

以细观力学法确定 α -TiAl 基 PST 晶体宏观屈服准则

苏继龙

(福建农林大学 机电工程学院,福州 350002)

摘要 基于 α -TiAl 基 PST 晶体的微结构及滑移系和形变孪晶的空间晶体学位向分布的变形机制,提出分析 PST 晶体宏观屈服准则的细观力学解析模型。从 α -TiAl 基 PST 晶体微结构复合材料代表单元的应力和应变场出发,对双轴载荷下 PST 晶体微观结构的宏观屈服面进行数值模拟,结合塑性理论中 Hill 屈服准则,得到 α -TiAl 基 PST 晶体的宏观屈服准则方程。结果表明:PST 晶体屈服应力 σ_y 和外载轴与片层微结构界面之间的夹角 θ 存在强烈依赖关系;PST 晶体在拉伸和压缩时屈服应力差别很小。

关键词 α -TiAl 基合金; PST 晶体; 屈服准则; 细观力学

中图分类号 TH 142.2

文章编号 1007-4333(2005)05-0076-05

文献标识码 A

Applying micromechanical method to characterize the yield criterion for polysynthetically twinning crystals of TiAl

Su Jilong

(Mechanical and Electronic Engineering College, Fujian Agriculture and Forestry University, Fuzhou 350002, China)

Abstract An analytical micromechanical method was proposed to investigate the yield criterion for a PST crystal based on lamellar microstructure and dislocation slip and twinning deformation mechanisms of polysynthetically twinned (PST) crystal. The emphasis was put upon simulating the yield surface of α -TiAl based PST crystal under biaxial loading on the basis of calculating stress and strain of lamellar microstructure of PST. With the Hill theory, the yield criterion function of α -TiAl based PST crystal was obtained. The results demonstrated that yielding stress of PST crystal depends strongly on loading angle between microstructure boundaries and differs only slightly with tension and compression applied loading conditions.

Key words α -TiAl alloys; PST crystals; yield criterion; micromechanics

近年来,两相(α -TiAl + β -Ti₃Al) α -TiAl 基合金因其独特的微结构形式和良好的高温结构强度,成为倍受关注的高温结构材料^[1-3]。弹、塑性性能以及变形、断裂和韧化机制一直是 α -TiAl 基合金力学性能的研究重点,而 α -TiAl 基合金的室温塑性一般较差,因此对其塑性机理的研究是目前重要的研究课题。 α -TiAl 基多孪晶片层晶体(polysynthetically twinned crystal,常称为 PST 晶体)作为一种理想的片层结构模拟材料和 α -TiAl 基合金的重要组分,在 α -TiAl 基合金力学性能的细观力学研究中起着关键作用。PST 晶体由排列方向相同的 α 相和 β 相片层结构组成(图 1)。由于 α 相和 β 相中存在

大量影响 α -TiAl 基合金屈服应力、位向不同的滑移系和孪晶,所以 PST 晶体的屈服应力具有明显的各向异性。Fujiwara 等^[4]用实验的方法确定了 PST 晶体屈服应力的这一特点。Kad、Asaro 等^[5-6]及 Brockman 等^[7]用有限元方法结合位错理论分析了 PST 晶体的屈服和变形;Schlogl 和 Fischer^[8-9]运用有限元方法并结合细观力学方法给出了 PST 晶体屈服曲线的模拟结果。但这些研究都是基于实验观察和有限元数值方法对 PST 晶体在单轴外载作用下屈服特性的分析,没有从 PST 晶体中 α 相和 β 相中滑移系启动的角度进行屈服应力微观机理上的解析分析,另外,对于 PST 晶体在双轴加载下的屈服

收稿日期: 2005-04-09

作者简介: 苏继龙,博士,副教授,主要从事复合材料细观力学研究, E-mail: fjsu@163.com

强度实验和解析数值模拟均未见报道。本文将 PST 晶体微结构中的 相和 2 相分别视为复合材料的基体相和夹杂相,在已有单轴加载屈服特性研究的基础上,从细观力学和位错滑移启动的角度,系统地分析和计算 PST 晶体在双轴外载作用下的屈服应力,构造 PST 晶体的宏观强度域,进而求其宏观屈服准则,拟为深入研究和预测 - TiAl 基多晶体的塑性变形行为和强度问题提供一种可选择的方法。

