

05

## Прогнозирование эволюции кристаллографической текстуры прокатки листа из молибденового сплава ЦМ-2А с использованием моделирования

© В.П. Тютин, О.А. Крымская, М.Г. Исаенкова

Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“, Москва, Россия

E-mail: vp.tyutin@gmail.com

Поступило в Редакцию 16 декабря 2025 г.

В окончательной редакции 12 января 2026 г.

Принято к публикации 12 января 2026 г.

Проведено моделирование кристаллографической текстуры в молибденовом сплаве ЦМ-2А при различных схемах прокатки. По экспериментальным данным подобрано отношение критических сдвиговых напряжений в системах скольжения  $\{110\}\langle 111\rangle$  и  $\{112\}\langle 111\rangle$   $\tau_{(110)}/\tau_{(112)} = 1.1-1.2$ , при котором ошибка совпадения экспериментальных и расчетных функций распределения зерен по ориентациям минимальна. Показано, что в процессе продольной прокатки происходит изменение типа активных систем скольжения, в то время как при перекрестной преобладает система одного типа.

**Ключевые слова:** молибден, кристаллографическая текстура, холодная прокатка, моделирование, модель Тейлора.

DOI: 10.61011/PJTF.2026.09.62701.20603

Молибден и его сплавы относятся к числу наиболее востребованных конструкционных материалов для высокотемпературных приложений благодаря сочетанию высокой температуры плавления ( $2623^\circ\text{C}$ ), низкого коэффициента теплового расширения, высокой теплопроводности и стойкости к ползучести [1,2]. Наиболее широко используемыми сплавами на основе молибдена являются сплавы типа TZM ( $\text{Mo}-0.5\text{Ti}-0.08\text{Zr}-0.02\text{C}$ ) и ЦМ-2А (аналогичный по составу отечественный сплав), которые находят применение в аэрокосмической, ядерной и электронной промышленности, в частности, для изготовления элементов тепловых экранов, штампов, а также компонентов конструкций, работающих при температурах  $1200-1800^\circ\text{C}$ .

Одним из ключевых факторов, определяющих эксплуатационные характеристики листовых полуфабрикатов из молибденовых сплавов, является кристаллографическая текстура, формирующаяся в процессе термомеханической обработки. Острая текстура прокатки приводит к выраженной анизотропии механических свойств. Для сплавов TZM и ЦМ-2А это является серьезной проблемой, поскольку повышенная анизотропия может служить причиной расслоений и хрупкого разрушения при термомеханических нагрузках [3]. В частности, при штамповке изделий из молибденовых листов возникают фестоны, обусловленные особенностями кристаллографической текстуры и свидетельствующие о неоднородности пластической деформации [4]. Поэтому понимание закономерностей текстурообразования и разработка на их основе способов управления текстурой являются важными для повышения качества изделий из молибденовых сплавов.

Формирование текстуры деформации металлов с объемомцентрированной кубической (ОЦК) решеткой определяется действием систем скольжения  $\{110\}\langle 111\rangle$ ,  $\{112\}\langle 111\rangle$  и  $\{123\}\langle 111\rangle$ , однако критические сдвиговые напряжения скольжения в них зависят от температуры прокатки [3]. Экспериментально в ультратонком молибдене показано, что барьер Пайерлса для дислокаций в системе  $\{112\}\langle 111\rangle$  ниже, чем для  $\{110\}\langle 111\rangle$  (690 и 870 МПа соответственно) [5], что указывает на более легкую активацию системы  $\{112\}\langle 111\rangle$ . *Ab initio* расчеты барьеров Пайерлса для тугоплавких металлов с ОЦК-структурой, таких как W, Nb, Mo и Ta, показывают, что  $\{110\}\langle 111\rangle$  остается энергетически наиболее выгодной системой для скольжения [6].

