

# 晶向和温度对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金断裂行为的影响

寇佩佩<sup>1,2</sup>, 冯瑞成<sup>1,2,✉</sup>, 李海燕<sup>1,2</sup>, 李龙龙<sup>3</sup>

1 兰州理工大学机电工程学院, 兰州 730050

2 兰州理工大学数字制造技术与应用省部共建教育部重点实验室, 兰州 730050

3 金川集团股份有限公司三矿区, 金昌 737100

本工作采用分子动力学方法研究了晶向和温度对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金断裂行为的影响, 主要分析了不同条件下 TiAl-Nb 合金的力学性能及微观缺陷演化。研究表明: 晶向对含孔洞 TiAl-Nb 合金的力学性能有显著影响, 但是对其断裂行为影响较小, 这可能是因为 Nb 元素的加入导致的固溶强化作用大于位错的强化作用; 温度越高, TiAl-Nb 合金的屈服应力、屈服应变及杨氏模量越小, 位错首次在孔洞处形核的时间越提前, 位错数量及位错类型越少, 材料失效时间越提前。

关键词 TiAl-Nb 合金 分子动力学 孔洞 晶向

中图分类号: TG146 文献标识码: A

## Effect of Crystal Orientation and Temperature on Fracture Behaviour of Single Crystal TiAl-Nb Alloys with Void

KOU Peipei<sup>1,2</sup>, FENG Ruicheng<sup>1,2,✉</sup>, LI Haiyan<sup>1,2</sup>, LI Longlong<sup>3</sup>

1 School of Mechanical and Electrical Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China

2 Key Laboratory of Digital Manufacturing Technology and Application, The Ministry of Education, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China

3 Jinchuan Group Co., Ltd. Third Mining Area, Jinchuan 737100, China

The effects of crystal orientation and temperature on the fracture behaviour of single crystal TiAl-Nb alloys with void were studied by molecular dynamics method. The mechanical properties and internal micro-defect evolution of TiAl-Nb alloys under different conditions were analyzed. The results show that, the crystal orientation has a significant effect on the mechanical properties of TiAl-Nb alloys with voids, but has little effect on the fracture behaviour of it, which is maybe due to the reason that the solid solution strengthening effect is greater than that of dislocation because of the addition of Nb element. The higher the temperature lead to the smaller yield stress, yield strain and Young's modulus of TiAl-Nb alloys, the time is earlier when the dislocations first nucleate at the void, the fewer number and type of dislocations, as well as the time of the material failure is earlier.

Key words TiAl-Nb alloys, molecular dynamics, void, crystal orientation

### 0 引言

一般而言, 材料在加工和生产过程中会难以避免地产生空位、位错、孔洞、裂纹等晶体缺陷。它们的存在会引起原子间结合能发生改变, 从而导致材料的力学性质发生改变<sup>[1-2]</sup>。孔洞作为一种体缺陷, 它的存在会严重影响材料的力学性能<sup>[3]</sup>。Su 等<sup>[4]</sup>研究了初始孔洞形状在金属薄膜塑性变形中的作用, 发现初始孔洞形状不仅从宏观角度改变了材料的屈服应力和屈服应变, 而且从纳米角度影响了位错成核和孔洞演化过程。对于金属材料而言, 孔洞的形核、生长及扩展被认为是导致其延性破坏的主要原因<sup>[5]</sup>。然而, 由于晶向和温度等外部因素的改变, 孔洞在材料内部的形核、生长及扩展过程将会表现出不同程度的差异, 从而引起材料力学性能的改变。因此, 有必要研究在不同晶向和温度下孔洞在材料内部的演化过程。

对于各向异性的金属材料来说, 不同晶向下原子排列的疏密程度存在较大差异, 研究不同晶向上材料的拉伸特性有助于更加全面地了解材料的性能。Wang 等<sup>[6]</sup>研究了晶向对含纳米孔洞单晶镍拉伸特性的影响, 结果表明, 不同晶向条件下位错形核的临界应力不同, [100]、[110]和[111]晶向的临

