

相场再结晶储能释放模型与显微组织演变的模拟研究*

张宪刚¹⁾²⁾ 宗亚平^{1)†} 吴艳¹⁾

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)

(2011年6月2日收到; 2012年1月11日收到修改稿)

在相场再结晶模型中提出了形式为 $f(\eta_i^k, \eta_j^k) = E_s(\eta_i^{de})^2(1 - (\eta_j^{re})^2)$ 的冷变形储能项, 并应用该模型模拟了 AZ31 镁合金的再结晶过程, 模拟结果和实验观测结果符合很好. 研究表明, 引入储能释放模型可以实现再结晶形核物理过程的模拟; 模拟结果可以把合金在冷变形后退火的过程按照机理分为再结晶和热晶粒长大两个阶段, 模拟得出的理论再结晶时间是实验再结晶时间的 2/3. 考察了冷变形应变大小对形变金属的亚晶粒尺寸和储能的影响机理和试验结果, 并将考察结果代入到改进后的再结晶模拟模型, 成功地再现了一个经典实验结果: 随预先应变量的增加, 存在临界应变变量对应的一个再结晶晶粒尺寸峰值. 同时还给出了这一经典实验结果的理论解释.

关键词: 相场法, 形核, 储能, 再结晶

PACS: 81.30.-t, 81.10.Jt, 64.60.Q-

1 引言

合金的再结晶是金属材料成型过程中细化显微组织和控制性能的重要方法, 由于再结晶过程的复杂性, 用实验的方法实现再结晶过程中微观组织演化的观察研究非常困难^[1-4]. 近年来, 伴随着计算机技术的迅速发展, 人们用计算机显微组织模拟的方式来研究再结晶过程的技术也得到了长足发展, 其中比较成功的模拟方法有蒙特卡罗法^[2]、元胞自动机法^[3,4]和相场法^[5-10].

Radhakrishnan 等^[2]使用有限元法和蒙特卡罗法相结合的方式模拟了面心立方晶体的再结晶过程, 其冷变形组织用有限元法进行模拟, 把冷变形组织的模拟结果数值化后移植到蒙特卡罗法中, 实现了再结晶形核的模拟, 并模拟研究了初始应变大小与再结晶形核率对再结晶晶粒尺寸的影响. Kugler 等^[3]用元胞自动机法模拟研究了再结晶晶

粒尺寸与初始冷变形晶粒尺寸及储能之间的关系, 并得出了形核率、冷变形初始晶粒尺寸与再结晶晶粒长大速度之间的关系. 但是, 由于蒙特卡罗法和元胞自动机法均缺乏与真实物理量相关的内禀时间、空间尺度^[2,3], 致使这两种模拟方法所得模拟结果的物理意义和理论价值较小.

文献[5]用相场法模拟了 AZ31 镁合金的再结晶过程, 实现了再结晶过程相场法工业真实时空尺度的模拟. 但是, 文献[5]中再结晶形核过程不符合形核的物理过程, 而是采用了人为设定晶核作为初始条件的方法, 并且文献[5]中储能释放模型是针对液相设定的, 缺乏真实的物理意义. 文献[8]应用网格畸变模型与相场模型相结合的方法, 模拟了 AZ31 镁合金的再结晶过程, 由于考虑了晶格畸变储存能在晶粒与晶界的分布, 故其再结晶初始条件更加合理. 但是, 文献[8]没有储能释放模型, 而是采用了数值表示的方法, 其形核过程是采用先在

* 国家自然科学基金(批准号: 51171040, 50771028)资助的课题.

† E-mail: zongyp@smm.neu.edu.cn

晶界后在晶内随机定义再结晶核心的方法来处理的, 缺乏再结晶形核过程的物理意义. 文献 [9] 用相场法模拟了片层状组织的形成, 利用了双阱函数的形式, 设定了一个储能模型. 但是, 文献 [9] 由于没有将再结晶前与再结晶后的晶粒区分开, 因此储能的物理意义不够准确, 也不能用于模拟再结晶形核的物理过程.

本文采用有序化参数区分初始冷变形晶粒与再结晶晶粒的不同, 并按照物理意义提出了一个储能释放模型, 用改进后的模型进行了相场法再结晶形核物理过程的模拟. 在探索相场模型完善的同时, 重点模拟研究了 AZ31 镁合金冷变形亚晶粒尺寸、冷变形储能、冷变形量与再结晶后晶粒大小的关系, 将模拟结果与 AZ31 镁合金再结晶的实验结果进行了对照并开展了讨论.

2 再结晶相场模型的建立

2.1 基本方程

相场法的理论基础是经典热力学和动力学理论, 通过引入一套与时间和空间有关的场变量将复杂的组织作为一个整体来研究, 这些场变量的变化可以通过求解以下 Cahn-Hilliard 方程 [11] 和 Ginzburg-Landau 方程 [12] 来获得:

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

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

这里 F 是系统的总自由能函数, $\eta_q(\mathbf{r}, t)$ 为长程有序化场变量, $C(\mathbf{r}, t)$ 为成分场变量, 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. 当再结晶温度 $T_{re} = 400^\circ\text{C}$ 时, L 和 M 分别取为 [13] $1.72 \times 10^{-2} \text{ mol/Js}$ [5] 和 $3.87 \times 10^{-20} \text{ m}^2 \text{ mol/Js}$. 本文在模拟溶质扩散时, 适当地进行了简化, 只考虑了铝的扩散, 而没有考虑其他微量元素的扩散.

