钛铝中 $\langle 011 \rangle$ 超位错的非对称形核及运动的分子动力学模拟

徐东生^{①*}, 王峰^①, 杨锐^①, SACHDEV Anil K^②

① 中国科学院金属研究所, 沈阳 110016;

② General Motors Research & Development Center, Warren, MI 48090, USA

* 联系人, E-mail: dsxu@imr.ac.cn

2013-07-20 收稿, 2013-10-18 接受

国家重点基础研究发展计划(2011CB606404)、国家自然科学基金(51171195)和美国通用汽车公司合作项目资助

摘要 钛铝金属间化合物具有优异的高温性能, 但室温脆性限制了其广泛应用. 为探寻脆性的解决办法, 需在原子尺度上理解其变形机理. 作为位错与孪晶机制系统研究的一部分, 本文采用分子动力学及静力学方法模拟了钛铝 $\langle 011 \rangle$ 超位错的形核与运动. 研究发现, 与普通无序合金不同, 有序的钛铝金属间化合物中沿正反 $[0\bar{1}1]$ 方向剪切时, 超位错表现出非对称行为. 分析表明, 这种差异源自与面心立方结构相比钛铝的 $L1_0$ 有序化使晶格对称性降低, 导致沿相反方向剪切时呈现不同的屈服应力、应变、位错芯的分解及位错运动规律. 沿 $[0\bar{1}1]$ 剪切变形时, 晶体中 4 根偏位错在同一滑移面上相继形核, 构成同心椭圆形超位错环. 超位错芯由 4 根肖克莱偏位错及将其隔开的 3 种广义层错组成. 超位错环扩张过程中其分解方式依赖于其在环上的部位(位错取向)及剪切方向. 刃取向及附近的超位错呈 4 重分解, 60° 附近逐渐转变为 3 重分解, 最后在 30° 附近变成 2 重分解. 超位错开动可具有不同的临界剪切应力, 与启动时的分解方式及剪切方向有关, 当 SISF 领先时其临界应力较低.

关键词

钛铝
金属间化合物
非对称
超位错
形核
分解
分子动力学
形变

钛铝金属间化合物因具有比强度高和高温力学性能保持良好等特点而成为很有潜力的飞机或汽车发动机材料^[1], 但较低的室温塑性阻碍了其广泛应用^[2], 因而理解其塑性变形及断裂的机理从而实现其室温延展性与其他性能之间的优化平衡具有重要意义^[3,4].

对于无序合金和有序金属间化合物, 位错和孪晶均为其塑性的主要贡献者, 但其行为在面心立方金属和基于面心立方的有序金属间化合物钛铝之间有很大不同. 由于晶体的对称性降低为 $L1_0$ 结构, 钛铝的滑移和孪晶系显著改变, 某些方向上剪切变形需要通过所谓的超位错实现, 且孪晶系也只有原来面心立方晶体的三分之一. 尽管在过去的 30 年中进

行了大量的实验和理论研究, 其变形的原子机制仍不清楚^[5]. 由于原子的有序, 面心立方金属中等价的 $\langle hkl \rangle$ 方向在 $L1_0$ 结构的 γ -TiAl 中不再等价, 因而采用 $\langle hkl \rangle$ 描述其晶体取向, 其中的对易只限于前 2 个指数, 而第 3 个指数是固定的^[6]. 实验表明沿任一 $\langle 110 \rangle$ 方向的晶格剪切生成普通位错; 而沿任一 $\langle 011 \rangle$ 方向, 有序结构的存在要求产生超位错^[5]. 对于孪晶变形, 属于给定 $\{111\}$ 面的 3 个 $\langle 112 \rangle$ 取向中, 只有沿 $[11\bar{2}]$ 剪切可产生形变孪晶, 而其他 2 个 $\langle 211 \rangle$ 方向的类似剪切, 即伪孪晶方向剪切, 一般认为将产生 $L1_1$ 结构的伪孪晶.

20 世纪 90 年代以来, 对 TiAl 的变形机制已有广泛的研究, 但关于超位错及孪晶与普通位错相比对

引用格式: 徐东生, 王峰, 杨锐, 等. 钛铝中 $\langle 011 \rangle$ 超位错的非对称形核及运动的分子动力学模拟. 科学通报, 2013, 58: 3722–3732

Xu D S, Wang H, Yang R, et al. MD simulation of asymmetric nucleation and motion of $\langle 011 \rangle$ superdislocations in TiAl (in Chinese). Chin Sci Bull (Chin Ver), 2013, 58: 3722–3732

变形的相对重要性的探索较少。一些研究集中于超位错的分解上,并试图解释其对变形的作用,尤其是钛铝的反常流变应力温度依赖性。尽管经过很多努力,但人们的认识仍然存在许多差异,如位错芯的分解方式和可动性等。早期的研究推测超位错由于其更大的伯格斯矢量应比普通位错可动性低得多^[5];而另一些研究表明普通位错的临界剪切应力比超位错更高,在所测试的取向中,当沿[110]方向变形时(开动[011]超位错)流变应力水平为最低^[7]。

在 TiAl 合金不同的微观组织中,由 $L1_0$ 结构的 γ -TiAl 相和 $D0_{19}$ 结构的 α_2 -Ti₃Al 相所组成的两相片层结构具有强度和延展性等的最佳组合,然而其变形的原子机制仍然不明确。因此作为进一步研究的基础,有必要对化学计量比的 γ -TiAl 的基本变形行为进行研究。

