

## 晶粒生长演变相场法模拟界面表达的物理模型\*

张宪刚<sup>1)2)</sup> 宗亚平<sup>1)†</sup> 王明涛<sup>3)</sup> 吴艳<sup>1)</sup>

1) (东北大学材料各向异性与织构教育部重点实验室, 沈阳 110004)

2) (沈阳化工大学数理系, 沈阳 110142)

3) (山西太钢不锈钢股份有限公司, 太原 030003)

(2010年7月6日收到; 2010年8月18日收到修改稿)

讨论了当前固态组织演变过程的相场法模拟模型, 论证了相场法中界面的概念以及模型中界面的各种处理方法, 以 AZ31 镁合金再结晶系统为例, 研究了模型参数取值对界面特征的影响, 提出了晶界作用域的概念, 阐述了晶界作用域就是相场模型中界面处有序化变量的变化范围, 其物理意义是界面能量的分布范围, 并对应于成分界面偏析的范围. 模拟得出, 晶界作用域宽度主要由梯度项系数决定, 晶界能则由梯度项系数和耦合项系数共同决定. 对于 AZ31 镁合金, 模拟研究了晶界作用域宽度取值的合理性和对显微组织影响的关系, 得出取值为  $1.18 \mu\text{m}$  时, 模拟符合实验结果. 引入界面作用域的新概念后, 利用本模型首次实现了相场法晶粒长大的真实空间、时间的工业尺度的模拟.

**关键词:** 相场法, 界面, 计算机模拟, 显微组织

**PACS:** 82. 20. Wt, 64. 70. kd, 77. 80. bn

## 1. 引言

相场法是一种基于经典热力学和动力学理论的半唯象方法<sup>[1]</sup>. 该方法具有以下优点: 可以通过场变量简单明了地表征出任何一种复杂组织的几何形貌, 包括单个区域或晶粒的几何形状, 区域或晶粒的空间分布、体积分数等; 可以考虑内部场和外加场(如应变场、电场和磁场)对组织变化的影响; 并且在 2 维和 3 维系统的应用并不增加模型的复杂性<sup>[2]</sup>. 相场法已经十分成熟地应用于模拟凝固过程<sup>[1,3,4]</sup>, 但是在固相-固相转变模拟的应用正处在活跃发展的阶段<sup>[5-10]</sup>.

晶界可以看成固体中具有 2 维结构的面缺陷, 晶界的厚度通常认为只有 2 到 3 个原子层, 也就是指晶界的晶体结构几何厚度<sup>[11]</sup>. 在相场法模型中以有序化变量(或成分变量)的变化范围来表示界面厚度, 以往的研究认为该厚度对应界面结构宽度或毛细现象的表面尺度<sup>[1,5]</sup>, 这样就要求模拟网格尺度为原子尺度, 相场法处理大范围原子集团的优势无法发挥, 按当前的计算能力, 网格原子尺度尚无

法完成数百微米和小时这样工业尺度的显微组织演变模拟, 导致了目前相场法固态转变的模拟基本采用的是约化时间和纳米尺度<sup>[2,5-10]</sup>. 为此, 文献[6]提出在不改变界面能和其他模拟参数的前提下, 将界面宽度任意加宽到理论值的 4 倍(约为 36 nm), 因此可以把网格尺寸提高到 6 nm 左右, 提高了计算效率、扩大了模拟范围, 但计算量仍然十分巨大无法实现工业尺度真实时空模拟. 该工作同时证明了相场模型中界面宽度的适当改变不会影响模拟结果, 但并未确定这样做的物理意义<sup>[7,8]</sup>. 本研究探索进一步扩大有序化参数表达的界面变化范围以扩大网格尺寸, 研究发现了界面作用域的概念, 阐明了扩大模型界面变化范围的合理性和其物理意义, 为许多研究表明的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<sup>[7,8]</sup>提供了理论依据.

目前所有模型都以实现真实时空模拟完成准确预测为目标, 一直在努力实现相场法的真实时空模拟. 文献[9]用计算相图的方法和数据库计算了局域自由能密度函数, 使相场法自由能表达实现真实值, 跨出了真实时空模拟的重要一步. 最近, Wen

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

† 通讯联系人. E-mail: ypzong@mail.neu.edu.cn

等<sup>[10]</sup>将相场模型应用到工程中,用该法模拟了一个扩散控制的材料组织演变过程,这是相场法首次实现了扩散型相变组织的小尺度真实时空演变过程模拟.但是在工业应用尺度界面控制相变的相场法模拟模型尚未见报道,其原因是模型中有序化参数梯度项系数等没有找到物理意义的真实值.本研究详细考察了梯度项,提出了界面作用域的概念,得到了模型参数的真实值,实现了相场法对界面控制组织演变的工业尺度真实时空模拟.

## 2. 相场法晶粒长大模型

### 2.1. 基本方程

相场法的理论基础是经典的热力学和动力学理论.与传统的方法相比,相场法也是用偏微分方程来描述组织的变化,但是该方法是通过引入一套与时间和空间有关的场变量把复杂的组织作为一个整体来研究.最熟悉的场变量的例子就是表征成分分布的浓度场和表征多相材料和多晶材料中结构变化的长程有序化参数场.这些场变量随时间和空间的变化提供了关于介观尺寸的组织变化的全部信息.场变量的变化可以通过求解半唯象的动力学方程来获得, Cahn-Hilliard 弛豫方程<sup>[12]</sup>和 Ginzburg-Landau 扩散方程<sup>[13]</sup>是相场法模型的基本方程,通过下列方程可以解出长程有序化参数  $\eta(r, t)$  和成分场变量  $c(r, t)$  随时间的变化并得到材料微观组织演化的信息

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

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

其中  $L$  和  $M$  分别是与结构松弛和扩散迁移率有关的动力学常数,  $F$  是系统的自由能函数.

