

# 镍基单晶高温合金界面位错网 在剪切载荷作用下的演化\*

吴文平 郭雅芳<sup>†</sup> 汪越胜 徐爽

(北京交通大学工程力学系, 北京 100044)

(2010年4月28日收到; 2010年8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  $\gamma/\gamma'$  相界面错配位错网在剪切载荷作用下的演化特征. 结果表明:(100),(110)和(111)三种相界面形成的位错网在载荷作用下有不同形式和不同程度的损伤,其变形和损伤随温度的增加而增加. 在相同的剪切载荷和温度作用下,(100)相界面形成的正方形位错网最稳定.

**关键词:** 镍基单晶高温合金, 界面位错网, 分子动力学

**PACS:** 68.37.-d, 31.15.xv, 61.66.DK

## 1. 引言

镍基单晶高温合金因具有优异的蠕变力学性能而被广泛应用于航空发动机的涡轮叶片材料,它在高温下经过蠕变、拉伸和疲劳形变后,在  $\gamma/\gamma'$  相的界面上会产生位错网<sup>[1-6]</sup>.  $\gamma/\gamma'$  相界面位错网的存在,使得合金强度要比单个的  $\gamma$  相和  $\gamma'$  相强很多,并能有效地抑制高温下位错的运动,阻碍  $\gamma'$  相的定向粗化(筏化)<sup>[6]</sup>. 而且界面位错网的形成能有效地降低界面错配应力,并大大提高合金的蠕变抗力<sup>[5-7]</sup>. 从某种意义上讲,  $\gamma$  基体和  $\gamma'$  沉淀相之间的界面位错结构及其在载荷和高温条件下的演化决定了合金的力学性能. 由于  $\gamma/\gamma'$  相界面的尺度在微米以下并已进入纳米尺度范围,原子模拟对于研究  $\gamma/\gamma'$  相界面位错行为具有重要的作用,因此得到了国内外学者的广泛应用. Geng 等<sup>[8]</sup> 和 Wang 等<sup>[9]</sup> 利用第一原理研究了合金元素对 Ni/Ni<sub>3</sub>Al 界面位错形核稳定性以及位错形核区原子占位的影响. 近年来,原子尺度的分子动力学(MD)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以及可模拟原子结构及结构演化为特征,已开始应用于研究  $\gamma/\gamma'$  相界面的晶界位错特征<sup>[10]</sup>、位

错的形核和运动<sup>[11-13]</sup> 以及界面错配位错网结<sup>[14-17]</sup>. MD 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,为我们研究载荷作用下界面微观结构演化的一些基本特征提供了一种方便、有效的手段.

由于镍基单晶合金在服役过程中复杂的受力形式和失效机理,以及  $\gamma/\gamma'$  相界面位错网在合金卓越力学性能中的重要作用,本文运用分子动力学方法研究了  $\gamma/\gamma'$  相界面错配位错网在剪切载荷作用下的演化特征. 通过分析三种不同相界面位错网在剪切载荷作用下的变形和损伤演化过程以及温度对位错网变形和损伤的影响,探讨界面位错网在载荷和温度作用下的稳定存在形式.

## 2. 建模与模拟

### 2.1. 模型的建立

本文采用 Zhu 和 Wang<sup>[17]</sup> 所建立的理想镍基单晶高温合金模型,其中  $\gamma$  基体由纯 Ni 组成,  $\gamma'$  沉淀相由立方体状 Ni<sub>3</sub>Al 组成. 考虑到 fcc 结构以及 L12 结构的主要晶面为 (100),(110)和(111)面,建立了三个不同的相界面结构单元,分别是 (100),

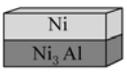
\* 国家自然科学基金(批准号:10672016),中央高校基本科研业务费专项资金(批准号:2009JBZ015)和北京交通大学优秀博士生科技创新基金(141039522)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: yfguo@bjtu.edu.cn

(110) 和 (111) 相界面. 所有的模拟均采用 Voter-Chen-type 嵌入原子势<sup>[18]</sup>, 因为此嵌入势已成功地应用于 Ni-Al 系统<sup>[14-17, 19, 20]</sup>. 由于  $\gamma$  和  $\gamma'$  两相的晶格参数略有差异,  $\alpha_\gamma$  为  $0.352 \text{ nm}^{[16, 17]}$ ,  $\alpha_{\gamma'}$  为  $0.3573 \text{ nm}^{[16, 17]}$ , 这样在 66 个  $\gamma'$  相晶格与 67 个  $\gamma$

相晶格形成的错配界面范围内, 因晶格参数差而形成的界面长度差在边界上刚好抵消, 即  $66\alpha_{\gamma'} = 67\alpha_\gamma$ . 模拟中为了便于比较, 在三个不同相界面模型中, 取了相同的原子数, 同时为了消除界面间相互作用的影响, 模型选择了较大的厚度, 如表 1 所示.

