

引用格式:Zhao Peng, Zhao Yufeng, Luo Haibo. Annealing Microstructure Simulation of Ultra-Fine Grained Pure Copper Based on CA Model[J]. Journal of Gansu Sciences, 2017, 29(5): 22-25. [赵鹏, 赵玉峰, 罗海波. 基于 CA 模型的超细晶纯铜退火组织模拟[J]. 甘肃科学学报, 2017, 29(5): 22-25.]  
doi:10.16468/j.cnki.issn1004-0366.2017.05.005.

# 基于 CA 模型的超细晶纯铜退火组织模拟

赵 鹏, 赵玉峰, 罗海波

(兰州理工大学 理学院, 甘肃 兰州 730050)

摘 要 通过基于静态再结晶(SRX)修正的元胞自动机(CA)模型,模拟了经等通道转角挤压(ECAP)挤压后超细晶纯铜退火过程,探索其微观组织演化规律。超细晶纯铜在不同退火条件下的模拟与实验对比结果表明:相同退火时间后,微观组织平均晶粒尺寸随着退火温度的增加而变大;随着 ECAP 挤压道次的增加而变小。

关键词 元胞自动机;超细晶;ECAP;静态再结晶

中图分类号:O152.7 文献标志码:A 文章编号:1004-0366(2017)05-0022-04

随着社会对金属材料优异性能的刚性要求及细化晶粒作为提高材料性能的重要手段,超细晶(UFG, ultrafine grained)材料成为热点研究方向。剧烈塑性变形(SPD, severe plastic deformation)因其可制备大尺寸、无污染、无微孔隙和晶粒尺寸细小均匀的纳米块体材料受到人们的广泛关注<sup>[3]</sup>。等通道转角挤压(ECAP, equal channel angular pressing)因挤压后材料横截面保持不变、可重复多次挤压、累积大量应变等特点而成为 SPD 中极具发展前景的一种方法<sup>[4]</sup>。其原理是将条状或棒状试样在一定挤压力下通过两个轴线相交且成一定角度的等截面通道,挤压后试样发生近似纯剪切变形,进而达到细化晶粒的目的。

近年来大量研究成果主要集中在 ECAP 工艺参数的缺陷影响,如挤压道次、模具夹角、挤压速度等参数对 ECAP 后材料的微观组织演化和物理、力学性能改善有着重要的影响。ECAP 研究成果涉及

Latief 等<sup>[4]</sup>关于挤压路径对微观组织和强度的影响;Yu 等<sup>[5]</sup>研究了应变速率对微观组织和力学行为的影响;Han 等<sup>[6]</sup>研究了挤压道次对钛基复合材料微观组织和力学性能的影响;Biswas 等<sup>[7]</sup>考虑变形温度对组织演化及均匀性的影响。

关于 ECAP 已有大量的研究工作及成果,但在 ECAP 挤压后超细晶材料退火过程的组织演化方面涉及较少,且退火参数对微观组织演化有重要影响。因此研究拟用基于 SRX 和 ECAP 原理的修正的 CA 模型模拟 ECAP 超细晶后退火过程的微观组织演化过程,探索其演变规律。其中所用超细晶材料由工业纯铜经六道次 ECAP 挤压所得。

## 1 元胞自动机模型

模拟模型以纯铜为试样,其相关材料参数<sup>[8]</sup>如表 1 所列。

表 1 纯铜材料参数

Table 1 Material parameters of pure copper

参数	活化能 $Q_a$ /(KJ·mol <sup>-1</sup> )	伯格矢量 $b$ /m	晶界扩散系数 $\delta D_{cb}$ /(m <sup>3</sup> ·s <sup>-1</sup> )	熔解温度 $T_m$ /K	晶界活化能 $Q_b$ /(KJ·mol <sup>-1</sup> )
数值	284	$2.49 \times 10^{-10}$	$3.5 \times 10^{-15}$	1 726	115

