

孔洞对双晶 TiAl 合金断裂行为影响的声发射响应

樊礼赫¹, 冯瑞成^{1,2}, 姚永军¹, 曹 卉^{1,2}, 李海燕^{1,2}, 雷春丽^{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 数字制造技术与应用教育部重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘 要: 基于分子动力学方法, 对含孔洞的双晶 TiAl 合金试样进行了单轴拉伸模拟, 在纳米尺度下研究了材料变形和断裂过程中的缺陷演化行为及其声发射响应。结果表明: 孔洞大小和位置对材料的弹性模量影响较小, 屈服强度随孔洞尺寸的增大而降低; 进入塑性变形后, 孪晶界对孔洞边缘连续发射的位错有阻碍作用, 使晶体强度增加; 达到屈服应力时, 含晶界孔洞的试样更容易产生稳定的位错结构, 阻碍其他位错运动, 从而提高了晶体强度; 通过对拉伸过程中的声发射信号进行分析, 发现声发射信号主要来源于晶格振动, 并且具有较大的功率值范围和较低的中值频率; 位错滑移的声发射信号表现出宽频域的特点, 位错增殖和位错塞积的声发射信号表现出低功率的特点; 裂纹扩展的声发射信号属于突发型信号, 表现为高频率、高功率的特征。

关键词: TiAl 合金; 声发射; 孔洞; 晶界; 分子动力学

中图分类号: TG131; TG146; O77

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2022)08-2923-10

在实际制造过程中, 由于空气等的掺杂非常容易引入微孔洞缺陷, 微孔洞缺陷的存在会导致材料局部强度降低, 影响其力学性能和使用寿命。目前对微孔洞缺陷的研究集中在孔洞大小、孔洞体积分数、孔洞形状、孔洞位置及加载条件等方面。Xu 等^[1]研究了单晶镁中孔洞大小对其力学性能的影响, 研究表明, 初始尺寸较大的孔洞对单晶镁力学性能的影响更大。Yuan 等^[2]讨论了孔洞体积分数对单晶铝塑性变形的影响, 发现孔洞体积分数越大, 位错形核时间越早, 但是孔洞对位错运动的阻碍作用反而增大。芮执元^[3]和寇佩佩等^[4]研究了孔洞大小、数量以及位置对 γ -TiAl 合金力学性能的影响, 发现孔洞的引入降低了位错发射的临界应力, 多个孔洞平行排列并与拉伸方向垂直时, 材料最容易失效, 裂纹的启裂应力值随着孔洞半径增大而减小。Potirniche 等^[5,6]研究了单晶 Ni 中孔洞在不同应变率和晶向下拉伸的变形机制。Su 等^[7]研究了铜中纳米孔洞的生长过程, 发现孔洞的形状改变了材料的屈服应力和屈服应变, 并影响位错形核和孔洞的演化。Traiviratana 等^[8]通过分子动力学方法研究了孔洞在单晶和双晶铜中的生长机制, 研究发现位错在孔洞边缘发射的时间随孔洞半径的增大而提前; 孔洞生长的主要机制是位错环的发射。

材料中若存在位错、孔洞、微裂纹等缺陷, 这些

缺陷会导致材料在服役过程中提前失效, 造成不必要的损失。因此在服役过程中在线监测材料的健康状况, 并对材料中缺陷的扩展演化及时预警显得尤为重要。声发射作为能够反映金属材料变形过程中弹性能量耗散的一种现象, 其对材料的早期塑性变形有着高度的敏感性^[9], 并且在变形过程中的各种位错反应, 例如脱离钉扎点、协同运动、湮灭和位错逃逸到自由表面等都是可探测的声发射源^[10]。张颖等^[11]用声发射技术监测缺陷试件的原位拉伸, 发现位错滑移、位错增殖、杂质、晶界相互作用等产生了不同类型、不同特征的大量声发射信号, 其中夹杂物断裂和位错滑移均能产生较高能量的突发型声发射信号, 位错滑移产生的连续型信号特征都很相似, 虽然位错滑移产生的突发型信号与连续型信号差异较大, 但其在边际谱特征上具有相似性。Li 等^[12]对铝的拉伸过程进行了声发射监测, 发现位错滑移和孪生是 2 种典型的声发射源。Linderov 等^[13]研究了不同温度下奥氏体不锈钢单轴拉伸的声发射信号特征, 通过对声发射信号特征参数聚类分析发现: 在变形过程中, 形变孪生、层错、马氏体相变以及位错滑移都能通过声发射信号特征明显地识别出来。Vinogradov 等^[14]推测声发射的大部分能量来源于位错的减少, 而位错减少主要有 3 种可能的方式: 符号相反的位错相遇、位错遇到弗兰克-

收稿日期: 2021-08-08

基金项目: 国家自然科学基金(52065036); 甘肃省自然科学基金(20JR5RA448); 兰州理工大学红柳一流学科建设项目

作者简介: 樊礼赫, 男, 1995 年生, 硕士, 兰州理工大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730050, E-mail: 1121060475@qq.com

瑞德源环(Frank-Read source loop)而湮灭和位错进入自由界面并湮灭, 符号相反位错相遇会释放弹性能, 但在实验中观察到大量声发射只出现在小的变形中, 而大量符号相反的位错相遇仅在大的变形中发生。Bohemen 等^[15]通过实验发现马氏体中位错密度的增加会引起声发射能量的增加。Kitagawa 等^[16]认为晶界的位错运动对声发射信号的能量会产生较大的影响, 双晶铝的声发射信号能量强度大于单晶铝的声发射信号能量强度。Dmitriev 等^[17]通过声发射研究了静态载荷下未退火和退火的钛合金, 发现未退火的钛合金有 3 个明显不同的声发射峰, 退火的钛合金有 2 个明显不同的声发射峰; 利用 SEM 观察和声发射信号分析建立了声发射与钛合金在载荷作用下的塑性应变和断裂机理之间的关系。Vinogradov 等^[18]报道了位错滑移、孪晶和马氏体相变是不同镍含量的高合金铬锰镍铸钢在变形和断裂过程中的声发射源, 并用聚类分析识别了声发射源。还有学者直接从原子角度对声发射源的类型进行研究。Feng 等^[19]利用分子动力学方法研究了 6H-SiC 脆性切削的声发射响应, 发现了 3 种声发射源: 晶格振动、位错增殖和裂纹扩展, 此外, 刀具引入的压应力会导致声发射功率下降; 祁永年等^[20]在 Ni₃Al 合金纳米切削的声发射响应研究中发现由位错活动引起的拉应力会增加声发射功率与中值频率, 更高能级的位错活动在大应变条件下产生并发射突发型高频信号。

