

Кривенок Д.А., Данилов С.В., Никульченков Н.Н., Лобанов М.Л.

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ТЕКСТУРЫ КОНТРОЛИРУЕМОЙ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ

Аннотация. Проведено моделирование кристаллографической текстуры контролируемой термомеханической обработки низкоуглеродистой высокопрочной стали. Текстура возникает в результате горячей прокатки аустенита и последующего полиморфного превращения в соответствии с ориентационными соотношениями между исходной и образующейся фазами. Из возможных ориентаций феррита были выбраны ориентации, возникающие на аустенитных границах решетки совпадающих узлов $\Sigma 3$.

Ключевые слова: кристаллографическая текстура, контролируемая термомеханическая обработка, ориентировки кристаллической решетки, сдвиговое превращение

Abstract. Crystallographic texture simulation of thermo-mechanical controlled processing for low-carbon higher strength steel was conducted. The texture arises as a result of austenite hot rolling with subsequent polymorphic transformation following the orientation relationships between the initial and formed phases. The orientations were chosen from possible options as ferrite orientations that arise on austenitic $\Sigma 3$ boundaries of coincidence site lattice.

Keywords: crystallographic texture, thermo-mechanical controlled processing, crystal lattice orientations, shear transformation

Введение

Формированию объемной кристаллографической текстуры предшествуют направленные деформационные и термические воздействия при производстве металлических полуфабрикатов и функциональных изделий. Наличие текстуры позволяет определять уровень ориентационно-зависимых физико-механических свойств изделия, а также оптимизировать известные и разрабатывать новые технологии, управляя ее возникновением и развитием [1-3]. В формирование объемной текстуры материала заложено сочетание результатов процессов, протекающих на субмикроуровне таких, как дислокационные сдвиги при деформациях, перемещения межкристаллитных и межфазных границ при трансформациях кристаллической решетки [4].

Для того, чтобы повысить экономическую эффективность магистральных трубопроводов, применяют низкоуглеродистые экономнолегированные высокопрочные стали, способные работать в сложных климатических условиях при повышенном рабочем давлении [5, 6]. Применение труб из высокопрочного материала позволяет существенно снизить их металлоемкость [5-7]. Переходу низколегированных трубных сталей от классов прочности X52–X65 к X70–X80 и выше к X100 способствовала разработка и внедрение в промышленное

производство Thermo-mechanical Controlled Processing (TMCP), суть которой заключается в контролируемой прокатке в аустенитной области и последующем ускоренном контролируемом охлаждении, в процессе которого реализуется сдвиговое $\gamma \rightarrow \alpha$ -превращение. Внедрение TMCP позволило осуществить переход от феррито-перлитных структур к продуктам сдвигового превращения – преимущественно бейнита, и, соответственно, получить более высокие классы прочности. Образование бейнита обеспечивается контролем устойчивости переохлажденного аустенита за счет специального легирования и применением ускоренного, управляемого охлаждения [5-12].

Наличие и выраженность кристаллографической текстуры оказывается ответственной за трещиностойкость изделий [13, 14]. Важно отметить, что ориентации зерен, возникающие при фазовых превращениях в соответствии с ориентационными соотношениями (ОС), Курдюмова-Закса (К-3), Нишиямы-Вассермана и др. являются многовариантными. То есть возникновение всех возможных ориентировок феррита в одном исходном аустенитном зерне должно приводить к возникновению практически бестекстурного состояния. При этом все современные исследования указывают на формирование выраженной текстуры в малоуглеродистых низколегированных сталях в результате TMCP, влияющей на разрушение готовых изделий [13-17].

Появление ограниченного числа ориентировок в результате сдвигового $\gamma \rightarrow \alpha$ -превращения, в материале с исходно сложной многокомпонентной текстурой, предполагает наличие неких структурных факторов, существенно ограничивающих возникновение всех возможных ориентаций кристаллитов при фазовой перекристаллизации. При этом следует учитывать два важных «энергетических» момента. Во-первых, трехмерная растущая область новой фазы или нового зерна в качестве зародыша должна иметь как минимум двухмерный объект, то есть некую достаточно протяженную поверхность. Во-вторых, при перестройки кристаллической решетки переориентации при рекристаллизации или трансформации при фазовом превращении, новая и исходная фазы должны содержать некий общий, кристаллографически практически одинаковый для обоих составляющих процесса элемент [18, 19].

