

相场法模拟 AZ31 镁合金再结晶晶粒长大

王明涛, 宗亚平, 王 刚

(东北大学 材料与冶金学院 材料各向异性与织构教育部重点实验室, 沈阳 110004)

摘 要: 建立一个相场模型, 并对 AZ31 镁合金进行再结晶晶粒长大模拟, 提出一系列法则以确定模型中参数的真实值, 从而实现组织演化在工业应用范围内的真实时空模拟。在 300~400 °C 100 min 内时, 模拟结果与实验结果吻合得很好, 在 250 °C 时, 模拟结果与实验结果有较大偏离, 说明该合金体系的界面迁移激活能在低温时有所改变, 定量模拟研究该合金组织的混晶程度。结果表明: 合金在 300~400 °C 时, 随时效时间的延长, 混晶特别严重。模型模拟相场法界面控制过程组织演变的真实时空, 所确定的参数值也可以用于其他相似合金系统的模拟。

关键词: AZ31 镁合金; 相场法; 再结晶; 晶粒长大; 计算机模拟

中图分类号: TG 111.7

文献标识码: A

Simulation of grain growth of AZ31Mg alloy during recrystallization by phase field model

WANG Ming-tao, ZONG Ya-ping, WANG Gang

(Key Laboratory for Anisotropy and Texture of Materials, Ministry of Education,
School of Materials Science and Metallurgy, Northeastern University, Shenyang 110004, China)

Abstract: A model was established to simulate the realistic spatio-temporal microstructure evolution in recrystallization of Mg alloy using the phase field approach. The rules were proposed to decide the real physical values of all parameters in the model. The simulated results agree well with the reported experimental measurements at 300–400 °C in 100 min. However, there is an obvious deviation between the simulation and experimental results at 250 °C, which indicates a variation in interface mobility activation energy of the alloy system at the temperature. The grain size fluctuation in the microstructure was studied quantitatively. The results show that the grain size becomes more severe with increasing aging time at the temperatures of 300–400 °C. The model simulates the grain growth in real spatio-temporal scale for the first time and the parameter values can be regarded as a database for other similar alloy systems.

Key words: AZ31 Mg alloy; phase-field model; recrystallization; grain growth; computer simulation

随着计算机的普及与发展, 研究人员提出了很多的模拟材料组织演化的模拟方法, 相场法就是其中之一。相场法很适合在工业应用的尺度内进行材料组织的模拟, 并在几十年的发展中显示出了其可以模拟组织真实时空演变的潜力。相场法已经成功地应用于很多组织演变过程, 例如马氏体相变^[1]、凝固过程^[2-3]

以及第二相析出^[4-6]等。同时, 相场法可以加深人们对不同类型组织形貌形成的热力学及动力学机理的认识。

尽管目前有关固态相变大部分相场法模拟是定性的研究, 研究人员已经开始将其变成定量研究的工具。ZHU 等^[7]采用计算相图的方法和数据库计算了局域自

由能密度函数,使自由能表达实现真实值。最近 WEB 等^[8]将相场模型应用到工程应用当中,用该法模拟某一热处理过程,该过程为扩散控制的材料组织演变过程,这是相场法首次用来在工业应用范围内模拟固态组织的真实时空演变过程。

到目前为止,还没有在工业应用范围内对界面控制过程进行真实时空模拟的相场法模型。合金的再结晶过程是一个界面控制的过程,虽然曾有模拟元胞自动法^[9]和蒙特卡洛法^[10]对再结晶过程模拟,然而只有相场法具有物理分析的准确特征,本文作者则对该过程利用相场法进行模拟,力图实现相场法对界面控制过程固态显微组织演变的真实时空模拟,促进相场法的实际应用,通过模拟得到的结果对理解晶粒长大的机理和规律提供重要的学术参考意义,对准确控制材料的晶粒尺寸与特性提供重要的参考价值。

1 模型建立

1.1 模拟基本方程

相场法是基于热力学和动力学的一种模拟方法,材料的微观组织随时间的演化可以通过分别解 Ginzburg-Landau 方程和 Cahn-Hilliard 扩散方程而得到,

$$\frac{\partial \eta_q(r,t)}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_q(r,t)} \quad (q=1, 2, \dots, n) \quad (1)$$

$$\frac{\partial c(r,t)}{\partial t} = M \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta c(r,t)} \quad (2)$$

式中: $\eta_p(r,t)$ 是长程有序化参数; $c(r,t)$ 是成分场变量; L 和 M 分别是结弛豫和化学迁移率。 F 是系统的自由能项, 各向同性的单相系统中该函数的一个合理表达如下^[11]

$$F(t) = \int \left[f_0(c, \eta_1(r,t), \eta_2(r,t), \dots, \eta_n(r,t)) + \frac{K_2}{2} \sum_{q=1}^n (\nabla \eta_q(r,t))^2 \right] dr \quad (3)$$

