

相场法模拟第二相颗粒对柱状晶定向生长的影响*

Phase Field Method Simulation of Directional Growth of Grain with Second Phase Particles

王震¹, 罗志荣², 黄礼琳¹, 卢强华¹, 高英俊^{1**}

WANG Zhen¹, LUO Zhi-rong², HUANG Li-lin¹, LU Qiang-hua¹, GAO Ying-jun¹

(1. 广西大学物理科学与工程技术学院, 广西南宁 530004; 2. 玉林师范学院物理科学与工程技术学院, 广西玉林 537000)

(1. College of Physics Science and Engineering, Guangxi University, Nanning, Guangxi, 530004, China; 2. Institute of Physics Science and Engineering Technology, Yulin Normal University, Yulin, Guangxi, 537000, China)

摘要:【目的】第二相颗粒的存在能影响晶粒的长大,提高材料的力学性能,因而我们用计算机模拟了含第二相颗粒的镍基合金材料在再结晶后的定向退火过程中的柱状晶生长。【方法】在相场法的基础上引入一个温度控制晶界运动的二维平面退火模型,使用该模型对含第二相颗粒的样品进行定向退火处理,观察退火过程中组织形貌的变化,并从第二相颗粒的含量和位置两个方面来讨论退火过程中第二相颗粒对柱状晶组织生长的影响,通过对柱状晶长宽比的统计来反应这些变化。【结果】定向退火处理可产生柱状晶结构;弥散分布的第二相颗粒的存在不利于柱状晶生长,并且含量越高柱状晶越粗,长宽比越小。【结论】第二相颗粒位置可以改变柱状晶晶界的形成方向,间距可以影响长宽比的大小,颗粒间的横向间距和纵向间距都存在一个临界值使柱状晶的长宽比最大。

关键词:柱状晶 相场法 定向退火 第二相颗粒

中图分类号: TG111 **文献标识码:** A **文章编号:** 1005-9164(2015)05-0492-07

Abstract:【Objective】The second particle has effect on the grain growth. In order to improve the mechanical properties of materials, we use computer to simulate the growth of the direction columnar of Ni-based alloy in the process of annealing after recrystallizing. 【Methods】Based on the phase field method, a two-dimensional annealing model for temperature controlled grain boundary motion is introduced to treat the samples with the second phase particles, and the changes of microstructure were observed. The effect of second phase particles on the growth of columnar crystal structure was discussed from two aspects: The content and the position of the second phase particles, and counting the aspect ratio to reflect the change of the columnar crystals. 【Results】The directional annealing process can produce columnar crystal structure. Second phase particles of dispersion distribution are not conducive to the growth of columnar crystals,

and the higher the content, the more the columnar crystal, the smaller the aspect ratio.

【Conclusion】The position of second phase particles can change the columnar crystal formation direction, and there is a critical value in the horizontal and vertical spacing between the particles, which guarantees the aspect ratio of columnar crystals to reach the largest.

Key words: columnar crystals, phase field method, directional annealing, the second phase particles

