

钛单晶纳米柱拉压不对称性的分子动力学模拟

李 萍, 储 潜, 严思梁, 纪小虎, 薛克敏

(合肥工业大学, 安徽 合肥 230009)

摘 要: 基于分子动力学模拟, 通过研究钛单晶纳米柱在拉伸和压缩下的力学响应特征及晶体结构演化行为, 揭示其塑性变形机制。结果表明, 沿[0001]晶向拉伸条件下, 主要塑性变形机制为伴生的 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶和基面层错; 而沿[0001]晶向压缩条件下, 基面 $\langle a \rangle$ 位错作为优先形核的缺陷参与到塑性变形过程, 随后锥面 $\langle c+a \rangle$ 位错出现并协调了轴向和横向变形, 压缩条件下无孪晶产生。拉伸模拟过程中, 观察到一种有别于传统孪生的晶体再取向现象, 其孪晶与基体间呈现基面/柱面对应关系。

关键词: 分子动力学; 钛单晶; 晶体再取向; 孪生; 位错

中图分类号: TG113.25⁺3

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2019)06-1835-06

钛及其合金因具有优良的耐蚀性、抗疲劳性和高比强度, 被广泛应用于航空航天、军事工业、车辆工程等领域^[1]。近年来, 随着大塑性变形技术的发展, 各国学者已成功制备出纳米级晶粒度的钛材, 进一步拓展了该类材料的强度极限^[2,3]。但由于纯钛在变形过程中力学响应较为复杂, 存在拉压不对称性等特征行为^[4,5]; Xiaoli Zhang^[4]、陶智君^[5]等人通过拉伸和压缩试验结合拉压变形特性阐明了商业纯钛的拉伸塑性变形机理主要是滑移, 压缩塑性变形机理主要为滑移-孪生-滑移。然而, 以上工作多集中于常规微米多晶纯钛材料, 研究中发现的拉压不对称性是否适用于纳米单晶纯钛材料目前尚无定论。且对于纳米材料, 通过实验手段很难深入了解其塑性变形的多尺度力学行为。而分子动力学模拟技术可直接对微观结构演化全过程进行实时观测, 从而成为分析纳米钛宏观变形行为及机理的有力工具。

在钛晶体材料塑性变形微观行为及建模仿真方面, 各国学者已应用分子动力学方法进行了大量研究。2014 年, Ren 等人^[6]采用分子动力学方法模拟了钛单晶纳米柱(11 nm×11 nm×22 nm) 在 300 K 温度和 10^8 s^{-1} 的应变速率下沿[0001]晶向的拉伸行为。结果表明, 在塑性变形初期产生 $\{10\bar{1}2\}$ 拉伸孪晶, 随着进一步加载, 由于尺度效应导致拉伸孪晶阻塞, 肖克莱不全位错增殖, 故出现了罕见的 hcp→fcc 相变。2017 年, 该课题组^[7]进一步研究了温度和应变速率对变形诱导相变的影响: 在 450 K 变形初期有两个孪晶形核点, 随后 2 个孪生变体合并而肖克莱不全位错没有被激活;

当应变率为 $5 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 时, 孪生变形后塑性变形机制由相变转成位错滑移; 而当应变率达 10^9 s^{-1} 时, 出现 2 个孪生变体且纳米柱沿着孪晶界断裂。Chang 等^[8,9]分析了钛单晶纳米线(2.95 nm×5.11 nm×28.91 nm)在不同应变速率和不同晶粒取向下的拉伸性能。当应变率达到 10^{10} s^{-1} 时, 由 hcp 晶体结构向非晶转变引起了钛纳米线的超塑性。当应变速率低于 10^{10} s^{-1} 时, 拉伸变形机制与晶粒取向有很大关联: 沿 $[11\bar{2}0]$ 晶向拉伸时首先产生 $\{10\bar{1}1\}$ 压缩孪晶, 随即在孪生区域发生相变, 相较其他两类取向晶粒, 沿此晶向加载时纳米线具有更好的塑性且与应变率无关; 沿 $[\bar{1}100]$ 晶向拉伸时, 纳米线在 10^8 s^{-1} 的应变率下, 主要塑性变形方式是柱面 $\langle a \rangle$ 滑移, 而随着应变率增加则有更多滑移系被激活; 沿[0001]晶向拉伸时, $\{10\bar{1}2\}$ 拉伸孪晶是主要塑性变形方式, 且对应变率最为敏感, 初始的孪晶形核点与应变率成正比, 饱和的孪晶体积分数则随着应变率增加而减少。然而, 上述研究大多针对单一变形模式, 针对拉-压变形条件下多机制控制的纳米钛不对称变形行为的研究鲜见报道。

