

镍基单晶高温合金沉淀相尺度效应研究

王佰智, 温志勋, 刘大顺, 岳珠峰

(西北工业大学, 陕西 西安 710129)

摘要: 对 Ni₃Al (γ') 沉淀相尺寸对镍基单晶高温合金拉伸性能的影响进行了研究。对镍基单晶高温合金而言, 材料的屈服来源于位错以 Orowan 机制绕过沉淀相, 而 Orowan 应力与沉淀相间距有关。根据这一机理, 基于晶体塑性理论, 引入一个本构方程以表征沉淀相尺寸对镍基单晶高温合金屈服强度的影响。采用该本构模型, 分别计算了在 [001] 以及 [111] 2 个取向, 含有尺寸为 0.2~2.5 μm 沉淀相的镍基单晶高温合金屈服强度, 并与试验结果进行了对比验证。结果表明, 该模型可以准确表征镍基单晶高温合金沉淀相的尺度效应。

关键词: 镍基单晶高温合金; 本构模型; Orowan 应力; 晶体塑性; 尺度效应

中图分类号: TG146.1⁺5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2015)11-2747-04

镍基单晶高温合金具有出色的高温性能, 成为航空发动机热端部件的重要材料。这种材料的微观结构由 γ 相以及 γ' 沉淀相构成, 通过固溶+时效处理, 立方形的 Ni₃Al(γ') 沉淀相均匀弥散地分布于 Ni 基体相 (γ) 中^[1]。镍基单晶材料的优异性能主要归因于 γ' 沉淀相的强化作用。已有大量研究表明, γ' 相的尺寸对镍基单晶材料的性能有很大的影响, 即存在明显的尺度效应。Shah 在对含不同尺寸 γ' 沉淀相的 PWA1480 的拉伸试验中发现, 随着沉淀相尺寸的增加, 材料的屈服应力逐渐降低^[2]。Busso 与 Choi 分别采用单胞有限元模型对 CMSX-4 镍基单晶材料的尺度效应进行了计算^[3-5]。以上单胞模型均包含一个弹性立方沉淀相以及包裹在沉淀相周围的粘塑性基体相。在上述基体相的材料本构模型中, 都引入了应变梯度以考虑尺度效应的影响。但由于将应变梯度引入单胞模型的有限元分析中, 极大地增加了本构模型的复杂性, 并严重降低了计算效率。Arzt 对金属材料中由位错与微观结构交互作用而导致的尺度效应进行了综述性研究^[6]。Fedelich 等人认为 Orowan 应力为镍基单晶材料产生塑性变形的临界应力^[7,8]。Svoboda 以及 Kuttner 等人采用 Orowan 应力模型计算了镍基单晶高温合金产生的临界屈服应力^[9,10]。Ting 建立了一个在沉淀相与基体相之间含有过渡层的单胞模型以考虑位错密度对尺度效应的影响, 并分别研究了 Orowan 应力与应变梯度对镍基单晶高温合金拉伸性能的影响, 指出应变梯度的影响仅在材料发生较大塑性变

形 (>5%) 时才会表现的较为明显, Orowan 机制是影响材料屈服强度的主要因素^[11]。由于 Orowan 应力引入了表示基体相尺度的控制因子, 因此采用该模型, 可以对含有不同尺寸沉淀相的镍基单晶屈服应力进行预测。

本研究结合 Orowan 应力, 引入一个适用于描述镍基单晶高温合金沉淀相尺度效应的本构模型, 采用该模型分别对 [001] 以及 [111] 取向, 含不同尺寸沉淀相的镍基单晶高温合金拉伸性能进行了预测, 并与试验数据进行了对比。结果表明, 该模型可以准确的模拟镍基单晶高温合金材料的尺度效应。

1 镍基单晶高温合金的材料尺度效应

镍基单晶高温合金微观组织结构如图 1 所示, 立方形的 γ' 沉淀相规则地分布在 γ 基体相中。 γ' 沉淀相的数量是高温合金强化的根本保证, γ' 沉淀相的体积分数越高, 强化效果越好, 强度越高, 当前最好的高温合金 γ' 沉淀相体积分数可以达到 65%~70%^[1]。当 γ' 沉淀相数量一定时, γ' 沉淀相的尺寸也对材料的性能有很大影响。

