Volume 32 Number 12

2022年12月 December 2022

DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-42674



镁合金变形机理研究中的 Schmid 因子 计算及应用

宋广胜1,徐德斌1,徐 勇2,陈帅峰2,张士宏2

(1. 沈阳航空航天大学 材料科学与工程学院, 沈阳 110136; 2. 中国科学院金属研究所, 沈阳 110016)

摘 要:基于EBSD技术所测得晶粒的欧拉角,建立了Schmid因子计算公式,用来计算HCP晶体中单个晶粒的Schmid因子。在此基础上,系统分析了镁合金板材拉伸变形时晶粒取向变化与不同微观变形模式

晶粒的 Schmid 因子。在此基础上,系统分析了镁合金板材拉伸变形时晶粒取向变化与不同微观变形模式的 Schmid 因子的关系。对镁合金棒材中的基面织构的 Schmid 因子分布特征进行了计算分析,结合镁合金棒材压缩变形的实测结果,分析了镁合金棒材压缩变形的力学性能及镁合金棒材径向压缩过程晶粒取向变化特征。结果表明:镁合金板材中的基面织构不利于基面滑移系和拉伸孪晶启动,而利于柱面和锥面滑移系启动,异步轧制对镁合金板材力学性能的提升有限。晶粒 Schmid 因子分布的差异导致镁合金棒材轴向和径向压缩时的微观变形机制存在差异,从而导致宏观力学性能差异明显。

关键词: 镁合金; 变形机理; 欧拉角; Schmid 因子; 织构

文章编号: 1004-0609(2022)-12-3661-12

中图分类号: TG146.2

文献标志码: A

引文格式: 宋广胜, 徐德斌, 徐 勇, 等. 镁合金变形机理研究中的 Schmid 因子计算及应用[J]. 中国有色金属学报, 2022, 32(12): 3661-3672. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-42674

SONG Guang-sheng, XU De-bin, XU Yong, et al. Calculation and application on Schmid factor in studying deformation mechanism of magnesium alloy[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2022, 32(12): 3661–3672. DOI: 10.11817/j.ysxb.1004.0609.2021-42674

镁合金因其具有密度低及比强度高等特点,满足环保对材料的要求,是具有潜在应用价值的结构材料。相关研究表明,镁合金的宏观力学性能受微观变形模式的变化影响明显,而微观变形模式的变化又与镁合金晶粒取向分布紧密联系。通过改变晶粒取向的分布特征,从而改进镁合金的宏观力学性能,是提高镁合金力学性能的一种重要方法,镁合金的异步轧制(Differential speed rolling, DSR)^[1-3]、反复弯曲(Alternative bending, AB)技术^[4-5]等都是基于此原理。

在镁合金变形机理研究中, 常通过电子背散射

技术(Electronic back scatter diffraction, EBSD)测得晶粒的欧拉角,由此确定晶粒的取向特征,在此基础上分析微观变形机理。其中,基于EBSD测量结果,通过计算镁合金不同滑移系和孪晶的 Schmid 因子(Schmid factor, SF),可以对镁合金的微观变形机制进行定性或定量分析^[6-8],特别是孪晶这种变形模式,它在镁合金微观变形中起到了重要作用。对于孪晶启动机制的分析而言,Schmid 因子计算是一个方便而有效的手段。

Schmid 因子用于镁合金的孪晶启动机制的分析时,所采取的主要方法为基于启动孪晶与基体晶

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52105412)

收稿日期: 2021-11-16; 修订日期: 2022-01-24

通信作者: 陈帅峰,副研究员,博士;电话: 18704090646; E-mail: chensf@imr.ac.cn

粒之间的取向差来确定实际启动的孪晶变体,并根 据晶粒基体的取向来计算孪晶变体的 Schmid 因子, 进而分析实际启动的孪晶类型及变体与 Schmid 因 子关系。相关研究表明, 镁合金变形中启动孪晶通 常都遵循 Schmid 定律,即 Schmid 因子大的孪晶变 体易启动[9-11]。但是一些工作结果也表明[12-16],特 定变形过程中至少有一半孪晶启动并不遵循 Schmid 定律, 甚至 Schmid 因子为负值的孪晶变体 也可启动。有些学者通过计算孪晶与相邻晶粒间所 产生的协调应变,或者通过计算局域的 Schmid 因 子作为应变协调因子[17-19]来解释上述孪晶启动的非 Schmid 行为。计算结果表明,应变协调因子低的 孪晶变体能更好地协调相邻晶粒的孪晶间的变形, 而应变协调因子高的孪晶变体能更好地协调与之相 邻晶粒孪晶滑移系间的变形。另外一些学者通过对 不同滑移系和孪晶的 SF 分析,确定微观变形机制, 进而对宏观力学性能特征做出合理解释[20-22]。对于 复杂的应力状态,如镁合金轧制及镁合金扭转等, 他们通过建立等效 Schmid 因子来分析复杂应力状 态下的微观变形机制,确定变形工艺参数与镁合金 板材轧制及棒材扭转变形织构的关系[23-25]。

上述研究主要针对某个具体变形过程中微观变形模式的 Schmid 因子进行计算,一些研究中甚至只针对了部分晶粒来计算 Schmid 因子。镁合金板材和棒材的拉伸或压缩变形是镁合金常规的变形方式,并且在镁合金板材和棒材中分别存在两种典型基面织构。因此,有必要利用 Schmid 因子计算结果来系统地分析基面织构及晶粒取向对镁合金板材和棒材的拉伸或压缩变形微观机制的影响,并用以指导镁合金型材的加工工艺。

本文建立基于欧拉角和应力张量的 Schmid 因子计算公式,并利用该公式计算镁合金板材和棒材在特定变形中的 Schmid 因子分布,系统地分析了晶粒取向对微观变形机制的影响。在此基础上,结合实测的宏观力学性能和织构,研究镁合金型材变形过程中微观机制对宏观力学性能和织构变化的影响规律及相关机理。

