镁合金塑性加工技术研究新进展专题

施密特因子在镁合金微观变形机制研究中的应用

张士宏，宋广胜，徐勇，宋鸿武，程明
（中国科学院金属研究所，沈阳 110016）

摘要：施密特因子具有计算简单、表述方便的优点，在金属微观塑性变形机理分析中，能够定性判断微观变形模式滑移和孪晶的启动。首先介绍了施密特因子在密排六方晶体结构中的多种表述形式，然后分别列出了其在镁合金塑性变形微观机理分析中的应用。上述应用结果表明，施密特因子在镁合金变形机理研究中是不可缺少的工具。

关键词：施密特因子；镁合金；滑移；孪晶；晶粒取向
DOI：10.3969/j.issn.1674-6457.2014.06.001
中图分类号：TG13.25+3　　**文献标识码：**A　　**文章编号：**1674-6457(2014)06-0001-06

Application of Schmid Factor in Mg Alloy Deformation Micro-Mechanism Investigation

ZHANG Shi-hong, *SONG Guang-sheng*, *XU Yong*, *SONG Hong-wu*, *CHENG Ming*
(Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

ABSTRACT: Schmid factor has advantages of easy calculation and convenient description, which can quantitatively predict activations of deformation micro-modes sliding and twinning. In this paper, some description ways of Schmid factor were first introduced, and application of Schmid factor in analyzing Mg alloy deformation micro-mechanism were also listed, which shows that the Schmid factor was an indispensible tool in Mg alloy deformation mechanism investigation.

KEY WORDS: Schmid factor; Mg alloy; sliding; twinning; grain orientation

自从奥地利学者施密特在1924年建立施密特因子的表达式以来[1]，施密特因子以其计算简单、表述方便的优点，在金属塑性变形机制的分析中得到了广泛应用[2—5]。通过计算金属在简单变形中的施密特因子，可以定性分析各种位错滑移机制的启动趋势。

镁合金因其固有的密排六方(hexagonal close-packed, HCP)晶体结构，使其呈现明显不同于立方系晶体结构金属的塑性变形特点，具体表现为：镁合金中一些位错滑移模式的启动对温度极敏感[6]，室温下变形，通常为基面滑移和拉伸孪晶启动，以满足密席斯准则[7]；织构对镁合金宏观力学性能影响明显，从而引起宏观力学性能的各向异性；孪晶特别是拉伸孪晶在变形初期易启动，从而引起宏观力学性

收稿日期：2014-10-22
基金项目：国家自然科学基金资助项目(50775211, 51174189)
作者简介：张士宏(1962—)，男，博士，研究员，博士生导师，主要研究方向为金属先进塑性加工技术。

能拉压不对称性等特征。

金属塑性变形过程中,孪晶和滑移系的启动通常遵循施密特定律,即施密特因子大的微观变形模式先启动。对于某个具体的变形模式,其能否启动作为取决于该变形模式的临界剪切应力(critical shear stress, CRSS)和沿切变方向的施密特因子,对于镁合金的各种微观变形模式,拉伸孪晶的 CRSS 值最小,远低于柱面和锥面滑移系,但孪晶的启动具有单向性特点,即在晶粒取向和载荷方向确定的条件下,只能沿某单一方向进行切变,这一点不同于滑移系的启动特点。故对应孪晶的施密特因子取值范围为[-0.5,0.5],而对应滑移系的施密特因子取值范围则为[0,0.5]。相比于滑移系的启动,施密特因子在描述孪晶启动机制方面更具有优势,如可以定量地确定所启动的孪晶变体。

文中结合作者在镁合金塑性变形机理的研究工作,介绍了施密特因子在镁合金微观变形机理分析中的应用。

1 施密特因子的表述方法

施密特因子适合于在单向载荷条件下对金属微观变形机制的描述,其最原始的表达方式为代数式:

$$m=\cos\varphi\cdot\cos\lambda \tag{1}$$

式中:m 为施密特因子;φ 为外载荷与滑移面法线的夹角;λ 为外载荷与滑移方向的夹角。

在具体的应用中,在直角坐标系(x,y,z)下式(1)的计算式则为:

$$m=\frac{\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{b}}{|\boldsymbol{F}|\cdot|\boldsymbol{b}|}\cdot\frac{\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{n}}{|\boldsymbol{F}|\cdot|\boldsymbol{n}|} \tag{2}$$

