

低碳含铌钢粗晶奥氏体再结晶的数值模拟

李龙飞¹⁾ 阳 锋¹⁾ 杨王玥²⁾ 孙祖庆¹⁾ 王西涛¹⁾

1) 北京科技大学新金属材料国家重点实验室, 北京 100083 2) 北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083

摘 要 建立了基于析出、回复和再结晶之间交互作用的低碳含铌钢组织预测模型, 用于模拟低碳含铌钢热轧道次间隔期间粗晶奥氏体的再结晶及析出行为, 并讨论了模型在绘制低碳含铌钢的再结晶-析出-时间-温度(RPTT)图中的应用. 结果表明, 模型对两种低碳含铌钢在热变形道次间隔期间内粗晶奥氏体的组织演变过程的模拟结果与测试数据符合较好, 可以有效预测不同低碳含铌钢在不同工艺条件下的析出和再结晶行为.

关键词 低碳微合金钢; 铌; 奥氏体; 析出; 再结晶; 数值模拟

分类号 TG 111.7; TG 142.33

Numerical Simulation on recrystallization of coarse-grained austenite in low-carbon Nb-microalloyed steel

LI Long-fei¹⁾, YANG Feng¹⁾, YANG Wang-yue²⁾, SUN Zu-qing¹⁾, WANG Xi-tao¹⁾

1) State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

2) School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

ABSTRACT A microstructural prediction model of low carbon Nb-containing steels based on the interaction of precipitation, recovery and recrystallization was developed to simulate the evolution of precipitation and recrystallization of coarse-grained austenite in low carbon Nb-containing steels during pass interval of hot deformation. The application of this model in making the recrystallization-precipitation-temperature-time diagram (RPTT) of low carbon Nb-containing steels was discussed. The simulation results are well coincident with the experimental data of two low-carbon Nb-containing steels, indicating that the behaviors of precipitation and recrystallization can be predicted using this model for different low carbon Nb-containing steels at various processing conditions.

KEY WORDS low carbon microalloyed steel; niobium; austenite; precipitation; recrystallization; numerical simulation

目前采用生产普碳钢等的常规薄板坯连铸连轧工艺在生产线上开发含铌微合金钢时还存在较多问题, 特别是当铌含量高于 0.03% (质量分数) 时容易产生混晶现象. 这主要是因为原始奥氏体晶粒粗大而总压下量较小, 对组织的细化不利. 采用常规工艺来生产含铌微合金钢较难获得理想的组织及性能, 亟需设计合理的工艺路线. 近年来, 材料工作者一直致力于建立低碳含铌钢热连轧过程的组织预测模型. 目前, 主要存在两种类型的模型: 基于经验公式的经验模型^[1-4]和基于物理冶金原理的物理模型^[5-8]. 经验模型已比较成熟, 能准确地描述特定钢种在热连轧过程中显微组织的演变过程, 但当

合金成分发生改变时, 需要重复进行大量实验. 物理模型建立在相关物理冶金原理基础上, 适应性强、反应速度快, 而且有助于更好地处理含铌粒子对奥氏体的回复、再结晶的影响, 物理模型的完善将有利于更好地制定含铌微合金钢的生产工艺.

在前期工作中, 本课题组针对粗大奥氏体条件下低碳含铌钢热连轧过程中的奥氏体再结晶和含铌粒子析出进行了系统研究, 并根据实验结果建立了基于经验公式的组织预测模型^[9-10]. 本文在物理冶金原理的基础上, 综合考虑位错-析出-再结晶之间的交互作用, 对低碳含铌钢粗晶奥氏体条件下热变形道次间隔期间内的组织演变过程进行模拟, 并讨

收稿日期: 2009-04-07

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (No. 50774008)

作者简介: 李龙飞 (1977-), 男, 副研究员, 博士, E-mail: lilf@skl.ustb.edu.cn

论了模型在构建低碳含铌钢的再结晶、析出过程的再结晶-析出-温度-时间(RPTT)图方面的应用。

1 模型建立

1.1 模型建立的基点

本文所建立的物理模型以位错密度作为联系析出、回复与再结晶行为之间的桥梁,主要从以下几个方面考虑其间的交互作用:

(1) 位错提高铌原子的有效扩散系数,促进含铌粒子的析出。

(2) 回复导致位错密度降低,减小再结晶驱动力的同时降低析出的总位置数(位错节点数)。由于粒子对位错的钉扎,析出阻碍回复的进行,析出的粒子数目与位错节点数目的比值越大,回复程度越小。

(3) 奥氏体再结晶同样导致位错密度降低。相关研究中一般认为再结晶形核仅在原始奥氏体晶界处发生,核心由亚晶发展而来^[6-8],并且通过大角度晶界的迁移实现长大。铌在钢中的存在状态对奥氏体再结晶产生影响,固溶铌的拖曳作用降低了大角度晶界的迁移率,含铌粒子阻碍亚晶发展,从而导致再结晶的形核概率降低,同时粒子产生的钉扎力降低再结晶驱动力。

1.2 位错密度模型

热变形奥氏体的位错密度 ρ 与基体的流变应力 σ 和屈服强度 σ_y 有如下关系^[2]:

$$\sigma - \sigma_y = M_T \alpha_\gamma \mu b \sqrt{\rho} \quad (1)$$

式中, M_T 为泰勒因子, α_γ 为常数 ($\alpha_\gamma = 0.15$), μ 为剪切模量, b 为柏氏矢量。流变应力和屈服强度的计算使用如下经验公式^[3]:

$$\sigma = 22.7 \epsilon^{0.223} \dot{\epsilon}^{0.048} d_\gamma^{-0.07} \exp(2880/T) \exp(301 W_{Nb}) \quad (2)$$

式中, ϵ 为应变变量, $\dot{\epsilon}$ 为应变速率, d_γ 为奥氏体晶粒尺寸, T 为热力学温度, W_{Nb} 为奥氏体中铌的质量分数。计算屈服强度 σ_y 时应变变量取值 0.002。联立式(1)和式(2)可以得到变形奥氏体的位错密度。

1.3 含铌粒子析出模型

假设粒子仅在位错节点上析出^[7],形核的总位置数近似等于位错节点数 ($N_0 = 0.5 \rho(t)^{3/2}$ ^[6],其中 t 为时间)。析出过程分为形核和粗化两个阶段。在形核阶段,粒子在位错节点上形核的同时伴随着粒子的长大,导致粒子的数目 (N) 和尺寸 (R) 增加。在粗化阶段,粒子尺寸增大,粒子数目减少。两阶段的粒子数目变化速率 (dN/dt) 模型及尺寸变化率 (dR/dt) 模型可参考文献^[5, 7, 11]。

另外,含铌粒子的析出转变量 f 为某一时刻的析出体积分数 $V(t)$ 与在此温度下含铌粒子平衡析出的最大析出体积分数 V_{\max} 之比,即 $f = V(t)/V_{\max}$ 。式中, $V(t) = 4\pi NR^3/3$, V_{\max} 的计算可参考文献^[12]。

1.4 回复模型

回复导致位错密度降低,本文的回复模型取自文献^[7]:

$$\frac{d(\sigma - \sigma_y)}{dt} = \frac{64(\sigma - \sigma_y)^2 v_d}{9 M^3 \alpha_\gamma^2 E} \exp\left(-\frac{U_a}{k_B T}\right) \cdot \sinh\left[\frac{(\sigma - \sigma_y) V_a}{k_B T}\right] \left[1 - \frac{N(t)}{N_0(t)}\right] \quad (3)$$

式中, v_d 为德拜频率, E 为弹性模量, U_a 与 V_a 分别为回复的激活能和激活体积。将式(1)代入式(3),可得到由回复引起的位错密度随时间的变化率 ($d\rho/dt$)。

1.5 再结晶模型

当回复不足以有效降低位错密度时,奥氏体发生再结晶。奥氏体再结晶百分数 (X) 为^[7]:

$$X = 1 - \exp\left\{-N_{\text{Rex}} \left[\int_0^t \Psi(t) M(t) G(t) dt \right]^3\right\} \quad (4)$$

式中, N_{Rex} 为再结晶的形核位置数(再结晶的最大核心数), $M(t)$ 为奥氏体晶界迁移率, $\Psi(t)$ 为再结晶形核概率, $G(t)$ 为再结晶驱动力。

