

单晶钛变形机制的分子动力学研究

牛 勇¹, 贾云杰¹, 王耀奇², 朱艳春¹, 张宗元³

(1. 太原科技大学 机械工程学院, 山西 太原 030024)

(2. 中国航空制造技术研究院, 北京 100024)

(3. 中国重型机械研究院股份公司, 陕西 西安 710072)

摘 要: 采用分子动力学模拟方法研究了单晶钛的变形机制, 研究温度为 500~1000 K, 应变率为 0.001~0.01 ps⁻¹, 加载方式为拉伸和压缩, 对结果进行了应力-应变分析、势能分析、共近邻分析和位错密度分析。结果表明, 随温度的升高, 屈服强度降低, 屈服点对应的应变值减小; 在相同温度下, 拉伸屈服强度略高于压缩屈服强度; 不同加载速率下弹性模量变化不大, 随着加载速率的增加屈服强度增大。随温度的升高或加载速率增加, 体系的势能峰值增加。随着应变的进行, hcp 结构减少, Other 结构增加, bcc、fcc 结构出现并增加 (除变形温度 1000 K 时以外); 超过屈服点后, 各种结构逐渐趋于平稳; 随着温度的升高, 晶体结构的转变提前发生。随着温度的升高, 位错密度降低, 拉伸载荷下的总位错密度大于压缩载荷下; 整个变形过程中的主要位错类型是 Other 位错、1/3< $\bar{1}100$ >位错和 1/3< $11\bar{2}0$ >位错。

关键词: 单晶钛; 分子动力学; 位错密度; 应变率; 塑性变形机制

中图分类号: TG319; TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2024)12-3447-10

钛是一种重要的结构材料, 因其优越的比强度、耐腐蚀性、抗疲劳性和耐高温性能而在航空航天、汽车、生物医学和能源工业等领域广泛应用^[1]。为了更好的利用这一材料的潜力, 深入理解其变形机制至关重要。

分子动力学模拟已被广泛用于研究各种材料的微观性质, 包括材料变形过程中的应力应变、势能、晶体结构转变和位错变化等, 以揭示其具体的变形机制。2017 年, Ren 等人^[2-3]研究了温度和应变速率对变形诱发相变的影响。储潜^[4]和李萍等人^[5]利用分子动力学模拟研究了在拉伸和压缩载荷下, 钛单晶纳米柱的力学性能和晶体结构演化行为。Zhang 等人^[6]研究了单轴拉伸方向对密排六方 (hcp) 单晶钛变形机制的影响, 研究了 3 个单轴拉伸方向, 即 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 、 $[01\bar{1}0]$ 和 $[0001]$ 方向。本研究使用 EAM 势描述原子间相互作用, 建立单晶钛的原子模型, 利用 LAMMPS 代码^[7]和 Ovito 等^[7]软件工具, 通过应力-应变分析、势能分析、共近邻分析和位错密度分析 (DXA) 等方法, 研究单晶钛在不同加载条件下的力学行为和微观结构演变。

1 分子动力学模型的建立

使用 AtomsK 对分子动力学系统进行建模, 钛具

有密排六方结构 (hcp), 在室温下的晶格常数分别为 $a=b=0.2951$ nm, $c=0.4683$ nm, $c/a=1.587$ 。为了表示晶体的取向, 分别将笛卡尔坐标系中的 X 、 Y 、 Z 坐标轴对应到该模型中的 $[\bar{1}2\bar{1}0]$, $[\bar{1}010]$, $[0001]$ 晶向^[7], 其中 Z 轴对应于模型中的 c 轴, 如图 1 所示。创建 1 个纳米圆柱模型, 直径为 20 nm, 高为 30 nm ($\Phi 20$ nm $\times 30$ nm), 该模型中共包含有 534 016 个原子。在 3 个方向上施加周期性边界条件, 并利用共轭梯度法来最小化体系的能量^[10]。建模完成后, 各个原子的位置通常是按照晶胞结构稳定分布的, 原子的速度也是满足特定温度条件下的高斯分布。在加载之前利用 NPT 系综对该系统进行充分弛豫 (50 ps), 以确保在加载之前系统处于加载温度的平衡状态^[11]。弛豫完成后在初始形态上分别施加不同的温度 500~1000 K, 不同的应变速率 0.0001~0.01 ps⁻¹ 对模型进行拉伸和压缩, 时间步长为 0.001 ps, 直到总应变达到 50%, 总共进行 50 000 步。在模拟过程中, 每隔 100 步记录 1 次应变、总能量、势能、动能和原子位置, 并通过 Ovito 软件进行可视化分析。

Ti 原子间势函数采用了 2016 年 Mendeleev, Underwood 和 Ackland 发布的 EAM 势函数^[12], 该势函数是 Mendeleev 等人^[12]模拟势函数的变体, 其中系

收稿日期: 2023-12-05

基金项目: 国家自然科学基金 (52075509, 52375363); 山西省自然科学基金 (20210302123203)

作者简介: 牛 勇, 男, 1981 年生, 博士, 副教授, 太原科技大学机械工程学院, 山西 太原 030024, E-mail: 2019005@tyust.edu.cn

统的总势能可以表示为:

$$U = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i) \quad (1)$$

式中, $F(\rho_i)$ 表示嵌入能量贡献, 它取决于第 i 个原子产生的电子云密度; $\varphi(r_{ij})$ 描述了对势相互作用; r_{ij} 表示原子 i 和第 j 个原子之间的距离。

