

TC4 时效相变及扩散连接的分子动力学模拟

刘小刚, 张 顺, 李百洋, 郭海丁

(南京航空航天大学 江苏省航空动力系统重点实验室, 江苏 南京 210016)

摘 要: 利用分子动力学方法模拟研究 TC4 时效相变及扩散连接过程。采用混合势分析了 TC4 三元合金时效相变过程的径向分布函数以及不同晶体结构相对含量的变化。同时研究了不同保温温度下扩散连接过程的原子浓度分布、扩散连接宽度以及扩散系数。结果表明: 在时效相变过程中, TC4 结构变化主要表现为亚稳 β 相析出 α 新相, 状态稳定后, β 相含量达到 23%, 与实验结果吻合较好; TC4 扩散连接过程中, 主要是界面附近的钛原子进行扩散, 钒原子扩散能力次之, 而参与扩散的铝原子相对较少; 相同条件下, 扩散连接宽度与保温温度呈现较好线性关系; 钛原子扩散系数与保温温度的倒数呈指数关系, 计算结果与实验相符。

关键词: 分子动力学; TC4 三元合金; 径向分布函数; 相变; 扩散系数

中图分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)10-3045-07

TC4 钛合金 (Ti-6Al-4V) 以其优异的综合性能成为航空领域中重要的制造材料。与其他钛合金相比, TC4 钛合金在 900 °C 左右具有良好的成型性能。在此温度范围内, 采用扩散连接技术使得 TC4 结构件具有应力变形小的优点, 选取合适的工艺参数可获得质量良好的扩散焊接接头而不需添加中间层。目前, 采用超塑性成型扩散连接组合工艺成型 TC4 宽弦空心风扇叶片已成为先进航空发动机关键技术之一。随着钛合金扩散焊构件在航空航天领域的日益广泛应用, 扩散连接工艺及接头性能等越来越受到关注。然而由于实际的扩散焊缝区非常狭窄, 通常在微米级, 且受检测方法和仪器分辨率等因素限制, 采用常规方法从宏观角度对扩散焊接头进行研究的难度较大。而运用分子动力学从微观角度来研究其扩散连接过程是一种理想的方法。

近年来, 随着计算机技术的迅猛发展, 在原子尺度上对 TC4 的相变行为以及扩散连接过程进行模拟研究逐渐成为可能。分子动力学方法作为材料计算领域中的一类有效模拟手段, 得到广大学者的青睐。Grujicic^[1]等基于 EAM 势对 Ti-V 合金的马氏体相变过程进行了分子动力学模拟, 分析了相变过程中点阵结构转变机理, 认为切变与滑移是影响相变过程的主要因素。Shimono^[2]等对非晶状态下 Ti-Al 合金的重新结晶过程进行了分子动力学模拟, 得到了 Ti-Al 合金在非晶状态下的临界冷却速率, 并发现 Al 含量会影响

Ti-Al 合金的非晶形成能力。Huang^[3]等采用分子动力学方法模拟了 Cu-Al 异质合金的扩散过程, 发现在扩散时主要为 Cu 原子向 Al 中扩散。汤富领^[4]等利用 LAMMPS 软件模拟了 Ti-Al 异质合金的扩散连接过程, 得出工艺参数、接触面粗糙度是影响扩散效果的主要因素。Semiatin^[5,6]等对 Ti-6Al-4V 合金中各原子的自扩散系数进行了实验探究, 给出了扩散系数随扩散温度变化的 Arrhenius 函数表达式。Zhu^[7]等研究了 V 原子在 Ti 合金中的扩散过程, 得出了 V 原子浓度对扩散距离及扩散系数的影响规律。

综上所述, 研究者对合金结构转变过程及单晶异种金属间的扩散连接过程开展了大量研究, 侧重点不尽相同, 而对于多元合金体系间的扩散连接过程的分子动力学模拟涉及较少。本研究针对 Ti6-Al4-V 三元合金的扩散连接过程展开分子动力学模拟研究, 基于 LAMMPS 软件, 采用随机替代法建立相应原子含量的 Ti-6Al-4V 初始构型; 通过对该构型进行时效预处理, 模拟亚稳 β 相析出 α 相的过程, 建立其稳定的 $\alpha + \beta$ 双相结构模型; 在此基础上, 研究温度等工艺参数对 TC4 扩散连接宽度以及 Ti 原子扩散系数等物理量的影响规律。

