

考虑相界效应的Ni基单晶合金纳米压痕模拟*

胡兴健¹⁾ 郑百林^{1)†} 胡腾越¹⁾ 杨彪¹⁾ 贺鹏飞¹⁾ 岳珠峰²⁾¹⁾(同济大学应用力学研究所, 上海 200092)²⁾(西北工业大学力学与土木建筑学院, 西安 710072)

(2014年1月16日收到; 2014年4月29日收到修改稿)

利用分子动力学方法分别模拟金刚石压头压入Ni模型和Ni基单晶合金 γ/γ' 模型的纳米压痕过程, 通过计算得到两种模型[001]晶向的弹性模量及硬度. 采用中心对称参数分析不同压入深度时两种模型内部位错形核、长大过程以及Ni基单晶合金 γ/γ' (001)相界面错配位错对纳米压痕过程的影响. 结果显示: 压入深度0.641 nm之前, 两种模型的压入载荷-压入深度曲线相似, 说明此时相界面处的错配位错对纳米压痕过程的影响很小; 压入深度0.995 nm时, 在错配位错处发生位错形核, 晶体在 γ 相中沿着{111}面滑移, 随即导致Ni基单晶合金 γ/γ' 模型压入载荷的下降, 并在压入深度达到1.487 nm之前低于Ni模型相同压入深度时的压入载荷; 压入深度从1.307 nm开始, 由于相界面错配位错的阻碍作用, Ni基单晶合金 γ/γ' 模型压入载荷上升速度较快.

关键词: 纳米压痕, 分子动力学, 错配位错**PACS:** 62.23.-c, 71.15.Pd, 61.66.DK**DOI:** 10.7498/aps.63.176201

1 引言

因为Ni基单晶合金中无晶界, 所以具有优良的高温蠕变性能, 同时具有良好的抗氧化性以及耐腐蚀性, 因而是航天、航空工业领域中应用非常广泛的高温结构材料, 主要用于航空发动机涡轮叶片等关键部位.Ni基单晶合金由 γ 基体相(Ni基固溶体)和 γ' 析出相(Ni_3Al 金属间化合物)以共格形式组成, γ 基体相和 γ' 析出相沿{001}方向形成相界面, 其中 γ' 析出相体积约占总体积的70%. γ/γ' 相界面的微观结构、两相弹性模量差及晶格错配度直接影响Ni基单晶合金材料的力学性能^[1-3], 所以 γ/γ' 相界面是国内外学者们在研究Ni基单晶合金材料时的重点研究对象, 研究方向主要分为以下几点: 1) 相界面错配位错的形成、反应和错配位错网络的演化^[4-7]; 2) 错配位错在不同载荷作用下的变形、损伤^[8-10]; 3) 不同晶向的相界面以及同一晶向相界面上不同原子堆垛结构对错配位错形态的影

响^[11,12]; 4) 错配位错在材料蠕变、疲劳等破坏过程中的作用^[13-15]等. 但是目前对Ni(001)晶面和Ni基单晶合金 γ/γ' (001)相界面纳米压痕产生的位错形核、长大的分子动力学模拟还少有报道, Ni基单晶合金 γ/γ' (001)相界面错配位错对纳米压痕过程的影响还不是很清楚.

纳米压痕技术, 也称深度敏感压痕技术, 是最简单的测试材料力学性能的方法之一, 其采用不同形式的压头压入基体, 得到压头的压入载荷-压入深度曲线, 从而计算材料的力学参数^[16]. 在众多可测力学参数中, 材料的弹性模量和硬度是比较容易获得的两个力学参数, 硬度又和材料的失效强度有很大关系, 所以研究材料的弹性模量和硬度具有较高的实用价值. 如文献^[17]对类金刚石薄膜的纳米压痕过程进行了模拟, 得到了类金刚石的弹性模量和硬度. 此外, 研究者也把纳米压痕实验用于研究材料的蠕变特性、塑性流动、黏弹性和断裂强度^[18-21]. 近20年来, 随着各种表面处理技术的迅

* 国家自然科学基金国际(地区)合作交流项目(批准号: 51210008)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: blzheng@tongji.edu.cn

