

熔融 TiAl 合金纳米粒子在 TiAl(001) 基底表面凝结过程中微观结构演变的原子尺度模拟

钱泽宇 张林

Atomical simulations of structural changes of a melted TiAl alloy particle on TiAl (001) substrate

Qian Ze-Yu Zhang Lin

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 243103 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.243103

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.243103>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I24>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[不同取向角下 CO₂ 分子波长依赖的垂直谐波效率](#)

[Wavelength-dependent perpendicular-harmonics efficiency from oriented CO₂ molecule](#)

物理学报.2015, 64(18): 183102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.183102>

[硅功能化石墨烯负极材料的粗粒模型](#)

[Coarse-grain model of silicon functionalized graphene as anode material for lithium ion batteries](#)

物理学报.2015, 64(14): 143101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.143101>

[H+Li₂: 一个典型的释能反应体系及其含时动力学研究](#)

[H + Li₂: a typical exothermic reactive system and its time-dependent dynamics investigation](#)

物理学报.2015, 64(6): 063101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.063101>

[U_{1-x}Pu_xO₂ 热膨胀性质分子动力学模拟研究](#)

[Molecular dynamic study on thermal expansion of U_{1-x}Pu_xO₂](#)

物理学报.2014, 63(8): 083103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.083103>

[Al_n\(n=13--32\) 团簇熔化行为的分子动力学模拟研究](#)

[Molecular dynamical simulations of the melting properties of Al_n\(n=13--32\) clusters](#)

物理学报.2013, 62(19): 193104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.193104>

熔融 TiAl 合金纳米粒子在 TiAl(001) 基底表面凝结过程中微观结构演变的原子尺度模拟*

钱泽宇 张林[†]

(东北大学理学院, 材料物理与化学研究所, 沈阳 110004)

(2015年8月26日收到; 2015年9月27日收到修改稿)

采用基于嵌入原子方法的分子动力学方法模拟了附着于 TiAl 合金 (001) 面的 TiAl 合金纳米粒子在不同温度下的原子堆积结构演变。在模拟中, 熔融态 (1500 K) 的纳米粒子先被放置在温度分别为 1100, 1000, 900, …, 200 和 100 K 的基体 (001) 面, 随后急冷降温至基体温度。通过逐层分析粒子内和基体表面的原子排列情况, 发现温度主要影响粒子内的原子堆积结构。当基体温度很高时, 粒子内除了靠近基体的几个原子层外, 其他区域内均未形成有序的原子堆积结构。随基体温度降低, 粒子内大部分原子逐渐形成了有序的原子堆积结构, 且粒子内出现了一个以基体 (001) 晶面为底面、以基体 [101], [−101], [011], [0−11] 晶向为轴的近四棱锥形内区域, 此区域内外的原子均呈有序排列, 但原子面的取向不同, 因而形成了明显的界面。随基体温度进一步降低, 这个内区域仍然存在但其体积不断减小, 同时在纳米粒子顶部有越来越多的原子再次呈现无序排列, 使此内区域愈加难以辨别。

关键词: 分子动力学, TiAl 合金, 纳米粒子, 计算机模拟

PACS: 31.15.xv, 61.66.Dk, 62.23.St, 83.10.Rs

DOI: 10.7498/aps.64.243103

1 引言

作为一种新型的轻质高温结构材料, γ -TiAl 合金以其优异的常温和高温力学性能广泛地应用于航空航天和先进发动机领域, 并受到研究人员越来越多的关注^[1,2]。但该合金材料因室温脆性较高且冷塑性变形能力较差, 以致在常温下切削、加工、制造有困难, 阻碍了其实际应用^[3,4]。通过快速凝固技术获得细小而均匀的纳米组织是有效提高 γ -TiAl 合金塑性的一个重要途径^[5–7]。快速凝固能扩大平衡溶解度极限, 获得超细晶, 从而获得具有优异性能的新型组织结构。作为一种先进的快速凝固技术, 喷射成形又称为喷射雾化沉积, 它把金属熔化、雾化和沉积三个过程自然地结合在一起, 以较少工序直接制备整体致密且具有快速凝

固特征的材料或坯件。因其可以克服铸造和粉末冶金制备高温合金的许多缺点, 在近 20 年得到迅速发展^[8–11]。当采用该技术时, 金属液流经气体雾化为不同尺寸的液滴, 液滴直接滴落到收集器表面, 形成高密度的沉积物。在此过程中, 后续产生的熔融液滴会附着在先行结晶形成的合金薄带表面, 之后这些液滴发生凝结。这种凝结过程是一种非平衡态过程^[12–14], 在此过程中, 原液滴内的原子堆积结构将发生改变, 同时合金基体表面的结构也将发生变化。由于现有的实验手段很难观察到不同温度条件下局域原子堆积结构的变化, 因而采用基于经验原子间相互作用势的计算, 如分子动力学等, 就成为在原子尺度上描述这种结构转变的首选^[15–18]。此外, 具有特殊功能的纳米结构材料已被成功制备并且越来越广泛地应用于微反应

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CB606403)、国家自然科学基金(批准号: 51171044)、辽宁省自然科学基金(批准号: 2015020207)和中央高校基本科研业务费(批准号: N140504001)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: zhanglin@imp.neu.edu.cn

器、微电子器件和光学器件等领域, 而基底的性质对纳米结构的形核与生长有着很大的影响^[19–21], 采用分子动力学法探究纳米熔融液滴在不同温度的基底上的异相成核过程与凝固结构是很有必要的。Zhou 等^[22]采用分子动力学方法模拟研究了液态铜在沟槽形貌基体表面上的形核过程, 林长鹏等^[23]采用分子动力学方法模拟研究了不同尺寸的纳米铝粒子的熔点变化和相变行为, 徐威等^[24]采用分子动力学方法模拟研究了纳米液滴在不同能量表面上的铺展过程和润湿形态。这些工作都为从原子尺度上模拟研究熔融纳米粒子在基体表面上的结构演化提供了有益的参考。

