

α -Ti 单晶失稳机制和初始塑性的多尺度研究

顾剑锋, 熊 凯, 刘晓晖

(上海交通大学 材料科学与工程学院, 上海 200240)

摘 要: 采用晶格动力学有限元法研究 α -Ti 晶体单向拉伸和压缩过程中弹-塑性转变和失稳的均匀形核机制。模拟结果表明: 在单向加载过程中, α -Ti 理想晶格的动力学失稳特征与晶体取向和变形方式有关, 并且初始塑性存在显著的各向异性 and 拉伸-压缩不对称性; 晶体变形过程中的晶格失稳产物既有晶格畸变和位错, 也观察到相变和变形孪生。

关键词: 钛; 弹塑性变形; 多尺度模拟; 分子动力学; 拉伸; 压缩

中图分类号: TG 111.2

文献标志码: A

Multiscale investigation on lattice disability mechanism and incipient plasticity in α -Ti single-crystalline

GU Jian-feng, XIONG Kai, LIU Xiao-hui

(School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: Uniaxial tension and compression of α -Ti crystal were simulated by lattice dynamics finite element method (LDFEM) to investigate the elastic-plastic transition and homogeneous nucleation mechanism of lattice disability in α -Ti. The simulation results show that lattice dynamics instability of α -Ti single crystal is associated with crystallographic and deformation model under uniaxial loading, indicating strong anisotropic incipient plasticity and tension-compression asymmetry. The predicted products of lattice disability include not only lattice distortion and dislocation but also phase transformation and deformation twinning in crystal deformation process.

Key words: titanium; elastoplastic deformation; multiscale modeling; molecular dynamics; tension; compression

密排六方(HCP)结构的 α -Ti 合金具有明显的力学各向异性, 这种各向异性与合金变形过程中原子滑移方式有关。在 HCP 结构晶体中最常见的滑移方式为 $\{10\bar{1}0\}$ 、 $\{10\bar{1}1\}$ 和 $\{0001\}$ 面上的原子沿 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向滑移, 组成 4 个独立的滑移系。而这些滑移系并不能产生沿 c -轴方向的变形, 且多晶材料均匀塑性变形至少需要 5 个独立的滑移系^[1]。为了保持 α -Ti 合金变形过程中相容性, 在多晶材料变形过程中, 通常会伴随有孪生, 因此, α -Ti 晶体内缺陷形成方式比较复杂^[2]。实验上, 人们已对 α -Ti 晶体中的位错和孪生机制进行了广泛的研究^[3-4], 基于多尺度分析的材料设计已成为必然趋势^[5]。

材料宏观弹塑性变形过程涉及从宏观到原子尺度的各种变化。尽管人们已经对 Ti 合金从电子和原子尺度上进行了大量研究^[6], 但因电子结构计算受到模型大小和计算成本的限制, 无法扩展至材料变形过程中缺陷形核机制。目前, 人们对 Ti 合金力学行为与滑移方式之间的关系主要采用连续塑性模型(例如晶体塑性有限元法)进行研究^[7-9], 这些建立在连续介质理论基础上的模型并不能准确反映材料变形过程中原子间相互作用的变化。近年来, 材料多尺度模拟技术的发展为直接建立宏观变形与微观缺陷形成机制之间的联系创造了条件^[10-11]。

LI^[12-13]等提出一种连接原子和连续尺度, 并能精

确反映晶体弹性变形过程中原子间相互作用的多尺度方法,称为相互原子势有限元法(IPFEM)。采用 IPFEM 方法对单晶 Cu 纳米压痕研究表明,临界压入深度、临界分切应力和临界压入硬度各向异性显著^[14]。LIU 等^[15]考虑了晶格变形过程中原子间的内位移,将 IPFEM 方法拓展到复杂晶体结构,并提出以晶格动力学为基础的复杂晶格动力学有限元模型(LDFEM)。对 B₂-NiAl 的研究结果表明,LDFEM 不仅适于研究均匀变形过程中弹塑性转变机制,还可以处理复杂加载问题,例如纳米压痕等。本文采用 LDFEM 多尺度方法和分子动力学(MD)方法研究单向拉伸和压缩过程中 α -Ti 晶体弹-塑性转变和缺陷形成机制。

