



孪晶密度和温度对纳米孪晶钛力学性能的影响

王 昊^{1,2}, 孙 瑜^{1,2}, 杨志勃^{1,2}, 陈雪峰^{1,2}

(1. 西安交通大学 机械工程学院, 西安 710049;

2. 西安交通大学 机械制造系统工程国家重点实验室, 西安 710049)

摘 要: 采用分子动力学方法模拟不同孪晶密度和不同温度下纳米孪晶钛单轴拉伸力学行为。模拟结果表明: 室温下随着孪晶密度的降低, 纳米孪晶钛的屈服强度出现先提升后降低的现象, 材料存在临界孪晶密度。当孪晶密度小于临界孪晶密度时, 孪晶界对晶粒的细化作用导致材料的强度提升。当孪晶密度大于临界孪晶密度时, 孪晶界、晶界和两者交汇处的位错成核增殖成为材料变形的主导因素; 且当孪晶密度远离临界值时, 孪晶间隔变小、位错源增多, 位错成核与增殖加剧, 材料的强度降低。相同孪晶密度条件下, 晶粒尺寸的减小会减少晶粒内孪晶界的数量, 进而减少孪晶和晶界交汇处位错源的生成, 增强了屈服强度。此外, 温度的变化会影响原子的活跃程度和晶格的变形机制。随着温度的升高, 原子间结合力下降, 晶界附近原子结构无序化和HCP-BCC相变程度加剧引起材料的弹性模量、屈服强度下降, 同时位错形核与运动的加剧影响了材料的塑性变形。

关键词: 纳米孪晶钛; 孪晶密度; 位错; 温度; 分子动力学

文章编号: 1004-0609(2022)-12-3684-10

中图分类号: V252.2

文献标志码: A

引文格式: 王 昊, 孙 瑜, 杨志勃, 等. 孪晶密度和温度对纳米孪晶钛力学性能的影响[J]. 中国有色金属学报, 2022, 32(12): 3684–3693. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-42421

WANG Hao, SUN Yu, YANG Zhi-bo, et al. Effect of twin density and temperature on mechanical properties of nano-twinned titanium[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2022, 32(12): 3684–3693. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-42421

在密排六方(HCP)金属中, 钛及钛合金因其良好的综合力学性能(低密度、高刚度、高比强度等)而广泛应用于航空发动机工业等领域^[1-4]。然而在航空发动机服役过程中, 高温、高压等复杂环境会诱发构件出现故障, 威胁发动机运行安全, 因此亟需开展高性能钛金属材料研究。20世纪90年代, “纳米材料”概念被提出, 晶粒尺寸发展到纳米尺度。随着现代工业发展, 纳米材料继续发展出纳米

颗粒、纳米线、纳米晶、纳米孪晶和纳米梯度结构等各种新型纳米材料^[5-7]。其中, 纳米孪晶材料因同时具有超高强度和高延展性而备受关注^[8-9]。

孪晶是两个晶体或晶体的两部分关于一个公共晶面镜面对称的位向关系^[10]。利用脉冲电沉积等技术可将孪晶引入纳米材料晶粒中, 生成纳米孪晶材料^[11]。目前对各类金属纳米孪晶结构变形机制的研究均已开展, 如立方系金属铜^[12-16]、铁^[17-20]、

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(91860127); 国家自然科学基金重大专项(2019-IV-0004-0071)

收稿日期: 2021-09-27; 修订日期: 2021-11-03

通信作者: 孙 瑜, 副教授, 博士; 电话: 13572191105; E-mail: yu.sun@xjtu.edu.cn

铝^[21-22]和HCP金属镁^[23-24]。以上研究均表明, 纳米孪晶材料中的晶界、孪晶和位错之间的相互作用对材料的力学性能有很大的影响。孪晶界作为一种特殊的低能态共格晶界, 与普通晶界一样可以在应变增大时通过阻碍位错滑移强化材料。因为这种阻碍作用, 晶体内不同的孪晶密度会影响位错的形核与运动, 进而影响着材料的屈服强度。相较于立方系金属, HCP钛的晶体结构对称性较低, 滑移系数量少, 孪生机制更易发生^[25-26], 当外加应力为拉力时, $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶是钛金属中最常见的孪晶系统之一^[27]。然而, 目前有关纳米孪晶钛力学性能的研究尚未得到充分探索。

温度是影响原子的活跃程度、晶格的变形机制及材料的力学性能的重要因素^[28-29]。DING等^[30]研究发现, 高温环境下纳米多晶材料中晶界周围的原子活动更加强烈, 晶界平均厚度增加, 进而导致晶界迁移和晶粒旋转。同时随着温度升高和应变积累, 材料内位错激活提前, 位错密度升高, 影响材料力学性能。相较于纳米多晶材料, 纳米孪晶材料引入了结构特殊的孪晶界使得材料内晶界数量上升。作为大角度晶界, 孪晶界同样会受温度影响, 从而影响材料整体力学性能。

本研究基于分子动力学方法(MD), 建立了含有不同孪晶密度的纳米孪晶钛模型, 研究了单轴拉伸下不同 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶密度和不同温度对多晶钛的力学响应过程, 分析了拉伸作用下应力-应变曲线变化规律, 观察了材料变形过程中微观组织结构演变, 以期优化多晶钛力学性能提供参考数据。

