\text{FCC}}$  之间<sup>[4]</sup>. 在光学显微镜和较低放大倍数的扫描或透射电子显微镜下观察时, Fe 基合金马氏体惯习面宏

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51571092)、广东省自然科学基金 (批准号: 2017A030310657, 2018B0303110012)、广州市科技计划 (批准号: 201904010316) 和江门市创新科研团队引进项目 (批准号: 2018G30100090019844) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: maxiao@scut.edu.cn

观上呈现出清晰的平直界面特征<sup>[5,6]</sup>. 马氏体相变晶体学唯象理论 (phenomenological theory of martensite crystallography, PTMC)<sup>[7]</sup> 认为该宏观平直的惯习面在马氏体相变过程中不发生畸变或刚性旋转, 称其为不变平面; 通过矩阵运算可以获得惯习面晶面指数、位向关系和宏观形状应变等重要的相变晶体学特征参量. PTMC 被成功用于解释大部分 Fe 基合金中已实验观测到的马氏体相变晶体学特征, 但该理论具有“唯象”属性特点且缺乏对相界面结构特征及界面原子迁移细节的描述, 并不涉及相变界面迁移微观机制. 另外, 高分辨透射电子显微 (HRTEM) 研究表明<sup>[8,9]</sup>, Fe 基合金马氏体惯习面具有台阶面和台阶亚结构, 该台阶面 (即  $\{111\}_{\text{FCC}} // \{110\}_{\text{BCC}}$  密排面) 为两相实际接触面, 称为原子尺度惯习面 (atomic habit plane), 而较低放大倍数下观察到的相界面即前述传统定义中的惯习面称为宏观尺度惯习面 (macroscopic habit plane). 受上述 HRTEM 实验研究进展等的启发, Hirth 和 Pond<sup>[10,11]</sup> 基于晶体对称性分析结合位错理论定义了一类相界面缺陷并称之为相变位错 (transformation dislocation 或 disconnection), 它具有普通晶体位错的 Burgers 矢量 ( $b^D$ ) 特征, 同时还具备有别于晶体位错的台阶高度 ( $h$ ) 特性; 并在此基础上提出了马氏体相变的拓扑模型 (topological model, TM)<sup>[12,13]</sup>, 如图 1 所示, 相对平直的宏观尺

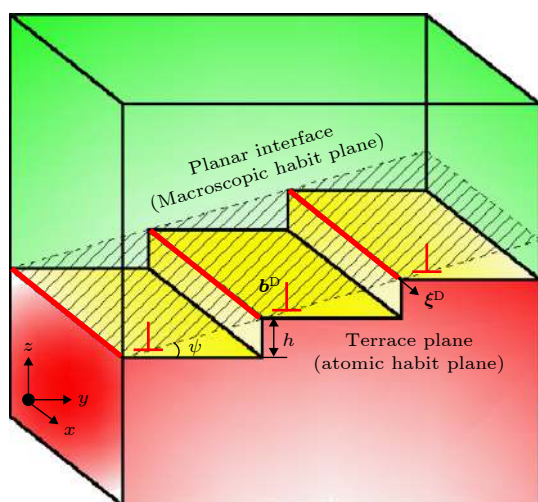


图 1 拓扑模型中母相-马氏体相界面台阶结构示意图<sup>[12,13]</sup>

Fig. 1. Schematic illustration of the stepped interface structure between parent and martensite phases in the topological model (in which the macroscopic planar habit plane is inclined to the terrace plane, or atomic habit plane, with an angle  $\psi$ )<sup>[12,13]</sup>.

度惯习面与台阶面即原子尺度惯习面之间存在倾角  $\psi$ . 拓扑模型不仅能够计算马氏体相变晶体学特征参量, 还可基于母相和马氏体相晶格在台阶面上形成半共格界面特征, 量化表征惯习面内的相变位错结构参数; 同时进一步认为, 相变位错在台阶面上通过横向的保守型滑移运动使母相原子发生迁移, 并占据相应马氏体相晶格点阵位置从而实现两相结构间的转变. 目前, 拓扑模型已成功应用于  $\text{ZrO}_2$  陶瓷<sup>[12,13]</sup>、TiMo 合金<sup>[12,13]</sup>、Fe 基合金<sup>[14,15]</sup> 和 Ni 基形状记忆合金<sup>[16-18]</sup> 等材料的马氏体相变晶体学研究中. 虽然拓扑模型在离散晶格点阵的基础上引入相变位错理论描述了马氏体相界面结构特征, 并给出了马氏体相变微观机制的晶体学解释, 但是该模型在本质上仍属于相变几何模型, 因此在讨论相变动力学及原子迁移行为等方面存在一定的局限性.

分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟方法能够再现材料体系中原子的实时运动轨迹, 进而获取材料物理状态的动态演变细节, 在常规实验手段难以达到的时间与空间尺度上对材料结构特征及转变过程进行研究, 为在原子尺度下探索 Fe 合金马氏体相变微观机制和相界面迁移行为提供了新的思路 and 工具. 例如, Bos 等<sup>[19]</sup> 在采用分子动力学模拟 Fe 中 FCC/BCC 相界面迁移工作中发现, 只有当模拟体系在至少一个方向上采用自由边界条件时相界面才发生迁移, 并指出自由表面的引入可松弛由相变引起的体积变化, 利于相变的发生. Suiker 等<sup>[20]</sup> 分别采用 Johnson-Oh 型势函数、嵌入原子 (embedded-atom method, EAM) 势函数及修正的 EAM 势函数模拟 Fe 相变过程, 并讨论了势函数类型对模拟结果的影响, 指出势函数准确表征 FCC 和 BCC 相物理性质对合理描述 Fe 相变行为具有重要意义. Wang 和 Urbassek<sup>[21,22]</sup> 模拟研究了 Fe 在不同温度下的马氏体正、逆相变过程, 发现当模拟温度接近相变临界温度时系统没有相变发生, 在相界面附近 BCC 相存在均匀和非均匀形核方式, 且两者存在竞争关系. Tateyam 等<sup>[23,24]</sup> 在模拟 Fe 的 FCC-BCC 复相系统相变过程时发现, BCC 相在不同位向关系下的生长方式存在差异. 其中, 在 Nishiyama-Wassermann (N-W) 晶体学位向关系下 BCC 相以平面生长方式形成, 从而实现 FCC/BCC 相界面沿法线向 FCC 相内部整体迁移; 而当两相为 Kurdjumov-Sachs (K-S) 位向

关系时, BCC 相从平面生长方式逐步转变为局部针状生长方式, 且该针状生长方式的生长速度显著高于前者. 他们将位向关系所导致的不同界面迁移行为归因于两相晶格在 N-W 和 K-S 位向关系下相界面匹配程度的差异. Ou 等<sup>[25]</sup> 则讨论了 K-S, N-W 和 Nagano 位向关系下 Fe 复相系统的相变过程, 根据相变过程中原子的位移分布状态, 在相界面上 FCC 和 BCC 晶格匹配较好的低能量区域内, FCC 向 BCC 结构的转变行为满足马氏体相变中原子最小位移量的动力学特征, 且晶格转变机制符合 Bogers-Burgers 模型; 而在两相晶格匹配较差的高能量区域内, FCC 向 BCC 结构的转变则需要原子作长程的扩散迁移. 此外, 马氏体相变能够在较低的温度环境下 ( $< 100$  K) 进行且转变速度极高, 表明马氏体相界面应具有高的可动性, 而相界面的迁移行为与界面微观结构密切相关. Song 和 Hoyt<sup>[26]</sup> 通过构建 FCC 和 BCC 相之间的  $(776)_{\text{FCC}} // (011)_{\text{BCC}}$  界面, 在 FCC 相一侧引入一组台阶结构, 发现这些台阶在 FCC/BCC 相界面迁移过程中基本处于静止状态, 并未发生显著的横向运动, 因而指出其相变机制并非借助台阶结构的迁移. 最近, Maresca 和 Curtin<sup>[27]</sup> 基于 Fe-Ni-Mn 合金中马氏体相界面微观结构的 HRTEM 分析结果<sup>[9]</sup> 构建了 FCC/BCC 相界面模型, 据此模拟分析相变过程中产生的界面位错结构特征, 并结合经典唯象理论的双切变模型 (double-shear model) 计算出马氏体相变晶体学特征参量. 可以看出, 随着 Fe 合金多体势函数理论的发展, 研究者利用分子动力学模拟方法探索了 FCC  $\rightarrow$  BCC 马氏体相变过程并取得了一定的研究成果和进展, 并认识到相界面结构在实际相变过程和理论模拟研究中的关键性和重要性. 如前所述, 越来越多的 HRTEM 研究分析表明<sup>[8,9]</sup>, Fe 基合金 FCC/BCC 相界面在原子尺度下具有高度为一个或几个原子层间距的台阶结构. 然而在目前的 Fe 合金马氏体相变 MD 模拟研究工作中, 绝大多数相界面初始模型的构建仅考虑了两相在最密排面即  $\{111\}_{\text{FCC}}$  和  $\{110\}_{\text{BCC}}$  上的匹配, 基于相界面台阶结构的 Fe 合金马氏体相变分子动力学模拟研究尚待系统和深入的开展.

