

原子模拟钛中微孔洞的结构及其失效行为

何燕 周刚 刘艳侠 王皞 徐东生 杨锐

Atomistic simulation of microvoid formation and its influence on crack nucleation in hexagonal titanium

He Yan Zhou Gang Liu Yan-Xia Wang Hao Xu Dong-Sheng Yang Rui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 050203 (2018) DOI: 10.7498/aps.20171670

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.20171670>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I5>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[纳米微结构表面与石墨烯薄膜的界面黏附特性研究](#)

Interface adhesion property between graphene film and surface of nanometric microstructure

物理学报.2018, 67(3): 030201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20172153>

[DNA 超分子水凝胶的粗粒化建模与模拟](#)

Modelling and simulation of DNA hydrogel with a coarse-grained model

物理学报.2017, 66(15): 150201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.150201>

[单层二硫化钼纳米带弛豫性能的分子动力学研究](#)

Molecular dynamics study on relaxation properties of monolayer MoS₂ nanoribbons

物理学报.2016, 65(16): 160201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.160201>

[碳纳米管中水孤立子扩散现象的模拟研究](#)

Simulation studies on the diffusion of water solitons in carbon nanotube

物理学报.2016, 65(14): 140202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.140202>

[运动物体在颗粒物质中的动力学过程及最大穿透深度仿真研究](#)

Simulation of the projectile dynamics in granular media

物理学报.2013, 62(13): 130204 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.130204>

原子模拟钛中微孔洞的结构及其失效行为*

何燕¹⁾²⁾³⁾ 周刚¹⁾⁴⁾ 刘艳侠⁵⁾ 王皞^{1)†} 徐东生¹⁾ 杨锐¹⁾

1)(中国科学院金属研究所, 沈阳 110016)

2)(中国科学院大学, 北京 100864)

3)(沈阳师范大学物理科学与技术学院, 沈阳 110034)

4)(大连理工大学材料科学与工程学院, 大连 116024)

5)(辽宁大学物理学院, 沈阳 110036)

(2017年7月20日收到; 2017年12月18日收到修改稿)

六角金属由于其各向异性等特点, 在塑性变形等过程中容易产生形状和构型都相对复杂的点缺陷团簇. 这些团簇之间及其与运动位错等缺陷的相互作用直接影响材料的物理和力学性能. 然而对相关问题的原子尺度、尤其是空位团簇的演化和微孔洞的形成乃至裂纹形核扩展等的理解还不全面. 本文采用激发弛豫算法结合第一原理及原子间作用势, 系统考察了钛中的空位团簇构型及不同构型间的相互转变, 给出了不同尺寸空位团簇的稳定和亚稳构型、空位团簇合并分解和迁移的激发能垒等关键参数, 发现较小的空位团簇形成稳定构型, 较大的空位团簇呈现出空间对称分布趋势进而形成微孔洞; 采用高通量分子动力学模拟系统研究了不同尺寸的空位团簇在拉应力作用下对变形过程的影响, 发现这些空位团簇可以形成层错, 并对微裂纹的形核产生影响.

关键词: 原子模拟, 力学性能, 空位团簇, 裂纹

PACS: 02.70.Ns, 82.20.Wt, 62.25.Mn

DOI: 10.7498/aps.67.20171670

1 引言

钛合金具有优异的综合性能, 实用钛合金中往往包含对称性较低、塑性较差的六角 α 相, 容易导致特定条件下的疲劳失效, 其中裂纹的萌生和扩展是决定钛合金服役性能的关键过程之一. 针对航空发动机中 α 和近 α 型钛合金叶片的大量实验研究显示, 其疲劳断裂主要源于特殊的微观组织下基面裂纹的形成和快速扩展^[1-3], 但裂纹形核的具体过程涉及原子尺度的交互作用^[4], 其机理尚不清楚.

