

不同应变比下 γ -TiAl 合金疲劳裂纹扩展机理

冯瑞成^{1,2}, 卢建涛^{1,2}, 李海燕^{1,2}, 曹 卉^{1,2}, 闫 峰^{1,2}, 司皇腾^{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了 γ -TiAl 合金在不同应变比作用下的疲劳裂纹扩展机理。结果表明, 疲劳裂纹均先以解理方式扩展, 随后通过驱动力驱动无序区域扩展, 最后转变为子-母裂纹传播机制扩展, 其差别在于不同应变比作用下裂纹扩展方式的转变发生在不同的时刻; 在塑性变形中, 应变比的不同使得位错在不同时刻被发射出来且沿不同平面滑移, 并且位错在滑移时有不同点缺陷形成如空位、双空位、三空位等, 同时, 应变比的不同也使得堆垛层错沿着不同密排面形成和扩展。

关键词: 应变比; 疲劳裂纹扩展; γ -TiAl 合金; 堆垛层错; 分子动力学

中图分类号: TG146⁺23; O77; TG131

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)09-2821-06

γ -TiAl 合金具有面心四方 (fct) 晶体结构, 如图 1 所示, 这种独特的晶体结构使其具有良好的性能, 如低密度, 高比刚度、良好的高温强度和抗蠕变性^[1,2]。正因为这些优点, 该合金被广泛的应用于航天航空等领域^[3]。而在实际工程中, 因疲劳发生的断裂破坏占到全部力学破坏的 50%~90%, 是机械、结构失效的最常见形式。因此, 对于 γ -TiAl 合金疲劳性能的研究显得尤其重要。

TiAl 合金的疲劳裂纹扩展行为受很多因素的影响, 例如应力比、微观结构、温度等。K. Sadananda 等^[4]对 TiAl 合金疲劳裂纹扩展行为进行了研究表明, 应力比对疲劳裂纹扩展有显著影响。H. Q. Xue 等^[5]通过实验的方法研究了 Ti-Al 合金在不同应力比作用下的长寿命疲劳行为, 由 S - N 曲线可知, 应力比 R 为 0.5

时, 很多试样发生失效是在循环周期为 10^7 之后, 也有一些试样的失效是发生在 10^9 之后, 对于应力比为 0.7 时, 试样一般在 10^5 ~ 10^8 之间发生断裂的, 大多数的失效是发生在 10^5 ~ 10^6 的范围内, 通过与文献[6]中应力比为 0.1 时的 S - N 曲线对比可以发现, 应力比越小, 试样发生疲劳断裂所需循环周期越长, 说明应力比是决定疲劳寿命的重要因素。B. K. Parida 等^[7]对室温下金属间化合物 Ti-24Al-11Nb 的疲劳裂纹扩展进行了研究, 由 da/dN - ΔK 曲线可知, 应力比对疲劳裂纹扩展速率有显著的影响。R. C. Feng 等^[8]在文献[7]的基础上对 γ -TiAl 合金裂纹扩展速率公式进行了修正, 并对应力比的作用进行了研究, 结果表明, 当应力比在 0.1 和 1 之间增加时, 裂纹扩展速率随之升高, 位错和晶体的滑移加快, 试样失效提前发生。

尽管以上实验在扫描隧道显微镜 (STM) 和原子力显微镜 (AFM) 帮助下可以观察到原子尺寸量级的现象, 能做到直接移动原子水平^[9], 但是要实现疲劳裂纹扩展动态过程的观察还是非常困难的。近几年来, 随着计算机的快速发展, 分子动力学已成为研究材料断裂动态过程的首选方法^[10]。为了能更全面地理解 γ -TiAl 合金疲劳断裂行为, 本实验采用分子动力学方法系统地研究不同应变比作用下疲劳裂纹扩展情况, 以揭示其对疲劳裂纹扩展的影响机理。

