

镍基单晶高温合金 γ' 相筏化组织三维相场模拟研究

冯秋水 夏鹄翔 许庆彦 柳百成
(清华大学材料学院先进成形制造教育部重点实验室)

摘 要 针对镍基单晶高温合金的 γ' 相组织的筏化过程,建立了三维弹塑性多元多相场模型。该模型中包含多种元素组分的成分信息,并对 γ' 相的 4 种等效有序状态进行了区分。通过该模型实现了对 CMSX-4 合金在单轴压缩条件下的 γ' 相筏化组织演变的三维模拟,模拟结果与已有研究一致。分析了筏化过程中的元素成分分布和力学分布信息。模拟结果表明,外载条件对不同元素的扩散情况产生了影响,塑性应变的分布则影响了弹性驱动力的分布情况,在共同作用下, γ' 相形成了筏化组织。

关键词 高温合金;相场模拟;筏化

中图分类号 TG132.3⁺2;TM743;TP311 **文献标志码** A

DOI:10.15980/j.tzzz.2023.01.019 **开放科学(资源服务)标识码(OSID)**:



Three-dimensional Phase Field Simulation of γ' Rafting in Nickel-based Superalloys
Feng Qiushui, Xia Huxiang, Xu Qingyan, Liu Baicheng
(Key Laboratory for Advanced Materials Processing, Ministry of Education,
School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University)

Abstract: A three-dimensional multiphase-field model was established for γ' rafting process in nickel-based single crystal superalloys, which contains composition information of multiple elements, and equivalent order states of γ' phases was distinguished. 3D simulation of γ' phase rafting process in CMSX-4 alloy under a uniaxial compression condition was achieved through the model, and simulation results are consistent with existing rules. Elemental and mechanical distribution information were analyzed. The results indicate that the diffusion of different elements is affected by external loading conditions, and the distribution of elastic driving force is affected by plastic strain, leading to a rafting structure of γ' phase.

Key Words: Superalloy, Phase Field Simulation, Rafting

镍基单晶高温合金因其优异的高温性能,被广泛应用于制备航空发动机涡轮叶片,其高温力学性能与合金的元素组成和微观组织息息相关。因此,深入研究镍基单晶高温合金在服役过程中的元素分布和微观组织演变,有助于开发更高强度的单晶高温合金^[1],具有积极意义。

γ' 析出相作为单晶高温合金最主要的强化相之一,在蠕变过程中会形成沿某一方向定向伸长并相互聚合的筏化组织^[2]。根据筏化方向与外载方向之间的关系,筏化组织可分为与外载方向垂直的 *N* 型(Normal)筏化和与外载方向平行的 *P* 型(Parallel)筏化^[3]。同时,筏化组织会对合金的力学性能产生影响,如降低合金蠕变性能和塑性等^[4]。研究发现,筏化方向主要与晶格错配度和外载方向有关^[5,6],对这一现象的认知也经历了

从弹性到弹-塑性的转变^[7,8]。单一试验研究存在周期长、成本高、影响因素众多等问题,因此数值模拟研究逐渐成为一种重要的手段。

相场法作为一种微米尺度的确定性模拟方法,被广泛应用于镍基单晶高温合金 γ' 相筏化组织演变的相关模拟研究中。GURURAJAN M P 等^[9]和 WANG J C 等^[10]通过弹性相场模型模拟了 Ni-Al 二元体系下合金的筏化结构。MUSHONGERA L T 等^[11]将模型扩展到多元体系,以研究更多元素对 γ' 相相貌演变的影响。随着对筏化现象认知的转变,单一弹性相场模型无法满足模拟需求,晶体塑性模型被引入到相场模拟中以模拟筏化现象中的塑性应变。GAUBERT A 等^[12]引入唯象塑性本构模型模拟二元体系合金的蠕变过程,并对比弹性相场模拟结果,发现 γ 相基体通道中的塑性活动

收稿日期:2022-05-12;修改稿收到日期:2022-06-08
基金项目:国家科技重大专项基金资助项目(2017-VII-0008-0101,2017-VI-0003-0073)
第一作者简介:冯秋水,女,1997 年出生,硕士研究生,北京(100084),E-mail: fqs19@mails.tsinghua.edu.cn
通信作者:许庆彦,男,1971 年出生,教授,北京(100084),E-mail: scjxqy@mail.tsinghua.edu.cn
引用格式:冯秋水,夏鹄翔,许庆彦,等. 镍基单晶高温合金 γ' 相筏化组织三维相场模拟研究[J]. 特种铸造及有色合金,2023,43(1):92-98.
FENG Q S, XIA H X, XU Q Y, et al. Three-dimensional phase field simulation of γ' rafting in nickel-based superalloys[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2023, 43(1):92-98.

