文章编号: 1004-0609(2013)S1-s0212-05

# 体心立方金属及合金的广义层错能的比较

武鹤楠1,徐东生1,王 皞1,刘艳侠1,2,杨 锐1

(1. 中国科学院 金属研究所, 沈阳 110016; 2. 辽宁大学 物理学院, 沈阳 110136)

**摘 要:**采用静力学方法模拟 Mo、β-Ti 和 Ti2448(Ti-24Nb-4Zr-8Sn(质量分数,%))的两个主要滑移面{110}和{112} 面的广义层错能曲面(y-surface),并对比研究其剪切变形性质。计算中所采用的势函数为本研究组构造的嵌入原子 型势函数。结果表明:3种材料在{110}和{112}面上的滑移系分别为{110}(111)和{112}(111),伯格斯矢量为 1/2(111); (112)面上[1]方向剪切可产生孪晶。剪切模量、位错和孪晶形核的能垒和屈服应力由高到低依次为 Mo、β-Ti 和 Ti2448。

**关键词**: *β*型钛合金; 静力学模拟; 广义层错能; 体心金属; 嵌入原子势 **中图分类号**: TG146.2 **文献标志码**: A

# Comparison between generalized stacking fault energy selected body-centered cubic metals and alloys

WU He-nan<sup>1,2</sup>, XU Dong-sheng<sup>1</sup>, WANG Hao<sup>1</sup>, LIU Yan-xia<sup>1,3</sup>, YANG Rui<sup>1</sup>

Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China;
 College of Physics, Liaoning University, Shenyang 110136, China)

**Abstract:** The generalized stacking fault energy surface ( $\gamma$ -surface) of three BCC materials, Mo,  $\beta$ -Ti and Ti2448 (Ti-24Nb-4Zr-8Sn (mass fraction, %)) on the two main slip planes was simulated using static method to compare their shear deformation properties. The EAM potential for Ti2448 constructed in our group was employed to compare. The results show that, for the metals and alloys investigated, the slip systems are {110} (111) and {112} (111), and with a Burgers vector of 1/2(111). The [1] direction on (112) plane is twinning direction. The shear modulus, energy barrier for dislocation and twinning nucleation and critical stress from high to low are Mo,  $\beta$ -Ti and Ti2448.

Key words:  $\beta$ -type titanium alloy; static simulation; generalized stacking fault energy; body-centered cubic metal; embedded-atom method potential

与面心立方合金在一个滑移系中进行大量滑移不同,体心立方材料中通常{110}和{112}面滑移均承担 塑性变形<sup>[1]</sup>。这种不同滑移系同时开动导致一系列分 析上的困难。如位错间的相互作用、杂质及缺陷对位 错的钉扎导致实验上难以确定滑移系的可动性。钛合 金有着广泛的应用<sup>[2]</sup>,其中,Ti2448(Ti-24Nb-4Zr-8Sn (质量分数,%))是一种新型亚稳 β 型钛合金,具有低 模量和高强度,其体模量与剪切模量相当,且接近人 骨,已开始应用于医用植入等领域。该合金塑性变形 机制有别于传统合金,也不同于一般的橡胶金属。它 在塑性变形时表现出高度局域化的非均匀塑性变形行 为<sup>[3]</sup>,并受应变速率影响<sup>[4]</sup>,研究其单晶塑性变形行为 对于理解多晶变形机理、掌握材料塑性变形特性有重 要意义。一般金属与合金中的塑性变形机制为滑移、 孪晶和扭折等,其中以滑移和孪晶为主,但Ti2448的 变形机制和路径还不十分清晰,这对其进一步应用有 一定限制。原子模拟方法可以克服实验上的不足,可 计算出主要滑移面{110}和{112}面上的广义层错能

基金项目:国家重点基础研究发展计划资助项目(2011CB606404);国家自然科学基金资助项目(51171195,51101158)

