

纳米压痕下孪晶钛铝合金性能的模拟研究

□ 杨 星¹ □ 芮执元^{1,2} □ 付 蓉¹ □ 剡昌锋^{1,2} □ 文 洮³

1 兰州理工大学 机电工程学院 兰州 730050

2 兰州理工大学 有色冶金新装备教育部工程研究中心 兰州 730050

3 甘肃省计算中心 兰州 730030

摘 要: 通过分子动力学方法对孪晶钛铝合金材料进行纳米压痕模拟,观察压痕过程中孪晶钛铝合金材料的位错演化和力学性能。模拟研究表明:在压痕前期,孪晶界阻碍位错运动,位错与位错形核之间的相互反应使材料的硬度提高;在压痕中后期,孪晶界吸收位错,使材料的硬度降低;压头距离孪晶界较远时,孪晶界对压痕过程的影响程度显著减小,且靠近孪晶界位置材料的弹性模量较大。

关键词: 钛铝合金 纳米压痕 性能 研究

中图分类号: TH142.2 文献标志码: A 文章编号: 1000-4998(2020)08-0054-04

Abstract: The nano-indentation simulation of the twin titanium-aluminum alloy material was performed by the molecular dynamics approach, and the dislocation evolution and the mechanical properties of the twin titanium-aluminum alloy material during the indentation process were observed. The simulation study shows that in the early stage of indentation, the twin boundary hinders the dislocation motion, and the mutual reaction between dislocations and dislocation nucleus increases the hardness of the material. In the middle and late stages of indentation, the twin boundary absorbs dislocations and the hardness of the material is reduced. When the indenter is far away from the twin boundary, the influence of the twin boundary on the indentation process is significantly reduced, and the elastic modulus of the material near the twin boundary is greater.

Keywords: Titanium-aluminum Alloy Nano-indentation Performance Study

1 研究背景

共格孪晶界是一种特殊的晶界结构,孪晶界两侧的晶粒是对称的,这种特殊的结构对钛铝合金的性能有重要影响。对孪晶钛铝合金材料的研究发现,具有较高能量的晶界结构使晶界附近区域的力学性能较为优异,并且具有很强的抗边缘位错能力^[1]。晶界既可以作为位错障碍阻止位错扩展,又可以作为位错源吸收位错^[2]。笔者采用分子动力学方法模拟孪晶钛铝合金材料的纳米压痕过程,研究在非均匀载荷下钛铝合金材料的孪晶界对压痕过程材料力学性能的影响。

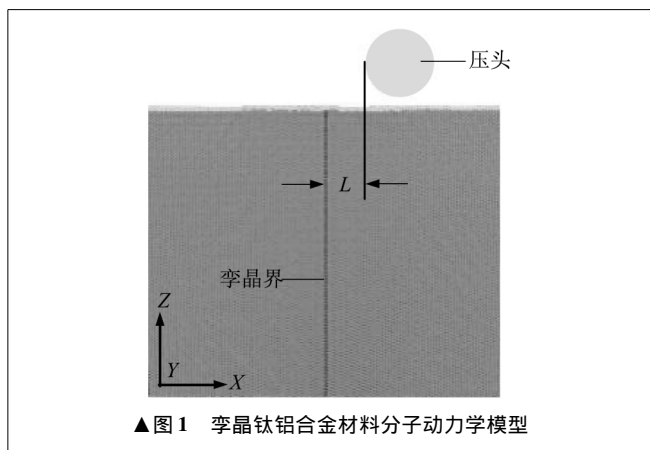
2 模拟方法

孪晶钛铝合金材料在纳米压痕下的分子动力学模型如图1所示。笔者建立的孪晶钛铝合金材料模型尺寸为22.24 nm × 30.52 nm × 24.89 nm,总原子数为1 000 000,刚化压头半径为3 nm。压痕过程参数中,压头的加载和卸载速度为50 m/s,加载、卸载分别沿Z轴负方向和正方向。系统采用1 fs积分步长,选取微