由于材料在载荷作用下出现损伤时, 其内部微观组织的演化非常复杂, 而现有的声发射理论在微观组织演化方面还不够完善。因此, 本实验采用分子动力学方法研究 TiAl 合金在拉伸过程中微观缺陷演化及其声发射响应, 分析声发射信号特性, 在纳米尺度上揭示声发射源产生的物理本质, 通过声发射信号响应识别材料中缺陷类型和分布及其演化规律, 为声发射信号检测技术提供理论支撑。

1 模型建立和模拟条件

1.1 模型的建立

γ -TiAl 合金具有独特的 L1₀ 型面心四方(fct)晶体

结构, 与面心立方(fcc)晶体结构相似, 其晶格常数为 $a=b=0.4001$ nm, $c=0.4181$ nm。在 Lammmps 软件中通过旋转晶粒取向建立含有 $\Sigma 3(111)$ 孪晶界的模型。模型中晶粒分为左中右 3 部分, 在左右 2 个晶粒内填充晶向为 [111]、 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 的原子, 在中间晶粒内填充晶向为 [111]、 $[\bar{1}\bar{1}\bar{2}]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 的原子, 最后将 3 个晶粒对接, 形成了双晶结构的孪晶模型。在建模时, 若模型尺寸选择不当会因堆垛次序和周期性边界条件而使表面处原子刚性对接能量升高, 为消除刚性对接, X、Y、Z 方向应取对应取向晶格最小单位的整数倍, 如 X 轴为 [111], 其长度应为 $N \times \sqrt{1^2 + 1^2 + 1^2} \times 0.4001$ nm, N 为整数, 模型尺寸为 27.7 nm×19.6 nm×5.9 nm, 模型含有原子数随孔洞尺寸大小而变化, 不同孔洞半径和原子数如表 1 所示。

共建有 9 个模型, 分别为无孔洞模型、含有不同孔洞半径的晶内孔洞模型和晶界孔洞模型, 如图 1 所示。

1.2 模拟条件

模拟中, 原子间势函数采用 EAM 势, 选用 0.5 fs 作为最小时间步长。在施加载荷前, 先对双晶 TiAl 合金晶胞模型弛豫 50 ps 达到平衡状态, 选用 Nose-Hoover 恒温器将模拟体系的温度控制在 1 K, 然后将弛豫后的模型在正则系综(NVT)下以恒定应变率进行拉伸, 拉伸方向垂直于孪晶界; 边界条件采用周期性边界条件; 模型的左右两端被刚化固定, 作为加载时的夹头, 通过对其施加外力来进行单向的拉伸; 用 Velocity-Verlet 算法计算原子的运动轨迹, 最后利用 Ovito 软件的 DXA 和 CNA 模块对模拟结果进行可视化处理分析。

1.3 声发射信号提取

在材料的拉伸变形过程中, 每隔 10 fs 监测全局动能和应力变化, 信号的采集频率为 100 THz, 每次分

表 1 原子数随孔洞半径的变化

Table 1 Variation of atomic number with void radius					
Void radius/nm	0	0.2	0.4	0.8	1.2
Atomic number	201600	201598	201582	201467	201148

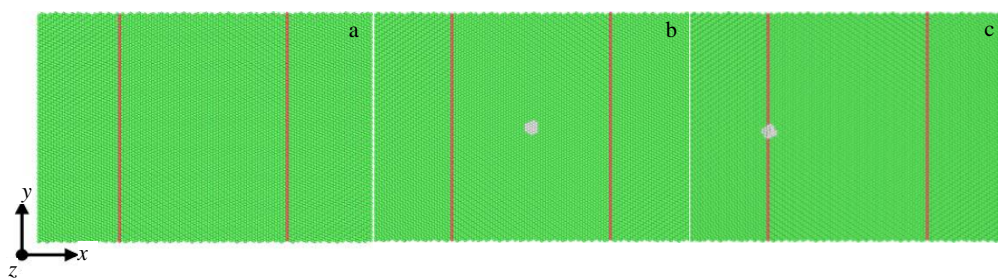


图 1 双晶 TiAl 合金模型

Fig.1 Model of bicrystal TiAl alloy: (a) without void, (b) with voids at intragranular, and (c) with voids at grain boundary

为 6 个信号球提取，位置分布如图 2 所示，图 2 中左下角蓝色点为坐标原点，球心坐标及球半径如表 2 所示。每次提取都会对球内的所有信号做一次平均，以减小随机过程带来的影响。并将提取到的信号没有重叠的均分为多帧，对每一帧，通过韦尔奇估计计算其功率谱密度函数(power spectral density, PSD) $G_i(f)$ ，计算声发射功率 $E = \int_{f_{min}}^{f_{max}} G(f)df$ ，并做归一化处理 $\tilde{G}(f) = G(f)/E$ ，再通过 $\int_0^{f_m} G(f)df = \int_{f_m}^{\infty} G(f)df$ 计算中值频率 f_m 。

2 模拟结果与讨论

2.1 晶内孔洞对双晶 TiAl 合金断裂行为的影响

图 3 为具有共格孪晶界的无孔洞双晶模型与不同孔洞半径 $R(0.2、0.4、0.8、1.2 \text{ nm})$ 的晶内单孔洞双晶模型的应力-应变曲线。由图 3 可知，应力在弹性阶段迅速增加，其斜率只存在微小差异，表明孔洞尺寸对含孪晶界的双晶 TiAl 合金的杨氏模量无显著影响。与无孔洞试样相比，孔洞的引入对双晶的应力峰值影响较大，有孔洞的纳米双晶 TiAl 合金屈服应力和屈服应变都随孔洞的增大明显降低，这是因为随着孔洞半径的增大，孔洞内表面位错形核能减小，从而降低了材料的屈服应力及其强度。

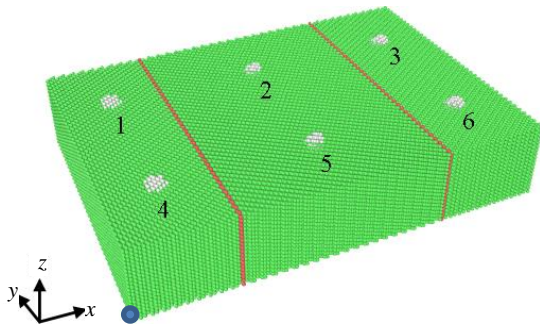


图 2 声发射信号采集点的分布

Fig.2 Distribution of acoustic emission signal acquisition points

表 2 信号球球心坐标参数及信号球半径

Table 2 Parameters of signal sphere center coordinates and signal sphere radius

Center coordinates	1	2	3	4	5	6
x	35	139	243	35	139	243
y	147	147	147	49	49	49
z	50	50	50	50	50	50
Radius/nm	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8