1 方法

1.1 本构模型

LIU 等^[15]给出了超弹性框架内相互原子势基础上本构关系的详细推导过程。晶格内每个原胞所在位置处的能量密度 W 为

$$W = \frac{1}{\Omega_0} \left[\sum_{\beta \neq \alpha}^{N_{\text{cut}}^{\alpha}} \frac{1}{2} V^{\alpha\beta}(r^{\alpha\beta}) + U^{\alpha}(\bar{\rho}^{\alpha}) \right] \quad (1)$$

式中:括号内第一项为原子势能的对势项;第二项为嵌入能; Ω_0 为原胞在参考构型中的体积; N_{cut}^{α} 为以与原子 α 距离小于截断半径 r_{cut} 的所有原子; $\bar{\rho}^{\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} \rho^{\beta}(r^{\alpha\beta})$ 为原子 α 位置处的总电荷密度,其中 $\rho^{\beta}(r^{\alpha\beta})$ 为 α 原子嵌入电子云之前 β 原子在 α 原子位处的电荷密度分布函数。超弹性本构关系可表示为

$$\mathbf{S} = \frac{\partial W}{\partial \mathbf{E}} \quad (2)$$

$$\mathbf{C} = \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{E}} = \frac{\partial^2 W}{\partial \mathbf{E} \partial \mathbf{E}} \quad (3)$$

式中: $\mathbf{S}$ 为第二 Piola-Kirchhoff 应力张量; $\mathbf{C}$ 为二阶弹性张量; $\mathbf{E}$ 为 Lagrangian Green 应变张量。以当前构型作为参考构型弹性模量 $\mathbf{C}$ 表示切向模量,则将式(1)代入式(2)和(3)可得到相互原子势基础上的超弹性本构关系。

根据相互原子势基础上的超弹性本构关系,编写 LDFEM 程序。在每个增量步计算变形梯度并更新近邻原子列表和原子内位移,实现 LDFEM 多尺度模拟。

1.2 模拟步骤

本研究中 LDFEM 和 MD 模拟选用 ZOPE 等^[16]发展的 EAM 势。该势拟合实验和 *ab initio* 数据而得,

可准确预测 α -Ti 的晶体结构和晶格性质。 α -Ti 晶体 $[01\bar{1}0]$ 和 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 方向拉伸和压缩基矢分别为 $\mathbf{x}[01\bar{1}0]$ 、 $\mathbf{y}[0001]$ 和 $\mathbf{z}[2\bar{1}\bar{1}0]$ 及 $\mathbf{x}[2\bar{1}\bar{1}0]$ 、 $\mathbf{y}[01\bar{1}0]$ 和 $\mathbf{z}[0001]$ 。采用 LAMMPS 软件^[17]进行 MD 模拟,模拟盒子在 $\mathbf{x}$ 、 $\mathbf{y}$ 和 $\mathbf{z}$ 方向的尺寸约为 177×10^{-10} 、 173×10^{-10} 和 173×10^{-10} m,共包含 297 360 个原子。模型采用周期性边界条件,模拟温度为 0.1 K, LDFEM 和 MD 均匀变形过程中工程应变率均匀为 10^9 s^{-1} 。采用 ATOMEYE 软件^[18]查看变形过程中原子结构的变化。

2 结果

2.1 单向拉伸

α -Ti 塑性变形过程中通常伴随滑移和孪生,表现出复杂的缺陷形成机制。详细分析 α -Ti 单晶弹塑性转变过程中缺陷形成过程对理解 Ti 合金塑性变形显得尤为重要。鉴于 LDFEM 可预测初始塑性变形过程中缺陷形成方式,采用 LDFEM 研究 α -Ti 单晶单向拉伸力学行为与晶体取向之间的关系。

