

# 两相钛合金再结晶退火组织与织构演变的 蒙特卡罗模拟\*

杨亮<sup>1)</sup> 魏承炆<sup>1)2)</sup> 雷力明<sup>3)</sup> 李臻熙<sup>4)</sup> 李赛毅<sup>1)5)†</sup>

1) (中南大学材料科学与工程学院, 长沙 410083)

2) (广东省肇庆市质量计量监督检测所, 肇庆 526060)

3) (中航商用航空发动机有限责任公司, 上海 200241)

4) (北京航空材料研究院, 北京 100095)

5) (有色金属材料科学与工程教育部重点实验室, 长沙 410012)

(2013年3月26日收到; 2013年5月30日收到修改稿)

蒙特卡罗 (MC) 方法被广泛应用于模拟金属材料在退火过程中的静态再结晶行为. 在已有两相材料晶粒长大 MC 模型基础上, 引入形核阶段, 综合考虑再结晶晶粒吞并变形晶粒和再结晶晶粒竞争长大两种情况, 建立了退火时两相合金再结晶 MC 模型. 结合电子背散射衍射所测初始晶粒形貌、相成分、晶体学取向及应变储能相对值, 该模型被应用于 TC11 钛合金退火过程中的微观组织及织构演变模拟. 结果表明, 所建模型能够较好地体现退火过程中两相晶粒的形核及晶粒长大行为. 与  $\beta$  相相比较,  $\alpha$  相具有较低的再结晶速率和较高的晶粒长大速率, 前者主要归结于  $\alpha$  相比较低的初始应变储能, 后者则体现了该条件下初始组织形貌、分布及两相比比例对晶粒长大具有重要影响; 由于非均匀形核的影响, 模拟得到的再结晶速率变化与假设均匀形核的 Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov 再结晶方程存在明显差异. 同时, 两相的基本织构特征在退火过程中无明显变化, 但织构强度增加.

**关键词:** 两相钛合金, 再结晶, 蒙特卡罗方法, 织构

**PACS:** 61.82.Bg, 81.40.Ef, 61.43.Bn, 61.50.Ah

**DOI:** 10.7498/aps.62.186103

## 1 引言

再结晶形核和晶粒长大是金属材料退火过程中显著影响材料组织和性能的主要行为<sup>[1]</sup>. 近年来, 人们借助计算机模拟对单相材料的再结晶行为及其机理进行了比较深入的研究<sup>[2-5]</sup>. 作为代表性的研究, Srolovitz 等<sup>[4,6,7]</sup> 用蒙特卡罗 (MC) 方法模拟了单相材料在均匀形核、非均匀形核及第二相粒子影响等情况下的再结晶过程, 发现在非均匀形核条件下的再结晶分数变化与 Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) 再结晶动力学方程的描述<sup>[8]</sup> 存在显著差异; Raabe 和 Hantcherli<sup>[9]</sup> 及 Chun 等<sup>[10]</sup> 将实测的应变储能相对值和晶粒取向等数据引入

到 MC 和元胞自动机模型中, 预测了材料的微观组织和织构变化, 发现体系内应变储能和晶界能的非均匀分布会导致晶粒长大驱动力和晶界迁移率的非均匀分布, 这对再结晶行为具有重要影响. 随着两相合金在工业和日常生活中的广泛应用, 关于两相合金再结晶退火行为的模拟亦越来越受到重视<sup>[11-14]</sup>. 例如, Fan 和 Chen<sup>[11]</sup> 利用相场法, Fang 等<sup>[12]</sup> 和 Bellucci 等<sup>[13]</sup> 利用 MC 法模拟两相材料在退火过程中的晶粒长大, 探讨了界面能和界面迁移率对晶粒长大的影响. 然而, 这些两相模型都局限于再结晶晶粒的长大阶段, 不包括形核阶段, 且忽略了体系内界面能和界面迁移率的非均匀分布以及晶体学取向的影响. 对于实际金属材料, 应变

\* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2007CB613803) 和国家自然科学基金 (批准号: 51271204) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: saiyi@csu.edu.cn

储能和界面能的非均匀分布将导致体系内非均匀形核, 退火早期同时存在再结晶形核与晶粒长大, 单一地模拟再结晶晶粒之间的竞争长大而不考虑形核及晶粒间的吞噬长大将不能全面反映材料的实际再结晶行为<sup>[10]</sup>. 因此, 已有研究尚没有确立同时考虑再结晶形核和晶粒长大的、一般意义上的两相合金再结晶模型.

本研究在同时考虑再结晶形核和晶粒长大的前提下, 引入体系内应变储能和界面能的非均匀分布, 并涵括晶体学取向的影响, 建立了两相合金再结晶 MC 模型. 该模型被应用于 TC11 钛合金, 结合电子背散射衍射 (EBSD) 实验数据, 定量模拟了退火过程中的微观组织和织构演变, 初步检验了模型的应用效果.

## 2 模型与方法

### 2.1 两相合金再结晶蒙特卡罗模型

充分合理地表征材料退火前 (即形变后) 的微观组织, 是模拟再结晶退火行为的前提. 传统的方法是利用随机整数来描述微观晶粒组织的形貌特征, 包括利用随机整数标识不同晶粒、利用正负整数来区分晶粒的相组分, 但不考虑材料的晶体学取向和应变储能分布等信息<sup>[12]</sup>. 这里, 我们将 Raabe 和 Hantcherli<sup>[9]</sup> 对单相材料的表征方法推广到两相材料, 将所研究的区域离散为若干 Potts 网格, 引入与该区域对应的 EBSD 实验结果, 包括相标识、晶体学取向和成像质量指数 (即 IQ 值): 用整数标识每个网格的相组分, 相同整数的相邻两网格为同一相组分, 不同整数的相邻网格之间形成相界; 用欧拉角表示每个网格所对应的晶体学取向, 并根据相邻网格的取向差大小来判定晶界位置; 用 IQ 值来表示体系内应变储能的相对大小. 其次, 在再结晶退火过程中, 微观组织通过回复、再结晶形核及晶粒长大而演变. 因此, 本模型考虑了形核及晶核长大两个阶段.

