

引文格式: 何波, 王雨轩, 杨光. 激光沉积制造TC4梯度组织的晶粒演化模拟和制备[J]. 航空制造技术, 2026, 69(3): 25020071.

HE Bo, WANG Yuxuan, YANG Guang. Grain evolution simulation and preparation of TC4 gradient structures fabricated by laser deposition manufacturing[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2026, 69(3): 25020071.

激光沉积制造TC4梯度组织的晶粒演化模拟和制备

何波^{1,2}, 王雨轩¹, 杨光^{1,2}

(1. 沈阳航空航天大学机电工程学院, 沈阳 110136;

2. 沈阳航空航天大学飞行器快速试制技术研究教育部重点实验室, 沈阳 110136)

[摘要] 基于宏观有限元法与微观相场法, 构建了用于激光沉积制造 TC4 钛合金梯度组织的多尺度模拟模型。利用该模型, 成功预测了采用不同的空间布局和不同的工艺参数所沉积的梯度组织演化过程。结果表明, 在先用大光斑高能量密度沉积, 后小光斑-低能量密度沉积的梯度组织中, 晶粒总体上由粗大柱状晶过渡到细小柱状晶。梯度组织的形成机制包括粗大柱状晶界面的形成, 细小柱状晶的形核以及细小柱状晶继续外延生长与竞争生长。采用平行方向沉积后, 在粗大柱状晶顶部生长出细小柱状晶或形成新的细小柱状晶。采用垂直方向沉积后, 在粗大柱状晶侧面形核垂直生长出 T 字形细小柱状晶。最后进行了 TC4 梯度组织的激光沉积制备, 发现该梯度组织的形貌及生长趋势与模拟结果一致。

关键词: 激光沉积制造; 钛合金; 相场法; 梯度组织; 组织模拟

中图分类号: V26; TG146.2+3

文献标志码: A

DOI: 10.16080/j.issn1671-833x.25020071



何波

博士, 教授, 研究方向为金属材料增材制造。

金属增材制造技术是一种成本低、成型快速、设计方便的新型制造技术。激光沉积制造 (Laser deposition manufacturing, LDM) 设计友好性强, 在航空、航天、核电、医疗等领域具有广阔的应用和发展前景^[1]。该技术利用激光融化金属粉末, 并迅速冷却凝固熔融材料, 以实现零件的快速制造^[2-3]。在制造过程中, 由于环境温度高、冷却速度快, 难以记录微观结构的动态演化过程; 也难以预测所得到的组织结构性能, 通常需要通过大量试验才能得到具有更好机械性能的组织结构。为弥补传统试验方

法在组织演变研究中的局限性, 数值模拟技术应运而生^[4]。

目前, 凝固组织数值模拟主要分为 3 种方法: 确定性方法、随机性方法和直接模拟法^[5]。在确定性方法中, 成核密度和生长速率被定义为材料的过冷度、溶质过饱和度和热物理参数共同作用的函数。同时, 根据温度场的分布, 对固相和液相进行划分, 常用方法是分子动力学法 (Molecular dynamics method, MD)^[6]。随机性方法通过概率论原理以随机方式反映晶体的成核和生长。常用的随机性方法包括蒙特卡罗法 (Monte

收稿日期: 2025-03-11; 退修日期: 2025-05-07; 录用日期: 2025-06-26

基金项目: 国家重点研发计划项目 (2022YFB4600901); 辽宁省国际科技合作计划项目 (2023JH2/10700024); 辽宁省高校基本科研业务费专项基金 (LJ222410143001、LJ232410143008、LJ212410143025 和 LJ232410143010)

Carlo method, MC) 和细胞自动机法 (Cellular automata method, CA)^[7-8]。直接模拟方法通过统一的数学和物理方程描述传热、传质和相变过程,并在数值计算过程中求解固液界面。常用的直接模拟方法为相场法 (Phase field method, PF)^[9-10]。在增材制造领域中常用的微观结构计算模型有元胞自动机法、蒙特卡罗法和相场法^[1]。

Liu 等^[11] 基于相场模型开发了一个多尺度模型,以研究 TC4 合金在选区电子束熔化中特定晶粒结构的演变机制,发现厚壁和薄壁中主要晶粒结构生长取向是不一致的。Yao 等^[12] 开发了一个包含非均匀成核模型的三维相场模型,来研究 TC4 合金在定向能量沉积中不同扫描策略和扫描速度下的微观结构演变,分析了过冷度对非均匀成核和柱状晶向等轴晶转变 (Columnar-to-equiaxed transition, CET) 的影响。Kumara 等^[13] 基于相场模型研究了 Inconel 718 合金在定向能量沉积及其后续热处理中的微观结构演变,可以预测不同工艺及后处理过程中微观组织的演变。Holfelder 等^[14] 提出了一种多相场模型来描述 TC4 合金在选择性激光熔化中激光-材料相互作用引起的熔化和再凝固,模拟了相变过程中的成核和生长过程。Liu 等^[15] 建立了 TC4 合金在选区电子束熔化中的工艺-结构-性能关系计算框架,列出了需要在不同模型之间传递的一些直接相关的参数或变量,完成了沉积过程的多尺度模拟及性能预测。

总之,大量的研究已经证明,通过有效的模拟方法,可以准确且可靠地预测增材制造过程中组织结构的变化。然而,现有的研究主要集中在工艺参数及后处理等因素对组织结构的影响。对于复杂的 LDM 沉积过程,特别是后续沉积与原沉积方向不同时或采用多组工艺参数的沉积过程,即对通过一些复杂工艺所得到

的梯度组织的演化与调控预测还尚无深入探讨,且针对梯度组织形成机制的模拟缺乏系统研究。而准确预测 LDM 过程中的梯度组织,既是调控微观组织结构的关键,也可为工艺参数的选择提供科学依据,对于提升 LDM 工艺的可控性和优化产品性能具有重要的理论和实际意义。

