

# 两相钛合金 TC16 衍射峰形分析与织构测定

杨梦瑶<sup>1</sup>, 袁利红<sup>1</sup>, 王文睿<sup>1</sup>, 张晖<sup>1</sup>, 张旺峰<sup>2</sup>

(1. 西安交通大学 物理学院材料物理系, 陕西 西安 710049)

(2. 北京航空材料研究院 钛合金研究所, 北京 100095)

**摘要:** TC16(Ti-3Al-5Mo-4.5V)钛合金的 $\alpha$ 相(0002)和 $\beta$ 相(110)衍射峰位差小于 $0.1^\circ$ , 由于 $\beta$ 相含量增多, 在传统的X衍射织构测试光路中两峰重叠严重, 目前 $\alpha+\beta$ 两相TC16钛合金织构无法测量。本研究对热轧退火态TC16钛合金棒材进行重叠衍射峰分离操作, 通过光学显微镜、X射线衍射仪、维氏硬度计对TC16合金的显微组织、织构和力学性能进行研究。在Matlab平台上借助柯西平方函数拟合衍射峰形, 依据 $\alpha$ 相衍射峰和 $\beta$ 相衍射峰的展宽和重叠影响程度, 考察衍射光路参数改变对其产生的影响。结果表明: 利用多导毛细管和平行长索拉狭缝的X射线衍射光路配置, 解决了衍射峰重叠问题, 提高了织构测定的准确性; 测试发现, 热轧退火态TC16棒材中主要存在2种织构组分, 为<0002>和<10\bar{1}0>双重丝织构; 织构的存在使TC16横向抗拉强度小于纵向抗拉强度, 讨论了织构对钛合金机械性能的影响。本研究对于提高钛合金紧固件的性能和加工工艺具有重要理论和工程意义, 同时, 也为两相钛合金织构的准确测定提供了一种解决方案。

**关键词:** 两相钛合金; TC16; 衍射峰; 峰形分析; 织构

中图法分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2021)04-1433-08

钛合金因其比强度高、耐高温耐腐蚀等优异性能, 被广泛应用于航空航天、船舶化工、医疗、体育和日用器械等诸多领域<sup>[1]</sup>。两相钛合金随 $\beta$ 相含量的增加, 其冷热加工变形的能力优异, 加工成本降低, 并具有良好的综合力学性能, 因此受到越来越多的重视, 应用领域不断扩大, 尤其是在航空航天紧固件领域<sup>[2]</sup>。钛合金紧固件是在航空航天领域一种极为常用的结构器件, 在目前我国航空航天业快速发展的时期, 更高强度、更高塑性、更耐高温的紧固件材料也亟待发展<sup>[3-5]</sup>。TC4(Ti-6Al-4V)作为应用最广泛的两相钛合金, 同样也是目前最常用的钛合金紧固件材料。然而, TC4钛合金虽然是两相钛合金, 但是它以hcp结构的 $\alpha$ -Ti为主,  $\beta$ 相含量极少, 因此TC4滑移系少, 变形抗力大, 塑性变形困难, 只能用热镦成形工艺制造紧固件产品, 很大程度上限制了紧固件行业的发展。与TC4钛合金相比, TC16(Ti-3Al-5Mo-4.5V)钛合金作为紧固件材料具有不可比拟的优势,  $\beta$ 稳定元素Mo和V的加入, 使TC16钛合金的 $\beta$ 稳定系数高达0.8, 改善了TC4塑性不足的缺点, 很大程度上提高了TC16钛合金冷成形率<sup>[6]</sup>, 解决了紧固件行业由于只能热成形造成的产品高、成品率低、材料消耗及能耗大等问题。

可以说, TC16钛合金作为高强度可冷变形的钛合金, 是极具应用价值的紧固件材料。

近年来, 针对TC16钛合金, 国内外也有较多研究, 尤其是TC16合金的不同热处理制度<sup>[7]</sup>, 研究确定了TC16合金适宜的轧制、镦制工艺、退火和固溶处理制度等。不同加工工艺下TC16钛合金的组织会有所改变<sup>[8]</sup>, 冷镦和热镦工艺制备的样品在显微组织和性能上的确有差异, 但是经过固溶时效热处理后其强度和硬度差异并不大。这表明, 冷成形技术的应用不会影响TC16成品的服役性能, 而且, 由于冷成形技术的诸多优势, 这种工艺更适用于TC16紧固件的生产。侯峰起等<sup>[9]</sup>通过试验研究了冷镦成形的显微组织, 提出有益于冷镦成形的组织类型, 对于工艺上的研究非常深入, 具有很强的实践应用性, 很好地总结了微观金相组织和力学性能的关系, 但晶体结构及精细组织的全面性研究还有待拓展, 影响机理研究也需要继续深入。随着冷变形工艺的应用, 织构的影响应该引起重视, 但织构测试存在很大的困难。TC16钛合金以 $\alpha$ 相为主,  $\alpha$ 相的组织结构会对钛合金的力学性能起决定性作用, 传统X射线法测试织构的光路系统是Φ1 mm准直管和0.6 mm接收狭缝, 但是, 这种光路不能分离

收稿日期: 2020-09-04

基金项目: 国家自然科学基金委员会与中国民用航空局联合资助项目(61179068); 航空科学基金(JZ20141106)

作者简介: 杨梦瑶, 女, 1995年生, 硕士, 西安交通大学物理学院材料物理系, 陕西 西安 710049, 电话: 029-82626623, E-mail: 1595408441@qq.com