表 1 (100), (110) 和 (111) 三种相界面的原子结构模型, 其中有相同的 Ni (744576) 原子数目和 Al (104544) 原子数目

相界面 ( $x, y, z$ )	模型	$\gamma$ 相原子组成 (Ni fcc)	$\gamma'$ 相原子组成 (Ni <sub>3</sub> Al L12)
(100) [010], [001], [100]		Ni: $67 \times 67 \times 24 \times 4 = 430944$	Ni: $66 \times 66 \times 24 \times 3 = 313632$ Al: $66 \times 66 \times 24 \times 1 = 104544$
(110) [110], [001], [110]		Ni: $67 \sqrt{2} \times 67 \times 12 \sqrt{2} \times 4 = 430944$	Ni: $66 \sqrt{2} \times 66 \times 12 \sqrt{2} \times 3 = 313632$ Al: $66 \sqrt{2} \times 66 \times 12 \sqrt{2} \times 1 = 104544$
(111) [112], [110], [111]		Ni: $67 \sqrt{6} \times 67 \sqrt{2} \times 4 \sqrt{3} \times 4 = 430944$	Ni: $67 \sqrt{6} \times 67 \sqrt{2} \times 4 \sqrt{3} \times 3 = 313632$ Al: $67 \sqrt{6} \times 67 \sqrt{2} \times 4 \sqrt{3} \times 1 = 104544$

## 2.2. 模拟过程和条件

采用 MD 方法实行单轴剪切模拟, 图 1 给出了三种相界面模型的几何性质和方向. 依据对称性, 在模拟中, 平行于相界面的方向 ( $X$  和  $Y$  方向) 采用周期边界条件, 垂直于相界面的方向 ( $Z$  方向) 采用固定位移边界条件. 由于三个相界面的厚度不同, 分别取了  $Z$  方向最外层 4, 3 和 2 层原子作为 (100), (110) 和 (111) 相界面的边界层.

$\gamma$  和  $\gamma'$  两相的晶格错配导致错配应力场, 在错配应力场作用下, 相界面不稳定. 基于能量最低原理, 相界面的原子将重新排列以降低  $\gamma$  和  $\gamma'$  相因晶格错配形成的弹性应力场. 因此, 在剪切载荷施加前, 需对模型进行足够的弛豫以使能量和应力达到最低, 本文取弛豫时间为 60 ps. 弛豫后, 在相界面形成了错配位错网. 随后, 沿  $X$  方向施加一个恒定的剪应变 (通过移动边界层原子实现). 对于 (100) 和 (111) 相界面, 该恒定应变为  $6 \times 10^{-5}$ ; 对于 (110) 相界面为  $3 \times 10^{-5}$ . 因为不同模型所采用的时间步长不同, 对于 (100) 和 (111) 相界面为  $6 \times 10^{-15} \text{ s}$ , 对于 (110) 相界面为  $3 \times 10^{-15} \text{ s}$ , 所以, 施加的剪应变在这三个相界面上引起  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  的恒应变率. 在模拟过程中系统温度保持不变, 在指定的温度下, 原子的瞬时速度符合 Maxwell-Boltzmann 分布. 采用 XMD 软件<sup>[21]</sup> 和自编程序实现分子动力学模拟, 并选择具有高势能的原子描述在载荷和温度作用下

位错网的形状演化.

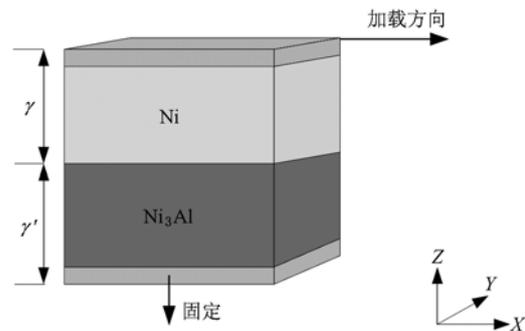


图 1 原子模拟模型及加载方向

## 3. 模拟结果与分析

### 3.1. (100) 相界面位错网结构

图 2 给出了 (100) 相界面在 0 K 温度, 应变率为  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  的剪切载荷作用下的位错网结构演化. 加载前首先弛豫 60 ps 后, 在 (100) 相界面上发现了规则的正方形位错网, 如图 2(a) 所示. 随后, 剪切应变沿图 1 中的  $X$  方向即 [010] 方向施加. 当剪应变达到 0.036 时, 正方形位错网沿载荷方向发生周期移动, 其一节点已进入另一个周期, 如图 2(b) 所示. 随着载荷的增加, 位错网继续沿载荷方向周期移动, 如图 2(c) 和 (d) 所示. 当应变增加到 0.096

