

γ - α 相变中不同晶界特征下铁素体生长形貌的相场模拟

张军 陈文雄 郑成武 李殿中

Phase-field modeling of ferrite morphology in austenite-to-ferrite transformation with considering anisotropic effects

Zhang Jun Chen Wen-Xiong Zheng Cheng-Wu Li Dian-Zhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 070701 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.070701

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.070701>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I7>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

CH基团与金刚石(111)面的碰撞反应及其对碳膜生长的影响

Collision reactions of CH radical on diamond and their effects on the carbon film growth

物理学报.2016, 65(3): 030701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.030701>

基于电磁拓扑的多腔体屏蔽效能快速算法

Electromagnetic topology based fast algorithm for shielding effectiveness estimation of multiple enclosures with apertures

物理学报.2016, 65(3): 030702 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.030702>

六方小面相螺旋在各向异性、表面吸附、界面动力学作用下生长的相场

Phase-Field Modeling of Facet Hexagonal Spirals with Anisotropy, Deposition, and Kinetic Effects

物理学报.2016, 65(2): 020701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.020701>

一种基于BLT方程的孔缝箱体屏蔽效能计算方法

A BLT equation-based approach for calculating the shielding effectiveness of enclosures with apertures

物理学报.2015, 64(1): 010701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.010701>

一种考虑小孔尺寸效应的孔阵等效建模方法

An equivalent approach to modeling aperture array with considering size effect of apertures

物理学报.2014, 63(12): 120701 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.120701>

γ - α 相变中不同晶界特征下铁素体生长形貌的相场模拟*

张军¹⁾²⁾ 陈文雄²⁾ 郑成武^{2)†} 李殿中²⁾

1) (中国科学技术大学化学与材料科学学院, 合肥 230026)

2) (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)

(2016年11月10日收到; 2017年1月11日收到修改稿)

利用多相场模型模拟了奥氏体(γ)-铁素体(α)相变过程中不同晶界特征下铁素体晶粒的形貌与生长动力学. 模型中通过能量梯度系数和耦合项系数的协同变化定量表达晶界能与晶界迁移率各向异性, 同时固定相场界面宽度来保证计算精度. 模拟结果显示: 随着原奥氏体晶界能与铁素体-奥氏体晶界能比值 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 的增加, 三叉相界面处的平衡角 β 减小, 铁素体晶粒沿原奥氏体晶界与垂直于奥氏体晶界方向的生长速率差变大. 铁素体与奥氏体晶粒间的晶粒取向越接近, 铁素体生长越缓慢. 模拟结果可描述铁素体晶粒生长形貌的多样性, 与实验结果符合.

关键词: 相场法, 奥氏体-铁素体相变, 晶界各向异性, 铁素体晶粒形貌

PACS: 07.05.Tp, 81.10.Aj, 81.30.-t

DOI: 10.7498/aps.66.070701

1 引言

多晶材料中晶界特征会影响材料的力学行为, 如韧性^[1]等. 而在微观组织演化过程中, 晶粒的取向性生长也往往与晶界特征密切相关. 晶界特征是指由于不同结构的晶体中原子按照特定的对称性排列, 晶粒间界面上物理性质出现的差别^[2]. 在固态相变过程中, 新相的生长过程有别于一般的晶粒长大过程, 化学驱动力和晶界能是控制新相生长过程的主要因素^[2]. 若化学驱动力远大于晶界能, 晶粒的取向生长较为不明显; 但如果化学驱动力较小, 晶粒的生长对晶界的各向异性就显得较为敏感. 多相多晶粒系统中晶粒间的晶界特征(包括晶界能和晶界迁移率)的影响更复杂, 不仅相与相之间存在不同类型的晶界, 而且晶粒与晶粒之间也存在不同的取向关系, 故形核于不同奥氏体晶界处铁素体晶粒的生长形貌容易出现多样性. 近年来,

为了描述晶粒的长大过程, 研究者开发出许多模型^[3-5]来研究晶粒的形貌演变和生长动力学. 然而, 这些模型大多仅考虑了晶界各向同性或有限条件下的各向异性的影响, 与实际晶界特征相比存在较大差别. 在这些模型中介绍的方法众多, 相比较而言, 相场法在真实和定量模拟上具有一些独特的优势^[6-9].

相场法是一种通过系列场变量描述多晶组织的微观结构和成分的介观尺度研究方法, 相场模型以相场变量在相邻结构或晶粒之间的离散范围来隐式地表达界面的宽度. 如此, 晶界能在模型中则表现为界面宽度范围内局部界面能密度的集合. 近年来, 相场法模拟单相多晶系统中晶粒生长取得了明显的进展. Kazaryan等^[10]利用相场法研究了各向异性的晶界能和晶界迁移率对晶粒尺寸及取向差分布的影响, 发现其有别于各向同性系统中的晶粒生长动力学和微观组织特征. Chang和Moelans^[11]采用相场法研究了不同程度的晶界各

* 国家自然科学基金(批准号: 51371169, 51401214)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: cwzheng@imr.ac.cn

向异性对高织构组织演化的影响, 探讨了界面多交叉点存在的稳定性. Miyoshi 和 Takaki^[12] 通过多相场模型^[13] 中添加序参量的高阶耦合项, 避免了三叉晶界处界面能不同带来的计算不稳定性问题, 模拟了晶粒异常长大现象.

相场模拟的关键之处在于能把材料真实物性参数以唯象参数的形式有效地表达在模型中, 这也是相场发展领域的研究热点^[14] 之一. 但是, 这些唯象参数的表达并不是简单的解析解^[15]. 为准确地表达整个系统中不同的晶界特征, 需要利用系列模型参数, 包括能量梯度系数与耦合项系数等, 同时考虑协调变化, 否则容易导致计算过程中界面处相场变量的离散范围(即相场界面宽度)出现混乱. 在薄界面近似的相场模型中, 相场界面宽度会影响模拟的计算精度^[16,17], 故模拟过程中有必要保持相场界面宽度固定以保证计算精度.

本文采用多相场模型模拟奥氏体-铁素体相变过程中铁素体晶粒的生长行为. 相场模型通过协调界面处模型参数定量表达晶界的各向异性特征, 研究不同晶界特征下铁素体晶粒的形貌特征和生长动力学. 最后, 实现多相多晶粒组织相变的模拟, 并与实际组织比较, 分析不同奥氏体晶界处铁素体晶粒形貌的形成原因.

2 相场模型

2.1 相场方程

在多相多晶粒系统中, 采用非保守场变量 $\eta(r, t)$ 和保守场变量 $x(r, t)$ 分别描述不同晶粒的取向与溶质浓度. 选择两组序参量 $\eta_{1i}(r, t)$ 和 $\eta_{2i}(r, t)$ 分别表示奥氏体相和铁素体相的不同晶粒, 其中 η 的第一个下标“1”和“2”分别表示奥氏体相和铁素体相, 第二个下标 i 则表示晶粒取向, n 为取向数, r 与 t 分别表示空间位置与时间.

