

Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的分子动力学模拟

朱 旭¹, 江五贵¹, 李源才¹, 吕 辉²

(1. 南昌航空大学 航空制造工程学院, 江西 南昌 330063)

(2. 南昌航空大学 土木建筑学院, 江西 南昌 330063)

摘 要: 采用分子动力学方法研究了 Ni/Ni₃Al 的拉伸力学性能。首先模拟了在室温、恒定应变速率环境下 γ' 强化相的含量对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响, 重点研究了具有 3 种典型特征的 γ' 强化相含量的 Ni/Ni₃Al 微观组织演化。研究表明: 相比于单晶 Ni, γ' 强化相可以提高 Ni/Ni₃Al 的抗拉强度。这是因为在塑性变形过程中, 随着位错的不断增殖, 位错密度逐渐增大, 导致位错塞积, 增大了位错运动的阻力, 提高了抗拉强度。接着研究了温度对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响, 发现 Ni/10%Ni₃Al (体积分数, 下同) 的抗拉强度随着温度的升高呈下降趋势。这是因为随着温度的升高, 原子动能增大, 导致原子热运动更剧烈, 原子间的结合力更弱, 脱离平衡位置的原子来不及回到平衡位置, fcc 结构转变为大量的 hcp 结构和其他无序原子排列结构, 导致晶格畸变, 降低了抗拉强度。最后研究了应变速率对 Ni/Ni₃Al 的拉伸力学性能的影响, 结果表明, 抗拉强度对低应变速率不敏感, 对高应变速率敏感。

关键词: Ni/Ni₃Al; γ' 强化; 温度效应; 应变速率效应; 分子动力学

中图分类号: TG132.3⁺3; TG146.1⁺5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2021)04-1254-09

镍基单晶高温合金因其优异的力学性能、蠕变性能和高温下的疲劳性能, 已成为先进航空涡轮叶片和工业燃气轮机叶片的关键材料^[1]。为了满足现代应用的具体要求, 对镍基单晶高温合金的发展提出了越来越高的要求。据不完全统计, 中国空军现役飞行的发动机事故中, 80% 都跟发动机叶片断裂失效有关, 而这么娇贵的部分一旦发生断裂失效, 对发动机乃至整个飞机的损害往往是致命性的。因此, 涡轮叶片的力学性能就决定了镍基单晶高温合金能否达到现代应用的要求。

随着计算机技术的发展, 分子动力学模拟在材料科学研究中得到了广泛的应用。近年来, 关于材料力学性能的影响的研究越来越受到学者们的关注。杨劫人等人^[2]采用分子动力学模拟研究了单晶钛在 1 K 下沿 [100]、[110] 和 [111] 取向下的拉伸变形行为。You 等人^[3]采用分子动力学方法分析了不同温度下铜的析出相对 Fe-1.1%Cu-0.9%Ni 三元合金拉伸性能的影响。Li 等人^[4]通过分子动力学模拟研究了空位、间隙和弗伦克尔对 α -Zr 抗拉强度的影响。Chang 等人^[5]采用分子动力学研究了晶体取向和应变速率对单晶钛纳米线拉伸力学性能的影响。以上研究都通过分子动力学研究了金属材料的拉伸力学性能, 这对金属材料拉伸力学性能的研究具有指导意义。

近年来, 许多研究者通过分子动力学方法对金属材料的拉伸力学性能以及微观结构演化做了大量的研究。Yang 等人^[6]采用分子动力学方法研究了三轴拉伸条件下不同因素对纳米晶铜的影响, 发现减小孔洞尺寸、提高应变速率和降低温度有助于提高单晶纳米铜的强度。Ma 等人^[7]采用分子动力学方法研究了单晶钨纳米线在不同温度下的拉伸力学性能和微观结构演变, 结果表明, 与 fcc 金属不同的是, 相变可以发生在 1 个方向或 2 个方向; 其损伤区可以是随机的, 也可以是双平面的。Weng 等人^[8]采用分子动力学方法模拟了具有共格、半共格和共格双界面 Cu/Ni 多层材料的拉伸行为。研究发现, 各种界面都可能成为位错运动的有力障碍。然而, 只有相干孪晶界面通过塑性变形表现出明显的强化作用, 这是由于双晶界面可以吸收斜位错, 降低其密度, 从而增强层状结构。Li 等人^[9]研究了镍基单晶高温合金 γ/γ' 相界面的失配位错网络演化和拉伸力学性能, 发现随着载荷的增加, 位错网络在 γ 基体中剪切 γ' 相可以有效地抑制位错的释放, 通过吸收基体的位错, 来增强自身的强度, 提高结构的稳定性。李萍等人^[10]基于分子动力学研究了钛单晶纳米柱在拉伸和压缩下的力学响应特征及晶体结构演化行为。结果表明, 沿 [0001] 晶向拉伸条件下, 主要塑性变形机制为伴生的 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶和基面层错; 而沿 [0001]

收稿日期: 2020-04-05

基金项目: 国家自然科学基金 (11772145)

作者简介: 朱 旭, 男, 1995 年生, 硕士生, 南昌航空大学航空制造工程学院, 江西 南昌 330063, E-mail: 2727619560@qq.com

晶向压缩条件下,基面<a>位错作为优先形核的缺陷参与塑性变形过程,随后锥面<c+a>位错出现并协调了轴向和横向变形,压缩条件下无孪晶产生。

目前,采用分子动力学来研究镍基单晶高温合金拉伸力学性能的文献较少。Shang 等人^[11]研究了孔洞尺寸对 Ni/Ni₃Al 界面在拉伸载荷作用下的塑性变形机制的影响。研究发现,预制孔洞半径较小的 Ni/Ni₃Al 界面结构具有比无孔洞结构更高的屈服应力。当孔洞半径为 0.3~1.5 nm 时,由 Ni/Ni₃Al 界面的晶格失配位错网络形成的完全位错 1/2<110>主导塑性变形。当预制孔洞半径大于 2.1 nm 时,屈服应力急剧下降。这是因为与初始界面晶格错配相比,肖克莱不全位错 1/6<112>主导塑性变形。Li 等人^[12]研究了镍基单晶高温合金在 γ/γ' 相界面失配位错网络演化和拉伸力学性能,发现在 γ/γ' 相界面上存在一个闭合的三维失配位错网络,位错网络的形状与晶格失配无关。关于 γ' 强化相的含量对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响的研究鲜有报道。因此,采用分子动力学方法重点研究不同 γ' 强化相的含量对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响,并同时探究温度与应变速率对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响,探讨其在单轴拉伸过程中的微观结构演化机理。