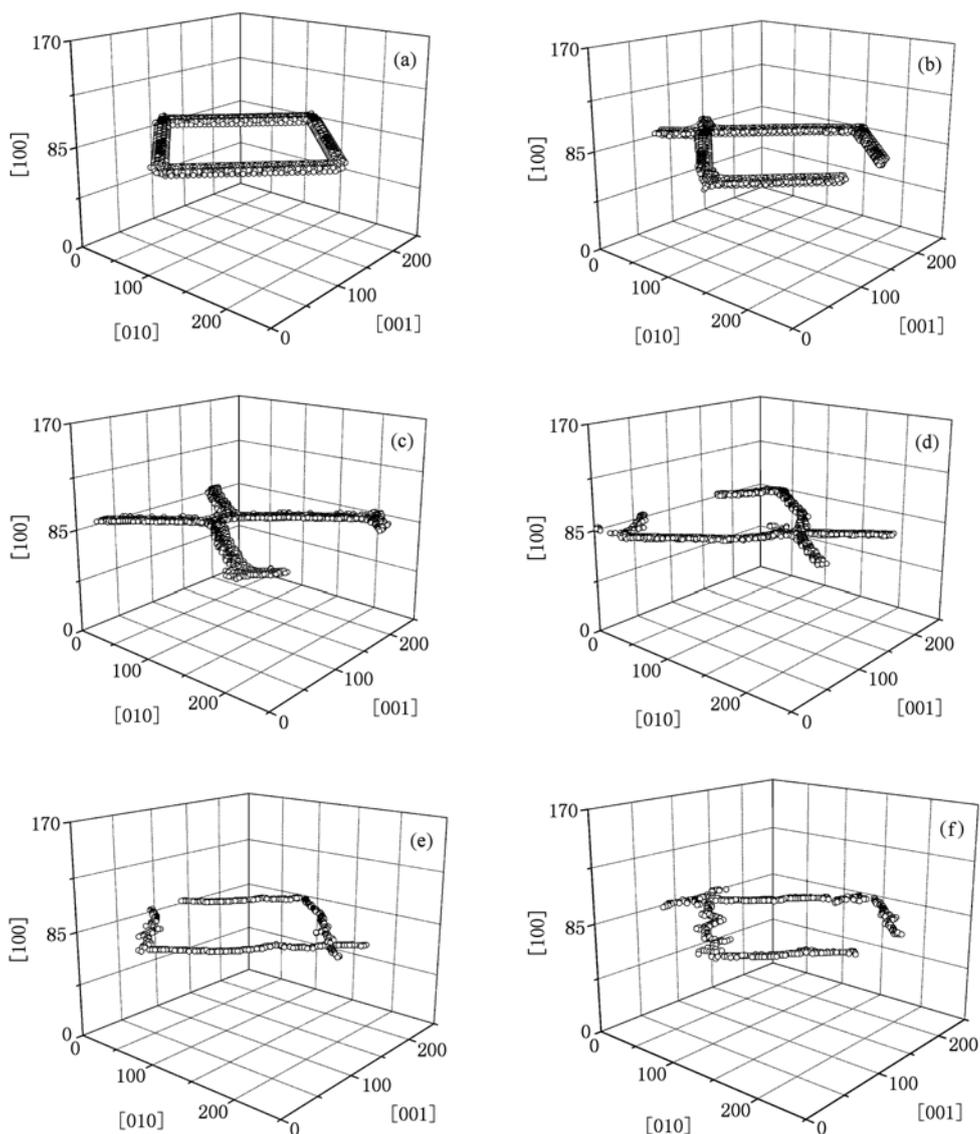


图2 (100) 相界面在剪切载荷作用下不同阶段时的位错网结构 (a)  $\varepsilon = 0$ ; (b)  $\varepsilon = 0.036$ ; (c)  $\varepsilon = 0.06$ ; (d)  $\varepsilon = 0.084$ ; (e)  $\varepsilon = 0.096$ ; (f)  $\varepsilon = 0.108$

时,位错网发生周期移动的同时,出现扭折变形,并随载荷的增加,扭折变形增加直至损伤,如图 2(e)和(f)所示.可见,在单轴剪切载荷作用下,(100)相界面位错网首先只沿载荷方向发生周期移动,没有出现变形和损伤;随着载荷的增加,位错网在周期移动的同时,开始出现扭折变形直至损伤.

