

纳米单晶 γ -TiAl 合金应变速率效应分子动力学模拟

罗德春¹, 张 玲², 付 蓉¹, 曹 卉¹, 芮执元¹

(1. 兰州理工大学 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)

(2. 兰州工业学院, 甘肃 兰州 730050)

摘 要: 采用分子动力学方法模拟不同应变速率下纳米单晶 γ -TiAl 合金中裂纹的扩展, 利用速度加载方式对预置裂纹的单晶 γ -TiAl 合金进行动态单向拉伸, 模拟过程中施加应变速率为 $5.0 \times 10^7 \sim 7.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 。结果表明: 不同的应变速率范围下裂纹的扩展形式差异很大。在不敏感区 ($\dot{\epsilon} \leq 4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$), 裂纹呈解理扩展; 在敏感区 ($4.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1} < \dot{\epsilon} \leq 1.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$), 前期呈现解理扩展特征, 后期裂纹扩展通过裂尖发射滑移位错, 位错塞积萌生空洞, 空洞形核长大形成子裂纹, $\dot{\epsilon} \leq 5.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时, 子裂纹发生偏向, 与主裂纹呈 45° 方向串接, $5.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1} < \dot{\epsilon} \leq 1.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时, 子裂纹与主裂纹同向串接, 最终导致裂纹扩展直至断裂; 在突变区 ($\dot{\epsilon} \geq 1.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$), 因应变强化作用使裂纹不在应力最大时刻启裂, 出现裂纹扩展后应力持续增加一段时间后减小的现象, 高应变速率导致裂尖前端多处区域的原子结构局部非晶化, 最终在原子结构混乱处萌生微裂纹, 微裂纹扩展导致“试件”多处开裂。

关键词: γ -TiAl 合金; 应变速率; 分子动力学; 裂纹扩展

中图分类号: TG146.23; O346.1

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)03-0853-07

TiAl 合金所具备的优异性能使其成为一种非常具有潜力和竞争力的新材料, 制备过程中不可避免的缺陷会影响材料的性能^[1]。材料的性能受应变速率的影响很大, 目前宏观尺度是通过在不同的应变速率下进行试验来研究材料的动力学性能。实验表明, 宏观材料的力学性能随应变速率的改变而变化, 但是通过透射电镜及扫描电镜等对实验结果观察表明, 材料结构的动态演化是一种涉及多尺度多层次的复杂过程, 微观结构中的空洞、位错、孪晶等都会影响材料的动态性能, 所以仅通过宏观的实验揭示应变速率效应存在困难。

分子动力学方法能够清晰的观察到模拟过程中原子的运动、微观缺陷的演变, 从原子角度研究材料应变速率效应, 以揭示材料在微观尺度下的变形和实质。F. L. Tang 等人^[2] 用分子动力学模拟了 γ -TiAl 单晶的空洞开裂过程, 发现初始屈服强度随着应变速率的增加而增加, 随着试件尺寸和空洞体积分数的增加而减小; C. H. Wang^[3] 等人对单层石墨烯边界裂纹扩展情况进行了模拟, 发现断裂强度和应变随应变速率增加而增加, 随裂纹长度和温度的增加而减小; C. N. Tao^[4] 等人将应变速率对含表面缺陷的硅进行了分子动力学模拟后发现, 硅纳米棒的抗拉强度强烈地依赖于应变

速率的变化, 并随应变速率增加而增加, 试样拉伸过程中应变速率变化对失效形式也有很大影响; S. Laura^[5] 等人对应变速率处于 $1 \times 10^5 \sim 1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 范围的纳米单晶钼薄膜形变与断裂机制进行了研究, 发现施加应变速率低于 $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 进行单轴拉伸时, 裂尖以完整位错发射与孪晶界迁移为主要形变方式, 螺型位错发射是第 1 个被激活的形变机制, 在更高的应变速率加载条件下, 孪晶成为最主要的形变机制; M. Z. Xiang^[6] 等人在纳米晶体铜对晶粒尺寸及应变速率依赖性的研究中发现, 其拉伸模量随应变速率增加而增加, 随晶粒尺寸减小而减小; L. M. Shen^[7] 在研究高应变速率范围内晶粒尺寸、应变速率加载条件对纳米晶体铜力学性能的影响中发现, 单轴应变加载下, 纳米晶体铜的强度和延性随应变速率增加而增强; J. C. Huang^[8] 在研究应变速率对纳米单晶铜抗拉伸强度及形变行为影响时得到: 应变速率对应力-应变曲线形状、极限抗拉强度和变形行为有很大影响, 应变速率越低, 应力-应变曲线震荡越剧烈, 并存在压力突然下降现象。H. Xin^[9] 在应变速率对含有缺陷和完美碳纳米管压缩性能研究中得知: 含缺陷碳纳米管屈曲行为受加载应变速率影响, 而完美碳纳米管的机械性能不受加载应变速率影响; J. Guo 等人^[10] 在研究 $0.001 \sim 0.03$