显著促进了筏化组织的形成。HUANG M S 等^[13]和 COTTURA M 等^[14]则采用计算位错的塑性模型模拟筏化演变过程,但对计算成本要求更高,因此限制了模拟区域的尺寸。

现有关于筏化现象的相场模拟研究中,大多数模型都被简化为二维平面上的 Ni-Al 二元体系,且不考虑 γ' 相因晶格有序性而产生的 4 种等效有序状态^[15]。本课题建立了三维弹塑性多元多相场模型,以 CMSX-4 合金为例,模拟了在高温低应力条件下 γ' 相的筏化组织,并对其微观组织形貌、元素分布情况和弹塑性力学信息进行了分析,旨在为其应用提供参考。

1 数理模型

本模型用于模拟在三维微米尺度空间内 γ 基体中的多个 γ' 相颗粒在高温低应力条件下发生定向伸长、彼此连接形成筏化结构的过程,并模拟演变过程中元素的成分分布和区域内的应力分布变化。

基于 STEINBACH I 等^[16]建立的弹性多元多相场模型,采用 Kim-Kim-Suzuki(KKS)^[17]模型对 γ' 相的 4 种等效有序状态进行了区分,并通过唯象塑性本构模型引入塑性应变。通过 C++ 编程自行编制模拟程序,实现三维框架下的弹塑性多元多相场模拟计算。

计算域内的总能量 F 的表达式为:

$$F(\{\varphi_a\}, \{\vec{c}_a\}) = \int_{\Omega} f(\{\varphi_a\}, \{\vec{c}_a\}) = \int_{\Omega} f^{\text{IN}} + f^{\text{CH}} + f^{\text{EL}} \quad (1)$$

式中, $\{\varphi_a(\vec{x}, t)\}$ ($\alpha=0, 1, 2, 3, 4$) 为随位置 $\vec{x}$ 和时间 t 变化的相场变量,其中 φ_0 代表 γ 相, $\varphi_{1\sim 4}$ 分别为具有不同有序状态的 γ' 相; $h(\varphi) = \sum_{a=1}^4 \varphi_a$ 为忽略有序差异的所有 γ' 相,因此 $\varphi_0 = 1 - h(\varphi)$; $\vec{c}_a(\vec{x}, t)$ 为各相中成分场变量; f 为能量密度函数,由界面能密度函数 f^{IN} 、化学自由能密度 f^{CH} 和弹性能密度 f^{EL} 组成。

界面能密度函数 f^{IN} 和化学自由能密度 f^{CH} 的求解为:

$$f^{\text{IN}} = \sum_{\alpha=0}^n \sum_{\beta=\alpha+1}^n \frac{\kappa_{\alpha\beta}}{\eta_{\alpha\beta}} \left\{ \frac{\eta_{\alpha\beta}^2}{\pi^2} |\nabla \varphi_{\alpha} \cdot \nabla \varphi_{\beta}| + \varphi_{\alpha} \varphi_{\beta} \right\} \quad (2)$$

$$f^{\text{CH}} = \sum_{a=0}^n \varphi_a f_a(\vec{c}_a) + \vec{\mu}_a(\vec{c} - \sum_{a=1}^n \varphi_a \vec{c}_a) \quad (3)$$

式中, $\kappa_{\alpha\beta}$ 为 α 和 β 两相之间的界面能,有序状态不同的 γ' 相之间的反相畴界 (Antiphase boundary, APB) 能量远大于 γ 和 γ' 相之间的界面能量; n 和 $\eta_{\alpha\beta}$ 分别为相个数和相界面宽度; $f_a(c_a)$ 为体积自由能密度函数; $\vec{\mu}_a$ 为化学势,均与元素成分有关。

弹性能密度 f^{EL} 的求解为:

$$f^{\text{EL}} = \frac{1}{2} \epsilon_{ij}^{\text{el}} C_{ijkl} \epsilon_{kl}^{\text{el}} \quad (4)$$

式中,应变 ϵ_{ij} 为二阶张量;等效弹性常数 C_{ijkl} 为四阶张量,通过 Reuss 极限的插值求解, i, j, k, l 为对应的张量下标:

$$C_{ijkl} = \left[\sum_{a=0}^n \varphi_a (C_{ijkl}^a)^{-1} \right]^{-1} \quad (5)$$

式中, $[C_{ijkl}^a]^{-1}$ 为 α 相弹性常数的逆矩阵,对于张量形式, ij, kl 可以分别简化为 m, n , 立方晶系中, $C_{11} = C_{22} = C_{33}$, $C_{12} = C_{13} = C_{23}$, $C_{44} = C_{55} = C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2$ 。根据胡克定律,立方晶系中局部应力场 σ_{ij} 和应变 ϵ_{ij} 的关系可以写为:

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{13} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = C_{ijkl} \epsilon_{ij}^{\text{el}} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ 2\epsilon_{23} \\ 2\epsilon_{13} \\ 2\epsilon_{12} \end{bmatrix} \quad (6)$$

其中,在相界面处不同相的 σ_{ij} 都相等。 C_{mn} 可以通过杨氏模量 E 和泊松比 ν 求解:

$$C_{11} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (7)$$

$$C_{12} = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad (8)$$

$$C_{44} = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (9)$$

弹性应变的求解为:

$$\epsilon_{ij}^{\text{el}} = \epsilon_{ij} - \epsilon_{ij}^* - \epsilon_{ij}^{\text{pl}} \quad (10)$$

式中, ϵ_{ij} 为体系中的总应变; ϵ_{ij}^* 为由晶格错配导致的等效本征应变; $\epsilon_{ij}^{\text{pl}}$ 为塑性应变。塑性应变速率通过已激活滑移系的塑性活动计算:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{\text{pl}} = \sum_{\text{active } s} \dot{\gamma}^s \omega_{ij}^s \quad (11)$$

