

柱状晶 Ni 在冷轧过程中晶粒取向的演变及模拟*

吴桂林 刘伟 Andrew Godfrey 刘庆
(清华大学材料科学与工程系, 北京 100084)

摘要 将具有 {001}⟨UV0⟩ 取向的柱状晶 Ni 样品分别冷轧到 0%, 10%, 30% 和 50%, 用电子背散射图 (EBSP) 技术测量晶粒取向, 跟踪晶粒取向在轧制过程中的演变, 得到晶粒取向演变的统计性结果. 采用 Taylor 模型模拟晶粒取向的演变, 并与实验结果比较. 结果表明, 晶粒取向的演变主要受原取向的影响, 只有一部分晶粒取向的演变符合 Taylor 模型.

关键词 柱状晶 Ni, 冷轧, 取向, Taylor 模型, 电子背散射图

中图分类号 TG335.12

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2004)08-0785-06

EXPERIMENTAL OBSERVATION AND MODELLING OF THE ORIENTATION EVOLUTION OF INDIVIDUAL GRAINS IN COLUMNAR GRAIN Ni DURING COLD ROLLING

WU Guilin, LIU Wei, Andrew GODFREY, LIU Qing

Department of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084

Correspondent: WU Guilin, Tel: (010)62772852, Fax: (010)62771160, E-mail: wuguilin@tsinghua.org.cn

Supported by National Natural Science Foundation of China (Nos.59825110 and 50231030)

Manuscript received 2003-07-15, in revised form 2003-11-11

ABSTRACT Columnar grain Ni samples with initial {001}⟨UV0⟩ orientations were cold rolled to reductions of 0%, 10%, 30% and 50%, respectively. By using EBSP (electron back scattering pattern) technique, the orientation evolution of individual grains during rolling was followed, and the statistic results of grain rotation were obtained. A Taylor model was used to simulate the orientation evolution of each grain, and the modelled results were compared with observed results. It is found that the orientation evolution of individual grains during rolling is mainly effected by its initial orientation, and only a part of grains follow the evolution rule described by the Taylor model.

KEY WORDS columnar gain Ni, cold rolling, orientation, Taylor model, EBSP

金属材料的塑性变形虽然已有较深入的研究, 但随着研究技术的发展以及微观组织结构自动测试技术的引入, 使得对塑性变形的实验研究和模拟从宏观发展到微观, 从定性发展到定量的水平, 因而可以得到物理机制、微观组织结构、加工工艺和宏观性能之间的相互关系^[1].

对金属材料在塑性变形过程中晶体取向演变的研究基本上都是在单晶或多晶材料上进行的, 结果表明, 晶体取向和晶界等是影响晶体取向演变的重要因素^[2-4]. 在单晶中虽然可以跟踪晶体取向的演变, 得到晶体取向的影响因素, 但单晶中不存在晶界的影响. 在多晶中虽然存在

晶界的影响, 但由于多晶中无法跟踪晶体取向的演变, 且晶体取向复杂, 也为研究带来了不便^[5-8].

以前的金属变形组织的模拟研究认为样品内部所有晶粒所受的应力应变状态相同, 但实验表明并非如此. 随着有限元的引入, 出现了多种新的模拟方法. 这些模型均考虑到每个晶粒所受的应力应变状态, 模拟单个晶粒取向在变形过程中的演变^[9]. 但是由于缺乏多晶样品中单个晶粒取向在变形过程中演变的可靠的结果, 这些模拟结果也无法得到验证. 为获得多晶样品中单个晶粒取向在变形过程中演变的结果, 有的工作研究多晶样品外表面或内截面内晶粒取向的演变, 也有的采用准柱状晶样品研究晶粒取向的演变^[10-14]. 但这些研究结果都是表面或近表层晶粒的结果, 表层晶粒的变形行为和样品心部晶粒的不同, 因此对其晶粒取向演变的模拟有待甄别. 柱状晶样品沿晶体生长方向上具有相同的晶粒结构和取向, 沿垂直于晶体

* 国家自然科学基金资助项目 59825110 和 50231030

收到初稿日期: 2003-07-15, 收到修改稿日期: 2003-11-11

作者简介: 吴桂林, 1975 年生, 博士生

生长方向切割一系列样品, 这些样品具有相同的组织结构和晶体取向^[14]. 将这一系列柱状晶样品分别轧制到不同的压下量, 便可跟踪研究柱状晶样品中每个晶粒的晶体取向的演变过程. 由于柱状晶样品中存在晶界, 因而可同时研究晶体取向和晶界等因素的影响.

