

# 镍基单晶高温合金相界面错配位错网络的演化<sup>\*</sup>

朱 弢<sup>1)†</sup> 王崇愚<sup>1)2)</sup> 干 勇<sup>1)</sup>

1) 钢铁研究总院功能材料研究所, 北京 100081)

2) 清华大学物理系, 北京 100084)

(2008 年 12 月 26 日收到, 2009 年 1 月 6 日收到修改稿)

运用分子动力学方法, 研究了镍基单晶高温合金  $\gamma/\gamma'$  相界面错配位错网络的特征. 通过对界面位错的形成、位错的反应、位错网络的演化等现象的分析发现, 在温度场影响下, 位错网络将由弛豫初期的十四面体演化成最终的正六面体.

关键词: 镍基单晶高温合金, 相界面错配位错, 位错网络演化, 分子动力学

PACC: 6185, 6170N, 6155H

## 1. 引 言

镍基单晶高温合金是先进航空发动机最主要的叶片材料, 是国家正在开展的“大飞机”项目的关键技术. 自 20 世纪 80 年代初第一代单晶高温合金研制成功以来, 单晶合金的发展甚为迅速. 相继出现耐高温能力有突破性提高的第二代、第三代和第四代单晶合金, 并且已经广泛应用于当前最先进的在役和在研的航空发动机和地面燃气轮机, 为发动机性能的大幅度提高做出了重大贡献. 单晶高温合金及其工艺的发展具有一系列重要特点, 其应用范围日益扩大. 在今后一段较长的时期内, 镍基单晶高温合金材料将是最重要、最可靠、用量最大和最经济的航空发动机和地面燃气轮机叶片材料<sup>[1, 2]</sup>.

镍基单晶高温合金的显微结构基本上由作为母相的  $\gamma$  相和析出相的  $\gamma'$  相组成. 为了简化, 又不失物理意义, 在本文中以单晶 Ni 作为合金的母相  $\gamma$  相. 单晶 Ni 是面心立方结构, 晶格常数  $a_\gamma$  为 0.352 nm<sup>[3]</sup>. 同时, 以有序金属间化合物 Ni<sub>3</sub>Al 作为强化相的  $\gamma'$  相. Ni<sub>3</sub>Al 属 L1<sub>2</sub> 结构, 晶格常数  $a_{\gamma'}$  为 0.3567 nm (实验值)<sup>[3]</sup> 或 0.3573 nm (计算值)<sup>[4]</sup>. 由此可见,  $\gamma'$  析出相与  $\gamma$  母相具有相似的结构, 并且晶格常数相差无几. 另外, 合金经过热处理后,  $\gamma'$  析出相呈方块状镶嵌在  $\gamma$  相中, 与  $\gamma$  相基体保持共格关系, 即形成

所谓的“马赛克 (mosaic) 结构”. 实验发现, 合金的持久寿命与细小 (约为 0.45  $\mu\text{m}$ ) 的  $\gamma'$  析出相的量有很大关系. 增加  $\gamma'$  析出相的量关键是提高合金固溶温度. 在新一代合金中,  $\gamma'$  相的体积分数可达 70%. 因此,  $\gamma/\gamma'$  相界面以及“马赛克”结构广泛地存在于镍基单晶高温合金中, 这是镍基单晶高温合金最主要的结构特征<sup>[5, 6]</sup>. 在一定程度上, 可认为镍基单晶高温合金的优异性能是由  $\gamma/\gamma'$  相界面的结构特征所决定. 因此, 在原子尺度上弄清“马赛克”结构的一些基本特征有极其重要的意义.

分子动力学方法为我们研究“马赛克”结构的一些基本特征提供了一种方便、可行、有效的手段. 分子动力学是一种确定性的模拟方法, 其出发点是物理系统的确定性微观描述, 亦即系统中的每个分子都遵从经典力学运动定律. 分子动力学模拟不仅能得到原子的运动细节, 还能像做实验一样进行各种观察. 特别是许多在实际实验中无法获得的微观细节, 而在分子动力学模拟中都可以方便地观察到. 这些优点使分子动力学在物理、化学和材料科学等领域的研究中非常有吸引力<sup>[7, 8]</sup>. 分子动力学模拟以程序简单、计算量小、可计算的原子体系大大超过第一性原理方法以及可模拟原子结构及结构演化为特征. 因而, 在对“马赛克”结构的研究中, 我们采用了分子动力学方法.