Учет данных моментов приводят к выводу о том, что местами зарождения новых зерен или новых фаз являются межзеренные кристаллографически упорядоченные границы или, возможно, протяженные дефекты упаковки. В работах [20, 21] на примере стали X18H9 было показано, что кристаллиты с ОЦК решеткой занимают две соседние области перекристаллизации в γ -фазе. Первые зародыши $\gamma \rightarrow \alpha$ -превращения возникают не внутри аустенитного зерна, а в соседних зернах, разделенных границей решетки совпадающих узлов (PCY) $\Sigma 3$. В результате образуются зерна феррита, связанные двойниковой разориентацией

или близкой к ней. Таким образом, отношение ориентации текстурных компонентов исходного материала и структуры, полученной термической обработкой, может быть объяснено в терминах начала фазовых превращений (как сдвиговых, так и диффузионно-контролируемых) на кристаллографически упорядоченных границах, включая специальные границы, аналогичными РСУ-границам $\Sigma 3$ и $\Sigma 11$ [14, 16, 22].

Целью данной работы является моделирование кристаллографической текстуры низкоуглеродистой высокопрочной стали, формирующейся при ТМСП, с учетом возможности зарождения зерен новой фазы на РСУ-границах $\Sigma 3$.

Образцы и методика эксперимента

При моделировании предполагалось, что сдвиговое $\gamma \rightarrow \alpha'$ (α)-превращение реализуется в соответствии с ориентационными соотношениями близкими к ОС К-3 $\{111\}\gamma \parallel \{101\}\alpha$, $\langle 110 \rangle \gamma \parallel \langle 111 \rangle \alpha$. Поскольку в ГЦК решетке γ имеется четыре кристаллографические эквивалентные плоскости типа (111), (1-11), (1-11), (11-1) и шесть кристаллографических эквивалентных направлений $\langle 110 \rangle$, то относительно одного положения кристалла γ , при отсутствии ограничений на места зарождения новой фазы, возможны 24 ориентации кристаллов α , удовлетворяющих ОС соотношению К-3. Соответственно, в результате превращения и отсутствия ограничений на места зарождения новой фазы из одной ориентировки аустенита может возникать 24 ориентировки феррита.

Изменение кристаллографической ориентации при фазовом превращении задавалось матричным уравнением: $M = T \cdot A$, где M и A – матрицы ориентации, состоящие из трех ортогональных единичных векторов, показывающих кристаллографическую ориентацию фаз аустенита и мартенсита (бейнита, феррита), соответственно, а T – матрица преобразования ориентации [23]:

$$T = \begin{pmatrix} 0,742 & -0,667 & -0,075 \\ 0,650 & 0,742 & -0,167 \\ 0,167 & 0,075 & 0,983 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

Для получения индексов Миллера направлений и плоскостей ориентировок α -фазы, после превращения, элементы матрицы перемножаются с индексами заданной ориентации и складываются между собой, а именно:

$$H = h \cdot a_{11} + k \cdot a_{12} + l \cdot a_{13}, \quad (2)$$

$$K = h \cdot a_{21} + k \cdot a_{22} + l \cdot a_{23}, \quad (3)$$

$$L = h \cdot a_{31} + k \cdot a_{32} + l \cdot a_{33}, \quad (4)$$

где (HKL) – искомые индексы плоскости ОЦК решетки, (hkl) – заданные индексы плоскости ГЦК решетки, a_{nm} – элемент матрицы, n – порядок строки, m – столбца.

По аналогичным формулам производится расчет индексов направления [UVW], подставляя вместо h, k, l заданные индексы направления – u, v, w .

Возможные ориентации α -фазы для любой ориентировки γ -фазы вычислялись с использованием программы MS Excel (таблица 1).

