

Fe-C 合金中形变诱导动态相变的蒙特卡罗模拟*

肖纳敏† 李殿中 李依依

(中国科学院金属研究所, 沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016)

(2008 年 12 月 16 日收到, 2009 年 1 月 8 日收到修改稿)

采用蒙特卡罗(MC)方法模拟了 Fe-C 合金在奥氏体-铁素体相变的平衡温度之上的形变诱导动态相变过程. 通过建立合适的 MC 规则, 在一个 MC 模型中同时实现了奥氏体-铁素体相变、铁素体-奥氏体逆相变以及奥氏体动态再结晶过程的模拟. 同时, 一个基于矢量变换的拓扑模型被嵌入此 MC 相变模型, 用来跟踪由于塑性变形导致的晶粒形貌变化. 在此基础上模拟分析了动态相变过程中铁素体的形成特点, 讨论了由于相变、逆相变和动态再结晶交互作用所带来的影响.

关键词: 形变诱导动态相变, 蒙特卡罗模型, 动态再结晶, 介观模拟

PACC: 6470, 8110, 8140

1. 引 言

显微组织的细化和均匀化是同时提高传统钢铁材料强度和韧性的主要手段. 其中形变-相变耦合技术是细化晶粒的一种重要方法. 近 20 年来, 形变诱导动态相变(deformation induced dynamic transformation, 简记为 DIDT)的新工艺由于其突出的晶粒细化能力, 在钢铁行业中得到了广泛的研究^[1-3]. 和传统的控轧控冷工艺不同, 在形变诱导动态相变工艺中, 奥氏体-铁素体相变发生在变形过程中, 而不是变形之后. DIDT 的许多实验研究结果都表明, 塑性变形导致的储存能可以有效提高奥氏体的自由能以及铁素体的析出温度. 因此工艺参数满足一定的临界条件时, 超细晶铁素体可以在动态相变过程中产生. 由于 DIDT 是一个相对短暂的动态过程, 同时这一过程包含塑性变形、相变、动态再结晶等一系列复杂的物理冶金现象^[4], 而传统的实验手段仍然是通过室温下的终态组织来反推动态过程中可能发生的过程. 因此, DIDT 的许多细节机制仍然很难通过传统的实验手段揭示出来.

近年来, 随着各种模型不断发展, 计算机模拟技术成为一种研究微观组织演变过程的有效手段, 许多计算方法被用来研究介观尺度的组织演变过

程. 在这些方法中, 蒙特卡罗(MC)方法被广泛应用于模拟金属材料的晶粒长大^[5]、再结晶^[6]和扩散型相变^[7]等典型的组织演变过程. 在这些研究中, 影响微观组织的各种因素通过系统的哈密顿量反映出来. 比如, 对于再结晶过程, 系统的哈密顿量考虑了基体的变形对储存能和晶粒之间界面能的影响. 对于无变形的扩散型相变, 则应考虑化学自由能和界面能的影响. 本文试图在常规 MC 方法的基础上, 发展一个新的模型来模拟形变诱导相变这一动态过程. 这一模型将同时考虑化学自由能、储存能以及界面能对相变过程的影响. 同时, 将采用一个基于矢量运算的拓扑变换模型来跟踪模拟塑性变形导致的晶粒形貌的变化. 此外, 在动态相变过程中, 可能会伴随有动态再结晶和铁素体-奥氏体逆相变等其他组织演变过程. 我们将通过引入合适的转变规则, 同时模拟上述可能发生的伴生过程.

2. MC 模型

本文所建立的二维 MC 模型是基于传统的再结晶以及奥氏体-铁素体扩散型相变的 MC 模型. 微观组织在二维平面上被离散成正六边形的网格. 我们用 5 个变量来描述 MC 模型中每一个单元胞的状态, 即晶体取向 S_i 、碳浓度 C_i 、相的序参量 η_i^p 、储存

* 国家自然科学基金(批准号 50871109)资助的课题.

† E-mail: nmxiao@imr.ac.cn

能 G_i^{def} 和再结晶序参量 η_i . 这 5 个变量的演化分别对应着微观组织演化、储存能场演化以及碳浓度场演化. 在本文模型中, 溶质原子的扩散取决于化学自由能, 奥氏体或铁素体的再结晶取决于储存能和界面能的交互作用, γ - α 的相转变或者 α - γ 的逆转变取决于界面能、储存能以及化学自由能之间的交互作用. 因此, Q 态波茨模型的哈密顿量采用如下的形式来描述:

$$H = \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_j^m G_{S_i S_j}^b + \sum_i^n G_i^c + \sum_i^n G_i^{\text{def}}, \quad (1)$$

其中, G_i^c 代表单元胞 i 的化学自由能, $G_{S_i S_j}^b$ 代表单元胞 i 和其近邻胞 j 之间的晶界能, G_i^{def} 代表单元胞 i 的储存能. 化学自由能的计算采用 Fe-C 合金的规则溶液亚点阵模型, 晶界能的计算采用经典的 Read-Shockley 模型, 这两个模型的详细描述可见文献 [8, 9].

