# 单晶/多晶镍拉伸力学性能的分子动力学模拟

李源才,江五贵,周 宇

(南昌航空大学, 江西 南昌 330063)

**摘 要**:为了提高航空发动机推重比,采用整体叶盘新技术却带来了盘叶连接区域高风险失效问题,采用分子动力学 对盘叶连接区单晶/多晶镍(SPSNi)的拉伸力学性能进行模拟。首先对比了不同晶态镍拉伸力学性能,发现由于单晶/ 多晶界面的存在使得拉伸后界面处的非晶化程度加剧,易于萌生孔洞,加剧了 SPSNi 突然断裂的风险。最后重点研究 了 SPSNi 的应变速率效应与温度效应。当应变速率 1×10<sup>8</sup> s<sup>-1</sup> < *ċ* <2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup> 时,SPSNi 对加载应变速率几乎不敏感, 抗拉强度 σ<sub>b</sub> 小幅上升。超过 2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup> 之后,抗拉强度 σ<sub>b</sub> 随着应变速率的增加而迅速下降。这是因为在高应变速率下, SPSNi 的 fcc 原子大规模且迅速转变为无序的非晶结构,导致了 SPSNi 承载能力迅速下降,可以将应变速率 2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup> 作为 SPSNi 抗拉强度的阈值。SPSNi 的抗拉强度 σ<sub>b</sub> 随温度的升高而线性下降。这是由于在温度的影响下,塑性变形阶 段 SPSNi 界面失配位错网络的初始镶嵌结构逐渐变得不规则,初始失配应力随着温度的升高而下降。

关键词:整体叶盘;单晶/多晶镍;应变速率效应;温度效应

中图法分类号: TB31 文献标识码: A 文章编号: 1002-185X(2020)07-2372-08

新一代高性能高推重比航空发动机性能强烈依赖 于整体叶盘先进技术的应用。应用新技术的最大问题是 使得盘片和叶片连接区域成为整个构件的薄弱区<sup>[1,2]</sup>, 这对于强调高可靠性和长寿命的航空发动机高温高速 转动部件来说是个重要隐患,因此整体叶盘结合区的 力学性能就成了决定整体叶盘在涡轮级内能否得到广 泛应用的关键因素。

在过去的几十年中,计算机模拟技术能够揭示纳 米材料在应力作用下位错形成、塑性变形和断裂的基 本机理<sup>[3]</sup>。在这种应用中,要求纳米材料以极高的速 度和位移振幅被拉伸和压缩。近年来,许多研究者<sup>[4,5]</sup> 利用分子动力学等数值模拟方法研究了晶体镍在单轴 拉伸下的变形行为。分子动力学模拟表明,镍在室温 下是塑性材料,但是纳米晶体镍在超过一定临界应变 速率后,仍可能发生脆性断裂,屈服和断裂机制与原 子结构有关<sup>[6]</sup>,这对镍材料的力学响应随着加载速率 与温度变化的研究有重要的指导意义和应用价值。

作为单晶或多晶材料以其典型的晶体结构和较为 广阔的应用前景备受研究者的关注<sup>[7-12]</sup>。Shi<sup>[13]</sup>等运用 分子动力学研究了金纳米线在不同应变速率下拉伸过 程,发现在低应变速率下,塑性变形是由位错滑移引 起的,在中等应变速率下,变形是由滑移和孪晶引起 的,在高应变速率下,塑性过程中应力-应变曲线呈波 浪形振荡,变形是由非晶化引起的。Cao<sup>[14]</sup>等采用分 子动力学模拟纳米晶石墨烯在室温下单轴拉伸过程, 发现纳米晶石墨烯沿晶界脆性断裂,断裂从晶界上的 一系列空位开始。罗德春<sup>[15]</sup>等采用分子动力学模拟不 同应变速率下纳米单晶 γ-TiAl 合金中裂纹的扩展,发 现高应变速率导致裂尖前端多处区域的原子结构局部 非晶化,微裂纹的扩展导致"试件"多处开裂。