1 建模及方法

采用 AtomsK^[13] 软件建立分子动力学模型。Ni (γ) 和 Ni₃Al (γ') 的晶格常数分别为 $a_\gamma=0.352$ nm^[14] 和 $a_{\gamma'}=0.3573$ nm^[15], 利用晶体学理论知识,首先建立单晶 Ni 原子模型,如图 1a 所示,其长、宽和高约为 9 nm。为了探究不同 γ' 强化相含量对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响,通过改变 Ni₃Al 的原子模型大小,将其嵌入到单晶 Ni 基体中,分别建立了 γ' 强化相体积分数为 10%, 25%, 50%, 65%, 75% 的 5 种 Ni/Ni₃Al 原子模型以及 Ni₃Al 模型,模拟盒子大小与单晶 Ni 一致,长、

宽、高约为 9 nm。图 1b 给出了 Ni/Ni₃Al 的原子模型。在所有的原子模型中,原子总数约为 62 500 个,晶体取向均为 $X=[100]$ 、 $Y=[010]$ 、 $Z=[001]$ 。

利用开源大规模原子/分子并行模拟器 LAMMPS^[16] 对 Ni/Ni₃Al 分子动力学模型进行计算。考虑到原子数目以及模拟盒子的大小,3 个方向均采用周期性边界条件。原子的初始速度按 Maxwell-Boltzmann 分布。在拉伸模拟之前,采用 Nose/Hoover 热浴法使整个系统的温度保持恒定^[17]。拉伸模拟的时间步均为 1 fs,采用 NPT 系综对整个系统进行弛豫 50 ps^[18],使体系总能量降到最低。然后采用 NPT 系综在 $Z=[001]$ 方向上对分子动力学模型进行单轴拉伸^[19],使其他 2 个方向保持应力大小近似为 0。体系经弛豫后,采用 NPT 系综和 Deform 拉伸组合命令,即通过计算系统的应力与设定的应力进行对比反馈,自动调节晶胞长度,再计算出应变。所以,在 Z 方向上对系统施加应力,通过改变模拟盒子的大小,计算出应变。设置不同温度或应变速率分组进行讨论,并重新设定分析步,步长为 1 fs。系统输出应力和应变数据,根据该结果绘制应力-应变曲线。根据文献[20],观察应力-应变曲线峰值,绘制抗拉强度变化曲线。利用可视化工具 OVITO^[21] 进行结果后处理,基于共近邻分析 (CNA) 和位错分析 (DXA) 分析原子的结构演变和位错运动^[22,23]。

采用嵌入原子势 (EAM)^[24] 描述镍铝合金体系的力场,EAM 势可以非常准确地预测镍铝合金的力学性能^[25,26]。原子总能量^[27] 可以表示为

$$E_{\text{tot}} = \sum_i E_i \quad (1)$$

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

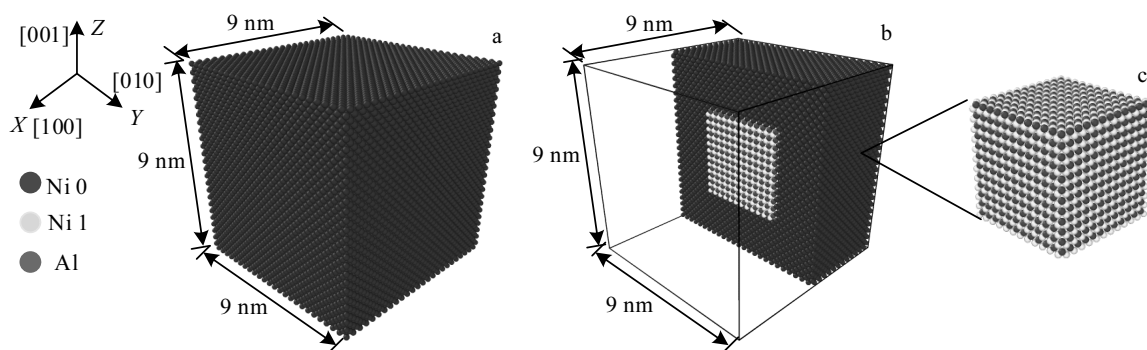


图 1 单晶 Ni, Ni/Ni₃Al 和 Ni₃Al 分子动力学模型

Fig.1 Molecular dynamics model: (a) single crystal Ni, (b) Ni/Ni₃Al, and (c) Ni₃Al

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} f_j(r_{ij}) \quad (3)$$

其中, E_{tot} 是所有原子的总能量; E_i 是第 i 个原子的能量; ρ_i 是除第 i 个原子以外的所有其他原子在 i 原子位置的电子云密度之和; $F_i(\rho_i)$ 是第 i 个原子依赖于电子云密度 ρ_i 的镶嵌能; r_{ij} 为 i 与 j 原子间的距离; $\Phi_{ij}(r_{ij})$ 是 i 原子与 j 原子在 r_{ij} 距离的相互作用势; $f_j(r_{ij})$ 是原子 j 在 r_{ij} 距离的电子云密度。

2 结果与讨论

2.1 γ' 强化相的含量对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响

为了探究 γ' 强化相含量对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响, 建立了一系列 γ' 强化相体积分数在 0%~100% 范围内的原子模型。设置温度为 300 K, 以 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 应变速率分别对不同 γ' 强化相含量的原子模型进行 Z 向单轴拉伸。图 2 绘出了具有不同 γ' 强化相含量的拉伸力学性能曲线。

从图 2a、2b 中可以看出, γ' 强化相含量对 Ni/Ni₃Al 的力学行为有显著影响。在 0%~10% 的范围内, 随着 γ' 强化相的含量的增加, 其抗拉强度和断裂应变增大明显。 γ' 强化相的体积分数为 10% 时, 抗拉强度达到最大。随着 γ' 强化相的含量的增大, 在 10% 之后, 抗

