

# $\gamma$ -TiAl 金属间化合物面缺陷能的分子动力学研究<sup>\*</sup>

周宗荣 王 宇 夏源明<sup>†</sup>

(中国科学技术大学力学和机械工程系, 中国科学技术大学中科院材料力学行为和 Design 重点实验室, 合肥 230027)

(2006 年 6 月 13 日收到, 2006 年 8 月 22 日收到修改稿)

运用分子动力学方法,对  $\gamma$ -TiAl 金属间化合物的面缺陷能(层错能和孪晶能)进行了研究. 计算得到  $\gamma$ -TiAl 不同滑移系(或孪生系)的整体堆垛层错能曲线. 结果表明,  $\gamma$ -TiAl 较一般 fcc 晶体结构的金属可动滑移系(孪生系)的数量减少, 在外界条件下呈脆性. 研究孪生系  $(1/6) 11\bar{2} \{111\}$  的弛豫的整体堆垛层错(GSF)能和整体孪晶(GTF)能曲线, 对不稳定层错能  $\gamma_{\text{usf}}$ 、稳定层错能  $\gamma_{\text{sf}}$  和孪晶能  $\gamma_{\text{st}}$  值进行分析, 可以预知,  $\gamma$ -TiAl 的主要变形机理为孪生系  $(1/6) 11\bar{2} \{111\}$  的孪生和普通滑移系  $(1/6) 11\bar{0} \{111\}$  的滑移, 以及超滑移系  $(1/2) 01\bar{1} \{111\}$  的滑移.

关键词:  $\gamma$ -TiAl 堆垛层错能 孪晶能 分子动力学

PACC: 6170P, 6185

## 1. 引 言

$\gamma$ -TiAl 金属间化合物具有良好的力学性能, 如密度小、比强度和比模量高, 高温下抗氧化、耐腐蚀和抗蠕变能力强等特征, 因此被认为是未来理想的轻质高温结构材料<sup>[1-4]</sup>. 但由于  $\gamma$ -TiAl 室温下塑性差, 使得其在应用上受到一定限制. 为了改善  $\gamma$ -TiAl 性能, 提高其强度和韧性, 研究工作者进行广泛的研究.

材料的韧脆性及机械变形方式与材料的结构组成、晶体结构、原子间相互作用力以及外界环境相关联的<sup>[5]</sup>. Rice 和 Thomson<sup>[6]</sup>根据裂尖裂纹发射位错和解理扩展竞争机理提出材料韧脆判据. 他们认为, 如果裂纹发射位错(其临界应力强度因子为  $K_{\text{Ic}}$ )比解理扩展(其临界应力强度因子为  $K_{\text{Ic}}$ )更容易, 即  $K_{\text{Ic}}/K_{\text{Ic}} < 1$ , 则通过发射位错, 裂尖将钝化从而韧断. 反之, 如果  $K_{\text{Ic}}/K_{\text{Ic}} \geq 1$ , 则裂纹首先解理扩展, 从而脆断. Rice 等<sup>[7]</sup>建立了一个裂尖位错成核的模型, 拓展了 Rice-Thomson 理论<sup>[6]</sup>. 他们认为, 在韧断中, 裂纹发射位错, 系统积累的能量跨越了原子间相互剪切滑移的能量势垒(即最大不稳定堆垛层错能  $\gamma_{\text{usf}}$ ), 故材料韧断时临界应力强度因子  $K_{\text{Ic}}$  是材料的不稳定堆垛层错能  $\gamma_{\text{usf}}$  的函数; 在脆断中, 裂纹解理

扩展, 根据 Griffith 理论<sup>[8]</sup>系统积累的势能补偿了产生新的表面所需的表面能  $\gamma_s$ , 故材料脆断时临界应力强度因子  $K_{\text{Ic}}$  是材料表面能  $\gamma_s$  的函数, 因此他们简单地用比值  $\gamma_{\text{usf}}/\gamma_s$  代替  $K_{\text{Ic}}/K_{\text{Ic}}$  来判定材料的韧脆性. Zhou 等<sup>[9]</sup>研究表明 Rice 的理论<sup>[7]</sup>对于 II 型裂纹符合得较好. 然而 Zhou 等<sup>[10]</sup>也发现 Rice 的理论<sup>[7]</sup>对于 I 型裂纹并不十分精确, 对这一理论加以研究, 结果发现, 材料的韧脆判据与表面能  $\gamma_s$  无关, 仅由不稳定层错能  $\gamma_{\text{usf}}$  决定, 当  $\gamma_{\text{usf}}/\mu b$  (其中  $\mu$  是剪切模量,  $b$  是 Burgers 矢量)大于 0.012 时, 材料表现为脆性特征, 反之, 材料表现出韧性特征.