Именно неоднородность активизации систем скольжения является причиной фестонообразования. Наличие в листе острой кубической текстуры типа  $\{001\}\langle 110\rangle$  снижает вероятность активизации систем скольжения типа  $\{110\}\langle 111\rangle$ , поэтому в направлении прокатки и поперечном направлении пластическое течение металла затруднено. При этом под углом  $45^\circ$  к направлению прокатки возможно скольжение в системах  $\{110\}\langle 111\rangle$  и  $\{112\}\langle 111\rangle$ , что и приводит к образованию выступов — фестонов. Чтобы избежать их образования, необходимо добиться равномерного распределения нормалей  $\{110\}$  в плоскости листа [4].

Эффективным инструментом выявления закономерностей формирования текстуры в ходе прокатки и оптимизации параметров деформации является компьютерное моделирование, которое проводится на основе кристаллографических законов пластической деформации. Наиболее распространенным подходом моделирования текстуры при пластической деформации является модель

Тейлора, предполагающая равенство макроскопического тензора деформации для всех зерен рассматриваемого поликристалла [7]. Эта модель позволяет определять переориентацию отдельных кристаллитов, предсказывать образование текстуры, для металлов с кубической сингонией [8] демонстрирует хорошее совпадение теоретических и экспериментальных данных [9], что позволяет использовать ее в качестве эффективного инструмента анализа схемы деформации по текстуре.

Настоящая работа направлена на адаптацию модели пластической деформации в программном обеспечении MTEX применительно к сплаву ЦМ-2А, а также ее верификацию по экспериментальным результатам холодной прокатки молибденовых листов.

Экспериментальные образцы сплава ЦМ-2А получены холодной прокаткой из исходного образца 0 толщиной 0.8 mm продольно вдоль исходного направления прокатки (НП<sub>0</sub>) (образец 1), перекрестно с сохранением НП<sub>0</sub> (образец 2), а также продольно (образец 3) и перекрестно (образец 4) под углом 45° к НП<sub>0</sub>. Прокатку проводили со скоростью деформации  $\dot{\epsilon} = 2-5 \text{ s}^{-1}$  до достижения степени обжатия  $\epsilon = 75\%$ , что соответствует истинной степени деформации  $\epsilon = 1.39$ . Структурное состояние прокатанных листов оценивали по дифракционным спектрам, полученным с использованием рентгеновского дифрактометра D8 Discover, оснащенного линейным детектором LynxEye и трубкой с  $\text{CuK}\alpha$ -излучением. Рентгеновские дифракционные спектры с поверхности образцов (нормальное направление, НН) свидетельствуют о присутствии единственной фазы ОЦК Мо. По полученным спектрам (рис. 1) определяли угловые положения линий (200), (220) и (222) для съемки неполных прямых полюсных фигур, по которым восстанавливали функцию распределения ориентаций (ФРО). Основные текстурные компоненты, наблюдаемые во всех образцах:  $\{001\}\langle 110\rangle$ ,  $\{001\}\langle 100\rangle$  и  $\langle 111\rangle\|\text{НН}$  ( $\gamma$ -волокно). По ФРО оценивали доли текстурных компонент [10]:

$$V = \int_c^{c+r} f(g) dg,$$

где  $c$  — положение центра текстурной компоненты (в градусах),  $r$  — угол раствора конуса в пространстве эйлеровых углов, внутри которого проводится суммирование,  $r = 5^\circ$ .

Ошибка моделирования определяли по совпадению расчетной  $f_{mod}(g)$  и экспериментальной  $f_{exp}(g)$  ФРО в статистически значимых областях ( $f(g) > 0.5$ ):

$$E = \frac{\int |f_{exp}(g) - f_{mod}(g)| dg}{\int f_{exp}(g) dg}.$$

Для моделирования холодной прокатки использовали программное обеспечение с открытым исходным кодом MTEX.

Условия прокатки задавались тензором деформации  $F_{\parallel}$ . При перекрестной прокатке проводилось моделирование деформации с чередованием тензоров деформации прямой  $F_{\parallel}$  и поперечной  $F_{\perp}$  прокатки. Выбранные условия прокатки являются упрощением, которое не учитывает неоднородность деформации по толщине листа, однако допустимы в рамках настоящей работы, поскольку позволяют задавать изменение направления прокатки при моделировании.

