

再结晶和外力场下第二相析出的相场法模拟^{*}

宗亚平[†] 王明涛 郭 巍

(东北大学材料各向异性与织构教育部重点实验室, 沈阳 110004)

(2008 年 12 月 19 日收到, 2009 年 2 月 19 日收到修改稿)

在讨论相场法模拟基本方程的基础上, 提出了晶界范围宽度的新概念, 解释了相场模拟模型中有序化参数梯度范围的物理意义, 论证了晶界范围不是晶界原子错排的宽度, 而是界面能和界面元素偏析存在范围的观点. 建立了一个模拟合金再结晶的相场模型, 提出了一系列法则来获得模型中各参数的物理真实值, 以 AZ31 镁合金为例, 实现了再结晶过程晶粒长大的真实时间和空间的模拟, 通过与试验数据的对比证明了模型的有效性. 此外, 还列举了相场法模拟 Ti-25Al-10Nb 合金中 α_2 相在外力场作用下析出过程的一系列有趣的新结果, 讨论了外力场对第二相析出的重要影响和机理以及模拟结果对合金开发潜在的重要指导意义.

关键词: 相场法, 再结晶, 析出, 外力场

PACC: 6470, 6185, 8140E

1. 引 言

相场法已经成功地应用于很多组织演变过程, 例如马氏体相变^[1]、凝固过程^[2]以及第二相析出^[3,4]等. 尽管目前相场法模拟基本是定性的研究, 但是相场法很适合在工业应用的尺度内进行材料组织的模拟, 并且在几十年的发展中显示出了其可以模拟组织真实时空演变的潜力.

文献 [5] 用计算相图的方法和数据库计算了局域自由能密度函数, 使自由能表达实现真实值. 最近, Wen 等^[6]将相场模型应用到工程中, 用该法模拟某一热处理过程的材料组织演变过程, 这是相场法首次用在工业应用范围内模拟组织的真实时空演变过程. 然而, 该模型处理的是一个扩散控制的过程, 将界面迁移率设计成任意值, 这种假设显然不适合晶粒长大过程的模拟. 到目前为止, 还没有对界面控制过程进行真实时空模拟的相场法模型工作报道. 本文对该过程建立相场模型, 确定模型中各参量的物理意义和实际取值, 提出一套取值的法则, 实现工业尺度真实时空的模拟.

研究表明, TiAl 基合金典型的 α_2/γ 全片层组织具有较高的断裂韧性和抗蠕变性能, 有效促进了对该合金的研究. 有关 Ti-25Al-10Nb 合金的研究中还没有实现全片层状组织的报道, 我们认为如果施加一个适量的外应变, 充分发挥外应力大小和方向综合的促进作用, 控制 α_2 相数量和形态, 有可能获得 α_2 全片层状组织. 因此, 本文将用相场法模拟外应力场的作用, 建立采用应变等温处理控制材料显微组织的理论, 证明和处理参数选取的参考原则及数值.

2. 再结晶模型与模拟结果

2.1. 模型基本方程

相场法是基于热力学和动力学的一种模拟方法, 材料的微观组织随时间的演化可以通过分别解 Ginzburg-Landau 方程和 Cahn-Hilliard 扩散方程而得到^[7],

$$\frac{\partial \eta_q(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_q(\mathbf{r}, t)} \quad (q = 1, 2, \dots, m), \quad (1)$$

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 50771028, 50471024)资助的课题.

[†] E-mail: ypzong@mail.neu.edu.cn

$$\frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta c(\mathbf{r}, t)}, \quad (2)$$

式中, $\eta_q(\mathbf{r}, t)$ 是长程有序化参数, $c(\mathbf{r}, t)$ 是成分场变量, L 和 M 分别是结构弛豫和化学迁移率, F 是系统的自由能. 各向同性的单相系统中 $F(t)$ 的一个合理表达式为^[7]

$$F(t) = \int \left[f_0(c, \eta_1(\mathbf{r}, t), \eta_2(\mathbf{r}, t), \dots, \eta_n(\mathbf{r}, t)) + \frac{K_2}{2} \sum_{q=1}^n (\nabla \eta_q(\mathbf{r}, t))^2 \right] d\mathbf{r}, \quad (3)$$

式中, f_0 是局域自由能密度函数, K_2 是梯度能系数.

本文以 AZ31 镁合金板材为例进行模拟, 并且以文献 8 中的试验数据作为标准与模拟结果进行比较以证明模型的有效性, 因此局域自由能密度函数建议表示如下:

$$f_0 = A + \frac{A_1}{2} (c(\mathbf{r}, t) - c_1)^2 + \frac{A_2}{4} (c(\mathbf{r}, t) - c_1)^4 - \frac{B_1}{2} (c(\mathbf{r}, t) - c_1)^2 \sum_{q=1}^n \eta_q^2(\mathbf{r}, t) + \frac{B_2}{4} \sum_{q=1}^n \eta_q^4(\mathbf{r}, t) + \frac{K_1}{2} \sum_{q=1}^n \sum_{p \neq q} \eta_q^2(\mathbf{r}, t) \eta_p^2(\mathbf{r}, t), \quad (4)$$

式中, c 是合金成分; c_1 是一定温度下自由能成分曲线最低点的成分, 其值在需要模拟的 4 个温度下分别为 0.17, 0.2, 0.2 和 0.2; A, A_1, A_2, B_1 和 B_2 均为拟合常数, 以下将逐一讨论确定.