式中:$\boldsymbol{F}$ 为外载荷矢量;$\boldsymbol{b}$ 为切变方向矢量;$\boldsymbol{n}$ 为滑移或孪晶面的法线矢量。

上述公式可以对单个晶粒的某个滑移系或孪晶系的施密特因子值进行计算,但在实际应用中,需要借助于其他表达形式对晶粒中各变形模式的施密特因子进行表述,以便于分析金属塑性变形的微观机理。常用的施密特因子分布表述方法有极图表示法、反极图表示法、晶粒取向图表示法和特定坐标系表示法等。

图 1 显示了对于某个镁合金变形过程在极图中表述晶粒施密特因子的方法,在图示的{0001}极图中,1M 和 1 分别表示晶粒 1 在变形前后对应的取向,t1 ~ t6 分别对应晶粒 1 的 6 个孪晶变体的取向,分别标示在 t1 ~ t6 下面的数值则对应着 6 个孪晶变体的施密特因子值。图中显示拉伸孪晶变体 t1 和 t5 具有最大施密特因子而最有可能启动,而实际上孪晶变体 t5 与变形后晶粒 1 的取向一致,从而可以确定该变形过程中实际启动的孪晶变体为 t5。在镁合金变形机理研究中,施密特因子分布的极图表示法多用于对单个晶粒孪晶启动机制的分析[8—10]。

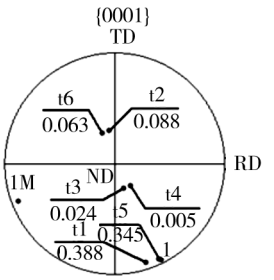


图 1 镁合金试样中晶粒 1 的极图

Fig. 1 Pole figure of grain 1 in the magnesium alloy specimen

HCP 晶体关于其 C 轴对称,在 HCP 晶体中,可以在 1/12 的空间中表示晶体的一些特征,图 2 显示了反极图表示变形镁合金试样内若干晶粒的基面滑移系的最大施密特因子分布。与图 1 所示的表示方法不同,施密特因子分布的反极图表示法多用于对观测区域内所有晶粒进行统计分析[11—12]。

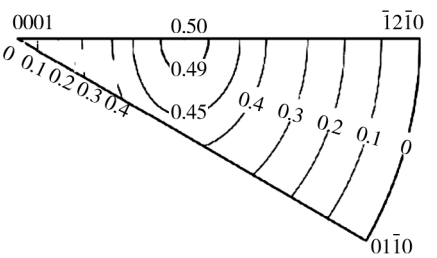
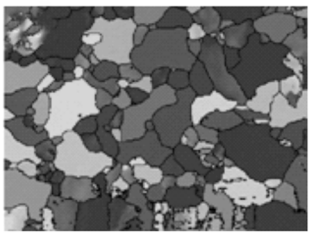


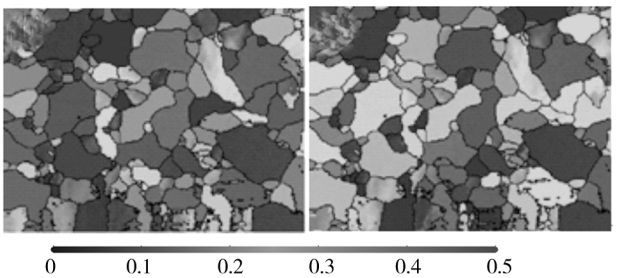
图 2 镁合金压缩过程中最大施密特因子的分布

Fig. 2 Maximum Schmid factor distribution of Mg alloy during compression

施密特因子也可以在利用电子背散射衍射(Electron Backscatter Diffraction, EBSD)技术所测得晶粒取向图中表示,如图 3 所示,对于某个镁合金压缩后的试样,在 EBSD 扫描区域内,显示了该区域内晶粒的 3 个基面滑移系的施密特因子的分布。施密特因子分布的晶粒取向图表示法较为直观地显示观测区域内所有晶粒的施密特因子分布,在镁合金变形



a　(0001)[11$\bar{2}$0]的施密特因子分布



b　(0001)[$\bar{2}$110]的施密特因子分布　c　(0001)[1$\bar{2}$10]的施密特因子分布

图 3　变形区晶粒滑移系

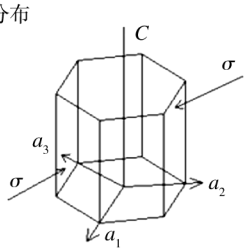
Fig. 3 Schmid factor distribution of slips

