体心立方金属位错滑移时反应应力对取向变化的影响

毛卫民 陈 冷 余永宁

(北京科技大学材料学系, 北京 100083. E-mail: wmmao@mater.ustb.edu.cn)

摘要 提出了一种考虑反应应力的体心立方金属塑性变形模型, 计算了位错开动所造成的切应变及可能会引发的反应应力, 并使之影响到后续的位错开动过程. 在{110}和{112}两类滑移面上的临界切应力比为 0.95, 第 2 位错与第 1 位错取向因子差小于 5%, 第 2 位错也同时开动的条件下计算了体心立方金属冷轧80%时的变形织构. 结果表明, 所计算的织构比以往其他计算模型更接近冷轧80%无间隙原子钢板的实际织构. 分析认为, 该模型可以兼顾多晶体塑性变形时应变与应力的连续性, 因而更接近于体心立方金属变形的真实晶体学过程.

关键词 体心立方金属 塑性变形 织构 应力 应变 模拟

体心立方金属多晶体塑性变形所产生的晶体学织构会对随后的再结晶织构和相应工程性能的各向异性产生重要的影响. 人们对体心立方金属塑性变形的晶体学过程进行了大量的研究, 根据所开动位错的滑移可以计算出晶体取向的变化和变形织构. 但由于体心立方金属位错滑移面的多样性以及多晶体晶粒间应变和应力连续问题的复杂性[1], 人们至今还不能比较合理地计算和预测体心立方金属塑性变形织构. 位错在塑性变形的滑移过程不仅会产生一个三维应变张量, 而且也会同时与周围其他取向的晶粒作用而产生一个三维应力张量[2]. 高塑性多晶体变形时变形体内各微元间会同时保持应变与应力的连续, 而采用现有的晶体学塑性变形理论模型很难同时兼顾这两种连续性[2,3]. 目前, 较多使用的织构计算模型侧重于应变的连续性, 当模拟结果与实际不符时, 则考虑放弃对应变张量中某些分量的限制[4], 使位错滑移造成的这种应变分量在不考虑周围晶粒阻碍作用的前提下得以完全实现, 这显然与实际变形过程不符. 因此, 现有的模拟计算不仅在物理本质上有缺陷, 而且计算结果与实际织构也有明显差别.

在外力作用下, 塑性变形晶粒内总有一个位错因所承受的切应力率先达到临界值而滑移. 本研究从这一点出发, 计算每一个位错开动后所造成的各应变分量与周围环境的作用及随之产生的反应应力, 进而在外应力和反应应力共存的条件下计算下一个开动的位错. 反应应力与前一位错滑移所造成的应变分量成正比, 因而会以不同方式变更下一个开动的位错, 以降低反应应力及变形晶粒与周围晶粒的应变不相容性(或不连续性).

1 位错滑移面的选择

体心立方金属中的位错通常会在{110}和{112}晶面上滑移. 实际观察到的诸如{123}等其他晶面上的滑移也可以通过{110}和{112}面滑移的适当组合而实现. 一个位错在外应力作用下于{110}或{112}面上的开动不仅取决于位错的取向因子μ, 而且也取决于促使位错开动的临界分切应力$\sigma_{c\{110\}}$和$\sigma_{c\{112\}}$, 其中{110}面的$\sigma_{c\{110\}}$和{112}面的$\sigma_{c\{112\}}$往往并不相同. 设 k 是$\sigma_{c\{110\}}$与$\sigma_{c\{112\}}$之间的比值, 则有

$$k = \sigma_{c\{110\}} / \sigma_{c\{112\}}. \quad (1)$$

由此可以推导出

$$\sigma_{c\{110\}} = \sigma_y \cdot \mu_{110} = \sigma_y \cdot (k \cdot \mu_{112}), \quad (2)$$

其中σ_y表示屈服应力, μ_{110}和μ_{112}分别表示{110}和{112}面上位错的取向因子. 模拟计算表明[5], 当 k 值小于 0.85 时, 位错已不能在{112}面上滑移, 而当 k 值大于 1.16 时, 位错则不能在{110}面上滑移. 实际体心立方金属位错在{110}面上的临界分切应力会略低于{112}面[6], 因而 k 值可取为 0.95[7].