收稿日期: 2017-03-20

基金项目: 国家自然科学基金 (51065014); 甘肃省教育厅基金资助项目 (2015A-164); 甘肃省自然科学基金项目 (148RJZA008)

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

ps^{-1} 应变速率范围内氧化锌纳米线力学性能时认为：相同的横截面积区域，应变速率变化对杨氏模量几乎没有影响；而在对金刚石纳米线的力学性能研究中发现^[11]，在 $0.001\sim 0.025 \text{ ps}^{-1}$ 应变速率范围内，相同的横截面积区域，应变速率变化对屈服强度和杨氏模量几乎没有影响。彭传校^[12]等对镍纳米丝在不同应变速率下的拉伸过程进行了模拟，研究表明高应变速率诱发了镍纳米丝的非晶化。W. Liang^[13]等研究了单晶铜纳米线拉伸变形过程中的应变速率效应。研究表明，随着应变速率的增大，铜纳米线的屈服应力增大，并且动态波动和声子曳引会阻碍位错的运动，在高应变速率下晶体出现非晶化。郭宇^[14]等模拟了纳米尺度单晶铜剪切变形过程中的应变速率响应。研究表明，单晶铜的剪切屈服应力随应变速率的增大而升高。S. J. A. Koh^[15]等模拟了 fcc 金属纳米线的应变速率效应。研究表明，不同应变速率下纳米线的变形机制有明显差异。

大量实验及数值模拟研究结果表明：应变速率对材料的力学性能和变形行为影响很大，不同的应变速率下材料的变形机制也不同。本研究采用分子动力学方法从原子角度研究 $\gamma\text{-TiAl}$ 合金中预置裂纹在不同应变速率下的扩展行为，揭示扩展过程中裂尖原子组态变化及微结构的形变机制，探索不同应变速率加载条件下 $\gamma\text{-TiAl}$ 合金中裂纹扩展及断裂机理的原子机制，为提高钛铝合金性能的微观组织优化设计提供方向性指导。

1 计算模型和模拟方法

1.1 模型的建立

$\gamma\text{-TiAl}$ 合金的晶体结构是 L_{10} 型面心四方^[1] (fct)，其原子结构如图 1 所示。其中分别以晶向 $[100]$, $[010]$, $[001]$ 作为 x , y , z 3 个坐标轴。

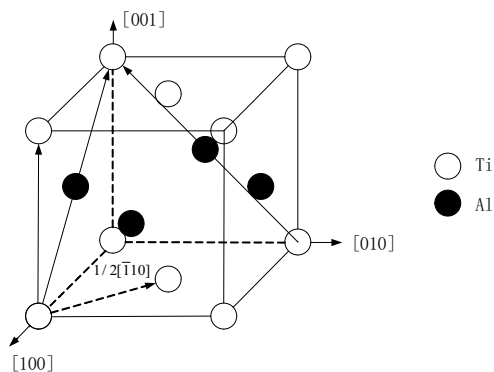


图 1 $\gamma\text{-TiAl}$ 的 L_{10} 结构

Fig.1 L_{10} structure of $\gamma\text{-TiAl}$

图 2 为分子动力学模拟的初始原子模型对应的几何模型，该原子模型大小为 $100a \times 6a \times 50.5c$ ，共 123012 个原子，通过消除原子间作用力在模型左端预置了长为 $10a$ 的 $(001)[100]$ 边界裂纹，裂纹面为 (001) 面。其中晶格常数 a 为 4.001 nm ，轴比 c/a 为 1.045 。

1.2 模拟过程

文献中一般多采用“位移控制”的方式进行加载^[16-18]，也就是对整个试件施加一个沿加载方向线性分布的位移场，然后进行多步弛豫，使得体系中每个原子由初始不平衡状态逐渐趋近稳态，这种加载方式实现的是准静态拉伸，并非真实的动态加载过程，本研究在模拟过程中采用一端固定一端拉伸的“速度加载”方式，以实现动态单向加载。为了避免原子热激活效应，单纯研究应变速率效应，采用分子动力学方法模拟了在 1 K 低温下应变速率对单晶 $\gamma\text{-TiAl}$ 合金中预置裂纹扩展的影响，并分析了不同应变速率下应力应变关系。

由于 EAM 势函数可以较好地描述晶格变形等相关问题^[19]，因此本研究在模拟中采用 EAM 势函数描述原子间的相对作用力。为使体系在加载之前达到平衡状态，先将 3 个方向都设置为周期性边界条件，并在 npt 系统下弛豫 100 ps 以消除表面效应，之后进行加载，加载之前变换边界条件， x 和 z 方向采用自由边界条件， y 方向采用周期性边界条件，这样做主要是为了在加载之前得到符合实际的“模拟试样”，减小试件中的残余应力。

