

激光选区熔化 GH3536 合金的晶体塑性有限元模拟

莫文龙^{1,2,3} 谢怡枫^{1,2,3} 曹伟^{1,2,3} 李伟^{1,2,3} 段伟^{1,2,3}

(1. 武汉科技大学机械工程学院冶金装备及其控制教育部重点实验室, 武汉 430081; 2. 武汉科技大学机械传动与制造工程湖北重点实验室, 武汉 430081; 3. 武汉科技大学精密制造研究所, 武汉 430081)

摘要 结合晶体塑性有限元与内聚力模型, 模拟了激光选区熔化成形 GH3536 合金不同微观组织参数对沿晶断裂行为的影响。结果表明, 断裂行为与拉伸方向、晶粒尺寸和晶界角度有关。晶界断裂路径与拉伸方向成垂直关系, 建造方向力学性能强于扫描方向, 其抗拉强度分别为 706 MPa、758 MPa; 晶粒尺寸越小, 其力学性能和抗断裂能力越优异, 平均尺寸从 31.74 μm 、27.54 μm 细化至 25.18 μm , 抗拉强度分别从 653 MPa、698 MPa 提升至 712 MPa; 将大角度晶界占比从 0%、52.75% 调整至 86.61%, 抗拉强度从 650 MPa 提升至 670 MPa、711 MPa, 但大角度晶界占比的增大会加剧晶界损伤, 断裂失效应变显著降低。

关键词 激光选区熔化; GH3536 镍基高温合金; 晶体塑性有限元; 内聚力模型

中图分类号 TP311; TG665

文献标志码 A

DOI: 10.15980/j.tzzz.T20250153

Finite Element Simulation of Crystal Plasticity for GH3536 Alloy by Selective Laser Melting

MO Wenlong^{1,2,3}, XIE Yifeng^{1,2,3}, CAO Wei^{1,2,3}, LI Wei^{1,2,3}, DUAN Wei^{1,2,3}

(1. Key Laboratory of Metallurgical Equipment and Control Technology, Ministry of Education, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan 430081; 2. Hubei Key Laboratory of Mechanical Transmission and Manufacturing Engineering, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan 430081; 3. Precision Manufacturing Institute, Wuhan University of Science and Technology, Wuhan 430081)

Abstract: The influence of various microstructural parameters on intergranular fracture behavior of GH3536 superalloy fabricated by selective laser melting (SLM) was investigated combined with crystal plasticity finite element and cohesive zone model. The results reveal that fracture behavior is correlated with tensile direction, grain size, and grain boundary (GB) misorientation. The intergranular fracture path along the grain boundary is perpendicular to the tensile direction, and mechanical properties along building direction is superior to those of ones along scanning direction, with tensile strength of 758 MPa and 706 MPa, respectively. With reduction of grain size, mechanical performance and fracture resistance are enhanced, where the average grain size is decreased from 31.74 μm and 27.54 μm to 25.18 μm , and tensile strength is increased from 653 MPa and 698 MPa to 712 MPa. With the proportion of HAGB rising from 0% and 52.75% to 86.61%, tensile strength is enhanced from 650 MPa to 670 MPa and 711 MPa, which exacerbates GB damage, leading to significant reduction in fracture failure strain.

Key Words: SLM, GH3536 Nickel-based Superalloy, Crystal Plasticity Finite Element, Cohesive Zone Model

GH3536 镍基高温合金凭借其出色的抗氧化、耐腐蚀性以及力学性能, 被广泛应用于制造航空发动机燃烧室部件、涡轮叶片、导向叶片等高温部件^[1-2]。然而, 该合金熔点高、加工难度大且部件构造复杂, 传统的机械加工方法易出现生产效率低下、工艺流程冗长以及成品质量不佳等挑战^[3-4]。激光选区熔化 (Selective laser melting, SLM) 作为一种先进的成形技术, 以其独

特的工艺优势, 为实现 GH3536 合金零件的高效、低成本制造提供了可能。目前, SLM 成形镍基高温合金已获得广泛的关注^[5-6]。

在 SLM 成形工艺中, 熔池逐层累积构建, 晶粒倾向于沿着热量传递的路径进行生长, 导致其组织在扫描方向呈细小的等轴晶, 在建造方向为柱状晶。SLM 成形零件在力学性能上表现出各向异性的特点^[7], 同

收稿日期: 2025-04-09; 修订日期: 2025-05-23

基金项目: 湖北省重点研发计划资助项目 (2024BAB007); 国家自然科学基金资助项目 (52175359)

第一作者: 莫文龙, 男, 2000 年出生, 硕士研究生, E-mail: 3148723839@qq.com

通信作者: 李伟, 男, 1989 年出生, 副教授, E-mail: lwliwei1989@163.com

段伟, 男, 1983 年出生, 副教授, E-mail: duanwei@wust.edu.cn

引用格式: 莫文龙, 谢怡枫, 曹伟, 等. 激光选区熔化 GH3536 合金的晶体塑性有限元模拟[J]. 特种铸造及有色合金, 2026, 46(7): 1 028-1 035.

MO W L, XIE Y F, CAO W, et al. Finite element simulation of crystal plasticity for GH3536 alloy by selective laser melting[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2026, 46(7): 1 028-1 035.

时,SLM激光能量呈高斯分布且激光快速移动,导致晶粒尺寸的不均匀性,而不同的晶粒尺寸可能会带来力学性能的差异^[8]。晶界角也是衡量晶粒结构和特征的另一重要参数指标,SLM成形过程中因为激光能量密度的提升以及重熔现象会导致大角度晶界比例的增加。大角度晶界对材料强度和晶界损伤具有一定的影响,会加剧晶界处的应力集中,影响材料的整体变形行为以及裂纹扩展路径^[9]。鉴于GH3536合金在SLM过程中易受上述多种因素影响,可能导致内部裂纹萌生、扩展乃至层裂,进而引发断裂失效。

