

# 单晶 $\gamma$ -钛铝沿不同晶向裂纹扩展的分子动力学研究

罗德春<sup>1,2</sup>, 芮执元<sup>1,2</sup>, 付蓉<sup>1,2</sup>, 张玲<sup>3</sup>, 曹卉<sup>1,2</sup>, 剡昌锋<sup>1,2</sup>

(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)

(3. 兰州工业学院, 甘肃 兰州 730050)

**摘要:** 利用分子动力学方法模拟了单晶  $\gamma$ -TiAl 合金预置微裂纹单向拉伸过程中沿不同晶向的扩展过程。探索了 [100]、[110] 及 [111] 晶向下微裂纹扩展过程中的力学行为及扩展形式, 研究表明: 3 种晶向下微裂纹启裂应力依次为 5.766、6.26、6.57 GPa, 裂纹强度依次增强; [100] 晶向下微裂纹扩展呈完全脆性解理特征, 应力始终集中在裂尖且随时间增加而减小; [110] 晶向下微裂纹初期以脆性解理扩展, 之后裂尖出现原子错排及发射位错导致钝化现象产生, 随后萌生与主裂纹不同平面的子裂纹, 应力始终集中在裂尖且随时间增加而递减, 主、子裂纹相连后形成台阶状初断裂纹; [111] 晶向下微裂纹通过裂尖发射滑移位错及局部衍生孪晶进行扩展, 表现出明显的取向效应, 材料强度出现强化效应, 应力集中在裂尖及孪晶面上并随加载而减小; 不同晶向下微裂纹扩展过程具有完全不同的特性。

**关键词:**  $\gamma$ -TiAl 合金; 分子动力学; 晶向; 裂纹扩展

**中图分类号:** TG146.2<sup>+</sup>3; O346.1

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1002-185X(2017)12-3792-07

近年来, 轻质、高温结构材料是研究者所关注的重点, TiAl 基合金作为新型结构材料其中之一, 目前主要用于发动机用高压压缩机叶片、高压涡轮叶片、低压涡轮、过度导管梁、排气阀、喷嘴等<sup>[1]</sup>, TiAl 基合金本身具有的优良特性决定了它在这些重要领域的应用。

关于 TiAl 基合金性能的实验研究已经非常广泛。对于各种情况下对近片层组织、双态组织和等轴  $\gamma$  合金的钛铝基合金的裂纹扩展影响进行了充分研究, 得到了一系列有益的结论<sup>[2-14]</sup>。但一般来说, 裂纹的形核及其扩展初期都是在原子或分子尺度上进行的, 而建立在宏观连续介质力学上的裂纹扩展机理, 由于其均匀连续性假设, 也与实际情况相差甚远, 不再适合解释原子或分子尺度下的断裂过程, 因此有必要建立微纳米尺度下的新型裂纹运动机理来解释裂纹萌生和扩展的规律。而分子动力学方法是近些年发展起来的, 在分子、原子尺度上研究微观特性的有力工具。Tang 等<sup>[15]</sup> 用分子动力学模拟了  $\gamma$ -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。曲洪磊等<sup>[16]</sup> 通过对  $\gamma$ -TiAl 单晶纳米杆在室温下的拉伸变形过

程的分子动力学方法模拟发现其塑性变形机制为孪生和普通位错, 变形过程中积累的应变能释放导致出现应力水平突然下降的现象。刘永利等<sup>[17]</sup> 利用分子动力学模拟 TiAl/Ti3Al 双相体系中的剪切变形过程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。张斌<sup>[18]</sup> 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, 在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 等<sup>[19]</sup> 用分子动力学对  $\gamma$ -TiAl 中  $\langle 110 \rangle$  倾斜晶界断裂行为进行了研究, 发现晶粒的相对取向及晶界特定的原子结构是影响位错形核临界应力的 2 个主要因素。

上述有关 TiAl 基合金的分子动力学研究主要集中在剪切变形和拉伸变形、相变行为、TiAl 化合物中缺陷的演变等, 但是这些研究并未涉及  $\gamma$ -TiAl 合金中晶向对于裂纹扩展影响的研究。采用分子动力学的模拟方法, 利用 EAM 嵌入原子势模型, EAM 表达式中所用到的具体参数是利用大量可靠的实验数据和第一

收稿日期: 2016-12-06

基金项目: 国家自然科学基金 (51065014)

作者简介: 罗德春, 男, 1979 年生, 博士生, 讲师, 兰州理工大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730050, 电话: 0931-2758258, E-mail: 119244238@qq.com

