

激光冲击强化单晶 Ni₃Al 合金分子动力学仿真

孙毓振, 郑海忠, 耿永祥, 李贵发, 肖怡新

(南昌航空大学 材料科学与工程学院, 江西 南昌 330063)

摘要: 镍基单晶高温合金因具有高体积分数的 L1₂ 结构 γ' (Ni₃Al)相而具有优异的综合力学性能。为研究激光冲击下 γ' 相的微观组织演变规律, 采用分子动力学方法构建了单晶 Ni₃Al 分子动力学模型, 分析了 [100]、[110]、[111] 3 种不同晶向上的微观组织演变行为。结果表明: [100]晶向冲击时, 其塑性变形机制为 fcc 相向 bcc 相转变, 并随着冲击压力的增大 bcc 相含量也随之增加; [110]和[111]晶向冲击时, 其塑性变形机制为位错滑移, 其中[110]晶向滑移系主要为 (1 $\bar{1}\bar{1}$)[011]和(11 $\bar{1}$)[0 $\bar{1}\bar{1}$], 而[111]晶向滑移系主要为 (1 $\bar{1}\bar{1}$)[10 $\bar{1}$]和 (11 $\bar{1}$)[101], 产生的位错主要为 1/6<112> (Shockley), 但随着冲击压力的增加, 塑性变形机制为 fcc 相向 bcc 相转变, 同时产生无序结构。

关键词: 单晶 Ni₃Al; 激光冲击; 分子动力学; 微观机制

中图分类号: TG132.3⁺3; TG146.1⁺5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)06-2118-08

镍基单晶高温合金因其优异的高温力学性能、疲劳性能和耐腐蚀性能而被广泛应用于航空发动机的涡轮叶片^[1-3], 镍基单晶高温合金可以在非常严苛的条件下工作是由于具有高体积分数 (70%) 的 L1₂ 结构 γ' (Ni₃Al)相^[4-5]。然而, 我国航空发动机在使用过程中, 涡轮叶片疲劳裂纹、断裂问题十分突出, 约占航空发动机故障的 40%^[6]。

近年来, 激光冲击强化 (laser shock peening, LSP) 作为新的表面强化技术迅速发展, 可以大幅度提高叶片的抗外力损伤作用和疲劳寿命, 成功应用于航空发动机的涡轮叶片的表面强化^[7]。因此, 研究激光冲击强化镍基单晶合金的作用机制对叶片的强化具有重要意义。Hu 等^[8]通过 LSP 镍基单晶高温合金试验, 发现 LSP 能在高温合金表面产生显著的加工硬化效应, 产生的高残余压应力能有效地延缓裂纹的萌生和扩展。王等^[9]研究了激光冲击镍基单晶高温合金的微观组织形貌, 通过电子背散射衍射发现 γ (Ni)相中的位错密度比 γ' 相中位错密度高, 位错形成缠绕结构。Geng 等^[10]通过 LSP 镍基单晶合金得出, LSP 通过 γ 相中的位错滑移和攀移以及 γ 相中位错剪切进入 γ' 相, 产生高密度位错, 从而显著提高了镍基单晶高温合金的显微硬度和残余应力。Lu 等^[11]对镍基单晶高温合金进行了 LSP 后的纳米压痕试验和扫描电镜观察, 结果发现激光冲击镍基单晶高温合金后有明显的表面硬化行为, 激光冲击在 γ' 相区域出现不同, γ' 相的大塑性变形使镍基单晶合金具有显著的硬化效应。

Ni₃Al 作为镍基单晶合金中的主要强化相, 研究 Ni₃Al 的冲击变形行为有利于更好的理解激光冲击强化镍基单晶高温合金的强化机制。然而, 目前对激光冲击强化单晶 Ni₃Al 的微观组织动态演变机制还不清楚。为此, 本研究借助大规模原子/分子并行模拟器 (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator, LAMMPS)^[12]构建了不同晶向上的单晶 Ni₃Al 分子动力学模型, 并对其激光冲击过程进行仿真, 深入探讨了单晶 Ni₃Al 微观组织的动态演变机制。

1 模型与仿真

选用 LAMMPS 软件, 运用非平衡分子动力学 (nonequilibrium molecular dynamics, NEMD) 模拟激光冲击强化过程^[13-15], 势函数选用 Ni-Al 嵌入式势函数 (Mishin-Ni-Al-2009.eam.alloy)^[16], 其已被广泛应用到研究 Ni-Al 体系^[17-18]。

Ni₃Al 属于 L1₂ 型面心立方 (face centered cubic, fcc) 有序结构, 晶格常数为 0.3532 nm^[16]。为模拟室温常压下激光冲击强化过程, 首先选取 NPT(原子数 N , 压力 P , 温度 T)系综在 300 K、1 Pa 下弛豫 10 ps 使体系达到平衡, 弛豫过程中 x 、 y 、 z 方向均采用周期性边界条件。其次, 冲击过程在 NVE(体积 V , 能量 E)系综下进行, 冲击方向采用自由边界条件, 时间步长为 1 fs。为了获得足够长时间的模拟, 需克服面自由边界对冲击波产生的干扰, 采用吸收边界条件方

