

文章编号:1671-6833(2009)01-0043-05

钛合金微结构力学计算与虚拟失效分析

任淮辉, 李旭东

(兰州理工大学 甘肃省有色金属新材料省部共建国家重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘要: 利用电子背散射衍射(EBSD)及 OIM 分析系统描述钛合金复合材料微观组织结构的金相形貌与晶体学取向, 通过对复合材料微结构的模块化与可视化设计, 模拟钛合金复合材料微观组织结构代表性体积单元. 在此基础上, 利用有限元法对钛合金微结构进行细观力学响应的数值计算, 根据计算结果, 识别“材料结构弱点”, 评估微裂纹的启裂、扩展, 预测材料微结构内材料损伤后的性能, 推演“微结构虚拟失效”行为.

关键词: 材料微结构; 代表性体积单元; 材料结构弱点; 虚拟失效; 各向异性

中图分类号: TG 111; TP 391 **文献标识码:** A

0 引言

随着观察设备的技术进步, 目前观察材料微观结构已经比较方便, 同时观察的精确程度得到了极大提高. 使用 OIM (Orientation Imaging Microscopy) 系统, 可以观察到材料表面纳米量级的组织状态. 凭借先进的观察设备, 能比较方便地观察、测量材料的取向和组织分布情况, 可以超越传统金相观察手段的不足, 在细观域内获得材料的组织分布信息.

钛合金是较常用的航空材料, 多数情况下, 通过传统的手段仅观察其微观组织结构的形貌, 很难指导材料的性能设计与材料微结构行为预测, 因此, 利用先进的设备除了测定钛合金的晶粒大小、形状与合金相分布等基本信息外, 还需要了解其晶粒的晶体学取向与组织分布. 同时, 利用有限元方法实现对钛合金复合材料微观组织结构代表性体积单元块的计算机模拟并且对其微结构进行力学数值计算, 可以弥补采用实验的手段难以表征实验过程中材料在细观尺度上应力状态分布与裂纹扩展形貌定量分析的不足, 从而更好地实现钛合金微观组织结构的“性能导向型设计”与断裂失效行为分析.

1 实验部分

1.1 实验设备与方法

EBSD 是以入射电子束单色波照射在试样表面上, 入射电子在试样表层发生弹性与部分非弹性散射形成点源, 该点源与试样被照射区域内某个晶粒的某一晶面发生布拉格衍射, 衍射波形成两个辐射圆. 在衍射圆锥与荧光屏的交截处得到一对交截的平行线, 成为 Kikuchi Pattern (菊池线). 所有晶面产生的 Kikuchi Pattern 构成了一张电子背散射衍射谱(EBSP), 通过处理系统对 EBSP 的计算和标定就可以得出该晶粒的取向信息^[1]. EBSD 系统的基本硬件是一套 SEM 和一套 EBSD 处理系统. 为了获得高空间分辨率, 需要配备 FEGSEM (Field Emission Gun Scanning Electron Microscopes). 背散射衍射的信息采集系统包括高灵敏度的 CCD 摄像机、衍射花样的成像处理和背底减薄系统.

EBSP 信息的获得: 通过每一点的背散射电子所产生的 Kikuchi Pattern, 标定出该点的取向, 以欧拉 (Euler) 角的方式给出结果. 通过面扫描, 逐点标定材料中每一点的取向, 可以得到整个材料的取向信息. 将试样扫描区域内的所有取向信息按照一定的取向差进行还原, 可以重构出材料

收稿日期: 2008-09-15; 修订日期: 2008-10-30

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50271016, 50571042); 国家重大基础研究前期研究专项资助项目 (2003CCA03800).

作者简介: 任淮辉 (1981-), 男, 安徽淮北人, 兰州理工大学博士研究生, 主要从事材料微结构力学计算与虚拟失效分析的研究, E-mail: sys2@lut.cn.

的晶粒图,即 OIM-MAP. OIM 取向成像显微技术通过采集电子背散射衍射信息,储存、计算、对比、校正后,重构多晶体图的自动连续过程,即通过处理系统连续自动地处理 EBSPs (电子背散射衍射图谱),经校正后得到材料的取向图的过程^[2].

1.2 选材与实验结果

实验所用的材料为 BT3-1 与 TC4 为较常使用的航空材料,均为双相钛合金, α 相为密排六方结构, β 相为体心结构.其中 BT3-1 为沿用前苏联的编号系统,按照成分对比相当于 TC6,材料由沈阳黎明航空发动机厂提供.材料及其化学成分如表 1 和表 2 所示.