$\alpha$  相(0002)和  $\beta$  相(110)衍射峰重叠干扰，目前  $\alpha+\beta$  两相钛合金组织无法测试。如果不控制组织，会导致产品性能不稳定，不能充分发挥其性能优势<sup>[10]</sup>。本作者<sup>[11]</sup>前期结合极图和 ODF（取向分布函数）对近  $\alpha$  型钛合金 TA18 钛合金液压管材组织的分布情况做了很深入的研究，得出更为可靠的晶体组织分布情况。但是， $\alpha+\beta$  钛合金组织目前还缺乏研究。两相钛合金中组织的演变和对力学性能的影响尚不明确。TC16 合金因其独特的优异性能得到广泛的应用，TC21 钛合金作为重要的结构件也存在同样的问题，组织对这类钛合金的力学性能影响颇大。因此，对两相钛合金的组织展开研究非常必要。

本研究以热轧退火态 TC16 棒材为研究对象，基于 Matlab 平台利用数学方法进行重叠衍射峰分离处理，分析两峰重叠的问题，改进 X 射线衍射测试光路设置，对 TC16 棒材的组织进行测定，以 TC16 钛合金为例，对于解决这一类材料  $\alpha+\beta$  两相钛合金组织的测定问题，提供有效的解决方案。本研究将进一步评估 TC16 钛合金棒材的组织类型，讨论组织对力学性能的影响。研究结果可为两相钛合金加工设计和制造提供参考。

## 1 实验

本试验所用材料是热轧退火态 TC16 钛合金棒材，钛合金铸锭经过热轧制、热拉拔、热旋锻等加工工艺，得到  $\Phi 5$  mm 的棒材，随后棒材在两相区退火，保温 2 h，炉冷到 550 °C 后空冷，得到退火态试验棒材。棒材初始直径为  $\Phi 5$  mm，电火花机切割  $\Phi 5$  mm × 10 mm 的圆柱试样，将得到的圆柱体沿棒轴径纵剖，用 502 胶水把两部分粘在玻璃片上，使两纵剖面结合在同一平面上，手工打磨抛光去除纵剖面线切割痕迹，制成 X 射线试样。对棒材的纵剖面进行砂纸粗磨、抛光、腐蚀，并用光学显微镜进行观察。化学腐蚀剂是 HF:HNO<sub>3</sub>:H<sub>2</sub>O=1:1:5。

物相图谱和组织数据通过德国 Bruker 公司的 D8 Advance X 射线衍射仪测定得到。选用 Cu 靶的 K $\alpha$  辐射，波长  $\lambda=0.15406$  nm，光管电压为 40 kV，管电流为 40 mA，物相扫描衍射角  $2\theta$  范围为 30°~70°，并对 38°~40° 的衍射角  $2\theta$  范围再次扫描，用于重叠衍射峰分离分析；测试极图时，转动角和倾角范围分别设定为 0°~360° 和 0°~70°，步长为 5°，测试  $\alpha$  相(10 $\bar{1}$ 0)、(0002)、(10 $\bar{1}$ 1)、(10 $\bar{1}$ 2)、(11 $\bar{2}$ 0) 5 个晶面的极图数据；利用 Bruker 公司的 TexEval V2.5 软件，计算得到 5 个极图和 ODF 图。

本实验采用维氏硬度计(450-SVD)来测试棒材表面硬度，试验方法依据 GB/T4340.1，硬度值为 HV10，试验力为 98 N，保持时间为 10 s，试验温度为 25 °C。

对棒材横向和纵向的表面硬度进行测试，试验后试样背部未出现可见变形压痕，为保证测试结果的准确性，在试样的 2 个面上分别测试 3 个点，取 3 次测试结果的算数平均值作为最终硬度的取值。

## 2 结果与分析

### 2.1 棒材显微组织

图 1 是 TC16 钛合金棒材的显微组织，其中白亮区域为初生  $\alpha$  相，黑色基底由更为细小的次生  $\alpha$  相和  $\beta$  相组成。结合棒材横截面和纵剖面的显微组织分析，合金 2 个方向的组织差异很小，初生  $\alpha$  相多以等轴和棒状组织为主，横向初生  $\alpha$  晶粒的纵横比小于 1.5，纵向局部出现很小的初生  $\alpha$  相集束。结果表明，棒材以初生  $\alpha$  相和  $\beta$  转变组织为主，次生  $\alpha$  相在  $\beta$  转变组织里分布，组织细小且均匀，初生  $\alpha$  相尺寸在 5  $\mu\text{m}$  以下。

### 2.2 TC16 峰形分析

图 2 是 TC16 钛合金棒材的 XRD 图谱。从图 2 可以看出， $\alpha$  相 5 个低晶面指数的衍射峰很明显，整个衍射图谱以  $\alpha$  相衍射峰为主，其中，最高强度衍射峰是  $\alpha$  相的(10 $\bar{1}$ 1)衍射峰，次高峰是  $\alpha$  相的(10 $\bar{1}$ 0)衍射峰， $\beta$  相的主要衍射峰(110)和(200)也检测出来。物相图谱说明 TC16 合金是一种  $\alpha$  相和  $\beta$  相同时存在的两相钛合金。 $\beta$  稳定元素 Mo 和 V 的加入，提高了 TC16 合金中  $\beta$  相的含量，体心立方的  $\beta$  相有 48 个滑移系，远多于密排六方的  $\alpha$  相，是 TC16 钛合金冷加工性能

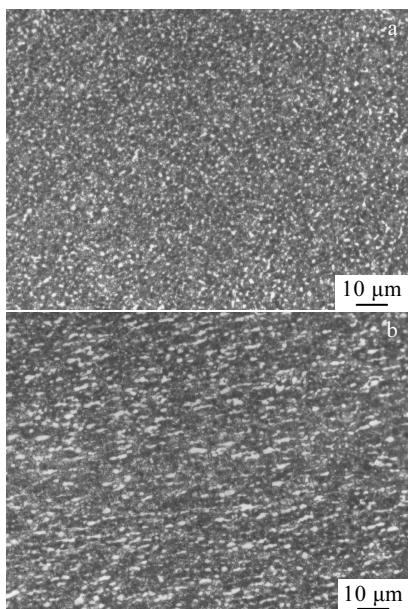


图 1 TC16 钛合金棒材显微组织

Fig.1 Microstructures of TC16 bar: (a) cross-section and (b) longitudinal-section