机理研究中,该方法多用于对滑移系的施密特因子分布进行分析[13—14]。

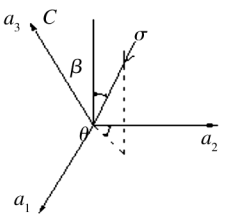
针对 HCP 晶体结构,可以建立特定坐标系,从而可以更准确地描述施密特因子在空间的分布。如图 4a 所示,建立(θ, β)坐标系,图 4b 和 c 则分别显示了在该坐标系下,θ 值分别为 0°,-15°和-30°,而 β 值为 0°~90°时的基面滑移系和柱面滑移系的施密特因子分布,图 4d 则显示了在 β 值为 0°,而 θ 值为 0°~90°时的施密特因子分布。

上述结果直观地显示了施密特因子的分布特征,对分析镁合金微观变形机制具有重要的参考作用。如图 4b 显示,当单向应力 σ 与 C 轴夹角为 45°时,基面滑移系处于软取向而最易启动,并且基面滑移系的施密特因子分布关于 β =45°对称分布。图 4c 则显示当 β 为 90°时,即应力 σ 与 C 轴垂直时,柱面滑移系处于软取向而最易启动;而当 β 为 0°时,即应力 σ 与 C 轴平行时,柱面滑移系处于硬取向而无法启动,并且柱面滑移系的施密特因子随着 β 角的增大而单调递增。

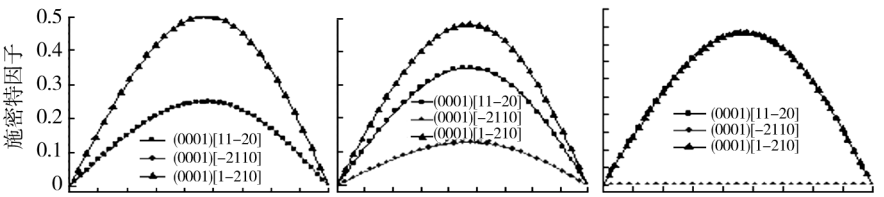
图 4d 则显示了当 β 为 90°,即压应力 σ 与 C 轴垂直时,拉伸孪晶 6 个变体的施密特因子的空间分布特点。图中结果显示,6 个孪晶变体的施密特因子分布可以分成 3 组,即变体 1 和 5、变体 2 和 6、变体 3 和 4,孪晶变体的施密特因子分布呈现三角函数曲线特征。图 4d 直观地显示,当垂直于 C 轴的压应力位于 θ=[-30°,30°]范围内时,孪晶变体 1 和 5 最易启动,在 θ=[-30°,-60°]范围内,孪晶变