体系内系统总自由能 F 为^[16,18]

$$F(\eta, x) = F_s(\eta, x) + F_c(\eta, x), \quad (1)$$

式中, F_s 和 F_c 分别为界面自由能和化学自由能, 均为序参量 η 和溶质浓度 x 的函数. 在多相多晶粒系统中, 界面自由能 F_s 的计算引入了各向异性的影响, 化学自由能 F_c 则通过计算各相的化学自由能与势阱函数的耦合而得到.

$$F_s(\eta, x) + F_c(\eta, x)$$

$$= \int_V f_s(\eta, x) + f_c(\eta, x) dV, \quad (2)$$

式中, f_s 为界面自由能密度, f_c 为化学自由能密度, V 为系统体积. f_s 由序参量 η 构建, 在晶粒内部值为 0, 而界面区域不为 0, 可表述为^[15,16]

$$f_s = m f_0(\eta) + \frac{\kappa}{2} \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^n (\nabla \eta_{ki})^2, \quad (3)$$

式中, f_0 为局部界面自由能密度, 可表达为序参量的四阶多项式:

$$\begin{aligned} & f_0(\eta_{11}, \eta_{12}, \dots, \eta_{1n}; \eta_{21}, \eta_{22}, \dots, \eta_{2n}) \\ &= \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^n \left(\frac{\eta_{ki}^4}{4} - \frac{\eta_{ki}^2}{2} \right) \\ &+ \varepsilon \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^n \left[\sum_{s=1}^2 \sum_{j=1; k_i \neq s_j}^n \frac{\eta_{ki}^2 \eta_{sj}^2}{2} \right] + \frac{1}{4}. \end{aligned} \quad (4)$$

对于任意序参量, f_0 在晶粒内部取最小值 0. 在多晶体系中, 能量梯度系数 κ 、耦合项系数 ε 和参数 m 受到各向异性晶界能的影响, 具体论述见 2.2 节.

化学自由能密度 f_c 为 η 与 x 的函数^[18,19]:

$$\begin{aligned} f_c &= \sum_{k=1}^2 G_k(x) w_k(\eta) \\ &+ \mu_C \left(x_C - \sum_{k=1}^2 x_C^k w_k(\eta) \right), \end{aligned} \quad (5)$$

式中, $w_k(\eta)$ 为势阱函数^[18], 其物理意义为相 k 在某处的体积分; x_C 为某处的 C 浓度; x_C^k 和 G_k 分别为 k 相的 C 浓度和化学自由能(相 k 为奥氏体相 γ 或铁素体相 α). 考虑 C 原子的长程扩散过程, 界面处 C 浓度可表示为两相的混合^[18]:

$$x_C = w_\alpha x_C^\alpha + w_\gamma x_C^\gamma, \quad (6)$$

μ_C 为 C 的扩散化学势, 模拟中假设在相界面范围内奥氏体相的 C 扩散势与铁素体相的 C 扩散势相等^[18]:

$$\frac{\partial G_\alpha(x_C^\alpha)}{\partial x_C^\alpha} = \frac{\partial G_\gamma(x_C^\gamma)}{\partial x_C^\gamma}. \quad (7)$$

奥氏体相与铁素体相化学自由能 G_k 可采用规则溶剂双亚点阵模型^[20-22] 计算.

C 浓度场变量 $x_C(r, t)$ 的演化采用保守场的 Cahn-Hilliard 动力学方程^[16] 描述:

$$\frac{\partial x_C}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\sum_{k=1}^2 w_k M_k \nabla \left(\frac{\partial G_k}{\partial x_C^k} \right) \right], \quad (8)$$

式中, 参数 M_k 为 M_γ 或 M_α , 它们分别为相场模型中奥氏体相和铁素体相中 C 原子的扩散迁移率, 其与两相中 C 原子的物理扩散迁移率 M_C^γ 和 M_C^α 有关, 可参考文献 [18].

序参量 $\eta_{ki}(r, t)$ 的演化采用非保守场的 Allen-Cahn 动力学方程 [16] 描述:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta_{ki}}{\partial t} &= -L \frac{\delta[F(\boldsymbol{\eta}, x)]}{\delta \eta_{ki}}, \\ \frac{\partial \eta_{ki}}{\partial t} &= -L \left\{ m \left(\eta_{ki}^3 - \eta_{ki} + 2\varepsilon \eta_{ki} \sum_{s=1}^2 \sum_{\substack{j=1; \\ ki \neq sj}}^n \eta_{sj}^2 \right) \right. \\ &\quad - \kappa \nabla^2 \eta_{ki} \\ &\quad + \frac{2\eta_{ki}}{\sum_{s=1}^2 \sum_{i=1}^n \eta_{si}^2} \left[(1-w_k) \left(G_k - \frac{\partial G_k}{\partial x_C^k} x_C^k \right) \right. \\ &\quad \left. \left. - w_{s,s \neq k} \left(G_{s,s \neq k} - \frac{\partial G_{s,s \neq k}}{\partial x_C^{s \neq k}} x_C^{s \neq k} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

式中, L 为与界面迁移率相关的模型参数, 与各向异性界面迁移率 M 相关.

2.2 界面模型参数

相场法模拟铁素体晶粒生长的过程中, 为了准确描述界面各向异性对相变过程的影响, 需要在相场模型中确定界面处模型参数的物理意义, 并对其进行定量表达.

从唯象理论上, 平直界面处界面能 σ 的计算可描述为 [15]

$$\begin{aligned} \sigma &= \int_{-\infty}^{+\infty} \{ m f_0(\boldsymbol{\eta}_i, \boldsymbol{\eta}_j) \\ &\quad + \frac{\kappa}{2} \left[\left(\frac{d\boldsymbol{\eta}_i}{dy} \right)^2 + \left(\frac{d\boldsymbol{\eta}_j}{dy} \right)^2 \right] \} dy. \end{aligned} \quad (10)$$

(10) 式可直接从 (3) 和 (4) 式得到, 式中 y 表示坐标, 而能量梯度系数 κ 、耦合项系数 ε 和参数 m 均与各向异性的界面能相关. 通过变分原理和系列变量变换 [15], (10) 式可转化为

$$\begin{aligned} \sigma &= \sqrt{2m\kappa} \int_0^1 \sqrt{f_0(\boldsymbol{\eta}_i, \boldsymbol{\eta}_j(\boldsymbol{\eta}_i))} \\ &\quad \times \sqrt{1 + \left(\frac{d\boldsymbol{\eta}_j(\boldsymbol{\eta}_i)}{d\boldsymbol{\eta}_i} \right)^2} d\boldsymbol{\eta}_i, \end{aligned} \quad (11)$$

式中, 场变量 $\boldsymbol{\eta}_i$ 与 $\boldsymbol{\eta}_j(\boldsymbol{\eta}_i)$ 的分布及离散范围受能量梯度系数 κ 和耦合项系数 ε 的影响, 局部界面自由