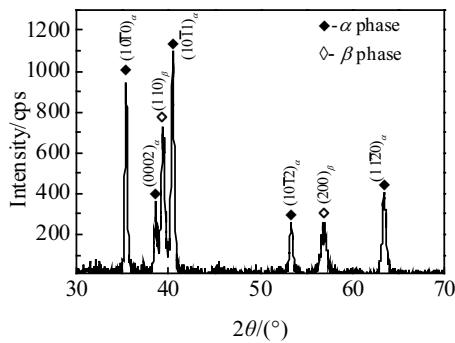


图 2 TC16 棒材 XRD 图谱

Fig.2 XRD pattern of TC16 bar

优异的主要原因,由于两相的存在,TC16 钛合金在追求高强度的同时也保证了好的塑性。

由 TC16 的 X 射线衍射图谱,可以定性分析 TC16 钛合金中的择优取向<sup>[12]</sup>。在  $\alpha$ -Ti 标准粉末衍射卡(JCPDS 00-044-1294)中,  $(1\bar{1}20)$ 衍射峰和 $(10\bar{1}0)$ 衍射峰强度比  $I_{(1\bar{1}20)} / I_{(10\bar{1}0)}$  为 30%, 在实际测试结果中, 衍射峰强度比  $I_{(1\bar{1}20)} / I_{(10\bar{1}0)}$  为 86% 左右, 因此可以认为 TC16 钛合金中择优取向明显。

根据  $\alpha$ -Ti 标准粉末衍射卡(JCPDS 00-044-1294)和  $\beta$ -Ti 标准粉末衍射卡(JCPDS 00-044-1288),  $\alpha$ -Ti 的(0002)衍射峰对应衍射角为  $38.405^\circ$ ,  $\beta$ -Ti 的(110)衍射峰对应衍射角为  $38.482^\circ$ , 峰位差距小。在实际的衍射图谱测定中, TC16 棒材合金化后的衍射图谱与标准粉末的有所不同, 加之测试条件等的影响, 尤其是组织测试时转动和倾动试样, 衍射峰会发生宽化和偏移,

$$I_{\alpha+\beta}(2\theta) = \frac{I_{p_{\alpha 1}}}{[1+k_{\alpha}(2\theta-2\theta_{p_{\alpha}})^2]^2} + \frac{I_{p_{\alpha 2}}}{[1+k_{\alpha}(2\theta-(2\theta_{p_{\alpha}}+\delta_{\alpha}))^2]^2} + \frac{I_{p_{\beta 1}}}{[1+k_{\beta}(2\theta-2\theta_{p_{\beta}})^2]^2} + \frac{I_{p_{\beta 2}}}{[1+k_{\beta}(2\theta-(2\theta_{p_{\beta}}+\delta_{\beta}))^2]^2} \quad (2)$$

式中,  $I_{\alpha+\beta}(2\theta)$  是拟合后复合衍射强度,  $2\theta$  是衍射角,  $I_{p_{\alpha 1}}$ 、 $I_{p_{\beta 1}}$ 、 $2\theta_{p_{\alpha}}$ 、 $2\theta_{p_{\beta}}$ 、 $k_{\alpha}$ 、 $k_{\beta}$  是与具体测定条件有关的参数。因此, 此问题最终描述为含 6 个未知参数的最优化问题。

6 个参数的确定与具体的试验仪器和试验材料有关。 $\delta$  是指  $K\alpha 1$  和  $K\alpha 2$  对应衍射峰之间的峰位差, 拟合时令  $\delta_{\alpha}=\delta_{\beta}$ , 计算公式如式(3)所示:

$$\delta=2\frac{\lambda_2-\lambda_1}{\lambda_1}\tan\theta \quad (3)$$

$I_{p_{\alpha 1}}$ 、 $I_{p_{\beta 1}}$  是分别与  $\alpha$  相和  $\beta$  相衍射谱线衍射强度有关的参数,  $2\theta_{p_{\alpha}}$ 、 $2\theta_{p_{\beta}}$  是分别与  $\alpha$  相和  $\beta$  相衍射角有关的参数,  $k_{\alpha}$ 、 $k_{\beta}$  是与  $\alpha$  相和  $\beta$  相衍射峰宽有关的参数。参数初值的确定对于对优化问题至关重要, 在确定了各个参数初值之后, 回代到分峰函数式(2)中, 经多

实测结果中  $\alpha$  相的(0002)衍射峰和  $\beta$  相的(110)衍射峰重叠明显, 相互干扰。用 X 射线衍射法进行  $\alpha$  相组织测定时, 需要 5 个峰进行峰值和左右背底的确定, 但是, 由于  $\alpha$  相的(0002)衍射峰和  $\beta$  相的(110)衍射峰两峰重叠, 不能直接采用  $\alpha$  相的(0002)衍射峰顶的强度,  $\beta$  相的(110)衍射峰对  $\alpha$  相的(0002)衍射峰的峰高值有无影响尚未可知, 需要分离出  $\beta$  相的(110)衍射峰, 得到滤去  $\beta$  相衍射峰影响的  $\alpha$  相衍射峰, 分析其影响程度, 才能获得更加准确的组织测量结果。

