

ЗАВИСИМОСТЬ УДЕЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ МЕЖФАЗНОЙ β/α -ГРАНИЦЫ В ТИТАНОВОМ СПЛАВЕ ВТ6 ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ НАГРЕВА В ИНТЕРВАЛЕ 600–975 °С

М. А. Мурзинова^{a*}, С. В. Жеребцов^b, Г. А. Салищев^b

^a Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук
450001, Уфа, Россия

^b Белгородский государственный национальный исследовательский университет
308015, Белгород, Россия

Поступила в редакцию 1 сентября 2015 г.

Удельная энергия межфазных границ является важной характеристикой многофазных сплавов, так как во многом определяет стабильность их микроструктуры и свойств при обработке и эксплуатации. В работе проанализировано изменение удельной энергии межфазной β/α -границы в титановом сплаве ВТ6 при температурах от 600 до 975 °С. В основу анализа положены модель ступенчатой межфазной границы и методика вычисления ее энергии, разработанные Ван дер Мерве и Шифлетом [33, 34]. При расчетах использованы результаты экспериментальных измерений параметров решеток фаз в указанном интервале температур и их химического состава, представленные в литературе. Кроме того, учтены данные экспериментов и моделирования по влиянию температуры и химического состава на упругие модули α - и β -фаз в сплавах титана. Показано, что с понижением температуры от 975 до 600 °С удельная энергия межфазной β/α -границы возрастает от 0.15 до 0.24 Дж/м². Основной вклад в энергию границы (около 85 %) вносят краевые дислокации, компенсирующие несоответствие в направлении $[0001]_{\alpha} \parallel [110]_{\beta}$. Энергия, связанная с компенсацией несоответствия в направлениях $[\bar{2}110]_{\alpha} \parallel [1\bar{1}1]_{\beta}$ и $[0\bar{1}10]_{\alpha} \parallel [\bar{1}12]_{\beta}$ за счет образования «ступенек» и наклонных дислокаций несоответствия, мала и слабо увеличивается с понижением температуры.

DOI: 10.7868/S004445101604009X

пластин и кристаллографически связаны ориентационным соотношением Бюргерса

1. ВВЕДЕНИЕ

В структуре многокомпонентных сплавов титана обычно присутствуют две фазы: α с ГПУ-решеткой и β с ОЦК-решеткой. Эксплуатационные свойства титановых сплавов во многом определяются морфологией фаз (формой, размером, расположением частиц, их кристаллографической ориентацией относительно друг друга). Этими структурными параметрами можно управлять, обоснованно выбирая режимы термической и деформационной обработки [1–5].

Хорошо известно [1–5], что в результате развития полиморфных превращений в сплавах титана ($\beta \rightarrow \alpha$ и распада мартенситных фаз), которые возникают при различных видах термической обработки, образуются α - и β -фазы, которые имеют форму

$$(0001)_{\alpha} \parallel \{110\}_{\beta}, \quad \langle 11\bar{2}0 \rangle_{\alpha} \parallel \langle 111 \rangle_{\beta}.$$

Пластинчатая структура в сплавах титана весьма устойчива, что объясняют низкой удельной энергией межфазной β/α -границы, которая имеет полукоргерентное строение [1, 5]. Для преобразования пластинчатой структуры в глобулярную проводят деформацию сплава при температурах двухфазной ($\alpha + \beta$)-области и, обычно, последующий отжиг. В ходе деформации движущиеся решеточные дислокации взаимодействуют с межфазными границами, что приводит к повышению удельной энергии межфазных границ и нарушению ориентационного соотношения Бюргерса [6–8]. Одновременно формируются внутрифазные границы деформационного происхождения. Если энергия межфазных границ возрастет до уровня энергии некогерентной границы, а разориентировка внутрифазных границ уве-

* E-mail: mma@imsp.ru

личится до средне- или большеугловой, то появляется термодинамический стимул для развития процессов деления и сфероидизации пластин и преобразования пластинчатой структуры в глобулярную [4, 9–14]. Кроме того, потеря когерентности ускоряет диффузию вдоль межфазных границ [4, 11–14], в результате чего интенсифицируются диффузионно-контролируемые процессы. Таким образом, величина удельной энергии β/α -границы является важной характеристикой двухфазных сплавов титана, поскольку определяет морфологию частиц при их образовании, а изменение удельной энергии во время роста частиц и при внешних воздействиях оказывает влияние на процессы преобразования микроструктуры и свойства сплавов [4–17].

Однако влиянию энергии межфазной границы на структурные изменения уделяется недостаточно внимания, что, видимо, связано со сложностью соответствующих оценок. В частности, для каждого конкретного сплава величина удельной энергии межфазной границы зависит от упругих свойств и параметров решеток α - и β -фаз [13–16], которые, в свою очередь, определяются содержанием легирующих элементов в фазах при температуре обработки. При выполнении оценочных расчетов энергии β/α -границы обычно используют данные о параметрах решеток фаз, измеренных при комнатной температуре, и не учитывают их увеличение при нагреве [6, 16]. Кроме того, часто не принимают во внимание влияние легирования на упругие свойства ГПУ- и ОЦК-решеток титана, поскольку экспериментальные данные о модулях упругости легированных α - и β -фаз крайне ограничены [5, 18, 19].

Цель данной работы — оценить изменение удельной энергии межфазной β/α -границы в широко распространенном титановом сплаве ВТ6 в интервале температур 600–975 °С с учетом имеющейся в литературе информации о температурной зависимости параметров решеток и упругих характеристик фаз.

2. ЭНЕРГИЯ β/α -ГРАНИЦЫ В ДВУХФАЗНЫХ СПЛАВАХ ТИТАНА С ПЛАСТИНЧАТОЙ МИКРОСТРУКТУРОЙ

Энергия межфазной границы связана с необходимостью компенсировать несоответствие межатомных расстояний на поверхности сопряжения двух решеток [13–16, 20–23]. Если это несоответствие может быть скомпенсировано за счет упругих деформаций решеток обеих фаз без возникновения дефектов кристаллического строения, то образуется ко-

герентная межфазная граница. Как показали оценки, приведенные в работе [16], размер α -пластины, когерентно сопряженной с β -матрицей в сплаве титана, не превышает нескольких десятков нанометров. Дальнейший рост α -пластины приводит к «срыву» когерентности и формированию полукogerентной межфазной границы. В этом случае несоответствие дополнительно компенсируется за счет дислокаций, вводимых на межфазную границу, и/или за счет образования так называемых структурных ступенек (structural ledges) [5–8, 13, 14, 20–26]. (Между дислокациями в плоскости каждой ступеньки сопряжение решеток остается когерентным.)

