

文章编号: 1000-8055(2009)09-2001-06

# 镍基单晶合金蠕变研究: 基于晶体塑性的蠕变建模

白露<sup>1</sup>, 杨晓光<sup>1</sup>, 石多奇<sup>1</sup>, 于慧臣<sup>2</sup>

(1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191;

2. 北京航空材料研究院, 北京 100095)

**摘 要:** 在镍基单晶合金高温蠕变建模工作的第二部分, 通过提出的蠕变材料模型, 在晶体塑性理论的变形梯度与滑移系剪切应变率关系的基础上, 结合不同温度下不同滑移系上的蠕变机理, 最终建立起滑移系上行为与材料结构变形的联系. 材料本构方程的积分采用了四阶 Runge-Kutta 法, 并通过对 DD3 和 CMSX-4 两种材料在不同温度、晶体取向和应力水平下的试验曲线进行计算模拟, 说明了模型及算法的可行性及对较宽的温度、应力和晶体取向蠕变行为模拟的能力.

**关键词:** 镍基单晶合金; 蠕变; 位错密度; 晶体塑性

**中图分类号:** V250.3

**文献标识码:** A

## Crystal-plasticity-based creep models for Ni-based single crystal superalloy

BAI Lu<sup>1</sup>, YANG Xiao-guang<sup>1</sup>, SHI Duo-qi<sup>1</sup>, YU Hui-chen<sup>2</sup>

(1. School of Jet Propulsion,

Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China;

2. Beijing Institute of Aeronautical Materials, Beijing 100095, China)

**Abstract:** The second part of modeling creep behavior for single crystal superalloy was presented in this paper. and a dislocation-based creep model was devoted to creep predictions. The constitutive equations described the relation between macroscopic strain rate and shear strain rate on slip systems derived from the slip theory, and the activity of various slip systems has been modeled based on the research of microscopic mechanisms. Results obtained by the present approach were compared with creep data with various temperatures and loads in different orientations, including single crystal superalloys DD3 and CMSX-4, to demonstrate the validity and applicability of the proposed model.

**Key words:** Ni-based single crystal superalloy; creep; dislocation density; crystal plasticity

基单晶材料的蠕变行为受到多种因素的影响, 不同镍基单晶材料的蠕变试验均表明, 温度、应力水平以及材料的晶体取向对蠕变行为有着决定性的影响. 目前先进航空发动机工作状态下, 高压涡轮叶片上的温度范围大约从 700 °C 到 1100 °C 左右, 这种条件下显然要准确分析叶片的

蠕变变形情况不但要考虑到叶片上应力分布对蠕变变形的影响, 也要兼顾很大温度范围内的材料蠕变行为.

在温度较高的情况下 (950 °C 左右), 低应力水平也可以造成明显的蠕变变形, 而且在蠕变过程的大部分时间内呈现出蠕变速率与蠕变应变成

收稿日期: 2008-09-20; 修订日期: 2008-12-07

作者简介: 白露 (1979 - ), 女, 蒙古族, 辽宁阜新内蒙古自治县, 博士生, 主要从事疲劳及本构理论.

正比的现象,即经典的蠕变理论中第三阶段加速蠕变的情况<sup>[1-2]</sup>.保持应力水平不变,随着温度降低蠕变速率减小,在温度较低时低应力水平并不造成明显蠕变变形.而在这种情况下当应力水平升高到超过一个门槛值时,可以观察材料的早期蠕变变形突然增大,整个蠕变过程也呈现出加速-稳态-再加速形式的三阶段<sup>[1,3]</sup>.同时,除了温度和应力水平,晶体的取向也影响着蠕变性能,有时即使近[001]晶体取向小的方向偏离,也会引起较大的蠕变变化<sup>[3]</sup>.

在镍基单晶高温蠕变研究的第一部分中,我们从精度和计算效率以及模型对蠕变行为的描述能力综合考虑,通过对在760℃到1150℃、不同应力和晶体取向高温蠕变机理的研究和认识,建立了基于可动位错密度及其演化规律的蠕变材料模型.

在前面已建立的蠕变材料模型基础上,本文在晶体塑性理论的框架下实现了可用于工程结构分析的数值计算方法,并利用所提出的模型,针对不同材料将蠕变试验结果与计算进行对比分析.