速发展, 纳米压痕实验逐渐成为研究表层材料力学性能的标准实验. 相对于传统的纳米压痕实验方法, 分子动力学方法模拟纳米压痕过程可以研究位错的形核与长大过程, 可以提供正在进行的纳米压痕过程瞬态信息, 进一步得到材料的微观变形机理. 作为Ni基单晶冷却叶片服役强度寿命评定技术研究工作的一部分, 本文分别建立了Ni和Ni基单晶合金 γ/γ' 纳米压痕的三维分子动力学模型, 从原子尺度讨论了纳米压痕的变形机理, 求得两种模型[001]晶向的弹性模量和硬度, 研究两种模型纳米压痕过程中位错的形核和长大以及Ni基单晶合金 γ/γ' (001)相界面错配位错对纳米压痕过程的影响. 为Ni基单晶合金冷却叶片材料破坏机理提供了一点理论依据.

2 建模与模拟

Ni纳米压痕的三维分子动力学模型由单晶Ni基体和金刚石压头组成, 压头为球形C原子团, 半径为2.5 nm, 基体为长方体, 坐标系的 x, y, z 轴分别平行基体[100], [010], [001]晶向, 基体尺寸为长 $67a_1 \times$ 宽 $67b_1 \times$ 高 $16c_1$, 对应原子数约为30.5万个, 其中 $a_1 = b_1 = c_1 = 0.352$ nm为单晶Ni三个方向的晶格长度, 如图1(a)所示; Ni基单晶合金 γ/γ' 纳米压痕的三维分子动力学模型由基体和金刚石压头组成, 压头为球形C原子团, 半径为2.5 nm, 基体为长方体, 坐标系的 x, y, z 轴分别平行基体[100], [010], [001]晶向, 基体中 γ 相尺寸为长 $67a_1 \times$ 宽 $67b_1 \times$ 高 $8c_1$, 对应的原子数约为15.7万个, γ' 相尺寸为长 $66a_2 \times$ 宽 $66b_2 \times$ 高 $8c_2$, 对应的原子数约为15.3万个, 其中 $a_2 = b_2 = c_2 = 0.3573$ nm为 γ' 相三个方向的晶格长度, 基体总原子数约为31.0万个, 如图1(b)所示. 两种模型边界条件一样: z 方向下表面为固定边界, 防止模型的移动, 上表面为自由表面. x 和 y 方向采用周期边界条件, 以消除边界的影响. 文献[22], 在 z 轴方向从上而下依次将两种模型分为牛顿层、恒温层和固定层. 在本文中我们仅限于研究力致位错, 不考虑温度对位错产生的影响, 因此在模拟过程中采用微正则系综(简称为NVE系综), 恒温层的温度控制采用速度标定法[23], 基体初始温度设为1 K. 由于计算机运算能力的限制, 纳米压痕分子动力学模拟中压头的速度通常为1—100 m/s, 本文中设定压头的速度为30 m/s, 最大压入深度1.75 nm. 弛豫时的时间步长设

置为 $\Delta t = 5 \times 10^{-15}$ s, 压头加载时的时间步长设置为 $\Delta t = 3 \times 10^{-15}$ s.

根据 γ/γ' 相界面原子层结构特征, γ/γ' (001)相界面上的原子层衔接模式有三种, 记作I, II, III型, 如图2所示. 根据文献[12], II型原子层衔接模式出现概率最高, 所以本次模拟选用II型 γ/γ' 相界面衔接模式.

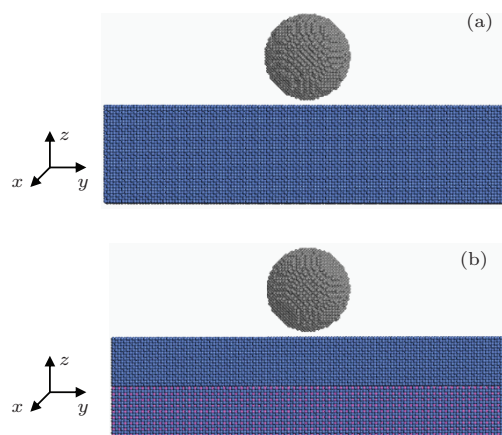


图1 纳米压痕模型 (a) Ni; (b) Ni基单晶合金 γ/γ'