拉强度和断裂应变随着 γ' 强化相的含量的增加呈下降趋势, 但抗拉强度始终高于单晶 Ni, 这是因为 γ' 强化相的存在提高了抗拉强度。从图 2a 中还可以看出, 在弹性变形阶段, 应力-应变曲线均保持线性关系, 直至到达抗拉强度, 此时应力达到最大值。随着拉伸的加载增加, 进入到塑性变形阶段, 应力急剧下降。当 γ' 强化相的体积分数为 100% 时, 应力下降到 7.5 GPa 左右, 随着拉伸的进行, 应力再次上升, 应力达到 10.2 GPa 左右之后, 应力急剧下降。这是因为在拉伸过程中, γ' 强化相的体积分数为 100% 时发生了与其他 6 种情况不同的微观结构变化, 此时出现部分 other 原子转化成 fcc 有序原子, 即部分原子从无序到有序, 部分原子重新回到平衡位置, 形成新的有序晶格结构, 这使得应力出现短暂的上升过程。从整个过程来看, 应力-应变曲线呈“之”字形的上升和下降, 这种现象被 Koh 等人^[28] 的研究所肯定, 说明该合金具有较好的塑性。然而, 其他 6 条应力-应变曲线并没有出现这种二次上升的现象。这是因为其他 6 种原子模型在整个拉伸过程中的微观结构演变与 Ni₃Al 不同, 没有出现从无序到有序这个过程。图 2c 所示为 Ni/Ni₃Al 从 $-Y$ 到 Y 路径的平均应力分布。选取了 4 种不同 γ' 强化相含量的原子模型, 从 $-Y$ 到 Y 向的距离为 9 nm, 平均

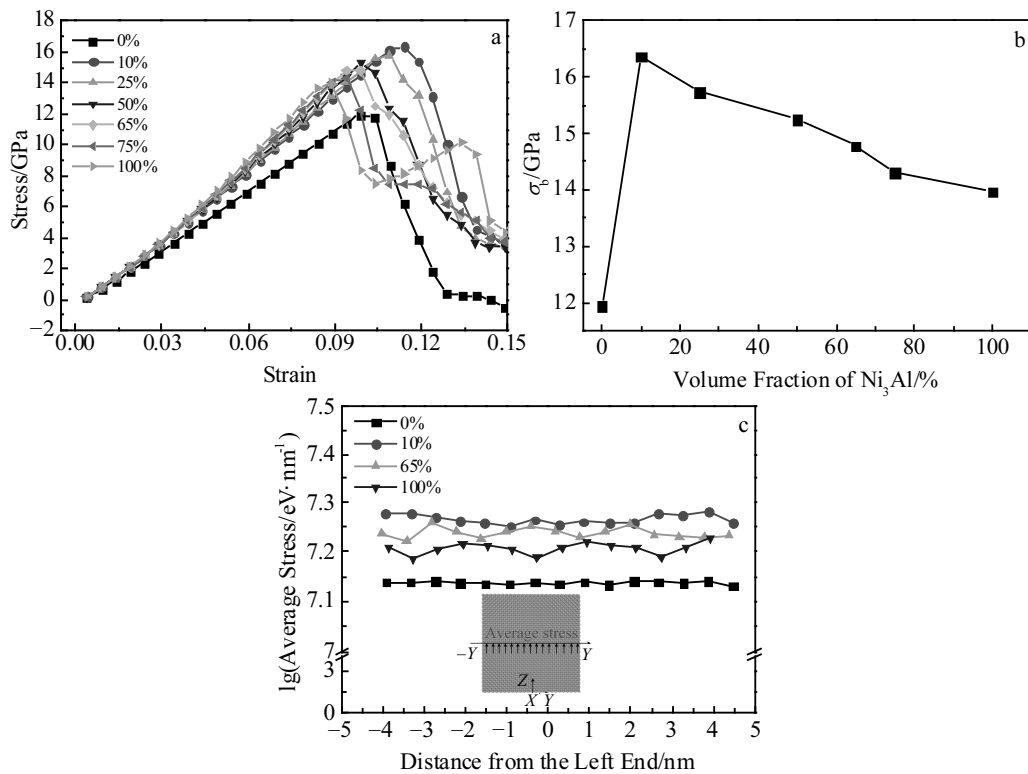


图 2 不同 γ' 强化相含量的 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能曲线: 应力-应变曲线; 抗拉强度曲线; 从 $-Y$ 到 Y 路径的平均应力分布

Fig.2 Tensile mechanical properties curves of Ni/Ni₃Al with different contents of γ' strengthening phase: (a) stress-strain curves, (b) tensile strength curves, and (c) average stress distribution of the path from $-Y$ to Y

分成 15 个组, 计算了从 $-Y$ 到 Y 距离的 Z 向平均应力, 可以看出 Ni/10%Ni₃Al 的平均应力普遍高于其他原子模型。

图 3 展示了合金达到各自抗拉强度后的拉伸原子图。从图 3 中可以看出, 当 γ' 强化相含量为 0% 时, 原子模型出现了大量非晶化。随着拉伸的进行, 应力随着应变逐渐增大, 达到其抗拉强度, 应力集中导致原子热运动更加剧烈, 原子动能增加, 大量原子脱离平衡位置, 导致晶格畸变, 这是导致原子模型出现大量非晶化的原因。 γ' 强化相的体积分数为 10% 时, 表面非晶化程度较低, 很好地保持了原有 fcc 模型, 表面压力处于较低水平, 如图 3b 所示。此时 γ' 相强化作用明显, 导致在 γ' 强化相含量为 10% 时抗拉强度较高。由于在 NPT 系综和周期性边界条件下, γ' 强化相的体积分数为 65% 和 100% 时, 大量表面原子非晶化, 如图 3c、3d 所示。随着应变增加, 表面原子失去邻近原子, 形成断键, 导致表面原子的配位数与内部原子不同。表面原子由于受力对称性被打破而偏离平衡位置, 产生表面张力, 同时表面原子还受到内部原子的拉应力作用, 这使得 γ' 相强化作用不明显。所以, γ' 强化相的体积分数为 10% 时, Ni/Ni₃Al 在很小的应变下即达到抗拉强度。 γ' 强化相的体积分数为 10% 之后, 非晶化程度和 γ' 强化相的含量同步增加, 相互作用相互影响。宏观实验中的镍基单晶高温合金中除了含有 Ni 和 Al 元素外, 还含有其他金属元素, 例如 Co、Cr、W、Mo、Re、Ru 等, 而研究所创建的模型中仅有 Ni 和 Al 元素, 这些其他元素也是影响 Ni/Ni₃Al 抗拉强度的原因之一。例如, 在第 1 代镍基单晶高温合金的基础上添加 Re 元素发展而来的第 2 代镍基单晶高温合金的耐高温能力提高了大约 30 °C^[29]。综上所述, 在本文所研究的体系内, Ni/10%Ni₃Al 的抗拉强度最好。

