

片层厚度对双相 TiAl 合金力学性能影响的 纳米压痕研究

刘兴华¹, 芮执元^{1,2}, 付蓉¹, 曹卉¹, 文洮³, 荆昌锋^{1,2}

(1. 兰州理工大学 机电工程学院, 甘肃 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, 甘肃 兰州 730050)

(3. 甘肃省计算中心, 甘肃 兰州 730030)

摘要: 为研究纳米压痕过程中片层厚度和 γ/α_2 相界对双相 TiAl 合金变形行为及力学性能的影响, 针对 5 种不同厚度的双相 TiAl 合金模型, 采用分子动力学的方法模拟计算了金刚石压头以垂直于 γ/α_2 相界方向分别压入 γ 和 α_2 相的纳米压痕过程。结果表明: 材料的硬度随片层厚度的减小而增大, 当片层厚度减小至 7 nm 时, 材料的硬度达到最大值, 进一步减小片层厚度时, 材料的硬度反而减小。材料的弹性模量也会随片层厚度的变化而改变, 与硬度呈现正比关系。此外, 在纳米压痕过程中, 压头压入 γ 相时, 变形行为以 $\{111\}$ 面的层错为主, γ/α_2 相界会阻碍位错的运动; 压头压入 α_2 相时, 变形行为以 (0001) 基面的堆垛层错为主, 基面上 Shockley 不全位错的运动会致材料表面产生相变, 且棱柱面滑移被激活。

关键词: 片层厚度; 双相 TiAl 合金; 力学性能; 纳米压痕; 分子动力学

中图分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2022)02-0629-08

TiAl 合金因其具有高弹性模量、高比强度以及优异的高温性能, 且密度只有传统镍基合金的一半, 而成为航天、航空及汽车领域极具竞争力的新材料之一^[1]。但室温塑性差和较低的断裂韧性是其工程应用的主要障碍^[2]。由 γ -TiAl 和 α_2 -Ti₃Al 构成的双相片层 TiAl 合金, 由于 γ/α_2 及 γ/γ 界面的存在, 表现出优于单相 TiAl 合金的力学性能而得到广泛的关注^[3-6]。涂爱东等^[7]采用分子动力学方法研究了双相 TiAl 合金中 γ/α_2 界面在拉伸作用下的变形过程, 发现材料的断裂行为会随 γ 和 α_2 相的厚度比而变化, 并且 γ/α_2 相界面是位错的形核点。Maruyama 等^[8]研究了片层厚度对双相 TiAl 合金力学性能的影响, 发现材料的应变硬化率随着片层厚度的减小而增加, 并且屈服强度随晶格错配度的增加而增大。Zhang 等^[9,10]通过纳米压痕实验方法研究了纳米孪晶 HgCdTe 的力学性能, 发现孪晶片层的厚度对塑性变形有着重要的影响。Huang 等^[11]采用纳米压痕分子动力学模拟的方法研究了孪晶界和孪晶厚度对纳米孪晶金刚石变形机制的影响, 发现硬度与厚度之间呈 Hall-Petch 关系。此外, Ji 等^[12]在双相 TiAl 合金的研究中指出界面可以有效提高材料的塑性变形能力。Li 等^[13]通过分子动力学方法研究了双相 TiAl 合金中

γ/α_2 相界在拉伸载荷作用下的变形机理, 结果发现两相片层具有不同的失效形式, 且相界在变形的过程中可作为位错源或裂纹源。从上述研究看出, 片层厚度和相界都会影响双相 TiAl 合金的力学行为及变形机理。但以上研究大都是在均匀载荷作用下进行的, 由于不同载荷作用也会导致材料发生不同的变形行为, 因此研究非均匀载荷作用下, 片层厚度对双相 TiAl 合金力学性能的影响具有一定的意义。

纳米压痕是研究材料微纳尺度上力学性能的方法, 即非均匀载荷下通过压头对基体表面进行压痕, 依据得到的载荷-位移曲线分析材料的力学特性。但纳米压痕实验成本高、周期长, 且不能借助实验设备直接观察压痕过程中的微观缺陷演化, 而分子动力学模拟是研究材料在微观尺度下变形机理的有效手段, 能够实时观察原子的瞬态信息及缺陷演化。可见采用分子动力学方法模拟纳米压痕过程是研究双相 TiAl 合金在非均匀载荷下变形机制的有效途径。

因此, 针对 5 种不同厚度的双相 TiAl 合金模型, 采用分子动力学方法模拟了金刚石压头以垂直于 γ/α_2 相界方向分别压入 γ 和 α_2 相的纳米压痕过程。计算了不同片层厚度模型的硬度和弹性模量, 并从原子尺度

收稿日期: 2021-05-10

基金项目: 国家自然科学基金(51865027)

作者简介: 刘兴华, 男, 1993 年生, 硕士生, 兰州理工大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730050, E-mail: 759337724@qq.com

