

## MODELING OF HOT ROLLING TEXTURE IN CM-2A MOLYBDENUM ALLOY USING A CELLULAR AUTOMATON

*Margarita Gennadyevna Isaenkova, Olga Aleksandrovna Krymskaya,  
Vladislav Pavlovich Tyutin <sup>a</sup>, Olga Romanovna Boldyreva,  
Vladimir Aleksandrovich Fesenko*

Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education, National Research Nuclear University MEPhI,  
Kashirskoe Shosse 31, 115409, Moscow, Russia

<sup>a</sup> vp.tyutin@gmail.com

### ABSTRACT

A combined model of plastic deformation and recrystallization was developed and verified to predict the evolution of crystallographic texture during annealing and hot rolling of CM-2A molybdenum alloy. The model takes into account the activation of the  $\{110\}\langle 111 \rangle$ ,  $\{112\}\langle 111 \rangle$ , and  $\{123\}\langle 111 \rangle$  slip systems, strain accumulation, and the nucleation and growth of nuclei misoriented relative to the deformed matrix. The nucleation and growth parameters were calibrated using literature data on static recrystallization and critical degrees of deformation of pure molybdenum and then verified using experimental kinetic recrystallization curves. Various hot rolling schemes were simulated, which made it possible to reproduce the main patterns of  $\gamma$ -fiber formation,  $\{100\}\langle 110 \rangle$  and  $\{111\}\langle 110 \rangle$  texture components, and the effect of temperature and degree of deformation on the proportion of the recrystallized component. The obtained results demonstrate the applicability of the developed model for analyzing texture formation during deformation and dynamic recrystallization, which allows its use in optimizing process routes for the manufacture of isotropic molybdenum sheets.

### KEYWORDS

Molybdenum alloys; recrystallization; modeling; cellular automaton; crystallographic texture.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕКСТУРЫ ГОРЯЧЕЙ ПРОКАТКИ В МОЛИБДЕНОВОМ СПЛАВЕ ЦМ-2А С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА

*Маргарита Геннадьевна Исаенкова, Ольга Александровна Крымская,  
Владислав Павлович Тютин <sup>a</sup>, Ольга Романовна Болдырева,  
Владимир Александрович Фесенко*

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Россия, 115409, Москва, Каширское ш., 31

<sup>a</sup> vp.tyutin@gmail.com

## АННОТАЦИЯ

Разработана и верифицирована комбинированная модель пластической деформации и рекристаллизации для прогнозирования эволюции кристаллографической текстуры при отжиге и горячей прокатке молибденового сплава ЦМ-2А. Модель учитывает активизацию систем скольжения  $\{110\}\langle 111\rangle$ ,  $\{112\}\langle 111\rangle$  и  $\{123\}\langle 111\rangle$ , накопление деформации, зарождение и рост разориентированных относительно деформированной матрицы зародышей. Параметры зародышеобразования и роста калиброваны с использованием литературных данных по статической рекристаллизации и по критическим степеням деформации чистого молибдена, а затем верифицированы по экспериментальным кинетическим кривым рекристаллизации. Проведено моделирование различных схем горячей прокатки, что позволило воспроизвести основные закономерности формирования  $\gamma$ -волокна, текстурных компонент  $\{100\}\langle 110\rangle$  и  $\{111\}\langle 110\rangle$ , а также влияния температуры и степени деформации на долю рекристаллизованной составляющей. Полученные результаты демонстрируют применимость разработанной модели для анализа текстурообразования при деформации и динамической рекристаллизации, что позволяет ее использовать при оптимизации технологических маршрутов изготовления изотропных молибденовых листов.

## КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Молибденовые сплавы; рекристаллизация; моделирование; клеточный автомат; кристаллографическая текстура.

## Введение

Развитие в листовых материалах из молибдена и сплавов на его основе острой кристаллографической текстуры в результате холодной прокатки определяет анизотропию их физико-механических свойств и служит причиной расслоения и хрупкого разрушения при термомеханических нагрузках [1]. Поэтому отработка технологии получения изотропных листов является актуальной задачей и предполагает предварительный анализ закономерностей текстурообразования, которые должны опираться как на экспериментальные данные, так и на возможности современных модельных представлений о развитии текстуры на разных этапах термомеханической обработки. Разработка способов управления текстурой с использованием верифицированных моделей текстурообразования при пластической деформации и рекристаллизации является важным направлением повышения надежности изделий из молибденовых сплавов.

Формирование текстуры деформации металлов с объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой определяется действием систем скольжения  $\{110\}\langle 111\rangle$ ,  $\{112\}\langle 111\rangle$  и  $\{123\}\langle 111\rangle$  [1]. Для молибденовых сплавов при холодной прокатке образуются характерные текстурные компоненты типа  $\{001\}\langle 110\rangle$  и  $\{111\}\langle 110\rangle$  [2], а при повышенных температурах пластической деформации большое влияние на текстуру оказывает динамическая рекристаллизация (ДР) [3]. Исследования, выполненные методами EBSD, показали, что при горячей деформации и последующем отжиге в молибденовых сплавах развивается сложная неоднородная структура с областями деформированной матрицы и разориентированными относительно нее рекристаллизованными зернами [4]. Механизм ДР в этих сплавах определяется накоплением и последующим перераспределением дислокаций; при этом скорость деформации существенно влияет на кинетику зарождения и роста новых зерен [5].

Таким образом, формирование кристаллографической текстуры полуфабрикатов зависит от схемы, степени обжатия, скорости и температуры деформации. Варьирование всех этих параметров для оптимизации существующих многостадийных технологических процессов экспериментальными методами – трудозатратный и экономически невыгодный подход. В связи с этим большое значение приобретает компьютерное моделирование процессов структуро- и текстурообразования, позволяющее проследить эволюцию структуры и текстуры на последовательных этапах обработки.