为了满足 f_0 在 $\eta = 1$ 处的最小值, 方程 (4) 对 η 的导数应该为零, 于是得到

$$B_1(c - c_1)^2 = B_2. \quad (5)$$

在方程 (4) 中, 当 $\eta_p^2 = 1$ 并且 $\sum_{q \neq p} \eta_q^2 = 0$ 时, f_0 代表再结晶后基体的自由能; 当 $\sum_{q=1}^n \eta_q^2 = 0$ 时, f_0 则代表再结晶前冷加工形变基体的自由能. 于是再结晶过程中释放的储存能 E 可以表示为

$$E = f_0\left(\sum_{q=1}^n \eta_q^2 = 0\right) - f_0\left(\eta_p^2 = 1, \sum_{q \neq p} \eta_q^2 = 0\right) = \frac{B_1}{2} (c - c_1)^2 - \frac{B_2}{4}. \quad (6)$$

储存能是再结晶过程的驱动力, 以缺陷 (如位错) 的

形式存在于材料中并在再结晶过程中释放^[9], 根据文献 [10], 储存能随冷轧金属变形量的增加而增加, 当变形量达到一定程度 (0.2) 后储存能将变为一个常数值, 由于本试验合金的变形量超过了临界值, 故本文中应变储存能取 $0.54 \text{ J} \cdot \text{g}^{-1}$ 即 $E = 12.8 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ [10].

将 $E = 12.8 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ 代入到 (5) 和 (6) 式中, 可以得到 B_1 和 B_2 , 由于本模型假设储存能是与再结晶温度无关的常数, 于是 B_1 和 B_2 也是独立于温度的参数. 计算结果见表 1.

在 Mg-Al-Zn 合金系统中, 不同温度下的自由能成分曲线 (图 1(a)) 可以通过软件 Thermocalc 获得, 于是参数 A, A_1 和 A_2 可以通过拟合方程 (4), 令 $f_0(\eta_p^2 = 1, \sum_{q \neq p} \eta_q^2 = 0)$ 与实际自由能成分曲线相同而得到, 拟合后的曲线见图 1(b), 最佳拟合结果见表 1.

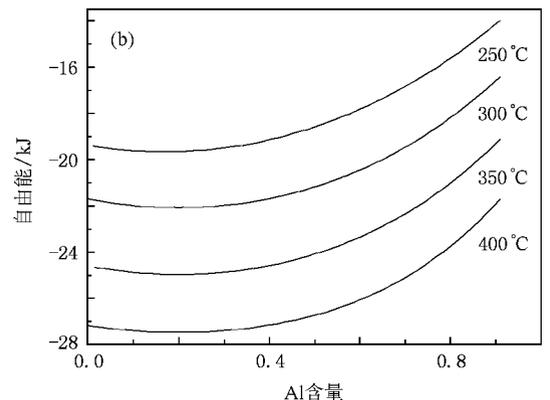
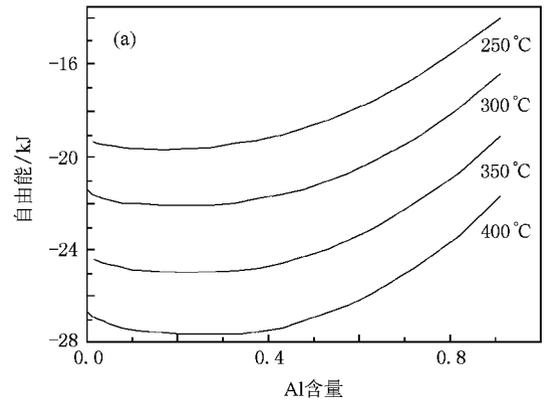


图 1 AZ31 镁合金在 250, 300, 350 和 400 °C 的自由能成分曲线 (a) 通过软件 Thermocalc 获得的实验数据曲线 (b) 通过方程 (4) 对 (a) 图进行数据拟合得到的曲线

表 1 方程(4)中参数 A, A_1, A_2, B_1 和 B_2 在各模拟温度下的取值

温度/°C	$A/\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	$A_1/\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	$A_2/\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	$B_1/\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	$B_2/\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$
250	-19.7	22.1	5.2	2.65	51.2
300	-22.1	21.1	13.0	1.79	51.2
350	-25.0	20.6	18.3	1.79	51.2
400	-27.5	16.8	31.5	1.79	51.2