对于形核阶段, 模型需确定形核位置及其晶体学取向的选取方式. 目前, 关于形核位置的选取机制主要有两种<sup>[15]</sup>, 即高应变储能处形核 (high-stored-energy-sites nucleation, HSEN) 机制和大角度界面处形核 (high-angle-boundary nucleation, HABN) 机制. 由于大角度界面往往是位错堆积的区域, 附近的应变储能较高, 因而 HABN 机制在一

定程度上兼容了 HSEN 机制, 得到更为广泛的认可. 对于晶核的晶体学取向选择则缺乏成熟的理论, 在实际模拟时人们一般假设其遗传自形变晶粒的取向, 包括从形变晶粒取向中随机选取或直接假定为某相邻形变晶粒的取向, 由此确立的择优取向体现了定向形核对再结晶织构的贡献, 但两种方式所得到的结果无明显差异<sup>[1]</sup>. 在本研究中, 再结晶形核的位置根据 HABN 机制来确定, 晶核的晶体学取向则从同相形变晶粒取向中随机选取.

对于晶粒长大阶段, 两相材料的基本建模方法与单相材料类似. 首先, 晶粒长大实质上是晶界迁移过程, 相应的晶界迁移速度可表示为<sup>[1]</sup>

$$v_{ij}^p = P_{ij}^p \cdot M_{ij}^p, \quad p = \alpha \text{ or } \beta, \quad (1)$$

其中  $P_{ij}^p$  和  $M_{ij}^p$  分别为相邻网格  $i$  和  $j$  之间的晶界前沿净压力 (即晶粒长大驱动力) 和晶界迁移率,  $p$  表示材料的相类型 (如  $\alpha$  相和  $\beta$  相等). 在 MC 模型中, 晶界迁移以一定的概率产生, 即在  $[0, 1]$  间产生一个均匀随机数, 并且当  $v_{ij}^p$  大于该随机数时, 再结晶晶粒所对应的网格  $i$  吞噬变形晶粒网格  $j$ , 且网格  $j$  所对应的相对应应变储能降为 0, 晶粒取向转变为网格  $i$  所对应的晶粒取向, 从而使体系处于总能量更低的状态.  $M_{ij}^p$  通常被视为关于晶粒取向差  $\theta_{ij}$  的函数, 采用 Humphreys<sup>[16]</sup> 所提出的经验公式表示:

$$M_{ij}^p = M_m^p \left\{ 1 - \exp \left[ -B_p \left( \frac{\theta_{ij}}{\theta_m} \right)^{n_p} \right] \right\}, \quad p = \alpha \text{ or } \beta, \quad (2)$$

式中  $M_m^p$  为大角度晶界的迁移率,  $\theta_m$  是区分大、小角度晶界的临界取向差 (本研究将其设为  $10^\circ$ ),  $B_p$  和  $n_p$  是与晶体结构有关的常数. 同时, 晶界迁移率还与退火温度和晶粒长大激活能相关<sup>[17,18]</sup>. 在本研究中, 可以利用 Arrhenius 方程获得大角度晶界迁移率, 即将 (2) 式中的  $M_m^p$  定义为与绝对温度  $T$  和晶粒长大激活能  $Q_p$  有关的函数:

$$M_m^p = C \cdot \exp \left( -\frac{Q_p}{RT} \right), \quad p = \alpha \text{ or } \beta, \quad (3)$$

其中  $R$  为气体常数,  $Q_p$  的取值与相组分有关. 在此基础上, 通过设置参数  $C$  将各相晶粒的  $M_m^p$  转化成相对比值以区分不同相的晶粒长大激活能对晶界迁移率的影响, 且最大的  $M_m^p$  值设为 1.

对于晶界前沿净压力, 传统的再结晶模型通常假设再结晶晶界前沿的移动遵循应变诱导晶界迁移 (SIBM) 规律<sup>[10]</sup>, 即晶界迁移受控于再结晶区域

与形变区域之间的应变储能差, 网格  $i, j$  之间的再结晶晶界前沿净压力  $P_{ij}^p$  正比于两者的应变储能差. 然而, 在非均匀形核的情况下, 早期再结晶晶粒之间的相遇还可能导致再结晶晶粒竞争长大, 即晶粒长大与再结晶形核共存<sup>[10]</sup>. 因此, 在模拟晶粒长大时应该区分再结晶晶粒吞并形变晶粒和再结晶晶粒竞争长大两种情况: 1) 当再结晶晶粒前沿为形变晶粒时, 与变形程度密切相关的应变储能会比晶界能高出几十到数百倍, 晶界能的影响不明显, 晶界迁移由 SIBM 主导<sup>[1]</sup>; 2) 当再结晶晶界前沿也为再结晶晶粒时, 应变储能差为零, 晶界能成为决定晶界迁移的主要因素<sup>[1]</sup>. 对于后者, 传统的 MC 模型不再适用. 为此, 我们认为应该区分如下两种情况来计算再结晶晶界的前沿净压力:

$$P_{ij}^p = \begin{cases} a \cdot \Delta H_{ij} & \text{界面前沿为形变晶粒} \\ \frac{\Delta E_{ij}^p}{\Delta E_{\max}} & \text{界面前沿为再结晶晶粒} \end{cases}$$

$$p = \alpha \text{ or } \beta, \quad (4)$$

其中  $\Delta H_{ij}$  和  $\Delta E_{ij}^p$  分别为网格  $i$  对应的晶体学取向尝试转变为邻近网格  $j$  对应的晶体学取向时应变储能和晶界能的变化;  $\Delta E_{\max}$  为最大的晶界能差;  $a$  为用来控制  $P_{ij}^p$  最大取值为 1 时的常数. 对于任意网格  $i$ , 其对应晶界的总能量是该网格与其相邻网格之间的晶界能之和<sup>[4]</sup>, 即:

$$E_i^p = \sum_{j=1}^k \gamma_{ij}^p, \quad p = \alpha \text{ or } \beta, \quad (5)$$

式中  $\gamma_{ij}^p$  为网格  $i$  和其相邻网格  $j$  之间的晶界能;  $k$  为与网格  $i$  邻近的网格数. 同时, 根据 Read-Shockley 函数<sup>[19]</sup> 将晶界能  $\gamma_{ij}^p$  定义为

$$\gamma_{ij}^p = \begin{cases} \gamma_m^p(\theta_{ij}/\theta_m) [1 - \ln(\theta_{ij}/\theta_m)] & \theta_{ij} \leq \theta_m, \quad p = \alpha \text{ or } \beta \\ \gamma_m^p & \theta_{ij} > \theta_m, \quad p = \alpha \text{ or } \beta \end{cases}, \quad (6)$$

式中  $\theta_{ij}$  为晶粒取向差,  $\gamma_m^p$  为大角度晶界单位面积上所包含的能量 (即大角度晶界能). 对于两相体系, 为了体现各相晶粒的晶界能特征, 需将不同相的  $\gamma_m^p$  转化成相对比值, 且  $\gamma_m^p$  的最大值为 1.

