

力学耦合相场模型在典型航空材料中的应用与展望

张金虎, 许海生, 武佳奇, 李学雄, 杨亮, 王 睿, 董利民, 徐东生, 杨 锐

(中国科学院金属研究所, 辽宁 沈阳 110016)

摘要: 随着航空工业的快速发展, 高温合金和钛基合金作为航空发动机及机体结构的核心材料, 其微观组织调控与性能优化已成为保障装备可靠性的关键。力学耦合相场模型作为一种有效的材料微观组织演变模拟工具, 能够衔接微观力学准则、介观组织模拟及宏观性能预测, 揭示材料在热-力耦合场中微观组织演化与材料力学性能之间的内在联系, 为航空材料的微观组织调控及性能评估提供了理论支撑。本文系统评述了力学耦合相场模型在高温合金与钛基合金等典型航空材料领域的研究进展, 梳理了该模型在固态相变机理研究中的典型应用案例, 内容涵盖了从弹性、弹塑性到考虑缺陷耦合作用的相场模型在高温合金中 γ 相析出及筏化组织形成、钛基合金中典型析出相演变规律等方面的应用。同时, 讨论了当前研究中面临的挑战, 并展望了力学耦合相场模型在航空材料研究中的发展前景, 最后特别指出了这类相场模型的热点问题及其未来发展方向。

关键词: 力学耦合相场模型; 航空材料; 固态相变; 组织模拟

中图分类号: O414.13

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2026)05-1308-09

1 引言

随着航空工业朝着高推重比、长寿命和极端环境适应性方向发展, 高温合金与钛基合金作为航空发动机和机体结构的核心材料, 如何实现微观组织调控与性能优化已成为保障装备可靠性的关键科学问题^[1-2]。高温合金因其优异的耐高温强度和抗蠕变性能, 长期主导着涡轮叶片等热端部件的制造, 而钛基合金凭借高比强度、耐腐蚀等优点, 成为航空结构轻量化的首选材料。然而, 这两类材料在制备和服役过程中均面临着复杂的多物理场耦合挑战, 如温度场、弹/塑性应力场、电场及磁场等。高温合金在极端热-力载荷作用下会发生 γ '强化相的定向粗化, 即发生筏化现象, 导致蠕变抗力显著下降^[3]; 钛基合金则由于对热加工和热处理工艺的敏感性, 其微观组织形貌的多样性直接影响最终的力学性能^[4]。然而, 传统的实验研究手段难以捕捉合金相变及变形过程中原子尺度的扩散、界面迁移及缺陷-析出相交等动态过程。另外, 宏观连续介质模型虽然能够预测整体力学响应, 却无法揭示晶格畸变、位错运动等微观机制对材料力学行为的影响规律^[5-8]。

近年来, 材料计算技术的飞速发展不仅加快了材料研发的进程, 也显著降低了研发成本。耦合了弹性/弹塑性力学的相场模型(力学耦合相场模型)作为衔接微观力

学准则、显微组织模拟及宏观性能预测的介观模拟工具, 通过构建自由能泛函与动力学方程的耦合体系, 为高温合金与钛基合金的跨尺度组织演化研究提供了全新范式^[9-10]。该模型通过序参量场描述相界面、浓度场及晶体取向的时空演化过程, 并引入弹性应变能、化学势梯度及界面能各向异性等物理量, 成功模拟了 γ '相在热-力耦合场中的筏化动力学^[11-12]、钛铝合金 γ/γ 界面类型调控^[13]、钛合金 α 相变体选择与塑性变形协同机制等关键过程^[14-16]。这些研究为合金在热加工、热处理及服役过程中微观组织的动态演变提供了量化的依据。

本文旨在聚焦力学耦合相场模型在高温合金与钛基合金中的应用研究进展, 系统评述该模型在合金固态相变过程中, 诸如筏化机理、应力场/过冷度下变体选择、缺陷-析出相交相互作用等方面的典型研究案例。通过热动力学计算、跨尺度模拟及实验数据等信息输入, 重点探讨了弹塑性应力/应变场、晶体缺陷与相变动力学之间的耦合机制, 以揭示微观组织演化与合金力学性能之间的内在关联。全文对力学耦合相场模型在航空材料研究中的应用进行了较为全面的综述与分析。

2 力学耦合相场模型

相场模型在材料科学中的迅速发展与应用主要始于20世纪80年代。在微观组织演化模拟方面, 主要分为两

收稿日期: 2025-05-30

基金项目: 国家重点研发计划(2021YFA1600601); 国家科技重大专项(J2019-VI-0005-0119)

作者简介: 张金虎, 男, 1984年生, 博士, 中国科学院金属研究所, 辽宁 沈阳 110016, 电话: 024-23971265, E-mail: jinhuizhang@imr.ac.cn

大分支^[17]:第一分支基于 Khachaturyan 的微弹性理论^[18],由 Chen^[9]、Wang^[10]等人代表,通过在总能量中添加弹性应变能,主要应用于固态相变研究。随后迅速扩展到缺陷演化^[19-20]及烧结^[21]等领域。此后引入磁能、电能等因素,推广至铁电薄膜^[22]、磁材料^[23]等领域;另一分支则专注于材料凝固过程的相场模型,典型代表包括 Karma^[24]、Kim^[25]及 Steinbach^[26]等人。图1为 Steinbach 教授在其课程中介绍的相场模型发展历程及其典型代表^[27]。本文将关注第一分支,重点综述耦合弹性/弹塑性力学的相场模型。

随着力学耦合相场模型的继续发展,Guo 等人^[28-29]提出了弹塑性相场模型,在应变能项内引入了塑性应变及其对体系总能量的贡献,丰富并扩展了 Khachaturyan 的微弹性理论。接下来,Cheng^[30]与 Xue^[31]等人进一步完善了相场模型中可考虑的力学准则,并将其应用于多晶体的疲劳与断裂过程模拟。本文主要针对航空材料,简要介绍微弹性相场模型与弹塑性相场模型,并通过典型案例展示它们在高温合金及钛合金中的应用。

2.1 微弹性相场模型

一般地,在相场模型中成分场 c_i 等保守场的演变采用 Cahn-Hilliard 方程描述,而非保守场 η_i 等则采用 Allen-Cahn 方程描述^[32]:

$$\frac{\partial c_i(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \nabla M_{ij} \nabla \frac{\delta F}{\delta c_j(\mathbf{r},t)} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta_i(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_i(\mathbf{r},t)} \quad (2)$$

