

单晶 γ -TiAl 中孔洞尺寸对裂纹扩展影响的分子动力学模拟

芮执元^{1,2}, 曹 卉^{1,2}, 罗德春^{1,2}, 陈文科¹, 杨 利^{1,2}, 剡昌锋^{1,2}

(1. 兰州理工大学, 甘肃 兰州 730050)

(2. 数字制造技术与应用省部共建教育部重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘 要: 运用分子动力学方法研究单晶 γ -TiAl 合金的裂纹扩展行为, 模拟时采用嵌入原子势方法, 结合原子轨迹图、能量演化图以及应力-应变曲线, 分析不同孔洞尺寸对裂纹扩展过程的影响。结果表明: 随着孔洞半径增大, 裂纹的启裂应力值减小; 裂纹与孔洞结合后, $R=0.4001$ nm 时, 孔洞变形后在孔洞边界的中心产生裂纹, 沿[100]方向扩展至材料断裂, 裂纹扩展中出现子母裂纹传播现象; $R=0.8002$ nm 时, 孔洞变形后在一角处产生裂纹, 沿[100]方向扩展至材料断裂; $R=1.2003$ nm 时, 孔洞变形后在两个角处产生裂纹, 沿[110]和 $[\bar{1}10]$ 方向扩展, [110]方向裂纹扩展中出现子母裂纹传播现象, 且边界产生子裂纹并与该方向裂纹汇合后扩展至材料断裂; 此外孔洞抑制裂纹扩展。

关键词: γ -TiAl 合金; 分子动力学; 裂纹扩展; 孔洞尺寸

中图分类号: TG146; O77; TG131

文献标志码: A

文章编号: 1002-185X(2017)09-2505-07

γ -TiAl 合金是一类新型金属间化合物, 也是一类有着巨大发展潜力和应用前景的高温结构材料^[1]。与其他高温结构材料相比, TiAl 合金显示出了优异的性能, 如低密度、耐高温、高比强度、高硬度、很好的阻燃性能等^[2-5], 在航空、航天等诸多领域中有着广泛的应用前景, 且取得了长足的发展和进步^[6], 但是仍然存在很多不足之处, 如 TiAl 合金在室温下的脆性、断裂韧性和高裂纹扩展速率, 为了克服这些缺点, 在室温下研究材料的脆性、裂纹扩展机理以及断裂机理很有必要, 将有助于 TiAl 合金得到更好的运用。在材料形成过程中许多与原子有关的微观细节, 在实验中基本无法获得, 而在计算机模拟中却可以方便获得, 分子动力学就是一种计算机模拟实验的方法, 是介于真实实验研究与理论计算间的一种方法, 是沟通宏观特性与微观信息的桥梁, 可以方便、低成本的设定和模拟材料所处的条件, 因而成为分子、原子尺度上研究微观特性的有力工具。

Xu^[7]用分子动力学研究了 TiAl 金属化合物在位错反应中点缺陷的形成过程, 发现在剪切变形中单一滑移系的运动即能促使空位、位错线及位错环的形成, 点缺陷与位错的反应很大程度上取决于缺陷的性质以及滑移面之间的距离。刘永利^[8]利用分子动力学模拟

了 TiAl/Ti₃Al 双相体系中的剪切变形过程, 并对变形过程中位错的形核、滑移系的启动以及相关结构的转变进行了研究和分析, 发现该剪切变形过程为粘滞-滑移式的滑移行为, 界面在其中起到了传递能量和协调变形的作用, fcc-TiAl 在受到局部剪切应力时将向 hcp 结构发生转变, 而在应力较为集中的 hcp-Ti₃Al 中易形成连续且稳定的 fcc 堆垛层错。Tang^[9]用分子动力学模拟了 γ -TiAl 单晶的空洞开裂过程, 发现位错核的连续产生和剪切循环的扩展使得空洞开裂, 初始屈服强度随着试件尺寸和空洞体积分数的增加而减小, 随着应变率的增加而增加。曲洪磊^[10]用分子动力学方法对 γ -TiAl 单晶纳米杆在室温下的拉伸变形过程进行了模拟研究, 发现 γ -TiAl 单晶纳米杆在室温下的塑性变形机制为孪生和普通位错, 进入塑性变形后单晶纳米杆中开始出现层错等缺陷, 变形过程中积累的应变能的释放使得应力应变曲线中出现应力水平突然下降的现象。张斌^[11]用分子动力学方法模拟了 Ti-Al 合金 $\beta \rightarrow \alpha$ 相变行为以及拉伸变形行为, 发现在相变过程中晶界交汇处容易出现层错、孪晶界等晶体缺陷, 模拟中 TiAl 合金的拉伸过程与宏观材料相似, 均经历弹性变形阶段和塑性变形阶段, 并出现颈缩现象。Zhao^[5]用分子动力学方法模拟了不同应变率和温度下 γ -TiAl