收稿日期:2016-05-06;修回日期:2016-06-13

基金项目:甘肃省自然科学基金项目(1107RJZA151)

作者简介:赵鹏(1990-),男,陕西渭南人,硕士,研究方向为金属材料的力学行为。E-mail:zhaop0913@163.com

### 1.1 位错密度模型

剧烈塑性变形通常会使得金属材料内部的位错密度升高,导致金属存在热力学不稳定性。由于静态再结晶过程的驱动力是塑性变形过程后以位错形式存储在材料内部的形变贮能,因此计算退火过程位错密度的变化很有必要。形变贮能  $E_D$  和位错密度  $\rho$  的关系<sup>[9]</sup>可近似表示为

$$E_D = CGb^2 \rho, \quad (1)$$

其中:  $C$  为常量;  $G$  为切变模量。

### 1.2 形核模型

再结晶形核速率是决定静态再结晶晶粒大小和方向的基本要素。形核速率  $\dot{N}$  作为形变贮能和退火温度  $T$  的函数,可表示为

$$\dot{N} = C_1 E_D \exp\left(\frac{-Q_a}{RT}\right), \quad (2)$$

其中:  $C_1$  是常量;  $R$  为气体常数。

此外剧烈塑性变形条件下诸如过渡带、剪切带等高位错密度区域下形核位置可能在其中任何地方,因此我们假定静态再结晶成核现象可在基体内部各处随机发生。

### 1.3 晶粒生长动力学

再结晶晶粒的生长驱动力主要由晶界两边位错密度的差异来产生。生长速度  $V$  可表示为<sup>[10]</sup>

$$V = \frac{PM}{4\pi r^2}, \quad (3)$$

其中:  $P$  为生长驱动力;  $r$  为再结晶晶粒半径;  $M$  为晶界迁移率;  $M$  可表示为

$$M = M_0 \exp\left(\frac{Q_a}{RT}\right), \quad (4)$$

$$M_0 = C_4 b \frac{\delta D_{ob}}{k T_m} \exp\left(-\frac{Q_b}{RT_m}\right), \quad (5)$$

其中:  $C_4$  为常量,取 2.0;  $k$  为玻尔兹曼常数。

假设再结晶晶粒是球形的,驱动力可由能量变化推导得出。当晶粒半径  $r$  增大  $dr$  时,能量变化<sup>[11]</sup>可表达为

$$dW = dW_V - dW_S, \quad (6)$$

$$dW_V = \left(\frac{4}{3}\pi(r+dr)^3 - \frac{4}{3}\pi r^3\right) \tau(\rho_m - \rho_d), \quad (7)$$

$$dW_S = (4\pi(r+dr)^2 - 4\pi r^2) \gamma, \quad (8)$$

$$P = \frac{dW}{dr} \approx 4\pi r^2 \tau(\rho_m - \rho_d) - 8\pi r \gamma, \quad (9)$$

其中:  $\tau = Gb^2/2$  为位错线能量;  $\rho_m$  为基体位错密度;  $\rho_d$  为再结晶晶粒位错密度; 另外晶界能  $\gamma$  可由 Read-Shockley 方程<sup>[12]</sup>导出

$$\gamma = \gamma_m \frac{\theta}{\theta_m} \left(1 - \ln\left(\frac{\theta}{\theta_m}\right)\right), \quad (10)$$

其中:  $\theta$  为晶界取向差;  $\theta_m$  和  $\gamma_m$  分别为大角度晶界的取向差和晶界能。

另外等轴晶生长的距离  $L$  可以表示为

$$L = \int_0^t V dt. \quad (11)$$

### 1.4 元胞自动机模型

模型采用二维元胞网格和 Von Neumann 邻近规则。每一个单元格有四个状态变量:晶粒颜色变量表示不同的晶粒;晶粒取向变量通常决定晶界能;位错密度变量代表晶粒内部位错密度;距离变量反映再结晶晶粒的生长速率。等轴晶生长过程用一个固定的转换规则来模拟,当成核过程发生后,以新晶核为中心元胞,其相应的生长距离为半径,逐一扫描每个新晶核周围的元胞,如果该元胞位于母相组织中,则该元胞的四个状态变量被中心元胞取代。