对于大多数镍基单晶高温合金, 沉淀相尺寸一般为 500 nm, 基体通道的宽度一般为 60 nm。通过不同的热处理条件, 可以得到不同尺寸的 γ' 沉淀相。Duhl 对 γ' 沉淀相体积含量相同, 尺寸为 0.3~3 μm 的 PWA1480 单晶材料的单轴拉伸试验中发现, γ' 沉淀相尺寸对材料的屈服强度影响很大: 其屈服强度均随着

收稿日期: 2014-11-15

基金项目: 国家自然科学基金 (51375388, 51210008)

作者简介: 王佰智, 男, 1985 年生, 博士生, 西北工业大学工程力学系, 陕西 西安 710129, 电话: 029-88431002, E-mail: wbz@mail.nwpu.edu.cn

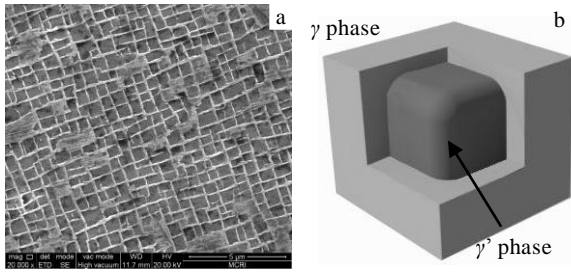


图 1 镍基单晶高温合金微观组织结构及沉淀相示意图
Fig.1 Microstructure of nickel-base SC superalloys (a) and illustration of precipitate phase (b)

沉淀相尺寸的增大而降低。其试验结果如表 1 所示，无论在[001]取向还是[111]取向下，PWA1480 材料的屈服强度均随着 γ' 沉淀相尺寸的增大而降低。

沉淀相的强化作用主要来源于其对位错的阻滞作用。当位错与沉淀强化相产生交互作用时，位错受外力作用在沉淀相之间弓出，如图 2 所示，这是沉淀相的主要强化机理。当产生塑性变形时，长程位错必须要越过沉淀相以克服其对位错运动的阻滞作用，这就是 Orowan 机制。对一般工程材料而言（沉淀相间距为 10~1000 nm），越过障碍所需的应力（Orowan 应力）与沉淀相间距成反比，即

$$\tau^{or} \propto \frac{\mu b}{d} \quad (1)$$

其中， μ 为剪切模量， b 为伯格矢量长度， d 沉淀相之间的距离。

表 1 不同沉淀相尺寸的 PWA1480 镍基单晶材料屈服强度
Table 1 Yield strength of PWA1480 in [001] and [111] orientations at room temperature with different γ' sizes

γ' size/ μm	σ_y [001]/MPa	σ_y [111]/MPa
0.3	1079	1400
0.5	974	1253
0.7	877	-
1.8	731	995

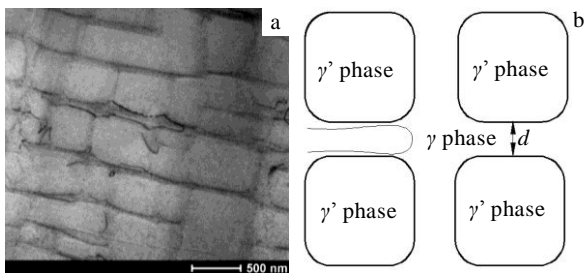


图 2 基体相中位错弓出越过沉淀相

Fig.2 Dislocations forced to bend through matrix phase: (a) TEM, foil normal (001) and (b) schematic diagram

对镍基单晶高温合金而言，材料的屈服主要源于位错以 Orowan 机制绕过沉淀相，公式(1)可以很好的反映出沉淀相尺寸对镍基单晶高温合金流动应力的影响。因此，为模拟计算镍基单晶高温合金的沉淀相尺度效应。

