



锆铌合金拉伸变形的分子动力学模拟

安克滢, 欧小琴, 宋 旻

(中南大学 粉末冶金研究院, 长沙 410083)

摘要: 本文采用分子动力学模拟方法研究了Nb含量对锆铌合金拉伸变形行为的影响。结果表明: 不同Nb含量的ZrNb合金在单轴拉伸变形中所表现的相变行为和纯锆相似, 外加载荷会诱发合金遵循Pitsch-Schrader(PS)位向关系的密排六方结构(HCP)到体心立方结构(BCC)的相变, 随后BCC相沿贝恩路径(Bain path)转化为FCC相。通过计算不同ZrNb合金体系形成基面层错的能量变化, 发现随着Nb含量的增加, 形成基面层错的能垒增加, 即Nb的加入不利于ZrNb合金中产生基面层错。随着Nb含量的提高, ZrNb合金的应力-应变曲线斜率有略微增加, 弹性模量有所提高, 但是合金体系的屈服强度逐渐降低。本研究将有助于更好地理解锆铌合金的变形机理。

关键词: 锆铌合金; 变形机制; 分子动力学模拟

文章编号: 1004-0609(2022)-10-2989-10

中图分类号: TB31

文献标志码: A

引文格式: 安克滢, 欧小琴, 宋 旻. 锆铌合金拉伸变形的分子动力学模拟[J]. 中国有色金属学报, 2022, 32(10): 2989-2998. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-42078

AN Ke-ying, OU Xiao-qin, SONG Min. Molecular dynamics simulation of ZrNb alloy during tensile deformation[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2022, 32(10): 2989-2998. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-42078

锆及其合金由于具有极低的热中子吸收率、优异的抗腐蚀、抗辐射损伤能力以及优异力学性能, 在化学工业和核工业中得到了广泛的应用^[1-2]。铌是一种难熔金属, 与大多数金属相比, 铌具有优良的力学性能、生物相容性及延展性, 其原子半径为0.145 nm, 略低于锆^[3]。在合金内部, 铌作为替代元素进入锆的晶体结构点阵, 形成ZrNb合金^[4-5]。随着时代发展, 核工业已成为世界各国的重点支持领域, 锆铌合金作为核工业的重要结构材料受到研究者的广泛关注。

材料的力学性能与其微观结构组成有着紧密联系, 在以往的研究中, 由应变诱发的HCP→FCC相变机制已广泛地在铅^[6]、锆^[7-9]、钛^[10-12]等金属材料

中被观察到。HCP和FCC相之间存在着两种不同的位向关系^[6-12], ①基面型(B型): $\langle 1\bar{2}10 \rangle_{\text{HCP}} \parallel \langle 1\bar{1}0 \rangle_{\text{FCC}}$, $\{0001\}_{\text{HCP}} \parallel \{111\}_{\text{FCC}}$; ②柱面型(P型): $\langle 0001 \rangle_{\text{HCP}} \parallel \langle 001 \rangle_{\text{FCC}}$, $\{10\bar{1}0\}_{\text{HCP}} \parallel \{1\bar{1}0\}_{\text{FCC}}$ 。此外, 外部施加的载荷也可导致HCP发生孪生, 进而有效协调变形^[13]。HCP-Zr孪晶有两种类型^[14-15], 一种是拉伸孪晶: $\{10\bar{1}2\} \langle 10\bar{1}\bar{1} \rangle$ 和 $\{11\bar{2}1\} \langle 11\bar{2}\bar{6} \rangle$; 另一种是压缩孪晶: $\{10\bar{1}1\} \langle 10\bar{1}\bar{2} \rangle$ 和 $\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}\bar{3} \rangle$ 。了解材料的变形过程有助于设计各种材料结构, 并根据特定的服役需求定制相应的性能。YANG等^[16]发现, Zr_{2.3}Nb合金进行塑性变形和退火处理后会产生双相组织, 导致其强度和韧性都有所提高。有研究报道了ZrNb合金中 α 相和 β 相在700 K高温下随

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51901248, 51828102)

收稿日期: 2021-07-22; 修订日期: 2022-03-28

通信作者: 欧小琴, 副教授, 博士; 电话: 13667339046; E-mail: Xiaoqin.Ouyang@csu.edu.cn

铌浓度变化的组织性能的实验结果^[17-19]。然而,关于铌含量对锆铌合金变形机制的影响尚不清楚。因此,分子动力学模拟作为一种原子尺度上探索材料微观结构的方法,在分析宏观变形与微观机制发挥着重要作用^[20-28]。

本文将以锆铌合金为研究对象,通过分子动力学方法对其在拉伸载荷作用下的变形行为进行研究,观察加载过程中锆铌内部的晶体结构变化,结合应力-应变曲线、晶相变化等参数,研究铌含量对其变形行为的影响。

1 模拟方法

为研究锆铌合金的变形机制,必须在模拟初期建立合理的结构模型。在本研究中,使用的是SMIRNOVA等^[29]开发的角相关原子势(Angular dependent potential, ADP),该势能描述了Zr-Nb原子之间的相互作用^[29]。首先在300 K温度下构建包含864000个Zr原子的HCP单晶,然后以一定量的Nb原子(摩尔分数为0、2.5%、5%、10%、15%)随机替换Zr原子形成Zr-Nb体系。该模型三维尺寸为19.46 nm×33.49 nm×31.27 nm, x 、 y 、 z 轴分别平行于 $[\bar{1}2\bar{1}0]_{\text{HCP}}$ 、 $[\bar{1}010]_{\text{HCP}}$ 、 $[0001]_{\text{HCP}}$ 晶向。首先采用NPT系综控制体系变量,初始模型在300 K的真空环境中弛豫10000步(步长为5 ps),使系统达到能量最小化。在300 K温度下对模型以 10^{10} s^{-1} 应变速率进行沿 x 方向的单轴拉伸模拟,总步长为100000步(步长为0.5 fs),相当于总应变为50%。所有分子动力学模拟均设置了 x 、 y 和 z 轴方向上的周期性边界条件。采用自适应共近邻分析方法(Adaptive common neighbor analysis, a-CNA)分析拉伸变形过程中的结构变化^[30]。借助可视化软件OVITO显示模拟过程的微观结构^[31]。所有分子动力学模拟过程均通过开源软件LAMMPS^[32]进行。