### 2.2. 系统自由能函数的表达

方程(1)和(2)中的  $F$  表示模拟系统的总自由能,是相场模型的关键.在固态微观组织演变系统中,对于不同的系统和不同的影响因素关键就在于  $F$  的表达不同,系统总自由能通常包括体化学自由能、弹性应变能以及和外作用场相关的能量(如电场和磁场)等.对于单相多晶组织而言,其化学自由能表达式的一般形式为<sup>[14]</sup>

$$F_{\text{ch}} = \int_V [f_{\text{grad}} + f_0] d\mathbf{r}. \quad (3)$$

这里  $f_{\text{grad}}$  为梯度能项,与系统的界面能有关.相场法中梯度项一般表示为以下形式<sup>[6,9]</sup>:

$$f_{\text{grad}} = \frac{K_2}{2} \sum_{q=1}^n (\nabla \eta_q)^2 + \frac{K_3}{2} (\nabla c)^2, \quad (4)$$

其中  $K_2$  是有序化参数梯度项系数,  $K_3$  是成分梯度项系数.这两个梯度有一定的函数关系,不是独立的变量,通常只用其中一项代表梯度项<sup>[14]</sup>,本文选取场变量的梯度来表达梯度能项,即令  $K_3 = 0$ .

(3)式中的  $f_0$  为局域自由能密度项,在模拟多晶系统的晶粒长大时,由于是单相组织没有考虑成分的影响, Fan 等<sup>[15]</sup>提出了如下表达式:

$$f_0 = \frac{A_1}{2} \sum_{q=1}^n \eta_q^2 + \frac{A_2}{4} \sum_{q=1}^n \eta_q^4 + \frac{K_1}{2} \sum_{q=1}^n \sum_{p \neq q} \eta_q^2 \eta_p^2, \quad (5)$$

其中  $A_1, A_2$  是与系统自由能有关的常数,  $K_1$  是耦合相系数.

文献[16]利用局域自由能密度表达式(5)对单相多晶材料的晶粒生长过程和组织特征进行了模拟,并对晶粒形态、动力学和拓扑学特征进行分析并得到了与实验结果和理论分析一致的结论. Krill 等<sup>[8]</sup>随后提出了动态分配晶粒取向的算法并利用该方法进行了3维空间晶粒长大过程的模拟,该方法大大节省了内存空间并得到广泛应用.

由于  $f_0$  代表的是体系的局域自由能密度,要求其能够准确表达自由能与成分的关系,所以可以直接按多项式的形式进行简化.最近本研究小组在方程(4)的基础上,为了实现真实时空模拟,结合热力学数据库 Thermocalc 的具体合金自由能测定表达曲线,将成分引入,建议  $f_0$  取为如下形式<sup>[17]</sup>:

$$f_0 = A + \frac{A_1}{2} (c - c_l)^2 + \frac{A_2}{4} (c - c_l)^4 - \frac{A_3}{2} (c - c_l)^2 \sum_{q=1}^n \eta_q^2 + \frac{A_4}{4} \sum_{q=1}^n \eta_q^4 + \frac{K_1}{2} \sum_{q=1}^n \sum_{p \neq q} \eta_q^2 \eta_p^2. \quad (6)$$

(6)式中  $A, A_1, A_2, A_3, A_4$  是系数,通过对(5)式与 Thermocalc 数据中 AZ31 镁合金的自由能成分曲线进行拟合,并且结合冷变形储能的具体数据,求出它们的真实值.对于 AZ31 镁合金再结晶系统, 400 °C 时,  $A, A_1, A_2, A_3$  和  $A_4$  值分别为 -27.5, 16.8, 31.5, 2.65, 1.79 和 51.2 J/mol<sup>[17,18]</sup>. 对于单相系统而言,  $c_l = 0.2$  是该合金自由能成分曲线在该温度下的最低点.  $\eta$  为长程有序化参数,其定义为:在被标

定为  $\eta_1$  的晶粒内部,  $\eta_1 = 1$ , 而其他  $\eta_{i(i \neq 1)} = 0$ . 穿过晶粒  $\eta_1$  和与它相邻晶粒的晶界时,  $\eta_1$  值由 1 连续地变为 0, 本文根据文献[15]将长程有序化参数个数取为 32 个.  $K_1$  是耦合相系数, 本文将重点论述耦合相系数  $K_1$  与上述梯度项系数  $K_2$  取值的理论根据和物理意义.

### 3. 相场法界面表达的物理模型

我们研究发现, 在相场法组织模拟中, 组织的界面特征与耦合项系数和梯度项系数的取值有关, 下面找出梯度项系数和耦合项系数与界面特征的关系, 以确定其物理意义.