### 3.2. (110) 相界面位错网结构

图 3 给出了 (110) 相界面在 0 K 温度以及恒应变率剪切载荷 ( $10^{10} \text{ s}^{-1}$ ) 作用下的位错网结构演化.加载前首先弛豫 60 ps,在 (110) 相界面出现了矩形的位错网结构,如图 3(a)所示.当剪切载荷沿

X(即 $[\bar{1}10]$ )方向施加时,位错网同样出现了沿载荷方向的周期移动,同时在位错网的交点处出现了损伤,如图 3(b)所示.交点处的损伤有利于垂直于 $[\bar{1}10]$ 方向的两条位错线发生周期移动,由图 3(c)—(e)可看出,随着载荷的增加,位错网发生周期移动,同时出现小量的变形损伤.当应变达到 0.12 时,垂直于 $[\bar{1}10]$ 方向的位错线出现沿载荷方向的弯曲变形损伤,如图 3(f)所示.总之,在单轴剪切载荷作用下,(110)相界面位错网沿载荷方向周期移动的同时出现损伤.首先是位错网交点处出现损伤,随后是位错线沿载荷方向产生弯曲变形损伤.图 4 位错网的平面图更清楚地显示了这一周期

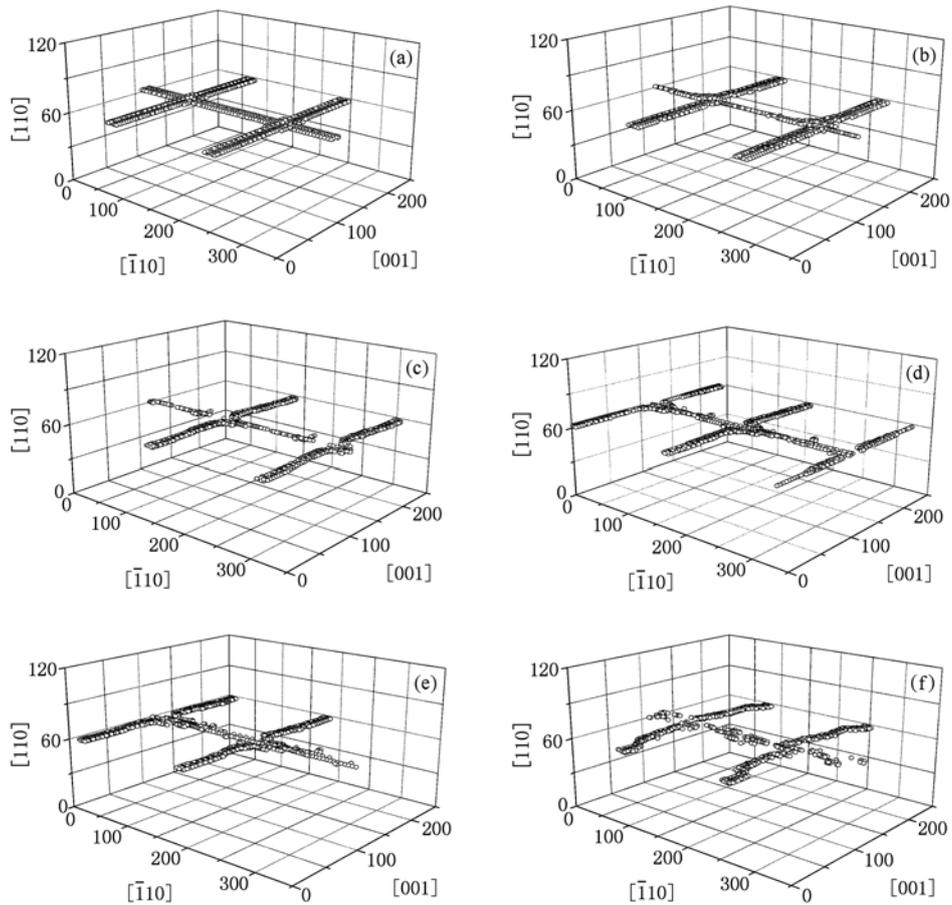


图3 (110) 相界面剪切载荷作用下不同阶段时的位错网结构 (a)  $\varepsilon=0$ ; (b)  $\varepsilon=0.048$ ; (c)  $\varepsilon=0.072$ ; (d)  $\varepsilon=0.084$ ; (e)  $\varepsilon=0.096$ ; (f)  $\varepsilon=0.12$