本工作采用柱状晶 Ni 样品, 跟踪样品中每一个晶粒在冷轧过程中晶体取向的演变, 采用 Taylor 模型模拟每个晶粒取向的演变并与实验结果想比较. 通过晶体取向演变的统计性结果, 分析影响晶体取向演变因素, 并讨论了 Taylor 模型在模拟晶体取向时存在的问题.

1 实验方法

实验材料是通过定向凝固方法制备的高纯柱状晶 Ni 样品, 铸锭的截面尺寸为 60 mm×12 mm, 长度为 200 mm. 沿垂直于柱状晶生长方向切割厚度不同的 4 个样品, 表面磨平后, 在室温下进行轧制. 在轧制过程中柱状晶样品的生长方向平行于 ND (RD, TD 和 ND 分别表示样品的轧向、横向和轧面法向), 如图 1 所示, 并保证在轧制过程中 RD 方向的保持不变. 4 个样品中, 第一个为未变形状态 (即压下量为 0%), 另三个分别轧制到 10%、30% 和 50% (真应变分别为 0, 0.11, 0.36 和 0.69). 为保证轧制过程中的平面应变条件, 在轧制过程中每一个道次保持几何变形参数 $\Delta=l/d$ (其中 l 为样品与轧辊之间的接触长度, d 为样品轧制前后的平均厚度) 大约为 2.5. 轧辊的尺寸为 300 mm, 轧辊的转速为 18 r/min. 因为 Δ 约为 2.5, 轧辊尺寸为 300 mm, 所以未变形和压下量为 10% 样品的厚度为 2 mm, 而压下量为 30% 和 50% 的样品的厚度为 4 mm.

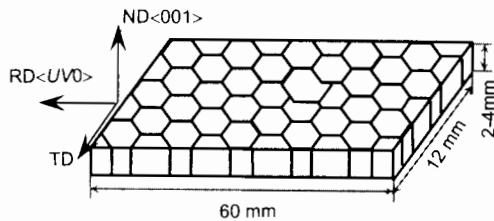


图 1 柱状晶样品轧制示意图

Fig. 1 The sketch of columnar grain sample during rolling

轧完后, 每个样品在轧面上沿 ND 磨掉约 1/4 厚的材料, 然后采用硫酸基的电解液电解抛光. 在未变形的样品轧面的中部 10 mm×10 mm 区域中, 用 EBSP 的样品台扫描模式扫描整个区域, 测量未变形样品晶粒的取向, 扫描所采用的步长为 100 μm . 同样在 3 个变形的样品上与未变形样品观察区域相对应的区域中, 用 EBSP 测量晶粒轧制后的取向. 在压下量为 10% 和 30% 的样品上, EBSP 首先采用样品台扫描模式, 步长为 100 μm , 然后再在压下量为 50% 的样品上, EBSP 采用电子束扫描模式, 步长为 10 μm . 由于受到电子束扫描范围的限制, 需要多个扫描拼接在一起才能扫描到整个区域.

2 实验结果与讨论

根据 EBSP 的结果按照 5° 定义晶界, 重构出每个晶粒, 由等面积法计算出每个晶粒的尺寸, 由四元素法 (quaternion method)^[15] 计算出晶粒的平均取向. 图 2 是未变形样品分析区域中晶粒的组织结构.