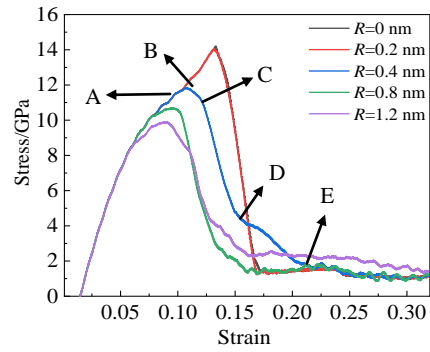


图 3 不同晶内孔洞半径下 TiAl 合金的应力-应变曲线

Fig.3 Stress strain curves of TiAl alloy with different intragranular void radii

图 4 为孔洞半径 $R=0.4 \text{ nm}$ 的演化过程。初始拉伸过程为弹性形变阶段，应力随应变增大而增加，当应力达到图 3 中 A 点时，开始产生塑性形变，位错首先在孔洞边缘形核，如图 4a 所示；拉伸过程中能量持续增大，孔洞边缘不断有 Shockley 不全位错向外发射，位错反应和运动引起的原子面滑移改变了孔洞附近原子的堆垛次序，产生了内禀堆垛层错(intrinsic stacking fault, ISF)和外禀堆垛层错(extrinsic stacking fault, ESF)，如图 4b 所示；ISF 由 2 层相邻的 hcp 原子面组成，而 ESF 由 1 层 fcc 原子面夹在 2 层 hcp 原子面之间构成，当超过 Peierls 势垒时，应变能释放， $1/6[121]$ Shockley 不全位错在孔洞发射并沿着 $\{111\}$ 易滑移面滑移，形成变形孪晶，如图 4c 所示；发射的位错和产生的层错在边界堆积，产生应力集中，使边界萌生孔洞，孔洞演化为微裂纹，继而扩展导致断裂，如图 4c~4e 所示。

从图 4b~4c 中可以看出随着应变的增加，孔洞附近的层错转变为孪晶（这里把变形孪晶定义为二次孪晶），而且初始孪晶界可有效阻碍二次孪晶穿过初始孪晶，此机制是由在塑性变形过程中发生的应变硬化引起的。变形过程中位错运动受多种力的作用：作用在位错上的拉应力、相邻位错之间的排斥力和孪晶界上的排斥力。施加在位错上的拉伸力和相邻位错之间的排斥力使位错滑移，当位错向着孪晶界运动时，被孪晶界的排斥力阻碍而引起位错堆积导致孪晶界附近位错密度增大，从而使材料强化^[21]。此外，不全位错向孪晶界滑移时因受到孪晶界的阻碍而堆积，并与孪晶界相互作用后产生新的不全位错。新产生的不全位错沿着孪晶界滑移有利于释放由位错累积引起的应力集中，提高了 TiAl 合金的韧性。

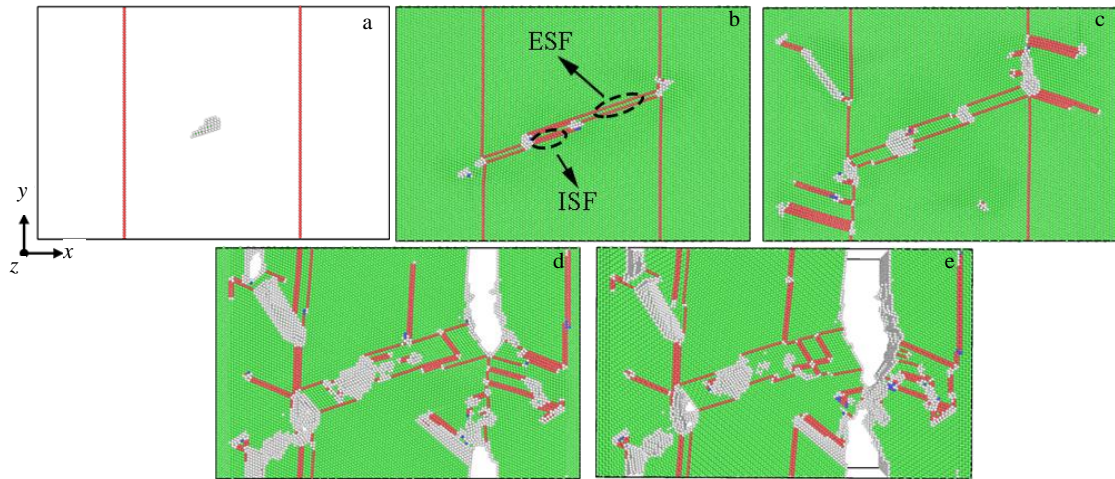


图 4 含晶内孔洞半径 $R=0.4$ nm 的原子结构演化图(分别对应图 3 中点 A、B、C、D、E)

Fig.4 Evolution of atomic structure with void of $R=0.4$ nm at different strains corresponding to point A, B, C, D and E in Fig.3: (a) 10.22%, (b) 10.78%, (c) 12.00%, (d) 15.65%, and (e) 20.21%

2.2 晶界孔洞对双晶 TiAl 合金断裂行为的影响

含有不同晶界孔洞半径的 TiAl 合金应力-应变曲线如图 5 所示。在弹性阶段，应力迅速增加，其斜率几乎没有差异，当应力达到峰值后，无孔洞试样和孔洞半径 $R=0.2$ nm 的试样，应力迅速下降，表现出明显的脆性断裂行为；随着孔洞半径的增大，屈服应力依次降低。由半径与面积的关系式 $S=\pi r^2$ 可知，孔洞与孪晶界的截面圆面积呈平方关系增大，导致晶界面积减小，使得孪晶界对位错滑移的阻力降低，进而导致材料的强度降低。

通过 DXA 分析得到含晶界孔洞的 TiAl 合金应力达到极值点时的微观结构图，如图 6 所示。其中蓝色表示 Perfect 全位错、绿色表示 Shockley 不全位错、紫色表示 Stair-rod 位错、红色表示 Other 类型位错。从图 6 可以发现，含晶界孔洞的 TiAl 合金应力达到极值点时应变随着孔洞半径的增加而逐渐减小，且在应力极值点处形成的位错类型和位错数目存在明显差异；在应力达到峰值时，孔洞半径 $R=0$ nm 和 $R=0.2$ nm 的试样发射首个位错，而其它试样中的位错已经发生了位错反应和滑移；随着载荷继续加大，位错数量继续增加，促进塑性变形，导致 TiAl 合金屈服强度进一步下降。

对比含晶内孔洞的 TiAl 合金，如图 7 所示，晶界孔洞的屈服强度比晶内孔洞的屈服强度高，尤其是孔洞半径 $R=0.4$ nm 时，晶界孔洞的屈服强度比晶内孔洞的屈服强度高 0.955 GPa；而当孔洞半径增加到 $R=0.8$ nm 时，2 个试样的屈服强度差距减小；当 $R=1.2$ nm

