

TiAl/Ti₃Al 体系剪切变形的分子动力学研究*

刘永利^{1)†} 赵 星^{1)B)} 张宗宁¹⁾ 张 林¹⁾ 王绍青²⁾ 叶恒强²⁾

1) 东北大学理学院, 沈阳 110004)

2) 中国科学院金属研究所, 沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016)

3) 辽宁工业大学数理科学系, 锦州 121001)

(2008 年 12 月 29 日收到, 2009 年 2 月 22 日收到修改稿)

利用分子动力学方法研究了正化学比的 TiAl/Ti₃Al 双相体系中剪切变形诱发位错形核以及相关结构转变的动态过程以及切变力场对最终结构的影响. 研究发现, 在 TiAl/Ti₃Al 双相体系中剪切变形诱发黏滞-滑移式的滑移行为, 界面在其中起到了传递能量、均衡协变的作用, 界面两侧的异相结构保留了单相形变特征. 六角密堆积(HCP)-Ti₃Al 部分各原子层较长时间内呈整体剪切协变, 其后形变变化为应力集中诱发层错区和初始完整结构回复区, 而面心立方(FCC)-TiAl 部分因刚性较大仅存在微协变, 其后局部受力区直接诱发相邻原子层间相对滑移, 发生 FCC 向 HCP 结构转变. 变形结构方面, HCP-Ti₃Al 部分在剪切力较大区域形成连续且稳定的 FCC 堆垛, 近界面区 FCC 薄层与 HCP 相交替并存, 而 FCC-TiAl 部分内禀层错和李晶共存, 当力场增大时形成亚稳 HCP 结构.

关键词: TiAl/Ti₃Al, 分子动力学模拟, 剪切变形, 层错结构

PACC: 7115Q, 6185, 6170L

1. 引 言

(γ -TiAl + α_2 -Ti₃Al) 双相组织具有优异的综合性能. 研究 TiAl 合金双相组织 ($\alpha_2 + \gamma$) 变形过程中界面 (α_2/γ , γ/γ) 行为以及相关机理具有重要的意义^[1-3]. 目前已有不少研究从实验和理论两方面报道了 TiAl 合金变形以及其与界面结构的关系^[4-17]. 室温下许多应力变形的方(如挤压、压缩、球磨、机械热处理和高压扭矩应变)被用来诱发得到双相组织^[4-10]. 实验观察发现, TiAl 合金中形变能诱发沿 $[11\bar{2}]$ 方向的位错滑移以及李晶^[4, 12]. 而在 Ti₃Al 中, 形变首先诱发基面(0001)上沿 $1/3 [10\bar{1}0]$ 方向的滑移^[4, 11, 12]. 计算研究方面, 有研究者从层错能^[13, 14]、铝的含量^[15]、界面的反对称性和结合键的影响^[16, 17]等方面研究 TiAl 界面相关问题. Liu 等^[18, 19]综合运用第一性原理和分子动力学方法研究了单相 TiAl 和 Ti₃Al 中形变诱发的位错滑移和微结构演化过程. 不过关于 TiAl/Ti₃Al 双相体系变形过程中与界面相关的位错衍生以及微结构演化等方

面的研究尚不多见, 因此开展这方面的研究非常必要.

本文采用分子动力学(MD)方法研究了正化学比的 TiAl/Ti₃Al 双相体系在恒正应力、不同外加切应力场作用下的微观结构演变过程. 重点关注变形过程中面心立方(FCC)与六角密堆积(HCP)结构之间的变化. MD 方法采用嵌入原子势(EAM)来描述系统内原子之间的相互作用,

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Phi_{i,j}(r_{i,j}) + \sum_i F_i(\bar{\rho}_i), \quad (1)$$

式中, 第一项描述对势作用能, 第二项描述嵌入势作用能, $\Phi_{i,j}$ 是 i 和 j 两个原子分别在 r_i 和 r_j 位置时的相互作用势, F_i 是 i 原子所受到的嵌入作用能, $\bar{\rho}_i$ 是除了 i 原子外的所有其他原子在 i 原子位置所产生的电荷密度之和. $\bar{\rho}_i$ 通过下式得到:

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}). \quad (2)$$

具体的 EAM 中所用到的参数是在上述 EAM 的框架下, 利用大量可靠的实验数据和第一性原理方法计算结果拟合得到的. 可以较好地描述系统中晶格变形等相关问题^[20].

* 国家自然科学基金(批准号 50671109)和国家重点基础研究发展计划(批准号 2006CB605103, 2006CB600905)资助的课题.