从图 2a 还可以看出, 应力-应变曲线可以分为 3 大类, 下面将对单晶 Ni, Ni/10%Ni₃Al 以及 Ni₃Al 等 3 个

比较具有代表性的原子模型做进一步的微观结构分析。

2.1.1 单晶 Ni

图 4 给出了单晶 Ni 在拉伸过程中的微观结构演变。在初始弹性阶段 ($0 < \epsilon \leq 0.089$), 每个原子围绕其平衡点阵位置运动, 原子模型保持了 fcc 的有序结构, 但是表面极少数的 fcc 原子由于较高的表面能而变成 other 原子, 如图 4c 所示。随着应变增大至 0.099, 靠近表面的 fcc 原子越来越多转化为 other 原子, fcc 原子数量逐渐减少, other 原子不断增多, 如图 4b。在接下来的阶段 ($0.099 < \epsilon \leq 0.109$), fcc 原子数量急速下降, 同时 other 原子数量急速上升, 如图 4b 所示。随着应变的增加, hcp 原子逐渐在表面形成, 塑性变形开始, 如图 4c。当应变为 $0.109 < \epsilon \leq 0.144$ 时, hcp 原子数量显著增加, 位错大量增殖, 塑性变形加快。随着应变的不断增大, 单晶 Ni 的内应力得到释放, 应变-应力曲线呈下降趋势。同时, 随着 fcc, hcp 以及 other 原子间的相互转变, fcc 原子的数目先增加后减少。在整个拉伸过程中, 单晶 Ni 无法恢复其 fcc 有序结构。在应变达到 0.144 时, 应力下降到 0, 因为采用 NPT 系综进行拉伸, 所以未发现形似纳米线的断裂原子模型。与初始弹性阶段的模型对比, 可以明显地看到该原子模型出现了明显的颈缩现象, 如图 4c 中 <4> 所示。

2.1.2 Ni/10%Ni₃Al

图 5 给出了 Ni/10%Ni₃Al 在拉伸过程中的微观结构演变。在初始的弹性阶段 ($0 < \epsilon \leq 0.099$), 每个原子围绕其平衡点阵位置运动, 原子模型保持了 fcc 的有序结构, 同样只有极少数 fcc 原子转变成了 other 原子, 如图 5c。随着应变增大至 0.114, 达到其抗拉强度, 一部分表面的 fcc 原子脱离平衡位置变成 other 原子。从图 5b 中可以看出 fcc 原子在缓慢减少, 同时 other 原子在缓慢增加, 这种微观结构特征与单晶 Ni 相似。随着拉伸的进行, 在接下来的阶段 ($0.114 < \epsilon \leq 0.124$), fcc 原子数量急速下降, other 原子数量急速上升, 同

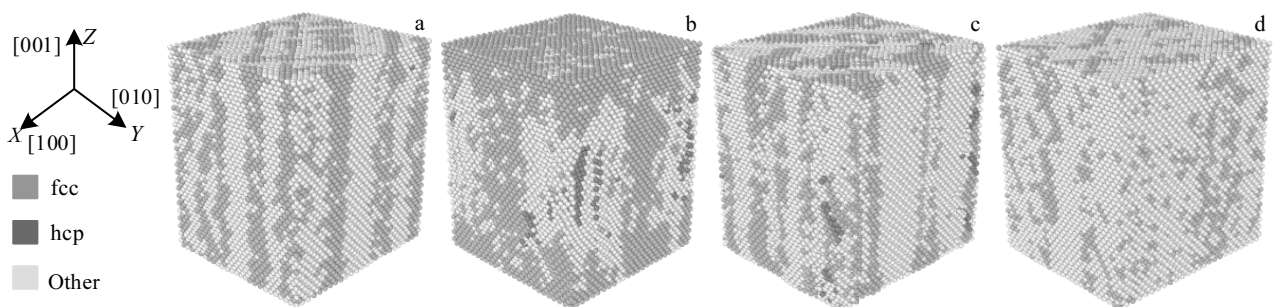


图 3 不同 γ' 强化相含量的 Ni/Ni₃Al 拉伸原子图

Fig.3 Atom snapshots of tensiling of Ni/Ni₃Al with different contents of γ' strengthening phase: (a) 0%, (b) 10%, (c) 65%, and (d) 100%