本文的主要目的是运用分子动力学方法, 研究

<sup>\*</sup> 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2006CB605102) 和中国博士后科学基金 (批准号: 20070420392) 资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: zhutao2003@sohu.com

在温度场作用下  $\gamma/\gamma'$  相界面及错配位错网络的行为特征.通过对界面和位错的形成、位错网络的演化、位错运动的特征等现象的分析,反映温度对合金蠕变行为的影响,探索环境影响合金原子结构演化的规律.在模拟中采用的原子间相互作用势是 Voter-Chen 的嵌入原子势(EAM 势)<sup>[4]</sup>.Voter-Chen 的 EAM 势在对 Ni-Al 体系的研究中有非常广泛的应用<sup>[9-13]</sup>,运用该 EAM 势进行分析和计算是方便和可靠的.

## 2. 建模与模拟

为了突出镍基单晶高温合金最主要的结构特征,我们在已有的实验和理论研究成果基础上,设计出具有最简单化学成分(Ni,Al 二元体系)和结构特征(“马赛克”结构)的原子结构模型.

我们从实验<sup>[5,6]</sup>中得知,镍基单晶高温合金经热处理后,析出相呈方块状镶嵌在  $\gamma$  母相中,形成“马赛克”结构, $\gamma/\gamma'$ 相界面沿 $\{100\}$ 方向, $\gamma'$ 析出相体积分数约为 70%.另外,由于  $\gamma$  相和  $\gamma'$  相具有相似的晶体结构,只是晶格常数略有差别<sup>[3]</sup>,当  $\gamma'$  相从基体  $\gamma$  相析出时,接触面上两相的原子处于错配状态.错配度  $\delta$  可表示为

$$\delta = 2 \frac{a_{\gamma'} - a_{\gamma}}{a_{\gamma'} + a_{\gamma}} \times 100\% . \quad (1)$$

将  $a_{\gamma} = 0.352 \text{ nm}$ ,  $a_{\gamma'} = 0.3567 \text{ nm}$  代入(1)式,得到  $\delta \approx 1.5\%$ .

基于能量最小原理,错配界面两侧附近的原子通过自动调整其位置,使体系能量降低,即发生弛豫.弛豫后,形成错配位错网,它是降低体系畸变能量的一种重要方式<sup>[14]</sup>.

考虑到实验事实,按照构造  $\gamma/\gamma'$  相界面的思想<sup>[15]</sup>,我们构造了 Ni 基单晶高温合金的“马赛克”结构模型<sup>[16]</sup>.因为  $\gamma$  相和  $\gamma'$  相晶格常数之间存在着以下关系:

$$66a_{\gamma'} = 67a_{\gamma} . \quad (2)$$

也就是分别沿着  $x$  方向 $[100]$ 、 $y$  方向 $[010]$ 和  $z$  方向 $[001]$ 排列而成、大小为 $(66a_{\gamma'})^3$ 的立方体  $\gamma'$ 析出相的体积与大小为 $(67a_{\gamma})^3$ 的立方体  $\gamma$ 基体的形状和体积完全一致.所以,用大小为 $(66a_{\gamma'})^3$ 的  $\gamma'$ 析出相立方体,替换大小为 $(75a_{\gamma})^3$ 的  $\gamma$ 基体中心的大小为 $(67a_{\gamma})^3$ 的  $\gamma$ 相,这就形成了“马赛克”的基本单元,见图 1.由此构成的模型因晶格常数差而

产生的应力,在总体上得到松弛,两相之间不会出现应力不匹配的现象.