Результаты экспериментальных исследований строения межфазных границ, в том числе данные высокоразрешающей электронной микроскопии, дают достаточно оснований полагать, что полукogerентные β/α -границы в двухфазных сплавах титана имеют ступенчатое строение [5, 27–31]. Межфазная граница схожа с террасой, которая состоит из небольших плоских участков/площадок/сегментов (terrace patch), смещенных относительно друг друга в направлении нормали к площадке на расстоянии, соизмеримые с межатомными. Площадки расположены параллельно плоскостям $(0110)_\alpha$ и $(\bar{1}12)_\beta$ и содержат краевые c -дислокации с вектором Бюргерса, параллельным оси c в ГПУ-решетке. Такое строение межфазной границы обеспечивает как выполнение ориентационного соотношения Бюргерса, так и удовлетворительное соответствие вытекающих из модели и выявленных экспериментально направлений роста α -пластин в β -матрице и нормали к «плоскости» габитуса (рис. 1а). Модель ступенчатой межфазной границы была предложена Холлом [32] и развита в работах [23–30]. Методика расчета удельной энергии такой границы разработана ван дер Мерве и Шифлетом [33, 34], и показано, что в случае образования структурных ступенек удельная энергия полукogerентной межфазной границы может быть меньше, чем в присутствии сетки дислокаций несоответствия. Поэтому в данной работе для оценки удельной энергии β/α -границы в сплаве ВТ6 использован подход ван дер Мерве и Шифлета для модели межфазной границы, где несоответствие решеток в одном из направлений компенсируется структурными ступеньками, а в другом — межфазными дислокациями несоответствия.

Схематическое и кристаллографическое строение ступенчатой межфазной границы в титановых сплавах представлено в работах [6, 7, 16, 23–30]. Эти схемы различаются деталями в соответствии с за-

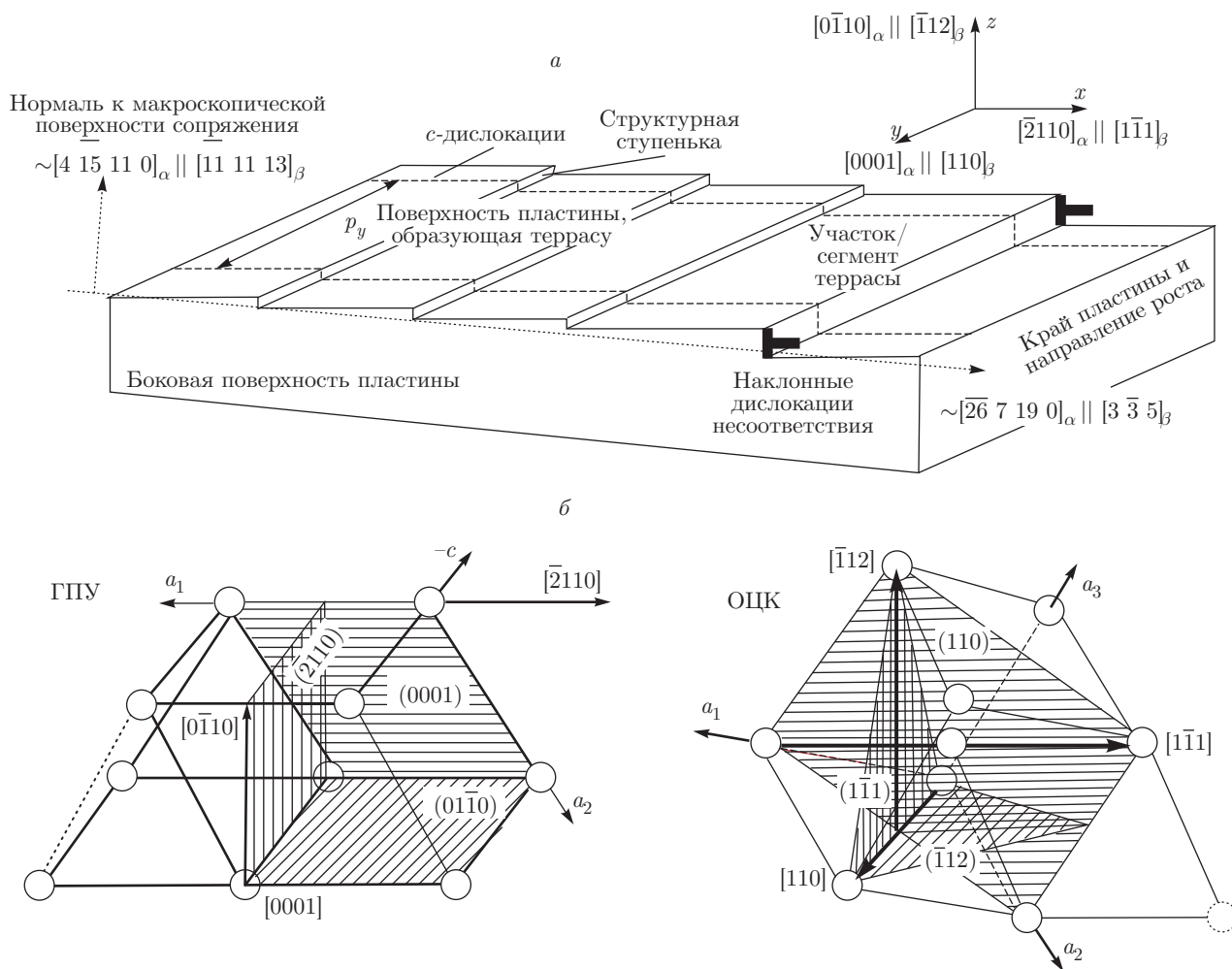


Рис. 1. Схема ступенчатой межфазной β/α -границы в сплавах титана (а) и пространственное расположение сопрягающихся решеток (б)

дачами, решаемыми в каждой конкретной работе. На рис. 1а представлена схема ступенчатой границы для случая сопряжения α - и β -фаз в сплавах титана, на которой указаны лабораторная (используемая в данной работе при расчете удельной энергии) система координат и наиболее важные кристаллографические направления. При возникновении такого сопряжения ГПУ- и ОЦК-решетки расположены в пространстве так, как показано на рис. 1б (параллельные плоскости в сопрягающихся решетках заштрихованы одинаково). Эта модель предполагает, что несоответствие межатомных расстояний на поверхности сопряжения ОЦК- и ГПУ-решеток компенсируется за счет образования структурных ступенек в направлении x ($[2\bar{1}10]_\alpha \parallel [1\bar{1}1]_\beta$) и за счет образования обычных краевых дислокаций несоответствия на «плоских» участках межфазной границы в направлении y ($[0001]_\alpha \parallel [110]_\beta$). Сопряжение решеток при образовании краевых дислокаций несо-

ответствия на «плоской» межфазной границе описано достаточно подробно [13–15, 20–23] и здесь не приводится.

Схема компенсации несоответствия при образовании структурных ступенек показана на рис. 2а. Пусть в точке А межфазной границы положение атомов в обеих решетках совпадает «идеально». Тогда из-за различия межатомных расстояний в решетках в направлении x (обозначенных a_x и b_x и показанных на рис. 2б) слева и справа от точки А атомы будут смещены из равновесных положений. При некоторой величине смещения или несоответствия, «накопленного» в направлении x (на схеме — в точке В), образуется ступенька, и межфазная граница продолжится по линии CD. Заметим, что в точке D положение атомов в сопрягающихся решетках совпадает уже не «идеально»: относительного смещения атомов нет только в направлении x , тогда как в направлении z такое смещение (δ_z) возникает из-за