本文将根据 Fe 基合金马氏体相界面 HRTEM 实验研究结果, 在拓扑模型框架下构建 Fe 中 FCC/BCC 相界面具有台阶结构特征的初始模型, 采用分子动力学模拟方法研究马氏体相界面在

FCC  $\rightarrow$  BCC 相变过程中的迁移行为并获取界面迁移动力学特征参量, 阐明 Fe 基合金马氏体相变原子尺度物相界面迁移行为及其微观机制.

## 2 FCC/BCC 相界面台阶结构初始模型的构建及模拟条件

在分子动力学模拟中, 势函数能否正确描述模拟对象的物理性质对于模拟结果的合理性至关重要, 而获得与 Fe 势函数的选择密切相关的稳定 FCC/BCC 相界面结构作为模拟的初始模型亦非常关键. Engin 等<sup>[28]</sup> 曾根据不同类型的势函数分别计算了 Fe 中 FCC 和 BCC 相的自由能, 计算结果显示 Finnis-Sinclair 型势函数<sup>[29]</sup> 所描述的 FCC 相自由能存在一个局部最小值, 表明 FCC 相在 FCC-BCC 复相体系中处于亚稳态, 它在转变为 BCC 相时需要克服一定的能垒. 更重要的是, 该能垒有利于在 FCC-BCC 复相体系中获得结构稳定的 FCC/BCC 相界面, 从而为后续界面迁移模拟提供合理的界面初始模型<sup>[21-26]</sup>. 因此, 本文采用 Fe 的 Finnis-Sinclair 型势函数作为初始参量, 其对应 FCC 和 BCC 相的晶格常数分别为  $a_{\text{FCC}} = 0.3668$  nm 和  $a_{\text{BCC}} = 0.2996$  nm<sup>[29]</sup>.

由于 FCC 和 BCC 晶体结构和晶格常数存在差异, 导致两相在界面上通常存在晶格错配. 根据 Finnis-Sinclair 型势函数对应的 FCC 和 BCC 相晶格常数, 计算可得两相晶格在  $y$  轴方向 (即  $[7\bar{1}0]_{\text{FCC}} // [\bar{5}70]_{\text{BCC}}$ ) 上的错配度  $\delta$  较小 ( $< 0.1\%$ ), 即在该方向上两相能够较好地匹配. 因而本模拟中相界面的晶格错配主要存在于  $x$  轴方向 (即  $[10\bar{1}]_{\text{FCC}} // [001]_{\text{BCC}}$ ) 上. 图 2(a) 是两相在  $x$  轴方向上的晶格匹配状态图, 其中 Fe 原子根据中心对称参数 (centrosymmetry parameter, CSP) 着色, 该原子参数为大于 0 的数值, 表征原子近邻晶格的无序程度, 可用于描述晶体材料中的位错缺陷结构. 对于占据理想晶格点阵位置的原子, 其 CSP 值为 0, 而位于晶格缺陷如位错附近的原子, 由于晶格畸变而导致该原子 CSP 值为一较大数值. 从图 2(a) 中可见, 自然状态下 FCC 和 BCC 相在  $x$  轴方向上存在明显的晶格错配, 这些错配可用在 FCC/BCC 相界面沿  $x$  轴方向分布并具有一定间距的失配位错阵列 (misfit dislocation array) 表示, 显然该相界面在自然状态下为非共格界面.



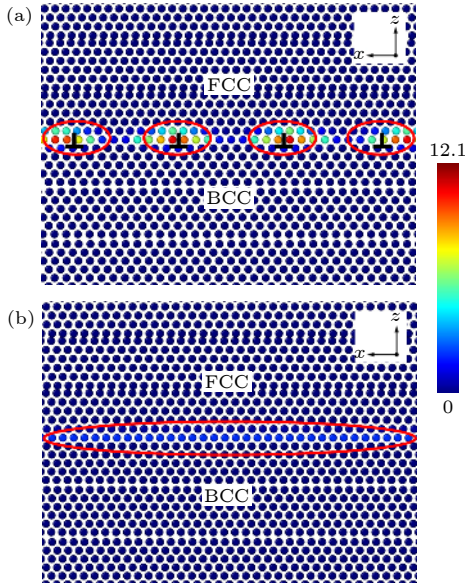


图 2 自然状态 (a) 和约束共格状态 (b) 下 FCC 和 BCC 相晶格点阵在  $x$  轴方向上的匹配状态图

Fig. 2. The atomic configuration of interphase boundary between FCC and BCC crystals in (a) natural state and (b) constraint coherent state (in which the atoms are colored by their centrosymmetry parameters).

另一方面, 马氏体相变过程无长程扩散, 原子通过协作式切变完成晶体结构转变, 可通过讨论相变过程中界面原子迁移的扩散通量来描述界面结构特征对马氏体相变的影响. 根据图 3 中 FCC 与 BCC 相在台阶面上接触并形成简单的双晶体结构, 将 Fe 原子在两相中的体密度分别记为  $X_{\text{FCC}}$  和  $X_{\text{BCC}}$ , 则当台阶面沿其法线方向朝 FCC 相内部迁移单位距离时, Fe 原子穿过台阶面单位面积的微元  $S$  流出或流入 FCC 相, 其中流出面微元  $S$  的原子占据 BCC 晶格阵点位置形成新生 BCC 相, 其体积为两相台阶面间距的比值, 即  $V_{\text{BCC}} = d_{\text{BCC}}/d_{\text{FCC}}$ , 从而新生 BCC 相中包含的 Fe 原子数为  $(d_{\text{BCC}}/d_{\text{FCC}}) \cdot X_{\text{BCC}}$ , 即单位体积内通过台阶面微元  $S$  的 Fe 原子净扩散通量  $N_{\text{Fe}} = X_{\text{FCC}} - (d_{\text{BCC}}/d_{\text{FCC}}) \cdot X_{\text{BCC}}$ . 若 FCC 和 BCC 相在台阶面上 Fe 原子的面密度分别为  $\sigma_{\text{FCC}}$  和  $\sigma_{\text{BCC}}$ , 则两相 Fe 原子体密度  $X$  与面密度  $\sigma$  之间具有  $X_{\text{FCC}} = \sigma_{\text{FCC}}/d_{\text{FCC}}$  和  $X_{\text{BCC}} = \sigma_{\text{BCC}}/d_{\text{BCC}}$  关系, 从而 Fe 原子的净扩散通量可等价表示为  $N_{\text{Fe}} = (\sigma_{\text{FCC}} - \sigma_{\text{BCC}})/d_{\text{FCC}}$ . 对于非共格相界面, FCC 和 BCC 晶格在台阶面上原子的面密度不相等 (即  $\sigma_{\text{FCC}} \neq \sigma_{\text{BCC}}$ ), 界面沿法线方向推进需要通过 Fe 原子的长程扩散 (即  $N_A \neq 0$ ) 来完成 [13]. 而当 FCC 和 BCC 晶格在相界面上呈共格匹配关系时 (即  $\sigma_{\text{FCC}} = \sigma_{\text{BCC}}$ ), 界面内 Fe 原子的净扩散通

量  $N_A = 0$ , 相界面沿法线方向的迁移不需要原子的长程扩散, 符合非扩散切变型马氏体相变的典型特征. 因此, 可通过对 FCC 和 BCC 相分别施加  $x$  轴向应变使两相晶格匹配, 从而得到共格 FCC/BCC 相界面, 如图 2(b) 所示, 而引入的应变称为共格应变, 相界面实际上处于约束共格状态, 本文 3.3 节中将对此共格应变场作进一步讨论. 此外, 界面能是新生相形核过程的主要阻力, 根据 (2) 式可计算得到复相体系中 FCC/BCC 相界面的界面能 [21]

$$E = [E_{\text{Total}} - (E_{\text{FCC}} + E_{\text{BCC}})]/(2A), \quad (1)$$

其中  $E_{\text{Total}}$  为 FCC-BCC 复相体系的总能量,  $E_{\text{FCC}}$  和  $E_{\text{BCC}}$  分别为形成相界面前的 FCC 和 BCC 相能量,  $A$  为相界面面积, 其系数 2 表示体系中含有两个相界面.

