高压物理学报

沿[110]晶向冲击加载下单晶铁的结构相变：基于不同势函数的分子动力学模拟

吴美琪 战金辉 李江涛 王昆 刘晓星

Structural Phase Transition of Single-Crystalline Iron under Shock Loading along the [110] Direction: Molecular Dynamics Simulations Based on Different Potential Functions

WU Meiqi, ZHAN Jinhui, LI Jiangtao, WANG Kun, LIU Xiaoxing

引用本文:
吴美琪, 战金辉, 李江涛, 等. 沿[110]晶向冲击加载下单晶铁的结构相变：基于不同势函数的分子动力学模拟[J]. 高压物理学报, 2025, 39(11):110105. DOI: 10.11858/gywlxb.20251037
WU Meiqi, ZHAN Jinhui, LI Jiangtao, et al. Structural Phase Transition of Single-Crystalline Iron under Shock Loading along the [110] Direction: Molecular Dynamics Simulations Based on Different Potential Functions[J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2025, 39(11):110105. DOI: 10.11858/gywlxb.20251037

在线阅读 View online: https://doi.org/10.11858/gywlxb.20251037

DOI: 10.11858/gywlxb.20251037

沿 [110] 晶向冲击加载下单晶铁的结构相变：基于不同势函数的分子动力学模拟

吴美琪[1,2], 战金辉[2], 李江涛[3], 王 昆[4], 刘晓星[2]

（1. 北京石油化工学院新材料与化工学院燃料清洁化及高效催化减排技术北京市重点实验室, 北京 102617;
2. 中国科学院过程工程研究所介科学与工程全国重点实验室, 北京 100190;
3. 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室, 四川 绵阳 621999;
4. 湖南大学材料科学与工程学院, 湖南 长沙 410082）

摘要: 作为冲击加载下金属材料动态行为研究的典型体系，单晶铁的相变机制与力学响应特性对于高压相变研究具有重要意义。利用分子动力学模拟方法研究了单晶铁沿 [110] 晶向冲击加载下的力学响应行为，考察了 3 种不同势函数（Ackland、Mishin、优化的 MAEAM）在应力传递、位错活动和新相形成过程中的差异，探讨了塑性与相变的耦合机制。结果表明：采用 Ackland 势函数预测的体心立方（body-centered cubic, BCC）相到密排六方（hexagonal close-packed, HCP）相的相变压力（14.03 GPa）最接近实验数据，并能较好地描述塑性变形与相变的耦合；Mishin 势函数在高应变率下表现出独立的塑性阶段；优化的 MAEAM 势函数给出的 BCC-FCC（face-centered cubic）相变压力阈值（49.91 GPa）较高，更符合实验未观测到 FCC 相的现象。此外，3 种势函数作用下均表现出相同的相变机制，即从 BCC 压缩到剪切诱导的堆垛层错形成及其重新取向。

关键词: 分子动力学；单晶铁；冲击加载；相变；塑性

中图分类号: O521.2; O469 **文献标志码:** A

作为工业应用最广泛的金属之一，铁在极端条件下的相变行为一直是高压物理和材料科学领域的研究热点[1–3]。特别是在冲击加载条件下，铁的塑性变形过程与相变机制对于理解地核结构演化和开发新型高性能金属材料具有重要意义[4–6]。其中，单晶铁从体心立方（body-centered cubic, BCC）相向密排六方（hexagonal close-packed, HCP）相的转变作为高压响应的典型范例，涉及应力波传播、塑性变形与相变机制的复杂耦合作用。

自 Bancroft 等[7] 报道铁在约 13 GPa 的冲击加载条件下会发生 BCC-HCP 相变以来，对该现象的实验和理论研究持续深入[8–10]，不同研究方法获得的相变压力阈值存在显著差异。Liu 等[11] 通过实验测得单晶铁沿 [110] 晶向的相变压力为 (13.5±0.4) GPa。而分子动力学的研究结果普遍偏高且差别较大：Kadau 等[12] 采用经典嵌入原子势（embedded atom method, EAM）方法计算得到沿 [110] 晶向的相变阈值压力为 17 GPa; Wang 等[13] 和 Lu 等[14] 则考虑了塑性变形的影响，计算得到的相变压力高达 22.3 GPa。这种偏差表明原子间相互作用势函数（以下简称势函数）对相变临界条件的预测具有显著的敏感性。

目前，冲击加载下塑性与相变的动态耦合机制尚不明确。Smith 等[15] 通过跨尺度斜波压缩实验发现，相变过载压力与弹塑性转变应力随应变率呈现同步阶段演化特征，表明铁的弹塑性转变过程显著

* **收稿日期:** 2025-02-26； **修回日期:** 2025-04-01
基金项目: 国家自然科学基金（21875255）
作者简介: 吴美琪（1998—），女，硕士，主要从事冲击分子动力学研究. E-mail: 15084698021@163.com
通信作者: 战金辉（1981—），男，副研究员，主要从事燃料转化与催化反应机理、多相流动传递与反应模拟研究. E-mail: jhzhan@ipe.ac.cn

影响动态压缩下铁的相变形核过程。Jensen 等[16] 通过高精度板撞击实验进一步证实了应变率对相变压力的调控效应，发现高应变率下存在显著的相变压力过载。在微观尺度，完美单晶铁的相变应力阈值高于多晶材料，而结构缺陷可通过异质形核显著降低相变临界压力，暗示塑性变形对相变具有促进作用[17]。崔新林等[18]、Cui 等[19] 通过分子动力学研究揭示了孔洞缺陷通过局部应力集中促进相变形核的具体机制。Amadou 等[20] 研究发现，完美单晶铁在高压下会出现硬化行为，抑制相变的发生，而预存缺陷可以促进相变的发生。Yao 等[21] 将相场模型与晶体塑性模型耦合，发现塑性变形通过滞后效应和动态变形诱导应力波影响相变。从上述实验和模拟研究中可以看出，冲击加载下铁的相变过程会受到塑性变形的影响，因此，探索相变与塑性变形的耦合机制至关重要。

另一方面，关于 BCC-HCP 相变路径的争议持续至今。Wang 等[22] 通过 X 射线吸收精细结构（X-ray absorption fine structure, XAFS）技术描述了相变过程，并推测了 3 种相变机制：机制 Ⅰ 为压缩和扩展过程，BCC 相的铁首先沿 [001] 晶向被压缩，同时沿 $[1\bar{1}0]$ 方向扩展，使 BCC 相的 (110) 面变成密排面，然后由相邻密排面相对滑移形成 HCP 相；机制 Ⅱ 包含剪切过程，$(\bar{1}12)$ 平面上沿 $[\bar{1}1\bar{1}]$ 方向进行剪切形成密排面，相邻密排面滑移生成 HCP 相；机制 Ⅲ 指出，相变过程可能经历中间态面心立方（face-centered cubic, FCC）结构，同样在 $(\bar{1}12)$ 平面上沿 $[\bar{1}1\bar{1}]$ 方向进行剪切形成密排面，(110) 平面沿 $[0\bar{1}10]$ 方向剪切生成中间 FCC 结构，相邻密排面滑移后生成 HCP 相。其中，Hawreliak 等[23] 通过原位 X 射线衍射实验和分子动力学模拟方法，仅观测到 BCC 相直接转变为 HCP 相，且相变机制对应机制 Ⅰ。Levitas 等[24–25] 开展了扭转金刚石压砧实验，发现剪切或扭转可以导致铁的 BCC-HCP 相变，支持剪切主导的相变过程；Wang 等[26]、Shao 等[27] 的分子动力学模拟结果支持旋转-平移的复合相变机制，与机制 Ⅱ 相似。然而，Kadau 等[12] 的分子动力学模拟则观察到沿 [110] 晶向冲击时 BCC-FCC-HCP 的分步转变。截至目前，仅有机制 Ⅰ 得到了实验和模拟的证实。不同方法对相变路径的预测可能存在差异，在分子动力学模拟中，这种差异可能来源于势函数对局域应力状态和相变能垒的描述方式。因此，探究不同势函数条件下单晶铁的微观结构变化，并验证其相变路径，对于理解铁在冲击加载下的相变机制具有重要意义。