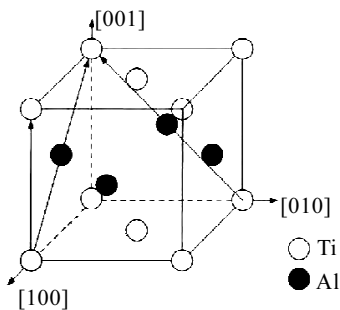


图 1 γ -TiAl 晶格结构

Fig.1 Lattice structure of γ -TiAl

1 模型和势函数

收稿日期: 2017-09-17

基金项目: 教育部“创新团队发展计划”(IRT_15R30); 甘肃省自然科学基金(148RJZA008); 甘肃省高校科研项目(2014A-033); 国家自然科学基金(51665030)

作者简介: 冯瑞成, 男, 1976 年生, 博士, 副教授, 兰州理工大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730050, E-mail: frcl@163.com

本实验建立的初始模型如图 2 所示, X、Y、Z 轴分别为晶向 [100]、[010]、[001]。模型大小为 $100a \times 60a \times 6c$, 其中晶格常数 a 为 0.405 nm, 轴比 c/a 为 1.045。裂纹的预制通过删除原子的方法来实现, 其方向沿 X 轴, 长度为模型长度的十分之一。Y 轴为加载方向, 为避免应力振荡, 其加载方式采用速度加载, 所以 Y 轴采用自由边界条件, X、Z 轴则采用周期性边界条件。为了揭示不同应变比作用下疲劳裂纹扩展机制, 应变比 $R = \epsilon_{\min} / \epsilon_{\max}$ 在 0.5 到 0.9 范围内变化, 加载示意图如图 3 所示。最大应变值取决于裂纹开始扩展时的应变临界值, 所以在模拟疲劳裂纹扩展之前, 应先进行单轴拉伸模拟以确定裂纹开始扩展时的应变临界值, 模拟过程中采用的应变率为 $1.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 。循环加载周期范围为 1 到 10。

在分子动力学模拟中, 选择适当的原子间相互作用势是模拟正确进行的前提。本研究采用了嵌入原子势 (EMA) [11]; 采用 open visualization tool (OVITO) [12] 对模拟结果进行可视化分析。循环加载过程中缺陷 (位错、堆垛层错等) 的出现通过中心对称参数 [13] 来显示, 其参数的表达式如下:

$$P = \sum_i |R_i + R_{i+6}|^2 \quad (1)$$

式中: R_i 和 R_{i+6} 是中心原子到最邻近原子的矢量, 分别对应于每对近邻原子。当原子的 P 值从 0 增大到 25 时, 代表着原子从完美的晶格结构向缺陷 (位错、空