富钛的 TiAl 合金单晶沿一定方向的压缩实验结果表明,普通位错在变形的早期阶段即开始运动,但很快发生纠缠,这限制了其对宏观变形的贡献,而后者主要由孪晶变形实现^[8]。与一般面心立方金属相比,TiAl 中的普通位错仅提供 1/3 的滑移系,因而在其制造和服役过程中超位错运动和孪晶对变形的贡献尤为重大^[9]。大量有关变形机制的研究表明,至少对富铝的 TiAl, [110]普通位错的临界剪切应力一般大于 [011]位错^[10-12]。在特定的应力控制下针对 TiAl 单晶或 PST 晶体的详细变形分析表明,在多数情况下,透射电子显微镜(TEM)下观察到的其他滑移系,如[110]普通位错乃至 $1/2\langle 112 \rangle$ 超位错,均可能来自[011]位错的分解^[10]。虽然这些位错经常被观察到,但他们往往比[011]超位错更难移动,如 $1/2\langle 112 \rangle$ 超位错几乎不可动。因此,尽管其在 TEM 观察中经常出现,但他们几乎无助于低温和中温变形。因此,对 TiAl 合金中[011]超位错的基本特性,包括形核和滑移行为的研究具有非常重要的意义。

位错的可动性强烈依赖于其位错芯结构。基于广义堆垛层错能分析推测, [011]超位错应该有四重分解,但是,不同的研究人员已观察到各种不同形式的分解。Hug 等人^[6,13,14]在 Ti-54Al 中观察到三重分解,其位错芯中包含超晶格内禀堆垛层错(SISF)和反相畴界(APB)。对于[011]超位错,还提出了其他 2 种类型的分解,一种是由 APB 连接的 2 个 $1/2\langle 011 \rangle$ 超偏位错,另一种是由 SISF 连接的 $1/6\langle 112 \rangle$ 和 $1/6\langle 154 \rangle$ 超偏位错,且 Shockley 偏位错为领先位错^[15]。后一种二

重分解更普遍,并被认为与[011]超位错的特殊运动及钉扎相关。

近年来,稳态的位错芯结构也成为采用不同的相互作用势进行原子模拟的对象。利用键级势(BOP)的静态模拟显示, [011]超位错往往具有三维芯结构^[16]。不同于更早的 TEM 观察,能量估算表明,可能一侧为 SISF 而另一侧为复杂层错(CSF)的三重分解,这是因为使用 BOP 计算的 APB 能量高于 CSF^[17,18]。

对于理解动态变形过程中的缺陷精细结构及相关力学行为的原子机制,分子动力学(MD)模拟已成为一个有用的工具。在过去的几年中,大规模分子动力学模拟被用于研究各种因素对金属中位错和孪晶行为的影响,如体心立方结构的 Mo 和 Fe; 面心立方结构的 Al, Cu 和 Ni; 金属间化合物 γ -TiAl 或基于 TiAl 的双相合金^[19-29]。Xu 等人^[28]的分子动力学模拟表明,在体心立方结构的 Mo 中,静压力在选择变形机制上起着重要的作用,静张力促进孪晶变形。当晶格剪切沿伪孪晶方向时,静压力对 TiAl 合金的形变孪晶具有重要影响。MD 模拟揭示了一种新的孪晶机制:在静张力下,伪孪晶剪切也能导致真孪晶的形成和长大,该过程涉及 5 个 Shockley 偏位错在两相邻原子面上的运动,并能提供 4 倍于普通孪晶的剪切应变^[19];而在静压力下,同样方向的伪孪晶剪切将导致 $L1_1$ 结构的伪孪晶形成^[29]。沿[110]方向的剪切表明,普通位错可均匀形核,并通过位错偶反应或剪切下位错的割阶拖曳形成各种点缺陷,包括不同尺寸的空位团簇、空位或间隙型的位错偶环^[20]。这些模拟促进了人们对 TiAl 基合金及其他系统中位错环形成的理解。窄位错偶湮灭的模拟显示,位错的湮灭并非完全消失,而是转变成依赖于位错偶高度和温度的缺陷结构,包括空位团、层错四面体、层错偶极子和小位错偶环^[21,22]。基于 MD 模拟还提出一种层错四面体的形成机制^[24-26]。

在众多的文献中,超位错动态过程的 MD 模拟的相关报道并不多见。本研究组基于大规模原子尺度模拟,针对 TiAl 基合金的变形和断裂行为进行了系统研究,作为该研究的一部分,本文采用原子模拟研究了 TiAl 中[011]超位错的形核及运动行为。首次报道该超位错在不同剪切条件下的动态形核及运动,其中主要关注[011]滑移系超位错分解与位错特征的关系及其位错芯结构和运动对剪切方向的依赖性。

1 模拟方法

TiAl 具有基于面心立方的 $L1_0$ 结构, 其变形机制主要集中于密排面 $\{111\}$. 主要变形系统开动的滑移或孪晶面及滑移或孪晶方向示于图 1, 包括普通位错、超位错、孪晶和伪孪晶.

