

# 剪切应力对 Ti-6Al-4V 合金 $\alpha$ 相形核及微织构形成的影响

张金虎<sup>1</sup>, 徐东生<sup>1</sup>, 滕春禹<sup>2</sup>, 王 峰<sup>1</sup>, 李学雄<sup>1</sup>, 孙 佳<sup>1</sup>, 杨 锐<sup>1</sup>

(1. 中国科学院金属研究所, 辽宁 沈阳 110016)

(2. 中国航空综合技术研究所, 北京 100028)

**摘 要:** 采用相场动力学方法模拟 Ti-6Al-4V 合金中  $\beta \rightarrow \alpha$  转变过程, 研究钛合金中不同方向的外加剪切应力对  $\alpha$  析出相变体形核及微织构形成的影响。模型输入数据来自 Pandat 热力学与动力学数据库及 JmatPro (TTT-Ti)。选取  $x[101]-y[\bar{1}2\bar{1}]-z[\bar{1}11]_{\beta}$  坐标系, 保持时效温度不变, 分别沿  $(101)[\bar{1}11]_{\beta}$  或  $(12\bar{1})[\bar{1}11]_{\beta}$  施加不同大小(10、30 及 50 MPa)的正反向切应力, 考察剪切加载对合金微观组织演化的影响。结果表明: 过冷度一定时, 随剪切应力增大, 析出变体与剪切应力之间的弹性相互作用在相变过程中逐渐起主要作用, 对  $\alpha$  相变体的选择作用逐渐增强; 应力大小一定时, 切应力对变体选择的作用强于正应力; 沿  $(101)[\bar{1}11]_{\beta}$  或  $(12\bar{1})[\bar{1}11]_{\beta}$  方向外加剪切应力, 正向切应力分别促进 2 种与 1 种  $\alpha$  变体的选择, 而反向切应力均主要选择 1 种  $\alpha$  变体。因而, 在  $\beta$  向  $\alpha$  转变过程中, 切应力更有利于  $\alpha$  相微织构的形成。

**关键词:** 切应力; 微织构; 相场模拟

中图分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2020)03-0939-05

钛合金由于其多层次的复杂微观组织而具有优异的力学性能, 广泛应用于航空航天、化工及生物医用等领域, 其多种多样的组织主要来源于不同热加工条件下的形变与相变耦合过程<sup>[1,2]</sup>。通常, 高温变形下的  $\beta \rightarrow \alpha$  相变是钛合金组织形成的关键, 相变时  $\beta$  与  $\alpha$  之间满足 Burgers 取向关系(BOR), 即  $\{101\}_{\beta} \parallel \{0001\}_{\alpha}$ ,  $\langle \bar{1}11 \rangle_{\beta} \parallel \langle \bar{2}110 \rangle_{\alpha}$ <sup>[3]</sup>。考虑到 BOR 以及两相晶体对称性, 在一个原始  $\beta$  晶粒内可以形成 12 种不同晶体学取向的  $\alpha$  变体<sup>[4]</sup>。

一般地, 热机械加工过程中伴随  $\beta \rightarrow \alpha$  转变同时, 外应力及残余应力等因素可诱发  $\alpha$  相的变体选择现象<sup>[5,6]</sup>, 进而导致  $\alpha$  相转变织构的形成<sup>[7,8]</sup>。强烈的织构甚至可能会引起“宏区”<sup>[8]</sup>, 其出现会大幅降低合金的疲劳与蠕变性能<sup>[9,10]</sup>。然而, 仅仅依靠实验方法, 热加工过程中复杂的应力状态对微观组织的影响难以搞清。借助计算机模拟将复杂的热-力耦合过程分解开来, 弄清楚热加工条件与形变及相变织构的内在关联, 对热加工工艺的选择与优化, 进而调控钛合金的力学性能具有重要意义。充分利用介观模拟手段, 发挥超级计算的作用, 将为解决钛合金热加工过程中的难题

