https://doi.org/10.12442/j.issn.1002-185X.20240692

孔洞缺陷对α-Fe拉伸变形行为影响的分子动力学模拟

李 翔[1]，尹益辉[2]，张元章[2]，李继承[2]，李洪祥[3]
（1. 西南科技大学 制造过程测试技术教育部重点实验室，四川 绵阳 621010）
（2. 中国工程物理研究院 总体工程研究所，四川 绵阳 621999）
（3. 西南科技大学 土木工程与建筑学院，四川 绵阳 621010）

摘 要：为深入研究孔洞缺陷对α-Fe试样拉伸变形行为的影响，构建含不同大小孔洞缺陷的α-Fe试样计算模型，并进行单轴拉伸应变下的分子动力学模拟。结果表明：整体趋势上，含孔洞缺陷试样的拉伸力学性能损减与孔洞尺寸正相关，孔洞尺寸越大，试样越容易进入塑性变形阶段；含孔洞缺陷试样的杨氏模量、屈服应力、极限强度和拉断延伸率均随着孔洞半径的增大而减小；试样的塑性变形表现为拉伸应力诱发的相变和位错滑移混合的机制；随着孔洞半径的增大，试样的应力-应变曲线特征发生显著变化——试样的塑性屈服段和应变硬化段越来越短，应变硬化段甚至消失。研究有助于深入认识孔洞缺陷对金属变形机制的影响，为后续开展多晶α-Fe材料的物理和力学性质的分析研究奠定有益基础。

关键词：α-Fe；孔洞；相变；位错滑移
中图法分类号：TL341 **文献标识码**：A **文章编号**：1002-185X(2026)02-0510-07

1 引 言

铁基核结构材料因其良好的力学特性和优良的加工性能，在核反应堆部件中广泛使用[1–4]。然而核反应堆结构部件在辐照、热、化学和应力等工况下服役，经受多物理化学场作用[1]，服役环境非常严酷，其力学性能的好坏，将直接影响到核设施的安全稳定性。已有的研究结果表明，在高能中子及其它高能粒子的辐照作用下，核结构材料将产生缺陷，纳米级的孔洞即是核结构材料经受长时间辐照后所形成的典型体缺陷，由空位团演化而来[5–6]。同时孔洞亦是材料制备加工过程中的固有体缺陷。Fe作为铁基核结构材料的主要元素，研究室温下（300 K）孔洞缺陷对α-Fe力学性能和变形行为影响的微观机制，将有助于评估和预测铁基核结构材料在长期服役过程中性能的变化，无疑具有重要的科学意义和直接的工程价值。

从微观层面开展纳米级孔洞缺陷对材料特性影响的研究，将有助于为材料制备工艺提升和抗辐照新材料的研发提供理论支撑。近年来，分子动力学（molecular dynamics，MD）模拟方法已广泛用于在原子尺度研究材料的相关特性[7–8]。研究人员已通过MD方法开展了孔洞缺陷对α-Ti[9]、Ni[10]、Al_2Cu[11]、含Nb单晶γ-TiAl[12]等金属材料力学性能的研究，结果表明：杨氏模量[9]、屈服强度[9,12]、屈服应变[9,12]和抗拉强度[10–11]随着孔洞的增大而减小。崔新林等[7,13]、邵建立等[14]和Wu等[15]通过MD方法研究了冲击加载下含孔洞缺陷单晶铁的相变。王云天等[16]研究发现单晶铁的抗拉强度随着温度的升高而降低，其原因在于高温下孔洞更容易成核，而孔洞的成核与生长将导致拉应力下降。吉建莎等[17]在含有晶界的α-Fe中预制孔洞缺陷并在其晶界周围随机添加He原子，对比孔洞缺陷位置在晶界面中心和在晶界上方试样的应力-应变曲线可知，孔洞缺陷在晶界上方试样的断裂应力和断裂应变最低。Xu等[18]研究了α-Fe金属薄膜在拉伸加载中孔洞的长大过程，结果表明：孔洞的初始椭圆度和初始取向角对孔洞的长大和应力-应变响应有重要影响。Wang等[19]研究了含双孔洞的双晶α-Fe的微观力学特性，发现不同的孔洞间距和晶界类型导致试样的断裂特性不同。Rawat等[20–21]研究了极端应变率下单晶铁中孔洞的演化和温度对孔洞演化的影响。同时也有研究者关注纳米晶铁[22]和铁纳米线[23]的拉伸变形行为。显然，为了更加全面的认识孔洞缺陷对材料特性的影响，不仅需要研究其对材料力学性能的影响，而且还应该研究其对材料变形机制以及变形行为的影响。