加载过程中，时间步长为 1 fs ，采用 Velocity 加载方式，利用 $\dot{\epsilon} = v / L_0$ 计算应变速率^[20]，施加的应变速率范围为 $5.0 \times 10^7 \sim 7.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 。为了避免在加载过程中出现分层现象，必须使速度作用原子层的厚度大于所用势函数的截断半径^[21]，故在设定边界时，将 z 加载方向上下边界各设置 5 层原子作为支持段（固定）和速度加载区，另外为消除边界效应，将右边界也固定。

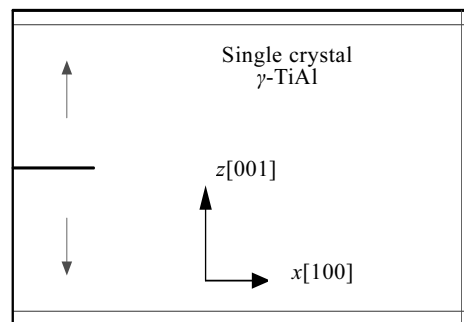


图 2 几何模型

Fig.2 Geometric model

2 结果与讨论

2.1 不同应变速率下的应力应变曲线

图 3 为不同应变速率加载下的应力应变曲线。从图上可以看出, 材料的强度随着应变速率的增大而增大, 当应变速率小于 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时, 应变值达到 0.04 之前, 不同范围的应力应变曲线在弹性阶段基本重合, 应变值超过 0.04 之后, 应力应变曲线的趋势随应变速率的不同而有差异; 当应变速率大于 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时, 与应变达到 0.035 之前的曲线几乎重合, 应变值超过 0.035 之后, 材料的抗拉强度随着应变速率的增大急剧增大。

根据模拟结果, 将不同应变速率加载下的最大应力及相应的应变值列于表 1, 并根据表 1 中的数据及扩展过程, 可将应变速率大致划分为 3 个区域, 即不敏感区、敏感区和突变区。当应变速率 $\dot{\varepsilon} \leq 4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时, 最大应力变化幅值较小, 将这个区域划分为应变速率不敏感区; 当应变速率 $4 \times 10^8 \text{ s}^{-1} < \dot{\varepsilon} \leq 1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时, 最大应力随着应变速率的增大由 5.86 GPa 逐渐增大到 5.97 GPa, 将这个区域划分为应变速率敏感区; 当应变速率 $\dot{\varepsilon} > 1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时, 最大应力随着应变速率的增大由 5.97 GPa 快速增大到 14.56 GPa, 该区域为应变速率突变区。

2.2 不同应变速率区域的原子模拟图及分析

图 4~图 12 分别为不同应变速率下单晶 γ -TiAl 合金中预制裂纹扩展过程的分子动力学图像及相应信息。

2.2.1 应变速率不敏感区

图 4 是单晶 γ -TiAl 合金中预制微裂纹在

$\dot{\varepsilon} = 4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时, 对应不同时刻的裂纹扩展图, 图中用中心对称参数 centro-symmetry parameter 进行着色 (下同)。

从扩展图及整个裂纹扩展过程中看出, 加载至 $t=102 \text{ ps}$ 时裂纹开始扩展 (如图 4a 所示), 整个扩展过程中裂尖未发射位错, 晶体结构始终保持理想晶格状态; 拉伸过程中应力随时间的变化如图 5a 所示。图 5b 为应力最大时对应的原子图。由此可以看出, 应力始终集中在裂尖上, 当裂尖应力达到最大时裂纹开始扩展, 并且裂尖上应力随着裂纹扩展而逐渐衰减, 直至完全断裂时衰减为 0。

对应变速率 $\dot{\varepsilon} \leq 4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时情况分析与以上类同。根据表 1 数据可知, 当应变速率 $\dot{\varepsilon} \leq 4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时, 最大应力变化幅值很小, 应变速率对裂纹扩展过程影响不

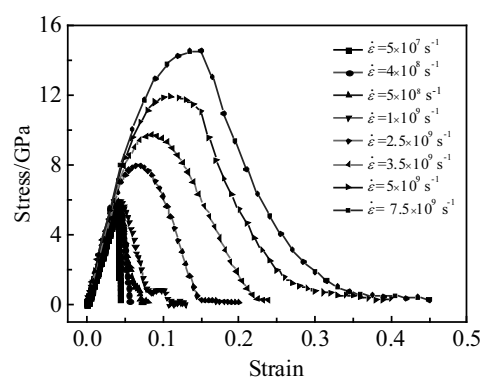


图 3 不同应变速率对应的应力应变曲线

Fig.3 Stress-strain curves at different strain rates

表 1 不同应变速率加载时的最大应力及对应的应变

Table 1 Maximum stress and related strain when loading at different strain rates

Strain rate, $\dot{\varepsilon} / \times 10^8 \text{ s}^{-1}$	0.5	4	5	10	25	35	50	75
Maximum stress/GPa	5.80	5.86	5.93	5.97	7.97	9.74	11.97	14.56
Strain, $\varepsilon / \%$	4.05	4.05	4.2	4.2	6.5	8.4	11	15