1 计算方法与模型

采用分子动力学方法对 Ti-Al-V 系三元合金的时效相变及扩散连接进行模拟研究。在分子动力学中, 任意粒子的运动状态可通过对牛顿运动方程积分获得^[8],

收稿日期: 2017-10-12

基金项目: 中央高校基本科研业务费 (NS2016022)

作者简介: 刘小刚, 男, 1977 年生, 博士, 副教授, 南京航空航天大学能源与动力学院, 江苏 南京 210016, 电话: 025-84892252, E-mail: liuxg03@nuaa.edu.cn

其中牛顿第二定律的微分方程如下：

$$m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} = -\nabla_i V(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (1)$$

式中， m_i 、 r_i 分别为第 i 个原子的质量和位置， $V(r_1, r_2, \dots, r_N)$ 为原子的势函数。

解得粒子的状态量（速度与位置），即可描述出系统的运动轨迹。对系统的计算结果运用统计方法进行平均化，可进一步得到所需要的宏观物理量，如温度、压强、应力等，进而研究系统的平衡热力学性质以及粒子的微观结构。

在分子动力学模拟中，原子间相互作用势是通过原子势能与坐标之间关系的数学函数来定义^[9]。Morse 在 1929 年提出了以他名字命名的势函数如下：

$$V_{ij} = D_0 \{ \exp[-2\alpha(r_{ij} - r_0)] - 2 \exp[-\alpha(r_{ij} - r_0)] \} \quad (2)$$

其中， D_0 具有能量量纲，描述了原子对之间相互作用的强弱， r_0 为平均半径， α 为归一化系数。Morse 势在研究 fcc 和 hcp 结构的金属体系时，具有较高的准确性^[10]，并且也常用来构造合金势的对势部分，广泛应用于合金体系的分子动力学模拟中^[11]。

与 Morse 势相比，嵌入原子势（EAM）属于半经验势。嵌入原子势（EAM）适用于金属原子系统，对原子间成键方式的描述优于其他势函数。该势函数由两体势推广得来，考虑了每个原子局部区域的自由电子气效应，利用凝胶模型来简化描述原子周围复杂的环境。它的函数形式如下^[11,12]：

$$U_{\text{total}} = \sum_i F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi(r_{ij}) \quad (3)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f(r_{ij}) \quad (4)$$

其中， F 为原子嵌入能，是 ρ_i 的函数， ϕ 为短程对势， ρ_i 为原子电子密度的函数。式（3）右端第 1 项为在电子气团背景中嵌入原子所需的能量，第 2 项为传统对势，描述了固体系统中原子间的排斥作用。由（3）和（4）两式可推得原子之间的作用力为：

$$F_{ij} = - \{ [F'(\rho_i) + F'(\rho_j)] f'(r_{ij}) + \phi'(r_{ij}) \} \quad (5)$$

目前，Ti-Al-V 系三元合金的 EAM 势函数尚未有学者进行系统研究。Parajuli^[13] 等人在 Ti-Al-V 合金凝固过程的分子动力学模拟中，采用 Python-ASE 处理得到 Morse 势函数。上述学者通过研究 Ti-Al-V 合金体系的最小能量结构，已初步论证了采用 Morse 势描述 Ti-Al-V 合金体系的合理性。本研究拟采用混合势的方法，Ti-Al 原子间采用 Zope^[14] 等通过实验数据和第一性原理方法得到的 EAM 势，Ti-V 原子间采用 Morse 势进行拟合，而 Al-V 原子间则采用 EAM 势。

在上述混合势条件下，采用 Nose-Hover 控温方法对 Ti-6Al-4V 合金的熔化过程进行分子动力学模拟。计算得到 Ti-6Al-4V 合金熔点约为 2200 K。实际 TC4 钛合金的熔点为 1950 K 左右，模拟值与实际值较为接近，说明了所选取势函数的合理性。

将 Ti-6Al-4V 合金的初始三维构型设定为 bcc 结构，构型所处系统采用 NVT 系综。考虑到尺度效应^[9]，在 x 、 y 方向设定周期性边界条件， z 方向设定收缩性边界条件。模型的原胞数量为 $25 \times 25 \times 18$ （bcc 结构立方晶胞，Ti 晶格常数为 0.328 nm），采用随机替换法，分别以 10 at% 的 Al 原子及 3.6 at% 的 V 原子随机替换相应的 Ti 原子。总原子个数为 43236。其中，Ti 原子 37154 个，Al 原子 4516 个，V 原子 1566 个。最终建立的初始原子构型如图 1 所示。为便于观察，文中将接触面上下构型用不同颜色区分开来。图中绿色以及粉色为 Ti 原子，蓝色以及深红色为 Al 原子，黑色以及黄色为 V 原子。