借助于高通量原子模拟, 前期的研究工作表明, 疲劳过程中的位错直接相互作用会导致点缺陷的形成^[5-8], 个别形式的点缺陷具有一定的稳定

性, 可对后续塑性变形产生影响^[9-14]. 六角密堆结构的对称性导致 α 钛中所形成的点缺陷有别于面心或体心材料^[15], 同时 α 钛合金疲劳条件下易出现难变形的硬取向织构等特点^[16-18], 可能使空位型点缺陷在裂纹萌生扩展中扮演比其他材料更重要的角色. 因此有必要对空位及其团簇的结构稳定性以及对裂纹形核的影响进行细致研究.

本文采用激发弛豫算法结合第一原理及原子间作用势, 考察钛中不同尺寸空位团簇的稳定和亚稳构型; 采用分子动力学模拟, 系统研究拉应力作用下不同尺寸的稳定空位团簇对微裂纹形核的影响, 以期理解钛合金复杂的疲劳断裂机理提供参考.

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2016YFB0701304)、国家自然科学基金(批准号: 51671195, 11674233, 61603265)和沈阳师范大学科技项目(批准号: L201521)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: haowang@imr.ac.cn

2 方法

原子模拟采用嵌入原子法作用势 (EAM), 该势可较好地描述六角金属钛的点缺陷能、面缺陷能和弹性常数等 [19]. 第一原理计算采用 VASP. 空位团簇形成能和迁移能计算采用激发弛豫算法 (ART), 模拟晶胞含 4000 个原子. 研究中从某一低能团簇构型开始搜索, 保留形成能低于 2 eV 的构型, 其中能量最低的构型即为该尺寸下最稳定的空位团簇构型. 动力学模型采用含约 16 万个原子的模拟晶胞. 对于静力学模拟中得到的稳定空位团簇构型施加沿 (0001) 方向的拉应力加载, 应变速率为 3×10^8 /s, 模拟温度为 1 K, 300 K. 所有模拟均应用三维周期性边界, 微正则 (NPT) 系综. 原子构型显示配位数着色. 体积和温度控制分别采用 Parrinello-Rahman 方法 [20] 和 Nose-Hoover 热浴 [21].

3 结果与讨论

3.1 EAM 势结果与第一原理计算结果的比较

为了验证 EAM 作用势计算空位团簇的合理性, 分别采用 EAM 势和第一原理计算了包含 1—6 个空位的空位团簇的形成能. 为了便于与孤立空位的能量进行比较, 采用被空位总数平均后的形成能. 计算结果见图 1, 图 1 中红色数据点表示由第一原理计算得到的形成能结果, 黑色数据点表示采用 EAM 势的分子动力 (MD) 学方法得到的形成能结果. 总体上, 两条曲线的数值较为接近, 变化趋势基本保持一致. 因此 EAM 势适用于本研究, 可以将其用于后续能量学和动力学计算.

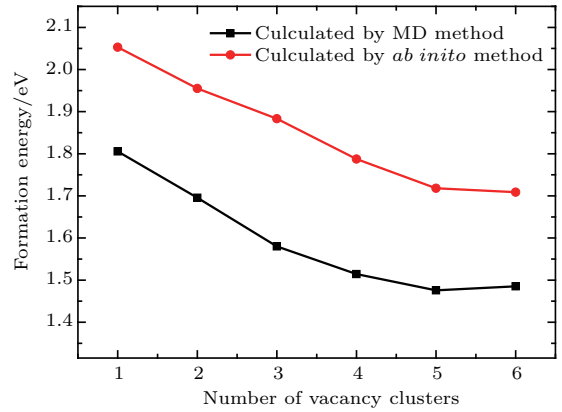


图 1 空位团簇形成能的 EAM 势与第一原理计算结果的比较

Fig. 1. Comparison of EAM potential and *ab initio* results for formation energy of vacancy clusters.

3.2 空位团簇的构型及其稳定性

由于六角金属钛的晶体结构的不对称性, 其空位团簇的构型随着空位数目的增加而变得复杂. 采用 ART 算法可以搜索到所有相对稳定的空位构型, 各数目空位团簇中, 最稳定的构型呈现出一些共同的分布规律. 3—5 空位团簇的部分相对稳定构型见图 2, 其各自的平均空位形成能见表 1.