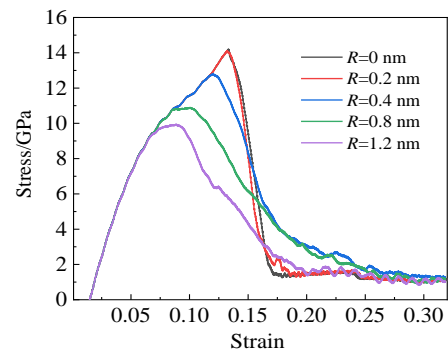


图 5 不同晶界孔洞半径下 TiAl 合金的应力-应变曲线

Fig.5 Stress-strain curves of TiAl alloy with different void radii at grain boundary

时，屈服强度几乎一致，这是因为随着孔洞半径的增大，孔洞尺寸对材料强度的影响大于孔洞位置对材料强度的影响作用，因此在大孔洞半径的情况下，孔洞尺寸对材料屈服强度的影响占主导作用。图 8 是晶界孔洞半径 $R=0.4$ nm 的试样达到屈服应力时的微观结构图，利用 DXA 技术识别缺陷原子，剔除正常的 fcc 原子，观察到 Stair-rod 位错连接着 2 个堆垛层错从而产生 Lomer-Cottrell 面角位错，如图 8b 所示，Lomer-Cottrell 位错的稳定性阻碍了其它位错的运动，使含晶界孔洞的双晶 TiAl 合金的强度增大，这说明当孔洞半径 $R=0.4$ nm 时，晶界孔洞的屈服强度高于晶内孔洞的屈服强度。

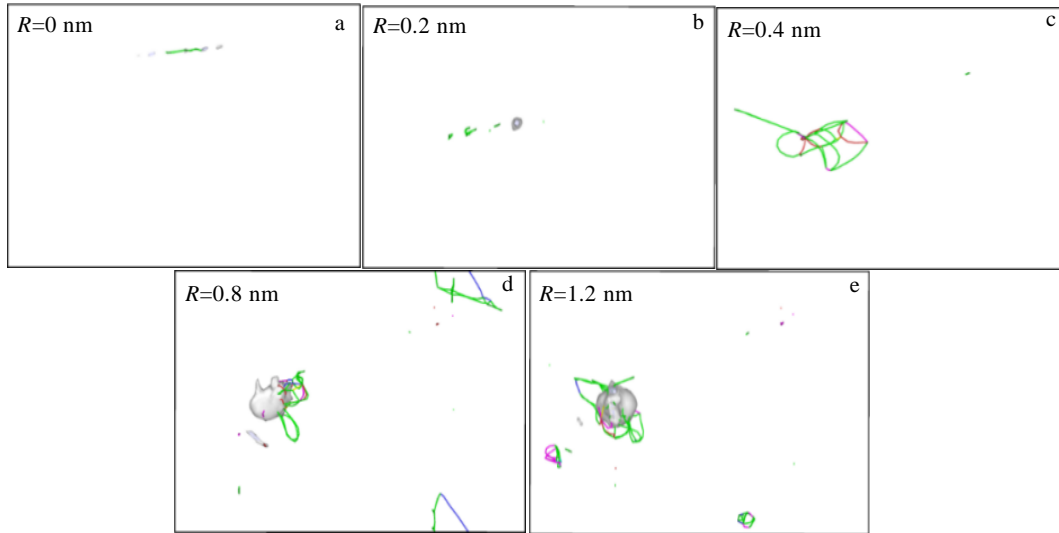


图 6 含不同晶界孔洞半径 TiAl 合金应力达到极值点时所对应的微观缺陷

Fig.6 Micro defects of TiAl alloy with different grain boundary void radii corresponding to the maximum stress at different strains: (a) 13.42%, (b) 13.21%, (c) 11.99%, (d) 9.97%, and (e) 8.85%

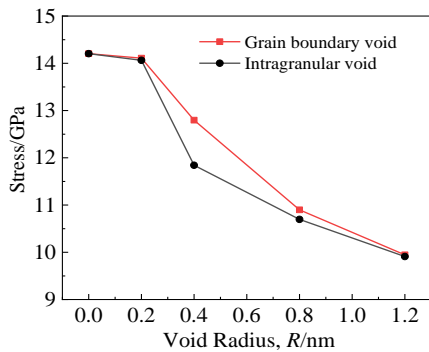


图 7 含晶内孔洞和晶界孔洞 TiAl 合金的屈服应力随孔洞半径的变化曲线

Fig.7 Curves of yield stress of TiAl alloy with different intergranular voids radii and grain boundary voids radii

2.3 孔洞对双晶 TiAl 合金断裂行为影响的声发射响应

图 9 所示为声发射信号和应力随时间变化曲线，从图中观察到，在弹性阶段（A 点之前），无论孔洞在双晶 TiAl 合金的晶内还是晶界，声发射信号的幅值变化都趋于零；到达极限应力（A 点）后，材料进入塑性变形阶段，幅值出现较大的波动。图 9a 中不同的声发射信号峰值对应不同的缺陷，第 1 次声发射信号峰值在时间上对应应力极值点，在该时刻位错运动到孪晶界，位错与孪晶界相互反应后穿过孪晶界的现象

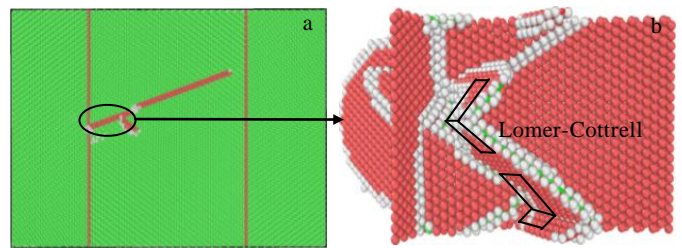


图 8 含晶界孔洞半径 $R=0.4$ nm 的 TiAl 合金达到屈服强度时所对应的微观结构

Fig.8 Microstructure of TiAl alloy with grain boundary void radii $R=0.4$ nm at yield strength: (a) microstructure diagram and (b) Lomer-Cottrell dislocation

表明试样开始进入塑性软化阶段，如图 4b 所示。由于位错周围存在应力场及其对应的弹性变形能，位错堆积时会导致应力场增强并储存大量的弹性变形能，当局部应力达到临界值时，将激发位错并使孪晶界成为位错形核源，储存的弹性变形能则为位错的形核、扩展和运动提供驱动力，位错行为又可使局部应力场松弛，进而释放弹性应变能，此时的信号可能由位错塞积、扩展和滑移运动等因素引起；BC 段的声发射信号峰值是 TiAl 合金在静载荷下屈服后，位错在晶界塞积和纠缠，储存了大量弹性变形能，其中一部分激发位错继续扩展，另一部分为孔洞的生成及裂纹的萌生提供动力，因此 BC 阶段的声发射信号峰值中可能含