2.1. 储存能模型

塑性形变导致的能量被假设以位错的形式储存在材料内部. 形变过程中, 位错密度的变化由加工硬化和动态回复两个相互竞争的过程来控制. Mecking 和 Kocks^[10] 曾提出过一个经典的位错密度演变模型

$$\frac{d\rho}{d\varepsilon} = k_1 \sqrt{\rho} - k_2 \rho. \quad (2)$$

这里, $k_1 = 2\theta_0 / (\alpha \mu b)$ 是代表加工硬化行为的常数, $k_2 = 2\theta_0 / \sigma_s$ 则是代表由于回复导致的软化, 其中 α 是一个与位错交互作用相关的常数, b 是 Burgers 矢量, μ 是材料的剪切模量, θ_0 代表材料的硬化率, 可以通过应力-应变曲线线性硬化阶段的斜率求出, σ_s 为应力-应变曲线的稳态应力.

对于动态相变过程, 一个很重要的特点是双相组织的形变. 形变奥氏体分解过程中只有奥氏体相经历形变过程, 析出的铁素体相为无位错结构, 并不存在位错的演化过程. 而动态相变在形变过程中有奥氏体和铁素体两个相同时存在, 析出的铁素体相同样会由于形变的加载而导致位错的产生、塞积硬化和回复消失等过程. 两个相的晶体结构以及滑移系运动情况不一样, 其位错密度的演化过程也不一样. 具体对于文献 [10] 的模型而言, 就是其参数 θ_0 和 σ_s 不一样. 当低碳钢处于两相区时, 纯奥氏体相或纯铁素体相的应力-应变曲线很难通过实验得出. 因此这里的参数 θ_0 和 σ_s 将采用一种解析应力-应变模型来计算. Hatta 等^[11] 通过引入 Zener-Hollomon

参数, 在大量试验数据和回归分析的基础上, 建立了一个在具有任意碳含量的铁碳二元系中奥氏体相和铁素体相在任意应变率、任意温度下的应力-应变模型. 这个模型适合描述在应变不大于第一个峰值应变(加工硬化和软化达到第一次平衡时的应变)之前的应力-应变曲线. 例如, Fe-0.11wt% 合金在温度为 1151 K、应变率为 0.5 s^{-1} 的条件下形变时, 通过此模型可以得到如下参数: $\alpha = 0.5$, $b = 0.256 \text{ nm}$, $\mu = 46.2 \text{ GPa}$, 对奥氏体相, $\theta_0 = 1438.5 \text{ MPa}$, $\sigma_s = 118.63 \text{ MPa}$; 对铁素体相, $\theta_0 = 872.0 \text{ MPa}$, $\sigma_s = 71.9 \text{ MPa}$. 详细的模型描述可以参见文献 [11]. 单位体积的储存能 G_{def} 则可以通过位错密度来求得,

$$G_{\text{def}} = \beta \rho \mu b^2, \quad (3)$$

其中 β 是一个范围在 0.5—1 的常数.

2.2. 基于矢量运算的拓扑变换模型

塑性形变导致的另外一个变化就是微观组织的拓扑结构会发生变形. 我们采用矢量运算的方法从数学上描述这一变形过程. 二维空间内的每一个点可以被认为是在空间内任意一点为原点的一个矢量, 因此当这个点的空间位置发生变化时, 从解析几何学的角度可以认为是一次矢量运算^[12]. 而二维空间下的形变本身可以用一个二维张量来描述. 因此, 塑性形变导致的晶粒形貌变化可以通过符合一定规则的矢量换算来实现. 一般情况下, 原始矢量 u 经历一个均匀形变 S 得到新的空间矢量 v 的表达式如下:

$$v = Su. \quad (4)$$

(4) 式可以写成如下的矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} v_x \\ v_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_x & 0 \\ 0 & l_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_x \\ u_y \end{bmatrix}. \quad (5)$$

其中, u_i ($i = x, y$) 表示原始矢量 u 坐标, v_i ($i = x, y$) 表示经过形变后的新矢量坐标, l_i ($i = x, y$) 表示沿两个方向的名义应变. 沿两个方向的真应变可以由公式 $\varepsilon_i = \ln l_i$ ($i = x, y$) 很方便地得到. 我们假设形变过程中体积不发生变化, 也就意味着形变张量 S 的行列式值不变, 即 $l_x l_y = 1$. 在模拟中, MC 模型的每个单元胞都可以看成是空间中的离散点. 在每一次形变的迭代计算过程中, 每一点都经历相同的形变, 这样可以不断跟踪塑性形变时晶粒形貌的变化.