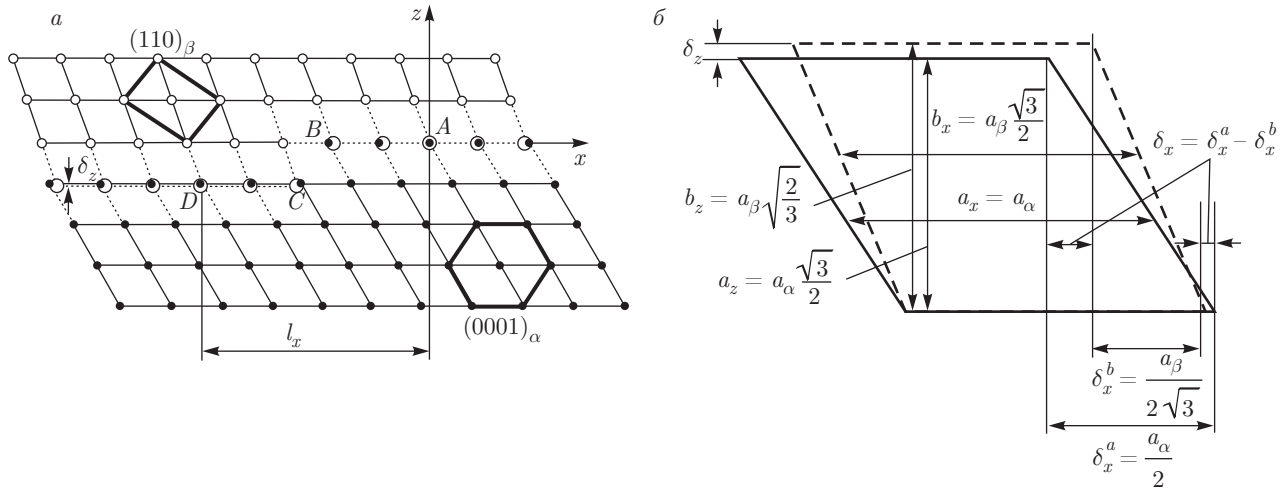


Рис. 2. а) Схема компенсации несоответствия при образовании структурных ступенек на межфазной β/α -границе. б) Межатомные и межплоскостные расстояния в ОЦК- (индексы «б») и ГПУ- (индексы «а») решетках в направлениях x и z

разницы величин a_z и b_z (рис. 2б). На каждом следующем участке/сегменте террасы несоответствие в направлении z будет увеличиваться, и при некоторой его величине компенсация осуществляется за счет образования «наклонных» дислокаций несоответствия (название дано по аналогии с малоугловыми границами наклона) [14, 20, 33, 34].

Энергия такой границы будет зависеть от величины смещений атомов в трех взаимно перпендикулярных направлениях, периодичности образования ступенек и дислокаций несоответствия (как обычных c -дислокаций, так и наклонных), т.е. геометрических параметров сопряжения, которые, в свою очередь, определяются параметрами решеток сопрягающихся фаз. Формулы для расчета этих геометрических параметров и пояснения к ним даны в табл. 1.

Удельная энергия ступенчатой межфазной β/α -границы будет складываться, согласно работам [33, 34], из удельной энергии E^S ступенчатой поверхности и удельной энергии \bar{E}_y^P «плоского» участка террасы, связанной с c -дислокациями несоответствия:

$$E_\Sigma = E^S + \bar{E}_y^P. \quad (1)$$

Все расчетные формулы позаимствованы из работ [33, 34]. Но чтобы не отправлять читателя к первоисточникам, эти формулы и краткие пояснения к ним приведены ниже. Удельная энергия ступенчатой поверхности E^S складывается из средней удельной энергии E_x^T участка/сегмента террасы, удель-

ной энергии E_x^Z , связанной с присутствием наклонных дислокаций несоответствия, и удельной энергии Γ , обусловленной переходом c -дислокации в плоскость смежной террасы:

$$E^S = E_x^T + E_x^Z + \Gamma. \quad (2)$$

Величина E_x^T учитывает упругую компенсацию несоответствия в направлении x и вклад упругой релаксации напряжений в направлении z и вычисляется по формуле

$$E_x^T = \frac{\mu U_0^2}{\pi^2 d} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n(n+n_0)}, \quad (3)$$

где μ — средний модуль сдвига сопрягающихся фаз, $\mu = (\mu_\alpha + \mu_\beta)/2$, μ_α и μ_β — зависящие от температуры модули сдвига α - и β -фаз, $U_0 = \delta_x/2$ — максимальное относительное смещение атомов сопрягающихся решеток в направлении x , которое достигается к моменту образования ступеньки (точки B и C на рис. 2а), $d \approx c_z$ — среднее расстояние между атомными плоскостями в решетках, разделенных границей, в направлении z ,

$$n_0 = \frac{\mu l_x}{2\pi d \lambda}, \quad \frac{1}{\lambda} = \frac{1 - \nu_\alpha}{\mu_\alpha} + \frac{1 - \nu_\beta}{\mu_\beta},$$

ν_α и ν_β — зависящие от температуры коэффициенты Пуассона α - и β -фаз.

Величина E_x^Z — удельная энергия границы, обусловленная присутствием наклонных дислокаций несоответствия, расположенных на расстоянии \bar{p}_x

Таблица 1. Геометрические параметры сопряжения ОЦК- и ГПУ-решеток на ступенчатой межфазной границе

Направление x	Направление y	Направление z
Межатомные расстояния в ГПУ-решетке α -титана (a) и ОЦК-решетке β -титана (b)		
$a_x = a_\alpha, b_x = a_\beta \frac{\sqrt{3}}{2}$	$a_y = c_\alpha, b_y = a_\beta \sqrt{2}$	$a_z = a_\alpha \frac{\sqrt{3}}{2}, b_z = a_\beta \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}$
Изменение положения атомов в ГПУ (a) и ОЦК (b) решетках в направлении x (рис. 2б)		
$\delta_x^a = a_\alpha \frac{1}{2}, \delta_x^b = a_\beta \frac{1}{2\sqrt{3}}$	—	—
Полное относительное смещение атомов в сопрягающихся решетках		
$\delta_x = \delta_x^a - \delta_x^b = \left a_\alpha \frac{1}{2} - a_\beta \frac{1}{2\sqrt{3}} \right $	$\delta_y = a_y - b_y = c_\alpha - a_\beta \sqrt{2} $	$\delta_z = a_z - b_z = \left a_\alpha \frac{\sqrt{3}}{2} - a_\beta \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} \right $
«Среднее» межатомное расстояние		
$c_x = \frac{2a_x b_x}{a_x + b_x} = \frac{2\sqrt{3} a_\alpha a_\beta}{2a_\alpha + a_\beta \sqrt{3}}$	$c_y = \frac{2a_y b_y}{a_y + b_y} = \frac{2\sqrt{2} c_\alpha a_\beta}{c_\alpha + a_\beta \sqrt{2}}$	$c_z = \frac{2a_z b_z}{a_z + b_z} = \frac{2\sqrt{6} a_\alpha a_\beta}{3a_\alpha + a_\beta 2\sqrt{2}}$
Период Верньера (соответствует периоду сетки межфазных дислокаций несоответствия)		
$p_x = \frac{a_x b_x}{ a_x - b_x } = \frac{a_\alpha a_\beta \sqrt{3}}{ 2a_\alpha - a_\beta \sqrt{3} }$	$p_y = \frac{a_y b_y}{ a_y - b_y } = \frac{c_\alpha a_\beta \sqrt{2}}{ c_\alpha - a_\beta \sqrt{2} }$	$p_z = \frac{a_z b_z}{ a_z - b_z } = \frac{a_\alpha a_\beta \sqrt{6}}{ 3a_\alpha - a_\beta 2\sqrt{2} }$
Несоответствие межатомных расстояний		
$f_x \equiv \frac{c_x}{p_x} = \frac{2 2a_\alpha - a_\beta \sqrt{3} }{2a_\alpha + a_\beta \sqrt{3}}$	$f_y \equiv \frac{c_y}{p_y} = \frac{2 c_\alpha - a_\beta \sqrt{2} }{c_\alpha + a_\beta \sqrt{2}}$	$f_z \equiv \frac{c_z}{p_z} = \frac{2 3a_\alpha - a_\beta 2\sqrt{2} }{3a_\alpha + a_\beta 2\sqrt{2}}$
Протяженность участка/сегмента террасы или периодичность ступеней		
$l_x = \frac{c_x}{f_x} \left(\frac{\delta_x^a}{a_x} - \frac{\delta_x^b}{b_x} \right) = \frac{c_x}{6f_x} = \frac{1}{6} p_x$		
Протяженность участка/сегмента террасы, после/перед которым появляется наклонная дислокация несоответствия (двойной шаг в направлении z)		
$\bar{l}_x = \frac{c_x}{f_x} \left(\frac{2\delta_x^a}{a_x} - \frac{\delta_x^b}{b_x} \right) = \frac{2}{3} \frac{c_x}{f_x} = \frac{2}{3} p_x$		
Период наклонных дислокаций несоответствия		
$\bar{p}_x = \frac{c_x c_z}{f_x f_z b_z} \left(\frac{\delta_x^a}{a_x} - \frac{\delta_x^b}{b_x} \right) + \frac{c_x}{f_x} \frac{\delta_x^a}{a_x} = l_x \left(\frac{1}{f_z} - \frac{1}{2} \right) + \delta_x^a \left(\frac{1}{f_x} + \frac{1}{2} \right) = \frac{p_x p_z}{6b_z} + \frac{p_x}{2}$		

