

# Nb 对奥氏体→铁素体相变动力学影响的模型

刘雪峰<sup>1</sup>, 贾涛<sup>1</sup>, 朱本强<sup>2</sup>

( 1. 东北大学 轧制技术及连轧自动化国家重点实验室, 辽宁 沈阳 110819 ;  
2. The Centre for Metallurgical Process Engineering , The University of British Columbia , Vancouver , BC , Canada V6T 1Z4 )

**摘 要 :**在热模拟实验中,通过奥氏体区不同时间的等温得到具有不同固溶 Nb%、相同晶粒尺寸的奥氏体,然后以 1~5 K/s 冷速冷却至室温获得连续冷却膨胀曲线.在 Rios 理论推导基础上,开发了一种基于 Johnson-Mehl-Avrami- Kolmogorov ( JMAK ) 方程和可加性法则的建模方法.建立了不同固溶 Nb% 条件下的奥氏体→铁素体相变动力学模型.结果表明,固溶 Nb% 对指数  $n$  没有影响,而动力学参数  $k$  随着固溶 Nb% 的增加而减小,即固溶拖拽效应增强.

**关 键 词 :**相变;动力学模型;Nb;JMAK;可加性法则

中图分类号: TG 111.5      文献标志码: A      文章编号: 1005-3026( 2016 )05-0642-05

## Modeling the Effect of Nb on Austenite → Ferrite Phase Transformation Kinetics

LIU Xue-feng<sup>1</sup>, JIA Tao<sup>1</sup>, ZHU Ben-qiang<sup>2</sup>

( 1. State Key Laboratory of Rolling and Automation , Northeastern University , Shenyang 110819 , China ; 2. The Centre for Metallurgical Process Engineering , The University of British Columbia , Vancouver V6T 1Z4 , Canada. Corresponding author : JIA Tao , E-mail : jiatao@ral.neu.edu.cn )

**Abstract :** In thermal simulation tests , the austenite with the same grain size but different solute Nb% was obtained by holding at austenite region with various times. The dilation curve was recorded when the sample was cooled to room temperature with the cooling rate of 1 ~ 5 K/s. Originating from Rios ' theoretical deduction , a modeling approach based on the JMAK( Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov ) equation and additivity rule was developed. The kinetic model of austenite to ferrite phase transformation under different solute Nb% was established. The results suggest that the exponential  $n$  is not affected by the solute Nb% , whereas the kinetic parameter  $k$  decreases with increasing solute Nb% that is an enhanced solute drag effect.

**Key words :** phase transformation ; kinetic model ; Nb ; JMAK ( Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov ) ; additivity rule

Nb 是一种广泛应用的微合金元素,在钢中通常以固溶原子或碳氮化物形式存在.对于含 Nb 微合金钢的热轧,Nb 在钢中的存在状态及其对奥氏体向铁素体、贝氏体相变的作用规律是决定最终微观组织及最终力学性能的关键.

从热力学上来说,Nb 作为铁素体稳定元素,会提高  $A_{c3}$  温度;但在动力学上,少量 Nb 的添加会很大程度上推迟奥氏体向铁素体相变,产生溶质拖拽效应<sup>[1]</sup>.这种现象通常解释为,由于与 Fe 晶格较大的错配度,Nb 易于偏析至晶界降低晶界能量,偏析至相界面对相界迁移产生拖拽效应;Nb 与 C 原子较强的相互作用降低了 C 的活度,抑制了 C 的扩散.然而,溶质拖拽理论是基于扩散相变,与贝氏体的切边机制不相适应,因此,Nb 对贝氏体相变的抑制作用主要体现在,Nb 的偏析使奥氏体晶界稳定化,抑制了贝氏体铁素体在晶界的形核<sup>[2]</sup>.

