

合金沉淀颗粒劈裂的模拟研究(II): 弹性能坍塌

刘磊 陈铮 王永欣

Simulation of precipitate splitting in an alloy (II): Elastic energy collapse

Liu Lei Chen Zheng Wang Yong-Xin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 016401 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.016401

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016401>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I1>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

合金沉淀颗粒劈裂的模拟研究(□): 分裂机制

The simulation of precipitate splitting in alloy (□): segmentation mechanism

物理学报.2012, 61(18): 186401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.186401>

外场作用下聚合物滞后生热效应

Hysteresis thermogenous process of polymer material under vibrational force field

物理学报.2011, 60(1): 016401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.016401>

合金沉淀颗粒劈裂的模拟研究(II): 弹性能坍塌*

刘磊^{1)2)†} 陈铮¹⁾²⁾ 王永欣²⁾

1)(西北工业大学凝固国家重点实验室, 西安 710072)

2)(西北工业大学材料学院, 西安 710072)

(2014年3月19日收到; 2014年7月29日收到修改稿)

对合金沉淀颗粒劈裂过程的模拟发现晶核长大过程中由结构和温度变化引起的体积变化的同时也发生弹性能坍塌现象. 弹性能坍塌方式可以是瞬间坍塌方式也可以是渐进坍塌方式, 计算结果表明: 沉淀是否发生劈裂与弹性能坍塌时刻有关, 而沉淀发生何种劈裂与弹性能坍塌的速率有关. 对弹性能坍塌速率较快的瞬间坍塌, 沉淀是否发生劈裂只决定于弹性能坍塌的时刻, 在沉淀晶核长大到直径为80*l*到90*l*之间大小时引入瞬间弹性能坍塌, 则沉淀发生4块型劈裂. 对弹性能坍塌速率较慢的渐进坍塌, 在引入时刻大于 $\tau = 7.5 \times 10^3$ s的情况下, 沉淀发生且只发生两块型劈裂.

关键词: 沉淀颗粒, 劈裂, 弹性能坍塌

PACS: 64.10.+h

DOI: 10.7498/aps.64.016401

1 引言

由Khachaturyan等^[1,2]给出的微结构应力场理论揭示了沉淀过程的弹性应变能决定于母相与沉淀相间结构变化所引起的弹性畸变, 但并没有给出这种弹性应变能是何时以及以何种方式产生的. 由经典形核理论, 母相中的亚稳晶核形成过程中只发生沉淀与母相间的体积变化, 而没有给出形核过程中弹性应变能是如何变化的, 如果弹性应变能是在形核过程发生的, 那么过饱和过冷固溶体中的结构起伏将更困难. 应变能在形核开始的一刹那引入, 是很多讨论中常见的形式^[3-5], Wang等^[3]讨论了具体的Ni基合金的沉淀过程沉淀形态的演化过程, 并模拟了簇聚机理的沉淀劈裂行为, Li等^[4]模拟了Ni基合金在外加应力作用下的筏化行为, 但这些模型不能模拟合金沉淀在应变能作用下的分裂式劈裂行为^[5,6]. 文献^[7], 也就是本系列(I), 对合金沉淀颗粒劈裂行为的研究表明, 理论合金沉淀颗粒在生长到尺度为80*l*—90*l*之间($l = 12.18$

nm)时加引入骤变的弹性能, 颗粒将发生4块型劈裂. 沉淀相的体积变化与温度变化有关, 而形核过程中界面温度是理论温度, 因此可以认为在晶核长大到半径足够大, 以至于晶核核心部冷却到一定温度后, 沉淀内部的结构变化从界面到心部是连续的, 本文研究表明晶核长大过程中由结构和温度变化引起体积变化的同时也发生弹性能坍塌现象.

所谓弹性能坍塌指的是相变过程中弹性能的变化是伴随晶核生长的连续过程而不是在形核时的瞬间发生. 本文的目的是通过对劈裂过程的模拟, 揭示晶核长大过程中的弹性能坍塌现象.

