

基于位错运动的镍基单晶各向异性蠕变寿命预测

张诚江¹, 胡卫兵¹, 王佳坡², 童文伟², 温志勋², 岳珠峰²

(1. 西安建筑科技大学, 陕西 西安 710055)

(2. 西北工业大学, 陕西 西安 710072)

摘要: 对 3 种不同取向的 DD6 镍基单晶高温合金进行了 980 °C 下的蠕变试验, 结果表明镍基单晶高温合金蠕变失效机理是材料内部微孔洞的萌生与微裂纹的扩展, 其本质是由位错运动造成的。采用透射电镜(TEM)对蠕变初期[001]、[111]和[011] 3 种取向的单晶合金的位错形貌进行观测, 发现其分别符合八面体滑移系开动、六面体滑移系开动与两滑移系同时开动的特征。针对上述微观现象, 基于晶体塑性理论建立了考虑 Orowan 效应与位错阻碍效应的蠕变本构模型与蠕变损伤模型, 并根据试验得到的蠕变曲线拟合了模型参数。该模型的有限元模拟结果与单晶材料的蠕变断口形貌相互印证, 解释了单晶蠕变的各向异性的力学行为。

关键词: 镍基单晶高温合金; 位错运动; 蠕变断口; 晶体塑性

中图分类号: TG146.1+5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2019)12-3930-09

镍基单晶合金在高温下具有优异的蠕变、疲劳以及抗氧化等力学性能, 被广泛应用于航空发动机的热端部件的制造^[1-4]。单晶面心立方晶胞的模量各向异性使其在高温应力作用下表现出宏观力学性能的各向异性, 其高温下的蠕变性能与断裂机理与应力加载的方向相关^[5]。在蠕变过程中, 温度、应力水平、强化相尺寸、基体通道宽度均影响单晶材料的微结构演化方式与速度^[5-8], 为此, 建立考虑各种因素的单晶材料的蠕变本构模型与寿命预测模型至关重要。

Betten 等^[9]将高温下的蠕变变形的本构方程表达为应力和时间的幂函数 $\dot{\epsilon}_c = A\sigma^n t^{m-1}$ 。基于连续损伤力学, Kachanov 和 Rabotnov^[10,11]提出了针对各项同性材料蠕变第 3 阶段的 K-R 模型。然而, 镍基单晶材料具有各向异性的特性, 在高温下, 材料的宏观塑性变形是由微观尺度主滑移面的滑移造成的^[12,13], 不同取向下的滑移面各不相同, 取决于开动的滑移系。因此, 在单晶材料的蠕变本构模型与寿命预测模型中应当考虑宏观的应变率与微观尺度上开动的不同的滑移系中滑移面剪切应变率的对应关系。Gunturi^[12]对 CMSX-4 和 SRR99 等材料进行了 950 °C 条件下不同取向的蠕变试验, 认为[001]取向的蠕变过程中开动的是八面体 $\langle 101 \rangle \{111\}$ 滑移系, [111]取向和[011]取向开动的是十二面体 $\langle 112 \rangle \{111\}$ 滑移系。岳珠峰等^[6]对此持不同观

点, 他们对[011]、[112]和[221]取向进行了蠕变试验与有限元模拟, 认为八面体与六面体同时开动的本构模型能够更好地匹配蠕变实验结果, 而并非 Gunturi 所认为的六面体与十二面体滑移系共同开动的模式。

本研究从不同取向下的单晶蠕变位错与断口观测结果出发, 揭示单晶微观位错滑移与宏观变形、失效之间的联系, 建立单晶材料的蠕变本构模型与损伤模型。

1 实验

本实验采用的材料为国产第 2 代镍基单晶合金 DD6, 经过标准热处理过程 (1315 °C/6 h/AC + 1130 °C/4 h/AC + 870 °C/32 h/AC), 其主要化学成分见表 1。采用电化学腐蚀后的 DD6 原始单晶材料(001)晶面的组织形貌如图 1 所示, 立方块状颗粒为 γ' 强化相, 粒径为 0.3~0.6 μm , 主要成分为 Ni_3Al , 其原子排列为 fcc 面心立方形式, 在合金中的体积分数为 67%, 分布均匀, 排列整齐。

蠕变试验的条件为 980 °C, 试验件采用工字型小试样, 尺寸如图 2, 断口与 TEM 观测的均为工字型小

表 1 DD6 镍基单晶高温合金化学成分

Table 1 Chemical composition of DD6 alloy ($\omega/\%$)

Cr	Co	W	Al	Ta	Re	Mo	Ni
3.8	8.5	7.0	5.2	6.0	1.6	1.5	Bal.

收稿日期: 2018-12-20

基金项目: 国家自然科学基金 (51875461, 51875462); 陕西省自然科学基金基础研究计划-重点项目 (2018JZ5002); 陕西省创新能力支撑计划 (2018KJXX-007)

作者简介: 张诚江, 男, 1987 年生, 博士, 西安建筑科技大学, 陕西 西安 710055, 电话: 029-88431002, E-mail: chengjiangzhang_21@163.com

