

Ti-6Al-4V 合金中片层组织形成的相场模拟^{*}

王 刚 徐东生[†] 杨 锐

(中国科学院金属研究所 沈阳 110016)

(2008 年 12 月 19 日收到 2009 年 1 月 14 日收到修改稿)

Ti-6Al-4V 是典型的 $\alpha + \beta$ 钛合金,不同热处理制度和热加工工艺下可得到形貌各异的微观组织,从而表现出不同的力学性能,深刻理解合金中微观组织的形成机制有助于合金的进一步优化和改造.采用相场方法模拟 Ti-6Al-4V 合金中片层组织的形成及演化,以热力学数据库和动力学数据库为输入,通过计算定量预测 β 晶界上已存在初生 α 相时合金组织随时间的演化.结果表明,在一定条件下,随着时间的延长晶界 α 向 β 晶内生生长形成片层组织,片状 α 簇的形貌与界面能各向异性密切相关,晶界取向对片层生长有重要作用,垂直于晶界生长时产生最密集的片层,随倾斜角增大片层加厚且生长缓慢;此外,热处理温度显著改变片层组织形貌,温度越高,片层尖端生长速度越慢,片层间距越大.

关键词:Ti-6Al-4V,相场模拟,片层组织

PACC:8220W,6155H

1. 引 言

钛合金具有密度低、强度高、耐高温、抗腐蚀等优点,被广泛用于航空航天、医疗、化工、体育用品等领域^[1].这类合金的力学性能强烈依赖于其微观组织,为更好地对合金的工艺进行优化与改进,有必要深刻理解各种微观组织的形成机制以及演化规律.

Ti-6Al-4V 是最常见的 $\alpha + \beta$ 钛合金,其用量达钛合金总用量的一半.随着温度的变化,高温 β 相(体心立方结构)会转变为低温 α 相(密排六方结构),但在不同的热处理条件下,这种转变会导致 Ti-6Al-4V 合金呈现出等轴、片层和双态组织三种典型形貌,并表现出不同的力学性能.一般而言,等轴组织具有较高的强度、塑性和疲劳强度^[2];片层组织具有较好的蠕变性能、断裂韧性和抗裂纹扩展能力^[3],但塑性和低周疲劳性能较差^[4];双态组织则综合了等轴和片层组织的特点,不仅具有优良的室温性能,而且蠕变性能、疲劳性能及热稳定性良好^[5].

随着损伤容限设计思想在钛合金上的应用,钛合金的抗裂纹扩展性能和断裂韧性受到了越来越高的重视,片层组织成为研究热点.迫切需要通过改善

热处理工艺来控制片层组织参数(如片层长宽比、片层间距等),优化片层组织的力学性能,在保证较高损伤容限性能的前提下提高其塑性.然而目前的实验手段还无法对高温下发生的微观组织演化进行实时的细致观察,使得片层组织的形成机制以及组织参数与热处理工艺之间的定量关系尚不明确.

随着计算材料学方法的发展,可采用计算机模拟的方法对材料中的微观组织演化过程进行研究.在介观尺度上,相场方法由于避免了对界面的跟踪,从而可以处理各种复杂的组织形态.因此本文采用相场方法来模拟 Ti-6Al-4V 合金中片层组织的形成过程,并探讨界面能各向异性和热处理温度对片层形貌的影响.

2. 相场模型

相场方法以 Ginzburg-Landau 相变动力学理论为基础,主要应用于材料微观组织演化的研究,在过去的十几年中获得飞速的发展,并在凝固、固态相变、晶粒长大与粗化等方面得到广泛的应用^[6-11].

相场模型采取场变量来表征研究体系.对于 Ti-6Al-4V 合金中的 β - α 相变过程,需两个浓度场变

^{*} 国家重点基础研究发展计划(批准号:2006CB605104)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: dsxu@imr.ac.cn

量 X_{Al} , X_V 来描述两相中的溶质浓度以及一个结构场变量 η 来表征两相的晶体结构差异, 设 $\eta = 0$ 表示基体相 β , $\eta = 1$ 表示生成相 α , 则体系总的自由能 G 可表示为

$$G = \frac{1}{V_m} \int_V \left(G_m + \frac{\kappa_{ij}}{2} \nabla_i \eta \nabla_j \eta \right) dV + E_s. \quad (1)$$