收稿日期:2015-07-15

修回日期:2015-09-08

作者简介:王震(1991-),男,博士研究生,主要从事纳米材料性能与计算模拟实验方面的研究。

* 国家自然科学基金项目(51161003,50661001)和广西研究生教育创新计划基金项目(YCSZ2014039,YCSZ2015029)资助。

** 通讯作者:高英俊(1962-),男,教授,博士生导师,主要从事纳米结构材料设计与计算模拟实验方面的研究,E-mail:gaoyj@gxu.edu.cn.

0 引言

【研究意义】柱状晶结构因晶界少^[1],且拉伸应力平行于柱状晶晶界方向,所以具有优良的塑性、导电性、抗蠕变性^[2~4]和抗疲劳性^[5,6]以及抑制裂纹扩展^[3,6]的能力,目前主要用于提高一些高温合金的性能,如航空发动机、燃气轮机的涡轮叶片的热疲劳性的提升^[7~11]、镍基高温合金的热物理性能的改善^[12]以及铁基高温合金中的磁学性能的提高^[13]等。高温合金的柱状晶结构的制备方法包括:定向凝固技术,定向再结晶退火技术^[14](在较低的退火温度下,控制材料再结晶的晶粒长大方向,获取具有定向晶粒的显微结构)。**【前人研究进展】**在定向退火技术运用于实验研究方面,Zhang等^[15,16]利用纯铁在定向退火条件下制备柱状晶组织,从材料的变形程度、退火温度、抽拉速率等角度详细讨论定向退火对柱状晶形成的影响;Baker等^[17]通过定向退火冷轧铜单晶实验,从退火温度、热区速度、温度梯度等角度讨论退火条件对柱状晶的影响;Li等^[18]在定向退火冷轧镍时,研究变形度、热区温度、温度梯度等的影响;Baker等^[19]用定向退火氧化物弥散强化 MA754 实验。在计算机模拟方面,Godfrey等^[20]采用蒙特卡洛模拟高织构材料的区域退火,并且在晶界迁移率较大时观察到柱状晶,而在较小时则出现时等轴晶;Badmos等^[21]则采用前端追踪法研究单相材料中柱状晶的长大过程,以及晶界能和晶界迁移率各项异性对柱状晶长大的影响。在相场法中,罗志荣等^[22]研究热区宽度和热源移动速率对柱状晶的影响;魏承炆等^[23]考虑热源的溫度梯度,设定晶界迁移率为高斯函数来研究温度对柱状晶的影响。上述研究在模拟时都忽略第二相颗粒的存在,而在实验中发现第二相颗粒对晶粒生长有重要的影响,如对晶界具有钉扎作用,不利于晶界的迁移^[24]。第二相颗粒通常可以分为两类^[25]:第一类在高温下不易分解或固溶,如氧化物或碳化物;第二类在高温下易熔化或分解消失。**【本研究切入点】**Baker等^[19]在对定向退火氧化物弥散强化 MA754 研究中,运用前端追踪法模拟第二相颗粒对柱状晶生长影响,但在其研究中没有考虑到杂质粒子的扩散,这与实际情况不相符。另外运用相场方法模拟定向退火下第二相颗粒对材料中柱状晶生长的影响的工作尚未见报道。本文将结合 Badmos等^[21]提出的无限大温度梯度的移动热区模型和 Kazaryan等^[26]提出 VPFM 相场模型,建立包括第二相颗粒的定向退火晶粒生长模型,其中第二相颗粒具有一定的扩散能力,并且不会异常长大。**【拟解决的关键问题】**本文在

文献[21,26~28]基础上,建立包括杂质相的定向退火晶粒长大的热力学模型,研究含杂质相的镍基合金材料在再结晶后的定向退火过程中的柱状晶生长,模拟并观察定向退火过程中柱状晶组织的演化,并讨论第二相颗粒含量以及位置对柱状晶形成的影响。

1 相场模型

1.1 自由能函数和动力学方程

根据扩散界面理论和连续场理论,可以用取向场 η_i 和浓度场 ρ 来描述体系的微观结构,如图 1 所示,即晶粒处用一个取向场变量值为 1,其余取向场变量值都为 0,及浓度场变量值为 1 表示;而对弥散的第二相颗粒,由于其原子的扩散速率很慢,因此所有取向场变量值和浓度场变量值用 0 表示。

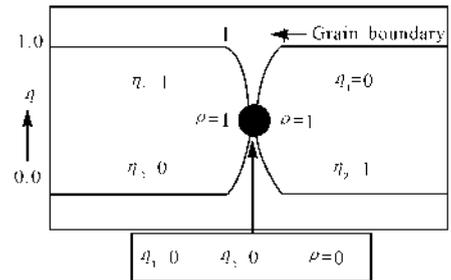


图 1 漫散界面示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the diffuse interface
体系的总自由能表示形式为

$$F = \int \left\{ f_0 + \frac{k_i}{2} \sum_{i=1}^q [\nabla \eta_i]^2 + \frac{k_\rho}{2} [\nabla \rho]^2 \right\} dv, \quad (1)$$

式中 f_0 表示局部自由能密度函数, k_i 和 k_ρ 分别表示取向场和浓度场的梯度能量系数,与界面能有关。局部自由能密度函数可以采用具有对称性的朗道自由能多项式来表示

$$f_0 = -\frac{A}{2}(\rho - \rho_m)^2 + \frac{B}{4}(\rho - \rho_m)^4 + \frac{C}{4}\rho^4 + \sum_{i=1}^p \left[\left(\frac{D}{2}(\rho - \rho_m)^2 - \frac{E}{2}\rho^2 \right) \eta_i^2 + \frac{F}{4}\eta_i^4 + \frac{G}{4} \sum_{j \neq i} \eta_j^2 \eta_i^2 \right], \quad (2)$$