## 2.3 重叠峰分离

### 2.3.1 双峰分离原理

随着  $\beta$  相含量的增加, 传统组织测试条件下,  $\beta$  相(110)衍射峰和主晶相  $\alpha$  相(0002)衍射峰重叠严重, 导致(0002)衍射峰强度不准确, 使组织结果出现较大误差。双相钛合金重峰分离具体实现是借助于 Matlab 平台, 利用数学函数对 TC16 重叠衍射峰衍射数据进行拟合和最优化处理, 最终得到分离的  $\alpha$ -Ti 衍射峰和  $\beta$ -Ti 衍射峰。柯西平方函数是一种拟合 X 射线衍射图谱常用的近似函数, 选择柯西平方函数(CC 函数)作为近似函数来进行 XRD 衍射谱线的拟合, 此时衍射谱线的表达式为:

$$I(2\theta)=\frac{I_p}{[1+k(2\theta-2\theta_p)^2]^2} \quad (1)$$

式中,  $I(2\theta)$  是衍射强度,  $2\theta$  是衍射角,  $I_p$ 、 $k$ 、 $2\theta_p$  是 3 个未知参数。对于 TC16 这种  $\alpha$  相和  $\beta$  相衍射谱线共存的双相钛合金, 考虑到  $K\alpha 2$  线分离, 最终的分峰函数式应确定为:

次优化使拟合曲线合理化。

### 2.3.2 双峰分离结果

传统组织测量光路是由  $\Phi 1$  mm 淮直管和 0.6 mm 接收狭缝组成, 但这种光路系统不能解决衍射峰重叠的情况下组织的准确测量, 设计 4 种不同光路系统, 利用分峰技术来探究最适合 TC16 材料的组织测量光路系统。为了便于区分, 将 4 种光路系统命名为 System 1、System 2、System 3、System 4。图 3 和图 4 是 4 种光路系统下重叠衍射峰的分离情况。4 种光路主要参数见表 1, 4 种光路系统下的影响率比较在表 2 中呈现。从结果上来看,  $\beta$  相衍射峰的影响主要体现在影响  $\alpha$  相衍射峰的峰值上, 不同光路系统下衍射峰重叠确有不同。 $\chi=0^\circ$  时, 4 种光路系统下  $\beta$  相衍射峰的影响不大, 都在 16% 以下, 其中  $\Phi 1$  mm 淮直管和平行

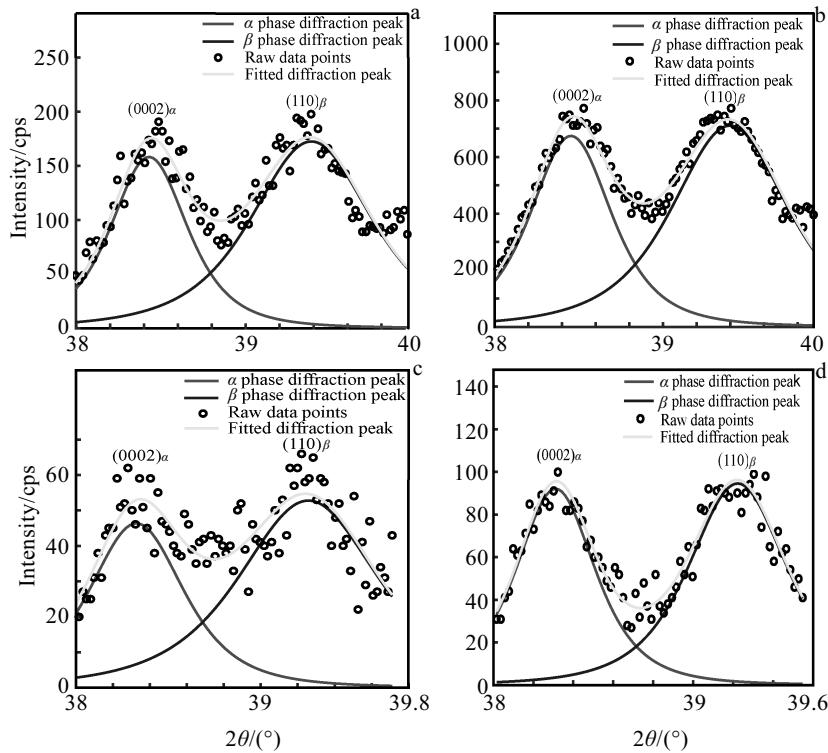
图 3 不同光路系统下分峰结果( $\chi=0^\circ$ )

Fig.3 Diffraction peak separation results under different optical path systems: (a)  $\Phi 1$  mm collimator+0.6 mm receiving slit, (b) polycapillary+0.6 mm receiving slit, (c)  $\Phi 1$  mm collimator+parallel long sola slit, and (d) polycapillary+parallel long sola slit

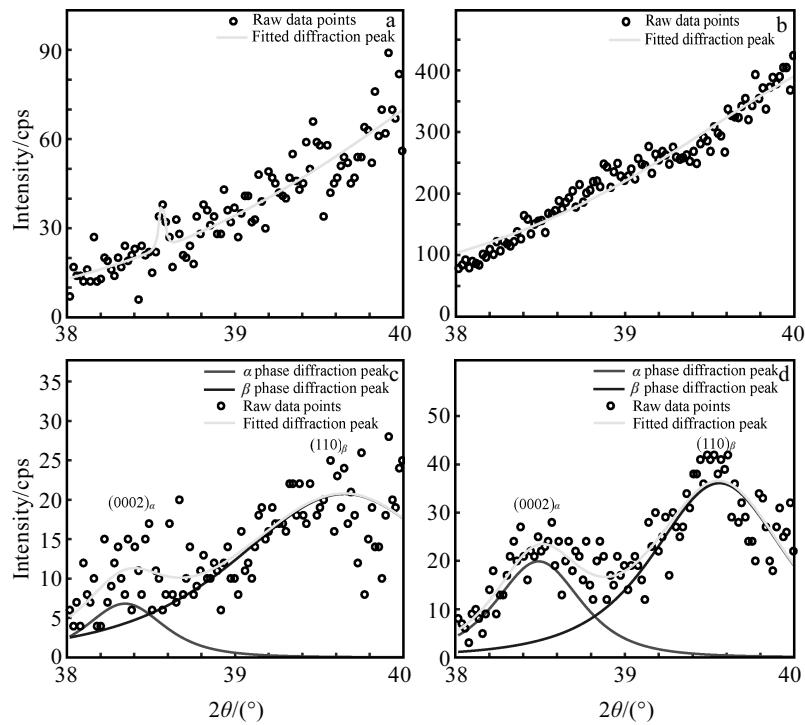
图 4 不同光路系统下分峰结果( $\chi=70^\circ$ )