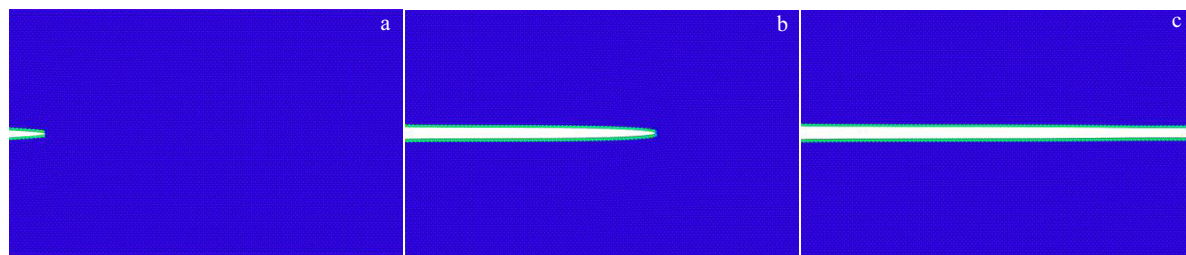


图 4 应变速率为 $4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时对应不同时刻的裂纹扩展图

Fig.4 Crack propagation images at strain rate of $4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$: (a) $t=102 \text{ ps}$, (b) $t=124 \text{ ps}$, and (c) $t=140 \text{ ps}$

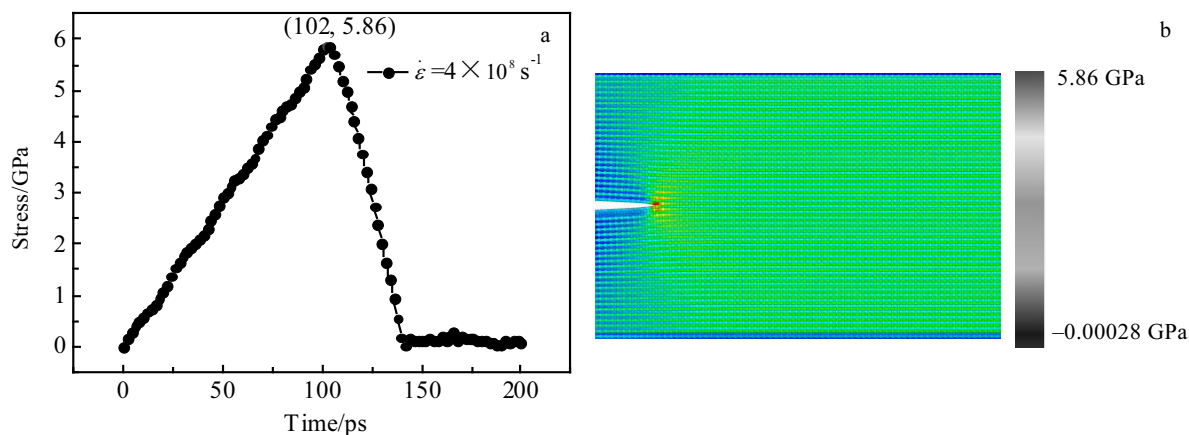


图 5 应变速率为 $4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时应力随时间变化的曲线图及原子图

Fig.5 Stress-time curve (a) and related atom image (b) at strain rate of $4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$

大,表现出与应变速率无关特征,属应变速率不敏感区。

2.2.2 应变速率敏感区

图 6 为单晶 γ -TiAl 合金中预制微裂纹在 $\dot{\epsilon} = 5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时,对应不同时刻裂纹扩展图。

从扩展图以及整个裂纹扩展过程可看出,加载至 $t = 84 \text{ ps}$ 时应力达到最大值,裂纹开始扩展; $t < 112 \text{ ps}$ 时,裂纹呈脆性解理扩展;当扩展至 $t = 112 \text{ ps}$ 时,裂尖首次发射位错,之后位错在裂尖前端堆积萌生空洞,进而演化为子裂纹;当 $t = 118 \text{ ps}$ 时,子裂纹与主裂纹连接形成新的主裂纹,裂纹继续向前扩展;当 $t = 120 \text{ ps}$ 时,裂尖继续发射位错,由于位错的运动受到阻碍,使得大量位错堆积在位错发射方向,形成孔洞并成核,导致裂纹沿位错发射方向萌生子裂纹,与主裂纹连接后与主裂纹面成 45° 发生转向开裂。