图 2 中, V3a, V4a, V5a 分别是最稳定的空位团簇, 其各自的平均空位形成能在各空位团簇构型中最低 (见表 1). 我们把这种能量最低的构型称为最稳定构型. 在 3 空位中, 最稳定构型分布在同一基面上, 并且呈最近邻关系. V3b 的构型能量与 V3a 非常接近, 但当空位数目增加, V3b 构型就会发生分解, 不能稳定地存在于数目较大的空位团簇中. V4a 是 4 空位团簇中的最稳定构型, 呈空间旋转对称的分布特征. V5a 是 5 空位的最稳定构型, 其分布特征也呈现空间旋转对称性.

表 1 包含空位数为 3—5 的空位团簇各稳定构型的形成能
Table 1. Formation energy of clusters with 3 to 5 vacancies.

Label	V3a	V3b	V3c	V4a	V4b	V4c	V5a	V5b	V5c	V5d
Energy/eV	4.74	4.74	4.78	5.84	6.02	6.03	6.92	7.04	7.12	7.13

当所研究的空位数目增大, 发现中等数目的最稳定空位团簇构型是由这些小数目的最稳定构型所组成的, 如图 3. 空位数为 6 的最稳定空位团簇构型是由两个最稳定的 3 空位团簇构型组成, 并且呈现空间轴旋转对称性. 空位数为 7 的最稳定空位

团簇构型是由两个最稳定的 3 空位团簇和一个单空位组成, 其构型呈空间分布. 由以上分析可以得出, 对于中小数目的空位团簇, 当空位数目适合, 空位团簇的最稳定构型呈旋转对称的分布趋势, 并且数目较小的最稳定构型依然能够稳定地存在于

中等数目的最稳定空位团簇构型中. 对于7空位团簇, 图3(c)显示了其构型能和迁移能的ART计算结果. 可见, 虽然空位数目较少, 但其可能的构型

数量相当多, 并且这些构型间相互转变存在一些较低迁移能的路径, 因此这种团簇稳定性的计算必须采用完备的搜索方法, 否则极易发生遗漏失真.