纳米金属的塑性变形机理与金属的面缺陷能(层错能和孪晶能)有密切关系. Tadmor 等<sup>[11]</sup>对试件裂口上出现孪晶现象进行了研究, 指出材料变形中出现孪晶的可能性大小与不稳定孪晶能与不稳定堆垛层错能比值相关, 一定程度上正比于  $\sqrt{\gamma_{\text{usf}}/\gamma_{\text{usf}}}$ . Van Swygenhoven 等<sup>[12]</sup>利用了文献 [11] 的结论对 Al, Ni 和 Cu 三种 fcc 结构的晶体的  $(1/6) 11\bar{2} \{111\}$  孪生系的面缺陷能(层错能和孪晶能)曲线和晶内位错滑动现象进行了分析, 总结出位错滑动方式和变形孪晶形成难易的规律, 指出纳米金属中位错是以全位错方式还是以部分位错方式滑动依赖于  $\gamma_{\text{sf}}/\gamma_{\text{usf}}$ , 其值越大越易以全位错方式滑动, 反之则易以部分位错方式滑动, 部分位错  $(1/6) 11\bar{2}$

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(批准号 90505002)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: ymxia@ustc.edu.cn

滑动是否形成形变孪晶依赖于  $\gamma_{\text{uf}}/\gamma_{\text{sf}}$ , 其值越小越易出现孪晶。

通过研究  $\gamma$ -TiAl 金属间化合物的面缺陷能特征, 将有助于了解  $\gamma$ -TiAl 的变形特征, 目前尚只能通过原子尺度模拟的方法分析得到晶体结构的面缺陷能曲线。本文利用分子动力学方法采用嵌入原子方法 (embedded-atom method, EAM) 势对  $\gamma$ -TiAl 不同滑移系 (或孪生系) 的面缺陷能 (整体堆垛层错能和孪晶形成能) 进行研究<sup>[13]</sup>, 考察这些滑移系 (或孪生系) 的可动性, 以揭示其变形机理并预报其力学性能, 进而验证和解释实验中的一些现象。

## 2. 势函数及计算方法

原子势函数采用 EAM 势<sup>[14]</sup>, 其数学形式为

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

$$E_i = \frac{1}{2} \sum_j \phi(r_{ij}) + F(\bar{\rho}_i), \quad (2)$$

$$\bar{\rho}_i = \sum_j \rho(r_{ij}), \quad (3)$$

其中  $\rho(r)$  为电子密度函数, 自变量  $r$  指距离原子核的距离;  $\bar{\rho}_i$  为原子  $i$  周围所有的原子在原子  $i$  所在位置处电子密度的叠加;  $F(\bar{\rho}_i)$  为将原子  $i$  镶嵌到同类原子电子密度为  $\bar{\rho}_i$  时所需的量子力学上的能量;  $\phi(r_{ij})$  为原子  $i$  和原子  $j$  间的经典静电力学上的相互作用势。计算中采用的势函数的具体形式是由 Zope 等<sup>[15]</sup> 提出的表格式 EAM 势<sup>[16]</sup>。

图 1 所示是  $\gamma$ -TiAl 的晶体结构, 它是面心四方 (fct) 结构, 与面心立方 (fcc) 结构十分相似, 只是这里  $a \neq c$ , 本文计算中所采用的  $\gamma$ -TiAl 的晶格常数为  $a = 3.998 \text{ \AA}$ ,  $c = 4.186 \text{ \AA}$ <sup>[15]</sup>。

首先对  $\gamma$ -TiAl 的堆垛层错能进行研究, 计算元胞及模拟过程采用如图 2 所示<sup>[17]</sup> 的形式,  $XZ$  平面为剪切面,  $X, Z$  方向采用周期性边界条件, 垂直与  $XZ$  面的方向 ( $Y$  向) 为固定边界, 一共有 80—120 层原子, 上下两固定界面原子 (如图深色部分) 各为 6—10 层。模拟过程中, 将理想晶体沿着剪切面分成上下两半部分, 让上半部分相对下半部分沿着剪切面的某个指定的晶向发生一个刚性位移, 将刚性位移前后单位面积上系统平均能量之差定义未弛豫层错能, 使系统内自由原子 (图 2 白色部分) 在  $Y$  方向上弛豫, 可以得到位移前后单位面积上系统弛豫的平均能量之差, 定义为弛豫层错能, 这样可以得到系

