

ПОВЕРХНОСТНОЕ РАСТРЕСКИВАНИЕ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ В ПРОЦЕССЕ ПОСЛЕЗАКАЛОЧНОГО ОТПУСКА

В.Л.Орлов, А.В.Орлов, Т.В.Луговой

Расчитаны послезакалочные упругие напряжения с учетом мартенситного превращения в $\alpha+\beta$ -титановом сплаве. Показано, что величина тангенциальной составляющей упругих растягивающих напряжений изменяет химический потенциал вакансий таким образом, что возникает их восходящая диффузия. Процесс образования зародыша трещины и ее роста при отпуске описан с привлечением механизма диффузионно-деформационной неустойчивости вакансий.

В процессе отпуска после закалки β -стабилизированных сплавов титана наблюдается поверхностное растрескивание массивных образцов. Эффект расстрескивания наблюдается в достаточно узком температурном интервале отпуска (200-500°C). Зависимость температуры отпуска от времени, после которого начинается растрескивание имеет вид С-образной кривой. При температуре 400°C для образования трещин оказывается достаточным отпуск в течение 5-10 часов. При повышении или понижении температуры момент растрескивания значительно отдалается.

Существующее до настоящего времени [1] качественное объяснение явления поверхностного растрескивания связывается с замедленным распадом β -фазы от образования сегрегатов до появления обособленной α -фазы, и с возникновением, вследствие этого, значительных напряжений.

В работе [2] предложен механизм дефектно-деформационной неустойчивости неравновесных вакансий. Суть механизма заключается в том, что растягивающие напряжения снижают химический потенциал вакансий и увеличивают их концентрацию. В результате возникает процесс восходящей диффузии вакансий.

В настоящей работе проводятся расчеты упругих напряжений, возникающих при закалке образцов и при мартенситном превращении $\beta \rightarrow \alpha$ в приповерхностном слое. Показано, что возникающие упругие растягивающие напряжения достаточны для возникновения диффузионно-деформационной неустойчивости вакансий. На основании неустойчивости рассчитывается температурный интервал развития трещины.

1. Послезакалочные термические напряжения в сферическом образце титана

Для расчета взят образец титана в виде шара радиусом 10 см. На первом этапе принято, что образец прогрет до температуры 1170 К, а затем охлаждается в воде, температура которой 300 К. Для процесса охлаждения образца решалось численно уравнение теплопроводности с граничным условием первого рода. На рис. 1 представлены температурные профили для различных моментов времени после начала охлаждения. Для расчета использовались справочные данные теплофизических характеристик, зависимость которых от температуры не учитывалась.

Для расчета упругих термонапряжений использовалось условие равновесия в виде

$$\text{grad div } \vec{u} - \frac{(1-2\cdot\sigma)}{2\cdot(1-\sigma)} \text{rot rot } \vec{u} = \alpha \frac{(1+\sigma)}{(1-\sigma)} \text{grad } T, \quad (1)$$

где \vec{u} – вектор смещения, α – объемный коэффициент температурного расширения, σ – коэффициент Пуассона. Далее, на каждом шаге расчета температурного профиля, находились компоненты тензора деформации, приведенные к главным осям, и, наконец, радиальные и тангенциальные напряжения:

$$\sigma_r(r,t) = \frac{E \cdot \alpha}{3} \left\{ \frac{T(r,t)}{1-2\cdot\sigma} + \frac{2}{1-\sigma} \left[\frac{1}{R^3} \int_0^R T(r,t) \cdot r^2 dr - \frac{1}{r^3} \int_0^r T(r,t) \cdot r^2 dr \right] \right\}, \quad (2)$$

$$\sigma_\tau(r,t) = \frac{E \cdot \alpha}{3 \cdot (1-\sigma)} \left\{ \frac{\sigma}{1-2\cdot\sigma} T(r,t) + \frac{2}{R^3} \int_0^R T(r,t) \cdot r^2 dr + \frac{1}{r^3} \int_0^r T(r,t) \cdot r^2 dr \right\}, \quad (3)$$

где E – модуль упругости, $T(r, t)$ – распределение температуры по радиусу в конкретный момент остывания. Распределения упругих касательных термонапряжений в различные моменты процесса остывания представлены на рис. 2. Видно, что на ранних стадиях остывания появляются значительные

термонапряжения. В радиальном направлении образец оказывается всесторонне сжатым. Тангенциальные (касательные) напряжения меняют знак. Внешняя, приповерхностная часть образца оказывается растянутой, а внутренняя – сжатой. По мере выравнивания температуры при охлаждении рассчитанные значения термических напряжений снижаются.