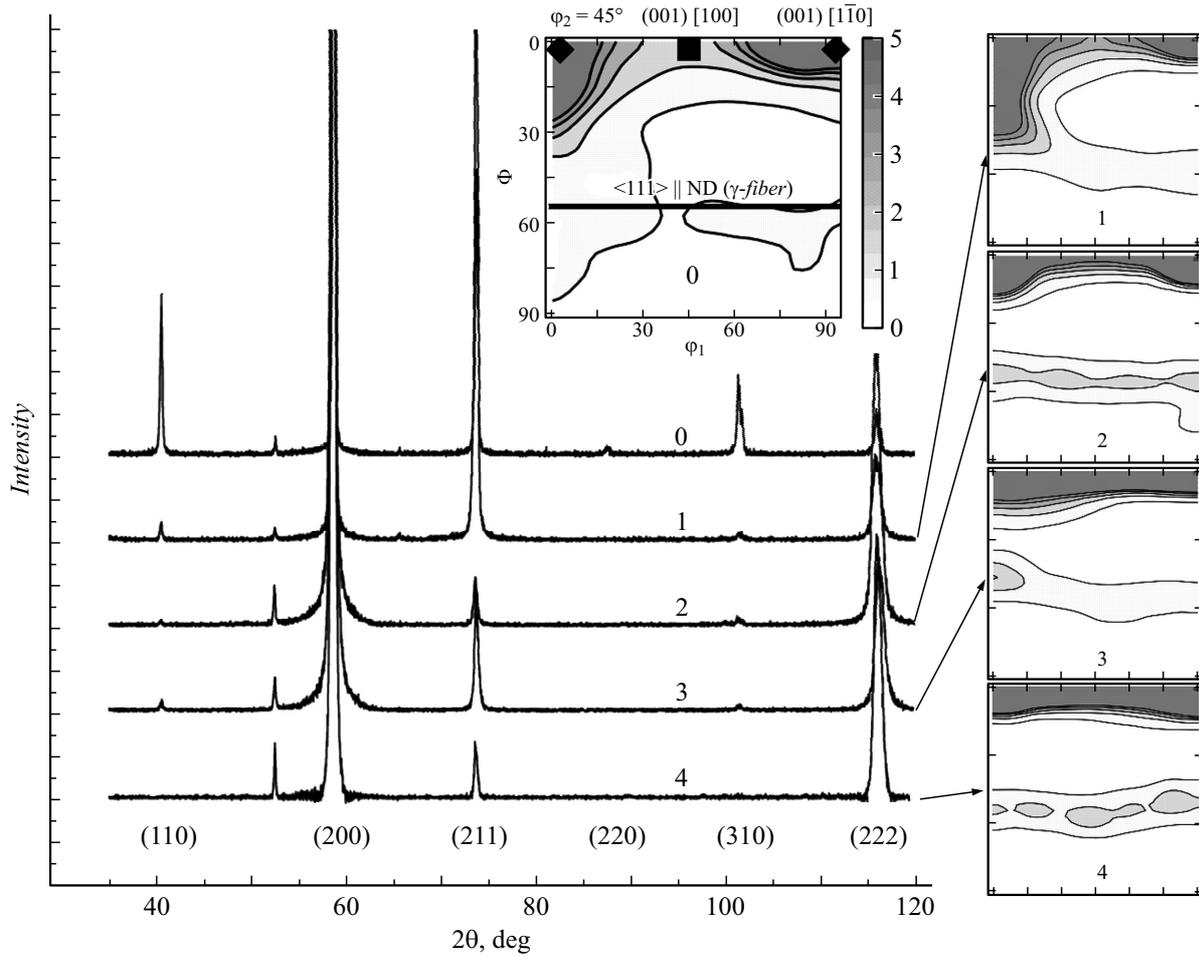
$$F_{\parallel} = \epsilon_i \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad F_{\perp} = \epsilon_i \cdot \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

где  $\epsilon_i$  — истинная степень деформации за проход.

