

# O 相对 Ti<sub>2</sub>AlNb 合金 B2 基体相拉伸性能影响的分子动力学模拟

李 萍, 丁瑞东, 张勇强, 石成峰, 郅 强, 薛克敏

(合肥工业大学 材料科学与工程学院, 安徽 合肥 230009)

**摘要:** 本研究基于分子动力学研究了 Ti<sub>2</sub>AlNb 合金中不同数密度的 O 相对基体 B2 相力学性能的影响。结果表明: B2 相中含有 O 相时材料的屈服强度和塑性均得到了提升。这是因为在拉伸变形过程中析出相阻碍了基体中滑移系的开动, 从而提高了基体 B2 相的塑性变形抗力。研究发现材料塑性的提升主要与内应力的释放有关, 其中 B2 相通过马氏体相变释放内应力占主导作用, 位错释放内应力为次要作用。当基体 B2 相中含有 O 相时, O 相对位错阻碍作用会导致应力集中, 从而诱导大量 bcc 结构发生马氏体相变, 在此过程中应力集中的程度降低, 延缓了孔洞形核长大; 另一方面由于 O 相为韧性相, 因此孔洞在 O 相和 B2 相边界生长受到抑制, 从而使 Ti<sub>2</sub>AlNb 合金的塑性和韧性大大提高。并且随着析出相数密度的增加, 材料的屈服强度和屈服应变下降, 但其强度和塑性相比不含 O 相时仍有提升。这是因为随着 O 相数密度的增加, 导致变形过程中基体原子发生马氏体相变的比例降低, 因此相变对应力集中的释放程度降低, 孔洞的产生与扩大速度提高, 从而使材料更容易发生断裂失效。

**关键词:** 分子动力学; Ti<sub>2</sub>AlNb; O 相数密度; 马氏体相变

中图法分类号: TG146.23; TG113.25<sup>+3</sup>

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2024)06-1701-08

Ti<sub>2</sub>AlNb 合金拥有较高的高温屈服强度、断裂韧性和蠕变抗力, 通常作为航空航天发动机的关键材料, 在国防和汽车工业等领域具有广阔的应用前景<sup>[1-3]</sup>。Ti<sub>2</sub>AlNb 合金的力学性能与其显微组织密切相关, 其相组成复杂, 包含基体 B2 相、正交 O 相和  $\alpha_2$  相, 其中 O 相和  $\alpha_2$  相还存在多种形态; 此外, 该合金在塑性变过程中的显微组织演变也非常复杂<sup>[4-6]</sup>。研究表明 B2+O 相合金具有最佳的拉伸、蠕变和断裂韧性的综合力学性能<sup>[7]</sup>。

目前经过大塑性变形、固溶和时效处理等方法, 可以使材料中的析出相尺寸达到纳米级别<sup>[8-10]</sup>。对于纳米析出相, 通过实验手段很难深入了解其塑性变形的多尺度力学行为。而分子动力学 (MD) 模拟可以直接对材料塑性变形过程中的微观结构演变进行实时观测, 能够系统性地反映原子之间的相互作用、原子轨迹。因此常常被用于纳米尺度下材料的力学性能和组织演化相关的研究。

大量研究表明析出相的形态、数量和分布对材料的力学性能有显著影响<sup>[11-13]</sup>。朱旭等<sup>[14]</sup>通过分子动力学研究了  $\gamma'$  相的含量对基体  $\gamma$  相的影响, 研究发现相

比于单晶  $\gamma$  相,  $\gamma'$  相的存在可以提高  $\gamma/\gamma'$  的抗拉强度。Cui 等<sup>[15]</sup>利用分子动力学研究了硅夹杂物对纯铜拉伸行为的影响, 研究表明较高的应变速率和较大的硅夹杂物尺寸会使位错和孔洞提前成核。Krasnikov 等<sup>[16]</sup>通过分子动力学方法研究了 Cu-Al 合金中的 CuAl<sub>2</sub> 相对其力学性能的影响, 发现 CuAl<sub>2</sub> 相的存在可以明显提高基体的剪切强度。Rajput 等<sup>[17]</sup>利用分子动力学模拟了球形 Mg 和 Ti 夹杂物对单晶铝拉伸性能的影响。发现 Al+Ti 系统中较高的位错密度抑制了孔洞的生长, 从而提高了材料的抗拉应变; 而在 Al+Mg 系统中, 位错密度较小导致应力集中使材料发生早期断裂。You 等<sup>[18]</sup>利用分子动力学方法研究了 Cu 析出相对 FeCuNi 三元合金在不同温度下拉伸性能的影响, 发现 Cu 析出相的存在导致基体局部晶格发生转变, 降低了基体材料的屈服强度, 增加了基体材料的脆性。Pogorelko 等<sup>[19]</sup>通过分子动力学模拟含有球形纳米 Cu 夹杂物的 Al 基体高速单轴拉伸试验, 研究发现铜纳米夹杂物的存在导致材料抗拉强度显著下降。

目前, 利用分子动力学研究 Ti<sub>2</sub>AlNb 合金拉伸性能的文献较少。本课题组在前期研究中使用分子动力

收稿日期: 2023-06-22

基金项目: 国家自然科学基金 (51975175, 51875158)