2 计算模型

合金沉淀粗化动力学可以由Cahn-Hilliard方程描述

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M \nabla \frac{\delta F}{\delta c} \right), \quad (1)$$

其中 F 是溶质浓度非均匀合金自由能密度泛函, c 为合金溶质浓度, M 为原子净迁移率. 非均匀合金

* 国家自然科学基金(批准号: 51174168, 51274167)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: superware@163.com

自由能密度泛函 F 表达为

$$F = \int_V \left[f(c, \varphi_i) + \frac{\beta}{2} |\nabla c|^2 \right] dV + E^{\text{el}}, \quad (2)$$

其中 β 是溶质浓度场变量的梯度能系数, E^{el} 为系统总弹性能, $f(c, \varphi_i)$ 是与局域浓度场变量 $c(\mathbf{r}, t)$ 和局域结构场变量 $\varphi_i(\mathbf{r}, t)$ 相关联的系统局域自由能密度. 在不考虑结构场变量的情况, 且系统无外加应力作用下, 系统的总弹性能表示为

$$E^{\text{el}} = \frac{1}{2} f(t) \int B(\mathbf{n}) |\Delta c(\mathbf{g})|^2 \frac{d^3 g}{(2\pi)^3}, \quad (3)$$

其中 $B(\mathbf{n}) = C_{ijkl}^0 \varepsilon_{ij}^0 \varepsilon_{kl}^0 - \mathbf{n} \sigma^* \Omega(\mathbf{n}) \sigma^* \mathbf{n}$, 且 $(\Omega^{-1})_{jk} = n_i C_{ijkl}^0 n_l$, 其中 C_{ijkl}^0 为系统均匀弹性常数, $\Delta c(\mathbf{g})$ 是系统溶质浓度的非均匀部分 $\Delta c(\mathbf{r}, t) = c(\mathbf{r}, t) - c_0(\mathbf{r}, t)$ 的傅里叶变换, $c_0(\mathbf{r}, t)$ 是合金溶质浓度, \mathbf{g} 是倒易空间位置矢量, $f(t)$ 为弹性能坍塌延迟函数. 对二维情况, 在忽略高阶无穷小量后, $B(\mathbf{n})$ 中与沉淀颗粒形态有关的项为 [2]

$$B(\mathbf{n}) \approx B^{\text{el}} n_x^2 n_y^2, \quad (4)$$

其中 $\mathbf{n} = (n_x, n_y)$ 是沉淀与母相界面外法向量. 对于各向异性系数 $\zeta = (C_{11}^0 - C_{12}^0)/(2C_{44}^0) < 1$ 的合金, 如常见 Ni 基合金 B^{el} 是正数 [1], 由于本文主要研究在何种情况下沉淀颗粒会劈裂, 因此认为 B^{el} 是可调的正数, 其可调范围由 Ni 基合金的物理性质大致确定 [7].

考虑到弹性能坍塌并非发生在形核瞬间, 而是发生在晶核长大过程中, 因此 (3) 式中 $f(t)$ 需要考虑应变能引入的时间延迟. 应变能引入的方式可能是渐变式引入, 也可能是瞬间引入, 因此 $f(t)$ 分别用 $h(t)$ 和 $g(t)$ 给出, 其中 $h(t)$ 为阶跃函数, 以模拟应变能的瞬间引入, $g(t)$ 是斜坡函数以模拟应变能的渐进式引入. $h(t)$ 和 $g(t)$ 的函数示意图如图 1 所示.

这里需要指出的是, 斜坡函数从 $t = 0$ 到 $t = \tau$ 有个逐步上升的阶段, 这个阶段的斜率取决于 $t = 0$ 到 $t = \tau$ 的时间间隔. 在不考虑结构场变量的情况下, 将系统局域自由能表达为

$$f(c) = 2H[(c - u)^2 - v^2]^2, \quad (5)$$

其中 $H = G(\varepsilon^0)^2$, G 为系统的剪切模量, 且 $u = (c'_\gamma + c_\gamma)/2$ 和 $v = (c'_\gamma - c_\gamma)/2$, 其中 c_γ 为母相溶质浓度而 c'_γ 为沉淀相溶质浓度, 同时认为原子净迁移率 M 是各向同性的常数. 由于只是进行理论计算, 这里假定母相溶质浓度 $c_\gamma = 0.2$ 而沉淀相溶质浓