针对上述问题，本研究采用分子动力学模拟方法，选择 Ackland、Mishin 和基于 MAEAM 势函数的优化版本（以下称优化的 MAEAM 势）3 种势函数，研究单晶铁沿 [110] 晶向冲击加载下的相变和塑性变形行为。通过对比相变压力阈值、微观结构演化、位错密度及相变路径等特征，分析不同势函数下冲击响应的差别，旨在为研究微观尺度下单晶铁冲击压缩响应行为的势函数选择提供依据。

1　分子动力学计算

1.1　势函数的选择

原子间相互作用势函数的选择关系到分子动力学模拟高压相变和塑性行为结果的准确性。传统势函数（如 Meyer-Ente 势[28]、Mendelev 势[29]）虽能较好地描述铁在常压下的热力学性质，但其对高压相变的预测与实验存在显著偏差[12, 30]；Voter-Chen 势[31] 虽在预测冲击波传播速度上表现良好，但对位错演化过程的描述与实验观测现象存在矛盾[12, 32]。针对上述局限，本研究选取 Ackland 势[33]、Mishin 势[34] 及优化的 MAEAM 势[13, 35] 进行分子动力学模拟。

Ackland 势函数基于多体势框架（finnis-sinclair, FS）

$$E=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N}V_{ij}(x_{ij})-\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j=1}^{N}\Phi_{ij}(x_{ij})\right)^{1/2} \tag{1}$$

式中：E 为系统总势能，N 为系统中的原子总数，$V_{ij}(x_{ij})$ 为成对相互作用函数，$\Phi_{ij}(x_{ij})$ 为原子嵌入能。

对成对相互作用函数进行修正，在原子间距 $x\leqslant x_1$（x_1 为距离阈值）时，匹配 Biersack-Ziegler 通用屏蔽库仑势

$$V(x)=\frac{Z_{\mathrm{A}}Z_{\mathrm{B}}e^2}{x}\varphi\left(\frac{x}{a_{\mathrm{s}}}\right) \tag{2}$$

式中：$\varphi(y)$ 为经验屏蔽函数，a_{s} 为屏蔽长度，Z_{A}、Z_{B} 为原子 A、B 的原子序数，e 为元电荷。

在 $x_1<x<x_2$ 区间，采用 3 次样条插值，确保势函数及其一阶导数连续

$$V(x)=\exp(B_0+B_1x+B_2x^2+B_3x^3) \tag{3}$$

式中：B_0、B_1、B_2、B_3 为插值参数，通过实验拟合得到，与具体材料的性质相关，用于确保势函数 $V(x)$ 及其一阶导数在插值区间内的连续性和平滑性。

Mishin 势函数采用 EAM 框架，并结合实验和第一性原理数据进行拟合

$$E_{\text{total}}=\frac{1}{2}\sum_{ij}V(r_{ij})+\sum_{i}F(\overline{\rho}_i) \tag{4}$$

式中：$V(r_{ij})$为原子 i 与原子 j 之间的成对相互作用势；$F(\overline{\rho}_i)$ 为原子 i 的嵌入能，$\overline{\rho}_i$为原子 i 的背景电子密度，$\overline{\rho}_i=\sum_{j\neq i}\rho(r_{ij})$，其中$\rho(r)$ 为分配给原子的电子密度函数。

$$V(r)=\left[E_1M(r,r_0^{(1)},\alpha_1)+E_2M(r,r_0^{(2)},\alpha_2)+\delta\right]\psi\left(\frac{r-r_{\text{c}}}{h}\right) \tag{5}$$

式中：E_1 和 E_2 为权重因子；$r_0^{(1)}$和$r_0^{(2)}$分别为能量分布的中心位置，上标 (1)、(2) 表示第 1、2 近邻的平衡距离；α_1和α_2为控制高斯函数衰减率的参数；δ为常数偏移项；$\psi\left(\frac{r-r_{\text{c}}}{h}\right)$为截断函数，$r_{\text{c}}$ 为截断半径，h 为调控平滑的参数。

电子密度函数

$$\rho(r)=\left\{A\exp\left[-\beta_1(r-r_0^{(3)})^2\right]+\exp\left[-\beta_2(r-r_0^{(4)})\right]\right\}\psi\left(\frac{r-r_{\text{c}}}{h}\right) \tag{6}$$

式中：A 为幅值控制因子；β_1和β_2为控制指数函数衰减速率的参数；$r_0^{(3)}$和$r_0^{(4)}$表示能量分布的中心位置，上标 (3)、(4) 表示第 3、4 近邻的平衡距离。

优化的 MAEAM 势函数表达式为

$$E_{\text{tot}}=\sum_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{2}V(r_{ij})+F(\rho_i)+M(P_i)\right] \tag{7}$$

式中：$F(\rho_i)$为嵌入能，$M(P_i)$为修正项。

两体相互作用能为

$$V(r)=k_0\left\{1+k_1\ln\frac{r}{r_1}+k_2\frac{r}{r_1^2}\left[\left(\frac{r}{r_1^{\text{c}}}\right)^2+k_3\left(\frac{r_1^m}{r}\right)^8\right]\left(1-\frac{r}{r_{\text{c}}}\right)^2\right\}\qquad r\leqslant r_{\text{c}} \tag{8}$$

式中：k_0、k_1、k_2、k_3 为拟合参数；截断半径$r_{\text{c}}=r_i^4+k_{\text{c}}(r_i^5-r_i^4)$，$r_i^j$为平衡态下第 i 近邻距离，r_i 为第 i 个近邻原子对之间的距离，上标 j 为每一个高斯函数的中心位置；r_1^{c}为与变量 r_1 对应的截断半径；m 为用于控制函数平滑程度的参数。

嵌入能$F(\rho_i)$表示为电子密度ρ_i的函数

$$F(\rho_i)=-F_0\left(1-n\ln\frac{\rho_i}{\rho_{\text{e}}}\right)\left(\frac{\rho_i}{\rho_{\text{e}}}\right)^n \tag{9}$$

式中：ρ_{e}为平衡态下的电子密度，F_0 为平衡态下的嵌入能，n 为势参数。其中，电子密度$\rho_i=\sum_{j\neq i}f(r_{ij})$，$f(r_{ij})$为球形原子电子密度函数，截断半径$r_{\text{c}}=r_i^5+0.5(r_i^6-r_i^5)$。

考虑电子密度非球对称性的修正项

$$M(P_i)=-\frac{\alpha P_iP_{\text{c}}}{(P_i+P_{\text{c}})^2} \tag{10}$$

式中：$P_i=\sum_{j\neq i}g(r_{ij})$，$g(r_{ij})$为原子偏差函数。$g(r_{ij})$表示为

$$g(r_{ij}) = g_0\left(\frac{r_i^2}{r_{ij}}\right)^{\gamma}\left(\frac{r_c - r_{ij}}{r_c - r_i^4}\right)^2 \tag{11}$$