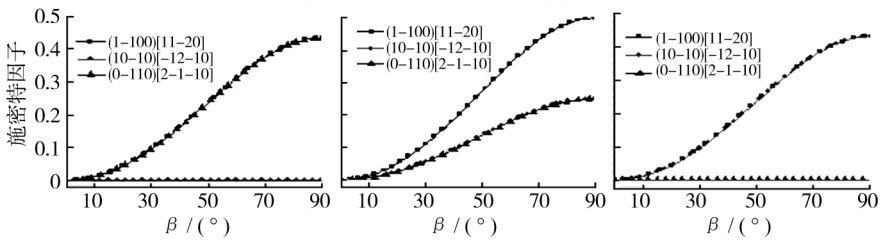
a　载荷与晶粒取向关系的示意图



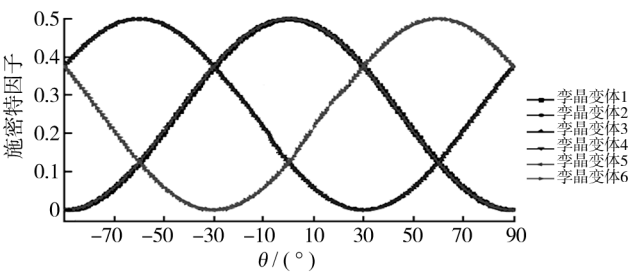
b　坐标系(θ, β)的定义



c　不同θ下的基面滑移系的施密特因子



d　不同θ下的柱面滑移系的施密特因子



e　θ=0条件下拉伸孪晶的施密特因子分布

图 4　不同载荷条件下镁合金微观变形模式的施密特因子计算

Fig. 4 Schmid factor calculation of Mg alloy micro deformation modes

体 3 和 4 最易启动,而在 $\theta=[30°,60°]$ 范围内,孪晶变体 2 和 6 最易启动。

2 施密特因子在镁合金微观变形机理分析中的应用

2.1 孪晶启动对变形模式的影响

在镁合金的各种微观变形模式中,拉伸孪晶因其 CRSS 最小而最易启动,启动拉伸孪晶对变形的直接贡献量较小,但其能够改变晶粒取向,从而有利于更多滑移系启动。

对于 AZ31 镁合金轧制板材,室温下沿轧向压缩变形,利用 EBSD 对晶粒取向变化进行原位跟踪,从而分析其微观变形机制。图 5 显示了在上述实验中所得拉伸孪晶启动对滑移系启动的分析结果[15],图 5 结果显示,在拉伸孪晶启动前后,基面滑移系的施密特因子虽然有小幅提高,但多数晶粒的施密特因子小于 0.2 而处于硬取向,即在拉伸孪晶启动前后基面滑移系的施密特因子变化不明显,始终处于硬取向。

图 5c 和 d 显示在拉伸孪晶启动后,柱面滑移系的施密特因子则明显降低,大约由 0.3 降至接近于 0,即在孪晶启动后明显处于硬取向而不易启动。图 5e 和 f 显示在拉伸孪晶启动后,锥面滑移系的施密特因子大幅度增加,平均由 0.25 增至约 0.45 左右,即在拉伸孪晶启动后,锥面滑移系处于软取向而易启动。上述变形过程微观变形模式的定量模拟结果显示,在变形后期锥面滑移系大量启动,而 CRSS 值较小的柱面滑移系在变形后期启动量较少[15],这正是拉伸孪晶启动对不同滑移系的施密特因子影响差异明显的结果。

镁合金沿轧向压缩的各滑移系的最大施密特因子分布如图 6a,b 和 c 所示,图 6d 和 e 则分别显示了上述变形过程中,在拉伸孪晶启动前后观测区域内所有晶粒的压缩轴(即轧向)的分布。可以看出在拉伸孪晶启动前,对于基面滑移系,多数晶粒位于施密特因子较低区域;对于柱面滑移系多数晶粒则位于施密特因子较大的区域;而对于锥面滑移系多数晶粒则位于施密特因子稍大的区域。在拉伸孪晶启动后,图 6e 则显示,对于基面滑移系,多数晶粒还是位于施密特因子较低的区域;对于柱面滑移系,多数晶粒则位于施密特因子较低的区域;而对于锥面滑移系,多数晶粒则位于施密特因子最高区域。图 6 中所显示的拉伸孪晶启动前后各滑移系的施密特因子变化特点与图 5 所显示的结果一致,即拉伸孪晶的启动不明显改变基面滑移系的施密特因子值,明显降低柱面滑移系的施密特因子,而大幅增加锥面滑移系的施密特因子值。

