L10 结构 TiAl 中超位错分解宽度研究*

宋西平 陈国良

(北京科技大学新金属材料国家重点实验室、北京 100083)

摘 要 研究了弹性各向异性、超位错分解组态、变形温度及层片界面对 L1₀ 结构 TiAl 合金中超位错分解宽度的影响作用 计算结果表明、同弹性各向同性相比、弹性各向异性减小了超位错的分解宽度、并且、使螺型超位错和刃型超位错的分解宽度差别 减小 超位错发生三重或四重分解时、形成内禀性层错 (SISF) 的分解宽度小于其发生二重分解时的分解宽度、非共面分解对超位 错的分解宽度也有一定的影响、随分解位错的 Burgers 矢量不同而不同 实验结果表明、温度变化对 <101] 型超位错的分解宽 度几乎没有影响、显示了剪切模量和层错能随温度变化而具有相同的变化趋势 <101] 型超位错在 γ/γ 层片界面附近的分解宽 度不同于 γ 层片内、位错分解位置愈靠近 γ/γ 层片界面、分解宽度愈窄

关键词 TiAl, 超位错、分解宽度

中图法分类号 TG146.1 文献标识码 A 文

文章编号 0412-1961(2002)06-0583-06

STUDY ON THE SUPERDISLOCATION DISSOCIATION WIDTHS IN L_{10} TiAl

SONG Xiping, CHEN Guoliang

State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083 Correspondent: CHEN Guoliang, professor, Tel: (010)62332508, Fax: (010)62332508,

E-mail: xpsong@public3.bta.net.cn

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.59895151) Manuscript received 2002–03–29

ABSTRACT The effects of anisotropic elasticity, superdislocation dissociation configurations, deformation temperatures as well as lamellar interfaces on the superdislocation dissociation widths have been studied. The calculation results showed that anisotropic elasticity made both the superdislocation dissociation widths and the difference between edge and screw superdislocation dissociation widths become smaller comparing with isotropic elasticity. The superdislocation dissociation widths of the superlattice intrinsic stacking fault (SISF) in the 3-fold or 4-fold dissociations were calculated to be smaller than that in 2-fold dissociation. The superdislocation dissociation widths were also affected by the non-coplanar dissociation configuration, the variation of which was with the Burgers vectors of dissociated superdislocations. The experimental results showed that deformation temperatures had little effect on the <101] superdislocation dissociation widths, implying that the shear modulus and stacking fault energy have the same changeable tender with temperatures. The dissociation widths of <101] superdislocations near the lamellar interfaces of γ/γ type were different with that inside the γ lamellar, the nearer the distance, the narrower the dissociation widths.

KEY WORDS TiAl, superdislocation, dissociation width

在 LI₀ 结构的 TiAl 台金中、由于原子的有序排列. 出现了 [10] 及 1/2 < 112] 这类超点阵位错、其 Burgers 矢量位于异类原子组成的平面上,且其大小是普通面心立 方结构中单位位错 Burgers 矢量的倍数.这类超位错的 可动性不但影响着 TiAl 台金中的 R(或 R') 现象,还影 响着此台金较低的室温塑性.影响超位错可动性的因素很 多.如位错滑移的 P-N 阻力、晶体结构因素、Burgers 矢 量大小及电子云密度分布等等、其中、超位错分解宽度和超 位错的可动性有着密切的联系.超位错分解宽度愈宽、越 过能堡所需要的能量就愈低、就愈容易越过障碍而运动. 位错分解宽度一般受层错能的影响、但在具有 LI₀ 结构 的 TiAl 台金中、还会受到弹性各向异性、位错分解组态 等因素的影响、而这一问题至今还没有引起足够的重视.