带来新契机<sup>[11]</sup>。

本研究借助相场动力学方法研究外加切应力下, Ti-6Al-4V (TC4)合金  $\beta \rightarrow \alpha$  相变过程中形核及微织构形成演化的过程。探讨外加切应力对  $\alpha$  相变微织构强度的影响, 并揭示该条件下变体选择的形成机理。

## 1 相场方法

首先对 TC4 合金中  $\beta \rightarrow \alpha$  相变过程建立相场模型。设置 2 个浓度场变量  $X_k$  ( $k = \text{Al}, \text{V}$ ) 来描述溶质浓度以及 12 个结构场变量  $\phi_p$  ( $p = 1, \dots, 12$ ) 表征 12 种不同取向的  $\alpha$  相变体。体系总能量表达为<sup>[12]</sup>:

$$F = \frac{1}{V_m} \int_V \left[ G_m(T, X_k, \phi_p) + \frac{\kappa_p}{2} \sum_p |\nabla \phi_p|^2 \right] dV + E^{\text{el}} \quad (1)$$

式中,  $V_m$  为摩尔体积,  $V$  是系统总体积,  $G_m$  为局域摩尔化学自由能函数, 自由能数据来源于 Pandat 热力学数据库。 $\kappa_p$  为结构场变量梯度项系数张量,  $E^{\text{el}}$  为体系的弹性应变能<sup>[13]</sup>。需要注意的是, 考虑到外加切应力(应变)的影响,  $E^{\text{el}}$  项具体的表达形式为<sup>[14]</sup>:

收稿日期: 2019-03-15

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2016YFB0701304); 中国科学院战略先导科技专项项目 (XDC01040100); 中国科学院信息化专项项目 (XXH13506-304); 辽宁省博士启动基金 (20180540133)

作者简介: 张金虎, 男, 1984 年生, 博士, 中国科学院金属研究所, 辽宁 沈阳 110016, 电话: 024-23971946, E-mail: jinhuzhang@imr.ac.cn

$$E^{cl} = \frac{1}{2} \sum_{p,q=1}^N \int \frac{dg}{(2\pi)^3} B_{pq}(n) \tilde{\phi}_p(g) \tilde{\phi}_q(g)^* + \frac{V}{2} C_{ijkl}^0 \bar{\varepsilon}_{ij}^{appl} \bar{\varepsilon}_{kl}^{appl} - \bar{\varepsilon}_{ij}^{appl} \int dr C_{ijkl}^0 \varepsilon_{kl}^T(r) \quad (2)$$

$$B_{pq}(n) = \begin{cases} C_{ijkl}^0 \varepsilon_{ij}^{p0} \varepsilon_{kl}^{q0}, & g = 0 \\ C_{ijkl}^0 \varepsilon_{ij}^{p0} \varepsilon_{kl}^{q0} - n_i \sigma_{ij}^{p0} \Omega_{jk}(n) \sigma_{kl}^{q0} n_l, & g \neq 0 \end{cases} \quad (3)$$

公式(2)与(3)中的变量含义同先前的工作<sup>[13]</sup>一致。外加切应力对体系的作用通过在弹性应变能公式中加入相应的切应力在体系里所产生的宏观均匀应变的方式实现。无外力作用时，系统没有宏观的均匀应变，即  $\bar{\varepsilon}_{ij}^{appl}=0$ ；外加切应力时，系统首先受到外力的作用，产生宏观变形  $\bar{\varepsilon}_{ij}^{appl}$ ，然后将边界固定不动，随后在该体系中发生相变。因此，可以通过给定  $\bar{\varepsilon}_{ij}^{appl}$  取合适的数值来研究外加切应力对合金相变时微观组织演化的影响<sup>[15]</sup>。