图 1 所示为 α -Ti 单晶拉伸应力—应变曲线(σ — ε 曲线)。从图 1 可知:应力 σ 随应变 ε 的增大而增大,晶格发生动力学失稳后(图 1 中 $\star$ 所示), σ 曲线迅速下降,晶体发生塑性变形; α -Ti 晶体表现出明显的拉伸弹塑性各向异性;晶格失稳前 LDFEM 和 MD 模拟得到的 σ — ε 曲线精确相符,表明 LDFEM 可以准确反映晶体变形过程中晶体内原子间相互作用的变化。

如图 1 所示,在 $[01\bar{1}0]$ 单向拉伸过程中,当 $\varepsilon=12.6\%$ ($\sigma=11.5 \text{ GPa}$) 时, α -Ti 单晶发生动力学失稳,相应的晶格振动格波色散关系如图 2(a)所示。当 $\varepsilon=13.0\%$ 时,MD 拉伸曲线达到最大应力 $\sigma=11.6 \text{ GPa}$,与 LDFEM 的相对误差约为 0.9%。图 2(a)中的一支横声学波在 Γ 点附近发生长波失稳,失稳波矢沿 $\mathbf{q}=[2\bar{1}\bar{1}0]$ 方向,Ti 原子振动方向为 $\mathbf{v}=[01\bar{1}0]$,这意味着 α -Ti 中 $(2\bar{1}\bar{1}0)$ 面上的原子可能沿 $[01\bar{1}0]$ 方向运动。观察拉伸过程中原子构型图 3(a)可知:当 $\varepsilon=13.4\%$ 时, $(2\bar{1}\bar{1}0)$ 面上的原子沿 $[01\bar{1}0]$ 方向滑移;在弹-塑性转变初期,随着 ε 的增加,滑移区晶格变形加剧;当变形达到一定程度时,晶体内发生相变,晶格从 HCP 结构的 α 相变为面心正交结构的 α' 相,使系统能量降低。图 3 中深色原子面即为相界面。

从图 1 可见:沿 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 方向拉伸过程中 $\varepsilon=7.7\%$ ($\sigma=4.7 \text{ GPa}$) 时 α -Ti 晶体发生失稳,MD 初始弹

塑性转变点与之重合。失稳时的声子谱如图 2(b)所示, 在 Γ 点附近一支横声学波发生弹性失稳, 滑移面可能是 $(\bar{1}100)$ 面。观察图 2(b)原子构型发现: 在晶体塑性变形初始阶段, 晶体内原子沿柱面滑移系 $[11\bar{2}0](\bar{1}100)$ 滑移; 在塑性变形初期, 原子滑移方式与 $[01\bar{1}0]$ 单向拉伸过程相类似, 随着 ε 的增加, 晶体内部分区域发生相变, 晶格从 HCP 结构的 α 相变为面心正交结构的 α' 相, 呈带状分布。

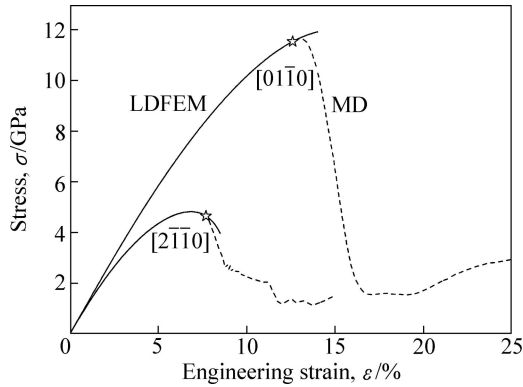


图 1 α -Ti 单晶沿 $[01\bar{1}0]$ 和 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 单向拉伸应力-应变曲线 (实线和虚线分别为 LDFEM 和 MD 模拟结果, $\star$ 表示动力学失稳位置)

Fig. 1 Uniaxial tension stress-strain curves of α -Ti crystal along $[01\bar{1}0]$ and $[2\bar{1}\bar{1}0]$ directions (Solid and dash line illustrate LDFEM and MD modeling results, respectively; $\star$ denotes dynamic instability point)

