

不同应力场中马氏体形核的择优取向

胡深洋 折晓黎 李玉兰

(兰州大学材料系, 兰州 730000)(兰州大学力学系, 兰州 730000)

(1993年8月1日收到; 1995年6月15日收到修改稿)

系统地模拟计算了不同方位四方相 $\text{ZrO}_2(\text{T})$ 椭球片分别在拉、压、剪应力诱导下发生 $\text{ZrO}_2(\text{T}) \rightarrow \text{ZrO}_2(\text{M})$ 马氏体相变时系统应变能的变化, 并用能量极小准则确定了有利的形核方位. 结果表明相变中伴随较大的剪切变形将使马氏体形核呈现明显的择优取向; 不同应力场诱导相变的临界应力相差很大.

PACC: 8130K; 8140; 6170Q

1 引 言

利用陶瓷材料中亚稳四方相 ZrO_2 颗粒应力诱导马氏体相变 ($\text{ZrO}_2(\text{T}) \rightarrow \text{ZrO}_2(\text{M})$), 目前已制备了许多高强度、高韧性的陶瓷材料^[1-5]. 然而, 由于实验观测和研究应力诱导 $\text{ZrO}_2(\text{M})$ 形核的困难, 关于应力诱导 $\text{ZrO}_2(\text{M})$ 形核的理论, 如: 何种应力场、何种缺陷将有助于相变的发生; 不同应力场中马氏体形核的择优取向; $\text{ZrO}_2(\text{T})$, $\text{ZrO}_2(\text{M})$ 的化学自由能、界面能的测量等方面的研究做的不多. 本文利用 Eshelby 的夹杂理论, 考虑 Ce-TZP 材料中一圆盘状 $\text{ZrO}_2(\text{T})$ 椭球片分别在拉、压、剪应力作用下转变为 $\text{ZrO}_2(\text{M})$ 时系统内能量的变化, 用计算机模拟计算了不同方位四方相 ZrO_2 晶粒内不同方位 $\text{ZrO}_2(\text{T})$ 椭球片转变时, 应变能和相互作用能的变化情况, 并用能量极小准则确定了马氏体形核的择优取向.

2 相变的能量关系

建立如图 1 所示的整体和局部坐标系. 外应力张量在整体坐标系 (x_1, x_2, x_3) 下记为 P_{ij}^A ; 局部坐标系 (x_1^1, x_2^1, x_3^1) 的三个轴分别置于四方相 $\text{ZrO}_2(\text{T})$ 的 a, b, c 轴, 在此坐标系下转变的本征应变张量记为 ϵ_{ij}^T ; 局部坐标系 (x_1^2, x_2^2, x_3^2) 的坐标轴对应于椭球片的三个主轴.

考虑图 1 中的椭球片在外应力 P_{ij}^A 作用下发生 $\text{T} \rightarrow \text{M}$ 相变, 则系统总能量的变化可表为

$$E_{\text{tot}} = E_{\text{surf}} + E_{\text{chem}} + E_{\text{strain}} + E_{\text{int}}, \quad (1)$$

式中 E_{surf} 是 $\text{ZrO}_2(\text{M})$ 与 $\text{ZrO}_2(\text{T})$ 界面能的变化, E_{chem} 是 (T) 与 (M) 化学自由能的变化, E_{strain} 是相变引入的应变能, E_{int} 是外应力与转变应变的相互作用能.

2.1 应变能 E_{strain}

如果已知在坐标系 $x_1^1 x_2^1 x_3^1$ 下 $T \rightarrow M$ 转变的本征应变 ϵ_{ij}^{1T} , 则通过坐标变换可得局部坐标系 $x_1^2 x_2^2 x_3^2$ 下, 椭球片的本征应变

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}^{2T} = & l_2(i) l_2(j) \epsilon_{11}^{1T} + m_2(i) m_2(j) \epsilon_{22}^{1T} \\ & + n_2(i) n_2(j) \epsilon_{33}^{1T} \\ & + (l_2(i) m_2(j) + l_2(j) m_2(i)) \epsilon_{12}^{1T} + (m_2(i) n_2(j) + m_2(j) n_2(i)) \epsilon_{23}^{1T} \\ & + (n_2(i) l_2(j) + n_2(j) l_2(i)) \epsilon_{13}^{1T}, \quad (2) \end{aligned}$$