本文中仅考虑奥氏体再结晶晶粒在原始奥氏体晶界上形核,则可能的形核位置数为^[13]:

$$N_{\text{Rex}} = k_2 S_V / A_C$$

式中, k_2 为形状调整因子, S_V 为单位体积形变奥氏体晶粒的表面积^[13], A_C 为再结晶晶核面积。

若奥氏体再结晶核心临界尺寸 D_C 小于含铌粒子的平均间距 l ($l = N(t)^{-1/3}$),则含铌粒子对再结晶核心的发展不造成影响,即形核概率 $\Psi(t) = 1$; 否则 $\Psi(t) = l/D_C$ 。

再结晶核心的长大与奥氏体晶界迁移率有关,奥氏体晶界迁移率为^[14]:

$$M(t) = (1/M_{\text{pure}} + \alpha C_{Nb})^{-1}$$

式中, M_{pure} 为纯奥氏体晶粒的晶界迁移率,即奥氏体晶粒中不含任何合金元素时的晶界迁移率;系数 α 为固溶铌对晶界迁移的拖曳作用系数; C_{Nb} 是固溶铌的摩尔浓度。

奥氏体再结晶的驱动力 $G(t)$ 受形变储存能 G_d 和粒子钉扎力 Z 的影响:

$$G(t) = G_d - Z$$

式中, $G_d = \rho(t) \mu b^2 / 2$, $Z = 3 \gamma_{gb} V(t) / R(t)$, γ_{gb} 是奥氏体晶界的界面能.

1.6 软化模型

在热连轧道次间隔期间, 奥氏体的回复、再结晶及固溶铌含量的减少引起基体的软化, 而含铌粒子的析出和再结晶晶粒的细化造成基体硬化, 软化和硬化的相对程度可以由软化分数 S 表示. 软化分数可表示为:

$$S = \frac{\sigma_m - \sigma_{y2}}{\sigma_m - \sigma_{y1}} \quad (5)$$

式中, σ_m 为第 1 道次变形结束时的应力, σ_{y1} 与 σ_{y2} 分别为第 1 和第 2 道次应变 0.002 时的应力值. 本文在计算软化分数的模拟结果时, σ_m 与 σ_{y1} 使用式(2)计算; 而 σ_{y2} 中包括基体的再结晶部分和未再结晶部分的贡献, 即

$$\sigma_{y2} = \sigma_{\text{Rex}} X + \sigma_{\text{Non}} (1 - X),$$

式中, 基体再结晶部分的贡献 $\sigma_{\text{Rex}} = \sqrt{\sigma_M^2 + \sigma_P^2}$, 基体未再结晶部分的贡献 $\sigma_{\text{Non}} = \sqrt{\sigma_{\text{Un-M}}^2 + \sigma_P^2}$, σ_M 和 $\sigma_{\text{Un-M}}$ 分别为再结晶基体和未再结晶基体应变 0.002 的流变应力(使用式(2)计算), σ_P 为析出引起的硬化(具体计算方法参考文献[11]). 由于未再结晶基体具有一定的位错密度($\rho(t)$), 不能直接使用式(2)计算 $\sigma_{\text{Un-M}}$, 为了简化, 联立式(1)和式(2)获得 $\rho(t)$ 对应的应变 ϵ' , 而计算时式(2)中 $\epsilon = \epsilon' + 0.002$. 热变形道次间隔期间基体的软化分数是析出、回复和再结晶的共同作用结果, 可以通过加载-卸载实验(Double-hit 实验^[15])简单而且精确地测量. 因此, 本文通过将软化分数的模拟结果与实验数据进行对比, 评估所建模型的准确度.

2 模型验证及讨论

本文所用软化分数的实验数据来自于本课题组的前期实验工作^[9-10], 实验用钢的化学成分如表 1 所示. 根据前期工作, 本文认为含铌粒子仅为 Nb(C, N)^[9]. 虽然两种钢的 C、N 和 Nb 的含量不同, 但其溶度积相近, 利用溶度积公式计算得到两种钢中 Nb(C, N) 粒子开始析出的温度均约为 1150℃. 为了模拟 CSP 工艺中的粗大奥氏体晶粒条件, 前期工作中利用高温奥氏体化(1350℃/5 min)将两种钢的原始奥氏体晶粒尺寸处理成约

800 μm.