当 Nb 以析出物形式存在时,它对相变的作

用很大程度上取决于其尺寸,或者说它与奥氏体的取向关系。例如,较小尺寸的析出物对铁素体、贝氏体的形核起阻碍作用,因为具有较高界面能的奥氏体晶界被共格或半共格的析出物/奥氏体界面占据<sup>[3]</sup>,而当析出物粗化后,共格关系消失,从而为新相的形核提供有利条件<sup>[4]</sup>。

尽管关于 Nb 对相变的影响已有大量研究工作发表,但大多是反映为 Nb 降低铁素体、贝氏体相变开始温度,很少有从动力学角度开展研究分析。这其中有一个很重要的原因就是相变动力学模型开发具有一定的难度,例如现在大量应用的相场模型有一个很大的不足之处:在模拟连续冷却相变时相界面迁移率表现出与冷却速率的相关性,这与界面迁移率的物理定义是相矛盾的<sup>[5]</sup>。

本文通过精心设计的热模拟工艺,获得具有相同晶粒尺寸、不同 Nb% 的奥氏体,然后以 1~5 K/s 冷速冷却至室温,得到铁素体相变膨胀曲线,基于 Rios 分析方法<sup>[6]</sup>和作者之前的模型研究工作<sup>[7-8]</sup>,建立了连续冷却相变动力学模型,对不同 Nb% 条件下的动力学模型参数进行了对比。本文旨在确定 Nb 对相变动力学的影响作用,为相界面迁移速率控制提供一定的理论与实验支撑。

## 1 实验材料与方法

实验用钢为一种低碳含 Nb 微合金钢,化学成分如表 1 所示。采用 ThermoCalc 热力学软件,计算得到该材料的  $A_{c3}$  温度为 1 112 K。热模拟试样为典型的哑铃状试样,其工作区尺寸为  $\phi 6\text{ mm} \times 10\text{ mm}$ 。热模拟工艺如图 1 所示。

表 1 实验用钢的化学成分(质量分数)							
Table 1 Chemical composition of the experimental steel (mass fraction)							
C	Mn	Si	P	S	Al	Nb	N
0.06	1.49	0.2	0.009	0.002	0.038	0.047	0.0094

热模拟实验在 Gleeble-3500 上进行,首先将试样在 1 473 K 保温 3 min 以固溶钢中的 Nb%;其次在 1 323 K 以  $1\text{ s}^{-1}$  的速率变形至 0.3 的真应变,保温 20 s 后获得完全再结晶的奥氏体,晶粒尺寸为  $40\text{ }\mu\text{m}$ ;以上步骤均在之前的研究中得到验证<sup>[9]</sup>。然后将试样以 100 K/s 冷却至 1 173 K,分别待温 0.2 和 20 min 获得不同程度的固溶 Nb%;最后,完成每一个待温时间下的连续冷却相变,冷却速率为 1~5 K/s。

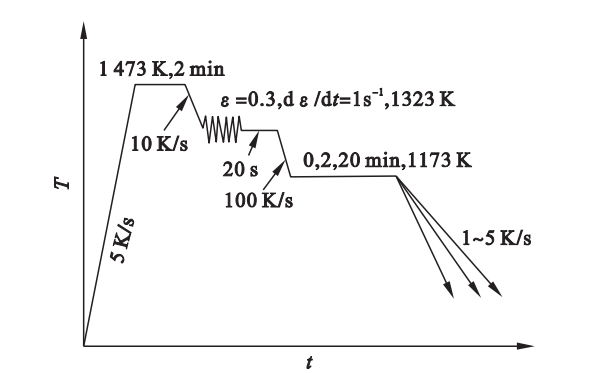


图 1 热模拟工艺图  
Fig. 1 Schematic diagram of heat treatment process

## 2 建模方法

### 2.1 Rios 建模方法

Rios 建模方法的基础是 JMAK 方程和可加性法则。JMAK 方程是描述等温相变动力学的半经验半理论模型:

$$X(t) = 1 - \exp[-k(T)t^n]. \quad (1)$$

其中:  $X$  为  $t$  时刻的相变分数;  $n$  和  $k(T)$  分别为代表形核位置的指数和代表长大速率的动力学参数。通过结合可加性法则,得

$$\int_0^{t_i} \frac{dt}{\pi(X_i, T)} = 1. \quad (2)$$

其中  $\pi(X_i, T)$  为在温度  $T$  下等温相变获得  $X_i$  相变分数所需时间,可实现连续冷却过程中任意时刻相变分数的预测:

$$X_i = 1 - \exp\left\{-\left[\frac{1}{q} \int_{A_{c3}}^{T_i} k(T)^{1/n} dT\right]^n\right\}. \quad (3)$$

其中:  $q$  为冷却速率;  $X_i$  为对应温度  $T_i$  的相变分数。Rios<sup>[6]</sup>从可加性法则出发,推导了从变温相变到等温相变转换的理论方法。本节将以 1 173 K 待温 20 min 后的连续冷却相变为例说明建模采用的方法。根据相变动力学数据,可以获得相变分数等值线图,如图 2 所示。根据 Rios 的推导,在任一温度  $T$  下,指数  $n$  可以通过  $\ln(\ln(1/(1-X)))$  与  $\ln q$  的线性拟合得出:

$$\ln\left(\ln\left(\frac{1}{1-X}\right)\right) = \ln(k(T)) + \ln\left(q(X_0, T)\left(\frac{\partial T}{\partial q}\right)_{X_0}\right)^n - n \cdot \ln q(X, T). \quad (4)$$

拟合结果见图 3,求得各温度下斜率的平均值,可得  $n$  为 1.34;在式(4)中设置  $X = X_0$ ,可得  $k(T)$  的计算公式为

$$k(T) = \ln(\ln(1/(1-X_0)))/((\partial T/\partial q)_{X_0})^n. \quad (5)$$

选取图 2 中的相变分数等值线,即  $X=0.1, 0.15, 0.2$  和  $0.24$ , 计算得到  $\ln k$  与温度的关系见图 4.

从图 4 可以看出,  $\ln k$  除了是  $T$  的函数外,与  $X$  也相关,即根据 Rios 方法的计算结果与其前提假设相矛盾.

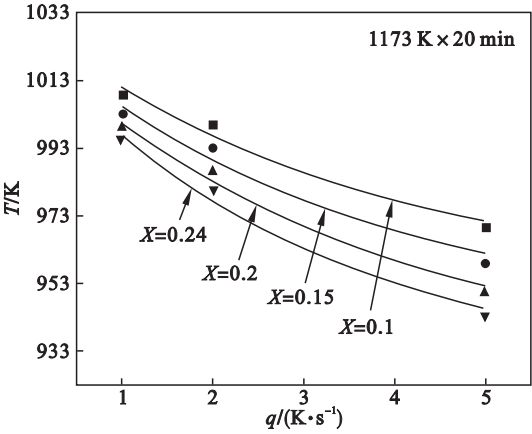


图 2 相变分数的等值线图  
Fig. 2 Contour plot of  $X(q, T)$

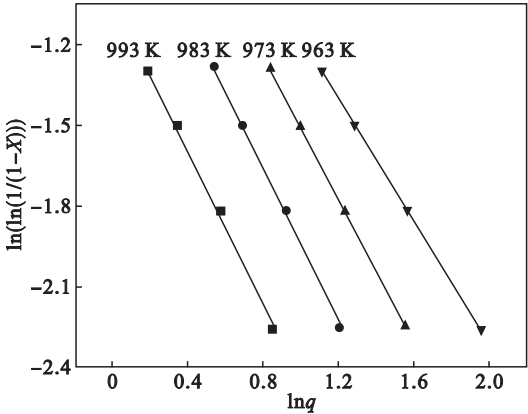


图 3  $\ln(\ln(1/(1-X)))$  与  $\ln q$  的线性拟合求  $n$  值  
Fig. 3 Linear fit of  $\ln(\ln(1/(1-X)))$  and  $\ln q$  to determine  $n$