本文采用基于嵌入原子方法(embedded atom method, EAM)的分子动力学方法模拟了附着在 TiAl 合金(001)面上的 TiAl 合金纳米粒子(包含 5625 个原子, 其中 Ti 原子 2650 个, Al 原子 2975 个)在快速凝固过程中的原子堆积结构的变化。这里选取 TiAl 合金的(001)面, 是因为实验研究表明 TiAl 合金的{100}面变形很小。

2 模拟方法

选用由 Farkas^[25]提出的用于描述 Ti-Al 原子间相互作用势的 EMA 形式, 其中体系的总能量 E_t 可以表示为

$$E_t = \sum_i F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j,i \neq j} \varphi(r_{ij}), \quad (1)$$

式中, ρ_i 是其他原子在原子 i 处产生的电荷密度, $F(\rho_i)$ 是将原子 i 嵌入到电子密度为 ρ_i 处所具有的能量, r_{ij} 是原子 i 和原子 j 之间的距离, $\varphi(r_{ij})$ 是原子 i 和原子 j 之间的两体势。采用正则系综分子动力学法进行模拟。计算中选取时间步长为 1.0×10^{-15} s, 通过对每个时间步的原子速度进行温度标定保证体系的温度不变。

计算中合金基体的尺寸为 $96.2 \text{ nm} \times 96.2 \text{ nm} \times 27.9 \text{ nm}$, 包含 17340 个原子(8092 个 Ti 原子, 9248 个 Al 原子), 其 x , y , z 轴分别平行于 [110], [−110], [001] 晶向, 在 x 和 y 方向取周期性边界条件, 合金基体的(001)面出现在 z 轴方向上。分子动力学模拟元胞尺寸为 $96.2 \text{ nm} \times 96.2 \text{ nm} \times 96.2 \text{ nm}$ 。将构造的合金基体分别在 100, 200, …, 900, 1000 和 1100 K 温度下弛豫 10^5 时间步, 获得在

这些温度下的合金基体结构, 对后 5000 时间步的结果取热力学平均值, 得到单独存在的基体的原子平均能量随温度的变化曲线。为获得处于液态的 TiAl 合金纳米粒子, 我们首先构造尺寸为 $95.9 \text{ nm} \times 95.9 \text{ nm} \times 37.9 \text{ nm}$ 的 TiAl 合金块体, 将其升温到 1500 K, 使其处于熔融态。在此块体中心截取包含 5625 个原子(2650 个 Ti 原子, 2975 个 Al 原子)的纳米粒子, 其直径为 57.4 nm, 此时纳米粒子内部的原子无序堆积。将这个处于熔融态的纳米粒子分别由 1500 K 急冷降温到 1100, 1000, 900, …, 200 和 100 K, 即 $1500 \text{ K} \rightarrow 1100 \text{ K}, 1500 \text{ K} \rightarrow 1000 \text{ K}, 1500 \text{ K} \rightarrow 900 \text{ K}, \dots, 1500 \text{ K} \rightarrow 200 \text{ K}$ 和 $1500 \text{ K} \rightarrow 100 \text{ K}$, 在每个温度弛豫 10^5 时间步, 得到单独存在的纳米粒子的原子平均能量随温度的变化曲线。将具有熔融态原子堆积结构的纳米粒子(温度为 1500 K 时得到的纳米粒子)放置在温度分别为 100, 200, …, 900, 1000 和 1100 K 的 TiAl 合金基体的(001)面上, 得到不同的凝固结构及其原子平均能量。在本模拟中, 基体表层为 Al 原子层。图 1 显示了这个纳米粒子放置在基体(001)面上后与基体构成的体系沿 [110] 方向的二维投影图, 图中浅色原子表示 Ti 原子, 深色原子表示 Al 原子。由图可见, 基体原子沿 [001] 晶向呈 Al-Ti-Al-Ti… 层状排列。

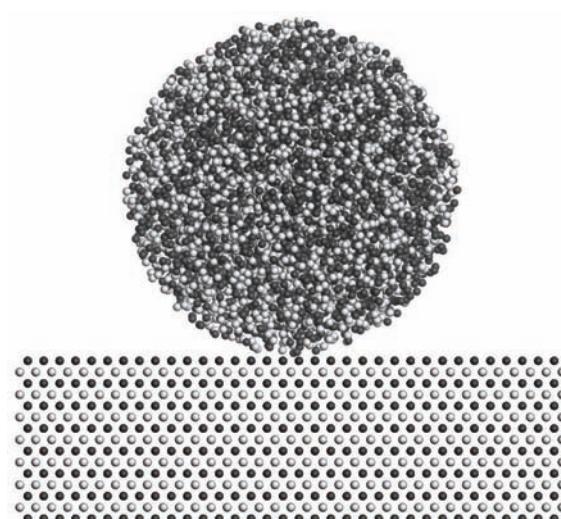


图 1 纳米粒子放置在基体(001)面上后与基体所构成的体系沿 [110] 方向的二维投影图

Fig. 1. Two-dimensional projection along [110] direction of the system being composed of substrate and the nanoparticle.