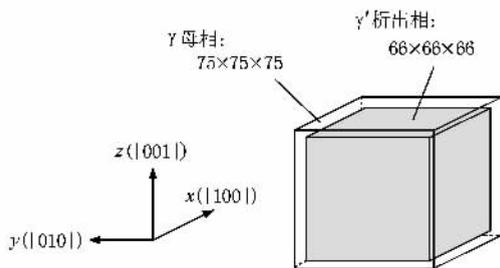


图 1 “马赛克”结构的初始模型

“马赛克”的基本单元的体积分数为

$$\left( \frac{66a_{\gamma'}}{75a_{\gamma}} \right)^3 \times 100\% . \quad (3)$$

将  $a_{\gamma}$  和  $a_{\gamma'}$  的值代入(3)式后得到  $\gamma'$  相的体积分数约为 71.3%,这与实际合金  $\gamma'$  相的体积分数相符.

为消除模型表面的影响,我们在模拟中采用的是周期边界条件.由于在实际的 Ni 基单晶高温合金中  $\gamma'$  析出相排列非常整齐,因此采用周期边界条件符合析出相在 Ni 基单晶高温合金中的实际情况.另外,在构造的 Ni 基单晶高温合金的“马赛克”结构模型中, $\gamma$  相基体的厚度为  $16a_{\gamma}$ ,远远大于我们所采用的 EAM 势的截断距离,因此在界面上形成的位错与其镜像之间距离足够远,二者之间没有相互作用.我们也通过模拟试验验证了这一点.

从以上模型的建立过程可以知道,晶格的排列方向分别为  $x$  方向 $[100]$ 、 $y$  方向 $[010]$ 和  $z$  方向 $[001]$ .因此, $\gamma/\gamma'$ 相界面均为 $\{100\}$ 面.这也与实验观察到的“马赛克”图形的  $\gamma/\gamma'$ 相界面的取向是一致的.

## 3. 结果及讨论

采用文献[4]的 EAM 势,在温度为 5 K 时,对以上模型进行弛豫.弛豫时采用的时间步长为  $5 \times 10^{-15} \text{ s}$ ,弛豫的总步数为 4100.势能收敛曲线示于图 2.

根据总势能变化曲线可以看出,总势能随着弛豫步数的增加逐渐降低,由初始的  $-7.406 \text{ MeV}$  降到  $-7.435 \text{ MeV}$ .到 3000 步时,降低速度已经很缓慢了.到 4000 步时,系统总能量在  $1.6 \text{ eV}$  的幅度内振荡衰减,系统处于动态平衡状态.

在本次模拟中,我们重点关注系统趋向平衡时相界面上形成的错配位错网构型的演化过程.为此,

我们获取了弛豫步数为 200, 500, 1000, 2000, 3000 和 4000 六个时刻系统的原子坐标.

我们从以上六个时刻系统的原子坐标中选出位错区的原子示于图 3.

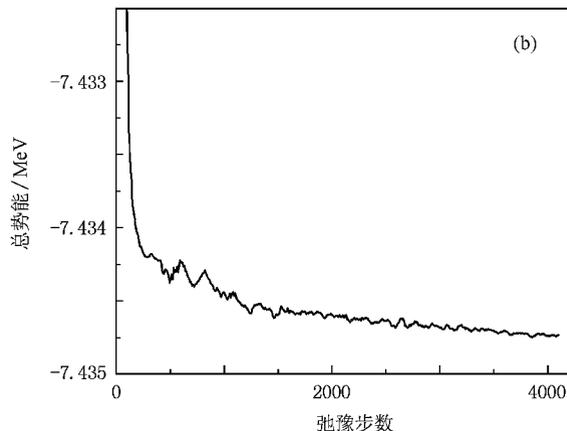
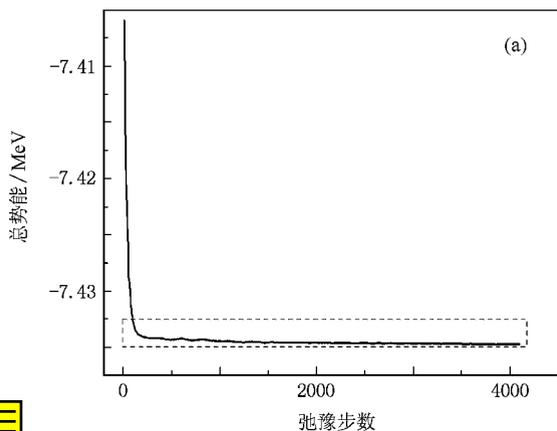
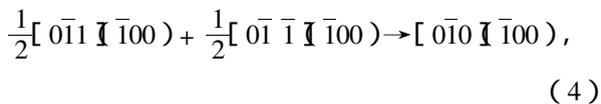