讨论了纳米压痕过程中材料的变形机理, 对不同相中的位错形核及演化过程进行了分析, 为 TiAl 合金的纳米加工机理提供一些理论依据。

1 建模与模拟

1.1 模型的建立

采用 Lammmps 软件进行了分子动力学建模, 根据 γ 相和 α_2 相之间的 Blackburn 取向关系^[3]: $(111)\gamma // (0001)\alpha_2$, $[1\bar{1}0]\gamma // \langle 11\bar{2}0 \rangle \alpha_2$, 建立了如图 1 所示的双相 TiAl 合金纳米压痕分子动力学模型, 其中 γ 和 α_2 相中 x, y 和 z 轴对应的晶向分别为 $[11\bar{2}]$ 、 $[1\bar{1}0]$ 、 $[111]$ 及 $[\bar{1}100]$ 、 $[1\bar{2}10]$ 、 $[0001]$ 。该模型中 γ 和 α_2 相的厚度比为 1:1, 长宽均为 24 nm。压头采用半径为 3 nm 的球形金刚石压头。为研究片层厚度对双相 TiAl 合金变形机制的影响, 建立了 5 种不同片层厚度(λ)的纳米压痕模型, 即 $\lambda=10, 8, 7, 6, 5$ nm, 则所研究的体系原子数为 350 071 到 683 646 个。模型包括边界层、恒温层和牛顿层。其中, 边界层的设置是为了防止基体的移动, 该区域中的原子被固定, 其厚度为 0.8 nm; 恒温层的设置是为了控制试样在纳米压痕过程中的温度(通过速度标定法实现), 其厚度为 1 nm; 牛顿层原子为压头作用区域, 该层原子遵循牛顿运动定律。模型在 x 和 y 轴方向采用周期性边界条件, z 轴方向采用自由边界条件。

1.2 纳米压痕模拟计算

由于金刚石压头硬度远高于双相 TiAl 合金, 所以模拟中压头被视为刚体, 因此 C-C 之间的相互作用可以被忽略, 采用 EAM 势函数^[14]描述基体原子间(Ti-Al)的相互作用^[13]。而压头原子和基体原子(C-Al 和 C-Ti)之间的作用力通过 Lennard-Jones(LJ)势进行描述^[15,16], 具体的表达式为:

$$U(r) = 4C \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], r < r_0 \quad (1)$$

其中, C 为势阱深度, σ 为平衡距离, r_0 为截断距离。

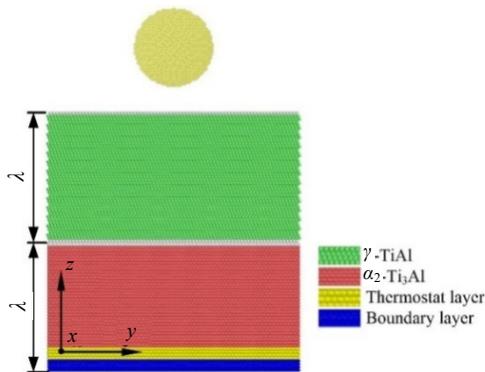


图 1 双相 TiAl 合金模型

Fig.1 Dual-phase TiAl alloy model

通常截断距离是平衡距离的 2.5 倍^[17]。其中各参数取值如表 1 所示。

压头初始位置位于试样表面上方 0.75 nm 处, 以确保压头原子与试样原子距离大于自由程。压入前, 将模型在微正则系综(NVE)300 K 条件下弛豫 100 ps, 使模型的能量达到最小。随后, 压头沿着 z 轴方向压入基体, 压痕速度为 50 m/s, 最大压痕深度为 2.25 nm。模拟时间步长 1 fs, 模拟温度为 300 K。

在模拟过程中, 通过 OVITO 软件对原子结构进行可视化, 采用共近邻分析(CNA)对原子进行着色^[18], 其中绿色原子表示 γ 相, 为面心四方结构(fct), 红色原子表示 α_2 相, 为密排六方结构(hcp), 白色原子表示缺陷和表面原子, 黄色原子表示金刚石压头。采用位错提取算法(DXA)来分析压痕过程中不同试样内缺陷的演化及其扩散规律。

2 结果与讨论

2.1 载荷深度曲线分析

不同片层厚度下, 对 γ 和 α_2 相进行纳米压痕模拟时得到载荷-位移曲线如图 2 所示。压痕过程中, 规定载荷为负值时表示试样与压头之间存在吸引力, 载荷为正值表示试样与压头之间存在压力。由图 2 看出, 所有试样的载荷-深度曲线均可分为 4 个阶段。第 I 阶段, 压头靠近试样时。当压头距离试样表面约 0.1 nm 时, 由于压头与基体间存在吸引力, 此时载荷为负值。但是吸引力较小, 压头下方的原子无法脱离基体。第 II 阶段, 压头压入基体阶段。此时压头与试样之间存在排斥力, 载荷为正, 且载荷随压痕深度的增加而增大。第 III 阶段, 卸载。当压头到达最深压痕深度时, 压头开始撤回至初始位置, 随着压头撤出, 载荷逐渐减小。由于基体发生了塑性变形, 卸载时试样并不能完全恢复成初始状态, 因此当载荷变为 0 时, 基体上存在压痕。第 IV 阶段, 压头继续撤回初始位置时载荷为负, 即当压头与试样之间存在吸引力, 之后继续向初始位置移动, 载荷再次降为 0, 直至压头回到初始位置。由图 2 可知, 当压头达到最大深度时, 片层厚度 λ 为 7 nm 的试样中, 两相的载荷均大于其它片层厚度的载荷。

表 1 Lennard-Jones 势函数参数

Table 1 Lennard-Jones potential function parameters used in simulation

Parameter	σ/nm	$C/\times 10^{-1} \text{ eV}$	r_0/nm
C-Ti	0.3759	0.314	0.9398
C-Al	0.2976	3.150	0.7440

