

晶粒尺寸对 γ -TiAl 合金力学性能影响的 纳米压痕研究

曹 鹏^{1,2}, 芮执元^{1,2}, 付 蓉^{1,2}, 曹 卉^{1,2}, 荆昌锋^{1,2}, 者建武³

(1. 兰州理工大学, 甘肃 兰州 730050)

(2. 数字制造技术与应用省部共建教育部重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

(3. 甘肃省计算中心, 甘肃 兰州 730030)

摘 要: 为研究纳米压痕过程中晶粒尺寸对 γ -TiAl 合金力学性能及变形行为的影响, 利用 Voronoi 方法建立多晶 γ -TiAl 模型, 采用分子动力学方法模拟压头压入不同晶粒尺寸模型的压痕过程, 得到相应尺寸下的载荷-深度曲线, 并计算了 7 种晶粒尺寸下 γ -TiAl 的硬度。结果表明: 当晶粒尺寸小于 9.9 nm 时, 晶粒尺寸与硬度表现出反 Hall-Petch 关系, 位错和晶界活动共同促使材料发生塑性变形, 晶界活动起主导作用。当晶粒尺寸大于 9.9 nm 时, 晶粒尺寸与硬度符合 Hall-Petch 关系, 晶界对材料变形影响较小, 位错主导基体发生塑性变形。另外, 分析了 γ -TiAl 在压痕过程中的应力传递和形变恢复过程, 发现致密晶界网络结构能够有效抑制压痕缺陷及内应力向材料内部传递; 晶粒尺寸越小, 压头下方的内应力分布越均匀, 沿压痕方向的弹性恢复比越小。

关键词: 晶粒尺寸; γ -TiAl; 纳米压痕; 力学性能; 分子动力学模拟

中图分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2021)06-2052-09

γ -TiAl 合金具有优异的高温强度、抗蠕变、抗氧化能力, 密度 (4 g/cm^3) 远低于镍基合金 (8 g/cm^3), 且弹性模量较高, 这些优点使其在航天航空等领域中有巨大的应用潜力^[1,2]。然而, 室温塑性差是其实际应用的主要障碍。近年来, 针对 γ -TiAl 合金, 研究者们通过添加微量元素、改变微观组织、合金化等在一定程度上改善了 γ -TiAl 合金的室温塑性, 但依旧存在不足^[3]。Hall^[4]和 Petch^[5]发现金属材料的屈服强度随晶粒尺寸的减小而增大, 即 Hall-Petch (H-P) 效应。基于这种关系, 人们发现细化晶粒是同时提高金属强度和塑性的重要手段。研究表明^[6,7], γ -TiAl 合金的塑性随晶粒尺寸的减小而提高。可见, 晶粒尺寸对 γ -TiAl 合金的力学性能有较大影响。另外, 材料的性能取决于特定的微观结构, 因此, 从微观角度研究 γ -TiAl 室温塑性差的原因是对现有宏观机制的一种补充。

材料在微纳尺度下具有不同于宏观材料的变形机制, 宏观实验已不适用于微观研究, 而纳米压痕是研究材料微纳尺度力学性能的有力工具, 通过压头对材料表面进行压痕, 可以得到载荷-深度曲线, 并获取材料的各种力学性能, 如弹性模量、硬度、断裂韧性和

应变硬化效应等。国内外学者基于纳米压痕方法已经对 TiAl 合金的塑性变形机理进行了试验研究^[8-10], 发现 Al 含量和局部变形对 γ -TiAl 的力学性能有较大影响。然而, 纳米压痕试验成本高、耗时, 且不能深入研究材料在微观尺度下的变形机理。分子动力学模拟作为研究材料在微观尺度下变形机理的有效手段^[11,12], 能够模拟压头与基体的作用过程, 并能实时展现压痕过程中原子的瞬态信息以及缺陷演化过程。因此, 纳米压痕分子动力学模拟成为研究材料微观性能和晶体内部塑性形变机制的有效方法^[13,14]。Fan 等^[15]基于纳米压痕模拟研究了晶粒尺寸对多晶硅变形机理的影响。结果表明: 在压痕过程中最大剪切应力控制了压痕过程中的塑性变形, 位错形核始终出现在压头下方, 晶粒尺寸越小, 梯度应变越大, 所有模型均遵循反 H-P 关系。Zhao 等^[16]对不同晶粒尺寸的多晶铜进行了纳米压痕试验模拟, 发现小晶粒度的多晶铜有更高的内应力和原子势能, 且致密的晶界网络结构限制了内应力和原子势能向晶内传播。Huang 等^[17]采用分子动力学模拟方法研究了单晶和多晶铜的纳米压痕过程, 发现多晶铜在 7 nm 以下出现反 H-P 关系。当晶粒尺寸小

收稿日期: 2020-06-27

基金项目: 国家自然科学基金 (51865027)

作者简介: 曹 鹏, 男, 1995 年生, 硕士生, 兰州理工大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730050, E-mail: cao10061995@163.com

于 5 nm 时, 压痕过程中等效应力减小, 并出现应力诱导晶粒长大现象; 当晶粒尺寸大于 5 nm 时, 压痕后的等效应力几乎没有变化, 对于较大的晶粒尺寸, 位错从晶界处形核并在相反位置湮灭。此外, Zhou 等^[18]通过纳米压痕分子动力学模拟研究了晶粒尺寸和形状对多晶铜力学性能的影响, 发现存在 3 种不同的晶粒尺寸区域和 2 种临界晶粒尺寸, 这 3 种区域暗示了不同的 H-P 关系且伴随着多晶铜形变机制的转变。

通过以上分析模拟发现, 目前学者们主要针对纯金属, 运用纳米压痕的分子动力学模拟研究晶粒尺寸对材料变形机制和力学性能的影响。本研究针对 γ -TiAl 合金, 研究晶粒尺寸对其纳米尺度下力学性能的影响, 拟通过分子动力模拟纳米压痕过程, 对不同晶粒尺寸 γ -TiAl 的载荷-位移曲线、硬度-深度关系、位错演化和压头下应力分布等进行研究, 揭示晶粒尺寸对 γ -TiAl 形变机制和力学性能的影响。