文献[19]针对单相晶粒长大系统根据界面处平衡条件计算得出界面宽度和界面能与梯度项系数的关系为

$$l = \eta_{\text{eq}} \left( \frac{K_2}{\Delta f_0} \right)^{1/2}, \quad (7)$$

$$\sigma_{\text{gb}} = \int_{-\infty}^{+\infty} 2\Delta f_0 dx, \quad (8)$$

其中  $K_2$  为单相系统的梯度项系数,

$$\Delta f_0 = \frac{K_p}{2} \left( \frac{d\eta_p}{dx} \right)^2 + \frac{K_q}{2} \left( \frac{d\eta_q}{dx} \right)^2.$$

(7)式中界面处取向场变量的平均值  $\eta_{\text{eq}}$  只有在计算后才知道, 而且界面是一个  $\eta$  值连续变化的区域, 会有一系列的  $\eta$  取值. 所以该表达并不能有效地计算模拟晶界的宽度或者根据需要的宽度来推导耦合项系数, 仅可以用来估计热力学参数对界面宽度的影响关系.

文献[17]随后将 Kim 等<sup>[20]</sup>在凝固过程中推导出的有关界面能和界面宽度与系数关系的结论应用于析出过程, 其具体界面宽度和界面能分别表示为

$$l = \frac{\sqrt{2}}{2} \alpha \left( \frac{\sqrt{K_2}}{\sqrt{\omega}} \right), \quad (9)$$

$$\sigma_{\text{gb}} = \frac{\sqrt{\omega K_2}}{3\sqrt{2}}, \quad (10)$$

其中  $\alpha$  为与对界面厚度的定义有关的常数,  $K_2$  为梯度项系数,  $\omega$  为自由能成分曲线上两个低谷之间的势垒值. 然而, 在凝固过程中推导出来的结论是否在固态相变条件下仍然适用在文献[17]中并没有进行论证; 并且该方法对模型的化学自由能项的构造要求较高, 仅对一些特殊系统有效, 无法适合各

种系统.

以上两种方法都是试图找出界面能和界面宽度与梯度项以及耦合项系数的解析关系, 这样的优点在于表达简单易于计算, 然而由于相场模型是利用离散化的方法进行数值计算, 对模型中的公式无法进行解析求解. 同时, 由于不同模拟系统的各能量项的表达不一样, 所以没有普遍适用的计算公式来计算界面能和宽度与界面项各系数的关系.

下面将以 AZ31 镁合金再结晶系统为研究载体, 选择  $128 \times 128$  个格子的 2 维空间进行模拟研究, 动力学常数  $L$  和  $M$  根据文献[17,21]分别取为  $1.72 \times 10^{-2} \text{ mol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{J}^{-1}$  和  $3.87 \times 10^{-20} \text{ m}^2 \cdot \text{mol} \cdot \text{J}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ , 选取扩散系数  $M$  时, 只考虑了 Al 的扩散, 而没有考虑其他微量元素的扩散.  $A, A_1, A_2, A_3, A_4$  及有序化参数个数的取值如上所述. 对  $K_1, K_2$  在一定范围内进行赋值并计算, 模拟得出了梯度项系数和耦合项系数不同的取值所得到的组织中晶界处成分场和取向变量场的分布. 经过计算发现, 当  $K_1$  取  $380 \text{ J/mol}$ ,  $K_2$  取  $3.60 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{J/mol}$  时, 晶界处有序化场变量以及成分场变量的变化如图 1 所示.

图 1(a) 和 (b) 分别是利用有序化参数  $\eta$  和 Al 含量得到的组织图. 由图 1(a), (b) 可以看出, 两图中晶界位置、宽度等对应良好, 说明了该模型的有效性. 图 1(c) 中  $r$  所表示的范围为晶界处有序化参数  $\eta$  的变化范围, 图 1(d) 中  $r$  表示的范围为晶界处成分偏析的范围 (Al 含量的变化范围), 这两个范围保持一致. 该现象表明, 相场模型中界面处是用有序化参数的变化来表示的, 变化的范围表示的不是界面原子结构的宽度, 而是界面能在垂直界面方向变化的范围, 同时也表明该范围对应着合金元素界面偏析的范围. 基于以上现象, 本文提出一个新的概念, 即晶界作用域  $r$ , 用它来表示相场模型中界面处有序化参数的变化范围. 如果是非单组分物质, 晶界作用域  $r$  还对应界面处的成分偏析范围. 其物理意义为界面能在界面上分布的范围.

为了进一步弄清楚  $K_1, K_2$  与晶界特征的关系, 在其他参数保持不变的条件下, 在一定的范围内对  $K_1$  进行随机离散取值, 对  $K_2$  进行随机离散取值的同时, 还需考虑所获得的对应晶界作用域的宽度是所设定的网格尺寸的整数倍关系, 以便于数据的处理. 对于晶界作用域宽度, 以图 1(c) 和 (d) 相同的方式进行观察.