界应力分别为 6.97 GPa、6.77 GPa 和 7.31 GPa。Pushkareva 等<sup>[7]</sup>研究了晶向和局部应变对金属钛中孔洞生长和聚合的影响, 结果发现, 与晶向相比, 孔洞周围的局部应变状态对孔洞形核的影响更大; 对于某些特定晶向, 局部应变状态对其主导滑移系统有显著的影响, 进而影响孔洞的生长和聚合。Adrien 等<sup>[8]</sup>分析了含孔洞工业纯钛的断裂过程, 利用激光钻孔材料和 X 射线成像技术, 对纯钛内部的孔洞生长进行了详细的观察。结果表明: 相比于孔洞间距和材料强度, 晶体取向对孔洞生长的影响更加显著; 对应不同间距的孔洞, 材料的断口形貌存在差异, 较小的孔洞间距更易导致脆性破坏。Peng 等<sup>[9]</sup>研究了单晶铜在晶向 [100]、[110]和[111]上的孔洞聚合各向异性, 结果表明, 在不同的晶体取向, 易滑移系统与加载方向的夹角不同; 孔洞最易聚合的角度也具有各向异性。

不同材料对温度的敏感性因自身特性的不同而存在差异, 因此当温度改变时, 材料性能也将会发生相应的改变。潘客麟等<sup>[10]</sup>在考虑温度效应的情况下研究了球形孔洞的整个动态增长过程, 发现由温度引起的热效应对孔洞的增长时间和增长率均有影响。黄凯鑫等<sup>[11]</sup>研究了温度对单晶镁中孔洞扩展的影响, 结果表明, 体系中的势能和屈服应变均随温度的升高而增大, 屈服强度随温度升高而降低。Jian 等<sup>[12]</sup>

基金项目: 国家自然科学基金 (51865027; 51665030); 兰州理工大学红柳一流学科建设项目

This work was financially supported by the National Natural Science Foundation of China (51865027, 51665030), the Hongliu First-class Discipline Construction Project of Lanzhou University of Technology.

分析了温度和孔洞对单晶铁的力学与微观结构组织转变的影响,发现孔洞可通过非均匀成核降低单晶铁的应力阈值,从而导致 hcp 结构更易形成,并且此种现象在较低温度下更加明显。Feng 等<sup>[13]</sup>分析了不同温度下含一定空位浓度的  $\gamma$ -TiAl 合金的力学性能,结果表明,该合金的极限应力和弹性模量均随温度的升高而降低。

上述学者主要研究了晶向和温度对材料性能的影响,结果表明晶向和温度对材料的力学性能均产生了一定的影响。TiAl 合金以其密度低、抗氧化性能好、比强度高优点而备受关注,被认为是最具发展潜力的高温结构材料之一。而与普通的 TiAl 合金相比, TiAl-Nb 基合金的强度、抗蠕变性能及高温抗氧化性均显著增强,因而具有更好的应用前景。然而近年来有关晶向和温度对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金断裂行为影响的研究还尚未见报道。因此,本工作采用分子动力学研究了不同晶向和温度下,孔洞增长过程中的微观缺陷演化及其与断裂行为之间的关系。

## 1 计算模型和模拟方法

### 1.1 模型的建立

采用 Lammps (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) 软件<sup>[14]</sup>建立初始晶向为 ( $X[100]$ )、( $Y[010]$ )、( $Z[001]$ ) 的单晶 TiAl-Nb 合金模型,其中 Nb 原子作为溶质原子随机置换体系中一定百分比的 Al 原子,然后利用 Atomsk<sup>[15]</sup>软件进行晶向转变,通过扭转晶向得到不同晶向分布的模型,转变前后试样的参数如表 1 所示,最后在模型中心植入球形孔洞。图 1 a 为完美的单晶 TiAl-Nb 合金模型,图 1 b 为含孔洞的 TiAl-Nb 合金模型。模拟过程中选用的具体参数如表 2 所示。

表 1 不同晶向下的试样参数

Table 1 Sample parameters under different crystals orientation

类型	X	Y	Z	原子数目
初始晶向	[100]	[010]	[001]	68 400
转变晶向	[110]	[-110]	[001]	68 400
转变晶向	[111]	[11-2]	[-110]	68 400

表 2 模拟参数

Table 2 The simulation parameters

类型	参数
模型尺寸	18 nm×8 nm×8 nm
模型原子数目	68 400
模拟温度	300 K; 800 K; 1 000 K; 1 100 K; 1 200 K
加载方向	X
加载应变率	$1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$
Nb 的原子分数	3%
孔洞大小, $R$	10 Å
孔洞数量, $N$	1

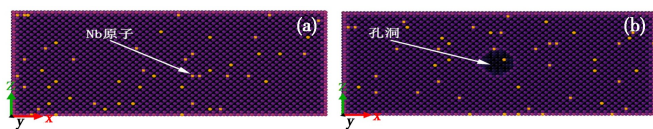


图 1 (a) TiAl-Nb 合金和 (b) 含孔洞 TiAl-Nb 合金的拉伸模型

Fig. 1 The tensile models of (a) TiAl-Nb alloys and (b) TiAl-Nb alloys with void

### 1.2 势函数的选取

本工作选取 EAM 势来描述含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金中原子间的相互作用<sup>[16]</sup>。系统的总能量表示为:

$$E = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \varphi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