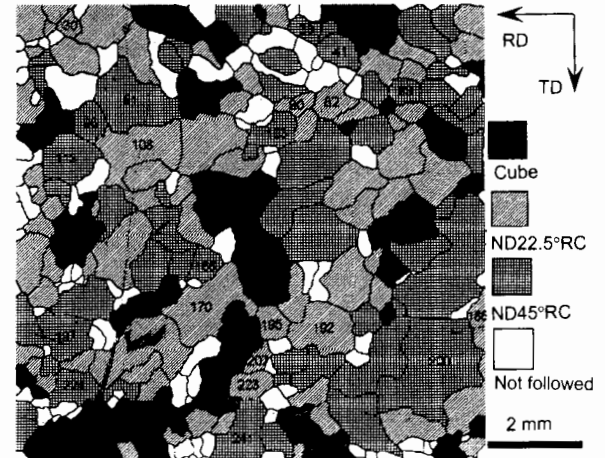


图 2 未变形样品轧面上晶粒的微观组织结构及取向示意图

Fig. 2 The sketch of microstructure and orientations of individual grains on the rolling plane of the undeformed sample. In the figure the numbers to be the symbols of grains within 5° to three ideal orientations (C—(100), ND22.5°RC—(940), ND45°RC—(110)), respectively

未变形样品晶粒的取向如图 3a 所示, 从极图可以看出柱状晶晶粒的原始取向为 $\{001\}\langle UV0 \rangle$, 即 ND 集中在 $\langle 001 \rangle$ 晶向上, 而 RD 的方向是随机的. 根据晶粒的原始取向将所有的晶粒分为三类: 第一类是晶粒的 RD 与 $\langle 100 \rangle$ 的夹角小于 15°, 第二类是晶粒的 RD 与 $\langle 100 \rangle$ 的夹角大于 15° 而小于 30°, 而第三类是晶粒的 RD 与 $\langle 100 \rangle$ 的夹角大于 30° 而小于 45°. 因此第一类晶粒的取向接近于立方取向 (简称 cube), 即 $\{001\}\langle 100 \rangle$; 第二类晶粒的取向接近于 ND22.5° 旋转立方取向 (简称 ND22.5°RC), 即立方取向沿 ND 转动 22.5° ($\{001\}\langle 940 \rangle$); 第三类晶粒的取向接近于 ND45° 旋转立方取向 (简称 ND45°RC), 即立方取向沿 ND 转动 45° ($\{001\}\langle 110 \rangle$). 三类不同取向的晶粒分别用不同的填充模式表示在图 2 中, 与三类理想取向的偏差小于 5° 的晶粒标号也显示在图 2 上.

图 3b 是未变形样品晶粒尺寸分布, 由图中可见晶粒尺寸分布在一个很大的范围内, 从最小的 100 μm 到最大的 2000 μm . 但是大部分晶粒的尺寸分布在 100—900 μm 的范围内.

在未变形样品的分析区域中有 250 多个晶粒, 当轧制到 50% 时能跟踪到约 200 个晶粒. 图 2 中的白色晶粒就是在轧制过程中无法跟踪到的晶粒.

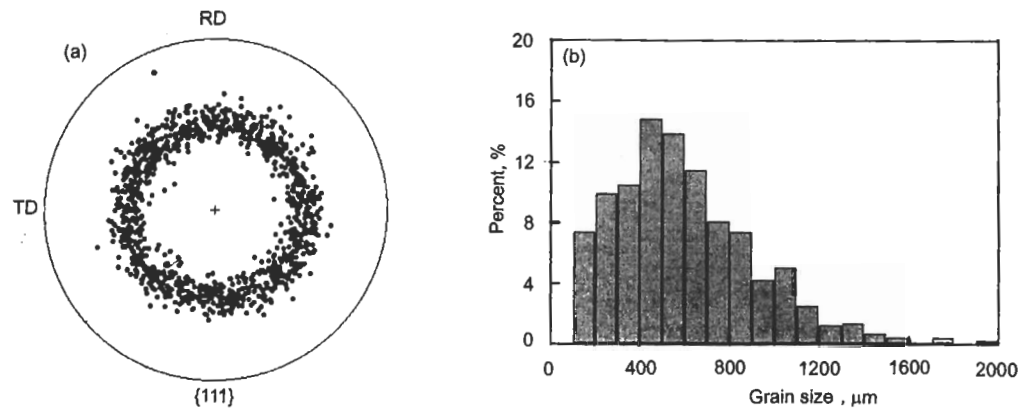


图 3 未变形样品晶粒的取向和晶粒尺寸分布
Fig.3 Distributions of orientation (a) and grain size (b) of individual grains in the undeformed sample

2.1 晶粒取向的演变

图 4 是所有能跟踪到的晶粒在压下量为 50% 时晶粒的平均取向, 与原始取向相比, 晶粒的取向已发生了较大的变化. 变形后, 晶粒的平均取向主要分布在 cube, $\{116\}\langle 19\ 54\rangle$ 和 $\{113\}\langle 332\rangle$ 取向. 与变形前的取向 (图 3a) 比较, cube 取向还保留了较多, $ND22.5^\circ RC$ 取向减少了很多, 而 $ND45^\circ RC$ 取向几乎消失.