其中, \mathbf{r} 为空间位置, t 为演化时间, c_i 与 η_i 分别为成分与结构场变量。 M_{ij} 与 L 分别是原子移动性参数和界面移动性参数。 F 是体系总能量,表达为场变量的泛函。根据 Khachaturyan 的微弹性理论,体系内新析出时引起的畸变能在 F 中通常表达为 E_{el} ^[18]:

$$F = \int_V (f_{local} + f_{gra}) dV + E_{el} \quad (3)$$

其中, f_{local} 是局域化学自由能密度,它是一系列序参量的函数。 f_{gra} 是梯度能密度,用于补偿界面能量,其数值仅在界面附近非零,同时包含了界面能各向异性张量。 E_{el} 具体表达为^[33]:

$$\begin{aligned} E_{el} &= \frac{1}{2} \sum_{p,q} \int \frac{d\mathbf{g}}{(2\pi)^3} [C_{ijkl} \epsilon_{ij}^0(p) \epsilon_{kl}^0(q) \\ &\quad - n_i \sigma_{ij}^0(p) \Omega_{jk}(\mathbf{n}) \sigma_{kl}^0(q) n_l] \tilde{\eta}_p(\mathbf{g}) \tilde{\eta}_q^*(\mathbf{g}) \quad (4) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{p,q} \int \frac{d\mathbf{g}}{(2\pi)^3} B_{pq}(\mathbf{n}) \tilde{\eta}_p(\mathbf{g}) \tilde{\eta}_q^*(\mathbf{g}) \end{aligned}$$

式中 $\mathbf{n} = \mathbf{g}/|\mathbf{g}|$ 是倒空间的单位格矢; n_i 为倒空间单位矢量 \mathbf{n} 的第 i 个分量; $\tilde{\eta}_p(\mathbf{g})$ 与 $\tilde{\eta}_q^*(\mathbf{g})$ 分别为 $\eta_p(\mathbf{r})$ 的 Fourier 变换与 $\tilde{\eta}_q(\mathbf{g})$ 的复共轭; C_{ijkl} 为弹性常数张量; $\epsilon_{ij}^0(p)$ 与 $\sigma_{ij}^0(p)$ 分别为第 p 个变体的相变应变与应力张量, $\epsilon_{kl}^0(q)$ 与 $\sigma_{kl}^0(q)$ 分别为第 q 个变体的相变应变与应力张量; $B_{pq}(\mathbf{n})$ 为变体 p 与 q 之间的相互作用势; $\Omega_{jk}(\mathbf{n})$ 表示格林函数张量,是 $\Omega_{jk}^{-1}(\mathbf{n}) = C_{ijkl} n_j n_l$ 的逆。

Khachaturyan 提出的微观相场模型是材料科学中相场方法发展的重要里程碑,其核心贡献在于将弹性应变能与微观结构演化耦合建模,为复杂材料体系的微结构演化和力学行为模拟提供了理论基础和计算框架。

2.2 弹塑性相场模型

弹塑性相场模型优势主要体现在材料非线性行为描述上,实际工程中的材料往往在达到一定应力后开始发生塑性变形,这时候弹性模型就不适用了。弹塑性相场模型是弹性相场模型的扩展,可以同时考虑弹性和塑性变形。关键在于如何在弹性应变能项中考虑塑性应变。在相场模型中,弹性应变能一般表达式为^[10,29]:

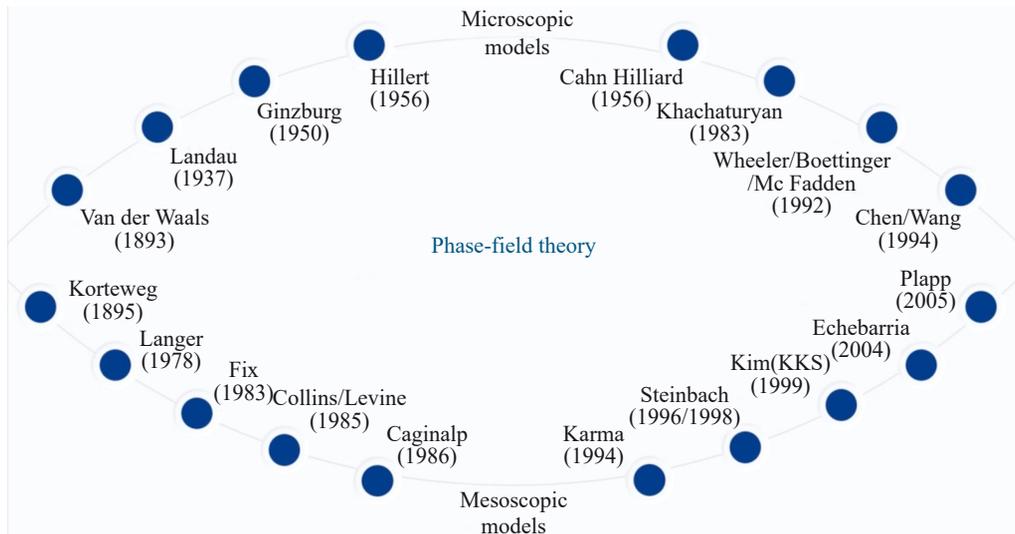


图1 相场模型发展历程及典型代表

Fig.1 Evolution of phase-field models and their typical representatives^[27]

$$\begin{aligned}
 E^{\text{el}} = & \frac{1}{2} \int_V C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \int \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \\
 & - \frac{1}{2V} C_{ijkl} \int_V \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \int_V \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}') d^3 \mathbf{r}' \\
 & - \frac{1}{2} \int \frac{d^3 \mathbf{g}}{(2\pi)^3} n_i \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{g}) \Omega_{jk}(\mathbf{n}) \tilde{\sigma}_{kl}^0(\mathbf{g})^* n_l \\
 & - \sigma_{ij}^{\text{appl}} \int_V \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} - \frac{V}{2} S_{ijkl} \sigma_{ij}^{\text{appl}} \sigma_{kl}^{\text{appl}}
 \end{aligned} \tag{5}$$

这里采用应力控制边界条件^[34]。V是系统体积， $\mathbf{n} = \mathbf{g}/|\mathbf{g}|$ 是倒空间单位矢量。格林函数张量定义为 $\Omega_{ij}(\mathbf{n}) = (C_{ijkl} n_k n_l)^{-1}$ ，其中 C_{ijkl} 是弹性常数张量，倒空间中应力表达为 $\tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{g}) = C_{ijkl} \tilde{\varepsilon}_{kl}^0(\mathbf{g})$ ， $\tilde{\varepsilon}_{kl}^0(\mathbf{g})$ 是 $\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r})$ 傅里叶变换形式， $\tilde{\sigma}_{kl}^0(\mathbf{g})^*$ 为 $\tilde{\sigma}_{kl}^0(\mathbf{g})$ 的复共轭。 S_{ijkl} 表示弹性柔度张量。 $\sigma_{ij}^{\text{appl}}$ 表示外加应力。总的无应力应变可以表达为^[35]：

$$\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ij}^{\text{pp}}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{ij}^{\text{p}}(\mathbf{r}) \tag{6}$$