收稿日期: 2016-09-03

基金项目: 国家自然科学基金 (51065014); 甘肃省自然科学基金 (148RJZA008); 甘肃省高等学校科研项目 (2014A-033)

作者简介: 芮执元, 男, 1962 年生, 硕士, 教授, 兰州理工大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730050, 电话: 0931-2758258, E-mail: zhiy_rui@163.com

中<110>倾斜晶界的断裂行为,发现双晶体断裂的机制是微裂纹在晶界形核并沿界面扩展,各种裂纹扩展取决于裂尖是否有塑性变形区。

以上用分子动力方法对 γ -TiAl 合金做了很多研究,但只是研究单一的缺陷,而在实际中往往是多种缺陷共存。针对以上研究的不足,本实验运用分子动力学方法,对同时存在裂纹和孔洞的单晶 γ -TiAl 合金进行了模拟,研究不同的孔洞尺寸对裂纹扩展的影响。

1 计算模型和方法

不同于一般的 fcc 结构, γ -TiAl 具有 $L1_0$ 型面心四方(fct)^[10]结构,其晶体结构如图 1,3 种试样模型如图 2。

在 γ -TiAl 合金的 3 种模型中通过取消裂纹上、下原子间作用力的方法预制了(010)[100]中心裂纹,裂纹长度为 $12a_0$,模型尺寸为 $120a_0 \times 50b_0 \times 6c_0$,晶格常数取为 $a_0=b_0=0.4001$ nm 和 $c_0=0.4181$ nm^[9],基本与实验值 $a_0=b_0=0.4005$ nm 和 $c_0=0.407$ nm 一致^[12],用删除原子的方法预制了半径分别为: 0.1、0.2 和 0.3 nm 的孔洞,孔洞距裂尖的距离均为: 0.4 nm。嵌入原子势(EAM)^[13]可以描述金属和合金中原子间的相互作用,所以采用 EAM 模型描述 γ -TiAl 合金中原子间的相互作用关系,嵌入原子势可以分为两部分,即相互作用

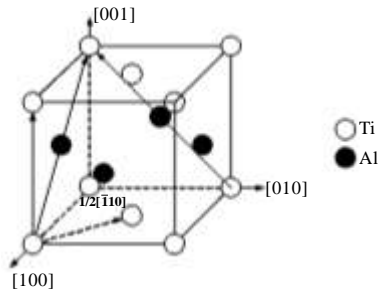


图 1 γ -TiAl 的 $L1_0$ 型结构
Fig.1 $L1_0$ structure of γ -TiAl

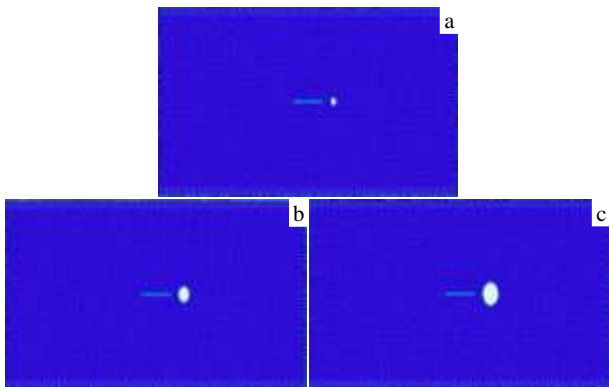


图 2 γ -TiAl 合金 3 种试样的原子模型
Fig.2 Three atom models of γ -TiAl alloy

对势和嵌入能两部分晶体的总势能可以表示为:

