

镍基高温合金定向快速凝固的分子动力学模拟

曹琳, 江五贵, 王津, 陈韬, 毛隆辉, 胡晨曦

(南昌航空大学 材料科学与工程学院, 江西 南昌 330063)

摘要: 运用分子动力学方法研究了 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 在定向快速凝固过程中的微观组织演化和凝固后的拉伸力学性能。研究发现, 在固液转变时, 温度先急剧下降, 后由于潜热释放而轻微上升。在此过程中, 晶核优先在低温区形成, 展现了异质凝固的特性。凝固完成后, 合金以面心立方 (fcc) 为主, 同时包含少量密排六方 (hcp) 和体心立方 (bcc) 结构, 非晶态晶界亦占有显著比例。 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金元素浓度分析进一步表明 Cr 原子在晶界处偏析。此外, 合金凝固后形成了大量热致孪晶和堆垛层错, 位错密度高达 10^{16} m^{-2} 量级, 且位错线在低温区更为密集, 呈现出明显的非均匀性。还研究了 4 种不同比例的 Ni-Cr-Fe 合金的形核过程, 发现合金元素比例对形核率有显著影响。此外, 还对凝固后的 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金进行了 2 个方向的拉伸测试模拟, 结果表明, 由于定向凝固组织的各向异性特性导致垂直凝固方向的抗拉强度低于平行凝固方向的抗拉强度。位错密度的变化与拉伸应力应变的变化趋势并不完全吻合, 这一现象表明 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金定向快速凝固组织的强化机制更为复杂, 可能涉及多种强化机制的协同作用。

关键词: 镍基高温合金; 定向快速凝固; 微观组织; 各向异性; 分子动力学

中图分类号: TG132.3⁺3; TG146.1⁺5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2025)11-2825-08

1 引言

镍基高温合金, 以其卓越的高温强度、韧性、蠕变和抗氧化/腐蚀性能^[1-2], 已成为航空航天领域不可或缺的材料之一。其中, Inconel 718 合金的应用尤为广泛。近年来, 增材制造 (AM) 技术在 Inconel 718 的制造上取得了重大突破, 这种变革不仅体现在制造工艺上, 更在设计层面展现出轻量化、一体化、复杂化的新趋势^[3-6]。相较于传统的金属成形工艺, 选区激光熔化 (SLM) 作为一种主要的金属 AM 制造形式, 已成为制造高性能且复杂形状金属零件的重要加工手段。

在 SLM 金属零件的制造过程中, 定向快速凝固作为一个关键且复杂的物理现象, 一直备受关注^[7-9]。由于凝固时间极短, 通过实验方法直接观察合金在凝固阶段的显微组织演化变得异常困难。然而, 分子动力学 (MD) 方法为研究者们提供了洞察原子尺度的独特视角, 使得他们得以深入探究快速组织演化的机制。采用 MD 方法, 研究者们能够更细致地模拟和预测显微组织的演化过程, 从而进一步增进对镍基高温合金增材制造过程的理解。作为一种在原子尺度上具备独特优势的研究工具, MD 在金属铸造的形核凝固研究中发挥了不可或缺的作用^[10-13]。近年来, MD 方法在金属快速凝固模拟领域展现出了卓越的模拟与预测能力, 能够精确地刻画显微

组织演化的动态过程。

在合金的快速凝固过程中, 对形核率的精准调控与优化显得尤为关键。形核率不仅直接关系到合金的晶粒尺寸和微观结构, 更进一步影响着合金的整体性能与特性。合金成分的调整, 作为调控形核率的重要手段, 能够显著改变熔体的物理和化学性质。李东泽^[14]通过 MD 方法模拟了液态 $\text{Ti}_{100-x}\text{Al}_x$ ($x=10, 25, 50, 75, 90$) 合金的快速凝固过程, 深入剖析了凝固过程中熔体微观结构的演变特性。研究揭示, 合金成分对微观结构以及非晶形成能力具有显著影响。Wang 等^[15]设计了 4 种不同成分的 Ni-Cr-Fe 三元合金原子模型, 并基于嵌入原子势 (EAM) 确定了相应的密度。研究结果表明, $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金的模拟密度值与 Inconel 718 高度吻合, 这为合金成分优化提供了有力的理论依据。

值得注意的是, 凝固后的特定组织结构对合金的拉伸力学性能具有显著影响。曾强等^[16]通过 MD 方法研究了不同晶态和孪晶界间距对 SLM 铝拉伸性能的影响。Bahramyan^[17]和 Cao 等^[18]分别采用 MD 方法模拟了 TWIP 钢和 304L 不锈钢的快速凝固及后续的拉伸行为。他们发现, 快速凝固过程会诱发热致孪生现象, 而孪生则会对合金的拉伸性能产生显著影响。

尽管增材制造工艺的试验开发已得到广泛研究, 但

收稿日期: 2024-11-12

基金项目: 国家自然科学基金 (12062016)

通讯作者简介: 江五贵, 男, 1975 年生, 博士, 教授, 南昌航空大学材料科学与工程学院, 江西 南昌 330063, E-mail: jiangwugui@nchu.edu.cn

关于 Ni-Cr-Fe 系合金在快速凝固过程中显微组织演化及拉伸性能的研究仍显不足。为了更加深入探究 Ni-Cr-Fe 系合金在快速凝固过程中的形核与晶核生长机制,本研究借助分子动力学方法,通过调整合金元素的百分比,模拟了这一系列合金的快速凝固过程及后续的拉伸过程。研究中,设计了 4 种具有不同元素比例的合金,分别是 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 、 $\text{Ni}_{56}\text{Cr}_{23}\text{Fe}_{21}$ 、 $\text{Ni}_{51}\text{Cr}_{30}\text{Fe}_{19}$ 和 $\text{Ni}_{51}\text{Cr}_{25}\text{Fe}_{24}$ 。