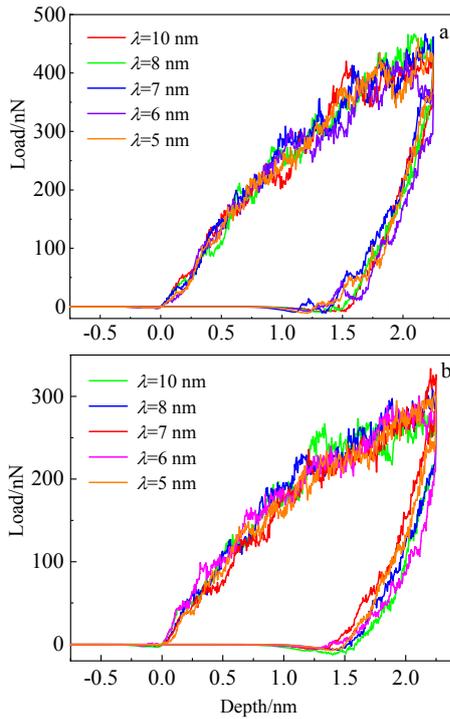


图 2 不同 γ 和 α_2 相片层厚度的载荷-深度曲线

Fig.2 Load-depth curves of different lamellar thickness of γ phase (a) and α_2 phase (b)

2.2 硬度和弹性模量的分析

为了进一步研究纳米压痕过程中片层厚度对双相 TiAl 合金的影响,通过载荷-位移曲线计算了材料的硬度(H)和弹性模量,可以由下列关系式得到:

$$H = \frac{P_{\max}}{A_c} \quad (2)$$

$$E_r = \frac{\sqrt{\pi}}{2\beta} \cdot \frac{S}{\sqrt{A_c}} \quad (3)$$

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1 - \nu^2}{E} + \frac{1 - \nu_i^2}{E_i} \quad (4)$$

式中, P_{\max} 为最大深度时的载荷, A_c 为压痕过程中压头与试样之间的接触面积, β 为与压头几何形状相关的常数,对于球形压头 $\beta=1$ ^[19]. E_r 为约化弹性模量, E 和 ν 分别为被测材料的弹性模量和泊松比,在这里取 $\nu=0.23$ ^[20]. E_i 和 ν_i 分别为压头的弹性模量和泊松比,在本研究中对压头进行了刚化处理,所以 E_i 为无穷大, $\nu_i=0$ ^[21].

要得到材料的硬度和弹性模量,必须计算出弹性接触刚度和接触面积。目前被广泛用来确定接触面积的方法称为 Oliver-Pharr 方法^[22],通过拟合卸载曲线得到载荷与位移如下关系:

$$P = B(h - h_f)^m \quad (5)$$

式中, P 为被测材料上的载荷, B 和 m 是通过测量获得的拟合参数; h_f 为完全卸载后的位移。接触刚度 S 可由式(5)在最大载荷点处微分得到:

$$S = \left(\frac{dP}{dh} \right)_{h=h_{\max}} = Bm(h_{\max} - h_f)^{m-1} \quad (6)$$

通过全部卸载曲线拟合得到的参量通常会导致较大的误差。因此,确定接触刚度的曲线拟合通常只取卸载曲线顶部的 25%~50%。

接触面积 A_c 是关于接触深度 h_c 的函数,因此为确定接触面积,必须先得到接触深度 h_c ,可以由式(5)求出:

$$h_c = h_{\max} - \varepsilon \frac{P_{\max}}{S} \quad (7)$$

式中, ε 为与压头形状有关的常数,对于球形压头 $\varepsilon=0.75$ ^[23]。再根据经验公式(6)计算出接触面积:

$$A_c = f(h_c) = \pi(2Rh_c - h_c^2) \quad (8)$$

通过以上公式和数据拟合计算得到不同相的硬度和弹性模量与片层厚度之间的关系,如图 3 所示。

由图 3a 可知,随着片层厚度的减小,材料的硬度随之增大,当厚度 $\lambda=7$ nm 时,试样的硬度达到最大值,可见,当片层厚度 $\lambda \geq 7$ nm 时,硬度与厚度之间符合 Hall-Petch 关系;当片层厚度继续减小,即 $\lambda < 7$ nm 时,

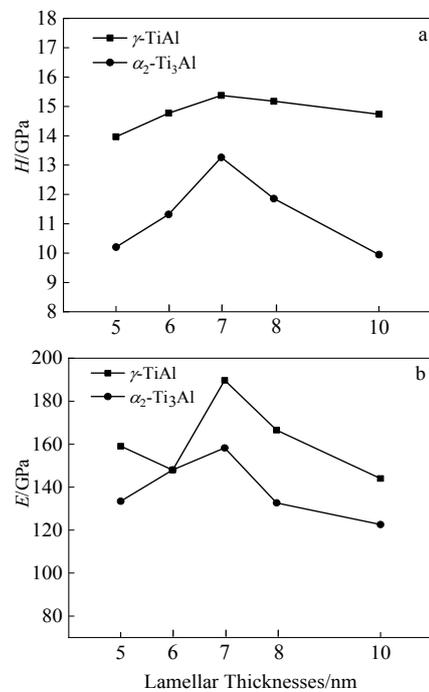


图 3 双相 TiAl 合金中不同片层厚度的硬度和弹性模量
Fig.3 Hardness H (a) and elasticity modulus E (b) of different lamellar thicknesses in dual-phase TiAl alloys