在 LDM 过程中,精度与效率是一对永久矛盾,提高沉积精度会不可避免地降低沉积效率,而提高沉积效率又会造成沉积精度的降低。所以在工艺改进过程中提出一种新型沉积方式即复合沉积。先采用低精度、大光斑、高功率进行零件内部基体的沉积;再采用高精度、小光斑、低功率,沉积出零件的外部轮廓。这种沉积方式既保证外部轮廓的更高精度,同时又可提高沉积效率。但是,工艺的复杂性使得两者间界面处的梯度组织较同种工艺组织更为复杂,为此本文将进行 LDM 钛合金梯度组织的组织模拟与试验验证。

本文提出一种基于相场模型来预测梯度组织的模拟方法。首先,进行宏观温度场仿真,获得仿真过程的热历史数据。在此基础上,计算温度梯度和凝固速率。然后,将这些结果作为初始条件输入相场模型,进行组织演变过程的模拟,探索不同工艺条件,以及空间布局变化对梯度组织晶粒演化的影响。为了验证模型的可靠性和准确性,设计了相应的沉积试验,结合光学显微镜检测手段,对所沉积的梯度组织进行了显微组织观察。

1 相关模型的建立

1.1 热传导模型

采用基于有限元仿真的热传导模型^[16],其中瞬态热传导的控制方程式为

$$c\rho\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(k_x\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(k_y\frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(k_z\frac{\partial T}{\partial z}\right) + q \quad (1)$$

式中, ρ 为密度, c 为比热容, T 为温度, q 为热源项, k_x 、 k_y 、 k_z 分别为 x 、 y 、 z 方向的导热系数。

为加快运算速度,忽略复杂的热传递,忽略空间上的对流与蒸发引起的热量损失。给出以下热边界条件

$$k_x\frac{\partial T}{\partial x}n_x + k_y\frac{\partial T}{\partial y}n_y + k_z\frac{\partial T}{\partial z}n_z = h(T_e - T) + \varepsilon C(T_e^4 - T^4) \quad (2)$$

式中, n_x 、 n_y 、 n_z 为表面法向量的方向余弦, C 为斯蒂芬玻尔兹曼常数, ε 为表面发射率, T_e 为环境温度。

考虑到相变过程中产生的相变潜热,用焓 H 来代替温度 T ,焓可由聚变潜热和温度来计算

$$H = \begin{cases} T + \frac{L_f}{c\rho} & T \geq T_1 \\ T_s + \frac{T - T_s}{T_1 - T_s} \frac{L_f}{c\rho} & T_s < T < T_1 \\ T & T \leq T_s \end{cases} \quad (3)$$

式中, L_f 为聚变潜热, T_s 为固相温度, T_1 为液相温度。

在 LDM 中采用高斯热源作为加热源,通过 DFLUX 子程序求解,得到热源^[17]

$$q = \frac{2AP}{\pi R^2} e^{-\frac{2r^2}{R^2}} \quad (4)$$

式中, A 为吸收率, P 为激光功率, R 为激光光斑半径。

通过式 (5) 和式 (6) 来计算对流热损耗和辐射热损耗:

$$q_c = h(T - T_e) \quad (5)$$

$$q_r = \sigma_B \varepsilon_r (T^4 - T_e^4) \quad (6)$$

式中: h 为热对流换热系数,取 $40 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$; σ_B 为 Stefan-Boltzmann 常数,取值为 $5.67 \times 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$; ε_r 为热辐射系数,取值为 0.6; T_e 为环境温度,设置为 $20 \text{ }^\circ\text{C}$ 。

通过宏观仿真得到的热历史可以计算出仿真凝固速率 V_s 与温度梯度 G 为

$$V_s = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1} \quad (7)$$

$$G = \frac{T_2 - T_1}{R} \quad (8)$$

式中, x_2 、 t_2 和 x_1 、 t_1 分别为后一个时间点和前一个时间点固液界面空间位置和时间。 T_2 、 T_1 分别为熔池中心与熔池边界的温度。

1.2 相场模型

相场法是以 Ginzburg-Landau 相变理论为基础,通过数学物理方程反映物理过程中扩散、有序化势及热力学驱动的综合作用。其利用空间连续变化的序参量来描述界面的形态、曲率以及界面的演化,无需跟踪界面,使计算精度大大提高,模拟结果更接近实际问题的物理机制。通过与溶质浓度场、温度场耦合能真实模拟金属的凝固过程^[18]。

为了预测 TC4 合金在 LDM 沉积过程中的梯度组织,参考了 Kobayashi^[19] 和 Echebarria^[20] 等建立的定量 PF 模型并加以改进。

封闭体系中单相二元合金的完整自由能泛函必须包括相的化学和温度效应,以及梯度能项,通常用一个自由能密度泛函表示

$$F(\varphi, c, T) = \int_V \left[f(\varphi, c, T) + \frac{\varepsilon_c}{2} |\nabla c|^2 + \frac{\varepsilon_\varphi}{2} |\nabla \varphi|^2 \right] dV \quad (9)$$

在大多数问题中,由于可以调整 ε_φ 来计算总表面能,所以 ε_c 项可以忽略。非保守场相场与保守场浓度场随时间演化的方程,可以由与时间相关的金兹堡-朗道方程推出

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -K_\varphi \frac{\partial F}{\partial t} \quad (10)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \Delta \left(M_c \Delta \frac{\delta c}{\delta t} \right) \quad (11)$$

