文章编号：1673-5196(2018)01-0011-06

层片状珠光体生长形貌的相场法模拟

冯　力[1,2]，高亚龙[1]，朱昶胜[2]，安国升[1]，肖荣振[1,2]，路妮妮[1]

(1. 兰州理工大学 材料科学与工程学院，甘肃 兰州　730050；2. 兰州理工大学 省部共建有色金属先进加工与再利用国家重点实验室，甘肃 兰州　730050)

摘要：采用相场法，以共析钢为例，模拟研究了不同初始共析层片间距及不同初始过冷度条件下层片状珠光体微观组织的生长形貌，探讨了不同初始层片间距及不同初始过冷度条件下层片状珠光体微观组织生长的规律. 模拟结果表明：过冷度不变时，随着初始层片间距的增大，共析层片振幅增大，共析层片生长形貌的变化是规则对称的层片状→非规则非对称形状→棒状；层片间距不变，初始过冷度在 19.6～20 K 时，随着初始过冷度的减小，共析钢中碳原子扩散能力增大，层片间距的失稳，致使共析层片由规则状向非规则形状变化；初始过冷度在 20～22 K 时，随着初始过冷度的增大，共析钢中碳原子的扩散能力减弱，渗碳体相前沿碳原子浓度无法使其规则对称地生长，渗碳体相向碳原子浓度高的地方生长，从而产生倾斜生长以及层片合并现象.

关键词：层片状珠光体；相场法；初始层片间距；初始过冷度；组织形貌

中图分类号：TG248；TG244　　**文献标志码**：A

Simulation of lamellar pearlite growth morphology with phase-field method

FENG Li[1,2], GAO Ya-long[1], ZHU Chang-sheng[2], AN Guo-sheng[1]
XIAO Rong-zhen[1,2], LU Ni-ni[1]

(1. College of Materials Science and Engineering, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou　730050, China; 2. State Key Laboratory of Advanced Processing and Recycling of Nonferrous Metals, Lanzhou Univ. of Tech., Lanzhou　730050, China)

Abstract: Taking eutectoid steel as example and using phase-field method, the growth morphology of lamellar pearlite microstructure is investigated simulatively under conditions of different initial lamella spacing and different initial undercooling degree and the growth rule of that microstructure is explored under the same conditions. The simulation result shows that with increase of initial lamella spacing when the undercooling degree is kept constant, the vibration amplitude of eutectoid lamella some will increase and the change of eutectoid lamellar some growth morphology will exhibit as follows: regular symmetric lamellar→irregular asymmetric one→rod like one. When the lamella spacing is kept constant and the initial undercooling is in the range from 19.6 K to 20 K, the diffusion ability of carbon atoms in eutectoid steel will increase with the decrease of the initial undercooling degree. Meantime, the stability of lamella spacing will lose, making the eutectoid lamella some change from regular form to irregular form. When the initial undercooling degree is in the range from 20 K to 22 K, the diffusion ability of carbon atoms in eutectoid steel will decrease with the increase of initial undercooling degree, making the concentration of carbon atoms in cementite phase front insufficient to grow regularly and symmetrically, and the cementite phase will grow toward that place where exists high carbon concentration, so that a phenomenon of tilt growth and lamellar merging will occur.

Key words: lamellar pearlite; phase-field method; initial lamella spacing; initial undercooling degree; microstructure morphology

相场法是目前微观组织模拟领域中最具优势的研究方法，其在共晶[1-4]与共析转变[5-6]数值模拟方面取得了许多重要的研究进展. 共析转变生成的珠光体组织是钢中的重要组织之一，高品质盘条钢、钢丝、钢绞线产品、城轨、地铁列车车轮和轨道等均是

收稿日期：2017-03-05
基金项目：国家自然科学基金(11504149，11364024，51661020)
作者简介：冯　力(1981-)，男，四川梁平人，副教授.

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

重要的珠光体组织结构件[7]. 因此对珠光体组织的研究具有十分重要的研究意义. 共析转变与共晶转变都是由母相生成 2 个不同的固态新相的过程，它们具有相同的自由能变化规律[8].

