

文章编号:1000-8055(2010)05-1077-08

镍基单晶合金蠕变细观结构演化及表征模拟

曹娟, 石多奇, 王延荣

(北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191)

摘 要: 分析了 NASAIR100 在高温下不同应力和温度的蠕变及细观结构演化的异同,得到了材料 4 个主要的细观结构演化参数及其与蠕变的对应关系,在筏化模型的基础上建立了计及沉淀相筏化过程中厚度和基体通道宽度变化的细观结构演化模型,得到材料沉淀相和基体的细观演化过程及蠕变. 结合试验结果,给出了不同细观演化方式对蠕变曲线的影响. 在高温下同时考虑基体和沉淀相的 4 个细观参数变化可以使模型更贴近细观实际,并能较好地模拟材料在不同应力和温度下的蠕变.

关 键 词: 镍基单晶合金; 细观结构演化; 高温蠕变模拟; 筏化

中图分类号: V231

文献标识码: A

Microstructural evolution and modeling for creep deformation of Ni base single crystal

CAO Juan, SHI Duo-qi, WANG Yan-rong

(School of Jet Propulsion,

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

Abstract: By analyzing the microstructural evolution and creep of NASAIR100 at different stresses in several high temperatures, four dominating parameters of microstructural evolution as well as its relationship with creep curves were found out. While the change of precipitate's thickness and interlamellar spacing during rafting was considered, a microstructural evolution model was established based on the primary rafting model, the deformation process of precipitation, the matrix and the creep curves was obtained. By comparing with the tests, the influence of different microstructural evolution processes on creep curves was given, showing that, if four parameters' change in microstructural evolution at high temperature is considered, the model can simulate the creep of material at different stresses and temperatures preferably and more close to the reality.

Key words: Ni base single crystal; microstructural evolution; creep simulation at high temperature; rafting

镍基单晶合金由基体相和均匀弥散其中的沉淀相以共格方式组成^[1-2],在中高温条件下,伴随不同的细观结构演化方式,其蠕变性能呈现出一定差异,不同蠕变阶段对应的细观状态不同.因此,对单晶细观结构演化的观测和模拟有助于加深对材料性能的理解,将材料的宏观变形行为与

细观物理本质联系起来,进而更好地为结构设计提供依据.

单晶细观结构演化有 4 个典型状态,如图 1 所示,材料在适当的热处理后会形成尺寸相近的立方沉淀相结构,见图 1(a),其中颜色较黑的部分是基体相,较浅的是沉淀相;在一定温度载荷组

收稿日期:2009-04-23; 修订日期:2009-07-01

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

作者简介:曹娟(1981-),女,陕西绥德人,博士生,主要从事镍基单晶合金的本构研究.

合作用下,初始结构逐渐以一定的速率演化为两相间隔的较平直的层状结构,见图 1(b),这是一种相对稳定的结构,一般对应于蠕变第二阶段;随着温度和载荷进一步作用,层状结构由平直逐渐变得曲折,呈波浪状,见图 1(c);而后继续粗化,并逐渐发生基体和沉淀相的角色互换,见图 1(d).

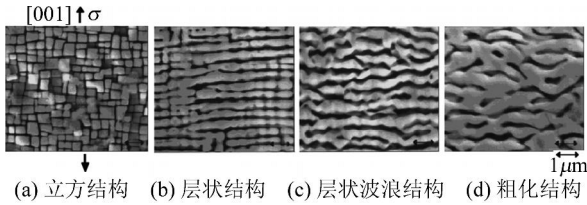


图 1 镍基单晶合金细观结构演化的 4 个典型状态^[3]

Fig.1 Four typical states of microstructural evolution of Ni base single crystal

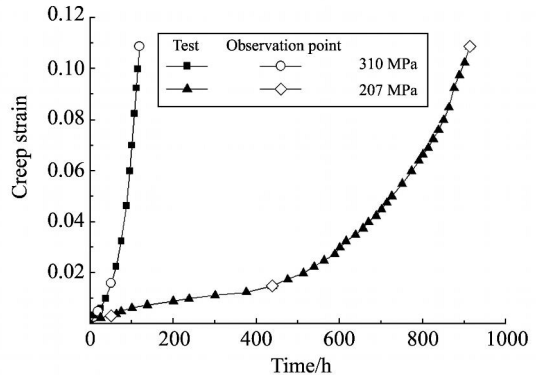
通过试验观测,对单晶细观结构演化的定量分析涉及到 4 个方面的变化,即筏长(沉淀相的筏化最终长度,一般用其最终长度和初始长度的比值来表示),筏化状态因子(表示某一时刻的筏化状态,在相同的时间下,其值越大表明筏化速率越快),沉淀相厚度(形成层状稳定结构后垂直筏化方向上沉淀相的厚度)和层间距(形成层状稳定结构后垂直筏化方向上基体相的厚度).这些变化贯穿材料的整个蠕变过程,其方式不仅与材料热处理后的初始状态密切相关^[4-5],且随温度和载荷条件的不同而变化,进而直接影响蠕变曲线^[6-10].