2.2 系统自由能函数

本文中系统的总自由能函数 F 可采用下式表示 [5]

$$F = \int \left[f_0(C(\mathbf{r}); \eta_1^{\text{de}}(\mathbf{r}), \eta_2^{\text{de}}(\mathbf{r}), \dots, \eta_p^{\text{de}}(\mathbf{r}); \right.$$

$$\left. \eta_1^{\text{re}}(\mathbf{r}), \eta_2^{\text{re}}(\mathbf{r}), \dots, \eta_q^{\text{re}}(\mathbf{r}) \right] + \frac{k_c}{2} (\nabla C(\mathbf{r}))^2 + \sum_{i=1}^8 \frac{k_2^{\text{de}}}{2} (\nabla \eta_i^{\text{de}}(\mathbf{r}))^2 + \sum_{j=1}^{32} \frac{k_2^{\text{re}}}{2} (\nabla \eta_j^{\text{re}}(\mathbf{r}))^2 \Big] d^3r. \quad (3)$$

为了使取向场变量表示的微观组织变化可以有直观的表现, 本文中用 8 个 η_i^{de} 的平方和的值作为灰度值来表示冷变形晶粒, 32 个 η_j^{re} 的平方和的值 [5] 作为灰度值来表示再结晶晶粒. 由于这些平方和的值在晶粒内部为 1, 而在晶界处相对很小, 这些平方和的值如果以较小的值用黑色表示、较大的值用白色表示, 用不同的灰色色阶 (即灰度) 来作图, 那么在所得到的图中白色部分表示晶粒而黑色线条表示晶界, 与光学显微镜观察到的组织形貌近似. 这样可以将模拟组织与实际观察到的合金组织很方便地进行比较. (3) 式中 f_0 是局域自由能密度函数, 其通用关系式取为如下形式 [5]:

$$f_0 = f(C) + f(C, \eta_i^{\text{de}}) + f(C, \eta_j^{\text{re}}) + \sum_{\text{de}}^{\text{re}} \sum_{i=1}^8 \sum_{j=1}^{32} f(\eta_i^{\text{de}}, \eta_j^{\text{re}}). \quad (4)$$

这里

$$f(C) = A + \frac{A_1}{2} (C - C_1)^2 + \frac{A_2}{4} (C - C_1)^4.$$

对于 AZ31 镁合金, 当 $T_{re} = 400^\circ\text{C}$ 时, C_1 , A , A_1 和 A_2 的值分别为 [5] 0.2, -27.5, 16.28 和 31.5. $f(C, \eta_i^{\text{de}})$ 和 $f(C, \eta_j^{\text{re}})$ 的形式为 [5]

$$f(C, \eta_i^{\text{de}}) = \frac{B_1^{\text{de}}}{2} (C - C_1)^2 \sum_{i=1}^8 \eta_i^2 + \frac{B_2^{\text{de}}}{4} \sum_{i=1}^8 \eta_i^4 + \frac{k_1^{\text{de}}}{2} \sum_{i=1}^8 \sum_{k \neq i}^8 \eta_i^2 \eta_k^2, \quad (5)$$

$$f(C, \eta_j^{\text{re}}) = \frac{B_1^{\text{re}}}{2} (C - C_1)^2 \sum_{j=1}^{32} \eta_j^2 + \frac{B_2^{\text{re}}}{4} \sum_{j=1}^{32} \eta_j^4 + \frac{k_1^{\text{re}}}{2} \sum_{j=1}^{32} \sum_{l \neq j}^{32} \eta_j^2 \eta_l^2.$$

(5) 式所表示的能量值是以液相能量为起点的能量差值, 因此, 再结晶相与冷变形相的自由能密度函数都需要含有固化潜热项. 在 (5) 式中, 当把所有 (冷变形与再结晶) 的长程有序化场变量取为 0 时, 代表液相组织的能量, 当把任意一个场变量取为 1 时, 代表固态晶粒组织的能量, 将 $\eta_p = 1$

和 $\eta_p = 0$ 分别代入 (5) 式中的第一式, 两者的差就是凝固潜热 E_{1a} , 即 [5]

$$E_{1a} = \frac{B_1^{de}}{2}(C(\mathbf{r}, t) - C_1)^2 - \frac{B_2^{de}}{4},$$

又有 [5]

$$B_1^{de}(C(\mathbf{r}, t) - C_1)^2 = B_2^{de}.$$

对于 AZ31 镁合金, 熔点凝固潜热 E_{1a0} 、熔点 T_0 和固态质量定压热容 c_{ps} 分别为 [14] 373 kJ/kg, 605 °C 和 1040 J/kgK, 而液态质量定压热容 c_{pl} 为 [15] 1360 J/kgK, 故 $T_{re} = 400$ °C 时的凝固潜热为

$$E_{1a} = E_{1a0} - \int_{t_0}^{t_1} c_{pl} dt + \int_{t_0}^{t_1} c_{ps} dt,$$

即 $E_{1a} = 307.4$ kJ/kg, 可得 $B_2^{de} = 30.12$ J/mol, $B_1^{de} = 1.042$ kJ/mol, 且有 $B_1^{re} = B_1^{de}$, $B_2^{re} = B_2^{de}$. 在本文模拟中, k_1^{re} 和 k_2^{re} 的值分别取为 [7] 4.0×10^2 J/mol 和 3.55×10^{-12} Jm²/mol, $k_1^{de} = k_1^{re}$, $k_2^{de} = k_2^{re}$; 模拟的网格尺寸为 [7] 2.95×10^{-7} m, 晶界宽度为 4 个网格 [7], 时间步长为 [7] 1.5 s.