на поверхностях, перпендикулярных направлению x (на площадках yz), определяется из соотношения

$$E_x^Z = \left[\frac{\mu c_z^2}{2\pi^2(1-2\nu)d} \right] F(\bar{\beta}_x), \quad (4)$$

где $\nu = (\nu_\alpha + \nu_\beta)/2$ — усредненный коэффициент Пуассона, $d \approx c_z$,

$$F(\bar{\beta}_x) = 1 + \bar{\beta}_x - \sqrt{1 + \bar{\beta}_x^2} - \bar{\beta}_x \ln \left[2\bar{\beta}_x \sqrt{1 + \bar{\beta}_x^2} - 2\bar{\beta}_x^2 \right], \quad (5)$$

$$\bar{\beta}_x = \frac{\pi d(1-2\nu)\lambda}{3\bar{p}_x \mu}. \quad (6)$$

Величина энергии Γ зависит от \bar{E}_y^P — удельной энергии «плоского» участка границы, содержащего межфазные c -дислокации, которые компенсируют несоответствие межатомных расстояний в направлении y и расположены на расстоянии p_y друг от друга. Величины \bar{E}_y^P и Γ вычисляются по следующим формулам:

$$\bar{E}_y^P = \frac{\mu c_y^2}{4\pi^2 d} F(\beta_y), \quad d \approx c_z, \quad (7)$$

$$F(\beta_y) = 1 + \beta_y - \sqrt{1 + \beta_y^2} - \beta_y \ln \left[2\beta_y \sqrt{1 + \beta_y^2} - 2\beta_y^2 \right], \quad (8)$$

$$\beta_y = \frac{2\pi d\lambda}{\mu\rho_y} \approx f_y \frac{2\pi\lambda}{\mu}, \quad d \approx c_y, \quad (9)$$

$$\Gamma = \overline{E}_y^P(\beta_y) \frac{c_x}{l_x}. \quad (10)$$

Из представленных зависимостей видно, что для оценки величины удельной энергии полугогерентной межфазной границы необходимо знать параметры решеток, значения модулей сдвига и коэффициентов Пуассона α - и β -фаз сплава. Поскольку как параметры решеток сопрягающихся фаз, так и их упругие свойства зависят от температуры, изменение температуры обработки будет сопровождаться изменением удельной энергии межфазной границы.

3. ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ИЗМЕНЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ РЕШЕТОК, ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ И УПРУГИЕ СВОЙСТВА α - И β -ФАЗ СПЛАВА ВТ6

3.1. Изменение параметров решеток и состава фаз сплавов титана при нагреве

На рис. 3 представлены температурные зависимости параметров a_α и c_α ГПУ-решетки α -фазы и параметра a_β ОЦК-решетки β -фазы титана и легированных титановых сплавов, полученные методами высокотемпературных рентгеновских исследований в работах [1, 3, 35–38].

Видно, что параметры решетки α -фазы растут линейно с повышением температуры от комнатной до температуры полного полиморфного превращения. Коэффициенты линейного термического расширения $K_{a(\alpha)}$ и $K_{c(\alpha)}$ в направлениях a и c составляют соответственно $(9.7\text{--}10.5) \cdot 10^{-6} \text{ 1/}^\circ\text{C}$ и $(12.6\text{--}14.5) \cdot 10^{-6} \text{ 1/}^\circ\text{C}$. Параметр решетки β -фазы увеличивается линейно при нагреве от комнатной температуры примерно до 600°C (а также при температурах однофазной β -области, где $K_{a(\beta)} = 13.6 \cdot 10^{-6} \text{ 1/}^\circ\text{C}$ [38]). В интервале температур $20\text{--}600^\circ\text{C}$ коэффициент $K_{a(\beta)}$ β -фазы составляет $(7.8\text{--}9.2) \cdot 10^{-6} \text{ 1/}^\circ\text{C}$. Нагрев от 600°C до температуры полного полиморфного превращения приводит к более быстрому увеличению параметра решетки a_β .

«Кажущийся коэффициент линейного расширения» возрастает почти в 6 раз, как следует из работ [35–37, 39, 40]. Авторы этих работ показали, что диффузионное превращение $(\alpha + \beta) \rightarrow \beta$ интенсивно протекает в легированных сплавах титана при нагреве (со скоростями от 2 до 100°C/мин) выше 600°C и сопровождается сравнительно слабым изменением химического состава α -фазы и значительным