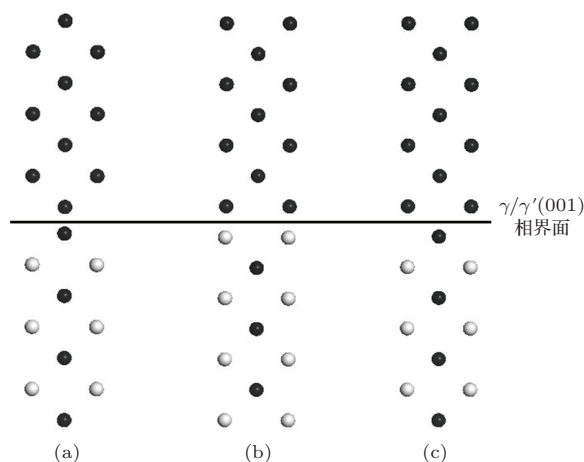


图2 γ/γ' 相界面原子层衔接模式(黑色点代表Ni, 灰白色点代表Al) (a) I型; (b) II型; (c) III型

文献[24]提出的嵌入原子多体势(embedded atom method, EAM)近年来被成功地用来描述Ni-Ni, Ni-Al间相互作用, 因此本文采用该势函数来描述Ni-Ni, Ni-Al间的作用, C-C, C-Ni和C-Al之间的作用采用Morse势来描述[25].

文中采用中心对称参数(center symmetry parameter, CSP)来研究纳米压痕过程中位错的形核和长大过程. 对于面心立方结构的晶体材料, 可以

通过下面公式定义每个原子的 CSP 值:

$$\text{CSP} = \sum_{i=1,6} |R_i + R_{i+6}|^2, \quad (1)$$

式中 R_i 为长度相同的近邻原子对, R_{i+6} 为方向相反的近邻原子对. 如果原子的 CSP 值为 0, 则材料处于弹性变形阶段. 如果 CSP 值不为 0, 说明原子处于晶格缺陷状态. CSP 是一个量化纳米尺度缺陷的指标. 本文只提取了所关心的 CSP 值大于 0.3 同时小于 20 的原子.

3 结果与讨论

弛豫 15000 步后, Ni 模型势能在 0.5 eV 范围内振荡衰减, Ni 基单晶合金 γ/γ' 模型势能在 3 eV 范围内振荡衰减, 可以认为两种模型处于动态平衡状态. Ni 基单晶合金 γ/γ' 模型弛豫后在 (001) 相界面上形成“成对”刃型错配位错, 位错的间隔为 16.7 nm, 如图 3 所示. 本次模拟中, 相界面形成的错配位错是 Ni 基单晶合金 γ/γ' 模型区别于 Ni 模型的主要特征.

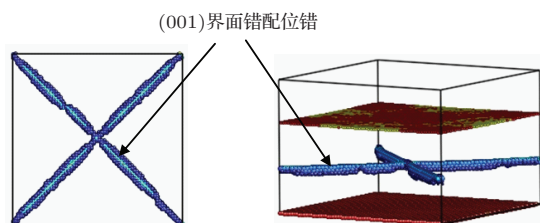


图 3 Ni 基单晶合金 γ/γ' 相模型 (001) 相界面错配位错

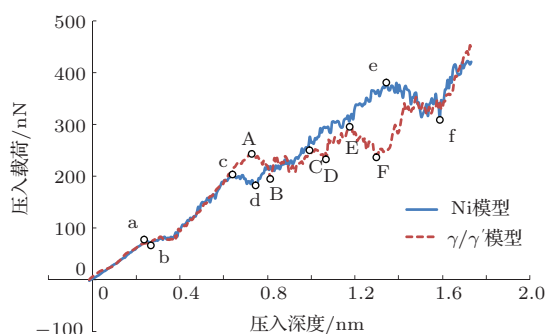


图 4 压入载荷-压入深度曲线

对势函数求导可以获得原子之间的相互作用力, 压头下方所有原子相互作用力之和在 z 方向的分量就是压头压入载荷, 求出不同压入深度时的压入载荷即可获得压入载荷-压入深度曲线, 如

图 4 所示.