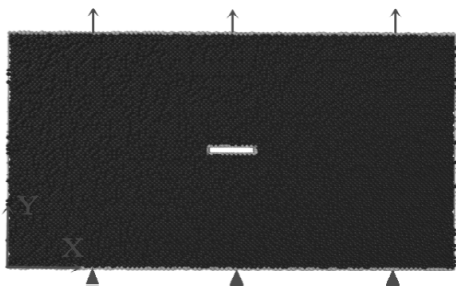


图 2 初始模型
Fig.2 Initial model

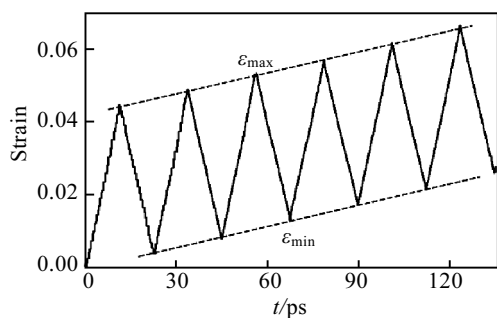


图 3 加载示意图
Fig.3 Sketch of loading

位、层错等) 的变化, 因此它可以描述不同缺陷的形成和发展。

2 结果与分析

由于选取的最大应变小于临界应变, 所以在第 1 个循环周期内, 晶体不发生塑性变形, 只是通过改变原子间距承受外力, 所以裂纹不会发生扩展。

$R=0.5$ 时, 裂纹在 $t=24.48 \text{ ps}$ 时开始扩展, 应力始终集中在裂尖, 即裂纹以解理方式扩展。随着应变进一步增加, 裂尖原子排列混乱, 裂纹张开位移增大, 裂尖锐化, 裂尖前端在 $t=27.36 \text{ ps}$ 时有无序区域形成, 裂纹开始通过驱动力驱动无序区域的方式扩展, 此过程中无序区域面积会增大, 为位错的形成提供了条件。在第 3 个循环周期的拉伸阶段, 右裂尖的应力在 $t=35.28 \text{ ps}$ 时超过晶格阻力, 发射出第 1 个位错, 位错沿 $(1\bar{1}0)$ 面向边界滑移时分解成 2 个位错, 如图 4 所示, 图中红色原子和绿色原子分别代表铝原子和钛原子, 离裂尖较近的位错会随着裂纹的扩展消失于无序区域, 而另 1 个位错则沿着 $(1\bar{1}0)$ 面继续向边界滑移, 滑移过程中在晶体内有缺陷形成, 位错的移动需要足够的临界切应力, 应变比越大导致裂尖应力集中越严重, 因而位错的滑移越容易, 材料越容易发生塑性变形。拉伸作用进一步使得无序区域内的应力大于原子键结合力, 原子键发生断裂形成孔洞, 孔洞演化成子裂纹, 子裂纹与主裂纹汇合实现了裂纹的扩展即裂纹开始通过子-母裂纹传播机制进行扩展。在压缩阶段, 有内禀层错沿 $(11\bar{1})$ 面形成, 其密度随着裂纹的扩展先增大, 然后减小至零。

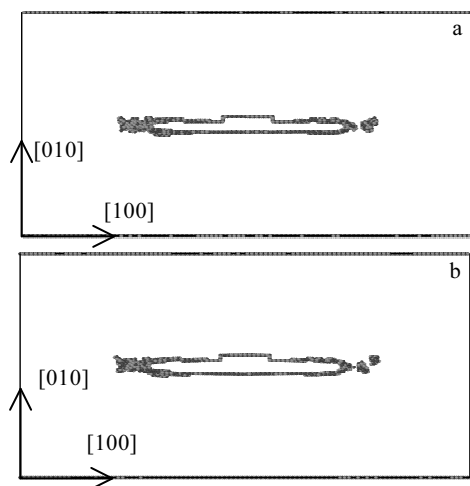


图 4 不同时刻右裂尖位错形态
Fig.4 Dislocation configuration of right crack tip at different time: (a) $t=35.28 \text{ ps}$ and (b) $t=36.40 \text{ ps}$

$R=0.6$ 时，裂纹在 $t=20.88$ ps 时开始解理扩展， $t=24.16$ ps 时无序区域在裂尖前端形成，此时裂纹开始以非解理方式扩展。在第 3 个循环周期的拉伸阶段，应力集中发生在裂尖前端无序区域，如图 5 所示，随着拉伸作用的增强，右裂尖前端在 $t=38.32$ ps 时有孔洞形成，其放大图如图 6a 右上角所示，孔洞很快演化为子裂纹，最后子裂纹与主裂纹汇合形成新的裂纹，这种裂纹扩展方式不同于非解理方式，左裂尖在 $t=38.96$ ps 时出现孔洞，其放大图如图 6b 左上角所示。