表 2 BT3-1 与 TC4 钛合金化学成分

BT3-1	Al	Mo	Cr	Fe	Si	C	其它元素	Ti		
	5.5~7.0	2.0~3.0	0.8~2.3	0.2~0.7	0.15~0.4	≤0.10	≤0.65	余		
TC4	Al	V	Fe	Si	C	N	H	O	其它元素	Ti
	6.2~6.4	4.1	0.09	<0.15	0.01	0.01	0.004	0.16	≤0.3	余

想要得到高质量的 OIM-MAP 取向图还需要注意以下细节:①默认取向差角为 12° (INCA 处理系统) 和 15° (HKL 处理系统),如果希望得到显示大角晶界的取向图,选用默认的取向差值即可;如果希望得到亚晶的分布取向图,需选择一定的角度作为亚晶间的角度差,可以在 $2^\circ \sim 15^\circ$ 之间选择 (HKL 处理系统).②计算取向差参数的选择:晶粒取向是一组欧拉角,每一组欧拉角包括 3 个角度值,并且按照不同的参数计算取向差所得到的取向图具有一致性,所以,重构取向图时选择 θ 、 ψ 、 ϕ 3 个角度作为描述晶粒局部各向异性的取向角度差.③OIM-MAP 形式的选择:利用 OIM 方法可以得到彩色和灰度两种形式的取向图,笔者采用灰度图配合取向差角分布图晶粒的取向分布如图 1(a) 所示.④双相合金的处理方式类似,将双相域视为晶粒,同样的处理方式可以得到相界,以及同一相域内的亚区域的分布信息.为了区分双相材料各相域分布情况,可以将双相或多相材料的各相域分别添色,得到相的分布图,对相的大小、分布、面积份额进行统计如图 1(b) 所示.

采用 OIM 方法得到的取向数据,是通过人工设置扫描步长,对选区内逐点扫描得到的各扫描点的取向值.每一扫描点的数据包括该扫描点的像素几何位置,和描述该点晶体学取向的一组欧拉空间角度值.因此,如果要得到每个晶粒的晶体学取向,

表 1 实验用材料、代号及规格

材料名称	代码编号	规格	试样尺寸	标记
钛合金	BT3-1	$\Phi 30$ 棒材	$10 \times 12 \times 3 /$ $10 \times 12 \times 1$	无标记
钛合金	TC4	$\Phi 40$ 棒材	$10 \times 10 \times 2 /$ $10 \times 10 \times 1$	无标记

使用 OIM 方法检测材料的取向与织构时,首先要已知材料的晶体结构和点阵常数.采用 X-ray 衍射方法测量材料的点阵常数,用于构建 OIM-EBSD 试验时的晶体结构模型.选用设备为: D/max-2400 Rigaxn.

还需要对扫描的像素点的位置与取向值进行数据处理,处理后钛合金 TC4 的微结构形貌与含有 359 个基体晶粒的数据统计结果,如图 2 所示.

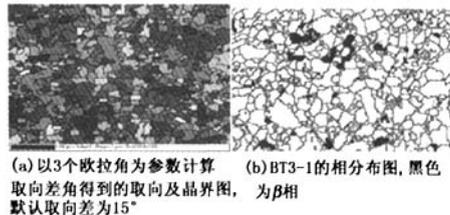


图 1 TC4 的晶体学取向图
Fig. 1 Orientation map of TC4.

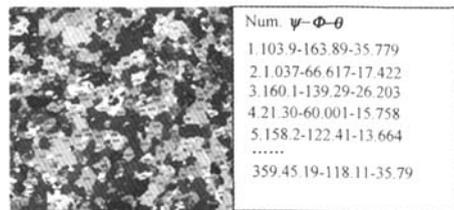


图 2 TC4 的晶粒取向图与晶粒的欧拉空间取向角度值
Fig. 2 Orientation map of TC4 and Euler angle of grains

2 有限元模拟

2.1 钛合金微结构的有限元模型

对于钛合金材料微结构的几何模型,笔者是通过材料微观组织结构仿真软件 ProDesign 构造

的,即利用 Voronoi tessellation 的方法,通过对材料微观组织结构的可视化与模块化设计,将体积份额较多的 α 相作为基体微结构,而将体积份额较少的 β 相视为第二相组成物(例如椭球或块体增强物),在商业有限元软件 ABAQUS 中对其进行复合,关于 β 相组成物的分布,非常关键的一点是必须定量澄清每个 β 相组成物几何与 α 相基体几何之间以及相邻 β 相组成物几何之间的相对位置关系. 钛合金复合材料微结构中的 β 相组成物,可视为其在 α 相基体微结构中一种或几种方式的几何分布^[3].