Burbery<sup>[16]</sup>等采用分子动力学模拟过渡晶界结构 力学性能,发现晶界移动与位错缺陷的相互作用是影 响金属塑性变形的主要因素,过渡晶界结构的温度和 应变速率直接影响其抗拉强度。单晶/多晶晶体的结合 区是由单晶向多晶过渡的一种晶体形态,研究其力学 性能对于了解宏观材料结合区的某些力学行为具有指 导意义,因此近年来有关单晶/多晶晶体界面的研究受 到人们的重视。一些学者还研究了温度、尺寸和应变 速率对晶体轴向拉伸行为的影响。Li<sup>[17]</sup>等利用分子动 力学研究单晶镍在不同应变率下失配位错网络对 ٧/٧ 界面的影响,发现位错网络能有效地抑制混乱增加结 构的稳定性。张兴明<sup>[18]</sup>利用原子模拟方法模拟了 Ni/Ni<sub>3</sub>Al 的过渡界面结构力学性能,结果表明过渡界 面区域的宽度随着温度的升高而增加。吴文平[19]基于 分子动力学模拟分析了应变速率和温度对界面位错网 结构演化的影响,发现界面的抗拉强度随应变速率的

收稿日期: 2019-07-15

**基金项目**:国家自然科学基金项目(11772145)

作者简介: 李源才, 男, 1987年生, 硕士生, 南昌航空大学航空制造工程学院, 江西 南昌 330063, E-mail: xiaoxiang\_li@139.com

增加而增加,随温度的升高而降低,其塑性和延展性 能随应变率的增加而减弱,随温度的升高而增加。 Wang<sup>[20]</sup>等用分子模拟方法模拟了单晶镍中 y/y'相界面 的结构动力学,结果发现失配应力影响 y/y'相界面结 构的基本特征与 y/y'相间界面的稳定性。

综上所述,应变速率和温度对单晶/多晶镍的力学性能有一定的影响。因此本研究将基于微观位错等理论,来充分说明这一材料强度的应变速率与温度相关性问题。为此,以单晶/多晶镍作为研究对象,通过分子动力学模拟试图探讨盘叶连接区单晶/多晶镍(SPSNi)在单向拉伸过程中的结构演化机理。

# 1 建模及方法

分子动力学模拟的首要条件是要知道原子间的相 互作用势,本研究采用嵌入原子势(EAM)来描述 Ni之间的相互作用<sup>[21]</sup>。分子动力学模型如图1所示。

镍的晶格常数为 0.352 nm,如图 1 所示,考虑到 计算成本,整个模型大小为 8 nm×8 nm×16 nm,其中 中间区域为 8 nm×8 nm×8 nm 的多晶镍,两端区域为 8 nm×8 nm×4 nm 的单晶镍,单晶镍的晶向如图 1a 所示。 考虑到原子数目比较少,表面原子在总原子数中所占 的比重就大,使用有限的原子数来模拟实际晶体中原 子的运动,须考虑表面对晶体结构中原子运动的影响, 为避免这种影响,所以在 *X、Y、Z* 方向均施加周期性 边界条件。多晶镍的平均晶粒尺寸为 4.34 nm,尽管该 晶粒尺寸小于实际金属材料晶粒尺寸(亚微米量级), 但经常在分子动力学模型中被用以研究多晶晶界的影 响<sup>[22]</sup>。为了使整个系统能量最小化进而得到平衡构 型,在模拟的初始阶段,利用 Nose/Hoover 热浴法使 整个体系的温度始终保持恒温。采用 NPT 系综,驰豫 20 ps,使模型弛豫得到初始构型,采用 NVT 系综<sup>[23-25]</sup>, 模型沿 Z 轴均匀施加位移载荷。通过施加一定的应变, 反过来计算应力。牛顿运动方程用速度方法求解。参 照文献[26],观察应力应变曲线峰值确定抗拉强度σ<sub>b</sub>。

其中嵌入原子势(EAM),是基于有效介质理论的半经验多体势函数,适合模拟原子的相互作用,可表示为:

$$E_{\text{tot}} = \sum_{i} F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j \neq i} \Phi(r_{ij})$$
(1)

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} g(r_{ij}) \tag{2}$$

式中,  $\Phi(r_{ij})$ 为传统对势形式,  $F(\rho_i)$ 为依赖于电子云密度  $\rho_i$ 的镶嵌能,  $\rho_i$ 表征周围原子 j 作用  $g(r_{ij})$ 的线性叠加,  $r_{ij}$ 为 i 与 j 原子间的距离。函数的具体形式和参数可以通过 Ackland<sup>[27]</sup>等人提出的方法拟合得到。

# 2 结果与讨论

## 2.1 不同晶态镍拉伸性能

设置温度为 300 K, 应变速率为 5×10<sup>9</sup> s<sup>-1</sup>分别对 单晶镍(SNi)、多晶镍(PNi)、单晶/多晶镍(SPSNi) 进行拉伸模拟。图 2 分别绘出不同晶态晶体镍的应力 应变曲线。图 3 是不同晶态晶体镍的拉伸原子图。