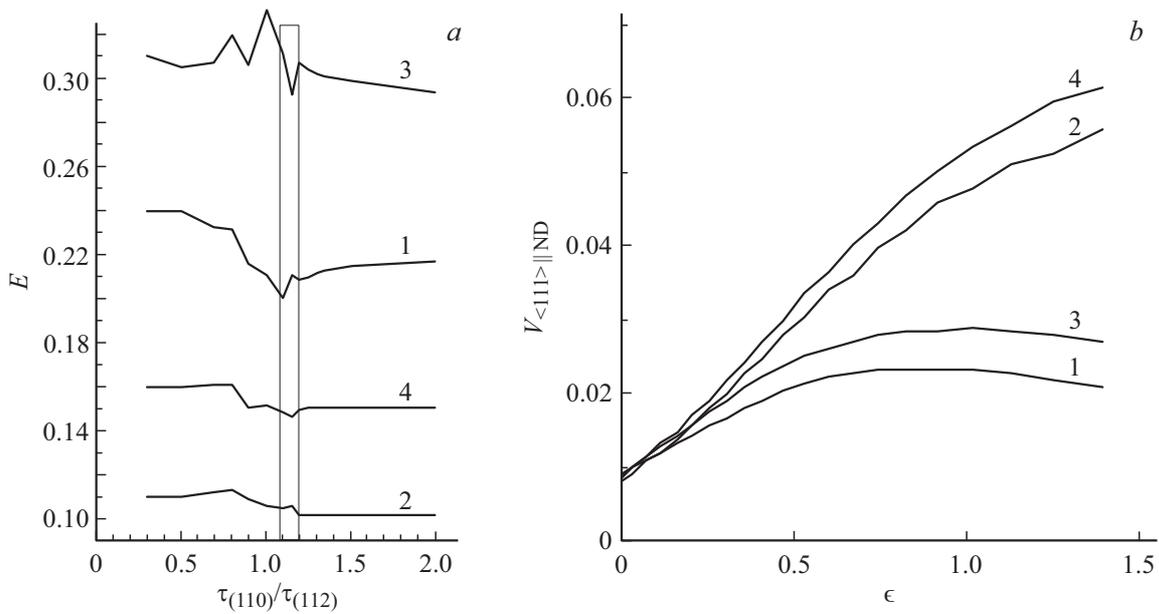
Текстура прокатанных образцов по различным схемам деформации представлена на рис. 1 в виде сечений ФРО при  $\varphi_2 = 45^\circ$ . Экспериментальные результаты использовались для верификации модели и подбора соотношения критических сдвиговых напряжений  $\tau$ . Проведено моделирование текстурообразования по схемам деформации, соответствующим схемам для образцов 1–4, с варьированием соотношения  $\tau_{(110)}/\tau_{(112)}$  в пределах от 0.5 до 2 (рис. 2, а). Учет систем скольжения  $\{123\}\langle 111\rangle$  не приводит к изменению текстуры в интервале  $\tau_{(123)}$  от  $0.5\tau_{(112)}$  до  $3\tau_{(112)}$  при достижении степени обжатия 1.39, и в дальнейших расчетах эта система скольжения не рассматривается. Для случаев продольной прокатки наблюдается наибольшая ошибка моделирования, что можно объяснить особенностями вычисления ошибки: в случае острой текстуры (характерной для перекрестной прокатки — образцы 2 и 4) ошибка мала, так как в расчет берутся только статистически значимые области ФРО ( $f(g) > 0.5$ ). В случае продольной прокатки наблюдается размытие текстуры, т.е. образуются области углов Эйлера, в которых невязка  $|f_{exp}(g) - f_{mod}(g)|$  невысока, но доля таких областей довольно велика. Тем не менее в них также наблюдаются характерные минимумы, соответствующие наилучшему совпадению экспериментальной и смоделированной ФРО.

Наилучшее совпадение результатов моделирования с экспериментом достигается при соотношении  $\tau_{(110)}/\tau_{(112)} = 1.1-1.2$ , что качественно согласуется с результатами, полученными в работе [5]. Отклонение от полученного в литературе соотношения барьеров Пайерлса  $\sigma_{(110)}/\sigma_{(112)} \approx 1.26$  можно объяснить тем, что литературные данные приведены для Мо высокой чистоты, а в настоящей работе исследуется сплав ЦМ-2А [5].