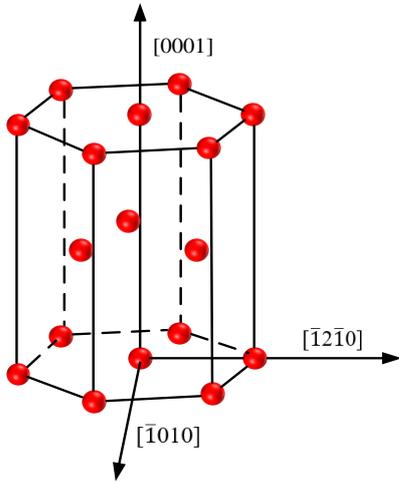


图 1 钛单晶原子模型图

Fig.1 Diagram of titanium single crystal atomic model

2 结果与讨论

2.1 应力-应变曲线

图 2a~2d 分别为单晶钛在加载速率 0.01 ps^{-1} 、温度 $500\sim 1000 \text{ K}$ 的压缩和拉伸的应力-应变曲线及温度 900 K 、加载速率 $0.0001\sim 0.01 \text{ ps}^{-1}$ 压缩和拉伸的应力-应变曲线。可见, 随着应变的增加应力值先增加, 在到达屈服点后下降某一谷值, 最后趋于平缓。在弹性阶段, 应力-应变曲线几乎为一条直线。在塑性阶段, 由于继续变形导致的金属键断裂, 释放一部分应力, 导致应力急剧下降至某一谷值。当加载速率为 0.01 ps^{-1} 时, 应力应变最后趋于稳定。当加载速率小于 0.01 ps^{-1} 时, 应力应变曲线出现波动区域。分析图 2a、2b 表明, 温度升高, 屈服点对应应变减小, 屈服应力降低。在压缩载荷下, 当加载温度为 500 K 时, 单晶钛模型在应变 8.8% 时达到屈服点, 屈服强度为 7.05 GPa 。当加载温度为 1000 K 时, 单晶钛模型在应变 5.2% 时达到屈服点, 屈服强度为 4.37 GPa 。随着温度的升高, 应变值提前 3.6% , 屈服强度降低 2.68 GPa 。比较图 2a、2b 可知, 在同一温度下, 拉伸载荷到达屈服点时对应

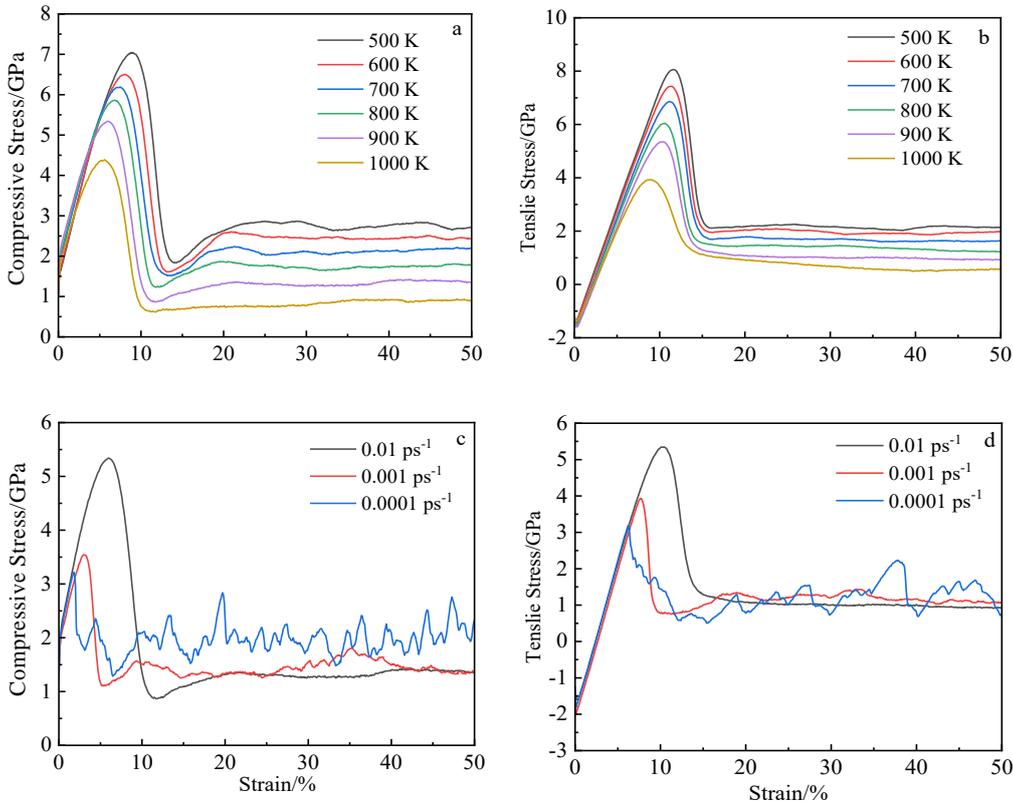


图 2 不同条件下单晶钛的应力-应变曲线

Fig.2 Stress-strain curves of single-crystal titanium under different conditions: (a) compression rate of 0.01 ps^{-1} at $500\sim 1000 \text{ K}$; (b) tensile rate of 0.01 ps^{-1} at $500\sim 1000 \text{ K}$; (c) compression rate of $0.0001\sim 0.01 \text{ ps}^{-1}$ at 900 K ; (d) tensile rate of $0.0001\sim 0.01 \text{ ps}^{-1}$ at 900 K

的应变值滞后于压缩载荷, 拉伸的屈服强度略高于压缩屈服强度。当加载温度为 500 K 时, 拉伸载荷在应变为 11.3% 时到达屈服点, 屈服强度为 8.02 GPa。压缩载荷在应变为 8.8% 时到达屈服点, 屈服强度为 7.05 GPa。分析图 2c、2d 表明, 加载速率增加, 屈服点对应的应变值滞后, 屈服应力增大。与 Chang 等^[13]模拟应变速率对单晶钛拉伸性能的结果一致。在压缩载荷下, 当加载速率为 0.0001 ps⁻¹ 时, 单晶钛模型在应变 1.8% 时达到屈服点, 屈服强度为 3.21 GPa。当加载速率为 0.001 ps⁻¹ 时, 单晶钛模型在应变 3% 时达到屈服点, 屈服强度为 3.54 GPa。当加载速率为 0.01 ps⁻¹ 时, 单晶钛模型在应变 5.9% 时到达屈服点, 屈服强度为 5.34 GPa, 随加载速率增大屈服强度增大。在弹性阶段, 应力应变曲线几乎重合, 表明加载速率对弹性模量的影响不大^[13]。在塑性阶段, 由于金属键断裂后导致应力值急剧下降, 但原子在塑性变形过程中发生移动之后又与其他原子形成新的金属键, 使得应力值重新上升, 导致在应力-应变曲线上出现波动区域, 其本质在于金属键的断裂与新金属键形成的竞争协调机制^[15]。