材料的硬度会随着片层厚度的减小而减小, 出现软化现象, 呈现反 Hall-Petch 现象, 在孪晶材料的研究中也观察到此类现象^[24,25]。值得注意的是, 所得到的临界片层厚度 7 nm 与实验观测值一致^[26]。此外, 在研究压头压入片层厚度为 10 nm 的 α_2 相试样时, 得到 α_2 相的硬度值为 9.95 GPa, 这与 Klein^[27]实验得到的结果一致。

通过计算可以得到不同片层厚度下两相的弹性模量, 如图 3b 所示。计算得到的弹性模量值符合实验测得的结果^[28]。此外, 还可以观察到弹性模量也会随片层厚度的减小而增大, 当片层厚度达到 7 nm 时, 达到最大值, 进一步减小片层厚度, 弹性模量呈现减小的趋势, 在孪晶铜的纳米压痕实验研究中也观察到同样的现象^[29]。

通过以上结果发现, 材料的弹性模量和硬度都会随片层厚度的变化而改变, 并且表现出相同的变化趋势, 这与 Bao^[30]的研究结果一致。Bao 等通过纳米压

痕实验研究发现材料的弹性模量与硬度呈正比关系, 主要取决于材料的能量耗散能力, 并通过建立了三者之间的本征关系, 得出同种材料其能量耗散的能力是相同的, 因此弹性模量与硬度成正比。

2.3 缺陷演化的分析

由以上研究可知双相 TiAl 合金片层厚度为 7 nm 时, 试样的硬度和弹性模量均达到最大值, 为进一步探究片层厚度和 γ/α_2 相界面对双相 TiAl 合金变形行为和力学性能的影响, 本节分析了片层厚度为 7 nm 的试样在纳米压痕过程中的变形机制和缺陷演化。

片层厚度 $\lambda=7$ nm, 压头压入 γ 相时的缺陷演化过程如图 4 所示。图中, 单层 hcp 结构原子表示孪晶界 (TB), 双层 hcp 结构原子代表内禀层错(SISF), 而双层 hcp 型原子中间夹杂一层 fct 型原子的结构则代表外禀层错(SESF)。绿色位错线代表 Shockley 型位错, 蓝色位错线代表 Perfect 型位错, 黄色位错线代表 Hirth 型位错。