2.2. 晶界作用域

设定局部自由能既是成分的函数也是成分梯度的函数,因此采用有序化参数的梯度项表示扩散界面,是相场法能够模拟显微组织演变的关键.但是,有序化参数具有部分唯象的特点,界面有序化参数变化的距离一直没有明确的物理意义,导致梯度参数只能估计相对取值,是目前相场法固态相变模拟

只能实现相对时间和空间尺寸粗略估算的原因^[1,7].因此,本研究首先在一定范围内对梯度系数 K_1 和 K_2 任意赋值,通过比较模拟来确定它们与晶界特征的关系,设法得出它们的物理意义,模拟结果如图 2(a)所示.图 2(b)为根据图 2(a)与方程(4)确定的 η 与成分的关系得到的晶界处成分变化曲线.从图 2 可以看出,随温度的降低晶界处的偏析程度增加,这与已有的理论一致.

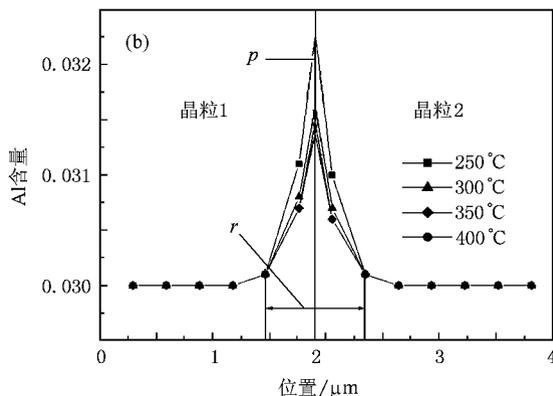
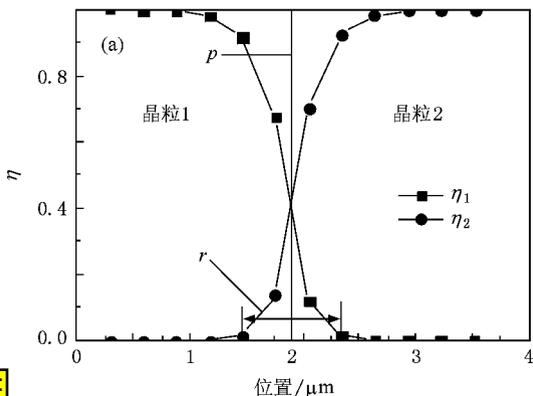


图 2 有序化参数及成分在晶界处的变化 p 表示晶界位置, r 表示晶界区域.(a)晶界处有序化参数的变化,(b)晶界处不同温度下成分的变化

由图 2 的结果,我们提出了晶界作用域的新概念,也就是图中的 r ,这是相场法有序化参数在界面处 0—1 变化的范围,为其赋予了具体的物理意义.晶界作用域表示界面能在垂直界面方向的分布范围,也对应合金元素界面偏析的范围,与界面结构几何宽度是完全不同的概念.而传统认为有序化参数变化范围是界面结构宽度或毛细现象的表面尺度^[1-4],要求模拟网格尺度为原子尺度,具有第一性原理模拟的缺陷,失去了相场法存在的意义.因此,目前相场法模拟只是尽量减小网格尺寸,导致了巨大的计算量,同时回避了界面作用域的物理意义,是相场法模拟存在的严重问题^[1,7].本研究提出的晶界作用域概念,为相场法在大尺寸网格模拟条件下可以模拟出真实显微组织形貌的事实^[3,7],提供了解释的理论依据.

进一步模拟表明,晶界作用域的宽度和晶界能是由梯度参数 K_1 和 K_2 的取值所决定.模拟研究的结果如图 3 所示.图 3(a)表明,当 $K_1 \in [1.80 \times 10^2 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}, 12.8 \times 10^2 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}]$ 时,晶界作用域的宽度基本由 K_2 决定.如果以小角度晶界位错模型为例,晶界作用域应为 1000 个原子距离以上,通常金相照片表明晶界作用域约为 1—2 μm ,于是本文取 $K_2 = 3.55 \times 10^{-12} \text{ Jm}^2\cdot\text{mol}^{-1}$,以保证模拟结果的晶界作用域宽度为 1.172 μm (4 个格子),即与实际宽度相符.根据图 3(b)所示, K_1 和 K_2 均对晶界能有影响,镁合金再结晶后的界面能理论值为 0.5—0.6 $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$ ^[11],本模型中则取 0.55 $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$.由于 K_2 已经确定,于是 K_1 可以唯一地确定为 $4.0 \times 10^2 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}$.

