

晶粒间反应应力对低轧制变形量 纯钛晶粒取向变化的影响

张 杏¹, 王 强¹, 张 宁², 毛卫民¹, 杨 平¹

(1. 北京科技大学, 北京 100083)

(2. 上海大学, 上海 200444)

摘要: 用扫描电镜和背散射电子衍射技术观察了低轧制变形量工业纯钛晶粒取向与形状的变化, 统计观测分析了变形过程中实际开动的滑移系, 研究了变形过程中晶粒间的力学交互作用及其对滑移系开动和取向演变的影响。用 Sachs 模型和反应应力模型(RS 模型)模拟计算了晶粒变形过程中开动的滑移系及取向的演变。结果表明, 工业纯钛多晶体中各晶粒的塑性应变并不符合 Taylor 变形原则, Sachs 模型能够部分地揭示滑移系的开动过程和取向演变的趋势。晶粒的塑性变形不仅取决于外应力的作用, 晶粒间的反应应力也会对滑移系的开动和取向演变产生重要影响。采用基于晶粒间交互作用的反应应力模型可以更全面地揭示滑移系的开动过程, 更准确地预测变形后的晶粒取向。晶粒间反应应力的高低受多种因素影响, 其中, 晶粒自身取向及其与周围晶粒取向关系对反应应力大小有重要影响。

关键词: 多晶纯钛; 冷轧; 位错滑移; 反应力; 塑性变形模型

中图法分类号: TG113.25

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2019)12-3895-06

塑性变形是多晶纯钛及钛合金工业产品重要的加工过程, 变形过程中晶粒取向的变化及织构的形成对其各向异性有重要影响。钛的塑性变形晶体学机制比较复杂, 涉及基面滑移, 柱面滑移, 多种锥面滑移以及机械孪生等^[1-4]。目前流行的描述金属塑性变形的多种晶体学理论大多基于 Taylor 原则, 包括 ALAMEL (advanced lamel) 模型、GIA (grain interaction) 模型、VPSC (viscoplastic self-consistent) 模型等^[5-9]。最初的 Taylor 理论认为每个晶粒应变张量均与样品外形应变张量保持一致, 由此能够保证多晶体晶粒间应变的连续性, 但无法保证应力的连续性^[5,8]。目前, 上述基于 Taylor 原则的模型已大体实现了应力与应变同时连续^[5,7,9], 然而实验观察发现塑性变形后多晶体各晶粒的应变张量往往不同于样品宏观应变张量^[10,11], 尽管实验观察和理论模拟之间的应变差距并不大, 但这种差距意味着变形过程中晶体学机制有所不同, 并可能造成取向演变的显著差异, 降低织构预测的准确性。由此可见, 目前各种塑性变形理论仍需改进和完善。

为进一步细致研究变形机制较为复杂的多晶体金属钛的塑性变形晶体学过程, 本研究选择低塑形变形量的变形钛晶粒为研究对象, 以便较清晰地追踪、观

察、探讨和模拟塑性变形过程, 为相关塑性变形理论的完善提供参考。

1 实验

采用锻造 TA2 纯钛 (C: 0.1%, N: 0.05%, H: 0.015%, O: 0.025%, Fe: 0.3%, 其他: 0.4%, Ti: 余量, 质量分数), 样品尺寸为: 40 mm×25 mm×5 mm。先在氩气气氛下 800 °C/2 h 加热退火, 退火后初始平均晶粒尺寸约为 200 μm。用 SEM 和 EBSD 装置在 40 mm×5 mm 的样品侧面上观察到约 200 个晶粒的初始晶粒组织及其取向。用 0.05 mm 厚的防氧化胶带保护好样品侧面观察过的初始晶粒组织, 并进行 9% (真应变为 -0.094) 的冷轧变形, 轧制过程中确保 40 mm×25 mm 面平行于轧面, 长边方向平行于轧向。轧制后, 再在原初始晶粒组织部位用 SEM 和 EBSD 装置观察晶粒组织和取向的变化。

2 实验结果

图 1a 和图 1b 给出了变形前后的侧面晶粒组织, 图 1c 中用黑实线勾勒出了变形后各晶粒的晶界走向。同时, 图 1c 中还用虚线绘出了如果各晶粒完全按照

收稿日期: 2018-12-20

基金项目: 国家自然科学基金 (51571024)

