

Ti-6Al-4V 合金中共格 α 析出相变体形貌演变的相场法模拟

张金虎¹, 滕春禹¹, 杨 梅², 徐东生¹, 王云志³, 杨 锐¹

- (1. 中国科学院金属研究所, 沈阳 110016;
2. 长沙中联重工科技发展股份有限公司, 长沙 410013;
3. The Ohio State University, Columbus, OH 43210, USA)

摘 要: 采用相场方法模拟 Ti-6Al-4V 合金 $\beta \rightarrow \alpha$ 相变过程, 对共格 α 析出相变体形貌及其惯习面取向进行研究。模型输入数据源自 Thermo-Calc 热力学和 Dictra 动力学数据库, 通过构造梯度项系数张量考虑界面能各向异性的影响, 基于 Khachaturyan 微观弹性理论考虑弹性应变能的影响。结果表明: 片状 α 相的形貌及惯习面取向是界面能各向异性及弹性应变能共同作用的结果; 变体的生长由溶质原子的扩散所控制, 在生长过程中, 在相界 β 侧形成 Al 原子的贫瘠区与 V 原子的富集区; 界面能越大的方向上片层生长越快; 根据 Burgers 关系, 由同一(110)晶面衍生出的两种 α 变体惯习面取向夹角约为 100° , 经旋转对称操作可推算出任意两变体间共有 5 种夹角。

关键词: Ti-6Al-4V 合金; 相场模拟; 弹性应变能; 微观组织演化; 析出

中图分类号: TG146.2

文献标志码: A

Phase field simulation of morphology evolution of coherent α precipitates in Ti-6Al-4V alloys

ZHANG Jin-hu¹, TENG Chun-yu¹, YANG Mei², XU Dong-sheng¹, WANG Yun-zhi³, YANG Rui¹

- (1. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Science, Shenyang 110016, China;
2. Zoomlion Heavy Industry Science and Technology Development Co., Ltd, Changsha 410013, China;
3. The Ohio State University, Columbus, OH 43210, USA)

Abstract: To investigate the morphology and habit plane orientation of α precipitates, the α precipitation process in $\beta \rightarrow \alpha$ transformation were simulated by phase field method using the Thermo-Calc thermodynamic and Dictra kinetic databases as direct input of the model. The phase field approach takes into account interface energy anisotropy and elastic strain energy by means of gradient energy tensor and microelasticity theory by Khachaturyan, respectively. The results show that the interface energy anisotropy and elastic strain energy play important roles in determining the morphology and habit plane orientation of α precipitates. The growth of α precipitates is a diffusion-controlled process. The solute concentrations are found inhomogeneous near α/β interface (Al-poor and V-rich on the β side), and the larger interface energy is, the faster α phase grows. According to Burgers relationship, the angle between the two variants derived from the same β slip plane is 100° . There are five angles between any two variants via symmetry operations.

Key words: Ti-6Al-4V alloy; phase field simulation; elastic strain energy; microstructure evolution; precipitation

多数工程合金通过引入第二相粒子进行强化, 这些第二相粒子的数量、尺寸、形状、取向及空间分布决定了该合金的变形机制与力学行为^[1]。钛基合金作

为一类传统的工程合金, 具有密度低、强度高、耐高温、抗腐蚀等优点, 被广泛用于航空航天、医疗、化工、体育等领域^[2]。这类合金的力学性能强烈地依赖

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); 中国科学院信息化专项(XXH12503-02-02-02)

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

于其显微结构, 为辅助合金的设计与性能优化, 有必要建立计算模型来预测其典型显微组织形貌并揭示其形成机制以及演化规律。

Ti-6Al-4V 合金是最常见的 $\alpha+\beta$ 钛合金。随着温度的降低, 高温 β 相会转变为低温 α 相, 钛合金的许多性能的变化在很大程度上取决于这一 $\beta \rightarrow \alpha$ 相变。在不同热机械处理制度下, 这种转变会导致合金出现等轴、片层及双态等组织形貌, 并表现出不同的力学性能。在 $\beta \rightarrow \alpha$ 相变过程中, α 析出相的形貌及其惯习面取向与界面能及弹性相互作用能有关, 然而, 这种作用及变体间相互影响很难从理论与实验上定量分析。