式中, ω_{ij}^s 为滑移系 s 的施密特因子; $\dot{\gamma}^s$ 为剪切应变速率。

体系中相场和浓度场随时间的变化分别通过 Ginzburg-Landau 变分方程和 Cahn-Hilliard 非线性扩散方程求解:

$$\frac{\partial \varphi_a}{\partial t} = - \sum_{a \neq \beta} \frac{\tilde{M}_{a\beta}}{n} \left(\frac{\delta F}{\delta \varphi_a} - \frac{\delta F}{\delta \varphi_{\beta}} \right) \quad (12)$$

∂c̃/∂t = ∇(∑_{a=0}^n φ_a D_a^i ∇c_a^i) (13)

式中, $\tilde{M}_{a\beta}$ 为界面迁移率; $\tilde{n}$ 为局部相的个数; D_a^i 为化学迁移率。

化学驱动力和弹性驱动力的求解为:

ΔG_{aβ}^{CH} ≈ ∑_{i=1}^m μ_a^i (c_a^i - c_a^{i,eq}) (14)

ΔG_{aβ}^{EL} = σ_{ij} { (ε_{a,ij}^* - ε_{β,ij}^*) - 1/2 ([C_{ijkl}^a]^{-1} - [C_{ijkl}^β]^{-1}) σ_{kl} } (15)

式中, m 为元素的种类数; $μ_a^i$ 为元素扩散势。

2 模拟初始条件

以第二代镍基单晶高温合金 CMSX-4 为研究对象,模拟其在 1 100 °C 下、以 137 MPa 的载荷沿 [010] 单轴压缩条件下的微观组织演变。三维相场模拟的计算中计算域的网格数目为 140 × 140 × 140, 对应的物理域大小约为 3.15 μm³, 相界面宽度为 60 nm, 计算域边界条件设置为周期性边界条件。模拟参数按照实际合金组分含量设置, 热物性参数根据实际合金组分, 通过热力学相图计算获得。模拟设置的 CMSX-4 合金元素含量见表 1。图 1 为三维相场坐标定义及 γ' 相微观组织演变示意图。其他模拟热动力学参数见表 2, 计算塑性应变所需的塑性参数见表 3。

表 1 1 100 °C 下初始平衡相元素含量

Tab.1 Equilibrium phase concentration at 1 100 °C		x _B								%
元素	Al	Co	Cr	Ta	Ti	W	Re	Mo	Ni	
固溶体	12.72	9.91	7.47	2.19	1.27	2.12	0.95	0.38	余量	
γ 相	7.61	13.94	14.87	0.65	0.60	3.31	1.96	0.80	余量	
γ' 相	16.15	7.18	2.52	3.20	1.74	1.31	0.27	0.11	余量	

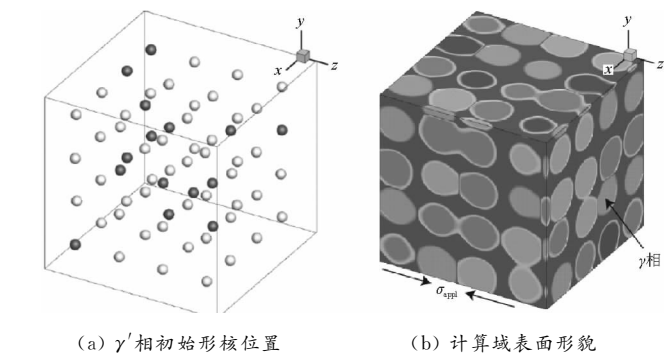


图 2 三维 γ' 相筏化组织形貌 (不同颜色代表不同占位状态)

Fig.2 3D morphologies of γ' rafting

域中的真实组织形貌, 初始 γ' 相形核位置设置成在规则排布的基础上, 围绕各点位做无规则微小扰动后的位置, 见图 2a。当析出的 γ' 相大致生长到最优组织参

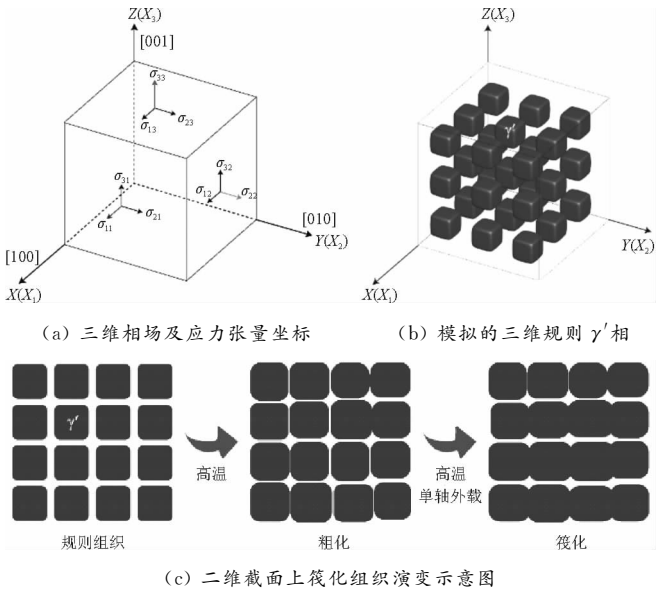


图 1 三维相场坐标定义及 γ' 相微观组织演变示意图
Fig.1 Coordinate definition and microstructure evolution diagram of γ' phase

