

基于细观位错机理的单晶合金高温力学性能模拟

曹 娟

(中航工业中国轻型燃气轮机开发中心, 北京 100028)



曹娟(1981), 女, 博士, 工程师, 从事单晶叶片的本构模型研究工作。

基金项目: 国家自然科学基金(50571004)、
凡舟青年科研基金(20060404)资助

收稿日期: 2012-01-04

摘要: 利用基于细观位错运动的蠕变筏化模型对镍基单晶合金 CMSX-4 在 1223K 下的拉伸、蠕变、循环、蠕变疲劳交互及各向异性进行模拟, 结果表明: 拉伸过程中应变率较高时应力略微下降的现象; 蠕变条件下应力越大则蠕变第 1 阶段越明显, 而蠕变稳定阶段越短的趋势; 蠕变疲劳交互作用下的应力松弛和应变增大; 以及单晶 3 个典型晶体取向的循环应变硬化特征。通过与试验结果对比, 验证了此模型在较高温度下对单晶合金性能的综合模拟能力。

关键词: 细观位错; 镍基单晶合金; 蠕变筏化模型; 各向异性模拟

Simulation of Single Crystal Superalloy Mechanical Properties Based on Microstructure Dislocation Mechanism

CAO Juan

(AVIC China Light Gas-turbine Development Center, Beijing 100028, China)

Abstract: The tension, creep, cycle, creep-fatigue interaction and anisotropic performance of Ni base single crystal superalloy CMSX-4 at 1223K were simulated by the creep rafting model based on the microstructure dislocation. The result shows that the stress declines slightly at higher strain rate during tension. The greater the stress, the more obvious the first stage of creep and the shorter the creep stable stage under the creep. The stress is relaxed and the strain increases under creep-fatigue interaction, and the cyclic strain tend to be harden at three typical crystal orientation of Ni base single crystal. Comparing with the test results, it verify that the model has comprehensive simulation capability for the performance of Ni base single crystal at higher temperature.

Key words: microstructure dislocation; Ni base single crystal; creep rafting model; anisotropic simulation

0 引言

镍基单晶高温合金作为当今制造先进航空发动机和燃气轮机叶片的主要材料^[1], 从 20 世纪 80 年代至今已发展到第 5 代, 并广泛应用于军、民用飞机发动机上^[2-3], 因为其力学性能受合金组成成分和热处理工艺的影响巨大, 因此如何扬长避短, 最大限度地发挥其应用潜力成为国内外高温材料研究的热点之一。

镍基单晶合金在拉伸载荷的条件下, 其力学性能和对应的细观变形机理按照温度大体可以分为 3 个区间: (1) 在 750 °C 以下(低温)时, 材料的屈服应力基本保持不变, 和加载速率无关, 由于位错没有足够的能量攀越 γ' , 所以当应力足够大时, 位错基本以切

割 γ' 的运动为主; (2) 在 750 ~ 900 °C (中温) 时, 达到最大屈服应力的峰值温度随应变率的变化而变化, 低应变率时峰值温度偏低, 高应变率时峰值温度偏高。如对 PWA1480 合金来说, 低应变率下的峰值温度为 760 °C, 高应变率下的峰值温度则为 815 °C^[4]。位错既存在对 γ' 的切割, 也存在对 γ' 的攀越; (3) 在 900 °C 以上(高温)时, 屈服强度随温度变化几乎呈线性降低, 温度不变时, 屈服应力随应变率的减小而减小, 位错基本以对 γ' 的攀越为主。

镍基单晶合金在蠕变条件下, 主要表现出蠕变强度的拉压不对称和各向异性的特征。K. Kakehi^[5] 经过观测, 认为导致这种拉压不对称的原因是孪晶的产生, 在 [001] 和 [011] 方向上都会产生孪晶, 因此出现不