† E-mail: ylliu@imp.neu.edu.cn

2. 计算方法与模型

本文的计算研究是基于 XMD 程序^[21]开展的. 实验观察发现,在 TiAl 中密排(111)面上沿 $[1\bar{1}\bar{2}]$ 方向的位错滑移与相变中位错形核密切相关,而在 Ti₃Al 中主要是(0001)基本上 $1/3 [10\bar{1}0]$ 方向的滑移诱发了层错.从这两个变形特征入手,我们可以把 TiAl/Ti₃Al 双相体系变形纳入到一个剪切变形的系统中.如图 1 所示,在原 L1₀ 结构基础上,MD 模型中

原 TiAl(图 1(a))三个方向重新取为 $x([11\bar{2}]),y([111]),z([1\bar{1}\bar{0}])$ (图 1(c)上方);而原 Ti₃Al(图 1(b))的三个方向重取为 $x([10\bar{1}0]),y([0001]),z([1\bar{2}10])$ (图 1(c)下方).利用此模型,TiAl 中(111)密排面 $[1\bar{1}\bar{2}]$ 方向以及 Ti₃Al 中(0001)面 $10\bar{1}0$ 方向的滑移可以简单地看作是系统沿着 x 方向的剪切变形(图 2).本工作中采用的模型共有 24300 个原子,在垂直于剪切平面的 y 方向上保持 60 个原子层,确保 y 方向上下两个边界之间几乎无相互作用(一般 10 个原子间距之外相互作用已很小).

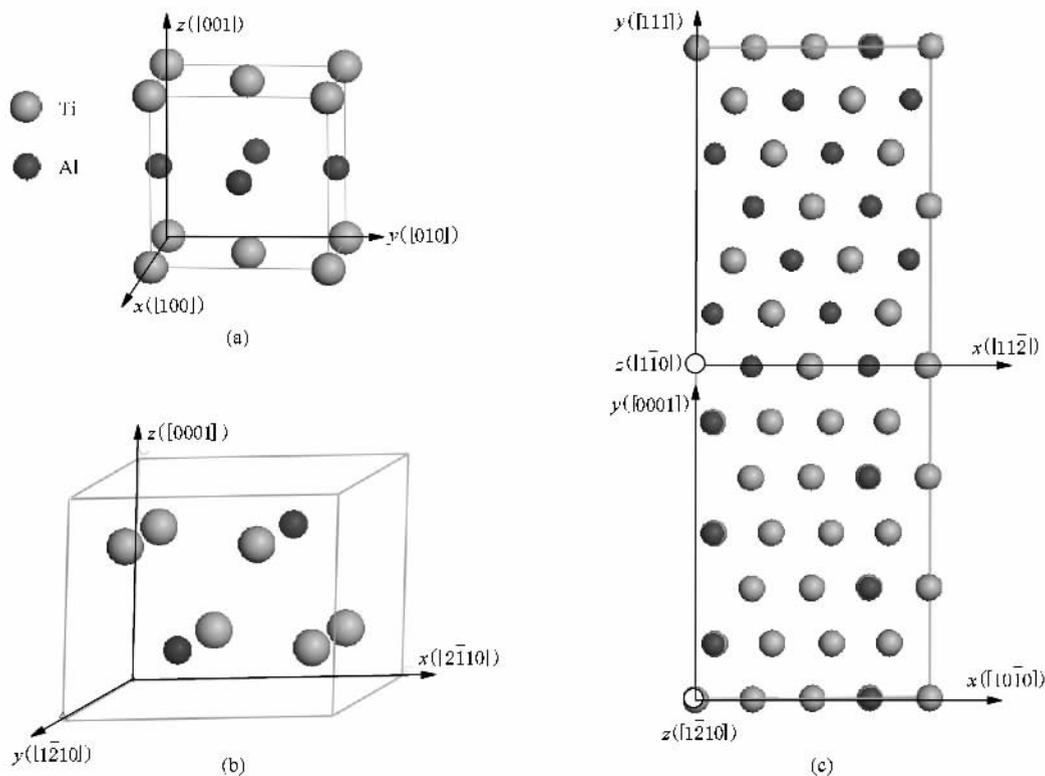


图 1 标准 L1₀-TiAl 结构、D0₁₉-Ti₃Al 结构和重新取向后采用的剪切模型在 z 方向上的投影 (a)L1₀-TiAl 结构, (b)D0₁₉-Ti₃Al 结构 (c)重新取向后剪切模型在 z 方向上的投影

在 y 方向上定义两个边界(见图 1(a)),每个边界包含 5 个原子层.边界内的原子位置固定,保持原来完整晶体的排列,不经历任何动力学过程.在边界区域加了一个 Nosé-Hoover 自动调温器,系统内的粒子保持恒温 300 K;对于边界外的其他粒子,则任其根据牛顿运动方程运动. y 方向采用自由边界条件,而 z 和 x 方向则采用周期性边界条件.