本文通过分析 NASAIR100 在不同温度和应力下的蠕变与细观结构演化进程,总结得到上述 4 个值在不同条件下的变化量及影响因素,对其进行建模,并结合基于胞元的细观滑移蠕变模型对 NASAIR100 在 1198,1273,1311 K 和 1400 K 下的蠕变曲线和细观结构演化进行了模拟,获得了与试验较吻合的结果.

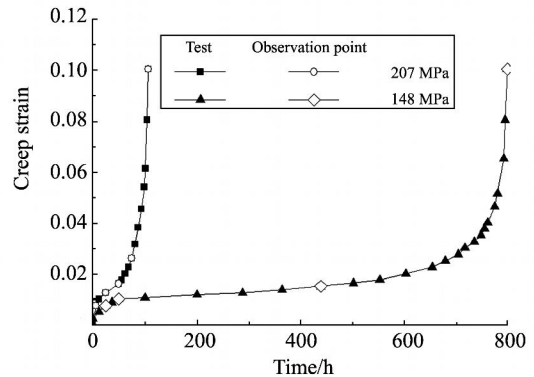
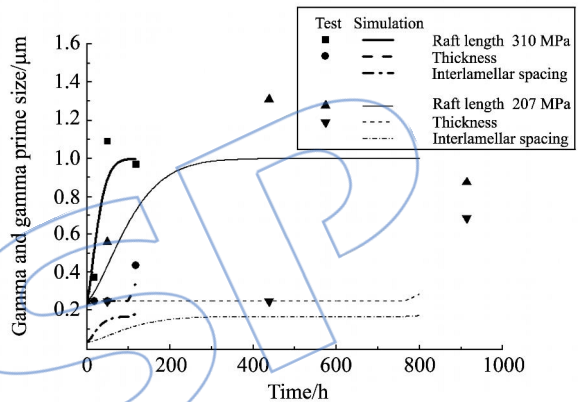
1 细观结构演化及蠕变分析

Nathal M V 给出了 NASAIR100 在 1198 K 和 1273 K 下不同载荷的蠕变与筏化进程对照^[11],如图 2 中的点所示,其中蠕变曲线上的空心点皆表示观测点.由图 2(a)可以看到,1198 K 时蠕变第一阶段应变很小,第二阶段和第三阶段的过渡较平缓.筏化一开始便很快发生,经过一段时间后趋于稳定,在相同的温度下,应力大的筏化速率较快,310 MPa 和 207 MPa 下筏化完成时间分别为 50 h 和 150 h,筏的最终长度约为初始尺寸的 4 倍.

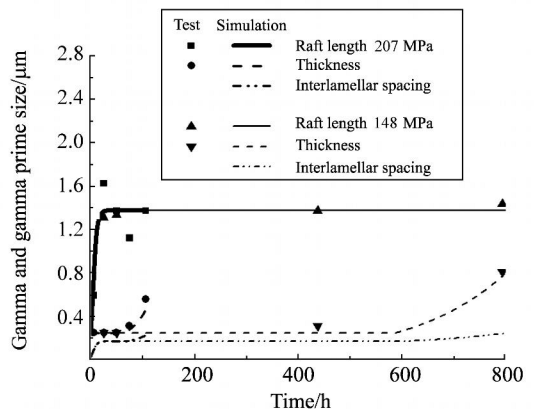
筏的厚度开始保持不变,直到基本接近蠕变第三阶段时,其厚度开始增大,应力越大增加得越快,

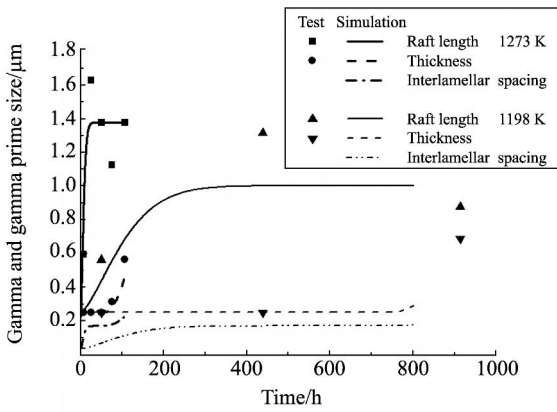


(a) 1198 K, 310 MPa and 207 MPa



(b) 1273 K, 207 MPa and 148 MPa





(c) 207 MPa, 1198 K and 1273 K

图 2 NASA IR100 在 1198 K 和 1273 K 下不同应力的蠕变与细观演化对照

Fig. 2 Comparison of creep and microstructural evolution curves of NASA IR100 under different loads at 1198 K and 1273 K