作者简介: 张 杏, 女, 1994 年生, 硕士生, 北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083, 电话: 010-82376968, E-mail: 18792465319@163.com

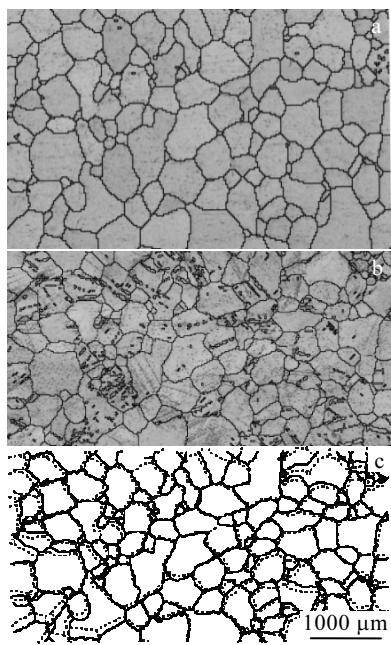


图 1 变形前后的纯钛晶粒组织

Fig.1 Microstructures of pure titanium grains before (a) and after (b) cold rolling (reduction=9%); (c) grain boundary comparison between experimental observation and Taylor description

Taylor 原则变形 9% 后应该有的晶粒形状。可以看出，实际各晶粒的变形状态并不符合 Taylor 原则对晶粒变形所作的设定，这种差异显示二者内在塑性变形晶体学机制及变形过程中取向的演变上有所不同。

在约 200 个初始晶粒中选取 10 个未发生机械孪生的晶粒(G1 至 G10)，轧制变形前、后各晶粒的取向，以及变形前后各晶粒取向的变化幅度，即取向差($\Delta\omega$)如表 1 所示。可以看出，各晶粒的取向变化幅度不尽相同。变形造成了晶粒 G2、G3、G5 较小的取向差，

表 1 晶粒轧制变形前后的取向与取向差

Table 1 Orientations and misorientations of the grains before and after 9% rolling (°)

Grain	Before rolling			After rolling			$\Delta\omega$
	φ_1	Φ	φ_2	φ_1	Φ	φ_2	
G1	143	85	297	140	79	299	7
G2	173	68	235	170	66	237	4
G3	164	102	351	161	103	352	4
G4	38	62	359	32	64	0.5	6
G5	175	123	49	174	119	51	5
G6	146	63	272	143	59	277	6
G7	73	133	290	71	138	292	6
G8	34	123	249	22	128	236	13
G9	57	42	304	52	47	307	6
G10	43	78	314	36	78	310	9

而晶粒 G1、G4、G6、G7、G9 的取向差较大，晶粒 G8 和 G10 则出现了更高的取向差。

纯钛塑性变形可开启的滑移系包括 $\{0001\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 、 $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 、 $\{10\bar{1}1\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ 、 $\{11\bar{2}2\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ ^[3,12]。为方便比较，在极图中作出所有滑移面与晶粒轧制横向面的交线，并使交线过极图中点。与实测滑移面痕迹对比，二者差值在 5° 范围内即为该晶粒激活的滑移面，滑移方向则根据取向因子大小确定，取向因子大的为激活的滑移系。以晶粒 G1 和 G4 为例，图 2 显示了在侧面观察到的变形组织和滑移痕迹，并用侧面极图中的贯通线标识所观察到滑移系的晶体学参数，其中基面和柱面滑移系的编号如表 2 所示，滑移方向的负号表示相反的滑移方向，锥面滑移系用 Miller 指数表示。在晶粒 G1 和 G4 内都观察到了贯穿晶粒的贯穿性滑移以及在晶界附近局部的非贯穿性滑移。表 3 左侧归纳了 10 个晶粒中实际开动滑移系的观察结果(滑移系的开动先后顺序以及滑移量过小等会导致部分滑移系观测不到)。在 9% 的低变形量下，晶粒内部的贯穿性滑移系主要包括基面和柱面滑移系，其中又以柱面滑移系较为活跃。锥面则多为晶界局部的非贯穿性滑移。