图 2 总势能随弛豫步数的变化曲线 (b)为(a)中虚线框内部分的放大图

由图 3(a) 可以看到, 弛豫步数为 200 时的错配位错网构型与温度为 0 K (即没有温度场作用) 时的位错网构型是一样的<sup>[16]</sup>. 此时, 在“马赛克”立方体的每一个相界面上都有四条首尾相接围成正方形的位错线, 组成这些位错网的位错是  $011 \{100\}$  型的刃型位错, 位错网络的总体形状是十四面体.

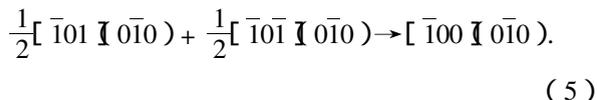
当温度为 5 K (即存在温度场) 时, 由于原子热运动, 到 500 步时有些位错线不再保持直线, 出现了扭折, 在扭折的“牵引”下位错沿着相界面向立方体的顶点移动. 同时, 还出现了新的位错, 这是有温度场时产生的现象. 下面我们仔细分析新位错的特征.

首先, 关注图 3(a) 中  $(\bar{1}00)$  界面右侧的 1 号和 2 号两个位错, 它们位错指数分别为  $[0\bar{1}1 \parallel \bar{1}00]$  和  $[0\bar{1}\bar{1} \parallel \bar{1}00]$ . 随着弛豫步数的增加, 到 500 步时 1 号和 2 号位错开始沿着各自的滑移方向向外侧滑移, 并在两个位错的交接处产生了 5 号新位错. 新位错的形成过程为



即在  $(\bar{1}00)$  界面上逆着  $y$  方向  $([0\bar{1}0])$  滑移的刃形位错.

然后, 再关注图 3(a)  $(0\bar{1}0)$  界面左侧的 3 号和 4 号两个位错, 它们的位错指数分别为  $[\bar{1}01 \parallel 0\bar{1}0]$  和  $[\bar{1}0\bar{1} \parallel 0\bar{1}0]$ . 同样, 随着弛豫步数的增加, 到 500 步时 3 号和 4 号位错开始沿着各自的滑移方向向外侧滑移, 并在两个位错的交接处产生了 5' 号新位错. 这个新位错的形成过程为



分别在  $(\bar{1}00)$  界面和  $(0\bar{1}0)$  界面上产生的两个新的 5 号和 5' 号位错滑移面和滑移方向相互垂直, 相遇后相互阻碍了对方继续滑移, 最终共同形成了一段无法移动的位错, 统称为 5 号位错.

同样, 在  $(\bar{1}00)$  界面和  $(00\bar{1})$  界面的交线上产生了新的 6 号位错, 在  $(0\bar{1}0)$  界面和  $(00\bar{1})$  界面的交线上产生了新的 7 号位错, 见图 3(c).

随着弛豫步数的增加, 5 号、6 号和 7 号位错逐渐变长. 当弛豫步数达到 4000 时, 这三条新位错相交在“马赛克”结构的顶点 A. 这时, 顶点 A 周围相应的弛豫初期形成的 2 号、4 号等位错随之消失. 可以预期, 继续增加弛豫步数, 另外七个顶点会逐个出现. 最终形成的位错网络的总体形状是立方体, 或者称为正六面体. 实验证实, 类似这样的位错反应与合金的蠕变相关, 正方形位错网更稳定, 能更有效地阻碍  $\gamma'$  相的粗化<sup>[17]</sup>.

需要说明的是, 同样的初始模型, 在没有温度场时, 形成的位错网络的形状总是保持十四面体不变, 没有发现扭折和位错滑移<sup>[16]</sup>. 而当存在温度场时, 在 200 步以前, 位错网络的形状还可以像没有温度场时一样保持十四面体不变. 随着弛豫步数的增加, 由于原子的热运动, 在温度场作用下某些位错原子获得了足够形成扭折的能量. 到 500 步时, 在温度场的作用下已经出现了扭折, 然后带动整个位错沿着相界面滑动. 经过位错反应, 最终整个“马赛克”结构位错网络由十四面体演化成了正六面体.