3 模拟结果与讨论

图2显示了基体内、未放置在基体表面纳米粒子内、由基体和纳米粒子所构成体系内原子的平均能量随温度的变化。如图所示，在100—1100 K温度范围内基体的原子的平均能量随温度增加呈线性增长，这是因为尽管在此温度范围内基体内原子仍位于它们的晶格格点位置，但基体原子围绕其格点位置的热运动随温度升高而增强。对未放置在基体表面的粒子，当急冷温度高于700 K时，原子平均能量以较大的斜率下降；当急冷温度低于700 K时，原子平均能量以较小的斜率下降。这说明在温度为700 K时，粒子内的原子堆积结构发生了转变。这里需要指出的是，对于具有自由表面的纳米粒子，由于它们具有远较块体高的表面积/体积比，使得其随温度变化而发生结构转变的温度（如熔点等）要低于由同样材质的块状固体。将粒子放置在基体表面并将其视为一个体系后，当基体温度高于1000 K时，原子平均能量以较大的斜率下降，当基体温度低于1000 K时，原子平均能量以较小的斜率下降。这是因为在由纳米粒子和基体构成的体系中，纳米粒子底部与基体相连，使得这个体系的表面积/体积比要远小于具有自由表面的纳米粒子，但该体系的表面积/体积比仍大于基体。这种转变温度的差异表明，与基体相接触的纳米粒子在凝结过程中的结构演变不同于其未受约束状态时的结构演变。

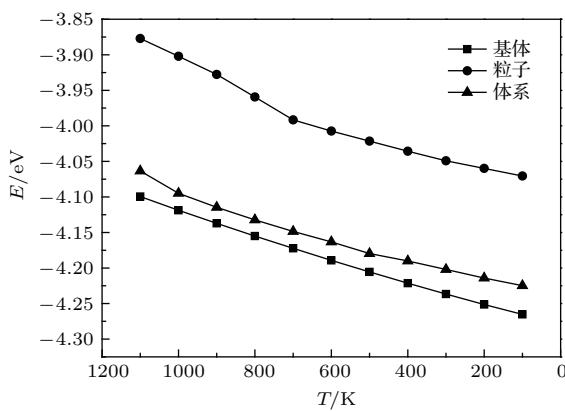


图2 基体、粒子与体系的原子平均能量随温度的变化

Fig. 2. Variations of average atomic energies of substrate, particle and system with temperature.

图3显示了当基体温度为1100, 1000, 800, 400和200 K时，体系沿[110]方向的二维投影图。由图

可见，当基体温度为1100 K时，粒子的形状由最初的球形变为半球形，半球底部与基体表面相接触，粒子内绝大多数原子呈无序堆积。随着基体温度降低到1000 K时，粒子的形状逐渐由半球形转变为

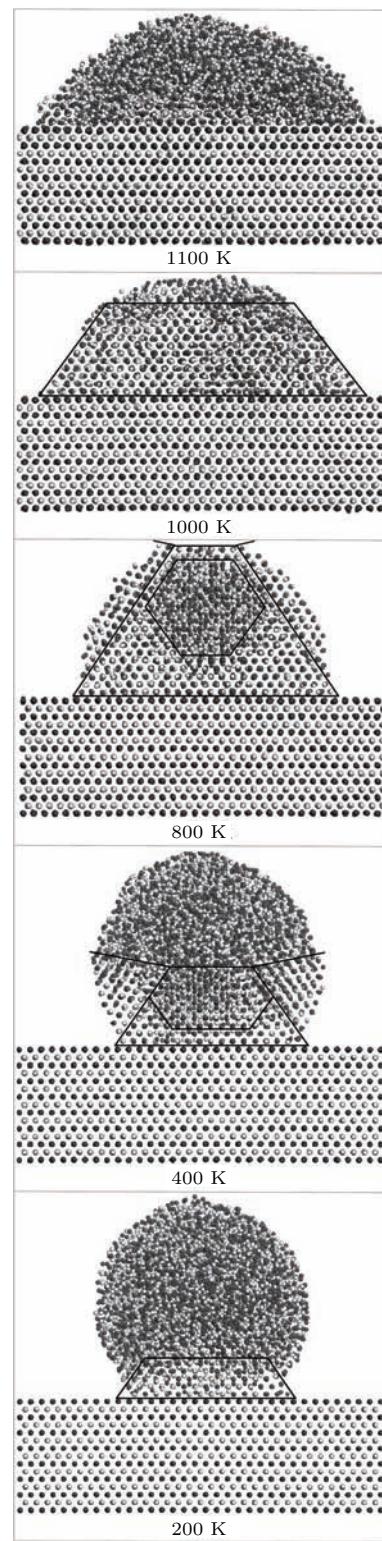


图3 不同温度下体系沿[110]方向的二维投影图

Fig. 3. Two-dimensional projections of the system along the [110] direction at different temperatures.

近梯形, 粒子与基体的接触面逐渐变小, 粒子内大多数原子呈有序堆积, 且其排列结构与基体相同, 即原子占据 TiAl 合金 (001) 面的格点位置。此时粒子顶部区域内的原子呈明显的无序堆积。随着基体温度降低到 800 K 时, 粒子内的原子堆积结构可由图中标示的直线划分为四个不同区域。粒子内靠近基体一侧的原子堆积顺序与基体相同。在粒子的左上部分和右上部分, 尽管原子仍呈有序堆积, 但其取向不同于粒子内靠近基体一侧的原子堆积取向。这就使得在粒子的左上部分/下端部分和右上部分/下端部分之间出现了明显的界面。在粒子的中

间部分, 原子整体上没有表现出明显的有序堆积, 这个区域内的原子形成了许多个小的局域结构。随着基体温度降低到 400 K 时, 粒子内的原子堆积结构呈现为粒子底端及左下部分和右下部分的原子呈有序堆积, 粒子上半部分的原子整体上呈无序堆积, 粒子中下部分的原子没有表现出明显的有序堆积。随着基体温度进一步降低到 200 K 时, 粒子与基体的接触区域进一步减小, 粒子内只有紧靠近基体的几层原子呈与基体原子堆积顺序相同的有序堆积。