1 建模与模拟

1.1 模型的建立

图 1 为采用 Voronoi 方法和 AtomsK 软件^[19]建立的多晶 γ -TiAl 纳米压痕分子动力学模型, 模型的基体尺寸为 24 nm×24 nm×24 nm, 包含 863 796 个原子。研究了同一基体尺寸下 7 种不同晶粒尺寸, 即 4.0、6.0、8.1、9.9、11.8、13.9 和 15.6 nm, 对 γ -TiAl 力学性能和变形机制的影响, 其中晶粒尺寸大小可通过改变模型中晶粒数量和模型维数来实现。在本研究中, 仅通过改变晶粒数量来获得不同晶粒尺寸模型, 其中晶粒尺寸 d 和晶粒数 n 的关系可用公式 (1) 来表述。

$$n = \frac{6v}{\pi d^3} \quad (1)$$

式中, v 是基体体积, n 是晶粒个数, 其范围为 7~400。

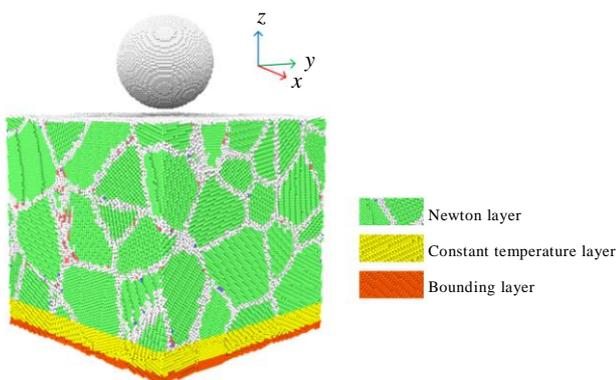


图 1 γ -TiAl 纳米压痕分子动力学模型

Fig.1 Nanoindentation model of γ -TiAl

由于金刚石压头硬度高、导热性好, 因此压痕过程中采用半径 5.0 nm 的球形金刚石压头 (晶格常数为 0.3566), 压头原子数为 92 394。金刚石硬度远高于 γ -TiAl, 所以 MD 模拟中压头被视为刚体。基体包括牛顿层、恒温层和固定层, 牛顿层和恒温层的原子运动遵循牛顿运动定律, 牛顿运动方程使用 Velocity-Verlet 时间积分算法, 恒温层控制系统的温度保持不变, 边界层固定基体底部以防止压痕过程中基体移动。模型 x 和 y 方向采用周期性边界条件以消除仿真中尺寸效应的影响, 压痕方向 (z 方向) 采用自由边界以不限制与压头接触表面的原子运动。

压痕过程中, 原子间的作用力受势函数控制, 势函数选取直接影响计算结果的精确度。模型中有 3 种不同类型的原子 Al、Ti 和 C, EAM 势函数^[20]被用于表达 Al-Ti 原子之间的作用力, 压头是刚体, 所以忽略 C-C 原子之间的作用力, Lennard-Jones (LJ) 势函数被用来描述 C-Al 和 C-Ti 之间的相互作用, 其表达式如下^[21]:

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad r < r_0 \quad (2)$$

式中, ε 为势阱深度, σ 为平衡距离, r_0 为截断距离, 通常截断距离是平衡距离的 2.5 倍。该函数由 2 项组成: 第 1 项表示排斥能, 第 2 项表示吸引能。其中各参数如表 1 所示^[22]。

1.2 压痕模拟过程

金刚石压头距基体上表面 0.7 nm, 远大于压头原子与基体原子的自由程。压痕前, 采用共轭梯度法进行能量最小化, 并在等温等压系综 (NPT 系综) 用 Nose-Hoover 热浴法在 293 K 下弛豫, 弛豫时间 400 ps。系统平衡后 (图 2 所示), 总能量达到最小值且在小范围内波动。模拟时间步长为 1fs, 远小于碳与铝及钛原子之间的震荡频率。采用 50 m/s 恒定速率进行压痕, 压痕深度为 3.3 nm, 期间每隔 0.1 nm 记录 1 次数据, 以测量基体在对应压痕深度下各原子坐标及应力等模拟参数; 当达到最大深度时, 压头缓慢移回初始位置进行卸载。

表 1 Lennard-Jones 势函数参数

Table 1 Lennard-Jones potential function parameters used in simulation

Parameter	σ/nm	ε/eV	r_0/nm
C-Al	0.2976	0.315	0.744
C-Ti	0.3759	0.0314	0.9398

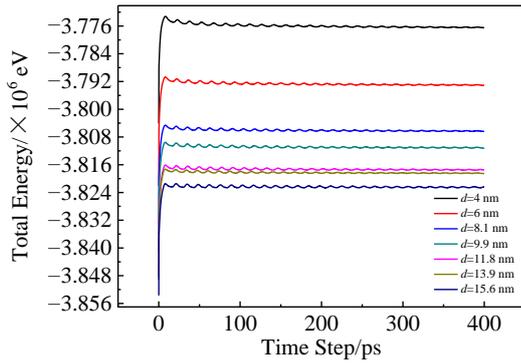


图 2 弛豫过程中不同晶粒尺寸基体总能量变化曲线

Fig.2 Total energy evolution of substrate with different grain sizes during relaxation

压头压入基体， γ -TiAl 将发生塑性变形，塑性变形通常伴随位错形核与滑移。为分析基体位错演化，采用 OVITO^[23]可视化软件分析分子动力学模拟计算过程中产生的数据，运用共近邻分析法(common neighbor analysis, CAN)^[24]和位错分析法(dislocation analysis, DXA)^[25]识别缺陷原子的结构和类型。在缺陷演化过程中，根据 CNA 着色识别基体原子结构，其中绿色原子为 fcc 结构，红色原子为 hcp 结构，白色原子为无序结构。此外，单层 hcp 原子代表孪晶界(TB)，双层 hcp 原子代表内禀层错(SISF)，双层 hcp 原子中间夹杂一层 fcc 结构原子代表外禀层错(SESF)。