国内外相关学者采用相场法对珠光体共析转变进行了较广泛的研究. Ankit 等[9]运用分析法和模拟法，比较地研究了生长相的扩散对层片前沿生长速度的影响；Nakajima 等[8,10]通过同时考虑碳在奥氏体和铁素体中的扩散，利用多相场法模拟了共析钢珠光体的协同生长，同时将模拟层片间距与生长速度的结果与实验结果进行了对比；Steinbach，Plapp[11]概述了珠光体转变的经典模型——Zener-Hillert 协作生长模型、亚共析珠光体中渗碳体的形核以及伴随应力驱使扩散的珠光体生长；Steinbach，Apel[12]采用相场法研究了应力与应变对珠光体的转变动力学的影响.

本文采用相场法，以珠光体共析钢为例，模拟研究了不同初始共析层片间距及不同初始过冷度条件下层片状珠光体微观组织的生长形貌，探讨了在不同初始层片间距及不同初始过冷度条件下层片状珠光体微观组织生长的规律.

1 相场模型

1.1 相场控制方程

相场控制方程采用 KKSO 模型[13]，其相场控制方程为

$$\frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \frac{-2}{n}\sum s_{ij} M_{ij}\left[\frac{\delta F}{\delta \varphi_i} - \frac{\delta F}{\delta \varphi_j}\right] \tag{1}$$

其中

$$\frac{\delta F}{\delta \varphi_i} = \sum_{j\neq i}\left[\frac{\varepsilon^2_{ij}}{2}\nabla^2\varphi_j + \omega_{ij}\varphi_j\right] + f^i(c_i) - c_i f_c \tag{2}$$

$$f^i(c_i) - c_i f_c = -\frac{RT_E}{V_m}\left(c_E - \frac{T_E - T}{m_i}\right)\times (1-k_i) - \frac{RT_E}{V_m}c_i \quad (i=1,2) \tag{3}$$

$$f^3(c_3) - c_3 f_c = -\frac{RT_E}{V_m}c_3 \quad (i=3) \tag{4}$$

式中：相场序参量 $\varphi_i(i=1,2,3)$，分别表示铁素体、渗碳体和奥氏体在凝固过程中任意位置的体积分数，在奥氏体相中，$\varphi_1=\varphi_2=0$，$\varphi_3=1$；在铁素体相中，$\varphi_2=\varphi_3=0$，$\varphi_1=1$；在渗碳体相中，$\varphi_1=\varphi_3=0$，$\varphi_2=1$，在凝固过程中的任意位置，上述 3 个序参量都要遵循以下法则：$\sum_i \varphi_i = 1\ (i=1,2,3)$；$n=\sum_{i=1}^{3} s_i$，$s_{ij}=s_i s_j$，$s_i$ 为步函数；M_{ij} 为相场动力学系数，$M_{i3}=\frac{V_m}{RT}\frac{\sigma_{i3}}{(1-k_i)^2}\frac{\sqrt{2\omega_{i3}}}{c^e_{3i}\varepsilon^e_{i3}\zeta_{i3}}$，上标 e 表示为平衡状态；$\varepsilon_{ij}$ 为梯度能系数，其表达式为 $\varepsilon_{ij}=\frac{4}{\pi}\sqrt{\zeta\sigma_{ij}}$；$\omega_{ij}$ 为界面厚度参数，其表达式为 $\omega_{ij}=2\frac{\sigma_{ij}}{\zeta}$，$\zeta$ 为界面厚度的一半；σ 为界面能；f 为自由能密度；c 为系统的组分. T_E 为共析温度；c_E 为共析成分；K_i 为平衡分配系数；m_i 为平衡母相线斜率.

1.2 溶质场控制方程

根据溶质守恒定律得到溶质场方程为

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla\cdot D\sum_i \varphi_i \nabla c_i \tag{5}$$

式中：D 为溶质扩散系数；φ_i 为相场序参量；$c_i(i=1,2,3)$ 分别表示铁素体、渗碳体及奥氏体在凝固过程中的溶质浓度.

