

⑩ 61-64 Fe-Cr 合金 Spinodal 相变的计算机模拟  
COMPUTER IZED SIMULATION OF SPINODAL DECOMPOSITION  
IN Fe-Cr ALLOYS

冯 华  
Feng Hua  
(重庆大学)

康沫狂  
Kang Mokuang  
(西北工业大学)

TG111.5

**摘 要** 本文在 M340 计算机上模拟了 Fe-Cr 合金 Spinodal 分解的动力学过程。模拟采用蒙特卡罗方法并从原子尺度上模拟了 Fe-Cr 合金 Spinodal 相变的上坡扩散。模拟计算获得的该合金 Spinodal 相图与实验结果吻合良好。

**关键词** 计算机模拟; 蒙特卡罗法; 动力学; 扩散 / 调幅分解, 铁-铬合金相变  
**中国图书资料分类法分类号** TG11.5

**ABSTRACT** The kinetic process of spinodal decomposition in Fe-Cr alloys has been simulated with the aid of the computer M340. The uphill diffusion of Fe-Cr alloy during spinodal decomposition has been investigated in atomic scale with Monte Carlo method. The computer simulated diagram is in agreement with the experimentally measured one.

**KEY WORDS** computerized simulation; Monte-Carlo method; dynamics; diffusion/spinodal decomposition

## 0 前 言

长期以来国内外研究学者对 Spinodal 相变动力学研究投入了大量的精力, 主要提出了连续模型、离散模型、MFDI 模型来解释其实验事实。这些模型几乎都依赖于扩散方程的处理。虽然 Cahn 早在 60 年代初期就提出了描述其过程的动力学方程<sup>[1]</sup>。

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \partial \left[ D \frac{\partial c}{\partial x} \right] / \partial x - 2k \left( \frac{\partial c}{\partial x} \right)^2$$

并且后来 Cahn 本人<sup>[2]</sup>以及 Fontaine<sup>[3]</sup>、Williams<sup>[4]</sup>、Langer<sup>[5]</sup>等国际著名学者都对上述方程的解做过大量努力, 但至今没有任何人找出上述方程的精确解析解。80 年代初期, 日本学者 Tsujimoto<sup>[6-9]</sup>从上述扩散方程的数值解上取得一定进展, 但其数值解对初值取法的依赖性太强, 收敛性较差, 其数值解往往与实验值差距较大。

由于经典处理 Spinodal 解析方程的办法难于从微观原子尺度上认识其相变本质, 而蒙

\* 收文日期 1991-08-19

本项目为国家自然科学基金资助项目(58901411)

特卡罗方法在研究原子尺度的微观扩散动力学上具有独特的优势<sup>[10]</sup>。故此,本文旨在采用蒙特卡罗方法来研究 Fe-Cr 合金的 Spinodal 动力学。

## 1 模 型

Fe-Cr 合金在 821℃ 以下为体心立方,密排面为  $\{111\}$   $\alpha$  面,密排方向为  $\langle 111 \rangle$   $\alpha$  晶向,由于置换原子的扩散通常认为是由某位置跳到最近邻位置,故此,选取密排面为计算机模拟单元,其上两个相交的  $\langle 111 \rangle$   $\alpha$  方向为每一步跳动的方向,选取的网格数是  $40 \times 40$ ,如图 1 所示。计算机模拟单元内每一次原子跳动所引起的能量变化( $\Delta Q$ )为:

$$\Delta Q = (N_2 - N_1) \times (\omega_{Fe-Fe} + \omega_{Cr-Cr} - 2\omega_{Fe-Cr} + C)$$

上式中  $N_1$  为  $(I, J)$  位置周围的最近邻置换位置中被与该原子同类的原子所占据的数目; $N_2$  为与  $(I, J)$  位置原子交换的某原子周围被与该原子同类的原子所占据的数目。计算机模拟单元四周的边界条件为与基体接触。 $\omega_{Fe-Fe}$ 、 $\omega_{Cr-Cr}$ 、 $\omega_{Fe-Cr}$  分别为 Fe-Fe 原子、Cr-Cr 原子、Fe-Cr 原子间的交互作用能。 $\omega_{Fe-Fe} = -404.8 \text{ KJ/mol}^{[11]}$ ,  $\omega_{Cr-Cr} = -334.38 \text{ KJ/mol}$ ,  $\omega_{Fe-Cr} = -52.75 \text{ KJ/mol}^{[12]}$ ,  $C = -407.38 \text{ KJ/mol}$ ,该值根据 Fe-Cr 合金在 821° 发生 Spinodal 相变这一事实<sup>[13]</sup>,并由计算机模拟反推而得,表示畸变能等能量影响因素。

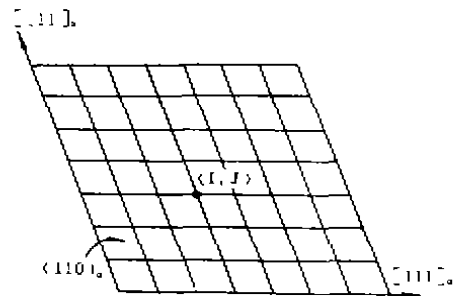


图 1 计算机模拟单元示意图

## 2 实验结果及讨论

### 2.1 Spinodal 相变过程模拟

图 2 是本文计算机模拟 Spinodal 相变过程的计算机框图。首先确定合金在高温下的原子分布状态,本文认为高温下各类原子呈无序分布,然后考查合金在某一温度下等温过程中原子微观的运动情况。直到观察到稳定的原子富集区出现时,方才认为该合金成分在该温度下可发生 Spinodal 相变。值得说明的是本文所观察到的 Spinodal 过程可能仅是该过程的形核阶段,至于其后的长大阶段有待于进一步研究。

