

微结构对 NiTi 形状记忆合金 相变行为影响的分子动力学模拟*

胡玲玲, 刘宏宇, 殷秋运

中山大学航空航天学院, 广东 深圳 518107

摘要: NiTi 形状记忆合金复杂的相变与塑性变行为与其微结构演化密切相关。通过分子动力学模拟, 文章研究了晶界、初始微缺陷对于 NiTi 合金动力学响应行为的影响。结果表明, 晶界能是影响多晶 NiTi 合金相变应力的主控因素之一。随着晶界能的减小, 马氏体相变应力逐渐减小。另外, 刃型位错条件下, NiTi 合金主要发生 B19 塑性滑移。Ti 空位缺陷与螺型位错条件下, 存在 B19→B19' 相变行为与塑性变形竞争。二者区别主要在于影响 NiTi 合金塑性变形模式。Ti 空位缺陷条件下, 以塑性滑移变形为主导。螺型位错条件下, 以孪晶塑性变形为主导。

关键词: NiTi 形状记忆合金; 晶界; 微缺陷; 相变

中图分类号: O369 **文献标志码:** A **文章编号:** 2097-0137 (2022) 06-0081-08

The effect of microstructure on the phase transformation behavior of NiTi shape memory alloys: A molecular simulation

HU Lingling, LIU Hongyu, YIN Qiuyun

School of Aeronautics and Astronautics, Sun Yat-sen University, Shenzhen 518107, China

Abstract: The microstructure evolution dominates the complicated phase transformation and plastic deformation of NiTi shape memory alloys (SMAs). In the present study, the effects of grain boundary energy and initial micro-defects on the mechanical behavior of NiTi are investigated through molecular dynamics simulation. It is found that the grain boundary energy is one of the main controlling factors for the phase transformation behavior of NiTi. The martensite transformation stress decreased with the decrease of grain boundary energy. In addition, NiTi alloys with initial edge dislocation mainly experience B19 plastic deformation. Moreover, under initial Ti-vacancy defects and screw dislocation condition, the competition of phase transformation and plastic deformation is observed. The difference is the dominated the plastic deformation modes of NiTi. NiTi with initial Ti-vacancy mainly experiences dislocation slide while NiTi with initial screw dislocation mainly experiences twinning deformation.

Key words: NiTi shape memory alloys; grain boundary; micro-defects; phase transformation

NiTi 合金是一类可以通过马氏体-奥氏体相变与逆相变行为实现超弹性与形状记忆效应的功能

性材料。因其成本低廉、性能优越, 被广泛应用于航空航天, 生物医疗等领域^[1-3]。了解 NiTi 合金

* 收稿日期: 2022-03-31

录用日期: 2022-04-16

网络首发日期: 2022-05-07

基金项目: 国家自然科学基金(12172388, 11802349)

作者简介: 胡玲玲(1980年生), 女; 研究方向: 力学; E-mail: hulingl@mail.sysu.edu.cn

通信作者: 殷秋运(1990年生), 男; 研究方向: 力学; E-mail: yinqy5@mail.sysu.edu.cn

的动力学性能是将其运用于不同领域的重要基础。Chen等^[4]研究了中低应变率条件下NiTi形状记忆合金动力学响应行为,发现马氏体相变应力随着应变率的增加而增大。Nemat-Nasser等^[5]将应变率范围扩展到了 10^4 s^{-1} 量级,发现当应变率超过一定临界值(约 10^4 s^{-1})后,最终残余结构为奥氏体塑性变形,无马氏体相残余。因此认为存在临界阈值,当应变率超过该值后,只会出现奥氏体屈服,不会发生马氏体相变行为。但是在更高应变率条件下,研究人员发现冲击波加载区域存在大量马氏体组织。且随着冲击压力的减小,残留组织结构变为非晶结构^[6-7]。

常用的NiTi形状记忆合金主要是通过一系列热轧、冷轧以及后续热处理得到^[8]。处理方式会导致合金中存在大量纳米晶粒、位错等微缺陷。这些初始微结构,对NiTi形状记忆合金复杂的相变行为以及塑性变形行为有重要影响。Aslan等^[9]通过实验研究了平均晶粒粒径对于NiTi合金超弹性性能的影响,发现随着平均晶粒粒径的减小,马氏体相变应力略有增加,且马氏体起始应力与完成应力差值增加。Bashir等^[10]采用梯度退火或梯度老化处理方法,可以调节NiTi合金内部晶粒分布,从而获得具有梯度相变行为的NiTi形状记忆合金。