## 1 单晶材料蠕变变形模型

### 1.1 滑移系上的蠕变模型

本文的第一部分中提出了晶体滑移系上的蠕变材料模型,通过描述滑移系上分解剪切应变率 $\dot{\gamma}$ 的演化规律来描述材料的蠕变变形特点.在第 $\alpha$ 个滑移系上,剪切变形速率 $\dot{\gamma}^\alpha$ 随累积剪切变形 $\gamma^\alpha$ 变化的方程为

$$\dot{\gamma}^\alpha = (\dot{\gamma}_0 + \Omega \dot{\gamma}^\alpha) [\exp(-\phi \gamma^\alpha - \psi + \lambda)] \quad (1)$$

其中 $\dot{\gamma}_0, \Omega, \phi$ 和 $\lambda$ 为材料常数,分别表示初始位错密度、位错增殖,变形硬化以及稳态位错组织的影响.这些因素的具体数值受到温度以及外载荷的影响,因此与温度和滑移系上的分切应力水平 $\tau^\alpha$ 有以下关系:

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}_0 &= A_1 \exp \left\{ B_1 \tau^\alpha - \frac{Q_1}{RT} \right\} \\ \Omega &= A_2 \exp \left\{ B_2 \tau^\alpha - \frac{Q_2}{RT} \right\} \\ \phi &= A_3 \exp \left\{ B_3 \tau^\alpha - \frac{Q_3}{RT} \right\} \\ \lambda &= A_4 \exp \left\{ B_4 \tau^\alpha - \frac{Q_4}{RT} \right\} \end{aligned} \quad (2)$$

这里的 $A_i, B_i$ 和 $Q_i$ 为材料参数.式(1)中 $\psi$ 表示滑

移系之间的交互作用,具体形式为

$$\psi = k \sum_{\beta \neq \alpha}^l \left| \frac{\tau^\beta}{m + \tau_{\max} - \tau^\beta} \right| \quad (3)$$

其中 $\tau_{\max}$ 是当前类型的滑移系上分解剪切应力的最大值,参数 $m$ 在双滑移的两个滑移系的应力水平具有相等数值时表示交互作用最强的状态, $k$ 为系数,这里的 $k$ 和 $m$ 为经验数值.

### 1.2 晶体变形的基本方程

由于本文中提出的材料模型通过滑移系上的分切应力和剪切变形的关系来描述单晶高温合金蠕变变形过程,主要的变形方程以及从滑移系到宏观的物理量转换都采用晶体塑性理论中的经典方程,具体的理论可参见相关文献[4].

在连续介质力学中,物体的变形用变形梯度表示.众所周知,承受一定外载荷的材料卸载后仅保留非弹性变形,基于这一现象对总变形梯度 $F$ 进行Lee分解

$$F = F^e F^p \quad (4)$$

式中的 $F^e$ 表示晶体中晶格的畸变与转动引起的变形梯度,并在卸载时消失, $F^p$ 代表晶体中材料流动对应的非弹性变形,通常认为是滑移系上的位错运动造成的.同样可以对速度梯度进行分解,当前时刻的速度梯度张量 $L$ 可以分解为

$$L = \dot{F} F^{-1} = \dot{F}^e (F^e)^{-1} + F^e \dot{F}^p (F^p)^{-1} (F^e)^{-1} = L^e + L^p \quad (5)$$

$$L^e = \dot{F}^e (F^e)^{-1} \quad (6)$$

$$L^p = F^e \dot{F}^p (F^p)^{-1} (F^e)^{-1} \quad (7)$$

式中的 $L^e$ 和 $L^p$ 分别为速度梯度的弹性部分和非弹性部分.

从弹性变形梯度可以获得对应的弹性应变.首先对 $F^e$ 进行极分解

$$F^e = R^e U^e \quad (8)$$

式中 $R^e$ 为转动张量, $U^e$ 为右伸长张量,分别代表弹性变形的转动部分和纯拉伸部分,而Hencky应变定义为

$$E^e = \ln U^e \quad (9)$$

这个应变即随体坐标系中的对数应变张量.显然,它与Cauchy应力张量间的关系即弹性本构关系,可以表示为

$$\sigma_M = \frac{1}{J} \frac{\partial \psi}{\partial C} : E_M^e \quad (10)$$

这里的下标  $M$  表示晶轴坐标系,  $C$  为晶轴坐标系上的四阶刚度张量, 而  $J = \det(F)$ .