能密度 f_0 的分布也受 κ 和 ε 的影响. 通常能量梯度系数 κ 和耦合项系数 ε 越大, 局部界面自由能密度 f_0 越大 [15]. 但对于序参量的离散范围 (即实际计算得到的相场界面宽度 δ), κ 和 ε 的作用不同: κ 越大, 序参量的离散范围越大; 而 ε 越大, 序参量的离散范围则越小. 直接求解 (11) 式中序参量 $\boldsymbol{\eta}_i$ 的积分并不容易, 但可以推导出 $\sqrt{m\kappa} \propto \sigma$, 并且, (11) 式中的积分部分也仅与耦合项系数 ε 相关, 故 (11) 式可简化为

$$\sigma = g(\varepsilon) \sqrt{m\kappa}, \quad (12)$$

式中, $g(\varepsilon)$ 为耦合项系数 ε 的函数. 当然, (12) 式未考虑对序参量离散范围的约束, 模拟计算过程中相场界面宽度 δ 可能会发生变化, 从而影响模拟结果的准确性. 为避免此问题, 模型中利用模型参数对相场界面宽度进行约束 [15]:

$$\begin{aligned} \delta &= \frac{1}{|(d\boldsymbol{\eta}_i/dy)_{y=0}|} \\ &= \sqrt{\frac{\kappa}{m f_{0,\text{interf}}(\boldsymbol{\eta}_{\text{interf}}, \boldsymbol{\eta}_{\text{interf}})}}, \end{aligned} \quad (13)$$

式中, $(d\boldsymbol{\eta}_i/dy)_{y=0}$ 表示 $y = 0$ 处 (相界面中心位置) 的序参量梯度, 此处序参量相交, 存在 $\boldsymbol{\eta}_i = \boldsymbol{\eta}_j = \boldsymbol{\eta}_{\text{interf}}$, f_0 取得最大值 $f_{0,\text{interf}}$, $\boldsymbol{\eta}_{\text{interf}}$ 的大小与耦合项系数 ε 的大小成反比. 结合 (12) 式和 (13) 式, 可得到界面能和相场界面宽度与能量梯度系数和耦合项系数的关系. 模型参数 κ 和 m 可表达为

$$\kappa = \sigma \delta \frac{\sqrt{f_{0,\text{interf}}(\varepsilon)}}{g(\varepsilon)}, \quad (14)$$

$$m = \frac{\sigma}{\delta} \frac{1}{g(\varepsilon) \sqrt{f_{0,\text{interf}}(\varepsilon)}}, \quad (15)$$

耦合项系数 ε 隐式地包涵在 (14) 和 (15) 式中, 而 $g(\varepsilon)$ 和 $f_{0,\text{interf}}(\varepsilon)$ 则可通过离散序参量 $(\boldsymbol{\eta}_i, \boldsymbol{\eta}_j)$ 进行求解, 可参考文献 [15], 其结果如图 1 所示. 对此结果进行多项式拟合, 即可得到关于 ε 的函数关系式 $g^*(\varepsilon)$, $f_{0,\text{interf}}^*(\varepsilon)$ 和反函数 $g^*(\varepsilon)^{-1}$, 将用于模型参数的求解过程中. (14) 和 (15) 式体现了模型参数 κ 和 m 对相场界面宽度 δ 的约束. 对于多晶体系, 采用普适计算公式求解模型参数并不合适, 需要根据不同晶界特征进行协调. 此外, 固定相场界面宽度 δ 有利于求解过程中数值计算的稳定性和准确性.

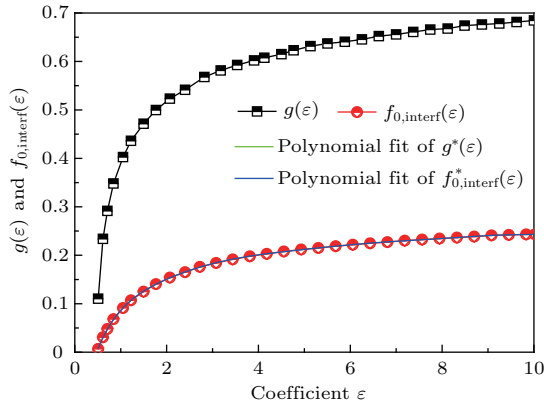


图1 (网刊彩色) g 和 $f_{0,interf}$ 与耦合项系数 ε 的关系
Fig. 1. (color online) Values of the parameters g and $f_{0,interf}$ as functions of ε .

针对不同的晶界特征, 结合 (14) 和 (15) 式, 采用迭代方法求解 (9) 式中的模型参数 κ , ε , L 和 m , 过程如下 [15].

1) 初始化过程

(a1) 参数初始化: 各向异性界面能 σ 和界面迁移率 M , 设置相场界面宽度 δ , 初始化界面能 σ_{init} , 初始化耦合项系数 ε_{init} , 参数 σ_{init} 和 ε_{init} 可以设置为各向同性的界面参数, 如 $\varepsilon_{init} = 1.5$.

(a2) 利用图 1 中拟合的多项式由 ε_{init} 求解 $g^*(\varepsilon_{init})$ 和 $f_{0,interf}^*(\varepsilon_{init})$, 计算

$$a_{init} = \sqrt{f_{0,interf}^*(\varepsilon_{init})/g^*(\varepsilon_{init})}.$$

(a3) 计算

$$m = \frac{\sigma_{init}}{\delta} \frac{1}{g^*(\varepsilon_{init}) \sqrt{f_{0,interf}^*(\varepsilon_{init})}}.$$

2) 循环迭代过程

迭代参数: κ_1 , ε_1 , a_1 和 a_{init} , 待求解模型参数 κ , ε 和 L .

(b1) 计算 $\kappa_1 = \sigma \delta a_{init}$.

(b2) 计算 $g(\varepsilon_1) = \sigma / \sqrt{m \kappa_1}$.

(b3) 利用图 1 中拟合的多项式由 $g^*(\varepsilon_1)^{-1}$ 求解 ε_1 , 再由 ε_1 求解 $f_{0,interf}^*(\varepsilon_1)$, 计算

$$a_1 = \sqrt{f_{0,interf}^*(\varepsilon_1)/g(\varepsilon_1)}.$$

(b4) 如果 $a_1 \neq a_{init} \Rightarrow a_{init} = a_1$, 返回步骤 (b1);

否则, 得出 $\kappa = \kappa_1, \varepsilon = \varepsilon_1, a = a_1, L = M/(\delta a_{init})$, 计算终止.