表 1 低碳含铌钢的化学成分(质量分数)

Table 1 Chemical composition of low carbon Nb-alloyed steels %							
钢种	C	Mn	Si	S	P	Nb	N
A	0.032	1.25	0.36	0.0053	0.010	0.089	0.0027
B	0.060	1.24	0.29	0.0036	0.010	0.049	0.0025

实验用 A 钢和 B 钢在不同温度、 2 s^{-1} 条件下应变 0.3 时道次间隔期内的软化分数 S 、再结晶分数 X 和析出转变量 f 的模拟结果如图 1 所示. 在 1050℃ 下, 虽然已经低于 Nb(C, N) 的开始析出温度, 但是由于析出驱动力较小, 析出过程发展缓慢, 如 A 钢和 B 钢中析出 5% 所需时间分别约为 2000 s 和 2400 s(图 1(a)、图 1(b)). 由于短时间内析出对回复和再结晶几乎没有影响, 奥氏体的回复和再结晶可以充分进行, 因此基体的再结晶曲线和软化曲线均呈典型的 S 形. 在此温度下, 道次间隔期间发生的软化主要是回复和再结晶共同作用的结果, 铌对奥氏体再结晶的影响主要体现为固溶铌对晶界迁移的拖曳作用, 可以实现晶粒细化.

在 900℃ 下, 由于温度明显低于含铌粒子的开始析出温度, 在道次间隔期间 Nb(C, N) 快速析出, A 钢和 B 钢中粒子析出 5% 时所需时间分别约为 3 s 和 10 s(图 1(c)、图 1(d)). 此时粒子数量已接近峰值(图 2(a)), 但粒子尺寸仅为 5~6 nm(图 2(b)), 因此析出体积分数较小(图 2(c)), 粒子钉扎力也较小(图 2(d)). 然而, 粒子对位错具有强烈钉扎作用, 同时还显著降低再结晶形核概率(图 3(a)), 以及未析出的固溶铌阻碍晶界迁移(图 3(b)), 使得奥氏体的回复和再结晶均不能有效进行, 即基体不能发生明显软化, 同时析出对基体产生明显的强化作用, 这两方面的原因导致软化曲线出现“平台”或“低谷”现象, 如图 1(c)、(d) 中箭头所示. 当粒子数量达到峰值时, 析出的第 1 阶段——形核阶段完成, A 钢和 B 钢所需时间分别约为 10 s 和 20 s(图 2(a)). 在第 2 阶段——粗化阶段, 粗化导致粒子尺寸继续增大、数量减少(图 2(a)、2(b)). 只有粗化导致粒子钉扎力明显减小时(图 2(d)), 才能够发生一定程度的再结晶. 但是, 此时驱动力也较小(图 3(c)), 再结晶不能充分进行. 因而, 在 900℃ 下难以通过奥氏体再结晶实现晶粒细化.