模型将实际模拟区域划分为  $250 \times 250$  的正方形二维元胞网格,以模拟实际试样中  $1.5 \times 1.5 \text{ mm}^2$  的区域。模型中初始微观组织由常态晶粒生长算法生成;初始平均晶粒直径设为  $200 \mu\text{m}$ 。基体元胞直径  $D_0$  可由以下公式<sup>[10]</sup>近似得到:

$$E_{D_0} = \frac{3\gamma_s}{D_0}. \quad (12)$$

## 2 模拟结果与讨论

$\Phi = 90^\circ$ ,  $\Psi = 20^\circ$ ,  $T = 623 \text{ K}$  时,纯铜经六道次 ECAP 挤压后不同退火时间下其微观组织的模拟结果如图 1 所示。从图 1 中可以看出,随着退火过程的进行,母相组织上出现了大小不一的静态再结晶晶粒,这主要是退火过程中再结晶晶核的形核时间各异、生长速度不同以及晶粒间相互挤压共同作用的结果,再结晶晶粒不断长大,晶粒生长过程中晶粒间的相互挤压作用使得再结晶晶粒的几何形状趋于多边形化,最终晶粒尺寸较小的母相组织完全被粗化的静态再结晶晶粒取代。对比不同退火时间下的微观组织模拟结果可以发现,退火过程开始时,再结晶晶粒形核率高且生长速度较快,随着退火时间的增加形核率和晶粒生长速度均会不断减小,这主要是因为随着退火过程的进行,母相组织内高的位错密度会因静态再结晶作用而不断降低,因此减小了再结晶形核率和晶粒生长速度。

$\Phi = 90^\circ$ ,  $\Psi = 20^\circ$ ,  $T = 623 \text{ K}$  退火 1 h 时,平均晶粒尺寸随 ECAP 挤压道次的变化如图 2 所示。

从图 2 中可以看出,相同退火温度和退火时间下,退火过程中静态再结晶晶粒的平均尺寸会随着退火前 ECAP 冷挤压道次的增加而不断减小,这与文献 [13] 中实验结果趋于一致。这主要是因为随着退火前 ECAP 冷挤压道次的增多,材料内部位错密度会

不断增高,材料累积的应变能增大,这使得退火过程中静态再结晶形核率增大,同时再结晶晶粒生长速度加快,但再结晶晶粒生长过程中晶粒间的相互挤压作用反而抑制了晶粒的粗化生长,促进了细小等轴晶粒的出现。

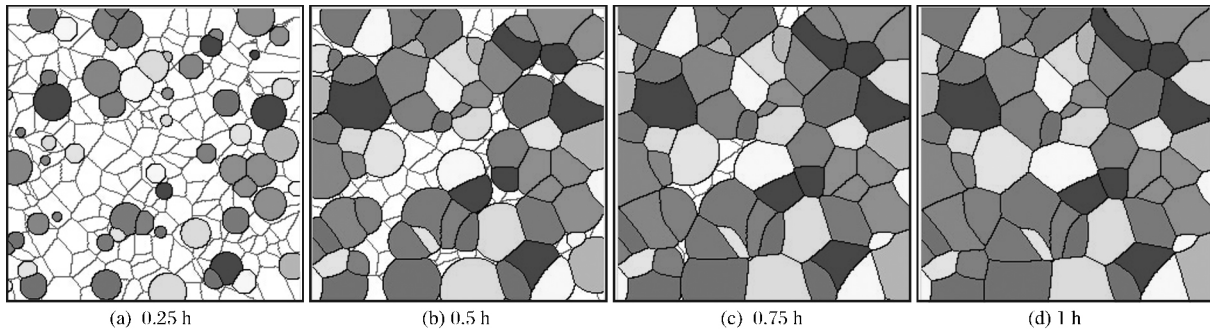


图 1 六道次 ECAP 挤压后不同退火时间下的纯铜微观组织变化

Fig.1 Microstructure change of pure copper under different annealing time after six passes extrusion of ECAP