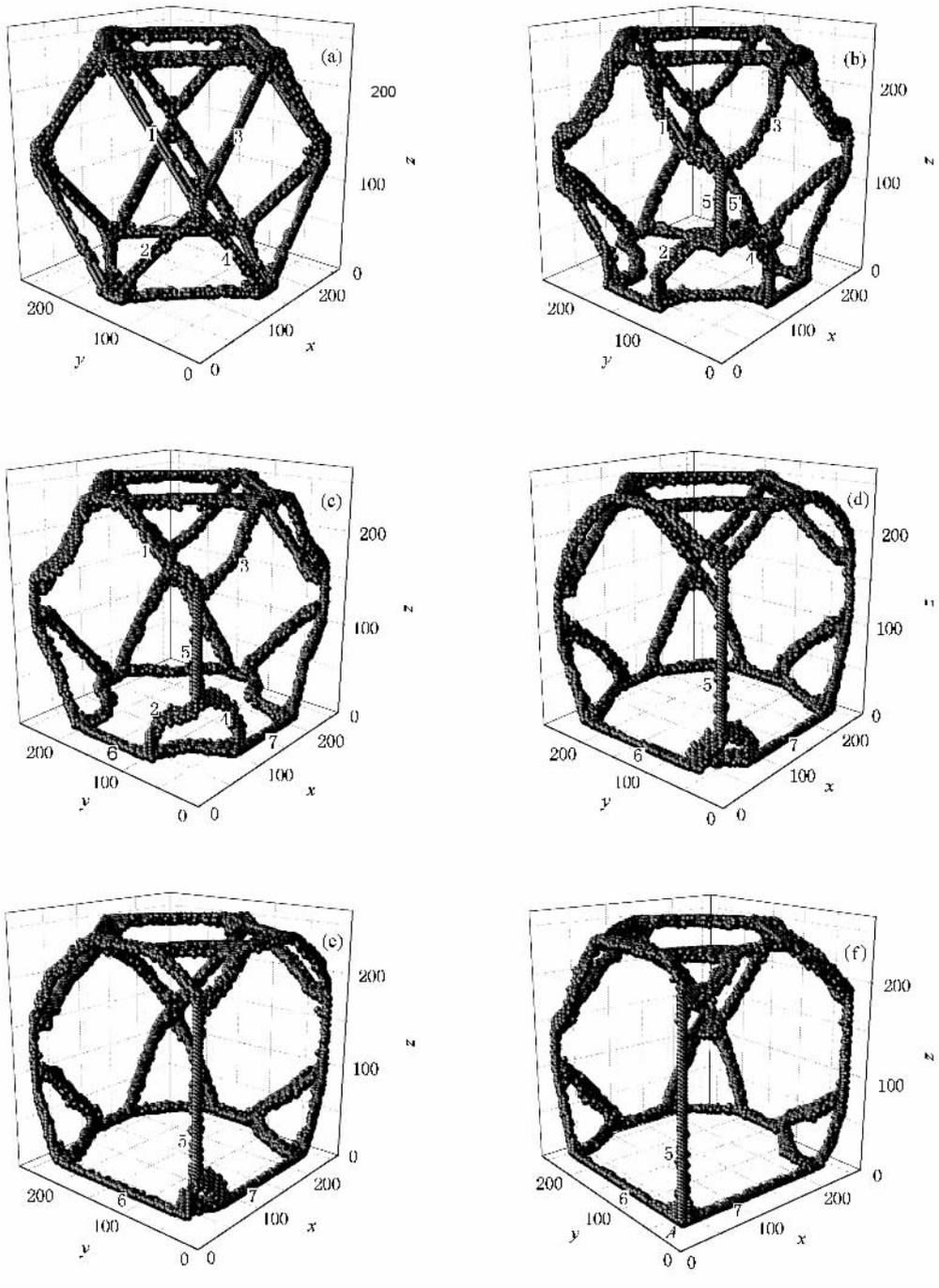


图3 弛豫步数为 200 500 1000 2000 3000 4000 时的相界面错配位错 (a)弛豫步数为 200 (b)弛豫步数为 500 , (c)弛豫步数为 1000 (d)弛豫步数为 2000 (e)弛豫步数为 3000 (f)弛豫步数为 4000