采用 MD 模拟及能量分析对不同变形条件下普通位错和超位错的形核扩展进行研究. 模拟晶胞包含最多 1100 万原子, 其 3 个方向的尺寸分别为 242, 181 及 225 nm. 剪切变形的动态过程模拟中采用 $10^7 \sim 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 的恒应变速率, 温度为 1~300 K. 位错形核及运动过程的模拟中采用三维周期性边界条件, 位错芯分解和单根超位错滑移的模拟中沿滑移面方向采用二维周期性边界条件, 而垂直滑移面为固定边界. 原子间相互作用采用 TiAl 的嵌入原子势函数(EAM)^[30]. 通过在模拟晶胞上沿正反 $\langle 110 \rangle$ 或 $\langle 011 \rangle$ 方向剪切研究位错或超位错的行为. 在模拟晶胞中下半部除去 4 个 $(0\bar{1}1)$ 面上的相应原子以构建 $[0\bar{1}1]$ 超位错. 弛豫后可形成超位错, 分解为由 3 个层错连接的 4 个偏位错, 其反应如下^[31], 导致水平非对称的芯结构:

2 结果与讨论

2.1 广义堆垛层错能曲面

图 2 为 EAM 势计算得到的 γ -TiAl (111) 面的广义堆垛层错能曲面(γ -surface). 各种层错能量的趋势与

图 1 $L1_0$ 结构 TiAl 中的滑移系和孪晶系
在 $\langle 111 \rangle$ 面上, 沿 $\langle 110 \rangle$ 剪切形成普通位错, 而沿 $\langle 011 \rangle$ 剪切形成超位错; 沿 $\langle 11\bar{2} \rangle$ 剪切形成孪晶, 而沿 $\langle 1\bar{2}1 \rangle$ 剪切则可能形成伪孪晶

之前的原子模拟及实验类似^[32,33]. 该曲面清楚显示 3 个局部极小, 按能量递增顺序分别为 SISF, APB 和 CSF. SISF 层错能为 60 mJ/m^2 , 与 Panova 和 Farkas^[34] 的结果一致, 而 APB 能(214 mJ/m^2)和 CSF 能(264 mJ/m^2)小于以往势函数结果. 这 3 个层错能与偏位错间的弹性相互作用的平衡决定偏位错之间的分解宽度.

2.2 $[1\bar{1}0]$ 剪切下的普通位错形核

取决于剪切方向, 在 γ -TiAl 的 $\{111\}$ 面进行剪切可能会形成普通位错、超位错或形变孪晶. 沿 $[1\bar{1}0]$ 剪切, 普通位错可均匀形核或于缺陷处形核. 图 3 所示为完整晶格中普通位错环的成核. 可见具有 $1/2[1\bar{1}0]$ 伯格斯矢量的位错分解成 2 个肖克莱偏位错, $1/6[\bar{1}21]$ 和 $1/6[2\bar{1}1]$, 其间由 CSF 连接. 该位错环从形核早期即呈椭圆形, 反应了位错可动性依赖于位错取向. 一旦形核位错将迅速扩展, 与螺位错取向成

图 2 γ -TiAl (111) 面的广义堆垛层错能曲面

图3 (111)面上沿 $[1\bar{1}0]$ 剪切时的普通位错环的(a), (b)均匀成核和(c), (d)长大

原子的颜色与其配位数对应(黄, 12; 粉, 9; 绿, 10; 红, 11; 蓝, 13). 后续图中均采用相同的着色方式, 只在图5中正正常原子不可见

60°的位错段运动最快, 最高速度达 1.0×10^6 m/s, 而 -30°的位错段运动最慢, 速度为 5.7×10^5 m/s. 值得注意的是, 构型分析表明, 最高速度并非位于整个位错环的刃取向部分, 而是在领先的 $1/6[2\bar{1}1]$ 偏位错的刃取向处. 对于普通位错, 位错环上偏位错的分解宽度较小且并不一致, 最宽为 60°部分, 约 1.5 nm, 刃位错段为 1.1~1.4 nm, 螺位错段为 0.9~1.1 nm(图3). 最窄的部分是 -30°方向, 分解宽度只有 0.3~0.4 nm. 由于分解宽度很窄, 小于 1.5 nm 的早期 TEM 的分辨率极限, 因此很难用 TEM 分辨位错的分解. MD 模拟所见的窄位错芯与实验观察到的普通位错的紧凑位错芯一致^[35].

滑移面上原子排列的详细观察及能量分析表明, 沿普通位错方向剪切形成 CSF 的晶格错动的能垒较小, 如图2所示, 而沿其他方向的运动更为困难, 导致在伯格矢量平行于该方向时位错运动更快. 这

与领先偏位错的刃取向部分具有最大的速度一致, 并造成沿着这个方向位错环被拉长. 两偏位错之间的 CSF 具有很高的能量, 形成很强的连接, 使跟随偏位错紧跟领先位错, 因此, 完整位错呈现椭圆形, 沿 $[1\bar{2}1]$ 方向伸长.

在本模拟中, 剪切相对缓慢从而使普通位错环独立成核. 而在更高应变率下, 沿普通位错方向剪切会使多个位错环几乎同时均匀成核. 位错的成核过程、构型及其反应形成点缺陷的细节可参见文献[20].

图4为沿 $[1\bar{1}0]$ 和 $[11\bar{2}]$ 方向应力分量随应变的变化. 可见主要应力分量沿 $[1\bar{1}0]$ 剪切方向, 而垂直于剪切方向的应力小得多, 小于前者的 1/3. 晶格屈服发生在应变为 12.5%, 应力为 4.85 GPa. 随着位错环的扩展以及更多位错环形成并在整个滑移面传播, 应力迅速下降. 环的螺取向部分可发生交滑移并与其他环发生反应, 形成多种缺陷. 压缩实验表明, 在

图4 $[1\bar{1}0]$ 普通位错方向剪切的应力应变曲线
应变速率 10^8 s^{-1} , 300 K. 黑色和红色曲线分别表示沿剪切方向和垂直剪切方向的应力分量

富铝 TiAl 合金中, 普通位错在变形早期即开始移动, 但很快纠结, 限制了其对宏观变形的贡献, 大变形阶段的主要贡献者是形变孪晶^[8]. 这与我们的观察一致, 普通位错较小的分解宽度使其容易交滑移并与其他位错反应, 形成位错运动的障碍^[20]. 一些位错被所形成的缺陷钉扎, 导致可动位错密度减少.

