

# 晶界扩散对 Ti-6Al-4V 中 $\alpha$ 相溶解影响的相场模拟

刘 涛<sup>1</sup>, 杨 梅<sup>1</sup>, 王 刚<sup>2</sup>, 王 璐<sup>1</sup>, 徐东生<sup>3</sup>

(1. 江苏理工学院, 江苏 常州 213001)

(2. 华南理工大学, 广东 广州 510640)

(3. 中国科学院金属研究所, 辽宁 沈阳 110016)

**摘 要:** 为了探索晶界扩散作用下的相变过程, 将晶界扩散耦合到定量的扩散控制相场模型, 研究了 Ti-6Al-4V 合金多晶体系中的晶界数量、 $\alpha$  相的空间分布和尺寸分布等对  $\alpha$  相溶解的影响。结果表明: 晶界是溶质扩散的快速通道, 晶界边数越多,  $\alpha$  相溶解速度越快, 即当  $\alpha$  相位于三岔点时,  $\alpha$  相溶解最快。而  $\alpha$  相位于晶界上和  $\alpha$  相均匀分布基体中时, 两种情况下的  $\alpha$  相溶解速度差别较小。与二维条件下  $\alpha$  相溶解速度相比, 三维条件下的晶界扩散对  $\alpha$  相溶解的影响更加显著; 当相变以溶质的体扩散为主时,  $\alpha$  相的空间分布是影响  $\alpha$  相溶解的主要因素之一; 但当相变以溶质的晶界扩散为主时, 除了均匀尺寸分布外, 其它尺寸分布对  $\alpha$  相溶解影响不显著。

**关键词:** 晶界扩散; 相场模型; 溶解; 空间分布; 尺寸分布

**中图分类号:** TG111.5; TG146.23

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1002-185X(2019)09-2864-09

钛合金由于优异的力学性能而广泛用于航空航天、化工、医药等领域, 其力学性能强烈地依赖于微观组织, 其中等轴组织和双态组织是 Ti-6Al-4V 合金中的典型组织之一, 可通过合金分别在  $\alpha+\beta$  两相区热加工后退火<sup>[1]</sup>和在  $\alpha+\beta$  两相区固溶时效处理获得<sup>[2]</sup>, 从而控制  $\alpha$  相在微观组织中的空间分布, 即  $\alpha$  相均匀分布基体中和集中分布在三岔点和晶界上。同时还发现采用不同工艺可以调整晶粒尺寸分布, 对数正态分布是多晶合金中典型的晶粒尺寸分布<sup>[3]</sup>, 采用固溶热处理工艺<sup>[4]</sup>、累积叠轧焊超塑性变形工艺<sup>[5]</sup>及机械粉碎烧结工艺<sup>[6]</sup>可以分别获得具有正态尺寸分布、均匀尺寸分布和双态尺寸分布的晶粒组织。而钛合金在热加工变形过程中, 首先进行固溶处理, 该过程可以溶解掉不稳定的  $\alpha$  相, 使成分达到均匀化, 同时还消除了强化相, 有利于合金的高温变形<sup>[7-10]</sup>。为了探讨  $\alpha$  相的空间分布和不同尺寸分布下的  $\alpha$  相溶解行为, 开展 Ti-6Al-4V 合金在固溶温度下的相变研究, 对深入理解  $\alpha$  相溶解动力学及工程实践工艺参数优化提供参考。

在多晶结构材料热加工的固溶热处理阶段, 其微观组织的演化过程实际上是溶质的再分配过程, 而溶质的扩散包括晶粒内的体扩散和沿晶界的晶界扩散。一般情况下, 晶界处的原子不规则排列为非共格结构, 可作为溶质的快速扩散通道<sup>[11]</sup>, 在扩散控制的相变过

程<sup>[12]</sup>特别是初生相溶解过程中起着重要作用<sup>[13,14]</sup>。为了深入探讨晶界扩散的影响机理, 研究者展开了相关研究。研究发现有效晶界扩散系数取决于晶粒尺寸, 即晶界数量<sup>[15,16]</sup>。Chen 等<sup>[15]</sup>在相变过程中发现, 如果晶界和体扩散在相变过程中起主要作用时, 则晶粒大小将会影响原子的扩散速度。晶粒尺寸越小, 晶界越多, 则有效扩散系数越大。后来 Prokoshkina 等<sup>[16]</sup>发现, 当温度 500 K 时, 合金中存在临界晶粒尺寸 (2  $\mu\text{m}$ )。当组织中的晶粒尺寸大于临界晶粒尺寸时, 晶界扩散系数与晶粒尺寸无关。当晶粒尺寸小于 2  $\mu\text{m}$  时, 晶界扩散系数随晶粒尺寸的降低而增加。有效晶界扩散系数除了取决于晶粒尺寸, 还发现其强烈地依赖于沉淀析出相的分布<sup>[17]</sup>、晶界类型<sup>[17,18]</sup>、残留杂质的数量<sup>[16]</sup>及晶粒的取向角等<sup>[19]</sup>。

随着计算机模拟技术的快速发展, 相场方法成为研究微观组织演化的一个重要工具<sup>[20,21]</sup>。Chen 等<sup>[22]</sup>构建了定量的相场模型, 初步研究了 Ti-Al-V 合金中单个  $\alpha$  析出相的生长和溶解行为。后来, Wang 等将该模型应用在 Ni-Al 合金中, 深入系统地研究了  $\gamma$  颗粒的溶解动力学<sup>[23]</sup>。而考虑晶界扩散下的相场模拟多集中于晶粒生长<sup>[24,25]</sup>及凝固问题<sup>[26]</sup>。除了相场模型外, 还出现了有关晶界扩散的其他数值模拟方法<sup>[27-35]</sup>。在 X70 钢中发现, 晶界含量对氢的扩散系数有重要影响, 单位体积的晶界表面积含量存在最佳值 5% (即晶粒尺寸

收稿日期: 2018-09-10

基金项目: 国家自然科学基金 (51601078); 国家重点研发计划项目 (2016YFB0701302); 江苏省自然科学基金 (BK20181047)

作者简介: 刘 涛, 男, 1981 年生, 博士, 江苏理工学院材料工程学院, 江苏 常州 213001, 电话: 0519-86953289, E-mail: liutao@jsut.edu.cn

46  $\mu\text{m}$ ), 当晶粒尺寸较小或较大时, 都会降低氢的扩散系数<sup>[27]</sup>。而在 Ti-Al-Nb 体系中, 当晶粒尺寸大于 500  $\mu\text{m}$  时<sup>[28]</sup>, 或多晶合金中元素扩散以晶界扩散为主时<sup>[29]</sup>, 有效扩散系数不依赖于晶粒尺寸。除了晶粒尺寸外, 研究者还探讨了晶界扩散系数与晶内扩散系数比值、高能晶界和低能晶界的分布对有效晶界扩散系数的影响<sup>[30]</sup>。综上所述, 晶界扩散的相关模拟研究多集中于凝固<sup>[26]</sup>、晶粒的生长<sup>[24,31-33]</sup>及有效扩散系数<sup>[27-30,34,35]</sup>等方面, 而晶界扩散对第二相溶解的相关研究较少。因此本研究建立耦合晶界扩散的相场模型, 研究 Ti-6Al-4V 多晶体系在高温下的晶界数量、相的空间分布及尺寸分布等对  $\alpha$  相溶解的影响。