本文主要讨论晶界能与晶界迁移率的各向异性对奥氏体-铁素体相变的影响, 其大小受不同晶

界取向的影响. 相对于一个参考取向角, 每个晶粒存在一个取向角 $\theta_i (\theta_i = [0, \pi])$, 并假定其在相变过程中不发生变化. 各向异性晶界能 $\sigma_{i,j}$ 可通过晶粒间的取向差 $\Delta\theta_{i,j} = \theta_i - \theta_j$ 来计算 [23]:

$$\begin{aligned} \sigma_{i,j}(\Delta\theta_{i,j}) &= \sigma_{i,j} \frac{\Delta\theta_{i,j}}{\Delta\theta_m} \left(1 - \ln \left| \frac{\Delta\theta_{i,j}}{\Delta\theta_m} \right| \right) \\ &\quad (\Delta\theta_{i,j} < \Delta\theta_m, \Delta\theta_m = 15^\circ), \\ \sigma_{i,j}(\Delta\theta_{i,j}) &= \sigma_{i,j} \quad (\Delta\theta_{i,j} \geq \Delta\theta_m), \end{aligned} \quad (16)$$

式中, $\sigma_{i,j}$ 为 i/j 相之间相界面的最大晶界能, 如 $\sigma_{\alpha,\gamma}$ 等. 本文假设晶粒间晶界取向差 $\Delta\theta_{i,j} < \Delta\theta_m$ 时, 该界面为小角度晶界; 当 $\Delta\theta_{i,j} \geq \Delta\theta_m$ 时, 该界面为大角度晶界; $\Delta\theta_m$ 在此取 15° .

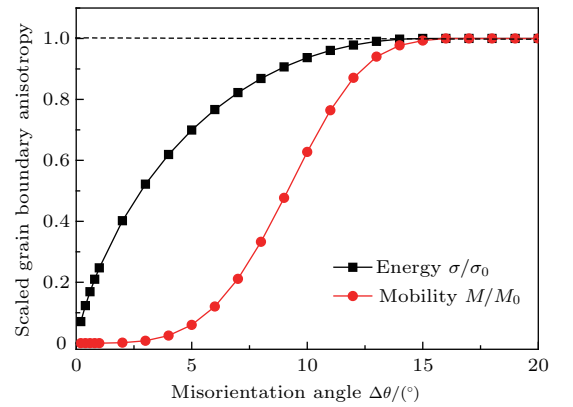


图2 (网刊彩色) 晶界能 σ 和晶界迁移率 M 与取向差 $\Delta\theta$ 之间的关系
Fig. 2. (color online) Scaled grain boundary energy σ and mobility M as functions of the misorientation $\Delta\theta$.

晶界迁移率与取向差之间的关系可用如下近似模型 [23-25] 来确定:

$$\begin{aligned} M_{i,j}(\Delta\theta_{i,j}) &= M_{i,j} \left(1 - \exp \left(-5 \left(\frac{\Delta\theta_{i,j}}{\Delta\theta_m} \right)^4 \right) \right) \\ &\quad (\Delta\theta_{i,j} < \Delta\theta_m, \Delta\theta_m = 15^\circ), \\ M_{i,j}(\Delta\theta_{i,j}) &= M_{i,j} \quad (\Delta\theta_{i,j} \geq \Delta\theta_m), \end{aligned} \quad (17)$$

式中, $M_{i,j}$ 为 i/j 相之间相界面的最大迁移率, 如 $M_{\alpha,\gamma}$ 等. 图 2 为不同取向差 $\Delta\theta$ 下的晶界能与晶界迁移率. 在小角度晶界下, 随着取向差 $\Delta\theta$ 的增加, 晶界能与晶界迁移率均增大.

2.3 模拟条件

本文以 Fe-0.1C-0.5Mn (wt.%) 合金为原型材料模拟 1123 K 等温过程中发生的奥氏体-铁素体相变. 模拟所用的物性参数 [26] 列于表 1.

表1 模拟所采用的物性参数 [26]

Table 1. The physical parameters used in simulations.

物性参数	标示	取值
α/γ 晶界能/ $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}$	$\sigma_{\alpha,\gamma}$	0.4
γ 中 C 原子迁移率/ $\text{m}^2\cdot\text{mol}\cdot\text{J}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$	M_{C}^{γ}	$\frac{1}{RT} 1.5 \times 10^{-5} \exp(-142000/RT)$
α 中 C 原子迁移率/ $\text{m}^2\cdot\text{mol}\cdot\text{J}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$	M_{C}^{α}	$\frac{1}{RT} 2.2 \times 10^{-4} \exp(-125000/RT)$
α/γ 界面迁移率/ $\text{m}\cdot\text{mol}\cdot\text{J}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$	$M_{\alpha,\gamma}$	$0.5 \exp(-140000/RT)$

整个模拟区域离散成规则正方形网格. 计算时间步长 Δt 与空间步长 Δy 间满足关系 $\Delta t < \Delta y^2/(4M_{\alpha,\gamma})$. 边界条件设置为周期性边界条件, 采用有限差分 and 迭代方法对动力学方程 (8) 和 (9) 进行求解. 为避免网格形状带来的误差和满足计算精度的要求, 预设相场界面宽度 δ 与 Δy 的关系为 [16]: $\delta = n\Delta y$ ($4 \leq n \leq 6$), $\Delta y = 0.4 \mu\text{m}$. 模拟中固定相场界面宽度 $\delta = 6\Delta y$, 并利用 2.2 节中介绍的迭代方法计算出不同晶界能的能量梯度系数 κ 和耦合项系数 ε , 结果如图 3 所示. 可以发现 κ 和 ε 都随着晶界能的增加而增大, 意味着界面处的序参量分布会发生变化, 如图 4 所示.

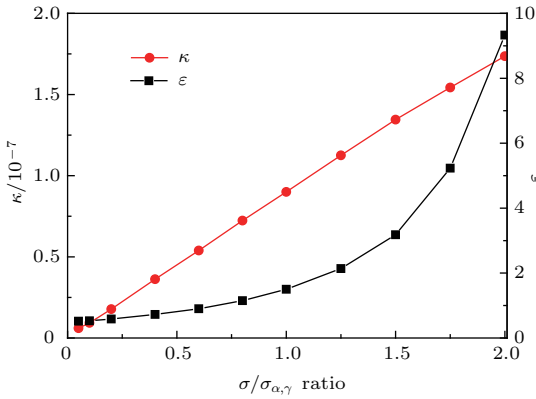


图3 (网刊彩色) 能量梯度系数 κ 和耦合项系数 ε 与晶界能 σ 之间的关系

Fig. 3. (color online) The model parameters κ and ε as functions of the interfacial energy σ .

图 4(a) 和图 4(b) 分别为铁素体晶粒 α 在奥氏体晶粒 γ_1 和 γ_2 之间生长的相场值和序参量沿图中虚线的分布. 模拟设置晶界能 $\sigma_{\alpha,\gamma_1} < \sigma_{\alpha,\gamma_2}$. 从图 4(a) 和图 4(b) 中可以看出, 不同晶粒间界面处的相场值和序参量的大小及变化范围均收敛较好, 图 4(a) 中 α/γ_2 界面处的最低相场值 (序参量相等时, 即 $\eta_{\text{interf}} = \eta_{\alpha} = \eta_{\gamma}$) 要小于 α/γ_1 界面处的最低相场值, 此结果也能从图 4(b) 中 α/γ_1 和 α/γ_2 界面处 η_{interf} 值大小得出, 这表明晶界能在模型中得

到了正确的反映. 此外, 图 4(b) 显示 α/γ_1 和 α/γ_2 界面宽度保持不变, 界面处序参量的离散范围保持一致, 表明该模型能有效控制计算精度. 引入不同晶界能时, 虽然会改变界面处序参量大小的分布, 但不会改变相场界面宽度而引起误差.

