

电子枪加热合金熔池的数值分析

薄 勇 王德武 应纯同

(清华大学工程物理系, 北京 100084)

(2002 年 7 月 17 日收到, 2002 年 8 月 28 日收到修改稿)

利用数值方法求解了电子枪加热二维合金熔池的流体力学方程组, 获得了熔池流场的速度、温度和浓度分布. 并且详细地研究了各种特征参量(如雷诺数、普朗特数、格拉晓夫数和李斯特数)对合金熔池流动特性的影响, 一般地, 雷诺数和普朗特数越小、而格拉晓夫数和李斯特数越大, 则熔池中溶剂金属的蒸发速率就越大. 在此基础上提出参杂适当浓度的溶质金属可以提高某些难熔难挥发金属的蒸发速率, 计算中对参杂了钨、钽、锡和铬等金属的钍、铀、铪和钨等合金熔池进行了数值分析, 都相应提高了溶剂金属的蒸发速率.

关键词: 液态合金, 毛细流, 浮力流, 熔池

PACC: 4725Q, 7215C

1. 引 言

现代科技的许多领域都需要详细地了解合金熔池的流动特性, 如金属铸造^[1]、表面处理^[2]、晶体生长^[3]以及同位素分离^[4]等. 目前, 多数的研究都是针对纯金属或非金属的熔化或凝固现象^[5], 因此主要考虑由温度梯度驱动的表面毛细流和内部浮力流的影响. 而为了获得合金熔池的详细的流动特性, 还需要研究浓度梯度对毛细流和浮力流的影响^[6]. 尤其是在电子枪加热金属熔池中, 由于参杂其他金属元素导致流动特性的变化, 对蒸发速率会产生较大的影响. 本文采用动量、能量和浓度方程描述电子枪加热合金熔池的动力学过程, 详细地讨论了雷诺数、普朗特数、格拉晓夫数及李斯特数等特征参量对合金熔池中溶剂金属蒸发速率的影响, 在此基础上提出可以通过参杂某种金属元素来提高钍、铀、铪和钨等难熔难挥发金属的蒸发速率, 并研究了蒸发速率随参杂金属浓度的变化情况.

2. 合金熔池的数值模拟

电子枪加热长槽形坩埚中的合金, 可以选取熔池的矩形截面来研究金属的熔化与蒸发过程, 如图 1 所示. 坩埚中装有某种溶剂金属, 表面则有少量其他种类的溶质金属, 在电子束的作用下可以认为溶质金属全部熔化而溶剂金属部分熔化形成合金熔

池, 而坩埚外壁由循环水冷却. 如果合金的蒸发速率较小, 就可以在熔池内形成暂稳态的固液边界. 在熔池中, 由液态合金表面水平方向温度梯度和浓度梯度引起表面张力的变化, 驱动流体流动产生的毛细流速度较快, 而由液态合金内部垂直方向温度梯度和浓度梯度引起内部密度的变化, 驱动流体流动产生的浮力流速度较慢.

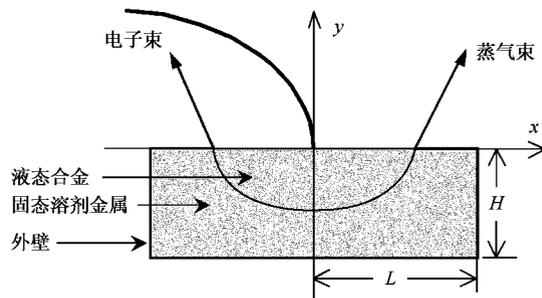


图 1 合金熔池的物理模型及坐标系

对液态合金作以下假设:

- 1) 认为液态合金为黏性不可压的牛顿流体, 流动为层流;
- 2) 液态合金密度采用 Boussinesq 近似, $\rho = \rho_0 [1 - \beta_t (T - T_0) - \beta_c (C - C_0)]$, 其中 β_t 和 β_c 分别为热膨胀系数和浓度膨胀系数, ρ_0 为温度 T_0 和浓度 C_0 时的合金密度;
- 3) 液态合金表面张力 $\sigma = \sigma_0 [1 - \sigma_t (T - T_0) - \sigma_c (C - C_0)]$, 其中 σ_t 和 σ_c 分别为温度表面张力系

数和浓度表面张力系数 σ_0 为温度 T_0 和浓度 C_0 时的合金表面张力；

4) 假设熔池在 z 向可视为无限长, 这样可以选取二维截面进行数值分析.