这里, V_m 是摩尔体积, V 是系统总体积, κ_{ij} 为梯度项系数张量, G_m 为局域摩尔化学自由能函数, E_s 为体系的弹性能. G_m 可写为

$$G_m = \rho(\eta) G_m^\alpha + (1 - \rho(\eta)) G_m^\beta + \omega \eta^2 (1 - \eta)^2, \quad (2)$$

式中 $\rho(\eta) = \eta^3(10 - 15\eta + 6\eta^2)$, ω 为能垒系数, G_m^α 和 G_m^β 分别为 α 相和 β 相的摩尔自由能, 均为成分 X_i 和温度 T 的函数, 可由热力学数据库给出. E_s 来源于相变过程中晶体结构变化所产生的弹性畸变. 倘若该弹性畸变使得新相与母相之间为共格界面, 则弹性能对体系总能量起重要贡献, 并可依据 Khachaturyan 弹性理论^[12] 给出其表达式. 然而在钛合金的片层组织中, 片层尖端处为非共格界面, 片层宽面处为半共格界面, 界面上的位错和空位使得弹性畸变能作用较弱. 在高温保温处理时, Ti-6Al-4V 合金中相变的模式为形核-生长型, 由于新相与母相的成分不同, 相变的实质为过饱和固溶体中的脱溶沉淀, 主要的物理过程是体系中溶质扩散跳跃的长程迁移, 且原子通过相界面较为容易. 因此, 本文忽略弹性能对体系的影响, 只考虑在不同生长方向上界面能的各向异性.

在相场理论中, 体系的界面能与(1)式中梯度项系数的平方根成正比. 二维情况下, 梯度项系数张量可表述为

$$\kappa_{ij} = \kappa_0 \mathbf{R}^T \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & a \end{bmatrix} \mathbf{R}. \quad (3)$$

这里, κ_0 为正常数; a 为表征界面能各向异性程度的常数, 若 $a = 1$, 则界面能为各向同性, 本文选取 $0 < a < 1$ 表示片层尖端处的非共格界面与片层宽面处的半共格界面之间界面能的比值为 $1:\sqrt{a}$; \mathbf{R} 为旋转矩阵, 其表达式为

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}, \quad (4)$$

其中 θ 表示界面能最大值方向在正交坐标系中的倾斜角.

浓度场变量和结构场变量随时间演化的动力学过程分别由 Cahn-Hilliard 方程^[13] 和 Allen-Cahn 方

程^[14] 描述, 即

$$\frac{1}{V_m} \frac{\partial X_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left[M_{ij} \nabla \left(\frac{\delta G}{\delta X_j} \right) \right], \quad (5)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -L \frac{\delta G}{\delta \eta}, \quad (6)$$

式中, t 为时间, M_{ij} 和 L 分别为 X_i 和 η 的动力学系数, 化学迁移率 M_{ij} 是成分 X_i 和温度 T 的函数, 可从热力学数据库得到.

以上动力学控制方程经无量纲化, 设定合适的模拟参数, 选取镜面对称边界条件, 并利用 Euler 差分方法进行数值求解, 即可得到体系中微观组织随时间的演变过程.

3. 模拟结果及讨论

3.1. 初始形貌设定

研究体系选为 256×512 的二维网格, 初始形貌为 β 基体的底部有一薄层 α 相, α/β 相界面处由随机噪声给出非平直界面, 如图 1 所示. 图 1 中黑色部分为 β 相, $\eta = 0$, 其 Al 和 V 的摩尔分数为 $T = 1223$ K 时的平衡成分, 白色部分为 α 相, $\eta = 1$, 其 Al 和 V 的摩尔分数为相应热处理温度下的平衡成分.

根据 Mullins-Sekerka 界面失稳理论^[15], 只有当界面上存在微小扰动且达到临界波长时才可能从界面处生成片状形貌, 此处所设定的 α/β 相界面扰动对应真实系统中界面上的成分涨落.



图 1 Ti-6Al-4V 合金 α/β 两相初始形貌

3.2. 片层组织的形成与演化

为模拟片层组织的生成, 设定自由能归一化参数为 5×10^4 J/mol, 迁移率归一化参数为 10^{-18} $\text{m}^2 \text{mol}/\text{Js}$, 则无量纲化后结构场变量动力学系数和梯度项系数分别为 $\tilde{L} = 2$, $\tilde{\kappa}_0 = 0.048$. 时间步长为

0.05,总计算步数为 60000,其余模拟参数设定为:
 $T = 1073 \text{ K}$, $a = 0.16$, $\theta = 0$.