本研究中的广义层错能(Generalized stacking fault energy, GSFE)采用分子静力学计算获得。计算方法如下:Zr- x Nb(摩尔分数为0、2.5%、5%、15%和10%)的初始模型三维尺寸为32.12 nm×55.68 nm×773.46 nm (a_0 为HCP结构中正六边形底面边长,为3.212 Å, c 为HCP结构中上下底面的距

离,为5.172 Å),其中 x 、 y 和 z 轴分别沿 $[\bar{1}2\bar{1}0]_{\text{HCP}}$ 、 $[\bar{1}010]_{\text{HCP}}$ 和 $[0001]_{\text{HCP}}$ 方向。周期性边界条件应用于 x 轴和 y 轴,自由表面垂直于 z 轴。每个晶体模型系统在能量最小化后,把整个晶体模型分成垂直于(0001)平面的上下两部分。晶体上半部分的原子相对于晶体下半部分沿 y 方向移动,进而形成基面层错^[33]。再次能量最小化以弛豫 z 轴方向的模型尺寸。广义层错能(ΔE_{GSFE})的计算如下^[33]:

$$\Delta E_{\text{GSFE}} = \frac{E_1 - E_0}{A} \quad (1)$$

式中: E_1 和 E_0 分别代表模型发生位移后和发生位移前的势能; A 表示 x - y 平面的面积。

2 结果与讨论

2.1 Zr-Nb合金的晶体结构参数及层错能

晶格常数 a 和轴比 c/a 是密排六方晶体的基本结构参数。HCP金属各晶面上原子密排程度随轴比 c/a 的变化而改变,因此滑移面也随 c/a 的变化而变化;当 $c/a > 1.633$ 时,滑移系统以基面(0001)滑移为主,因而合金塑性不佳;当 $c/a < 1.633$ 时,除了基面产生滑移,棱柱面和锥面也可产生滑移^[34]。在0 K与300 K的温度下,HCP结构的ZrNb合金的Nb含量与晶格常数 a 、轴比 c/a 的关系如图1(a)所示,随着Nb原子浓度的增加,ZrNb合金的晶格常数和轴比都降低,这与前人研究中的趋势一致^[2]。这是由于Zr和Nb两种元素的结构性质有所差异,其中元素Nb的原子半径为0.208 nm,略低于Zr的0.216 nm;Nb的相对原子质量为92.906,略高于Zr的91.224。因此,Nb原子置换基体金属HCP-Zr点阵中的Zr原子时会造成一定程度的晶格畸变,引起合金晶格常数的改变,从而引起 c/a 的变化。

计算了0 K时不同ZrNb合金体系HCP相中产生基面层错需要克服的能垒 ΔE ,结果如图1(b)所示。由图1(b)可知,Zr、Zr2.5Nb、Zr5Nb、Zr10Nb和Zr15Nb的 ΔE 分别是8.38 meV/Å²、9.17 meV/Å²、10.03 meV/Å²、11.01 meV/Å²和12.51 meV/Å²。Zr的 ΔE 最小,且体系的 ΔE 随着Nb含量的增加而增加,这意味着当对以上合金体系施以相同的拉伸载荷时,Zr最容易克服能垒 ΔE 而形成基面层错。随

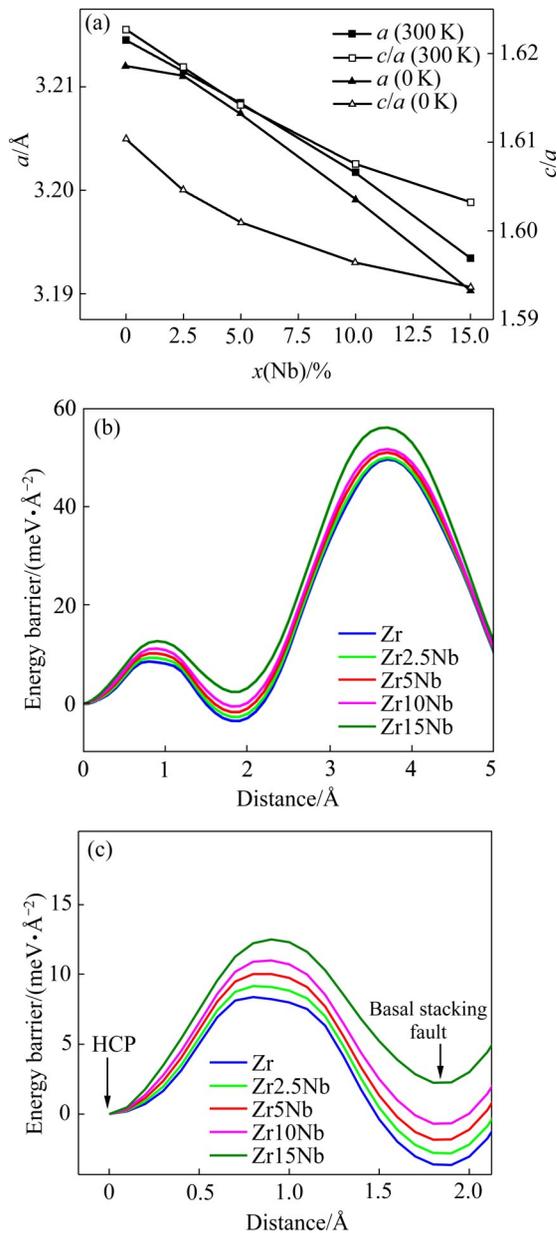


图 1 不同温度下 ZrNb 合金的晶格常数 a 和轴比以及 0 K 时生成基面层错需克服的能垒 ΔE

Fig. 1 Lattice constants and axial ratios of ZrNb alloy at different temperatures(a) and energy barriers to overcome basal stacking fault formation in different ZrNb systems at 0 K(b), (c)

随着 Nb 含量增加, 能垒 ΔE 增加, 可能与晶格常数随 Nb 含量的变化有关^[35]。如图 1(a)所示, 随着 Nb 含量的增加, 可以算得 c 轴逐渐变短且 c/a 值降低。这意味着基面的晶面间距在减小, 层错能变高(见图 1(b)), 从而导致 Shockley 不全位错沿基面滑移更加困难^[36]。这使得基面层错形成更困难, 即能垒升高。