收稿日期: 2022-06-10

基金项目: 国家自然科学基金 (52071172, 51361026); 江西省自然科学基金青年基金 (20212BAB214037)

作者简介: 孙毓振, 男, 1998 年生, 硕士生, 南昌航空大学材料科学与工程学院, 江西 南昌 330063, E-mail: 1249452053@qq.com

法^[19]。其冲击模拟如图 1 所示, 在冲击方向两侧选取 2 层原子作为活塞 1 和活塞 2, 冲击初始时给活塞 1 施加冲击速度 U_p , 冲击波会以 U_s 的速度在材料中传播, 当冲击波到达活塞 2 时, 使活塞 2 也获得同样的冲击速度 U_p 。为了研究不同晶向对激光冲击强化的影响, 分别建立了[001]、[110]、[111] 3 种不同晶向上的 Ni₃Al 分子动力学模型, 其模型参数如表 1 所示。

选用 OVITO 软件进行可视化处理, 采用近邻分析 (common neighbor analysis, CNA)^[20]分析晶体结构的转变, 位错分析 (dislocation extraction method, DXA)^[21]分析位错密度及种类。

2 结果与讨论

2.1 激光冲击 Ni₃Al 的 Hugoniot 曲线

冲击速度(U_p)是影响冲击波结构的一个重要物理参数^[22]。图 2 为不同晶向冲击压力与冲击速度的关系曲线, 即 Hugoniot 曲线。仿真结果发现随着冲击速度的增加, 冲击压力也增大。当 U_p 超过 0.5 km/s 时,

Hugoniot 曲线斜率发生改变, 表明 Ni₃Al 发生塑性变形。

图 3 给出了 $U_p=1$ km/s, 在冲击时间 3 ps 时不同晶向下的粒子速度分布曲线及原子动能分布快照。从图 3 中可以看出, 当发生塑性变形时, 弹性波和塑性波发生分离, 产生弹性区和塑性区, 弹性波作为先驱波, 传播速度比塑性波快。冲击[100]、[110]、[111] 晶向都可以看出双波结构。随着冲击速度的增加, 塑性波变快, 赶上弹性波, 弹塑性波分离不明显^[22]。

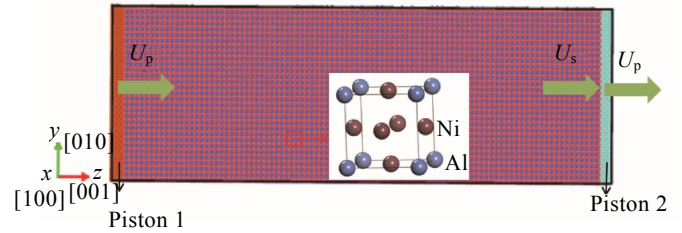


图 1 单晶 Ni₃Al 冲击[100]仿真模型

Fig.1 Simulation model of shock [100] crystal direction in single crystal Ni₃Al

表 1 不同晶向上的模型参数

Table 1 Model parameters of different crystal directions

Shock direction (x, y, z)	Length in x direction/nm	Length in y direction/nm	Length in z direction/nm	Atomicity
(100) [100], [010], [001]	10.596	10.596	35.32	360 000
(110) [$\bar{1}10$], [001], [110]	12.487	8.83	34.965	350 000
(111) [11 $\bar{2}$], [$\bar{1}10$], [111]	11.535	9.99	36.935	385 187

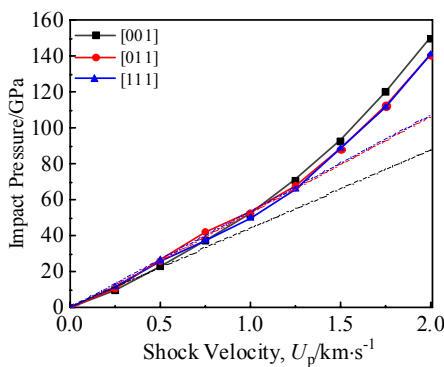


图 2 不同晶向冲击压力与冲击速度的关系曲线

Fig.2 Relationships between impact pressure and shock velocity in different crystal directions

弹性冲击波波速 (U_s) 和冲击速度 (U_p) 满足线性关系^[23]: $U_s=s_1U_p + U_0$, s_1 是常数, $U_0 \sim c_0$ 为声速。图 4 给出了不同晶向弹性冲击波波速和冲击速度的关系曲线, 冲击[100]晶向与实验值 ($U_s=4.5+2.31U_p$)^[24] 和模拟值 ($U_s=4.15+1.74U_p$)^[25] 对比, 发现 $U_p < 1$ km/s