度 $c'_\gamma = 0.8$, 这样构造局域自由能的目的是为了便于计算, 对实际的合金这样的要求是很苛刻的. 将方程 (2), (4), (5) 代入方程 (1) 并进行无量纲化的结果为 [7]

$$\frac{\partial c}{\partial t^*} = \nabla^{*2} \left[\frac{\partial f^*}{\partial c} - \beta^* \nabla^{*2} c + \{B^*(\mathbf{n}) \Delta c(\mathbf{g})\}_r \right], \quad (6)$$

其中 $\nabla^* = l \nabla$, $t^* = tMH/l^2$, $\beta^* = \beta/Hl^2$, $B^{\text{el}*} = B^{\text{el}}/H$, 为无量纲算符, 其中 l 为母相和沉淀间相界面宽度, 各唯象参数的确定参考文献 [7].

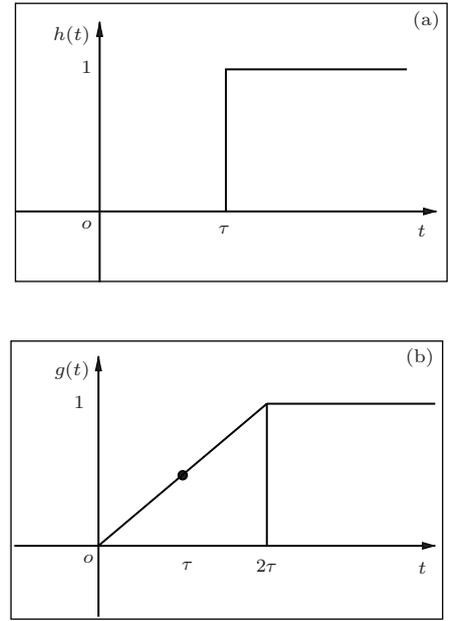


图 1 弹性能坍塌函数, 以表明弹性能坍塌的引入方式 (a) 阶跃函数方式, 模拟瞬间弹性能坍塌; (b) 斜坡函数方式, 模拟渐进弹性能坍塌

方程 (6) 的详细求解过程可以参考文献 [7] 以及文献 [8], 这里只给出结果. 方程 (6) 用稳定 Fourier 谱方法求解 [8], 由文献 [8] 可得

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{pre}^{m+a}(k) &= A(k) \tilde{c}^m(k) - B(k) \{ \tilde{\varphi}(c_N^m) \}_k, \\ \tilde{c}^{m+1}(k) &= A(k) \tilde{c}^m(k) - B(k) \\ &\quad \times \{ \tilde{\varphi}_0(c_{N,pre}^m, c_N^m, \alpha) \}_k, \end{aligned} \quad (7)$$

其中

$$\varphi(c) = 8H(c - u)[(c - u)^2 - v^2], \quad (8)$$

而

$$\varphi_0(x, y) = 4(x + y)[\alpha x^2 + (1 - \alpha)y^2 - v^2], \quad (9)$$

且 $x = c_{N,pre}^m - u$, $y = c_{N,\alpha}^m - u$, 根据文献 [8], $A(\mathbf{k})$,

$B(\mathbf{k})$ 可以表达如下:

$$A(\mathbf{k}) = \left(1 - \frac{1}{2}\beta\tau k^4 + \beta\tau^2 k^2\right)/D(k),$$

$$B(\mathbf{k}) = \tau k^2/D(k), \quad (10)$$

且

$$D(\mathbf{k}) = 1 + \frac{1}{2}\tau B(\mathbf{n})k^2 + \frac{1}{2}\beta\tau k^4 + \beta\tau^2 k^2. \quad (11)$$

方程的迭代方法可参考文献[7], 其中 α, β 皆取0.5.