2.2 微观结构演变与变形机制

图 2 所示为不同 Nb 含量的 ZrNb 合金沿 x 轴方向拉伸变形的微观结构演变图。模拟结果表明, 在单轴拉伸载荷下, 四个不同 Nb 含量的 ZrNb 合金初始晶体结构内部都发生了相变。当应变 ε 为 10% 时, 各体系 HCP 晶体中都产生了相互交叉的 BCC 条带。随着应变增加到 15%, 各体系开始发生 HCP→FCC、BCC→FCC 和 BCC→HCP 相变。随着应变的继续增加, FCC 晶粒不断长大, HCP 和 BCC 相则相应慢慢减少。在 HCP-Ti 晶体沿 $[\bar{1}2\bar{1}0]_{\text{HCP}}$ 方向拉伸的分子动力学模拟中, 也观察到了 HCP→BCC→FCC 连续相变和 HCP ↔ BCC 相变^[37]。

纯锆和锆铌合金的变形路径相似: 随着拉伸变形的增加, 首先诱发 HCP 结构相变为条带状的 BCC 结构, 其位向关系遵循 Pitsch-Schrader(PS)关系^[38], 即 $(0001)_{\text{HCP}} \parallel (110)_{\text{BCC}}$, $[\bar{1}2\bar{1}0]_{\text{HCP}} \parallel [001]_{\text{BCC}}$ (见图 3(a)); 然后, BCC 结构沿贝恩路径(Bain path)^[39]生成 FCC 结构: $(001)_{\text{BCC}} \parallel (100)_{\text{FCC}}$, $[\bar{1}\bar{1}0]_{\text{BCC}} \parallel [010]_{\text{FCC}}$ (见图 3(b))。随后, BCC 条带完全相变为 FCC 相, 并与基体 HCP(定义为“HCP-M”)相接触形成 HCP/FCC 界面。值得注意的是, HCP-M/FCC 界面符合 P 型关系: $(0\bar{1}10)_{\text{HCP-M}} \parallel (1\bar{1}0)_{\text{FCC}}$, $[0001]_{\text{HCP-M}} \parallel [001]_{\text{FCC}}$ (见图 3(c))。与以往研究中的 P 型相变机制^[10, 12]不同, 分子动力学模拟结果显示 FCC 相并不是直接从基体 HCP 相转变而来, 而是从 BCC 相转变而来, FCC 相和 HCP 基体之间形成 P 型界面。

除上述 BCC→FCC 相变外, 还发生了 BCC→HCP 逆相变, 其位向关系符合 PS 位向关系的变体形式。这是由于 HCP 为低温稳定相^[40], 拉伸变形可为 BCC 结构提供相变驱动力, 即更容易发生 BCC→HCP 相变。而且 BCC 晶格具有高度对称性, 因此, BCC 可以通过 PS 位向关系的不同变体发生 BCC→HCP 相变, 新形成的 HCP 晶粒(定义为“HCP-N”)晶体取向与基体 HCP 不同。新生成的 HCP 和 FCC 都通过消耗 BCC 晶粒而长大, 当它们相互接触时形成 B 型关系的 HCP-N/FCC 界面(见图 4(a)): $(0001)_{\text{HCP-N}} \parallel (111)_{\text{FCC}}$, $[\bar{1}010]_{\text{HCP-N}} \parallel [11\bar{2}]_{\text{FCC}}$ 。如图 4(b)所示, FCC 结构通过 Shockley 不全位错的滑移相转变为 HCP 结构, 这与以往研究中的 B 型相变

