

不同空位浓度 γ -TiAl 合金剪切过程分子动力学模拟

高 鑫¹ 温余远² 王克鲁¹ 李 鑫¹ 张开铭¹ 刘 杰¹
(1.南昌航空大学航空制造工程学院;2.宜春市科技创新促进中心)

摘 要 利用分子动力学分析了不同空位浓度的 Al 空位和 Ti 空位对 γ -TiAl 合金剪切力学性能的影响,重点研究了含空位 γ -TiAl 合金的温度效应。结果表明,随着空位浓度增加,弹性模量没有太大变化,但剪切强度逐渐减小,且含 Al 空位 γ -TiAl 合金的剪切强度要高于含 Ti 空位 γ -TiAl 合金。在剪切过程中,材料偏向于离边界更近处的空位处形成位错源,进而向材料内部发射位错,并且出现了类似于宏观材料的颈缩现象。进一步分析了温度对空位浓度为 0.5% 的 γ -TiAl 合金剪切强度的影响,发现随着温度的增加, γ -TiAl 合金剪切强度总体呈下降趋势。

关键词 分子动力学; γ -TiAl;空位浓度;剪切强度;温度效应

中图分类号 TG146.4;TM743 **文献标志码** A

DOI:10.15980/j.tzzz.2023.03.011

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Molecular Dynamics Simulation on γ -TiAl Alloy Shear Process with Different Vacancy Concentrations

Gao Xin¹, Wen Yuyuan², Wang Kelu¹, Li Xin¹, Zhang Kaiming¹, Liu Jie¹
(1.School of Aeronautical Manufacturing Engineering, Nanchang Hangkong University;
2.Yichun Science and Techonlogy Innovation Promotion Center)

Abstract: The molecular dynamics simulation was carried out to investigate the influence of different Al and Ti vacancy concentrations on the shearing properties of γ -TiAl, and temperature effect of γ -TiAl with vacancy was emphasized. The results indicate that with the increase of vacancy concentration, the elastic modulus shows little change, while the shearing strength is decreased gradually, and the shearing strength of γ -TiAl containing Al vacancy is higher than that of one containing Ti vacancy. During the shear process, dislocation sources tend to form at vacancies closer to the boundary, then emitting dislocations into material interior, and the necking phenomenon similar to that in macroscopic materials occurs. The effects of temperature on γ -TiAl with 0.5% vacancy concentrations are further analyzed. The results reveal that the shearing strength is overall decreased with the increase of temperature.

Key Words: Molecular Dynamics, γ -TiAl, Vacancy Concentration, Shearing Strength, Temperature Effect

γ -TiAl 合金具有密度低、比强度高、抗氧化能力强等特点,在航空航天领域具有重大的应用潜力^[1]。在实际晶体结构中, γ -TiAl 合金往往存在很多缺陷,如空位、孪晶等。其中,空位作为一种原子尺度的点缺陷,会严重影响 γ -TiAl 合金的力学性能,缩短其使用寿命,因此研究空位对其力学性能的影响对 γ -TiAl 合金的应用十分重要^[2]。空位的大小只有一个原子尺度,难以通过试验手段进行观察,分子动力学模拟作为一种研究材料原子尺度的重要方法,可以更加直观地了解材料的微观结构演化机理,所以采用分子动力学研究具有重要意义^[3-4]。

近些年,通过原子尺度阐述材料力学性能的研究得到重视。刘晓波等^[5]采用分子动力学方法研究了 Al_2Cu 合金在 300 K,恒定的工程应变速率下的拉伸变形行为。结果发现,300 K 时 Al_2Cu 相非常脆,在应变为 0.086 时应力峰值达到 6.4 GPa,且拉伸初期位错不易产生,使弹性阶段较长。XU D 等^[6]采用分子动力学研究了 γ -TiAl 孪晶形变的一种新机制,即沿 {111} 晶面两个伪孪晶晶向 [211] 剪切,发现了 $2/3[211]$ 孪晶可能是适应高应力集中或非常大应变速率的有效机制。罗德春等^[7]采用了分子动力学方法对预置裂纹的单晶 γ -TiAl 进行单轴拉伸。结果表明,应变速率不同,裂纹的

