

9058-261

镍基单晶高温合金定向粗化行为的取向依赖性*

II 有限元分析

沙玉辉 陈昌荣 张静华 徐永波 胡壮麒

(中国科学院金属研究所材料疲劳与断裂国家重点实验室, 沈阳 110015)

摘要 本文对点阵错配力和施加外载后的内应力大小及分布进行了有限元计算. 结果表明, 基体通道的应力分布与 γ' 颗粒的定向粗化有密切联系. 定向粗化的驱动力是塑性变形不均匀分布导致的错配力各向异性松弛.

关键词 镍基单晶高温合金, 有限元, 定向粗化, Mises 应力

中图分类号: TG132.3, TG111

文献标识码: A

文章编号: 0412-1961(2000)03-0258-04

TG14615

ORIENTATION DEPENDENCE OF DIRECTIONAL COARS-ENING BEHAVIOR IN A NICKEL-BASE SINGLE CRYSTAL SUPERALLOY

II Finite Element Analysis

SHA Yuhui, CHEN Changrong, ZHANG Jinghua, XU Yongbo, HU Zhuangqi

State Key Laboratory for Fatigue and Fracture of Materials, Institute of Metal Research, The Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015

Correspondent: SHA Yuhui, postdoctor, Tel: (024)23968655

Manuscript received 1999-09-16, in revised form 1999-12-06

ABSTRACT Finite element analysis was applied to the amplitude and distribution of internal stress before and after loading. The results showed that the stress distribution in matrix channels is closely related with the directional coarsening, and the driving force for directional coarsening is the anisotropic relaxation of lattice misfit resulted from the inhomogeneous distribution of plastic deformation.

KEY WORDS nickel-base single crystal superalloy, finite element, directional coarsening, Mises stress.

控制定向粗化的两个物理参数— γ 及 γ' 间的点阵错配和弹性常数差, 在结构中产生弹性应力场. 为此一些研究进行了相关的计算, Pineau^[1]、Miyazaki 等^[2] 及 Chang 和 Allen^[3] 等以 Eschelby 理论为基础, 从总弹性应变能角度讨论 γ' 颗粒的稳定形状. Tien 等^[4,5] 从 γ' 颗粒有效模量、共格应变能和总相界面面积等方面考察自由能的变化, 提出了一个热力学分析理论. Johnson 等^[6] 利用系统总能量的 Landau 型扩张方法研究了 γ' 颗粒在粗化过程中的形态改变. Gayda 和 Srolovitz^[7] 则利用混合 Monte Carlo 有限元方法模拟了由弹性应变能驱动的粗化过程. Ohashi 等^[8] 采用有限元方法, 以点阵错配和弹性常数差以及 γ' 体

积分数为参数, 分析了平行和垂直于应力轴的 γ 基体通道中的应力状态. Socrate 和 Parks^[9] 在计算颗粒嵌入基体并承受应力条件下的弹性能时, 考虑了蠕变应变的作用. Pollock 和 Argon^[10] 的研究则表明, 位错优先进入高应力基体通道, 从而改变了错配应力的分布.

鉴于目前计算基本限于 [001] 应力轴取向, 所以本文对 [001] 和 [110] 两个取向中由点阵错配和弹性常数差引起的内应力以及施加外载后的内应力大小与分布进行了有限元分析.

1 有限元计算

有限元分析模型采用广义平面应变元, 即允许在厚度方向上进行一致变形. 相对平面应变或平面应力模型, 广义平面应变能对小应变三维问题提供更好的近似. 有限元分析中使用的刚度系数为 (单位: 10^{11} Pa): $C_{11}^{\gamma}=1.87$, $C_{12}^{\gamma}=1.29$, $C_{44}^{\gamma}=0.90$, $C_{11}^{\gamma'}=2.05$, $C_{12}^{\gamma'}=1.33$, $C_{44}^{\gamma'}=0.89$ ^[11]. γ 及 γ' 相

* 国家自然科学基金资助项目 59871052

收到初稿日期: 1999-09-16, 收到修改稿日期: 1999-12-06

作者简介: 沙玉辉, 男, 1969年生, 博士后

的热膨胀系数取 $\gamma' = 1.63 \times 10^{-5}/K$, $\alpha_{\gamma'} = 1.26 \times 10^{-5}/K$ ^[12] 与 $\gamma = 1.58 \times 10^{-5}/K$, $\alpha_{\gamma} = 1.32 \times 10^{-5}/K$ ^[13] 的平均值, 即 $\gamma' = 1.60 \times 10^{-5}/K$, $\alpha_{\gamma'} = 1.29 \times 10^{-5}/K$. DD8 单晶合金室温点阵错配 $\delta_{RT} = 0.04\%$, 由此可估算出 1223 K 时的点阵错配: $\delta_{1223K} = (\alpha_{\gamma'} - \alpha_{\gamma})\Delta T + \delta_{RT} = -0.25\%$. 应力状态以 Mises 应力 σ_{Mises} 表示, σ_{Mises} 定义为:

$$\sigma_{Mises} = \{0.5 \cdot [(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (\sigma_{22} - \sigma_{33})^2 + (\sigma_{33} - \sigma_{11})^2] + 3 \cdot (\sigma_{12}^2 + \sigma_{23}^2 + \sigma_{31}^2)\}^{1/2}$$