作者没有从解析几何的角度来定量表征 β 相组成物与 α 相基体微结构之间的界面几何信息,对于任意形状颗粒、纤维、块状增强物与基体材料微结构的界面几何信息数据的求解及数据的存储、管理方式都是非常困难的. 将钛合金微结构的两相结构推演为具有普遍适用性的多面体块体颗粒增强的复合材料微结构进行图示说明. 多面体块体颗粒与基体材料微结构的复合,导致基体晶粒几何结构的不连续性,同时产生难以定量描述的复杂界面关系如图 3(a) 所示. 因此,从解析几何的角度很难定量表征如图 3(b) 所示的以多面体块体颗粒作为第二相组成物的复合材料微观组织结构.

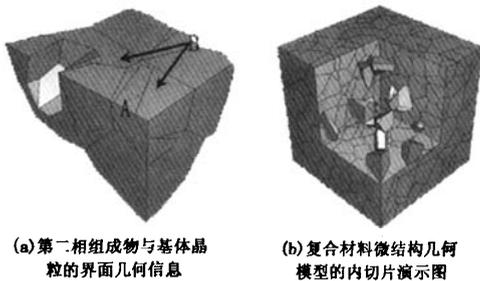


图 3 多面体块体增强复合材料微结构几何模型
Fig. 3 Geometrical model of composite microstructures with block granules

在进行钛合金的微结构应力计算时,为了有效地避开这些界面几何信息数据的求解,采用几何实体单胞的自动识别技术,有效地跟踪、识别复合材料微结构的 α 相基体晶粒与 β 相组成物的几何实体.

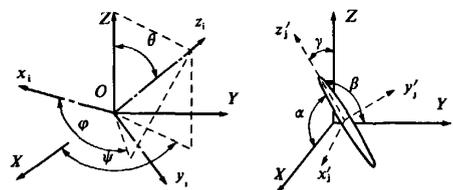
2.2 各向异性的表征与本构关系

利用 EBSD-OIM 系统,可以定量表征钛合金复合材料内 α 相基体晶粒与 β 相组成物在微结构中局部各向异性. 各向异性在材料微结构中具有广泛的意义,即材料微结构的“各向异性”不仅包

括由于材料组成物不同取向所引起的各向异性行为、材料组成物不规则的几何形状所导致的各向异性行为、材料组成物的非均匀分布所产生的各向异性,而且也包含了微结构内由于细观应力场的不均匀性所产生的各向异性^[4-5].

EBSD-OIM 系统重构的取向图,可以得到定量表征晶粒局部各向异性的三个取向角度差,即极角 Θ ,方位角 Ψ 和旋转角 Φ . 在钛合金材料微结构中,将 α 相与 β 相同同时视为多晶体材料微结构内的晶粒,分别用不同的材料属性加以区别,晶粒的取向则通过旋转一个参考坐标系来确定其不同空间点阵的晶格坐标轴(或者,相反地,根据已确定晶格的坐标轴调整参考坐标系).

为了使模拟具有广泛的物理意义,作者研究的是复合材料微结构中第二相对基体微结构影响的普遍适用性,对其引入第二相几何结构的取向概念. 以椭球短纤维增强的复合材料为例,短纤维增强的复合材料微结构被定义为不仅包含空间分布的任意多边形的晶粒与其晶体学取向,而且还包含空间分布的椭球形短纤维与其晶体学取向. 含有统一晶体学取向的区域被认为是一个独立的复合材料组成物. 在 Euler 空间 $\Omega (\Theta, \Phi, \Psi \in \Omega)$ 中定义了三个区间角,用于描述晶粒的空间取向. 在全局直角坐标系 $O-XYZ$ 中,根据参数化的 Euler 角,定义第 i 个晶粒的局部晶体学直角坐标系,如图 4(a) 所示. 第 i 个晶粒的晶体学平面法向量 d_i 可以由全局参考坐标系中晶体学方向的余弦 $\cos\alpha, \cos\beta, \cos\gamma$ 测量得到,也可以被定义在局部坐标系 $O-X'_i Y'_i Z'_i$ 的方向余弦 $\cos\alpha_i, \cos\beta_i, \cos\gamma_i$. 同样,在全局坐标系 $O-XYZ$ 中,短纤维被认为是彼此之间拥有各自晶体学取向的几何区域. 局部坐标系 $O-X'_j Y'_j Z'_j$ 被定义,用于指定在 Euler 空间中相对整体参考坐标下的第 j 个短纤维的纤维取向,局部坐标轴 Z'_j 与短纤维的长轴保持一致如图 4(b) 所示,极端的条件亦包含与三维短纤维的任意取向相一致的情况.