图 4 中 a—f 点是 Ni 模型压入载荷-压入深度曲线上有特殊性的几个点, 每个符号对应于图 5 (a)—(f) 的 CSP 值图. 当压入深度未达到 0.245 nm (图 4 中的 a 点) 时, 压入载荷近似线性增加. 此时停止加载并立即卸载, 卸载曲线与加载曲线重合, 这是由于在加载阶段中材料发生弹性变形, 在卸载阶段材料发生完全的弹性恢复, 卸载结束后没有残余压入深度. 这时材料并没有进入塑性, 采用此时的数据计算弹性模量和硬度较为准确. 因此, 可以用弹性变形阶段的压入载荷-压入深度曲线数据来计算基体的弹性模量及硬度. 参考文献 [26, 27], 当使用球形压头对基体进行纳米压痕时, 发生弹性变形的基体与球形压头之间满足赫兹弹性理论, 如下式所示:

$$F = \frac{4}{3} E^* r^{1/2} h^{3/2}, \quad (2a)$$

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_{\text{sub}}^2}{E_{\text{sub}}} + \frac{1 - \nu_{\text{ind}}^2}{E_{\text{ind}}}, \quad (2b)$$

$$A = \pi a + r_0^2, \quad (2c)$$

$$H = \frac{F}{A}, \quad (2d)$$

式中 F 为压入载荷, E^* 为有效弹性模量, $r = 2.5$ nm 为压头半径, h 为压入深度, E_{sub} , ν_{sub} 分别为基体弹性模量和泊松比, E_{ind} , ν_{ind} 分别为压头弹性模量和泊松比, A 为压头与基体的投影接触面积, 由文献 [28] 提出的接触原子方法确定, 其中, a 为压头与基体投影接触面半径, $r_0 = 0.17$ nm 为压头与基体原子间的平衡距离, H 为基体硬度. 本文设定 Ni 基体和 γ 相的 $\nu_{\text{sub}} = 0.3$, 设定 $E_{\text{ind}} = 1141$ GPa 和 $\nu_{\text{ind}} = 0.07$ [29,30]. 弹性阶段, 两种模型的压入载荷-压入深度曲线非常相似, 所以只取 Ni 模型的 $h = 0.245$ nm 及对应的 $F = 70$ nN 代入 (2) 式计算 (此时, 为简便起见, 直接由几何关系得到 $a = 1.079$ nm), 得到 1 K 时的 E_{sub} 为 327.32 GPa, H 为 14.28 GPa.

缺陷演变的动态分析显示在 Ni 基体发生弹性变形到塑性变形转变时, 压入载荷下降是由于初始位错从基体上表面压痕处形核造成的. Ni 模型压入深度从 0.245 nm (图 4 a 点) 到 0.270 nm (图 4 b 点) 时, 压入载荷从 70 nN 降到 67 nN, 减少了 4.3%, CSP 值对应于图 5 (a) 到 (b) 的转变, 在图 5 (b) 中可见有位错在压头下方的基体表面形核, 并以层错形式表现出来, 晶体在 $\{111\}$ 滑移面上滑移. 位错的形核和晶体的滑移释放了基体弹性变形时积

累的应变能, 从而引起压入载荷的下降. 随着压头向下运动, 曲线抖动上升, 当压入深度为 0.641 nm(图 4c 点) 时, 压头下方的层错只是大小变大了而没有明显的形式改变, 如图 5(c) 所示. 当压入深度为 0.773 nm(图 4d 点) 时, 压入载荷从 203 nN(图 4c 点) 降到 184 nN, 减少了 9.4%, 压头下方的层错区域变大, 如图 5(d) 所示, 将此时的 CSP 值图局部放大并转动一定视角, 如图 6 所示, 压头下方出现了不全位错环, 随着压头的进一步的下压,

不全位错环将变成全位错环^[31], 不全位错环的出现也是一个应变能释放的过程, 从而引起压入载荷有较大幅度的下降. 压头继续下压时, 曲线继续抖动上升, CSP 值对应于图 5(d) 到 (e), 位错形式几乎没有变化, 只是大小变大了. 当压入深度为 1.589 nm(图 4f 点) 时, 压入载荷从 376 nN(图 4e 点) 降到 312 nN, 减少了 17.0%, 压头下方出现大量新位错, 晶体沿着 $\{111\}$ 面滑移, 导致层错区域变大很多, 如图 5(f) 所示.

