

初始压入位置对Ni基单晶合金纳米压痕影响研究

胡兴健 郑百林 杨彪 余金桂 贺鹏飞 岳珠峰

Influence of initial indentation point on nanoindentation of Ni-based single crystal line alloys

Hu Xing-Jian Zheng Bai-Lin Yang Biao Yu Jin-Gui He Peng-Fei Yue Zhu-Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 076201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.076201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.076201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I7>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

考虑相界效应的Ni基单晶合金纳米压痕模拟

Nanoindentation simulation of Ni-base single-crystal superalloy with the consideration of interface effect

物理学报.2014, 63(17): 176201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.176201>

NiZr, AlZr 和 BCr 相局域原子短程序特征

Local atomic short-range-order features of NiZr, AlZr and BCr crystalline phases

物理学报.2014, 63(6): 066101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.066101>

纳米Ni在77 K温度下压缩行为的研究

Compression behavior of nanocrystalline nickel at 77 K

物理学报.2013, 62(14): 147102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.147102>

温度对超薄铜膜疲劳性能影响的分子动力学模拟

Temperature dependence of fatigue properties of ultrathin copper films: molecular dynamics simulations

物理学报.2013, 62(10): 107103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.107103>

高温高压下Ag-Mg-Zn合金中金属间化合物的微观结构与热力学性质的第一性原理计算

First-principles calculations of microstructure and thermodynamic properties of the intermetallic compound in Ag-Mg-Zn alloy under high pressure and high temperature

物理学报.2013, 62(1): 016106 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.016106>

初始压入位置对Ni基单晶合金纳米压痕影响研究*

胡兴健¹⁾ 郑百林^{1)†} 杨彪¹⁾ 余金桂²⁾ 贺鹏飞¹⁾ 岳珠峰³⁾

1) (同济大学应用力学研究所, 上海 200092)

2) (武汉理工大学机电工程学院, 武汉 430070)

3) (西北工业大学力学与土木建筑学院, 西安 710072)

(2014年9月27日收到; 2014年11月4日收到修改稿)

针对Ni基单晶合金建立初始压入 γ 相的 γ/γ' 模型和初始压入 γ' 相的 γ'/γ 模型, 采用分子动力学方法模拟金刚石压头压入两种模型的纳米压痕过程, 计算两种模型[001]晶向硬度. 采用中心对称参数分析两种模型(001)相界面错配位错对纳米压痕过程的影响. 结果显示: 弛豫后, 两种模型(001)相界面错配位错形式不同, 其中 γ'/γ 模型(001)相界面错配位错以面角位错形式存在; 压入深度在0.930 nm之前, 两种模型(001)相界面错配位错变化不大, 压入载荷-压入深度及硬度-压入深度曲线较符合; 压入深度在0.930 nm之后, γ'/γ 模型(001)相界面错配位错长大很多, 导致相同压入深度时 γ'/γ 模型比 γ/γ' 模型压入载荷和硬度计算结果小; 压入深度在2.055 nm之后, γ/γ' 模型(001)相界面错配位错对 γ 相中位错进入 γ' 相有阻碍作用, 但仍有部分位错越过(001)相界面进入 γ' 相中, γ'/γ 模型(001)相界面处面角位错对 γ' 相中位错进入 γ 相有更明显的阻碍作用, 几乎无位错越过(001)相界面进入 γ 相中, 面角位错的强化作用更明显, 所以 γ'/γ 模型比 γ/γ' 模型压入载荷上升速度快.

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.64.076201

1 引言

因为Ni基单晶合金中无晶界, 不存在高温晶界弱化、晶界裂纹等问题, 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, 目前广泛应用于航空发动机和工业燃气轮机的叶片材料中. 从微观角度看, Ni基单晶合金由 γ 相(Ni基固溶体)和均匀镶嵌在其中的 γ' 相(Ni_3Al 金属间化合物)以共格形式组成, 其中 γ' 相体积约占总体积的70%, γ 相和 γ' 相沿 $\langle 110 \rangle$ 方向形成相界面, 由于两相的晶格长度有微小差异, 所以会在相界面处生成错配位错.