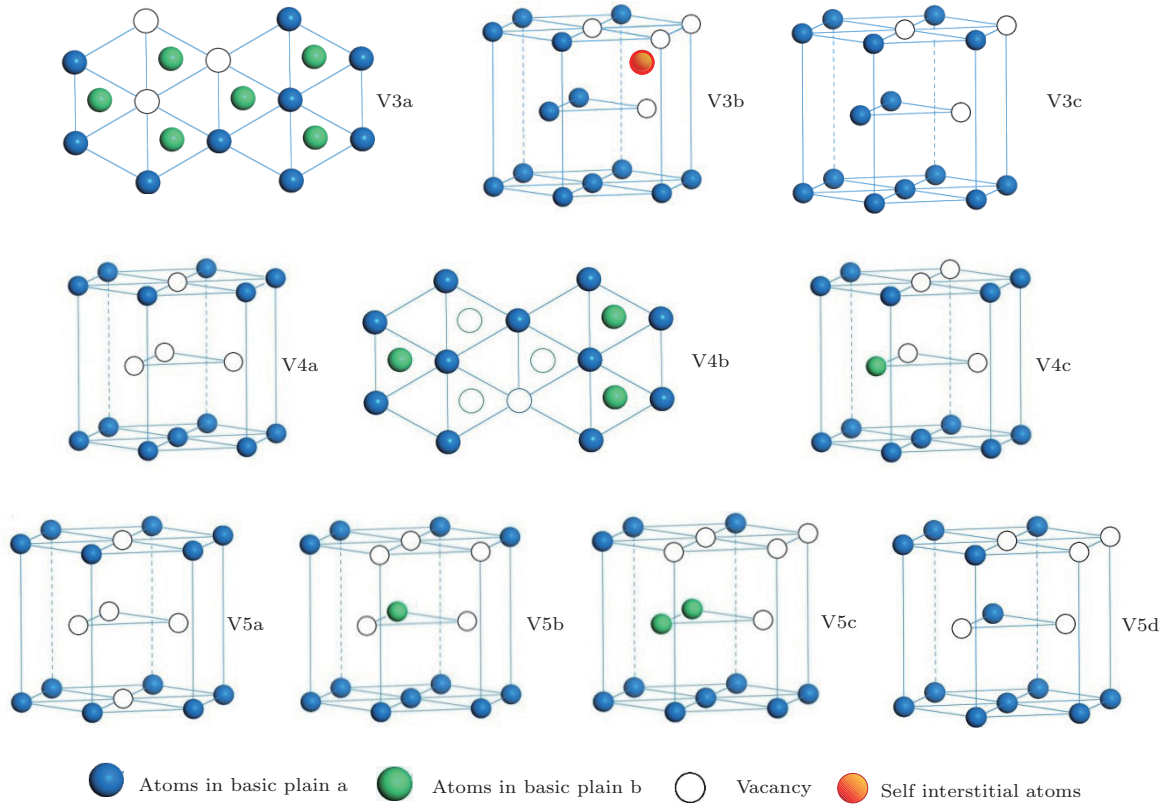


图2 包含空位数为3—5的空位团簇部分相对稳定构型
Fig. 2. Stable vacancy clusters with 3 to 5 vacancies.

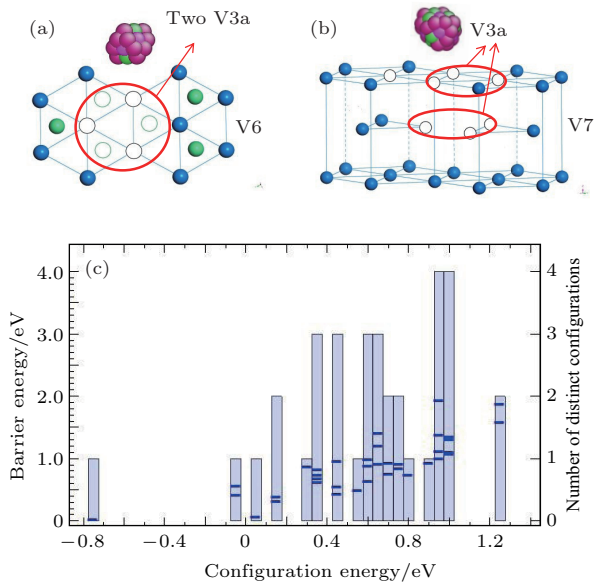


图3 (a), (b) 包含空位数为6和7的最稳定空位团簇构型;
(c) ART搜索得到的7空位团簇所有构型能及其迁移能
Fig. 3. (a), (b) Stable vacancy clusters with 6 to 7 vacancies; (c) configuration energy and barrier energy of V7 found by ART.

在动力学过程中, 空位团簇的迁移能是决定其可动性的重要参数. 图4总结了ART计算得到的小空位团簇最稳定构型的形成能和最低迁移能. 随着空位数增加, 形成能和迁移能均呈降低趋势, 且均明显低于单空位的相应能量, 尤其是对于迁移

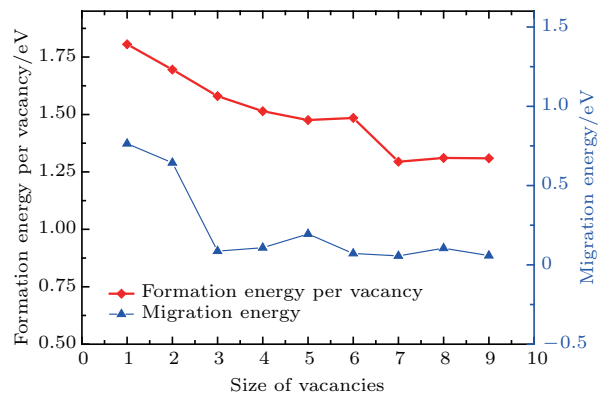


图4 空位团簇最稳定构型形成能和迁移能
Fig. 4. Formation and migration energies of stable vacancy clusters.