本文作者采用相场方法模拟 Ti-6Al-4V 合金中 α 相析出过程, 探讨界面能各向异性与弹性应变能对其形貌的影响并揭示其形成机理。

1 相场模型

相场方法中用场变量描述合金体系。对于 Ti-6Al-4V 合金的 $\beta \rightarrow \alpha$ 相变, 需 2 个浓度场变量 $X_k(k=\text{Al}, \text{V})$ 来描述两相中的溶质浓度以及 12 个结构场变量 $\phi_p(p=1, \dots, 12)$ 表征 12 个不同取向的 α 变体。体系总能量 F 可表示为

$$F = \frac{1}{V_m} \int_V [G_m(T, X_k, \phi_p) + \frac{\varepsilon}{2} \sum_{k=\text{Al}, \text{V}} |\nabla X_k|^2 + \frac{\kappa_i}{2} \sum_{p=1}^{12} |\nabla \phi_p|^2] dV + E^{\text{el}} \quad (1)$$

此处: V_m 是摩尔体积; V 是系统总体积; G_m 为局域摩尔化学自由能函数^[3]; T 为体系温度; ε 为浓度梯度项系数; κ_i 为结构场变量梯度项系数张量; E^{el} 为体系的弹性能。

根据 Khachaturyan 的弹性理论^[4], 体系的弹性能 E^{el} 可表示为

$$E^{\text{el}} = \frac{1}{2} \sum_{p,q} \int \frac{d\mathbf{g}}{(2\pi)^3} [C_{ijkl}^0 \varepsilon_{ij}^{00}(p) \varepsilon_{kl}^{00}(q) - n_i \sigma_{ij}^{00}(p) \Omega_{jk}(\mathbf{n}) \sigma_{kl}^{00}(q) n_l] \tilde{\phi}_p(\mathbf{g}) \tilde{\phi}_q^*(\mathbf{g}) \quad (2)$$

$$\varepsilon_{ij}^T(\mathbf{x}) = \sum_{p=1}^N \varepsilon_{ij}^{00}(p) \phi_p(\mathbf{x}) \quad (3)$$

式中: $\mathbf{n}=\mathbf{g}/|\mathbf{g}|$ 是倒空间的单位格矢; n_i 为倒空间单位矢量 $\mathbf{n}$ 的第 i 个分量; $\tilde{\phi}_p(\mathbf{g})$ 与 $\tilde{\phi}_q^*(\mathbf{g})$ 分别为 $\phi_p(\mathbf{x})$ 的 Fourier 变换与 $\tilde{\phi}_q(\mathbf{g})$ 的复共轭; C_{ijkl}^0 为弹性常数张量; $\varepsilon_{ij}^{00}(p)$ 与 $\sigma_{ij}^{00}(p)$ 分别为第 p 个变体的相变应变与应力张量; $[\Omega(\mathbf{n})]_{ik}$ 表示格林函数张量, 是

$[\Omega^{-1}(\mathbf{n})]_{ik} \equiv C_{ijkl}^0 n_j n_l$ 的逆; $\varepsilon_{ij}^T(\mathbf{x})$ 表示 $\mathbf{x}$ 处的本征应变张量。

为模拟方便, 选定 2 个坐标系:

N_1 坐标系(变体坐标系), $x_1//[010]_\beta$; $x_2/[-101]_\beta$; $x_3//[101]_\beta$;

N_2 坐标系(基体): $x_1//[100]_\beta$; $x_2//[010]_\beta$; $x_3//[001]_\beta$ 。

相变应变张量 $\varepsilon_{ij}^{00}(p)$ 是通过晶格常数以及 β 与 α 相之间的 Burgers 取向关系^[5]决定的。晶格常数: $a_\beta=0.3196 \text{ nm}$; $a_\alpha=0.2943 \text{ nm}$; $c_\alpha=0.4680 \text{ nm}$ 。

在析出相变体参考坐标系下(N_1), 由上述取向关系计算可得变体的相变应变张量 $\varepsilon_{ij}^{00}(p)$ ^[3]。本文作者假设 α 变体的弹性模量与 β 基体的弹性模量相同^[6]。

相场模拟中采用梯度系数张量表征界面能各向异性程度^[7]。本文作者选取变体尖端处界面与变体侧面、宽面处界面之间的界面能比值为 3:2:1。合金组织演化通过求解非保守的序参量场的 Ginzburg-Landau 控制方程和保守的浓度场的 Cahn-Hilliard 扩散方程来实现。在体系中, 假设界面能 $\sigma=0.5 \text{ J/m}^2$, 相关模拟参数根据界面能及界面厚度表达式求解选取^[8]。