1 仿真模型与控制条件

1.1 仿真模型

本研究采用ATOMSK^[31]软件包建立含不同密度 $\{10\bar{1}2\}$ 孪晶的纳米孪晶钛模型。晶体模型整体尺寸为 $40\text{ nm} \times 40\text{ nm} \times 40\text{ nm}$, 共含约 3.6×10^6 个原子, 通过设置不同数量的随机种子, 建立了平均晶粒尺寸 20 nm 和 25 nm 的多晶体模型。纳米孪晶钛的孪晶密度通过晶粒内部两个相邻孪晶界的间隔距离表征, 孪晶密度随着孪晶界间隔增大而减小。图1(a)~(c)分别显示了孪晶界间隔为 5.0 nm 、 9.0 nm 和 13.5 nm 时平均晶粒尺寸 20 nm 模型局部结构示意图, 晶粒内孪晶实现了多重分布。在单轴拉伸前首先采用共轭梯度法使系统达到能量最小化, 随后在NPT(恒温恒压)系综下利用Nose-Hoover热浴法进行结构弛豫, 最终使系统保持稳定状态。弛豫结束后以 $1 \times 10^9\text{ s}^{-1}$ 的应变速率沿Y轴方向对模型进行单轴拉伸。在整个模拟过程中, 模型的X, Y, Z方向均设置为周期性边界条件以更好地模拟三维立方体模型, 拉伸模拟时间步长为 1 fs 。

1.2 控制条件

采用开源原子并行模拟器LAMMPS^[32]进行纳米孪晶钛单轴拉伸并利用可视化软件OVITO^[33]对不同晶格着色, 红色代表HCP结构, 绿色代表面心立方结构(FCC), 蓝色代表体心立方结构(BCC), 灰色代表其他结构(Other)。公共近邻分析法(CNA)

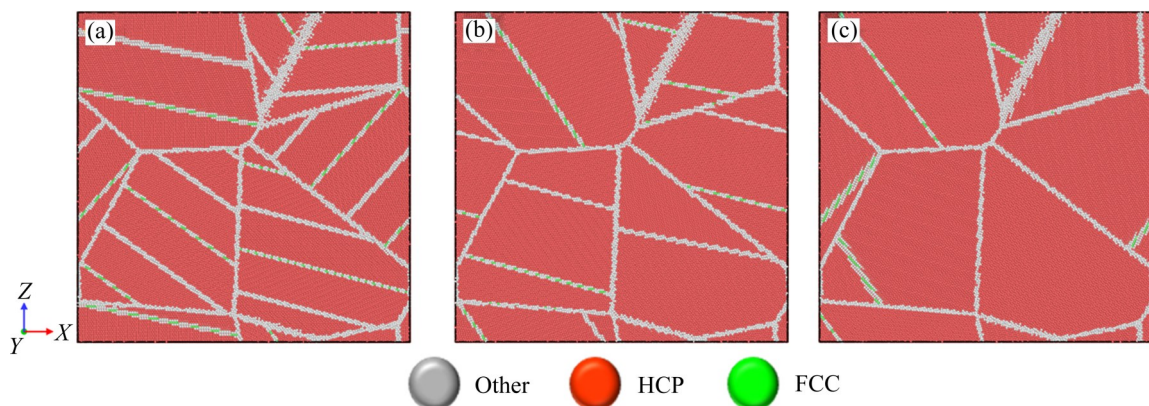


图1 不同孪晶界间隔纳米孪晶钛晶体结构示意图

Fig. 1 Schematic diagrams of nano-twinned titanium grain structure with different twin spacings: (a) 5.0 nm ; (b) 9.0 nm ; (c) 13.5 nm

^[34]和位错提取算法(DXA)^[35]用于分析原子结构演化和微观结构变形。分子动力学研究中势函数用来描述系统中原子间的相互作用,本次模拟采用Ackland团队提出的嵌入原子势(EAM)^[36],该方法已被广泛使用在钛金属及其合金的拉伸模拟中^[37-38]。

势能函数的基本方程为:

$$U = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \phi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i) \quad (1)$$

式中: U 代表系统的总势能; N 为原子的总个数; 下标 i 和 j 是代表系统内的原子编号; r_{ij} 指的是原子 i 和原子 j 之间的距离; $\phi(r_{ij})$ 描述对势; $F(\rho_i)$ 代表嵌入能。

$$\rho_i = \sum_j \psi(r_{ij}) \quad (2)$$

式中: $\psi(r_{ij})$ 是密度函数。

为了验证势函数的准确性,采用分子动力学方法计算了单晶钛的平衡晶格常数、弹性模量和体积模量,并与从头算密度泛函计算(DFT)和实验结果进行了对比(见表1)。由表1可以看到,MD模拟所得结果与DFT、实验结果一致,该势函数是准确的。

表1 α -Ti块体晶格常数,弹性模量和体积模量的MD, DFT和实验计算值

Table 1 Lattice constant, elastic modulus and bulk modulus of α -Ti bulk from MD, ab initio DFT and experiment

Method	Lattice constant/ $\text{\AA}$	Elastic modulus/GPa	Bulk modulus/GPa
MD	$a=2.949$ $c=4.69$	132.9	112.68
DFT	$a=2.94^{[39]}$ $c=4.66$	$136.3^{[41]}$	$111.35^{[39]}$
Experiment	$a=2.95^{[40]}$ $c=4.68$	$115^{[42]}$	$114^{[43]}$