式中, A, B, C, D, E, F, G 是为唯象系数, $\rho_m = \frac{\rho_g}{2}$, $\rho_g = 1$ 。自由能密度函数定义为在 $\rho = \rho_g = 1, \eta_i = \eta_g = 1, \eta_{j \neq i} = 0$ 和 $\rho = 0, \eta_i = 0$ 处满足极小值的双势井。 ρ_g 和 η_g 表示晶粒内平衡相对密度和取向序参量参数。取向场和浓度场的动力学演化方程为

$$\frac{d\eta_i}{dt} = -L \frac{\partial F}{\partial \eta_i}, \quad (3)$$

$$\frac{d\rho}{dt} = \nabla [M \nabla \frac{\partial F}{\partial \rho}]. \quad (4)$$

式中, L 和 M 是相关于界面迁移率和第二相颗粒的

热力学扩散系数的动力学系数, ∇ 表示梯度算符。

1.2 移动热区模型

基于相场方法, 根据晶界迁移率与温度的关系, 将晶粒长大过程控制在具有一定宽度的高温热区范围内, 构建具有无限大温度梯度且热区内温度均匀的热区模型, 并且热区可以以速率 v 匀速运动, 如图 2 所示。在热区内具有均匀的温度, 通常用晶界迁移率 L 来体现, 晶粒长大只发生在热区, 在热区外则不发生长大。

$$L = \begin{cases} h, & \text{热区内,} \\ 0, & \text{热区外,} \end{cases}$$

式中, h 表示热区内晶界迁移率的数值大小。

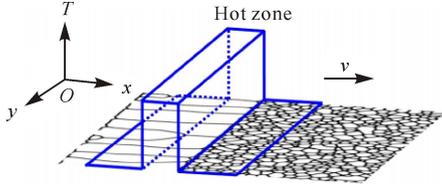


图 2 移动热区示意图^[22]

Fig. 2 Schematic diagram of moving hot zone

1.3 杂质相的设置

实验模拟的第二相颗粒属于在高温下不易分解或固溶的第一类颗粒相(如 Y_2O_3 ^[19] 等), 该类颗粒粒子在退火时具有固定的扩散系数 M , 并且在体系中的分布服从均匀分布, 平均半径为 2 gp, 所占面积分数用 $f = S_{\text{杂质}}/S$ 表示, 其中 $S_{\text{杂质}}$ 表示第二相粒子所占的面积, S 表示体系的总面积。表 1 列出了计算模拟时 5 组样品所需第二相颗粒的含量, 其中, Sample 为样品, f 表示杂质粒子含量, R 表示杂质粒子半径, N 表示第二相颗粒数目。

表 1 第二相颗粒含量及大小的设置

Table 1 The volume fraction and radius setting of second phase particles

Sample	f (%)	R (gp)	N
a	0.05	2	10
b	0.09	2	20
c	0.29	2	60
d	0.90	2	187
e	1.5	2	312

1.4 模拟热区参数选取

晶界迁移率是关于温度的函数, 晶界迁移率与温度之间符合 Arrhenius 方程: $L = L_0 \exp(-\frac{Q}{kT})$, 式中 Q 是晶界迁移的激活能, 与选取材料的种类有关

系; k 为玻尔兹曼常数; L_0 是前置因子, 与选取材料的结构有关。在本文的定向退火相场模拟中, 温度是通过晶界迁移率的大小来体现^[29], 且高温热区的参数设置如表 2 所示, 其中 Sample 表示样品, L 表示晶界迁移率, M 表示第二相粒子扩散系数, V 表示热区移动速率, W 表示热区宽度。

表 2 移动热区参数设置

Table 2 Parameters setting of moving hot zone

Sample	L	M	V (gp/ts)	W (gp)
a~e	1.0	0.00001	0.002	120

1.5 模拟区域的设计及可视化处理

选取的计算区域为 $512 \text{ gp} \times 512 \text{ gp}$ 的正方形区域, 在计算时, 将连续空间做离散化处理, 采用周期性边界条件。根据 Kazaryan 等^[26] 的观点, 本文计算采用的相关无量纲参数值为: $A = 2.6$, $B = 10.4$, $C = 2.0$, $D = 0.3$, $E = 2.0$, $F = 2.0$, $G = 5.0$, $k_i = 1.0$, $k_p = 2.0$, 取向场变量 $p = 32$ 。计算的时间步长 $\Delta t = 0.1$, 空间步长 $\Delta x = 1.0$ 。