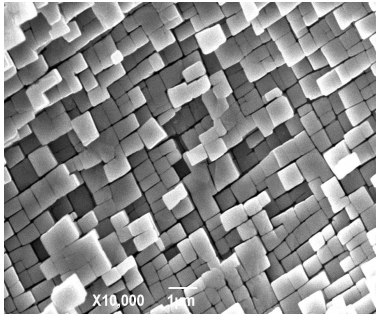


图 1 DD6 原始材料两相结构

Fig.1 Two-phase structure of DD6 original material

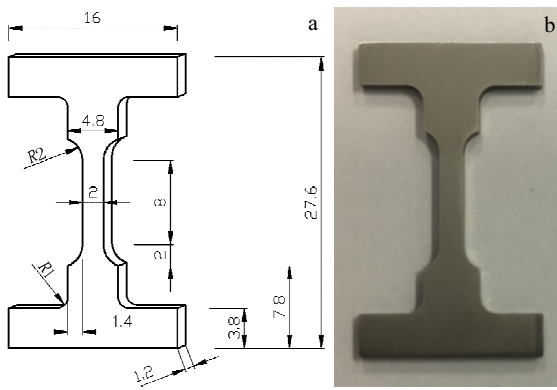


图 2 “工”字型试样尺寸及实物图

Fig.2 Dimension (a) and physical drawing (b) of “I” type sample

试样中部的标距段，此部位的应力为单轴应力且大小均匀。共加工 3 批工字型小试样，其受力方向分别为 [001]，[011]及[111]取向。

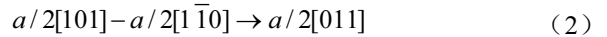
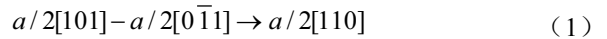
2 实验结果

2.1 断口分析

图 3 为 3 种取向的小试样在 980 °C/250 MPa 条件下的蠕变断口形貌。由 3 种取向的断口形貌可知，3 种断面均发生了颈缩，但与[001]取向和[111]取向的矩形断面不同，[011]取向断面扭转为平行四边形。同时，断口中发现大量台阶状的解理面，随着单晶试样取向的不同，解理面的形状随之发生改变。

2.2 位错运动

[001]取向样品观测晶带轴为[110]晶带轴，采用(111)操作矢量进行观测。在 980 °C 的高温以及 250 MPa 的应力作用下，在蠕变的前期，[001]取向的 γ' 相还未完全转变为筏状结构，此时材料的蠕变变形由位错主导，变形量较小。 γ/γ' 界面的位错网络源自 γ/γ' 界面位错之间的反应，此时位错运动主要以滑移和攀移方式进行，位错并不能够剪切强化相，例如垂直拉伸方向的基体通道出现了弓出的位错，表明位错越过强化相需要克服阻碍，这种行为被称为 Orowan 绕过机制。同时还出现基体通道内相互交错并与拉伸方向呈 45° 的位错网。不同滑移面的界面位错会发生如下反应：



此时开动滑移系以 $a/2\langle 1\bar{1}0 \rangle\{111\}$ 滑移系族为主，滑移面为(111)、 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 、 $(1\bar{1}\bar{1})$ 和 $(\bar{1}\bar{1}1)$ ，滑移方向为 $\langle 0\bar{1}1 \rangle$ 、 $\langle 011 \rangle$ 、 $\langle 10\bar{1} \rangle$ 、 $\langle 101 \rangle$ 、 $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ 和 $\langle 110 \rangle$ ，属于八面体滑移系开动。当 γ' 相形筏完成后，位错网络趋于稳定，Zhang 等^[13]认为位错网络中的位错密度越大，位错网对位错运动的阻碍作用越大。在建立蠕变本构模型与蠕变损伤模型过程中，应当对 Orowan 机制与位错网的阻碍机制加以考虑。

[111]取向样品观测晶带轴为[111]晶带轴，操作矢量为(220)。在 980 °C 的高温以及 250 MPa 的应力作用下，在蠕变初期，[111]取向的 γ' 相未完全转变为筏状结构，仅有少数的 γ' 相相互连接，大部分仍保持原有形貌，此时的蠕变变形同样由位错主导。垂直拉伸方

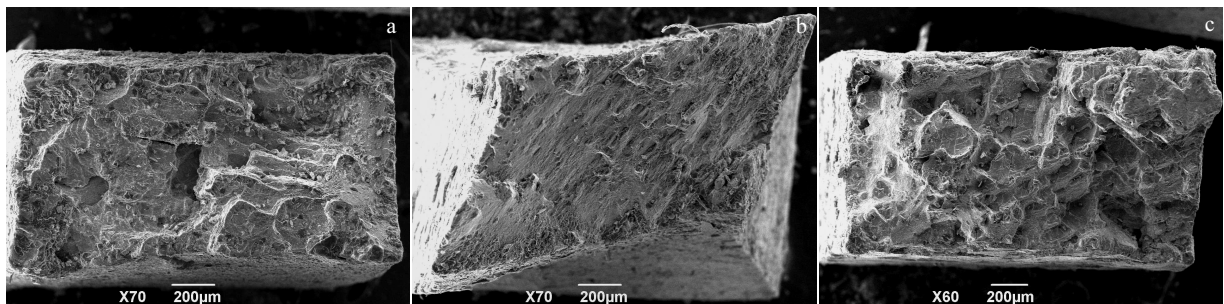


图 3 3 种取向小试样的断口形貌

Fig.3 Fracture morphologies of samples of [001] orientation (a), [011] orientation (b), and [111] orientation (c)