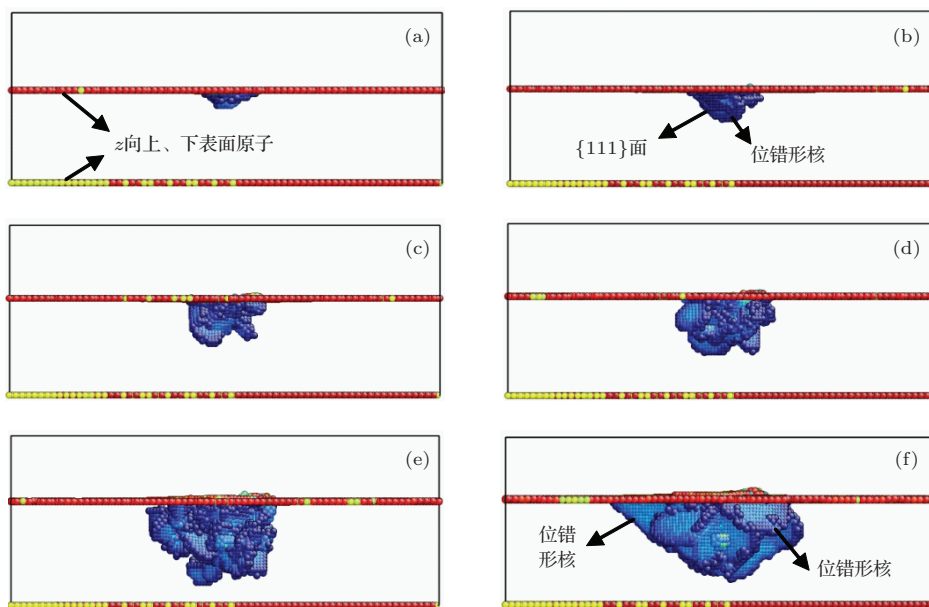


图5 Ni模型(001)晶面在不同压入深度时基体内部的CSP值图 (a) 压入深度 0.245 nm; (b) 压入深度 0.270 nm; (c) 压入深度 0.641 nm; (d) 压入深度 0.773 nm; (e) 压入深度 1.337 nm; (f) 压入深度 1.589 nm

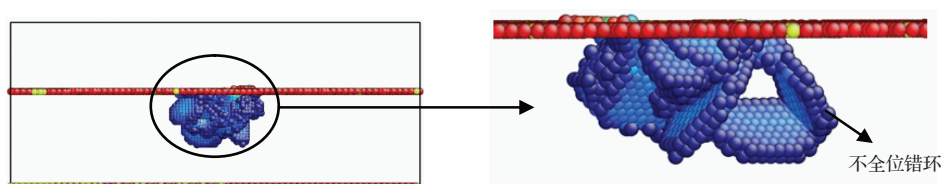


图6 Ni模型压入深度为 0.773 nm 时的不全位错环

图 4 中 A—F 点是 Ni 基单晶合金 γ/γ' 模型压入载荷-压入深度曲线上有代表性的几个点, 每个符号对应于图 7(a)—(f) 的 CSP 值图(压入深度 0.641 nm 之前, 两种模型的压入载荷-压入深度曲线比较相似, 同时, γ 相中的位错与 Ni 模型基体中的位错相近, 所以图 7 只显示压入深度 0.641 nm 后且具有特殊性的基体 CSP 值图). 压入深度从 0.731 nm(图 4A 点) 到 0.815 nm(图 4B 点) 时, 压入载荷从 242 nN 降到 196 nN, 减少了 19.0%, CSP 值对应于图 7(a) 到图 7(b) 的转变, 在图 7(b) 中压头下方

出现了不全位错环, 不全位错环的出现释放了应变能, 从而引起压入载荷的下降. 由图 4 可知: Ni 基单晶合金 γ/γ' 模型出现不全位错环时的压入深度比 Ni 模型出现不全位错环时的压入深度大. 压入深度从 0.995 nm(图 4C 点) 到 1.487 nm, Ni 基单晶合金 γ/γ' 模型压入载荷明显比相同压入深度的 Ni 模型压入载荷小, 图 7(c) 显示有位错在错配位错处形核, 晶体在 γ 相中沿着 $\{111\}$ 面滑移, 这是由于错配位错降低了位错的临界形核应力, 错配位错处比相界面其他位置更容易使位错形核和发