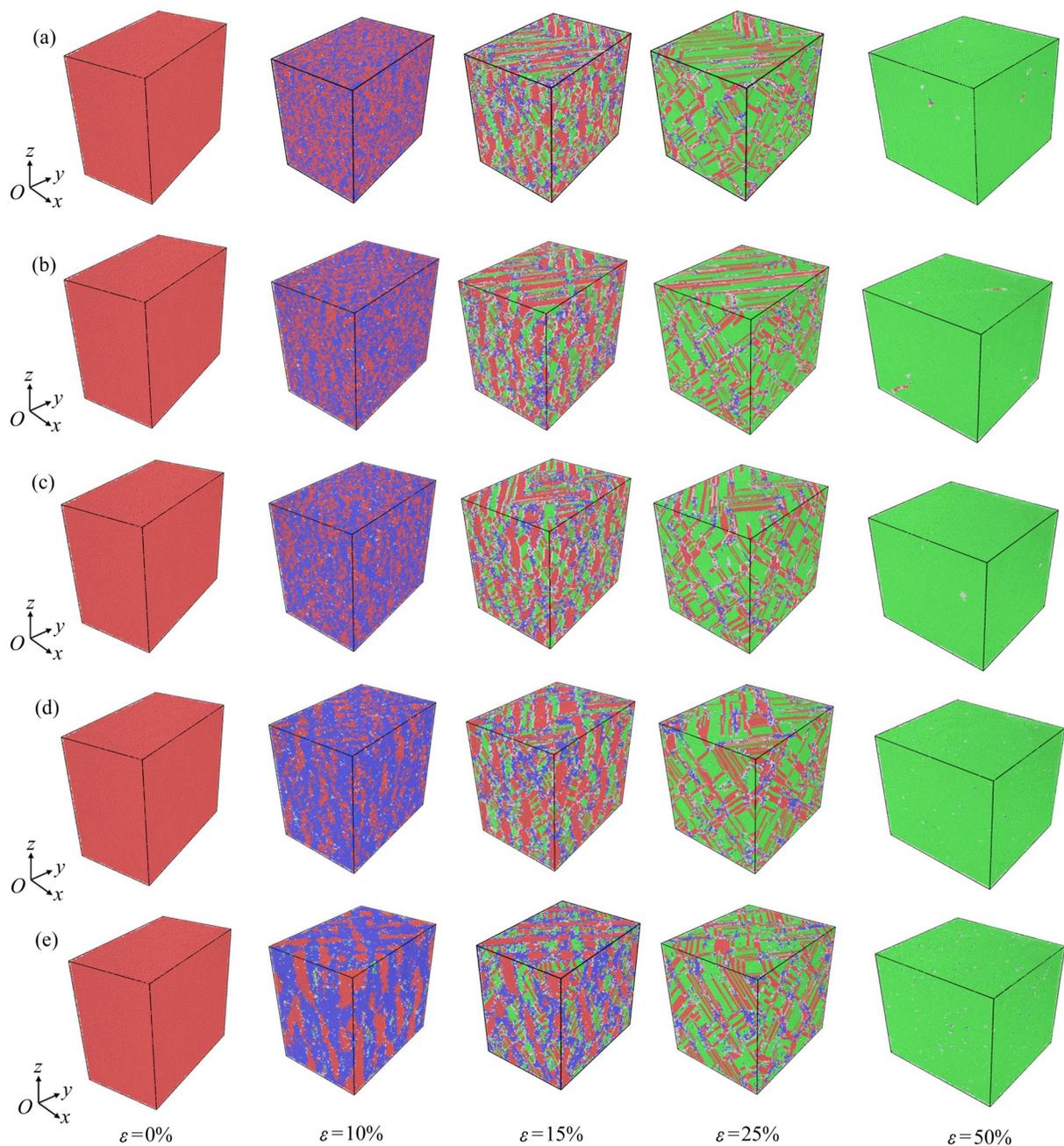


图2 不同Nb含量的ZrNb合金沿x方向拉伸变形后微观结构演变图

Fig. 2 Microstructures evolutions of ZrNb alloy without Nb contents after tensile formation along x axis (x , y and z axes of simulation cells are paralleling to $[\bar{1}2\bar{1}0]_{\text{HCP}}$, $[\bar{1}010]_{\text{HCP}}$ and $[0001]_{\text{HCP}}$ directions of HCP crystalline, respectively. red—HCP, green—FCC, blue—BCC, white—Unrecognized): (a) Zr; (b) Zr2.5Nb; (c) Zr5Nb; (d) Zr10Nb; (e) Zr15Nb

机制一致^[7,10]。

如前所述, BCC→HCP逆相变产生了晶体取向不同的两种HCP晶粒(HCP-N和HCP-M), 二者相互接触时, 呈 $\{10\bar{1}1\}$ 孪晶关系, 如图5(a)所示。图5(b)所示为通过BCC→HCP转化形成 $\{10\bar{1}1\}$ 孪晶的示意图。具体而言, 由于 $(110)_{\text{BCC}}$ 和 $(10\bar{1})_{\text{BCC}}$ 两平面之间的夹角为 120° , 因此, $(110)_{\text{BCC}}$ 的平行平面 $(0001)_{\text{HCP-M}}$

和 $(10\bar{1})_{\text{BCC}}$ 平行平面 $(0001)_{\text{HCP-N}}$ 之间的夹角也为 120° , 即HCP-M和HCP-N呈现出 $\{10\bar{1}1\}$ 孪晶关系。这种 $\{10\bar{1}1\}$ 孪晶的形成机理, 也曾出现在钛单晶变形的分子动力学模拟中^[37]。

综上所述, Zr和ZrNb合金的变形路径相似: HCP基体首先遵循PS关系相变为BCC结构, 然后沿贝恩路径发生BCC→FCC相变。同时, 出现了

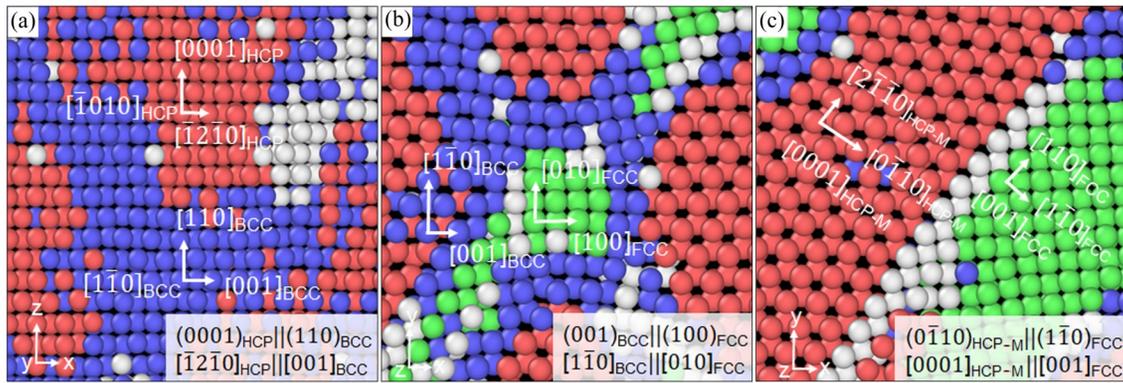


图 3 Zr2.5Nb 合金在不同应变下的相变情况

Fig. 3 Phase transition of Zr2.5Nb alloys at different strains: (a) Snapshot showing PS OR at $\epsilon=10.9\%$ with view direction perpendicular to $(\bar{1}10)_{\text{HCP}}$ plane; (b) Snapshot showing Bain OR at $\epsilon=11.5\%$ with view direction perpendicular to $(0001)_{\text{HCP}}$ plane; (c) Snapshot showing P-type relation between HCP matrix and FCC phase at $\epsilon=14\%$ with view direction perpendicular to $(0001)_{\text{HCP}}$ plane

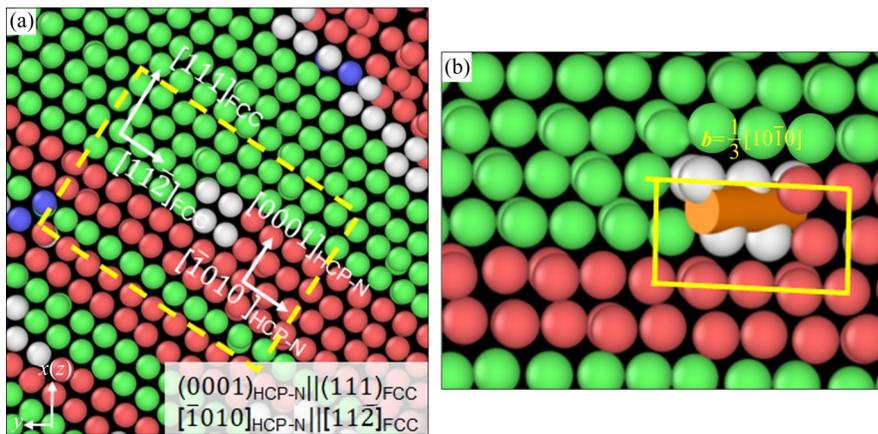


图 4 $\epsilon=20.5\%$ 时 Zr2.5Nb 新生成的 HCP(HCP-N)和 FCC 相接触形成的 B 型关系

Fig. 4 Newly formed HCP (HCP-N) and FCC grains contact and form B-type relationship in Zr2.5Nb at $\epsilon=20.5\%$ (HCP-N phase transforms into FCC phase by slip of Shockley partial dislocation $b=1/3[10\bar{1}0]$): (a) B-type relationship photo; (b) Enlarger view of yellow dashed box in Fig. 4(a)