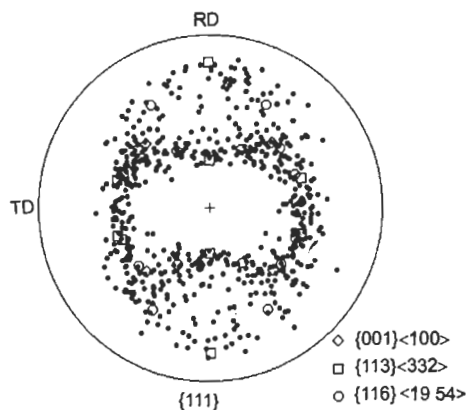


图 4 柱状晶样品在压下量为 50% 时晶粒的平均取向
Fig.4 The mean orientations of individual grains in columnar grain sample after rolled to 50% reduction

在三类取向的晶粒中, 变形前与三个理想取向的偏差小于 5° 的晶粒在压下量为 50% 时晶粒的平均取向分别如图 5 所示. 从图中可见, cube 取向晶粒的平均取向绕 RD 转向 $RD15^\circ C$ (即 cube 取向绕 RD 转动 15°), 如果继续绕 RD 转动, 晶粒取向将转向 Gauss 取向. $ND22.5^\circ RC$ 取向的晶粒绕着一个极点转向 $\{116\}\langle 19\ 54\rangle$ 取向, 如果继续绕极点转动, 晶粒取向将转向 $S(\{123\}\langle 634\rangle)$ 取向. 而 $ND45^\circ RC$ 取向的晶粒绕着 TD 转向 $\{113\}\langle 332\rangle$, 如果继续绕 TD 转动, 晶粒取向将转向 $Cu(\{112\}\langle 111\rangle)$ 取向. 在变形过程中, 三种取向的平均取向不仅转动方向不同, 而且它们的最大转角也不同, cube 取向的平均转角

最小约为 15° , $ND22.5^\circ RC$ 取向的平均转角为 20° , 而 $ND45^\circ RC$ 取向的平均转角最大约为 25° .

在压下量为 50% 的样品中, 如果沿平行于 RD 方向将样品平分为左右两个部分, 对于 cube 取向的晶粒, 其位于样品右侧的晶粒 (如 3, 24, 25 和 32) 平均取向将绕 RD 沿着顺时针方向转动, 而位于样品左侧的样品晶粒 (如 156, 302, 240 和 257) 平均取向将绕 RD 沿着逆时针方向转动. 图 6 为 cube 取向的晶粒的标号和它们在 50% 压下量时的平均取向. 对于 $ND22.5^\circ RC$ 和 $ND45^\circ RC$ 取向的晶粒则不存在这种对应关系.

