

镍基单晶高温合金 / (001) 相界面上原子构型的分子动力学研究^{*}

耿翠玉^{1)†} 王崇愚¹⁾²⁾³⁾ 朱 骏¹⁾

¹⁾ (钢铁研究总院功能材料研究所, 北京 100081)

²⁾ (清华大学物理系, 北京 100084)

³⁾ (中国科学院国际材料物理中心, 沈阳 110016)

(2004 年 7 月 5 日收到; 2004 年 7 月 28 日收到修改稿)

用分子动力学方法研究了镍基单晶高温合金 / (001) 相界面上三种各具特征的原子堆垛结构. 能量学计算发现, 存在最优构型, 动力学模拟显示不同构型的界面弛豫后, 在相界面上都“成对”出现刃型错配位错. 相关计算表明体系能量、界面形成能及弛豫能都依赖于界面原子堆垛特征, 而几何特征则具共性, 即不同原子构型的界面具有同一的应力释放模式.

关键词: 镍基单晶高温合金, 相界面, 错配位错, 分子动力学模拟

PACC: 6155H, 6848, 6170G, 6185

1. 引 言

镍基单晶高温合金由于具有优异的高温力学性能、良好的抗氧化性以及耐腐蚀能力, 因而是航天、航空工业领域中一类重要的高温结构材料, 作为关键部件用于航空发动机涡轮叶片. 镍基单晶高温合金由基体相 (Ni 基固溶体) 和析出相 (Ni_3Al 金属间化合物) 两相组成. 本文取面心立方 Ni 为模型

相, 晶格常数为 0.352nm, 如图 1(a) 所示 (图中 a, b 标志原子层的类型). 相具有 L1_2 型晶体结构, 如图 1(b) 所示, Al 原子占据 Ni_3Al 单胞的角顶位置, Ni 原子占据 Ni_3Al 单胞的面心位置 (图中 c, d 标志原子层的化学及几何特征). 相 Ni_3Al 晶格常数为 0.3568nm. 相关研究发现^[1-5], 镍基单晶高温合金中存在复杂的界面错配位错, 实验工作^[1-3] 指出, 界面位错与高温合金的蠕变行为相关, 第三代、第四代以及第五代镍基单晶高温合金蠕变强度都密切联系于界面位错网格^[6,7]. 可以推断 / 两相相界面的微观结构对航空发动机叶片材料的耐温能力和力学性能有很大影响, 显然界面原子结构研究对高温结构

材料具有重要的理论意义和技术价值.

目前关于界面的研究, 多集中于金属-半导体界面、陶瓷基层状复合材料界面以及金刚石/硅异质界面^[8,9], 而对于镍基单晶高温合金 / 相界面的研究却比较少, 且由于实用高温合金材料化学组分和结构复杂性, 直接实验观测尚难以给出 / 相界面原子几何排布以及化学环境的细节. 基于上述背景, 本文用分子动力学方法^[10], 在原子尺度上研究了 / 相界面上三种各具特征的堆垛结构, 同时进行了能量学分析计算.

2. 模型与方法

实验表明, 与两相转变发生在沿 [001] 方向约一个原子层的尺度上^[11]. 我们选取的模型示于图 2. 根据两相原子层结构特征, 两相界面上原子层衔接模式有三种, 堆垛次序分别为: $\dots ababdc \dots$, $\dots abacdc \dots$, $\dots abadcd \dots$ (见图 2), 记以 A, B, C. 基于上述模型, 我们对镍基单晶高温合金的 / 相界面结构进行了模拟. 模型尺寸取为: 在 x, y, z (即 [100], [010], [001]) 三个方向上 相分别为 74, 74 及 6 个原胞, 在三个方向上 相则分别为 73, 73 及 8

^{*} 国家重点基础研究发展规划项目 (批准号: TG2000067102) 和国家自然科学基金 (批准号: 90306016 和 901041044) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: gengcuiyu122@sohu.com