表 2 相场模拟热动力学参数

Tab.2 Thermodynamics parameters in phase-field simulation							
摩尔体 积 V _m / (m ³ · mol ⁻¹)	界面迁移 率 $\tilde{M}_{\gamma\gamma'} =$ $\tilde{M}_{\gamma'\gamma'}/(\text{m}^4 \cdot$ $\text{J}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	γ/γ' 相 界面能 $\kappa_{\gamma\gamma'}/(\text{J} \cdot$ $\text{m}^{-2})$	APB 能 $\kappa_{\gamma\gamma'}/(\text{J} \cdot$ $\text{m}^{-2})$	γ 相杨 氏模量 $E_{\gamma}/$ GPa	γ' 相杨 氏模量 $E_{\gamma'}/$ GPa	泊松 比 ν _γ = ν _{γ'}	晶格 错配 度 δ
7.1 × 10 ⁻⁶	4 × 10 ⁻¹⁷	0.02	0.2	80	88	0.37	-0.03

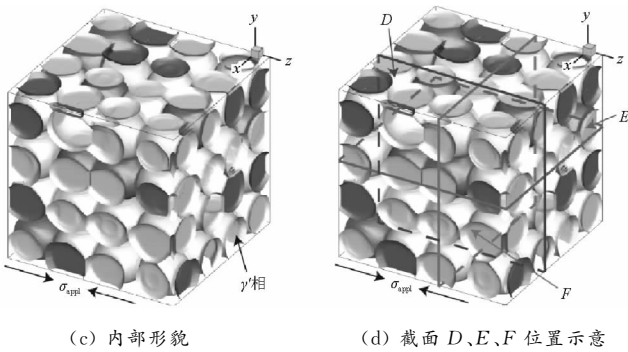
表 3 相场模拟塑性参数

Tab.3 Plastic parameters in phase-field simulation				
参考剪切速 率 $\dot{\gamma}_0/\text{s}^{-1}$	滑移临界抗 力 τ ₀ /MPa	饱和剪切应 力 τ _s /MPa	初始硬化模 量 h ₀ /MPa	速率敏感 指数 m
0.001	60	108	534	5

3 试验结果及讨论

3.1 γ' 相组织形貌演变

图 2 为三维 γ' 相筏化组织形貌。为模拟实际物理



量^[1], 即为立方状, 尺寸约为 0.6 μm 时, 沿 [010] 轴施加 137 MPa 的单轴压力。规则排布的 γ' 相在高温低应力作用下逐渐形成筏化组织。分别取垂直于 x、y、z 轴并

穿过 γ' 相颗粒之间的截面 D 、 E 、 F ，进行针对性分析，见图 2d。

施加外载后，截面 D 上的组织形貌演变见图 3。可以看到，由于外载方向平行于 y 轴方向，在高温压力条件下，具有负晶格错配度的 CMSX-4 合金的 γ' 相沿着 y 轴方向发生定向伸长，即出现了 P 型筏化结构，这一模拟结果与 LUKÁŠ P 等^[18]得出的演变规律相符。可以观察到，随着蠕变进行， γ/γ' 相界面逐渐从图 3a 中的平坦界面发展到图 3i 中的波浪形界面，这是因为在蠕变过程中 γ' 相颗粒随着筏化发生了接触和“合并”，使得 γ' 相颗粒的边界出现了起伏，这与 YU Z 等^[19]的模拟结果一致。

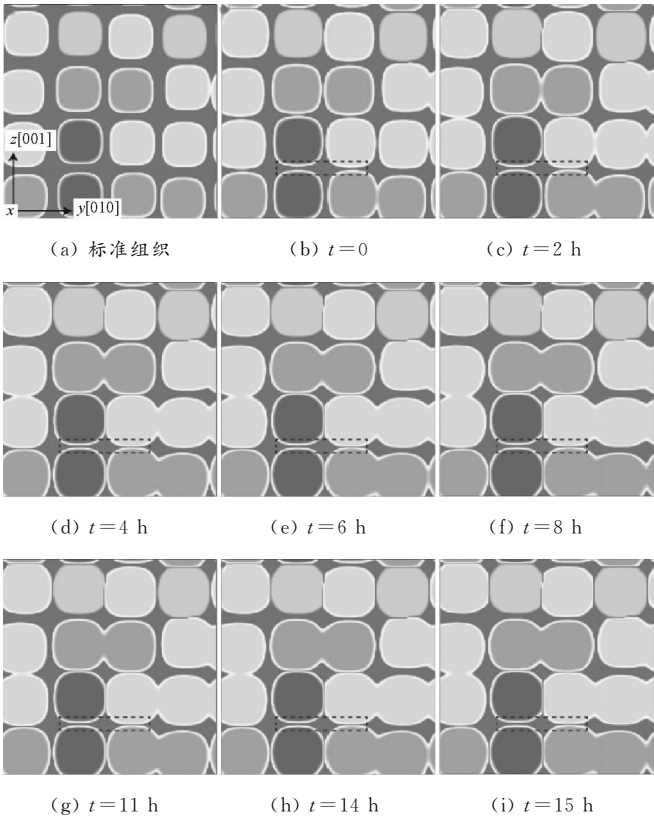


图 3 截面 D 上的 γ' 相筏化组织形貌

Fig.3 Microstructure of γ' rafting on section D

图 3 中的虚线框位置展示了 γ 相基体通道宽度(即垂直于外载方向上的尺寸大小)的变化。可以观察到，随着筏化时间延长，基体通道宽度首先因为 γ' 相颗粒尺寸在垂直于外载方向上的增大而减小。但在外载作用下， γ' 相颗粒不会在垂直于外载方向上继续生长，而是发生平行于外载方向的定向伸长，此时基体通道宽度也随之增大，并最终随着筏化结构的稳定而趋于稳定。