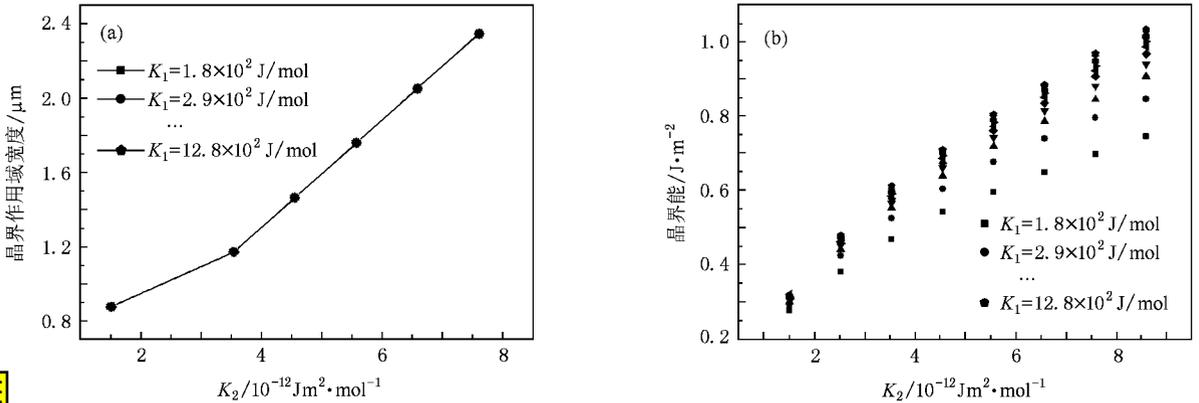


图3 晶界作用域宽度和界面能与系数 K_1 和 K_2 的关系 (a)作用域宽度与 K_1, K_2 的关系 (b)界面能与 K_1, K_2 的关系

2.3. 界面迁移率

在方程(1)中 L 是与界面迁移率有关的参数, 并且与温度的关系符合阿伦尼乌斯公式的形式^[12]

$$L = L_0 e^{-\frac{Q}{RT}}, \quad (7)$$

式中 L_0 是常数, R 是气体常数, Q 是激活能. 到目前为止在再结晶和晶粒长大过程中, Q 的物理意义和真实取值并不是十分清楚, 很多理论认为第二相粒子或偏析原子对晶界移动的拖曳是该过程的主要影响因素^[12], 然而本模型模拟的是单相合金没有第二相析出, 故本文建议用外加元素的偏析激活能作为 Q , 凝固的相场法模拟也表明界面处成分偏析十分显著^[13], 对界面能动性起重要作用.

偏析激活能 V 可以通过公式 $V = 8\pi r^3 G \delta^2$ 计算^[12] 其中 r 是基体原子半径, G 是剪切模量, $\delta = \left| \frac{r - r_F}{r} \right|$, r_F 是与基体原子半径相差较大的主要溶质原子的半径, 本文中 $r_F = r_{Zn}$. 由 $r = 1.59 \times 10^{-10} \text{ m}$, $r_{Zn} = 1.33 \times 10^{-10} \text{ m}$ ^[12], $G = 17 \text{ GPa}$, 可得平均每个原子的激活能 V 为 $4.49 \times 10^{-20} \text{ J}$, 相当于 $Q = 27.6 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$.

(7)式中的 L_0 无法直接从理论上推导得出, 本文则通过 $400 \text{ }^\circ\text{C}$ 时实验所得的晶粒尺寸时间曲线与模拟曲线拟合得到 L_0 , 当 $L = 2.37 \times 10^{-7} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1} \text{J}^{-1}$ 时, 模拟结果与实验结果符合最好, 因此 $L_0 = 3.29 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1} \text{J}^{-1}$.

2.4. 模拟结果与实验结果比较

模拟与实际的显微组织形貌示于图4. 结果表

明, 再结晶显微组织形貌模拟结果与实验观察结果符合得很好. 图5给出了晶粒尺寸随时间变化的实际与模拟结果的比较, 从图5可以看出, $400 \text{ }^\circ\text{C}$ 的实验结果(本模型中用来标定方程(7)中的 L_0)与模拟值符合得很好, 同时可以看到在 350 和 $300 \text{ }^\circ\text{C}$ 仍然符合得很好, 这表明本模型可以很好地模拟再结晶过程. 特别是有关方程(7)中激活能的假设可以认为是正确的. 然而, 在 $250 \text{ }^\circ\text{C}$ 的实验结果与模拟结果有较大差别, 表明在低温下激活能机理发生了改变. 250 和 $300 \text{ }^\circ\text{C}$ 的实验值基本重合, 表明在 $300 \text{ }^\circ\text{C}$ 下迁移率基本相等.

本模型的成功不仅在于模拟了 AZ31 镁合金, 更重要的是提出了一系列法则来确定模型中参数的物理意义以及实际取值, 从而完成材料组织真实时空的模拟. 只要具有动力学和热力学数据, 例如偏析激活能、自由能成分曲线等, 本模型以及法则可很容易地移植到其他合金系统中, 利用本模型模拟得出的参数值也可以直接用于类似的合金系统. 通过本模型模拟不仅可以提供该合金控制工艺的参考数据, 更重要的是确定微观组织演化的机制, 从而加深对合金物理过程和合金特性的理解.