其中 $\varepsilon_{ij}^{\text{pp}}(\mathbf{r})$ 为非塑性应变部分， $\varepsilon_{ij}^{\text{p}}(\mathbf{r})$ 是塑性应变， $\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}')$ 为 \mathbf{r}' 处总的无应力应变。需要注意的是，在发生塑性应变时，材料体积几乎保持不变，而弹性变形则会产生一个明显的体积变化。因此，在考虑塑性应变时，需要满足下面限制条件，即塑性应变主对角元素求和：

$$\varepsilon_{kk}^{\text{p}}(\mathbf{r}) = 0 \tag{7}$$

这里采用了爱因斯坦求和约定。

现在，考虑通过泛函分析来求解塑性变形区域内的塑性应变^[36]。引入拉格朗日乘子并加强体积不变的限制条件，即公式(7)。这时，体系的拉格朗日量可以表示为^[31]：

$$L = E^{\text{el}} - \int_V \lambda^V(\mathbf{r}) \varepsilon_{kk}^{\text{p}}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \tag{8}$$

拉格朗日乘子 $\lambda^V(\mathbf{r})$ 作为一种场变量，考虑到各处应满足公式(7)的限制。基于泛函分析， $\varepsilon_{ij}^{\text{p}}(\mathbf{r})$ 对时间偏 t 的微分方程为^[37]：

$$\frac{\partial \varepsilon_{ij}^{\text{p}}}{\partial t} = -K_{ijkl} \frac{\delta L}{\delta \varepsilon_{kl}^{\text{p}}(\mathbf{r})} = K_{ijkl} \sigma'_{kl}(\mathbf{r}) \tag{9}$$

其中， $\sigma'_{kl}(\mathbf{r})$ 为偏应力张量：

$$K_{ijkl} = \begin{cases} 0, & \sigma_s \leq \sigma_Y \\ L \delta_{ij} \delta_{kl}, & \sigma_s > \sigma_Y \end{cases} \tag{10}$$

其中， K_{ijkl} 为流动性张量， δ_{ij} 和 δ_{kl} 均为克罗内克符号，当 $i=j$ 时， $\delta_{ij}=1$ 否则 $\delta_{ij}=0$ 。当 $k=l$ 时， $\delta_{kl}=1$ ，否则 $\delta_{kl}=0$ 。这里 $\sigma_s = \left[\frac{3}{2} \sigma'_{ij} \sigma'_{ij} \right]^{1/2}$ ，为米塞斯等效应力屈服准则。 σ_Y 表示屈服强度。当 σ_s 大于 σ_Y 时，该局域位置发生塑性变形。

弹塑性相场模型通过耦合塑性本构关系与相场方法，突破了弹性框架下材料响应的理想化限制，为复杂非线性力学行为和物理场耦合问题提供了更普适、更物理的建模工具。尽管计算成本可能增加，但其对真实材料行为的精确刻画使其在科学研究和工程应用中更具价值。

3 力学耦合相场模型在航空材料中的应用

在模型部分，介绍了微弹性相场模型与弹塑性相场模型。接下来，本部分将围绕以下三个方面，列举了一些典型的相场模拟案例，并对相关相场模型进行综述与分析。在微弹性相场模型中，可以考虑不同相之间的畸变能和外加弹性力场，而弹塑性力场则需借助弹塑性相场模型。此外，这两种模型还可考虑更为复杂的晶体缺陷及析出相周围力场的影响。

3.1 畸变能与弹性力场影响

早期，微弹性相场模型就已应用于高温合金的研究。Wang等人^[38]通过相场模拟研究了在应变诱导的粗化过程中，形状转变是由弹性应变能和界面能之间的相互竞争引起的。特别是在二维模型系统中，发现圆形析出相的形状会转变为方形，随后进一步转变为片状双重体。从方形到双重体的转变是通过在方形中心基体相形核开始的，而从圆形到方形的转变则是一个连续过程。此外，方形到四重体的转变趋势也被观察到。这些二维计算模拟结果与Ni-Al合金中的实验观察结果惊人地吻合^[39]，验证了相场模拟在高温合金研究中的有效性。另外，Kundin等人^[40]则结合实验研究与相场模拟，研究了Ni基CMSX-4和CMSX-6高温合金在热处理过程中的显微组织演变。该模型考虑了晶格失配下的弹性驱动力，并提出了一种理论模型，用于预测各向异性颗粒粗化过程中的主要动力学参数。通过对实验与相场模拟得到的非定向 γ' 粗化过程中的显微组织演变特征进行比较，结果表明CMSX-4合金的粗化动力学表现出良好的一致性。然而，CMSX-6合金的相场模拟结果与实验数据存在差异，可能是由塑性变形等其它因素引起的，揭示了影响粗化速率的复杂因素。

随着相场模型逐渐扩展到多元合金体系，研究也更加深入。刘兴军教授团队^[1]通过耦合热/动力学数据库和相场法，建立了钴基高温合金中 γ/γ' 两相组织演化的相场动力学模型，并基于热/动力学数据库开展了Co-Al-W合金时效过程的微观组织演化模拟。探讨了初始成分、两相错配度和时效温度等工艺条件对合金时效两相形貌、体积分数、粗化速率等组织特征的影响，模拟结果与实验数据一致，为钴基高温合金的组织设计和工艺优化提供了理论依据。近期，Wang等^[41]采用相场方法对Ni-Al-Cr-Mo四元高温合金中 γ' 相转变过程进行模拟研究。研究发现，随着Mo浓度增加，Ni-Al-Cr-Mo合金中 γ' 相的体积分数异常增大，组织形貌演化过程见图2所示。这是因为Mo元素占据了 γ' -Ni₃Al中Al位置点的缘故。此外，考虑到Mo具有较强的固溶强化效应，有望减少镍基高温合金中Re和W元素的含量。

