

# 分子动力学模拟不同层错能单晶 Ni 及其合金拉伸变形行为

陈建军<sup>1,2</sup>, 丁雨田<sup>1,2</sup>, 马元俊<sup>3</sup>, 高钰璧<sup>1,2</sup>, 王兴茂<sup>1,2</sup>

(1. 兰州理工大学 材料科学与工程学院, 甘肃 兰州 730050)

(2. 兰州理工大学 省部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

(3. 兰州石化职业技术大学 机械工程学院, 甘肃 兰州 730060)

**摘要:** 采用分子动力学模拟了不同尺寸模型的单晶 Ni 及 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> 合金[100]晶向拉伸变形过程, 确定了具有稳定塑性流变应力的模型尺寸, 进一步研究了在具有稳定塑性流变应力的相同模型下单晶 Ni 及其合金拉伸变形行为。结果表明, 层错能较低的单晶 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> 合金在小尺寸模型拉伸变形时, 容易形成多层孪晶结构或变形孪晶; 模型的横截面边长大于 30 倍的晶格常数时, 塑性流变阶段流变应力、相结构及位错密度随应变起伏趋于平稳。具有稳定流变应力的相同尺寸单晶 Ni 及其合金拉伸时, 层错能越低, 塑性变形时层错面的面积越大。Shockley 不全位错在单晶 Ni 及其合金塑性变形过程中起主导作用, 多层孪晶的形成伴随着位错耗尽, 变形孪晶的形成与湮灭则主要由位错饥饿机制主导。

**关键词:** 分子动力学模拟; 单晶 Ni 基合金; 层错能; 孪晶; 位错

中图分类号: TG111.2; TG146.1<sup>+</sup>5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)09-3186-12

过渡族金属 Ni 由于其原子的第三电子壳层基本上被填满, 可以溶解较多的合金元素进行合金化而仍然保持奥氏体结构, 是镍基高温合金的主要的基体元素<sup>[1]</sup>。合金元素加入 Ni 基体, 通常会降低奥氏体基体的层错能<sup>[1-4]</sup>; 层错能越低, 越容易发生孪生变形形成变形孪晶, 且在后续退火过程中越容易形成退火孪晶组织<sup>[5-7]</sup>。在镍基变形高温合金中, 通过界面调控获得细小晶粒组织, 并引入大量低能孪晶界可显著提高其综合力学性能<sup>[8-11]</sup>。因此, 探究镍基高温合金在合金化过程中不同层错能 Ni 基合金变形过程中的组织演变, 研究层错能与变形机制之间的关系对高性能镍基变形高温合金的成分-组织-性能一体化设计具有重要意义。

当前, 承温能力达到 700 °C 以上的涡轮盘用镍基变形高温合金中, Ni、Cr、Co、Al 元素的含量超过 80at%, 其中 Cr、Co 是主要的固溶强化元素, Al 元素为主要的沉淀强化元素<sup>[12-13]</sup>。本课题组前期<sup>[14]</sup>采用分子动力学模拟计算了 Cr、Co、Al 合金元素加入 Ni 基体形成的二元、三元以及四元 Ni 基合金的层错能, 结果表明, Cr、Co、Al 元素的加入都会降低 Ni 基体的层错能, 随着合金化元素种类的增多, Ni 基合金的层错能随合金元素含量的变化由一元线性关系转变为多

元非线性关系; Ni-Cr-Co-Al 合金的层错能随合金元素含量的变化出现层错能波动变化的极小值。基于层错能计算结果, 结合热力学计算设计并制备了较低合金化、低层错能的新型镍基高温合金<sup>[15]</sup>。为了揭示合金化过程层错能与变形机制之间的关系, 需研究合金化过程中不同层错能的 Ni 基合金的变形行为。

单晶作为组成多晶材料的基本单元, 为不同取向金属材料变形行为的模拟提供了方便。分子动力学广泛应用于金属材料界面能<sup>[16-17]</sup>、变形机制<sup>[18-19]</sup>、以及尺寸效应<sup>[20-22]</sup>的模拟。当前, 大量文献<sup>[17,23-27]</sup>报道了单晶金属的变形行为, 大多数文献报道主要集中在尺寸<sup>[17,23-24]</sup>、合金元素含量<sup>[25]</sup>以及不同变形参数对单晶拉伸变形机制的影响<sup>[26-27]</sup>。Sainath<sup>[23]</sup>、Cao<sup>[24]</sup>等对不同横截面尺寸[100]取向单晶铜纳米线进行了拉伸变形, 结果表明, 横截面尺寸不同, 微观变形机制不同, 横截面尺寸越大, 屈服强度越小, 杨氏模量越小, 塑性流变应力越稳定。Lu<sup>[25]</sup>等人采用分子动力学模拟了不同 Co 含量 Ni-Co 合金单晶纳米线[100]方向拉伸变形行为, 揭示了 Co 含量对 Ni-Co 合金力学性能的影响及拉伸过程位错演变。郑茂<sup>[26]</sup>与朱旭<sup>[27]</sup>都报道了周期性边界条件下不同块体单晶 Ni 拉伸变形行为, 由

收稿日期: 2022-09-16

基金项目: 国家重点研发计划(2017YFA0700703); 甘肃省科技重大专项(145RTSA004)

作者简介: 陈建军, 男, 1993 年生, 博士生, 兰州理工大学材料科学与工程学院, 甘肃 兰州 730050, E-mail: lutchenjianjun@163.com

于选择的模型尺寸不同,使得应力-应变曲线以及对应的变形机制皆存在不同程度的差异。当前,合金化过程引起的Ni基合金层错能已有大量报道,而层错能-层错-变形机制之间的关系有待研究。因此,本工作基于一种新型的低层错能镍基变形高温合金的成分<sup>[15]</sup>,通过建立不同模型的块体单晶Ni及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金[100]取向的拉伸变形,研究不同层错能Ni及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金在不同尺寸模型下拉伸变形行为,揭示不同层错能Ni基合金拉伸时可能发生的变形机制。通过流变应力、相结构、位错长度与位错密度的变化确定相同的拉伸变形模型,进一步研究不同层错能单晶Ni、Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub>、Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub>、Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金拉伸变形行为,为镍基高温合金的成分-组织-性能一体化设计提供理论参考。

## 1 建模与方法

### 1.1 Ni及其合金的层错能

表1为分子动力学模拟方法计算的Ni、Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub>、Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub>、Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金的平衡晶格常数和层错能<sup>[14]</sup>。可以看出,4种合金的平衡晶格常数均大于Ni的晶格常数0.352 nm, Ni的层错能与试验结果(120~130 mJ·m<sup>-2</sup>)<sup>[28]</sup>非常吻合。Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub>合金的层错能比Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub>合金低,表明二元合金中Cr元素降低层错能的能力大于Co,这与文献<sup>[2,4,29-30]</sup>模拟结果一致。同时,对比Ni及Ni基合金的层错能发现,合金化程度越高,层错能越低。

### 1.2 单晶Ni及其合金拉伸变形

采用大规模分子动力学模拟软件LAMMPS<sup>[31]</sup>沿

X[100]、Y[010]、Z[001]方向创建纵向长度为 $6a_0$  nm,正方形横截面边长依次为 $0.8a_0$ 、 $0.1a_0$ 、 $0.2a_0$ 、 $0.3a_0$ 、 $0.4a_0$ 、 $0.5a_0$  nm的fcc结构Ni及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金单晶模型进行单轴拉伸模拟,如图1所示。采用Diana Farkas与Alfredo Caro提出的针对fcc结构Fe-Ni-Cr-Co-Al五元合金的嵌入原子法(EAM)势函数,势函数模型设计方法与为单原子金属创建可靠的原子势的方法类似,同时在Fe-Ni-Cr-Co-Al五元合金中进行了晶格常数、层错能的分子动力学模拟,考虑了Al含量较少的情况,均获得了可靠的实验数据<sup>[32-33]</sup>。为了消除边界效应,在X、Y、Z方向均采用周期性边界条件,利用Nose/Hoover热浴法<sup>[34]</sup>使整个体系保持恒温,首先在等温等压(NPT)系综下通过共轭梯度法(conjugate gradient method)<sup>[35]</sup>进行能量最小化,时间步长为1 fs。然后在300 K退火并弛豫50 ps获得稳定的能量和温度,最后采用NPT系综沿X轴均匀施加载荷,进行300 K拉伸变形,应变速率为 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ 。为了观察块体单晶模型在拉伸过程中缺陷的演变,将确定拉伸应变选为50%。根据应力-应变曲线、相结构演变以及位错演变,选择合适的模型尺寸,建立单晶Ni、Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub>、Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub>、Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金模型进行相同条件的单晶拉伸。采用可视化软件OVITO<sup>[36]</sup>中的共近邻分析(CNA)<sup>[37]</sup>和位错提取算法(DXA)<sup>[38]</sup>对模拟过程产生的相结构、层错、位错等结构进行分析。