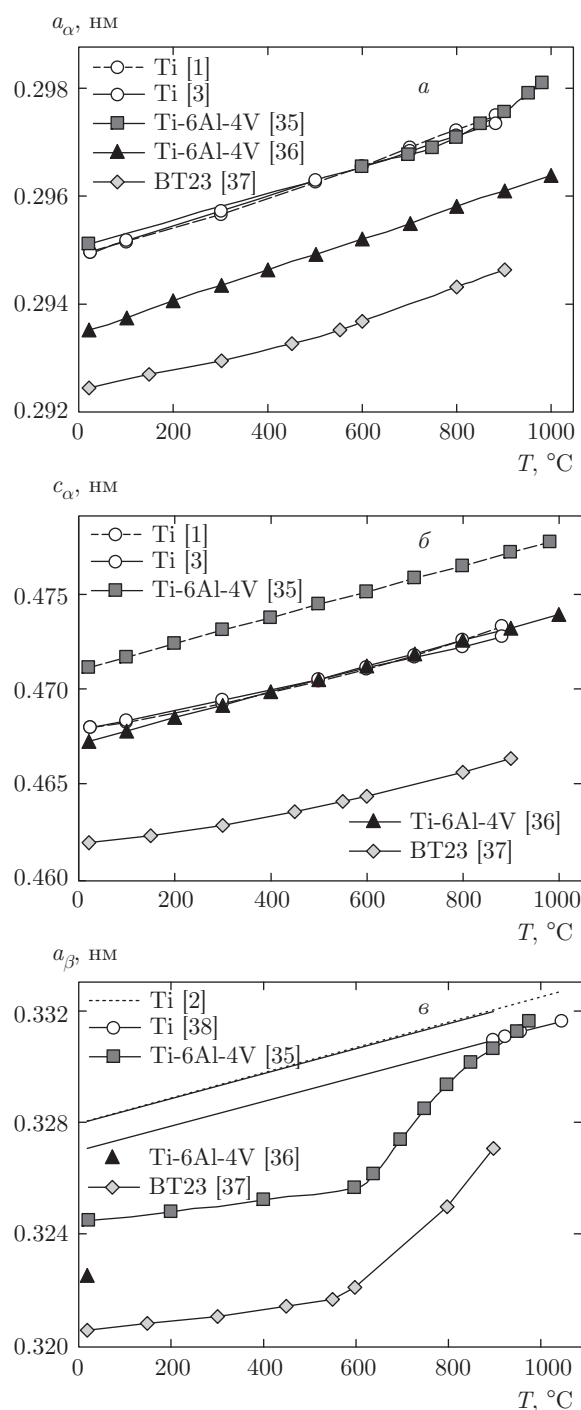


Рис. 3. Влияние температуры нагрева на изменение параметров решеток фаз в сплавах титана: а — параметра a_α ГПУ-решетки; б — параметра c_α ГПУ-решетки; в — параметра a_β ОЦК-решетки

Таблица 2. Параметры решеток [35] и упругие характеристики α - и β -фаз в сплаве ВТ6 при температурах 600–975 °С

T , °С	600	700	800	900	975
V в β -фазе, % масс.	15.4	12.4	9.4	6.4	4.2
a_α , нм	0.2967	0.2969	0.2972	0.2977	0.2983
c_α , нм	0.4752	0.4758	0.4765	0.4772	0.4777
a_β , нм	0.3257	0.3274	0.3294	0.3307	0.3316
ν_α	0.357	0.364	0.372	0.379	0.385
ν_β	0.375	0.377	0.379	0.381	0.382
μ_α , ГПа	33.5	31.1	28.7	26.3	24.5
μ_β , ГПа	24.3	23.6	22.8	22.1	21.6

изменением состава β -фазы: концентрация алюминия в β -фазе возрастает, а концентрация β -стабилизаторов уменьшается в 2–4 раза. Последнее обстоятельство объясняет «быстрое» увеличение параметра решетки β -фазы при $T > 600$ °С, так как большинство β -стабилизаторов, растворенных в β -фазе, уменьшает ее параметр решетки [3]. В частности, согласно экспериментальным данным [35], при нагреве сплава Ti-6Al-4V (аналог сплава ВТ6) от 600 до 975 °С содержание ванадия в β -фазе уменьшилось с 15.4 до 4.2 %, а содержание алюминия увеличилось с 2.9 до 6 % по массе. При этом α -фаза содержала около 6.7 % Al и 1.4 % V. При диффузионном превращении в ходе охлаждения от температуры однофазной β -области следует ожидать развития обратных процессов.

Для оценок удельной межфазной поверхностной энергии в сплаве ВТ6 в данной работе использовались результаты высокотемпературных измерений параметров a_α и a_β , полученные в работе [35]. Параметр c_α в этой работе, к сожалению, определен только при комнатной температуре, поэтому при температурах 600–975 °С параметр c_α рассчитывали, принимая значение $K_{c(\alpha)} = 14.48$, которое было получено экспериментально для этого же сплава в работе [36]. Значения параметров решетки, использованные для расчетов, приведены в табл. 2. Принимая, что содержание ванадия в β -фазе при нагреве от 600 до 975 °С изменялось линейно, была выполнена оценка концентрации ванадия в β -фазе при различных температурах, результаты которой даны в

табл. 2.

Существенные различия в изменении химического состава α - и β -фаз при нагреве и охлаждении приводят не только к разной скорости изменения параметров решетки фаз и, следовательно, объемных эффектов превращения [35–37, 39–41], но и к различиям в изменении упругих свойств решеток при изменении температуры превращения.

3.2. Влияние температуры и химического состава фаз на изменение их упругих свойств

Температурные зависимости упругих модулей поликристаллов и постоянных жесткости C_{ij} монокристаллов экспериментально измерены только для технически чистого α -титана [32–44]. Формальное описание зависимостей $\mu_\alpha(T)$ предложено в работах [44, 45]. Результаты оценки модуля сдвига в них практически одинаковы. В настоящей работе величины μ_α и ν_α при различных температурах определяли по уравнениям [44]

$$\mu_\alpha = \mu_{0\alpha} - 0.024T, \quad (11)$$

$$\nu_\alpha = (10^3 \nu_{0\alpha} + 0.076T) \cdot 10^{-3}, \quad (12)$$

где $\mu_{0\alpha}$ и $\nu_{0\alpha}$ — модуль сдвига и коэффициент Пуассона при 0 °С, T — температура, °С. Постоянные C_{ij} α -фазы сплава Ti-6Al-4V были получены методом моделирования в работах [47, 48] (табл. 3). Поскольку данные работы [48] отражают экспериментально наблюдаемый рост упругих модулей α -фазы титана на 8–10 % при растворении в ней примерно 6 % алюминия [18], они были использованы для оценок величин $\mu_{0\alpha}$ и $\nu_{0\alpha}$ в настоящей работе. Значения μ и ν были рассчитаны по приближениям Фойгта – Ройса – Хилла [52], которые устанавливают связь между постоянными жесткости C_{ij} кристалла и средними значениями упругих модулей изотропного кристалла. Рассчитанные значения μ и ν для α -фазы при 20 °С приведены в табл. 3, а μ_α и ν_α при температурах 600–975 °С — в табл. 2.

Постоянные жесткости C_{ij} монокристаллов β -фазы чистого титана были определены при 1000 °С [49, 50] и 1020 °С [51]; их величины существенно зависели от метода измерения (см. табл. 3). Упругие модули поликристаллического β -титана измеряли в интервале температур 900–1000 °С [43] и 900–1100 °С [44]. Авторы работ [43, 44] отмечают, что упругие свойства β -титана практически не зависят от температуры. На основании этого в настоящей работе величины μ_β и ν_β также считали