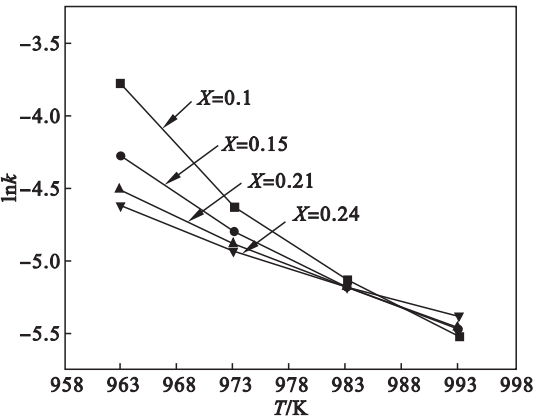


图 4 Rios 方法计算的  $\ln k$  与温度的关系  
Fig. 4 Relation between  $\ln k$  and temperature calculated by Rios' method

2.2 JMAK 模型的拓展

为此, JMAK 模型被拓展至更具一般性的情况,即  $\ln k = H(T) + L(X)$ ; 为了确定  $\ln k$  与  $T, X$  的函数关系,开发了一种新的建模分析方法<sup>[8]</sup>. 通过变换方程(3),可得

$$q[1 - \ln(1 - X_i)]^{\frac{1}{n}} = \int_{A_{c3}}^{T_i} k(X, T)^{\frac{1}{n}} dT. \quad (6)$$

预设  $n$ , 可得  $k(X, T)$  的计算公式为

$$k(X_i, T_i) = \left( \frac{I_i - I_{i-1}}{T_i - T_{i-1}} \right)^n. \quad (7)$$

其中  $I_i = q \cdot [1 - \ln(1 - X_i)]^{1/n}$ . 该方法被成功应用于 TRIP, CP 高强钢的连续冷却相变动力学建模<sup>[8]</sup>.

2.3 基于 Rios 推导的建模新方法

在 JMAK 模型的拓展中,指数  $n$  对  $k(X, T)$  具有很大的影响,但它的选择始终缺乏合理的依据. 在本文中,仍然以广泛应用的 JMAK 模型一般形式,即  $k = k(T)$  为出发点,采用方程(7),通过合理预设  $n$  可以获得  $\ln k$  仅为  $T$  的函数,如图 5 所示.

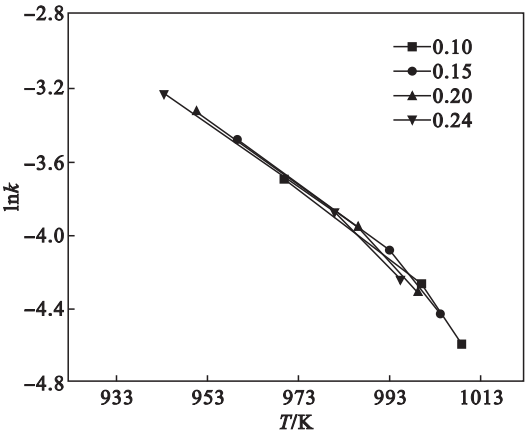


图 5 当  $n=1.1$  时  $\ln k$  与  $T$  的函数关系  
Fig. 5 Temperature dependence of  $\ln k$  using  $n=1.1$

采用抛物线方程可以很好地描述  $\ln k$  与  $T$  的关系:

$$\ln k = A(T - T_0)^2 + B. \quad (8)$$

其中  $A, T_0$  和  $B$  都是拟合参数. 通过以上步骤,建立了相变动力学模型,获得了动力学模型参数  $\ln k$  和  $n$ . 为了验证指数  $n$  的理论正确性,本文通过逆向应用 Rios 推导重构相变分数的等值线图,与实验结果(见图 2)进行对比. 首先,方程(9)是 Rios 方法的基础.