式中: f_0 是局域自由能密度函数; K_2 是梯度能系数。

本文作者以 AZ31 镁合金板材为例进行模拟并且以文献[12]中的试验数据作为标准与模拟结果进行比较。因此,合金成分为 $w(\text{Al})=3\%$ 、 $w(\text{Zn})=1\%$,余量为 Mg。再结晶温度为 250、300、350 和 400 °C,再结晶时间直到 100 min。所有的组织图片和试验数据

如无特殊说明均来自文献[12]。

由于和三维空间相比晶粒长大二维空间的模拟结果并没有太大差异^[13],同时为了增强计算效率,本文作者在 512×512 个格子的二维空间进行模拟。为了能与实际试验结果相比较,本模拟的总尺寸取 $150 \mu\text{m} \times 150 \mu\text{m}$,即每个单元格的宽度为 $2.93 \times 10^{-7} \text{m}$ 。为了使结果收敛,时间步长需要相对小些,但时间步长过小则需要耗费更多的计算时间来形成要求的组织,综合以上两方面因素本模拟取 0.3 s 作为时间步长。由于模拟过程为界面控制扩散迁移率并不起主要作用,根据文献[13],方程 2 中的扩散迁移率 M 近似取 $3.87 \times 10^{-20} \text{m}^2 \cdot \text{mol} \cdot \text{J}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 。

1.2 局域自由能密度函数的建立

本模型考虑了再结晶前后的储存能并将其添加到局域自由能密度函数中,局域自由能密度函数建议表达如下:

$$f_0 = A + \frac{A_1}{2} [c(r,t) - c_l]^2 + \frac{A_2}{4} [c(r,t) - c_l]^4 - \frac{B_1}{2} [c(r,t) - c_l]^2 \sum_{q=1}^n \eta_q^2(r,t) + \frac{B_2}{4} \sum_{q=1}^n \eta_q^4(r,t) + \frac{K_1}{2} \sum_{q=1}^n \sum_{p \neq q} [\eta_q^2(r,t) \eta_p^2(r,t)] \quad (4)$$

式中: c 是合金成分; c_l 是一定温度下自由能成分曲线的最低点的成分,其值在需要模拟的 4 个温度下分别为 0.17、0.2、0.2 和 0.2(见图 1(a))。 n 是系统中可能的晶粒取向个数,根据文献[11]该值取 32。为了满足 f_0 在 η_1 处的最小值,式(4)对 η 的导数应该为 0,于是得到

$$B_1(c - c_l)^2 = B_2 \quad (5)$$

在式(4)中,当 $\eta_p^2 = 1$ 且 $\sum_{q \neq p} \eta_q^2 = 0$ 时, f_0 代表再结

晶后基体的自由能;当 $\sum_{q=1}^n \eta_q^2 = 0$ 时, f_0 则代表再结晶前冷加工形变基体的自由能。于是再结晶过程中释放的储存能 E 可以按如下方法求出,

$$E = f_0 \left(\sum_{q=1}^n \eta_q^2 = 0 \right) - f_0 \left(\eta_p^2 = 1, \sum_{q \neq p} \eta_q^2 = 0 \right) = \frac{B_1}{2} (c - c_l)^2 - \frac{B_2}{4} \quad (6)$$

储存能是再结晶过程的驱动力,以缺陷(例如位错)的形式存在于材料中并且在再结晶过程中释放^[15]。根

据文献[16]储存能随着冷轧金属的变形量的增加而增加, 当变形量到达一定程度(0.2)后储能将变成一个常数值, 由于本试验合金的变形量超过了临界值, 故本研究中应变储能取 0.54 J/g, 即 $E=12.8 \text{ J/mol}^{[16]}$ 。

将 $E=12.8 \text{ J/mol}$ 代入到式(5)和(6)中, 可以得到 B_1 和 B_2 , 由于本模型假设储存能是与再结晶温度无关的常数, 于是 B_1 和 B_2 也是独立于温度的参数。计算结果见表 1。