2.2 势能曲线

图 3a~3d 分别为单晶钛在加载速率 0.01 ps⁻¹、温度 500~1000 K 的压缩和拉伸的势能曲线及温度 900 K、

加载速率 0.0001~0.01 ps⁻¹ 压缩和拉伸的势能曲线。随着应变的增加势能值先增大, 到达势能峰值逐渐下降最后趋于平缓。在弹性阶段, 由于原子间距离缩小和相互作用力增强, 导致势能增加。在塑性阶段, 由于位错、滑移和晶键断裂等因素的作用导致势能逐渐减小, 最终趋于稳定。薛春等^[10]在温度对单晶镁拉伸性能影响的模拟中也观察到此现象。分析图 3a、3b 表明, 随着温度升高, 势能峰值点提前产生, 势能峰值增加, 温度越高原子更活跃, 所以势能增加较快。在压缩载荷下, 当加载温度 500 K 时, 单晶钛在应变 10.5% 时达到势能峰值, 对应的势能峰值为 -279.4 keV。当加载温度 1000 K 时, 单晶钛在应变 8.1% 时达到势能峰值, 对应的势能峰值为 -275.4 keV。比较图 3a、3b 可知, 压缩载荷下势能峰值对应的应变值在 9% 附近, 拉伸载荷下势能峰值对应的应变值在 12% 附近, 单晶钛在压缩载荷下先达到势能峰值点。分析图 3c、3d 表明, 加载速率增加, 势能峰值增大, 但势能峰值点的出现滞后。在压缩载荷下, 当加载速率为 0.0001 ps⁻¹ 时, 单晶钛在应变 2% 时的势能达到最大值, 对应的势能峰值为 -279 keV。当加载速率为 0.001 ps⁻¹ 时, 单晶钛在应变 4.1% 时的势能达到最大值, 对应的势能峰值为 -278 keV。当加载速率为 0.01 ps⁻¹ 时, 单晶钛

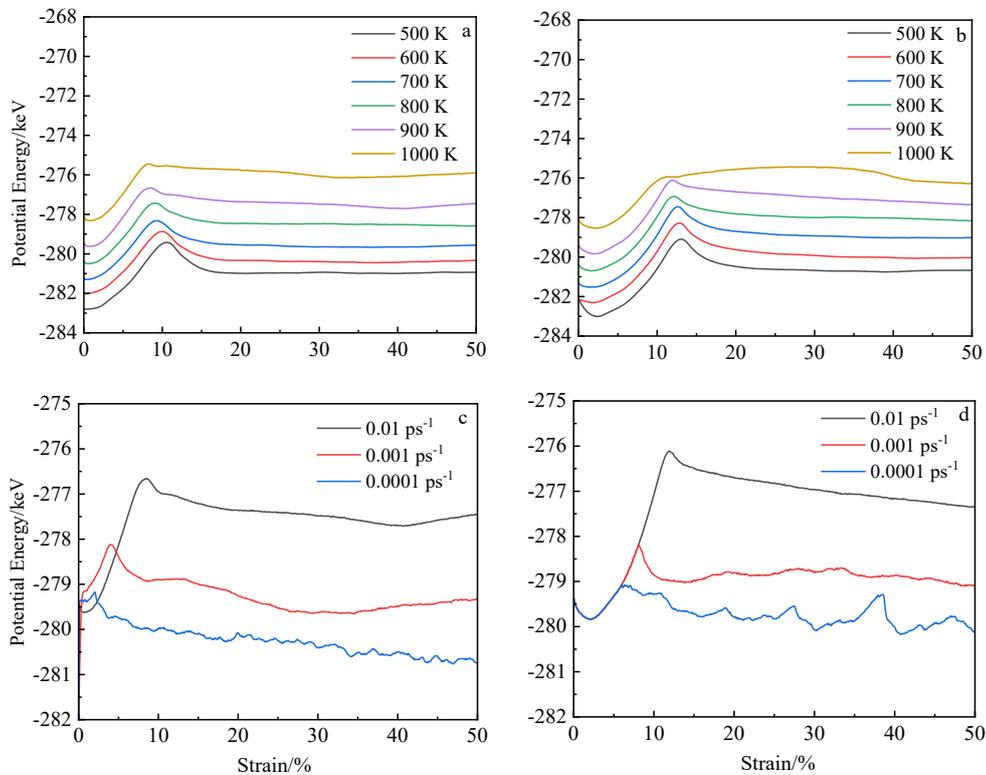


图 3 不同条件下单晶钛的势能曲线

Fig.3 Potential energy curves of single-crystal titanium under different conditions: (a) compression rate of 0.01 ps⁻¹ at 500–1000 K; (b) tensile rate of 0.01 ps⁻¹ at 500–1000 K; (c) compression rate of 0.0001–0.01 ps⁻¹ at 900 K; (d) tensile rate of 0.0001–0.01 ps⁻¹ at 900 K

在应变 8.3%时势能达到最大值，对应的势能峰值为 -276.6 keV。加载速率增大，原子键断裂所需的时间较短，需要更多能量，从而增加势能。当到达势能峰值时，原子键断裂释放能量，但由于加载速率较高，释放的时间较短，体系中还存在大量的能量^[15]，因此势能下降得较慢。

2.3 共近邻分析

共近邻分析 (CNA) 提供了一种直观观察不同变形程度下各种原子结构分布的方法，并可以导出系统内各种原子结构的数量数据，以进行量化分析。图 4~图 7 分别为压缩和拉伸时加载速率 0.01 ps^{-1} 、温度 500~1000 K 各相结构的原子分数随应变的变化关系及温度 900 K、加载速率 $0.0001\sim 0.01 \text{ ps}^{-1}$ 时各相结构的原子分数随应变变化的关系。Other 原子代表晶界和未识别的结构^[11]。随着应变的进行，hcp 结构减少，Other 结构增加，bcc、fcc 结构出现并增加 (除变形温度 1000 K 时以外)；超过屈服点后，各种结构逐渐趋于平稳；各种结构转变在应变接近屈服点时速度最快。Other 原子的存在不是从零开始的，这是由于在弛豫过程中，纳米柱表面的原子与其相邻的原子相比内部原子较少，因此会转化为 Other 结构^[13]。由图 4、图 5 表明，随着温度的升高，hcp 原子转化对应的应变值

提前，体系中含有的 hcp 原子在逐渐减少，Other 原子逐渐增加。当加载方式为压缩时，在温度 500 K 下，当应变值为 13.3%时，Other 结构出现拐点，平稳后 Other 结构的比例为 35%。在温度 1000 K 下，当应变值为 8.2%时，Other 结构出现拐点，平稳后 Other 结构的比例为 75%。当加载方式为拉伸时，在温度 500 K 下，当应变值为 15.3%时，Other 结构出现拐点，平稳后 Other 结构的比例为 30%。在温度 1000 K 下，当应变值为 14%时，Other 结构出现拐点，平稳后 Other 结构的比例为 74%。温度高时，材料发生变形比较迅速，产生位错的时间较短，晶体进行重组的时间较少，很难形成规则的晶体结构，因此 Other 结构较多^[17]。由图 4、图 5 表明，在拉伸载荷下 hcp 结构转化为 Other 结构的转化速率大于压缩载荷。由图 6、图 7 表明，随加载速率增加，hcp 结构转化为 Other 结构的应变值增加，bcc、fcc 结构产生的应变值减小，体系中 Other 结构增多。在 0.0001 ps^{-1} 加载速率下，Other 结构在应变值 2.1%时达到峰值，所占比例为 10%。在 0.001 ps^{-1} 加载速率下，Other 结构在应变值 4.3%时达到峰值，所占比例为 30%。在 0.01 ps^{-1} 加载速率下，Other 结构在应变值 8.6%时达到峰值，所占比例为 60%。温度越高，加载速率越快，原子更容易滑动和重新排列，导