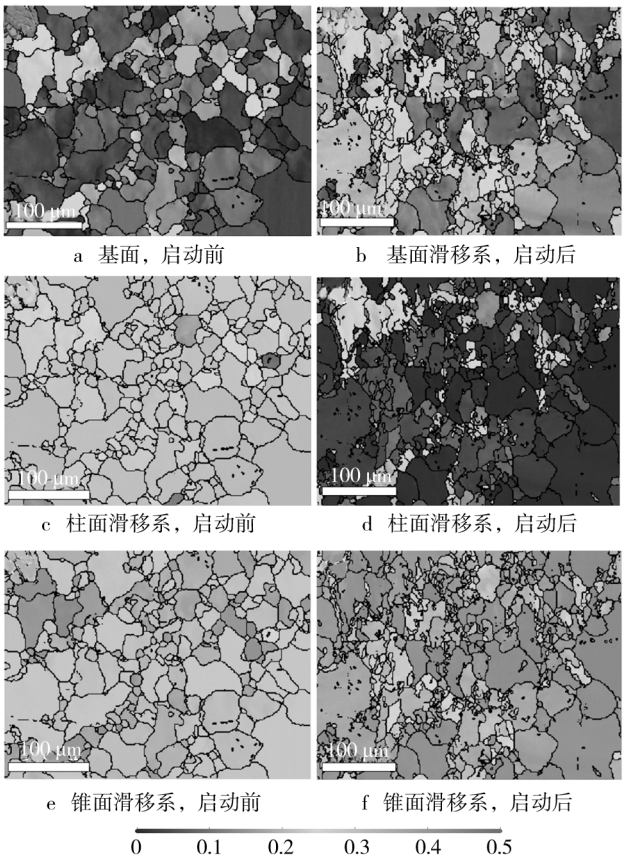


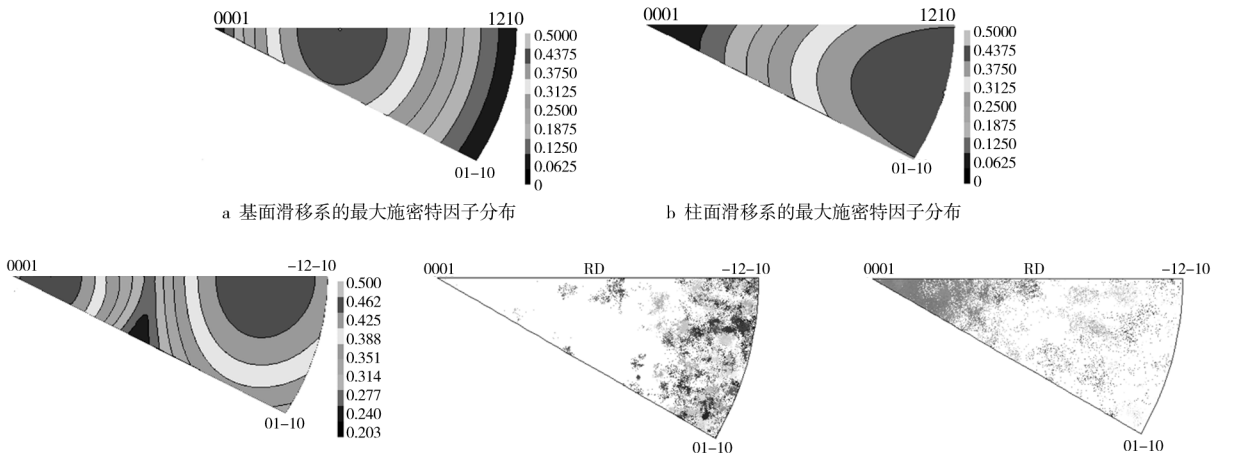
图 5 各晶粒滑移系在孪晶启动前后的施密特因子

Fig. 5 SFs of slps before and after twinning

2.2 孪晶变体分析

在 AZ31 镁合金轧制板材上截取立方体试样,对该试样先后沿轧向和横向压缩至一定变形量。图 7 则显示了在沿横向压缩变形后观测区内部分晶粒的取向及其对应的{0001}极图。图中的 1M ~ 6M 则分别表示 6 个晶粒在沿横向压缩前(沿轧向压缩后)的取向,数字 1 ~ 6 则分别表示 6 个晶粒在沿横向压缩后的取向,极图中的 t_1 ~ t_6 则分别表示每个晶粒对应的 6 个拉伸孪晶变体,其具体的晶体学特征如表 1 所示。

图 7 中每个晶粒的极图显示,在沿横向压缩后,



a 基面滑移系的最大施密特因子分布　　b 柱面滑移系的最大施密特因子分布

c 锥面滑移系的最大施密特因子分布　　d 室温压缩过程中晶粒压缩轴在孪晶启动前的分布　　e 室温压缩过程中晶粒压缩轴在孪晶启动后的分布

图 6　各滑移系的最大施密特因子分布以及室温压缩过程中晶粒压缩轴在孪晶启动前后的分布

Fig. 6 Distribution of the maximum SFs of Slips and distribution of the com pression axes of grains before and after twinning during compression at rom temperature