式中:方程右边第 1 项是关于电荷密度  $\rho_{oi}$  的嵌入能函数,其中  $\rho_{oi}$  是原子  $i$  处的电子云/电荷密度;第 2 项表示原子  $i$  和  $j$  之间的对势,其中  $r_{ij}$  表示原子间的距离。

### 1.3 模型计算与方法

拉伸模拟过程中采用恒定工程应变率加载方式;利用 Velocity-Verlet 算法计算原子的运动轨迹;采用周期性边界条件,以减小尺寸效应带来的影响,主要包括弛豫和拉伸两个阶段。将含孔洞的单晶 TiAl-Nb 合金在 NVT 系综下弛豫 200 ps 以达到新的平衡状态,使体系中的总能量达到稳定值,为加载阶段营造一个平衡状态;弛豫结束后沿 X 方向加载, Y 和 Z 方向的压强分别由对应方向的应力分量控制,对加载结果影响较小,可忽略不计。加载过程中通过在 Ovito (Open Visualization Tool)<sup>[17]</sup>中设置相应的中心对称参数观察试样中各种缺陷的形成与扩展,其参数表达式为<sup>[18]</sup>:

$$P = \sum_i |R_i + R_{i+6}|^2 \quad (2)$$

式中: $R_i$  和  $R_{i+6}$  是中心原子到最近原子的矢量,分别对应于每对近邻原子。在 TiAl-Nb 合金中一个原子的中心对称参数值从  $0 \text{ \AA}^2$  可增加到  $25 \text{ \AA}^2$ ,分别表示这个原子处于完美的晶格结构、位错核、部分位错、孪晶、堆垛层错或晶体的自由表面。因此,从中心对称参数中可以得到缺陷形成及演化的相关信息<sup>[19]</sup>。

材料在服役过程中会受到外加载荷作用,当应力达到一定值时,应力有微小的增加而应变却急剧增长,导致材料发生屈服,使材料发生屈服时的正应力就是材料的屈服应力。因此,材料在服役过程中受到外加非均匀载荷或交替循环载荷的作用,其内部各原子难以保持平衡状态,而且每个原子上的应力状态有很大差异。在微观尺度下进行分子动力学研究,可以用二阶张量表示任意一点上原子的应力状态,其表达式如下:

$$\sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad (3)$$

式中: $\sigma_{ij}$  表示在  $i$  平面上平行于  $j$  方向的分量; $\sigma_{ij}(i=j)$  为正应力, $\sigma_{ij}(i \neq j)$  为切应力。

每次加载结束后的模型长度相比于未加载前模型长度的伸缩量,即单位伸缩量或相对伸缩量,称为正应变。本工作研究的即为正应变,用  $\varepsilon$  表示:

$$\varepsilon = \frac{\Delta l}{l} \quad (4)$$

式中: $\Delta l$  为变化的长度,  $l$  为材料未受力时的初始长度。

位错的存在与运动会引起材料变形,并且影响材料的塑性屈服机制。通常,过饱和空位盘的崩塌、Frank-Read 位错源增殖、交滑移以及晶体的不均匀塑性变形等都会引起位错的形核<sup>[20]</sup>。位错运动主要包括两种基本类型:滑移与攀移,其

中滑移最为常见。位错滑移时需要的一种特征切应力称为临界剪切应力;当位错启动滑移的剪切应力大于临界剪切应力时,位错开始滑移。在外加载荷的作用下,由于位错的运动,材料内部将会产生塑性应变,塑性应变与材料所承受的外加应力之间的关系比较复杂,它与加载温度和材料内部的微观演化等因素均密切相关。