合金组织演化过程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，即<sup>[16]</sup>：

$$\frac{\partial \phi_p}{\partial t} = -L_\phi \frac{\delta F}{\delta \phi_p} + \xi_p(r,t) \quad (4)$$

$$\frac{1}{V_m^2} \frac{\partial X_k}{\partial t} = \nabla \sum_{j=1}^{n-1} M_{kj}(T, X_i, \phi_p) \nabla \frac{\delta F}{\delta X_j} + \zeta_k(r,t) \quad (5)$$

式中， $L$  为场变量动力学系数， $M_{kj}$  为化学迁移率，

迁移率来自相应动力学数据库。 $\xi_p(r,t)$  与  $\zeta_k(r,t)$  均为 Langevin 噪声项，扰动幅度及形核所占体积分数依据 JmatPro (TTT-Ti) 来设置。在本研究相场模拟中，体系大小设置为  $100 \times 100 \times 100$  grids，采用周期性边界条件，网格  $l_0=0.0125 \mu\text{m}$ ， $dt=0.01$ ， $dx=1.0$ 。 $\alpha$  相变体尖端，阔面以及侧面的界面能分别采用  $300$ 、 $150$  以及  $230 \text{ mJ/m}^2$ <sup>[14]</sup>。其余模拟参数均与先前的工作基本一致<sup>[13]</sup>。另外，为了方便描述外加切应力的具体载荷取向，本研究中引入直角坐标系  $N$ ： $x/[101]_\beta$ ， $y/[1\bar{2}1]_\beta$ ， $z/[\bar{1}11]_\beta$ 。

## 2 结果与讨论

### 2.1 沿(101)[ $\bar{1}11$ ] $_\beta$ 外加切应力对相变织构形成的影响

本节考虑沿(101)[ $\bar{1}11$ ] $_\beta$  方向施加切应力时，不同应力方向及大小对 TC4 合金组织中各  $\alpha$  相变体体积分数的影响。在固定体系的边界之前先引入宏观均匀应变变量  $\bar{\varepsilon}_{ij}^{appl}$ ，见式(2)。外加正向和反向切应力时，大小分别为  $10$ 、 $30$  及  $50 \text{ MPa}$ 。当  $\sigma_{xz}^{appl} = \sigma_{zx}^{appl} = 10 \text{ MPa}$  时，所对应的切应变分量为  $\bar{\varepsilon}_{xz}^{appl} = \bar{\varepsilon}_{zx}^{appl} = 0.9778 \times 10^{-3}$ ， $\bar{\varepsilon}_{xy}^{appl} = \bar{\varepsilon}_{yx}^{appl} = -0.5028 \times 10^{-3}$ ；在外加切应力为  $30$  与  $50 \text{ MPa}$  的情况下，所对应的应变分量分别为以上应变值的  $3$  倍与  $5$  倍。采用前面介绍过的坐标系框架  $N$ ，模拟结果如图 1 所示。

图 1a 和 1b 分别为  $1073 \text{ K}$  下，沿(101)[ $\bar{1}11$ ] $_\beta$  施加  $10 \text{ MPa}$  正向切应力，在  $\tau=1.0 \times 10^4$  时合金的微观组织