在钛基合金研究方面，Teng等人^[42]通过相场模拟研

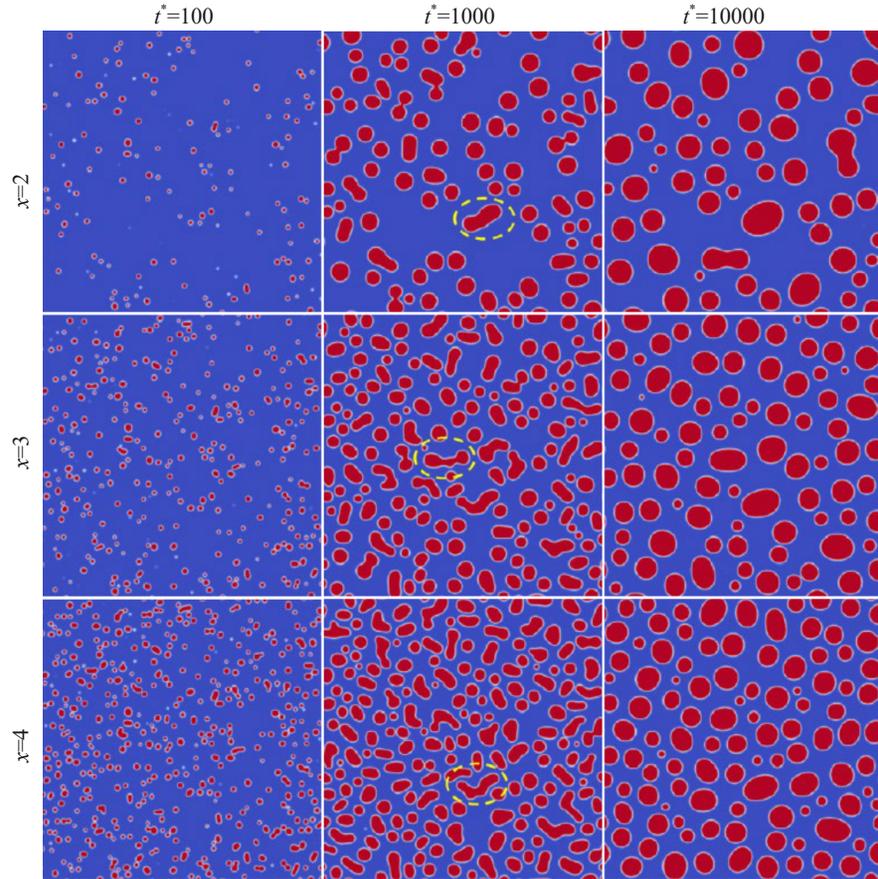


图2 Ni-10Al-8.5Cr-xMo($x=2, 3, 4$)合金在 1073 K 下时效过程中 γ' 相的形貌演变

Fig.2 Morphology evolution of γ' phase with aging time in Ni-10Al-8.5Cr-xMo ($x=2, 3, \text{ and } 4$) alloys aged at 1073 K (γ' precipitate coalescence is labeled by the yellow dotted circles)^[41]

究了TiAl合金中片层组织的孪晶界面比例,尤其关注在 $\alpha_2 \rightarrow \gamma$ 相变过程中 γ 片层的形核与生长机制。研究分析了共格应力、不同界面类型之间的界面能差异以及过冷度对形核的影响,发现孪晶界面比例随着弹性应变能的增加、界面能差异增大和过冷度降低而升高。通过Langevin噪声模拟,形核机制可表现为集群、相关或独立形核模式,这为控制片层结构中的孪晶界面比例提供了理论依据。此外,针对该合金,Wang等人^[43]将对Landau形式自由能进一步替换为定量化的吉布斯自由能。随后,Teng等人^[44]还研究了外加应力对 γ 相形核和演化的影响。研究发现当两个变体为孪晶关系时,弹性相互作用能最小。施加外应力时,自催化形核可增强或受抑制。垂直于基面的压缩或与基面平行的拉伸会增强析出相之间的内部弹性相互作用,促进孪晶变体选择,并降低形核速率;而等静压、平行基面压缩或垂直于基面的拉伸则起到相反作用。无论剪切方向如何,沿界面的剪切始终会降低孪晶界面比例。这些发现为优化TiAl基合金片层组织中的孪晶界面比例提供了新思路。

此外,相场模型逐渐从单晶体系向多晶体系扩展^[45]。Shi等人^[46-47]提出并采用了一个三维多相场模型,研究了

外加弹性载荷对Ti-6Al-4V合金中 α 相析出行为的影响。在该单晶体系研究的基础上^[48],进一步探讨了多晶合金的 $\beta \rightarrow \alpha$ 相转变过程。研究表明,弹性各向异性和多晶体中非均匀的局域应力会导致显著的变体选择。在某些预应变条件下,模拟中的多晶 β 相体系若具有较强的初始 β 相织构,最终可能形成较弱的微观和宏观 α 相织构,如图3所示^[46]。其中, X -Compressive表示沿 X 轴外加压缩应力, X -Tensile表示沿 X 轴外加拉伸应力,其余以此类推。此外,研究还发现,无论初始 β 相织构的强度如何,固定边界约束比自由边界约束更有利于抑制相变织构的形成。研究结果为通过控制热加工条件和内部应力,减少单个 β 晶粒和多晶层面上的相变织构提供了新思路。同时,Heo等人^[49]在弹性各向异性的多晶固溶体晶界偏析相场模型中引入了弹性应变能的贡献。研究表明,共格析出相产生的局部应力场会影响其它晶粒中析出相的形状。由于晶界附近初生共格析出相所产生的局部应力分布,导致沿晶界的溶质分布不均匀,从而使二次形核在晶界上的分布不均匀。

总的来说,微弹性相场模型在高温合金、钛基合金等领域的应用不断拓展,促进了对多元合金体系中显微组

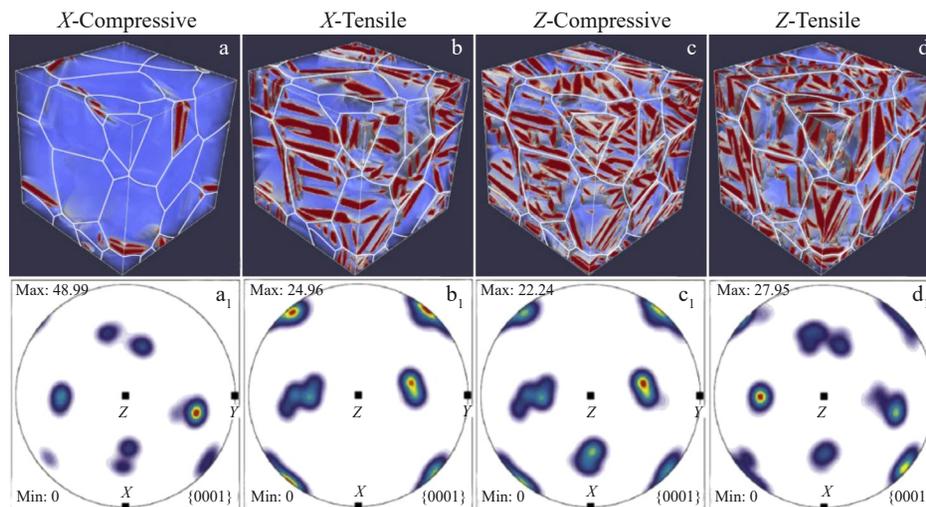


图3 在不同预应变下具有原始强 β 结构体系的最终微观组织及对应的 α 相 $\{0001\}_\alpha$ 织构

Fig.3 Final α/β microstructure in a strong-texture- β sample under different pre-strains (a-d) and corresponding final $\{0001\}_\alpha$ texture of α phase (a₁-d₁)^[46]