## 2 结果与分析

### 2.1 单晶Ni及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金拉伸应力-应变曲线

图2a、2b分别为不同横截面边长模型下单晶Ni

表1 Ni及Ni基合金的平衡晶格常数( $a_0$ )与层错能( $\gamma_{\text{ISF}}$ )

Table 1 Equilibrium lattice constants ( $a_0$ ) and stacking fault energies ( $\gamma_{\text{ISF}}$ ) of Ni and Ni-based alloys<sup>[14]</sup>

Alloy	Ni	Ni <sub>81</sub> Cr <sub>19</sub>	Ni <sub>81</sub> Co <sub>19</sub>	Ni <sub>62</sub> Cr <sub>19</sub> Co <sub>19</sub>	Ni <sub>57</sub> Cr <sub>19</sub> Co <sub>19</sub> Al <sub>5</sub>
$a_0/\times 0.1 \text{ nm}$	3.52	3.5244	3.5244	3.5244	3.5446
$\gamma_{\text{ISF}}/\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$	125.25	109.34	119.80	97.89	79.36

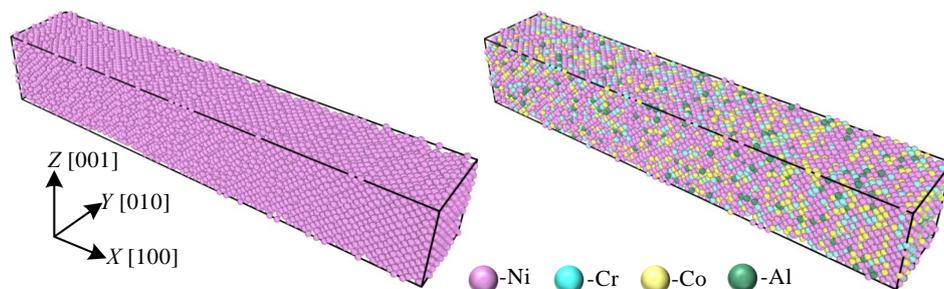


图1 单晶Ni及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金原子模型

Fig.1 Atomic models of monocrystalline Ni and Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> alloy

及  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金拉伸应力-应变曲线。单晶 Ni 及  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金在不同尺寸的模型拉伸时，应力-应变曲线均呈现随应变的增加，首先发生弹性变形，其应力迅速增加，达到峰值应力(屈服应力)后，应力随应变的增加而迅速下降，发生塑性变形，应力下降到一定值后，随应变增加，流变应力上下起伏变化。单晶 Ni 及  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金在弹性变性阶段，不同模型下应力-应变曲线重合，表明弹性模量不随模型尺寸变化，这与 Sainath<sup>[23]</sup>、Cao<sup>[24]</sup>报道的单晶 Cu 纳米柱尺寸拉伸不同。这是因为 Ni 及  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金拉伸时在三维方向都采用了周期性边界条件，消除了边界效应，相同成分材料单晶体中的原子之间结合强度相同，因而弹性模量相同<sup>[39]</sup>。同时，随着单晶模型横截面尺寸的增加，流变应力随应变的起伏幅度越小。从图 2b 可以看出， $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金模型的横截面边长为 2.84 nm 时，存在 2 个屈服应力值。图 2c、2d 分别为单晶 Ni 及  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金不同模型拉伸的屈服应力以及应变为 0.2~0.5 平均流变应力值。从图 2c 可以看出，随着单晶模型横截面尺寸的变化，单晶 Ni 的屈服强度变化不大，在 19.51~19.63 GPa 之间，与文献报道<sup>[26-27,40-41]</sup>的采用分子动力学模拟计算的结果相近。 $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金中(图 2d)，随着模型尺寸的变化， $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金屈服强度在

12.38~12.99 GPa 之间。单晶 Ni 及  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金中均表明，随单晶模型横截面尺寸的增加，平均流变应力先减小，到达一定横截面尺寸后(单晶 Ni 为 14.08 nm， $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金为 10.63 nm)，平均流变应力基本相同。分析认为，同样成分的块体单晶材料，小尺寸模型只能显示块体单晶中局部区域组织的变化，随着模型尺寸越大，块体单晶变形机制趋于相同，因而平均流变应力基本相同。对比单晶 Ni 及  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金拉伸屈服应力与平均流变应力值可以发现，单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金拉伸时屈服强度与平均流变应力相对较小。这是因为，溶质原子引入 Ni 基体增加了晶体的缺陷，原子间的结合力降低<sup>[42]</sup>。

### 2.2 单晶 Ni 及 $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$ 合金拉伸过程组织演变

图 3 为不同横截面边长模型的单晶 Ni 拉伸过程中的相结构变化。弹性变形初期，单晶 Ni 的晶体结构是面心立方(fcc)结构，随着应变的增加，晶体结构发生改变，出现了体心立方(bcc)结构以及 Other 结构，达到屈服应变时，bcc 与 Other 结构含量最大。随着应变的进一步增加，单晶 Ni 发生塑性变形，密排六方(hcp)结构出现，bcc 结构原子含量迅速减少，直至趋于零。横截面边长小于 7.04 nm 时，Other 结构的含量首先迅速减小，随后起伏增加。横截面边长大于 7.04 nm 时，Other 结构的含量首先迅速减小，随后趋于缓慢增加。根据 fcc

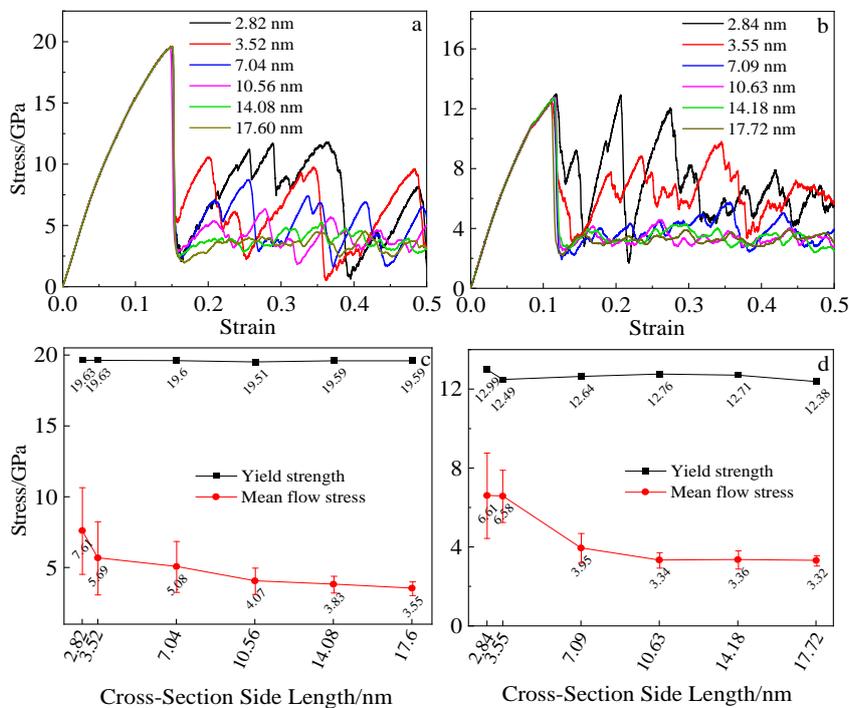


图 2 不同横截面边长的单晶 Ni 及  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金模型拉伸应力-应变曲线及力学性能

Fig.2 Stress-strain curves (a, b) and mechanical properties (c, d) for monocrystalline Ni (a, c) and  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  alloy (b, d) at different cross-sectional side length of model during tensile process