对于图 2 的 SNi 曲线中两次屈服点数值与文献[4] 叙述较为吻合,而在拉伸过程中曲线在初次下降以后 会逐渐再次回升,然后又迅速下降,且第 2 次的峰值 比第 1 次高,这与文献[28,29]描述基本一致。引起该 现象的原因是在变形过程中输入的大量应变能在滑移 变形过程中被消耗,储存在晶体内部的畸变能比例较



图 1 分子动力学模型 Fig.1 Molecular dynamics models: (a) SNi, (b) PNi, and (c) SPSNi



#### 图 2 不同晶态晶体镍拉伸的应力应变曲线



低。因而会再次出现一个与第1次基本相同的屈服点, 然后曲线剧烈下降。研究还发现晶粒尺寸为4.34 nm 的 PNi和 SPSNi的抗拉强度σ<sub>b</sub>与 SNi 大致相等。这是 由于晶粒尺寸较小,晶界变多,位错遇到的障碍也就 越来越多,导致大量位错塞积,从而使材料强化并提 高了屈服极限,这与文献[30]描述较为吻合。SPSNi 的变化趋势与 SNi和 PNi 基本一致,说明基于多体势 (EAM)较强作用下, SPSNi 界面达到了强结合效果, 所以 SPSNi 的抗拉强度σ<sub>b</sub>与 SNi和 PNi 大致相当。

通过观察各个拉伸阶段的原子图,进一步分析了 晶体镍在弹性和塑性阶段的演变情况。如图 3a 所示, 由于拉伸作用,原子开始迁移,随应变不断增加 SNi 结构开始出现无序化,这表明系统已经开始塑性变形。 金属镍的原子应力基本成比例上升,系统能量也随之 上升。从图 3b 中可以看出表面原子开始运动,结合变 形分析可知,表面晶格在外力作用下释放出表面能。



图 3 不同晶态晶体镍的拉伸原子图

Fig.3 Tensile atomic snapshots of different crystalline crystal nickel at specified loading strain: (a~c) SNi, (d~f) PNi, and (g~i) SPSNi

图 3c 是 SNi 屈服后,没有出现明显的滑移线,非晶 化程度加剧。如图 3d 所示, PNi 原子开始迁移, 导致位 错交割缠结。位错堆积会产生应力集中,同时晶界移动与 位错缺陷的相互作用,位错网络的初始镶嵌结构逐渐变得 不规则, 使得初始失配应力也缓慢下降造成部分原子分 离。当应力超过晶界结合强度时,会产生孔洞,进而扩展 形成裂纹造成断裂,如图 3f。由图 3g 看到,SPSNi 多晶 侧晶界变形过程中,晶界出现了一定程度的迁移,晶界的 变形与迁移又会暂时降低原子系统的能量。在大量位错塞 积下结构发生了很大变化,无法继续保持原来的结构,说 明晶界能量相对较高,稳定性较低,能够容纳应变能量进 一步输入和释放的能力较差。如图 3h 所示,在变形过程 中,孔洞首先在界面偏多晶侧萌生。随着试样左右两侧裂 纹的形成与扩展,范围缩小的多晶晶界要承受更大的载 荷,更易于晶界的迁移与扩散,于是晶界原子金属键更容 易断裂,如图 3i。在较多的金属键断裂后,到达一定应 变时,继续加载则试样断裂,系统应力迅速降为零。所以 SPSNi 的断裂主要由孔洞的生成和扩展引起的。

## 2.2 单晶镍与多晶镍不同组合方式对拉伸性能的影响

设置温度为 300 K, 应变速率为 5×10<sup>9</sup> s<sup>-1</sup>分别对单 晶镍与多晶镍不同位置组合 SPSNi 和 PSPNi 进行拉伸模 拟。图 4 为 SPSNi 界面的径向分布函数。图 5 分别绘制 出了 SPSNi 和 PSPNi 应力应变曲线。图 6 为 SPSNi 和 PSPNi 拉伸原子图。