本研究采用MD方法，对含孔洞缺陷的α-Fe试样施加拉伸应变直至断裂，研究孔洞缺陷对试样力学性能和塑性变形行为的影响规律，获得试样的工程应力-应变曲线以及材料微观结构随拉伸应变的演化情况等，结果表

收稿日期：2025-02-20
基金项目：国家自然科学基金（12072333）；西南科技大学科研基金（23zx7129）
作者简介：李 翔，男，1984年生，博士，西南科技大学制造过程测试技术教育部重点实验室，四川 绵阳 621010，E-mail：mylixiang@swust.edu.cn

明：整体趋势上，含孔洞缺陷试样的杨氏模量、屈服应力、极限强度和拉断延伸率均随着孔洞半径的增大而减小；试样的塑性变形表现为拉伸应力诱发的相变和位错滑移混合的机制，但随孔洞半径的增大，试样的应力-应变曲线特征发生显著变化——随着孔洞半径的增大，试样的塑性屈服段和应变硬化段越来越短，应变硬化段甚至消失。

2　计算模型与方法

MD 的建模采用与课题组前期研究中类似的建模方法[24]。首先，以单晶 α-Fe 为基体材料，建立计算模型，然后在其中心位置删除一定半径范围内的 Fe 原子，进而构建含孔洞缺陷的计算模型，计算模型的相关参数如表 1 所示，含孔洞缺陷试样的模型如图 1 所示。显然，孔洞半径为 0.00 nm 的试样即是理想晶格的单晶 α-Fe 试样，简称理想试样。

表 1　计算模型参数

Table 1　Parameters of calculate model

Parameter	Value
Sample size	11.42 nm×11.42 nm×31.41 nm
α-Fe lattice constant, a_0/nm	0.2855
Number of Fe atoms in tensile deformation zone	320 000
Void position/nm	(5.71, 5.71, 15.71)
Void radius/nm	0.00, 0.25, 0.50, 0.75, 1.00

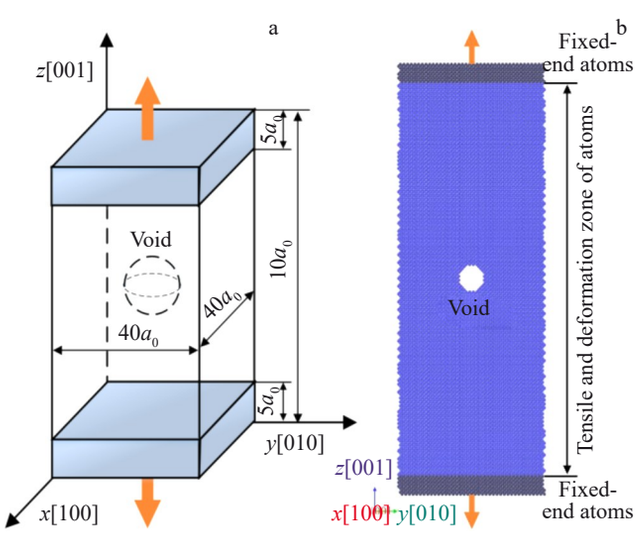

图 1　单轴拉伸试样的 MD 计算模型

Fig.1　MD computational model of sample subjected to uniaxial tension: (a) coordinate and geometry sizes and (b) MD computational model

MD 模拟采用经典的分子动力学软件，Ackland 等[25]开发的 Fe-Fe 势函数用于描述 Fe 原子间的相互作用。如图 1 所示，直角坐标系的 x、y 和 z 轴分别对应于 MD 计算模型的 3 个晶向。本模拟中，首先设定模拟温度为室温 300 K，时间步长为 1 fs，采用三维周期性边界条件；其次进行能量最小化处理和 150 ps 的弛豫；然后采用与课题组前期研究相同的拉伸模拟方法[24]，根据计算模型的规模，结合前人的研究结果[26–28]，沿 z 轴方向以 5×10^8 s^{-1} 的速率对计算模型固定端原子施加拉伸应变，直至模型断裂。

模拟结束后，利用位错提取算法（dislocation extraction algorithm，DXA）[29]分析拉伸过程中试样的变形区域内位错的形成情况，利用共近邻分析法（common neighbor analysis，CNA）[30]分析拉伸过程中试样的变形区域内晶体结构的演化情况。

3　结果与分析

3.1　含孔洞缺陷 α-Fe 试样的应力-应变曲线

对孔洞半径分别为 0.00、0.25、0.50、0.75 和 1.00 nm 的 α-Fe 试样施加拉伸应变，计算所得工程应力-工程应变曲线如图 2 所示，其中理想试样的应力-应变曲线也就是孔洞半径为 0.00 nm 时试样的应力-应变曲线。