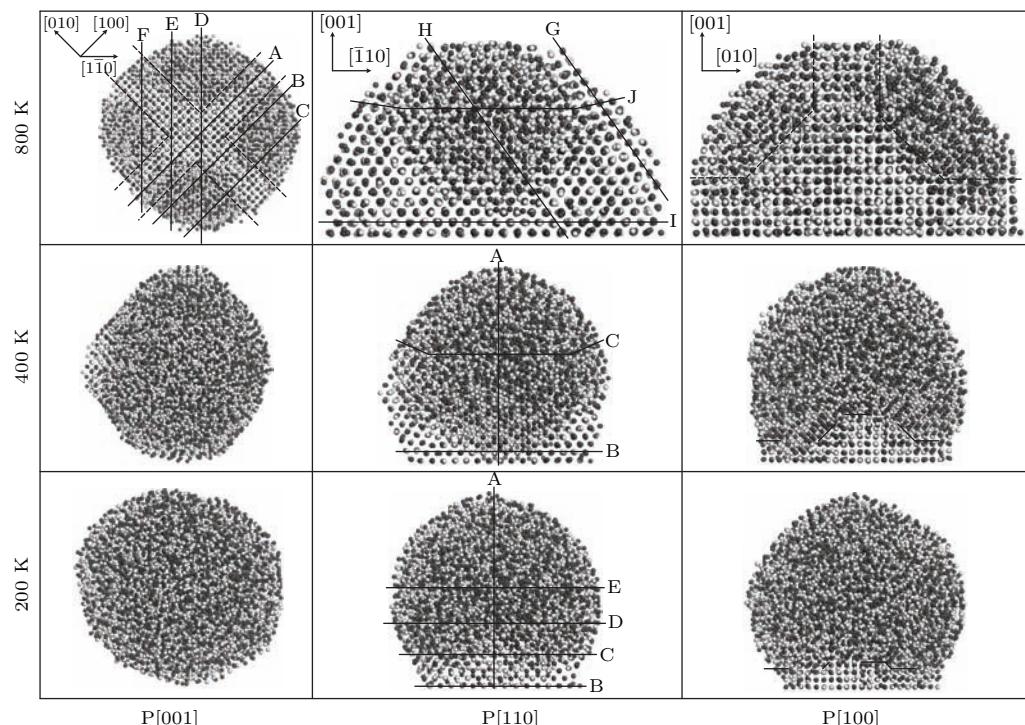


图 4 不同温度下粒子沿 [001], [110] 与 [100] 方向的二维投影图

Fig. 4. Two-dimensional projections along [001], [110] and [100] directions of particle at different temperatures.

图 4 显示了当基体温度为 800, 400 和 200 K 时, 放置在基体表面的粒子沿 [001], [110] 和 [100] 方向的二维投影图, 图中用 P[001], P[110] 和 P[100] 分别标示粒子沿 [001], [110] 和 [100] 方向的二维投影图。当基体温度为 800 K 时, 由粒子沿 [001] 方向的二维投影图可见, 在粒子的左上到右下和左下到右上两个对角线区域内, 原子有序堆积。在粒子的其余四个区域内, 原子没有表现出明显的有序堆积。这就使粒子内出现了黑色虚线所示的明显的界面区域。由粒子沿 [100] 方向的二维投影图可见, 在粒子的上方中间部分和靠近基体一侧(如图中黑色

虚线所标示), 原子有序堆积。在粒子的左上部分和右上部分, 原子没有表现出明显的有序堆积。由粒子沿 [001], [110], [100] 方向粒子内原子堆积结构的二维投影图可见, 粒子内部的原子堆积成多种结构, 在沿 [110] 方向看似原子无序堆积的区域内, 原子仍具有沿某一方向的局域有序堆积结构。在图 P[001] 和图 P[110] 中, 我们用黑线 A—J 分别标志 10 层原子, 这些层内原子的排列结构将在图 5 中给出。当基体温度为 400 K 时, 由粒子沿 [001] 方向的二维投影图可见, 粒子边缘的少量原子堆积成有序结构, 粒子大部分区域内的原子堆积没有表现出明

显的有序性。由粒子沿[100]方向的二维投影图可见, 粒子内靠近基体一侧的原子堆积有序。在该温度下的图P[110]中, 我们用黑线A—C标示3层原子, 这些层内的原子排列见图5。当基体温度降低到200 K时, 粒子沿[001]方向的二维投影图显示粒

子内的绝大多数原子没有堆积成明显有序的结构。由粒子沿[100]方向的二维投影图可见, 粒子内只有最靠近基体的几层原子呈与基体原子相同堆积顺序的有序堆积结构。在该温度下的图P[110]中, 我们用黑线A—E标示出5层原子。