1 PST 晶体微结构及其细观力学三维分析模型

PST 晶体的层状(板条)组织结构(图 1)由 TiAl (相)和 Ti₃Al (2 相)片层组织构成,其中嵌入的 2 相板条的体积为晶体体积的 5%~10%。相具有四方的 L1₀ 型有序结构, Ti 原子和 Al 原子沿[001]方向在相邻的(001)面上相间分层排列,近似为立方结构;而 2 相具有 D0₁₉型的六方有序结构^[1-2]。

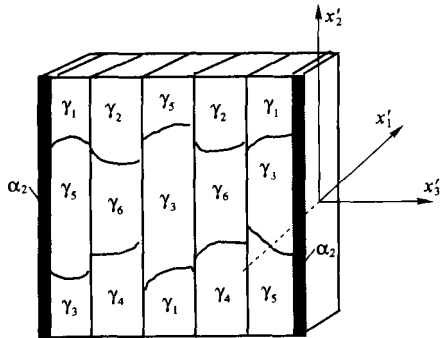


图 1 PST 晶体微结构分析模型

Fig. 1 Model of PST crystal microstructure

片层组织中的 相之间有 6 种晶体学关系的有序畴变体,各相邻片层中有序畴变体间的取向关系为绕片层界面法向,即 相的[111]方向分别旋转 $n \cdot 60^\circ$ ($n=0, 1, 2, \dots, 5$),将这 6 种有序畴变体分别标记为 1、2、3、4、5、6。PST 晶体中 2 相与 相的关系是: $(111) \{0001\}_2$ 和 $1\bar{1}0 \quad 11\bar{2}0_2$ 。将整个 PST 晶体视为复合材料,相为基体相,2 相为夹杂相。为确定 相和 2 相三维空间各滑移系和形变孪晶的分切应力,必须建立宏观外载与基体相和夹杂相中的应力和应变场。所建立的宏观整体坐标系和片层结构局部坐标系见图 1 和 2,其中 x_1, x_2, x_3 为整体坐标系, x_1, x_2, x_3 为 PST 晶体局部坐标系,即晶体的主轴坐标系。

进行细观力学分析计算时,首先要确定基体相和夹杂相的弹性模量。对 - TiAl 基合金弹性常数的计算目前已有许多,各结果有些差异,本文中采用 Yoo 等^[10-11]的计算结果。

下面运用细观力学的 Mori-Tanaka 平均场理论,计算 PST 晶体中基体相(相)和夹杂相(2 相)的平均应力和平均应变。对于 PST 单晶体中含量较少的 2 相片层结构,可以近似地认为是钱币型夹杂。通过一系列运算(限于篇幅,类似的推导过程^[12-13]在此省略),可以确定基体相和夹杂相中的平均应力张量,分别为:

$$\sigma_m = \frac{1}{1-f} (M_m - M_I)^{-1} (M - M^I) = P_m \quad (1)$$

$$\epsilon_I = \frac{1}{f} (M_I - M_m)^{-1} (M - M_m) = P_I \quad (2)$$

式中:下标 m, I 分别表示基体相和夹杂相; M 为 PST 晶体整体柔度张量; 为外载荷; P_m 和 P_I 分别为基体项和夹杂相的应力集中张量,

$$P_m = [P_1 \quad P_2 \quad P_3 \quad P_4 \quad P_5 \quad P_6]$$

$$P_1 = \frac{M_{I,11} + M_{L,12}}{(1-f)(M_{I,11} + M_{I,12}) + f(M_{m,11} + M_{m,12})}$$

$$P_2 = \frac{f(M_{I,13} - M_{m,13})}{(1-f)(M_{I,11} + M_{I,12}) + f(M_{m,11} + M_{m,12})}$$

$$P_3 = 0$$

$$P_4 = P_5 = 1$$

$$P_6 = \frac{M_{I,11} - M_{L,12}}{(1-f)(M_{I,11} - M_{I,12}) + f(M_{m,11} - M_{m,12})}$$

