

[文章编号] 1004-0609(2000)06-0774-05

γ -TiAl 片层界面在裂纹形核中的双重作用^①

陆永浩^{1, 2}, 张永刚², 乔利杰¹, 王燕斌¹, 褚武扬¹

(1. 北京科技大学 材料物理系, 北京 100083; 2. 北京航空航天大学 材料科学与工程系, 北京 100083)

[摘 要] 通过全片层 γ -TiAl 基合金 SEM 原位拉伸实验以及对裂纹前方滑移面及解理面上的应力进行有限元计算, 研究了片层界面在形核中的作用。当原裂纹与片层平行时, 裂纹尖端滑移系的分切应力较小, 滑移相对困难, 片层面上的正应力比其它解理面上的正应力大, 从而解理裂纹优先沿片层界面形核; 当裂纹与片层界面垂直时, 裂纹尖端很多滑移系上的分切应力较大, 滑移相对容易, 片层面上的正应力远比其他解理面上的正应力小, 从而裂纹优先在跨 γ 片层的解理面上形核, 片层界面成为滑移和裂纹扩展的障碍。

[关键词] γ -TiAl; 全片层结构; 片层界面; 裂纹形核; 有限元法

[中图分类号] TG111.9

[文献标识码] A

TiAl 基金属间化合物因为密度低、高温力学性能及抗氧化性能好, 从而成为潜在的高温结构材料^[1~3]。由一系列 γ -TiAl 和 α_2 -Ti₃Al 板条构成的全片层组织具有较高的断裂韧性及较好的高温性能, 但其室温塑性较差^[4]。对于全片层组织, 片层界面在断裂过程中起着重要作用, 在一定的片层尺寸范围内, 全片层组织的 K_{IC} 随片层间距的减少而升高, 服从 Hall-Petch 关系^[5]: $K_{IC} = K_{IC}^0 + b\lambda^{1/2}$, 对单一取向的(类单晶) PST 晶体(Polysynthetically twinned crystal) 则有 $\sigma_y = \sigma_0 + k_y \lambda^{-1/2}$ ^[6]。由此可见, 片层界面是裂纹扩展的阻碍, 其作用类似于晶界。通过对 PST 晶体的研究表明, 片层组织的 K_{IC} 具有强烈的各向异性, 当缺口平行于 γ/α_2 界面时, K_{IC} 很低, $K_{IC} = 5 \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$; 而当缺口垂直于 γ/α_2 界面时, K_{IC} 很高, $K_{IC} = (15 \sim 25) \text{ MPa}\sqrt{\text{m}}$ ^[7]。可见, 当原裂纹平行于片层时, 界面不再是裂纹扩展的阻碍, 而是裂纹优先形核、扩展的位置, 这时 Hall-Petch 关系不再成立。 γ -TiAl 基合金片层界面在形变和断裂中的作用具有双重性, 这取决于裂纹(或加载方向)和片层的相对取向。

作者通过扫描电镜(SEM)原位拉伸实验, 研究 γ -TiAl 片层界面在裂纹形核和扩展中的作用。由于 γ -TiAl 基合金的层状组织存在 6 种不同取向的 γ 有序畴, 片层取向存在强烈地各向异性, 而且在同一滑移面上不同的滑移方向也存在各向异性现象^[8], 用常规的力学分析手段很难对此进行相应分

析, 故这里采用有限元法计算裂纹前端各滑移面和解理面上的应力分量。

1 实验及计算过程

Ti-49%Al(摩尔分数)多晶体在真空感应悬浮炉中制备, 经 1400 °C, 30 min 固溶处理后空冷, 其组织为全片层结构, 片层宽度为 0.2~2 μm 。Ti-49%Al PST 晶体用磁悬浮炉制备, 其生长速度为 5 mm/h。SEM 动态拉伸试样尺寸为 0.8 mm × 2.5 mm × 5 mm。在型号为 JSM-5800 的 SEM 上用 JE-OL 动态拉伸台进行拉伸, 最大载荷为 200kg, 用二次电子像记录裂纹扩展过程。