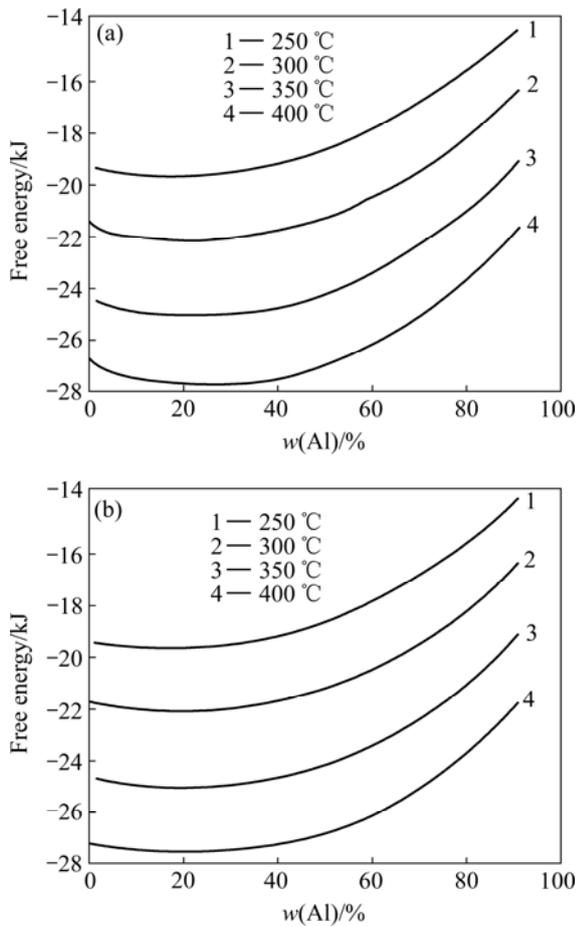


图 1 AZ31 镁合金在 250, 300, 350 和 400 °C 的自由能曲线
Fig.1 Free energy curves of AZ31 Mg alloy at 250, 300, 350 and 400 °C: (a) By software Thermocalc; (b) By fitting Fig.1(a) and Eq.(4)

表 1 式(4)中参数 A, A_1, A_2, B_1 和 B_2 在各模拟温度下的取值

Table 1 Calculated parameters A, A_1, A_2, B_1 and B_2 in Eq.(4) at different temperatures

Temperature/°C	$A/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$A_1/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$A_2/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$B_1/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$B_2/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$
250	-19.7	22.1	5.2	2.65	51.2
300	-22.1	21.1	13.0	1.79	51.2
350	-25.0	20.6	18.3	1.79	51.2
400	-27.5	16.8	31.5	1.79	51.2

在 Mg-Al-Zn 合金系统中, 不同温度下的自由能成分曲线(见图 1(a))可以通过软件 Thermocalc 获得, 于是参数 A, A_1 和 A_2 可以通过拟合式 (4)

$$f_0(\eta_p^2 = 1, \sum_{q \neq p} \eta_q^2 = 0)$$

与实际自由能成分曲线得到, 拟合后的曲线如图 1(b)所示, 最佳拟合结果见表 1。

1.3 模拟组织的晶界特征

为了实现真实时空模拟, 本文作者通过研究晶界特征, 即晶界宽度和界面能, 来确定式(3)和(4)中的参数 K_1 和 K_2 , 本模型以双晶平直界面作为研究对象。

通过现有的方程, 仅能够知道 K_1 和 K_2 在晶界处的作用, 却无法直接推导出与晶界特征的关系, 于是本文作者采用在一定范围内对 K_1 和 K_2 任意赋值, 通过比较模拟结果来确定梯度系数与晶界特征的关系, 从而确定系数 K_1 和 K_2 的真实取值。根据计算发现 K_1 和 K_2 不同的取值所得到的组织中晶界处成分场和取向场变量的变化趋势是一致的, 当 $K_1=4.0 \times 10^2 \text{ J/mol}$, $K_2=3.5 \times 10^{-12} \text{ m}^2\cdot\text{J/mol}$ 时, 晶界处取向场变量的变化如图 2(a)所示, 即在晶界处取向场变量介于 0 与 1 之间。同时, 在本研究中的晶界并不是传统意义上的原子排列不规则的晶格畸变区, 而是能量有异于基体的区域, 本文作者称之为晶界作用域, 如图 2 中 r 所代表的宽度(例如有些小角度晶界的位错应变区为 1 000 个原子宽度)。从实际的合金显微组织(见图 4)也可看出, 其晶界宽度远大于原子排列不规则的晶格畸变区的宽度, 原因即为通过腐蚀使能量不同于基体的区域显现出来形成了如前所述的晶界作用域。图 2(b)所示为根据图 2(a)与方程 4 确定的 η 与成分关系做出的晶界处成分变化曲线。由图 2(b)可以看出, 随温度的降低, 晶界处的偏析程度增加, 这与已有的理论一致。

在本模型中, 本文作者通过晶界作用域的宽度和晶界能这两个晶界特征来限制 K_1 和 K_2 的取值, 本模拟首先在 $K_1 \in [1.80 \times 10^2 \text{ J/mol}, 12.8 \times 10^2 \text{ J/mol}]$ 且增量为 $1.1 \times 10^2 \text{ J/mol}$ 时, K_2 分别取 1.55、3.55、4.55、