收稿日期:2022-06-22;修改稿收到日期:2022-07-15
基金项目:江西省自然科学基金重点资助项目(20202ACBL204001);南昌航空大学研究生创新专项基金资助项目(YC2021017)
第一作者简介:高鑫,男,1997 年出生,硕士研究生,南昌(330063),E-mail:1308078668@qq.com
通信作者:王克鲁,男,1968 年出生,教授,南昌(330063),E-mail:wangkelu@126.com
引用格式:高鑫,温余远,王克鲁,等. 不同空位浓度 γ -TiAl 合金剪切过程分子动力学模拟[J]. 特种铸造及有色合金,2023,43(3):345-348.
GAO X, WEN Y Y, WANG K L, et al. Molecular dynamics simulation on γ -TiAl alloy shear process with different vacancy concentrations [J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2023, 43(3):345-348.

扩展方式有很大差异。朱旭等^[8]采用分子动力学方法模拟了 γ' 强化相对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响。结果表明, γ' 强化相可以提高 Ni/Ni₃Al 的抗拉强度。WU H N 等^[9]采用分子动力学方法研究了各种表面缺陷对单晶 γ -TiAl 拉伸力学性能的影响。结果表明, 表面和边缘处的缺陷会降低材料的强度, 并为位错提供形核点。XU X T 等^[10]采用分子动力学方法研究了单轴压缩作用下 γ -TiAl 球形孔洞的收缩特性。结果表明, 塑性变形阶段堆垛断层滑动在晶体内是孔洞收缩的主要变形机制。LI W 等^[11]采用分子动力学模拟方法研究了在不同约束条件下具有 γ/α_2 界面的两相 TiAl 金属间化合物的力学性能响应及其变形机理。结果发现, 应力应变关系随着加载方向不同具有很大差异。同时, 在自由边界条件下, 以塑性变形为主, 但是在约束边界条件下则以断裂为主。在不同的边界条件下, 相界面可作位错源或裂纹源。LI P T 等^[12]采用分子动力学方法研究了 TiAl+Ti₃Al 两相纳米多晶合金在不同温度下的变形行为。结果表明, 在两相纳米多晶合金中, TiAl 相中晶粒尺寸小于临界尺寸的位错运动占主导地位。涂爱东等^[13]采用分子动力学方法研究了对不同厚度的 γ/α_2 相进行拉伸加载。发现位错首先出现在 γ 相一侧, 并以剪切传递的形式穿过 γ/α_2 相界面, 激活 α_2 相一侧的锥面层错。

综上, 研究者多采用分子动力学方法研究 γ -TiAl 的力学性能, 但 TiAl 合金含有 Ti 空位和 Al 空位, 且目前关于 Ti 空位与 Al 空位对 γ -TiAl 剪切力学性能的研究较少。本研究采用分子动力学, 研究不同浓度的 Ti 空位和 Al 空位和温度对 γ -TiAl 剪切力学性能的影响旨在为了解其机理提供参考。

1 模型与方法

1.1 含空位 γ -TiAl 模型的构建

先采用 AtomsK^[14] 方法构建完整的单晶 γ -TiAl 模型, 晶向为 $X=[100]$ 、 $Y=[010]$ 、 $Z=[001]$, 大小为 10 nm×10 nm×10 nm, 原子总数为 62 500, 随后使用 AtomsK 方法随机删除不同摩尔分数的 Al 原子和 Ti 原子, 选取的 Al 空位浓度和 Ti 空位浓度分别为 0.3%、0.5%、0.7% 及 1.0%。0.5% 的 Al 空位浓度模型见图 1。