拉伸过程中应力随时间的变化如图 7 所示,裂尖应力分布小图 (a, b, c, d) 为对应红色坐标点 (A, B, C, D) 时刻图。由此可看出,当裂尖上的应力达到最大值时裂纹开始扩展,随着扩展的继续,应力值逐渐变小,随后因裂尖发射位错且受到阻碍而塞积,裂尖上的应力重新分布,出现波段曲线下降后呈台阶状或是上升段曲线。

由进一步研究 $\dot{\epsilon} = 1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时对应的不同时刻裂纹扩展情况 (图 8 示) 可以看出,裂纹开始扩展时间为 $t = 42 \text{ ps}$,相比应变速率为 $5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时,裂纹开始扩展的时间提前,裂尖上的最大应力值也增大;裂纹脆性解理扩展至 $t = 60 \text{ ps}$ 后裂尖前端发射位错,由于较大的应变速率使位错没有足够时间完成完整运动,造成位错在裂尖前端堆积,位错堆积处随之萌生空洞,

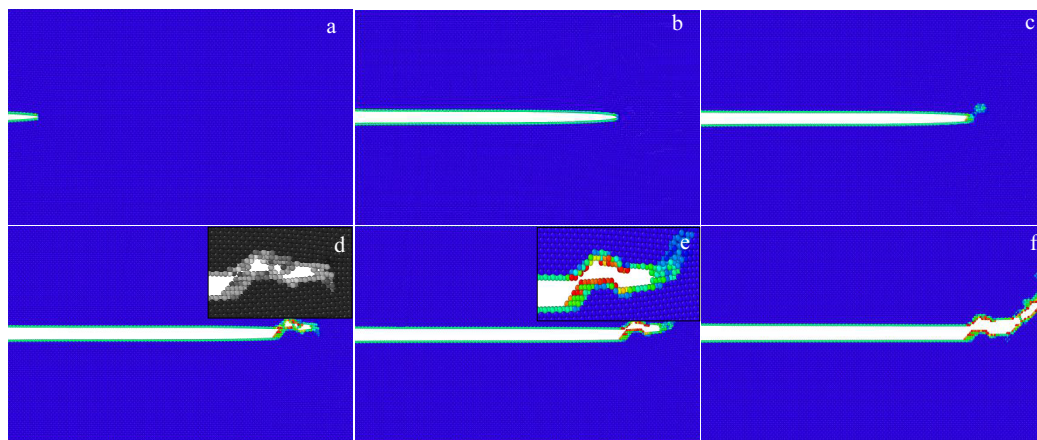


图 6 应变速率为 $5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时对应不同时刻的裂纹扩展图像

Fig.6 Crack propagation images at strain rate of $5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$: (a) $t = 84 \text{ ps}$, (b) $t = 108 \text{ ps}$, (c) $t = 112 \text{ ps}$, (d) $t = 118 \text{ ps}$, (e) $t = 120 \text{ ps}$, and (f) $t = 144 \text{ ps}$

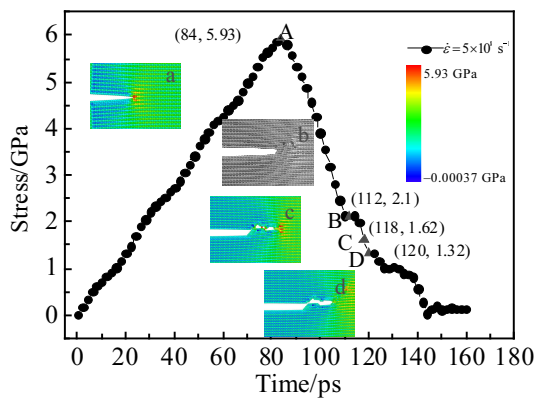


图7 应变速率为 $5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时应力随时间变化的曲线图及原子图

Fig.7 Stress-time curves and related atom image at strain rate of $5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$

空洞形核长大形成微裂纹, 随着加载的继续, 微裂纹与主裂纹连接, 并且裂纹扩展后期出现裂纹面不平整现象直至断裂。裂纹扩展后期裂尖未出现如前所述的转向现象, 主要原因是应变速率 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1} > 5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, 使