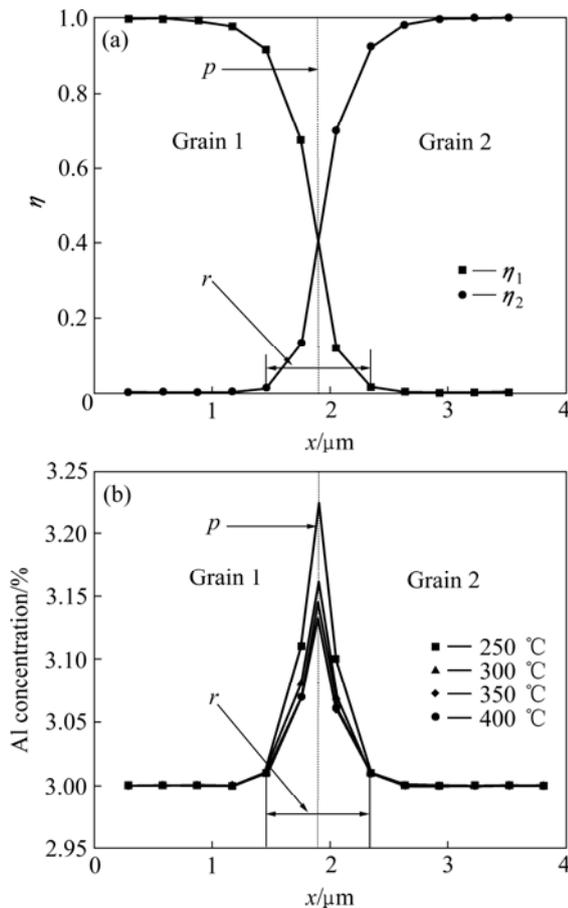


图2 有序化参数及成份在晶界处的变化
Fig.2 Variation of orientation parameters and composition in grain boundary (p is grain boundary position; r is range of grain boundary): (a) Variation of orientation parameters at grain boundary; (b) Variation of composition at grain boundary at different temperatures

5.55、6.55、7.55 $\times 10^{-12}$ $\text{m}^2\cdot\text{J/mol}$ 时进行组织模拟，并对模拟结果的晶界作用域宽度进行计算，发现不同 K_1 条件下， K_2 相同，晶界作用域宽度也相同，其值分别为：0.879、1.172、1.465、1.758、2.051、2.344 μm 。这说明在以上 K_1 和 K_2 的取值范围内晶界作用域的宽度主要由 K_2 决定。对于模拟组织晶界能的计算参考文献[13]，计算结果如图3所示。

根据实验所得金相照片(见图4)，其上晶界作用域约为1~2 μm ，于是本研究取 $K_2=3.55 \times 10^{-12}$ $\text{m}^2\cdot\text{J/mol}$ 以保证模拟结果的晶界作用域宽度为1.172 μm (4个格子)即与实际宽度相符合。

K_1 和 K_2 均对晶界能有影响，且随 K_1 和 K_2 的增大，模拟组织的晶界能增大。同时，镁合金再结晶后的界面为任意大角度界面，在大部分单相系统中理论值为0.5~0.6 J/m^2 [17]，本模型中则取0.55 J/m^2 。由于 K_2 可

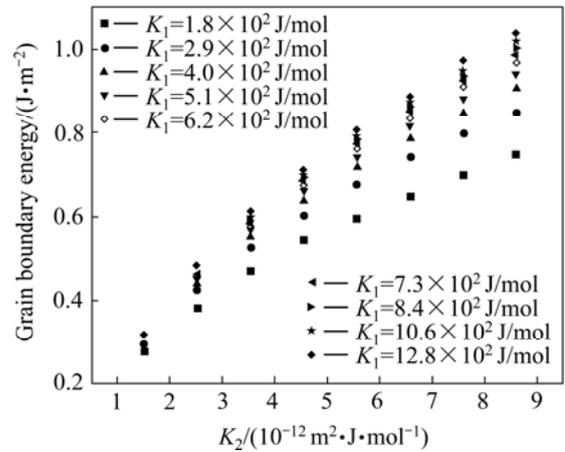


图3 系数 K_1 和 K_2 与晶界能的关系
Fig.3 Relationship between gradient parameters and grain boundary energy

根据晶界作用域宽度确定，于是按照晶界能值从图3中 K_1 可以唯一确定为 4.0×10^2 J/mol 。

1.4 模型中界面迁移率的表达及取值

在方程1中 L 是和界面迁移率有关的参数，且和温度的关系符合阿伦尼乌斯公式的形式[10]

$$L = L_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (7)$$

式中： L_0 是常数； R 是摩尔气体常数； Q 是激活能。到目前为止，在再结晶和晶粒长大过程中 Q 的物理意义和真实取值并不是十分清楚，很多理论都认为第二相粒子或偏析原子对晶界移动的拖拽是该过程的主要因素[15]，然而本模型模拟的是单相合金，没有第二相析出，故本研究建议采用外加元素的偏析激活能作为 Q 。

偏析激活能 V 可以通过公式 $V = 8\pi r^3 G \delta^2$ 计算[18]，其中 r 是基体原子半径； G 是剪切模量； $\delta = \left| \frac{r - r_F}{r} \right|$ ， r_F 则取与基体原子半径相差较大的主要溶质原子。本研究中 $r_F = r_{Zn}$ ， $r = 1.59 \times 10^{-10}$ m ， $r_{Zn} = 1.33 \times 10^{-10}$ m [18]， $G = 17$ GPa ，可得 $E = 4.49 \times 10^{-20}$ J/atom ，相当于 $Q = 27.6$ kJ/mol 。