式中, K_φ 是一个通常与温度相关的动力学常数。浓度方程是质量守恒方程的表述。将式(9)带入式(10)可以得到相场模型中的相场演化方程

$$\tau \frac{\partial \varphi}{\partial t} = W^2 \nabla^2 \varphi + \varphi - \varphi^3 - \frac{\tilde{\lambda}}{1-k} \tilde{g}'(\varphi) \left(\exp(u) - 1 - \frac{T-T_0}{mc_1^0} \right) \quad (12)$$

$$\text{式中: } u = \ln \left(\frac{2c}{c_1^0 [1-k-(1-k)h(\varphi)]} \right);$$

$$\tilde{\lambda} = \frac{H_T W}{2\Gamma} \text{ 为无量纲耦合参数,}$$

$$l_T = |m|(1-k)c_1^0, I = \frac{2\sqrt{2}}{3}; \tilde{g}(\varphi) = \frac{15}{8}$$

$$= \left(\varphi - \frac{2\varphi^3}{3} - \frac{\varphi^5}{5} \right); \tau = 1/(K_\varphi H), W = (K_\varphi / H)^{1/2}; \Gamma \text{ 是 Gibbs-Thomson 常数; } k \text{ 为溶质分配系数; } m \text{ 表示液相线斜率。}$$

此外, Karma 等^[21] 通过引入反溶质截流项 (Anti-trapping current, ATC) 来抵消非真实的浓度扩散。反溶质截流 \bar{J}_{at} 可表示为

$$\bar{J}_{at} = -a(\varphi)W(1-k)c_1^0 \exp(u) \frac{\partial \varphi}{\partial t} \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \quad (13)$$

式中, $\frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|}$ 为沿界面法线方向的位置长度, $\frac{\partial \varphi}{\partial t}$ 表示相变的速度, $a(\varphi)$ 为控制参数。

将式(9)带入式(11)可得到浓度场演化方程

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \Delta \left(M_c \Delta \frac{\delta c}{\delta t} - \bar{J}_{at} \right) \quad (14)$$

定义溶质过饱和度 U

$$U = \frac{\exp(u) - 1}{1-k} \quad (15)$$

综上,单相二元合金凝固过程相场模型的控制方程可以表示为

$$\tau_0 \left[1 - (1-k) \frac{G(y-V_s t)}{l_T} \right] \alpha_s^2 \frac{\partial \varphi}{\partial t} =$$

$$\nabla [\alpha_s^2 \nabla \varphi] + \partial_x \left[|\nabla \varphi|^2 \alpha_s \frac{\partial \alpha_s}{\partial (\partial_x \varphi)} \right] +$$

$$\partial_y \left[|\nabla \varphi|^2 \alpha_s \frac{\partial \alpha_s}{\partial (\partial_y \varphi)} \right] + \varphi - \varphi^3 -$$

$$\lambda g(\varphi) \left[U + \frac{G(y-V_s t)}{l_T} \right] \quad (16)$$

$$\left(\frac{1+k}{2} - \frac{1+k}{2} \varphi \right) \frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \left\{ Dq(\varphi) \nabla U \right.$$

$$\left. + \frac{1}{2\sqrt{2}} [1 + (1-k)U] \frac{\partial \varphi}{\partial t} \frac{\partial \varphi}{|\partial \varphi|} \right\} +$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} [1 + (1-k)U] \quad (17)$$

式中: τ_0 表示相场弛豫时间,由 $\tau_0 = a_2 \lambda W^2 / D$, $\lambda = a_1 W / d_0$ 给出, a_1 和 a_2 是数值常数,可以选择为 $a_1 = 5\sqrt{2}/8$, $a_2 = 0.6267$; $d_0 = k\Gamma / [m|(1-k)c_1^0]$ 表示化学毛细长度。插值函数 $g(\varphi)$ 为双阱势函数,保证了 $g(1) = g(-1) = 1$, $\tilde{q}(\varphi) = \left[\frac{1-\varphi}{1+k-(1-k)\varphi} \right]$ 保证了溶质扩散系数在固相为 0, W 为界面厚度。

面向 LDM 梯度组织沉积仿真,考虑到改变空间布局与工艺参数会改变沉积过程中的温度梯度和各向异性 α_s 。在改变沉积方向后,将温度梯度 G 改进为

$$G_1 = G \cdot k_G \cdot \cos \alpha \quad (18)$$

$$\alpha_1 = \alpha_s \cdot k_\alpha \cdot \cos \alpha \quad (19)$$

式中, k_G 和 k_α 为补偿系数, α 为两种工艺沉积方向夹角。

2 模拟过程及结果

2.1 梯度组织温度模拟过程及结果

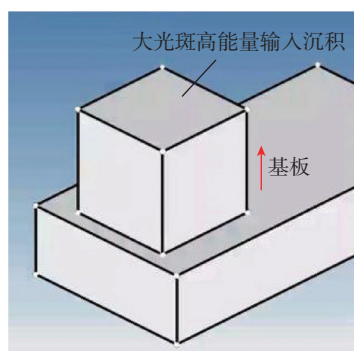
设计两种典型的空布局局和两组工艺参数,并构建了相应的宏观仿真模型,如图 1 所示。首先在基板上进行大光斑-高能量密度沉积(图 1(a)),图 1(b)和(c)分别为沿原方向和垂直于原方向在图 1(a)沉积件上进行小光斑-低能量密度沉积。基板材料为锻造 TC4 钛合金,尺寸为 $100 \text{ mm} \times 50 \text{ mm} \times 20 \text{ mm}$ 。采用大光斑-高能量密度沉积部分的理论尺寸为 $30 \text{ mm} \times 30 \text{ mm} \times 30 \text{ mm}$ 。采用小光斑-低能量密度沉积部分的理论尺寸为 $20 \text{ mm} \times 20 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ 。

构建了图 1(b)和(c)所示的两个三维有限元模型。兼顾结果的精度与计算效率,大光斑-高能量密度沉积零件网格尺寸为 $0.5 \text{ mm} \times 0.5 \text{ mm} \times 0.6 \text{ mm}$,小光斑-低能量密度沉积零件网格尺寸为 $0.2 \text{ mm} \times 0.2 \text{ mm} \times 0.15 \text{ mm}$ 。基板部分不是主要研究对象,故其网格划分为 $1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm} \times 1 \text{ mm}$ (图 2)。