这是粗化的表现. 与 1198 K 相比, 温度为 1273 K 时蠕变第一阶段应变要大些, 见图 2(b), 蠕变稳定阶段也更明显, 第三阶段蠕变率较大. 此时不同应力下的筏化速率与筏的最终长度基本相同, 筏的厚度也存在类似的变化. 图 2(c) 所示为应力相同时, 不同温度下细观结构演化的对比, 可以看到温度较高时, 筏化速率和筏长都明显较大, 厚度增加得也快. 而应力相同时, 温度高的筏化速率较快, 但当温度达到 1273 K 或更高时, 筏化在 20 h 左右便已完成, 此时应力对它没有明显影响.

Mackay R A^[12] 针对 NASA IR100 在 1311 K 下不同应力的蠕变中断试样, 测量了其对应的细观筏长, 沉淀相厚度及层间距的变化, 如图 3 中的点所示, 可以看到, 温度越高时, 蠕变第二阶段越明显, 第三阶段蠕变率越大, 此时在不同的应力下, 筏的最终长度和筏化完成时间都十分接近, 基本在 50 h 后达到初始的 4.3 倍左右. 在 179 MPa 时筏的厚度开始不变, 在蠕变接近第三阶段时开始增大, 而层间距则一开始便逐渐增大到原来的 5 倍, 保持一段时间后在蠕变接近第三阶段时又有继续增大的趋势, 而在 147 MPa 时筏的厚度和层间距均在初始时刻便增大, 而后一直保持平稳, 最后阶段的变化也不明显.

图 4 所示为温度和应力都不同, 但蠕变寿命相近时的对比, 可以看到, 温度较高时 (1273 K) 第一阶段蠕变速率稍大, 第二阶段较稳定, 第三阶段蠕变速率更快; 此时, 筏化速率快, 筏化的最终长度大, 沉淀相厚度也增大得多.

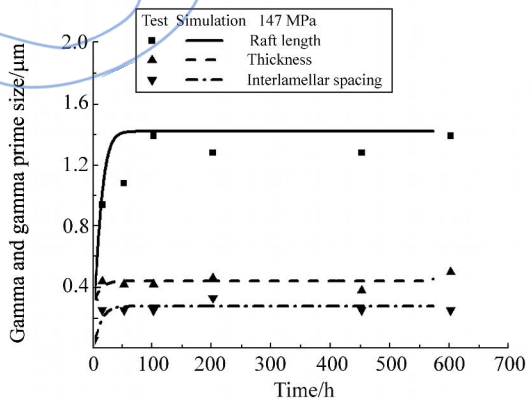
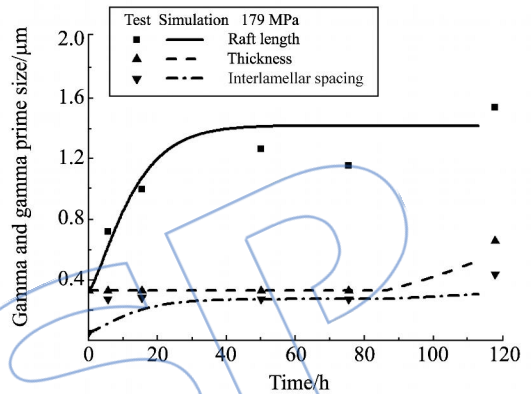
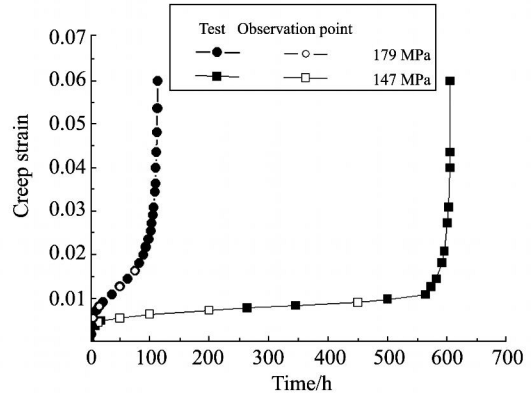


图 3 NASA IR100 在 1311 K 下 179 MPa 和 147 MPa 的蠕变及细观演化

Fig. 3 Creep and microstructural evolution curves of NASA IR100 at 1311 K under 179 MPa and 147 MPa

综上所述, 筏的最终长度和筏化速率均随温度升高而增大, 当温度接近 1273 K 时, 应力对其影响不明显. 在接近蠕变第三阶段时, 沉淀相厚度和基体通道宽度都有增大的趋势, 尤其是应力较大时增加较快, 表明细观层状结构的破坏和粗化的发生与材料的蠕变破坏有一定关联. 当温度较高而应力较低时, 沉淀相厚度和基体通道宽度在一开始便增大, 而后保持稳定.