2 计算结果与讨论

2.1 孪晶密度对纳米孪晶钛力学性能的影响

本节选取平均晶粒尺寸25 nm的模型,研究了室温下不同孪晶密度对其单轴拉伸时力学性能的影响。图2所示为不同孪晶密度的纳米孪晶钛单轴拉

伸后的应力-应变曲线,孪晶界间隔分别为5.0、7.5、9.0、12.0和15.0 nm(为便于讨论,依次标记为Space-1, Space-2, Space-3, Space-4, Space-5),可以发现孪晶密度对材料力学性能有很大影响。不同孪晶密度模型的应力-应变曲线可分为弹性变形和塑性变形两个阶段。对于所有孪晶密度模型,初始张力下的应力-应变曲线都是线性的,这意味着模型正在经历弹性变形。弹性阶段的斜率代表弹性模量,可以看出弹性模量随孪晶界间隔的增大而发生小幅度的变化。弹性阶段结束时,应力-应变曲线到达屈服点。屈服点定义为弹性阶段结束后应力-应变曲线的第一个极大值点,其对应的应力为屈服应力。随着孪晶界间隔增大,屈服应力先增大后减小,在孪晶间隔9.0 nm时达到最大值,即纳米孪晶钛存在临界孪晶密度,该结果与纳米孪晶铜实验结果定性相似^[44]。孪晶界间隔5.0、7.5、9.0、12.0和15.0 nm对应的屈服应力分别为2.51、2.61、2.68、2.55和2.35 GPa。

为了进一步理解孪晶密度对屈服强度变化机制的影响,表2所列不同孪晶密度纳米孪晶钛屈服点时晶体内位错的总数量和总长度。结果表明,当孪晶界间隔由15.0 nm减至5.0 nm时,位错总数量逐渐递增,位错总长度先减少后增大,而图2中屈服强度的变化为先增大后减小,位错总长度与屈服强度的极值点均位于孪晶界间隔9.0 nm时。由此可知,屈服强度变化与位错总长度的变化有关,且与

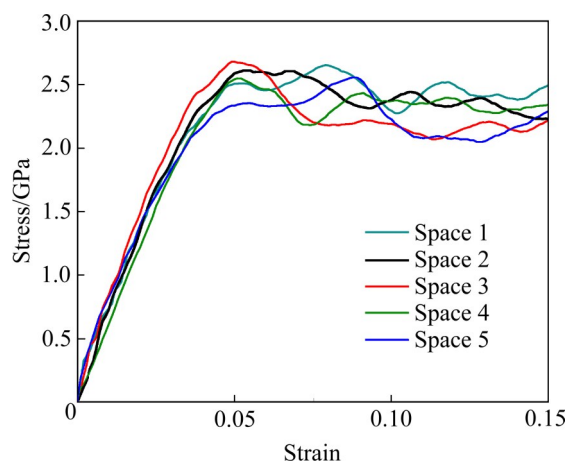


图2 不同孪晶界间隔纳米孪晶钛单轴拉伸应力-应变曲线(平均晶粒尺寸25 nm)

Fig. 2 Uniaxial tensile stress-strain curves of nano-twinned titanium with different twin spacings (Average grain size 25 nm)

表 2 不同孪晶界间隔纳米孪晶钛屈服点时位错的总数量和总长度

Table 2 Total segs and length of dislocations at yield point of nano-twinned titanium with different twin spacings

Twin spacing/ nm	Total segs of dislocations/Segs	Total length of dislocations/ANG
5.0	2946	28615.4326
7.5	2335	24634.3213
9.0	2287	24393.7297
12.0	2269	26760.5474
15.0	2255	28554.9649

其满足比例关系。相较于 5.0 nm, 孪晶界间隔 15.0 nm 时模型内位错总数量较小, 然而两者的位错总长度却接近。

为了解释这一现象, 采用 DXA 算法分析了孪晶间隔为 5.0、9.0 和 15.0 nm 模型局部原子结构的演化和微观结构的变形, 结果见图 3(a)~(c)。可以看出, 纳米孪晶钛晶粒中位错主要萌生于三个位置: 晶界、孪晶、晶界与孪晶的交汇处, 模型内存在 $\langle 0001 \rangle$ 、 $\langle 1\bar{1}00 \rangle$ 、 $1/3\langle 1\bar{2}10 \rangle$ 、 $1/3\langle 1\bar{1}00 \rangle$ 和 $1/3\langle 1\bar{2}13 \rangle$ 5 种取向的位错类型, 其中 $1/3\langle 1\bar{1}00 \rangle$ 位错

数量最多, $1/3\langle 1\bar{2}10 \rangle$ 位错次之, 不同取向的位错分别采用不同颜色标记。

结合表 2 和图 3 发现, 当孪晶界间隔由 9.0 nm 增至 15.0 nm 时, 位错总数量的递减并不显著, 位错总长度却发生明显增长。此时材料发生的屈服强度下降现象可以用晶粒细化强化机制解释, 即随着晶粒中孪晶间隔的增大, 孪晶数量的减少削弱了其作为一种特殊共格晶界对位错运动的阻碍作用, 位错更易运动生长, 从而降低了材料的屈服强度(见图 3(c))。当孪晶界间隔由 9.0 nm 减至 5.0 nm 时, 位错总数量和总长度均发生大幅度增长, 材料的强化现象不符合晶粒细化强化机制。当孪晶密度大于临界孪晶密度时, 虽然孪晶界的增多会增强晶粒整体对位错运动的阻碍作用(见图 3(a)), 然而其与晶界也会形成更多的交汇处, 从而产生大量位错源致使位错萌生, 导致位错总数量和总长度增加, 进而降低材料的屈服强度, 此时材料发生的屈服强度变化可总结为位错形核的控制。