本研究通过基于 LAMMPS 软件平台^[10]的分子动力学模拟, 研究钛纳米柱在拉伸和压缩过程中的力学性能和微观结构的演化, 结合应力-应变曲线和 OVITO 可视化软件^[11], 分析不同加载状态下材料各个变形阶段的力学行为, 并揭示其内在变形机理。

1 模拟方法

收稿日期: 2018-06-16

基金项目: 国家自然科学基金(51675154)

作者简介: 李 萍, 女, 1973 年生, 博士, 教授, 合肥工业大学材料学院, 安徽 合肥 230009, 电话: 0551-62901368, E-mail: li_ping@hfut.edu.cn

1.1 计算模型

纯钛在室温下为 hcp 晶体结构, 见图 1, X、Y、Z 坐标轴分别对应 $[\bar{1}\bar{1}20]$ 、 $[1\bar{1}00]$ 、 $[0001]$ 方向, 大小为 $15\text{ nm}\times 15\text{ nm}\times 30\text{ nm}$, 共有 384 355 个原子, 采用三向自由边界条件(SSS), 时间步长取 0.001 ps 。固定距模型上下边界 2.5 nm 范围内的原子为边界层, 彼此之间无相对位移, 在外载荷的作用下整体运动。模拟分为 2 个步骤, 首先对初始结构在 300 K 的室温下弛豫 10 000 步, 使得表面处于不平衡状态而偏离理想点阵位置的原子达到能量稳定状态; 充分弛豫后在 NVT 系综(恒定的粒子数、体积和温度)下, 利用 Nose-Hover 控温方法^[12], 保持在等温条件下沿 Z 轴对纳米柱均匀拉伸/压缩。拉伸过程对上边界层原子沿 Z 轴正方向施加 0.025 nm 的位移, 压缩过程对下边界层原子沿 Z 轴正方向施加 0.025 nm 的位移, 然后弛豫 10 000 步。重复此拉伸/压缩、弛豫过程, 直至拉伸应变达到 0.7 (压缩应变达到 0.35)。其中每 10 000 步记录 1 次原子信息, 并输出 1 次全局热力学数据, 且统计 1 次应力-应变曲线, 然后对应力-应变曲线、晶体结构等模拟结果进行分析讨论。

1.2 势函数

分子动力学模拟中, 用同一材料研究不同内容, 比如裂纹扩展或位错运动, 应使用不同的势函数。本文采用 Ackland^[13]等通过实验数据和第一性原理计算得到的 EAM 势。EAM 势的基本思想是把晶体的总势能分成两部分, 一部分是位于晶格点阵上的原子核之间相互作用的对势, 另一部分是原子核镶嵌在电子云背景中的嵌入能, 它代表多体相互作用。

在嵌入原子法中, 系统的总势能表示为:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \Phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i) \quad (1)$$

式中, 第 1 项是对势能, 根据需要可以取不同的形式; 第 2 项是嵌入能, ρ_i 是除第 i 个原子以外的其它所有

原子的核外电子在第 i 个原子处产生的电子云密度之和, 可以表示为:

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \quad (2)$$

$\rho_j(r_{ij})$ 是第 j 个原子的核外电子在第 i 个原子处贡献的电荷密度, r_{ij} 是第 i 个原子与第 j 个原子之间的距离。对于不同的金属, 嵌入能函数和对势函数需要通过拟合金属的宏观参数来确定。

Ackland 等在此基础上通过拟合金属的弹性常数、点阵常数、空位形成能、聚合能及压强体积关系给出 Ti 的多体势函数。其中(1)式中的多体项及对势项分别为:

$$\rho_i(r_{ij}) = \sum_{k=1}^2 A_k (R_k - r_{ij})^3 H(R_k - r_{ij}) \quad (3)$$

$$\Phi_{ij}(r_{ij}) = \sum_{k=1}^6 a_k (r_k - r_{ij})^3 H(r_k - r_{ij}) \quad (4)$$

$$H(x) = \begin{cases} 0, & x > 0 \\ 1, & x < 0 \end{cases} \quad (5)$$

式中: A_k, R_k, a_k, r_k 为常数, 并有 $R_1 > R_2, r_1 > r_2 > \dots > r_6$, 它们的值随金属物质不同有所不同。图 2 为本文中所采用 EAM 势的对势能曲线、电子密度曲线和嵌入能曲线, 描述了势能的多体性质。