由熔池的物理模型和假设条件可以得到液态合金流动满足的无量纲化的流体力学方程组^[7]

$$U \frac{\partial \omega}{\partial x} + V \frac{\partial \omega}{\partial y} = \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) + \frac{Gr}{Re^2} \frac{\partial T}{\partial x} + \frac{Gc}{Re^2} \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (1)$$

$$U \frac{\partial T}{\partial x} + V \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{1}{RePr} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), \quad (2)$$

$$U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{1}{Le} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right), \quad (3)$$

$$U = -\frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad V = \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (4)$$

$$\omega = -\left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right), \quad (5)$$

式中 $A = H/L$ 为几何因子; U, V, ω, ψ, T 和 C 分别为流体的 x 向速度、 y 向速度、涡量、流函数、温度和溶质金属摩尔数百分比的无量纲量, 定义如下:

$$x = x'/L, \quad y = y'/H, \quad U = U'/V_0,$$

$$V = V'/AV_0, \quad V_0 = -\sigma_0(T_m - T_0)A/\mu,$$

$$\psi = \psi'/V_0L, \quad \tilde{\omega} = L\tilde{\omega}'/V_0,$$

$$T = (T' - T_0)/(T_m - T_0), \quad C = C', \quad (6)$$

6 个方程含有 6 个未知量: U, V, ω, ψ, T 和 C , 方程封闭. 特征参量包括雷诺数 Re , 普朗特数 Pr , 温度格拉晓夫数 Gr , 浓度格拉晓夫数 Gc 和李斯特数 Le , 定义如下:

$$Re = -\sigma_0(T_m - T_0)H/\mu\nu, \quad (7)$$

$$Gr = g\beta_1(T_m - T_0)L^3/\nu^2, \quad (8)$$

$$Gc = g\beta_c L^3/\nu^2, \quad (9)$$

$$Pr = \frac{\nu}{\chi}, \quad (10)$$

$$Le = -\sigma_0(T_m - T_0)H/\mu D, \quad (11)$$

式中 σ_1 为温度表面张力系数, μ 为动力黏性系数, ν 为运动黏性系数, χ 为热扩散系数, D 为质量扩散系数, g 为重力常量, T_m 和 T_0 分别为熔池中心最高温度和溶剂金属熔点温度.

由于存在固态溶剂金属坩埚, 需要给出无量纲化的固体热传导方程:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0. \quad (12)$$

边界条件:

1) 气液界面为自由表面, 法向速度、流函数、涡量、温度和浓度分别为

$$V = 0, \quad (13)$$

$$\psi = 0, \quad (14)$$

$$\omega' = -\left(\frac{\sigma_1}{\mu} \frac{\partial T'}{\partial x} + \frac{\sigma_c}{\mu} \frac{\partial C'}{\partial x} \right), \quad (15)$$

$$\lambda_1 \frac{\partial T'}{\partial n} = q_e - q_r - q_v = \frac{\gamma P_w}{b \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2b^2}\right) - \epsilon \sum (T^4 - T_s^4) - (E_{v1} + 2RT'/M_1)V_{rx1} - (E_{v2} + 2RT'/M_2)V_{rx2}, \quad (16)$$

$$\rho_2 D \frac{\partial C'}{\partial n} \frac{M_2}{M} = V_{rx2} = \delta P_2 \sqrt{M_2/2\pi RT'}. \quad (17)$$