1 基于欧拉角计算单个晶粒的 Schmid因子

采用EBSD方法测试获得的晶粒取向数据为欧

拉角 $(\varphi_1, \phi, \varphi_2)$,是通过将晶体坐标系依次绕样品坐标系的不同坐标轴旋转三次而确定,用来表示晶粒相对于样品坐标系的位向关系。设某滑移系或孪晶系米勒指数为(hkil)[uvtw],其中(hkil)表示滑移面或孪晶面,[uvtw]表示滑移或孪晶方向。首先采用三坐标轴和四坐标轴的方向指数的转换关系式,将(hkil)[uvtw]转换为(HKL)[UVW],并将转换后的方向指数进行归一化处理。然后将晶体坐标系转换为样品坐标系,即分别将晶面(HKL)和晶向[UVW]转换为样品坐标系中的方向指数(H'K'L')和[U'V'W'],转换公式为

$$\begin{bmatrix} H' \\ K' \\ L' \end{bmatrix} = \mathbf{g}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} H \\ K \\ L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U' \\ V' \\ W' \end{bmatrix} = \mathbf{g}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} U \\ V \\ W \end{bmatrix}$$
(1)

式中: g^T 为矩阵g的转置矩阵; 矩阵g为样品坐标系转换为晶体坐标系的转换矩阵, 其各元素为欧拉角的函数, 具体表达式如下:

g =

$$\begin{bmatrix} c\varphi_{1}c\varphi_{2} - s\varphi_{1}s\varphi_{2}c\phi & s\varphi_{1}c\varphi_{2} + c\varphi_{1}s\varphi_{2}c\phi & s\varphi_{2}s\phi \\ -c\varphi_{1}s\varphi_{2} - s\varphi_{1}c\varphi_{2}c\phi & -s\varphi_{1}s\varphi_{2} + c\varphi_{1}c\varphi_{2}c\phi & c\varphi_{2}s\phi \\ s\varphi_{1}s\phi & -c\varphi_{1}s\phi & c\phi \end{bmatrix}$$

$$(2)$$

其中: c为cos: s为sin。

对 Schmid 因子的计算通常是在单向正应力(拉伸或压缩)条件下进行,不能考虑切应力影响,所以应力张量对应的矩阵为

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{bmatrix} \tag{3}$$

在计算单向应力状态下的 Schmid 因子时,根据具体的应力方向,分别将三个正应力 σ_x 、 σ_y 、 σ_z 中的一个设置为 1(拉应力)或-1(压应力),而其他两个设置为 0。需要注意的是,加载应力对应坐标方向(x, y, z)要与 EBSD 测试中样品方位相应。则 Schmid 因子(m)的表达式为

$$m = \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \begin{bmatrix} H' \\ K' \\ L' \end{bmatrix}\right)^{\mathrm{T}} \cdot \begin{bmatrix} U' \\ V' \\ W' \end{bmatrix} \tag{4}$$

为了验证上述 Schmid 因子计算方法的准确性, 选取文献[9]中的晶粒取向计算 Schmid 因子,并将 计算结果与之对比。文献[9]中,采用欧拉角表示 镁合金挤压管材主要存在(90°,90°,0°)和(0°,0°,0°) 两种织构,对于该两种取向,分别计算了拉伸孪晶 在管材拉伸和压缩中的 Schmid 因子。镁合金的拉伸孪晶存在 6个变体,可依次表示为 ET1~ET6,对应的晶体学指数依次为: $(10\bar{1}2)[\bar{1}011]$ 、 $(1\bar{1}02)[\bar{1}101]$ 、 $(01\bar{1}2)[0\bar{1}11]$ 、 $(0\bar{1}12)[01\bar{1}1]$ 、 $(\bar{1}012)[10\bar{1}1]$ 和 $(\bar{1}102)[1\bar{1}01]$ 。表 1 所示为沿挤压方向(Extrusion direction, ED)压缩时采用上述计算方法所得 6个拉伸孪晶变体对应的 SF,其中m (90, 90, 0)和m (0, 0, 0)分别表示对应欧拉角为(90°, 90°, 0°)和(0°, 0°, 0°)的 Schmid 因子。与文献[9]中的计算结果对比表明,两者一致。

表 1 镁合金管材压缩时不同欧拉角对应的拉伸孪晶变体的 Schmid 因子

Table 1 SF values of extension twin variants under different Euler angles during Mg alloy tube compression

-		•
Extension twin variants	m (90, 90, 0)	m(0,0,0)
ET1 (1012)[1011]	0.498	0
ET2 (1102)[1101]	0.124	0.374
ET3 (0112)[0111]	0.124	0.374
ET4 (0112)[0111]	0.124	0.374
ET5 (1012)[1011]	0.498	0
ET6 (1102)[1101]	0.124	0.374

2 晶粒取向变化对 Schmid 因子的 影响

基面滑移、柱面滑移、锥面滑移、拉伸孪晶和 压缩孪晶是镁合金对应的微观变形模式。在镁合金 变形过程中,不同的微观变形模式启动将对宏观力 学性能产生明显的影响,如拉伸孪晶启动与否所产 生的拉压非对称性及锥面滑移系启动影响抗拉强度 等。在镁合金变形机理研究中,需要定性或定量分 析上述微观变形模式的启动。

在镁合金的变形过程中,启动上述各微观变形模式的驱动力主要取决于两个因素,即晶粒的取向和晶粒的应力状态,其关系可以表示为

$$\tau = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \boldsymbol{\sigma}_{ij} \boldsymbol{m}_{ij} \tag{5}$$

式中: τ 为分切应力,即启动微观变形模式的驱动力,MPa; σ_{ij} 为应力张量,用以描述晶粒的应力状态,MPa; m_{ij} 则对应着由晶粒取向决定的Schmid

因子矩阵。只有分切应力τ达到了各微观变形模式的临界剪切应力(Critical resolved shear stress, τ_c),各微观变形模式才能启动。从基面滑移、拉伸孪晶、柱面滑移、锥面滑移到压缩孪晶,各微观变形模式的临界剪切应力依次提高。对于不同微观变形模式,不同文献所报道的临界剪切应力存在差异,但共同的结论是:室温下,基面滑移和拉伸孪晶的临界剪切应力较低,柱面滑移的临界剪切应力则明显高于前两者,压缩孪晶的临界剪切应力最高。

式(5)描述了复杂应力状态下内应力对晶粒的 微观变形模式所产生的驱动力,在实际应用中,依 据该表达式难以直观地判断晶粒微观变形模式与晶 粒取向及载荷的关系。对于单向拉伸或单向压缩的 简单应力状态,式(5)可简化为

$$\tau = \sigma \cdot m \tag{6}$$

式中: σ为单向载荷引起的内应力,为外载荷除以变形体截面积所得,MPa; m为Schmid因子,为应力方向分别与滑移面(孪晶面)法线及位错运动方向所形成的两个夹角余弦值的乘积。由式(6)可以看出,在载荷一定的情况下,所产生的各微观变形模式的驱动力与SF成正比。因此,对简单变形过程中各微观变形模式的SF进行计算,可以定性地分析微观变形机制。