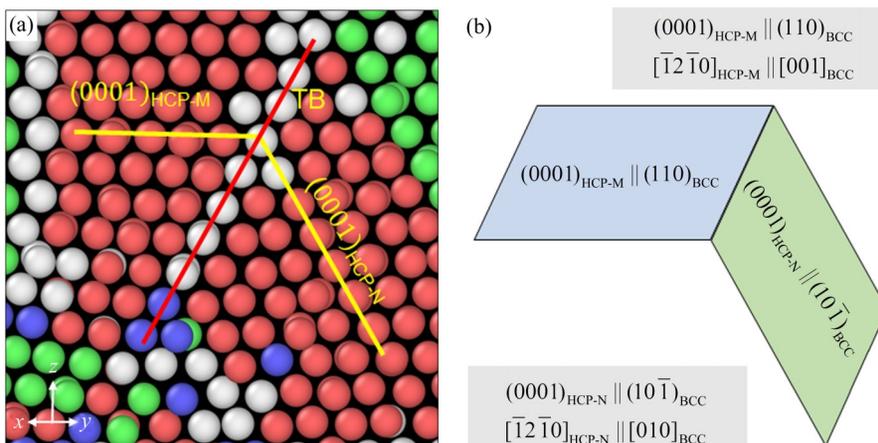


Fig. 5 $\{10\bar{1}\}$ twinning through BCC \rightarrow HCP phase transition of newly formed HCP-N and HCP-M grains in Zr2.5Nb alloys at $\epsilon=15.6\%$ (a) and schematic diagram showing formation mechanism(b)

PS 变体形式的 BCC→HCP 逆向相变。随着拉伸变形的增加, FCC/HCP-M 界面形成 P 型关系, 而 FCC/HCP-N 界面呈 B 型关系。另外, 新形成的 HCP 结构(HCP-N)和基体 HCP 呈 $\{10\bar{1}1\}$ 孪晶关系。

图 6(a)~(e)所示分别为不同 ZrNb 合金体系在拉伸变形中相组成的演变过程。其中, 图 6 中黑色虚线所对应的是 HCP 的相变点, 可以发现 Nb 含量越高, HCP→BCC 的相变发生得越早, 这是由于 Nb 为 BCC 相稳定元素^[40], Nb 的存在加快了变形诱发

的 HCP→BCC 相变。此外, 结合图 2 可知, HCP 相变为 BCC 条带, BCC 条带的含量随着 Nb 含量的增加而提高。从图 1 中 Zr 及 ZrNb 合金的晶格参数及层错能计算结果可知, 随着 Nb 含量的增加, 轴比 c/a 降低, HCP 结构中产生基面层错更加困难^[36]。另外, Zr 或其合金形成基面层错需要越过一定的能垒, 且随 Nb 含量的增加, 能垒提高, 这也进一步说明更高 Nb 含量的 ZrNb 合金中形成基面层错的难度更大。因此, HCP 相在沿 $[12\bar{1}0]_{\text{HCP}}$ 方向拉伸变形

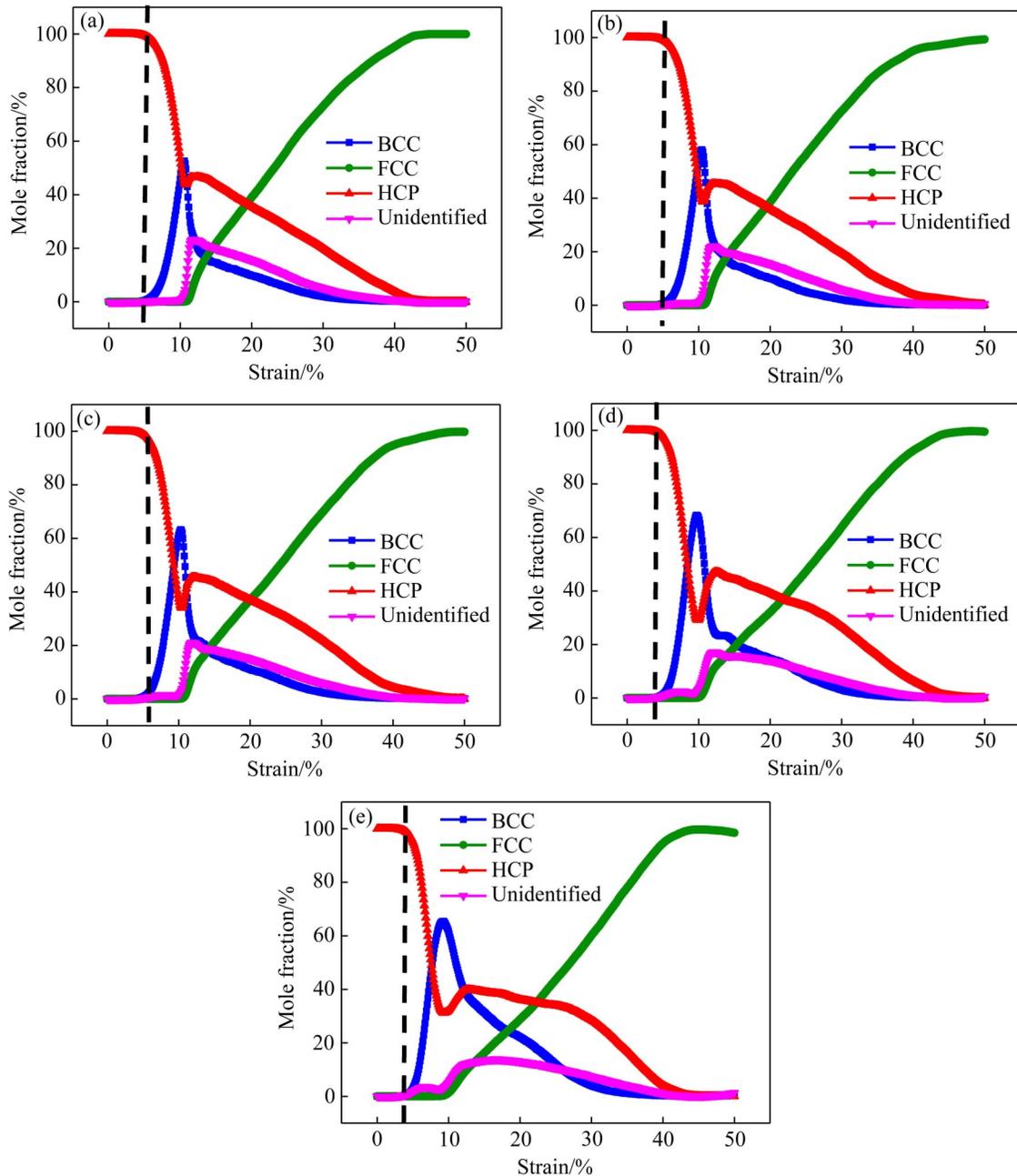


图 6 拉伸变形中不同 ZrNb 合金各相成分的变化曲线

Fig. 6 Change curves of phase in different ZrNb alloys during tensile deformation: (a) Zr; (b) Zr_{2.5}Nb; (c) Zr₅Nb; (d) Zr₁₀Nb; (e) Zr₁₅Nb