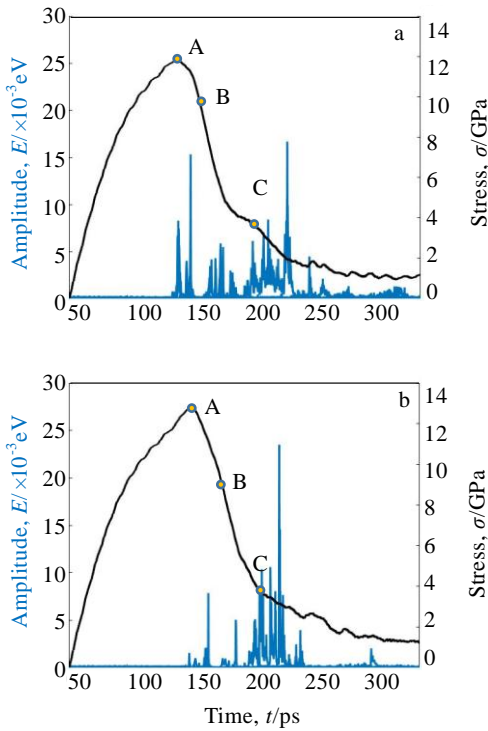


图 9 孔洞半径 $R=0.4$ nm 的 TiAl 合金的声发射信号与应力随时间的变化曲线

Fig.9 Acoustic emission signal and stress vs time curves of TiAl alloy with void radius $R=0.4$ nm: (a) intragranular void and (b) grain boundary void

有裂纹萌生引起的突发型声发射信号以及位错塞积、扩展和位错滑移运动产生的声发射信号；C 点之后材料内部滑移系减少，位错纠缠严重，因此塑性变形的声发射源减少，但此时声发射信号出现峰值，可能与裂纹扩展发射的声发射信号有关。

从图 9 可以观察到孔洞位置在晶界时应力达到极值点的时间要比孔洞位置在晶内时应力达到极值点的时间晚，从图 9b 中也可以观察到第 1 次声发射信号峰值出现时间要晚于图 9a，并与到达应力极值点的时间相对应。从这 2 个试件的单轴拉伸模拟试验中，观察到一个共同的现象，在拉伸过程中材料达到屈服时，发生了大范围的塑性变形，材料内部位错发生大量运动，位错密度增加，产生的声发射信号较多。随着拉伸载荷的不断增加，试样的塑性变形加剧，整体塑性变形或硬化，位错平均自由路径大大减少，试样的塑性降低，声发射信号的活动性也随之降低。在损伤开始加剧，出现裂纹扩展时，声发射信号的活动性开始增加，直到试样发生断裂，声发射信号的活动性降低。在图 9b 中 150~200 ps 时间段内出现声发射密集活动，在这个时间段内，裂纹演化时其不稳定性引起的裂纹偏折会释放更多应变能，

这也意味着更多的声发射信号出现，同时这种裂纹偏折是一种抵抗变形的有效机制，可以提高含孪晶界的 TiAl 合金试样的断裂韧性。

图 10 为孔洞位置在纳米孪晶双晶模型的晶内时信号采集点 $N_i(i=1, 2, 3, 4, 5, 6)$ 的声发射中频-功率二维分布的聚类分析和对应声发射源的能量积分图。由于数据点比较少，并且点的分区明显，使用其他方法无法对每个点都进行合理划分，因此采用手动划分区域对 f_m-E 分布进行分类。为避免热激活效应，模拟温度在 1 K 下进行，因此原子的布朗运动被限制。从图 10 中可以看出黑色的点或线分布最为明显，占据低频区域且能量积分近似于直线，且在拉伸开始时就开始上升，可以断定这是晶格振动所引起的，划定为第 1 类声发射源，因为只有晶格振动在其它声发射源不存在时仍然充当着稳定的声发射源。从图 10 中可以看出，位于孪晶界附近的信号采集点(N_1, N_3, N_4, N_6)，收集到的声发射信号都存在低功率值的区域，而距离孪晶界较远的信号采集点(N_2, N_5)，其声发射功率多数在 12 000 以上，这是因为位错容易在晶界处堆积，孪晶界充当位错的容器，使得位错在孪晶界处运动变得困难，导致晶界原子振动幅度降低，最终出现图中的绿色簇。在图 10a 中，绿色簇位于低功率段、宽频率区，其能量积分上升开始时间在 98 ps 附近。从图 11 的微观结构演化过程中观察到，Shockley 不全位错组成的混合位错在孔洞处形核长大，脱离初始位置，滑移到 N_1 信号采集点附近的孪晶界，与孪晶界相遇，孪晶界阻碍位错的滑移。信号采集点收集到的声发射信号先是红色簇的能量积分开始上升，随后是绿色簇的能量积分开始上升，这说明在位错滑移到信号点前，其收集到的是高功率的位错滑移信号，在位错滑移到离信号采集点越来越远或者经过信号采集点时，位错滑移的信号表现出低功率特征，在位错滑过信号点后，绿色簇的能量积分出现平台，此时的位错滑移信号表现为高声发射功率特征，随后图 10d 中红色簇的声发射能量积分继续上升。在接下来的时间内，位错穿过孪晶界，孪晶界上出现台阶，如图 11c 中黑色圆圈所示，台阶又做为新的位错发射源发射位错，其中位错相互反应、位错与孪晶界的反应以及位错在此处的塞积，都表现为中值频率的升高，因此可以判断图 10d 中的红色簇和绿色簇都是位错滑移、位错反应，以及位错塞积的声发射信号，划定红色簇和绿色簇为第 2 类声发射源。