正则系综^[3],沿Z轴负方向,即压头加载方向附加自由边界条件,沿X轴和Y轴方向附加周期性边界条件。试件底部建立厚度为0.5 nm的边界层,在边界层上部建立厚度为3 nm的恒温层,通过速度标定法对系统的温度进行有效控制^[4]。铝原子和钛原子之间的相互作用选用嵌入势来描述,碳原子和钛原子、碳原子之间的势函数选用兰纳-琼斯势^[5]。在研究中分别对压头边缘与孪晶界距离L为0.5 nm、1.5 nm、2.5 nm、4 nm四个位置进行压痕模拟。

3 结果分析

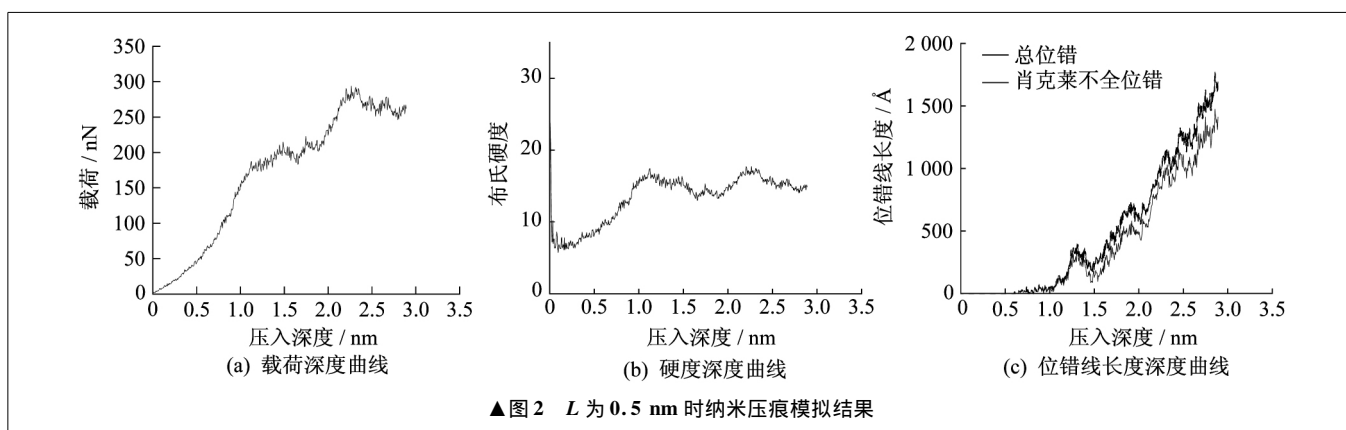
近年来研究显示,对钛铝合金材料进行试验或模拟时,载荷曲线下降的原因通常有位错成核、位错环产生和发射、晶界吸收或发射位错、位错大量湮灭^[6-10]。但以上研究没有考虑载荷深度曲线呈现出一定的周期性和锯齿状。在模拟中出现载荷和硬度小幅减小,原因包括压头下方原子崩塌,导致能量释放;孪晶界阻碍位错的扩展,导致材料硬度提高;孪晶界吸收位错时,载荷和硬度均会减小。