2 建模及方法

在 SLM 工艺中,高功率激光扫描金属粉末层时,通过局部加热使金属粉末迅速熔化形成熔池。激光束的移动和随后的撤离导致熔池在构建方向上经历快速冷却和凝固过程,如图 1 所示。

为了深入研究在原子尺度上,合金元素比例对温度梯度区域中一维快速凝固机制的影响,构建了 4 种具有不同镍、铬、铁元素比例的 Ni-Cr-Fe 系合金原子模型。所有模型均置于 1 个大小为 $20\text{ nm} \times 20\text{ nm} \times 20\text{ nm}$ 的模拟盒中,每个模拟盒包含 729672 个原子。图 2 给出了 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 原子模型,图中绿色代表 Ni 原子,红色代表 Cr 原子,紫色则代表 Fe 原子。

为了使模拟盒内的原子达到熔融状态,模拟盒被加热至熔点以上,即 2500 K ,并在此温度下保持 150 ps 以达到热平衡状态。在此过程中,采用了等温等压系综 (NPT),时间步长设定为 3 fs 。温度和压力分别通过 Nose-Hoover 恒温器和 Parrinello-Rahman 气压计进行控制,以确保系统的热稳定性和压力稳定性。同时,在所有 3 个方向上应用了周期性边界条件,以模拟无限大的体系。

为了模拟快速凝固过程,模拟盒被分为 3 个区域,如图 2 所示。左侧 2 nm 厚的区域设定为低温区,温度保持在 $0.7T_m$ (T_m 为 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金的熔点, 1680 K);右侧 2 nm 厚的区域则作为高温区,温度恒定在 $0.86T_m$ 。这 2 个区域的温度通过 Langevin 热浴进行控制。温度设置借鉴了 Bahramyan 等^[17]的研究结论。他们指出,将高温区和低

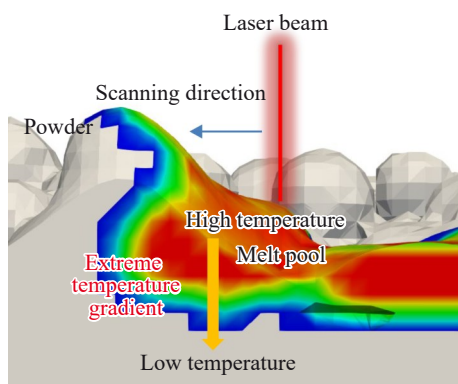


图 1 SLM 工艺示意图

Fig.1 Schematic diagram of SLM process

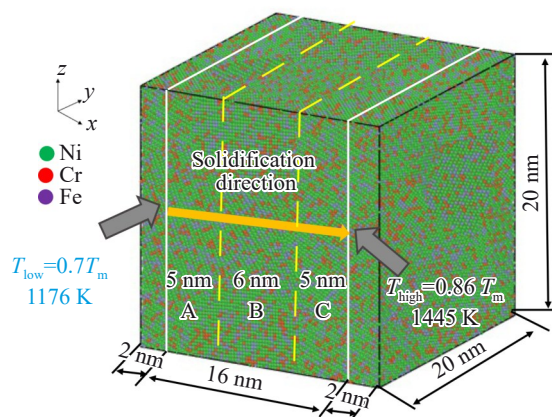


图 2 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 初始原子模型及定向快速凝固的模拟设置

Fig.2 Initial atomic model of $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ and simulation setup for the directional rapid solidification

温区的温度范围设置在比熔点 T_m 低 $0.15 \sim 0.30$ 倍的范围内,能够模拟出与最高成核率相对应的临界过冷度环境,这对于准确模拟合金的结晶过程至关重要。中间区域则未施加温度控制,以自然形成温度梯度。在凝固过程中,模拟盒采用微正则系综 (NVE),并将凝固方向的周期性边界条件更改为收缩包裹边界条件,以模拟实际的凝固过程。在设定的温度范围 ($0.7T_m \sim 0.86T_m$) 内,进行了 5 ns 的模拟,时间步长调整为 1 fs ,以捕捉快速凝固过程的细节。

为了研究凝固组织对力学性能的影响,在 700 K 环境下对 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 的最终凝固组织分别进行了沿 x 方向 (快速凝固方向) 和 z 方向 (垂直于凝固方向) 拉伸的分子动力学模拟,所有拉伸过程均在 NPT 系综下采用 deform-erate 的方式进行。根据我们以前的工作,拉伸应变率取为 $5 \times 10^8\text{ s}^{-1}$,时间步长为 1 fs 。

所有模拟采用 Bahramyan 等^[17]采用的嵌入原子势 (EAM) 描述 Ni-Cr-Fe 系合金中各原子的相互作用。EAM 势函数表示为:

$$E_{\text{total}} = \sum_i \left[\frac{1}{2} \sum_j \phi(r_{ij}) + F(\rho_i) \right] \quad (1)$$

式中, F 表示嵌入能函数,是体系内原子的电子密度 ρ 的函数; $\phi(r_{ij})$ 是指相距 r_{ij} 的两原子核 i, j 之间的中心对势; ρ_i 为除了第 i 个原子以外所有原子在 i 处产生的电子云密度的线性叠加。本研究采用 ATOMSK 软件^[19]构建初始原子模型,利用大规模原子/分子大规模并行模拟器 (LAMMPS)^[20]进行模拟计算,并通过 OVITO 软件^[21]对模拟数据进行后处理和可视化。