2 粘塑性本构模型

在镍基单晶高温合金的塑形变形过程中，位错主要在基体相中沿八面体滑移系{111}(110)滑移。该材料共有 12 个八面体滑移系，滑移系的分切应力与宏观应力之间的关系可以表示为：

$$\tau^\alpha = \sigma : P^\alpha \quad (2)$$

其中， τ^α 为各滑移系的分切应力； σ 为晶轴系下的应力张量； P^α 为取向因子，可以表示为：

$$P^\alpha = \frac{1}{2} \left[m^{(\alpha)} (n^{(\alpha)})^T + n^{(\alpha)} (m^{(\alpha)})^T \right] \quad (3)$$

其中 m 和 n 分别表示滑移面法向以及滑移方向。

总应变可以表示为：

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^p \quad (4)$$

滑移系分切应变与宏观应变之间的关系可表示为：

$$\varepsilon^p = \sum \gamma^{(\alpha)} P^{(\alpha)} \quad (5)$$

结合 Orowan 机制，镍基单晶高温合金本构模型采用以下粘塑性表达式：

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} \left\{ \frac{|\tau^{(\alpha)}|}{g^{(\alpha)}} \right\}^{1/m} \left\{ 1 - \exp \left(- \frac{|\tau^{(\alpha)}|}{\tau^{or}} \right) \right\}^n \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \quad (6)$$

式中， \dot{a} 为参考滑移率； $g^{(\alpha)}$ 表示滑移阻力； τ^{or} 表示 Orowan 应力，根据文献[12]，

$$\tau^{or} = \alpha^{or} \frac{\mu b}{d} \quad (7)$$

式中， α^{or} 为常量。

公式(6)的物理意义为，滑移阻力 $g^{(\alpha)}$ 与 Orowan 应力 τ^{or} 共同控制材料的塑性切应变。当切应力 $\tau^{(\alpha)} > \tau^{or}$ 时，位错线进入基体通道，如果切应力 $\tau^{(\alpha)}$ 同时也大于滑移阻力 $g^{(\alpha)}$ ，则基体内可以继续产生滑移变形。由公式(7)可知，Orowan 应力 τ^{or} 与沉淀相间距 d 成反比，对于镍基单晶材料而言， τ^{or} 一般高于其基体相的滑移阻力 $g^{(\alpha)}$ ，在这种情况下分切应力一旦超过 Orowan 应力，即发生塑性变形。

材料的应变硬化由滑移阻力 $\dot{g}^{(\alpha)}$ 控制，其演化规律为：

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (8)$$

式中, $h_{\alpha\beta}$ 为滑移硬化模量, $h_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$) 为潜硬化模量, $h_{\alpha\alpha}$ (不求和) 为自硬化模量。由于主要研究沉淀相尺寸对镍基单晶材料初始屈服强度的影响, 考虑 Bauschinger 效应的动态硬化规律不是研究重点, 故采用 Peirce 以及 Asaro 等人^[13-15] 提出的未考虑 Bauschinger 效应的自硬化模量表达式:

$$h_{\alpha\alpha} = h(\gamma) = h_0 \sec h^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \quad (9)$$

式中, h_0 为初始硬化模量; τ_0 为初始屈服应力, 其值大小与滑移阻力 $g^{(\alpha)}$ 的初始值相等; τ_s 为饱和分切应力; γ 为 Taylor 累计剪切应变:

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^t |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (10)$$

潜硬化模量为:

$$h_{\alpha\beta} = qh(\gamma) \quad (11)$$

式中, q 为常数。

3 模型验证

为验证上述本构模型, 将采用商用有限元软件 Abaqus 对镍基单晶高温合金的拉伸屈服行为进行模拟计算, 并与试验结果进行比较。

镍基单晶高温合金本构模型参数如表 2 所示。

因含不同尺寸沉淀相的镍基单晶材料的沉淀相体积分率基本不变, 为 60%~65%。本研究取 60% 进行计算。在上述体积分率下, 基体通道宽度如表 3 所示。

采用以上参数, 对表 1 所示沉淀相尺寸的 [001] 以及 [111] 取向镍基单晶高温合金试验结果进行了单轴拉伸模拟, 模拟计算结果如图 3~图 4 所示。模拟计算结果表明, 不同沉淀相尺寸的镍基单晶高温合金单轴拉伸曲线形状基本保持一致, 最大应力随沉淀相尺寸的减小而增大。