(13)–(16) 式见文献 [8], 而公式 (17) 是由液面溶质向上蒸发与向内部扩散相平衡得到的. 其中 q_e, q_v 和 q_r 分别为表面 x 处单位长度上的电子枪输入功率、溶剂金属与溶质金属的蒸发热和液态合金表面的辐射热, λ_1 为液态合金的热传导系数; P_w 为单位长度上电子束功率; b 为电子枪半束宽; γ 为熔池对输入能量的吸收率; ϵ 为表面辐射系数; \sum 为 Stefan-Boltzmann 常数; T_s 为环境温度; n 表示液面的法向; V_{rx1}, V_{rx2} 分别为表面 x 处单位长度上的溶剂和溶质金属的蒸发速率; E_{v1}, E_{v2} 分别为溶剂和溶质金属的相变潜热; M_1, M_2 分别为溶剂和溶质金属的原子量; M 为折合原子量; R 为气体常量; δ 为蒸气中没有返回液面的百分数; ρ_2, P_2 分别为溶质金属的密度和饱和蒸气压.

2) 在熔池内部金属的固液界面上^[9]

$$U = V = \alpha \text{ (固壁无滑移条件)}, \quad (18)$$

$$\psi = \alpha \text{ (自由表面条件)}, \quad (19)$$

$$T = T_0 \text{ (} T_0 \text{ 为熔点)}, \quad (20)$$

$$\omega = -\frac{2\psi}{\Delta n^2}, \quad (21)$$

$$C = \alpha \text{ (溶剂为纯金属)}, \quad (22)$$

式中 Δn 表示固液界面法向的计算网格长度 (21) 式是由 ψ 的 Taylor 展开与 (5) 式加以推导得到的.

3) 在溶剂金属外壁设定为环境温度 T_s .

由于熔池左右对称, 可以只计算右半部分, 采用三阶迎风差分格式离散方程组进行数值求解. 其中, 浓度方程 (3) 与温度方程 (1) 的形式相同, 所以可以采用同样的数值差分法进行计算.

3. 计算结果与分析

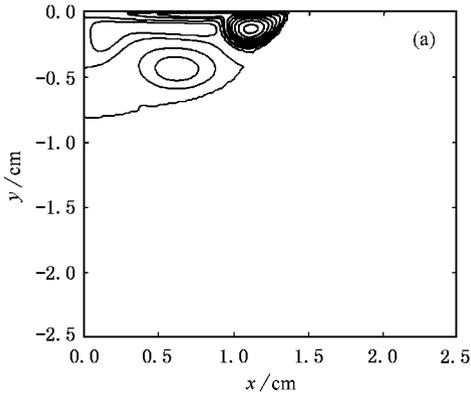
3.1. 合金熔池的特性分析

利用以上方程组和边界条件,对宽度为 5cm、深度为 2.5cm 坩埚中的钽铌合金熔池,在电子枪单位厘米长功率为 5kW,半束宽度为 3mm 的条件下,进行了计算分析,其中溶质铌的平均浓度为 1%,相应的熔池流场、浓度场以及熔池表面的温度与浓度分布如图 2 所示。

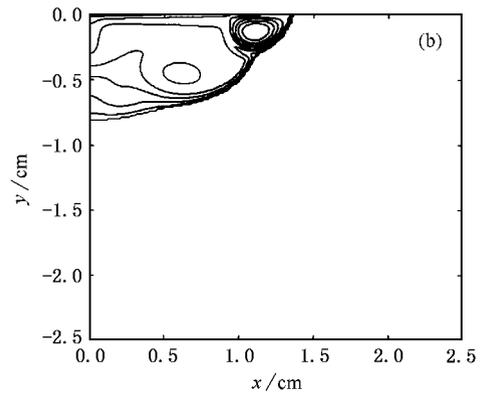
合金熔池的流场由表面毛细流、内部浮力流以及两者之间的二次环流组成,如图 2(a)所示。其中毛细流较强,流速从中心点的零速逐渐增加,到右侧固壁时达到最大值(约为 $40\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$)后,遇冷壁阻挡返回,形成回流区;而浮力流较弱(约为 $4\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$),形成稳定的环流。合金熔池的浓度场基本按照流场