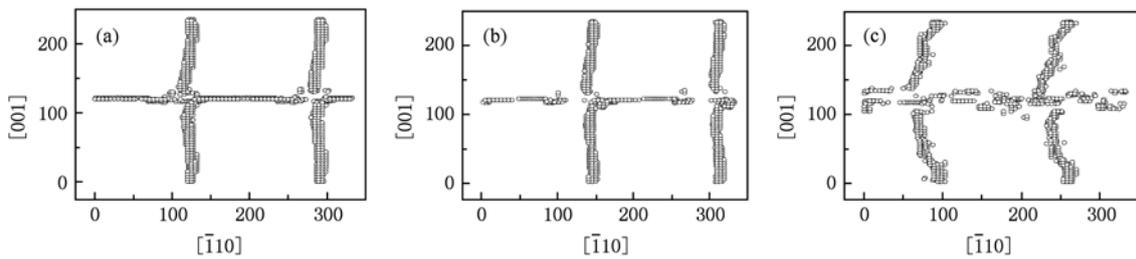


图4 (110) 相界面在剪切载荷作用下不同阶段时的位错网平面图 (a)  $\varepsilon=0.036$ ; (b)  $\varepsilon=0.06$ ; (c)  $\varepsilon=0.12$

移动和变形损伤演化过程。

### 3.3. (111) 相界面位错网结构

(111) 相界面在 0 K 温度且施加恒应变率 ( $10^{10} \text{ s}^{-1}$ ) 剪切载荷时的界面位错网结构演化如图 5 所示. 经过 60 ps 弛豫后, 在 (111) 相界面出现了

规则的等边三角形位错网, 如图 5(a) 所示. 当剪应变载荷沿  $X$  (即  $[11\bar{2}]$ ) 方向施加时, 三角形位错网没有沿载荷方向发生周期移动, 而是直接发生了变形, 如图 5(b), (c) 以及对应的平面图 6(a), (b) 所示. 当应变为 0.084 时, 由图 5(d) 可以看出, 位错网已经出现损伤. 可见, (111) 相界面位错网在单轴剪

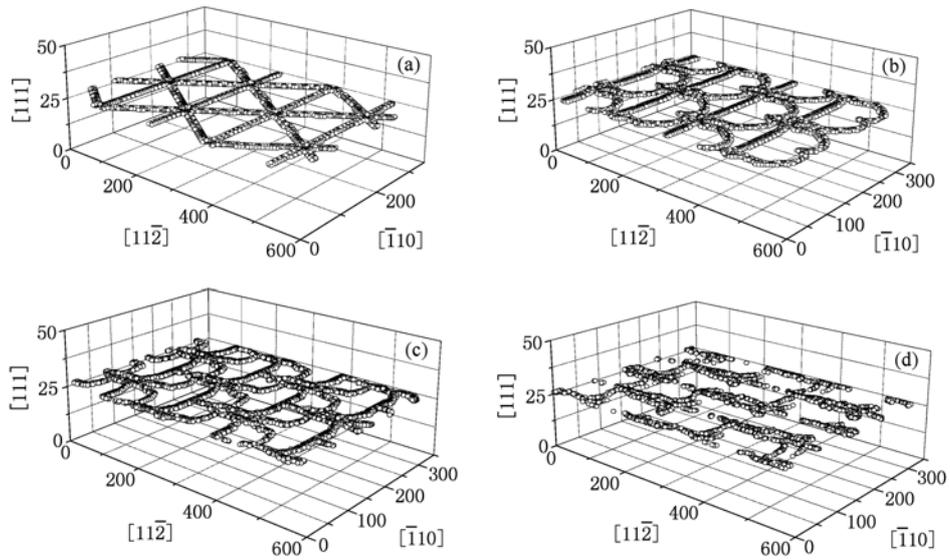


图5 (111)相界面在剪切载荷作用下不同阶段时的位错网结构 (a)  $\varepsilon = 0$ ; (b)  $\varepsilon = 0.036$ ; (c)  $\varepsilon = 0.06$ ; (d)  $\varepsilon = 0.084$

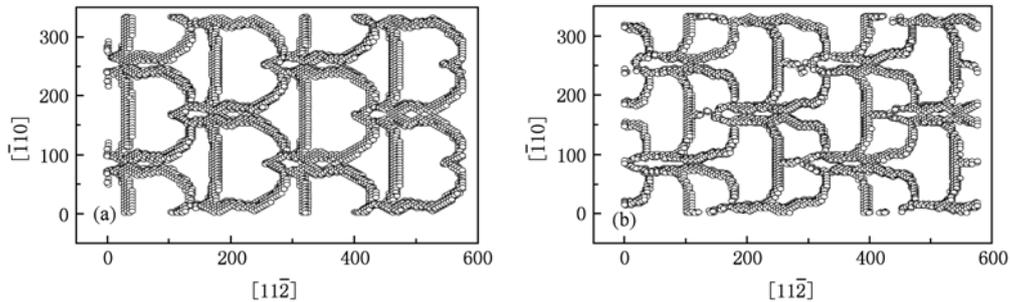


图6 (111)相界面在剪切载荷作用下不同阶段时的位错网平面图 (a)  $\varepsilon = 0.036$ ; (b)  $\varepsilon = 0.06$