为显示微观组织演化过程, 利用函数 $\varphi(r, t)$ 实现可视化, 其形式如下

$$\varphi(r, t) = \sum_{i=1}^p \eta_i^2(r, t).$$

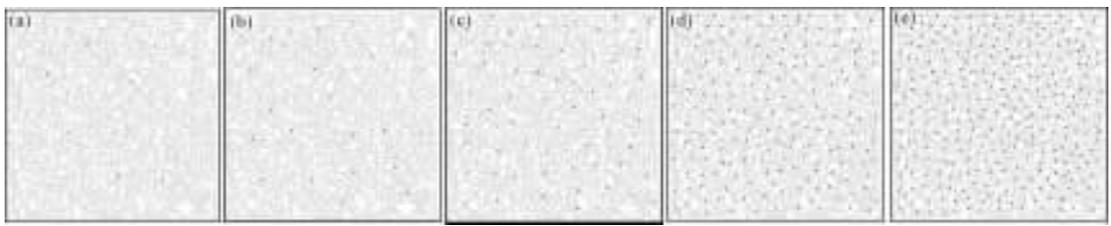
当 $\varphi(r, t) = 1.0$ 时, 表示晶粒内部; 当 $\varphi(r, t) = 0$ 时, 表示第二相颗粒位置。

2 结果与分析

2.1 第二相颗粒含量对柱状晶生长的影响

图 3 为定向退火模拟实验所用样品的微观结构, 各子图样品中的第二相颗粒含量 f 为 $0.05\% \sim 1.5\%$, 晶粒组织的形貌呈现等轴晶状态, 第二相颗粒多数位于晶界处或晶界的“三叉晶”处。在模拟实验中, 样品中的第二相颗粒半径设置为 $r = 1 \text{ gp}$, 第二相颗粒在退火过程中的扩散系数 M 设置处于很低的值 ($M = 0.00001$), 从而保证第二相颗粒在退火过程中不粗化, 避免粗化对晶粒生长的影响, 使得在模拟过程中第二相颗粒多处于离散分布状态, 并且不粗化不聚集。

对图 3a~e 中的样品进行定向退火, 退火条件如 1.3 节表 1 所示, 对 a~e 样品施加相同的退火温度, 在此温度下导致 a~e 样品中晶粒的晶界迁移率 L 为 1.0, 退火后的微观组织结构如图 4 所示。



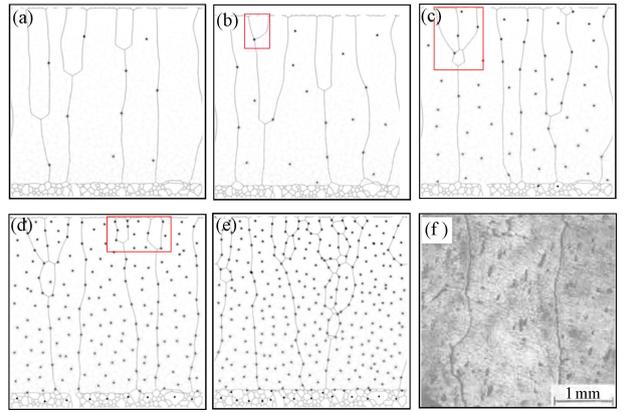
(a)0.05%;(b)0.09%;(c)0.29%;(d)0.9%;(e)1.5%

图3 不同杂质粒子含量的样品微观结构

Fig.3 Simulation microstructures of samples with different volume fractions of particles

图4a为第二相颗粒含量 f 为0.05%的样品定向退火后的组织,第二相颗粒多位于晶界处或靠近晶界处,柱状晶的生长方向与定向退火的热区运动方向相同;热区扫过样品时,初始端的柱状晶数目多于末端的柱状晶数目,其尺寸则小于末端的柱状晶尺寸,这是因为样品中粗细不同的柱状晶晶粒伴随着运动热区并肩向前延伸时,粗大的柱状晶在生长过程中合并了细小的柱状晶,这种现象在定向凝固理论中称作“柱状晶合并机制”^[1]。图4b为第二相颗粒含量 f 增加到0.09%时样品定向退火后的组织,此种情况下柱状晶生长依然良好,位于柱状晶内部的颗粒数目增加,局部位置的粗大柱状晶开始提前合并(图中4b红色矩形框所示)。图4c为第二相颗粒含量 f 为0.29%时样品定向退火后的组织,柱状晶晶界沿热区方向形成,晶粒内部的第二相颗粒数目开始大量增加,同时有更多的柱状晶在热区运动的初始端合并(图4c中红色矩形框所示),同样的情况也发生在第二相颗粒含量 f 为0.9%的样品中(图4d中矩形框所示)。当第二相颗粒的含量增加到1.5%时(图4e),在相同条件的移动热区通过样品时,样品中的柱状晶组织变得粗大,热区前端的晶界跃过更多的第二相颗粒,并把颗粒包含在柱状晶内部;晶界排列不规则,但最终趋于热区运动方向排列;在样品的初始端以及中部区域处,细小的等轴晶粒和粗大的柱状晶共存,理论分析认为第二相颗粒的存在增加了柱状晶合并几率,当粒子含量达到1.5%,离散分布的第二相颗粒数目较大时,恰好增加柱状晶合并概率;在样品的中后部区域柱状晶粗大,等轴晶粒数目减少,这主要是由于前期晶粒大量合并导致晶界数量大量减少,晶界只能沿着热区运动方向形成。图4f为实验条件下所获得的柱状晶组织图,通过与图4a~e比较可见计算机模拟的结果与实验结果一致。