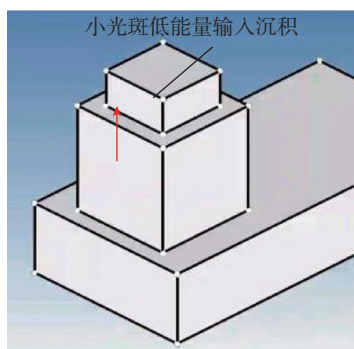
利用 Simufact Welding 有限元仿真软件对 LDM 过程进行宏观温度

场仿真,工艺参数如表 1 所示。

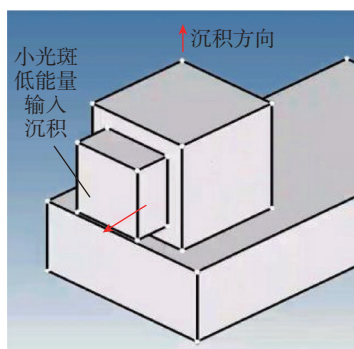
因为基板未进行预热,在沉积的初始阶段,基板的热输入大于热输出,导致温度场数据不稳定,会影响数据的准确性。在仿真过程中可以发现,当沉积层数较高时,零件的温度场数据趋于稳定,所以应从较高层的仿真结果中提取温度场数据。然后,将提取出的数据输入到式(7)与式(8)中,计算组织模拟所需要的温度梯度与凝固速率。选取多个不同的位置提取数据并计算出平均值。



(a) 大光斑-高能量密度沉积



(b) 沿原方向进行后续沉积



(c) 沿垂直于原方向进行后续沉积

图 1 不同空间布局和工艺参数下的沉积
Fig.1 Deposition with different layouts and parameters

2.2 晶粒演化模拟

在进行 LDM 钛合金梯度组织模拟之前时,需进行一系列合理的假设,以确保模型在尽可能准确模拟实际情况的同时,降低计算和模型的复杂性。

(1) 将 TC4 钛合金视为典型的 Ti-Al 二元合金体系。

(2) 假设材料对激光束的吸收率是恒定的。这意味着,无论在高能量输入还是在低能量输入区,材料对激光作用和吸收率都将保持不变。

(3) 忽略潜热效应,由于潜热在材料熔化和凝固过程中产生的热量相对较小,不足以显著影响整个模拟过程。

(4) 假设液相中的流动是连续

进行的。即忽略任何可能导致相分离或不连续的局部变化。

通过引入这些假设大大简化了相场模型的构建和求解过程。然而,这些假设也导致模拟结果与实际情况产生偏差。本文将 TC4 合金假设为 Ti-Al 二元合金,表 2^[22]总结了在 PF 模拟中使用的热物性参数,并假设这些参数在模拟过程中是恒定的。表 3 为仿真过程中设置的模拟参数。

使用相场模型对两种不同的沉积方式进行模拟,得到仿真结果如图 3 和图 4 所示。由图 3 (a)和图 4 (a)可以看出,在大光斑-高能量密度沉积方式下显微组织中主要为柱状晶结构,生长方向垂直向上,且表现出

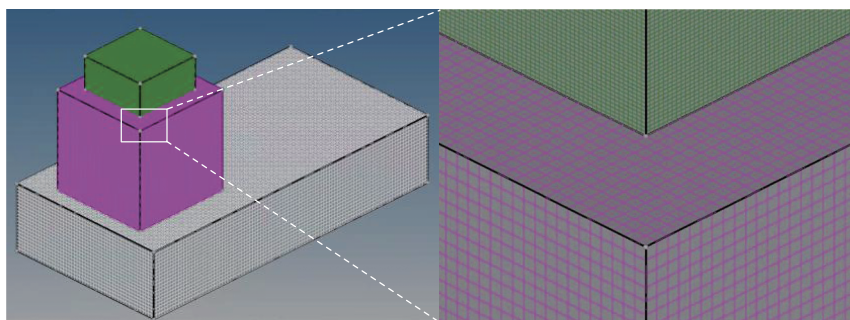


图 2 LDM 梯度组织的网格划分

Fig.2 Mesh division of LDM gradient structures

表 1 宏观温度场仿真工艺参数

Table 1 Process parameters for temperature field simulation

沉积方式	激光功率/W	激光效率	扫描速度/(mm/min)	扫描间距/mm	光斑大小/mm
大光斑	2000	0.28	600	2	2
小光斑	450	0.28	900	0.4	1

表 2 Ti-Al 合金的热物性参数

Table 2 Thermophysical properties of Ti-Al alloy

密度/(kg/m ³)	固相线温度/K	液相线温度/K	相变潜热/(J/kg)	热传导系数/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	比热容/(J/(kg·K))
4220	1877	1923	2.86 × 10 ⁵	14.16	546

表 3 仿真过程模拟参数

Table 3 Simulation parameters

溶质分配系数	初始质量分数	耦合系数	液相线斜率	溶质扩散系数	各向异性系数	界面厚度/m
0.14	0.04	1	2.7	3 × 10 ⁻⁹	4	1.55 × 10 ⁻⁶

显著的外延生长和竞争生长现象,其平均宽度约为 $631\ \mu\text{m}$,高度几乎贯穿整个零件,其中最大宽度约为 $870.9\ \mu\text{m}$,最小宽度约为 $472.8\ \mu\text{m}$ 。在沉积零件上沿平行于和垂直于原沉积方向进行小光斑-低能量密度沉积。首先,柱状晶会在激光的作用下重熔,同时,重熔区内组织会重新形核,并在温度梯度的驱动下进行外延生长和竞争生长。模拟结果表明,大光斑-高能量密度沉积方式下生长出的柱状晶尺寸要明显大于小光斑-低能量密度沉积方式。此外,由于沉积方向的不同,新柱状晶的生长方向也会朝新沉积方向延伸。