为了验证纳米孪晶钛临界孪晶密度强化机理, 研究了不同孪晶密度条件下平均晶粒尺寸 20 nm 纳

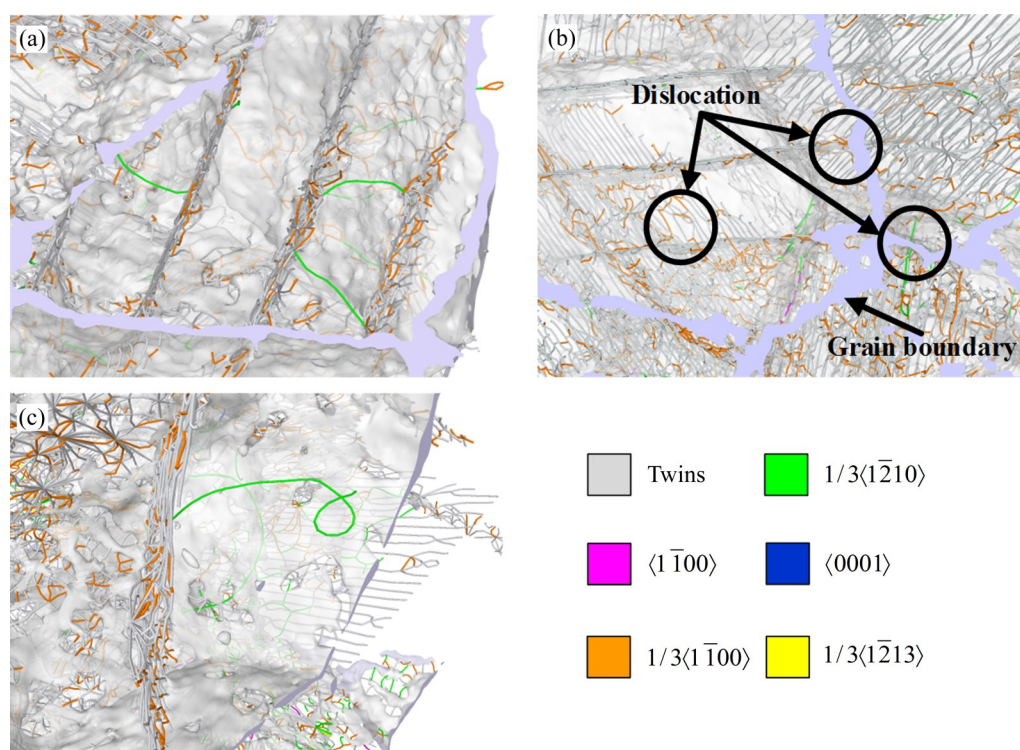


图 3 纳米孪晶模型中位错结构示意图

Fig. 3 Schematic diagrams of dislocation structure in nano-twinned model: (a) Twin spacing of 5.0 nm; (b) Twin spacing of 9.0 nm; (c) Twin spacing of 15.0 nm

米孪晶钛单轴拉伸力学性能。图4所示为不同孪晶密度、平均晶粒尺寸 20 nm 纳米孪晶钛单轴拉伸后的应力-应变曲线, 孪晶界间隔分别为 2.5、9.0、13.5、14.5 和 15.0 nm (为便于讨论, 依次标记为 Space-6, Space-7, Space-8, Space-9, Space-10), 对应屈服强度分别为 2.77、3.03、3.33、3.13 和 3.07 GPa。与平均晶粒尺寸 25 nm 纳米孪晶钛相似, 屈服强度和孪晶密度均存在临界值。

将不同孪晶密度的平均晶粒尺寸 20 nm 和 25 nm 纳米孪晶钛屈服强度进行对比(见图5)。结果表明, 在孪晶密度接近时, 平均晶粒尺寸 20 nm 纳米孪晶钛的屈服强度均要强于平均晶粒尺寸 25 nm 纳

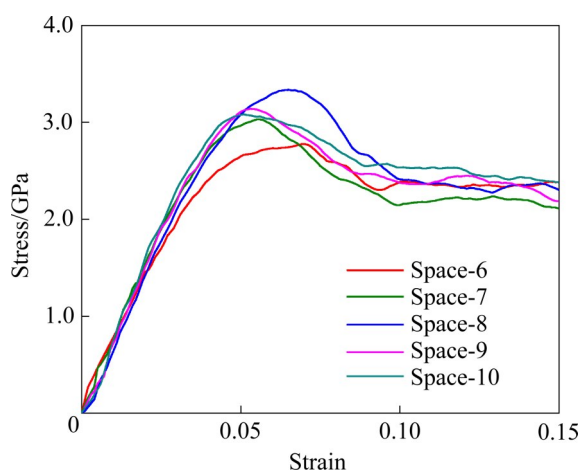


图4 不同孪晶界间隔纳米孪晶钛单轴拉伸应力-应变曲线(平均晶粒尺寸 20 nm)

Fig. 4 Uniaxial tensile stress-strain curves of nano-twinned titanium with different twin spacings (Average grain size 20 nm)

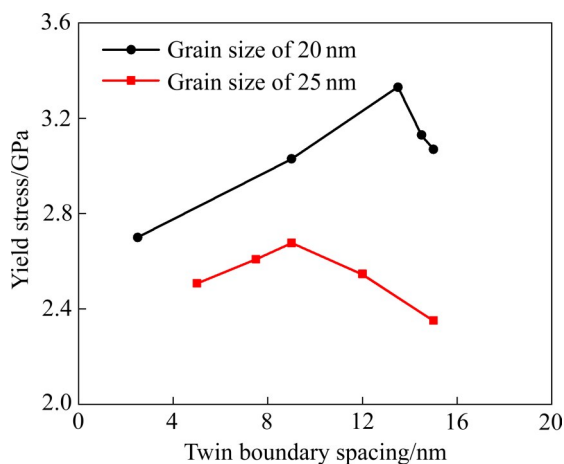


图5 不同孪晶界间距纳米孪晶钛屈服强度

Fig. 5 Yield strength of nano-twinned titanium with different twin spacings

米孪晶钛的屈服强度。

首先, 这是由于晶粒细化导致晶界结构所占的比例提高, 而晶界的高势能状态会阻碍位错等缺陷结构进一步向其他晶粒传递, 从而提升了金属的强度^[45-46]。其次, 结合表3可以看出, 这是由于相同或相近的孪晶密度条件下, 平均晶粒尺寸越小的晶粒内孪晶界的数量越少, 孪晶界与晶界的交汇处也越少, 此时位错源的减少导致屈服强度增强。