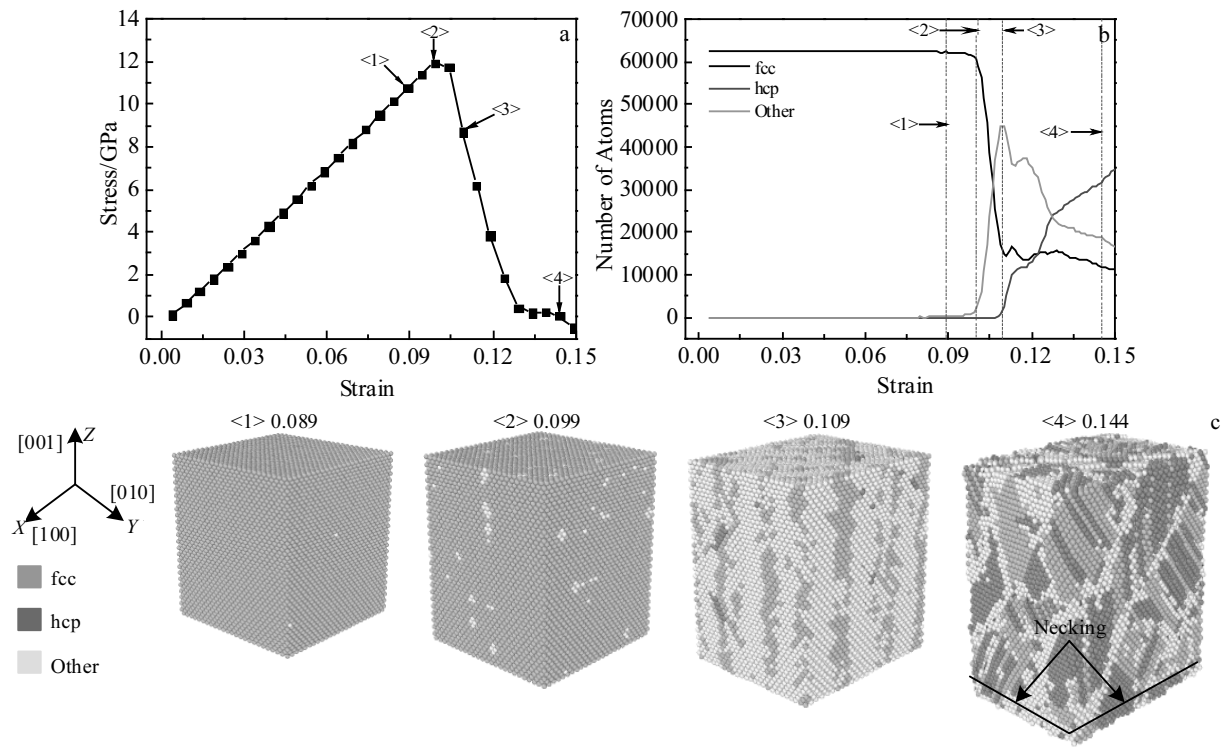


图 4 单晶 Ni 的微观结构演变：应力-应变曲线；fcc, hcp 以及 other 原子数目随应变的变化；拉伸原子图

Fig.4 Microstructure evolution of single crystal Ni: (a) stress-strain curve, <1>~<4> present four typical strain values; (b) changes of the numbers of fcc, hcp and other atom clusters with strain; (c) atom snapshots of tensiling

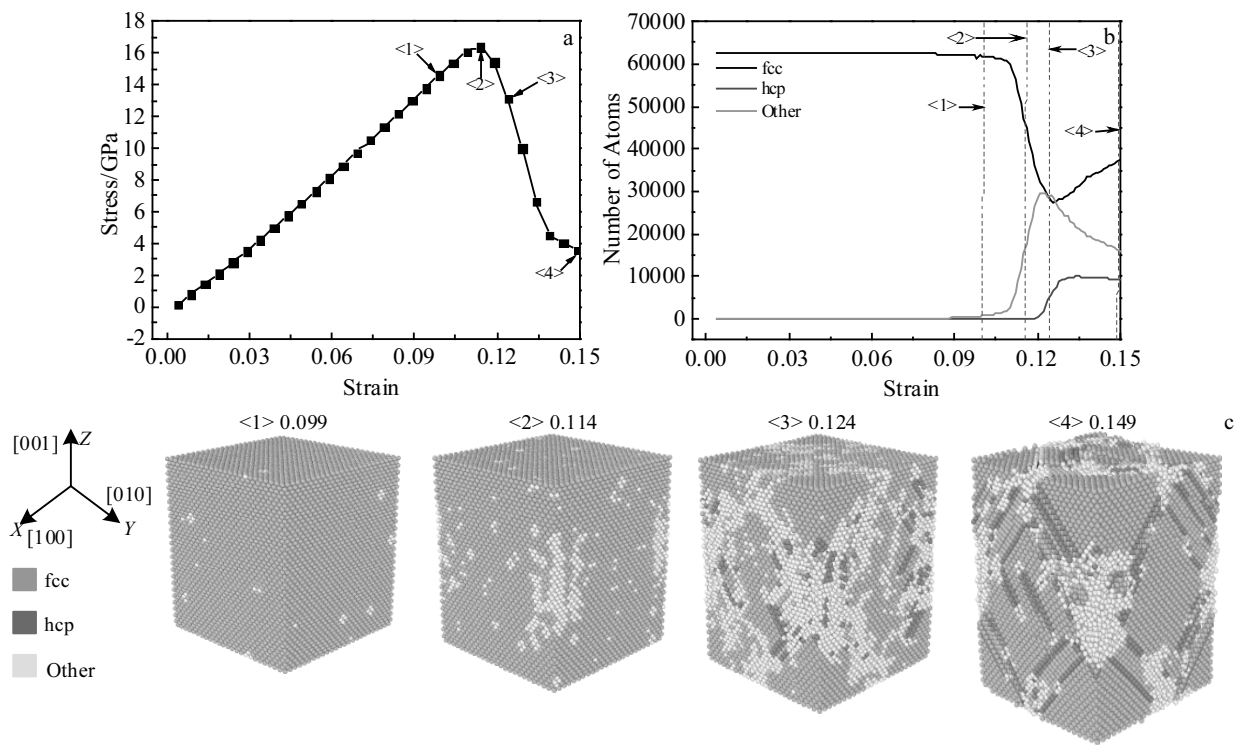


图 5 Ni/10%Ni₃Al 的微观结构演变：应力-应变曲线；fcc, hcp 以及 other 原子数目随应变的变化；拉伸原子图

Fig.5 Microstructure evolution of Ni/10%Ni₃Al: (a) stress-strain curve, <1>~<4> present four typical strain values; (b) changes of the numbers of fcc, hcp and other atom clusters with strain; (c) atom snapshots of tensiling

时一些 hcp 原子数目开始增多, 大量的 fcc 原子数目转变成 other 原子以及少部分 hcp 原子, 如图 5b 所示。随着拉伸的不断进行, 塑性变形加快。当应变为 $0.124 < \epsilon \leq 0.149$ 时, 部分 other 原子回到平衡位置, 重新转变成 fcc 原子以及部分 hcp 原子, 如图 5b 所示。hcp 原子到达一定的应变之后不再生成, 之后的 other 原子数目下降的那部分全部转变成 fcc 原子, 如图 5b 所示。从图 5c 可以看出, 在整个拉伸结构演变过程中, 相比于之前的单晶 Ni, 该模型并没有发生明显的颈缩现象, 这说明 Ni/10%Ni₃Al 由于 γ 强化相的存在, 使该原子模型得到了强化, 大大提高了抗拉强度和断裂应变, 这也可以从图 2a 的应力-应变曲线中得到证实。

2.1.3 Ni₃Al

图 6 给出了 Ni₃Al 在拉伸过程中的微观结构演变。

在初始弹性阶段 ($0 < \epsilon \leq 0.074$), 每个原子围绕其平衡点阵位置运动, 原子模型保持了 fcc 的有序结构, 原子模型表面只有极少数的 other 原子产生, 如图 6c, 这与之前的单晶 Ni 类似。随着拉伸的进一步进行, 应变逐渐增大, 当应变增大至 0.089 时, 达到其抗拉强度, 同样地, 由于较高的应力导致部分 fcc 原子离开平衡位置, 变成 other 原子, 分布在表面。在接下来的阶段 ($0.089 < \epsilon \leq 0.094$), 模型表面的大量 fcc 原子在短时间内发生结构畸变, 变成 other 原子, 非晶化程度加剧, 如图 6c。随着应变增大至 0.104, 越来越多的 fcc 原子离开平衡位置, 基本转变成 other 原子。当应变达到 0.134 时, 该模型全部由 other 原子构成, 如图 6c, 完全变成了一个无序的结构, 此时的变形抗力达到第 2 次峰值。在接下来的阶段 ($0.134 < \epsilon \leq 0.149$),