В качестве исходных ориентировок аустенита выбирались стабильные деформационные ориентировки ГЦК решетки согласно работе [24]. Предполагалось, что все зародыши $\gamma \rightarrow \alpha$ -превращения возникают в соседних аустенитных зернах, разделенных РСУ-границей $\Sigma 3$. На данной стадии моделирования из всех стабильных ориентировок аустенита отбирались «парные», находящиеся в двойниковой разориентации. Из производных от «парных» ориентировок γ -фазы отбирались ориентировки α -фазы, также находящиеся в двойниковой разориентации. Последние полагались основными ориентировками феррита, сформировавшимися в процессе ТМСП (таблица 2). Все возможные разориентации РСУ $\Sigma 3$ (двойниковые) для обеих кубических решеток строились (подбирались) геометрически с использованием поворотов на 60° вокруг осей $\langle 111 \rangle$ или на $70,5^\circ$ вокруг осей $\langle 110 \rangle$ [25].

Результаты и обсуждение

Для оценки результатов моделирования использовались результаты работы [26] по текстуре ТМСП (рисунок 1, а) в виде сечений функции распределения ориентировок (рисунок 1, а). Наложение ориентировок феррита на сечения ФРО показывает удовлетворительную сходимость результатов моделирования (рисунок 1, б).

Основные ориентации, сформировавшиеся в результате фазового превращения, в пределах их рассеяния могут быть описаны как пары двойниковых ферритных. Исключение составляет ориентация $\{001\}\langle 110 \rangle$, которая в зависимости от режима ТМСП может существенно ослабляться, вплоть до исчезновения [13]. Ориентация $\{001\}\langle 110 \rangle$ является стабильной при деформации ОЦК решетки, и, согласно [13], ответственна за формирование расщеплений при разрушении. Поскольку изотермическая горячая прокатка происходит при температурах близких к A_{C3} для низкоуглеродистых трубных сталей, можно предположить, что ориентация $\{001\}\langle 110 \rangle$ формируется не при фазовом превращении, а в результате деформации феррита, образовавшегося в материале при температуре несколько ниже критической.

Таблица 1 – Пример расчета кристаллографических вариантов ориентации феррита, образующихся из ориентации аустенита (110)[001] в соответствии с ОС Курдюмова-Закса

№ варианта	Ориентации в индексах Миллера		Ориентация в виде проекции элементарной ячейки
	Расчётные (точные)	Приближенные*	
1	(0,075;1,391;0,242)[-0,075;0,167;0,983]	(010)[001]	
2	(0,742;0,575;1,058)[-0,742;0,650;0,167]	(111)[$\bar{1}$ 10]	
3	(-0,742;0,575;1,058)[0,742;0,650;0,167]	($\bar{1}$ 11)[110]	
4	(-0,075;1,391;0,242)[0,075;-0,167;0,983]	(010)[001]	
5	(0,667;0,483;1,150)[-0,667;0,742;0,075]	(112)[$\bar{1}$ 10]	
6	(-0,667;0,483;1,150)[0,667;0,742;0,075]	($\bar{1}$ 12)[110]	
7	(0,592;-0,908;0,908)[0,742;0,650;0,167]	(1 $\bar{1}$ 1)[110]	
8	(-1,408;-0,092;0,092)[0,075;-0,167;0,983]	($\bar{1}$ 00)[001]	
9	(0,816;0,816;-0,816)[-0,667;0,742;0,075]	(11 $\bar{1}$)[$\bar{1}$ 10]	
10	(0,816;-0,816;0,816)[0,667;0,742;0,075]	(1 $\bar{1}$ 1)[110]	
11	(-1,408;0,092;-0,092)[-0,075;-0,167;0,983]	($\bar{1}$ 00)[001]	
12	(0,592;0,908;-0,908)[-0,742;0,650;0,167]	(11 $\bar{1}$)[$\bar{1}$ 10]	
13	(1,408;-0,092;0,092)[-0,075;-0,167;0,983]	(100)[001]	
14	(-0,592;-0,908;0,908)[-0,742;0,650;0,167]	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 1)[$\bar{1}$ 10]	
15	(-0,592;0,908;-0,908)[0,742;0,650;0,167]	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 1)[110]	
16	(1,408;0,092;-0,092)[0,075;0,167;0,983]	(100)[001]	
17	(-0,816;-0,816;0,816)[-0,667;0,742;0,075]	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 1)[$\bar{1}$ 10]	
18	(-0,816;0,816;-0,816)[0,667;0,742;0,075]	($\bar{1}$ $\bar{1}$ 1)[110]	
19	(0,667;0,483;1,150)[-0,667;-0,742;0,075]	(112)[1 $\bar{1}$ 0]	
20	(-0,667;0,483;1,150)[-0,667;-0,742;-0,075]	($\bar{1}$ 12)[$\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	
21	(0,075;1,391;0,242)[0,075;0,167;-0,983]	(010)[00 $\bar{1}$]	
22	(0,742;0,575;1,058)[0,742;-0,650;-0,167]	(111)[1 $\bar{1}$ 0]	
23	(-0,742;0,575;1,058)[-0,742;-0,650;-0,167]	($\bar{1}$ 11)[$\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	
24	(-0,075;1,391;0,242)[-0,075;0,167;-0,983]	(010)[00 $\bar{1}$]	