L_0 无法直接从理论上推导出，本研究则通过400 $^\circ\text{C}$ 时实验所得的晶粒尺寸时间曲线与模拟曲线拟合得到 L_0 ，当 $L = 2.37 \times 10^{-7}$ $\text{m}^3/(\text{s}\cdot\text{J})$ 时，模拟结果与实验结果具有最优拟合，此时根据式(7)， $L_0 = 3.29 \times 10^{-5}$ $\text{m}^3/(\text{s}\cdot\text{J})$ ，从而其他温度下的 L 值可以通过式(7)得到。

1.5 模型初始条件的设置

再结晶的形核是一个复杂的过程在当前水平还无法进行真实时空的模拟^[15], 因此在本模型中通过唯象的方法处理形核过程, 即在整个模拟区域内以 $8dx \times 8dx$ (其中 dx 表示模拟网格的宽度) 作为基本单元, 每个单元内形成一个晶核, 其半径为 $0 \sim 4dx$ 之间的随机值。同时引入一个持续 1 min 的快速长大阶段来模拟形核, 该阶段的迁移率 L' 假设为 $L'=100L$ 。同时初始成分根据初始值的确定, 在新基体内 ($\eta=1$) 成分为合金平均成分 0.03, 在其余位置则取为 0.031 以形成成分偏析。

2 结果与讨论

本研究模型的建立对再结晶过程是储能与界面曲率同时推动晶粒长大的过程, 即可以认为是再结晶与晶粒长大过程同时发生, 这其实更符合实际的再结晶

过程^[15]。也就是再结晶的进行是储存能和界面能同时起作用无法分开, 通过式(3)和(4)可知, 当 η 在 $0 \sim 1$ 之间的时候, 局域自由能密度和梯度项均不为零, 即对组织演变均起作用。

本模型得到的是真实时空的显微组织, 因此可以与实验结果的形貌进行直接比较。模拟组织与实验组织图如图 4 所示, 比较相同处理条件下的实验与模拟组织图可以看出, 组织形貌在相对应的时效温度和时间吻合得很好, 这证明了该模型的有效性。因此说明再结晶过程界面能同样起十分重要的作用, 这点正是材料开发实验研究者通常忽略的问题方面, 本模拟的这个结果应该给予关注。

观察同一温度下组织演化过程可以发现(见图 4), 尺寸大于周围晶粒尺寸的晶粒会继续长大, 尺寸小于周围晶粒尺寸的晶粒会逐渐变小直至消失, 于是随时间增加, 模拟区域内的晶粒会越来越, 平均晶粒尺寸则越来越大, 这与普通理论分析的结果是相符的。从图中还可以发现四边形、五边形晶粒, 即有可能边