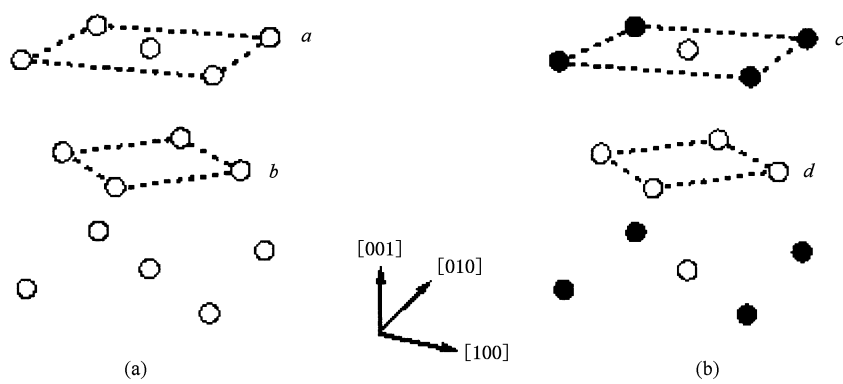


图1 Ni (a) 和 Ni₃Al (b) 晶体结构

个原胞. 三个模型中包含的总原子数目以及 Ni 和 Al 原子的原子数目均相同. 其中总原子数为 301952, 相含有 131424 个原子, 相含有 170528 个原子, 相中 Ni 与 Al 原子数目比例为 3:1. 在分子动力学模拟中,沿 x,y 方向采用周期性边界条件,在 z 方向采用自由边界条件.

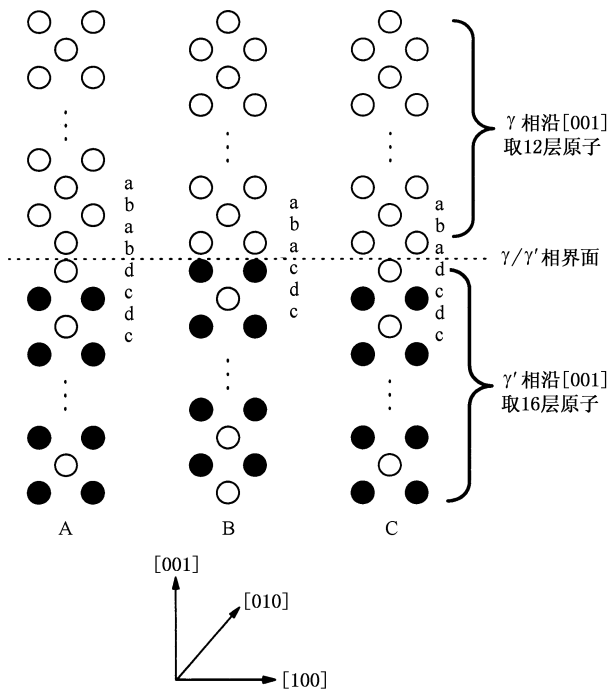


图2 / 相界面上的三种界面构型

分子动力学 (molecular dynamics) 方法^[10] 被广泛应用于材料科学中微观尺度的计算机模拟. 随着计算技术的发展,分子动力学方法和技术也随之发展,并在材料的动态模拟中得到广泛应用. 本文分子动力学模拟过程采用 Gear 预测-修正算法^[12],并通过重新标定原子瞬时速度来保持系统温度恒定. 模拟

中采用 Voter 和 Chen 发展的 Ni₃Al 原子间相互作用势^[13,14],分子动力学弛豫的时间步长为 6×10^{-15} s. 本文取 Ni₃Al 晶格常数为长度单位,能量单位为电子伏特.

3. 结果与讨论

3.1. 体系势能和界面形成能计算

图 3 示出弛豫过程中体系势能随弛豫时间的变化趋势. 由图 3 可见,对于 A、B、C 三种构型,随着弛豫时间的增加,势能变化曲线都逐渐呈线性变化. 弛豫步数达 10000 步左右时,势能变化趋于稳定. 考虑到本文为准静态模拟 (0 K),因此可以基于原子间相互作用势给出的能量作为构型稳定性的判据. 定义界面形成能 $E_{\text{formation}}$ 为

$$E_{\text{formation}} = E_{\text{slab, /}} - [E_{\text{slab,}} + E_{\text{slab,}}], \quad (1)$$

式中 $E_{\text{slab, /}}$ 为 / 相的体系能量, $E_{\text{slab,}}$ 和 $E_{\text{slab,}}$ 分别为孤立 相及 相的能量. 三种构型的 $E_{\text{slab, /}}$