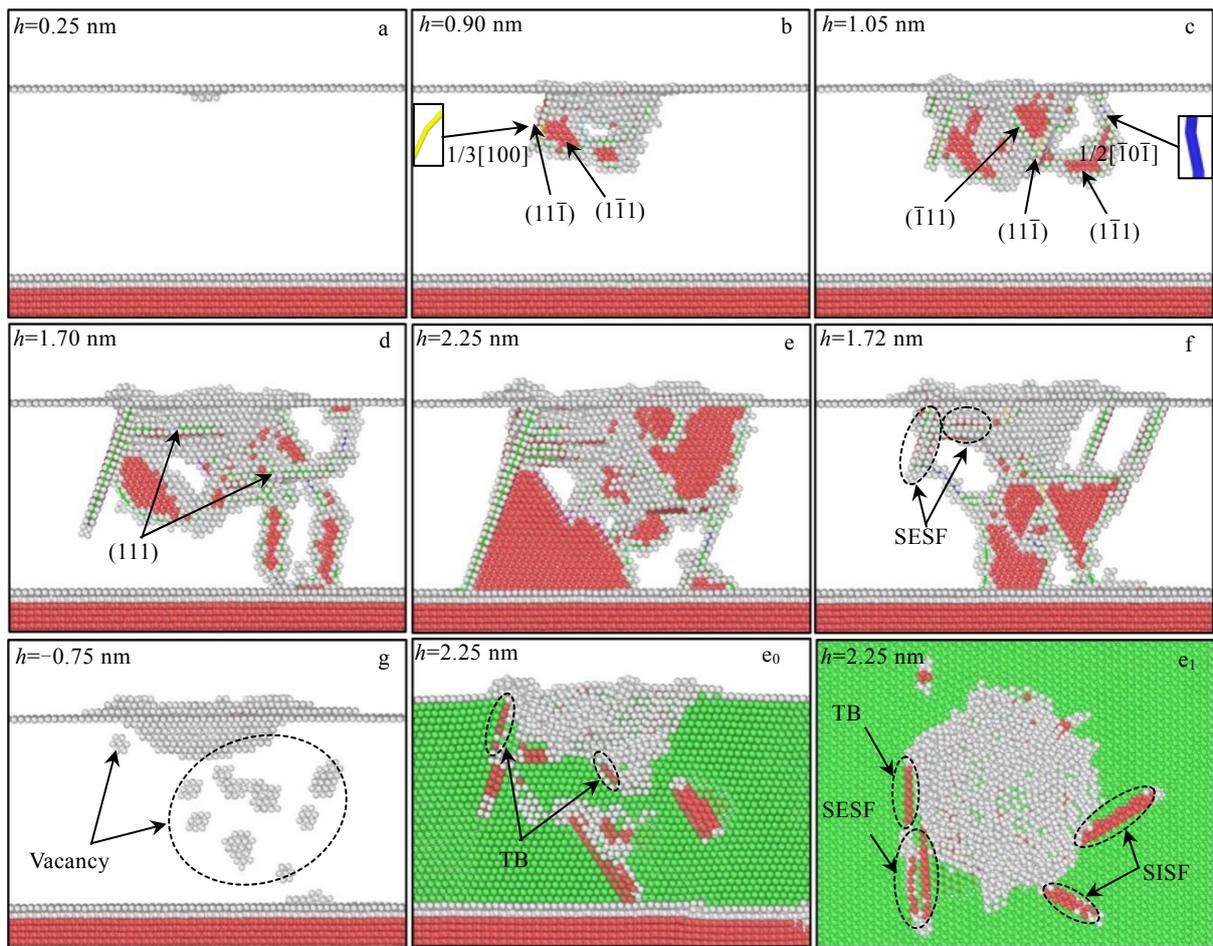


图 4 厚度为 7 nm 的 γ 相片层在纳米压痕下的缺陷演化过程

Fig.4 Defect evolution of γ phase with a thickness of 7 nm under nanoindentation

压入过程中,当压痕深度为 0.25 nm 时,压头下方的原子偏离了原来的位置,试样中出现位错环核,如图 4a 所示。当压痕深度为 0.90 nm 时,由于位错滑移,在(11 $\bar{1}$)和(1 $\bar{1}$ 1)面上均形成了 1 个内禀层错,并且由于位错反应 $1/6[1\bar{2}1]+1/6[12\bar{1}]\rightarrow 1/3[100]$ 的发生,压头下方生成了 1 个 $1/3[100]$ Hirth 位错,如图 4b 所示。当压痕深度为 1.05 nm 时,在(11 $\bar{1}$)面和($\bar{1}$ 11)面上又分别生成 1 个内禀层错,此时压痕下方生成了 1 个位错环,释放了积累的应变能,并且位错环上 $1/6[1\bar{1}2]$ 和 $1/6[2\bar{1}\bar{1}]$ 的 Shockley 不全位错发生反应后生成 1 个 $1/2[\bar{1}0\bar{1}]$ Perfect 位错,如图 4c 所示。类似地,在研究压头压入不同厚度的 γ 相时,均观察到有位错环的产生,如图 5 所示。当压痕深度达到 1.70 nm 时,(11 $\bar{1}$)面和($\bar{1}$ 11)面上的内禀层错向不断向下扩展增大,同时在(111)面上又形成了 2 个内禀层错,如图 4d 所示,此时位错环不断向下滑移最终到达相界,而相界的存

在阻碍了位错环的运动。图 4e 所示为压痕深度达到最大值 2.25 nm 时,位错环被 γ/α_2 相界吸收,(1 $\bar{1}$ 1)面和(11 $\bar{1}$)面上的内禀层错不断向下运动,最终被相界阻碍,并在压头下方产生了大量倾斜的变形纳米孪晶界和层错,这些孪晶界大多是不连续的高能孪晶界,如图 4e₀, 4e₁ 所示。

此外,当压头压入不同片层厚度的 γ 相时,在片层厚度为 10、6 和 5 nm 的试样中,均观察到位错环运动到相界后被吸收,如图 5a~5c, 5g~5i 所示,而在 $\lambda=8$ nm 的试样中发现,开始时位错环随着压痕深度的增加而扩展,但位错环在还没有到达相界的时候就逐渐退化消失(图 5d~5f)。在 $\lambda=5$ nm 的试样中位错穿过了相界,并在 α_2 相中形成了堆垛层错且生成了 1 个伯氏矢量为 $1/3[01\bar{1}0]$ 的 Shockley 不全位错(图 5k)。另外,从图 4, 图 5 还可以观察到,在 γ 相中压头下方缺陷原子密集处主要产生了双层 hcp 结构的堆垛层错。