NiTi形状记忆合金复杂的力学响应行为是其微观组织结构演化的宏观表现,了解其微结构的演化历程,是理解合金复杂相变行为以及塑性变形的的基础。通过现有的实验手段,难以考察其微结构演化规律。利用分子动力学模拟,可以直接获得动载条件下原子、分子的运动轨迹,对于解释宏观现象的微观机理具有独特的优势。近年来,已有大量分子动力学研究工作,来研究NiTi合金复杂相变行为^[11-17]。Zhong等^[18]研究了单晶NiTi合金纳米线在高应变率下的相变行为。结果表明,NiTi纳米线在加载过程中经历了奥氏体 $B2 \rightarrow B19 \rightarrow B19' \rightarrow BCO$ 马氏体相变过程,且奥氏体 $B2 \rightarrow B19$ 马氏体相变应力随测试温度增加而增加。Mirzaifar等^[19]发现NiTi合金可以通过马氏体 $B19$ 相的重取向行为发生大变形的微观机理。Won-Seok等^[17]研究了多晶NiTi合金温度、应力相关的相变行为。Wang等^[20]研究了梯度晶粒结构对NiTi合金相变行为的影响,发现随着平均晶粒粒径的增加,不可恢复应变减小。可以看到,上述研究工作主要

集中于考察NiTi合金在动态加载过程中的微结构形核与演化。但是对于初始微结构,特别是初始微缺陷对微观组织结构的演化历程的影响研究较少。

本文通过构建不同平均晶粒粒径、初始微缺陷的NiTi合金微观数值模型,研究了晶界能、微缺陷对NiTi合金相变行为的影响。通过改变平均晶粒粒径,考察了晶界能对于相变应力的影响。通过改变初始微缺陷形式,得到了不同微缺陷对于变形模式的影响,从而得到初始微结构对NiTi合金复杂相变行为的影响规律。

1 方法

1.1 多晶模型

通过Voronoi方法建立了不同平均晶粒粒径的NiTi形状记忆合金微观数值模型,通过开源软件LAMMPS (large-scale atomic/molecular massively parallel simulation)进行动态加载数值模拟^[21]。模型尺寸为 $15\text{ nm} \times 15\text{ nm} \times 15\text{ nm}$,晶粒的平均粒径 d 分别为4、6、8、10和12 nm。为了消除边界效应,三轴方向均设置为周期性边界条件。热平衡弛豫阶段,采用NPT系综^[22]。环境温度为400 K,弛豫时间200 ps。为了提高模拟精度,步长设置为1 fs,弛豫步数为 2×10^5 。弛豫完成后,通过控制原子位移实现均匀动态加载,应变率为 $3.3 \times 10^8\text{ /s}$ 。

原子间相互作用通过2NN-MEAM^[14, 23]描述,该势函数可以准确描述NiTi合金由于温度、应力诱导的相变行为,多用于多晶NiTi合金相变行为的计算模拟。其表达式为

$$E = \sum_i \left[F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(j \neq i)} S_{ij} \phi_{ij}(R_{ij}) \right],$$

式中 E 表示整个系统总能量, F_i 表示电子云密度为 ρ_i 位置处的嵌入势, S_{ij} 表示开关函数, $\phi_{ij}(R_{ij})$ 表示相对距离为 R_{ij} 的原子 i 与原子 j 之间的对势。其中,电子云密度 ρ_i 由多个具有不同角动量的电子云密度 $\rho^{\alpha(h)}(R)$ 加权平均得到,单个电子云密度形式为

$$\rho^{\alpha(h)}(R) = \rho_0 \exp \left[-\beta^{(h)} \left(R/r_e - 1 \right) \right],$$

其中 ρ_0 、 $\beta^{(h)}$ 分别为可调控电子云密度比例因子以及衰变长度因子。 r_e 为平衡构型时的晶格长度。

1.2 微缺陷模型

通过 atomsk 构建存在刃型位错, 螺型位错以及 Ti 空位缺陷的 NiTi 合金数值计算模型, 并通过 LAMMPS 进行动态加载数值模拟。模型尺寸为 $15\text{ nm} \times 15\text{ nm} \times 15\text{ nm}$ 。刃型位错线与螺型位错线均设置于模型中部, Ti 空位缺陷的 Ti 原子缺失比例设为 5% (即随机删除 5% 的 Ti 原子)。边界条件以及热平衡弛豫条件与多晶模拟一致。弛豫完成后, 通过控制原子位移实现均匀动态加载。加载方向设置为 $[110]$ 晶向, 应变率为 $3.3 \times 10^8 / \text{s}$ 。原子间相互作用通过 EAM 势函数描述^[16], 其表现形式为

$$E = \sum_i \left[\sum_{j \neq i} A_{\alpha\beta} \exp \left[-p_{\alpha\beta} \left(R_{ij} / r_{\alpha\beta} - 1 \right) \right] - \sqrt{\sum_{j \neq i} F_{ij} \left(R_{ij} \right)} \right],$$

