

温度梯度对晶粒生长行为影响的相场模拟*

魏承炆^{1)†} 李赛毅²⁾

1) (华南理工大学机械与汽车工程学院, 广州 510640)

2) (中南大学材料科学与工程学院, 长沙 410083)

(2010年7月31日收到; 2011年1月11日收到修改稿)

利用相场法建立了一个可应用于研究温度梯度影响下的晶粒生长行为的二维模型, 模拟了多晶材料退火过程中由温度梯度引起的非均匀晶粒生长和定向晶粒生长行为. 结果表明: 退火过程中, 在静态温度梯度的影响下, 体系的晶粒呈现不均匀生长, 且从晶粒生长指数来看, 不同程度地偏离了正常晶粒生长; 在动态温度梯度的影响下, 体系内部常出现柱状晶粒生长, 柱状晶粒前端持续生长至温度最高位置; 柱状晶粒生长与动态热源的移动速率密切相关, 只有当动态热源的移动速率处于最小和最大晶粒生长速率之间时, 柱状晶粒才会出现.

关键词: 晶粒生长, 相场法, 晶界迁移率, 局部退火

PACS: 07.05.Tp, 61.72.Mm, 81.40.Ef, 61.72.Cc

1. 引言

在多晶材料中, 晶粒尺寸及其均匀性是影响材料性能的关键因素, 用热处理工艺控制晶粒生长是提高材料性能的常用方法之一. 在退火过程中, 保温时间、温度场的分布等因素对材料最终的晶粒形貌、尺寸及其分布有显著的影响, 尤其是温度场在材料内部的不均匀分布更显著地影响材料的晶界迁移^[1, 2], 进而影响晶粒生长行为. 例如, 在局部退火工艺中, 温度场的不均匀分布影响微观组织的演变, 常常引起非均匀晶粒生长或定向晶粒生长行为^[3, 4]. 退火过程中的晶粒生长受到很多复杂因素的影响, 单纯通过实验的方法来研究晶粒生长及其相关机理, 往往面临着很多困难, 诸如大量的实验结果分析、因素影响很难分离等, 甚至需要实时观察晶粒生长行为, 然而此种测试条件目前还十分缺乏, 但是计算机模拟仿真可以做到实时追踪材料微观组织的演化规律, 具有连续性、同步性, 信息数据更加完整. 因此, 人们试图通过计算机模拟晶粒生长, 分析各种因素的影响规律, 并结合常规的实验手段来深入分析其内在机理.

近年来, 研究工作者借助多种模拟方法研究了

晶粒生长行为, 其中以蒙特卡洛法和相场法为主. Rollett 等人^[5] 和 Holm 等人^[6] 考虑了不均匀分布的晶界迁移率, 用蒙特卡洛法分别模拟了异常晶粒长大和定向非均匀晶粒长大行为, 并研究了复杂微观组织的演变过程和晶粒生长动力学. 但是, 蒙特卡洛法在模拟晶粒生长行为时所得到的晶粒生长指数与模拟时间的相关性较大, 而且该方法所采用的 Potts 模型不能很好地表述晶界的特征 (如晶界曲率关系), 只能通过晶界两侧晶粒取向标记和能量起伏的约束条件来表述晶界迁移和晶粒生长行为. 同时, 不少研究工作致力于用相场法模拟诸如晶粒形核^[7]、长大^[8-10]、粗化^[11] 和外场诱发的晶粒组织变化^[12, 13] 等不同现象. 相场法是一种建立在热力学基础上, 考虑有序化势与热力学驱动力的综合作用来建立相场方程, 从而描述系统演化动力学的方法. 与蒙特卡洛法相比, 相场法不需要追踪晶界的位置, 能方便地处理晶界上溶质聚集和第二相析出的问题, 并且能够更方便和准确地描述不均匀分布的晶界迁移率等晶界特征和温度场、畸变场等物理场对材料微观组织的演变行为的影响. 例如, Moelans 等人^[14] 和 Kazaryan 等人^[15] 将取向差、晶界宽度和晶界倾角引入到相场模型中, 研究了受这些因素影响的不均匀分布的晶界迁移率及与之相关的晶粒

* 教育部新世纪优秀人才支持计划 (批准号: NCET-06-0741) 资助的课题.

† E-mail: weyxhl@gmail.com

生长. 这些研究都假设退火环境为均匀温度场, 而对于非均匀温度场的相场法研究尚未见报道.

温度梯度对晶界迁移率有很大影响, 本文根据晶界迁移率与温度的关系, 确立晶界迁移率函数, 并将相场法应用于研究体系在非均匀温度场中的退火过程, 模拟多晶材料受不均匀分布晶界迁移率影响而引发的非均匀晶粒生长行为, 探讨退火温度对晶粒形貌的影响和柱状晶粒出现的条件, 试图为探明非均匀晶粒生长的微观机理提供预测精度更高的模型与方法.

2. 方法与模型

本研究以 Chen 等人^[8]和 Moelans 等人^[14]所提出的相场法为基础, 进一步考虑受温度场影响而产生不均匀分布的晶界迁移率及其在模型中的表示方式, 从而研究温度梯度对晶粒生长的影响以及非均匀晶粒生长行为. 本节首先简单介绍相场的基本方法, 然后根据晶界迁移率与温度的关系确立晶界迁移率的表达式及其离散方法, 最后说明应用到静态和动态温度梯度下晶粒生长行为的模拟条件和模型.