图 1(a)和(b)分别给出了工业上高纯净普通和高强无间隙原子钢板冷轧 80%后在中心层测得的织构[7]. 参照图 1(d)可以看出, 晶体取向密度主要聚集在α($\varphi_1 = 0°$, $\Phi = 0° \sim 55°$, $\varphi_2 = 45°$)和γ($\varphi_1 = 0° \sim 90°$, $\Phi = 55°$, $\varphi_2 = 45°$)取向线附近.

在模拟轧制织构过程中, 通常假设外应力张量(σ_{ij})为[2~4,8]

$$(\sigma_{ij}) = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} = \frac{\sigma_s}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3)$$

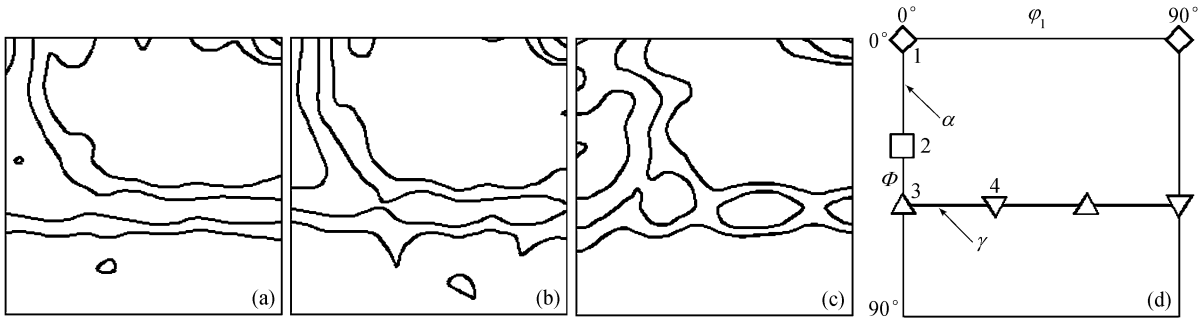

图 1 无间隙原子钢冷轧 80%后的织构(取向分布函数φ_2 = 45°截面图, 密度水平: 2, 4, 8, 16)

(a) 普通无间隙原子钢板织构, 最大 9.4; (b) 高强无间隙原子钢板织构, 最大 12.8; (c) k = 0.95 时模拟计算的织构, 最大 16.7; (d) φ_2 = 45°截面图上重要取向的位置. 1 示{001}〈110〉, 2 示{112}〈110〉, 3 示{111}〈110〉, 4 示{111}〈112〉

其中, 下标 1, 2 和 3 分别对应轧板的轧向、横向和法向. 在外应力作用下首先达到临界分切应力并且开动的位错应具有最大的取向因子.

取 k 值为 0.95, 在不考虑应变连续问题的前提下, 以(3)式所示的应力状态和单系滑移模型[8]模拟计算冷轧 80%的织构. 结果如图 1(c)所示, 大体再现了实际晶体取向在α和 γ取向线附近的聚集情况. 但与图 1(a)和(b)相比, 模拟计算的取向密度在α和 γ取向线上的分布呈现更大的起伏, 明显偏离实际情况. 改变 k 值会使这种偏离以不同形式加大, 而采用现有的各种形式的应变连续模型也不能改善模拟结果[2,4]. 因此需要建立更为合理的多晶体塑性变形模型.

2 反应应力的计算

设位错的柏氏矢量和滑移面法向分别为 $\boldsymbol{b}$ = (b_1, b_2, b_3)和 $\boldsymbol{n}$ = (n_1, n_2, n_3), 则该位错滑移造成的应变张量可表达为[7]

$$(\varepsilon_{ij}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} = \delta \cdot \begin{pmatrix} b_1n_1 & \frac{1}{2}(b_1n_2+b_2n_1) & \frac{1}{2}(b_1n_3+b_3n_1) \\ \frac{1}{2}(b_2n_1+b_1n_2) & b_2n_2 & \frac{1}{2}(b_2n_3+b_3n_2) \\ \frac{1}{2}(b_3n_1+b_1n_3) & \frac{1}{2}(b_3n_2+b_2n_3) & b_3n_3 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

其中, ε_{ii} 为正应变分量, ε_{ij} ($i \neq j$)为切应变分量, δ 为晶体坐标系内位错滑移造成的切变量.