性原理方法计算结果拟合得到的，经验证，该势函数可以较好地描述  $\gamma$ -TiAl 体系中晶格变形等相关问题<sup>[20,21]</sup>，因此模拟中采用 EAM 嵌入原子势描述原子间的相互作用力。从原子尺度研究[100]、[110]和[111]晶向下  $\gamma$ -TiAl 合金中预置微裂纹的扩展过程及其断裂机理，基于晶体力学性能的各向异性研究  $\gamma$ -TiAl 合金中微裂纹扩展与晶向之间的关系，从而揭示  $\gamma$ -TiAl 合金的本征特性。

## 1 计算模型和模拟方法

### 1.1 计算模型

$\gamma$ -TiAl 合金的晶体结构是  $L1_0$  型面心四方 (fct)，其原子结构如图 1 所示。

建模采用通过消除原子间作用力在模型左端预置边界裂纹的方法，建立裂尖方向为[100]晶向的模型如图 2 所示（裂尖方向为[110]、[111]晶向的建模与此类同）。

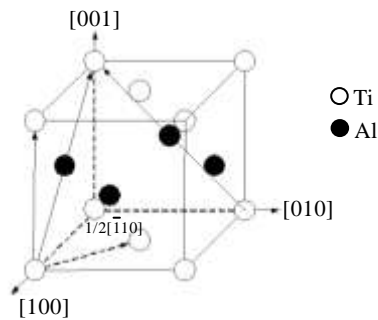


图 1  $\gamma$ -TiAl 的  $L1_0$  结构  
Fig. 1  $L1_0$  structure of  $\gamma$ -TiAl

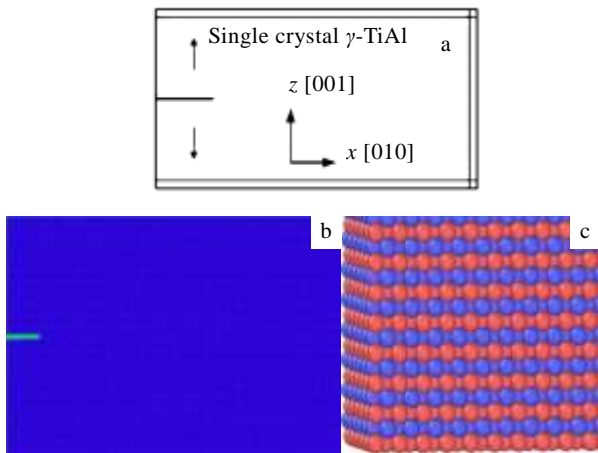


图 2 [100]晶向几何模型和初始原子模型及原子排布取向图  
Fig. 2 Geometric model (a), atomic model (b) and atomic arrangement orientation (c) of [100] figure

建立的模拟体系中，3 个模型的原子数和尺寸大小相近(消除尺寸效应影响)，将裂纹前沿方向设置为  $X$  方向，沿  $Z$  方向加载。裂尖方向为[100]晶向的模型大小为  $100a \times 6b \times 50.5c$ ，该体系中共有 123 012 个原子，其中预置裂纹的长度为  $10a$ ， $X$  轴、 $Y$  轴、 $Z$  轴分别为 [100]、[010]、[001]晶向，晶格间距  $a = b = a_0 = 0.4001$  nm,  $c = 1.045a_0$ ， $a_0$  为  $\gamma$ -TiAl 合金的晶格常数；裂尖方向为[110]晶向的模型大小为  $71a \times 4.5b \times 50.5c$ ，该体系中共有 130 815 个原子，其中预置裂纹的长度为  $7.1a$ ， $X$  轴、 $Y$  轴、 $Z$  轴分别为 [111]、 $[\bar{1}10]$ 、[001] 晶向，晶格间距  $a = b = \sqrt{2}a_0 = 0.565 827$  nm， $c = 1.045a_0$ ；裂尖方向为[111]晶向的模型大小为  $56.95a \times 4.5b \times 32c$ ，该体系中共有 130 338 个原子，其中预置裂纹的长度为  $5.695a$ ， $X$  轴、 $Y$  轴、 $Z$  轴分别为[111]、 $[\bar{1}10]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}2]$  晶向，晶格间距  $a=0.703 388$  nm， $b=0.565 827$  nm， $c=0.668 061$  nm。