2.1. 相场法

在反映单相多晶材料晶粒生长的相场法^[8]中, 可以采用一系列非保守的取向场变量 ($\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_p$) 来描述不同的晶粒取向, 其中 p 是总取向数. 某一个取向场变量 η_i 在晶界处被定义为绝对值在 $[0, 1]$ 之间的值, 而在晶粒内则被定义为 1 或 -1 , 其他的 $p-1$ 个取向的值均为 0. 该取向场能够描述具有曲率、倾角和宽度等特征的晶界. 晶粒生长的驱动力是界面能的降低, 为了描述晶粒生长行为需构建包含界面能的能量方程; 在相场法中, 体系的总能量 F 可表示为取向场的函数, 即

$$F = \int_V \left[f_0(\eta_1(r), \eta_2(r), \dots, \eta_p(r)) + \frac{\kappa}{2} \sum_{i=1}^p (\nabla \eta_i(r))^2 \right] d^3r, \quad (1)$$

其中, f_0 是局部自由能密度函数, r 是用离散格子 (grid) 位置 (x, y) 表示的二维空间, κ 是能量梯度系数, 对于一个给定的 f_0 , 晶界能和晶界宽度与 κ 值有关. 在 $(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_p) = (1, 0, \dots, 0), (0, 1, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, 1), (-1, 0, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, -1)$ 处, 要求 f_0 存在等深的势阱, 从而保证每个取

向的权重在空间上是等同的. 在本研究中, 我们采用 Chen 等人^[8]给出的简单函数来表示

$$f_0 = \sum_{i=1}^p \left(-\frac{\alpha}{2} \eta_i^2 + \frac{\beta}{4} \eta_i^4 \right) + \gamma \sum_i \sum_{j \neq i}^p \eta_i^2 \eta_j^2, \quad (2)$$

其中, α, β, γ 是与晶界能和晶界宽度有关的常数. 在 $\gamma > \beta/2$ 的条件下, f_0 能满足上述要求.

取向场 $\eta_i(r, t)$ 是非保守场, 其演化规律可以通过与时间相关的金兹堡-朗道 (TDGL) 方程^[16]来描述, 即

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta_i(r, t)}{\partial t} &= -L(r, t) \frac{\delta F}{\delta \eta_i(r, t)} \\ &= -L(r, t) \left[-\alpha \eta_i(r, t) + \beta (\eta_i(r, t))^3 \right. \\ &\quad \left. + 2\gamma \eta_i(r, t) \sum_{j \neq i}^p (\eta_j(r, t))^2 \right. \\ &\quad \left. - \kappa \nabla^2 \eta_i(r, t) \right], \quad (3) \end{aligned}$$

其中, $L(r, t)$ 是归一化后的晶界迁移率; F 为 (1) 式给出的自由能函数; t 为时间步 (ts), 所有格子各计算一次后计为一个时间步. 为了求解 (3) 式, 必须将其在空间离散, 再用欧拉 (Euler) 法求解时间相关性问题. Chen 等人^[8]用该方法模拟晶界迁移率在体系内呈均匀分布时的晶粒生长时假设 $L(r, t)$ 为一个常数, 但也指出了如果将其设置为一个函数, 就可用于研究不均匀分布的晶界迁移率对晶粒生长行为的影响. 事实上, Moelans 等人^[14]通过建立 $L(r, t)$ 与晶粒取向差、晶界倾角等相关的函数形式, 模拟了材料本身特性引起不均匀分布的晶界迁移率以及相应的晶粒生长行为, 较好地体现了 Chen 等人的设想. 本文的关键工作是建立 $L(r, t)$ 的表达式并用于描述体系内受不均匀温度场影响下的晶界迁移率大小, 且根据具体模型将其在空间与时间中离散化, 最后用于模拟体系内温度场分布不均匀的退火过程.

2.2. 晶界迁移率的离散

在退火过程中, 温度通过晶界迁移率对晶粒生长产生影响, Arrhenius 描述了晶界迁移率与温度的关系方程, 即 Arrhenius 方程^[17]; 不均匀温度场影响晶粒生长的物理本质是与之有关的不均匀晶界迁移率对晶粒生长的影响. 根据 Arrhenius 方程, 晶界迁移率与温度具有相似分布情况, 即二者在体系内的大小和梯度呈一定的比值. 因此, 通过设定晶界迁移率与时间和空间的函数可以描述温度对晶

粒生长的影响,且晶界迁移率在体系的大小和梯度均与温度的大小和梯度一一对应.