^{*} 国家自然科学基金 59895151 资助项目 收到初稿日期: 2002-03-29 联系人: 陈国良、男、 1934 年生、中国工程院院士

1 L1₀ 结构中位错分解宽度的理论计算

一般地、当位错在其滑移面上能够自由滑移时,其分 解宽度可以通过滑移面内分解位错间的弹性作用能同层 错能的平衡求得,假定位错线在分解前后为直线型且相互 平行,则有:

$$\gamma = f_{12} = \frac{G\vec{b}_1\vec{b}_2}{2\pi d_{12}} = \frac{G|b_1||b_2|}{2\pi d_{12}} \cdot \left[\cos(\phi - \alpha)\cos(\phi + \beta) + \frac{\sin(\phi - \alpha)\sin(\phi + \beta)}{1 - \nu}\right]$$
(1)

式中, γ 为分解位错间的层错能, f_{12} 为分位错间的弹性 作用能, d_{12} 为分位错间的距离, G 为剪切模量, b_1 , b_2 分別为分位错的 Burgers 矢量, 角度 ϕ , α , β 分別为全位 错、部分位错 b_1 和部分位错 b_2 的 Burgers 矢量与位错 线的夹角. 为了考虑 L1₀ 结构 TiAl 中弹性各向异性对分 解宽度的影响作用、本文采取将弹性各向同性下的 G, ν 换成弹性各向异性时的 G'_{hkl} , ν'_{hkl} . 在 [hkl] 方向上的弹 性模量 E'_{hkl} 和 (HKL) 面 [hkl] 方向上的剪切模量 G'_{hkl} 可以利用原坐标系下广义 Hooke 定律的柔度矩阵 s_{ij} . 通 过坐标系的旋转得到 s'_{ij} 矩阵求得 ^[3,4], 即:

$$G' = (s'66)^{-1} \tag{2}$$

$$E' = (s'11)^{-1} \tag{3}$$

对于弹性各向异性中 [*hki*] 方向上的 Poisson 比 ν'_{hkl} , 我们利用坐标旋转把 [*hki*] 方向变为正应力方向,并用 [*hki*] 方向上的应变与另外两个垂直于 [*hki*] 方向上的应变 相比,比值的算术平均值作为 [*hki*] 方向上的 Poisson 比 ν'_{hkl} ,即: $\nu'_{hkl}=1/2(\nu'_{h'k'l'}+\nu'_{h''k''l''}), \nu'_{h'k'l'}=s'_{12}/s'_{11},$ $\nu'_{h''k''l''}=s'_{13}/s'_{11}$. s'_{ij} 及 s_{ij} 的数值计算见文献 [3-5]. 弹性各向异性场中的弹性模量 E'_{hkl} .剪切模量 G'_{hkl} 及 Poisson 比 v'_{hkl} 的计算值见表 1. 表 1 中还列出了弹性 各向同性场中的弹性参量.

在 TiAl 中, 超位错可发生二重、三重或四重型的位 错分解、在一定条件下, 还可以发生非共面的三重或四重 型的位错分解, 对 [10ī] 超位错来讲, 在 (111) 面上的分 解为:

$$2-\text{fold} \quad [10\overline{1}] \to 1/6 < 11\overline{2} + \text{SISF} + 1/6 < 5\overline{14} \quad (4)$$

$$3 - \text{fold} \quad [10\overline{1}] \to 1/6 < 11\overline{2} + \text{SISF} + 1/6 < 2\overline{11} + \text{APB} + 1/2 < 10\overline{1} \quad (5)$$

$$4 - \text{fold} \quad [10\overline{1}] \to 1/6[11\overline{2}] + \text{SISF} + 1/6 = 10\overline{1} \quad (5)$$

 $1/6 < 2\overline{11}$ + APB + $1/6 < 11\overline{2}$ + CSF + $1/6 < 2\overline{11}$ (6)

[101] 超位错在 (111) 与 (100) 面上的非共面分解 为.

$$3 - \text{fold}$$
 [10 $\overline{1}$] $\rightarrow 1/6 < 11\overline{2}$] + SISF₍₁₁₁₎+
 $1/6 < 2\overline{11}$] + APB₍₁₀₀₎ + $1/2 < 10\overline{1}$] (7)

对 1/2< 112] 超位错来讲, 在 (111) 面上的分解为.