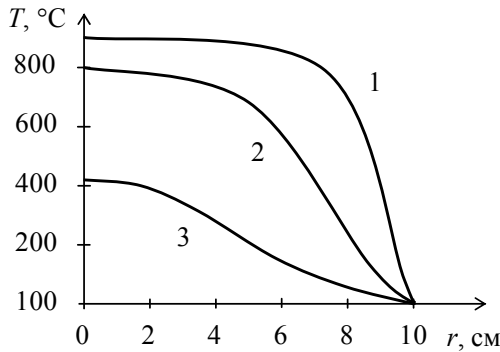


Рис. 1. Радиальные температурные профили для различных моментов времени после начала охлаждения (1 – 1 с, 2 – 10 с, 3 – 50 с)

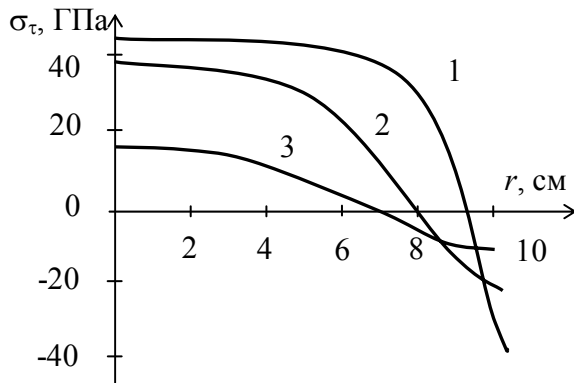


Рис. 2. Радиальные профили тангенциальных термонапряжений для различных моментов времени после начала охлаждения (1 – 1 с, 2 – 10 с, 3 – 50 с)

2. Закалка вакансий при охлаждении

Перед закалкой образец титана нагрет до высокой температуры. Следовательно, в исходном состоянии концентрация вакансий, равновесная для данной температуры, определяется энергией образования E_f

$$C_{v0} = C_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_f}{k \cdot T}\right), \quad (4)$$

где C_0 – объемная концентрация узлов кристаллической решетки. При понижении температуры вакансии становятся неравно-

весными и начинается процесс их релаксации, определяемый постоянной времени релаксации τ_v . Постоянная времени релаксации вакансий определяется [3] средним расстоянием до эффективных стоков L_s и коэффициентом диффузии

$$\tau_p = \frac{L_s^2}{D_0} \cdot \exp\left(\frac{E_m \pm \sigma_\tau \cdot \Omega}{k \cdot T}\right), \quad (5)$$

где E_m – энергия миграции вакансий, σ – напряжение, Ω – атомный объем, D_0 – предэкспоненциальный член коэффициента диффузии. Знаки “ \pm ” в выражении (5) выбираются в зависимости от того, действуют в данной точке пространства сжимающие или растягивающие напряжения. Величина L_s для области сжимающих напряжений может быть взята равной нескольким межатомным расстояниям, так как уменьшение концентрации неравновесных вакансий может происходить за счет краудионного механизма, когда ряд атомов сдвигается и происходит заполнение вакансии. Краудионный механизм исчезновения вакансий подтверждается прямым компьютерным моделированием двумерной кристаллической решетки в поле сжимающих напряжений. В области растягивающих напряжений величина L_s может определяться размером зерна, плотностью дислокаций и т.п. В этом случае величина L_s достаточно велика. Для расчетов принято $L_s = 10^{-8}$ м для сжимающих напряжений и $L_s = 10^{-7}$ м для растягивающих напряжений.