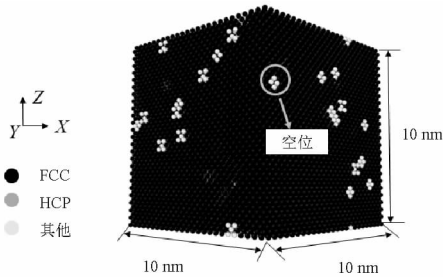


图 1 含空位 γ -TiAl 模型
Fig.1 γ -TiAl model with vacancy

1.2 势函数的选取

势函数表示了原子间的相互作用, 原子间相互作用势的准确性会直接影响模拟结果。目前, EAM^[15-16] 是描述金属原子间相互作用最常用的势函数, 可以表示为:

$$E_{\text{tot}} = \sum_i E_i \quad (1)$$

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

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f_j(r_{ij}) \quad (3)$$

式中, ρ_i 为原子 i 处的电子云密度; $F_i(\rho_i)$ 为镶嵌能; $\Phi_{ij}(r_{ij})$ 为原子 i 与原子 j 之间的对势; r_{ij} 为原子 i 与原子 j 之间的距离。

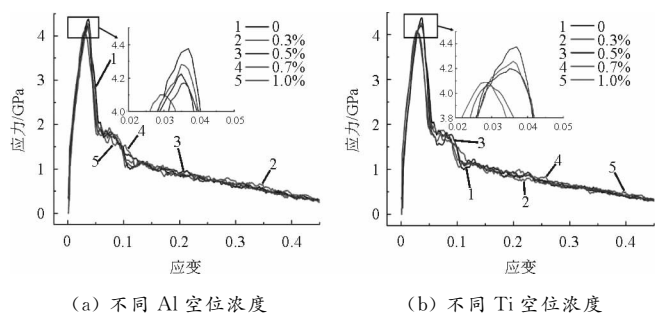
1.3 模拟方法

在 X 方向采取非周期性边界条件, 在 Y 与 Z 方向采取周期性边界条件, 使模拟过程与实际相符。在模拟过程中, 首先将含不同空位浓度的 γ -TiAl 在 NPT 系综^[17]下弛豫 100 ps 以达到稳定状态; 弛豫结束后, 上下各固定厚度为 1 nm 的刚性原子层, 利用 Nose-Hoover 控温法将温度控制在 300 K, 设置时间步长为 1 ps, 工程速率为 1 ps⁻¹, 为保持模型体积不变, 在 NVT 系综^[18]下沿 X 轴进行剪切模拟。

2 试验结果与讨论

2.1 300 K 下不同浓度 γ -TiAl 的剪切变形行为分析

图 2 为不同 Al 空位和 Ti 空位浓度下单晶 γ -TiAl 合金沿 X 轴剪切模拟时的工程应力-应变曲线。可以看出, 在初始弹性阶段, 5 组曲线的斜率变化不大, 说明空位浓度对弹性模量的影响并不大。随着空位浓度增大, γ -TiAl 的剪切强度逐渐下降, 这与文献^[19]的研究结果较为符合。当剪切应力下降到 2.0 GPa 附近时, 曲线出现了短暂的上升, 材料的塑性变形受到阻碍, 随后曲线又开始缓慢下降直至趋于 0, 这与材料内部的微观结构变化有一定的关联。含 Al 空位 γ -TiAl 在不同空位浓度下的剪切强度分别为 4.37(0%)、4.28(0.3%)、4.22(0.5%)、4.17(0.7%) 和 4.10 GPa(1.0%); 含 Ti 空位 γ -TiAl 在不同空位浓度下的剪切强度分别为 4.37(0)、4.25(0.3%)、4.19(0.5%)、4.05(0.7%) 和 4.06 GPa(1.0%)。可以看出, 含 Al 空位 γ -TiAl 的剪切强度均高于含 Ti 的, 这是由于 Ti 原子和 Al 原子的空位形成能不同所致。Ti 与 Al 的空位形成能分别为 1.71 和 0.99 eV^[20], Ti 原子的空位形成能高于 Al 原子的空位形成能, 因此剪切过程中 Ti 空位所产生的畸变能高于 Al 空位, 其引起的晶格畸变更加严重, 对周围原子



(a) 不同 Al 空位浓度 (b) 不同 Ti 空位浓度

图2 不同 Al 空位和 Ti 空位浓度下 γ -TiAl 合金的工程应力-应变曲线

Fig.2 Stress-strain curves of γ -TiAl with different Al and Ti vacancy concentrations

