

引用:赵子博,王清江,刘建荣,等. 两种可用于描述晶粒变形传递倾向性的物理量:滑移位向差和孪生取向差[J]. 聊城大学学报(自然科学版),2025,38(5):703-706.

Citation:ZHAO Zibo, WANG Qingjiang, LIU Jianrong, LIU Yujing, YANG Rui. Two physical quantities to describe the tendency of grain deformation transfer: slip misorientation and twinning misorientation[J]. Journal of Liaocheng University (Natural Science Edition), 2025,38(5):703-706.

文章编号 1672-6634(2025)05-0703-04

DOI 10.19728/j.issn1672-6634.2025050011

两种可用于描述晶粒变形传递倾向性的物理量: 滑移位向差和孪生取向差

赵子博^{1,2,3},王清江¹,刘建荣¹,刘玉敬²,杨锐¹

(1. 中国科学院金属研究所,辽宁 沈阳 110016;2. 宝鸡西工钛合金制品有限公司 显华先进材料研究院,陕西 宝鸡 721300;
3. 秦创原(宝鸡)产业创新研究院有限公司,陕西 宝鸡 721000)

摘要 变形在晶粒间传递方式直接主导了材料的力学行为。作者基于变形在晶粒间的传递现象,提出了描述晶粒间变形传递倾向性的物理量:滑移位向差和孪生取向差。阐述了两物理量的概念、公式及其关键推导过程。该物理量可更直观地表述多变形模式下的变形传递行为,便于统计性分析和预测,为多晶材料的塑性变形研究提供新的分析工具。

关键词 变形传递;几何相容因子;滑移位向差;孪生取向差;相变取向差

中图分类号 TG111

文献标志码 A

开放科学(资源服务)标识码(OSID)



Two physical quantities to describe the tendency of grain deformation transfer: slip misorientation and twinning misorientation

ZHAO Zibo^{1,2,3},WANG Qingjiang¹,LIU Jianrong¹,LIU Yujing²,YANG Rui¹

(1. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China; 2. Yuhua Institute of Advanced Materials, Baoji Xigong Ti Alloy Products Co., Ltd, Baoji 721300,China; 3. Qinchuangyuan (Baoji) Institute of Industrial Innovation Co., Ltd, Baoji 721000,China)

Abstract Plastic deformation transfer between grains critically influences the mechanical behavior of materials. Based on the phenomenon of deformation transfer between grains we propose two physical quantities to describe the tendency of the strain transfer between grains: slip misorientation and twinning misorientation. This work elaborates on the concepts of mathematical formulations and derivations of these parameters. These parameters directly characterize deformation transfer across grains under deformation modes, enabling statistical analysis and prediction. They provide a new approach for studying polycrystalline plastic deformation.

收稿日期:2025-05-27

基金项目:国家科技重大专项项目(J2019-VI-0005-0119)资助

通信作者:赵子博,男,汉族,博士,研究员,陕西省地方领军人才,研究方向:金属材料,E-mail:zbzhao@imr.ac.cn。

Keywords strain transfer; geometrical compatibility factor; slip misorientation; twinning misorientation; phase transformation misorientation

0 引言

滑移和孪生是金属材料最为主要的两种变形方式,形变在不同晶粒间的传递也是多晶体材料塑性变形的重要机制之一,其发生与否以及传递的方式直接影响材料的力学性能^[1]。变形过程中晶粒应力状态和晶界结构的复杂性使人们对金属材料的实际变形过程难以直接洞察,更难以进行预测分析。通过借助或创造出模型或者物理量,以简洁并力求精准的形式进行表述是人们理解变形过程的必要手段。