### 1.2 模拟方法

模拟过程中仍然采用一端固定一端拉伸的“速度加载”方式，为避免原子的热激活效应，采用 1 K 的低温模拟晶向对单晶  $\gamma$ -TiAl 合金中预置裂纹扩展的影响。模拟过程分为弛豫和加载两个阶段。首先为使体系在加载之前达到平衡状态，先将模型在 NPT 系综下弛豫 100 ps，弛豫过程中 3 个方向都设置为周期性边界条件；弛豫之后开始加载，加载过程采用正则系综 (NVT)，利用 Nose-Hoover 方法进行控温，时间步长为 1 fs，同样采用 EAM 势函数描述原子间的相互作用，加载时将  $X$  和  $Z$  方向设置为自由边界条件， $Y$  方向仍为周期性边界条件。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，文献[15,19]中提到的应变率范围在  $1.0 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$  到  $1.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  之间，所以本模拟中选择应变率不敏感区的应变率  $3.5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$  进行加载，以避免应变率对模拟结果的影响。

## 2 模拟结果及讨论

图 3~图 9 是不同晶向裂纹扩展过程的相关图表，下面的讨论内容不仅来源于图像，还来源于整个裂纹扩展过程的分子动力学动画所提供的信息。扩展图中利用中心对称参数 (Centro-symmetry parameter, CSP) 对原子进行着色，用于区分缺陷原子和正常原子，正常 fct 结构的原子显示为蓝色。

### 2.1 裂尖沿 [100] 晶向的扩展过程

图 3 为裂尖前沿方向为[100]晶向时的裂纹扩展原子图。微裂纹在应力作用下慢慢张开，当加载至  $t=116$  ps 时应力值达到 5.766 GPa 时，裂尖局部集中应力已

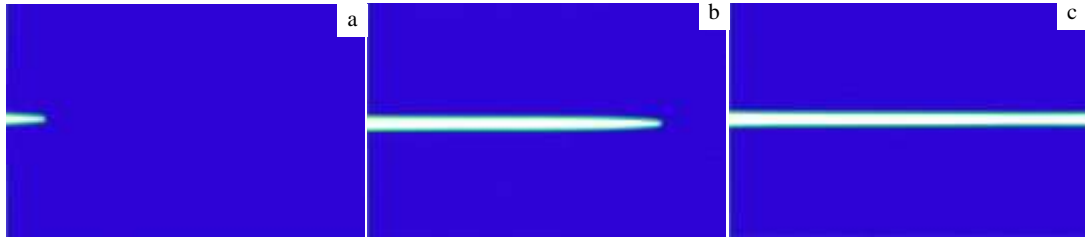


图 3 裂尖前沿为[100]晶向的裂纹扩展原子图

Fig. 3 Atoms of crack extension of crack tip cutting edge for the crystal to [100]: (a)  $t=116$  ps, (b)  $t=144$  ps, and (c)  $t=154$  ps

等于最大原子间作用力，裂尖原子上下表面原子键被拉断，裂纹开始快速失稳扩展，扩展至  $t=154$  ps 时“试件”完全断裂。在整个过程中裂尖周围晶体结构始终保持理想晶格状态，扩展过程没有位错发射，裂纹扩展后形成的断裂面也很平整，呈现完全脆性解理扩展特征。

拉伸过程中应力随时间的变化如图 4 所示，图 4a 为拉伸过程中最大应力对应的原子图，最大应力集中在裂尖上，裂尖应力达最大值时裂纹开始扩展，应力始终集中在裂尖上并随扩展过程而逐渐减小。

### 2.2 裂尖沿[110]晶向的扩展过程

裂尖前沿方向为[110]晶向时裂纹扩展过程中的主要原子图如图 5 所示，图 6 中 a~e 为坐标点对应的应力分布原子图。裂尖应力随加载而逐步增加，当加载至  $t=114$  ps 应力达到最大值 6.26 GPa 时（图 6 中 a 点），裂尖局部集中应力已等于最大原子间作用力，裂纹开始失稳扩展，裂纹扩展过程中裂尖原子的位置始终固定在裂尖周围并保持理想晶格状态，无位错发

射，裂纹平面光滑平整，呈脆性解理扩展特征（图 5a）。直至  $t=124$  ps 时，裂尖原子上下表面原子键被拉断，裂尖原子被推向远离裂尖而出现原子错排，产生局部