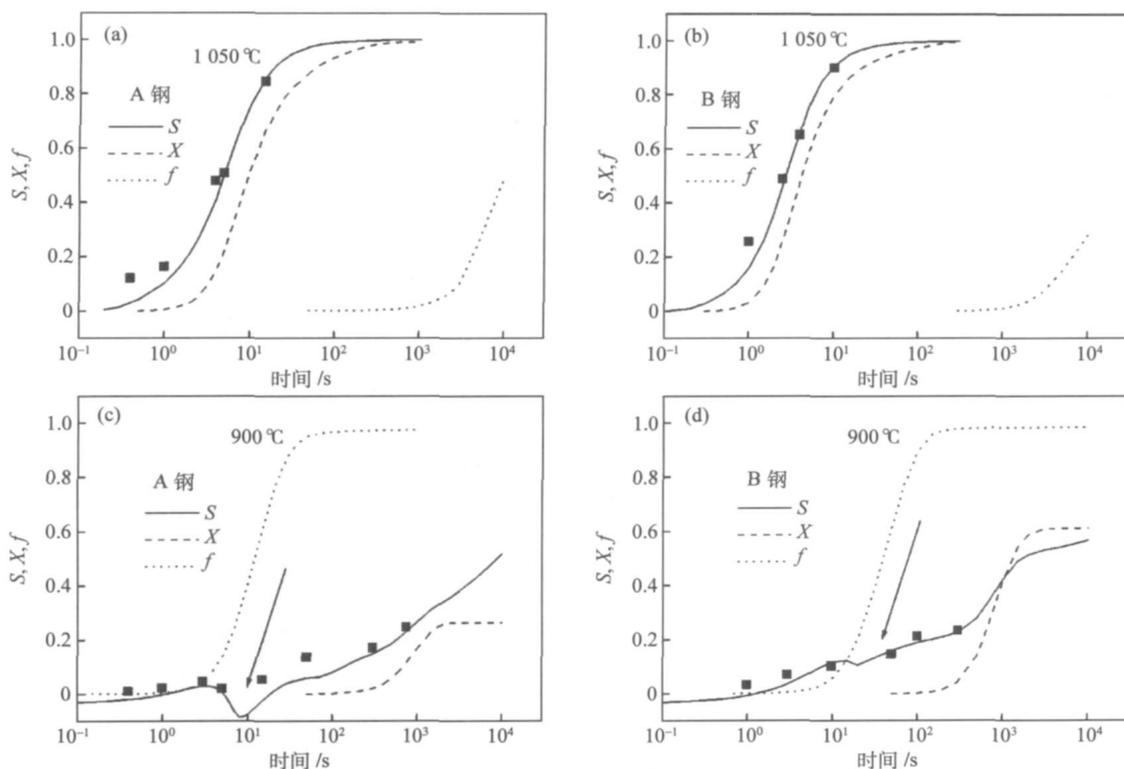


图 1 低碳含铌钢的软化分数 S 、再结晶分数 X 和析出转变量 f 的模拟结果($\dot{\epsilon}=2\text{ s}^{-1}$, $\epsilon=0.3$)。 (a) A 钢, 1050 °C; (b) B 钢, 1050 °C; (c) A 钢, 900 °C; (d) B 钢, 900 °C。其中■为 S 的实验值^[9-10]

Fig.1 Simulated results of softening fraction S , recrystallization fraction X and precipitation fraction f for Nb-containing low carbon steels ($\dot{\epsilon}=2\text{ s}^{-1}$, $\epsilon=0.3$): (a) Steel A, 1050 °C; (b) Steel B, 1050 °C; (c) Steel A, 900 °C; (d) Steel B, 900 °C. ■ Experimental data of S ^[9-10]