PST 晶体全层状结构中, γ 片层中存在 6 种不同取向的亚片层, 分别用 $\gamma_1 \sim \gamma_6$ 表示, 它们之间的取向差为 $n\pi/3$ (以 γ/γ 界面(111)的法线为轴转动), 如图 1 所示。根据实验测出的有序畴平均尺寸(11 $\mu\text{m} \times 35 \mu\text{m}$)以及各种 γ 有序畴所占的比例, 就可以构造一个结构单元(两个 α_2 板条之间夹有 7 个 γ 亚片层), 如图 2 所示。把 4 个图 2 所示的基元并列就构成一个有限元计算单元(105 $\mu\text{m} \times 32.8 \mu\text{m} \times 8 \mu\text{m}$)。用八节点四面体单元分别对裂纹垂直于片层以及裂纹平行于片层两类情况用 ANSYS5.3 程序进行有限元计算。有限元计算建立在线弹性的基础上, 由于层状组织塑性较差, 计算结果在一定程度上能反映裂纹前端应力分布情况。有限元网格的

① [基金项目] 国家自然科学基金资助项目(59895153)

[收稿日期] 1999-11-02; [修订日期] 2000-03-27

[作者简介] 陆永浩(1967-), 男, 博士。

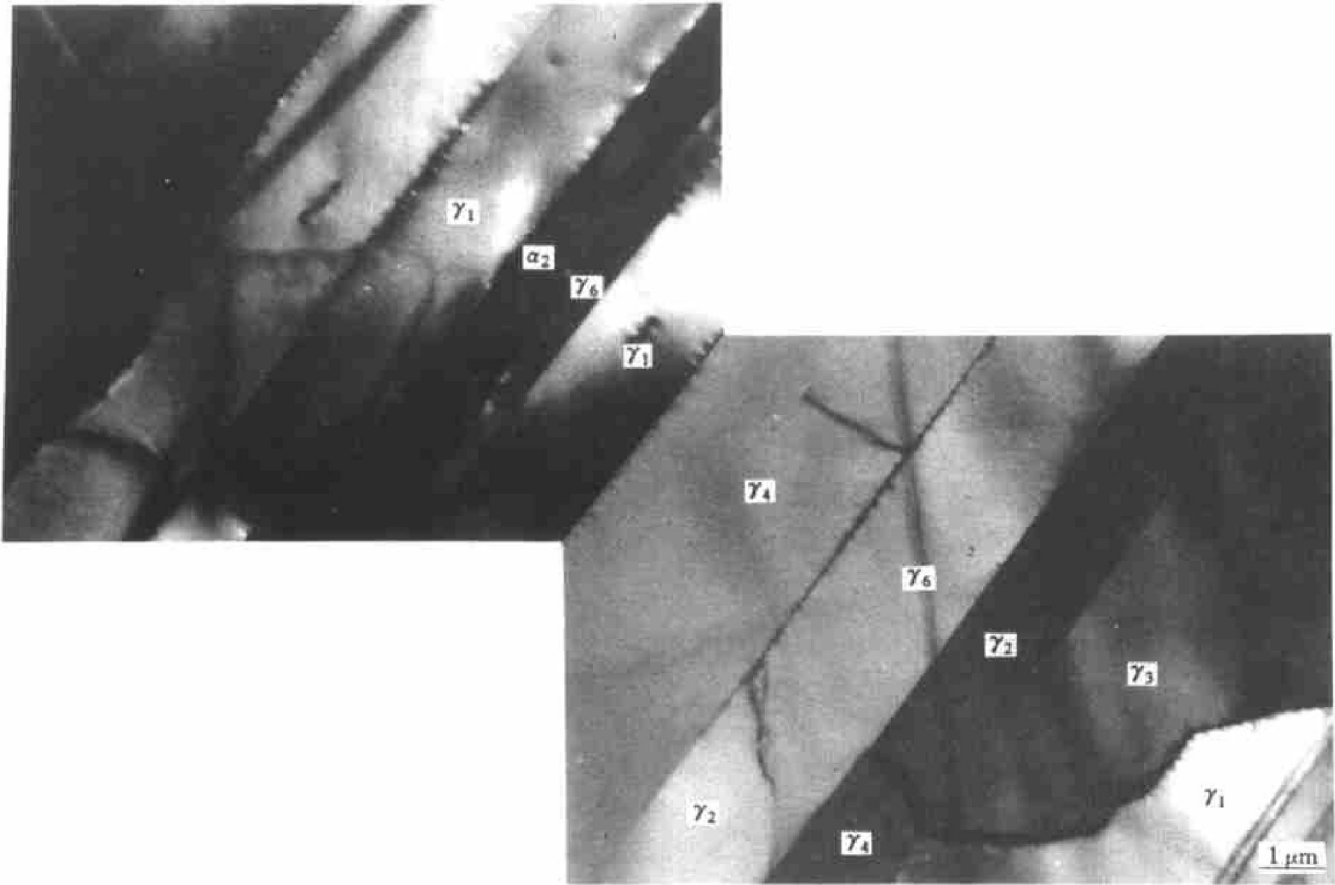


图 1 PST 晶体的 TEM 照片

Fig. 1 TEM photography of PST crystal

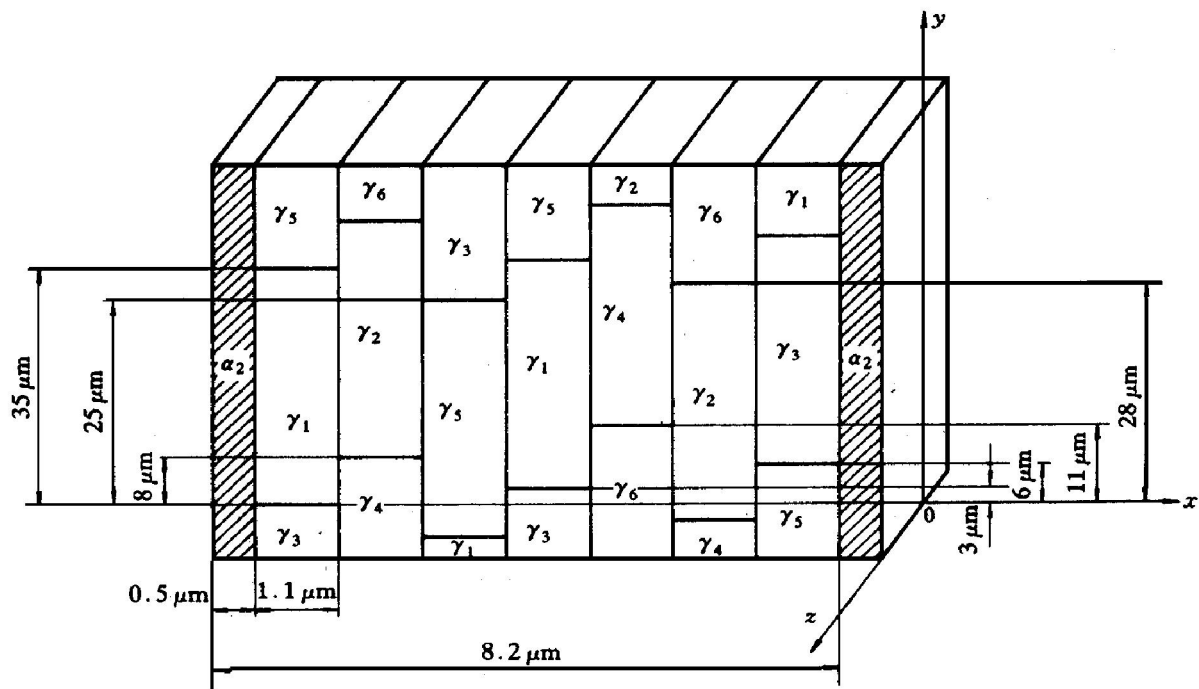


图 2 PST 晶体全片层组织的结构单元

Fig. 2 Structural unit of fully lamellar TiAl alloy (PST crystal)

列宽为一 γ 板条或 α_2 板条宽度, 行距为 $1.5 \mu\text{m}$ 。当裂纹垂直于片层时, 裂纹面位于 xoz 平面上, 裂

纹尖端位于第 2 单元 γ_5 , γ_3 的界面上。其加载方式为: 在 $y = 105 \mu\text{m}$ 平面加均布力, $p = 0.1 \text{ Pa}$, 其

