

温度与速度如何影响铁的“强韧度”？——多晶铁的拉伸奥秘

How do Temperature and Speed Affect the “Strength and Toughness” of Iron? —The Tensile Mystery of Polycrystalline Iron

供稿|武兴¹, 李京², 卢玮宁², 陈浩^{1,2}, 刘麟², 陈杨¹, 季敏² / WU Xing¹, LI Jing², LU Weining², CHEN Hao^{1,2}, Liu Lin², CHEN Yang¹, JI Min²

内容导读

金属材料在高温或快速变形时，为何会变“软”或变“脆”？本文通过分子动力学模拟技术，观察多晶铁在不同温度和拉伸速度下的变形行为。研究发现：温度升高时，铁的“抗拉能力”和“刚性”显著下降，但“延展性”增强；而当拉伸速度加快时，铁的“抗拉能力”反而提升，但“刚性”变化不大。这些现象背后的原因是原子热运动加剧和位错密度的变化。该成果揭示了微观原子运动如何决定宏观力学性能的奥秘，并为开发高性能钢铁材料（如耐高温管道、高韧性机械部件）提供了理论支持。

工业纯铁是一种碳含量很低的金属材料，其化学成分主要是铁，铁的质量分数为 99.5%~99.9%，碳的质量分数在 0.01% 以下^[1]。纯铁作为工业生产的重要基础材料，因其具有高延展性等优异的使用性能而被广泛应用于化工装备、电器产品、轨道交通等领域。金属结构材料优异的力学性能决定了装备的安全性和可靠性。在服役工况下，金属材料极易发生失效行为。因此，研究工业纯铁的力学性能具有重要的工程实际意义。分子动力学模拟是一种用来计算经典多体系平衡和传导性质的方法，已经发展成为研究凝聚态系统平衡和非平衡问题的有力工具。目前，很少有研究分析拉伸温度和应变速率对纯铁力学性能的影响。本文基于分子

动力学模拟方法，利用 LAMMPS 软件研究不同拉伸温度和应变速率下纳米多晶铁的拉伸变形行为，探究拉伸温度和应变速率对多晶铁变形机制的影响规律。

模拟方法与步骤

首先利用 AtomsK 建模软件中的 Voronoi 法构建多晶铁模型^[2]，选取 5 个位置作为晶粒中心构建晶粒。由于模型尺寸较小，仅包含 5 个晶粒，为了尽可能的观察不同晶粒取向在拉伸时产生的变形效应，5 个晶粒分别绕 y 轴旋转 0°、10°、20°、30°和 40°，其他方向保持不变。模型在 x、y 和 z 3 个方向上的尺寸分别为 15、5 和 15 nm，共计 95165 个原

作者单位：1. 江苏省特种设备安全监督检验研究院，江苏 南京 210036；2. 常州大学机械与轨道交通学院，江苏 常州 213164

子, 3 个方向均采用周期性边界条件。构建的多晶 Fe 模型如图 1 所示。

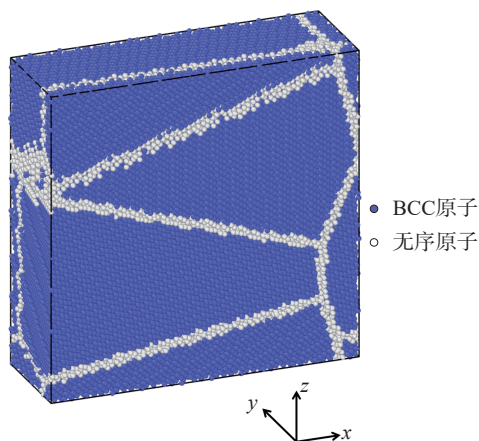


图 1 多晶 Fe 分子动力学模型

考虑到模拟计算效率, 在可以分析拉伸断裂过程及机制的情况下应尽量减小模型尺寸; 多晶 Fe 模型的晶格常数与单晶 Fe 相同, 通过势函数及温度、压力、系综等条件下达到近似真实的物理特性; 采用的势函数为由 Chamati 等^[3]通过拟合实验和第一性原理得出的 Fe_Mishin2006.eam.alloy, 通过计算 BCC-Fe 和 FCC-Fe 的热膨胀、均方位移、元素的表面弛豫等, 与现有实验数据进行验证比较。同时该势函数属于一种嵌入原子势, 在原子对势的基础上添加了电子云密度相关项, 确保了模型的准确性。嵌入原子势 E_{tot} 的表达式见式 (1)^[4]:

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\bar{\rho}_i) \quad (1)$$

式中, F_i 为嵌入函数, 表示将该位置的原子嵌入背景电子密度 $\bar{\rho}_i$ 时所需要的能量, Φ_{ij} 为多体屏蔽因子, $\Phi_{ij}(r_{ij})$ 为原子 i 和 j 之间为距离 r 时的相互作用势。

利用分子动力学软件 LAMMPS^[5], 对多晶 Fe 模型在不同拉伸温度和应变速率下进行 x 轴方向的单轴拉伸模拟。拉伸模拟前, 先将模型进行能量最小化, 调整部分原子不合理位置, 然后在等温等压系综下弛豫 20 ps 得到真实情况下的模型状态。参考压力容器用碳钢服役温度范围, 充分分析不同拉伸温度对多晶 Fe 拉伸性能的影响规律, 选择拉伸温度分别为 500、600 和 700 °C, 对应应变速率为 $3 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 。

充分考虑应变速率范围并提高分子动力学模拟效率, 选择在温度为 550 °C 条件下, 应变速率为 1×10^8 、 5×10^8 和 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 进行拉伸模拟。分子动力学模拟完成后, 利用 Ovito 软件对模拟结果进行可视化处理与分析。

模拟结果与分析

拉伸温度影响

图 2 所示为多晶 Fe 在不同拉伸温度下拉伸模拟得到的应力-应变曲线。可以看出, 不同拉伸温度下, 模型的拉伸应力-应变曲线变化趋势基本相同。拉伸开始时, 应力与应变都呈线性关系, 说明拉伸初始阶段模型为弹性变形阶段。当模型到达屈服点后进入塑性变形阶段, 应力-应变曲线呈现出应力逐渐上升趋势, 当应力达到峰值后又逐渐下降, 直至趋于稳定。随着温度的升高, 多晶 Fe 在断裂时的应变逐渐增加。多晶 Fe 的抗拉强度不断减小, 最大应变逐渐增加。

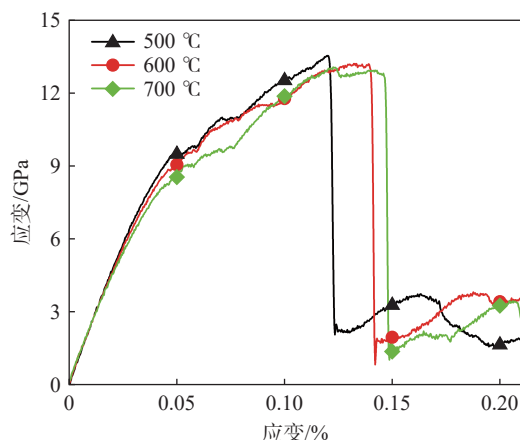


图 2 不同拉伸温度下多晶 Fe 模型的应力-应变曲线

表 1 给出了不同温度下多晶 Fe 模型的抗拉强度、弹性模量及最大应变值。可以看出, 随着温度升高, 多晶 Fe 模型的抗拉强度和弹性模量不断减小。在拉伸温度为 500 °C 时, 模型的抗拉强度、弹性模量和最大应变分别为 13.54 GPa、202.84 GPa 和 12.25%。当拉伸温度为 700 °C 时, 模型的抗拉强度和弹性模量分别减小到 12.94 和 182.85 GPa, 最大应变增大至 14.80%, 与 500 °C 下的拉伸性能相比, 抗拉强度和弹性模量分别减少了 4.43% 和 9.86%, 最大应变提高了 20.82%。拉伸温度升高使原子动能增

表 1 不同温度下多晶 Fe 模型的抗拉强度、弹性模量及最大应变值

温度/°C	抗拉强度/GPa	弹性模量/GPa	最大应变/%
500	13.54	202.84	12.25
600	13.20	193.91	14.15
700	12.94	182.85	14.80

加,大量空位不断迁移汇合导致更易萌生孔洞,使材料的变形抗力降低。高温下的软化效应使材料塑性增加,导致最大应变值得到了提高。同时原子动能的增加使热振动加剧,增大了原子间距离,最终使材料的弹性模量减小^[6-7]。

应变速率影响

图 3 所示为多晶 Fe 在不同应变速率下拉伸模拟得到的应力-应变曲线。与图 2 类似,在不同拉伸应变速率下,模型的拉伸应力-应变曲线变化趋势也基本相同。在拉伸初始阶段,模型表现出弹性变形,应力与应变呈线性关系;在模型到达屈服点后进入塑性变形阶段,应力逐渐上升;当应力达到峰值后又逐渐下降,直至趋于稳定。随着应变速率的增加,多晶 Fe 在断裂时的应变逐渐增加。多晶 Fe 的抗拉强度和最大应变不断增加。