3 单颗粒的弹性能坍塌

本文将单一颗粒的弹性能坍塌方式假设为两种极端形式, 即图1(a)的阶跃函数方式和图1(b)的斜坡函数方式, 实际上这两种方式可以近似用图2所示的双曲正切函数 $f(t)$ 加以描述, $f(t)$ 的函数形式为

$$f(t) = \begin{cases} \frac{1 + \tanh(\xi(t - \tau))}{2}, & t \leq 2\tau, \\ 1, & t > 2\tau, \end{cases} \quad (12)$$

其中 $\xi = \beta/(2\tau)$, 当 ξ 取很小或很大的值, $f(t)$ 就可以分别模拟 $h(t)$ 和 $g(t)$ 两个极端函数.

本次模拟选择周期性边界条件, 而初始条件设定为在计算区域 γ 相心部有一个初始半径为 $5l$ 大

小的 γ' 晶核, 合金溶质浓度为 $c_0 = 0.26$, 而晶核溶质浓度取 $c'_\gamma = 0.72$, 该晶核按照方程(6)生长.

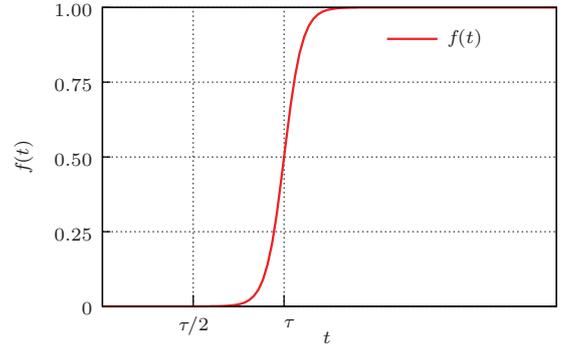


图2 弹性能坍塌模拟函数 $f(t)$: 当 ξ 取值较大时可以模拟阶跃函数 $h(t)$, 当 ξ 取值较小时可以模拟斜坡函数 $g(t)$

3.1 瞬间弹性能坍塌

瞬间弹性能坍塌方式指的是弹性能坍塌函数选取阶跃函数形式, 也就是图1(a)所示的函数形式, 该函数表明应变能在晶核长大过程中瞬间坍塌. 在实际的模拟中使用的是函数(12)式进行近似, 这种情况下 ξ 取40. 形核瞬间发生弹性能坍塌, 也是形核同时发生体积变化的情况, 等效为 $f(t)$ 中的 $\tau = 0$ 的情形.