射, Ni模型没有错配位错, 也就没有此类位错形核. 由于错配位错处位错形核和运动释放了大量应变能, 造成相同压入深度情况下Ni基单晶合金 γ/γ' 模型压入载荷明显比Ni模型压入载荷小. 随着压头向下运动, 曲线的抖动比较剧烈, 伴随着新的位错在错配位错处形核并在 γ 相中发射, 如图7(d)—(f). 为了更好地观察错配位错处形核的位错, 将压入深度为1.307 nm(图4F点)时的CSP

值图局部放大并转动一定视角, 可见在错配位错处有成对位错形核, 晶体沿着 $\{111\}$ 面滑移, 如图8所示. 压入深度从1.307 nm开始, Ni基单晶合金 γ/γ' 模型压入载荷比Ni模型压入载荷增大速度快, 并在后期有超越的趋势, 这是由于错配位错处位错形核并发射到 γ 相上表面后, 相界面处的错配位错阻碍了此类位错向下穿过 $\gamma/\gamma'(001)$ 相界面的原因.

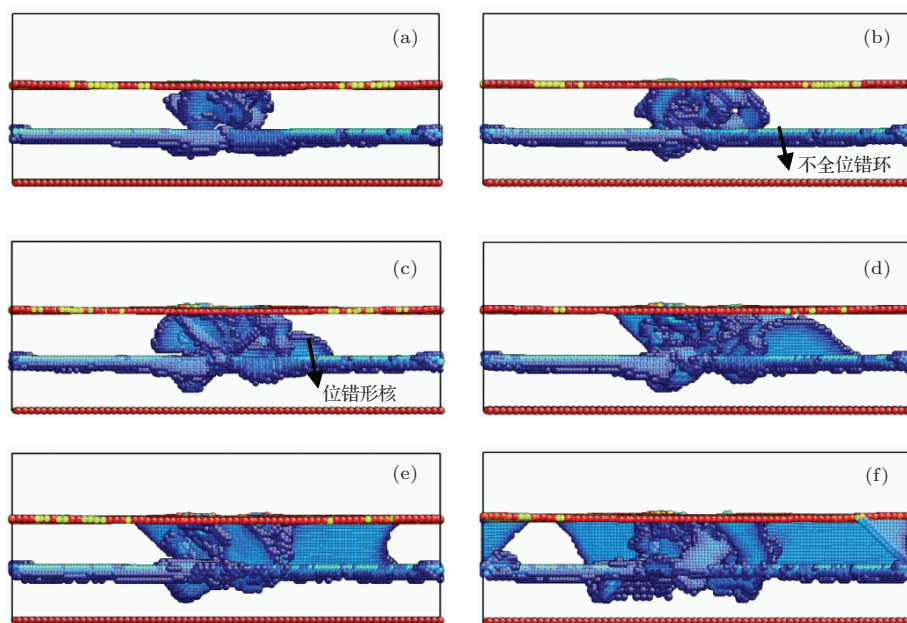


图7 Ni基单晶合金 γ/γ' 模型(001)晶面在不同压入深度时基体内部的CSP值图 (a) 压入深度0.731 nm; (b) 压入深度0.815 nm; (c) 压入深度0.995 nm; (d) 压入深度1.079 nm; (e) 压入深度1.175 nm; (f) 压入深度1.307 nm

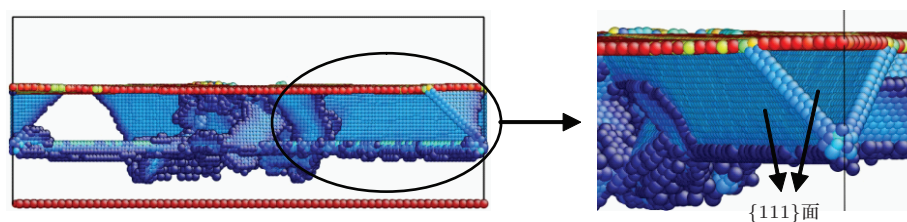


图8 Ni基单晶合金 γ/γ' 模型压入深度为1.307 nm时错配位错处的位错

4 结 论

本文对Ni模型(001)晶面和Ni基单晶合金 γ/γ' 模型(001)晶面进行了纳米压痕过程的三维分子动力学模拟, 比较了两种模型的弹性模量和硬度, 研究了两种模型纳米压痕过程中位错的形核和长大以及 $\gamma/\gamma'(001)$ 相界面错配位错对Ni基单晶合金 γ/γ' 模型压入载荷-压入深度曲线的影响. 基于以上分析, 得到以下结论:

- 1) 压入深度在0.641 nm之前(包括弹性阶段), 两种模型压入载荷-压入深度曲线比较符合, 因此采用两种模型弹性变形阶段的压入载荷-压入深度曲线数据计算所得到的基体弹性模量及硬度相差无几;
- 2) 两种模型压入载荷的下降伴随着位错的形核和晶体在 $\{111\}$ 面的滑移;
- 3) Ni基单晶合金 γ/γ' 模型出现不全位错环时的压入深度比Ni模型出现不全位错环时的压入深度大;

4) Ni基单晶合金 γ/γ' 模型的压入深度从0.995 nm到1.487 nm, 压入载荷明显比相同压入深度的Ni模型压入载荷小, 这是由于有位错在错配位错处形核, 晶体在 γ 相中沿着 $\{111\}$ 面滑移, 而位错形核和晶体滑移释放了大量应变能的原因;

5) Ni基单晶合金 γ/γ' 模型的压入深度从1.307 nm开始, 压入载荷比Ni模型压入载荷增大速度快, 并在后期有超越的趋势, 这是由于错配位错处位错形核基本完成并发射到 γ 相表面, 而相界面处的错配位错阻止了此类位错向下穿过 $\gamma/\gamma'(001)$ 相界面的原因。

参考文献

- [1] Erickson G L 1995 *J. of Metals* **47** 36
- [2] Probst-Hein M, Dlouhy A, Eggeler G 1999 *Acta Mater.* **47** 2497
- [3] Hu Z Q, Peng P, Liu Y, Jin T, Sun X F, Guan H R 2002 *Acta Metall. Sin.* **38** 1121 (in Chinese) [胡壮麒, 彭平, 刘轶, 金涛, 孙晓峰, 管恒荣 2002 金属学报 **38** 1121]
- [4] Wen Y H, Zhu T, Cao L X, Wang C Y 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2520 (in Chinese) [文玉华, 朱弢, 曹立霞, 王崇愚 2003 物理学报 **52** 2520]
- [5] Zhu T, Wang C Y, Gan Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S156 (in Chinese) [朱弢, 王崇愚, 干勇 2009 物理学报 **58** S156]
- [6] Jackson J J, Donachie M J, Henrich R J, Gell M 1977 *Metall. Trans. A* **8** 1615
- [7] Khan T, Caron P 1986 *Mater. Sci. Techn* **2** 486
- [8] Wu W P, Guo Y F, Wang Y S, Xu S 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 056802 (in Chinese) [吴文平, 郭雅芳, 汪越胜, 徐爽 2011 物理学报 **60** 056802]
- [9] Xie H X, Yu T, Liu B 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 046104 (in Chinese) [谢红献, 于涛, 刘波 2011 物理学报 **60** 046104]
- [10] Xie H X, Wang C Y, Yu T 2009 *Mater. Sci. Eng.* **17** 055007
- [11] Zhu T, Wang C Y 2005 *Phys. Rev. B* **72** 014111
- [12] Geng C Y, Wang C Y, Zhu T 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1320 (in Chinese) [耿翠玉, 王崇愚, 朱弢 2005 物理学报 **54** 1320]
- [13] Zhang J X, Murakumo T, Koizumi Y, Harada H, Masaki J S 2002 *Metall. Mater. Trans. A* **33** 3741
- [14] Gabb T P, Draper S L, Hull D R, Mackay R A, Nathal M V 1989 *Mater. Sci. Eng. A* **118** 59
- [15] Pollock T M, Argon A S 1994 *Acta Metall. Mater.* **42** 1859
- [16] Xie C Y 2001 *Phys.* **30** 432 (in Chinese) [谢存毅 2001 物理 **30** 432]
- [17] Quan W L, Li H X, Ji L, Zhao F, Du W, Zhou H D, Chen J M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 5687 (in Chinese) [权伟龙, 李红轩, 吉利, 赵飞, 杜雯, 周惠娣, 陈建敏 2010 物理学报 **59** 5687]
- [18] Ju S P, Wang C T, Chien C H, Huang J C, Jian S R 2007 *Mol. Simulat.* **33** 905
- [19] Lin J F, Wei C C, Yung Y K, Ai C F 2004 *Diam. Relat. Mat.* **13** 1895
- [20] Bouzakis K D, Hadjiyiannis S, Skordaris G, Mirisidis I, Michailidis N, Efstathiou K, Pavlidou E, Erkens G, Cremer R, Rambadt S, Wirth I 2004 *Surf. Coat. Technol.* **177** 657
- [21] An T, Wen M, Tian H W, Wang L L, Song L J, Zheng W T 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 136201 (in Chinese) [安涛, 文懋, 田宏伟, 王丽丽, 宋立军, 郑伟涛 2013 物理学报 **62** 136201]
- [22] Fang T H, Chang W Y, Huang J J 2009 *Acta Mater.* **57** 3341
- [23] Hoffmann K H, Schreiber M 1996 *Computational Physics* (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag) 268
- [24] Mishin Y, Farkas D, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A 1999 *Phys. Rev. B* **59** 3393
- [25] Maekawa K, Itoh A 1995 *Wear. September* **188** 115
- [26] Imran M, Hussain F, Rashid M, Ahmad S A 2012 *Chin. Phys. B* **21** 116201
- [27] Imran M, Hussain F, Rashid M, Ahmad S A 2012 *Chin. Phys. B* **21** 126802
- [28] Chen S D, Ke F J 2003 *Sci. China Ser. G* **33** 400 (in Chinese) [陈尚达, 柯孚久 2003 中国科学 **33** 400]
- [29] Oliver W C, Pharr G M 1992 *J. Mater. Res.* **7** 1564
- [30] Ni H, Li X, Gao H, Nguyen T P 2005 *Nanotechnology* **16** 1746
- [31] Lee Y, Park J Y, Kim S Y, Jun S, Im S 2005 *Mech. Mater.* **37** 1035