作者简介: 李 萍, 女, 1973 年生, 博士, 教授, 合肥工业大学材料科学与工程学院, 安徽 合肥 230009, 电话: 0551-62901368, E-mail: li\_ping@hfut.edu.cn

学模拟的方法研究了 Ta15/Ti2AlNb 扩散连接界面的形貌演化和失效机制<sup>[20]</sup>，研究发现长时间保温会导致晶粒粗化，降低接头的抗拉强度和塑性；提高扩散焊的温度会增加扩散元素的含量并增强相分布的均匀性从而提高接头的强度和塑性。但保温时间过长会导致晶粒粗化。还利用分子动力学模拟的方法研究了循环载荷作用下不同取向的裂纹在 Ti2AlNb 基合金 B2 相基体中的扩展机制<sup>[21]</sup>，发现取向的变化可以调节 B2 相基体中裂纹尖端的塑性和韧性。目前，在纳米尺度下 Ti2AlNb 基合金中 O 相含量对合金的拉伸行为的影响机理尚不明确。

本研究采用分子动力学方法研究了 Ti2AlNb 基合金中 O 相数密度对基体力学性能的影响。从位错滑移和相变角度分析材料在拉伸载荷作用下的失效行为，探明位错增殖、相变和孔洞生长之间的关系。为揭示 Ti2AlNb 基合金中 O 相对基体拉伸性能的影响及材料的变形、损伤和断裂机制提供了理论支持。

## 1 模拟方法

### 1.1 计算模型

首先在 Atomsk 软件<sup>[22]</sup>的基础上建立分子动力学模型，将 bcc 结构的 Ti 和正交结构的 O 相分别设定为基体相和析出相。其次，建立单晶 Ti 的原子模型，模型的总尺寸为  $L_x \times L_y \times L_z = 11.45 \text{ nm} \times 22.89 \text{ nm} \times 11.45 \text{ nm}$ ，然后在模型中心切出特定半径  $R$  的孔洞，并将单晶 Ti2AlNb 球形析出相放入孔内。为了避免嵌入的 O 相与基体 B2 相原子重叠而导致能量过高，建模时 O 相与基体 B2 相之间留有半个原子高度的距离，并在驰豫过程中对模型 3 个方向进行施压来消除该间隙，模型构建如图 1 所示。为研究 O 相数密度对基体 B2 相在原子尺度下的力学性能和微观变形机制的影响，建立含有不同数密度的析出相分子动力学模型，模型如图 2 所示。为便于后续分析，对不同数密度模型编号为 I、II、III、IV，对应析出相的体积分数分别为 0%、0.31%、0.61%、0.92%。模型中析出相直径为 2.6 nm，总原子数量分别为 171500、171530、171560、171590。各模型原子总数相差不超过 0.02%，避免了原子数量差异对结果的影响。B<sub>2</sub> 相基体和 Ti2AlNb 析出相的晶体取向均为  $X=[100]$ 、 $Y=[010]$ 、 $Z=[001]$ 。模拟利用 LAMMPS<sup>[23]</sup>分子动力学软件进行计算，并通过可视化软件 OVITO<sup>[24]</sup>进行后处理。

### 1.2 势函数

分子动力学模拟中可靠的力场对于获得合理的结果非常重要。对于金属材料，原子之间的相互作用通常由 EAM（嵌入原子法）势描述<sup>[25-27]</sup>。EAM 势的基

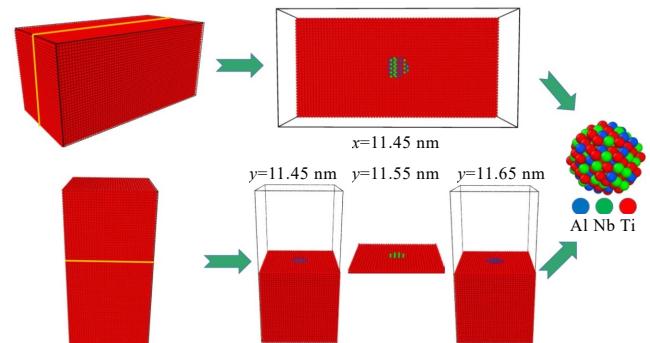


图 1 含析出相分子动力学模型构造图

Fig.1 Molecular dynamics model construction with precipitation phase

本思想是将总势能分为 2 部分：位于晶格中的原子核之间的对势能、以及原子核嵌入电子云时产生的嵌入能<sup>[28-29]</sup>。本研究使用的 Ti-Al-Nb 三元体系的 EAM 电势由 Farkas 等人<sup>[30]</sup>所拟合，它可以系统地描述 Ti-Al、Al-Nb、Ti-Nb 之间的相互作用<sup>[20-21]</sup>，其表达式如下：

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_i) \quad (1)$$

式中， $\phi_{ij}(r_{ij})$  为对势能， $F_i(\rho_i)$  为嵌入能， $\rho_i$  为除第  $i$  个原子以外其它所有原子的核外电子在第  $i$  个原子处产生的电子云密度之和：

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \quad (2)$$

式中， $\rho_j(r_{ij})$  是第  $j$  个原子的核外电子在第  $i$  个原子处的电荷密度。

### 1.3 计算参数设置

首先使用共轭梯度 (CG) 算法进行优化，以实现具有最小平衡能量的稳定配置。然后使用恒温恒压 (NPT) 系统在 300 K 下以 0.001 ps 的时间步长驰豫 50 ps，对初始仿真模型进行热平衡，驰豫过程中系统的所有边界条件设置为周期性边界条件。驰豫完成后，