对称的现象;而在[111]方向不产生孪晶,只有位错运动,因此没有不对称的情况。大量文献中对蠕变性能的晶体取向相关性进行了研究,对 3 个典型方向蠕变强度优劣的评价不一。Sass^[6]的研究认为蠕变率的大小同各方向上参与蠕变的基体通道数目有关,[001]、[011]和[111]3 个方向参与蠕变的基体通道分别为 1、2 和 3,因此这 3 个方向的蠕变率也依次增大,但也有研究表明对于不同的单晶材料,在不同温度下,这 3 个方向的蠕变寿命长短次序不一致。

对于镍基单晶细观结构演化的观测和初步建模分析,国外从 20 世纪 70-80 年代就已出现,到 80 年代末至 90 年代,已经逐渐形成许多普遍认同的观点。国内 90 年代后开始对单晶细观变形进行观测^[7-10],但涉及对胞元模型进行力学建模则开始较晚,在 2000 年左右出现,主要有田素贵等人^[11-12]采用的有限元分析方法,及张克实等人^[13-14]对胞元的塑性行为研究。

本文利用之前建立的基于位错增殖、剪切、攀移、恢复滑移、交滑移及细观结构演化运动的位错蠕变筏化模型^[15-16],对第 2 代单晶材料 CMSX-4 在 1223 K 下的拉伸、蠕变、循环、蠕变疲劳交互及各向异性进行模拟,从细观机理上体现出不同载荷条件下单晶的变形特征,验证了这种基于细观胞元结构的位错蠕变筏化模型在对单晶合金模拟能力上的适用性和准确性。

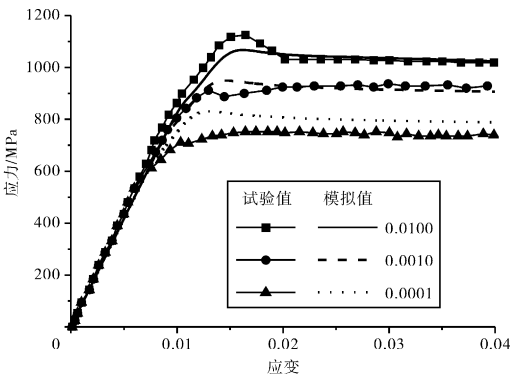
1 CMSX-4 合金的各向异性模拟

第 2 代单晶合金 CMSX-4,密度为 8.7 g/cm³,用作 EJ200 和 RB211 发动机等高压涡轮叶片的材料,最高使用温度约为 1163 ℃^[1]。对其进行不同晶体取向的变形性能模拟,其在 1223 K 下的弹性、蠕变及筏化参数见表 1。其中参数的定义和具体内涵参考文献[15-16];该合金的更多细观位错运动参考文献[17-19];有关单晶筏化及细观结构演化参考文献[20-21];其在 1223 K 下不同方向的试验曲线取自文献[22]。

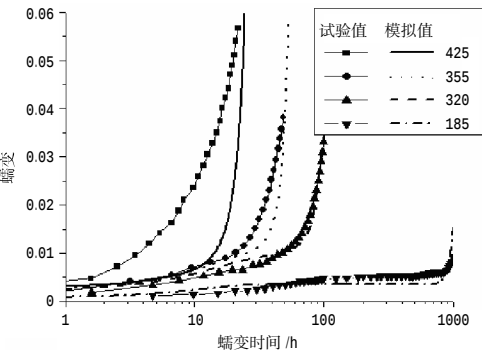
在 1223 K 下,CMSX-4 合金在[001]取向的拉伸和蠕变曲线如图 1 所示。从图 1(a)中可见,当拉伸应变率较小时,应力减小不明显,当应变率达到 0.01/s 时,应力减小 100 MPa 左右。从图 1(b)中可见,蠕变第 1 阶段的应变量随着应力的减小呈逐渐减小的趋势,同时蠕变的第 2 阶段也更趋于稳定,在应力为 425 MPa 时,试验曲线中蠕变应变很快增大,几乎不