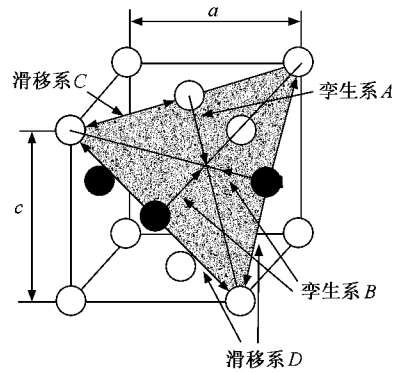


图 1  $\gamma$ -TiAl 的 fct 晶体结构

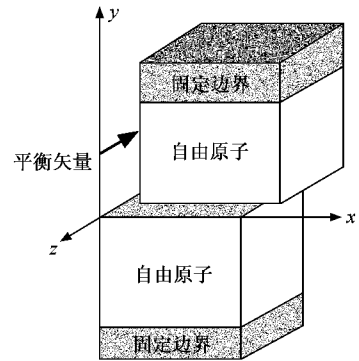


图 2 面缺陷能的模拟示意图<sup>[17]</sup>

统未弛豫的和弛豫的整体堆垛层错 (GSF) 能曲线。本文模拟了  $\gamma$ -TiAl 所有可能的滑移系 (或孪生系) 的滑动过程。由于  $\gamma$ -TiAl 晶体结构的对称性, 实际独立的可能滑移系 (或孪生系) 只有 8 个, 分别为 A  $11\bar{2} \{111\}$ , B  $1\bar{2}1 \{111\}$ , C  $1\bar{1}0 \{111\}$ , D  $01\bar{1} \{111\}$ , E  $110 \{001\}$ , F  $101 \{010\}$ , G  $110 \{1\bar{1}0\}$  和 H  $10\bar{1} \{101\}$ 。计算过程中利用速度调温进行等温调节, 温度控制在 0.1K。

进一步对  $\gamma$ -TiAl 孪生系  $(1/6) 11\bar{2} \{111\}$  进行研究, 在上述由理想晶体  $ABC \dots ABCA \mid BCAB \dots ABC$  (如图 3(a)) 形成稳定的堆垛层错 (SF)  $ABC \dots ABCA \mid CAB \dots BCA$  (如图 3(c)) 的基础上, 让剪切面上移一层原子, 平移矢量不变, 移动此剪切面上部分的所有原子, 于是就形成了有两个孪晶面 (TP) 的微孪晶结构  $ABC \dots ABCA \mid C \mid BCA \dots CAB$  (如图 3(e)), 计算此模拟过程中的弛豫后单位面积上平均能量的变化, 可以得到相应的能量变化与位移关系曲线——整体孪晶能曲线 (GTF)。

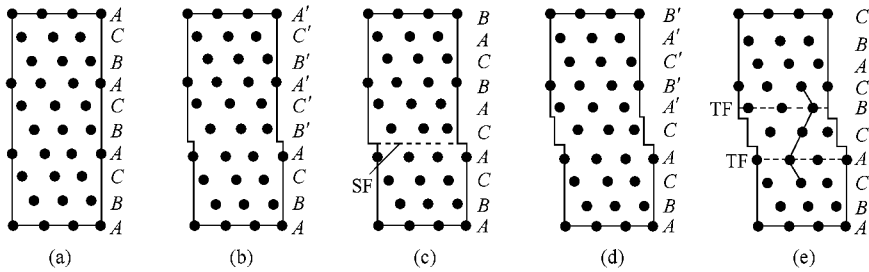


图3 堆垛层错和孪晶的形成过程的原子构型示意图

### 3. 计算结果和讨论

图4给出了八个独立的可能滑移系(或孪生系)未弛豫的和弛豫的整体堆垛层错能曲线. 这里横坐标代表位移, 单位为  $\text{\AA}$  ( $0.1 \text{ nm}$ ), 纵坐标代表单位面积上的平均每个原子的能量, 单位为  $\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$ .