目前,国内外针对SLM成形GH3536合金的研究多集中于宏观试验,难以量化单一元素的影响,因此对单一元素的研究易受到其他因素的影响。晶体塑性有限元方法(Crystal plasticity finite element method, CPFEM)作为一种能够反映材料变形过程中微结构效应的分析方法,可以量化单一元素的影响,同时观察到晶粒尺度下的塑性变形全过程,保证研究准确性的同时,还具有显著的经济性和灵活性,被广泛用于研究晶体组织的非均匀塑性变形。胡鸿彪等^[10]使用CPFEM对镁合金进行了研究,LIU L Y等^[11]使用CPFEM研究了石墨烯对铝合金裂纹扩展的影响。但目前使用CPFEM对SLM成形GH3536合金的研究鲜有报道。此外,在传统CPFEM研究中,模拟通常被简化为仅考虑晶粒内部的应力应变响应而忽略晶界的影响,然而晶界处通常是多晶材料损伤和微裂纹萌生的源头,晶界的损伤与失效会引发微裂纹的萌生与扩展,最终加速断裂并缩短部件服役寿命^[12],要完整理解微裂纹沿晶界萌生与扩展的机制,需要对晶界进行考虑。内聚区模型(Cohesive zone model, CZM)通过结合CPFEM来模拟整体变形行为,为模拟晶粒内部裂纹扩展提供了一种有效的计算框架。王姝予等^[13]在模拟中将Cohesive单元插入晶粒间以模拟晶界,SUN J Y等^[14]将CPFEM与SLM相结合,准确预测了工程材料的损伤位置。目前对SLM成形镍基高温合金的CPFEM研究着重于晶粒内部的研究,对晶界的研究报道很少,同时对晶粒形貌、晶粒尺寸和晶界角度等微观因素对沿晶断裂行为的影响尚未明晰。因此,对GH3536合金的微观裂纹萌生展开研究,建立晶粒尺度的晶体塑性有限元模型对裂纹萌生和扩展进行模拟对保证其可靠性具有积极意义。

本研究根据位错滑移机制的晶体塑性有限元方法,提出一种结合CPFEM-CZM三维多晶模型构建方法,以研究SLM成形GH3536合金细观尺度下沿晶裂纹断裂行为。为实体单元赋予晶体塑性有限元模型,在晶粒微观结构的晶界网格中插入内聚力单元以模拟损伤演化和裂纹扩展,并通过试验与数值模拟的应力-应变曲

线对比证明其可靠性。最后,利用结合CPFEM-CZM的三维多晶模型对拉伸方向、晶粒尺寸和晶界角度等影响沿晶断裂的因素进行探讨,最终实现对GH3536合金裂纹萌生、扩展到断裂全过程的模拟和解释。

1 晶体塑性本构模型

目前,CPFEM理论经过不断的丰富和发展,适用于各类金属材料,从细观尺度上描述其力学响应和变形机理。晶体的总变形包括 F^p 作用下从初始构型到中间构型的塑性变形和 F^e 作用下从中间构型到当前构型的弹性变形两部分^[15],总变形梯度为:

$$F = F^e \cdot F^p \quad (1)$$

速度梯度为:

$$L^e = \dot{F}^e \cdot (F^e)^{-1} \quad (2)$$

$$L = \dot{F} \cdot (F)^{-1} = L^e + L^p \quad (3)$$

式中, L^e 为弹性速度梯度张量; L^p 为塑性速度梯度张量。室温下,GH3536合金的塑性变形主要由位错滑移引起,因此 L^p 可以写为:

$$L^p = \sum_{a=1}^N \dot{\gamma}^a m^a \otimes n^a \quad (4)$$

式中, $\dot{\gamma}^a$ 为第 a 个滑移系上的滑移剪切率; m^a 为滑移系的滑移方向; n^a 为滑移面法线方向; N 为滑移系数数。

通过Schmid定律,单个滑移系位错运动的剪切应变率和作用在该滑移系上的分切应力与位错开动需要克服的临界分切应力之间满足幂率关系:

$$\dot{\gamma}^a = \dot{\gamma}_0^a \left(\frac{\tau^a}{g^a} \right)^{n-1} \quad (5)$$

式中, τ^a 为该滑移系上的分切应力; g^a 为位错开动需要克服的临界分切应力。在晶体塑性变形过程中,位错需要持续克服滑移阻力。不同滑移系的应变行为与其位错运动存在一定关联,其滑移阻力为:

$$\dot{g}^a = \sum_{\beta=1}^N H^{a\beta} |\dot{\gamma}^\beta| \quad (6)$$

式中, $H^{a\beta}$ 为硬化系数,分为自硬化 H^{aa} 和潜硬化 $H^{a\beta}$,分别表示位错滑移对自身和其他滑移系位错运动阻力的影响; $\dot{\gamma}^\beta$ 为第 β 滑移系的滑移剪切应变率。PEIRCE D等^[16]提出了一种更为简单的自硬化模量假设:

$$H^{aa} = H_0 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{H_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right) \quad (7)$$

式中, H_0 为初始硬化模量; τ_s 为饱和屈服应力; τ_0 为初始临界切应力,为全部滑移系累计滑移量,可计算为:

$$\gamma = \sum_{a=1}^N \int_0^t |\dot{\gamma}^{(a)}| dt \quad (8)$$

潜硬化模量与自硬化模量之间满足下述关系:

$$H^{a\beta} = q H^{aa} \quad (9)$$

式中, q 为比例系数, 一般取 1~1.4。

2 内聚力单元损伤演化模型

内聚力单元可以被用于模拟多晶材料的晶界损伤和裂纹扩展, 在多晶模型的晶界处插入内聚力单元来模拟其拉伸断裂, 内聚力单元使用牵引-分离定律 (TSL) 定义裂纹面张开位移与内聚力之间的函数关系, 见图 1。 δ 为内聚力单元节点相对分离位移, t 为牵引力大小。双线性 TSL 包含线弹性阶段和损伤阶段: 在线弹性阶段, 力随张开位移增大而增大, 其斜率即为初始刚度。当张开位移达到损伤起始位移时, 力达到最大值。当位移超过损伤起始位移时, 位移与力呈现负相关关系, 损伤参数从 0 逐渐增大到 1, 而刚度则逐渐退化至 0。当张开位移等于总损伤位移时, 内聚力区发生破坏并向前扩展。