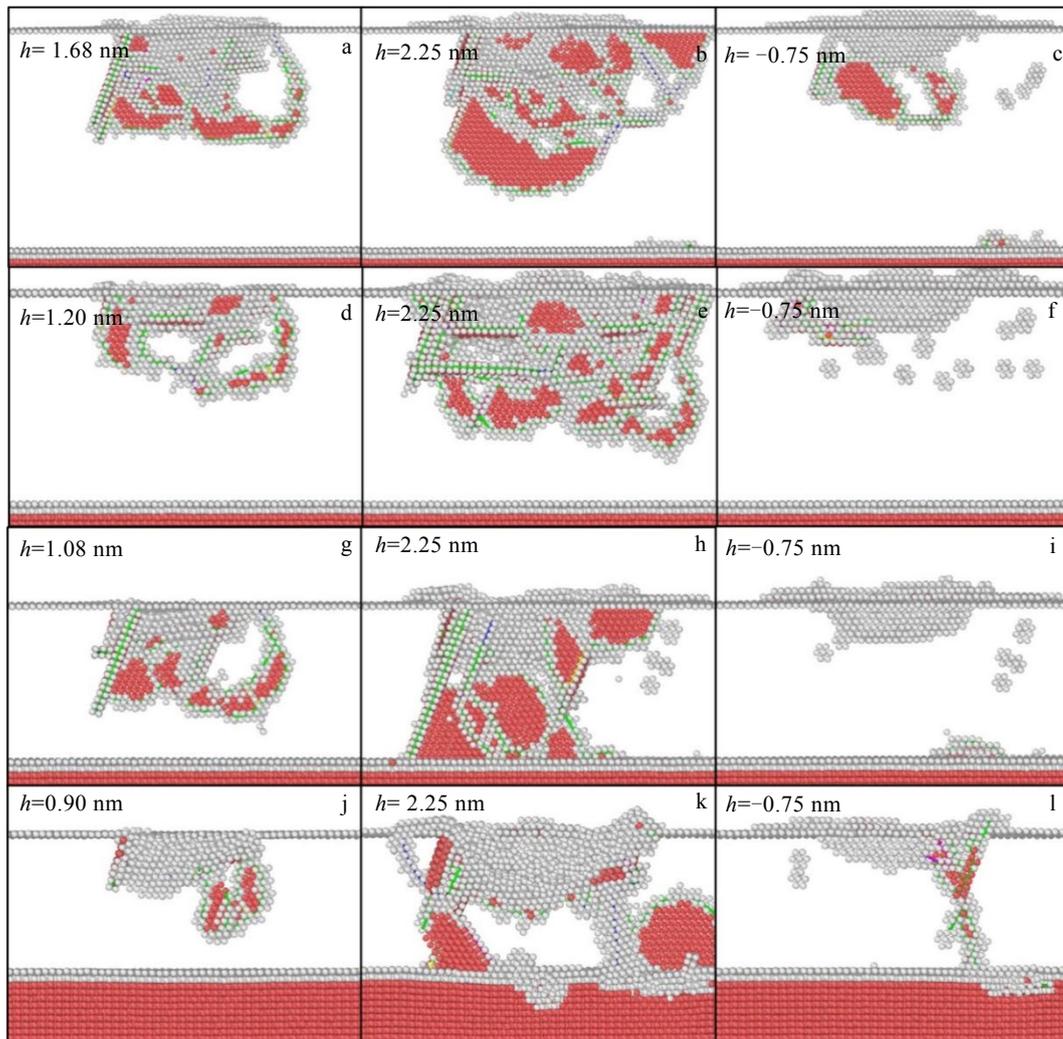


图 5 γ 相不同片层厚度的缺陷演化

Fig.5 Defect evolution of γ -phase lamellar with different thickness: (a~c) $\lambda=10$ nm, (d~f) $\lambda=8$ nm, (g~i) $\lambda=6$ nm, and (j~l) $\lambda=5$ nm

图 4f 和 4g 所示为卸载阶段。当压痕深度为 1.72 nm 时, (11 $\bar{1}$)面和(111)面上的内禀层错消失后形成了 2 个外禀层错, 如图 4f 所示。当压头回到初始位置时, 试样内没有残留的位错, 压痕周围由于位错反应生成了少量空位与间隙原子, 如图 4g 所示。从图 5 看出, 片层厚度为 10 和 8 nm 的试样中, 当压头回到初始位置时, 在试样内均有残留的层错, 还有少量的空位和间隙原子; $\lambda=6$ nm 时, 试样内没有残留的位错, 在压痕下方存在空位和间隙原子; $\lambda=5$ nm 时, 试样内仍然有内禀层错, 并且位错穿过了相界, 在 α_2 相中形成了堆垛层错, 相界面也发生了迁移。

因此, 当 $\lambda \geq 7$ nm 时, 硬度与厚度之间符合 Hall-Petch 关系, 主要是由于界面的存在阻碍了位错的运动, 位错的塞积效应主导了材料的塑性变形, 造成了加工硬化; 当片层厚度继续减小到 $\lambda < 7$ nm 时, 材料的硬度会随着片层厚度的减小而减小, 出现软化现象, 这是由于在相界面处形成了大量的位错形核位点, 位错运动穿过了相界, 并出现相界面迁移(图 5I 所示), 从而导致材料硬度的降低, 同时也造成了弹性模量的降低, 这与 Shamsutdinov^[31]研究得到的结果一致。

片层厚度 $\lambda=7$ nm, 压头压入 α_2 相时的缺陷演化过程, 如图 6 所示。当压痕深度为 0.29 nm 时, 位错开始在压头下方形核, 并演化为 1 个 $1/3\langle 1100 \rangle$ Shockley 不全位错, 随着压痕深度的增加位错不断产生, 压头下方出现大量白色高能缺陷原子, 如图 6a 所示。当压痕深度达到 0.49 nm 时, 压头下方开始出现了双层堆垛层错, 在其它各片层厚度的试样中也观察到此类

现象, 相当于在 hcp 结构中插入了 2 层 fct 结构原子, 并且在压头下方生成了 1 个 $1/3[0\bar{1}10]$ Shockley 不全位错, 如图 6b 所示。当压痕深度达到 1.37 nm 时, 在平行平面上产生了多个 $1/3\langle 1100 \rangle$ Shockley 不全位错, 这些位错沿(0001)基面不断运动, 使得堆垛层错逐渐聚集, 形成连续且稳定的 fct 堆垛层错, 导致在试样表面产生了相变, 在纯 Ti 和 TiZr 的研究中也观察到相变的产生^[32,33]。随着位错的运动和堆垛层错的增殖, 在生成的 fct 结构中有孪晶界生成, 如图 6c 所示。当压痕深度到达 1.64 nm 时, 随着压痕深度的增加, 堆垛层错不断增殖扩展, 可以观察到 $1/3\langle 11\bar{2}0 \rangle \{1\bar{1}00\}$ 棱柱面滑移的产生, 此类非基面滑移的在室温下较难发生, 需要很高的应力作用, 如图 6d 所示。当压痕深度达到最大值 2.25 nm 时, 压头下方产生了大量的堆垛层错, 并在形成的 fct 结构中产生了 2 个孪晶界, 如图 6e 所示, 棱柱面滑移不断增殖扩展而基面堆垛层错的存在阻碍了棱柱面滑移的运动, 造成了加工硬化, 这也是片层厚度为 7 nm 的试样硬度高的主要原因, 在纯 Zr 的实验研究中也观察到此类现象^[34]。