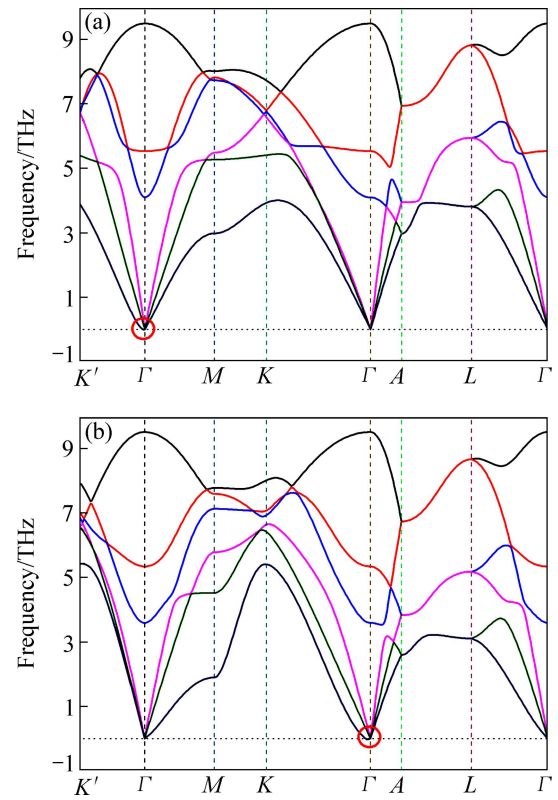


图 2 $[01\bar{1}0]$ 和 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 单向拉伸过程中晶格动力学失稳时对应的声子谱(圆圈标记出失稳波矢位置)

Fig. 2 Lattice instability phonon spectras of α -Ti crystal tension along $[01\bar{1}0]$ (a) and $[2\bar{1}\bar{1}0]$ (b) directions (Circle shows instability region of wave vector)

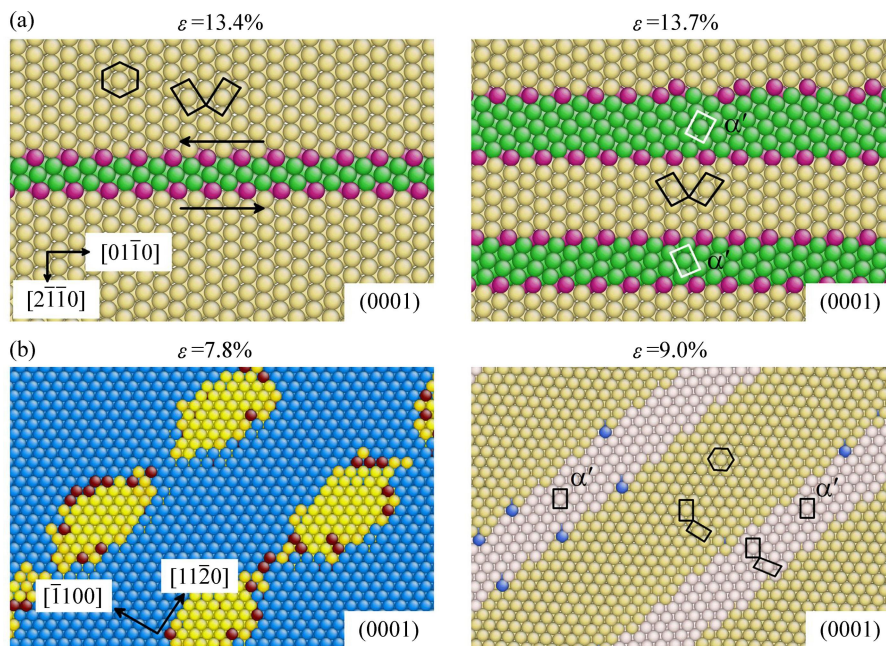


图 3 α -Ti 单晶沿 $[01\bar{1}0]$ 和 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 单向拉伸过程中塑性变形初始阶段缺陷原子构型。

Fig. 3 Defect atomic configurations of α -Ti single-crystalline in initial plastic stage tension along $[01\bar{1}0]$ (a) and $[2\bar{1}\bar{1}0]$ (b) directions

