DOI: 10.12442/j.issn.1002-185X.20230208

空位浓度对 γ-TiAl 涂层阻尼性能的影响

王 宁[1]，杨 帆[2]，叶枭宇[1]，邵长钺[1]，杜广煜[3]，姜文全[1]

（1. 辽宁石油化工大学 机械工程学院，辽宁 抚顺 113005）

（2. 辽宁石油化工大学 石油天然气工程学院，辽宁 抚顺 113005）

（3. 东北大学 机械工程及自动化学院，辽宁 沈阳 110819）

摘 要：为了研究空位缺陷对 γ-TiAl 涂层阻尼性能的影响，采用分子动力学方法（MD）对不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层模型进行往复振动模拟计算。比较分析了应力-应变、储存势能、位错线密度、缺陷面积的变化及微观结构的变化机制。结果表明：随着空位浓度的升高，γ-TiAl 涂层能耗逐渐增加，弹性模量逐渐减小，涂层提前发生疲劳破坏；不同空位浓度 γ-TiAl 涂层的储存势能均呈周期性变化，变化幅度随空位浓度的升高而逐渐减小；在振动模拟过程中，空位缺陷会演化为位错线及其它缺陷，导致位错密度和缺陷面积升高，不同缺陷的运动、演化及湮灭是 γ-TiAl 涂层产生能耗的主要来源；另外，高空位浓度的 γ-TiAl 涂层内部产生较多的塑性变形，出现颈缩和孔洞等缺陷，使阻尼发生失效。

关键词：阻尼性能；分子动力学；γ-TiAl 涂层；位错密度；能量耗散

中图法分类号：TG146.23 **文献标识码**：A **文章编号**：1002-185X(2024)06-1761-09

随着工业的高速高精度发展，不仅要求材料满足使用的力学性能，还要求具有较好的阻尼性能[1-4]。尤其在航空、航天领域中发动机叶片在高速运转时产生的共振会使发动机产生故障的概率大幅度增加，对生命财产造成严重危害。为了减少共振带来的一系列危害，在发动机叶片上制备一层高阻尼合金涂层是最行之有效的方法之一。

近些年计算机技术的高速发展，分子动力学模拟在众多领域中得到了广泛应用，可以揭示纳米材料在外部激励作用下位错形成、塑性变形和断裂的基本机制[5-7]。

目前，许多国内外学者对金属合金的阻尼性能及结构变化机理进行了研究。如 Patsias 和 Tassini 等[8-9]采用气相等离子喷涂和 EB-PVD 沉积的方法，制备 Fe-Cr-Ni 合金梁镀氧化钇和氧化锆涂层，研究了其阻尼性能。王贺权等人[10]采用分子动力学软件 LAMMPS 在 700、800 和 900 K 下对含有位错的单晶 γ-TiAl 涂层进行模拟，得出 800 K 时的阻尼性能最好，并对比分析了不同温度下位错缺陷的变化，发现温度影响缺陷的分布范围，进而影响材料本身的阻尼性能。江会磊等[11]应用 ABAQUS 软件，对 4 种 γ-TiAl 涂层模型进行不同压力下的振动模拟。研究发现，γ-TiAl 合金涂层的阻尼性能随受到的压力升高而增强。采用 LAMMPS 分子动力学软件和 Atomeye 可视化软件进一步分析不同缺陷对模型阻尼性能的影响规律。薛春等人[12]运用分子动力学的模拟方法，研究了拉伸速率为 10^{10} s^{-1} 下温度对于单晶镁性能的影响。结果表明，温度对于单晶镁的拉应力峰值有明显的影响，随着温度的升高，单晶镁的抗拉强度峰值降低。晶体结构的转化和位错的产生也随着温度的升高提前发生，且位错密度有升高趋势。姜文全等人[13]采用分子动力学方法，对含表面缺陷金属涂层的阻尼性能进行探究。结果表明，微裂纹萌生、扩展及恢复的变化过程消耗掉了部分能量，揭示了金属涂层的能量耗散机制。鲁若鹏等[14]研究了 Al 含量对纯镁阻尼性能的影响，当 Al 含量较低时，在 60 和 260 ℃存在 2 个阻尼峰，是由于位错运动导致的内耗峰和晶界运动相关的晶界峰。随着合金中 Al 含量增加，位错峰峰值面贡献降低，并且峰值出现时温度有升高趋势，在 Mg-0.75Al 中未观察到明显的内耗峰，这是由于固溶原子的存在抑制了位错阻尼峰的出现。李国浩等人[15]利用分子动力学手段分析金属氧化物能量耗散过程，金属氧化物空位缺陷结构在加载过程中扩展为微裂纹等新的缺陷结构，对能量有耗散的作用，表明空位缺陷会增加涂层对于外施加载荷的消耗能力。

γ-TiAl 合金具有低密度、高弹性模量、高比刚度、

收稿日期：2023-06-13

基金项目：国家重点研发计划（SQ2020YFB200353-4）；辽宁省教育厅科学研究经费项目（L2019024，LJKMZ20220725）

作者简介：王 宁，男，1995 年生，硕士生，辽宁石油化工大学机械工程学院，辽宁 抚顺 113005，电话：024-89774672，E-mail: 771929775@qq.com

高温强度和抗氧化性等优点，在航空、航天、生物、医学等诸多领域中得到广泛应用[16-18]。而 γ-TiAl 合金作为涂层使用时具有较高阻尼性能已经被人们所认知，但从微观角度出发，对含有缺陷 γ-TiAl 涂层的阻尼性能研究仍未形成较为成熟的理论基础。因此，本研究利用分子动力学模拟方法，从微观角度探究缺陷对 γ-TiAl 涂层的阻尼性能影响具有较大的工程应用指导意义。

本研究通过分子动力学模拟方法对不同空位缺陷浓度的 γ-TiAl 涂层进行振动模拟，对比分析阻尼性能，通过能量、位错线及微观结构的变化进行深入分析，揭示空位缺陷对 γ-TiAl 涂层阻尼性能的影响机制。

1　分子动力学模拟基本理论

1.1　镶嵌原子势函数

EAM 势能够准确地描述出金属原子之间力场，是描述金属体系最常见的一种势函数，由 Daw 和 Baskes[19]于 1984 年率先提出。由 Zope 等人[20]开发研究的嵌入原子势函数（EAM），是通过大量的可靠实验数据和第一原理方法计算拟合得到了晶格参数 a_0、内聚能 E_0 和 c/a_0 的比值，与实验结果较为吻合，如表 1 所示。证明选取的势函数具有一定的准确性，因此采用 EAM 势进行模拟。