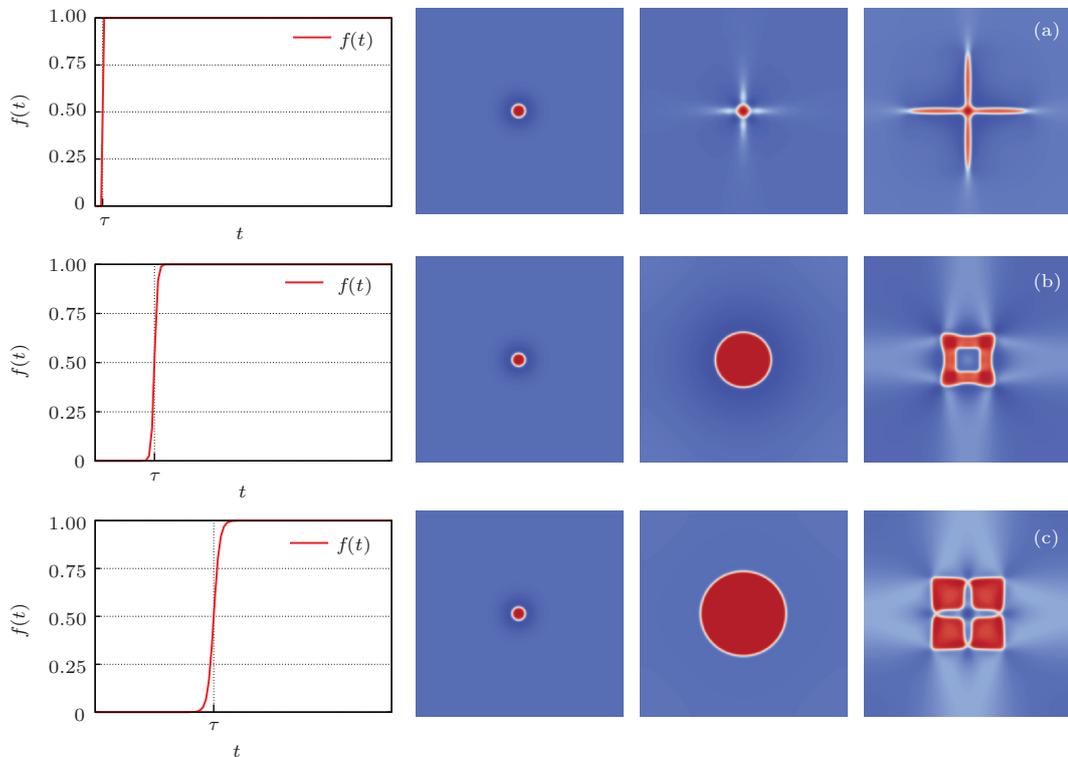


图3 $\xi = 40$ 时合金在不同时刻发生弹性能坍塌对沉淀颗粒劈裂的影响 (a) $\tau = 0$ s; (b) $\tau = 3.0 \times 10^4$ s; (c) $\tau = 7.5 \times 10^4$ s

下面就不同的弹性能坍塌时刻 τ 对合金沉淀形态的影响进行探讨, 指出只有在晶核长大过程中发生弹性能坍塌, 才有可能发生沉淀的分裂式劈裂现象.

在弹性能坍塌之前, 晶核以各向同性向外生长为球状. 当 τ 时刻引入弹性能坍塌, 晶核在该应变能作用下的形态发生变化. 图 3 是合金时效过程中单一颗粒在不同时刻弹性能坍塌对沉淀形态影响的计算结果. 图 3(a) 表明如果弹性能坍塌发生在形核的一刹那, 也就是说沉淀形核就伴随着体积变化, 那么沉淀将向 [100] 方向生长成片状. 如果考虑到不同颗粒间反相畴界的影响, 不同颗粒由于不能融合, 大量颗粒将在 [100] 方向线状排列, 很多实验和计算都能解释这种生长方式 [6-8].

图 3(b) 在 $\tau = 3.0 \times 10^4$ s 发生弹性能坍塌, 由于晶核体积尚小, 晶核生长为方块状, 继续时效方块状的沉淀心部由 γ' 转变为 γ 相. 由于 γ 向 γ' 相转变是体积增加的过程, 而相反的过程是体积缩小的过程, 在受到周围压应力的作用下, γ' 将向体积缩小的方向发生相变, 这是典型的应力诱发相变的方式. 图 3(c) 是 $\tau = 7.5 \times 10^4$ s 发生弹性能坍塌的情形, 在应力发生坍塌的一刹那, 由于晶核体积已经

较大, 较大的晶核在压应力作用下发生分裂式劈裂形成等体积的 4 块, 这是典型的分形生长方式.

3.2 渐进弹性能坍塌

渐进弹性能坍塌是指应变能引入方式是渐进增加的方式, 这里的渐进弹性能坍塌函数用图 1(b) 的斜坡函数的形式进行模拟, 该函数表明弹性能在晶核长大过程逐渐过渡到稳定状态. 在实际的计算中使用的是函数 (12) 式进行近似, 这种情况下 ξ 取 0.5. 弹性能在晶核生长过程中逐步趋于稳定, 表明相变过程中弹性能变化是一个从 γ 相到 γ' 相的渐变过程.

图 4(a) 是在 $\tau = 7.5 \times 10^3$ s 时引入弹性能坍塌, 此时沉淀颗粒的生长过程与图 3(a) 的情形相似, 沉淀也是沿着 [100] 方向生长为片状, 如果是多颗粒情形, 由于颗粒间反向畴界的作用, 颗粒将在 [100] 方向链状分布. 图 4(b) 是 $\tau = 4.5 \times 10^4$ s 发生弹性能坍塌的情景, 此时沉淀在方程 (12) 的作用下向外生长为球状, 并在畸变应力的作用下生长为方块状. 将方块状沉淀继续时效, 方块状沉淀在继续生长的同时沉淀心部将出现 γ 岛, 且沉淀明显分裂为两块, 而不是图 3(c) 的 4 块.