采用式(1)~(4)的 Schmid 因子计算方法,可以 分析晶粒取向对不同微观变形模式的影响规律,进 而可以定性分析镁合金的微观变形机制。拉伸变形 是镁合金型材在实际应用中最常见的加载方式,特 别是镁合金轧制或挤压板材在冲压等工艺中,都是 以拉伸变形方式为主。图1所示为沿镁合金板材的 轧制方向(Rolling direction, RD)拉伸时晶粒的基面 取向与各变形模式最大 Schmid 因子的对应关系, 相关结果基于 HKL Channel 5 软件导出的取向数 据,利用Matlab软件的编程计算实现。之所以选用 基面取向来表示晶粒的取向,是因为对于密排六方 (Hexagonal close packed, HCP)晶体来说,基面取向 具有代表性。这里需要说明的是,由于滑移变形的 双向性,图1(a)、(b)和(c)中的结果也可同样应用于 沿RD压缩时各微观变形模式的最大Schmid因子与 晶粒基面取向的关系。而由于孪晶变形的单向性, 图 1(d)和(e)中的结果与沿RD压缩时的相应结果是 相反的。图1中的结果也可以用来表示沿任意方向 平行于板材轧面的拉伸变形。

镁合金板材具有强的基面织构, 即晶粒的 c轴 与板材的法线方向(Normal direction, ND)接近或一 致。由图 1(b)可知,对于镁合金板材沿 RD 拉伸变 形, 当晶粒的 c 轴满足与 ND-TD 平面 (Transverse direction, TD)的夹角为0°~15°,柱面滑移系的 Schmid 因子接近最大值 0.5,则基面织构使晶粒 处于软取向,从而有利于柱面滑移系启动。对比 图 1(e)与(b)可以看出,随着晶粒c轴与应力方向夹 角由0°增至90°,柱面滑移系和压缩孪晶由硬取向 逐渐转变为软取向。满足压缩孪晶Schmid因子值 最大的晶粒与满足于基面滑移系为软取向的晶粒具 有几乎相同的取向特征,但对于压缩孪晶,具有最 大 Schmid 因子值的晶粒的 c 轴与 ND-TD 平面的夹 角增至0°~30°。由图1(b)与(e)也可看出, 当晶粒的 c轴与ND-TD平面夹角超过60°时,柱面滑移系的 Schmid 因子接近于0 而处于硬取向, 压缩孪晶的 Schmid因子甚至为负值,其启动受到抑制。图1(b) 和(e)所呈现的晶粒取向与SF关系可概括如下: 当 晶粒的c轴与应力方向接近或完全垂直时, 柱面滑 移系和压缩孪晶处于软取向,后者的晶粒取向变化 范围相对大一些; 当晶粒的 c 轴与应力方向接近于 或完全一致时, 柱面滑移系和压缩孪晶处于硬取 向。实际上,压缩孪晶由于临界剪切应力较高,在 拉伸变形中很难启动,而柱面滑移系却在拉伸变形 中大量启动^[26-28]。

由图1(c)可知,当晶粒的c轴位于与ND-TD平 面夹角位于0°~20°范围内时, 锥面滑移系的 Schmid 因子最大值为0.4,有利于其启动;镁合金 板材的基面织构使大部分的 c 轴位于该取向范围, 但锥面滑移系的临界剪切应力值也较高, 在镁合金 板材的拉伸变形中很难启动[28-29]。同时可知, 当晶 粒的c轴与应力方向接近一致时,锥面滑移系的 Schmid 因子值接近最大值 0.5, 有利于其启动。在 镁合金板材平行于轧面的压缩变形中,由于{1012} 拉伸孪晶的大量启动, 使晶粒 c 轴与载荷方向接近 一致,从而使锥面滑移系处于软取向而利于其启 动。相关研究表明,在镁合金板材沿平行于轧面的 压缩变形中, 在变形后期锥面滑移系大量启 动 $^{[27,30]}$ 。由图 1(c)可知,当晶粒的 c 轴与 ND-TD 平 面夹角位于30°~50°范围内时, 锥面滑移系的 Schmid 因子低于 0.3 而不易启动。

在镁合金的各种微观变形模式中,基面滑移系由于临界剪切应力值最低,因而在镁合金变形中最易启动,甚至在镁合金板材的拉伸或压缩变形的初期都大量启动^[26-27]。但基面滑移系所启动的是〈a〉

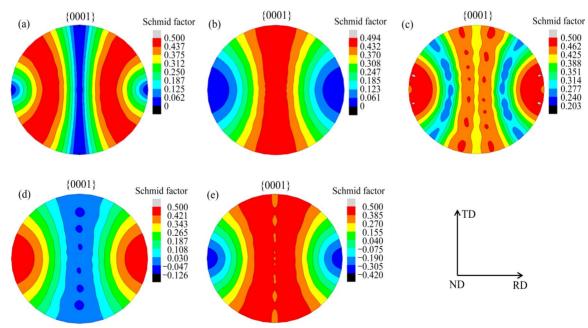


图1 沿RD拉伸时晶粒的基面取向与不同微观变形模式最大Schmid因子(SF)的关系

Fig. 1 Relationship between grain basal orientation and maximum SFs of different micro deformation modes during extension along RD: (a) Basal $\langle a \rangle$ slip; (b) Prismatic $\langle a \rangle$ slip; (c) pyramidal $\langle c+a \rangle$ slip; (d) $\{10\overline{1}2\}$ extension twinning; (e) $\{10\overline{1}1\}$ compression twinning

位错,因而不能协调镁合金板材在ND方向的变形,需要拉伸孪晶或锥面滑移系启动才能实现ND方向的变形。由图1(a)可知,具有基面织构的镁合金板材在拉伸变形中不利于基面滑移系启动,而当晶粒 c 轴位于与ND-TD 平面夹角为30°~60°范围内时,基面滑移系因其 Schmid 因子值接近0.5 而最易启动。在相关研究中,对于镁合金板材,采用 DSR和AB工艺来使晶粒 c 轴产生偏离板材 ND的偏转,即削弱基面织构强度。但上述工艺所产生的 c 轴偏转角度通常不会很大,依据图1(a)中的计算结果(见图2),在晶粒 c 轴与 ND 夹角在 0°~20°内,基面滑移系的 Schmid 因子值不超过 0.3。这就意味着采用 DSR和AB工艺如果不能使晶粒 c 轴偏离 ND 超过 20°,则不会明显提高镁合金板材的塑性。图 1(a)显