绝大部分曲线(除孪生系  $B$ )都是成正弦或斜正弦状, 同一滑移系(或孪生系)弛豫的较未弛豫的堆垛层错能普遍降低, 不稳定堆垛层错能  $\gamma_{\text{usf}}$  有显著降低, 稳定堆垛层错能  $\gamma_{\text{sf}}$  相对降低较小. 弛豫的与未弛豫的在纵坐标为  $\gamma_{\text{usf}}$  值时横坐标对应的位移  $\delta_{\text{usf}}$  基本一致, 大部分都是位错的 Burgers 矢量  $b$  的一半. 在纵坐标为  $\gamma_{\text{sf}}$  值时横坐标对应的位移均为位错的 Burgers 矢量  $b$ , 详见表1. 特别说明一点, 滑移系  $C, E$  和  $G$  原子滑动 Burgers 矢量  $b$  后, 整个晶胞还原为初始理想构型, 内部不存在堆垛层错, 记  $\gamma_{\text{sf}} = 0$ .

表1 所有可能滑移系(或孪生系)弛豫的与未弛豫的堆垛层错能特征值

滑移系 (或孪生系)	$(\gamma_{\text{usf}}^{(r)}/\gamma_{\text{usf}}^{(u)})$ / $\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$	$(\gamma_{\text{sf}}^{(r)}/\gamma_{\text{sf}}^{(u)})$ / $\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$	$b/\text{nm}$	$\delta_{\text{usf}}/b$
$A \ 11\bar{2} \ \{111\}$	197/276	59/70	0.1869	0.541
$B \ 1\bar{2}1 \ \{111\}$	297/320	265/281	0.1612	0.711
$C \ 1\bar{1}0 \ \{111\}$	537/966	0/0	0.2827	0.500
$D \ 0\bar{1}1 \ \{111\}$	588/1371	219/230	0.3039	0.509
$E \ 110 \ \{001\}$	805/1821	0/0	0.2827	0.500
$F \ 101 \ \{010\}$	704/1846	135/142	0.2894	0.510
$G \ 110 \ \{1\bar{1}0\}$	814/1247	0/0	0.2827	0.500
$H \ 10\bar{1} \ \{101\}$	885/1729	217/234	0.3010	0.510

分析不同滑移系(或孪生系)的整体堆垛层错能曲线, 考察其特征值  $\gamma_{\text{usf}}$  (见表1), 可以发现, 孪生系

$B \ 1\bar{2}1 \ \{111\}$  的整体堆垛层错能曲线随着位移的增大整体向上翘, 出现能量值超过  $\gamma_{\text{usf}}$ , 这表明原子沿  $\{111\}$  面的  $1\bar{2}1$  向发生相对滑动使得系统能量增高, 故发生这种滑动的可能性很小. 除了孪生系  $B$  外,  $\{111\}$  面上的其他孪生系和滑移系 ( $A, C$  和  $D$ ) 的  $\gamma_{\text{usf}}$  值较其他面上的滑移系 ( $E-H$ ) 的  $\gamma_{\text{usf}}$  值低, 这表明  $\{111\}$  面上的孪生系和滑移系 ( $A, C$  和  $D$ ) 较其他面上的滑移系的可动性高, 这与实验观察到的  $\gamma$ -TiAl 在绝大多数条件下变形都是发生在  $\{111\}$  面上的现象一致. 在  $\{111\}$  面上可动孪生系  $A$  及滑移系  $C$  和  $D$  中, 孪生系  $A \ 11\bar{2} \ \{111\}$  的  $\gamma_{\text{usf}}$  值较低, 表明原子沿  $\{111\}$  面的  $11\bar{2}$  向发生相对滑动较容易, 易形成面缺陷, 滑移系  $C \ 1\bar{1}0 \ \{111\}$  和滑移系  $D \ 0\bar{1}1 \ \{111\}$  的  $\gamma_{\text{usf}}$  值较高, 说明原子沿  $\{111\}$  面的这两个方向发生相对滑动较难, 不容易产生整体层错, 但与其他 ( $E-H$ ) 的  $\gamma_{\text{usf}}$  相比, 在外界载荷作用下, 易产生局部位错滑移. Shechtman 等<sup>[18]</sup> 在单相 TiAl 合金压缩试验中观察到普通位错  $(1/2) \ 1\bar{1}0 \ \{111\}$  和超位错  $(1/2) \ 0\bar{1}1 \ \{111\}$  的存在, 而并未发现其他结构位错. 但是, 滑移系  $D$  的不稳定层错能量要略高于滑移系  $C$ , 这说明相对于普通位错  $(1/2) \ 1\bar{1}0 \ \{111\}$ , 超位错  $(1/2) \ 0\bar{1}1 \ \{111\}$  较难形成, Sawai 等<sup>[19]</sup> 在 873 K 下对  $\gamma$ -TiAl 的拉伸实验发现, 变形构形中存在大量普通位错  $(1/2) \ 1\bar{1}0 \ \{111\}$ , 而未发现超位错  $(1/2) \ 0\bar{1}1 \ \{111\}$ . 这些表明  $\gamma$ -TiAl 的变形机理与外界条件有着密切联系, 尚有待进一步研究.