2.2 单轴压缩

采用 LDFEM 和 MD 方法研究了 α -Ti 晶体单向压缩过程, 压缩 σ — ε 曲线如图 4 所示。从图 4 可见: α -Ti 晶体压缩过程中表现出明显的弹-塑性各向异性。

从图 4 可知: 在 α -Ti 晶体 $[01\bar{1}0]$ 压缩过程中当 $\varepsilon=-6.5\%$ ($\sigma=-4.1$ GPa)时发生动力学失稳。晶体失稳时的声子谱如图 5(a)所示。从图 5(a)可见: 一支声学波在 Γ 点附近发生长波失稳, 格波波矢 q 沿 $[\bar{1}100]$, 原子振动方向 $v=[11\bar{2}0]$, 表明晶体内 $(\bar{1}100)$ 上的原子可

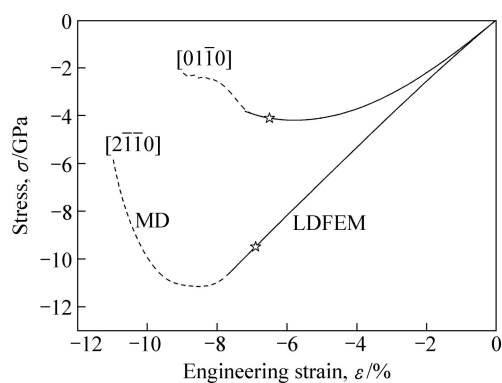


图 4 α -Ti 单晶沿 $[01\bar{1}0]$ 和 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 单向压缩应力—应变曲线 (实线和虚线分别为 LDFEM 和 MD 模拟结果; ☆表示应变过程中发生动力学失稳)

Fig. 4 Uniaxial compression stress-strain curves of α -Ti single-crystalline along $[01\bar{1}0]$ and $[2\bar{1}\bar{1}0]$ directions (Solid and dash line obtained from LDFEM and MD simulation, respectively; ☆ indicates dynamic instability point)

能沿 $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 方向滑动。观察图 6(a)中塑性变形初始阶段原子构型的变化可知: 当 $\varepsilon=-7.7\%$ 时, 晶体内已经

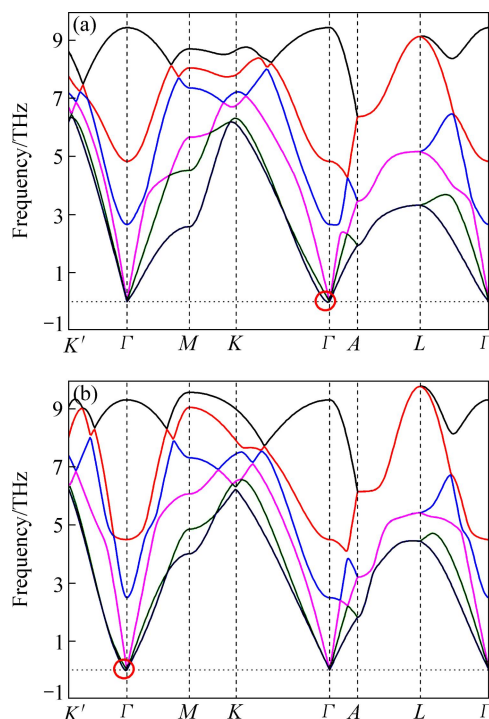


图 5 $[01\bar{1}0]$ 和 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 压缩过程中晶格动力学失稳时对应的声子谱, 圆圈表示晶格振动频率为负。

Fig. 5 Instability phonon spectras of crystal in tension along the $[01\bar{1}0]$ (a) and $[2\bar{1}\bar{1}0]$ (b) direction, the circles denote minus lattice vibration frequency