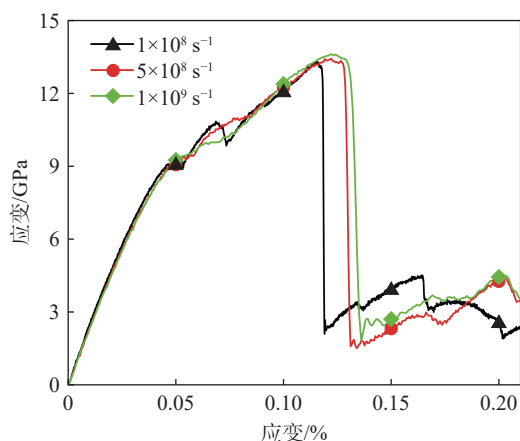


图 3 不同应变速率下模型的应力-应变曲线

表 2 给出了不同应变速率下多晶 Fe 模型的抗拉强度、弹性模量和最大应变比较结果。在应变速率为 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时,模型的抗拉强度、弹性模量和最大应变分别为 13.28 GPa、198.08 GPa 和 11.85%;当应变速率为 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时,模型的抗拉强度和弹性模量分别为 13.61 和 194.56 GPa,最大应变为 13.40%。根据比较结果可知,随着应变速率的增加,模型的

表 2 不同应变速率下多晶 Fe 模型的抗拉强度、弹性模量及最大应变值

应变速率/ s^{-1}	抗拉强度/GPa	弹性模量/GPa	最大应变/%
1×10^8	13.28	198.08	11.85
5×10^8	13.42	196.50	13.00
1×10^9	13.61	194.56	13.40

抗拉强度和最大应变值所有增加,主要是由于应变速率的增加使材料在更短的时间内发生较大变形,增加了位错密度和晶粒细化效果,从而提高了多晶 Fe 的抗拉强度和最大应变值。而应变速率对金属材料的弹性行为没有影响,所以与拉伸温度相比,应变速率对多晶 Fe 的弹性模量影响较小。

拉伸过程中原子的变化规律

通过分子动力学模拟结果可知,拉伸温度和应变速率对多晶 Fe 的抗拉强度和弹性模量都有一定的影响。在选定的模拟参数范围内,多晶 Fe 模型在拉伸过程中的原子变化规律基本一致。图 4 所示为应变速率为 $3 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 、拉伸温度 600°C 时,多晶 Fe 模型在拉伸过程中的原子变化规律。其中,拉伸方向为 x 方向,观察方向为多晶 Fe 模型的 $x-z$ 面。图 4(a) 为多晶 Fe 充分弛豫后的初始原子构型,此时的应变 $\epsilon=0$ 。由图 4(b) 可见,当应变达 $\epsilon=0.030$ 时,模型处于弹性形变,模型沿 x 轴方向拉伸产生了泊松效应,但模型没有明显变化。如图 4(c) 所示,当应变 $\epsilon=0.069$ 时,模型处于塑性变形阶段,此时晶粒开始沿晶界产生滑移现象。在应变 $\epsilon=0.138$ 时,模型达到最大拉伸强度,模型中出现大量相变和滑移带,同时晶界宽度也逐渐变大,如图 4(d) 所示。图 4(e) 所示为应变 $\epsilon=0.150$ 时的原子构型,此时模型已经发生断裂,同时出现了晶粒细化现象,这是拉伸载荷诱导塑性变形引起的。如图 4(f) 所示,当应变 $\epsilon=0.210$ 时,细化的晶粒取向接近,晶粒又发生了融合及长大现象。由图 4 中可以看出,由于塑性变形,多晶 Fe 模型在拉伸过程中产生了少量的位错,位错密度的积累引起了晶粒细化。随着应变的持续增加,在晶界处生成了滑移带和相变结构,这些微观缺陷在应变后期会逐渐消失,同时晶粒也会逐渐长大。由于应变增加使模型温度升高,拉伸塑性变形诱导的缺陷结构发生了湮灭现象^[7]。