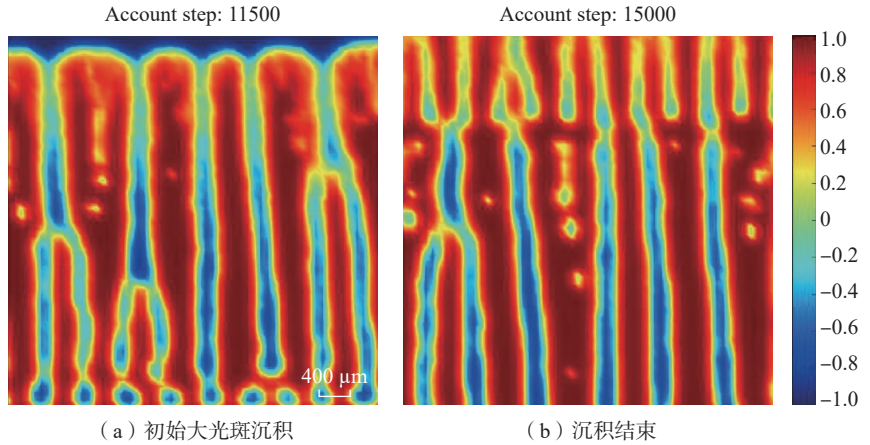
如图 3 (b) 所示,在小光斑-低能量密度沉积过程中,晶粒在重熔区内重新形核向上外延竞争生长,小光斑低能量沉积柱状晶宽度平均约为 $313.2\ \mu\text{m}$,其中最大柱状晶宽度约为 $389.7\ \mu\text{m}$,最小宽度约为 $115.5\ \mu\text{m}$ 。粗大柱状晶的顶端由于温度梯度和凝固速率的增加,不足以维持其继续生长,进而与重新形核的细小柱状晶连接,形成多个细小柱状晶,继续向上生长。图 4 (b) 中小光斑-低能量密度沉积会重熔粗大柱状晶的右侧部分,在重熔区内形核,向右外延竞争生长,向左连接粗大柱状晶。

相比于高能量密度沉积,低能量密度沉积由于较小的热输入抑制了柱状晶的生长,柱状晶的宽度减小。这归因于冷却速率的不同,较高的冷却速率导致柱状晶的生长受限,从而形成较细小的柱状晶。在梯度组织中随着沉积的进行,组织由粗大柱状晶逐渐转变为细小的柱状晶。

3 梯度组织的制备和组织分析

3.1 试验方法

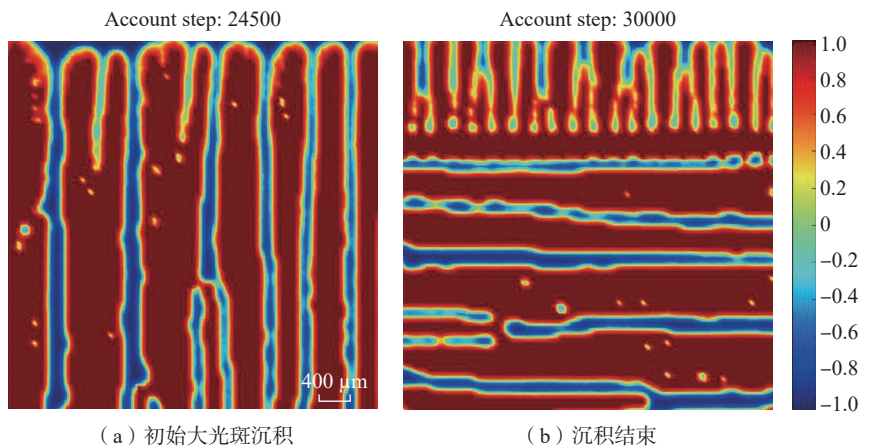
采用 $100\ \text{mm} \times 50\ \text{mm} \times 20\ \text{mm}$ 的锻造 TC4 钛合金作为基材,大光斑-高能量密度沉积采用海宝 $75\sim 300\ \mu\text{m}$ 钛合金粉末,小光斑-低能量密度沉积采用铂力特 $15\sim 45\ \mu\text{m}$



(a) 初始大光斑沉积 (b) 沉积结束

图 3 平行沉积梯度组织模拟结果

Fig.3 Gradient microstructure obtained along parallel depositions



(a) 初始大光斑沉积 (b) 沉积结束

图 4 垂直沉积梯度组织模拟结果

Fig.4 Gradient microstructure obtained along vertical directions

表 4 TC4 钛合金基材的化学成分 (质量分数)

Table 4 Chemical composition of TC4 titanium alloy substrate (mass fraction) %

Ti	Fe	C	N	H	O	Al	V
余量	≤ 0.30	≤ 0.10	≤ 0.05	≤ 0.015	≤ 0.20	$5.5\sim 6.75$	$3.5\sim 4.5$

钛合金粉末。基材和粉末的化学成分如表 4 所示,沉积所用工艺参数如表 1 和表 5 所示。在试验前,为提高结合强度,对钛合金基板表面进行了打磨去氧化层处理,同时对钛合金粉末进行了烘干处理。

LDM 试验设备如图 5 所示, LDM 系统由激光系统、控制系统、送粉系统、保护气系统和工作台等模块组成。控制系统采用奔日 CNC 系统。送粉系统包括送粉头、送粉器等。采用惰性气体 Ar 气作为系统保护气