3. 外应力场对显微组织的影响

3.1. 模 型

模拟外应力场作用模型与前面再结晶模型基本相同, 但是自由能密度函数由于合金系统的变化也重新建议为^[6]

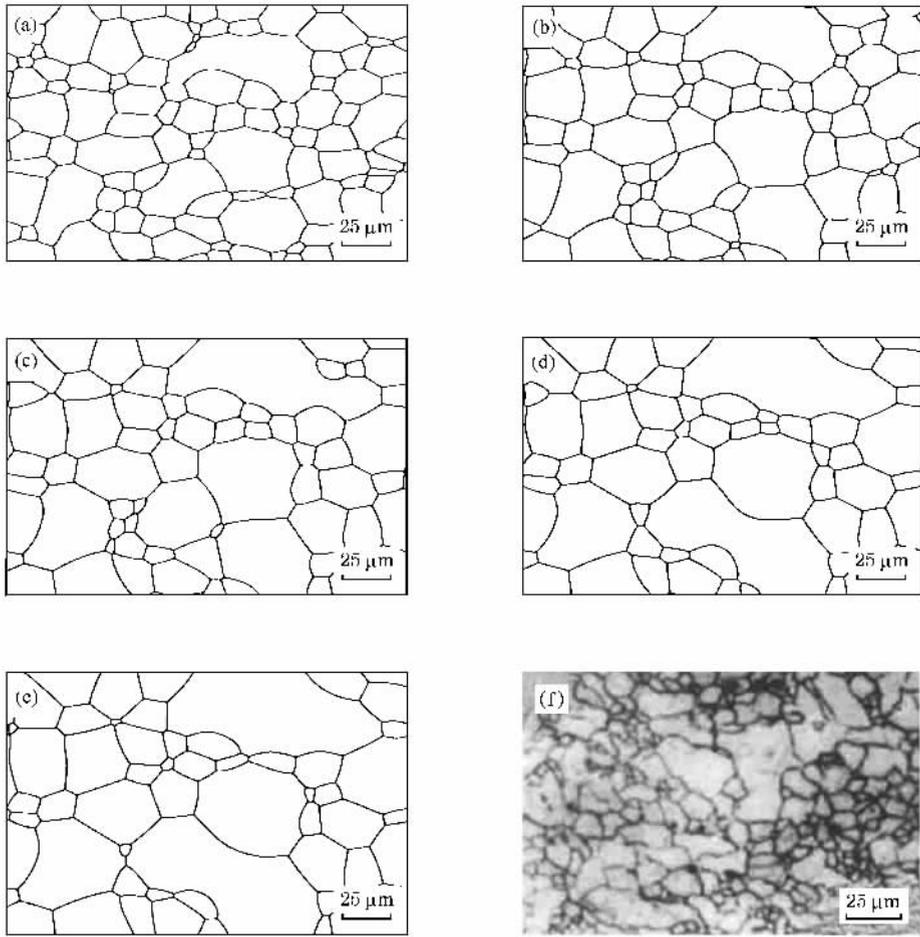


图4 模拟与实际组织图的比较 (a)(b)(c)(d)和(e)分别为 400 °C 时 10, 30, 50, 70 和 90 min 时的模拟组织图 (f)为 400 °C 时 30 min 的实际组织图

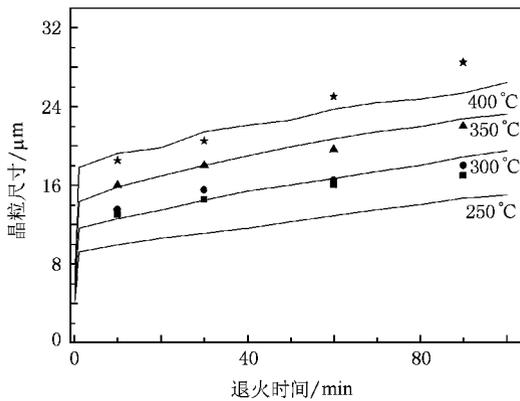


图5 晶粒尺寸随退火时间变化的模拟结果及实验结果 曲线为模拟结果 数据点为文献 [8] 的实验结果

$$f_a = \frac{a_1}{2}(c - c_1)^2 + \frac{a_2}{2}(c_2 - c) \sum_{p=1}^3 \overline{\eta_p^2} - \frac{a_3}{4} \sum_{p=1}^3 \overline{\eta_p^4} + \frac{a_4}{6} \left(\sum_{p=1}^3 \overline{\eta_p^2} \right)^3 \quad (8)$$

根据文献 [6] 对于 Ti-25Al-10Nb 合金 (8) 式中的 $a_1 = 100$, $a_2 = 24$, $a_3 = 22$, $a_4 = 27.8$, $c_1 = 0.15$, $c_2 = 0.245$.