2.3 储能释放模型的建立

由于本模型用于模拟再结晶过程, 所以 (4) 式中必须加入一个考虑储能贡献的自由能密度项 $f(\eta_i^{de}, \eta_j^{re})$, 根据储能的物理意义, 要求该项具有如下性质: 在再结晶开始之前 ($\eta_i^{de} = 1, \eta_j^{re} = 0$), 储能应该具有最大值, 对应于再结晶尚未开始; 在再结晶进行过程中 (η_i^{de} 逐渐减小、 η_j^{re} 逐渐增大), 储能项应逐渐减小, 对应于再结晶晶粒长大、冷变形晶粒变小; 在再结晶过程完成后 ($\eta_i^{de} = 0, \eta_j^{re} = 1$), 储能项应为零, 对应于冷变形晶粒完全消失. 为了满足上述要求, 本文建议储能项取为如下形式:

$$f(\eta_i^k, \eta_j^k) = E_s(\eta_i^{de})^2(1 - (\eta_j^{re})^2). \quad (6)$$

在本文中, 将储能 E_s 的值取为 [16] 0.54 J/g, 即 12.8 J/mol.

采用本文的储能模型对 AZ31 合金冷变形后再结晶温度 $T_{re} = 400$ °C 下的再结晶晶粒长大过程进行了模拟, 模拟结果示于图 1. 图 1 中 d_{re} 为再结晶晶粒平均尺寸, t 为退火时间, 本文中的退火时间不包括再结晶孕育期. 图 1 同时还给出了其他储能模型在相同热力学条件下的模拟结果. 文献 [5] 的冷变形储能是用 B_1 和 B_2 来表示的, 相当于用再结晶相与液相的能量之差来定义储能, 称之为化学

储能模型; 文献 [8] 则将储能以数值化的形式加在了初始条件中, 无法看出其储能的释放对再结晶晶粒形核长大过程的贡献, 称之为数值储能模型. 图 1 中的实验值由文献 [17] 得到, 由于退火时间较短时实验中无法区分冷变形晶粒和再结晶晶粒, 所以退火时间较短时的冷变形晶粒平均尺寸的实验数据无法获得, 因此图中的实验值只有 $t = 10$ min 时的数据.

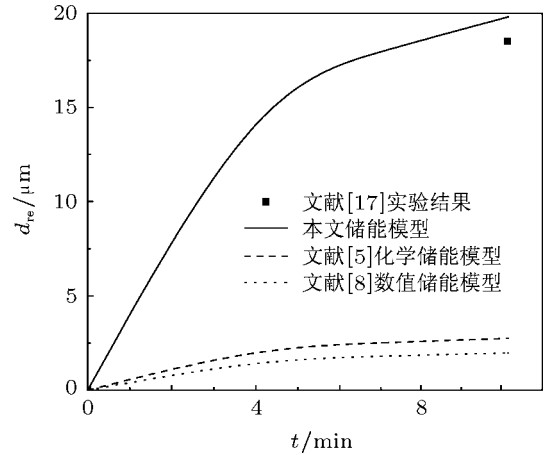


图 1 本文储能模型与其他相场储能模型晶粒尺寸计算结果比较 模拟对象同为 $T_{re} = 400$ °C 下的 AZ31 镁合金

由图 1 可以看出, 文献 [5,8] 两种模型中, $t = 10$ min 时, 冷变形晶粒平均尺寸都在 3 μm 以下, 无法在较短时间内实现晶粒的快速生长, 模拟所得冷变形晶粒平均尺寸与实验值 [17] 存在很大的差距. 而采用本文的模型在 $t = 10$ min 时模拟所得冷变形晶粒平均尺寸在 16 μm 以上, 可以实现短时间内晶粒的快速生长, 且与实验值 [17] 符合良好. 这说明本文模型中的储能完全可以以再结晶驱动力的形式释放出来, 冷变形储能项的表达合理, 取得意外的成功.

3 镁合金 AZ31 再结晶形核和长大的演变

3.1 再结晶显微组织演变

由于冷变形合金不仅存在原始晶界, 而且在晶粒中还存在大量的亚晶界, 晶界、亚晶界为高能量状态的位错墙 [18], 虽然在显微镜下很难看清楚, 但却是再结晶形核的重要部位. 因此, 作为再结晶模拟初始条件的原始冷变形组织, 以实验显微组织

照片输入是不合适的. 本文首先初步设定冷变形组织晶粒平均尺寸 d_{de} 和冷变形晶粒长宽比 r_{as} , 然后在程序中运行 5 min, 将运行结果设定为模拟的初始条件, 如图 2(a) 所示. 此时, $d_{de} = 14.2 \mu\text{m}$, $r_{as} = 3$, 晶界中很多部分可以认为是亚晶界.

因为再结晶形核在机理上只能在晶界形成, 再结晶晶核是已经存在的一段可动晶界 [19], 而

且再结晶形核不需要热涨落、不需要时间 [19], 所以本研究再结晶形核程序采用了在初始冷变形组织的所有晶界上设定一个晶界形核率, 计算机一次性读写数据来定义再结晶晶核的方法. 当晶界形核率为 $7.64 \mu\text{m}^{-1}$ 时, 一次性形核结束后 $t = 100 \text{ s}$ 时模拟所得 AZ31 镁合金的显微组织如图 2(b) 所示.