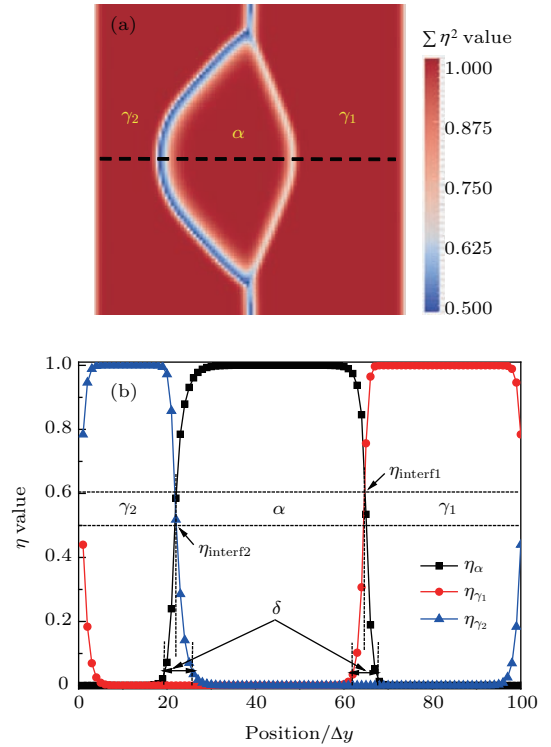


图4 (网刊彩色)(a) 铁素体生长过程中相场值的分布情况; (b) 序参量沿图 4(a) 中虚线的分布情况

Fig. 4. (color online) (a) Distribution of the phase-field values during ferrite growth; (b) profile of the order parameter along the dashed line in Fig. 4(a).

3 结果分析与讨论

3.1 原始奥氏体晶界能对铁素体生长的影响

已报道的相场模型大多仅考虑了奥氏体相与铁素体相之间的晶界能 $\sigma_{\alpha,\gamma}$ 在相变过程中的影响, 而对奥氏体与奥氏体相之间晶界能 $\sigma_{\gamma,\gamma}$ 的影响则

少有关关注, 但事实上, $\sigma_{\gamma,\gamma}$ 也是影响相变过程的一个重要因素. 为讨论原始奥氏体晶界能对相变的影响, 模拟中保持 $\sigma_{\alpha,\gamma}$ 不变, 设置不同的 $\sigma_{\gamma,\gamma}$ 值进行模拟, 考察铁素体晶粒形貌和转变动力学. 随着 $\sigma_{\gamma,\gamma}$ 取值的变化, 相场模型中奥氏体与奥氏体

界面处的能量梯度系数 κ 和耦合项系数 ε 随之改变. 从图 3 的结果可以看出, $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma} \in [1.0, 2.0]$ 时, $\kappa \in [0.9 \times 10^{-7}, 1.8 \times 10^{-7}]$ 且 $\varepsilon \in [1.5, 10]$. $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 增大, κ 和 ε 也将增大, 界面处自由能密度 f_s 升高, 会加快界面处相场变量的演化.

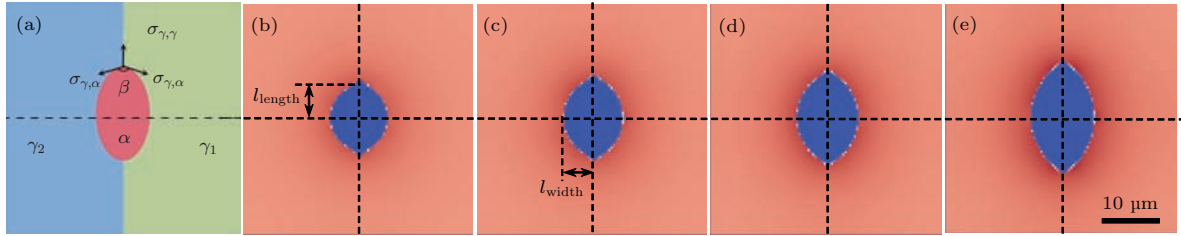


图 5 (网刊彩色)(a) 铁素体晶粒 α 与奥氏体晶粒 γ_1 和 γ_2 之间的相界面轮廓示意图, β 为三叉界面平衡角; (b)–(e) 不同 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值对 α/γ 相界面轮廓的影响: (b) $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma} = 1.0$; (c) $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma} = 1.25$; (d) $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma} = 1.5$; (e) $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma} = 2.0$. The equilibrium angle β is determined from the intersection of the grain boundaries.

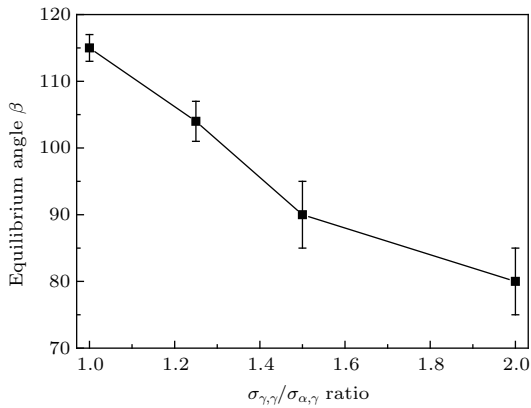


图 6 不同 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值下相界面平衡角 β 的变化情况
Fig. 6. The equilibrium angles β at the triple junction under different $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ ratios.

图 5 为不同 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 比值下的 α/γ 相界面轮廓的模拟结果. 模拟中设置单一铁素体晶粒 α 在两个奥氏体晶粒 γ_1 和 γ_2 间生长, 设置 α/γ_1 界面能为 σ_{α,γ_1} , α/γ_2 界面能为 σ_{α,γ_2} , 并假定此处 $\sigma_{\alpha,\gamma_1} = \sigma_{\alpha,\gamma_2} = \sigma_{\alpha,\gamma}$, $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值分别取为 1, 1.25, 1.5 和 2. 从图 5 可以发现, 不同 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值下三叉晶处平衡角 β 不同. 图 6 为 β 值随 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值的变化情况, 图中不同 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值下 β 值的大小经过多次统计而确定, 存在误差. 从图 6 中可以发现, 当 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值从 1 逐渐增加到 2 时, β 值从 115° 逐渐减小到 80° . 这表明晶界能的变化将导致三叉界面处平衡角 β 发生改变, 从而影响铁素体晶粒的生长形貌. 需要说明的是, 当 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma} = 1$ 时,

β 值小于 120° , 这是因为铁素体晶粒的生长是由化学驱动力和晶界能共同控制, 三叉晶界处平衡角会偏离 120° .