由图 2a 可知，MD 模拟所得试样的屈服应力和极限强度均远远高于宏观实验值，但其拉伸变形规律与宏观试样的拉伸变形规律一致，亦与 Zhang 等[31]的 MD 模拟

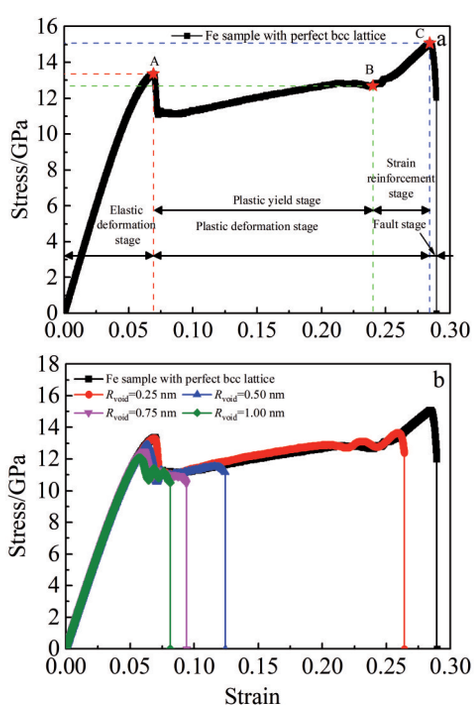

图 2　理想试样和含孔洞缺陷 α-Fe 试样的应力-应变曲线

Fig.2　Stress-strain curves of α -Fe with void of different radii: (a) sample with perfect lattice and (b) samples with voids

结果相似，由其工程应力-工程应变曲线可知，整个拉伸至断裂过程亦分为4个阶段[32]：弹性变形、塑性屈服、应变硬化和断裂，即对应图2a中的OA段、AB段、BC段和C点之后，且对应变为0~0.03的区间段进行线性拟合，得到杨氏模量（Young's modulus）为241.38 GPa，比纯铁宏观实验测试得到的杨氏模量211 GPa[33]大14.40%，其杨氏模量值偏大的原因已在课题组前期研究中阐述[24]，此处不在赘述。这些定性和定量结果表明，本研究所采用的MD模拟方法是可行的，计算结果是有效的。

由图2b所示不同孔洞半径下试样的应力-应变曲线可知，随着孔洞半径的增大，试样的应力-应变曲线特性发生显著变化，当孔洞半径为0.25 nm时，试样在屈服之后有明显的塑性屈服段及应变硬化段，但随着孔洞半径的增大（如孔洞半径分别为0.50、0.75和1.00 nm），几乎没有应变硬化阶段，且塑性屈服段越来越短，即随着孔洞半径的增大，应变硬化段逐渐消失，塑性屈服段逐渐减小。

3.2　孔洞对α-Fe试样力学性能的影响

同样对图2b所示应变为0~0.03的区间段进行线性拟合，得到各试样的杨氏模量；采用上屈服点的应力作为屈服应力；取应力急剧下降前的最大值作为极限强度，与之对应的应变定义为断裂应变亦为材料的拉断延伸率；以上所得试样力学性能指标与孔洞半径的关系分别如图3~5所示。

由图3可知，整体趋势上，含孔洞α-Fe试样的杨氏模量随着基体中孔洞半径的增大而减小，这与含孔洞的钛[9]、铝[34]和金纳米薄膜[35]的结论一致。由此可知，随着孔洞半径的增大，试样抵抗变形的能力下降。然在本文的研究中，孔洞在整个基体材料中的体积占比很小，故对试样杨氏模量的影响很小，如孔洞半径为1.00 nm的α-Fe试样的杨氏模量为240.69 GPa，仅比理想试样的减小了0.29%。

由图4可知，试样的屈服应力也随着孔洞半径的增大而减小，且总体上呈线性关系。孔洞半径为1.00 nm的α-Fe试样的屈服应力为12.07 GPa，比理想试样的减小了9.66%。