表 5 两组沉积方式工艺参数

Table 5 Two sets of deposition parameters

沉积方式	送粉量/(g/min)	层厚/mm
大光斑	1.5	0.6
小光斑	1.0	0.2

体,以排除空气中其他元素的干扰,同时避免 TC4 合金基体、沉积件、熔池和粉末在高温条件下被氧化,从而减少对试验结果的负面影响。

首先进行大光斑-高能量密

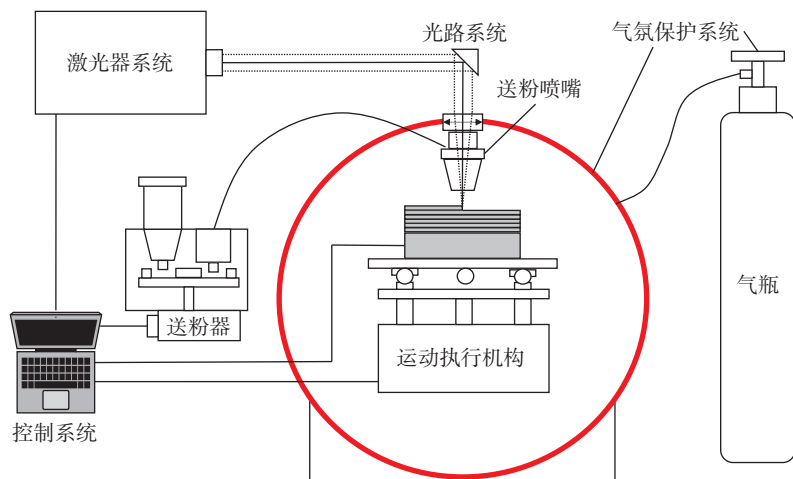


图5 LDM 试验设备
Fig.5 LDM equipments

度沉积如图6所示,沉积尺寸为30 mm×30 mm×30 mm。

之后进行小光斑-低能量密度沉积,如图7所示。采用了两种空间布局:第一种为沉积方向相同的空间布局,即后续沉积方向与之前沉积方向平行;第二种为垂直沉积方向的空间布局,即后续沉积的沉积方向与之前沉积方向垂直。在第二种空间布局中,为避免干涉,在进行大光斑-高能量密度沉积过程中尽可能靠近基板边缘。切割后,同样需要进行打磨处理。

3.2 试验结果

梯度组织沉积及金相结果如图8所示。图8(b)与(c)分别表示按图8(a)中两种空间布局进行沉积所得梯度组织的金相结果。高能量输入沉积组织与低能量输入沉积组织存在明显差异,并且有明显的分界。图8(b)下侧与图8(c)左侧

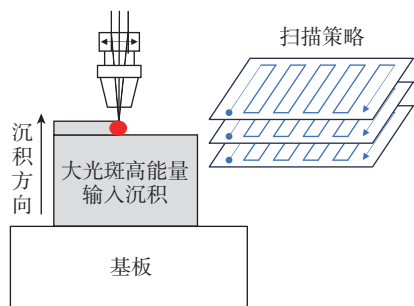
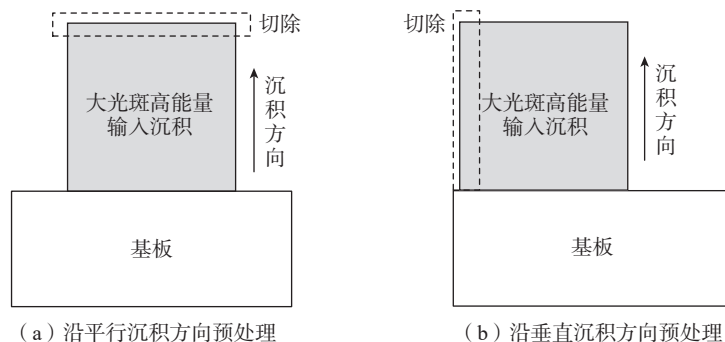


图6 大光斑-高能量密度沉积
Fig.6 Large-spot high-energy deposition

为激光功率2000 W、光斑直径2 mm的高能量输入沉积区域,在沉积过程中,温度梯度低、凝固速率慢,柱状晶有更长时间生长和变粗,在此区域内柱状晶平均宽度约为573.3 μm,最

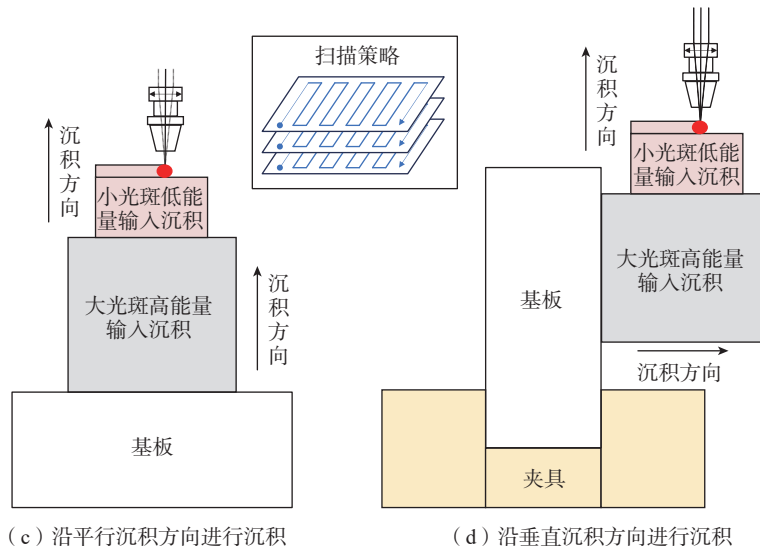
大宽度约为723.5 μm,最小宽度约为490.7 μm。相反,另外一侧为激光功率450 W、光斑直径1 mm的低能量输入沉积区域,沉积过程中温度梯度高、凝固速率快,柱状晶尺寸较小,其平均宽度约为295.4 μm,最大宽度约为421.5 μm,最小宽度约为202.3 μm。

由图8(b)和图8(c)可以看出,在粗大柱状晶的顶部和侧面出现小尺寸的柱状晶并沿平行和垂直方向生长。即粗大柱状晶的顶部和侧面首先被重熔,重熔区内不断出现新的形核点,然后新的柱状晶在这些位置生长。细小柱状晶受原粗大柱状晶、空间布局和工艺参数的影响。由图8(b)可以看出,在平行沉积过程中,重熔区位于粗大柱状晶上侧,细小柱状晶就会同粗大柱状晶上侧连接或重新生成;后续的生长方向与粗大柱状晶相同;在梯度部位可见某些