的形状分布,如图 2(b)所示。这是由于质量扩散系数很小,溶质元素在液态钽中的扩散主要是对流扩散,所以浓度分布线与流线相似,尤其在熔池右上角的回流区,浓度梯度较大,浓度也较高。

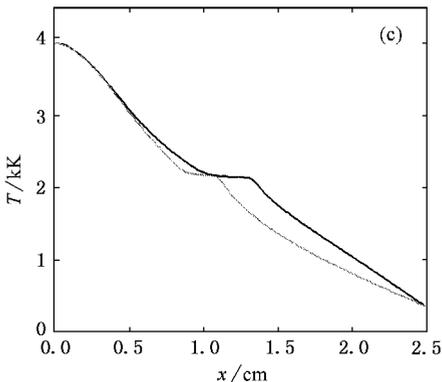
合金熔池的表面温度分布包括液态熔池和固态金属,如图 2(c)所示。其中液态熔池表面中心处由于受电子枪直接轰击温度最高(约为 4008K),随表面毛细流传热逐渐成曲线下降,在熔点处形成拐点,而后在固态金属表面接近线性下降。与纯金属熔池的表面温度分布(灰线所示)趋势基本一致,只是普遍温度更高,因此蒸发速率也更大。合金熔池的液面浓度分布如图 2(d)所示。溶质元素在液面中心的蒸发速率较高,使中心浓度较低(约为 0.05%),在熔池右上角的回流区温度较低,蒸发速率较少,溶质浓度较高(约为 1.16%),而到了固液界面,浓度陡降为零。



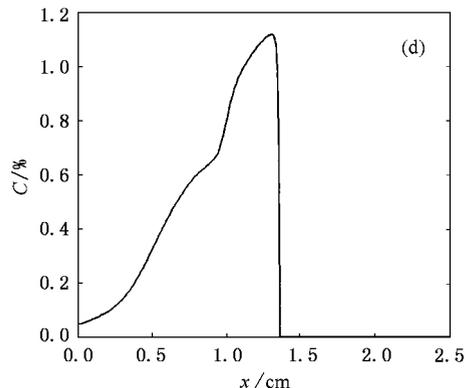
(a)为合金熔池的流场



(b)为合金熔池的浓度场



(c)为合金熔池的表面温度分布(灰线表示纯钽熔池)



(d)为合金熔池的表面浓度分布

图 2 合金熔池的物理特性

3.2. 各种特征参数对合金熔池的影响

在描述合金熔池流动的方程组中含有 5 个特征参量: 雷诺数 Re , 普朗特数 Pr , 温度格拉晓夫数 Gr , 浓度格拉晓夫数 Gc 和李斯特数 Le . 通过数值模拟分别研究了它们对合金熔池的溶剂蒸发速率 V_i 、中心温度 T_c 和液态熔池尺寸 ($W_l \times H_l$) 的影响, 如图 3—7 中所示. 其中 $Re_{C=1\%}$, $Pr_{C=1\%}$, $Gr_{C=1\%}$, $Gc_{C=1\%}$ 和 $Le_{C=1\%}$ 分别表示溶质平均浓度 1% 时的雷诺数、普朗特数、温度格拉晓夫数、浓度格拉晓夫数和李斯特数.

从图 3 和 4 中可以看出, 合金熔池中溶剂的蒸发速率随雷诺数 Re 和普朗特数 Pr 的减小而升高, 当 Pr 减小到原来 ($Pr_{C=1\%}$) 的 0.7 时, 溶剂的蒸发速率增加了大约 50%. 从图 5 和 7 中可以看出, 合金熔池中溶剂的蒸发速率随温度格拉晓夫数 Gr 、浓度格拉晓夫数 Gc 以及李斯特数 Le 的增大而有所增加, 但增加得较少. 因此, 要提高合金熔池中溶剂的蒸发速率, 需要减小 Re 和 Pr , 而增大 Gr , Gc 和 Le , 并且 Pr 和 Re 的影响更大一些. 而从它们的定义式 (7)—(11) 中可以看出, 这需要选择热扩散系数 χ 较大、热膨胀系数 β_l 和浓度膨胀系数 β_c 较大、表面张力系数 σ 较小、质量扩散系数 D 较小的掺杂溶质金属, 并且适当选择黏性系数. 而从液面传热平衡方程 (16) 和液面浓度平衡方程 (17) 中还可以看出, 掺杂的溶质金属的导热系数要小, 蒸发速率和蒸发潜热也要小.