织演变规律的深入理解。通过不断优化模型和实验验证,研究者们为高性能合金的设计和工艺优化提供了重要的理论支撑。

3.2 弹塑性力场影响

与弹性相场模型相比,弹塑性相场模型不仅能够描述材料的弹性行为,还能深入揭示和预测材料的塑性变形、应力-应变非线性及失效机制,特别是在大应变和高应力的应用场合中展现出显著优势。通过结合弹性和塑性行为,弹塑性相场模型为材料设计与优化、失效分析等方面提供了更为全面的理论支持。

Zhou 等人^[50]进行了单晶 Ni-Al 高温合金中耦合 γ/γ' 微观结构演化与塑性变形的三维相场模拟。基于 Khachaturyan 相场微弹性理论,模拟了共格的 γ/γ' 微结构与 β 通道内的塑性变形。特别地,引入了一组新场变量,用于表征各激活滑移系的局域位错密度。为了扩大相场模拟的实际空间尺寸,采用了 Kim-Kim-Suzuki 方法来处理 γ/γ' 界面。模拟了 γ' 相筏化动力学、析出相与基体之间的转化过程及相应的蠕变变形,考察了外加应力和晶格失配度等参数的影响。模拟结果与现有实验数据较为一致。同时,张金虎等人^[12]采用弹塑性相场模型模拟了 Ni-Al 合金的 γ' 相定向粗化过程,再现了 γ' 相筏化微观组织及对应的蠕变演变演化过程,见图 4 所示。其中图 4a 的晶格失配度为 0.3%。沿 $[001]$ 方向外加 152 MPa 拉伸应力作用下,由图 4a 经 0.492 h 时效后的筏化组织及 $\mathbf{n} = 1/\sqrt{3}(1\bar{1}1)$, $\mathbf{b} = 1/\sqrt{2}[011]|b|$ 滑移系对应的塑性应变见图 4b~4e。另外, Cottura 等人^[51]通过 2D 和 3D 相场模拟研究了 Ni 基高温合金在 $[110]$ 方向蠕变加载过程中的显微组织演化。提出了一种新开发的相场模型,该模型与基于位错密度的晶体塑性模型相耦合。研究表明,在接近 $[110]$ 方向加载时,观察到片层状结构,而当加载沿

$[110]$ 方向进行时,微观结构则由棒状析出相组成。还研究了非均匀和各向异性弹塑性驱动力的相对作用,发现塑性是筏化组织形成的主要驱动力。此外,初始位错密度会略微改变析出相的形貌,而蠕变曲线受到显著影响。Yang 等人^[52]建立了一个新的相场模型,用于高温合金蠕变过程的模拟。该模型不仅考虑了弹塑性应变场对微观组织演化的影响,还引入了蠕变损伤的作用^[53]。利用该蠕变相场模型,可以全面模拟蠕变过程中三个阶段的微观组织演化,并能够预测相应的蠕变曲线,从而实现蠕变过程中的三阶段组织-性能同步模拟,这为镍基单晶高温合金的蠕变模拟提供了一种新的研究途径。

此外,晶体塑性有限元模型还可以与相场模拟结果相结合,对合金特定微观组织的力学性能进行评估。在 Ti-6Al-4V 合金中,Zhang 等人^[54]采用三维相场模型研究了在特定取向应力下, α 变体从 β 基体中析出的变体选择过程。该模型考虑了 Burgers 转变路径、界面能各向异性、外加应力以及 α/β 之间的弹性相互作用。Gibbs 自由能和原子迁移数据来自现有的热力学数据库。研究表明,外加应力对变体选择有显著影响,且变体选择对外加应力具有敏感的依赖性,这一结论通过相互作用能计算和相场模拟得到了验证。与正应力相比,在特定方向上施加剪切应力,更有效加速相变过程,倾向于选择更少的变体。最终的微观组织受外应力和不同变体之间的弹性相互作用共同影响。通过晶体塑性有限元模拟,计算了在不同条件下相场模拟得到的不同微观结构的力学性能。结合这两种模拟方法,可以在合金制造之前有效评估不同微观结构的力学行为,从而通过热加工选择合适的微观结构,优化合金的力学性能。长期以来,协同提升钛合金的强度与塑性仍然是一个难题。Hao 等人^[55]提出了一种新方法,通过激活不同的相变机制,设计多相合

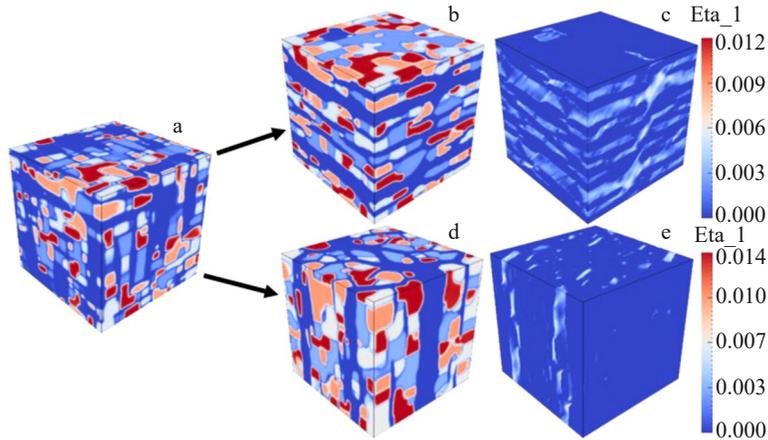


图4 无外部载荷作用下,在1300 K时效后合金的 γ/γ' 微观组织以及沿[001]方向外加152 MPa拉伸应力作用负失配度(-0.3%)和正失配度(+0.3%)下的筏化组织和对应的塑性应变