当裂纹扩展至边界时，由于受表面作用的影响，有内禀层错沿(111)面形成，其密度会沿(111)面增加，随后不断减小直至消失，此时在该处有少量位错形成。

$R=0.7$ 时，裂纹在 $t=20$ ps 时开始解理扩展， $t=21.84$ ps 时转化为非解理扩展。

在第 2 个循环周期压缩阶段， $1/2\langle 110 \rangle$ 全位错、 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错从右裂尖被发射出来，并沿 $(1\bar{1}0)$ 面向边界滑移，之后有同种位错从该裂尖被发射，但其沿(110)面进行滑移。随着裂纹的扩展，右裂尖前端在 $t=26.48$ ps 时有内禀层错沿 $(\bar{1}11)$ 面形成，如图 7a 红褐色原子所示，其晶体结构为 hcp 结构，通过

分析发现，层错的形成是由于 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错沿密排面扫过引起的，与文献[14]中层错的形成机理一致；随着压缩作用的增强，层错密度不断增加， $t=27.52$ ps 时密度达到最大，如图 7b 所示，随后其密度开始减小，当其完全消失时，有 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错和 $1/3\langle 001 \rangle$ 不全位错形成，位错沿 $(1\bar{1}0)$ 面向边界滑移时 $1/3\langle 001 \rangle$ 不全位错发生分解而消失；在 $t=27.68$ ps 时，左裂尖前端也有内禀层错形成，如图 7c 所示， $t=28.40$ ps 时密度达到最大，如图 7d 所示；层错密度开始减小时，左裂尖有位错沿(110)面被发射，滑移时有缺陷形成，同时沿 $(\bar{1}10)$ 面有 $1/2\langle 110 \rangle$ 全位错、 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错和 $1/3\langle 001 \rangle$ 不全位错形成， $1/3\langle 001 \rangle$ 不全位错在位错滑移时发生分解，且位错滑移过程中有三空位形成，其晶格结构如图 8 所示。

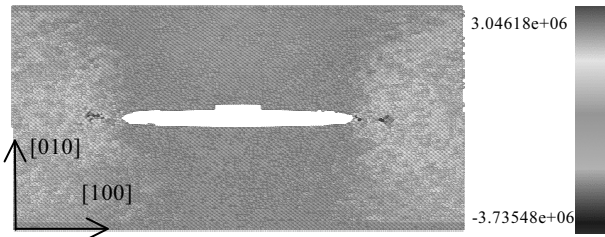


图 5 应力分布图

Fig.5 Stress distribution

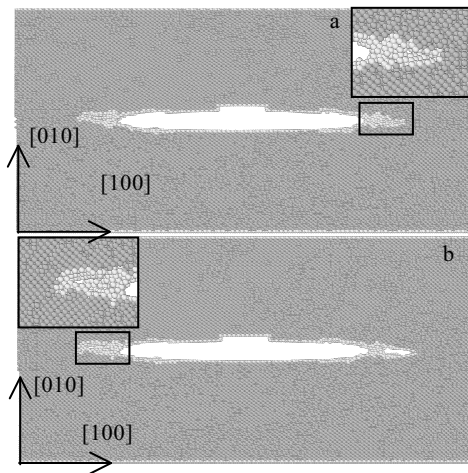


图 6 不同时刻孔洞的形成

Fig.6 Formation of the hole at different time: (a) $t=38.32$ ps and (b) $t=38.96$ ps