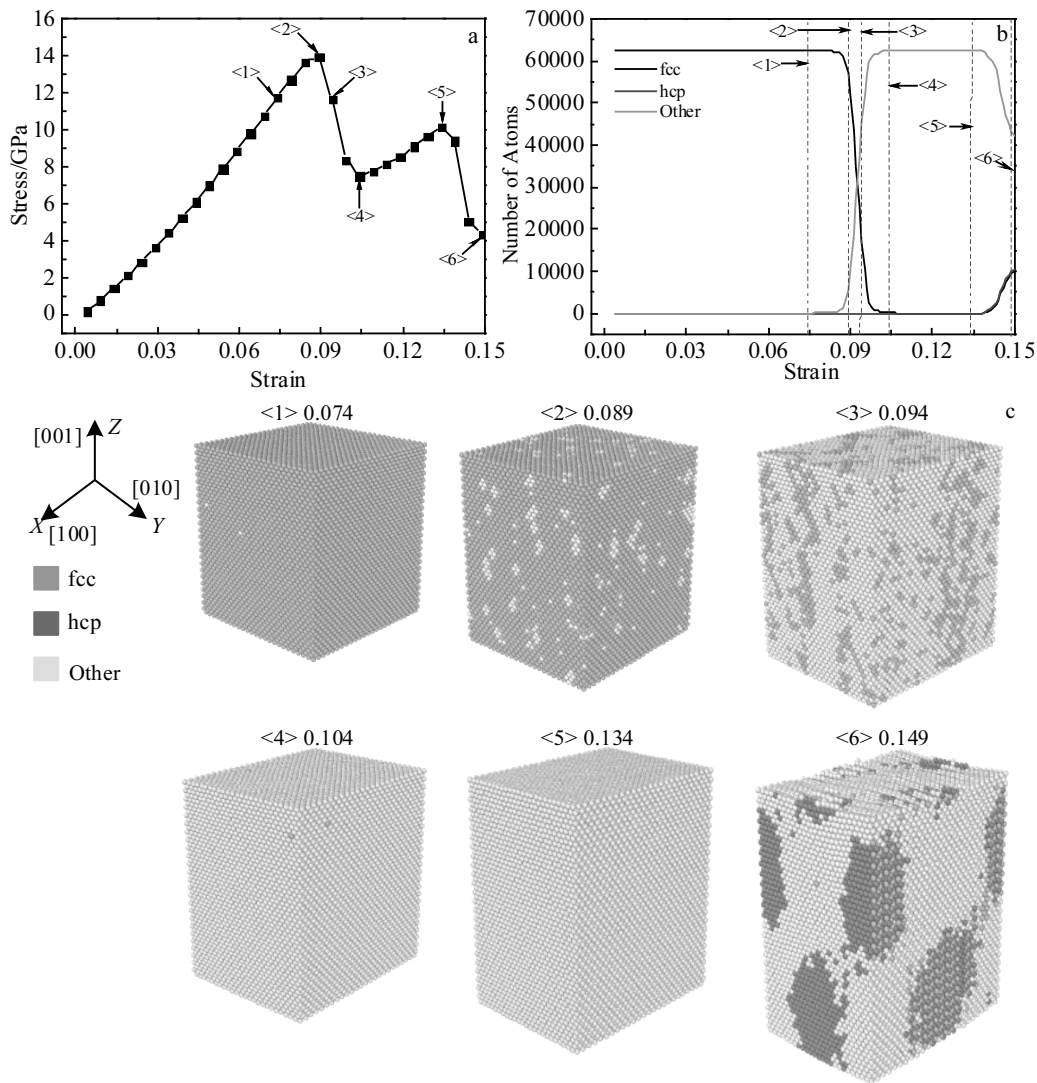


图 6 Ni₃Al 的微观结构演变: 应力-应变曲线; fcc, hcp 以及 other 原子数目随应变的变化; 拉伸原子图
 Fig.6 Microstructure evolution of Ni₃Al: (a) stress-strain curve, <1>-<6> present six typical strain values; (b) changes of the numbers of fcc, hcp and other atom clusters with strain; (c) atom snapshots of tensiling

随着应变的不断增大,部分 other 原子重新回到平衡位置,转变成 fcc 原子,部分 other 原子转变成 hcp 原子,这可以从图 6b 中得到证实。从整个拉伸过程来看, Ni₃Al 的原子结构演化可以概括为:有序-无序-部分有序,说明该合金发生了二次强化,具有较好的塑性。

结合单晶 Ni, Ni/10%Ni₃Al 和 Ni₃Al 的微观结构演变,可以看出,这 3 种拉伸体系都是先经过初始弹性阶段,每个原子围绕其平衡点阵位置运动,原子表面只有极少数 other 原子产生。随着进一步拉伸,达到其抗拉强度,一部分表面的 fcc 原子脱离平衡位置变成 other 原子, fcc 原子在缓慢减少,同时 other 原子在缓慢增加。然而,从整个拉伸过程来看,单晶 Ni 没有恢复其原有的 fcc 结构,发生了宏观断裂。Ni/10%Ni₃Al 由于 γ' 强化相的存在,使该原子模型得到了强化,大大提高了抗拉强度和断裂应变。Ni₃Al 发生了二次强化,具有较好的塑性。

2.2 温度对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响

为了探究温度对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响,采用了 10 K 到 1300 K 等 7 种不同的变形温度,设置同样的应变速率为 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$,对 Ni/10%Ni₃Al 进行 Z 向单轴拉伸。图 7a 所示为不同温度下 Ni/10%Ni₃Al 的应力-应变曲线,图 7b 所示为不同温度下 Ni/10%Ni₃Al 的抗拉强度曲线。

Ni/10%Ni₃Al 应力-应变曲线趋势与 Feng 等人^[30]的研究较为吻合。从图 7a 中可以看出,随着温度的升高,其抗拉强度依次减小。从图 7b 可以看出, Ni/10%Ni₃Al 在不同温度下的抗拉强度分别为: 18.85 GPa (10 K), 16.36 GPa (300 K), 14.70 GPa (500 K), 13.44 GPa (700 K), 11.26 GPa (900 K), 9.51 GPa (1100 K), 7.89 GPa (1300 K)。很明显,温度的升高导致原子的动能增大,原子热运动加剧,原子间的键能减小,原子间的结合力减小,原子更容易脱离平衡位置。因此,晶体结构更容易变形,抗拉强度更低。通过拟合抗拉强度曲线,可以用函数表达式 $y = -0.00852x + 19.00139$ 对 Ni/10%Ni₃Al 不同温度下的抗拉强度进行预测。