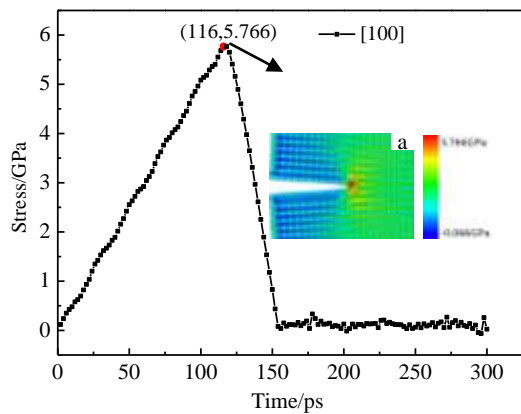


图 4 裂尖前沿为[100]时应力随时间变化的曲线图及原子图  
Fig. 4 Stress changing with time curve and atomic figure of crack tip cutting edge for the crystal to [100]

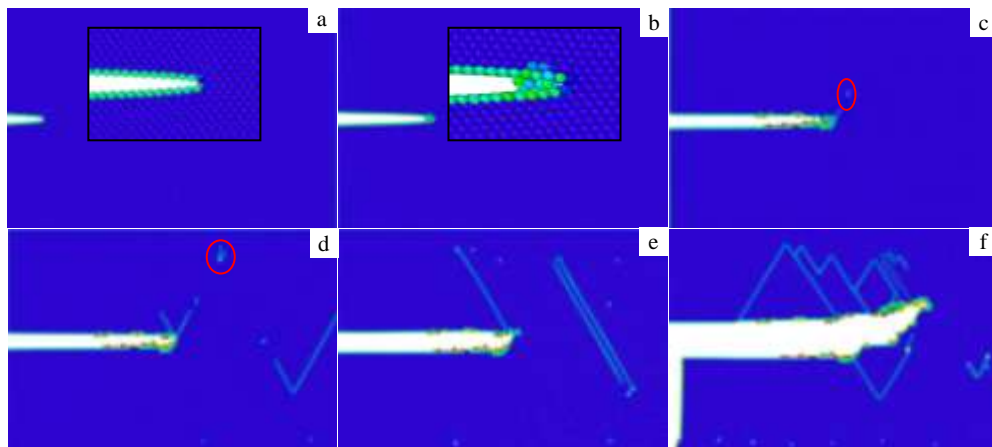


图 5 裂尖前沿为[110]晶向时的裂纹扩展原子图

Fig. 5 Atoms of crack extension of crack tip cutting edge for the crystal to [110]: (a)  $t=114$  ps, (b)  $t=124$  ps, (c)  $t=148$  ps, (d)  $t=180$  ps, (e)  $t=256$  ps, and (f)  $t=500$  ps

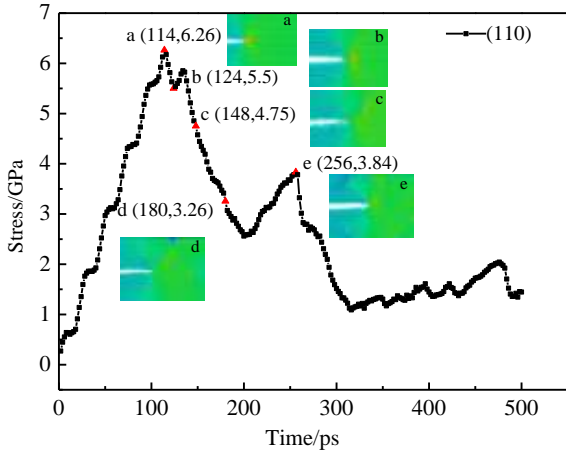


图 6 裂尖前沿为[110]时应力随时间变化的曲线图及原子图  
Fig. 6 Stress changing with time curve and atomic figure of crack tip cutting edge for the crystal to [110]

形变 (图 5b), 裂尖弛豫后出现钝化现象, 裂尖应力重新集中分布而增强(图 6 中 b 点); 继续加载至  $t=148$  ps 时, 裂尖第 1 次发射与其成大约  $45^\circ$  方向的位错(图 5c), 裂尖发射位错之后, 裂尖上的应力集中现象消失, 裂尖钝化并使裂尖上的应力重新分布并减小, 应力应变曲线呈台阶状(图 6 中 c 点); 裂尖区域钝化导致原子排布错乱, 晶格变得不连续而产生裂纹陷阱效应, 陷阱范围大小依赖于裂尖原子键断裂的方向<sup>[22]</sup>, 裂纹陷阱使裂纹保持稳定并阻止裂纹向前扩展, 扩展受到抑制, 但开口度继续增大; 随着加载的继续, 当加载至  $t=180$  ps 时, 裂尖第 2 次沿同样的方向快速发射位错 (图 5d), 并与第 1 次发射的位错相遇而塞积,