为描述、预测多晶体材料中的变形传递机制,Livingston 和 Chalmers 在 1957 年引入了切应变连续性理论,认为切向位移在界面处是连续的,并基于入射位错与发出位错所在滑移面法向矢量和滑移方向矢量的双重投影关系构建了几何传播因子 N ,用于预测可能发生的滑移传递行为。1986 年 Shen 等人和 1989 年 Lee 等人考虑了晶界对变形传递的调控作用,将晶界几何参量纳入滑移传递行为的量化体系,提出了几何参数 M ,认为所激活传递滑移系在考虑满足最大分切应力条件的同时,还需考虑晶界处残余伯氏矢量的最小化。为提高适用性,1995 年 Luster 和 Morris 提出了更为简便的几何取向相容因子 m' ,该参数仅需考虑晶粒取向信息,计算简便,提高了应用的可行性,被广泛应用于多晶材料中变形传递研究中^[2]。需要指出的是,上述应用于变形传递过程中的参数虽以滑移为研究对象,但其构建原理对孪生的传递行为同样适用。

上述参数均可描述变形系统的几何关联,但不便于统计性分析,若采用易量化的物理量,如取向差,则能够实现变形传递行为的统计分析和高效预测。基于此,我们提出了“滑移位向差”和“孪生取向差”,作为描述晶粒间变形传递倾向性的新判据。两物理量通过晶粒取向与变形传递行为关联的量化表达,可用于预测变形传递发生的难易程度以及变形激活的择优模式,也可用于描述跨晶系变形传递或多模式变形机制的竞争行为,是一种用于描述变形传递规律更普适、更便捷的物理量。其与我们前期提出的“相变取向差”一脉相承^[3],借鉴了“中介性辩证”和“共性映射”的思想,希望三者可方便科研人员描述、理解多晶材料的塑性变形行为与相变过程的变体选择。

1 概念、公式及关键推导

1.1 滑移位向差

滑移位向差定义为:晶粒转动至与另一晶粒可产生平行滑移系的最小角度。这里的平行滑移系是指两晶粒的滑移面和滑移方向均平行的滑移系,可用下式表达

$$\mathbf{R}_{ij}\mathbf{D}_i\mathbf{G}_1 = \mathbf{D}_j\mathbf{G}_2, \quad (1)$$

式中 $\mathbf{G}_1$ 和 $\mathbf{G}_2$ 为两晶粒取向矩阵, $\mathbf{D}_i$ 和 $\mathbf{D}_j$ 为两晶粒晶体坐标系与对应滑移系的位向关系矩阵, $\mathbf{R}_{ij}$ 为 $\mathbf{G}_1$ 晶粒转至产生平行滑移系的旋转矩阵,其中 $i = 1, 2, \dots, m, j = 1, 2, \dots, n$ 。此时,两晶粒间的滑移位向差可由下式得到

$$\theta_{\min} = \min \left\{ \arccos \left(\frac{\text{tr}(\mathbf{R}_{ij}) - 1}{2} \right) \right\}, \quad (2)$$

式中 $\text{tr}(\mathbf{R}_{ij})$ 为旋转矩阵 $\mathbf{R}_{ij}$ 的迹。

上述公式为滑移位向差求解的一般表达式,公式具体推导过程需综合考虑坐标系变换、晶体对称性以及矢量方向性。为此需建立基矢由滑移面法向、滑移方向及二者正交方向构成的滑移坐标系,用以描述滑移系空间位向。规定 γ 表示样品坐标系, α 和 β 表示两晶体坐标系, α' 和 β' 表示两滑移坐标系。位向关系矩阵 $\mathbf{D}_i$ 和 $\mathbf{D}_j$ 的作用是将滑移坐标系转换为晶体坐标系,可表示为 $\mathbf{D}_{i(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'-\alpha}$ 和 $\mathbf{D}_{j(j=1,2,\dots,n)}^{\beta'-\beta}$, 矩阵上标从左至右表示坐标系转换顺序,矩阵下标中的索引(如 $i = 1, 2, \dots, m$)表示其是一系列矩阵的集合。

考虑到滑移坐标系与晶体坐标系的类型可能不同,二者间转换可能涉及旋转和变换,需将 $\mathbf{D}_{i(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'-\alpha}$ 和 $\mathbf{D}_{j(j=1,2,\dots,n)}^{\beta'-\beta}$ 分解为基变换矩阵 $\mathbf{B}$ 与滑移系旋转矩阵 $\mathbf{C}$,公式如

$$\begin{cases} \mathbf{D}_{i(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'-\alpha} = \mathbf{C}_{i(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'} \mathbf{B}^{\alpha'-\alpha}, \\ \mathbf{D}_{j(j=1,2,\dots,n)}^{\beta'-\beta} = \mathbf{C}_{j(j=1,2,\dots,n)}^{\beta'} \mathbf{B}^{\beta'-\beta}, \end{cases} \quad (3)$$