2.3. 形核模型

当整个模拟体系在奥氏体-铁素体的平衡温度

之上未施加形变时,所有的晶粒都属于奥氏体相。塑性形变开始实施时,奥氏体晶界或晶界内部将会出现再结晶的形核或铁素体相变的形核。目前已有一些基于经典形核理论的形核率唯象模型,但是这些模型中的参数很难精确测定^[13]。同时,像动态相变这样的复杂过程远远偏离经典形核理论所采用的理想假设。因此,这些模型很难被用来预测动态相变的形核过程。这里仍然采用一种名义形核率模型来描述动态再结晶和奥氏体-铁素体相变的形核过程。

在每一 MC 计算步中,模拟体系的所有单元胞将被访问一次。如果被选中的单元胞属于奥氏体相,则该胞允许以一个固定的名义形核概率 P_1 转变成奥氏体动态再结晶的核心。如果动态再结晶未发生,则允许以名义形核概率 P_2 转变成铁素体的核心。如果被选中的单元胞属于铁素体相,则允许以名义形核概率 P_3 转变成铁素体动态再结晶的核心。同样,这些核心的存在只是暂时的,因为它能否被系统接受必须由随后的 MC 转变规则来决定。

在上述形核模型中,无论是再结晶的形核,还是铁素体相变的形核,都会导致储存能的释放。同时,后续的形变会使这些新形成的奥氏体或铁素体晶粒内的储存能重新累积。一旦这些储存能达到某一临界值,新一轮的再结晶或相变形核又将在它们的基础上发生。值得注意的是,上述模型并没有考虑铁素体-奥氏体逆相变的形核,也就是铁素体单元胞只允许发生铁素体的再结晶形核,而不允许形成新的奥氏体。铁素体-奥氏体逆相变主要通过奥氏体/铁素体相界面向铁素体一侧的移动来实现,而不是新的奥氏体核心在铁素体晶粒内的长大。这主要有两方面的考虑。一方面,奥氏体的形核过程需要一个高碳的环境,比如珠光体中渗碳体层的溶解等;另一方面,当奥氏体/铁素体相界存在时,相界迁移的驱动力要比奥氏体的形核驱动力小。因此,逆相变过程中会优先发生相界面的迁移。实验观察表明,奥氏体在铁素体相中形核只是在应变量极大的情况下观察到(比如多道次的等角挤压过程)^[14]。因此铁素体-奥氏体逆相变在此不考虑这种形核过程,只考虑已有的奥氏体/铁素体相界面向铁素体一侧的迁移。

2.4. MC 转变规则

传统的 MC 基本转变规则描述的一般是单一的物理冶金过程,比如晶粒长大、再结晶或相变,和这些规则不同,动态相变的 MC 转变规则必须要同时

包含两个主要的物理冶金过程,也就是相转变和再结晶转变,下面详细介绍这一规则。首先,在离散网格内随机选择一个单元胞 i 以及它的任意两个近邻单元胞 j 和 k ,其中 j 和 k 允许为同一个单元胞。本次模拟选取二维正六边形网格,采取 Von Neuman 近邻规则,即其距离最近的 6 个单元胞为第一近邻。

1) 如果相的序参量 $\eta_i^p = \eta_j^p$,而取向 $S_i \neq S_j$,则两个胞之间的转换属于再结晶转变。公式(1)所描述的哈密顿量表达式将自动转换为如下的形式:

$$H = \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_j^m G_{S_i S_j}^b + \sum_i^n G_i^{\text{def}}. \quad (6)$$

显然,(6)式是 MC 再结晶模型的典型形式。单元胞 i 的状态变量,即再结晶序参量 η_i^p 、取向 S_i 和储存能 G_i^{def} 尝试转换成单元胞 j 的相应值。转换前和转换后系统的哈密顿量 H_1 和 H_2 ,可以根据(6)式分别得出。如果 $H_2 \leq H_1$,单元胞 i 状态变量的转换将被接受。否则,将以 $W = \exp\{(H_1 - H_2)/k_B T\}$ 的概率接受上述转换。