3.3. 浓度变化对合金熔池的影响

溶质金属浓度对熔池的流场形状和温度分布以及溶剂金属的蒸发速率有重要的影响. 我们对宽度为 5cm, 深度为 2.5cm 坩埚中的钽钨合金熔池, 在电子束单位厘米长功率为 5kW, 半束宽度为 3mm 的条件下, 分别对不同平均浓度的合金熔池进行了计算分析, 其液态熔池尺寸、中心温度和溶剂蒸发速率的变化如表 1 所示, 溶剂钽的蒸发速率随浓度的变化如图 8 所示.

影响熔池蒸发速率的因素主要有表面温度分布和液态熔池宽度. 当溶质浓度从 0.0 增加到约 0.50% 时, 液态熔池宽度增加, 表面温度升高, 因此使溶剂金属的蒸发速率逐渐增加; 当溶质浓度继续增加时, 虽然液面宽度有所增加, 但表面温度却下降较多, 因此使溶剂金属的蒸发速率降低. 如图 8 所

示, 溶剂金属的蒸发速率随浓度的变化曲线上有一个极值点, 即存在一个最佳浓度值 (约为 0.50%) 使溶剂金属的蒸发速率达到最大 (约为 $143.1 \text{ mg} \cdot \text{s}^{-1}$), 相对于纯钽熔池的蒸发速率提高了约 7.5%. 对于不同的溶剂金属或者溶质金属, 这个最佳的溶质平均浓度值是不同的, 所获得的溶剂金属最大蒸发速率也是不同的.