在研究金属界面时,通常用 EAM 多体势势函数 来描述这种较强的界面连接,比如 Spearot<sup>[31]</sup>等在研究 双晶铜界面的时候,就采用了 EAM 势。经过长时间 驰豫后,单晶镍原子和多晶镍原子相互夹杂,在多体 势作用下界面中的原子连接仍较为紧密,应变为 0.3 时大部分原子间距在 0.26~0.29 nm 范围内,如图 4 所 示。如图 5 所示,单晶镍与多晶镍不同位置分布下晶 体镍的抗拉强度σ<sub>b</sub>基本一致,曲线趋势也保持了一致。

如图 6 所示, 拉伸过程中金属镍的原子应力基本 成比例上升,系统能量也随之上升,多晶侧大规模 fcc 原子转换成了 Other 原子,非晶化程度明显大于单晶 侧。对应于图 5,发现应力水平达到抗拉强度 ob 时, SPSNi 非晶化程度较明显,这与文献[32]描述基本吻 合,还发现孔洞基本始发于单晶/多晶镍界面偏多晶一 侧。从图 6a 中看出,SPSNi 多晶侧出现了 1 个孔洞, 这可能是由于载荷增加导致变形量的增加,形变储存 能也随之上升。原子特别是表面原子首先开始摆脱晶 格点阵控制,开始出现空位,空位的进一步扩大形成 了孔洞,正是孔洞的出现导致了应力的下降。此时 SPSNi 已经断裂,这是随应变量的继续增加,空洞继 续扩展形成裂纹,从而导致材料的断裂。如图 6b,由 于原子迁移, PSPNi 多晶侧两端随着应变增加首先产 生微小孔洞, 应变继续增加导致孔洞连接形成裂纹。

## 2.3 应变速率对单晶/多晶镍拉伸性能的影响

图 7a 是不同应变速率下 SPSNi 拉伸应力应变曲线。 图 7b 为不同应变率下 SPSNi 抗拉强度变化曲线。图 8 为应变速率为 3×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup> 时 SPSNi 拉伸原子图。

图 7a 曲线趋势与文献[25]所描述基本吻合。结合图 7a 和图 7b, SPSNi 对小于 2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup>的应变速率几乎不 敏感,呈静态或准静态响应,曲线特征基本相似,强化 现象随着应变速率的增大愈加明显;应变速率超过 2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup>后,呈准静态逐渐向动态转变,动态特征十分 显著。在应变速率数值小于 2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup>之前, SPSNi 抗拉 强度 σ<sub>b</sub>小幅上升。这是由于随着荷载的增加,导致位错 密度的增加,激活了位错相互作用的机制,位错网络能 有效地抑制混乱增加结构的稳定性,增加了 SPSNi 的抗



#### 图 4 SPSNi 界面径向分布函数







Fig.5 Tensile stress-strain curves of SPSNi and PSPNi





Fig.6 Tensile atomic snapshots: (a) SPSNi and (b) PSPNi





Fig.7 Tensile mechanical properties curves of SPSNi at different strain rates: (a) stress-strain curves and (b) tensile strength curve

拉强度。超过 2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup>之后, SPSNi 抗拉强度σ<sub>b</sub>随着 应变速率的增加而迅速下降,应变速率的强化效应不 显著,如图 7b 所示。

如图 8 所示, 对晶体镍模型作切片处理。本研究 中某一应变速率下 SPSNi 的 Other 原子分数相差( $\lambda$ ) 通过公式  $\lambda = (\lambda_2 - \lambda_1)/\lambda_1$ 计算,其中  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$  分别是试样 在不同应变下 Other 原子分数。图 8a 中 Other 原子分 数为 22.9%,在高加载速率下,如图 8b 中 Other 原子 分数达到 43.2%,与图 8a 相比原子分数相差高达 88.64%, 在屈服阶段 fcc 原子迅速转变为无序的非晶 结构, 此时 SPSNi 变形机制为位错孪晶和大规模的 非晶化。图 8c 中 Other 原子分数达到 70.2%, 与图 8b 相比原子分数相差达到 62.5%。在塑性流动过程中 发生晶体非晶化现象, 非晶化程度随着应变的增加而 加剧。如图 8c 所示, SPSNi 随着塑性变形的增加, 产生大量位错, 位错在多晶侧塞积形成位错胞。所以 在高应变速率下, SPSNi 变形是由大规模非晶化引 起的。



图 8 应变率为  $3 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 时 SPSNi 拉伸原子图 Fig.8 Tensile atomic snapshots of SPSNi at strain rate of  $3 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ : (a)  $\varepsilon$ =0.054, (b)  $\varepsilon$ =0.204, and (c)  $\varepsilon$ =0.384