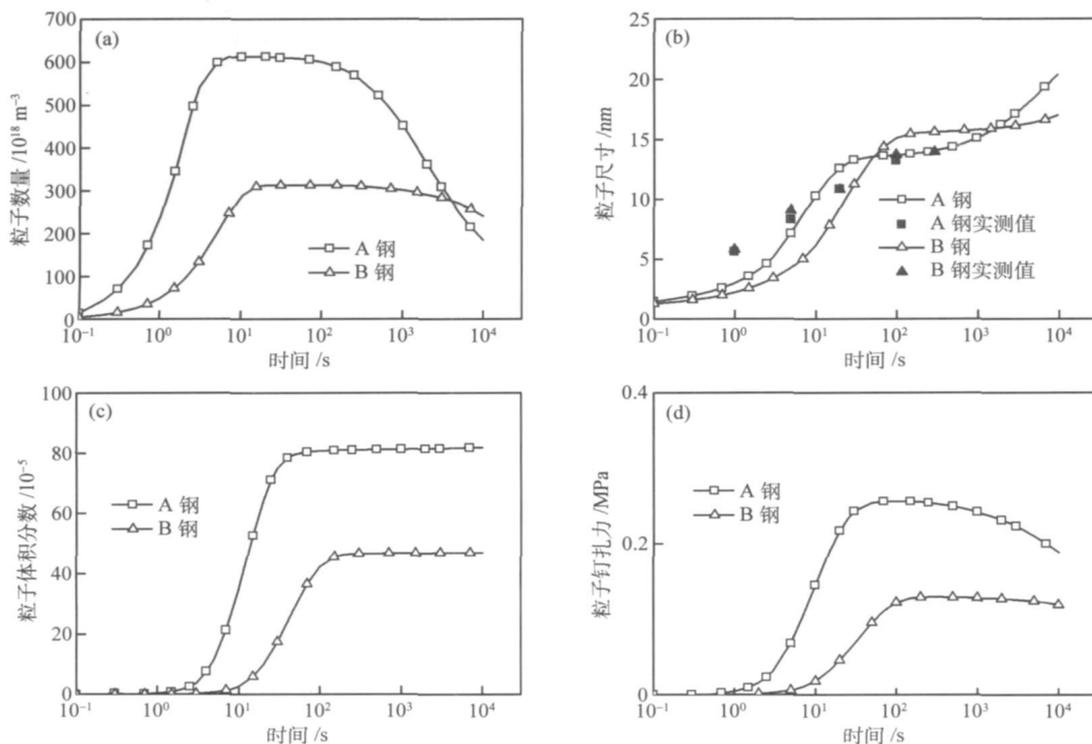


图 2 900 °C 条件下析出的模拟结果($\dot{\epsilon}=2\text{ s}^{-1}$, $\epsilon=0.3$): (a) 粒子数量; (b) 粒子尺寸; (c) 粒子体积分数; (d) 粒子钉扎力

Fig.2 Simulated results of precipitation at 900 °C ($\dot{\epsilon}=2\text{ s}^{-1}$, $\epsilon=0.3$): (a) particle number; (b) particle size; (c) particle volume percent; (d) particle drag force