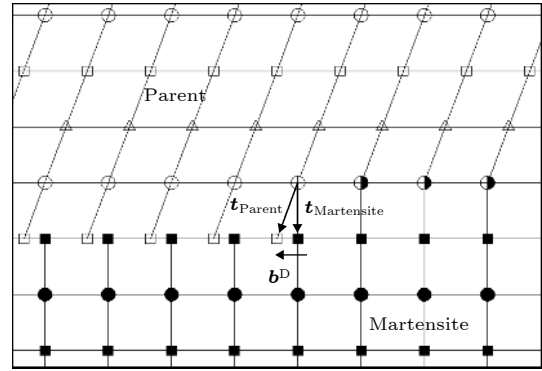


图 3 相变位错 Burgers 矢量  $b^D$  形成过程示意图

Fig. 3. Depiction of the formation of a transformation dislocation  $b^D$  by eliminating the “gap” between parent and martensite crystals.

目前 Fe 合金马氏体相变 MD 模拟研究中大多以原子尺度惯习面  $\{111\}_{\text{FCC}}//\{110\}_{\text{BCC}}$  作为 FCC/BCC 相界面初始模型, 并不考虑宏观尺度惯习面与原子尺度惯习面间的差异. 实际上, 如图 1 中所示, 由于相界面台阶结构的存在, 导致宏观尺度惯习面与原子尺度惯习面之间存在倾角  $\psi$ . 拓扑模型认为马氏体相界面台阶结构可通过相变位错进行描述, 其几何特征可利用图 3 中的双晶体模型加以阐明. 当母相与马氏体相在台阶面上接触时, 两相晶格由于平移对称性被破坏而在相界面上产生“间隙”, 为消除“间隙”以维持两相晶格结构在相界面上的连续性并降低界面弹性应变能, 可在相界面上引入相变位错, 其 Burgers 矢量记为  $b^D$ , 表征

两相由于晶体结构差异而在相界面引起的失配或不连续性, 可表达为

$$\mathbf{b}^D = \mathbf{t}_{\text{Parent}} - \mathbf{t}_{\text{Martensite}}, \quad (2)$$

式中  $\mathbf{t}_{\text{Parent}}$  和  $\mathbf{t}_{\text{Martensite}}$  分别为母相和马氏体相晶格点阵的特定平移矢量.

据此, 本文在立方模拟盒子中构建台阶型 FCC/BCC 相界面模型, 满足  $x//[10\bar{1}]_{\text{FCC}}//[001]_{\text{BCC}}$ ,  $y//[7\bar{1}07]_{\text{FCC}}//[570]_{\text{BCC}}$  和  $z//[575]_{\text{FCC}}//[750]_{\text{BCC}}$  位向关系, 其中 FCC/BCC 宏观尺度惯习面为两相  $(575)_{\text{FCC}}//(750)_{\text{BCC}}$  面, 其法线方向平行于  $z$  轴, 如图 4 所示. 图中 Fe 原子基于截断半径 3.2 Å 内的原子配位数进行着色, 其中绿色表示配位数为 12 的 FCC 相 (第一和第二近邻原子间距分别为 2.62 和 3.70 Å), 红色表示配位数为 14 的 BCC 相 (第一、第二和第三近邻原子间距分别为 2.49, 2.87 和 4.06 Å), 而相界面上的原子由于对称性破坏导致其配位数区别于 FCC 和 BCC 晶体, 即图中的黄色原子, 用于表示 FCC/BCC 相界面结构. 可见, 原子配位数可作为区分相界面和两相晶体的合理特征参数, 有助于清晰地分辨出相变位错的台阶结构特征, 其中台阶面即原子尺度惯习面为 FCC 和 BCC 相的  $(111)_{\text{FCC}}//(110)_{\text{BCC}}$  密排面, 台阶高度为 1 个密排晶面间距, 其平均台阶间距约为 1.294 nm, 台阶方向平行于  $[10\bar{1}]_{\text{FCC}}//[001]_{\text{BCC}}$  方向, 两相晶格在台阶面上满足 N-W 位向关系.

为讨论界面结构对 FCC→BCC 相变行为的影响, 本文分别针对非共格和约束共格相界面结构

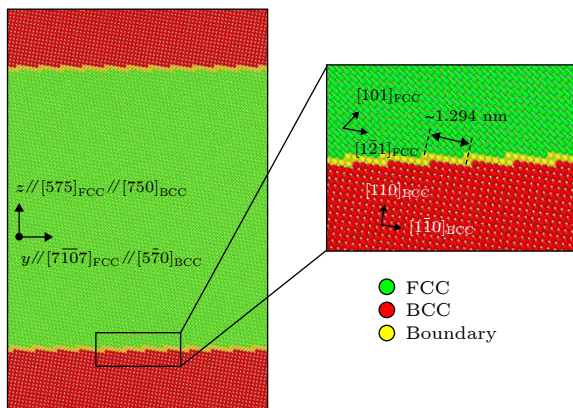


图 4 具有台阶结构特征的 FCC/BCC 相界面复相体系初始模型

Fig. 4. Atomic configuration of the FCC-BCC biphasic system in Fe alloy evaluated by coordination number method where FCC crystal, BCC crystal and interphase boundary are represented by green, red and yellow dots respectively.

特征, 模拟 FCC-BCC 复相体系的相变行为以及相界面的迁移过程. 在 FCC-BCC 复相体系  $x$ ,  $y$  和  $z$  方向上均采用周期性边界条件 (periodic boundary condition), 取时间积分步长为 1 fs, 采用共轭梯度法 (conjugate gradient method) 对相界面初始模型作能量最小化处理, 以消除不合理结构因素并获得原子势能最小的稳定结构. 同时, 采用 Nose-Hoover 控温法维持体系温度在 10 K 以减少原子热力学起伏的影响, 并在等温等压 (isothermal-isobaric, NPT) 条件下弛豫复相体系 25 ps 至平衡状态. 在弛豫过程中, 考虑到马氏体相变过程伴生宏观切变, 即相变导致系统产生沿相界面法线 (即  $z$  方向) 的膨胀或收缩形变和平行于相界面 (即  $x$ - $y$  平面) 的剪切形变, 本模拟采用 Nose-Hoover 控压法调控体系的主应力  $P_z$  和剪切应力  $P_{yz}$  为零, 据此允许体系形状发生轴向形变和剪切形变以松弛相变产生的宏观变形.

模拟采用分子动力学计算程序 LAMMPS (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator)<sup>[30]</sup>, 并借助开源可视化工具 OVITO (open visualization tool)<sup>[31]</sup> 对模拟结果进行可视化处理及微观分析. 采用共邻近分析 (common neighbor analysis, CNA) 方法<sup>[32]</sup> 对模拟体系内具有不同晶体结构的物相进行分析, 通过选取恰当的截断半径可判别 5 种晶体结构类型, 并采用数值 1—5 对其进行标定: 数值 1 表示 FCC 结构, 2 为 BCC 结构, 3 为密排六方结构, 4 为二十面体结构, 5 代表其他未知结构. CNA 方法通过提取并分析模拟体系内一个原子的近邻原子排列特征, 是判别原子近邻区域晶体结构的有力工具, 有助于区分 FCC-BCC 复相体系中各相结构的分布状态并据此讨论体系微观结构的动态演变过程.