3 结果与讨论

3.1 定向快速凝固过程晶粒结构的演化

为了更细致地研究凝固区域的温度变化情况,进一

步将该区域划分为 A、B 和 C 3 个子区域,如图 2 所示。图 3a、3b 分别展示了这 3 个子区域的平均温度以及冷却速率随时间的变化情况。从图中可以清晰地看出,在定向凝固的初始阶段,A、B 和 C 3 个区域的温度都经历了一个急剧下降的过程。然而,随着凝固过程的深入,由于固液转变时释放的潜热,即凝固放热效应,导致从低温区向高温区(即 C 区、B 区和 A 区)依次在大约 0.635 ns 附近出现了一个轻微的温度上升现象,即再辉现象。在快速凝固过程中,由于冷却速度极快,液态金属的过冷度通常很大,意味着储存的凝固潜热也更多。因此,当凝固发生时,这些潜热的释放会导致更显著的再辉温度回升。然而,在分子动力学模拟的快速凝固研究中,高凝固速度可能导致固液界面的热交换受限,使得凝固潜热的释放与液滴表面的散热达到相对平衡,从而减弱了再辉现象的温度上升幅度。本研究模拟的快速凝固过程中,再辉温度上升约 56 K(如图 3a),这与 Cao^[18]采用分子动力学模拟 304L 不锈钢时所观察到的再辉温升幅度相近。这些潜热的快速释放导致已凝固的金属或合金温度迅速回升每个区域的温度在大约 0.9 ns 后均达到了稳定阶段。由图 3 表明,在整个快速定向凝固过程中,温度梯度大致维持在 16 K/nm 左右,而冷却速率则稳定在约 10^9 K/s。这 2 个关键参数的稳定维持,保证了模拟环境为定向凝固提供了合理的温度条件。

图 4 绘制了 4 种不同合金比例的 Ni-Cr-Fe 系合金在快速凝固过程中晶体的生长情况。使用共邻分析方法(CNA)对不同晶体结构的原子进行着色,其中 fcc 原子为绿色,hcp 原子为红色,bcc 原子为蓝色,而液态和无定形固态的原子则为白色。初始晶核从模型区域的左侧形成,这表明基于 SLM 工艺的特性,发生了异质凝固。这些成核位点作为固体种子,使剩余的液体逐渐凝固。凝固前沿向液体移动,并沿着温度梯度逐渐转变为固体的 fcc(面心立方)晶体结构。在 $\text{Ni}_{56}\text{Cr}_{23}\text{Fe}_{21}$ 和 $\text{Ni}_{51}\text{Cr}_{25}\text{Fe}_{24}$ 的快速凝固的过程中,观察到图 4 中黄色方框标记所示的五次对称结构,该结构类似于被以色列科学家

Shechtman 教授命名为“准晶”的原子堆积五重对称性结构^[22]。

以 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 为例,在 600 ps 时,可以观察到低温区域中晶核的出现,这标志着异质凝固过程的开始。这些新生的晶核持续发育,并逐渐成长为小晶粒。随后这些晶粒的表面上又催生了新的晶核,它们同样遵循着晶粒生长的规律。随着凝固前沿从左侧的低温区向右侧的高温区稳步推进,凝固体逐渐展现出典型的 fcc 结构特征,但其间也夹杂着以 hcp 方式的堆垛层错,如图 4 所示。这种复杂的微观结构为定向凝固获得的材料增添了独特的性质。

图 5 为 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 在快速凝固过程中,各种晶体结构的百分比和位错密度随时间的变化情况。大约从 600 ps 开始,面心立方(fcc)和密排六方(hcp)的比率开始显著增加,并在大约 1200 ps 时达到稳定状态。与此同时,体心立方(bcc)结构的占比始终保持在较低水平。在 1200 ps 时,fcc、hcp 和 bcc 的占比分别为 60.9%,8.26% 和 0.2%。此外,非晶态的晶界也占据了显著的比例。这些晶界不仅影响着材料的微观结构,而且对其整体性能有着不可忽视的影响。

图 6 则进一步揭示了定向快速凝固过程中,Ni、Cr 和 Fe 元素在不同晶体结构中的浓度随时间的变化规律。在晶粒形核完成后,这些元素的浓度很快趋于稳定。值得注意的是,所有的 Ni、Cr 和 Fe 原子都倾向于富集在 fcc 和非晶态结构中,而很少分布在 bcc 结构中。特别是 Cr 原子,它们更倾向于集中在晶界处,即出现了明显的晶界偏析现象。这种元素分布的不均匀性对合金的耐腐蚀性和抗氧化性具有显著影响,是增材制造过程中需要重点关注的因素。

图 7 为 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金在不同凝固阶段的径向分布函数 $g(r)$ 。在凝固的初始阶段以及 0.6 ns 时,各峰的相对较低高度表明原子周围近邻原子的数量较少,原子排列的有序度与结晶程度均处于较低水平。然而,随着凝固过程的深入,至 1 ns 时,合金已接近完全凝固状态,其

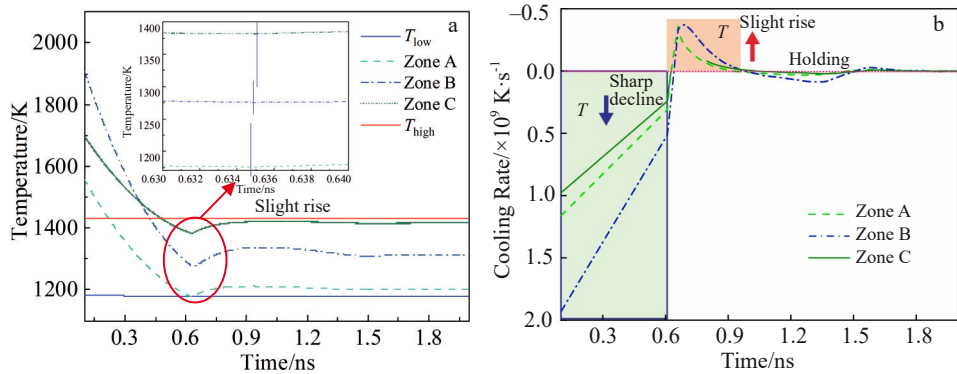


图 3 定向快速凝固过程不同区域的温度和冷却速率变化曲线

Fig.3 Variations of temperature (a) and cooling rate (b) with time in different regions during the directional rapid solidification