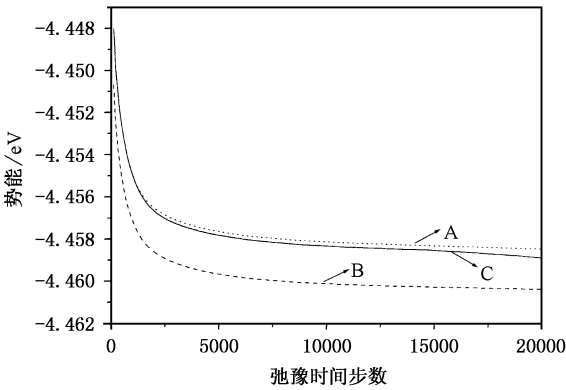


图3 势能随时间的变化

和 $E_{\text{formation}}$ 的计算结果列于表 1. 结果显示 B 构型的能量最低, 其次是 C 构型, A 构型的能量最高. 可以认为: 从基体析出 相所形成的界面以 B 构型在能量上最为有利.

表 1 三种构型的体系能量和界面形成能 (N 为体系总原子数, N_1 和 N_2 分别为 相和 相的原子数, S 为相界面的面积, 能量单位为 eV)

构型	$E_{\text{slab}, 1} / N_1$	$E_{\text{slab}, 2} / N_2$	$E_{\text{slab}, 3} / N_3$	$(E_{\text{formation}}/S) / (\text{eV}/\text{nm}^2)$
A	-4.458442	-4.341536	-4.476371	-18.1406
B	-4.460354	-4.341536	-4.476371	-18.9916
C	-4.458859	-4.341536	-4.476371	-18.3262

3.2. 界面原子结构分析和弛豫能计算

基于弛豫状态界面原子格位能计算, 在 / (001) 三种构型的相界面上挑选出能量高于 -4.4 eV 的原子, 相应的三维及平面图形示于图 4. 易见大部分能量较高的原子分布在边界以及沿 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向的区域. 沿 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向 / (001) 相界面上三种构型的原子结构示于图 5. 模拟计算发现: 不同特征的界面构型体系, 弛豫后在 / (001) 相界面上都形成了“成对”出现的 Burgers 矢量为 $a/2[110]$ 和 $a/2[1\bar{1}0]$ 的刃型错配位错, 位错的间隔为 18.4 nm.

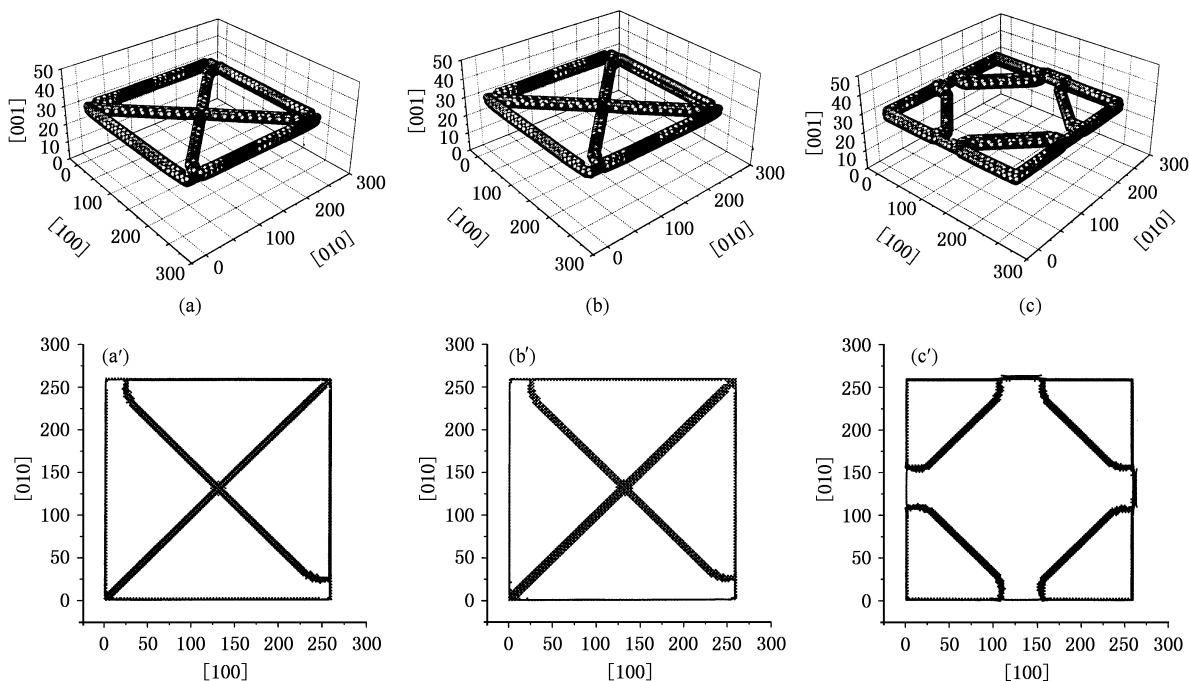


图 4 相界面处能量较高原子的三维及平面图形 (a) 和 (a') 对应于构型 A; (b) 和 (b') 对应于构型 B; (c) 和 (c') 对应于构型 C