时, 与实验数值吻合, 当 $U_p > 1$ km/s 时, 与模拟值相似, 这是由于实验值是由 $U_p < 0.5$ km/s 时所得数据耦合出的曲线。本研究模拟冲击单晶 Ni₃Al, 冲击[100] 晶向发现, 当 U_p 大于 0.5 km/s 时, U_s-U_p 曲线斜率发生了变化, 说明此时 Ni₃Al 体系发生了相转变^[26], 同样在[110]和[111]也发现类似现象。同时还发现冲击 [110]晶向的 U_s 比[100]和[111]晶向的值高, 这是因为 $\langle 110 \rangle$ 是 Ni₃Al(fcc)密排面, 面与面之间的碰撞更激烈导致较快的弹性冲击速度产生^[23]。

2.2 激光冲击 Ni₃Al 相转变分析

图 5a 为冲击[100]晶向下 Ni₃Al 晶体结构占比与冲击速度的关系曲线。可以发现当 U_p 大于 0.5 km/s 时, Ni₃Al 的晶体结构开始由 fcc 转变为体心立方晶体 (body centered cubic, bcc), 其演变过程如图 5b 所示, 两相邻的 fcc 中间组成了体心四方 (body centered tetragon, bct) 晶体结构, 在冲击压力作用下, 其高度由 a 压缩到 $\sqrt{2} a/2$ 时, 形成 bcc 结构^[27]。冲击[100] 晶向时 U_p 大于 0.5 km/s 时, 开始发生相转变, Ni₃Al 进入塑性变形状态, 这与前面结论相吻合。随着冲击

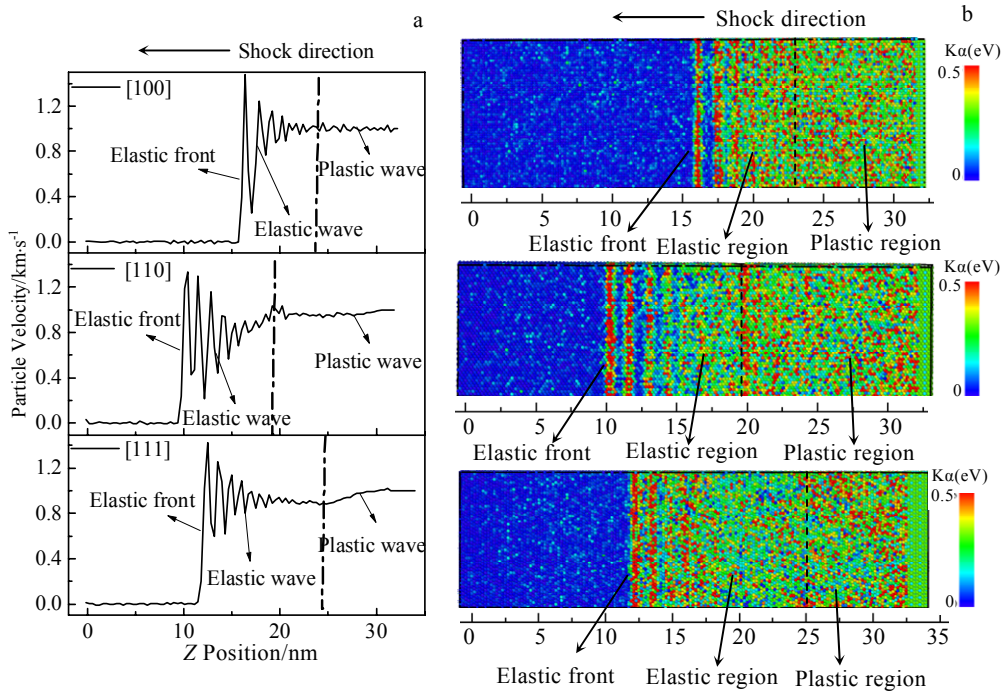


图 3 $U_p=1$ km/s 冲击 3 ps 时不同晶向的粒子速度曲线及原子动能分布云图

Fig.3 Particle velocity curves and atomic kinetic energy cloud diagrams in different directions under the velocity speed of 1 km/s and the shock time of 3 ps

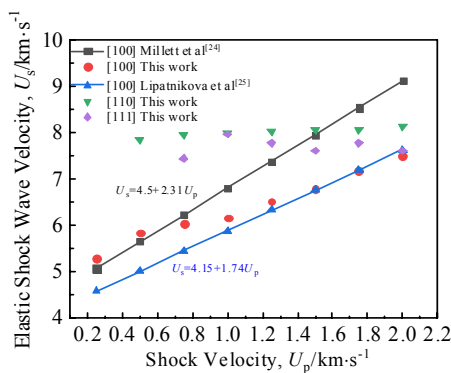


图 4 弹性冲击波波速与冲击速度在不同冲击晶向下的关系曲线

Fig.4 Relationships between elastic shock wave velocity (U_s) and shock velocity (U_p) under different shock directions

速度的增加, bcc相的含量随之增加。当 U_p 为1.5 km/s时, bcc相含量达到最大, Ni_3Al 中bcc相结构的含量达到90%以上。当 U_p 超过1.5 km/s, 会生成少量无序结构 (Other) 相。图6为 $U_p=1$ km/s冲击[100]晶向的CNA分析快照, 其中图6a~6c分别为2、4、6 ps下的CNA分析快照。可以看出随着冲击波的冲击压缩, fcc相转变为bcc相。