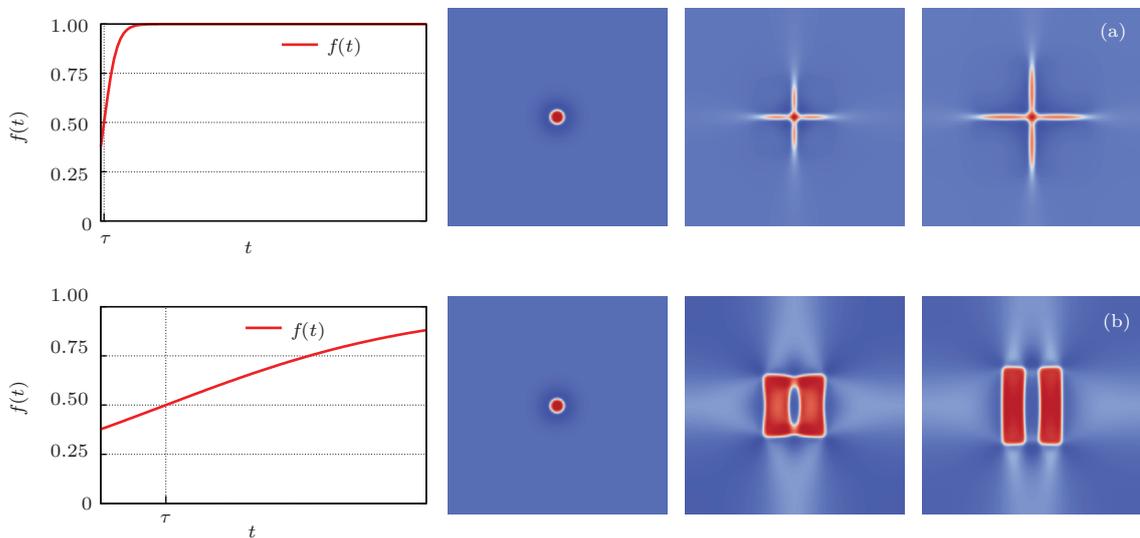


图 4 $\xi = 0.5$ 时合金在不同时刻发生弹性能坍塌对沉淀颗粒劈裂的影响 (a) $\tau = 7.5 \times 10^3$ s; (b) $\tau = 4.5 \times 10^4$ s

4 结果分析

弹性能坍塌函数 (12) 式给出了相变过程中弹性能的坍塌方式, 当 ξ 取值较大时模拟图 1(a) 的瞬

间坍塌方式, 表示弹性能在晶核生长到某一大小时弹性能突然变化; 而当 ξ 取值较小时模拟图 1(b) 的渐进坍塌方式, 表示相变过程中弹性能随着晶核生长而连续变化的过程. 图 3 和图 4 是分别由上述两种不同的弹性能坍塌方式所计算的结果, 计算结果

表明: 沉淀是否发生劈裂与弹性能坍塌时刻有关, 而沉淀发生何种劈裂与弹性能坍塌的速率有关.

如果弹性能坍塌速率较快, 比如 $\xi = 40$, 也就是瞬间坍塌, 那么可能发生劈裂也可能不发生劈裂, 而是否发生劈裂只决定与弹性能坍塌的时刻. 如果在沉淀生长的早期引入瞬间弹性能坍塌, 沉淀不劈裂; 如果在沉淀生长的后期, 也就是晶核长大到直径为 $80l$ 到 $90l$ 之间大小时引入瞬间弹性能坍塌, 则沉淀发生 4 块型劈裂^[9-11]. 如果弹性能坍塌速率较慢, 比如 $\xi = 0.5$, 也就是缓慢坍塌, 沉淀可能劈裂也可能不劈裂. 沉淀发生劈裂与否取决于弹性能坍塌引入时机, 当引入时机大于 $\tau = 7.5 \times 10^3$ s 的情况下, 沉淀一定发生劈裂, 而且只发生的是两块型劈裂.