### 3 模拟结果

#### 3.1 两相晶格界面匹配状态对相变行为的影响

在相变过程中, FCC-BCC 复相体系的相变特征可通过径向分布函数 (radial distribution function, RDF)  $g(r)$  来表示, 它反映了以特定原子为中心时周围原子根据距离的分布情况. 图 5(a) 为含有非共格相界面的 FCC-BCC 复相体系径向分布函数图, 0 ps 时复相体系相结构第一和第二特

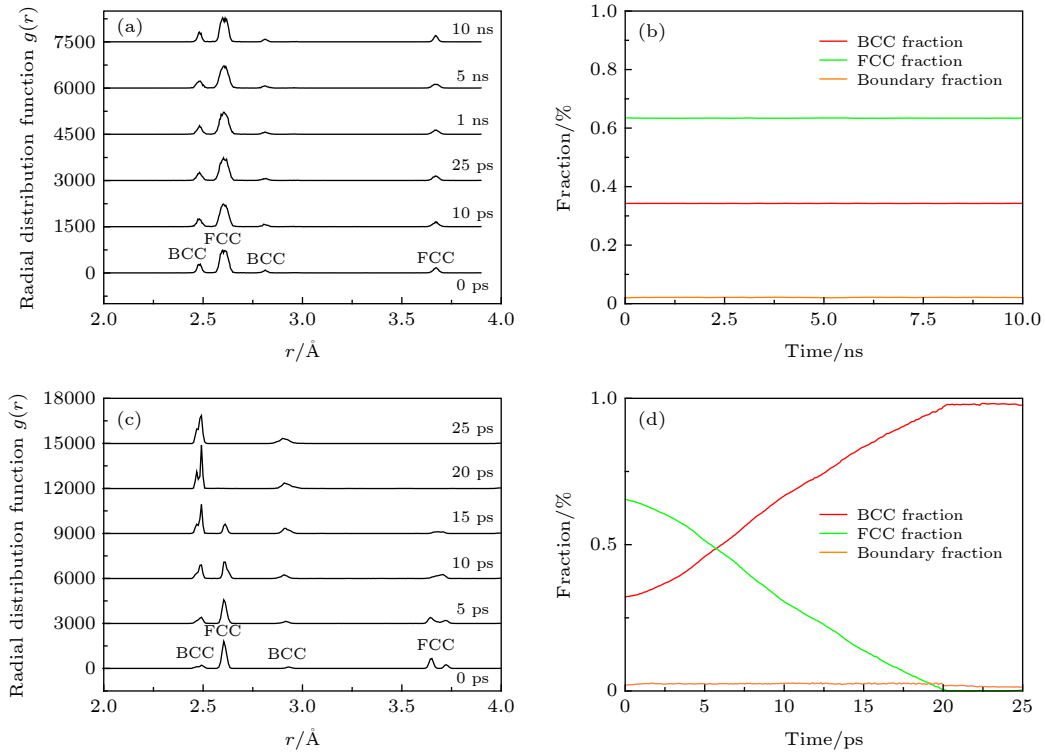


图 5 非共格 FCC-BCC 复相体系在 0—10 ns 内的径向分布函数图 (a) 及各相原子比例分数随相变时间变化关系曲线 (b); 约束共格 FCC-BCC 复相体系在 0—25 ps 内的径向分布函数图 (c) 及各相原子比例分数随相变时间变化关系曲线 (d)

Fig. 5. RDF of the FCC-BCC system with (a) incoherent and (c) constraint coherent boundary; and evolution of the phase fractions with (b) incoherent and (d) constraint coherent boundary.

征峰的位置分别对应着最近和次近邻原子的分布状态, 其中初始状态下 FCC 相第一特征峰强度明显高于 BCC 相. 由图 5(a) 可见, 非共格复相体系的径向分布函数在整个模拟阶段内基本保持不变; 当模拟时间进一步延长至 10 ns 时, 体系径向分布函数特征仍无显著变化. 同时, 在图 5(b) 复相体系各相原子比例分数随时间变化关系曲线图中可见, FCC 和 BCC 相原子的比例分数保持不变, 表明该复相体系在模拟阶段内没有发生 FCC→BCC 相变, 即非共格 FCC/BCC 相界面未发生迁移. 另一方面, 在处于约束共格状态的 FCC/BCC 相界面体系中, 如图 5(c) 所示, 其径向分布函数在 5 ps 时 FCC 相结构的第一和第二特征峰强度开始减弱, BCC 相特征峰逐渐增强, 表明 FCC 相向 BCC 相发生结构转变. 在 25 ps 时 FCC 相结构第一和第二特征峰已基本消失, 复相体系完全转变为 BCC 单相结构, 相变结束. 同时, 从图 5(d) 可见, FCC 相原子比例分数随时间延长呈线性减少, 而 BCC 相原子比例则逐渐增加, 表明 FCC 相以接近恒定的速率转变为 BCC 相, 当相变结束时其 BCC 相原子比例分数达 98% 以上, 而相界面原子

占比在相变过程中基本维持在约 2.5% 并在相变结束时迅速降至约 1%.

如前所述, 非共格相界面迁移时需要原子作长程扩散, 而在本模拟温度 (10 K) 下原子的活动能力有限, 且进行扩散型相变所需的时间远超出分子动力学模拟的时间尺度 (ns), 因而在这些条件下无法捕捉到 FCC→BCC 相变的发生及非共格相界面的迁移. 而且, 由于 FCC 和 BCC 相之间本身存在一定能垒, 根据 (2) 式计算得到非共格和共格相界面能分别为  $0.607$  和  $0.027 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}$ , 前者具有较高的界面能并进一步阻碍了非共格 FCC-BCC 复相体系相变的发生及相界面迁移. 可见, 在分子动力学模拟中能量较高的 FCC 相并不一定转变为相对更稳定的 BCC 相, 相变行为与相界面结构特征密切相关, 模拟结果表明具有较低界面能的共格 FCC/BCC 相界面更有利于 FCC→BCC 非扩散型相变的发生及界面迁移.

### 3.2 约束共格状态下台阶型 FCC/BCC 相界面的迁移行为

图 6 是约束共格复相体系 FCC→BCC 晶体



结构转变过程模拟结果及宏观尺度相界面的位置-时间关系曲线, 其中相界面位置以界面原子  $z$  坐标的统计平均值进行标定. 在相变过程中, FCC/BCC 相界面沿其界面法线方向稳定迁移至 25 ps 时转变完成, 且在迁移过程中与两相  $(575)_{\text{FCC}} // (750)_{\text{BCC}}$  初始界面始终保持平行, 并在宏观尺度下呈现相对平直的界面结构特征<sup>[5,6]</sup>, 在此期间未观察到有新生 BCC 相在 FCC 晶体内部的形核. 从相界面位置-时间关系曲线可见, 相界面沿法线方向的迁移距离与时间呈单调线性变化关系, 且相界面具有接近恒定的迁移速度, 并可通过线性拟合相界面位置-时间关系曲线计算获取. 为了更好地反映本文所采用相界面模型的可靠性并评价模拟结果的数值偏差或不确定度, 我们在同一 FCC/BCC 双相系统初始结构模型下采用 10 组具有不同模拟盒子尺寸和原子总数的模拟参数分别进行计算, 结果显示 FCC/BCC 相界面的迁移速度是  $(4.4 \pm 0.3) \times 10^2$  m/s. 此外, 相变过程中复相体系产生一个平行于相界面的剪切应变  $\varepsilon_{yz}$  以及一个垂直于相界面的法向应变  $\varepsilon_{zz}$ , 其数值分别为 0.349 和 0.053, 这是非扩散切变型马氏体相变的典型特征.

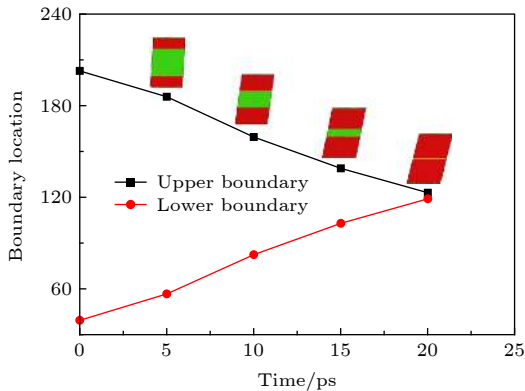


图 6 FCC→BCC 相变中约束共格台阶型相界面位置随时间变化关系曲线及晶体结构转变过程模拟结果  
Fig. 6. Curves of the constraint coherent FCC/BCC boundary location versus time within 20 ps and snapshots of the crystal structure evolution process by MD simulation.

在另一方面, 可以用 FCC 和 BCC 晶体的  $(111)_{\text{FCC}}$  和  $(110)_{\text{BCC}}$  密排面构建非台阶型 FCC/BCC 相界面初始模型, 其界面结构如图 7 所示, 图中 Fe 原子根据其势能值进行着色. 该相界面为半共格界面, 两相间的晶格错配通过界面内两组失配位错  $\mathbf{b}_1 = \frac{1}{2}[\bar{1}\bar{1}0]_{\text{FCC}} // (\frac{1}{2}[\bar{1}11]_{\text{BCC}})$  和  $\mathbf{b}_2 = \frac{1}{2}[10\bar{1}]_{\text{FCC}} (// \frac{1}{2}[1\bar{1}1]_{\text{BCC}})$  松弛以降低界面的应变能.