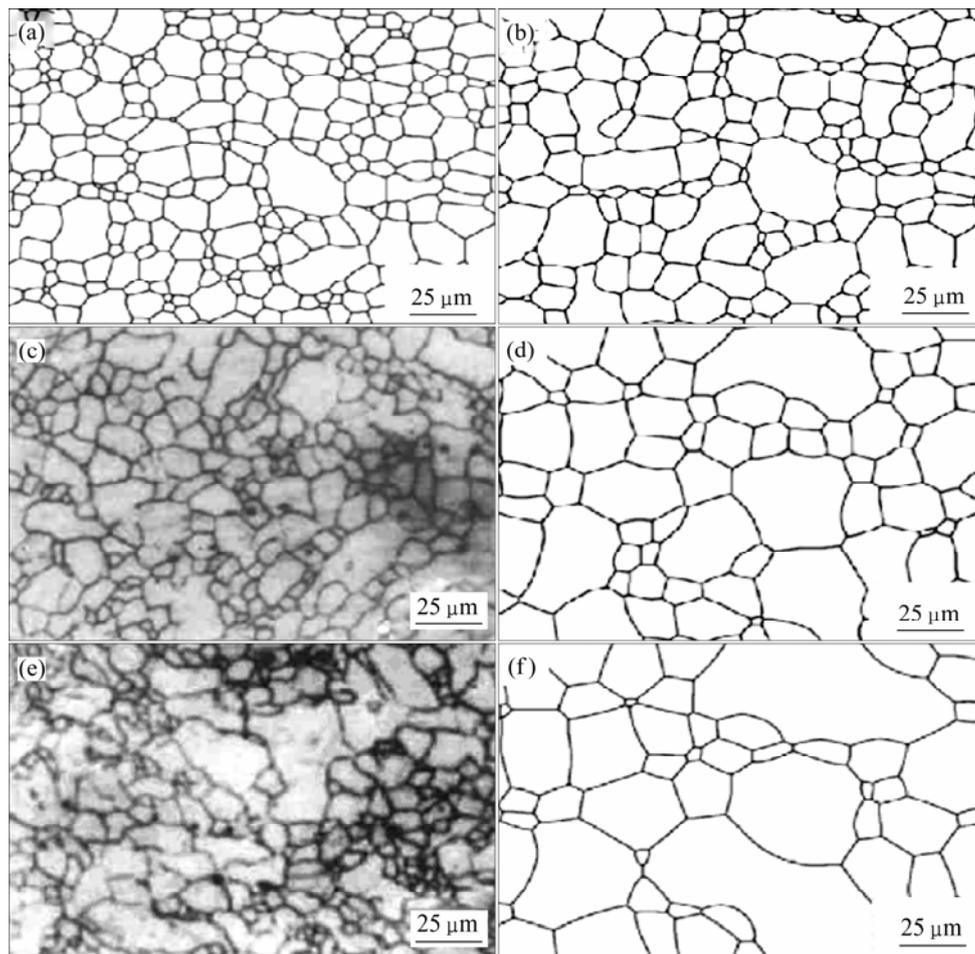


图 4 模拟与实际组织图的比较

Fig.4 Comparison of simulation and experimental photographs: (a) 250 °C, 30 min, simulation; (b) 250 °C, 90 min, simulation; (c) 250 °C, 30 min, experimental; (d) 400 °C, 30 min, simulation; (e) 400 °C, 30 min, experimental; (f) 400 °C, 90 min, simulation

数逐渐减少至三角形后消失, 并形成一个稳定的三叉节点; 也有可能直接消失, 并分别形成不稳定的四叉和五叉晶界节点, 节点又随后分解为两个和3个稳定的三叉节点, 这与已有的实验观察结果完全一致^[9], 这里通过模拟提供了再结晶晶粒长大的演变机理。同时由图4(a)和(b)可知, 低温时(250℃), 该合金晶粒细小, 分布较为均匀, 且随着时间的延长, 尺寸略有增大; 而高温时(400℃), 晶粒粗大, 且随时效时间增加, 尺寸增加明显。为了定量研究晶粒尺寸, 进一步检验模型的正确性, 本研究统计了各温度下晶粒的平均尺寸随时间的变化, 并与试验结果进行了对照, 结果如图5所示。

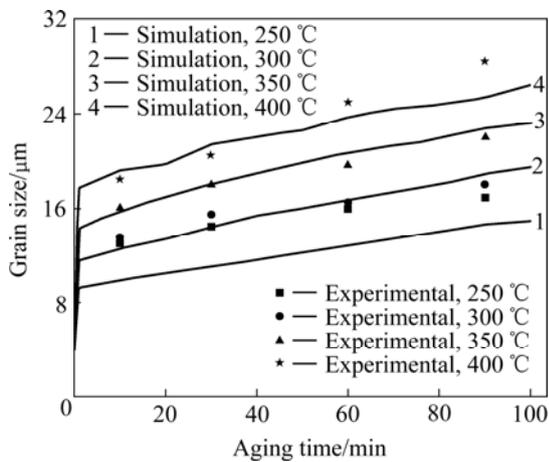


图5 晶粒尺寸随保温时间变化时模拟结果与实验结果的对比

Fig.5 Comparison of simulation and experimental results of mean grain size evolution with aging time

图5所示为晶粒尺寸随时间变化的实验与模拟结果的比较。从图5可看出, 4个五角星图标表示400℃时的实验结果, 该数据用来标定本模型中式(7)中的 L_0 , 所以在该温度下实验与模拟值吻合得很好, 同时可以看到在350和300℃时, 仍然吻合的很好, 这表示当前模型可以很好的模拟再结晶过程, 说明在这两个温度下利用式(7)得到的界面迁移率的正确性, 特别是有关式(7)中激活能的假设可以认为是正确的, 同时说明Zn原子在界面偏析对界面迁移的能动性起主要作用, 而Al在体系中所占比例虽然较大但对界面能动性所起作用不大, 这个结果对材料设计和优化具有重要参考意义。然而, 在250℃时, 实验与模拟结果有较大差别, 这显然是在低温下激活能机理的发生了改变; 250和300℃时, 实验值与模拟值基本重合, 说明300℃以下的界面迁移率基本相等, 这表明300℃以下热处理不产生合金元素的界面偏析。进一步观察

图5中模拟曲线发现, 随温度升高曲线斜率增加, 表示平均晶粒尺寸长大速度加快, 说明较高温度会促进晶界移动速度, 符合1.4节提出的温度与界面迁移率的关系。

目前, 对于再结晶形核的机理主要认为是两侧错密度不同的界面突然移动, 其移动后扫过的区域既是新晶粒的形核区域, 这就决定了形核过程的速度很快, 时间很短的特点。图5中模拟曲线即使在再结晶开始阶段与多数实验结果符合很好, 说明本模型的形核阶段设定为1min的假设是合理的, 符合再结晶过程中形核时间很短, 储存能释放非常迅速的特点。再结晶晶粒长大阶段的模拟中, 本模型同时也是基于界面能项驱动晶粒长大原理的, 而长大阶段的模拟与实验结果对应也很好, 说明该合金的再结晶过程经过很短时间后是储存能与界面能共同作用的结果, 其中储存能主要通过组织中位错、空位等缺陷数量的进一步减少进行释放, 从而促进组织演化。体系界面能量则通过平均晶粒尺寸的增加来减少体系中界面的面积进行降低, 从而影响组织的演化过程。