其中

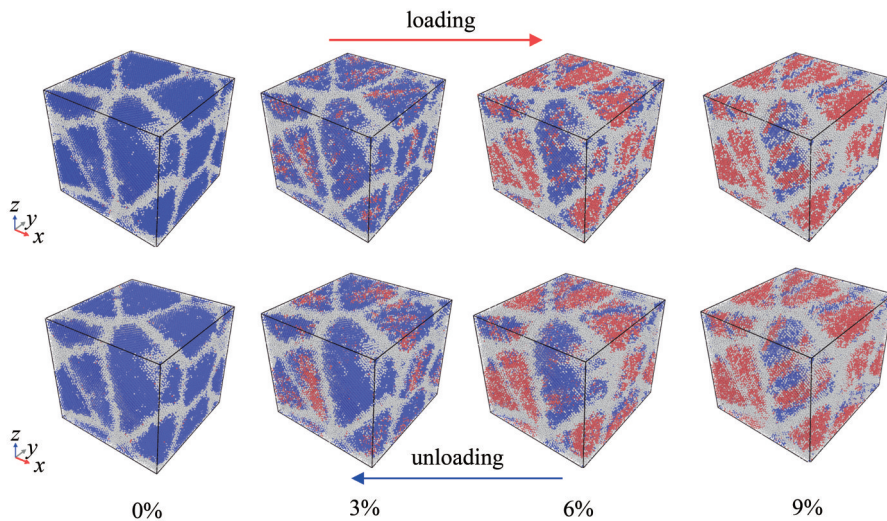
$$F_{ij} \left(R_{ij} \right) = \begin{cases} \xi_{\alpha\beta}^2 \exp \left[-2q_{\alpha\beta} \left(R_{ij} / r_{\alpha\beta} - 1 \right) \right], & R_{ij} \leq r_1, \\ c_{3,\alpha\beta} \left(R_{ij} - r_1 \right)^3 + c_{2,\alpha\beta} \left(R_{ij} - r_1 \right)^2 \\ + c_{1,\alpha\beta} \left(R_{ij} - r_1 \right) + c_{0,\alpha\beta}, & r_1 < R_{ij} \leq r_c. \end{cases}$$

α, β 分别表示两种原子类型, r_1, r_c 分别为可调整的相对距离以及计算截断半径。 $c_{h,\alpha\beta} (h=0, 1, 2, 3)$ 为拟合参数, 需保证 r_1 和 r_c 处函数连续, 且一阶导数连续。其余参数均为原子本征参数。该势函数对于应力诱导的相变行为描述准确, 计算代价小, 可以描述更大的模型。

2 结果与讨论

2.1 晶界能对于相变行为的影响规律

图 1 给出了平均晶粒粒径 $d=10\text{ nm}$ 的 NiTi 形状记忆合金在加卸载过程中的相变与逆相变行为。采用近邻原子分析方法 (CNA, common neighbor analysis) 表述结构演化历程, 可根据该方法, 计算得到不同的 CNA 值, 代表不同的原子结构^[24]。由图可以看出, 加载过程中, 晶粒内部先出现相变形核区。在持续加载过程中, 相界逐渐向晶界方向扩展, 相变区域占比增大。在卸载过程中, 逆相变行为首先形核于晶界处, 而后逐步向内演化, 与加载过程相反。



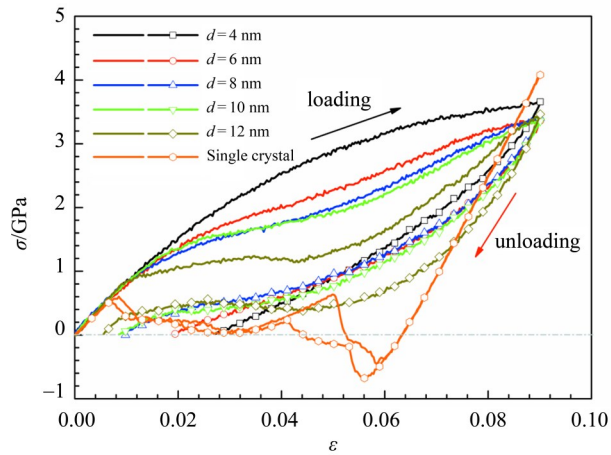
蓝色区域表示初始奥氏体相, 灰色部分表示晶界以及位错等结构, 红色区域表示马氏体相。

图1 $d=10\text{ nm}$ NiTi 合金相变与逆相变行为

Fig. 1 The phase transformation and reverse phase transformation of NiTi with grain size of 10 nm

为了更好地了解晶粒大小对相变行为的影响规律, 考察了不同平均晶粒粒径 NiTi 合金在加卸载过程中的力学响应行为。图 2 给出了加载应变率为 $3.3 \times 10^8 / \text{s}$ 的拉伸工况下, 不同平均晶粒粒径 NiTi 合金的应力应变曲线。可以看出, 随着平均晶

粒粒径的增加, 卸载后的残余变形逐步减少, 单晶时卸载后完全恢复到初始形状。另一方面, 随着平均晶粒粒径的增加, 马氏体相变起始应力逐渐减小, 单晶时相变应力最低。值得注意的是, 对于平均晶粒粒径为 8 和 10 nm 的两种工况, 应力



不带标志的表示加载过程,有标志的表示卸载过程。

图2 不同平均晶粒粒径NiTi合金的应力应变曲线

Fig. 2 The stress-strain curves of NiTi with different grain sizes

应变曲线重合度较高,说明平均晶粒粒径只是影响相变行为的因素之一,还存在其他影响因素。

微结构演化历程决定了材料的宏观变形特征,从而影响材料的力学响应行为。加卸载过程中,不同平均晶粒粒径NiTi合金的整体结构平均CNA(初始奥氏体相CNA=3,马氏体相CNA=5,位错、晶界CNA=5)变化趋势见图3。由图可以看出,当平均晶粒粒径小于8 nm时,加卸载结束后CNA幅值有一定提高。随着平均晶粒粒径的增加,CNA增幅减小。这是因为小晶粒条件下,由于晶界占