Поправки, вносимые в концентрацию вакансий и связанные с их релаксацией, рассчитывались следующим образом. Во-первых, для каждого временного шага расчета распределения напряжений вычислялись времена релаксации $\tau_v(r, t)$. Величины времен релаксации в области растягивающих напряжений (вблизи поверхности), а также во всем образце через время большее одной минуты, оказываются большими ($10^3 \div 10^5$ с). В таких случаях концентрация вакансий не испытывает значительной релаксации. В областях с высокой температурой и сжимающими напряжениями время релаксации вакансий сравнимо с временным шагом расчета (10^{-1} с) и релаксация вакансий существенна. Во-вторых, на каждом временном шаге процесса охлаждения рассчитывалась равновесная для данных условий концентрация вакансий $C_v(r, t)$

ПОВЕРХНОСТНОЕ РАСТРЕСКИВАНИЕ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ В ПРОЦЕССЕ ПОСЛЕЗАКАЛОЧНОГО ОТПУСКА

$$C_v(r, t) = C_0 \cdot \exp\left(-\frac{E_f \pm \sigma_\tau \cdot \Omega}{k \cdot T}\right). \quad (6)$$

Далее, поправки в концентрацию вакансий рассчитывались методом последовательных приближений. Пусть $\Delta C_i(r, t)$ – изменение равновесной концентрации вакансий в i -м приближении. Тогда

$$\Delta C'_i(r, t) = \Delta C_i(r, t) \cdot \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_v(r, t)}\right) \quad (7)$$

является действительным изменением концентрации вакансий вследствие релаксации.

Уменьшение концентрации вакансий приводит к уменьшению сжимающих напряжений:

$$\Delta \sigma'_i(r, t) = A \cdot \Delta C'_i(r, t), \quad (8)$$

где A – коэффициент, зависящий от упругих свойств материала [2].

После проведения расчетов напряжений и концентраций вакансий в i -м приближении рассчитывались напряжения и концентрации вакансий в $i+1$ -м приближении

$$\sigma_{i+1}(r, t) = \sigma_i(r, t) - \Delta \sigma'_i(r, t), \quad (9)$$

$$C_{i+1}(r, t) = C_i(r, t) - \Delta C'_i(r, t). \quad (10)$$

Расчет прекращался после того, как получаемые значения σ_τ и C_v в соседних приближениях оказываются отличными менее чем на 1%. На рис. 3 представлены зависимости относительной концентрации вакансий и тангенциальных напряжений от радиуса в различные моменты процесса охлаждения.

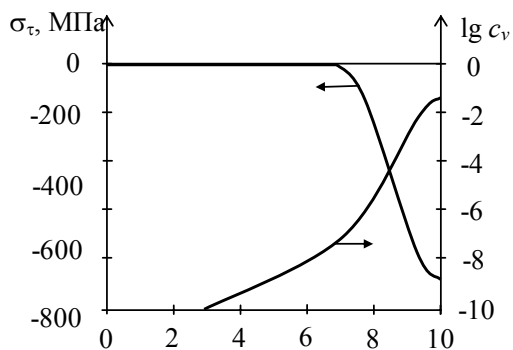


Рис. 3. Профили напряжений и концентрации структурных вакансий после мартенситного превращения в поверхностном слое

Результаты проведенных расчетов позволяют сделать вывод о том, что при закалочных экспериментах с массивными образцами титана закаленными (остаточными) оказываются только вакансии вблизи поверхности образца. Эти вакансии являются нерав-

новесными (избыточными) и создают в поверхностном слое упругие напряжения

$$\sigma_\tau = A \cdot C_v. \quad (11)$$

Термоупругие напряжения исчезают в процессе выравнивания температуры при охлаждении. Полученные значения остаточных напряжений слишком малы, чтобы вызвать диффузионно-деформационную неустойчивость [2] вакансий, то есть $\sigma_\tau \cdot \Omega < k \cdot T$.

3. Мартенситное превращение β-титана

Экспериментальные результаты свидетельствуют о том, что явление поверхностного растрескивания при послезакалочном отпуске характерно для металлических материалов, в которых при термической обработке происходит некоторое фазовое превращение. Так, аналогичное явление в бериллиевых образцах обычно объясняют [1] образованием частиц γ -фазы. Растрескивание сплава нимоник (ХН77ТЮР) связывается [1] с концентрационными и структурными несоответствиями при формировании γ' -фазы типа $Ni_3(TiAl)$.