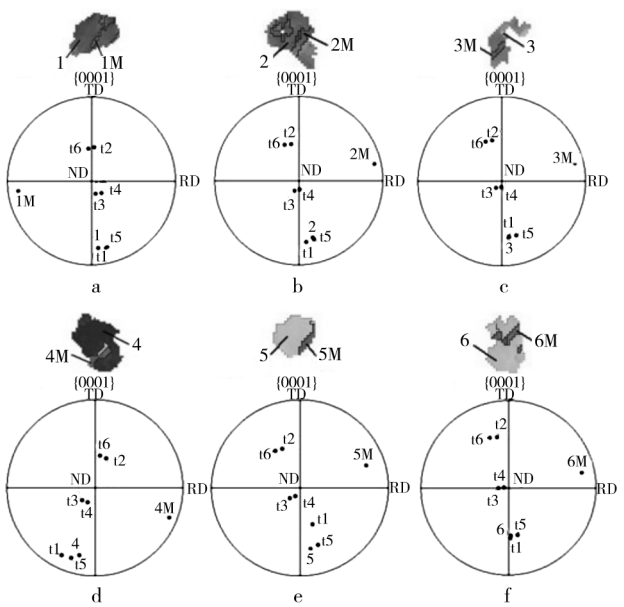


图 7　镁合金压缩试样中晶粒孪晶变体的启动

Fig. 7 Activation of twin variant within the compressed Mg alloy specimen

表 1　镁合金的拉伸孪晶变体及其取向

Table 1 Mg alloy twin variants and their orientations

孪晶变体	取向	孪晶变体	取向
t1	$(10\bar{1}2)[\bar{1}011$	t4	$(0\bar{1}12)[01\bar{1}1$
t2	$(1\bar{1}02)[\bar{1}101$	t5	$(\bar{1}012)[10\bar{1}1$
t3	$(01\bar{1}2)[0\bar{1}11$	t6	$(\bar{1}102)[1\bar{1}01$

所有晶粒的取向与孪晶变体 t1 或 t5 的取向最接近,表明在沿横向压缩过程中所有晶粒所启动的孪晶变体都为 t1 或 t5,图 4e 中的结果显示,在 $\theta=[-30°,30°]$ 范围内孪晶变体 t1 和 t5 具有最大的施密特因子而最易启动,由图 8 所显示的试样沿轧向压缩后的 $\{10\bar{1}0\}$ 极图特征,可以看出此时沿横向(TD)压缩,则 θ 角在 $[-30°,30°]$ 范围内,即位于孪晶变体 t1 和 t5 具有最大的施密特因子的角度范围内,从而所启动的孪晶变体皆为 t1 或 t5。

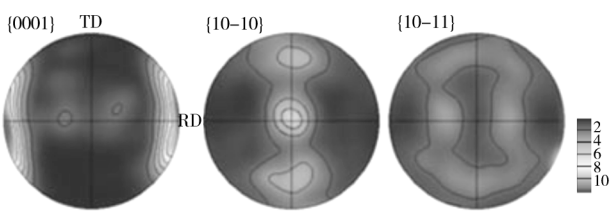


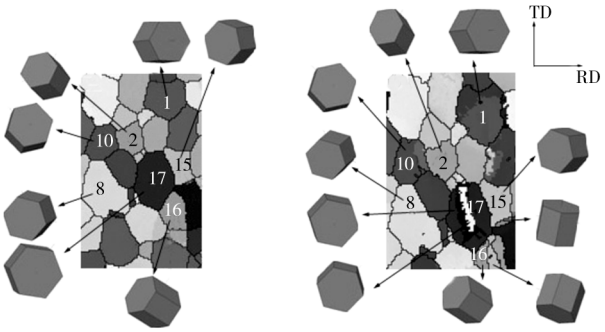
图 8　镁合金试样沿轧向压缩后的极图

Fig. 8 Pole figures of Mg alloy specimen after compression along rolling direction

2.3　孪晶启动机制分析

对 AZ31 镁合金轧制板材室温下沿轧向进行拉伸,利用 EBSD 技术原位跟踪变形过程晶粒取向变化。图 9 显示了在不同变形量下观测区内部分晶粒的取向变化,其中晶粒 15 和 16 基体中出现了孪晶