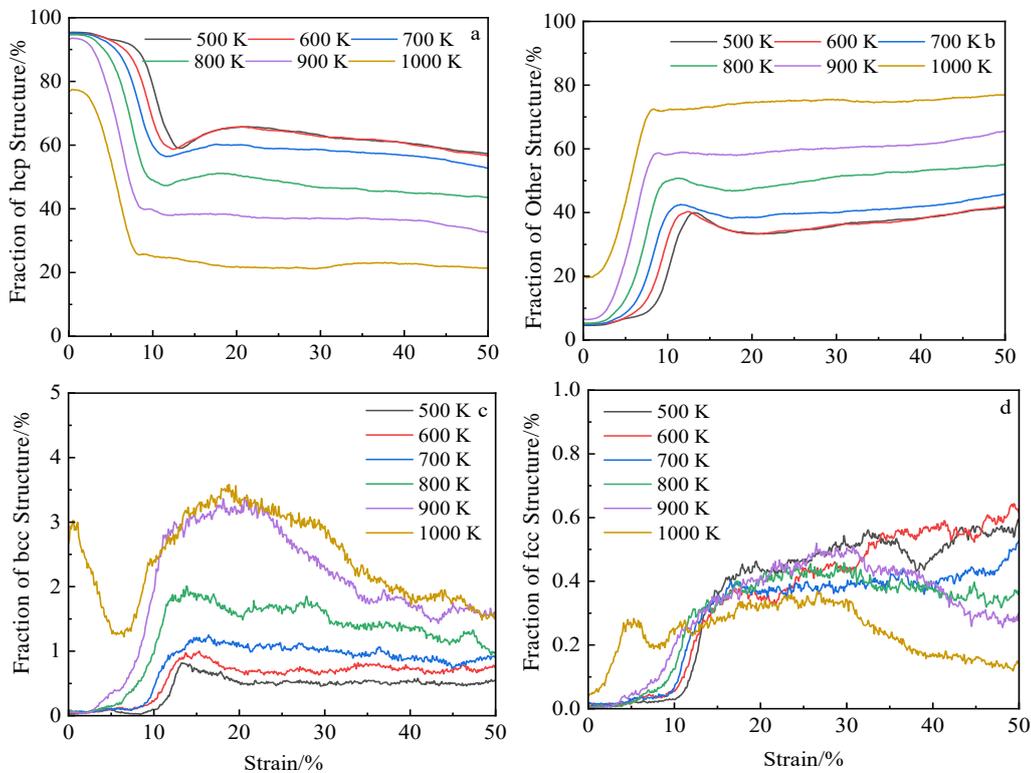


图 4 压缩速率 0.01 ps^{-1} 、温度 500~1000 K 的单晶钛的 CNA 结果

Fig.4 CNA results of single-crystal titanium at 500–1000 K with the compression rate of 0.01 ps^{-1} : (a) hcp, (b) Other, (c) bcc, and (d) fcc

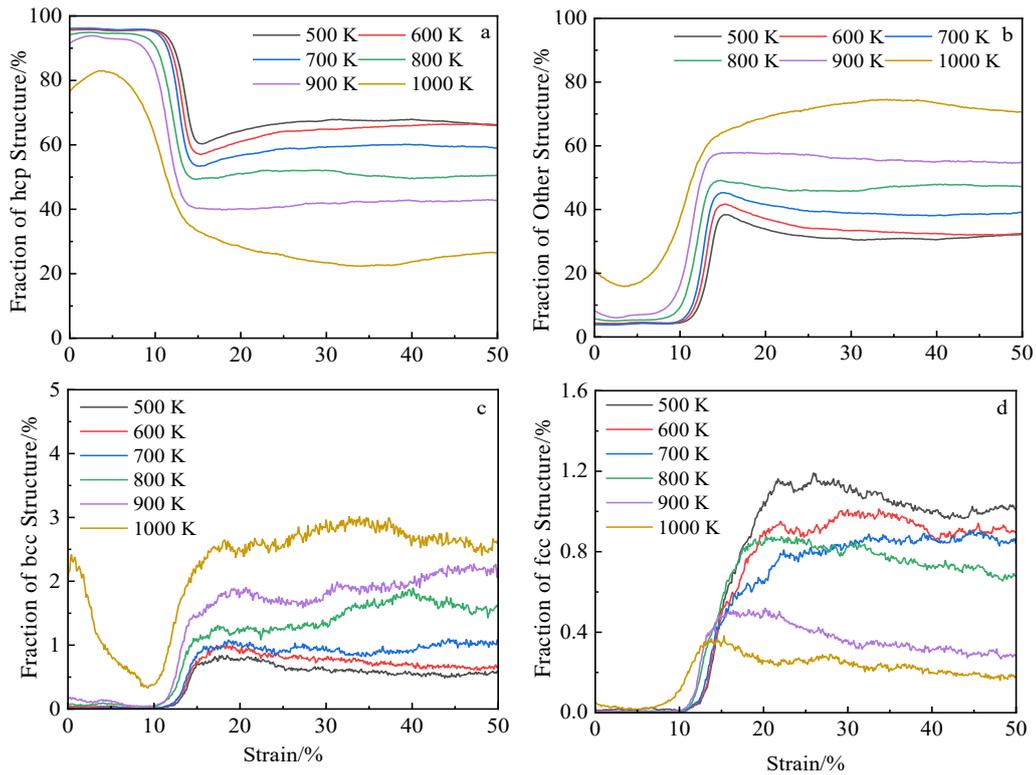


图 5 拉伸速率 0.01 ps^{-1} 、温度 500~1000 K 单晶钛的 CNA 结果

Fig.5 CNA results of single-crystal titanium at 500–1000 K with the tensile rate of 0.01 ps^{-1} : (a) hcp, (b) Other, (c) bcc, and (d) fcc