式中 σ_{ij} 为应力张量分量.

1.1 [001] 取向有限元计算

根据 $\gamma + \gamma'$ 两相结构的立方对称性, 只需考虑 1/8 颗粒及其相邻的基体, 有限元模型示于图 1, 其中阴影部分为 γ' 颗粒. 平行于上边界的基体通道称为水平通道, 平行于右边界的基体通道称为垂直通道. 压缩应力沿 Y 方向施加. 由于结构对称性, 上边界和右边界在分析过程中保持平面, 而底边界和左边界上的节点分别只允许在 X 或 Y 方向上运动.

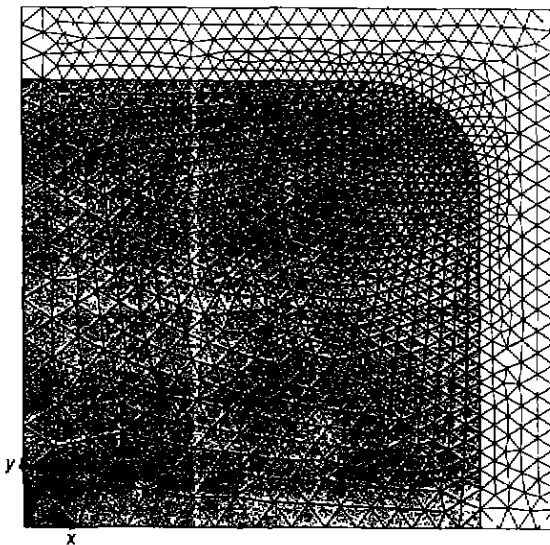


图 1 [001] 取向有限元模型
Fig.1 Finite element model for [001] stress axis

图 2a, b 所示为 γ' 颗粒和 γ 基体中点阵错配力的分布, 可见, 基体通道中的错配应力非常高. 除颗粒角附近区域外, 沿通道长度方向均匀分布, 约为 300 MPa, 而 γ' 中的错配应力则很低, 大致在 56—80 MPa 之间.

如果对图 1 所示的结构施加应力, 外应力将与错配应力相互叠加. 图 3a, b 分别为在 300 MPa 外应力作用下颗粒和基体中的 Mises 应力分布, 300 MPa 对应压缩曲线上的最大应力. 可见, 基体中的 Mises 应力沿通道长度方向仍然均匀分布, 但各通道之间表现出强烈的各向异性, 水平

通道中的 Mises 应力仅为 55 MPa, 而在垂直通道中却高达 515 MPa. Mises 应力在 γ' 颗粒中的分布仍十分均匀, 约为 326—364 MPa. 这样的应力状态将使塑性变形集中于垂直基体通道, 从而导致塑性变形的各向异性分布.

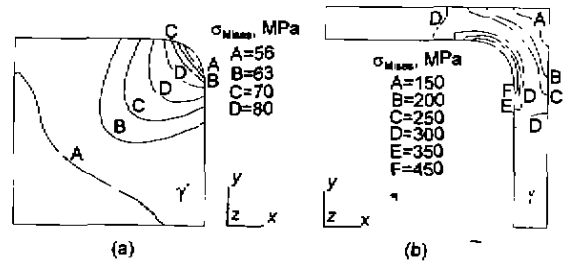


图 2 [001] 取向点阵错配力的分布
Fig.2 Misfit stress distribution for [001] stress axis
(a) γ' precipitate (b) γ matrix

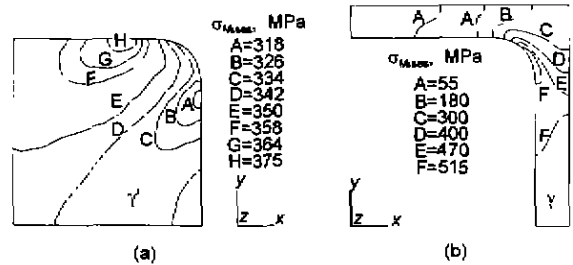


图 3 [001] 取向施加 300 MPa 压应力后 Mises 应力分布
Fig.3 Mises stress distribution under the compressive stress of 300 MPa along [001] stress axis
(a) γ' precipitate (b) γ matrix