过程中优先形成 BCC 相, 而未诱发形成基面层错。

图 7 所示为不同 ZrNb 合金拉伸变形过程中各相中 Nb 的含量变化。拉伸变形初期发生 HCP→BCC 相变时, Nb 在 HCP 相中的含量大幅减少, 而在 BCC 相中的含量急剧增多, 这说明 Nb 所在的区域更容易发生 HCP→BCC 相变, 从而 Nb 在 BCC 相中含量大幅增加, 这是由于 BCC 相是元素 Nb 的稳定相, Nb 所在的区域容易发生 BCC 相的形核。随着拉伸变形的增加, 各相中 Nb 含量趋于平稳。拉伸变形后期, 除 FCC 相外, 其他相的数量都极少, 导致 Nb 在各相中的含量出现剧烈波动。

2.3 拉伸强度与塑性

为了更好地理解不同 Nb 含量的 ZrNb 合金的力学性能, 图 8 所示为不同 Nb 含量 ZrNb 合金的应力-应变曲线。在拉伸过程中, 起始阶段为弹性变形阶段, 应力基本呈线性上升。若此时撤销加载, 合金可以完全恢复到变形前的状态。结果表明, 每

条曲线的斜率略有不同, 这表明 Nb 含量会影响 ZrNb 试样的弹性模量。随着 Nb 含量的提高, 曲线斜率有略微增加, 当 Nb 含量为 2.5%(质量分数)时, 应力-应变曲线的斜率最小, 这说明 Nb 含量的增加将提高合金的弹性模量, 低 Nb 含量的 ZrNb 试样更容易变形。进入塑性变形后, ZrNb 合金应力-应变曲线由于相变产生明显的上下波动, 但 ZrNb 合金的应力-应变曲线变化趋势基本一致, 即应力随着应变先降低后逐渐升高。

当 Nb 含量为 0%、2.5% 和 5%(质量分数)时, 屈服强度分别为 4.05 GPa、3.81 GPa 和 3.53 GPa。当 Nb 含量为 10% 和 15%(质量分数)时, 合金屈服强度分别为 2.88 GPa 和 2.48 GPa。当 Nb 含量为 15%(质量分数)时, 合金具有最小的屈服应力和最低的强度。合金的屈服应力随着 Nb 含量的增加而降低, 这是由于随着 Nb 含量增加, 合金体系发生 HCP→BCC 相变的时间变早, 使得体系更早达到屈服点; 而且, 当 ZrNb 合金中 BCC 相的强度低于

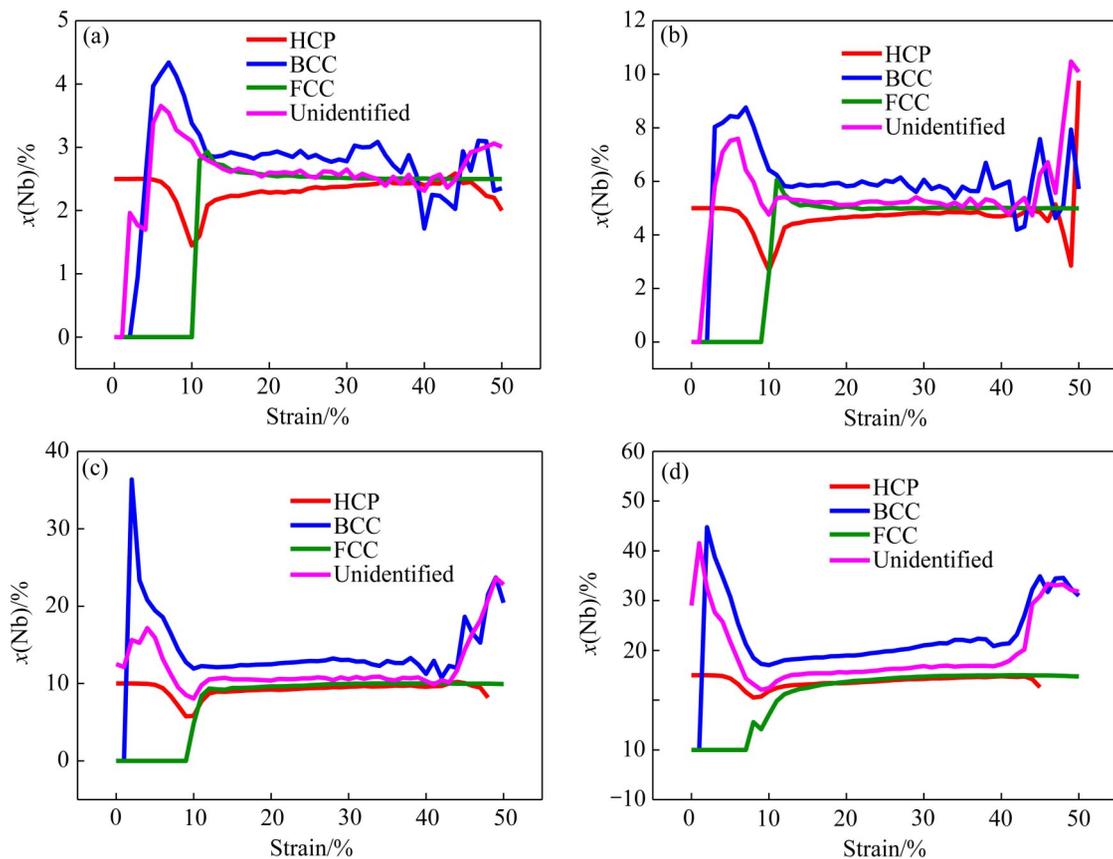


图 7 不同 ZrNb 合金拉伸变形过程中各相中 Nb 含量的变化

Fig. 7 Change of Nb content in each phase during tensile deformation of different ZrNb alloy: (a) Zr_{2.5}Nb; (b) Zr₅Nb; (c) Zr₁₀Nb; (d) Zr₁₅Nb