式中 $\mathbf{C}_{i(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'}$ 和 $\mathbf{C}_{j(j=1,2,\dots,n)}^{\beta'}$ 中任一分量可由下式求解

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} r & s & t \\ u & v & w \\ h & k & l \end{bmatrix}, \quad (4)$$

式中 $[h \ k \ l]$ 为滑移面法向向量, $[u \ v \ w]$ 为滑移方向向量, $[r \ s \ t]$ 为二者正交向量,三者皆为单位向量且满足右手定则。

旋转矩阵 $\mathbf{C}_{i(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'}$ 和 $\mathbf{C}_{j(j=1,2,\dots,n)}^{\beta'}$ 的数量 m 和 n 为对应晶系的滑移系变体总数,通过(5)式计算

$$\begin{cases} m = m_1 + m_2 + m_3 + \dots + m_o, \\ n = n_1 + n_2 + n_3 + \dots + n_c, \end{cases} \quad (5)$$

式中 m_o 和 n_c 为两晶系中第 o 和 c 种滑移系的变体数量(区分正负)。

考虑晶体对称性,两晶粒所有可能的滑移系空间位向 $\mathbf{U}_{ix(i=1,2,\dots,m,x=1,2,\dots,a)}^{\alpha'-\gamma}$ 和 $\mathbf{U}_{jy(j=1,2,\dots,n,y=1,2,\dots,b)}^{\beta'-\gamma}$ 可表示为

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{ix(i=1,2,\dots,m,x=1,2,\dots,a)}^{\alpha'-\gamma} = \mathbf{D}_{i(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'-\alpha} \mathbf{S}_{x(x=1,2,\dots,a)}^{\alpha} \mathbf{G}_1^{\alpha-\gamma}, \\ \mathbf{U}_{jy(j=1,2,\dots,n,y=1,2,\dots,b)}^{\beta'-\gamma} = \mathbf{D}_{j(j=1,2,\dots,n)}^{\beta'-\beta} \mathbf{S}_{y(y=1,2,\dots,b)}^{\beta} \mathbf{G}_2^{\beta-\gamma}, \end{cases} \quad (6)$$

式中 $\mathbf{S}_{x(x=1,2,\dots,a)}$ 和 $\mathbf{S}_{y(y=1,2,\dots,b)}$ 为两晶系的旋转对称操作矩阵。由于矢量平行具有方向性,引入正交晶系的旋转对称操作矩阵 $\mathbf{P}_{q(q=1,2,\dots,4)}^{\beta'}$ 来充分描述滑移系的平行关系

$$\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'} \mathbf{U}_{ix(i=1,2,\dots,m,x=1,2,\dots,a)}^{\alpha'-\gamma} = \mathbf{P}_{q(q=1,2,\dots,4)}^{\beta'} \mathbf{U}_{jy(j=1,2,\dots,n,y=1,2,\dots,b)}^{\beta'-\gamma} \quad (7)$$

联合式(3)、(4)、(6)和(7)可得

$$\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'} = \mathbf{P}_{q(q=1,2,\dots,4)}^{\beta'} \mathbf{C}_{j(j=1,2,\dots,n)}^{\beta'} \mathbf{B}^{\beta'-\beta} \mathbf{S}_{y(y=1,2,\dots,b)}^{\beta} \mathbf{G}_2^{\beta-\gamma} (\mathbf{G}_1^{\alpha-\gamma})^{-1} (\mathbf{S}_{x(x=1,2,\dots,a)}^{\alpha})^{-1} (\mathbf{B}^{\alpha'-\alpha})^{-1} (\mathbf{C}_{i(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'})^{-1}. \quad (8)$$