由图4还可以看出, 高温时模拟再结晶组织混晶现象很严重, 这与以往的晶粒长大模拟结果不同^[9-11], 这可能是AZ31镁合金再结晶的一个重要特性, 于是本研究对模拟结果的混晶现象进行了定量研究。由于以往的研究中没有有关混晶程度的定量表示方法, 本研究提出一个描述材料组织混晶程度的参量即混晶度, 用 Δd 表示。其具体计算方法为: $\Delta d = d_{\max} - d_{\min}$, 其中 d_{\max} 是5%最大晶粒尺寸的平均值; 而 d_{\min} 是5%最小晶粒尺寸的平均值。

各再结晶温度下混晶度随时间变化的模拟结果和部分实测数据如图6所示。由图6可以看出, 随着再

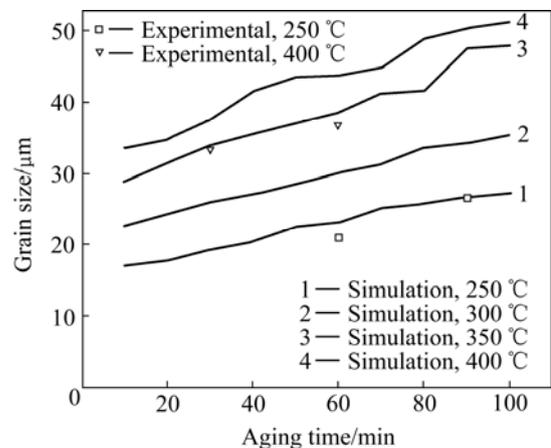


图6 混晶度的模拟与实验结果对比

Fig.6 Comparison of simulation and experimental results of grain size

结晶温度的提高,相同的条件下再结晶的晶粒混晶度显著增加,尤其在300~350℃时,受温度影响最为显著,同时也可以看出在低温时混晶度随时间的变化很平稳,而在高温时混晶度的变化变得不稳定。这有可能是随着温度的增加,储存能进一步释放,相对而言界面能对组织演化起着更重要的作用,且温度越高,晶粒形状越不规则,导致混晶度在高温时的不稳定变化。比较图4(b)与(c), (d)与(e)以及图6的模拟结果与实验结果,可以发现模拟结果与部分有限的实验数据吻合得很好,这种出现显著混晶的现象应该与AZ31镁合金自由能与成分变化曲线的特点有关。

综上所述,本研究从合金组织形貌、晶粒尺寸以及混晶度等几个方面对模拟以及试验结果进行比较,均吻合较好,这种一致性说明该模型的有效性以及准确性。同时本模型的成功不仅在于其能够模拟AZ31镁合金,更重要的是提出了一系列法则来确定模型中参数的物理意义以及实际取值,从而完成了材料组织真实时空的模拟。只要给出动力学和热力学数据,例如偏析激活能和自由能成分曲线等,本模型以及法则可很容易移植到其他合金系统中,而本模拟得出的参数值也可以直接用于类似的合金系统。通过本模拟不仅可以提供该合金控制工艺的参考数据,更重要的是确定微观组织演化的机制,从而加深对合金物理过程和合金特性的理解。

3 结论

1) 建立了一个可以在工业应用范围内模拟真实时空再结晶组织演化的模型。

2) 模拟结果与在300~400℃退火100 min内的实验结果吻合得很好,在250℃的时候有较大差别,说明在该温度下AZ31Mg合金界面迁移激活能的机制发生了变化。

3) AZ31Mg合金再结晶组织的混晶度随温度的升高而增大,且在同一温度下,混晶度随时效时间的增加而增加。

4) AZ31Mg合金在300~400℃进行时效时,随时效时间的延长出现严重混晶现象,这一模拟结果与已有的几个实验数据符合。

REFERENCES

[1] ARTEMEV A, JIN Y, KHACHATURYAN A G. Three-

dimensional phase field model of proper martensitic transformation[J]. *Acta Materialia*, 2001, 49(7): 1165-1177.

[2] 龙文元, 蔡启舟, 魏伯康, 陈立亮. 二元合金非等温凝固过程的相场法模拟[J]. *特种铸造及有色合金*, 2005, 25(2): 88-91.

LONG Wen-yuan, CAI Qi-zhou, WEI Bo-kang, CHEN Li-liang. Phase-field simulation of non-isothermal solidification of binary alloy[J]. *Special Casting and Nonferrous Alloys*, 2005, 25(2): 88-91.