将晶格中的第  $\alpha$  个滑移系用其滑移方向的单位向量和滑移面法向单位向量表示, 分别记为  $m^{(\alpha)}$  和  $n^{(\alpha)}$ , 晶格的畸变和转动会影响到材料的滑移系, 在弹性变形  $F^e$  作用下, 滑移系的两个标志向量因此变成

$$m^{*(\alpha)} = F^e m^{(\alpha)} \quad (11)$$

$$n^{*(\alpha)} = (F^e)^{-T} n^{(\alpha)} \quad (12)$$

根据 Schmid 定律, 可建立宏观应力和滑移系上分解剪切应力的关系, 即第  $\alpha$  个滑移系上的分解剪切应力  $\tau^{(\alpha)}$  为

$$\tau^{(\alpha)} = \sigma : P^{*(\alpha)} \quad (13)$$

其中  $P^{*(\alpha)}$  为 Schmid 取向因子.

$$P^{*(\alpha)} = \frac{1}{2} (m^{*(\alpha)} \otimes n^{*(\alpha)} + n^{*(\alpha)} \otimes m^{*(\alpha)}) \quad (14)$$

在晶体滑移系上的分解剪切应力驱动位错的运动, 即利用滑移系上剪切变形率  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  与分解剪切应力  $\tau^{(\alpha)}$  之间的关系可得到剪切变形率  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ .

各个滑移系上的剪切变形率累加可得到非弹性变形速度梯度为

$$L^p = \dot{F}^e F^p (F^p)^{-1} (F^e)^{-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} m^{*(\alpha)} \otimes n^{*(\alpha)} \quad (15)$$

如果去除弹性变形的影响, 将式(11)和(12)带入式(15), 整理得到在初始构形下的非弹性速度梯度

$$\dot{F}^p (F^p)^{-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} m^{(\alpha)} \otimes n^{(\alpha)} \quad (16)$$

对速度梯度进行积分, 就可以获得当前时刻的材料变形状态并得到宏观的非弹性变形.

$$F^p = I + \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)} m^{(\alpha)} \otimes n^{(\alpha)} \quad (17)$$

式中的  $I$  为单位张量, 表示初始的无变形状态.

### 1.3 参与变形的滑移系选择

正如本文第一部分所阐述的, 对于镍基单晶材料, 各个滑移系对单晶高温合金变形的贡献由载荷温度条件决定, 因此模型中需要参照材料所经历的变形过程来选择参与变形的滑移系. 由于模型对具有两相组织的单晶进行了简化, 计算中使用了伪  $\{100\} < 110 >$  型的立方滑移系来反映材料的性质, 对应的仍然是  $\{111\} < 110 >$  型滑移系.

在应力较低的情况下变形来自  $\{111\} < 110 >$  和  $\{100\} < 110 >$  类型的滑移系, 位错运动的主要方式是位错在基体相中的滑移以及  $\gamma/\gamma'$  两相界面上的攀移, 非弹性变形仅限于  $\gamma$  相的范围内. 此时的材料的蠕变变形过程由分切应力最大的主滑移系决定: 在  $[001]$  方向附近主滑移系是  $\{111\} < 110 >$  型滑移系, 而在  $[111]$  方向上则转变为  $\{100\} < 110 >$  型滑移系. 而在高应力条件下, 位错可以具有足够的能量切割晶体中的  $\gamma$  相, 以长程滑移方式实现变形.

具体计算时, 不同滑移系激活参与变形的条件为:

1) 当所有八面体副滑移系的分切应力都低于切割门槛值, 开动全部八面体主滑移系和立方滑移系;

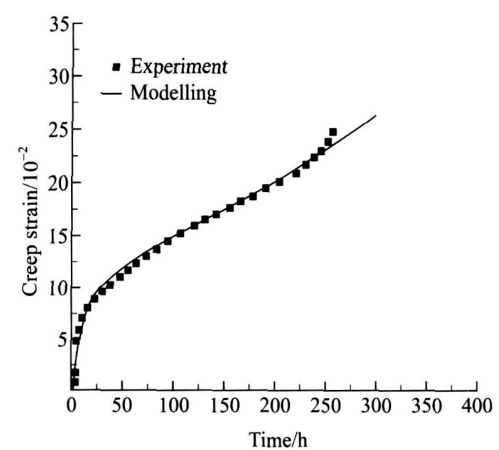
2) 八面体副滑移系中某个滑移系上的分切应力超过切割门槛值时, 开动此八面体副滑移系.