2 - fold $1/2 < 11\overline{2} \rightarrow 1/6 < 11\overline{2} +$ SISF $+ 1/3 < 11\overline{2}$ (8)

$$3 - \text{fold} \qquad 1/2 < 11\overline{2}] \rightarrow 1/6 < 11\overline{2}] + \text{SISF} + 1/6 < 11\overline{2}] + \text{SISF} + 1/6 < 11\overline{2}] \qquad (9)$$

其中式 (9) 中最右边的一个不全位错是由两个相邻 (111) 面上的 1/6< 211] 和 1/6< 121] 不全位错组成, 这里 近似地作为一个 (111) 面上的 1/6< 112] 不全位错来处 理 1/2< 112] 超位错在 (111) 和 (111) 面上的非共面 分解为:

$$3 - \text{fold}$$
 $1/2 < 11\overline{2} \rightarrow 1/6 < 11\overline{2} + \text{SISF}_{(111)} +$

$$1/6 < 11\overline{2} + SESF_{(\overline{1}11)} + 1/6 < 11\overline{2}$$
 (10)

这样、分位错除了受到最邻近的分位错的弹性作用

表 1 弹性各向异性 TiAl 的 (111) 平面 [hkl] 方向上的弹性模量和 Poisson 比 Table 1 Elastic moduli and Poisson's ratio in the [hkl] direction of (111) plane in anisotropic TiAl

| Тетр | Moduli and Poisson's ratio | 101 | 112 | 011 | ī2ī | 1 10 | ž 11 | Isotropy ^[6] |
|--------|-------------------------------|--------------|--------|------|--------|-------------|-------------|-------------------------|
| 300 K | $E'({ m GPa})$ | 199.55 | 190.96 | | 189.96 | 172 4 | | 182 |
| | $G'({ m GPa})$ | 61.78 | 60.21 | | 65.47 | 67 14 | | 74 |
| | ν | 0.17 | 0.05 | 0.41 | 0.23 | 0.43 | 0.01 | 0.23 |
| 1273 K | $E'(\mathrm{GPa})$ | 156 96 | 155.36 | | 147.87 | 138.34 | | 144 |
| | $G'({ m GPa})$ | 45.16 | 45.03 | | 45.45 | 45.59 | | 57 |
| | ν | 0.24 | 0.04 | 0.49 | 0.25 | 0.49 | 0.02 | 0.26 |

外、还要受到次邻近分位错的作用,因此,在计算共面组 态位错分解宽度时、采取联立方程组来求某一组分位错间 的分解宽度,在处理非共面组态的位错分解时,仅考虑径 向作用能,切向作用能的影响暂不考虑.

2 位错分解宽度的实验测定过程

选用包套锻造 Ti-46Al-8.5Nb-0.2W 和 Ti-46Al-10Nb 合金为实验材料、经 1000 C、4 h 退火后、得到平 衛显微组织.考虑变形温度影响时、分别在室温和 1000 C 进行少量压缩变形并高温淬火、固定高温变形亚结构.考 虑层片界面影响作用时、先在近 α 温度短时保温炉冷得到 层片组织、再进行少量压缩变形引入位错分解。压缩变形 速率 $\dot{\epsilon}=1\times10^{-4}\cdot s^{-1}$,压缩变形量 $\epsilon=1\%$.从变形后的试 样上切取透射电镜薄片试样、双喷减薄、在 JEM-2000CF 透射电镜上利用弱束技术 (WBTEM) 观测超位错分解宽 度、加速电压 160 kV.