在相场法中,可以利用 Arrhenius 方程和温度场的分布获得晶界迁移率,但是本文为了便于研究温度场梯度对晶粒生长的影响,假设晶界迁移率 $L(r, t)$ 受温度梯度的影响在二维离散格子 $r(x, y)$ 的其中一维空间(x 方向)上呈正态分布

$$L(r, t) = L(x, t) = L_{\min} + (L_{\max} - L_{\min}) \times \exp\left(-\frac{(x - X_p)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (4)$$

其中 L_{\max} 和 L_{\min} 分别为最大和最小的晶界迁移率,分别对应着体系内的最高和最低的温度;标准差 σ 间接表示了体系内的温度梯度大小;均值 X_p 是峰值在离散空间 $r(x, y)$ 的横坐标值. 当温度梯度不随时间变化时,例如(4)式中的 $X_p = X_a/2$ (X_a 为模型的一维尺度)时,体系中部温度最高,将出现最大的晶界迁移率;然而,在诸如焊接、钎焊和局部退火等工艺中,温度梯度是随时间变化的,材料的晶界迁移率受动态温度梯度影响也随时间和空间而变化,此时我们通过设置式(4)中的均值 X_p 为一个与时间 t 和动态热源迁移速率 v 有关的变量($X_p = vt$)来表述晶界迁移率随时间和位置的变化.

2.3. 模拟条件与模型

本研究中,我们首先通过设定晶界迁移率为常数来模拟在温度场均匀分布情况下晶粒生长 300 ts 后得到的微观组织,将其作为初始组织. 随后,将晶界迁移率设定为如(3)式所示的正态分布函数,模拟温度场非均匀分布条件下的晶粒生长行为. 在此条件下,体系内预热温度(即最低温度)引起的最小迁移率 L_{\min} 为 0.001,而由附加热源中心温度(即最高温度)加热引起的最大迁移率 L_{\max} 为 1.0,即最大迁移率与最小迁移率的比值 L_{\max}/L_{\min} 取 1000:1. 一般来说,在对一种具体的材料体系进行定量模拟时,能量函数((1)和(2)式)中的参数可以通过拟合 Thermocalc 软件获得的该体系自由能数据^[18]或者由实验获得的晶界能换算^[8]而确定. 然而,本文的研究对象不是一种具体的材料体系,所以采用无量纲参数作为研究体系的系数,而且为了方便单独考虑不均匀分布的晶界迁移率对晶粒生长的影响,假设晶界能和晶界宽度在体系内均为恒定的值,即将(1)和(2)式中与晶界能和晶界宽度相关的系数 α, β, γ 和 κ 分别设置为常量(本文分别选取为 1.0,

1.0, 1.0 和 1.5).

模拟范围均采用 256×256 单元的正方格子,即 $X_a = 256$;在采用显式 Euler 法求解相场方程((3)式)时,为了保证数值收敛时间步长(Δt)和空间步长($\Delta x, \Delta y$)的选取应满足如下条件:

$$\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{(\Delta y)^2} \leq \frac{1}{4\kappa\Delta t}, \quad (5)$$

在满足该收敛条件下,不同的空间步长将导致数值计算产生不同的误差,且选取的空间步长越大,引起的数值计算误差也越大^[19]. 然而,当选取的空间步长减小时,时间步长也要相应的减小,这意味着计算耗时增加. 为了减少数值计算误差和计算耗时,这里选取 $\Delta x = \Delta y = 2.0, \Delta t = 0.25$. 另外,给定了所有的模型参数后,根据 Fan 等人^[20]和 Chen 等人^[21]提出的关系式可计算得到模拟中晶界宽度为 5 个网格,并可得到实际时间步长($\Delta t'$)与模拟时间步长的对应关系.

在上述模拟中,我们考虑了两种不同的温度梯度,即静态温度梯度和动态温度梯度. 在考虑静态温度梯度时,设置四种均值相同($X_p = X_a/2$)而标准差不同($2\sigma = 0.04X_a, 0.08X_a, 0.16X_a, 0.32X_a$)的正态分布函数(如图 1 所示)来描述体系内不均匀分布的晶界迁移率,以考察静态温度梯度大小(对应于 2σ)对晶粒生长的影响;在考虑动态温度梯度时,设置五种与速度相关的不同均值($X_p = vt; v = 2.0 \times 10^{-2}, 2.0 \times 10^{-3}, 2.0 \times 10^{-4}, 2.0 \times 10^{-5}, 2.0 \times 10^{-6}$ grid/ts)而标准差相同($2\sigma = 0.08X_a$)的正态分布函数作为体系内随时间变化的不均匀分布晶界迁移率(如图 2 所示),以考察热源以五种不同的恒定速率移动的动态温度梯度对晶粒生长的影响.

3. 结果与讨论

3.1. 静态温度梯度对晶粒生长的影响

图 3 所示为退火过程中受不同静态温度梯度大小影响的微观组织形貌. 可以看出,由于 y 方向上不存在温度梯度,在该局部区域内具有相同的晶界迁移率,晶粒尺寸在 y 方向上是均匀分布的. 同时,由于该体系在 x 方向上存在静态温度梯度(见(4)式),晶粒尺寸在 x 方向上呈不均匀分布,体系中央区域的温度(或晶界迁移率)较高,受其影响晶粒较为粗大,反之边缘区域的晶粒较为细小;随着温度