2 结果与讨论

2.1 拉伸过程分析

图 3 是模拟获得的单晶 Ti 拉伸过程的工程应力-应变曲线。可见在拉伸变形初期, 应力随着应变的增加而线性增大。在此段变形区间, 模型均匀伸长, 原子构型保持规则排列, 说明在轴向位移载荷的作用下材料首先发生弹性变形。直至屈服应力达 4.55 GPa 后陡然下降至某一谷值, 开始发生塑性变形。

图 4 所示为钛单晶纳米柱在 $[0001]$ 晶向拉伸作用下原子结构在 $(\bar{1}\bar{1}20)$ 晶面的的演化过程, 采用 CNA^[14] 方法对原子进行着色。图中红色原子代表 hcp 密排六方晶格原子, 绿色原子代表 fcc 结构的层错, 灰色原子代表表面原子及位错、空位等缺陷。当变形量达到 3.98% 后材料进入塑性变形阶段, 在 $(1\bar{1}00)$ 表面与 $(\bar{1}\bar{1}20)$ 表面的交界处发生局部晶体转向, 即孪生变形, 如图 4a 所示。从图 4b 可以看到, 当变形量为 4.06% 时, 孪晶贯穿整个横截面, 孪晶与基体界面的局部放大图用黑色矩形框标出; 当变形量达到 9.62% 时, 孪晶占据整个模型的可移动区, 此过程中由界面迁移主导生长。加载到 66.85% 时, 在模型中出现类似于宏观拉伸的颈缩现象, 如图 4d 所示。此后, 颈缩现象更明显。变形主要集中在颈缩部位, 其它部分原子位置基本不变, 颈缩区域不断被拉长, 截面不断减小。

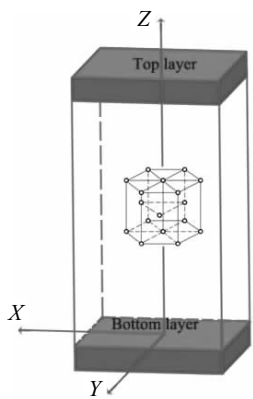


图 1 钛单晶纳米柱模型

Fig.1 Simulation model for titanium nano-pillars

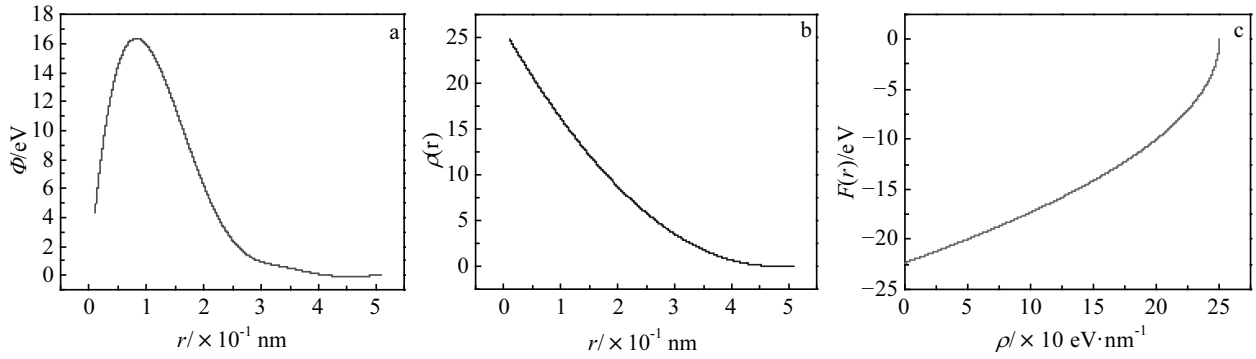


图 2 EAM 势能函数变化曲线：(a) 对势能函数；(b) 电子密度函数；(c) 嵌入能函数

Fig.2 Variation curves of EAM potential energy function: (a) pair potential function; (b) electron density function; (c) embedding energy function