在模型中，系统总能量可以表示为：

$$E_{\mathrm{tot}}=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1\neq i}^{N}\Phi_{ij}\left(r_{ij}\right)+\sum_{i=1}^{N}F_i\left(\rho_i\right) \tag{1}$$

式中，E_{tot} 是所有原子的总能量，$\Phi_{ij}(r_{ij})$是 i 原子与 j 原子之间的相互作用势，$F_i(\rho_i)$是把原子 i 埋入电子密度为 ρ_i 的位置所需的能量。

简化的拟合方法如下：

$$E\left(r\right)=-E_{\mathrm{c}}\left[1+b\left(\frac{r}{r_{\mathrm{e}}}-1\right)\right]\exp\left[-b\left(\frac{r}{r_{\mathrm{e}}}-1\right)\right] \tag{2}$$

$$b=\left(\frac{\Omega_{\mathrm{e}}B}{E_{\mathrm{c}}}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{3}$$

式中，$E(r)$为所有原子的总能量，E_{c} 为结合能，r 为原子间距离，r_{e} 为平衡原子间距，b 为待定参数，Ω_{e} 为平衡原子体积，E_{c} 为结合能，B 为弹性模量。

表 1　EAM 势与实验数据对比

Table 1　Comparison of EAM potential with experimental data

Parameter	Experiment	EAM
a_0	3.997	3.998
c/a_0	1.02	1.047
E_0/eV·atom^{-1}	4.51	4.509

1.2　速度算法

Verlet 算法作为 Euler 算法的改进算法，是牛顿力学中最经典的计算方法[21]。具有较高的稳定性和准确性，被广泛地应用在分子动力学模拟中。其表达式如下：

$$r_i\left(t_0+t\right)=2r_i\left(t_0\right)-r_i\left(t_0-\Delta t\right)+\left(\Delta t^2/m_i\right)f_i\left(t_0\right) \tag{4}$$

$$v_i\left(t_0\right)=\left(r_i\left(t_0+\Delta t\right)-r_i\left(t_0-\Delta t\right)\right)/2\Delta t \tag{5}$$

式中，$r_i(t_0)$为 i 原子 t_0 时刻的位置，$r_i(t_0$-$\Delta t)$为 i 原子 t_0-Δt 时刻的位置，$f_i(t_0)$为 i 原子 t_0 时刻的作用力，m_i 为 i 原子的质量，$v_i(t_0)$ 为 i 原子 t_0 时刻的速度。

由初始时刻的位置 $r_i(t_0)$ 及前一时刻的位置 $r_i(t_0-\Delta t)$，计算出 $t+t_0$ 时刻的位置 $r_i(t_0+\Delta t)$，再通过 $r_i(t_0-\Delta t)$和 $r_i(t_0+\Delta t)$共同计算出速度 $v_i(t_0)$。

1.3　温度控制

Nose-Hoover 热浴法[22-23]是分子动力学软件 LAMMPS 中最常用的控温方法，运动方程为：

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\tau^2}\left[\frac{T}{T_{\mathrm{c}}}-1\right] \tag{6}$$

式中，ξ 为摩擦系数，τ 为热浴的弛豫时间，T 为模拟的瞬时温度，T_{c} 为热浴温度。

2　模型建立及模拟条件

2.1　模型建立

γ-TiAl 合金的晶体结构为面心四方（fct）晶体结构[24]，与面心立方（fcc）晶格结构相似，晶格常数 a=0.4001 nm、b=0.4001 nm、c=0.4181 nm，x、y、z 轴的晶向为[100]、[010]、[001]，采用 Lammps 分子动力学软件建立的 γ-TiAl 合金晶体结构如图 1 所示。

由单个 γ-TiAl 合金晶格结构分别沿 x、y、z 轴方向周期性复制形成尺寸为 37a×15b×11c 的模型，原子总数为 24 420 个，得到完美晶格结构的 γ-TiAl 合金涂层模型。在完美模型中按照一定比例随机删除原子，得到含空位缺陷的 γ-TiAl 合金涂层模型（图 2）。选

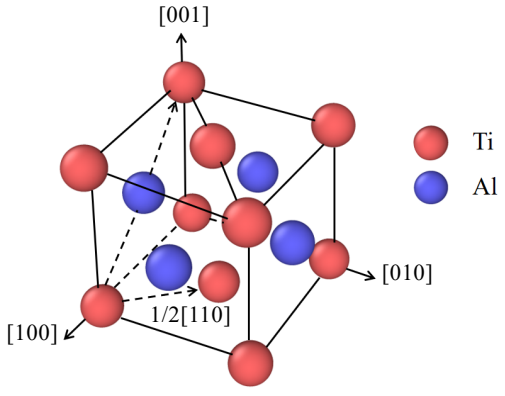

图 1　γ-TiAl 合金晶格结构

Fig.1　Lattice structure of γ-TiAl alloy

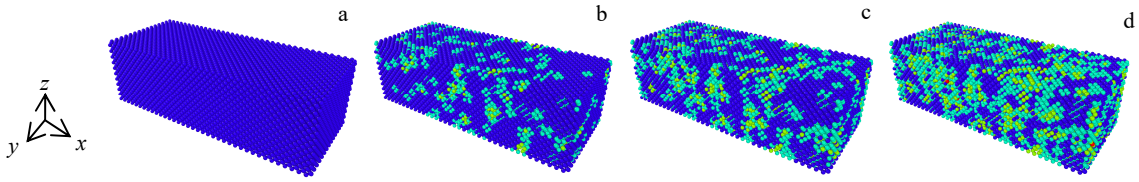

图 2　不同空位浓度的 γ-TiAl 合金模型

Fig.2　γ-TiAl alloy model with different vacancy concentrations: (a) 0%, (b) 2%, (c) 4%, and (d) 6%

用空位缺陷浓度为 0%、2%、4%和 6%的 4 个 γ-TiAl 合金涂层模型。通过 Ovito 可视化软件中的配位数着色分析观察微观结构中缺陷的变化。当 γ-TiAl 涂层中出现缺陷时，缺陷附近原子的配位数会发生变化，从而以原子配位数来观察缺陷结构变化，正常配位数原子为深蓝色，其它颜色为缺陷原子。从图 2 中可以看出，由于 γ-TiAl 涂层中空位缺陷的存在，破坏了原有的晶格结构，随着空位浓度的升高，缺陷原子数量逐渐增加。