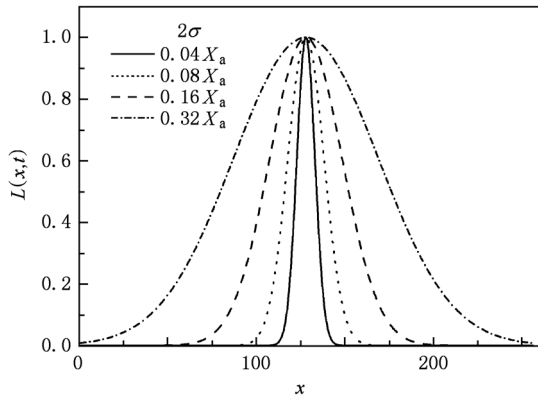


图1 静态温度梯度条件下均值相同而标准差不同的晶界迁移率分布($X_p = X_a/2$, $2\sigma = 0.04X_a, 0.08X_a, 0.16X_a, 0.32X_a$)

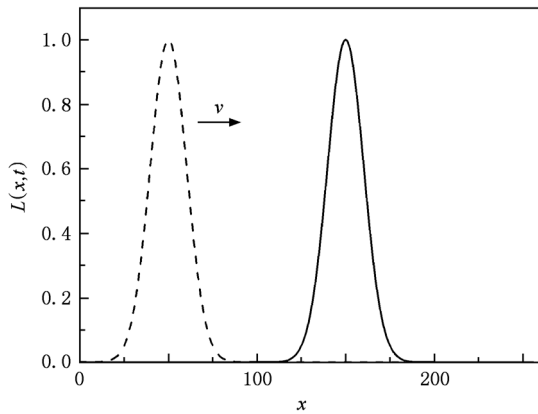


图2 动态温度梯度条件下以速率 v 移动的晶界迁移率分布($X_p = vt$, $2\sigma = 0.08X_a$)

梯度的减小(即 2σ 增大), 温度较高的区域占体系的范围更广, 粗大晶粒区域变宽.

虽然在晶界迁移率相同的 y 方向上晶粒大小呈均匀分布, 但是从微观组织形貌上尚无法判断这些晶粒在演化过程中是否为正常生长. 晶粒生长指数是判断晶粒是否属于正常生长的一个重要依据. 对于多晶体材料, 晶粒生长应该满足以下动力学方程:

$$R(x, t)^m = R_0^m + 2CL(x, t)t, \quad (6)$$

其中 R_0 为初始晶粒尺寸; m 为晶粒生长指数的倒数; C 是与晶界能有关的参数; $L(x, t)$ 为晶界迁移率; t 为模拟时间步. 对于正常晶粒生长, 其生长指数 ($1/m$) 的理论值应为 0.5.

在静态温度梯度条件下, 假设 y 方向上晶界迁移率相同的晶粒属于正常生长, 不同位置的平均晶粒尺寸 $R(x, t)$ 应该等于晶粒在恒定迁移率 $L(x, t)$ 作用下正常生长 t 时间后的尺寸 $R(t)$, 其晶粒生长

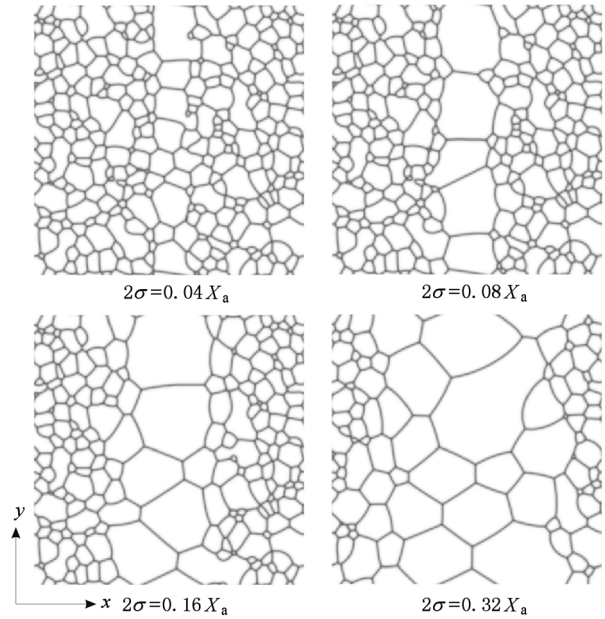


图3 温度梯度大小(2σ)对微观组织演变的影响($t = 2.0 \times 10^4$ ts)