Nanoindentation simulation of Ni-base single-crystal superalloy with the consideration of interface effect^{*}

Hu Xing-Jian¹⁾ Zheng Bai-Lin^{1)†} Hu Teng-Yue¹⁾ Yang Biao¹⁾
He Peng-Fei¹⁾ Yue Zhu-Feng²⁾

1) (*institute of Applied Mechanics, Tongji University, Shanghai 200092, China*)

2) (*School of Mechanics and Civil & Architecture, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China*)

(Received 16 January 2014; revised manuscript received 29 April 2014)

Abstract

Nanoindentation made by diamond indenter on pure Ni and the γ/γ' -phase in a Ni-base single-crystal superalloy is simulated respectively with molecular dynamics method. Elasticity modulus and hardness of the two models are calculated. Initiation and growth of dislocations and the influence of misfit dislocations of γ/γ' -phase in Ni-base single-crystal superalloy at different indentation depths are analyzed with center symmetry parameter. Results show that the relationship between indentation load and depth for the two models is similar when the indentation depth below 0.641 nm, indicating that the misfit dislocation on interface little affects the indentation. When the indentation depth reaches 0.995 nm, the dislocation nucleation can be found in misfit dislocations and the crystals that have slipped along {111}-oriented crystal surface in γ -phase. As a result, the indentation load of the latter model decreases and is smaller than that in pure Ni model before the indentation depth reaches 1.487 nm. When the indentation depth reaches 1.307 nm, owing to the inhibition caused by misfit dislocations at the interface, the indentation load for the γ/γ' -phase model in Ni-base single-crystal superalloy increases rapidly.

Keywords: nanoindentation, molecular dynamics, misfit dislocation

PACS: 62.23.-c, 71.15.Pd, 61.66.DK

DOI: 10.7498/aps.63.176201

^{*} Project supported by the Funds for International Cooperation and Exchange of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51210008). Corresponding author.

[†] Corresponding author. E-mail: blzheng@tongji.edu.cn