在研究 cube 取向的单晶 Al 和 Ni 中, 其轧制过程中晶体取向一般都绕 TD 转动而产生沿 TD 的分散, 此外也有报道晶体绕 RD 转动^[16]. 本文的实验结果表明, cube 取向晶粒的极图中也存在较大的沿 TD 的分散. TD 转动是由应变 ε_{13} (其中 1, 2 和 3 分别表示样品的 RD, TD 和 ND) 产生的, 而 RD 转动则是由应变 ε_{23} 产生的. ε_{13} 是晶体在变形过程中由几何因素产生的, 而 ε_{23} 是由非理想平面应变条件所产生的. 在本文中, 虽然在每道次中控制几何因素以保证平面应变条件, 但是由于柱状晶样品的厚度和宽度的比值在 2—5, 样品变形后有一定的宽展, 因而实际变形条件并非完全理想的平面应变条件, 所以存在 ε_{23} , 同时也表明 cube 取向对 ε_{23} 不稳定. $ND22.5^\circ RC$ 取向在变形过程中绕极点转向 $\{116\}\langle 19\ 54\rangle$, 但是这个取向在以前文献中未见详细报道. $ND45^\circ RC$ 取向在变形过程中绕 TD 转向 $\{113\}\langle 332\rangle$, $\{113\}\langle 332\rangle$ 与 D ($\{4\ 4\ 11\}\langle 11\ 11\ 8\rangle$) 和 Cu 取向都比较接近. 在以前的文献中, $ND45^\circ RC$ 取向的单晶和多晶 Al 或 Ni 在轧制和拉伸过程中都转向 D 和 Cu 取向, 与本文的结果一致. 虽然样品在变形过程中还存在 ε_{23} , 但是 ε_{23} 并没有在 $ND22.5^\circ RC$ 和 $ND45^\circ RC$ 取向的晶粒产生绕 RD 的转动, 因而表明 $ND22.5^\circ RC$ 和 $ND45^\circ RC$ 取向对 ε_{23} 稳定.

在上述的结果中, 每一类取向晶粒的原始取向相差都

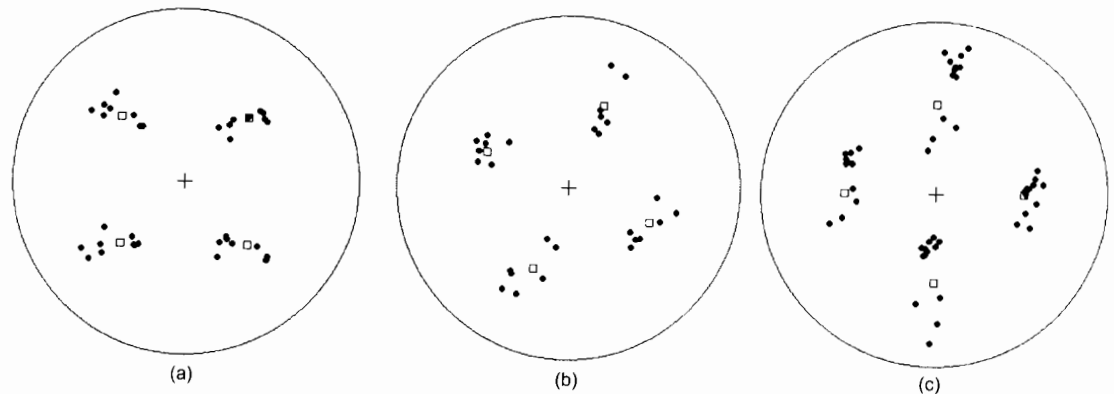


图5 柱状晶样品在压下量为 50% 时晶粒的平均取向的 {111} 极图

Fig.5 The {111} pole figures of mean orientations for grains with initial orientations within 5° to cube (a), ND22.5°RC (b) and ND45°RC (c) orientations in columnar grain sample after rolled to 50% reduction. In the pole figures, the squares representing the three ideal orientation, respectively

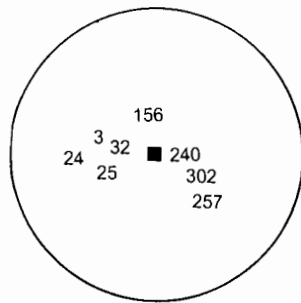


图6 Cube 取向晶粒在压下量为 50% 时的 {111} 极图

Fig.6 The {111} pole figure of grains with initial cube orientation after rolled to 50%

比较小,但是变形后晶粒取向的转动方向和转角有一定的差别.这些晶粒变形前的取向很接近,晶粒在变形过程中晶体转动的差别是由晶粒尺寸或晶粒与晶粒之间的相互作用形成的.