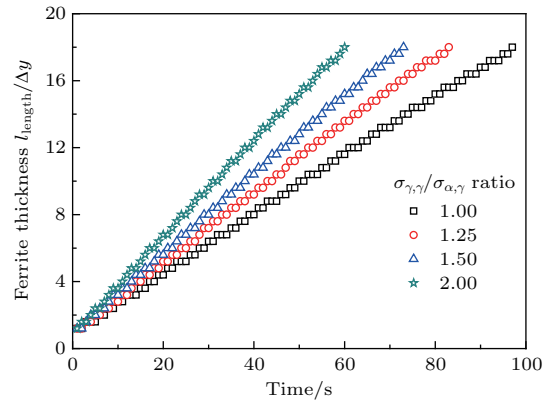


图 7 (网刊彩色) 不同 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值下铁素体晶粒生长距离 l_{length} 的演化情况
Fig. 7. (color online) Variation of the ferrite thickness l_{length} with time under different $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ ratios.

从图 5 中还可以看出, 铁素体晶粒沿原始奥氏体晶界方向与垂直于奥氏体晶界方向的生长距离不同. 由于 $\sigma_{\alpha,\gamma}$ 不变, 晶粒 α 垂直于奥氏体晶界方向的生长距离 l_{width} 基本相同, 而沿原奥氏体晶界生长的距离 l_{length} 则随 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值的增大而增加. 图 7 给出了晶粒 α 初期生长过程中 l_{length} 的演化情况. 可以发现, 对单一曲线, l_{length} 与时间 t 成线性关系, 即铁素体沿原奥氏体晶界生长的速率基本不发生变化. 但各曲线的斜率不一样, $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$ 值越大, 曲线斜率越大, 铁素体晶粒的生长速率越快.

清晰地认识不同类型晶界对铁素体生长动力学的影响, 将有助于分析不同晶粒形貌的形成原因. 上述结果表明晶界能的提高会加快相界面迁移, 改变相界面轮廓, 从而影响铁素体晶粒的生长形貌.

3.2 α/γ 晶界取向差对铁素体生长的影响

新相形核于母相之间的晶界上, 会与紧邻的母相存在着不同取向关系, 产生不同大小的晶界能和晶界迁移率, 导致铁素体晶粒向不同奥氏体晶粒内的生长速率不同. 模拟中设定晶界能比值 $\sigma_{\gamma_1, \gamma_2}/\sigma_{\alpha, \gamma}$ 为 2, 为方便对比, 将 α 相晶粒与 γ_2 母相晶粒之间的界面设置为大角度晶界 ($\Delta\theta_{\alpha/\gamma_2} \geq 15^\circ$), 而与 γ_1 母相晶粒之间的界面设置为不同取向差的小角度晶界 ($\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} \leq 15^\circ$), 进而模拟不同 $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$ 值对 α 晶粒生长形貌的影响. 图 8 为 $t = 40$ s 时不同取向差 $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$ 下铁素体晶粒形貌的模拟结果. 可以看出, 当 α/γ_1 与 α/γ_2 的取向差相等且其界面均为大角度晶界时, 铁素体晶粒向奥氏体晶粒 γ_1 和 γ_2 内部生长的距离 l_{width} 相

同, 铁素体晶粒呈椭圆形状 (图 8 (a1)); 而当 α/γ_1 的界面为小角度晶界时, 铁素体晶粒向 γ_1 内部的生长明显被抑制, 而且取向角差 $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$ 越小, 其生长距离 l_{width} 越小. 这是因为取向差 $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$ 值减小, 晶界能随之变小, 界面处的自由能密度 f_s 降低, 延缓了界面处相场变量的演化. 图 9 统计了不同 $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$ 值下铁素体晶粒向奥氏体晶粒 γ_1 内部生长的距离 l_{width} 随时间的演化情况. 可以看出, 当 $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$ 较大时, 相界面的迁移速率较快, α 晶粒向母相 γ_1 内部生长明显. 取向差对相变过程的影响主要表现在对晶界能和晶界迁移率的影响上, 如图 2 所示. 因此, 如果新形成的铁素体晶粒的取向与母相奥氏体晶粒取向相近, 即使能提供足够高的化学驱动力, 铁素体晶粒生长也会被抑制, 如图 8 (a4) 所示. 故考虑晶界各向异性时, 新相晶粒的生长存在多样性, 在某些方向上正常生长, 而在某些方向上缓慢生长, 晶粒的局部生长形貌受到晶粒间取向的影响. 晶粒间取向越接近, 相对生长越缓慢.

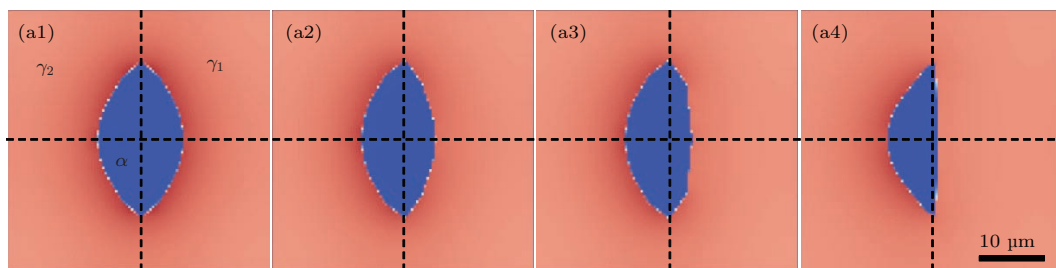


图 8 (网刊彩色) $t = 40$ s 时不同取向差 $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$ 下铁素体晶粒的生长形貌 (a1) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = 15^\circ$; (a2) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = 10^\circ$; (a3) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = 5^\circ$; (a4) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = 1^\circ$

Fig. 8. (color online) The simulated morphology of ferrite α at $t = 40$ s with different misorientations $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$: (a1) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = 15^\circ$; (a2) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = 10^\circ$; (a3) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = 5^\circ$; (a4) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = 1^\circ$.

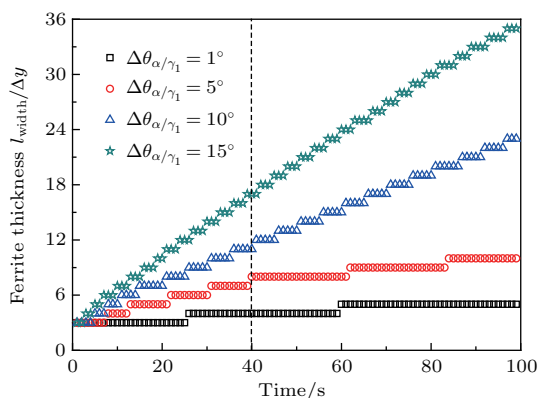


图 9 (网刊彩色) 不同取向差 $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$ 下铁素体晶粒生长距离 $l_{\text{width}}(\alpha/\gamma_1)$ 的演化情况

Fig. 9. (color online) Evolution of the ferrite thickness $l_{\text{width}}(\alpha/\gamma_1)$ with different misorientations $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1}$.