原子模型建立后，首先进行时效过程模拟以获得材料的初始状态，然后进行扩散过程模拟，具体流程如图 2 所示。初始构型在 300 K 下弛豫 40 000 步，模拟步长 0.01 ps（1 ps=10⁻¹² s）。一般 $\alpha + \beta$ 型钛合金时效温度为 500~600 °C， $\alpha + \beta$ 型钛合金高温淬火形成的亚稳相，随后在较低的 α 相温度区经时效处理析出 α 新相，使合金综合性能得到显著强化。本研究设定 TC4 时效处理温度 800 K，该阶段系综运行 6000 步，原子信息的记录间隔为 20 步，在模拟 TC4 钛合金时效处理过程中，将模型上下 3 层原子边界层（如图 1 所示）进行固定刚化处理，对该边界层中每个原子均施加 z 方向载荷，类似于刚性模具加压，从而达到施加压力均匀的目的。扩散时先进行位移控制，使上下模型恰

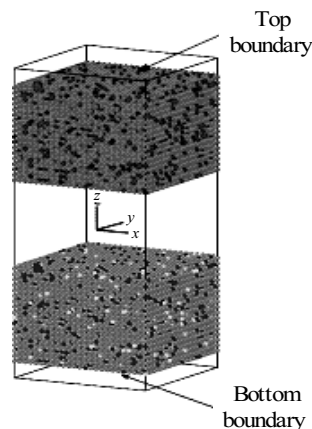


图 1 沿 [001] 方向生长的 Ti-6Al-4V 初始三维构型图
Fig.1 Initial 3D configuration diagram of Ti-6Al-4V in the direction of [001]

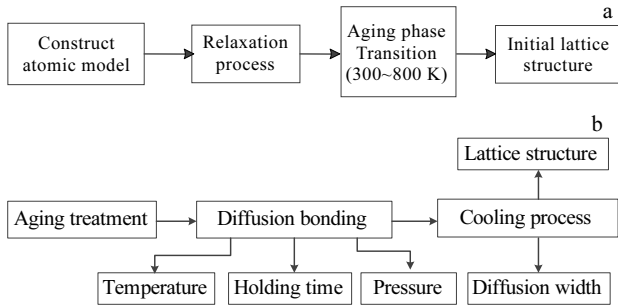


图 2 TC4 分子动力学模拟流程图

Fig.2 Flow chart of TC4 molecular dynamics simulation: (a) aging phase transition process and (b) TC4 diffusion bonding

好接触，然后进行温度、压强控制，模型在此条件下进行扩散连接。最后将系统降温至 300 K，输出原子坐标等物理量信息，进行数据处理。

2 结果与讨论

2.1 TC4 时效相变过程模拟结果分析

分子动力学模拟中，常用径向分布函数 (RDF) 对点阵结构的有序化程度进行表征^[15]。图 3 为 Ti-6Al-4V 三元合金时效相变过程中不同时刻径向分布函数 $g(r)$ 曲线。可以看出，随着时间推移，每条曲线第 1 个峰值的位置缓慢右移，且波峰变宽。此变化是因为 bcc 结构的原子在 0.284 nm 处，包含 8 个第一近邻原子；在 0.328 nm 处，包含 6 个第二近邻原子。

从图 3 中还可以发现，波峰因原子振动偏移而变宽。但随着模型发生相变，原子发生相对位移，初始 bcc 结构所对应特征峰的强度逐渐减弱，峰轮廓逐渐变得平缓。bcc 结构逐渐变成 hcp 结构，hcp 结构的第一近邻原子有 12 个，RDF 曲线的第 1 个峰值位置偏至 0.290 nm 处，且峰的高度、宽度均因配位数的增加而增大。Ti-6Al-4V 在 11 ps 发生了 bcc 结构特征峰向 hcp 特征峰的转变。

为更好地观察模型相变过程中晶格结构的变化，采用 Ackland^[16]等提出的共近邻角分布分析方法进行处理，并通过 OVITO 软件对 Ti-6Al-4V 合金的时效相变过程进行可视化。