2) 如果相的序参量 $\eta_i^p \neq \eta_j^p$,则两个单元胞之间的转换属于相结构转变。公式(1)所描述的哈密顿量表达式不必修改,可直接应用。这时相当于扩散型相变的 MC 转换规则。单元胞 i 的状态变量,即相序参量 η_i^p 、取向 S_i 和储存能 G_i^{def} 尝试转换成单元胞 j 的相应值。同时,单元胞 i 和 j 之间进行基于溶质守恒的碳扩散尝试,如以上所述。转换前和转换后系统的哈密顿量 H_1 和 H_2 ,可以根据(1)式分别得出。类似地,如果 $H_2 \leq H_1$,单元胞 i 状态变量的转换将被接受。否则,将以 $W = \exp\{(H_1 - H_2)/k_B T\}$ 的概率接受上述转换。

上述第二条规则中已经包含了晶粒内碳扩散的过程。当单元胞 i 和 j 满足 $\eta_i^p = \eta_j^p$ 和 $S_i = S_j$ 条件时,两者属于同一个晶粒。因此,在哈密顿量的表达式中,界面能项变成零。这样,MC 转变规则就变成随机跃迁碳扩散 MC 模型^[7]。

3. 模拟结果

首先,Fe-0.11wt% C 合金在 1300 K 奥氏体化并同时保温 10 min。在 MC 模型中,热形变前的试样被离散成 800×400 的正六边形网格,相当于真实试样的二维尺寸为 $200 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ 。初始奥氏体晶粒形貌采用正常的 MC 晶粒长大模型计算得到,初始晶粒尺寸约为 $80 \mu\text{m}$ 。同时采用周期性边界条件。根据

相图计算可以得到,在同样的碳浓度下奥氏体-铁素体相变的平衡温度为 1141 K.显然,未形变试样在该温度之上保温将不会有铁素体形成.然后将试样冷却至 1151, 1171, 1191 和 1211 K 并施加平面压缩形变.形变时总的真应变为 $\epsilon = 1.6$,形变速率平均每个 MC 模拟时间步分别为 8.0×10^{-4} , 2.0×10^{-3} , 8.0×10^{-3} 和 2.0×10^{-2} .这里 MC 模拟时间步并不等同于真实时间步,目前仍然没有好的方法给出它们之间准确的对应关系.因此我们没有采用真实应变速率,而是采用了 MC 应变速率来表征形变快慢程度对组织演变过程的影响.这样的处理方式在以前的

MC 再结晶模拟工作中也被广泛使用^[6].

3.1. 动态相变过程中铁素体的形成

热力学分析表明,塑性形变导致的储存能可以给铁素体在奥氏体中的析出提供额外的驱动力.因此当试样形变时,铁素体有可能在奥氏体-铁素体相变的平衡温度以上形成.图 1(a)–(c)给出了一个通过形变在奥氏体-铁素体相变的平衡温度以上析出铁素体的例子.在组织形貌图中,白色区域代表原始奥氏体基体,灰色区域代表不同取向的铁素体晶粒,黑线为奥氏体晶界.