3.3 三叉晶界处铁素体晶粒的生长特征

为了更清楚地描述晶粒取向对铁素体晶粒生长形貌的影响, 对三叉晶界处铁素体晶粒的生长形貌进行了模拟, 如图 10 所示. 考虑了三叉晶界处铁素体晶粒与 3 个奥氏体晶粒间之间的 3 种不同的取向关系:

- 1) 铁素体晶粒与相邻 2 个奥氏体晶粒保持取向近似 (取向非常接近, $\theta_{\alpha/\gamma} \leq 1^\circ$), 这种情况下铁素体晶粒仅向保持大取向差的奥氏体晶粒内部生长, 向另外两个奥氏体晶粒的生长被抑制, 如图 10 (a) 所示.

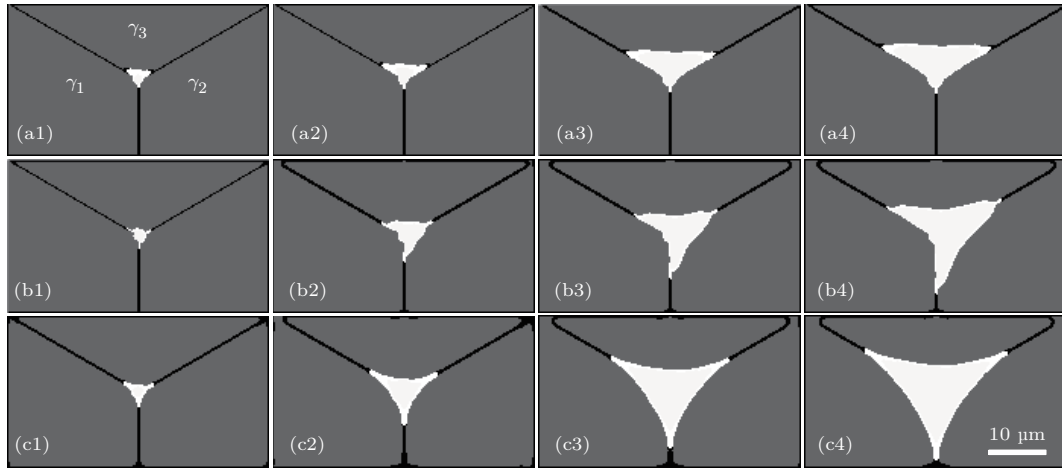


图10 三叉晶界处铁素体晶粒的生长情况 (a) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = \Delta\theta_{\alpha/\gamma_2} \leq 1^\circ, \Delta\theta_{\alpha/\gamma_3} > 15^\circ$; (b) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} \leq 1^\circ, \Delta\theta_{\alpha/\gamma_2} = \Delta\theta_{\alpha/\gamma_3} > 15^\circ$; (c) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = \Delta\theta_{\alpha/\gamma_2} = \Delta\theta_{\alpha/\gamma_3} > 15^\circ$
 Fig. 10. Evolution of the ferrite morphology at the triple junctions with different grain-boundary structures: (a) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = \Delta\theta_{\alpha/\gamma_2} \leq 1^\circ, \Delta\theta_{\alpha/\gamma_3} > 15^\circ$; (b) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} \leq 1^\circ, \Delta\theta_{\alpha/\gamma_2} = \Delta\theta_{\alpha/\gamma_3} > 15^\circ$; (c) $\Delta\theta_{\alpha/\gamma_1} = \Delta\theta_{\alpha/\gamma_2} = \Delta\theta_{\alpha/\gamma_3} > 15^\circ$.

2) 铁素体晶粒与其中1个奥氏体晶粒保持取向近似, 此时铁素体晶粒向此晶粒内的生长被抑制, 如图10(b)所示.

3) 铁素体晶粒不与任何晶粒存在近似取向, 此时铁素体进行等轴生长, 如图10(c)所示.

3.4 与实验结果的对比

为实现与真实组织的比较, 应用此模型模拟多相多晶粒系统中不同奥氏体晶界处铁素体晶粒的生长形貌. 模拟过程假设 $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma} = 2$ 不变, 并随机设置新形成的铁素体相晶粒与邻近奥氏体相晶粒之间的取向差. 图11(a)为模拟得到的微观组织形貌, 图中白色区域为新形成的铁素体相, 灰色区域代表原奥氏体相, 黑色表示相场界面. 从图中可

以看出不同奥氏体晶界处的铁素体晶粒形貌表现出明显差异. 作为对比, 图11(b)给出了Fe-0.1C-0.5 Mn (wt.%)合金在1123 K等温后淬火的金相组织, 白色晶粒为铁素体相, 其他区域为马氏体相(即高温时的奥氏体相). 对比图11(a)与图11(b)可以发现, 模拟的铁素体晶粒形貌能很好地反映实验中所观察到的现象. 实验组织中观察到不同奥氏体晶界处铁素体晶粒展现出几种不同形貌, 在模拟中也能找到相应的晶粒形貌.

- 1) 形核于原奥氏体晶界: 类型A和B.
- 2) 形核于原奥氏体三叉晶界: 类型C, D和E.
- A类: 铁素体晶粒仅向紧邻某个奥氏体晶粒内生长.
- B类: 铁素体晶粒向紧邻奥氏体晶粒内生长.

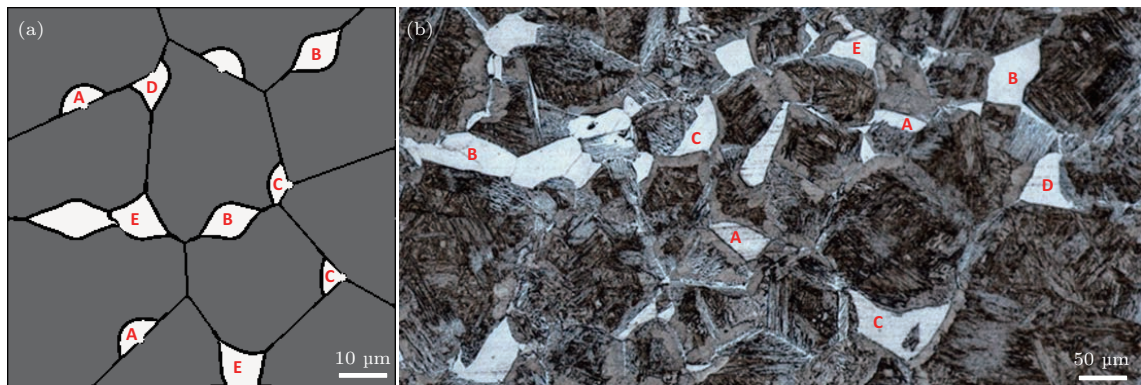


图11 (网刊彩色) 模拟结果(a)与金相组织(b)的比较
 Fig. 11. (color online) Comparison of the microstructure between the simulation (a) and the micrograph (b) in the given Fe-C-Mn alloy.

C类: 铁素体晶粒仅向紧邻某个奥氏体晶粒内生长.

D类: 铁素体晶粒向紧邻某两个奥氏体晶粒内生长.

E类: 铁素体晶粒向紧邻奥氏体晶粒内生长.