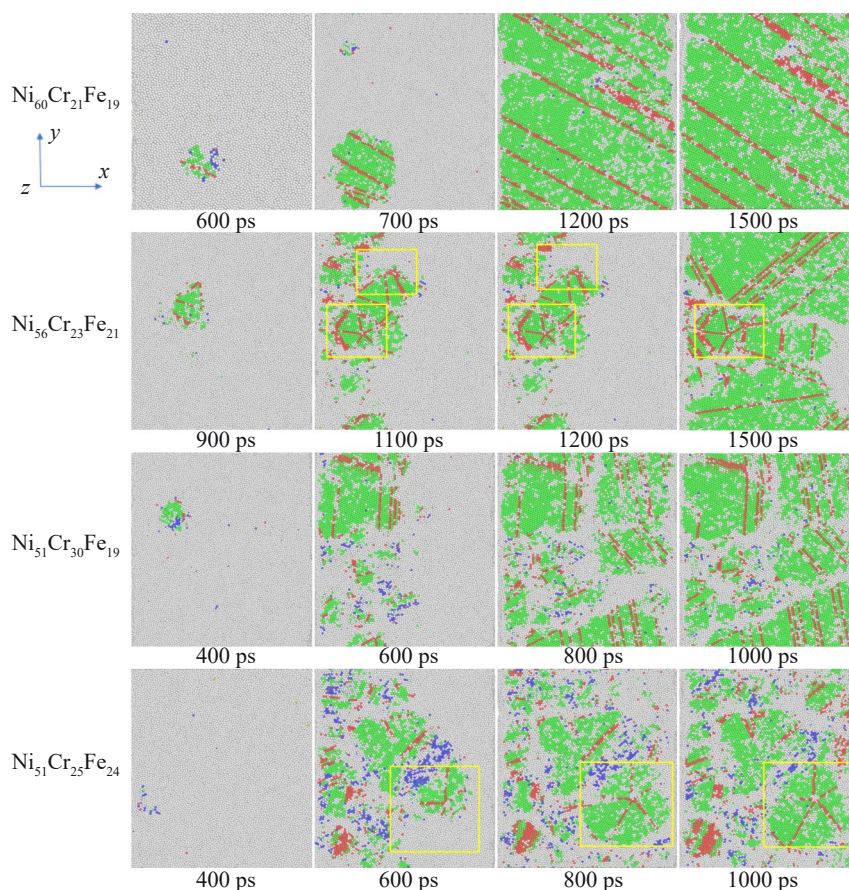


图4 4种元素比例的合金在快速凝固过程的晶粒生长过程

Fig.4 Grain growth process of the four alloys with different element proportions during directional rapid solidification (green: fcc, red: hcp, blue: bcc, white: amorphous state)

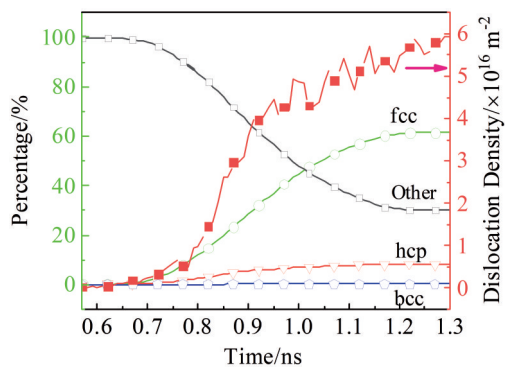


图5 定向快速凝固过程中晶体结构百分比和位错密度随时间的变化
Fig.5 Variations of crystal structure percentage and dislocation density with time during directional rapid solidification

结构的有序性显著提升,这一转变直观地体现在峰值变得更加尖锐上。这种变化归因于金属原子在凝固过程中不断聚集并形成规则分布,同时构建出多晶结构。到了 5 ns 时,曲线形态与 1 ns 时基本保持一致,进一步证实了合金结构的稳定性和高度的有序性。由于合金在凝固过程中形成了大量以 fcc 为代表的各种晶体结构,这些曲线清晰地捕捉到了从非晶态向晶态过渡的物理转变过程。

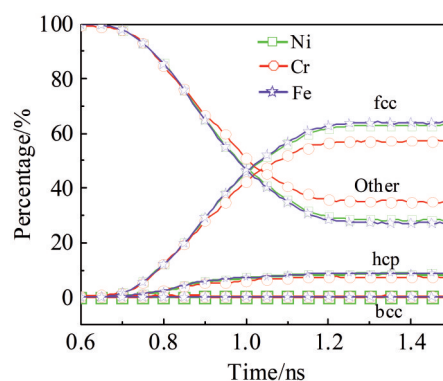


图6 定向凝固过程中元素在不同晶体结构中的浓度
Fig.6 Variations of element percentage in different crystal structures with time during the directional solidification

3.2 定向快速凝固过程位错的演化

使用 LAMMPS 分子动力学模拟软件进行应力分析时,首先通过 compute stress/atom 命令计算系统中每个原子在不同方向上的应力分量。紧接着,采用 compute voronoi/atom 命令来计算每个原子的 Voronoi 体积。将每个原子的应力分量除以其对应的 Voronoi 体积,并再除以 10 000 以进行单位转换,最终将应力值转换为 GPa 单位。