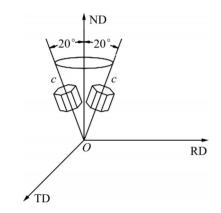
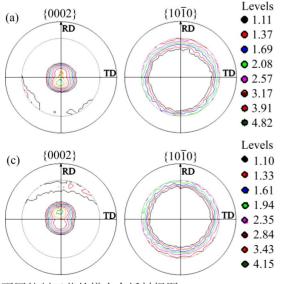


图2 晶粒基面偏转示意图

Fig. 2 Illustration of grain basal leaning



示,当晶粒的c轴与ND-TD平面夹角约为0°~10°时 (具有基面织构的晶粒取向多位于此范围内),或者晶粒c轴接近或与应力方向一致时,基面滑移系的 Schmid因子接近于0而处于硬取向。

图 3 所示为分别采用异步比为 1.1 的 DSR 和普通轧制(Normal rolling, NR)得到的 AZ31 镁合金板材的极图,轧制温度分别选取 200 $^{\circ}$ 元和 250 $^{\circ}$ 宏观极图采用 XRD 技术测得,所用设备为 Bruker D8 3kW型 X 射线衍射仪,选用纯铜靶材,样品旋转范围: $\alpha=0^{\circ}\sim70^{\circ}$, $\beta=0^{\circ}\sim360^{\circ}$,采用步进式扫描方式($\Delta\alpha=5^{\circ}$, $\Delta\beta=5^{\circ}$),利用纯镁粉末对所测得极图的数据进行修正。分别对比图 3(a)和(c)及图 3(b)和(d)可以看出,在相同的轧制温度下,DSR 板材对应极图中的极密度最大值与 NR 板材相比有较小幅度的降低,但对比 NR 和 DSR 的 $\{00002\}$ 极图可以看出,采用 DSR 并没有使晶粒的 c 轴产生明显偏转,即板材的基面织构强度没有明显削弱。

图4所示为室温下镁合金轧制板材沿RD方向 拉伸真应力-真应变曲线。由图4可知,相比于 200 ℃下的NR板材,其他工艺条件下的镁合金板 材伸长率有所提高。对比图3(a)和(c)中{0002}极图 可以看出,相比于NR板材,200 ℃下的DSR板材 晶粒c轴朝RD偏转幅度要大一些,从而导致DSR 板材的伸长率要高一些。对比图3(a)和(b)可知, 200 ℃和250 ℃下的NR板材织构特征无明显差异 (见图4),后者伸长率高于前者。这是因为轧制温

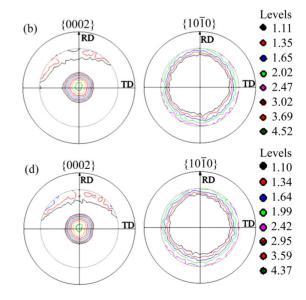


图3 不同轧制工艺的镁合金板材极图

Fig. 3 Pole figures of magnesium alloy sheet under different rolling methods and temperatures: (a) NR, 200 °C; (b) NR, 250 °C; (c) DSR, 200 °C; (d) DSR, 250 °C

度的提高促进了动态再结晶的进行[31-32],细化了晶粒,从而提高了塑性。由图4可知,在250 \mathbb{C} 的轧制温度条件下,NR板材与DSR板材的伸长率并没有明显区别。对比图3(b)和(d)可知,DSR没有使晶粒c轴产生明显偏转,即基面滑移系的SF并没有明显提高,变形时基面滑移系的启动量没有明显增加,从而导致塑性变形能力没有明显提高。

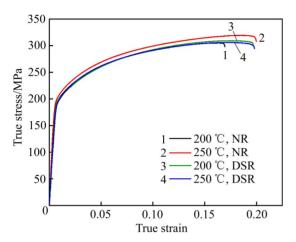


图4 不同轧制工艺的镁合金板材拉伸真应力-真应变曲线

Fig. 4 Tensile true stress – strain curves of magnesium alloy sheet under different rolling techniques

由图 1(d)可知,拉伸变形过程中,当晶粒c轴与应力方向夹角由 0° 到 90° 变化时,拉伸孪晶则由软取向逐渐转变为硬取向;当晶粒c轴与 ND-TD 平面夹角为 0° ~ 20° 时,其 Schmid 因子接近于 0,基面织构使晶粒取向位于此硬取向范围内;只有当晶粒c轴满足与拉应力方向夹角为 0° ~ 30° 条件时,拉伸孪晶的 Schmid 因子值接近 0.5,在拉伸变形中大量启动。这意味着对于在实际生产的镁合金板材,无论采用何种加工工艺都很难使晶粒的 c 轴偏离 ND大的角度,所以在镁合金板材拉伸变形中,拉伸孪

晶很难大量启动。

3 典型织构的 Schmid 因子计算及应用

镁合金型材中存在两种最典型变形织构,分别 是镁合金棒材中存在的丝织构和板材中存在的板织 构,统称为基面织构。其中,镁合金棒材的晶粒取 向特征为基面平行于棒材的轴向,镁合金的晶粒取 向特征为基面平行于板材轧面。

图 5 所示为采用 EBSD 技术测得的商用 AZ31 镁合金挤压棒材(成分与图 3 对应的板材相同)极图。 EBSD 实验采用 Zeiss Gemini SEM500/300 场发射扫描电镜上的 EBSD 系统实现,测得的晶粒取向数据利用 HKL Channel 5 软件进行处理。分析图 5 中的极图所显示的晶粒取向特征可以看出,晶粒的 c 轴与棒材轴向(即挤压方向,Extrusion direction, ED)垂直,并且沿圆周方向均匀分布,同时晶粒的柱面 $\{10\bar{1}0\}$ 法线与 ED 夹角为 $0\sim\pi/6$ 。根据欧拉角的定义,具有该取向特征晶粒的欧拉角 $(\varphi_1,\phi,\varphi_2)$ 对应值为 $(0\sim2\pi,\pi/2,0)$,其定义如图 6 所示,首先晶粒绕ED([0001])旋转 φ_1 (取值范围为 $0\sim2\pi$),转至位置 I,再以转动后的 $[10\bar{1}0]$ 轴为转轴,旋转 $\pi/2(\phi$ 角),此时对应的 φ_2 值为 0,最终形成图 5 中对应的晶粒取向特征。

在确定了镁合金棒材中晶粒欧拉角的取值范围后,依据上述的Schmid因子计算方法,则可以对镁合金棒材变形过程中各微观变形模式的启动趋势做定性分析。镁合金棒材可能经历的变形为沿棒材轴向(ED)拉伸或压缩变形,以及沿径向的压缩变形。