2.2　模拟条件

选取速度 Verlet 算法作为本研究使用的计算方法，势函数采用了 EAM 势，边界条件均采用了周期性边界（ppp），系综选用了等温等压系综（NVT 系综），温度控制选择 Nose-Hoover 热浴法。为使系统初始状态趋于平衡状态，在 300 K 温度下进行等温等压系综的弛豫，总时间为 10 ps，共 50 000 步。弛豫的过程中不施加任何外加载荷，不限制模型长度方向的变化。使用 Nose-Hoover 热浴法对模拟系统的温度进行控制。由于 γ-TiAl 涂层在实际应用中的振动最接近正弦变化规律，因此对模型施加一个 x 方向的持续正弦简谐应变，模拟 γ-TiAl 合金涂层在实际应用情况下的振动规律。振幅设置为 15 nm，周期为 60 ps，共运行 5 个周期，总时长为 300 ps。计算并输出了平均应力、应变、运行步数、运行时间、储存势能信息，每运行 1500 步输出 1 次计算结果，用于后续的计算分析。

3　结果与讨论

3.1　阻尼性能分析

在往复应变的作用下，非理想弹性变形的应力与应变之间存在相位差，导致应力应变滞回环的产生，通过滞回环面积表示一个周期内模型系统所消耗的能量[25]。图 3 为不同空位缺陷浓度 γ-TiAl 涂层在整个振动模拟中的应力-应变曲线。从图 3a 中可以观察到，空位浓度为 0%的 γ-TiAl 涂层的应力-应变曲线未产生滞回环，基本符合胡克定律。由图 3b~3d 可知，随着空位浓度的升高，γ-TiAl 涂层的滞回环面积出现明显升高趋势，这说明含空位缺陷的 γ-TiAl 涂层所消耗的能量逐渐增多，消耗了更多的外界机械能。

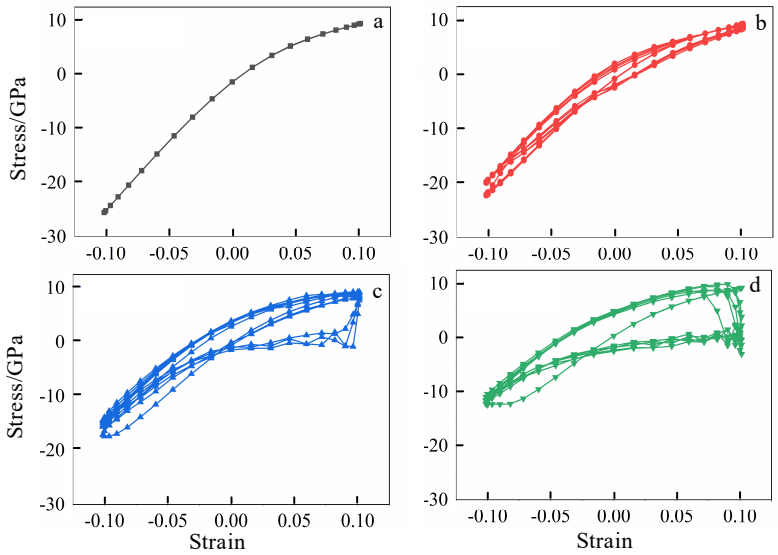

图 3　不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层应力-应变曲线

Fig.3　Stress-strain curves of γ-TiAl coatings with different vacancy concentrations: (a) 0%, (b) 2%, (c) 4%, and (d) 6%

图 4 为不同空位浓度 γ-TiAl 涂层在振动模拟第 5 周期的应力-应变曲线。从图中可以明显看出，当空位浓度升高时，滞回环与横坐标轴的夹角变小，模型的弹性模量逐渐减小，这与 Yang 等[26]和 Feng 等[27]的研究结果相同。空位浓度分别为 0%、2%、4%和 6%的 γ-TiAl 涂层在应变最大值处（ε=0.104）的应力值分别为 9.43、8.65、8.15 和−3.01 GPa，应变最小值处（ε=−0.104）的应力值分别为−45.84、−37.99、−32.23 和−27.58 GPa。可以看出，不同空位 γ-TiAl 涂层在应变最小时的应力值相差较大，应力值随空位浓度的升高而减小，对涂层力学性能有较为明显的影响。空位浓度分别为 0%、2%、4%和 6%的 γ-TiAl 涂层在振动模拟的第 5 周期内的滞回环面积分别为 0.0029、0.4525、1.0205 和 1.2072 GJ/m^3。随着空位浓度的升高，不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层在同一振动周期内的能量损耗出现明显上升趋势。从图 4 中可以发现，在 ε=0.104 附近，空位浓度分别为 4%和 6%涂层的应力水平发生急剧下降，表明涂层此时达到屈服强度，材料发生破坏。观察图 3c、3d 可知，空位浓度分别为 4%和 6%的 γ-TiAl 涂层分别在振动模拟的第 4 周期和第 2 周期发生屈服。图 3a、3b 中空位浓度分别为 0%和 2%的 γ-TiAl 涂层未出现屈服现象。

比阻尼 Ψ 通常可以反映材料的阻尼性能，比阻尼值越大，说明材料的阻尼性能越好[2]。比阻尼 Ψ 表达式如下：

$$\Psi = \frac{W_0}{W} \tag{7}$$

$$W_0 = \oint \sigma \mathrm{d}\varepsilon \tag{8}$$

$$W = \int_{\omega t=0}^{\omega t=\pi/2} \sigma \mathrm{d}\varepsilon \tag{9}$$

式中，W 为单位体积最大储存应变能密度，W_0 为单位体积消耗应变能密度，σ 为应力，ε 为应变，ω 为角速度。

通过图 3a~3d 应力-应变曲线分别计算得出空位浓度分别为 0%、2%、4%和 6%的 γ-TiAl 涂层的比阻尼值，并绘出图 5 不同空位浓度 γ-TiAl 涂层的比阻尼变化曲线。从图 5 中的比阻尼变化可知，γ-TiAl 涂层的比阻尼随空位浓度的升高有明显的提升。空位浓度为 0%的 γ-TiAl 涂层的比阻尼值始终接近于 0，这表明完美晶格结构的 γ-TiAl 涂层在振动模拟中的阻尼性能较弱。空位浓度为 2%的涂层的比阻尼变化较为平稳，较空位浓度为 0%的 γ-TiAl 涂层有较为明显的提升，未出现明显波动。而空位浓度为 4%和 6%的 γ-TiAl 涂层的比阻尼值变化波动较大，比阻尼均发生了突变，与图 3 应力-应变曲线中涂层发生屈服的时间保持同步。