比较大,约束了马氏体相变行为的形核及演化,提高了马氏体相变应力。同时,对于金属材料,当平均晶粒粒径小于一定阈值时,随着晶粒的减小材料的屈服应力减小^[25]。因此,在小晶粒条件下,存在奥氏体屈服和马氏体相变竞争机制,加载结束后塑性变形行为不可恢复,从而导致CNA幅值的增加。当 $d > 10$ nm时,卸载后CNA增幅相对较小。特别地,单晶时初始CNA与完成加卸载后的CNA值完全一样。这说明加载过程中,变形行为主要以可恢复的马氏体相变为主导。此外,8和10 nm的平均CNA变化趋势相似度较高,说明这两种工况下的结构响应行为较为近似。

平均晶粒粒径的不同将引起晶界占比的变化。因此,晶界对于相变行为的影响不可忽略。图4给出了晶界能(E)对于相变应力的影响规律。可以看出,随着平均晶粒粒径的增加,由于晶界占比减小,引起晶界能减小。晶界能较大时,相变起始应力 σ_{is} 与完成应力 σ_{if} 均较大,表明晶界能对相变行为起阻碍作用。另一方面,二者之间的差值 $\Delta\sigma = \sigma_{if} - \sigma_{is}$ 随着晶界能的增加而增加。这是由于晶界处晶格畸变能较大时,晶界处易发生塑性变形行为,该行为将抑制奥氏体-马氏体相界的迁移,从而阻碍相变行为的演化,引起相变应力的提升。需注意的是,对于本文计算工况模型,平均晶粒粒径为8和10 nm的晶界能基本一致,两种