▲图1 孪晶钛铝合金材料分子动力学模型

L 为 0.5 nm 时纳米压痕模拟结果如图 2 所示。

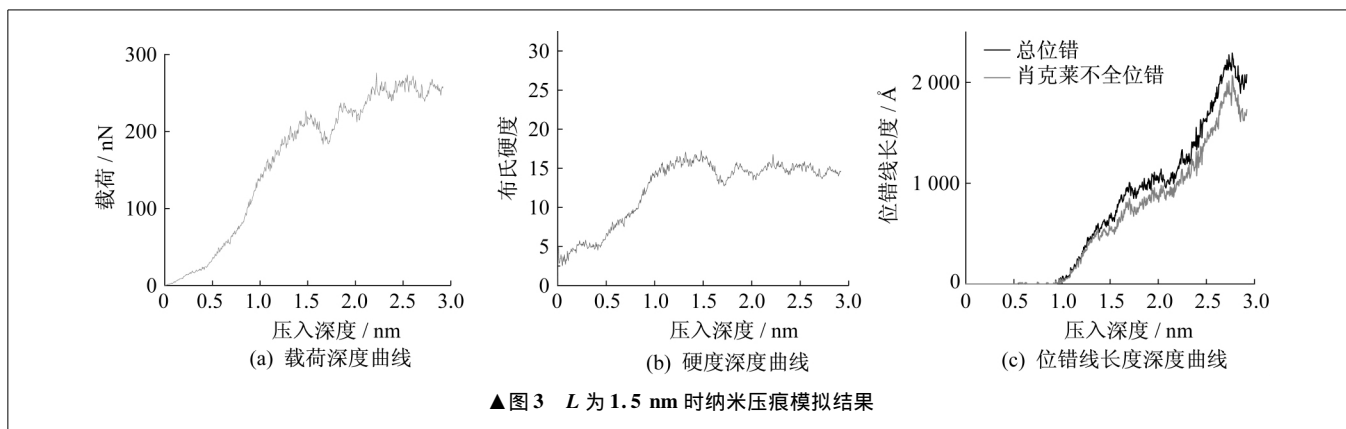
由图 2 分析可知,压头距离孪晶界 0.5 nm,压入深度为 1.12 nm 时,硬度达到第一个峰值。载荷逐渐增大,在压入深度为 1.48 nm 时,载荷达到第一个峰值。随着压头的继续下压,当压入深度为 1.63 nm 时,硬度降低至谷值,载荷之后也随之减小。压入深度为 2.25 nm 时,硬度达到第二个峰值,随后开始降低。载荷达到第二个峰值后,也随之减小。载荷随硬度的变化而变化,所以引起载荷变化的主要原因为材料硬度的变化。在纳米压痕模拟中,通过位错提取算法统计分子动力学模拟压痕过程不同类型位错的伯格矢量及位错线长度^[1]。随着压头压入深度的增大,位错线总长度整体呈现出增大的趋势,且位错以肖克莱不全位错反应为主。



▲图2 L 为 0.5 nm 时纳米压痕模拟结果

L 为 1.5 nm 时纳米压痕模拟结果如图 3 所示。由图 3 分析可知,压头距离孪晶界 1.5 nm,压入深度为 0.55 ~ 1.5 nm 时,载荷与硬度不断增大,纵向比较位错,此时肖克莱不全位错在材料内部扩展缓慢。压入深度为 1 ~ 1.5 nm 时,载荷达到第一个峰值,硬度也

在不断提高,原因是位错核和位错之间的相互反应使材料得到硬化。压入深度为 1.5 ~ 1.7 nm 时,载荷和硬度开始减小,产生这一现象的原因是位错环的滑移。压入深度为 1.7 ~ 3.0 nm 时,载荷不断增大,硬度则趋于稳定。