Возможность активизации процессов рекристаллизации в случае высокотемпературной деформации определяет необходимость развития модели с учетом динамических процессов, без которых моделирование горячей прокатки невозможно. Многие работы по кинетике рекристаллизации традиционно опираются на эмпирическую модель JMAK (Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov) и ее вариации для аппроксимации зависимости степени рекристаллизации от времени [6]. Эта модель хорошо описывает макроскопическую кинетику, но не позволяет прогнозировать пространственное распределение ориентаций зерен, т.е. кристаллографическую текстуру.

Для учета процессов возникновения и роста зародышей рекристаллизации в последние годы активно применяются модели клеточных автоматов (КА), основанные на дискретном описании микроструктуры в виде сетки ячеек, каждая из которых характеризуется ориентацией, накопленной энергией деформации или плотностью дислокаций и температурой. КА позволяют моделировать зарождение и рост рекристаллизованных зерен, учитывая локальные градиенты деформации и влияние соседних ячеек, и хорошо работают для описания процессов статической рекристаллизации [7, 8].

Тем не менее, КА применяются и для моделирования процесса динамической рекристаллизации, например, при горячем одноос-

ном сжатии образцов из аустенитной стали достигнуто хорошее совпадение результатов моделирования с экспериментом [9]. Такой подход включает в себя моделирование циклов деформации, образования и роста зародышей, и позволяет корректно воспроизводить эволюцию микроструктуры.

Современные исследования демонстрируют эффективность комбинированных моделей, связывающих модели деформации с использованием метода конечных элементов (МКЭ) с КА. Например, в [10] предложена модель, объединяющую модели деформации и КА-подход для описания метадинамической рекристаллизации при горячей прокатке, показав, что такая модель обеспечивает корректное воспроизведение морфологии зерен и кристаллографической текстуры при высоких скоростях деформации. Аналогичные результаты получены [11] для аустенитной стали 304LN.

Несмотря на возросший интерес к моделированию рекристаллизации с применением КА и комбинированных моделей, они все еще недостаточно широко используются для моделирования динамических процессов рекристаллизации металлов с объемно-центрированной кубической структурой (ОЦК), играющих большую роль в формировании кристаллографической текстуры тугоплавких жаропрочных сплавов, например, на основе молибдена. Применение комбинированной модели Тейлора и КА может быть полезно при оптимизации существующих и разработке новых промышленных циклов производства полуфабрикатов из молибденовых сплавов с заданной кристаллографической текстурой. Такой подход позволит значительно сократить объем экспериментальных работ, однако требует верификации и калибровки модели.

Настоящая работа направлена на разработку комбинированной модели, объединяющей модель Тейлора для описания деформации и модель клеточного автомата для рекристаллизации, применительно к сплаву ЦМ-2А, а также ее валидации по литератур-

ным и экспериментальным результатам горячей и холодной прокатки молибденовых листов.

## 1. Материалы и методы исследования

### 1.1. Исследованные образцы.

Для исследования процесса формирования кристаллографической текстуры при горячей прокатке рассматривали образцы из сплава ЦМ-2А, полученные горячей прокаткой исходного образца 0 по двум последовательным схемам деформации: горячая перекрестная прокатка при температуре 1600 °С, выполненная в два прохода с обжатием 30 и 28,5%; горячая продольная прокатка при температуре 1400 °С с суммарным обжатием 60%. Кристаллографическая текстура, снятая с нормального направления (НН) представлена на рис. 1.

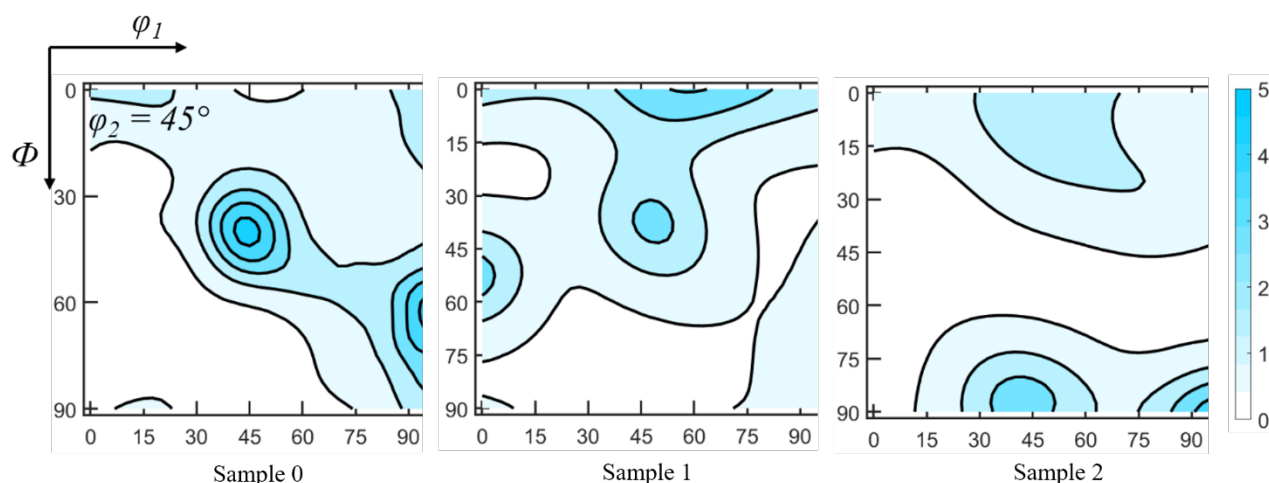
Для исследования текстуры регистрировали пространственное распределение плоскостей {110}, {100} и {112} рентгеновским методом наклона на отражениях (220), (200) и (112) соответственно. По неполным прямым полюсным фигурам (НППФ) {110}, {100} и {112} с использованием программного обеспечения MTEX восстанавливали функцию распределения зерен по ориентациям (ФРО) и полные ППФ, для которых рассчитывали остроту текстуры.

$$T_f = \oint f(g)^2 dg.$$

### 1.2. Методика моделирования пластической деформации и рекристаллизации.

Моделирование горячей прокатки с учетом рекристаллизационных процессов проводилось с использованием программного обеспечения с открытым исходным кодом MTEX [12]. По алгоритму моделирования все этапы термомеханической обработки делились на холодную прокатку с последующим отжигом и горячую прокатку.