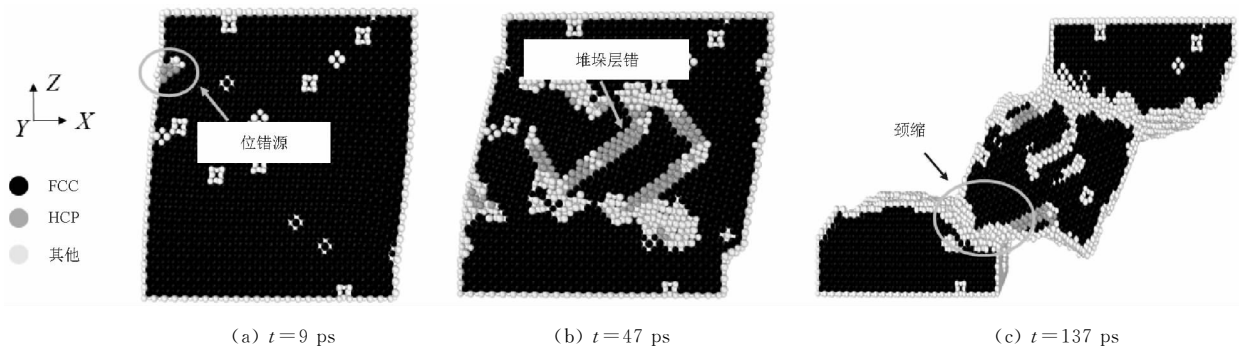


图3 不同时刻下的剪切原子图

Fig.3 Shear atom diagram at different moments

位处形核,并向晶体内部发射 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 位错,以释放局部应力。当 $t = 47$ ps 时,材料内部出现堆垛层错,层错之间形成复杂的层错网,能有效地阻碍材料的塑性变形,这也很好地解释了曲线在下降过程中出现上升的原因,李源才等^[21]也发现了这种现象。随着剪切应变的增加,大量位错产生并于晶体内部交割缠结产生局部应力高度集中,从而导致原子无序化,使材料开始出现断裂的趋势。当 $t = 137$ ps 时,材料出现了明显的断裂,并且出现类似于宏观材料的颈缩现象。继续增加剪切应变,靠近颈缩区的原子键被破坏,原子无序化加剧,使材料发生断裂。

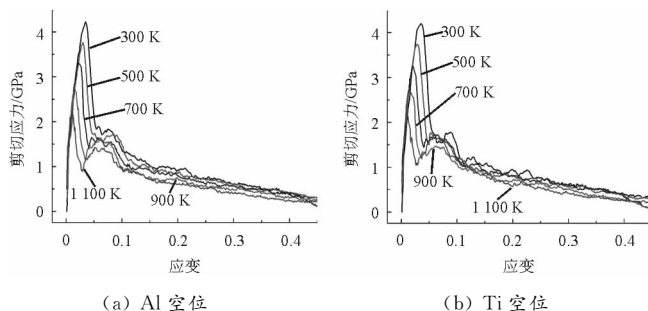
2.2 温度对材料力学性能的影响

设置温度分别为 300、500、700、900 和 1 100 K,剪切速率为 1 ps^{-1} ,对 γ -TiAl 沿 X 轴进行剪切模拟。图 4 为 Al 空位浓度与 Ti 空位浓度为 0.5% 的工程应力-应变曲线。可以看出,随着温度升高,Al 空位浓度与 Ti 空位浓度 γ -TiAl 的弹性阶段逐渐缩短,但其弹性模量基本相同。0.5% 的 Al 空位 γ -TiAl 在不同温度下的剪切强度分别为 4.22(300 K)、3.77(500 K)、3.32(700 K)、2.71(900 K)和 2.21 GPa(1 100 K);0.5% 的 Ti 空位 γ -TiAl 在不同温度下的剪切强度分别为 4.19(300 K)、3.76(500 K)、3.29(700 K)、2.67(900 K)和 2.19 GPa(1100 K)。由这些数据可知,随着温度升高,Al 空位和