收稿日期: 2013-07-28; 修订日期: 2013-10-10

通信作者: 徐东生, 研究员, 博士; 电话: 024-23971946; E-mail: dsxu@imr.ac.cn

(y-surface)并预测滑移系,为进一步用分子动力学方法研究其塑性变形机制及特征奠定基础。

广义层错(GSF)能的概念<sup>[5-6]</sup>最早由 Vitek 在 1968 年研究面心立方晶体时提出[7]。将完整晶体沿一平面 (即滑移面)分成两部分,把两部分晶体沿分界面相对 移动任意位移(如图 1(a)所示, u 为滑移矢量), 晶体在 单位滑移面积上的能量增额即广义层错能。计算最小 周期单元内所有滑移矢量所对应的层错能并按滑移矢 量绘图,所得曲面反映了该滑移面上沿不同方向上滑 移导致的能量变化特征,被称为广义层错能。它可反 映晶体的很多力学性质,如滑移系、弹性模量、孪晶 方向等。为探索具有不同稳定性的金属及合金的变形 行为,选取 Mo、Ti 和 Ti2448 体心立方材料进行对比 研究。其中 Mo 十分稳定,很难发生相变, $\beta$ -Ti 可发 生向六角密堆的相变,而Ti2448的转变比较复杂,导 致其奇异的变形机制。因此,本文作者采用静力学方 法计算三者在两个主要滑移面{110}和{112}面上的广 义层错能,分析研究其异同,为在原子尺度上理解该 合金的特殊弹性及塑性行为和进一步应用奠定基础。



图 1 体心立方结构中沿(001)面(10)面、(112)面滑移示意图 Fig. 1 Schematic showing slip on (001) plane (a) and (10) plane and (112) plane (b) (*u* is slip vector, red arrows represent Burgers vectors in each slip plane)

# 1 计算方法

体心立方结构的主要滑移面为{110}和{112},见 图 1(b),其中的红色箭头表示各滑移面上的伯格斯矢 量。本文作者采用静力学方法计算了 Mo、β-Ti 和 Ti2448 的广义层错能。其中 Mo 和 β-Ti 分别采用 FINNIS 等<sup>[8]</sup>及 ZOPE 等<sup>[9]</sup>构造的势函数,而 Ti2448 采 用本研究组构造的 EAM 势函数。计算(10)面的广义层 错能所采用的模拟晶胞基矢为[110]、[001]、[10],包 含 2 000 个原子, 计算(112)面的广义层错能所采用的 模拟晶胞基矢为 1/2[11]、[10]、1/2[111], 包含 1 000 个原子。模拟时采用周期性边界条件, 垂直于滑移面 方向进行弛豫。

### 2 结果与讨论

计算得到的 3 种材料的(10)和(112)面的广义层错 能如图 2 和图 3 所示。从图 2 和 3 中可以看出, 3 种 材料(10)面的广义层错能均为中心对称,但中心极小 值处的形状有区别,Mo的较圆,β-Ti的较细长,Ti2448 的介于前两者之间,且沿[111]方向的鞍点能量比其他 方向的低很多,因此,在(10)面上沿[111]方向最易滑





**Fig. 2**  $\gamma$ -surface of (10) plane of three kinds of materials: (a) Mo; (b)  $\beta$ -Ti; (c) Ti2448 (Arrows represent twinning and anti-twinning shear directions)





**Fig. 3**  $\gamma$ -surfaces of (112) plane of three kinds of materials: (a) Mo; (b)  $\beta$ -Ti; (c) Ti2448 (Arrows represent twinning and anti-twinning shear directions)

移。(112)面的广义层错能左右不对称,沿[11]方向的 鞍点能量比其他方向的低很多,因此在(112)面上沿[11] 方向最易滑移。两种滑移面上滑移系分别为{110}(111) 和{112}(111),伯格斯矢量为 1/2(111)。(10)面的广义 层错能沿伯格斯矢量的正负方向是对称的,表明该滑 移面上位错滑移无正反向之分;而(112)面的不对称, 说明正反方向剪切时应存在不同的变形行为。这种不 对称行为一般与孪晶变形相关,使孪晶只能单方向剪 切,反向剪切时可产生退孪晶或开动其他滑移系。对 于有序金属间化合物中的超位错滑移,近期已通过原 子模拟发现其可出现形核及运动的不对称性<sup>[10]</sup>。