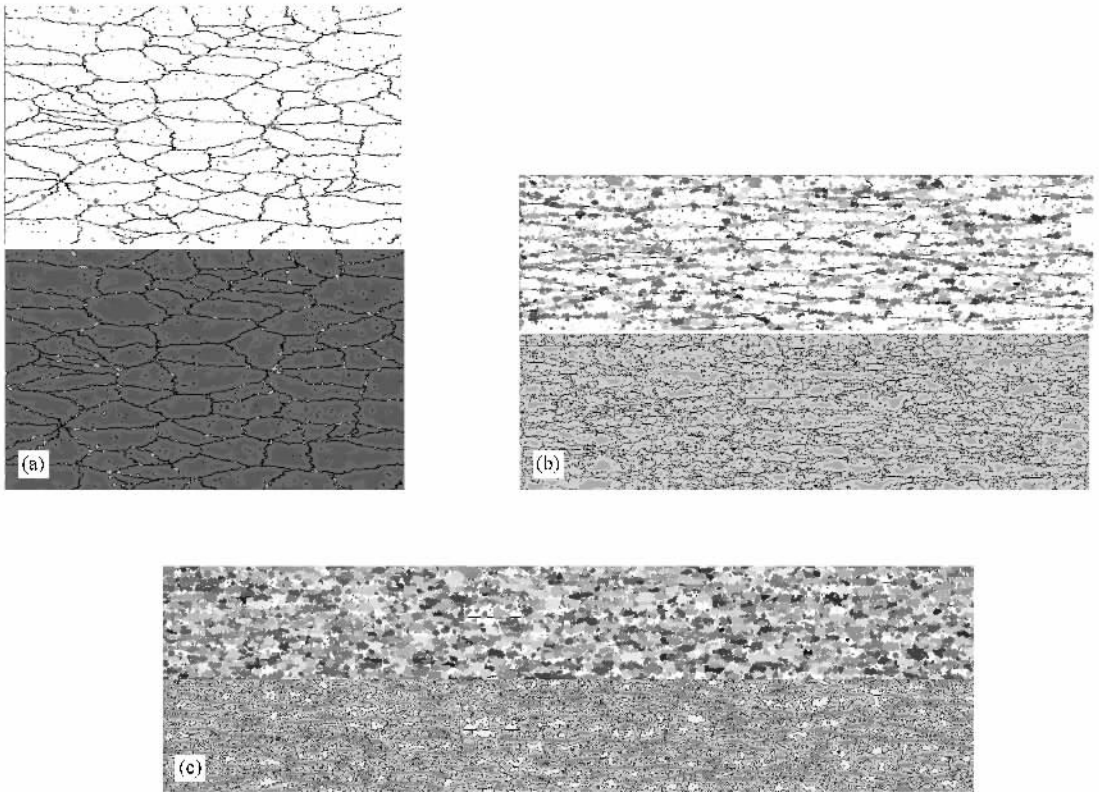


图 1 奥氏体-铁素体相变过程中的组织场和储存能场. MC 模拟变形条件为 $T = 1151$ K, 形变速率为平均每 MC 模拟时间步. 上为组织场, 下为储存能场. (a) $\epsilon = 0.6$ (b) $\epsilon = 1.0$ (c) $\epsilon = 1.4$

从图 1 可以看出,在形变的初始阶段原始奥氏体被压缩,储存能开始累积.但此时储存能的累积并不充分,还不足以抵消界面能和化学自由能所形成的阻力,因此铁素体还不能形核.随着形变量的增加,奥氏体晶粒被进一步拉长,储存能的累积也继续增加.此时,有部分铁素体核心开始在原始奥氏体晶界形成.和未形变奥氏体的分解过程类似,原始奥氏体晶界仍然是铁素体的优先形核位置.当形变量增加到 $\epsilon = 1.0$ 时,几乎所有的原始奥氏体晶界都被诱导出来的铁素体核心所占据.同时,连续的形变导致

奥氏体晶粒被压扁得非常厉害,整个模拟区域内都存在高储存能分布.这也导致很多铁素体核心在奥氏体晶粒内部以及新形成的铁素体界面上形成.这里新形成的铁素体界面由于相界能和储存能的共同作用,也成为铁素体连续、反复形核的一个重要位置.许多实验研究也表明,铁素体的这种反复形核是动态相形变核的一个显著特点^[15].当应变量 ϵ 达到 1.4 时,大约 90% 的原始奥氏体基体转变成等轴晶铁素体.值得注意的是,由于相变在形变过程中进行,诱导出的铁素体不再是无位错结构,储存能在铁

素体上继续累积到一定程度后,将成为随后铁素体动态或亚动态再结晶的原始驱动力。

图 1 表明,对于动态相变,铁素体的形成存在一个临界应变.如果应变量小于这个临界值,形变将无法为铁素体的形核提供足够的驱动力.一旦应变量大于临界值,原始奥氏体晶界、晶内高储存能位置以及新形成的铁素体界面都将成为铁素体的优先形核位置。

3.2. 动态相变过程中的振荡行为

奥氏体的动态再结晶是一个消耗储存能以及影响铁素体体积分数的关键机制.当位错的累积达到

一定程度后,将触发动态再结晶.实验研究已经表明,作为一种软化机制,奥氏体的动态再结晶可以存在于动态相变过程中^[4].图 2 给出了某些工艺参数下的终态组织形貌,其中白色区域代表原始奥氏体基体,灰色区域代表再结晶奥氏体晶粒,不同的灰度代表不同取向的铁素体晶粒,黑色实线为奥氏体晶界.从图 2 可以看出,在这些特定的工艺条件下,大多数组织属于再结晶奥氏体,只有少量铁素体沿着晶界分布.当奥氏体发生动态再结晶时,变形导致的储存能以再结晶的形式被消耗掉,从而导致奥氏体-铁素体相变的驱动力不足,抑制了铁素体的析出.这也意味着再结晶和铁素体的析出之间存在竞争关系。