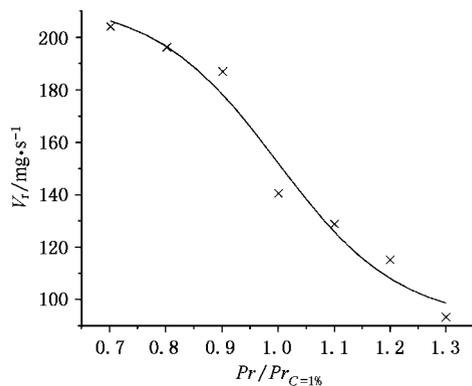


图 3 溶剂的蒸发速率与普朗特数 Pr 的关系

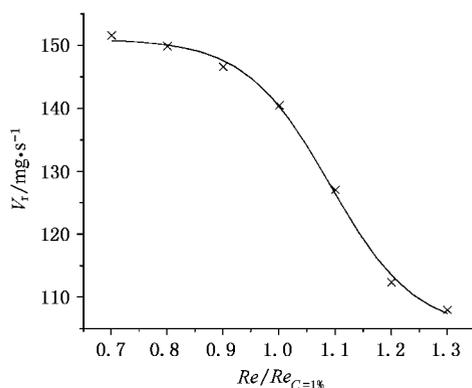


图 4 溶剂的蒸发速率与雷诺数 Re 的关系

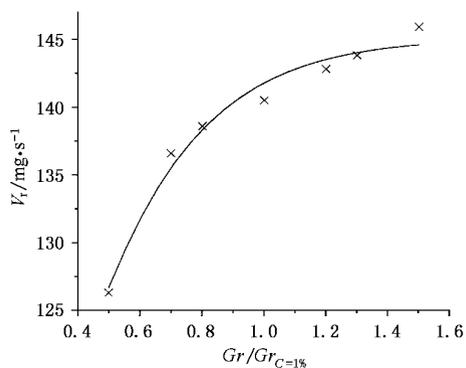


图 5 溶剂的蒸发速率与温度格拉晓夫数 Gr 的关系

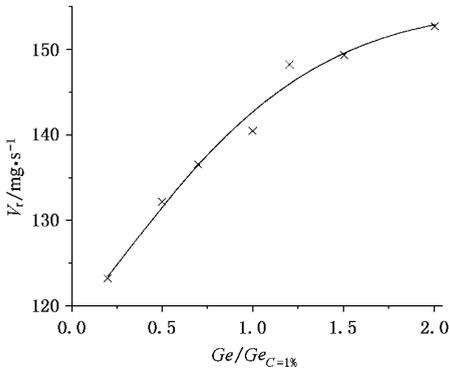
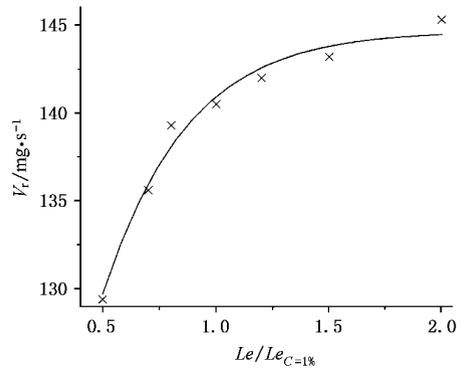
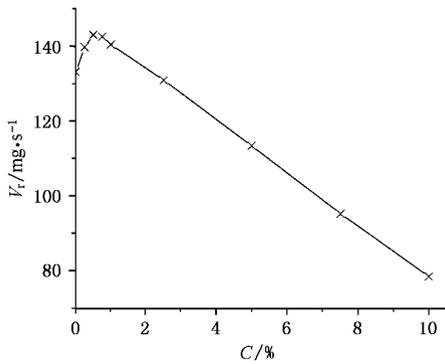
图6 溶剂的蒸发速率与浓度格拉晓夫数 G_c 的关系图7 溶剂的蒸发速率与李斯特数 Le 的关系

图8 溶剂的蒸发速率随溶质平均浓度的变化

表1 溶质浓度对合金熔池的影响

溶质平均浓度 $\bar{C}/\%$	中心温度 T_c/K	蒸发速率 $V_r/mg \cdot s^{-1}$	熔池半宽度 W_l/cm	熔池深度 H_l/cm
0.0	4005	133.2	1.16	0.70
0.25	4012	139.8	1.25	0.75
0.50	4014	143.1	1.33	0.79
0.75	4014	142.6	1.33	0.79
1.0	4008	140.5	1.38	0.81
2.5	4000	131.0	1.33	0.79
5.0	3974	113.4	1.30	0.79
7.5	3944	95.3	1.28	0.78
10.0	3906	78.6	1.19	0.76

3.4. 掺杂溶质金属对溶剂金属蒸发速率的影响

根据以上对溶质金属的特性与合金熔池中溶剂金属蒸发速率关系的分析,我们就可以选择合适的掺杂金属来提高难熔难挥发金属的蒸发速率.如表2中,对于难蒸发的金属铂 Pt、铱 Ir 和钌 Ru,通过适当掺杂金属钨 W、钽 Nd、锡 Sn 和铬 Cr,可以提高其蒸发速率.其中计算铂合金熔池时,其坩埚宽度为 3cm 深度为 1.5cm,电子束单位厘米长功率为 4kW、半束宽度为 3mm;计算铱合金熔池时,其坩埚宽度为 4cm 深度为 2cm,电子束单位厘米长功率为 10kW、半束宽度为 3mm;计算钌合金熔池时,其坩埚宽度为 6cm 深度为 3cm,电子束单位厘米长功率为 6kW、半束宽度为 3mm;而掺杂的溶质金属平均浓度皆为 1%,表2中“—”表示无掺杂的纯金属蒸发情况.