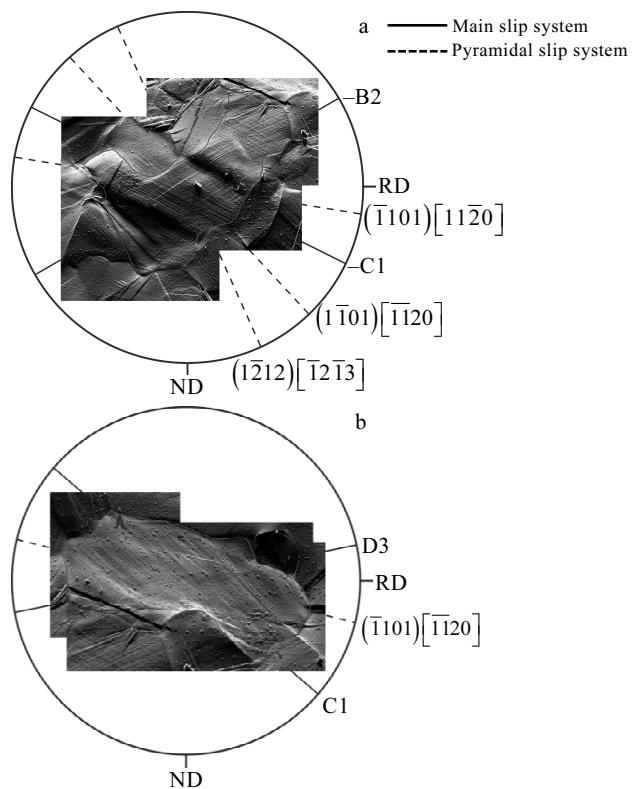


图 2 晶粒开动滑移系观察与分析

Fig.2 Observation and analysis of active slip systems in grains G1 (a) and G4 (b) (RD-rolling direction, ND-normal direction)

表 2 主要滑移系编号

Table 2 Numbering of main slip systems

Type of slip plane	Slip plane	Number	Slip direction	Number
Basal	(0001)	A	[11̄20]	1
			[1̄210]	2
	(10̄10)	B	[2110]	3
	(1̄100)	C	[1̄120]	4
Prismatic	(01̄10)	D	[1̄21̄0]	5
			[211̄0]	6

3 塑性变形过程中钛晶粒间的力学交互作用

在外载荷的单独作用下晶粒 G1 内-C1 滑移系的切应力率先达到临界值、作贯穿性滑移(表 3, 图 2a), 并造成一定的塑性应变, 如图 3a 所示。如果晶粒只是在外应力作用下发生塑性变形, 不考虑晶粒间的反应应力, 即传统的 Sachs 变形模式, 则会造成特定的开动滑移系的选择和取向演变的过程。然而, B2 滑移系的滑移会受到周围晶粒的阻碍。在变形初期这种阻碍会表现为 G1 晶粒与周围晶粒的弹性交互作用, 即周围晶粒的阻碍会产生反应应力, 使得 G1 晶粒产生与其塑性应变方向相反的弹性应变; 同时周围晶粒也会相应的产生与 G1 晶粒塑性应变同方向的弹性应变。此时, G1 晶粒与周围晶粒将按照胡克定律自然地实现应力与应变的平衡^[13,14]。在后续的变形过程中, G1 晶粒应该在外应力与周围晶粒的反应应力共同作用下选择开动的滑移系实现塑性变形。在轧制变形条件下晶

粒所承受的应力应表现为^[14]:

$$[\sigma_{ij}] = \sigma_y \begin{bmatrix} 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & \sigma'_{12} & \sigma'_{13} \\ \sigma'_{21} & 0 & \sigma'_{23} \\ \sigma'_{31} & \sigma'_{32} & 0 \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$[\sigma_{ij}] = \sigma_y \begin{bmatrix} 0.5 & -2\mu\varepsilon_{12}R\frac{d}{b} & -2\mu\varepsilon_{13}R\frac{d}{b} \\ -2\mu\varepsilon_{21}R\frac{d}{b} & 0 & -2\mu\varepsilon_{23}R\frac{d}{b} \\ -2\mu\varepsilon_{31}R\frac{d}{b} & -2\mu\varepsilon_{32}R\frac{d}{b} & -0.5 \end{bmatrix} \quad (2)$$

