

基于JMatPro软件的TA15钛合金热物性能研究

温钟淳¹, 姜汇洋², 关峰¹, 郑建超¹, 贾志宏¹, 毕婧涵¹

1. 沈阳飞机工业(集团有限公司) 钛合金加工中心 辽宁沈阳 110850

2. 海装沈阳局驻沈阳地区第一军事代表室 辽宁沈阳 100850

摘要: 使用JMatPro软件对TA15钛合金的成分进行预测, 得到平衡条件下的热力学相图。通过对主相组元浓度变化进行分析, 得知其含量受中性元素的影响极小。通过计算TA15钛合金的热处理性能、马氏体转变过程、热物性能, 得到流变曲线、不同冷却速度的马氏体相图, 以及密度、热导率、电阻率、杨氏模量、比热容、热焓和膨胀系数等性能的变化曲线。在降温过程中, 冷却速度越快, 产物中马氏体相越多。结果表明: 细小的马氏体能提高材料的极限强度, 但会降低体模量、杨氏模量, 影响材料疲劳性能。因此, 在热处理时, 需要控制冷却方式来改变组织内的马氏体含量, 以保证零件达到性能要求。

关键词: 钛合金; 成分预测; 马氏体; 热物性能; 热处理

Study on hot matter properties of TA15 titanium alloy based on JMatPro software

WEN Zhongchun¹, JIANG Huiyang², GUAN Feng¹, ZHENG Jianchao¹, JIA Zhihong¹, BI Jinghan¹

1. Shenyang Aircraft Corporation, Shenyang 110850, Liaoning, China

2. The First Representative Office of Sea Outfit Shenyang Bureau in Shenyang Region, Shenyang 100850, Liaoning, China

Abstract: The composition of TA15 titanium alloy was predicted by JMatPro software, and the thermodynamic phase diagram under equilibrium conditions was obtained. Through the analysis of the change of the concentration of the main phase components, it is known that its content is very little affected by neutral elements. The heat treatment properties, martensitic transition process and thermal properties of TA15 titanium alloy were calculated, and the rheological curves, martensitic phase diagrams of different cooling rates, and the variation curves of density, thermal conductivity, resistivity, Young's modulus, specific heat capacity, heat enthalpy, expansion coefficient and other properties were obtained. During the cooling process, the faster the cooling rate, the more martensitic phases are in the product. Fine martensitic can improve the ultimate strength of the material, but it will reduce the body modulus and Young's modulus, and affect the fatigue performance of the material. Therefore, in heat treatment, it is necessary to control the cooling method to change the martensitic content in the tissue to ensure that the parts meet the performance requirements.

Keywords: titanium alloy; ingredient prediction; martensite; thermal properties; heat treatment

1 序言

随着航空器对材料性能、使用寿命的要求越来越

越严格, 钛合金因其高强度、耐热性、耐蚀性等优势, 在航空制造领域颇受青睐。不同类型钛合金的

特性也有所不同, α 型钛合金具有更为优异的力学性能, β 型钛合金则更易通过热处理强化, $\alpha + \beta$ 型表现出良好的综合能力^[1]。由于钛工业的发展逐渐成熟, 因此钛合金逐渐被应用到航空航天、生物医疗及电子器械等众多领域, 且可以利用如冷成形、等温锻造、焊接及激光增材等多种工艺进行加工。

TA15 (化学成分为Ti-6.5Al-2Zr-1Mo-1V) 是一种近 α 型钛合金, 具有良好的疲劳性能与焊接性能, 在航空航天领域中多用于制造飞机和发动机的承力结构件。在对其进行深入研究时, 如果仅通过试验测试则会造成极大的成本浪费, 同时将所有样本全部加工也是不现实的。因此, 模拟分析逐渐成为了一种新型的研究手段。王鲁等^[2]使用ThermoCalc与JMatPro软件对Nimonic105镍基合金进行了成分优化的设计研究, 通过降低CO、Cr和Mo元素含量有效地降低了组织中 μ 相的析出温度, 同时也可降低700℃时合金中 σ 相的析出倾向。郑亮等^[3]利用JMatPro软件计算GH4169+K418混合成分的热力学平衡相图, 得出其组成相主要为 γ 相、 γ' -Ni₃Al、