外力方向为 $[\bar{1}\bar{1}2]$, 裂纹长 $12\mu\text{m}$; 当裂纹平行于片层时, 裂纹面位于 xoz 平面上, 裂尖位于第 2 单元的 γ_4 和 γ_5 板条之间, 其加载方式为: 在 $y = 32.8\mu\text{m}$ 平面加均布力, $p = 0.1\text{ Pa}$, 其外力方向为 $[111]$, 裂纹长度也为 $12\mu\text{m}$ 。

2 结果及讨论

2.1 原位拉伸

1) 拉伸轴与片层近似垂直

当拉伸轴与片层近似垂直时, 裂纹沿片层形核和扩展, 如图 3 所示。图 3 中 a 是沿片层界面刚开始形核的微裂纹, b, c 表示微裂纹已沿片层扩展。仔细观察可以看到, b, c 裂纹是由很多孤立的微裂纹相互连接而成的。

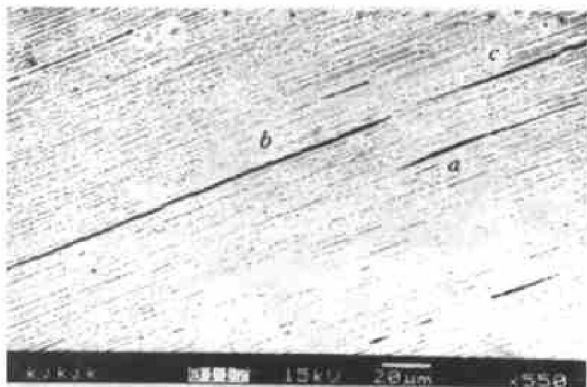


图 3 拉伸轴与片层界面接近垂直时, 裂纹沿片层形核
Fig. 3 Nucleation of microcracks along lamellae for case of loading axis perpendicular to lamellae

2) 拉伸轴与片层界面近似平行

当拉伸轴与片层界面近似平行时, 微裂纹优先在各个片层跨界面滑移面上形核, 而终止于片层界面, 如图 4(a) 中的 a, b, c, d, e 裂纹。在图 4(a) 中的主裂纹前端 B 处存在塑性区, 主裂纹前端 A 处塑性变形所造成的局部应力集中使 $\gamma/\alpha_2/\gamma$ 片层界面发生开裂, 产生层间裂纹。图 4(a) 的裂纹区经局部放大 (如图 4(b) 所示) 后可以看到, 在 γ 相内的裂纹 c 是由多个不连续形核的纳米尺寸微裂纹长大后相互连接而成的, 这些微裂纹均沿滑移带 $\{111\}$ 形核。

3) 拉伸轴与片层成一定角度

当拉伸轴与片层成 50° 角时, 微裂纹仍以片层开裂为主, 如图 5(a) 所示。微裂纹 a 和 b 沿片层形核, 主裂纹也沿片层方向扩展, 不同层间裂纹通过韧带剪切相互连接。当拉伸轴与片层成 35° 角时, 裂纹尖端首先引发垂直于片层的微裂纹, 如图 5(b) 所示, 垂直于片层的各个微裂纹靠沿片层界面解理