2 数值计算

2.1 初始及边界条件

初始条件设为：在共析成分即含碳摩尔分数为 3.494%，低于共析温度 1 000 K 的恒定温度条件下，发生奥氏体的分解时开始模拟计算. 铁素体和渗碳体初始晶粒以固定的层片宽度（在铁碳合金相图中，利用杠杆定律计算可得铁素体和渗碳体的层片宽度比约为 7∶1）设定在计算区域的底部. 左面和右面边界设定为周期性边界条件，上面和下面边界设定为绝热边界条件，如图 1 所示（图中 γ 代表奥氏体，α 为铁素体，Cem 为渗碳体，λ 为层片间距）.

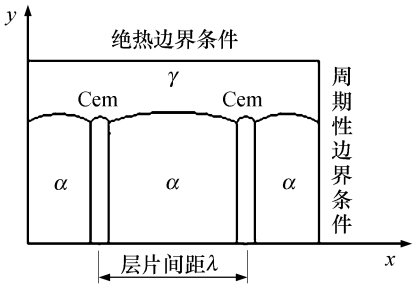

图 1 初始及边界条件设定示意图

Fig. 1 Schematic diagram of initial and boundary condition setting

2.2 合金物性参数

以 Fe-C 二元合金为例，模拟研究不同初始层片间距以及不同初始过冷度条件下，层片珠光体生长形貌的规律. 主要参数通过 Fe-Fe_3C 合金相图计算，Fe-Fe_3C 合金相图（本文选取相图中发生共析转变的部分）如图 2 所示.

Fe-C 二元合金热物性参数-扩散系数主要与温

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

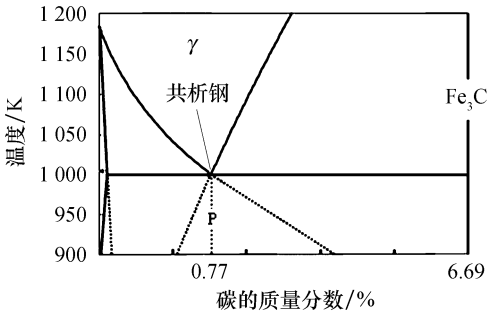

图 2　Fe-Fe$_3$C 合金相图

Fig. 2　Phasigram of alloy Fe-Fe$_3$C

度有关,其随温度变化的规律如下式所示[14]:

$$D = D_0 \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right) \tag{6}$$

式中:D_0 为扩散常数;Q 为扩散激活能;R 为气体常数;T 为热力学温度.

Fe-C 二元合金中铁素体以及渗碳体的分配系数由下式计算可得[8]:

$$c_i = k_{ir} c_r \tag{7}$$

式中:c_i 为相 i 的溶质浓度;K_{ir} 为相 i 和相 r 的溶质浓度比;c_r 为相 r 的溶质浓度(本文中 r 相为奥氏体相).

模拟空间步长取 $\Delta x = \Delta y = 1.0 \times 10^{-8}$ m;时间步长由差分格式的稳定条件决定:

$$\Delta t \leqslant \frac{(\Delta x)^2}{4D} \tag{8}$$

Fe-C 二元合金物性参数见表 1[14-15].

表 1　Fe-C 二元合金物性参数

Tab. 1　Material physical parameters of Fe-C binary alloy

物性参数	取值
铁素体分配系数 k_1	0.922 8
渗碳体分配系数 k_2	1.108 1
铁素体扩散系数 D_s/(m^2 · s^{-1})	$2.243\ 5 \times 10^{-11}$
渗碳体扩散系数 D_1/(m^2 · s^{-1})	$1.014\ 5 \times 10^{-12}$
生成铁素体相斜率 m_1/(K · mol^{-1})	−52.937 8
生成渗碳体相斜率 m_2/(K · mol^{-1})	74.133 6
铁素体/渗碳体界面能 σ_{12}/(J · m^{-2})	0.922 3
铁素体/奥氏体界面能 σ_{13}/(J · m^{-2})	0.85
渗碳体/奥氏体界面能 σ_{23}/(J · m^{-2})	0.68
摩尔体积/(m^3 · mol^{-1})	7.7×10^{-6}