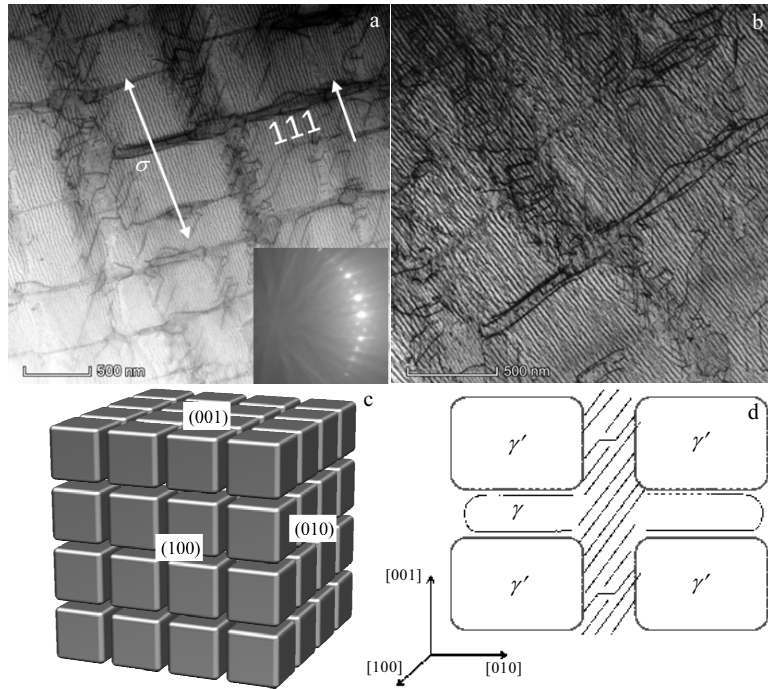


图 4 [001]取向的 980 °C/250 MPa 蠕变 20 h 样品内部位错分布

Fig.4 Dislocation distribution of sample of [001] orientation after creep under 980 °C/250 MPa for 20 h: (a) macro dislocation distribution and operation vector, (b) local dislocation direction, (c) [001] orientation space layout, and (d) schematic of [001] orientation dislocation

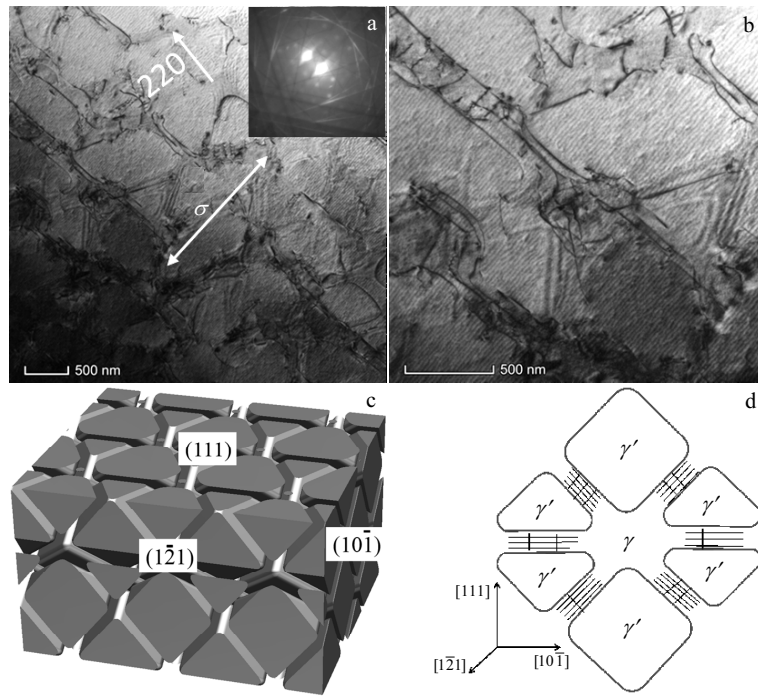


图 5 [111]取向的 980 °C/250 MPa 蠕变 20 h 样品内部位错分布

Fig.5 Dislocation distribution of sample of [111] orientation after creep under 980 °C/250 MPa for 20 h: (a) macro dislocation distribution and operation vector, (b) local dislocation direction, (c) [111] orientation space layout, and (d) schematic of [111] orientation dislocation

向的基体通道出现紧贴相界面的位错网络，同时平行拉伸方向的基体相通道内出现相互交错的与通道轴向呈 90°的位错网。与[001]取向相类似，蠕变初期[111]取向的位错运动主要以滑移和攀移方式进行，位错并不能够剪切强化相。与[001]取向不同的是，此时开动滑移系以 $a/2\langle 1\bar{1}0 \rangle\{100\}$ 滑移系族为主，移面为 (100)、(010)和(001)，滑移方向与[001]取向的 6 个滑移方向相同，属于六面体滑移系开动。

[011]取向样品观测晶带轴为[112]晶带轴，沿(111)操作矢量进行观测。在蠕变的初期， γ' 相基本保持立方体状。类似[001]取向与[111]取向，基体通道内以及两相界面出现高密度的位错，并以滑移和攀移方式扩展。由图中可以看出既有与 γ' 相颗粒呈 45°的{111}滑移面开动，也有与 γ' 相颗粒平行的{100}滑移面开动，说明[011]取向下的位错运动兼具八面体滑移系与六面体滑移系开动的特征。

3 分析与讨论

3.1 蠕变本构模型与蠕变寿命预测模型

基于 Hill 和 Rice^[14,15]等人建立的晶体塑性理论，不同滑移系 α 的蠕变剪应变率 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 可表达为：

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = A(\tau^{(\alpha)})^n \quad (3)$$

式中， A 、 n 为与温度相关的蠕变参数，随滑移系的变

化而发生改变。 $\tau^{(\alpha)}$ 为滑移系 α 的分切应力，可表示为

$$\tau^{(\alpha)} = \sigma / P^{(\alpha)} \quad (4)$$

式中， σ 为晶轴系下的应力张量， $P^{(\alpha)}$ 为取向因子，可表示为

$$P^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(m^{(\alpha)} n^{(\alpha)\top} + n^{(\alpha)} m^{(\alpha)\top} \right) \quad (5)$$

式中， $m^{(\alpha)}$ 表示开动滑移系的滑移方向， $n^{(\alpha)}$ 表示该滑移系中滑移面的单位法向量。

将宏观应变率 $\dot{\epsilon}$ 分解为弹性部分 $\dot{\epsilon}^e$ 和非弹性部分（蠕变应变率） $\dot{\epsilon}^c$ ：