1.2　模型构建与模拟方法

本研究基于开源软件 LAMMPS 进行模型构建和分子动力学模拟。为了探究不同原子间势函数对单晶铁相变压力的预测能力，首先，构建 1.6×10^4 个原子的 BCC、HCP 和 FCC 结构的单晶铁体系，并进行静水压力变形模拟，用于预测相变压力阈值；然后，构建单晶铁试样用于冲击加载下的相变研究，尺寸为 14 nm×14 nm×160 nm，包含约 3×10^6 个原子。模型的坐标轴取向为 $x[\bar{1}10]$、$y[001]$ 和 $z[110]$。

冲击加载前，首先采用共轭梯度法进行能量最小化对体系进行平衡模拟，并将三轴均设置为周期性边界条件；随后在 *NPT* 系综下（零压、300 K），以 0.1 fs 的时间步长进行总时长为 60 ps 的结构优化，确保系统达到平衡；进一步将 z 方向（冲击加载方向）的周期性边界条件更改为自由边界条件，允许材料在该方向自由扩展，而其他方向维持周期性边界条件；最后，在 *NVE* 系综下，试样左侧设置一个以恒定速度（分别为 0.6、0.8 和 1.0 km/s）沿 z 方向运动的刚体活塞，活塞持续向右侧（沿 z 轴）冲击单晶铁试样，冲击加载持续 40 ps，如图 1 所示。

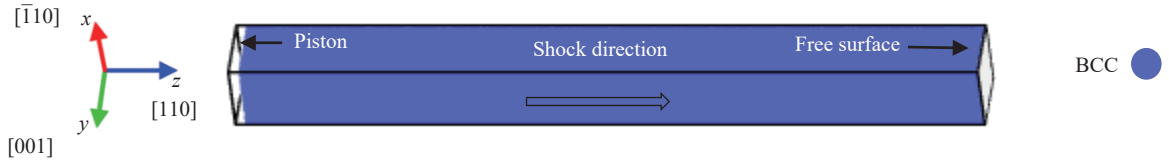


图 1　单晶铁冲击加载示意图

Fig. 1　Schematic diagram of impact loading of single crystal iron

结合静水压力和 von Mises 应力进行体系的力学性质分析。局部静水压力用于表征材料的体积变化和压缩行为，而 von Mises 应力则用于研究材料在外加载荷下的塑性变形特性，特别是剪切主导的变形行为。

局部静水压力

$$p = -\frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3V} \tag{12}$$

式中：σ_{xx}、σ_{yy}和σ_{zz}分别为原子周围的应力张量分量，V 为原子的体积。式 (12) 中的负号表明，当压力为正时，材料处于受压状态。

von Mises 应力表示为

$$\sigma_{\mathrm{vM}} = \sqrt{\frac{1}{2}\left[(\sigma_{xx}-\sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy}-\sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz}-\sigma_{xx})^2 + 6(\tau_{xy}^2 + \tau_{yz}^2 + \tau_{zx}^2)\right]} \tag{13}$$

式中：τ_{xy}、τ_{yz}、τ_{zx}为剪切应力分量。

剪切应变表示为

$$\eta_i^{\mathrm{Mises}} = \sqrt{\eta_{xy}^2 + \eta_{yz}^2 + \eta_{xz}^2 + \frac{1}{6}\left[(\eta_{xx}-\eta_{yy})^2 + (\eta_{xx}-\eta_{zz})^2 + (\eta_{yy}-\eta_{zz})^2\right]} \tag{14}$$

式中：η_{xx}、η_{yy}、η_{zz}为正应变分量，η_{xy}、η_{yz}、η_{xz}为剪应变分量。

为了更直观地分析模拟结果，使用 OVITO[36] 软件进行后处理，观察相变和位错的分布。利用其中的公共近邻法（common neighbor analysis, CNA）分析原子结构，识别不同相的原子，准确区分 BCC、FCC 和 HCP 等不同晶体结构并渲染成不同颜色，从而帮助识别相变过程中的微观结构变化；使用扩展位错分析（extended dislocation analysis, EDA）方法精确识别位错线和位错密度，获得位错在模拟过程中的演化情况。

2　结果与讨论

2.1　压力诱导相变

为了探究不同的原子间势函数对单晶铁相变压力的预测能力，采用 3 种原子间势函数 Ackland、Mishin 和优化的 MAEAM 势，分别对 1.6×10^4 个原子的 BCC、HCP 和 FCC 结构单晶进行静水压力变形模拟，并计算不同压力下各相的焓值。

根据经典热力学理论，在恒压条件下，系统的相变驱动力由吉布斯自由能（$G=H-TS$）决定[36]，当压力达到阈值时，BCC 相与 HCP 相的吉布斯自由能相等，使相变得以发生。在冲击加载的绝热近似下，这一判据可简化为两相焓相等，因此，在相变过程中，焓的变化是决定相变能否发生的关键因素之一，这与文献 [9] 报道的研究结果一致。

焓-压力曲线的交点对应相变压力阈值，如图 2 所示，红色三角形标记了相应的相变点，并将 3 种势函数的预测结果与文献的模拟结果及实验数据进行了比较，如表 1 所示。对于 BCC-HCP 相转变：采用 Ackland 势函数能够较准确地预测相变压力，其结果与实验数据[16] 最接近，且与 Gunkelmann 等[30] 使用该势函数得到的模拟结果相近；采用 Mishin 势函数预测的相变压力阈值远高于实验值，可能会导致压力条件下的相变模拟产生偏差；采用优化的 MAEAM 势函数对 BCC-HCP 相变压力阈值（$p_{\mathrm{BCC\text{-}HCP}}$）的预测结果高于实验值及 Ackland 势函数的预测结果，而低于 Mishin 势函数的预测结果。在实验中没有明确的证据表明 BCC-FCC 相转变的存在，但是 3 个势函数的模拟结果均观测到了 BCC-FCC 相变现象，