表 2 镍基单晶高温合金本构模型参数

Table 2 Model parameters for nickel-base single crystal superalloy

Model parameter	Symbol	Value	Unit	Used in equation
Reference slip rate	$\dot{\alpha}$	1.5×10^{-10}	s^{-1}	(6)
Rate sensitivity exponent slip resistance	m	0.085	-	(6)
Rate sensitivity exponent orowan threshold	n	7	-	(6)
Parameter in Orowan stress	$\alpha_{001}^{or} / \alpha_{111}^{or}$	3.20/1.75	-	(6)
Critical shear stress	$g_0^{(\alpha)}, \tau_0$	98	MPa	(6), (9)
Shear modulus	μ	155	GPa	(7)
Burgers vector length	b	0.25	nm	(7)
Initial hardening modulus	h_0	20	GPa	(9)
Saturation shear stress	τ_s	110	MPa	(9)
Latent hardening constant	q	1.3	-	(11)

表 3 不同尺寸沉淀相下的镍基单晶基体通道宽度
Table 3 Matrix width in single crystal superalloys with different precipitate sizes

Precipitate size/ μm	Matrix width, d/nm
0.2	74
0.3	112
0.4	148
0.5	184
0.6	222
0.7	260
1.0	371
1.5	556
1.8	668
2.0	743
2.5	928

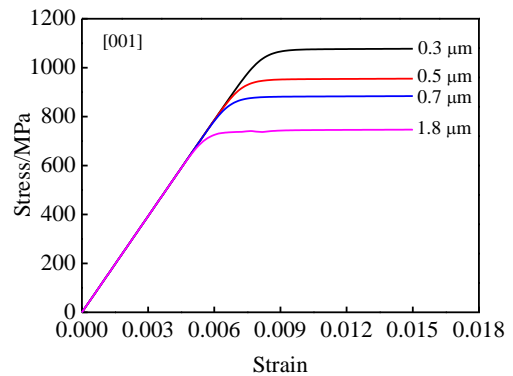


图 3 沉淀相尺寸对 [001] 取向镍基单晶应力应变的影响
Fig.3 Effect of changing microstructural dimensions on the stress-strain curve of [001] oriented specimens

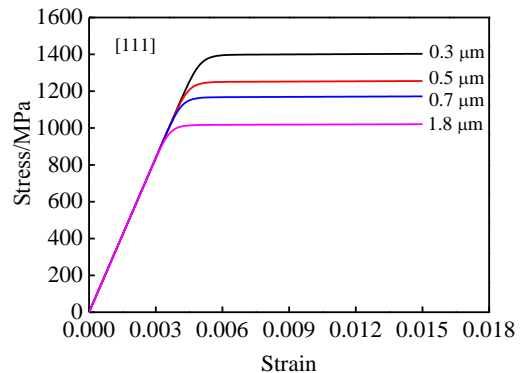


图 4 沉淀相尺寸对 [111] 取向镍基单晶应力应变的影响
Fig.4 Effect of changing microstructural dimensions on the stress-strain curve of [111] oriented specimens

为进一步验证本研究提出的模型, 将 0.2% 屈服强度的模拟计算结果与文献 [2] 所示 PWA 1480 试验结果进行比较, 结果如图 5 所示。结果表明, 该模型可以准确的对镍基单晶沉淀相尺度效应进行预测。