应力再次重新集中而开始增加(图 6 中 d 点); 当加载时间为  $180 \text{ ps} < t < 256 \text{ ps}$  时, 裂尖持续钝化, 裂纹扩展一直受制于裂纹陷阱效应, 裂纹向前扩展进一步受阻甚至停滞, 但裂尖集中应力持续增加, 裂纹开口度进一步增大; 直至加载到  $t=256$  ps 时, 观察到与钝化裂尖约成  $30^\circ$  顶角处萌生子裂纹, 此时, 主裂纹穿过由弹性弛豫能及断键能组成的陷阱势垒后失去稳定性, 并通过降低了裂纹尖端应力的钝化引起主裂纹跳跃至子裂纹平面, 子裂纹与主裂纹串接后快速失稳扩展(图 5e)。在扩展过程中, 主裂纹选择局部应力强度因子取最大值及裂纹陷阱势垒相对较小的路径扩展, 因而裂尖发生了较明显的取向效应, 形貌呈台阶状(图 5f)。

### 2.3 裂尖沿[111]晶向的扩展过程

为清晰所见, 删除正常结构的 fct 原子, 只保留裂纹面上的原子 (图 7), 图 8 为该晶向下裂纹扩展过程中裂尖上形成的孪晶图。可以看出, 加载至  $t=114$  ps 时裂纹向与预置裂纹面之间约成  $30^\circ$  方向扩展(图 7a), 应力值为 6.57 GPa; 当  $t=120$  ps 时, 裂尖上应力集中达到 6.28 GPa, 裂尖第 1 次发射层错(图 7b), 同时, 裂尖在平行于加载方向上出现了孪晶现象(图 8a-①), 此时, 应力重新分布且主要集中于孪晶面和裂尖上, 裂尖上的应力小幅减小之后又开始增加。孪晶保持一层原子厚度持续随着加载沿 Z 方向滑动; 直至  $t=156$  ps 时, 裂尖朝与第 1 个层错同方向第 2 次发射层错并相互作用, 滑移过程中因阻塞而萌生孔洞(图 7c), 并出现第 2 个孪晶面(图 8b-②), 之后裂尖上的应力再次重新分布, 裂尖上应力集中达到最大值 6.84 GPa。由此易得知裂纹失稳扩展时应力状态并不是体系的最大应力值, 说明层错运动受塞积和孪晶面

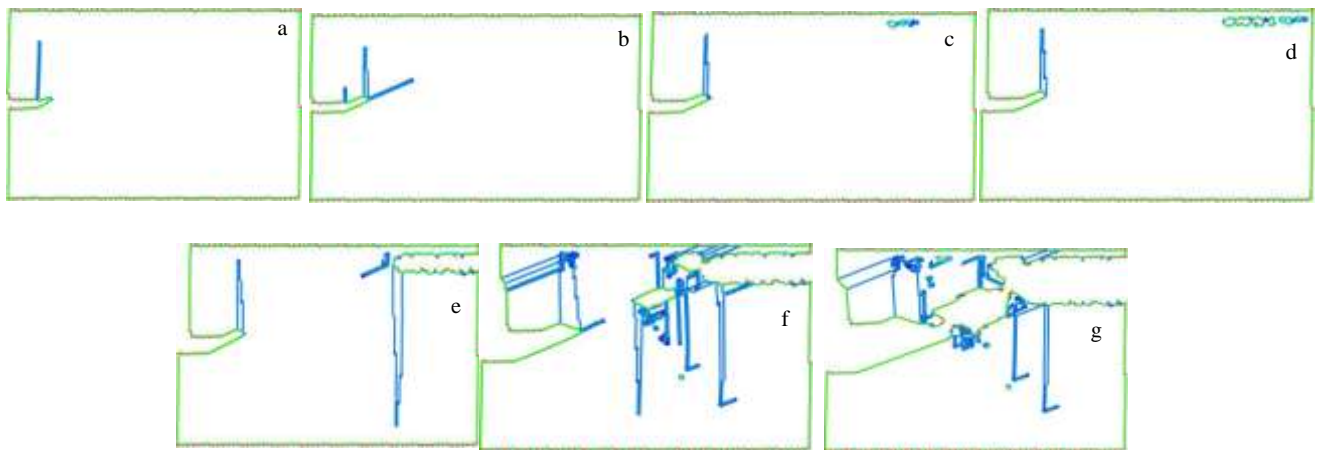


图 7 裂尖前沿为[111]晶向时的裂纹扩展原子图

Fig. 7 Atoms of crack extension of crack tip cutting edge for the crystal to [111]: (a)  $t=114$  ps, (b)  $t=120$  ps, (c)  $t=156$  ps, (d)  $t=170$  ps, (e)  $t=226$  ps, (f)  $t=424$  ps, and (g)  $t=800$  ps