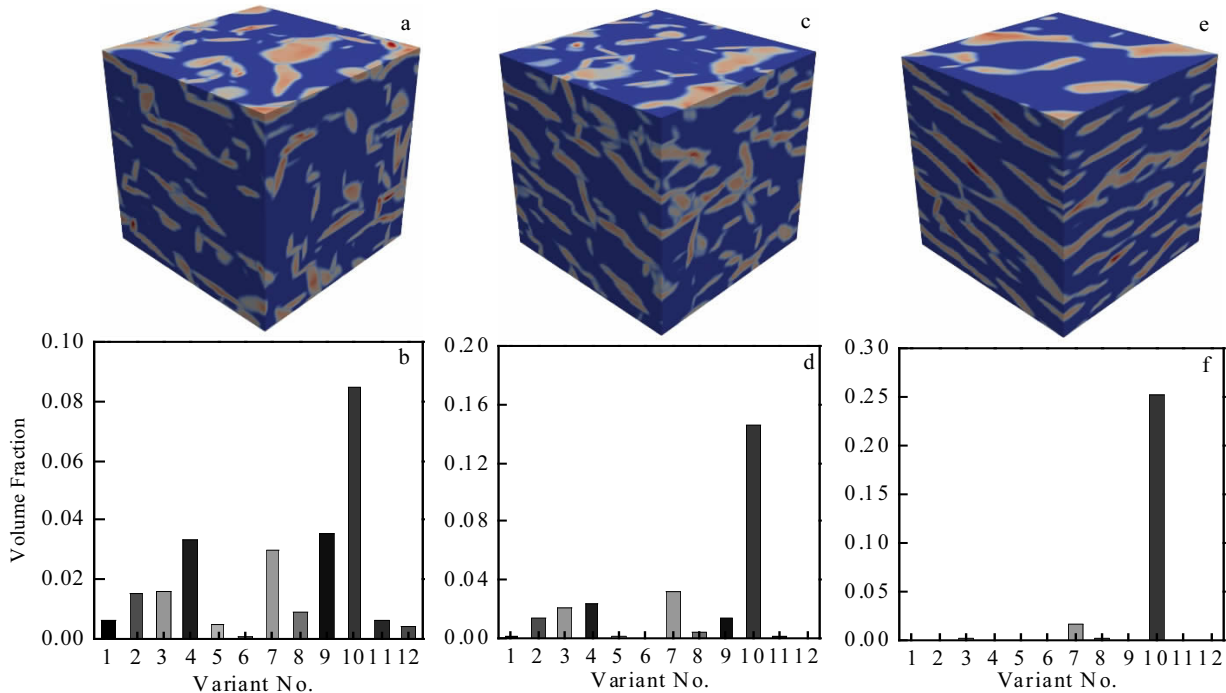


图 1 1073 K 时，沿(101)[ $\bar{1}11$ ] $_\beta$  外加正向切应力时  $\alpha$  相析出形貌及对  $\alpha$  相变体分数的影响

Fig.1 Morphologies (a, c, e) of  $\alpha$  precipitates and volume fractions (b, d, f) of all the variants at  $\tau=1.0 \times 10^4$  under different shear stress of  $10 \text{ MPa}$  (a, b),  $30 \text{ MPa}$  (c, d) and  $50 \text{ MPa}$  (e, f), when shear stress along  $(101)[\bar{1}11]_\beta$ , temperature is  $1073 \text{ K}$

及  $\alpha$  相各变体的分数。由图 1a 可见, 组织中出现近乎“平行”排列、“V”型等  $\alpha$  相片层, 这是因为此时变体选择作用较弱, 析出变体种类较多, 以 V7/V10、V4 与 V9 变体为主, 见图 1b。当施加的正向切应力增加至 30 MPa 时, 组织中“平行”排列的  $\alpha$  相片层逐渐增加, 片层尺寸随之增大, 而交织呈“V”形的变体减少, 如图 1c 所示。此时, V7 与 V10 为主要析出变体, 见图 1d。注意到 V7/V10 及 V2/V3 2 种变体间惯习面法线方向夹角呈  $8^\circ$ 。随着外加正向切应力继续增大至 50 MPa, 见图 1e、1f, 组织基本由单一种类变体 V10 组成, 而其余变体受到进一步抑制, 组织内  $\alpha$  相微结构逐渐形成。

对体系沿  $(101)[\bar{1}11]_\beta$  方向外加反向切应力 10、30 及 50 MPa 时, 随着应力增大, 单一变体 V12 占据主导。外加切应力较小(10 MPa)时, 变体之间的弹性相互作用起重要作用, 近乎“平行”排列的变体 V7/V10/V12, V2/V3/V6 可以极大地弛豫体系的应变能<sup>[17]</sup>, 而当外加应力增大时, 外加应力同变体间的相互作用开始占据主导作用这些与前面工作中关于外加正应力的计算结果类似, 见 2.3 节中对这些相互作用的分析。