图 4 描述了模型的 (001) 晶面原子点阵结构随模拟时间的演变过程。图中黑色原子区域为 bcc 点阵结

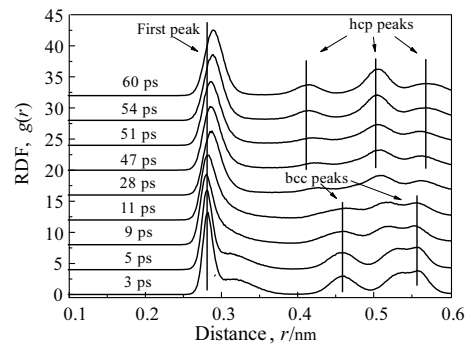


图 3 Ti-6Al-4V 三元合金时效相变过程的 RDF 曲线

Fig.3 RDF curves of the time-varying process of Ti-6Al-4V ternary alloy

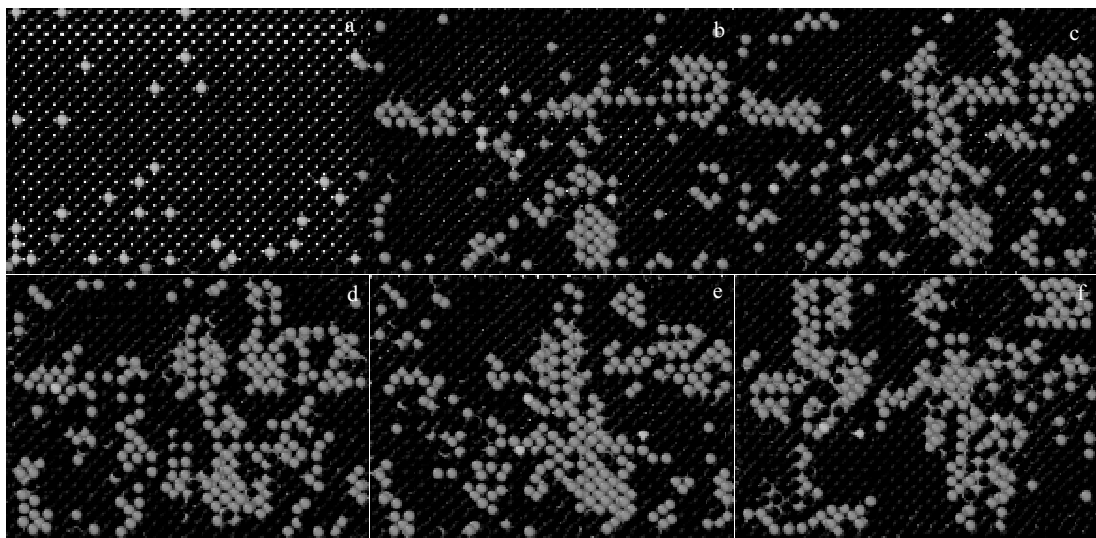


图 4 TC4 的 (001) 晶面原子点阵结构随模拟时间的变化 (黑色代表 bcc; 红色代表 hcp; 绿色代表 fcc)

Fig.4 Snapshots of the lattice structure (001) plane of TC4 with different simulation time (black : bcc; red: hcp; green: fcc):

(a) 5 ps, (b) 11 ps, (c) 28 ps, (d) 47 ps, (e) 51 ps, and (f) 60 ps

构，红色区域为 hcp 点阵结构，绿色区域为 fcc 点阵结构。由图可见，在 5 ps 时，模型中的大部分原子由于振动产生的位移而偏离结构点阵；至 11 ps 时，hcp 原子簇开始在晶体结构中形成，新相开始形核（此结果与图 3 中的平台期一致）。如图 4c 所示，最开始形核的新相显著增大，表明在 TC4 时效相变过程后期主要进行的是新相长大的过程；在 47 ps 之后，晶体中结构趋于稳定。

图 5 为 bcc 结构和 hcp 结构的相对含量随模拟时间变化的曲线。从图中可以看出，至 20 ps，模型的 bcc 结构含量急剧下降，而 hcp 结构含量逐渐上升。在 25~35 ps 期间，hcp、bcc 结构含量变化速率有所减缓。47 ps 后，晶体结构的含量均趋于稳定，其中 hcp 结构含量约为 70%，bcc 结构含量约为 23%，与文献 [17] 中得到的 TC4 在保温时效处理后 β 相含量约为 25% 这一结论吻合较好。