指数也应该为模拟正常晶粒生长所得的值. 作为比较, 我们设定晶界迁移率为常数(这里研究了三种不同晶界迁移率的情况: $L(x, t) = 0.01, 0.10$ 和 1.00), 模拟了在温度场均匀分布情况下 $0 \leq t \leq 2.0 \times 10^4$ ts 期间的正常晶粒生长行为, 采用递归统计法^[22] 统计出平均晶粒尺寸, 最后拟合该时间段内的晶粒尺寸数据, 得到不同晶界迁移率作用下的晶粒生长指数 $1/m = 0.515 \pm 0.006$ (即 $m = 1.94 \pm 0.02$), 参数 $C = 0.06 \pm 0.01$. 另外, 在模拟时, 体系内晶界能是均匀分布的且为一定值, 而参数 C 与温度梯度及晶界迁移率的大小无关, 因此在不同静态温度梯度和晶界迁移率下, 如果体系出现正常晶粒生长行为, 参数 C 仍应等于 0.06; 在此基础上(即 $C = 0.06$) 上, 我们拟合了不同静态温度梯度下三个具有不同晶界迁移率(即 $L(x, t) = 0.01, 0.10$ 和 1.00) 位置的晶粒在 $0 \leq t \leq 2.0 \times 10^4$ ts 期间的生长, 统计出平均晶粒尺寸, 并获得相应的晶粒生长指数(见表 1). 由表 1 可知, 体系晶粒生长指数都偏离了正常生长指数, 且偏离程度与体系内温度及其梯度大小有关, 随着温度梯度增大(即 2σ 减小) 晶粒生长指数 $1/m$ 减小. 为了显示不同温度梯度条件下的晶粒长大行为, 图 4 给出了表 1 中 $L(x, t) = L(128, t) = 1.00$ 所对应的 $R(t)$ 与 t ($0 \leq t \leq 2.0 \times 10^4$ ts) 的关系及其拟合曲线. 由图可知, 随着温度梯度增大晶粒生长指数 $1/m$ 减小, 最终晶粒尺寸

减小,意味着温度梯度对晶粒生长有显著影响. 这是因为温度梯度越大时,体系中心附近的温度下降的越快,低温区域的晶界对高温区域晶粒生长的阻碍作用

越明显. 综上所述,在温度(或晶界迁移率)相同的局部区域内晶粒生长与温度及其梯度大小有关,其生长指数不同程度地偏离了正常生长指数.

表 1 基于不同静态温度梯度模拟结果所拟合的晶粒生长动力学参数($R_0 = 7.53, C = 0.06$)

	$2\sigma = 0.04X_a$			$2\sigma = 0.08X_a$			$2\sigma = 0.16X_a$			$2\sigma = 0.32X_a$		
$L(x)$	0.01	0.10	1.00	0.01	0.10	1.00	0.01	0.10	1.00	0.01	0.10	1.00
$1/m$	0.490	0.414	0.350	0.548	0.432	0.415	0.630	0.460	0.453	0.740	0.492	0.462

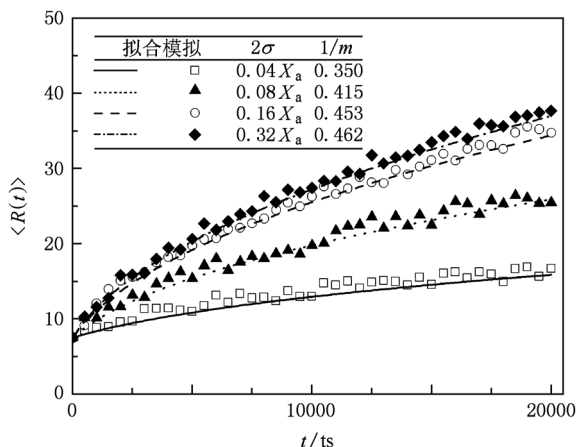


图 4 不同静态温度梯度条件下平均晶粒尺寸 $R(t)$ 与时间 t 的关系($x = 128, R_0 = 7.53, C = 0.06, L(x, t) = 1.00$)

3.2. 动态温度梯度对晶粒生长的影响

在焊接和局部退火等工艺中,受动态温度梯度

影响,晶界迁移率在体系中随时间定向变化,导致不均匀晶粒的生长,并经常会出现定向生长的柱状晶粒. 本文以局部退火工艺作为模拟条件,研究动态热源的移动速率对晶粒生长的影响. 图 5 所示是动态热源移动速率为 2.0×10^{-3} grid/ts 时,柱状晶粒组织的演变过程. 可以看出,柱状晶粒持续向右生长至温度最高位置,且有继续向右吞并等轴晶粒的趋势,而动态热源右侧还处在最低晶界迁移率状态,晶粒几乎没有生长.

图 6 所示为在不同动态热源移动速率条件下,热源从体系最左端移动到最右端后所获得的微观组织形貌. 可以看出,当动态热源移动速率为 2.0×10^{-6} grid/ts (图 6 (b)) 或 2.0×10^{-2} grid/ts (图 6 (f)) 时,体系都呈现等轴晶粒分布,但前者的晶粒尺寸更加粗大;当动态热源移动速率为 2.0×10^{-5} 至 2.0×10^{-3} grid/ts 时(图 6 (c, d, e)),体系内出现了柱状晶粒,且随着速率的增加,在柱状晶之间分布等轴晶粒的概率升高.