的扰动性更强,使得更多的原子无序化,最终导致材料力学性能大幅下降,故含 Al 空位 γ -TiAl 剪切强度更高。

为了更加直观地观察 γ -TiAl 剪切模拟过程中的微观结构变形机理,对模型进行切片处理。图 3 为 300 K、0.5% 的 Al 空位 γ -TiAl 剪切模拟过程中的原子轨迹图,此空位浓度下的微观结构演变具有其他空位浓度 γ -TiAl 剪切变形微观结构演变的共性。可以看出,当 $t = 9$ ps 时,剪切应力达到最大值,材料开始塑性变形,因为空位对周围原子结构的扰动性较强,使得周围的晶格产生畸变,导致局部应力集中,位错也更偏向于在空

Ti 空位 γ -TiAl 剪切强度均逐渐减小,且达到剪切强度所需要的应变更小,这说明很小的剪切应力就能引起很大的变形。原因是随着温度升高,系统能量升高,原子动能也随之增大,原子迁移和重组加剧,内部原子无序化更加严重,导致材料更容易变形。



(a) Al 空位 (b) Ti 空位

图4 不同温度下 Al 空位与 Ti 空位 γ -TiAl 的应力-应变曲线

Fig.4 Stress-strain curves of γ -TiAl with Al and Ti vacancy at different temperatures

为更加直观地观察微观结构变化,对模型进行切片处理,900 K、0.5% 的 Al 空位 γ -TiAl 的剪切原子图见图 5,此温度下的微观结构演变具有其他温度下 γ -TiAl 剪切变形微观结构演变的共性。可以看出,当 $t = 6$ ps 时,剪切应力就已经达到最大值,为释放内部应力,材料开始发生塑性变形,位错于离边界更近的空位处产生,见图中黑色圆圈处。当 $t = 47$ ps 时,随着温度升高,系

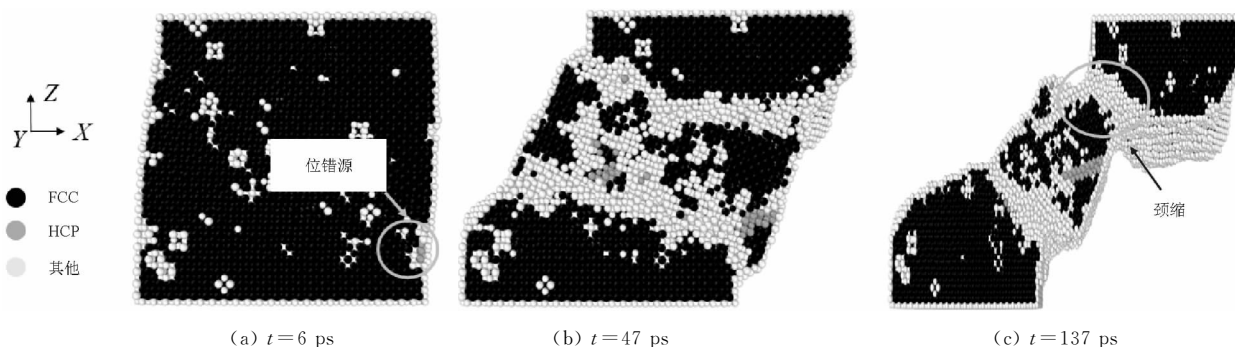


图 5 剪切原子图

Fig.5 Shear atom diagram

统势能上升,原子活动更加活跃,导致在两个加载步时间内原子无法回到平衡的位置,内部原本有序的原子转变成 hcp 或者其他结构,材料出现了明显的断裂趋势。当 $t=137$ ps 时,材料出现了颈缩现象,随着应变增加,颈缩区周围的原子无序化更加严重,材料最终断裂。

3 结 论

(1)在 300 K 下对比不同空位浓度的 Al 空位和 Ti 空位对 γ -TiAl 剪切力学性能的影响,发现弹性模量没有太大变化,但剪切强度逐渐减小,且含 Al 空位 γ -TiAl 的剪切强度要高于含 Ti 空位的。工程应力-应变曲线在下降过程中出现了短暂的上升,材料的塑性变形受到阻碍。

(2)在剪切过程中,含空位 γ -TiAl 偏向于离边界处更近的空位处产生位错源,向晶体内部发射位错,并且材料均出现类似于宏观材料的颈缩现象。

(3)随着温度增加, γ -TiAl 剪切强度总体表现为下降的趋势,且到达剪切强度的应变更小。主要原因是随着温度升高,系统能量增大,原子动能也增大,内部原子无序化更加严重,材料更容易变形。