对于界面能, 选取各向同性系统双晶平直界面

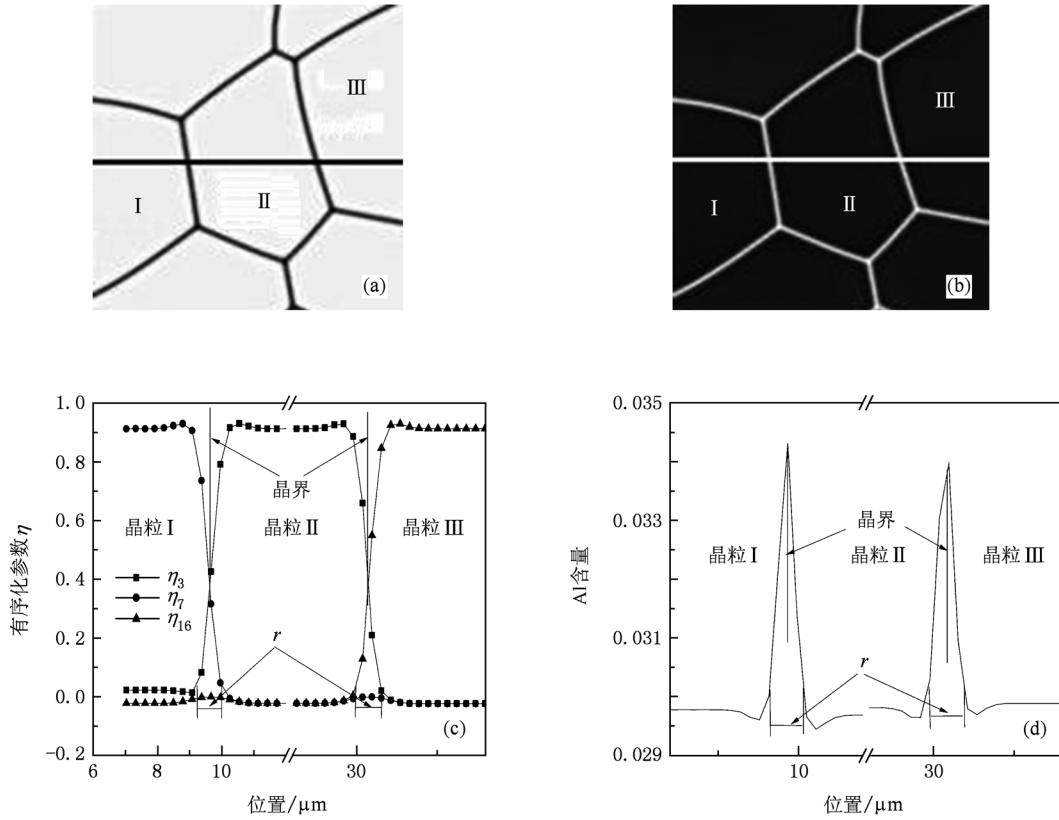


图1 有序化参数及成分在晶界处的变化 (a)用有序化参数 $\eta$ 得到的组织图; (b)用Al含量得到的组织图; (c)晶界处的 $\eta$ 值; (d)晶界处的Al含量

模型界面能公式进行计算<sup>[19]</sup>

$$\sigma_{gb} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ f_{0,gb} - f_{min} + \frac{K_2}{2} \left( \frac{d\eta_p}{dx} \right)^2 + \frac{K_2}{2} \left( \frac{d\eta_q}{dx} \right)^2 \right] dx . \quad (11)$$

该式容易由(6)式导出,其中 $f_{0,gb}$ 是晶界附近局域自由能

密度函数, $f_{min}$ 是基体处自由能密度函数,为 $\sum_{q \neq p}^n \eta_q^2(\mathbf{r}, t) = 0, \eta_p^2(\mathbf{r}, t) = 1$ 时的局域自由能密度函数.

模拟得出的 $K_1, K_2$ 与晶界特征的关系如图2所示.由图2(a)可以看出, $K_2$ 相同而 $K_1$ 不同的点会

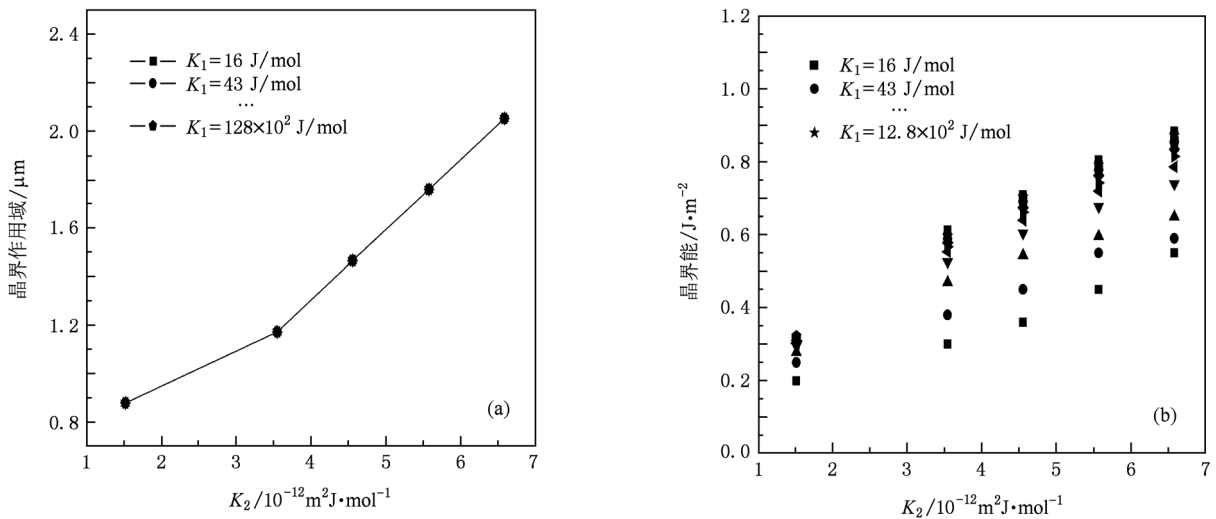


图2  $K_1, K_2$ 和界面特征关系的模拟结果 (a) $K_1, K_2$ 和晶界作用域的关系; (b) $K_1, K_2$ 和晶界能的关系

相互重合,即晶界作用域主要由方程(6)中梯度项系数  $K_2$  决定,并且随其增大晶界作用域的范围也变大.  $K_1, K_2$  和界面能的关系如图 2(b) 所示,可以看出界面能随着  $K_1, K_2$  的增大而增大,界面能由梯度项系数和耦合项系数共同决定.