由图5可见,随着第二相颗粒含量的增加,样品中柱状晶的平均长度(D_y)在整体上呈现下降的趋势,由第二相颗粒含量 f 为0%时的410 gp下降到含量 f 为1.5%时的110 gp左右;而柱状晶的平均宽度(D_x)则基本上保持不变,维持在50 gp左右。在柱状晶的长宽比上,其整体变化趋势也呈下降趋势,



(a)0.05%;(b)0.09%;(c)0.29%;(d)0.9%;(e)1.5%;

(f)experimental graph^[14]

图4 第二相颗粒含量不同的样品定向退火后微观组织结构图

Fig.4 Simulation microstructures of samples with different content of particles after directional annealing

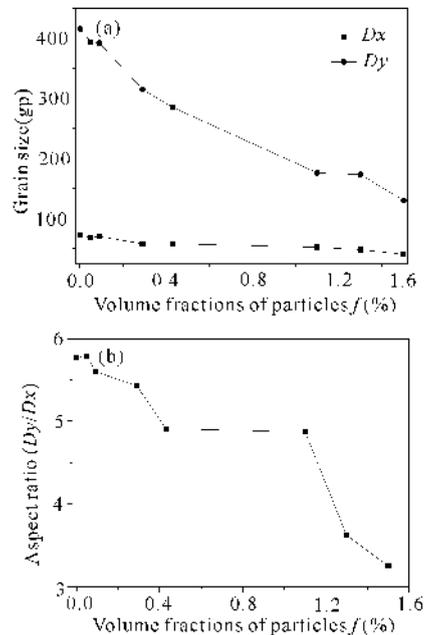


图5 定向退火时样品中第二相颗粒含量与晶粒的长度和宽度的关系曲线

Fig.5 Relationship curves of grain size (a) and aspect ratio (b) with volume fractions of particles during directional annealing

由开始的 6 : 1 左右降到 3 : 1 左右。从而也说明在样品进行定向退火时,样品中弥散分布的第二相颗粒的存在不利于柱状晶的形成。

2.2 第二相颗粒位置对柱状晶生长的影响

从上一节的模拟结果可以看出第二相颗粒的存在对柱状晶晶界的生长有显著的影响。为验证这结果,对比含第二相颗粒平行排列的样品(图 6a,有 4 条平行排列的第二相颗粒,每个粒子间的纵向间距 D_L 为 15 gp,横向间距 D_T 为 101 gp)与不含第二相颗粒的样品定向退火后组织(图 6b,)结果可见第二相颗粒的定向排列时,柱状晶的晶界沿着第二相颗粒方向生长,明显改变了定向退火后的组织形貌。

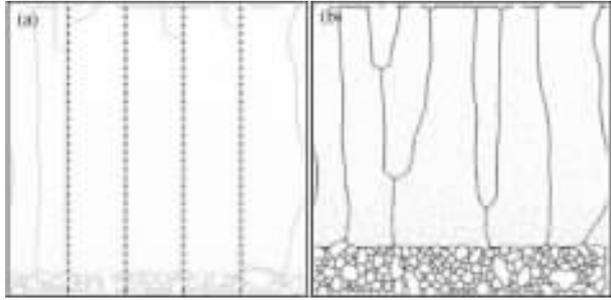
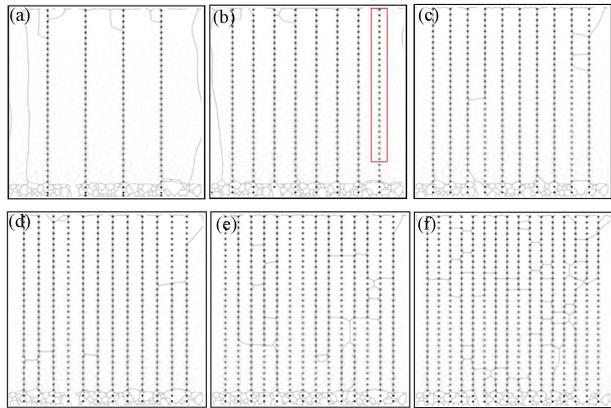