根据实际样品变形时的受力情况,作用在各个原子面上的作用力可以分为垂直于原子面和平行于

原子面两部分.据此,变形模拟将设置为双相系统在一个恒正压力和一个剪切力场共同作用下的变形过程.首先,对于边界区,我们分别在上下边界施加了束缚正应力(y 方向)和切应力(x 方向).其次,根据实验情况,系统各个原子面都会受到一个初始的切应力,各原子面会在这个外力作用下发生切变以缓解局部受力.所以在变形之初($t = 0 - 500t_0$),我们对边界外的各个原子层沿 x 方向施加了一个初始切应力场($-F_{\text{tangential}} - F_{\text{tangential}}$).根据牛顿运动方程,在撤去该切应力场后,界面上部分的原子面

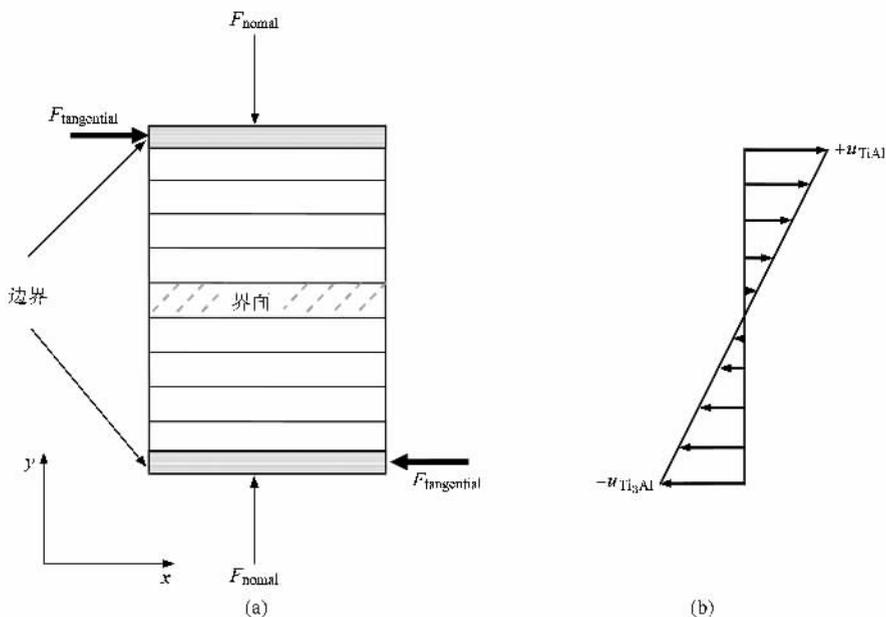


图2 切变模型应力场和 x 方向应力撤去后各原子层的初始切变速度场示意图 (a)切变模型应力场, y 方向上灰色区域代表两个边界, x 方向施加切变应力 $F_{tangential}$ 目的是诱发原子面的滑移(500 个时间步长后即撤去), 沿 y 方向施加的垂直应力 F_{normal} 则是为保证一定的正应力和原子面间的内部摩擦作用 (b) x 方向应力撤去后各个原子层的初始切变速度场示意图

将具有一个 $+\frac{1}{2} u_{TiAl}$ 的中心速度, 而下部分的原子面具有一个 $-\frac{1}{2} u_{Ti3Al}$ 的中心速度, 其中 u_{TiAl} 为 TiAl 原子层的最大切变速度, u_{Ti3Al} 为 Ti_3Al 原子层的最大切变速度. 整个系统具有一个从 $-u_{Ti3Al}$ 到 $+u_{TiAl}$ 的初始速度场(图 2(b)). 正应力的存在可以确保必要的原子面间黏滞力, 切应力的存在可导致原子面间的相互滑移. 在随后的时间里, 系统内上下边界之间的原子按照牛顿方程运动直至达到平衡态. 然后, 我们再进行系统性质的测量和计算.

本模拟中变形应力场是在对 TiAl/ Ti_3Al 系统弛豫 10000 步以后再施加的, 分别研究了切应力场最大值 $F_{tangential}$ 为 0.5×10^{-9} N, 1×10^{-9} N 和 1.5×10^{-9} N 三种情况. 这些值是参考实验并且通过比较不同应力场的模拟结果之后确定的. 我们认为最小的应力场应该能够诱发某些结构变化, 而较大的应力场引发的结构变化可以和之前的有所区别.

本工作采用的切变模型有些与文献 [22, 23] 的模型类似, 如边界的定义^[22]、边界条件和初始变形的设置^[23]. 不同之处在于 y 方向应力、 x 方向切变

力场的施加以及速度场的初始化.