$$U = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \tag{2}$$

式中,第 1 项 F_i 是嵌入能;第 2 项 $\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij})$ 是对势项; ρ_i 是除第 i 个原子以外的所有其他原子的核外电子在第 i 原子处产生的电子云密度之和; ϕ_{ij} 是第 i 个原子与第 j 个原子之间的对势作用函数; r_{ij} 是第 i 个原子与第 j 个原子之间的距离,相关参数如表 1 所示。用 velocity-verlet 算法求解原子的运动轨迹,模拟温度为 300 K,文献[5,9]中提到的应变率范围在 1.0×10^7 s⁻¹ 到 1.0×10^9 s⁻¹ 之间,所以本实验以 2.5×10^8 s⁻¹ 的应变率恒定加载,该应变率相对于宏观实验来说很高,而分子动力学研究的是原子运动,合理的变形总是在很短的时间内发生,因此需要很高的应变率。设置边界条件时,使上下边界区的厚度大于原子间相互作用力的截断半径,为便于拉伸加载,沿 Y 方向固定 $2a_0$ 层原子, X 和 Y 方向采用自由边界条件, Z 方向周期性边界条件, X 、 Y 、 Z 坐标轴分别对应 γ -TiAl 合金模型的[100]、[010]、[001] 晶向。模拟的第 1 阶段为弛豫阶段,用速度标定法对整个体系进行控温,根据原子的初始速度服从 Maxwell-Boltzmann 分布,给原子赋予初始速度并将整个体系在给定条件下弛豫 120 ps 使体系达到平衡状态;第 2 阶段采用下表面固定不动,对上表面进行拉伸的模式在给定条件下以恒定应变率拉伸,时间步长为 0.001 ps。

2 结果与讨论

2.1 裂纹扩展过程分析

通过 LAMMPS 软件计算得到体系的总能量和应力应变等数据,半径分别为 0.4001、0.8002 和 1.2003 nm 时用 OVITO 软件对计算结果进行分析和处理,得到原子的运动轨迹图,并获得的各个时刻 γ -TiAl 合金裂纹扩展的原子轨迹图如图 3、图 4 和图 5。

表 1 EAM 势中 γ -TiAl 的晶格常数, c/a_0 , 结合能和弹性常数
Table 1 Lattice constant, c/a_0 , cohesive energy and elasticity modulus of γ -TiAl in EAM potential^[10]

	Experiment	EAM
a_0	3.997	3.998
c/a_0	1.02	1.047
E_0 /eV atom ⁻¹	4.51	4.509
C_{11}	186, 183	195
C_{12}	72, 74.1	107
C_{13}	74, 74.4	113
C_{33}	176, 178	213
C_{44}	101, 105	92
C_{66}	77, 78.4	84

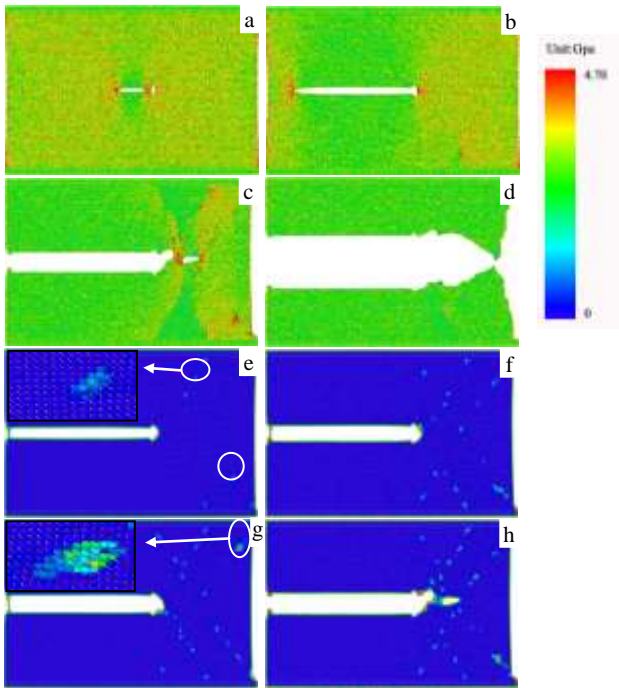


图 3 $R=0.4001$ nm 时 γ -TiAl 合金的裂纹扩展图

Fig.3 Crack propagation of γ -TiAl alloy at $R=0.4001$ nm: (a) $t=164$ ps, (b) $t=184$ ps, (c) $t=546$ ps, (d) $t=1870$ ps, (e) $t=262$ ps, (f) $t=390$ ps, (g) $t=450$ ps, and (h) $t=546$ ps

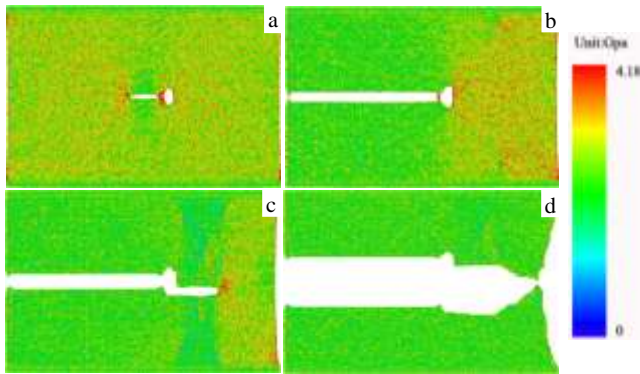


图 4 $R=0.8002$ nm 时 γ -TiAl 合金的裂纹扩展图

Fig.4 Crack propagation of γ -TiAl alloy at $R=0.8002$ nm: (a) $t=150$ ps, (b) $t=240$ ps, (c) $t=368$ ps, and (d) $t=1530$ ps