MC型碳化物及少量的M₂₃C₆碳化物、 μ 相和Ni₂M相等。在研究组元较多的合金时, 试验测试变得复杂且难以实施, 此时应用模拟预测的研究手段便尤为重要^[4]。武文璐等^[5]利用激光送粉增材技术打印了60组成分不同的试样, 将组织观察结果结合Back Propagation (BP) 神经网络模型的建立, 获得体成形Ti-xAl-yMo (2.0≤x≤7.5, 2.0≤y≤9.0) 合金成分与显微组织特征的定量关系。本文基于JMatPro软件针对TA15钛合金进行有关成分变化、热物性能的分析研究。

2 TA15钛合金热力学平衡相图分析

2.1 平衡凝固阶段分析

试验使用JMatPro软件对TA15钛合金进行有关热物性能的预测分析, 其化学成分见表1。将成分输入到热力学性质模块中, 温度区间为室温至液相线以上, 通过模拟计算得到TA15钛合金的热力学平衡相, 如图1所示。

该软件的计算遵循热力学原理, 以体系总吉布

表1 TA15钛合金化学成分 (质量分数) (%)

C	H	O	N	Al	Mo	V	Zr	Fe	Si	Ti
0.1	0.015	0.15	0.05	6.87	1.56	1.99	2.26	0.12	0.033	Bal

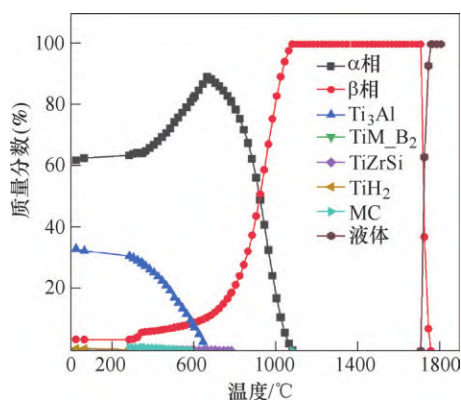


图1 TA15钛合金热力学平衡相

斯自由能达到最小值, 且组元*i*在各相中的化学势相等为平衡条件, 则

$$G_m = \sum_i X_i G_i^0 + RT \sum_i X_i \ln X_i + \sum_i \sum_j X_i X_j \sum_v \Omega_v (X_i - X_j)^v \quad (1)$$

从图1可看出, TA15钛合金的主相为 α -Ti、 β -Ti, 次生析出相主要为Ti₃Al钛铝化合物, 以及少量TiZrSi、TiH₂、TiM₂B₂等。TA15钛合金^[6]的液相线

温度为1706.63℃, 当合金的凝固过程开始时随着温度降低, β 相在短时间内快速形核结晶。当温度低于 β 转变点(1085℃)进入两相区时^[7], 开始逐渐析出 α 相。由于发生固态相变时存在的界面能要大于 β 相形核时的表面能, 所以 β 相转变为 α 相的速度低于其自身形核速度。当温度<800℃时, 开始析出少量金属化合物, 此时 α 相含量已超过 β 相。最终, 室温条件下平衡相组成为61.91% α -Ti+33.29%Ti₃Al+3.66% β -Ti+0.72%TiH₂+0.22%TiM₂B₂+0.21%TiZrSi。值得注意的是, 即使TA15钛合金属于近 α 型, 在平衡凝固条件下也不存在 α 单相区。

2.2 组元浓度变化分析

为了进一步分析 β 相→ α 相过程受组元影响的机制, 计算600~1200℃区间内 α 相稳定元素Al与 β 相稳定元素Mo含量的变化, 如图2所示。由图2可知, Al元素在670℃时熔解度最高, 而Mo元素1084℃以上熔解度达到100%。通过与上文计算结果对比, 在665℃时 α 相含量达到峰值, 1082℃以上只存在 β

相, 温度相差无几。这说明在钛合金中, 平衡凝固时主相的含量取决于其稳定元素的溶解度, 中性元素或其他组元产生的影响几乎可以忽略不计^[8]。

3 TA15钛合金的热处理参数计算

3.1 流变曲线计算

在TA15钛合金进行热处理的过程中, 随着温度升高, 金属逐渐软化^[9]。软化态是固液间过渡态, 在此过程中属于液态物质的特性逐渐显现。液态金属的黏性随温度升高而降低, 变形速度加快。当金属处于软化态时, 升温会导致变形过程所需要的力越来越小。使用软件计算并绘制0.1m/s应变速率下的流变曲线, 获得温度与应力的相关数据^[10], 如图3所示。从图3可看出, 温度从25℃上升到1400℃的过程中, 达到相同应变程度所需的力越来越小。当热处理温度从600℃上升到800℃时, 应力值大幅度下降, 200MPa左右便能使零件开始产生变形。由于钛合金在退火时温度通常超过800℃, 这表示在热处理过程中需要使用工装夹持零件起固定控形的作用。