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}^e + \dot{\epsilon}^c \quad (6)$$

其中，弹性应变率 $\dot{\epsilon}^e$ 遵循胡克定律，可由弹性力学的知识得到， $\dot{\epsilon}^c$ 由滑移系的分切应变率乘以取向因子得出，即：

$$\dot{\epsilon}_{ij}^c = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^{(\alpha)} P^{(\alpha)} \quad (7)$$

将蠕变应变分解：

$$\left(\epsilon_{ij} \right)_c = \left(\epsilon_{ij} \right)_c^{Oct1} + \left(\epsilon_{ij} \right)_c^{Oct2} + \left(\epsilon_{ij} \right)_c^{Cub} \quad (8)$$

式中，右边 3 项分别对应的是八面体滑移系、十二面体滑移系和六面体滑移系的蠕变应变，若其中某滑移系不开动，则对应的项取零。

假设宏观应变率中的弹性部分 $\dot{\epsilon}^e$ 与非弹性部分

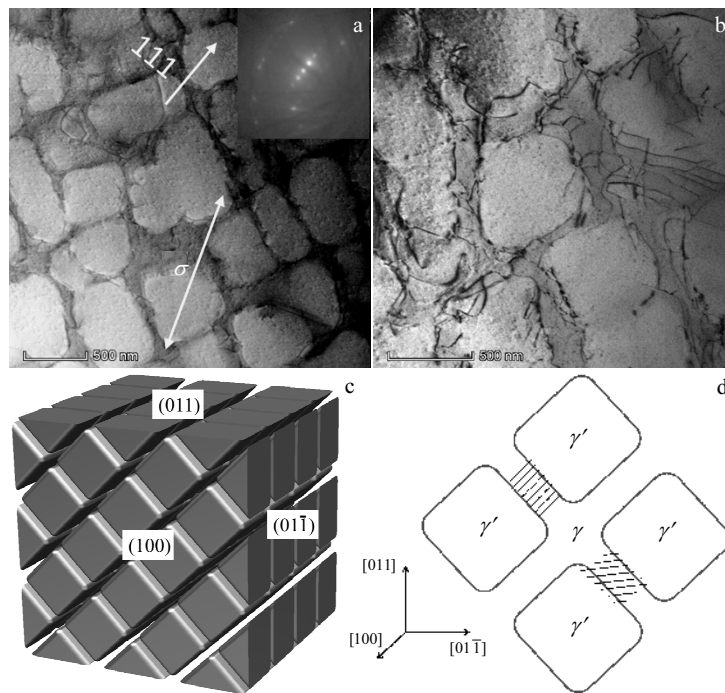


图 6 [011]取向的 980 °C/250 MPa 蠕变 20 h 样品内部位错分布

Fig.6 Dislocation distribution of sample of [011] orientation after creep under 980 °C/250 MPa for 20 h: (a) macro dislocation distribution and operation vector, (b) local dislocation direction, (c) [011] orientation space layout, and (d) schematic of [011] orientation dislocation

ε^c 不会相互影响, 则蠕变变形带来的应力变化率 $\dot{\sigma}$ 可以表达为:

$$\dot{\sigma} = C^e / \dot{\varepsilon} \quad (9)$$

式中 C^e 为各向异性弹性张量。

镍基单晶高温合金具有特殊的两相微结构, 其中的强化相对于蠕变的强化作用主要来自其对位错运动的阻碍, 当位错与强化相相互作用时, 位错在相界面处弓出, 如图 7a 中白色箭头所指部位。位错需要越过强化相以克服该阻碍, 这种行为被称为 Orowan 绕过机制。绕过强化相所需的力即为蠕变的门槛应力, 称作 Orowan 应力, 记为 τ_{or} 。Kakehi 等^[16-18]认为该滑移阻力与基体通道宽度 (即强化相间距) 成反比, 即:

$$\tau_{or} = \lambda \frac{Gb}{\kappa} \quad (10)$$

其中, κ 为基体通道当前宽度, G 为剪切模量, b 为伯格矢量的模, λ 为材料常数并随蠕变条件的不同有所变化。由于位错的绕过机制会阻碍位错在基体内的运动, 在蠕变过程中, 基体通道的宽度随时间增加而变宽, 基体通道宽度控制着位错在外力下的绕过机制。

根据材料蠕变中断试验所得到的不同蠕化时间的显微结构扫描电镜图分析可知, 基体通道的粗化与蠕变时间大致呈抛物线关系, 表示为:

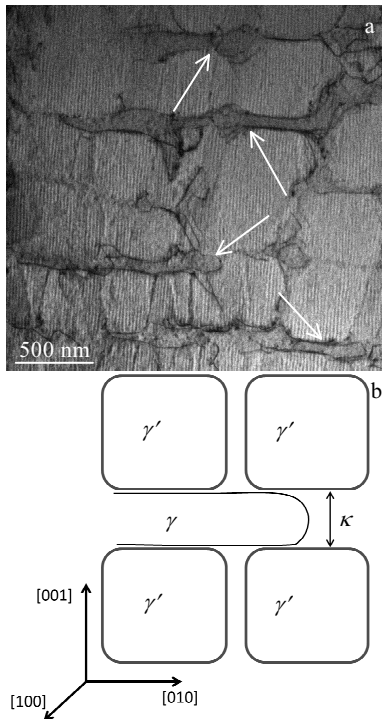


图 7 基体相中位错弓出越过强化相的 TEM 图和示意图
Fig.7 TEM image (a) and schematic diagram (b) of the dislocation in the matrix phase lunging past the enhanced phase

$$\kappa = \kappa_0 + c_1 \sqrt{t} \quad (11)$$

其中, κ_0 为初始基体通道宽度, 对于本实验所采用的单晶合金为 $0.05 \mu\text{m}$, c_1 为表征材料蠕化速率的参数, 按应力从小变大一般取 $0.008 \sim 0.016$, 当模型存在应力梯度时, 可近似取 0.01 , t 为蠕变时间。