图中原子从绿色到红色表示应力依次增大，图 4 和图 5 同图 3。从图 3a、3b、3c 和 3d 可知，裂纹在扩展过程中，应力始终在裂尖处集中，图 3e、3f、3g 和 3h 是用 OVITO 中的中心对称参数着色的，可以显示缺陷原子并观察缺陷原子的演化过程，其中深蓝色原子表示正常原子，浅蓝色原子表示缺陷原子如图 3e 中黑色标出部分就表示一个位错，可以从局部放大图中明显观察到。从图 3e、3f、3g 和 3h 中可观察到不

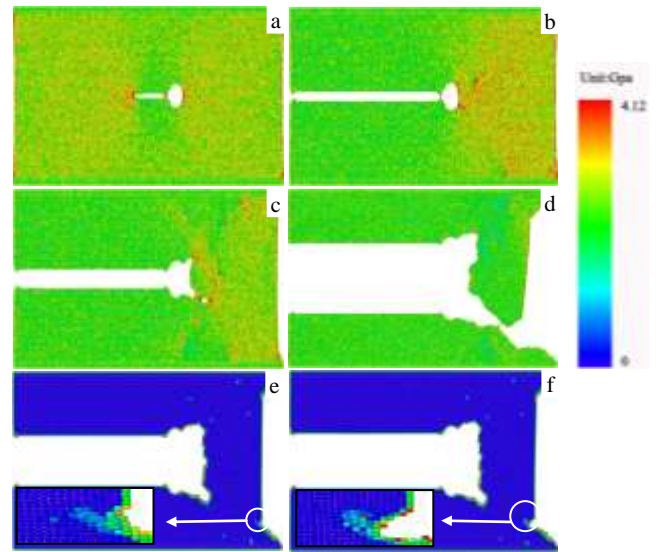


图 5 $R=1.2003$ nm 时 γ -TiAl 合金的裂纹扩展图

Fig.5 Crack propagation of γ -TiAl alloy at $R=1.2003$ nm: (a) $t=146$ ps, (b) $t=238$ ps, (c) $t=490$ ps, (d) $t=2670$ ps, (e) $t=1568$ ps, and (f) $t=1746$ ps

断有位错从裂尖发射并且在边界塞积以及出现子母裂纹传播的现象，此外由于边界效应的影响，边界也有位错发射如图 3g 中红色圈标出部分的局部放大图，此类现象的出现导致应力重新分布。 $t=164$ ps 时，可观察到两个裂尖处应力较大，此时应力值大于原子间作用力，裂纹启裂时应力值为 4.63 GPa，裂纹开始同时沿 $[100]$ 和 $[\bar{1}00]$ 方向扩展如图 3a 所示，直至 $[100]$ 方向的裂尖与孔洞结合，圆形孔洞周围应力分布均匀，没有应力集中现象，因此抑制 $[\bar{1}00]$ 方向裂纹的扩展。

在裂纹沿 $[\bar{1}00]$ 方向扩展过程中，孔洞形状发生变化，在孔洞边界的中心处出现裂纹，应力又在裂尖集中， $t=184$ ps 时裂纹开始沿 $[100]$ 方向快速扩展，裂纹面平整而光滑，表明裂纹扩展的方式是脆性解理如图 3b 所示，此时裂纹启裂应力值为 2.8 GPa， $t=438$ ps 时裂尖锐化并出现偏折现象，裂纹不断变宽， $t=468$ ps 时， $[\bar{1}00]$ 方向材料断裂。

$t=544$ ps 时， $[100]$ 方向裂尖前方应力集中，随着继续加载，应力集中处出现空洞，这是由于位错堆积造成应力集中，导致 γ -TiAl 合金在应力集中处产生较大塑性变形，当材料在塑性变形处由于应力集中造成的局部应力超出合金中原子间的结合力时，该处的原子键将会断裂从而形成空洞， $t=548$ ps 时空洞先沿着 $[100]$ 方向扩展如图 3c 所示，之后形成的微裂纹与主裂纹结合，主裂纹扩展直至材料沿 $[100]$ 方向断裂。