γ/γ' 相界面的微观结构、两相的基本力学参数直接影响Ni基单晶合金材料的性能, 所以国内

外学者采用各种方法对 γ/γ' 相界面的演化、损伤以及Ni基单晶合金的基本力学参数进行了大量研究^[1-11]. 各种研究方法中, 纳米压痕技术是一种比较简单、实用的方法, 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, 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, 硬度又和材料的屈服应力有很大关系^[12,13], 所以研究材料的弹性模量和硬度具有较高的实用价值, 此外, 研究者也把纳米压痕实验用于研究Ni基单晶合金的蠕变特性、塑性流动、黏弹性和断裂强度, 如文献^[9]采用准连续介质方法模拟了Ni单晶纳米压痕过程, 分析了纳米压痕过程中Ni单晶发生初始塑性变形的过程, 并计算了材料的硬度; 文献^[10]采用纳米压痕实验方法测定了Ni基单晶合

* 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.

† 通信作者. E-mail: blzheng@tongji.edu.cn

金 CMSX-4 在一定温度范围内的弹性模量及硬度; 文献 [11] 采用纳米压痕仪对 Ni 基单晶合金进行了蠕变实验, 得到蠕变应力指数, 分析了材料的蠕变机理. 近 20 年来, 随着各种表面处理技术的迅速发展, 纳米压痕实验逐渐成为研究材料表层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. 目前, Ni 基单晶合金 (001) 相界面错配位错对纳米压痕过程影响的分子动力学研究还较少, 文献 [14] 进行纳米压痕分子动力学模拟时考虑了相界面的影响, 计算了特定基体厚度的 Ni 模型和 Ni 基单晶合金 γ/γ' 模型压入载荷-压入深度曲线, 发现相界面错配位错对压入载荷-压入深度曲线有较大的影响, 并计算了两种模型弹性模量和硬度. 单个两相共格结构的尺寸在几百纳米左右, 比一般纳米量级尺寸的压头大很多, 所以纳米压痕实验时压头初始压入位置具有随机性, 初始压入时既可能压入 γ 相, 也可能压入 γ' 相, 初始压入位置不同, 力学参数的计算结果也可能有区别. 综上所述, 本文分别建立了 Ni 基单晶合金 γ/γ' 模型和 γ'/γ 模型, 对两种模型的纳米压痕过程进行分子动力学模拟, 研究两种模型 (001) 相界面错配位错对纳米压痕过程的影响, 最后以硬度为例, 说明由于两种模型初始压入位置不同, 力学参数计算结果不相同, 并从原子尺度上解释了这种现象产生的原因, 为 Ni 基单晶合金材料的破坏机理提供了一点理论依据.

2 建模与模拟

γ/γ' 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, 上层 γ 相, 尺寸为 $67a_1 \times 67b_1 \times 12c_1$ (长 \times 宽 \times 高), 下层 γ' 相, 尺寸为 $66a_2 \times 66b_2 \times 12c_2$ (长 \times 宽 \times 高), 其中 $a_1 = b_1 = c_1 = 0.352$ nm 为 γ 相三个方向的晶格长度, $a_2 = b_2 = c_2 = 0.3573$ nm 为 γ' 相三个方向的晶格长度, 如图 1 (a) 所示; γ'/γ 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, 上层 γ' 相, 尺寸为 $66a_2 \times 66b_2 \times 12c_2$ (长 \times 宽 \times 高), 下层 γ 相, 尺寸为 $67a_1 \times 67b_1 \times 12c_1$ (长 \times 宽 \times 高), 如图 1 (b) 所示. 从图 1 可以看出, γ/γ' 模型中压头初始压入

相, γ'/γ 模型中压头初始压入 γ' 相. 在两种模型中, 坐标系的 x, y, z 轴分别平行基体 [100], [010], [001] 晶向, 基体总原子数都约为 45.6 万个, 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. 参考文献 [15], 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 [16], 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设为 1—100 m/s, 文中设置压头的速度为 30 m/s, 最大压入深度 2.4 nm. 弛豫时间步长设为 5×10^{-15} s, 压头加载时间步长设为 2×10^{-15} s.

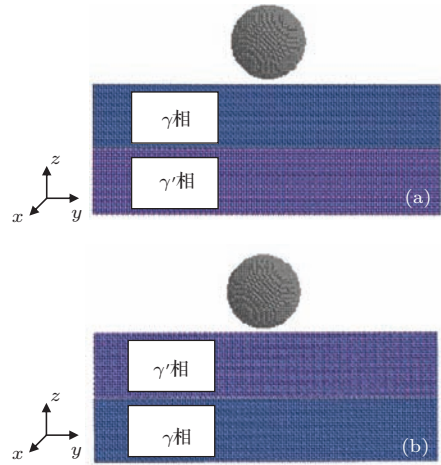


图 1 纳米压痕模型 (a) γ/γ' ; (b) γ'/γ

两种模型 (001) 相界面上的原子层衔接模式及所采用的势函数与文献 [14] 相同. 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. 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 值为

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

式中 R_i 为长度相等的近邻原子对, 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, 说明材料晶格处于缺陷状态. 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 的原子.