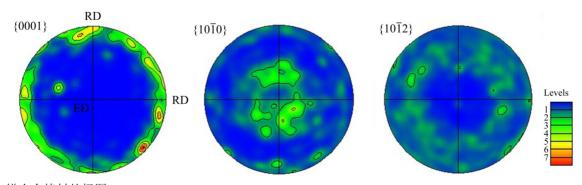


图5 镁合金棒材的极图

Fig. 5 Pole figures of magnesium alloy rod

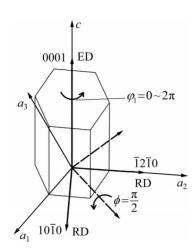


图6 欧拉角的定义

Fig. 6 Definition of Euler angles

在镁合金棒材的轴向拉伸或压缩变形过程中,对于基面滑移系,由于应力方向平行于基面,依据 Schmid 因子的定义,其 Schmid 因子为零;对于拉伸孪晶,在轴向压缩时处于软取向(Schmid 因子接近或等于 0.5),在轴向拉伸时则处于硬取向;对于柱面滑移系,在轴向拉伸或压缩时,将 $(0\sim2\pi,\pi/2,0)$ 代入上述计算公式中,得到最大 Schmid 因子值为 0.43。同样,得到锥面滑移系在镁合金棒材轴向拉伸或压缩时的最大取向因子为 0.45。由于压缩孪晶在镁合金棒材的轴向拉伸或压缩过程中很难启

动,所以对其不做分析。相关研究表明,在镁合金棒材的轴向拉伸过程中,主要的微观变形模式为基面、柱面和锥面滑移^[32-33]。而在镁合金棒材的轴向压缩过程中,主要的微观变形模式则为拉伸孪晶、基面滑移和柱面滑移^[33-35]。基面滑移系之所以在轴向拉伸或压缩变形中大量启动,是因为棒材中存在大量*c* 轴与 ED 不严格垂直的晶粒,由于基面滑移系的临界剪切应力值最低,所以这部分晶粒的基面滑移系在轴向变形过程中能够启动。

图7所示为镁合金棒材沿径向(RD1)压缩时晶粒的基面取向与不同微观变形模式最大 Schmid因子的关系。由图7(a)可知,当晶粒的 c 轴与应力方向(RD1)约成45°时,基面滑移系处于软取向而易启动,对于 c 轴与 RD1 向平行或垂直的晶粒,其基面滑移系则处于硬取向。由图7(b)可知,对于柱面滑移系,当晶粒 c 轴由与 RD1 平行转变为与之垂直时,柱面滑移系由硬取向转变为软取向。由图7(a)与(b)可知,基面与柱面滑移系都在一定晶粒取向范围内处于软取向,这意味着在镁合金棒材的径向压缩变形中,这两种变形模式会大量启动^[31-32]。由图7(c)可知,对于锥面滑移系,在镁合金棒材沿径向压缩过程中,当晶粒的 c 轴与 RD1 成 0°~30°时,处于软取向;而当晶粒的 c 轴与 RD1 成约 60°时,

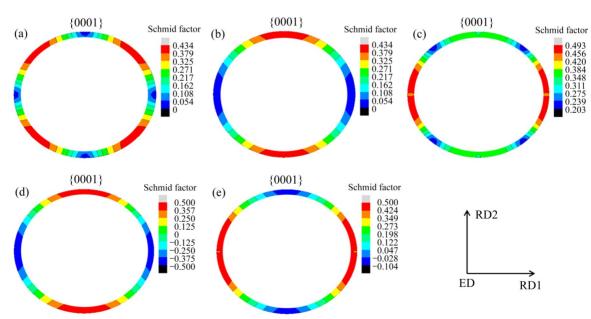


图7 镁合金棒材沿径向(RD1)压缩时晶粒的基面取向与不同微观变形模式最大Schmid因子(SF)的关系

Fig. 7 Relationship between grain basal orientation and maximum SFs of different micro deformation modes during radical (RD1) compression of magnesium alloy rod: (a) Basal slip; (b) Prismatic slip; (c) Pyramidal $\langle c+a \rangle$ slip; (d) $\{10\overline{1}2\}$ extension twinning; (e) $\{10\overline{1}1\}$ compression twinning

锥面滑移系处于硬取向。

由图7(d)可知,在镁合金棒材沿径向压缩变形过程中,当晶粒c轴与RD2夹角为0°~20°时(此时晶粒c轴趋向于与RD1垂直),拉伸孪晶处于软取向而易启动,并且在圆周方向的约0°~40°内都满足该条件,这意味着在棒材的径向压缩变形时,位于该角度范围内的晶粒将启动拉伸孪晶。拉伸孪晶启动使该部分晶粒的c轴转向应力方向,而其他部分的晶粒取向不发生变化。镁合金棒材在径向压缩变形前后的晶粒取向变化可用图8中的示意图来表示。

图 7(e)所示为镁合金径向压缩变形时晶粒基面取向与 $\{10\bar{1}1\}$ 压缩孪晶最大 Schmid 因子的关系。由图 7(e)可知,当晶粒的c 轴与应力方向成 30°时,压缩孪晶的处于软取向,并且在圆周方向 0°~60°内都满足此条件,表明该变形过程很有可能启动压缩孪晶。

对镁合金棒材分别沿ED和RD方向的准静态 压缩过程的变形微观机理分析表明[28],相关微观变 形机制与晶粒取向变化特征同上述分析结果一致。 镁合金在实际应用中可能承受高速冲击等动态变 形, 如汽车碰撞时某些部件所承受的应变速率高达 600 s-1, 高速行驶时碰撞所产生的应变速率甚至更 高,因此有必要对其动态压缩的微观机制进行分 析。图9所示为镁合金棒材在应变速率为1100 s-1 条件下分别沿轴向和径向动态压缩变形时的真应 力-真应变曲线,其中沿轴向压缩变形的真应力-真 应变取向为典型拉伸孪晶启动决定的S型曲线,其 宏观屈服强度为拉伸孪晶启动所决定。由图9可 知,沿径向压缩真应力-真应变曲线在硬化特征上 与轴向压缩有所区别, 前者的宏观屈服强度也低于 后者。如前文所分析,镁合金棒材轴向压缩变形 时,基面滑移系处于硬取向,而拉伸孪晶则处于软 取向,所以在变形的初始阶段拉伸孪晶的大量启动 决定宏观屈服强度。由图7(a)可以看出,镁合金棒 材径向压缩变形时, 当晶粒的 c 轴与应力方向成 30°~60°时,该部分晶粒的基面滑移系处于软取向。 同时图7(d)也显示,部分晶粒(这部分晶粒的c轴与 RD2方向一致或接近)的拉伸孪晶也处于软取向, 这意味着在变形初始阶段,有部分晶粒基面滑移系 和拉伸孪晶启动。由于基面滑移系的临界剪切应力 稍低于拉伸孪晶, 因此径向压缩的屈服强度是由基 面滑移系启动所决定,导致径向压缩的屈服强度低