综上所述, 本研究所确立的两相材料再结晶 MC 模型是在已有两相材料晶粒长大 MC 模型的基础上, 考虑了形核阶段晶核的晶体学取向, 并通过分别表征晶界前沿净压力与晶界能和应变储能的关系来兼顾晶粒长大过程中再结晶晶粒吞并形变

晶粒和再结晶晶粒竞争长大两种情况. 同时, 该模型通过直接利用 Arrhenius 方程来考虑退火温度和各相晶粒长大激活能对晶界迁移率的影响.

## 2.2 模拟方法和条件

模拟所采用的材料为 TC11 (Ti-6.5Al-3.5Mo-1.5Zr-0.3Si) 两相钛合金, 是由直径为 700 mm 的铸锭经过  $\beta$  相区锻压和两相区多火次镦拔至横断面尺寸为 100 mm ( $X$  方向)  $\times$  100 mm ( $Y$  方向) 的工件. 在工件的中心部位切取 7 mm ( $X$ )  $\times$  5 mm ( $Y$ )  $\times$  2.5 mm ( $Z$ ) 的片状试样, 然后在 940 °C 下退火 30 min. 为了确定模拟所需初始材料组织信息以及验证模拟结果, 利用 EBSD 对样品退火前后的微观组织和微观织构进行了分析. EBSD 样品通过电解抛光制备, 所用抛光液由 5% 高氯酸, 35% 正丁醇和 60% 甲醇组成, 抛光温度约为 -10 °C, 电压为 21 V, 测试所用仪器是 FEI/Nova NanoSEM430 场发射扫描电镜上安装的 HKL Channel Fast EBSD 系统, 扫描电镜加速电压为 20 kV, 扫描区域为 40  $\mu$ m  $\times$  40  $\mu$ m (退火前) 或 30  $\mu$ m  $\times$  30  $\mu$ m (退火后), 步长为 0.1  $\mu$ m. 对于退火后的样品, 利用系统所带的 Tango 软件分析了组织类型: 晶内平均取向差大于 1° 的晶粒记为形变组织, 晶内亚晶平均取向差小于 1° 但亚晶粒之间的取向差大于 1° 的记为亚结构, 其余的为再结晶组织.

图 1 为 EBSD 测得的退火前晶粒取向反极图 (IPF) 和 IQ 值分布图.  $\alpha$  相含量占 90%, 主要为长条状晶粒, 含有少量的等轴晶粒;  $\beta$  相含量约为 10%, 主要分布在等轴  $\alpha$  晶粒的三角晶界处以及条状  $\alpha$  晶粒之间. 从图 1(a) 和 (b) 可以看出, 大部分延伸方向相同的条状  $\alpha$  晶粒的 [0002] 方向与样品的  $X$  轴平行, 而其他条状和等轴状晶粒则呈现出较为随机的取向; 相应地, 分布于条状  $\alpha$  晶粒之间的  $\beta$  晶粒则主要表现为 [111] 或 [110] 轴平行于  $X$  轴, 其他位置的晶粒无明显择优取向. 由图 1(c) 和 (d) 可以看出, 两相的 IQ 值都分布不均匀, 且  $\beta$  相的 IQ 值总体上低于  $\alpha$  相. 由于 EBSD 测得的 IQ 值能够反映样品上相应位置处的晶格畸变程度, 晶格畸变较大时, EBSD 测得的成像质量指数较差 (即 IQ 值较小, 转换成灰度图表示时灰度较大), 间接表征出该位置存储的应变能较高. 因此, 两相 IQ 值分布图可表明两相的应变储能分布不均匀,  $\beta$  相的应变储能略高, 在变形过程中  $\beta$  相承载了较大部分的应变.

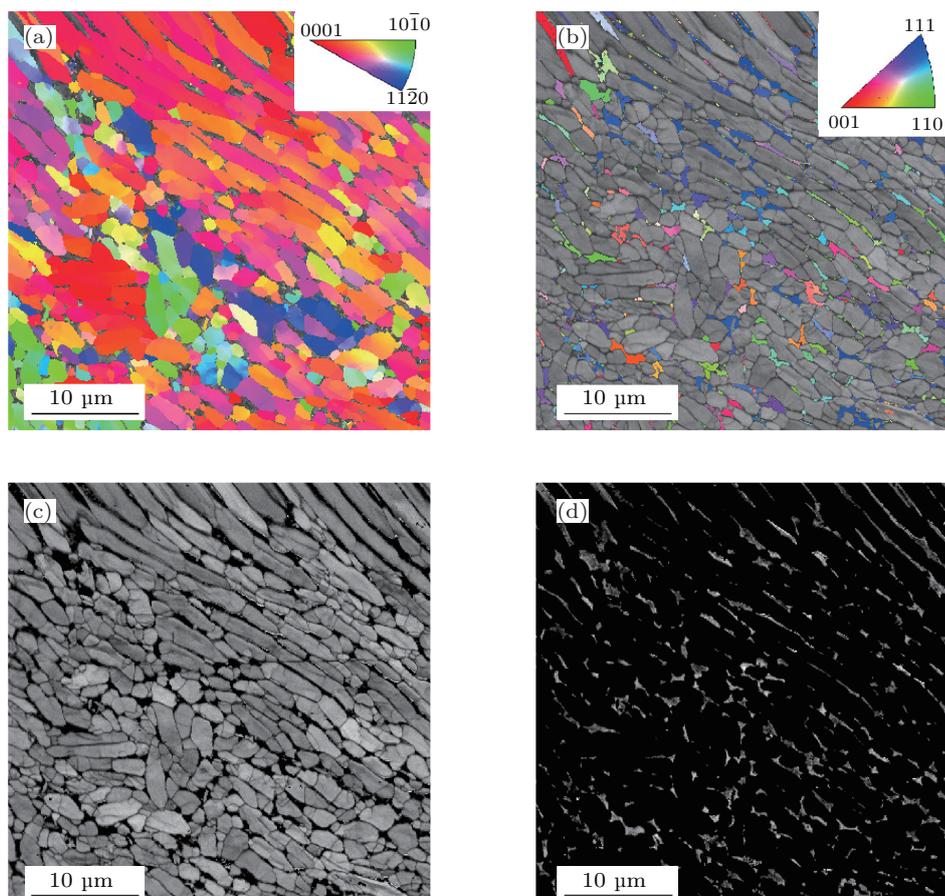


图1 TC11 钛合金初始组织的 EBSD 分析结果 (a)  $\alpha$  和 (b)  $\beta$  相的晶粒取向图 (X 轴 IPF, 其他相为灰色); (c)  $\alpha$  和 (d)  $\beta$  相的 IQ 值分布图 (其他相为黑色)