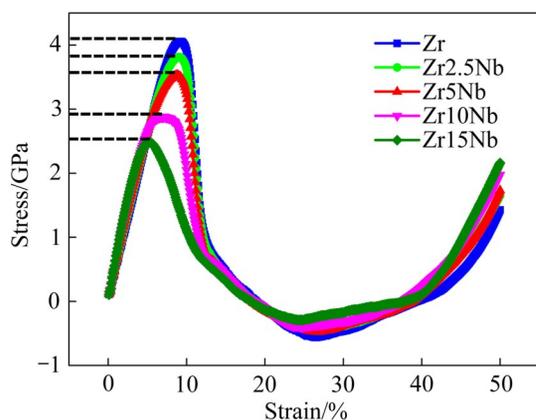


图8 不同Nb含量的ZrNb合金的应力-应变曲线

Fig. 8 Stress-strain curves of ZrNb alloy with different Nb contents

HCP相,随着Nb含量增加,体系转变为BCC相的数量更多,降低了合金的强度^[41]。

3 结论

1) 随着Nb含量的增加,ZrNb合金的晶格常数随之降低。ZrNb合金所表现的相变行为和纯锆相似。通过比较各体系产生基面层错所需越过的能垒,可以发现Zr在变形过程中最容易越过能垒形成层错。对于ZrNb合金来说,随着Nb含量的增加,形成基面层错的能垒增加,这说明Nb的加入不利于ZrNb合金中产生基面层错。

2) 随着Nb含量的增加,ZrNb合金应力-应变曲线斜率有所增加,Nb含量的增加有利于提高合金的弹性模量,低Nb含量的ZrNb合金的屈服强度较低;在较小的应变时,发生HCP、BCC以及FCC结构之间的相变,可以释放晶体内部的应力集中,从而提高低Nb含量的ZrNb合金的可塑性。

REFERENCES

[1] ROY A K, KAIPARAMBIL A V. Tensile and corrosion behavior of Zr705 for nuclear hydrogen generation[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2006, 427(1/2): 320-326.

[2] 马明亮,朱珍彪,王树军,等.国内锆合金及其铸造工艺的研究进展[J].*铸造技术*,2020,41(10):986-989.
MA Ming-liang, ZHU Zhen-biao, WANG Shu-jun, et al. Domestic research progress on zirconium alloy and its

casting process[J]. *Foundry Technology*, 2020, 41(10): 986-989.

- [3] SLATER J C. Atomic radii in crystals[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1964, 41(10): 3199-3204.
- [4] KAPOOR R, CHAKRAVARTTY J K. Characterization of hot deformation behavior of Zr2.5Nb in β phase[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2002, 306(2/3): 126-133.
- [5] JEONG Y H, KIM H G, KIM T H. Effect of β phase, precipitate and Nb-concentration in matrix on corrosion and oxide characteristics of Zr-xNb alloys[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2003, 317(1): 1-12.
- [6] ZHAO H L, SONG M, NI S, et al. Atomic-scale understanding of stress-induced phase transformation in cold-rolled Hf[J]. *Acta Materialia*, 2017, 131: 271-279.
- [7] ZHAO H L, HU X Y, SONG M, et al. Mechanisms for deformation induced hexagonal close-packed structure to face-centered cubic structure transformation in zirconium[J]. *Scripta Materialia*, 2017, 132: 63-67.
- [8] HU X Y, ZHAO H L, NI S, et al. Grain refinement and phase transition of commercial pure zirconium processed by cold rolling[J]. *Materials Characterization*, 2017, 129: 149-155.
- [9] AN X L, ZHANG H, NI S, et al. Effects of temperature and alloying content on the phase transformation and $\{10\bar{1}\bar{1}\}$ twinning in Zr during rolling[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, 41: 76-80.
- [10] ZHENG X D, GONG M Y, XIONG T, et al. Deformation induced FCC lamellae and their interaction in commercial pure Ti[J]. *Scripta Materialia*, 2019, 162: 326-330.
- [11] YANG J X, ZHAO H L, GONG H R, et al. Proposed mechanism of HCP \rightarrow FCC phase transition in titanium through first principles calculation and experiments[J]. *Scientific Reports*, 2018, 8: 1992.
- [12] WU H C, KUMAR A, WANG J, et al. Rolling-induced face centered cubic titanium in hexagonal close packed titanium at room temperature[J]. *Scientific Reports*, 2016, 6: 24370.
- [13] KASCHNER G C, TOMÉ C N, BEYERLEIN I J, et al. Role of twinning in the hardening response of zirconium during temperature reloads[J]. *Acta Materialia*, 2006, 54(11): 2887-2896.
- [14] MURTY K L, CHARIT I. Texture development and anisotropic deformation of zircaloys[J]. *Progress in Nuclear Energy*, 2006, 48(4): 325-359.
- [15] FRANCILLETTE H, BACROIX B, GASPÉRINI M, et al. Effect of initial textures on deformation mechanisms and texture evolutions of Zr- α polycrystals deformed by channel-die compression tests[J]. *Materials Science and Engineering A*, 1997, 234/235/236: 974-977.