带。一些研究结果中也报道了在拉伸变形后的镁合金晶粒中产生了孪晶,但都推测是在试样拉伸后的卸载过程中产生的。

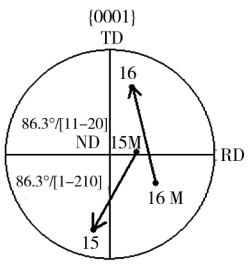


a 拉伸前 b 拉伸后

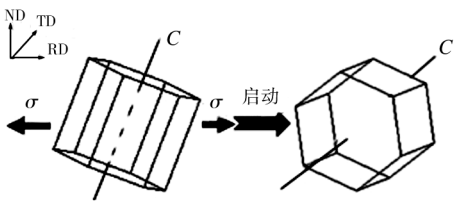
图 9 晶粒在变形前后的取向图

Fig. 9 Grain orientation micrographs before and after deformation

表 2 显示了在拉伸变形过程中晶粒 15 和 16 的 6 个孪晶变体的施密特因子值,其中施密特因子值为负数的孪晶变体应该是在试样拉伸后卸载过程中启动。图 10a 则显示了实际启动的孪晶变体,可以看出,晶粒 15 中所实际启动的孪晶变体为[$1\bar{2}10$],而表 2 显示该孪晶变体拉伸过程具有最大施密特因子,符合施密特定律,同样,晶粒 16 在拉伸变形过程中启动了具有最大施密特因子值的孪晶变体[$11\bar{2}0$]。图 10 则显示了上述孪晶启动机制,即晶粒 15 和 16 的 C 轴与轧向(RD)的夹角较小,在拉应力作用下,



a 晶粒15和16的 {0001}极图



b 晶粒15和16中拉伸孪晶的启动

图 10 晶粒 15 和 16 中孪晶的形成机制

Fig. 10 Mechanism of twin activation for grain 15 and 16

表 2 试样拉伸过程中晶粒 15 和 16 的孪晶变体的施密特因子

Table 2 Schmid factor of twin variant in grain 15 and grain 16 during the tension

晶粒	孪晶变体的施密特因子					
	[$\bar{1}2\bar{1}0$]	[$11\bar{2}0$]	[$\bar{2}110$]	[$2\bar{1}\bar{1}0$]	[$1\bar{2}10$]	[$\bar{1}\bar{1}20$]
15	0.08	−0.07	−0.27	−0.22	0.10	−0.11
16	−0.05	0.20	0.10	0.14	0.02	0.22

晶粒沿 C 轴方向产生正应变,从而产生拉伸孪晶,使晶粒 C 轴与横向接近。

上述分析结果表明,拉伸试样中的一些晶粒内的孪晶是在试样拉伸变形过程中启动的,而非在卸载过程中启动。

3 结论

1) 施密特因子有极图表示法、反极图表示法、晶粒取向图表示法和特定坐标系表示法等,相比于施密特因子的数值计算结果,上述各种表示法能够直观地表示变形过程中施密特因子的分布。

2) 在镁合金塑性变形机理研究中,采用上述各种施密特因子表示法可以准确描述孪晶启动机制,及其对后续变形机制的影响。

参考文献:

[1] SCHMID E, BOAS W. Plasticity of Crystals[M]. Berlin and London: Springer and Hughes, 1950.

[2] 刘毓舒,赵波,宓小川. 泰勒模型在冷轧深冲钢塑性各向异性预估中的应用[J]. 上海交通大学学报,2000,34(3):326—328.
LIU Yu-shu, ZHAO Bo, MI Xiao-chuan. Application of Taylor Model in Prediction of Plastic Anisotropy for Cold-Rolled Deep Drawing Steel[J]. Journal of Shanghai Jiaotong University, 2000, 34(3): 326—328.

[3] 陈建,李巍,彭渝丽,等. 面心立方金属冷拔织构的计算机模拟[J]. 西安工业大学学报,2008,28(3):235—239.
CHEN Jian, LI Wei, PENG Yu-li, et al. Computer Simulation of Cold Drawing Textures[J]. Journal of Xi´an Technological University, 2008, 28(3): 235—239.

[4] WU Xian-ping, KALIDINDI S R, NECKER C, et al. Prediction of Crystallographic Texture Evolution and Anisotropic Stress-strain Curves During Large Plastic Strains in High Purity α-titanium Using a Taylor-type Crystal Plasticity Model[J]. Acta Materialia, 2007, 55: 423—432.

(下转第 39 页)

[48] 高亚丽,熊党生,王存山,等. 医用镁合金激光熔覆羟基磷灰石涂层初探[J]. 特种铸造及有色合金,2009,29(4):305—307.

[49] WANG H,GUAN S,WANG X,et al. In Vitro Degradation and Mechanical Integrity of Mg-Zn-Ca Alloy Coated with Ca-deficient Hydroxyapatite by the Pulse Electrode Position Process[J]. Acta Biomaterialia,2010,6(5):1743—1748.

[50] SALUNKE P,SHANOV V,WITTE F. High Purity Biodegradable Magnesium Coating for Implant Application[J]. Materials Science and Engineering: B, 2011, 176(20): 1711—1717.