图 2 给出不同时刻下的片层组织.图 3 和图 4 则分别给出 Al 原子和 V 原子摩尔分数的空间分布随时间的变化,其中无量纲参数 t 为时间步长与计算时间步数的乘积,随灰度增加表示浓度值逐渐降低.模拟结果表明 (1)在 $\alpha + \beta$ 两相区保温时, α 相因界面扰动而形核,并向 β 基体内生长形成片层组织,相邻 α 片之间仍存在残留 β 相.(2)相变过程中,Al 原子从 β 相向 α 相扩散,而 V 原子从 α 相向 β 相扩散,并在片层间形成 Al 原子的贫瘠区和 V 原子的富集区.(3) α 片层的形貌与 Al 和 V 的成分空间分布一致,表明相变受溶质原子的长程扩散控制.

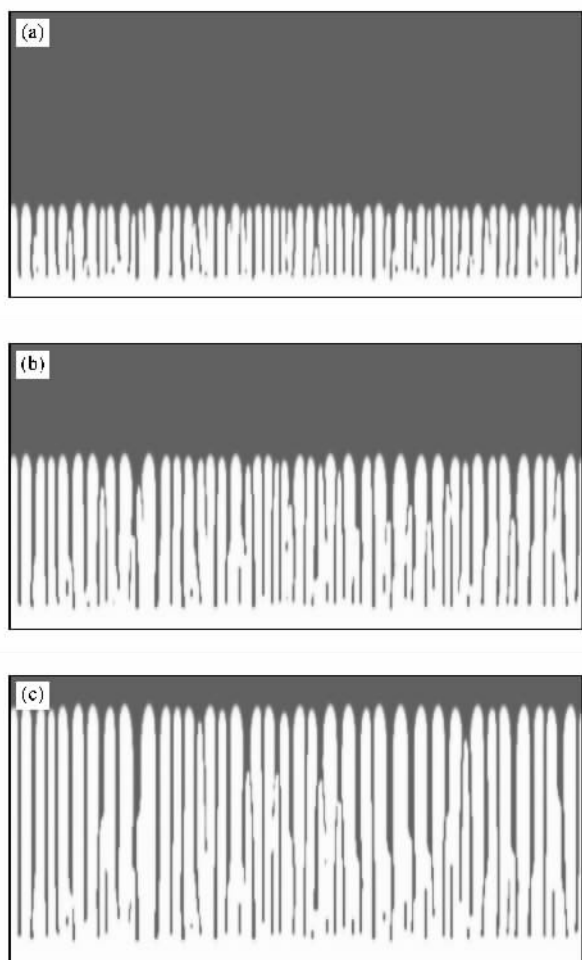


图 2 Ti-6Al-4V 中片层组织的形貌演化过程 (a) $t = 1000$, (b) $t = 2000$, (c) $t = 3000$

3.3. 界面能各向异性对片层形貌的影响

由 (3) 和 (4) 式可以看出,界面能各向异性的程度和角度可通过改变 θ 和 a 两个参数来调节.分别设定

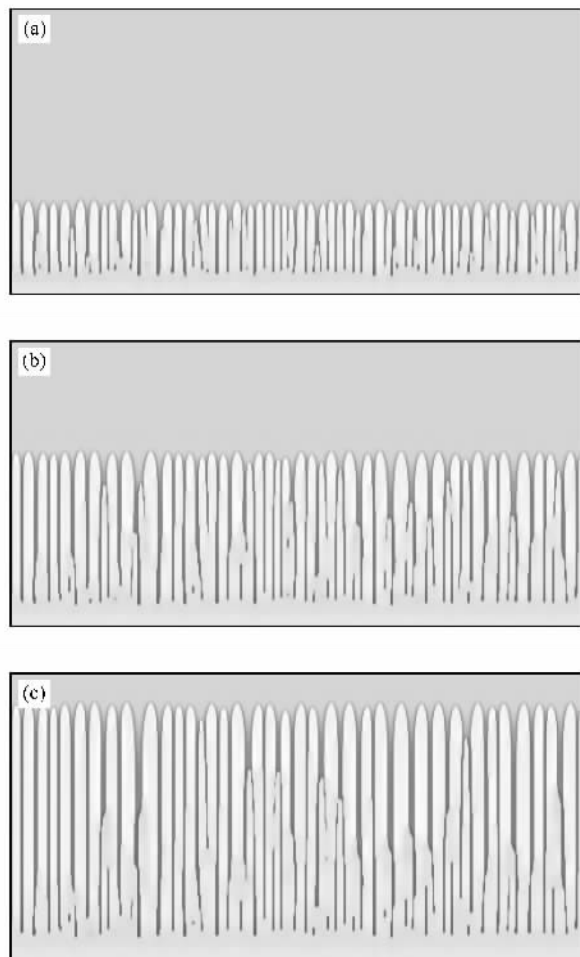


图 3 Ti-6Al-4V 中 Al 原子浓度随时间的变化 (a) $t = 1000$, (b) $t = 2000$, (c) $t = 3000$

不同的 θ 和 a 以考察其对片层组织形貌的影响.