(a) 晶粒的欧拉角取向定义 (b) 纤维空间取向的描述
图 4 几何关联性示意图

Fig. 4 Sketch of geometric relations

2.3 边界条件与有限元网格的划分

为了实现钛合金微结构在商业有限元软件 ABAQUS 中的有限元计算,创建了含有 500 个晶粒的几何区域作为钛合金微结构内的 α 相基体,并复合 50 个多面体块体颗粒作为钛合金材料微观组织结构内的 β 相组成物,分别为每个 α 相基体晶粒与 β 相颗粒定义具有正交各向异性的材料属性以及任意分布的晶体学取向。

为钛合金微结构的有限元模型指定简单静态线弹性的分析,利用建模过程中设置的边界面集合定义该微结构代表性体积单元的边界条件与轴向拉伸的统一应力分布载荷,并对模型进行相应地有限元网格划分。为了使分析结果更精确,利用几何实体单胞的自动识别技术,对识别的 β 相组成物(包括内部的多面体块体颗粒)及其界面,进行更为精细的网格划分。图 5 展示出模拟的钛合金复合材料微结构样本的边界条件、单轴拉伸载荷与有限元网格划分结果,在含有 500 个 α 相基体晶粒与 50 个 β 相块体颗粒组成物的代表性体积单元中,含有 79 682 个节点和 449 211 个四节点四面体网格单元。随后对建立的复合材料微结构模型提交分析,监控模型的分析过程。

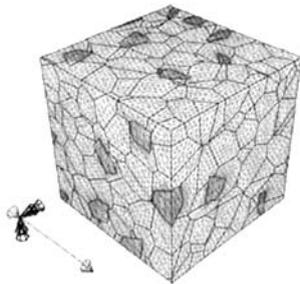


图 5 多面体块体增强异质体材料微结构的边界条件、轴向拉伸载荷与微结构表面的单元网格

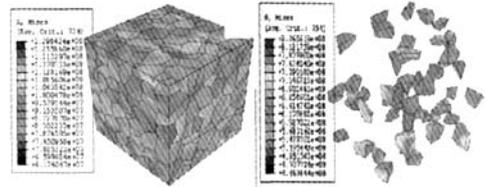
Fig. 5 Boundary condition, axial tension of heterogeneous material microstructure with block granule reinforcing and meshing of microstructure surface

3 结果与讨论

3.1 模型分析结果

图 6 演示了钛合金复合材料微结构有限元模型的力学响应计算的 Mises 应力云纹图。由于 α 相基体与 β 相颗粒组成物晶体学取向的差异与两相材料物性的差异,导致钛合金微结构代表性体积单元块内等效 Mises 应力分布的显著数值差异如图 6(a) 所示。图 6(b) 展示了钛合金微结构代

表性体积单元块内 β 相颗粒组成物的 Mises 等效应力云图,由于相对于 α 相基体材料的刚度较高,所以其等效平均应力水平显著高于 α 相,并且呈现出明显的各向异性。



(a) 钛合金微结构代表性体积单元块内等效应力分布 (b) β 相颗粒组成物的 Mises 等效应力云图

图 6 微结构力学响应计算的模拟结果

Fig. 6 Result of mechanical computation of microstructures

3.2 微结构虚拟失效的模拟

复合材料内的微裂纹扩展不仅取决于材料的微观组织结构,而且取决于当地材料的损伤机理。微裂纹在材料的微结构内的扩展行为是受路径决定的。在复合材料微观组织结构内,由微裂纹引起的损伤,其损伤机理因开裂部位的不同而不同。换句话说,当微裂纹在复合材料微结构内扩展时,在微裂纹前缘前进的路径上,由于不同的损伤机理并存,很难实时判别微裂纹前缘处引起当地材料破坏的损伤机理,很难根据一个给定的损伤力学模型描述微结构的整个破坏过程^[6-7]。一个在复合材料微结构内形成的微裂纹,在一定的外部载荷作用下,其裂纹前缘必然是朝着当地微结构最薄弱处扩展的。基于这一客观事实,可以认为,当一个微裂纹在复合材料微结构内持续扩展时,是否可以实时确认由何种损伤机理导致当地材料破坏显得并不重要,重要的是要能够识别出微裂纹前缘处当地微结构相对薄弱的部位。