参 考 文 献

- [1] 陈玉勇,崔宁,孔凡涛. 变形 TiAl 合金研究进展[J]. 航空材料学报, 2014, 34(4): 112-118.
- [2] TANG F L, CAI H M, BAO H W, et al. Molecular dynamics simulations of void growth in γ -TiAl single crystal[J]. Computational Materials Science, 2014, 84: 232-237.
- [3] MISHIN Y. Machine-learning interatomic potentials for materials science[J]. Acta Materialia, 2021, 214: 116 980.
- [4] 张宏亮,吴冰洁,杨龙龙,等. 纳米单晶铜磨料磨损行为的分子动力学研究[J]. 精密成形工程, 2020, 12(2): 98-103.
- [5] 刘晓波,熊震,方洲,等. Al_2Cu 拉伸变形的分子动力学模拟[J]. 中国有色金属学报, 2018, 28(9): 1 746-1 754.
- [6] XU D, WANG H, RUI Y, et al. Molecular dynamics investigation of deformation twinning in γ -TiAl sheared along the pseudo-twinning direction[J]. Acta Materialia, 2008, 56(5): 1 065-1 074.
- [7] 罗德春,张玲,付蓉,等. 纳米单晶 γ -TiAl 合金应变速率效应分子动力学模拟[J]. 稀有金属材料与工程, 2018, 47(3): 853-859.
- [8] 朱旭,江五贵,李源才,等. Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的分子动力学模

拟[J]. 稀有金属材料与工程, 2021, 50(4): 1 254-1 262.

- [9] WU H N, XU D S, WANG H, et al. Molecular dynamics simulation of tensile deformation and fracture of γ -TiAl with and without surface defects[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2016, 32(10): 1 033-1 042.
- [10] XU X T, TANG F L, XUE H T, et al. Molecular dynamics simulations of void shrinkage in γ -TiAl single crystal[J]. Computational Materials Science, 2015, 107: 58-65.
- [11] LI W, YIN Y, XU Q, et al. Tensile behavior of γ/α_2 interface system in lamellar TiAl alloy via molecular dynamics[J]. Computational Materials Science, 2019, 159: 397-402.
- [12] LI P T, YANG Y Q, KOVAL V, et al. Temperature-dependent deformation processes in two-phase TiAl+Ti₃Al nano-polycrystalline alloys[J]. Materials & Design, 2021, 199: 109 422.
- [13] 涂爱东,滕春禹,王峰,等. Ti-Al 合金 γ/α_2 界面结构及拉伸变形行为的分子动力学模拟[J]. 金属学报, 2019, 55(2): 291-298.
- [14] HIREL P. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files[J]. Computer Physics Communications, 2015, 197: 212-219.
- [15] MISHIN Y, FARKAS D, MEHL M J, et al. Interatomic potentials for monoatomic metals from experimental data and ab initio calculations[J]. Physical Review, 1999, B59(5): 3 393.
- [16] FARKAS D. Interatomic potentials for Ti-Al with and without angular forces[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 1994, 2(5): 975-984.
- [17] HAN X L, LIU P, SUN D L, et al. Molecular dynamics simulations of the tensile responses and fracture mechanisms of Ti₂AlN/TiAl composite[J]. Theoretical and Applied Fracture Mechanics, 2019, 101: 217-223.
- [18] YU R, YANG S, CHEN G, et al. Vacancy and temperature effects on mechanical properties of single-crystal bulk Mg₂Si: A molecular dynamics study[J]. Journal of Electronic Materials, 2014, 43(6): 1 668-1 673.
- [19] ZHOU Y, JIANG W G, FENG X Q, et al. In-plane compressive behavior of graphene-coated aluminum nano-honeycombs[J]. Computational Materials Science, 2019, 156: 396-403.
- [20] WANG B Y, WANG T M, RONG Z W, et al. Investigation of point defects in TiAl alloy[J]. Journal of Computer-Aided Materials Design, 1999, 6(2-3): 239-246.
- [21] 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): 1 837-1 845.

(编辑:刘晨辉)