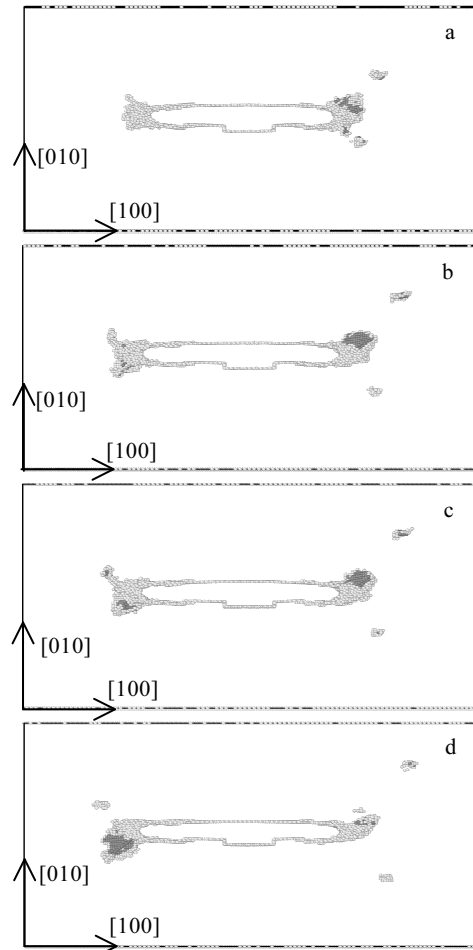


图 7 不同时刻裂尖处层错密度

Fig.7 Density of stacking faults at crack tip at different time: (a) $t=26.48$ ps, (b) $t=27.52$ ps, (c) $t=27.68$ ps, and (d) $t=28.40$ ps

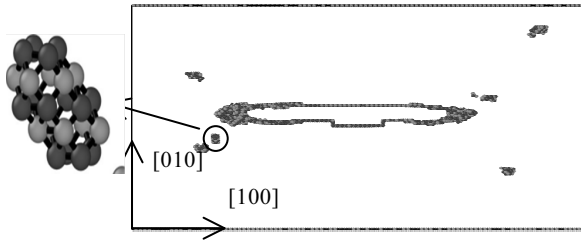


图 8 位错滑移时三空位的形成

Fig.8 Formation of trivacancy during dislocation gliding

进入第 3 个循环周期后，裂纹在拉伸作用下扩展时，有 $1/2[1\bar{1}0]$ 全位错从左裂尖被发射出来，并沿 $(1\bar{1}0)$ 面向边界滑移，滑移过程中有空位产生，同时，在第 2 个循环周期内形成的位错沿 $(1\bar{1}0)$ 面滑移时，有三空位产生。在此阶段中，孔洞首先出现在右裂尖前端的无序区域内，孔洞长大演化成子裂纹，最后与主裂纹汇合，实现裂纹的扩展。在裂纹扩展过程中，沿 $(1\bar{1}0)$ 面和 (110) 面滑移的两个位错在右下边界相遇，有“波浪型”交叉内禀层错形成，如图 9 所示，在循环载荷作用下，交叉内禀层错消失，2 个位错分开，有 $1/3[001]$ 不全位错的形成，俗称 Hirth 锁^[15]，其形成来源于不全位错 $1/6[2\bar{1}1]$ 和 $1/6[2\bar{1}\bar{1}]$ 的结合。

$R=0.8$ 时，裂纹在 $t=16.96$ ps 时开始解理扩展， $t=19.52$ ps 时裂尖前端无序区域形成，裂纹扩展方式发生转变。随着裂纹在第 2 个循环周期内的扩展，当 $t=22.16$ ps 时，右裂尖前端有内禀层错沿 $(11\bar{1})$ 面形成，如图 10a 所示，其密度会不断增大， $t=22.96$ ps 时其密度达到最大，如图 10b 所示，随后，内禀层错密度开始减小，在右裂尖有 $1/2\langle 110 \rangle$ 全位错、 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错和 $1/3\langle 001 \rangle$ 不全位错形成，当其沿 (110) 面向边界滑移时有空位的形成且 $1/3\langle 001 \rangle$ 不全位错发生分解。进入压缩阶段后，裂纹扩展速率减小，无序区域面积减小，有位错在左