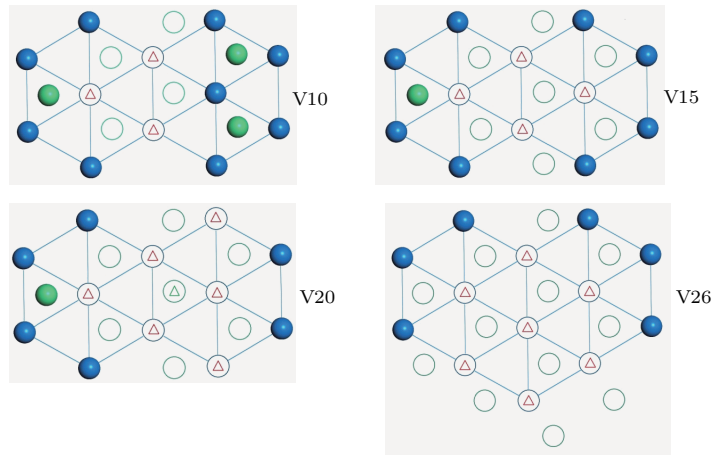


图5 空位数为10, 15, 20, 26的空位团簇的最稳定构型

Fig. 5. Stable vacancy cluster with 10, 15, 20 and 26 vacancies.

能, 这意味着大的点缺陷团簇并不一定如想象中的难以移动, 而是可能存在特定的低能量迁移路径, 这与面心体系中模拟结果一致^[22].

对于数目更大的空位团簇, 基面空位数分布最多, 其稳定构型的分布有呈镜面对称的趋势, 对称面为基面, 其聚集形式可视为微孔洞或微裂纹, 如图5. 其中表示的分别为10, 15, 20, 26的空位团簇中最稳定的构型分布, 蓝色圆表示在基面的原子, 绿色圆表示在两个基面中间层的原子, 空心圆表示空位, 圆中带三角的符号表示在相邻两个基面的相同位置都是空位.

3.3 拉伸加载下的塑性变形行为

选取不同数目的空位团簇最稳定构型, 进行拉伸过程的分子动力学模拟, 应力方向沿着 c 轴方向, 模拟的环境温度分别为1 K和300 K. 分别选取6空位、15空位和26空位的最稳定团簇构型, 这几个构型的空间分布方式呈不同特点, 6空位属于中等数目团簇, 其空间分布呈轴旋转对称特性, 26空位属于大数目团簇, 其空间分布呈基面对称性. 将这两种不同构型特征的团簇结构放在同样外加应力和温度条件下进行拉伸模拟, 结果发现它们对材料变形方式的影响各不相同.

图6显示了包含不同尺寸空位的金属Ti晶胞在[0001]方向拉伸加载下的变形原子过程, 其中(a1)—(a4)对应6空位团簇, (b1)—(b4)对应15空位, (c1)—(c4)对应26空位团簇. (a1)—(c1)是三种空位团簇的初始稳定构型, (a2)—(c2)是三种空

位团簇在临界应力点时的构型, (a3)—(c3)是1 K温度下, 裂纹形核初期的构型, (a4)—(c4)是300 K温度下, 裂纹形核初期的构型. 低温时随着加载模拟晶胞变形量逐渐增加, 当应力值增大至某一临界应力时, 体系在空位团簇边缘处沿着晶胞的锥面方向产生一个偏位错并进而沿锥面滑移, 形成锥面层错如图(a2), (b2), (c2). 对于包含6, 15空位团簇的模拟晶胞, 当两个不同方向的层错相交后, 交割的位置对两个层错会起到定扎作用, 使层错无法继续移动, 这时在节点位置产生较大的应力集中, 进而原子键发生断裂, 裂纹形核; 当应力继续增加, 裂纹沿着基面方向发生扩展, 如图6(a3)和(b3). 对于包含26空位团簇的模拟晶胞, 产生锥面层错后, 裂纹以原空位团簇为核心继续生长并在空位团簇的边缘沿着锥面方向发生扩展, 如图(c3). 而当温度提高到300 K时, 三种团簇裂纹扩展的方式相同, 都是沿着锥面发生扩展, 如图(a4), (b4), (c4). 比较可见, 三种团簇初期的变形特征基本一致, 但裂纹的形核及发展的方式和方向并不相同, 空位数目越大, 越容易沿锥面方向发生扩展.