2.2 TC4 钛合金扩散连接过程模拟结果分析

影响 TC4 合金扩散连接结果的主要因素有保温温度、压力、保温时间和降温速率。本研究采用控制变量法，重点考察保温温度对 TC4 合金扩散连接过程的影响。实际扩散焊加工过程中，TC4 钛合金的扩散连接保温温度一般设定在 1183 K 左右，模拟中分别设定保温温度为 1000、1100、1183、1283 K，保温时间及压强固定为 400 ps 及 3.5 MPa。图 6 给出了上述工艺参数下，完全扩散后的 Ti-Al-V 原子分布图。为便于观察，这里将接触面上方模型的 3 种原子均设定为黑色。

由图 6 可以看出，在保温时间与压强不变的情况下，当系统温度从 1000 K 增大到 1283 K 时，TC4 扩散连接宽度也随之增大，原子扩散更充分。扩散时，主要是界面附近的 Ti 原子扩散，V 原子扩散能力次之，而 Al 原子扩散的较少。此时接触表面附近 Al 的面心

立方结构基本被破坏，Al-Al 键断裂，Ti 的密排六方结构基本保持不变，这说明 Ti-Ti 键不易断裂。

从图 6 还可以看出，温度为 1000 K 至 1100 K 时，TC4 母材间几乎不发生扩散；而当保温温度超过 1100 K 时，扩散宽度显著增加，说明 TC4 钛合金发生扩散连接过程存在最低的保温温度，该温度在 1100 K 左右。

图 7 为不同工艺参数下的 Ti-Al-V 原子浓度分布图。图中 Ti-V1 及 Al1 为接触面下方模型的原子，Ti-V2 及 Al2 为接触面上方模型的原子。由于 V 原子的初始含量不高，扩散区域中的含量更少，本文将 Ti-V 二者的原子浓度进行求和，不予单独计算，以便于计算处理及观察。图 7 中虚线区域表示扩散过渡层。一般规定，接触面上、下两部分中各原子浓度均超过 5% 的区域为过渡层，从而可以确定扩散连接宽度值的大小。由图可见，随着保温温度升高，扩散连接宽度明显增大。

图 8 给出了扩散连接宽度随保温温度的变化曲线。可以看出，在文中模拟条件下，扩散连接宽度与保温温度呈现较好的线性关系。较高的保温温度能促进扩散连接界面发生塑性屈服从而扩大接触面积，降低孔洞产生概率。

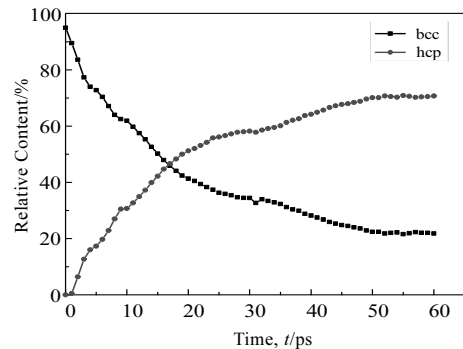


图 5 晶体结构含量曲线

Fig.5 Content curves of crystal structure

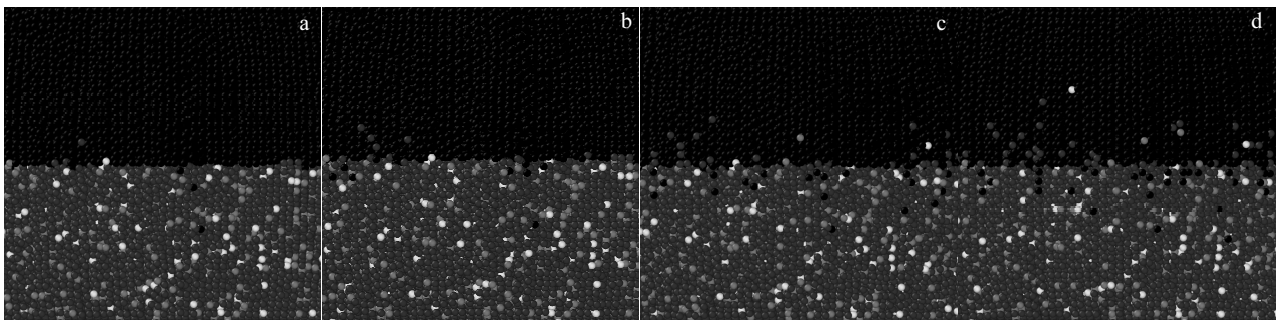


图 6 晶体 (011) 面原子分布图 (黑色为上方模型部分，红、蓝、黄分别为下方 Ti、Al、V 原子)