## 1 晶界扩散的相场模型

### 1.1 定量的相场模型

相场方法求解  $n$  元系中的相变问题, 需  $n-1$  个成分场变量和一系列序参量。本研究中定义一组序参量  $\{\eta_1(r, t), \eta_2(r, t), \dots, \eta_q(r, t)\}$ , 其中  $\eta_1$  描述  $\alpha$  相, 其余序参量描述  $\beta$  相。体系总吉布斯自由能  $G$  可以写成:

$$G = \frac{1}{V_m} \int_V (G_m + \frac{k}{2} \sum_i |\nabla \eta_i|^2) dV \quad (1)$$

其中,  $V_m$  是摩尔体积,  $k$  是梯度能系数。局域摩尔自由能  $G_m$  可以写成:

$$G_m = p(\eta)G_m^\alpha(X, T) + [1 - p(\eta)]G_m^\beta(X, T) + \omega\eta(1 - \eta) \quad (2)$$

其中,  $p(\eta) = \eta(1 - \eta)$ ,  $\omega$  是双势阱高度。  $G_m^\alpha(X, T)$  和  $G_m^\beta(X, T)$  分别是  $\alpha$  和  $\beta$  相的摩尔自由能。

序参量  $\eta$  和成分场变量  $X_k$  随时间的演化方程由 Ginzburg-Landau 方程和 Cahn-Hilliard 扩散方程来决定:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -L \left( \frac{\partial G}{\partial \eta} - k \nabla^2 \eta \right) \quad (3)$$

$$\frac{1}{V_m} \frac{\partial X_k}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \sum_{i=1}^{n-1} M_{ki}(T, X_i, \eta) \nabla \frac{\partial G}{\partial X_i} \right) \quad (4)$$

其中,  $L$  是序参量演化的动力学系数,  $M_{ki}(T, X_i, \eta)$  是溶质的化学迁移率。模型中的热力学数据和动力学数据分别来自 Thermo-Calc 和 Dictra 数据库。模型构建及参数设置详见文献<sup>[36]</sup>。

### 1.2 晶界扩散模型

当溶质扩散穿过具有一定厚度晶界的晶粒时, 根据 Porter 和 Easterling 的推导<sup>[37]</sup> (如图 1), 溶质通过晶粒的扩散流  $J_V$  和沿晶界的扩散流  $J_{GB}$  可以写成:

$$J_V = -D_V \frac{dC}{dx}, \quad J_{GB} = -D_{GB} \frac{dC}{dx} \quad (5)$$

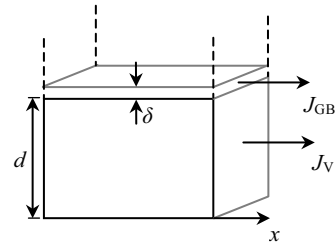


图 1 含晶界体系中的扩散

Fig.1 Diffusion in system containing a grain boundary

其中,  $C$  是溶质的浓度,  $D_V$  和  $D_{GB}$  分别表示溶质在晶粒内与沿晶界的扩散系数。

整个体系总扩散流主要取决于相应的横截面面积。如果晶界厚度为  $\delta$ , 晶粒尺寸为  $d$ , 总扩散流  $J$  可表示为:

$$J = (J_{GB}\delta + J_V d) / (\delta + d) = - \left( \frac{D_{GB}\delta + D_V d}{\delta + d} \right) \frac{dC}{dx} \quad (6)$$

有效扩散系数  $D_{eff}$ :

$$D_{eff} = \left( \frac{D_{GB}\delta + D_V d}{\delta + d} \right) = D_V \left( \frac{D_{GB}}{D_V} \frac{\delta}{\delta + d} + \frac{d}{\delta + d} \right) \quad (7)$$

如果  $d \gg \delta$ , 则有效扩散系数可以简写成:

$$D_{eff} = D_V \left( 1 + \frac{D_{GB}\delta}{D_V d} \right) \quad (8)$$

在相场中沿晶界的扩散系数为:

$$D_{GBPF} = D_V \left( 1 + a \sum_{i \neq j}^q \eta_i^2 \eta_j^2 \right) \quad (9)$$

其中, 常数  $a$  与  $D_{GB}/D_V$  的比值有关。由于真实合金中的晶界厚度大约是 1 nm, 而相场中的界面厚度要比实际的晶界厚度大, 可通过积分方法来确定模型中  $a$  值, 即相场方法与真实合金中的晶界所围成的面积相等来确定<sup>[38]</sup>。  $a$  计算可以写为:

$$a = \frac{\frac{D_{GB}}{D_V} \times 1 \times 10^{-9}}{\int_{-\lambda}^{\lambda} \eta_{eq}^2 (1 - \eta_{eq})^2 dx} \quad (10)$$

其中,  $\eta_{eq}$  是界面处两相平衡时序参量的轮廓曲线, 可由 Allen-Cahn 方程<sup>[39]</sup>计算得出:

$$\eta_{eq} = \frac{1}{2} [1 - \sin(\sqrt{\frac{2\omega}{k}} x)] \text{ 和 } 2\lambda = \pi \sqrt{\frac{k}{2\omega}}$$

$\lambda$  为半个界面的厚度。

由于原子的扩散系数与原子迁移率满足能斯特-爱因斯坦方程<sup>[40]</sup>, 晶界扩散条件下的动力学系数  $M_{ki}$  可以写为:

$$M_{ki} = M_{ki} \left( 1 + a \sum_{i \neq j}^q \eta_i^2 \eta_j^2 \right) \quad (11)$$

公式 (4) 可以改写为:

$$\frac{1}{V_m^2} \frac{\partial X_k}{\partial t} = \nabla \cdot \left( \sum_{i=1}^{n-1} M_{ki} \nabla \frac{\partial G}{\partial X_i} \right) \quad (12)$$

本文应用晶界扩散的定量相场模型，选取晶界扩散与体扩散的扩散系数比值等于 2000<sup>[41]</sup>，研究晶界扩散对  $\alpha$  相溶解行为的影响。

## 2 结果与讨论

### 2.1 晶界数量对 $\alpha$ 相溶解的影响

为探讨晶界扩散对 Ti-6Al-4V 合金  $\alpha$  相溶解的影响，选取 462×400 的网格体系，将横截面为圆形的单个  $\alpha$  相分别位于 3 种晶界上：(1)  $\beta$  晶粒内部(无晶界)；(2)  $\beta$  晶界上；(3)  $\beta$  晶界三岔点上。初始体系为 1210 K 的平衡状态， $\alpha$  相的体积分数为 6.49%；Al 在  $\alpha$  和  $\beta$  相中的摩尔分数分别是 0.121 和 0.101，V 在  $\alpha$  和  $\beta$  相中摩尔分数分别是 0.0126 和 0.0376。随后将体系升温至 1213 K 保温， $\alpha$  相溶解将发生。