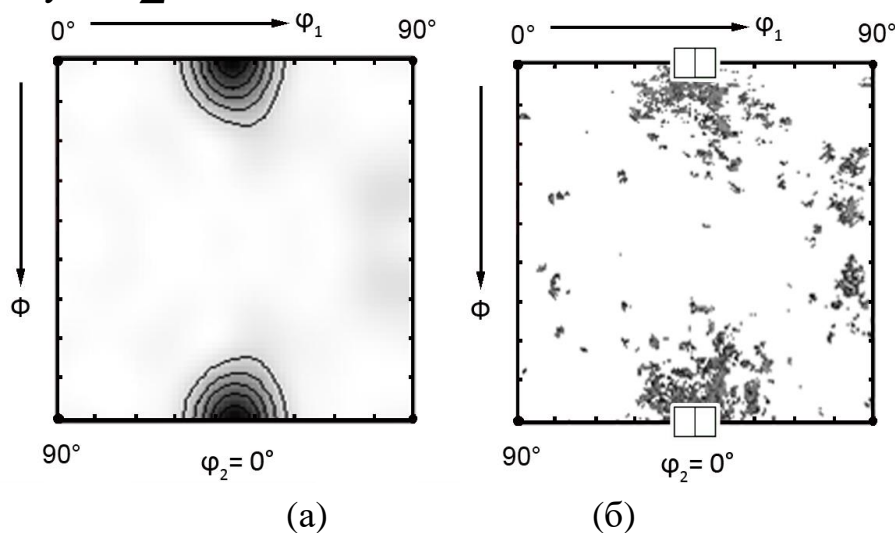
*Примечание: отклонение приближенных ориентаций от рассчитанных по всем углам составляет величину не более 15°.

Таблица 2 – Ориентации, формирующиеся в результате ТМСП

Стабильные ориентации ГЦК решетки [24]		Ориентация ОЦК решетки, возникающие в результате ТМСП	
Индексы Миллера	Ориентация в виде проекции элементарной ячейки	Индексы Миллера	Ориентация в виде проекции элементарной ячейки
(110)[001]			
(100)[010]			
(011)[111̄]		(112)[1̄10]	
(011)[11̄1]		(112)[1̄10]	
(011)[211̄]		(110)[1̄11]	
(011)[21̄1]		(110)[1̄11]	
(112)[1̄11]		(111)[1̄12]	
(1̄12)[111]		(111)[112]	

Заключение

Результатом моделирования является демонстрация того, что кристаллографическая текстура, формирующаяся в результате контролируемой термомеханической обработки низкоуглеродистой высокопрочной трубной стали, может быть представлена как совокупность ориентаций ОЦК решетки, образованных в результате сдвигового фазового превращения (ГЦК → ОЦК), в соответствии с известными ориентационными соотношениями (например, Курдюмова-Закса). Причем зарождение кристаллитов феррита происходит на границах между аустенитными зернами, связанными разориентацией решетки совпадающих узлов $\Sigma 3$.