Fig.6 Crystal (011) surface atom map under different technological parameters (the black is the upper part of the model, the red, blue and yellow are the lower Ti, Al, and V atoms, respectively): (a) 1000 K, 400 ps, 3.5 MPa; (b) 1100 K, 400 ps, 3.5 MPa; (c) 1183 K, 400 ps, 3.5 MPa; (d) 1283 K, 400 ps, 3.5 MPa

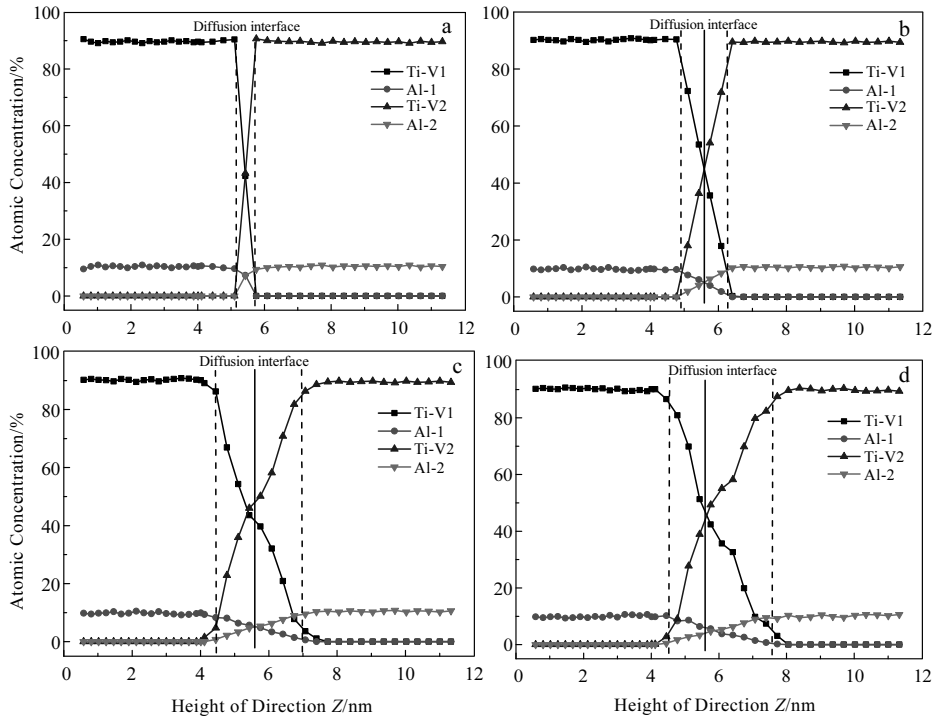


图 7 不同工艺参数下的扩散过程原子浓度分布图

Fig.7 Atomic concentration distribution diagram of the diffusion process under different technological parameters: (a) 1000 K, 400 ps, 3.5 MPa; (b)1100 K, 400 ps, 3.5 MPa; (c) 1183 K, 400 ps, 3.5 MPa; (d) 1283 K, 400 ps, 3.5MPa

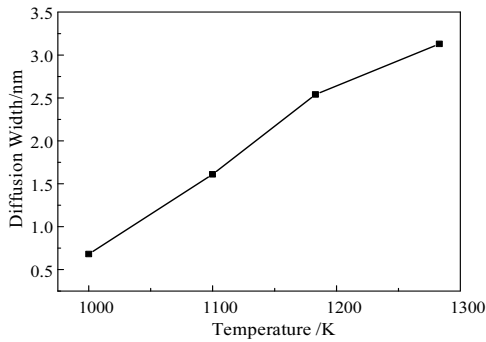


图 8 扩散连接宽度随保温温度的变化曲线

Fig.8 Diffusion connection width varying with the thermal insulation temperature

原子扩散系数表征各元素彼此间扩散能力的大小，考察扩散系数对讨论金属合金间的扩散机制有着重要意义。在分子动力学模拟中，可以通过计算均方差 (MSD)随模拟时间分布曲线斜率的 1/6 来得到相应元素的扩散系数。