固定其他参数,将 a 值分别改为 0.09 和 0.25,这两种情况下 $t = 3000$ 时的片层组织形貌如图 5 所示.通过与图 2(c) ($a = 0.16$) 比较可以看出,界面能各向异性程度不同时所得到的 α 片层的形貌也不同,当 a 逐渐增大时, α 片的宽度相应增大,而其长度则相应变小.

固定其他参数,仅改变界面能各向异性角度 θ 为 $\pi/6$ 和 $\pi/3$,这两种情况下 $t = 3000$ 时片层组织形貌如图 6 所示.此时模拟所得片层与纵轴夹角分别约为 30° 和 60° ,亦即片层生长方向与界面能最大的方向相一致.通过与图 2(c) ($\theta = 0$) 对比可见,随着倾斜角增大,片层厚度逐渐增加,而其长度逐渐减小.注意到 θ 即为最大界面能方向与 α/β 相界面法线方向之间的夹角,当该夹角越大,则片层生长方向上可以扩散的溶质原子相对越小,不利于相变的进行,继而使片层变得短而宽.

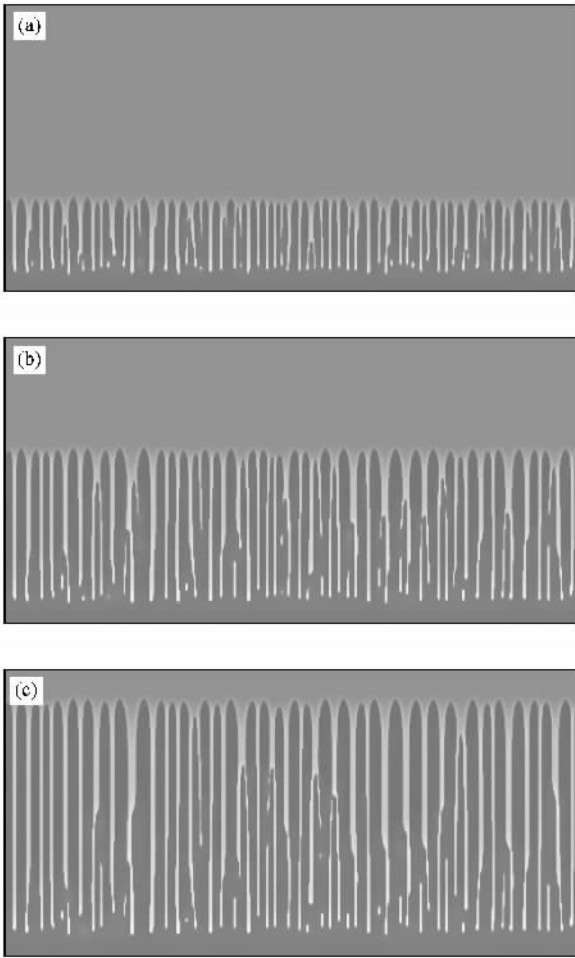


图4 Ti-6Al-4V 中 V 原子浓度随时间的变化 (a) $t = 1000$, (b) $t = 2000$, (c) $t = 3000$

3.4. 热处理温度对片层组织的影响

片层形貌除与界面初始扰动导致的片层形核、界面能各向异性等因素密切相关之外,还取决于相变时两相的自由能差,而在成分一定的情况下,自由能是温度的函数.同时,原子扩散也强烈依赖于温度.因此热处理温度将会对片层组织形貌产生一定的影响.

设定 $a = 0.16$, $\theta = \pi/6$,并选取两个不同的热处理温度 $T = 1123$ K 和 $T = 1173$ K,图 7 显示了这两个温度下 $t = 3000$ 时的显微组织.通过与图 6(a) ($T = 1073$ K)比较,可以清晰地看出热处理温度对 α 片层形貌有重要影响,温度越高,所形成的片层越少,片层尖端的生长速度越慢,片层间距也越宽.