## 4. 结 论

在温度场作用下原子的热运动加强,模拟初期

在相界面上形成的位错出现了扭折,从而带动位错沿着相界面滑动.随着弛豫步数的增加,整个“马赛克”结构位错网络将由弛豫初期的十四面体演化成最终的正六面体.

- [ 1 ] Gell M , Duhl D N , Giamei A F 1980 *Superalloys* ( Metals Park : American Society for Metals ) p205
- [ 2 ] Walston S , Cetel A , Mackay R , O 'Hara K , Duhl D , Dreshfield R 2004 *Superalloys* ( Warrendale : The Minerals , Metals and Materials Society ) p15
- [ 3 ] Kayser F X , Stassis C 1981 *Phys. Stat. Sol. A* **64** 335
- [ 4 ] Voter A F , Chen S P 1987 *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys* ( Pittsburgh : Materials Research Society ) p175
- [ 5 ] Jackson J J , Donachie M J , Henrich R J , Gell M 1977 *Metall. Trans. A* **8** 1615
- [ 6 ] Khan T , Caron P 1986 *Mater. Sci. Techn.* **2** 486
- [ 7 ] Wen Y H , Zhang Y , Zhu Z Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1834 ( in Chinese ) [ 文玉华、张 杨、朱梓忠 2008 物理学报 **57** 1834 ]
- [ 8 ] Chen L Q , Wang C Y , Yu T 2008 *Chin. Phys.* **17** 662
- [ 9 ] Angelo J E , Moody N R , Baskes M I 1995 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **3** 289
- [ 10 ] Angelo J E , Baskes M I 1996 *Interf. Sci.* **4** 47
- [ 11 ] Mishin Y , Farkas D , Mehl M J , Papaconstantopoulos D A 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3393
- [ 12 ] Cherne F J , Baskes M I , Deymier P A 2001 *Phys. Rev. B* **65** 024209
- [ 13 ] Farkas D , Roqueta D , Vilette A , Ternes K 1996 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **4** 359
- [ 14 ] Hirth J P , Lothe J 1968 *Theory of Dislocations* ( New York : McGraw-Hill ) p201
- [ 15 ] Zhu T , Wang C Y 2005 *Phys. Rev. B* **72** 014111
- [ 16 ] Zhu T , Wang C Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 2087
- [ 17 ] Zhang J X , Murakumo T , Koizumi Y , Kobayashi T , Harada H , Masaki S 2002 *Metall. Mater. Trans. A* **33** 3741

## Evolution of interphase misfit dislocation networks in Ni-based single-crystal superalloy<sup>\*</sup>

Zhu Tao<sup>1)†</sup> Wang Chong-Yu<sup>1)2)</sup> Gan Yong<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup> *Division of Functional Materials , Central Iron and Steel Research Institute , Beijing 100081 , China*

<sup>2)</sup> *Department of Physics , Tsinghua University , Beijing 100084 , China*

( Received 26 December 2008 ; revised manuscript received 6 January 2009 )

### Abstract

The molecular dynamics simulations are used to study the characteristics of misfit dislocation networks in the  $\gamma/\gamma'$  phase interface of a Ni-based single-crystal superalloy. From the analyses of the formation of interphase dislocations , the reaction of dislocations , and the evolution of dislocation networks , we find that the shape of the dislocation network finally evolves into a regular hexahedron from an original tetradedron.

**Keywords:** Ni-based single-crystal superalloy , interphase misfit dislocation , evolution of dislocation network , molecular dynamics

**PACC:** 6185 , 6170N , 6155H

<sup>\*</sup> Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China ( Grant No. 2006CB605102 ) and the Science Foundation for Postdoctor of China ( Grant No. 20070420392 ).

<sup>†</sup> E-mail : zhutao2003@sohu.com