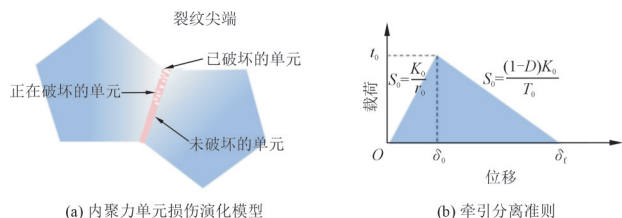


图 1 内聚力模型

Fig.1 Cohesive zone model

n, s, t 依次为内聚力单元 1 个法线方向和 2 个正交剪切方向, 3 个方向的名义应变和相对分离位移之间的关系可表示为:

$$\begin{Bmatrix} \delta^n \\ \delta^s \\ \delta^t \end{Bmatrix} = T_0 \begin{Bmatrix} \epsilon^n \\ \epsilon^s \\ \epsilon^t \end{Bmatrix} \quad (10)$$

式中, $\delta^n, \delta^s, \delta^t$ 分别为 n, s, t 方向的节点位移; $\epsilon^n, \epsilon^s, \epsilon^t$ 为 3 个方向上内聚力单元的应变; T_0 为内聚力单元的本构厚度而非真实厚度, 一般设为 1。忽略拉伸和剪切的耦合, 内聚力单元受到的牵引力 F 与名义应变 ϵ 的关系通过弹性矩阵来定义:

$$F = \begin{Bmatrix} F_n \\ F_s \\ F_t \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} K_0^{nn} & 0 & 0 \\ 0 & K_0^{ss} & 0 \\ 0 & 0 & K_0^{tt} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \epsilon_n \\ \epsilon_s \\ \epsilon_t \end{Bmatrix} = K_\epsilon \quad (11)$$

式中, F_n, F_s, F_t 分别为 n, s, t 方向上的牵引力; $K_0^{nn}, K_0^{ss}, K_0^{tt}$ 分别为 3 个方向的初始刚度, 其关系定义为:

$$K_0^{nn} = \frac{E}{T_c} T_0, K_0^{ss} = \frac{G}{T_c} T_0, K_0^{tt} = \frac{G}{T_c} T_0 \quad (12)$$

式中, E 为弹性模量; G 为切变模量; T_c 为内聚力单元的初始几何厚度。

牵引分离曲线的初始斜率 S_0 与初始刚度 K_0 之间满足:

$$S_0 = \frac{K_0}{T_0} \quad (13)$$

图 1b 中的峰值表示损伤的开始, 峰值点的横坐标表示初始损伤位移 δ_0 , 本研究在模拟过程中采用最大名义应变准则:

$$\max \left\{ \frac{\langle \epsilon_n \rangle}{\epsilon_n^0}, \frac{\epsilon_s}{\epsilon_s^0}, \frac{\epsilon_t}{\epsilon_t^0} \right\} = 1 \quad (14)$$

式中, $\epsilon_n^0, \epsilon_s^0, \epsilon_t^0$ 依次为纯张力和剪切载荷下损伤起始的临界应变。最大名义应力准则, 某一个方向的力达到最大值时, 材料就开始损伤, 随着内聚力单元的相对位移不断增大, 牵引力开始下降, 在曲线到达某一临界点发生完全开裂, 损伤演化过程可描述为:

$$F = (1 - D) \bar{t}, K = (1 - D) K_0 \quad (15)$$

式中, $\bar{t}$ 为未考虑损伤时内聚力单元的牵引力; D 为损伤演化变量, 其值范围是 0~1。损伤演化可描述为:

$$D = \begin{cases} 0 & \delta < \delta_0 \\ \frac{\delta_f(\delta - \delta_0)}{\delta(\delta_f - \delta_0)} & \delta \geq \delta_0 \end{cases} \quad (16)$$

式中, δ_0 为模型开始发生损伤时的相对分离位移; δ_f 为模型最终断裂的节点位移。

3 有限元模型建立

SLM 成形 GH3536 合金在扫描方向、建造方向具有不同的晶粒形貌, 这种形貌与性能差异主要是 SLM “自上而下” 的传热特点, 导致沿建造方向生长为柱状晶组织, 而扫描方向则呈现出等轴晶组织^[17]。为建立符合实际晶粒形貌的数值模型, 同时考虑计算精度和计算成本, 使用 NEPER 软件建立了 100 颗晶粒的多晶模型来模拟 GH3536 合金试样的 RVE (Representative volume element, 代表性体积单元): 在建造方向为柱状晶组织, 在扫描方向则为等轴晶组织, 见图 2。多晶模型基于位错滑移的用户自定义子程序 UMAT 来模拟晶粒的塑性变形。在晶界处插入 Cohesive 单元以实现沿晶断裂, 使用 Cohesive 单元厚度足够

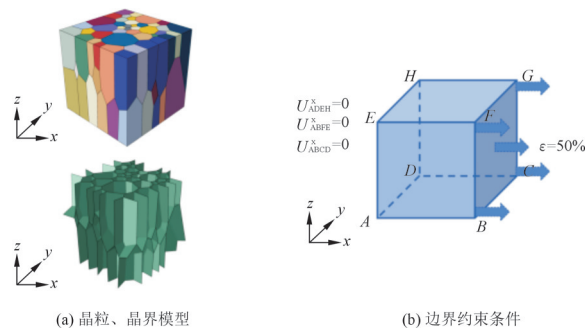


图 2 晶粒、晶界模型与模型边界条件

Fig.2 Grain, grain boundary model and model boundary conditions

小,设置为0.000 1 mm,多晶模型的边界条件见图 2b。

为保证 CPFEM-CZM 结合模拟 SLM 成形 GH3536 合金力学响应的可靠性,将模拟与试验的应力-应变曲线对比。需要确定的材料参数主要包括:SLM 成形 GH3536 合金的弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 、 C_{44} ,初始硬化模量 h_0 、初始临界切应力 τ_0 、饱和流动剪切应力 τ_s 、

Cohesive 单元的弹性模量 E 、最大牵引力 F 与初始损伤位移 δ_f 等^[18]。拟合得出符合本研究中 SLM 成形 GH3536 合金的晶体塑性参数与 Cohesive 单元参数,见表 1,其应力-应变曲线见图 3。可以看出,模拟应力-应变曲线与试验曲线拟合程度良好^[2],证明数值模型具有较高的可靠性。