2 结果与讨论

2.1 载荷-深度曲线

不同晶粒尺寸的多晶 γ -TiAl 合金在纳米压痕下的载荷-深度曲线如图 3 所示。在压痕过程中，压痕力为负表示压头与基体存在吸引力，压痕力为正表示压头与基体存在排斥力。由图 3 可知，所有载荷-深度曲线包括 4 个阶段。第 I 阶段，压头与基体接触。此时，

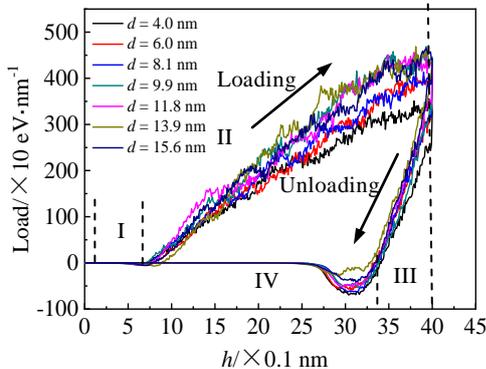


图 3 γ -TiAl 合金在纳米压痕下的载荷-深度曲线

Fig.3 Load-depth (h) curves of γ -TiAl alloy in nanoindentation

压痕力为负，说明基体与压头存在吸引力。第 II 阶段，压头压入基体。随着压入深度的增加，载荷也随之增大，且近似呈线性关系。在压痕初始阶段，基体发生弹性变形，晶粒尺寸变化对压痕力影响不大。当压痕深度为 1.5 nm 时，基体受压区域将发生明显的弹塑性转变，载荷-深度曲线出现较大幅度的波动，曲线整体呈上升趋势，但不同晶粒尺寸基体的压痕力增长率不同。这是因为基体在塑性变形阶段，位错-位错、位错-晶界间发生相互作用导致压痕力显著增加，但不同晶粒尺寸的模型因晶粒分布不同，使得晶界结构存在差异从而造成不同晶粒尺寸的基体中压痕力增长率不同，并且晶界随晶粒尺寸的减小而增多，也会影响压痕力。当晶粒尺寸为 9.9 nm 时，压痕力达到最大值 4579 eV/nm。第 III 阶段，卸载，即将压头从最大压痕深度处撤回。随着压头的上移，压痕力逐渐减小。当压痕力减小为零时，对应的压痕深度并不为零，这是因为基体在压痕过程中发生了明显的塑形变形。第 IV 阶段，压头继续上移至压痕力变为负值即压头与基体存在吸引力。此后压头继续撤回至初始位置，压痕力始终为 0。

基于载荷深度曲线，可以计算一些材料的力学参数，如硬度、弹性模量等。其中，材料硬度被定义为材料抵抗外力而发生局部塑性变形的能力，由公式(3)计算得到^[26]。

$$H = F_{\max} / A \tag{3}$$

式中， F_{\max} 是压痕过程中最大压痕力， A 是在最大压痕力下压头与基体的有效接触面积。

对于球形压头，其接触面积用公式(4)来表示^[27,28]。

$$A = \pi(2R - h)h \tag{4}$$

式中， h 是压痕深度， R 是压头的半径。

为确保模拟结果准确，本研究对 3 种相同晶粒尺寸的模型进行了纳米压痕模拟。硬度随晶粒尺寸变化的反平方关系如图 4 所示，可以看出，硬度分布存在 2 种不同的区域。当晶粒尺寸大于 9.9 nm 时， γ -TiAl 的硬度随晶粒尺寸的增大而减小；而当晶粒尺寸小于 9.9 nm 时， γ -TiAl 的硬度随晶粒尺寸减少而降低，此时，多晶 γ -TiAl 开始出现软化现象，材料硬度表现出反 H-P 关系。由此推断，9.9 nm 可能是 γ -TiAl 发生这种转变的临界晶粒尺寸。这与 Ding^[29]对 γ -TiAl 进行拉伸模拟得到的临界晶粒尺寸 8 nm 有所不同，这是因为本研究所建立模型的晶粒形状、尺寸、取向具有随机性。此外，在很多纳米材料中都发现存在反 H-P 临界晶粒尺寸，如 Al^[30]、Cu^[31]等材料。由此，为揭示多晶 γ -TiAl 中硬度存在反 H-P 关系的具体原因，研究了

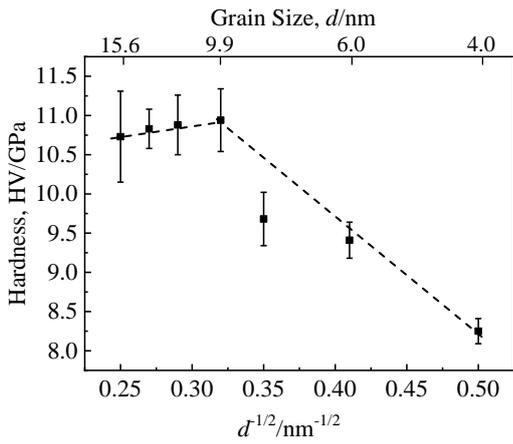


图 4 硬度随晶粒尺寸反平方关系

Fig.4 Relationship between hardness and inverse square of grain size

晶粒尺寸分别为 4、8.1、11.8 和 15.6 nm 时，纳米压痕过程中位错演化过程与应力分布行为。

2.2 位错演化

4 种不同晶粒尺寸的模型在压头压入基体时的位错演化过程如图 5 所示。加载过程中，压头下方区域原子将发生弹塑性转变，并伴随着弹性恢复能的释放，而弹性恢复能释放将导致压头下方区域产生位错。当压痕深度为 1.6 nm (图 a2~d2) 时，位错首先在压头周围和晶界附近形核。随着压痕深度增加至 3.3 nm (图 a3~d3) 时，位错穿越晶界并向相邻晶粒中滑移，且位错数量明显增多。小晶粒尺寸中位错数量明显少于大晶粒，这是因为致密晶界结构可以有效限制并吸收一定量的位错，从而有效减小了缺陷范围。大晶粒中晶