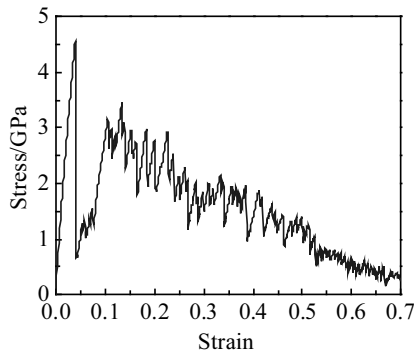


图 3 拉伸过程中的应力-应变曲线

Fig.3 Typical stress-strain curves subjected to uniaxial tension

孪晶是由于原子重新排列而形成的一种特殊的旋转变形方式。孪晶的特征是存在共格界面，将孪晶区域和基体区域分开，且这个界面与基面的角度呈固定值，这是由材料晶体结构的对称性决定的^[15]。在纯钛晶体中，最常出现的变形孪晶即为(1102)拉伸孪晶和(1122)压缩孪晶^[15-17]。在同一平面内选取分别位于基体和孪晶 *c* 轴的 2 组原子形成 2 个向量 *a* 和 *b*，如图 4e 中所标示，通过 OVITO 计算 2 组向量夹角为 84.7°。图 5a 所示为钛单晶晶胞结构图， θ 为(0001)基面与(1102)孪晶面之间的夹角：

$$\tan \theta = \frac{c}{\sqrt{3}a} \tag{6}$$

式中，*a* 为密排六方晶胞底面的边长，*c* 为上下底面的间距。计算得出 θ 的值为 85°，与模拟结果符合，故确定为 {1102} 拉伸孪晶。然而，通过局部放大图可以看到，{1102} 孪晶界除了 {1102} 孪晶面，还存在基面/柱面(basal/prismatic, B/P)与柱面/基面(prismatic/basal, P/B)交替的折面，即在界面处孪晶基面对应基体柱面、

基体基面对应孪晶柱面的取向关系。2015 年，Tu 等^[18]在研究钛、钴和 AZ31 镁中的形变孪晶过程中，也观察到了此类不规则界面。由图 4f 可知，颈缩形貌是二次孪生引起微观局部化变形导致的，且该区域内孔洞已发生聚集和长大，形成横贯试样中截面的裂纹，表明已发生了宏观断裂。

上述复杂的微观变形行为与图 3 所示的材料宏观力学响应特征存在显著的内在关联性。对于 hcp 金属，可启动的滑移系较少，某些外载条件下滑移难以发生。然而，因 hcp 金属孪生应变 *S* 比较低，而孪生引起的应变能和 *S*² 成正比，所以六方晶系孪生较容易。孪生行为可以改变局部晶体取向，故可同时协调横向和纵向的应变，促进变形的持续进行。孪生经常在高应力集中处形核，孪晶形核所需要的应力远比使孪晶长大要大，因而从图 3 应力-应变曲线中可观察到当出现孪生时应力-应变曲线会有突然下降，体现在应力-应变曲线上为锯齿状的起伏。这是由于孪晶的形成会伴随着一定的应力松弛，从而在应力-应变曲线上产生相应的起伏。

为进一步了解孪生过程中原子的运动规律，需进一步通过(1102)面原子排列的观测深入分析 hcp-Ti 的孪生几何特征。图 5b、5c 揭示了钛单晶在孪生过程中从[0001]取向到[1100]取向的变形机制。其中实线表示没有发生孪生的基体原子排列，虚线表示已发生孪生区域的原子排列。根据式(6)计算出 θ 的值为 85°，接近 90°。标示的 4 种颜色代表具有不同位移方式的 4 类原子，如图 5b 中箭头所示。同时，沿[1101]晶向的切应力使晶粒发生整体的微小变形：

$$\varepsilon_{zz} = \frac{\sqrt{3}a - c}{c} = 0.09 \tag{7}$$

根据式(7)计算出沿[0001]晶向的应变 $\varepsilon_{zz} = 0.09$ ，同理可得沿[1100]晶向的应变 $\varepsilon_{yy} = -0.09$ 。需要注意的是，