fcc 晶体结构中, 孪生系  $B$  等效于孪生系  $A$ , 滑移系  $D$  等效于滑移系  $C$ . 由此可见  $\gamma$ -TiAl 较一般 fcc 结构晶体可动滑移系(或孪生系)的数量减少, 这使得  $\gamma$ -TiAl 在室温下呈现脆性特征. 由表1中孪生系  $A$  的数据可以看出,  $\gamma$ -TiAl 的  $\{111\}$  面  $11\bar{2}$  向的  $\gamma_{\text{usf}}^{(r)} = 197 \text{ mJ}\cdot\text{m}^{-2}$ ,  $b = 0.1869 \text{ nm}$ , 又  $\mu = (c_{11} + c_{12} - 4c_{13} + 2c_{33} + c_{44} + 2c_{66})/9$ <sup>[20]</sup>, 实际计算中  $c_{11}, c_{12},$

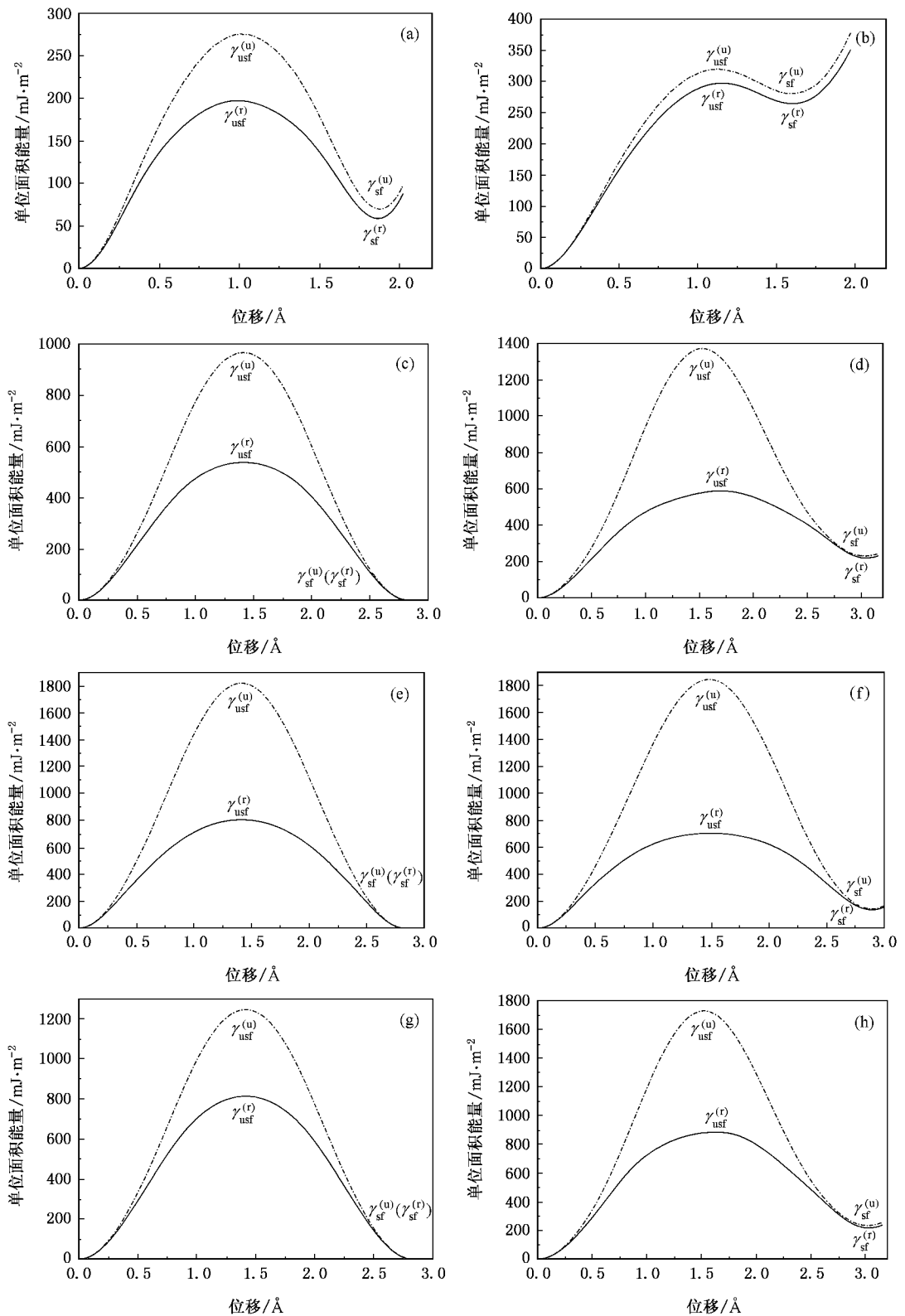


图4 所有可能滑移系或孪生系未弛豫的(----)和弛豫的(——)整体堆垛层错能曲线 (a)孪生系  $A \ 11\bar{2} \{111\}$ ; (b)孪生系  $B \ 1\bar{2}1 \{111\}$ ; (c)滑移系  $C \ 1\bar{1}0 \{111\}$ ; (d)滑移系  $D \ 0\bar{1}1 \{111\}$ ; (e)滑移系  $E \ 110 \{001\}$ ; (f)滑移系  $F \ 101 \{010\}$ ; (g)滑移系  $G \ 110 \{1\bar{1}0\}$ ; (h)滑移系  $H \ 10\bar{1} \{101\}$

92 GPa 和 85 GPa<sup>[20]</sup> ,这样可以计算出  $\gamma_{\text{usf}}^{(r)}/\mu b = 0.0176 > 0.012$  ,依据 Zhou<sup>[10]</sup> 提出的材料脆性判据也可知  $\gamma$ -TiAl 在外界条件下为脆性材料 ,这与实验<sup>[21]</sup> 得到的微观断口为平断口相符合 .

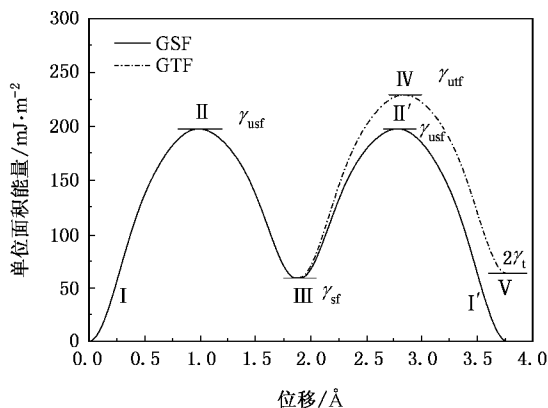


图 5  $\gamma$ -TiAl 孪生系  $(1/6) \bar{1}1\bar{2} \{111\}$  整体堆垛层错能 (GSF) 和孪晶能 (GTF) 曲线