Таблица 3. Упругие модули α - и β -фаз сплавов титана

ν	μ , ГПа	C_{11} , ГПа	C_{12} , ГПа	C_{13} , ГПа	C_{33} , ГПа	C_{44} , ГПа	$\frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$	Сплав	Ссылки
ГПУ									
0.322	43.36	162.4	92.0	69.0	180.7	46.7	1.33	Ti	[42]
0.319	44.33	163.6	92.3	67.9	185.2	47.7	1.34	Ti	[43]
0.342	41.00	—	—	—	—	—	—	Ti поликрист.	[44]
0.323	45.30	174.0	95.0	72.0	190.0	45.0	1.14	Ti*	[46]
0.298	50.23	172.0	82.0	68.0	191.0	51.0	1.13	Ti*	[46]
0.387	28.20	143.0	110.0	90.0	177.0	40.0	2.42	Ti-6Al-4V*	[47]
0.311	47.85	170.0	92.0	70.0	192.0	52.0	1.33	Ti-6Al-4V*	[48]
ОЦК									
0.399	16.41	99.0	85.0	—	—	33.6	4.80	Ti**	[49]
0.387	18.08	97.7	82.7	—	—	37.5	5.00	Ti**	[50]
0.402	20.89	134.0	110.0	—	—	36.0	3.00	Ti**	[51]
0.391	20.70	—	—	—	—	—	—	Ti поликрист.**	[43]
0.420	17.50	—	—	—	—	—	—	Ti поликрист.**	[44]
0.370	27.56	140.0	99.5	—	—	39.7	1.96	Ti-29.4V ат. %	[18]
0.362	30.34	149.0	100.5	—	—	40.9	1.69	Ti-38.5V ат. %	[18]
0.358	34.13	167.6	105.1	—	—	41.3	1.32	Ti-53V ат. %	[18]
0.355	38.47	192.3	111.1	—	—	41.5	1.02	Ti-73V ат. %	[18]
0.385	20.65	111.5	91.2	—	—	39.1	3.85	Ti экстр. на 0%V	
0.373	36.86	130.0	90.0	—	—	65.0	3.25	Ti-6Al-4V*	[47]
0.317	28.27	138.0	108.0	—	—	51.0	3.40	Ti-6Al-4V*	[48]

Примечания: * C_{ij} определены методом моделирования; ** C_{ij} и μ определены экспериментально при 1000 °C [43, 44, 49, 50] и 1020 °C [51]; остальные значения C_{ij} получены экспериментально при комнатной температуре.

температурно-независимыми. При этом была сделана попытка учесть влияние содержания ванадия на μ_β и ν_β . Для этого были использованы значения C_{ij} , экспериментально полученные для монокристаллов β -титана с содержанием ванадия 29–73 ат. % (30.7–74.2% по массе) после их охлаждения в соляном растворе [2, 5, 18] (см. табл. 3). Экстраполяция этих данных к нулевому содержанию ванадия дает значения C_{ij} близкие к чистому титану при 1000 °C [49, 50] (см. табл. 3) и позволяет оценить C_{ij} , μ_β и ν_β β -фазы с заданной концентрацией ванадия (см.

табл. 2). Определенное таким образом значение μ_β оказалось примерно на 15% меньше, а значение ν_β — на 15% больше по сравнению с данными, полученными методом моделирования [48] для β -фазы с содержанием ванадия 15.4%.

Выполненный анализ позволил получить исходные данные, необходимые для расчета величины удельной межфазной поверхностной энергии в сплаве ВТ6 при различных температурах, которые сведены в табл. 2.

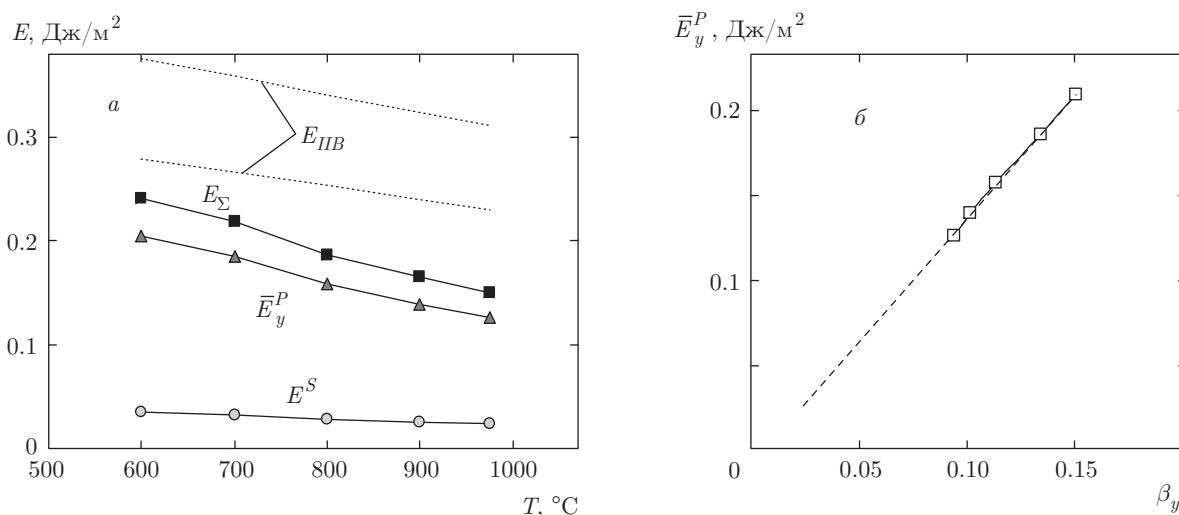


Рис. 4. а) Влияние температуры обработки сплава ВТ6 на величину удельной энергии E_{Σ} межфазной β/α -границы и ее составляющих E^S и \bar{E}_y^P . б) Влияние параметра β_y на величину удельной энергии \bar{E}_y^P

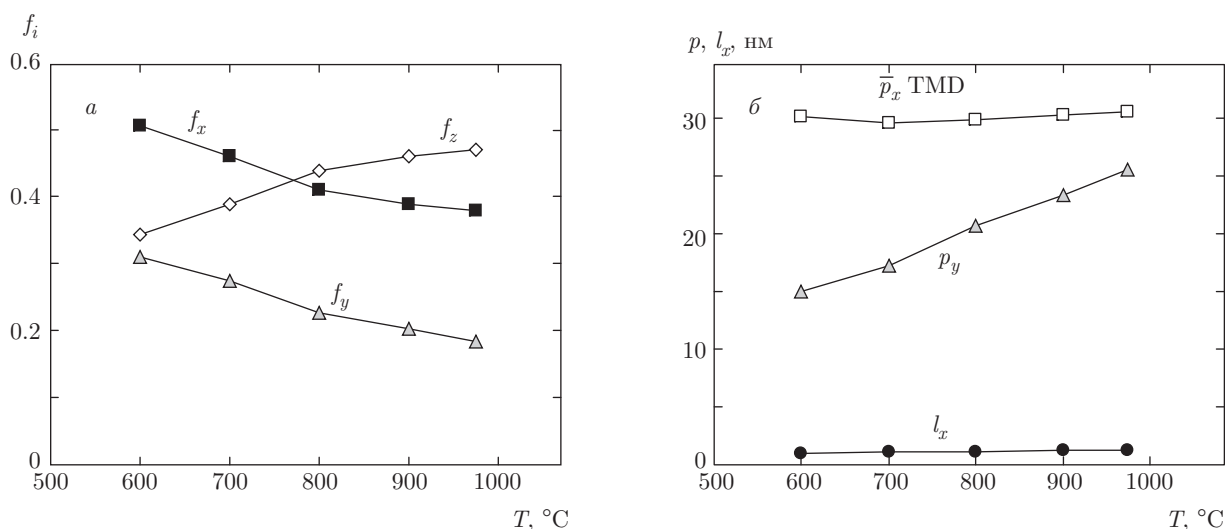


Рис. 5. Влияние температуры обработки сплава ВТ6 на величину несоответствия межатомных расстояний в направлениях x , y и z (а) и на расстояния между дислокациями и ступенями, компенсирующими несоответствия на межфазной β/α -границе (б)

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ОЦЕНКИ УДЕЛЬНОЙ МЕЖФАЗНОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты оценки удельной энергии E_{Σ} межфазной β/α -границы в сплаве ВТ6 и ее компонент \bar{E}_y^P и E^S по формулам (1)–(10) с использованием данных из табл. 2 представлены на рис. 4а. Полученные значения величины E_{Σ} и ее компонент можно считать вполне разумными по следующим причинам.