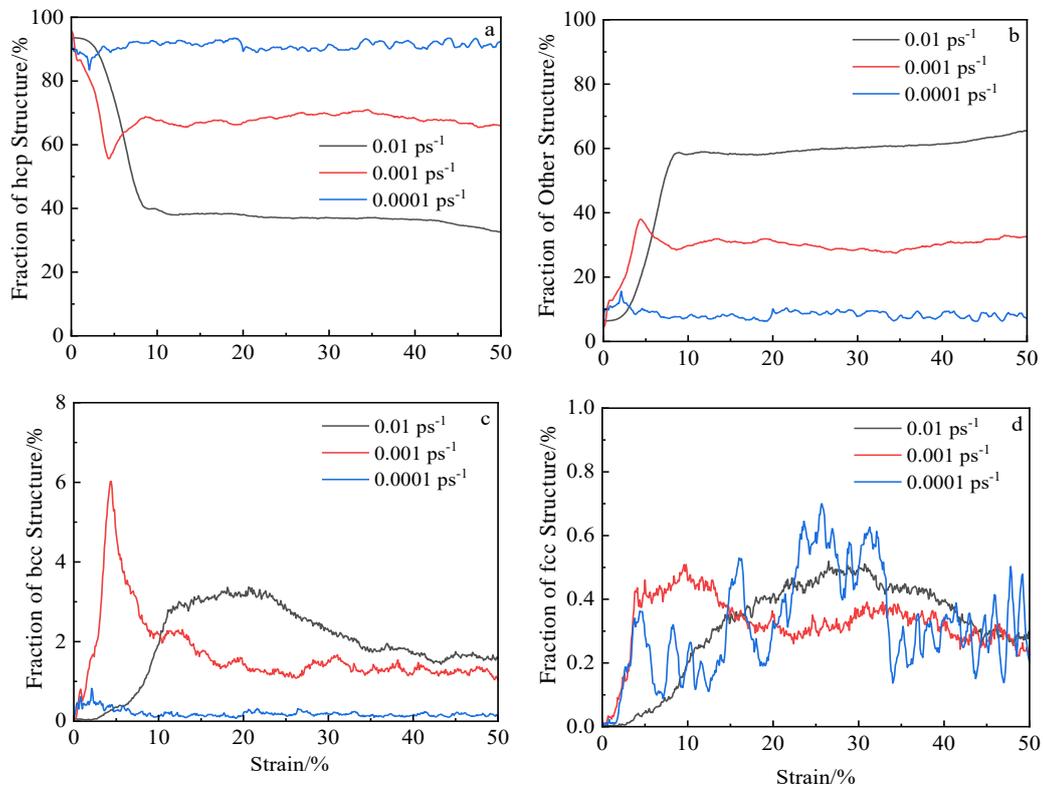


图 6 温度 900 K、压缩速率 $0.0001\sim 0.01 \text{ ps}^{-1}$ 单晶钛的 CNA 结果

Fig.6 CNA results of single-crystal titanium at 900 K with the compression rate of $0.0001\sim 0.01 \text{ ps}^{-1}$: (a) hcp, (b) Other, (c) bcc, and (d) fcc

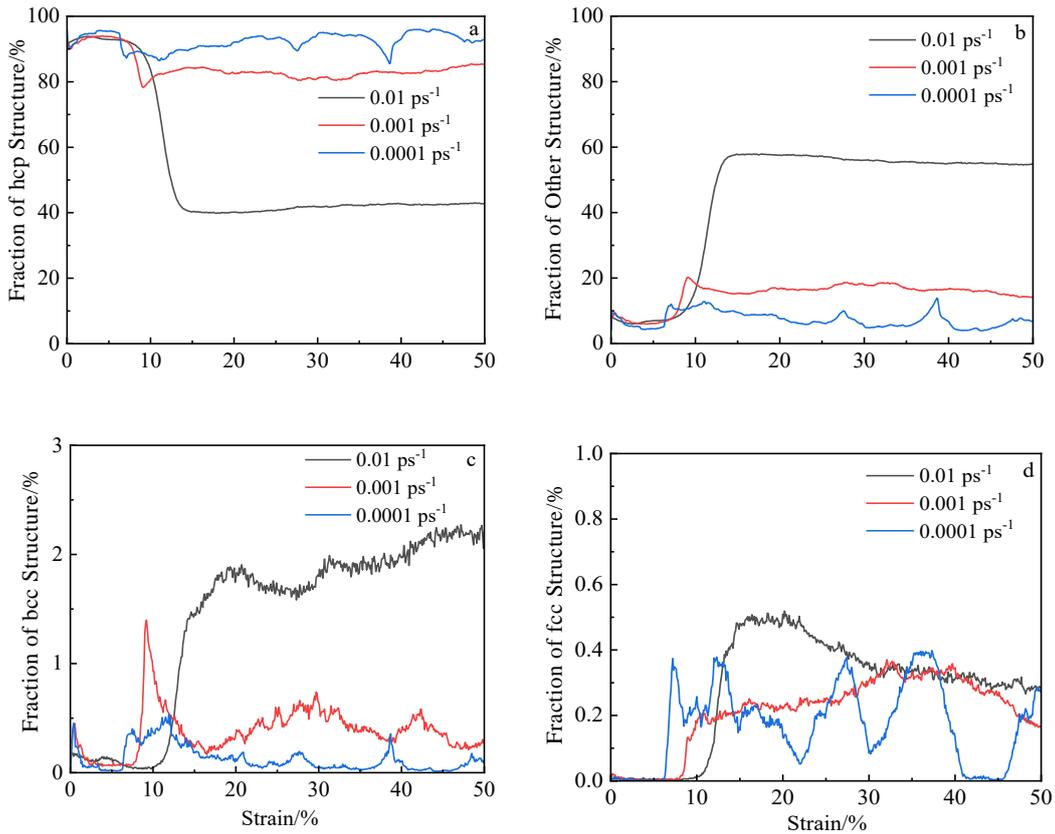


图 7 温度 900 K、拉伸速率 0.0001~0.01 ps⁻¹ 单晶钛的 CNA 结果

Fig.7 CNA results of single-crystal titanium at 900 K with the tensile rate of 0.0001–0.01 ps⁻¹: (a) hcp, (b) Other, (c) bcc, and (d) fcc

致 Other 结构的数量增多。图 8、图 9 为不同温度和不同应变速率下的原子排列图。由图 8、图 9 表明，随着应变的进行体系中出现了 fcc 原子，李萍等^[5]在钛单晶拉压不对称的分子动力学模拟中也观察到此类相变的产生。Hong 等^[18]在商业纯钛的低温通道模压缩中也发现了应力诱导的 hcp-fcc 相变，证实了此类相变的可实现性。

2.4 位错密度分析 (DXA)