结构原子排布方式可知，[100]方向拉伸时，立方结构8个角位置的原子受力相同，面心原子的受力相同，拉伸使得8个角的原子运动包围了晶胞面心处原子，从而形成了bcc结构，原子在力的作用下无序排列则形成Other结构。已有研究表明，bcc结构与Other是形成层错的中间结构<sup>[43]</sup>。同时，塑性变形过程中原子发生运动，为了协调晶粒取向的变化，不同取向原子区域之间形成Other结构，即晶界<sup>[44]</sup>。hcp结构则是由于塑性变形使得原子面发生了滑移，形成的层错<sup>[45]</sup>。对比图3中不同横截面尺寸模型的单晶Ni拉伸过程中的结构变化可以看出，塑性变形阶段，模型尺寸越小，hcp与Other结构的含量越高，表明越容易形成层错以及发生单晶到多晶的转变。同时，Other结构随应变增加而缓慢增加，这是由于拉伸过程使得空位、位错等缺陷增加使缺陷处原子无序排列造成的。当横截面边长大于10.56 nm时，单晶Ni拉伸过程中的相结构变化基本相同。

结合应力-应变曲线与拉伸过程相结构变化图，对横截面边长为2.82与14.08 nm的单晶Ni模型的塑性变形阶段进行CAN与DXA分析，如图4。横截面边长为2.82 nm(图4a)，应变( $\epsilon$ )为0.151时，塑性变形开始，层错与Shockley不全位错在{111}滑移面同时形成。 $\epsilon=0.152$ 时，发生交滑移，层错含量迅速增加，形成相互交割的层错，层错交割处产生Hirth位错，Other结构由弥散转变为聚集。 $0.152 \leq \epsilon \leq 0.37$ 时的层错含量一

直保持在较高的状态， $\epsilon=0.235$ 时层错含量达到最大值，此时层错面相互平行或相互交割， $1/2[100]$ 全位错、Shockley不全位错、Hirth位错、Frank不全位错、Stair-rod等位错主要在层错交割处形成，并相互缠结(图4a<sub>3</sub>)，层错交割处Other结构聚集，趋于形成晶界。当 $\epsilon > 0.37$ 时，层错逐渐湮灭，层错含量减少， $\epsilon=0.5$ 时，单晶Ni中含有少量的层错与相互连接的Other原子团簇。横截面边长为14.08 nm(图4b)的单晶Ni模型拉伸， $\epsilon=0.150$ 时，塑性变形发生，层错产生。 $\epsilon=0.152$ 时，层错含量最大，此时层错相互平行或相互交割，Other结构由分散转变为聚集的团簇。 $\epsilon > 0.152$ 时，层错含量逐渐下降，直至 $\epsilon=0.5$ 时，层错含量最小，层错交割处同样出现明显的Other原子团簇。对比横截面边长为2.82与14.08 nm的单晶Ni模型拉伸过程组织变化可知，小尺寸模型单晶Ni拉伸时的组织在大尺寸的局部变化中皆有对应，小尺寸的模型反映了大尺寸模型中层错相互平行或相互交割的区域，这与图3中相同应变下小横截面尺寸的hcp与Other含量较多相对应。结合横截面边长为2.82 nm时 $\epsilon=0.235$ 和 $\epsilon=0.5$ 的原子图以及横截面边长为14.08 nm时 $\epsilon=0.152$ 和 $\epsilon=0.5$ 的原子图可以发现，层错减少阶段，层错的形核与湮灭是同时发生的，此时层错的湮灭速率大于形核速率。

图5为不同横截面尺寸的单晶Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金模型拉伸过程中相结构变化。可以看出，弹性变形

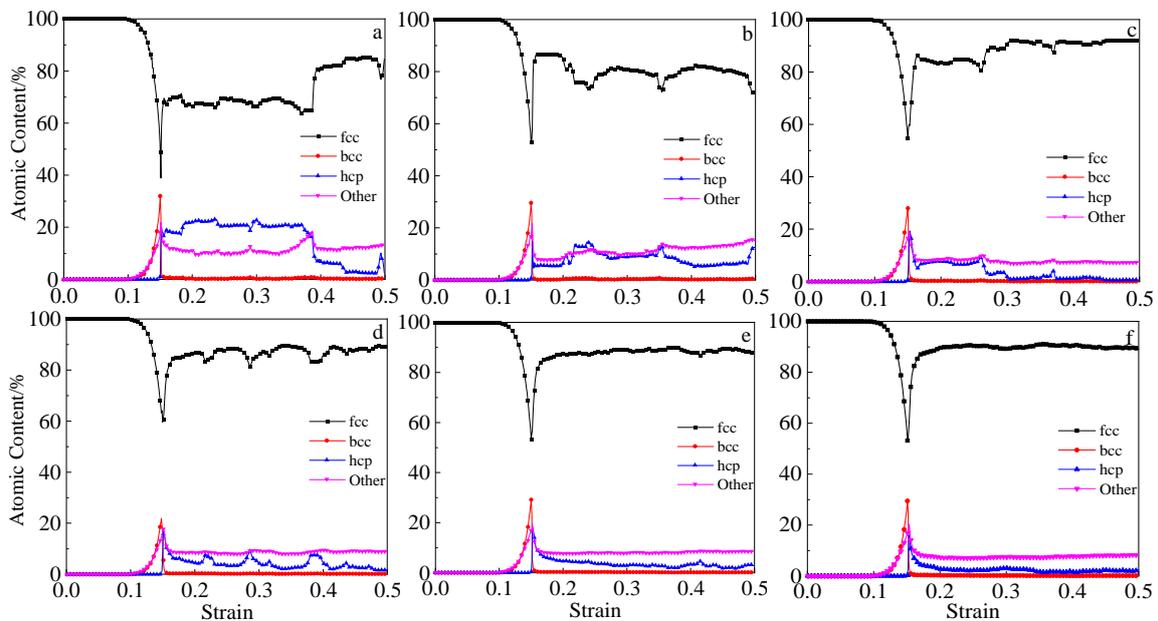


图3 不同横截面边长的单晶Ni模型拉伸过程相结构演变

Fig.3 Phase structure evolutions of monocrystalline Ni with different cross-sectional side length of model during tensile process: (a) 2.82 nm, (b) 3.52 nm, (c) 7.04 nm, (d) 10.56 nm, (e) 14.08 nm, and (f) 17.06 nm

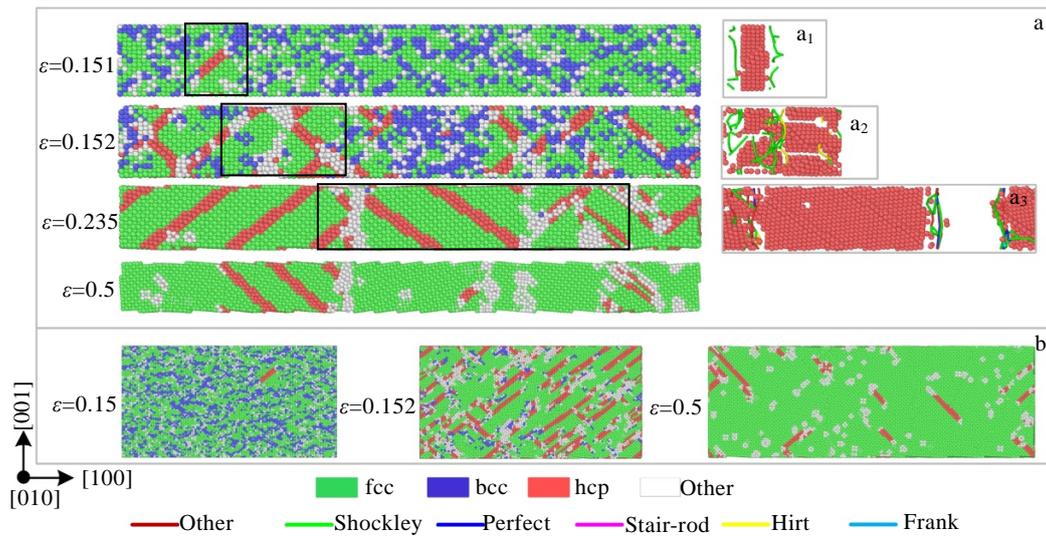


图 4 横截面边长为 2.82 和 14.08 nm 的单晶 Ni 模型拉伸过程不同应变时的原子图

Fig.4 Atomic graphs of monocrystalline Ni with cross-sectional side length of 2.82 nm (a) and 14.08 nm (b) models at different strains during tensile process