图 2 为晶界数量对圆形  $\alpha$  相组织形貌演化的影响。从图中可看到，3 种晶界下的  $\alpha$  相形貌显著不同。当  $\alpha$  相位于晶粒内时(图 2a)，体系只有  $\alpha/\beta$  晶界，由于溶质在  $\alpha/\beta$  晶界的扩散比体扩散快，溶质快速扩散到整个晶界。此后，在相溶解过程中，体扩散起着主要作用，而晶界扩散作用不大。当  $\alpha$  相位于  $\beta/\beta$  晶界上(图 2e)，溶质除了在  $\alpha/\beta$  晶界上扩散外，同时也沿  $\beta/\beta$  晶界扩散。由于界面张力的作用，初始圆形  $\alpha$  相逐渐演变成椭圆形  $\alpha$  相，同文献[42]观察到的结果一致。当相位于晶界三岔点时，圆形的  $\alpha$  相最终演变为近三角形的  $\alpha$  相(图 2i)。除了界面张力引起相的形状改变外，Li 等<sup>[7]</sup>在对 Ti-8V-1.5Mo-2Fe-3Al 合金进行固溶热处理时发现，随着固溶时间的延长，初生  $\alpha$  相由初始的球状转变成条带状，引起  $\alpha$  相形貌变化的原因是变形存储能。而变形储存能对 Ti-6Al-4V 合金相变的影响将另文研究。

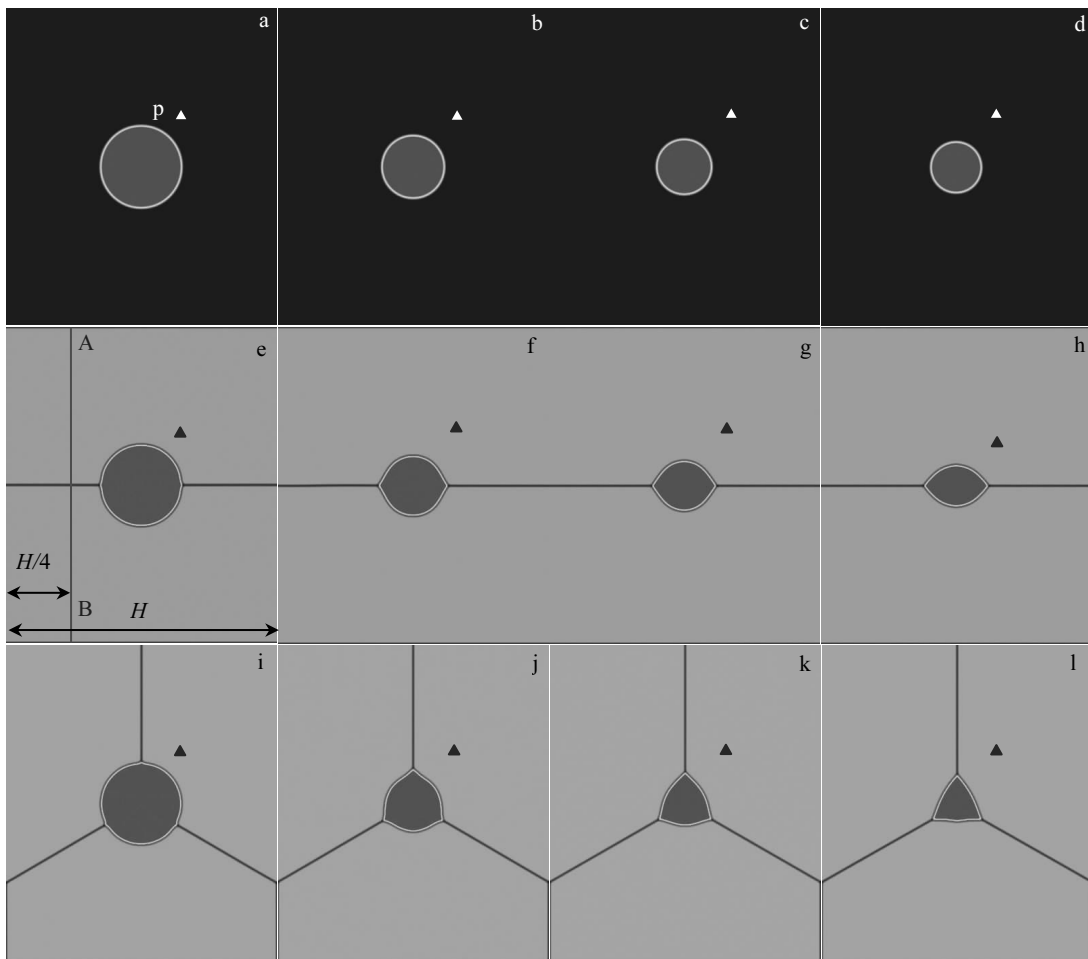


图 2 固溶过程中晶界数量对  $\alpha$  相组织演化的影响

Fig.2 Effect of the number of grain boundaries on microstructural evolution of  $\alpha$  phase in the process of solution treatment: (a~d) interior, (e~h) on the grain boundary, (i~l) at the triple junction; (a, e, i) 1000 s, (b, f, j) 40 000 s, (c, g, k) 80 000 s, and (d, h, l) 150 000 s

图 3 为晶界数量对  $\alpha$  相溶解动力学的影响。 $\alpha$  相的溶解速度随晶界数的增加而加快, 当  $\alpha$  相位于晶粒内部时, 相的溶解速度与仅考虑体扩散下的相溶解动力学一致。这主要由于在考虑晶界扩散时,  $\alpha$  相溶解速度主要取决于晶界数及晶界分布。溶质在晶界上的扩散速度远大于其在晶粒内的扩散速度, 晶界起到扩散通道的作用。在  $\alpha$  相发生溶解时, 除了本身固有的  $\alpha/\beta$  晶界外, 体系中  $\beta/\beta$  晶界含量起着主导作用。从图中可以看到晶界的含量从小到大依次为晶粒内部、晶界上、晶界三岔点上。晶界的含量越大, 溶质的扩散通道越多,  $\alpha$  相的溶解速度越快, 这与文献[27]观察到的结果相一致, 在单位体积的晶界表面积的含量低于 5% 时, 元素的扩散系数随着晶界表面积含量的增加而增大。在 Ti-6Al-4V 合金中的晶界扩散对  $\alpha$  相长大的影响<sup>[33]</sup>, 同样也观察到了晶界是溶质扩散的快速通道。与本文的不同之处在于, 当  $\alpha$  相位于晶界上时  $\alpha$  相的生长速度明显较快于  $\alpha$  相位于晶粒内部时的相生长速度, 主要原因可能是在文献[33]中的晶界含量明显高于本文中晶界的含量的缘故。