与退火前样品的 EBSD 测试区域相对应, 模拟采用  $400 \times 400$  Potts 正方形网格, 每个网格单元描述  $0.1 \mu\text{m} \times 0.1 \mu\text{m}$  的区域, 通过映射导入 EBSD 测试点的数据包括相类型、欧拉角 ( $\phi_1, \Phi, \phi_2$ ) 和相对应应变储能. 其中, 相对应应变储能与 IQ 值的关系为<sup>[10]</sup>

$$H_i = h \left( 1 - \frac{q_i}{f \cdot q_{\max}} \right), \quad (7)$$

式中  $H_i$  和  $q_i$  分别表示网格  $i$  的相对应应变储能和 IQ 值,  $q_{\max}$  表示最大 IQ 值,  $h$  和  $f$  是决定  $H_i$  上下限的常数. 参照 Chun 等<sup>[10]</sup> 的工作, 我们将  $h$  和  $f$  分别设为 1.0 和 2.0, 以较合理地体现体系内应变储能非均匀分布的程度.

模拟所需其他与材料体系及结构相关的参数, 包括 TC11 合金的大角度晶界能和晶粒长大激活能等, 在关注两相间的比值基础上主要根据已有文献研究确定. Gil 等<sup>[20,21]</sup> 的研究表明钛合金的晶粒长大激活能及大角度晶界能与晶体结构、合金元素的种类和含量等有关, 但对它们影响最明

显的是晶体结构. 因此, 我们将参考具有密排六方结构的  $\alpha$  相和体心立方结构的  $\beta$  相的晶粒长大激活能及大角度晶界能, 将 TC11 合金内  $\alpha$  晶粒和  $\beta$  晶粒的晶粒长大激活能分别近似设为  $100 \text{ kJ/mol}$  ( $Q_\alpha$ ) 和  $20 \text{ kJ/mol}$  ( $Q_\beta$ ); 类似地,  $\alpha$  晶粒和  $\beta$  晶粒的大角度晶界能分别近似地设为  $0.56 \text{ J/m}^2$  ( $\gamma_m^\alpha$ ) 和  $0.75 \text{ J/m}^2$  ( $\gamma_m^\beta$ )<sup>[21-24]</sup>. 根据 Humphreys<sup>[16]</sup> 和 Rollett 和 Holm<sup>[25]</sup> 对晶界迁移率 ((2) 式) 与晶体结构关系的研究结果, 对属于体心立方结构的  $\beta$  相, 我们采用  $B_\beta = 4, n_\beta = 5$ , 而对属于密排六方结构的  $\alpha$  相, 设定  $B_\alpha = 1, n_\alpha = 3$ ; 用于控制  $M_m^p$  和  $P_{ij}^p$  的参数分别设为  $C = 0.97$  和  $a = 1.0$ . 此外, 考虑到两相材料在相变点以下进行恒温退火过程中相成分保持稳定, 模拟该条件下的再结晶过程可以忽略相成分的变化; 对此, 传统的 MC 模型往往需要设定体系不发生相变<sup>[12,13,26-28]</sup>, 本研究则在模型中通过设定相界面不发生迁移而实现.

### 3 模拟结果与讨论

#### 3.1 微观组织演变和再结晶动力学的基本特征

为了整体了解模拟所得到的 TC11 钛合金再结晶行为, 图 2 给出了 MC 模拟所得到的两相再结晶分数和再结晶晶粒平均尺寸随时间  $t$  (单位为 MC 步, 即 MCs) 的变化情况. 由于模拟忽略了回复行为, 所以图 2(a) 不包含再结晶孕育期, 在 0 MCs 时就形成了部分再结晶晶粒, 即再结晶分数不为 0.

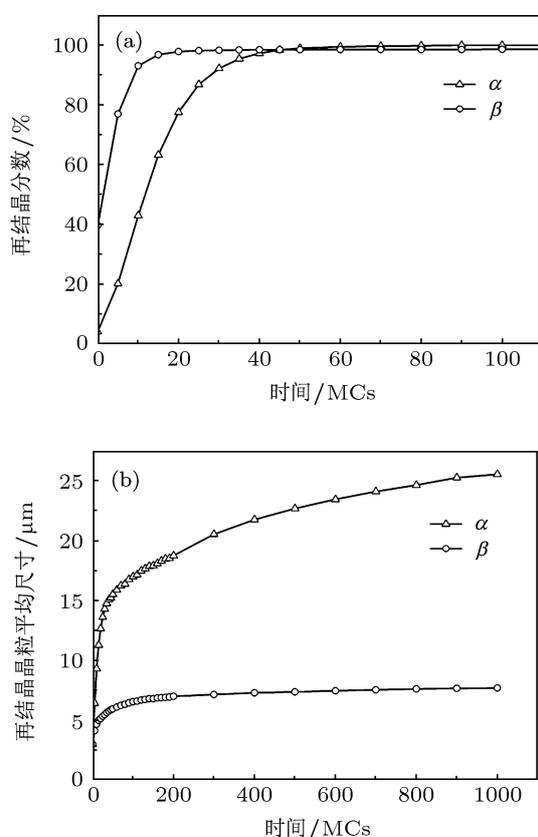


图 2 MC 模拟 TC11 钛合金在退火过程中的两相 (a) 再结晶分数和 (b) 再结晶晶粒平均尺寸随时间的变化

由图 2(a) 可以看出,  $\beta$  相的初始再结晶分数远远大于  $\alpha$  相, 且  $\beta$  相再结晶速率较高, 在大约 20 MCs 时即已接近完全再结晶状态, 而  $\alpha$  相在大约 60 MCs 时才接近完全再结晶. 这主要是由于  $\beta$  相的初始应变储能较高 (见图 1(c) 和 (d)), 再结晶形核的驱动力较大; 同时, 由于前期晶粒长大的驱动力主要源于再结晶晶粒与形变晶粒的应变储能差. 因此,  $\beta$  相再结晶晶粒更容易吞并形变晶粒而长大, 导致再结晶分数增大较快. 根据 JMAK 再结晶方程对图 2(a) 所示的模拟结果计算了 Avrami 指