Модель реализована на двумерной сетке размером  $N_x \times N_y$  с толщиной слоя равным длине ребра одной ячейки (5 мкм). Для большинства расчетов использовалась сетка 64×64 ячеек в целях обеспечения высокой скорости счета, необходимой при подборе параметров на стадии первичной верификации. Для обеспечения статистической значимости получаемых результатов и проверки подбираемых параметров, расчет проводился на сетке 128×128 ячеек. Каждой ячейке ставилась в соответствие кристаллографическая ориентация, задаваемая на основе восстановленной по экспериментальной текстуре ФРО. Зеренная структура на сетке генерировалась методом Вороного и разбивалась на 200 зерен.



**Рис. 1.** Сечения ФРО при  $\varphi_2 = 45^\circ$  исходного образца 0, а также образца 1 после перекрестной горячей прокатки и образца 2 после последующей продольной горячей прокатки

**Fig. 1.** ODF sections at  $\varphi_2 = 45^\circ$  of the initial sample 0, sample 1 after cross hot rolling and sample 2 after subsequent longitudinal hot rolling

Условия прокатки задавались тензором деформации  $F_{||}$ . При перекрестной прокатке проводилось моделирование деформации с чередованием тензоров деформации прямой  $F_{||}$  и поперечной  $F_{\perp}$  прокатки.

$$F_{||} = \varepsilon_i \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}; F_{\perp} = \varepsilon_i \cdot \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

где  $\varepsilon_i$  – степень деформации за проход.

Скорость деформации на всех этапах принималась равной  $\dot{\varepsilon} = 1 \text{ с}^{-1}$ , при этом время деформации на этапе рассчитывалось как:

$$t = \frac{\varepsilon}{\dot{\varepsilon}}$$

Для описания эволюции кристаллографической текстуры при пластической деформации поликристаллов применяли классический метод Тейлора. Основное предположение модели заключалось в том, что тензор пластической деформации одинаков для всех зерен [13].

Согласно [13] величину накопленной деформации можно рассчитать, как сумму деформации по всем системам скольжения  $\gamma_i$ :

$$\Gamma = \sum \gamma_i.$$

Смоделированная с использованием метода Тейлора текстура деформации и соответствующее распределение накопленных деформаций являлись исходными данными для дальнейшего моделирования рекристаллизации.

Моделирование рекристаллизации проводили с использованием клеточного автомата (КА), основанного на дискретизации пространства и времени. Ячейки сетки КА характеризуются величиной накопленной деформации по всем системам скольжения  $\Gamma$  и кристаллографической ориентацией. Эво-

люция микроструктуры определяется в рамках стохастической модели, предполагающей вероятностное образование зародышей и их рост [14].

При описании процессов динамической рекристаллизации часто пользуются параметром Зинера-Холломона  $Z$ , который зависит от скорости деформации  $\dot{\varepsilon}$  [8].

$$Z = \dot{\varepsilon} \exp\left(\frac{Q_z}{RT}\right),$$

где  $Q_z$  – энергия активации динамической рекристаллизации, 439706 Дж/моль [16];  $R$  – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К);  $T$  – абсолютная температура, К.

Ускорение процессов зародышеобразования и роста при горячей прокатке может быть учтено введением поправочного коэффициента к функциям образования и роста зародыша:

$$Z_{\text{др}} = BZ^p,$$

где  $B$  и  $p$  – настроечные коэффициенты.

В разработанной в настоящей работе модели вероятность зарождения определяется пропорционально объему  $V_N$ , в котором может появиться зародыш:  $P_{\text{nuc}} = IV_N dt$ , где  $dt$  – временной инкремент, с.

Функция  $I$  описывается аррениусовской зависимостью с учетом критерия достижения критической накопленной деформации  $\Gamma_{\text{factor}}$ , а также параметра, зависящего от скорости деформации  $Z_{\text{др}}$ . В случае, когда  $Z_{\text{др}} = 1$ , уравнение описывает зародышеобразование при статической рекристаллизации, что позволяет проводить калибровку параметров по экспериментальным кинетическим кривым, соответствующим модели ЖМАК [8, 15].

$$I = I_0 \cdot \Gamma_{\text{factor}} \cdot Z_{\text{др}} \exp\left(-\frac{Q_{\text{nuc}}}{RT}\right).$$



Здесь:  $I_0$  – предэкспоненциальный множитель,  $\text{м}^{-3}\text{с}^{-1}$ ;  $Q_{\text{нuc}}$  – энергия активации зародышеобразования, Дж/моль;

Так как зародышеобразование при первичной рекристаллизации может происходить только в деформированной матрице, для активации этого процесса требуется достижение некоторой критической деформации, которую можно описать в соответствии с [7, 16] следующим образом:

$$\Gamma_{\text{factor}} = E_{\text{lab}} \left( \frac{\Gamma}{a\Gamma + b} - \frac{\Gamma_c}{a\Gamma_c + b} \right), \Gamma_{\text{factor}} \geq 0,$$

где  $E_{\text{lab}}$  – удельная энергия малоугловых границ, Дж/м<sup>2</sup>;  $\Gamma$  и  $\Gamma_c$  – текущая и критическая накопленная деформация;  $a$  и  $b$  – настроечные коэффициенты, определяющие чувствительность начала рекристаллизации к деформации.