不同条件下微观组织演变的差异与动态热源

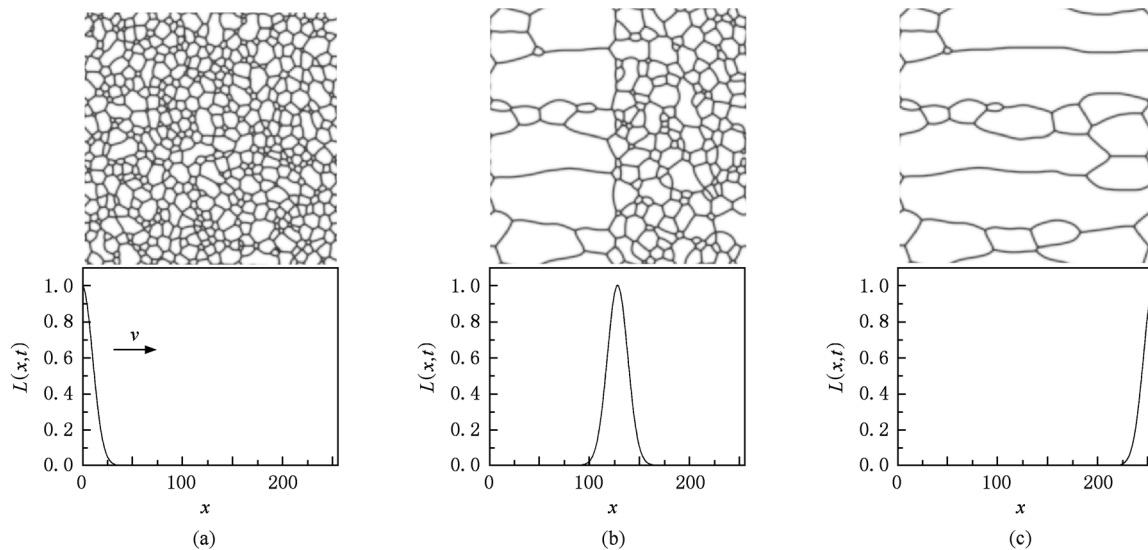


图 5 局部退火过程中的柱状晶粒形貌随时间的演变($L_{max} = 1.0, 2\sigma = 0.08X_a, v = 2.0 \times 10^{-3}$ grid/ts) (a) 初始组织, $t = 0$ ts; (b) 柱状晶粒前端位于加热中央区, $t = 6.4 \times 10^4$ ts; (c) 最终柱状组织, $t = 1.28 \times 10^5$ ts

移动速率及晶粒生长速率的大小有关. 当动态热源移动速率过低时(如图 6(b)), 每模拟 5.0×10^5 ts 热源才向右移动一个空间格子, 晶粒沿热源移动方向的生长速率高于热源的移动速率, 使得移动热源不足以约束晶粒的定向生长, 得到等轴晶粒; 而当动态热源移动速率过高时(如图 6(f)), 每模拟 50 个时间步热源即向右移动一个空间格子, 晶粒沿热源移动方向的生长速率低于热源的移动速率, 没有充足的时间形成柱状晶粒, 也得到等轴晶粒. 综上所述, 动态热源移动速率过低或过高, 体系都不会出现柱状晶粒, 且形成的等轴晶均由原等轴晶受热生长得来, 但由于前者的动态附加热源移动速率较低, 体系受附加热源加热时间较长, 因此产生了相对粗大的等轴晶. Bake 等人^[3, 4] 实验研究了退火工艺对柱状晶生长的影响, 发现热源移动速率过高或过低都不会出现柱状晶粒; 同时指出当体系能形成柱状晶粒时, 随着热源移动速率的增加, 在柱状晶之间更容易分布等轴晶粒, 本模拟结果较好地体现了这些规律. 比较图 6(c)—(e) 后不难看出当动态热源移动速率处于能产生柱状晶的速率范围内时, 随着热源移动速率的增加, 在柱状晶之间存在等轴晶粒的概率升高. 这是因为随着附加热源移动速率的增加, 提供柱状晶前沿吞并等轴晶的时间将减少, 使得部分原等轴晶粒未能被柱状晶充分吞并而遗留成等轴晶.

文献[4, 6]报道的局部退火条件下柱状晶粒生长的实验与理论研究表明, 当动态热源的移动速率介于晶粒生长的最小速率和最大速率之间时, 体系才会出现柱状晶粒. 为了检验这一论点以及模型的可靠性, 我们在模拟所得结果的基础上, 通过(6)式中的晶粒尺寸 R 对时间的导数计算了晶粒生长速率 v_g , 即

$$v_g = \frac{dR}{dt} = \frac{2R^{1-m}CL}{m}, \quad (7)$$

体系内具有最小迁移率系数 $L_{\min} = 0.001$ (对应的晶粒生长指数 $1/m = 0.572$) 区域的晶粒生长速率最小, 而在最大迁移率系数 $L_{\max} = 1.00$ (对应的晶粒生长指数 $1/m = 0.415$) 区域的晶粒生长速率最大. 我们把几何参数 ($C = 0.06$), 初始晶粒尺寸 ($R_0 = 7.53$) 和迁移率系数及对应的晶粒生长指数代入(7)式后, 计算得到最小和最大晶粒生长速率分别为 1.51×10^{-5} 和 2.89×10^{-3} grid/ts. 从图 6 的组织形貌及模拟条件可以看出, 出现柱状晶粒时, 动态热源的移动速率处在该范围内, 较好地验证了上述