表 1 CPFEM-CZM 参数

Tab.1 CPFEM-CZM parameters

C_{11} /GPa	C_{12} /GPa	C_{44} /GPa	m	$\gamma_0^{(a)}$	h_0 /MPa	τ_s /MPa	τ_0 /MPa	q	E /GPa	F /N	δ_f /mm
299.27	161.15	69.06	10	0.002	90	200	106	1	200	900	0.001 8

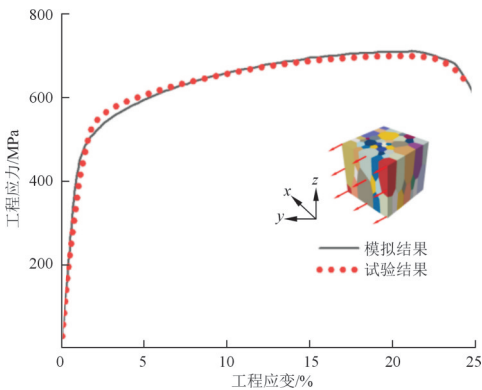


图 3 试验与模拟力学响应对比

Fig.3 Comparison of experimental and simulated mechanical response

4 数值模拟与讨论

4.1 不同拉伸方向的影响

对不同拉伸方向的晶界损伤和晶粒应力进行分析,模拟得到 15% 应变下晶粒的应力云图,见图 4。建造方向 RVE 应力范围为 395~1 063 MPa,该区域最大应力和最小应力相差 62.84%,这一数值能更好地反映应力极值间的差距。扫描方向 RVE 应力范围为 393~1 019 MPa,其最大应力和最小应力相差 61.43%,建造方向与扫描方向应力水平相近。由云图可观察到晶粒交界处相对于晶内呈现出更大的应力,因为晶界相较于晶粒内部能够承受高应力并促进晶间变形的协调。此外,还观察到不同晶粒间被内聚力单元隔绝的清晰边界,这是由于各晶粒的取向和尺寸以及晶界的阻挡和变形协调作用,晶界两侧不同晶粒的应力状态分布存在明显差异。图 4 验证了考虑晶界的 CZM-CPFEM 模型可以很好地反映真实的微观组织演化行为与晶界势垒效应。

图 5 为 15% 应变下不同拉伸方向晶界损伤演变的应变能耗散密度(SDEG)值,可以观察到其中少部分晶界率先进入损伤阶段(箭头处),大部分晶界处于未损伤阶段。在相同应变下,沿扫描方向的晶界损伤明显

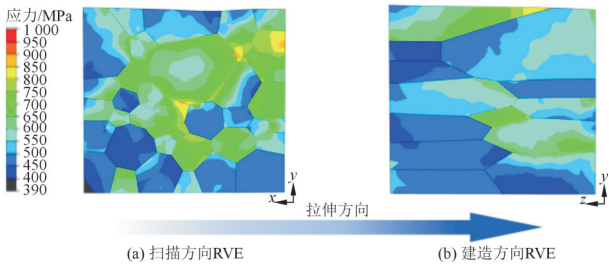


图 4 15% 应变下晶粒应力云图

Fig.4 Stress nephogram of grains at 15% strain

高于建造方向。相对于单晶界,多晶界交汇处由于晶粒滑移在晶界处的积累加剧了晶界处的变形和应力,最终增加了损伤的可能性。同时,与拉伸方向垂直的晶界通常会率先出现损伤,而平行于拉伸方向的晶界表现出最小的损伤,这是由于法向位置的晶界更容易受到载荷,这在沿扫描方向拉伸的晶界表现得尤为明显。

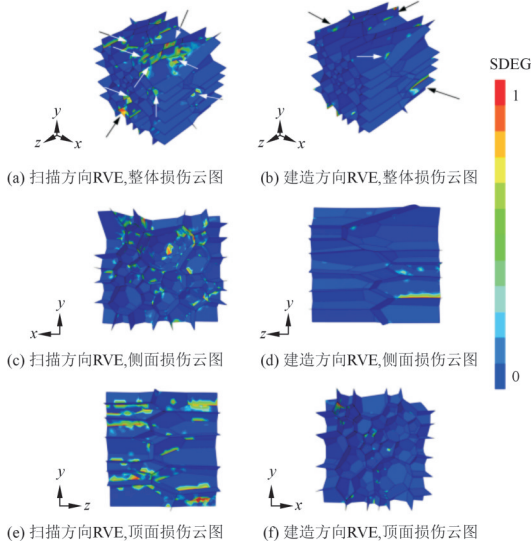


图 5 15% 应变下晶界损伤云图

Fig.5 Damage nephogram of grain boundary at 15% strain

图 6 为不同拉伸方向 RVE 在拉伸中得到的结果。从图 6a 可知,建造方向具有更高的强度和伸长率,其模拟结果与试验结果保持一致^[2],进一步证明几何模型具备较高的可靠性。从图 6b 可以看出,建造方向的屈服强度和抗拉强度均高于扫描方向,沿扫描方向和建造

方向屈服强度分别为 454 MPa、457 MPa,而抗拉强度分别为 706 MPa、758 MPa。通过提取晶界损伤单元数目,分析了 2 个 RVE 的晶界单元破坏的占比情况,见图 6c。可见沿着扫描方向 RVE 晶界单元破坏占比明显高于建造方向。从不同拉伸方向 RVE 的断面图可以看出,建造方向 RVE 的断面不平整,而扫描方向 RVE 的断面相对平整。由图 6d 可知,在相同应变下,扫描方向拉伸破坏占比

比高于沿建造方向。这是由于沿扫描方向的晶界多数与拉伸方向垂直,而沿建造方向 RVE 的晶界多数与拉伸方向平行,只有少部分晶界与拉伸方向保持一定角度,这部分晶界在拉伸过程中相对于平行方向晶界容易发生破坏,但相对于垂直于拉伸方向的晶界抵抗破坏能力更强,最终沿扫描方向 RVE 导致拉伸破坏占比较高,这与图 6c 中 RVE 的断面图以及图 5 晶界损伤云图一致。