3 结果及讨论

3.1 弹性各向异性的影响作用

弹性各向同性和弹性各向异性条件下、 [10] 和 1/2[112] 超位错二分分解时的位错分解宽度的计算结果 见图 1. 在弹性各向异性的情况下、超位错的分解宽度 明显小于弹性各向同性下的分解宽度.相同层错能的情况 下、弹性各向同性时螺型超位错和刃型超位错的分解宽度 之差约有 4 nm、而弹性各向异性时不足 2 nm,是各向 同性情况下的 1/2 倍. 在弹性各向同性的情况下、 [101] 和 1/2[112] 超位错的分解宽度基本相同、而在弹性各向 异性的情况下、螺型时的分解宽度基本相同、而了型时的 分解宽度则有一定的差别、约为 1 nm、并且、 [101] 超位 错的最大分解宽度出现在位错线和 Burgers 矢量的夹角 $\phi=90^\circ$ 的方向、而 1/2[112] 超位错的最大分解宽度出现



图 1 弾性各向同性和弾性各向异性下 <101]和 1/2 <112]超 位错的分解宽度随位错线和 Burgers 矢量的夹角 φ 的变 化情况

Fig.1 The variations of dissociation widths of $< 10\overline{10}$ and $1/2 < 11\overline{2}$ superdislocation with ϕ under elastic anisotropy and isotropy. 在 φ=60° 的方向.

造成这一现象的原因、我们认为、同弹性各向异性时 的剪切模量 G'_{hkl} 和 Poisson 比 ν'_{hkl} 有关. G'_{hkl} 影响 位错分解宽度的整体大小水平、而 ν'_{hkl} 则影响位错线和 Burgers 矢量成不同角度时的分解宽度的变化.

Ti-45Al-8Nb-2.5Mn-0.05B 合金中的 < 101] 型超 位错分解形成 SISF 后其宽度的 WBTEM 测量值 ^[7] 与各向同性和各向异性条件下的计算值的比较见图 2. 可 见,在各向同性的条件下,用 < 101] 型超位错的实际分解 宽度所计算出的 SISF 层错能在 40—54 mJ/m² 之间变 化、数据波动为 14 mJ/m²,而用各向异性的弹性参数对 数据重新进行分析,其 SISF 层错能在 32—37 mJ/m² 之 间变化、数据波动为 6 mJ/m². 对 Ti-46Al-10Nb 合金 中的 1/2 < 112] 型超位错的分解宽度 ^[8,9] 用同样的方法 进行分析,各向同性时 1/2 < 112] 型超位错的 SISF 层错 能在 60—74 mJ/m² 之间变化、数据波动为 14 mJ/m². 而各向异性时的 SISF 层错能在 43—49 mJ/m² 之间变 化、数据波动为 6 mJ/m². 因此、用上述弹性各向异性 的方法来评估 TiAl 中的层错能不仅可行、而且更准确、 和实际情况更相符.







3.2 分解组态的影响

图 3 和图 4 分别为 [101] 超位错发生多重共面分解 以及非共面分解时不同面缺陷下的超位错分解宽度 (由于 多重及非共面分解时的位错分解宽度计算复杂,这里仅考 虑各向同性情况).可见,发生三重和四重共面分解时,其 SISF 的宽度均小于二重分解时的宽度,且三重共面分解 时的 SISF 宽度小于三重非共面分解时的宽度.图 5 和图 6 分别为 1/2[112] 超位错的分解宽度随夹角 φ 的变化情 况.可见、发生三重共面分解时,其 SISF 的宽度小于二 重分解时的宽度, 1/2[112] 超位错在三重共面和三重非 共面分解时形成 SISF 的宽度是否变化取决于其 SISF 和



 图 3 [101] 超位错多重分解时 SISF, APB 及 CSF 的层错觉 度 d_{SISF}, d_{APB}, d_{CSF} 随 φ 的变化情况

Fig.3 The variations of d_{SISF} , d_{APB} and d_{CSF} with ϕ under multi-fold dissociations in $[10\overline{1}]$ superdislocation