2.2 晶粒取向演变的模拟

本工作采用全约束 Taylor 模型^[17],用平均法计算晶粒取向在轧制过程中的演变.由于在变形过程中通过控制变形条件保持平面应变条件,因而在模拟时采用平面应变条件,即

$$\varepsilon_{33} < 0$$

$$\varepsilon_{12} = \varepsilon_{13} = \varepsilon_{22} = \varepsilon_{23} = 0$$

图7是模拟的压下量为 50% 时柱状晶 Ni 中所有晶粒的平均取向,从图中可以看出模拟的变形后的主要取向有 cube, {116}⟨19 54⟩ 和 {113}⟨332⟩,而测量的晶粒平均取向(图4)主要是 RD15°C, {116}⟨19 54⟩ 和 {113}⟨332⟩.与测量结果比较, {116}⟨19 54⟩ 和 {113}⟨332⟩ 取向与测量结果吻合,而 cube 取向与测量结果不吻合,此外模拟的结果中晶粒取向的集中程度明显要高得多.

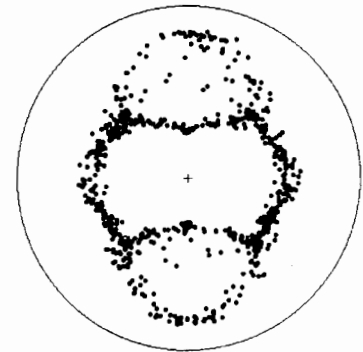


图7 模拟柱状晶 Ni 在压下量为 50% 时晶粒平均取向的 {111} 极图

Fig.7 The {111} pole figure of the modelled mean orientations of individual grains in columnar grain Ni after rolled to 50%

图8分别是变形前与 cube, ND22.5°RC 和 ND45°RC 取向的偏差小于 5° 的所有晶粒压下量为 50% 时模拟的平均取向.由图中可以看出,按照 Taylor 模型 cube 取向是稳定取向,在变形过程中几乎不发生转动,而 ND22.5°RC 和 ND45°RC 取向是不稳定的取向,分别转向 {116}⟨19 54⟩ 和 {113}⟨332⟩.与测量结果相比, cube 取向晶粒的模拟结果不吻合, ND22.5°RC 和 ND45°RC 取向晶粒的模拟结果不仅转动方向而且最大的转角都比较吻合,所以在图 8a 中测量结果与模拟结果几乎没有重叠,而图 8b, c 中有部分测量结果与模拟结果重叠.

为进一步验证 Taylor 模型,模拟了图8中显示的所有晶粒在变形过程中取向的演变,并将模拟结果与测试结果对比.因为在图 8a 中几乎没有结果相重叠,所以变形前与 cube 取向的偏差小于 5° 的 8 个晶粒的模拟结果中没有一个与测量结果吻合.作为一个例子,图 9a 给出了晶粒 25 的测量结果和模拟结果.变形前与 ND22.5°RC 取向的偏差小于 5° 的 10 个晶粒中,有 2 个晶粒的模拟

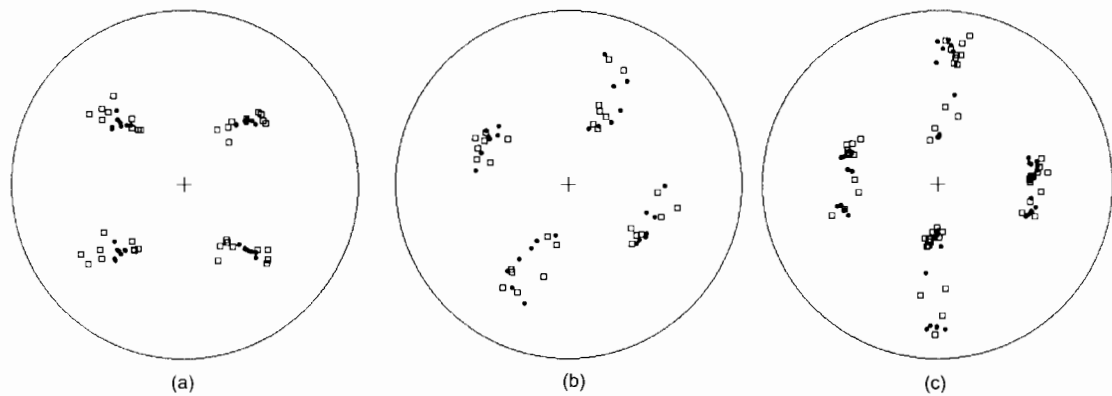


图 8 柱状晶中变形前与 cube, ND22.5°RC 和 ND45°RC 取向偏差小于 5° 的晶粒在压下量为 50% 时模拟的平均取向的 {111} 极图

Fig.8 The {111} pole figures of modelled mean orientations of grains in columnar grain Ni with initial orientations within 5° to cube (a), ND22.5°RC (b) and ND45°RC (c) orientations after rolled to 50%. In the figures, the points representing the modelled mean orientations of grains, squares the measured mean orientation of grains