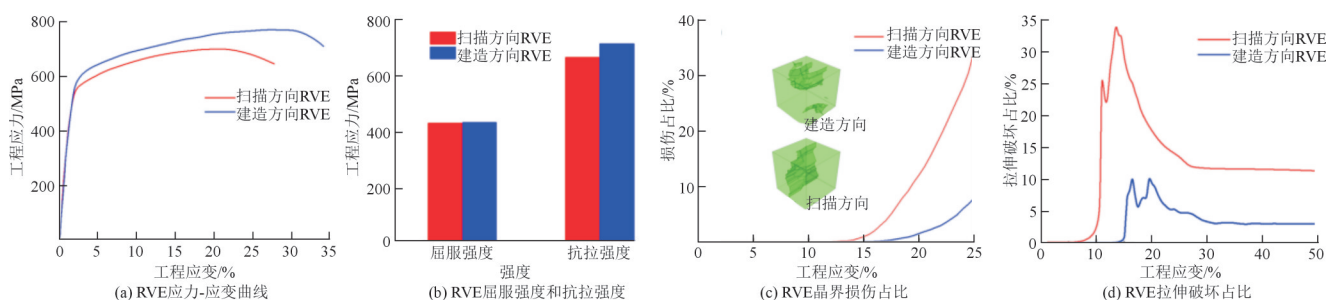


图 6 不同拉伸方向 RVE 结果
Fig.6 RVE results in different tensile directions

4.2 不同晶粒尺寸的影响

为研究晶粒尺寸对沿晶断裂的影响,在相同大小的立方体中分别划分出 50、75 与 100 个晶粒(依次记为 RVE-100、RVE-75 与 RVE-50),在模拟过程中使用相

同的网格大小,以消除网格尺寸的影响。同时为排除晶粒取向对晶界损伤的影响,基于 Matlab 平台的 MTEX 工具箱对晶粒取向进行可视化,3 个 RVE 的极图取向分布基本一致^[19],见图 7。

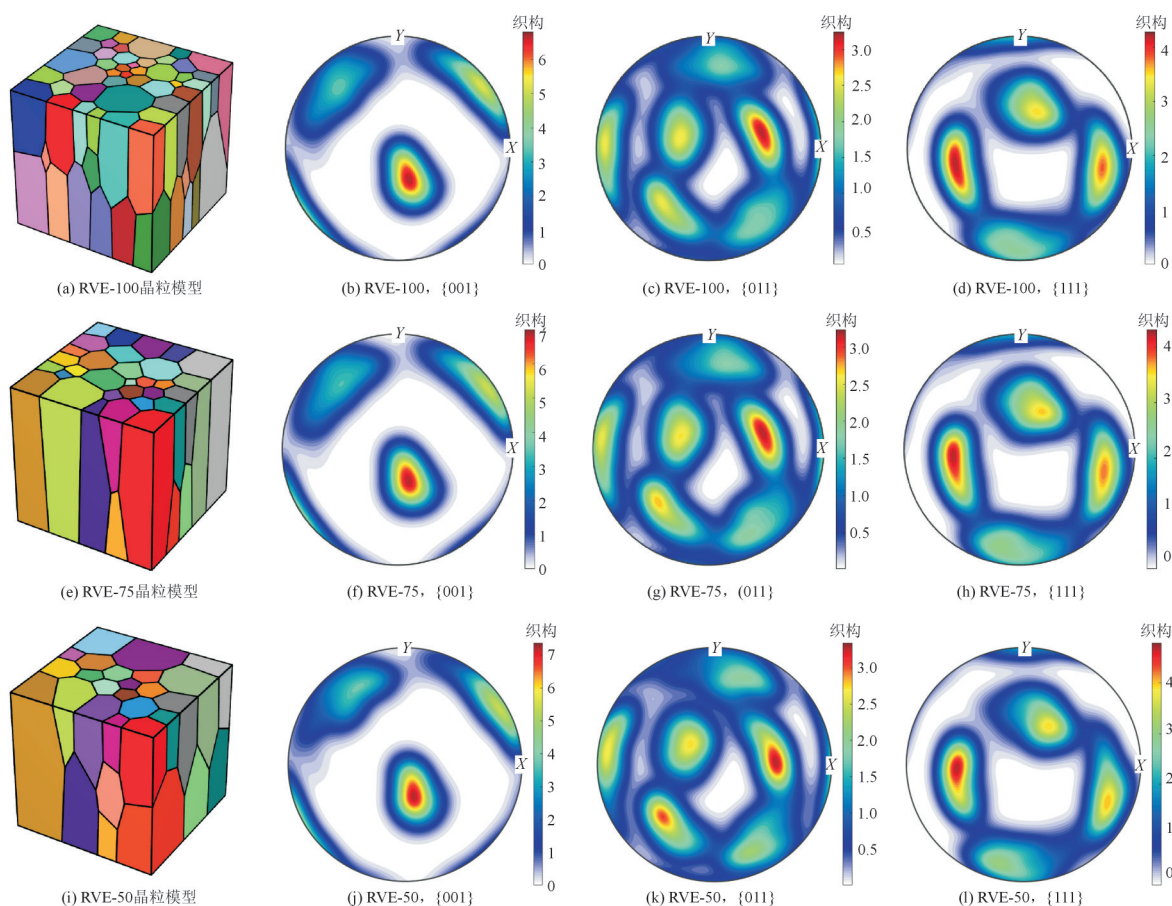


图 7 不同晶粒尺寸 RVE 模型与晶体取向分布

Fig.7 RVE model with different grain sizes and crystal orientation distributions

图 8 为 15% 应变下 RVE 晶粒的应力云图以及晶界的损伤情况。可以观察到 3 个 RVE 应力分布不均匀, RVE-100、RVE-75 和 RVE-50 的应力范围分别为 393~1 019 MPa、396~939 MPa 和 402~932 MPa, 其应力处于同一水平, 但晶粒的细化会小幅提升 RVE 的应力水平。同时可以观察到 RVE-100 晶界数量明

显多于 RVE-75, 而 RVE-50 晶界数量最少, 但晶界数量的提升一定程度上增加了晶界损伤的可能性, 在相同应变下 RVE-100 晶界单元出现损伤区域最多, 这是由于 RVE-100 晶界分布均匀, 应力可以更加均匀地传递, 而 RVE-50 晶界仅有少部分区域出现损伤。