图 4 中也可以观察到应力集中和重新分布的现

象。 $t=150$ ps 裂纹开始同时沿 $[100]$ 和 $[\bar{1}00]$ 方向扩展如图 4a 所示, 启裂应力值为 4.30 GPa, 在此过程中圆形孔洞变形为椭圆形孔洞, 在 $[\bar{1}00]$ 方向出现尖端并在 $t=260$ ps 时与裂纹结合, 孔洞抑制 $[\bar{1}00]$ 方向裂纹扩展, 裂纹沿 $[100]$ 方向快速扩展直至材料断裂, 裂纹面平整而光滑表明裂纹以脆性解理的方式扩展。

$R=0.8002$ nm 时, 裂纹先沿两个方向扩展, 直至 $[\bar{1}00]$ 方向材料断裂后孔洞才与裂纹结合, 不同于 $R=0.4001$ nm 时。

裂纹与孔洞结合后, 孔洞的启裂位置也不同于 $R=0.4001$ nm 时, $t=326$ ps 时, 从孔洞的一角处开始快速以脆性解理的方式扩展, 此时的启裂应力值为 1.92 GPa, $t=368$ ps 时, 扩展速率明显减慢, 由于裂尖钝化, 裂纹不再沿 $[100]$ 方向向前扩展, 而是宽度增大, 之后缓慢沿 $[100]$ 方向扩展直至材料断裂, 此过程中没有出现子母裂纹传播机制如图 4c 所示。

从图 5 中也可以观察到应力集中和重新分布现象。 $t=146$ ps 时, 裂纹开始扩展如图 5a 所示, 启裂应力值为 3.98 GPa, $t=446$ ps 之前, 裂纹的扩展形式类似于 $R=0.8002$ nm 时, 继续加载, 裂纹沿 $[\bar{1}00]$ 方向以脆性解理方式断裂后, 裂纹沿 $[100]$ 方向与孔洞结合,

之后裂纹的启裂方式不同于 $R=0.4001$ nm 和 $R=0.8002$ nm 时, 裂纹沿孔洞的两个角开始扩展, 即 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向, $t=456$ ps 时沿 $[1\bar{1}0]$ 方向开始扩展, 启裂应力值为 1.64 GPa, $t=480$ ps 时沿 $[110]$ 方向扩展, 启裂应力值为 1.48 GPa。

$t=490$ ps 时, $[110]$ 方向局部出现应力集中, 同样由于材料发生塑性变形, 导致局部应力大于原子间结合力, 从而空洞形核、扩展并形成微裂纹如图 5c 所示, $t=732$ ps 时微裂纹与主裂纹结合, $[1\bar{1}0]$ 方向的裂尖发生偏折, 之后 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向裂尖出现钝化现象, 裂纹逐渐变宽。

与 $R=0.4001$ nm 和 $R=0.8002$ nm 不同的是由于边界效应的影响, 边界在位错堆积处产生子裂纹如图 5e 和 5f 所示, 从局部放大图中可明显看到位错在边界堆积并产生子裂纹。子裂纹扩展直至与 $[110]$ 方向裂纹结合, 材料断裂。

2.2 曲线分析

3 种情况下应力随时间变化的曲线以及各点对应的原子轨迹图如图 6、图 7 和图 8 所示, 其中的 a 为红色方框部分的局部放大图。3 幅图分别选取了裂尖偏折, 空洞形核、长大并与主裂纹结合, 裂纹与孔洞