Fig.4 Diffraction peak separation results under different optical path systems: (a)  $\Phi 1$  mm collimator+0.6 mm receiving slit, (b) polycapillary+0.6 mm receiving slit, (c)  $\Phi 1$  mm collimator+parallel long sola slit, and (d) polycapillary+parallel long sola slit

表 1 4 种光路系统的主要参数

Table 1 Main parameters of the four optical systems

Optical system	Main parameters
System 1	$\Phi 1$ mm collimator+0.6 mm receiving slit
System 2	Polycapillary+0.6 mm receiving slit
System 3	$\Phi 1$ mm collimator+parallel long sola slit
System 4	Polycapillary+parallel long sola slit

长索拉狭缝的组合影响率最高, 达 15.33%, 以多导毛细管加平行长索拉狭缝组合影响最小, 只有 4.48%。当实际测试极图时, 转动引起的试样位置变化, 使得两峰移位, 重叠进一步加剧, 这在  $\chi=70^\circ$  下的衍射图谱中反映出来。 $\chi=70^\circ$  时, System 1 和 System 2 已经不能进行衍射峰分离, 在能进行衍射峰分离的光路系统中, 以 System 4 影响最小, 影响率仅为 16.7%。综合来看, 在多导毛细管和平行长索拉狭缝的光路条件下,  $\beta$  相衍射峰对  $\alpha$  相衍射峰的影响最小, 为 10% 左右, 在此种光路系统下测织构被认为是准确的。

使用布鲁克的 EVA 软件, 测得  $\chi=0^\circ$  时每种光路系统下的半高宽, 如表 3 所示。结合表 2 的数据, 分析可得, 在  $\Phi 1$  mm 准直管和多导毛细管的参数下测试, 衍射强度有较大的提高, 影响率减小, 半高宽有所增加, 衍射峰宽化, 不利于织构测定。当在  $\Phi 1$  mm 准直管和平行长索拉狭缝的光路参数下测试时, 虽然半高宽降至 0.259°, 但是衍射峰的强度大幅度降低, 衰减率达 67% 左右, 分峰后的影响率增加, 此种光路系统也存在问题。多导毛细管和平行长索拉狭缝的光路, 对比  $\Phi 1$  mm 准直管和平行长索拉狭缝的情况, 衍射强度增大, 半高宽减小至 0.245°。综合对比, 多导毛细

管和平行长索拉狭缝的光路系统, 不仅能保留较高的衍射强度, 还能最大程度的减小半高宽。利用 XRD 测定晶体织构的重要基础是得到准确且足够强度的衍射数据, 在 TC16 钛合金 X 射线衍射试验中, 衍射峰重叠导致衍射数据的失准。考虑光路系统的变化, 讨论准直管、平行长索拉狭缝和多导毛细管对衍射峰形的影响。准直管在光路中相当于发散狭缝,  $\Phi 1$  mm 准直管一定程度上限制了 X 射线在试样上的照射宽度<sup>[13]</sup>, 使衍射峰强度降低, 重叠峰影响没有消除。多导毛细管在 X 射线衍射上的应用很广泛<sup>[14,15]</sup>, 它可以减小 X 射线的发散率, 从而减少了 X 射线的衰减, 提高衍射峰强度, 峰强的提高对于衍射峰的分辨率有一定的作用, 但是并不显著。平行长索拉狭缝在光路中垂直于普通的索拉狭缝, 可以改善试样位置变动带来的峰位移动, 降低 X 射线在垂直方向上的发散度, 提高衍射峰的分辨率, 加上多导毛细管的作用, 峰强和峰形都得到保证。进一步延长时间, 分峰效果将会进一步提高。因此, TC16 钛合金织构测试采用 System 4 的光路配置。

## 2.4 织构

图 5 是 TC16 棒材的(0002)极图, AD 表示棒材的轴向, RD 表示棒材的径向。(0002)极图密度极值点分布呈现以下特点: 最大值点分布在轴向附近, 强度等级为 2.77; 次大值点强度等级为 1.99, 有环绕棒材轴向分布趋势。ODF (三维取向分布函数) 是一种定量表征织构的方法, ODF 表征织构因其准确性和定量表征优于极图, 受到广泛认可并被应用<sup>[11]</sup>。为了全面地分析 TC16 棒材中所含织构组分, 图 6 给出了  $\varphi_2$  从

表 2 4 种光路系统的重叠峰影响率比较

Table 2 Comparison of the influence rate of diffraction peaks of four optical systems

Optical systems	Intensity of fit peak diffraction/cps	Intensity after peak splitting/cps	Impact rate/%
System 1	$\chi=0^\circ$	176.5	158.19
	$\chi=70^\circ$	The degree of influence cannot be estimated.	10.37
System 2	$\chi=0^\circ$	744.03	674.35
	$\chi=70^\circ$	The degree of influence cannot be estimated.	9.36
System 3	$\chi=0^\circ$	54.728	46.34
	$\chi=70^\circ$	11	7
System 4	$\chi=0^\circ$	96.28	91.97
	$\chi=70^\circ$	24	20