# 2.4 温度对单晶/多晶镍拉伸性能的影响

图 9a 为不同温度下 SPSNi 拉伸应力应变曲线。 图 9b 为不同温度下 SPSNi 抗拉强度变化曲线。从图 9a 可以看出, SPSNi 的应力应变曲线趋势与文献[33] 结果较为吻合。如图 9b 所示,抗拉强度σ<sub>b</sub> 随温度的 升高而线性下降。由于在温度的影响下,塑性变形阶 段 SPSNi 界面不同晶态镍原子夹杂造成失配位错网络 的初始镶嵌结构逐渐变得不规则,初始失配应力随着 温度的升高而缓慢下降。

另外,由于温度升高,原子能级升高,导致2个 连续加载步之间的时间间隔小于所有原子重新达到平 衡状态所需要的时间,使其在整个拉伸过程中都难以 达到平衡状态,温度越大这种非平衡状态越明显。而 且,温度越高使得 PNi 晶界对位错的形成和滑移运动 产生阻碍作用降低,所以在 300~1300 K 温度区间 SPSNi 抗拉强度σ<sub>b</sub>随着温度的升高而线性下降。



图 9 不同温度下 SPSNi 拉伸力学性能曲线

Fig.9 Tensile mechanical properties curves of SPSNi at different temperatures: (a) stress-strain curves and (b) tensile strength curve

## 3 结 论

1) SPSNi 在塑性流动过程中,随着应变增加,部

分晶体转化成非晶态,非晶化程度明显。SPSNi 的抗 拉强度 $\sigma_b$ 与 SNi 和 PNi 大致相当,这是由于在 EAM 多体势作用下, SNi 和 PNi 的 Ni 原子结合力较强。晶 粒尺寸为 4.34 nm PNi 和 SPSNi 的抗拉强度σ<sub>b</sub>与 SNi 大致相等,所以晶粒尺寸可能影响了 PNi 的拉伸性能。 对于单晶镍与多晶镍的不同组合方式,可以看到孔洞 基本萌生于界面偏多晶一侧。

2)不同应变速率下,SPSNi 对小于 2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup>的 加载应变率几乎不敏感,抗拉强度σ<sub>b</sub>小幅上升。对于 应变速率超过 2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup>之后,其抗拉强度σ<sub>b</sub>随着应变 速率的增加而迅速下降,应变速率的强化效应不显著。 可以将应变速率 2×10<sup>10</sup> s<sup>-1</sup>作为 SPSNi 抗拉强度的阈 值。在高应变速率下,fcc 原子迅速转变为无序的非晶 结构。在塑性流动过程中发生晶体非晶化现象,非晶 化程度随着应变的增加而加剧,SPSNi 变形机制为位 错孪晶和大规模的非晶化。所以,高应变速率下 SPSNi 变形是由大规模非晶化引起的。

3)随着温度的升高, SPSNi 抗拉强度σ<sub>b</sub>呈线性下降趋势。温度越高使得多晶晶界对位错的形成和滑移运动产生阻碍作用降低,所以在 300~1300 K 温度区间抗拉强度σ<sub>b</sub>随着温度的升高而减小。

## 参考文献 References

- [1] Liu Tao(刘 涛), Deng Qiang(邓 强), Liu Yuan(刘 源) et al.
  Mechanical Research & Application(机械研究与应用)[J], 2015(4): 94
- [2] Qin Desheng(秦德胜), Chen Baoyan(陈宝延), Sun Jining(孙纪宁). Tactical Missile Technology(战术导弹技术)[J], 2015(2):49
- [3] Ren J, Sun Q, Xiao L et al. Computational Materials Science[J], 2017, 126: 66
- [4] Zhen Mao(郑 茂). *Thesis for Master* (硕士论文)[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2007
- [5] Setoodeh A R, Attariani H, Khosrownejad M. Computational Materials Science[J], 2008, 44(2): 384
- [6] Bandyopadhyay K, Sarkar J, Ghosh K S et al. Computational Materials Science[J], 2017, 127: 277
- [7] Chang L, Zhou C Y, Wen L L et al. Computational Materials Science[J], 2017, 128: 348
- [8] Ma B, Rao Q, He Y. Computational Materials Science[J], 2016, 117: 40
- [9] Wu H N, Xu D S, Wang H et al. Journal of Materials Science & Technology[J], 2016, 32(10): 1033
- [10] Zheng G, Wang Y, Li M. Acta Materialia[J], 2005, 53(14): 3893