Fig.4 γ/γ' microstructure developed in the alloy of 0.3% lattice misfit without external stress after aging at 1300 K (a); rafted γ/γ' microstructures (b, d) and plastic strain (c, e) simulated by the effective plastic strain model after aging for 0.492 h under tension of 152 MPa along [001]: (b-c) negative misfit (-0.3%) and (d-e) positive misfit (+0.3%)^[12]

金,实现优异的强塑性匹配。以双相钛合金为例,首先通过相场模拟设计了常规(形核与生长)及非常规(伪调幅分解)的热处理方案,并通过晶体塑性有限元建模评估了计算得到的微观组织。根据模拟结果,提出了一种两步热处理的工艺,以在Ti-10V-2Fe-3Al合金中生成双态微观组织。进一步的力学测试表明,该合金的延展性提高了约50%,强度提高了约10%。相关研究为通过多尺度微观组织设计提升合金力学性能提供了一种有效的路径。

3.3 晶体缺陷及析出相周围力场影响

航空材料中,位错、孔洞及析出相周围的局部应力场模拟对合金中相变行为的研究具有重要意义。这些微观缺陷及第二相的存在显著改变了基体材料的应力分布,从而影响了相变的热力学驱动力和变体选择过程。

Qiu等人^[56]通过三维相场模拟研究发现,位错在钛合金 α 相析出过程中对变体选择及后续微结构形成产生了显著影响。研究表明,弹性相互作用主导了析出相与位错之间在形核阶段的变体选择,而位错线与析出相惯习面的相对取向则在生长阶段对变体选择起着重要作用。一般地,刃型位错的影响明显强于螺型位错,这一结论与其它模拟结果一致^[57]。研究还揭示了不同位错周围异质形核所形成的多种微观组织形态,如一种特殊的“帐篷”结构,该结构呈金字塔形状,每个面由特定的 α 变体组成。“帐篷”结构能够通过自催化作用引发二次 α 形核,从而降低变体选择的程度。此外,过冷度对变体选择也有显著影响,过冷度越小,变体选择越强。与化学驱动力相比,位错的影响更为显著。

与此同时,Zhang等人^[55]通过 J_2 塑性理论和相场模拟,研究了孔洞周围弹塑性应力场下 β 到 α 转变过程中 α

变体团簇的形成。与弹性材料不同,采用弹塑性相场模型能够通过塑性变形部分弛豫孔洞周围的应力场,从而减小最大应力幅度。随着孔洞尺寸的增大,钛合金中 α 变体团簇的选择效应逐渐增强。在拉伸和压缩应力作用下,变体选择表现出不对称性,而在外加剪切应力作用下,孔洞周围的应力场对变体选择的影响更为显著。通过计算孔洞周围应力场与 α 变体之间的相互作用,可对这些结果进行预测和验证。在不同外加应力条件下,还发现了若干有趣的变体团簇,如“风车型”等,见图5所示^[55]。在特定的 α/α 取向关系下,通过感生形核可形成“等边三角形”、“近平行”和“准等边三角形”等类型的变体团簇,这些取向关系对应较低的能量。最终,孔洞附近的微观结构由变体之间及变体与外部应力场的相互作用共同决定。同时,Ding等人^[58]采用弹塑性相场模型系统研究了孔洞形状对其周围弹塑性力场的影响规律。

此外,Jia等人^[59]在Ti-Al-Mo-V合金体系研究了生长中的 ω 颗粒的浓度场与应力场的相互作用对 α 相形核的影响。研究发现,浓度场抑制了 α 相形核,而应力场则起到了促进作用。浓度场与应力场的共同作用可能不会为 α 相形核提供额外的驱动力。大量且细小的 α 相沉淀主要是由于在相对高密度的 ω/β 界面处发生的异质形核过程。通过相场模拟,还揭示了 ω 辅助的 α 相形核过程主要受浓度变化、弹性相互作用以及 ω/β 界面特征的影响。合金中胚胎态 ω 和等温态 ω 均可以根据时效温度和时效时间的变化而形成。值得注意的是,胚胎态 ω 由于其周围 β 基体没有显著的浓度波动,因此无法细化 α 相。相反,等温态 ω 颗粒周围的浓度场会降低 α 相形核的驱动力,且其周围的应力场为 α 形核提供了额外的驱动力。细化的 α 相沉淀通过在 ω/β 界面处的异质形核形成,这一

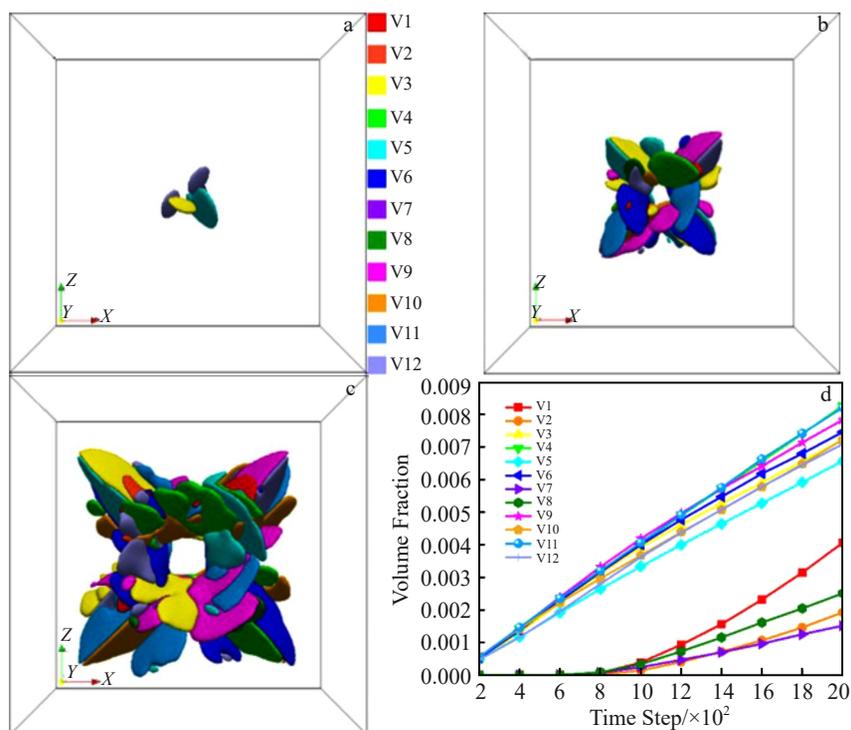


图 5 外加拉伸应力 300 MPa 下,不同孔洞半径周围的 α 析出情况及孔洞半径为 10.0 个网格点时不同 α 变体的体积分数

Fig.5 α precipitations around the voids with radius of 2.5 (a), 5.0 (b) and 10.0 (c) grids during β to α transformation at $\tau=2 \times 10^3$ under an external tensile stress of 300 MPa; volume fractions of different α variants under the configuration of the void with radius of 10.0 grids during the growth process of variant cluster (d)^[35]