### 2.2 沿 $(12\bar{1})[\bar{1}11]_\beta$ 施加切应力对相变织构形成的影响

本节研究对体系沿  $(12\bar{1})[\bar{1}11]_\beta$  施加正向切应力时应力大小对  $\alpha$  析出相变体选择的影响, 结果如图 2 所示。当  $\sigma_{yz}^{appl} = \sigma_{zy}^{appl} = 10$  MPa 时, 所对应的主应变为  $\bar{\epsilon}_{xx}^{appl} = -0.2514 \times 10^{-3}$ ,  $\bar{\epsilon}_{yy}^{appl} = 0.2514 \times 10^{-3}$ , 切应变为  $\bar{\epsilon}_{yz}^{appl} = \bar{\epsilon}_{zy}^{appl} = 0.9778 \times 10^{-3}$ 。

从图 2a 可见, 与图 1a 类似, 组织中出现“平行”及“V”型  $\alpha$  相片层, 且片层尺寸较小。不同的是, 该条件下主要选择 2 种  $\alpha$  变体, V10 与 V12。由前节可知, 这 2 种变体的惯习面法线夹角为  $8^\circ$  且这种变体团簇可有效地弛豫体系的应变能。

随着外应力增大, 体系对变体 V10 与 V12 的选择作用逐渐增强, 该 2 种变体的分数可达  $\sim 0.12$ 。而对其余变体生长的抑制作用更为明显, 见图 2c 与 2d。当外加正向切应力进一步增加至 50 MPa 时, 合金组织基本由 V10 及 V12 2 种变体组成, 呈现“平行”组织形貌。此时, 合金中  $\alpha$  相总的体积分数约为 0.32。同 2.1 节结果, 随着外加切应力的增加, 其促进  $\alpha$  相形核率的提高, 使变体选择更为明显, 容易形成  $\alpha$  相微结构。若对体系沿  $(12\bar{1})[\bar{1}11]_\beta$  方向外加反向切应力 10、30 及 50 MPa 时, 随着外加应力增大, 变体 V7 则占据主导, 此时则对单一变体进行选择。

综上, 由于相变过程包含了原子的剪切与移动, 在适当的方向上外加切应力可以促进相变的发生。模拟可见, 随着沿  $(101)[\bar{1}11]_\beta$  或  $(12\bar{1})[\bar{1}11]_\beta$  方向外的加切应力增大, 正向切应力分别促进选择 2 种与 1 种  $\alpha$  变体, 而反向切应力均趋于选择一种  $\alpha$  变体。而在前面工作中<sup>[18]</sup>, 沿不同方向施加正应力时, 相对于外加切应力, 则变体选择种类较多。因此, 同等强度下的剪切应力对变体选择的作用强于正应力。