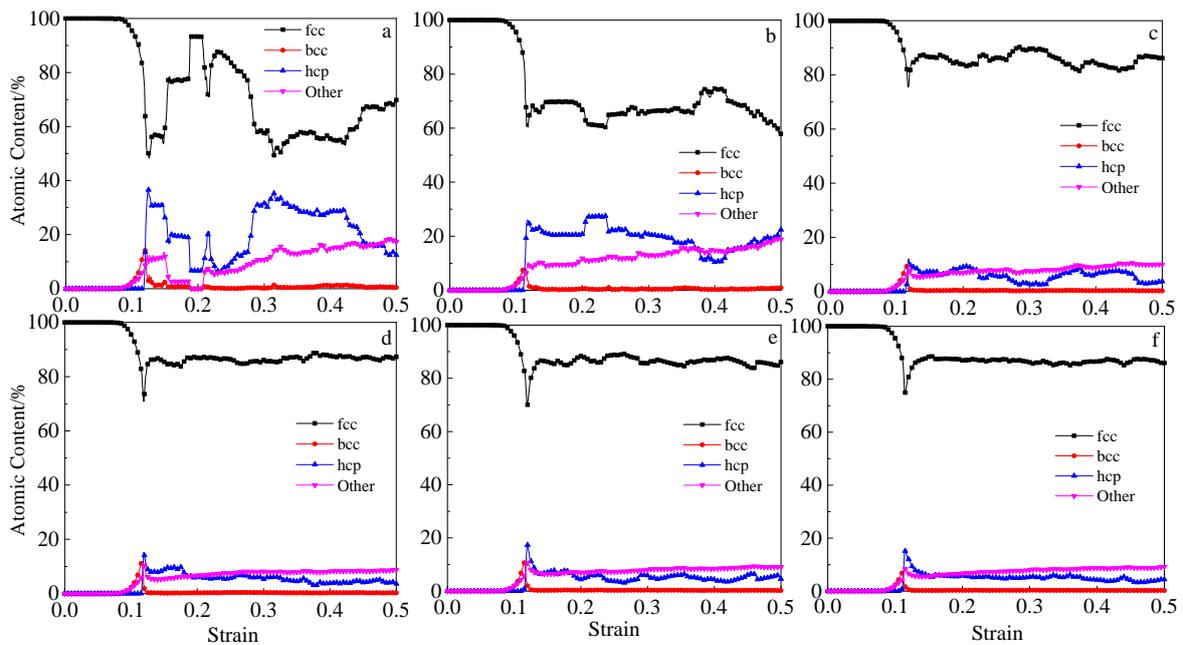


图 5 不同横截面尺寸的单晶  $Ni_{57}Cr_{19}Co_{19}Al_5$  合金模型拉伸过程相结构演变

Fig.5 Phase structure evolutions of monocrystalline  $Ni_{57}Cr_{19}Co_{19}Al_5$  alloy with different cross-sectional side length models during tensile process: (a) 2.84 nm, (b) 3.55 nm, (c) 7.09 nm, (d) 10.63 nm, (e) 14.18 nm, and (f) 17.72 nm

阶段同样出现了 bcc 与 Other 结构，且 bcc 与 Other 结构原子的含量随应变的增加而增加，直至达到屈服应变；在塑性变性阶段，hcp 结构形成，bcc 结构迅速减少，含量趋于零。横截面边长为 2.84 nm 时，hcp 与 Other 结构原子的含量随应变的变化上下起伏变化；横截面边长为 3.55 nm 时，hcp 结构原子的含量随应变上下起伏，Other 原子的含量随应变的增加而增加。横截面边长大

于 3.55 nm 时，随着应变的增加，hcp 原子的含量起伏下降，Other 结构的含量首先迅速减小，随后趋于缓慢增加。横截面边长为 2.84 和 3.55 nm 时的 hcp 与 Other 结构原子的含量高于其余横截面边长模型的单晶  $Ni_{57}Cr_{19}Co_{19}Al_5$  合金。当单晶模型的横截面边长大于 10.63 nm 时，单晶  $Ni_{57}Cr_{19}Co_{19}Al_5$  合金相结构变化趋势相近。对横截面边长为 2.84、3.55 以及 14.18 nm 的单

晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金塑性变形过程进行 CNA 分析, 如图 6 所示。横截面边长为 2.84 nm (图 6a),  $\varepsilon=0.118$  时, 塑性变形发生, 形成层错, Other 结构的原子弥散分布。随着应变的增加, 层错的扩展与形核同时发生(应变为

0.123), 单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金中形成大量相互交割的层错, 出现典型的交滑移特征, Other 结构原子聚集分布于层错交割处。当  $\varepsilon=0.152$  时, 这种相互交割的层错进一步扩展, 层错宽度变宽, 在相互交割的层错处观

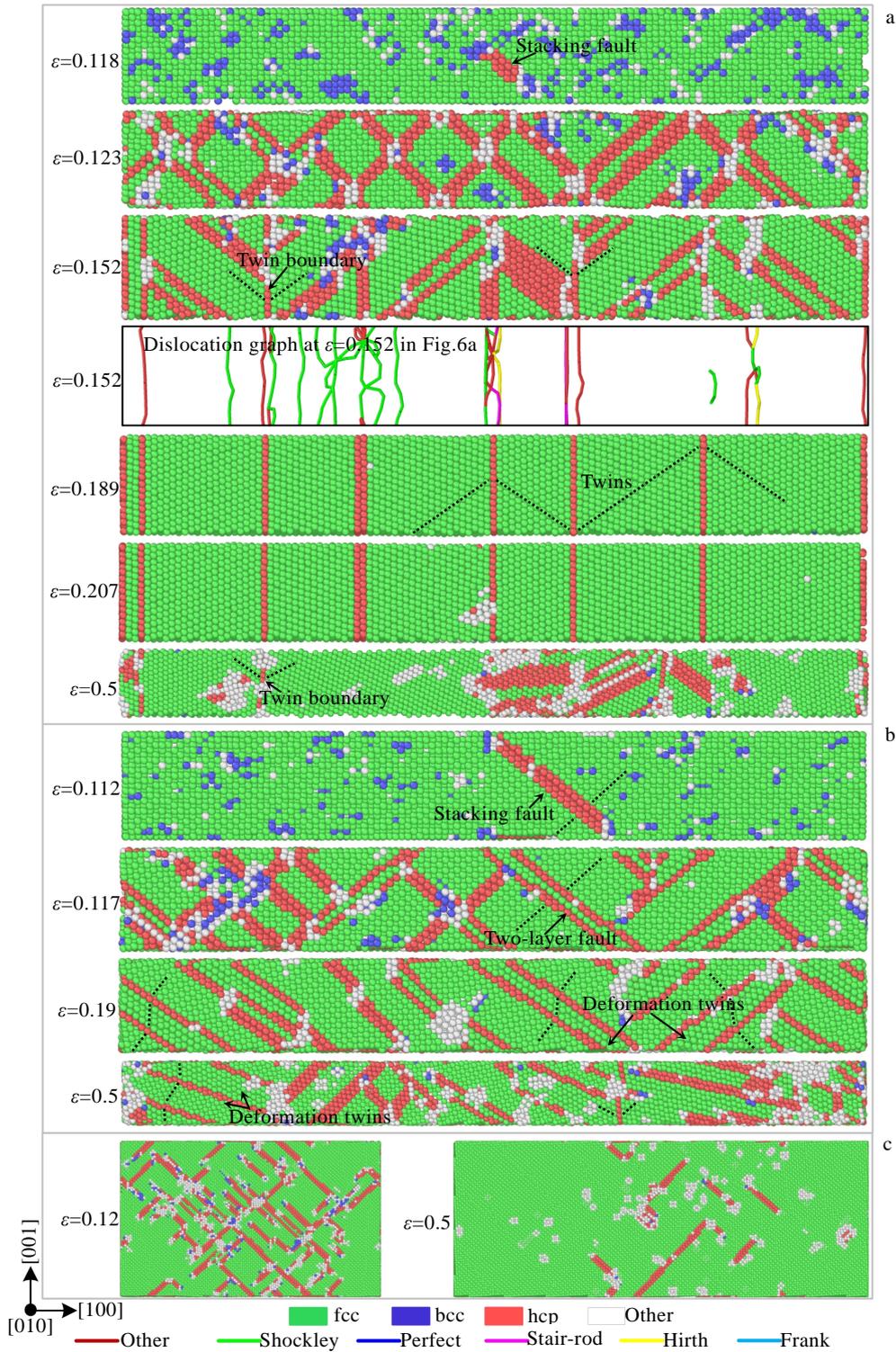


图 6 横截面边长为 2.84、3.55 和 14.18 nm 的单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金模型拉伸过程不同应变时的原子图