过程与 Ti-Mo 基^[60]和 Ti-V^[61]合金系统中观察到的机制类似。

这些研究成果表明,位错、孔洞及析出相的局部应力场在航空材料中起着至关重要的作用,它们显著影响了合金中相变的热力学驱动力和变体选择行为。

4 展望

相场模型的发展正朝着多场耦合与跨尺度模拟的方向发展。未来的多元相场模型将更加注重新物理场(如成分场、温度场、应力场及电磁场等)之间的耦合,尤其是对于多相、多组分系统的模拟。在复杂材料的相变过程中,温度场、应力场和成分场等可能会相互影响,如何在模型中有效地耦合这些场并进行精确模拟将是一个重要的发展方向。此外,跨尺度模拟也会成为未来的重要发展趋势。当前的相场模型主要集中在介观尺度,若将其与不同尺度的其它模拟方法进行有效地衔接,例如耦合原子尺度的分子动力学、宏观上有限元方法与相场模拟结合,将能更好地揭示材料的内在规律。

然而,相场模型中由多相、多场耦合带来的计算复杂度以及跨尺度数据传递的数据精度损失等限制,仍然是制约相场模型在工程应用中的瓶颈。为满足模拟上的空间与时间维度上接近实际情况,传统的求解方法在计算效率上存在一定的瓶颈,这使得在大规模和高精度模拟时,计算资源的消耗十分巨大,限制了其在实际工程中的

广泛应用。因此,提高相场模型的求解速度,特别是在多场耦合和多相系统中的应用,成为未来研究的一个重要方向。可能的解决方案包括通过优化数值算法、并行计算、机器学习等手段来提升计算效率,同时确保计算结果的准确性^[62-63]。

此外,相场模型依赖于实验数据来提供和验证模型参数,但在极端环境(如高温、高压、快冷等)条件下,获取这些数据难度较大。因此,探索新的实验手段或采用计算机模拟与实验相结合的策略,将有助于突破这一瓶颈^[64]。值得注意的是,人工智能(AI)方法在相场模型中的应用也为模型的量化提供了新的契机^[65]。随着人工智能技术的快速发展,尤其是在数据分析和模式识别方面的应用,AI能够有效地辅助相场模型中的参数识别和优化。通过机器学习等技术,可以从大量实验数据中自动提取相场模型的参数,并进行智能化的模型校正和预测。这不仅可以加速模型的量化过程,还能提高模型的适应性和准确性,进一步推动相场模型在多元合金及其他复杂材料系统中的应用。

综上所述,未来相场模型的研究应聚焦于多元合金的相变和力学行为的多场耦合模拟,突破计算效率和实验验证的瓶颈,同时充分发挥人工智能技术在优化模型参数方面的作用,以推动相场模型在材料科学中的应用深化与拓展。

参考文献

References

- [1] Liu Xingjun(刘兴军), Chen Yuechao(陈悦超), Lu Yong(卢勇) et al. *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2020, 56(1): 1
- [2] Xu Dongsheng(徐东生), Wang Hao(王焱), Teng Chunyu(滕春禹) et al. *E-Science Technology & Application*(科研信息化技术与应用)[J], 2015, 6(3): 14
- [3] Kamaraj M. *Sadhana*[J], 2003, 28(1): 115
- [4] Zhang Jinhu(张金虎), Teng Chunyu(滕春禹), Yang Mei(杨梅) et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2013, 23(z1): s296
- [5] Raabe D. *Computational Materials Science*(计算材料学)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2002: 244
- [6] Zhao Y H, Xin T Z, Tang S et al. *MRS Bulletin*[J], 2024, 49(6): 613
- [7] Zhao Y H. *Materials Genome Engineering Advances*[J], 2024, 2(2): 44
- [8] Zhao Y H. *npj Computational Materials*[J], 2023, 9(1): 94
- [9] Chen L Q. *Annual Review of Materials Research*[J], 2002, 32(1): 113
- [10] Wang Y Z, Li J. *Acta Materialia*[J], 2010, 58(4): 1212
- [11] Gaubert A, Bouar Y L, Finel A. *Philosophical Magazine*[J], 2010, 90(1-4): 375
- [12] Zhang Jinhu(张金虎), Xu Haisheng(许海生), Guo Hui(郭辉) et al. *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2025, 61(12): 1911
- [13] Zhang J H, Teng C Y, Meng Z C et al. *Intermetallics*[J], 2020, 126: 106946
- [14] Zhang Jinhu(张金虎), Xu Dongsheng(徐东生), Teng Chunyu(滕春禹) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(3): 939
- [15] Li Xuexiong(李学雄), Xu Dongsheng(徐东生), Yang Rui(杨锐). *Chinese Journal of Materials Research*(材料研究学报)[J], 2019, 33(4): 241
- [16] Li Xuexiong(李学雄), Xu Dongsheng(徐东生), Yang Rui(杨锐). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2019, 55(7): 928
- [17] Moelans N, Blanpain B, Wollants P. *Calphad*[J], 2008, 32(2): 268
- [18] Christian J W. *Theory of Structural Transformations in Solids*[M]. New York: John Wiley & Sons Press, 1983: 201
- [19] Zhang Wei(张伟), Cheng Dazhao(程大钊), Liu Caiyan(刘彩艳) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2024, 53(10): 2926
- [20] Pei Jiaqi(裴嘉琪), Hou Hua(侯华), Yang Wenkui(杨文奎) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2024, 53(3): 834
- [21] Sun Qiming(孙启明), Shen Wenlong(申文龙), Liao Yuxuan(廖宇轩) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2025, 54(3): 671
- [22] Chen L Q. *Journal of the American Ceramic Society*[J], 2008, 91(6): 1835
- [23] Koyama T. *Science and Technology of Advanced Materials*[J], 2008, 9(1): 013006
- [24] Karma A, Rappel W J. *Physical Review Letters*[J], 1996, 77(19): 4050
- [25] Kim S G, Kim W T, Suzuki T. *Physical Review E*[J], 1999, 60(6): 7186
- [26] Steinbach I, Pezzolla F, Nestler B et al. *Physica D: Nonlinear Phenomena*[J], 1996, 94(3): 135
- [27] Steinbach I. *Phase-Field Theory and Application, Lecture Series*[R]. Freiberg: Institut für Werkstoffwissenschaft, 2024
- [28] Guo X H, Shi S Q, Ma X Q. *Applied Physics Letters*[J], 2005, 87(22): 221910
- [29] Guo X H, Shi S Q, Zhang Q M et al. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2008, 378(1): 110
- [30] Cheng T L, Wen Y H, Hawk J A. *International Journal of Plasticity*[J], 2017, 96: 242
- [31] Xue F, Cheng T L, Lei Y K et al. *npj Computational Materials*[J], 2022, 8(1): 18
- [32] Chen Longqing(陈龙庆). *Chinese Science Bulletin*(科学通报)[J], 2013, 58(35): 3638
- [33] Khachaturyan A G, Semenovskaya S, Tsakalakos T. *Physical Review B*[J], 1995, 52(22): 15909
- [34] Shen C, Simmons J P, Wang Y. *Acta Materialia*[J], 2006, 54(20): 5617
- [35] Zhang J H, Guo H, Xu H S et al. *Computational Materials Science*[J], 2022, 215: 111781
- [36] Yeddu H K, Borgenstam A, Agren J. *Acta Materialia*[J], 2013, 61(7): 2595
- [37] Jin Y M, Wang Y U, Khachaturyan A G. *Philosophical Magazine*[J], 2003, 83(13): 1587
- [38] Wang Y Z, Chen L Q, Khachaturyan A G. *Scripta Metallurgica et Materialia*[J], 1991, 25(6): 1387
- [39] Miyazaki T, Imamura H, Kozakai T. *Materials Science and Engineering*[J], 1982, 54(1): 9
- [40] Kundin J, Mushongera L, Goehler T et al. *Acta Materialia*[J], 2012, 60(9): 3758
- [41] Wang Z X, Liang C X, Wang D et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2024, 976: 172982
- [42] Teng C Y, Zhou N, Wang Y Z et al. *Acta Materialia*[J], 2012, 60(18): 6372
- [43] Wang F B, Wang G, Ji L et al. *Computational Materials Science*[J], 2019, 164: 22
- [44] Teng C Y, Du A, Xu D S et al. *Intermetallics*[J], 2015, 65: 1
- [45] Wang Y U, Jin Y M, Khachaturyan A G. *Journal of Applied Physics*[J], 2002, 92(3): 1351
- [46] Shi R, Zhou N, Niezgoda S R et al. *Acta Materialia*[J], 2015, 94: 224
- [47] Shi R, Wang Y. *Acta Materialia*[J], 2013, 61(16): 6006
- [48] Shi R, Ma N, Wang Y. *Acta Materialia*[J], 2012, 60(10): 4172
- [49] Heo T W, Bhattacharyya S, Chen L Q. *Philosophical Magazine*[J], 2013, 93(13): 1468
- [50] Zhou N, Shen C, Mills M et al. *Philosophical Magazine*[J], 2010, 90(1-4): 405
- [51] Cottura M, Appolaire B, Finel A et al. *Acta Materialia*[J], 2021,