2.3 $[0\bar{1}1]$ 剪切下超位错的均匀形核

TiAl 具有面心正方晶格, 其 Ti 和 Al 原子沿 $[001]$

方向交替层叠, 使 $[001]$ 不同于 $[100]$ 和 $[010]$ 方向. 由于这种有序排列, 包含 c 轴分量的任何方向上的晶格周期将加倍, 如 $[0\bar{1}1]$ 方向约 2 倍于 $[1\bar{1}0]$, 沿着 $[0\bar{1}1]$ 方向的剪切应产生超晶格位错, 即超位错. 图 5 所示为 $[0\bar{1}1]$ 剪切下完整 TiAl 晶格中超位错环的形核及早期生长过程. 可见超位错由顺序在同一平面上同心形核的 4 个 Shockley 偏位错环组成. 这 4 个偏位错环呈椭圆形一起长大, 并沿 30° 方向拉长. 不同偏位错间的分解宽度不相等, 反应出其间层错能的差异, 沿同一环的分解也呈各向异性. 分析表明, 与前面普通位错类似, 这部分源于偏位错运动时各向异性的晶格阻力, 还与 TiAl 的 $L1_0$ 晶格的弹性各向异性有关.

图 6 为一个超位错芯在 (111) 滑移面上的扩展. 可见其包含 4 个偏位错 (P1~P4), 其中 P1 和 P2, P2 和 P3, P3 和 P4 之间分别由 APB, CSF, SISF 分隔. 总伯格斯矢量 $[0\bar{1}1]$ 为 4 个偏位错的总和. 超位错剪切沿 $[0\bar{1}1]$ 方向, 但位错环长轴与该方向约成 30° 角, 这还是与领先偏位错的伯格斯矢量有关. 同时还受偏位错沿不同方向的线能量的影响, 因为沿能量最低方向的原子错动将花费比其他方向较少的能量, 导致沿该方向滑移的刃位错具有较低的线张力. 由图 7 中所示的应力应变关系可以看出, 相比于普通位错剪切, 超位错剪切下完整晶格屈服发生在较高的应力和应变条件下.

随着位错特征沿位错环由刃型变为螺型, 超位

图5 在 (111) 面上沿 $[0\bar{1}1]$ 方向剪切时, 超位错的 (a)~(c) 形核和 (d) 长大

图6 (111)滑移面上的超位错芯结构顶视图

超位错由4根偏位错P1~P4及其间的CSF、APB和SISF层错所组成,各偏位错的位移矢量如蓝色小箭头所示,超位错的运动方向从左下角到右上角

图7 沿 $[0\bar{1}1]$ 超位错方向剪切的应力应变曲线

错的分解宽度发生变化,60°部分最宽而30°至螺取向较窄.每对偏位错的间距对其特征有不同的依赖关系,这可能源于每个层错连接的偏位错的伯格矢量和位错线方向的组合,以第3个偏位错后沿30°方

向的分解宽度最大(图6).接近于螺取向位错段的相对较小的分解宽度使位错容易束集,因此可能在相对低的应力下交滑移至其他滑移面.此宽度变化趋势与弹性各向异性的估算一致^[36].

2.4 超位错芯分解的特征依赖性

图8所示为接近刃取向、具有较宽分解的超位错芯在2个不同方向的截面图.可见超位错的位错芯具有平面结构,分解为4个偏位错,其间从左至右分别由SISF、APB和CSF 3个层错连接.模拟过程中观察到,超位错在成核和运动的早期阶段均保持平面芯结构.如应力条件改变,接近于螺取向的部分会交滑移至另一 $\{111\}$ 面形成所谓的屋顶式结构,阻碍位错的移动.需要指出的是,在许多情况下运动和静止位错的分解宽度是不一样的.偏位错的平衡间距主要决定于其间层错的张力和偏位错间的弹性排斥力,并受位错滑移时各偏位错所受晶格阻力的影响.对于Peierls势垒较高的晶体后者影响很大,如 Ti_3Al 中的超位错分解宽度可能从8~90 nm^[37],因此实验上对分解宽度的不同测量很难统一.而对于比 Ti_3Al 更脆的 TiAl ,其Peierls势垒可能会更高,位错分解情况可能变化更大.

图9(a)和(b)分别为60°和30°取向的超位错芯结构,与刃取向相比其分解宽度均更小.60°位错芯(图9(a))包含三重分解,前2个Shockley偏位错间为SISF,第2个Shockley偏位错和第3个超偏位错间为APB,其中第3超偏位错由后2个Shockley偏位错合并而成;而30°位错芯(图9(b))几乎是两重分解,左为Shockley偏位错,右为超偏位错,其间为SISF.

从图8中接近刃取向的部分(最大宽度7 nm)到图9(b)中的30°部分(约2 nm),偏位错之间的距离逐渐减小.位错芯的分解也发生变化,从四重分解首先经

图8 沿(a)[112]和(b)[$\bar{1}10$]方向观察所见的刃取向附近具有较宽分解的超位错芯结构

图9 沿 $\bar{1}10$ 方向投影的(a)60°和(b)30°取向的超位错芯结构
由刃取向到螺取向变化时 $[011]$ 超位错由三重分解变为二重分解

过2个领先偏位错合并为1个超偏位错而变为三重分解,进而前3个偏位错合并为1个更大的超偏位错,最后转变为二重分解.偏位错间的分解宽度对应应力水平有弱依赖性,当应力大且位错运动快时,平面位错芯在滑移面上扩展较大,而应力降低且位错的运动变慢时,其核心略有收缩.二重和三重分解在实验上已观测到.在某些情况下静态构型中存在重构的位错芯,特别是对于螺取向,其分解常涉及2个滑移面,导致形成三维不可动芯结构^[38].