要研究外应力场作用 (3) 式的体系自由能中必须加上应变能项. 根据 Khachaturyan 的弹性理论, 应变能 E_{el} 可以表示为 [6]

$$E_{el} = \frac{V}{2} C_{ijkl} \overline{\epsilon_{ij}} \overline{\epsilon_{kl}} - VC_{ijkl} \overline{\epsilon_{ij}} \sum_{p=1}^3 \overline{\epsilon_{kl}^0(p)} \overline{\eta_p^2(\mathbf{r})} + \frac{V}{2} C_{ijkl} \sum_{p=1}^3 \sum_{q=1}^3 \overline{\epsilon_{ij}^0(p)} \overline{\epsilon_{kl}^0(q)} \overline{\eta_p^2(\mathbf{r})} \overline{\eta_q^2(\mathbf{r})} - \frac{1}{2} \sum_{p=1}^3 \sum_{q=1}^3 \int \frac{d^3g}{(2\pi)^3} B_{pq}(\mathbf{n}) \{ \overline{\eta_p^2(\mathbf{r})} \}_g^* \{ \overline{\eta_q^2(\mathbf{r})} \}_g \quad (9)$$

式中 $\overline{(\cdot)}$ 表示 (\cdot) 的体积平均值, V 表示系统的总体积, C_{ijkl} 表示弹性系数张量, $\epsilon_{ij}^0(p)$ 表示第 p 个变体的无应力相变应变张量, $\overline{\epsilon_{ij}}$ 表示系统的宏观均匀应变张量; $B_{pq}(\mathbf{n}) = \mathbf{n}_i \sigma_{ij}^0 \Omega_{jk}(\mathbf{n}) \sigma_{kl}^0(q) \mathbf{n}_l$, 其中 \mathbf{n} 表示

单位倒空间矢量 n_i 表示 n 的第 i 个分量, $\Omega_{ij}(\mathbf{n})$ 表示 $\Omega_{ij}^{-1}(\mathbf{n}) = C_{ijkl} n_k n_l$ 的逆阵; $\{\eta_q^2(\mathbf{n})\}_g$ 和 $\{\eta_q^2(\mathbf{n})\}_g^*$ 分别表示 $\eta_q^2(\mathbf{n})$ 的傅里叶变换和 $\{\eta_q^2(\mathbf{n})\}_g$ 的复共轭.

本文中 α 相变体的无应力相变应变张量与文献 [3] 中相同, 通过定义合适的宏观均匀应变张量 $\bar{\epsilon}_{ij}$ 来实现给所研究的系统施加一个外加单轴压应变场, 即宏观均匀应变就相当于外加应变. 本文外应变施加方向由偏离 α_2 相的 $11\bar{2}0$ 方向的角度 θ 表示, 根据 3 个变体的对称关系, θ 只需要在 0° — 30° 之间取值就可以代表外应变场的所有施加方向. 本文选择了 3 个方向, 即 $\theta = 0^\circ$, $\theta = 15^\circ$ 和 $\theta = 30^\circ$ 作为代表, 来研究外应变场的方向对组织的影响. 与所选 3 个角度相对应的外应变张量分别为

$$\bar{\epsilon}_1 = \epsilon^{\text{amp}} \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix},$$

$$\bar{\epsilon}_2 = \epsilon^{\text{amp}} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