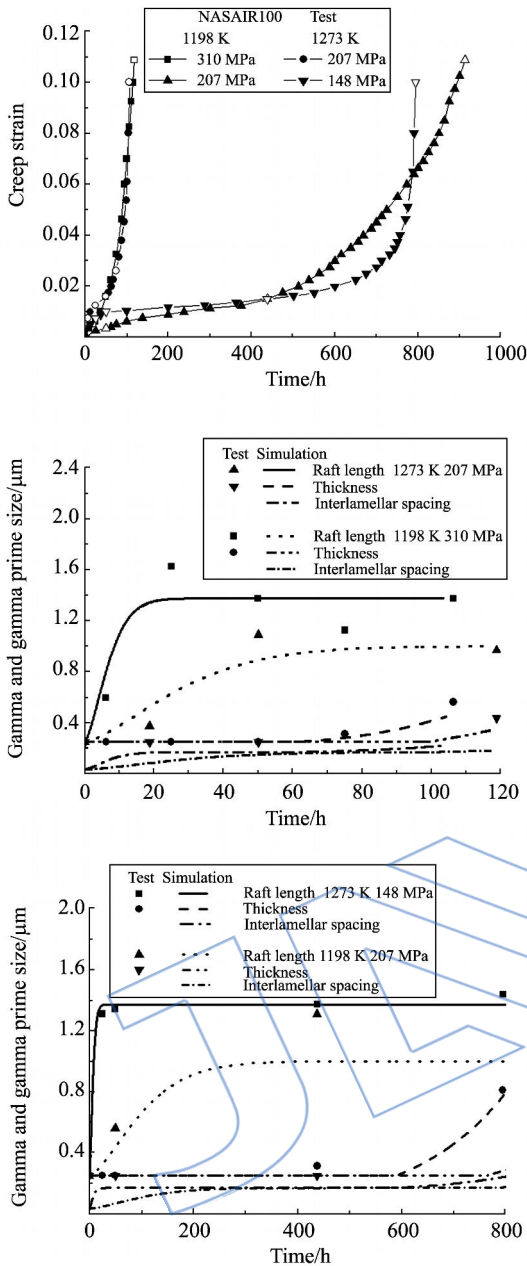


图 4 NASAIR100 不同温度和应力,蠕变寿命相近时的蠕变及细观演化

Fig. 4 Comparison of creep and microstructural evolution curves of NASAIR100 with similar creep lives but under different temperatures and stresses

2 细观结构演化模型

根据以上对比分析,对筏的最终长度进行定量,对筏化速率,沉淀相厚度及层间距变化进行了模拟,得到基本符合实际的细观结构演化过程,进而模拟单晶在高温蠕变载荷作用下细观组织结构的变化及其对性能的影响.因为筏化的产生使原

来的几个立方的 γ' 合并在一起,它们之间的基体通道消失,形成筏化后的周期性层状胞元结构,如图 5 所示,此时 γ 数量比初始状态少,新的胞元体积根据筏化情况可以增大到原来的十几倍或几十倍,但经测量其中 γ 体积分数变化不大^[11].

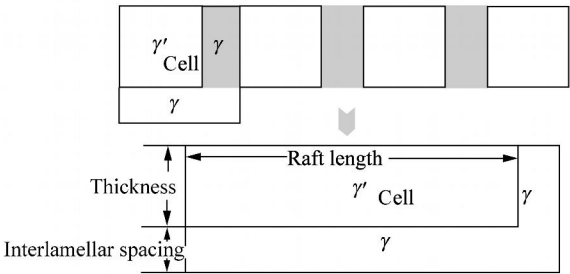


图 5 γ' 筏化前后示意图
Fig. 5 Sketch of γ' combination

首先给筏化 γ' 后的最终长度进行定量,用其最终长度 R_{over} 和初始长度 R_0 的比值来表示

$$R_{raft} = R_{over} / R_0 \tag{1}$$

由上面的分析可以看出,这个最终比值受应力的影响相对较小,而受温度的影响十分明显,这里以 1273 K 为界将其分为两个区域,分别给 R_{raft} 定义不同的常量值,表 1 为几种状态下的不同筏长,定义温度小于 1273 K 时 $R_{raft} = 3.6$,大于 1273 K 时 $R_{raft} = 4.3$.