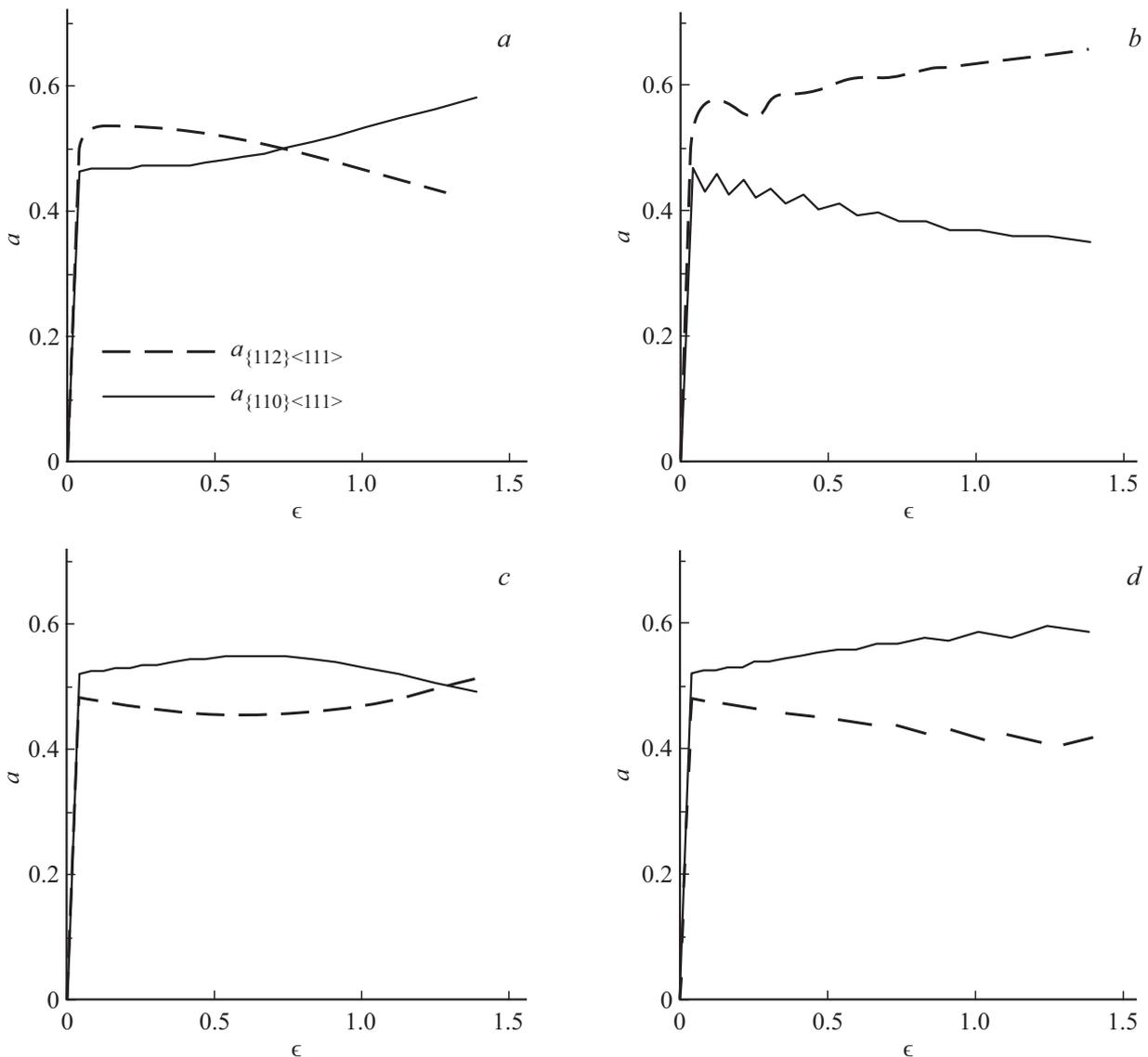
При моделировании прокатки с выбранным соотношением сдвиговых напряжений  $\tau_{(110)} = 1.1\tau_{(112)}$  обнаружено, что в процессе деформации по всем схемам на начальном этапе происходит рост доли компоненты  $\gamma$ -волокна (рис. 2, б). Различия в дальнейшем характере формирования этой компоненты определяются активностями систем скольжения  $\{110\}\langle 111\rangle$  ( $a_{\{110\}\langle 111\rangle}$ ) и  $\{112\}\langle 111\rangle$  ( $a_{\{112\}\langle 111\rangle}$ ). В образцах 1 и 2, прокатанных продольно и перекрестно относительно НП<sub>0</sub>,  $a_{\{110\}\langle 111\rangle}$