在材料强度满足工程要求的前提下，适当的塑性变形可以增加材料吸收外载荷能量的能力，并提高材料的阻尼性能。但是过量的塑性变形会导致材料失效，此问题是在工程应用中需要避免的问题。观察图 5 比阻尼变化曲线可知，γ-TiAl 涂层的比阻尼随空位浓度的升高而升高。但结合图 3 中 γ-TiAl 涂层的应力-应变曲线可知，在低空位浓度下，γ-TiAl 涂层阻尼性能升高的同时，力学性能和抗疲劳性能发生略微降低。而在高空位浓度下，γ-TiAl 涂层的力学性能和抗疲劳性能有下降趋势，涂层提前进入宏观的塑性变形，阻尼性能发生失效。

3.2　系统能量变化

图 6 为不同空位浓度 γ-TiAl 涂层在振动模拟下的储存势能变化曲线。从图 6a 中可以看出，空位缺陷对 γ-TiAl 涂层的储存势能产生较大影响，随着空位缺陷浓度的升高而升高。储存势能的变化趋势基本一致，与振动模拟周期保持同步。在拉伸-卸载过程中，空位浓度分别 0%、2%和 4%的涂层的势能峰值保持稳定，没有出

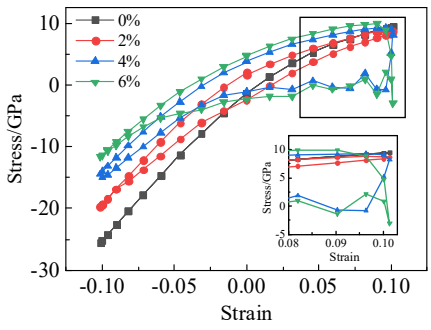

图 4　振动模拟第 5 周期 γ-TiAl 涂层的应力-应变曲线

Fig.4　Stress-strain curves of γ-TiAl coating during the fifth period of vibration simulation

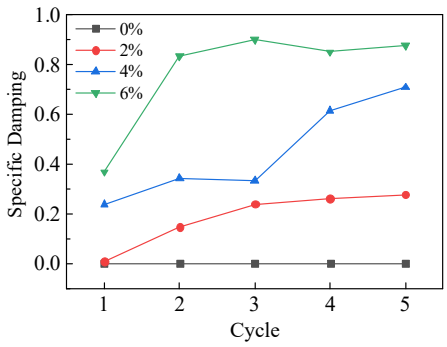

图 5　不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层比阻尼变化曲线

Fig.5　Change curves of specific damping of γ-TiAl coatings with different vacancy concentrations

现明显的波动。而空位浓度为 6%的涂层势能峰值下降幅度较大，下降了 1106.51 eV。在压缩-卸载过程中，当 γ-TiAl 涂层中的空位浓度为 0%时，势能峰值无明显波动。含空位 γ-TiAl 涂层的势能峰值均呈现下降趋势，势能峰值分别下降 757.06、893.99 和 1076.42 eV。这表明随着空位浓度增加，γ-TiAl 涂层对机械能的吸收能力也在增强，更多的机械能转化为内能被消耗。

为使后续分析更为准确，应当选取不同空位浓度 γ-TiAl 涂层均较为稳定的振动周期，结合图 5 中的比阻尼变化曲线和图 6a 中储存势能变化曲线，可知各涂层振动模拟的第 4、第 5 周期比阻尼变化较平稳，储存势能波动较小。因此选取振动模拟的第 5 个周期进行详细分析。

图 6b 为不同空位浓度 γ-TiAl 涂层在振动模拟的第 5 周期储存势能变化曲线。在拉伸-卸载阶段（t=240~270 ps），拉伸时原子间距增大，机械能转化为储存势能，在卸载阶段储存的势能被释放。此阶段不同空位涂层储存的势能分别为 1793.57、1532.43、1841.97 和 2063.69 eV。储存势能变化差值基本一致。在压缩-卸载阶段（t=270~300 ps），储存的势能分别为 3081.16、1722.24、834.51 和 336.99 eV，势能差值下降了 9 倍左右，储存的势能在卸载过程中被释放。

在振动模拟周期中，储存势能的变化差值随空位浓度的升高而减小，尤其在压缩-卸载阶段的储存势能变化差值下降更为明显。这表明随着空位浓度的升高，转化为储存势能的能量大幅度减小，大部分机械能直接以内能的形式被消耗。

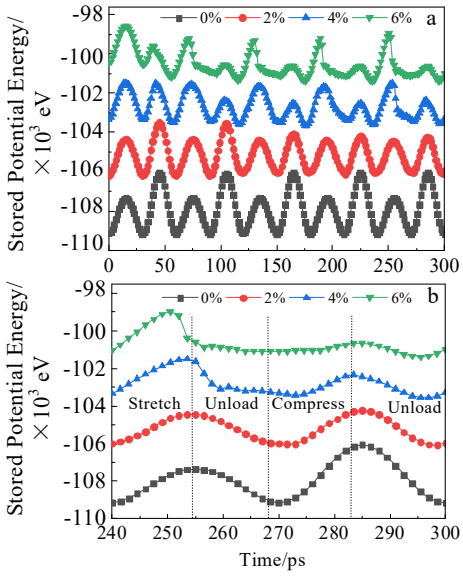

图 6　不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层储存势能变化曲线

Fig.6　Change curves of stored potential energy of γ-TiAl coatings with different vacancy concentrations in five vibration periods (a) and at the fifth vibration cycle (b)

3.3　微观结构分析

为了分析空位缺陷对 γ-TiAl 涂层阻尼性能的影响机制，通过 Ovito 可视化软件[28]的 DXA（位错分析）观察内部位错线及缺陷面积变化，对不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层进行对比探讨。图 7~图 11 分别展示出了不同空位浓度 γ-TiAl 涂层在振动第 5 周期内的 0、1/4、1/2、3/4 和 1 周期时刻位错分布图。

图 7 为 0 周期时刻的位错线分布图。从图 7a 中可以看出，空位浓度为 0%的 γ-TiAl 涂层内部未出现位错，涂层处于稳态。观察图 7b~7d 可知，当 γ-TiAl 涂层含有空位缺陷时，涂层中产生了较为明显的位错线，同时出现分散的小面积缺陷网，位错主要存在形式为 Shockley 和 Stair-rod 位错以及少量其它位错。观察图 7d 可以发现，空位浓度为 6%的 γ-TiAl 涂层出现发射位错，涂层内部产生裂纹缺陷。这说明在经历了 4 个振动周期模拟后，完美晶格结构的 γ-TiAl 涂层保持了原有的结构状态。含空位缺陷的涂层中残存了不同程度的缺陷，随着空位浓度为的升高，残存的位错密度和缺陷面积逐渐升高。