其中 f 为 2 相与 PST 晶体的体积比, %。同时,基体中的平均应变张量

$$\epsilon_m = C_m^{-1} \sigma_m \quad (3)$$

式中: C_m⁻¹ 为基体相的柔度张量,式(2)中的 P_I 表达式类似 P_m 可求。这样,对于 PST 晶体,可计算在任何外载荷 作用下,其基体相和夹杂相中的平均应力,进而进行屈服强度分析。

- TiAl 基 PST 晶体 相中的滑移系和孪晶均在立方单胞的 1 个正四面体中,滑移面分别为 (111)、($\bar{1}11$)、($1\bar{1}1$)、($11\bar{1}$)。根据现有的研究成果, - TiAl 基合金中 相的滑移和形变孪晶是 PST 晶体中的主要变形模式^[1,8];另外,由于 2 相具有基面、柱面和锥面上的滑移系,在外载作用下 2 相对塑性变形有重要贡献。本文中综合考虑 相和 2 相中的变形机制对 PST 晶体屈服应力的影响,基面由于其临界分切应力(CRSS)较大,平行片

层平面内的滑移往往被 相中变形机制所取代^[7,14],所以不考虑其开动。计算时,PST 晶体中孪晶与普通(超)位错、柱面与孪晶、锥面与柱面之间的临界分切应力的比例关系,根据已有数值和实验结果确定为 $k e z = 1.318^{[5-6,15]}$ 。

如图 1 和图 2(a) 所示,在整体坐标系 $x_1、x_2、x_3$ 中,令双轴拉伸外载 σ_{22} 和 σ_{33} 沿 x_2 和 x_3 轴向,则其应力状态表示为: $\sigma = \{0 \ \sigma_{22} \ \sigma_{33} \ 0 \ 0 \ 0\}^T$ 。在加载过程中可定义一加载路径 $\lambda = \sigma_{33} / \sigma_{22}$,即由不同的加载路径 模拟不同的加载方式。在主轴坐标系下双轴外载荷表示为:

$$\sigma = \{0 \ A \ B \ C \ 0 \ 0\}^T \quad (4)$$

式中: $A = \sigma_{22}(\cos^2 \theta + \sin^2 \theta)$, $B = \sigma_{22}(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)$, $C = \sigma_{22} \sin 2\theta$, 为外载 σ_{22} 与 x_2 轴夹角,称为加载角。下面在晶体的主轴坐标系下进行计算。

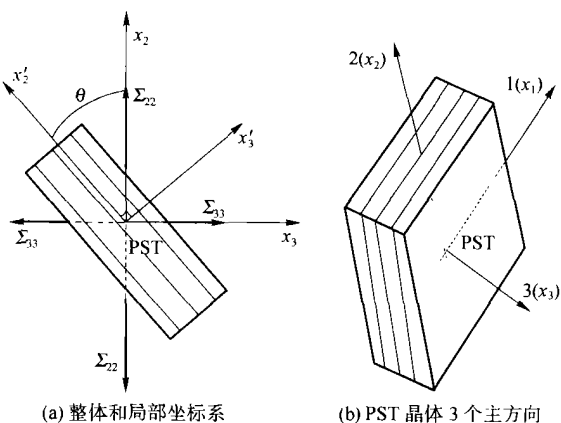


图 2 PST 晶体双轴加载分析模型

Fig. 2 Model of PST crystal under biaxial loading

由于 相存在微结构,本文中各微结构畴体应变相等(等应变)为分析前提计算分配各有序畴体上的应力。对于等应变情况,各有序畴体上的应变张量为 ϵ_m ,应力张量则为 $\sigma_i = C_i \epsilon_m$ 。式中 C_i 为畴体 i 的刚度张量。每个滑移系用滑移面的法向单位向量 n 和滑移方向单位向量 b 来表示。由 Schmid 定律,对于任一应力状态,如果在某一特定的滑移系 s 上的分解剪切应力 τ_s 达到临界分切应力 τ_{cr} 时,那么晶体将在此滑移系上产生滑移变形(即宏观屈服)。如果应力状态用张量 σ_{ij} 表示,则 Schmid 定律可表示为:

$$m_{s,ij} \sigma_{ij} = \tau_{cr} \quad (5)$$

式中: $m_{s,ij}$ 为滑移系 s 上的广义 Schmid 因子,

$m_{s,ij} = (b_{s,i} n_{s,j} + b_{s,j} n_{s,i}) / 2$; 等号对开动滑移系成立,不等号对其他滑移系成立。

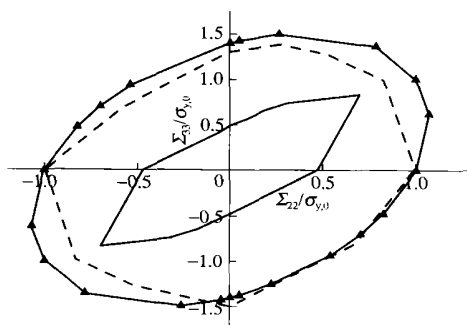
至此,可对任意 畴体中的任意滑移系或孪晶及 相中柱面和锥面滑移系分别计算分切应力。令分切应力达到各自变形机制相应的临界分切应力 τ_{cr} ,即 $\tau = \tau_{cr}$,位错将开始移动,这样就可反解出外载 σ_{22} 及 σ_{33} 。令屈服应力比值 $\lambda = \sigma_{22} / \sigma_{y0}$, σ_{y0} 为拉伸屈服应力($\sigma_{y0} = 3 \tau_{cr}$),从而得到 随外载方向与片层界面间夹角 的变化关系。

2 PST 晶体在双轴外载作用下的屈服面及宏观屈服准则

为进一步证明单轴加载时 PST 晶体屈服应力具有明显的各向异性^[1-4],同时基于尚未见有关 PST 晶体双轴加载实验报道的考虑,对 PST 晶体双轴加载实验进行模拟。

计算模型的思想是:通过改变加载方式 得到不同的双轴外载组合,相当于实验中测量材料强度时的不同加载路径,对每一种加载方式,先计算相和 相的平均应力张量 σ_m 和 σ_1 ,再计算 6 种畴体中所有的滑移系及 相柱面和锥面上的分切应力,运用分切应力的 Schmid 定律,反解出不同双轴加载情况下 PST 晶体的屈服应力。

本文中对 2 个双轴加载方向,即 $\theta = 0$ 和 45° 分别施加相互垂直的双轴外载 σ_{22} 和 σ_{33} ,得到这 2 种角度下 PST 晶体的屈服面(图 3)。



细观模拟方法:-- $\theta=0^\circ$,— $\theta=45^\circ$; Hill 近似方程: \rightarrow
 $\sigma_{y,0}$ 为 PST 晶体平行片层方向单轴加载时的屈服应力

$\sigma_{y,0}$ 为 PST 晶体平行片层方向单轴加载时的屈服应力

图 3 双轴加载下 PST 晶体的屈服面

Fig. 3 Yield surface of PST crystal under biaxial loading

从图 3 可以得出结论:PST 晶体的屈服应力与双轴加载时的加载角 有关,即与 PST 晶体单轴加载时情况一样,屈服应力表现出明显的各向异

性^[13]。同时,由图 3 可以看到: 分别为 0°和 45°时, $\sigma_{y,0} > \sigma_{y,45}$;另外,从双轴加载屈服面曲线也可推断单轴加载情况:对于 $\theta = 0^\circ$, σ_{22} 方向(对应单轴加载的 $\theta = 0^\circ$)拉伸和压缩屈服应力几乎相同,而在 σ_{33} 方向(对应单轴加载的 $\theta = 90^\circ$)拉伸和压缩屈服应力有差别,压缩时屈服应力比拉伸时稍大,但总的来说差别很小,这与文献报道的实验结果一致^[8,15]。

下面讨论 PST 晶体在 $\theta = 0^\circ$ 双轴加载时的近似屈服准则。Hill^[16]提出,正交各向异性材料的屈服准则可表示为

$$\phi = (G + H) \frac{\sigma_{11}^2}{2} + (H + F) \frac{\sigma_{22}^2}{2} + (F + G) \frac{\sigma_{33}^2}{2} - 2H \sigma_{11} \sigma_{22} - 2F \sigma_{22} \sigma_{33} - 2G \sigma_{33} \sigma_{11} + 2L \frac{\sigma_{23}^2}{2} + 2M \frac{\sigma_{31}^2}{2} + 2N \frac{\sigma_{12}^2}{2} = 1 \quad (6)$$