将旋转矩阵 $\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'}$ 代入式(2)即可求得两晶粒间的滑移位向差。为方便读者理解,下面给出几种常见情况下旋转矩阵 $\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'}$ 的求解公式。

当两晶粒为不同晶系,但各自开动的滑移系类型确定时,旋转矩阵 $\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'}$ 为

$$\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'} = \mathbf{P}_{q(q=1,2,\dots,4)}^{\beta'} \mathbf{C}_{j(j=1,2,\dots,n_v)}^{\beta'} \mathbf{B}^{\beta'-\beta} \mathbf{S}_{y(y=1,2,\dots,b)}^{\beta} \mathbf{G}_2^{\beta-\gamma} (\mathbf{G}_1^{\alpha-\gamma})^{-1} (\mathbf{S}_{x(x=1,2,\dots,a)}^{\alpha})^{-1} (\mathbf{B}^{\alpha'-\alpha})^{-1} (\mathbf{C}_{i(i=1,2,\dots,m_z)}^{\alpha'})^{-1}, \quad (9)$$

式中 m_z 和 n_v 为确定滑移系类型的变体数量。

当两晶粒为相同晶系,但仍考虑所有可能的滑移系时,旋转矩阵 $\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'}$ 为

$$\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'} = \mathbf{P}_{q(q=1,2,\dots,4)}^{\beta'} \mathbf{C}_{j(j=1,2,\dots,m)}^{\beta'} \mathbf{B}^{\alpha'-\alpha} \mathbf{S}_{y(y=1,2,\dots,b)}^{\alpha} \mathbf{G}_2^{\alpha-\gamma} (\mathbf{G}_1^{\alpha-\gamma})^{-1} (\mathbf{S}_{x(x=1,2,\dots,a)}^{\alpha})^{-1} (\mathbf{B}^{\alpha'-\alpha})^{-1} (\mathbf{C}_{i(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'})^{-1}. \quad (10)$$

当两晶粒为相同晶系,同时各自开动的滑移系类型也确定时,旋转矩阵 $\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'}$ 为

$$\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'} = \mathbf{P}_{q(q=1,2,\dots,4)}^{\beta'} \mathbf{C}_{j(j=1,2,\dots,m_r)}^{\beta'} \mathbf{B}^{\alpha'-\alpha} \mathbf{S}_{y(y=1,2,\dots,b)}^{\alpha} \mathbf{G}_2^{\alpha-\gamma} (\mathbf{G}_1^{\alpha-\gamma})^{-1} (\mathbf{S}_{x(x=1,2,\dots,a)}^{\alpha})^{-1} (\mathbf{B}^{\alpha'-\alpha})^{-1} (\mathbf{C}_{i(i=1,2,\dots,m_z)}^{\alpha'})^{-1}, \quad (11)$$

式中 z 和 r 代表该晶系的两个已知滑移系,二者可以相同也可不同。

1.2 孪生取向差

类似地,孪生取向差定义为晶粒转动至与另一晶粒可产生相同孪晶的最小角度。由于孪晶传递发生在相同晶系的晶粒之间,故孪生取向差与相同晶系的滑移位向差相似。

当考虑所有可能的孪生系时,孪生取向差的旋转矩阵 $\mathbf{R}_{xyijq}^{\alpha'}$ 为

$$\mathbf{R}_{xyjq}^{\alpha'} = \mathbf{P}_{q(q=1,2,\dots,4)}^{\alpha'} \mathbf{T}_{j(j=1,2,\dots,f)}^{\alpha'} \mathbf{B}^{\alpha'-\alpha} \mathbf{S}_{y(y=1,2,\dots,b)}^{\alpha} \mathbf{G}_2^{\alpha-\gamma} (\mathbf{G}_1^{\alpha-\gamma})^{-1} (\mathbf{S}_{x(x=1,2,\dots,a)}^{\alpha})^{-1} (\mathbf{B}^{\alpha'-\alpha})^{-1} (\mathbf{T}_{i(i=1,2,\dots,f)}^{\alpha'})^{-1} \quad (12)$$