3 结果与讨论

弛豫 15000 步后, 两种模型势能在 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, 此时, 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 2 所示, 从图 2 可以观察到两种模型形成的错配位错并不完全相同, 其中 γ/γ' 模型每一条错配位错由单独的一条位错线组成; γ'/γ 模型每一条错配位错以三条位错线和位错线之间的层错组成的面角位错形式存在, 局部放大如图 3 所示.

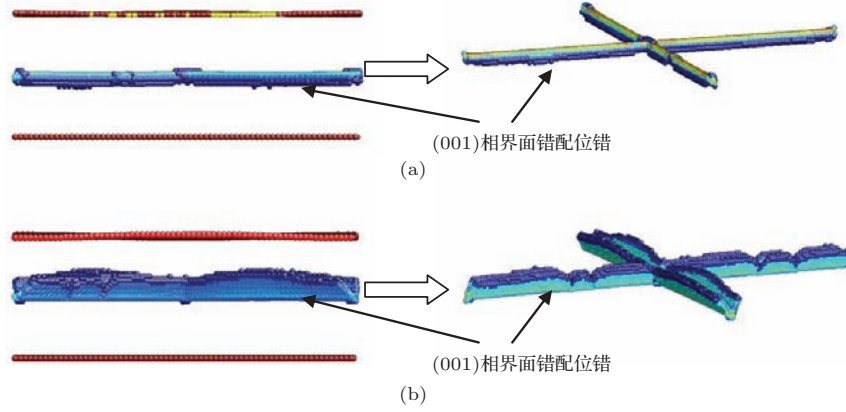


图2 (001) 相界面错配位错 (a) γ/γ' 模型; (b) γ'/γ 模型

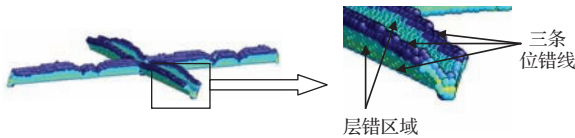


图3 γ'/γ 模型 (001) 相界面处的面角位错

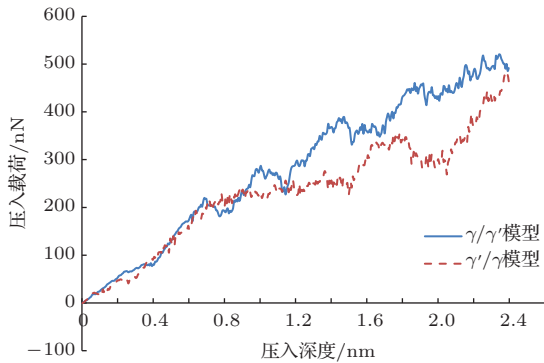


图4 压入载荷-压入深度曲线

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. 由图 4 可知, 压入深度在 0.930 nm 之前, 两种模型压入载荷-压入深度曲线较符合, 压入深度在 0.930 nm 之后, 两种模型压入载荷-压入深度曲线差别较大, 总体趋势上看, 在相同压入深度时,

γ/γ' 模型比 γ'/γ 模型压入载荷大, 压入深度大于 2.055 nm 时, γ'/γ 模型比 γ/γ' 模型压入载荷上升速度快.

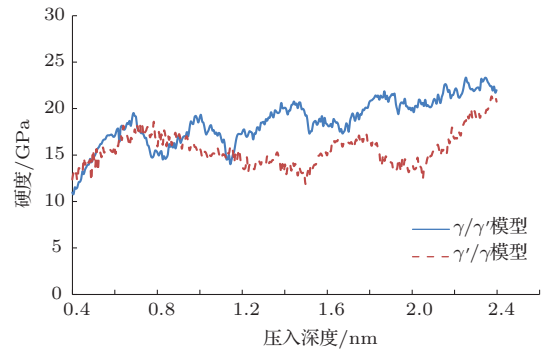


图5 硬度-压入深度曲线

相关文献 [14,17,18] 表明, 根据压入载荷-压入深度曲线并结合压头与基体接触投影面积公式可得到硬度-压入深度曲线, 具体的硬度和压头与基体接触投影面积计算公式参考文献 [14], 为了减小接触零点取值造成的误差, 取压入深度大于 0.4 nm 时的硬度计算结果如图 5 所示. 由图 5 可知, 压入深度在 0.930 nm 之前, 两种模型计算所得硬度相差不多, 压入深度在大于 0.930 nm 时, 两种模型计算所得硬度相差较大, 总体趋势上看, 相同压入深度时, γ/γ' 模型比 γ'/γ 模型硬度计算结果大, 压入