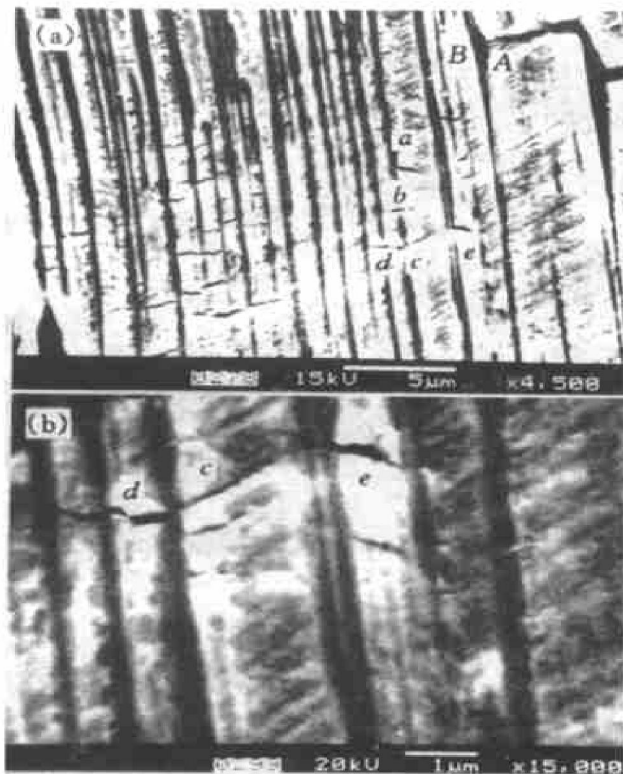


图 4 拉伸轴与片层界面近似平行时
裂纹在跨片层内解理面上的萌生

Fig. 4 Nucleation of microcracks at trans-lamellar cleavage planes for case of loading axis parallel to lamellae
(a) —Slips and microcracks ahead of crack tip;
(b) —Magnified photography

相互连接。图 5(b) 中 a, b, c, d, e 为片层内的解理裂纹, f, g 和 h 为沿片层扩展的裂纹。

2.2 有限元计算

γ -TiAl 滑移面为 $\{111\}$ 面, 除了普通位错 $1/2\langle 1\bar{1}0 \rangle$, 超位错 $\langle 01\bar{1} \rangle$ 和孪晶位错 $1/6\langle 11\bar{2} \rangle$ 外, 还有少量的 $1/2\langle 11\bar{2} \rangle$ 位错, 它们均能发生滑移^[9]。必须指出的是, 外加应力为拉应力时, 若计算所得滑移面上孪晶位错 $1/6\langle 11\bar{2} \rangle$ 的分切应力为负值时, 则孪晶不能开动^[10]。

对裂尖最近邻的每一网格都计算出作用在 16 个滑移系上的分切应力, 作用于每个滑移系上的最大分切应力 (以外加应力 σ_∞ 的倍数表征) 如表 1 所示。在这里, 应说明的是表中滑移方向使用了单形符号, 是由于不同滑移面上滑移具有不同的表达形式, 例如 $1/2\langle 110 \rangle$ 应包括: $1/2[1\bar{1}0](111)$, $1/2[1\bar{1}0](\bar{1}\bar{1}1)$, $1/2[110](1\bar{1}1)$, $1/2[110](\bar{1}1\bar{1})$ 。其它滑移系也一样。作用于裂纹前端解理面 $\{001\}$, $\{110\}$, $\{111\}$ 上的最大正应力 (它们并不处于同一网络内) 如表 2 所示。由表 1 和表 2 可知, 当裂纹

表 1 裂纹前端 γ 相滑移系上的最大分切应力($\tau_{\max}/\sigma_{\infty}$)

Table 1 Maximum resolve shear stresses on slip systems in γ phase ahead of crack tip($\tau_{\max}/\sigma_{\infty}$)

Slip direction	Crack perpendicular to lamellae				Crack parallel to lamellae			
	(111)	(11 $\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}$ 1)	($\bar{1}$ 11)	(111)	(11 $\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}$ 1)	($\bar{1}$ 11)
1/2 $\langle$ 110 $\rangle$	0.30	1.98	3.39	0.34	0.68	0.07	0.46	0.89
$\langle$ 101 $\rangle$	0.82	1.02	1.95	3.06	0.54	- 0.11	0.81	0.54
$\langle$ 011 $\rangle$	0.37	3.64	2.81	1.56	0.13	0.61	0.38	0.83
1/6 $\langle$ 112 $\rangle$	1.35	- 1.81	- 1.79	- 2.30	0.79	- 1.08	1.16	1.02

Note: $\tau_{\max}$ —Maximum resolve shear stress; σ_{∞} —Applied stress

表 2 裂纹前端 γ 相滑移系上的最大分正应力($\sigma_{\max}/\sigma_{\infty}$)

Table 2 Maximum resolve normal stresses on slip systems in γ phase ahead of crack tip($\sigma_{\max}/\sigma_{\infty}$)

Cleavage plane	(100)	(010)	(001)	(110)	(101)	(011)	(111)	(11 $\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}$ 1)	($\bar{1}$ 11)
Crack perpendicular to lamellae	2.46	5.35	1.78	2.88	2.90	2.72	2.63	2.90	5.30	5.80
Crack parallel to lamellae	1.62	2.79	1.74	2.87	2.84	3.10	3.71	1.63	1.79	2.28