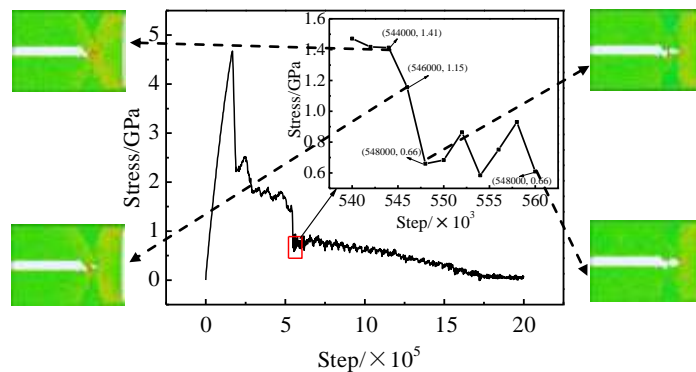


图 6 $R=0.4001$ nm 应力随时间的变化曲线

Fig.6 Stress as function of the loading time at $R=0.4001$ nm

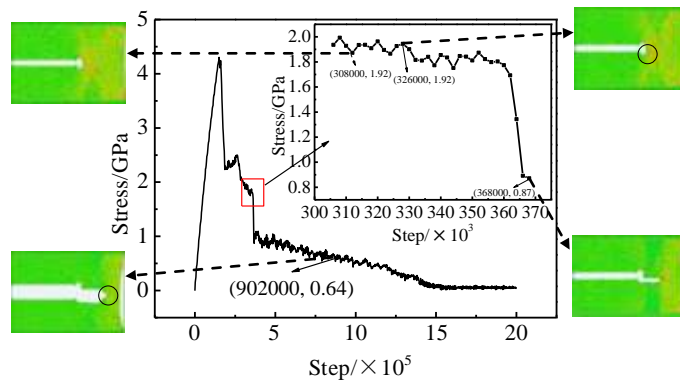


图 7 $R=0.8002$ nm 应力随时间的变化曲线

Fig.7 Stress as function of the loading time at $R=0.8002$ nm

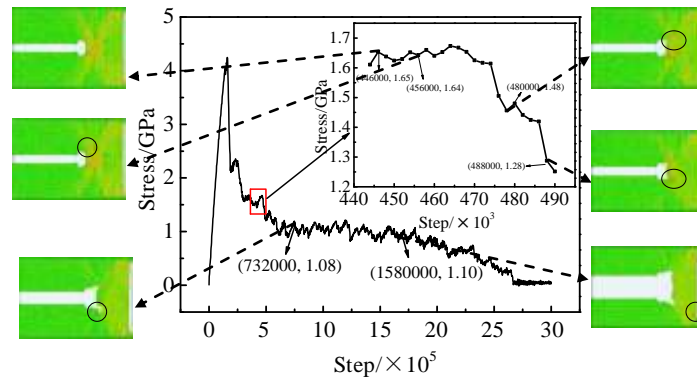


图 8 $R=1.2003$ nm 应力随时间的变化曲线

Fig.8 Stress as a function of the loading time at $R=1.2003$ nm

结合后裂纹的启裂以及边界出现子裂纹的特殊点，并提取了相应的应力值，通过观察可知，在这些特殊点出现时，应力值均是减小的，因此可以推断出在裂纹扩展过程中，裂纹的不同变化形态导致应力减小，因为应力集中达到这些特殊点所对应裂纹变化时的应力值之后应力开始释放，孔洞的尺寸影响应力的分布，而应力的分布又会影 响裂纹的扩展，使得裂纹与孔洞结合后裂纹的扩展形式和启裂应力值不同。

从图 9 不同孔洞尺寸下原子总能量随时间的变化曲线中可知，随着时间步增大，总能量曲线呈现上下波动的现象。 $t=125$ ps 之前 3 种曲线的变化趋势基本相同，均呈增大趋势，因为随着加载继续，内部原子开始运动，动能和势能增加，所以 γ -TiAl 合金总能量呈增大趋势。从曲线 a 和 c 对应的原子轨迹图中可以明显观察到子母裂纹汇合现象，因此能量曲线会出现能量波峰，曲线 c 整体较平稳，波动幅度较小，且总体能量最小，而曲线

a 和 b 波动幅度较大。曲线 a、b 和 c 分别在 $t=1870$ ps, $t=1530$ ps 和 $t=2670$ ps 时达到稳定值，结合原子运动轨迹图可知，材料分别在这 3 个时间断裂。