式中: σ_{ij} 为宏观外载在主轴坐标系中的分量; ϕ 中的各待定参数分别为

$$\begin{aligned} 2H &= 1/\sigma_{x_1}^2 + 1/\sigma_{x_2}^2 - 1/\sigma_{x_3}^2 \\ 2G &= 1/\sigma_{x_3}^2 + 1/\sigma_{x_1}^2 - 1/\sigma_{x_2}^2 \\ 2F &= 1/\sigma_{x_2}^2 + 1/\sigma_{x_3}^2 - 1/\sigma_{x_1}^2 \\ 2L &= 1/\sigma_{x_1}^2, 2M = 1/\sigma_{x_2}^2, 2N = 1/\sigma_{x_3}^2 \end{aligned} \quad (7)$$

式中: σ_{x_1} 、 σ_{x_2} 、 σ_{x_3} 分别为各向异性材料 3 个主方向单向加载屈服应力; σ_{x_1} 、 σ_{x_2} 、 σ_{x_3} 分别为垂直 3 个主方向面内的剪切屈服应力。对本文中讨论的平面 (σ_{22} - σ_{33})内加载情况, Hill 屈服准则可表示为

$$\phi = (H + F) \frac{\sigma_{22}^2}{2} + (F + G) \frac{\sigma_{33}^2}{2} - 2F \sigma_{22} \sigma_{33} + 2L \frac{\sigma_{23}^2}{2} = 1 \quad (8)$$

利用图 3,考虑到它是用 $\sigma_{y,0}$ 归一化后的结果,按照实验结果取 $\sigma_{y,0} = 300$ MPa。由此可得到 PST 晶体 3 个主方向应力,分别为: $\sigma_{x_1} = 303$ MPa, $\sigma_{x_2} = 300$ MPa, $\sigma_{x_3} = 420$ MPa。结合参数公式(7),可得到各待定参数:

$$\begin{aligned} H &= 8.203 \times 10^{-6} \text{ MPa}^{-2} \\ G &= 2.761 \times 10^{-6} \text{ MPa}^{-2} \\ F &= 2.907 \times 10^{-6} \text{ MPa}^{-2} \end{aligned}$$

而参数 L 对应的应力状态是: $\sigma_{23} = 0$, $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33} = \sigma_{31} = \sigma_{12} = 0$,即 $\sigma_{22} = \sigma_{33}$, $\sigma_{33} = -\sigma_{23}$,也就是对应 $\theta = 45^\circ$ 的纯剪切应力状态。由图 3 中 $\theta = 45^\circ$ 屈服面对应的计算结果, $\sigma_{22} = -\sigma_{33} = 65$ MPa,故有 $2L = 2.367 \times 10^{-4} \text{ MPa}^{-2}$;因此, PST 晶体在 $\theta = 0^\circ$ 方向上双轴加载时的宏观屈服准则可表示为:

$$\begin{aligned} &11.110 \times 10^{-6} \frac{\sigma_{22}^2}{2} + 5.668 \times 10^{-6} \frac{\sigma_{33}^2}{2} - \\ &5.814 \times 10^{-6} \sigma_{22} \sigma_{33} + 2.367 \times 10^{-4} \frac{\sigma_{23}^2}{2} = 1 \quad (9) \end{aligned}$$

最终,通过整体宏观和主轴坐标系之间的转换,可以得到在双轴外载 ($\sigma = \sigma_{33}/\sigma_{22}$)作用下对应任意加载角 θ 时 PST 晶体的近似屈服面:

$$\frac{\sigma_{22}^2}{35.152 + 59.341 J} (0.592 - J) + 2.721 (1 - J^2) \cos^2 \theta - 26.763 (J - 1)^2 \cos^4 \theta = 10^6 \text{ (MPa)} \quad (10)$$