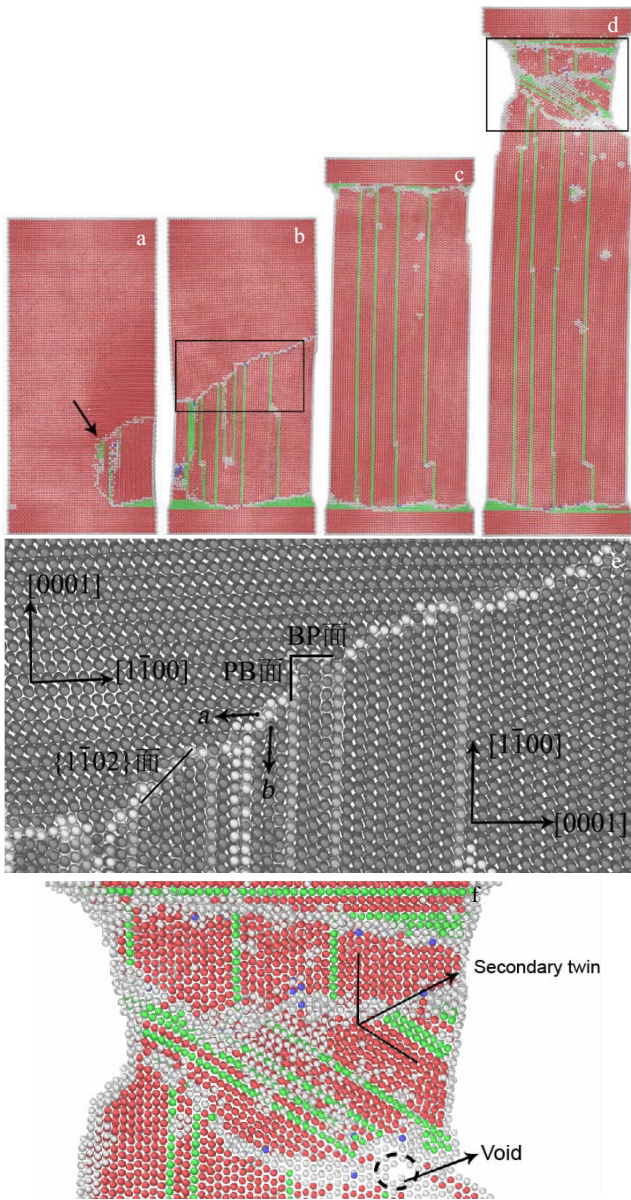


图 4 钛单晶纳米柱拉伸变形不同阶段 $[1\bar{1}\bar{2}0]$ 晶向原子排列图
 Fig.4 Schematic diagram of atoms arrangement along the $[1\bar{1}\bar{2}0]$ direction on the single-crystal titanium pillar under tension loading of $\epsilon=3.98\%$ (a), $\epsilon=4.06\%$ (b), $\epsilon=9.62\%$ (c), and $\epsilon=66.85\%$ (d); a close-up of the boundary marked by a rectangle in Fig.4b (e), and a close-up of the necking marked by a rectangle in Fig.4d (f)

文中提到的局部晶体转向是由于原子发生了重排和切变所造成的, Zong 等^[19]在研究纯钛沿 a 轴冲击加载变形时也观察到该类晶体转向的现象。

2.2 压缩过程分析

图 6 为单晶 Ti 压缩过程中的应力-应变曲线。与其拉伸状态下的变形方式类似, 整个过程表现为弹性变形和塑性变形, 但压缩变形时的屈服应力(7.33 GPa)