数, 得到的  $\alpha$  相和  $\beta$  相的 Avrami 指数分别为 1.25 和 0.71, 均小于理想情况下 JMAK 所得到的值 (即 2). 人们在进行模拟研究时, 对出现类似问题的解释主要集中在非均匀形核和模型网格结构等方面<sup>[9]</sup>. 本研究中, 初始样品内的应变储能大小分布不均匀引起非均匀形核, 在应变储能较高的某些区域集中形核, 容易形成相互竞争作用的晶核团簇, 导致相应的 Avrami 指数小于均匀形核条件下的理论值. 另外, 两相之间在应变储能大小及其分布方面亦存在较大差别. 与  $\alpha$  相相比,  $\beta$  相的应变储能较高、大小分布更不均匀, 而且  $\beta$  相的组织形貌的板条状宽度较窄, 这就使得  $\beta$  相再结晶形核时更容易形成晶核团簇, 其非均匀形核现象更为显著, 导致其 Avrami 指数偏离理想值的程度更大.

由图 2(b) 可以看出,  $\alpha$  相的晶粒长大速率在整个退火过程中都明显高于  $\beta$  相, 且两相之间的晶粒长大速率差异随退火时间的延长而进一步扩大. 从  $t \sim 60$  MCs 开始,  $\beta$  相的晶粒长大速率明显变缓, 在模拟的后期晶粒尺寸逐渐趋于饱和; 而对于  $\alpha$  相, 在同样的时间范围内其始终保持较快的晶粒长大速率, 在  $t = 1000$  MCs 时仍未表现出明显的饱和.

图 3 为模拟的 TC11 合金两相晶粒形貌与取向 ( $X$  轴反极图) 及组织类型分布随退火时间的演变情况. 首先, 对比图 3(a) 与图 1(a), (b) 可以发现, 模拟所采用的初始晶粒形貌与取向较好地再现了 EBSD 实验结果. 由于没有模拟退火过程中的回复行为, 因此体系在 0 MCs 时即已形成微小的再结晶晶粒 (图 3(a)); 随后, 再结晶晶粒开始吞并形变晶粒, 部分晶粒表现出明显的晶粒长大, 原有条状或非规则形状的晶粒组织逐渐向等轴晶转变, 晶粒尺寸亦变得更为均匀 (图 3(b) 和 (c)), 且当退火至 60 MCs 时 (图 3(d)), 两相组织均接近于完全再结晶, 而且大多数再结晶晶粒已经相遇; 此后, 随着退火时间的延长, 晶粒平均尺寸逐渐增大且尺寸分布越均匀、更接近于等轴晶 (图 3(e)). 同时, 从两相的再结晶和形变组织分布变化可以看出,  $\beta$  相再结晶速率明显高于  $\alpha$  相,  $\beta$  相比  $\alpha$  相先达到完全再结晶状态, 与图 2 所示的统计结果一致.

图 2(b) 和图 3 的结果都表明,  $\alpha$  相的晶粒长大速率在整个退火过程中都明显高于  $\beta$  相. 两相晶粒长大速率的差异在本质上与两相晶粒长大激活能、晶界能、应变储能及初始组织特征的差异有

关. TC11 合金体系内  $\alpha$  相晶粒的单位面积晶界能和应变储能略低于  $\beta$  相晶粒, 而长大激活能则远远高于  $\beta$  相晶粒. 从晶界迁移速率与晶界能和晶界迁移率的关系 ((1)—(4) 式) 可知, 完全再结晶之前,  $\alpha$  相晶粒较低的应变储能和较高的长大激活能均不利于晶界迁移; 完全再结晶之后,  $\beta$  相晶粒较高的晶界能有利于晶界迁移和晶粒的迅速长大. 所以,  $\beta$  相晶粒的长大速率原则上在退火过程中都应高于  $\alpha$  相晶粒. 然而, 从初始组织特征来看 (见图 1(a) 或 (b)),  $\beta$  相的含量远远小于  $\alpha$  相, 尺寸较小, 且主要散布在近似等轴的  $\alpha$  相晶粒三角晶界处或长条状  $\alpha$  相晶粒之间. 基于这样的初始组织,  $\beta$  相再结晶晶粒遇到同相形变或再结晶晶粒的概率较小, 其晶界迁移较多地受到  $\alpha$  相晶粒的阻碍, 难以通过

吞噬形变晶粒或通过与其他再结晶晶粒的竞争而长大. 因此, 模拟所获得的两相再结晶晶粒长大速率的结果实际上表明, 在该条件下合金的初始组织形貌、分布及两相比例更为明显地影响了晶粒的长大行为.

在退火过程中的组织演变方面, 由于模型假设再结晶晶粒的取向遗传自形变晶粒, 所以在整个退火过程中没有出现新的取向, 晶粒取向的变化主要体现在不同取向比例的变化. 从图 3 的 IPF 信息来看, 不同取向的  $\alpha$  相晶粒的长大速率存在可见的差别,  $[11\bar{2}0]$  方向与  $X$  轴平行的晶粒的长大速率略高于  $[0002]$  方向与  $X$  轴平行的晶粒, 但  $\beta$  相则未见具有明显长大优势的晶粒.