表 1 不同材料在不同温度下的筏长
Table 1 Raft length of different materials at different temperatures

材料	温度 / K	R_{over}	R_0	$\frac{R_{over}}{R_0}$	$\frac{R_{over}}{R_0}$
NASAIR100	1198	1	0.25	4	
CMSX-4	1223			3.6	3.6
NASAIR100	1255	1	0.33	3	(< 1273 K)
NASAIR100	1273	1.375	0.25	5.5	4.3
NASAIR100	1311	1.40	0.33	4.24	(≥1273 K)

设 ζ 表示某一时刻 t 时 γ 的筏化状态因子,则

$$\zeta = \frac{R / R_0 - 1}{R_{raft} - 1} \tag{2}$$

ζ 的值在 0 ~ 1 之间变化,当 $\zeta = 0$ 时,保持初始状态,没有筏化;当 $\zeta = 1$ 时,筏化全部完成.利用 Avrami 方程^[5]

- ln (1 - ζ) = κtⁿ (3)

式中 t 为时间, κ 和 n 为参数, 可以通过试验曲线中提供的不同应力下的筏化完成时间 (见表 2) 得到. 首先利用式 (3) 得到 ζ 的值, 再通过式 (2) 得到 R 的值, 即某一时刻对应的 γ 相筏化程度, 进而根据 R 的值对胞元尺寸进行更新, 实现筏化定量, 更新方式详见文献 [13].

表 2 NASAIR100 在不同温度和应力下的筏化完成时间

Table 2 Raft finishing time of NASAIR100 under different temperatures and stresses

温度/ K	应力/ MPa	筏化完成时间/ h
1 198	310	50
	207	150
1 273	207	25
	148	25
1 311	179	50
	147	50

其次模拟蠕变后期沉淀相厚度和层间距的变化, 认为蠕变第三阶段启动后沉淀相厚度开始变化, 首先需要得到蠕变第三阶段的大概时间 t_{ter} , 设 t_{ter} 与外载间的关系为

ln $t_{\text{ter}} = a + b \ln (c\sigma_{\text{app}})$ (4)

式中 a 和 b 为参数, σ_{app} 为外载, $c = 0.6$ 为 Schmid 张量模的近似值, $c\sigma_{\text{app}}$ 表示滑移系上分切剪应力的近似值. 根据试验曲线中提供的筏厚度开始变化的时间 (见表 3), 可以得到参数 a 和 b 的值.

表 3 NASAIR100 在不同温度和应力下的蠕变第三阶段启动时间

Table 3 Tertiary stage start time of creep of NASAIR100 under different temperatures and stresses

温度/ K	应力/ MPa	t_{ter}/ h
1 198	310	100
	207	750
1 273	207	60
	148	600
1 311	179	80
	147	530

有了蠕变第三阶段的启动时间, 沉淀相厚度和层间距在第三阶段的增大即可模拟出来, 这里设两者具有相同的变化过程, 则令

$\xi_{\text{thick}} = \frac{T_{\text{thick}}}{T_{\text{thick}}^0}$ (5)

$\xi_{\text{inter}} = \frac{H_{\text{inter}}}{H_{\text{inter}}^0}$ (6)

$\xi_{\text{thick}} = \xi_{\text{inter}} = \exp [k_t (t - t_{\text{ter}})]$ (7)

式中 k_t 为参数, 这里对两个变化过程取相同的值. 当 $t \geq t_{\text{ter}}$ 时, ξ_{thick} 和 ξ_{inter} 的值初始为 1, 最大取 3, 分别表示沉淀相厚度和层间距在某一时刻 t 的增大量, 进而由式 (5) 和式 (6) 分别得到此时两者的实际大小 T_{thick} 和 H_{inter} , 其中, T_{thick}^0 和 H_{inter}^0 分别为其初始值.

对于高温时应力较小的情况, 其沉淀相厚度和层间距一开始就会迅速增大, 根据试验一般增加到其初始值的 5 倍左右, 此种情况无需模拟第三阶段变化, 直接让 ξ_{thick} 和 ξ_{inter} 以筏化的速度增大即可.

本文采用基于细观周期性胞元结构建立的明确区分两相的应力应变解析模型和基于细观位错运动的滑移蠕变模型, 结合此细观结构演化模型进行蠕变模拟, 变形过程中 γ 体积分数略有波动但变化不大, 其他公式详见文献 [14].

3 结果及讨论

针对 NASAIR100 在 4 个不同温度下的变化, 利用上述模型模拟其蠕变及细观结构演化过程, 材料及蠕变参数见表 4, 其具体意义详见文献 [14], 细观结构演化参数见表 5.

对 NASAIR100 在 1 198 K 下不考虑沉淀相厚度和层间距变化时的模拟结果如图 6 所示, 在 1 198 K/ 310 MPa 下, 考虑筏化的蠕变曲线第一阶段要高于试验值, 而不考虑筏化则得到较慢的第三阶段蠕变速率, 减小筏化速率也不能得到和试验很符合的结果 (见图 6 (a)); 1 198 K/ 207 MPa 下, 若不考虑厚度和宽度的变化, 得到的蠕变值远高于试验值, 稳定阶段较短, 而第三阶段蠕变速率为常数, 与试验结果差距明显. 考虑沉淀相厚度和层间距变化后的结果如图 7 所示, 对 310 MPa 和 207 MPa 下的模拟与试验曲线都符合得较好. NASAIR100 在 1 198 K 下的细观结构演化模拟如图 2 (a) 中的曲线所示.