值得注意的是，并不是所有平行于筏结构方向上的 γ' 相颗粒都会“合并”。随着筏化时间延长，当平行于外载方向上相邻的 γ' 相颗粒具有相同的有序结构(在模拟结果中表示为具有相同颜色)时，两个 γ' 相颗粒会逐

渐发生“合并”，而有序结构不同时，即使两个 γ' 相颗粒边界已经接触，也只会彼此之间形成一个明锐的界面，即反相畴界(Antiphase boundary, APB)。由于相场模拟中对界面的判断是通过场变量的值进行的，因此通过计算域内的相场增量 $\Delta\phi$ 的展示可以更加直观地理解 APB 对 γ' 相筏化过程的形貌影响，见图 4，虚线框位置为 APB 位置。显然，APB 的存在显著限制了该位置处 γ' 相颗粒的进一步筏化。

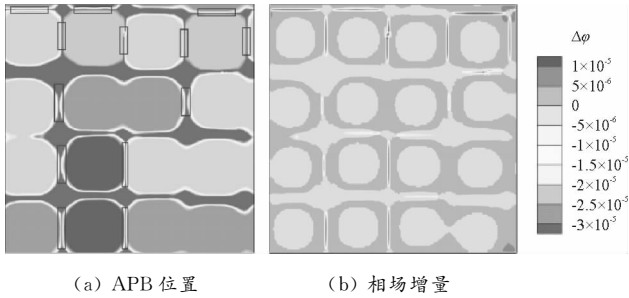


图 4 筏化 15 h 后截面 D 上的 APB 位置及对应相场增量
Fig.4 APB and corresponding phase-field increment on section D when $t=15$ h

图 5 为模拟的筏化 15 h 后垂直于 y 轴的截面 E 和垂直于 z 轴的截面 F 上的组织形貌，对应同一时刻截面 D 上的组织形貌，见图 3i。可以看到，当外载方向在平面上时，截面 F 上的 γ' 相粒子演化规律与截面 D 上的相似。而当外载方向垂直于平面时，在截面 E 上的 γ' 相颗粒大体保持了立方形，但在外载作用下， γ' 相之间的 γ 相基体通道宽度发生了改变。

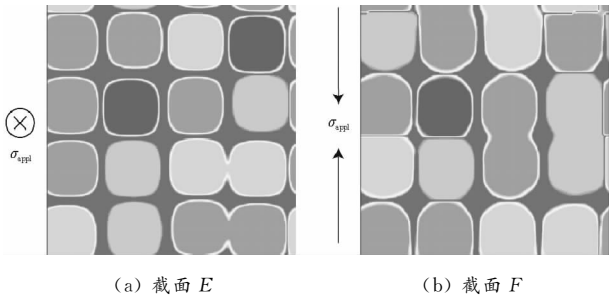


图 5 筏化 15 h 后截面 E 和截面 F 上的 γ' 相粒子形貌
Fig.5 Morphology of γ' particle on section E and section F when $t=15$ h

3.2 元素成分分布

作为多组分合金，除 Ni、Al 两种主要元素外，镍基单晶高温合金还具有多种其他元素，这些元素的添加对合金的高温性能具有重要影响。因此，深入理解在筏化过程中的元素偏析情况具有重要的研究意义。

外载作用下的计算域内元素偏析情况见图 6。可以看出，Al、Ta、Ti 元素主要分布在 γ' 相中；Co、Cr、Mo 元素主要分布在 γ 基体相中；W、Re 在 γ 相内含量较高，但主要是在 γ/γ' 相界面处富集。这一分布规律与

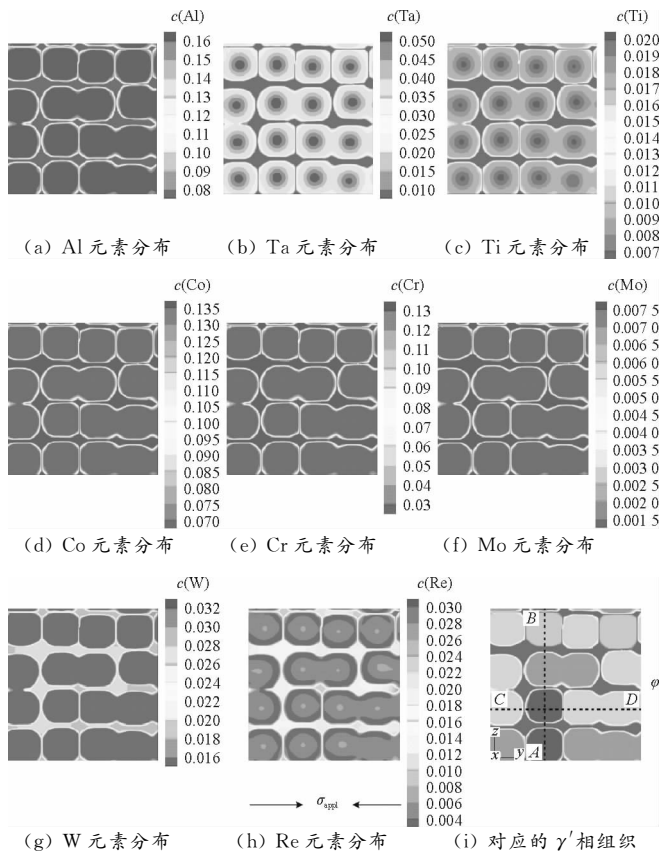


图 6 不同元素分布云图

DING Q 等^[20]研究结果符合。

在外载作用下,平行于外载方向和垂直于外载方向上的元素偏析情况有所不同。分别提取不同筏化时刻下图 6i 中垂直于筏化方向的 AB 和平行于筏化方向的 CD 两条横断线上的元素浓度作图,见图 7。