弹性各向异性对 $[\bar{1}01]$ 超位错的二、三、四重分解的影响已有估算,弹性各向异性导致刃取向和螺取向分解宽度差异的增加,最宽的分解发生在与刃取向成约20°^[36].后一点与本文的模拟结果一致.

应该指出的是,超位错的螺取向并不对应于位错环中最小的分解宽度.分析表明,这与超位错中第1个偏位错的特征有部分关系,因为第1个偏位错可能对整个位错环的形状有决定性作用,这是因为螺取向的第1个偏位错运动缓慢,使位错环在首个偏位错为螺取向的部分更窄.其他因素还包括TiAl晶格的各向异性可能有利于30°取向位错的较窄分解,如弹性计算所示^[36].

比较图5、8和9可见,近螺取向部分比近刃取向部分要窄得多,并且30°位错段的滑移面上晶格呈现出非平面畸变.这可解释在静态下该段偏位错容易交滑移至其他滑移面的趋势,某些交滑移将形成位错锁并阻碍超位错的进一步运动.

近期采用BOP的静力学模拟表明, $\langle 101 \rangle$ 超位错可能存在平面结构,但对于螺取向,平面分解比非平面分解具有更高的能量,后者中偏位错可延伸到其他的 $\{111\}$ 面^[16].这与本文的结果中接近螺取向的位

错芯区域的滑移面轻微弯曲,有交滑移的趋势一致.平面分解的位错芯因位错滑移的晶格阻力显著减小,应对变形有更大的贡献.采用BOP势的类似模拟也预测了三重分解.由于其APB能量高于CSF, Kazarov等人^[16]预测由刃取向变到螺取向时,由APB连接的偏位错将首先束集,而在本研究中,CSF能量比APB稍高,与APB相关的分解更明显.BOP计算结果表明,由于APB能量高于CSF,四重分解变为三重分解时,中间的2个偏位错将束集形成1个超偏位错.

基于第一原理的广义堆垛层错能计算得到,刃位错的四重分解宽度分别为3.43、0.56和1.61 nm,而螺位错为2.05、0.25和1.26 nm^[39].总的来说,螺位错的总分解宽度(3.6 nm)小于刃位错(5.6 nm).由于较高的APB和CSF能量,第2和第3个偏位错之间的距离相当小,只有1~2个原子面间距.这小于早期的TEM分辨率.实验上合金往往偏离化学计量比,且合金元素和间隙元素偏聚都可能导致层错能降低,使分解宽度可达到目前TEM的分辨水平.因此,在与第一原理结果进行比较时需考虑无序及偏聚化的效果.

在实验方面,一些研究者报道了包含SISF和APB的三重分解,而其他研究认定偏位错间存在SISF和CSF.除了如在TEM观测中的图像偏移等测量误差以外,APB和CSF能量本身可能依赖于合金成分和有序状态,特别是在位错芯附近的有序度可能会进一步降低,并且合金元素和杂质元素还会在此处偏聚.进行这种估算时还必须考虑详细的实验条件,包括热处理,它会影响相成分和有序状态.对TiAl这样的具有高Peierls力的系统中,即使相同的位错分解方式也可能得到多个分解宽度,类似于在

Ti₃Al 中, 由于较大的晶格阻力, 位错无法达到一致的平衡分解宽度^[40], 因此测量的分解宽度离散程度较大. 从这个意义上说, 模拟与实验的一一对应, 甚至是实验与实验的完全一致并不现实.

2.5 [01 $\bar{1}$]剪切下超位错形核及剪切方向不对称性

沿[01 $\bar{1}$]方向上剪切时的应力应变关系和位错结构演化示于图 10 和 11. 可以看出, 与图 6 相比, 反向剪切导致不同的应力应变行为. 值得注意的是, 临界应变 11.4% 和应力 4.95 GPa (100 K, 剪切速率为 10⁷ s⁻¹) 明显小于图 7 的剪切, 两应力分量的变化趋势也不同. 沿图 2 中 γ 面的剪切路线的能量(图 12)分析表明, 与无序面心立方结构沿两方向的剪切对称相比, L1₀有序结构导致正反方向不再等价.

由图 11 可见, 偏位错 P1 和 P2 形核远早于 P3 和 P4, 从而产生一个大的间隔. γ 面上超位错路径上沿相反方向的能量变化分析表明, 从原点到 SISF 处的能量增加比反方向剪切时从原点到 CSF 处的要小得多. 这使得[01 $\bar{1}$]剪切时 P1 和 P2 在超位错成核时较早释放, 导致与后 2 个偏位错间隔增加; 而在相反的[0 $\bar{1}1$]剪切下, 沿 CSF 路径的高能垒延缓了首个偏位错的形核, 直到较大应力下, 所有偏位错均达到临界形核应力, 进而同时形成, 因而彼此非常接近, 容易在

图 10 沿[01 $\bar{1}$]方向剪切下的应力应变曲线

较小的 MD 模拟胞中同时存在, 如图 5 和 6 所示.