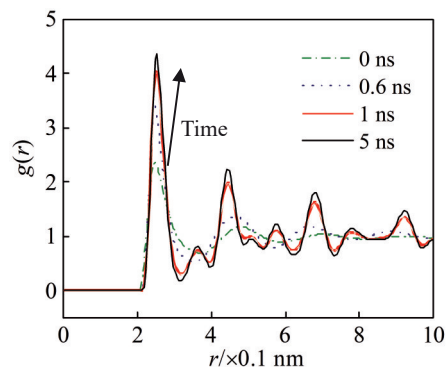


图7 不同凝固状态下Ni₆₀Cr₂₁Fe₁₉合金径向分布函数 $g(r)$

Fig.7 Radial distribution function $g(r)$ of Ni₆₀Cr₂₁Fe₁₉ alloy during different solidification states

随后,利用OVITO软件对处理后的数据进行进一步的分析。图8展示了凝固后原子尺度的沿凝固方向的法向残余应力 σ_{xx} 云图。从图中可以清晰地观察到,在定向快速凝固条件下,系统中的某些局部区域产生了极大的残余应力。这些高应力区域的存在,揭示了材料内部应力的复杂分布。

图8还展示了位错密度的变化情况。在定向快速凝固后,Ni₆₀Cr₂₁Fe₁₉的位错密度达到了 10^{16} m^{-2} 量级。这一数值与He等^[23]通过实验方法测得的Inconel 718在选区激光熔化后的位错密度相近。这一相似性表明在快速凝固过程中,镍基高温合金普遍会产生高位错密度。

为了深入了解定向快速凝固过程中位错、层错以及层错界等缺陷的形成机制及其相互作用的机制,图9和图10分别绘制了Ni₆₀Cr₂₁Fe₁₉在0.9和2 ns时刻的共近邻分析(CNA)图和位错分析(DXA)图。从图中可以看出,组织凝固的方向是自左往右。随着凝固过程的推进(图9a~图9b),能够清晰地观察到大量的热致孪晶和堆垛层错。

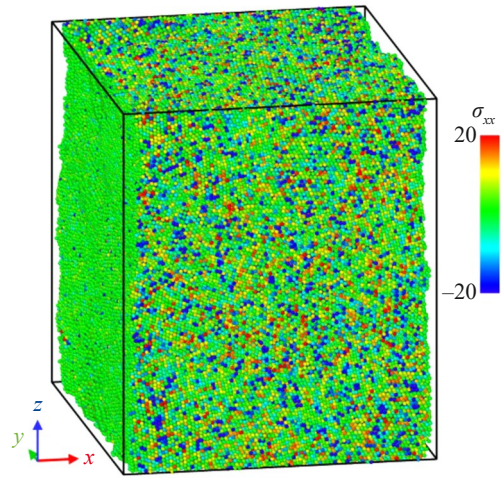


图8 应力云图

Fig.8 Contour plot of stress

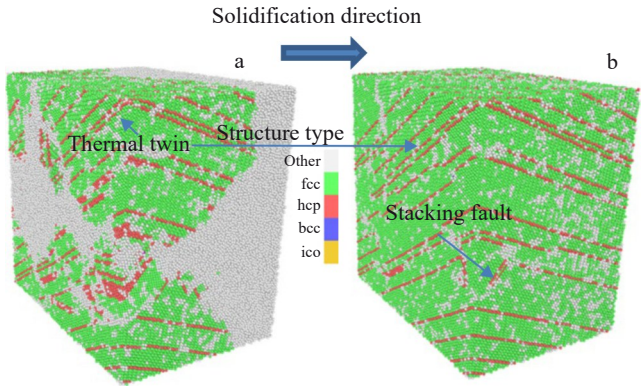


图9 凝固过程不同时刻的CNA图

Fig.9 CNA contour plots at different moments during solidification process: (a) 0.9 ns and (b) 2 ns

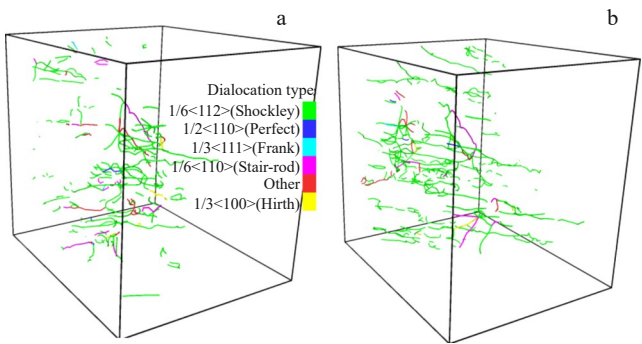


图10 凝固过程不同时刻的DXA位错图

Fig.10 DXA contour plots at different moments during solidification process: (a) 0.9 ns and (b) 2 ns

此外,由图10a、10b进一步显示,在凝固后的左侧和晶界周围,检测到了高密度的位错线,这些位错线具有不同的Burgers矢量和非均匀性(低温区明显高于高温区),特别是Shockley不全位错线。这种高位错线密度正是快速和非平衡凝固的典型特征,也是增材制造工艺中不可或缺的一部分。这些位错线对于材料的力学性能和变形行为具有至关重要的影响,特别是在那些要求高塑性和韧性的应用场景中。因此,在增材制造过程中,通过精细控制工艺参数来优化位错线的形成和分布,对于提升镍基高温合金等先进材料的性能具有重要意义。