3. 结果及讨论

我们首先给出力场 $F_{tangential} = 1 \times 10^{-9}$ N 时的切变相关情况, 其他两个力场的作用结果将在下面与 $F_{tangential} = 1 \times 10^{-9}$ N 的结果进行对比分析时讨论.

力场的施加引发了切变方向上原子面的滑移, 能定性地反映系统内原子之间即时位置相对变化的参数主要是势能 E_{pot} . 由势能的变化趋势可以定性判断特定时间段内的结构转变. 另外, 原子构型图可以直观地给出即时微结构变化的细节, 从中了解变形机制和模式.

3.1. 势能 E_{pot} 变化与微结构演变

图 3 表示的是系统内 TiAl/ Ti_3Al 部分及总的平均原子势能随时间的变化曲线, 其中 TiAl/ Ti_3Al 部分势能均在大致相同时刻观察到若干局域极大值, 表明结构变化的步调基本一致. 图 4 是相应于图 3 中曲线变化的某些特定时刻, 系统在 x - y 平面上的即时结构剖面图(仅截取了界面两侧部分原子层).

从图 3 可以看到, 约 $500t_0$ 左右时系统有一段能量低谷, 这可能是由于正化学比的初始 TiAl/ Ti_3Al

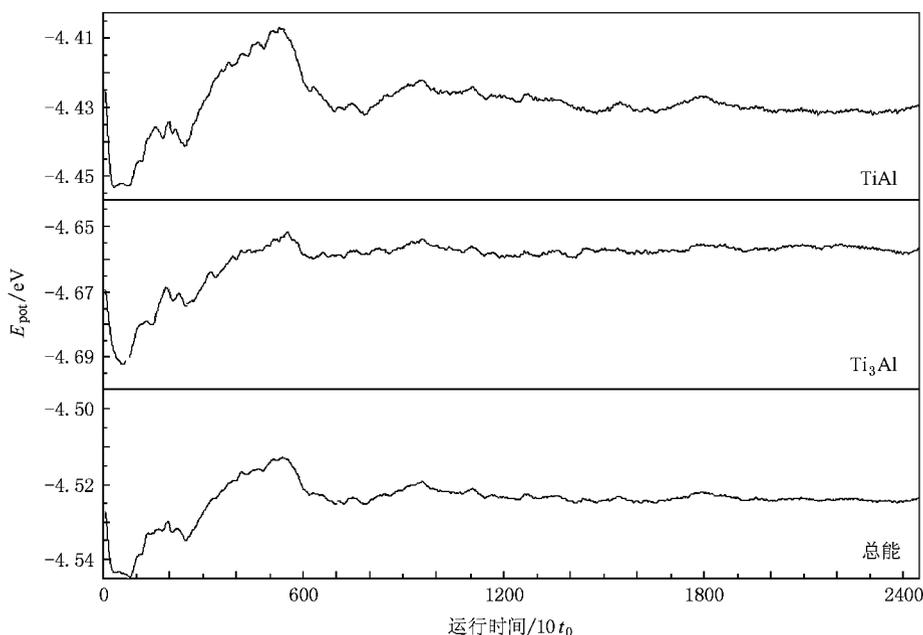


图3 系统平均原子势能 E_{pot} 随时间的变化 $t_0 = 5 \times 10^{-16}$ s

结构(图4(a))界面受力集中,而0—500 t_0 时间段施加的切变力场引起的原子层微滑移可以缓解这种应力紧张状态,所以能量更低.500 t_0 后初始切变力场被撤去,系统各原子层在图2(b)所示的切变速度场中运动.从图3可以观察到在500 t_0 —2500 t_0 , 2500 t_0 —7000 t_0 以及8000 t_0 —10000 t_0 之间分别出现峰值.从 E_{pot} 以及切变结构的变化可以看出,该剪切变形是一种黏滞-滑移行为,即系统内各原子层根据受力不同时而黏滞时而滑移.具体而言,就是当剪切应力(能量)逐渐增大,但仍未能克服形变诱发的晶格阻力时,相对滑移受阻(黏滞状态),而当外力增加到能克服形变阻力时,就会诱发原子层间的滑移(滑移状态)来缓解应力集中,此时系统能量会迅速降低趋于平缓或达到另一个极小值.