以上不同类型的晶粒形貌反映出铁素体晶粒生长受到不同晶界特征的作用. 模拟组织能很好地再现实际组织中铁素体晶粒生长形貌的多样性, 表明了该模型的有效性和正确性. 更重要的是该相场模型在物理和数学方面对界面模型参数进行了精细化处理, 把物性参数准确地表达在相场模型中, 故相场模拟结果具有明确的物理基础, 并成功地反映到模拟结果中, 能描述铁素体相变真实组织的特征.

4 结 论

1) 所建立的多相场模型通过协调能量梯度系数和耦合项系数定量表达晶粒的晶界特征, 且能固定相场界面宽度以保证必要的计算精度. 本文相场模型可用于描述各向异性晶界作用下的相变行为.

2) 相场模拟结果显示, 晶界类型的变化会影响相变中三叉界面处的平衡角与新相晶粒的生长速率. 晶粒间取向差会影响铁素体向紧邻奥氏体内的生长速率, 晶粒间取向越接近, 新相的生长越缓慢.

3) 通过与实验结果对比, 本文相场模型可成功描述奥氏体-铁素体相变过程中铁素体晶粒生长形貌的多样性, 从而为相变过程中的复杂晶粒生长行为提供机理解释.

参考文献

[1] Palumbo G, Lehockey E M, Lin P 1998 *JOM* **50** 40

- [2] Xu Z, Zhao L C 2004 *Principle of Solid-State Transformation in Metal* (1st Ed.) (Beijing: Science Press) pp7-19 (in Chinese) [徐洲, 赵连城 2004 金属固态相变原理 (北京: 科学出版社) 第7—19页]
- [3] Anderson M P, Srolovitz D J, Grest G S, Sahni P S 1984 *Acta Metall.* **32** 783
- [4] Raabe D 1998 *Mater. Sci. Forum.* **273-275** 169
- [5] Fan D, Chen L Q 1997 *Acta Mater.* **45** 611
- [6] Militzer M 2011 *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **15** 106
- [7] Chen L Q 2002 *Annu. Rev. Mater. Res.* **32** 113
- [8] McFadden G B, Wheeler A A, Braun R J, Coriell S R 1993 *Phys. Rev. E* **48** 2016
- [9] Steinbach I 2009 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **17** 073001
- [10] Kazaryan A, Wang Y, Dregia S A, Patton B R 2002 *Acta Mater.* **50** 2491
- [11] Chang K, Moelans N 2014 *Acta Mater.* **64** 443
- [12] Miyoshi E, Takaki T 2016 *Comput. Mater. Sci.* **112** 44
- [13] Steinbach I, Pezzolla F 1999 *Physica D* **134** 385
- [14] Moelans N, Wendler F, Nestler B 2009 *Comput. Mater. Sci.* **46** 479
- [15] Moelans N, Blanpain B, Wollants P 2008 *Phys. Rev. B* **78** 024113
- [16] Moelans N 2011 *Acta Mater.* **59** 1077
- [17] 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]
- [18] Zhang J, Zheng C W, Li D Z 2016 *Acta Metall. Sin.* **52** 1449 (in Chinese) [张军, 郑成武, 李殿中 2016 金属学报 **52** 1449]
- [19] Eiken J, Böttger B, Steinbach I 2006 *Phys. Rev. E* **73** 066122
- [20] Gustafson P 1987 *Metall. Trans. A* **18** 175
- [21] Huang W 1990 *Metall. Trans. A* **21** 2115
- [22] Loginova I, Ågren J, Amberg G 2004 *Acta Mater.* **52** 4055
- [23] Holm E A, Hassold G N, Miodownik M A 2001 *Acta Mater.* **49** 2981
- [24] Takaki T, Tomita Y 2010 *Int. J. Mech. Sci.* **52** 320
- [25] Kim Y J, Hwang S K, Kim M H, Kwun S I, Chae S W 2005 *Mater. Sci. Eng. A* **408** 110
- [26] Zheng C W, Raabe D 2013 *Acta Mater.* **61** 5504

Phase-field modeling of ferrite morphology in austenite-to-ferrite transformation with considering anisotropic effects*

Zhang Jun¹⁾²⁾ Chen Wen-Xiong²⁾ Zheng Cheng-Wu^{2)†} Li Dian-Zhong²⁾

1) (School of Chemistry and Materials Science, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

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

(Received 10 November 2016; revised manuscript received 11 January 2017)

Abstract

The morphology of proeutectoid ferrite in steels has attracted much attention in view of its close correlation with the fundamentals about the phase transformation theory as well as its potential practice relating to the final microstructure and properties of the steel product. With the recent development of mesoscale microstructure-based transformation models, the approach to integrated microstructural simulation is ideally suited to provide a more in-depth insight into the mechanism and morphology complexity for this problem. Among the various mesoscopic models, the phase-field method can readily be used to simulate the complex morphological phenomena during the austenite-to-ferrite transformation in steels in view of its convenience to include the material properties, especially the grain boundary properties, in a phenomenological way, and thus to model the microstructural process in an anisotropic system. In this study, a modified multi-phase-field (MPF) model that takes into account various anisotropic interfacial conditions is developed to simulate the growth morphology of ferrite during the austenite-to-ferrite transformation in a Fe-C-Mn alloy. In this model, a quantitative relation between the MPF model parameters and the physical anisotropic interfacial properties, including the grain-boundary energy and the mobility, is carefully considered, which allows the identical width of the diffuse interface regarding arbitrary interfacial anisotropies in the MPF simulations. In this way, both the accuracy and the numerical stability of the model can be ensured. Using this model, the effects of the grain boundary anisotropy on the ferrite growth are studied. The simulation results indicate that apart from the interfacial energy of $\sigma_{\alpha,\gamma}$, the grain boundary energy between the initial austenite grains, $\sigma_{\gamma,\gamma}$; does also significantly influence the growing morphology of ferrite. The ferrite growth along the initial austenite grain boundaries is facilitated when increasing the ratio of $\sigma_{\gamma,\gamma}/\sigma_{\alpha,\gamma}$, and hence leading to a smaller equilibrium angle at the triple junction. The results also indicate that misorientation-dependent grain boundary energy and mobility play important roles in determining the ferrite growth behavior. The growth of ferrite with a low misorientation α/γ interface is greatly inhibited. The ferrites nucleated at the triple junctions of the initial austenite grains present different growth scenarios while assigning different orientation relationships. Finally, the simulated ferrite morphologies in a polycrystalline structure are compared with the optical micrograph and are found that they are in good consistence with each other. This MPF model can replicate the morphology diversity of the ferrite grains in the austenite-to-ferrite transformation.

Keywords: multi-phase-field, austenite-to-ferrite transformation, anisotropic grain boundary, ferrite morphology

PACS: 07.05.Tp, 81.10.Aj, 81.30.-t

DOI: 10.7498/aps.66.070701

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51371169, 51401214).

† Corresponding author. E-mail: cwzheng@imr.ac.cn