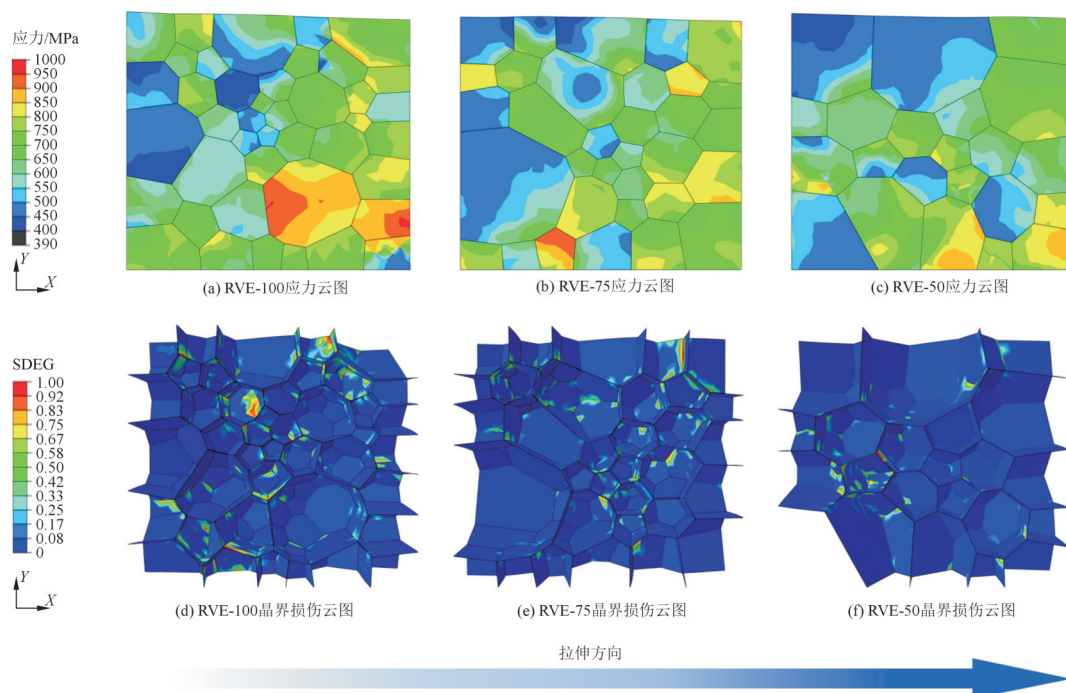


图 8 15% 应变下晶粒应力云图和损伤分布

Fig.8 Grain stress nephogram and damage distribution at 15% strain

图 9 为不同晶粒尺寸的 RVE 拉伸结果。从图 9a 可以看出, RVE-50、RVE-75 与 RVE-100 平均直径分别为 31.74、27.54 和 25.18 μm , RVE-100、RVE-75 小晶粒占比明显高于 RVE-50, RVE-50 中出现较大尺寸晶粒的可能性更高。从图 9b 可以看出, 不同晶粒尺寸的 RVE 体现出不同的力学性能。从图 9c 可知, RVE-50、RVE-75 与 RVE-100 屈服强度分别为 420、453 和 456 MPa, 而抗拉强度分别为 653、698 和 712 MPa。随晶粒尺寸减小, 屈服强度和抗拉强度增加, 这与 Hall-

Petch 效应一致。晶粒尺寸的减小会造成材料强度增加, 这是由于当晶粒尺寸减小时, 晶界数量增加, 位错在穿越晶界时需要克服更大的阻力, 从而导致材料强度的提高^[20]。从图 9d 可以看出, RVE-100 的晶界破坏比例明显高于 RVE-75 和 RVE-50 的晶界, 这是由于晶粒尺寸的减小增加了晶界数量, 可以有效分散应力集中, 增加晶界开裂点, 但密集的晶界缓解了裂纹的进一步扩大, 进而提高材料的韧性和抗变形性能, 这在图 8b 中得到较好反映。

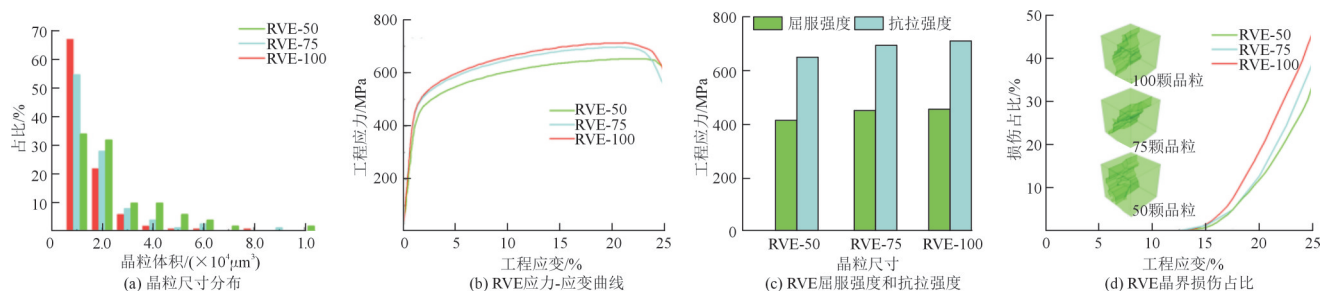


图 9 不同晶粒尺寸的 RVE 拉伸结果

Fig.9 RVE tensile results with different grain sizes

4.3 不同晶界角度的影响

研究发现晶界角度与晶界损伤具有一定的关联^[21]。为深入研究晶界角度对力学性能的影响,本研究将考虑晶界取向差角的晶体塑性本构关系写入 UMAT 子程序,并控制其内部晶界的取向差角来研究晶界取向差角对裂纹萌生的影响:RVE-1 晶界角度均为小角度晶界,RVE-2 晶界均为大角度晶界,但取向差角不超过 30°,RVE-3 晶界取向差角均为大角度晶界,且相较于 RVE-2 晶界取向差角进一步提升。