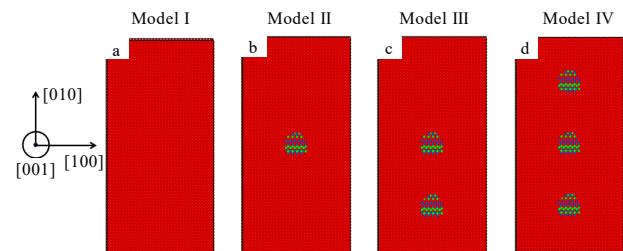


图 2 含有不同析出相数密度的模型示意图

Fig.2 Schematic diagrams of the model with different precipitation phase number densities

在MD模型Y轴方向的两边1 nm厚区域的刚性原子上施加应变率为10<sup>9</sup> s<sup>-1</sup>速度控制的拉伸载荷,如图3所示。由于计算限制分子动力学模拟中10<sup>9</sup> s<sup>-1</sup>的应变速率等效于常规拉伸试验的准静态拉伸<sup>[31-33]</sup>。拉伸过程在室温300 K、微正则系综(NVE)下进行,加载方向采用自由边界条件,其他2个方向采用周期性边界条件,每200步输出一次热力学信息和应力应变数据。

## 2 结果与讨论

### 2.1 析出相数密度对基体B2相力学性能的影响

模型I和II的拉伸应力应变曲线如图4所示。不含析出相时单晶B2相在拉伸过程中屈服强度约为9.8 GPa,屈服应变约为15.4%,随后进入到塑性变形阶段,应力急剧下降。B2相中含有析出相时,模型的屈服强度增加至10.77 GPa,对应的屈服应变也增加至17.8%。表明O相的存在可以显著提高B2相的屈服强度和屈服应变。通过拟合弹性阶段的弹性模量,不含析出相的单晶B2相在拉伸过程中弹性阶段的弹性模量约为77.8 GPa,当基体B2相中含有O相时,弹性阶段的弹性模量约为79.7 GPa,证明O相的存在可以略微提高B2相抵抗弹性变形的能力。

图5为含有不同析出相数密度的单晶B2相模型在300 K下沿Y轴拉伸的力学性能。在弹性变形阶段含有不同析出相数密度的模型对应的应力应变曲线斜率基本一致。随着应变的继续增加,模型IV在应变 $\varepsilon=0.15891$ 处发生屈服,屈服强度为10.29 GPa;模型III在应变 $\varepsilon=0.16868$ 处发生屈服,屈服强度为10.56 GPa;而模型II在应力 $\sigma=0.17782$ 处才发生屈服,屈服强度提高至10.77 GPa。表明随着析出相数密度的增加,模型的屈服应变和屈服强度都有不同程度的下降,但其强度和塑性相比不含O相时仍有提升。通过拟合弹性阶段的弹性模量得到模型II的弹性模量为79.7 GPa;

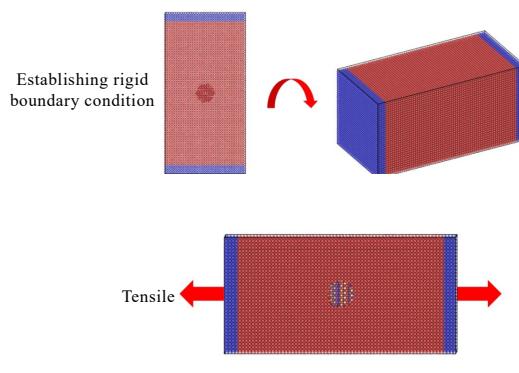


图3 MD模型拉伸示意图

Fig.3 Stretching schematic diagram of molecular dynamics model

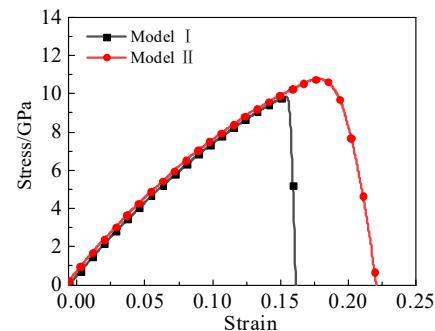


图4 含析出相和不含析出相模型拉伸应力-应变曲线

Fig.4 Tensile stress-strain curves of models with and without precipitated phase

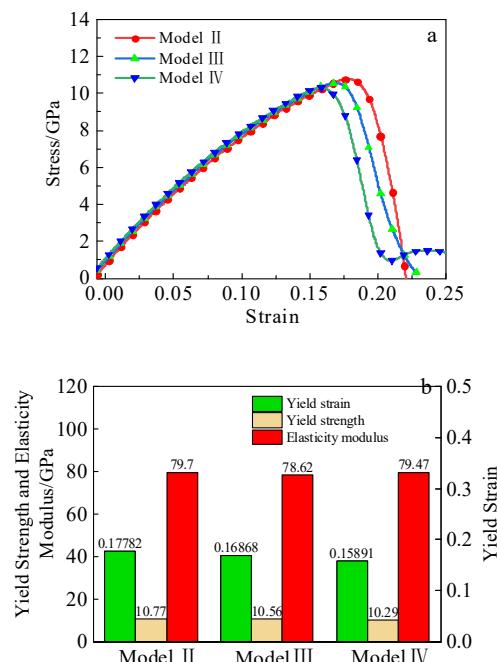


图5 不同数密度模型在拉伸载荷下的力学性能

Fig.5 Stress-strain curves (a) and micromechanical property characteristics (b) of different numerical density models under different tensile loads