2 模拟结果及讨论

2.1 界面能各向异性对变体形貌的影响

模拟初始时预置 1~2 个不同变体的椭球 α 核, 为 1 073 K 下的平衡成分, 过饱和 β 基体中 Al 和 V 的浓度(摩尔分数, 下同)分别取 10.19% 与 3.60%。保持弹性相互作用不变, 通过改变界面性质考察界面能各向异性对单变体形状的影响。界面能各向同性时, 变体呈片状, 边缘较圆滑; 而界面能各向异性时, 变体为边缘较尖锐的片状, 沿 x 轴方向相对于各向同性片层生长更快, 并且惯习面法线方向相对于各向同性片层略有偏离。图 1 和图 2 中第一行为沿不同坐标轴方向观察界面能各向同性及各向异性时析出变体的形貌。由图 1 和 2 见界面能各向异性对析出变体形貌及其惯习面取向的影响。

图 1 和图 2 中第二、三行分别为过体系中心沿不同坐标轴(x, y, z)方向 Al 和 V 浓度的分布。可以看出 Al 从 β 向 α 相扩散, V 从 α 向 β 相扩散, 在相界 β 侧形成 Al 贫瘠区与 V 富集区, 表明变体的生长由溶质原子的扩散控制。比较发现: 界面能各向异性时, 沿 x 轴方向, Al 贫瘠区与 V 富集区域较界面能各向同性时不显著, 这说明此时沿 x 轴向变体的尖端比较尖锐, 扩散较快, 尖端向前生长较快, 片状变体的长度相对界面能各向同性时较长; 沿 y 轴方向, 界面能各