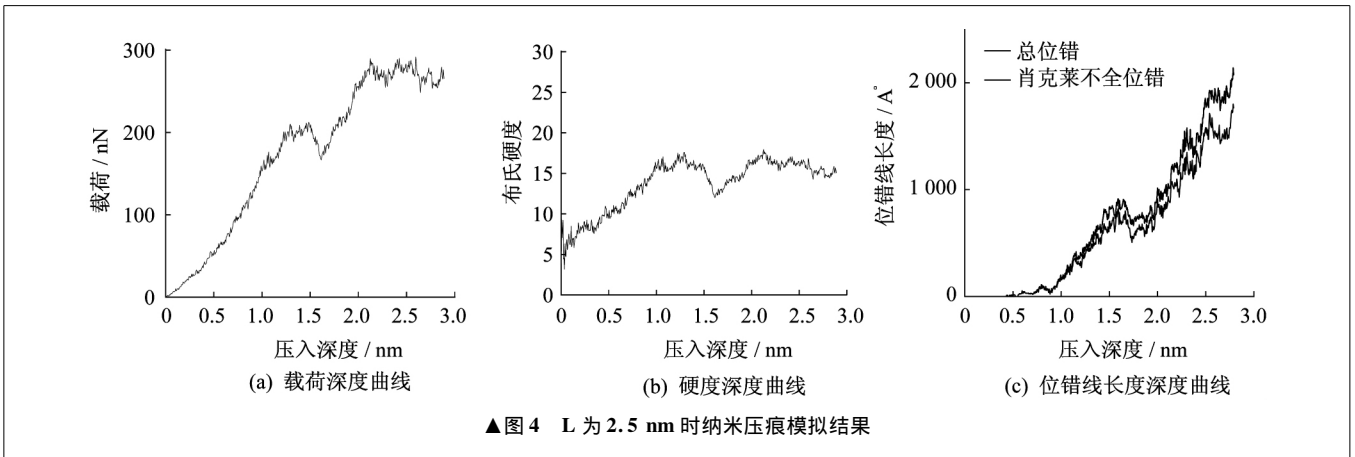
▲图3 L 为 1.5 nm 时纳米压痕模拟结果

L 为 2.5 nm 时纳米压痕模拟结果如图 4 所示。由图 4 分析可知,压头距离孪晶界 2.5 nm,压入深度为 0 ~ 1.49 nm 时,载荷不断增大,达到第一个峰值,硬度则在压入深度为 1.27 nm 时达到第一个峰值。压入深度为 1.61 nm 时,载荷和硬度均减小至谷值,此时肖

克莱不全位错线长度也处于减小过程中,原因是位错环的滑移带走了部分原子,使材料的载荷和硬度减小。压入深度为 1.61 ~ 2.2 nm 时,载荷与硬度开始增大,产生这一现象的原因是孪晶界阻碍了位错运动,压头下方位错核与位错之间相互反应的程度增大。压入深

度为 2.2 ~ 3 nm 时,总位错长度不断增大,载荷趋于稳定,而硬度相比第一个峰值有所降低,产生这一现象的

原因是在压痕后期孪晶界开始吸收位错,使材料的硬度降低。



L 为 4 nm 时纳米压痕模拟结果如图 5 所示。由图 5 分析可知,压头距离孪晶界 4 nm,压入深度为 1.31 ~ 1.62 nm 时,载荷和硬度减小,肖克莱不全位错线长度缓慢增大,产生这一现象的原因与位错环的滑移有关。

由式(1) ~ 式(3)得出四个不同压头位置下孪晶钛铝合金材料的弹性模量,见表 1。

表1 孪晶钛铝合金材料弹性模量

L/nm	0.5	1.5	2.5	4
弹性模量/GPa	190.8	184.7	180.9	175.8

通过以上四组距离孪晶界不同位置时的纳米压痕模拟,发现孪晶界对压痕过程中基体材料的力学性能有较为明显的影响,为此对四个不同压痕位置下孪晶钛铝合金材料的弹性模量 E 进行计算。

由表 1 可以看出,压头与孪晶界的距离最近时,弹性模量达到最大值,原因是孪晶界对压头下的位错演化有一定影响,在一定条件下孪晶界会阻碍位错扩展,孪晶界附近区域的材料弹性模量较大。压头在距离孪晶界 4 nm 时,由于孪晶界对纳米压痕过程影响程度降低,所得弹性模量数值约等于单晶钛铝合金材料弹性模量的数值。