模型III弹性模量降低到78.62 GPa;模型IV的弹性模量又增加到79.47 GPa。模拟结果表明,析出相数密度对屈服强度影响较为显著,对弹性阶段的弹性模量影响较小,变化在2%以内。

### 2.2 析出相数密度对基体B2相拉伸性能影响的微观机制

图6为存在不同析出相数密度时基体B2相拉伸过程中的微观结构演变图。图6a1~6a5为模型I在拉伸过

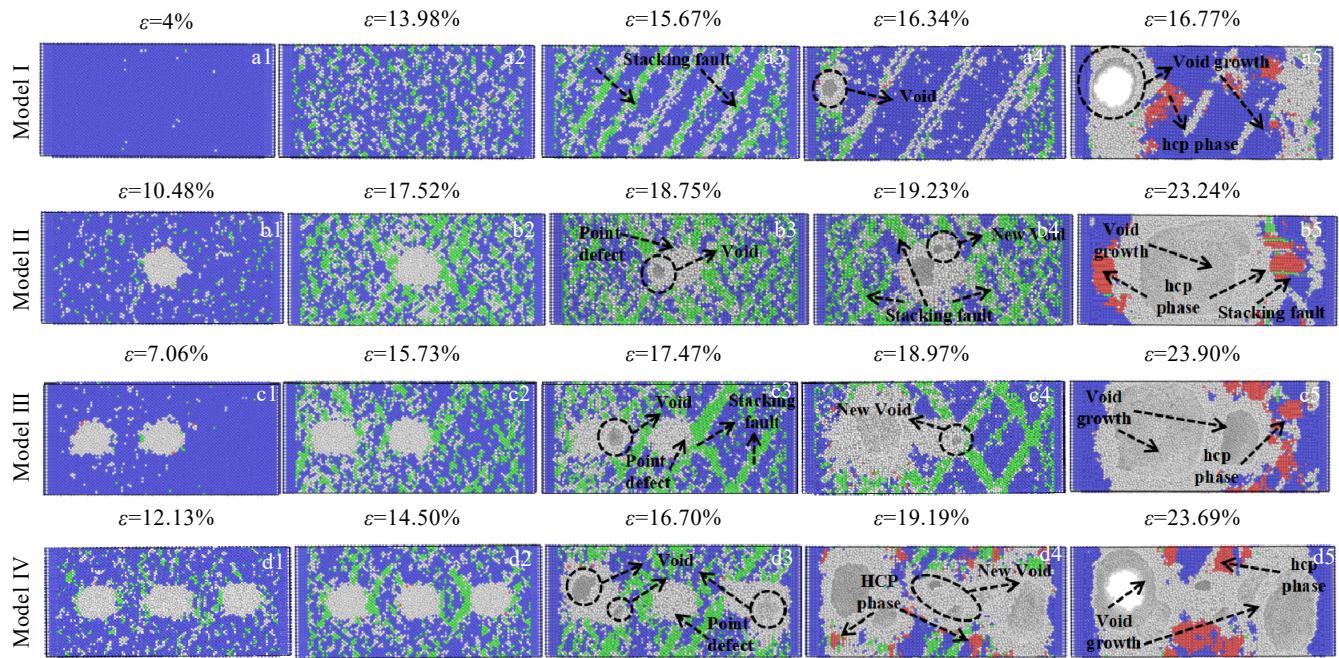


图 6 不同应变水平下模型 I、II、III、IV 的微观结构演变图

Fig.6 Microstructure evolutions of model I, model II, model III and model IV at different strain levels (blue atom: bcc; red atoms: hcp; green atom: fcc)

程中的微观结构演变。在应变为 4.0% 时，体系处于弹性变形阶段，每个原子围绕其平衡点阵位置运动，原子模型保持 bcc 构型，少部分原子在拉伸载荷的作用下由于能量较高形成了点缺陷。当应变达到 13.98% 时，模型内局部原子在应力诱导下发生马氏体相变，导致 bcc 结构堆垛顺序发生局部改变形成 fcc 层错，堆垛层错的形成降低了模拟单元的部分应力<sup>[17]</sup>。类似的现象也出现在 Ti-Al 合金  $\beta$  相向  $\alpha$  相转变过程及 Zr 的 bcc 相向 hcp 相转变过程中<sup>[34-35]</sup>，这被认为是在相变过程中原子层切变产生的应力导致原有的原子堆垛顺序发生改变。当应变达到 15.67% 时，晶体内滑移系开动，主要发生在 fcc 原子区域。应变为 16.34% 时，fcc 原子数量随应变增加而减少，模型内部空位缺陷增多，并且出现了孔洞缺陷。空位原子在大变形过程中靠得很近，并通过积累空位形成孔洞<sup>[36]</sup>。微孔洞之间的相互作用促使形成更大的孔洞，这些孔洞进一步增长并渗透到基体中，最终导致内部宏观断裂，发生材料失效。当应变达到 16.77% 时，模型出现宏观裂纹，孔洞和裂纹缺陷随着拉伸应变的增加而长大，直至断裂。此时材料断口附近部分 bcc 结构的 Ti 发生相变生成 hcp 结构的 Ti。可以看出单晶 B2 相拉伸变形过程中伴随着相变的发生，产生晶体缺陷形成孔洞，在拉伸载荷的作用下进一步扩展，最终使材料失效。