在图 10l 中发现在塑性变形的初期，红色簇的能量积分在 90 ps 附近开始上升，此时由孔洞位置形核扩展的位错脱离初始位置向晶界开始滑移，从 N_6 信

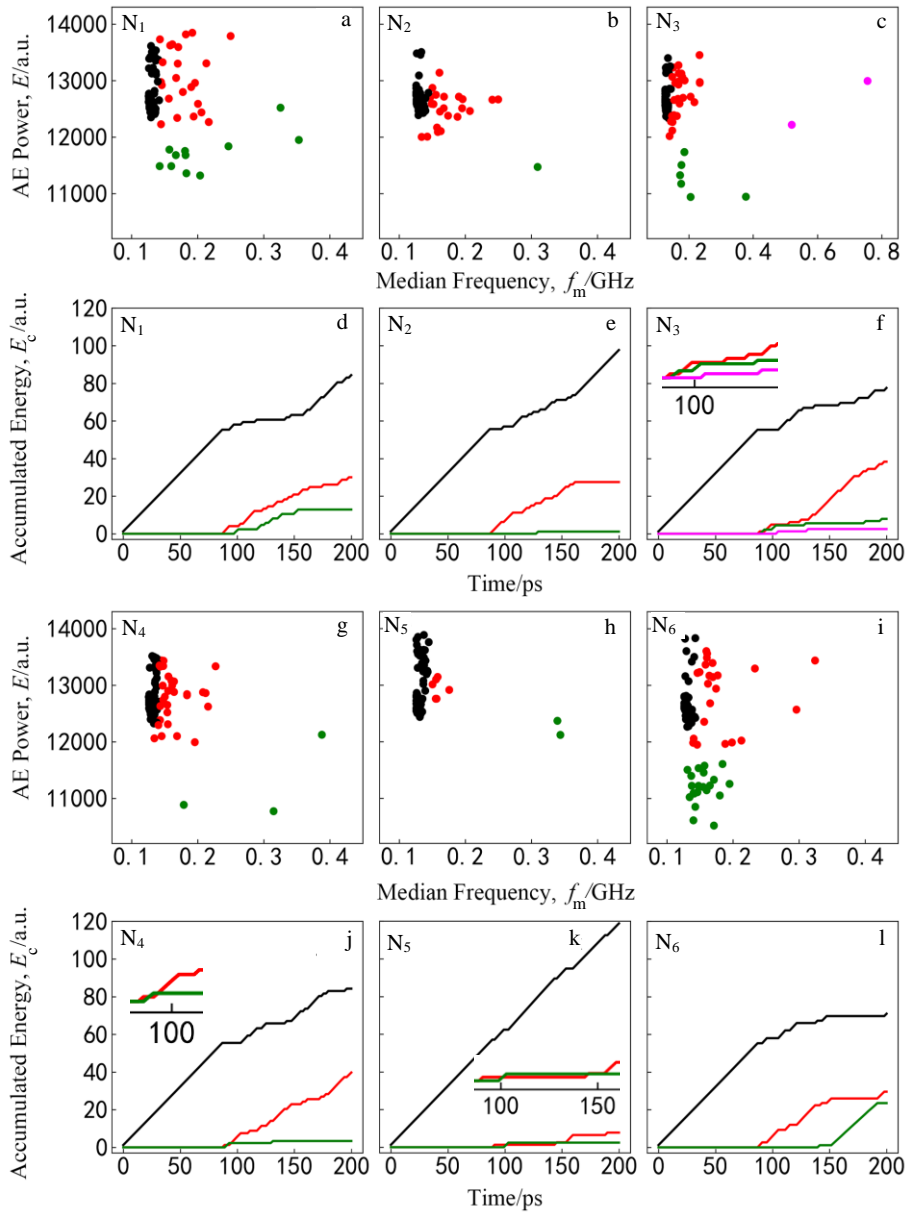


图 10 含晶内孔洞双晶模型的不同信号采集点声发射中频-功率二维分布与能量积分图

Fig.10 Two dimensional distribution of intermediate frequency-power and energy integration diagrams from different signal collection points of acoustic emission from intragranular voids: (a, d) N₁, (b, e) N₂, (c, f) N₃, (g, j) N₄, (h, k) N₅, and (i, l) N₆

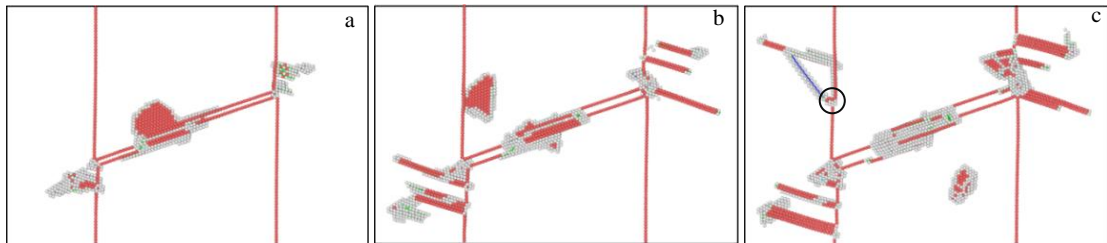


图 11 含晶内孔洞半径 $R=0.4$ nm 的 TiAl 合金的微观结构演化图

Fig.11 Microstructure evolution of TiAl alloy with intragranular void radius $R=0.4$ nm for different time: (a) 94 ps, (b) 98 ps, and (c) 103 ps

号采集点附近经过，没有对信号采集点附近的原子形成挤压，其传播的声发射信号余波带动信号点附近的原子声发射功率上升，声发射信号特征与红色团簇信号特征一致。在塑性变形后期，大约 150 ps 时，声发射功率位于 12 000 以下的绿色簇占据主导地位，位错运动受到孪晶界的阻碍，孪晶界与位错反应，孪晶界作为新的位错源，位错在这里增值，当裂纹扩展到这个位置时，位错群阻碍裂纹的进一步扩展，此时信号采集点接收到的声发射信号表现为低功率特征，表明信号点附近的原子因为位错群的活动受到挤压，使声发射信号的振动幅度降低，中值频率增加。随着加载继续，绿色团簇的能量积分出现平台，红色团簇的能量积分开始上升，此时该信号位置的位错密度开始降

低，位错在裂纹处湮灭，裂纹扩展继续进行。在图 10c 中紫色团簇特征为高频率高功率，属于突发型信号，其能量积分开始时间在 103 ps 附近，在微观结构演化过程中，如图 11c 所示，拉伸进行到 103 ps 时，由于位错在晶界塞积，塞积处萌生孔洞，孔洞演化成裂纹，因此定义紫色团簇为裂纹萌生扩展的声发射信号，划定为第 3 类声发射源。

图 12 为孔洞位置在孪晶界时信号采集点 N_i ($i=1, 2, 3, 4, 5, 6$) 的声发射中频-功率二维分布的聚类分析和对应声发射源的能量积分图。与上图 10 一样，图 12 中黑色团簇为晶格振动的声发射信号。图 12 中红色团簇在一开始其能量积分没有上升，随着加载时间到达 101 ps 时，红色簇的能量积分开始上升，在图 9 中观察到，此时试样