## 2 晶向对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金断裂行为的影响

在不同晶向下,单晶 TiAl-Nb 合金中可供位错运动的滑移系统数量并不相同,由此将会导致体系中位错数量不同,而位错数量的差异又会对材料的力学性能产生不同的影响。因此,为了更加全面地了解单晶 TiAl-Nb 合金的力学性能,得到了沿不同晶向拉伸下合金的应力-应变曲线,如图 2 所示。沿不同晶向拉伸时应力-应变曲线在弹性阶段均呈线性关系,随应变的增大,应力逐渐达到最大值,最终位错的形核与孔洞的长大导致 TiAl-Nb 合金断裂。为了进一步研究晶向对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金力学性能的影响,计算了含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金在不同晶向上的杨氏模量和剪切模量,如表 3 所示。这里的杨氏模量是指模型中位错首次形核时的杨氏模量,杨氏模量与剪切模量之间的关系如式(5)所示:

$$G = E / [2(1 + \nu)] \quad (5)$$

式中: $G$ 为剪切模量; $E$ 为杨氏模量; $\nu$ 为泊松比,这里取  $\nu = 0.23$ 。

表 3 含孔洞 TiAl-Nb 合金在三个晶向上的力学性能  
Table 3 Mechanical properties of TiAl-Nb alloys with void in three crystal directions

晶向	[100]	[110]	[111]
杨氏模量/GPa	220.71	223.12	216.14
剪切模量/GPa	89.48	90.70	87.86

由表 3 中数据可知:含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金在不同晶向上表现出较为明显的各向异性,并且在 [110] 晶向上 TiAl-Nb 合金的弹性模量与剪切模量最大,具有良好的力学性能。

不同晶向下含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的断裂形式基本一致,这说明晶向对含孔洞 TiAl-Nb 合金的断裂形式影响较小。这可能是因为体系中位错的强化作用与由于 Nb 原子的引入而导致的固溶强化作用存在竞争机制。这种竞争机制可以用材料发生塑性变形直至断裂过程中位错运动所需的流变应力和固溶强化过程中位错通过 Nb 原子所需的临界切应力来说明。流变应力的数学表达式为<sup>[21]</sup>:

$$\sigma = \sigma_0 + \alpha G b \rho^{1/2} \quad (6)$$

式中: $\alpha$ 为常数,一般为 0.2~0.5; $G$ 为剪切模量; $b$ 为柏氏矢量; $\rho$ 为位错密度。

固溶强化过程中所需的临界切应力  $\tau_0$  可由式(7)给出<sup>[22]</sup>:

$$\tau_0 = G b / d \quad (7)$$

式中: $d$ 为两个相邻 Nb 原子之间的距离,其表达式为:

$$d = (n_p)^{-1/3} \quad (8)$$

式中: $n_p$ 为 Nb 原子的浓度,本工作中 Nb 为 3%(原子分数)。

此时,将式(7)与式(6)作比得式(9):

$$\frac{\tau_0}{\sigma} = \frac{G b / d}{\sigma_0 + \alpha G b \rho^{1/2}} \quad (9)$$

将 [100]、[110] 和 [111] 晶向下屈服应力处对应的位错密度  $4.74 \times 10^9 \text{ mm}^{-2}$ 、 $3.30 \times 10^9 \text{ mm}^{-2}$  和  $2.26 \times 10^9 \text{ mm}^{-2}$  分别代入式(9),发现无论在哪个晶向上,最终得到的  $\tau_0/\sigma$  数值均大于 1。这说明在含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金中,因为 Nb 原子的引入而导致的固溶强化作用大于位错的强化作用,所以不同晶向下的位错滑移系统不同而导致位错数量的差异对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的断裂形式影响较小。

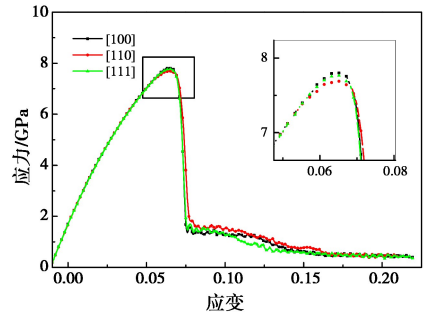


图 2 不同晶向下含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的应力-应变曲线  
Fig.2 Stress-strain curves of single crystal TiAl-Nb alloys with void in different crystals orientation