#### 4. 界面作用域取值的影响及讨论

为了检验晶界作用域宽度对 AZ31 镁合金单相再结晶过程中晶粒长大速度的影响,选择了  $512 \times 512$  个格子的 2 维空间进行模拟研究. 模拟的总尺寸取为  $151 \mu\text{m} \times 151 \mu\text{m}$ ,即每个单元格的宽度为  $2.95 \times 10^{-7} \text{m}$ ,采用半隐式格式进行计算,时间步长为 1.5 s.

在其他参数不变条件下,根据图 2(a),  $K_2$  分别选择为  $1.586 \times 10^{-12}, 3.55 \times 10^{-12}, 4.65 \times 10^{-12}, 5.56 \times 10^{-12}, 6.58 \times 10^{-12} \text{m}^2\text{J/mol}$ ,其对应的晶界作用域宽度分别为 0.885, 1.18, 1.475, 1.77, 2.065  $\mu\text{m}$ ;为了保持晶界能不变,由图 2(b) 可知,对应的  $K_1$  值分别为 1800, 400, 180, 43, 16 J/mol. 这里所作的模拟相当于在化学自由能和界面能保持不变的条件下,改变晶界作用域取值,故所得结果为晶界作用域取值对晶粒大小演变的影响. 模拟的前一分钟假设为形核阶段,由于再结晶过程主要的形核位置是冷变形后的晶界,这决定了新晶核均匀地分布于基体中,所以本模型的形核过程也是按照匀质形核进行模拟,即每隔 8 个网格宽度放入一个尺寸为 0—4 网格的随机尺寸的晶核<sup>[17,18]</sup>,之后的过程为新晶粒继续长大的过程. 晶界作用域  $r$  不同时,再结晶组织晶粒的平均尺寸随时间的变化如图 3 所示. 同时,模拟还可以给出不同界面作用域取值下再结晶组织合金元素的分布数据,结果见图 4.

图 4 所选数据为退火 100 min、晶界作用域  $r$  为 0.885, 1.18, 1.475, 1.77  $\mu\text{m}$  时所对应 Al 含量数据二维数组中的任一行随位置的变化. 图 4 中各峰所对应的位置区域即为晶界宽度,可以看出,随着晶界作用域的变大 Al 含量偏析范围也逐渐变大,其偏析的范围对应于晶界作用域宽度. 从图 4(a) 和 (d) 中可以发现,个别晶界的界面偏析范围明显比界面作用域大,且成分峰的中间存在下凹(如图(d)中箭头所指处). 检查对应的显微组织发现,图 4(a) 和 (d) 中箭头所指部分对应着晶界的水平部分,即此峰是沿晶界一段距离叠加的结果. 图 4(a) 表明,当

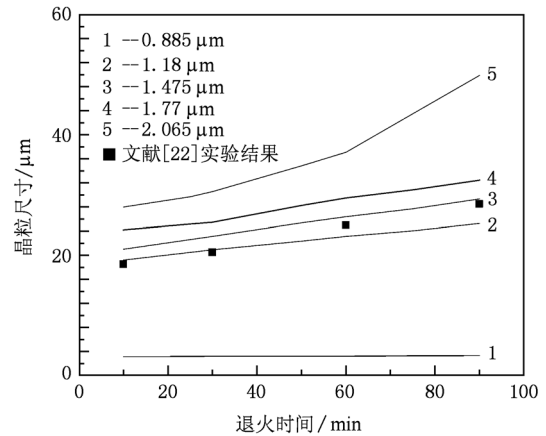


图 3 晶粒尺寸随晶界作用域  $r$  变化的模拟结果与实验结果所模拟的保温温度为 400  $^{\circ}\text{C}$

晶粒尺寸小时,晶界偏析程度会起伏有所降低,但大量晶界的偏析程度与图 4(b), (c), (d) 中界面偏析的峰值基本保持不变. 这个模拟结果表明,晶界作用域宽度不会影响界面成分偏析的峰值.

由图 3 可以看出,当界面作用域宽度不同时,晶粒尺寸随时间变化的曲线斜率发生了变化. 曲线 1 代表的晶界作用域宽度为 0.885  $\mu\text{m}$ ,其晶粒生长速度异常缓慢;曲线 2、曲线 3 和曲线 4 代表的晶界作用域宽度逐渐变大,晶粒生长速度也逐渐变快,但 3 条曲线之间的差值很小;曲线 5 表示晶粒生长速度明显变快. 这表明增大晶界作用域宽度能够加快再结晶晶粒生长速度,但是当晶界作用域宽度取值在 1.18—1.77  $\mu\text{m}$  范围内时,对晶粒生长速度的影响很小. 由于图 3 中曲线 1 的晶粒尺寸明显小于实验值,其晶粒长大速度也非常缓慢,而曲线 5 的晶粒尺寸明显大于实验值,且曲线 5 中的晶粒平均尺寸增大速度与再结晶时间不再呈线性关系,故这两条曲线对应的晶界作用域宽度值不可取. 曲线 2、曲线 3 和曲线 4 的结果与实验值都比较接近,基于最小计算量和模拟精度平衡的考虑,我们确定晶界作用域宽度应取为 1.18  $\mu\text{m}$ ,即曲线 2 的结果. 本文所确定的晶界作用域宽度 1.18  $\mu\text{m}$  不是只适合于本文模拟的合金. 不同的材料,晶界作用域  $r$  的数值会存在一些差异,但差异很小,对于其他合金体系,本文选取的数值也具有参考意义. 同样的材料,不同的处理温度,晶界作用域  $r$  也会发生变化,但这种很小的变化可忽略不计,可以用一个温度下的晶界作用域进行计算.