图 11(c)和(d)中 2 个额外的偏位错为 P1 和 P2 下半部的镜像因周期性边界条件而从上方进入模拟胞与上半部位错湮灭后所激发的 P3 和 P4. 该图中的晶格取向与图 5 和 6 不同. 总的伯格斯矢量是从左上角到右下角, 沿[01 $\bar{1}$]方向.

比较图 6 和 11 中的构型以及图 7 和 10 中的应力应变曲线可见, 在相反方向上剪切导致不同结构的超位错在不同的应力下形核. 虽然 2 个位错芯均包含 4 个偏位错及 3 个层错, 但其偏位错的先后顺序被逆转, 且具有不同的偏位错间分解宽度. 可以看出, 在

图 11 沿[01 $\bar{1}$]方向剪切下的位错形核及结构演变

前 2 个偏位错于左下角形成(a), 然后向右运动(b); 后 2 个偏位错形成(c), 并扩展(d). 连接 P1~P4 的层错分别为 SISF, APB 和 CSF

图 11 中位错芯是由 P1 ~ P4 4 个偏位错以及 P1 与 P2 之间的 SISF, P2 与 P3 之间的 APB 以及 P3 与 P4 之间的 CSF 组成. 偏位错 P2 和 P3 之间的较大间距是由于 P1 和 P2 偏位错的提前形成以及位错成核过程中的动态效应. 由于模拟晶胞的尺寸和应变速率的限制, 这种情况下难以在一幅图中完整呈现超位错芯的扩展. 如无其他干扰, 偏位错分解将随着其运动逐渐达到平衡宽度. 这与反向剪切时分解宽度大致对应于每个层错的能量形成鲜明对比, 特别是在早期位错环扩张的阶段. 在位错的成核和运动过程中局部应力也会影响分解宽度, 因为局部的静压力可能以不同方式改变各层错能, 甚至可能改变其稳定性顺序, 因此对分解行为有很强的影响^[19,29].

图 12 为沿图 2 中标识的路径的能量及其导数变化. 从图 12(a)可见, 对于 $[0\bar{1}1]$ 剪切, 两近邻极小之间的势垒高度依 OC, SO', CA, AS 的顺序降低, 而对反向的 $[01\bar{1}]$ 剪切, 该顺序变为 SA, O'S, AC, CO, 其中 C, A 和 S 代表 3 种层错, O 和 O'分别为原点和超位错 Burgers 矢量 $[0\bar{1}1]$ 的终点. 这些能垒与各偏位错运动时的晶格阻力相关, 不仅决定超位错受到的 Peierls 应力, 还决定位错运动过程中偏位错之间的距离.

对于超晶格位错, 剪切方向的反转导致偏位错顺序的反转. 由于每个偏位错所受晶格阻力不是对称的, 偏位错间距在 2 种情况下也不同. 研究图 2 中 γ 面和图 12 中沿变形路径的能量及其导数发现, 后者与各偏位错运动时受力相关, 可为超位错分解行为提供进一步的线索.

图 12(b)中的约化应力沿变形路径存在 4 个峰. 值得注意的是, 所有峰的左侧均比右侧更陡. 这似乎意味着, 向右移动比向左更困难, 因为沿 $[0\bar{1}1]$ 剪切应力会迅速增加, 而在相反的方向上的应力增加要慢得多, 并且不同偏位错受力具有不同的顺序, 导致

不同剪切方向下不仅超位错的临界应力不对称, 其分解也不同, 这由其不同层错的宽度变化可见. 这种锯齿形的力分布不仅使成核过程非对称, 也使超位错运动非对称, 因为当位错沿相反方向运动时其受力不同, 这在下节介绍中也可看出.

2.6 位错运动的多重临界剪切应力

由于不对称的位错芯构型, 在(111)面上沿 $[0\bar{1}1]$ 和 $[01\bar{1}]$ 剪切下超位错运动的临界剪切应力也应不同. 图 13 为 2 种剪切下静力学弛豫得到的应力应变曲线. 确实存在着临界应力的不对称性, 平均来看对 SISF 靠前的 $[01\bar{1}]$ 剪切, 其临界应力比沿 $[0\bar{1}1]$ 剪切低.

超位错运动时整体所受的力来自所有偏位错受力的叠加. 当沿任一晶格方向运动时, 偏位错之间的距离可能改变, 这些距离取决于偏位错所受的驱动力和阻力之间的平衡, 其中包括层错间的张力. 由于 TiAl 原子间的部分共价键导致晶格阻力大, 偏位错分解宽度可能随每个偏位错所受阻力的变化而显著改变^[37]. 因此, 对于超位错可能存在多个临界剪切应力(CSS). 由于临界应力取决于位错芯结构包括每个偏位错的位置, 位错受到的总阻力根据其开始移动时的具体位错芯情况不同而不同. Paidar 等人^[41]在其早期的工作中注意到超位错运动的这种不对称性, 考虑了超位错只能向一个方向移动的情况, 而认为相反方向的剪切不会激发位错运动. 事实上, 我们的模拟表明, 在不同方向上剪切时不能排除超位错沿任何方向的移动, 且即使沿一个方向运动也可存在多个临界应力, 平均起来在一个方向上的临界应力比另一个方向大.