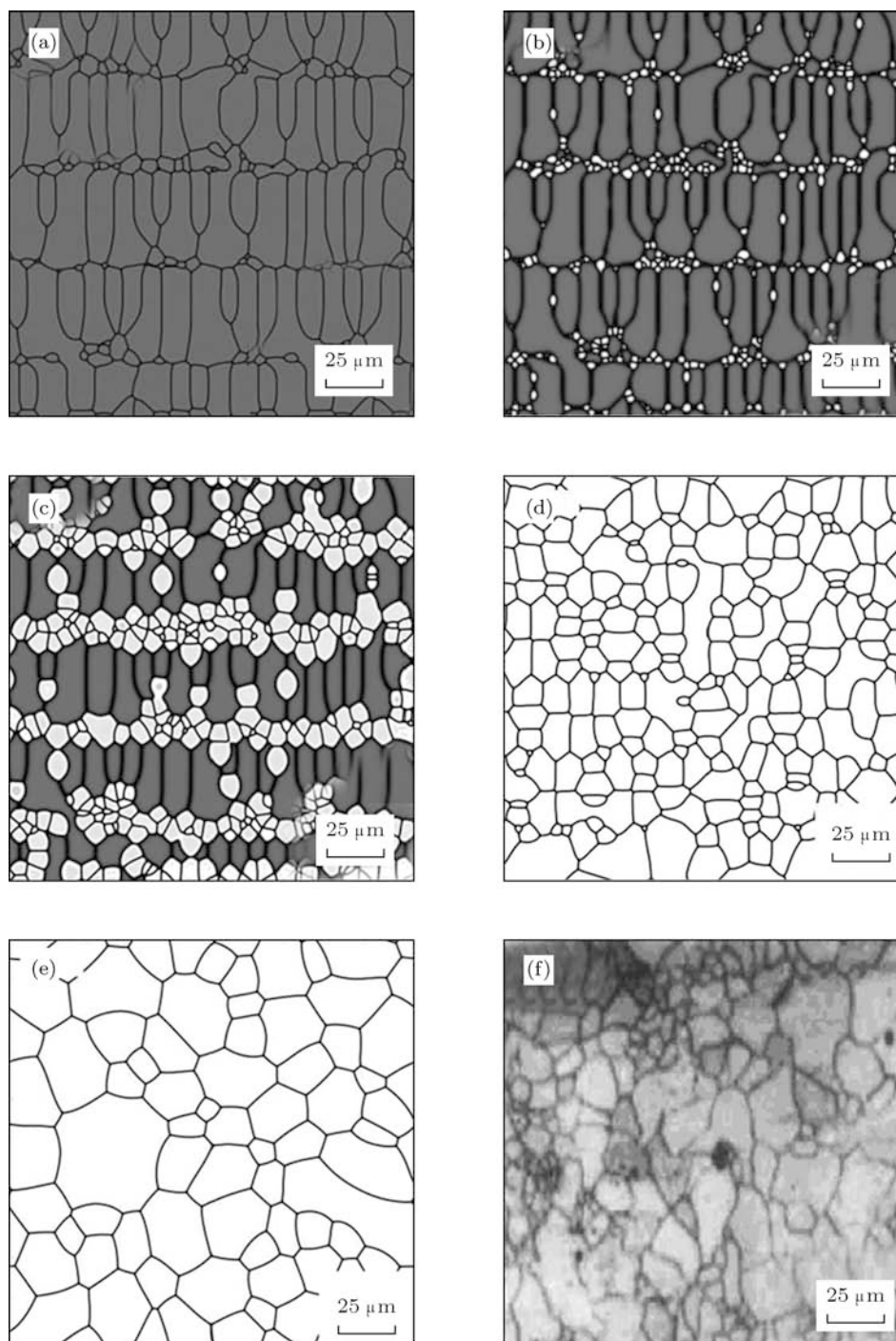


图 2 当 $T_{re} = 400 \text{ }^\circ\text{C}$ 时 AZ31 镁合金显微组织的模拟结果以及文献 [17] 中的实验结果 (a) $t = 0 \text{ s}$ 模拟结果; (b) $t = 100 \text{ s}$ 模拟结果; (c) $t = 200 \text{ s}$ 模拟结果; (d) $t = 600 \text{ s}$ 模拟结果; (e) $t = 3600 \text{ s}$ 模拟结果; (f) $t = 3600 \text{ s}$ 实验结果 [17]

图 2(c), (d) 是采用本文模型模拟得到的 $t = 200, 600$ s 时 AZ31 镁合金的显微组织图, 图 2(f) 给出了 AZ31 镁合金 $T_{re} = 400^\circ$, $t = 3600$ s 时实验直接观测到的显微组织图, 与相同条件的模拟图 (图 2(e)) 对照后可以看出, 模拟结果与实验结果对应很好. 这表明本文的相场模型 (尤其是储能项) 的表达合理.

当 $t = 10$ min 时初始冷变形晶粒全部消失 (图 2(d)), 此时冷变形储能亦消耗完毕, 因此 $t = 10$ min 恰好对应理论再结晶完成的时间. 随着退火时间的继续增加, 再结晶后的晶粒仍然会长大, 如图 2(e) 所示. 这表明合金在冷变形后的退火过程可按机理分为理论再结晶和热晶粒长大两个阶段, 再结晶的驱动力主要为冷变形储能, 而随后的晶粒热长大的驱动力主要是界面能. 实验观测无法区分再结晶和晶粒热长大两个阶段, 实验给出的再结晶组织都是两个阶段结合的产物. 本模型首次模拟区分清楚理论再结晶和热晶粒长大两个阶段, 提出了理论再结晶完成时间的概念.