$$\tau(X_i, T) = \left( \frac{\partial T}{\partial q} \right)_{X_i}. \quad (9)$$

根据 JMAK 模型,  $\tau(X_i, T)$  也可以通过以下

方程计算,即：

$\pi(X_i,T)=\exp(A^*(T-T_0)^2+B^*)$ . (10)

其中：

$$\left. \begin{aligned} A^* &= -\frac{A}{n}, \\ B^* &= \frac{1}{n} \left( \ln \left( \ln \left( \frac{1}{1-X_i} \right) \right) - B \right). \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

结合方程(9)可得

$\left( \frac{\partial T}{\partial q} \right)_{X_i} = \exp(A^*(T-T_0)^2+B^*)$ . (12)

以上微分方程的解即为相变分数的等值线：

$\frac{1}{2} \left( \frac{\pi}{A^*} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \operatorname{erf}(\xi) = q \cdot \exp(B^*) + C$ . (13)

其中,  $\xi = \sqrt{A^*}(T-T_0)$  和  $\operatorname{erf}(\xi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^\xi \exp(-t^2)dt$ . 对于任一  $X_i$ ,  $C$  是个常数,并可通过  $(q,T)_{X_i}$  求得. 图 6 为重构的相变分数等值线与实验数据的对比,可以看出,两者误差绝对值在 10 K 以内.

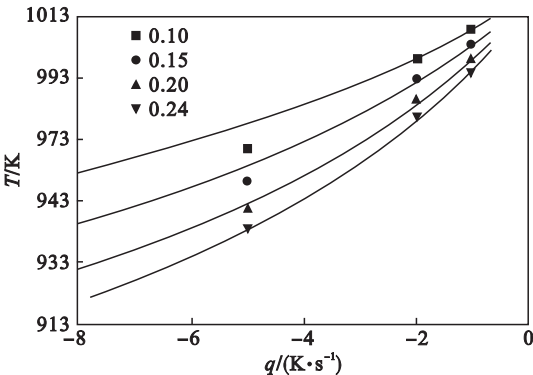


图 6 重构相变分数等值线与实验数据的对比  
Fig. 6 Comparison between reconstructed contour plot and experimental data

以上建模方法也被应用于 1 173 K 待温 0 和 2 min 后的连续冷却相变动力学建模式(8),模型参数如表 2 所示. 图 7 为动力学模型预测值(图中实线)与实验数据(图中符号)的对比,可以看出,模型获得了较好的预测精度.

表 2 1 173 K 待温 0, 2 和 20 min 后的相变动力学模型参数  
Table 2 Model parameters for phase transformation kinetics after holding at 1 173 K for 0, 2 and 20 min

保温时间/min	$A/K^{-2}$	$T_0/K$	$B$	$n$
0		857	-3.3	
2	$-1 \times 10^{-4}$	872	-3.25	1
20		885	-3.15	