图 10~图 12 分别为加载速率 0.01 ps⁻¹、温度 500~1000 K 的单晶钛压缩及拉伸位错密度与应变的关系及温度 900 K、加载速率 0.0001~0.01 ps⁻¹ 时位错总密度与应变速率的关系。出现的位错类型有： $1/3\langle\bar{1}100\rangle$ 位错， $1/3\langle 1\bar{1}20\rangle$ 位错， $1/3\langle 11\bar{2}3\rangle$ 位错， $\langle\bar{1}100\rangle$ 位错， $\langle 0001\rangle$ 位错，也有一些不能被识别的位错，定义为 Other 位错。随着应变的增加，在弹性阶段位错较少，主要位错类型为 $1/3\langle 1\bar{1}20\rangle$ 位错。在塑性阶段，位错突然增多，起主导作用的是 Other 位错、 $1/3\langle\bar{1}100\rangle$ 位错和 $1/3\langle 11\bar{2}0\rangle$ 位错，在压缩载荷下有少量的 $1/3\langle 1\bar{1}23\rangle$ 位错。由图 10，图 11 表明，随着温度的升高，位错密度均降低。应变小于 10%

时，位错较少，随着应变的进行，位错增加。在拉伸载荷下，当加载温度为 500 K 时，位错密度在应变 10.4% 时突然增大，总位错密度最大为 3.22 nm^{-3} 。当加载温度为 1000 K 时，位错密度在应变 7.1% 时突然增大，总位错密度最大为 0.5 nm^{-3} 。随着应变的进行，位错密度增加到某一最大值后缓慢降低。Zhang 等^[6]在 hcp-Ti 单轴拉伸方向依赖性的模拟中也观察到此现象。随着温度的升高，位错密度增长的斜率增加。由图 10 和图 11 表明，拉伸载荷下的位错密度大于压缩载荷下，这是由于在拉伸载荷下晶体中的原子间距增加，导致晶体扩展引发位错的产生和移动，因此位错密度较高。在压缩载荷下原子间距缩小，位错运动受到限制，所以位错密度较低。分析图 12a 表明，当加载方式为压缩时，0.001 ps⁻¹ 加载速率下的总位错密度最高，位错密度为 0.7 nm^{-3} 。0.01 ps⁻¹ 加载速率下的总位错密度最低，位错密度为 0.2 nm^{-3} ，比 0.001 ps⁻¹ 加载速率下位错密度降低了 0.5 nm^{-3} 。Rawat 等^[17]模拟单晶钛在不同原子间势压缩时也观察到 0.001 ps⁻¹ 加载速率下位错密度最高。

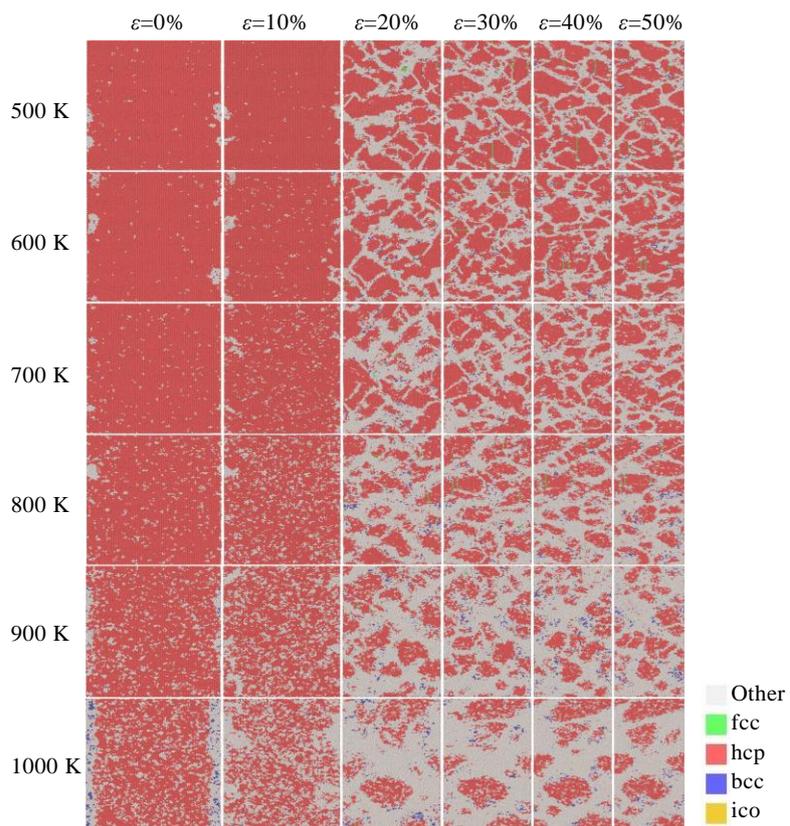


图 8 拉伸速率 0.01 ps^{-1} 、温度 $500\sim 1000 \text{ K}$ 单晶钛的原子排列图

Fig.8 Atomic arrangement diagrams of single-crystal titanium at $500\sim 1000 \text{ K}$ with tensile rate of 0.01 ps^{-1}

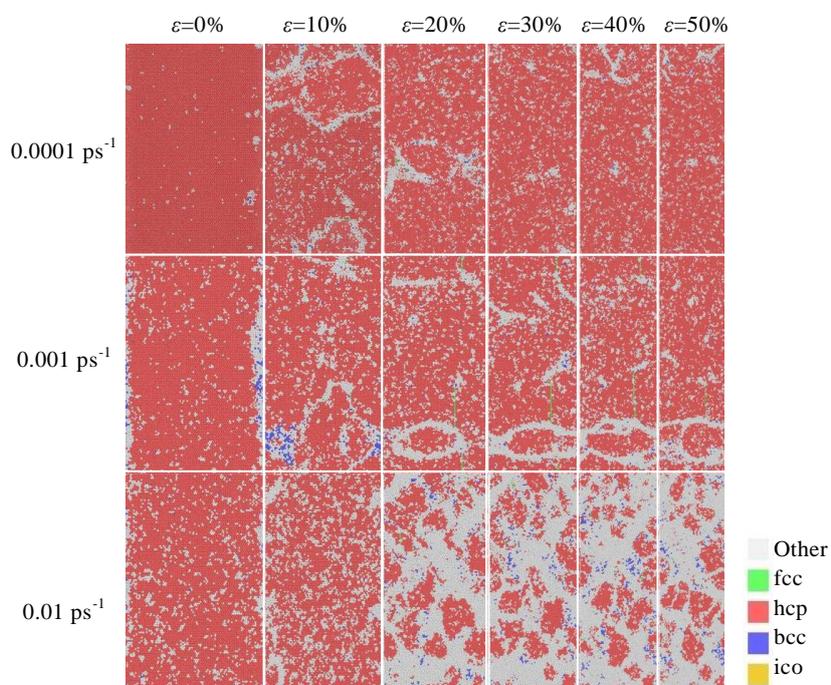


图 9 温度 900 K 、拉伸速率 $0.0001\sim 0.01 \text{ ps}^{-1}$ 单晶钛的原子排列图

Fig.9 Atomic arrangement diagrams of single-crystal titanium at 900 K with tensile rate of $0.0001\sim 0.01 \text{ ps}^{-1}$