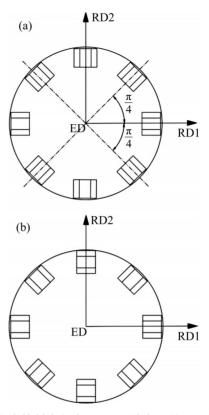


图8 镁合金棒材在径向(RD1)压缩变形前后晶粒取向变 化示意图

Fig. 8 Illustration of grain orientation variation before and after radical (RD1) compression of magnesium alloy rod: (a) Before deformation; (b) After deformation

于轴向压缩。

由图9可知,在变形的后期,轴向压缩的真应力一真应变曲线对应的应力值明显高于径向压缩。这是因为在轴向压缩变形过程中,在变形初期拉伸孪晶大量启动,使晶粒c轴由垂直于轴向转变为平行于轴向。在后续的变形中,锥面滑移系大量启动^[36],由于锥面滑移系的临界剪切应力高,所以在变形后期应力值升高较快。而对于径向压缩变形,图7(a)和(c)则分别显示,一部分晶粒的取向有利于基面滑移系启动。这些晶粒的取向不属于图7(d)中显示的有利于拉伸孪晶启动的那部分晶粒,即这些晶粒的取向不会发生改变。在变形过程中,始终有部分晶粒启动基面滑移系。由于基面滑移系的临界剪切应力远低于锥面滑移系,所以在变形后期,径向压缩的应力明显低于轴向压缩变形。

镁合金棒材沿径向压缩变形后的晶粒取向及晶界分布如图10所示。对比图5的中的晶粒取向特

征,可以看出在径向压缩变形后,晶粒的 c 轴由沿圆周方向均匀分布转变为向应力方向集中。这是因为在径向压缩变形过程中部分晶粒启动拉伸孪晶,这部分晶粒属于图 7(d)所显示的取向因子高的那部分晶粒。这部分晶粒在启动拉伸孪晶前后的晶粒取向变化如图 8 所示。Schmid 因子低的那部分晶粒(见图 7(d))则在径向压缩变形过程中没有启动拉伸

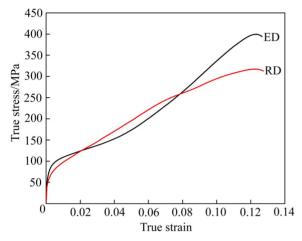


图9 镁合金棒材沿 ED和 RD 方向的高应变速率(1100 s^{-1})压缩真应力-真应变曲线

Fig. 9 True stress-strain curves of magnesium alloy rod for compression along ED and RD under high strain rate (1100 s^{-1})

孪晶,继而其取向没有发生变化,最终形成图 10 中所示的晶粒取向特征。

图 10(b)中的晶界分布特征显示,变形后的晶粒中存在少量的 {10Ī2} 拉伸孪晶界。根据图 10(c)显示的晶粒取向特征,启动拉伸孪晶的那部分晶粒几乎完全被转变为孪晶,少量晶粒在变形后没有被转变为孪晶,这部分晶粒在变形后存在拉伸孪晶界。图 10(b)也显示变形后的个别晶粒中存在少量的 {10Ī2}-{10Ī2} 孪晶界。这是因为在变形过程中晶粒内部启动了不同 {10Ī2} 孪晶变体。由于不同变体间存在取向差,所以不同变体相遇时形成 {10Ī2}-{10Ī2} 孪晶界^[37]。

另外,由图 10(b)可知,变形后的部分晶粒中存在 $\{10\bar{1}\}$ - $\{10\bar{1}2\}$ 二次孪晶界。 $\{10\bar{1}1\}$ - $\{10\bar{1}2\}$ 二次孪晶是在先启动 $\{10\bar{1}1\}$ 压缩孪晶基础上再次启动 $\{10\bar{1}2\}$ 拉伸孪晶。图 7(e) 显示,c 轴与应力方向(RD1)夹角在 $0^{\circ}\sim30^{\circ}$ 范围内的晶粒取向使 $\{10\bar{1}1\}$ 压缩孪晶的 Schmid 因子接近 0.5 而易启动。压缩孪晶启动后,使晶粒 c 轴朝 RD2 偏转约 57° ,则偏转后的晶粒 c 轴与 RD2 的夹角在 $3^{\circ}\sim33^{\circ}$ 范围内的一部分晶粒与图 7(d)中有利于 $\{10\bar{1}2\}$ 拉伸孪晶启动的部分晶粒(与 RD2 的夹角约在 $0^{\circ}\sim20^{\circ}$)重

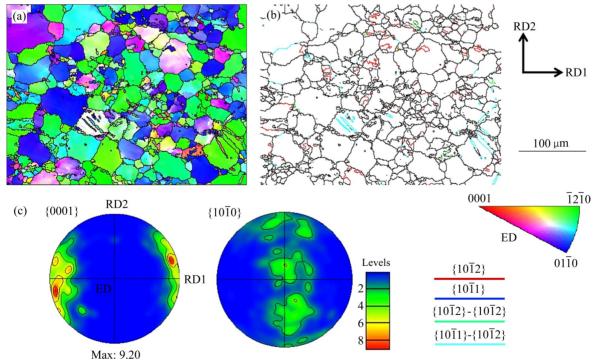


图10 镁合金棒材沿径向(RD1)压缩后晶粒取向及晶界分布

Fig. 10 Distributions of grain orientations and grain boundaries of magnesium alloy rod after radical compression: (a) Grain orientations; (b) Grain boundaries; (c) Pole figures

合,继而在后续的变形中可能启动拉伸孪晶。由于 {10Ī1} 压缩孪晶的临界剪切应力很高导致其较难启动(见图10(b)),只有少数几个晶粒中启动了 {10Ī1}-{10Ī2} 二次孪晶。图 10(b)显示晶粒中没有 {10Ī1} 压缩孪晶界,表明其全部转变为 {10Ī1}-{10Ī2} 孪晶界。