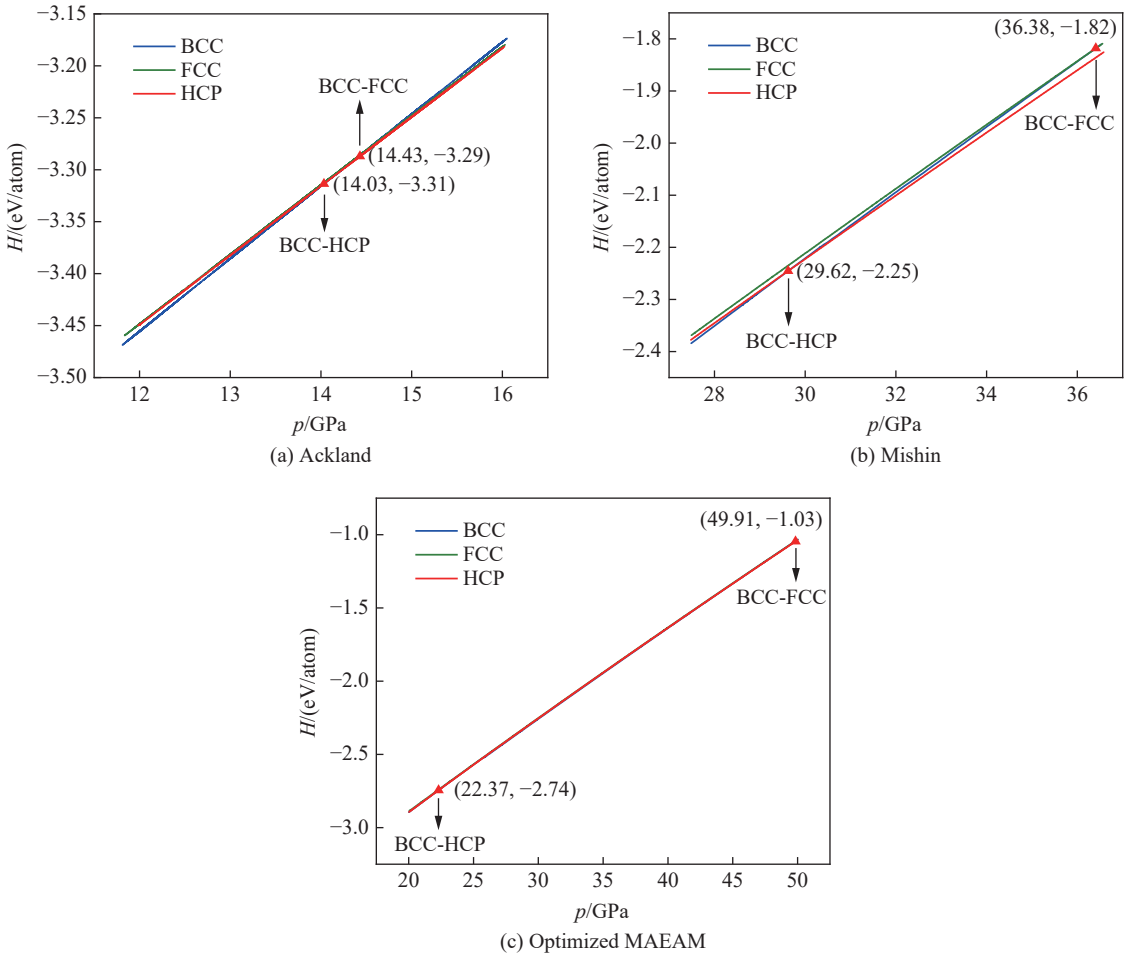


图 2　不同势函数模拟的 10 K 下 BCC、FCC、HCP 结构的焓-压力曲线（红色三角表示相变压力）

Fig. 2　Enthalpy-pressure diagrams of BCC, FCC, and HCP structures based on the simulations under different potential functions at 10 K (The red triangle marks the phase transition pressure)

优化的 MAEAM 势函数预测的 BCC-FCC 相变压力阈值($p_{\mathrm{BCC\text{-}FCC}}$)显著高于另外 2 个势函数的模拟结果；而 Ackland 势函数对于实验中没有观测到的 BCC-FCC 相变仍然给出了与 BCC-HCP 相接近的相变压力。因此，基于相变压力阈值的预测结果反映出 Ackland 势函数能够较好地描述 BCC-HCP 相转变现象，但是会在压力较低时出现 BCC-FCC 相变，优化的 MAEAM 势函数对于 BCC-FCC 相变压力阈值的预测更符合现有实验结果对于冲击过程中不存在 FCC 相的判断。

表 1　不同势函数下的相转变压力

Table 1　Phase transition pressure under different potential functions

Potential function	$p_{\mathrm{BCC\text{-}HCP}}$/GPa	$p_{\mathrm{BCC\text{-}FCC}}$/GPa
Ackland	14.03 (13.75[30])	14.43 (14.4[30])
Mishin	29.62	36.38
Optimized MAEAM	22.37 (22.3[13])	49.91
Experiment: polycrystal	12.89±0.15[16]	

2.2　冲击波的传播与相变的产生

根据计算得出 3 个势函数对应的相变压力阈值，采用不同冲击速度(0.6、0.8、1.0 km/s)研究对应条件下的微观结构分布及压力波形，如图 3 所示，其中 p_{zz} 为 z 轴方向上的正向压力分量。

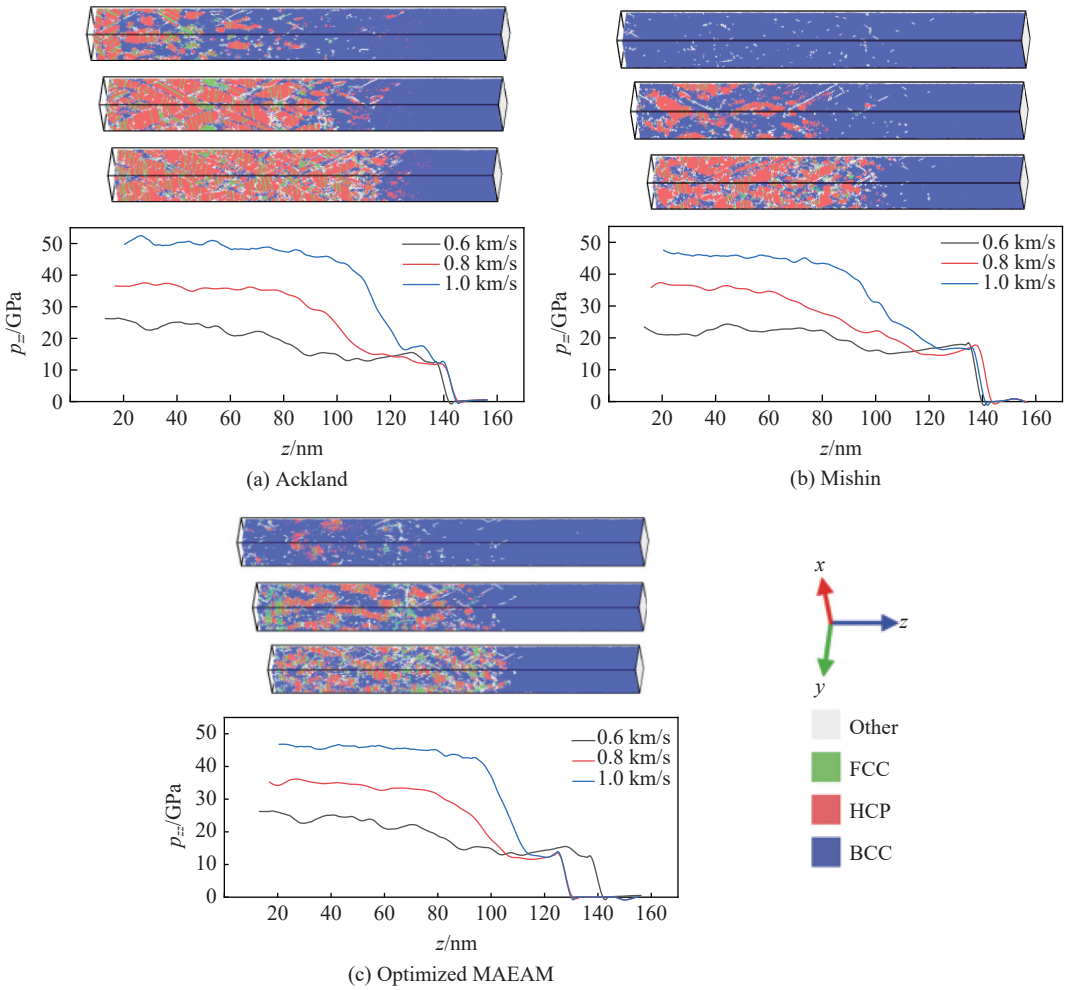


图 3　不同冲击速度下晶体微观结构在 18 ps 时刻的分布及对应波形

Fig. 3　Corresponding microstructure distribution under different impact velocities and the corresponding waveform at 18 ps