在500 t_0 —2500 t_0 时间段,TiAl(Ti₃Al)部分势能总体呈现上升趋势但伴随若干微小降低,系统势能于2000 t_0 时刻出现局域极大值,而后在2500 t_0 时刻降低到低谷.该过程中结构转变首先在远离界面、初始剪切速度场较大的原子层发生,应力诱发FCC或HCP向HCP或FCC堆垛转变,TiAl(Ti₃Al)部分初始时刻的ABCABC(ABAB)堆垛序列(图4(a))中出现了ABAB(ABABCA)堆垛(图4(b)—(d)).其次,FCC-TiAl和HCP-Ti₃Al部分原子层的切变诱发滑移呈现不同特征.HCP-Ti₃Al部分各原子层整体协变特征

明显,而FCC-TiAl则表现出更大刚性,相同时间内仅经历了微协变(图4(b)(c)),其后上下部分才各自进入实质性的结构转变阶段,相邻原子层间发生错配滑移,由原来的ABCABC堆垛转变为A'B'A'B'A'B'堆垛(图4(d)(e)).界面两侧的原子层滑移稍后启动.结合该过程中的能量变化(图3)可知,微观结构在初始速度场和晶格内部阻力的作用下暂时没有明显滑移(黏滞状态),直到外力场克服了晶格阻力,能量达到峰值(2000 t_0 时刻),系统变形持续进行(滑移状态),其滑移导致的结构变化使得系统势能略有下降(2500 t_0),上下两部分在大致相同时刻发生原子序列堆垛的完全转变(图4(e)).此时,形变区域分化,部分切变诱发新生相,部分回复初始完整堆垛状态.FCC-TiAl部分新生结构分别有HCP、孪晶、内禀层错等.HCP-Ti₃Al中转变更连续,出现了九原子层高度的连续立方堆垛结构,近界面处发生了HCP向FCC结构转变(图4(e)).

上述结构并不稳定,在随后的2500 t_0 —7000 t_0 时间段,系统势能在之前基础上又经历了能量升高而后降低的变化.在该过程中,FCC-TiAl和HCP-Ti₃Al部分经由界面处能量和受力的传递与协调,经历了丰富而又有趣的结构变化(图4(f)—(h)).FCC-TiAl部分前一阶段的切变诱发HCP结构逐渐消失,并发生了HCP向孪晶的转变,这一特点在纯TiAl