为了比较理论再结晶时间和实验再结晶时间, 我们模拟测定了 AZ31 合金在再结晶温度 ($T_{re} = 0.35T_m = 0.35 \times 605^\circ\text{C} = 212^\circ\text{C}$) 下的理论再结晶时间. 根据界面迁移率公式^[5] $L = L_0 e^{-\frac{Q}{RT}}$, 可计算出再结晶温度 (212 °C) 下的界面迁移率 $L = 0.0025$ mol/Js, 代入本文的模型中模拟得到再结晶温度下的理论再结晶时间是 40 min. 与再结晶温度下实验再结晶时间 (60 min) 相比较, 理论再结晶时间是实验再结晶时间的 2/3, 说明实验再结晶时间中已经包含了一段热长大的过程. 由此可知, 实践中为了获得最小再结晶晶粒度, 可以适当减少习惯采用的再结晶时间.

3.2 初始条件对亚晶粒尺寸和形状的影响

本模拟设定的初始条件是冷变形后的多晶组织, 初始条件的控制指标是晶粒粒度和晶粒长宽比, 这两个指标取决于真实合金的凝固、冷变形的方式和形变量, 要根据真实材料的测定值输入. 但是, 这两个指标在实验中较难测定, 所以这里对这两个指标对再结晶后晶粒尺寸的影响进行了模拟研究. 在冷变形晶粒平均尺寸取为 $14.2 \mu\text{m}$ 的前提下, 冷变形晶粒长宽比 r_{as} 对再结晶晶粒平均尺寸 d_{re} 影

响的模拟结果如图 3(a) 所示. 在长宽比取为 3:1 的前提下, 冷变形晶粒平均尺寸 d_{de} 对再结晶晶粒平均尺寸 d_{re} 影响的模拟结果如图 3(b) 所示.

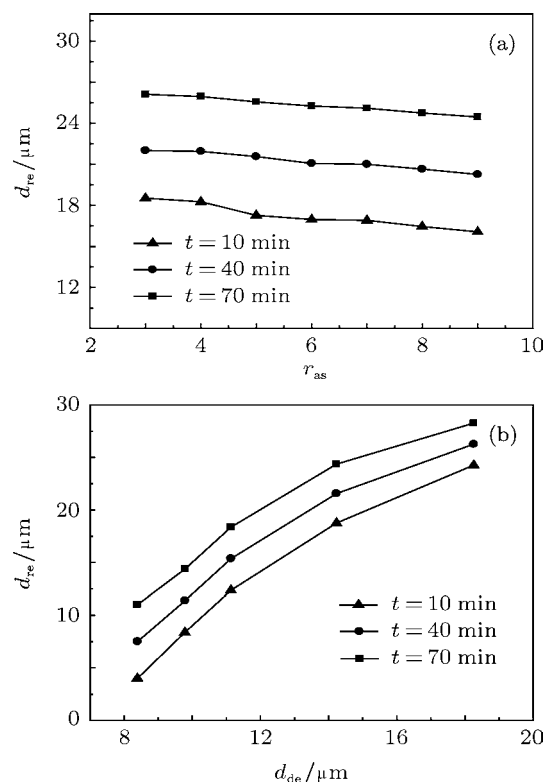


图 3 当 $T_{re} = 400^\circ\text{C}$ 时模拟初始条件对 AZ31 镁合金 d_{re} 影响的模拟结果 (a) r_{as} 对 d_{re} 的影响; (b) d_{de} 对 d_{re} 的影响

由图 3(a) 可以看出, 再结晶晶粒平均尺寸会随着冷变形晶粒长宽比的增加而下降, 但影响不显著. 这是由于在冷变形晶粒平均尺寸不变的前提下, 长宽比的增加会使计算区域内的晶界总长度增加, 在相同的晶界形核率下, 再结晶晶核的数量会增加, 从而导致再结晶晶粒平均尺寸有所下降. 由于冷变形亚晶粒不是等轴晶, 而在计算冷变形亚晶粒尺寸时借用了等轴晶再结晶的晶粒尺寸的计算方法, 所以图 3(b) 中冷变形晶粒平均尺寸 d_{de} 的单位为 μm . 由图 3(b) 可见, 各退火时间下的再结晶晶粒平均尺寸都会随着冷变形晶粒平均尺寸的增加而显著增加. 这是由于冷变形晶粒平均尺寸越大则晶界越少, 而再结晶形核只能在晶界 (本文模拟时初始条件的设置把亚晶界也作为普通晶界处理) 形成, 因此再结晶晶核出现较少, 再结晶晶粒平均尺寸必然较大, 而冷变形晶粒平均尺寸比长宽比更能有效地改变晶界数量, 因此冷变形晶粒平均尺寸对随后再结晶的影响要显著得多.

3.3 再结晶晶界形核率 r_n 的影响

相场法再结晶形核的模拟,通常采用的是在整个模拟系统中人为设定晶核^[5]或者先在晶界上后在晶粒内以数值化的方式设定晶核^[8],这两种晶核设定方式都缺乏物理意义,也无法考察 r_n 对再结晶组织的影响.本文通过引入储能释放模型,用相场法实现了再结晶物理形核过程的模拟,即在初始冷变形组织的晶界上以 6×6 个格子为一个形核单元,在单元中形成不同大小的再结晶晶核,单位晶界长度上形成的再结晶晶核数即为晶界形核率 r_n ,因此本文 r_n 的单位是 μm^{-1} .当 $E_s = 12.8 \text{ J/mol}$, $d_{de} = 14.2 \mu\text{m}$, $r_{as} = 3$ 时,相同退火时间下再结晶晶界形核率 r_n 与再结晶晶粒平均尺寸 d_{re} 的关系模拟结果如图 4 所示.