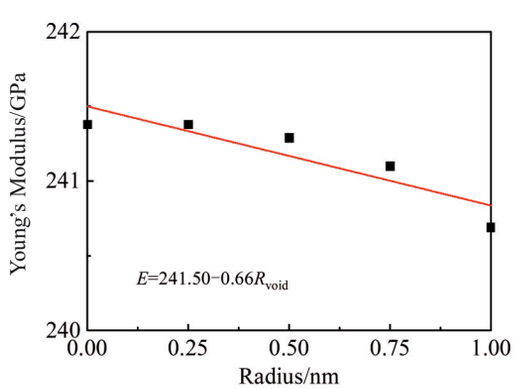

图3　杨氏模量与孔洞缺陷的关系

Fig.3　Relationship between Young's modulus and void radius

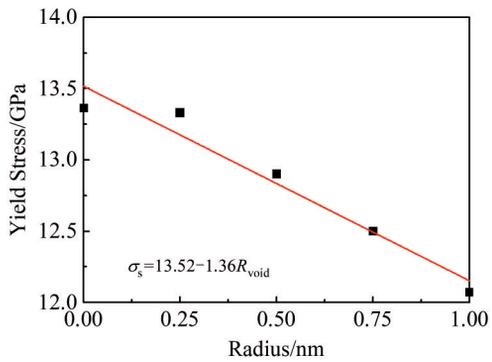

图4　屈服应力与孔洞缺陷的关系

Fig.4　Relationship between the yield stress and void radius

由图5可知，试样的极限强度和拉断延伸率也随着孔洞半径的增大而减小，且总体上也呈线性关系。孔洞半径为1.00 nm的α-Fe试样的极限强度为11.20 GPa，比理想试样的减小了25.73%，而拉断延伸率为0.0763，比理想试样的减小了73.15%。

综上可知，含孔洞缺陷α-Fe试样的杨氏模量、屈服应力、极限强度和拉断延伸率均随着孔洞半径的增大而减小，但减小程度不尽相同。如表2所示，孔洞缺陷对α-Fe试样杨氏模量的影响较小，而对屈服应力、极限强度和拉

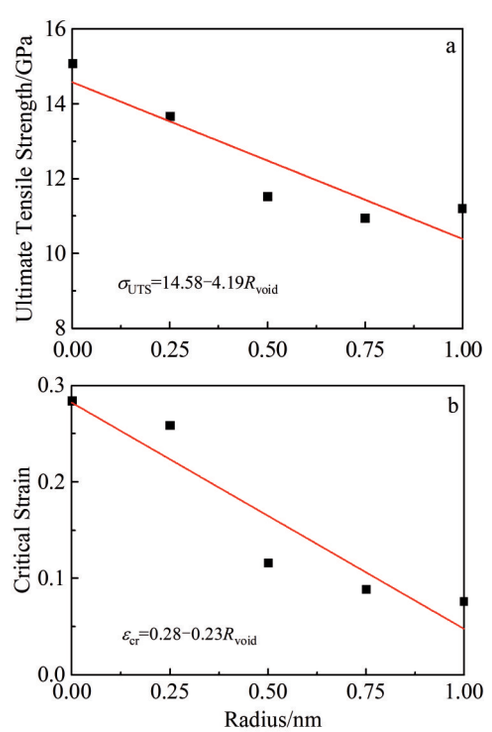

图5　极限强度和拉断延伸率与孔洞缺陷的关系

Fig.5　Relationships of ultimate tensile strength (a) and critical strain (b) with void radius

表 2　含孔洞缺陷 α-Fe 试样力学性能

Table 2　Mechanical properties of α-Fe samples with voids of different radii

Mechanical property index	Void radius/nm				
	0.00	0.25	0.50	0.75	1.00
Young's modulus/GPa	241.38	241.38	241.29	241.10	240.69
Loss of Young's modulus/%	0	0	–0.04	–0.12	–0.29
Yield stress/GPa	13.36	13.33	12.90	12.50	12.07
Loss of yield stress//%	0	–0.22	–3.44	–6.46	–9.66
Ultimate tensile strength/GPa	15.08	13.67	11.52	10.95	11.20
Loss of ultimate tensile strength/%	0	–9.35	–23.61	–27.39	–25.73
Critical strain	0.2842	0.2589	0.1162	0.0890	0.0763
Loss of critical strain/%	0	–8.90	–59.11	–68.68	–73.15

Note: mechanical property loss=[(value of the sample with void defects−value of the ideal sample)/value of the ideal sample]×100%

断延伸率的影响较大。

3.3　晶体结构和缺陷的演化及塑性变形机制分析

为进一步从微观层面探究分析孔洞缺陷对 α-Fe 试样拉伸变形行为影响的内在机理，选取两个具有代表性的含孔洞 α-Fe 试样进行分析，通过 CNA 方法，获得含孔洞 α-Fe 试样变形区域内的晶体结构随拉伸应变的演化情况，所得结果如图 6 所示。