图 8a~8d 分别为 1/4 周期时刻位错线分布图。图 8a 中空位浓度为 0%的 γ-TiAl 涂层未生成缺陷，处于稳态。含空位 γ-TiAl 涂层内部的位错线发生增殖并演化为缺陷网，缺陷网面积发生明显增加，表明涂层中发生了大量的塑性变形。尤其在空位浓度为 4%和 6%的 γ-TiAl 涂层中部出现了较大面积的缺陷网，大量集中的塑性变形导致涂层发生破坏，应变能被迅速释放。这一现象解释图 4 中空位浓度为 4%和 6%的 γ-TiAl 涂层应力值急剧下降的原因。

图 9 为 1/2 周期时刻位错线分布图。1/4 至 1/2 周期阶段涂层开始回缩，从图 9a 中可以发现，空位浓度为 0%的 γ-TiAl 仍处于稳态。图 9b~9d 含空位 γ-TiAl 涂层的位错密度降低，缺陷网面积也逐渐减少。这是由于涂层的回缩导致部分塑性变形消失，缺陷网逐渐湮灭或演化为位错线。

图 10a~10d 为 3/4 周期时刻的位错线分布图。在 1/2 至 3/4 周期阶段涂层整体被压缩。图 10a 中空位浓度为 0%的 γ-TiAl 涂层无缺陷生成。观察图 10c、10d 可以发现，空位浓度为 4%和 6%的 γ-TiAl 涂层内部集中的大面积缺陷网已经湮灭并演化为位错线。空位浓度为 6%的 γ-TiAl 涂层内部存在集中的发射位错，表明涂层内部仍存在裂纹缺陷。

图 11 为 1 周期时刻的位错线分布图，完成了 1 个周期的振动模拟，涂层回到初始尺寸。对比图 7a~7d 和图 11a~11d 的位错线分布图可以发现，不同空位浓度为 γ-TiAl 涂层在经历了 1 个周期的振动模

拟后，位错线数量及缺陷网面积相近。这说明在经历了 1 个周期的振动模拟后，各涂层的内部结构保持了相对稳定状态。

通过对比不同空位浓度为 γ-TiAl 涂层在振动模拟周期内的 0、1/4、1/2、3/4 和 1 周期时刻的位错线分布图后发现，空位浓度为 0%的 γ-TiAl 涂层始终未出现位错线及缺陷网，保持了原有的稳定状态。解释了图 3a 应力-应变曲线中未产生滞回环面积的原因。含有空位缺陷的 γ-TiAl 涂层产生了较多的位错线和缺陷网，位错线类型主要以 Shockley 和 Stair-rod 位错为主。在简谐应变的振动模拟作用下，空位缺陷会促进位错线的演化及增殖，导致位错线密度升高。随着模拟的进行，位错线逐渐演化为更多的缺陷网，使涂层中产生不同程度的塑性变形，促使更多的机械能以内能形式耗散。

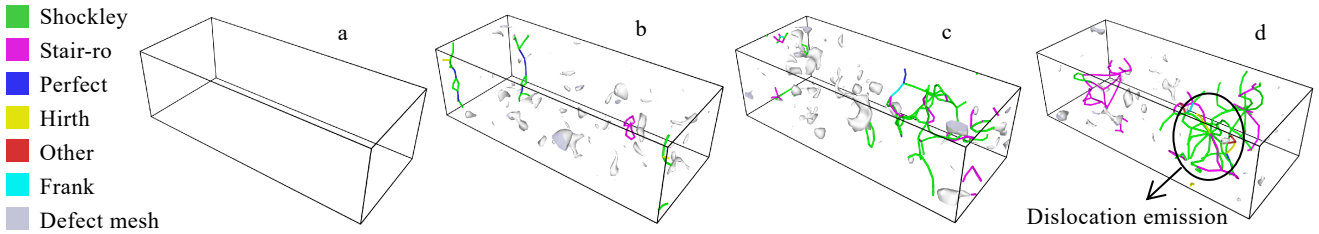

图 7　不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层在 0 周期时刻位错线分布图

Fig.7　Dislocation line distributions of γ-TiAl coatings with different vacancy concentrations at 0 cycle time: (a) 0%, (b) 2%, (c) 4%, and (d) 6%

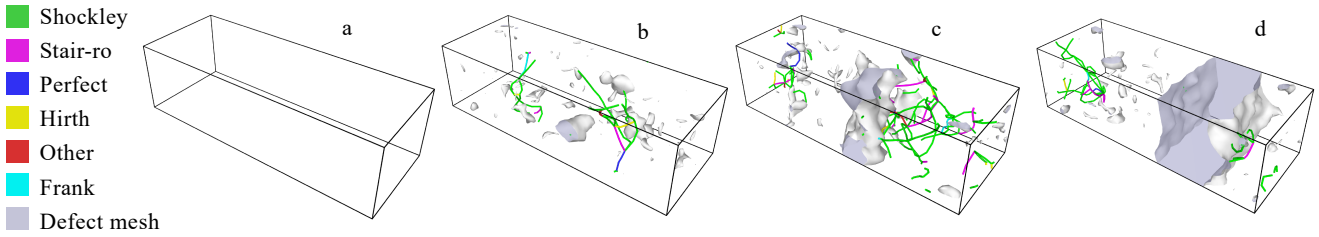

图 8　不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层在 1/4 周期时刻位错线分布图

Fig.8　Dislocation line distributions of γ-TiAl coatings with different vacancy concentrations at 1/4 cycle time: (a) 0%, (b) 2%, (c) 4%, and (d) 6%