Они удовлетворительно согласуются с результатами оценок удельных энергий межфазной β/α -

границы в сплаве Ti-5Al-2.5Sn-0.05Fe, выполненных фазово-полевым методом моделирования [16], и ступенчатых границ между ГЦК- и ОЦК-фазами в сплавах на основе железа и никеля [14].

Они адекватно отражают физические представления о строении межфазной границы. Например, при увеличении расстояния p_y между s -дислокациями несоответствия величина β_y , которая характеризует «плотность» дислокаций несоответствия с «вектором Бюргерса» s_y , будет стремиться к нулю [23]; следовательно, будет стремиться к нулю и энергия \bar{E}_y^P , обусловленная присутствием

c -дислокаций несоответствия (рис. 4б).

Основной вклад в удельную энергию E_{Σ} межфазной границы вносит составляющая \overline{E}_y^P (около 85%), обусловленная присутствием c -дислокаций, компенсирующих несоответствие межатомного расстояния f_y . Удельная энергия E^S , связанная с компенсацией несоответствий f_x и f_z за счет образования структурных ступенек и наклонных дислокаций несоответствия, мала и увеличивается с понижением температуры гораздо медленнее, чем \overline{E}_y^P (см. рис. 4а). Различия в изменении составляющих \overline{E}_y^P и E^S с понижением температуры от 975 до 600 °С, очевидно, связаны с разницей в изменении величин несоответствия и, следовательно, периодичности появления дислокаций и ступеней на межфазной границе. В указанном интервале температур величина f_y возрастает (рис. 5а), и расстояние p_y между c -дислокациями несоответствия сокращается примерно в 1.7 раз (рис. 5б). При этом f_x увеличивается в 1.3 раза, а f_z уменьшается в 1.4 раза (рис. 5а), в результате чего периодичность l_x ступеней и расстояние \overline{p}_x между наклонными дислокациями несоответствия (tilt misfit dislocations, TMD) изменяются мало (рис. 5б).

С понижением температуры от 975 до 600 °С удельная энергия ступенчатой межфазной границы в сплаве ВТ6 возрастает от 0.15 до 0.24 Дж/м² (см. рис. 4а), приближаясь к энергии некогерентной границы E_{IIB} (incoherent interphase boundary)¹⁾. Рост E_{Σ} прежде всего связан с обогащением β -фазы ванадием, которое происходит не только при понижении температуры обработки в пределах двухфазной ($\alpha + \beta$)-области, но и в ходе длительных выдержек сплава при постоянных температурах, что обеспечивает приближение составов фаз к равновесному. Согласно работам [1, 3, 35, 53], равновесное содержание ванадия в β -фазе сплава Ti-6Al-4V при 600 °С составляет около 30% по массе, тогда как по результа-

там эксперимента [35], которые использовались для оценки E_{Σ} , оно вдвое меньше, около 15.4%. Обогащение β -фазы ванадием будет сопровождаться увеличением модуля сдвига (примерно на 12%), уменьшением параметра решетки β -фазы (примерно на 1%) и ростом E_{Σ} примерно на 30% — до 0.3 Дж/м², т. е. величина E_{Σ} может достигнуть уровня энергии некогерентной границы, и свойства межфазных границ (диффузионная проницаемость, взаимодействие с дислокациями и др.) могут существенно измениться.

Результаты выполненных оценок дают дополнительную информацию для понимания причин стабильности/нестабильности микроструктуры и свойств титановых сплавов при внешних воздействиях. Например, еще раз подтверждается необходимость деформации для преобразования пластинчатой микроструктуры в глобулярную. Видно (см. рис. 4а), что при относительно высоких температурах, обеспечивающих достаточную скорость развития диффузионных процессов, энергия межфазной β/α -границы низкая, и появление термодинамического стимула для развития сфероидизации пластинчатых частиц при отжиге маловероятно. При относительно низких температурах (не выше 600 °С) и длительных выдержках строение межфазных β/α -границ может измениться с полукотогерентного на некогерентное, что отрицательно повлияет на характеристики ползучести и длительной прочности.

Полученные данные открывают дополнительные возможности для контролируемого изменения структуры и свойств межфазных границ. Этому направлению материаловедения (grain boundary engineering) в последнее время уделяется большое внимание. Следует отметить, что влияние на энергию межфазной границы такого важного фактора, как химический состав сплава и фаз, может быть более сложным, чем рассмотрено в данной работе. Развитие этого направления представляет интерес как для лучшего понимания строения межфазных границ, так и для улучшения свойств сплавов.

5. ВЫВОДЫ

Результаты теоретического исследования влияния температуры на величину удельной энергии межфазной β/α -границы, выполненного с учетом литературных данных об изменении параметров решеток и упругих свойств фаз сплава ВТ6, показали, что

¹⁾ Поскольку удельная энергия некогерентной межфазной границы близка к энергии нерегулярной большеугловой межзеренной границы ($\theta \geq 0.26$ рад) [13, 14, 22], оценка величины E_{IIB} была выполнена по уравнению Рида–Шокли $\gamma = [\mu b \theta / 4\pi(1 - \nu)](A - \ln \theta)$, где γ — удельная энергия границы наклона, b — вектор Бюргерса, θ — угол разориентировки границы ($0 < \theta \leq 0.26$ рад или $0 < \theta \leq 15^\circ$), A — безразмерный параметр, который обычно принимают равным от -0.347 до 0 [6, 16, 22]. Температурные зависимости $E_{IIB} = \gamma$ при $\theta = 0.26$ рад, $A = -0.347$ и $A = 0$ были получены с использованием данных (μ , ν и $b = a_\alpha$) из табл. 2 и показаны на рис. 4а пунктирными линиями. (Заметим, что верхняя оценка обеспечивает лучшее соответствие экспериментальных и расчетных значений для большеугловых границ зерен в ГЦК-металлах.)

1) удельная энергия межфазной β/α -границы в сплаве ВТ6 повышается от 0.15 до 0.24 Дж/м² при снижении температуры обработки от 975 до 600 °С;

2) энергия ступенчатой межфазной границы в основном зависит от плотности краевых дислокаций, компенсирующих несоответствие межатомных расстояний в направлении $[0001]_{\alpha} \parallel [110]_{\beta}$; энергия, связанная с образованием структурных ступенек и наклонных дислокаций несоответствия, обеспечивающих сопряжение фаз в направлениях $[\bar{2}110]_{\alpha} \parallel [1\bar{1}1]_{\beta}$ и $[0\bar{1}10]_{\alpha} \parallel [\bar{1}12]_{\beta}$, составляет около 15% от суммарной;

3) уменьшение параметра решетки β -фазы, обусловленное увеличением содержания ванадия, приводит к заметному уменьшению расстояния между краевыми дислокациями несоответствия и слабо влияет на протяженность структурных ступеней и расстояние между наклонными дислокациями несоответствия.