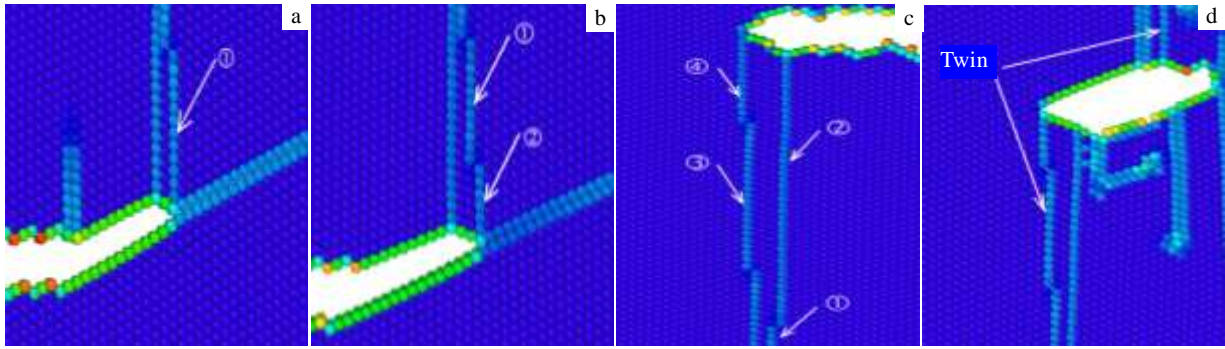


图 8 裂尖上的孪晶 (① ② ③ ④代表孪晶面)

Fig. 8 Twin on the crack tip (① ② ③ ④ on behalf of the twinning plane): (a)  $t=120$  ps, (b)  $t=156$  ps, (c)  $t=188$  ps, and (d)  $t=424$  ps

的阻碍影响后，材料强度出现强化效应；当  $t=170$  ps 时（图 7d），第 2 次发射的层错开动至边界孔洞处并与其产生相互作用，使得孔洞演化为子裂纹，之后主裂纹扩展几乎停滞，子裂纹加速扩展并在裂尖上发现孪晶现象，此时应力集中在 2 个裂尖和孪晶面上，对应的应力图也被垂直 2 个裂纹的孪晶面分成三部分（图 9d），这与其他 2 个晶向裂纹的应力分布形态差别很大；当  $t=188$  ps 时，边界萌生的子裂纹通过在裂尖处形成孪晶（图 8c），使子裂纹裂尖钝化并沿 Z 方向变宽，最终使得边界处开裂。当  $t=226$  ps 时（图 7e），主裂纹裂尖上的应力集中促使其继续发射位错，同时子裂纹也由于应力集中发射位错，该位错与子裂纹发射的位错第 1 次相遇并相互作用产生新位错，新位错继续与主裂纹发射的位错相互作用，最终在位错与孪晶的综合作用下，当  $t=424$  ps 时，在位错滑移方向上

再次萌生子裂纹（图 7f），随着加载继续，第 2 次萌生的子裂纹在 2 个裂纹的约束下扩展很慢，裂尖主要是通过产生孪晶致使其开口增大（图 8d）；直至  $t=800$  ps 时，3 条裂纹相连导致模型断裂（图 7g）。由此得出，[111]晶向微裂纹不是沿直线扩展，而是出现了非常明显的取向效应。

#### 2.4 3 种晶向下微裂纹扩展的应力应变关系

3 种晶向下微裂纹扩展过程应力随应变的增大整体呈现出先增大后减小的趋势（图 10）。[100]晶向的裂纹表现出脆性解理断裂特征，而[110]和[111]晶向下微裂纹在扩展过程中裂尖通过位错滑移及孪晶发生局部塑性变形。根据应力应变曲线图得到 3 个晶向的裂纹在扩展过程中的最大应力及相应应变（表 1）。