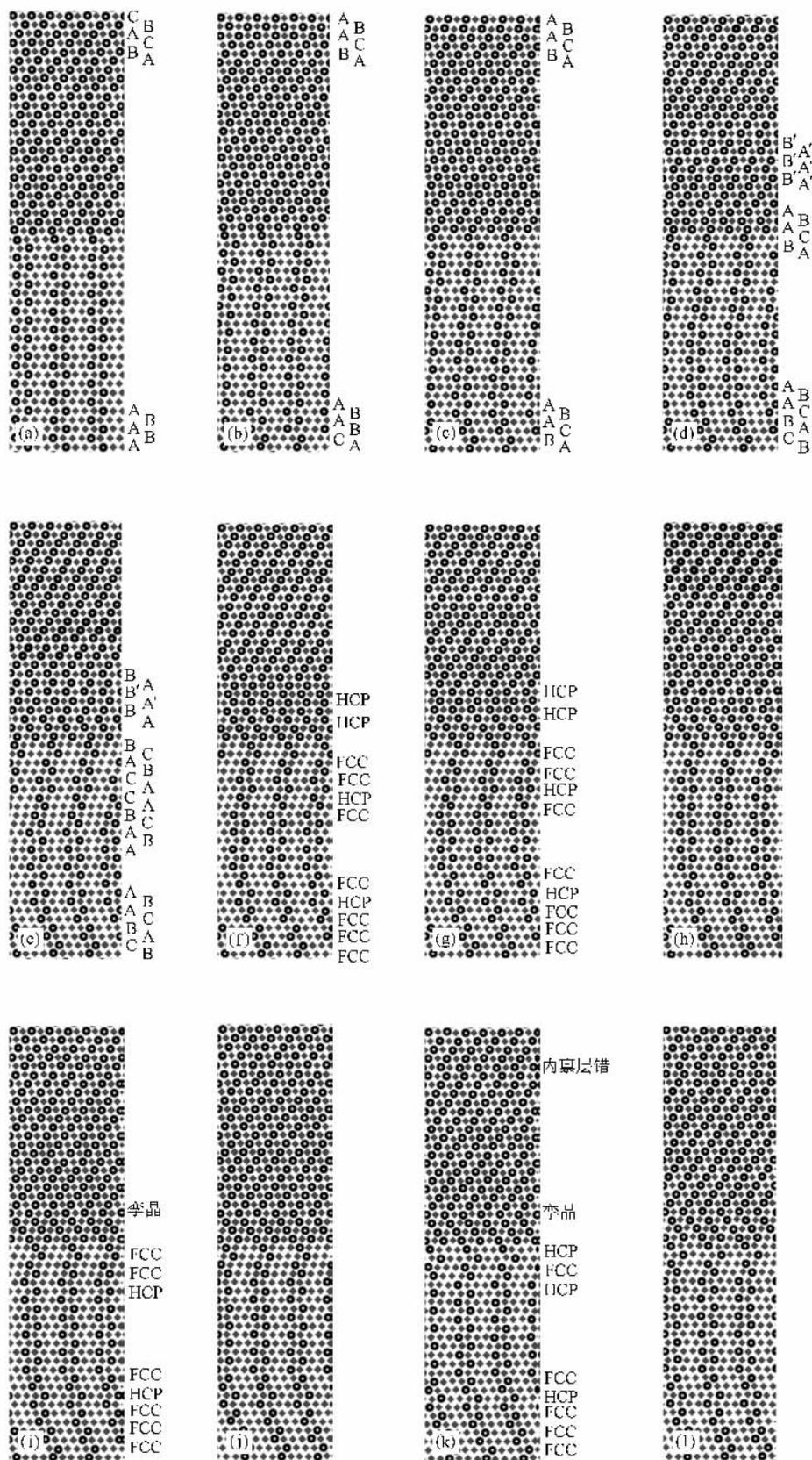


图 4 剪切变形作用下系统即时结构变化 圆形和菱形分别代表 Ti 和 Al 原子。(a) t_0 (b) $1000t_0$ (c) $1500t_0$ (d) $2000t_0$, (e) $2500t_0$ (f) $3500t_0$ — $4500t_0$ (g) $5500t_0$ (h) $5500t_0$ — $7000t_0$ (i) $8500t_0$ (j) $9000t_0$ (k) $9500t_0$ (l) $12450t_0$

计算和实验研究^[11,18]中已被观察到. HCP-Ti₃Al 部分较为复杂,在切变速度场的作用下近界面区域再次切变,中间为三原子层高度的立方堆垛错对,相界面和边界则形成了六原子层高度以上的立方堆垛层错对(图 4(f)(g)). 这样一种貌似对称的层错结构对应的却是系统能量的极大值(图 3 中 5500t₀). 随后与 TiAl 中连续 HCP 亚稳相部分消失的行为类似, Ti₃Al 中部分六原子层高的新生 FCC 结构也消失,仅保留 FCC 层错核(图 4(h)),而这也正是纯 Ti₃Al 中已发现的变形特征^[19].

在 8000t₀—10000t₀ 时间段,体系结构经历了最后一次微小变化,主要是界面处原来六原子层高的 FCC 新生结构部分回复为 HCP 堆垛. 最终 HCP-Ti₃Al 部分是连续 FCC 堆垛, FCC 层错核和 HCP 结构交替存在. 而 FCC-TiAl 部分则是孪晶和层错共存. 系统弛豫了更长时间步(15000t₀)后,结构再无变化,保持动态平衡,其中 FCC-TiAl 部分的能量约保持在平均每个原子 -4.275 eV, HCP-Ti₃Al 部分的能量约保持在平均每个原子 -4.625 eV. 与完整晶体平衡态时的实验值^[24]和计算值^[19]相比,这个变形系统因为受到了外场的做功,原子平均能量绝对值略大. 从初始变形到结构转变基本完成,持续时间约为 10000 个时间步长(5 ps).

从结构演变过程看,室温时系统在外力作用下的结构转变应该是无扩散型,类似结论在实验中也有所报道^[5,6,8,11]. 然而,目前由于模拟体系的设计以及尺度等方面的原因毕竟不能与实验相提并论,这一点仍有待进一步考察.

3.2. 初始力场的影响

不同力场最终变形结构如图 5 所示. 研究发现,对 FCC-TiAl 部分,当力场较小时只生成内禀层错和孪晶(图 5(a)(b)),可能有亚稳的 HCP 相出现,但 HCP 结构仅在力场很大时才可能有所保留. 对 HCP-Ti₃Al 部分,当初始力场较小时仅在较大受力区域形成连续立方堆垛,近界面区域则是薄层立方堆垛与六角相交替存在(图 5(a)). 力场的增大会进一步促进立方堆垛结构(图 5(b)(c)),界面区连续堆垛的 FCC 新生结构也会由亚稳态变为稳定结构而保存下来.

虽然在变形之初系统上下两部分所受外力一样,但随后产生的切变速度场并不相同($u_{TiAl} > u_{Ti_3Al}$). 由此可知, Ti₃Al 部分比较容易发生切变诱发新的层错. 这与我们在先前的工作^[25,26]中用第一性原理方法研究所得结果相同.