Ackland 势函数(图 3(a))在 0.6 km/s 冲击速度下预测的压力峰值约为 27 GPa, 试样出现显著的 BCC→FCC/HCP 相变。BCC 相沿着冲击方向转变为 FCC 和 HCP 相, 表明该势函数对应的相变压力阈值较低, 与预测值吻合较好(详见 2.1 节)。随着冲击速度增至 1.0 km/s, 压力峰值升至约 50 GPa, 同时相变范围进一步扩大, BCC 相大幅减少。相比之下, Mishin 势函数的模拟结果表现出截然不同的相变现象(图 3(b))。在 0.6 km/s 冲击速度下, 压力峰值约为 23 GPa, 体系以 BCC 相为主, 未出现明显的 HCP 相, 这是由于其较高的 BCC-HCP 相变压力(29.62 GPa)导致相变启动压力较高, 从而限制了新相的生成; 只有在较高冲击速度(0.8 和 1.0 km/s)时能观测到 HCP 相产生, 且冲击速度越高, 相变的比例越大, 并在 HCP 相之间存在少量 FCC 相的零散分布。对于优化的 MAEAM 势函数(图 3(c)), 0.6 km/s 冲击速度下的压力峰值约为 25 GPa, 此时生成少量的 FCC 和 HCP 相, 但 BCC 相仍占主导地位。值得注意的是, 即使冲击速度升至 1.0 km/s, 优化的 MAEAM 势函数模拟得到的 HCP 相的比例仍显著低于 Ackland 和 Mishin 势函数的模拟结果, 同时观察到明显的 FCC 相生成。

综上可知, Ackland 势函数预测得到的相变压力与实验值吻合较好, 较低的冲击速度即可启动相变; Mishin 势函数因较高的相变启动压力, 导致仅能在较高冲击速度下诱发相变, 且主要转变为 HCP 相; 而优化的 MAEAM 势函数预测的 HCP 相变发生率最低, 尽管预测的 BCC-FCC 相变压力阈值较高, 但允许 FCC 相生成。

图 4 展示了在不同势函数作用下各相分数及位错密度随时间演化的变化趋势。为保证相变充分发生且排除额外高压的影响, 选择 0.8 km/s 冲击速度进行分析。考虑到冲击波到达右侧末端后会返回稀疏波, 对样品相变产生影响, 在 40 ps 的冲击过程中, 本研究主要关注 BCC-HCP 相转变至最大演化阶段时的状态。

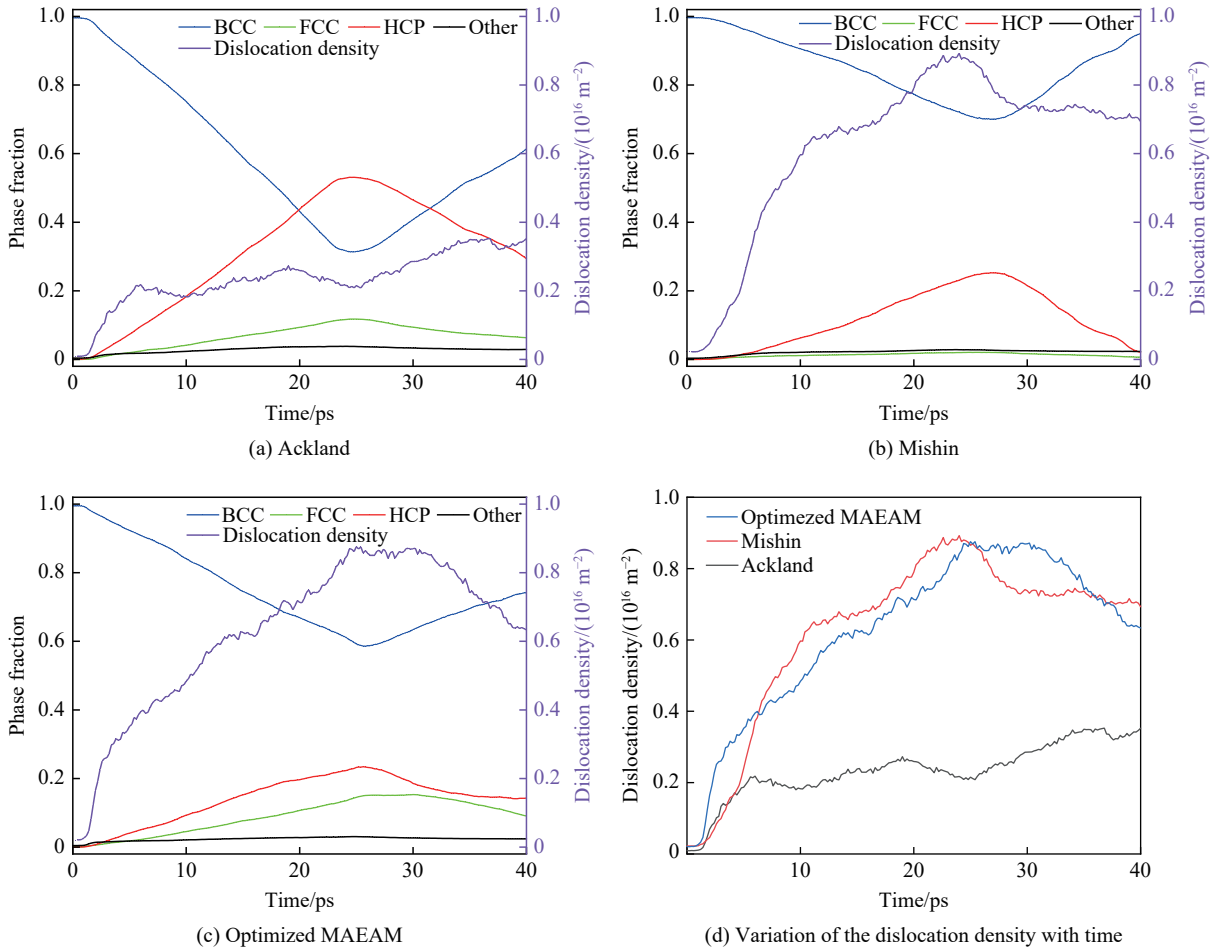


图 4　不同势函数下相分数及位错密度随时间的演化

Fig. 4　Evolution of phase fraction and dislocation density with time under different potential functions

从 Ackland 势函数的模拟结果(图 4(a))可以看出：随着 BCC 相的转换，HCP 相的产生速率较快，其占比在约 24 ps 时达到最大值(约 50%)；FCC 相的演化与 HCP 相呈同步趋势；位错密度在初期迅速上升，随后进入动态稳定阶段。这种现象表明，采用 Ackland 势函数进行冲击模拟时，位错活动不仅在初始阶段的塑性变形中发挥了重要作用，还可能在 BCC-HCP 相变过程中发挥作用，以位错滑移为主的塑性过程与相变过程存在耦合。

相比之下，Mishin 势函数的模拟结果(图 4(b))显示：HCP 相的演化速率较缓慢，其占比在约 28 ps 时达到最大值(约 25%)；对应的 BCC 转化率同样较低(约 30%)；位错密度在 24 ps 前持续增加；尽管 HCP 相的比例在初期有所增长，但其最终的生成量较低，FCC 相分数在整个模拟过程中处于非常低的水平，对应相图中仅在 HCP 相间观测到零散分布(图 3)。

优化的 MAEAM 势函数的模拟结果(图 4(c))表明：HCP 相分数在 25 ps 左右达到最大值(约为 22%)；位错密度在整个模拟过程中的变化趋势与 HCP 以及 FCC 相的趋势同步，暗示位错与相变存在竞争关系。

图 4(d) 通过对比位错密度演化曲线，进一步量化了三者的差异：采用 Ackland 势函数时，位错密度在早期迅速增长，随后趋于稳定；采用 Mishin 和优化的 MAEAM 势函数时，位错密度持续增长，在达到最大值前未表现出明显的稳定阶段。这种趋势表明：在 Mishin 和优化的 MAEAM 势函数下，位错的累积更多地与塑性变形相关；而在 Ackland 势函数下，位错活动可能在 HCP 相的成核和增长过程中发挥关键作用。