## 3 温度对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金断裂行为的影响

### 3.1 不同温度下含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的应力-应变曲线分析

Rawat<sup>[23]</sup> 研究发现孔洞的形核和生长与温度有关,随温度的升高,孔洞形核与生长的应力阈值逐渐下降。因此研究温度对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金力学性能的影响具有重要的意义。一般情况下,TiAl 合金在室温下呈现脆性;800~1 000 K 时,随着温度的升高,TiAl 合金逐渐发生脆性转变;1 023~1 223 K 为其蠕变极限温度。这里选取 300 K、800 K、1 000 K、1 100 K 和 1 200 K 并沿 [100] 晶向对合金进行拉伸模拟。图 3 为不同温度下含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的应力-应变曲线。由图 3 可知,应力随应变的增加均表现出先增大后减小再逐渐趋于平稳的趋势。然而,含孔洞 TiAl-Nb 合金的屈服应力、屈服应变以及杨氏模量(即曲线斜率)随温度的升高均出现了不同程度的变化。图 4 更加直观地表示了不同温度下,含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的屈服应力和屈服应变。随温度的升高,TiAl-Nb 合金的屈服应力和屈服应变依次减小,这是由于随温度升高,材料内部原子的热激活能量增大,原子易发生迁移,降低了位错滑移的临界剪切应力,使位错易于滑移,从而降低了材料的屈服应力和屈服应变。此外,随温度升高,TiAl-Nb 合金的杨氏模量也发生了相应的变化。温度越高,TiAl-Nb 合金的杨氏模量越小,这是因为温度升高时,材料内部原子运动加剧,原子键结合能力减弱,材料抵抗塑性变形的能力也随之降低。因此,温度越高,TiAl-Nb 合金越易发生塑性变形,甚至失效。

图 5 为含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的弹性模量随温度变化的拟合曲线,其杨氏模量随温度的升高而依次降低,这与徐



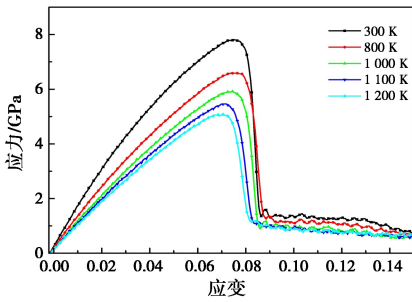


图3 不同温度下含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的应力-应变曲线(电子版为彩图)

Fig.3 Stress-strain curves of single crystal TiAl-Nb alloys with void under different temperatures

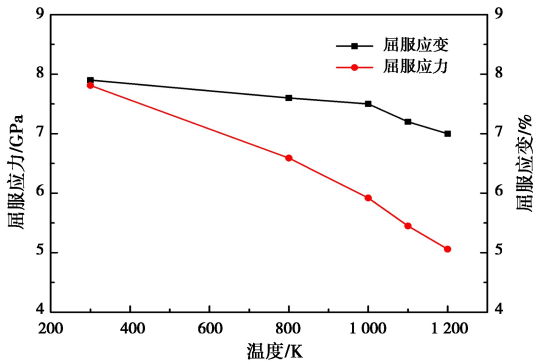


图4 不同温度下含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的屈服应力和屈服应变

Fig.4 The yield stress and yield strain of single-crystal TiAl-Nb alloys with void under different temperatures

志东等<sup>[24]</sup>得出的结论一致。因此,在研究合金杨氏模量的变化过程中应该考虑温度的影响。刘彤等<sup>[25]</sup>也研究了合金弹性模量随温度的变化关系,其中低温下合金弹性模量与温度的关系为:

$$E = E_0 e^{-m\alpha_0(1+bT/2)T} \quad (10)$$

式中: $E_0$  是热力学温度为零时的弹性模量; $m$  和  $b$  均为常数; $\alpha_0$  为线膨胀系数。

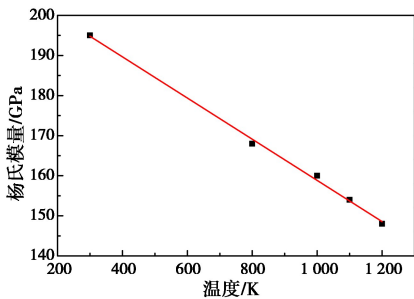


图5 不同温度下含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的杨氏模量

Fig.5 Elastic modulus of single crystal TiAl-Nb alloys with void under different temperatures

高温下含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的弹性模量与温度的关系为:

$$E = \frac{1}{1 + A e^{-\Delta G/(kT)}} E_c \quad (11)$$

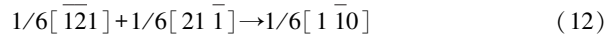
式中: $A$  为常数; $\Delta G$  为位错用最小激活能从其平衡位置等温移至鞍点位置时系统的 Gibbs 自由能变化量; $k$  为波尔兹曼常数; $E_c$  为初始温度时材料的弹性模量。

综合式(10)和式(11)可以看出,无论是在高温下还是低

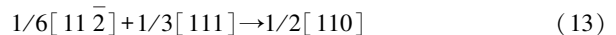
温下,材料的杨氏模量均随温度的升高而降低。这主要是因为当温度升高时,体系中原子运动加剧,原子键结合力减弱,材料抵抗塑性变形的能力降低,故材料的杨氏模量随温度的升高而降低。