**Рис. 1.** Рентгеновские дифракционные спектры (в скобках указаны индексы отражающих плоскостей) и сечения ФРО для  $\phi_2 = 45^\circ$  исследованных экспериментальных образцов (цифрами 0–4 обозначены номера образцов). ND — нормальное направление.



**Рис. 2.** Результаты моделирования пластической деформации молибденовых листов. *a* — изменение ошибки моделирования  $E$  при варьировании отношения критических сдвиговых напряжений  $\tau_{(110)}/\tau_{(112)}$ . Выделен интервал  $\tau_{(110)}/\tau_{(112)}$  с наименьшей ошибкой. *b* — зависимость доли компоненты  $V_{\langle 111 \rangle \parallel \text{ND}}$  ( $\gamma$ -волокна) от истинной степени деформации. Цифрами 1–4 обозначены номера образцов.



**Рис. 3.** Результаты моделирования пластической деформации молибденовых листов. *a–d* — зависимости активностей систем скольжения  $a_{\{112\}\langle 111\rangle}$  и  $a_{\{110\}\langle 111\rangle}$  от истинной степени деформации  $\epsilon$  для образцов 1–4 соответственно.

ограничена малым фактором Шмида для этой системы в зернах с текстурной компонентой  $\{001\}\langle 110\rangle$ , поэтому на начальном этапе деформации  $a_{\{110\}\langle 111\rangle} < a_{\{112\}\langle 111\rangle}$  (рис. 3, *a, b*). Однако продольная прокатка (образец 1) приводит к размытию компоненты  $\{001\}\langle 110\rangle$ , что способствует активизации скольжения в системе  $\{110\}\langle 111\rangle$  (рис. 2, *b*), и формирование  $\gamma$ -волокна прекращается при достижении  $\epsilon = 0.7–0.8$ . Перекрестная прокатка (образец 2), наоборот, препятствует размытию компоненты  $\{110\}\langle 111\rangle$ , и  $a_{\{110\}\langle 111\rangle}$  монотонно снижается при одновременном монотонном росте компоненты  $\gamma$ -волокна (рис. 2, *b*).

Образцы 3 и 4, прокатанные под углом  $45^\circ$  относительно НПО, характеризуются большей  $a_{\{110\}\langle 111\rangle}$ . Это объясняется тем, что при повороте направления прокатки компонента  $\{001\}\langle 110\rangle$  становится  $\{001\}\langle 100\rangle$ ,

для которой фактор Шмида системы  $\{110\}\langle 111\rangle$  уже не стремится к нулю. Поэтому перекрестная прокатка (образец 4) сопровождается ростом  $a_{\{110\}\langle 111\rangle}$  и увеличением доли  $\gamma$ -волокна. Продольная прокатка (образец 3), как и в случае образца 1, также сопровождается прекращением формирования компоненты  $\gamma$ -волокна и снижением  $a_{\{110\}\langle 111\rangle}$  при достижении  $\epsilon = 0.7–0.8$ .

По результатам моделирования определена величина среднего накопленного сдвига в зернах различных текстурных компонент: их соотношения для  $\gamma$ -волокна,  $\{001\}\langle 100\rangle$  и  $\{001\}\langle 110\rangle$  составили  $(1.52–1.60):(1.13–1.16):1$  соответственно. Это подтверждает, что зерна, образующие  $\gamma$ -волокно, являются наиболее нагартованными, а зерна компоненты  $\{001\}\langle 110\rangle$  испытывают меньшую деформацию из-за подавления систем скольжения  $\{110\}\langle 111\rangle$ .

Таким образом, по результатам сопоставления экспериментальных и расчетных данных получено следующее.