为了反映弛豫前后的能量变化, 定义弛豫能 E_{release} 为

$$E_{\text{release}} = E_{\text{relax}} - E_{\text{unrelax}}. \quad (2)$$

其中 E_{relax} , E_{unrelax} 分别为弛豫后与弛豫前的体系能量, 弛豫能 E_{release} 的计算结果列于表 2. 由表 2 看出, 三种构型中 B 构型弛豫能量最大, C 构型次之, A 构型弛豫能量最小. 基于弛豫前后能量变化, 可以认为“成对”出现错配位错是 / (001) 相界面释放晶格错配应力的一种有效方式. 表 2 中相关能量计算显示: 界面堆垛取 B 构型有较高的出现率. 界面原子结构的优选可为第一原理电子结构计算提供几何

构型和原子学基础.

表 2 三种构型的弛豫能 (N 为体系总原子数)

构型	$(E_{\text{release}}/N) / \text{eV}$
A	0.044256
B	0.051184
C	0.044672

4. 结 论

本文设计了镍基单晶高温合金 / (001) 相界

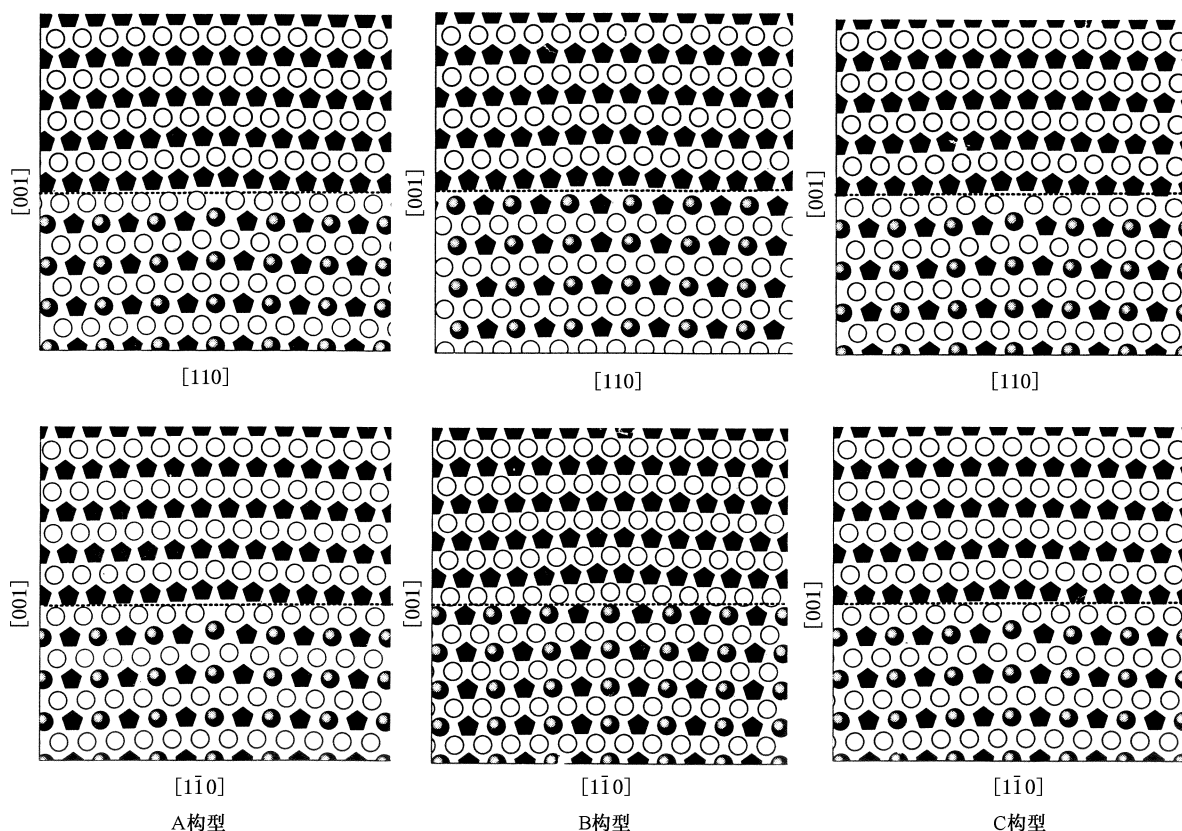


图5 三种构型的相界面沿 $[110]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向的原子排列 虚线表示相界面。垂直纸面方向堆垛次序为ABCBA,图中给出AB两层原子。A层原子用实心表示,其中球形为Al原子,五边形为Ni原子;B层Ni原子则用空心圆表示(注:将A层Ni原子换为Al原子,Al原子换为Ni原子便是C层)

面上三种不同原子构型(各具不同的原子层堆垛特征),进行了分子动力学模拟。计算发现界面上不同原子构型的能量学参量(体系能量、界面形成能、弛豫能)都依赖于界面原子堆垛特征,而几何结构则具共性,相应的界面错配位错特征为“成对”出现大小

为 $a/2[110]$ 和 $a/2[1\bar{1}0]$ 的刃型位错。

衷心感谢陈宏老师在镍基单晶高温合金相界面上错配位错实验方面有益的讨论和帮助。

- [1] Lasalmonie A and Strudel J L 1975 *Phil. Mag.* **32** 937
- [2] Lahrman D F, Field R D, Darolia R and Fraser H L 1988 *Acta Metall.* **36** 1309
- [3] Nobuhiro M, Yoshihiro K and Narihito O 2000 *Superalloys* (New York: TMS) p377
- [4] Wen Y H, Zhu T, Cao L X and Wang C Y 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2520 (in Chinese) [文玉华、朱 骏、曹立霞、王崇愚 2003 物理学报 **52** 2520]
- [5] Zhu T and Wang C Y submitted to *Phys. Rev. B*
- [6] Zhang J X, Murakumo T, Koizumi Y and Harada H 2003 *J. Mater. Sci.* **38** 4883
- [7] Koizumi Y, Zhang J X, Kobayashi T, Yokokawa T, Harada H, Aoki Y and Arai M 2003 *Japan. J. Inst. Metals* **67** 468
- [8] Tu X W and Gai Z 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2439 (in Chinese) [涂修文、盖 峥 2001 物理学报 **50** 2439]
- [9] Dai Y B *et al* 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 244 (in Chinese) [戴永兵等 2001 物理学报 **50** 244]
- [10] Allen M P and Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* (New York: Oxford University Press) p83