此外,随着温度的升高,原子总能量增大,原子热运动的不断加剧导致处在拉伸过程中的原子来不及回到平衡位置, fcc 结构转变为大量的 hcp 结构和其他无序原子排列结构,导致晶格畸变。温度越高,原子模型的非晶化越严重,使得 γ' 强化相对位错的阻碍作用越低,所以在模拟的温度范围内,整个原子模型的抗拉强度都随着温度的升高而降低。

2.3 应变速率对 Ni/Ni₃Al 拉伸力学性能的影响

为了研究应变速率对拉伸变形机制的影响,设置变形温度为 300 K,采用了从 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 到 $5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$

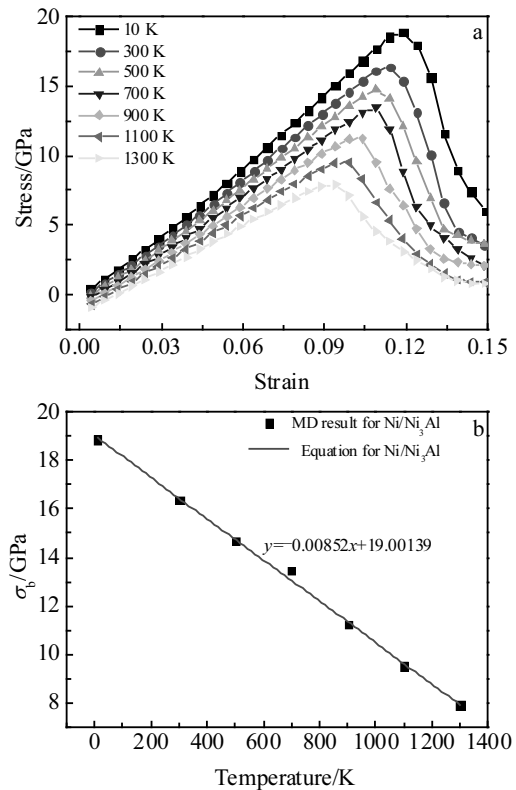


图 7 不同温度下 Ni/10%Ni₃Al 的应力-应变曲线和抗拉强度曲线
Fig.7 Stress-strain curves (a) and tensile strength curve (b) of Ni/10%Ni₃Al at different temperatures

等 6 种不同的应变速率,对 Ni/10%Ni₃Al 进行 Z 向单轴拉伸。图 8a 是不同应变速率下 Ni/10%Ni₃Al 的拉伸应力-应变曲线,图 8b 是不同应变速率下 Ni/10%Ni₃Al 的抗拉强度曲线。

图 8a 的应力-应变曲线的趋势与 Wen 等人^[31]的研究较为吻合。在低应变速率下 ($\dot{\epsilon} \leq 1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$),应力在初始弹性变形阶段随应变线性增加。随着应变的增大,应力达到峰值,然后急剧下降。这种下降过程通常被认为是金属材料的屈服阶段。随着 Ni/10%Ni₃Al 的进一步拉伸,应力随应变线性增加,然后突然再次下降。由于 γ' 强化相的强化作用,应力不会达到 0,应力-应变曲线呈现出明显的锯齿状特征。对于中等应变速率 ($1 \times 10^9 \text{ s}^{-1} < \dot{\epsilon} \leq 1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$),初始阶段的应力-应变曲线与低应变速率下 ($\dot{\epsilon} \leq 1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$) 的应力-应变曲线基本重合,应力-应变曲线呈现出明显的波浪状特征,说明 Ni/10%Ni₃Al 的弹性特性对应变速率不敏感。对于高应变速率 ($\dot{\epsilon} > 1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$),屈服应力明显增大,随着拉伸的进行,应力达到峰值,然后平缓下降至 5 GPa 左右,然后随着应变的增加,应力-应变曲线平稳前进,

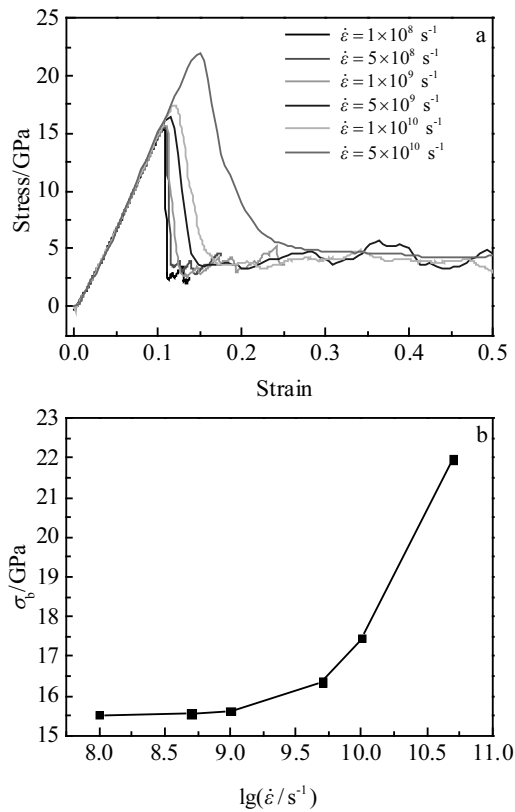


图8 不同应变速率下 Ni/10%Ni₃Al 的应力-应变曲线和抗拉强度曲线

Fig.8 Stress-strain curves (a) and tensile strength curve (b) of Ni/10%Ni₃Al at different strain rates

表现出较好的塑性。从图 8b 可以看出, 在应变速率为 1×10^8 , 5×10^8 和 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时, 它们的屈服应力基本一致。当应变速率超过 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时, Ni/10%Ni₃Al 的屈服应力逐渐增大, 并且在应变速率超过 $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 时, 其抗拉强度增大明显。这说明抗拉强度对低应变速率不敏感, 对高应变速率敏感, 可以看出, Ni/10%Ni₃Al 在高应变速率下具有较高的抗拉强度。

3 结论

1) Ni/10%Ni₃Al 的抗拉强度最好, 当 γ 强化相的体积分数超过 10% 时, 抗拉强度呈下降趋势。相比于单晶 Ni 基体, γ 强化相可以提高 Ni/Ni₃Al 的拉伸力学性能。这是因为在塑性变形过程中, 随着位错的不断增殖, 位错密度逐渐增大, 增大了位错运动的阻力, 提高了抗拉强度。