(4)式所示一晶粒内某位错滑移造成的切应变分量通常会因周围晶粒的阻滞而不能完全实现. 这种阻滞作用表现为切应变分量诱发的反应应力. 这种反应应力与外应力叠加会改变变形晶粒的受力状态, 进而导致其他位错的开动. 假设一变形晶粒被取向随机分布的晶粒包围, 则可用 Hooke 定律计算反应应力 σ'_{ij}. 根据广义 Hooke 定律有[9]

$$\begin{bmatrix} \sigma'_{11} \\ \sigma'_{22} \\ \sigma'_{33} \\ \sigma'_{12} \\ \sigma'_{23} \\ \sigma'_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda+2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda+2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda+2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2\mu \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} \end{bmatrix}, \quad (5)$$

其中, 对 Lame 系数 λ 和 μ 有

$$\lambda = \frac{Ev}{(1+v)(1-2v)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1+v)}, \quad (6)$$

式中 E 是杨氏模量, v 是 Possion 比, 铁的 v 值约为 0.29[10]. 参照(4) ~ (6)式可算出反应应力张量为

$$(\sigma'_{ij}) = E \cdot \begin{pmatrix} \varepsilon_{11}/1.29+0.29(\varepsilon_{22}+\varepsilon_{33})/0.5418 & \varepsilon_{12}/1.29 & \varepsilon_{13}/1.29 \\ \varepsilon_{21}/1.29 & [0.71\varepsilon_{22}+0.29(\varepsilon_{11}+\varepsilon_{33})]/0.5418 & \varepsilon_{23}/1.29 \\ \varepsilon_{31}/1.29 & \varepsilon_{32}/1.29 & \varepsilon_{33}/1.29+0.29(\varepsilon_{11}+\varepsilon_{22})/0.5418 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

一位错开动所产生的如(4)式所示的应变张量会以(7)式的形式产生弹性反应应力张量, 进而与外应力张量((3)式)结合, 以 σ_{ij}-σ'_{ij} 的方式影响下一个位错的开动. 考虑到反应应力的弹性性质, 设 ε_{ne} 或 ε_{se} 分别是周围晶粒最大的弹性正应变和弹性切应变, 则塑性变形时, 在拉伸屈服应力 σ_s 或剪切屈服应力 τ_s 的作用下有

$$\sigma_s = E \cdot \varepsilon_{ne}, \quad \tau_s = 2\mu \cdot \varepsilon_{se} = E \cdot \varepsilon_{se}/1.29. \tag{8}$$

在轧制变形条件下, 周围晶粒也要发生塑性变形. 这样, 主弹性应变分量 ε_{11e} 和 $-\varepsilon_{33e}$ 总是保持其可能的最高值 ε_{ne}, 即 $\varepsilon_{11e} = -\varepsilon_{33e} = \varepsilon_{ne}$, 因此, 有

$$\sigma_s = E \cdot (\varepsilon_{11e} - \varepsilon_{33e}) = 2E \cdot \varepsilon_{ne}. \tag{9}$$

考虑到屈服条件下纯剪切面上的切应力并参照(8)式, 屈服应力 σ_s 与 τ_s 的关系为

$$\tau_s = \sigma_s/2 = E \cdot \varepsilon_{se}/1.29. \tag{10}$$

因此, 下一个开动位错实际承受的应力为

$$(\sigma_{ij}) = \frac{\sigma_s}{2} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -\varepsilon_{12}/|1.29 \cdot \varepsilon_{33}| & -\varepsilon_{13}/|1.29 \cdot \varepsilon_{33}| \\ -\varepsilon_{21}/|1.29 \cdot \varepsilon_{33}| & -[0.71\varepsilon_{22} + 0.29(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33})]/|0.5418\varepsilon_{33}| & -\varepsilon_{23}/|1.29 \cdot \varepsilon_{33}| \\ -\varepsilon_{31}/|1.29 \cdot \varepsilon_{33}| & -\varepsilon_{32}/|1.29 \cdot \varepsilon_{33}| & -1 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