其中 $l_2(i)$, $m_2(i)$, $n_2(i)$ ($i=1, 2, 3$) 是 x_1^1 轴在坐标系 $x_1^2 x_2^2 x_3^2$ 中的方向余弦. 由 Eshellby 的夹杂理论^[6]则

$$E_{\text{strain}} = -1/2 VP_{ij}^{2T} \epsilon_{ij}^{2T}, \quad (3)$$

V 是椭球片的体积, P_{ij}^{2T} 是椭球片内转变引入的应力场

$$P_{ij}^{2T} = \lambda (\epsilon_{ij}^{2O} - \epsilon_{ij}^{2T}) + 2\mu (\epsilon_{ij}^{2O} - \epsilon_{ij}^{2T}), \quad (4)$$

$$\epsilon_{ij}^{2O} = S_{ijkl} \epsilon_{kl}^{2T}, \quad (5)$$

式中 ϵ_{ij}^{2O} 是约束应变, μ 是剪切模量, λ 是拉梅常数, S_{ijkl} 是 Eshellby 张量^[7], 它只依赖于椭球片的形状, 从(3)–(5)式中可以看出 E_{strain} 是椭球片相对晶粒的方位、本征应变等的函数.

2.2 相互作用能 E_{int}

在外应力场 P_{ij}^A 作用下, 某一方位晶粒内一椭球域发生本征应变 ϵ_{ij}^{2T} , 则相互作用能为

$$E_{\text{int}} = -VP_{ij}^{2A} \epsilon_{ij}^{2T} = -VP_{ij}^{1A} \epsilon_{ij}^{1T}, \quad (6)$$

式中上标 1, 2 分别表示外应力场、本征应变在局部坐标系 $x_1^1 x_2^1 x_3^1$ 或 $x_1^2 x_2^2 x_3^2$ 中的分量. 可以看出 E_{int} 是四方相 $\text{ZrO}_2(T)$ 晶粒相对外应力场取向等的函数.

2.3 相变条件

由上分析, 针对一薄圆盘状椭球片应力诱导相变总能量的变化可以具体的写为

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} &= E_{\text{surf}} + E_{\text{chem}} + E_{\text{strain}} + E_{\text{int}} \\ &= 2\pi a^2 \sigma - \Delta f V - 1/2 VP_{ij}^{2T} \epsilon_{ij}^{2T} - VP_{ij}^{1A} \epsilon_{ij}^{1T}, \quad (7) \end{aligned}$$

式中 σ 是 $\text{ZrO}_2(T)$ 和 $\text{ZrO}_2(M)$ 界面单位面积上界面能的变化, Δf 是单位体积内化学自由能的变化. 则应力诱导相变的条件为

$$E_{\text{tot}} \leq 0. \quad (8)$$

在给定材料和温度的情况下, 影响应力诱导相变的主要因素是外应力场, 本征应变的大小, 椭球片在晶粒中的方位和晶粒相对外力的方位, 也就是式中 E_{strain} 和 E_{int} 的值.