而当温度持续上升到1000℃时, 即钛合金固溶温度^[11]附近, 材料黏度显著降低, 形变过程更易发生, 进一步说明了约束零件的必要性。计算不同应变速率下的流变曲线作为仿真模拟技术的理论基础, 进行全流程下的变形预测, 能为生产工作提供有效的技术指导^[12, 13]。

3.2 热处理温度对力学性能的影响

使用软件计算TA15钛合金^[14]在500℃、600℃、700℃和800℃加热时^[15], 计算屈服强度、抗拉强度、硬度与晶粒尺寸的关系, 如图4所示。从图4可看出, 随着热处理温度升高, 屈服强度、极限强度和硬度均表现出升高趋势。而随着晶粒尺寸变大, 在1~5μm内性能急速下降, 在5~20μm区间内降低趋势逐渐缓慢。这说明晶粒越大, 组织内晶界数量少, 对滑移运动的阻碍减小, 导致强度下降。

3.3 马氏体转变计算

钛合金中的马氏体相是由于冷却速度过快, 各组元来不及扩散而形成的过渡相^[16]。由β相沿着惯习面切变形成, 是β相→α相的中间产物^[12]。包括α'

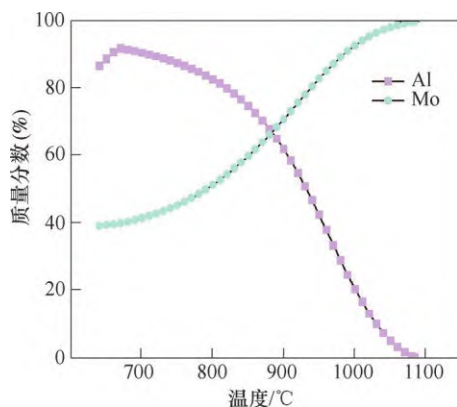


图2 组元浓度变化相

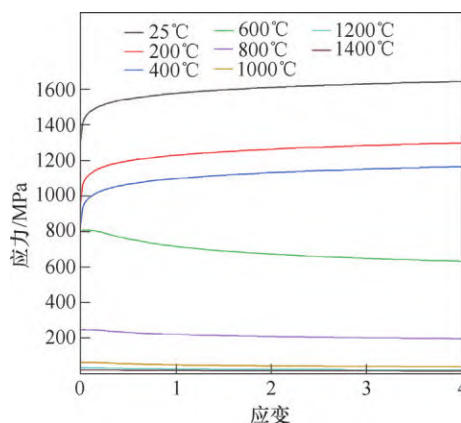
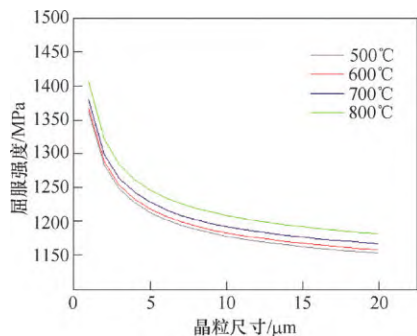
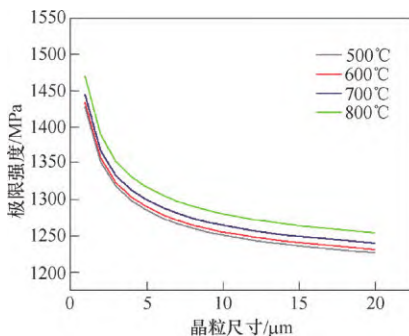