沉淀发生劈裂的原因是由于从 γ 到 γ' 的相变是一个体积膨胀的相变过程, 相变过程中沉淀体积的增加导致 γ 母相与 γ' 沉淀相之间产生弹性畸变能, 致使沉淀受到来自母相的压应力. 体积膨胀的沉淀颗粒在受到周围外部压应力的作用下使得沉淀有减小体积的趋势, 因此 γ' 沉淀向体积更小的 γ 相沉淀转变, 因此沉淀颗粒生长过程中的劈裂现象实质是应力诱发相变的结果.

5 结 论

合金相变过程中是否发生劈裂和发生何种劈裂取决于两个参数: 弹性能坍塌函数 (12) 中的弹性

能坍塌速率 ξ 和弹性能坍塌时机 τ . 弹性能坍塌速率 ξ 决定发生何种劈裂, 而弹性能坍塌时机 τ 决定何时发生劈裂. 如果弹性能坍塌方式是瞬间坍塌, 当晶核生长到 $80l$ 到 $90l$ 之间时发生 4 块型劈裂; 如果弹性能坍塌是渐进坍塌, 那么沉淀颗粒很容易发生劈裂, 而且只出现两块型劈裂. 沉淀颗粒生长过程中的劈裂现象实质是应力诱发相变的结果.

参考文献

- [1] Khachaturyan A G 1986 *Theory of structural transformations in solids* (New York: Willey)
- [2] Khachaturyan A G, Semenovskaya S, Tsakalakos T 1995 *Phys. Rev. B* **52** 22
- [3] Wang Y, Khachaturyan A G 1995 *Acta Metal. Mater.* **43** 1837
- [4] 1998 *Acta Mater.* **47** 247
- [5] Calderon H A, Kosterz G, Qu Y Y 1997 *Mater. Sci. and Eng. A* **238** 13
- [6] Yoo Y S, Yoon D Y, Henry M F 1995 *Mater. and Mater.* **1** 47
- [7] Liu L, Chen Z, Wang Y X 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 186401 (in Chinese) [刘磊, 陈铮, 王永欣 2012 物理学报 **61** 186401]
- [8] He L P, Liu Y X 2009 *J. Comput. Phys.* **228** 101
- [9] Prikhodko S A, Ardell A J 2003 *Acta Mater.* **51** 5021
- [10] Song W B, Wang J Q, Li Z Y 2014 *Chin. Phys. B* **23** 066501
- [11] Qin X B, Li D X, Li R Q, Zhang P 2014 *Chin. Phys. B* **23** 066501

Simulation of precipitate splitting in an alloy (II): Elastic energy collapse*

Liu Lei^{1)2)†} Chen Zheng¹⁾²⁾ Wang Yong-Xin²⁾

1) (State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

2) (School of Material Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 19 March 2014; revised manuscript received 29 July 2014)

Abstract

The phenomenon of elastic energy collapse (EEC) accompanying the variation of the structure and temperature during the growth of a nucleus is discovered while we study the precipitate splitting in an alloy. There are two ways to introduce the EEC, one is the instantaneous elastic energy collapse (IEEC) and the other is the gradual elastic energy collapse (GEEC). Simulation shows that whether the precipitate is splitted is related to the time when EEC emerges, and that the kind of splitting of the precipitate depends on the rate of EEC. For IEEC, if it is introduced when the diameter of a nucleus reaches about $80l-90l$ ($l = 12.18$ nm) the precipitate is splitted to 4 blocks. For GEEC, if it is introduced when the time is larger than $\tau = 7.5 \times 10^3$ s, the precipitate is splitted to 2 blocks.

Keywords: precipitate, splitting, elastic energy collapse

PACS: 64.10.+h

DOI: [10.7498/aps.64.016401](https://doi.org/10.7498/aps.64.016401)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51174168, 51274167).

† Corresponding author. E-mail: superware@163.com