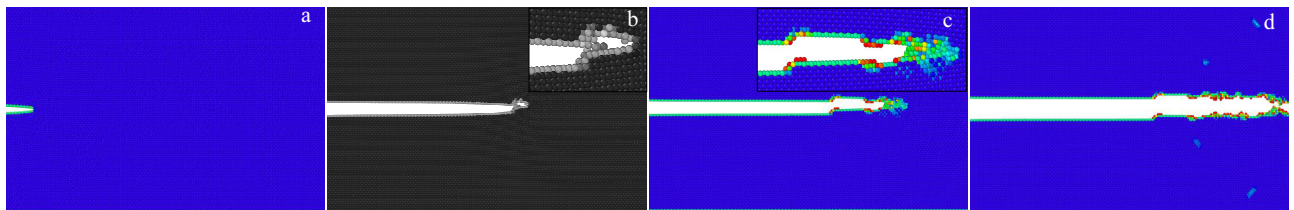


图8 应变速率为 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时对应不同时刻的裂纹扩展图像

Fig.8 Crack propagation image at strain rate of $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$: (a) $t=42 \text{ ps}$, (b) $t=60 \text{ ps}$, (c) $t=68 \text{ ps}$, and (d) $t=108 \text{ ps}$

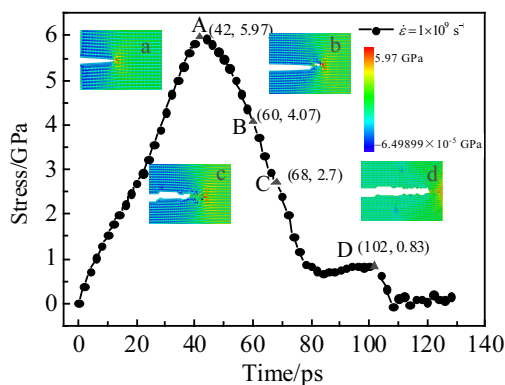


图9 应变速率为 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时应力随时间变化的曲线图及原子图

Fig.9 Stress-time curves and related atom image at strain rate of $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$

得2次加载间隔更短, 这样位错运动的时间就非常短, 位错刚离开裂尖, 下一次加载就开始作用, 致使位错运动至裂尖前端堆积, 那么空洞始终在裂尖前端萌生, 此时裂纹便通过裂尖前端萌生的子裂纹与主裂纹连接直线扩展, 而不会发生转向。

拉伸过程中应力随时间变化如图9所示, 裂尖应力分布小图(a, b, c, d)为对应红色坐标点(A, B, C, D)时刻图。

对应变速率 $4 \times 10^8 < \dot{\epsilon} \leq 1 \times 10^9$ 时的裂纹扩展过程进行分析, 得出与应变速率为 $\dot{\epsilon} = 5 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 时类似的结果。根据表1的数据可知, 在这个区间, 最大应力随着应变速率的增大逐渐增大, 并且应变速率越高, 裂尖发射位错的数目越多, 扩展过程越复杂, 表现出对应变速率变化的敏感性。

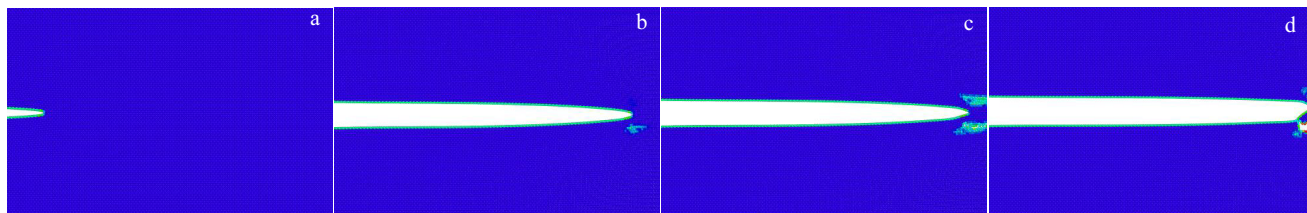
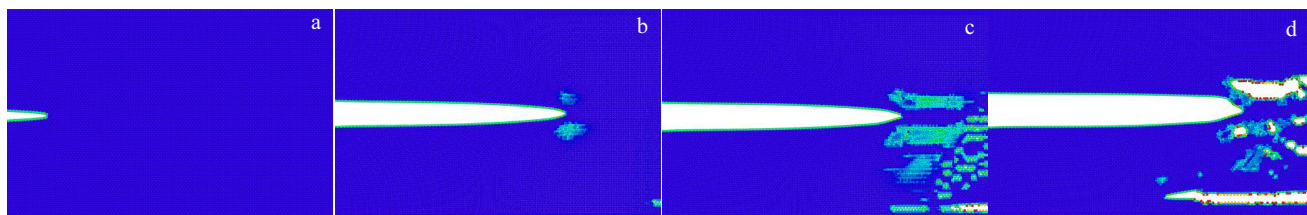
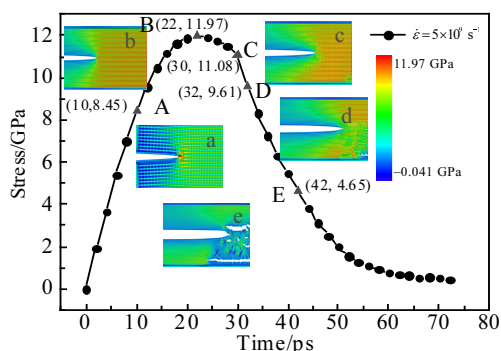
2.2.3 应变速率突变区