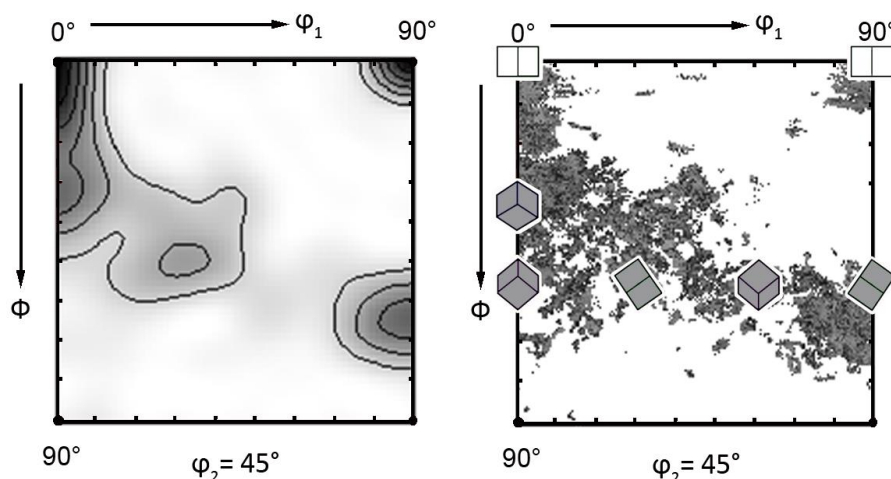


Рисунок 1 – Сравнение результатов моделирования с экспериментально зафиксированной текстурой ТМСР в виде сечений ФРО при $\varphi_2 = 0^\circ$ и $\varphi_2 = 45^\circ$: (а) – текстура ТМСР из [26]; (б) – то же, что на «а» с наложением ориентаций феррита, полученных моделированием

Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке стипендии Президента Российской Федерации (проект СП-3775.2021.1).

Библиографический список

1. Hutchinson B. Practical Aspects of Texture Control in Low Carbon Steels / B. Hutchinson // Materials Science Forum. – 1994. – Vol. 157, Iss. 6. – P. 1917–1928.
2. Lindell D. Texture evolution of warm-rolled and annealed 304L and 316L austenitic stainless steels / D. Lindell // IOP Conference Series : Materials Science and Engineering. – 2015. – Vol. 82. – Art. 012101.
3. Is it Possible to Use Rolling Methods to Improve Textures on Fe–Mn–Si Shape Memory Alloys / A. V. Druker, C. Sobrero, V. Fuster [et al.]. – DOI 10.1002/adem.201700062 // Advanced Engineering Materials. – 2017. – Vol. 20, Iss. 4. – Art. 1700062.
4. Humphreys F. J. Recrystallization and related annealing phenomena / F. J. Humphreys, M. Hatherly. – Oxford : ELSEVIER, 2004. – 574 p.
5. Хулка К. Тенденции разработки сталей для труб большого диаметра / К. Хулка, П. Петерс, Ф. Хайстеркамп // Сталь. – 1997. – № 10. – С. 62–67.
6. Shigeru E. Development of Thermo-Mechanical Control Process (TMCP) and High Performance Steel in JFE Steel / E. Shigeru, N. Naoki // JFE Technical Report. – 2015. – Vol. 20. – P. 1–7.
7. Obtaining high-quality properties of rolled material for large-diameter pipes based on formation of ferrite-bainite microstructure / Yu. D. Morozov, S. Yu. Nastich, M. Matrosov, O. N. Chevskaya. – DOI 10.1007/s11015-008-9003-5 // Metallurgist. – 2008. – Vol. 52, Iss. 1. – P. 21–28.