图 6b1~6b5 为模型 II 在拉伸载荷作用下的微观结

构演变。当应变为 10.48% 时，模型内部晶格在拉伸变形下发生畸变，诱导大量点缺陷和团簇缺陷形成。拉伸应变为 17.52% 时，体系内滑移系开动，大量滑移线构成滑移带，使晶体部分堆垛顺序发生改变形成 fcc 结构，O 相与滑移系的交互作用阻碍了滑移系开动，从而提高了单晶 B2 相的塑性变形抗力；与初始弹性阶段对比，可以看到模型出现了明显的颈缩现象，模型中心的 O 相在拉伸载荷作用下已发生明显变形，不再呈现初始的球形。当应变达到 18.75% 时，模型开始失效。析出相周围出现了孔洞，由于 O 相是韧性相，孔洞在 O 相和 B2 相边界生长受到抑制，从而使材料的塑性和韧性大大提高。B2 相中含有 O 相时，孔洞主要是在滑移带处由于不均匀滑移引起的位错集中产生的。有研究表明<sup>[37]</sup>孔洞是位错运动到第二相粒子边界后形成堆积并在拉应力作用下形成的。应变为 19.23% 时，在拉伸应力的作用下原先的孔洞继续生长，O 相周围出现新的孔洞成核、长大。当拉伸应变为 23.24% 时，多个孔洞长大后最终结合成一个大的孔洞导致材料完全失效。断口附近应力较大，大部分原子脱离平衡位置，由 bcc 晶格转变为 hcp 晶格。

图 6c1~6c5 为模型 III 在拉伸载荷作用下的微观结构演变。应变为 7.06% 时，材料发生弹性变形，模型内部形成大量点缺陷和团簇缺陷，O 相在拉应力作用下发生变形。当应变为 15.73% 时，晶体中滑移系的开

动使晶体堆垛顺序发生局部变化形成 fcc 结构。当应变为 17.47%时, 在拉伸应力的作用下晶体中出现孔洞。变形过程中部分位错发生了位错反应, 当位错运动至析出相附近受到析出相的阻碍, 在 O 相相界处塞积产生应力集中, 所以孔洞优先在析出相相界处形核长大。在拉伸应力作用下孔洞不断长大并且在此过程中释放内应力, 从而抑制了其他孔洞形核长大。应变为 18.97%时, 在滑移带相交处新的孔洞才开始形核长大。应变为 23.90%时, 在拉伸载荷的作用下, O 相附近的空隙不断扩大, 导致晶体断裂失效。断口处大量原子脱离平衡状态形成无序化结构, 少部分原子转化为密排六方结构。

图 6d1~6d5 为模型IV在拉伸载荷作用下的微观结构演变, 当应变率为 12.13%时, 在拉伸应变的作用下, 模型中大量原子脱离平衡位置变成缺陷原子形成点缺陷和团簇缺陷, 中心位置球形 O 相在应力作用下被明显拉长。应变为 14.50%时, 随着拉伸载荷的增加, 脱离平衡位置的原子也逐渐增加, 滑移系开动后产生堆垛层错形成 fcc 结构。当拉伸应变为 16.70%时, 在靠近拉伸载荷处的 O 相附近发生位错塞积, 其引起的应力集中导致多个孔洞开始形核长大。孔洞在拉伸应力的作用下不断长大释放了内应力, 可以抑制材料其他部位的孔洞形核长大。直至应变为 19.19%时, 模型中远离拉伸载荷处的 O 相附近才出现新的孔洞, 边界处的纳米孔洞继续长大。应变为 23.69%时, 体系中的孔洞相互融合形成更大的裂纹, 导致材料断裂失效, 断口附近部分 bcc 晶格转化成 hcp 晶格, 大部分原子由于具有较大的动能脱离平衡状态变成无序化结构。

综上所述, 模型I在拉伸过程中孔洞在加载边界处产生, 随后迅速扩大导致基体断裂失效。模型II在拉伸过程中孔洞在 O 相和 B2 相界面处形核长大, O 相为韧性相阻碍了孔洞继续长大, 所以孔洞生长比较缓慢。模型III在拉伸过程中首先在靠近拉伸载荷处的析

出相附近产生孔洞, 该孔洞成为主导孔洞, 主导孔洞的增长释放了析出相内部的应力, 抑制了第二孔洞的形核长大。模型IV在拉伸过程中孔洞首先在靠近拉伸载荷处的 2 个析出相附近形核长大, 在拉伸应变的作用下这 2 个孔洞成为主导孔洞, 延缓了模型中间处孔洞的生长。