由图 6 可知，对于含孔洞 α-Fe 试样，在弹性变形阶段，其拉伸变形区均呈现出 bcc 晶体结构的特征；然而在塑性变形阶段，由于拉伸应力的作用，其拉伸变形区发生不同程度的相变，具体而言，部分 bcc 结构的原子转变为 fcc 结构，并且在塑性变形阶段的后期还观察到 hcp 结构的原子生成；当试样完全断裂后，除了靠近断口的区域外，拉伸变形区的晶体结构重新恢复为 bcc 结构特征。对于孔洞半径为 0.25 nm 的试样，fcc 结构的区域随着应变的增大而增大，在塑性变形后期大部分原子已转变为 fcc 结构，仅留存有少量 bcc 结构原子，且有 hcp 结构原子出现，并观察到堆垛层错，但裂纹并未首先在孔洞边缘处萌发，如图 6a 所示；而对于孔洞半径为 1.00 nm 的试样，在拉伸应力作用下，孔洞周围首先发生相变，但 fcc 结构仅在局部区域出现，且有少量的 hcp 结构原子在孔洞周围出现，裂纹亦在孔洞边缘处萌发，如图 6b 所示。

实验[36–37]和 MD 模拟[22,31,36,38]中均观察到，试样进入塑性变形后，将产生应力诱发相变机制，在本研究中即发

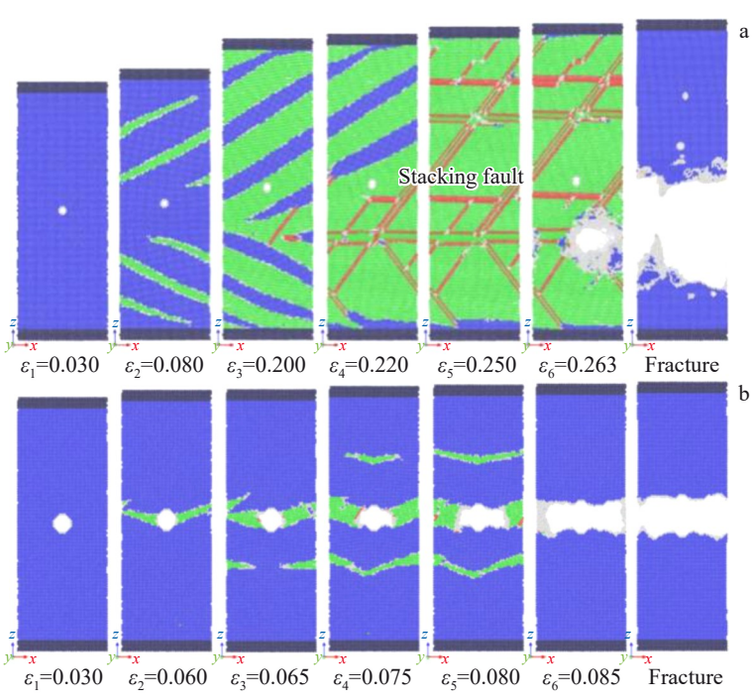

图 6　不同拉伸应变时含孔洞 α-Fe 试样的晶体结构

Fig.6　Crystal structures of α-Fe samples with voids under different tensile strains (blue represents the bcc atoms, green represents the fcc atoms, magenta represents the hcp atoms, white represents the boundary or disordered atoms, and black represents the fixed-end atoms; the same below): (a) the sample with void radius of 0.25 nm and (b) the sample with void radius of 1.00 nm

生 bcc 晶体结构重组为 fcc 结构。然而，值得注意的是生成的 fcc 结构是亚稳定的（bcc 相的自由能低于 fcc 相的，即体系中 bcc 相更稳定）[37]。因此，当含孔洞 α-Fe 试样拉伸至断裂后，其内部应力得以释放，使得生成的亚稳定的 fcc 结构重新恢复为稳定的 bcc 结构，如图 6 所示。这一现象与课题组先前的研究结果[24]及 Wang 等[36]、Ivanisenko 等[37]和 Latapie 等[38]的研究结果相符。同时，由图 6 可知，孔洞尺寸对应力诱发相变机制有直接影响，在本文的模拟中，相对于孔洞半径为 0.25 nm 的试样，孔洞半径为 1.00 nm 的试样，其孔洞尺寸相对较大，孔洞边缘处的应力更高，因而应力诱发相变机制首先在孔洞周围区域发生，如图 6b 所示。这与前期的研究结果吻合[24]，即当其他变形方式受到抑制，为了释放内部应力和协调塑性变形，将发生相变。同时，由图 7 可知，在相同的拉伸应变下，孔洞半径为 1.00 nm 的试样，其孔洞周围区域的原子应变大于孔洞半径为 0.25 nm 的试样，亦表明孔洞半径为 1.00 nm 试样的孔洞边缘处应力更高，更容易诱发相变机制。