Note: $\sigma_{\max}$ —Maximum resolve normal stress; σ_{∞} —Applied stress

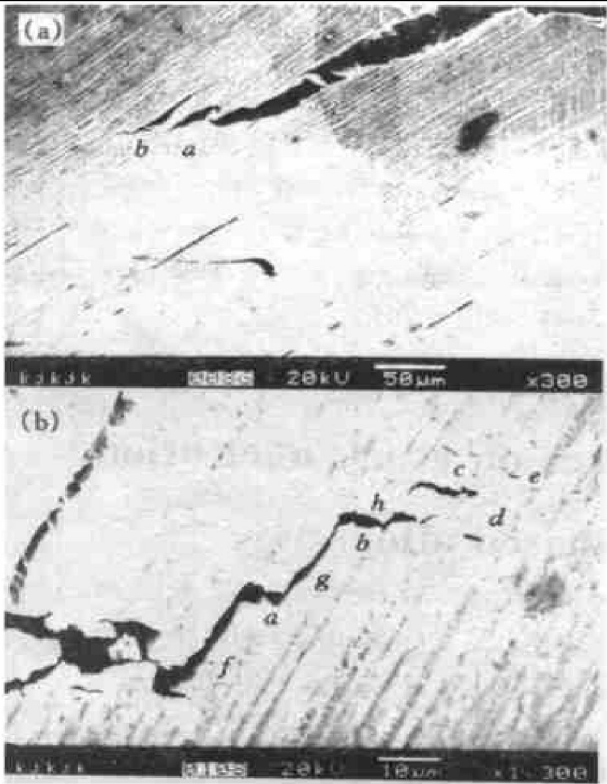


图 5 拉伸轴与片层界面分别成 50°(a) 和 35°(b) 时裂纹形核和扩展过程

Fig. 5 Nucleation and propagation process of microcracks for case of loading axes lying 50° (a) and 35° (b) from lamellae respectively

平行于片层界面时,所有滑移系上的分切应力很小, $\tau_{\max} \leq 1.3 \sigma_{\infty}$, 但沿 γ/γ 或 γ/α_2 的层界面 (111) 的正应力有最大值 $\sigma_{\max} = 3.71 \sigma_{\infty}$ 。当裂纹垂直于片层界面时,有 3 个滑移系上的分切应力 $\tau_{\max} \leq 3.0 \sigma_{\infty}$, 片层界面 (111) 上的正应力 $\sigma = 2.63 \sigma_{\infty}$, 远小于 γ 板条内其它滑移面 (如 ($\bar{1}\bar{1}$ 1) 和 ($\bar{1}$ 11)) 以

及 (010) 解理面上的正应力 ($> 5.3 \sigma_{\infty}$)。

由原位拉伸和有限元计算结果可见,在正应力方面,裂纹平行于界面时作用在层界面上的正应力大于裂纹尖端垂直于片层时作用于界面的正应力;但作用于跨片层解理面的正应力却明显小于后者。在切应力方面,裂纹平行于片层时,所有滑移面上的分切应力均较小;而当裂纹垂直于片层时,则在多个滑移系上的分切应力均较大。这说明当裂纹平行于片层时,裂纹优先沿界面形核,滑移较困难,裂纹在扩展中不易钝化,而保持尖锐,如图 3 所示。当裂纹垂直于片层时,裂纹尖端很容易发生塑性变形,裂纹沿跨 γ 片层内的滑移面 ($\bar{1}\bar{1}$ 1) 或 ($\bar{1}$ 11) (它们既是滑移面也是解理面) 形核,如图 4(b) 裂纹 b 和 c,另外也可沿 γ 板条内的 (001) 等解理面形核,如图 4(b) 中的微裂纹 d。由于裂纹尖端存在较明显的塑性变形 (如图 4(a) 中的 B 处),位错塞积引起的应力集中和作用在片层上的正应力叠加就会导致微裂纹沿片层界面 (111) 形核,如图 4(a) 裂尖 A 处的片层开裂。由此,根据有限元应力分析可以解释片层界面的双重作用。当原裂纹平行于片层界面时,所有滑移系上的分切应力均很小,滑移相对困难,但由于界面也是解理面,且作用在其上的正应力比其它解理面上的正应力要大,因此,微裂纹优先沿片层界面形核,并沿片层界面尖锐地向前扩展;当原裂纹垂直于片层界面时,裂纹尖端很多滑移系上的分切应力都很大,滑移极为容易,另外作用在层界面上的正应力远小于其它解理面上的正应力,故裂纹并不沿界面形核,这时层界面是滑移和裂纹扩展的障碍。