图 7 为冲击[110]晶向和[111]晶向在不同冲击速度下的晶体结构变化曲线。可以发现当 Ni_3Al 发生塑性

变形时, [110]和[111]晶向都有密排六方结构 (hexagonal close packed, hcp) 产生。由于 fcc 中存在堆垛层错时, 相当于在其中间形成一层 hcp 结构, hcp 的出现说明 Ni_3Al 中产生了层错^[28]。可以得出在 U_p 较低时, 冲击[110]和[111]晶向的塑性变形主要为位错的滑移, 同时还发现了另一种无序结构的产生。当 U_p 大于 1 km/s 时, [110]晶向和[111]晶向的位错开始消失, bcc 和无序结构开始增多。

图8为3种晶向在不同冲击速度下的相转变。图8a为不同冲击速度下bcc相含量占比。图8b为不同冲击速度下无序相含量占比。可以得出激光冲击[100]晶向主要产生了bcc相, 随着 U_p 的增加这种转变增多, 同时有少量无序相产生; 冲击[110]晶向同时发生了2种相结构的转变, bcc相和无序相的含量基本相似, 随 U_p 的增加而增加; 冲击[111]晶向主要产生无序相, bcc相含量较低。在 U_p 较低时发现[110]和[111]晶向的2种相含量都较低, 而[100]已经产生了较高含量的bcc相, 这是因为 U_p 低时[110]和[111]的塑性变形机制为位错的滑移。

2.3 激光冲击 Ni_3Al 位错演变分析

图 9a、9b 分别为 [110]和[111]晶向在不同冲击速度下位错密度变化曲线。图中红色虚线为冲击波到达底面时间, 冲击[110]晶向和[111]晶向冲击波到达底面

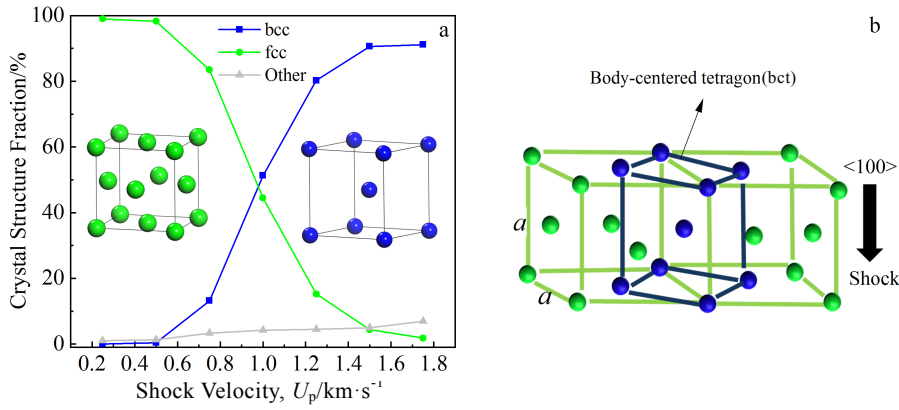


图 5 [100]晶向在不同冲击速度下的 CNA 分析

Fig.5 CNA of [100] crystal direction under different shock velocities: (a) proportion of crystal structure and (b) schematic diagram of fcc→bcc transformation

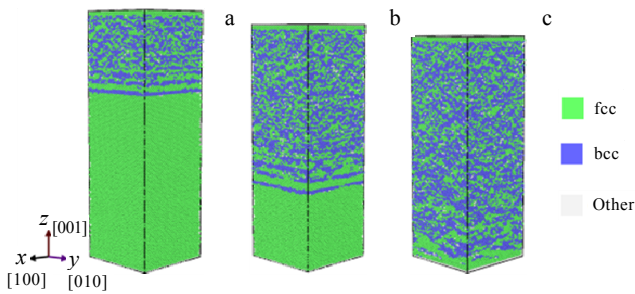


图 6 $U_p=1 \text{ km/s}$ 时的 CNA 分析快照

Fig.6 CNA snapshots under the shock velocity of 1 km/s:

(a) 2 ps, (b) 4 ps, and (c) 6 ps

边界的时间分别为 4.2 和 4.3 ps。从图 9 中可以发现随着冲击波的冲击, 位错密度增加, 当到达某一时间时位错密度稳定。冲击[110]晶向和[111]晶向的 Ni₃Al 分别在 $U_p=1 \text{ km/s}$ 和 $U_p=1.25 \text{ km/s}$ 时位错密度最大, 当超过最大位错密度的 U_p 值时, 位错密度随 U_p 增大而减小, 直到消失。从图 9a 中还可以发现 U_p 为 0.5 km/s 时, 没有产生位错, 当 U_p 为 0.75 km/s 时, 在初始冲击过程没有位错产生, 在平衡阶段产生了位错, 这是由于 $U_p=0.75 \text{ km/s}$ 时[110]晶向的剪切应力达到其临界值。位错滑移是在切应力的作用下发生的, 当晶体受力时, 晶体中的某个滑移系是否发生滑动, 决定于沿此滑移系的分切应力的大小, 当分切应力达到某一临界值时, 位错滑移才能发生。同样当 U_p 为 0.5 km/s 时, [111]晶向的剪切应力也达到其临界值。