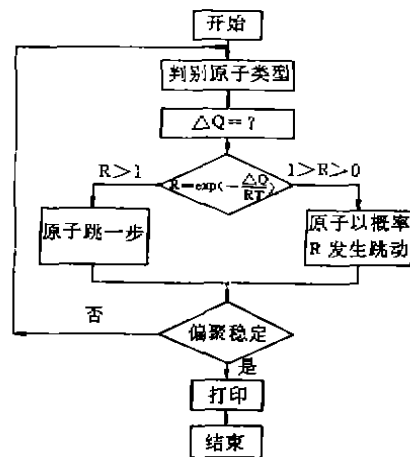


图 2 Spinodal 相变过程的计算机模拟框图

本文计算了不同合金成分在不同温度下 Spinodal 相变初期的原子富集过程,结果之一如图 3 所示。图 3 是 Fe-23atom%Cr 合金在 600℃ 等温时 Spinodal 相变过程中原子分布示意图。虽然在初始状态铁和铬原子呈均匀分布(图 3a),但是,经一定时间等温后,同类原子的聚集

产生了 Spinodal 分解(图3b)。由此可见,蒙特卡罗方法实际上是在计算机上做实验,该方法对于观察相变动力学过程中原子的扩散过程不失为一种有力的工具。

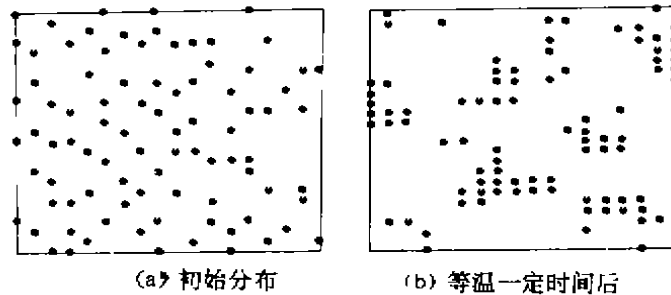


图3 Fe-23atom% Cr 合金在600℃等温时 Spinodal 相变过程中原子分布示意图。“·”表示铬原子

## 2.2 Spinodal 分解曲线的计算

图4是 Fe-Cr 合金相图中计算的 Spinodal 分解曲线与实测曲线的比较,由图4可知,计算值与实测曲线良好吻合,所以,蒙特卡罗方法是一种有希望的计算 Spinodal 分解曲线的方法。

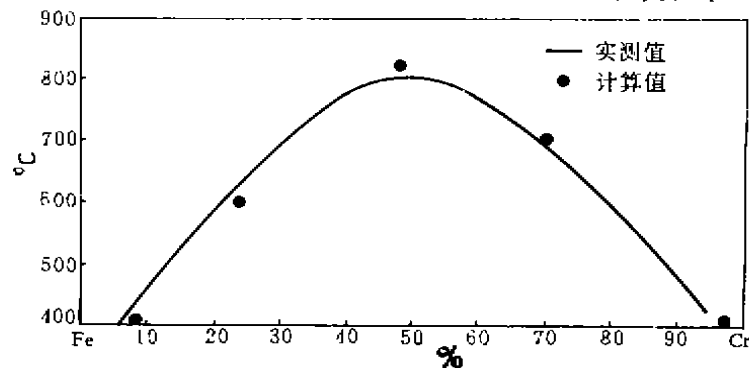


图4 Fe-Cr 合金 Spinodal 分解曲线的计算值与实测曲线比较

## 3 结 论

本文用蒙特卡罗方法研究了 Fe-Cr 合金 Spinodal 相变动力学过程。计算机模拟实验显示了 Fe-Cr 合金 Spinodal 动力学过程中原子的上坡扩散行为。并且计算的 Spinodal 分解点与实测曲线吻合良好。

本研究承蒙国家自然科学基金资助,项目编号为58901411,重庆大学李亚明、李琼参加了本研究工作,在此一并致谢。

## 参 考 文 献

- 1 Cahn J W. On Spinodal Decomposition, *Acta Metall.*, 1961, 9(9): 795
- 2 Cahn J W. The Later Stages of Spinodal Decomposition and the Beginnings of Particle Coarsening, *Acta Metall.*, 1966, 14(12): 1685
- 3 Fontain D de. A Computer Simulation of the Evolution of Coherent Composition Variations in Solid Solutions, Ph. D. Thesis, Northwestern University of Illinois, 1967, USA

- 4 Williams R O. Interface Formotion During Spinodal Decomposition. *Acta Metall.* ,1981,29(1):95
- 5 Langer J S. Statistical Methods in the Theory of Spinodal Decomposition. *Acta Metall.* ,1973,21(12):1649
- 6 Tsujimoto T. Change in the Motive Force of Diffusion and the Free Energy on Phase Separation and Aggregation of Precipitates. *Trans. JIM*,1982,23(6):303
- 7 Tsujimoto T. Fourier Transformation of Diffusion Eqution with Non-linear Terms. *Trans. JIM*,1980,21(7):458
- 8 Tsujimoto T. The Role of Non-linear Terms in the Diffusion Equation during phase-decomposition process. *Trans. JIM*,1981,22(2):127
- 9 Miyazaki T. A Theoretical Analysis of the Phase-Decomposition Based upon the Non-linear Diffusion Equation, 1983,24(4):246
- 10 冯华,康沫狂,李春信. 钢中贝氏体预相变的蒙特卡罗模拟,材料科学进展,1988,2(3):32
- 11 冯端等. 金属物理. 第一卷. 北京. 科学出版社1987. 22
- 12 康振川. 纺 分解的理论及应用(Ⅰ). 国外金属材料,1974,(5):1