3.3 合金元素对形核率的影响

根据经典成核理论,形核率 I_t 可表示为^[24],

$$I_t = N_0 \nu \exp \left[- \frac{k_1 \sigma^3 f(\theta)}{k_B T (\Delta G_v)^2} \right] \tag{2}$$

$$\Delta G_v = \frac{\Delta H \Delta T}{T_m} \tag{3}$$

式中, N_0 是依赖于温度的指前因子; ν 是原子越过液晶界面的粘度相关频率; k_1 是几何因子; σ 为固-液界面能; $f(\theta)$ 为接触角函数; θ 为接触角; k_B 为玻尔兹曼常数; ΔG_v 为单位体积自由能变化; ΔH 是熔化热; ΔT 是过冷度; T_m 为平

衡熔点温度。这 2 个公式描述了形核率 I_r 与过冷度 ΔT 之间的关系。过冷度 ΔT 是理论结晶温度与实际结晶温度之间的差值,它反映了系统偏离平衡态的程度。

根据经典成核理论可知,更高的过冷度会导致更高的形核率,因为系统需要释放更多的能量来回到平衡态。在凝固过程中,高形核率有助于获得细晶组织,进而实现细晶强化效果,这是提升材料综合力学性能的有效手段^[25]。细晶组织由于晶界增多,能够有效地阻碍位错的运动,从而提高材料的强度和韧性。

然而,该模型对过冷度水平的误差非常敏感,微小的过冷度误差可能导致成核速率与预期值相差悬殊,有时甚至达到几个数量级。本研究采用更简洁的模型来确定形核速率^[26]:

$$I_r = \frac{n}{\tau V} \quad (4)$$

式中, n 是模拟盒中的晶核数量, V 是模拟盒体积, τ 为诱导时间。

在采用晶粒分割算法确定晶粒数时,为了标准化晶粒尺寸的度量并消除由于原子数量差异导致的误差,设定最小晶粒尺寸包含 1000 个原子^[27]。图 11a 绘制了 4 种 Ni-Cr-Fe 系合金在定向凝固过程中形核数的变化。从图中可以清晰地看到,由于凝固驱动力的高强度,所有合金在凝固开始阶段都经历了形核数的极速上升。在形核数达到最大值以后,不同合金形核数随保温时间的增加表现出不一样的规律。如图 11b、11c 所示, $\text{Ni}_{51}\text{Cr}_{25}\text{Fe}_{24}$ 合金在形核数达到最大值后,晶粒数基本保持不变,这可能是因为该合金在凝固阶段已经完成了晶粒的生长和合并过程,后续的保温时间并没有对晶粒数产生显著影响。相比之下, $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金在形核数达到最大值后,晶粒数出现了减少的现象,如图 11d、11e 所示。这一现象是由于晶粒间的竞争生长导致的。在保温过程中,较大的晶粒通过吞并较小的晶粒来进一步长大,即发生了“晶粒合并”现象。

表 1 列出了根据式(4)计算的形核率,预测的形核率与 Branco 等^[28]采用分子动力学计算的纯铝在 SLM 中的形核率相近,说明 Ni-Cr-Fe 系合金在凝固过程中的形核率也处于较高的水平。同时,从表 1 中可以明显看出,合金元素的占比对形核率有着显著的影响。这可能是因为不同元素之间的相互作用影响了合金的凝固行为和晶核的形成过程。因此通过优化合金成分和凝固条件,可以进一步调控形核率和晶粒尺寸,从而获得具有优异性能的材料。

3.4 拉伸性能的各向异性

图 12 为 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金快速定向凝固组织沿凝固方向(即 x 方向)和垂直于凝固方向(即 z 方向)拉伸时的应力应变和位错密度变化曲线。图 12 显示该合金在沿凝固方向(即 x 方向)和垂直于凝固方向(即 z 方向)上的拉伸性能和位错密度演化存在显著差异,垂直凝固方向

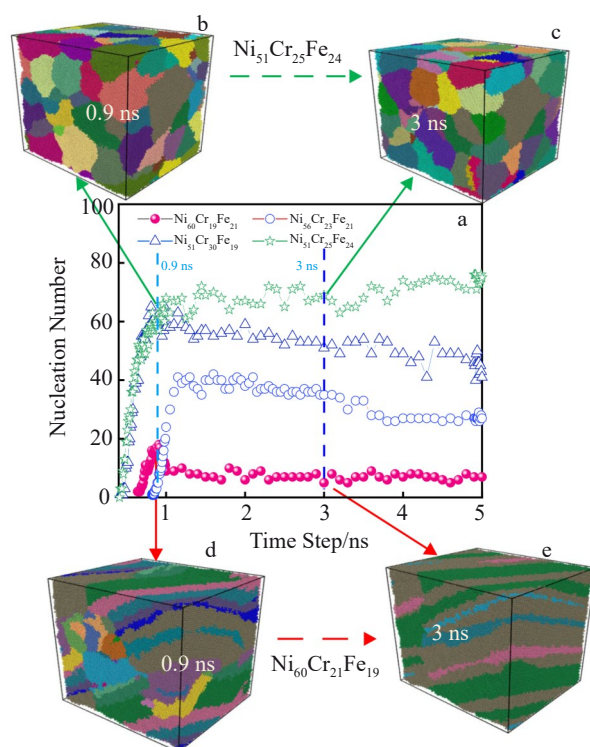


图 11 快速凝固过程中形核数的演化

Fig. 11 Evolution of nucleation number during rapid solidification: (a) nucleation number vs. time step; (b–c) $\text{Ni}_{51}\text{Cr}_{25}\text{Fe}_{24}$ alloy; (d–e) $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ alloy