卸载阶段, 当压头回到初始位置时, 堆垛层错逐渐退化消失, 由于没有了基面堆垛层错的阻碍, 导致棱柱面滑移继续向下运动, 最终被相界阻碍, 如图 6f 所示, 而在其它片层厚度的试样中没有观察到此类现象。同时可以发现 α_2 相在卸载完成后仍然存在大量的位错。通过以上研究发现, 在 α_2 相的纳米压痕过程中变形主要以(0001)基面的堆垛层错为主, 并伴随有棱柱面滑移的产生。

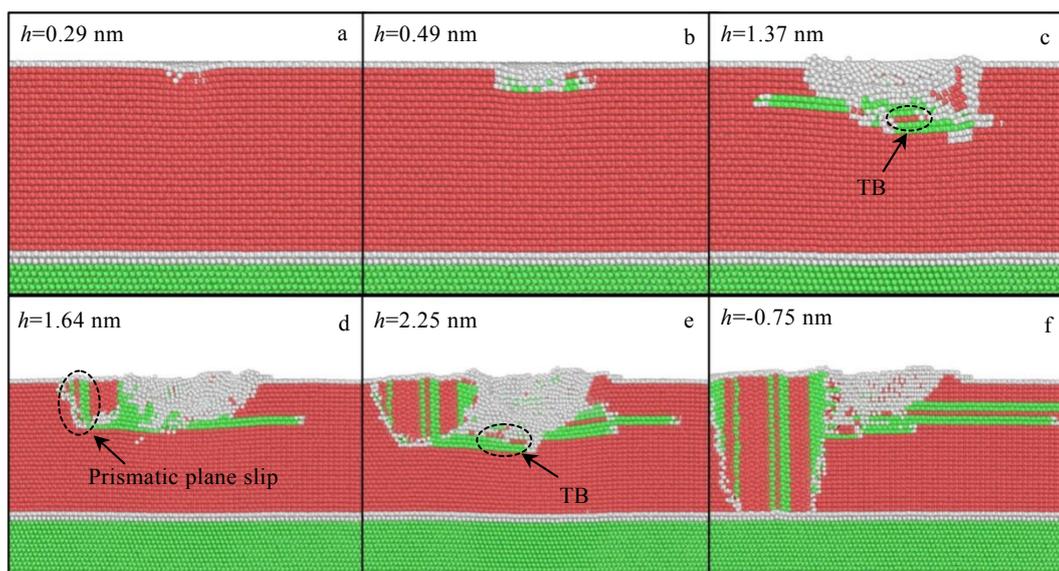


图 6 厚度为 7 nm 的 α_2 相片层在纳米压痕下的缺陷演化过程
Fig.6 Defect evolution of α_2 phase with thickness of 7 nm under nanoindentation

3 结 论

1) 当片层厚度 $\lambda \geq 7$ nm 时, 双相 TiAl 合金的硬度随片层厚度的减小而增大, 呈 Hall-Petch 关系, 主要是由于相界阻碍了位错的运动, 造成了位错堆积, 产生加工硬化, 当片层厚度减小至 7 nm 时, 材料的硬度达到最大值。进一步减小层厚度, 硬度反而减小, 呈反 Hall-Petch 关系, 这是由于位错运动穿过了相界, 造成了软化现象。

2) 在双相片层 TiAl 合金中, 材料的弹性模量随片层厚度的变化而改变, 并且与硬度呈正比关系。当材料的片层厚度 λ 为 7 nm 时, 材料的弹性模量达到最大值。

3) 在纳米压痕过程中, 压头压入 γ 相时, 变形行为以 $\{111\}$ 面的层错为主, γ/α_2 相界会阻碍位错的运动; 压头压入 α_2 相时, 变形行为以 (0001) 基面的堆垛层错为主, 并伴随有棱柱面滑移的产生, 基面上 Shockley 不全位错的运动会导致材料表面产生相变。