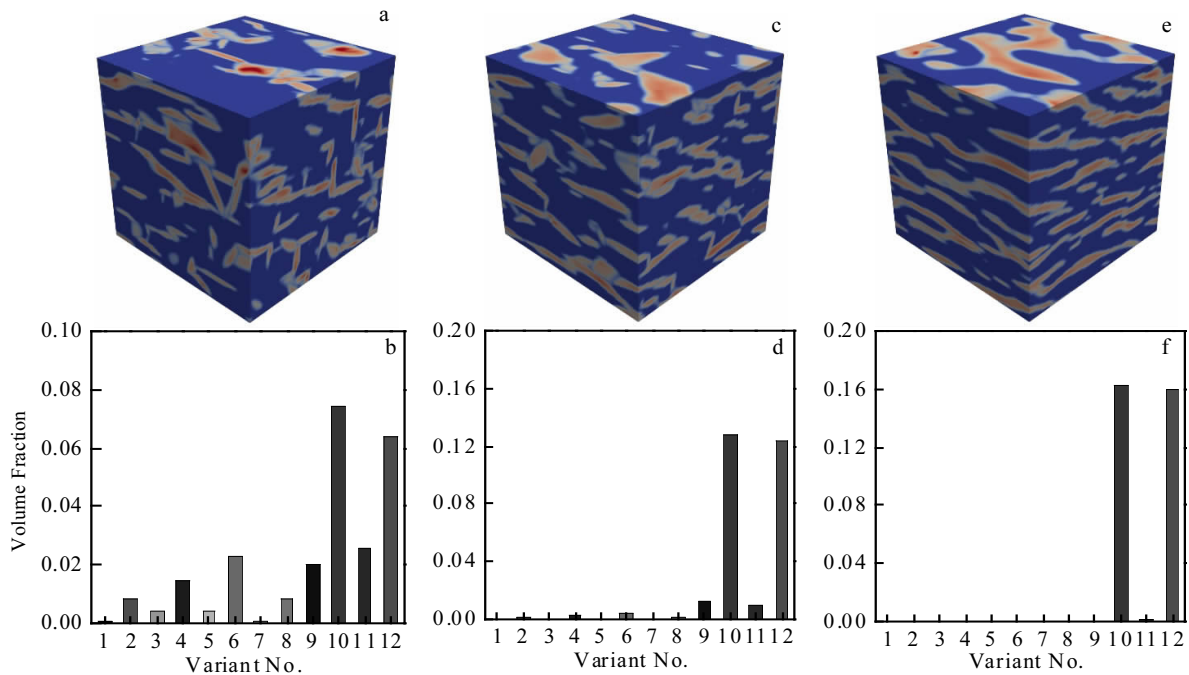


图 2 1073 K 时沿  $(12\bar{1})[\bar{1}11]_\beta$  外加不同正向切应力的形貌及应力大小对  $\alpha$  相变体分数的影响

Fig.2 Morphologies of  $\alpha$  precipitates (a, c, e) and volume fractions of all variants (b, d, f) at  $\tau=1.0 \times 10^4$  under different shear stress of (a, b) 10 MPa, (c, d) 30 MPa, and (e, f) 50 MPa along  $(12\bar{1})[\bar{1}11]_\beta$  at 1073 K

### 2.3 外加切应力与 $\alpha$ 相变体相互作用能计算

计算外加切应力与不同  $\alpha$  变体间的相互作用能是一种快速而且准确的预测变体选择的方法<sup>[13]</sup>。在应变控制条件下, 可将外加切应力对  $\alpha$  相析出驱动力的贡献估量为对应的外加均匀应变与每个  $\alpha$  相变体相变应变之间的相互作用能, 即表示为<sup>[19, 20]</sup>:

$$E_p^{int} = -\bar{\varepsilon}_{ij}^{app} C_{ijkl}^0 \varepsilon_{kl}^{p0} \quad (6)$$

式中,  $\varepsilon_{kl}^{p0}$  为  $\alpha$  相第  $p$  个变体的无应力应变。由于外加切应力与每一种  $\alpha$  变体的相互作用能不同, 可以促进或抑制某种  $\alpha$  变体的形核与生长。具体表现为: 相互作用能为负值, 降低了变体周围的弹性应变能, 可促进某种变体优先形核与生长; 相反, 具有正相互作用能的某种变体的形核与生长将被抑制。导致各种  $\alpha$  相变体不等概率的出现, 进而诱发  $\alpha$  相变织构。本节针对沿(101)[ $\bar{1}11$ ] $_{\beta}$ 或(12 $\bar{1}$ )[ $\bar{1}11$ ] $_{\beta}$ 外加 50 MPa 正向切应力时, 其与各种变体的相互作用能进行了计算, 其结果如图 3 所示。