При охлаждении β -стабилизированного титана происходит мартенситное превращение. Различают, как правило, три типа мартенситных фаз: α' с искаженной гексагональной решеткой, α'' с ромбической решеткой и ω -фаза с гексагональной структурой, когерентно связанной с матрицей. При отпуске мартенситные фазы превращаются в α -фазу. Таким образом, их можно считать предвыделениями α -фазы.

Для инициирования мартенситного превращения, суть которого заключается в перестройке структуры, связанной с пусть малыми, но смещениями атомов, необходим некоторый свободный объем. Можно предположить, что мартенситное превращение имеет место в областях образца, где действуют остаточные растягивающие напряжения.

Превращение из высокотемпературной ГЦК-фазы в низкотемпературную ГПУ-фазу – суть мартенситного превращения в титане. Обе эти структуры могут быть получены путем чередования в определенной последовательности плоских гексагональных сеток атомов, так, что обе решетки имеют общую плотноупакованную плоскость. Этой плоскостью является плоскость (111) кубической структуры и плоскость (0001) гексагональной структуры. Именно эта плоскость является габитусной при превращении. Условием превращения является когерентность фаз, что

возможно при совпадении межатомных расстояний в плотноупакованных плоскостях этих фаз.

Расчеты показывают, что в плотноупакованных областях α - и β -титана существует значительное несоответствие межатомных расстояний (0,29358 нм для β - и 0,29503 нм для α -титана [4]). Следовательно, до начала мартенситного превращения β -фаза должна быть подвергнута растягивающим напряжениям. Такие напряжения в поверхностном слое образца возникают, как показано выше, вследствие закалки вакансий.

Таким образом, в процессе закалки β -стабилизированного титана вблизи поверхности массивного образца возникают зародыши мартенситных фаз. Эти зародыши растут, однако мартенситное превращение прекращается вследствие потери когерентности. Цепная реакция в данном случае, по видимому, затруднена из-за большого несоответствия межатомных расстояний в плотноупакованных областях. Во внутренних областях массивных образцов титана переход $\beta \rightarrow \alpha$ происходит немартенситным путем.

Удельный объем α -фазы оказывается на 4% меньше, чем у β -фазы, поэтому мартенситные предвыделения α -фазы оказываются подвергнуты напряжению растяжения. По мере перемещения вглубь массивного образца по границам мартенситной фазы увеличиваются напряжения сжатия центральной области и превращение прекращается. В данной работе для оценочных расчетов принято, что мартенситное превращение, начинаясь с поверхности массивного образца создает дополнительные растягивающие напряжения. Эти напряжения вызывают сжимающие напряжения в более глубоких слоях. Расчет напряжений, связанных с продвижением мартенситной фазы вглубь образца проведен с использованием теории упругости. В результате получено, что растягивающие напряжения, инициирующие возникновение предвыделений α -фазы достаточно быстро убывают с глубиной. В предположении о том, что доля предвыделений α -фазы пропорциональна величине растягивающих напряжений получен их профиль (рис. 3).

Растянутое напряженное состояние предвыделений α -фазы аналогично существованию в этой области структурных вакансий, концентрация которых может быть определена из разности удельных объемов фаз и доли и доли предвыделений α -фазы (рис.3).

4. Диффузионно-деформационная неустойчивость вакансий

В поверхностном слое массивного образца титана после закалки образуются мартенситные предвыделения α -фазы с высокой концентрацией структурных вакансий (значительные растягивающие напряжения). Химический потенциал вакансий в поверхностном слое определяется

$$\mu_{xv} = \mu_{x0} + k \cdot T \cdot \ln C_v - \sigma \cdot \Omega. \quad (12)$$

Поток вакансий вызывается градиентом химического потенциала и определяется эффективным коэффициентом диффузии [2]

$$D_{эф} = D_0 \cdot \left(1 - \frac{\sigma \cdot \Omega}{k \cdot T}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E_m - \sigma \cdot \Omega}{k \cdot T}\right). \quad (13)$$

Неустойчивость диффузионно-деформационного типа возникает в случае $\sigma \cdot \Omega > k \cdot T$ (восходящая диффузия).