参考文献 References

- [1] Chen Ziyong(陈子勇), Liu Yingying(刘莹莹), Jin Yanfang(靳艳芳) et al. *Aeronautical Manufacturing Technology*(航空制造技术)[J], 2019, 62(19): 22
- [2] Liu Yingying(刘莹莹), Chen Ziyong(陈子勇), Jin Tounan(金头男) et al. *Materials Reports*(材料导报)[J], 2018, 32(11): 1863
- [3] Mao Xinping(毛新平). *Titanium Microalloyed Steel: Fundamentals, Technology, and Products*(钛微合金钢)[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2016: 3
- [4] Gao Zitong(高子彤), Hu Rui(胡锐), Wu Yulun(吴与伦) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(9): 3071
- [5] Luo Yuanyuan(罗媛媛), Xi Zhengping(奚正平), Mao Xiaonan(毛小南) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2014, 43(4): 896
- [6] Cao Hui(曹卉), Rui Zhiyuan(芮执元), Feng Ruicheng(冯瑞成) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(4): 1102
- [7] Tu Aidong(涂爱东), Teng Chunyu(滕春禹), Wang Hao(王皞) et al. *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2019, 55(2): 291
- [8] Maruyama K, Tabata A, Toriyama Y et al. *Journal of Physics: Conference Series*[J], 2010, 240(1): 012 101
- [9] Zhang Zhenyu, Zhang Nianmin, Ma Guojun et al. *Scripta Materialia*[J], 2013, 69(4): 299
- [10] Zhang Zhenyu, Li Fangyuan, Ma Guojun et al. *Scripta Materialia*[J], 2013, 69(3): 231
- [11] Huang C, Peng X, Yang B et al. *Ceramics International*[J], 2017, 18(43): 16 888
- [12] Ji Zongwei, Lu Song, Hu Qingmiao et al. *Acta Materialia*[J], 2017, 144: 835
- [13] Li Wen, Yin Yajun, Xu Qian et al. *Computational Materials Science*[J], 2019, 159: 397
- [14] Zope R R, Mishin Y. *Physical Review B*[J], 2003, 68(2): 366
- [15] Blonski S, Brostow W, Kuba't Josef. *Physical Review B Condensed Matter*[J], 1994, 49(10): 6494
- [16] Tang F L, Cai H M, Bao H Wet et al. *Computational Materials Science*[J], 2014, 84: 232
- [17] Peng P, Liao G, Shi T et al. *Applied Surface Science*[J], 2010, 256(21): 6284
- [18] Honeycutt J D, Andersen H C. *Journal of Physical Chemistry*[J], 1987, 91(19): 4950
- [19] Chen Zhangwei, Wang Xin, Bhakhri Vineet et al. *Acta Materialia*[J], 2013, 61(15): 5720
- [20] He Y, Schwarz R B, Migliori A et al. *Journal of Materials Research*[J], 1995, 10(5): 1187
- [21] Xu S, Wan Q, Sha Z et al. *Computational Materials Science*[J], 2015, 110: 247
- [22] Oliver W C, Pharr G M. *Journal of Materials Research*[J], 1992, 7(6): 1564
- [23] Qian Z, Risan J, Stadnick B et al. *Journal of Polymer Science Part B Polymer Physics*[J], 2018, 56(5): 414
- [24] Lu L, Chen X, Huang X et al. *Science*[J], 2009, 323(5914): 607
- [25] Li Xiaoyan, Wei Yujie, Lu Lei et al. *Nature*[J], 2010, 464(7290): 877
- [26] Hazzledine P M. *Intermetallics*[J], 1998, 6(7): 673
- [27] Klein T, Schachermayer M, Mendez-Martin F et al. *Acta Materialia*[J], 2015, 94(8): 205
- [28] Göken M, Kempf M, Nix W D. *Acta Materialia*[J], 2001, 49(5): 90
- [29] Hong S H, Kim K S, Kim Y M et al. *Composites Science & Technology*[J], 2005, 65(9): 1401
- [30] Bao Y W, Wang W, Zhou Y C. *Acta Materialia*[J], 2004, 52(18): 5397
- [31] Shamsutdinov N R, Böttger A J, Thijsse B J. *Acta Materialia*[J], 2007, 55(3): 777
- [32] Hong D H, Lee T W, Lim S H et al. *Scripta Materialia*[J], 2013, 69(5): 405
- [33] Zhang Z, Ming L, Guo D et al. *Materials Science & Engineering A*[J], 2014, 594(31): 321
- [34] Hu X, Zhao H, Ni S et al. *Materials Characterization*[J], 2017, 129(7): 149

Effect of Lamellar Thickness on Mechanical Properties of Dual-Phase TiAl Alloy by Nanoindentation

Liu Xinghua¹, Rui Zhiyuan^{1,2}, Fu Rong¹, Cao Hui¹, Wen Tao³, Yan Changfeng^{1,2}

(1. School of Mechanical and Electrical Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

(2. State Key Laboratory of Advanced Processing and Recycling of Non-ferrous Metals, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

(3. Gansu Computing Center, Lanzhou 730030, China)

Abstract: In order to investigate the effects of lamellar thickness and γ/α_2 interface on the deformation and mechanical properties of dual-phase TiAl alloy during nano-indentation process, molecular dynamics method was used to simulate the nano-indentation process of γ and α_2 phases with diamond indentation perpendicular to γ/α_2 interface for five kinds of dual-phase TiAl alloy models. The results show that the hardness of the material increases with the decrease of the lamellar thickness. When the lamellar thickness decreases to 7 nm, the hardness of the material reach the maximum value. However, when the lamellar thickness further decreases, the hardness of the material decreases. The elastic modulus of the material changes with the thickness of lamellar and is proportional to the hardness. In addition, the deformation behavior of γ phase in the nano-indentation process is mainly the stacking fault of $\{111\}$ plane, and the γ/α_2 interface can effectively hinder the dislocation movement. The deformation behavior of α_2 phase is mainly the stacking fault of (0001) base plane. The Shockley partial dislocation motion formed on the base plane leads to the phase transformation on the material surface. The prismatic plane slip system is activated.

Key words: lamellar thickness; dual-phase TiAl alloy; mechanical properties; nanoindentation; molecular dynamics;

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