4 结论

- 1) 建立了基于欧拉角和应力张量的镁合金微观 变形模式的 Schmid 因子计算方法,该方法可以应 用于其他HCP 晶体的 Schmid 因子计算。
- 2) 镁合金板材拉伸变形的 Schmid 因子分析表明,板材中的基面织构有利于柱面和锥面滑移系启动。如果异步轧制不能使晶粒的基面偏转角度超过20°,则不足以明显提高基面滑移系的启动量。
- 3) 计算了具有基面织构的镁合金棒材沿径向压缩变形的 Schmid 因子分布,表明镁合金棒材径向压缩时,对每一种微观变形模式,都有部分晶粒的取向有利于其启动。镁合金棒材压缩变形实测结果表明,微观变形机制的差异使镁合金在轴向和径向压缩时,真应力-真应变曲线在屈服强度和硬化特征方面出现差异。
- 4) 镁合金棒材径向压缩时,部分晶粒启动拉伸孪晶,晶粒取向的变化特征与基于 Schmid 因子分析的结果一致,变形中部分晶粒中启动了不同的拉伸孪晶变体,形成{10Ī2}-{10Ī2}孪晶界,少量晶粒内形成{10Ī1}-{10Ī2}孪晶界。

REFERENCES

- [1] 刘华强, 唐 获, 胡水平, 等. 不同轧制工艺对 AZ31 镁合金 薄板室温成形性能的影响[J]. 中国有色金属学报, 2012, 22(12): 3293-3299.
 - LIU Hua-qiang, TANG Di, HU Shui-ping, et al. Effect of rolling technology on forming properties of AZ31 magnesium alloy sheets at room temperature[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2012, 22(12): 3293–3299.
- [2] 江海涛, 段晓鸽, 蔡正旭, 等. 异步轧制 AZ31 镁合金板材的 超塑性工艺及变形机制[J]. 材料工程, 2015, 43(8): 7-12. JIANG Hai-tao, DUAN Xiao-ge, CAI Zheng-xu, et al. Superplastic process and deformation mechanism of asymmetrically rolled AZ31 Magnesium alloy[J]. Journal of Materials Engineering, 2015, 43(8): 7-12.

- [3] LEE J B, KONNO T J, JEONG H G. Effect of differential speed rolling on the anisotropy of mechanical properties and texture evolution of AZ31 Mg alloys[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2010, 499: 273–277.
- [4] 霍庆欢, 杨续跃, 马继军, 等. AZ31 镁合金板材低温双向反复弯曲及退火下的织构弱化[J]. 中国有色金属学报, 2012, 22(9): 2492-2499.
 - HUO Qing-huan, YANG Ji-yue, MA Ji-jun, et al. Texture weakening of AZ31 Mg alloy sheet under bidirectional cyclic bending at low temperature and subsequent annealing[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2012, 22(9): 2492–2499.
- [5] HUANG G S, LI H C, SONG B, et al. Tensile properties and microstructure of AZ31B magnesium alloy sheet processed by repeated unidirectional bending[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2010, 20(1): 28–33.
- [6] HONG S G, PARK S H, LEE C S. Role of {1012} twinning characteristics in the deformation behavior of a polycrystalline Magnesium alloy[J]. Acta Materialia, 2010, 58: 5873-5885.
- [7] WANG X X, MAO P L, WANG R F, et al. Role of {1012} twinning in the anisotropy and asymmetry of AZ31 Magnesium alloy under high strain rate deformation[J]. Materials Science and Engineering A, 2020, 772: 138814.
- [8] XIN Y C, JIANG J, CHAPUIS A, et al. Plastic deformation behavior of AZ31 magnesium alloy under multiple passes cross compression[J]. Materials Science and Engineering A, 2012, 532: 50-57.
- [9] GODET S, JIANG L, LUO A A, et al. Use of Schmid factors to select extension twin variants in extruded magnesium alloy tubes[J]. Script Materialia, 2006, 55: 1055-1058.
- [10] SONG G S, ZHANG S H, ZHENG L, et al. Twinning, grain orientation and texture variation of AZ31 Mg alloy during compression by EBSD tracing[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2011, 509(22): 6481–6488.
- [11] YIN D D, BOEHLERT C J, LONG L J, et al. Tension-compression asymmetry and the underlying slip/twinning activity in extruded Mg-Y sheets[J]. International Journal of Plasticity, 2021, 136: 102878.
- [12] JONAS J J, MU S J, AL-SAMMAN T, et al. The role of strain accommodation during the variant selection of primary twins in magnesium[J]. Acta Materialia, 2011, 59: 2046 – 2056.
- [13] LIU X, JONAS J J, ZHU B W, et al. Variant selection of primary extension twins in AZ31 magnesium deformed at 400 °C [J]. Materials Science and Engineering A, 2016, 649: 461-467.

- [14] BARNETT M R, KESHAVARZ Z, BEER A G, et al. Non-Schmid behaviour during secondary twinning in a polycrystalline magnesium alloy[J]. Acta Materialia, 2008, 56: 5–15.
- [15] MARTIN É, CAPOLUNGO L, JIANG L, et al. Variant selection during secondary twinning in Mg-3%Al[J]. Acta Materialia, 2010, 58: 3970–3983.
- [16] MU S J, JONAS J J, GOTTSTEIN G. Variant selection of primary, secondary and tertiary twins in a deformed Mg alloy[J]. Acta Materialia, 2012, 60: 2043–2053.
- [17] XIN R L, GUO C F, JONAS J J. Variant selection of $\{10\overline{1}2\}$ - $\{10\overline{1}2\}$ double twins during the tensile deformation of an AZ31 Mg alloy[J]. Materials Science and Engineering A, 2017, 700: 226–233.
- [18] ZHU B W, LIU X, XIE C, et al. {1012} extension twin variant selection under a high train rate in AZ31magnesium alloy during the plane strain compression[J]. Vacuum, 2019, 160: 279–285.
- [19] WU B L, DUAN G S, DU X H. In situ investigation of extension twinning-detwinning and its effect on the mechanical behavior of AZ31B magnesium alloy[J]. Materials and Design, 2017, 132: 57-65.
- [20] 宋广胜, 张士宏, 徐 勇, 等. 施密特因子在镁合金微观变形 机制研究中的应用[J]. 精密成形工程, 2014, 6(6): 1-6. SONG Guang-sheng, ZHANG Shi-hong, XU Yong, et al. Application of schmid factor in Mg alloy deformation micromechanism investigation[J]. Journal of Netshape Forming Engineering, 2014, 6(6): 1-6.
- [21] 刘晏宇, 毛萍莉, 刘 正, 等. Schmid因子的理论计算及其在 镁合金高速变形过程中的应用[J]. 金属学报, 2018, 54(6): 950-958. LIU Yan-yu, MAO Ping-li, LIU Zheng, et al. Theoretical calculation of Schmid factor and its application under high strain rate deformation in Magnesium alloys[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2018, 54(6): 950-958.
- [22] TANG W R, LIU Z, LIU S M, et al. Deformation behavior of ultrafine grained Mg-7Gd-5Y-1.2Nd-0.5Zr alloy under high strain rates[J]. Materials Science and Technology, 2019, 35(18): 2225–2233.
- [23] XIN R L, MAO M Y, HUANG X X, et al. Observation and Schmid factor analysis of multiple twins in a warm-rolled Mg-3Al-1Zn Alloy[J]. Materials Science and Engineering A, 2014, 596: 41–44.
- [24] CHEN S F, SONG H W, ZHANG S H, et al. An effective Schmid factor in consideration of combined normal and shear stresses for slip/twin variant selection of Mg-3Al-1Zn alloy[J]. Scripta Materialia, 2019, 167: 51–55.