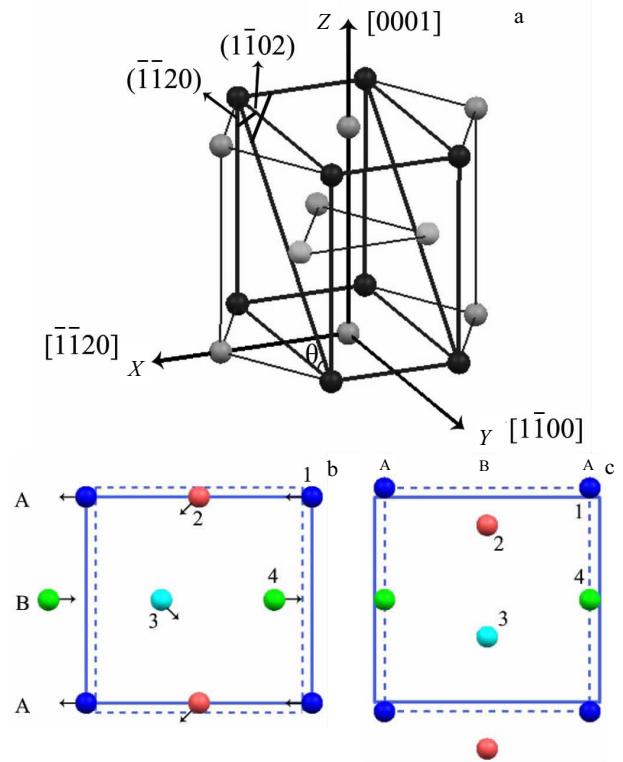


图 5 局部晶体转向的示意图: 钛单晶晶胞结构; 晶体转向前的 $(1\bar{1}\bar{2}0)$ 面原子排列; 晶体转向后的 $(1\bar{1}\bar{2}0)$ 面原子排列

Fig.5 Lattice structure of titanium single crystal (a), schematic illustration of the reorientation mechanism from (b) to (c) in the $(1\bar{1}\bar{2}0)$ plane

明显大于拉伸变形时的屈服应力(4.55 GPa)。由于单晶纳米柱尺寸限制, 位错形核后易于滑出表面, 且没有位错塞积源, 导致位错不能充分积累, 因而没有产生加工硬化现象。王欣等^[20]在模拟单晶 Cu 纳米线拉伸和压缩变形时也没有观察到屈服应力升高的现象。

图 7 为压缩过程的原子缺陷图。为方便观察纳米柱内部的结构演化, 不显示密排六方晶格原子。当应变为 3.81%时, 因应力在纳米柱棱边处集中, 如图 7a 中椭圆框标识, 锥面不全位错作为优先形核的缺陷参与到初始塑性变形过程; 加载到 3.89%时, 不同的滑移系启动, 在纳米柱中部位错交割, 引起屈服应力的升高。当应变达到 4.06%时, 观察到锥面 $\langle c+a \rangle$ 滑移系启动, 其柏氏矢量为 $1/3[1\bar{2}13]$ 。锥面滑移系的启动有效协调了横向和纵向的变形; 且在晶体部分区域出现层错, 局部位错滑移易终止在层错面处, 于是在层错区与完美晶体的交界处就会出现不全位错。像这样 2 个不全位错之间夹有 1 个层错的位错组态称为“扩展位错”。原子层切变引起的强应力场使 hcp 的堆垛顺序

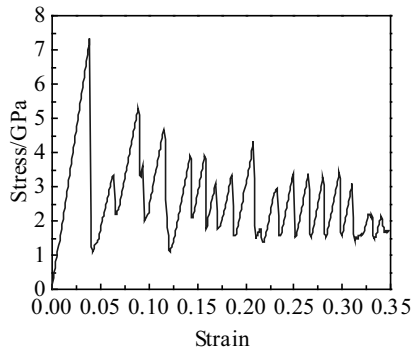


图 6 压缩过程中的应力-应变曲线

Fig.6 Typical stress-strain curves subjected to uniaxial compression

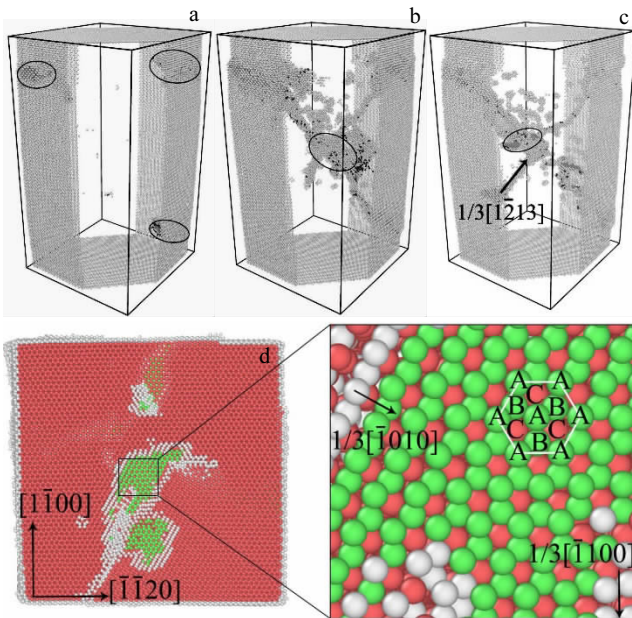


图 7 钛单晶纳米柱压缩变形不同阶段原子缺陷三维图

Fig.7 Three-dimensional view of the dislocation and stacking faults on the single-crystal titanium pillar under compression strain of $\epsilon=3.81\%$ (a), $\epsilon=3.89\%$ (b), and $\epsilon=4.06\%$ (c); (d) atomic configuration view from [0001] direction