图 5 给出了孪生系  $(1/6) \bar{1}1\bar{2} \{111\}$  弛豫的整体堆垛层错能 (GSF) 及整体孪晶能 (GTF) 曲线 ,曲线上标的 I , II , III , IV 和 V 处的原子构型示意图分别对应图 3 中的 (a) (b) (c) (d) (e) . 由此曲线可得到  $\gamma$ -TiAl 不稳定堆垛层错能  $\gamma_{\text{usf}}$  , 稳定堆垛层错能  $\gamma_{\text{sf}}$  和 不稳定孪晶能  $\gamma_{\text{usf}}$  的相对比值  $\gamma_{\text{sf}}/\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{usf}}/\gamma_{\text{usf}}$  (如表 2) . 对照 Van Swygenhoven 等<sup>[12]</sup> 给出的采用不同势函数<sup>[22-25]</sup> 计算出的 Al ,Ni 和 Cu 三种 fcc 纳晶金属的相应值 (如表 2) ,可以发现 , $\gamma$ -TiAl 的  $\gamma_{\text{sf}}/\gamma_{\text{usf}}$  ,  $\gamma_{\text{usf}}/\gamma_{\text{usf}}$  值最接近 Cu 的相应值 ,  $\gamma_{\text{sf}}/\gamma_{\text{usf}}$  和  $\gamma_{\text{usf}}/\gamma_{\text{usf}}$  都较小 . 而 Lipsitt 等<sup>[26]</sup> 在单相 TiAl 合金中发现了大量的孪晶 ,并确定孪晶位错为部分位错  $(1/6) \bar{1}1\bar{2}$  . 因此可以认为 Van Swygenhoven 等<sup>[12]</sup> 就 fcc 结构晶体总结出来的位错滑动方式和变形孪晶形成难易的规律也适用于  $\gamma$ -TiAl 金属间化合物 ,即  $\gamma_{\text{sf}}/\gamma_{\text{usf}}$  较小时  $\gamma$ -TiAl 较易以部分位错  $(1/6) \bar{1}1\bar{2}$  滑动 ,