深度在大于 2.055 nm 时, γ'/γ 模型比 γ/γ' 模型硬度计算结果上升速度快. 为了从原子尺度上解释这种现象, 分别提取了压入深度 0.375 nm, 0.930 nm, 1.430 nm, 2.055 nm 和 2.355 nm 时的 CSP 值分别如图 6(a)—(e) 所示. 图 6(a) 中, 两种模型上部相中压痕产生的位错大小差别不大, 且 (001) 相界面错配位错与弛豫结束时的错配位错相比几乎没有变化, 两种模型的压入载荷-压入深度曲线及硬度-压入深度曲线比较符合; 图 6(b) 中, 两种模型上部相中位错长大很多, 晶体沿着 $\{111\}$ 滑移面滑移, 晶体滑移释放了基体弹性变形时积累的应变能, 所以压入载荷随着压入深度增加而抖动上升, γ/γ' 模型相界面错配位错几乎没有变化, 而 γ'/γ 模型相界面处的面角位错有沿着 $\{111\}$ 滑移面长大的趋势, 面角位错的长大伴随着晶体的滑移, 从而引起压入载荷的下降, 所以压入深度大于 0.930 nm 时, 相同压入深度时 γ'/γ 模型比 γ/γ' 模型压入

载荷和硬度的计算结果小; 图 6(c) 中, 随着压头的继续下压, 两种模型上部相中都有大量新的位错形核、长大, 晶体沿着 $\{111\}$ 滑移面滑移, 两种模型压入载荷继续随着压入深度增加而抖动上升, γ/γ' 模型相界面错配位错几乎没有变化, 而 γ'/γ 模型相界面处的面角位错沿着 $\{111\}$ 滑移面长大很多, 造成相同压入深度时 γ'/γ 模型比 γ/γ' 模型的压入载荷和硬度计算结果小; 图 6(d) 中, γ/γ' 模型上表面有大量新的位错在不同位置形核、长大, 相对而言, 越过 (001) 相界面进入 γ' 相中的位错较少, 说明 γ/γ' 模型 (001) 相界面错配位错对 γ 相中位错进入 γ' 相中有阻碍作用, 错配位错起到一定的强化作用. 而 γ'/γ 模型中面角位错大部分长大到模型上表面后晶体较难继续滑移, 同时, 面角位错中的层错区域对 γ' 相中的位错进入 γ 相中有明显的阻碍作用, γ'/γ 模型中几乎无位错越过 (001) 相界面进入 γ 相中, 面角位错起到了更明显的强化作用, 所以压入