发生改变，如图 7d 局部放大图所示，由 ABABAB... 变成 ABCABC... 顺序，形成部分 fcc 结构。这种堆垛层错的形成可以降低总体应力，故图 7b 的位错交割处演变成了图 7c 中多原子层 fcc 结构的过渡态。张斌等^[21]在模拟 Ti-Al 合金的 bcc→hcp 相变中也观察到了 fcc 结构的出现，并认为这是由相变应力引起的。Hong 等^[22]在商业纯钛的低温通道模压缩中，亦发现了应力诱导的 hcp→fcc 相变，证实了此类相变的可实现性。

在商业纯钛的压缩试验中，{112̄2} 压缩孪晶为重

要的塑性变形方式^[23,24]。Yu^[25]等对不同尺寸的钛合金单晶沿[0001]晶向进行微压缩或原位纳米压缩，发现在 hcp 金属中变形孪晶存在显著的尺寸效应： $d>1.0 \mu\text{m}$ 的样品中均观察到 {112̄2} 压缩孪晶，而当样品尺寸减小到 $1.0 \mu\text{m}$ 时，位错滑移代替孪生发生塑性变形。本文中钛纳米单晶沿 c 轴压缩的模拟中没有观察到孪晶，认为其与变形孪晶的尺寸效应有关。

2.3 拉压不对称行为的机理分析

比较图 3 与图 6 可见，压缩时纳米柱的屈服应力显著高于拉伸时的屈服应力。这主要与塑性变形初始阶段的控制机制有关。在拉伸变形下，孪生是塑性变形的启动机制，由图 4a 可知，孪生的形核点有且只有一个；在压缩变形下，初始的屈服是由锥面不全位错的形核和扩展所致的，但多个滑移系同时启动，如图 7a 所示，即塑性变形的启动需要多个滑移系同时达到临界分切应力。故压缩屈服强度会高于拉伸屈服强度。另一方面，材料塑性变形阶段的流动应力也存在拉压不对称性。在拉伸载荷作用下，孪生作为初始塑性变形机制会随着应变的增加而不断长大，使得纳米柱内部大量晶格发生局部转向，如图 4c 所示。此时，在孪生区，新的 c 轴方向与加载方向不再平行，使基面滑移成为可能。而在压缩的整个塑性变形过程中，最主要的变形机制始终是锥面位错滑移。由于基面滑移是密排六方结构中最容易启动的滑移系，相较锥面滑移，它具有最低的临界分切应力。因此，压缩时流动应力仍高于拉伸时。

3 结 论

1) 当沿 [0001] 晶向拉伸时，在 $(1\bar{1}00)$ 表面与 $(\bar{1}\bar{1}20)$ 表面的交界处局部晶体发生转向，主导塑性变形，颈缩发生在二次孪生区，随后出现孔洞，形成贯穿试样中截面的裂纹，表明已发生了宏观断裂。

2) 当沿 [0001] 晶向压缩时，锥面不全位错作为优先形核的缺陷参与到初始塑性变形过程，且有锥面位错 $\langle c+a \rangle$ 来协调纵向和横向的应变，在压缩模拟中没有孪晶产生。

3) 在拉伸模拟过程中观察到一种特殊的晶体再取向现象，即 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶界除了 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶面，还存在基面/柱面 (basal/prismatic, B/P) 与柱面/基面 (prismatic/basal, P/B) 交替的折面，有别于传统孪晶界的形式。

4) 压缩时材料的屈服应力远大于拉伸时，这种不对称性主要是由于两种加载条件下初始的变形机制不同所引起。且压缩时材料的流动应力也大于拉伸时，这是因为拉伸变形时，发生孪生变形的转向晶体中，新的 c 轴方向与加载方向不再平行，使基面滑移成为可能。