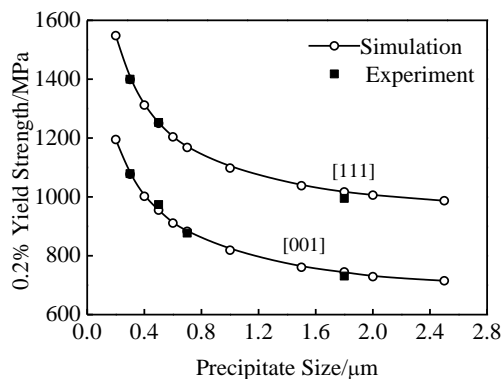


图 5 沉淀相尺寸对[001]以及[111]取向镍基单晶高温合金屈服强度的影响

Fig.5 Effect of changing microstructural dimensions on the yield strength of [001] and [111] oriented specimens

4 结 论

1) 镍基单晶高温合金性能存在显著的沉淀相尺度效应, 比较典型的表现是材料屈服强度随沉淀相尺寸的减小而增大。

2) 基于晶体塑形理论, 结合 Orowan 位错机制提出了一个本构模型, 并结合商用有限元软件 Abaqus 对 [001] 及 [111] 晶体取向, 含不同沉淀相尺寸 (0.2~2.5 μm) 的镍基单晶高温合金屈服强度进行了计算。计算结果与 PWA1480 材料的单轴拉伸试验结果对比表明, 该模型可以较准确的预测镍基单晶高温合金的沉淀相尺度效应。

参考文献 References

- [1] Guo Jianting(郭建亭). *Materials Science and Engineering for Superalloys(高温金属材料学)*[M]. Beijing: Science Press, 2008: 336
- [2] Shah D M, Duhal D N. *Superalloys 1984*[M]. Seven Springs, PA: TMS, 1984: 105
- [3] Busso E P, Meissonnier F T, O'Dowd N P. *J Mech Phys Sol*[J], 2000, 48: 2333
- [4] Meissonnier F T, Busso E P, O'Dowd N P. *Int J Plast*[J], 2001, 17: 601
- [5] Choi Y S, Parthasarathy T A, Dimiduk D M *et al. Mat Sci Eng A*[J], 2005, 397: 69
- [6] Arzt E. *Acta Mater*[J], 1998, 46: 5611
- [7] Fedelich B. *Comp Mat Sci*[J], 1999, 16: 248
- [8] Fedelich B. *Int J Plast*[J], 2002, 18: 1
- [9] Scoboda J, Lukas P. *Acta Mater*[J], 2000, 48: 2519
- [10] Kuttner T, Wahi R P. *Mat Sci Eng A*[J], 1998, 242: 259
- [11] Tinga T, Brekelmans W A M, Geers M G D. *Philos Mag*[J], 2008, 88: 3793
- [12] Yuan C, Guo J T, Yang H C, Wang S H. *Scr Mat*[J], 1998, 39: 991
- [13] Peirce D, Asaro R J, Needleman A. *Acta Metall*[J], 1982, 30: 1087
- [14] Asaro R J. *Adv Appl Mech*[J], 1983, 23: 1
- [15] Asaro R J. *J Appl Mech*[J], 1983, 50: 921

Influence of Precipitate Size on the Strength of Nickel-Base Single Crystal Superalloys

Wang Baizhi, Wen Zhixun, Liu Dashun, Yue Zhufeng
(Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129, China)

Abstract: The influence of Ni₃Al (γ') precipitate size on the tensile properties of nickel-base single crystal superalloys was studied. For single crystal superalloys, the main contribution to the yield stress arises from the Orowan stress in the γ channels. According to Orowan mechanism, a constitutive model based on crystal plastic theory was introduced to characterize the influence of precipitate size on the yield strength of single crystal superalloys. The tensile simulations of [001] and [111] oriented specimens were carried out. The yield strength of single crystal superalloys with precipitate size varying from 0.2 to 2.5 μm was calculated and the simulation results agree with the experiments. This constitutive model is shown to accurately simulate the size effects in the nickel-base single crystal superalloys.

Key words: nickel-base single crystal superalloys; constitutive model; Orowan stress; crystal plasticity; size effect

Corresponding author: Wen Zhixun, Ph. D., Associate Professor, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129, P. R. China, Tel: 0086-29-88431002, E-mail: zxwen@nwpu.edu.cn