2.3　塑性与相变的耦合现象

在前述分析中(图 3)，已经观察到不同势函数下相变的演化趋势，并发现相变的发生不仅受到冲击压力的影响，同时也与塑性变形存在一定的关系。因此，为了进一步揭示塑性变形与相变之间的联系，展示了 0.8 km/s 冲击速度下 18 ps 时刻的位错分布、相变分布及波形，通过对比不同势函数的塑性演化过程，分析以位错为主的塑性与相变的耦合机制，如图 5 所示。

在 Ackland 势函数下(图 5(a))，区域 Ⅰ 为弹性区，应力快速上升但未超过材料的屈服极限，未产生位错，晶体保持初始 BCC 结构，表明此阶段主要为弹性变形。区域 Ⅱ 为屈服阶段，在应力波传播过程中出现第 1 个平台，进入屈服状态，表明由弹性向塑性转变。区域 Ⅲ 表现为局部塑性区，位错开始出现但尚未均匀分布，伴随少量 HCP 相变，这是早期塑性变形行为的标志。区域 Ⅳ 为混合区，von Mises 应力 σ_{vM} 开始明显下降，塑性变形逐渐向相变过渡，新相开始生成并与位错交织，塑性主导逐渐转为相变主导。区域 Ⅴ 为相变稳定区，受冲击波作用生成的新相基本稳定，位错分布密度相较区域 Ⅳ 显著降低，表明相变在较高应力作用下达到稳定状态。采用 Ackland 势函数的模拟展示出较低的相变压力和较快的相变启动特征，位错与相变同步发生，表明塑性变形与相变耦合(见图 4(a))。

在 Mishin 势函数下(图 5(b))，同样地，区域 Ⅰ 为弹性区，区域 Ⅱ 为屈服区；不同的是，区域 Ⅲ 为明显的塑性区，出现有规律的位错分布，塑性变形充分发展，且独立于相变；区域 Ⅳ 为混合区，由塑性主导向相变主导转变；区域 Ⅴ 为相变稳定区，此阶段新相生成并趋于稳定，且相变区域相对集中。在 Mishin 势函数下有较大段的单独塑性区，仅在应力降至临界值时触发相变，新生相区域集中且与位错网络无显著交互。

在优化的 MAEAM 势函数作用下(图 5(c))，区域划分与 Mishin 势函数相似。区域 Ⅲ 的塑性范围缩小，位错密度较低。区域 Ⅳ 出现局部相变与位错的部分交互，耦合强度介于 Ackland 势函数与 Mishin 势函数之间。

通过对比可以发现：在 Ackland 势函数下，位错运动与相变过程几乎同步发生，两者的耦合程度较高；在 Mishin 势函数下，塑性变形在相变启动之前独立发展，且独立塑性区域较大，但仍存在一定的耦合行为；优化的 MAEAM 势函数中，塑性变形与相变之间的耦合强度介于 Ackland 与 Mishin 势函数之间的耦合强度。

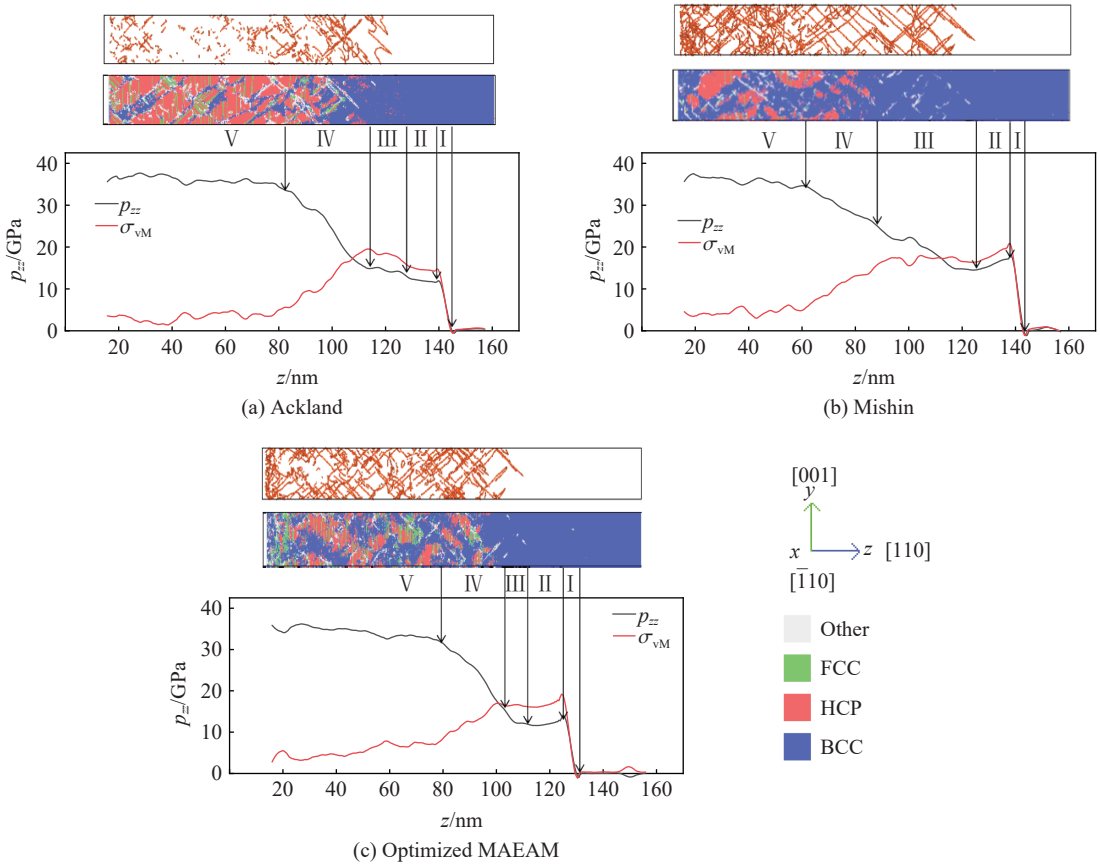


图 5　不同势函数模拟的 18 ps 时刻的位错、相结构、压力、von Mises 应力与位置关系

Fig. 5　Relationship for dislocation, phase structure, pressure and von Mises stress with position at 18 ps under different potential functions