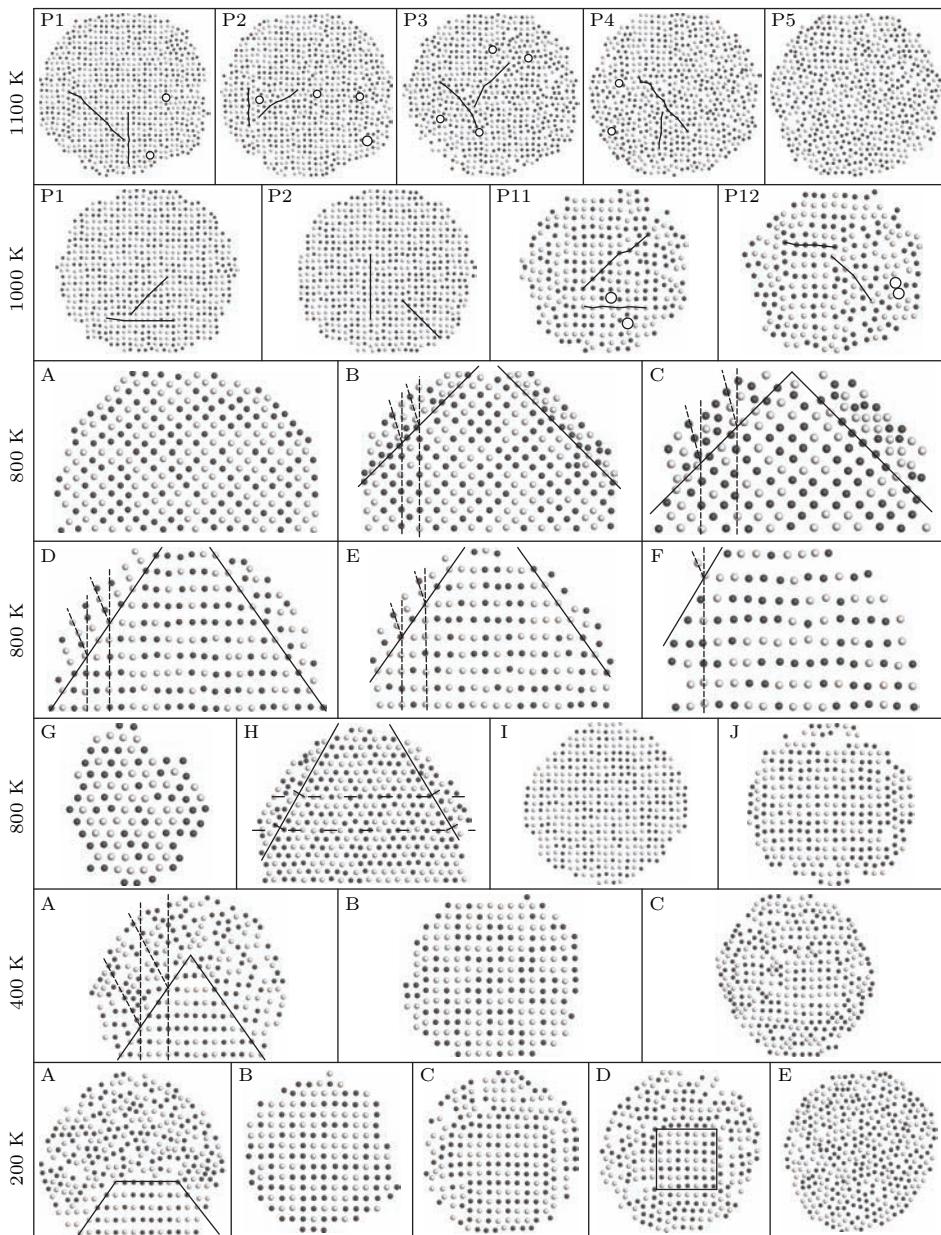


图5 不同温度下粒子内的各层原子排列图

Fig. 5. Atomic arrangements of different atomic layers in particle at different temperatures.

图5显示了当基体温度为1100, 1000, 800, 400和200 K时, 放置在基体表面的粒子内的各层原子的排列图。当基体温度为1100 K时, P1为沿[001]方向粒子与基体相接触的原子层内的原子排列图; P2, P3, P4和P5为沿同一方向粒子内第二层、第三层、第四层和第五层内的原子排列图。如图所示, 这

5个原子层内的每个原子层都有Ti原子和Al原子, 而不是如基体内 Ti原子层-Al原子层的堆积样式。P1原子层内的绝大多数原予呈局域有序排列, 且位于与基体原子相同的格点位置上。尽管这些原子呈局域有序排列, 但在局域有序区之间存在原子的错排区域。同时原子层内存在如圆圈所标示的少量

空位。P2 原子层内的原子排列情况与 P1 原子层的类似，但其原子错排程度和空位数量都有所增加。P3 原子层内多数原子仍呈局域有序排列，但已明显偏离格点位置，原子错排程度进一步增加，原子层边缘的原子呈无序排列。P4 原子层内绝大多数原子已严重偏离格点位置，原子的局域有序排列结构已不明显。P5 原子层内绝大多数原子已经不再处于格点位置，而表现为无序排列。这说明在较高的温度下，粒子内距离基体较远的区域内不能形成稳定的局域原子堆积结构。当基体温度为 1000 K 时，在与基体相接触的粒子 P1 原子层内绝大多数原子呈局域有序排列，且位于与基体原子相同的格点位置。此时尽管原子层仍存在原子的错排，但错排程度较 1100 K 时已大为降低，且没有出现明显的空位。该温度下 P2 原子层的原子排列情况与 P1 原子层的类似。在距离基体较远的 P11 原子层内，中间区域内的原子位于与基体面心晶格相同的格点位置，且原子错排程度较小，但原子层边缘的原子已明显偏离格点位置且原子错排程度较大，同时原子层内出现少量空位。P12 原子层内的原子排列情况与 P11 原子层的类似，但其边缘有更多原子严重偏离格点位置。当基体温度降低到 800 K 时，在图 4 中黑线 A 所标示的原子层 A(图 5A, 800 K) 中，所有原子均呈有序排列。原子层 B 和 C(图 5B 和 C, 800 K) 中的原子呈有序排列，但如图所示黑色实线内侧的原子与黑色实线外侧的原子表现出不同取向的排列，图中的黑色虚线显示了这两种取向之间的错排关系。原子层 D, E 和 F(图 5D, E 和 F, 800 K) 中的原子明显表现出以黑色实线为边界的两种取向不同的有序排列，图中黑色虚线显示了这两种取向之间的错排关系。原子层 G(图 5G, 800 K) 中的原子均以相同的取向呈有序排列。原子层 H(图 5H, 800 K) 中的原子以两种不同取向呈有序排列。原子层 I(图 5I, 800 K) 中的原子全部位于边界同一侧，层内全部原子均占据 (001) 面格点位置。原子层 J(图 5J, 800 K) 中的原子位于边界两侧，由图可见，位于原子层 J 中部的原子占据 (001) 面格点位置，位于原子层 J 边缘的原子并不占据 (001) 面格点位置，而是表现出不同取向的有序排列。当基体温度为 400 K 时，在图 4 中对应的黑线 A 所标示的原子层 A(图 5A, 400 K) 中，黑色实线内的原子呈与基体原子排列顺序相同的有序排列，黑色实线外且距黑色实线较近的原子呈另一种取向的有序排列，黑色实线外且距黑色实线较远