本研究在以往采用原子间势的静态芯结构计算和实验对重构位错芯观察的基础上, 利用分子动力学模拟研究了 TiAl 中的超位错行为, 在原子尺度上

图 12 对于图 2 所示的 $[0\bar{1}1]$ 超位错, 沿变形路径的(a)能量及其(b)导数的变化
各种层错的位置标于图中

图 13 准静态剪切下, 固定边界条件下沿(111)面正反 $[0\bar{1}1]$ 方向的应力应变关系

红色曲线对应超位错中 SISF 为领先层错, 蓝色曲线对应反方向剪切

获得了位错的形核、运动、芯结构随剪切方向和位错特征的动态变化规律, 将有助于理解超位错对变形、硬化的影响。下一步将基于第一原理计算, 构造可靠的三元体系的势函数, 并在此基础上实现 TiAl 金属间化合物合金的位错运动和相互作用的动力学过程模拟。进而将通过改变合金成分或微观组织探索成份和微观结构因素对位错及孪晶行为的影响规律, 为优化合金性能提供线索。

致谢 感谢中国科学院超级计算环境沈阳分中心对大规模分子动力学计算的支持。

参考文献

- 1 Sachdev A, Kulkarni K, Fang Z, et al. Titanium for automotive applications: Challenges and opportunities in materials and processing. JOM, 2012, 64: 553–565
- 2 Appel F, Paul J D H, Oehring M. Gamma Titanium Aluminide Alloys: Science and Technology. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2011. 357–402
- 3 Kim Y W, Dimiduk D M. Deformation and fracture behavior in TiAl alloys under monotonic and cyclic loading conditions. In: Chan K S, ed. Proceedings of a Symposium held at 1997 TMS Fall Meeting. Warrendale, PA: TMS, 1997. 305–317
- 4 Kim Y W. Strength and ductility in TiAl alloys. Intermetallics, 1998, 6: 623–628
- 5 Appel F, Wagner R. Microstructure and deformation of two-phase γ -titanium aluminides. Mater Sci Eng R, 1998, 22: 187–268
- 6 Hug G, Loiseau A, Veyssire P. Weak-beam observation of a dissociation transition in TiAl. Philos Mag A, 1988, 57: 499–523
- 7 Kawabata T, Kanai T, Izumi O. Positive temperature dependence of the yield stress in TiAl $L1_0$ type superlattice intermetallic compound single crystals at 293–1123 K. Acta Metall, 1985, 33: 1355–1366
- 8 Huang B Y. The behavior of the ordinary dislocations in TiAl. J Cent South Inst Min Metall, 1988, 19: 539–545
- 9 Panchal J H, Kalidindi S R, McDowell D L. Key computational modeling issues in integrated computational materials engineering. Comput-Aided Des, 2013, 45: 4–25
- 10 Veyssire P, Chiu Y L, Grgori F. Micromechanisms of deformation in γ -TiAl. In: George E P, Inui H, Mills M J, et al., eds. Symposium on Defect Properties and Related Phenomena in Intermetallic Alloys held at the 2002 MRS Fall Meeting. Warrendale, PA: Materials Research Society, 2003. 163–173
- 11 Grgori F, Veyssire P. Properties of $\langle 011 \rangle \{111\}$ slip in Al-rich gamma-TiAl. I. Dissociation, locking and decomposition of $\langle 011 \rangle$ dislocations at room temperature. Philos Mag A, 2000, 80: 2913–2932

3 结论

(1) 分子动力学模拟表明, 对于 $L1_0$ 结构的 TiAl, 在(111)面上沿正反 $[0\bar{1}1]$ 方向剪切时, 可形成具有平面芯结构的超位错环, 其均匀形核应力大于普通位错。

(2) 与普通位错不同, 正反方向剪切时, 超位错形核及运动呈非对称性。

(3) $[0\bar{1}1]$ 剪切形成的超位错环中位错芯的分解强烈依赖于位错段的取向, 60° 到刃取向部分由 4 个偏位错构成, 其间由 SISF, APB 和 CSF 3 种层错隔开, 且具有最大的分解宽度; 在 30° 取向附近分解为 SISF 连接的 2 个偏位错; 上述取向之间, 则发生三重分解, 各偏位错由 SISF 和 APB 连接。

(4) 正反方向剪切时超位错形核及运动的非对称源于位错形成及运动时, 领先和拖尾偏位错及其间层错所形成的不同位错芯结构。沿 $[0\bar{1}1]$ 剪切时与 SISF 连接的领先偏位错形核能垒较小, 使超位错形核的临界应力低于反向剪切。