式(1)右边部分第 1 项代表外应力张量, 第 2 项代表反应应力张量。式中 μ 为开动滑移系的取向因子, d 为平均位错间距, b 是柏氏矢量长度, σ_y 为屈服强度, R 是反应应力影响因子, 通常取为 0.5^[14]。 σ'_{ij} 即为反应应力, 1、2、3 分别表示轧向、横向和法向。

随着变形过程的进行, 晶粒间的反应应力会不断地累加, 甚至达到很高的值。但是当反应应力只能累积到某个极限值, 不可能超越材料的屈服应力。反应应力的上限值 $[\sigma_{ij}]_{lim}$ 可表达为^[14]:

$$[\sigma_{ij}]_{lim} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} = \sigma_y/2 & \sigma'_{12} \leq \alpha_{12}\sigma_y/2 & \sigma'_{13} \leq \alpha_{13}\sigma_y/2 \\ \sigma'_{21} \leq \alpha_{21}\sigma_y/2 & \sigma_{22} = 0 & \sigma'_{23} \leq \alpha_{23}\sigma_y/2 \\ \sigma'_{31} \leq \alpha_{31}\sigma_y/2 & \sigma'_{32} \leq \alpha_{32}\sigma_y/2 & \sigma_{33} = \sigma_y/2 \end{bmatrix} \quad (3)$$

式中 α_{ij} ($i \neq j$) 为反应切应力作用系数, 其取值范围为 [0,1], $\alpha_{ij}=0$ 时即为没有反应应力影响的 Sachs 模型, $\alpha_{ij}=1$ 时即为反应应力可以达到理论上最高的上限值。当晶粒间反应应力足够高时, 可能会驱动晶界区域附近某些滑移系的非贯穿性局部滑移, 进而以少量塑性变形的形式协调晶粒间应力与应变的连续性。在外载

表 3 各晶粒开动滑移系的观察与开动滑移系的模拟计算

Table 3 Observation of active slip systems in grains and corresponding simulation calculations (9% reduction)

Grain	Experiment		Sachs model	RS model
	Penetrating slip	Local slip		
G1	-B2, -C1	(1̄101)[1̄120], (1̄101)[11̄20], (1̄212)[121̄3]	-C1	-A1, A2, -B2, -C1, (1̄101)[1̄120]
G2	B2	(1011)[121̄0], (11̄01)[11̄20]	B2	A1, -A3, B2, -D3, (1011)[121̄0], (10̄11)[1̄210]
G3	C1	(10̄11)[1̄21̄0]	D3	C1, D3, (01̄11)[2110]
G4	C1, D3	(1̄101)[11̄20]	C1	(10̄11)[1̄21̄0], C1, D3
G5	B2, -D3	(1̄101)[11̄20], A2	B2	B2, -D3
G6	-C1, B2	(1̄101)[1̄120]	(01̄11)[21̄10]	-A3, B2, -C1, -D3, (01̄11)[21̄10]
G7	A3	(1011)[121̄0]	A3	-A1, A3, -D3, (01̄11)[21̄10], (01̄11)[21̄10]
G8	B2	(1̄011)[121̄0], (10̄11)[1̄210]	B2, (1̄101)[1̄120]	A3, B2, (1̄101)[1̄120], (10̄11)[1̄210]
G9	-B2, (01̄11)[21̄10]	(1011)[121̄0]	-A3	-A3, -B2, (1̄011)[121̄0], (01̄11)[21̄10]
G10	-B2	(1̄101)[11̄20], (10̄11)[1̄21̄0]	-B2	-B2, (1̄101)[11̄20]