Fig.6 Atomic graphs of monocrystalline  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  alloy model with cross-sectional side length of 2.84 nm (a), 3.52 nm (b), and 14.18 nm (c) models at different strains during tensile process

察到 Stair-rod 位错和 Hirth 位错。这是因为相互交割的层错处的领先不全位错发生位错反应<sup>[46]</sup>:

$$\frac{a}{6}[\bar{1}2\bar{1}] + \frac{a}{6}[1\bar{1}2] \rightarrow \frac{a}{6}[011] \quad (1)$$

$$\frac{a}{6}[\bar{2}1\bar{1}] + \frac{a}{6}[211] \rightarrow \frac{a}{3}[010] \quad (2)$$

单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金中, 相互交割的层错与 Stair-rod 和 Hirth 不可动位错形成的组合结构使得滑移不易进行, 因此  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金发生了孪生变形, 在层错交割处产生了孪晶界面; 当  $\varepsilon=0.189$  时, 交割的层错结构消失, 形成了多层孪晶组织, 表明  $0.152 \leq \varepsilon \leq 0.189$  时, 孪生变形是主要的塑性变形机制, 这与本课题组<sup>[47]</sup>采用表面机械碾压在 Inconel 625 合金表面获得的多层孪晶结构相吻合。当  $0.189 < \varepsilon \leq 0.206$  时, 多层孪晶组织未发生变化。由拉伸过程相结构演变曲线(图 5a)可知, 此时单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金的主要相结构为 fcc 结构以及少量的 hcp 结构。结合应力-应变曲线(图 2b)可知, 在此阶段,  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金发生的是弹性变形, 进一步解释了横截面边长为 2.84 nm 时存在 2 个屈服应力值。当  $\varepsilon=0.207$  时, 塑性变形发生, 孪晶界处出现 Other 与 hcp 结构, 孪晶界逐渐湮灭,  $\varepsilon=0.5$  时, 大部分孪晶界消失, 少量孪晶界、层错以及较大的 Other 原子团簇存在。横截面边长为 3.55 nm 拉伸(图 6b)时, 应变为 0.117 时塑性变形发生, 随着塑性变形的进行, 层错发生形核与扩展, 层错面相互平行或相互交割。最先形成的层错面沿着{111}面扩展, 形成 2 层原子错排结构。2 层孪晶结构进一步扩展形成变形孪晶, 表明此时的孪晶是由层错面的顺序扩展而形成的, 这与  $\text{Ni}_{47}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{25}\text{Al}_9$  合金<sup>[14]</sup>[001]晶向压缩时孪晶机制形成的一样, 符合 Beyerlein<sup>[6]</sup>报道的变形孪晶形成机制理论模型。当  $\varepsilon=0.190$  时,  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金中存在大量的变形孪晶组织, 此时孪生变形为主要变形机制。随着应变的增加, 层错的湮灭与形成同时发生, 部分孪晶组织消失( $\varepsilon=0.5$ ), Other 原子团簇聚集在层错与层错的交割处以及层错与孪晶界的交割处。横截面边长为 14.18 nm 的单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金模型拉伸时(图 6c), 塑性变形阶段层错产生, 随应变的增加层错快速形核与扩展, 当  $\varepsilon=0.120$  时, 层错含量最大, 此时  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金中层错相互平行或相互交割, Other 原子团簇主要聚集在层错与层错的交割处, 这主要是由于层错与层错交割处存在位错, 导致原子无序排列。当  $\varepsilon > 0.120$  时, 层错形核与湮灭同时发生, 但是层错的形核速率小于湮灭速率,  $\varepsilon=0.5$  时, 层错含量最少, 由于拉伸过程使空位等缺陷的增多以及层错交

割处位错的存在, Other 原子团簇弥散分布或聚集在层错与层错的交割处。对比 3 种尺寸的单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金模型可知, 小尺寸模型中层错的相互交割同样对应了大尺寸模型中的层错平行及相互交割的区域。对比变形过程组织演变可知, 小尺寸模型出现了孪晶, 而大尺寸中并未出现, 这是因为小模型尺寸拉伸时流变应力普遍较高(图 2b), 达到了孪生应力。

### 2.3 单晶 Ni 及 $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$ 合金拉伸过程位错演变

图 7 为不同横截面尺寸 Ni(图 7a~7f)与  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金(图 7g~7l)单晶模型拉伸时不同种类位错长度随应变的变化曲线。可以看出, 在所有横截面尺寸的 Ni 以及  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金单晶模型拉伸变形过程中, Shockley 不全位错起主要作用, 这与单晶 Ni-Co 合金拉伸过程一致<sup>[25]</sup>。单晶模型的横截面尺寸越小, Shockley 不全位错、Stair-Rod 位错、Hirth 位错、Frank 不全位错以及 Other 位错长度都随着应变的增加波动变化越显著。这也就解释了单晶模型的横截面尺寸越小, 图 2a、2b 中流变应力起伏阶段应力随应变起伏越大的现象。这是因为, 小尺寸的单晶模型代表了块体单晶局部的层错交割处的变化趋势, 层错交割处伴随着位错塞积与位错反应的发生, 位错含量随应变的变化越明显。当横截面边长为相同晶格常数的倍数时, Stair-rod 位错所占比例在单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金拉伸时明显高于单晶 Ni, 表明在  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金中, Shockley 不全位错与层错更容易形成 Stair-rod 位错。横截面边长大于 10.56 nm 时, 单晶 Ni 拉伸过程位错长度随应变的变化趋势相似; 横截面边长大于 10.63 nm 时, 单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金在塑性变形阶段位错长度随应变的变化趋势相似。进一步根据位错长度与体积的值计算不同尺寸单晶模型拉伸过程中位错密度的变化, 如图 8 所示。不同横截面尺寸单晶 Ni 与  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金拉伸时, 位错密度远高于试验研究的, 这与拉伸时的高应变速率有关, 在已报道的分子动力学模拟中皆有此发现<sup>[23-24]</sup>。从图 8a 可以看出, 单晶 Ni 在塑性变形阶段, 位错密度首先迅速增加, 然后随着应变的增加, 位错密度迅速下降, 表明此阶段发生位错耗尽; 最后, 位错密度曲线稳定波动下降, 位错形核和位错滑出模型共同作用, 即位错饥饿<sup>[48]</sup>主导塑性变形。单晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金在不同横截面尺寸拉伸时的位错密度变化如图 8b, 横截面边长为 2.84 nm 拉伸时, 位错密度首先迅速增加, 然后平稳波动变化, 位错饥饿主导塑性变形。当应变增加至 0.152 时, 伴随着孪生变形的发生, 位错密度迅速下降; 直至应变为 0.189 时, 晶体重新取向形成了多层孪晶结构, 位错密度几乎为 0, 表明多层孪晶形成阶段表现为位错耗尽。应变为 0.189~0.206 时, 重新取向的多层孪晶  $\text{Ni}_{57}\text{Cr}_{19}\text{Co}_{19}\text{Al}_5$  合金发生弹性变形, 位错密度未发生改变。随后位错密度随应变的增加而起伏

增加,这是因为孪晶界阻碍了位错的运动,位错发生增殖。横截面边长为 3.55 nm 时,位错密度随应变的增加起伏上升或起伏下降,位错饥饿主导整个塑性变形过程,这与变形孪晶的形成与消失有关。横截面边长大于 3.55 nm 时,位错密度首先迅速增加,然后随着应变的增加,位错密度迅速下降。最后,位错密度随应变的增加缓慢波动下降,单晶 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> 合金在小应变下表现为位错耗尽,大应变下表现为位错饥饿。模型的横截面尺寸越大,单晶 Ni 及 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> 位错密度随应变起伏幅度越小,横截