图 9 为 Ti 原子在不同保温温度下，均方差与保温时间的关系曲线。从图 9 可以看出，在 1183 K 至 1500 K

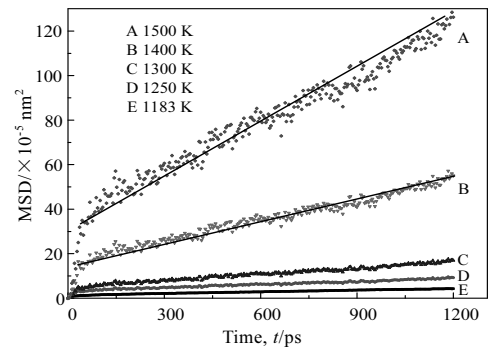


图 9 Ti 原子均方差(MSD)与保温时间的关系曲线

Fig.9 Relation curves of MSD (mean variance) with thermal insulation time for Ti atom

温度内，TC4 扩散连接过程中，Ti 原子的均方差随保温时间呈线性变化规律，通过线性拟合，可以求得不同保温温度下 Ti 原子的扩散系数。

表 1 给出了不同保温温度下，Ti 原子在 Ti-6Al-4V 合金系中的扩散系数。扩散过程中，元素扩散系数 D 取决于扩散激活能 Q 与保温温度 T 。扩散激活能 Q 是

原子跃迁时所具有的最小能量。扩散系数 D 、扩散激活能 Q 、保温温度 T 之间满足 Arrhenius 关系:

$$D = D_0 \exp(-Q/RT) \quad (6)$$

式中, D_0 为扩散因子, R 为扩散系数常数, 一般取 $8.314 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ 。

由式(6)可知, 扩散系数 D 与 $1/T$ 存在指数关系。图 10 为模拟得到的 Ti 原子在 Ti-6Al-4V 系统中的扩散系数与 $1/T$ 的关系分布图。从图 10 中可以看出, 在指数坐标中, 扩散系数与 $1/T$ 呈现较好的线性关系。一般情况下, 钛合金在 1155 K 时, 发生 α 、 β 相转变过程。从图中可以看出, 当保温温度小于 1155 K 时, Ti 原子扩散系数非常小, 量级在 $10^{-18} \text{ m}^2/\text{s}$ 。而当保温温度大于 1155 K 时, Ti 原子的扩散系数迅速增大到 $10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$, 扩散效果较好。

通过对表 1 中扩散系数 D 与 $1/T$ 的数据进行拟合, 得到 Ti 原子在 Ti-6Al-4V 系统中的扩散系数与保温温度 T 的关系近似满足:

$$D_{\text{Ti}} = 4.38 \times 10^{-9} \exp(-13593/T) \quad (7)$$

根据式(7)求得扩散因子 $D_0 = 4.38 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, 扩散激活能 $Q = 113.012 \text{ kJ/mol}$ 。该结果与 Murdock^[18]、Xu^[19] 等人的实验及模拟结果吻合较好。

表 1 Ti 原子在 Ti-6Al-4V 系统中的扩散系数

Table 1 Diffusion coefficients of Ti atoms in the Ti-6Al-4V system

Thermal insulation temperature/K	1183	1250	1300	1400	1500
Diffusion coefficient/ $\times 10^{-14} \text{ m}^2\cdot\text{s}^{-1}$	4.1	8.4	13	37	80

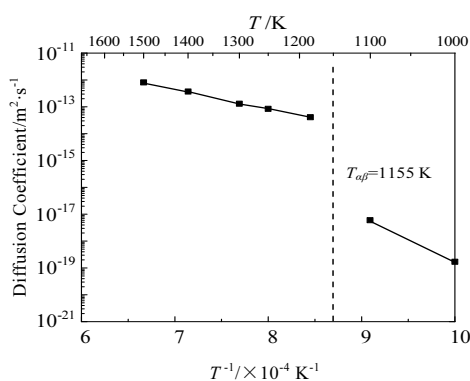


图 10 扩散系数与 $1/T$ 的关系曲线

Fig.10 Relation of diffusion coefficient and $1/T$

3 结 论

1) 利用 EAM 势和 Morse 势的混合势, 可以较好

地模拟 TC4 合金在 300 K 至 800 K 的时效相变过程。该过程主要为亚稳 β 相析出 α 新相; 达到平衡状态时, β 相结构的含量趋于稳定, 约为 23%。

2) TC4 扩散连接过程中, 主要是界面附近的 Ti 原子扩散, V 原子次之, 而 Al 原子很少扩散; 相同条件下, 扩散连接宽度随保温温度的升高而明显增大, 而且呈现较好的线性关系。