参照(10)式, 同时考虑剪切反应应力 τ_{ij} 造成环境屈服和未造成屈服的两种不同情况而定义参数 s 为

$$\tau_{ij} = s \cdot \sigma_s \leqslant \sigma_s/2. \tag{12}$$

即剪切反应应力的上限参数 s 为 0.5, 根据(8)~(10)式有

$$|[0.71\varepsilon_{22} + 0.29(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{33})]/0.5418\varepsilon_{ne}| \leqslant 1,$$

$$|\varepsilon_{ij}/(1.29 \cdot \varepsilon_{se})| \leqslant s (i \neq j).$$

(11)式同时包括了(3)式所描述的轧制变形的外应力和(7)式所示变形晶粒承受的由周围环境所施加的实际弹性反应应力, 因而可以取代(3)式作为计算位错取向因子的依据. 也就是说, 一位错开动后所产生的应力场会以(11)式的形式影响下一个开动位错的选择. 反应应力会促使下一个位错开动时一定程度减低前一个位错造成的如(4)式所示的剪切应变分量 $\varepsilon_{ij}(i \neq j)$, 降低不同取向的相邻晶粒间应变的不协调性. 因此, 这种计算模式接近实际变形过程的多位错系滑移模式, 且可以一定程度兼顾多晶体应变的连续性.

3 反应应力对织构的影响

采用常规的模拟计算方法[3,4,7,8]并根据(11)式和上述反应应力对位错开动的影响模式, 模拟计算了不同反应应力条件下体心立方金属冷轧 80%时的织构. 图 2 给出了模拟计算的结果. 可以看出, 随着反应应力上限参数 s 值的上升冷轧织构会发生变化. 当 s 值为 0.03 或 0.05 时, γ取向线上取向密度分布的起伏程度显著降低, 更接近冷轧无间隙原子钢板的织构(图 1(a), (b)), 优于图 1(c)的计算结果. 然而, 当 s 值达到其最高值 0.5 时, γ取向线上的密度分布又偏离了冷轧无间隙原子钢板的织构(图 2(d)), 即取向{111}〈112〉上的密度值升高而取向{111}〈110〉上的密度值明显降低(参见图 1(d)). 这表明(10)和(11)式所计算出的反应应力并不会全部作用于变形晶粒整体的位错开动过程. 设想多晶体的实际变形过程, (10)和(11)式所给出的反应应力会直接作用于变形晶粒与周围晶粒接壤的边界上, 当其向变形晶粒内部传递时会有所递减, 因而减弱了反应应力对位错开动的影响力. 另外, 在取向{001}〈110〉附近也可以发现, 模拟计算的取向密度分布(图 2(b), (c))与实际冷轧钢板(图 1(a), (b))尚有较大差别.

以往的模拟分析表明[8], 在多晶体塑性变形过程中, 当取向因子最大的两个位错的取向因子值非常接近时, 其各自开动时所产生(如(4)式所示)的切应变分量会很大程度地相互抵消, 进而增进多晶体的应变相容性, 此时应在模拟计算中令第 2 位错同时开动. 图 3 给出了当第 2 位错与第 1 位错的取向因子差小于 5%, 第 2 位错也同时开动条件下, 模拟计算出的体心立方金属冷轧 80%的织构. 其中, 取向{001}〈110〉附近的取向密度分布得到显著提高, 而且 α取向线上密度分布的起伏状况也进一步趋向于实际情况. 可以看出, 图 3 的模拟计算结果更加接近图 1(a)和(b)所示的实际体心立方金属的织构.

本模型假设变形晶粒被取向随机分布的晶粒包围, 在高变形量时, 这种随机环境会被织构环境所取代. 这种影响因素尚未在本模型中予以考虑, 因而, 可能是造成模拟的取向密度仍高于实测值的原因. 在这方面, 本模型尚需改进.