面边长大于 30a<sub>0</sub> 时,位错密度随应变起伏趋于稳定。

### 2.4 不同层错能 Ni 及 Ni 基合金拉伸变形

根据不同横截面尺寸单晶 Ni 及 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> 合金的拉伸变形行为可知,当横截面边长大于 3a<sub>0</sub> nm 时,流变应力起伏幅度较小、相含量随应变变化趋势趋于相近、位错长度与位错密度随应变变化起伏幅度小。因此建立横截面边长为 4a<sub>0</sub> nm 的 Ni、Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub>、Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub>、Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub> 及 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> 合金的单晶模型进行[100]晶向拉伸。应力-应变曲线见图 9a,可以看出,流变应

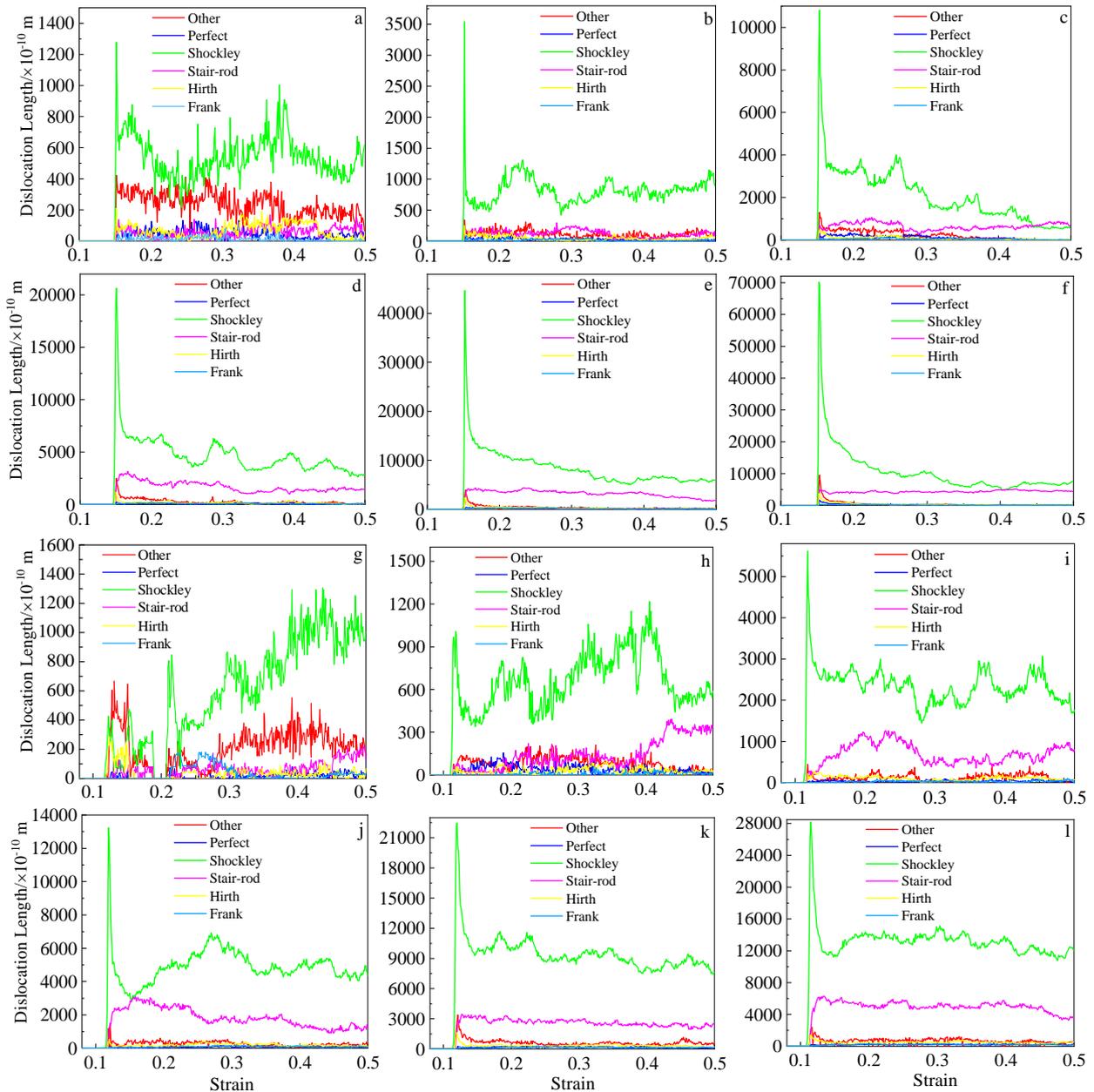


图 7 不同横截面边长的单晶 Ni 及 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> 合金模型拉伸过程中不同位错的长度随应变的变化

Fig.7 Variations of length of different types of dislocation with strain during tensile process of monocrystalline Ni (a-f) and Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> alloy models (g-l) with the cross-sectional side length of 2.82 nm (a), 3.52 nm (b), 7.04 nm (c), 10.56 nm (d), 14.08 nm (e), 17.6 nm (f), 2.84 nm (g), 3.55 nm (h), 7.09 nm (i), 10.63 nm (j), 14.18 nm (k), and 17.72 nm (l)

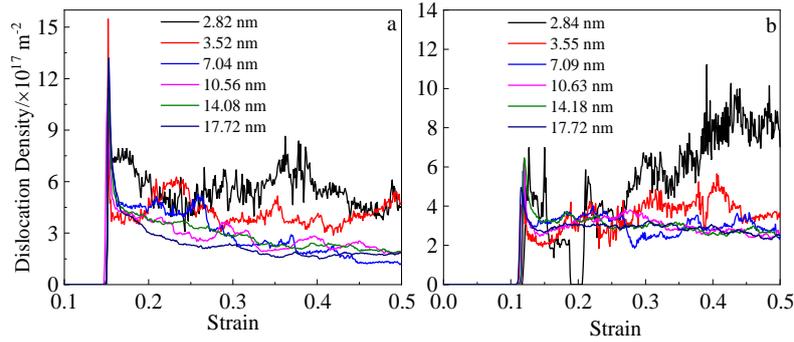


图 8 不同横截面边长单晶 Ni 及 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> 合金拉伸过程中位错密度随应变的变化曲线

Fig.8 Variations of dislocation density in the monocrystalline Ni (a) and Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> alloy (b) with tensile strain with different cross-sectional side lengths

力阶段应力起伏基本稳定，合金化程度越高，弹性模量越小、发生塑性变形的应变越小。根据图 9b 中不同合金屈服应力和平均流变应力值可以看出，合金化程度越高，单晶的屈服应力越小、平均流变应力越小。这主要是因为与实际金属材料相比，分子动力学模拟是理想的模型，合金化程度越大，点缺陷越多，原子间结合力减小；同时基于位错弹性理论<sup>[49]</sup>可知，溶质原子与溶剂原子的体积不同，产生晶格畸变，溶质原子的加入使得位

错的应变能降低，因此塑性变形起始阶段形成 Shockley 不全位错所需应力减小。由于层错为 hcp 结构原子组成，因此对不同层错能 Ni 基合金的 hcp 相含量进行了统计，见图 9c。可以看出，合金化程度越高，形成层错的应变越小，层错含量的峰值大小依次为 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> < Ni < Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub> < Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub> < Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub>，分析认为，这可能与层错含量峰值有关的应力(图 9a 中黄色点 1~5 分别为 Ni、Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub>、Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub>、Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub> 及 Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>