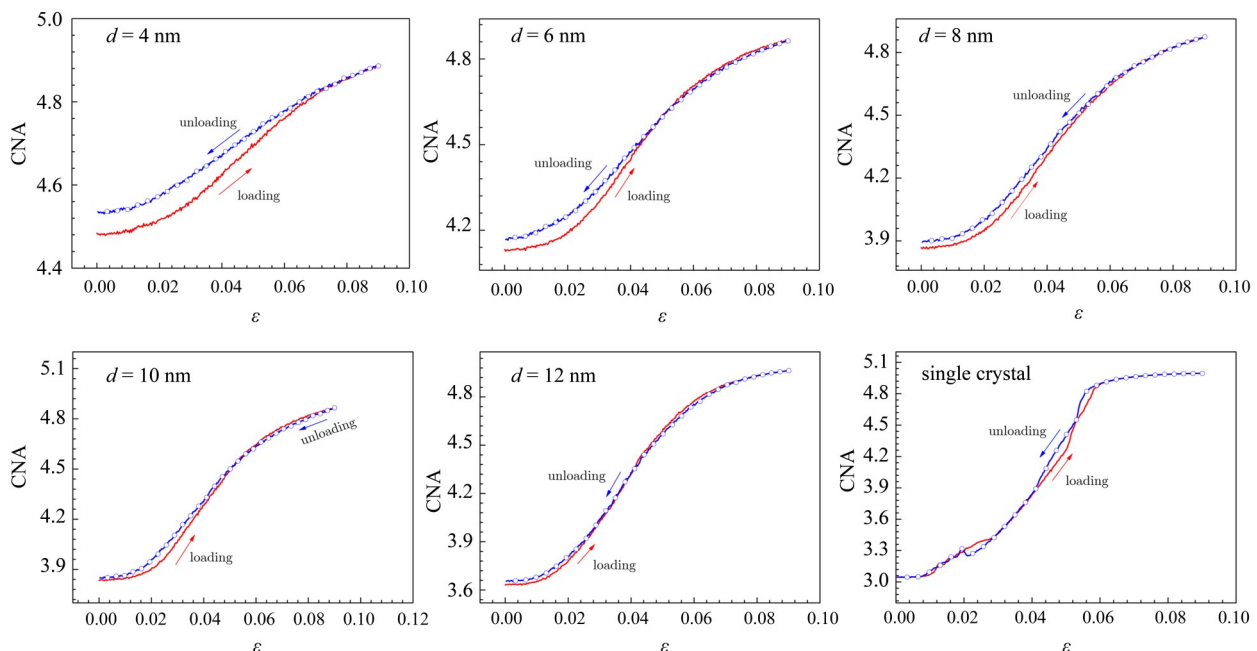


图3 不同平均晶粒粒径平均CNA演化历程

Fig. 3 The evolution of average CNA with different grain sizes

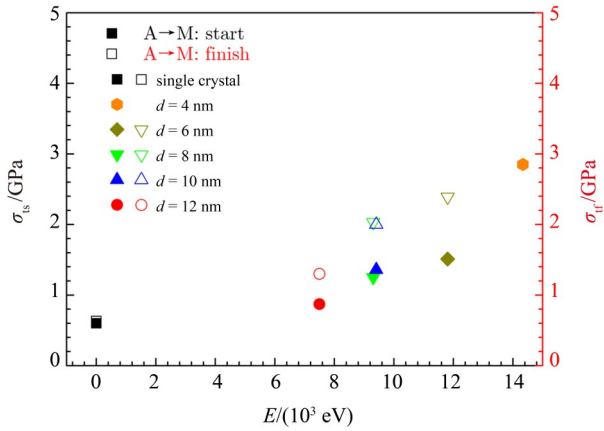


图 4 晶界能对相变应力的影响

Fig. 4 The influence of interfacial energy for phase transformation

模型的相变起始应力 σ_{ls} 与完成应力 σ_{rf} 也基本一致。结合前述应力应变关系以及微结构演化关系, 说明与平均晶粒粒径相比, 晶界能对于相变行为的影响更大。

2.2 微缺陷对相变行为的影响

图 5 给出了应变率为 $3.3 \times 10^8/s$ 时, 存在刃型位错、Ti 空位缺陷以及螺型位错等 3 种缺陷的 NiTi 合金的压缩应力应变曲线。由图可以看出, 刃型位错对于奥氏体 B2-马氏体 B19 相变应力以及 B19 塑性屈服应力影响较大。对于存在刃型位错的合金, B2-B19 相变应力与相变应变均有所减小。同时, B19 屈服应力出现较大的减小, 下降了约 50%。螺型位错以及 Ti 空位缺陷的塑性屈服应力基本一致。

在加卸载过程中, 存在 3 种缺陷形式的 NiTi 合

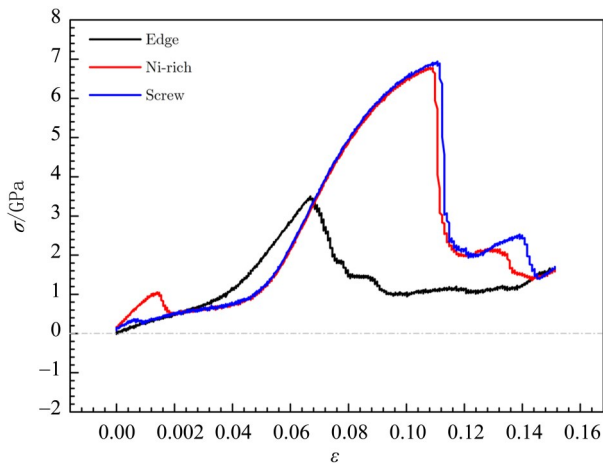


图 5 存在刃型位错、Ti 空位缺陷以及螺型位错的 NiTi 合金的应力应变

Fig. 5 The stress-strain of NiTi with different defect types: Edge, Ni-rich and Screw

金的平均 CNA 变化趋势见图 6。由图可以看出, 刃型位错条件下, 加载过程中由于位错线的存在显著降低了材料承载能力, 响应行为主要以初始位错线滑移为主, 卸载后微结构与初始微结构变化不大。螺型位错以及 Ti 空位缺陷条件下, 存在塑性变形与相变行为的竞争机制, 加载过程中大部分结构发生了 B19' 相变行为。进一步加载下,

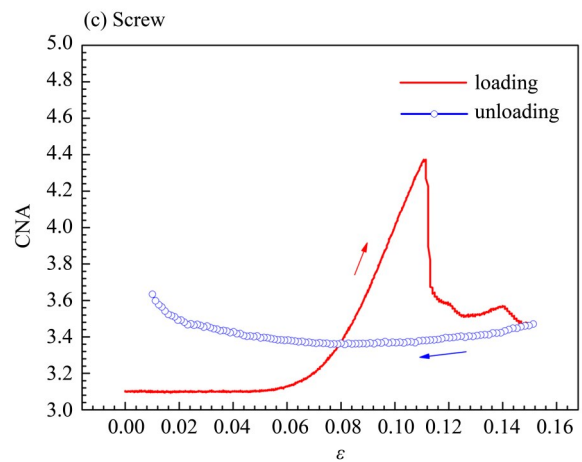
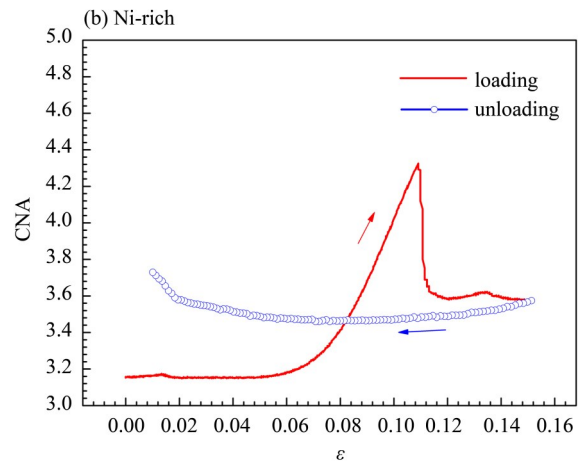
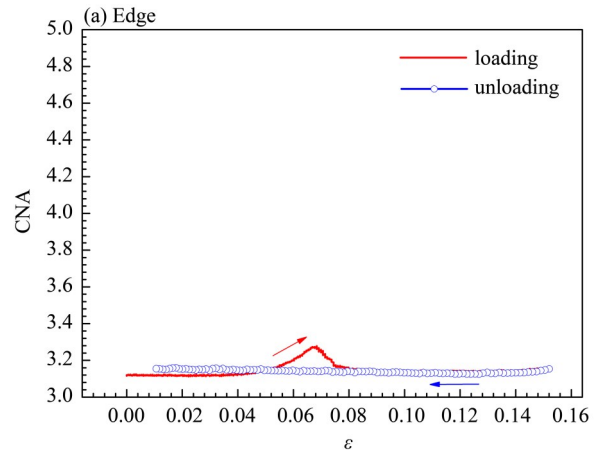