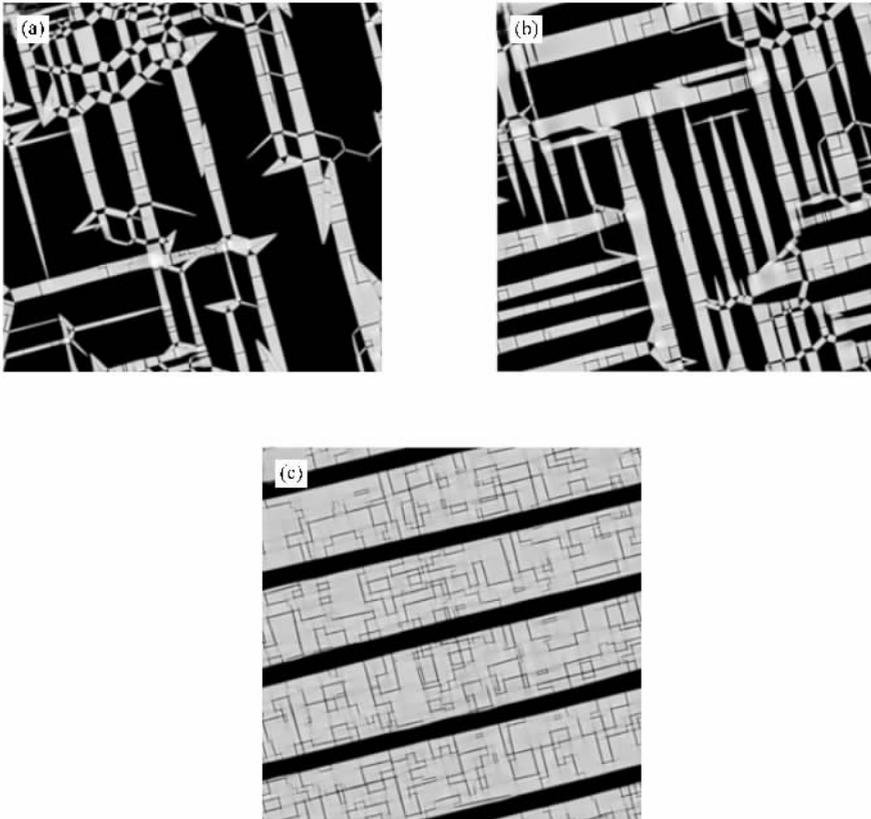


图 6 在 $\theta = 30^\circ$ 的外加拉应变作用下, Ti-25Al-10Nb 合金的组织形貌. (a) $\epsilon^{\text{amp}} = 0.25\epsilon_s$, (b) $\epsilon^{\text{amp}} = 0.5\epsilon_s$, (c) $\epsilon^{\text{amp}} = 1\epsilon_s$.

$$\bar{\epsilon}_3 = \epsilon^{\text{amp}} \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{3}{4} \end{pmatrix},$$

式中 ϵ^{amp} 是外加应变的大小. 模型的更多细节可以参见文献 [3, 4].

3.2. 外加压应变场作用下的析出形貌

Ti-25Al-10Nb 合金的模拟组织如图 6 所示, 图中的浅色部分代表 α 相, 黑色部分代表 α_2 相. 由图 6 可见, 当 $\epsilon^{\text{amp}} = 0.25\epsilon_s$ 时, 合金主要由条状组织和少量块状组织组成; 当 $\epsilon^{\text{amp}} = 0.5\epsilon_s$ 时, 组织截然不同, 这时合金几乎完全由互相平行和垂直排列的条状组织组成; 当 $\epsilon^{\text{amp}} = 1\epsilon_s$ 时, 合金为 α 相和 α_2 相互交替平行排列的全片层状组织.

3.3. 外加压应变场对 α 相体积分数的影响

Ti-25Al-10Nb 合金在不同大小和方向的外应变作用下, α 相体积分数如图 7 所示. 由图 7 可见, 外应变的大小对 α 相体积分数有强烈的影响. 当沿 $\theta = 15^\circ$ 增大外应变时, α 相体积分数随外应变变化最大, 变化量达 24%. 除外应变大小对 α 相体积分数

的影响之外, α_0 相体积分数也明显地受外应变施加方向 θ 的影响.

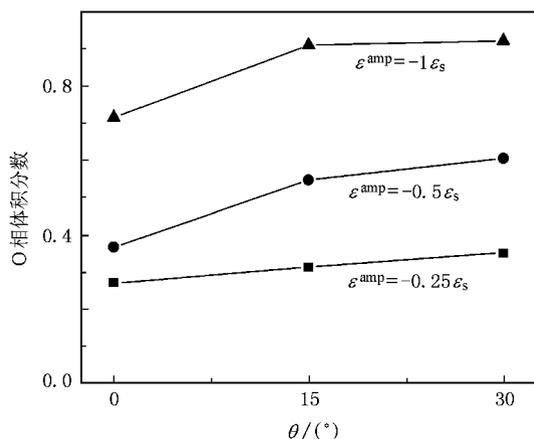


图7 外加压应变的方向 θ 对 Ti-25Al-10Nb 合金中 α_0 相体积分数的影响

3.4. 出现全片层显微组织的外应变条件

根据计算结果,要在合金中形成全片层状组织,外应变需要沿着一特定的方向施加,即 θ 取特定值.对于外加压应变,特定方向为 $\theta = 0^{\circ}$;对于外加拉应变,特定方向为 $\theta = 30^{\circ}$.图8显示了在不同的外加压应变和拉应变的作用下,合金形成全片层状组织所需要的最短约化时间 τ_{min} (用循环时间 τ 约化).由图8可见,无论是外加压应变还是拉应变, τ_{min} 都随外应变的增大而先增加后减小.但是,外应变还需要大于一个最小应变值,图8表明对于外加压应变,应变至少要大于 $0.5\epsilon_s$,而对于外加拉应变,应变至少要大于 $0.65\epsilon_s$ 才能在合金中形成全片层状组织.这是由于单向压应力更有利于单一变体的形成,因而较小的应变就导致全片层组织,而拉应力不产生材料内部有效多向应力状态,不利于单变体形成,因此需要更大的应力才能实现全片层状组织.

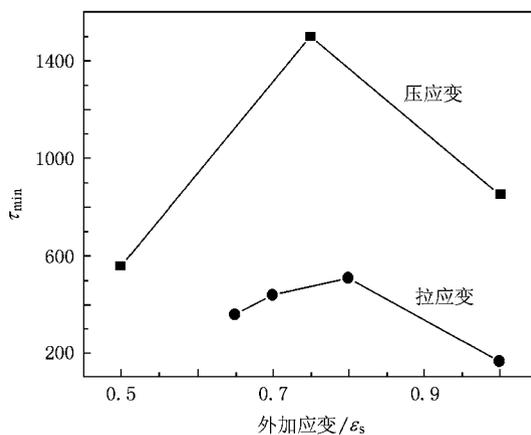


图8 不同外应变对 Ti-25Al-10Nb 合金形成全片层状组织所需最短约化时间 τ_{min} 的影响

4. 结 论

1) 本文提出了一个晶界作用域的新概念,并建议取值为 $1 \mu\text{m}$ 左右,解释了相场法有序化参数界面处 0—1 变化范围的物理意义,成功地建立了一个可以在工业应用范围内模拟真实时空再结晶组织演化的模型.