### 2.3 拉伸过程中位错密度、相含量和孔洞体积分数的变化

图 7 为不同模型位错演化曲线和晶体内孔洞体积分数随应变变化的关系。从图 7a 中可以看出模型I体系中位错在应变为 0.156 左右开始形核。随着应变的增加, 模型IV、III 和 II 中的位错分别在在应变为 0.161、0.169 和 0.181 时开始形核增殖。从图 7b 中可以看出模型I在应变为 0.154 时孔洞开始形核长大。模型IV在应变为 0.157 时孔洞开始形核, 然后快速增长。模型 III 在应变为 0.165 时, 体系中孔洞开始形核长大。模型 II 在应变为 0.175 时, 孔洞开始形核长大。对比不同模型的位错演化曲线和孔洞体积分数变化曲线可以看出孔洞生长的快速增加导致位错密度增长速度的提高。类似的现象也在纳米孪晶镍中孔洞的生长中发现<sup>[40]</sup>: 空洞的增长与位错的发射和一系列位错相互作用有关。对比位错演化曲线和应力-应变曲线可以看出随着位错活性增长速度的加快, 不同体系中的应力也随之减小。这与 Pogorelko 等<sup>[19]</sup>得到的位错结构的快速形成降低了平均应力的结论相吻合。

图 8 为不同模型在拉伸过程中 fcc 和 hcp 相含量随应变变化的关系。图 8a 为 fcc 相含量随应变变化曲线, 从图中可以看出当应变达到 5%后, bcc 原子发生马氏体相变转变成 fcc 结构, 马氏体相的晶体结构容易由不稳定的 fcc 相转化为稳定的 hcp 相, 所以模型屈服后 fcc 含量快速下降, 同时 hcp 相含量逐渐升高。模型中含有 O 相时发生的 fcc 相变比不含 O 相时多。这是因为模型中含有 O 相时对位错阻碍作用较大导致应力

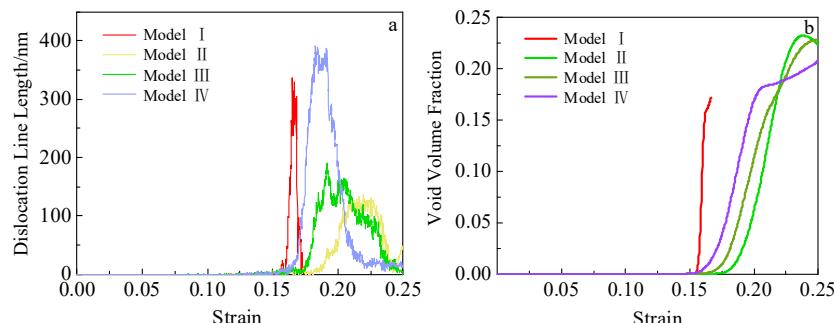


图 7 不同模型位错演化曲线和晶体内孔洞体积分数随应变变化曲线

Fig.7 Dislocation line length vs strain curves of different models (a) and variation of void volume fraction in the crystal with strain (b)

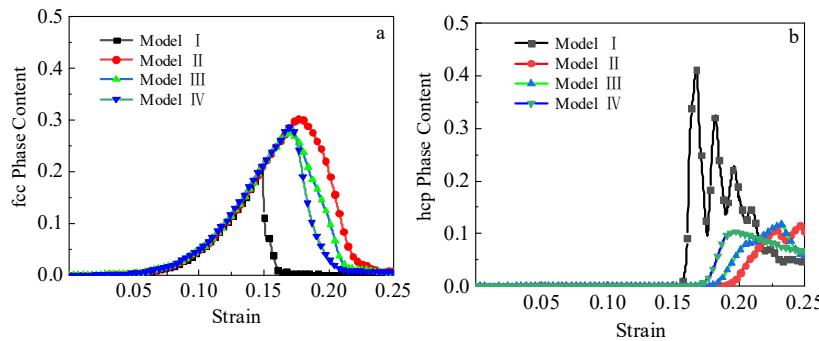


图 8 不同模型拉伸过程中相含量随应变变化

Fig.8 Variations of fcc phase (a) and hcp phase (b) contents of different models with strain during stretching

集中, 高应力集中诱导大量 bcc 结构发生马氏体相变, 应力集中通过马氏体相变得到释放。当基体中不含 O 相时, 位错具有较高的活性, 通过位错运动可以释放局部应力, 所以应力诱导马氏体相变较少。从模拟结果可以看出, B2 相通过马氏体相变释放内应力占主导作用, 位错释放内应力为次要作用。所以模型中含有析出相时, 应力集中大部分通过马氏体相变得到了释放, 抑制了孔洞形核长大所以延缓了断裂过程; 而模型中不含 O 相时通过位错运动释放应力有限, 又由于相变较少, 最终高应力集中导致了早期断裂。