图 6 存在刃型位错、Ti 空位缺陷以及螺型位错的 NiTi 合金的 CNA 变化趋势

Fig. 6 The CNA evolutions of NiTi with different defect types: Edge, Ni-rich and Screw

出现马氏体 B19' 塑性滑移、孪晶变形行为。且由于应力的快速卸载引起应变能的减小, 导致自由能的增加, 为逆相变行为提供了推动力。完全卸载后, CNA 幅值与初始值相比有了较大的提升, 表明已发生的塑性变形结构得以保留。

图 7 给出了 3 种缺陷形式的 NiTi 合金在不同应变时的径向分布函数(RDF, radial distribution func-

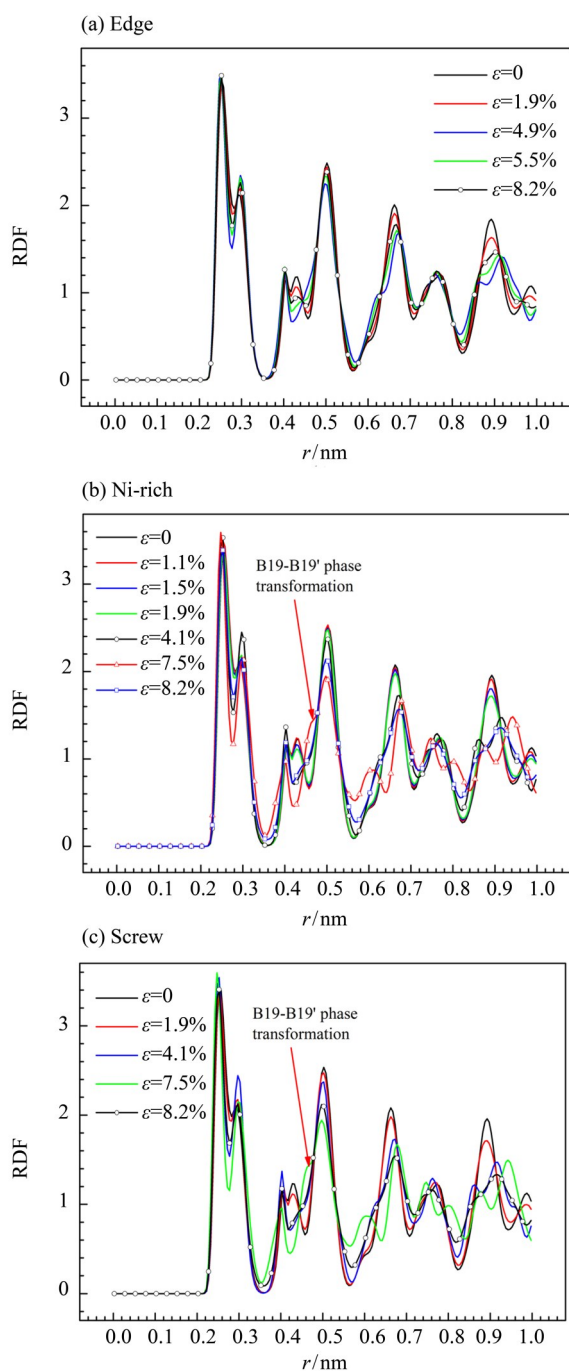


图 7 存在刃型位错、Ti 空位缺陷以及螺型位错的 NiTi 合金的 RDF 变化

Fig. 7 The RDF evolutions of NiTi with different defect types: edge, Ni-rich and screw

tion), 图中横坐标 r 表示与参考中心的距离。由图可以看出, 刃型位错条件下, 整体结构基本保持不变。Ti 空位缺陷以及螺型位错条件下, 当应变增加至应变 $\varepsilon=7.5\%$ 时, 出现了整体结构的改变趋势, 表明存在 B19-B19' 相变结构转变。

图 8~10 分别给出了刃型位错、Ti 空位缺陷以

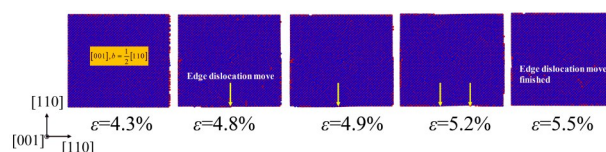


图 8 刃型位错 NiTi 合金微结构演化
Fig. 8 Micro-structure evolution of NiTi with initial edge dislocation