为了更加深入理解晶界扩散对  $\alpha$  相溶解行为的影响, 选取  $\alpha$  相位于晶界上的 AB 线 (图 2 e) 观察  $D_{GBPF}/D_V$  及 Al 成分分布 (图 4)。从图中可以发现, 从  $\beta$  晶粒到晶界处的等效晶界扩散与体扩散系数比值  $D_{GBPF}/D_V$  从 1 增到 5, 即溶质在晶界处的扩散速度是其在  $\beta$  晶粒内部扩散速度的 5 倍, 该值不同于初始设置的  $D_{GB}/D_V=2000$ , 主要由于本模型中的晶界厚度<sup>[36]</sup> (0.2236  $\mu\text{m}$ ) 明显大于实际的晶界厚度的缘故。同样通过对 AB 线上 Al 溶质分布的观察, 发现随着相的溶解,  $\alpha$  相中的 Al 溶质将沿晶界快速通道进行扩散, 同时 Al 溶质也从晶界向两侧基体中扩散。1000 s 时,

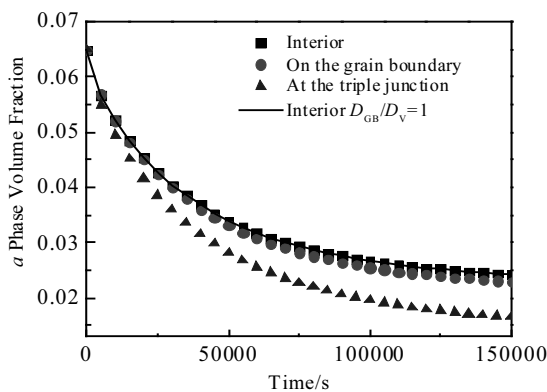


图 3 不同晶界数量下的  $\alpha$  相体积分数随时间的演化

Fig.3 Temporal evolution of  $\alpha$  phase volume fraction with different number of grain boundaries

Al 溶质从晶界处扩散到了基体中间位置, 即距离晶界约 20  $\mu\text{m}$  以内为元素的快速扩散区域, 这与纳米  $\text{UO}_2$  多晶中观察到的元素快速扩散区域显著不同 (距离晶界 2 nm 以内)<sup>[35]</sup>。其原因除了由于两种实验条件下的合金体系不同外, 还有可能是本模型中具有较大的晶界宽度的缘故。由于相场方法中耦合了 Kim-Kim-Suzuki (KKS) 模型, 晶界厚度要比实际合金的晶界厚度高几个数量级, 因此作为元素快速扩散的通道“运输”能力较强, 同时模型中  $D_{GBPF}/D_V$  (公式 9) 随着晶界宽度的增加而降低, 因此对于某特定合金系, 可能存在一个最佳的晶界厚度, 这部分内容将在后续研究。因此, 模型中的晶界厚度是影响溶质晶界扩散的重要因素之一。随相溶解的进行, 晶界处的 Al 溶质逐渐增加。150 000 s, Al 溶质达到均匀化。Al 溶质分布特点及其随时间的演化规律, 与 Mg-Al、Mg-Zn 合金经 400  $^\circ\text{C}$  退火后溶质的分布特征相类似<sup>[31]</sup>。

图 5 为不同晶界数量下 p 点的 (图 2) Al 成分随时间的演化行为。从图中可见  $\alpha$  相在  $\beta$  晶粒内部时, Al 成分浓度最低; 而  $\alpha$  相位于晶界的三岔点上, Al 成分浓度最大。这主要是由于  $\alpha$  相在晶粒内部时, Al 成分沿径向均匀地向基体扩散。而其它两种情况, Al 元素除了沿径向还沿  $\beta/\beta$  晶界向基体扩散, 而晶界是溶质扩散的快速通道, 晶界数量越多, Al 溶质的扩散速度越快。

### 2.2 空间分布对 $\alpha$ 相溶解的影响

为了观察  $\alpha$  相的空间分布对其溶解行为的影响, 选取 512 $\times$ 512 网格体系, 对应实际边长 114.48  $\mu\text{m}$ 。基体  $\beta$  晶粒采用多晶生长的相场模型建模, 正态尺寸分布的  $\alpha$  相<sup>[36]</sup>以 3 种空间分布形式: (1) 在三岔点; (2) 晶界上; (3) 均匀分布在基体中。初始系统为 1210 K 的平衡状态, 随后将系统升温到 1223 K 保温。

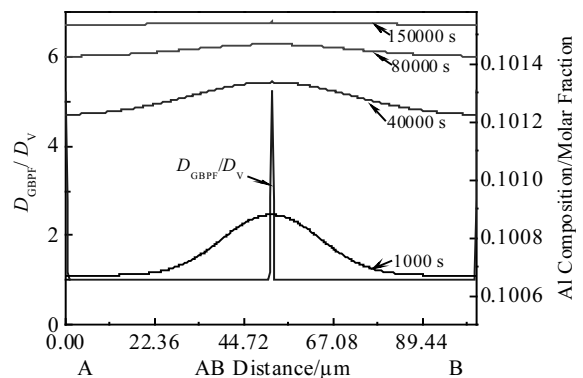


图 4  $\alpha$  相位于晶界时 AB 线上的晶界扩散/体内扩散系数  $D_{GBPF}/D_V$  及 Al 溶质分布随时间的演化

Fig.4 Evolution of  $D_{GBPF}/D_V$  and Al solute distribution along line AB for a single  $\alpha$  phase on the grain boundary

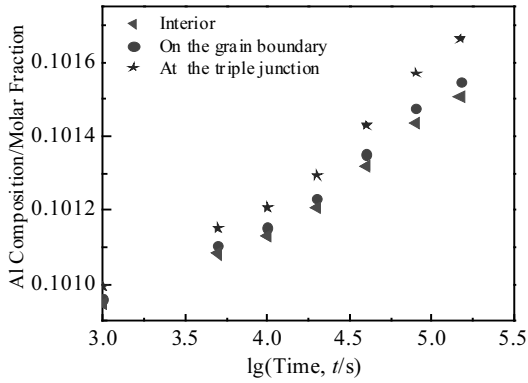


图 5 不同晶界数量下 p 点的 Al 成分随时间的演化

Fig.5 Temporal evolution of composition of Al at the point p at different number of grain boundaries

图 6 显示了不同空间分布的  $\alpha$  相溶解过程。从图中可观察到在溶解过程中, 尺寸较小的  $\alpha$  相消失较快, 而尺寸较大的  $\alpha$  相逐渐收缩。Jones 等<sup>[8]</sup>发现 Ti-5Al-5Mo-5V-3Cr 合金在 1080 K 保温时出现类似的溶解过程。距离较近的  $\alpha$  相将会融合成一个新  $\alpha$  相(图 6a 中 P<sub>1</sub> 处), 这主要是由于成分场发生交叠而产生的“软钉扎”的缘故。随着保温时间的增加, 出现  $\alpha$  相溶