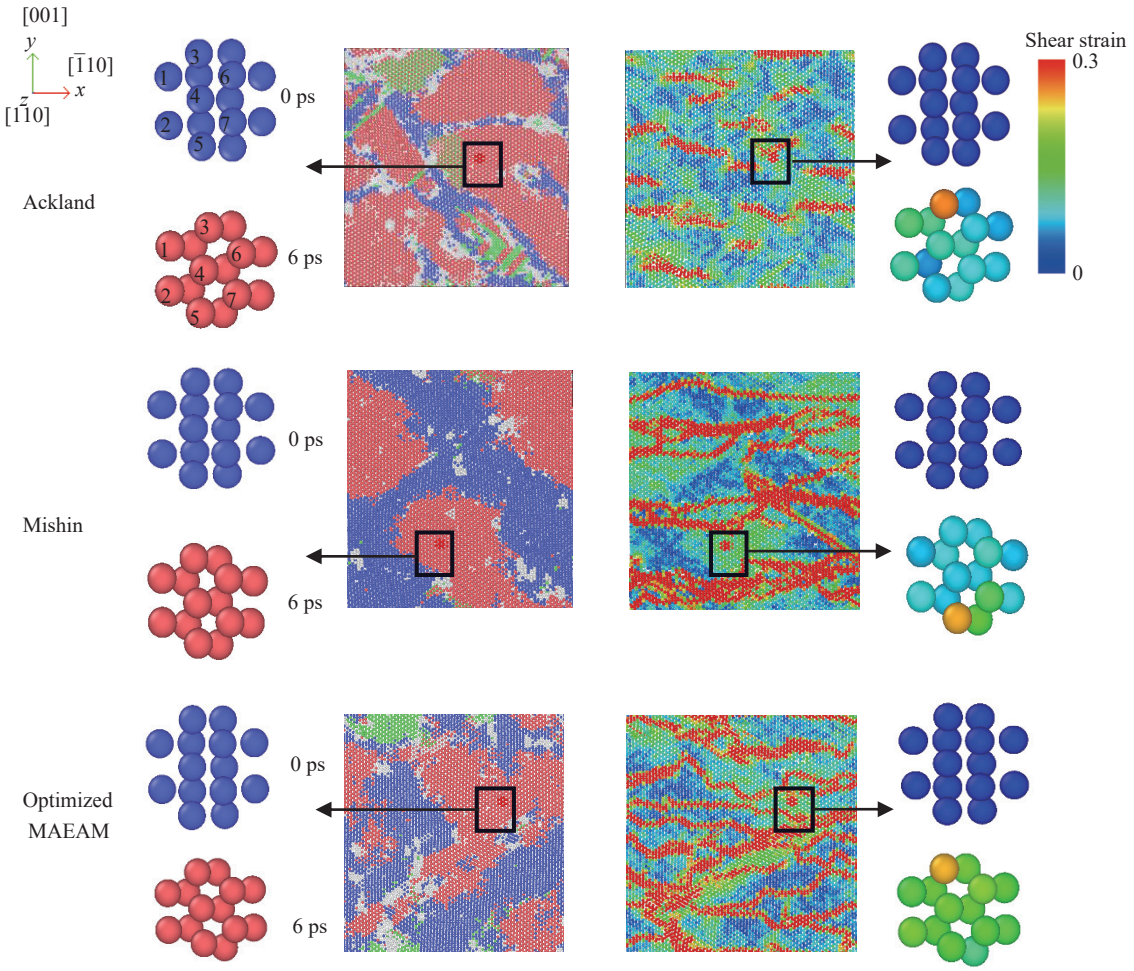
2.4　相变机制

为了深入探究冲击压缩下 BCC-HCP 相变过程，在试样相变稳定区选取垂直于冲击方向的平面(110)，并追踪其中 HCP 相原子的相变演化历程，如图 6 所示。0 和 6 ps 2 个关键时刻的原子分布(图 6(a)和图 6(d))结果表明：在冲击波的作用下，BCC 原子首先沿 [001] 晶向发生局部收缩，使原子间距减小，形成更紧密的结构；随后，在剪切应力的驱动下，原子层之间发生错动，并伴随小角度旋转，该过程中逐渐形成堆垛层错，最终诱导 BCC-HCP 相变发生。

对截取的原子中上层进行编号，根据原子间距离量化压缩程度。Ackland 势函数模拟结果显示，原子沿 [001] 方向表现出较强的局部收缩效应，随后在剪切作用下发生原子平面旋转。Mishin 势函数表现出类似的机制，但压缩程度相对较小。优化的 MAEAM 势函数的响应最为明显，沿 [001] 方向的压缩最为显著。

值得注意的是，3 个势函数的模拟结果均显示相变为压缩-剪切-层错过程，且具有相似的剪切角(约 4.3°)，如图 6(a) 中，3、4、5 号原子形成的直线在 0 和 6 ps 时刻所形成的夹角表明其变形行为在机制上具有一致性。这一结论与 Wang 等[22] 推测的模型 Ⅱ 高度吻合。此外，本研究中未观察到 BCC-FCC-HCP 的中间相演化，而是直接发生 BCC-HCP 相变。这进一步支持了 BCC-HCP 直接转变路径，表明在当前模拟条件下，并不存在 FCC 作为中间态的过渡相变过程。

尽管单晶铁的相变路径在 3 种势函数下保持一致，但具体的动力学过程，如收缩程度、剪切方向及堆垛层错的密度仍受到势函数的影响，这些差异将在后续研究中进一步探讨。



(a) Phase transition atom　(b) Cross-sectional phase　(c) Cross-sectional shear strain (d) Atomic shear strain

图 6　3 种势函数模拟的相变过程

Fig. 6　Phase transition process simulated by three potential functions

3　结　论

采用分子动力学模拟方法，对单晶铁在 [110] 晶向冲击加载下的相变和塑性变形行为进行研究，对比了 Ackland、Mishin 和优化的 MAEAM 3 种势函数，得到以下主要结论。

(1) 模拟结果表明，不同势函数在描述铁的位错活动及应力响应方面存在显著差异，对相变机制整体趋势影响不大。

(2) Ackland 势函数预测的 BCC-HCP 相变压力阈值 14.03 GPa 与实验较接近，并能够描述塑性变形与相变的耦合关系。该势函数适用于相变压力阈值定量预测及塑性-相变耦合，但其对 BCC-FCC 相变压力阈值的低估在涉及多相竞争的研究中需谨慎考虑。

(3) Mishin 势函数预测的相变压力阈值明显高于实验值，但其在相变前表现出的独立塑性阶段为高压纯塑性行为（如位错滑移）研究提供了独特视角，尤其适用于分析高应变率下的相变延迟或抑制现象。

(4) 优化的 MAEAM 势函数模拟结果中，虽然 HCP 相生成率较低，但其较高的 BCC-FCC 相变压力阈值（49.91 GPa）更符合实验中未观测到 FCC 相的现象。

(5) 在相变机制方面，冲击波作用下，BCC 原子首先沿 [001] 方向发生收缩，并在剪切力的作用下出现小角度（约 4.3°）扭转，原子层之间发生错动，最终导致相变的发生。尽管 3 个势函数在 [001] 方向的压缩率存在差异，但单晶铁的相变路径（从 BCC 收缩到剪切诱导的堆垛层错形成和重新取向）在这 3 种势函数下保持一致。

参考文献：

[1] MAO H K, BASSETT W A, TAKAHASHI T. Effect of pressure on crystal structure and lattice parameters of iron up to 300 kbar [J]. Journal of Applied Physics, 1967, 38(1): 272–276.

[2] LIN J F, HEINZ D L, CAMPBELL A J, et al. Iron-silicon alloy in Earth's core? [J]. Science, 2002, 295(5553): 313–315.

[3] GU C, CHEN H Y, ZHAO Y S, et al. Formation of hierarchically structured martensites in pure iron with ultrahigh strength and stiffness [J]. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2024, 121(42): e2408119121.

[4] TAKAHASHI T, BASSETT W A. High-pressure polymorph of iron [J]. Science, 1964, 145(3631): 483–486.

[5] NGUYEN J H, HOLMES N C. Melting of iron at the physical conditions of the Earth's core [J]. Nature, 2004, 427(6972): 339–342.

[6] SUN Y, MENDELEV M I, ZHANG F, et al. *Ab initio* melting temperatures of bcc and hcp iron under the Earth's inner core condition [J]. Geophysical Research Letters, 2023, 50(5): e2022GL102447.

[7] BANCROFT D, PETERSON E L, MINSHALL S. Polymorphism of iron at high pressure [J]. Journal of Applied Physics, 1956, 27(3): 291–298.

[8] 唐志平. 冲击相变研究的现状与趋势 [J]. 高压物理学报, 1994, 8(1): 14–22.
TANG Z P. Some topics in shock-induced phase transitions [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1994, 8(1): 14–22.

[9] 王昆, 肖时芳, 祝文军, 等. 动态载荷下铁相变的原子模拟研究进展 [J]. 高压物理学报, 2021, 35(4): 040110.
WANG K, XIAO S F, ZHU W J, et al. Progress on atomic simulations of phase transition of iron under dynamic loading [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2021, 35(4): 040110.

[10] ZHU Y Q, GONG Q H, YI M. Molecular dynamics investigation of shock-induced deformation behavior and failure mechanism in metallic materials [J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2024, 31(4): 2317–2344.