表3 临界孪晶密度条件下不同晶粒尺寸纳米孪晶钛屈服点时位错的总数量和总长度

Table 3 Total segs and length of dislocations at yield point of nano-twinned titanium with different grain sizes under condition of critical twin density

Grain size/ nm	Total segs of dislocations/Segs	Total length of dislocations/ANG
20	1739	17130.977
25	2287	24393.7297

2.2 温度对多晶钛力学性能的影响

为了研究温度对纳米孪晶钛单轴拉伸变形机制的影响, 本节分析了 300、600 和 800 K 下平均晶粒尺寸 20 nm、孪晶界间隔 13.5 nm 模型单轴拉伸过程中的变形行为。图6所示为不同温度下模型单轴拉伸后的应力-应变曲线。

弹性模量是表征原子间结合强度的物理量, 代表结合力的强度。从图6中可以看到, 当材料发生弹性变形时, 在高应变率拉伸影响下, 300、600 和 800 K 三种温度下具体的弹性模量值分别为 68.155,

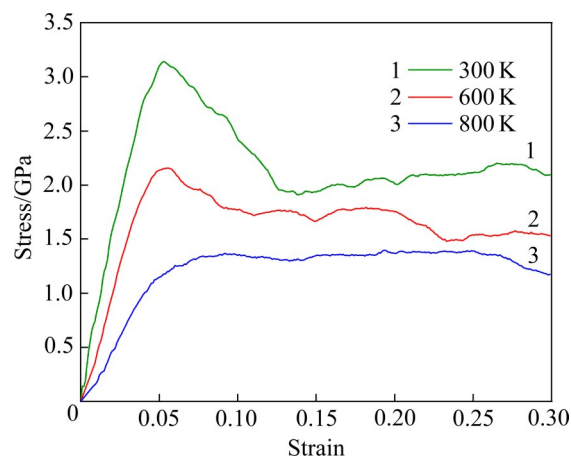


图6 不同温度下模型单轴拉伸后应力-应变曲线图

Fig. 6 Stress-strain curves of model after uniaxial tension at different temperatures

51.612 和 27.515 GPa, 材料的弹性模量随着温度的升高而逐渐降低。图 7(a)~(c)所示分别为 300 K、600 K 和 800 K 下 2% 应变时纳米孪晶钛局部原子结构图。从图 7(a)可以发现, 相较于晶粒内部, 无序原子结构更容易在晶界附近产生, 这是由于在拉伸过程中晶界的高势能状态导致应力集中, 原子键更易断裂。当温度为 600 K 时, 除了晶界附近的无序原子结构增多外, 孪晶界上也开始产生少量无序原子结构, 同时晶粒内部和晶界上发生 HCP-BCC 相变(见图 7(b))。在图 7(c)中, 温度增加到了 800 K, 孪晶界处也开始大量产生无序原子结构, HCP-BCC 相变分布更为广泛。可以发现, 当温度升高后, 晶界处原子运动的加剧增加了无序原子结构的数量, 原子间结合力下降, 材料发生相变, 导致弹性模量降低。

弹性变形阶段结束后, 应力-应变曲线到达屈服点。由图 6 可知, 材料的屈服强度随着温度的升

高而降低。图 8(a)~(c)所示分别为 300、600 和 800 K 下屈服点时纳米孪晶钛局部原子结构图。相较于弹性阶段, 各温度下均可见晶粒内部晶界、孪晶界发生明显扭折、滑动。600 K 与 800 K 时晶界与距离其较近的孪晶界厚度显著增加并结合为面积更大的无序原子团簇, 并作为位错源发射出少量位错, HCP-BCC 相变的数量与分布也更为广泛。从图 8(c)中可以看到在温度继续升高后孪晶界和晶界扭折节点处成为新的位错源, 晶体内部晶粒尺寸均匀性降低。

随着晶体内部的位错等缺陷结构的不断生成与扩展, 材料进入塑性变形阶段。图 9(a)~(c)所示分别为 300 K、600 K 和 800 K 下应变为 20% 纳米孪晶钛局部原子结构图。相较于屈服点阶段, 模型在单轴拉伸作用下沿拉伸方向长度发生变化, 并且随着应变的升高, 无序原子团开始小体积、分散出现在晶粒内部, 导致材料内部的位错滑移和变形孪晶数

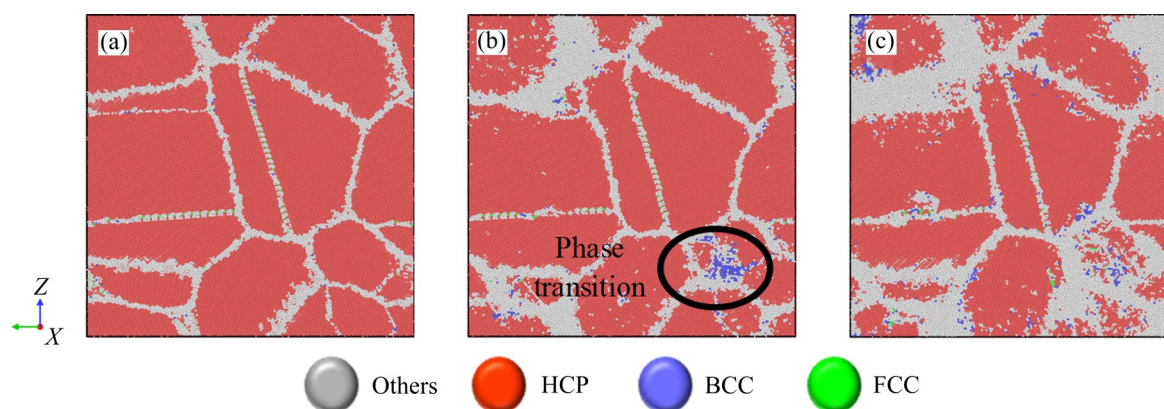


图 7 不同温度下应变为 2% 时模型局部构型演变图

Fig. 7 Local configuration evolution of model with 2% strain at different temperatures: (a) 300 K; (b) 600 K; (c) 800 K