### 3.2 不同温度下含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的断裂过程分析

图6为300 K下,含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金弛豫完成后的应力分布图。经充分弛豫后,合金整个体系中的应力分布较为均匀,但是孔洞处的应力高度集中,此为位错的形核提供了条件。图7为含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金在300 K下的断裂过程及缺陷演化,其中图7a<sub>1</sub>—d<sub>1</sub>为断裂过程,图中颜色表示 TiAl-Nb 合金所受应力状态,蓝色表示所受的应力为压应力,红色表示所受的应力为拉应力;图7a<sub>2</sub>—d<sub>2</sub>分别对应图7a<sub>1</sub>—d<sub>1</sub>的缺陷演化过程。在加载过程中,应力分布逐渐变得不再均匀,这主要是因为拉伸作用下体系内部的应力较为集中,有大量的应力需要被释放,并且体系内部的微观缺陷不断地发生着各种变化。当  $t = 79.6$  ps 时,孔洞的形态并无明显的改变,但是孔洞周围的应力集中区域扩大,如图7a<sub>1</sub>所示。此时,位错首次在孔洞表面形核,体系内部其他位置暂无位错形核,如图7a<sub>2</sub>所示,并且其中的  $1/6[\bar{1}21]$  和  $1/6[21\bar{1}]$  型肖克莱不全位错反应生成了  $1/6[1\bar{1}0]$  型压杆位错,反应式为:



当  $t = 100.2$  ps 时,孔洞长大,孔洞周围的应力集中区域进一步扩大,可供位错形核的位置增多,如图7b<sub>1</sub>所示。此时孔洞周围产生的位错数量和位错类型也增多,除了上述出现的肖克莱不全位错和压杆位错外,还产生了部分弗兰克位错和全位错以及大片的堆垛层错,如图7b<sub>2</sub>所示,其中  $1/6[11\bar{2}]$  型肖克莱不全位错与  $1/3[111]$  型弗兰克位错反应生成了一个  $1/2[110]$  型全位错,反应式为:



随着拉伸的进行,  $t = 120$  ps 时孔洞被继续拉大,并且在孔洞表面出现了微裂纹,如图7c<sub>1</sub>所示。大量的位错和堆垛层错在孔洞和微裂纹处终结,位错和堆垛层错数量明显减少,如图7c<sub>2</sub>所示。当  $t = 140$  ps 时,上述微裂纹扩展的同时又产生了新裂纹,两个裂纹同时扩展,为位错的湮灭提供了条件,位错数量进一步减少,如图7d<sub>1</sub>所示。拉伸后期,两个裂纹贯穿,最终材料断裂。

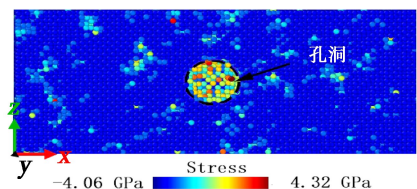


图6 含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金在300 K时的应力分布(电子版为彩图)

Fig.6 The stress distribution of single crystal TiAl-Nb alloys with void at 300 K

1000 K 时,含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的断裂过程和微观缺陷演化如图8所示,其中图8a<sub>1</sub>—d<sub>1</sub>为试样的断裂过程,图8a<sub>2</sub>—d<sub>2</sub>分别对应图8a<sub>1</sub>—d<sub>1</sub>的缺陷演化。当  $t = 42.7$  ps

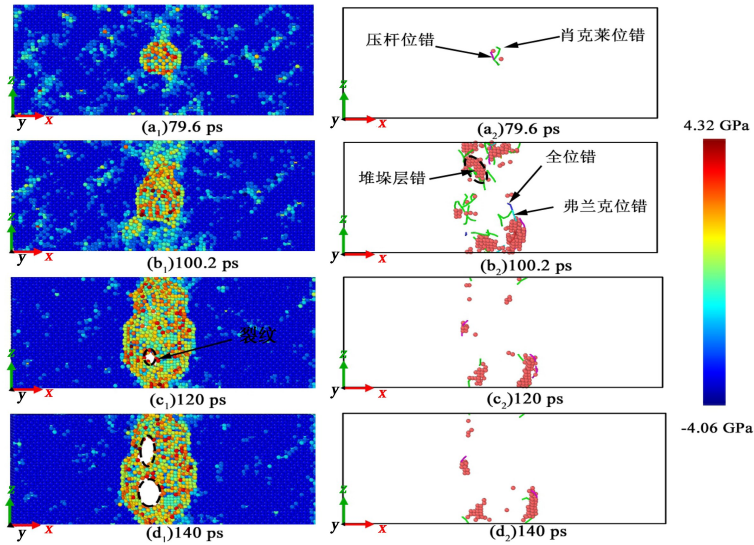


图7 含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金在 300 K 时的断裂过程及缺陷演化(电子版为彩图)  
Fig.7 Fracture process and defect evolution of single crystal TiAl-Nb alloys with void at 300 K