表 1 Ni-Cr-Fe 系合金的平均形核率
Table 1 Average nucleation rate of Ni-Cr-Fe alloys

Alloy	Average nucleation rate/ $\times 10^{34} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$
$\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$	0.482
$\text{Ni}_{56}\text{Cr}_{23}\text{Fe}_{21}$	2.890
$\text{Ni}_{51}\text{Cr}_{30}\text{Fe}_{19}$	1.630
$\text{Ni}_{51}\text{Cr}_{25}\text{Fe}_{24}$	3.400

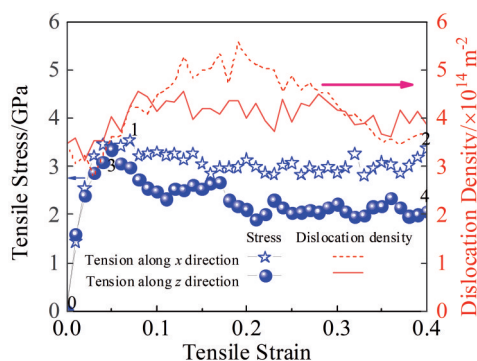


图 12 凝固组织对不同方向单轴拉伸应力-应变曲线和位错密度的影响
Fig.12 Influences of solidified microstructures on the tensile stress-strain curves and dislocation densities under uniaxial tension along different directions

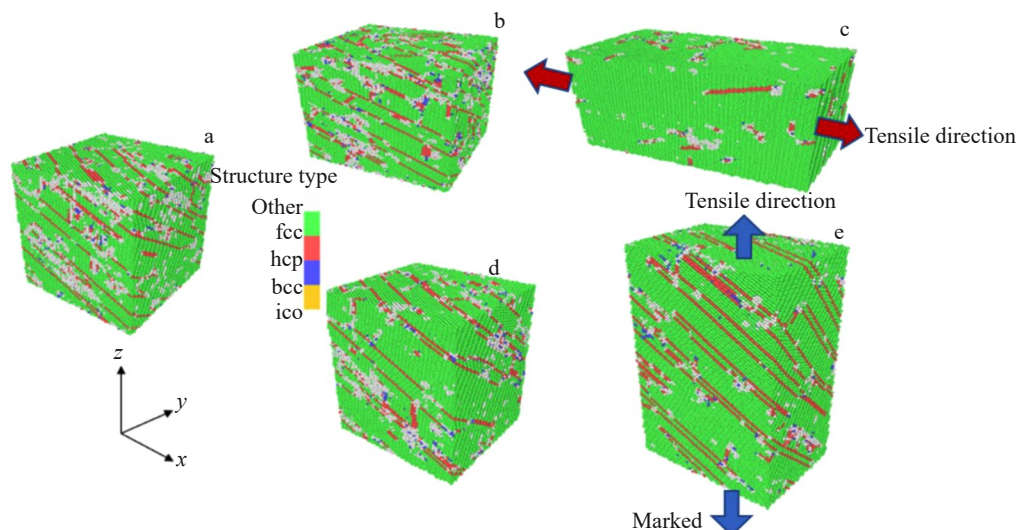


图 13 图 12 中不同点在不同方向拉伸时的微观组织演化

Fig. 13 Microstructure evolution of different points marked in Fig. 12 under uniaxial tension along different directions: (a) point 0, (b) point 1, (c) point 2, (d) point 3, and (e) point 4

的抗拉强度低于平行凝固方向的抗拉强度。这一发现不仅体现了材料在不同拉伸方向上的力学响应特性,同时也凸显了定向凝固组织对合金整体性能的重要影响。

图 13 给出了图 12 中所示 5 个不同位置的微观组织结构。这些分析揭示了合金在拉伸过程中位错密度和孪晶的演变规律。具体来说,当合金在 z 方向上受到拉伸时,位错密度显著上升,并维持在一个较高的水平。同时,孪晶的数量也显著增加,这可能是由于应力诱导的晶体结构变化所致。然而,在 x 方向上拉伸时,位错密度的变化则呈现出不同的趋势。尽管初始阶段位错密度同样增加,但随后却出现了下降,这表明位错在拉伸过程中经历了显著的重塑和消失。此外,孪晶在 x 方向拉伸时也表现出类似的减少趋势。

值得注意的是,尽管图 12 和图 13 显示位错密度的变化与拉伸应力应变的变化趋势在表面上似乎并不完全吻合,但这并不意味着位错在合金的强化机制中不占据重要地位。相反,这一现象表明 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金定向快速凝固组织的强化机制更为复杂,可能涉及多种强化机制的协同作用。

4 结 论

1) 在固液转变过程中,温度先经历急剧下降,随后由于潜热的释放从低温区域到高温区域依次呈现轻微上升趋势。这种温度梯度变化导致晶核优先在低温区形成,体现了异质凝固的特性。

2) 合金在定向快速凝固后,其微观结构主要以 fcc 为主,同时包含少量的 hcp 和 bcc 结构。此外,非晶态晶界也占据了显著的比例。通过元素浓度分析进一步发现,在 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金中,Cr 原子在晶界处存在明显的偏析

现象。

3) 在凝固过程中,合金形成了大量的热致孪晶和堆垛层错。这些结构特征导致合金在凝固后具有高达 10^{16} m^{-2} 量级的位错密度。此外,位错线在低温区更为密集,呈现出明显的非均匀性。

4) 该合金在沿凝固方向和垂直于凝固方向上的拉伸性能和位错密度演化存在显著差异。位错密度的变化与拉伸应力应变的变化趋势并不完全吻合,这一现象表明 $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ 合金定向快速凝固组织的强化机制更为复杂,可能涉及多种强化机制的协同作用。