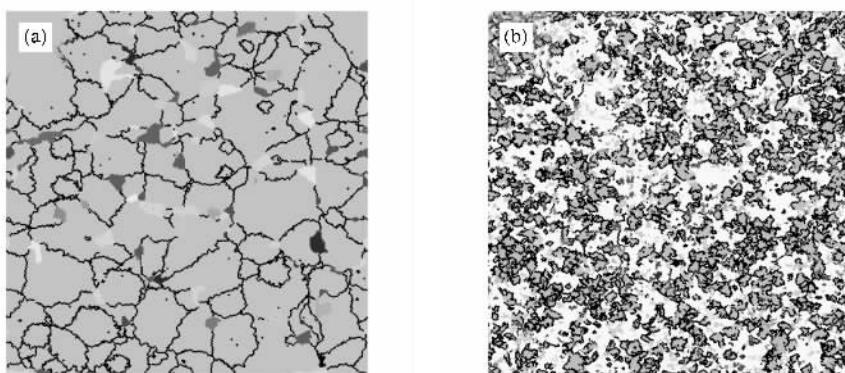


图 2 动态相变过程中的组织形貌 (a) 经过 $T = 1151$ K、形变速率为平均每 MC 模拟时间步 0.002 和 $\epsilon = 1.6$ 的变形后得到的组织形貌 (b) 经过 $T = 1211$ K、形变速率为平均每 MC 模拟时间步 0.02 和 $\epsilon = 1.6$ 的变形后得到的组织形貌

奥氏体-铁素体相变与奥氏体动态再结晶之间的这种竞争关系在某些特定的形变条件下会导致一种特殊的振荡行为,如图 3 所示.图 3 展示了当形变条件为 $T = 1151$ K 和形变速率为平均每 MC 模拟时间步 0.002 时,模拟得到的诱导铁素体体积分数和奥氏体再结晶分数在形变过程中的变化.铁素体分数在达到一定数量后并不会趋向于某一平衡态的值,而是会在一个范围内上下波动,奥氏体再结晶分数(相对于原始奥氏体基体)也是如此.同时,铁素体体积分数曲线上的峰值总是对应着再结晶分数上的谷值(双箭头所标).这意味着在振荡过程中,当铁素体体积分数增加(或减少)的时候,奥氏体体积分数的变化则恰好相反。

在实际的工艺中,动态相变总是处于亚稳态.铁素体-奥氏体的逆相变一直在进行.上述振荡行为中,铁素体体积分数的下降就是由铁素体-奥氏体逆相变导致的.在本文采用的 MC 模型中,逆相变其实是 $\eta_i = 1$ 和 $\eta_i = 0$ 的一个特殊 MC 转换规则.在 MC 模型中,奥氏体/铁素体相界面的移动方向完全由系统

哈密顿量的变化来决定,亦即相界面总是朝可以减少系统总能量的方向移动.因此当奥氏体的形成能够降低系统的总能量时,铁素体-奥氏体的逆相变就会发生,从而导致铁素体体积分数的下降.总之,铁素体分数曲线上峰值的形成可以分成三个典型的阶段(如图 3 中虚线箭头所示).第 I 阶段对应着由于诱导铁素体从形变奥氏体基体中析出导致的铁素体分数不断增加,第 II 阶段则对应由于铁素体-奥氏体逆相变导致的体积分数减少,第 III 阶段是新形成的奥氏体(第 II 阶段逆相变形成的奥氏体)重新转变为铁素体,导致铁素体分数增加.图 4(a)-(c) 为三个不同阶段的热力学解释,从中可以看出,奥氏体-铁素体相变、奥氏体动态再结晶和铁素体-奥氏体逆相变三者之间的交互关系导致了振荡行为的发生.在形变加载之前奥氏体相处于稳定状态,不会析出铁素体.加载形变后,不断累积的储存能引起奥氏体相的自由能不断升高.当应变达到某一临界值时,奥氏体相不再成为稳定相,开始析出铁素体,这对应着振荡曲线的第 I 阶段.与此同时,奥氏体的动态再结晶

也会触发.当两者进行到一定阶段,再结晶的奥氏体晶粒前沿和诱导铁素体晶粒的前沿会相互碰撞,此时的再结晶奥氏体由于刚刚形成,其内部接近于无位错,也就是接近于形变加载前的奥氏体状态.这也意味着在两者接触的局部区域,再结晶奥氏体比诱导铁素体在热力学上更为稳定.两者之间的自由能差导致了相界面朝铁素体方向移动,也就是铁素体-奥氏体的逆相变,这对应着振荡曲线的第 II 阶段.由于形变继续进行,再结晶奥氏体内部不会总是保持无位错结构,其位错会重新累积,从而导致奥氏体相的自由能再一次被提升.到一定的阶段,相界面又开始向奥氏体方向移动,奥氏体重新转变成铁素体,这对应着振荡曲线的第 III 阶段.上述第 II 和第 III 阶段周而复始,循环进行,使得体积分数呈周期性振荡.以上分析表明,位错的循环累积和耗散是相界面不断来回移动的驱动力,也是周期性振荡的原因.