3 结论

1) 裂纹平行于全片层 γ -TiAl 的片层界面时, 裂纹尖端所有滑移系上的分切应力均较小, 滑移相对困难, 与此同时作用在层界面上的正应力比其它解理面上的正应力大, 从而解理裂纹优先在界面形核、扩展。

2) 当裂纹垂直于片层界面时, 裂纹尖端很多滑移系上的分切应力均较大, 滑移相对容易, 与此同时, 作用于解理面上的正应力远比层界面上的正应力大, 从而裂纹优先在解理面上形核, 片层界面成为滑移和裂纹扩展的障碍。

[REFERENCES]

- [1] Kim Y W and Dennis M. Progress in the understanding of gamma titanium aluminide [J]. JOM, 1991, 8: 40–47.
- [2] Kim Y W. Ordered intermetallic alloys, part III: gamma titanium aluminides [J]. JOM, 1994, 11: 30–39.
- [3] Yamaguchi M. High temperature intermetallics with particular emphasis on TiAl [J]. Mater Sci Tech, 1992, 8: 299–307.
- [4] Yamaguchi M and Inui H. TiAl compounds for structural applications [A]. Darolia R, Lewandowski J J, Liu C T. Structural Intermetallics [C]. The Minerals, Metals and Materials Society, 1993. 127–142.
- [5] Chan K S and Kim Y W. Effects of lamellae spacing and colony size on the fracture resistance of a fully-lamellar TiAl alloy [J]. Acta Metall Mater, 1995, 43(2): 439–451.
- [6] Umakoshi Y and Nakano T. The role of ordered domains and slip mode of phase in the plastic behavior of TiAl crystals containing oriented lamellae [J]. Acta Metall Mater, 1993, 41(4): 1155–1161.
- [7] Yokoshima S and Yamaguchi M. Fracture behavior and toughness of PST crystals of TiAl [J]. Acta Mater, 1996, 44(3): 873–883.
- [8] Tanaka K Ichitsubo T, Inui H, et al. Single-crystal elastic constants of TiAl [J]. Phil Mag Letters, 1996, 73(2): 71–78.
- [9] Lipsitt H A, Shechtman D and Schafrik R E. The deformation and fracture of TiAl at elevated temperature [J]. Metall Trans A, 1975, 6A: 1991–1996.
- [10] Sun Y Q, Hazzledine P M and Christian J W. Intersections of deformation twins in TiAl [J]. Phil Mag A, 1993, 68(3): 495.

Twofold effects of lamellar interface on crack nucleation in fully lamellar TiAl based alloy

LU Yong-hao^{1,2}, ZHANG Yong-gang², QIAO Li-jie¹, WANG Yan-bing¹, CHU Wu-yang¹

(1. Department of Materials Physics, University of Science and Technology Beijing,

Beijing 100083, P. R. China;

2. Department of Materials Science and Engineering, Beijing University of Aeronautics and Astronautics,

Beijing 100083, P. R. China)

[Abstract] The twofold effects of lamellar interface on crack nucleation in fully lamellar TiAl based alloys were investigated through in-situ SEM technique and stress analysis on cleavage planes using finite element method. When the crack is parallel to the lamellae, the resolved stresses on all slip planes ahead of crack tip is small, which makes the slips difficult; while the normal stresses on lamellar interfaces is higher than those on other cleavage planes, which results in crack nucleation along lamellar interfaces preferentially. When the crack is perpendicular to the lamellae, the resolved stresses on many slip planes ahead of crack tip are much higher compared with the condition when the crack is parallel to the lamellae, which makes slips easy; while the normal stresses on lamellar interfaces are much smaller than those on other cleavage planes, which results in crack nucleation along trans-lamellar interfaces preferentially, and the lamellar interface is the hindrance of slip and crack propagation.

[Key words] γ -TiAl based alloy; fully lamellar structure; lamellar interface; crack nucleation; finite element method

(编辑 杨 兵)