表 1 CMSX-4 合金在 1223 K 下的材料及蠕变模型参数

参数	数值	参数	数值
C_{11} /MPa	187200	$D/(nm/s \cdot MPa)$	1.85×10^{-6}
C_{12} /MPa	123000	θ	0
C_{11}^{shear} /MPa	168200	$v_0^{\text{shear}}/(nm/s)$	8.31×10^{-9} (蠕变)
C_{12}^{shear} /MPa	110400	$V^{\text{shear}}(b^3)$	8.31×10^{-5} (拉伸)
C_{44} /MPa	33600	$E^{\text{spb}}/(J/m^2)$	48.6
C_{44}^{spb} /MPa	-	φ	0.0664
伯格矢量 /nm	0.25	$(q/\sqrt{2} L_k)/eV$	0
错配度	-0.0018	$v_0^{\text{back}}/(nm/s)$	1.56×10^{-2}
沉淀相边长 /nm	430	$f_0^{\text{cubic}}/s^{-1}$	1.0×10^{-5}
基体通道宽度 /nm	80	$V^{\text{cubic}}(b^3)$	7.43×10^{-7}
α	0.2	n	94.3
β	2.2×10^{-9}	k	1.4
ρ_0	0.01	a	2.27×10^{-9}
$v_0^{\text{filling}}/(nm/s)$	1.0	b	131.774
$V^{\text{filling}}(b^3)$	56.8	b	-6.31
		k_t	0



(a) 不同应变率的拉伸曲线



(b) 不同载荷的蠕变曲线

图 1 CMSX-4 合金在 1223 K 下、[001]方向的拉伸和蠕变曲线

存在蠕变的稳定阶段,对其在 1%塑性应变以下的蠕变寿命预测与试验值相差较大,而在 355 MPa 以下的应力范围内对其模拟较好。这可能是由于目前在应力较

大时,对几种类型的滑移系开动的门槛应力值掌握得还不够精确,需进一步研究。CMSX-4合金在[001]方向、不同应变范围时的对称循环曲线如图2所示。

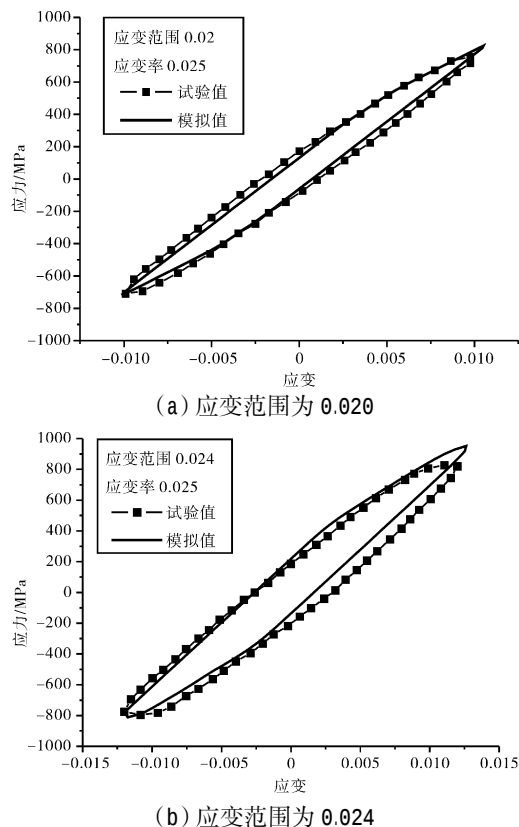


图2 CMSX-4合金在[001]方向、应变率为0.025时,不同应变范围的对称循环曲线

CMSX-4合金在[001]方向分别控制最大应变和最大应力时的蠕变疲劳交互曲线如图3所示。在 $R=0$ 、最大应变为0.009、保载120 s时的应力-时间曲线如图3(a)所示,在保载的过程中应力随着时间的增加而减小,从初始的800 MPa到第3个循环结束时降到550 MPa左右;在 $R=0$ 、最大应力为500 MPa加载过程为20—30—40—0的应变-时间曲线如图3(b)所示,在前10个循环中,应变随时间的增加有增大的趋势,对应变量的模拟开始偏大,而后逐渐接近。这一现象的原因可能与图1(b)类似,即在应力较大时,对初始单晶滑移系开动的观察和研究不够准确,但随着时间的增加,滑移系的开动趋于稳定,因此模拟结果逐渐趋近试验结果。