2) 对 AZ31 镁合金板材再结晶过程的模拟结果表明,在 $300\text{—}400^{\circ}\text{C}$ 退火 100 min 内与实验结果符合得很好,在 250°C 退火与实验结果有较大差别,说明低温下激活能机制发生了改变.

3) 外加应变的大小可以使 Ti-25Al-10Nb 合金中 α_0 相体积分数增加到 60%,而且应变方向也对 α_0 相有明显的影响,增量可达 24%.

4) 对 α_2 相施加合适的外应变时,可以在 Ti-25Al-10Nb 合金中实现全片层状组织.压应变作用下,形成全片层状组织需要的最小应变比拉应变作用所需临界应变小 30%.

[1] Artemev A, Jin Y, Khachatryan A G 2001 *Acta Mater.* **49** 1165
 [2] Nestler B, Wheeler A A 2000 *Physica D* **138** 114
 [3] Guo W, Zong Y P, Zuo L, Wang Y Z 2006 *Acta Metall. Sin.* **42** 549 (in Chinese) [郭巍,宗亚平,左良,王云志 2006 金属学报 **42** 549]
 [4] Guo W, Zong B Y, Wang G, Zuo L 2004 *J. Mater. Sci. Tech.* **20** 245
 [5] Zhu J Z, Liu Z K, Vaithyanathan V, Chen L Q 2002 *Scripta Mater.* **46** 401

[6] Wen Y H, Wang B, Simmons J P, Wang Y 2006 *Acta Mater.* **54** 2087
 [7] Krill III C E, Chen L Q 2002 *Acta Mater.* **50** 3057
 [8] Liu R C, Wang L Y, Gu L G, Huang G S 2004 *Forming Tech. Light Metals* **32** 22 (in Chinese) [刘饶川,汪凌云,辜蕾钢,黄光胜 2004 轻合金加工技术 **32** 22]
 [9] Doherty R D, Hughes D A, Humphreys F J, Jonas J J, Jensen D J, Kassner M E, King W E, McNelley T R, McQueen H J, Rollett A D 1997 *Mater. Sci. Eng. A* **238** 219

- [10] Verdier M , Groma I , Flandin L , Lendvai J , Brechet Y , Guyot P 1997 *Scripta Mater.* **37** 449
- [11] Gjostein N A , Rhines F N 1959 *Acta Metall.* **7** 319
- [12] Lücke K , Detert K 1957 *Acta Metall.* **5** 628
- [13] Li J , Wang J , Yang G 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3516

Phase field simulation on recrystallization and secondary phase precipitation under strain field ^{*}

Zong Ya-Ping[†] Wang Ming-Tao Guo Wei

(Key Laboratory for Anisotropy Design and Texture Engineering of Materials of Ministry of Education , Northeastern University , Shenyang 110004 , China)

(Received 19 December 2008 ; revised manuscript received 19 February 2009)

Abstract

General theory and formula of phase field simulation are discussed to as certain physical meanings of some phenomenological parameters in the basic model. A new concept of boundary range is suggested to explain the physical backgrounds of the phase order parameter gradients at grain boundary and the diffusion grain boundary , separately. It is argued that the boundary range is not the geometrical boundary width of atom disorder and generally believed to be within 3—4 atom sizes . However , the range has an independent boundary feature to represent the grain boundary energy distribution range in which the solute alloy atoms are segregated from interior grain. A model is established to simulate the realistic spatio-temporal microstructure evolution in recrystallization of a magnesium alloy by using the phase field approach. A set of rules has been proposed to determine the real physical value of all parameters in the model. The simulated results are shown to be in good agreement with reported measurements at the temperatures from 300 to 400 °C for up to 100 min. The effect of applied strains field on the microstructure produced during α_2 phase to O-phase (orthorhombic phase) transformation in Ti-25Al-10Nb alloy is finally studied by phase field simulation. The effects of strain direction on the volume fraction of O-phase and on the microstructure are investigated. It is also found that a full laminar microstructure can be formed when the applied strain is loaded along $11\bar{2}0$ of α_2 phase with magnitude greater than a half of the stress-free transformation strain. The significance and the potential application of the new simulation discovery are discussed.

Keywords : phase field , recrystallization , precipitates , applied strain field

PACC : 6470 , 6185 , 8140E

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50771028 , 50471024).

[†] E-mail : ypzong@mail.neu.edu.cn