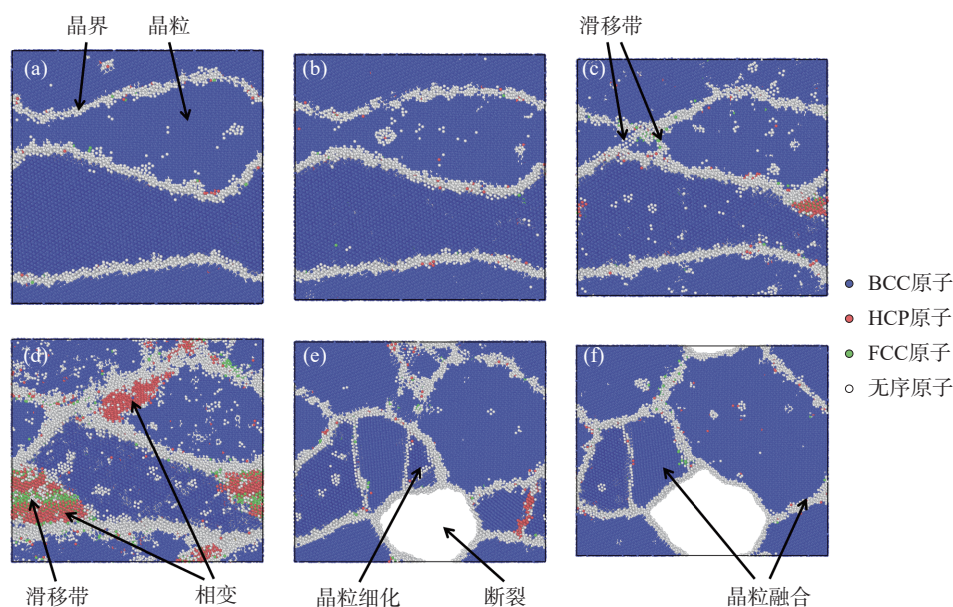


图4 多晶 Fe 在拉伸过程的原子构型: (a) $\varepsilon=0$; (b) $\varepsilon=0.030$; (c) $\varepsilon=0.069$; (d) $\varepsilon=0.138$; (e) $\varepsilon=0.150$; (f) $\varepsilon=0.210$

结束语

(1) 拉伸温度对于多晶 Fe 的拉伸性能具有显著影响, 拉伸温度的升高使原子动能增加, 大量空位的迁移汇合导致孔洞更易萌生, 其断裂所需的极限应力更小; 同时原子动能的增加使热振动加剧, 增大了原子间距离; 因此, 多晶 Fe 的抗拉强度和弹性模量随着拉伸温度的升高而不断减小。

(2) 应变速率对于多晶 Fe 的拉伸性能也具有一定的影响, 不同应变速率拉伸得到的应力-应变曲线变化趋势基本相同; 由于应变速率的增加提高了位错密度, 使材料的抗拉强度有所增加, 而应变速率对金属材料的弹性行为没有影响, 所以多晶 Fe 的弹性模量没有显著变化。

(3) 本文的研究结果和方法对于多晶 Fe 的制备和力学性能强化具有一定的指导意义; 同时, 探索影响多晶 Fe 拉伸性能的其他因素, 特别是模拟与实验结果进行对比研究, 也是笔者下一步的工作重点。

参考文献

[1] 史志鹏, 余慧, 王红国, 等. 工业纯铁 LY07 生产实践. 河北冶

金, 2022(9): 38

- [2] Hirel P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files. *Comput Phys Commun*, 2015, 197: 212
- [3] Chamati H, Papanicolaou N I, Mishin Y, et al. Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe (100). *Surf Sci*, 2006, 600(9): 1793
- [4] Zope R R, Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system. *Phys Rev B*, 2003, 68(2): Art No. 024102
- [5] 柏智文, 丁志刚, 周爱龙, 等. α -Fe 单晶拉伸变形热-动力学的分子动力学模拟. *金属学报*, 2024, 60(6): 848
- [6] 冯悦, 王文森, 谢敬佩, 等. TiC/Ti 复合材料拉伸断裂机理的分子动力学模拟. *塑性工程学报*, 2022, 29(7): 191
- [7] 张国栋, 赵俊生, 高帅, 等. 纳米多晶 Cu-Ni 合金拉伸行为的分子动力学模拟. *塑性工程学报*, 2021, 28(9): 194

基金项目: 江苏省市场监督管理局科技计划资助项目 (KJ2022001)。

作者简介: 武兴 (1977—), 男, 正高级工程师, 辽宁沈阳人, 主要研究方向: 承压类特种设备的检验检测工作。

通信作者: 李京 (1988—), 男, 副教授, 江苏邳州人, 主要研究方向: 金属材料表面改性。通信地址: 江苏省常州市科教城机械石油楼; E-mail: ljing@cczu.edu.cn。