[3] 路阳, 王帆, 朱昌盛, 王智平. 等温凝固多晶粒生长相场法模拟[J]. *物理学报*, 2006, 55(2): 780-785.

LU Yang, WANG Fan, ZHU Chang-ping, WANG Zhi-ping. Simulation of multiple grains for isothermal solidification of binary alloy using phase-field model[J]. *Acta Physica Sinica*, 2006, 55(2): 780-785.

[4] 郭巍, 宗亚平, 左良, 王云志. 外加应变对Ti-25Al-10Nb合金显微组织影响的相场法模拟[J]. *金属学报*, 2006, 42(5): 549-533.

GUO Wei, ZONG Ya-ping, ZUO Liang, WANG Yun-zhi. Simulation of effect of applied strain on the microstructure of Ti-25Al-10Nb alloy by phase field method[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2006, 42(5): 549-533.

[5] GUO Wei, ZONG Ya-ping, WANG Gang, ZUO Liang. Applied strain field on microstructure optimization of Ti-Al-Nb alloy computer simulated by phase field approach[J]. *Journal of Materials Science and Technology*, 2004, 20(2): 245-248.

[6] 陈大钦, 郑子樵, 李世晨, 刘祖耀, 李剑, 周明, 陈志国. 共格沉淀析出过程的模拟—微观结构演化[J]. *中国有色金属学报*, 2005, 15(12): 1945-1952.

CHEN Da-qin, ZHENG Zi-qiao, LI Shi-chang, LIU Zu-yao, LI Jian, ZHOU Ming, CHEN Zhi-guo. Simulation of precipitation process of coherent particles—Microstructure evolution[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2005, 15(12): 1945-1952.

[7] ZHU J Z, LIU Z K, VAITHYANATHAN V, CHEN L Q. Linking phase-field model to CALPHAD: Application to precipitate shape evolution in Ni-base alloys[J]. *Scripta Materialia*, 2002, 46(5): 401-406.

[8] WEN Y H, WANG B, SIMMONS J P, WANG Y. A phase-field model for heat treatment applications in Ni-based alloys[J]. *Acta Materialia*, 2006, 54(8): 2087-2099.

[9] MARX V, REHER F R, GOTTSTEIN G. Simulation of primary recrystallization using a modified three-dimensional cellular automaton[J]. *Acta Materialia*, 1999, 47(4): 1219-1230.

[10] RADHAKRSHNAN B, SARMA G B, ZACHARIA T. Modeling the kinetics and microstructural evolution during static recrystallization—Monte Carlo simulation of recrystallization[J]. *Acta Materialia*, 1998, 46(12): 4415-4433.

[11] FAN D N, CHEN L Q. Computer simulation of grain growth using a continuum field model[J]. *Acta Materialia*, 1997, 45(2):

- 611-622.
- [12] 刘饶川, 汪凌云, 辜蕾钢, 黄光胜. AZ31B 镁合金板材退火工艺及晶粒尺寸模型的研究[J]. 轻合金加工技术, 2004, 32(2): 22-25.
- LIU Rao-chuan, WANG Ling-yun, GU Lei-gang, HUANG Guang-sheng. Study on annealing technique for wrought magnesium alloy plate and modeling research on the changing law of its grain size[J]. Forming Technology of Light Metals, 2004, 32(2): 22-25.
- [13] KRILL III C E, CHEN L Q. Computer simulation of 3-D grain growth using a phase-field model[J]. Acta Materialia, 2002, 50(12): 3057-3075.
- [14] MOREAU G, CORNET J A, CALAIS D. Acceleration of the chemical diffusion under irradiation in the system aluminium-magnesium[J]. Journal of Nuclear Materials, 1971, 38(2): 197-202.
- [15] DOHERTY R D, HUGHES D A, HUMPHREYS F J, JONAS J J, JUUL J D, KASSNER M E, KING W E, MCNELLEY T R, MCQUEEN H J, ROLLETT A D. Current issues in recrystallization: A review[J]. Mater Sci Eng A, 1997, 238(2): 219-274.
- [16] VERDIER M, GROMA I, FLANDIN L, LENDVAI J, BRKHET Y, GUYOT P. Dislocation densities and stored energy after cold rolling of Al-Mg alloys: Investigations by resistivity and differential scanning calorimetry[J]. Scripta Materialia, 1997, 37(4): 449-454.
- [17] GJOSTEIN N A, RHINES F N. Absolute interfacial energies of [001] tilt and twist grain boundaries in copper[J]. Acta Metallurgica, 1959, 7 (5): 319-330.
- [18] LÜCKE K, DETERT K. A quantitative theory of grain-boundary motion and recrystallization in metals in the presence of impurities[J]. Acta Metallurgica, 1957, 5(11): 628-637.
- [19] PALMER M, RAJAN K, GLICKSMAN M, FRADKOV V, NORDBERG J. Two-dimensional grain growth in rapidly solidified succinonitrile films[J]. Metall Mater Trans A, 1995, 20: 1061-1066.

(编辑 李艳红)