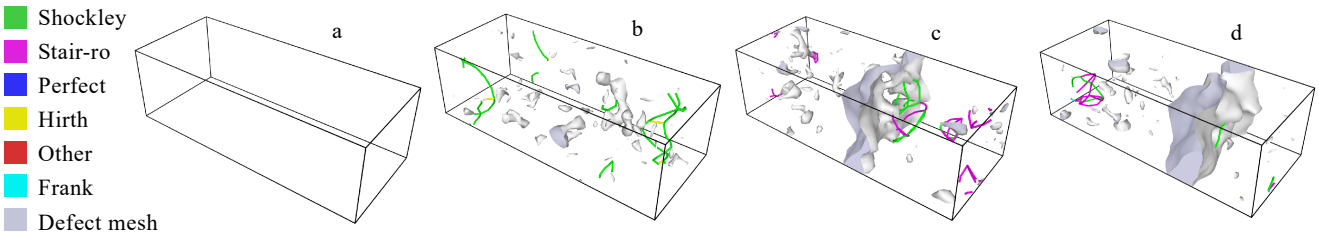

图 9　不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层在 1/2 周期时刻位错线分布图

Fig.9　Dislocation line distributions of γ-TiAl coatings with different vacancy concentrations at 1/2 cycle time: (a) 0%, (b) 2%, (c) 4%, and (d) 6%

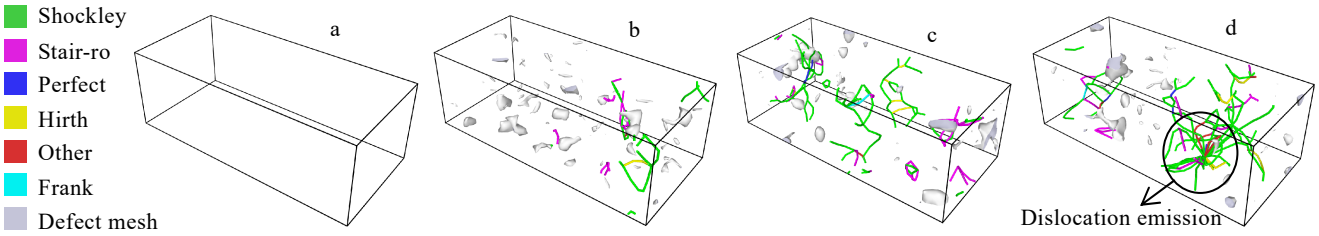

图 10　不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层在 3/4 周期时刻位错线分布图

Fig.10　Dislocation line distributions of γ-TiAl coatings with different vacancy concentrations at 3/4 cycle time: (a) 0%, (b) 2%, (c) 4%, and (d) 6%

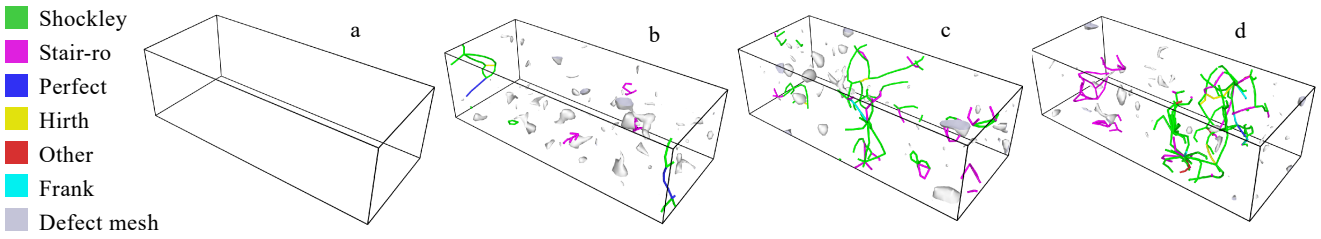

图 11　不同空位浓度的 γ-TiAl 涂层在 1 周期时刻位错线分布图

Fig.11　Dislocation line distributions of γ-TiAl coatings with different vacancy concentrations at 1 cycle time: (a) 0%, (b) 2%, (c) 4%, and (d) 6%

为了进一步探究含空位缺陷 γ-TiAl 涂层的微观结构变化对阻尼性能的影响规律，对比空位浓度为 4%和 6%的 γ-TiAl 涂层在比阻尼突变前后周期内的应力-应变曲线和微观结构变化如图 12、图 13 所示。

图 12a、12b 分别为空位浓度为 4%的 γ-TiAl 涂层在振动模拟第 3、4 周期的应力-应变曲线和微观结构图。在拉伸阶段（ε=0~0.104）中，原子间距增大，导致原有晶格结构发生破坏，2 个周期均产生了较多的缺陷原子。当 ε=0.104 时，应力值分别为 9.14 和 7.74 GPa，应力值发生轻微下降。对比微观结构图可以发现，在第 4 周期时出现更多具有较低配位数的缺陷原子，观察到尺寸较小的孔洞缺陷。在接下来的卸载阶段（ε=0.104~0），涂层整体发生回缩，缺陷原子的数量逐渐降低。从应力-应变曲线可以看出，第 3 周期的曲线呈线性下降。第 4 周期的曲线迅速下降到较低水平，而在 ε=0.09~0 阶段缓慢下降。在 ε=0.090 时，应力值分别为 8.15 和 2.46 GPa，应力值下降了 5.69 GPa，力学性能下降幅度较大，材料发生屈服。通过对比微观结构图可发现，在第 4 周期时涂层产生了更多的缺陷原子，孔洞发生扩展。而在第 3 周期中，孔洞缺陷逐渐湮灭，未出现新的缺陷区域。这表明涂层内部的缺陷运动促使大量的应变被释放，从而导致应力值的迅速下降。在 ε=0.090~0 期间，模拟第 3 和第 4 周期的缺陷原子数量逐渐较少，第 4 周期的孔洞发生湮灭，吸收