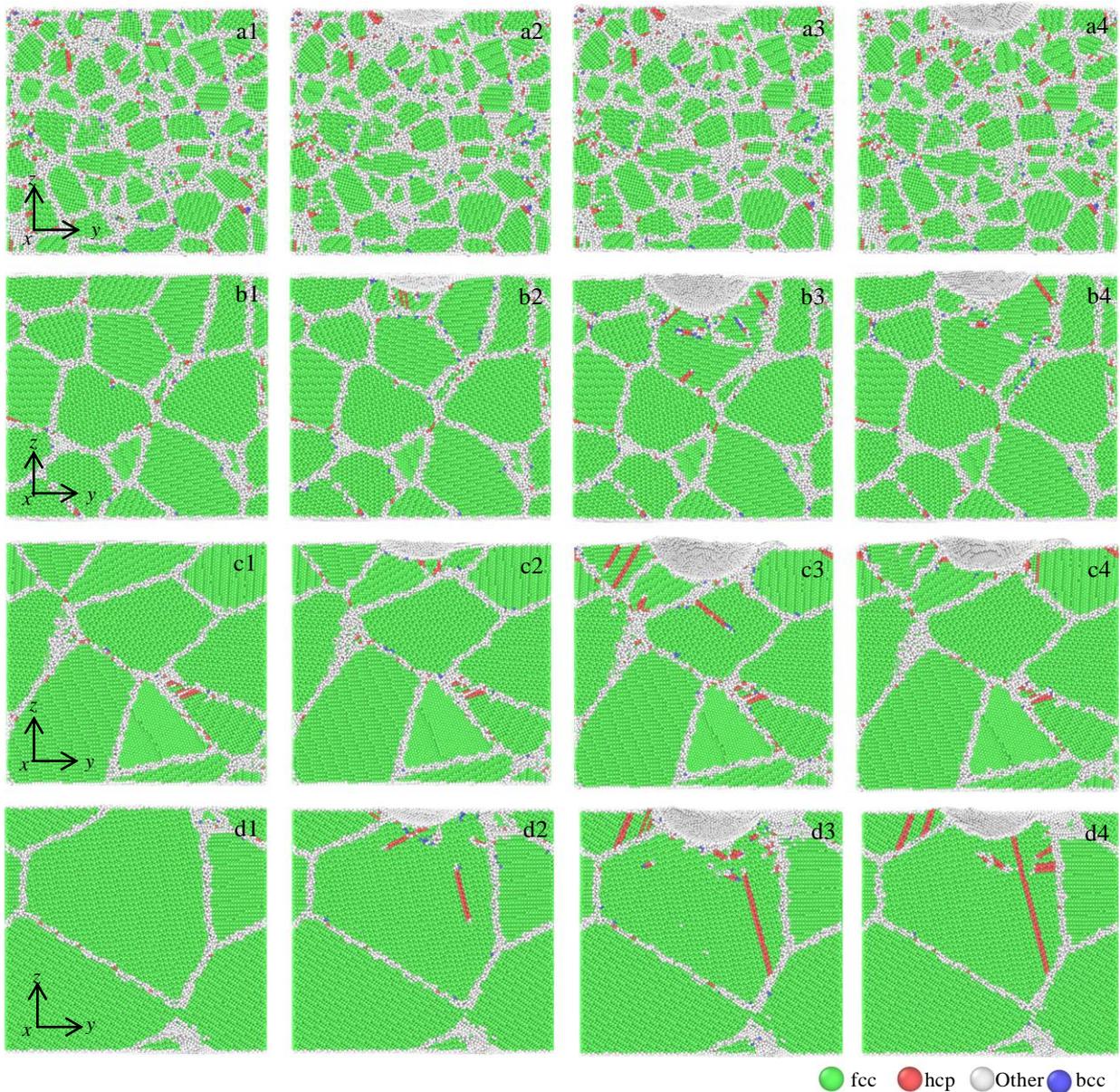


图 5 不同晶粒尺寸 γ -TiAl 位错演化过程

Fig.5 Dislocation evolution process of polycrystalline γ -TiAl alloy: (a) $d=4$ nm, (b) $d=8.1$ nm, (c) $d=11.8$ nm, (d) $d=15.6$ nm; (a1~d1) before the indentation; (a2~d2) $h=1.6$ nm; (a3~d3) final indentation depth of 3.3 nm; (a4~d4) unloading of indentation

界较少，位错主要在压头下的晶粒中滑移。而在卸载过程中，压头下方区域将发生弹性恢复，由图 a4~d4 可知，压头下方位错和缺陷原子数减少。与小晶粒尺寸模型相比，大晶粒尺寸中缺陷变化明显。

对晶粒尺寸为 8.1 和 11.8 nm 基体进行位错演化分析，以探究基体在压痕过程中出现临界晶粒尺寸的原因。图 6 是晶粒尺寸为 8.1 nm 时基体中的位错演化过程。在压痕深度为 0.5 nm (图 6a) 时，位错在晶粒 G1 中形核，基体开始发生塑性变形。随着压痕深度的增加，位错核演变成位错，随后位错在 G1 中沿(111)面滑移并破坏正常原子的堆垛顺序产生堆垛层错。在压痕深度为 1.65 nm (图 6b) 时，压头下方晶粒 G1 中产生内禀层错，但晶界阻碍了内禀层错的滑移，故位错在晶界处塞积。这与 Monchus 等^[7]对 γ -TiAl 进行拉伸测试实验观察到的现象相吻合。随着压痕深度进一步增大，塞积群中的位错数量增多，塞积群在晶界 1 处产生应力集中，使得位错穿越晶界向相邻晶粒内部滑移 (图 6c)。此外，在晶粒 G2 中 (图 6c)，2 个不同滑移面上的内禀层错相交形成面角位错 (Lomer-Cottrell dislocation)，阻碍了不全位错继续向晶内滑移。同时，发现面角位错不仅出现在 8.1 nm 的基体中，而且在晶粒尺寸为 4、11.8 和 15.6 nm 时也存在，因此面角位错不是导致基体发生形变机制转变的原因。面角位错是固定位错，通常不发生滑移和攀移。但随着压痕深度的增加，晶界 2 处所受应力增大，面角位错被破坏，晶界 2 处原子开始向晶内扩散，晶界发生滑移和扩散 (图 6d)，导致晶粒 G2 与 G3 融合成晶粒 G4，同