解, 同时还伴随着基体  $\beta$  晶粒的生长和湮灭。体系中的  $\alpha$  相对基体晶粒生长具有较强的钉扎作用(图 6d、6e 中 P<sub>2</sub> 处), 使晶界的移动速率减小, 从而改善基体的晶粒尺寸。而当  $\alpha$  相溶解到一定程度时, 尺寸较小的  $\alpha$  相对晶界的钉扎作用减弱, 最终导致三岔点及晶界脱离  $\alpha$  相(图 6c、6f 中 P<sub>3</sub> 处)。在溶解过程中,  $\alpha$  相的空间分布也发生了显著变化。当  $\alpha$  相位于三岔点情况时, 由于基体  $\beta$  晶界的移动, 一些  $\alpha$  相将位于四个晶粒的交界处(图 6c)。而当  $\alpha$  相位于晶界上时, 出现了大量  $\alpha$  相位于三岔点的现象(图 6f), 这是由于  $\alpha$  相位于三岔点处是最稳定的状态。不同空间分布下的  $\alpha$  相溶解速度曲线如图 7 所示。在固溶初始阶段,  $\alpha$  相溶解速度较快, 随着固溶保温时间的增加, 溶解速度较慢, 与文献[8]观察到的  $\alpha$  相溶解动力学相似。这主要由于  $\alpha$  相溶解过程主要受溶质的长程扩散所控制。在溶解初期, 溶质梯度较大, 有利于溶质扩散。随着溶解进行, 溶质场发生交叠提高了基体的浓度, 使溶解速度减慢。而  $\alpha$  相溶解速度变化趋势明显不同于文献[9]。Semiatin 等发现具有团簇  $\alpha$  组织的  $\alpha/\beta$  钛合金在 900 和 955 °C 进行保温时, 片层分支以常速率进行溶解, 这主要是由于片层尖端的曲率不同导致浓度梯度存在(如 Gibbs-Thompson 效应), 最终使溶

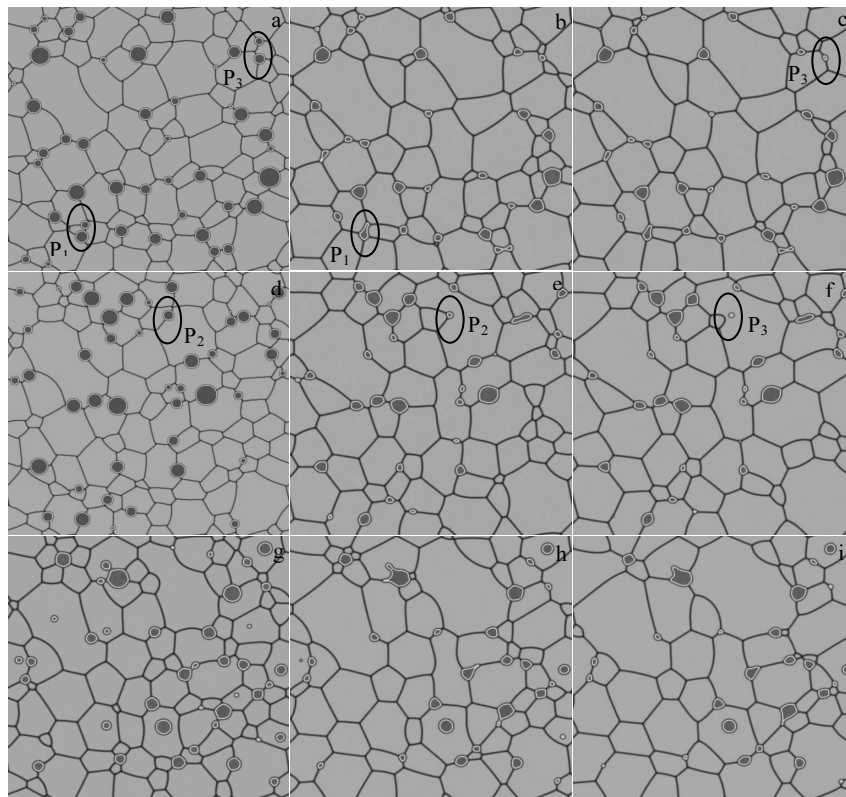


图 6 不同空间分布下  $\alpha$  相微观组织演化过程

Fig.6 Evolution microstructure of multi  $\alpha$  phase in the process of dissolution: (a~c) at the triple junction, (d~f) on the grain boundary, (g~i) uniform distribution; (a, d, g) 0 s, (b, e, h) 3000 s, and (c, f, i) 5000 s

质在片层分支尖端与基体间完成扩散的缘故。不同空间分布下的  $\alpha$  相溶解动力学有显著差别, 当  $\alpha$  相位于三岔点时  $\alpha$  相的溶解速度最快, 而  $\alpha$  相均匀分布在基体中时,  $\alpha$  相溶解速度最慢, 这主要是由于  $\alpha$  相均匀分布下, 有部分  $\alpha$  相位于晶粒内部, 降低了  $\alpha$  相的溶解速度, 即扩散速度最慢的路径将控制  $\alpha$  相溶解速度<sup>[43]</sup>。

### 2.3 尺寸分布对 $\alpha$ 相溶解的影响

为了解真实材料的溶解过程, 需对三维条件下大体系的  $\alpha$  相溶解进行研究。具体方法可将实验中的三维晶粒形貌作为输入, 但在实际处理过程中, 存在一定难度。因此采用球状颗粒作为等轴  $\alpha$  相, 通过多场变量模型获得的多晶组织表示基体  $\beta$  相, 研究  $\alpha$  相尺寸分布 (PSD) 为<sup>[36]</sup>均匀分布、正态分布、对数-正态分布和双态分布下的溶解动力学行为。本模拟采用  $192 \times 192 \times 192$  网格体系, 对应实际边长  $43 \mu\text{m}$ 。初始体系为  $1210 \text{ K}$  热处理温度下的平衡状态, 将体系迅速放在  $1223 \text{ K}$  下保温,  $\alpha$  相开始溶解。