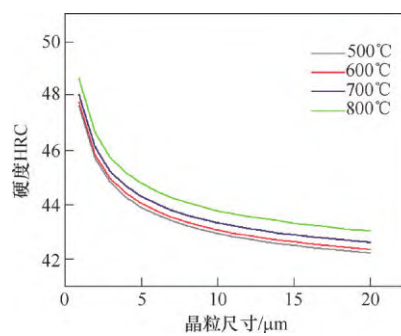
图3 流变曲线计算



a) 屈服强度



b) 极限强度



c) 硬度

图4 不同温度下材料性能变化

相、 α'' 相及 ω 相等，其中 α' 相是 α 相的次级产物， α'' 相是 α' 相与 β 相的中间相，而 ω 相则是淬火产生的过冷 β 相脱溶形成的。由于凝固时间短，因此马氏体的晶粒细小，通常为针状或细条状。受到外力时，组织中的马氏体对晶面的滑移起到阻碍作用，提高极限强度同时降低塑性，然而这会导致材料极易发生脆性断裂。由此可见，钛合金中马氏体是影响性能的重要因素，因此针对TA15钛合金计算马氏体含量与冷却速度的关系，能有效避免过量马氏体引起性能恶化^[17]。

用软件计算从1400℃分别在50℃/s、100℃/s、200℃/s和400℃/s的冷却速度下马氏体的析出量，其晶粒尺寸设为1 μ m。从图5可看出，以50℃/s速度冷却时，组织内无任何马氏体出现。在 G_m 降低的驱动下，原子充分扩散， β 相有足够时间完成晶格重构。当冷却速度提高到100℃/s时，少量 β 相于485℃时开始发生马氏体化，这是由于此时 β 相晶格中没有足够的溶质原子能够继续促使其向 α 相继续转变。室温平衡条件下组织内马氏体含量为27.85%， α 相含量为72.15%。随着冷却速度继续提高到200℃/s时， β 相变的产物为含量相近的 α 相与马氏体， M_s 为670℃。

在385℃时，组织内马氏体含量为46.39%， α 相含量为53.61%，无 β 相存在，此时相变已结束。当冷却速度提高到400℃/s，此时溶质原子没有充足的时间运动，固态相变的类型以切变反应为主。于430℃时结束相变过程，组织内马氏体含量为65.71%， α 相含量为34.29%，同样无 β 相残留。

应用激光沉积技术，在不同激光功率下打印试样，在OM显微镜下观察显微组织，结果如图6所示。当激光功率由1000W提高至5000W时，由于能量密度逐渐变大，因此冷却速度逐渐变小。从图6可看出，黑色的针状马氏体逐渐减少。至此可知，冷却速度越快，马氏体化趋势越强^[18]。由于马氏体含量是衡量钛合金力学性能的重要指标，因此将软件计算结果作为热加工制度的依据，可节省大量试验测试的时间成本。

使用软件计算不同冷却速度下TA15钛合金^[19]的部分性能（见图7），与上文计算马氏体转变时选择的参数相同，冷却速度分别为50℃/s、100℃/s、200℃/s和400℃/s。从图7可看到，合金密度、体模量的变化趋势较为明显，随着冷却速度提高而降低，而杨氏模量的变化则不显著。由图7a可知，以