ЛИТЕРАТУРА

- С. П. Белов, М. Я. Брун, С. Г. Глазунов и др., *Металловедение титана и его сплавов*, под ред. С. Г. Глазунова, Б. А. Колачева, Металлургия, Москва (1992).
- G. Lütjering and J. C. Williams, *Titanium — Engineering Materials and Processes*, Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg (2007).
- У. Цвиккер, *Титан и его сплавы*, Металлургия, Москва (1979).
- S. L. Semiatin and D. U. Furrer, in *ASM Handbook, Fundamentals of Modeling for Metals Processing*, ed. by S. L. Semiatin and D. U. Furrer, Materials Park, OH: ASM International (2009), Vol. 22, p. 536.
- D. Banerjee and J. C. Williams, *Acta Mater.* **61**, 844 (2013).
- S. Zherebtsov, G. Salishchev, and S. L. Semiatin, *Phil. Mag. Lett.* **90**, 903 (2010).
- S. Suri, G. B. Viswanathan, T. Neeraj et al., *Acta Mater.* **47**, 1019 (1999).
- M. Cabibbo, S. Zherebtsov, S. Mironov, and G. Salishchev, *J. Mater. Sci.* **48**, 1100 (2013).
- S. Zherebtsov, M. Murzinova, G. Salishchev, and S. L. Semiatin, *Acta Mater.* **59**, 4138 (2011).
- С. В. Жеребцов, Деформация и разрушение материалов № 10, 16 (2012).
- С. З. Бокштейн, *Диффузия и структура металлов*, Металлургия, Москва (1973).
- M. I. Mazurski and G. A. Salishchev, *Phys. Stat. Sol. (b)* **188**, 653 (1995).
- Physical Metallurgy*, Vol. 2, ed. by R. W. Cahn and P. Haasen, Elsevier Sci., North-Holland (1996).
- Physical Metallurgy*, ed. by D. E. Laughlin and K. Ноно, Newnes (2014).
- А. Келли, Р. Никлсон, *Дисперсионное твердение. Успехи физики металлов*, пер. с англ. под ред. Л. К. Гордиенко, Е. Н. Власовой, Металлургия, Москва (1966).
- R. Shi, N. Ma, and Y. Wang, *Acta Mater.* **60**, 4172 (2012).
- A. Dehghan-Manshadi and R. J. Dippenaar, *Mater. Sci. Eng. A* **528**, 1833 (2011).
- Е. В. Коллингз, *Физическое металловедение титановых сплавов*, пер. с англ. под ред. Б. И. Веркина, В. А. Москоленко, Металлургия, Москва (1988).
- T. Ozaki, H. Matsumoto, S. Watanabe, and S. Hanada, *Mater. Trans.* **45**, 2776 (2004).
- J. H. van der Merwe, *Proc. Phys. Soc. A* **63**, 616 (1950).
- В. М. Косевич, В. М. Иевлев, Л. С. Палатник, А. И. Федоренко, *Структура межкристаллитных и межфазных границ*, Металлургия, Москва (1980).
- А. Келли, Г. Гровс, *Кристаллография и дефекты в кристаллах*, пер. с англ. под ред. М. П. Шаскольской, Мир, Москва (1974).
- G. J. Shiflet, *Mater. Sci. Eng.* **81**, 61 (1986).
- J. P. Hirth, G. Spannos, M. G. Hall, and H. I. Aaronson, *Acta Mater.* **46**, 857 (1998).
- T. Furuhashi, H. J. Lee, E. S. K. Menon, and H. I. Aaronson, *Metall. Trans. A* **21**, 1627 (1990).
- T. Furuhashi, T. Ogawa, and T. Maki, *Phil. Mag. Lett.* **72**, 175 (1995).
- R. C. Pond, S. Celotto, and J. P. Hirth, *Acta Mater.* **51**, 5385 (2003).
- R. C. Pond, X. Ma, Y. W. Chai, and J. P. Hirth, *Dislocations in Solids* **13**, 225 (2007).
- S. Nag, R. Banerjee, R. Srinivasan et al., *Acta Mater.* **57**, 2136 (2009).
- T. Furuhashi, J. M. Howe, and H. I. Aaronson, *Acta Metall. Mater.* **39**, 2873 (1991).

31. N. Miyano, K. Ameyama, and G. C. Weatherly, *Mater. Trans.* **43**, 1547 (2002).
32. M. G. Hall, H. I. Aaronson, and K. R. Kinsma, *Surf. Sci.* **31**, 257 (1972).
33. J. H. van der Merwe, G. J. Shiflet, and P. M. Stoop, *Metall. Trans. A* **22**, 1165 (1991).
34. J. H. van der Merwe and G. J. Shiflet, *Acta Metal. Mater.* **42**, 1173 (1994).
35. J. W. Elmer, T. A. Palmer, S. S. Babub, and E. D. Specht, *Mater. Sci. Eng. A* **391**, 104 (2005).
36. S. Malinov, W. Sha, Z. Guo et al., *Mater. Character.* **48**, 279 (2002).
37. А. А. Ильин, В. М. Майстров, В. В. Засыпкин, *Металлофизика* **8**(6), 112 (1986).
38. O. N. Senkov, B. C. Chakoumakos, J. J. Jonas, and F. H. Froes, *Mater. Res. Bull.* **36**, 1431 (2001).
39. P. Barriobero-Vila, G. Requena, T. Buslaps et al., *J. Alloys Comp.* **626**, 330 (2015).
40. A. K. Swarnakar, O. Van der Biest, and B. Baufeld, *J. Alloys Comp.* **509**, 2723 (2011).
41. А. А. Ильин, М. Ю. Коллеров, В. В. Засыпкин, В. М. Майстров, *Металловедение и термическая обработка металлов* № 1, 52 (1986).
42. E. S. Fisher and C. J. Renken, *Phys. Rev.* **135**, 2A, A482 (1964).
43. H. Ogi, S. Kai, H. Ledbetter et al., *Acta Mater.* **52**, 2075 (2004).
44. O. N. Senkov, M. Dubois, and J. J. Jonas, *Metall. Mater. Trans. A* **27**, 3963 (1996).
45. Г. Дж. Фрост, М. Ф. Эшби, *Карты механизмов деформации*, Металлургия, Челябинск (1989).
46. R. G. Hennig, T. J. Lenosky, D. R. Trinkle et al., *Phys. Rev. B* **78**, 054121 (2008).
47. A. M. Stapleton, S. L. Raghunathan, I. Bantounas et al., *Acta Mater.* **56**, 6186 (2008).
48. J. L. W. Warwick, J. Coakley, S. L. Raghunathan et al., *Acta Mater.* **60**, 4117 (2012).
49. E. S. Fisher and D. Dever, in *Science, Technology and Application of Titanium*, ed. by R. I. Jaffee and N. E. Promisel, Pergamon Press, Oxford, UK (1968), p. 373.
50. H. Ledbetter, H. Ogi, S. Kai et al., *J. Appl. Phys.* **95**, 4642 (2004).
51. W. Petry, A. Heimig, J. Trampenau et al., *Phys. Rev. B* **43**, 10933 (1991).
52. Т. Д. Шермергор, *Теория упругости микронеоднородных сред*, Наука, Москва (1977).
53. W. Sha and S. Malinov, *Titanium Alloys: Modelling of Microstructure, Properties and Applications*, Woodhead Publ. Lim. and CRC Press LLC (2009).