的原子呈无序排列。原子层 B(图 5B, 400 K) 中的原子全部呈与基体原子排列顺序相同的有序排列，原子层内没有出现空位。原子层 C(图 5C, 400 K) 中间区域的原子呈有序排列，边缘的原子呈无序排列。当基体温度为 200 K 时，在图 4 中对应的黑线 A 所标示的原子层 A(图 5A, 200 K) 中，黑色实线内的原子呈与基体原子排列顺序相同的有序排列，黑色实线外的原子呈无序排列。原子层 B(图 5B, 200 K) 内的原子全部呈与基体原子排列顺序相同的有序排列，原子层内没有出现明显的空位。原子层 C(图 5C, 200 K) 内的原子排列情况与原子层 B 的类似，但位于边缘的部分原子已经偏离格点位置。位于原子层 D 中部的原子呈有序排列(图中用正方形标示)，边缘的原子呈无序排列。原子层 E(图 5E, 200 K) 中的原子则呈无序排列。

由图 4 和图 5 中的不同区域内的原子排列关系可见，随着基体温度降低，位于基体表面的粒子内形成了一个如图 6(a) 所示的以基体靠近粒子 (001) 面为底面、以基体 [101], $[\bar{1}01]$, [011], $[0\bar{1}1]$ 晶向为棱的四棱锥边界。在该示意图中，四棱柱代表基体，上边的球代表刚放置在基体表面时的球形粒子，四棱锥代表不同温度下在与基体相接触后粒子内原子形成的不同有序排列结构的边界。这时，边界外的原子相对边界内的原子沿边界向 [001] 晶向翻折某个角度。如图 6(b) 所示，四棱柱内的黑色平面代表基体 (001) 面，四棱锥内的平面代表基体表面上粒子在不同温度下粒子内出现有序排列结构的区域，这时四棱锥外的原子也会形成有序排列结构，它们之间出现了边界。即粒子内的原子内会形成以不同取向有序排列的结构形式。随着基体温度的降低，四棱锥边界区域随之减小。当基体温度较低时，尽管仍然存在四棱锥边界，但四棱锥外的原子则主要呈无序排列。这是由于很低的温度限制了原子的运动，这时粒子内位于距基体较远处的原子尽管仍有可能形成局域有序排列，但这些局域有序排列区域没有机会变得更大。根据上述分析并结合 800, 400, 200 K 时实际的模拟结果，绘制了图 7。

图 7 显示了当基体温度分别为 800, 400, 200 K 时，粒子内不同原子排列区域内 $[\bar{1}10]$ 方向的二维投影示意图。图中区域 1 的原子排列结构与基体相同，均为原子沿基体 [001] 晶向呈层状排列。区域 2 的原子也呈层状排列，但每层原子所在平面均平行于区域 2 中虚线代表的平面，而非平行于基体 (001)

面。区域3外部的(即此区域中位于 $[\bar{1}10]$ 方向两端的)原子排列结构与区域2的相同, 内部的(即此区域中位于 $[\bar{1}10]$ 方向中间的)原子排列结构与区域1的相同, 因此沿 $[\bar{1}10]$ 方向观察时, 这两种原子排列

结构会在视觉上重叠, 导致此区域的原子排列结构特征不明显。区域4内绝大多数原予呈无序排列, 仅有处于粒子中心且在此区域虚线标示范围内的少数原予呈与区域1原予相同的层状有序排列。

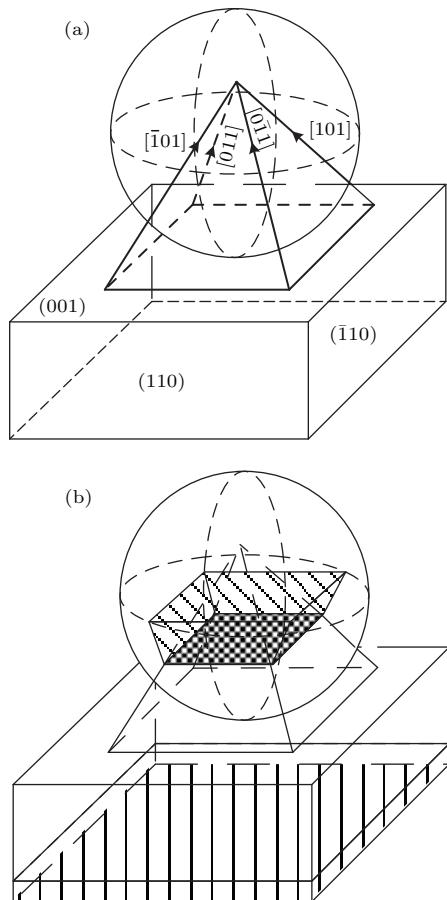


图6 粒子的“复式”原子排列结构

Fig. 6. “Duplex” atomic packing in this particle.

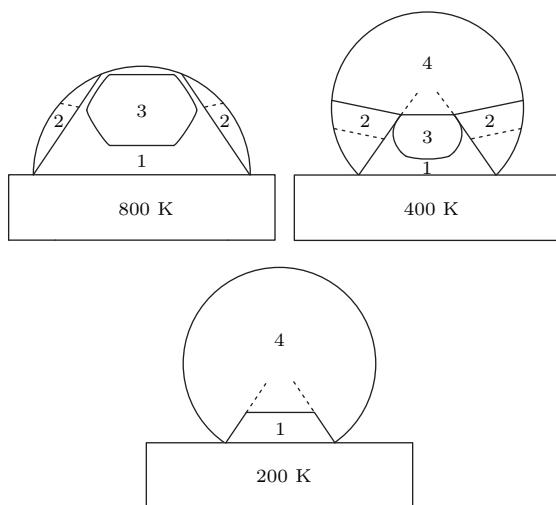


图7 粒子内不同原子排列区域的 $[\bar{1}10]$ 方向二维投影示意图

Fig. 7. Schematic projection along $[\bar{1}10]$ direction of regions with different atomic arrangements in particle.