3　模拟结果与讨论

3.1　不同初始层片间距条件下共析层片形貌及溶质分布

图 3 与图 4 分别表示 Fe-C 二元合金片状珠光体在不同初始层片间距条件下,共析层片生长形貌及溶质分布. 经计算在过冷度为 20 K 时,$\lambda_0 = 0.4\ \mu$m,为平衡层片间距. 其中图 3a～3f 依次表示初始层片间距为 $\lambda = 0.5\lambda_0$、$\lambda = 1.0\lambda_0$、$\lambda = 1.9\lambda_0$、$\lambda = 2.1\lambda_0$、$\lambda = 2.9\lambda_0$、$\lambda = 3.0\lambda_0$ 的共析层片生长形貌,图 4a～4f 为对应于图 3a～3f 共析层片生长的溶质分布图.

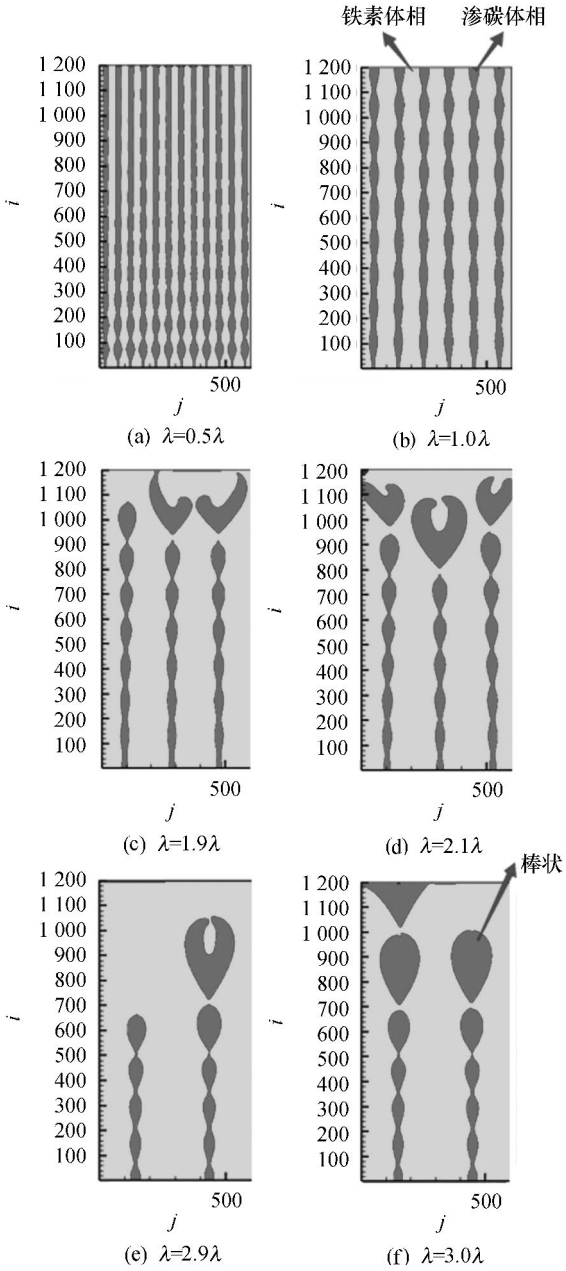

图 3　不同初始层片间距条件下的共析层片生长形貌

Fig. 3　Growth morphology of eutectoid lamella some under condition of different initial lamella spacing

图 3a～3f 为不同初始层片间距条件下共析层片的生长形貌图,可以看出,当片状珠光体的初始层片间距为平衡层片间距时,共析层片呈现规则对称的生长形貌,如图 3b 所示;当初始层片间距小于平衡间距时,共析层片振幅减小,依然呈现规则对称的生长形貌,如图 3a 所示;随着初始层片间距增大,共析层片振幅变大,生长一段时间后渗碳体相停止生

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

长，部分渗碳体相在其停止生长后，在其正前方重新形核，形核后呈现不规则不对称形状的生长形貌，如图 3c～3e 所示；随着初始层片间距的进一步增大，共析层片振幅进一步增大，渗碳体相停止生长后，在其正前方重新形核后形貌如图 3f 所示，若从三维角度来考虑，其形貌呈现棒状.