- [11] Zhang Y, Wanderka N, Schumacher G, Schneider R W and Neumann W 2000 *Acta Mater.* **48** 2787
- [12] Gear C W 1971 *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equation* (New Jersey: Prentice-Hall) p1—54
- [13] Voter A F and Chen S P 1987 *Proc. Mater. Res. Soc. Symp.* **82** 175
- [14] Chen S P, Srolovitz D J and Voter A F 1989 *J. Mater. Res* **62** 4

Molecular dynamics simulation of atomic configurations at / (001) interface in Ni-based single-crystalline superalloys^{*}

Geng Cui-Yu^{1)†} Wang Chong-Yu¹⁾²⁾³⁾ Zhu Tao¹⁾

¹⁾ (Institute of Functional Materials, Central Iron and Steel Research Institute, Beijing 100081, China)

²⁾ (Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

³⁾ (International Center for Materials Physics, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

(Received 5 July 2004; revised manuscript received 28 July 2004)

Abstract

In this paper, three different atomic configurations at / (001) interface in Ni-based single-crystalline superalloys has been studied by means of molecular dynamics. The most stable atomic configuration was obtained by energetics calculation. Among the three configurations analyzed, dynamics simulation results show that a pairs of edge misfit dislocations appeared at all the relaxed interfaces. The related calculations reveal that the system energy, the interface formation energy and the relaxed energy are determined by the stacking sequence, while the geometric character of different atomic configurations is the same. That is, different atomic configurations at / (001) interface have the same strain relief mechanism.

Keywords: Ni-based single superalloys, interface, misfit dislocation, molecular dynamics simulation

PACC: 6155H, 6848, 6170G, 6185

^{*}Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. TG2000067102), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 90306016 and 901041044).

[†]Corresponding author. E-mail: gengcuiyu122@sohu.com