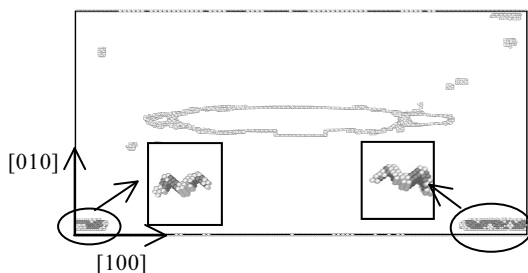


图 9 “波浪型”内禀层错

Fig.9 Wave shape of intrinsic stacking faults

裂尖形成，如图 11a 区域 A 所示，该位错的位错线如图 11b 所示，其中蓝色线为 $1/2\langle 110 \rangle$ 全位错、绿色线为 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错、黄色线为 $1/3\langle 001 \rangle$ 不全位错，位错沿 $(1\bar{1}0)$ 面进行滑移时 $1/3\langle 001 \rangle$ 不全位错发生分解而消失。进入压缩阶段后期，左裂尖前端的无序区域内出现孔洞，孔洞长大演化成子裂纹。

进入第 3 个循环周期的拉伸阶段后，子裂纹开始向左扩展，子裂纹扩展过程中，右裂尖有刃型位错被发射出来，其柏氏矢量为 $1/2[110]$ ，滑移面为 $(1\bar{1}0)$ 面，滑移过程中有空位形成，空位的形成使得其周围原子失去力平衡，偏离平衡位置，在空位周围形成一个弹性畸变区，从而影响了材料的机械性能。同时，左裂尖也有刃型位错被发射出来，不同的是其柏氏矢量为 $1/2[1\bar{1}0]$ ，滑移时没有空位形成。

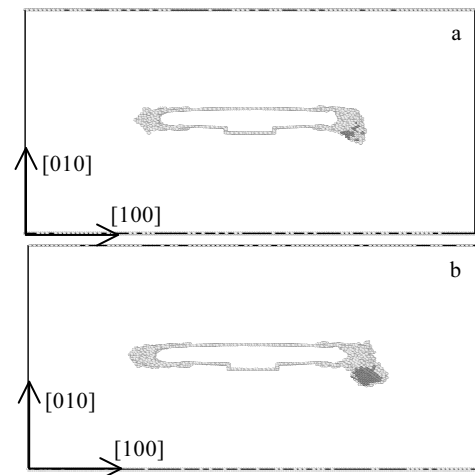


图 10 不同时刻裂尖处层错密度

Fig.10 Density of stacking faults at crack tip at different time: (a) $t=22.16$ ps and (b) $t=22.96$ ps

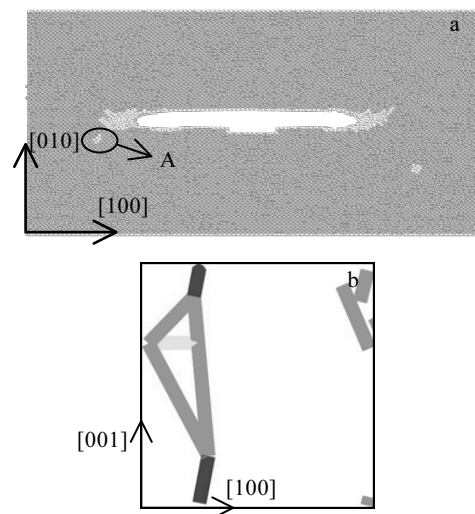


图 11 位错发射图

Fig.11 Dislocation emission: (a) atomic figure of dislocation and (b) dislocation line

$R=0.9$ 时，裂纹在 $t=16.16$ ps 时开始解理扩展， $t=17.36$ ps 时裂尖前端原子排列出现混乱形成无序区域，裂尖开始变钝，裂纹开始非解理扩展。