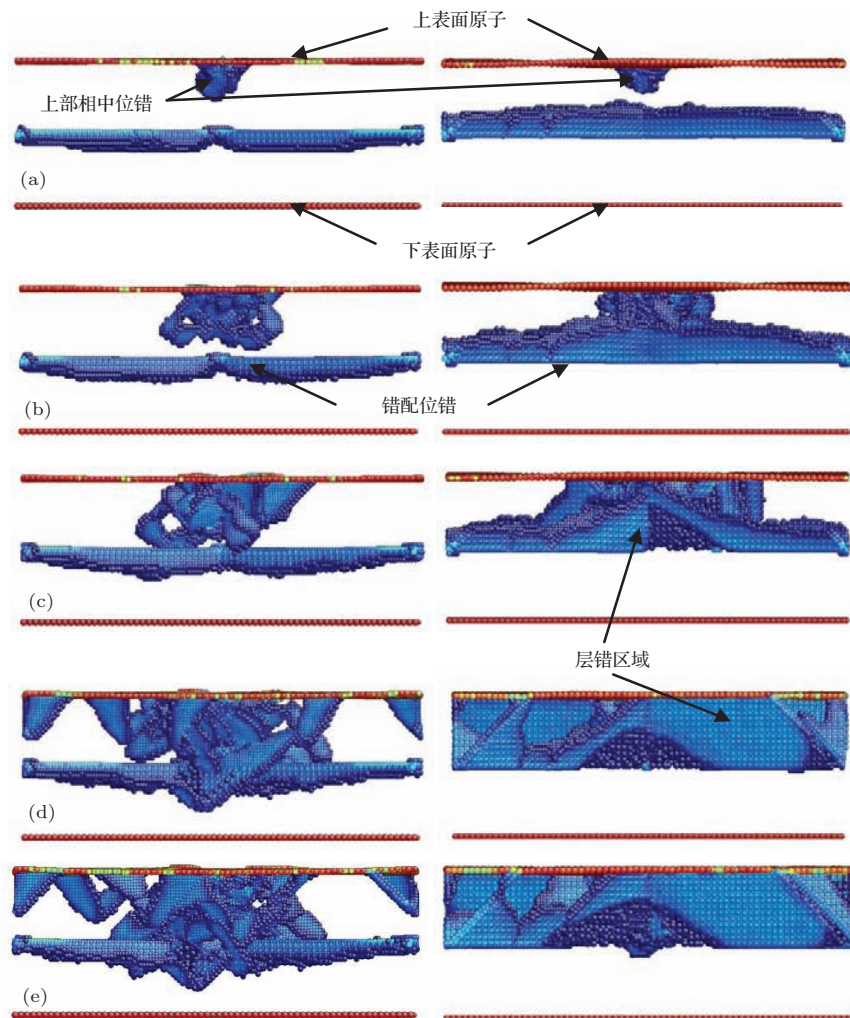


图 6 两种模型不同压入深度时基体内部 CSP 值图 (左边 γ/γ' 模型, 右边 γ'/γ 模型) (a) 压入深度 0.375 nm; (b) 压入深度 0.930 nm; (c) 压入深度 1.430 nm; (d) 压入深度 2.055 nm; (e) 压入深度 2.355 nm

深度大于 2.055 nm 时, γ'/γ 模型比 γ/γ' 模型压入载荷上升速度快; 图 6(e) 中 γ/γ' 模型有更多位错越过了 (001) 相界面进入 γ' 相中, 而 γ'/γ 模型仍几乎无位错进入 γ 相中. 图 7 对应于图 6(e) 的下视图 (隐藏了模型的下表面原子), 可以更好地观察到面角位错对 γ' 相中的位错阻碍作用.

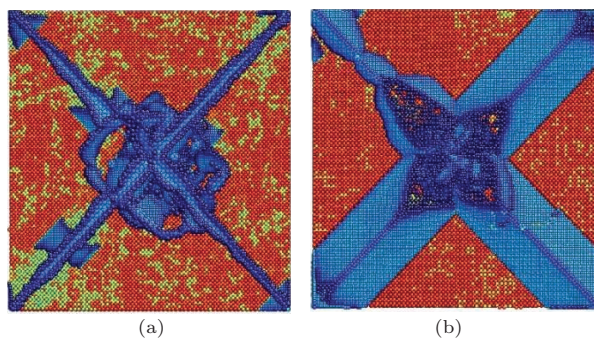


图 7 两种模型压入深度为 2.355 nm 时 CSP 值下视图
(a) γ/γ' 模型; (b) γ'/γ 模型

4 结 论

本文对不同初始压入位置的 Ni 基单晶合金 γ/γ' 模型和 γ'/γ 模型 [001] 晶向进行了纳米压痕过程的分子动力学模拟, 得到两种模型压入载荷-压入深度曲线和硬度-压入深度曲线, 从原子尺度上分析了两种模型 (001) 相界面错配位错对压入载荷-压入深度曲线和硬度-压入深度曲线的影响. 基于以上分析, 得到以下结论:

1) 弛豫后, 两种模型 (001) 相界面处形成的错配位错形式不同, γ/γ' 模型每一条错配位错由单独的一条位错线组成, γ'/γ 模型每一条错配位错以三条位错线和位错线之间的层错组成的面角位错形式存在;

2) 压入深度在 0.930 nm 之前, 两种模型上部相中位错大小差别不大, 且 (001) 相界面错配位错与弛豫刚结束时的错配位错相比几乎都没有变化, 两种模型的压入载荷-压入深度曲线及硬度-压入深度曲线比较符合;

3) 压入深度在大于 0.930 nm 时, γ'/γ 模型 (001) 相界面处的面角位错长大很多, 导致相同压入深度时 γ'/γ 模型比 γ/γ' 模型压入载荷和硬度

计算结果小;

4) 压入深度在大于 2.055 nm 时, γ'/γ 模型 (001) 相界面处的面角位错比 γ/γ' 模型 (001) 相界面错配位错的强化作用更明显, 所以压入深度大于 2.055 nm 时, γ'/γ 模型比 γ/γ' 模型压入载荷及硬度上升速度快.