(a) 沿平行沉积方向预处理

(b) 沿垂直沉积方向预处理



(c) 沿平行沉积方向进行沉积

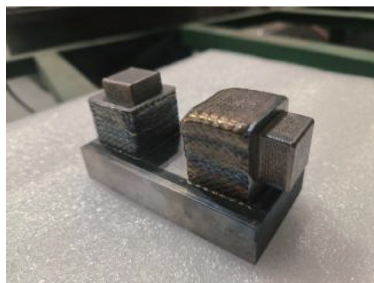
(d) 沿垂直沉积方向进行沉积

图7 小光斑-低能量密度沉积

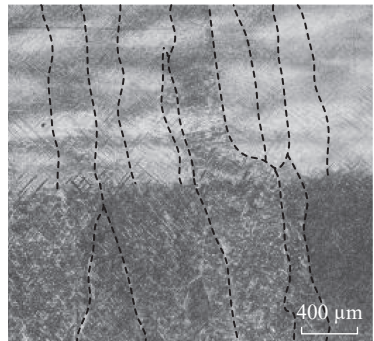
Fig.7 Small-spot low-energy deposition

粗大柱状晶分裂成多个细小柱状晶。由图 8 (c) 可以看出, 在垂直沉积过程中, 重熔区位于粗大柱状晶侧面, 细小柱状晶会同粗大柱状晶侧面连接; 生长方向与粗大柱状晶垂直; 在梯度部位可见粗大柱状晶的侧面连接多个细小柱状晶。

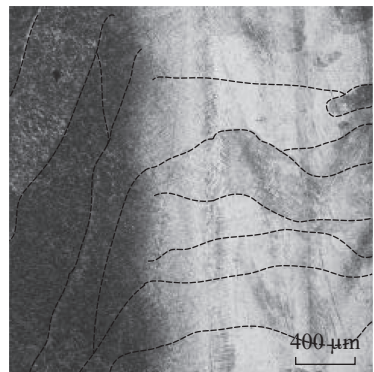
试验结果表明, 小光斑、低能量输入的柱状晶宽度平均为 295.4 μm , 而大光斑、高能量输入的柱状晶宽度达 573.3 μm , 柱状晶的宽度减少了 48.5%。这一现象主要归因于前者具有更高的冷却速率和温度梯度,



(a) 梯度组织样件



(b) 平行沉积的梯度组织



(c) 垂直沉积的梯度组织

图 8 梯度组织样件及金相形貌

Fig.8 Gradient structure sample and morphology

抑制了晶粒的横向扩展, 促进了细小柱状晶的形成。不同空间布局对梯度组织的形成也有显著影响。图 8 (b) 组织较为均匀, 晶界曲率小, 而图 8 (c) 受热梯度、凝固速率共同作用, 呈现明显的大曲率晶界柱状晶结构, 导致组织形貌差异。

试验结果与仿真结果具有良好的—致性。仿真结果中柱状晶平均宽度与实际测量误差小于 10%。平行沉积中柱状晶的生长方向、形态以及界面演化方面与仿真预测相吻合。垂直沉积中仿真与试验的梯度区域同时呈现出较大曲率的晶界。两种空间布局的梯度区域的组织变化特征较为相似。这表明, 所采用的模拟方法能够较为准确地预测梯度组织的形成与演变。然而, 试验中可能存在的工艺波动、残余应力等影响, 导致组织的实际形貌与仿真存在一定偏差。

总体而言, 工艺参数和空间布局的变化显著影响梯度组织的形成, 决定了晶粒的生长方向和均匀性。仿真较好地预测了梯度组织的演变趋势, 为工艺优化提供了理论支持。在工艺选择时需综合考虑热梯度、组织稳定性及最终性能要求。

4 结论

(1) 本文基于宏观有限元法与微观相场法, 构建了用于激光沉积制造 TC4 钛合金梯度组织的多尺度模拟模型, 并进行了 LDM 钛合金梯度组织温度场和组织演化模拟, 系统研究了不同空间布局和工艺参数的沉积方式下梯度组织的演化行为。基于模拟结果进行了钛合金梯度组织的激光沉积制备试验, 结果表明, 所制备的梯度组织的形貌和生长趋势与模型预测基本一致, 验证了所构建的模型的有效性与准确性。

(2) 在梯度组织沉积过程中, 当采用大光斑—高能量密度沉积时, 温度梯度低、凝固速率慢, 柱状晶有更长时间生长和变粗, 会形成粗大柱状晶。

后续小光斑—低能量密度沉积时, 原柱状晶会在激光的作用下重熔; 重熔区内会重新形核, 并且由于温度梯度高、凝固速率快, 无法满足粗大柱状晶的生长, 所以形核生长出细小柱状晶; 部分细小柱状晶会连接粗大柱状晶。

(3) 后续沉积方向会影响细小柱状晶的生长。平行沉积时重熔区位于粗大柱状晶的顶部, 细小柱状晶在形核之后, 部分连接在粗大柱状晶的顶部形成先粗后细的连续柱状晶, 另一部分生成为新的细小柱状晶向上生长。垂直沉积时重熔区位于粗大柱状晶的侧面, 细小柱状晶会连接在粗大柱状晶的侧面并沿垂直方向生长, 柱状晶呈现出 T 字形。

(4) 采用平行沉积方式所得梯度组织由于柱状晶变细, 其力学性能有望得到提升。垂直沉积所得 T 字形晶粒, 其特殊的晶界分布能够有效阻碍位错的滑移, 从而可提高材料的强度。但 T 字形晶粒内应力集中较大, 裂纹在晶粒的尖角处容易萌生, 可能导致脆性增加和疲劳性能变差。本文所得结果可满足同种材料零件不同位置的不同性能需求, 有助于实现梯度组织定制。

参考文献

- [1] LIU C M, GAO H B, LI L Y, et al. A review on metal additive manufacturing: Modeling and application of numerical simulation for heat and mass transfer and microstructure evolution[J]. China Foundry, 2021, 18(4): 317–334.
- [2] 杨光, 马玥, 王超, 等. 增材修复对激光沉积制造 TC4 组织与力学性能的影响[J]. 中国激光, 2018, 45(12): 70–76.
- [3] YANG Guang, MA Yue, WANG Chao, et al. Effects of additive repair on microstructure and mechanical properties of laser additive manufactured TC4 titanium[J]. Chinese Journal of Lasers, 2018, 45(12): 70–76.
- [4] DEBROY T, WEI H L, ZUBACK J S, et al. Additive manufacturing of metallic components—Process, structure and properties[J]. Progress in Materials Science, 2018, 92: 112–224.
- [5] TAN J H K, SING S L, YEONG W Y. Microstructure modelling for metallic additive manufacturing: A review[J]. Virtual and Physical Prototyping, 2020, 15(1): 87–105.