参考文献 References

- [1] Leyens C, Peters M. *Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications*[M]. New York: Wiley, 2003: 25
- [2] Xue Kemin(薛克敏), Sun Jianhui(孙建辉), Ji Xiaohu(纪小虎) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(4): 1189
- [3] Ashida M, Chen P, Doi H et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2015, 640(29): 449
- [4] Zhang Xiaoli, Yang He, Li Heng et al. *Transaction of Non-ferrous Metals Society of China*[J], 2014, 24(10): 3257
- [5] Tao Zhijun(陶智君), Yang He(杨合), Li Heng(李恒) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2017, 46(9): 2471
- [6] Ren Junqiang, Sun Qiaoyan, Sun Jun et al. *Computational Materials Science*[J], 2014, 92: 8
- [7] Ren Junqiang, Sun Qiaoyan, Sun Jun et al. *Computational Materials Science*[J], 2017, 126: 66
- [8] Chang Le, Zhou Changyu, He Xiaohua et al. *Computational Materials Science*[J], 2017, 128: 348
- [9] Chang Le, Zhou Changyu, He Xiaohua et al. *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2018, 34(5): 864
- [10] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1
- [11] Stukowski A. *Modelling and Simulation Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18: 15 012
- [12] Nosé S. *The Journal of Chemical Physics*[J], 1984, 81(1): 511
- [13] Ackland G J. *Philosophical Magazine A*[J], 1992, 66(6): 917
- [14] Honeycutt J D, Andersen H C. *The Journal of Physical Chemistry*[J], 1987, 91(19): 4950
- [15] Christian J W, Mahajan S. *Progress in Materials Science*[J], 1995, 39(1-2): 1
- [16] Chun Y B, Yu S H, Semiatin S L et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2005, 398(1-2): 209
- [17] Wang L, Yang Y, Eisenlohr P et al. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2010, 41: 421
- [18] Tu J, Zhang X Y, Zhou Z M et al. *Materials Characterization* [J], 2015, 110: 39
- [19] Zong Hongxiang, Lookman Turab, Ding Xiangdong et al. *Acta Materialia*[J], 2014, 65: 10
- [20] Wang Xin(王欣). *MD Study on Work-hardening of Single Crystal Nano-wire* (单晶 Cu 纳米线加工硬化现象的分子动力学研究)[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2008
- [21] Zhang Bin(张斌), Zhang Xiaoyong(张晓泳), Li Chao(李超) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(6): 1010
- [22] Hong D H, Lee T W, Lim S H et al. *Scripta Materialia*[J], 2013, 69(5): 10
- [23] Guo Y, Schwiedrzik J, Michler J et al. *Acta Materialia*[J], 2016, 120: 292
- [24] Xu Shun, Toth Laszlo S, Schuman Christophe et al. *Acta Materialia*[J], 2017, 124: 59
- [25] Yu Qian, Shan Zhiwei, Li Ju et al. *Nature*[J], 2010, 463: 335

Unsymmetry of Tension and Compression in Titanium Single-crystal Nanopillars Based on Molecular Dynamics Simulation

Li Ping, Chu Qian, Yan Siliang, Ji Xiaohu, Xue Kemin
(Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract: The plastic deformation mechanisms of the titanium single-crystal nanopillars under both tension and compression were studied with the molecular dynamics simulation method. In this work, the research focuses on two aspects around the microscopic deformation mechanisms: stress-strain analysis and the evolution of atomistic configuration. The results indicate that the $\{10\bar{1}2\}$ twinning and stacking fault dominate the tension deformation along the $[0001]$ direction. The $\langle a \rangle$ slip is the principal factor leading to the initial yielding and then the $\langle c+a \rangle$ pyramidal slip occurs to coordinate both vertical and horizontal strains for the compression condition along the $[0001]$ direction. Additionally, no twinning is found in compression. Besides the conventional $\{10\bar{1}2\}$ plane, semi-coherent basal-prismatic interfaces between parent and reoriented crystal are also observed under tensile loading.

Key words: molecular dynamics; titanium single-crystal; reoriented crystal; twinning; dislocation

Corresponding author: Xue Kemin, Ph. D., Professor, School of Material Science and Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, P. R. China, Tel: 0086-551-62905110, E-mail: xuekm0721@sina.com