由表 1 可以看出，微裂纹在[111]晶向下拉伸过程中达到最大应力及对应应变值最大，[110]晶向最大应

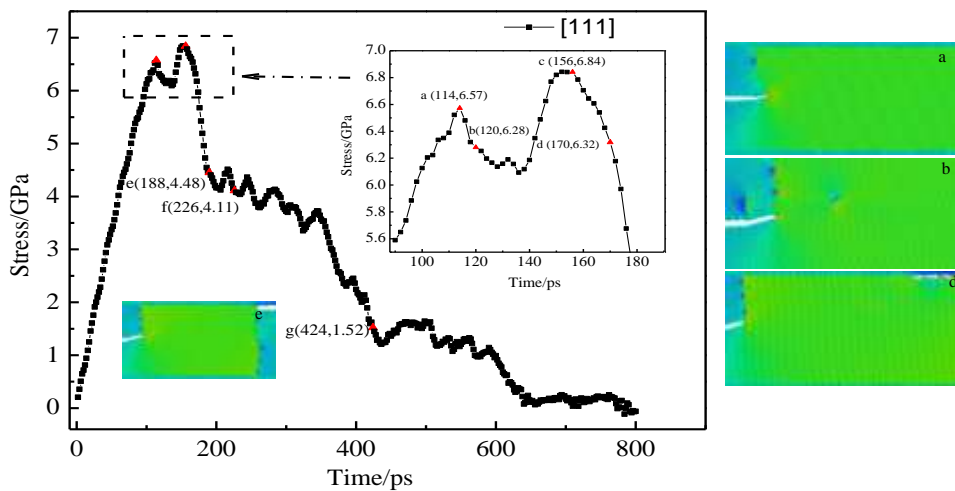


图 9 裂尖前沿为[111]时应力随时间变化的曲线图及原子图

Fig. 9 Stress changing with time curve and atomic figure of crack tip cutting edge for the crystal to [111]

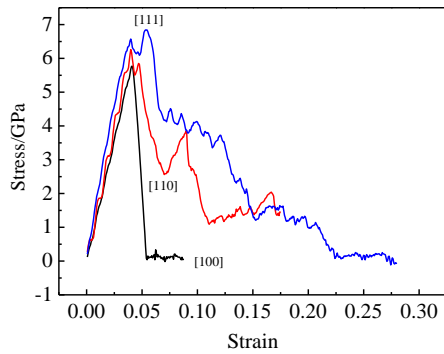


图 10 3 个晶向应力应变曲线图

Fig. 10 Stress strain curve of the three kinds of crystal

表 1 不同晶向裂纹扩展最大应力及其应变

Table 1 Maximum stress and the corresponding strain of the different crystal to crack propagation

Different crystal	[100]	[110]	[111]
Max stress/GPa	5.766	6.26	6.84
Strain	0.0406	0.0399	0.053

力次之, [100]晶向最大应力最小, 而[100]和[110]晶向对应的应变值近似相等。说明[100]晶向的裂纹最容易扩展, [111]晶向的裂纹扩展最难, 这从 3 个晶向裂纹扩展原子图及动态视频得以验证, [100]晶向的裂纹从扩展至断裂仅用了 154 ps, [111]晶向为 800 ps, [110]晶向的裂纹介于之间, 不同晶向下裂尖应力、应变场及形变机制与裂纹扩展过程密切相关。

### 3 结 论

1) [100]晶向的裂纹启裂应力最小, 裂纹强度最低, 最容易扩展, 裂纹扩展方式为脆性解理扩展。

2) [111]晶向的裂纹启裂应力值最大, 裂纹强度最大, 最难扩展, 裂纹通过发射滑移位错以及裂尖上形成的孪晶进行扩展, 并表现出明显的取向效应, 受位错塞积群及孪晶面阻碍影响, 材料出现强化效应, 位错塞积后萌生子裂纹, 主、子裂尖发射滑移位错相互作用后, 在主裂尖前端二次萌生子裂纹, 最终主、子裂纹串接导致断裂。

3) [110]晶向裂纹启裂应力值介于其它 2 个晶向之间, 扩展初期为解理扩展, 之后裂尖因原子错排及发射位错使之钝化且萌生与主裂纹不同平面的子裂纹, 最后以主-子裂纹传播机制形成台阶状扩展裂纹。