热处理温度对片层组织形貌的影响可以作如下解释:高温下溶质原子扩散快,易于使整个界面向前推进,导致只有很少的区域达到片层形成所需的浓

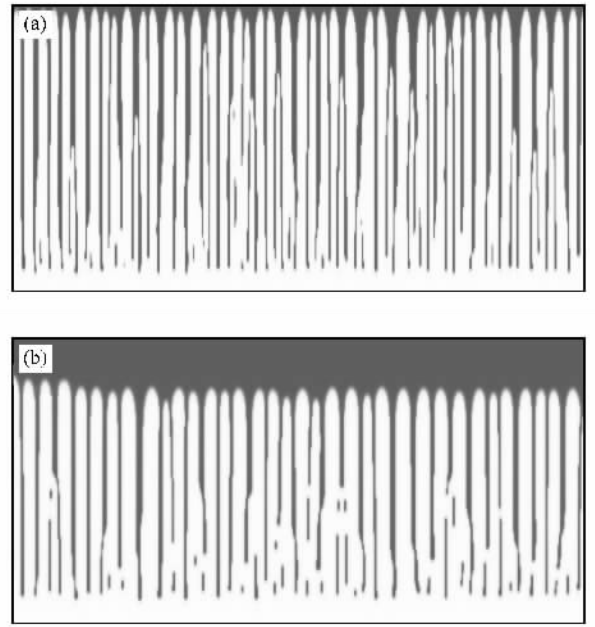


图5 界面能各向异性程度对片层形貌的影响 (a) $a = 0.09$, (b) $a = 0.25$

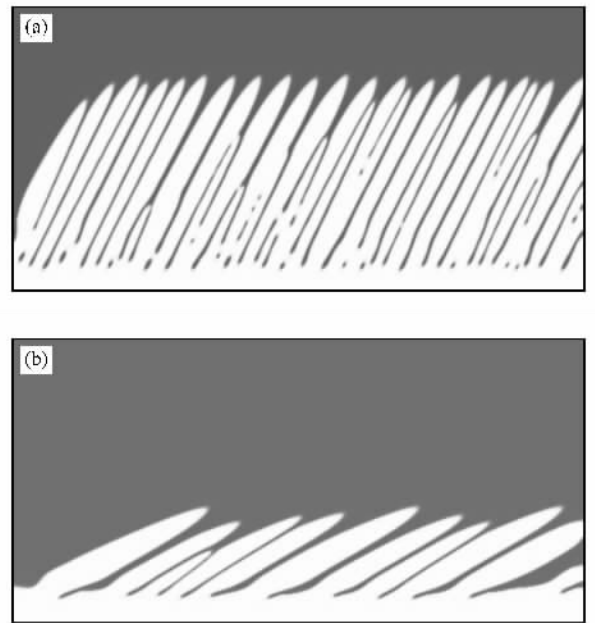


图6 界面能各向异性角度对片层形貌的影响 (a) $\theta = \pi/6$, (b) $\theta = \pi/3$

度梯度,这意味着更大的片层间距.同时由于温度较高时两相的自由能差减小,降低了相变的驱动力,从而使片层尖端生长速度降低.当温度达到 1173 K 时,片层组织甚至无法形成,这是因为横向与纵向上的溶质原子扩散速度都很快,原子扩散距离均较大,致使初始的非平直界面变得平滑,导致即使界面能

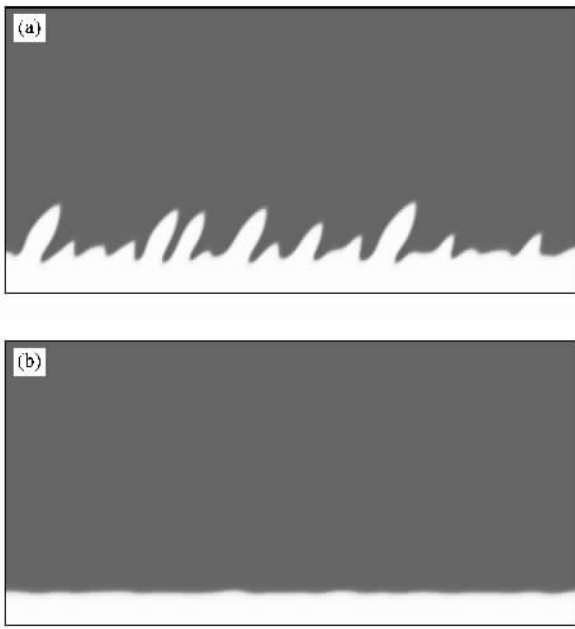


图7 热处理温度对片层形貌的影响 (a) $T = 1123 \text{ K}$, (b) $T = 1173 \text{ K}$

仍然存在各向异性也无法形成片层形貌. Mullins-Sekerka 界面失稳理论^[15]表明,温度越高,则体系的

过饱和度越低,界面失稳所需要的临界波长越大,亦即形成的片层间距越大.当临界波长超过晶界 α 相的长度时,则无法形成片层组织.