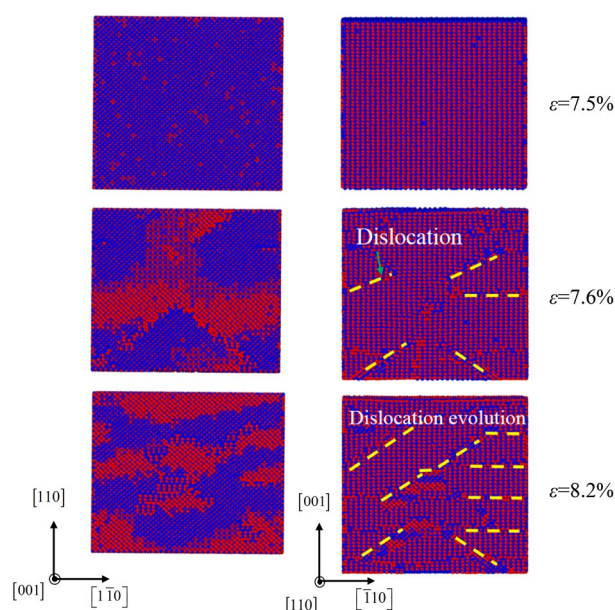


图 9 Ti 空位缺陷 NiTi 合金微结构演化
Fig. 9 Micro-structure evolution of NiTi with initial Ti-vacancy defects

及螺型位错结构的 NiTi 合金的微结构演化历程。从图 8 可以看出, 当初始刃型位错伯氏矢量方向与加载方向平行时, 加载至 4.5% 的应变时, 位错线开始由初始中心位置沿着伯氏矢量方向缓慢移至一端。位错线滑移过程中, 应力幅值缓慢减小。从图 9 可以看出, Ti 空位缺陷条件下, 当应变为 7.5% 时, 开始出现位错滑移。随着变形的增加, 多条位错线同时出现, 导致应力快速下降。由于位错的出现, 抑制了相变行为, 且应变能减小引起的自由能增加将导致逆相变行为的产生。加载至 8.2% 的应变时, 多条位错交叠, 使得结构可以继续承载, 应力幅值缓慢增加。塑性变形以位错

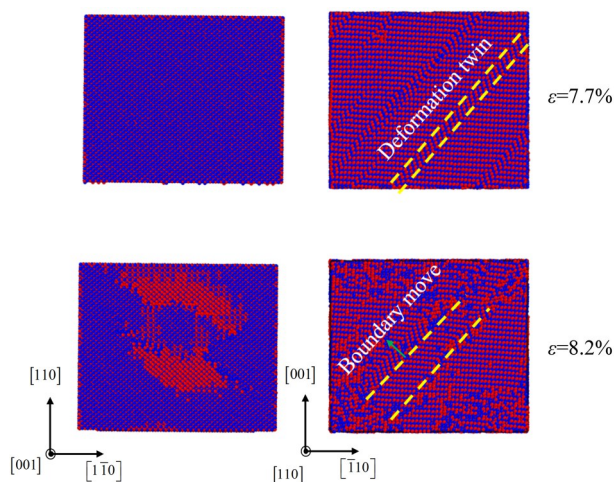


图10 螺型位错NiTi合金微结构演化

Fig. 10 Micro-structure evolution of NiTi with initial screw dislocation

滑移为主。从图10可以看出, 缺陷为螺型位错时, 塑性变形行为以孪晶变形为主。在加载过程中, 孪晶区域不断增加, 当应变增加至8.2%时, 多条孪晶带演化完成, 结构可以继续承载。

上述结果表明, 不同缺陷对NiTi合金相变及塑性变形行为影响较大。初始为刃型位错的合金结构以该刃型位错滑移为主导, 屈服应力较小。初始为螺型位错时, Ti空位缺陷对B19'相变行为影响不大, 对逆相变后的塑性变形模式影响较大。螺型位错以孪晶变形为主导, Ti空位缺陷以塑性

滑移变形为主导。

4 结论

通过分子动力学模拟, 本文研究了平均晶粒粒径及初始微缺陷对NiTi形状记忆合金动力学响应行为的影响规律。主要结论如下:

1) 晶界能是影响相变应力的主导因素。随着晶界能减小, NiTi合金发生相变行为所需应力减小。在极小晶粒条件下, 由于晶界能较大, NiTi合金相变行为受抑制, 加载过程中存在奥氏体塑性变形与马氏体相变行为的竞争。完全卸载后, 存在明显不可恢复的塑性变形。

2) 微缺陷的形式对于相变行为影响存在明显差异性。初始缺陷为刃型位错情况, 微缺陷的存在显著降低了B19结构的屈服应力, 使其低于B19→B19'相变应力。因此加载过程中主要发生位错滑移塑性变形。初始缺陷为Ti空位缺陷以及螺型位错时, 加载过程中均出现明显B19'相变行为。但在进一步加载时, 出现塑性变形, 抑制了B19'相变行为的演化。且弹性能的释放引起的自由能增加诱导了B19'→B19逆相变行为的发生。二者的主要区别在于塑性变形模式的不同。存在Ti空位缺陷NiTi合金的塑性变形以位错滑移为主导, 而存在螺型位错的NiTi合金则发生以孪晶变形为主导的塑性变形行为。