图 6 第二相颗粒定向排列和无第二相颗粒样品定向退火后的组织结构图

Fig. 6 Simulation microstructures of samples with directional arrangement of particles and without particles after directional annealing on growth of columnar crystals

为找出第二相颗粒的排列方式对柱状晶生长的影响,使用第二相颗粒纵向间距相同,而横向间距不同的样品进行定向退火,退火后的组织如图 7 所示,各子图的第二相颗粒平行排列的条数以及每个粒子间的纵横向间距见图注。



(a) $D_L = 15$ gp, $D_T = 101$ gp; (b) $D_L = 15$ gp, $D_T = 56$ gp; (c) $D_L = 15$ gp, $D_T = 46$ gp; (d) $D_L = 15$ gp, $D_T = 39$ gp; (e) $D_L = 15$ gp, $D_T = 34$ gp; (f) $D_L = 15$ gp, $D_T = 30$ gp

图 7 第二相颗粒定向排列横向间距对柱状晶生长的影响

Fig. 7 Effects of different lateral spacing of directional arrangement of particles

对比图 7a 和 7b 可见,当进一步缩小第二相颗粒平行排列的距离时,柱状晶的宽度也随之减小;图 7b 红色矩形框中一排第二相颗粒处没有产生晶界,对比图 6b 中相应的位置,可知如果第二相颗粒所处的位置处原本没有晶界产生,即使粒子纵向间距缩小到 15 gp 也不会产生晶界,进而说明平行排列的第二相颗粒虽然能够改变柱状晶生长方向,并且能缩小柱状晶的宽度,但不是产生晶界的必要条件。对比图 7b 和图 7c 可知,当再进一步缩小第二相颗粒平行排列的间距时,柱状晶的宽度并没有进一步减小(图 7c),此时晶界开始偏离平行排列的第二相颗粒方向生长,说明第二相颗粒对晶粒方向的改变是有局限性的,不能无休止的的改变晶界方向,也不能产生更多的晶界。

从图 8 中可见第二相颗粒定向排列,颗粒的横向间距在 20~120 gp 变化时,退火产生的柱状晶的长宽比随横向间距增加呈现出先增加后减少的趋势,并且在横线间距为 56 gp,长宽比达到最大值 8.27。

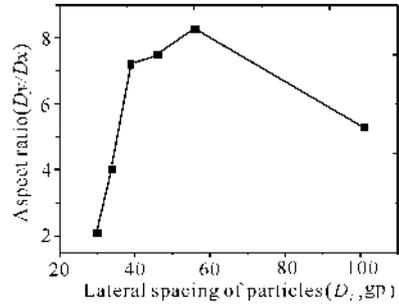


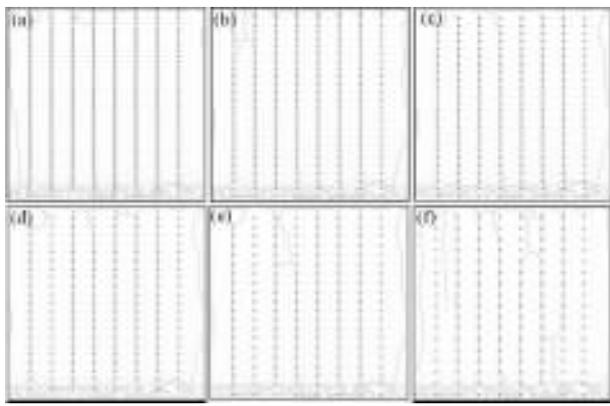
图 8 横向间距对柱状晶的长宽比影响

Fig. 8 Relationship curve between aspect ratio and different lateral spacing of particles

为进一步验证平行排列的第二相颗粒纵向间距是否对柱状晶生长产生影响,于是对图 8 样品进行定向退火,退火后的组织如图 9 所示,各子图的第二相颗粒平行排列的条数以及每个粒子间的纵横向间距如图注所示。

当第二相颗粒平行排列的横向间距相同时,随着颗粒间的纵向间距增加(图 9b、d、e),晶界开始偏离第二相颗粒排列位置生长,甚至某些位置出现柱状晶生长从中间位置截断现象,说明第二相颗粒的纵向间距对改变晶界生长方向的也起着一定的作用,即纵向间距越大,对晶界生长的束缚作用越小。