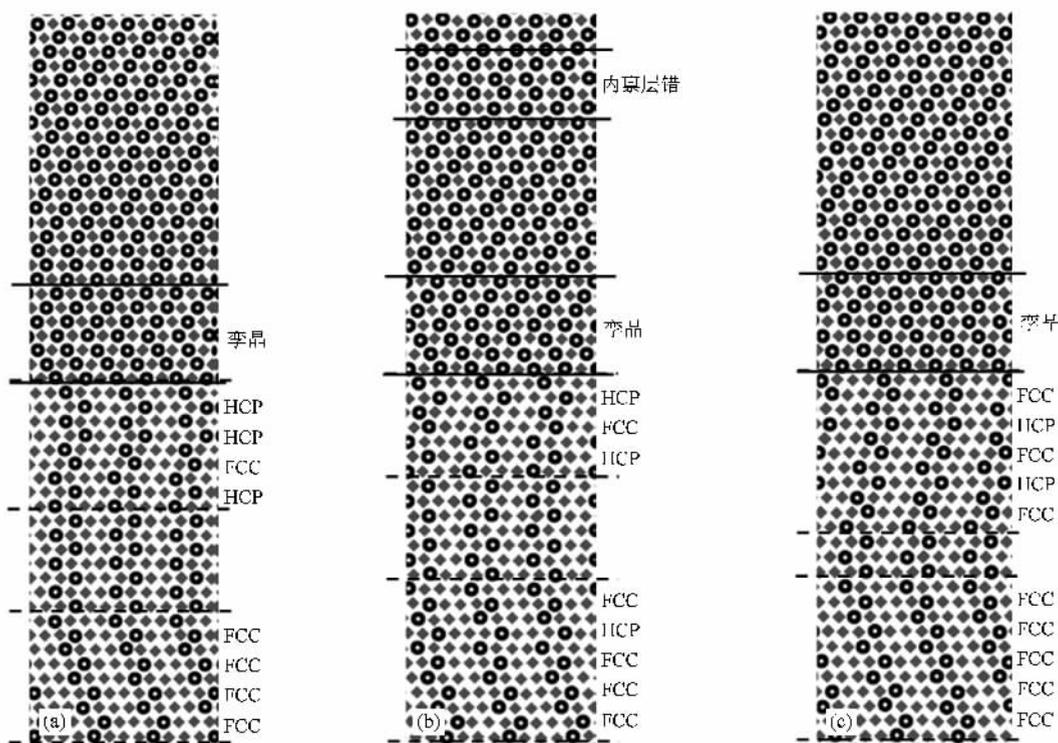


图 5 不同初始力场作用下的终态结构(x-y 平面) FCC-TiAl 部分形变结构用两条实线表示, HCP-Ti₃Al 部分形变结构用两条虚线表示. (a) 5×10^{-9} N (b) 1×10^{-9} N (c) 1.5×10^{-9} N

4. 结 论

利用分子动力学方法研究了在正化学比的 TiAl/Ti₃Al 双相体系中切变诱发位错形核以及相关结构转变的动态过程,进一步探讨了切变力场对最终结构的影响,揭示了其中变形机制.发现在 TiAl/Ti₃Al 双相体系中切变诱发的结构转变特征如下(1)剪切变形诱发黏滞-滑移式的滑移行为.(2)界面两侧的 HCP-Ti₃Al 部分各原子面间整体剪切协变特征明显,其后协变区分化,部分原子层集中受力诱发 HCP 向 FCC 结构转变,部分原子层则回复初始 HCP 结构.立方堆垛 FCC-TiAl 部分各原子面间

因刚性较大仅存在微协变,在克服原子层间晶格阻力后,局部集中受力区直接诱发相邻原子层间相对滑移,发生 FCC 向 HCP 结构转变.(3)受力较大区域 HCP-Ti₃Al 部分形成连续 FCC 堆垛且较稳定,近界面区薄层 FCC 堆垛与 HCP 相交替并存,界面处只有当力场足够大时才能保留稳定的 FCC 堆垛.而 FCC-TiAl 部分内禀层错和孪晶普遍存在,当初始剪切力场较大时会形成亚稳 HCP 区.(4)界面在其中起到了传递能量、均衡协变的作用.界面两侧异相结构部分地保留了单相形变时的特征.

从切变诱发位错衍生的动力学过程透视变形特征,本工作深化了研究者对实验研究中微观结构转变机制等方面的认识.