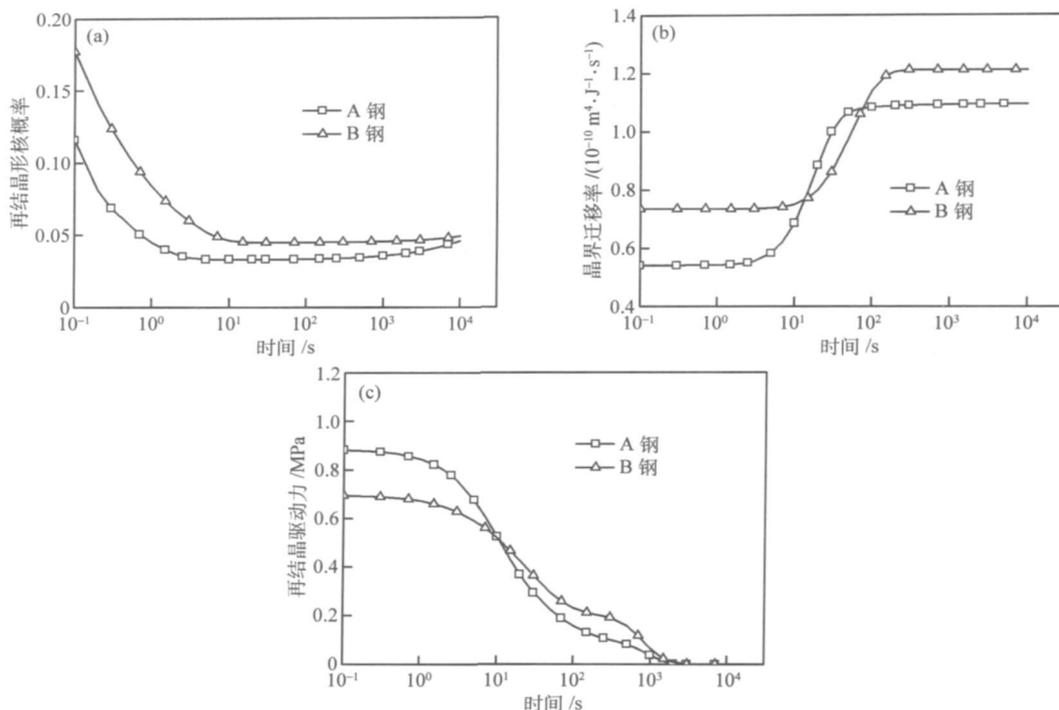


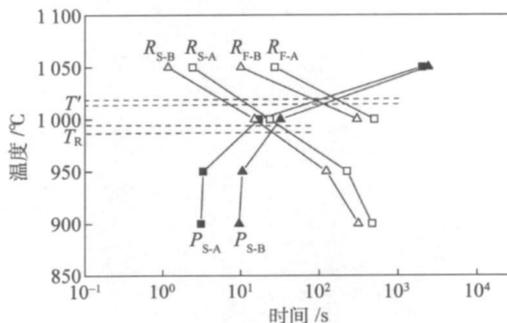
图 3 900 °C 下再结晶过程的模拟结果($\dot{\epsilon}=2\text{ s}^{-1}$, $\epsilon=0.3$): (a) 形核概率; (b) 晶界迁移率; (c) 驱动力

Fig. 3 Simulated results of recrystallization at 900 °C ($\dot{\epsilon}=2\text{ s}^{-1}$, $\epsilon=0.3$): (a) nucleation probability; (b) grain boundary mobility; (c) driving force

从图 1 和图 2(b)来看,对软化分数的模拟结果与实验测量数据符合得较好,而粒子尺寸的模拟结果与实验测量数据的符合程度较低,但变化趋势基本相同. 这一方面表明本文所建模型有待进一步完善,但也与实验测量数据不够精确有关. 实际上,由于含铌粒子尺寸较小(几纳米到几十纳米),并且室温下仅能观察奥氏体的淬火组织——马氏体,因此如何精确测量含铌粒子的尺寸、数量及体积分数仍然是相关研究中的难题之一.

再结晶-析出-时间-温度(RPTT)图是低碳含铌钢热连轧工艺优化的重要参考依据^[4]. 图 4 给出了利用本文模型计算的两种低碳含铌钢在不同温度(1050~900 °C)、 2 s^{-1} 条件下应变 0.3 时道次间隔期间的 RPTT 图. 其中,析出开始时间 P_S 对应的析出转变量 $f=5\%$,再结晶开始时间 R_S 对应的再结晶分数 $X=5\%$,而再结晶完成时间 R_F 对应的再结晶分数 $X=80\%$. 这样选择 R_F 主要是考虑:一方面,对于 A 钢,在 1000 °C 条件下再结晶的最大分数仅约为 80%;另一方面,从前期实验结果来看^[10],当再结晶分数达到 80%左右时,组织已基本均匀,很难区分残余的原始粗大奥氏体晶粒与再结晶晶粒. 图 4 中的温度可以划分成三个范围,分别以再结晶受限温度 T' 和再结晶停止温度 T_R 为分

界. 其中, T' 为析出开始时间曲线 P_S 与再结晶结束时间曲线 R_F 交点对应的温度, T_R 是析出开始时间曲线 P_S 与再结晶开始时间曲线 R_S 交点对应的温度. 在 T' 温度以上,析出开始之前再结晶已基本完成,析出对奥氏体再结晶的影响不明显. 在 T_R 温度以下,再结晶开始之前析出已经开始,由于析出对再结晶的强烈阻碍作用,一般认为此温度以下为奥氏体的未再结晶区 ($T_R \sim A_3$), TMCP (thermo-me-



R_{S-A} —A 钢的再结晶开始时间; R_{S-B} —B 钢的再结晶开始时间;
 R_{F-A} —A 钢的再结晶完成时间; R_{F-B} —B 钢的再结晶完成时间;
 P_{S-A} —A 钢的析出开始时间; P_{S-B} —B 钢的析出开始时间

图 4 A 钢和 B 钢的再结晶、析出过程的再结晶-析出-时间-温度(RPTT)图

Fig. 4 Simulated RPTT diagram for the recrystallization and precipitation of Steel A and Steel B

chanical control process) 工艺中的奥氏体未再结晶区轧制即在此温度范围内进行. 在 $T_R \sim T'$ 的温度范围内, 虽然再结晶比析出早, 但由于析出的强烈阻碍作用, 再结晶不能充分进行, 即此温度范围内为部分再结晶区, 变形组织容易出现混晶, 在制定热连轧工艺时应避免在 $T_R \sim T'$ 的温度区间内进行变形.