图 4a～4f 为不同初始层片间距条件下共析层片的溶质分布图，图中溶质的分布与共析层片生长形貌保持一致. 当片状珠光体的初始层片间距为平衡层片间距时，共析层片中渗碳体相与铁素体相完全按照共析层片扩散机制进行生长，其横向与纵向扩散速度保持平衡，规则对称地向前生长，如图 4b 所示；当共析层片的初始层片间距小于平衡层片间距时，由于过冷度保持不变，即温度不变，碳原子的扩散能力不变，当初始层片间距减小时，碳原子能够更容易更稳定地扩散到渗碳体相前沿，共析层片振幅减小，规则对称地向前生长，如图 4a 所示；相反，当初始层片间距增大时，共析层片振幅增大，横向与纵向扩散平衡被打破，导致渗碳体相前沿溶质富集程度达不到其生长需求，从而停止生长，一段时间后，渗碳体相前沿溶质原子浓度富集程度达到其形核需求，重新形核. 重新形核后，渗碳体相向溶质原子浓度高的区域生长，从而形核后的渗碳体相向两侧生长，同时为了减小生长相的表面能，生长相的两侧向中心靠拢，如图 4c～4f 所示. 这个模拟结果所表现出的机理与共析层片生长扩散理论[16]相符合.

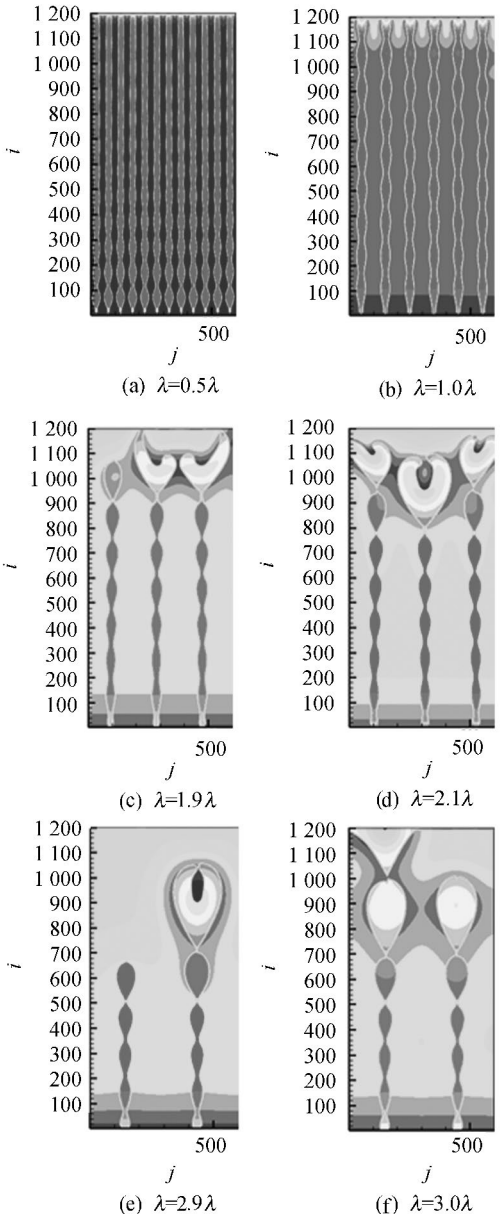

图 4　不同初始层片间距条件下的共析层片的溶质分布

Fig. 4　Solute distribution of eutectoid lamella some under condition of different initial lamella spacing

根据以上模拟结果，可以得出如下规律：过冷度不变时，随着初始层片间距的增大，共析层片振幅增大，共析层片生长形貌的变化为：规则对称的层片状→非规则非对称形状→棒状.

3.2　不同初始过冷度条件下共析层片生长形貌及溶质分布

图 5 与图 6 分别表示 Fe-C 二元合金片状珠光体在不同初始过冷度条件下共析层片的生长形貌及溶质分布. 其中图 5a～5f 依次表示初始层片间距为平衡层片间距时，初始过冷度为 19.6、19.8、20、20.6、21、22 K 时共析层片生长形貌；图 6a～6f 为对应于图 5a～5f 共析层片生长的溶质分布图.