上述加载过程的应力应变曲线如图7, 分别对应模拟的单晶、6空位、15空位和26空位的拉伸加载过程. 空位团簇导致体系临界应力大大降低, 大数目空位团簇对体系临界应力的影响强于小数目空位团簇. 总体上, 由于提供了应力集中和形核点, 空位团簇有助于六角钛中微裂纹的形核和扩展, 但不同类型的团簇对其影响明显不同.

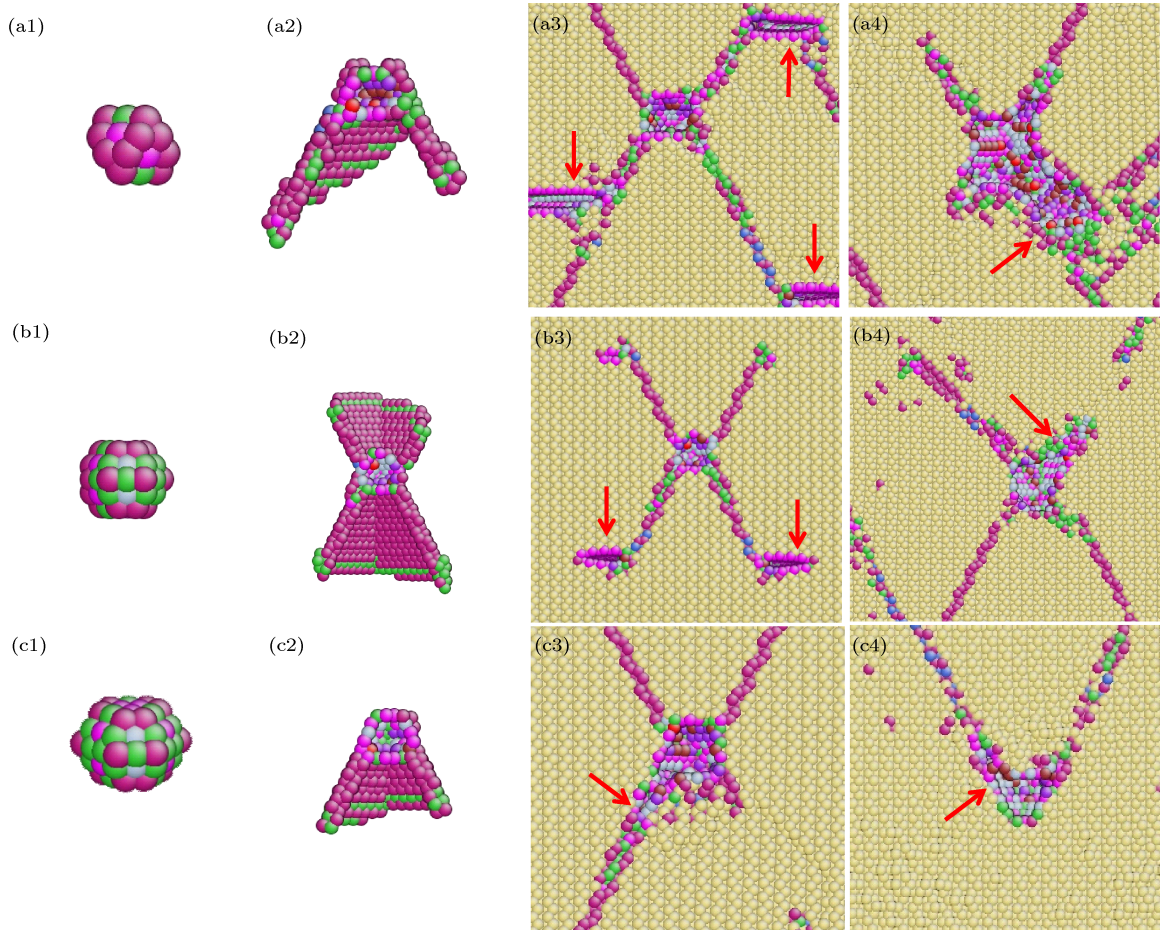


图6 三种空位团簇对裂纹形核扩展的不同影响 (a1)—(c1) 6, 15, 26 空位团簇的初始稳定构型; (a2)—(c2) 6, 15, 26 空位团簇在临界应力下的构型; (a3)—(c3) 6, 15, 26 空位团簇在 1 K 下裂纹形核初期; (a4)—(c4) 6, 15, 26 空位团簇在 300 K 下裂纹形核初期

Fig. 6. Influence of different vacancy clusters on crack nucleation and propagation: (a1)—(c1) The initial stable configurations of 6, 15, 26 vacancies; (a2)—(c2) configurations on critical stress of 6, 15, 26 vacancies; (a3)—(c3) configurations on initiation of