从图 10 中可以发现,当第二相颗粒的横向间距相同时,柱状晶的长宽比随第二相颗粒的纵向间距增加呈现出先增加后减少的趋势,并且在第二相颗粒的纵向间距为 21 gp 时出现最大值 7.6。



(a) $D_L = 15$ gp, $D_T = 56$ gp; (b) $D_L = 20$ gp, $D_T = 56$ gp; (c) $D_L = 21$ gp, $D_T = 56$ gp; (d) $D_L = 23$ gp, $D_T = 56$ gp; (e) $D_L = 25$ gp, $D_T = 56$ gp; (f) $D_L = 30$ gp, $D_T = 56$ gp

图9 第二相颗粒定向排列纵向间距对柱状晶生长的影响

Fig. 9 Effects of different longitudinal spacing of directional arrangement of particles on growth of columnar crystals

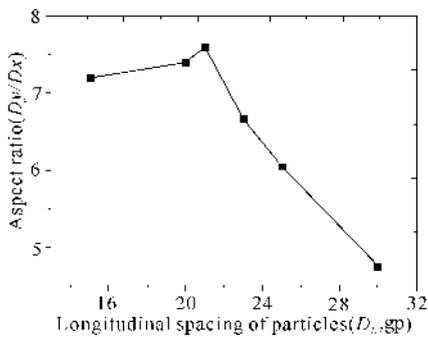


图10 纵向间距对柱状晶的长宽比影响

Fig. 10 Relationship curve between aspect ratio and different longitudinal spacing of particles

3 结论

通过定向退火方法可以产生柱状晶结构。第二相颗粒在样品中的位置对柱状晶晶界的生长有显著的影响,弥散分布的第二相颗粒不利于柱状晶生长,定向排列的第二相颗粒在一定程度上有利于柱状晶生长;样品中第二相颗粒含量越高,柱状晶的长度值越小,长宽比值也越小。

当第二相颗粒平行排列的纵向间距相同时,缩小横向间距可减少柱状晶宽度值,增加长宽比;当平行排列的颗粒横向间距相同时,增大纵向间距则晶粒偏离颗粒位置生长,柱状晶宽度值增加。

参考文献:

[1] 陈亚军,陈琦,王自东,等.定向凝固过程中柱状晶的生长机制[J].清华大学学报:自然科学版,2004,44(11):1464-1467.

[2] Beddoes J, Seo D Y, Saari H. Long term creep of TiAl+ W+ Si with polycrystalline and columnar grain structures[J]. Scripta Materialia, 2005, 52(8):745-750.

[3] Cairns R L, Curwick L R, Benjamin J S. Grain growth in dispersion strengthened superalloys by moving zone heat treatments[J]. Metallurgical Transactions A, 1975, 6(1):179-188.

[4] Bellows R S, Schwarzkopf E A, Tien J K. Creep-fatigue behavior of directionally solidified and single crystal intermetallic Ni 3 Al(B, Hf) at an intermediate temperature[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1988, 19(3):479-486.

[5] Godfrey A W, Martin J W. The effect of directional recrystallization on the low cycle fatigue response of a powder metallurgy nickel-based superalloy at elevated temperatures[J]. Materials Science and Engineering: A, 1997, 222(2):91-100.

[6] Mino K, Nakagawa Y G, Ohtomo A. Abnormal grain growth behavior of an oxide dispersion strengthened superalloy[J]. Metallurgical Transactions A, 1987, 18(6):777-784.

[7] Whitesell H S, Overfelt R A. Influence of solidification variables on the microstructure, macrosegregation, and porosity of directionally solidified Mar-M247[J]. Materials Science & Engineering, 2001, A 318(1-2):264-276.

[8] Szcotok A E A S, Szala J, Cwajna J, et al. Selection of etching methods of primary carbides in MAR-M247 nickel-base superalloy for computer-aided quantitative metallography[J]. Materials Characterization, 2006, 56(4):348-354.

[9] Bae J S, Lee J H, Kim S S, et al. Formation of MC- γ/γ' eutectic fibers and their effect on stress rupture behavior in D/S Mar-M247LC superalloy[J]. Scripta Materialia, 2001, 45(5):503-508.

[10] Kermanpur A. Directional solidification of Ni base superalloy IN738LC to improve creep properties[J]. Materials Science & Technology, 2000, 16(5):579-586.