- [11] Jing H, Jiapeng S, Ying H et al. Metals[J], 2018, 8(5): 344
- [12] Zhang Y, Millett P C, Tonks M et al. Scripta Materialia[J], 2012, 66(2): 117
- [13] Shi G J, Wang J G, Hou Z Y et al. Modern Physics Letters B[J], 2017, 31(27): 1 750 247
- [14] Cao A, Qu J. Applied Physics Letters[J], 2013, 102(7): 071902
- [15] 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
- [16] Burbery N J, Das R, Ferguson W G. Acta Materialia[J], 2016, 108: 355
- [17] Li N L, Wu W P, Nie K. *Physics Letters A*[J], 2018, 382(20):1361
- [18] Zhang Xing Ming(张兴明). Thesis for Master(硕士论文)[D]. Hunan: Hunan University, 2014
- [19] Wu Wen Ping(吴文平). Thesis for Master(硕士论文)[D]. Beijing: Beijing Jiaotong University, 2010
- [20] Wang C Y. Physical Review B[J], 2005, 72(1): 014 111
- [21] Mishin Y, Farkas D, Mehl M J et al. Physical Review B[J], 1999, 59(5): 3393
- [22] Cao A, Wei Y. Physical Review B[J], 2007, 76(2): 024 113
- [23] Yi L, Chang T, Feng X Q et al. Carbon[J], 2017, 118: 348
- [24] Zhou Y, Jiang W G, Feng X Q et al. Computational Materials Science[J], 2019, 156: 96
- [25] Wen Y H, Zhu Z Z, Zhu R Z. Computational Materials Science[J], 2008, 41(4): 553
- [26] Zhou Y, Jiang W G, Li D S et al. Applied Sciences[J], 2019, 9(2): 352
- [27] Ackland G J, Tichy G I, Vitek V et al. Philosophical Magazine A [J], 1987, 56(6): 735
- [28] Gao A, Mukherjee S, Srivastava I et al. Advanced Materials Interfaces[J], 2017, 4(23): 1 700 920
- [29] Cheng Q, Wu H A, Wang Y et al. Applied Physics Letters[J], 2009, 95(2): 021911.
- [30] Cheng Cong(成 聪). Thesis for Master(硕士论文)[D]. Hunan: Xiangtan University, 2014
- [31] Spearot D E, Tschopp M A, Jacob K I et al. Acta Materialia[J], 2007, 55(2): 705
- [32] Lin Y, Chen T. Crystals[J], 2019, 9(5): 240
- [33] Tian X, Li D, Yu Y et al. Materials Science and Engineering A[J], 2017, 690: 277

# Molecular Dynamics Simulations of the Tensile Mechanical Response of Single Crystal/Polycrystalline Nickel

Li Yuancai, Jiang Wugui, Zhou Yu

(Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

Abstract: In order to improve the thrust-to-weight ratio of the aero-engine, a new technology of the integral blisk has been widely used, but it has brought about a high-risk failure problem at the disk-blade joint zone. Therefore, the molecular dynamics was used to simulate the tensile mechanical properties of the single-crystal/polycrystalline nickel (SPSNi) at the joint zone. At first, the tensile mechanical properties of different crystalline nickel were compared. It is found that the degree of amorphization at the interface after tension is aggravated due to the presence of the single crystal/polycrystalline interface, which easily germinates the cracks and exacerbates the risk of sudden fracture of SPSNi. Then the effects of strain rate and temperature were investigated. In the range of  $1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$  to  $2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ , the tensile strength of the SPSNi is almost independent on the strain rate. But after exceeding  $2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ , the tensile strength  $\sigma_b$  of SPSNi decreases rapidly with the increase of strain rate. This is because at a high strain rate, the fcc atoms of SPSNi rapidly transform into a disordered amorphous structure on a large scale, resulting in a rapid decline in the carrying capacity of SPSNi. So the strain rate of  $2 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$  can be used as the threshold for the tensile deformation of SPSNi. The tensile strength  $\sigma_b$  of SPSNi decreases linearly with the increase of the temperature. This is because the SPSNi interface misfit dislocation network gradually becomes irregular under the influence of temperature, and the misfit stress decreases with the increase of temperature during plastic deformation stage.

Key words: integral blisk; single crystal/polycrystalline nickel; strain rate effect; temperature effect

Corresponding author: Jiang Wugui, Ph. D., Professor, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, P. R. China, E-mail: jiangwu gui@nchu.edu.cn