剪切应力^[29]公式为:

$$\sigma_{\text{shear}}=0.5[\sigma_{zz}-0.5(\sigma_{xx}+\sigma_{yy})] \quad (1)$$

式中, σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} 分别为 x , y , z 方向所受应力。

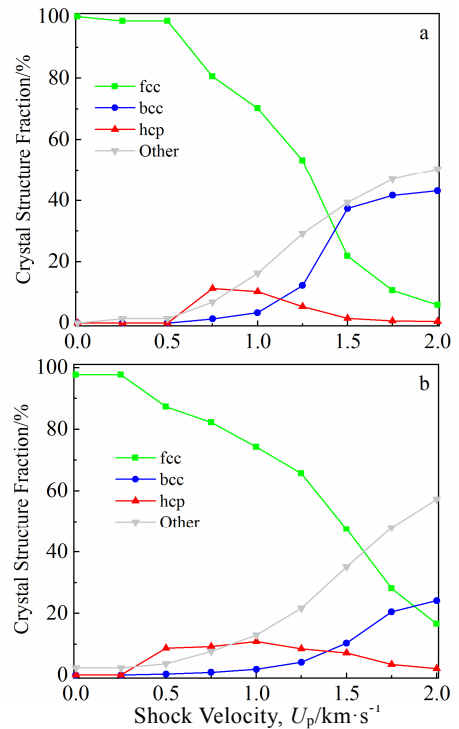


图 7 [110]和[111]晶向在不同冲击速度下的 CNA 分析

Fig.7 CNA of [110] (a) and [111] (b) directions under different shock velocities

图 10 为激光冲击过程中剪切应力变化曲线。可以发现当 $U_p=0.5 \text{ km/s}$ 时, 激光冲击到底面边界后剪切应力保持平衡, 而当 $U_p=0.75 \text{ km/s}$ 时, 剪切应力出现降低, 这是由于出现了位错滑移, 使剪切应力降低。因此, 得出冲击[110]晶向时的临界剪切应力约为 14 GPa, 同理, 冲击[111]晶向时的临界剪切应力约为 9.5 GPa。图 11 为 3 种晶向在不同冲击速度下的应变与剪切应力

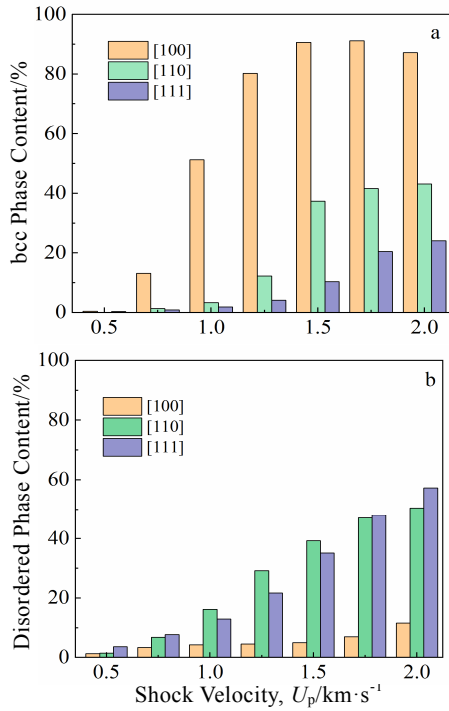


图 8 3 种晶向在不同冲击速度下的相含量对比

Fig.8 Phase content comparisons of three crystal directions under different shock velocities: (a) bcc phase and (b) disordered phase

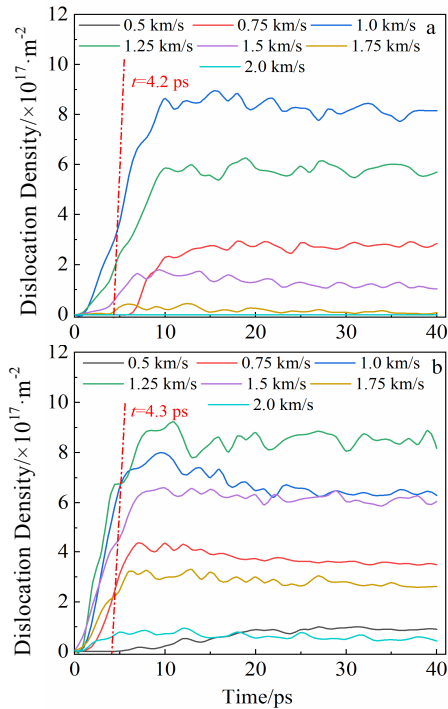


图 9 不同冲击速度下冲击过程位错密度变化曲线

Fig.9 Variations of dislocation density under different shock velocities along [110] direction (a) and [111] direction (b)