图10是单晶 γ -TiAl合金中预制微裂纹在 $\dot{\epsilon} = 3.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时, 对应不同时刻的裂纹扩展图。从扩展图上可以看出, 裂纹扩展的前30 ps呈现脆性解理扩展, 裂纹扩展面很平整; 当 $t=30 \text{ ps}$ 时, 裂尖前端的一小部分原子出现混乱现象; 随着扩展的继续, 在 $t=32 \text{ ps}$ 时, 裂尖上下两侧都出现局部原子混乱的现象, 继而在原子结构混乱处萌生子裂纹, 如图10c所示。

进一步研究 $\dot{\epsilon} = 5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时对应不同时刻裂纹扩展情况(图11所示)。

从扩展图上可以看出, 裂纹开始扩展时间为 $t=10 \text{ ps}$, 裂纹扩展的前28 ps呈脆性解理扩展; 当 $t=30 \text{ ps}$ 时, 裂尖前端的局部原子以及靠近下端固定边界处出现混乱现象; 随着扩展的继续, 在 $t=32 \text{ ps}$ 时, 裂尖前端出现大范围原子混乱现象, 并且在原子结构混乱处萌生子裂纹或者出现分层现象, 如图11c所示; 随着加载的继续, 原子结构混乱处的子裂纹开始扩展, 整个试件多处开裂, 最终抑制了主裂纹的扩展, 并且下端固定边界与中间部分逐渐脱离, 如图11d所示。

拉伸过程中应力随时间变化如图12所示, 裂尖应力分布小图(a, b, c, d, e)为对应红色坐标点(A, B, C, D, E)时刻图。

图 10 应变速率为 $3.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时对应不同时刻的裂纹扩展图像Fig.10 Crack propagation images at strain rate of $3.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$: (a) $t=14 \text{ ps}$, (b) $t=30 \text{ ps}$, (c) $t=32 \text{ ps}$, and (d) $t=38 \text{ ps}$ 图 11 应变速率为 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时对应不同时刻的裂纹扩展图Fig.11 Crack propagation images at strain rate of $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$: (a) $t=10 \text{ ps}$, (b) $t=30 \text{ ps}$, (c) $t=32 \text{ ps}$, and (d) $t=42 \text{ ps}$ 图 12 应变速率为 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时应力随时间变化的曲线图及原子图Fig.12 Stress-time curves and related atom image at strain rate of $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$

与应变速率敏感区相比, 由于更高的应变速率导致了应变强化, 裂尖上的应力分布最初只集中在裂纹前端局部原子上, 裂纹并不是在裂尖应力最大时开始扩展。随着加载的继续, 发射滑移位错不能完全消耗系统中的能量, 裂纹前端所有原子上的应力都增大, 导致裂尖前端多处区域的原子结构变成无序状态, 也就是局部非晶化, 最终在原子结构混乱处萌生微裂纹, 微裂纹扩展致使试件多处断裂并伴随应力减小。

应变速率为 $3.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 及 $7.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时的现象类似于 $5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 时的情况, 裂纹开始扩展时的应力并不是应力最大状态, 并且随着应变速率的增大, 出现无序现象的区域越多。可以猜想, 当应变速率增大到某

个值时, 靠近裂尖前端区域整体非晶化, 故此应变速率区域为应变速率突变区。

3 结 论

1) 纳米单晶 γ -TiAl 合金裂纹扩展对应变速率具有很强的敏感性, 根据模拟结果可将应变速率分为不敏感区、敏感区以及突变区。

2) 在不敏感区, 当应力达到峰值即启裂, 整个扩展过程呈脆性解理状, 最大应力震幅很小, 应变速率对裂纹扩展过程影响不大。

3) 在敏感区, 应力达到峰值即启裂, 扩展前期呈脆性解理状, 后期通过裂尖发射位错(与主裂纹成 45°)并在塞积处萌生空洞, 空洞形核生长成子裂纹; 主、子裂纹串接后扩展直至断裂。

4) 在突变区, 因应变强化作用使裂纹不在应力最大时刻启裂, 裂纹扩展后应力继续增加, 之后逐渐减小; 高应变速率使得裂纹扩展前端整体原子应力增大, 非平衡态系统迫使裂尖前端局部非晶化, 最终在原子结构混乱处萌生微裂纹, 并且应变速率越高, 非晶化区域越大。