图 8b 为 hcp 相含量随应变变化的关系, 对比孔洞体积分数(图 7b)可以得到 hcp 相主要在孔洞扩展时产生, hcp 相位跃迁与孔洞扩展几乎同时发生, 弹性变形阶段模型中没有裂纹产生不存在 hcp 相。从图 9 中可以看出模型 I 中的 hcp 相含量在达到峰值后发生明显波动, 其原因主要是由于材料中的应力集中诱导马氏体相变所导致的。图 10 为模型 I 在不同应变水平下的微观结构演变和应力分布图。如图 10a1, 当应变为 0.16 时, 材料中只有少部分原子由 bcc 结构转变为 hcp 结构, 材料中的内应力在外加载荷作用下逐渐增大, 如图 10b1 所示。当应变增加到 0.168 时, 高应力集中诱导大量 bcc 结构发生马氏体相变, 形成 hcp 结构, 此时材料中 hcp 结构的含量达到峰值。由于马氏体相变释放了内应力, 所以材料内部的应力集中得到了缓解, 如图 10b2 所示。随着内应力的降低, 材料中的 hcp 相含量也逐渐减少。当应变为 0.176 时, 在外加载荷作用下, 材料中再次出现应力集中现象并诱导 bcc 结构向 hcp 结构转变。因此, 当应变为 0.183 时, 材料中的 hcp 含量又上升到了一个峰值, 并且材料中的应力集中也再次得到了缓解, 如图 10b4 所示。当应变继续增加到 0.191 时, 材料内部又产生应力集中, 在应变达到 0.198 时应力集中诱导马氏体相变使得 hcp 含量上升, 并且释放了内应力。最后, 随着孔洞的增

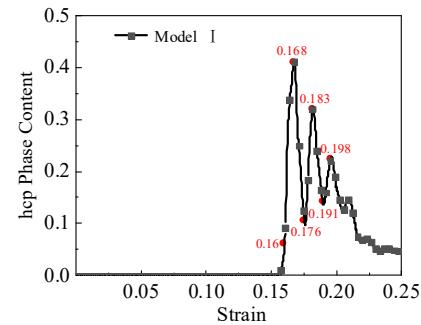


图 9 模型 I 拉伸过程中 hcp 相含量随应变变化的关系

Fig.9 Change of hcp phase content of model I with strain during tensile process

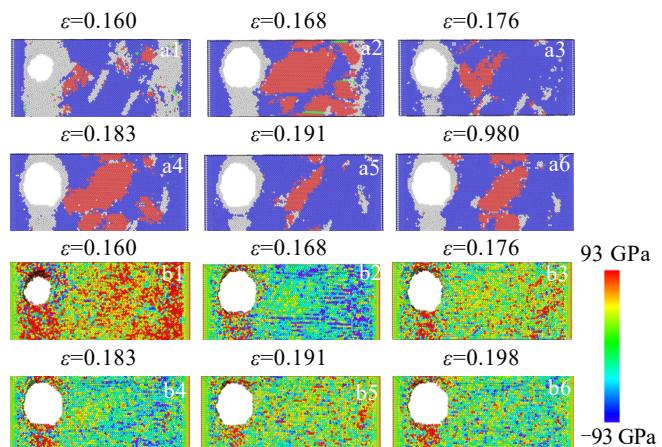


图 10 模型 I 在不同应变水平下的微观结构演变和应力分布图

Fig.10 Microstructure evolution and stress distribution of model I at different strain levels

大, 材料中的内应力主要通过孔洞得到了释放, 剩余的内应力不足于驱动 bcc 结构发生马氏体相变, 所以 hcp 含量逐渐下降最终趋于稳定状态。由于模型 II~IV 中, 孔洞分布于材料的中间部位且有多个孔洞同时长大, 材料中的内应力通过孔洞的长大得到了释放, 从

而抑制了马氏体相变的发生, 所以 hcp 相的含量没有出现模型I中明显波动的现象。

### 3 结 论

1) O 相可以增加基体 B2 相的屈服强度和塑性, 当 O 相体积分数为 0.31% 时, Ti<sub>2</sub>AlNb 合金的综合性能相对较好, 随着析出相数密度的增加, 材料的强度和塑性所有下降。B2 相的塑韧性较差, 在拉伸过程中达到屈服强度后急剧下降, 而 B2 相中含有 O 相时, 其在拉伸过程中达到屈服强度后应力缓慢下降。

2) B2 相在拉伸过程中伴随相变、点缺陷的产生。拉伸过程中应力集中主要通过马氏体相变得到释放, 从而延缓了孔洞的形核和长大。由于 O 相抑制了位错运动, 导致应力集中诱导大量 bcc 结构发生马氏体相变, 所以不含析出相时发生 fcc 相变的原子比含有析出相时少。模型屈服后 fcc 相逐渐减少, 由不稳定的 fcc 相转化为稳定的 hcp 相。