图 8 为均匀尺寸分布的  $\alpha$  相在不同空间分布状态下的溶解过程。从图中可以观察到, 尺寸较小的  $\alpha$  相迅速消失, 尺寸较大的  $\alpha$  相缓慢收缩。当  $\alpha$  相分布在  $\beta$  晶界处和  $\beta$  晶界三岔点时, 随保温时间的增加,  $\beta$  晶界变宽, 这可能是由于在三维条件下作为溶质快速通道的晶界面促进溶质扩散的作用更加显著的缘故。不同尺寸分布状态下的  $\alpha$  相溶解动力学具有相似性 (图 9a~9d)。 $\alpha$  相在  $\beta$  晶粒内部时的溶解速度最慢, 而  $\alpha$  相在晶界和三岔点上时的溶解速度较快, 且两者的溶解速度曲线接近。这是因为当  $\alpha$  相位于晶界上时, 晶界起到扩散路径的作用, 提高了溶质的扩散速度, 从而加快了  $\alpha$  相的溶解。与二维条件下  $\alpha$  相的溶解速度相比 (图 7), 在三维条件下晶界对  $\alpha$  相的溶解速度具有显著提高的作用。其原因主要在于三维条件下, 起到溶质快速扩散的通道是晶界面, 作为溶质快速扩散通道的含量远高于二维条件下的晶界含量, 导致  $\alpha$  相内的 Al 元素通过较多快速通道扩散到基体中的缘故。当  $\alpha$  相位于晶内和三岔点时, 4 种不同  $\alpha$  相尺寸分布下的相溶解动力学从快到慢均依次为均匀分布、正态分布、双态分布和对数正态分布。但当  $\alpha$  相位于晶粒内时, 溶质的扩散以体扩散为主,  $\alpha$  相尺寸分布对  $\alpha$  相的溶解动力学影响更加显著 (图 9 e)。而当  $\alpha$  相位于三岔点时, 均匀尺寸分布下的  $\alpha$  相溶解动力学最快, 而正态分布、双态分布和对数正态分布的  $\alpha$  相溶解动力学差别较小 (图 9 f)。

### 2.4 Ti-6Al-4V 双相等轴组织的 $\alpha$ 相溶解

应用多晶粒生长的相场模型构建  $\alpha + \beta$  等轴组织, 选取网格为  $512 \times 512$ , 对应实际边长  $114.48 \mu\text{m}$ 。微观组

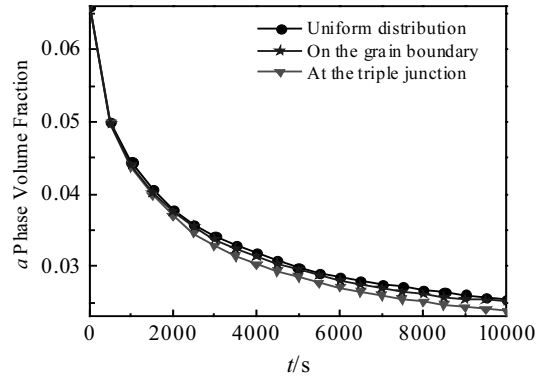


图 7 不同空间分布  $\alpha$  相体积分数随时间的演化  
Fig.7 Temporal evolution of  $\alpha$  phase volume fraction for the different spatial distributions

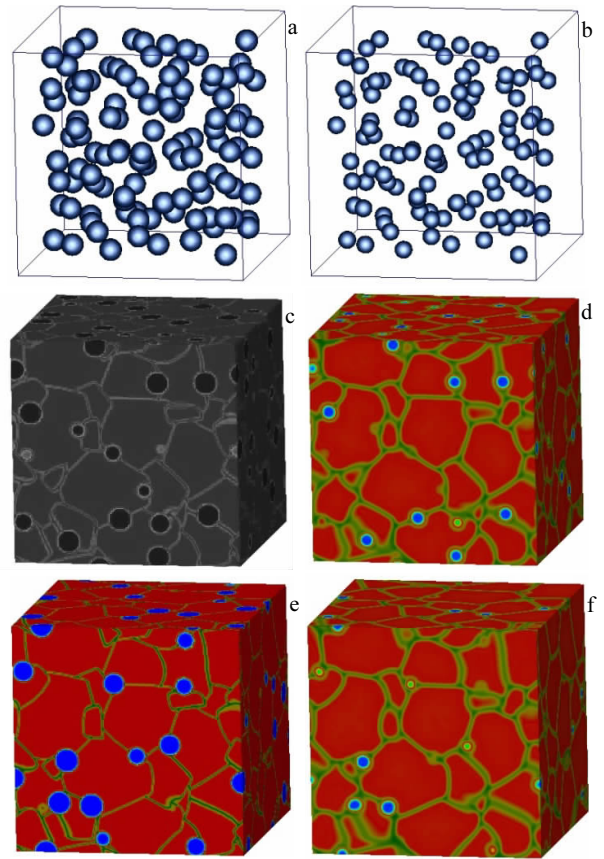


图 8 均匀尺寸分布的  $\alpha$  相在不同空间分布下的组织形貌图  
Fig.8 Microstructure evolution under uniform PSD condition: (a, b) interior, (c, d) on the grain boundary, (e, f) at the triple junction; (a, c, e) 10 s and (b, d, f) 50 s

织中红色晶粒表示  $\alpha$  相, 其它颜色晶粒表示  $\beta$  相不同取向。体系的初始状态为  $1200 \text{ K}$  下的平衡状态,  $\alpha$  相体积分数为  $18.9\%$ , 将系统迅速放在  $1223 \text{ K}$  下进行保温。

图 10 为 Ti-6Al-4V 合金在  $1223 \text{ K}$  下的微观组织

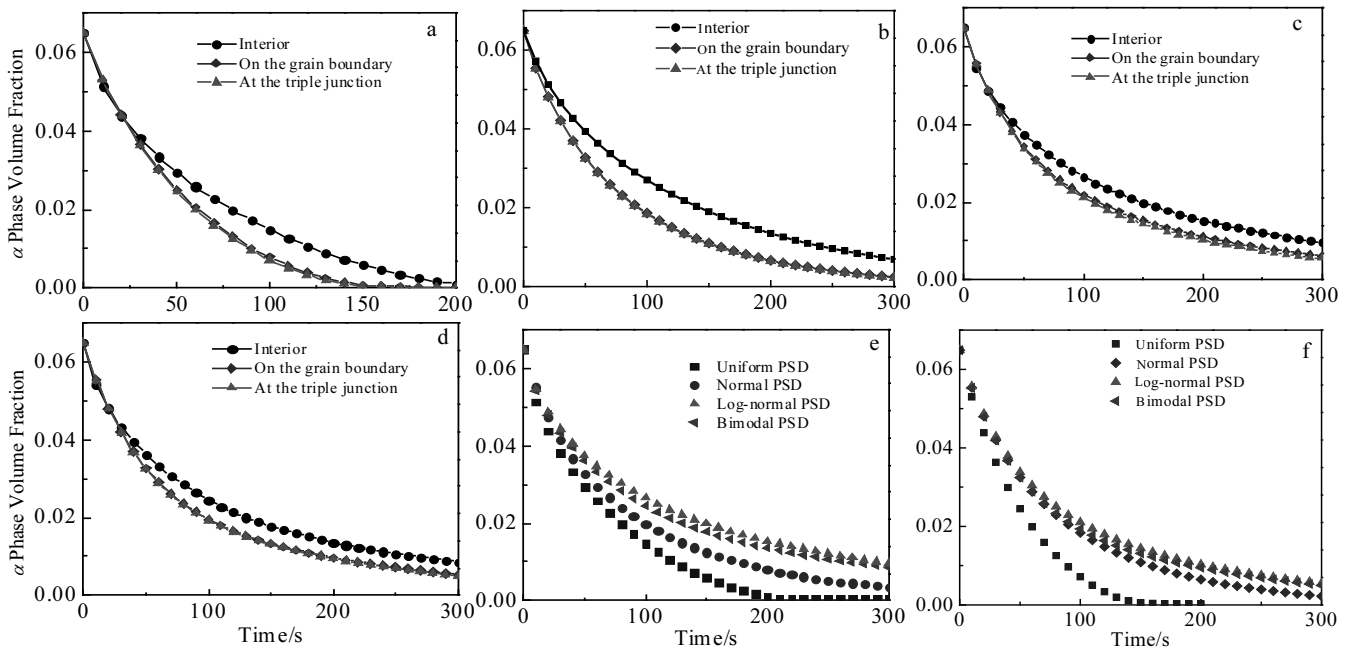


图 9  $\alpha$  相体积分数随时间的演化

Fig.9 Temporal evolution of  $\alpha$  phase volume fraction: (a) uniform PSD, (b) normal PSD, (c) log-normal PSD, (d) bimodal PSD, (e) interior, and (f) at the triple junction