4. 结 论

采用相场方法研究了 Ti-6Al-4V 合金中片层组织的形成机理和长大过程,给出了不同条件下组织形貌随时间的演化过程以及不同时刻溶质原子浓度的空间分布.模拟结果表明:相变受溶质原子扩散所控制,Al 原子从 β 相向 α 相扩散,V 原子从 α 相向 β 相扩散,并在相界处形成 Al 原子的贫化区和 V 原子的富集区.界面能各向异性程度越大,则生成的 α 片越长、越细,此外界面能越高的方向上片层生长越快.片层形貌对热处理温度很敏感,温度越高,片层间距越宽,生长速度越慢.计算机模拟结果对实验起到一定的指导作用,可通过增加空位或位错等晶体缺陷来调节界面能,或者设置合适的热处理温度得到不同的片层组织参数,从而优化合金力学性能的搭配.

- [1] Leyens C, Peters M 2003 *Titanium and Titanium Alloys* (Weinheim: Wiley-VCH) p2
- [2] Yoder G R, Cooley L A, Crooker T W 1977 *Metall. Trans.* A **8** 1737
- [3] Hall I W, Hammond C 1978 *Mater. Sci. Eng.* **32** 241
- [4] Greenfield M A, Margolin H 1972 *Metall. Trans.* **3** 2649
- [5] Es-Souni M 2001 *Metall. Mater. Trans.* A **32** 285
- [6] Chen L Q, Wang Y 1996 *JOM* **48** 13
- [7] Wang Y, Chen L Q 2000 *Methods in Materials Research, A Current Protocols* (New York: John Wiley & Sons)
- [8] Chen L Q 2002 *Ann. Rev. Mater. Res.* **32** 113

- [9] Zhu Y C, Wang J C, Yang G C, Zhao D W 2007 *Chin. Phys. B* **16** 805
- [10] Li J J, Wang J C, Yang G C 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3516
- [11] Wang G, Xu D S, Ma N, Zhou N, Payton E J, Yang R, Mills M J, Wang Y 2009 *Acta Mater.* **57** 316
- [12] Khachaturyan A G 1983 *Theory of Structural Transformation in Solids* (New York: Wiley) p198
- [13] Cahn J W 1961 *Acta Metall.* **9** 795
- [14] Allen S M, Cahn J W 1979 *Acta Metall.* **27** 1085
- [15] Mullins W W, Sekerka R F 1963 *J. Appl. Phys.* **34** 323

Phase field simulation on sideplates formation in Ti-6Al-4V alloy^{*}

Wang Gang Xu Dong-Sheng[†] Yang Rui

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

(Received 19 December 2008 ; revised manuscript received 14 January 2009)

Abstract

Ti-6Al-4V is a typical $\alpha + \beta$ titanium alloys. It presents the diversiform microstructures and thus various properties under different heat-treatment regimes and thermomechanical conditions. The thorough understanding of the formation mechanisms and the evolution rules of different microstructures is crucial to the optimization of the alloys. In this paper, the formation and the evolution of sideplates in Ti-6Al-4V alloy are simulated by using phase field method, with the thermodynamics and the mobility databases used as the input of the phase field model and the primary α phase assumed to exist at the grain boundary. The simulation results show that under a certain condition the grain boundary α phase can grow into β matrix and form sideplates, and that the morphology of α colony is related to the interfacial energy anisotropy. The grain boundary orientation has a strong effect on the sideplate structure. In addition, the heat-treatment temperature can also change the morphological features of sideplates. Higher temperature can slow down the growth of sideplates and result in wider sideplate spacing as well.

Keywords : Ti-6Al-4V, phase field simulation, sideplate microstructure

PACC : 8220W, 6155H

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2006CB605104).

[†] Corresponding author. E-mail : dsxu@imr.ac.cn