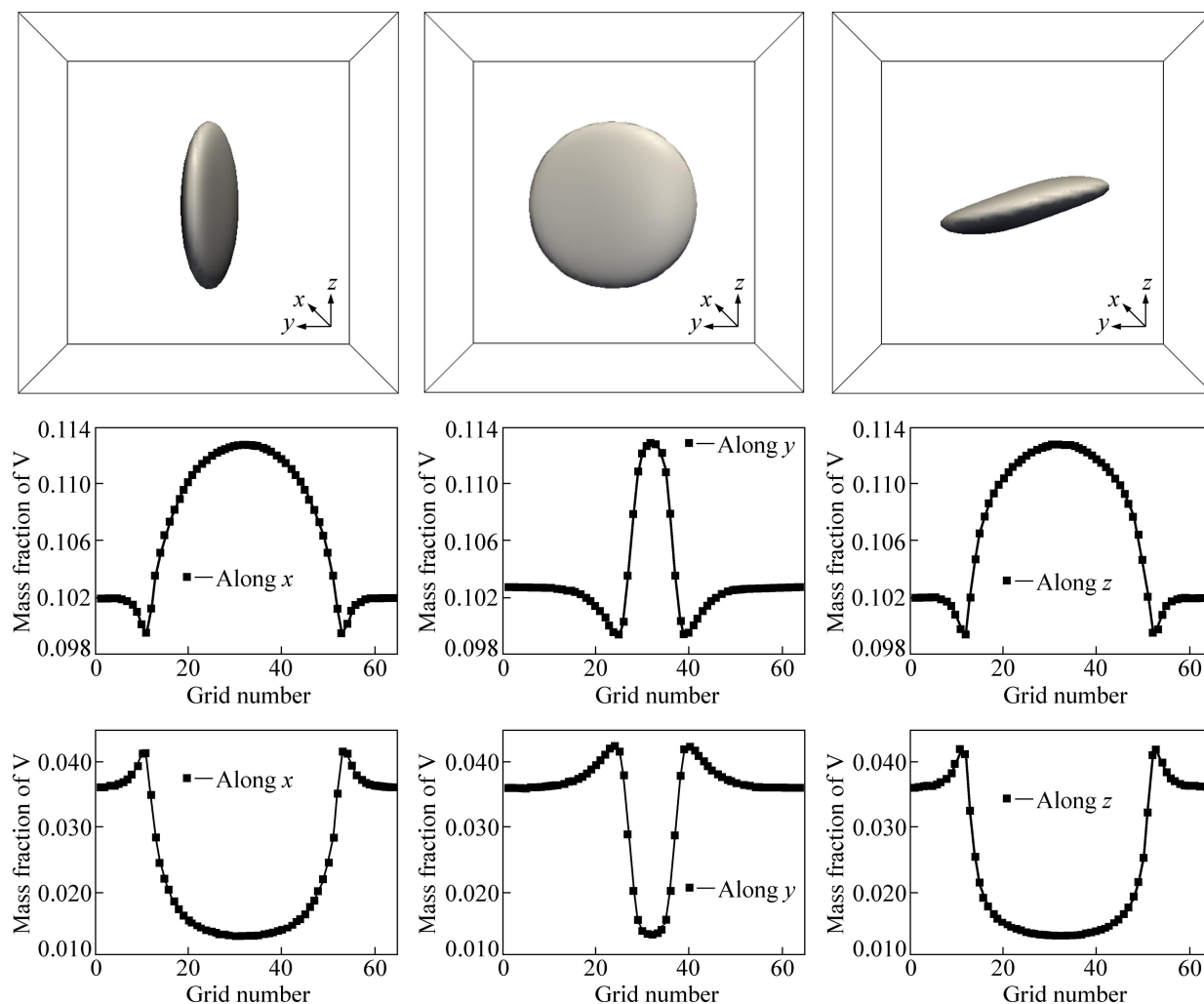


图1 界面能各向同性条件下 $\tau=50$ 时变体的形貌及成分分布

Fig. 1 Morphologies and composition profiles of variant when $\tau=50$ with isotropic interfacial energy (Morphologies of variant view along different axes in the first row; concentrations of Al and V along different axes through center of variant are shown in the second and third rows, respectively)

向异性对片状变体的厚度影响不明显；沿 z 轴方向，界面能各向异性时片状变体的宽度相对界面能各向同性时较小。

图3所示为界面能和弹性能随变体体积的变化。其中，内插图为2条曲线交叉处的局部放大，表明当析出相体积超过28时体弹性能超过界面能。在固态相变时，新相核心与母相之间不同的晶格匹配导致界面能和应变能的不同，因此，晶核将倾向于形成某种形状，以力求降低界面能与应变能。而析出相的形状要视新相形成时应变能与界面能的相对大小来确定。交叉位置代表界面能与应变能角色变换的临界点，在此之前界面能占主导地位，并且由于界面能各向异性的影响，变体形状倾向于椭球状；在此之后，弹性能开始占主导地位，变体形状倾向于片状以降低弹性应

变能。

2.2 变体惯习面取向计算

界面能各向同性的情况下，应变能密度 $B_{pq}(\mathbf{n})$ 的极小值方向就是变体的惯习面法线方向^[4]。对于2.1节中的变体，在完全共格的条件下， $B_{pq}(\mathbf{n})$ 的极小值为 $6.4 \times 10^7 \text{ J/m}^3$ ；根据变体坐标系与晶体取向之间的对应关系，可以计算出其惯习面法向为 $[-11; 10.1; 14.3]_\beta$ ，相对于实验观察的取向^[9] $[-11; -13; 11]_\beta$ 偏离 7.9° 。该偏差可能主要是没有考虑到 α 片与基体界面处的位错结构。在通常情况下，随着变体的逐渐长大，其尖端处开始失去与基体的共格关系而向半共格或非共格过渡，在两相界面处产生位错，部分弛豫掉弹性应变，