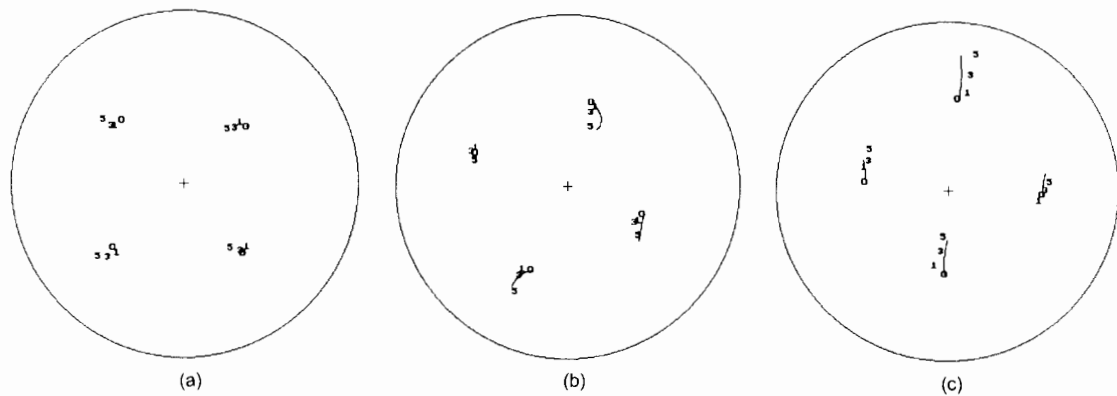


图 9 晶粒 25, 晶粒 207 和晶粒 96 在轧制过程中平均取向演变的模拟 ({111} 极图)

Fig.9 The modelled orientation evolution of grain 25 (a), grain 207 (b) and grain 96 (c) during rolling ({111} pole figure). In the figures, 0, 1, 3 and 5 representing the measured mean orientations of the grains after rolled to 0%, 10%, 30% and 50%, respectively, the curves the modelled orientation rotation paths of the grains during cold rolling

结果与测量结果非常吻合, 有 2 个晶粒的模拟结果与测量结果比较吻合, 而其余晶粒的模拟结果与测量结果不吻合. 图 9b 为晶粒 207 的测量结果和模拟结果. 变形前与 ND45°RC 取向的偏差小于 5° 的 12 个晶粒中, 有 5 个晶粒的模拟结果与测量非常吻合, 有 2 个晶粒的模拟结果与测量比较吻合, 其余晶粒的模拟结果与测量结果不吻合. 图 9c 为晶粒 96 的测量结果和模拟结果.

根据本工作中采用的 Taylor 模型, cube 取向的晶粒有 12 种滑移系组合, ND22.5°RC 取向的晶粒有 6 种滑移系组合, ND45°RC 取向的晶粒有 4 种滑移系组合, 所以本工作中所采用的 Taylor 模型在滑移系组合的选择上依然存在不唯一性的问题. 对于 cube 取向的晶粒, 12 种组合之间差别很大, 按照每种组合计算变形后的晶体取向都不相同, 因而采用平均法计算变形后的晶体取向也与

每种组合计算的晶体取向差别很大, 所以模拟结果与测量结果相差很远. 对于 ND22.5°RC 取向的晶粒, 6 种组合之间的差别不大, 采用平均法计算变形后的晶体取向也与每种组合计算的晶体取向差别不大, 所以只有小部分模拟结果与测量结果吻合. 而对于 ND45°RC 取向的晶粒, 4 种组合之间的差别很小, 采用平均法计算变形后的晶体取向也与每种组合计算的晶体取向差别也很小, 因而大部分模拟结果与测量结果吻合. 从上面的分析可见, 模拟结果与测量结果不完全吻合的原因主要是在滑移系组合的选择上存在不唯一性.