图 10 为 3 个 RVE 在 15% 应变下的晶粒应力与晶界损伤云图。可以看出,RVE-1 晶粒出现应力集中位置相对较少,RVE-3 则出现大量的应力集中,在 15% 应变下晶粒的应力云图,RVE-1 应力范围为 513~667 MPa,区域内的最大应力和最小应力相差 23.09%,RVE-2 应力范围为 393~1 019 MPa,其最大和最小应力相差 61.43%,而 RVE-3 应力范围为 352~997 MPa,

最大和最小应力相差高达 64.7%。在 3 个 RVE 相同区域,大角度晶界导致应力水平显著提升,小角度晶界相邻的晶粒应力水平则相对较低。此外,在 15% 应变下,RVE-1 晶界几乎无损伤,RVE-2 晶界出现较少的损伤,RVE-3 晶界出现大量的损伤。

图 11 为不同晶界角度的 RVE 在拉伸中得到的结果。图 11a 中,RVE-1 大角度晶界占比为 0%,而 RVE-2 与 RVE-3 的大角度晶界占比分别为 52.75%、86.61%。从图 11b 可观察到,随晶界角度增大,屈服强度和抗拉强度均得到提升,但是断裂失效应变会显著降低,而 RVE-1 未见显著的断裂阶段,但其应力水平出现缓慢下降,这是由于插入晶界的 Cohesive 单元刚度降低,其应力水平开始下降导致 RVE 整体应力水平下降。通过图 11c 可知,RVE-1、RVE-2 与 RVE-3 屈服强度分别为 435、446 和 493 MPa,抗拉强度分别为 650、670 和 711 MPa。因此,大角度晶界对力学性能与裂纹扩展有显著影响,这是由于晶界能阻碍位错滑移运动,

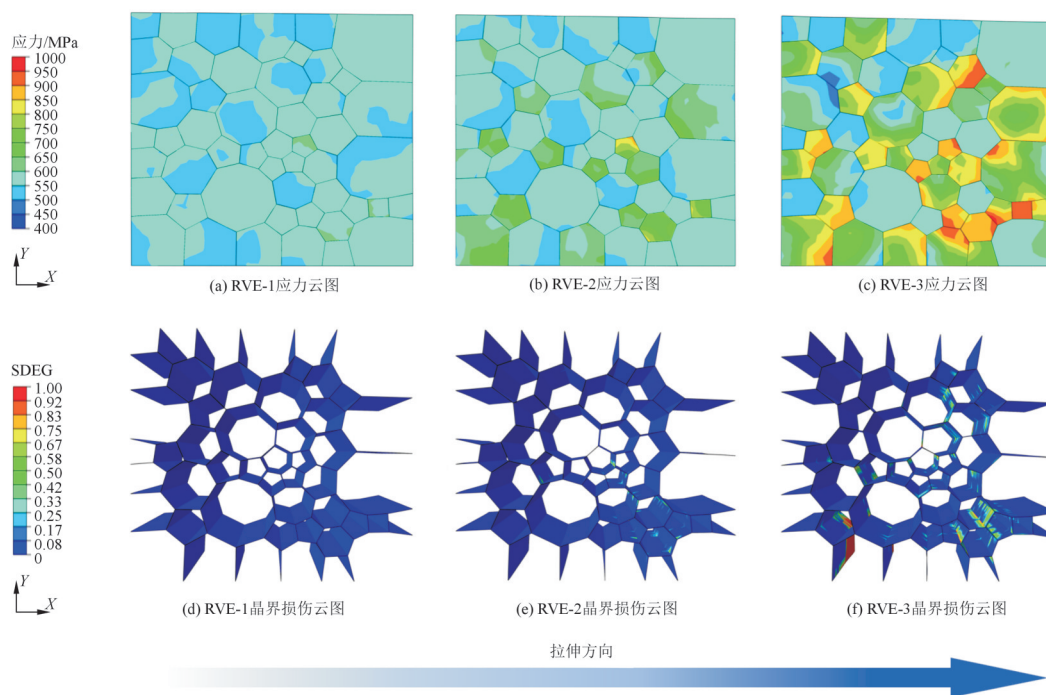


图 10 不同晶界角度、15% 应变下晶粒应力云图和晶界损伤

Fig.10 Stress nephogram of grains and grain boundary damage at 15% strain for different crystal orientations

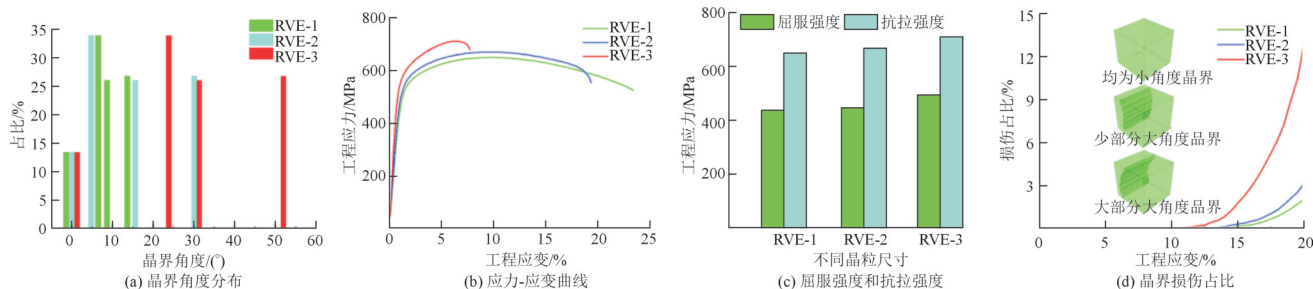


图 11 不同晶界角度的 RVE 拉伸结果

Fig.11 RVE tensile results with different crystal orientations

大角度晶界由于结构复杂,对位错的阻碍作用更强,从而提高材料的屈服强度和抗拉强度。小角度晶界由于结构完整有序,能量较低,对位错的阻碍作用较小,因此对强度的贡献也较小^[22-23]。从图 11d 可知,在相同应变水平下,大角度晶界为代表的 RVE-3 损伤单元数目最多,其次是 RVE-2、RVE-1, RVE-1 由于均为小角度晶界,晶界损伤占比较低。从图 11d 可以观察到 RVE 的断裂位置不同,这表明晶体取向的变化对裂纹萌生位置会有明显影响,同时 RVE-1 由于主要为小角度晶界,因此仅出现少量裂纹。