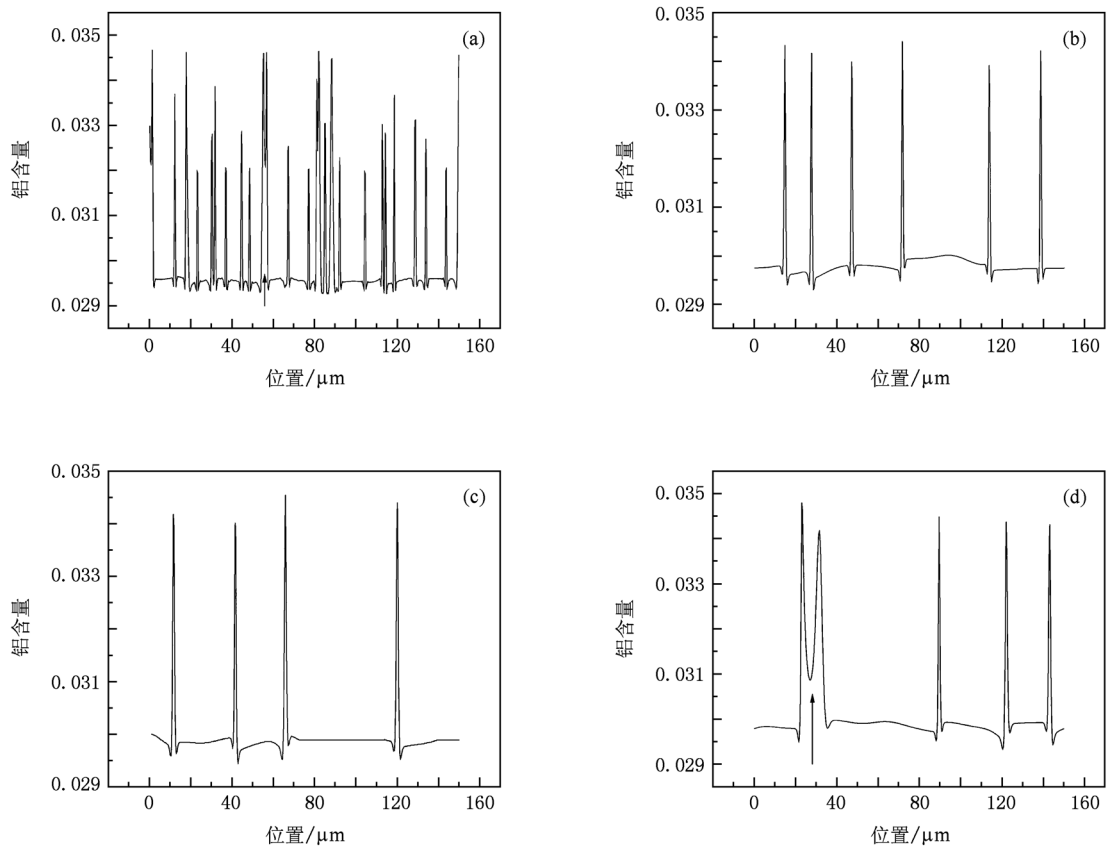


图4 成分偏析随晶界作用域变化的模拟结果 所模拟的保温温度为400 °C. (a), (b), (c), (d)分别为晶界作用域宽度为0.885,1.18,1.475,1.77 μm时对应的显微组织沿某一水平线成分的变化

下面讨论界面作用域取1.18 μm的物理意义和合理性. 首先从小角度晶界的模型出发,这时的界面能来源于位错应力场,其范围约为上千个原子宽度,可以达到微米量级,与目前模拟的取值相符. 本模型从小角度晶界出发,论证了对于尺寸为10 μm以上的晶粒其晶界作用域为1 μm左右,而大角度晶界的腐蚀图像和晶界偏析的范围长度也表明晶界作用域的存在且其尺度为1 μm左右. 这说明晶界作用域概念对于小角度晶界和大角度晶界是同样适用的. 其次,从实际的合金显微组织(图5(c)和(f))<sup>[22]</sup>也可以看出,晶界处有1—2 μm的腐蚀宽度,原因就是由于界面处与基体的能量及成分不同,反映的正是界面能和界面偏析分布的范围. 显微组织观察的结果也与本文所定义的界面作用域概念相符,实验得到的晶界宽度度也与本文的模拟结果相一致.

晶界作用域宽度确定为1.18 μm后,根据图2(a), $K_2$ 的值被确定为 $3.55 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \text{ J} \cdot \text{mol}^{-1}$ ;金属晶界能的理论值为0.5—0.6 J/m<sup>2</sup><sup>[23]</sup>,本模型中

取0.55 J/m<sup>2</sup>,根据图2(b),代入确定的界面能值和 $K_2$ 值, $K_1$ 就可以唯一地确定为 $4.0 \times 10^2 \text{ J/mol}$ .