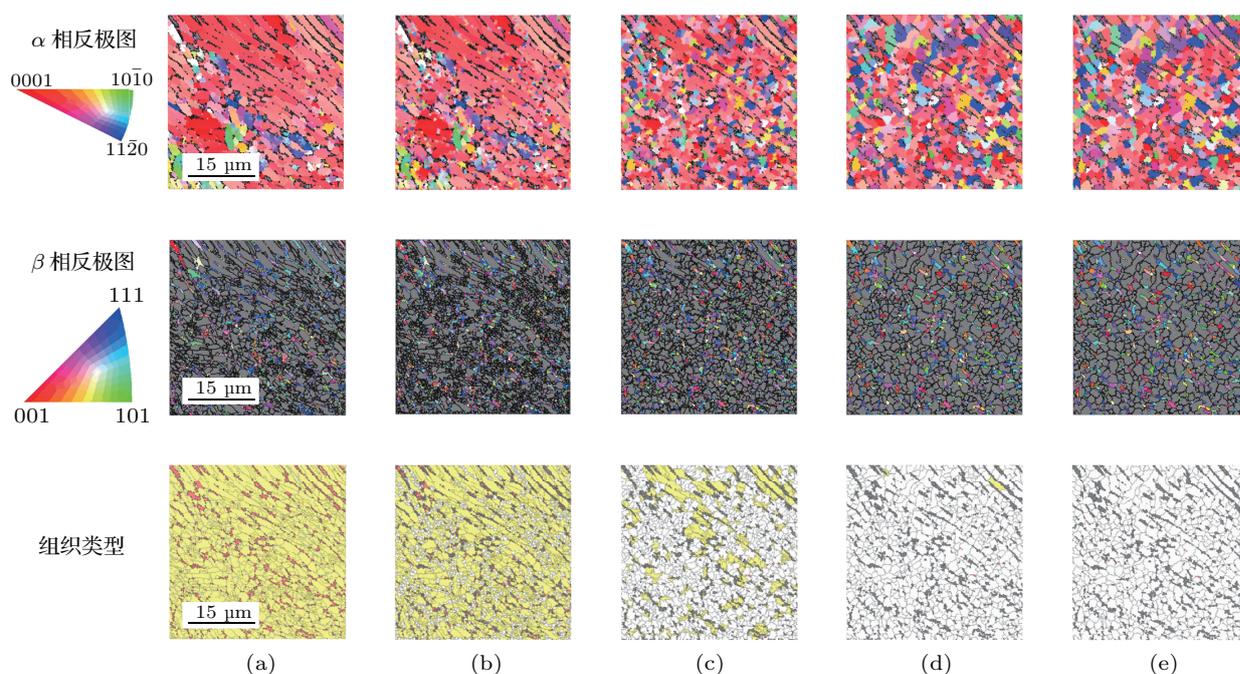


图 3 TC11 钛合金的  $\alpha$  相取向成像图 (上)、 $\beta$  相取向成像图 (中) 以及两相的组织类型分布 (下) 随退火时间的变化 (a) 0 MCs; (b) 5 MCs; (c) 20 MCs; (d) 60 MCs; (e) 100 MCs; 黄色和白色区域分别表示  $\alpha$  相的形变和再结晶晶粒; 红色和灰色分别表示  $\beta$  相的形变和再结晶晶粒

### 3.2 再结晶组织演变

图 4 所示为模拟不同退火时间后  $\alpha$  相和  $\beta$  相的极图. 对比退火前后的极图可以看出, 退火后  $\alpha$  相和  $\beta$  相的主要组织特征与退火前相似, 但组织强度均随着退火时间的延长而提高. 这说明该温度下的退火处理对组织基本特征影响不大. 如前所述, 由于再结晶晶核的晶体学取向从所有与该晶核同

一相的变形晶粒取向中随机选取, 所以再结晶晶粒的取向不超出形变晶粒的取向范围, 再结晶晶粒结构与形变组织基本相同. 然而, 再结晶晶粒的晶界迁移率与晶粒间取向差相关 ((2) 式), 且晶粒间取向差在体系内呈非均匀分布, 这二者导致了再结晶晶粒的晶界迁移率大小在体系内亦呈非均匀分布, 使再结晶晶粒各向异性长大. 这一点在  $\alpha$  相中较为明显, 且最终导致较大的组织强度变化.

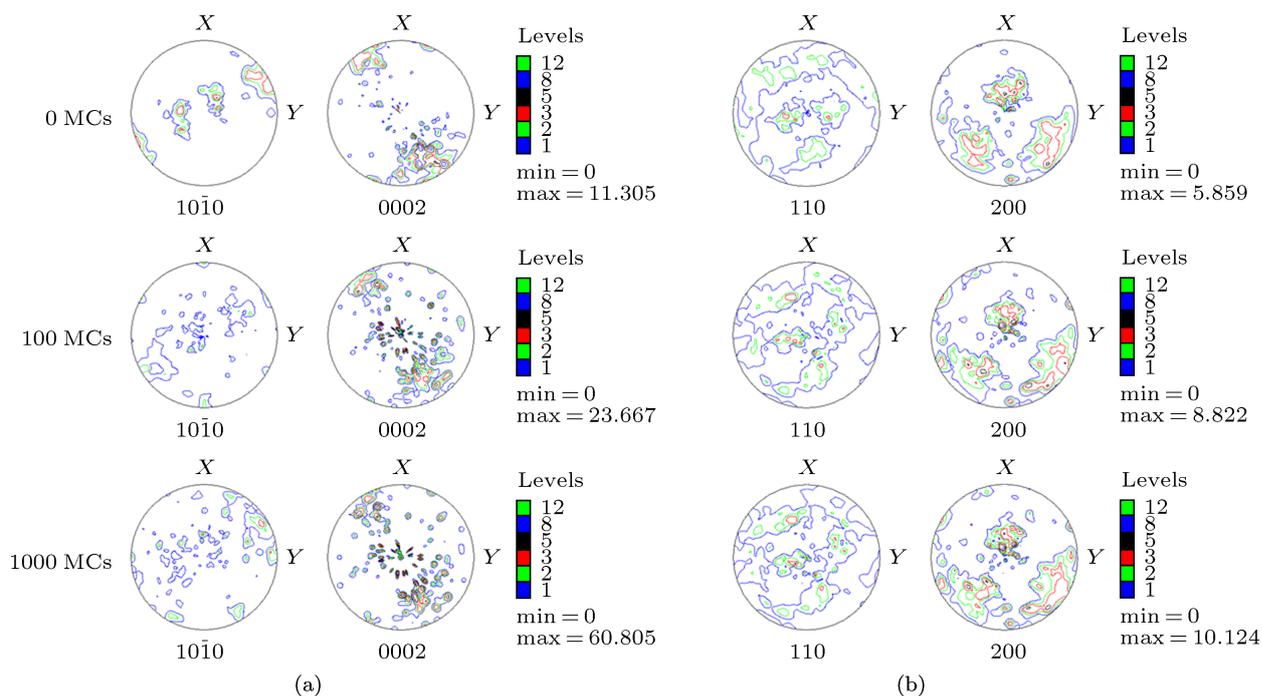


图4 TC11 钛合金退火过程中 (a)  $\alpha$  相和 (b)  $\beta$  相的组织模拟结果

### 4 初步实验验证

由于实验条件的限制, 本研究未对退火前后样品进行大面积的 EBSD 测试分析和相应的模拟及验证. 这里, 作为初步的验证, 图 5 所示为 EBSD 测定的退火后  $\alpha$  相 (a) 晶粒取向成像和 (b) 组织类型分布. 由图 5(a) 可以看出, 原始条状  $\alpha$  相晶粒退火后已基本消失, 转变为等轴状晶粒, 晶粒尺寸分布较为均匀; 同时, 与退火前的组织 (图 1(a)) 相比较, 退火后  $\alpha$  相晶粒不再表现出原有 [0002] 方向与 X 轴方向平行的取向特征, 且总体上无显著的择优