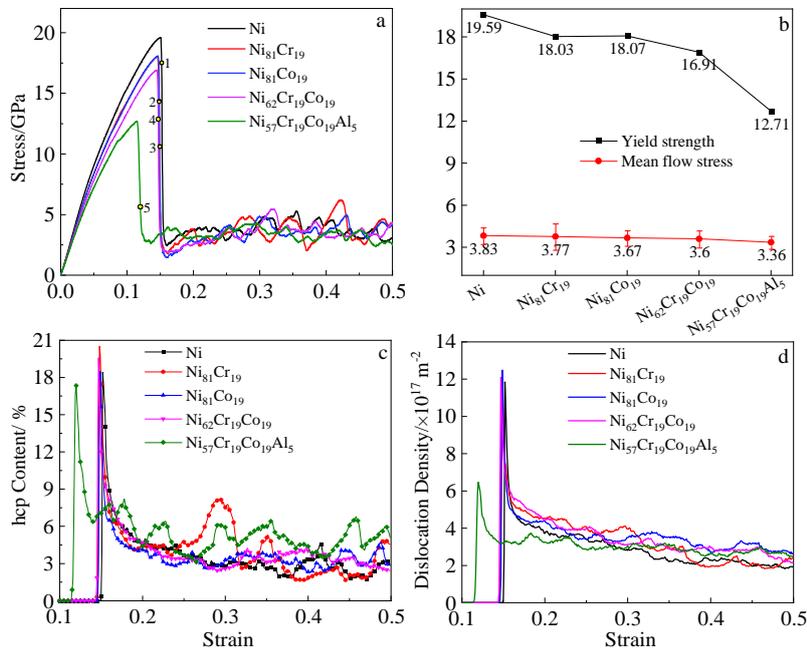


图 9 横截面边长为 4a<sub>0</sub> nm 时单晶 Ni 及其合金模型在 [100] 晶向拉伸变形过程中的应力-应变曲线、力学性能、层错含量随应变的变化及位错密度随应变的变化

Fig.9 Stress-strain curves (a), mechanical properties (b), hcp content as a function of strain (c), and dislocation density as a function of strain (d) for monocrystalline Ni and its alloys model during tensile deformation in the [100] orientation with the cross-section side length of 4a<sub>0</sub> nm

合金层错含量峰值对应的应力)及层错能的共同作用有关。对比流变应力阶段的层错含量可知,当应力趋于稳定起伏时,虽然Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金的层错含量相对较高,但是由于层错含量随应变增加起伏变化时,层错含量曲线皆有相交,这同样与应力起伏有关。图9d为不同层错能Ni基合金拉伸过程位错密度随应变的变化,不同层错能Ni及其合金在小应变下皆表现为位错耗尽,大应变下皆表现为位错饥饿。

结合图9a、9c、9d可以看出,随着塑性变形的开始,层错与Shockley不全位错同时形成,层错含量(图9c)与位错密度(图9d)随应变的增加而迅速增加,达到最大值,此阶段塑性变形以Shockley不全位错的滑移占主导。Ni及Ni基合金[100]晶向拉伸达到层错峰值对应的{111}面原子图如图10a~10e所示。可以看出,层错面积的大小依次为Ni < Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub> < Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub> < Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub> < Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>,显然层错能越小,层错面积越大,这与文献[5]报道一致。这是因为,层错能与层错的宽度成反比,层错能越低,层错的宽度越宽<sup>[5,50]</sup>。同时,结合图10a~10e可知,高层错能金属易发生交滑移形成相互交割的层错,层错面限制了层错

的扩展。然而,与Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金在横截面尺寸为3.55 nm拉伸时不同,随着变形程度的进一步增加,相互交割的{111}面发生交滑移,层错发生湮灭,如图10e和10f所示。此阶段层错湮灭速率大于层错形核速率,层错含量减小,伴随着位错耗尽;随着变形程度的进一步增加,层错湮灭速率与层错形核速率逐渐趋于平稳的起伏变化,位错饥饿主导塑性变形,表现为应力趋于平稳的起伏变化。在横截面边长为4a<sub>0</sub> nm的单晶Ni、Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub>、Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub>、Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金在[100]晶向拉伸时,拉伸过程中皆未发现孪晶。因此,变形机制为滑移变形机制。这是因为[100]晶向拉伸时,切应力方向与拉伸力方向呈45°,有利于{111}密排面滑移。研究发现,Cu的层错能(45 mJ·m<sup>-2</sup>)<sup>[6]</sup>低于Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金的层错能,[100]晶向拉伸过程中同样未观察到孪晶组织<sup>[23-24]</sup>。因此,除了层错能与横截面尺寸,孪生变形还与晶体的取向有关,这在Chowdhury<sup>[51]</sup>的研究中得到证实,Chowdhury<sup>[51]</sup>的研究表明,单晶体在[111]晶向拉伸或者[100]晶向压缩容易发生孪生变形,这在单晶Ni<sub>47</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>25</sub>Al<sub>9</sub>合金[100]晶向压缩时得到证实<sup>[14]</sup>。

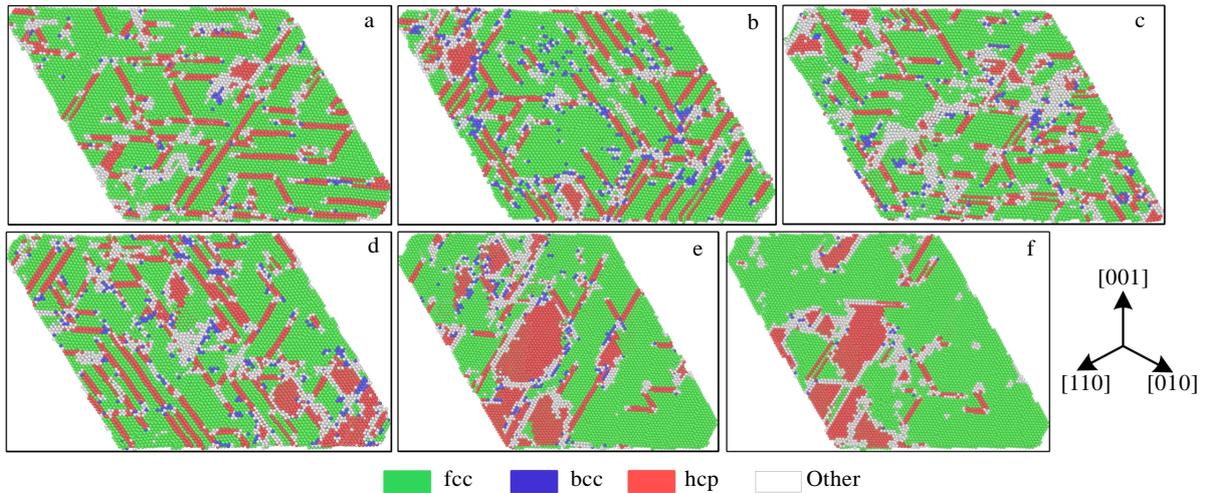


图10 横截面边长为4a<sub>0</sub> nm的单晶Ni、Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub>、Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub>、Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金模型达到层错含量峰值时{111}面原子图及单晶Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>合金层错含量达到峰值后进一步变形的原子图

Fig.10 Atomic graphs of {111} plane of the monocrystalline Ni (a), Ni<sub>81</sub>Cr<sub>19</sub> (b), Ni<sub>81</sub>Co<sub>19</sub> (c), Ni<sub>62</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub> (d), Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> (e-f) alloy models with the cross-sectional side length of 4a<sub>0</sub> nm when the stacking faults content reaches the peak values: (a) ε=0.152, (b) ε=0.148, (c) ε=0.149, (d) ε=0.147, (e) ε=0.12, and (f) ε=0.127 (Fig.10f is the atomic graph of further deformation of monocrystalline Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> alloy after reaching the stacking faults content peak value)

### 3 结论

1) Ni基合金的合金化程度越高,层错能越低,拉伸过程越容易发生孪生变形,形成具有共格界面的多

层孪晶或非共格界面的变形孪晶。多层孪晶的形成是Stair-rod位错和Hirth位错抑制了滑移造成的,非共格界面的变形孪晶是层错面顺序扩展的结果。

2) 模型的横截面尺寸越小,单晶Ni及Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub>

合金的平均流变应力越大,流变应力、相结构及位错密度随应变起伏越显著,横截面边长大于  $3a_0$  nm 时,塑性流变阶段流变应力、相结构及位错密度随应变起伏趋于平稳,具有稳定塑性流变的相同尺寸模型的单晶 Ni 及 Ni 基合金拉伸时,层错能越小,变形过程中形成的层错面面积越大。

3) 单晶 Ni 及其合金拉伸过程中,Shockley 不全位错在塑性变形过程中起主导作用,多层孪晶的形成伴随着位错耗尽,变形孪晶的形成与湮灭则主要由位错饥饿机制主导。