与 $\mathbf{C}_{j(i=1,2,\dots,m)}^{\alpha'}$ 相似, 式中 $\mathbf{T}_{j(i=1,2,\dots,f)}^{\alpha'}$ 任一分量可由(13)式求得

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} r & s & t \\ u & v & w \\ h & k & l \end{bmatrix}, \quad (13)$$

式中 $[h \ k \ l]$ 为孪晶面法向量, $[u \ v \ w]$ 为孪生方向向量, $[r \ s \ t]$ 为二者正交向量, 三者也皆为单位向量且满足右手定则。

孪生系旋转矩阵 $\mathbf{T}_{j(i=1,2,\dots,f)}^{\alpha'}$ 的数量 f 为该晶系的孪晶变体总数, 通过(14)式计算

$$f = f_1 + f_2 + f_3 + \dots + f_p, \quad (14)$$

式中 f_p 为第 p 种孪生系的变体数量(区分正负)。

当开动的孪生系确定时, 孪生取向差的旋转矩阵为

$$\mathbf{R}_{xyjq}^{\alpha'} = \mathbf{P}_{q(q=1,2,\dots,4)}^{\alpha'} \mathbf{T}_{j(j=1,2,\dots,f_l)}^{\alpha'} \mathbf{B}^{\alpha'-\alpha} \mathbf{S}_{y(y=1,2,\dots,b)}^{\alpha} \mathbf{G}_2^{\alpha-\gamma} (\mathbf{G}_1^{\alpha-\gamma})^{-1} (\mathbf{S}_{x(x=1,2,\dots,a)}^{\alpha})^{-1} (\mathbf{B}^{\alpha'-\alpha})^{-1} (\mathbf{T}_{i(i=1,2,\dots,f_k)}^{\alpha'})^{-1}, \quad (15)$$

式中 k 和 l 代表该晶系的两个已知孪生系, 二者可能相同。

特别地, 求解两晶粒的滑移位向差和孪生取向差均涉及从大量的旋转角度中求最小值。为简化计算, 滑移和孪生系变体均可使用晶体对称性描述, 以大大减少旋转矩阵 $\mathbf{C}$ 和 $\mathbf{T}$ 的数量, 再结合旋转矩阵的正交性、群的性质以及迹的循环置换不变性使旋转角度数量降低几个数量级, 可大幅提高滑移位向差和孪生取向差的计算效率。

2 结语

滑移位向差、孪生取向差及相变取向差这三种晶体学关系, 可用于描述、理解材料的变形和相变行为。今后的工作可尝试将其与过程的“能量”建立联系, 以探究其本质。需要说明的是, 这些物理量并非基于能量最低原则建立, 最小的角度也不会直接对应最小的功或热。由于上述三种取向关系也与其特定的行为相关, 正如取向差与晶界能的关系, 因此三者可作为预测晶粒间变形传递行为和相变变体选择倾向性的数学工具, 协助科研人员逼近变形和相变行为本质或者理解其统计性的规律, 有助于完善塑性变形和相变过程的理论完善。更实用地, 开发出上述物理量的可视化模型, 可直接用于材料组织和织构的逆向设计。

本文三取向差概念是 2020 年作者在中科院金属研究所工作期间构思, 现整理完成。其中相变取向差及其在钛合金中的验证工作于 2024 年在《Metallurgical and Materials Transactions A》杂志上发表^[3], 该文被主编推荐为免费开源文章。本文所用基础知识主要为本人在聊城大学学习期间获得, 借此文向母校致敬! 作者团队学生刘远宏、李小龙、张博华对三概念涉及到的部分工作做出了贡献, 一并致谢。

参 考 文 献

- [1] 胡庚祥, 蔡珣, 戎咏华. 材料科学基础[M]. 3 版. 上海: 上海交通大学出版社, 2010.
- [2] LOUISETTE PRIESTER. 晶界与晶体塑性[M]. 江树勇, 张艳秋. 译. 北京: 机械工业出版社, 2016.
- [3] LIU Y H, ZHAO Z B, WANG Q J, et al. An orientation relationship between parent grains and its application to variant selection of transformed α in titanium alloys[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2025, 56: 801-814.

(责任编辑: 蒲锡鹏)