对比可以看出,随着筏化时间增长,AB 和 CD 横断线上的元素分布发生变化。在垂直于筏化方向的 AB 横断线上,整体元素分布趋势变化不大,但以 Co 为代表的 γ 相主要形成元素在 AB 方向上的基体通道中含量更高,即主要向平行于筏化方向的基体通道上扩散,从而对基体通道的宽度产生了影响。而在平行于筏化方向的 CD 横断线上,以 Al 为代表的 γ' 相主要形成元素向垂直于筏化方向上的基体通道处扩散,从而使具有相同有序结构的 γ' 相颗粒发生合并,使 CD 方向上的基体通道减小乃至消失。尽管 Ta、Ti 分布曲线仍有起伏,但振幅明显减小,较图 7a 中更为平缓。而 Re、W 由于具有更低的扩散速率,筏化过程中富集在 γ/γ' 相界面处,抑制该位置 γ' 相颗粒的进一步粗化。CD 横断线上的 APB 位置处的 Re、W 两种元素具有更为尖锐的波峰,与图 6 中的结果保持一致。

因为不同元素在外载作用下的扩散方向和速率不同,导致 γ' 相逐渐发生 P 型筏化,出现图 3 中的组织形

Fig.6 Distribution nephogram of different elements

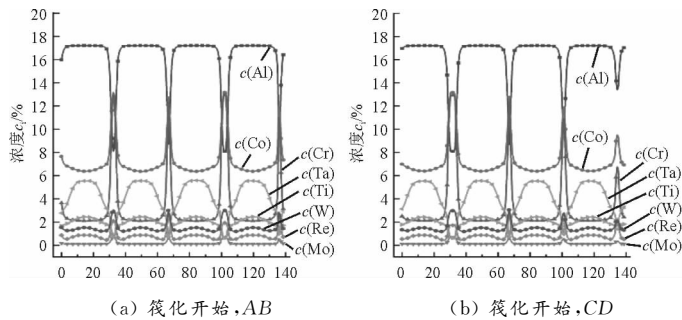


图 7 筏化刚开始和筏化 15 h 后元素在不同方向上的分布

Fig.7 Element distribution along different directions at the beginning of rafting and after rafting for 15 h

貌演变,而基体通道的宽度变化趋势则与元素扩散的驱动力有关。在筏化初始阶段,元素的扩散主要受温度影响,在化学势驱动下扩散,因此不存在各向异性,AB 方向上的基体通道宽度减小。随着筏化过程进行,元素的扩散主要受外载影响,在应力梯度作用下 AB 方向的基体通道宽度增大。当筏化趋于稳定时,基体通道的宽度也随之趋于稳定。

3.3 塑性应变与弹性驱动力

计算域中的力学分布会对 γ' 相的组织演变产生重要影响。在筏化过程中,计算域内不仅存在因 γ 相和 γ' 相之间晶格错配而导致的弹性能差异,还存在因滑移系活动而产生的塑性应变。可通过定义平均等效塑性应变 $\bar{\epsilon}_{\text{eff}}^{\text{pl}}$,来计算不同滑移系综合作用下的塑性应变。在三维框架下,平均等效塑性应变 $\bar{\epsilon}_{\text{eff}}^{\text{pl}}$ 的计算式为:

$$\bar{\epsilon}_{\text{eff}}^{\text{pl}} = \frac{1}{V} \int_V \sqrt{\frac{2 \times \{(\epsilon_{11}^{\text{pl}})^2 + (\epsilon_{22}^{\text{pl}})^2 + (\epsilon_{33}^{\text{pl}})^2 + 2 \times [(\epsilon_{12}^{\text{pl}})^2 + (\epsilon_{23}^{\text{pl}})^2 + (\epsilon_{13}^{\text{pl}})^2]\}}{3}} \times dV \quad (16)$$

式中, V 为计算域内的体积。

图 8 为在单轴压缩条件下,不同筏化时刻的平均等效塑性应变和对应的弹性驱动力分布图。图 9 为平均等效塑性应变曲线。可以看出,在单轴压缩条件下,因

外载而产生的等效塑性应变主要分布在平行于外载方向的基体通道中,且随着筏化时间增长,塑性应变也不断累积。弹性驱动力的分布则与塑性应变呈相反的趋势,即受塑性应变影响,弹性驱动力在塑性应变较大处