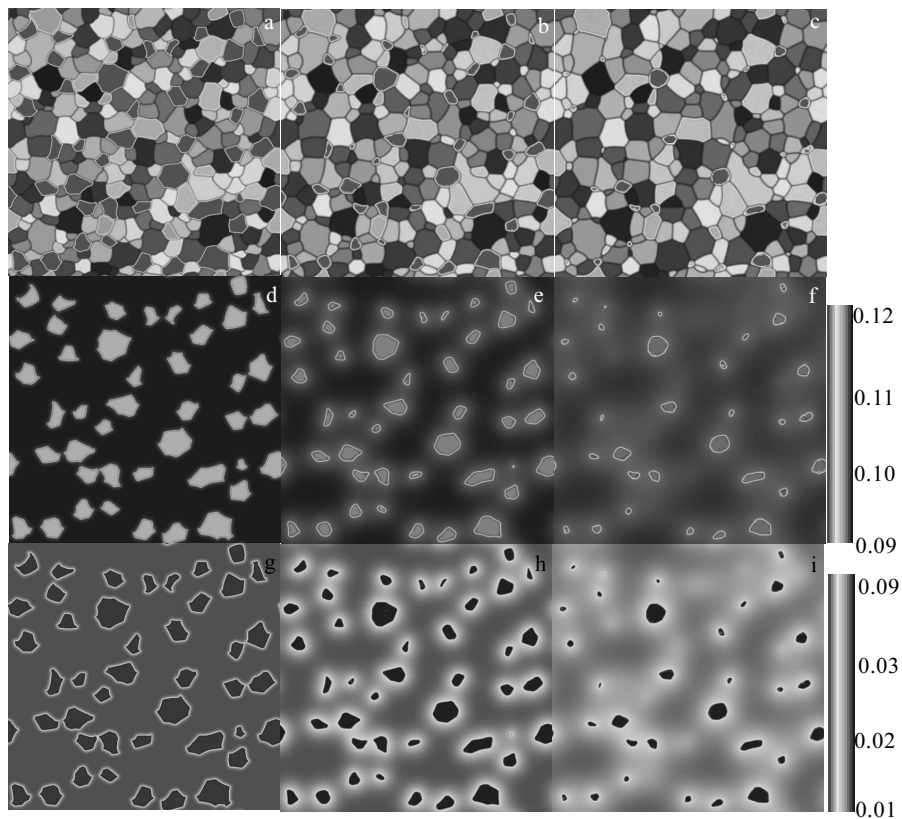
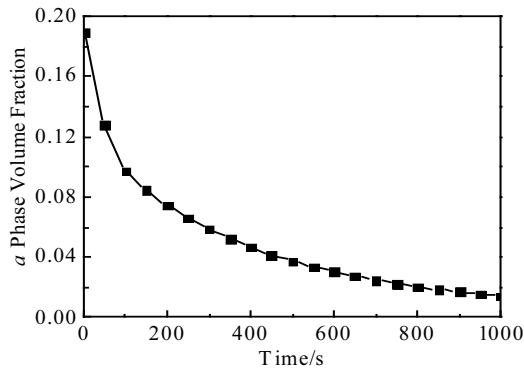


图 10 1223 K 时  $\alpha$  相溶解的微观组织形貌和溶质分布

Fig.10 Microstructure evolution and solute profile in the dissolution process of  $\alpha$  phase at 1223 K: (a~c) the microstructure, the red grains represent  $\alpha$  phase, and others represent  $\beta$  grains with different orientations, (d~f) Al, (g~i) V; (a, d, g) 10 s, (b, e, h) 200 s, and (c, f, i) 600 s

图 11  $\alpha$  相体积分数随时间演化过程Fig.11 Temporal evolution of  $\alpha$  phase volume fraction

演化过程。从图中可见,随保温时间的增加, $\alpha$ 相缓慢溶解,直到最后消失。随着 $\alpha$ 相溶解,体系伴有小 $\beta$ 晶粒收缩,大 $\beta$ 晶粒长大的粗化现象,与Ti-5Al-5Mo-5V合金在 $\beta$ 单相区进行固溶热处理时观察到的现象一致<sup>[10]</sup>。由于 $\alpha$ 相的溶解过程主要受元素扩散所控制,在溶解过程中, $\beta/\beta$ 晶界作为 $\alpha$ 相溶解的快速通道,使更多的Al元素扩散到基体 $\beta$ 相区,加快了溶解速度。 $\alpha$ 相扩散出的Al元素在基体 $\beta$ 相中不断扩散,浓度分布不均匀(图10f)。而V元素则从基体中向 $\alpha$ 相扩散,如图10i所示。图11为 $\alpha$ 相体积分数随时间的演化曲线。热处理初始时, $\alpha$ 相的溶解速度较大,随后由于元素扩散使溶质发生堆积,溶解速度降低,直到最后,达到稳定状态。

### 3 结论

1) 建立了含晶界扩散的相场模型,研究了Ti-6Al-4V合金在高温下的 $\alpha$ 相溶解行为。

2)  $\alpha$ 相的溶解速率与晶界边数有关。晶界数量越多,溶质的扩散速度越快,即当 $\alpha$ 相位于三岔点时, $\alpha$ 相溶解最快;而 $\alpha$ 相在晶界上和 $\alpha$ 相均匀分布基体中, $\alpha$ 相溶解速度差别较小。与二维条件下 $\alpha$ 相溶解速度相比,三维条件下的晶界扩散对 $\alpha$ 相溶解的影响更加显著。

3) 不同尺寸分布下的 $\alpha$ 相溶解动力学从快到慢依次是均匀分布、正态分布、双态分布和对数正态分布。当相变以溶质的体扩散为主时, $\alpha$ 相的空间分布是影响 $\alpha$ 相溶解的主要因素之一;但当相变以溶质的晶界扩散为主时,除了均匀尺寸分布外,其它尺寸分布对 $\alpha$ 相溶解影响不显著。