位错的这种循环过程是通过连续形变下的奥氏体动态再结晶、奥氏体-铁素体相变以及铁素体-奥氏体的逆相变三者之间的交互作用来实现的.

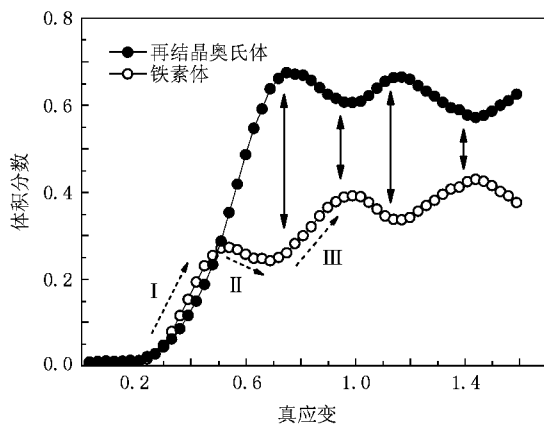


图 3 铁素体体积分数与奥氏体再结晶分数的振荡行为

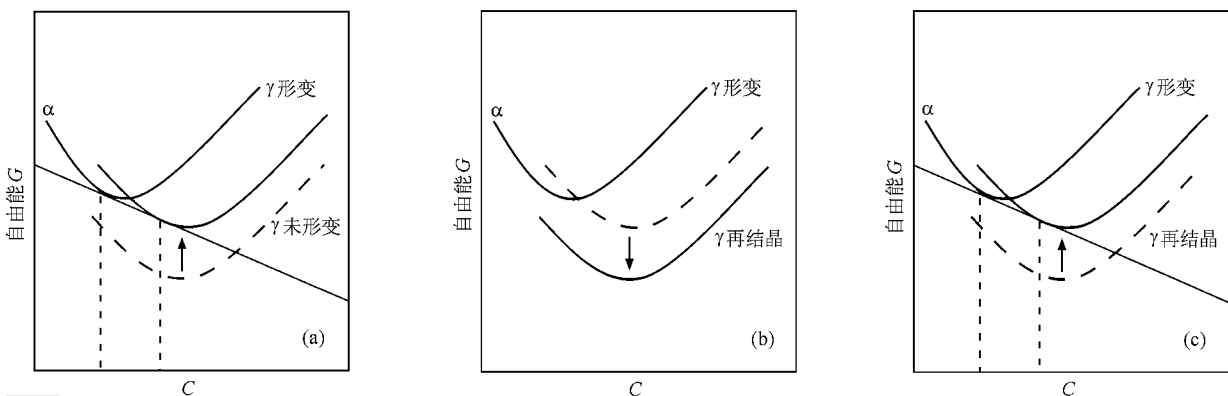


图 4 振荡过程中三个不同阶段的自由能变化 (a)第 I 阶段 (b)第 II 阶段 (c)第 III 阶段

4. 结 论

本文在顺序耦合模型的基础上,在形变与组织演变之间建立了一种同步耦合模型,描述动态组织演变过程中两者之间的交互作用.在此基础上,以奥氏体-铁素体相变的平衡温度之上形变诱导铁素体动态相变为模拟对象,采用基于矢量运算的拓扑变换模型和位错能量模型模拟塑性形变导致的晶粒形貌和储存能的变化,采用修改后的 MC 模型模拟动态相变过程中发生的组织演变,研究探讨动态相变中发生的现象及其特有规律.

1) 动态相变过程中,塑性形变导致的储存能为铁素体的形成提供驱动力.为了诱发铁素体的形成,需要一个临界应变来提供足够的驱动力.模拟得到

的组织演变结果表明,原始奥氏体晶界和奥氏体晶粒内部高储存能位置是铁素体的优先形核位置.同时,在大形变量下新形成的铁素体界面由于相界能和储存能的共同作用,也成为铁素体连续、反复形核的一个重要位置.

2) 奥氏体的动态再结晶是影响铁素体析出的一个非常重要因素.连续形变导致的储存能也能给动态再结晶提供驱动力.动态再结晶消耗的储存能降低了铁素体形核与长大的驱动力,从而使再结晶和铁素体的析出之间存在竞争关系.