3) TC4 扩散连接过程中, Ti 原子在 Ti-6Al-4V 系统中的扩散系数与保温温度的倒数呈指数关系; 采用 Arrhenius 方程对模拟结果拟合, 得到的扩散系数、扩散因子及扩散激活能数值量级与实验结果一致。此外, 扩散系数模拟结果还显示保温温度存在临界值, 当保温温度低于 1100 K 时, TC4 中各原子几乎不发生扩散。

参考文献 References

[1] Grujicic M, Dang P. *Materials Science and Engineering A*[J], 1996, 205(1-2): 153

[2] Shimono M, Onodera H. *Materials Science and Engineering A*[J], 2001, 304-306(1-2): 515

[3] Huang Y, Lin L, Shanker A et al. *Heat Treatment Technology & Equipment*[J], 2011, 71(19): 6122

[4] Tang Fuling(汤富领), Zhou Jun(周 君), Bao Hongwei(包宏伟) et al. *Journal of Lanzhou University of Technology*(兰州理工大学学报)[J], 2015, 41(2): 1

[5] Semiatin S L, Knisley S L, Fagin P N et al. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2003, 34(10): 2377

[6] Wang Jing(王 敬). *Thesis for Master*(硕士论文)[D]. Zhenjiang: Jiangsu University of Science and Technology, 2012

[7] Zhu Lilong. *Journal of Materials Science*[J], 2017, 52(6): 3255

[8] Zhang Bin(张 斌), Zhang Xiaoyong(张晓泳), Li Chao(李 超) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(6): 1010

[9] Zhang Xiaoyong(张晓泳), Zhang Bin(张 斌), Li Chao(李 超) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(10): 2057

[10] Leach A R. *Molecular Modeling-Principles and Applications*[M]. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 2001.

[11] Xia Lu(夏 璐), Chen Song(陈 松), Lu Jiansheng(陆建生) et al. *Precious Metals*(贵金属)[J], 2013(4): 82

[12] Wang Lei(王 磊). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2009

[13] Parajuli Jwala, Mainardi Daniela S. *2017 AIChE Spring Meeting and 13th Global Congress on Process Safety*[C]. San

- Antonio: American Institute of Chemical Engineers (AIChE), 2017
- [14] Zope R, Mishin Y. *Physical Review B*[J], 2003, 68(2): 366
- [15] Liu Yongli(刘永利), Zhao Xing(赵星), Zhang Zongning(张宗宁) *et al. Journal of Physics*(物理学报) [J], 2009, 58(6): 246
- [16] Ackland G J, Jones A P. *Physical Review B*[J], 2006, 73(5): 54 104
- [17] Deng Wujing(邓武警), Shao Jie(邵杰), Zeng Yuansong(曾元松) *et al. Aeronautical Manufacturing Technology*(航空制造技术)[J], 2013, 436(16): 55
- [18] Murdock J F. *Acta Metallurgica*[J], 1964, 12(9): 1033
- [19] Xu W W. *Physical Chemistry Chemical Physics*[J], 2016, 18(25): 16 870

Molecular Dynamics Simulation of TC4 Aging Phase Transition and Diffusion Bonding

Liu Xiaogang, Zhang Shun, Li Baiyang, Guo Haiding

(Jiangsu Province Key Laboratory of Aerospace Power Systems, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: The aging phase transition and diffusion bonding of TC4 was studied by a molecular dynamics method. The radial distribution function of TC4 ternary alloy and the relative content of different crystal structures were analyzed. At the same time, the atomic concentration distribution, diffusion connection width and diffusion coefficient of diffusion bonding process at different thermal insulation temperatures were studied. The results show that the structural changes of TC4 in the aging phase transition are mainly manifested by the precipitation of new α phase from the metastable β phase, and the β phase content reaches 23% after the state stabilizes, which is in good agreement with the experimental results. In the process of TC4 diffusion bonding, the titanium atoms near the interface dominate the diffusion, and the vanadium atom diffusion is the secondary, while the aluminum atoms are relatively few. Under the same conditions, the diffusion connection width and the thermal insulation temperature are in a good linear relationship. The diffusion coefficient of titanium is exponentially related to the temperature of heat preservation, and the results are in accordance with the experiment.

Key words: molecular dynamics; TC4 ternary alloy; radial distribution function; phase change; diffusion coefficient

Corresponding author: Liu Xiaogang, Ph. D., Associate Professor, College of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, P. R. China, Tel: 0086-25-84892252, E-mail: liuxg03@nuaa.edu.cn