在第 2 个循环周期的拉伸阶段，当 $t=21.68$ ps 时在右裂尖前端有内禀层错沿 $(11\bar{1})$ 面形成，如图 12a 所示， $t=22.80$ ps 时其密度达到最大值，如图 12b 所示；在 $t=23.12$ ps 时在左裂尖前端沿 $(\bar{1}11)$ 面也有内禀层错的形成，如图 12c 所示， $t=23.92$ ps 时其密度达到最大，如图 12d 所示。进入压缩阶段，裂尖前端的内禀层错密度减小，左裂尖有 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错和空位形成，空位原子图如图 13 所示，位错沿 $(1\bar{1}0)$ 面进行滑移，同时，右裂尖前端无序区域有 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错和 $1/3 [001]$ 不全位错形成，位错沿 $(1\bar{1}0)$ 面滑移， $1/3 [001]$ 不全位错消失。伴随着内禀层错密度的减少，新的内禀层错会在左裂尖前端沿 (111) 面形成，如图 12d 区域 B 所示。

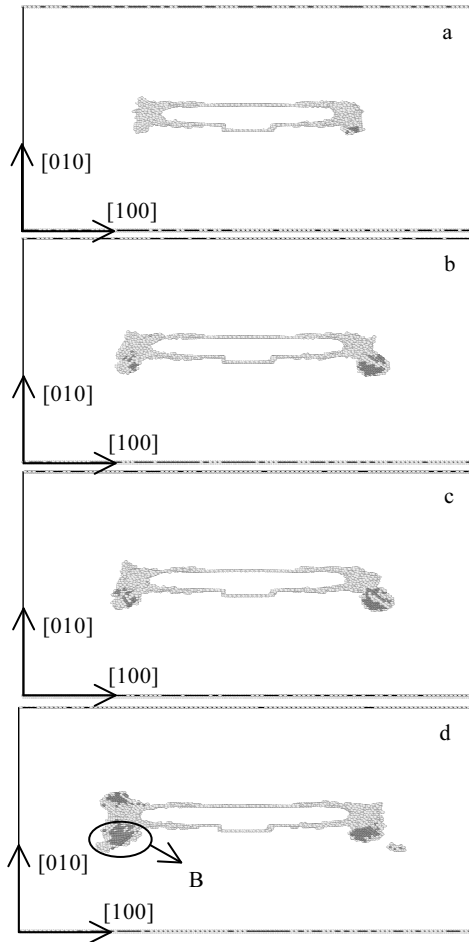


图 12 不同时刻裂尖处层错密度

Fig.12 Density of stacking faults at crack tip at different time: (a) $t=21.68$ ps, (b) $t=22.80$ ps, (c) $t=23.12$ ps, and (d) $t=23.92$ ps

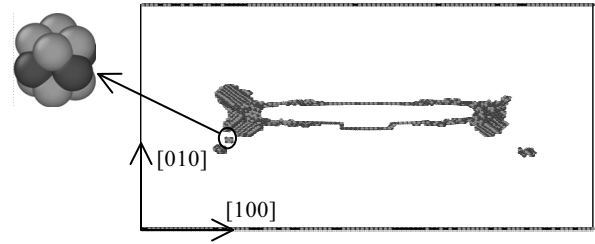


图 13 空位形成图

Fig.13 Formation of vacancy

进入第 3 个循环周期后，左裂尖有位错沿 $(1\bar{1}0)$ 面被发射出来，同时，在第 2 个循环周期沿 (111) 面形成的内禀层错的密度会不断减少，在层错减少的地方有位错形成，当位错所受应力大于晶格阻力时位错沿 (110) 面进行滑移，这些位错沿 (110) 面和 $(1\bar{1}0)$ 面向边界滑移时有空位产生。位错的发射使得裂尖的应力减小，应力集中发生在裂尖前端的无序区域内，孔洞在无序区域内的出现标志着裂纹扩展方式由原来的驱动力驱动无序区域的方式转变为子-母裂纹传播的方式。