$\gamma_{\text{usf}}/\gamma_{\text{usf}}$  较小时部分位错  $(1/6) \bar{1}1\bar{2}$  较易形成变形孪晶 .

表 2  $\gamma$ -TiAl 弛豫的面缺陷能的相对值  $\gamma_{\text{sf}}/\gamma_{\text{usf}}$  ,  $\gamma_{\text{usf}}/\gamma_{\text{usf}}$  与 Van Swygenhoven 等<sup>[12]</sup> 用不同势函数计算出的 Al ,Ni 和 Cu 三种金属相应值对比 \*

势函数	$\gamma_{\text{sf}}/\gamma_{\text{usf}}$	$\gamma_{\text{usf}}/\gamma_{\text{usf}}$	来源
TiAl ZM <sup>[15]</sup>	0.30	1.16	本文
Al MF <sup>[22]</sup>	0.97	1.32	
Al EA <sup>[23]</sup>	0.77	1.21	
Ni CR <sup>[24]</sup>	0.55	1.28	
Ni MF <sup>[22]</sup>	0.70	1.36	文献 [12]
Cu CR <sup>[24]</sup>	0.13	1.06	
Cu SJ <sup>[25]</sup>	0.19	1.10	

\* ZM ,MF ,EA ,CR 和 SJ 分别对应 Zope-Mishin<sup>[15]</sup> , Mishin-Farkas<sup>[22]</sup> , Ercolessi-Adams<sup>[23]</sup> , Cleri-Rosato<sup>[24]</sup> 和 Schiottz-Jacobser<sup>[25]</sup> 提出的相应势函数 .

## 4. 结 论

1. 本文计算了  $\gamma$ -TiAl 八个独立的可能滑移系 (或孪生系) 的整体堆垛层错能曲线 ,通过分析得出  $\gamma$ -TiAl 较一般面心立方结构 (fcc) 晶体可动滑移系 (或孪生系) 数量减少 ,主要有  $A \bar{1}1\bar{2} \{111\}$  ,  $C \bar{1}1\bar{0} \{111\}$  和  $D 0\bar{1}1 \{111\}$  ,可动性依次降低 ,并预报了  $\gamma$ -TiAl 在外界条件下呈现脆性特征 .

2. 通过对孪生系  $(1/6) \bar{1}1\bar{2} \{111\}$  的整体面缺陷能 (堆垛层错能和孪晶能) 曲线的分析 ,得出  $\gamma$ -TiAl 在变形过程中容易形成变形孪晶 ,与实验结果相符合 .

3. 分析指出孪晶位错  $(1/6) \bar{1}1\bar{2} \{111\}$  的孪生、普通位错  $(1/2) \bar{1}1\bar{0} \{111\}$  和超位错  $(1/2) 0\bar{1}1 \{111\}$  的滑移是  $\gamma$ -TiAl 的主要变形特征 ,其变形机理与外界条件有着密切联系 ,尚待进一步研究 .

[1] Zhang Y G , Han Y F , Chen G L , Guo J T , Wan X J , Feng D 2001 *Structural Intermetallics* (Beijing : National Defence Industry Press) (in Chinese) 张永刚、韩雅芳、陈国良、郭建亭、万晓景、冯涂 2001 金属间化合物结构材料 (北京 : 国防工业出版社) ]

[2] Huang B Y , He Y H , Wang J N 1999 *Intermetallics* 7 881

[3] Zhang K , Li Z W , Gao W 2002 *Mater. Lett.* 57 834

[4] Dimiduk D M 1999 *Mater. Sci. Eng. A* 263 281

[5] Wen Y H , Zhou F X , Liu Y W 2001 *Chin. Phys.* 10 407

[6] Rice J R , Thomson R 1974 *Phil. Mag.* 29 73

[7] Rice J R 1992 *J. Mech. Phys. Solids* 40 239

[8] Fan T Y 2003 *Foundations of Fracture Theory* (Beijing : Science Press) (in Chinese) 范天佑 2003 断裂理论基础 (北京 : 科学出