图 4 [101] 超位错共面和非共面分解时 d_{SISF}, d_{APB} 分解完 度随夹角 φ 的变化

Fig.4 The variations of d_{SISF} and d_{APB} with ϕ under the coplanar and non-coplanar dissociations in [101] superdislocation

SESF 层错能数值是否相等,如果 SISF 和 SESF 层错能数值相等,则其在三重共面和三重非共面分解时的宽度相等, 从图 3 到图 6 还可以看到,不同分解组态对 [101] 超位错分解宽度的影响作用较小、而对 1/2[112] 超位错的分解宽度影响作用较大、

3.3 变形温度的影响

Ti-46Al-8,5Nb-0.2W 合金室温和 1000 ℃变形 后, < 101]型超位错分解宽度的实际测量值见图 7.图 7 中还给出了不同温度下不同层错能数值所对应的超位错 分解宽度的变化情况 (采用弹性各向异性计算).可见,室 温时其分解宽度的变化范围同 1000 ℃时分解宽度的变化 范围基本吻合、考虑到 WBTEM 对位错像的分辨率,可 以得出:温度变化对 < 101]型超位错的分解宽度几乎没 有影响.这一结论,同 Hug 等^[1]认为的温度对层错能基



图 5 1/2[112] 超位错多重分解时 d_{SISF}, d_{SESF} 随 φ 的变化

Fig.5 The variations of $d_{\rm SISF}$ and $d_{\rm SESF}$ with ϕ under multi-fold dissociations in $1/2[11\overline{2}]$ superdislocation



图 6 1/2[112] 超位错共面和非共面分解时 d_{SISP}, d_{SESF} 随 φ 的变化

Fig.6 The variations of d_{SISF} and d_{SESF} with ϕ under the coplanar and non-coplanar dissociations in $1/2[11\overline{2}]$ superdislocation

变化本没有影响的结论不一致,若按他们的观点、当温度 升高时, γ 不变,而温度升高时剪切模量 G 减小,因此, 由 $d = Gb_1b_2/\gamma$,将得出温度升高 d 减小的结论,显然, 这样的结论和传统的观点不符合,本文认为,当温度变化 时,分解宽度 d 是否变化将取决于 Gb_1b_2 和 γ 的相对 变化程度,而关于层错能的变化,Yamaguchi 等 ^[10] 及 Woodward 等 ^{11]} 学者认为可用原子间的弹性作用势, 即弹性模量参数来表征,并且,Gallagher^[12] 研究铜锌合 金时发现,温度升高时层错能将减小、减小的程度和剪切 模量 G 相同,因此,当温度升高时,层错能 γ 和剪切模量 G 将同步减小,这将得出 d 不变的结论,我们的实验结果 和这一分析结论完全一致,这一结论为测定不同温度下的 层错能提供了一种捷径、即通过代入室温下测得的分解宽 度和某一温度下的弹性常数,即可计算出该温度下的层错 能. 对本实验来讲, 其室温下的层错能为 77—81 mJ/m², 1000 ℃下的层错能为 57—60 mJ/m², 和以前的数据基 本一致 ^[13.14].

3.4 层片界面的影响

Ti-46Al-10Nb 台金室温变形后、 < 101] 型超位错 在层片界面附近的分解宽度的数据及 TEM 象分别见图 8 及图 9. 经位错消光原理和衍射斑点分析,层片界面附 近的位错为 < 101] 型超位错,层片界面为 γ/γ 真孪晶型 (详见文献 [15]).可见、距层片界面的距离为 6 nm,其分 解宽度为 5.1 nm[图 9(c)](数据的测量误差为 10%),距层 片界面的距离为 20 nm,其分解宽度为 6.1 nm[图 9(d)]. 同时、超位错在层片内的分解宽度为 8.1 nm,而在接近层 片界面时,其分解宽度明显减小 [图 9(b)].这说明位错愈 靠近层片界面,其分解宽度愈窄.这种层片界面对超位错 分解宽度的影响、除了受到层错能的影响外、作者认为还 受到层片界面处的残余应力及分位错与层片界面的弹性 交互作用的影响.有关这一问题还需进一步研究讨论.