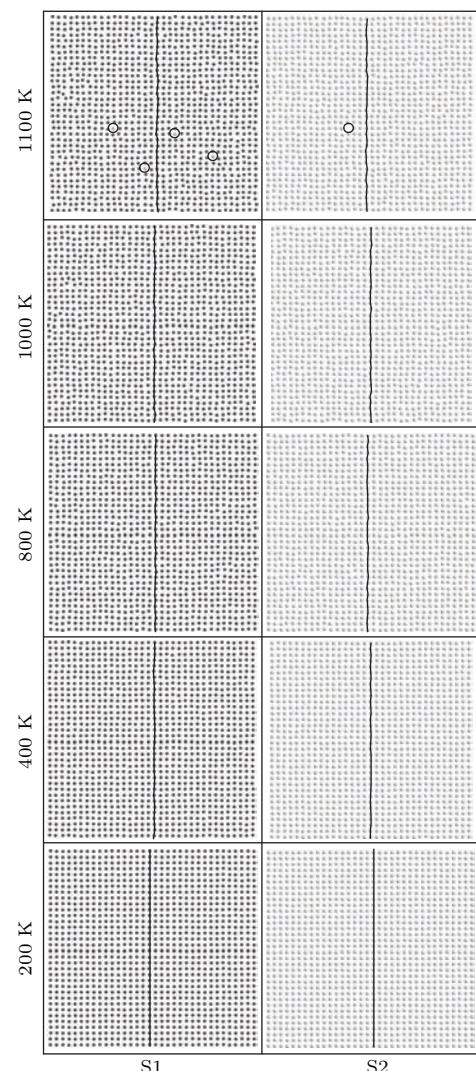


图8 不同温度下基体表面层的原子排列

Fig. 8. Atom arrangements of atomic layers on the substrate surface at different temperatures.

图8显示了当基体温度为1100, 1000, 800, 400和200 K时, 基体表面靠近粒子的两个原子层内的原子排列结构。S1为沿 $[001]$ 方向与粒子相接触的基体Al原子层的原子排列图, S2为沿同一方向的基体内Ti原子层的原子排列图。当基体温度为1100 K时, 如图8S1所示, 基体表面Al原子层内绝大多数Al原子仍呈有序排列, 但部分Al原子离开了其原晶体格点位置, 同时原子层内出现了如黑圈标志的少量Ti原子, 它们位于原基体表层Al原子的晶格位置, 这些Ti原子来源于基体Ti原子层和基体上的粒子。由于Al原子偏离其格点位置且

Ti原子占据原Al原子的晶格格点位置, 基体表面Al原子层内的多个区域出现了晶格畸变。这里需要指出的是, 在基体Al原子层内发生结构变化的区域位于图3所示的粒子与基体表面相接触的区域内, 这是因为高温粒子与低温基体相接触加剧了接触面内的基体原子的热运动。在图8S2中, 在靠近基体表面Al原子层的Ti原子层内, 大多数Ti原子仍位于格点位置, 仅有少数的Ti原子偏离格点, 这时有Ti原子离开了该原子层, Ti原子层内出现了空位。随基体温度降低, Al原子层和Ti原子层内原子偏离格点位置的程度和晶格畸变区域的数量也逐渐降低。当基体温度为1000 K时, 基体内原子偏离晶格格点位置的程度明显减小, 且没有Ti原子出现在Al原子层上。在更低的基体温度时, 基体表面Al原子层和Ti原子层内的原子均位于晶格格点位置。

4 结 论

采用基于嵌入原子方法的分子动力学方法模拟了附着于TiAl合金(001)面上的TiAl合金纳米粒子急冷降温至不同温度后的原子堆积结构。通过分析粒子内各个原子层的原子排列情况发现, 当基体温度较高时, 粒子内除在靠近基体的原子层内原子呈有序堆积外, 粒子的大部分区域内无法形成稳定的原子堆积结构。这时, 基体与粒子相接触的原子层内的少量原子也脱离其原格点。随着基体温度的降低, 粒子内成稳定的局域原子堆积结构的区域变大, 并且出现了一个以基体顶端(001)面为底面、以基体[101], [−101], [011], [0−11]晶向为棱的四棱锥边界, 边界内的大部分原子占据(001)面格点位置, 边界外的原子尽管也占据(001)面格点位置, 但边界内外原子形成明显的边界。当基体温度很低时, 尽管仍存在四棱锥边界, 但四棱锥内区域明显变小。同时由于原子的运动受到很大抑制, 距基体较远的原子只能形成范围较小的局域有序堆积结构。在温度低于1000 K时, 基体的表面原子层内的排列结构没有发生变化。

参考文献

- [1] Yang R 2015 *Acta Metall. Sin.* **51** 129 (in Chinese) [杨锐 2015 金属学报 **51** 129]