为进一步分析含孔洞 α-Fe 试样的塑性变形机制，通过 DXA 方法分析拉伸过程中材料内部位错缺陷的演化情况。对于孔洞半径为 0.25 nm 的试样，在塑性变形后

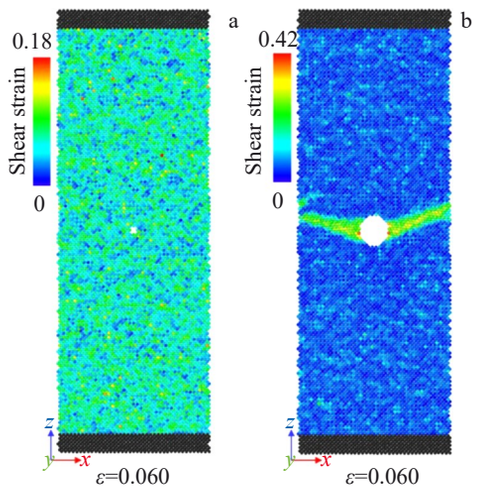

图 7　含孔洞 α-Fe 试样的原子应变

Fig.7　Atomic strain of α-Fe samples with void: (a) sample with void radius of 0.25 nm and (b) sample with void radius of 1.00 nm

期，材料内部出现了以 1/6<112>Shockley 为主的不全位错，如图 8a 所示。然而对于孔洞半径为 1.00 nm 的试样，孔洞作为位错源，位错首先在孔洞周围形核，在整个塑性变形过程中出现多种类型的位错，如在相变区域出现 1/6<112>Shockley 的不全位错和在非相变区域出现

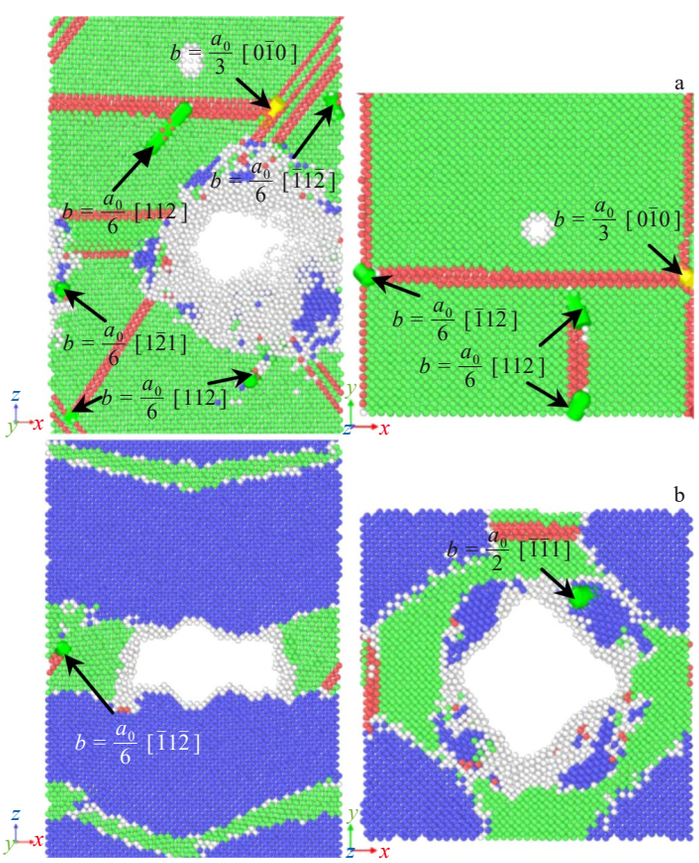

图 8　含孔洞缺陷 α-Fe 试样中形成的位错局部图

Fig.8　Local diagrams of dislocations formed in α-Fe sample with void defect: (a) sample with void radius of 0.25 nm and (b) sample with void radius of 1.00 nm