除 τ_{or} 外, 在基体相中形成的位错网络产生的阻碍应力 $\tau_{net}^{(\alpha)}$ 同样对蠕变变形产生阻碍作用^[13]。文献^[19-22]对包括镍基单晶高温合金在内的高温材料进行研究, 认为位错的强化作用与位错密度的平方根成正比, 即:

$$\tau_{net}^{(\alpha)} = c_2 Gb \sqrt{\rho_{110}^{(\alpha)}} \quad (12)$$

其中, c_2 为常量, b 为伯格矢量的模, G 为剪切模量, $\rho_{110}^{(\alpha)}$ 表示 γ 基体相中的 $a/2 \langle 110 \rangle$ 位错密度, 其变化率为:

$$\dot{\rho}_{110}^{(\alpha)} = (k_1 \sqrt{\rho_{110}^{(\alpha)}} - k_2 \rho_{110}^{(\alpha)}) |\dot{\gamma}_M^{(\alpha)}| \quad (13)$$

其中, k_1 和 k_2 分别为表征位错应力硬化与回复的材料常数, 取 2×10^9 与 25 ^[23], $\dot{\gamma}_M^{(\alpha)}$ 为该滑移系下的应变率。

单晶材料在某一温度下是发生长时蠕变断裂还是短时拉伸破坏取决于载荷应力与屈服应力的关系, 当超过屈服应力时, 单晶的强化相被剪切, 材料瞬时被拉断。屈服应力在各滑移面上的分应力, 称为临界分切应力 τ_c ^[24]。首先使用一个方程作为蠕变 (长时) 失效判据与拉伸 (短时) 失效判据, 定义

$$R^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)} - \tau_{net}^{(\alpha)} - \tau_{or} \quad (14)$$

(1) 当 $R^{(\alpha)} \leq 0$ 时, 分切应力小于位错进入基体相的临界值, 基体内并无滑移变形, 此时令 $\dot{\gamma}^{(\alpha)} = 0$;

(2) 当 $0 < R^{(\alpha)} < \tau_c - \tau_{net}^{(\alpha)} - \tau_{or}$, 即 $\tau_{net}^{(\alpha)} + \tau_{or} < \tau^{(\alpha)} < \tau_c$ 时, 材料处于蠕变变形状态, 在 Kachanov 和 Ravbotnov^[10,11]提出的连续损伤模型以及 Yeh 等^[25]提出的损伤演化率的基础上, 本研究基于晶体塑性理论中的晶体滑移面上的参数, 建立分切应力与剪切应变率同时主导的蠕变损伤模型:

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0^{(\alpha)} \left(\frac{R^{(\alpha)}}{\tau^{(\alpha)}} \times \frac{1}{1 - \omega^{(\alpha)}} \right)^n \quad (15)$$

$$\dot{\omega}^{(\alpha)} = \dot{\omega}_0 \left| \frac{R^{(\alpha)}}{\beta \tau_c} \right|^\chi \left| \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\dot{\gamma}_s^{(\alpha)}} \right|^\phi \quad (16)$$

其中, χ 和 ϕ 为与温度相关的参数, β 为常数, 这里取为 2.5 。 ω 为材料的损伤, $\omega=0$ 代表原始材料没有损伤, $\omega=1$ 代表材料断裂时的损伤值。 $\dot{\gamma}_s^{(\alpha)}$ 为稳态蠕变率, 一般取 10 。 $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ 和 $\dot{\omega}_0$ 分别为初始蠕变率和初始损伤率, 其中 $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$ 是温度和应力的函数, 采用葛庭燧-Dorn (K-D) 公式与 Arrhenius 表达式相结合的形式:

$$\dot{\gamma}_0^{(\alpha)} = A \cdot \exp(-Q/RT) \cdot (\tau^{(\alpha)})^n \quad (17)$$

式中, A 与 n 与式(1)中的物理意义相同, T 为绝对温度, R 为气体常数。 Q 为激活能, 对于八面体滑移系

取 $Q_{oct} = 6.97E - 19 \text{ J/atom}$ ，对于六面体滑移系取 $Q_{cube} = 7.30E - 19 \text{ J/atom}$ 。

(3) 当 $R^{(\alpha)} \geq \tau_c - \tau_{net}^{(\alpha)} - \tau_{or}$ ，即 $\tau^{(\alpha)} \geq \tau_c$ 时，外部荷载大于材料屈服强度，结构将发生瞬时拉伸破坏，此时位错扩展方式将由滑移攀移机制变为直接切割强化相，材料在极短时间内被拉断，蠕变本构方程与蠕变损伤方程将不再适用。

将公式(16)进行从 0 到 1 的积分，可以得到损伤从初始的 0 到达 1 时的断裂时间，即寿命预测模型：

$$t_f = \frac{1}{\sum_{\alpha=1}^N \dot{\omega}_0 \left| \frac{R^{(\alpha)}}{\beta \tau_c} \right|^z (1+n\phi)} \quad (18)$$

其中， N 为某滑移系下的滑移面开动方向的个数，八面体滑移系(Oct1, $\langle 110 \rangle [111]$)与十二面体滑移系(Oct2, $\langle 112 \rangle [111]$)的 N 为 12，六面体滑移系(Cub, $\langle 110 \rangle [100]$)的 N 为 6。公式(3)~(18)中涉及的弹性参数与蠕变参数分别见表 2 与表 3。