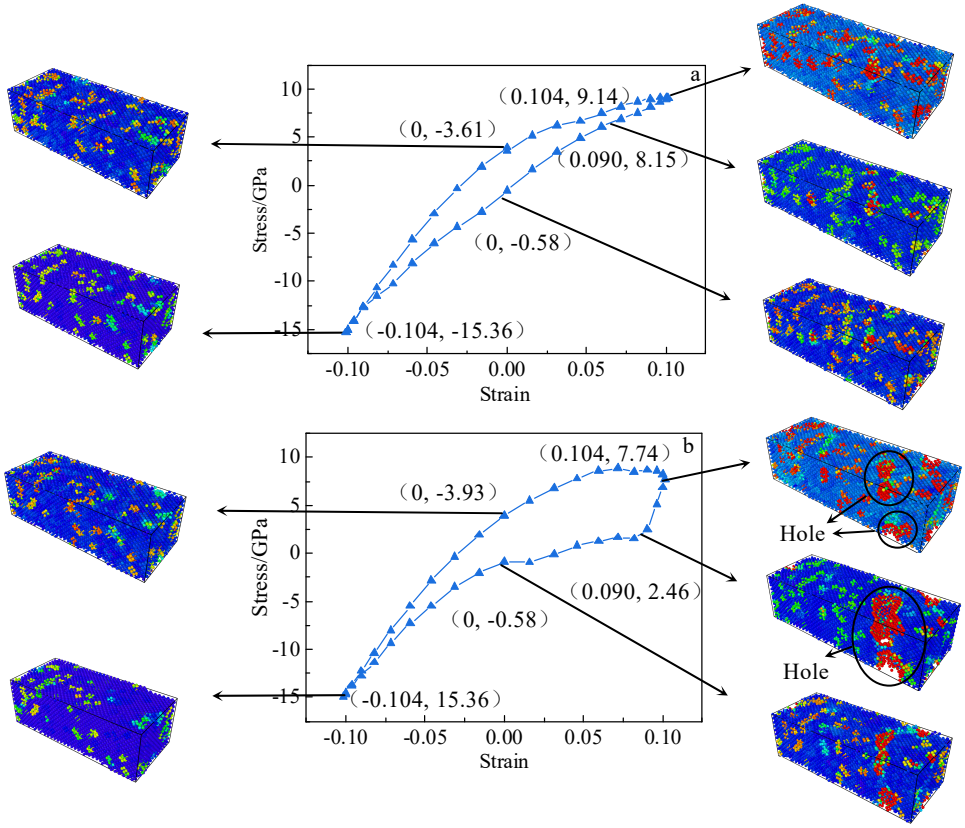

图 12　空位浓度为 4%的 γ-TiAl 涂层在振动模拟第 3、4 周期的应力-应变曲线及微观结构

Fig.12　Stress-strain curves and microstructures of γ-TiAl coatings with the vacancy concentration of 6% at the third vibration cycle (a) and the fourth vibration cycle (b)

外界机械能，导致应变能的增加，导致应力缓慢下降。在压缩阶段（ε=0~−0.104）和卸载阶段（ε=−0.104~0）中，二者的微观结构相差较小，应力-应变曲线基本保持一致。当 ε=−0.104 时，应力值均为−15.36 GPa。当 ε=0 时，应力值分别为−3.61 和−3.93 GPa。

图 13a、13b 分别为空位浓度 6%的 γ-TiAl 涂层在模拟的第 1、2 周期的应力-应变曲线和微观结构图。可以发现，在拉伸-卸载阶段，第 1 周期涂层缺陷分布较均匀，未出现配位数较低的原子。其应力-应变曲线未形成滞回环，处于弹性变形阶段。第 2 周期中涂层中出现了较多配位数较低的缺陷原子，并发生了颈缩，大量应变能通过塑性变形被释放，导致应力值瞬间降低至较低水平。当 ε=0.096 时，应力值分别为 8.97 和−1.35 GPa，下降了 4.9 GPa。在 ε=0.09~0 阶段，应力-应变曲线发生波动。观察微观结构图可以发现，颈缩不断减小。当 ε=0 时，仍存在少部分的颈缩没有消失。在压缩-卸载阶段，两者的曲线基本一致。

以上分析可以得出，高空位缺陷浓度为下的 γ-TiAl 涂层更容易发生塑性变形。随着振动周期的增加，残留的塑性变形不断累积，涂层提前产生屈服，抗疲劳性大幅度降低，最终导致涂层的阻尼失效。而颈缩和孔洞扩展的过程中消耗了较多的能量，证实图 5 比阻尼变化曲线中空位浓度为 4%和 6%的 γ-TiAl 涂层比阻尼值发生突变的现象。

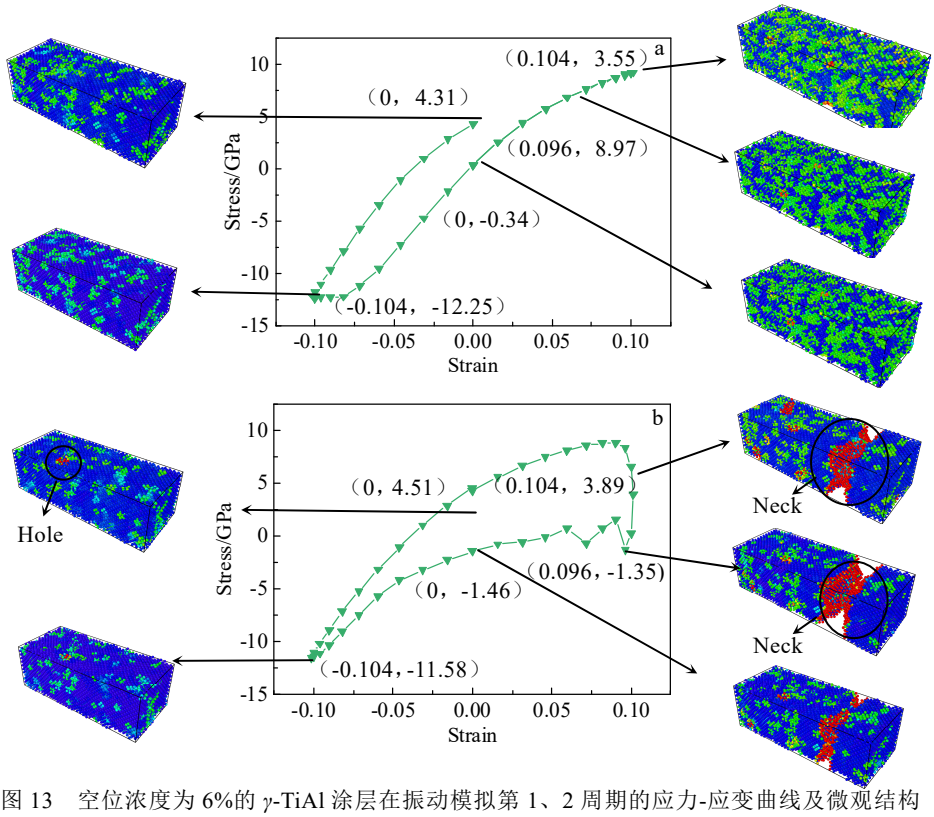

图 13　空位浓度为 6%的 γ-TiAl 涂层在振动模拟第 1、2 周期的应力-应变曲线及微观结构

Fig.13　Stress-strain curves and microstructures of γ-TiAl coating with the vacancy concentration of 6% at the first vibration cycle (a) and the second vibration cycle (b)

4　结　论

1）通过对比不同空位缺陷浓度为 γ-TiAl 涂层在往复振动模拟下的应力-应变曲线及比阻尼值，发现随着空位浓度的升高，γ-TiAl 涂层的内耗随之升高。但在高空位浓度下，γ-TiAl 涂层出现应力屈服现象，导致其抗疲劳性下降，并且阻尼发生失效。