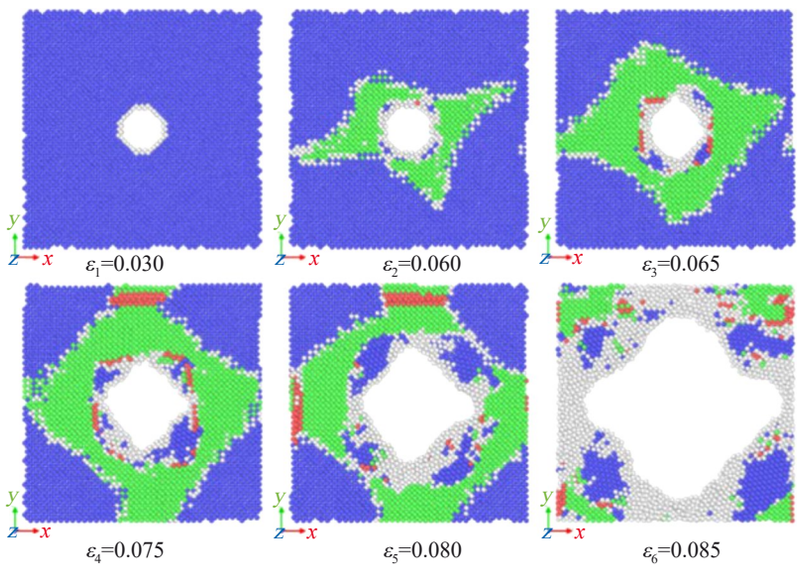

图 9　不同拉伸应变时孔洞缺陷的演化

Fig.9　Evolution of void defect at different tensile strains (sample with an initial void radius of 1.00 nm)

1/2<111>的全位错等，如图 8b 所示；随着应变的增大，孔洞周围出现裂纹，裂纹进一步扩展后，试样断裂，如图 9 所示。

由以上分析可知，对于含孔洞缺陷的 α-Fe 试样，不论孔洞大小如何，塑性变形均表现为拉伸应力诱发的相变和位错滑移混合的机制，但相变区域随着孔洞尺寸的增大而减少。

4　结　论

1）整体趋势上，含孔洞 α-Fe 试样拉伸力学性能的损减与孔洞尺寸正相关，孔洞尺寸越大，试样越容易进入塑性变形阶段；含孔洞试样的杨氏模量、屈服应力、极限强度和拉断延伸率均随着孔洞半径的增大而减小。

2）孔洞缺陷对 α-Fe 试样工程应力-工程应变曲线特征有显著影响，随着孔洞尺寸的增大，试样的塑性屈服段和应变强化段越来越短，应变硬化段甚至消失。

3）单轴拉伸作用下，含孔洞 α-Fe 试样的塑性变形机制为相变和位错滑移相混合的机制。

参考文献　　References

[1] Hao Jiakun(郝嘉琨). *Fusion Reactor Materials*(聚变堆材料)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 11

[2] Liu Jianzhang(刘建章). *Nuclear Structure Materials*(核结构材料)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 197

[3] Lin Yun(林　赟), Ning Guangsheng(宁广胜), Zhang Changyi(张长义) *et al. Atomic Energy Science and Technology*(原子能科学技术)[J], 2016, 50(2): 204

[4] Lin Yun(林　赟), Tong Zhenfeng(佟振峰), Ning Guangsheng(宁广胜) *et al. Nuclear Power Engineering*(核动力工程)[J], 2017, 38(S1): 74

[5] Yu Jinnan(郁金南). *Material Irradiation Effect*(材料辐照效应)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 1

[6] Wang Longbao(王隆保), Luo Shunzhong(罗顺忠), Peng Shuming(彭述明). *Helium in Metals and Metal Tritides*(金属和金属氚化物中的氦)[M]. Harbin: Harbin Engineering University Press, 2015

[7] Cui Xinlin(崔新林), Zhu Wenjun(祝文军), He Hongliang(贺红亮) *et al. Chinese Journal of High Pressure Physics*(高压物理学报)[J], 2007, 21(4): 6

[8] Li Yuancai(李源才), Jiang Wugui(江五贵), Zhou Yu(周　宇). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(7): 2372

[9] Ding Jun(丁　军), Wang Jian(汪　建), Huang Xia(黄　霞) *et al. Materials Reports*(材料导报)[J], 2018, 32(18): 3171

[10] Li Yuancai(李源才), Jiang Wugui(江五贵), Zhou Yu(周　宇). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2020, 56(5): 776

[11] Liu Xiaobo, Xiong Zhen, Fang Zhou *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2019, 48(9): 2745

[12] Kou Peipei(寇佩佩), Feng Ruicheng(冯瑞成), Li Haiyan(李海燕) *et al. Materials Reports*(材料导报)[J], 2020, 34(7): 14140

[13] Cui Xinlin(崔新林), Zhu Wenjun(祝文军), Deng Xiaoliang(邓小良) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2006, 55(10): 5545

[14] Shao Jianli(邵建立), Wang Pei(王　裴), Qin Chengsen(秦承森) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2008, 57(2): 1254

[15] Wu Li, Wang Kun, Xiao Shifang *et al. Computational Materials Science*[J], 2016, 122: 1