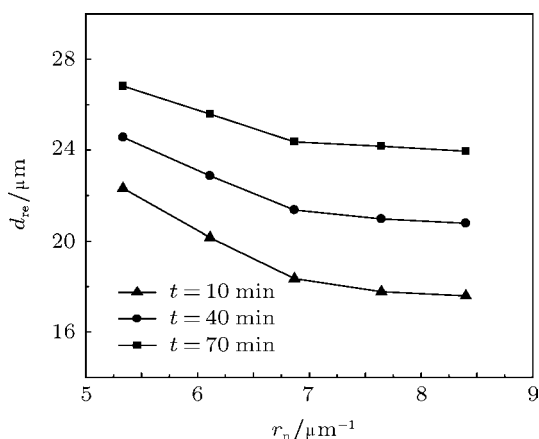


图 4 当 $T_{re} = 400 \text{ }^\circ\text{C}$ 时 AZ31 镁合金 d_{re} 随 r_n 变化的模拟结果

由图 4 可知,相同退火时间下的再结晶晶粒平均尺寸 d_{re} 随着 r_n 的增加呈逐渐下降的趋势,存在一个较小的临界值 $6.87 \mu\text{m}^{-1}$,当 r_n 小于该值时,再结晶晶粒平均尺寸随着 r_n 的增加而显著下降,当 r_n 大于该值后, r_n 对再结晶晶粒平均尺寸不会产生显著的影响.图 1—图 3 的模拟结果都是在 $r_n = 7.64 \mu\text{m}^{-1}$ 时进行的,与文献 [17] 中的实验结果符合良好.一般认为,形核率是影响晶粒尺寸的最重要因素,这一认识是在凝固过程得到的,而凝固过程中形核是在整个体积中进行的.这里所研究的是再结晶,再结晶形核只能在晶界进行而且可以瞬时全部完成.因此,决定再结晶晶核数量的因素除了晶界形核率外还有晶界的数量,而最终再结晶后的晶粒尺寸主要取决于由储能决定的长大速度而不是晶界上的形核率.本文得到的这一结果不

仅新颖,而且对用再结晶控制显微组织的工业生产具有重要的参考价值.

3.4 冷变形储能 E_s 的影响

再结晶过程是通过形核和长大方式进行的,再结晶长大的驱动力为冷变形储能,因此储能会对再结晶产生重要影响.本文模拟时将储能在一定的范围内进行取值, E_s 分别取为 6.4, 9.6, 12.8, 16.0 J/mol, 讨论冷变形储能对再结晶晶粒平均尺寸的影响,模拟所得结果如图 5 所示.

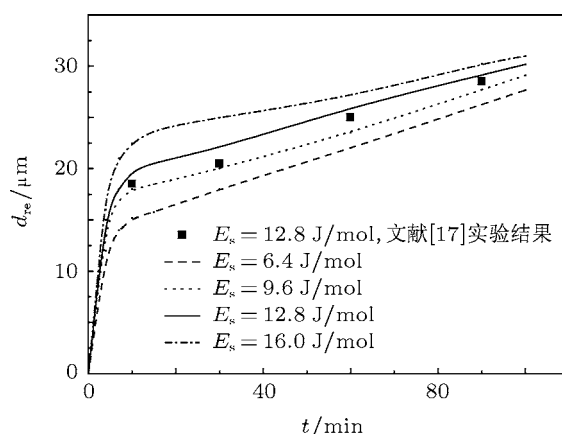


图 5 当 E_s 取不同值时 AZ31 镁合金 d_{re} 随 t 的变化 $T_{re} = 400 \text{ }^\circ\text{C}$

由图 5 可以看出,冷变形储能 E_s 的增加可以显著地增大再结晶晶粒的平均尺寸,图 5 同时还给出了文献 [17] 中的实验结果,该实验结果是对应于 $E_s = 12.8 \text{ J/mol}$ 时得到的.与相同冷变形储能值的模拟曲线比较后可以发现,模拟结果与实验结果符合很好.从图 5 还可以发现,冷变形储能的影响在退火初期较为显著,随着退火时间的增加,影响逐渐变小.这说明退火时间较短时是理论的再结晶阶段,储能起决定作用,但在较长的退火时间下再结晶晶粒尺寸受到热长大的影响,储能的影响变小.本文模拟结果很好地显示了再结晶退火晶粒长大的物理本质.

3.5 冷变形应变变量 ϵ 的影响

冷变形晶粒平均尺寸 d_{re} 与冷变形应变变量 ϵ 存在着对应关系,本文对纯铜^[20]、LY11 铝合金^[21]以及 AZ31 镁合金^[22]进行了考察,所得结果如图 6(a) 所示.由图 6(a) 可见,随着冷变形应变量的逐渐增大,冷变形晶粒平均尺寸会迅速减小,并随

应变量的增加冷变形晶粒平均尺寸减小速率逐渐变小. 本文模拟采用了图 6(a) 中镁合金的实验数据及其延长线.

Doherty 等^[19] 将储能表示为

$$E_s = \frac{2\gamma}{d_{re}}, \quad (7)$$

式中 γ 为单位区域晶界的能量, $\gamma = 0.55 \text{ J/m}^2$ ^[14].

Verdier 等^[16] 将储能与外应力联系起来, 表示为

$$E_s = \frac{1}{2}Gb^2(\rho - \rho_0), \quad (8)$$

$$\sigma_s = \sigma_0 + M\alpha Gb\rho^{1/2}, \quad (9)$$

式中 G 为材料的剪切模量; b 为伯格矢量; ρ 为位错密度; ρ_0 为材料屈服时的位错密度; σ_s 和 σ_0 分别为外应力和屈服应力; M 为泰勒因子, 取^[16] $M = 2$; α 为常数, 取^[16] $\alpha = 0.3$.