时伴随有孪晶界 (TB) 出现。此外，Zhang 等^[32]对纳米多晶铜进行纳米压痕实验研究时也发现了晶粒长大现象，这与本研究模拟结果相符。

基体原子压痕前后的位移矢量图如图 6e 所示，为表达原子在压痕前后的运动趋势，晶粒内部原子被删除只留下晶界处原子，晶界和晶粒内部原子位移变化被标注。黑色箭头代表晶界滑移方向，黑色旋转箭头代表晶粒旋转方向。晶粒旋转是由晶界滑移引起的，晶粒旋转现象常出现在晶粒尺寸较小的晶体变形中，其依赖于基体所受外在应力和相邻晶粒的取向等因素影响，但并不是所有小晶粒尺寸的基体都会出现这种现象。此外，研究人员通过对 Al^[33]和 Ni^[34]的实验研究也发现了晶粒旋转现象，这与本研究模拟结果一致。

另外，通过对其它几组基体压痕位错演化过程分析，发现当晶粒尺寸小于 9.9 nm 时，压头下方晶界滑移和晶粒旋转现象较为普遍，这表明晶界活动对基体发生塑性变形有较大的影响。

晶粒尺寸为 11.8 nm 时的位错演化过程如图 7 所示。当压痕深度为 1.26 nm 时，位错在晶界 1 处形核并向晶粒 G1 内滑移。压痕深度为 1.90 nm 时，晶粒 G1 中出现堆垛层错。随着压痕力的增大，晶界 1 持续吸收来自压头的压应力而产生应力集中，导致位错在晶界 1 下侧晶粒 G2 中形核 (图 7c)。当压痕力进一步增大，位错在晶界 1 下侧处发射，然后在晶粒 G2 中传播 (图 7d)。此外，在缺陷演化过程中，没有发现晶界滑移和晶粒旋转现象，这表明晶界活动在位错演化过程中不起主导作用。

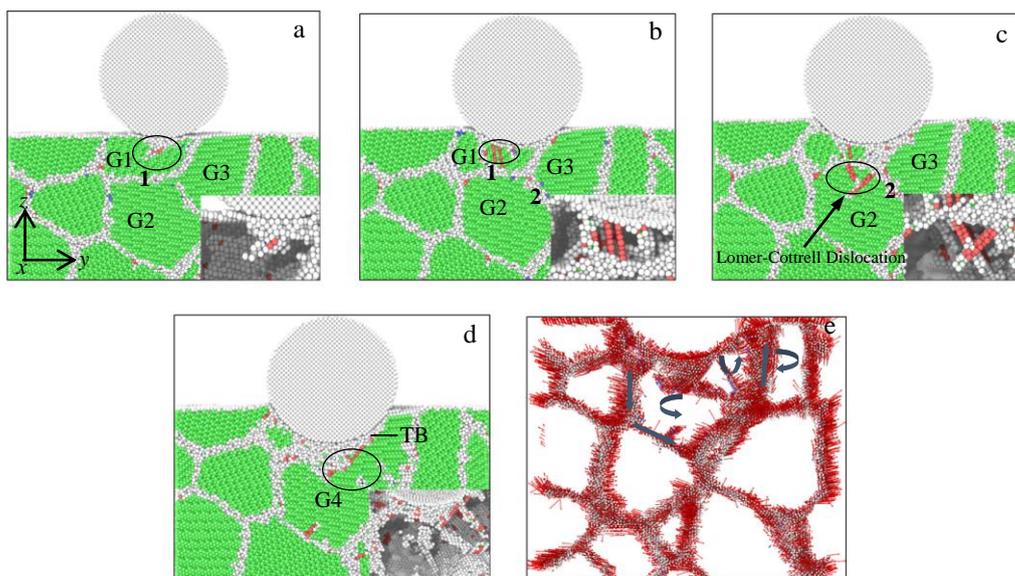


图 6 晶粒尺寸为 8.1 nm 模型压头下局部原子结构变化以及压头下晶界处原子由压痕前到压痕后的位移变化趋势

Fig.6 Configuration of local atoms beneath the indenter of γ -TiAl (8.1 nm): (a) $h=0.5$ nm, (b) $h=1.65$ nm, (c) $h=2.2$ nm, (d) $h=3.1$ nm; (e) displacement of atoms in grain boundaries from the initial state to total loading (the insets are partial enlarged views of the dislocation in the ellipse area)

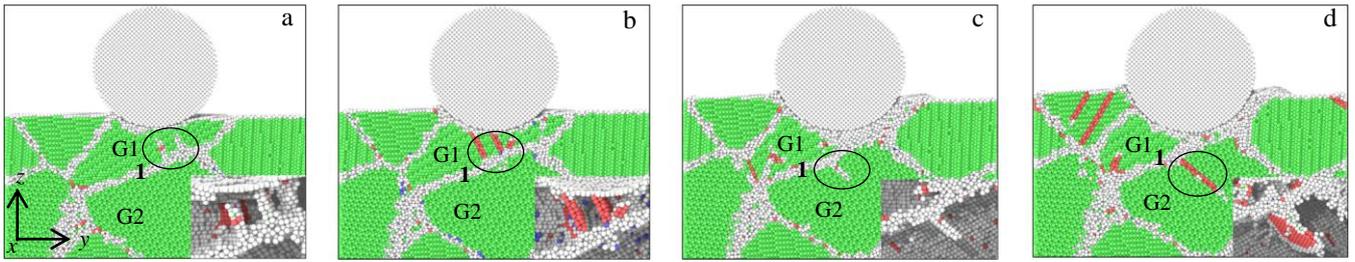


图 7 晶粒尺寸为 11.8 nm 模型位错演化过程

Fig.7 Dislocation evolution process of γ -TiAl with a grain size of 11.8 nm: (a) $h=1.26$ nm, (b) $h=1.90$ nm, (c) $h=2.90$ nm, (d) $h=3.30$ nm (the insets are partial enlarged views of the dislocation in the ellipse area)