基于晶体塑性理论，分解到各滑移面上的分切应力 τ 与宏观应力 σ 之间的关系对应可用 Schmid 公式表示：

$$\tau = S_f \sigma \quad (19)$$

其中， S_f 为 Schmid 因子。由材料在该温度下的拉伸曲线中的屈服应力 $\sigma_{0.2}$ 与 Schmid 因子，可以求得每个取向下某滑移系的临界分切应力 τ_c 。

由透射电镜对 980 °C 下各取向蠕变初期硬化前的位错观测可知，[001]取向的开动滑移系以八面体滑移系为主，[111]取向开动的滑移系以六面体滑移系为主，而[011]取向下八面体滑移系与六面体滑移系同时开动，因此[011]取向的寿命在 3 个取向中最短。由[011]取向八面体与六面体滑移系同时开动，2 类不同的滑移面交替沿 $\langle 110 \rangle$ 方向滑移，此时 Orowan 应力与位错

网的阻碍作用不应同时施加在 2 个滑移系上，而是只针对开动较慢的滑移系（如 980 °C 下[001]取向寿命低于[111]取向，说明该温度下八面体滑移系开动速率更快，此时考虑[011]取向的八面体滑移系参数时，公式(15)与(16)中的 $R^{(\alpha)}$ 应换为 $\tau^{(\alpha)}$ ）。

由公式(18)可知，蠕变寿命与 $R^{(\alpha)}$ 的 $(-z)$ 方成正比，而损伤驱动力 $R^{(\alpha)}$ 与蠕变载荷 σ 呈正相关，因此可利用各取向不同应力梯度下的曲线，可对损伤公式中的 z 进行标定，使蠕变模型适应各个应力（如图 8）。图 9 为 980 °C 条件下的 3 种取向有限元模拟结果，说明 3 种取向不同滑移系开动的理论基本符合实际情况。

3.2 断口分析与取向相关性讨论

图 10 为 3 种取向蠕变断口的解理面形貌，可知，[001]取向断面分布大量正方形的解理面，黑色箭头所指为解理面中心的微孔洞，并向四周发射出撕裂棱，

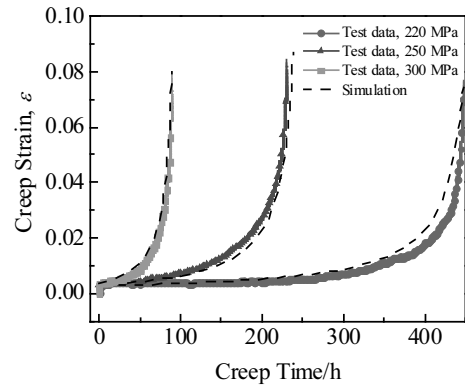


图 8 DD6 镍基单晶高温合金[001]取向在 980 °C 的试验曲线与模拟曲线

Fig.8 Creep test curves and simulations of [001] orientation of DD6 superalloy at 980 °C

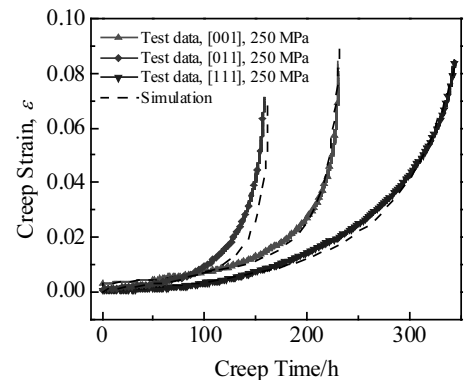


图 9 DD6 镍基单晶高温合金 3 种取向在 980 °C 的试验曲线与模拟曲线

Fig.9 Creep test curves and simulations of three orientations of DD6 superalloy at 980 °C

表 2 980 °C 下 DD6 镍基单晶高温合金弹性参数

Table 2 Elastic parameters of DD6 nickel based single crystal superalloy at 980 °C

Orientation	Elastic modulus/GPa	Poisson's ratio	Shear modulus/GPa
[001]	80.5	0.39	91
[011]	217.5	0.39	245
[111]	145	0.39	165

表 3 980 °C 下 DD6 镍基单晶高温合金蠕变参数

Table 3 Creep parameters of DD6 nickel based single crystal superalloy at 980 °C

Orientation	Slip system	A	n	$\dot{\omega}_0$	z	ϕ	τ_c/MPa
[001]	Octahedron	1.2×10^{-20}	7.5	12	5.2	0.4	277.6
[111]	Hexahedron	1.0×10^{-21}	7.5	9.5	5.2	0.2	320.6
[011]	Octahedron & hexahedron	Octahedron & hexahedron parameters					

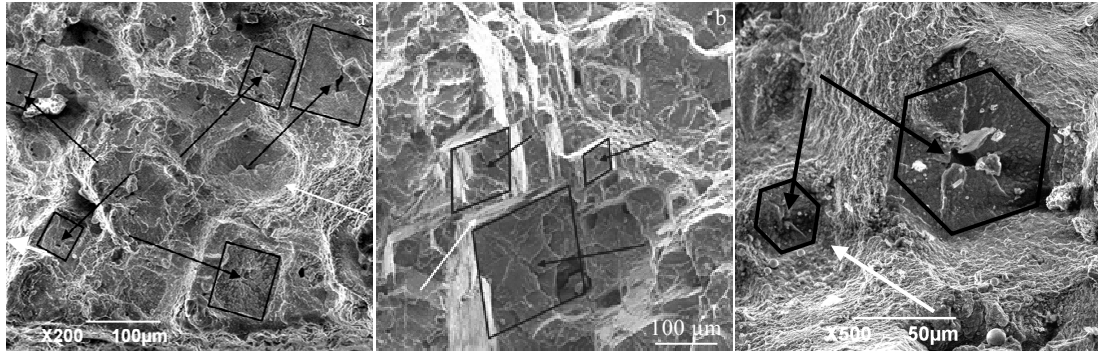


图 10 3 种取向蠕变断口的解理面形貌

Fig.10 Morphologies of cleavage plane for creep fracture in [001] orientation (a), [011] orientation (b), and [111] orientation (c)