## 5. 模拟结果与实验对照

引入界面作用域概念后,使用上述确定的各模拟参数值,给出了在该模型下模拟得到的显微组织图如图5所示,图5同时给出了相同条件下实验得到显微组织图<sup>[22]</sup>.

在图5(a),(b),(d)和(e)是以有序化参数和成分得到的组织图,图5(a)和(d)中显示的界面宽度实际上就是本文所定义的晶界作用域,图5(b)和(e)为成分分布组织图,其所显示的界面宽度实际上是界面处的成分偏析范围. 经比较可以发现,模拟得到的显微组织与图5(c)和(f)的实际组织符合很好,这是对本文提出的界面作用域的概念和具体取值合理性的一个最直接的证明. 另一方面,由图5(a),(b),(d),(e)可以看出,其组织主要由等轴晶组成,符合再结晶组织形貌的特点,并且晶粒大小也与实际组织符合.

同时还可以从中看到实际组织有比较严重的混晶现象的出现,并且意外地发现这一现象同样存在于模拟组织中,这可能与该合金系统本身的热力学参数有关.由于本文采用的均为实际值,所以模拟结果和实验结果符合很好.以上所述表明了该模型的正确性,

同时也证明了对界面部分处理的有效性.另外,由图3中的曲线2可以发现,我们模拟的晶粒平均尺寸随时间变化的曲线也与实验所得结果对应很好,这同样表明该模型界面作用域宽度取值的合理性,可以很好模拟再结晶过程.

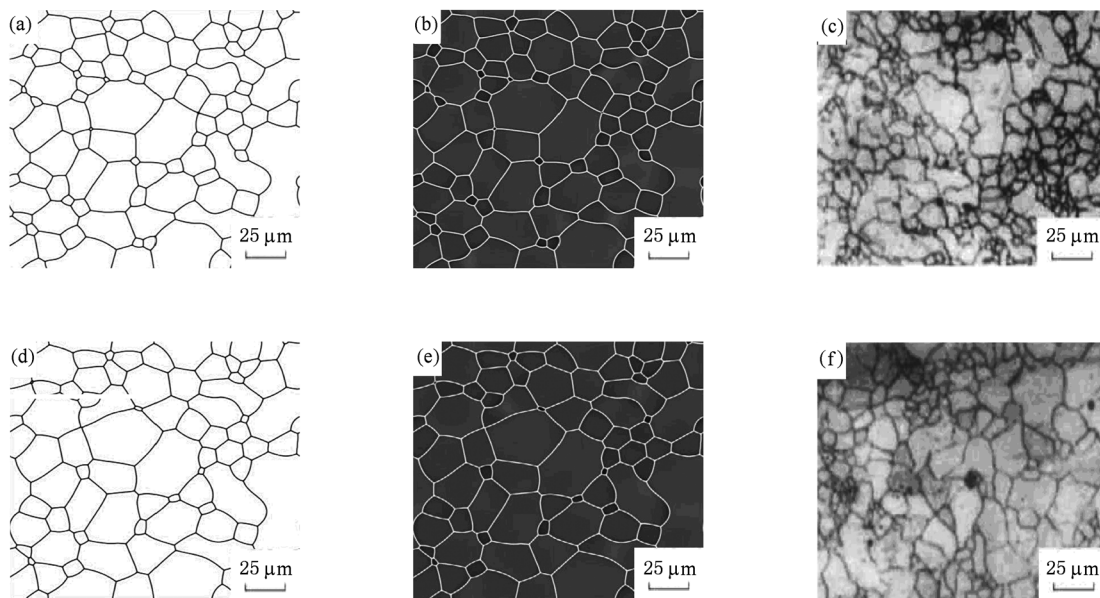


图5 模拟结果与实际组织图的比较 (a),(d),(c)为400 °C时30 min时的组织图;(d),(e),(f)为400 °C时60 min时的组织图;(a)和(d)为用 $\eta$ 得到的组织图,(b)和(e)为用成分得到的组织图,(c)和(f)为实验所得实际组织图<sup>[22]</sup>

本文从合金组织形貌、晶粒尺寸等方面对模拟结果与实验结果进行比较,均符合较好,这说明了该模型的有效性及准确性,特别是模型中对界面的处理的科学性.同时本模型的成功不仅在于其模拟了AZ31镁合金,更重要的是提出了晶界作用域的概念,阐述了相场模型中界面的物理意义以及与界面有关的参数的取值方法,扩大了相场法的模拟范围从而完成了材料组织在工业应用尺度上的真实时空的模拟,可以直接提供生产所需要的参考数据,并且可以模拟界面元素偏析的分布,表明相场法模拟技术具有广阔的发展前景.本文所确定的晶界作用域的概念和取值不只适合于本文模拟的合金,对其他合金体系也具有参考意义.

我们认为,界面作用域的概念在材料学其他领域也可以得到更多的使用.例如在纳米晶显微组织中,由于其晶粒尺寸相当于正常大角度晶界的作用域的值,这样晶内与晶界属性的差异会大大减小,所以在纳米晶材料中晶界偏析会显著减弱,这个预言有一定的实验数据<sup>[24]</sup>支持.又如在晶界偏析的计算模型中,传统晶界偏析占位数的计算中认为偏析

仅仅发生在纳米尺度的晶界几何宽度,而实际上应该发生在界面作用域的微米级范围内,该计算值被严重低估,应重新审定,同时应重新评估晶界偏析的原子数量和对性能影响所起的作用.