- 版社 )]
- [ 9 ] Zhou S J , Carlsson A , Thomson R 1993 *Phys. Rev. B* **47** 7710
- [ 10 ] Zhou S J , Carlsson A , Thomson R 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 852
- [ 11 ] Tadmor E B , Hai S 2003 *J. Mech. Phys. Solids* **51** 765
- [ 12 ] Van Swygenhoven H , Derlet P M , Froseth A G 2004 *Nature Mater.* **3** 399
- [ 13 ] Zhang J M , Wu X J , Huang Y H , Xu K W 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 393 ( in Chinese ) 张建民、吴喜军、黄育红、徐可为 2006 物理学报 **55** 393 ]
- [ 14 ] Voter A F 1994 *Intermetallic Compounds*( New York : Wiley ) **1** 77
- [ 15 ] Zope R R , Mishin Y 2003 *Phys. Rev. B* **68** 024102
- [ 16 ] <http://xmd.sourceforge.net>
- [ 17 ] Farkas D , Zhou S J , Vailhe C , Mutasa B , Panova J 1997 *J. Mater. Res.* **12** 93
- [ 18 ] Shechtman D , Blackburn M J , Lipsitt H A 1974 *Metall. Trans.* **5** 1373
- [ 19 ] Sawai T , Hishinuma A 2005 *J. Phys. Chem. Solids* **66** 335
- [ 20 ] Zhou Z R 2006 *Master Thesis* ( Univ. of Sci. & Tech. of China )( in Chinese ) 周宗荣 2006 硕士论文( 中国科学技术大学 )]
- [ 21 ] Sastry S M L , Lipsitt H A 1977 *Metall. Trans. A* **8** 299
- [ 22 ] Mishin Y , Farkas D , Mehl M J , Papaconstantopoulos D A 1999 *Mater. Res. Soc. Symp. Proc* **538** 535
- [ 23 ] Erolessi F , Adams J B 1994 *Europhys. Lett.* **26** 583
- [ 24 ] Cleri F , Rosato V 1993 *Phys. Rev. B* **48** 22
- [ 25 ] Jacobsen K W , Stoltze P , Norskov J K 1996 *Surf. Sci.* **366** 394
- [ 26 ] Lipsitt H A , Shechtman D , Schefrik R E 1975 *Metall. Trans. A* **6** 1991

## Molecular dynamics study of deformation mechanism of $\gamma$ -TiAl intermetallics<sup>\*</sup>

Zhou Zong-Rong Wang Yu Xia Yuan-Ming<sup>†</sup>

( Department of Mechanics and Mechanical Engineering and The Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials , Chinese Academy of Sciences , University of Science and Technology of China , Hefei 230027 , China )

( Received 13 June 2006 ; revised manuscript received 22 August 2006 )

### Abstract

The generalized planar fault ( GPF ) energies of various slip systems in  $\gamma$ -TiAl intermetallics are studied by using molecular dynamics ( MD ) method. The unrelaxed and relaxed GPF curves of various slip systems are compared. It was show that the  $\gamma$ -TiAl has fewer mobile slip systems than the fcc crystal. It is also found that the  $\gamma$ -TiAl intermetallics would exhibit brittle behavior at ambient temperature. The relaxed generalized stacking and twinning fault energy curves of  $( 1/6 ) 11\bar{2} \{111\}$  twinning system are obtained. By analyzing the unstable stacking fault energy  $\gamma_{ust}$  , the stable stacking fault energy  $\gamma_{sf}$  , and the unstable twinning fault energy  $\gamma_{utf}$  , it can be predicted that the major deformation mechanisms are twinning  $( 1/6 ) 11\bar{2} \{111\}$  and ordinary dislocation slip  $( 1/2 ) 1\bar{1}0 \{111\}$  , as well as superdislocation slip  $( 1/2 ) 0\bar{1}1 \{111\}$ .

**Keywords :**  $\gamma$ -TiAl , stacking fault energy , twinning fault energy , molecular dynamics

**PACC :** 6170P , 6185

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 90505002 ).

<sup>†</sup> E-mail : ymxia@ustc.edu.cn