**第二章 γMn基合金马氏体相变的相场模型**

**2.1 引言**

γMn基合金马氏体相变主要为FCC-FCT热弹性马氏体相变。本文的模拟工作是基于Wang和Khachaturyan建立的马氏体相变相场模型。本章介绍马氏体相变相场模型的具体推导过程。

**2.2 相场模型**

**2.2.1 相场变量**

首先，需要找到合理的相场变量，来描述想要研究的微观组织。对于某个格点，需要根据相场变量组的值，就能知道格点是奥氏体还是马氏体，如果是马氏体，要知道属于哪一种变体。因此，在马氏体相变的相场模型中，1个相场变量用来表示某种Bain变体在该位置的含量，那么相场变量的数目就与马氏体的Bain变体数相等，如FCC-FCT相变中有3个Bain变体(*η*1(**r**, *t*), *η*2(**r**, *t*), *η*3(**r**, *t*))，而B2-B19相变中由6个Bain变体。各状态对应的变量值如图1所示：

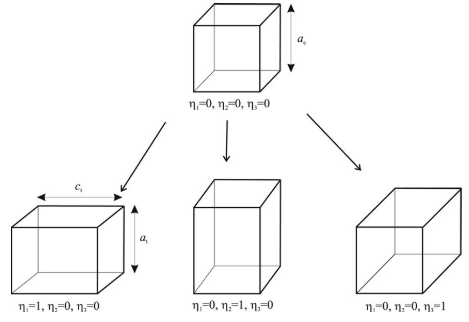


图1 奥氏体和各马氏体变体对应的相场变量值

可以想象，模拟时相场变量的值不可能只有0或1，而是对于图1所示的4个状态有所偏离。那么，如果将序参量理解为某个变体在此位置的含量，将难以解释多种变体共存的。对于FCC-FCT相变，可以将序参量在此位置的值看作此位置在某个方向的畸变程度，那么相场变量组则与该点的晶格常数呈一一对应关系，如(*η*1, *η*2, *η*3) = (1.1, 0.1, 0)表示此点的相变应变在*x*方向的畸变度为1.1，在*y*方向的畸变度为0.1，在*z*方向的畸变度为0。这套相场变量可以很好地描述马氏体相变产生的晶格畸变，同时也满足三种变体具有完全平等性的对称性要求。

**2.2.2 相场动力学方程**

相场动力学方程决定相场变量随时间的演化。马氏体相变的相场变量属于非保守场变量，动力学方程通常采用Allen-Cahn方程，即时间相关的Ginzburg-Landau方程，其形式为：

(2-1)

其中，*L*pq是动力学系数张量，*G*是体系自由能泛函，是Langevin噪声项。*n*是变量数，此处为3，*p*分别取1, 2, …, *n*。

**2.2.2 体系自由能**

由式(2-1)可知，如果能给出体系自由能对相场变量的偏导，就可模拟相场变量随时间的演化。对于马氏体相变相场模型，通常将体系自由能分为化学自由能和弹性应变能(*G*el)，化学自由能又分为体化学自由能(*G*ch)和梯度能(*G*gr)：

(2-2)

*G*ch表示相变在不考虑界面、外加应力等条件时，相场变量组所表示的状态和母相之间的自由能差。*G*ch是*η*的函数，因为变体之间是完全对等的，因此*G*ch函数必须能反映晶体结构的对称性。在Landau的相变理论中，他引入序参量的概念，序参量是能够表征相变的相关物理量，与本文的相场变量是相同的概念。*G*ch必须满足两相之间的热力学关系，相变的对称性，相变的级数等要求。对于马氏体相变，通常采用Landau多项式表示。Landau多项式分为2-3-4型和2-4-6型。本章采用2-3-4型：

(2-3)

其中，积分表示对整个模拟系统进行积分，系数*A*、*B*、*C*可表示为：*A* = 32Δ*G*\*, *B* = 3*A* - 12Δ*G*m，*C* = 2*A* - 12Δ*G*m 。*G*\*是自由能能垒，*G*m是化学驱动力，可表示为：

∆*G*m = *Q*(*T*−*T*0)/*T*0 (2-4)

其中，*Q*是相变潜热，*T*0是两相热力学平衡温度，*T*是模拟时的系统温度。

*G*gr表示体系中的界面能，通常用序参量对空间差分的函数表示：

(2-5)

其中，*β*是梯度能系数，是差分算子。

弹性应变能以及应变能对序参量的偏导可通过微弹性理论得到。微弹性理论可以根据在系统中任意分布的本征应变，得到体系的力学平衡状态。是本征应变，包括相变应变、预置缺陷应变、塑性应变等。如果只考虑相变应变，则有：

(2-6)

其中，是p变体对应的相变应变张量，即马氏体相变的Bain应变，对于本章的FCC-FCT相变，可有：

，， (2-7)

其中，，。*a*0是FCC奥氏体的晶格常数，*a*和*c*是FCT马氏体的晶格常数。下节详细推导弹性应变能的计算过程。

**2.2.4 微弹性理论**

本文假设体系的弹性模量是均匀的，因此体系应变能可表示为：

(2-8)

将总应变分为均匀部分和非均匀部分：

(2-9)

(2-10)

(2-11)

其中*v*i(**r**)是位移场，，非均匀应变满足：

(2-12)

将式(2-9)和(2-11)代入式(2-8)后，将应变能分为均匀应变能和非均匀应变能：

(2-13)

(2-14)

(2-15)

其中，用到了弹性张量的对称性，即*C*ijkl = *C*klij = *C*jikl = *C*ijlk。假定自由边界条件，其表达式为：

(2-16)

其中，是系统表面，是外法线矢量。要求得弹性应变能最小化，可以将均匀应变能和非均匀应变能最小化，从而求得均匀应变和位移场：

(2-17)

所以，平均应变的解为：

(2-18)

其中，

(2-19)

非均匀应变能对位移的偏导为：

(2-20)

对式(2-20)，乘以，再对体系积分，然后在利用高斯理论，可得：

(2-21)

利用公式(2-16)和(2-18)，可得

(2-22)

其中，

(2-23)

式(2-22)可重写为：

(2-24)

其中，*G*ik(**k**)是Green函数张量，有，而位移场

(2-25)

假设系统的边界条件为周期性边界条件，则系统是一个周期性重复的无限大的系统，则表面项不再考虑，则有：

(2-26)

将非均匀应变和均匀应变代入应变能表达式中，得

(2-27)

其中，***e*** = ***k***/|***k***|，，\*表示复共轭。应变的表达式为：

(2-27)

应变能对本征应变的变分偏导为：

(2-28)

**2.2.3 驱动力的具体表达式**

在上节中推导了各体系能量的计算过程，这节将给出演化驱动力的具体表达式，即，接下来以求解完全约束边界条件下()的为例。

(2-29)

(2-30)

如果梯度能是各向同性的，则有：

(2-31)

(2-32)

其中，是Laplace算子。

(2-32)

将式(2-28)，(2-6)代入式(2-32)，可得

(2-33)

此时，就能得到驱动力项的总的表达式。

**2.2.4 数值求解**

对动力学方程进行数值求解时，采用半隐式Fourier谱方法。假定动力学系数矩阵[*L*pq]是对角矩阵，且系数为常数，即：

*L*pq = *L*0 (*p* = *q*), *L*pq = 0 (*p* *q*) (2-34)

动力学方程为：

(2-35)

数值求解时的方程变为：

(2-36)

其中，。整理式(2-36)得：

(2-37)