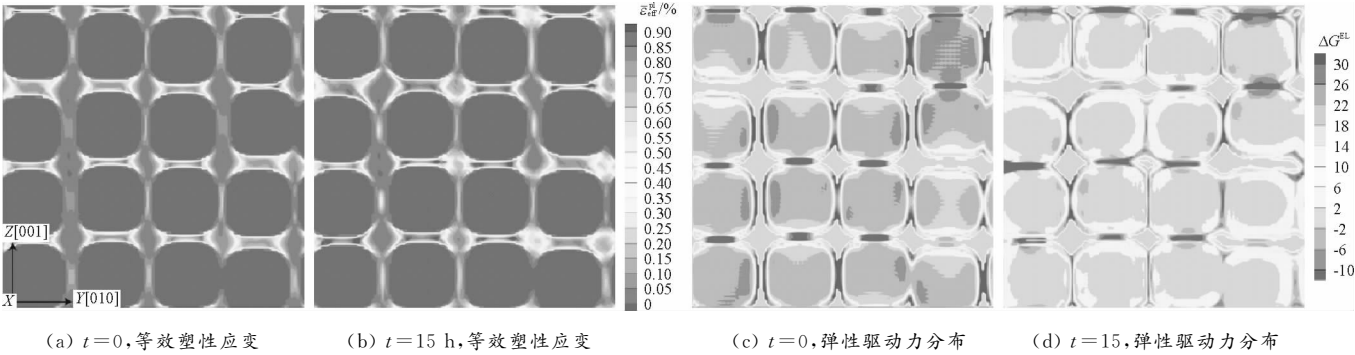


图 8 不同筏化时刻的平均等效塑性应变和对应的弹性驱动力分布

Fig.8 Average equivalent plastic strain and corresponding elastic driving force distribution at different rafting moments

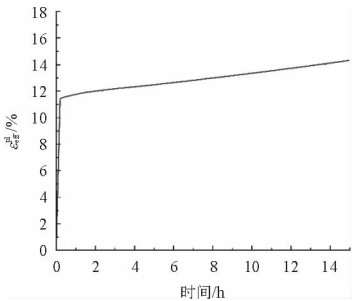


图 9 平均等效塑性应变曲线

Fig.9 Average equivalent plastic strain

有较小值。因此原本呈立方状的 γ' 相颗粒在两者的共同作用下向平行于外载方向伸长,从而发生 P 型筏化。筏化刚开始时,塑性应变较小,但随着塑性应变的不断累积, γ' 相的粗化在垂直于外载方向上受到抑制,从而使得该方向上的基体通道宽度增大。

4 结 论

- (1)建立的三维弹塑性多元多相场模型可用于模拟三维框架下某组分的镍基单晶高温合金的筏化现象,模拟结果与试验研究相符合。
- (2)具有负晶格错配度的镍基单晶高温合金会在单轴压缩条件下发生 P 型筏化。这一组织演变的生产与元素扩散和应力分布有关。
- (3)在 P 型筏化过程中, γ' 相主要组成元素向垂直于外载方向的基体通道中扩散, γ 相主要组成元素向平行于外载方向的基体通道中扩散,而扩散速率较低的 Re、W 元素会在界面处富集。
- (4)在单轴压缩条件下,塑性应变主要分布在平行于外载方向的基体通道中,其分布影响了弹性驱动力的分布, γ' 相在二者共同作用下发生了 P 型筏化。

参 考 文 献

[1] 张健,王莉,王栋,等. 镍基单晶高温合金的研发进展[J]. 金属学报, 2019, 55(9): 1 077-1 094.
[2] REED R C. The Superalloys: Fundamentals and Applications[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2006.

[3] FREDHOLM A, STRUDEL J L. On the creep resistance of some nickel base single crystals[J]. Superalloys, 1984(2): 211-220.
[4] XIA W S, ZHAO X B, YUE L, et al. Microstructural evolution and creep mechanisms in Ni-based single crystal superalloys: A review[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2020, 819: 152 954.
[5] 陈晶阳,赵宾,冯强,等. Ru 和 Cr 对镍基单晶高温合金 γ/γ' 热处理组织演变的影响[J]. 金属学报, 2010, 46(8): 897-906.
[6] KAMARAJ M, MAYR C, KOLBE M, et al. On the influence of stress state on rafting in the single crystal superalloy CMSX-6 under conditions of high temperature and low stress creep[J]. Scripta Materialia, 1998, 38(4): 589-594.
[7] SCHMIDT I, GROSS D. Directional coarsening in Ni-base superalloys: Analytical results for an elasticity-based model[J]. Proceedings of the Royal Society, 1999, A455: 1 364-1 370.
[8] ICHITSUBO T, KOUMOTO D, HIRAO M, et al. Rafting mechanism for Ni-base superalloy under external stress: Elastic or elastic-plastic phenomena? [J]. Acta Materialia, 2003, 51(14): 4 033-4 044.
[9] GURURAJAN M P, ABINANDANANT A. Phase field study of precipitate rafting under a uniaxial stress [J]. Acta Materialia, 2007, 55(15): 5 015-5 026.
[10] WANG J C, OSAWA M, YOKOKAWA T, et al. Modeling the microstructural evolution of Ni-base superalloys by phase field method combined with CALPHAD and CVM[J]. Computational Materials Science, 2007, 39(4): 871-879.
[11] MUSHONGERA L T, FLECK M, KUNDIN J, et al. Effect of Re on directional γ' -coarsening in commercial single crystal Ni-base superalloys: A phase field study[J]. Acta Materialia, 2015, 93: 60-72.
[12] GAUBERT A, BOUAR Y L, FINEL A. Coupling phase field and viscoplasticity to study rafting in Ni-based superalloys[J]. Philosophical Magazine, 2010, 90(1-4): 375-404.
[13] HUANG M S, ZHAO L G, TONG J. Discrete dislocation dynamics modelling of mechanical deformation of nickel-based single crystal superalloys[J]. International Journal of Plasticity, 2012, 28(1): 141-158.
[14] COTTURA M, APPOLAIRE B, FINEL A, et al. Coupling the phase field method for diffusive transformations with dislocation density-based crystal plasticity: Application to Ni-based superalloys[J]. Journal of the Mechanics & Physics of Solids, 2016, 94: 473-489.