Величина критической степени деформации для молибденовых сплавов определяется в соответствии с [16] эмпирической зависимостью  $\Gamma_c = 0,0651Z^{0,00166}$ .

Рост зародыша рекристаллизации в ячейке с координатами  $i, j$  рассчитывается как вероятность захвата соседней ячейки из окрестности Неймана ( $n_i, n_j$ ).

$$P = \frac{vdt}{L},$$

где  $v$  – скорость движения границы, м/с;  $L$  – длина ребра ячейки клеточного автомата, соответствующая пути движения границы, м.

Скорость роста определяется мобильностью границы  $M$  и движущей силой  $p_\epsilon$  [7, 16]:  $v = Mp_\epsilon$ .

Так как мобильности малоугловых (МУГ) и высокоугловых границ (ВУГ) отличаются, вводится зависимость от угла разориентировки  $\theta$ , а сама мобильность приводится в удобной для калибровки форме:

$$M = M_0 \cdot \theta_{\text{factor}} \cdot Z_{\text{дp}} \exp \left( -\frac{Q_g}{RT} \right).$$

где  $M_0$  – предэкспоненциальный множитель, м<sup>4</sup>/(Дж·с).

Различия в мобильности МУГ и ВУГ определяется в соответствии с уравнением Рида-Шокли [8, 17]:

$$\theta_{\text{factor}} = \begin{cases} E_{\text{hagb}}, & \text{при } \theta > \theta_c \\ E_{\text{hagb}} \frac{\theta}{\theta_c} \left( 1 - \ln \left( \frac{\theta}{\theta_c} \right) \right), & \text{при } \theta < \theta_c \end{cases},$$

где  $E_{\text{hagb}}$  – удельная энергия высокоугловых границ, Дж/м<sup>2</sup>,  $\theta_c$  – угол, меньше которого граница считается малоугловой, в настоящей работе принят 15°.

Движущую силу рекристаллизации обычно разделяют на два вклада. Первый вклад: от разницы накопленных деформаций в деформированной матрице  $\Gamma_{ni,nj}$  и в зародыше  $\Gamma_{ij}$ :

$$p_\epsilon = \frac{CG(\Gamma_{ni,nj} - \Gamma_{ij})}{2},$$

где  $C$  – настроечный коэффициент;  $G$  – модуль сдвига, ГПа.

Этот вклад играет основную роль при росте зародышей первичной рекристаллизации, и становится равным нулю, как только один зародыш встречается с другим.

Второй вклад, связанный с кривизной поверхности рекристаллизованного зерна, начинает влиять на формирование зеренной структуры, как правило уже после завершения первичной рекристаллизации и определяет в большей степени процесс собирательной рекристаллизации. Исходя из того, что настоящее исследование направлено на моделирование процесса динамической рекристаллизации, этот вклад в движущую силу не учитывается.

Верификация модели и подбор параметров проводился по результатам, полученным в [18] и [19] для статической рекристаллизации. Процесс включал в себя три этапа: грубая настройка параметров  $M_0$ ,  $C$  и  $I_0$  на основе экспериментальных кинетических кривых, представленных в [18], предварительная настройка параметров  $a$  и  $b$  по результатам исследования инкубационного периода рекристаллизации [19], а затем уточнение всех пяти полученных параметров для количественного соответствия ЖМАК-модели в [18] для сплава TZM.

Первый этап грубой настройки параметров состоял в определении начальных значений параметров возникновения и роста зародышей для последующего уточнения. Для соответствия литературным данным проводили расчет деформации по модели Тейлора до степени 95%, после чего моделировали процесс статической рекристаллизации при температурах 1300, 1400 и 1450 °C в течение 22000 с. Параметры варьировались случайным образом, при этом рассчитывали степень рекристаллизации по модели ( $X_m$ ) и сравнивали с экспериментальной степенью рекристаллизации ( $X_e$ ) для заданного времени отжига. Целевые значения для различных температур и времен отжига представлены в табл. 1.

Количество выполненных итераций – 100. Лучший набор параметров для дальнейшей оптимизации выбирался на основе получения минимальной интегральной ошибки при всех трех температурах:

$$Err = \sum_T \sum_t (X_e(T_i, t_i) - X_m(T_i, t_i))^2.$$

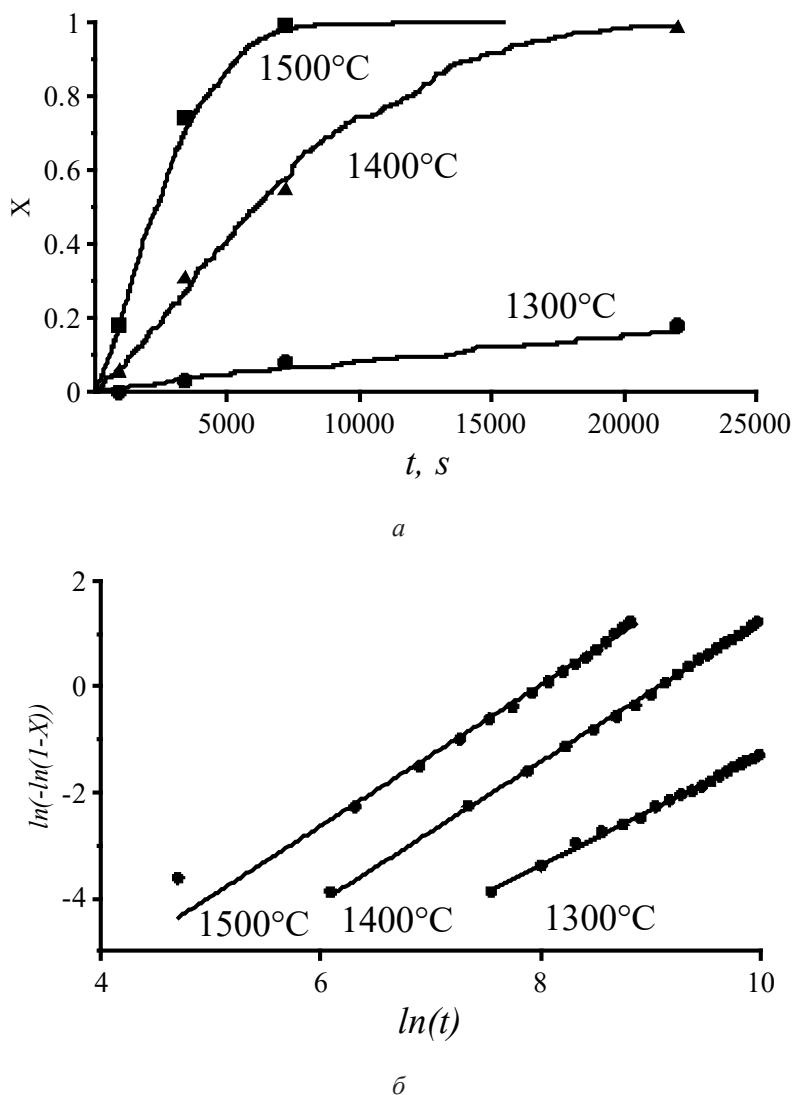
Полученный набор параметров использовался для подбора параметров  $a$  и  $b$  по данным о деформации, необходимой для начала рекристаллизации чистого молибдена [19]. Из результатов указанной статьи сформировано семь (по одной паре на каждую температуру) пар величин деформации, соответствующих состоянию предшествующему началу рекристаллизации, и деформаций, при которых обнаружены признаки начала рекристаллизации. Подбор параметров проводился до достижения 90% совпадения при 100 итерациях.

Полученные в результате двух этапов подбора параметры использовались для тонкой настройки модели [18] по критериям аналогичным первому этапу. При этом для достижения устойчивого решения расчет проводили методом градиентного поиска до достижения минимальной интегральной ошибки  $Err$ . Результат моделирования при наилучшем совпадении с  $Err = 6\%$  приведен на рис. 2. Оптимальные параметры модели приведены в табл. 2.

**Таблица 1.** Целевые параметры степени рекристаллизации при заданном времени  $t$  ( $X_t$ ) использованные при верификации модели [18]

**Table 1.** Target degree of recrystallization at a given time  $t$  ( $X_t$ ) parameters used in the verification of the model [18]

Температура, °C / Temperature, °C	$X_{900 \text{ c}}$	$X_{3400 \text{ s}}$	$X_{7200 \text{ s}}$	$X_{22000 \text{ s}}$
1573	–	0,03	0,08	0,18
1673	0,06	0,31	0,55	0,99
1723	0,18	0,74	0,99	–



**Рис. 2.** Результат калибровки модели по данным статической рекристаллизации чистого молибдена [18]:  
 а – кинетические кривые зависимости степени рекристаллизации ( $X$ ) от времени отжига ( $t$ ), полученные при моделировании и экспериментальные результаты из литературы (● – для температуры 1300 °С, ▲ – 1400 °С, ■ – 1500 °С); б – JMAK-кривые в спрямляющих координатах, построенные по результатам моделирования

**Fig. 2.** Result of model calibration based on static recrystallization data for pure molybdenum [18]:  
 а – kinetic curves of the degree of recrystallization ( $X$ ) versus annealing time ( $t$ ), obtained during modeling and experimental results from the literature (● – for a temperature of 1300 °С, ▲ – 1400 °С, ■ – 1500 °С);  
 б – JMAK curves in rectifying coordinates, constructed based on the modeling results

**Таблица 2.** Параметры модели, подобранные в настоящей работе

**Table 2.** Model parameters selected in this work

Параметр / Parameter	$a$	$b$	$I_0$	$M_0$	$C$
Значение / Value	$1,33 \cdot 10^{-9}$	$3,94 \cdot 10^{-9}$	$7,99 \cdot 10^{19}$	$2,88 \cdot 10^3$	$3,22 \cdot 10^{-10}$



Так как с точки зрения модели, представленной в данной работе, учет динамической рекристаллизации реализован вводом параметров, зависящих от  $Z$ , то параметры, найденные для статической рекристаллизации, в процессе расчетов не изменялись.

Определяющее влияние на текстуру рекристаллизации оказывает процесс зарождения, а также ориентации зародышей рекристаллизации. В настоящей работе принято предположение, что при первичной и динамической рекристаллизации образуются зародыши, случайно разориентированные относительно деформированной матрицы. Так как в процессе динамической рекристаллизации происходят образование и рост зародышей, а также их деформация, то появляющиеся в процессе горячей прокатки новые зародыши могут расти как за счет деформированной матрицы (это наиболее предпочтительный случай, так как движущая сила рекристаллизации выше из-за большей раз-