1.2 [110] 取向有限元计算

应力轴沿 [110] 取向时, 基体通道可分为两类: 一类与应力轴成 45° , 称为“roof”基体通道, 另一类与应力轴平行, 称为“gable”基体通道. 考虑到结构的对称性和有限元计算本身所要求的对称性, 有限元模型涉及两个 γ' 颗粒及其毗邻的 γ 基体 (图 4), 且该模型包含了 roof 及 gable 两类基体通道. 图 5a, b 所示分别为 roof 和 gable 基体通道中点阵错配力的分布情况, 除接近通道相交的区域外, 错配 Mises 应力沿通道长度方向也是均匀分布, 约为 300—330 MPa, 与图 2b 的结果基本一致. 图 6a, b 分别为沿 [110] 取向施加 360 MPa 压应力后 roof 及 gable 基体通道中的 Mises 应力分布情况, 360 MPa 也是对应压缩曲线上最大应力. 两类基体通道中 Mises 应力的分布表现出明显的各向异性, roof 通道中的 Mises 应力约为 420 MPa, 而 gable 通道中约为 530—580 MPa. 这样的应力分布将使塑性变形优先发生于 gable 基体通道.

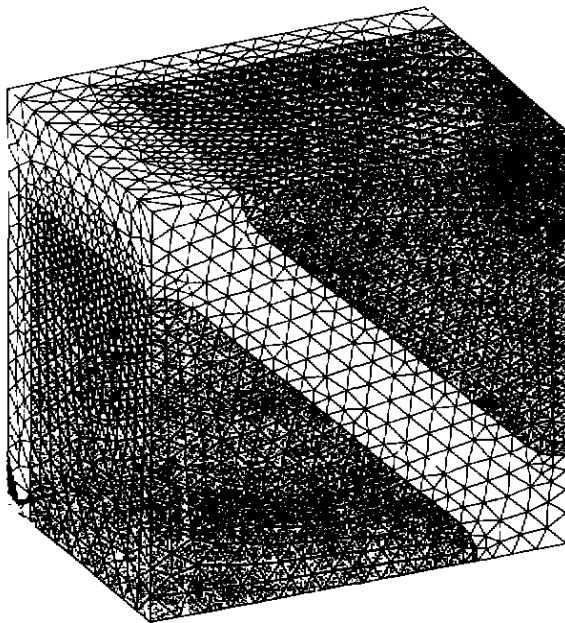


图4 [110]取向有限元模型
Fig.4 Finite element model for [110] stress axis

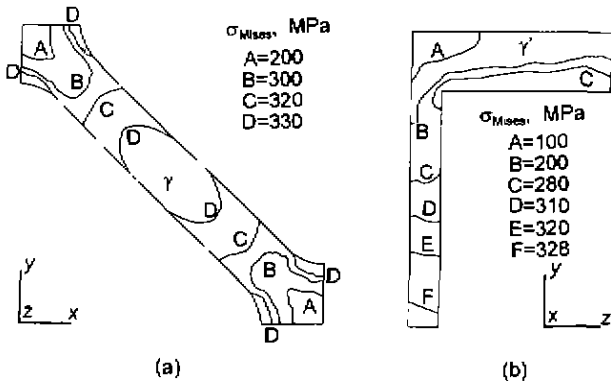


图5 [110]取向点阵错配力的分布
Fig.5 Misfit stress distribution for [110] stress axis
(a) roof channel (b) gable channel

2 分析讨论

根据有限元计算结果,施加外应力前,各基体通道中的点阵错配力尽管数值较大,但均匀分布,而施加外应力后,基体通道之间产生强烈的各向异性.这是由于高温下点阵错配为负,即 γ' 颗粒点阵常数小于 γ 基体,因此 γ 基体中的点阵错配力性质为压应力,方向与对应的 γ/γ' 界面平行,这样在外加压应力作用下,对于[001]取向,垂直通道中的点阵错配力与外应力相互增强,而水平通道中的点阵错配力与外应力相互削弱;对于[110]取向,由于gable通道中的点阵错配力与外应力平行,而roof通道中的点阵错配力与