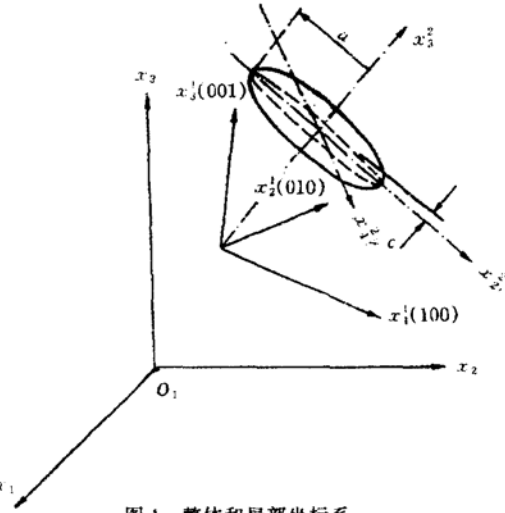


图 1 整体和局部坐标系

3 不同应力场中椭球片马氏体形核的择优取向

本文以 Ce-TZP 材料为研究对象, 取杨氏模量 $E = 200\text{GPa}$, 泊松比 $\nu = 0.3$, 椭球片轴长比 $c/a = 0.01$, 根据 Ce-TZP 材料中 $\text{ZrO}_2(\text{T}) \rightarrow \text{ZrO}_2(\text{M})$ 相变的特点^[1,6], 选择表 1 所列六种本征应变, 利用计算机模拟计算了不同方位椭球片, 在不同的本征应变和不同应力场中应变能 E_{strain} 和相互作用能 E_{int} 的变化, 然后由能量极小准则给出了 $\text{ZrO}_2(\text{M})$ 在不同应力场中形核的择优取向.

表 1 六种本征应变

	$\epsilon_{11}^{\text{IT}}$	$\epsilon_{22}^{\text{IT}}$	$\epsilon_{33}^{\text{IT}}$	$\epsilon_{13}^{\text{IT}}$	$\epsilon_{12}^{\text{IT}}$	$\epsilon_{23}^{\text{IT}}$
I	0.0201	0.0260	0.0251	0.0333	0.0000	0.0000
II	0.0201	0.0260	0.0251	0.0500	0.0000	0.0000
III	0.0201	0.0260	0.0251	0.0666	0.0000	0.0000
IV	0.0201	0.0260	0.0251	0.0833	0.0000	0.0000
V	0.0101	0.0160	0.0151	0.0833	0.0000	0.0000
VI	0.0001	0.0060	0.0051	0.0833	0.0000	0.0000

3.1 极小应变能 E_{strain} 的椭球相对晶粒的方位

图 2(a)–(f) 分别给出本征应变为 I–VI 时, 不同 x_3^2 方向的椭球片转变应变能 $E_{\text{strain}}/(0.001\mu\text{V})$ 的等值线 $E_s(i)$ ($i = 1, 2, 3, 4$) 在 (001) 面上的球极投影图. 图中“●”表示 E_{strain} 最小的点, “○”表示 E_{strain} 最大点. 图 3 给出以下结论: 1) E_{strain} 极小的椭球方位不同一个方向, 而是在一个取向范围内, 即图 3 中 $E_s(1)$ 表示的区域. 2) 随着剪切变形在总本征应变中的含量增加, 见图 2(a)–(f), 不同方向椭球片的应变能变化加快, 这表明椭球片的择优取向越来越明显.

3.2 极小 E_{int} 的晶粒相对外力的方位

图 3(a), (b), (c) 给出了拉应力, 压应力, 剪应力场中本征应变为 IV, 不同 x_3^1 方向的晶粒内椭球片相变时, $E_{\text{int}}/(0.001\mu\text{V})$ 的等值线 $E_i(i)$, ($i = 1, 2, 3, 4$) 在 $(x_1o_1x_2)$ 平面上的球极投影. 结果可以看出对于不同的应力场, 存在不同的极小相互作用能区域, 另外, 在压、剪应力场中一些晶粒方位 E_{int} 是正的, 在这些方位上晶粒不会发生应力诱导相变, 除非受相邻晶粒相变的影响.

由能量极小准则, 假设对于一给定体积和形状的椭球片 $E_{\text{surf}} + E_{\text{chem}}$ 为常数 6, 则结合图 2 和图 3 可以得到不同应力场中 $\text{ZrO}_2(\text{M})$ 形核的有利取向. 如本征应变为 IV, 对于拉应力情况, 如图 3(a) 的“●”附近方向晶粒上图 2(d) 的“●”附近方向的椭球片是形核的有利取向. 同样, 不同本征应变, 不同应力场下的有利取向也可到. 另外, 图 2 表明剪切变形的增加, E_{strain} 极小的两个区域相应的椭球片成 90° , 说明在应力作用下容易形成相互垂直的马氏体片. 这些结果在实验中是常见的.