直达解理面的四周边界（图中黑色方框）；[011]取向的蠕变试验中，试样在拉应力作用下会发生扭转，随着蠕变的进行，相互对称的 2 个裂纹源向试件边缘拓展，形成无数相互平行的撕裂棱裂纹不断扩展至试样的四周，造成试件的断裂；[111]取向的断面比较粗糙，在台阶附近出现了大量正三角形与六边形状的解理面，其所在平面是垂直于拉伸轴方向的 (111) 面，与 [001]取向的正方形解理面相同，这些正三角形与六边形的中心存在微孔洞，并向解理面四周发散出放射状的撕裂棱，这是蠕变断裂的主要裂纹源起始位置。

孔洞附近的微裂纹拓展至解理面的边缘，而不同取向的断口的解理面形貌各不相同。对于[001]取向，在蠕变后期，微裂纹沿垂直于应力轴的(001)晶面扩展，在八面体滑移系开动的情况下，{111}晶面为位错易滑移面，高密度位错有助于裂纹的扩展，于是垂直拉伸方向的(001)面的裂纹沿着镜像对称的 4 个{111}滑移面沿<110>方向交替扩展（图 11b 所示）。当裂纹与{111}晶面二次解理面相截时，(001)面的裂纹扩展终

止，形成正方形的解理面，即图 11a 中红色虚线所组成的正方形。对于[011]取向，当八面体滑移系开动时，如图 11c 展示的，孔洞附近的微裂纹沿垂直于应力轴的(011)晶面扩展，扩展方向为<011>，在遇到{111}位错易滑移面与二次解理面相截时终止，形成如图 11a 中蓝色虚线所示菱形解理面。

同理，当[011]取向蠕变下六面体滑移系开动时，微裂纹仍然在(011)晶面内沿<011>方向拓展(图 12c)，在遇到{100}位错易滑移面时沿{100}滑移面交替扩展，与二次解理面相截时终止，形成如图 12a 中蓝色虚线所示矩形解理面。

对于[111]取向，如图 12b 所示，孔洞周围裂纹沿垂直于应力轴的(111)晶面发生扩展，扩展方向为<211>、<112>和<121>，与 6 个二次滑移面相截，最终形成图 12a 中浅绿色虚线所示正六边形的解理面，当微裂纹的拓展平面(111)晶面刚好只与 3 个二次解理面相截时，便形成图 12a 中墨绿色所示的三角形解理面，这也就解释了为何在[111]取向断口中可以看到六

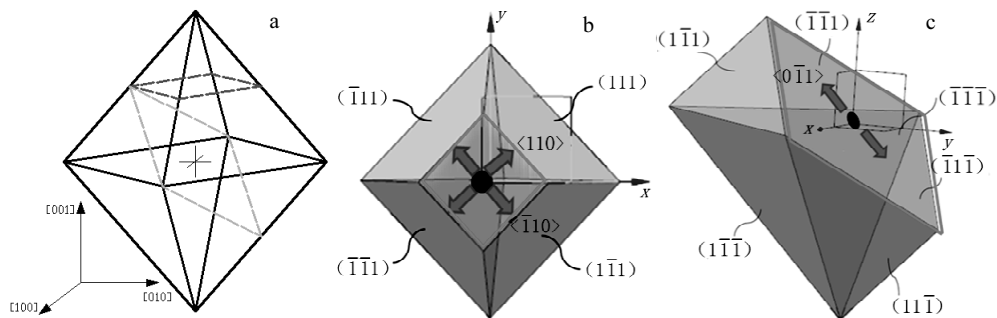


图 11 八面体滑移系的解理面、孔洞沿(001)晶面扩展和孔洞沿(011)晶面扩展

Fig.11 Octahedral slip system: (a) cleavage plane, (b) the hole extends along (001) lattice plane, and (c) the hole extends along (011) lattice plane

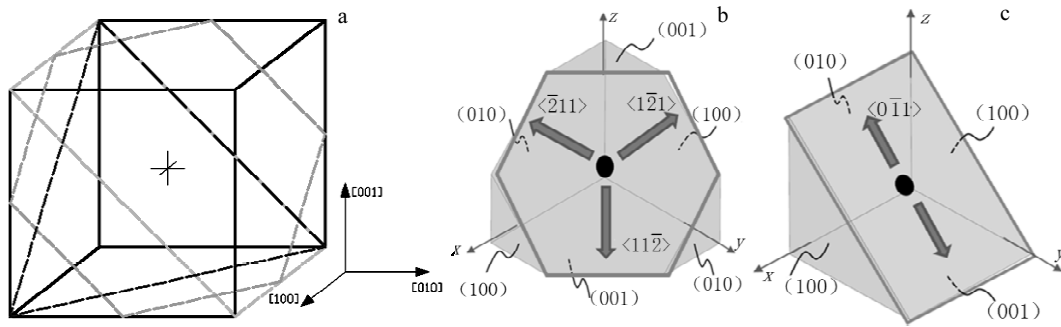


图 12 六面体滑移系的解理面、孔洞沿(111)晶面扩展和孔洞沿(011)晶面扩展

Fig.12 Hexahedral slip system: (a) cleavage plane, (b) the hole extends along (111) lattice plane, and (c) the hole extends along (011) lattice plane