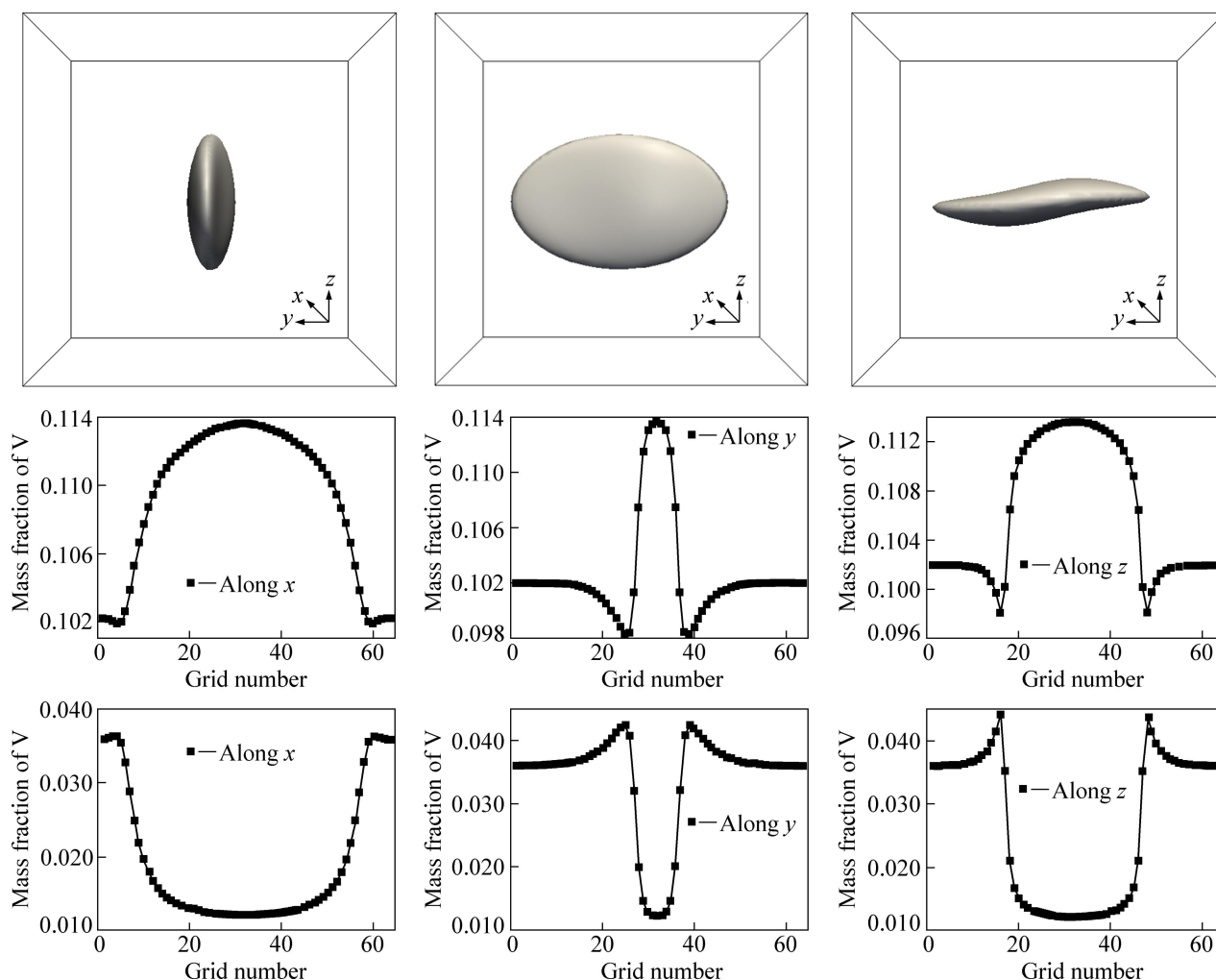


图 2 界面能各向异性条件下 $\tau=50$ 时变体的形貌及成分分布

Fig. 2 Morphologies and composition profiles of variant when $\tau=50$ with anisotropic interfacial energy (Morphologies of variant viewed along different axes in the first row; concentrations of Al and V along different axes through center of variant are shown in the second and third rows, respectively)

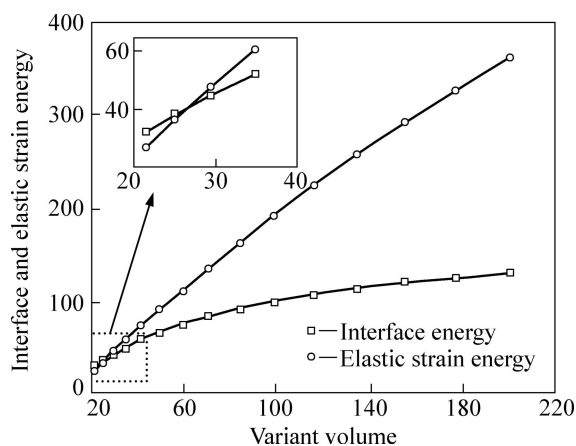


图 3 界面能和弹性能随变体体积的变化

Fig.3 Change of interfacial energy, elastic strain energy with variant volume

进而影响变体取向。

2.3 两变体析出过程模拟

由同一(110) $_{\beta}$ 面衍生的 2 种变体同时析出情况见图 4(其中, τ 为相场方法中无量化后的时间)。由图 4 可见: 当 2 个变体逐渐长大而接近时, 变体 1(上)与变体 2(下)接近的局部生长减慢, 出现凹陷, 而变体 2 的尖端部分穿过变体 1 的凹口, 围绕变体 1 继续生长。两变体的交叉生长是研究多变体生长的基础。

由图 4 所示的结果, 沿不同方向截取两变体, 得到变体的交角不同。以 β 相(101)晶面为例, 相变时衍生出 1 和 2 共 2 种取向的变体, 其取向夹角约为 100° 。通过实验^[9]确定变体 1 取向, 经过旋转对称操作, 可以推导出其余所有变体的取向, 进而计算出任意两变