图 7 演示了钛合金复合材料微结构内包含微裂纹的有限元模拟结果,其微裂纹的启裂与扩展是由材料微结构的本质性特征——虚弱性和微裂纹扩展的本质性特征——当地性所决定的,微裂纹的扩展与实验结果较吻合,裂纹大多发生在 β 相颗粒组成物与 α 相基体复合的位置,并以 β 相组成物为中心沿相界在基体内部扩展。

4 结论

(1) 采用 EBSD - OIM 系统观察钛合金微观组织结构,并重构两相钛合金的取向图,测量取向角分布得到两相结构的取向分布图,并通过数据处理标注微结构内的晶粒与第二相分布形态,

给出了相应晶粒与第二相的欧拉空间角度值。

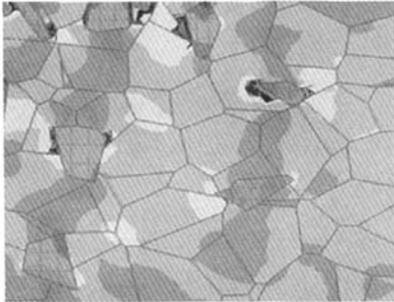


图7 计算机模拟的钛合金材料微结构模型的断裂面
Fig.7 Microcracking surface of virtual failure of Ti alloy microstructure with computer simulated

(2)参考实验测试的结果,将两相几何结构等效为基体晶粒与第二相颗粒,通过几何实体单胞的自动识别技术,有效地跟踪、识别复合材料微结构模型内的 α 相基体晶粒与 β 相颗粒组成物的几何实体,在商业有限元软件ABAQUS/CAE中,自动创建钛合金复合材料微结构有限元模型。

(3)实现复合材料微结构模型的有限元网格划分及力学响应计算;评价模型建立、装配、分析过程,对分析结果进行合理的解释评估。

(4)根据钛合金微结构有限元模型力学计算的数值解,识别异质体材料微结构的“材料结构弱点”,评估微裂纹(群)的启裂,扩展;根据微结构的力学响应结果,预测微结构材料损伤后的材料性能,推演“微结构虚拟失效”行为。

参考文献:

- [1] PATRICK W T, DAVID J P. Microstructure imaging techniques: a comparison between light and scanning electron microscopy [J]. *Tectonophysics*, 1999, 303: 71 - 81.
- [2] DAVID P F, DAVID J D. Microstructure Mapping of Interconnects by Orientation Imaging Microscopy [J]. *Journal of Electronic Material*, 1996, 25: 1767 - 1771.
- [3] YAOWU Z, ROBRIT T. Automatic 3 - D simulation and micro - stress distribution of polycrystalline metallic materials[J]. *Comput. Method Appl. Mech. Engrg.*, 2004, 193: 3919 - 3934.
- [4] LI X D. On composites structure weaknesses Part I; simulation, properties and numerical approach [J]. *Metallurgical and Material Transactions*, 2002, A33: 2205 - 2215.
- [5] LI X D. On composites structure weaknesses Part II; computer experiments, identifications and correlation [J]. *Metallurgical and Materials Transactions*, 2002, A33: 2217 - 2227.
- [6] RAVICHAndran K S, LI X D. Fracture mechanical character of small cracks in polycrystalline materials; concept and numerical K calculations[J]. *Acta Materials*, 2000, 48: 525 - 540.
- [7] LI X D. Numerical correlation of material structure weakness in anisotropic polycrystalline material [J]. *Acta Mechanica*, 2002, 155: 137 - 155.

Computation of Microstructures of Ti Alloy and Virtual Failure Analysis

REN Huai - hui, LI Xu - dong

(Lanzhou University of Technology, State Key Laboratory of Advanced Non-Ferrous Material, Lanzhou 730050, China)

Abstract: To describe the metallographical feature and a crystallographic orientation of microstructures of titanium alloy composite material with the help of EBSD and OIM analytical system. by means of modularization and visualization design of composite material, the RVE of microstructure of the titanium alloy composite material is constructed. On this basis, the numerical response of micromechanics of Ti alloy microstructure achieved by finite - element method, and according to results of numerical simulation, it is significant for identifying “material structure weakness”, evaluating initialization and propagation of microcracks of microstructures for heterogeneous materials, predicting material performance after material microstructure damage, deducing the behavior of “virtual failure of microstructure”.

Key words: microstruture; representative volume element; material structure weakness; virtual failure; anisotropy