[11] Kobayashi T, Koizumi Y, Yokokawa T, et al. Development of a 4th generation DS superalloy[J]. Journal of the Japan Institute of metals, 2002, 66(9):897.

[12] 李秀臣.定向凝固镍基高温合金的热物理性能[J].机械工程材料, 1988, 45(3):125-129.

Li X C. Thermo-physical properties of directionally-solidified Ni-based superalloys[J]. Journal of mechanical engineering materials, 1988, 45(3):125-129.

[13] Fu H, Zhang Z, Jiang Y, et al. Improvement of magnet-

- ic properties of an Fe-6.5 wt% Si alloy by directional solidification[J]. *Materials Letters*, 2011, 65(9):1416-1419.
- [14] 张中武, 陈国良, 陈光. 定向再结晶的研究进展[J]. *金属热处理*, 2007, 32(2):1-6.
Zhang Z W, Chen G L, Chen G. Research progress of directional recrystallization [J]. *Heat Treatment of Metals*, 2007, 32(2):1-6.
- [15] Zhang Z W, Chen G L, Chen G. Microstructural evolution of commercial pure iron during directional annealing[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2006, 422(1-2):241-251.
- [16] Zhang Z W, Chen G, Chen G L. Dynamics and mechanism of columnar grain growth of pure iron under directional annealing[J]. *Acta Materialia*, 2007, 55(17):5988-5998.
- [17] Baker I, Li J. Directional annealing of cold-rolled copper single crystals[J]. *Acta Materialia*, 2002, 50(4):805-813.
- [18] Li J, Baker I. An EBSP study of directionally recrystallized cold-rolled nickel[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2005, 392(1-2):8-22.
- [19] Baker I, Iliescu B, Li J, et al. Experiments and simulations of directionally annealed ODS MA 754[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2008, 492:353-363.
- [20] Godfrey A W, Martin M J. Some Monte Carlo studies of grain growth in a temperature gradient[J]. *Philos Mag*, 1995, A72:737.
- [21] Badmos A Y, Frost H J, Baker I. Microstructural evolution during directional annealing[J]. *Acta Materialia*, 2002, 50(13):3347-3359.
- [22] 罗志荣, 高英俊, 邓芊芊, 等. 定向退火条件下柱状晶形成及连续扩展的相场模拟[J]. *中国有色金属学报*, 2014, 24(7):1778-1784.
Luo Z R, Gao Y J, Deng Q Q, et al. Phase field simulation of formation and continuous propagation of columnar grain structure during directional annealing[J]. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2014, 24(7):1778-1784.
- [23] 魏承炆, 李赛毅. 温度梯度对晶粒生长行为影响的相场模拟[J]. *物理学报*, 2011, 60(10):132-139.
Wei C Y, Li S Y. Effect of temperature gradient on grain growth behavior from phase field simulations[J]. *Acta Physica Sinica*, 2011, 60(10):132-139.
- [24] Humphreys F J, Hatherly M. *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*[M]. 2nd. Elsevier Ltd, 2004.
- [25] 李慧改, 郑少波, 王利伟, 等. 超细夹杂物析出研究[J]. *材料与冶金学报*, 2007, 6(2):105-108.
Li H G, Zheng S B, Wang L W, et al. Research on the precipitation of superfine inclusions[J]. *Journal of Materials and Metallurgy*, 2007, 6(2):105-108.
- [26] Kazaryan A, Wang Y, Patton B R. Generalized phase field approach for computer simulation of sintering: Incorporation of rigid-body motion[J]. *Scripta Materialia*, 1999, 41(5):487-492.
- [27] 卢成健, 蒋丽婷, 王玉玲, 等. 晶体相场法模拟小角度晶界的位错结构及其演化[J]. *广西科学*, 2013, 20(4):316-320.
Lu C J, Jiang L T, Wang Y L, et al. Dislocation structure evolution in low angle grain boundary[J]. *Guangxi Sciences*, 2013, 20(4):316-320.
- [28] 罗志荣, 黄世叶, 茹谢辛, 等. 晶体相场法模拟大角度晶界的变形过程[J]. *广西科学*, 2013, 20(4):311-315.
Luo Z R, Huang S Y, Ru X X, et al. Phase-field-crystal modeling for deformation process of high-angle grain boundary[J]. *Guangxi Sciences*, 2013, 20(4):311-315.
- [29] Holm E A Z N S D. Nonuniform and directional grain growth caused by grain boundary mobility variations [J]. *Acta Materialia*, 1998, 46(3):953-964.

(责任编辑:米慧芝)