#### 参考文献 References

[1] Lutjering G, Williams T C. *Titanium*[M]. New York: Verlag

Berlin Heidelberg, 2003: 186

- [2] Peng Meiqi(彭美旗), Cheng Xingwang(程兴旺), Zheng Chao(郑超) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2017, 46(7): 1843
- [3] Fatima Vaz M, Fortes M A. *Scripta Metallurgica*[J], 1988, 22(1): 35
- [4] Semiatin S L, Kirby B C, Salishchev G A. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2004, 35(9): 2809
- [5] Terada D, Inoue M, Kitahara H *et al. Materials Transactions*[J], 2008, 49(1): 41
- [6] Shoichi K, Takafumi I, Hiroki K *et al. International Journal of Fatigue*[J], 2016, 92(2): 616
- [7] Li C L, Zou L N, Fu Y Y *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2014, 616(20): 207
- [8] Jones N G, Dashwood R J, Dye D *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2008, 490: 369
- [9] Semiatin S L, Poteet P S. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2008, 39A: 2538
- [10] Guan Jie(官杰). *Thesis for Master Degree*(硕士论文)[D]. Shenyang: Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, 2008: 45
- [11] Tomohiro A, Kenta S, Md Suruz M *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2018, 748: 87
- [12] Ruan J J, Ueshima N, Oikawa K. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2018, 737: 83
- [13] Pasparakis A, Brown L C. *Acta Metallurgica*[J], 1973, 21: 1259
- [14] Ontman Aleks Y M, Shiiflet G J. *Acta Materialia*[J], 2015, 89: 98
- [15] Chen Y, Schuh C. *Scripta Materialia*[J], 2007, 57(3): 253
- [16] Prokoshkina D, Esin V A, Wilde G *et al. Acta Materialia*[J], 2013, 61: 5188
- [17] Liu D D, Peterlechner M, Fiebig J *et al. Intermetallics*[J], 2015, 61: 30
- [18] Xiong X L, Zhang L N, Zhang Z H *et al. Electrochemistry Communications*[J], 2018, 92: 24
- [19] Das S K, Brodusch N, Gauvin R *et al. Scripta Materialia*[J], 2014, 80: 41
- [20] Zhang Jun(张军), Chen Wenxiong(陈文雄), Zheng Chengwu(郑成武) *et al. Acta physica Sinica*(物理学报)[J], 2017, 66(7): 0707011
- [21] Yang Yujuan(杨玉娟), Wang Jincheng(王锦程), Zhu Yaochan(朱耀产) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2007, 36(4): 573
- [22] Chen Q, Ma N, Wu K S *et al. Scripta Materialia*[J], 2004, 50: 471
- [23] Wang G, Xu D S, Ma N *et al. Acta Materialia*[J], 2009, 57:



- 316
- [24] Wu Y, Zong B Y, Zhang X G *et al.* *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2013, 44: 1599
- [25] Lynda A, Mathis P. *Acta Materialia*[J], 2009, 57: 237
- [26] Yeh S Y, Chen C C, Lan C W. *Journal of Crystal Growth*[J], 2011, 318: 46
- [27] Yazdipour N, Haq A J, Muzaka K *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2012, 56: 49
- [28] Gu Y Y, Fan F J, Guo Y H *et al.* *Calphad*[J], 2018, 62: 83
- [29] Deng J, Morgan D, Szlufarska I. *Computational Materials Science*[J], 2014, 93: 36
- [30] Magnus H, Astrid P. *International Journal of Hydrogen Energy*[J], 2017, 42(35): 22 530
- [31] Das S K, Kang D H, Jung I H. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2014, 45: 5212
- [32] Gong M M, Castro R H R, Liu F. *Journal of Materials Science* [J], 2015, 50: 4610
- [33] Yang F. *Quantitative Study of Precipitate Growth in Ti-6Al-4V Using the Phase Field*[D]. Ohio: The Ohio State University, 2008: 40
- [34] Mohammadzadeh R, Mohammadzadeh M. *Physica A*[J], 2017, 482: 56
- [35] Govers K, Verwerf M. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2013, 438: 134
- [36] Yang M, Wang G, Liu T *et al.* *Acta Metallurgica Sinica, English Letters*[J], 2017, 30(8): 745
- [37] Porter D, Easterling K. *Phase Transformation in Metals and Alloys*[M]. Van Nostrand: UK Company Ltd, 1986: 52
- [38] Kazaryan A, Wang Y, Patton B R. *Scripta Materialia*[J], 1999, 41: 487
- [39] Gunton J D, Miguel M S, Sahni P S. *The Dynamics of First-order Phase Transitions*[M]. New York: Academic Press, 1983: 152
- [40] Hu Gengxiang(胡赓祥), Cai Xun(蔡 珣), Rong Yonghua(戎咏华). *Fundamentals of Materials Science(材料科学基础)* [M]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 2001: 142
- [41] DavidBromiley G, Hiscock M. *Geochimica et Cosmochimica Acta*[J], 2016, 178: 281
- [42] Prokofjev S I, Johnson E, Zhilin V M *et al.* *Journal of Materials Science*[J], 2008, 43: 3894
- [43] Johnson C H, Richter S K, Hamilton C H *et al.* *Acta Mater*[J], 1998, 47: 23

## Phase Field Simulation of Effect of Grain Boundary Diffusion on $\alpha$ Phase Dissolution

Liu Tao<sup>1</sup>, Yang Mei<sup>1</sup>, Wang Gang<sup>2</sup>, Wang Lu<sup>1</sup>, Xu Dongsheng<sup>3</sup>

(1. Jiangsu University of Technology, Changzhou 213001, China)

(2. South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)

(3. Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China)

**Abstract:** In order to study the phase transformations in consideration of the grain boundary diffusion, the diffusion along grain boundary was incorporated in the quantitative phase field model coupled with the Kim-Kim-Suzuki (KKS). The effect of the number of grain boundaries, the spatial distribution and size distribution (PSD) of  $\alpha$  phase on the  $\alpha$  phase dissolution was researched. The results show that grain boundaries are a faster element diffusive path. The larger the number of grain boundaries is, the faster the kinetics of  $\alpha$  phase dissolution is. Namely, the kinetics of  $\alpha$  phase dissolution is fastest when the phase is located at triple junctions. However, the dissolution kinetics is of little difference when  $\alpha$  phase is on the grain boundary and distributed uniformly in the matrix. Compared to the phase dissolution rate in two-dimensional condition, the effect of the grain boundary diffusion on dissolution kinetics is more obvious in three-dimensional condition. When phase transformation is dominated by bulk diffusion of solute, the spatial distribution of  $\alpha$  phase is a main factor affecting the  $\alpha$  phase dissolution. But when phase transformation is dominated by grain boundary diffusion of solute, the effects of other size distributions on the dissolution of  $\alpha$  phase are not obvious except for uniform PSD.

**Key words:** grain boundary diffusion; phase field model; dissolution; the spatial distribution of phase; phase size distribution

Corresponding author: Yang Mei, Ph. D., School of Materials and Engineering, Jiangsu University of Technology, Changzhou 213001, P. R. China, Tel: 0086-519-86953290, E-mail: myang@jsut.edu.cn