- [5] CARTALADE A, YOUNSI A, RÉGNIER É, et al. Simulations of phase-field models for crystal growth and phase separation[J]. *Procedia Materials Science*, 2014, 7: 72–78.
- [6] FENG J R, DAI K D, ZHOU Q, et al. Formation of bonding interface in explosive welding—A molecular dynamics approach[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2019, 31(41): 415403.
- [7] LI J H, ZHOU X L, BROCHU M, et al. Solidification microstructure simulation of Ti–6Al–4V in metal additive manufacturing: A review[J]. *Additive Manufacturing*, 2020, 31: 100989.
- [8] ZHANG Z, TAN Z J, YAO X X, et al. Numerical methods for microstructural evolutions in laser additive manufacturing[J]. *Computers & Mathematics with Applications*, 2019, 78(7): 2296–2307.
- [9] ZHANG S J, GUILLEMOT G, GANDIN C A, et al. A partitioned two-step solution algorithm for concurrent fluid flow and stress–strain numerical simulation in solidification processes[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2019, 356: 294–324.
- [10] KUNDIN J, STEINBACH I. Comparative study of different anisotropy and potential formulations of phase-field models for dendritic solidification[J]. *Computational Materials Science*, 2019, 170: 109197.
- [11] LIU P W, JI Y Z, WANG Z, et al. Investigation on evolution mechanisms of site-specific grain structures during metal additive manufacturing[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2018, 257: 191–202.
- [12] YAO X X, GAO X, ZHANG Z. Three-dimensional microstructure evolution of Ti–6Al–4V during multi-layer printing: A phase-field simulation[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, 20: 934–949.
- [13] KUMARA C, SEGERSTARK A, HANNING F, et al. Microstructure modelling of laser metal powder directed energy deposition of alloy 718[J]. *Additive Manufacturing*, 2019, 25: 357–364.
- [14] HOLFELDER P, LU J M, KREMPASZKY C, et al. A phase field approach for modeling melting and re-solidification of Ti–6Al–4V during selective laser melting[J]. *Key Engineering Materials*, 2016, 704: 241–250.
- [15] LIU P W, WANG Z, XIAO Y H, et al. Integration of phase-field model and crystal plasticity for the prediction of process-structure-property relation of additively manufactured metallic materials[J]. *International Journal of Plasticity*, 2020, 128: 102670.
- [16] LU X F, LIN X, CHIUMENTI M, et al. Finite element analysis and experimental validation of the thermomechanical behavior in laser solid forming of Ti–6Al–4V[J]. *Additive Manufacturing*, 2018, 21: 30–40.
- [17] LI B B, ZHANG J, YIN J, et al. Distortion prediction method for large-scale additive metal components based on feature partitioning and temperature function method[J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2024, 130(3): 1373–1391.
- [18] 罗志荣. 金属材料微观组织结构演化的相场法研究[D]. 南宁: 广西大学, 2013.
- LUO Zhirong. Study on the evolution of microstructure of metallic materials by phase field method[D]. Nanning: Guangxi University, 2013.
- [19] KOBAYASHI R. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth[J]. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 1993, 63(3–4): 410–423.
- [20] ECHEBARRIA B, FOLCH R, KARMA A, et al. Quantitative phase-field model of alloy solidification[J]. *Physical Review E*, 2004, 70(6): 061604.
- [21] KARMA A. Phase-field formulation for quantitative modeling of alloy solidification[J]. *Physical Review Letters*, 2001, 87(11): 115701.
- [22] MEDVEDEV D, VARNIK F, STEINBACH I. Steinbach simulating mobile dendrites in a flow[J]. *Procedia Computer Science*, 2013, 18: 2512–2520.

Grain Evolution Simulation and Preparation of TC4 Gradient Structures Fabricated by Laser Deposition Manufacturing

HE Bo^{1,2}, WANG Yuxuan¹, YANG Guang^{1,2}

(1. School of Mechatronics Engineering, Shenyang Aerospace University, Shenyang 110136, China;

2. Key Laboratory of Rapid Development & Manufacturing Technology for Aircraft, Shenyang Aerospace University, Ministry of Education, Shenyang 110136, China)

[ABSTRACT] In this paper, based on the macroscopic finite element method and the microscopic phase field method, a multi-scale simulation model for laser deposition manufacturing (LDM) of TC4 titanium alloy gradient structure was constructed. The model successfully predicted the microstructure evolution of TC4 gradient structures obtained with different deposition layouts and process parameters. The results show that in the gradient structure of large-spot high-energy density deposition followed by small-spot low-energy density deposition, the grains transit from coarse columnar crystals to fine columnar crystals. The formation mechanism of the gradient structure includes the generation of the coarse columnar crystal interface, the nucleation of the fine columnar crystal and the continuous epitaxial growth and competitive growth of the fine columnar crystal. In the sample deposited along parallel directions, small-size grains grow on the top of large-size grains. In the sample deposited along vertical directions, small-size grains nucleate and grow vertically in a T-shape adjacent to the large-size grains. According to the simulated process, TC4 gradient structures were fabricated by LDM and the experimental observations match the simulation outcomes.

Keywords: Laser deposition manufacturing; Titanium alloy; Phase field method; Gradient structures;

Microstructure simulation

(责编 大漠)