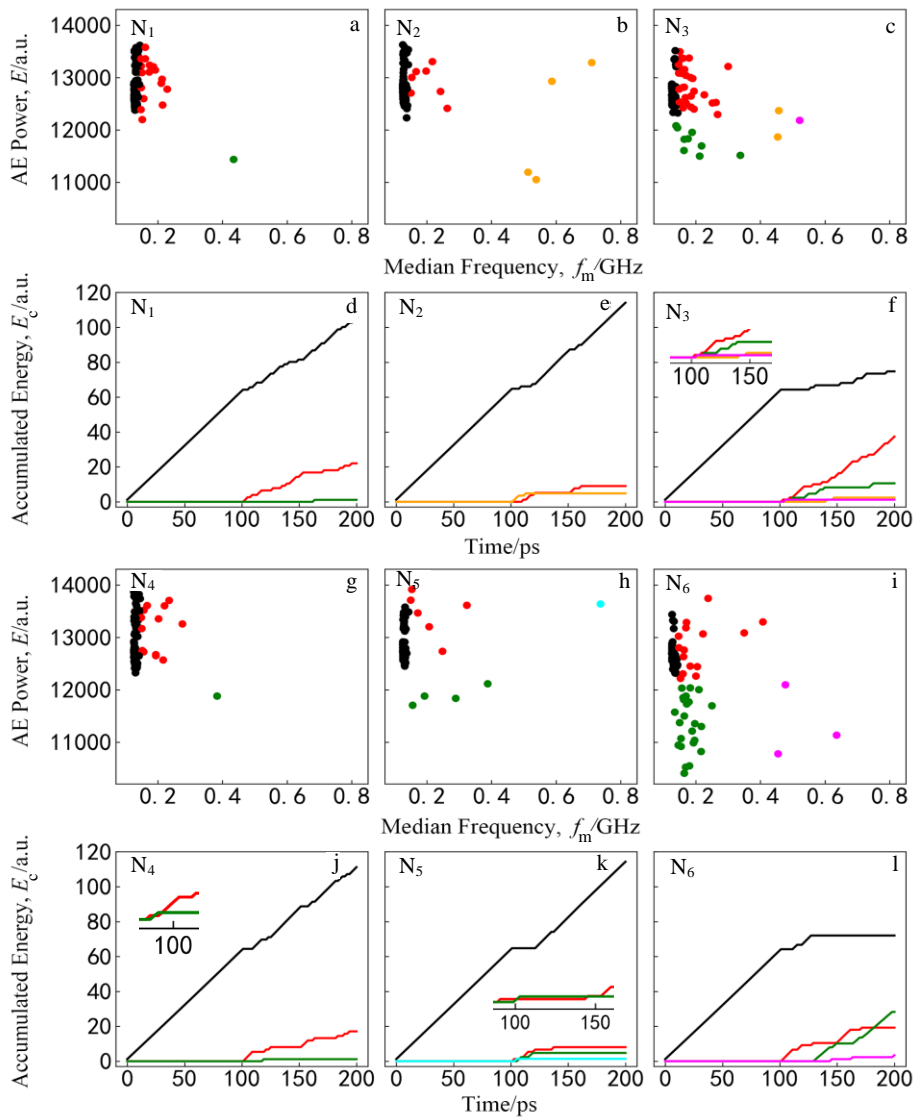


图 12 含晶界孔洞双晶模型不同信号采集点声发射中频-功率二维分布与能量积分图

Fig.12 Two dimensional distribution of intermediate frequency-power and energy integration diagrams from different signal collection points of acoustic emission from grain boundary voids: (a, d) N_1 , (b, e) N_2 , (c, f) N_3 , (g, j) N_4 , (h, k) N_5 , and (i, l) N_6

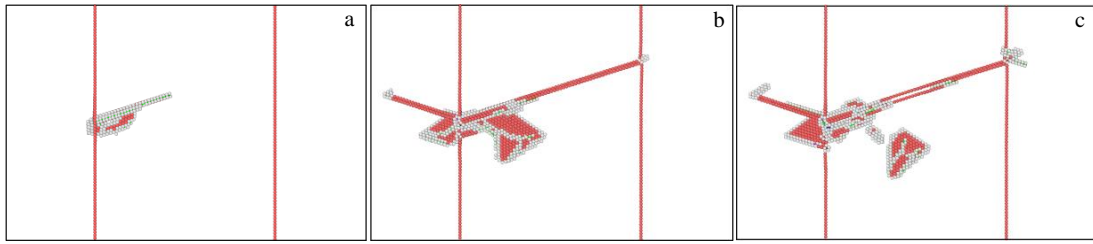


图 13 含晶界孔洞半径 $R=0.4$ nm 的 TiAl 合金的微观结构演化

Fig.13 Microstructure evolution of TiAl alloy with grain boundary void radii $R=0.4$ nm for different time: (a) 102 ps, (b) 105 ps, and (c) 106 ps

进入塑性变形阶段, 位错在孔洞位置形核发射, 位错的活动释放声发射信号, 由此可以判定红色簇是试样进入塑性变形过程中的位错活动产生的声发射信号。图 12b 中的橘黄色簇声发射中值频率大于 0.5 GHz, 其能量积分开始上升的时间在 102 ps, 比红色簇能量积分开始上升的时间早, 出现这个现象是因为在材料发生塑性变形开始, 有高速运动的位错经过 N_2 信号采集点, 如图 13a 所示, 使其原子振动幅度降低, 声发射功率下降, 对应 2 个低功率高频率的点, 在运动的位错远离信号采集点后, 位错滑移过后形成的层错振动幅度加大, 振动频率升高, 相应的声发射功率上升, 中值频率升高, 对应 2 个高功率高频率的点。随后位错滑移到孪晶界, 如图 13b 所示, 声发射信号被 N_3 信号点捕捉到, 橘黄色点的声发射能量积分开始上升时间在 105 ps, 如图 12f 所示, 图 12c 中橘黄色簇表现出的声发射信号特征和图 12b 中橘黄色簇的声发射信号特征一致, 由于孪晶界的阻碍, 声波信号的衰减, 因此图 12c 中橘黄色簇的声发射中值频率没有图 12b 中橘黄色簇的声发射频率高。这里定义橘黄色簇的声发射信号是高速运动位错的声发射信号。

图 12c 的紫色簇能量积分开始上升的时间在 140 ps, 图 12i 中紫色簇能量积分上升时间在 145 ps, 从微观结构演化过程中观察到, 位错在 N_3 信号采集点附近的晶界处塞积, 塞积处萌生孔洞, 孔洞演化成裂纹, 当裂纹扩展到 N_6 信号采集点附近时, 裂纹扩展受到层错和位错群的阻碍, 堆垛层错和各类位错在裂纹尖端发生位错与位错反应、位错与孪晶界反应、位错与裂纹的相互作用, 位错的频繁活动造成红色簇的能量积分持续增长, 位错的堆积和增殖让位错活动的声发射功率下降, 出现图 12i 中的绿色簇, 当位错累积到一定密度后, 应力集中在裂纹的扩展中释放, 紫色簇的能量积分开始上升, 在位错反应、层错堆积和裂纹扩展的多种演化机制的竞争下, 出现图 12l 中红色簇、绿色簇与紫色簇的能量积分上升竞争现象, 最终