时,试样的断裂过程与 300 K 时相似,由于孔洞处应力集中导致位错首先在孔洞表面形核,体系内部其他位置暂有位错形核,如图 8a<sub>2</sub> 所示。但是当温度上升到 1 000 K 时,位错首次在孔洞表面形核的时间相比于 300 K 时有所提前,这说明在较高温度下,含孔洞的单晶 TiAl-Nb 合金更易发生塑性变形。当  $t = 72.8$  ps 时,孔洞周围出现了较为明显的应力集中区域,更多的位错在此区域内形核,如图 8b<sub>2</sub> 所示,但是并未出现堆垛层错,且位错数量与位错类型也比 300 K 时少,只出现了肖克莱不全位错。这一方面是因为在拉伸过程中产

生的正负位错相遇发生湮灭,导致位错数量减少;另一方面是因为随温度的升高,体系内原子之间的热运动加剧,体系中产生的位错更易向孔洞处运动,最终在孔洞处终结。另外,应力集中区域得到了一定的扩散,体系中的一部分应力被释放,致使体系内部分区域的应力未能达到位错形核所需的剪切应力。当  $t = 101.1$  ps 时,孔洞长大的同时出现了微裂纹,更多的位错在此处终结,位错数量显著减少,如图 8c<sub>2</sub> 所示。 $t = 138.5$  ps 时,在拉伸的作用下孔洞进一步长大并且裂纹也随之扩展,位错数量进一步减少,材料失效,如图 8d<sub>2</sub> 所示。

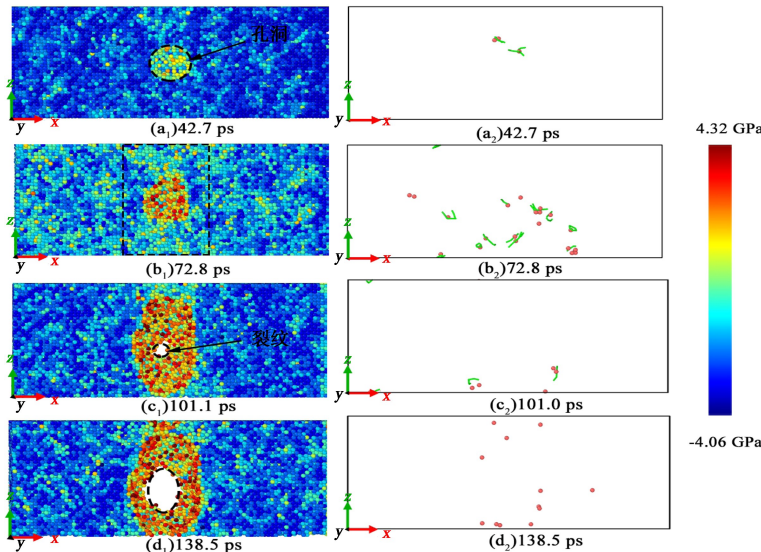


图8 含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金在 1 000 K 下的断裂过程及缺陷演化(电子版为彩图)  
Fig.8 Fracture process and defect evolution of single crystal TiAl-Nb alloys with void at 1 000 K

当温度为 800 K、1 100 K 及 1 200 K 时,含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的断裂过程和微观缺陷演化与上述过程相似。不同的地方在于,随温度的升高体系中位错首次在孔洞处形核的时间提前,位错数量和位错类型减少,材料失效时间提前。

#### 4 结论

(1) 晶向对含孔洞 TiAl-Nb 合金的力学性能有显著影

响,其中 TiAl-Nb 合金在 [110] 晶向上表现出较好的力学性能;晶向对含孔洞单晶 TiAl-Nb 合金的断裂形式影响较小,这可能是因为在体系中位错的强化作用与由于 Nb 原子的引入而导致的固溶强化作用存在竞争机制,并且固溶强化作用大于位错的强化作用。

(2) 随温度的升高,含孔洞 TiAl-Nb 合金的屈服应力、屈服应变及杨氏模量均依次减小,这是因为当温度升高时,体

系内原子的热激活能量增大,导致原子运动加剧,原子键结合能力减弱,材料抵抗塑性变形的能力也随之降低。因此,温度越高,含孔洞 TiAl-Nb 合金越易发生塑性变形,甚至失效。