从图 10 中可知，第 1 个位错发射时能量降低，之

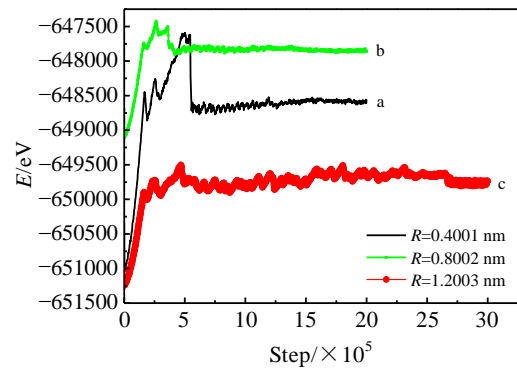


图 9 不同孔洞尺寸下原子总能量随时间的变化曲线

Fig.9 Total energy as a function of the loading time at different holes

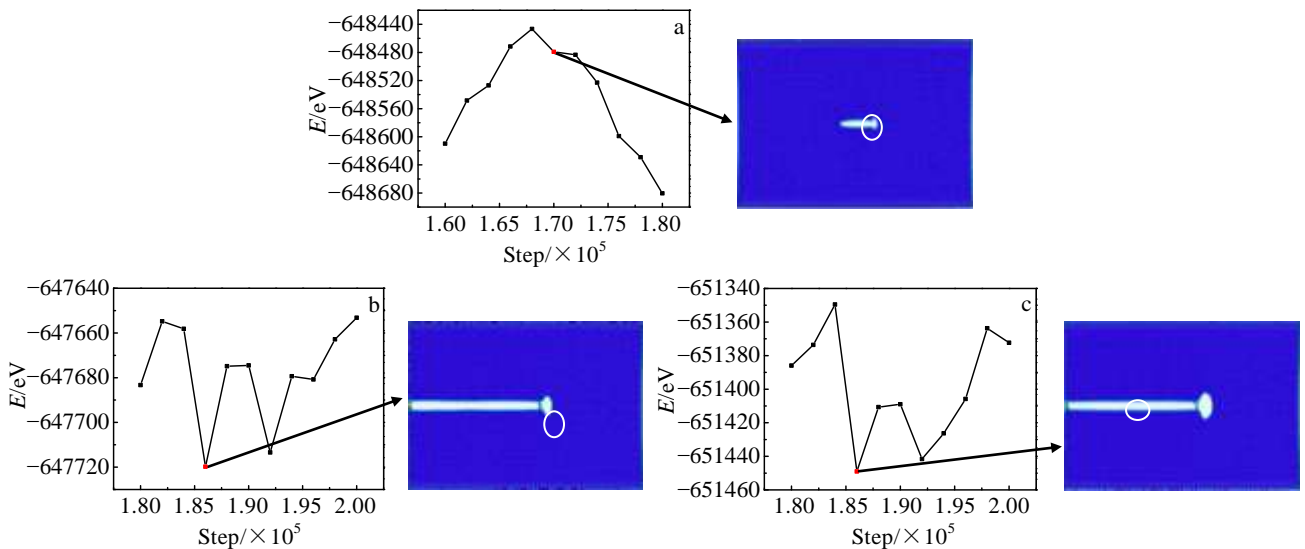


图 10 不同孔洞尺寸下发射第一个位错前后的能量变化曲线

Fig.10 Energy change before/after the first dislocation emission at different holes sizes: (a) $R=0.4001$ nm, (b) $R=0.8002$ nm, (c) $R=1.2003$ nm

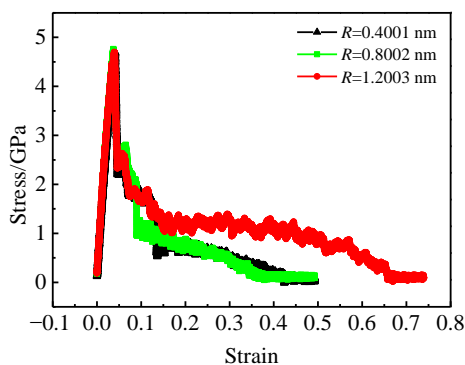


图 11 不同孔洞尺寸下原子的应力-应变曲线

Fig.11 Stress-strain curves of atoms at different hole sizes

后能量又呈增大趋势, 因为发射位错时消耗能量, 而位错的不断堆积又使能量升高, 能量升高后又促使位错继续产生, 这就解释了能量曲线出现波动的原因。

图 11 为不同孔洞尺寸下原子的应力-应变曲线。 $\varepsilon=0.05$ 之前对应的是 γ -TiAl 合金的弹性变形阶段, 而 3 条曲线在此阶段基本重合, 应力峰值均为 4.25 GPa 左右, 之后曲线出现较大差异, 可见孔洞尺寸对材料的弹性变形阶段影响不大。随着应变增大, 原子间作用力减小导致曲线应力值急剧下降, 进入塑性变形阶段, 从原子轨迹图中可知, 在此过程中裂纹与孔洞结合, 位错的发射使应力减小, 而位错的堆积又使应力增大, 子裂纹的形成也是应力集中造成的, 当子裂纹与母裂纹结合之后应力值下降, 如此反复直至材料断裂, 这就解释了应力-应变曲线出现波动的原因, 孔洞半径越大, 应力-应变曲线下落的趋势越缓慢, 模拟得到的应力-应变曲线符合 γ -TiAl 合金的性质。

3 结 论

1) $R=0.4001$ nm 时, 裂纹启裂应力值为 4.63 GPa, 裂纹最初同时沿 [100] 和 $[\bar{1}00]$ 方向扩展, 直至 [100] 方向的裂尖与孔洞结合, 圆形的孔洞周围应力分布均匀, 未出现应力集中现象, 因此抑制了 $[\bar{1}00]$ 方向裂纹的扩展, 孔洞变形并在孔洞边界的中心出现裂纹后, 裂纹沿 [100] 方向扩展, 扩展过程中出现子母裂纹传播机制。