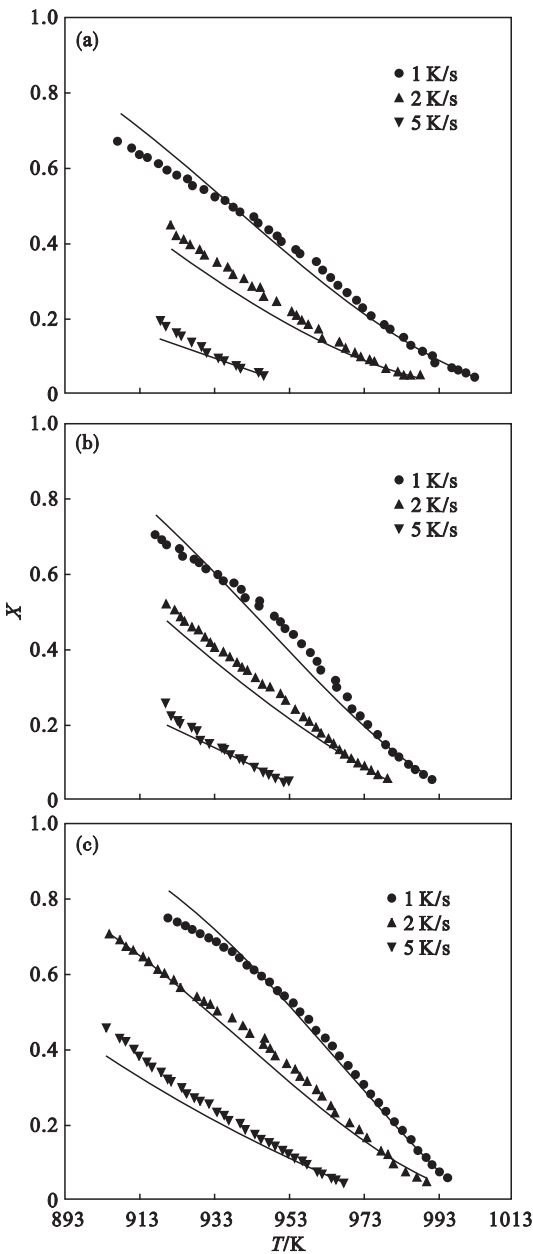


图 7 1 173 K 待温后相变动力学模型预测值与实测值对比  
Fig. 7 Comparison between measured and predicted ferrite transformation kinetics after holding at 1 173 K for different time  
(a)—0 min ; (b)—2 min ; (c)—20 min.

### 3 Nb% 对 $k(T)$ 的影响

Nb% 除了抑制铁素体、贝氏体相变,将其相变开始温度推迟至低温区之外,对相变动力学也有显著的影响. 本研究为含 Nb 钢相变速率的控制提供理论与实验的支撑.

Mecozzi<sup>[10]</sup>和 Takahama<sup>[11]</sup>等采用相场模型(phase field modeling)研究了 Nb 的固溶与析出对相界面迁移的作用,通过模拟不同加热温度后的相变动力学得到,Nb 以 NbC 析出态存在时对

相界面迁移的抑制作用比固溶 Nb 要大. 但至今为止, 相场模型仍然存在一个较大的缺陷, 即析出或固溶态的 Nb 对相界面的作用都只能考虑在有效界面迁移率  $M_{\text{eff}}$  中, 而在此模型框架应用于连续冷却相变动力学建模时  $M_{\text{eff}}$  始终表现出冷却速率的相关性<sup>[5]</sup>, 这与界面迁移率的物理定义相矛盾.

基于 JMAK 方程和可加性法则的动力学模型, 其应用前提是“位置饱和”, 即所有的铁素体晶粒在相变初始时刻已经形成, 相变速率由晶核的长大控制. 因此  $k$  是代表铁素体长大速率的动力学参数. 根据表 2 可知, 1 173 K 待温不同时间后的相变动力学指数  $n$  均为 1, 可认为铁素体形核位置不变; 而  $k$  随着待温时间的延长, 即固溶 Nb% 的减小而增大, 如图 8 所示. 这表明, 相变前 Nb 的析出加快了奥氏体向铁素体的相变速度, 即固溶 Nb 对相界面迁移具有较强的拖拽效应.

