

# 有第二相粒子的复相材料显微组织 及其演变的仿真研究\*

宋晓艳<sup>①②</sup> 刘国权<sup>②</sup> 谷南驹<sup>①</sup>

(<sup>①</sup>河北工业大学材料科学与工程学院,天津 300130;

<sup>②</sup>北京科技大学材料科学与工程学院,北京 100083)

**摘要** 建立了具有明确物理冶金基础的复相材料显微组织及其演变的图像仿真方法,仿真结果与实验事实相符,从而为利用计算机仿真手段研究材料科学提供了一条有效途径.应用建立的仿真系统,可以直接观察复相材料显微组织及其演变过程,并可对复相组织演变的动力学特性进行定量分析.

**关键词** 计算机仿真 第二相粒子 显微组织演变

材料在制备中加入(如颗粒增强复合材料)或一定处理工艺下析出(如时效)的第二相粒子对基体晶粒长大起到阻碍作用.由于大多数工程应用中要求材料具有细小均匀的晶粒组织,利用弥散分布的第二相粒子已成为工业上细化晶粒的常用手段.因此,研究有第二相粒子的复相材料显微组织及其演变对于理论预测和有效控制晶粒长大过程具有重要的学术意义和实用价值.

有关第二相粒子对晶粒长大的影响已建立较多的理论模型并有一定程度的实验研究<sup>[1~3]</sup>,但许多理论预测与实验结果存在明显差异,这些差异一方面来自模型的不合理假设,另一方面也来自复杂的实验过程带来的误差,因此,发展有第二相粒子的复相材料显微组织及演变的计算机仿真对理论和实验都是一种辅助研究和比较鉴定的有效途径.

迄今对复相材料组织及其演变的计算机仿真还不多,而图像仿真更为稀少.美国 EXXON 研究组曾对复相材料晶粒长大过程进行了图像仿真<sup>[4]</sup>,但对仿真算法构成与真实过程之间的关系缺乏清楚的分析 and 论述,而这正是对有第二相粒子的复相材料显微组织及演变进行合理仿真研究的关键所在.本工作首先建立具有明确物理冶金基础的复相材料组织及其演变的二维和三维系统图像仿真方法,而后通过仿真与真实过程的比较论述仿真的合理性,在此基础上,利用仿真手段研究复相组织演变的动力学特性.

## 1 复相组织及其演变的图像仿真方法

复相材料中第二相粒子阻碍晶粒长大的实质是:粒子位于晶界上时,由于部分晶界被占据使界面能降低,如果这部分晶界移动要脱离粒子时,晶界面积增加将引起界面能升高,只有当

1999-01-20 收稿,1999-04-16 收修改稿

\* 国家自然科学基金资助项目(批准号:59771070)

晶粒组织演变引起的系统自由能下降超过这部分增加的界面能时,晶界才可能继续移动,由此产生粒子对基体晶粒长大的钉扎作用,这就是建立相应仿真算法的基础。

本文作者已建立了单相材料显微组织及其演变的二维和三维图像仿真方法<sup>[5,6]</sup>,其正确性已获得理论和实验的成功验证<sup>[7]</sup>。复相组织及其演变仿真方法的构造思路既是在单相组织中引入第二相粒子,并合理体现粒子对基体晶粒长大的作用。为与已有理论和实验结果相比较,本文针对有稳定第二相粒子存在的复相材料进行仿真研究。

二维系统仿真方法的构成为:

(1)将平面区域离散成大量正六边形微小单元,构成基体晶粒组织的每一小单元各赋值一个整数表征其微观取向,被第二相粒子占据的小单元赋以特殊数值以和基体晶粒相区分。对于构成基体相的小单元,相邻的取向不同的小单元之间形成晶界微段,相邻的取向相同的小单元属于同一晶粒内部。

(2)依次提取构成基体晶粒的小单元,逐一进行再取向尝试。小单元的新取向选择其周围邻居的取向之一。如果系统中小单元总数为  $N$ ,其中被第二相粒子占据的个数为  $N_{sp}$ ,基体晶粒小单元的个数则为  $(N - N_{sp})$ ,每个晶粒小单元均需进行再取向尝试,则程序每完成  $(N - N_{sp})$ 次再取向尝试记作 1 个 MCS,为仿真复相材料晶粒长大的时间单位。