切载荷作用下,不出现周期移动,而是直接发生变形、损伤直至消失。

### 3.4. 剪切载荷作用下温度对位错网结构的影响

前面分别介绍了(100), (110)和(111)三种相界面在单轴剪切载荷作用下,温度为0 K时界面位错网结构的演化.下面讨论提高温度对位错网结构的影响.图7给出了在剪应变率为 $10^{10} \text{ s}^{-1}$ 的载荷作用下,当剪切应变达到0.06,温度分别为0 K和300 K时,(100), (110)和(111)三个相界面的位错网结构.可以发现,温度在0 K和300 K两种情况下,相同的剪应变载荷作用时,位错网的形状基本一致,但是温度升高位错网的密集程

度降低,而且变形程度也增加.图8显示了三个相界面在不同温度下的位错网平面图.可以发现,温度升高到300 K时,在(100)相界面,位错网不仅密集度降低,同时还出现了少量扭折变形,如图8(b)所示.在(110)相界面,矩形的位错网由于剪切载荷的作用在交点处破坏,同时平行于 $[\bar{1}10]$ 方向的位错线也比0 K时的变形程度大,如图8(d)所示.在(111)相界面,位错网在300 K时要比0 K时变形程度大,但没有0 K时的密集,如图8(f)所示.这是因为温度升高时,原子能量增加;而且在热激活作用下,高能量的原子也比较分散.因此,在界面附近区域内,位错网在较低温度时相对密集,较高温度时则相对稀疏.

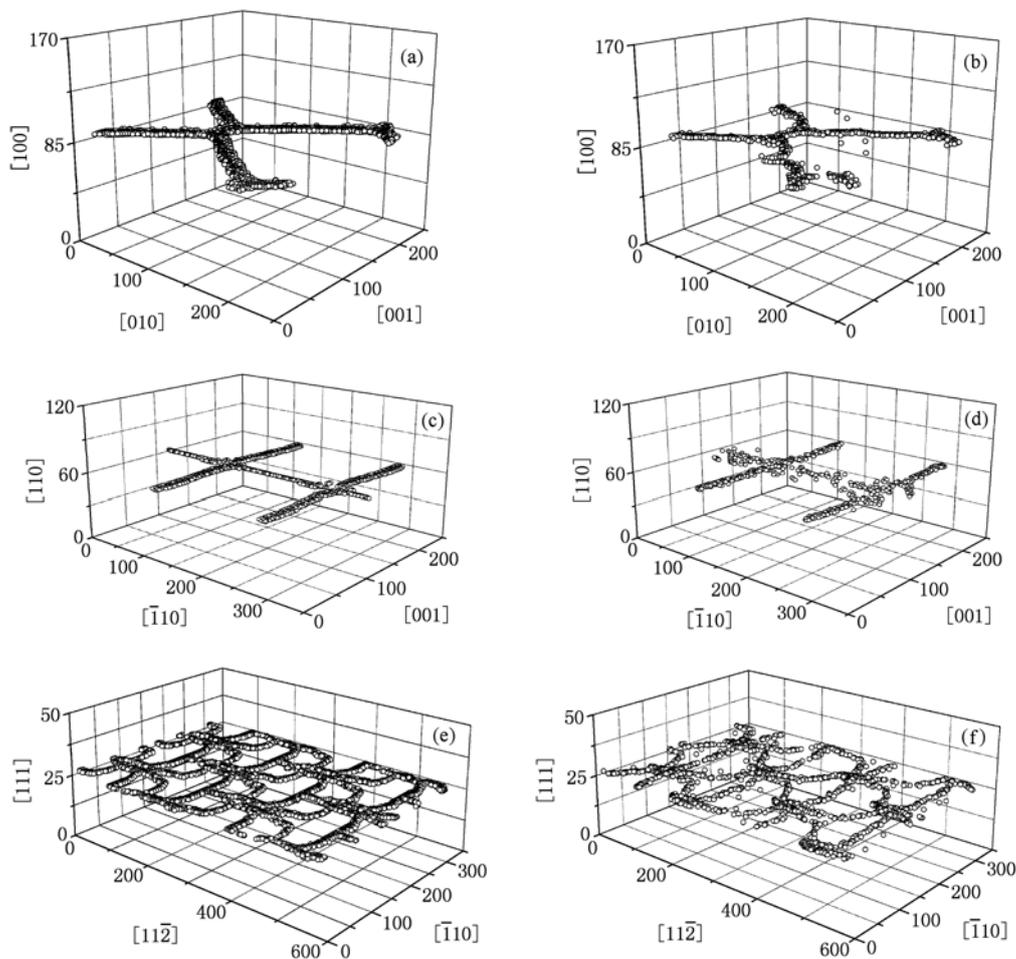


图7 剪切应变为0.06,不同温度下界面位错网结构 (a) (100)相界面,0 K;(b) (100)相界面,300 K;(c) (110)相界面,0 K;(d) (110)相界面,300 K;(e) (111)相界面,0 K;(f) (111)相界面,300 K