- [2] Liu Y, Huang B Y, Zhou K C, He Y H, Tang Z H 2001 *J. Aeronaut. Mater.* **21** 50 (in Chinese) [刘咏, 黄伯云, 周科朝, 贺跃辉, 唐志宏 2001 航空材料学报 **21** 50]
- [3] Zhang C P, Zhang K F 2009 *Mater. Sci. Engng. A* **520** 101
- [4] Bacso M P, Morel A, Naveos S, Bachelier-locq A, Josso P, Thomas M 2006 *Intermetallics* **14** 102
- [5] Kong F T, Chen Z Y, Tian J, Chen Y Y 2003 *Rare Metal. Mat. Eng.* **32** 81 (in Chinese) [孔凡涛, 陈子勇, 田竟, 陈玉勇 2003 稀有金属材料与工程 **32** 81]
- [6] Liu Z G, Chai L H, Chen Y Y, Kong F T 2008 *Acta Metall. Sin.* **44** 569 (in Chinese) [刘志光, 柴丽华, 陈玉勇, 孔凡涛 2008 金属学报 **44** 569]
- [7] Kenel C, Leinenbach C 2015 *J. Alloy. Compd.* **637** 242
- [8] Zhang G Q, Li Z, Tian S F, Yan M G 2006 *J. Aeronaut. Mater.* **26** 258 (in Chinese) [张国庆, 李周, 田世藩, 颜鸣皋 2006 航空材料学报 **26** 258]
- [9] Wang H W, Zhu D D, Zou C M, Wei Z J 2011 *T. Non-ferr. Metal. Soc.* **21** 328
- [10] Staron P, Bartels A, Brokmeier H G, Gerling R, Schimansky F P, Clemens H 2006 *Mater. Sci. Engng. A* **416** 11
- [11] Wegmann G, Gerling R, Schimansky F P, Zhang J X 2002 *Mater. Sci. Engng. A* **329** 99
- [12] Kiselev S P, Zhirov E V 2014 *Intermetallics* **49** 106
- [13] Morris M A, Leboeuf M 1997 *Mater. Sci. Engng. A* **224** 1
- [14] Imayev R M, Gabdullin N K, Salishchev G A, Senkov O N, Imayev Y M, Froes F H 1999 *Acta Mater.* **47** 1809
- [15] Song C F, Fan Q N, Li W, Liu Y L, Zhang L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 063104 (in Chinese) [宋成粉, 樊沁娜, 李蔚, 刘永利, 张林 2011 物理学报 **60** 063104]
- [16] Liu Z G, Wang C Y, Yu T 2014 *Chin. Phys. B* **23** 110208
- [17] Xie Z C, Gao T H, Guo X T, Qin X M, Xie Q 2014 *Physica B* **440** 130
- [18] Xia J H, Liu C S, Cheng Z F, Shi D P 2011 *Physica B* **406** 3938
- [19] Campo A D, Arzt E 2008 *Chem. Rev.* **108** 911
- [20] Zhang C H, Lv N, Zhang X F, Saida A, Xia A G, Ye G X 2011 *Chin. Phys. B* **20** 066103
- [21] Lv N, Pan Q F, Cheng Y, Yang B, Ye G X 2013 *Chin. Phys. B* **22** 116103
- [22] Zhou X Y, Wu W K, He Y Z, Li Y F, Wang L, Li H 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 20658
- [23] Lin C P, Liu X J, Rao Z H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 083601 (in Chinese) [林长鹏, 刘新健, 饶中浩 2015 物理学报 **64** 083601]
- [24] Xu W, Lan Z, Peng B L, Wen R F, Ma X H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 216801 (in Chinese) [徐威, 兰忠, 彭本利, 温荣福, 马学虎 2015 物理学报 **64** 216801]
- [25] Farkas D 1994 *Model. Simul. Mater. Sci. Engng.* **2** 975

Atomical simulations of structural changes of a melted TiAl alloy particle on TiAl (001) substrate*

Qian Ze-Yu Zhang Lin[†]

(Institute of Material Physics and Chemistry, College of Science, Northeastern University, Shenyang 110004, China)

(Received 26 August 2015; revised manuscript received 27 September 2015)

Abstract

Atomic packing structures of a melted TiAl alloy nanoparticle on TiAl(001) substrate at different temperatures are investigated by molecular dynamic simulation within the framework of embedded atom method. In order to obtain a melted TiAl alloy nanoparticle, a larger TiAl alloy bulk in nano-size is initially constructed, subsequently it is heated up to 1500 K and finally melted. A smaller sphere is extracted from the center of the melted bulk to serve as the melted nanoparticle. Periodic boundary conditions are employed in the x and y directions when constructing the sheet-like TiAl alloy substrate. In this simulation, the melted nanoparticle at 1500 K is laid on a TiAl(001) substrate, separately, at 1100, 1000, 900, ..., 200 and 100 K as integral systems, and then they experience rapid solidification process. With the analysis of atomic arrangements of the nanoparticle and substrate surface layer by layer, it is found that temperature greatly affects the atomic packing structure of the nanoparticle. When the temperature of the substrate is 1100 K, most atoms in the nanoparticle disorderly pack, indicating that the nanoparticle is still melted at this temperature. At 1000 K, nearly all the atoms in the nanoparticle occupy TiAl lattice points, indicating that the nanoparticle is already solidified at this temperature. With the substrate temperature decreasing, most atoms in the nanoparticle are still of orderly pack. Meanwhile, a pyramid-like inner region, which takes TiAl(001) crystallographic plane as undersurface and TiAl [101], [101], [011], and [011] crystallographic axis as edges, abruptly emerges in the nanoparticle. Different atomic packing structures are observed inside and outside this region. Atomic layers composed of atoms inside this region are parallel to the (001) crystallographic plane of TiAl alloy substrate while atomic layers composed of atoms outside this region arranges along other different directions, which therefore leads to four interfaces separating the inner region from other parts of the nanoparticle. At low temperatures, this inner region still exists but its volume decreases with temperature decreasing. Besides, more and more atoms in the upper part of the nanoparticle gradually pack disorderly, which makes it more difficult to distinguish the inner region. In addition, the melted nanoparticle has very limited influences on the central and bottom parts of the substrate. However, thermal motion of atoms of substrate surface which touches the nanoparticle is intensified, thus leading to more obvious lattice distortion.

Keywords: molecular dynamics, TiAl alloy, nanoparticle, computer simulation

PACS: 31.15.xv, 61.66.Dk, 62.23.St, 83.10.Rs

DOI: 10.7498/aps.64.243103

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB606403), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51171044), the Natural Science Foundation of Liaoning Province, China (Grant No. 2015020207), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. N140504001).

† Corresponding author. E-mail: zhanglin@imp.neu.edu.cn