- 212: 116851
- [52] Yang M, Zhang J, Wei H *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2018, 769: 453
- [53] Yang M, Zhang J, Wei H *et al. Scripta Materialia*[J], 2018, 147: 16
- [54] Zhang J H, Li X X, Xu D S *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2021, 90: 168
- [55] Hao M Y, Li P, Li X X *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2022, 124: 150
- [56] Qiu D, Shi R, Zhang D *et al. Acta Materialia*[J], 2015, 88: 218
- [57] Zhang Jinhu(张金虎), Xu Dongsheng(徐东生), Wang Yunzhi(王云志) *et al. Acta Metallurgica Sinica(金属学报)* [J], 2016, 52(8): 905
- [58] Ding X X, Yu D J, Li B *et al. MRS Communications*[J], 2025, 15(3): 576
- [59] Jia Y D, Su H H, Cao S *et al. Acta Materialia*[J], 2024, 279: 120302
- [60] Prima F, Vermaut P, Texier G *et al. Scripta Materialia*[J], 2006, 54(4): 645
- [61] Sharma A, Soni V, Dasari S *et al. Scripta Materialia*[J], 2021, 196: 113766
- [62] Zhou X W, Sun S, Cai S L *et al. Journal of Materials Science*[J], 2024, 59: 15727
- [63] Bonneville C, Bieberdorf N, Hegde A *et al. npj Computational Materials*[J], 2025, 11(1): 14
- [64] Herbeaux A, Aboleinein H, Villani A *et al. Additive Manufacturing*[J], 2024, 81: 103994
- [65] Rieger L H, Zelič K, Mele I *et al. Scientific Data*[J], 2024, 11(1): 1275

Application and Prospects of Mechanically-Coupled Phase-Field Models in Aeronautical Materials

Zhang Jinhu, Xu Haisheng, Wu Jiaqi, Li Xuexiong, Yang Liang, Wang Hao, Dong Limin, Xu Dongsheng, Yang Rui
(Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

Abstract: With the rapid development of the aviation industry, superalloys and titanium-based alloys serve as core materials for aerospace engines and structural components, whose microstructure control and performance optimization are key factors to ensure equipment reliability. The mechanically-coupled phase-field model, as an effective tool for simulating microstructure evolution, bridges the gap among microscale mechanical principles, mesoscale microstructure simulation and macroscopic performance predictions. The model reveals the intrinsic connection between microstructure evolution and mechanical properties of materials in thermomechanical coupled field, providing theoretical support for the microstructure control and performance evaluation of aerospace materials. This paper systematically reviewed the research progress on mechanically-coupled phase-field models in the fields of typical aerospace materials, such as superalloys and titanium-based alloys. It outlined typical application cases of the model in investigating the mechanisms of solid-state phase transformation. This review encompassed applications of phase-field models from elastic and elastoplastic to defect-coupled formulations, addressing both γ' phase precipitation and rafting in superalloys, as well as the evolution of precipitate phases in titanium-based alloys. Furthermore, it discussed the challenges in current research and provided an outlook on the future prospects of the mechanically-coupled phase-field model in aerospace material research. Lastly, it highlighted the key issues of this type of phase-field model and its future development directions.

Key words: mechanically-coupled phase-field models; aeronautical materials; solid-state phase transformation; microstructure simulation

Corresponding author: Xu Dongsheng, Ph. D., Professor, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, P. R. China, Tel: 0086-24-23971946, E-mail: dsxu@imr.ac.cn; Wang Hao, Ph. D., Professor, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, P. R. China, Tel: 0086-24-23971946, E-mail: haowang@imr.ac.cn