取向. 图 5(b) 表明, 退火后材料并没有发生完全再结晶, 仍存在少量亚结构和形变组织 (这里 EBSD 所确定的亚结构和形变组织对应于模拟中的形变组织), 接近于模拟  $t = 5$  MCs 时的状态. 退火后得到的实测组织基本形貌特征与模拟的组织演变趋势符合较好. 但是, 由于退火前后 EBSD 所测区域并不对应, 且微观取向的测定存在局域性, 这些实验结果只能表明模拟能够定性地再现退火过程中的组织变化, 进一步定量验证有必要借助于原位 EBSD 观察等手段, 直接得到选定区域的材料在退火过程中的组织与微观组织演变.

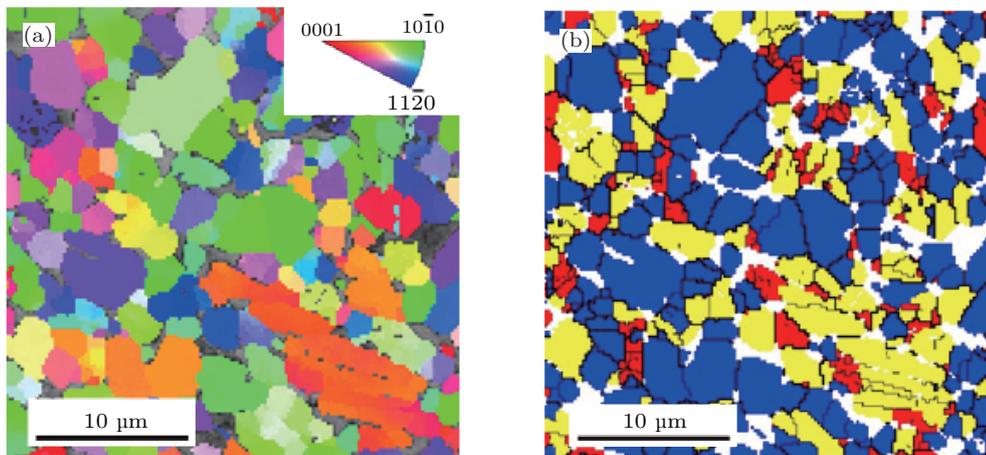
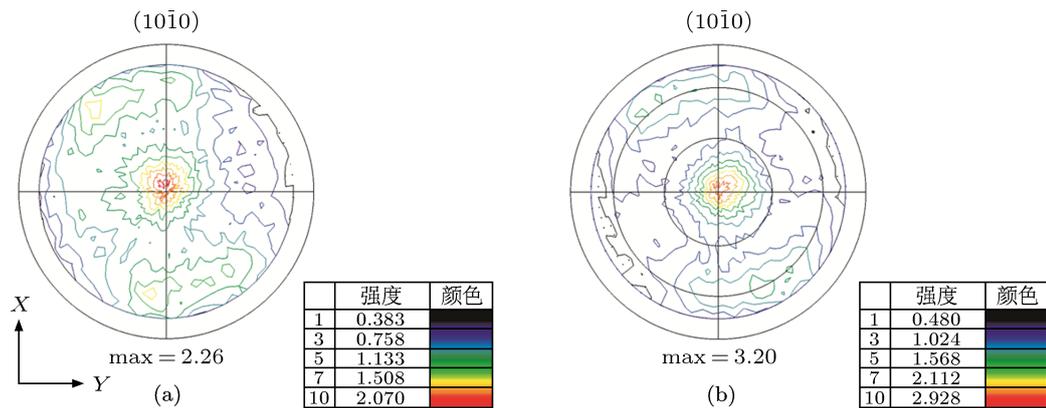


图5 TC11 钛合金 940 °C 退火后的 EBSD 结果 (a)  $\alpha$  相的晶粒取向图 (X 轴 IPF, 灰色区域表示  $\beta$  相); (b)  $\alpha$  相再结晶晶粒 (蓝色区域)、亚结构 (黄色区域) 和形变晶粒 (红色区域) 的分布情况 (白色区域表示  $\beta$  相)<sup>[29]</sup>

图6 XRD测定的TC11钛合金940 °C退火前(a)后(b)  $\alpha$ 相的(10 $\bar{1}$ 0)极图<sup>[29]</sup>

值得指出的是,我们利用X射线衍射(XRD)测定了该样品在相同退火处理前后的宏观织构变化<sup>[29]</sup>.图6所示为退火前后样品内 $\alpha$ 相经背底和散焦修正以及归一化处理后的(10 $\bar{1}$ 0)不完整极图.可以看出,在退火过程中合金内 $\alpha$ 相的织构特征基本不变,但强度略有增加,与图4所示模拟织构的基本特征和变化趋势相符,可认为是该模型能较好地体现织构演变基本趋势的佐证.

## 5 结论

本研究通过引入体系内应变储能和界面能的非均匀分布,并涵括晶体学取向的影响,建立了两相合金再结晶形核和晶粒长大的MC模型.作为对

模型的初步检验,该模型被应用于模拟TC11钛合金退火过程中的微观组织和织构演变.结果表明,所建模型能够较好地体现退火过程中的微观组织演变,包括两相晶粒的再结晶及晶粒长大行为.与 $\beta$ 相相比, $\alpha$ 相具有较低的再结晶速率和较高的晶粒长大速率,前者主要归结于 $\alpha$ 相较低的初始应变储能,后者则表明该条件下初始组织形貌、分布及两相的比例对晶粒长大具有重要影响.由于非均匀形核的影响,模拟得到的再结晶速率变化与假设均匀形核的JMAK再结晶方程存在明显差异.模拟的基本形貌特征及组织演变趋势与退火后得到的实测组织符合较好.同时,模拟表明合金在退火后保留了形变织构的基本取向特征,两相的织构均有所增强,与宏观织构测定结果所体现的变化趋势一致.