表 4 NASAIR100 不同温度下的蠕变参数
Table 4 Creep parameters of NASAIR100 at different temperatures

参数	数值			
温度/ K(°Q	1 198(925)	1 273(1 000)	1 311(1 038)	1 400(1 127)
E/ MPa	87 100	82 000	79 717	73 364
μ	0.4	0.4	0.4	0.4
C ₁₁ / MPa	186 643	175 715	170 822	157 208
C ₁₂ / MPa	124 429	117 143	113 881	104 805
b/ nm	0.25	0.25	0.25	0.25
错配度 δ	- 0.003 6	- 0.003 6		
γ 边长/ nm	250	250	330	250
γ 宽度/ nm	34	34	55	32
γ 体积分数/ %	68	68	63	70
α	0.153	0.083	0.103	0.036
β 10 ⁻⁹	2.2	2.2	2.2	2.2
ρ_0	0.01	0.01	0.01	0.01
v_0^{fill} / (nm/ s)	0.055 3	5.53	0.005 53	0.553
V^{fill}/ b^3	61.4	61.4	61.4	61.4
D/ 10 ⁻³ ((nm/ s) · MPa)	2.93	2.93	2.93	2.93
$v_0^{\text{shear}}/ 10^{-3}$ (nm/ s)	6.1	3.81	5.81	12.37
V^{shear}/ b^3	24.8	24.8	24.8	25.3
E^{apb} / (J/ m ²)	0.06	0.06	0.06	0.053 9
ϕ 10 ³	31.0	31.0	31.0	31.0

表 5 NASAIR100 不同温度和应力下的细观结构演化参数
Table 5 Parameters of microstructural evolution of NASAIR100 at different temperatures and stresses

温度/ K	载荷/ MPa	n	k/ 10 ⁻⁸	a	b	k _t / 10 ⁻⁶
1 198	310	1.456	4.3	108.942	- 5.05	4.82
	207	1.488 6	0.664	108.942	- 5.05	1.02
1 273	207	1.278	99.9	139.935	- 6.85	4.82
	148	1.278	99.9	139.935	- 6.85	1.53
1 311	179	1.278	100	189.98	- 9.59	4.82
	147	1.456	4.3	189.98	- 9.59	4.82
1 400	60	1.278	6.0	79.05	- 3.68	4.82
	75	1.278	6.0	79.05	- 3.68	4.82
	90	1.278	10	105.8	- 5.22	4.82
	125	1.278	10	105.8	- 5.22	4.82

图 8 给出了不同模型对 NASAIR100 在 1 273 K 下的蠕变模拟结果,可见在 207 MPa 和 148 MPa 下,不考虑筏化时基本上没有模拟出第一阶段的蠕变,第三阶段蠕变率也较小,与试验结果相差甚远,因为此时温度较高,筏化对蠕变的影响较大.不考虑第三阶段沉淀相厚度和层间距的变化时,其蠕变第三阶段的应变率偏大,可见第三阶段

组织结构的变化可以在一定程度上降低蠕变速率,因此,细观结构变化的引入使蠕变曲线各部分都更加趋近于试验曲线,而细观结构在第三阶段的变化也使第三阶段的蠕变率更接近试验值.同时其细观尺寸变化也与试验测量值基本吻合,其细观结构演化模拟如图 2(b)中所示.

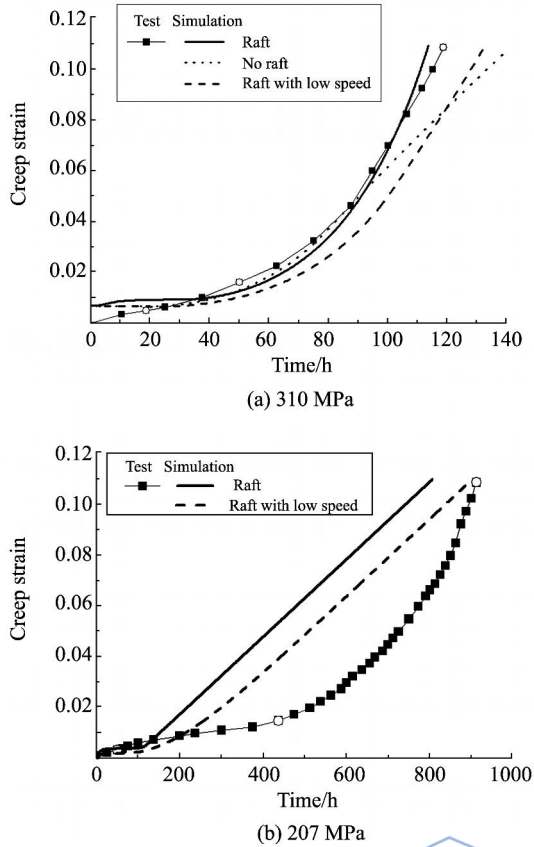


图 6 NASAIR100 在 1198 K 下不考虑沉淀相厚度和层间距变化的蠕变曲线

Fig.6 Creep curves of NASAIR100 at 1198 K without changing of rafting length and interlamellar spacing