为探索(112)面上的可能变形途径,对不同层数原 子同时剪切的广义层错能进行了计算。图 4 所示为 3 种材料(112)面[11]方向多层广义层错能沿[11]方向的 截面,可更清楚地看出[1]为孪晶方向。由图 3(a)可见, 对于 Mo, 2 层及以上孪晶才稳定, 而 β-Ti 和 Ti2448 则需3层及以上孪晶才能稳定。为更清楚地分析滑移 及产生孪晶的能量情况,将3种材料在(10)面单层滑 移、(112)面单层滑移和(112)面产生稳定孪晶的能垒列 于表1中。可见能垒由高到低为 Mo、β-Ti 和 Ti2448。 对同种材料,(10)面单层滑移的能垒稍低于(112)面单 层滑移的能垒,但高于(112)面产生孪晶的能垒;其中 Mo 和 β-Ti 的约高一倍,而 Ti2448 的高近两倍。位错 和孪晶形核的能垒由高到低为(112)面单层滑移、(10) 面单层滑移、(112)面产生孪晶,即(112)孪晶更易开动, 表明理想晶体中,这3种材料塑性变形时可在(112)面 上均匀形核产生孪晶,因而孪晶是其主要塑性变形机 制之一,实际材料受缺陷、温度等影响。

通过广义层错能可求出静态剪切应力一应变曲 线,可反映剪切变形时应力随变形量的变化。所研究 的 3 种材料沿(10)面[111]方向和(112)面[11]方向的应 力一应变曲线绘于图 5 中。曲线分析可知, (10)面正 反方向滑移对称,因此图5只画出了其中一半,而(112) 面上正反剪切应力随应变方向不同,应力分析可知, [1]、[11]方向应分别为孪晶和反孪晶方向。从图 4 中 可见,随应变增加应力不断增大,达到极大值,即屈 服应力随后下降。3 种材料相比, 屈服应力由大到小 依次为 Mo、β-Ti 和 Ti2448,列于表 2 中,可见各面 和方向间应力值差别不大。由应力一应变曲线还可得 到3种材料的剪切模量,见表3。可见剪切模量由高 到低为 Mo、β-Ti 和 Ti2448, 这与位错和孪晶形核的 能垒和屈服应力趋势一致。Ti2448(10)面[111]方向的 模量是β-Ti的一半, 而远低于 Mo 的模量; (112)面[11] 方向的模量比β-Ti的稍低, 而远低于 Mo 的模量;(112) 面[1]方向的模量比β-Ti 的低 55%, 而远低于 Mo 的模



**图 4** 3 种材料(112)面[11]方向多层广义层错能沿[11]方向的截面

**Fig. 4** Multilayer  $\gamma$ -surface on (112) plane along [11] direction of three kinds of metal and alloys: (a) Mo; (b)  $\beta$ -Ti; (c) Ti2448 (*N* layers indicate that homogeneous shear occurs among *N* atomic layers; abscissa axis shows amount of shear for each layer; **b** is Burgers vector)

量。注意到 3 种金属及合金(112)面的剪切模量均比(10) 面的剪切模量低很多,其中,(112)面[11]方向与(10) 面[111]方向比,Mo的低 54%、β-Ti的低 77%、Ti2448 的低 60%。(112)面上孪晶方向与反孪晶方向相比, **表 1** 3 种材料在(10)面[111]方向单层滑移、(112)面[11]方向 单层滑移和(112)面[1]方向产生孪晶的能垒计算值

Table 1Calculated twinning energy of three kinds ofmaterials in cases of (10)[111] and (112)[11]monolayer slip and(112)[1] twinning

Material	Calculated twinning energy/ $(J \cdot m^{-2})$			
	(10)[111] monolayer slip	(112)[11] monolayer slip	(112)[1] twinning	
Мо	0.913	1.101	0.486	
$\beta$ -Ti	0.282	0.566	0.155	
Ti2448	0.274	0.315	0.106	



**图 5** 3 种材料沿(10)面[111]方向和(112)面的[11]方向的应 力一应变曲线

**Fig. 5** Stress—strain curves of three kinds of metal and alloys on (10) plane along [111] direction (a) and (112) plane along [11] direction (b)

Mo 和 Ti2448 接近,而β-Ti 的高一倍。结合上面对能 垒的分析,可以得出(112)面孪晶方向的模量和能垒均 比(10)面[111]方向的低,而屈服应力接近,进一步说 明孪晶是所研究的 3 种理想金属及合金的重要塑性变 形机制之一。