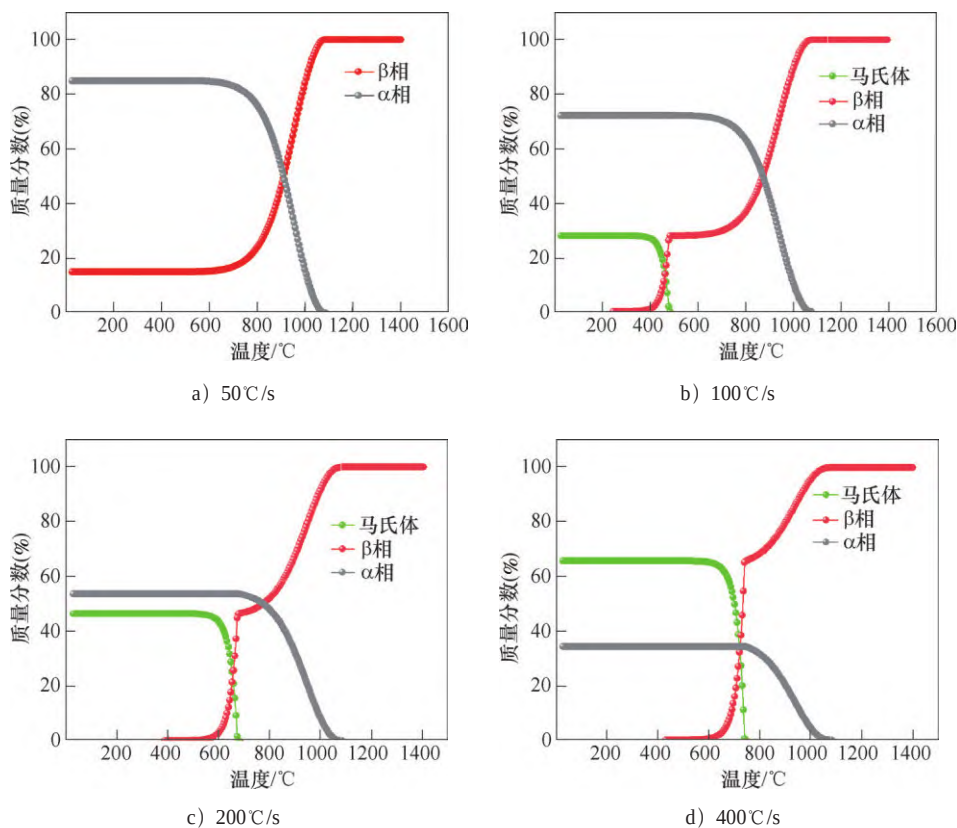


图5 不同冷却速度下的马氏体转变相

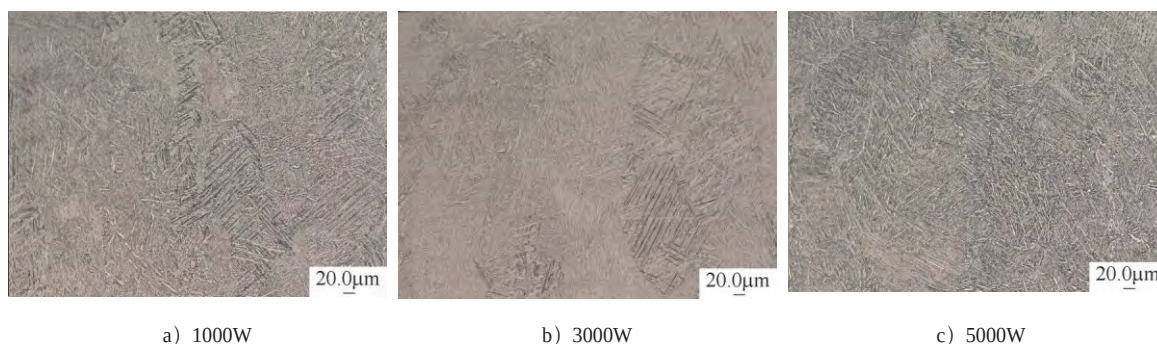


图6 不同激光功率下增材制造试样的显微组织 (500×)

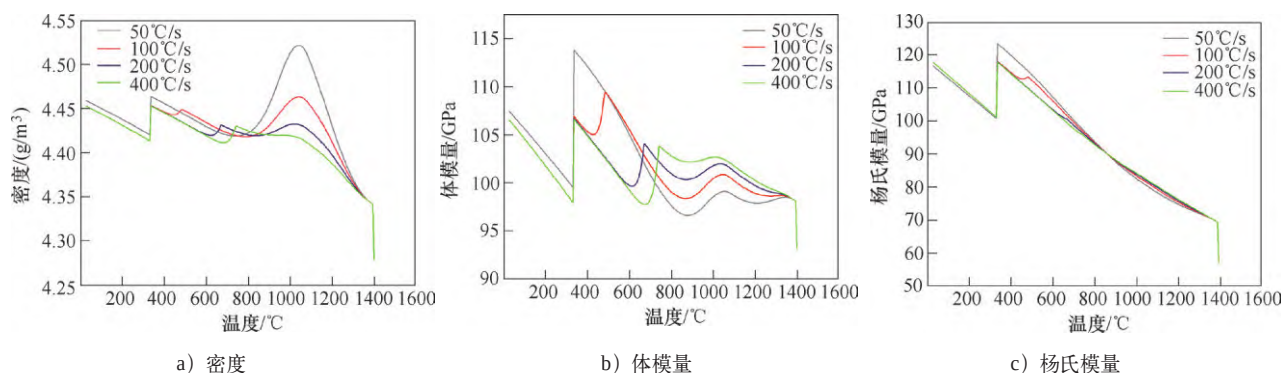


图7 不同冷却速度下的材料性能

50℃/s冷却时合金密度大,这是由于材料在降温过程中受“热胀冷缩”的影响时间更为充足。从分子动力学的角度分析,说明慢速冷却有利于原子填充“空位”的过程。在整个过程中,于1040℃时达到峰值,此时密度为4.52g/cm³。由图7b、c可知,体模量、杨氏模量同样是以50℃/s冷却时表现更为良好,几乎同时于400℃左右达到峰值,体模量为113.92GPa,杨氏模量为123.49GPa。结合上文中冷却速度对马氏体化的影响分析,在快速冷却条件下,组织内产生更多马氏体产物。虽然其能有效提高材料的极限强度与硬度,但会降低模量,使材料到达理论屈服强度的时间变短。