表 3 4 种光路系统下衍射图谱的半高宽

Table 3 FWHM of diffraction patterns under four optical path systems

Optical system	FWHM/(°)
System 1	0.397
System 2	0.457
System 3	0.259
System 4	0.245

$0^\circ\sim60^\circ$  每隔  $5^\circ$  取的 ODF 截图, 结果显示, 最大值点出现在  $\varphi_2=0^\circ$  的 ODF 截面图上, 最大值点的位置和织构强度如图中标注, 故用  $\varphi_2=0^\circ$  的 ODF 截面图来分析 TC16 棒材中的织构组分。在  $\varphi_2=0^\circ$  时, 最大密度值位置如图中数字标记。织构在理想情况下的 ODF 图<sup>[16]</sup> 如图 7 所示, 图 7a 是<0001>丝织构的理想 ODF 图,

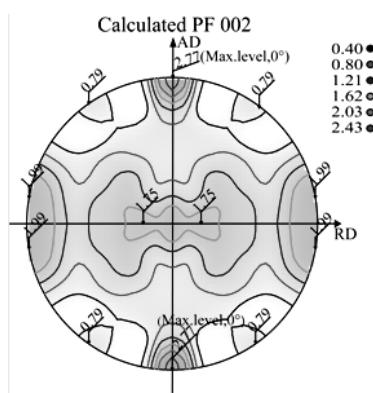


图 5 TC16 合金棒材的(0002)极图

Fig.5 (0002) pole diagram of TC16 alloy bar

在  $\varphi_2=0^\circ$  的 ODF 截面，密度极值点在  $\varphi=90^\circ$ ,  $\varphi_1=90^\circ$  的位置，与实测结果完全吻合，认为材料中存在  $<0001>$  丝织构。 $<10\bar{1}0>$  丝织构理想 ODF 图如图 7b 所示，在  $\varphi_2=0^\circ$  的 ODF 截面，密度极值点分布在  $\varphi_1$  接近  $0^\circ$ ,  $\varphi=0^\circ \sim 90^\circ$  的条状区域，实测 ODF 图中，4 个次强值点分布在  $\varphi_1=10^\circ$ ,  $\varphi=0^\circ \sim 85^\circ$  的条带上，由于实际材料有一定程度的偏离理想情况，因此可以认为材料中存在  $<10\bar{1}0>$  丝织构。经过与理想织构 ODF 图对比分析，认为：TC16 棒材有 2 种织构组分，分别是  $<0001>$  丝织构和  $<10\bar{1}0>$  丝织构，密度为 4.04 和 2.25~2.66。织构类型与极图反映出的一致，但是极密度点的强度有所差异。

结合极图和 ODF 结果，作出晶粒取向情况示意图如图 8 所示。

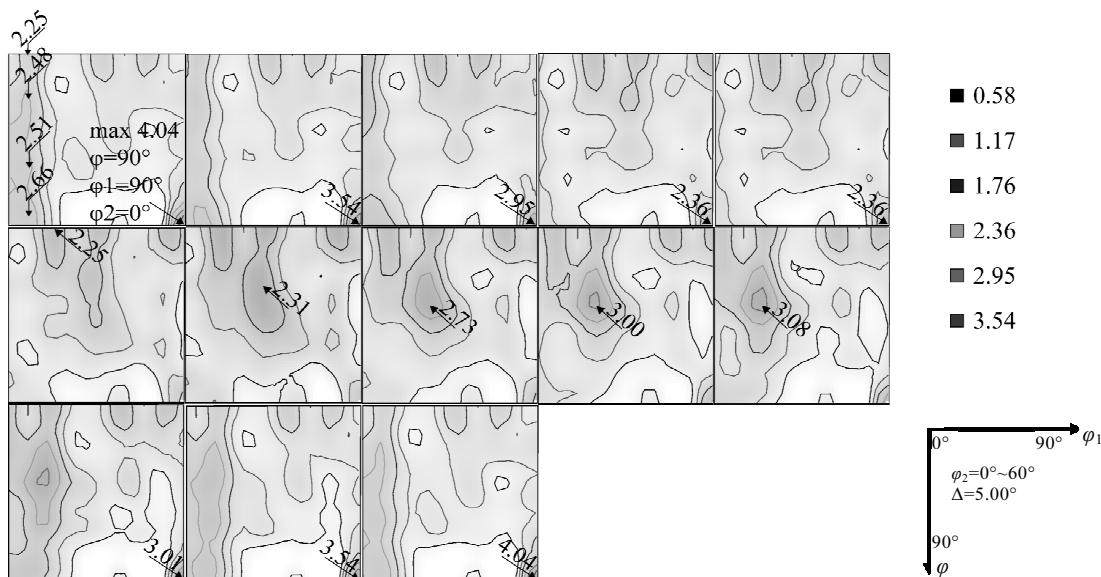


图 6 TC16 合金的 ODF 图

Fig.6 ODF figures of TC16 alloy bar

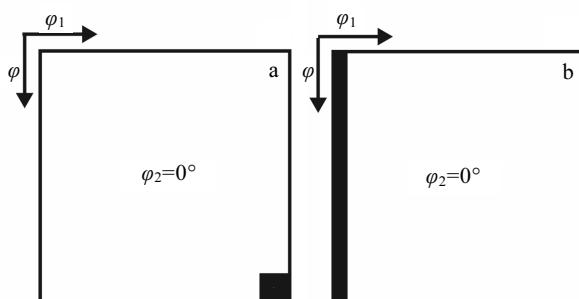


图 7 hcp 的理想织构 ODF 图

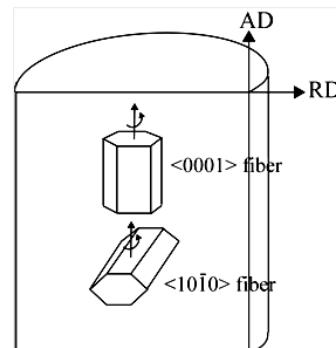
Fig.7 Ideal texture's ODF positions of the hcp crystalline structure: (a)  $<0001>$  fiber and (b)  $<10\bar{1}0>$  fiber