3) 在某些特定的形变条件下,奥氏体-铁素体相变与奥氏体动态再结晶之间的竞争关系导致铁素体分数或奥氏体再结晶分数的振荡行为.奥氏体-铁素体相变与铁素体-奥氏体逆相变的交错运行导致相界面在一定范围内来回移动.位错的循环累积和耗

散是相界面不断来回移动的驱动力,也是周期性振荡的原因.位错的这种循环过程是通过连续形变下的奥氏体动态再结晶、奥氏体-铁素体相变以及铁素体-奥氏体的逆相变三者之间的交互作用来实现.

总之,形变诱导铁素体动态相变是一种复杂的工艺.本文着重考虑动态相变过程中组织演变之间

的相互关系.在实际的材料生产过程中还要考虑到更复杂的因素,比如微合金钢中形成的碳化物对再结晶以及相变过程中晶界迁移动力学的影响等,这些重要的问题也将明显影响动态组织演变过程,本文将在后续的研究工作中逐步加以考虑.

-
- [1] Weng Y Q 2003 *Ultrafine Grained Steel* (Beijing : Metallurgical Industry Press) p9 (in Chinese [翁宇庆 2003 超细晶钢 (北京 : 冶金工业出版社) 第 9 页]
- [2] Yada H , Matsumura Y , Nakajima K 1984 *United State Patent* 4466842
- [3] Hodgson P D , Hickson M R , Gibbs R K 2000 *United State Patent* 6027587
- [4] Ferreira J L , de Melo T M F , Bott I S , Santos D B , Rios P R 2007 *ISIJ Int.* **47** 1638
- [5] Srolovitz D J , Anderson M P , Sahni P S , Grest G S 1984 *Acta Metall.* **32** 1429
- [6] Rollett A D , Luton M J , Srolovitz D J 1992 *Acta Mater.* **40** 43
- [7] Xiao N M , Tong M M , Lan Y J , Li D Z , Li Y Y 2006 *Acta Mater.* **54** 1265
- [8] Kaufman L , Clougherty E V , Weiss R J 1963 *Acta Metall.* **11** 323
- [9] Read W , Shockley W 1950 *Phys. Rev.* **78** 275
- [10] Mecking H , Kocks U F 1981 *Acta Metall.* **29** 1865
- [11] Hatta N , Kokado J , Kikuchi S , Takuda H 1985 *Steel Res.* **56** 575
- [12] Singh S B , Bhadeshia H K D H 1998 *Mater. Sci. Tech.* **14** 832
- [13] Offerman S E , van Dijk N H , Sietsma J , Grigull S , Lauridesn E M , Margulies L , Poulsen H F , Rekveldt M T , van der Zwaag S 2002 *Science* **298** 1003
- [14] Son Y I , Lee Y K , Park K T 2006 *Metall. Mater. Trans. A* **37** 3161
- [15] Sun Z Q , Yang W Y , Qi J J , Hu A M 2002 *Mater. Sci. Eng. A* **334** 201

Numerical investigation of deformation-induced dynamic transformation in Fe-C alloy by using a Q-state potts Monte Carlo model^{*}

Xiao Na-Min[†] Li Dian-Zhong Li Yi-Yi

(*Shenyang National Laboratory for Materials Science , Institute of Metal Research , Chinese Academy of Sciences , Shenyang 110016 , China*)

(Received 16 December 2008 ; revised manuscript received 8 January 2009)

Abstract

The deformation induced dynamic transformation (DIDT) of a Fe-C alloy above austenite transformation equilibrium temperature is simulated by using a Q-state potts Monte Carlo (MC) model . The austenite-to-ferrite transformation , dynamic recrystallization (DRX) of austenite and ferrite , and the ferrite-to-austenite reverse transformation can be simulated simultaneously in the same MC model by building suitable MC transition rules . Meanwhile , an affine transformation model based on vector operation is also coupled with the MC model for the first time for tracking the changes in grain shape during dynamic transformation . The formation of ferrite during DIDT and the influence of austenite DRX on DIDT are simulated based on this MC model . The simulation results show that the competition between the DRX of austenite and the austenite-to-ferrite transformation causes the oscillation behaviour of ferrite kinetics .

Keywords : deformation induced dynamic transformation , Monte Carlo model , dynamic recrystallization , mesoscopic simulation

PACC : 6470 , 8110 , 8140

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50871109).

[†] E-mail : nmxiao@imr.ac.cn