[51] WU G,XU R,FENG K,et al. Retardation of Surface Corrosion of Biodegradable Magnesium-based Materials by Aluminum Ion Implantation[J]. Applied Surface Science, 2012,258(19):7651—7765.

[52] REGAR E,SIANOS G,SERRUYS P. Stent Development and Local Drug Delivery[J]. British Medical Bulletin, 2001,59(1):227—248.

[53] WANG J,HE Y,MAITZ M F,et al. A Surface-eroding Poly (1,3-trimethylene Carbonate) Coating for Fully Biodegradable Magnesium-based Stent Applications:Toward Better Biofunction, Biodegradation and Biocompatibility [J]. Acta Biomaterialia,2013,9(10):8678—8689.

[54] GU X,ZHENG Y,LAN Q,et al. Surface Modification of An Mg-1Ca Alloy to Slow Down Its Biocorrosion by Chitosan[J]. Biomedical Materials,2009,4(4):044109.

[55] GRAY-MUNRO J E,SEGUIN C,STRONG M. Influence of Surface Modification on the In Vitro Corrosion Rate of Magnesium Alloy AZ31[J]. Journal of Biomedical Materials Research Part A,2009,91(1):221—230.

[56] WU W,GASTALDI D,YANG K,et al. Finite Element Analyses for Design Evaluation of Biodegradable Magnesium Alloy Stents in Arterial Vessels[J]. Materials Science and Engineering:B,2011,176(20):1733—1740.

[57] GROGAN J A,LEEN S B,MCHUGH P E. A Physical Corrosion Model for Bioabsorbable Metal Stents[J]. Acta Biomaterialia,2014,10(5):2313—2322.

[58] SCHIAVONE A,ZHAO L G,ABDEL-WAHAB A A. Effects of Material,Coating,Design and Plaque Composition on Stent Deployment inside A Stenotic Artery - Finite Element Simulation[J]. Materials Science Engineering:C,2014,42:479—488.

(上接第 6 页)

[5] KUO J C,CHEN D,CHEN S H,et al. Prediction of the Orientation Spread in an Aluminum Bicrystal During Plane Strain Compression Using a DIC-based Taylor Model [J]. Computational Science,2008,42:564—569.

[6] 张士宏,宋广胜,宋鸿武,等. 镁合金板材温热变形机理及温热成形技术[J]. 机械工程学报,2012,48(18):28—32.
ZHANG Shi-hong,SONG Guang-sheng,SONG Hong-wu, et al. Deformation Mechanism and Warm Forming Technology for Magnesium Alloys Sheets[J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2012,48(18):28—32.

[7] JAIN A,AGNEW S R. Modeling the Temperature Dependent Effect of Twinning on the Behavior of Magnesium Alloy AZ31B Sheet[J]. Materials Science and Engineering A, 2007,462:29—36.

[8] SONG G S,ZHANG S H,ZHENG L,et al. Twinning,Grain Orientation and Texture Variation of AZ31 Mg Alloy during Compression by EBSD[J]. Journal of Alloys and Compounds,2011,509:6481—6488.

[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]. Scripta Materialia,2006,55:1055—1058.

[10] HE J J,LIU T M,ZHANG Y,et al. Twin Characteristics and Flow Stress Evolution in Extruded Magnesium Alloy AZ31 Subjected to Multiple Loads[J]. Journal of Alloys and Compounds,2013,578:536—542.

[11] PEI Y,GODFREY A,JIANG J,et al. Extension Twin Variant Selection During Uniaxial Compression of a Magnesium Alloy [J]. Materials Science and Engineering A, 2012,550:138—145.

[12] BARNETT M. Non-Schmid Behavior During Secondary Twinning in a Polycrystalline Magnesium Alloy[J]. Acta Materialia,2008,56:5—15.

[13] LI N L,HUANG G J,ZHONG X X,et al. Deformation Mechanisms and Dynamic Recrystallization of AZ31 Mg Alloy with Different Initial Textures during Hot Tension [J]. Materials and Design, 2013,50:382—391.

[14] WU B L,ZHAO Y H,DU X H,et al. Ductility Enhancement of Extruded Magnesium Via Yttrium Addition[J]. Materials Science and Engineering A,2010,527:4334—4340.

[15] SONG G S,CHEN Q Q,ZHANG S H,et al. Deformation Micro-mechanism for Compression of Magnesium Alloys at Room Temperature Analyzed by Electron Backscatter Diffraction[J]. Materials and Design,2015,65:534—542.