#### 参考文献 References

- [1] Guo Jianting (郭建亭). *Materials Science and Engineering for Superalloys (Book 1)*(高温合金材料学(上册))[M]. Beijing: Science Press, 2008: 3
- [2] Shang S L, Zacherl C L, Fang H Z *et al. Journal of Physics: Condensed Matter*[J], 2012, 24: 505 403
- [3] Dodaran M S, Guo S M, Khonsari M M *et al Computational Materials Science*[J], 2021, 191: 110 326
- [4] Xie X S, Chen G L, Mchugh P J *et al. Scripta Metallurgica*[J], 1982, 16(5): 483
- [5] Yuan Y, Gu Y F, Cui C Y *et al. Journal of Materials Research*[J], 2011, 26(22): 2833
- [6] Beyerlein I J, Zhang X H, Amit M. *Annual Review of Materials Research*[J], 2014, 44: 329
- [7] Gleiter H. *Acta Metallurgica*[J], 1969, 17: 1421
- [8] Lu K, Lu L, Suresh S. *Science*[J], 2009, 324(5925): 349
- [9] Wang X M, Ding Y T, Gao Y B *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2021, A823: 141 739
- [10] Gao Y B, Ding Y T, Chen J J *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2019, A767: 138 361
- [11] Sun L G, Wu G, Wang Q *et al. Materials Today*[J], 2020, 38: 114
- [12] Zhang Yong(张勇), Li Xinxu(李鑫旭), Wei Kang(韦康) *et al. Acta Metallurgica Sinica(金属学报)*[J], 2020, 56(10): 1401
- [13] Gu Yuefeng(谷月峰), Cui Chuanyong(崔传勇), Yuan Yong(袁勇) *et al. Acta Metallurgica Sinica(金属学报)*[J], 2015, 51(10): 1191
- [14] Chen J J, Ding Y T, Zhang X *et al. Vacuum*[J], 2022, 203: 111 322
- [15] Wang X M, Ding Y T, Yu H Y *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2022, A847: 143 293
- [16] Zhang Jianmin(张建民), Wu Xijun(吴喜军), Huang Yuhong(黄育红) *et al. Acta Physica Sinica(物理学报)*[J], 2006, 55(1): 393
- [17] Sun H L, Chen L Y, Sun S *et al. Science China Technological Sciences*[J], 2018, 61(5): 687
- [18] Fang Q J L, Sansoz F. *Acta Materialia*[J], 2021, 212: 116 925
- [19] Huang Q S, Zhu Q, Chen Y B *et al. Nature Communication*[J], 2021, 12: 6695
- [20] Wu R H, Zhao Y S, Yin Q *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2021, 855: 157 355
- [21] Gupta A, Gruber J, Rajaram S S *et al. npj Computational Materials*[J], 2020, 6: 153
- [22] Wen B, Xu B, Wang Y B *et al. npj Computational Materials*[J], 2019, 5: 117
- [23] Sainath G, Rohith P, Choudhary B K. *Philosophical Magazine*, 2017, 97(29): 2632
- [24] Cao H, Rui Z Y, Yang F Q. *Materials Science and Engineering A*[J], 2020, A791: 139 644
- [25] Lu X F, Yang P F, Luo J H *et al. RSC Advances*[J], 2019, 9: 25 817
- [26] Zheng(郑茂). *Molecular Dynamics Simulation of Tensile Mechanical Properties and Defect Behavior of Metal-single Crystal(金属单晶拉伸力学性能及缺陷行为的分子动力学模拟)*[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2007
- [27] 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
- [28] Carter C B, Holmes S M. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*[J], 1977, 35(5): 1161
- [29] Kumar K, Sankarasubramanian R, Waghmare U V. *Computational Materials Science*[J], 2018, 150: 424
- [30] Yu X X, Wang C Y. *Acta Materialia*[J], 2009, 57: 5914
- [31] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1
- [32] Farkas D, Caro A. *Journal of Materials Research*[J], 2018, 33: 3218
- [33] Farkas D, Caro A. *Journal of Materials Research*[J], 2020, 35: 3031
- [34] Evans D J, Holian B L. *The Journal of Chemical Physics*[J], 1985, 83: 4069
- [35] Fletcher R, Reeve C M. *Computer Journal*[J], 1964, 7: 149
- [36] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18: 015 012
- [37] Honeycutt J D, Andersen H C. *Journal of Physical Chemistry*[J], 1987, 91: 4950

- [38] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2012, 20: 085 007
- [39] Wang Congzeng(王从曾). *Materials Properties(材料性能学)*[M]. Beijing: Beijing University of Technology Press, 2007: 4
- [40] Tao Weiming(陶伟明), Huang Dan(黄丹), Guo Yimu(郭乙木) et al. *Journal of Zhejiang University(Engineering Science)*(浙江大学学报, 工学版)[J], 2005(8): 1265
- [41] Li Yuancai(李源才), Jiang Wugui(江五贵), Zhou Yu(周宇). *Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2020, 49(7): 2372
- [42] Hu Gengxiang(胡赓祥), Cai Xun(蔡洵), Rong Yonghua(戎咏华). *Fundamentals of Materials Science, Third Edition(材料科学基础, 第三版)*[M]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 2010: 161
- [43] Korchuganov A V, Zolnikov K P, Skryzhevich D S. *Materials Letters*[J], 2019, 252: 194
- [44] Hahn E N, Meyers M A. *Materials Science and Engineering A*[J], 2015, A646: 101
- [45] Zhao S J, Osetsky Y, Stocks G M et al. *npj Computational Materials*[J], 2019, 5: 13
- [46] Zhen Liang(甄良), Shao Wenzhu(邵文柱), Yang Dezhuang(杨德庄). *Strength and Microscopic Theory of Fracture in Crystal Materials(晶体材料强度与断裂微观理论)*[M]. Beijing: Science Press, 2018: 103
- [47] Ma Y J, Ding Y T, Gao Y B et al. *Metals and Materials International*[J], 2023, 29: 1454
- [48] Greer J R, Nix W D. *Physical Review B*[J], 2006, 73: 245 410
- [49] Wang Yanan(王亚男), Chen Shujiang(陈树江), Dong Xichun(董希淳). *Dislocation Theory and Its Applications(位错理论及其应用)*[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2007: 89
- [50] Jamaati R, Toroghinejad M R. *Materials Science and Engineering A*[J], 2014, 606: 443
- [51] Chowdhury P, Sehitoglu H, Abuzaid W et al. *International Journal of Plasticity*[J], 2015, 71: 32

## Molecular Dynamics Simulation of Tensile Deformation Behavior of Monocrystalline Ni and Its Alloys with Different Stacking Fault Energies

Chen Jianjun<sup>1,2</sup>, Ding Yutian<sup>1,2</sup>, Ma Yuanjun<sup>3</sup>, Gao Yubi<sup>1,2</sup>, Wang Xingmao<sup>1,2</sup>

(1. School of Materials Science and Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

(2. State Key Laboratory of Advanced Processing and Recycling of Nonferrous Metals, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

(3. School of Mechanical Engineering, Lanzhou Petrochemical University of Vocational Technology, Lanzhou 730060, China)

**Abstract:** The uniaxial tensile deformation of monocrystalline Ni and Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> alloy models with different cross-sectional size models in the [100] orientation was simulated by molecular dynamics, and the appropriate simulation model size with stable plastic flow stress was determined. The tensile deformation behavior of monocrystalline Ni and its alloys of the same model with stable flow stress were further studied. The results show that the monocrystalline Ni<sub>57</sub>Cr<sub>19</sub>Co<sub>19</sub>Al<sub>5</sub> alloy with smaller model sizes are likely to form multi-layer twins or deformation twins during the tensile process because of low stacking fault energy. As the cross-sectional side length of model is greater than 30 times of lattice constant, the fluctuation of the flow stress, phase structures and dislocation density in the plastic flow stage tends to be stable with the variation of strain. When the monocrystalline Ni and Ni-based alloys with same model at stable flow stress stage are stretched, the lower the stacking fault energy is, the larger the area of the stacking faults plane during plastic deformation. During the tensile process of monocrystalline Ni and Ni-based alloys, Shockley partials play a leading role in the plastic deformation process. The formation of multi-layer twins is accompanied by dislocation exhaustion, while the formation and annihilation of deformation twins are mainly dominated by the dislocation starvation mechanism.

**Key words:** molecular dynamics simulation; monocrystalline Ni-based alloys; stacking fault energy; twin; dislocation

Corresponding author: Ding Yutian, Ph. D., Professor, State Key Laboratory of Advanced Processing and Recycling of Nonferrous Metals, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, P. R. China, E-mail: dingyt@lut.edu.cn