4 TA15钛合金热物性能计算

材料的热物性能主要受温度、晶粒尺寸大小及组元成分等因素影响^[20]。使用JMatPro软件计算TA15钛合金在200~900℃温度区间内的密度、热导率、电阻率、比热容、热焓及热膨胀系数等热物性能参数,结果如图8所示。由图8可知,TA15钛合金的密度与温度呈负相关,随着温度升高,先增大后减小,峰值为4.4g/cm³。热导率、电阻率、热焓则呈正相关,其中,电阻率在670℃时逐渐保持平稳

而不再继续增大,最大值分别为21.1W/(m·K)、1.36Ω·m、273.6J/g。膨胀系数随着温度升高,出现先减小后增大的趋势,拐点分别为200℃、660℃。660℃时刚开始发生α→β相变,可知β相会增大材料的热膨胀系数。比热容则在340~450℃间出现反复波动,最小值为-3.48J/(g·K),最大值为6.23J/(g·K)。

5 结束语

1) 使用JMatPro软件计算的TA15钛合金热力学平衡相图中,室温下平衡产物由61.91%α-Ti+33.29%Ti₃Al+3.66%β-Ti+0.72%TiH₂+0.22%TiM₂B₂+0.21%TiZrSi组成,其主相含量基本取决于其稳定元素的溶解度,中性元素等其他组元产生的影响几乎可以忽略不计。

2) TA15钛合金在热处理过程中,随着温度升高,材料逐渐变成软化态,从而导致变形趋势增大,因此在退火或双重退火时,必须使用工装进行夹持固定。材料的黏性在退火与双重退火温度下差距较大,需要针对热处理温度调整工装的结构刚性。