的曲线(图中红色虚线为[110]晶向的临界剪切应力,蓝色虚线为[111]晶向的临界剪切应力)。可以发现冲击[100]晶向在 U_p 较低时剪切应力较低,所以冲击[100]晶向时没有发生位错滑移,而冲击[110]晶向和[111]晶向时剪切应力达到了临界切应力值。当应变超过 0.15, [110]和[111]晶向的剪切应力突然升高,这时其塑性变形机制由位错滑移转变为生成 bcc 相。

为了观察激光冲击强化过程中位错的演变过程,图12和图13分别给出了位错密度最大时2种晶向的冲击过程。图中2个相邻的hcp原子层构成层错(stacking fault, SF)。从图11和图12中可以看出随着冲击波的传播,弹性波和塑性波分离,弹性波在前,塑性波产生了塑性区域,使Ni₃Al产生层错并伴随着的位错的滑移。图12c和图13c为弹性波冲击到达底面的快照,当弹性波到达底面后,之后为塑性波传播。图12e和13e为冲击达到动态平衡快照。可以发现层错与位错都沿一定的方向进行滑移。

图 14 为冲击 2 种晶向的层错放大图。可以发现激光冲击[110]晶向时,滑移系主要为(111)[011]和(111)[011];激光冲击[111]晶向时,滑移系主要为(111)[101]

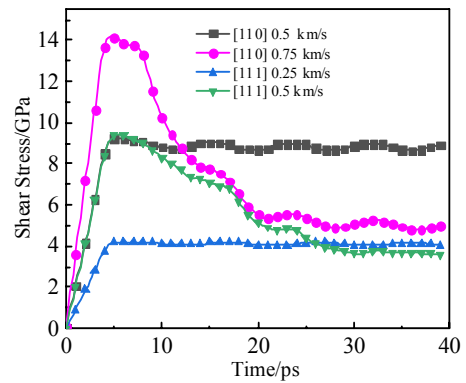


图 10 激光冲击过程中剪切应力变化

Fig.10 Changes of shear stress during laser shock

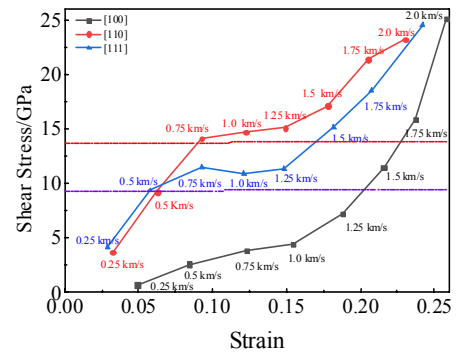


图 11 不同晶向剪切应力与应变关系

Fig.11 Relationships between shear stress and strain in different crystal directions

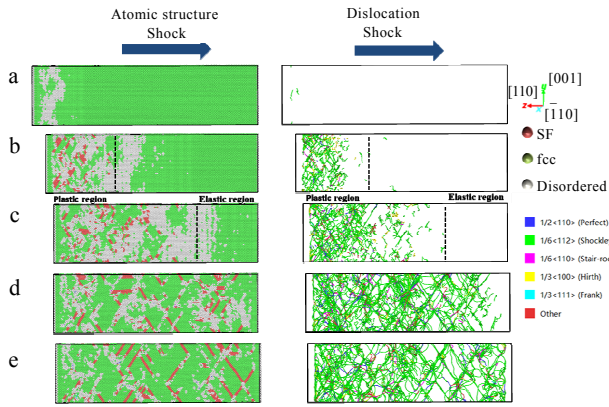


图 12 冲击[110]晶向在冲击速度为 1 km/s 和不同时间步 DXA 快照
 Fig.12 DXA snapshots under the shock velocity of the $U_p=1$ km/s in [110] direction at different time: (a) 1 ps, (b) 3 ps, (c) 5 ps, (d) 10 ps, and (e) 40 ps

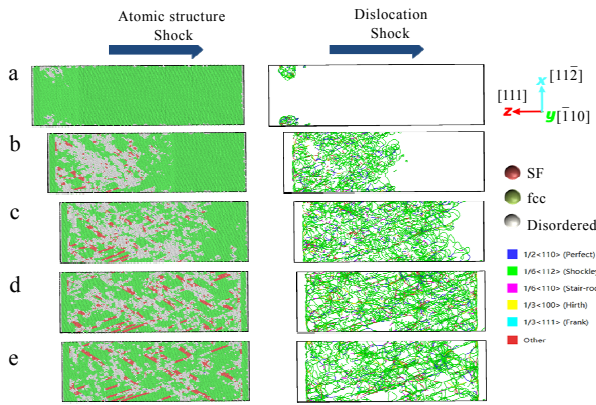


图 13 冲击[111]晶向在冲击速度为 1.25 km/s 和不同时间步 DXA 快照
 Fig.13 DXA snapshots under the shock velocity of 1.25 km/s in [111] direction at different time: (a) 1 ps, (b) 3 ps, (c) 5 ps, (d) 10 ps, and (e) 40 ps