$$H = P_{\max} / A \quad (1)$$

$$E_r = \frac{\sqrt{\pi} S}{2\beta \sqrt{A}} \quad (2)$$

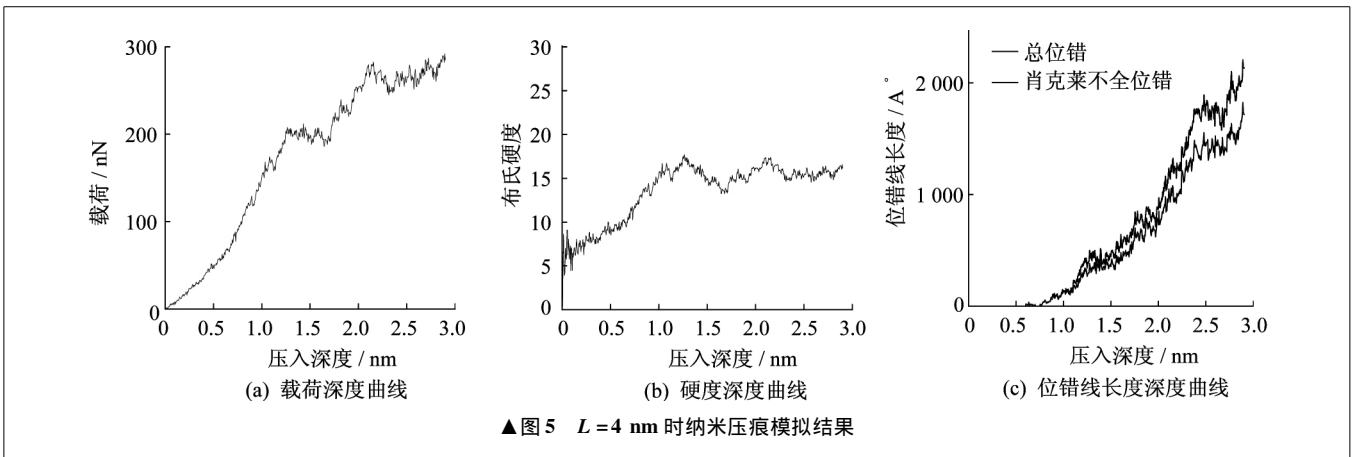
$$\frac{1}{E_r} = \frac{1 - \nu^2}{E} + \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} \quad (3)$$

此外,靠近孪晶界区和远离孪晶界区孪晶钛铝合金材料的弹性模量结果与其它通过模拟和试验所得结果相符^[12-14]。

式中: A 为压头与孪晶钛铝合金材料的接触面积; P_{max} 为压痕过程中的最大载荷; H 为压头压入深度; β 为与压头几何形状相关的常数,球型压头 β 取 1; S 为弹性接触韧度; E_r 为孪晶约化弹性模量; ν 为孪晶钛铝合金材料的泊松比; E₁ 为压头的弹性模量; ν₁ 为压头的泊松比。

4 结束语

笔者通过模拟孪晶钛铝合金材料的纳米压痕过程,对孪晶钛铝合金材料的性能进行了研究。在纳米



压痕过程中, 孪晶界吸收位错的运动和位错环的滑移, 使钛铝合金材料的硬度降低; 位错与位错核之间的相互反应和孪晶界阻碍位错运动, 使钛铝合金材料的硬度提高。

参考文献

- [1] 李恒城. γ -TiAl 基合金塑性变形中孔洞与界面交互作用的 MD 研究[D]. 湘潭: 湘潭大学 2018.
- [2] 刘颖超. 晶界对双晶 γ -TiAl 力学性能影响的计算机模拟[D]. 南京: 南京航空航天大学 2018.
- [3] 张俊杰. 基于分子动力学的晶体铜纳米机械加工表层形成机理研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学 2011.
- [4] 王亚锋. 基于分子动力学模拟的氮化硼热导率主动调控方法的研究[D]. 南京: 东南大学 2017.
- [5] 张治国. 单晶材料纳米级切削机理的研究[D]. 天津: 天津大学 2009.
- [6] 曲洪磊. γ -TiAl 单晶纳米杆拉伸变形的分子动力学研究[D]. 合肥: 中国科学技术大学 2008.
- [7] 付蓉. 单晶 γ -TiAl 合金裂纹扩展机理的分子动力学研究[D]. 兰州: 兰州理工大学 2015.
- [8] 奉新锋. 晶内纳米孔洞对 γ -TiAl 多晶拉伸变形影响的 MD 模拟[D]. 湘潭: 湘潭大学 2016.