通过以上模拟结果可以发现:位错网在相同剪切载荷作用下,不同相界面有不同形式的变形和损伤方式.对于(100)相界面,正方形位错网首先在很长时间内只沿载荷方向发生周期移动,不出现变形损伤,随着载荷的增加,位错网才渐渐出现扭折变形直至损伤;对于(110)相界面,矩形的位错网在剪切载荷作用下沿载荷方向周期移动,并同时出现损伤;对于(111)相界面,三角形位错网没有沿载荷方向发生周期移动,而是直接发生变形、损伤直至消失.同时温度的增加,加快了位错网的变形和损伤,其密集程度也降低.

Zhu 和 Wang<sup>[17]</sup>采用分子动力学模拟了(100),(110)和(111)三种相界面形成的三种错配位错网结构,并通过弛豫后相界面能的计算发现:(111)相界面是最优析出相.本文在剪切作用下的模拟发现:尽管(111)相界面是最优析出相,但

是在载荷和温度作用下,(111)相界面形成的三角形位错网是最容易损伤和消失的,而(100)相界面形成的正方形位错网最不容易出现损伤和消失.因此,这种正方形位错网结构是最稳定的,它能最有效强化界面,且能有效地抵抗镍基单晶合金的蠕变,它的存在对合金的卓越力学性能起到了重要作用.

#### 4. 结 论

不同相界面位错网在剪切载荷作用下有不同形式的变形和损伤方式,同时温度的增加,加快了位错网的变形和损伤,其密集程度也降低.在相同剪切载荷和温度作用下,(100)相界面形成的正方形位错网最不容易出现损伤和消失.这种正方形位错网结构最稳定,最能有效强化界面.