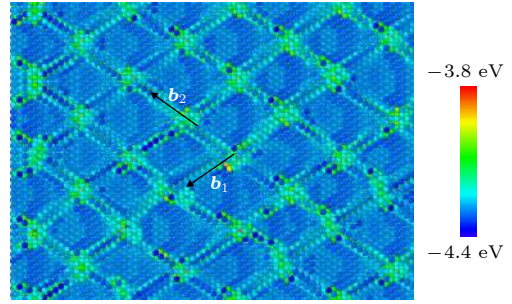


图 7 FCC 和 BCC 晶体非台阶型  $(111)_{\text{FCC}} // (110)_{\text{BCC}}$  相界面初始结构  
Fig. 7. View on the FCC/BCC boundary of  $(111)_{\text{FCC}} // (110)_{\text{BCC}}$  interface (in which the atoms are colored in terms of their potential energy).

图 8 是非台阶型  $(111)_{\text{FCC}} // (110)_{\text{BCC}}$  相界面迁移及晶体结构演变过程模拟结果, 同上, 晶体结构根据原子配位数进行着色. 图 8 中新生 BCC 相通过在初始 BCC 晶体  $(110)_{\text{BCC}}$  密排面上外延形核并生长, 由于失配位错的 Burgers 矢量  $\mathbf{b}_1$  和  $\mathbf{b}_2$  平行于相界面, 因此界面的迁移需要借助失配位错在热激活作用下沿界面法线方向作非保守攀移, 导致相界面在迁移过程中呈现出粗糙界面, 与实验观察中马氏体相界面具有相对平直的形貌特征不符.

### 3.3 马氏体相界面迁移微观机制

如图 9 所示, 将约束共格复相体系在 10.0 ps 时台阶面上的原子构型与 10.2 ps 时的原子构型重叠获得原子位移前后状态图, 对 Fe 原子使用 CNA 方法标识晶体结构并着色, 绿色和蓝色分别代表 FCC 和 BCC 相, 白色为未知结构. 图中红色箭头表示原子位移方向, 其长度表征位移量. 相变过程中 FCC 相在  $x$  方向上的界面原子列  $A_1$  沿台阶面  $[\bar{1}\bar{2}1]_{\text{FCC}}$  方向整体切变式迁移并占据 BCC 相的  $A_2$  位置, 即 FCC 晶格沿  $[\bar{1}\bar{2}1]_{\text{FCC}}$  方向产生剪切形变, 同时 FCC 相的  $\frac{1}{2}[101]_{\text{FCC}}$  转变为 BCC 相的  $[010]_{\text{BCC}}$  晶格矢量, 实现 FCC 晶格向 BCC 晶格的结构转变.

图 10 是约束共格复相体系在 10.0 和 10.2 ps 时 FCC/BCC 相界面的微观结构及界面近邻原子位移状态图, 显然 CNA 方法能辨识相界面近邻两侧的 FCC 和 BCC 晶体结构, 并可清晰展示出相界面的台阶形貌特征. 根据马氏体相变拓扑模型理论, 图中相界面的台阶前沿存在一组相变位错结构阵列, 如图 10(a) 中白色原子所示, 其位错线沿

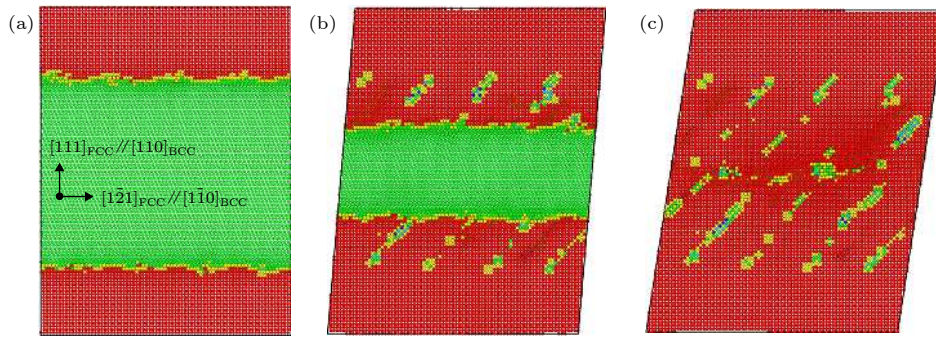


图 8 (111)<sub>FCC</sub>// (110)<sub>BCC</sub> 非台阶型相界面迁移及两相晶体结构演变过程模拟结果 (a) 0 ps; (b) 15 ps; (c) 30 ps

Fig. 8. Snapshots of the evolution of the local structure and propagation of the (111)<sub>FCC</sub>// (110)<sub>BCC</sub> boundary at different times: (a) 0 ps; (b) 15 ps; (c) 30 ps (in which the atoms are colored by their coordinate number where green: FCC, red: BCC and yellow: phase boundary).

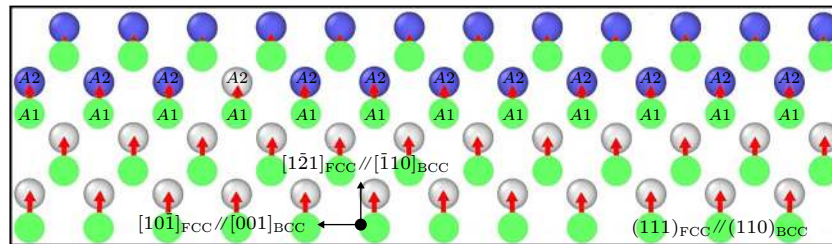


图 9 台阶面上原子在 10.0 和 10.2 ps 时的位移前后状态图

Fig. 9. Atomic displacements on the terrace plane of (111)<sub>FCC</sub>// (110)<sub>BCC</sub> (in which the transformed configuration at 10.2 ps is superposed over the configuration at 10.0 ps).

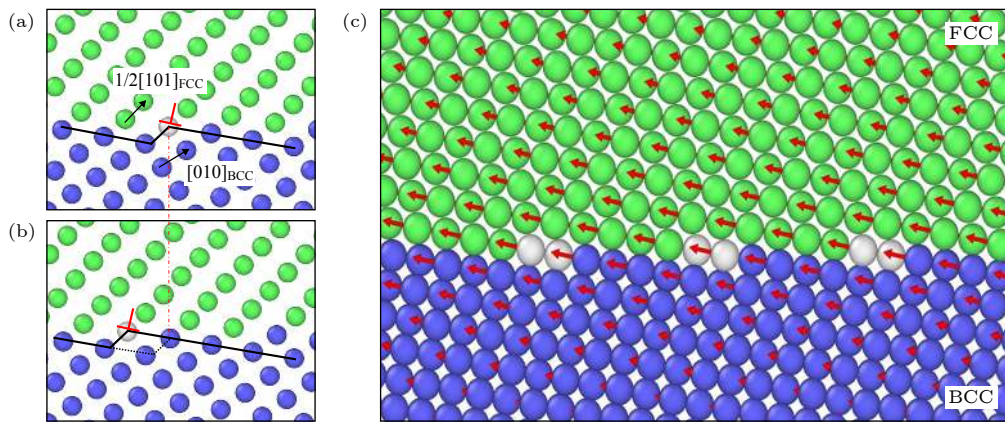


图 10 约束共格 FCC/BCC 相界面在 (a) 10.0 ps 和 (b) 10.2 ps 时的微观结构以及相界面近邻原子位移状态图 (c)

Fig. 10. Configuration of the step-like constraint coherent interface between FCC and BCC crystals at (a) 10.0 ps and (b) 10.2 ps evaluated by common neighbor analysis method; and (c) the atomic displacements near the transforming boundary.