- [9] 李纯良. γ -TiAl 多晶拉伸变形中晶界与含孔洞晶界力学行为的 MD 研究[D]. 湘潭: 湘潭大学 2016.
- [10] 罗德春, 芮执元, 曹卉, 等. 单晶 γ -TiAl 中孔洞位置对裂纹扩展影响的分子动力学模拟[J]. 功能材料 2016, 47(6): 6136-6141.
- [11] 刘启涛. 单晶铜纳米压痕过程中位错演化的分子动力学研究[D]. 武汉: 华中科技大学 2018.
- [12] 芮执元, 曹卉, 罗德春, 等. 单晶 γ -TiAl 中孔洞尺寸对裂纹扩展影响的分子动力学模拟[J]. 稀有金属材料与工程 2017, 46(9): 2505-2511.
- [13] 谢鑫强. 取向与晶界影响 γ -TiAl 合金位错与孪生启动的 FEM 模拟[D]. 湘潭: 湘潭大学 2015.
- [14] 宋成粉. 冷凝过程形成 TiAl 合金薄膜的分子动力学计算研究[D]. 沈阳: 东北大学 2010.

△

收稿日期: 2020 年 3 月

作者简介:

杨星(1996—) 男, 硕士研究生, 主要研究方向为钛铝合金疲劳强度; 芮执元(1962—) 男, 教授, 主要研究方向为机械强度理论。

(编辑 平 平)

(上接第 39 页)

- [12] 杨培青, 管义锋. 具有不同尾翼形式潜艇的阻力数值模拟与分析[J]. 江苏科技大学学报(自然科学版) 2007, 21(3): 6-9.

△

收稿日期: 2020 年 3 月

作者简介:

李阳(1994—) 男, 硕士研究生, 主要研究方向为动力工程; 吴俊飞(1968—) 男, 教授, 主要研究方向为高压与超高压技术、过程设备等。

(编辑 岚)

(上接第 53 页)

- [11] 席爱民. 模糊控制技术[M]. 西安: 西安电子科技大学出版社 2008.
- [12] SILVA C W D. Intelligent Control: Fuzzy Logic Applications [M]. Boca Raton: CRC Press 2018.
- [13] 张卫波, 杨南杰, 吴星. 车用电动增压系统的设计及其性能试验研究[J]. 福州大学学报(自然科学版) 2017, 45(6): 866-872.

△

收稿日期: 2020 年 2 月

作者简介:

寿磊(1993—) 男, 工程师, 主要研究方向为发动机节能环保技术; 张卫波(1971—) 女, 教授, 主要研究方向为发动机节能环保技术。

(编辑 平 平)

(上接第 13 页)

- [6] 王野平, 李杭, 朱凤. 砌块成型机机架的模态分析与结构优化[J]. 机械制造 2019, 57(9): 28-31, 38.
- [7] 陈威, 夏利娟. 粘弹性自由阻尼加筋板的随机响应分析和试验研究[J]. 舰船科学技术 2020, 42(1): 62-67.
- [8] 吴欣宇. 基于 ANSYS 的柔性支撑结构随机振动分析[J]. 机械工程师 2019(12): 40-42, 44.
- [9] 陈艳霞. ANSYS Workbench 18.0 有限元分析: 从入门到

精通(升级版) [M]. 北京: 电子工业出版社 2018.

- [10] 董小庆. 基于 ANSYS 的石油钻机井架冲击载荷响应分析[J]. 机电工程技术 2019, 48(7): 76-77.

△

收稿日期: 2020 年 3 月

作者简介:

施云高(1975—) 男, 高级实验师, 主要研究方向为精密机械制造。

(编辑 丁 罡)