## 2 计算结果与讨论

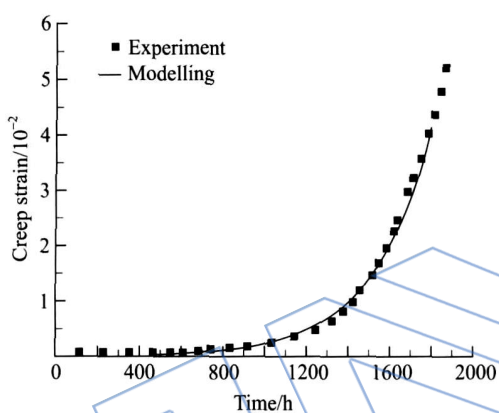
通过优化拟合蠕变试验曲线获得的各滑移系上的材料参数, 分别计算模拟 DD3, DD6 及 CMSX-4 镍基单晶合金在 760 °C 至 1150 °C 及不同应力和晶体取向下的蠕变试验曲线 (部分试验曲线见文献[5-6]). 下面分别从不同温度范围下的蠕变模拟, 近  $[001]$  晶体取向的蠕变模拟, 不同晶体取向的蠕变模拟等方面说明所发展和建立的模型及算法的能力.

图 1 为模拟计算的 CMSX-4 单晶合金  $[001]$  取向在 750, 950 °C 和 1150 °C 时的蠕变行为, 可以看出方法可准确地模拟材料在很宽的温度范围内不同的变形特性, 其中典型的为 750 °C 时明显的蠕变第一和第二阶段, 而温度高于 950 °C, 蠕变主要是第三阶段的特性, 对 1150 °C 时蠕变速率突变前的小蠕变应变也有很好的模拟.

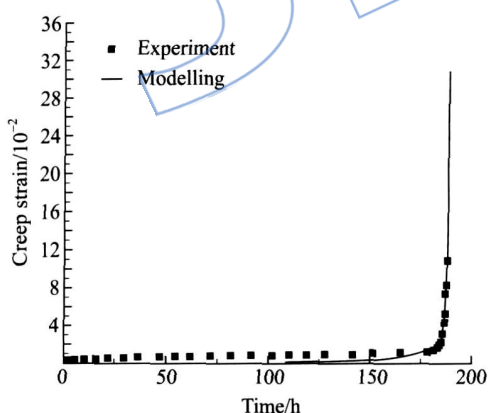
材料试验表明: 即使在在  $[001]$  晶体取向附近“较小”的取向偏离 ( $< 10^\circ$ ), 也会引起蠕变性能的强烈变化. 考虑由于加工工艺的影响, 叶片制造时会不可避免地产生这种偏离  $[001]$  取向, 模型需要能够对此现象进行准确的计算模拟. 图 2 是利用蠕变模型对 CMSX-4 和 DD6 两种材料在  $[001]$  方向附近的蠕变行为进行的模拟, 从图中可见模型能够反映出晶体取向的偏离引起的蠕变变化, 而且两种温度条件下显示的蠕变变形的特点也与图 1 一致.



(a) 750 °C, 750 MPa



(b) 950 °C, 185 MPa



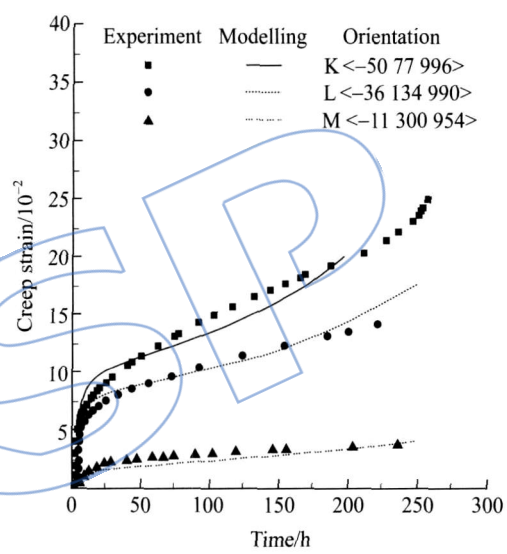
(c) 1150 °C, 100 MPa

图 1 CMSX-4 不同温度时蠕变的模拟

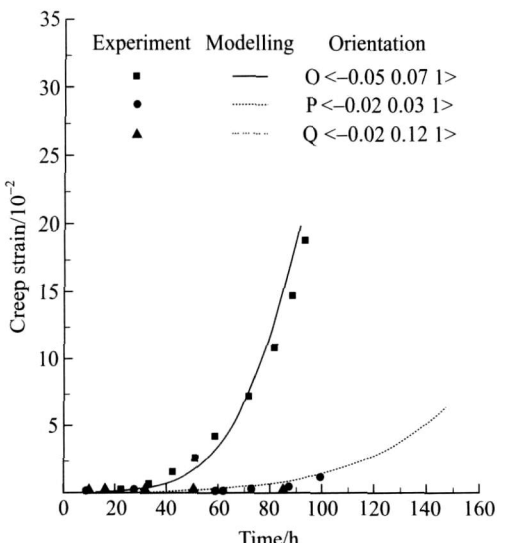
Fig. 1 Modelling of creep curve of CMSX-4 under various temperatures