crack of 6, 15, 26 vacancies in 1 K; (a4)—(c4) configurations on initiation of crack of 6, 15, 26 vacancies in 300 K.

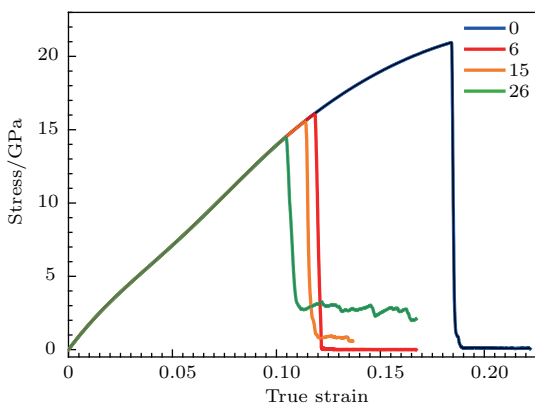


图7 包含不同尺寸空位团簇的模拟晶胞沿 [0001] 方向拉伸加载的应力应变曲线

Fig. 7. Strain-stress curves during the [0001]-tensile deformation of different simulation boxes with vacancy clusters of various sizes.

4 结 论

采用激发弛豫算法结合第一原理及原子间作用势, 考察了钛中不同尺寸空位团簇的稳定和亚稳构型; 采用分子动力学模拟系统研究了在不同温度环境中拉应力作用下不同尺寸的稳定空位团簇对微裂纹形核的影响, 得到以下主要结论:

1) α 钛中空位团簇的形成能随其尺寸增加而呈降低趋势, 迁移能同样随其尺寸增加而呈降低趋势;

2) 空位团簇的构型随所含空位数变化, 空位数较少时形成高对称性稳定构型, 空位数较多时形成沿基面对称的稳定构型;

3) 拉伸加载下, 体系的屈服应力随空位团簇尺寸增大而减小, 小尺寸团簇处裂纹先孕育形核而后

长大, 大尺寸团簇形成微空洞, 裂纹直接长大.