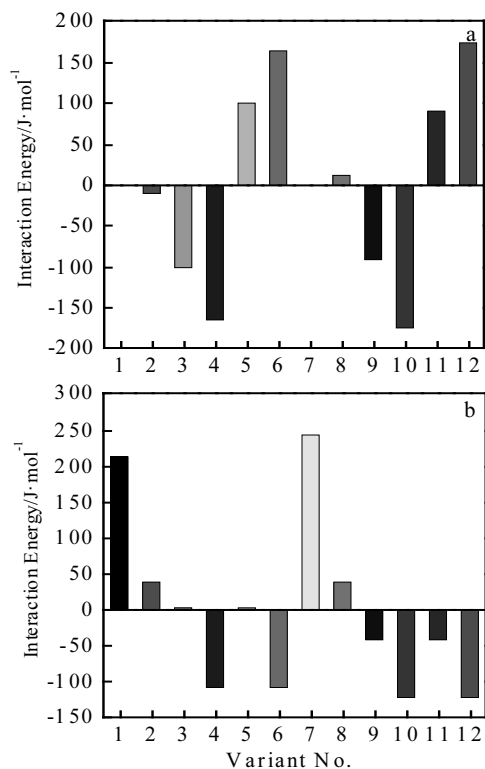


图 3 沿(101)[ $\bar{1}11$ ] $_{\beta}$ 或(12 $\bar{1}$ )[ $\bar{1}11$ ] $_{\beta}$ 方向外加 50 MPa 正向切应力时, 外加均匀应变与每种变体之间的弹性相互作用能

Fig.3 Elastic interaction energy between the applied homogeneous strain and each variant under 50 MPa positive shear along (101) [ $\bar{1}11$ ] $_{\beta}$  (a) or (12 $\bar{1}$ ) [ $\bar{1}11$ ] $_{\beta}$  (b)

对应于 10、30 MPa 切应力情况下的相互作用能并没有在本节中展示, 由于它们与图 3 中的结果表现出相同的趋势, 只是其相互作用能数值更小。由上述可见, 相场模拟结果同上图中相互作用能计算结果基本一致。

### 3 结 论

1) 过冷度一定条件下, 随外加切应力增大, 其与变体之间的弹性相互作用在相变过程中逐渐起主要作用, 因而对  $\alpha$  变体的选择作用逐渐增强; 应力幅度一定时, 切应力对变体选择的作用强于正应力。

2) 沿(101)[ $\bar{1}11$ ] $_{\beta}$ 或(12 $\bar{1}$ )[ $\bar{1}11$ ] $_{\beta}$ 方向外加切应力, 随应力增大, 正向切应力分别促进选择 2 种或 1 种  $\alpha$  变体, 而反向切应力均趋向选择 1 种  $\alpha$  变体。对于  $\beta \rightarrow \alpha$  转变时, 与正应力相比, 切应力更有利于  $\alpha$  相微织构的形成。

#### 参考文献 References

[1] Banerjee D, Williams J C. *Acta Materialia*[J], 2013, 61(3): 844

[2] Xu Dongsheng, Wang Hao, Zhang Jinhu *et al. Handbook of Materials Modeling*[M]. Cham: Springer, 2019

[3] Burgers W G. *Physica* [J], 1934, 1(7-12): 561

[4] Zhao Zibo, Wang Qingjiang, Wang Hao *et al. Journal of Applied Crystallography*[J], 2018, 51(4): 1125

[5] Glavicic M, Goetz R, Barker D *et al. Metallurgical and Materials Transactions A* [J], 2008, 39(4): 887

[6] Bate P, Hutchinson B. *Acta Materialia*[J], 2000, 48(12): 3183

[7] Zhao Zibo, Wang Qingjiang, Hu Qingmiao *et al. Acta Materialia* [J], 2017, 126: 372