图 3 中给出直接由近似屈服面方程式(10)确定的 PST 晶体双轴加载 ($\theta = 0^\circ$)宏观屈服面,并与用细观力学方法模拟结果进行了比较,两者吻合较好。

3 结 论

1) 将 - TiAl 基 PST 晶体微结构中的 相和 σ_2 相分别视为复合材料的基体相和夹杂相,从细观力学和位错滑移启动的角度系统地分析和计算了 PST 晶体在双轴载荷作用下的屈服应力,构造了 PST 晶体的宏观强度域,进而拟合得到其宏观屈服准则;

2) PST 晶体在双轴载荷作用下的屈服应力与加载轴的角度 θ 有关,即表现出明显的屈服应力各向异性;

3) PST 晶体在双轴载荷作用下各加载角 θ 所对应的屈服面近似方程可表示为:

$$\frac{\sigma_{22}^2}{35.152 + 59.341 (0.592 - J)} + 2.721 (1 - J^2) \cos^2 \theta - 26.763 (J - 1)^2 \cos^4 \theta = 10^6 \text{ (MPa)}$$

4) PST 晶体在拉伸和压缩时屈服应力有些差别,但总的来说差别很小。

参 考 文 献

[1] Appel F, Wagner R Microstructure and deformation of two-phase titanium aluminides [J]. Materials Science and Engineering, 1998, R22: 187-268

[2] Kim Young-Won. Ordered intermetallic alloys, part 1: gamma titanium aluminides [J]. Journal of Metall, 1994, 46:30-39

[3] Dimiduk D M, Hazzledine P M, Parthasarathy triplicane A, et al. The role of grain size and selected microstructure parameters in strengthening fully lamellar TiAl alloys [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1998, 29A:37-47

[4] Fujiwara T, Nakamura A, Hosomi M, et al. Deformation of polysynthetically twinned crystals of TiAl with a

- nearly stoichiometric composition[J]. Philosophical Magazine A, 1990, 61(4): 591~606
- [5] Kad B K, Dao Ming, Asaro R J. Numerical simulation of plastic deformation and fracture effects in two phase - TiAl + γ -Ti₃Al lamellar microstructures[J]. Philosophical Magazine A, 1995, 71(3): 567~604
- [6] Kad B K, Dao M, Asaro R J. Numerical simulations of stress-strain behaviour in two-phase α + β lamellar TiAl alloys[J]. Materials Science and Engineering A, 1995, 192/193:97~103
- [7] Brockman R A. Analysis of elastic-plastic deformation in TiAl polycrystals[J]. International journal of plasticity, 2003, 19: 1749~1772
- [8] Schlogl S M, Fischer F D. The role of slip and twinned crystals of TiAl: A micromechanical model[J]. Philosophical Magazine A, 1997, 75(3): 621~636
- [9] Schlogl S M, Fischer F D. Numerical simulation of yield loci for PST crystals of TiAl[J]. Materials Science and Engineering A, 1997, 239/240: 790~803
- [10] Yoo M H, Fu C L. Physical constants, deformation twinning, and microcracking of Titanium Aluminides [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1998, 29A: 49~63
- [11] Yoo M H, Zou Jin, Fu C L. Mechanistic modeling of deformation and fracture behavior in TiAl and Ti₃Al [J]. Materials Science and Engineering A, 1995, 192/193: 14~23
- [12] Hu Gengkai. A method of plasticity for general aligned spheroidal inclusion or void reinforced composites [J]. International Journal of Plasticity, 1996, 12:439~449
- [13] 苏继龙,胡更开.全片层 TiAl 合金临界屈服应力的细观研究[J].材料科学与工程学报,2003,4:535~538
- [14] Dimiduk D M, Parthasarathy T A, Hazzledine P M. Design-tool representations of strain compatibility and stress-strain relationships for lamellar gamma titanium aluminides[J]. Intermetallics, 2001, 19:875~882
- [15] Inui H, OH M H, Nakamura A, et al. Room-temperature tensile deformation of polysynthetically twinned (PST) crystals of TiAl [J]. Acta Metall Mater, 1992, 40(11): 3095~3104
- [16] Hill R. A theory of the yield and plastic flow of anisotropic metals [J]. Proc R Soc. London, 1948, 193A: 281~291