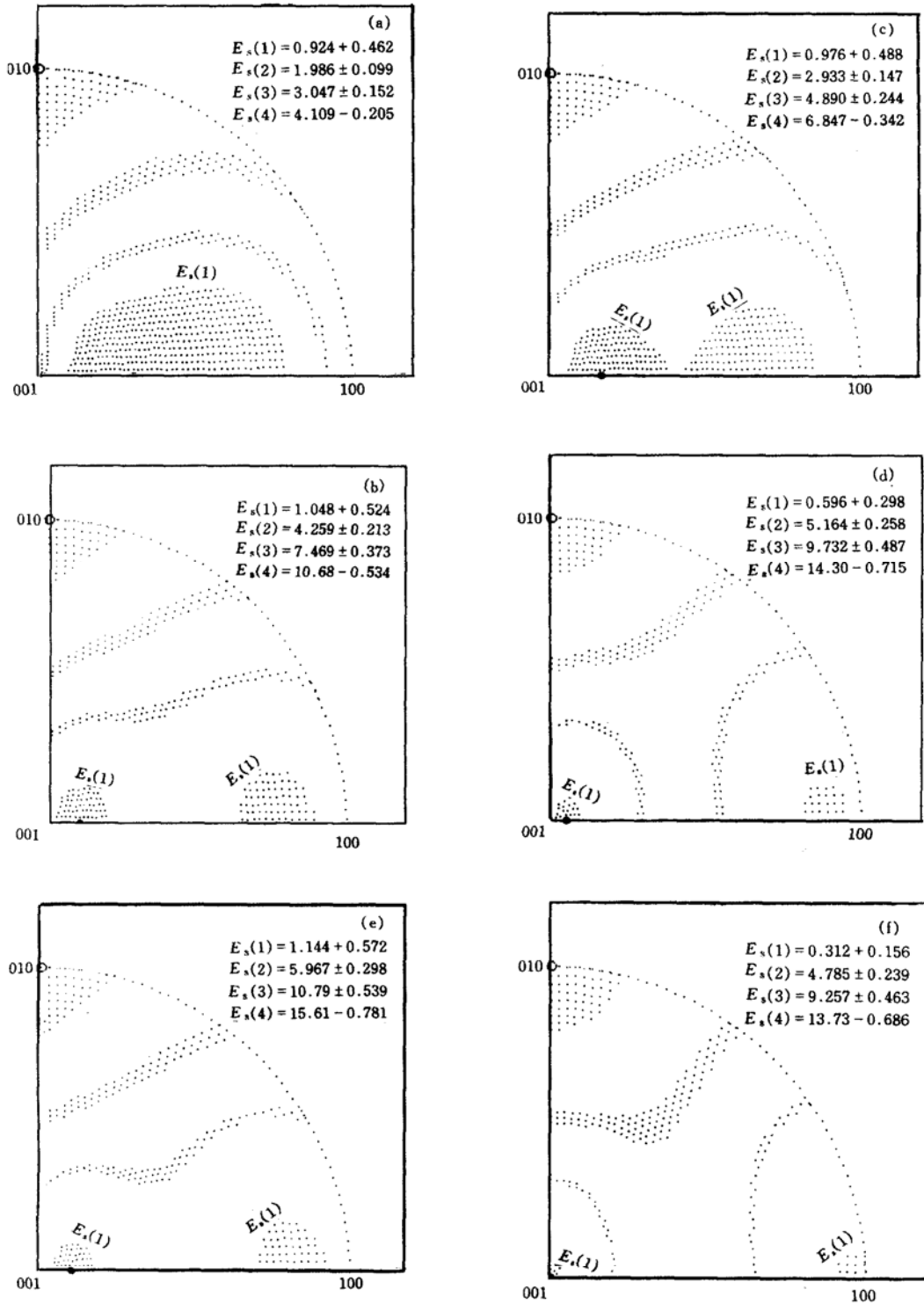


图2 不同的本征应变时 $E_{\text{strain}}/(0.001\mu\text{V})$ 的等值线 $E_s(i)$ 在(001)面上的球极投影

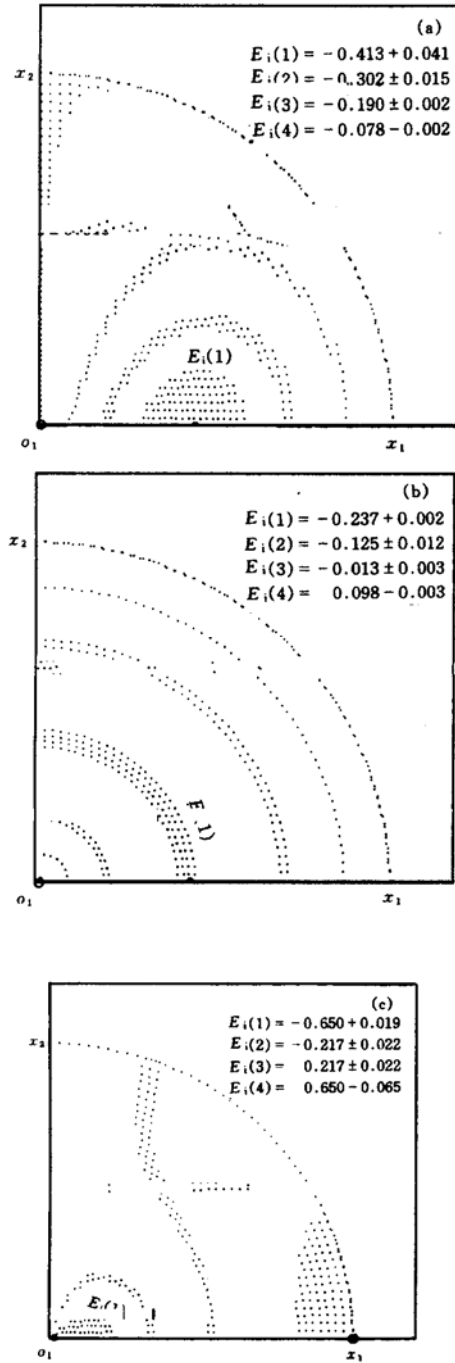


图3 (a), (b), (c)分别表示拉应力 $P_{11}^A = 300\text{MPa}$, 压应力 $P_{33}^A = -300\text{MPa}$, 剪应力 $P_{12}^A = 300\text{MPa}$ 作用下, $E_{\text{int}}/0.001\mu\text{V}$ 的等值线 $E_i(i)$ 在 x_1ox_2 面上的球极投影。