由此推断， γ -TiAl 硬度出现反 H-P 关系时必定伴随着形变机制的转变。当晶粒尺寸小于临界值 9.9 nm 时，晶界活动是材料发生塑性变形的因素；当晶粒尺寸大于临界值时，位错主导塑性变形。

2.3 压痕过程中内应力传递分析

纳米压痕过程中，压头对基体原子的挤压会导致基体内局部区域的应力升高，随着压痕深度的不断增加，应力会沿压入方向向基体内部传递，由此导致材料内部应力变化将直接影响基体原子结构的转变。本研究通过计算静水压力(hydrostatic stress, HY)和范式等效应力(von Mises stress, VM)，分析了晶粒尺寸为 4.0、8.1、11.8、15.6 nm 时的内应力传递分析。HY 和 VM^[16]的计算，如公式 (5) 和 (6) 所示：

$$\sigma_{hy}(i) = \frac{1}{3}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}) \quad (5)$$

$$\sigma_{vm}(i) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\frac{(\sigma_{xx}(i) - \sigma_{yy}(i))^2 + (\sigma_{yy}(i) - \sigma_{zz}(i))^2 + (\sigma_{xx}(i) - \sigma_{zz}(i))^2}{+6(\sigma_{xy}(i)^2 + \sigma_{yz}(i)^2 + \sigma_{zx}(i)^2)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

式中， σ_{hy} 是静水压力， σ_{vm} 是范式等效应力， i 是原子

序号； σ_{xy} 、 σ_{xz} 、 σ_{zy} 是原子 3 个正交面的应力分量； σ_{xx} 、 σ_{yy} 、 σ_{zz} 分别是原子 3 个正交方向的应力分量。

压痕深度为 3.3 nm 时，晶粒尺寸为 4.0、8.1、11.8 和 15.6 nm 时的原子静水压力分布如图 8 所示，受压原子标记为蓝色，受拉原子标记为红色。可见，不同晶粒尺寸的最大静水压力都以压应力形式分布在压头下方局部晶粒中，但压应力分布存在明显差异，即晶粒尺寸越小，静水压力分布范围越小且更为均匀。这是由于晶界结构可以吸收来自压头的压应力，同时，晶界还阻碍静水压力向相邻晶粒内部扩展。

压痕深度为 3.3 nm 时，上述 4 种晶粒尺寸的范式等效应力分布如图 9 所示，红色表示高应力，蓝色表示低应力。由于晶内原子按照 fcc 结构规则排列，而晶界原子排列疏松且不规则，这导致晶界区域尤其是三叉晶界附近有较高的 VM。与压头接触区域应力集中明显，随着压痕深度的增加，应力由应力集中区域向相邻晶粒扩散，在大晶粒基体中尤为明显。小晶粒基体由于致密晶界网络的存在，VM 分布在压头下方局部区域。此外，与大晶粒尺寸基体相比，小晶粒基体沿压痕方向有较低范式等效应力梯度。

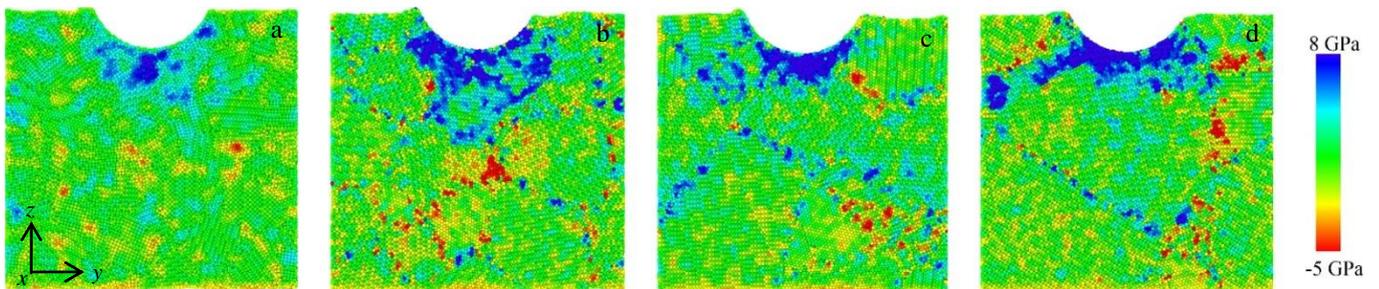


图 8 不同晶粒尺寸 γ -TiAl 合金压痕深度为 3.3 nm 时静水压力分布

Fig.8 Hydrostatic pressure distribution of γ -TiAl alloy with different sizes at indentation depth of 3.3 nm: (a) $d=4.0$ nm, (b) $d=8.1$ nm, (c) $d=11.8$ nm, and (d) $d=15.6$ nm

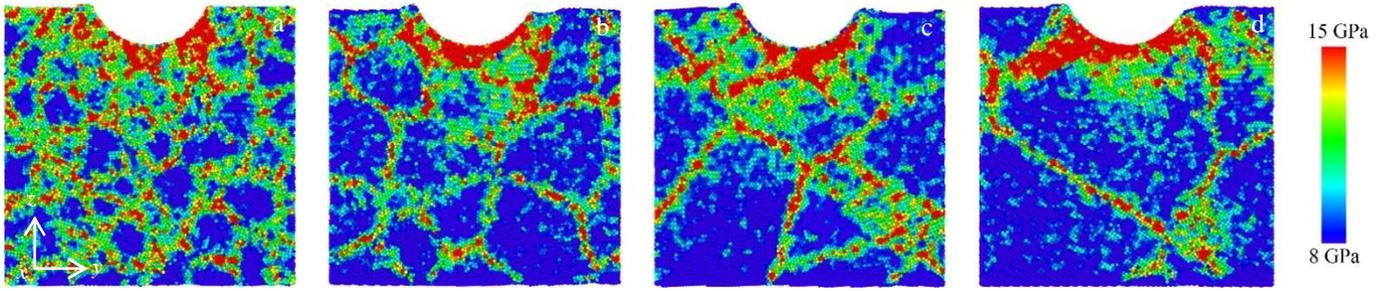


图 9 不同晶粒尺寸 γ -TiAl 压痕深度为 3.3 nm 时范式等效压力分布

Fig.9 Von Mises stress distribution of γ -TiAl alloy with different sizes at indentation depth of 3.3 nm: (a) $d=4.0$ nm, (b) $d=8.1$ nm, (c) $d=11.8$ nm, and (d) $d=15.6$ nm