本文利用上述两种储能表达方式计算了 AZ31 镁合金的储能与冷变形应变量的关系, 所得结果如图 6(b) 所示. 本文模拟采用了 (8), (9) 两式计算所得的数据.

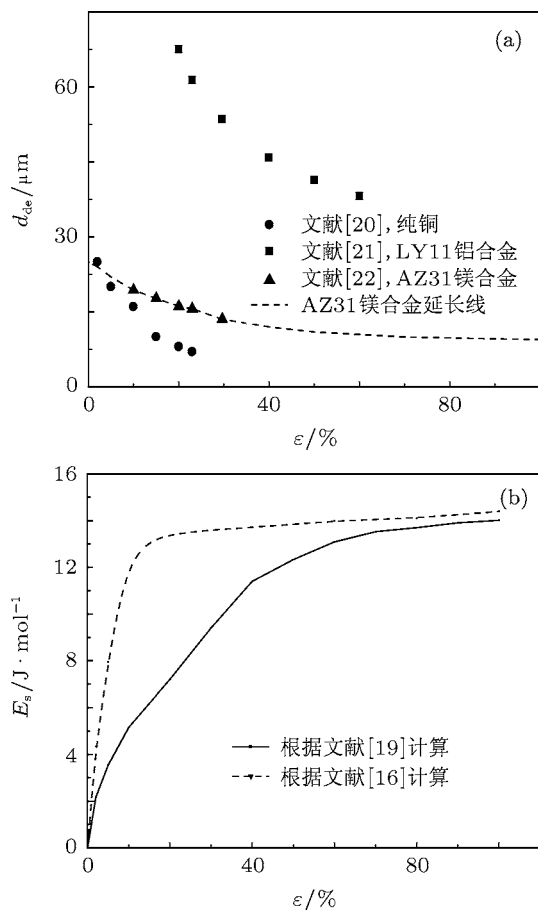


图 6 ϵ 对冷变形组织的影响 (a) ϵ 对 d_{de} 的影响; (b) ϵ 对 E_s 的影响

设定不同的冷变形应变量后, 由图 6 中的曲线分别得到对应的冷变形晶粒平均尺寸 d_{re} 及储能 E_s 的值并代入到本文改进的再结晶模型中, 就可以对不同冷变形应变量下再结晶晶粒长大过程进行模拟计算. 这里冷变形晶粒长宽比 $r_{as} = 3$, 晶界形核率 $r_n = 7.64 \mu\text{m}^{-1}$, 计算得到的结果如图 7 所示.

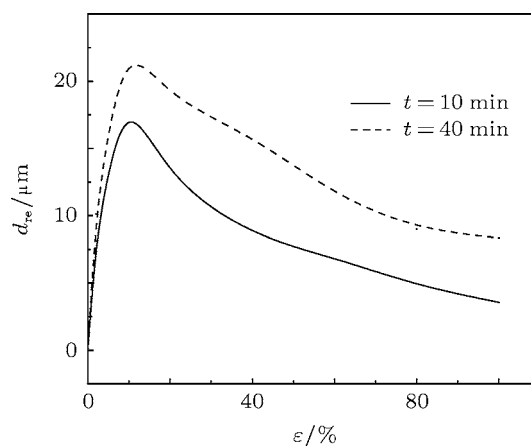


图 7 当 $T_{re} = 400 \text{ }^\circ\text{C}$ 时 AZ31 镁合金 d_{re} 随 ϵ 变化的模拟结果

由图 7 可以发现, 在再结晶退火时间 $t = 10, 40 \text{ min}$ 时, 随着冷变形应变量的增加, 再结晶晶粒平均尺寸都会呈现先增加后减小的趋势, 增加与减小的临界应变量 $\epsilon_c = 0.1$. 这种现象是实验观测到的普遍现象, 但是其机理却一直存在争论. 若根据文献 [19] 计算所得结果进行模拟, 同样会有类似的现象发生, 只不过 ϵ_c 不同, 本文之所以选取文献 [16] 计算所得结果进行模拟, 是因为这样做 ϵ_c 的值较小, 更接近实验观测的 ϵ_c 值. 在实际工作中为了能够在形变合金再结晶后得到细小的晶粒, 明确要求采用大冷变形应变量, 尽量避免上述现象的发生. 当然, 也有利用上述现象培养大尺寸双晶体来研究晶界特性的报道.

利用本模型成功再现了这一实验现象, 不仅证明了本模型的先进性, 也为解释这一现象提供了理论证据. 冷变形应变量对再结晶晶粒平均尺寸的影响是通过冷变形晶粒平均尺寸与冷变形储能共同作用的结果. 当冷变形应变量较小时, 冷变形应变量的增加会使得储能增加并使冷变形晶粒平均尺寸减小. 储能的增加会使再结晶晶粒平均尺寸逐渐增大, 而冷变形晶粒平均尺寸的减小又导致再结晶晶粒平均尺寸的减小, 最终结果使得再结晶晶粒平

均尺寸逐步增大. 当冷变形应变量达到一定值之后, 随着应变量的继续增加, 储能几乎不再增大而冷变形晶粒平均尺寸在逐渐减少, 冷变形晶粒平均尺寸的减小导致再结晶晶粒平均尺寸的减小, 即再结晶晶粒平均尺寸会逐渐减小, 因此产生了再结晶晶粒平均尺寸的峰值.