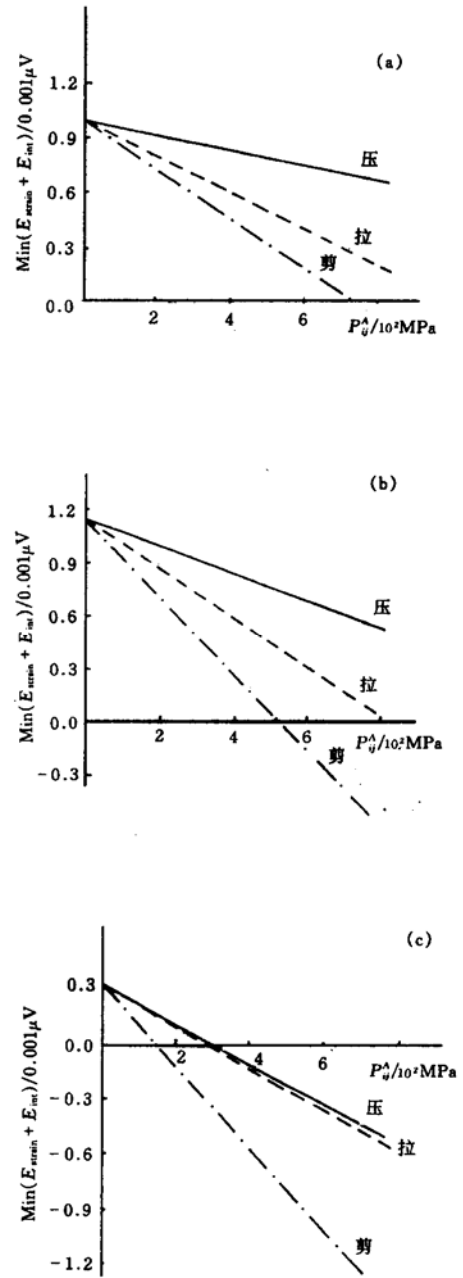


图4 (a), (b), (c)分别表示征应变为 II, IV, IV 时, $\text{Min}(E_{\text{strain}} + E_{\text{int}})/0.001\mu\text{V}$ 随应力大小的变化

3.3 极小 $E_{\text{strain}} + E_{\text{int}}$ 随外力的变化

图 4(a)~(c)给出本征应变为 II, IV, VI 时极小 $E_{\text{strain}} + E_{\text{int}}$ 随外加应力大小的变化. 结果表明剪应力最易诱发 $\text{ZrO}_2(\text{T}) \rightarrow \text{ZrO}_2(\text{M})$ 的相变, 拉应力次之. 另外, 如果知道 E_{chem} 和 E_{surf} , 则由图 4 和相变条件(8)式可以得到诱导相变的临界应力, 反之亦然. 通常 Ce-TZP 材料的临界压应力 700 MPa, 临界拉应力为 300 MPa, 这与图 4(a)的结果符合得很好.

4 结 论

从上计算结果分析有以下结论:

- 1) 随本征应变中剪切变形含量的增加, 应力诱导 $\text{ZrO}_2(\text{T}) \rightarrow \text{ZrO}_2(\text{M})$ 马氏体相变的随球片择优取向越来越明显.
- 2) 压应力、剪应力场中马氏体片的择优取向性较拉应力场中强.
- 3) 不同应力场诱导相变的临界应力相差很大, 剪应力最易引起 $\text{ZrO}_2(\text{T}) \rightarrow \text{ZrO}_2(\text{M})$ 的相变, 拉应力次之, 压应力场最不容易.
- 4) 计算结果与实验相符合, 可供理论和实验分析参考.

- [1] F. F. Lange, *J. Mater. Sci.*, **17**(1982), 225.
- [2] R. M. Mcmeeking and A. G. Evans, *J. Am. Ceram. Soc.*, **65**(1982), 242.
- [3] G. K. Bansal and A. H. Heuer, *Acta Metallurgica*, **22**(1974), 409.
- [4] K. E. Easterling and A. R. Tholen, *Acta Metallurgica*, **24**(1976), 333.
- [5] Cheng-Sheng Yu, *J. Am. Ceram. Soc.*, **75**(1992), 2991.
- [6] J. D. Eshelby, *Proc. Roy. Soc.*, **241A**(1957), 376.
- [7] Toshio Mura, *Micromechanics of Defects in Solids* (Martinus nijhoff Publishers, 1982).

THE OPTIMAL ORIENTATION OF MARTENSITIC NUCLEATION UNDER DIFFERENT STRESSES

HU SHEN-YANG¹⁾ ZHE XIAO-LI¹⁾ LI YU-LAN²⁾

1) (Department of Materials, Lanzhou University, Lanzhou 730000)

2) (Department of Mechanics, Lanzhou University, Lanzhou 730000)

(Received 11 August 1993; Revised manuscript received 15 June 1995)

ABSTRACT

The total-energy change is systematically evaluated in this paper when the thin $\text{ZrO}_2(\text{T})$ ellipsoidal plate at different orientation transforms into $\text{ZrO}_2(\text{M})$ under extension, compression and shear stresses. The optimal orientation of Martensitic nucleation is determined by using the criterion of minimum energy. The numerical results show that the shear strains resulting from the transformation affect obviously the orientation of Martensitic nucleation and the critical stresses inducing transformation are very different.

PACC: 8130K; 8140; 6170Q