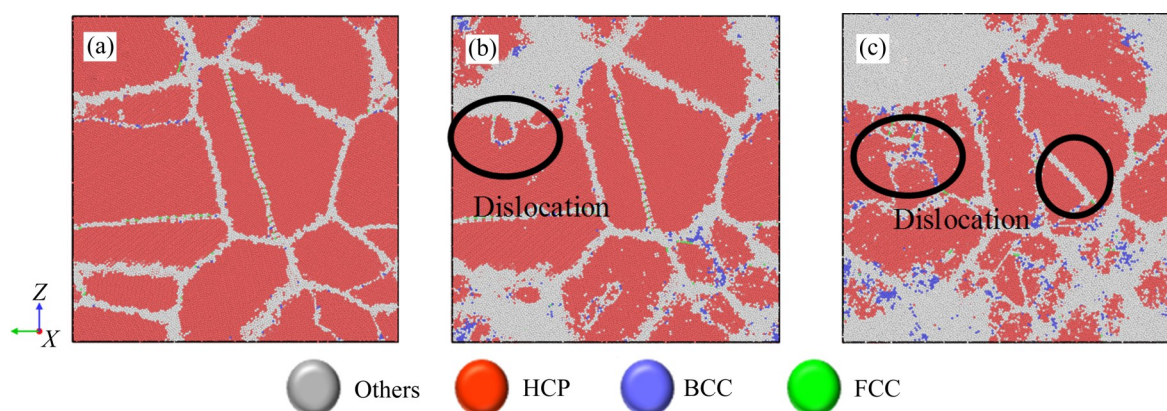


图 8 不同温度下屈服点时模型局部构型演变图

Fig. 8 Local configuration evolution of model at yield point at different temperatures: (a) 300 K; (b) 600 K; (c) 800 K

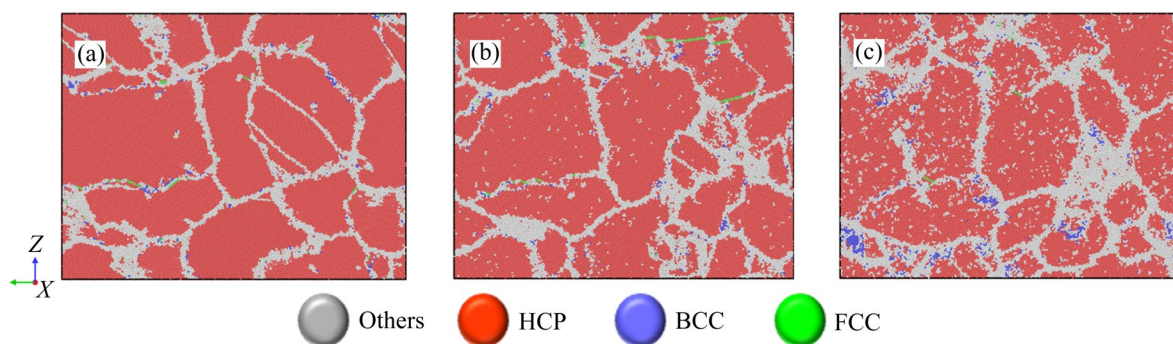


图9 不同温度下应变为20%时模型局部构型演变图

Fig. 9 Local configuration evolution of model with 2% strain at different temperatures: (a) 300 K; (b) 600 K; (c) 800 K

量进一步增多, 位错形核主导了纳米孪晶钛的塑性变形。随着温度的升高, 晶界、孪晶界发生断裂, 晶粒内位错发射源的数量再次增多(见图9(c))。

3 结论

1) 室温下纳米孪晶多晶钛金属存在临界孪晶密度, 使其屈服强度达到最大值。当孪晶密度小于临界孪晶密度时, 孪晶界作为特殊共格晶界对晶粒的划分使得晶粒细化。孪晶密度越靠近临界值, 晶粒细化程度越大, 导致材料的强度提升。当孪晶密度大于临界孪晶密度时, 孪晶界、晶界和两者交汇处增加, 促进位错成核, 孪晶密度越大, 位错成核与增殖越剧烈, 材料的强度降低。

2) 孪晶密度相近时, 尺寸越小的晶粒在其临界孪晶密度时的屈服强度越高。这是由于在孪晶间隔相近的条件下, 晶粒内孪晶界的数量会随着晶粒尺寸的减小而减少, 相应地减少了孪晶界与晶界的交汇, 导致位错源的减少进而增强了屈服强度。

3) 温度的变化会影响原子的活跃程度、晶格的变形机制。随着温度的升高, 原子间结合力下降, 晶界附近原子结构无序化和HCP-BCC相变程度加剧, 导致纳米多晶钛弹性模量、屈服强度均发生下降。同时, 温度的增高加剧了位错形核与运动, 主导了材料的塑性变形。

本研究发现并解释了纳米孪晶钛临界孪晶密度强化机制和温度效应, 对于优化纳米孪晶钛力学性能提供参考数据, 但下一步还需针对其他复杂影响因素, 如应变率、微裂纹与缺陷等开展研究。