3) 随着冷却速度加快,β相马氏体化程度提

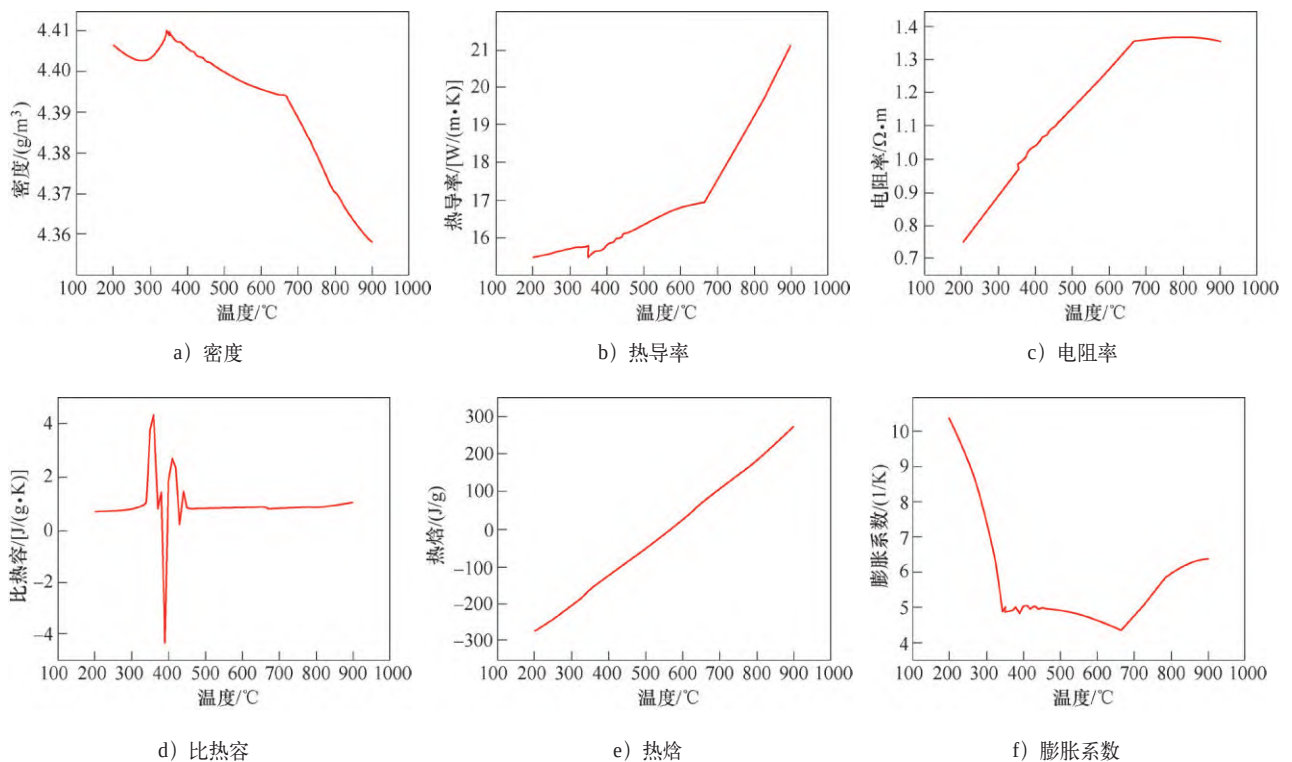


图8 TA15的热物性能变化

高。在受到外力时,表现出高强低塑的特点。同时,大量的马氏体会导致体模量、杨氏模量降低,恶化材料的疲劳性能。

4) TA15钛合金的密度与温度呈负相关,随着温度升高先增大后减小,热导率、电阻率、热焓则呈正相关。

参考文献:

- [1] 杨俊伟, 汤海波, 田象军, 等. 增材制造钛合金凝固晶粒调控研究进展[J]. 稀有金属材料与工程, 2023, 52 (9) : 3316-3331.
- [2] 王鲁, 杨钢, 刘正东, 等. 基于Thermo-Calc和JMatPro模拟计算的新型镍基合金设计[J]. 材料热处理学报, 2017, 38 (4) : 193-199.
- [3] 郑亮, 刘朝阳, 朱强, 等. 超瞬态凝固增材制造梯度整体涡轮叶盘用高温合金粉末特性研究: 盘体用合金粉末[J]. 稀有金属材料与工程, 2021, 50 (10) : 3648-3656.
- [4] 徐仰涛, 沙岐振. 基于JMatPro软件对不同B含量下Co-8.8Al-9.8W合金析出相的热力学模拟计算[J]. 稀有金属材料与工程, 2016, 45 (9) : 2332-2336.
- [5] 武文璐, 李静, 赵可馨, 等. 激光立体成形Ti-Al-Mo合金成分-组织相关性研究[J]. 稀有金属, 2023, 47 (5) : 714-724.

- [6] 韩培培, 臧旭, 董志, 等. 激光冲击强化对TA15钛合金双孔结构显微组织和疲劳性能的影响[J]. 金属热处理, 2023, 48 (7) : 254-258.
- [7] 郑俊超, 黄陆军, 马瑞, 等. 热处理对网状结构TiBw/TA15 (Mo, Si) 复合材料组织与性能的影响[J]. 航空材料学报, 2020, 40 (3) : 118-126.
- [8] 许荣玉, 魏放, 王玄玄. 电极感应熔炼气雾化制备TA15粉末氧增量研究[J]. 金属加工 (热加工), 2024 (4) : 126-128.
- [9] 杨光, 吴怀远, 任宇航, 等. 成形方式与方向对TA15钛合金显微组织及超声参量的影响[J]. 稀有金属材料与工程, 2021, 50 (5) : 1760-1766.
- [10] 曾平. 热作模具钢5CrNiMo焊接性及补焊接头性能研究[J]. 金属加工 (热加工), 2017 (4) : 58-60.
- [11] 黄卫东, 王璐, 黄旭, 等. 热处理对SLM成形TiN/AlSi10Mg合金复合材料组织性能及残余应力的影响[J]. 金属热处理, 2023, 48 (11) : 161-167.
- [12] 雷晓飞, 董利民, 张志强, 等. 固溶和时效温度对TC6钛合金显微组织与力学性能的影响[J]. 稀有金属材料与工程, 2020, 49 (3) : 1038-1044.
- [13] 信云鹏, 朱知寿, 王新南, 等. 固溶冷却速率对全片层亚稳β钛合金α相形貌的影响[J]. 材料工程, 2022, 50 (10) : 80-86.