2）不同空位浓度 γ-TiAl 涂层的储存势能变化形态基本一致，与振动周期保持同步。储存势能最大峰值均有缓慢下降趋势，在振动中涂层产生疲劳状态。在稳定振动周期内，储存势能变化差值随空位浓度的升高而减小，更多的机械能直接以内能的形式被消耗。

3）在往复应变作用下，空位缺陷对 γ-TiAl 涂层内部的位错线密度及缺陷网面积具有较大影响，随空位浓度的升高而增大，与应力-应变滞回环面积的变化具有相似性。不同类型缺陷的形成、湮灭以及相互演化促使更多的机械能以内能的形式被消耗。高空位浓度 γ-TiAl 涂层内部产生较多孔洞缺陷，并提前发生颈缩。

参考文献　References

[1] Nan Tiantian(南田田), Meng Lingyu(孟玲宇), Fei Chundong(费春东) *et al. Fiber Composites*(纤维复合材料)[J], 2020, 37(2): 68

[2] Zhang Xiuming(张修铭), Chen Shengjun(陈盛军), Deng Zilong(邓子龙) *et al. Journal of Liaoning Petrochemical University*(辽宁石油化工大学学报)[J], 2020, 40(3): 57

[3] Chen Jie(陈 捷). *Metal World*(金属世界)[J], 2018(2): 53

[4] Liu Shifeng(刘世锋), Song Xi(宋 玺), Su Tong(苏 彤) *et al. Journal of Aeronautical Materials*(航空材料学报)[J], 2020, 40(3): 77

[5] Liu Xiaobo(刘晓波)，Fang Zhou(方 洲), Xu Qingjun(徐庆军) *et al. Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2017, 46(2): 56

[6] Eftink B P, Li A, Szlufarska I *et al. Acta Materialia*[J], 2017, 138: 212

[7] Stamenkovic M, Karlicic D, Goran J *et al. Journal of Mechanics of Materials and Structures*[J], 2016, 11(3): 279

[8] Tassini N, Patsias S, Lambrinou K. *Materials Science and Engineering A*[J], 2006, 442: 509

[9] Patsias S, Tassini N, Lambrinou K. *Materials Science and Engineering A*[J], 2006, 442: 504

[10] Wang Hequan(王贺权), Zhang Xinyu(张馨予). *Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2020, 49(8): 95

[11] Jiang Huilei(江会磊), Wang Hequan(王贺权). *Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2022, 51(2): 97

[12] Xun Chun(薛 春), Yang Qianhua(杨千华), Chu Zhibing(楚志兵) *et al*. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(5): 1812

[13] Jiang Wenquan(姜文全), Du Guangyu(杜广煜), Ba Dechun (巴德纯) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2015, 64(14): 250

[14] Lu Ruopeng(鲁若鹏), Yao Keyu(姚珂宇), Li Kun(李 昆) *et al. Special-cast and Non-ferrous Alloys*(特种铸造及有色合金)[J], 2020, 40(11): 1195

[15] Li Guohao(李国浩). *Effects of Microstructure and Defects on Damping Properties of YSZ Coatings*(微观结构及缺陷对 YSZ 涂层的阻尼性能影响研究)[D]. Shenyang: Northeastern University, 2017

[16] Tetsui T. *Rare Metals*[J], 2011, 30(1): 294

[17] Chen Yuyong(陈玉勇), Ye Yuan(叶 园), Zhang Yu(张 宇) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2023, 52(11): 4002

[18] He Jin(贺 进), Zhou Han(周 汉), Zhu Wenqi(朱文琪) *et al. Materials Reports*(材料导报)[J], 2014, 28(15): 87

[19] Daw M S, Baskes M I. *Physical Review B*[J],1984, 29: 6443

[20] Zope R R, Mishin Y. *Physical Review B*[J], 2003, 68: 024102

[21] Swope W C, Andersen H C, Berens P H *et al. Journal of Chemical Physics*[J], 1982, 76(1): 637

[22] Nose S. *Molecular Physics*[J], 2002, 100(1): 191

[23] Li J. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2003, 11: 173

[24] Tang F L, Cai H M, Bao H W *et al. Computational Materials Science*[J], 2014, 84: 232

[25] Zhang Zhongming(张忠明), Liu Hongzhao(刘宏昭), Wang Jincheng(王锦程) *et al. Functional Materials*(功能材料)[J], 2001(3): 227

[26] Yang X Q, Zhai P C, Liu L S *et al. Phys B*[J], 2012, 407: 2234

[27] Feng R C, Cao H, Li H Y *et al. Journal of High Temperature Materials and Processes*[J], 2018, 37(2): 113

[28] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(1): 015012

Effects of Vacancy Concentration on Damping Property of γ-TiAl Coating

Wang Ning[1], Yang Fan[2], Ye Xiaoyu[1], Shao Changcheng[1], Du Guangyu[3], Jiang Wenquan[1]

(1. School of Mechanical Engineering, Liaoning Petrochemical University, Fushun 113005, China)

(2. College of Petroleum Engineering, Liaoning Petrochemical University, Fushun 113005, China)

(3. School of Mechanical Engineering and Automation, Northeastern University, Shenyang 110819, China)

Abstract: In order to study the effect of vacancy defects on the damping performance of γ-TiAl coating, molecular dynamics (MD) was used to simulate the reciprocating vibration of γ-TiAl coating with different vacancy concentrations. The changes of stress-strain, stored potential energy, dislocation line density, defect area, and microstructure were compared and analyzed. The results show that with the increase in vacancy concentration, the energy consumption of γ-TiAl coating increases gradually, and the damping performance is enhanced obviously. The stored potential energy of γ-TiAl coating with different vacancy concentrations changes periodically, and the range of variation decreases gradually with the increase in vacancy concentration. In the process of vibration simulation, vacancy defects will evolve into dislocation lines and other defects, resulting in increased dislocation density and defect area. The movement, evolution and annihilation of different defects are the main sources of energy consumption of γ-TiAl coating. In addition, γ-TiAl coating with high vacancy concentrations produces more plastic deformation, neck shrinkage and more holes, which further increases the energy dissipation.

Key words: damping performance; molecular dynamics; γ-TiAl coating; dislocation density; energy dissipation

Corresponding author: Jiang Wenquan, Ph. D., Associate Professor, School of Mechanical Engineering, Liaoning Petrochemical University, Fushun 113005, P. R. China, E-mail: jiangwenquan@lnpu.edu.cn