REFERENCES

- [1] BOYER R R. An overview on the use of titanium in the aerospace industry[J]. Materials Science and Engineering A, 1996, 213(1/2): 103–114.
- [2] 金和喜, 魏克湘, 李建明, 等. 航空用钛合金研究进展[J]. 中国有色金属学报, 2015, 25(2): 280–292.
JIN He-xi, WEI Ke-xiang, LI Jian-ming, et al. Research development of titanium alloy in aerospace industry[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2015, 25(2): 280–292.
- [3] 赵庆云, 徐 锋. 航空紧固件用钛合金的研究进展[J]. 中国有色金属学报, 2010, 20(S1): s1021–s1023. ZHAO Qing-yun, XU Feng. Research progress of titanium alloy for aerospace fasteners[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2010, 20(S1): 1021–1023.
- [4] MARKETZ W T, FISCHER F D, CLEMENS H. Deformation mechanisms in TiAl intermetallics—Experiments and modeling[J]. International Journal of Plasticity, 2003, 19(3): 281–321.
- [5] MEYERS M A, MISHRA A, BENSON D J. Mechanical properties of nanocrystalline materials[J]. Progress in Materials Science, 2006, 51(4): 427–556.
- [6] SCHODEK D, FERREIRA P, ASHBY M. Nanomaterials, nanotechnologies and design: An introduction for engineers and architects[M]. Oxford: Elsevier, 2009.
- [7] 贺琼瑶, 吴桂林, 刘 聪, 等. 表面纳米化技术制备梯度纳米结构金属材料的研究进展[J]. 表面技术, 2021, 50(1): 267–295.
HE Qing-yao, WU Gui-lin, LIU Cong, et al. Research progress on gradient nanostructured metals prepared by surface nanocrystallization technique[J]. Surface Technology, 2021, 50(1): 267–295.

- 2021, 50(1): 267–295.
- [8] ZHAO X, LU C, TIEU A K, et al. Deformation mechanisms in nanotwinned copper by molecular dynamics simulation[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2016, 687: 343–351.
- [9] KOU H, LU J, LI Y. High-strength and high-ductility nanostructured and amorphous metallic materials[J]. *Advanced Materials*, 2014, 26: 5518–24.
- [10] CAO H, RUI Z Y, CHEN W K, et al. Crack propagation mechanism of γ -TiAl alloy with pre-existing twin boundary[J]. *Science China (Technological Sciences)*, 2019, 62(9): 1605–1615.
- [11] LU L, SHEN Y F, CHEN X H, et al. Ultrahigh strength and high electrical conductivity in copper[J]. *Science*, 2004, 304(5669): 422–446.
- [12] SUN L G, HE X Q, WANG J B, et al. Deformation and failure mechanisms of nanotwinned copper films with a pre-existing crack[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2014, 606: 334–345.
- [13] WANG Y M, SANOSZ F, LAGRANGE T, et al. Defective twin boundaries in nanotwinned metals[J]. *Nature Materials*, 2013, 12: 697–702.
- [14] TAO N R, LU K. Nanoscale structural refinement via deformation twinning in face-centered cubic metals[J]. *Scripta Materialia*, 2009, 60(12): 1039–1043.
- [15] QU S, AN X H, YANG H J, et al. Microstructural evolution and mechanical properties of Cu-Al alloys subjected to equal channel angular pressing[J]. *Acta Materialia*, 2009, 57(5): 1586–1601.
- [16] PAN Q S, ZHOU H, LU Q, et al. History-independent cyclic response of nanotwinned metals[J]. *Nature*, 2017, 551(7679): 214–217.
- [17] SABURI T, WAYMAN C M, TAKATA K, et al. The shape memory mechanism in 18R martensitic alloys[J]. *Acta Metallurgica*, 1980, 28(1): 15–32.
- [18] MÜLLNER P, CHERNENKO V A, KOSTORZ G. A microscopic approach to the magnetic-field-induced deformation of martensite (magnetoplasticity)[J]. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2003, 267(3): 325–334.
- [19] MÜLLNER P, KING A H. Deformation of hierarchically twinned martensite[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(16): 5242–5261.
- [20] WEI Y, LI Y, ZHU L, et al. Evading the strength-ductility trade-off dilemma in steel through gradient hierarchical nanotwins[J]. *Nature Communications*, 2014, 5(4): 3580(1–8).
- [21] XIE Y H, XU J G, SONG H Y, et al. Effect of twin boundary on nanoimprint process of bicrystal Al thin film studied by molecular dynamics simulation[J]. *Chinese Physics B*, 2015, 24(2): 340–346.
- [22] GAO L, SONG H Y, SUN Y, et al. Effects of twist twin boundary and stacking fault on crack propagation of nanocrystal Al[J]. *Computational Materials Science*, 2014, 95: 484–490.
- [23] GUO Y F, XU S, TANG X Z, et al. Twinability of HCP metals at the nanoscale[J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 115(22): 224902.
- [24] ZHOU L, GUO Y F. Dislocation-governed plastic deformation and fracture toughness of nanotwinned magnesium[J]. *Materials*, 2015, 8(8): 5250–5264.
- [25] TEGART M W J. Independent slip systems and ductility of hexagonal polycrystals[J]. *Philosophical Magazine*, 1964, 9(98): 339–341.
- [26] YOO M H, FU C L, LEE J K. Deformation twinning in metals and ordered intermetallics-Ti and Ti-aluminides[J]. *Journal de Physique III*, 1991, 1(6): 1065–1084.
- [27] CHRISTIAN J W, MAHAJAN S. Deformation twinning[J]. *Progress in Materials Science*, 1995, 39(1/2): 1–157.
- [28] 王云天, 曾祥国, 杨 鑫. 高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长影响的分子动力学研究[J]. *物理学报*, 2019, 68(24): 235–251.
- WANG Tian-yun, ZENG Xiang-guo, YANG Xin. Molecular dynamics simulation of effect of temperature on void nucleation and growth of single crystal iron at a high strain rate[J]. *Acta Physica Sinica*, 2019, 68(24): 235–251.
- [29] 苏娟华, 周铁柱, 任凤章, 等. 工业纯钛高温拉伸性能及断口形貌[J]. *中国有色金属学报*, 2015, 25(6): 1471–1479.
- SU Juan-hu, ZHOU Tie-zhu, REN Feng-zhang, et al. High-temperature tensile properties and fracture morphology analysis of commercially pure titanium[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2015, 25(6): 1471–1479.
- [30] DING J, TIAN Y, WANG L S, et al. Micro-mechanism of the effect of grain size and temperature on the mechanical properties of polycrystalline TiAl[J]. *Computational Materials Science*, 2019, 158: 76–87.
- [31] HIREL P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files[J]. *Computer Physics Communications*, 2015, 197: 212–219.
- [32] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1–19.
- [33] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic

- simulation data with OVITO-the open visualization tool[J]. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*, 2010, 18(1): 2154–2162.
- [34] TSURU T, SHIBUTANI Y, HIROUCHI T. A predictive model for transferability of plastic deformation through grain boundaries[J]. *Aip Advances*, 2016, 6: 015004.
- [35] GOEL S, FAISAL N H, LUO X C, et al. Nanoindentation of polysilicon and single crystal silicon: Molecular dynamics simulation and experimental validation[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2014, 47: 994–1004.
- [36] MENDELEV M I, UNDERWOOD T L, ACKLAND G J. Development of an interatomic potential for the simulation of defects, plasticity, and phase transformations in titanium[J]. *Journal of Chemical Physics*, 2016, 145(15): 154102.
- [37] FARIA B, GYARDA C, SILVESTRE N, et al. CNT-reinforced iron and titanium nanocomposites: Strength and deformation mechanisms[J]. *Composites Part B: Engineering*, 2020, 187: 107836.
- [38] ZHANG H, OU X Q, NI S, et al. Toughening α -Ti by dislocation-induced phase transformation at crack tips[J]. *Mechanics of Materials*, 2020, 151: 103629.
- [39] LI D D, WAN W F, ZHU L Q, et al. Experimental and DFT characterization of interphase boundaries in titanium and the implications for omega-assisted α phase precipitation[J]. *Acta Materialia*, 2018, 151: 406–415.
- [40] CHARLES K. *Introduction to solid state physics*[M]. New York: Wiley, 2004: 347–348.
- [41] CHEN Y B, XUE Z, ZHANG S L, et al. First principles calculations of the influence of nitrogen content on the mechanical properties of α -Ti[J]. *Materials Chemistry and Physics*, 2020, 248: 122891.
- [42] LEYENS C, PETERS M. *Titanium and titanium alloys: Fundamentals and applications*[M]. New York: Wiley, 2003: 2.
- [43] ZHANG J, ZHAO Y, HIXSON R S, et al. Thermal equations of state for titanium obtained by high pressure-temperature diffraction studies[J]. *Physical Review*, 2008, 78(5): 266–272.
- [44] YUAN F P, WU X L. Size effects of primary/secondary twins on the atomistic deformation mechanisms in hierarchically nanotwinned metals[J]. *Applied Physics*, 2013, 113(20): 203516.
- [45] HALL E O. The Lüders deformation of mild steel[J]. *Journal of Photochemistry and Photobiology B*, 1965, 13(2): 534–540.
- [46] 卢柯, 刘学东, 胡壮麒. 纳米晶体材料的 Hall–Petch 关系[J]. *材料研究学报*, 1994, 8(5): 385.
- LU Ke, LIU Xue-dong, HU Zhuang-qi. The Hall – Petch relation in nanocrystalline materials status[J]. *Chinese Journal of Materials Research*, 1994, 8(5): 385–391.

Effect of twin density and temperature on mechanical properties of nano-twinned titanium

WANG Hao^{1,2}, SUN Yu^{1,2}, YANG Zhi-bo^{1,2}, CHEN Xue-feng^{1,2}

(1. School of Mechanical Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. State Key Laboratory for Manufacturing Systems Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: The mechanical behavior of nano-twinned titanium under uniaxial tension was simulated by molecular dynamics at different twin densities and temperatures. The simulation results show that with the decrease of twin density, the yield strength of nano-twinned titanium first increases and then decreases at room temperature, and there is a critical twin density in the material. When the twin density is less than the critical twin density, the grain refinement effect of twins leads to the increase of the strength of the material. When the twin density is larger than the critical twin density, the nucleation and increment of dislocations at twin boundary, grain boundary and their intersection become the dominant factors of material deformation, which affect the mechanical properties of nano-twinned titanium. When the twin density is far away from the critical value, the twin spacing becomes smaller, the nucleation and proliferation of dislocations become more intense, and the strength of the material decreases. The change of temperature can affect the activity of atoms and the deformation mechanism of lattice. With the increase of temperature, the bonding force between atoms decreases, the disorder of atomic structure near the grain boundary and the degree of HCP-BCC phase transformation increase, resulting in the decrease of elastic modulus and yield strength, and the increase of dislocation nucleation and movement affects the plastic deformation of the material.

Key words: nano-twinned titanium; twin density; dislocation; temperature; molecular dynamics

Foundation item: Project(91860127) supported by the National Natural Science Foundation of China; Project (2019-IV-0004-0071) supported by the National Science and Technology Major Project, China

Received date: 2021-09-27; **Accepted date:** 2021-11-03

Corresponding author: SUN Yu; Tel: +86-13572191105; E-mail: yu.sun@xjtu.edu.cn

(编辑 王 超)