图 5a～5f 表示不同初始过冷度条件下共析层片的生长形貌，可以看出，当初始过冷度为 20 K 时，此时共析层片呈现规则对称的生长形貌，如图 5c 所示；随着初始过冷度的降低，共析层片振幅增大，但依旧呈现规则对称的生长形貌，如图 5b 所示；随着初始过冷度进一步降低，共析层片振幅进一步变大，当生长一段时间后，渗碳体相停止生长，部分渗碳体相停止生长后重新形核，形核后呈现不规则不对称的生长形貌，如图 5a 所示. 初始过冷度在 20～22 K 时，随着初始过冷度的增大，共析层片中部分渗碳体相倾斜生长，如图 5d 所示；随着初始过冷度的继续增大，共析层片中部分渗碳体相发生层片合并现象，如图 5e 和图 5f 所示.

图 6a～6f 表示不同初始过冷度条件下共析层片的溶质分布，图中溶质的分布与共析层片生长形貌保持一致. 当初始温度为 980 K，即初始过冷度为 20 K 时，碳原子的扩散能力与层片间距正好处于稳定状态，共析层片规则对称地向前生长，如图 6c 所示；随着初始温度的增大，共析钢中碳原子的扩散能

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

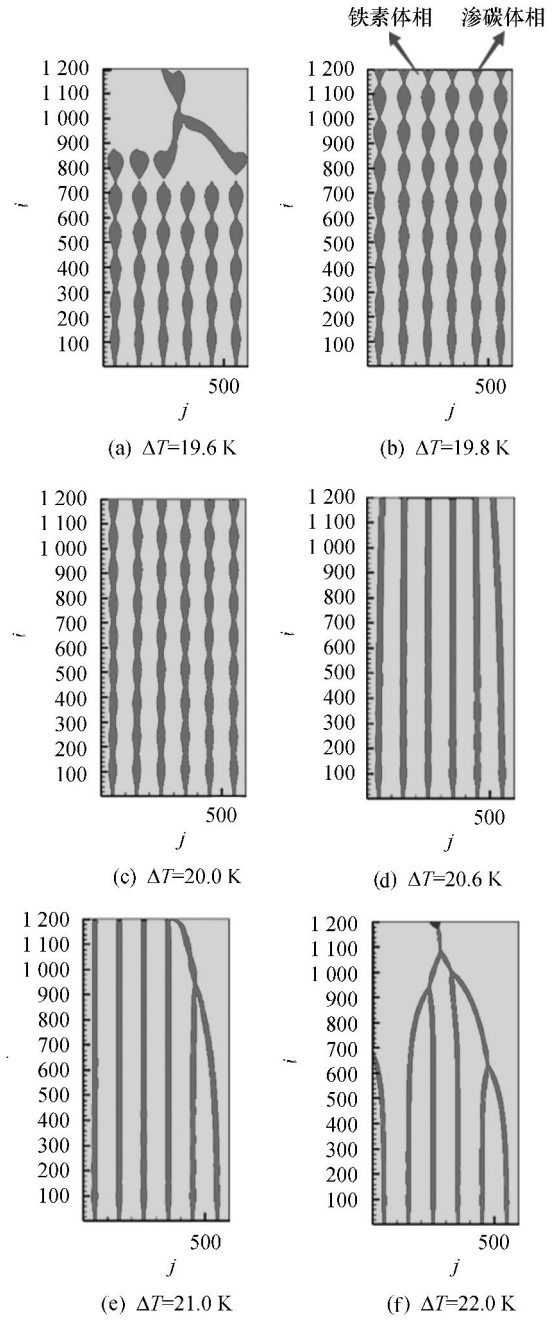

图 5　不同初始过冷度条件下共析层片的生长形貌

Fig. 5　Growth morphology of eutectoid lamella some under condition of different initial undercooling degree