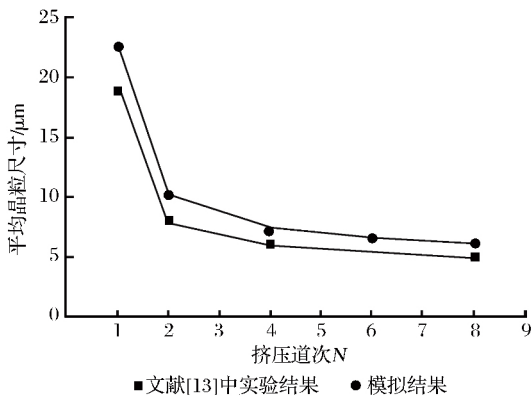


图 2 平均晶粒尺寸随挤压道次的变化曲线

Fig.2 Variation curve of the average grain size with the extrusion passes

$\phi = 90^\circ, \psi = 20^\circ$ , 纯铜六道次 ECAP 挤压后 1 h 退火时,平均晶粒尺寸随退火温度的变化曲线如图 3 所示。由图 3 可知,模拟结果和文献 [14] 的结果基本吻合,即静态再结晶晶粒的平均尺寸会随着退火温度的升高而不断增大。这是因为静态再结晶现象和动态再结晶现象类似,也是典型的热激活过程,随着退火温度的升高晶界迁移率会不断增大,这将加快再结晶晶粒的生长速度,导致了晶粒的粗化。

部的位错密度,这与实际情况尚有不符,相关研究 [14] 结果表明,即使退火良好的材料组织内部也存在一定的位错密度。这两方面的原因使得静态再结晶过程中晶粒生长驱动力增大,同时生长速度加快,

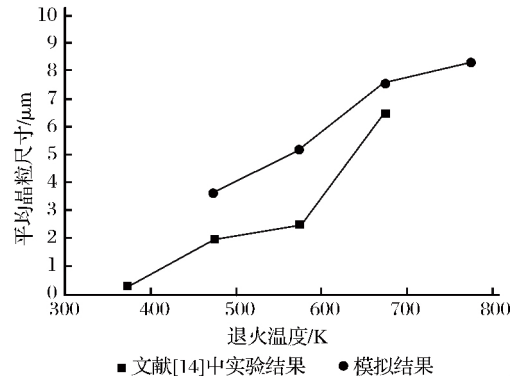


图 3 平均晶粒尺寸随退火温度的变化曲线

Fig.3 Variation curve of the average grain size with annealing temperature

对比图 2 和图 3 中的模拟结果和实验结果可以发现,模拟结果的平均晶粒尺寸均大于实验结果,这主要是模拟模型所致。一方面该模型未考虑退火过程中静态回复的影响,位错密度模型忽略了静态回复过程中位错交滑移和攀移所引起的母相组织位错密度的降低;另一方面模型忽略静态再结晶晶粒内

这导致了模拟结果略大于实验结果。因此要利用静态再结晶元胞自动机模型精确模拟超细晶材料退火过程中晶粒的尺寸变化。

### 3 结论

结合元胞自动机法和金属静态再结晶理论建立了 2-D 元胞静态再结晶模型。动态地模拟材料经 ECAP 冷挤压后退火过程中静态再结晶过程的形核和长大现象以及相应微观组织的变化,模拟结果表明,ECAP 冷挤压后制备的超细晶晶粒在退火过程中会逐渐粗化长大。分析了退火温度和挤压道次对