- [1] Humphreys F J, Hatherly M 2004 *Recrystallization and Related Annealing Phenomena* (2nd Ed.) (Oxford: Elsevier) pp123–135
- [2] Peranio N, Li Y J, Roters F, Raabe D 2010 *Mater. Sci. Eng. A* **527** 4161
- [3] Rocha R O, Melo T M F, Pereloma E V, Santos D B 2005 *Mater. Sci. Eng. A* **391** 296
- [4] Srolovitz D J, Grest G S, Anderson M P 1986 *Acta Metall.* **34** 1833
- [5] Moelans N, Blanpain B, Wollants P 2008 *Phys. Rev. B* **78** 024113
- [6] Srolovitz D J, Grest G S, Anderson M P, Rollett A D 1988 *Acta Metall.* **36** 2115
- [7] Rollett A D, Srolovitz D J, Anderson M P, Doherty R D 1992 *Acta Metall. Mater.* **40** 3475
- [8] Avrami M 1939 *J. Chem. Phys.* **7** 1103
- [9] Raabe D, Hantcherli L 2005 *Comput. Mater. Sci.* **34** 299
- [10] Chun Y B, Semiatin S L, Hwang S K 2006 *Acta Mater.* **54** 3673
- [11] Fan D, Chen L Q 1997 *Acta Mater.* **45** 4145
- [12] Fang B, Huang C Z, Liu H L, Xu C H, Sun S 2009 *J. Mater. Proc. Tech.* **209** 4568
- [13] Bellucci D, Cannillo V, Sola A 2010 *Ceram. Int.* **36** 1983
- [14] Kong F R, Santhanakrishnan S, Lin D, Kovacevic R 2009 *J. Mater. Proc. Tech.* **209** 5996
- [15] Doherty R D, Hughes D A, Humphreys F J, Jonas J J, Juul Jensen D, Kassner M E, King W E, McNelley T R, McQueen H J, Rollett A D 1997 *Mater. Sci. Eng. A* **238** 219
- [16] Humphreys F J 1997 *Acta Mater.* **45** 4231
- [17] Arrhenius S 1889 *Z. Phys. Chem.* **4** 226
- [18] Ivasishin O M, Shevchenko S V, Semiatin S L 2002 *Mater. Sci. Eng. A* **332** 343
- [19] Read W T, Shockley W 1950 *Phys. Rev.* **78** 275
- [20] Gil F X, Planell J A 2000 *Mater. Sci. Eng. A* **283** 17
- [21] Gil F X, Rodriguez D, Planell J A 1995 *Scripta Metall. Mater.* **33** 1361
- [22] Da Costa Teixeira J, Appolaire B, Aebly-Gautier E, Denis S, Brune-seaux F 2006 *Acta Mater.* **54** 4261
- [23] Roth T A, Henning W D 1985 *Mater. Sci. Eng. A* **76** 187
- [24] Suppayak P 1977 *M. S. Dissertation* (Kansas: Kansas State University)
- [25] Rollett A D, Holm E A 1997 *Proceedings 3rd International Conference on Recrystallization and Related Phenomena (ReX'96)* Monterey, October 21–24, 1996 p31
- [26] Sha W, Malinov S 2009 *Titanium Alloys: Modelling of Microstructure, Properties and Applications* (Cambridge: Woodhead Publishing) p233
- [27] Ding R, Guo Z X 2001 *Acta Mater.* **49** 3163
- [28] Ding R, Guo Z X, Wilson A 2002 *Mater. Sci. Eng. A* **327** 233
- [29] Li S, Yang L, Lei L, Wei C, Zhang H 2012 *J. Mater. Sci. Technol.* **28** 1015

# Monte Carlo simulations of microstructure and texture evolution during annealing of a two-phase titanium alloy\*

Yang Liang<sup>1)</sup> Wei Cheng-Yang<sup>1)2)</sup> Lei Li-Ming<sup>3)4)</sup> Li Zhen-Xi<sup>4)</sup> Li Sai-Yi<sup>1)5)†</sup>

1) (School of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

2) (Guangdong Zhaoqing Supervision Testing Institute of Quality and Measuring, Zhaoqing 526060, China)

3) (AVIC Commercial Aircraft Engine Co. Ltd., Shanghai 200241, China)

4) (Beijing Institute of Aeronautical Materials, Beijing 100095, China)

5) (Key Laboratory of Nonferrous Metal Materials Science and Engineering, Ministry of Education, Changsha 410012, China)

(Received 26 March 2013; revised manuscript received 30 May 2013)

## Abstract

Nucleation and grain growth are important phenomena during static recrystallization of metallic materials and both processes have significant influences on the material properties. The Monte Carlo (MC) method has been widely used to simulate static recrystallization behavior during annealing of metallic materials. In this study, an MC model for static recrystallization of two-phase alloys is proposed by extending an existing MC model, through the introduction of the nucleation stage to account for the grain growth by both consuming deformed grains and competing with other recrystallized grains. The two-phase MC model is used to simulate the evolution of microstructure and texture during annealing of a TC11 (Ti-6.5Al-3.5Mo-1.5Zr-0.3Si) titanium alloy, accounting for initial grain morphology, phase compositions, crystallographic orientations, and relative values of strain stored energy determined by electron back-scattered diffraction. The results show that the model can reproduce satisfactorily the recrystallization and grain growth behavior in annealing. Compared with the  $\beta$  phase, the  $\alpha$  phase depicts a lower recrystallization rate but a higher grain growth rate: the former difference can be mainly attributed to the lower strain stored energy in the  $\alpha$  phase before annealing, whereas the latter suggests that the grain growth in the system is significantly influenced by the grain morphology, distribution of grains, and relative volume fractions of the two phases in the initial condition. Due to the influence of heterogeneous nucleation accounted for in the model, the simulated recrystallization rate deviates considerably from that described by the Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov equation. The simulation also indicates that for both phases the textures strengthen with little changes in their basic features during annealing.

**Keywords:** dual-phase titanium alloy, recrystallization, Monte Carlo method, texture

**PACS:** 61.82.Bg, 81.40.Ef, 61.43.Bn, 61.50.Ah

**DOI:** 10.7498/aps.62.186103

\* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2007CB613803) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51271204).

† Corresponding author. E-mail: saiyi@csu.edu.cn