

相场法研究FeC系中奥氏体-铁素体相变时魏氏体形貌的生长行为

张黎, 沈耀

上海交通大学, 材料科学与工程学院, 上海200240

简介

钢中奥氏体-铁素体的等温相变, 无论对于理论研究还是工程应用而言, 都很重要, 但至今仍有许多需深入研究之处。如过冷度适中时, 将生成盘状结构的魏氏铁素体 (widmanstätten, 如图1所示), 现有理论模型在分析时, 或假设了奥氏体/铁素体相界面处成分局部平衡, 或简化了形貌特征, 使模型仅适用于低维的简单形貌分析, 难以进一步推广。而擅长描述复杂形貌演变且易于向高维推广的相场方法, 成为了又一有力手段。

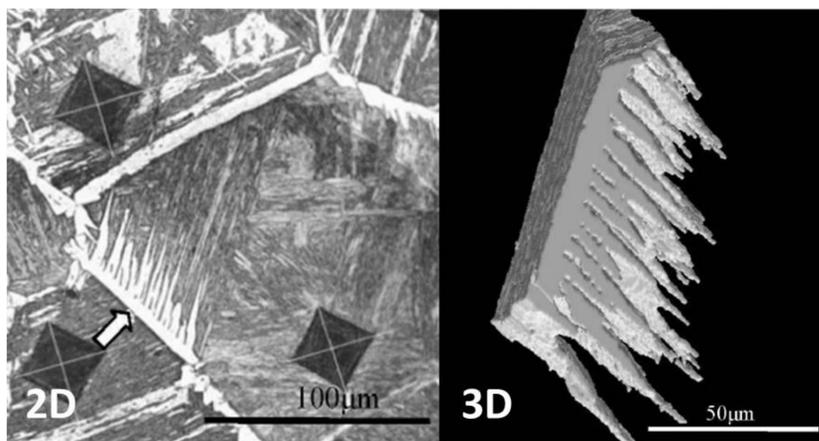


图 1. 2D、3D魏氏铁素体实验观察、重构形貌

相场模型

描述奥氏体→铁素体相变的相场模型控制方程组。

相场方程

$$\dot{\phi} = -M_{\phi} \frac{\delta G}{\delta \phi} = -M_{\phi} \left\{ \frac{1}{V_m} \frac{\partial G_m}{\partial \phi} - \sum_j^{n=2,3} \left[\frac{\partial}{\partial j} \left(\varepsilon(\hat{\mathbf{n}}) \frac{\partial \varepsilon(\hat{\mathbf{n}})}{\partial \phi_j} |\nabla \phi|^2 + \varepsilon(\hat{\mathbf{n}})^2 \phi_j \right) \right] \right\}$$

扩散方程

$$\frac{\partial u_C}{\partial t} = \nabla \cdot \left[u_C y_{va} M_C \cdot \left(\frac{\partial^2 G_m}{\partial u_C^2} \nabla u_C + \frac{\partial^2 G_m}{\partial u_C \partial \phi} \nabla \phi \right) \right]$$

将上述耦合的方程组, 写入 COMSOL Multiphysics® 中自定义PDEs接口, 其初始和边界条件如图2所示。

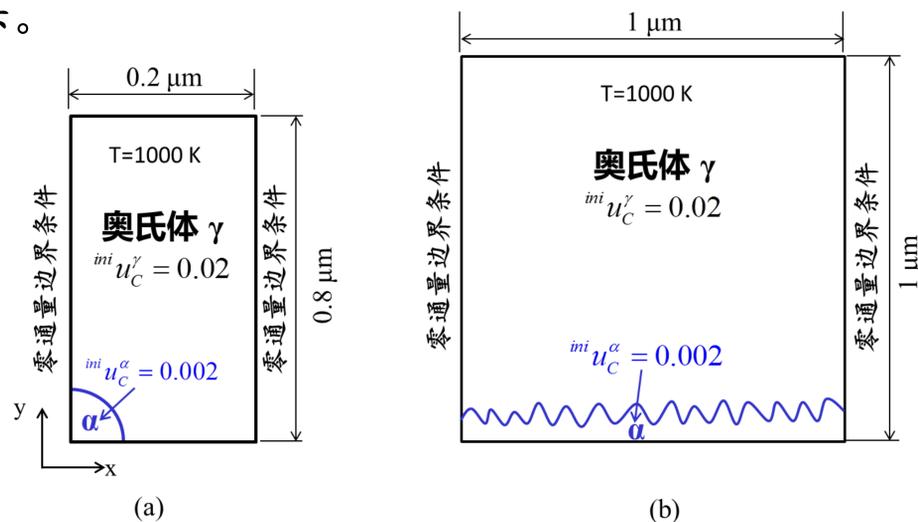


图 2. 2D中单个(a)、一簇(b)魏氏体盘初始条件和边界条件

结果

在二维、三维分别求解相场模型控制方程组, 且采用“强”梯度能各向异性函数, 所获模拟结果如图3-5所示, 包括了单个盘 (2D、3D) 和一簇盘 (2D) 的魏氏体形貌。

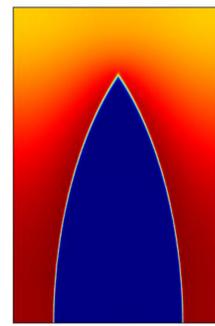


图 3. 2D单个魏氏体盘相场模拟形貌



图 4. 3D单个魏氏体盘相场模拟形貌

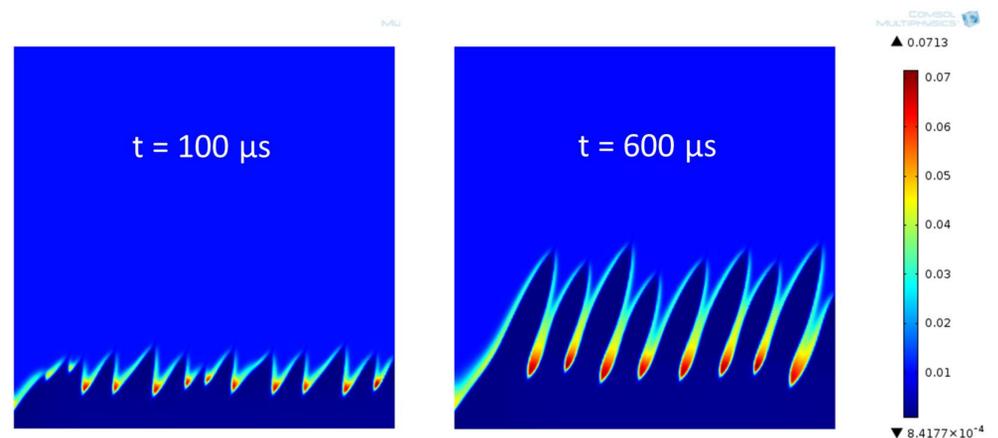


图 5. 2D一簇魏氏体盘相场模拟形貌

结论

模拟得到的形貌与实验观察形貌有很好的相似度。后续工作将进一步就相变温度、界面能各向异性、额外的弹性能等因素, 对魏氏体盘尖端伸长速度的影响做更多分析讨论。

参考文献

1. I. Loginova, J. Ågren, G. Amberg, Acta Materialia 52 (2004) 4055-4063.
2. A. Yamanaka, T. Takaki, Y. Tomita, Materials Transactions 47 (2006) 2725-2731.
3. H.K. Lin, C.C. Chen, C.W. Lan, Journal of Crystal Growth 362 (2013) 62-65.
4. W. Yan, N. Xiao, Y. Chen, D. Li, Computational Materials Science 81 (2014) 503-509.