图 7 室温和 1000 € 时 ~101] 型超位错分解宽度与 SISF 层 错能的关系

Fig.7 Relationships between SISF energy and the dissociation widths of the <101] superdislocation at room temperature and 1000 C



图 8 距层片界面不同距离处的 <101] 型超位错分解宽度





- 图 9 [101] 型超点阵位错在 γ 内部和在 γ/γ 层片界面附近处 的分解宽度
- Fig.9 The dissociation widths of [101] superdislocation (a) inside lamellar (b) and near lamellar interfaces (c, d)

4 结论

(1) 在弹性各向异性条件下、超位错的分解宽度明显 小于弹性各向同性条件下的分解宽度,并且、弹性各向异 性减小了螺型超位错和刃型超位错分解宽度的差别。

(2) 对 [101] 超位错来讲,发生三重和四重共面分解 时、其 SISF 的宽度均小于二重分解时的宽度,且三重共 面分解时的 SISF 宽度小于三重非共面分解时的宽度.而 对 1/2< 112] 超位错来讲,发生三重分解时、其 SISF 的 宽度小于二重分解时的宽度.

(3) 温度变化对 < 101] 型超位错的分解宽度几乎没 有影响,显示了剪切模量和层错能随温度变化而具有相同 的变化方向和幅值.

(4) γ/γ 层片界面对超位错分解宽度也有一定的影响 作用. 位错分解位置愈靠近 γ/γ 层片界面、分解宽度就 愈窄.

参考文献

- [1] Hug G, Loiseau A, Veyssiere P. Philos Mag A, 1998; 57: 499
- [2] Yoo M H, Fu C L. In: Stoloff N S, Jones R H eds, Role of Interfaces in Deformation and Fracture: Trianium Aluminides, Processing and Design Issues in High Tempera-

ture Materials, Warrendale: MTS; 1997: 57

- [3] Bisplinghoff R L, Mar J W, Piau T H H. Statics of Deformable Solids. MA: Addisou-Wesley Publishing Company Inc, 1965: 7
- [4] Auld B A. Acoustic Fields and Waves in Solids. New York: John Wiley and Sons Inc, 1973: 1
- [5] Cheu H S. Anisotropy in Metals. Beijing: Metallurgy ludustry Publisher, 1996. 1
 (陈洪荪. 金属的弹性各向异性 北京: 冶金工业出版社、1996: 1)
- [6] Yoo M H, Fu C L. Metall Mater Tran A, 1998; 29A: 49
- [7] Zhang L C, Cheu G L, Wang J G, Ye H Q, Mater Sci Eng A, 1998; 247A: 1
- [8] Zhang W J, Liu Z C, Chen G L, Kim Y W. Mater Sci Eng A, 1999; 271A: 416
- [9] Song X P, Chen G L. J Mater Sci Lett, 2001; 20: 6590
- [10] Yamaguchi M, Umakoshi Y Pro Mater Sci, 1990; 34: 1
- [11] Woodward C, MacLaren J M, Rao S. J Mater Res, 1992;
 7: 1735
- [12] Gallacher P C J Metall Tran, 1970: 1: 2429
- [13] Zhang L C. D Thesis, Univ Sci Technology of Beijing. 1999

〈张立春 北京科技大学博士论文、 1999〉

- [14] Zhang W J. Appel F. Acta Metall Mater. in press
- [15] Song X P. Study Report of Postdoctoral Fellowship, Univ Sci Technology of Beijing, 2001
 (宋西平,北京科技大学博士后出站报告, 2001)