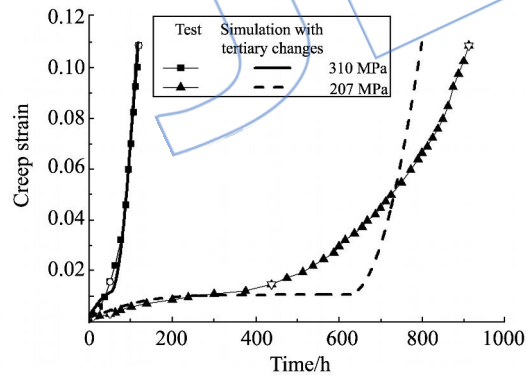


图 7 NASAIR100 在 1198 K 下考虑筏厚度和层间距变化的蠕变曲线

Fig.7 Creep curves of NASAIR100 at 1198 K with changing of rafting length and interlamellar spacing

图 9 所示为 NASAIR100 在 1311 K 下不同情况的蠕变曲线,当高温应力较小时,开始就考虑沉淀相厚度和层间距的增大,可使第一阶段的蠕变回落,而使第二阶段加长,更贴近试验曲线.其细观结构演化模拟如图 3 中所示.

图 10 给出了 NASAIR100 在 1400 K 下不同应力的蠕变模拟结果,对应蠕变寿命跨度较大的几种情况,此筏化模型也能得到与试验吻合的结果.