(5) 超位错运动时, 由于各偏位错受到较大的晶格阻力和不同偏位错间相互作用的影响, 导致超位错分解的不唯一性, 使超位错运动存在多个临界应力。

- 12 Inui H, Matsumuro M, Wu D H, et al. Temperature dependence of yield stress, deformation mode and deformation structure in single crystals of TiAl (Ti-56at.% Al). *Philos Mag A*, 1997, 75: 395–423
- 13 Hug G, Loiseau A. Observation of a new type of superdislocations in TiAl, configurations of dissociation. *J Microsc Spect Elec*, 1985, 10: A21
- 14 Hug G, Loiseau A, Veyssire P. Dislocation fine structure in strained TiAl. *J Elect Microsc*, 1986, 35: 1575–1576
- 15 Jiao S, Bird N G, Taylor P B H. Yield stress anomalies in single crystals of Ti-54.5at.% Al. I. Overview and $\langle 011 \rangle$ superdislocation slip. *Philos Mag A*, 1998, 78: 777–802
- 16 Katzarov I H, Paxton A T. Atomistic studies of $\langle 101 \rangle$ screw dislocation core structures and glide in gamma-TiAl. *Philos Mag*, 2009, 89: 1731–1750
- 17 Katzarov I H, Cawkwell M J, Paxton A T, et al. Atomistic study of ordinary $1/2\langle 110 \rangle$ screw dislocations in single-phase and lamellar gamma-TiAl. *Philos Mag*, 2007, 87: 1795–1809
- 18 Porizek R, Znam S, Nguyen-Manh D, et al. Atomistic studies of dislocation glide in gamma-TiAl. In: George E P, Inui H, Mills M J, et al., eds. *Symposium on Defect Properties and Related Phenomena in Intermetallic Alloys Held at the 2002 MRS Fall Meeting*. Warrendale, PA: Materials Research Society, 2003. 181–186
- 19 Xu D S, Wang H, Yang R, et al. Molecular dynamics investigation of deformation twinning in γ -TiAl sheared along the pseudo-twinning direction. *Acta Mater*, 2008, 56: 1065–1074
- 20 Xu D S, Wang H, Yang R, et al. Point defect formation by dislocation reactions in TiAl. In: Cai W, Edagawa K, Ngan A H W, eds. *International Conference on the Fundamentals of Plastic Deformation*. Bristol, England: IOP Publishing Ltd, 2009. 012024
- 21 Wang H, Xu D S, Yang R, et al. The transformation of narrow dislocation dipoles in selected fcc metals and in γ -TiAl. *Acta Mater*, 2009, 57: 3725–3737
- 22 Wang H, Xu D S, Yang R, et al. The transformation of edge dislocation dipoles in aluminium. *Acta Mater*, 2008, 56: 4608–4620
- 23 Gu X Y, Xu D S, Wang H, et al. Lattice weakening by edge dislocation core under tension. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2010, 18: 065004
- 24 Wang H, Xu D S, Yang R, et al. The formation of stacking fault tetrahedra in Al and Cu: III. Growth by expanding ledges. *Acta Mater*, 2011, 59: 19–29
- 25 Wang H, Xu D S, Yang R, et al. The formation of stacking fault tetrahedra in Al and Cu: II. SFT growth by successive absorption of vacancies generated by dipole annihilation. *Acta Mater*, 2011, 59: 10–18
- 26 Wang H, Xu D S, Yang R, et al. The formation of stacking fault tetrahedra in Al and Cu: I. Dipole annihilation and the nucleation stage. *Acta Mater*, 2011, 59: 1–9
- 27 Xu D S, Yang R, Li J, et al. Atomistic simulation of the influence of pressure on dislocation nucleation in bcc Mo. *Comput Mater Sci*, 2006, 36: 60–64
- 28 Xu D S, Chang J P, Li J, et al. Dislocation slip or deformation twinning: Confining pressure makes a difference. *Mater Sci Eng A*, 2004, 387–389: 840–844
- 29 Xu D S, Wang H, Li Y J, et al. Deformation of TiAl by the formation of L11 pseudo-twin. In: Kim Y W, Morris D, Yang R, et al., eds. *Structural Aluminides for Elevated Temperatures Symposium Held at the TMS 2008 Annual Meeting and Exhibition*. Warrendale, PA: Minerals, Metals & Materials Soc, 2008. 119–124
- 30 Zope R R, Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system. *Phys Rev B*, 2003, 68: 024102
- 31 Grgori F, Veyssire P. Properties of $\langle 011 \rangle \{111\}$ slip in Al-rich gamma-TiAl. I. Dissociation, locking and decomposition of $\langle 011 \rangle$ dislocations at room temperature. *Philos Mag A*, 2000, 80: 2913–2932
- 32 Woodward C, Maclaren J M, Rao S. Electronic structure of planar faults in TiAl. In: Johnson L A, Pope D P, Stiegler J O, eds. *Symposium on High-Temperature Ordered Intermetallic Alloys IV*. Pittsburgh: Materials Research Society, 1991. 715–720
- 33 Fu C L, Yoo M H. Elastic constants, fault energies, and dislocation reactions in TiAl: A first-principles total-energy investigation. *Philos Mag Lett*, 1990, 62: 159–165
- 34 Panova J, Farkas D. Atomistic simulation of dislocation core configurations in TiAl. *Philos Mag A*, 1998, 78: 389–404
- 35 Hemker K J, Viguier B, Mills M J. Dislocation core structures in the ordered intermetallic alloy TiAl. *Mater Sci Eng A*, 1993, 164: 391–394
- 36 Song X P, Chen G L. Effect of elastic anisotropy on the dissociation widths of superdislocations in TiAl. *Mater Lett*, 2001, 48: 273–280
- 37 Paidar B V, Caillard D. Dissociation of sessile dislocations. *Philos Mag Lett*, 1994, 69: 305–308
- 38 Greenberg B A, Antonova O V, Indenbaum V N, et al. Dislocation transformations and the anomalies of deformation characteristics in TiAl. I. Models of dislocation blocking. *Acta Metall Mater*, 1991, 39: 233–242
- 39 Schoeck G, Ehmann J, Fahnle M. Planar dissociations of $[101]$ superdislocations in TiAl: *Ab-initio* electron theory and generalized peierls-nabarro model. *Philos Mag Lett*, 1998, 78: 289–295
- 40 Paidar V, Legros M, Couret A, et al. Nonequilibrium dissociations of dislocations. In: Lukac P, ed. *6th International Symposium on Plasticity of Metals and Alloys (ISPMA 6)*. Clausthal Zellerfe, Germany: Trans Tech Publications, 1994. 97: 201–206
- 41 Paidar V, Kishida K, Yamaguchi M. Polarization of plastic deformation modes in polysynthetically twinned TiAl crystals. *J Mater Res*, 2003, 18: 702–708