CMSX-4合金在[011]和[111]方向的拉伸和对称循环曲线如图4、5所示。从图中可见,在相同的应变率下,[111]方向的屈服应力有明显减小。2个方向的拉伸曲线开始都有明显的应力减小,而后又有硬化出

现,对[011]方向来说应变率较小时硬化明显,而对[111]方向来说,3个应变率的拉伸曲线硬化都很明显。但[111]方向的模拟曲线并未体现出应力的这一变化,而是屈服后应力有缓慢减小的趋势,这可能是由于应力的解析模型中未考虑基体通道交叉处的影响,因为在[111]方向加载时,3个基体通道所处的方位相同,此时其交叉区域的变形将产生一定的影响。对于对称循环曲线来说,[011]方向的模拟结果与试验结果相比体现出较好的硬化现象,而[111]方向的结果在加载时应力增加得偏快,但最终的值接近。

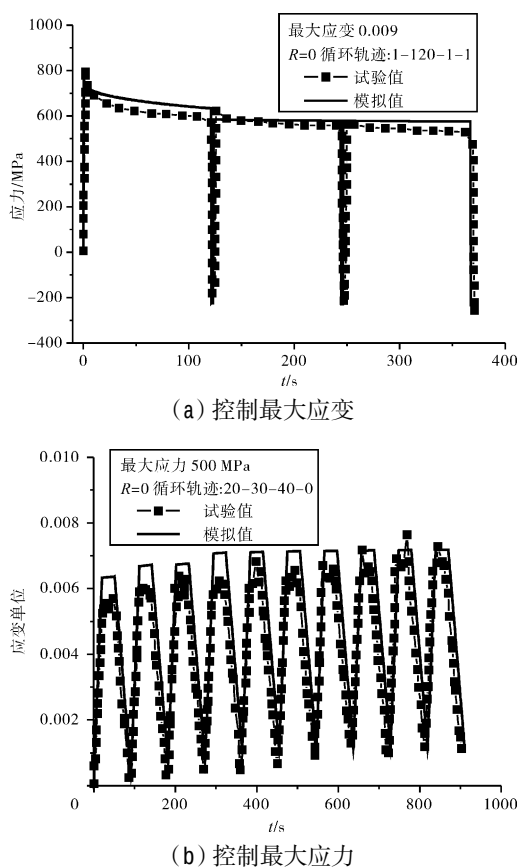


图3 CMSX-4合金在1223 K下、[001]方向的蠕变疲劳交互曲线

通过以上对CMSX-4合金在3个晶体取向的模拟结果可见,此基于细观位错运动的蠕变模型结合细观结构演化模型,通过拟合立方滑移系的2个参数 f_0^{cubic} 和 V^{cubic} ,能实现对单晶材料在不同晶体取向较为准确的性能模拟,体现出其各向异性的特点。