3) 晶体发生塑性变形过程中, 孔洞的快速长大导致位错密度增长速度突然提高, 随着位错结构的快速增殖不同模型中的应力也随之减小。

### 参考文献 References

- [1] Froes F H, Suryanarayana C, Eliezer D. *Journal of Materials Science*[J], 1992, 27(19): 5113
- [2] Boehlert C J, Majumdar B S. *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*[J], 1999(9): 30
- [3] Xue Kemin(薛克敏), Hu Yong(胡勇), Shi Yingbin(时迎宾) et al. *Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2019, 48(8): 2556
- [4] Banerjee D, Gogia A K, Nandi T K et al. *Acta Metallurgica*[J], 1988, 36(4): 871
- [5] Cowen C J, Boehlert C J. *Intermetallics*[J], 2015, 14(4): 412
- [6] Li Ping(李萍), Huang Xiaoyu(黄晓雨), Liu Le(刘乐) et al. *Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2023, 52(2): 685
- [7] Partridge A, Shelton E F J. *Air and Space Europe*[J], 2001, 3(3): 170
- [8] Gholami M, Vesely J, Altenberger I et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2016, 676: 156
- [9] Zhao Y H, Liu J Z, Topping T D et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2021, 851: 156931
- [10] Ahmadabadi M N, Shirazi H, Ghasemi-Nanesa H et al. *Materials & Design*[J], 2011, 32(6): 3526
- [11] Pogorelko V V, Mayer A E. *Materials Science and Engineering A*[J], 2015, 642: 351
- [12] Cho J, Sun C T. *Computational Materials Science*[J], 2007, 41(1): 54
- [13] Dewapriya M A N, Meguid S A, Rajapakse R K N D. *Engineering Fracture Mechanics*[J], 2018, 195: 92
- [14] Zhu Xu(朱旭), Jiang Wugui(江五贵), Li Yuancai(李源才) et al. *Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2021, 50(4): 1254
- [15] Cui Y, Chen Z. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2016, 25(2): 025007
- [16] Krasnikov V S, Mayer A E, Pogorelko V V. *International Journal of Plasticity*[J], 2020, 128: 102672
- [17] Rajput A, Paul S K. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2021, 869: 159213
- [18] You L J, Hu L J, Xie Y P et al. *Computational Materials Science*[J], 2016, 118: 236
- [19] Pogorelko V V, Mayer A E. *Materials Science and Engineering A*[J], 2015, 642: 351
- [20] Li P, Wang L S, Wang B et al. *Vacuum*[J], 2022, 195: 110637
- [21] Xue K M, Zhang Y Q, Meng M et al. *Engineering Fracture Mechanics*[J], 2023, 279: 109050
- [22] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1
- [23] Xu S, Guo Y F, Ngan A. *International Journal of Plasticity*[J], 2013, 43: 116
- [24] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(1): 2154
- [25] Ludwig M, Farkas D, Pedraza D et al. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 1998, 6(1): 19
- [26] Cao A J, Wei Y G. *Journal of Applied Physics*[J], 2007, 102(8): 422
- [27] Jelinek B, Groh S, Horstemeyer M et al. *Physical Review B*[J], 2012, 85(24): 245102
- [28] Amodeo J, Begau C, Bitzek E. *Materials Research Letters*[J], 2014, 2(3): 140
- [29] Singh D, Sharma P, Jindal S et al. *Current Applied Physics*[J], 2019, 19(1): 37
- [30] Farkas D, Jones C. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 1999, 4(1): 23
- [31] Rawat S, Mitra N. *Computational Materials Science*[J], 2020, 172(3): 109325
- [32] Paul S K, Kumar S, Tarafder S. *Engineering Fracture Mechanics*[J], 2017, 176: 257

- [33] Rajput A, Paul S K. *Metals and Materials International*[J], 2021, 27: 825
- [34] Zhang Bin(张斌), Zhang Xiaoyong(张晓泳), Li Chao(李超) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(6): 1010
- [35] Pinsook U, Ackland G J. *Phys Rev B*[J], 1998, 58(17): 11252
- [36] Dieter G E. *Journal of the Franklin Institute*[J], 1962, 273(4): 338
- [37] Zhang Y, Jiang S. *Philosophical Magazine*[J], 2017, 97(30): 1

## Molecular Dynamics Simulation of Effect of O Phase on Tensile Properties of B2 Matrix Phase in Ti<sub>2</sub>AlNb Alloy

Li Ping, Ding Ruidong, Zhang Yongqiang, Shi Chengfeng, Zhi Qiang, Xue Kemin

(School of Materials Science and Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

**Abstract:** The effect of different number densities of O phase on the mechanical properties of the matrix B2 phase in Ti<sub>2</sub>AlNb alloy was investigated based on molecular dynamics. The results show that the yield strength and plasticity of the B2 phase are improved when the O phase is contained. This is because the precipitated phase hinders the start of the slip system in the matrix during the tensile deformation process, thereby improving the plastic deformation resistance of the B2 phase of the matrix. It is found that the improvement of material plasticity is mainly related to the release of internal stress, in which the release of internal stress by the B2 phase through martensitic phase transition is dominant, and the release of internal stress by play a less prominent role. When the matrix B2 phase contains the O phase, the hindering effect of O phase on dislocation will lead to stress concentration, thereby inducing martensitic phase transition of a large number of bcc structures, and the degree of stress concentration in this process decreases, delaying the growth of pore nuclei. In addition, since the O phase is a ductile phase, the growth of holes at the boundary between the O phase and the B2 phase is inhibited, so that the plasticity and toughness of Ti<sub>2</sub>AlNb alloy are greatly improved. And with the increase in the number density of precipitated phases, the yield strength and yield strain of the material decrease, but its strength and plasticity are still improved compared with those without the O phase. This is because with the increase in O phase number density, the proportion of martensitic phase transition of the matrix atoms decreases during the deformation process, so the release degree of the stress concentration by the phase transition decreases, and the generation and expansion rate of the holes increase, with makes it more prone for the material to fracture failure.

**Key words:** molecular dynamics; Ti<sub>2</sub>AlNb; O phase number density; martensitic phase transition

---

Corresponding author: Xue Kemin, Ph. D., Professor, School of Materials Science and Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, P. R. China, E-mail: xuekm0721@sina.com