参考文献:

- [1] COSTANZA G, TATA M E. A novel methodology for solar sail opening employing shape memory alloy elements [J]. *Journal of intelligent material systems and structures*, 2018, 29(9): 1793-1798.
- [2] BIESIEKIERSKI A, WANG J, GEPREEL A H, et al. A new look at biomedical Ti-based shape memory alloys [J]. *Acta Biomaterialia*, 2012, 8(5): 1661-1669.
- [3] PEQUEGNAT A, VLASCOV M, DALY M, et al. Dynamic actuation of a multiple memory material processed nitinol linear actuator [C]//*Proceedings of the ASME 2011 Conference on Smart Materials, Adaptive Structures and Intelligent Systems*, F, 2011.
- [4] CHEN W W, WU Q P, KANG J H, et al. Compressive superelastic behavior of a NiTi shape memory alloy at strain rates of 0.001-750 s⁻¹ [J]. *International Journal of Solids & Structures*, 2001, 38(50/51): 8989-8998.
- [5] NEMAT-NASSER S, GUO W G. Superelastic and cyclic response of NiTi SMA at various strain rates and temperatures [J]. *Mechanics of Materials*, 2006, 38(5/6): 463-474.
- [6] LIAO Y, CHANG Y, DONG L, et al. Deformation induced martensite in NiTi and its shape memory effects generated by low temperature laser shock peening [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 112(3): 178-186.
- [7] 夏伟光, 吴先前, 魏延鹏, 等. 激光冲击强化对NiTi形状记忆合金力学性质的影响 [J]. *中国激光*, 2013, 40(11): 1103002.
- [8] MITWALLY M E, FARAG M. Effect of cold work and annealing on the structure and characteristics of NiTi alloy [J]. *Materials Science & Engineering A*, 2009, 519(1/2): 155-166.
- [9] AHADI A, SUN Q. Effects of grain size on the rate-dependent thermomechanical responses of nanostructured superelastic NiTi [J]. *Acta Materialia*, 2014, 76:

- 186–197.
- [10] SHARIAT B S, MENG Q, MAHMUD A S, et al. Functionally graded shape memory alloys: Design, fabrication and experimental evaluation [J]. *Materials & Design*, 2017, 124(Supplement C): 225–237.
- [11] AHADI A, SUN Q. Stress hysteresis and temperature dependence of phase transition stress in nanostructured NiTi—Effects of grain size [J]. *Applied Physics Letters*, 2013, 103(2): 021902.
- [12] CHEN J, WU Y, YIN H. In situ multi-field investigation of grain size effects on the rate-dependent thermo-mechanical responses of polycrystalline superelastic NiTi [J]. *Materials Letters*, 2020, 259(15): 126845.
- [13] GUR S, FRANTZISKONIS G N, MURALIDHARAN K. Atomistic simulation of shape memory effect (SME) and superelasticity (SE) in nano-porous NiTi shape memory alloy (SMA) [J]. *Computational Materials Science*, 2018, 152: 28–37.
- [14] KO W-S, GRABOWSKI B, NEUGEBAUER J. Development and application of a Ni-Ti interatomic potential with high predictive accuracy of the martensitic phase transition [J]. *Physical Review B*, 2015, 92(13): 134107.
- [15] XIE G, WANG F, SONG B, et al. Grain size dependence of cracking performance in polycrystalline NiTi alloys [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2021, 884: 161132.
- [16] ZHONG Y, GALL K, ZHU T. Atomistic study of nanotwins in NiTi shape memory alloys [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 110(3): 033532.
- [17] KO W S, MAISEL S B, GRABOWSKI B, et al. Atomic scale processes of phase transformations in nanocrystalline NiTi shape-memory alloys [J]. *Acta Materialia*, 2017, 123: 90–101.
- [18] ZHONG Y, GALL K, ZHU T. Atomistic characterization of pseudoelasticity and shape memory in NiTi nanopillar [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60: 6301–6311.
- [19] MIRZAEIFAR R, GALL K, ZHU T, et al. Structural transformations in NiTi shape memory alloy nanowires [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 115(19): 635–311.
- [20] WANG B, KANG G, KAN Q, et al. Molecular dynamics simulations to the pseudo-elasticity of NiTi shape memory alloy nano-pillar subjected to cyclic compression [J]. *Computational Materials Science*, 2017, 131: 132–138.
- [21] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1–19.
- [22] NOSÉ S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1984, 81(1): 130511.
- [23] BYEONG-JOO L, BASKES M I, HANCHUL K, et al. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for bcc transition metals [J]. *Physical Review B*, 2001, 64: 184102.
- [24] STUKOWSKI A. Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials [J]. *Simulation in Materials Science Engineering*, 2012, 20(4): 045021.
- [25] 卢柯, 刘学东. 纳米晶体材料的Hall-Petch关系 [J]. *材料研究学报*, 1994, 8(5): 385–391.

(责任编辑 王海蓉)

(终校 本刊编辑部)