3 结论

利用基于细观2相胞元结构的位错蠕变演化模型对CMSX-4合金在1223 K下的综合力学性能进行

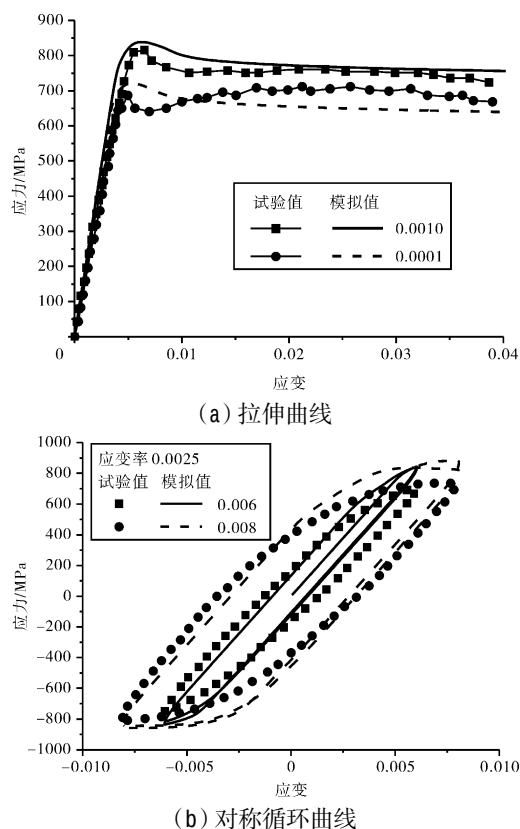


图4 CMSX-4合金在1223 K下、[011]方向的拉伸和循环曲线

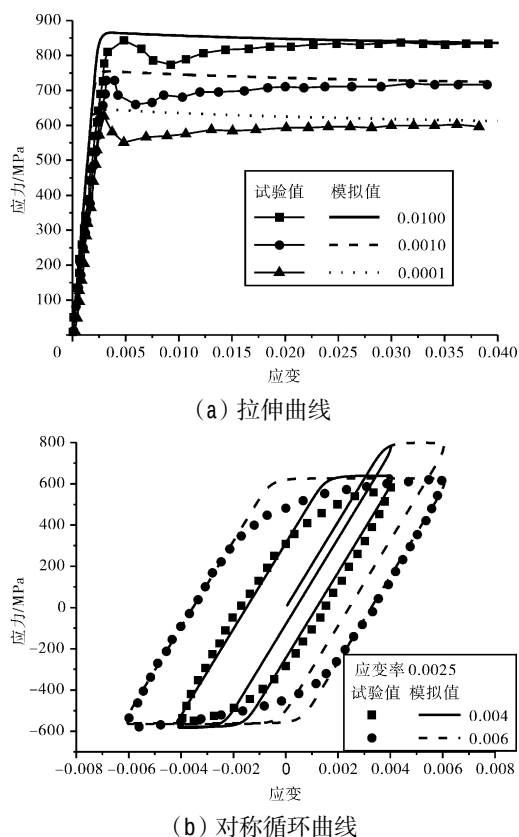


图5 CMSX-4合金在1223 K下、[111]方向的拉伸和循环曲线

模拟。结果表明:在拉伸条件下,应变率较大时应力表现出略微减小的趋势;在蠕变条件下,应力越大则蠕变第1阶段越明显,而蠕变稳定阶段则越短,此模型对于应力相对较小、蠕变稳定阶段较长的情况模拟较准确;在蠕变疲劳交互作用下,控制最大应变时模拟曲线表现出应力略有减小,控制最大应力时表现出应变有所增大,均与试验结果较吻合;对单晶[011]方向的拉伸和循环模拟基本与[001]方向的类似,表现出拉伸的应力减小和循环的应变硬化,但对[111]方向的模拟与试验曲线相比在过渡阶段变形较快,这可能是由于没有考虑此方向上3个通道交叉的影响,但最终值都与试验结果接近。

总之,根据单晶合金细观的变形机理,基于之前建立的基于位错运动的蠕变筏化模型对CMSX-4合金的力学行为进行模拟,通过与试验结果对比,能够在一定程度上反映单晶合金在较高温度的变形本质,对其综合力学性能进行表征,可为材料的寿命评估提供参考。

参考文献:

- [1] 胡壮麒,刘丽荣,金涛,等. 镍基单晶高温合金的发展[J]. 航空发动机,2005,31(3):1-7.
- [2] 陈荣章. 航空铸造涡轮叶片合金和工艺发展的回顾与展望[J]. 航空制造技术,2002(2):19-23.
- [3] 岳珠峰,郭一,郑长卿,等. Ni基高温单晶合金结构强度与寿命研究方法分析[J]. 机械强度,1994,16(2):63-70.
- [4] 刘金来. 一种镍基单晶高温合金的拉伸、持久性能及组织演化[D]. 沈阳:中国科学院金属研究所,2002.
- [5] Kakehi K. Tension/compression asymmetry in creep behavior of a ni-based superalloy [J]. Scripta Materialia, 1999, 41(5): 461-465.
- [6] Sass V, Glatzel U, Feller-kniepmeier M. Anisotropic creep properties of the Nickel-base superalloy CMSX-4 [J]. Acta mater, 1996, 44(5):1967-1977.
- [7] 田素贵,周惠华,张静华,等. 单晶Ni基合金蠕变初期的组织形貌及演化[J]. 沈阳工业大学学报,1997,19(6):64-69.
- [8] 沙玉辉,张静华,徐永波,等. 镍基单晶高温合金定向粗化行为的取向依赖性I γ'形态的SEM观察 [J]. 金属学报,2000,36(3):254-257.
- [9] 岳珠峰,杨治国. 镍基单晶涡轮单晶材料的细观力学研究[J]. 燃气涡轮试验与研究,2005,18(1):9-13.
- [10] 王跃臣,李守新,艾素华,等. 单晶镍基高温合金DD8反位相热机械疲劳后的层错 [J]. 金属学报,2003,39(2):150-154.

- [11] 田素贵,陈昌荣,杨洪才,等. 单晶 Ni 基合金高温蠕变期间 γ' 相定向粗化驱动力的有限元分析[J]. 金属学报, 2000, 36(5): 465-471.
- [12] 沙玉辉,陈昌荣,张静华,等. 镍基单晶高温合金定向粗化行为的取向依赖性 II 有限元分析 [J]. 金属学报, 2000, 36(3): 258-261.
- [13] 郭运强,张克实,耿小亮,等. 细观非均质性对镍基单晶双相合金塑性行为的影响[J]. 稀有金属材料与工程, 2007, 36(8): 1331-1335.
- [14] 张克实,郭运强,刘林. γ - γ' 双相镍基高温合金蠕变损伤的微观分析[J]. 金属学报, 2007, 43(9): 961-967.
- [15] 曹娟,王延荣,石多奇. 镍基单晶合金粘塑性行为的微力学模型[J]. 航空动力学报, 2009, 24(7): 1537-1543.
- [16] 曹娟,王延荣,石多奇. 镍基单晶合金高温蠕变筏化模型研究[J]. 航空动力学报, 2009, 24(8): 1691-1698.
- [17] Knowles D M, Chen Q Z. Superlattice stacking fault formation and twinning during creep in γ/γ' single crystal superalloy CMSX-4 [J]. Materials Science and Engineering A, 2003, 340: 88-102.
- [18] Gunturi S S K, MacLachlan D W, Knowles D M. Anisotropic creep in CMSX-4 in orientations distant from $\langle 001 \rangle$ [J]. Materials Science and Engineering A, 2000, 289: 289-298.
- [19] MacLachlan D W, Wrieth LW. Constitutive modeling of anisotropic creep deformation in single crystal blade alloys SRR99 and CMSX-4 [J]. International Journal of Plasticity, 2001, 17: 441-467.
- [20] Matan N, Cox D C, Rae C M F, et al. On the kinetics of rafting in CMSX-4 superalloy single crystals [J]. Acta mater, 1999, 47(7): 2031-2045.
- [21] Peng Z, Glatzel U, Link T. Change of phase morphologies during creep of CMSX-4 at 1253K [J]. Scripta Materialia, 1996, 34(2): 221-226.
- [22] Levkovitch V, Sievert R, Svendsen B. Simulation of deformation and lifetime behavior of a Fcc single crystal superalloy at high temperature under low-cycle fatigue loading [J]. International Journal of Fatigue, 2006, 28: 1791-1802.