图 8 TC16 合金棒材中的织构组分

Fig.8 Texture components in TC16 alloy bar

## 2.5 维氏硬度

表4是试样纵剖面和横截面的维氏硬度和抗拉强度结果, 其中, 硬度测量的标准偏差为40 MPa。抗拉强度值根据公式(4)<sup>[17]</sup>计算得到:

$$\sigma_b=0.362HV \quad (4)$$

从结果分析, 两个方向的硬度值和强度值有所差异, 纵剖面的硬度和抗拉强度大于横截面, 硬度差约为95 MPa, 抗拉强度差  $\Delta\sigma_b=39$  MPa。由于材料横、纵2方向的显微组织几无差异, 可以认为2个方向性能的差异是由材料内部的组织引起的。当对试样横截面施加试验力时, 由于 $<10\bar{1}0>$ 丝织构的存在, 限制了晶粒在横向的变形, 当对试样纵剖面施加试验力时,  $<0001>$ 丝织构在限制晶粒沿着纵向的变形。 $<10\bar{1}0>$ 丝织构平均密度值为2.48,  $<0001>$ 丝织构密度值为4.04, 所以, 晶粒沿纵向的变形阻力更大, 强度也就更大, 与硬度测试结果相符。收缩应变比(CSR)通常用来表征管材性能的各项异性<sup>[18]</sup>, CSR>1说明材料材料内部晶粒存在择优取向, 且晶粒倾向于径向分布, 对TA18钛合金的研究发现<sup>[19]</sup>, 当ODF图的密度极大值为7.58时, 对应的CSR值为1.38, 这表明材料的周向和径向力学性能的各向异性明显。本实验中ODF图的密度极大值仅为3.98, 组织不够强, 造成了39 MPa的强度差异, 一方面说明, 组织对材料力学性能确有影响, 另一方面指出了材料性能的改进方向, 若通过工艺的提升, 进一步控制组织, 例如增大 $<10\bar{1}0>$ 丝织构强度, 有望提高TC16的剪切性能。

TC16钛合金是一种两相共存的钛合金。在冷热加工过程中,  $\beta$ 相有48个滑移系, 在协调塑性变形中发挥重要作用, 可以提高材料的加工变形能力。在服役过程中时,  $\alpha$ 相是主晶相, 将承担主要的载荷, 对材料力学性能起决定作用。 $<0001>$ 方向是六方钛合金晶体抗拉强度的最大方向, TC16棒材中存在双重丝织构, 导致材料性能的各向异性<sup>[20]</sup>。在固溶时效处理后, 不会改变材料内部的组织类型<sup>[21]</sup>。在服役过程中, TC16钛合金紧固件主要是受到垂直于棒材轴向上剪切力的作用, 当有 $<0001>$ 丝织构平行于轴向分布时, 在塑性变形过程中, 轴向的临界剪切应力较大, 滑移阻力大, 导致轴向强度较高, 抗剪能力强, 而垂直于轴向剪切强度小。如果还同时存在 $<10\bar{1}0>$ 丝织构也平行于轴向分布,  $<0002>$ 最强方向沿棒材径向分布, 产

生较高的剪切强度, 也正是紧固件需要的组织类型。因此, 如果在加工过程中控制棒材组织, 适度减小 $<0001>$ 丝织构强度, 增大 $<10\bar{1}0>$ 丝织构强度, 将有利于棒材径向抗剪能力的提高, 服役性能会更加优异。在材料加工工艺中控制组织是非常有必要的, TC16棒材由径锻机锻造工艺制成, 改变径锻机的频率, 进给速度和径锻过程的道次变形量及总变形量, 改善工艺使 $<0001>$ 组织组分强度适当减弱,  $<10\bar{1}0>$ 组织组分强度增强, 确保TC16钛合金发挥更好的性能潜力。

## 3 结 论

1) 通过数学柯西平方函数拟合分析不同衍射测试光路系统下的衍射峰重叠情况, 确定了优化的TC16钛合金组织测量的光路系统, 即多导毛细管和平行长索拉狭缝的组合, 测试中使 $\beta$ 峰对组织的测定影响率降低至10%以下。

2) 热轧退火态TC16棒材的组织组成是 $<0001>$ 和 $<10\bar{1}0>$ 双重丝织构, 组织密度为4.04和2.25~2.66。组织的存在使TC16的力学性能在横向和纵向上表现出各向异性。

3)  $<0001>$ 丝织构不利于材料的剪切性能,  $<10\bar{1}0>$ 丝织构的存在可以提高材料的抗剪强度。进一步控制和改变加工工艺和热处理手段, 使TC16棒材的 $<0001>$ 组织适度减弱,  $<10\bar{1}0>$ 组织增强, 是工艺改进的方向。