- [25] 宋广胜, 牛嘉维, 张士宏, 等. 镁合金棒材扭转变形的孪晶 机制[J]. 中国有色金属学报, 2020, 30(7): 1574-1583.

 SONG Guang-sheng, NIU Jia-wei, ZHANG Shi-hong, et al. Twinning mechanism of Magnesium alloy rod torsion[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2020, 30(7): 1574-1583.
- [26] CHANDOLA N, MISHRA R K, CAZACU O. Application of the vpsc model to the description of the stress-strain response and texture evolution in AZ31 Mg for various strain paths[J]. Journal of Engineering Materials and Technology, 2015, 137(4): 1–10.
- [27] GUO X Q, CHAPUIS A, WU P D, et al. On twinning and anisotropy in rolled Mg alloy AZ31 under uniaxial compression[J]. International Journal of Solids and Structures, 2015, 64/65: 42–50.
- [28] GUO X Q, CHAPUIS A, WU P D, et al. Experimental and numerical investigation of anisotropic and twinning behavior in Mg alloy under uniaxial tension[J]. Materials and Design, 2016, 98: 333–343.
- [29] WANG H, RAEISINIA B, WU P D, et al. Evaluation of self-consistent polycrystal plasticity models for Magnesium alloy AZ31B sheet[J]. International Journal of Solids and Structures, 2010, 47: 2905–2917.
- [30] KUANG J, ZHANG Y Q, DU X P, et al. On the strengthening and slip activity of Mg-3Al-1Zn alloy with pre-induced {1012} twins[J/OL]. Journal of Magnesium and Alloys, 2021. [2023.01]. http://doi.org/10.1016/j.jma.2021.07.016.
- [31] REN X W, HUANG Y C, ZHANG X Y, et al. Influence of shear deformation during asymmetric rolling on the microstructure, texture, and mechanical properties of the AZ31B magnesium alloy sheet[J]. Materials Science and Engineering A, 2021, 800: 140306.
- [32] GUO L L, FUJITA F. Effect of deformation mode, dynamic recrystallization and twinning on rolling texture evolution of AZ31 magnesium alloys[J]. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2018, 28: 1094–1102.
- [33] 苏辉, 楚志兵, 薛春, 等. 基于粘塑性自洽模型 AZ31 镁合金塑性变形行为研究[J]. 功能材料, 2021, 52(1): 1173-1179.
 - SU Hui, CHU Zhi-bing, XUE Chun, et al. Study on plastic deformation behavior of AZ31 Magnesium alloy based on viscoplastic self-consistent model[J]. Journal of Functional Materials, 2021, 52(1): 1173–1179.
- [34] KABIRIAN F, KHAN A S, GNÄUPEL-HERLOD T. Viscoplastic modeling of mechanical responses and texture evolution in extruded AZ31 Magnesium alloy for various

- loading conditions[J]. International Journal of Plasticity, 2015, 68: 1–20.
- [35] 宋广胜, 张健强, 牛嘉维, 等. AZ31 镁合金挤压棒材变路径 压缩的微观机理[J]. 稀有金属材料与工程,2019, 48(11):

SONG Guang-sheng, ZHANG Jian-qiang, NIU Jia-wei, et al. Micro-mechanism of various paths compression of the extruded AZ31 Mg alloy rod[J]. Rare Metal Materials and

- Engineering, 2019, 48(11): 3563-3570.
- [36] LI L, MURÁNSKY O, FLORES-JOHNSON E A, et al. Effects of strain rate on the microstructure evolution and mechanical response of Magnesium alloy AZ31[J]. Materials Science and Engineering A, 2017, 684: 37–46.
- [37] NAVE M D, BARNETT M R. Microstructures and textures of pure Magnesium deformed in plane-strain compression[J]. Scripta Materialia, 2004, 51: 881–885.

Calculation and application on Schmid factor in studying deformation mechanism of magnesium alloy

SONG Guang-sheng¹, XU De-bin¹, XU Yong², CHEN Shuai-feng², ZHANG Shi-hong²

(1. School of Materials Science and Engineering, Shenyang Aerospace University, Shenyang 110136, China; 2. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

Abstract: Formula on the Schmid factor (SF) was established with the Euler angles measured by the electronic backscatter diffraction technique (EBSD), which could be applied to calculate the SFs of HCP structural materials. With this formula, the relationship between variation of grain orientation and SFs for different plastic deformation modes during the extension of magnesium alloy sheet was systematically analyzed. The results show that the existence of basal texture within the magnesium alloy sheet is not beneficial for activations of basal sliding and extension twin, but beneficial for activations of prismatic and pyramidal slips. The improvement of the mechanical properties of magnesium alloy sheet caused by the differential speed rolling is limited. The differences in activation of micro deformation mechanism between axial and radical compressions of magnesium alloy rod are caused by their distinctive SFs for grain, which correspondingly result in obviously different mechanical properties for two loading cases.

Key words: magnesium alloy; deformation mechanism; Euler angles; Schmid factor; texture

Foundation item: Project(52105412) supported by the National Natural Science Foundation of China

Received date: 2021-11-16; Accepted date: 2022-01-24

Corresponding author: CHEN Shuai-feng; Tel: +86-18704090646; E-mail: chensf@imr.ac.cn

(编辑 龙怀中)