$x$  方向. 计算可得相变位错的 Burgers 矢量  $b^D$  垂直于台阶面的分量  $b_{\perp}^D$  为  $8.095 \times 10^{-4}$ , 远小于平行于台阶面的分量  $b_{\parallel}^D = -0.727$ , 且它对台阶面上的共格应变不具有松弛作用. 实际上, 相变位错平行于台阶面的 Burgers 矢量分量  $b_{\parallel}^D$  为 FCC 晶体中  $1/2$  Shockley 不全位错, 即  $\frac{1}{2}[1\bar{2}1]_{FCC} (\parallel \frac{1}{6}[\bar{1}01]_{BCC})$ , 它垂直于位错线即  $x$  轴方向, 具有刃型位错结构特征. 该相变位错阵列随相变的进行而沿台阶面

$[1\bar{2}1]_{FCC} // [\bar{1}\bar{1}0]_{BCC}$  方向滑移, 计算可得相变位错的平均迁移速度高达  $(2.8 \pm 0.2) \times 10^3 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ . 从原子位移状态图 10(c) 可见, 相变位错滑移过程中相变位错应力场引起界面前沿 FCC 相原子在 (111)<sub>FCC</sub> 密排面上沿  $[1\bar{2}1]_{FCC}$  方向作整体切变式迁移, 在界面处 Fe 原子的堆垛结构由 FCC 晶体 (111)<sub>FCC</sub> 密排堆垛转变为 BCC 晶体 (110)<sub>BCC</sub> 的堆垛结构, 即界面处 FCC 相 (111)<sub>FCC</sub> 晶面切变为



BCC相(110)<sub>BCC</sub>晶面,相变位错滑过区域内的FCC相转变为BCC相.综上,相变位错的保守型滑移对FCC向BCC晶体结构转变起到关键作用,马氏体相变的原子机制是相变位错沿台阶面的横向滑移.

另一方面,相变位错除了作横向保守型滑移导致相变进行之外,同时还起到松弛两相晶体内共格应变的作用.图11是1.0 ps时FCC和BCC两相以及界面附近的应变分布图,其中应变值根据各原子相对于截断半径3.2 Å内近邻原子的位移计算获得<sup>[33]</sup>.两相晶格在台阶面上处于约束共格状态,台阶面上FCC晶体一侧存在拉应变,而BCC晶体为压应变.虽然共格应变施加于两相晶体,但在相变开始后模拟体系逐渐弛豫至平衡状态,两相晶体内的共格应变场得到松弛,并只局限于台阶面近邻处,而远离相界面的晶体内部并不存在显著的长程应变.值得一提的是,有HRTEM实验报道在ZrO<sub>2</sub>陶瓷材料的马氏体惯习面上观察到类似的共格应变特征<sup>[34]</sup>,表明马氏体相界面共格应变为短程应变场,其在两相晶体内的长程作用通过间隔分布的相变位错阵列得到有效松弛.

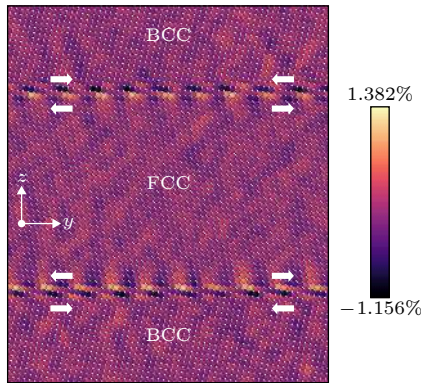


图 11 FCC 和 BCC 相在 1.0 ps 时约束共格台阶面上的应变分布图

Fig. 11. Distribution of the strain field along the constraint coherent terrace plane calculated by relative displacements of atoms' neighbors within a given cutoff radius of 3.2 Å.

### 3.4 FCC→BCC 马氏体相变晶体学特征参量计算

如图12所示,在台阶面上建立坐标系( $x_{TP}$ ,  $y_{TP}$ ,  $z_{TP}$ )以确定台阶面内的共格应变.根据FCC和BCC满足N-W位向关系,可知台阶面上存在 $x_{TP}$ 和 $y_{TP}$ 方向的共格应变,其中,具有特定间距的相变位错阵列可松弛 $y_{TP}$ 方向的共格应变,而

对于 $x_{TP}$ 方向的共格应变则往往需要另一组晶体缺陷阵列加以松弛,但是,在本文的拓扑模型计算中将抑制该方向上的共格应变,从而能够得到具有一组相变位错阵列的相界面结构特征参数,进而与MD模拟结果进行对比分析.根据本文采用的Finnis-Sinclair势函数,计算可得台阶面上沿 $y_{TP}$ 方向的共格应变 $\varepsilon_{yy} = 0.0585$ .根据(2)式得到相变位错Burgers矢量在台阶面坐标系下的表达式为 $\mathbf{b}^D = [0, -0.727474, 8.095331 \times 10^{-4}]$ ,其中, $\mathbf{t}_{\text{Martensite}} = [010]_{\text{BCC}}$ ,且其位错线方向 $\xi^D$ 平行于 $x$ 轴.

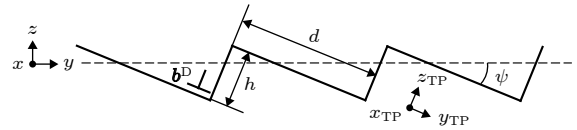


图 12 拓扑模型中台阶型 FCC/BCC 交界面上的相变位错结构示意图

Fig. 12. Schematic illustration of the transformation dislocation configuration at the stepped FCC/BCC boundary in the topological model.

马氏体相界面在两相晶体内不产生长程应变场,因此相变位错除了通过横向滑移实现结构转变外,其位错应变场还起到松弛共格应变的作用.由于相变位错还具有台阶高度 $h$ 的特征,因此FCC/BCC整体相界面实际上通过一个倾角 $\psi$ 偏离局部原子台阶面,共格应变在相界面两侧的晶体内部不产生长程应变场,据此并基于Frank-Bilby公式<sup>[13]</sup>建立倾角 $\psi$ 的平衡方程

$$b_z^D \cdot (\tan(\psi))^2 + b_y^D \cdot \tan(\psi) + h \cdot \varepsilon_{yy} = 0, \quad (3)$$

求解可得FCC/BCC相界面与台阶面间的倾角 $\psi = 9.662^\circ$ ,进而计算得到整体宏观相界面的晶面指数为 $(0.501, 0.701, 0.501)_{\text{FCC}}$ ,同时可以得到相变位错阵列的平衡间距 $d^D = -b_y^D / \varepsilon_{yy} = 1.244 \text{ nm}$ .进一步地,根据位错阵列应变场公式<sup>[35]</sup>可计算得到具有平衡间距 $d^D$ 的相变位错阵列 $y$ 方向的应变为 $\varepsilon_{yy}^D = -0.0585$ .

FCC-BCC复相体系相变所产生的形状应变 $\Gamma$ 主要来源于相变位错在相变过程中的滑移,FCC晶胞在相变位错滑移过程中发生晶格切变并转变为BCC晶胞结构,而该晶格切变在一组相变位错协同运动过程中不断积累并导致复相体系产生宏观相变应变.根据晶体形变的位错滑移机制,一组相变位错 $\mathbf{b}^D$ 滑移产生的形变在复相模型坐标

系下为

$$\Gamma^D = \frac{1}{h} \mathbf{b}^D \cdot \mathbf{n}_D^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.057 & 0.334 \\ 0 & -9.614 \times 10^{-3} & 0.056 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

式中  $\mathbf{n}_D$  为台阶面法线单位矢量. 另外, 共格应变对体系宏观相应变变也有贡献, 它在模型坐标系下为

$$\Gamma^C = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.057 & 9.680 \times 10^{-3} \\ 0 & 9.680 \times 10^{-3} & 1.648 \times 10^{-3} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

此外, 注意到相变位错存在一个垂直于台阶面的位错分量, 其弹性作用仅局限在相界面近邻, 而在远离相界面区域内则导致两相晶体产生一个关于相变位错线方向的小角度旋转, 在模型坐标系下可表示为

$$\begin{aligned} \Gamma^R &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\sin(\varphi) \\ 0 & -2\sin(\varphi) & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6.508 \times 10^{-5} \\ 0 & -6.508 \times 10^{-5} & 0 \end{bmatrix}, \quad (6) \end{aligned}$$

式中  $\phi$  为旋转角度, 可根据 Frank 公式得到. 因此, FCC→BCC 相变产生的总体宏观形状应变  $\Gamma$  为上述各应变之和, 即

$$\Gamma = \Gamma^D + \Gamma^C + \Gamma^R = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.344 \\ 0 & 0 & 0.058 \end{bmatrix}. \quad (7)$$

(7) 式表明, FCC → BCC 马氏体相变过程中产生了一个平行于相界面的剪切应变  $\Gamma_{yz} = 0.344$ , 以及一个垂直于惯习面的法向应变  $\Gamma_{zz} = 0.058$ .