图 3 和图 4 分别为 CMSX- 4 和 DD3 在 950 °C 时,不同的典型晶体取向和应力水平下的蠕变试验曲线<sup>[6]</sup>和计算模拟的结果. 一般研究蠕变晶体取向相关性的 3 个典型晶体取向是[001],[011]和

[111](见图 3(a)~(c)和图 4);可以看出,模型可以较好地模拟这 3 个晶体取向下的蠕变,并且对其它取向的蠕变(见图 3(d))也可给出好的预报. 由于蠕变与晶体取向的相关性是一个很复杂的问题,并非完全靠 Schmid 因子就可以解释,如图 2 中 DD6 在 980 °C,320 MPa 下的蠕变,3 个试件 O,P 和 Q 的主 Schmid 因子分别为 0. 435,0. 420 和 0. 451,但是蠕变差别很大而且变化规律与 Schmid 因子并不一致,这表明了其它的机理在起作用,并不完全遵循 Schmid 定律. 鉴于材料表现出的复杂行为,模型也需要更多的试验验证.



(a) 760 °C, CMSX-4



(b) 980 °C, 320 MPa, DD6

图 2 镍基单晶近[001]取向的蠕变曲线模拟

Fig. 2 Modelling of creep cures with orientations near [001]

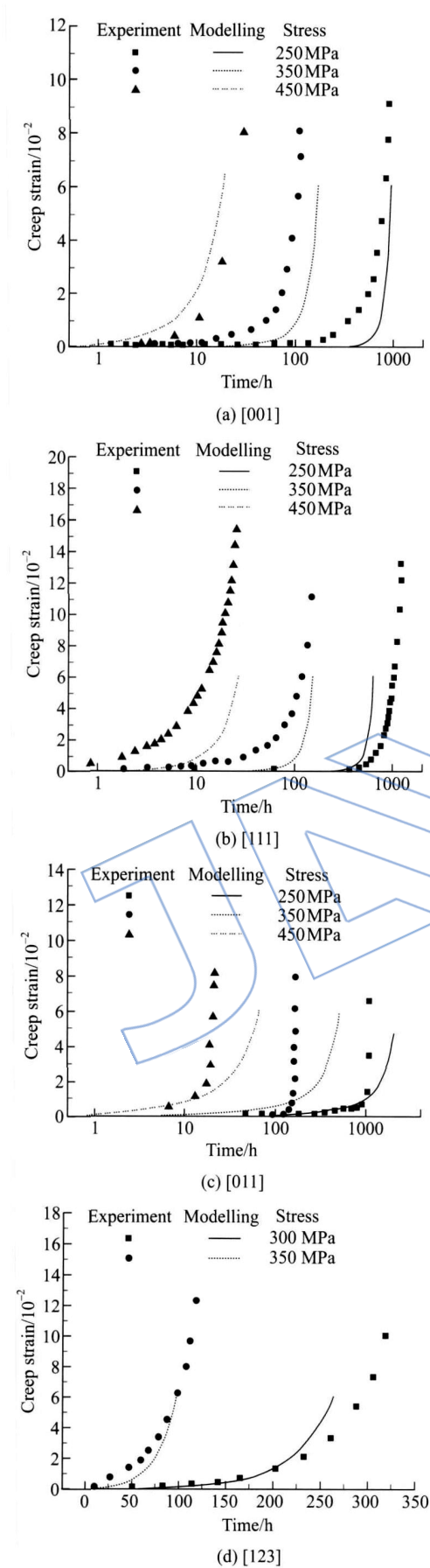


图 3 镍基高温合金 CMSX-4 在 950 °C 的蠕变曲线  
Fig.3 Creep curves of CMSX-4 at 950 °C

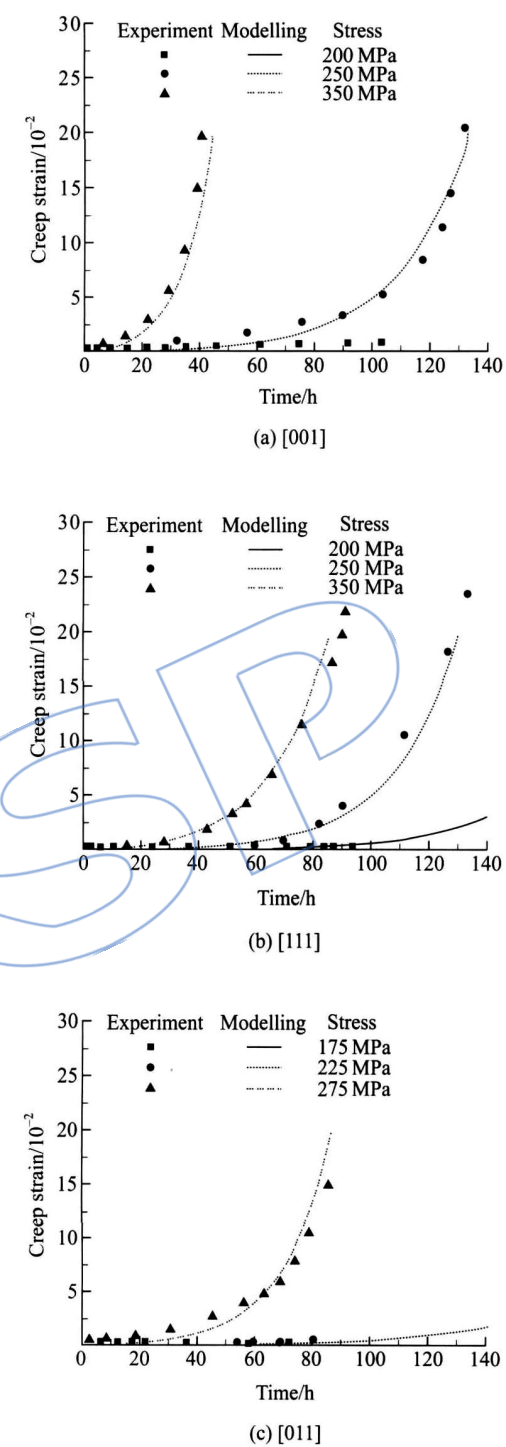


图 4 镍基高温合金 DD3 在 950 °C 的蠕变曲线  
Fig.4 Creep curves of DD3 at 950 °C and various orientations

3 结 论

在镍基单晶合金蠕变现象和微观变形机理理解的基础上,通过在滑移系上建立起基于位错演化规律来表征的蠕变材料模型,本文在晶体塑性框架下实现利用滑移系上的模型描述蠕变变形的过程,并通过对三种典型一、二代镍基单晶合金在

较宽的温度、应力和晶体取向范围蠕变行为的计算模拟验证,说明了建立起的材料模型和计算方法具有较好的精度并有较宽的适用范围.在本文的第三部分中将针对典型叶片结构进行蠕变分析.