(3) 随温度的升高,体系内原子间的热运动加剧,体系中产生的位错更易向孔洞处运动,最终在孔洞处终结。另外,应力集中区域得到了一定的扩散,体系中的一部分应力被释放,致使体系内部分区域的应力未能达到位错形核所需的剪切应力。因此,温度越高,位错首次在孔洞处形核的时间提前,位错数量及位错类型越少,材料失效时间提前。

## 参考文献

- Feng R C, Wang M M, Li H Y, et al. *Materials*, 2019, 12(1), 184.
- Zhang M Y, Zhong M, Yuan S, et al. In: *Materials Science Forum of 2018. Switzerland*, 2018, pp. 627.
- Jun Y U, Mao D K, Ya H L, et al. *Foundry Technology*, 2018, 39(11), 196.
- Su Y, Xu S. *Materials Science & Engineering A*, 2016, 678, 153.
- Zhang Y, Jiang S. *Philosophical Magazine*, 2017, 97(30), 2772.
- Wang J P, Yue Z F, Wen Z X, et al. *Computational Materials Science*, 2017, 132, 116.
- Pushkareva M, Sket F, Segurado J, et al. *Materials Science and Engineering A*, 2019, 760, 258.
- Adrien J, Pushkareva M, Maire E, et al. *Materials Science and Engineering, A*, 2016, 1.
- Peng X, Zhu W, Chen K, et al. *Journal of Applied Physics*, 2016, 119(16), 1.
- Pan K L, Wang Y G. *Journal of Tongji University*, 1998, 26(2), 1 (in Chinese).  
潘客麟, 王远功. *同济大学学报*, 1998, 26(2), 1.
- Huang K X, Yao J P, Hu Q Y, et al. *Journal of Material Heat Treatment*, 2018, 39(12), 121 (in Chinese).  
黄凯鑫, 尧军平, 胡启耀, 等. *材料热处理学报*, 2018, 39(12), 121.
- Jian L S, Pei W, Feng G Z, et al. *Journal of Physics, Condensed Matter*, 2018, 30(25), 1.
- Feng R, Cao H, Li H, et al. *High Temperature Materials & Processes*, 2018, 37(2), 113.
- Feng R C, Qi Y N, Zhu Z X, et al. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, Doi: 10.1007/s12541-019-00249-z.
- Hirel P. *Computer Physics Communications*, 2015, 197, 212.
- Zope R R, Mishin Y. *Physical Review B*, 2003, 68(2), 366.
- Feng R C, Qiao H Y, Zhu Z X, et al. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2019(5), 1559 (in Chinese).  
冯瑞成, 乔海洋, 朱宗孝, 等. *稀有金属材料与工程*, 2019(5), 1559.
- Wang Q L, Zhang C F, Wu M P, et al. *China Mechanical Engineering*, 2019, 30(16), 1959 (in Chinese).  
王全龙, 张超锋, 武美萍, 等. *中国机械工程*, 2019, 30(16), 1959.
- Tang F L, Cai H M, Bao H W, et al. *Computational Materials Science*, 2014, 84, 232.
- Irvine D, Marzari N. *Springer Berlin*, 2005, 24, 497.
- Smallman R E, Ngan A H W. *Modern Physical Metallurgy*, 2014, 13(2), 121.
- Irvine D, Marzari N. *Springer Berlin*, 2005, 24, 497.
- Rawat S, Warriar M, Chaturvedi S, et al. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2011, 19(2), 1.
- Xu Z D, Fan Z L. *Journal of Southwest Jiaotong University*, 1993, 28(2), 87 (in Chinese).  
徐志东, 范子亮. *西南交通大学学报*, 1993, 28(2), 87.
- Liu T, Liu M S. *Mechanical Engineering Materials*, 2014, 38(3), 85 (in Chinese).  
刘彤, 刘敏珊. *机械工程材料*, 2014, 38(3), 85.  
(责任编辑 向秀洮)



**Peipei Kou** is a postgraduate from the Lanzhou University of Technology. Her research concerns structure and material strength.

寇佩佩, 兰州理工大学硕士研究生, 主要研究结构和材料强度。



**Ruicheng Feng** is an associate professor and doctor from the Lanzhou University of Technology. His research concerns processing surface integrity assessment, structure and material strength.

冯瑞成, 兰州理工大学博士、副教授, 主要从事加工表面完整性评价、结构和材料强度的研究。