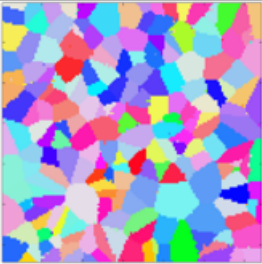
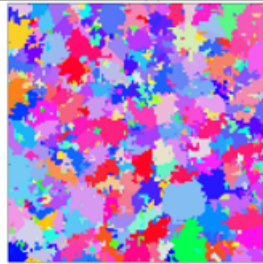
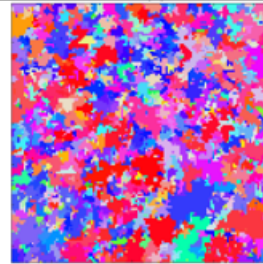
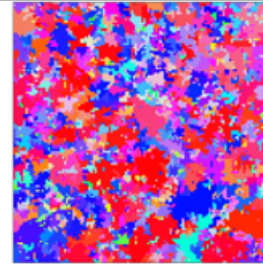
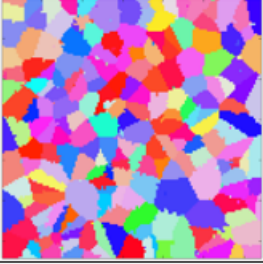
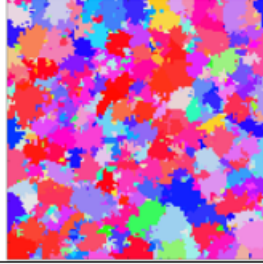
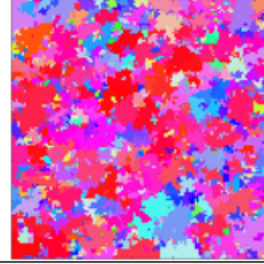
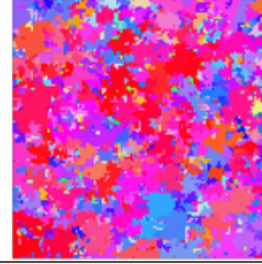
ницы накопленных деформаций), так и за счет возникших ранее зародышей рекристаллизации, подвергнутых деформации.

## 2. Результаты моделирования

Проведено моделирование перекрестной прокатки образца с исходной текстурой, соответствующей образцу 0, и продольной прокатки образца с исходной текстурой, соответствующей образцу 1. Полученные ориентационные карты представлены в табл. 3. На начальных этапах моделирования горячей прокатки в обоих случаях наблюдается появление зародышей рекристаллизации на границах зерен с различной ориентацией. После достижения целевой деформации при горячей прокатке на ориентационных картах наблюдается образование мелких зародышей, а также отдельные нерекристаллизованные зерна трех основных ориентаций:  $\langle 001 \rangle \parallel \text{HH}$  – красные,  $\langle 111 \rangle \parallel \text{HH}$  – синие, и  $\langle 112 \rangle \parallel \text{HH}$  – фиолетовые.

**Таблица 3.** Структура горячекатаных листов молибдена, смоделированная для перекрестной и продольной прокаток, представленная ориентационными картами (деформация представлена в процентах от суммарной деформации ( $\varepsilon_{\max}$ ) на этапе)

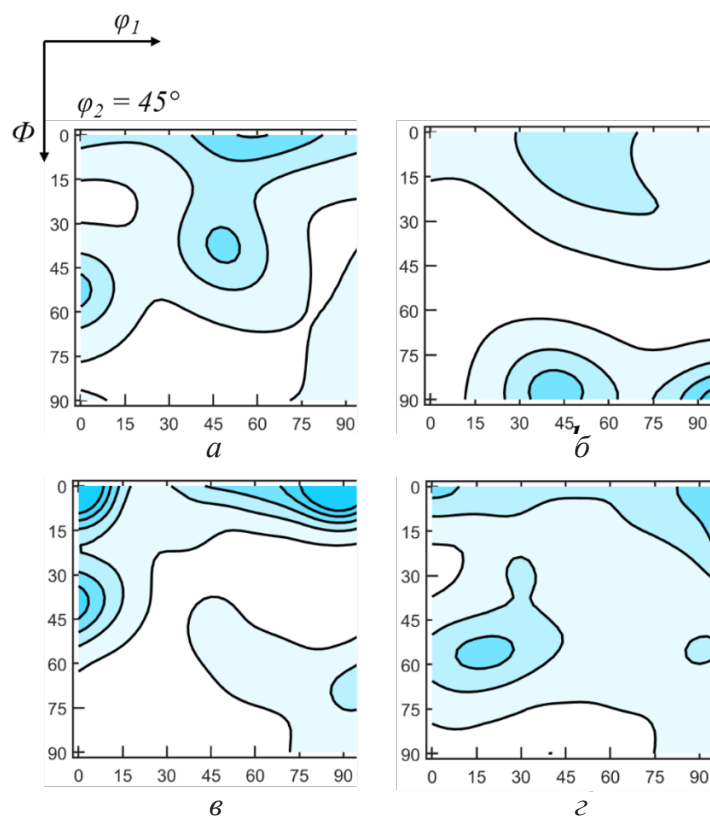
**Table 3.** Structure of hot-rolled molybdenum sheets modeled for cross and longitudinal rolling represented by orientation maps (the deformation is presented as a percentage of the total deformation ( $\varepsilon_{\max}$ ) at the stage)

		$\varepsilon/\varepsilon_{\max} = 0$	$\varepsilon/\varepsilon_{\max} = 33 \%$	$\varepsilon/\varepsilon_{\max} = 67\%$	$\varepsilon/\varepsilon_{\max} = 100\%$
T = 1600 °C Образец 1 Sample 1					
T = 1400 °C Образец 2 Sample 2					

Кристаллографическая текстура образцов 1 и 2, полученная моделированием представлена компонентами  $\langle 100 \rangle \parallel \text{НН}$  и слабой компонентой  $\langle 111 \rangle \parallel \text{НН}$ . Для образца 1 ошибка совпадения ФРО составила 22%, для образца 2 – 21%, при этом наблюдается качественное совпадение смоделированных и экспериментальных ФРО. В смоделированной структуре наблюдается присутствие зерен с ориентацией  $\{001\} \langle 100 \rangle$ , хотя их доля меньше, чем в экспериментальных образцах. Можно отметить, что в модели для образца 2 наблюдается ослабление компоненты  $\langle 111 \rangle \parallel \text{НН}$ , по сравнению с образцом 1, что также совпадает с экспериментальными результатами.