2) 在 10~1300 K 的温度范围内, Ni/10%Ni₃Al 的抗拉强度随着温度的升高呈下降趋势。这是因为随着温度的升高, 原子动能增大, 导致原子热运动加剧, 原

子间的结合力减弱, 脱离平衡位置的原子来不及回到平衡位置, fcc 结构变成大量的 hcp 结构和 other 原子排列结构, 导致晶格畸变, 降低了抗拉强度。可以用函数表达式 $y = -0.00852x + 19.00139$ 对 Ni/10%Ni₃Al 不同温度下的抗拉强度进行预测。

3) 在低应变速率下 ($\dot{\epsilon} \leq 1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$), Ni/10%Ni₃Al 的应力-应变曲线呈现出明显的锯齿状特征。对于中等应变速率 ($1 \times 10^9 \text{ s}^{-1} < \dot{\epsilon} \leq 1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$), 应力-应变曲线呈现出明显的波浪状特征。对于高应变速率 ($\dot{\epsilon} > 1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$), 抗拉强度明显增大, 这说明抗拉强度对低应变速率不敏感, 对高应变速率敏感。

参考文献 References

- [1] Wang G, Liu J, Liu J *et al.* *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2016, 32(10): 1003
- [2] Yang Jieren(杨劫人), Wang Hu(王虎), Hu Rui(胡锐) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(5): 1380
- [3] You L J, Hu L J, Xie Y P *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2016, 118: 236
- [4] Li Y, Chen H, Chen Y *et al.* *Nuclear Materials and Energy*[J], 2019, 20: 100 683
- [5] Chang L, Zhou C Y, Liu H X *et al.* *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2018, 34(5): 864
- [6] Yang Y, Wang X, Zhang G *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2017, 138: 377
- [7] Ma B, Rao Q, He Y. *Computational Materials Science*[J], 2016, 117: 40
- [8] Weng S, Ning H, Hu N *et al.* *Materials & Design*[J], 2016, 111: 1
- [9] Li N L, Wu W P, Nie K. *Physics Letters A*[J], 2018, 382(20): 1361
- [10] Li Ping(李萍), Chu Qian(储潜), Yan Siliang(严思梁) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(6): 1835
- [11] Shang J, Yang F, Li C *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2018, 148: 200
- [12] Li Y L, Wu W P, Ruan Z G. *Acta Metallurgica Sinica*[J], 2016, 29(7): 689
- [13] Hirel P. *Computer Physics Communications*[J], 2015, 197: 212
- [14] Kayser F X, Stassis C. *Physica Status Solidi (a)*[J], 1981, 64(1): 335
- [15] Voter A F, Chen S P. *MRS Online Proceedings Library Archive*[C]. Cambridge: Cambridge University Press, 1986,

- 82: 175
- [16] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1
- [17] Verlet L. *Physical Review*[J], 1967, 159(1): 98
- [18] Li Y, Chen H, Chen Y *et al. Nuclear Materials and Energy*[J], 2019, 20: 100 683
- [19] Tian X, Li D, Yu Y *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2017, 690: 277
- [20] Ma B, Rao Q, He Y. *Computational Materials Science*[J], 2016, 117: 40
- [21] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2009, 18(1): 15 012
- [22] Faken D, Jónsson H. *Computational Materials Science*[J], 1994, 2(2): 279
- [23] Stukowski A, Albe K. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(8): 85 001
- [24] Mishin Y. *Acta Materialia*[J], 2004, 52(6): 1451
- [25] Wang Y J, Gao G J J, Ogata S. *Applied Physics Letters*[J], 2013, 102(4): 41 902
- [26] Amodeo J, Begau C, Bitzek E. *Materials Research Letters*[J], 2014, 2(3): 140
- [27] Johnson R A. *Physical Review B*[J], 1988, 37(8): 3924
- [28] Koh S J A, Lee H P, Lu C *et al. Physical Review B*[J], 2005, 72(8): 85 414
- [29] Celal A D, Duhl D N. *Superalloys 1988*[C]. Hartford: Pratt & Whitney Press, 1988: 235
- [30] Feng Y X, Shang J X, Qin S J. *Computational Materials Science*[J], 2019, 159: 265
- [31] Wen Y H, Zhu Z Z, Zhu R Z. *Computational Materials Science*[J], 2008, 41(4): 553

Molecular Dynamics Simulation of Tensile Mechanical Properties of Ni/Ni₃Al

Zhu Xu¹, Jiang Wugui¹, Li Yuancai¹, Lv Hui²

(1. School of Aeronautical Manufacturing Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

(2. School of Civil Engineering and Architecture, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

Abstract: The tensile mechanical properties of Ni/Ni₃Al were simulated by molecular dynamics. First, the effect of the content of γ' strengthening phase on the tensile mechanical properties of Ni/Ni₃Al was studied at room temperature and constant strain rate. The microstructure evolution of Ni/Ni₃Al under the content of γ' strengthening phase with three typical characteristics was especially investigated. Compared with single crystal Ni, it is found that the γ' strengthening phase can increase the tensile strength of Ni/Ni₃Al. This is because during the plastic deformation process, as the dislocations continue to multiply, the dislocation density gradually increases, resulting in dislocation plugging, which increases the resistance to dislocation movement, thereby increasing the tensile strength. Secondly, the effect of temperature on the tensile mechanical properties of Ni/Ni₃Al was studied, and it is found that the tensile strength of Ni/10vol%Ni₃Al decreases with increasing temperature. This is because as the increasing temperature, the internal kinetic energy of the atom increases, resulting in the more intense thermal motion of the atoms, and the weaker bonding force between the atoms. The atoms leaving the equilibrium position have no time to return to the equilibrium position, and the fcc structures transform into a large number of hcp structures and other atomic arrangements, which cause lattice distortion and reduce tensile strength. Finally, the effect of strain rate on the tensile mechanical properties of Ni/Ni₃Al was studied. The results show that the tensile strength is not sensitive to low strain rate, but sensitive to high strain rate.

Key words: Ni/Ni₃Al; γ' strengthening; temperature effect; strain rate effect; molecular dynamics

Corresponding author: Jiang Wugui, Ph. D., Professor, School of Aeronautical Manufacturing Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, P. R. China, E-mail: jiangwugui@nchu.edu.cn