### 参考文献:

- [ 1 ] Matan N, Cox D C, Carter P, et al. Creep of CMSX-4 superalloy single crystals: effects of misorientation and temperature[J]. Acta Mater. , 1999, 47(5) :1589-1563.
- [ 2 ] Ghosh R N, Curtis R V, McLean M. Creep deformation of single crystal superalloys-modelling the crystallographic anisotropy [J]. Acta Metall Mater. , 1990, 38 (10) : 1977-1992.
- [ 3 ] MacLachlan D W, Gunturi G S K, Knowles D M. Modeling the uniaxial creep anisotropy of nickel base single crystal superalloy CMSX-4 and RR2000 at 1023 K using a slip system based finite element approach[J]. Computational Materials Science, 2002, 25:129-141.
- [ 4 ] 王自强, 理性力学基础[M]. 北京:科学出版社,2000. WANG Ziqiang. Foundation of rational mechanics [M]. Beijing:Science Press, 2000. (in Chinese)
- [ 5 ] Creed R,Matan N, Cox D C, et al. Creep of CMSX-4 superalloy single crystals: effects of rafting at high temperature[J]. Acta Mater. , 1999,47(12) :3367-3381.
- [ 6 ] MacLachlan D W, Wright L W, Gunturi S, et al. Constitutive modelling of anisotropic creep deformation in single crystal blade alloys SRR99 and CMSX-4[J]. International Journal of Plasticity, 2001 ,17 :441-467.