3 结论

- 1) 不同应变比作用下，疲劳裂纹开始扩展的时间不同，应变比越大，裂纹开始扩展所需时间越短。
- 2) 层错的形成是由于 $1/6\langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错沿密排面扫过引起的，应变比越大，晶体内能量越高，位错可动性越强，进而导致内禀层错在不同周期内形成且其密度沿不同密排面增加。当 $R=0.5$ 和 $R=0.6$ 时，内禀层错在第 3 个循环周期内形成，其密度分别沿 $(11\bar{1})$ 面和 (111) 面变化； $R=0.7$ 和 $R=0.8$ 时，内禀层错在第 2 个循环周期内形成，其密度分别沿 $(\bar{1}11)$ 面和 $(11\bar{1})$ 面变化； $R=0.9$ 时，内禀层错同样在第 2 个循环周期内形成，但其密度沿 $(\bar{1}11)$ 面和 $(11\bar{1})$ 面变化。
- 3) 位错在不同应变比作用下滑移时，有不同的点缺陷形成，对于较小的应变比而言，系统能量没有达到点缺陷形成能，因此不会有点缺陷形成。当 $R=0.5$ 和 $R=0.6$ 时，无空位形成； $R=0.7$ 时，有空位和 3 空位形成； $R=0.8$ 和 $R=0.9$ 时，仅有空位形成。

参考文献 References

[1] Clemens H, Mayer S. *Advanced Engineering Materials*[J], 2012, 15(4): 191
 [2] Clemens H, Smarsly W. *Advanced Materials Research*[J],

- 2011, 278: 551
- [3] Yang J, Li H, Hu D *et al.* *Intermetallics*[J], 2014, 45(2): 89
- [4] 3Sadananda K, Vasudevan A K. *Materials Science & Engineering A*[J], 1995, 192–193(94): 490
- [5] Xue H Q, Tao H, Shao R P *et al.* *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2008, 18(3): 499
- [6] Bayraktar E, Bathias C, Xue H *et al.* *International Journal of Fatigue*[J], 2004, 26(12): 1263
- [7] Parida B K, Nicholas T. *International Journal of Fracture*[J], 1991, 52(3): R51
- [8] Feng R C, Rui Z Y, Zuo Y R *et al.* *Applied Mechanics & Materials*[J], 2013, 457-458: 7
- [9] Eigler D M, Schweizer E K. *Nature*[J], 1990, 344(6266): 524
- [10] Buehler M. *Atomistic Modeling of Materials Failure*[M]. Berlin: Springer Science & Business Media, 2008
- [11] Zope R R, Mishin Y. *Physical Review B*[J], 2003, 68(2): 366
- [12] Stukowski A. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*[J], 2010, 23(1): 61
- [13] Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C. *Phys Rev B*[J], 1998, 58(17): 11085
- [14] Qu Xuanhui, Huang Baiyun, Lu Haibo *et al.* *Metal Science & Technology*[J], 1992(S1): 31
- [15] Paulauskas T, Buurma C, Colegrove E *et al.* *Acta Crystallographica*[J], 2001, 70(6): 524

Fatigue Crack Propagation Mechanism of γ -TiAl Alloy under Different Strain Ratios

Feng Ruicheng^{1,2}, Lu Jiantao^{1,2}, Li Haiyan^{1,2}, Cao Hui^{1,2}, Yan Feng^{1,2}, Si Huangteng^{1,2}

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

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

Abstract: The mechanism of fatigue crack propagation of γ -TiAl alloy under different strain ratios was studied using the molecular dynamics method. The results show that a fatigue crack propagates in the manner of cleavage firstly, and then propagates through disordered region by driving force. Finally, it changes into sub-main crack mechanisms. The difference is that the change in the mode of crack propagation occurs at different time under different strain ratios. At the stage of plastic deformation, dislocations emit at different time and glide at different planes due to different strain ratios. Defects, such as vacancies, divacancies, and trivacancies, are generated during dislocation gliding. Meanwhile, stacking faults are generated along the different close-packed planes under different strain ratios.

Key words: strain ratio; fatigue crack propagation; γ -TiAl alloy; stacking fault; molecular dynamics

Corresponding author: Li Haiyan, Master, School of Mechanical and Electrical Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, P. R. China, E-mail: frcly76@126.com