## 参考文献 References

- [1] Su Yuru, Guan Zhidong, Wang Xin et al. Chinese Journal of Aeronautics[J], 2019, 32(3): 619
- [2] Huang Sensen(黄森森), Ma Yingjie(马英杰), Zhang Shilin(张仕林) et al. Acta Metallurgica Sinica(金属学报)[J], 2019, 55(6): 741
- [3] Li Meng(李蒙), Feng Weizhong(凤伟中), Guan Lei(关蕾) et al. Nonferrous Metal Materials and Engineering(有色金属材料与工程)[J], 2018, 39(4): 49
- [4] Dong Ruiheng(董瑞峰), Li Jinshan(李金山), Tang Bin(唐斌) et al. Aeronautical Manufacturing Technology(航空制造技术)[J], 2018, 61(4): 86
- [5] Song Qinghua(宋庆华). Science and Technology Vision(科技视界)[J], 2017(10): 76
- [6] Zhang Qinglai(张青来), Guo Wenjian(郭文建), Han Yinben(韩寅奔) et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(4): 824
- [7] Ma Qinjin(马琴琴), Zheng Weiwei(郑为为), Li Xingwu(李兴无). Journal of Materials Engineering(材料工程)[J], 2009(1): 19

表4 TC16合金棒材维氏硬度及抗拉强度

Sample section	Hardness, HV/ $\times 10$ MPa	$\sigma_b/\text{MPa}$
Longitudinal section	299.5 $\pm$ 4	1058
Cross section	290.0 $\pm$ 4	1019

- [8] Yang Yang(杨 洋), Dong Limin(董利民), Guan Shaoxuan(关少轩) et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2010, 20(S1): 107
- [9] Hou Fengqi(侯峰起), Hu Bin(胡 彬), Sun Xiaoping(孙小平) et al. *Titanium Industry Progress*(钛工业进展)[J], 2017, 34(5): 18
- [10] Srinivasan N, Velmurugan R, Singh S K et al. *Materials Characterization*[J], 2020, 164: 110 349
- [11] Zhang H, Sheng Z M, Zhang W F et al. *Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2015, 24(6): 2312
- [12] Chen Yongchong(陈永翀), Xu Xingjun(徐兴军), Cui Hongzhi(崔宏芝) et al. *Acta Physico-Chimica Sinica*(物理化学学报)[J], 2020, 56(1): 9
- [13] Ruan Yinjie(阮音捷), Zhou Xuan(周 玄), Sun Yue(孙 玥) et al. *Physical Testing and Chemical Analysis, Part A: Physical Testing*(理化检测: 物理分册)[J], 2008, 56(15): 3951
- [14] Meng Xianwen(孟宪文), Wang Gao(王 高), Huang Liang(黄亮). *Sci-Tech Information Development & Economy*(科技情报与开发与经济)[J], 2006, 16(23): 175
- [15] Yang Fan(杨 帆), Fei Weidong(费维栋), Jiang Jianqing(蒋建清). *Jorunal of Functional Materials*(功能材料)[J], 2007, 38(11): 1745
- [16] Wang Y N, Huang J C. *Materials Chemistry and Physics*[J], 2003, 81(1): 11
- [17] Chen Wenguang(陈文广). *Chinese Journal of Rare Metals*(稀有金属)[J], 1986(1): 30
- [18] Liu Fan(刘 凡), Li Yun(李 蕴), Wang Wenrui(王文睿) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(6): 2011
- [19] Wang W, Yuan L, Yun L et al. *Journal of Applied Crystallography*[J], 2020, 53: 419
- [20] Linga Murty K, Charit I. *Progress in Nuclear Energy*[J], 2006, 48(4): 325
- [21] Chen Haijun(陈海军), Chen Jing(陈 静), Lu Guangxi(卢广玺) et al. *Materials for Mechanical Engineering*(机械工程材料)[J], 2011, 35(4): 13

## Diffraction Peak Profile Analysis and Texture Measurement of Two-phase Titanium Alloy TC16

Yang Mengyao<sup>1</sup>, Yuan Lihong<sup>1</sup>, Wang Wenrui<sup>1</sup>, Zhang Hui<sup>1</sup>, Zhang Wangfeng<sup>2</sup>

(1. School of Science, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(2. Department of Titanium Alloys, Beijing Institute of Aeronautical Materials, Beijing 100095, China)

**Abstract:** The difference between the diffraction peak position of  $\alpha$  phase (0002) and  $\beta$  phase (110) of TC16 (Ti-3Al-5Mo-4.5V) titanium alloy is less than  $0.1^\circ$ . Due to the increase of  $\beta$  phase content, the two peaks overlap severely in the traditional X-ray diffraction test optical path. At present, the  $\alpha+\beta$  two-phase TC16 titanium alloy texture cannot be measured. In the present paper, overlapping diffraction peaks were separated from the hot rolled annealed TC16 titanium alloy bar diffraction pattern. The microstructure, texture and mechanical properties of TC16 alloy bar were studied by optical microscope, X-ray diffraction and Vickers hardness tester. The shape of the diffraction peak was fitted by the Cauchy square function on the Matlab platform, and the influence of the change of diffraction optical path parameters on the broadening and overlapping of the  $\alpha$  phase diffraction peak and the  $\beta$  phase diffraction peak was investigated. The results show that the X-ray diffraction optical path configuration of the polycapillary and parallel long sola slit solves the problem of overlapping diffraction peaks and improves the accuracy of texture measurement. The test results show that there are mainly two texture components in hot rolled annealed TC16 bar, which are  $<0002>$  and  $<10\bar{1}0>$  double wire texture; the texture makes the transverse tensile strength of TC16 less than the longitudinal tensile strength. The effects of texture on the mechanical properties of titanium alloy were discussed. This research has important theoretical and engineering significance for improving the performance and processing technology of titanium alloy fasteners. At the same time, it also provides a solution for the accurate measurement of the texture of two-phase titanium alloys.

**Key words:** two-phase titanium alloy; TC16; diffraction peak; peak profile analysis; texture

Corresponding author: Zhang Hui, Ph. D., Professor, Department of Material Physics, School of Science, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, P. R. China, Tel: 0086-29-82626623, E-mail: zhanghui@mail.xjtu.edu.cn