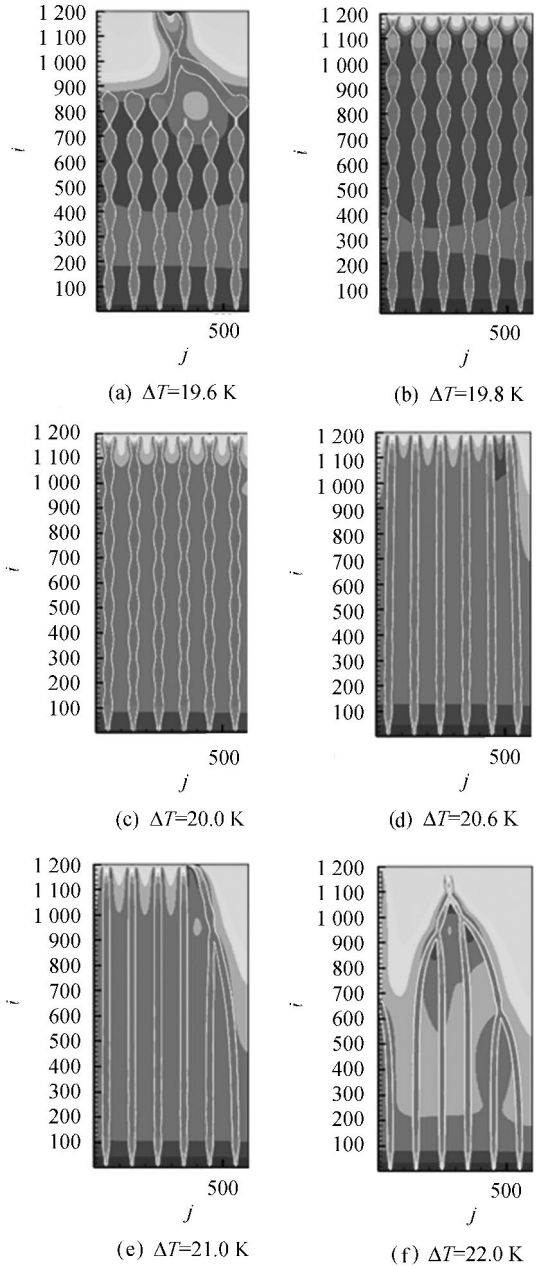

图 6　不同初始过冷度条件下共析层片的溶质分布

Fig. 6　Solute distribution of eutectoid lamella some under condition of different initial undercooling degree

力增大,在层片间距不变的条件下,致使碳原子的扩散能力与层片间距失稳,共析层片振幅变大,如图 6b 所示;随着初始温度进一步增大,碳原子扩散能力继续增大,致使碳原子的扩散能力与层片间距失稳加剧,共析层片振幅进一步变大.当生长一段时间后,由于界面前沿溶质原子浓度达不到渗碳体相生长需求,使渗碳体相停止生长,而铁素体相单独生长一段时间后,部分渗碳体相前沿溶质原子浓度达到了其生长需求,重新形核,形核后呈非规则非对称地生长,如图 6a 所示.而当初始温度减小为 979.4 K,即初始过冷度为 20.6 K 时,此时共析钢中碳原子的扩散能力减弱,渗碳体相前沿碳原子浓度无法使其规则对称地生长,渗碳体相向碳原子浓度高的区域生长,呈倾斜生长,如图 6d 所示;随着初始温度的进一步减小,共析钢中碳原子的扩散能力继续减弱,渗碳体相倾斜生长加剧,产生层片合并,如图 6e 和图 6f 所示.这个模拟结果所表现出的机理与共析层片生长扩散理论[16]相符合.

根据以上模拟结果,可以得出如下规律:层片间

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

距不变，初始过冷度在 19.6～20 K 时，随着初始温度的增大，即初始过冷度的减小，共析钢中碳原子扩散能力增大，以及层片间距的失稳，致使共析层片由规则状向非规则形状变化；初始过冷度在 20～22 K 时，随着初始温度的降低，即初始过冷度的增大，共析钢中碳原子的扩散能力减弱，渗碳体相前沿碳原子浓度无法使其规则对称地生长，渗碳体相向碳原子浓度高的地方生长，从而产生倾斜生长以及层片合并现象.