Экспериментальный образец 2 (рис 3, б) характеризуется присутствием компоненты

$\{110\} \langle 110 \rangle - \langle 001 \rangle$ , которая наблюдается при горячей прокатке других ОЦК металлов (например, Fe [20]), и обычно связана с высокими касательными напряжениями на поверхности образца, не учитываемыми в рамках используемой модели. В образце 1 (рис. 3, а) данная компонента не наблюдается, что связано с применением перекрестной схемы прокатки, приводящей к снижению касательных напряжений. При этом в образце 1 сохраняется компонента  $\langle 111 \rangle \parallel \text{НН}$ , что свидетельствует о более равномерном распределении деформации и пониженном накоплении энергии в зернах данной ориентации по сравнению с продольной прокаткой (образец 2), после которой данная компонента полностью исчезает.



**Рис. 3.** Экспериментальные (а, б) и рассчитанные по модели (в, г) сечения ФРО при  $\varphi_2 = 45^\circ$  для образцов 1 (а, в) и 2 (б, г)

**Fig. 3.** Experimental (a, б) and model-calculated (в, г) ODF sections at  $\varphi_2 = 45^\circ$  for samples 1 (a, в) and 2 (б, г)

### 3. Обсуждение результатов

Согласно результатам моделирования ГП, в процессе деформации скольжение приводит к переориентации зерен в сторону компоненты  $\langle 111 \rangle \parallel \text{НН}$ , при этом зерна с ориентацией  $\{001\} \langle 110 \rangle$  почти не подвержены деформации и не изменяют ее в процессе прокатки. Из-за подавления скольжения такие зерна вовлекаются в процесс динамической рекристаллизации позднее, чем остальные, и вероятность возникновения и роста зародышей в них меньше. Это объясняет сохранение этой текстурной компоненты на протяжении всего процесса деформации. Зерна с ориентацией  $\langle 111 \rangle \parallel \text{НН}$  испытывают при прокатке большие деформации, вследствие чего чаще становятся центрами рекристаллизации, и характеризуются высокой движущей силой при росте зародышей. Поэтому в процессе ГП происходит ослабление текстурной компоненты  $\langle 111 \rangle \parallel \text{НН}$ .

Ориентационные карты поверхности листа (табл. 3) демонстрируют, что при малых степенях деформации на границах исходных зерен наблюдается формирование зародышей рекристаллизации. При этом зародыши рекристаллизации, образующиеся на границах исходных зерен, приобретают ориентацию, отличную от каждого из своих соседей, что определяет высокую мобильность их границ. Одновременно с этим наблюдается преимущественный рост зерен с пониженной накопленной деформацией за счет большей движущей силы рекристаллизации на их границах с высокодеформированной матрицей, сопровождающийся усилением компоненты  $\langle 001 \rangle \parallel \text{НН}$ . На более позднем этапе ГП этот процесс замедляется в связи с уменьшением движущей силы роста границ (средняя деформация  $\Gamma$  не возрастает), а также образованием на границах зерен зародышей, тормозящих рост слабдеформированных зерен. Таким образом, зеренная структура после моделирования представлена мелкими зародышами рекристаллизации и нерекристаллизованными исходными зернами.

Наблюдаемое при моделировании формирование компоненты  $\{001\} \langle 100 \rangle$  (рис. 3, в, г) может быть связано с селективным ростом случайно ориентированных зародышей, возникающих в окрестностях зерен с ориентацией  $\{001\} \langle 110 \rangle$ . Такой рост возможен при наличии высокоугловых границ и низкой скорости накопления деформации, что реализуется для ориентаций  $\langle 001 \rangle \parallel \text{НН}$ . Таким сочетанием характеристик могут обладать зерна с ориентацией  $\langle 001 \rangle \parallel \text{НН}$ , в которых активизация скольжения повышается при отклонении  $\langle 110 \rangle$  от направления прокатки, но в то же время увеличивается угол разориентации с  $\{001\} \langle 110 \rangle$  и повышается мобильность границ. Тем не менее количественное воспроизведение экспериментальной текстуры (рис. 3, а, б) затруднено из-за отсутствия в модели механизмов собирательного роста и избирательного роста путем миграции специальных границ, реализующихся при горячей прокатке и последующем охлаждении [21].

Следует отметить, что разработанная модель направлена на воспроизведение основных тенденций текстурообразования и механизмов динамической рекристаллизации, тогда как количественные расхождения могут быть обусловлены отсутствием в модели механизмов собирательного роста и учета специальных границ и требуют более точной настройки параметров модели динамической рекристаллизации по экспериментальным кривым напряжения-деформации для температурного интервала 1400–1600 °С.

### Выводы

1. Разработана комбинированная модель Тейлора и клеточного автомата рекристаллизации, которая объединяет предсказание кристаллографической текстуры при пластической деформации с моделированием динамической рекристаллизации. Модель учитывает появление зародышей рекристаллизации на границах зерен и их рост за счет деформированной матрицы, позволяя вос-

производить основные закономерности формирования текстур при холодной и горячей прокатке и адекватно воспроизводит основные тенденции формирования текстур и динамической рекристаллизации.

2. Параметры модели откалиброваны по литературным данным статической рекристаллизации [18, 19]. Верификация показала хорошее соответствие рассчитанных по разработанной модели и экспериментальных кинетических кривых, при котором ошибка составила 6%.

3. Результаты моделирования горячей прокатки показали, что на ранних стадиях деформации зародыши рекристаллизации формируются на границах исходных зерен, причем они приобретают ориентации, отличные от соседних зерен, что обеспечивает высокую мобильность их границ. При этом зерна с ориентацией  $\langle 001 \rangle \parallel \text{НН}$  (нормальное направление в листе) почти не деформируются и вовлекаются в процесс рекристаллизации позднее, что объясняет сохранение этой компоненты на протяжении всей деформации. Зерна  $\langle 111 \rangle \parallel \text{НН}$  характеризуются более высокой энергией деформации в силу накопления дислокаций и чаще становятся центрами рекристаллизации, что приводит к ослаблению этой компоненты при горячей прокатке. Формирование компоненты  $\{001\}\langle 100 \rangle$  в рассчитанной структуре объясняется селективным ростом случайно ориентированных зародышей за счет зерен с ориентацией  $\{001\}\langle 110 \rangle$ , обусловленным высокой мобильностью границ и низкой скоростью накопления деформации.