## 4 讨论

近年越来越多的材料界面高分辨电子显微分析研究发现, 宏观上呈平直形貌特征的 Fe 基合金马氏体惯习面在微观尺度下具有高度为一个或多个原子层间距的台阶结构<sup>[14-16]</sup>. 此外, 在 Ti(Mo)<sup>[12,13]</sup>, ZrO<sub>2</sub><sup>[34]</sup>, PuGa<sup>[36]</sup> 及 TiNb 合金<sup>[37]</sup> 等材料中也观察到类似的台阶型相界面结构特征, 研究表明马氏体相界面台阶结构普遍存在于合金与陶瓷材料中并对其固态相变具有重要影响. 然而,

在目前 Fe 合金 FCC → BCC 相变的分子动力学模拟研究中, 绝大多数工作以  $\{111\}_{\text{FCC}}$  和  $\{110\}_{\text{BCC}}$  密排面构建非台阶型相界面初始模型, 该类界面的迁移需要失配位错作非保守攀移, 即通过原子长程迁移实现, 这与马氏体相变具有的非扩散本质和切变特性相矛盾. Song 和 Hoyt<sup>[26]</sup> 曾在 FCC 相单侧引入台阶结构, 但 BCC 相一侧却仍用  $\{110\}_{\text{BCC}}$  平直界面处理, 在 FCC → BCC 相变 MD 模拟中并未观察到界面台阶发生滑移, 由此认为该相变过程不是由界面台阶的运动主导. 根据拓扑模型<sup>[12,13]</sup>, Song 和 Hoyt<sup>[26]</sup> 构建的相界面实质上引入了台阶高度  $h = 0$  的相变位错, 其在晶体内滑移时没有原子从 FCC 向 BCC 相的对应点阵位置迁移, 因此不会引起晶体结构的转变. 本文通过在 FCC 和 BCC 相界面两侧分别引入一组高度为 1 个密排晶面间距的台阶结构, 构建基于相变位错的台阶型 FCC/BCC 马氏体相界面初始模型, 采用分子动力学模拟方法研究 Fe 相变过程中 FCC/BCC 相界面的迁移行为, 并在拓扑模型理论框架下计算相变位错及其阵列的结构特征参量, 厘清界面初始结构对相变行为的影响并阐明马氏体相界面迁移的微观机制.

模拟结果表明, 当 FCC 和 BCC 相之间形成非共格的台阶型相界面时, 复相体系没有发生明显的 FCC → BCC 相变, 相界面在整个模拟阶段基本处于静止状态并维持相对稳定的界面结构特征. 当两相形成约束共格相界面时, 复相体系中 FCC 相以恒定速率转变为 BCC 相, 相界面高速迁移并在相变过程中始终保持稳定的台阶结构特征. 同时, 相变位错随相界面迁移沿台阶面作协同的侧向滑移, 计算可得相变位错的滑移速度为  $(2.8 \pm 0.2) \times 10^3$  m/s, 接近剪切波在钢中的传播速度 (约 3000 m/s)<sup>[38]</sup>. 在另一方面, FCC 相在转变为 BCC 相时需克服一定的相变能垒, Engin 等<sup>[28]</sup> 计算得到 Finnis-Sinclair 型势函数作用下 FCC → BCC 相变需克服的能垒数值约为 10 meV/atom, 对于非扩散型马氏体相变而言, 相结构转变通过原子的协作式切变完成. 当 FCC/BCC 的相界面结构不利于非扩散型相变时, 例如上述非共格相界面结构中, 由界面结构引入的额外能垒在一定程度上阻碍甚至阻止 FCC→BCC 相变的发生. 相界面结构特征对于相界面可动与否具有重要影响, 在建立 MD 模拟的初始界面模型时需综合考虑两相晶格在界面上的匹配关系和相变位错的结构特征.



相界面迁移速度是材料相变动力学的重要特征参量, 在 3.2 小节中通过相界面位置-时间关系曲线计算得到 FCC/BCC 宏观相界面沿其法线方向的迁移速度约为  $(4.4 \pm 0.3) \times 10^2$  m/s. Yu 和 Clapp<sup>[38]</sup> 曾测量得到钢中剪切波速度约为 3000 m/s, 且 Fe-Ni 合金母相-马氏体相界面的迁移速度约为剪切波速度的 1/4, 与本模拟中获得的宏观相界面迁移速度值相近. 另一方面, Bos 等<sup>[19]</sup> 基于 Johnson-Oh 型势函数采用自由边界条件模拟计算得到 Fe 中 FCC/BCC 相界面的平均迁移速度介于 200—700 m/s 之间, 但当模型三个尺寸方向上采用周期性边界条件时, 其迁移速度为 0, 即没有相变发生. Tateyama 等<sup>[23,24]</sup> 通过修正截断半径的方法获得可用于模拟 Fe 中 FCC  $\leftrightarrow$  BCC 正、逆相变的 Finnis-Sinclair 势函数, 并计算得到 FCC/BCC 相界面迁移速度在 10—15 m/s 之间. Suiker 和 Thijssse<sup>[20]</sup> 分别采用 EAM, MEAM 和 Johnson-Oh 三种不同的势函数模拟计算得到 FCC/BCC 相界面的迁移速度均高于 500 m/s, 最高可达 2400 m/s. 而 Wang 和 Urbassek<sup>[21]</sup> 采用 Meyer 和 Entel<sup>[39]</sup> 建立的 Finnis-Sinclair 势函数模

拟得到 N-W 位向关系下的 FCC/BCC 相界面迁移速度约为 24 m/s. 值得指出的是, Song 和 Hoyt<sup>[26]</sup> 在 FCC 相引入单侧台阶结构并计算得到 FCC  $\rightarrow$  BCC 转变过程中相界面的迁移速度仅在 0.7—3.4 m/s 之间. 可见, 目前 Fe 中马氏体相界面迁移速度的模拟结果较分散, 其数值除了与模拟所采用的势函数类型有关外, 还受初始界面结构模型及模拟条件等的影响. 此外, 通过分子动力学模拟和根据拓扑模型计算均可获得 Fe 合金马氏体相变晶体学特征参量, 包括 FCC/BCC 宏观尺度相界面晶面指数, 相变位错结构的平衡间距以及相变所产生的形状应变等. 如表 1 所列, 使用分子动力学方法获得的模拟结果与采用拓扑模型方法推导出的解析解数值非常接近, 尤其是 MD 模拟不仅可将 Fe 相变产生的整体宏观形状应变分解为平行于相界面的剪切应变和垂直于相界面的法向应变即体积应变, 还能量化表征马氏体相界面的迁移速度, 为钢铁材料如相变诱导塑性钢 (TRIP 钢) 等的强韧化处理提供有价值的理论参考依据和基础数据.

表 1 FCC  $\rightarrow$  BCC 相变晶体学特征参量的分子动力学模拟结果与拓扑模型计算值的比较

Table 1. Comparison of the FCC  $\rightarrow$  BCC transformation crystallographic characteristics obtained by MD simulation and topological model.

	MD simulation	TM calculation
Macroscopic habit plane index	$(575)_{\text{FCC}}$	$(0.501, 0.706, 0.501)_{\text{FCC}}$
Line direction of transformation dislocation	$[10\bar{1}]_{\text{P}}$	$[10\bar{1}]_{\text{P}}$
Spacing of transformation dislocation/nm	1.294	1.244
Shear direction	$[7\bar{1}07]_{\text{P}}$	$[7\bar{1}07]_{\text{P}}$
Shear magnitude	0.349	0.344
Dilation	0.053	0.058
Phase boundary migration velocity/ m·s <sup>-1</sup>	$(4.4 \pm 0.3) \times 10^2$	—

## 5 结 论

1) 基于拓扑模型和相变位错理论构建了 Fe 合金 FCC/BCC 相界面初始模型, 分子动力学模拟研究表明, 当两相界面具有共格匹配关系及台阶结构时, 体系发生 FCC  $\rightarrow$  BCC 马氏体相变并呈现典型的非扩散及切变特征, 两相界面的原子尺度结构对界面迁移行为具有重要影响.

2) 马氏体相变过程中约束共格状态下的 FCC/BCC 宏观尺度相界面沿其法线方向以  $(4.4 \pm 0.3) \times 10^2$  m/s 的速度迁移, 且相界面在迁移过程

中始终保持稳定的台阶结构和相对平直的宏观界面形貌特征.

3) 相变位错的滑移速度高达  $(2.8 \pm 0.2) \times 10^3$  m/s, 相变位错阵列沿台阶面的协同侧向滑移是马氏体台阶结构宏观相界面迁移的微观机制, 也是马氏体相变宏观形状应变的主要来源.