#### 表2 3种材料的屈服应力计算值

 Table 2
 Calculated yield stress of three kinds of metal and alloys

Motorial	Calculated yield stress/GPa			
Waterrai	(10)[111]	(112)[11]	(112)[1]	
Мо	12.449	13.322	13.243	
<i>β-</i> Ti	4.465	3.866	3.569	
Ti2448	2.555	3.035	3.009	

#### 表3 3种材料的剪切模量计算值

 Table 3
 Calculated shear moduli of three kinds of metal and alloys

Motorial	Calculated shear moduli/GPa			
Materia	(10)[111]	(112)[11]	(112)[1]	
Мо	194.800	89.086	86.549	
<i>β-</i> Ti	52.217	12.021	24.770	
Ti2448	26.768	10.843	11.235	

### 3 结论

1) 对于所研究的 3 种金属及合金,(10)面广义层 错能中心对称,表明该滑移面上位错滑移无正反向之 分;而(112)面的不对称,说明正反方向剪切时应存在 不同的变形行为。如产生位错滑移,则可能出现滑移 的不对称行为;而如以孪晶方式变形,则只有[1]方向 剪切可产生孪晶。

 2) 3 种材料在{110}和{112}面上的滑移系分别为 {110} (111)和{112}(111), 伯格斯矢量为 1/2(111)。

3) 剪切模量、位错和孪晶形核的能垒与屈服应力 由高到低为 Mo、β-Ti 和 Ti2448。(112)面孪晶方向的 模量和能垒均比(10)面[111]方向的低,而屈服应力接 近,说明孪晶应是所研究的 3 种理想金属及合金的主 要塑性变形机制之一;对于 Mo,孪晶最小厚度为 2 层,而对于β-Ti 和 Ti2448,孪晶最小厚度为 3 层。

#### REFERENCES

 BRICK V F. Deformation of ferrite single crystals [J]. Transactions of the American Institute of Mining and Metallurgical Engineers, 1953, 197(5): 700-706.

[2] 李 中. 钛及钛合金在汽车上的应用[J]. 中国有色金属学报, 2010, 20(S1): s1034-s1038.

LI Zhong. Applications of titanium and titanium alloys in automotive field [J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2010, 20(S1): s1034-s1038.

- [3] HAO Y L, LI S J, SUN S Y, ZHENG C Y, HU Q M, YANG R. Super-elastic titanium alloy with unstable plastic deformation [J]. Applied Physics Letters, 2005, 87(9): 091906
- [4] 田宇兴,李述军,郝玉林,杨 锐. Ti2448 合金在不同应变速 率下的高温变形机制[J]. 中国有色金属学报, 2010, 20(S1): s83-s86.

TIAN Yu-xing, LI Shu-jun, HAO Yu-lin, YANG Rui. Elevated temperature deformation mechanism of Ti2448 alloy at different strain rates [J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2010, 20(S1): s83–s86.

- [5] LU G, KIOUSSIS N, BULATOV V V, KAXIRAS E. Generalized-stacking-fault energy surface and dislocation properties of aluminum [J]. Physical Review B, 2000, 62(5): 3099–3108.
- [6] HARTFORD J, von SYDOW B, WAHNSTRÖM G, LUNDQVIST B I. Peierls barriers and stresses for edge dislocations in Pd and Al calculated from first principles [J]. Physical Review B, 1998, 58(5): 2487–2496.
- [7] VÍTEK V. Intrinsic stacking faults in body-centred cubic crystals
   [J]. Philosophical Magazine, 1968, 18(154): 773–786.
- [8] FINNIS M W, SINCLAIR J E. A simple empirical n-body potential for transition-metals [J]. Philosophical Magazine A, 1984, 50(1): 45-55.
- [9] ZOPE R R, MISHIN Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system [J]. Physical Review B, 2003, 68(2): 024102.
- [10] 徐东生,王 皞,杨 锐, SACHDEV A. 钛铝中(011)超位错的非对称形核及运动的分子动力学模拟[J]. 科学通报, 2013, 58(35): 3722-3732.

XU Dong-sheng, WANG Hao, YANG Rui, SACHDEV A. MD simulation of asymmetric nucleation and motion of (011] superdislocations in TiAl [J]. Chinese Science Bulletin, 2013, 58(35): 3722–3732.

(编辑 李艳红)