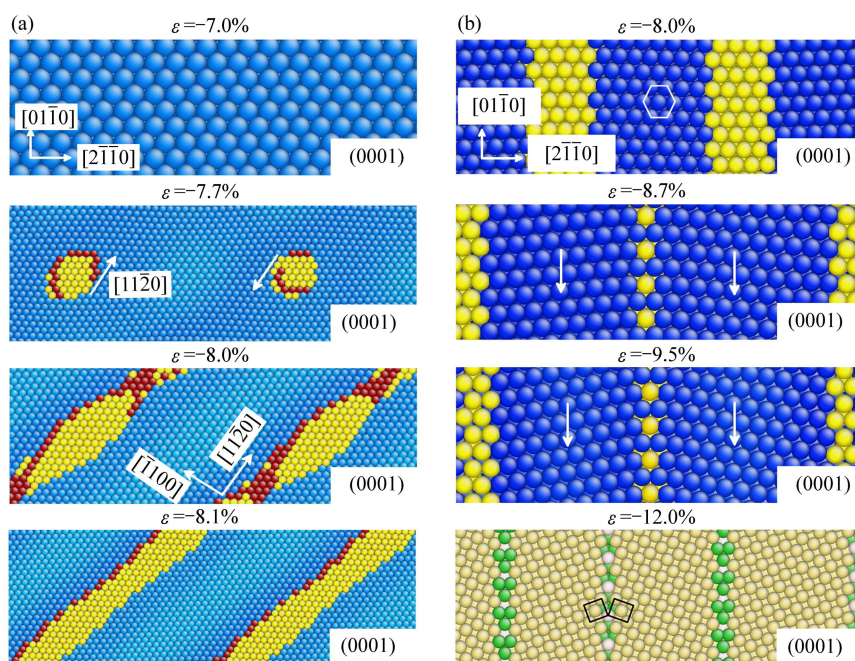


图 6 α -Ti 单晶沿 $[01\bar{1}0]$ 和 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 压缩过程中塑性变形初始阶段缺陷原子构型

Fig. 6 Defect atomic configurations of α -Ti single-crystalline at onset of plastic deformation during compression along $[01\bar{1}0]$ (a) and $[2\bar{1}\bar{1}0]$ (b) direction

产生局部原子滑移, 滑移方向为 $[11\bar{2}0]$, 随着 ε 的增大, 在晶体内形成带状条纹($\varepsilon=8.1\%$)。

从图 4 可知: 当 $\varepsilon=-6.9\%$ ($\sigma=-9.5$ GPa) 时, α -Ti 晶体发生弹性失稳。失稳声子谱如图 5(b) 所示, 失稳波矢位于 Γ 点附近。根据晶格失稳时波矢方向和原子位移取向可知: 晶体内原子可能发生 $[01\bar{1}0](2\bar{1}\bar{1}0)$ 滑移。塑性变形初始阶段原子构型如图 6(b) 所示, α -Ti 晶体内形成孪晶, 孪生面为 $(2\bar{1}\bar{1}0)$, 孪生方向为 $[01\bar{1}0]$ 。晶体孪生过程中伴随结构的变化, 如图 6(b) 中 $\varepsilon=-12.0\%$ 所示, 孪晶带内原子从 HCP 结构变为面心正交结构。

3 讨论

α -Ti 晶体变形过程中表现出的各向异性与晶体内复杂的缺陷形成和演化机制有关。从晶格动力学失稳方式上看, 晶体变形方式不同, 晶格动力学失稳波矢位置和原子振动方向也不同。对比图 3 和图 6 发现: $[01\bar{1}0]$ 拉伸和压缩过程中滑移方式分别为 $[01\bar{1}0](2\bar{1}\bar{1}0)$ 和 $[11\bar{2}0](\bar{1}100)$, 柱面滑移系 $[11\bar{2}0](\bar{1}100)$ 在 α -Ti 晶体中比较容易激活。在晶体塑性变形初始阶段, 晶体变形过程中积蓄的能量, 促使变形过程中相变发生。此外, 在 $[2\bar{1}\bar{1}0]$ 压缩过程中发生孪生塑性变形, 孪生面为 $(2\bar{1}\bar{1}0)$, 孪生方向为 $[01\bar{1}0]$ 。同时在孪生过程中伴随结构改变, 孪晶内的晶体结构也从 HCP 变为面心正交结构。总之, α -Ti 塑性变形初始阶段表现出复杂的缺陷形成机制, 缺陷类型与晶体取向和变形方式有关。