在 Taylor 模型中本文采用了理想的平面应变条件, 而样品在变形过程中的实际受力状态并非理想的平面应变条件, 这也导致模拟结果与测量结果不完全吻合. 虽然晶粒取向的演变也受晶粒尺寸和晶粒与晶粒之间的相互

作用的影响,但是由于受到模型本身的限制,因而不能分析这些影响因素,这也是模拟结果与测量结果不完全吻合的一个原因.

Skalli 等^[11]用 Taylor 模型模拟多晶 Al 表面晶粒在轧制过程中晶粒取向的演变,结果表明部分晶粒取向的演变符合 Taylor 模型、部分符合 Sach 模型、而部分晶粒两者都不符合. Panchanadeeswaran 等^[12]采用晶体塑性力学基础上的有限元法模拟样品内部晶粒取向在塑性变形过程中的演变,并与 Taylor 模型模拟的结果和实验结果比较.虽然有限元法模拟考虑了晶粒局部的应力应变的协调,模拟的结果并没有得到有效的改善.有限元法模拟变形后晶粒取向的分散较直接用 Taylor 模型模拟的结果大,但是晶体取向的转动并没有太大的区别,即便如此,模拟的组织强度也大于实测的强度.因此为了正确模拟晶粒取向在塑性变形过程中的演变,需要进一步研究塑性变形的物理机制,并发展新的模型.

3 结论

通过跟踪研究柱状晶 Ni 在变形过程中晶粒取向的演变,获得晶粒取向演变的统计性结果,并对晶粒取向的演变采用经典 Taylor 模型模拟,得出以下结论:

(1) 晶粒在变形过程中取向的演变主要决定其原始取向,晶粒与晶粒之间的相互作用也有一定的影响.

(2) 在压下量为 50% 时, cube 取向的晶粒绕 RD 的转向 RD15°C, ND22.5°RC 取向的晶粒绕极点转向 {116}{19 54}, 而 ND45°RC 取向的晶粒绕 TD 转向

{113}{332}.

(3) 通过 Taylor 模型模拟表明,只有部分晶粒在轧制过程中晶粒取向的演变符合 Taylor 模型.

参考文献

- [1] Hansen N. *Metall Mater Trans A*, 2001; 32A: 2917
- [2] Bay B, Hansen N, Hughes D A, Kuhlmann-Wilsdorf D. *Acta Metall Mater*, 1992; 40: 205
- [3] Hughes D A, Hansen N. *Metall Trans*, 1993; 24A: 2021
- [4] Hansen N, Juul Jensen D. *Proc R Soc Lond A*, 1999; 357: 1447
- [5] Liu Q, Juul Jensen D, Hansen N. *Acta Mater*, 1997; 46: 5819
- [6] Huang X, Hansen N. *Scr Mater*, 1997; 38: 1
- [7] Huang X. *Scr Mater*, 1998; 38: 1697
- [8] Delannay L, Mishin O V, Juul Jensen D, Van Houtte P. *Acta Mater*, 2001; 49: 2441
- [9] Solas D E, Tome C N. *Inter J Plast*, 2001; 17: 737
- [10] Hirsch J, Nes E, Lücke K. *Acta Metall*, 1987; 35: 427
- [11] Skalli A, Fortunier R, Fillit R, Driver J H. *Acta Metall*, 1985; 33: 997
- [12] Panchanadeeswaran P, Doherty R D, Becker R. *Acta Mater*, 1996; 44: 1233
- [13] Raabe D, Sachtleber M, Weiland H, Scheele G, Zhao Z. *Acta Mater*, 2003; 51: 1539
- [14] Bhattacharyya A, El-Danaf E, Kalidindi S R, Doherty R D. *Inter J Plast*, 2001; 17: 861
- [15] Krieger Lassen N C, Juul Jensen D, Conradsen K. *Acta Crystall*, 1994; A50: 741
- [16] Hartig C H, Feller-Kniepmeier M. *Acta Metall*, 1985; 33: 743
- [17] Taylor G J. *J Ins Met*, 1938; 62: 307