2.4 压痕过程中形变分析

不同晶粒尺寸基体表面在压痕前后的形态变化如图 10 所示，原子按照其所处高度着色。由图 10a 和图 10b 可知，压痕达到最大深度时，2 种模型的基体表面原子位移变化相似。卸载后（图 10c 和 10d），原子位移发生了变化，晶粒尺寸较大的基体弹性恢复大于晶粒尺寸小的基体。

为分析不同晶粒尺寸基体的压痕区域在压头压入及卸载后的形变，计算了 2 种弹性恢复比^[35]，即宽度(w_{er})弹性恢复比，如公式(7)，深度(l_{er})弹性恢复比如公式(8)：

$$w_{er} = \frac{w_0 - w_1}{w_0} \times 100\% \quad (7)$$

$$l_{er} = \frac{l_0 - l_1}{l_0} \times 100\% \quad (8)$$

式中， w_0 、 w_1 为基体卸载前后的宽度变化， l_0 、 l_1 为深度变化，如图 11a 所示。

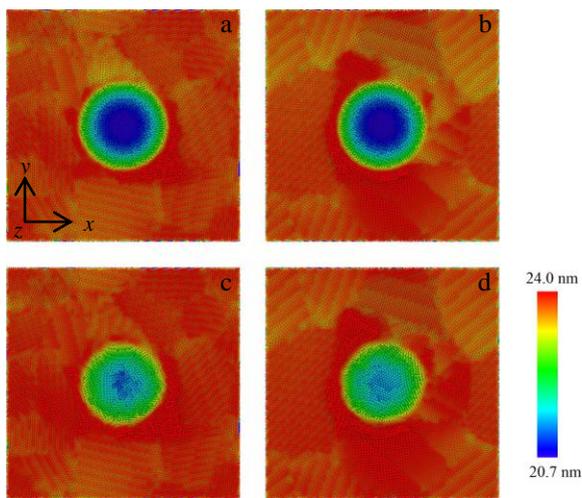


图 10 压痕过程中原子位移图 (xoy 平面)

Fig.10 Atomic displacement diagrams (xoy plane) of γ -TiAl: (a, c) $d=8.1$ nm, and (b, d) $d=11.8$ nm; (a, b) $h=3.3$ nm and (c, d) unloading of indentation

压痕过程中基体弹性恢复比与晶粒尺寸的关系如图 11b 所示。由图可知，基体宽度恢复比对晶粒尺寸不敏感，在 5% 左右波动，而深度恢复比随晶粒尺寸的增大而增加。这是因为弹性恢复比常与材料在压痕过程中发生的弹塑性变形密切相关。由于晶界本身存在诸多缺陷如空穴、杂质原子和位错等，则晶界处原子存储的弹性势能小于晶内原子。因此，在纳米压痕过程中，晶界比例将显著影响基体塑性变形行为。而晶界占比随晶粒尺寸的减小而增大，所以晶粒尺寸较大的基体深度弹性恢复比明显较大。在压痕过程中，基体原子受力集中

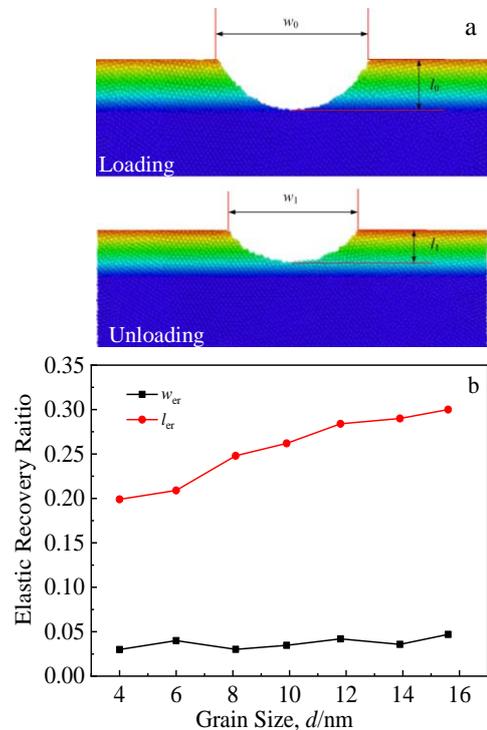


图 11 纳米压痕模型弹性恢复比的定义模型及弹性恢复比与 γ -TiAl 合金晶粒尺寸的关系

Fig.11 Definition of elastic recovery for nanoindentation model (a); relationship between elastic recovery ratio and grain size of γ -TiAl alloy (b)

在压头下方区域,此处原子变形远大于压痕宽度方向原子变形,导致 γ -TiAl宽度弹性恢复比远小于深度弹性恢复比。

3 结论

1) 晶粒尺寸为 9.9 nm, 是出现反 H-P 关系的临界尺寸。当晶粒尺寸小于 9.9 nm 时, γ -TiAl 合金的硬度与晶粒尺寸表现出反 H-P 关系, 位错和晶界活动共同促使材料发生塑性变形, 晶界活动起主导作用。当晶粒尺寸大于 9.9 nm 时, 晶粒尺寸与硬度符合 H-P 关系, 晶界对材料塑性变形影响较小, 位错主导基体发生塑性变形。

2) 在压痕过程中, 压头下方有明显的静水压力梯度和范式等效应力梯度。静水压力主要分布在压头下方局部区域, 范式等效应力则分布在晶界及压头下方区域, 并且晶粒尺寸越小, 静水压力和范式等效应力分布更为均匀。另外, 小晶粒尺寸引起的致密晶界网格结构能够有效抑制压痕缺陷及内应力向材料内部传递。