和(111)[101]。符合fcc结构的滑移面与滑移方向。当2种层错相交时, 会形成位错芯, 这种结构会阻碍位错运动, 使位错密度增加, 这种结构在激光冲击Cu模拟中也被发现^[30]。

图 15 为冲击[110]和[111]晶向的位错密度对比。图 15a 为不同冲击速度下 2 种晶向冲击达到平衡时的位错密度。发现[110]晶向在 $U_p=1$ km/s 时位错密度最大, [111]晶向在 $U_p=1.25$ km/s 时位错密度最大, 最大位错密度都约为 $8 \times 10^{17}/m^2$ 。图 15b 为冲击[110]晶向在 1 km/s 和[111]晶向在 1.25 km/s 时不同类型位错密度对比, 发现冲击 2 种晶向所产生的位错类型主要为 1/6<112>(Shockley), 其它类型的位错密度都比 Shockley 位错低 1 个数量级。

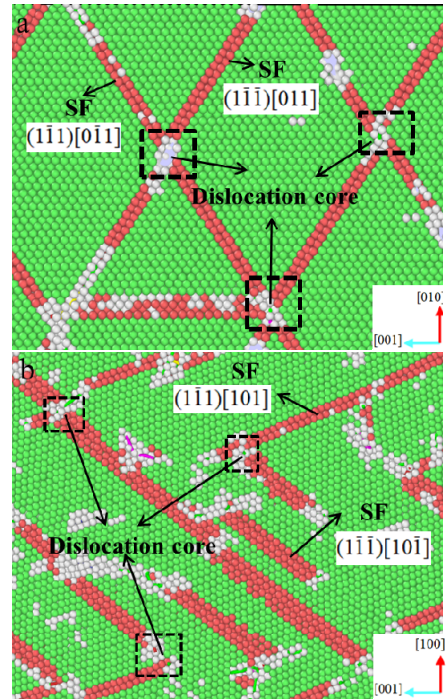


图 14 层错放大图

Fig.14 Enlarged views of stacking fault in [110] (a) and [111] (b) crystal orientations

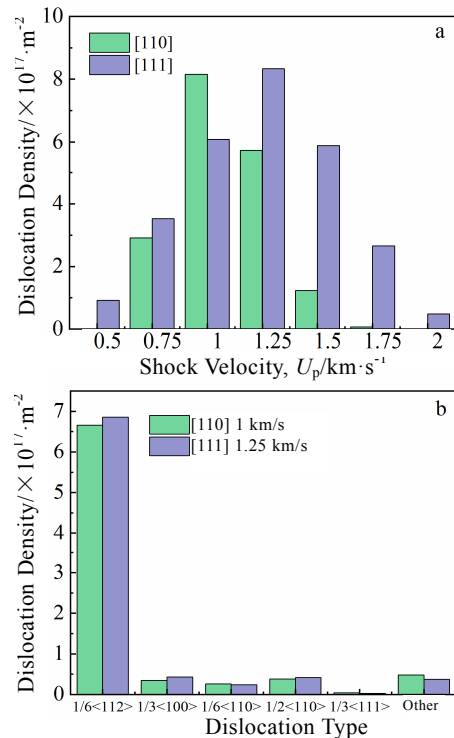


图 15 [110]晶向和[111]晶向位错密度对比

Fig.15 Comparisons of dislocation density in [110] and [111] directions: (a) dislocation density under different shock velocities and (b) maximum densities of different dislocation types

3 结 论

1) 激光冲击单晶 Ni_3Al 在[100]、[110]、[111]晶向都发现弹性波与塑性波分离现象, 塑性波诱导 Ni_3Al 发生塑性变形。

2) 冲击[100]晶向其塑性变形机制为晶体结构由 fcc \rightarrow bcc, 发生了相转变; 冲击[110]晶向和[111]晶向的塑性变形机制为在冲击速度较低时主要为位错的滑移, 随着冲击速度的增加, 同样发生了 fcc \rightarrow bcc 相转变, 同时产生不规则结构。

3) 模拟得出单晶 Ni_3Al 在激光冲击[110]晶向的临界剪切应力值约为 14 GPa, [111]晶向的临界剪切应力约为 9.5 GPa, [100]晶向没有产生位错滑移, 这是由于其剪切应力较低造成的。

4) 冲击[110]晶向的滑移系主要为 $(1\bar{1}\bar{1})[011]$ 和 $(1\bar{1}\bar{1})[0\bar{0}11]$, 冲击[110]晶向的滑移系主要为 $(1\bar{1}\bar{1})[10\bar{1}]$ 和 $(1\bar{1}\bar{1})[101]$, 2 种晶向所产生的位错类型主要为 $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley)位错。