2) $R=0.8002$ nm 时, 裂纹启裂应力值为 4.30 GPa, [100] 方向裂尖与孔洞结合前, 裂纹的扩展机制与 $R=0.4001$ nm 时相似, 裂纹与孔洞结合后孔洞的一角

产生裂纹, 裂纹沿 [100] 方向扩展直至材料断裂。

3) $R=1.2003$ nm 时, 裂纹启裂应力值为 3.98 GPa, [100] 方向裂尖与孔洞结合前, 裂纹的扩展机制与 $R=0.4001$ nm 和 $R=0.8002$ nm 时相似, 结合后孔洞的两个角处产生裂纹, 且裂纹分别沿 [110] 和 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 方向扩展, [110] 方向裂纹在扩展过程中出现子母裂纹传播机制, 并且在边界位错堆积处产生子裂纹, 最终与 [110] 方向裂纹汇合, 材料断裂。

参考文献 References

- [1] Rui Zhiyuan(芮执元), Zhang Guotao(张国涛), Feng Ruicheng(冯瑞成) *et al. Journal of Functional Materials(功能材料)*[J], 2015, 46(1): 01 103
- [2] Clemens H, Mayer S. *Advanced Engineering Materials*[J], 2013, 15(4): 191
- [3] Marketz W T, Fischer F D, Clemen S H. *International Journal of Plasticity*[J], 2003, 19: 281
- [4] Clemens H, Smarsly W. *Advanced Materials Research*[J], 2011, 278: 551
- [5] Zhao W, Xu D, Zhao J *et al. Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2014, 24(11): 3645
- [6] Qu H, Wang Y, Xia Y. *Journal of University of Science and Technology of China*[J], 2009, 6: 011
- [7] Xu D S, Wang H, Yang R *et al. Materials Science and Engineering*[J], 2009, 3(1): 012 024
- [8] Liu Yongli(刘永利), Zhao Xing(赵 星), Zhang Zongning(张宗宁) *et al. Acta Physica Sinica(物理学报)*[J], 2009, 58(S): 246
- [9] Tang F L, Cai H M, Bao H W *et al. Computational Materials Science*[J], 2014, 84: 232
- [10] Qu Honglei(曲洪磊), Wang Yu(王 宇), Xia Yuanming(夏源明) *et al. Journal of University of Science and Technology of China (中国科学技术大学学报)*[J], 2009, 39(6): 627
- [11] Zhang Bin(张 斌). *Thesis for Master Degree(硕士论文)* [D]. Changsha: Central South University, 2012
- [12] Mehl M J, Osburn J E, Papaconstantopoulos D A *et al. Physical Review B*[J], 1990, 42: 5362
- [13] Zope R R, Mishin Y. *Phys Physical Review B*[J], 2003, 68: 024 102

Effect of Hole Size on Single Crystal γ -TiAl Alloy Crack Propagation Based on Molecular Dynamics Simulation

Rui Zhiyuan^{1,2}, Cao Hui^{1,2}, Luo Dechun^{1,2}, Chen Wenke¹, Yang Li^{1,2}, Yan Changfeng^{1,2}

(1. Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

(2. Digital Manufacturing Technology and Application of Key Laboratory of the Ministry of Education, Lanzhou 730050, China)

Abstract: Molecular dynamics method has been applied to research the process of crack propagation of single crystal γ -TiAl. The atomic trajectory figure, energy evolution and the relationship between stress and strain were obtained to study the hole size effect. The results indicate that the initiation stress decreases with hole size increasing. After the crack combines with the hole, when $R=0.4001$ nm, crack occurs at the center of hole boundary after hole deformation, and it propagates along the direction of $[100]$ until material fracture, and mother-child model is found; when $R=0.8002$ nm, crack occurs at one corner after hole deformation, and it propagates along the direction of $[100]$ until material fracture; when $R=1.2003$ nm, crack occurs at two corners after hole deformation, and it propagates along the direction of $[110]$ and $[\bar{1}0]$, mother-child model is found at the direction of $[110]$, and child crack occurs at boundary which combines with crack in this direction and propagates until material fracture. In addition the crack propagation is inhibited by the hole.

Key words: γ -TiAl alloy; molecular dynamics; crack propagation; hole size

Corresponding author: Rui Zhiyuan, Professor, Mechanical and Electrical Engineering College, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, P. R. China, Tel: 0086-931-2758258, E-mail: zhiy_rui@163.com