(3)小单元取向组合的能量表达式为

$$E = \sum J(1 - \delta_{S_i S_j}), \quad (1)$$

$J$  正比于界面能,对于各向同性的晶粒长大过程, $J$  为常量。 $\delta_{S_i S_j}$  为 Kronecker 函数<sup>[6]</sup>, $S_i$  为第  $i$  个晶粒小单元的取向值, $S_j$  为与第  $i$  个晶粒小单元相邻的、构成基体晶粒或第二相粒子的小单元的取向值,求和在第  $i$  个晶粒小单元的最近邻范围内进行。

复相材料晶粒长大的微观判据为:如果晶粒小单元重新取向后组合能量降低,即  $\Delta E < 0$ ,小单元将更更换取向,晶界实现微观迁移;如果  $\Delta E > 0$ ,小单元将保持原来取向,晶界微段保持不动;如果  $\Delta E = 0$ ,小单元更更换取向和保持原取向的概率均等。

上述二维复相组织演变的仿真思想也适用于三维系统,差别只在于三维组织的显微构成,三维复相组织及其演变的仿真方法为:

(1)将一定体积的三维空间离散成大量微小尺寸的立方体单元,对构成基体和第二相粒子的三维微元分别赋予不同类型数值表征其微观取向。基体微元在三维空间内彼此邻接、取向不同时,之间形成晶界面微元,而彼此邻接、取向相同时属于同一晶粒内部。

(2)依次提取每一基体微元作再取向尝试,新取向选择为该微元三维近邻<sup>[6]</sup>取向之一。

(3)三维基体微元取向组合的能量表达式为

$$E = \sum_{k=1}^{N_k} \sum_{j \in k} J(1 - \delta_{S_i S_j}), \quad (2)$$

其中  $N_k = 1, 2, 3$  分别对应于该基体微元三维空间的最近邻、次近邻和第 3 近邻<sup>[6]</sup>,其他符号意义同前。

三维复相组织演变的“能量判据”同于二维。

(4)引入三维周期性边界条件<sup>[8]</sup>,仿真体积足够大且空间连续的复相材料。

## 2 复相组织及其演变仿真合理性的分析

由二、三维复相组织及其演变仿真方法的构成可以看出,第二相粒子对晶界(二维包括晶界线和三晶交汇点,三维包括晶界面、三晶棱和四晶交汇点)运动的阻碍作用是通过减小基体晶粒小单元近邻取向范围和使包含第二相粒子小单元在内的组合能量稳定在较低数值而体现的.当第二相粒子位于晶界附近时,一方面,晶界附近基体相小单元进行再取向尝试时近邻晶粒小单元的取向数减少;另一方面,在第二相粒子和晶界相互作用达到局部平衡时,晶粒小单元再取向尝试往往引起近邻组合能量升高而使更取向无法实现,致使晶界难以“扫过”第二相粒子,即局部晶界为粒子所钉扎.

图1示出二维复相组织形态及其演变过程,其中第二相粒子的面积分数为 $f_A = 0.01$ ,粒子半径为 $r = 1.3820\lambda$ ( $\lambda$ 为像素点间距, $r$ 为构成第二相粒子小单元的等面积圆半径).由图可见,由于第二相粒子的存在,复相材料的晶粒组织与单相材料正常长大的晶粒组织<sup>[6,9]</sup>不同,如,当粒子占据三晶点位置时,120°夹角的状态难以保持,这是因为部分界面张力施与粒子而不能达到平衡条件;受粒子钉扎作用,晶界趋于平直,而且一些小尺寸晶粒因受多个粒子钉扎在长时间演变中不会从组织中消失,这些都延缓了晶粒长大进程.当足够多的第二相粒子钉扎住晶界时,晶界迁移受阻而中止,系统组织演变处于停滞.