参考文献 References

- [1] Yan Wuzhu(闫五柱), Li Youliang(李有亮), Wen Zhixun(温志勋) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(6): 1854
- [2] Wu W P, Guo Y F, Dui G S et al. *Computational Materials Science*[J], 2008, 44: 259
- [3] Pollock T M, Tin S. *Journal of Propulsion and Power*[J], 2006, 22(2): 361
- [4] Xia W S, Zhao X B, Yue L et al. *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2020, 44: 76
- [5] Long H, Mao S, Liu Y et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2018, 743: 203
- [6] Mishra R.K, Thomas J, Srinivasan K et al. *Engineering Failure Analysis*[J], 2017, 79: 836
- [7] Nie Xiangfan(聂祥樊), Li Yinghong(李应红), He Weifeng(何卫锋) et al. *Journal of Mechanical Engineering*(机械工程学报)[J], 2021, 57(16): 293
- [8] Hu X L, Yang Y Q, Zhao J B et al. *Applied Surface Science Advances*[J], 2021, 6: 100 183
- [9] Wang Xin(王欣), Zhang Tao(张涛), Huang Zhaohui(黄朝晖) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2018, 47(6): 1668
- [10] Geng Y X, Dong X, Wang K D et al. *Optics & Laser Technology*[J], 2020, 123: 105 917
- [11] Lu G X, Liu J D, Qiao H C et al. *Optics & Laser Technology*[J], 2017, 91: 116
- [12] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117: 1
- [13] Holian B L, Lomdahl P S. *Science*[J], 1998, 280(5372): 2085
- [14] Reed E J, Fried L E, Joannopoulos J D. *Physical Review Letters*[J], 2003, 90(23): 235 503
- [15] Holian B L. *Physical Review A*[J], 1988, 37(7): 2562
- [16] Purjapun G P, Mishin Y. *Philosophical Magazine*[J], 2009, 89: 3245
- [17] Mishin Y. *Acta Materialia*[J], 2004, 52: 1451
- [18] Chen B, Wu W P, Chen M X. *Acta Mechanica Sinica*[J], 2021, 34: 79
- [19] Bolesta A V, Zheng L Q, Thompson D L et al. *Physical Review B*[J], 2007, 76(27): 224 108
- [20] Stukowski A, Albe K. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18: 085 001
- [21] Singh R, Sharma V. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*[J], 2020, 99: 107 655
- [22] Jia Wei(贾唯). *Experimental and Simulation Study on Micro Deformation of Nickel Strengthened by Laser Shock*(激光冲击强化金属镍的微观形变实验与模拟研究)[D]. Zhenjiang: Jiangsu University, 2018
- [23] Sichani M M, Spearot D E. *Journal of Applied Physics*[J], 2016, 120: 045 902
- [24] Knapp I, Millett J C F, Gray G T et al. *AIP Conference Proceedings*[J], 2006, 845: 741
- [25] Lipatnikova Y D, Belov N N, Yugov N T et al. *Russian Physics Journal*[J], 2018, 61(5): 955
- [26] Bringa E M, Cazamias J U, Erhart P et al. *Journal of Applied Physics*[J], 2006, 96(7): 3793
- [27] Du Xin(杜欣), Xiong Qilin(熊启林), Zhou Liucheng(周留成) et al. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*(力学学报)[J], 2021, 53(12): 3331
- [28] Liu H X, Zhang Y F, Ma Y J. *Computational Materials Science*[J], 2020, 172: 109 352
- [29] Jarmakani H N, Bringa E M, Erhart P et al. *Acta Materialia*[J], 2008, 56: 5584
- [30] Neogi A, Mitra N. *Computational Materials Science*[J], 2017, 135: 141

Molecular Dynamics Simulation of Single Crystal Ni₃Al Alloy During Laser Shock Peening

Sun Yuzhen, Zheng Haizhong, Geng Yongxiang, Li Guifa, Xiao Yixin

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

Abstract: Excellent mechanical properties of nickel-based single crystal superalloy are mainly attributed to its ordered L1₂ structure of γ' (Ni₃Al) phase. In order to study the effect of laser shock on the microstructure evolution of γ' phase, the molecular dynamics model of single crystal Ni₃Al was constructed by molecular dynamics method, and the microstructure evolution behavior along [100], [110] and [111] crystal directions was analyzed. The results show that the plastic deformation mechanism of [100] crystal shock is the transformation from fcc phase to bcc phase, and the content of bcc phase is increased with increasing the shock pressure. The plastic deformation mechanism of [110] and [111] crystal direction shock is dislocation slip, and the [110] crystal direction slip system is mainly $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[011]$ and $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[0\bar{1}1]$. The [111] crystal slip system is mainly $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[10\bar{1}]$ and $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})[101]$, and the produced dislocations are mainly $1/6\langle 112 \rangle$ (Shockley). However, with increasing the impact pressure, the plastic deformation mechanism is the transformation from fcc phase to bcc phase, and the disordered structure is produced at the same time.

Key words: single crystal Ni₃Al; laser shock; molecular dynamics; micro-mechanism

Corresponding author: Zheng Haizhong, Ph. D., Professor, School of Materials Science and Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, P. R. China, E-mail: zhnchu@126.com