参考文献 References

- [1] Huang Xu(黄旭), Zhu Zhishou(朱知寿), Wang Honghong(王红红). *Advanced Aviation Titanium Material and Application* (先进航空钛合金材料与应用)[M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2012
- [2] Tang F L, Cai H M, Bao H W et al. *Computational Materials*

- Science*[J], 2014, 84: 232
- [3] Wang C H, Han Q, Xin D G. *Molecular Simulation*[J], 2015, 41(4): 325
- [4] Tao C N, Ran X, Lic Q B. *Acta Mechanica Solida Sinica*[J], 2015, 28(2): 133
- [5] Smith L, Zimmerman J A, Hale L M *et al.* *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2014, 22(4): 76
- [6] Xiang M Z, Cui J Z, Tian X *et al.* *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*[J], 2013, 10(5): 1215
- [7] Shen L M. *Acta Mechanica Sinica* [J], 2012, 28(4): 1125
- [8] Huang J C. *Advanced Science Letters*[J], 2012, 13(1): 410
- [9] Xin H, Han Q. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*[J], 2012, 9(3): 371
- [10] Guo J, Wen B, Roderick M. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*[J], 2012, 9(12): 2138
- [11] Rawat S, Warriar M, Chaturvedi S *et al.* *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2011, 19(2): 25007
- [12] Peng Chuanxiao(彭传校), Wang Li(王 丽), Zhang Yanning(张妍宁). *Acta Physico-Chimica Sinica*(物理化学学报)[J], 2007, 23(4): 517
- [13] Liang W, Zhou M. *Journal of Mechanical Engineering Science*[J], 2004, 218(6): 599
- [14] Guo Yu(郭 宇), Zhuang Zhuo(庄 茁), Li Xiaoyan(李晓雁). *Journal of Mechanics*(力学学报)[J], 2006, 38(3): 398
- [15] Koh S J A, Lee H P. *Nanotechnology*[J], 2006, 17(14): 34
- [16] Zheng Mao(郑 茂). *The Molecular Dynamics Simulation of Tensile Mechanical Properties and Defect Behavior of Single Crystal Metal*(金属单晶拉伸力学性能及缺陷行为的分子动力学模拟)[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2007
- [17] Wu W P, Yao Z Z. *Theoretical and Applied Fracture Mechanics*[J], 2012, 62: 67
- [18] Liang Haiyi(梁海弋), Wang Xiuxi(王秀喜), Wu Hengan(吴恒安). *Journal of University of Science and Technology of China*(中国科学技术大学学报)[J], 2001, 31(4): 454
- [19] Zope R R, Mishin Y. *Phys Rev B*[J], 2003, 68: 24
- [20] Wu Xiaoming(武晓敏), Ma Gang(马 钢), Xia Yuanming(夏源明). *Acta Metallurgica Sinica* (金属学报)[J], 2005, 41(10): 1037
- [21] Guo Yafang(郭雅芳), Gao Suowen(高索文). *Journal of Beijing Jiaotong University, Natural Science Edition*(北京交通大学学报, 自然科学版)[J], 2005, 29(4): 5

Molecular Dynamics Simulation of Nano Single Crystal Gamma-TiAl Alloy Strain Rate Effect

Luo Dechun¹, Zhang Ling², Fu Rong¹, Cao Hui¹, Rui Zhiyuan¹

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

Abstract: The propagation form of the preset edge crack in the nano single crystal gamma-TiAl at different strain rates were simulated by molecular dynamics. Dynamic uniaxial tension for preset edge cracks was carried out by velocity loading in the single crystal gamma-TiAl within $5.0 \times 10^7 \sim 7.5 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$. The results show that the crack propagation form varies with the range of strain rate. In the non-sensitive region ($\dot{\epsilon} \leq 4 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$), the crack propagates in a brittle cleavage manner. In the sensitive region ($4.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1} < \dot{\epsilon} \leq 1.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$), it exhibits cleavage extension feature early; in the latter stage, the slip dislocation is emitted from the crack tip, and the void defect initiates the place where dislocation pile up and then grow to the child crack, the child crack links the main crack when it bias 45° when $\dot{\epsilon} \leq 5.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, but it connects the main crack at the same direction under $5.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1} < \dot{\epsilon} \leq 1.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, thus leading to the fracture finally. In the sharp-change region ($\dot{\epsilon} \geq 1.0 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$), the crack does not craze at the maximum stress for the reinforcement of strain, and the stress decreases after it continues to increase for some time. The non-crystallizing of the atom structure occurs near the crack tip because of high strain rate, and then the micro crack initiates in the area of structure disordered, the micro crack growth causes fracture of the “test specimen” eventually.

Key words: gamma-TiAl alloy; strain rate; molecular dynamics; crack propagation

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