静态再结晶平均晶粒尺寸的影响,模拟结果表明,相同道次的 ECAP 冷挤压后,退火过程中退火温度越高材料内部晶粒粗化现象越明显;相同的退火温度和退火时间下,材料内部晶粒的平均尺寸会随着 ECAP 挤压道次的增加而减小。

#### 参考文献:

- [ 1 ] Sakai T, Belyakov A, Kaibyshev R, *et al.* Dynamic and Post-Dynamic Recrystallization Under Hot, Cold and Severe Plastic Deformation Conditions [J]. *Progress in Materials Science*, 2014, 60(1): 130-207.
- [ 2 ] Valiev R Z, Langdon TC. Principles of Equal-channel Angular Pressing as a Processing Tool for Grain Refinement [J]. *Progress in Materials Science*, 2006, 51(7): 881-981.
- [ 3 ] 黄磊, 王海波, 王建波, 等. 低温固相反应法制备  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$  纳米颗粒 [J]. *甘肃科学学报*, 2009, 21(3): 74-77.
- [ 4 ] Latief F H, Hong S I. Effect of Pressing Routes on the Microstructure and Strength in Equal Channel Angular Pressing of Cu-3.75Ag [J]. *Metals and Materials International*, 2015, 21(4): 746-752.
- [ 5 ] Yu X, Li Y L, Wei Q M, *et al.* Microstructure and Mechanical Behavior of ECAP Processed AZ31B Over a Wide Range of Loading Rates under Compression and Tension [J]. *Mechanics of Materials*, 2015, (86): 55-70.
- [ 6 ] Han Y F, Li J X, Huang G F, *et al.* Effect of ECAP Numbers on Microstructure and Properties of Titanium Matrix Composite [J]. *Material Design*, 2015, (75): 113-119.
- [ 7 ] Biswas S, Brokmeier H G, Fundenberger J J. Role of Deformation Temperature on the Evolution and Heterogeneity of Texture During Equal Channel Angular Pressing of Magnesium [J]. *Materials Characterization*, 2015, (102): 98-102.
- [ 8 ] Derby B. The Dependence of Grain Size on Stress During Dynamic Recrystallisation [J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1991, (39): 955-962.
- [ 9 ] Humphreys F J, Hatherly M. *Recrystallization and Related Annealing Phenomena* [M]. Oxford: Elsevier, 2004.
- [ 10 ] Song X Y, Rettenmayr M. Modelling Study on Recrystallization Recovery and Their Temperature Dependence in Inhomogeneously Deformed Materials [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2002, 332: 153-160.
- [ 11 ] Ding R, Guo Z X. Coupled Quantitative Simulation of Microstructural Evolution and Plastic Flow During Dynamic Recrystallization [J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2001, 49(16): 3163-3175.
- [ 12 ] Read W T, Shockley W. Dislocation Models of Crystal Grain Boundaries [J]. *Physical Review*, 1950, 78: 275-289.
- [ 13 ] Kadri S J, Hartwig K T. Recrystallized Grain Size in Severely Deformed Pure Copper [J]. *Materials Science Forum*, 2006, 503: 349-354.
- [ 14 ] Neishi K, Horita Z, Langdon T G. Achieving Superplasticity in Ultrafine-grained Copper Influence of Zn and Zr Additions [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2003, 352: 129-135.

## Annealing Microstructure Simulation of Ultra-Fine Grained Pure Copper Based on CA Model

Zhao Peng, Zhao Yufeng, Luo Haibo

(School of science, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

**Abstract** Based on the cellular automaton (CA) model modified by static recrystallization (SRX), the annealing process of ultra-fine grained pure copper after the extrusion of equal channel angular pressing (ECAP) was simulated, and the microstructure evolution law was explored. The comparison results between simulations and experiments of ultrafine grained pure copper under different annealing conditions showed that with the same annealing time, the average grain size of the microstructure increased with the increase of annealing temperature, and decreased with the increase of the extrusion passes of ECAP.

**Key words** Cellular automaton; Ultra-fine grain; ECAP; Static recrystallization