体之间共有 5 种夹角: 8.7° , 65.2° , 65.9° , 73.1° 和 80.6° , 这与纯钛中存在 5 种 α/α 界面相对应^[10]。

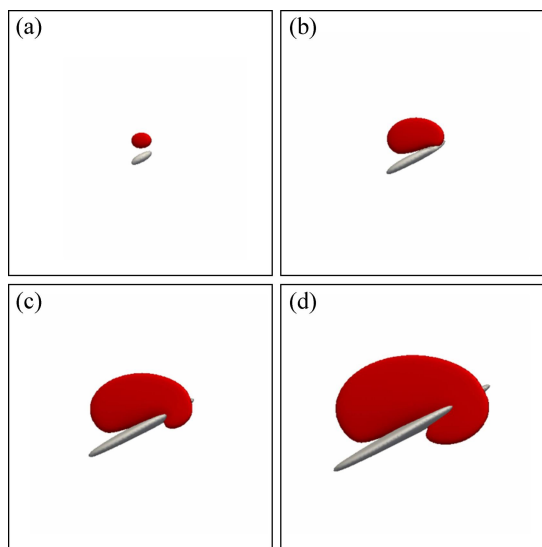


图 4 $\tau=5, 15, 25$ 和 35 时 2 种变体交叉生长的微观结构

Fig. 4 Microstructure evolutions of two intersecting variants at τ of 5 (a), 15 (b), 25 (c) and 35 (d), respectively

3 结论

1) α 相变体形状是界面能与弹性能共同作用的结果, 在变体体积较小时, 界面能占主导地位, 且由于其各向异性的影响, 变体倾向于椭球状; 随体积的增加, 弹性能开始占主导地位, 变体倾向于片状以降低弹性应变能。

2) 考虑弹性能情况时, 变体的生长仍由溶质原子的扩散所控制。Al 从 β 向 α 相扩散, V 从 α 向 β 相扩散, 在相界 β 侧形成 Al 贫瘠区与 V 富集区, 界面前沿溶质的堆积或贫化阻碍变体的生长, 且界面能大的方向上片层生长快。

3) 在同一(110)面, 根据 Burgers 关系可衍生出 2 种 α 变体, 其惯习面夹角约为 100° ; 经由旋转对称操作, 可以推导出其余所有变体的取向, 进而计算出任意 2 种变体之间共有 5 种夹角。

REFERENCES

- [1] BROWN L M, HAM R K. In: KELLY A, NICHOLSON R B, editors. Strengthening methods in crystals[M]. London: Elsevier, 1971: 550–594.
- [2] LEYENS C, PETERS M. Titanium and titanium alloys[M]. Weinheim: Wiley-VCH, 2003: 1–31.
- [3] SHI R P, MA N, WANG Y Z. Predicting equilibrium shape of precipitates as function of coherency state[J]. Acta Materialia, 2012, 60(10): 4172–4184.
- [4] KHACHATURYAN A G. Theory of structural transformations in solids[M]. New York: John Wiley & Sons, 1983: 198–212.
- [5] BURGERS W G. On the process of transition of the cubic-body-centered modification into the hexagonal-close-packed modification of zirconium[J]. Physica, 1934, 1(7/8/9/10/11/12): 561–586.
- [6] LEDBETTER H, OGI H, KAI S, KIM S, HIRAO M. Elastic constants of body-centered-cubic titanium monocrystals[J]. Journal of Applied Physics, 2004, 95(9): 4642–4644.
- [7] MA N, YANG F, SHEN C, WANG G, VISWANATHAN G B, COLLINS P C, XU D S, YANG R, FRASER H L, WANG Y Z. Modeling formation of α sideplates in alpha/beta Ti-alloys: Effect of interfacial energy and coherency elastic strain energy[C]//Ti-2007 Science and Technology. Sendai, Japan, 2007: 287–290.
- [8] KIM S G, KIM W T, SUZUKI T. Phase-field model for binary alloys[J]. Physical Review E, 1999, 60: 7186–7197.
- [9] MILLS M J, HOU D H, SURI S, VISWANATHAN G B. Orientation relationship and structure of alpha/beta interface in conventional titanium alloys[C]//CLARK W A T, KING A H. America: The Minerals, Metals & Materials Society, 1998: 295–301.
- [10] WANG S C, AINDOW M, STARINK M J. Effect of self-accommodation on α/α boundary populations in pure titanium[J]. Acta Materialia, 2003, 51(9): 2485–2503.

(编辑 陈灿华)