热处理对 Al-0.7Fe-0.2Sc 合金慢应变腐蚀拉伸性能影响

陈 力 张嘉艺 黄成聪 罗志坚 陈 璞
(江西理工大学材料冶金化学学部)

摘 要 采用慢应变腐蚀拉伸测试、扫描电镜、透射电镜观察等手段,研究了在腐蚀环境(腐蚀剂为 0.1 mol/L Na₂SO₄+0.001 mol/L NaCl 的混合溶液)下不同热处理工艺对 Al-0.7Fe-0.2Sc 合金力学性能和微观组织的影响。结果表明,600 ℃×72 h 固溶+325 ℃×72 h 时效为最优工艺,合金伸长率达到13.8%,抗拉强度为 131.2 MPa;试样断口形貌由韧窝和撕裂棱组成,韧窝尺寸较小、较浅且数量较多。经过固溶时效,除了已经存在的 Al₃Fe 第二相外,还有大量的 Al₃Sc 析出相,这些相钉扎在位错及亚晶界处,阻碍塑性变形,提高了 Al-0.7Fe-0.2Sc 合金的力学性能。

关键词 Al-0.7Fe-0.2Sc 合金;慢应变腐蚀拉伸;断口形貌;伸长率;Al₃Sc 析出相

中图分类号 TG146.21;TG156.99 **文献标志码** A

DOI:10.15980/j.tzzz.2023.01.020 **开放科学(资源服务)标识码(OSID):**



Effects of Different Heat Treatments on Slow Strain Corrosion Tensile Properties of Al-0.7Fe-0.2Sc Alloy

Chen Li, Zhang Jiayi, Huang Chengcong, Luo Zhijian, Chen Pu

(Department of Materials Metallurgical Chemistry, Jiangxi University of Science and Technology)

Abstract: Effects of different heat treatment processes on mechanical properties and microstructure of Al-0.7Fe-0.2Sc alloy under corrosive environment(Na₂SO₄+NaCl solution) were investigated by slow strain corrosion tensile test, scanning electron microscope and transmission electron microscope. The results indicate that the optimal process parameters are solid solution at 600 ℃ for 72 h+aging 325 ℃ for 72 h, where the elongation and tensile strength reach up to 13.8% and 131.2 MPa, respectively. After heat treatment, the fracture morphology of the specimens is composed of dimples and tearing edges, and the dimples are smaller, shallower with more quantities. After solution aging, in addition to the Al₃Fe second phase already existing in the solid solution state, large amounts of Al₃Sc precipitates appear, which are pinned at the dislocations and subgrain boundaries, hindering the plastic deformation and improving the tensile properties of Al-0.7Fe-0.2Sc alloy.

Key Words: Al-0.7Fe-0.2Sc Alloy, Slow Strain Corrosion Tensile, Fracture Morphology, Elongation, Al₃Sc Precipitate

纯铝具有密度小、熔点低、塑性高、耐腐蚀性好、导电性能较好等特点,但是强度较低,不能直接用于制造

电缆。8xxx(Al-Fe)系合金是在纯铝基础上发展而来的,与纯铝电缆相比,8xxx 合金添加的合金元素在不降

收稿日期:2022-03-30;**修改稿收到日期:**2022-05-14
基金项目:江西省科技创新国际科技合作资助项目(20212BDH81005);江西省教育厅青年人才资助项目(GJJ210881)
第一作者简介:陈力,女,2002 年出生,硕士研究生,江西赣州(341000),E-mail:2478202816@qq.com
通信作者:张嘉艺,女,1991 年出生,博士,江西赣州(341000),E-mail:jiayizhang21@jxust.edu.cn
引用格式:陈力,张嘉艺,黄成聪,等. 热处理对 Al-0.7Fe-0.2Sc 合金慢应变腐蚀拉伸性能影响[J]. 特种铸造及有色合金,2023,43(1):98-101.
CHEN L, ZHANG J Y, HUANG C C, et al. Effects of different heat treatments on slow strain corrosion tensile properties of Al-0.7Fe-0.2Sc alloy[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2023, 43(1):98-101.

[15] WANG Y, BANERJEE D, SU C C, et al. Field kinetic model and computer simulation of precipitation of L12 ordered intermetallics from fcc solid solution[J]. Acta Materialia, 1998, 46(9): 2 983-3 001.

[16] STEINBACH I, APEL M. Multi phase field model for solid state transformation with elastic strain[J]. Physica, 2006, D217(2): 153-160.

[17] KIM S G, KIM W T, SUZUKI T. Phase-field model for binary alloys[J]. Physical Review, 1999, E60(6): 7 186-7 197.

[18] LUKÁŠ P, ČADEK J, ŠUSTEK V, et al. Creep of CMSX-4 single crystals of different orientations in tension and compression[J]. Materials Science & Engineering, 1996, A208(2): 149-157.

[19] YU Z, WANG X M, YUE Z F, et al. Visco-plasticity phase-field simulation of the mechanical property and rafting behavior in nickel-based superalloys[J]. Intermetallics, 2020, 125: 106 884.

[20] DING Q, LI S, CHEN L Q, et al. Re segregation at interfacial dislocation network in a nickel-based superalloy[J]. Acta Materialia, 2018, 154: 137-146.

(编辑:彭瑾)