由于涉及的温度范围较宽, 对于某一特定钢种, 需要进行大量的变形实验才能绘制比较准确的 RPTT 图, 而一旦合金成分改变时则需要重复实验. 从图 3 的结果可以看出, 利用基于位错析出-再结晶之间交互作用模型的数值模型来绘制 RPTT 图可以显著减少实验工作量, 而且适应性强, 仅需少量调整就可以绘制不同钢种的 RPTT 图.

3 结论

以物理冶金原理为基础建立了低碳含铌钢热变形道次间隔期间内的组织预测模型. 模型以位错密度作为联系析出、回复与再结晶行为之间的桥梁, 综合考虑析出-回复-再结晶之间的交互作用. 利用该模型对低碳含铌钢道次间隔期间内粗晶奥氏体的组织演变进行了数值模拟, 结果与实验数据符合得较好. 所得低碳含铌钢的再结晶、析出过程的再结晶-析出-温度-时间(RPTT)图对制定含铌微合金钢薄板坯连铸连轧工艺具有很好的指导意义.

参 考 文 献

- [1] Sellars C M, Whiteman J A. Recrystallization and grain growth in hot rolling. *Met Sci*, 1978, 13: 187
- [2] Mecking H, Kocks U F. Kinetics of flow and strain-hardening. *Acta Metall*, 1981, 29: 1865
- [3] Yoshie A, Fujita T, Fujioka M, et al. Formulation of flow stress of Nb added steels by considering work-hardening and dynamic recovery. *ISIJ Int*, 1996, 36: 467
- [4] Kwon O, Deardo A J. Interactions between recrystallization and precipitation in hot-deformed microalloyed steels. *Acta Metall Mater*, 1991, 39: 529
- [5] Dutta B, Palmiere E J, Sellars C M. Modelling the kinetics of strain induced precipitation in Nb microalloyed steels. *Acta Mater*, 2001, 49: 785
- [6] Zurob H S, Hutchinson C R, Brechet Y, et al. Rationalization of the softening and recrystallization behaviour of microalloyed austenite using mechanism maps. *Mater Sci Eng A*, 2004, 38: 64
- [7] Zurob H S, Hutchinson C R, Brechet Y, et al. Modeling recrystallization of microalloyed austenite; effect of coupling recovery, precipitation and recrystallization. *Acta Mater*, 2002, 50: 3075
- [8] Wang X T, Siwecki T, Engberg G A. Physical model for prediction of microstructure evolution during thermo mechanical processing. *Mater Sci Forum*, 2003, 426-432: 3801
- [9] Zhang L. *Microstructure Control and Process Optimization of Thin Slab Direct Rolling* [Dissertation]. Beijing: University of Science and Technology Beijing, 2007
(张玲. TSDR 工艺热加工过程的组织演变与控制[学位论文]. 北京: 北京科技大学, 2007)
- [10] Xue C X, Zhang L, Yang W Y, et al. Static recrystallization in low-carbon niobium-microalloyed steels with coarse austenite. *J Uni Sci Technol Beijing*, 2008, 30(4): 374
(薛春霞, 张玲, 杨王玥, 等. 低碳含铌钢粗大奥氏体的静态再结晶. 北京科技大学学报, 2008, 30(4): 374)
- [11] Deschamps A, Brechet Y. Influence of predeformation and ageing of an Al-Zn-Mg Alloy-II Modeling of precipitation kinetics and yield stress. *Acta Mater*, 1998, 47: 293
- [12] Liu W J. A new theory and kinetic modeling of strain-induced precipitation of Nb (CN) in microalloyed austenite. *Metall Mater Trans A*, 1995, 26: 1641
- [13] DeArdo A J. Thermomechanical processing of microalloyed steels; grain refinement revisited// Palmiere E J, Mahfouf M, Pinna C. *International Conference on Thermomechanical Processing: Mechanics, Microstructure & Control*. Sheffield: University of Sheffield, 2002: 9
- [14] Cahn J W. The impurity-drag effect in grain boundary motion. *Acta Mater*, 1962, 10: 789
- [15] Li G, Maccagno T M, Bai D Q. Effect of initial grain size on the static recrystallization kinetics of Nb microalloyed steels. *ISIJ Int*, 1996, 36: 1479