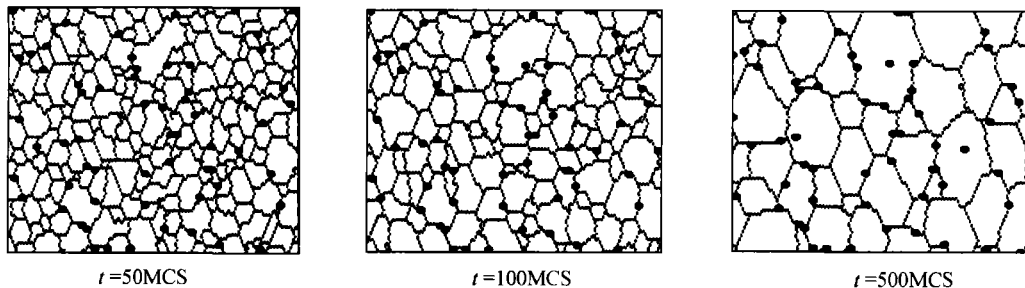


图1 二维复相材料显微组织及其演变过程

其中第二相粒子面积分数为 $f_A = 0.01$ ,半径为 $r = 1.3820\lambda$ , $\lambda$ 为像素点间距,图示尺寸为设计值的1.45倍。 $t$ 为仿真时间

在复相组织演变中,也可以观察到少量的晶界“脱钉”现象.随晶粒长大进行,晶界依靠局部能量起伏使迁移驱动力超过粒子钉扎力而能够继续运动.图2示意了仿真过程中晶界“脱钉”的微观图像.局部晶界的小单元取向组合总是趋向于低能量状态,如果粒子邻近区域小单元更取向引起的能量降低超过基体小单元与粒子小单元组合引起的能量变化,粒子邻区的基体小单元将实现重新取向,导致晶界微段发生迁移而脱离粒子.局部晶界的曲率越大,这种“脱钉”趋势越强.

图3示出三维复相材料显微组织的截面形态及与真实组织<sup>[10]</sup>的比较.三维复相材料在截面上表现出来的晶界“脱钉”现象似乎比二维系统明显得多,这有两方面原因:一是截面上粒子与晶界的相对位置不能准确反映两者真实的三维空间位置,位于三维晶界(包括界面、晶棱和角隅)的粒子数密度一定大于截面上位于晶界迹线上的粒子数密度;二是在二维系统晶界运

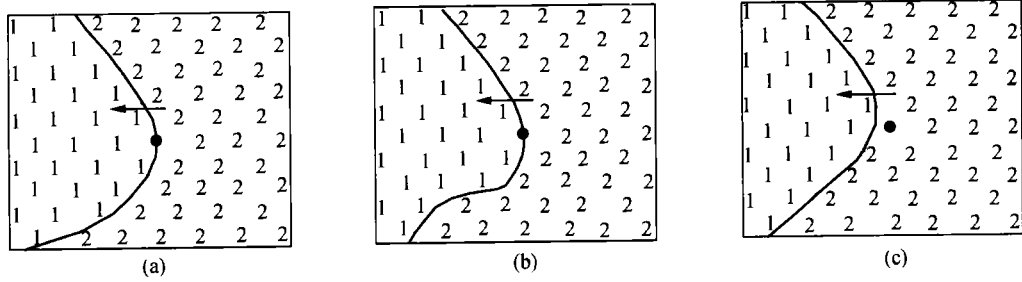


图 2 晶界“脱钉”示意图

箭头表示晶界运动方向

动受阻时,只有通过晶界附近原子向二维平面内邻晶有效跳动才可能实现晶界“脱钉”,而在三维系统,晶界邻区原子除在与粒子同一平面内跳动外,还可在不同平面内向空间邻晶跳动,只要原子跳动满足能量降低的条件(仿真算法中的“能量判据”与此相应),三维晶界即可实现继续运动,从而表现出比二维晶界较强的“脱钉”趋势。此仿真结果与 Richter<sup>[10]</sup>, Cerri<sup>[11]</sup>, Li<sup>[12]</sup> 等人的实验观察完全一致。