4 结论

采用相场法实现了对片状珠光体在不同初始层片间距与不同初始过冷度条件下层片生长形貌的模拟研究. 不同初始层片间距及不同初始过冷度条件下层片状珠光体微观组织生长的规律如下：

1）过冷度不变时，随着初始层片间距的增大，共析层片振幅增大，共析层片生长形貌的变化为：规则对称的层片状→非规则非对称形状→棒状.

2）层片间距不变，初始过冷度在 19.6～20 K 时，随着初始温度的增大，即初始过冷度的减小，共析钢中碳原子扩散能力增大以及层片间距的失稳，致使共析层片由规则状向非规则形状变化；初始过冷度在 20～22 K 时，随着初始温度的降低，即初始过冷度的增大，共析钢中碳原子的扩散能力减弱，渗碳体相前沿碳原子浓度无法使其规则对称地生长，渗碳体相向碳原子浓度高的地方生长，从而产生倾斜生长以及层片合并现象.

参考文献：

[1] 路 阳，冯小静，冯 力，等. 强迫对流下共晶组织生长的相场法模拟 [J]. 兰州理工大学学报，2017，43(2)：19-24.

[2] 杨玉娟，严 彪. CBr_4-C_2Cl_6 共晶合金生长的三维多相场模拟 Ⅰ. 模型建立及验证 [J]. 金属学报，2010，46(7)：781-786.

[3] 杨玉娟，严 彪. CBr4-C2Cl6 共晶合金生长的三维多相场模拟 Ⅱ. 层片间距对形态演化的影响 [J]. 金属学报，2010，46(7)：787-793.

[4] APEL M，BOETTGER B，DIEPERS H J，*et al*. 2D and 3D phase-field simulations of lamella and fibrous eutectic growth [J]. Journal of Crystal Growth，2002(1)：154-158.

[5] ANKIT K，MUKHERJEE R，NESTLER B. Deviations from cooperative growth mode during eutectoid transformation：Mechanisms of polycrystalline eutectoid evolution in Fe-C steels [J]. Acta Materialia，2015，97：316-324.

[6] ANKIT K，MUKHERJEE R，MITTNACHT T，*et al*. Deviations from cooperative growth mode during eutectoid transformation：Insights from a phase-field approach [J]. Acta Materialia，2014，81：204-210.

[7] 曹敏鹏，蒋 永，冉巍巍，等. 珠光体钢晶粒尺寸与拉伸性能的关系研究 [J]. 现代机械，2015(5)：84-87.

[8] NAKAJIMA K，APEL M，STEINBACH I. The role of carbon diffusion in ferrite on the kinetics of cooperative growth of pearlite：A multi-phase field study [J]. Acta Materialia，2006，54(14)：3665-3672.

[9] ANKIT K，CHOUDHURY A，CHENG Q，*et al*. Theoretical and numerical study of lamellar eutectoid growth influenced by volume diffusion [J]. Acta Materialia，2013，61(11)：4245-4253.

[10] NAKAJIMA K，TANAKA Y，HOSOYA Y，*et al*. Phase-field simulation of cooperative growth of pearlite [J]. Materials Science Forum Vols，2007(20)：1013-1020.

[11] STEINBACH I，PLAPP M. Pearlite revisited [J]. Continuum Mechanics and Thermodynamics，2012，24(4)：665-673.

[12] STEINBACH I，APEL M. The influence of lattice strain on pearlite formation in Fe-C [J]. Acta Materialia，2007，55(14)：4817-4822.

[13] KIM S G，KIM W T，SUZUKI T，*et al*. Phase-field modeling of eutectic solidification [J]. Journal of Crystal Growth，2004，261(1)：135-158.

[14] 崔忠圻，覃耀春. 金属学与热处理 [M]. 2 版. 北京：机械工业出版社，2007.

[15] PANDIT A S. Theory of the pearlite transformation in steels [D]. Cambridge：University of Cambridge，2011.

[16] 席慧智，傅宇东，方双全. 固态相变 [M]. 1 版. 北京：国防工业出版社，2011.

(C)1994-2021 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net