1. Для прогнозирования кристаллографической текстуры холодной прокатки листов из сплава ЦМ-2А использована модель пластической деформации Тейлора. Установлено, что в результате варьирования соотношения критических сдвиговых напряжений  $\tau_{110}$  и  $\tau_{112}$  для систем скольжения  $\{110\}\langle 111 \rangle$  и  $\{112\}\langle 111 \rangle$  соответственно наилучшее совпадение расчетных и экспериментальных функций распределения зерен по ориентациям достигается при  $\tau_{110}/\tau_{112} = 1.1-1.2$ , в этом случае наблюдается качественное и количественное совпадение для всех рассмотренных в работе схем прокатки. Полученные результаты позволяют рекомендовать разработанную модель для разных технологических схем холодной деформации ЦМ-2А с различной исходной ориентацией зерен.

2. Экспериментально и расчетным методом показано, что продольная и поперечная холодные прокатки листов из молибденового сплава ЦМ-2А с кристаллографической текстурой  $\{001\}\langle 110 \rangle$  относительно исходного направления прокатки приводят к усилению этой компоненты при степени обжатия 1.39. При изменении направления прокатки на  $45^\circ$  относительно НПО возможно получение аксиальной текстуры с осью  $\langle 001 \rangle \parallel \text{HN}$ , что обеспечивает необходимую для последующей штамповки изотропию в плоскости листа по сравнению с острой кристаллографической текстурой  $\{001\}\langle 110 \rangle$ .

3. Выявлено, что поперечная прокатка до степени деформации 1.39 ведет к повышению доли компоненты  $\langle 111 \rangle \parallel \text{HN}$ , в то время как при продольной прокатке ее формирование прекращается при достижении степени деформации 0.7–0.8, что связано с ослаблением активности систем скольжения  $\{112\}\langle 111 \rangle$  при прокатке в исходном направлении и систем  $\{110\}\langle 111 \rangle$  при прокатке под углом  $45^\circ$  к этому направлению.

## Финансирование работы

Исследования выполнены в рамках программы стратегического академического лидерства „Приоритет-2030“ (проект СП-1).

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] R. Su, L. Liu, J.H. Perepezko, *Int. J. Refract. Met. Hard Mater.*, **113**, 106199 (2023). DOI: 10.1016/j.ijrmhm.2023.106199
- [2] P.M. Cheng, C. Yang, P. Zhang, J.Y. Zhang, H. Wang, J. Kuang, J. Sun, *J. Mater. Sci. Technol.*, **130**, 53 (2022). DOI: 10.1016/j.jmst.2022.04.043
- [3] L.A.I. Kestens, H. Pirgazi, *Mater. Sci. Technol.*, **32**, 1303 (2016). DOI: 10.1080/02670836.2016.1231746
- [4] K.K. Park, J.H. Cho, H.N. Han, H.C. Lee, K.H. Oh, *Key Eng. Mater.*, **233-236**, 567 (2003). DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.233-236.567
- [5] L. Hollang, D. Brunner, A. Seeger, *Mater. Sci. Eng. A*, **319**, 233 (2001). DOI: 10.1016/S0921-5093(01)01002-4
- [6] X.C. Zhang, S. Cao, L.J. Zhang, R. Yang, Q.M. Hu, *J. Mater. Res. Technol.*, **22**, 3413 (2023). DOI: 10.1016/j.jmrt.2022.12.162
- [7] U.F. Kocks, C.N. Tomé, H.R. Wenk, *Texture and anisotropy: preferred orientations in polycrystals and their effect on materials properties* (Cambridge University Press, 2000), p. 390–407.
- [8] J. Galán-López, L.A. Kestens, *Metallurg. Mater. Trans. A*, **49**, 5745 (2018). DOI: 10.1007/s11661-018-4869-8
- [9] О.А. Крымская, М.Г. Исаенкова, Р.А. Минушкин, Ю.А. Романова, В.П. Тютин, С.В. Данилов, *Металлы*, № 2, 24 (2025). DOI: 10.31857/S0869573325022433
- [10] F. Bachmann, R. Hielscher, H. Schaeben, *Solid State Phenomena*, **160**, 63 (2010). DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.160.63