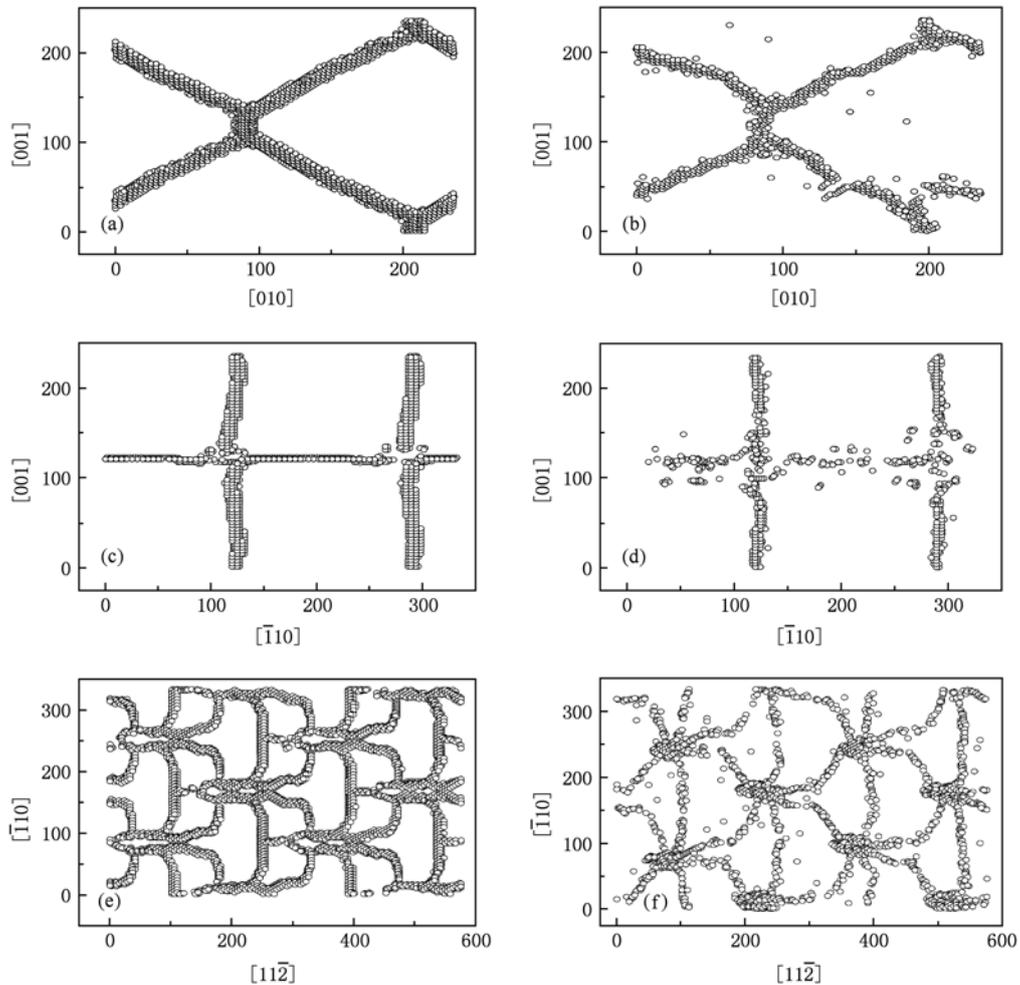


图8 为图7对应的位错网平面图 (a) 0 K; (b) 300 K; (c) 0 K; (d) 300 K; (e) 0 K; (f) 300 K

- [1] Lasalmonie A, Strudel J L 1975 *Phil. Mag.* **32** 937
- [2] Singh A K, Louat N, Sadananda K 1988 *Metall. Mater. Trans. A* **19** 2965
- [3] Keller R R, Maier H J, Mughrabi H 1993 *Scripta Metall. Mater.* **28** 23
- [4] Tian S G, Zhou H H, Zhang J H, Yang H C, Xu Y B, Hu Z Q 2000 *Mater. Sci. Eng. A* **279** 160
- [5] Zhang J X, Murakumo T, Koizumi Y, Harada H, Masaki Jr S 2002 *Metall. Mater. Trans. A* **33** 3741
- [6] Gabb T P, Draper S L, Hull D R, Mackay R A, Nathal M V 1989 *Mater. Sci. Eng. A* **118** 59
- [7] Pollock T M, Argon A S 1994 *Acta Metall. Mater.* **42** 1859
- [8] Geng C Y, Wang C Y, Yu T 2005 *Phys. B: Condens. Matter* **358** 314
- [9] Wang C, Wang C Y 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3928
- [10] Wen Y H, Zhu T, Cao L X, Wang C Y 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2520 (in Chinese) [文玉华、朱 毅、曹立霞、王崇愚 2003 物理学报 **52** 2520]
- [11] Yashiro K, Kurose F, Nakashima Y, Kubo K, Tomita Y, Zbib H M 2006 *Int. J. Plasticity* **22** 713
- [12] Yashiro K, Naito M, Tomita Y 2002 *Int. J. Mech. Sci.* **44** 1845
- [13] Xie H X, Wang C Y, Yu T 2009 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **17** 055007
- [14] Geng C Y, Wang C Y, Zhu T 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1320 (in Chinese) [耿翠玉、王崇愚、朱 毅 2005 物理学报 **54** 1320]
- [15] Zhu T, Wang C Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 2087
- [16] Zhu T, Wang C Y, Gan Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S156 (in Chinese) [朱 毅、王崇愚、干 勇 2009 物理学报 **58** S156]
- [17] Zhu T, Wang C Y 2005 *Phys. Rev. B* **72** 014111
- [18] Voter A F, Chen S P 1987 *Proc. Mater. Res. Soc. Symp.* **82** 175

- [19] Angelo J E, Moody N R, Baskes M I 1995 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **3** 289  
[20] Angelo J E, Baskes M I 1996 *Interface Sci.* **4** 47  
[21] The XMD <http://xmd.sourceforge.net/>

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

Wu Wen-Ping Guo Ya-Fang<sup>†</sup> Wang Yue-Sheng Xu Shuang

(Department of Engineering Mechanics, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China)

(Received 28 April 2010; revised manuscript received 6 August 2010)

### Abstract

The molecular dynamics simulation is used to study the evolution of misfit dislocation networks at  $\gamma/\gamma'$  phase interfaces of Ni-based single crystal superalloy under shear loading. From the simulation we found that the three patterns of dislocation networks on the (100), (110) and (111) phase interfaces show different degrees and patterns of damage. The deformation and damage occur easier at a higher temperature. Under the same shear loading and temperature, the square dislocation network at (100) phase interface is the most stable.

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

**PACS:** 68.37.-d, 31.15.xv, 61.66.DK

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10672016), the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant No. 2009JBZ015) and BJTU Excellent Doctor's Science and Technology Innovation Foundation (Grant No. 141039522).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: yfguo@bjtu.edu.cn