- [1] Lipsitt H A ,Shechtman D ,Schafrik R 1975 *Metall. Trans. A* **6** 1991
- [2] Sastry S M L ,Lipsitt H A 1997 *Metall. Trans. A* **8** 299
- [3] Appel F ,Wagner R 1998 *Mater. Sci. Eng. R.* **22** 187
- [4] Singh S R ,Howe J M 1992 *Philos. Mag. Lett.* **65** 233
- [5] Gao Y ,Zhu J 1993 *Scripta Metall. Mater.* **28** 651
- [6] Zhang Y G ,Chaturvedi M C 1994 *Mater. Sci. Eng. A* **174** 45
- [7] Yang S J ,Nam S W 2002 *Mater. Sci. Eng. A* **329—331** 898
- [8] Klassen T ,Oehring M ,Bormann R 1997 *Acta Mater.* **45** 3935
- [9] Korznikov A V ,Dimitrov O ,Korznikova G F ,Dallas J P ,Quivy A ,Valiev R Z ,Mukherjee A 1999 *Nanostruct. Mater.* **11** 17
- [10] Zghal S ,Thomas M ,Naka S ,Finel A ,Couret A 2005 *Acta Mater.* **53** 2653
- [11] Ye H Q ,He L L ,Yu R ,Peng H Y 1999 *J. Electron. Microsc.* **48** (Suppl. S) 1099
- [12] Appel F ,Beaven P A ,Wagner R 1993 *Acta Metall. Mater.* **41** 1721
- [13] Fu C L ,Yoo M H 1997 *Scripta Metall. Mater.* **37** 1453
- [14] Fu C L ,Zou J ,Yoo M H 1995 *Scripta Metall. Mater.* **33** 885
- [15] Maahapatra R ,Girshick A ,Pope D P ,Vitek V 1995 *Scripta Metall. Mater.* **33** 1921
- [16] Siegl R ,Vitek V 1997 *Philos. Mag.* **A 75** 1447
- [17] Vitek V ,Ito K ,Siegl R ,Znam S 1997 *Mater. Sci. Eng. A* **239—240** 752
- [18] Liu Y L ,Wang S Q ,Ye H Q 2007 *J. Mater. Res.* **22** 1685
- [19] Liu Y L ,Zhang L ,Wang S Q ,Ye H Q 2008 *Model. Simul. Mater. Sci.* **16** 085008
- [20] Zope R R ,Mishin Y 2003 *Phys. Rev. B* **68** 024102
- [21] Rifkin J 2004 *XMD—Molecular Dynamics for Metals and Ceramics* (Connecticut : University of Connecticut)
- [22] Hammerberg J E ,Holian B L ,Roder J ,Bishop A R ,Zhou S J 1998 *Physica D* **123** 330
- [23] Delogu F ,Cocco G 2005 *Phys. Rev. B* **71** 144108
- [24] Hultgren R ,Desni R L ,Haukins D T ,Gleiser M ,Helley K K 1973 *Selected Value of Thermodynamic Properties of Binary Alloys* (Metals Park : American Society for Metals)
- [25] Liu Y L ,Liu L M ,Wang S Q ,Ye H Q 2007 *J. Alloy. Compd.* **444** 328
- [26] Liu Y L ,Liu L M ,Wang S Q ,Ye H Q 2007 *Intermetallics* **15** 428

Molecular dynamics study of the shear deformation in TiAl/Ti₃Al system *

Liu Yong-Li^{1)†} Zhao Xing^{1)‡} Zhang Zong-Ning¹⁾ Zhang Lin¹⁾ Wang Shao-Qing²⁾ Ye Heng-Qiang²⁾

¹⁾ College of Science, Northeastern University, Shenyang 110004, China

²⁾ Shenyang National Laboratory for Materials Science, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China

³⁾ Department of Mathematics and Physics, Liaoning University of Technology, Jinzhou 121001, China

(Received 29 December 2008 ; revised manuscript received 22 February 2009)

Abstract

The dynamical shear deformation induced hexagonal close-packed (HCP) ↔ face-centred cubic (FCC) processes in TiAl/Ti₃Al system are investigated by the molecular dynamics method. The details of the dislocation initiation, the microstructure evolution and the force field effect are presented and discussed. The analyses of the potential variation and the structural snapshots show that the shear deformation is related to the “ stick-slip ” behaviour. The interface can transit the energy and counterpoise the deformation between the hetero-phases. The HCP-Ti₃Al (FCC-TiAl) shows obvious (little) covariant deformation stage before the initiation of the fault transition. For HCP-Ti₃Al, the final structure is the continued FCC stacking in a region with the large force field, and the FCC and HCP plates alternatively occur near the interface. For FCC-TiAl, twin and SISF are the main remnants, and the meta-stable HCP phase may occur with the increment of the force field.

Keywords : TiAl/Ti₃Al, molecular dynamics simulation, shear deformation, fault structure

PACC : 7115Q, 6185, 6170L

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50671109) and the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant Nos. 2006CB605103, 2006CB600905).

† E-mail: ylliu@imp.neu.edu.cn