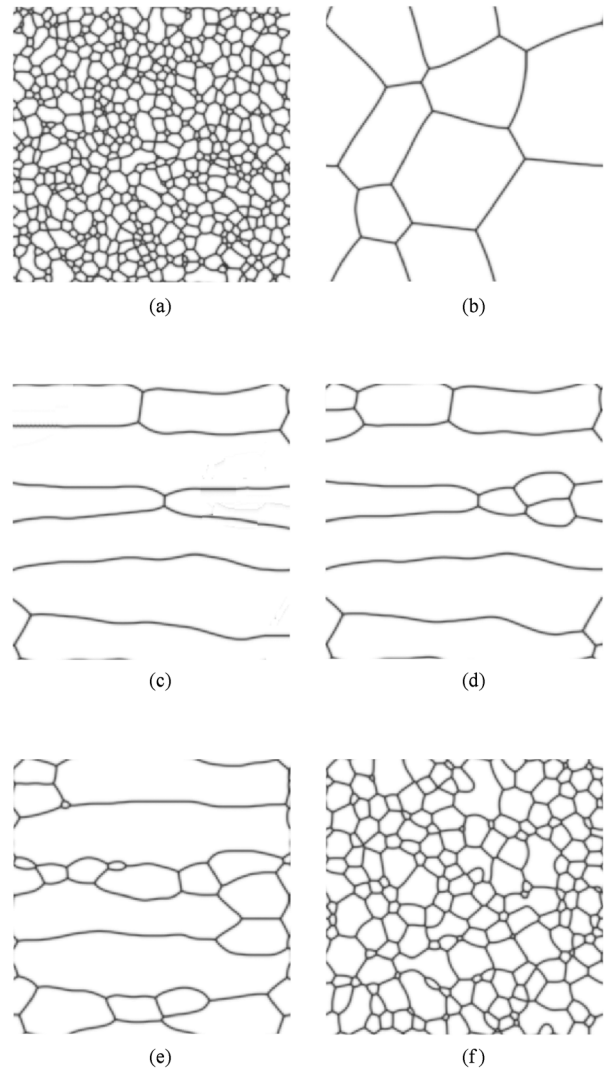


图 6 局部退火过程中动态热源移动速率 (v) 对组织形貌的影响 ($L_{\max} = 1.0, L_{\min} = 0.001, 2\sigma = 0.08X_a$) (a) 初始组织; (b) $v = 2.0 \times 10^{-6}$ grid/ts, $t = 1.28 \times 10^8$ ts; (c) $v = 2.0 \times 10^{-5}$ grid/ts, $t = 1.28 \times 10^7$ ts; (d) $v = 2.0 \times 10^{-4}$ grid/ts, $t = 1.28 \times 10^6$ ts; (e) $v = 2.0 \times 10^{-3}$ grid/ts, $t = 1.28 \times 10^5$ ts; (f) $v = 2.0 \times 10^{-2}$ grid/ts, $t = 1.28 \times 10^4$ ts

实验与理论结果.

综上所述, 在静态温度梯度条件下的晶粒呈不均匀生长, 其生长指数与温度梯度大小有关; 在动态温度梯度条件下, 只有当热源的移动速率处于一定范围内才会出现柱状晶粒, 模拟结果能较好地体现实验和理论研究的结果. 因此, 该模型可以为通过控制温度梯度大小或者热源的移动速率来获得理想的晶粒尺寸或柱状晶粒提供有益的信息, 虽然对温度梯度进行了简化处理, 但在实际应用中可通过 Arrhenius 方程建立晶界迁移率 $L(r, t)$ 与实测温度梯度的函数来进一步研究在更为复杂条件下的

晶粒生长行为. 文献[6]中用蒙特卡洛法作过类似的研究,但是该方法所得的晶粒生长指数在模拟前期和后期有较大差别^[23-25],而通过相场法得到的生长指数与模拟时间基本无关^[8],因此在计算与生长指数和模拟时间有关的物理量时(如晶粒生长速率),相场法得到的结果更接近实际情况;另外,与蒙特卡洛法相比,相场法最大的优点是将晶界作弥散化处理^[18, 26],更易于将晶界几何形态、晶粒间的取向差、各向异性的晶界能等复杂因素考虑进来^[14],用相场法研究由晶界特性主导的晶粒生长行为更能体现其物理本质.

4. 结 论

本文建立了一个可应用于研究温度梯度影响下的晶粒生长行为的相场模型. 考虑到在退火过程中温度梯度对晶粒生长的影响实质是不均匀分布的晶界迁移率对晶界迁移的影响,该模型将温度及其梯度大小通过设定与之相关的晶界迁移率函数

来体现,同时利用该模型研究了受静态和动态温度梯度影响的晶粒生长行为. 研究表明:在温度场呈静态梯度分布的退火过程中,体系内的晶粒发生不均匀生长,低温区域阻碍了高迁移率晶界的迁移,导致晶粒生长指数随温度梯度的变化而变化,不同程度地偏离了正常生长指数;在温度场呈动态梯度分布的退火过程中,柱状晶粒前端持续生长至温度最高位置,且有继续向右吞并等轴晶粒的趋势;柱状晶粒生长与动态热源的移动速率有密切的关系,只有当热源的移动速率处于一定范围内,柱状晶粒才会出现,且当动态热源移动速率处于能产生柱状晶的速率范围内时,随着热源移动速率的增加,在柱状晶之间更易分布有等轴晶粒. 如果通过 Arrhenius 方程建立晶界迁移率与实测温度及其梯度大小的函数,该模型将可以用于研究更为复杂条件下的晶粒生长行为.