参考文献

- [1] Bache M R 2003 *Int. J. Fatigue* **25** 1079
- [2] Dunne F P E, Rugg D, Walker A 2007 *Int. J. Plast.* **23** 1061
- [3] Sinha V, Mills M J, Williams J C 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 3141
- [4] Pilchak A L, Williams R E A, Williams J C 2010 *Metall. Mater. Trans. A* **41** 106
- [5] Veyssi re P, Wang H, Xu D S, Chiu Y L 2008 *IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng.* **3** 012018
- [6] Xu D S, Wang H, Yang R, Veyssi re P 2008 *IOP Conf. Series: Mater. Sci. Eng.* **3** 012024
- [7] Wang H, Xu D S, Yang R, Veyssi re P 2008 *Acta Mater.* **56** 4608
- [8] Wang H, Xu D S, Yang R, Veyssi re P 2009 *Acta Mater.* **57** 3725
- [9] Wang H, Xu D S, Yang R, Veyssi re P 2011 *Acta Mater.* **59** 1
- [10] Wang H, Xu D S, Yang R, Veyssi re P 2011 *Acta Mater.* **59** 10
- [11] Wang H, Xu D S, Yang R, Veyssi re P 2011 *Acta Mater.* **59** 19
- [12] Wang H, Rodney D, Xu D S, Yang R, Veyssi re P 2011 *Phys. Rev. B* **84** 220103
- [13] Wang H, Rodney D, Xu D S, Yang R, Veyssi re P 2012 *Philos. Mag.* **93** 186
- [14] Wang H, Xu D S, Veyssi re P, Yang R 2013 *Acta Mater.* **61** 3499
- [15] Wang H, Xu D S, Yang R 2014 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **22** 085004
- [16] Sinha V, Mills M J, Williams J C 2006 *Metall. Mater. Trans. A* **37** 2015
- [17] Sparkman D M, Millwater H R, Ghosh S 2013 *Fatigue Fract. Eng. Mater. Struct.* **36** 994
- [18] Dunne F P E 2014 *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **18** 170
- [19] Zope R R, Mishin Y 2003 *Phys. Rev. B* **68** 024102
- [20] Parrinello M, Rahman A 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 7182
- [21] Nose S 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 511
- [22] Mart nez E, Uberuaga B P 2015 *Sci. Rep.* **5** 9084

Atomistic simulation of microvoid formation and its influence on crack nucleation in hexagonal titanium*

He Yan¹⁾²⁾³⁾ Zhou Gang¹⁾⁴⁾ Liu Yan-Xia⁵⁾ Wang Hao^{1)†} Xu Dong-Sheng¹⁾ Yang Rui¹⁾

1) (Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

2) (University of Chinese Academy of Science, Beijing 100864, China)

3) (College of Physics Science and Technology, Shenyang Normal University, Shenyang 110034, China)

4) (School of Materials Science and Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

5) (School of Physics, Liaoning University, Shenyang 110036, China)

(Received 20 July 2017; revised manuscript received 18 December 2017)

Abstract

During the plastic deformation of hexagonal metals, it is easy to generate the point defect clusters with complex shapes and configurations due to their anisotropic properties. The interactions among these clusters and between these clusters and moving dislocations significantly influence the physical and mechanical properties of hexagonal materials. However, none of these issues in particular concerning the evolutions of vacancy clusters, the formation of microvoids, and the crack nucleation and propagation, is comprehensively understood on an atomic scale. In the present work, we first employ the activation-relaxation technique, in combination with *ab initio* and interatomic potential calculations, to systematically investigate vacancy cluster configurations in titanium and the transformation between these clusters. The results indicate the stable and metastable configurations of vacancy clusters at various sizes and activation energies of their dissociation, combination and migration. It is found that the formation and migration energies decrease with the size of vacancy cluster increasing. Small vacancy clusters stabilize at configurations with special symmetry, while large clusters transform into microvoids or microcracks. High-throughput molecular dynamics simulations are subsequently employed to investigate the influences of these clusters on plastic deformation under tensile loading. The clusters are found to facilitate the crack nucleation by providing lower critical stress, which decreases with the size of the vacancy clusters increasing. Under tensile loading, cracks are first nucleated at small clusters and then grow up, while large clusters form microvoids and cracks directly grow up.

Keywords: atomistic simulation, mechanical behavior, vacancy cluster, crack

PACS: 02.70.Ns, 82.20.Wt, 62.25.Mn

DOI: 10.7498/aps.67.20171670

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2016YFB0701304), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51671195, 11674233, 61603265), and the Technology Foundation of Shenyang Normal University, China (Grant No. L201521).

† Corresponding author. E-mail: haowang@imr.ac.cn