- [16] YANG Z N, ZHANG F C, LIU F C, et al. Achieving high strength and toughness in a Zr-2.3Nb alloy by the formation of duplex microstructure[J]. *Materials & Design*, 2012, 40: 400–406.
- [17] BENITES G M, GUILLERMET A F, CUELLO G J, et al. Structural properties of metastable phases in Zr-Nb alloys: I. Neutron diffraction study and analysis of lattice parameters[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2000, 299 (1/2): 183–188.
- [18] BENITES G M, GUILLERMET A F. Structural properties of metastable phases in Zr-Nb alloys: II. Systematics of the atomic volumes and interatomic distances[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2000, 302(1/2): 192–198.
- [19] AURELIO G, GUILLERMET A F, CUELLO G J, et al. Structural properties of metastable phases in Zr-Nb alloys: III. The athermal Ω phase[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2002, 335(1/2): 132–138.
- [20] 刘欢, 郭永博, 赵鹏越, 等. 基于分子动力学模拟的金属材料纳米加工机理研究进展[J]. *中国有色金属学报*, 2019, 29(8): 1640–1653.
- LIU Huan, GUO Yong-bo, ZHAO Peng-yue, et al. Research progress on nano-machining mechanism of metallic materials based on molecular dynamics simulation[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2019, 29(8): 1640–1653.
- [21] OU X Q, SONG M. Deformation mechanisms of mechanically induced phase transformations in iron[J]. *Computational Materials Science*, 2019, 162:12–20.
- [22] ZU Q, GUO Y F, YAO X. Surface and orientation effects on stress-induced hcp-fcc phase transformation in Ti nanopillars[J]. *Applied Surface Science*, 2020, 509: 145234.
- [23] SINGH D, PARASHAR A. Atomistic simulations to study the effect of Nb precipitate on fracture properties of bi-crystalline Zr[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2019, 35(52): 355304.
- [24] 李源才, 江五贵, 周宇. 单晶/多晶镍复合体剪切过程分子动力学模拟[J]. *中国有色金属学报*, 2020, 30(8): 1837–1845.
- LI Yuan-cai, JIANG Wu-gui, ZHOU Yu. Molecular dynamics simulation on shear mechanical properties of single crystal/polycrystalline Ni composites[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2020, 30(8): 1837–1845.
- [25] GONG Y D, ZHU Z X, ZHOU Y G, et al. Research on the nanometric machining of a single crystal nickel via molecular dynamics simulation[J]. *Science China Technological Sciences*, 2016, 59(12): 1837–1846.
- [26] SUN B, OUYANG W Z, REN J J, et al. FCC→BCC→HCP successive phase transformations in the strained ultrathin copper film: A molecular dynamic simulation study[J]. *Materials Chemistry and Physics*, 2019, 223: 171–182.
- [27] TANG F, JIAN Z Y, XIAO S F, et al. Molecular dynamics simulation of cylindrically converging shock response in single crystal Cu[J]. *Computational Materials Science*, 2020, 183: 109845.
- [28] 刘晓波, 熊震, 方洲, 等. Al₂Cu拉伸变形的分子动力学模拟[J]. *中国有色金属学报*, 2018, 28(9): 1746–1754.
- LIU Xiao-bo, XIONG Zhen, FANG Zhou, et al. Molecular dynamics simulation of tensile deformation of Al₂Cu[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2018, 28(9): 1746–1754.
- [29] SMIRNOVA D E, STARIKOV S V. An interatomic potential for simulation of Zr-Nb system[J]. *Computational Materials Science*, 2017, 129: 259–272.
- [30] STUKOWSKI A. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2012, 20(4): 045021.
- [31] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—The open visualization tool[J]. *Modelling & Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, 18(1): 015012.
- [32] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1–19.
- [33] ANDRIC P, YIN B L, CURTIN W A. Stress-dependence of generalized stacking fault energies[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2019, 122: 262–279.
- [34] YOO M H. Slip, twinning, and fracture in hexagonal close-packed metals[J]. *Metallurgical Transactions A*, 1981, 12(3): 409–418.
- [35] 杨志南. 变形Zr-Nb合金组织与性能调控研究[D]. 秦皇岛: 燕山大学, 2013.
- YANG Zhi-nan. Investigation on the control of microstructure and mechanical properties of deformed Zr-Nb alloy[D]. Qinhuangdao: Yanshan University, 2013.
- [36] HIRTH J P, LOTHE J. *Theory of dislocations*[M]. New York: John Wiley & Sons, 1982.
- [37] ZHANG H, OU X Q, WEI B Q, et al. Strain direction dependency of deformation mechanisms in an HCP-Ti crystalline by molecular dynamics simulations[J]. *Computational Materials Science*, 2020, 172: 109328.
- [38] MATSUKAWA Y, OKUMA I, MUTA H, et al. Crystallographic analysis on atomic-plane parallelisms between bcc precipitates and hcp matrix in recrystallized Zr-

- 2.5Nb alloys[J]. *Acta Materialia*, 2017, 126: 86–101.
- [39] SANDOVAL L, URBASSEK H M, ENTEL P. The Bain versus Nishiyama-Wassermann path in the martensitic transformation of Fe[J]. *New Journal of Physics*, 2009, 11(10): 103027.
- [40] ACKERMANN O, GARG S P, RAUH E G. High-temperature phase diagram for the system Zr[J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2010, 60(7/8): 341–345.
- [41] PAN R J, TANG A T, WANG Y R, et al. Effects of alloying elements (Sn, Fe, Cr, Nb) on mechanical properties of zirconium: Generalized stacking-fault energies from first-principles calculations[J]. *Computational Condensed Matter*, 2017, 10: 22–24.
- [40] ACKERMANN O, GARG S P, RAUH E G. High-temperature phase diagram for the system Zr[J]. *Journal of*

Molecular dynamics simulation of ZrNb alloy during tensile deformation

AN Ke-ying, OU Xiao-qin, SONG Min

(State Key Laboratory of Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: In this paper, the molecular dynamics simulation was used to study the influence of niobium content on the tensile deformation behavior of ZrNb alloys. The results show that the phase transformation behavior of ZrNb alloys with different Nb contents during uniaxial tensile deformation is similar to that of pure zirconium. Externally applied loading induces the hexagonal close-packed (HCP) to body-centered cubic (BCC) phase transition following the Pitsch-Schrader (PS) orientation relationship (OR). Then, the face-centered cubic (FCC) structure transforms from the BCC phase in the Bain path. By calculating the basal stacking fault energy of different ZrNb alloy systems, it is found that the energy barrier for forming basal stacking faults increases with the increasing Nb content. Therefore, it is more difficult for the generation of basal stacking faults in ZrNb alloys with a higher Nb content. With the increase of Nb content, the slope of the ZrNb alloys' stress-strain curve increases slightly and thus the elastic modulus increases, while the yield strength of the alloy gradually decrease. This study may provide a better understanding of the deformation mechanism of zirconium-niobium alloys.

Key words: ZrNb alloy; deformation mechanism; molecular dynamics simulation

Foundation item: Projects(51901248, 51828102) supported by the National Natural Science Foundation of China

Received date: 2021-07-22; **Accepted date:** 2022-03-28

Corresponding author: OU Xiao-qin; Tel: +86-13667339046; E-mail: Xiaoqin.Ouyang@csu.edu.cn

(编辑 李艳红)