4 结论

1) 采用 LDFEM 多尺度方法研究 α -Ti 晶体均匀变形过程中的塑性变形初始阶段晶体内缺陷形核机制。

2) α -Ti 晶体在均匀变形过程中表现出明显的各向异性和拉伸-压缩不对称性, 晶格失稳方式与晶体变形方式有关。

3) 在塑性变形初始阶段理想晶格存在复杂的缺陷形成机制, 缺陷类型与晶体取向和变形方式有关, 均匀变形导致的失稳产物包括位错、孪生和相变。

REFERENCES

[1] CHICHILI D R, RAMESH K T, HEMKER K J. The high-strain-rate response of alpha-titanium: Experiments,

- deformation mechanisms and modeling[J]. *Acta Materialia*, 1998, 46(3): 1025–1043.
- [2] NIE J F, ZHU Y M, LIU J Z, FANG X Y. Periodic Segregation of Solute Atoms in Fully Coherent Twin Boundaries[J]. *Science*, 2013, 340(6135): 957–960.
- [3] ZHU K Y, VASSEL A, BRISSET F, LU K, LU J. Nanostructure formation mechanism of α -titanium using SMAT[J]. *Acta Materialia*, 2004, 52(14): 4101–4110.
- [4] YU Q, SUN J, MORRIS J W, MINOR A M. Source mechanism of non-basal $\langle c+a \rangle$ slip in Ti alloy[J]. *Scripta Materialia*, 2013, 69(1): 57–60.
- [5] BANERJEE D, WILLIAMS J C. Perspectives on titanium science and technology[J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(3): 844–879.
- [6] 王 峰, 徐东生, 杨 锐. α -Ti 中 a 型位错的运动及相互作用的分子动力学模拟[J]. *中国有色金属学报*, 2010, 20(S1): s457–s462.
- WANG Hao, XU Dong-sheng, YANG Rui. Molecular dynamics simulations of glide and interaction of a-type dislocations in α -titanium[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2010, 20(S1): s457–s462.
- [7] FROMM B S, ADAMS B L, AHMADI S, KNEZEVIC M. Grain size and orientation distributions: Application to yielding of α -titanium[J]. *Acta Materialia*, 2009, 57(8): 2339–2348.
- [8] ALANKAR A, EISENLOHR P, RAABE D. A dislocation density-based crystal plasticity constitutive model for prismatic slip in α -titanium[J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(18): 7003–7009.
- [9] GURAO N P, KAPOOR R, SUWAS S. Deformation behaviour of commercially pure titanium at extreme strain rates[J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(9): 3431–3446.
- [10] WARNER D H, CURTIN W A, QU S. Rate dependence of crack-tip processes predicts twinning trends in f.c.c. metals[J]. *Nature Materials*, 2007, 6(11): 876–881.
- [11] BEABER A, GERBERICH W. Alloys: Strength from modelling[J]. *Nature Materials*, 2010, 9(9): 698–699.
- [12] LI J, van VLIET K J, ZHU T, YIP S, SURESH S. Atomistic mechanisms governing elastic limit and incipient plasticity in crystals[J]. *Nature*, 2002, 418(6895): 307–310.
- [13] van VLIET K, LI J, ZHU T, YIP S, SURESH S. Quantifying the early stages of plasticity through nanoscale experiments and simulations[J]. *Physical Review B*, 2003, 67(10): 104105-1–104105-15.
- [14] LIU X H, GU J F, SHEN Y, CHEN C F. Anisotropy in homogeneous dislocation nucleation by nanoindentation of single crystal Cu[J]. *Scripta Materialia*, 2008, 58(7): 564–567.
- [15] LIU X, GU J, SHEN Y, LI J, CHEN C. Lattice dynamical finite-element method[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(2): 510–523.
- [16] ZOPE R R, MISHIN Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system[J]. *Physical Review B*, 2003, 68(2): 024102-1–024102-14.
- [17] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1–19.
- [18] LI J. AtomEye: An efficient atomistic configuration viewer[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2003, 11(2): 173–177.

(编辑 陈灿华)