边形与三角形 2 种解理面的形状。

4 结 论

1) [001]取向的开动滑移系为八面体滑移系, [111]取向的开动滑移系为六面体滑移系, 而[011]取向兼具 2 个滑移系开动的特征。

2) 在原有的与应力和时间呈幂函数的蠕变本构模型的基础上, 基于晶体塑性理论建立了更符合单晶材料各向异性特点的蠕变本构模型与蠕变寿命预测模型, 能够计算应力梯度下不同取向的蠕变速率和损伤演化。

3) 单晶试样的断裂机制为试样内部微孔洞的萌生与微裂纹的扩展, 当裂纹扩展至试样表面即发生断裂。结合八面体滑移系与六面体滑移系中微孔洞四周裂纹扩展的规律, 解释了[001]、[011]与[111] 3 种取向试样断口中不同解理面的形成机理。解理面是 γ/γ' 相界面处形成的微孔洞沿垂直应力轴的平面呈放射状扩展, 直至与不同滑移系各自的二次解理面相截形成的。

参考文献 References

- [1] Wen Z X, Zhang D X, Li S W *et al.* *Journal of Alloys & Compounds*[J], 2017, 692: 301
- [2] Zhao Y S, Liu C G, Guo Y Y *et al.* *Progress in Natural Science: Materials International*[J], 2018, 28(4): 483
- [3] Pei H P, Wen Z X, Zhang Y M *et al.* *Applied Surface Science*[J], 2017, 411: 124
- [4] Wang Baizhi(王佰智), Wen Zhixun(温志勋), Liu Dashun(刘大顺) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2015, 44(11): 2747
- [5] MacKay R A, Maier R D. *Metallurgical Transactions A*[J], 1982, 13(10): 1747
- [6] Yue Zhufeng(岳珠峰), Yu Qingmin(于庆民), Wen Zhixun(温志勋) *et al.* *Structural Strength Design of Nickel-Based Single Crystal Turbine Blades(镍基单晶涡轮叶片结构强度设计)*[M]. Beijing: Science Press, 2008
- [7] Sass V, Feller-Kniepmeier M. *Materials Science and Engineering A*[J], 1998, 245(1): 19
- [8] Han G M, Yu J J, Sun Y L *et al.* *Materials Science and Engineering A*[J], 2010, 527(21-22): 5383
- [9] Betten J. *Creep Mechanics*[M]. New York: Springer, 2008
- [10] Kachanov L M. *Introduction to Continuum Damage Mechanics*[M]. The Netherlands: Martinus Nijhoff, 1986
- [11] Rabotnov Y N. *Creep Problems in Structural Members*[M]. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1969
- [12] Gunturi S S K, MacLachlan D W, Knowles D M. *Materials Science and Engineering A*[J], 2000, 289(1-2): 289
- [13] Zhang J X, Murakumo T, Harada H *et al.* *Scripta Materialia* [J], 2003, 48(3): 287
- [14] Hill R. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 1966, 14(2): 95
- [15] Hill R, Rice J R. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 1972, 20(6): 401
- [16] Kakehi K. *Materials Transactions*[J], 1999, 40(2): 159
- [17] Tinga T, Brekelmans W A M, Geers M G D. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*[J], 2010, 18(1): 015 005
- [18] Yuan C, Guo J T, Yang H C *et al.* *Scripta Materialia*[J], 1998, 39(7): 991
- [19] Preußner J, Rudnik Y, Brehm H *et al.* *International Journal of Plasticity*[J], 2009, 25(5): 973
- [20] Zhao L G, O'Dowd N P, Busso E P. *Journal of the Mechanics & Physics of Solids*[J], 2006, 54(2): 288

- [21] Déprés C, Fivel M, Tabourot L. *Scripta Materialia*[J], 2008, 58(12): 1086
- [22] Kumar R S, Wang A J, McDowell D L. *International Journal of Fracture*[J], 2006, 137(1): 173
- [23] Wang Baizhi(王佰智). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2014
- [24] Liu Dashun(刘大顺). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2015
- [25] Yeh N M, Krempl E. *Advances in Multiaxial Fatigue*[M]. West Conshohocken, PA: ASTM International, 1993

Anisotropic Creep Life Prediction of Nickel-based Single Crystal Based on Dislocation Movement

Zhang Chengjiang¹, Hu Weibing¹, Wang Jiapo², Tong Wenwei², Wen Zhixun², Yue Zhufeng²

(1. Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China)

(2. Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: The creep tests of three different orientations of the single crystal superalloy DD6 were carried out at 980 °C. The results indicate that the creep failure mechanism of superalloy is the initiation of micropores and the propagation of microcracks, which is caused by dislocation motion. The dislocation morphology of monocrystals in [001], [111] and [011] orientation at the initial stage of creep was analyzed by transmission electron microscopy (TEM), matching the characteristics of the octahedral sliding system activated, the hexahedral sliding system activated and the simultaneous motion of the two sliding systems, respectively. Based on the crystal plasticity theory, the creep constitutive model and creep damage model under variational stress conditions considering Orowan effect and dislocation blocking effect were established; meanwhile, the model parameters were fitted according to the creep curve obtained from the test. Moreover, the finite element simulation results of the model and creep fracture morphology of monocrystalline materials confirm each other and explain the anisotropic behavior of monocrystalline creep.

Key words: nickel based single crystal superalloy; dislocation movement; creep fracture; crystal plasticity

Corresponding author: Zhang Chengjiang, Ph. D., Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, P. R. China, Tel: 0086-29-88431002, E-mail: chengjiangzhang_21@163.com