### Благодарности / Acknowledgments

*Исследования выполнены в рамках программы стратегического академического лидерства «Приоритет-2030», проект СП-1.*

*The research was carried out within the framework of the strategic academic leadership program “Priority 2030”, project SP-1.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kestens L., Pirgazi H. Texture formation in metal alloys with cubic crystal structures. *Material Science and Technology* 32 1303–1315 (2016). DOI: 10.1080/02670836.2016.1231746
2. Perlovich Yu.A., Isaenkova M.G. Structural inhomogeneity of textured metallic materials. Monograph. Moscow: NRNU MEPhI, 2015. P. 396. (in Russian) [Перлович Ю.А., Исаенкова М.Г. Структурная неоднородность текстурованных металлических материалов. Монография М.: НИЯУ МИФИ, 2015. 396 с.]
3. Nemat-Nasser, S., Guo, W., & Liu, M. Experimentally-based micromechanical modeling of dynamic response of molybdenum. *Scripta materialia*, 40(7), 859–872 (1999). DOI: 10.1016/S1359-6462(99)00041-X
4. Wang B., Zhou Y., Xu L. et al. EBSD Analysis of Hot Deformation Behavior of Oxide-Doped Molybdenum Alloys. *Metals* 13, 238 (2023). DOI: 10.3390/met13020238
5. Souza Filho, I. R. D., Knabl, W., Kestler, H., & Sandim, H. R. Z. (2023). Strain-rate effects on the recrystallization of molybdenum-based MZ17 alloy. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 112, 106124. DOI: 10.1016/j.ijrmhm.2023.106124
6. Shirzad, K., & Viney, C.. A critical review on applications of the Avrami equation beyond materials science. *Journal of the Royal Society, Interface*, 20(203), 20230242 (2023). DOI: 10.1098/rsif.2023.0242
7. Churyumov, A. Y., & Pozdniakov, A. V. Simulation of microstructure evolution in metal materials under hot plastic deformation and heat treatment. *Physics of Metals and Metallography*, 121(11) (2020), 1064–1086. DOI: 10.1134/S0031918X20110034
8. Hallberg, H. Approaches to modeling of recrystallization. *Metals*, 1(1), 16–48 (2011). DOI: 10.3390/met1010016
9. Babu, K. A., Prithiv, T. S., Gupta, A., & Mandal, S. Modeling and simulation of dynamic recrystallization in super austenitic stainless steel employing combined cellular automaton, artificial neural network and finite element method. *Computational Materials Science*, 195, 110482 (2021). DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.110482
10. Shah V. et al. Coupling crystal plasticity and cellular automaton models to study meta-dynamic recrystallization during hot rolling at high strain rates. *Mater. Sci. Eng. A* 849: 143471 (2022). DOI: 10.1016/j.msea.2022.143471
11. Park J. et al. A fully coupled crystal plasticity-cellular automata model for predicting thermomechanical response with dynamic recrystallization in AISI 304LN stainless steel. *Mechanics of Materials* 167: 104248 (2022). DOI: 10.1016/j.mechmat.2022.104248



12. Bachmann F., Hielscher R., Schaeben H. Texture analysis with MTEX – Free and open source software toolbox // *Solid State Phenomena*. V. 160. P. 63-68 (2010). DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.160.63.
13. Kocks, U. F., Tomé, C. N., Wenk, H. R. *Texture and anisotropy: preferred orientations in polycrystals and their effect on materials properties* (Cambridge university press, 1998), pp. 390-407.
14. Raabe, D. Recovery and recrystallization: phenomena, physics, models, simulation. *Physical metallurgy*, 2291-2397 (2014). DOI: 10.1016/B978-0-444-53770-6.00023-X
15. Shirzad, K., & Viney, C. A critical review on applications of the Avrami equation beyond materials science. *Journal of the Royal Society, Interface*, 20(203), 20230242 (2023). DOI: 10.1098/rsif.2023.0242
16. Cai, M., Yang, H., Liu, X., Cai, J., Zhou, J., Sun, G., & Wang, K. Dynamic recrystallization behavior of molybdenum: Microstructure evolution and numerical simulation. *Materials Chemistry and Physics*, 131663 (2025). DOI: 10.1016/j.matchemphys.2025.131663
17. Read, W. T., & Shockley, W. J. P. R. Dislocation models of crystal grain boundaries. *Physical review*, 78(3), 275 (1950). DOI: 10.1103/PhysRev.78.275
18. Mroczek, T., Hoffmann, A., & Martin, U. Hardening mechanisms and recrystallization behaviour of several molybdenum alloys. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 24(4), 298-305 (2006). DOI: 10.1016/j.ijrmhm.2005.10.003
19. Primig, S., Leitner, H., Clemens, H., Lorch, A., Knabl, W., & Stickler, R. On the recrystallization behavior of technically pure molybdenum. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 28(6), 703-708 (2010). DOI: 10.1016/j.ijrmhm.2010.03.006
20. Li, L., Cai, Z., Wang, S., Wu, H., Feng, Y., Liu, Y., & Mao, X. Texture evolution with different rolling parameters of ferritic rolled IF steel. *Metals*, 11(9), 1341 (2021). DOI: 10.3390/met11091341
21. Lobanov, M. L., Danilov, S. V., Pastukhov, V. I., Averin, S. A., Khrunyk, Y. Y., & Popov, A. A. The crystallographic relationship of molybdenum textures after hot rolling and recrystallization. *Materials & Design*, 109, 251-255 (2016). DOI: 10.1016/j.matdes.2016.06.103