[8] Germain L, Gey N, Humbert M *et al. Acta Materialia*[J], 2008, 56(16): 4298

[9] Germain L, Gey N, Humbert M *et al. Acta Materialia*[J], 2005, 53(13): 3535

[10] Humbert M, Germain L, Gey N *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2006, 430(1-2): 157

[11] Xu Dongsheng, Wang Hao, Teng Chunyu *et al. E-Science Technology & Application*[J], 2015, 6(3): 14

[12] Zhang Jinhu(张金虎), Xu Dongsheng(徐东生), Wang Yunzhi(王云志) *et al. Acta Metallurgica Sinica(金属学报)*[J], 2016, 52(8): 905

[13] Zhang Jinhu(张金虎), Teng Chunyu(滕春禹), Yang Mei(杨梅) *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals(中国有色金属学报)*[J], 2013, 23(S1): s296

[14] Shi Rongpei, Wang Yunzhi. *Acta Materialia*[J], 2013, 61(16): 6006

- [15] Shen Chen, Simmons J P, Wang Yunzhi. *Acta Materialia*[J], 2006, 54(20): 5617
- [16] Huang Sensen, Zhang Jinhu, Ma Yingjie *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2019, 791: 575
- [17] Wang Shuncai, Aindow M, Starink M J. *Acta Materialia*[J], 2003, 51(9): 2485
- [18] Zhang Jinhu(张金虎), Xu Dongsheng(徐东生), Teng Chunyu(滕春禹) *et al. Proceedings of the 16th National Conference on Titanium and Titanium Alloys*(第十六届全国钛及钛合金学术交流会论文集)[C]. Xi'an: China Nonferrous Metals Society, 2016
- [19] Yeddu H K, Malik A, Ågren J *et al. Acta Materialia*[J], 2012, 60(4): 1538
- [20] Teng Chunyu, Du An, Xu Dongsheng *et al. Intermetallics*[J], 2015, 65: 1

## Influences of Applied Shear Stress on the Nucleation and Micro-texture Formation of $\alpha$ Phase in Ti-6Al-4V Alloy

Zhang Jinhu<sup>1</sup>, Xu Dongsheng<sup>1</sup>, Teng Chunyu<sup>2</sup>, Wang Hao<sup>1</sup>, Li Xuexiong<sup>1</sup>, Sun Jia<sup>1</sup>, Yang Rui<sup>1</sup>

(1. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

(2. AVIC China Aero-Polytechnology Establishment, Beijing 100028, China)

**Abstract:** Influences of applied shear stress on the nucleation process and micro-texture formation of  $\alpha$  precipitates,  $\beta \rightarrow \alpha$  transformation in Ti-6Al-4V alloy were simulated by phase field method with Pandat software and JmatPro (TTT-Ti) databases as direct input in the model. The effects of applied positive and negative shear stresses (10, 30 and 50 MPa) along  $(101) [\bar{1}11]_{\beta}$  or  $(12\bar{1}) [\bar{1}11]_{\beta}$  on the microstructure evolution of Ti-6Al-4V alloy were explored at certain aging temperature. The results show that with the increase of shear stress, the elastic interaction between applied stress and  $\alpha$  variants gradually plays more significant role in determining the microstructure of the system under certain undercooling; therefore, the selection of  $\alpha$  variants is gradually enhanced. It is found that the shear stress has a stronger effect on the variant selection than the normal stress, and thus it may be more effective in microtexture formation. With the increase of shear stress, two or one type of variant are selected under positive shear, and one type of variant is favored by the negative shear along  $(101) [\bar{1}11]_{\beta}$  or  $(12\bar{1}) [\bar{1}11]_{\beta}$ .

**Key words:** applied shear stress; micro-texture; phase field simulation

---

Corresponding author: Xu Dongsheng, Ph. D., Professor, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, P. R. China, Tel: 0086-24-23971946, E-mail: dsxu@imr.ac.cn