参考文献 References

- [1] Yao Liangliang(姚亮亮), Zhang Xiancheng(张显程), Liu Feng(刘峰) et al. *Materials and Mechanical Engineering*(机械工程材料)[J], 2016, 40(4): 25
- [2] Wang Lei(王磊), Liu Mengya(刘梦雅), Liu Yang(刘杨) et al. *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2023, 59(9): 1173
- [3] Jiang W G, Xu G G, Li Q et al. *Additive Manufacturing*[J], 2022, 59: 10320
- [4] Liu Wei(刘伟), Li Neng(李能), Zhou Biao(周标) et al. *Journal of Mechanical Engineering*(机械工程学报)[J], 2019, 55(20): 128
- [5] Xing Yue(邢悦), He Pengfei(何鹏飞), Li Jinglong(李竞龙) et al. *Acta Materialiae Compositae Sinica*(复合材料学报)[J], 2023, 40(7): 3703
- [6] Si Rui(司瑞), Chen Yong(陈勇). *Chinese Journal of Aeronautics*(航空学报)[J], 2024, 45(5): 78
- [7] Zhang Yawei(张亚玮), Zhang Shuquan(张述泉), Wang Huaming(王华明). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2008, 37(1): 169
- [8] Wei Guocui(韦国翠), Tian Ze'an(田泽安). *Acta Physica Sinica*

- (物理学报)[J], 2021, 70(24): 258
- [9] Xu Shansen(徐山森), Chang Jian(常健), Wu Yuhao(吴宇昊) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2019, 68(19): 224
- [10] Zhou Y, Jiang W G, Feng X Q *et al. Computational Materials Science*[J], 2019, 156: 396
- [11] Tian Nan(田楠), Tong Yonggang(仝永刚), Zhao Chaojie(赵超杰) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2023, 33(1): 100
- [12] Jian Zengyun(坚增运), Gao Ahong(高阿红), Chang Fang'e(常芳娥) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2013, 62(5): 292
- [13] Wu Boqiang(吴博强), Liu Hairong(刘海蓉), Liu Rangsu(刘让苏) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2017, 66(1): 251
- [14] Li Dongze(李东泽). *Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2022, 51(3): 73
- [15] Wang H P, Zheng C H, Zou P F *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2018, 34(3): 436
- [16] Zeng Qiang(曾强), Wang Lijuan(王丽娟), Chen Tao(陈韬) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2023, 52(1): 145
- [17] Bahramyan M, Mousavian R T, Carton J G *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2021, 812: 140999
- [18] Cao Z. *Directional Solidification of Alloys for Additive Manufacturing*[D]. Munich: Technical University of Munich, 2021
- [19] Hirel P. *Computer Physics Communications*[J], 2015, 197: 212
- [20] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1
- [21] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2009, 18(1): 015012
- [22] Shechtman D, Blech I, Gratias D *et al. Physical Review Letters*[J], 1984, 53(20): 1951
- [23] He M L, Cao H L, Liu Q *et al. Additive Manufacturing*[J], 2022, 55: 102839
- [24] Wang Y C, Shi J. *Journal of Materials Science*[J], 2019, 54: 9809
- [25] Liu S J, Tao H Z, Zhang Y F *et al. Journal of the American Ceramic Society*[J], 2017, 100(9): 3875
- [26] Tian Y, Ding J, Huang X *et al. Computational Materials Science*[J], 2020, 171: 109218
- [27] Mahata A, Zaeem M A, Baskes M I. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2018, 26(2): 025007
- [28] Branco D, Vasconcelos L, An L *et al. Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2021, 151: 104391

Molecular Dynamics Simulation of Directional Rapid Solidification in Nickel-Based Superalloys

Cao Lin, Jiang Wugui, Wang Jin, Chen Tao, Mao Longhui, Hu Chenxi

(School of Materials Science and Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

Abstract: The microstructural evolution of $\text{Ni}_x\text{Cr}_y\text{Fe}_z$ alloy during the directional rapid solidification process and the tensile mechanical properties of $\text{Ni}_x\text{Cr}_y\text{Fe}_z$ alloy after solidification were investigated using molecular dynamics simulations. The results reveal that during the solid-liquid phase transition, the temperature initially drops sharply and then rises slightly due to the release of latent heat. During this process, crystal nuclei preferentially form in low-temperature regions, exhibiting heterogeneous solidification characteristics. After solidification, the alloy is primarily composed of face-centered cubic (fcc) structures, with a small amount of hexagonal close-packed (hcp) and body-centered cubic (bcc) structures, and amorphous grain boundaries also occupy a significant proportion. The elemental concentration analysis of the $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ alloy further indicates that Cr atoms segregate at the grain boundaries. Additionally, a large number of thermally induced twins and stacking faults are formed in the alloy after solidification, with a dislocation density reaching the order of 10^{16} m^{-2} . The dislocation lines become more concentrated in low-temperature regions, demonstrating significant heterogeneity. The nucleation process of four kinds of Ni-Cr-Fe alloys with different proportions was also studied, revealing that the alloy composition ratio has a significant impact on the nucleation rate. Furthermore, tensile tests were simulated on the $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ alloy in two directions, showing that the tensile strength perpendicular to the solidification direction is lower than that parallel to the solidification direction due to the anisotropic nature of the directional solidification structure. The discrepancy between the changes in dislocation density and tensile stress-tensile strain indicates that the strengthening mechanism of directional rapid solidification structure of the $\text{Ni}_{60}\text{Cr}_{21}\text{Fe}_{19}$ alloy is more complex, potentially involving the synergistic effect of multiple strengthening mechanisms.

Key words: nickel-based superalloy; directional rapid solidification; microstructure; anisotropy; molecular dynamics

Corresponding author: Jiang Wugui, Ph. D., Professor, School of Materials Science and Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, P. R. China, E-mail: jiangwugui@nchu.edu.cn