(下转第121页)

约为0.65mm；大于3倍硬化层（见图8中虚线位置）往里再取10点（各点相隔0.1mm），其心部平均硬度约为（281±18）HV1。

感应退火后，对同一件产品上述5点进行硬度梯度检测，以中间 P_3 位置硬度梯度分布曲线进行对比分析（见图8）。从图8可知，退火后表面硬度为393HV1，退火深度约为0.65mm；退火影响区（总深度）约为0.85mm，过渡区的宽度不超过1/4。感应退火后，原硬化层的硬度整体下降约300HV；退火热影响区的硬度下降约200HV；而大于3倍渗层的心部区域，硬度变化甚微，很好地控制了退火区域。

6 结束语

对于新能源减速器而言，主减齿轮渗碳淬火后，对其内孔需焊接部位进行局部感应退火工艺，可满足工艺技术要求。

1) 内孔感应退火工艺采用同时加热方式，COMSOL有限元软件模拟分析可优化感应线圈与零件的间隙及相对位置，并参数化扫描求解选取合适的电热参数，为工艺调试提供了依据。本例求解参数是：在电流频率4kHz条件下，当倒角为C5、感应线圈输出电流260A、 $Z=6\text{mm}$ 、间距3mm时，所得表面温度在612~656℃。实际验证中，电流频率（3.1±1）kHz，输出电流257~268A，实测表面温度620~650℃，理论计算与实测值一致性好。

2) 对于渗碳淬火件，当感应退火表面温度控制在（635±25）℃时，能很好地控制内孔退火硬度≤40HRC，退火层深度≤1.0mm。

参考文献：

- [1] 李星辰, 田野, 姚雯. COMSOL传热与多物理场耦合仿真[M]. 北京: 机械工业出版社, 2023.
- [2] 杨澍. 高频电磁感应加热成形热源模型建立及数值模拟研究[J]. 材料开发与应用, 2015, 30 (4): 20-23.
- [3] 中国机械工程学会热处理学会. 热处理手册: 工艺基础[M]. 北京: 机械工业出版社, 2013.
- [4] 林信智. 汽车零部件用感应器的结构设计[J]. 金属加工 (热加工), 2008 (21): 16-20.
- [5] 林信智, 齐松涛, 赵文龙. 感应淬火的频率选择[J]. 金属热处理, 2015, 40 (3): 209-211.
- [6] 沈庆通, 黄志. 感应热处理技术300问[M]. 北京: 机械工业出版社, 2013.
- [7] 魏文婷, 赵天翼, 柯锦哲, 等. 汽车轮毂轴承内圈感应回火温度均匀性的数值模拟[J]. 金属热处理, 2023, 48 (5): 129-137.
- [8] 樊东黎. 热加工工艺规范[M]. 北京: 机械工业出版社, 2003.
- [9] 刘震涛, 潘俊, 尹旭, 等. 感应加热线圈参数对被试件温度场的影响分析[J]. 机电工程, 2015, 32 (3): 317-323.

(收稿日期: 20250107)

(上接第116页)

- [14] 李勇, 王秋林, 门正兴, 等. 磁场辅助TA15钛合金表面热浸铝镀层的组织性能[J]. 金属热处理, 2023, 48 (8): 254-259.
- [15] 王振, 孙连北, 范孜耘, 等. 基于JMatPro软件的GH4169合金高温力学性能研究[J]. 金属加工 (热加工), 2023 (4): 96-99.
- [16] 孙晓敏, 刘栋, 汤海波, 等. TC17钛合金构件激光直接成形固态相变行为及显微组织[J]. 稀有金属材料与工程, 2013, 42 (4): 724-729.
- [17] 曾菁, 王晓巍, 余胜峰, 等. 退火对高Mo当量大型TA15钛合金锻件组织与拉伸性能的影响[J]. 钛工业进展, 2022, 39 (6): 24-27.

- [18] 杨光, 冯志国, 钦兰云, 等. 成形气氛中氧含量对激光沉积TA15钛合金组织及力学性能的影响[J]. 稀有金属材料与工程, 2017, 46 (6): 1650-1655.
- [19] 李明兵, 王新南, 商国强, 等. 近 α 型、($\alpha+\beta$)型和近 β 型钛合金的高温力学性能[J]. 金属热处理, 2022, 47 (11): 199-205.
- [20] 韩培培, 焦清洋, 赵栋, 等. 激光冲击强化对TA15钛合金小孔结构残余应力和疲劳性能的影响[J]. 热加工工艺, 2023, 52 (14): 76-79, 84.

(收稿日期: 20241228)