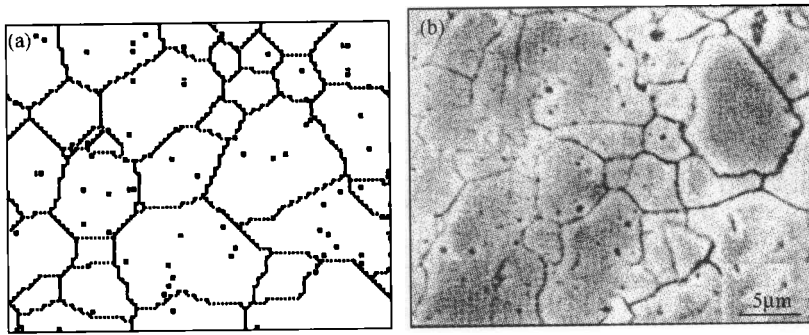


图 3 仿真的三维复相材料截面组织与真实组织的比较

(a) 仿真组织, (b) 含有稳定碳化物粒子的高速钢的截面组织<sup>[10]</sup>; (a) 图中  $r = 0.6204\lambda$ ,  $f_v = 0.01$ , 图示粒子尺寸为设计值的 1.61 倍

由对复相材料中晶粒组织演变、停滞态显微组织以及晶界“脱钉”现象等的观察和分析,可以看到,仿真反映的复相材料显微组织及演变特征与实验结果相符,由此可以肯定仿真能够较为准确地描述有稳定第二相粒子存在的复相材料组织演变过程。

### 3 复相材料显微组织演变的动力学研究

图 4 在对数坐标系下示出三维复相材料(其中第二相粒子参量为  $r = 0.6204\lambda$ ,  $f_v = 0.01$ ) 基体晶粒的平均尺寸(平均等体积球半径  $\langle R_V \rangle$ ) 随时间的变化。根据晶粒长大动力学基本方程<sup>[9]</sup>,  $\log_{10} \langle R_V \rangle \sim \log_{10} (t - t_0)$  曲线上任意一点切线的斜率即为对应于该时刻的晶粒长大指数。由图可见,晶粒长大指数随时间逐渐减小,到 3000MCS 后逐渐趋于 0。晶粒平均尺寸不随时间发生变化——即长大指数成为 0 时,对应时刻称为复相材料晶粒长大的极限时间  $t_c$ , 相应的平

均晶粒尺寸则为极限晶粒尺寸  $R_c^{[1,2]}$ , 图中示出了相应数值.

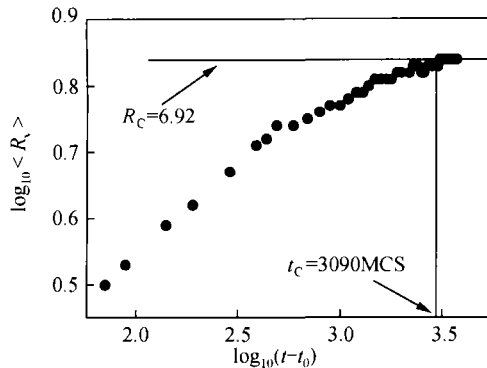


图4 三维复相材料平均晶粒尺寸随时间的变化  
 $t_0$  为形成充满空间的复相显微组织的初始时刻

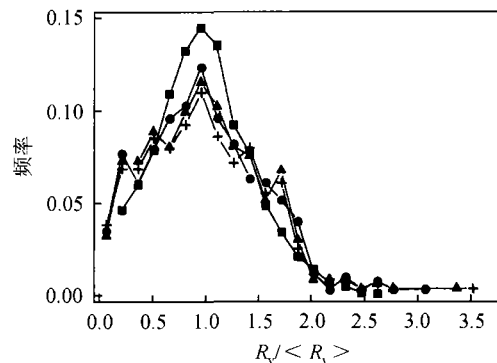


图5 三维复相显微组织演变中基体晶粒尺寸分布及其演变

■, ●, ▲和+符号连成曲线分别对应  $t = 500, 1500, 2500$  和  $3500$ MCS 时刻

图5示出复相材料晶粒长大到达停滞以前的长时间范围内,晶粒尺寸分布及演变.随晶粒长大进行,尺寸分布宽度增加,分布峰值下降,这是由于空间弥散分布的粒子的钉扎作用,在单相材料中不断收缩并趋于消失的部分小尺寸晶粒在复相材料中保留下来,而少量大尺寸晶粒,因其较大的驱动力能够克服局部粒子的阻力而得以持续长大,对于大部分晶粒被粒子钉扎的系统,最大相对尺寸随时间逐渐增长,直至系统最大晶粒被完全钉扎.