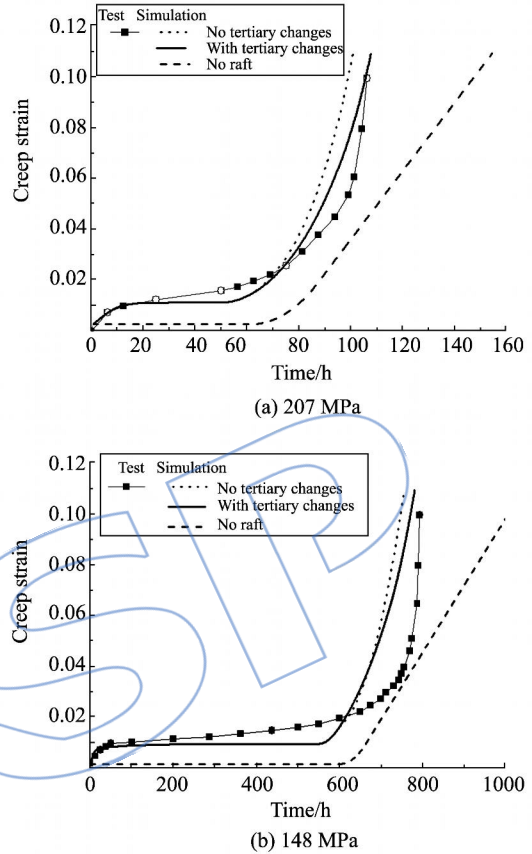


图 8 NASAIR100 在 1273 K 下不同筏化模型的蠕变曲线

Fig.8 Creep curves of NASAIR100 at 1273 K with different rafting models

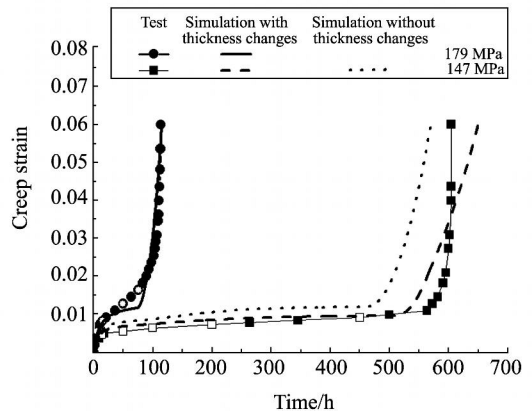


图 9 NASAIR100 在 1311 K 下不同筏化模型的蠕变曲线

Fig.9 Creep curves of NASAIR100 at 1311 K with different rafting models

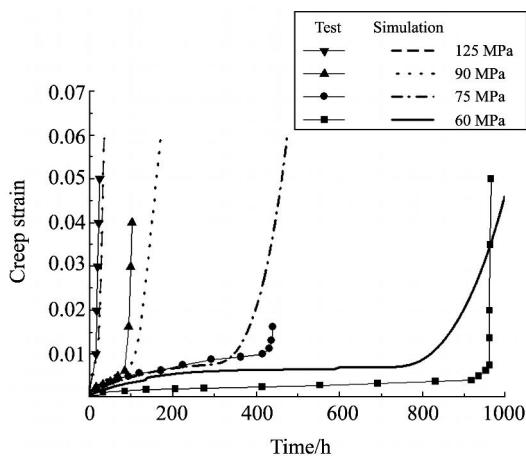


图 10 NASAIR100 在 1400 K 下的蠕变曲线

Fig. 10 Creep curves of NASAIR100 at 1400 K

4 结 论

通过对 NASAIR100 在高温下不同应力和温度的蠕变及细观结构演化进行的对比分析,得到细观两相结构演化的 4 个主要因素的变化过程及其与蠕变的关系.在筏化模型的基础上,首先给出了不同温度下筏的最终长度和不同应力下筏化的完成时间,其次在蠕变第三阶段引入沉淀相厚度和基体通道宽度在此阶段的变化,使模型能更好地实现高温下蠕变率快速增大的蠕变第三阶段,建立了更详细的细观结构演化模型.

在不同的温度/应力组合下,通过对比不同的细观结构演化过程对单晶蠕变曲线的影响,可以看出在高温下,同时考虑这 4 个细观尺寸的变化可以使模型的物理意义更加明确,并更准确地模拟材料的蠕变行为.对 1400 K 下 4 个不同应力水平的蠕变模拟表明,在蠕变寿命跨度较大时也能得到较好的结果.

参考文献:

- [1] 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.
LIU Jinlai. Tension, stress rupture property and microstructure evolution of a Ni base single crystal[D]. Shenyang: Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, 2002. (in Chinese)
- [2] 任英磊.一种镍基单晶高温合金的组织演化及高温力学性能[D].沈阳:中国科学院金属研究所,2002.
REN Yinglei. Microstructure evolution and mechanical performance at high temperature of a Ni base single crystal [D]. Shenyang: Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, 2002. (in Chinese)
- [3] Royer A, Bastie P, Veron M. In situ determination of γ' phase volume fraction and of relations between lattice parameters and precipitate morphology in Ni-based single crystal superalloy[J]. Acta Materialia, 1998, 46(15): 5357-5368.
- [4] Socrate S, Parks D M. Numerical determination of the elastic driving force for directional coarsening in Ni-superalloys [J]. Acta Metallurgica et Materialia, 1993, 41(7): 2185-2209.
- [5] Conley J G, Fine M E, Weertman J R. Effect of lattice registry variation on the late stage phase transformation behavior of precipitates in Ni-Al-Mo alloys[J]. Acta Metallurgica, 1989, 37(4): 1251-1263.
- [6] Nathal M V. Effect of initial gamma prime size on the elevated temperature creep properties of single crystal Nickel base superalloys[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1987, 18(11): 1961-1970.
- [7] Murakumo T, Kobayashi T, Koizumi Y, et al. Creep behaviour of Ni-base single-crystal superalloys with various γ' volume fraction [J]. Acta Materialia, 2004, 52(12): 3737-3744.
- [8] Nathal M V, Mackay R A, Miner R V. Influence of precipitate morphology on intermediate temperature creep properties of a Nickel-base superalloy single crystal[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1989, 20(1): 133-141.
- [9] Zhang J X, Wang J C, Harada H, et al. The effect of lattice misfit on the dislocation motion in superalloys during high-temperature low-stress creep[J]. Acta Materialia, 2005, 53(17): 4623-4633.
- [10] Royer A, Jacques A, Bastie P, et al. The evolution of the lattice parameter mismatch of nickel based superalloy: an in situ study during creep deformation[J]. Materials Science and Engineering A, 2001, 319-321: 800-804.
- [11] Nathal M V, Ebert L J. Elevated temperature creep-rupture behavior of the single crystal Nickel-base superalloy NASAIR100[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1985, 16(3): 427-439.
- [12] Mackay R A, Ebert L J. The development of $\gamma-\gamma'$ lamellar structures in a Nickel-base superalloy during elevated temperature mechanical testing[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1985, 16(11): 1969-1982.
- [13] 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.
CAO Juan, WANG Yanrong, SHI Duoqi. Rafting creep model of Ni base single crystal at high temperature based on microstructure cell [J]. Journal of Aerospace Power, 2009, 24(8): 1691-1698. (in Chinese)
- [14] 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.
CAO Juan, WANG Yanrong, SHI Duoqi. Slip model for the plastic behavior of Ni base single crystal based on dual-phase microstructure cell[J]. Journal of Aerospace Power, 2009, 24(7): 1537-1543. (in Chinese)