裂纹发生偏折转向, 随后在 200 ps 时断裂, 因此定义紫色团簇为裂纹萌生扩展的声发射信号, 红色簇和绿色簇都是位错活动的声发射信号, 红色簇倾向于代表位错相互反应释放能量和位错湮灭时释放能量发射的声发射信号, 绿色簇倾向于代表位错滑移至信号点位置, 在信号点附近堆积, 对信号点的原子挤压造成的声发射信号以及位错繁殖时吸收能量的声发射信号。对于图 12a、12b、12c、12g、12h 中出现的红色簇和绿色簇与图 12i 中的红色簇和绿色簇代表的信号特征一致, 也与图 10 孔洞位置在晶内时出现的红色簇和绿色簇代表的声发射信号一致。对于图 12h 中出现的青蓝色信号点, 其声发射特征表现为高频高幅, 属于突发型信号, 在 106 ps 时其能量积分开始上升, 在 106 ps 时, 晶界孔洞发射的位错反应生成的 Lomer-Cottrell 位错, 脱离钉扎点开始滑移, 如图 13c 所示, 因此判断这个信号为位错脱离钉扎点时释放的声发射信号。

3 结 论

1) 双晶 TiAl 合金在拉伸载荷下屈服应力随着孔洞半径的增大而减小。在受到相同外载荷情况下, 小孔洞试样的表面应力小于大孔洞试样的表面应力, 大孔洞试样产生位错和滑移的概率更大, 更容易出现屈服现象。

2) 在拉伸载荷下, 含晶界孔洞的双晶 TiAl 合金的屈服强度比含晶内孔洞的高, 尤其是在孔洞半径 $R=0.4$ nm 时, 屈服应力相差最大; 含晶内孔洞的双晶 TiAl 合金, 位错形核和发射所需的应力更小, 含晶界孔洞的双晶 TiAl 合金更容易发射稳定的位错结构, 阻碍位错的运动, 增强材料的强度。

3) 位错的类型和运动、堆垛层错的形成、位错与孪晶界的反应以及分级孪晶的形成在双晶 TiAl 合金的塑性变形和断裂中均起着很重要的作用, 影响其力学性能的变化规律。

4) 在双晶 TiAl 合金的拉伸变形断裂中, 声发射源主要包括晶格振动、位错增殖、位错塞积、位错滑

移、裂纹扩展。应力与动能、声发射功率和中值频率分布以及能量积分分析都表明晶格振动占据声发射的大部分比值,并且具有较大的功率值范围和较低的中值频率;位错滑移的声发射信号表现出宽频率的特点,位错增殖、位错塞积表现出低功率、宽频域的特点,裂纹扩展则表现为高频率、高功率的特征。

参考文献 References

- [1] Xu Shuozi, Su Yanqing, Chavoshi Saeed Zare. *Materials Research Express*[J], 2018, 5(1): 016 523
- [2] Yuan Y, Sun T, Zhang J *et al. Applied Surface Science*[J], 2011, 257(16): 7140
- [3] Rui Zhiyuan(芮执元), Cao Hui(曹 卉), Luo Dechun(罗德春) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2017, 46(9): 2505
- [4] Kou Peipei(寇佩佩), Feng Ruicheng(冯瑞成), Li Haiyan(李海燕) *et al. Materials Reports*(材料导报)[J], 2020, 34(14): 14 140
- [5] Potirniche G P, Horstemeyer M F, Wagner G J *et al. International Journal of Plasticity*[J], 2005, 22(2): 257
- [6] Potirniche G P, Hearndon J L, Horstemeyer M F *et al. International Journal of Plasticity*[J], 2005, 22(5): 921
- [7] Su Yanqing, Xu Shuozi. *Materials Science & Engineering A*[J], 2016, 678: 153
- [8] Traiviratana S, Bringa E M, Benson D J *et al. Acta Materialia*[J], 2008, 56(15): 3874
- [9] Vinogradov A, Yasnikov I S, Merson D L. *Scripta Metallurgica*[J], 2019, 170: 172
- [10] Vinogradov A, Yasnikov I S, Estrin Y. *Journal of Applied Physics*[J], 2014, 115(23): 233 506
- [11] Zhang Ying(张 颖), Li Yue(李 越), Zhou Junpeng(周俊鹏) *et al. Journal of Experimental Mechanics*(实验力学)[J], 2020, 35(2): 259
- [12] Li Lifei, Zhang Zheng, Shen Gongtian. *Materials Science & Engineering A*[J], 2015, 636: 35
- [13] Linderov M, Segel C, Weidner A *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2014, 597: 183
- [14] Vinogradov A, Merson D L. *Low Temperature Physics*[J], 2018, 44(9): 930
- [15] Bohemen S, Sietsma J, Hermans M *et al. Acta Materialia*[J], 2003, 51(14): 4183
- [16] Kitagawa K, Kaneko Y, Vinogradov A. *Materials Transactions JIM*[J], 1997, 38(7): 607
- [17] Dmitriev A A, Polyakov V V. *International Conference on Advanced Materials with Hierarchical Structure for New Technologies and Reliable Structures*[C]. Barnaul, Russia: Altai State University, 2019: 020 070
- [18] Vinogradov A, Lazarev A, Linderov M *et al. Acta Materialia*[J], 2013, 61(7): 2434
- [19] Feng Ruicheng, Qi Yongnian, Li Haiyan *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2021, 50(5): 1602
- [20] Qi Yongnian(祁永年). *Thesis for Master*(硕士论文)[D]. Lanzhou: Lanzhou University of Technology, 2020
- [21] Sun L G, He X Q, Wang J B *et al. Materials Science & Engineering A*[J], 2014, 606: 334

Acoustic Emission Response on Effect of Voids on Fracture Behavior of Bicrystal TiAl Alloy

Fan Lihe¹, Feng Ruicheng^{1,2}, Yao Yongjun¹, Cao Hui^{1,2}, Li Haiyan^{1,2}, Lei Chunli^{1,2}

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

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

Abstract: Based on the molecular dynamics method, the uniaxial tensile simulation of the bicrystal TiAl alloy containing voids was performed. The evolution behavior of defects and acoustic emission (AE) response on the deformation of TiAl alloy and fracture of the TiAl alloy were studied at nanometer scale. The results show that the size and location of the voids have little influence on the elastic modulus of the TiAl alloy and the yield strength decreases with the increase of the void size. After plastic deformation, twin boundary can block dislocation emitted continuously at the edge of void, and increase crystal strength. When yield stress is reached, the TiAl alloy with voids at grain boundary is more likely to produce stable dislocation structure, which hinders the movement of other dislocations, thus improving the crystal strength. Through the analysis of the AE signals during the stretching process, it is found that the AE signals mainly come from lattice vibration, and has a large power range and a lower median frequency. The AE signals of dislocation slip reveal the characteristics of wide frequency domain, and the AE signals of dislocation proliferation and dislocation accumulation display the characteristics of low power. The AE signals of crack propagation belongs to the burst signal, which is characterized by high frequency and high power.

Key words: TiAl alloy; acoustic emission; voids; grain boundary; molecular dynamics

Corresponding author: Feng Ruicheng, Ph. D., Professor, School of Mechanical and Electronical Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, P. R. China, Tel: 0086-931-5135199, E-mail: postfeng@lut.edu.cn