5 结 论

(1)沿不同方向拉伸模拟可知,晶界相对于晶内会出现更大的应力,多晶界交汇处会率先出现应力集中,微裂纹通常在多晶界交汇处萌生扩展。SLM 成形 GH3536 合金具有各向异性的原因可能是晶界损伤位置与拉伸方向呈垂直关系,扫描方向等轴晶组织晶界断面平整,而建造方向柱状晶组织晶界断面凹凸不平不利于裂纹的传递。

(2)在相同的晶体取向,晶粒尺寸与力学性能呈现显著的负相关关系。晶粒平均尺寸由 31.74 μm 细化到 27.54 μm 再到 25.18 μm 时,其抗拉强度提高,分别为 653、698 和 712 MPa。随晶粒尺寸细化,其力学性能和抗断裂能力显著提升。

(3)晶界角度对力学行为同样具有重要影响,通过提升大角度晶界比例从 0%、52.75% 提升至 86.61%,其抗拉强度逐步从 650 MPa 提升至 670 MPa、711 MPa,但大角度晶界会加剧晶间应力集中,增大晶界损伤,断裂失效应变会显著降低。

参 考 文 献

- [1] CHEN N, ZHENG D, NIU P D, et al. Laser powder bed fusion of GH3536 nickel-based superalloys: Processing parameters, microstructure and mechanical properties[J]. Materials Characterization, 2023, 202: 113 018.
- [2] 程坦,张振雨,刘演冰,等.在线稳恒磁场对激光选区熔化成形 GH3536 组织和性能各向异性的影响[J].中国激光,2022,49(8): 184-194.
- [3] REN Q, CHEN J T, LU J X, et al. In-situ study of microstructure and mechanical properties of GH3536 alloy manufactured by selective laser melting at 750 $^{\circ}\text{C}$ [J]. Materials Science and Engineering, 2024, A900: 146 452.
- [4] LIU W H, WANG P C, SHI W T, et al. Achieving ultrafine grain strengthening C_t/SiC -GH3536 joints brazed with Cu-Ti-WC composite interlayer via cold spray additive manufacturing[J]. Additive Manufacturing, 2024, 89:104 258.
- [5] SUN S S, TENG Q, XIE Y, et al. Two-step heat treatment for laser powder bed fusion of a nickel-based superalloy with simultane-

- ously enhanced tensile strength and ductility[J]. Additive Manufacturing, 2021, 46: 102 168.
- [6] 王颖琦,彭凡,项炜明,等.扫描速度对 SLM 成形 Ti-6Al-4V 合金组织性能影响[J].特种铸造及有色合金,2025,45(3):390-396.
- [7] DAI H L, DI S C, XUE Y Z. Microscopic mechanism of plastic heterogeneous deformation of columnar-grained polycrystalline ice[J]. Cold Regions Science and Technology, 2024, 222:104 183.
- [8] TONG X, LI Y, FU M W. Modelling of grain size effects in progressive microforming using CPFEM[J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2024, 267: 108 971.
- [9] CHEN J B, HUANG S S, CHEN N, et al. Effect of forming angle on the microstructure and properties of GH3536 nickel-based superalloy formed by SLM[J]. Rapid Prototyping Journal, 2024, 30(2): 393-403.
- [10] 胡鸿彪,金朝阳.晶粒尺寸分布对 AZ80 镁合金力学性能的影响[J].塑性工程学报,2024,31(12):204-214.
- [11] LIU L Y, YANG Q S, LIU X, et al. Modeling damage evolution of graphene/aluminum composites considering crystal cracking and interface failure[J]. Composite Structures, 2021, 267: 113 863.
- [12] 王彪,王姝予,熊宇凯,等.梯度晶粒结构材料拉伸断裂行为的晶体塑性有限元模拟[J].力学学报,2024,56(8):2 271-2 281.
- [13] 王姝予,宋世杰,陆晓翀,等.CrMnFeCoNi 高熵合金拉伸断裂的晶体塑性有限元模拟[J].机械工程学报,2021,57(22):43-51.
- [14] SUN J Y, QIAN G A, LI J H, et al. A framework to simulate the crack initiation and propagation in very-high-cycle fatigue of an additively manufactured AlSi10Mg alloy[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2023, 175: 105 293.
- [15] 赵宏伟,杨贤樑,张嵩,等.基于晶体塑性的 DD6 单晶合金力学性能及织构演化[J].特种铸造及有色合金,2024,44(10):1 382-1 387.
- [16] PEIRCE D, ASARO R J, NEEDLEMAN A. An analysis of non-uniform and localized deformation in ductile single crystals[J]. Acta Metallurgica, 1982, 30(6):1 087-1 119.
- [17] LIU Y, PANG X, HE S, et al. In-situ formation of AlN nanoparticles in NiAl-strengthened ferritic alloy with enhanced high-temperature mechanical properties via SLM fabrication[J]. Materials Science and Engineering, 2024, A899:146 460.
- [18] 郑战光,孙煜航,孙腾,等.应变速率对多晶纯铜晶格应变影响的数值模拟研究[J].塑性工程学报,2025,32(1):152-160.
- [19] JIANG M Y, FAN Z X, KRUCH S, et al. Grain size effect of FCC polycrystal: A new CPFEM approach based on surface geometrically necessary dislocations[J]. International Journal of Plasticity, 2022, 150: 103 181.
- [20] CAI W, SUN C Y, WANG C H, et al. Modelling of the intergranular fracture of TWIP steels working at high temperature by using CZM-CPFE method[J]. International Journal of Plasticity, 2022, 156: 103 366.
- [21] GUO H H, LU R S, LIU F, et al. Microscopic fatigue crack propagation model for polycrystalline alloys[J]. International Journal of Fatigue, 2023, 170: 107 526.
- [22] ASIM U B, SIDDIQ M A, KARTAL M E. A CPFEM based study to understand the void growth in high strength dual-phase titanium alloy (Ti-10V-2Fe-3Al) [J]. International Journal of Plasticity, 2019, 122:188-211.
- [23] 陶蒙,于培师,赵军华.基于晶体塑性与内聚力模型的 Cu-Ni-Si 合金晶界起裂研究[J].机械强度,2024,46(5):1 184-1 191.

(编辑:彭瑾)