4) 分子动力学模拟获得的 Fe 合金马氏体相变晶体学特征参量与拓扑模型的解析解数值非常接近, 相变产生的整体宏观形状应变由平行于相界面的剪切应变和垂直于相界面的法向应变两部分组成, 其中剪切应变远高于法向应变, 即体积应变.

## 参考文献

- [1] Porter D A, Easterling K E 1992 *Phase Transformations in Metals and Alloys* (2nd Ed.) (London: Chapman and Hall) p1
- [2] Xu Z Y 1999 *Martensitic Transformation and Martensite* (Beijing: Science Press) p1 (in Chinese) [徐祖耀 1999 马氏体相变与马氏体(北京: 科学出版社) 第1页]
- [3] Christian J W 2002 *The Theory of Transformation in Metal and Alloys* (Amsterdam: Elsevier) p1
- [4] Honeycombe R W K, Bhadeshia H K D H 2006 *Steels: Microstructure and Properties* (3rd Ed.) (Amsterdam: Elsevier) p1
- [5] Shibata A, Murakami T, Morito S, Furuhashi T, Maki T 2008 *Mater. Trans.* **49** 1242
- [6] Maki T 2012 *Phase Transformation in Steels* (Cambridge: Woodhead Publishing) p34
- [7] Wayman C M 1964 *Introduction to the Crystallography of Martensitic Transformations* (New York: MacMillan) p1
- [8] Moritani T, Miyajima N, Furuhashi T, Maki T 2002 *Scr. Mater.* **47** 193
- [9] Ogawa K, Kajiwara S 2004 *Philos. Mag.* **84** 2919
- [10] Hirth J P 1994 *J. Phys. Chem. Solids* **55** 985
- [11] Hirth J P, Pond R C 1996 *Acta Mater.* **44** 4749
- [12] Pond R C, Celotto S, Hirth J P 2003 *Acta Mater.* **51** 5385
- [13] Pond R C, Ma X, Chai Y W, Hirth J P 2007 *Dislocation in Solids* (Amsterdam: Elsevier) p225
- [14] Ma X, Pond R C 2008 *Mater. Sci. Eng.* **A481-482** 404
- [15] Wei Z Z, Ma X, Zhang X P 2014 *Philos. Mag. Lett.* **94** 288
- [16] Ma X, Wei Z Z, Zhang X P 2014 *J. Mater. Sci.* **49** 4648
- [17] Wei Z Z, Ma X, Zhang X P 2018 *Acta Metall. Sin.* **54** 1461 (in Chinese) [韦昭召, 马晓, 张新平 2018 金属学报 **54** 1461]
- [18] Mohammed A, Schitoglu H 2020 *Acta Mater.* **183** 93
- [19] Bos C, Sietsma J, Thijsse B 2006 *Phys. Rev. B* **73** 104117
- [20] Suiker A S J, Thijsse B J 2013 *J. Mech. Phys. Solids* **61** 2273
- [21] Wang B J, Urbassek H M 2013 *Phys. Rev. B* **87** 104108
- [22] Wang B J, Urbassek H M 2014 *Comput. Mater. Sci.* **81** 170
- [23] Tateyama S, Shibuta Y, Suzuki T 2008 *Scr. Mater.* **59** 971
- [24] Tateyama S, Shibuta Y, Kumagai T, Suzuki T 2011 *ISIJ Int.* **51** 1710
- [25] Ou X, Sietsma J, Santofimia M J 2016 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **24** 055019
- [26] Song H, Hoyt J J 2012 *Acta Mater.* **60** 4328
- [27] Maresca F, Curtin W A 2017 *Acta Mater.* **134** 302
- [28] Engin C, Sandoval L, Urbassek H M 2008 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **16** 035005
- [29] Finnis M W, Sinclair J E 1984 *Philos. Mag. A* **50** 45
- [30] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [31] Stukowski A 2009 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [32] Faken D, Jonsson H 1994 *Comput. Mater. Sci.* **2** 279
- [33] Shimizu F, Ogata S, Li J 2007 *Mater. Trans.* **48** 2923
- [34] Chiao Y H, Chen I W 1990 *Acta Metall. Mater.* **38** 1163
- [35] Hirth J P, Lothe J 1982 *Theory of Dislocations* (New York: McGraw-Hill) p1
- [36] Hirth J P, Mitchell J N, Schwartz D S, Mitchell T E 2006 *Acta Mater.* **54** 1917
- [37] Chai Y W, Kim H Y, Hosoda H, Miyazaki S 2008 *Acta Mater.* **56** 3088
- [38] Yu Z Z, Clapp P C 1989 *Metall. Trans. A* **20** 1617
- [39] Meyer R, Entel P 1998 *Phys. Rev. B* **57** 5140



# Molecular dynamics simulation of migration behavior of FCC-BCC atomic terrace-step phase boundary in iron-based alloy\*

Wei Zhao-Zhao<sup>1)</sup> Ma Xiao<sup>2)†</sup> Ke Chang-Bo<sup>2)</sup> Zhang Xin-Ping<sup>2)</sup>

1) (*Faculty of Intelligent Manufacturing, Wuyi University, Jiangmen 529020, China*)

2) (*School of Materials Science and Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China*)

( Received 16 December 2019; revised manuscript received 18 April 2020 )

## Abstract

The martensitic transformation between the high-temperature face-centered cubic (FCC) phase and the low-temperature body-centered cubic (BCC) phase in iron-based alloys has been studied for years, which plays a critical role in controlling microstructures and hence properties of the alloys. Generally, the BCC structure martensitic phase forms from the FCC parent phase, involving a collective motions of atoms over a distance less than the interatomic distance in the vicinity of the interphase boundary. Thus the structure of interphase boundary separating the FCC and BCC phases is the key characteristics to quantitatively understanding the mechanism and kinetics of martensitic transformation. Due to the difficulty in observing the atomic motions taking place at a velocity as high as the speed of sound, the experimental investigation on the migration of FCC/BCC interphase boundary during the transformation is as yet limited. Noteworthily, molecular dynamics (MD) simulation has been applied to studying the martensitic transformation, in particular for investigating the mobility of the FCC/BCC interphase boundary in iron. However, in most of the MD studies the atomistically planar interfaces of  $\{111\}_{\text{FCC}} // \{110\}_{\text{BCC}}$  are considered as the initial configuration of the interphase boundary between FCC and BCC phases, which is in contradiction to the high-resolution TEM observations. In fact, the FCC/BCC interphase boundary, which is known as the macroscopic habit plane, is a semi-coherent interface consisting of several steps and terrace planes on an atomic scale. In the present work, the atomic configuration of a terrace-step FCC/BCC interphase boundary of iron is built in terms of the topological model. The MD simulation is conducted to clarify the mechanism of interphase boundary migration in the FCC-to-BCC transformation. The results show that the FCC/BCC boundary migrates along its normal at the expense of FCC phase as a result of the lateral motions of the transformation dislocations. Meanwhile, the interphase boundary maintains the stable terrace-step structure during the transformation. Further examinations reveal that the transformation dislocations move steadily at a velocity as high as  $(2.8 \pm 0.2) \times 10^3$  m/s, affecting the migration of the interphase boundary with a constant velocity of about  $(4.4 \pm 0.3) \times 10^2$  m/s. The effective migration velocity of FCC/BCC interface exhibits dynamic properties consistent with the characteristic features commonly observed in a displacive martensitic transformation. Additionally, the motion of transformation dislocations gives rise to the macroscopic shape strain composed of a shear component  $\Gamma_{yz} = 0.349$  parallel to the boundary and a dilatation  $\Gamma_{zz} = 0.053$  normal to the boundary in the MD simulation, which is close to the crystallographic calculations by the topological model.

**Keywords:** transformation dislocation, interphase boundary migration, molecular dynamics simulation, topological model of martensitic transformation

**PACS:** 61.72.Lk, 68.35.-p, 87.10.Tf, 81.30.Kf

**DOI:** 10.7498/aps.69.20191903

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51571092), the Natural Science Foundation of Guangdong Province, China (Grant Nos. 2017A030310657, 2018B0303110012), the Science and Technology Program of Guangzhou, China (Grant No. 201904010316), and the Fund for Introduced Innovative R&D Team Program of Jiangmen City, China (Grant No. 2018630100090019844).

† Corresponding author. E-mail: maxiao@scut.edu.cn