4) 不同晶向下微裂纹扩展机制具有很大差别。

### 参考文献 References

- [1] Chen Yuyong(陈玉勇), Su Yongjun(苏勇君), Kong Fantao(孔凡涛). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2014, 43(1): 50
- [2] Chen Hui(陈 晖), Su Yanqing(苏彦庆), Luo Liangshun(骆良顺) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2014, 43(1): 31
- [3] Chen Mingwei(陈明伟), Lin Dongliang(林栋梁), Chen Da(陈达) et al. *Acta Metallurgica Sinica* (金属学报)[J], 2009, 45(9): 416
- [4] Chan K S, Kim Y W. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 1994, 25(6): 1217
- [5] Umakoshi Y, Yasuda H Y, Nakano T. *Intermetallics*[J], 1996, 4: S65
- [6] Gloanec A L, Henaff G, Bertheau D et al. *Scripta Materialia*[J], 2003, 49(9): 825
- [7] Park Y S, Nam S W, Hwang S K et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2002, 335(1): 216
- [8] Lu Yonghao(陆永浩), Zhang Yonggang(张永刚). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2001, 30(1): 15
- [9] Lu Y H, Zhang Y G. *Materials and Engineering*[J], 2001(2): 8
- [10] Chen J H, Wang G Z, Cao R et al. *Metallurgical and Materials Transactions A* [J], 2004, 35(2): 439
- [11] Cao Rui(曹 睿), Chen Jianhong(陈剑虹), Zhang Ji(张 继) et al. *Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 2005, 34(5): 696
- [12] Li J, Qiao S, Han D et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2007, 471(1): 106
- [13] Imayev R M, Imayev V M, Oehring M et al. *Intermetallics*[J], 2007, 15(4): 451
- [14] Paradkar A G, Kamat S V, Gogia A K et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2007, 456(1): 292
- [15] Tang F L, Cai H M, Bao H W et al. *Computational Materials Science*[J], 2014, 84: 232
- [16] Qu Honglei(曲洪磊), Wang Yu(王 宇), Xia Yuangming(夏源明). *Journal of University of Science and Technology of China* (中国科学技术大学学报)[J], 2009(6): 627
- [17] 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
- [18] Zhang Bin(张 斌). *Dissertation for Master*(硕士论文)[D]. Changsha: Central South University, 2012
- [19] Zhao W, Xu D, Zhao J et al. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2014, 24(11): 3645

- [20] Zhang Bangwei(张邦维), Hu Wangyu(胡望宇), Shu Xiaolin(舒小林). *Theory of Embedded Atom Method and Its Application to Materials Science* (嵌入原子方法理论及其在材料科学中的应用[M]). Changsha: Hunan University Press, 2003: 75
- [21] Zope R R, Mishin Y. *Physical Review B*[J], 2003, 68: 024 102
- [22] Riedle J, Gumbsoh P, Fischmeister H F. *Phys Rev Lett*[J], 1996, 76(19): 3594

## Molecular Dynamics Research of Crack Propagation of Single Crystal $\gamma$ -TiAl Alloy along the Different Crystalline Phases

Luo Dechun<sup>1,2</sup>, Rui Zhiyuan<sup>1,2</sup>, Fu Rong<sup>1,2</sup>, Zhang Ling<sup>3</sup>, Cao Hui<sup>1,2</sup>, Yan Changfeng<sup>1,2</sup>

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

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

(3. Lanzhou Institute of Technology, Lanzhou 730050, China)

**Abstract:** The different crystallographic orientation extension of the prefabricated micro-crack in the process of uniaxial tension of the single crystal  $\gamma$ -TiAl was investigated using molecular dynamics simulations. The different forms of mechanical behavior and extension were analyzed at the crystallographic orientation of [100], [110] and [111]. The results show that the micro crack stress value of the three crystallographic orientation is 5.766, 6.26, and 6.57 GPa, respectively and their strength is enhanced in turn. The micro crack of the [100] crystal orientation exhibits brittleness cleavage extension completely, and the stress is always focused on the crack tip and decreases with increasing time. The micro crack of the [110] crystal orientation exhibits brittleness cleavage extension in the early stage and passivation phenomenon appears due to atomic staggering and dislocation emission, subsequently the sub crack initiates whose plane is different from that of the main crack, the stress always concentrates on the crack tip and decreases with increasing time; the main crack and the sub crack connect to constitute the step touch fracture crack. The micro crack of the [111] crystal orientation extends for launching slip dislocation and producing twins, and presents the obvious orientation effect, so the strength of materials is enhanced; the stress is always focused on the crack tip and twinning planes and it decreases with loading; the micro crack extension has fully different characteristics in the different crystallographic orientations.

**Key words:**  $\gamma$ -TiAl alloy; molecular dynamics; crystallographic orientation; crack propagation

---

Corresponding author: Luo Dechun, Candidate for Ph. D., Lecturer, Mechanical and Electrical Engineering Schools, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, P. R. China, Tel: 0086-931-2758258, E-mail: 119244238@qq.com