Процесс образования зародыша трещины с учетом вышеизложенного представляется в виде следующей последовательности. На первой стадии возникает малая флуктуация избыточных вакансий на фоне их средней концентрации, удовлетворяющей условию неустойчивости. Скопление вакансий меняет свой профиль, растет и, наконец, превращается в трещину.

Для инициирования диффузионных процессов необходима повышенная температура. Образование и рост трещин происходит на стадии отпуска закаленного материала. Температурный интервал растрескивания может быть описан функцией $\varphi(T)$. В первом приближении за такую величину может быть принята величина обратно пропорциональная модулю коэффициента восходящей диффузии

$$\varphi(T) = B \frac{\sigma \cdot \Omega}{\sigma \cdot \Omega - k \cdot T} \cdot \exp\left(\frac{E_m - \sigma \cdot \Omega}{k \cdot T}\right), \quad (14)$$

где B – нормированный множитель, который может быть выбран для сравнения с существующими экспериментальными результатами равным приблизительно 5 часам в минимуме функции $\varphi(T)$. Для расчета температурной зависимости времени отпуска до начала образования трещин использовались следующие параметры: $E_m = 0,5$ эВ [5], $\sigma = 590$ МПа.

ПОВЕРХНОСТНОЕ РАСТРЕСКИВАНИЕ ТИТАНОВЫХ СПЛАВОВ В ПРОЦЕССЕ ПОСЛЕЗАКАЛОЧНОГО ОТПУСКА

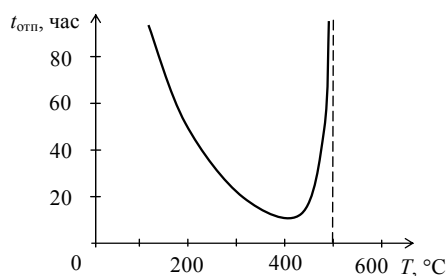


Рис. 4. Зависимость времени отпуска до начала растрескивания от температуры

На рис. 4 представлена указанная зависимость, которая хорошо согласуется с экспериментом. При высоких температурах отсутствие растрескивания объясняется отсутствием восходящей диффузии вакансий вследствие нарушения условия неустойчивости. При низких температурах диффузионные процессы оказываются подавленными.

Показанные в данной работе напряжения растяжения в массивных образцах титана хорошо объясняют изменение размеров при отпуске.

5. Обсуждение результатов

Специфическая зависимость времени отпуска до начала поверхностного растрескивания указывает на диффузионный характер процессов, предшествующих разрушению. Причиной растрескивания является действие двух факторов. Во-первых, это процесс закалки массивных образцов титана. При закалке в поверхностном слое образца возникают растягивающие термонапряжения, инициирующие процесс развития процесса мартенситного превращения. Мартенситное превращение происходит с уменьшением удельного объема. В результате растягивающие напряжения вблизи поверхности дополнительно возрастают. Напряжения изменяют химический по-

тенциал избыточных вакансий, что приводит к явлению восходящей диффузии. Скопления вакансий, образующиеся в результате роста малых флуктуаций, в конечном счете, превращаются в трещины.

Проведенный анализ процессов, приводящих к трещинообразованию, и оценочные расчеты не противоречат существующим представлениям [6] и экспериментальным результатам [1].

ЛИТЕРАТУРА

1. Паршин А.М., Тихонов А.Н., Бондаренко Г.Г., Кириллов Н.Б. Радиационная повреждаемость и свойства сплавов. – СПб.: Политехника, 1995. – 301 с.
2. Орлов В.Л., Орлов А.В., Малышкина А.Г. Известия вузов. Физика. – 2003. – №2. – С 31.
3. Бокштейн С.З. Диффузия и структура металлов. – М.: Металлургия, 1973. – 208 с.
4. Барабаш О.М., Коваль Ю.Н. Кристаллическая структура металлов и сплавов: Справочник. – Киев.: Наук. Думка, 1986. – 599 с.
5. Лариков Л.Н., Исайчев В.И. Диффузия в металлах и сплавах. – Киев.: Наук. Думка, 1987. – 509 с.
6. Лахтин Ю.М. Металловедение и термическая обработка металлов. – М.: Металлургия, 1983. – 360 с.