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] Zhang J X, Murakumo T, Koizumi Y, Harada H, Masaki J S 2002 *Metall. Mater. Trans. A* **33** 3741
- [5] Gabb T P, Draper S L, Hull D R, Mackay R A, Nathal M V 1989 *Mater. Sci. Eng. A* **118** 59
- [6] Pollock T M, Argon A S 1994 *Acta Metall. Mater.* **42** 1859
- [7] 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]
- [8] 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]
- [9] Zeng F L, Sun Y 2006 *Chinese J. Solid Mech.* **27** 341 (in Chinese) [曾凡林, 孙毅 2006 固体力学学报 **27** 341]
- [10] Sawant A, Tin S 2007 *Scripta Mater.* **58** 275
- [11] Gao Y, Wen S P, Wang X H, Pan F 2006 *J. Aeronaut. Mater.* **26** 148 (in Chinese) [高阳, 文胜平, 王晓慧, 潘峰 2006 航空材料学报 **26** 148]
- [12] Zhang P, Li S X, Zhang Z F 2011 *Mater. Sci. Eng. A* **529** 62
- [13] Caceres C H, Griffiths J R, Pakdel A R, Davidson C J 2005 *Mater. Sci. Eng. A* **402** 258
- [14] Hu X J, Zheng B L, Hu T Y, Yang B, He P F, Yue Z F 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 176201 (in Chinese) [胡兴健, 郑百林, 胡腾越, 杨彪, 贺鹏飞, 岳珠峰 2014 物理学报 **63** 176201]
- [15] Fang T H, Chang W Y, Huang J J 2009 *Acta Mater.* **57** 3341
- [16] Hoffmann K H, Schreiber M 1996 *Computational Physics* (Berlin Heidelberg: Springer-Verlag) p268
- [17] Imran M, Hussain F, Rashid M, Ahmad S A 2012 *Chin. Phys. B* **21** 116201
- [18] Imran M, Hussain F, Rashid M, Ahmad S A 2012 *Chin. Phys. B* **21** 126802

Influence of initial indentation point on nanoindentation of Ni-based single crystal line alloys*

Hu Xing-Jian¹⁾ Zheng Bai-Lin^{1)†} Yang Biao¹⁾ Yu Jin-Gui²⁾
He Peng-Fei¹⁾ Yue Zhu-Feng³⁾

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

2) (*School of Mechanical and Electronic Engineering, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China*)

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

(Received 27 September 2014; revised manuscript received 4 November 2014)

Abstract

Ni-based single crystal line alloy is constituted with γ phase and γ' phase in the form of coherency. Since an indenter for two-phase coherent structure is bigger than the usual nano-scale indenter, the press location of indenter may be unclear in nanoindentation simulation. Both γ phase and γ' phase may be pressed initially, and the mechanical properties shown are different because of the initial press locations. The nanoindentation of Ni-based single crystal line alloys is simulated by molecular dynamics method. Two models are used to study about the hardness in [001] crystal orientation, one is the model γ/γ' with the initial indentation on γ phase, and the other is the model γ'/γ with the initial indentation on γ' phase. The influence of misfit dislocation at (001) interface on nanoindentation of the two models is analyzed using a center-symmetry parameter. Results show that the misfit dislocation shape of the two models are different after relaxation. Lomer-Cottrell dislocation occurs on (001) interface in the γ'/γ model. Before 0.930 nm press depth is reached, there is little change in the (001) interface misfit dislocation of the two models. Relationship between press load and press depth is similar for the two models, and it is the same in the relationship between hardness and press depth. After press depth reaches 0.930 nm, the misfit dislocation at (001) interface for model γ'/γ grows big, which results in a smaller press load and a smaller hardness computation in the model γ'/γ than that in model γ/γ' . When the press depth reach 2.055 nm, we find only a small amount of dislocations in γ phase that can go into γ' phase since the misfit dislocation at (001) interface in model γ/γ' hinders the process. However, none of dislocations can go into γ phase because of the prevention caused by Lomer-Cottrell dislocation at the (001) interface in the model γ'/γ . That means the Lomer-Cottrell dislocation reinforces the material obviously. So the press load in model γ'/γ grows faster than that in model γ/γ' .

Keywords: nanoindentation, molecular dynamics, misfit dislocation

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

DOI: 10.7498/aps.64.076201

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

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