## 6. 结 论

1) 相场模型中界面处有序化变量的变化范围对应界面能分布范围并与成分界面偏析的范围相同,本文提出将该范围定义为界面作用域.通过小角度晶界模型和与真实金相照片的对比,论证了晶界作用域的存在.

2) 晶界作用域宽度在相场模型中主要由有序化参数梯度项系数决定,而晶界能则由梯度项系数和耦合项系数共同决定.

3) 界面作用域取值变大时,再结晶晶粒增长速度变快,当取值在1.18—1.77  $\mu\text{m}$ 范围内时,对模拟结果的影响很小,对界面偏析峰值不产生影响.

4) 引入界面作用域的新概念后,利用本模型首

次实现了相场法晶粒长大和成分偏析的真实空间和时间在工业尺度的模拟,与实验结果符合很好.

- [1] Nestler B, Wheeler A A 2000 *Physica D* **138** 114
- [2] Yang Y J, Wang J C, Zhang Y X, Zhu Y C, Yang G C 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2797 (in Chinese) [杨玉娟、王锦程、张玉祥、朱耀产、杨根仓 2009 物理学报 **58** 2797]
- [3] Li J J, Wang J C, Yang G C 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3516
- [4] Lu Y, Wang F, Zhu C S, Wang Z P 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 780 (in Chinese) [路阳、王帆、朱昌盛、王智平 2006 物理学报 **55** 780]
- [5] Guo W, Zong B Y, Wang G, Zuo L 2004 *J. Mater. Sci. Technol.* **20** 245
- [6] Shen C, Chen Q, Wen Y H, Simmons J P, Wang Y Z 2004 *Scripta Mater.* **50** 1029
- [7] Guo W, Zong Y P, Zuo L, Wang Y Z 2006 *Acta Metal. Sin.* **42** 549 (in Chinese) [郭巍、宗亚平、左良、王云志 2006 金属学报 **42** 549]
- [8] Krill III C E, Chen L Q 2002 *Acta Mater.* **50** 3057
- [9] Zhu J Z, Liu Z K, Vaithyanathan V, Chen L Q 2002 *Script. Mater.* **46** 401
- [10] Wen Y H, Wang B, Simmons J P, Wang Y Z 2006 *Acta Mater.* **54** 2087
- [11] Zhou Y M, He Y G, Lu A X, Wan Q 2009 *Chin. Phys. B* **18** 3966
- [12] Cahn J W 1961 *Acta Metall.* **9** 795
- [13] Gunton J D, Miguel M S, Sahni P S 1983 *Phase Transitions and Critical Phenomena* (London: Academic Press) pp267—466
- [14] Zhu J Z, Wang T, Ardell A J, Zhou S H, Liu Z K, Chen L Q 2004 *Acta Mater.* **52** 2837
- [15] Fan D N, Chen L Q 1997 *Acta Mater.* **45** 611
- [16] Chen D Q, Zheng Z Q, Liu Z Y, Li S C 2003 *Acta Metal. Sin.* **39** 1238 (in Chinese) [陈大钦、郑子樵、刘祖耀、李世晨 2003 金属学报 **39** 1238]
- [17] Wang M T, Zong B Y, Wang G 2009 *Comput. Mater. Sci.* **45** 217
- [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] Fan D N, Chen L Q, Chen S P 1997 *Mater. Sci. Eng. A* **238** 78
- [20] Kim S G, Kim W T, Suzuki T 1999 *Physica E* **60** 7186
- [21] Moreau G, Cornet J A, Calais D 1971 *J. Nucl. Mater.* **38** 197
- [22] 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]
- [23] Gjostein N A, Rhines F N 1959 *Acta Metall.* **7** 319
- [24] Färber B, Cadel E, Menand A, Schmitz G, Kirchheim R 2000 *Acta Mater.* **48** 789



# A physical model to express grain boundaries in grain growth simulation by phase-field method\*

Zhang Xian-Gang<sup>1) 2)</sup> Zong Ya-Ping<sup>1) †</sup> Wang Ming-Tao<sup>3)</sup> Wu Yan<sup>1)</sup>

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

2) (*Department of Mathematics and Physics, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang 110142, China*)

3) (*Shanxi Taigang Stainless Steel Company Limited, Taiyuan 030003, China*)

(Received 6 July 2010; revised manuscript received 18 August 2010)

## Abstract

Grain boundary model in phase-field simulation during microstructure evolution in solid states is discussed based on the way to express grain boundary and its physical background. The effects of different values of simulation parameters on feature of grain boundary in the phase field model are investigated systematically and a new conception of grain boundary range is suggested based on the simulation results of recrystallization of AZ31 magnesium alloy. The gradient range of the order parameter expresses the boundary range, whose physical meaning is found to be the range of grain boundary energy distribution across the boundary. The range is also corresponding to the segregation range of alloying elements around the boundary. It is shown that the gradient parameter determines the boundary range but the grain boundary energy is determined by both the gradient parameter and the coupling parameter. The effect of the boundary range value on microstructure feature is examined by simulating the recrystallization of the alloy. The simulation results are consistent well with reported experimental measurements when the boundary range has a value of 1.18  $\mu\text{m}$ . Grain growth phase-field simulation in industrial space and time scale is realized for the first time using the new model developed by introducing the new conception of the grain boundary range.

**Keywords:** phase field, grain boundary, computer simulation, microstructure

**PACS:** 82.20. Wt, 64.70. kd, 77.80. bn

---

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

† Corresponding author. E-mail: ypzong@mail.neu.edu.cn