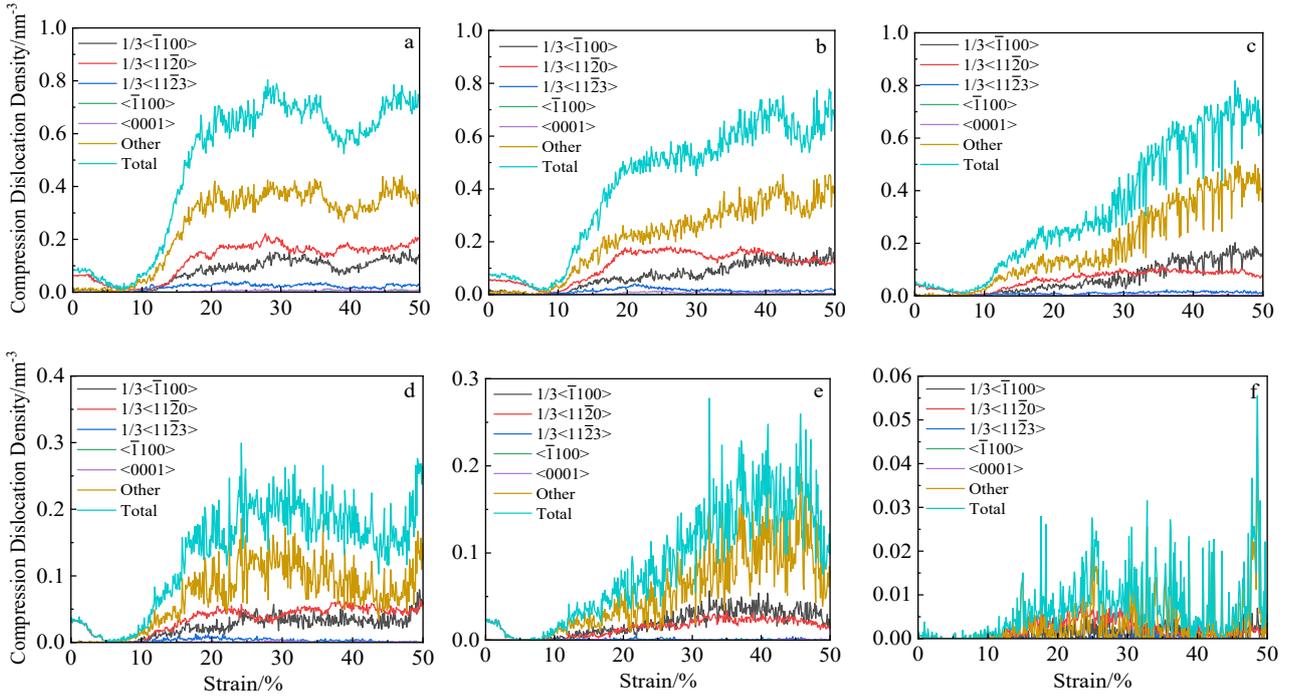


图 10 单晶钛压缩位错密度与应变的关系曲线

Fig.10 Relationships between compression dislocation density and strain of single-crystal titanium: (a) 500 K, (b) 600 K, (c) 700 K, (d) 800 K, (e) 900 K, and (f) 1000 K

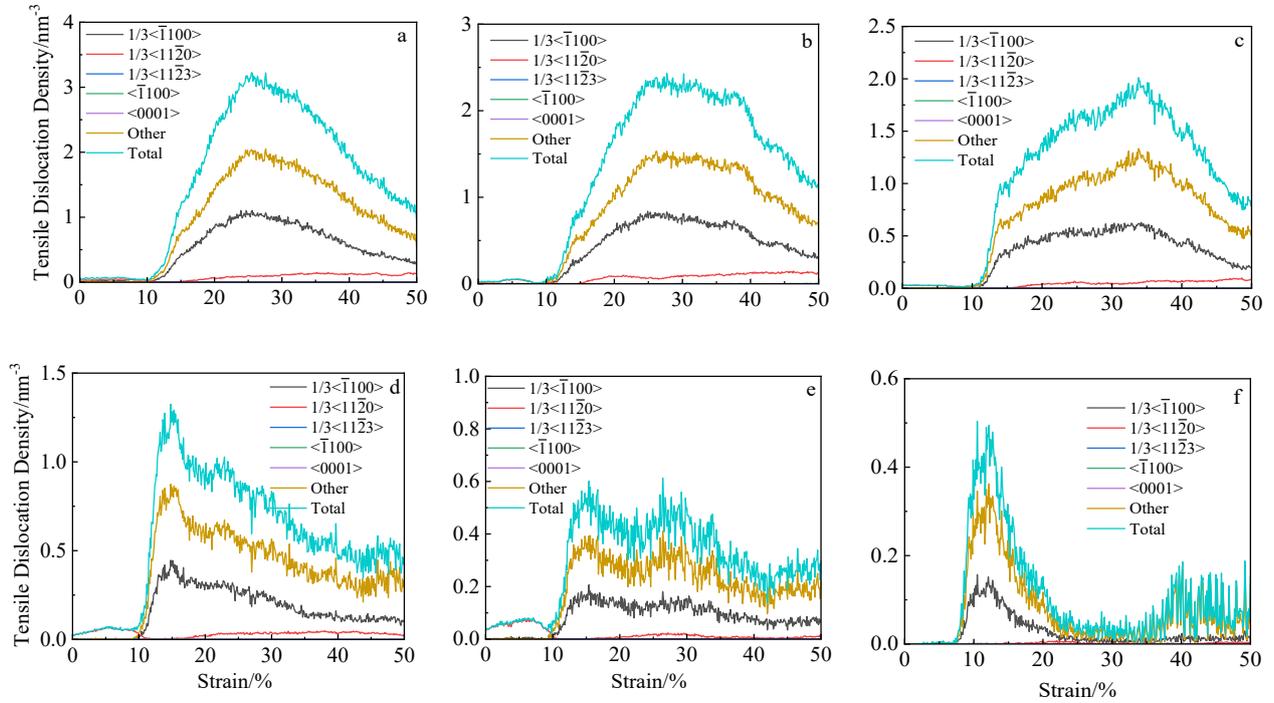


图 11 单晶钛拉伸位错密度与应变的关系曲线

Fig.11 Relationships between tensile dislocation density and strain of single-crystal titanium: (a) 500 K, (b) 600 K, (c) 700 K, (d) 800 K, (e) 900 K, and (f) 1000 K