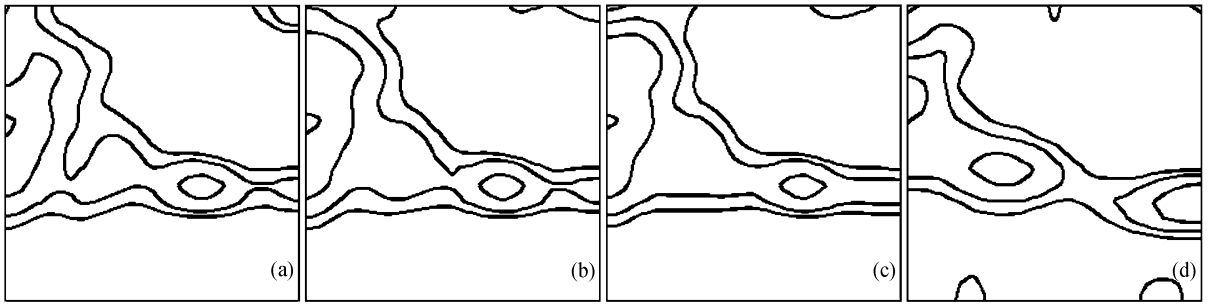

图 2 不同反应应力上限条件下体心立方金属冷轧 80%织构的模拟结果
(a) s = 0.01, 最大 16.9; (b) s = 0.03, 最大 17.3; (c) s = 0.05, 最大 16.9; (d) s = 0.5, 最大 13.0. k = 0.95; 取向分布函数φ_2 = 45°截面图; 密度水平: 2, 4, 8, 16

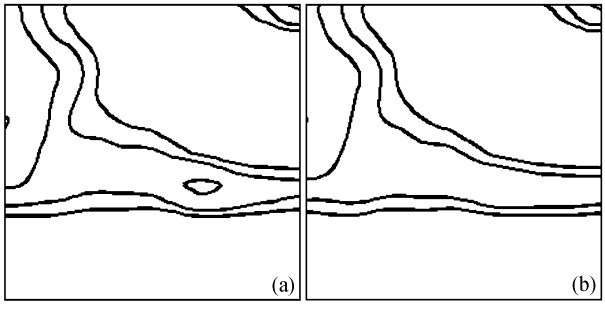

图 3 第 2 与第 1 位错的取向因子差小于 5%并同时开动时, 冷轧 80%织构的模拟结果
(a) s = 0.03, 最大 16.3, (b) s = 0.05, 最大 16.1. k = 0.95; 取向分布函数φ_2 = 45°截面图; 密度水平: 2, 4, 8, 16

4 结论

所提出的以位错滑移为基础的晶体学变形模型分析计算了变形晶粒可能承受的反应应力, 因而可以兼顾多晶体塑性变形时应变与应力的连续性. 该模型更接近于体心立方金属的真实变形过程, 所模拟计算的轧制织构也比以往模型更接近体心立方无间隙原子钢板的实际织构.

致谢 作者感谢丹麦 RISÖ 国家实验室的 T. Leffers 博士与作者就金属塑性变形模型所作的十分有益的讨论. 本工作为国家自然科学基金资助项目(批准号: 50171014).

参 考 文 献

1 Leffers T. Why we cannot simulate deformation textures. Proc 12th Inter Conf Textures of Materials. Szpunar J A, ed. O-Hawa: NRC Research Press, 1991. 261~266

2 毛卫民, 张新明. 晶体材料织构定量分析. 北京, 冶金工业出版社, 1995. 149~170

3 Hirsch J, Lücke K. Mechanism of deformation and development of rolling texture in polycrystalline fcc metals. Acta Metall, 1988, 36(11): 2863~2927

4 Raabe D. Simulation of rolling textures of bcc metals considering grain interactions and crystallographic slip on {110}, {112} and {123} planes. Mat Sci & Eng, 1995, A197: 31~37

5 Chin G Y. Competition among {110}, {112}, {123}〈111〉 slip modes in bcc metals. Metall Trans, 1972, 3(8): 2213~2216

6 Franciosi P. Glide mechanisms in bcc crystals: An investigation of the case of α-iron through multi-slip and latent hardening test. Acta Metall, 1983, 31(9): 1331~1342

7 Mao W. Simulation of shear texture formation in the surface layer of interstitial free steel sheets. Inter J Engineering Simulation, 2001, 2(1): 17~23

8 Mao W. Modeling of rolling texture in aluminum. Mat Sci & Eng, 1998, A257: 171~177

9 Reid C N. Deformation Geometry for Material Scientist. Oxford: Pergamon Press, 1973. 65~82

10 Hombogen E, Warlimont H. Metallkunde. Berlin: Springer-Verlag, 1991. 84

(2002-04-11 收稿, 2002-08-13 收修改稿)