[11] LIU X, MASHIMO T, KAWAI N, et al. Isotropic phase transition of single-crystal iron (Fe) under shock compression [J]. Journal of Applied Physics, 2018, 124(21): 215101.

[12] KADAU K, GERMANN T C, LOMDAHL P S, et al. Atomistic simulations of shock-induced transformations and their orientation dependence in bcc Fe single crystals [J]. Physical Review B, 2005, 72(6): 064120.

[13] WANG K, XIAO S F, DENG H Q, et al. An atomic study on the shock-induced plasticity and phase transition for iron-based single crystals [J]. International Journal of Plasticity, 2014, 59: 180–198.

[14] LU Z P, ZHU W J, LU T C, et al. Does the fcc phase exist in the Fe bcc-hcp transition? a conclusion from first-principles studies [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2014, 22(2): 025007.

[15] SMITH R F, EGGERT J H, SWIFT D C, et al. Time-dependence of the alpha to epsilon phase transformation in iron [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 114(22): 223507.

[16] JENSEN B J, GRAY III G T, HIXSON R S. Direct measurements of the α-ε transition stress and kinetics for shocked iron [J]. Journal of Applied Physics, 2009, 105(10): 103502.

[17] KADAU K, GERMANN T C, LOMDAHL P S, et al. Microscopic view of structural phase transitions induced by shock waves [J]. Science, 2002, 296(5573): 1681–1684.

[18] 崔新林, 祝文军, 邓小良, 等. 冲击波压缩下含纳米孔洞单晶铁的结构相变研究 [J]. 物理学报, 2006, 55(10): 5545–5550.
CUI X L, ZHU W J, DENG X L, et al. Molecular dynamic simulation of shock-induced phase transformation in single crystal iron with nano-void inclusion [J]. Acta Physica Sinica, 2006, 55(10): 5545–5550.

[19] CUI X L, ZHU W J, HE H L, et al. Phase transformation of iron under shock compression: effects of voids and shear stress [J]. Physical Review B, 2008, 78(2): 024115.

[20] AMADOU N, DE RESSÉGUIER T. Pressure waves induced by the bcc-hcp phase transition in dynamically loaded single crystal iron [J]. Computational Materials Science, 2025, 247: 113559.

[21] YAO S L, YU J D, PEI X Y, et al. A coupled phase-field and crystal plasticity model for understanding shock-induced phase transition of iron [J]. International Journal of Plasticity, 2024, 173: 103860.

[22] WANG F M, INGALLS R. Iron bcc-hcp transition: local structure from X-ray-absorption fine structure [J]. Physical Review B, 1998, 57(10): 5647–5654.

[23] HAWRELIAK J, COLVIN J D, EGGERT J H, et al. Analysis of the X-ray diffraction signal for the α-ε transition in shock-compressed iron: simulation and experiment [J]. Physical Review B, 2006, 74(18): 184107.

[24] LEVITAS V I. Strain-induced nucleation at a dislocation pile-up: a nanoscale model for high pressure mechanochemistry [J]. Physics Letters A, 2004, 327(2/3): 180–185.
[25] LEVITAS V I. High-pressure mechanochemistry: conceptual multiscale theory and interpretation of experiments [J]. Physical Review B, 2004, 70(18): 184118.
[26] WANG B T, SHAO J L, ZHANG G C, et al. Nucleation of hcp and fcc phases in bcc iron under uniform compression: classical molecular dynamics simulations [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2010, 22(43): 435404.
[27] SHAO J L, WANG P, ZHANG F G, et al. Hcp/fcc nucleation in bcc iron under different anisotropic compressions at high strain rate: molecular dynamics study [J]. Scientific Reports, 2018, 8(1): 7650.
[28] MEYER R, ENTEL P. Martensite-austenite transition and phonon dispersion curves of Fe_{1-x} Ni_x studied by molecular-dynamics simulations [J]. Physical Review B, 1998, 57(9): 5140–5147.
[29] MENDELEV M I, HAN S, SROLOVITZ D J, et al. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron [J]. Philosophical Magazine, 2003, 83(35): 3977–3994.
[30] GUNKELMANN N, BRINGA E M, KANG K, et al. Polycrystalline iron under compression: plasticity and phase transitions [J]. Physical Review B, 2012, 86(14): 144111.
[31] HARRISON R J, VOTER A F, CHEN S P. Embedded atom potential for BCC iron [M]//VITEK V, SROLOVITZ D J. Atomistic Simulation of Materials: Beyond Pair Potentials. New York: Springer, 1989: 219–222.
[32] KADAU K, GERMANN T C, LOMDAHL P S, et al. Shock waves in polycrystalline iron [J]. Physical Review Letters, 2007, 98(13): 135701.
[33] ACKLAND G J, MENDELEV M I, SROLOVITZ D J, et al. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α-iron [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2004, 16(27): S2629–S2642.
[34] CHAMATI H, PAPANICOLAOU N I, MISHIN Y, et al. Embedded-atom potential for Fe and its application to self-diffusion on Fe (100) [J]. Surface Science, 2006, 600(9): 1793–1803.
[35] HU W Y, SHU X L, ZHANG B W. Point-defect properties in body-centered cubic transition metals with analytic EAM interatomic potentials [J]. Computational Materials Science, 2002, 23(1/2/3/4): 175–189.
[36] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO —the open visualization tool [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2010, 18(1): 015012.

Structural Phase Transition of Single-Crystalline Iron under Shock Loading along the [110] Direction: Molecular Dynamics Simulations Based on Different Potential Functions

WU Meiqi[1,2], ZHAN Jinhui[2], LI Jiangtao[3], WANG Kun[4], LIU Xiaoxing[2]

(1. *Beijing Key Laboratory of Clean Fuel and High-Efficiency Catalytic Emission Reduction Technology*, *School of New Materials and Chemical Engineering*, *Beijing Institute of Petrochemical Technology*, *Beijing* 102617, *China*;
2. *State Key Laboratory of Mesoscience and Engineering*, *Institute of Process Engineering*, *Chinese Academy of Sciences*, *Beijing* 100190, *China*;
3. *National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics*, *Institute of Fluid Physics*, *China Academy of Engineering Physics*, *Mianyang* 621999, *Sichuan*, *China*;
4. *College of Materials Science and Engineering*, *Hunan University*, *Changsha* 410082, *Hunan*, *China*)

Abstract: Single-crystal iron is a prototypical system for studying the dynamic behavior of metallic materials under shock loading, which is of great significance in high-pressure phase transition research due to its phase transformation mechanisms and mechanical response characteristics. In this work, molecular dynamics simulations were performed to investigate the mechanical response of single-crystal iron under shock loading along the [110] crystallographic direction. Three different potential functions (Ackland,

Mishin, optimized MAEAM) were employed to examine differences in stress transmission, dislocation activity, and new phase formation, as well as to explore the coupling mechanisms between plasticity and phase transformation. The research results show that the body-centered cubic-hexagonalclose-packed (BCC-HCP) phase transition pressure (14.03 GPa) predicted by the Ackland potential function is closest to the experimental data and can better describe the coupling of plastic deformation and phase transition; the Mishin potential function shows an independent plastic stage at high strain rates; the optimized MAEAM potential function gives a higher BCC-FCC (face-centered cubic) phase transition pressure threshold (49.91 GPa), which is more consistent with the phenomenon that the FCC phase was not observed in the experiment. In addition, the three potential functions all show the same phase transition mechanism: from BCC compression to shear-induced stacking fault formation and its reorientation.

Keywords: molecular dynamics; single-crystal iron; shock loading; phase transition; plasticity