3) 在压痕过程中, 由于晶界处储存的弹性势能小于晶内原子, 而晶界占比随晶粒尺寸的增大而减小。因此, γ -TiAl 的深度弹性恢复比随晶粒尺寸的增大而增加。此外, 压入方向的原子变形远大于压痕宽度方向原子的变形, 则宽度弹性恢复比远小于深度弹性恢复比, 并且宽度弹性恢复比对晶粒尺寸不敏感。

参考文献 References

- [1] Clemens H, Mayer S. *Advanced Engineering Materials*[J], 2013, 15(4): 191
- [2] Clemens H, Mayer S. *Materials at High Temperatures*[J], 2016, 33(4-5): 560
- [3] Cheng Zhiyong(陈志勇), Wu Lijuan(吴丽娟), Zhou Feng(周峰) *et al. Materials Review(材料导报)*[J], 2014, 28(9): 11
- [4] Hall E O. *Proceedings of the Physical Society Section B*[J], 1951, 64(9): 747
- [5] Petch N J. *Journal of the Iron and Steel Institute*[J], 1953, 174: 25
- [6] Kim Y. *JOM*[J], 1994, 46(7): 30
- [7] Monchoux J, Luo J, Voisin T *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2017, 679: 123
- [8] Huape E, Villafañe A M, Soto R P T *et al. International Journal of Science and Advanced Technology*[J], 2015, 5(8): 1
- [9] Appel F, Paul J D H, Staron P *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2017, 709: 17
- [10] Wen Y, Xie L, Wang Z *et al. Journal of Materials Research and Technology*[J], 2019, 8(4): 3434
- [11] Cao H, Rui Z Y, Feng R C *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2019, 48(4): 1102
- [12] Luo Dechun(罗德春), Zhang Ling(张玲), Fu Rong(付蓉) *et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2018, 47(3): 853
- [13] Begau C, Hartmaier A, George E P *et al. Acta Materialia*[J], 2011, 59(3): 934
- [14] Fan X C, Rui Z Y, Cao H *et al. Materials*[J], 2019, 12(5): 770
- [15] Fan J, Li J, Huang Z *et al. Computational Materials Science*[J], 2018, 144: 113
- [16] Zhao P Y, Guo Y B. *Computational Materials Science*[J], 2018, 155: 431
- [17] Huang C, Chiang T, Fang T *et al. Applied Surface Science*[J], 2015, 353: 494
- [18] Zhou K, Liu B, Yao Y *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2014, 615: 92
- [19] Hirel P. *Computer Physics Communications*[J], 2015, 197: 212
- [20] Zope R R, Mishin Y. *Physical Review B*[J], 2003, 68(2): 024 102
- [21] Blonski S, Brostow W, Kubat J *et al. Physical Review B*[J], 1994, 49(10): 6494
- [22] Jun T, Armstrong D E, Britton T B *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2016, 672: 282
- [23] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(1): 015 012
- [24] Tsuzuki H, Branicio P S, Rino J P *et al. Computer Physics Communications*[J], 2007, 177(6): 518
- [25] Stukowski A, Albe K. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(8): 085 001
- [26] Gao Y, Ruestes C J, Tramontina D *et al. Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2015, 75: 58
- [27] Peng W, Sun K, Abdullah R *et al. Applied Surface Science*[J], 2019, 487: 22
- [28] Qiu C, Zhu P, Fang F *et al. Applied Surface Science*[J], 2014, 305: 101
- [29] Ding J, Tian Y, Wang L *et al. Computational Materials Science*[J], 2019, 158: 76
- [30] Xu W, Davila L P. *Materials Science and Engineering A*[J], 2018, 710: 413
- [31] Conrad H. *Metallurgical and Materials Transactions A-physical Metallurgy and Materials Science*[J], 2004, 35(9): 2681
- [32] Zhang K, Weertman J R, Eastman J A. *Applied Physics Letters*[J], 2005, 87(6): 833
- [33] Kumar S, Li X, Haque A *et al. Nano Letters*[J], 2011, 11(6): 2510
- [34] Wang Y B, Li B, Sui M L *et al. Applied Physics Letters*[J], 2008, 92(1): 011 903
- [35] Wang C H, Fang T H, Cheng P C *et al. Journal of Molecular Modeling*[J], 2015, 21(6): 1

Effect of Grain Size on Mechanical Properties of γ -TiAl Alloy by Nanoindentation

Cao Peng^{1,2}, Rui Zhiyuan^{1,2}, Fu Rong^{1,2}, Cao Hui^{1,2}, Yan Changfeng^{1,2}, Zhe Jianwu³

(1. Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

(2. Key Laboratory of Digital Manufacturing Technology and Application, Lanzhou 730050, China)

(3. Gansu Computing Center, Lanzhou 730030, China)

Abstract: To study the effect of grain size on the mechanical properties and deformation behavior of γ -TiAl alloy in nanoindentation process, a polycrystalline γ -TiAl model was established by Voronoi method, and the nanoindentation process for different grain sizes was simulated by molecular dynamics method. According to the simulation results, the Load-depth curves of different grain sizes were obtained, and the hardness of γ -TiAl alloy with 7 kinds of grain sizes was calculated. The results show that the relationship between hardness and grain size exhibits an inverse Hall-Petch when the grain size is less than 9.9 nm. Meanwhile, the grain boundary activity and dislocation sliding promote the plastic deformation of matrix, and the grain boundary activity plays a major role. However, the relationship between hardness and grain size conforms to Hall-Petch when the grain size exceeds 9.9 nm. The grain boundary has little effect on the plastic deformation, and the plastic deformation of matrix is dominated by dislocation. In addition, the stress transfer and deformation recovery of γ -TiAl were analyzed in the nanoindentation process, it was found that the dense grain boundary grid can effectively inhibit the indentation defects and the internal stress transfer to the matrix. When the grain size becomes smaller, the stress distribution will be more uniform under the indenter and the elastic recovery ratio will be smaller along the indentation direction.

Key words: grain size; γ -TiAl; nanoindentation; mechanical properties; molecular dynamics

Corresponding author: Rui Zhiyuan, Professor, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, P. R. China, Tel: 0086-931-2758258, E-mail: zhiy_rui@163.com