[16] Wang Yuntian(王云天), Zeng Xiangguo(曾祥国), Yang Xin(杨鑫). *Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2019, 68(24): 246102

[17] Ji Jiansha(吉建莎), Zhang Xiaoxun(张效迅), Yu Juan(喻　娟) *et al. Atomic Energy Science and Technology*(原子能科学技术)[J], 2016, 50(11): 2034

[18] Xu Shuozhi, Su Yanqing. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2016, 24(8): 085015

[19] Wang Jin, Huang Yuan, Li Chong *et al. Physica B: Condensed Matter*[J], 2017, 521: 275

[20] Rawat S, Raole P M. *Computational Materials Science*[J], 2018, 154: 393
[21] Rawat S, Chaturvedi S. *Philosophical Magazine*[J], 2021, 101(6): 657
[22] Yuan Fuping. *Science China: Physics, Mechanics and Astronomy*[J], 2012, 55(9): 1657
[23] Li Lili, Han Ming. *Applied Physics A*[J], 2017, 123(6): 450
[24] Li Xiang(李 翔), Yin Yihui(尹益辉), Zhang Yuanzhang(张元章). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2022, 51(8): 2881
[25] Ackland G J, Mendelev M I, Srolovitz D J *et al. Journal of Physics: Condensed Matter*[J], 2004, 16(27): S2629
[26] Lee W S, Lin Chifeng. *Materials Science and Engineering A*[J], 2001, 308(1–2): 124
[27] Gao N, Perez D, Lu G H *et al. Journal of Nuclear Materials*[J], 2018, 498: 378
[28] Wang Jin(王 瑾), Yu Liming(余黎明), Li Chong(李 冲) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2019, 55(2): 274
[29] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2012, 20(8): 85007
[30] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2012, 20(4): 045021
[31] Zhang Meng, Chen Juan, Sun Kun *et al. Materials Chemistry and Physics*[J], 2020, 241: 122414
[32] Pan Jinsheng(潘金生), Fan Yudian(范毓殿). *Physical Foundation of Nuclear Materials*(核材料物理基础)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 60
[33] Martienssen W, Warlimont H. *Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data*[M]. New York: Springer, 2005: 132
[34] Liang Hua(梁 华), Li Maosheng(李茂生). *Chinese Journal of Computational Physics*(计算物理)[J], 2019, 36(2): 211
[35] Liu Jialin, Fan Xiaofeng, Gu Changzhi *et al. Computational Materials Science*[J], 2021, 189(1–2): 110255
[36] Wang S J, Wang H, Du K *et al. Nature Communications*[J], 2014, 5: 3433
[37] Ivanisenko Y, MacLaren I, Sauvage X *et al. Acta Materialia*[J], 2006, 54(6): 1659
[38] Latapie A, Farkas D. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2003, 11(5): 745

Molecular Dynamics Simulation of the Effects of Void Defect on the Tensile Deformation Behavior of *α*-Fe

Li Xiang[1], Yin Yihui[2], Zhang Yuanzhang[2], Li Jicheng[2], Li Hongxiang[3]
(1. Key Laboratory of Testing Technology for Manufacturing Process, Ministry of Education, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)
(2. Institute of Systems Engineering, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China)
(3. School of Civil Engineering and Architecture, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

Abstract: To further investigate the effects of void defect on the plastic deformation behavior of *α*-Fe under tensile load, the molecular dynamic models of the *α*-Fe samples with the void defects were established and related simulations under uniaxial tension were carried out for a series of models. The results show that overall, the deterioration of tensile mechanical properties of the sample with void is positively related to the void size. The larger the void size, the easier the occurrence of plastic deformation stage for sample. Overall, the Young's modulus, yield stress, ultimate tensile strength and tensile elongation of the samples containing void decrease with increasing the radius of void. The plastic deformation mechanism is of a mixture of the tensile stress-induced structural phase transition and the dislocation slip. However, the characteristics of stress-strain curves change significantly with increasing the radius of void, the plastic yield stage and strain hardening stage of the sample become shorter, and the strain hardening stage even vanishes. The research deepens the understanding of the effects of void defect on the mechanical properties and plastic deformation mechanisms of metals and lays a useful foundation for the subsequent analysis and study of the physical and mechanical properties of polycrystalline *α*-Fe materials under various conditions.

Key words: *α*-Fe; void defect; phase transition; dislocation slip

Corresponding author: Li Xiang, Ph. D., Key Laboratory of Testing Technology for Manufacturing Process, Ministry of Education, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, P. R. China, E-mail: mylixiang@swust.edu.cn