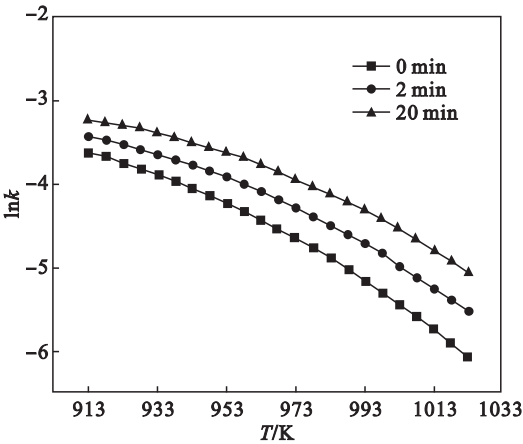


图 8 1 173 K 待温 0、2 和 20 min 后的相变动力学参数  $\ln k$  与  $T$  的关系  
Fig. 8 Temperature dependence of  $\ln k$  after holding at 1 173 K for 0, 2 and 20 min

4 结 论

1) 通过合理的热模拟实验设计, 获得了具有相同晶粒尺寸、不同 Nb% 的奥氏体, 然后连续冷却至室温, 相变动力学的差异完全归结于 Nb 在奥氏体中不同的存在形式, 即固溶或析出.  
2) 本文基于 JMAK 模型和可加性法则, 应用 Rios 方法的逆向推导, 开发了一种连续冷却相变动力学建模新方法.

3) 研究结果表明, Nb% 的析出对 JMAK 方程中代表铁素体形核位置的指数  $n$  没有影响, 而代表铁素体晶核长大速率的动力学参数  $k$  随着固溶 Nb% 的减少而增大, 即固溶 Nb 对相界面迁移具有较强的拖拽效应.

参考文献:

[ 1 ] Bradley J R, Aaronson H I. Growth kinetics of grain boundary ferrite allotriomorphs in Fe-C-X alloys [ J ]. *Metallurgical Transactions A*, 1981, 12( 10 ): 1729 – 1741.  
[ 2 ] Fossaert C, Rees G, Maurickx T et al. The effect of niobium on the hardenability of microalloyed austenite [ J ]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1995, 26( 1 ): 21 – 30.  
[ 3 ] Yuan X Q, Liu Z Y, Jiao S H et al. The onset temperature of  $\gamma$  to  $\alpha$ -phase transformation in hot deformed and non-deformed Nb micro-alloyed steels [ J ]. *ISIJ International*, 2006, 46( 4 ): 579 – 585.  
[ 4 ] Rees G I, Perdrix J, Maurickx T et al. The effect of niobium in solid solution on the transformation kinetics of bainite [ J ]. *Materials Science and Engineering A*, 1995, 194( 2 ): 179 – 186.  
[ 5 ] Mecozzi M G, Militzer M, Sietsma J, et al. The role of nucleation behavior in phase-field simulations of the austenite to ferrite transformation [ J ]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2008, 39( 6 ): 1237 – 1247.  
[ 6 ] Rios P R. Relationship between non-isothermal transformation curves and isothermal and non-isothermal kinetics [ J ]. *Acta Materialia*, 2005, 53( 18 ): 4893 – 4901.  
[ 7 ] Jia T, Liu Z Y, Yuan X Q, et al. Conversion between non-isothermal and isothermal transformation kinetics of  $\gamma$  to  $\alpha$  for C-Mn and Nb microalloyed steels [ J ]. *Materials Science and Technology*, 2007, 23( 7 ): 780 – 786.  
[ 8 ] Jia T, Militzer M, Liu Z Y. General method of phase transformation modeling in advanced high strength steels [ J ]. *ISIJ International*, 2010, 50( 4 ): 583 – 590.  
[ 9 ] Gerami S. Characterization and microstructural evolution model of a Nb ferrite-bainite steel [ D ]. Vancouver: University of British Columbia, 2010.  
[ 10 ] Mecozzi M G, Sietsma J, van der Zwaag S. Analysis of  $\gamma \rightarrow \alpha$  transformation in a Nb micro-alloyed C-Mn steel by phase field modelling [ J ]. *Acta Materialia*, 2006, 54( 5 ): 1431 – 1440.  
[ 11 ] Takahama Y, Sietsma J. Mobility analysis of the austenite to ferrite transformation in Nb microalloyed steel by phase field modeling [ J ]. *ISIJ International*, 2008, 48( 4 ): 512 – 517.