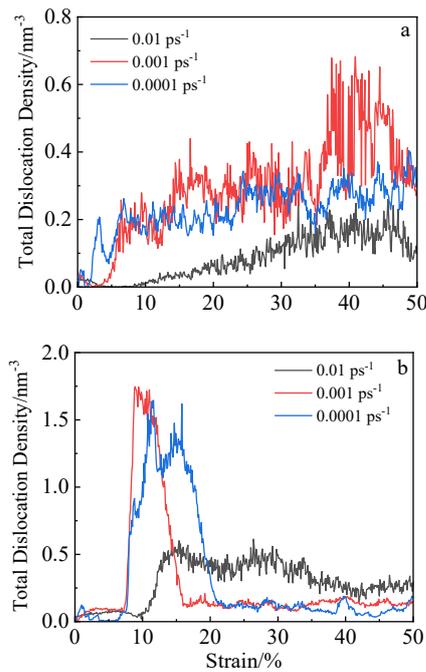


图 12 位错总密度与应变速率关系

Fig.12 Relationships between total dislocation density and strain rate: (a) compression and (b) tension

3 结 论

1) 屈服强度随温度的升高均降低。在相同温度条件下, 拉伸的屈服强度略高于压缩的屈服强度。随加载速率增大, 对应的弹性模量变化不大, 屈服点的出现滞后。

2) 体系势能峰值随温度升高而增加, 在屈服点后势能下降, 最后趋于平缓。随加载速率增大, 对应的势能值增大, 到达势能峰值点对应的应变值增大, 在屈服点后势能下降, 最后趋于平缓。

3) 随温度升高, 体系中 hcp 结构减少, Other 结构增加, bcc、fcc 结构含量变化不大。加载速率对微观结构演化的影响很大, 在应变速率 0.01 ps^{-1} 下 hcp 结构转化为 Other 结构的比例较多, 在应变速率小于 0.01 ps^{-1} 下 hcp 结构转化为 Other 结构的比例较少。

4) 位错密度随温度的升高而降低。应变小于 10% 时, 位错较少, 随着应变的进行, 位错增加。拉伸载荷下的总位错密度大于压缩载荷下。Other 位错, $1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 位错和 $1/3\langle \bar{1}100 \rangle$ 位错在变形中起主导作用。

参考文献 References

[1] Leyens C, Peters M. *Titanium and Titanium Alloys: Fundamentals and Applications*[M]. New York: Wiley, 2003:

25

- [2] Ren J Q, Sun Q Y, Lin X *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2017, 126: 66
- [3] Ren J Q, Sun Q Y, Lin X *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2018, 147: 272
- [4] Chu Qian(储 潜). *Research on Plastic Deformation of Single Crystal Nano Titanium Based on Molecular Dynamics*(基于分子动力学的单晶纳米钛塑性变形研究)[D]. Hefei: Hefei University of Technology, 2018
- [5] Li Ping(李 萍), Chu Qian(储 潜), Yan Siliang(严思梁) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(6): 1835
- [6] Zhang Hao, Ou Xiaoqin, Wei Bingqiang *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2020, 172: 1093
- [7] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117: 1
- [8] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18: 15012
- [9] Wang Huanzhu(王环珠), Xue Chun(薛 春), Yang Qianhua(杨千华) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(4): 1391
- [10] Xue Chun(薛 春), Yang Qianhua(杨千华), Chu Zhibing(楚志兵) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(5): 1812
- [11] Xue C, Li S, Chu Z B *et al.* *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2022, 11(10): 3749
- [12] Mendelev M I, Underwood T L, Ackland G J. *The Journal of Chemical Physics*[J], 2016, 145(15): 4102
- [13] Chang Le, Zhou Changyu, Wen Leilei *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2017, 128: 348
- [14] Hang Jun(杭 俊). *Molecular Dynamics Study on hcp Ti Plastic Deformation Mechanism* (hcp-Ti 塑性变形机制的分子动力学研究)[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2011
- [15] Wang Xian(王 献), Wei Yan(魏 燕). *Materials Reports*(材料导报)[J], 2023, 37(S1): 23010016
- [16] Xue Chun(薛 春). *Research on the changes in Microstructure and Properties of Magnesium Single Crystals Based on Molecular Dynamics* (基于分子动力学的镁单晶组织与性能变化规律研究)[D]. Taiyuan: Taiyuan University of Science and Technology, 2021
- [17] Lin Y C, Zheng J R, Lu S C. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*[J], 2020, 109(3-4): 727
- [18] Hong D H, Lee T W, Lim S H *et al.* *Scripta Materialia*[J], 2013, 69(5): 405
- [19] Rawat S, Mitra N. *Computational Materials Science*[J], 2018, 141: 19

Molecular Dynamics Study on Deformation Mechanism of Single-Crystal Titanium

Niu Yong¹, Jia Yunjie¹, Wang Yaoqi², Zhu Yanchun¹, Zhang Zongyuan³

(1. School of Mechanical Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

(2. AVIC Manufacturing Technology Institute, Beijing 100024, China)

(3. China National Heavy Machinery Research Institute, Co., Ltd, Xi'an 710072, China)

Abstract: The deformation mechanism of single-crystal titanium was investigated by molecular dynamics simulation at 500–1000 K with the strain rate of 0.0001–0.01 ps⁻¹, and the loading mode was tension and compression. The results were subjected to the stress-strain analysis, potential analysis, coevolutionary neighbourhood analysis and dislocation density analysis. The results show that with the increase in temperature, the yield strength decreases, and the strain value corresponding to the yield point decreases; at the same temperature, the tensile yield strength is slightly higher than the compressive yield strength; the modulus of elasticity does not change much under different loading rates, and the yield strength increases with the increase in loading rate. With the increase in temperature or loading rate, the peak potential energy of the system increases. As the strain proceeds, the hcp structure decreases, the Other structure increases, and the bcc and fcc structures appear and increase (except at the deformation temperature of 1000 K); after exceeding the yield point, the various structures gradually tend to be stable; with the increase in temperature, the transformation of crystal structure occurs earlier. The dislocation density decreases with increasing temperature, and the total dislocation density under tensile load is larger than that under compressive load; the main types of dislocations throughout the deformation process are Other dislocations, $1/3\langle\bar{1}100\rangle$ dislocations and $1/3\langle 11\bar{2}0\rangle$ dislocations.

Key words: single crystal titanium; molecular dynamics; dislocation density; strain rate; Plastic deformation mechanism

Corresponding author: Niu Yong, Ph. D., Associate Professor, School of Mechanical Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, P. R. China, E-mail: 2019005@tyust.edu.cn