8. New steels for pipelines of strength classes K54-K60 (X70) : Production experience at OAO MMK / S. Y. Nastich, V. L. Kornilov, Yu. D. Morozov [et al.]. – DOI 10.3103/S0967091209050179 // *Steel in Translation*. – 2009. – Vol. 39. – P. 431–436.
9. Effects of carbon equivalent and cooling rate on tensile and Charpy impact properties of high-strength bainitic steels / H. K. Sung, S. Shin, B. Hwang [et al.]. – DOI 10.1016/j.msea.2011.10.015 // *Materials Science and Engineering A*. – 2011. – Vol. 530, Iss. 1. – P. 530–538.
10. Nano-sized precipitation and properties of a low carbon niobium micro-alloyed bainitic steel / Z. J. Xie, X. P. Ma, Ch. J. Shang [et al.]. – DOI 10.1016/j.msea.2015.05.101 // *Materials Science and Engineering A*. – 2015. – Vol. 641. – P. 37–44.
11. Goli-Oglu E. A. Effect of deformation regime in main stages of controlled rolling on pipe steel microstructure / E. A. Goli-Oglu, L. I. Éfron, Yu. D. Morozov // *Metal Science and Heat Treatment*. – 2013. – Vol. 55. – P. 294–297.
12. Влияние скорости охлаждения на структуру низкоуглеродистой низколегированной стали после контролируемой термомеханической обработки / М. Л. Лобанов, М. Л. Краснов, В. Н. Урцев [и др.] // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2019. – № 1. – С. 31–37.
13. Влияние кристаллографической текстуры бейнита на разрушение листов трубных сталей, полученных контролируемой термомеханической обработкой / И. Ю. Пышминцев, А. О. Струин, А. М. Герасьев [и др.] // *Металлург*. – 2016. – № 4. – С. 57–63.
14. Данилов С. В. Причина формирования расщеплений при разрушении трубных сталей, изготовленных методом ТМСП / С. В. Данилов, Е. Р. Струина, М. Д. Бородина // *Известия высших учебных заведений. Черная металлургия*. – 2017. – Т. 60, № 3. – С. 247–249.
15. Texture in hot rolled austenite and resulting transformation products / B. Hutchinson, L. Ryde, E. Lindh, K. Tagashira. – DOI 10.1016/S0921-5093(98)00820-X // *Materials Science and Engineering A*. – 1998. – Vol. 257, Iss. 1. – P. 9–17.
16. Texture Inheritance in the Ferrite-Martensite Structure of Low-Alloy Steel after Thermomechanical Controlled Processing / M. L. Lobanov, I. Pyshmintsev, V. N. Urtsev [et al.] // *Physics of Metals and Metallography*. – 2019. – Vol. 120, Iss. 12. – P. 1180–1186.
17. Ray R. K. Transformation textures in steels / R. K. Ray, J. J. Jonas // *International Materials Reviews*. – 1990. – Vol. 35. – P. 1–36.
18. Microtwinning as a common mechanism for the martensitic and pearlitic transformations / V. Kraposhin, I. Jakovleva, L. Karkina [et al.]. – DOI 10.1016/j.jallcom.2011.10.102 // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2013. – Vol. 577. – P. S30–S36.
19. Крапошин В. С. Некристаллические симметрии кристаллической структуры цементита и ее превращений / В. С. Крапошин, А. Л. Талис // *Цементит в углеродистых сталях : коллектив. моногр. / под ред. В. М. Счастливецва*. – Екатеринбург, 2017. – С. 186–188.
20. Лобанов М. Л. Кристаллографические особенности распада γ -фазы в

- аустенитной коррозионно-стойкой стали / М. Л. Лобанов, В. И. Пастухов, А. А. Редикульцев // *Металловедение и термическая обработка металлов.* – 2020. – № 7. – С. 5–11.
21. Лобанов М. Л. Влияние специальных границ на $\gamma \rightarrow \alpha$ -превращение в аустенитной нержавеющей стали / М. Л. Лобанов, В. И. Пастухов, А. А. Редикульцев // *Физика металлов и металловедение.* – 2021. – Т. 122, № 4. – С. 424–430.
22. Pereloma E. V. The crystallography of carbide-free bainites in thermo-mechanically processed low Si transformation-induced plasticity steels / E. V. Pereloma, Al-Harbi Fayez, A. A. Gazder // *Journal of Alloys and Compounds.* – 2014. – Vol. 615. – P. 96–110.
23. Специальные разориентации в низкотемпературном бейните высокоуглеродистой марганец-кремнистой стали, полученном в изотермических условиях / Н. А. Терещенко, И. Л. Яковлева, И. Г. Кабанова, Д. А. Мирзаев // *Физика металлов и металловедение.* – 2019. – Т. 120, № 9. – С. 954–961.
24. Danilov S. V. Hot-rolled texture of fcc and bcc metals / S. V. Danilov, P. L. Reznik // *Solid State Phenomena.* – 2018. – Vol. 284. – P. 605–609.
25. Кайбышев О. А. Границы зерен и свойства металлов / О. А. Кайбышев, Р. З. Валиев. – Москва : *Металлургия*, 1987. – 214 с.
26. Структурно-текстурные состояния штрипсов стали 06Г2МБ после контролируемой термомеханической обработки / С. И. Платов, М. Л. Краснов, В. Н. Урцев [и др.] // *Металловедение и термическая обработка металлов.* – 2020. – № 1. – С. 56–61.