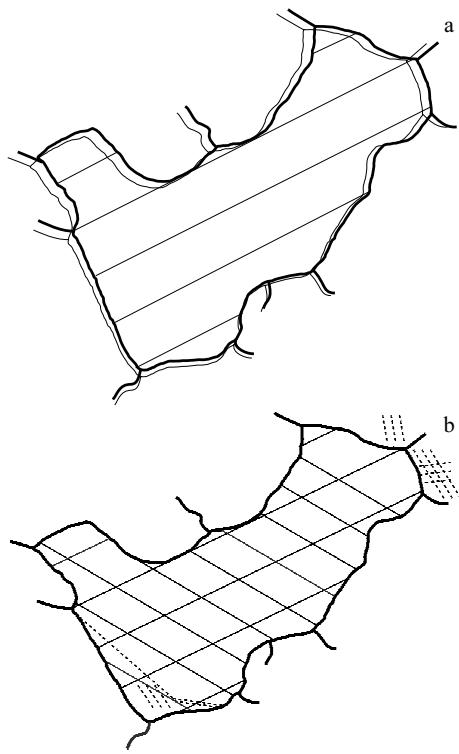


图 3 G1 晶粒轧制变形过程晶粒间反应应力分析

Fig 3 Analysis of intergranular reaction stress during rolling of grain G1: (a) intergranular interaction and activation of penetrating slip and (b) activation of penetrating multi-slip and non-penetrating local slip made by combination of external stress and reaction stress

荷作用下的塑性变形过程中，所有滑移系，包括未开动的滑移系都会承受不同的切应力。反应力引起的切应力会与外应力叠加，因此在反应力尚未达到理论上限值的情况下就有可能造成某些滑移系的局部开动。由此可见，反应力切应力的上限值通常不是一个固定的常数，且与变形晶粒自身的取向及其与邻接晶粒的取向差密切相关，需要进一步的分析与探索。

针对本研究所选取的 10 个晶粒分别用 Sachs 模型 ($\alpha_{ij}=0$) 和 RS 模型 ($\alpha_{ij}\neq 0$) 模拟计算了轧制变形条件下的取向变化(模拟步长 $\Delta\varepsilon_{33} = 0.001$, 基面与柱面及锥面滑移系的临界分切应力比值为 1.5:1:1.3^[15])。图 4 以 G1 晶粒为例在 $\{0001\}$ 和 $\{10\bar{1}0\}$ 极图中显示了实验观测的起始取向、变形后的取向，以及用 Sachs 模型和 RS 模型模拟计算变形过程中取向演变的路径。结果显示，用 RS 模型模拟变形后的取向比 Sachs 模型更接近实验观测值。比较 10 个晶粒内开动滑移系的实验观察和模拟计算可以发现，Sachs 模型只模拟出了部分真实开动的滑移系，而 RS 模型较全面地模拟出了各晶粒内

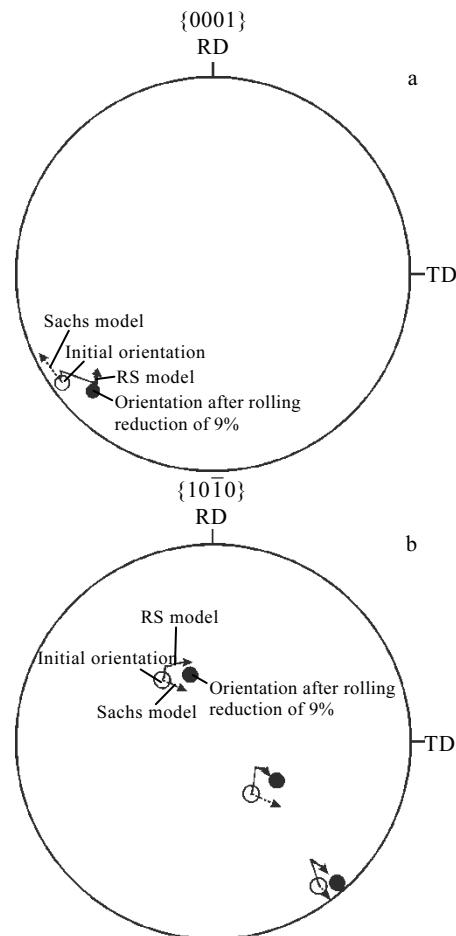


图 4 G1 晶粒轧制过程中的取向变化及理论计算

Fig.4 Orientation evolution and corresponding simulation of grain G1 during rolling: (a) $\{0001\}$ and (b) $\{10\bar{1}0\}$