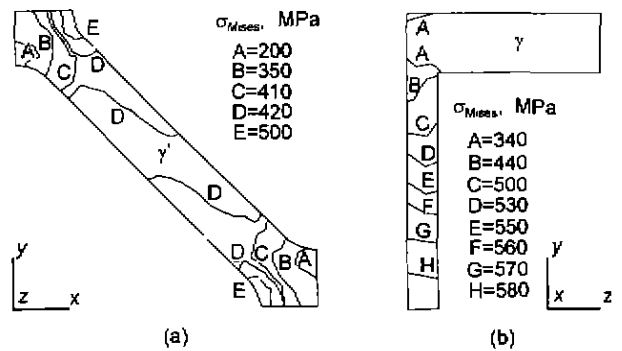


图6 [110]取向施加360 MPa压应力后Mises应力分布
Fig.6 Mises stress distribution under compressive stress of 360 MPa along [110] stress axis
(a) roof channel (b) gable channel

外应力呈 45° ,故前者的相互增强效应强于后者,在[001]取向中,垂直通道中的Mises力远远高于水平通道,SEM观察显示 γ' 颗粒沿平行于应力轴的方向粗化,即垂直通道扩展;在[110]取向中,gable通道中的Mises应力高于roof通道, γ' 颗粒沿[100]和[010]方向粗化,即gable通道扩展.[111]取向虽未作计算,但由于6个{100}基体通道的等价性,在施加外应力前后均应处于相同的应力状态,而SEM观察表明 γ' 颗粒没有表现出沿任何方向上的择优粗化,也就是说,基体通道的应力状态与 γ' 颗粒的定向粗化有密切联系,优先发生塑性变形的通道扩展,不易发生塑性变形的通道减少,如果各基体通道处于同等应力状态,则不会发生定向粗化.另一方面,应力轴为[001]取向时, γ' 颗粒是沿平行于应力轴的方向形成棒结构,但当应力轴取向为[110]时, γ' 颗粒并不是沿[110]方向粗化,而是仍然沿 $\langle 100 \rangle$ 方向.这表明最终对 γ' 颗粒定向粗化起作用的是基体通道内的应力状态.

TEM研究^[14]发现,在发生塑性变形的基体通道中,毗邻的 γ/γ' 界面上形成规则的位错网,而这些位错刃型分量的半原子面取向有利于松弛点阵错配,同时Veron^[15]等发现位错密度必须达到一个临界值,才能使定向粗化行为发生,而该临界值对应于完全松弛界面错配所需的位错密度,因此从根本上说,塑性变形的不均匀分布是引起了点阵错配的各向异性松弛,在粗化过程中扩展的界面是被松弛的界面.

基于以上分析,可以明确点阵错配和外应力各自所起的作用.由点阵错配引起的错配力,是 γ' 颗粒定向粗化的基础,为定向粗化行为的发生提供了可能性,外应力的作用是通过与点阵错配力叠加,使不同基体通道中的应力状态产生差异,塑性变形不均匀分布,从而导致点阵错配的各向异性松弛,为 γ' 定向粗化提供了现实的驱动力.

3 结论

(1) 基体通道的应力分布与 γ' 颗粒的定向粗化有密切联系：Mises 应力高的通道扩展，Mises 应力低的通道减小。

(2) 定向粗化的驱动力是塑性变形不均匀分布导致的错配力各向异性松弛。

参考文献

- [1] Pineau A. *Acta Metall.*, 1976; 24: 559
- [2] Miyazaki T, Nakamura K, Mori H. *J Met Sci*, 1979; 14: 1837
- [3] Chang J C, Allen S M. *J Mater Res*, 1991; 6: 1843
- [4] Tien J K, Gamble R P. *Metall Trans*, 1971; 2: 1663
- [5] Tien J K, Gamble R P. *Metall Trans*, 1972; 3: 2157
- [6] Johnson W C, Berkenpas M B, Laughlin D E. *Acta Metall.*, 1988; 36: 3149
- [7] Gayda J, Srolovitz D J. *Acta Metall.*, 1989; 37: 641
- [8] Ohashi T, Hidaka K, Imana S. *Acta Mater.*, 1997; 45: 1801
- [9] Socrate S, Parks D M. *Acta Metall Mater*, 1993; 41: 2185
- [10] Pollock T M, Argon A S. *Acta Metall Mater*, 1994; 42: 1859
- [11] Muller L, Glatzel U, Feller-kniepmeier M. *Acta Metall Mater*, 1992, 40. 1321
- [12] Royer A, Bastie P, Varon M. *Acta Mater*, 1998; 46: 5357
- [13] Glatzel U, Feller-Kniepmeier M. *Scr Metall.*, 1989; 23: 1839
- [14] Keller R R, Maier H J, Mughrabi H. *Scr Metall Mater*, 1993; 28: 23
- [15] Veron M, Brechet Y, Louchet F. *Scr Mater*, 1996; 34: 1883