除了研究复相组织演变的动力学,利用该仿真系统还可设计多种复相体系,用于研究极限晶粒尺寸与第二相粒子参量间的数量关系,从而可以大大缩减实验工作量,并能够保证设计和计算精度.

如果在仿真算法中引入第二相粒子随温度和时间变化的关系,即在材料处理过程中第二相粒子发生溶解或(和)粗化,利用在本文基础上发展的仿真系统可以研究存在不稳定第二相粒子的复相材料组织及其演变过程.

## 4 结论

本研究工作建立了含有第二相粒子的复相材料显微组织及其演变的二维和三维图像仿真方法,分析了仿真方法构成的物理冶金基础,并结合仿真组织及其演变以及真实复相组织,论述了仿真的合理性,从而为利用仿真手段研究材料显微组织及其演变提供了一条新的途径.应用本文建立的仿真系统,研究了复相材料显微组织演变的动力学特性,结果表明,由于第二相粒子对晶界运动的阻碍作用,复相材料基体晶粒长大指数随时间逐渐减小,晶粒尺寸分布增宽而峰值下降;当长大指数趋于0时,晶粒长大处于停滞状态,此时晶粒尺寸分布宽度达到最大值.

## 参 考 文 献

- 1 Zener C. Grains phases and interfaces: an interpretation of microstructure. *Trans AIME*, 1948, 175: 15 ~ 51
- 2 Hillert M. Inhibition of grain growth by second-phase particles. *Acta Metall*, 1988, 36(12): 3 177 ~ 3 181
- 3 Koul A K, Pickering F B. Grain coarsening in Fe-Ni-Cr alloys and the influence of second phase particles. *Acta Metall*, 1982, 30: 1 309 ~ 1 306
- 4 Srolovitz D J, Grest G S, Sahn P S, et al. Computer simulation of grain growth——III. Influence of a particle dispersion. *Acta Metall*, 1984, 32(9): 1 429 ~ 1 438
- 5 宋晓艳,刘国权,何宜柱. 一种改进的晶粒长大 Monte Carlo 模拟方法. *自然科学进展*, 1998, 8(3), 337 ~ 341
- 6 Song Xiaoyan, Liu Guoquan. A simple and efficient three dimensional Monte Carlo simulation of grain growth. *Scripta Mater*, 1998, 38 (11): 1 691 ~ 1 696
- 7 宋晓艳,刘国权. 基于计算机模拟的正常晶粒长大的三维特征和二维截面表征. *材料研究学报*, 1998, 12(3): 245 ~ 250
- 8 张孝泽. 蒙特卡罗方法在统计物理中的应用. 郑州: 河南科学技术出版社, 1991, 62
- 9 Atkinson H V. Theories of normal grain growth in pure single phase systems. *Acta Metall*, 1988, 36(3): 469 ~ 491
- 10 Richter J, Cwajna J, Szala J. Quantitative estimation of particles with large size variation. *Acta Stereol*, 1994, 13(2): 293 ~ 298
- 11 Cerri E, Evangelista E, Ryum N, et al. On the effect of plastic deformation the coarsening of  $\theta$ -phase precipitation in an Al-Cu alloy. *Metall Mater Trans*, 1997, 28A(2): 257 ~ 263
- 12 Li G P, Li D, Liu Y Y, et al. Microstructure of second-phase particles in Ti-5Al-4Sn-2Zr-1Mo-0.25Si-1Nd alloy. *Metall Mater Trans*, 1997, 28A(8): 1 595 ~ 1 604