部真实开动的滑移系。表 4 归纳了用 Sachs 模型和 RS 模型对 10 个晶粒变形后取向的模拟结果，由此可见，金属多晶体塑性变形过程中变形晶粒之间确实存在反应力，反应力的高低会受到诸如晶体结构、晶粒取向、晶粒间取向差、弹性各向异性、加工硬化程度等多种因素的影响，且会在变形过程中有所改变。因此准确地描述每种变形条件下每个晶粒各反应力的数值是十分困难的。然而，对于多晶体来说各反应力总会有一个大致的波动范围。RS 模型借助调整对各反应力作用系数来观察晶粒取向的相应变化。当所选用的各反应力作用系数使得模拟计算出的晶粒取向演变与实测值基本一致时，即可认为这些作用系数就是反应力波动的大致边界值，如表 4 中的 G5, σ'_{12} 波动范围为 0~0.3, σ'_{13} 和 σ'_{23} 为 0。当反应力值没有达到边界值时，RS 模型可根据弹性理论计算出反应力具体数值。本研究对低变形量钛合金中若干晶粒

表 4 Sachs 和 RS 模型模拟计算的取向演变

Table 4 Orientation evolution simulated based on Sachs and RS models (9% reduction)

Grain	Sachs			RS			$\Delta\theta(\text{Sachs})/(\circ)$	$\Delta\theta(\text{RS})/(\circ)$	Reaction stress coefficients		
	$\varphi_1/(\circ)$	$\Phi/(\circ)$	$\varphi_2/(\circ)$	$\varphi_1/(\circ)$	$\Phi/(\circ)$	$\varphi_2/(\circ)$			α_{12}	α_{13}	α_{23}
G1	146	85	300	141	79	299	9	1	0.1	0.9	0.1
G2	174	70	239	173	66	237	6	3	0.4	0	0.4
G3	165	101	355	165	103	352	5	4	0.6	0.3	0.8
G4	33	65	356	34	63	1	4	2	0	0	0.1
G5	176	120	55	175	119	52	4	1	0.3	0	0
G6	149	61	265	143	57	272	11	5	0	0.6	0
G7	73	138	290	72	137	291	4	2	0.6	0.2	0.9
G8	30	122	248	32	126	241	12	8	0	1	0.1
G9	59	38	304	51	48	304	10	4	0.1	0.5	0.5
G10	40	79	309	39	78	310	4	3	0	0	0.3

反应应力作用系数的分析有助于了解钛合金塑性变形时晶粒间交互作用的基本规律, 为模拟钛合金冷变形组织奠定基础。

4 分析与讨论

达到屈服强度的应力会造成晶粒的塑性变形, 此应力包含外应力和晶粒间的相互作用力。Taylor 模型及其以 Taylor 原则为基础的改进模型预先设定晶粒应该产生的应变, 这有别于应力诱发变形的这一物理过程。图 1 所示的真实晶粒的变形过程并不符合 Taylor 原则的预设。因此, 本研究回归应力诱发应变的基本原则, 在外载荷作用下晶粒内取向因子最大的滑移系开动, 产生塑性变形。在晶粒与周围环境均沿轧向伸长、沿法向压缩的同时, 滑移所产生的切应变会与基体产生变形的不协调性, 如图 3a 所示。因此, 晶粒间的反应应力是客观存在的。如表 3 所示, 只考虑外应力的 Sachs 模型不能全面反映出晶粒中真实开动的全部位错, 采用 RS 模型则可较全面地反映出真实晶粒的全部位错。这说明反应应力的存在会造成有别于 Sachs 滑移系开动过程, 也会造成不同于 Sachs 模型的取向演变。表 4 所示, RS 模拟取向演变更接近于真实情况, 这也说明反应应力的存在及其对滑移系选择与取向演变的重要作用。

一方面, 反应应力大小与变形晶粒开动滑移系造成的切应变大小直接相关。在外载荷作用下, 变形晶粒发生塑性变形, 产生切应变, 此应变与环境不相容, 会产生晶粒间的弹性交互作用即反应应力, 以释放部分应变来实现晶粒与周围环境应力应变的自然连续。另一方面, 反应应力大小受到变形晶粒周围各晶粒已经承受的外载荷大小的限制。起初, 变形晶粒与周围各晶粒以弹性反应应力的方式协调, 当反应应力与外载荷共同作用达到周围各晶粒某滑移系的临界分切应力时, 会发生局部滑移来进一步协调应变, 如图 3b

所示。由表 4 可以看出, 不同取向的晶粒开动的滑移系一般不同, 导致产生的切应变大小不一, 同时每个变形晶粒所处的周围环境是不一样的, 其周围各晶粒的滑移系已经承受的外载荷大小不同, 因此各晶粒反应应力作用系数 α_{ij} 具有显著的差异。