本论文得到中南大学高性能计算中心的支持,在此表示感谢.

- [1] Doherty R D, Hughes D A, Humphreys F J, Jonas J J, Juul Jensen D, Kassner M E, King W E, McNelley T R, McQueen H J, Rollett A D 1997 *Mater. Sci. Eng. A* **238** 219
- [2] Humphreys F J, Hatherly M 2004 *Recrystallization and related annealing phenomena (second edition)* (Oxford: Elsevier) pp121 - 167
- [3] Li J, Johns S L, Iliescu B M, Frost H J, Baker I 2002 *Acta Mater.* **50** 4491
- [4] Baker I, Li J 2002 *Acta Mater.* **50** 805
- [5] Rollett A D, Srolovitz D J, Anderson M P 1989 *Acta Mater.* **37** 1227
- [6] Holm E A, Zacharopoulos N, Srolovitz D J 1998 *Acta Mater.* **46** 953
- [7] Simmons J P, Wen Y H, Shen C, Wang Y Z 2003 *Mater. Sci. Eng. A* **365** 136
- [8] Chen L Q 1995 *Scripta Metall. Mater.* **32** 115
- [9] Li J J, Wang J C, Yang G C 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3516
- [10] Gao Y J, Zhang H L, Jin X, Huang C G, Luo Z R 2009 *Acta Metall. Sin.* **45** 1190 (in Chinese) [高英俊、张海林、金星、黄创高、罗志荣 2009 金属学报 **45** 1190]
- [11] Lu Y, Beckermann C, Ramirez J C 2005 *J. Cryst. Growth*. **280** 320
- [12] Moelans N 2006 *Ph. D. Dissertation* (Leuven: Katholieke Universiteit Leuven)
- [13] Yang H, Zhang Q G, Chen M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3740 (in Chinese) [杨弘、张清光、陈民 2005 物理学报 **54** 3740]
- [14] Moelans N, Blanpain B, Wollants P 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 025502
- [15] Kazaryan A, Wang Y, Dregia S A, Patton B R 2002 *Acta Mater.* **50** 2491
- [16] Chan J W, Hilliard J E 1958 *J. Chem. Phys.* **28** 258
- [17] Encyclopaedia Britannica (Encyclopedia Britannica, Inc., Chicago, IL) <http://www.britannica.com/eb/article-9009619> [2007]
- [18] Zong Y P, Wang M T, Guo W 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S161 (in Chinese) [宗亚平、王明涛、郭巍 2009 物理学报 **58** S161]
- [19] Chen L Q, Shen J 1998 *Comput. Phys. Commun.* **108** 147
- [20] Fan D, Chen L Q, Chen S P 1997 *Mater. Sci. Eng. A* **238** 78
- [21] Chen Q, Ma N, Wu K S, Wang Y Z 2004 *Scripta Mater.* **50** 471
- [22] Wei C Y, Gao Y J, Zhang L N 2008 *Chin. J. Nonfer. Metal.* **18** 132 (in Chinese) [魏承扬、高英俊、张丽娜 2008 中国有色金属学报 **18** 132]
- [23] Grest G S, Anderson M P 1988 *Phys. Rev. B* **38** 4752
- [24] Anderson M P, Srolovitz D J, Grest G S, Sahni P S 1984 *Acta Metal.* **32** 783
- [25] Song X Y, Liu G Q, He Y Z 1998 *Prog. Natur. Sci.* **8** 337 (in Chinese) [宋晓艳、刘国权、何宜柱 1998 自然科学进展 **8** 337]
- [26] Chen D Q, Zheng Z Q, Liu Z Y, Li S C 2003 *Acta Metall. Sin.* **39** 1238 (in Chinese) [陈大钦、郑子樵、刘祖耀、李世晨 2003 金属学报 **39** 1238]

Effect of temperature gradient on grain growth behavior from phase field simulations *

Wei Cheng-Yang^{1)†} Li Sai-Yi²⁾

1) (School of Mechanical and Automotive Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

2) (School of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

(Received 31 July 2010; revised manuscript received 11 January 2011)

Abstract

A 2D model is developed to investigate the grain growth behavior under the influence of temperature gradient using the phase field method. The model is used to simulate the effect of temperature gradient on the nonuniform and directional grain growth behavior during annealing of polycrystalline materials. The results show that the static temperature gradient leads to the nonuniform grain growth, and that the grain growth exponent deviates from that of normal grain growth. In the case of annealing with a moving temperature gradient, the columnar grains may develop towards the locations with the highest temperature in the heated zone. Moreover, the grain growth behavior is closely related to the moving speed of the moving heated zone. Columnar grains occur only when the moving speed of the heated zone is higher than the minimum grain growth rate but lower than the maximum grain growth rate.

Keywords: grain growth, phase field method, grain boundary mobility, zone annealing

PACS: 07.05.Tp, 61.72.Mm, 81.40.Ef, 61.72.Cc

* Project supported by the Program for New Century Excellent Talents in University, China (Grant No. NCET-06-0741).

† E-mail: weyxhl@gmail.com