4 结论

本文在相场再结晶模型中提出了一个形式为 $f(\eta_i^k, \eta_j^k) = E_s(\eta_i^{\text{de}})^2(1 - (\eta_j^{\text{e}})^2)$ 的冷变形储能项, 并应用该模型模拟了 AZ31 镁合金的再结晶过程, 模拟结果和实验结果符合很好. 本文提出的模型可以把冷变形合金在退火过程中的晶粒生长过

程区分为储能驱动的理论再结晶和界面能驱动的晶粒热长大两个阶段, 实现了再结晶形核物理过程的模拟. 模拟结果成功地再现了再结晶晶粒尺寸随预先冷变形应变量增加的变化曲线上在临界应变量 ($\varepsilon = 0.1$) 处出现一个尺寸峰值的普遍实验结果. 模拟得出: 理论再结晶时间是实验再结晶时间的 $2/3$, 说明实践中的再结晶包含着相当数量的晶粒热长大; 再结晶晶界形核率存在一个很小的临界值 (AZ31 镁合金的临界值为 $6.87 \mu\text{m}^{-1}$), 当大于这个临界值时, 晶界形核率对再结晶晶粒平均尺寸几乎没有影响. 再结晶晶粒尺寸峰值则是由于预应变量的增加使得冷变形晶粒尺寸减小、储能增加两个因素共同造成的.

- [1] Liss K D, Garbe U, Li H, Schambron T, Almer J D, Yan K 2009 *Adv. Eng. Mater.* **11** 637
- [2] Radhakrishnan B, Sarma B, Zacharia T 1998 *Acta Mater.* **46** 4415
- [3] Kugler G, Turk R 2006 *Comput. Mater. Sci.* **37** 284
- [4] Raabe D, Becker R C 2000 *Simul. Mater. Sci. Eng.* **8** 445
- [5] Wang M T, Zong B Y, Wang G 2008 *J. Mater. Sci. Technol.* **24** 829
- [6] 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]
- [7] Zhang X G, Zong Y P, Wang M T, Wu Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 068201 (in Chinese) [张宪刚, 宗亚平, 王明涛, 吴艳 2011 物理学报 **60** 068201]
- [8] Gao Y J, Luo Z R, Hu X Y, Huang C G 2010 *Acta Metall. Sin.* **46** 1161 (in Chinese) [高英俊, 罗志荣, 胡项英, 黄创高 2010 金属学报 **46** 1161]
- [9] Wang G, Xu D S, Yang R 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S343 (in Chinese) [王刚, 徐东升, 杨锐 2009 物理学报 **58** S343]
- [10] Takaki T, Tomita I Y 2010 *Int. J. Mech. Sci.* **52** 320
- [11] Cahn J W 1961 *Acta Metall.* **9** 795
- [12] Gunton J D, Miguel M S, Sahni P S 1983 *Phase Transitions and Critical Phenomena* (London: Academic Press) pp267—466
- [13] Moreau G, Cornet J A, Calais D 1971 *J. Nucl. Mater.* **38** 197
- [14] Watari H, Haga T, Koga N, Davey K 2007 *J. Mater. Process. Technol.* **192** 300
- [15] Miyashita Y, Borrisutthekul R, Chen J, Mutoh Y 2007 *Key Eng. Mater.* **353** 1956
- [16] Verdier M, Groma I, Flandin L, Lendvai J, Brechet Y, Guyot P 1997 *Scripta Mater.* **37** 449
- [17] Liu R C, Wang L Y, Gu L G, Huang G S 2004 *Light Alloy Fabr. Technol.* **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]
- [18] Langford G, Cohen M 1969 *ASM Trans. Quart.* **62** 623
- [19] Doherty R D, Hughes D A, Humphreys F J, Jonas J J, Juul J D, Kassner M E, King W E, McNelley T R, McQueen H J, Rollett A D 1997 *Mater. Sci. Eng. A* **238** 219
- [20] Hansen N, Ralph B 1982 *Acta Metall.* **30** 411
- [21] Belyakov A, Sakai T, Miura H, Tsuzakit K 2001 *Philos. Mag. A* **81** 2629
- [22] Barnett M R, Keshavarz Z, Beer A G, Atwell D 2004 *Acta Mater.* **52** 5093

A model for releasing of stored energy and microstructure evolution during recrystallization by phase-field simulation*

Zhang Xian-Gang¹⁾²⁾ Zong Ya-Ping^{1)†} Wu Yan¹⁾

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*)

(Received 2 June 2011; revised manuscript received 11 January 2012)

Abstract

A format of $f(\eta_i^k, \eta_j^k) = E_s(\eta_i^{\text{de}})^2(1 - (\eta_j^{\text{re}})^2)$ to express cold deformed stored energy is suggested in a phase-field model for simulating recrystallization in alloys. Using AZ31 magnesium alloy as an example, the recrystallization process is simulated by the new model, and the simulation results are in good agreement with experimental measurements. The nucleation process of recrystallization is realized for the first time by the model based on the physical background. The simulation results show that the grain growth of a cold deformed alloy in the annealing process indicates automatically two stages: recrystallization driven by the restored energy and thermal growth driven by boundary energy. A theoretical time spent in finishing recrystallization, obtained by simulation, is found to be 2/3 of that obtained by industrial practice. The mechanism and the experimental results about the influence of cold deformation on subgrain size and stored energy are examined, and the experimental results are introduced into the simulation. The common experimental phenomenon shows that there is a peak at the critical strain on the curve of recrystallized grain size versus cold strain. A theoretical explanation to the mechanism of the peak occurrence is also discussed.

Keywords: phase field method, nucleation, stored energy, recrystallization

PACS: 81.30.-t, 81.10.Jt, 64.60.Q-

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51171040, 50771028).

† E-mail: zongyp@smm.neu.edu.cn