5 结 论

1) 对纯钛多晶体低轧制变形量下晶粒形状改变和取向变化的研究显示, 工业纯钛多晶体的塑性应变并不符合 Taylor 变形原则。原始的 Sachs 模型只能部分地再现真实晶粒滑移系开动与取向变化过程。塑性变形过程中, 晶粒间确实存在反应应力并能够造成有别于 Taylor 原则的应力应变的自然平衡。

2) 反应应力与外应力共同作用决定了滑移系的开动过程和取向的变化, 能够更合理地反映出晶粒真实的变形行为。反应应力与变形晶粒取向、周围晶粒的取向差以及其它各种潜在因素的定量关系还有待进一步研究。

参 考 文 献 References

- [1] Partridge P G. Metallurgical Reviews[J], 1967, 12(1): 169
- [2] Yoo M H. Metallurgical Transactions A[J], 1981, 12(3): 409
- [3] Lütjering G, Williams J C. Titanium[M]. Berlin: Springer-Verlag Press, 2007: 14
- [4] Tao Zhijun(陶智君), Li Heng(李 恒), Ma Jun(马 俊) et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)[J], 2017, 46(9): 2470
- [5] Van Houtte P, Li S Y, Seefeldt M et al. International Journal of Plasticity[J], 2005, 21(3): 589
- [6] Xie Q, Van Bael A, Sidor J et al. Acta Materialia[J], 2014, 69: 175
- [7] Crumbach M, Goerdeler M, Gottstein G. Acta Materialia[J], 2006, 54(12): 3275

- [8] Mu S J, Tang F, Gottstein G. *Acta Materialia*[J], 2014, 68: 310
- [9] Lebensohn R A, Tomé C N, Ponte Castañeda P. *Philosophical Magazine*[J], 2007, 87(28): 4287
- [10] Saleh A A, Haase C, Pereloma E V et al. *Acta Materialia*[J], 2014, 70: 259
- [11] Shao C W, Zhang P, Zhu Y K et al. *Acta Materialia*[J], 2018, 145: 413
- [12] Huang Wen(黄文), Wang Yang(汪洋), Ge Peng(葛鹏) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2010, 39(3): 469
- [13] Mao W, Yu Y. *Materials Science & Engineering A*[J], 2004, 367(1-2): 277
- [14] Mao W M. *Materials Science & Engineering A*[J], 2016, 672: 129
- [15] Barkia B, Doquet V, Couzinié J P et al. *Materials Science & Engineering A*[J], 2015, 636: 91

Effect of Intergranular Reaction Stress on Orientation Evolution of Pure Titanium Grains After Low Rolling Deformation

Zhang Xing¹, Wang Qiang¹, Zhang Ning², Mao Weimin¹, Yang Ping¹

(1. University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

(2. Shanghai University, Shanghai 200444, China)

Abstract: The grain orientation and grain shape changes of commercially pure titanium after low rolling deformation were observed using scanning electron microscope and electron backscatter diffraction techniques, and the actual active slip systems during deformation process were analyzed statistically. The mechanical interaction between grains and its influence on the slip system selection and orientation evolution of grains were studied. The active slip systems and orientation evolution of rolling grains were simulated using Sachs model and reaction stress model. The results show that the plastic strain of grains in the polycrystalline commercially pure titanium is not in accordance with Taylor deformation principle, and the Sachs model can partly reveal the mechanism of slip and trend of the orientation evolution. The plastic deformation of grains depends not only on the external stress, but also on the reaction stress between grains, which influence the selection of slip systems. The reaction stress model based on the interaction of grains can be used to reveal the activation process of the slip systems more comprehensively, and to predict the grain orientation after deformation more accurately. The reaction stress between grains is influenced by many factors, among which, the orientation of grains and its relation to the grain orientation have important impact on the magnitude of the reaction stress.

Key words: polycrystalline pure titanium; cold-rolling; dislocation slip; reaction stress; plastic deformation model

Corresponding author: Yang Ping, Ph. D., Professor, School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, P. R. China, Tel: 0086-10-82376968, E-mail: yangp@mater.ustb.edu.cn