由表2中可以看出,对于某些金属熔池可以通过掺杂少量的其他金属来提高溶剂金属的蒸发速

率.这是由于掺杂金属的存在改变了流体的物理特征参量,如使 $(Re \times Pr)$ 减小、使 Gr 增大.其中掺杂金属钨 W 能使 $(Re \times Pr)$ 减小得最多,所以对溶剂蒸发速率的增加影响也最大,但是钨 W 的导热性较好,能使更多的热量散失,所以掺杂了钨 W 的液态合金熔池的体积变小了些;而掺杂金属钽 Nd 或锡 Sn 使 $(Re \times Pr)$ 减小得较少,但钽 Nd 和锡 Sn 的导热率较低,可以减少热量的散失,从而使掺杂了钽 Nd 或者锡 Sn 的金属熔池体积增大了,因此也使溶剂金属的蒸发速率增大,而掺杂金属铬 Cr 的导热率以及对 $(Re \times Pr)$ 减小的影响介于钨 W 和钽 Nd 或者锡 Sn 之间,因此掺杂了铬 Cr 的液态合金熔池体积也介于两者之间,也可以提高溶剂金属的蒸发速率.

因此,虽然在多数情况下掺杂金属对电子枪加热合金熔池中溶剂的蒸发不利,即在相同的条件下比纯金属的蒸发速率要降低些.但是通过选择导热率和 $(Re \times Pr)$ 都较小的溶质金属,并且掺杂到合适的浓度,是可以提高溶剂金属的蒸发速率.

表 2 溶质浓度对合金熔池的影响

溶剂金属	溶质金属	$Re/10^6$	$Pr/10^{-2}$	$Gr/10^7$	$Gc/10^7$	$Le/10^6$	中心温度 T_c/K	蒸发速率 $V_e/mg \cdot s^{-1}$	熔池半宽度 W_l/cm	熔池深度 H_l/cm
Pt	—	4.382	1.479	7.559	—	—	3182	11.4	0.61	0.36
	W	4.211	1.490	7.218	4.50	0.942	3223	12.7	0.69	0.40
Ir	—	5.408	1.202	7.111	—	—	3999	162.7	0.65	0.36
	W	5.241	1.213	6.906	4.32	0.926	4035	183.8	0.68	0.39
	Nd	5.410	1.208	7.152	38.60	0.440	3976	168.2	0.75	0.44
	Cr	5.199	1.243	6.762	38.00	0.098	3991	175.4	0.73	0.41
	—	14.35	1.272	3.741	—	—	3599	35.4	0.68	0.54
Ru	W	13.44	1.284	3.637	-56.46	3.184	3609	41.4	0.70	0.59
	Nd	14.27	1.280	3.802	31.82	1.154	3577	41.2	0.76	0.66
	Sn	14.31	1.261	3.793	31.08	1.101	3577	41.0	0.76	0.56
	Cr	13.45	1.324	3.573	34.09	0.426	3581	39.7	0.73	0.63

4. 结 论

本文详细地讨论了掺杂溶质金属对合金中溶剂金属蒸发速率的影响,主要获得以下的研究结果.

1)利用动量方程、能量方程和浓度方程,在给定的电子枪加热条件下,对二元合金熔池进行了数值模拟,获得了稳定的熔池流场、温度场和浓度场图像.

2)详细研究了各种物理特征参量对合金熔池的溶剂金属蒸发速率的影响.一般而言,雷诺数 Re 和

普朗特数 Pr 越小、温度格拉晓夫数 Gr 、浓度格拉晓夫数 Gc 和李斯特数 Le 越大,溶剂金属的蒸发速率就越大.因此适当掺杂一定的溶质金属,可以提高难挥发的溶剂金属的蒸发速率,并且溶质金属的掺杂浓度也存在一最佳值.

3)参照以上分析,适当选择了某些溶质金属(如钨 W、钕 Nd、锡 Sn 和铬 Cr 等)掺杂到某些难挥发的溶剂金属(如钍 Th、铂 Pt、铱 Ir 和钌 Ru 等)熔池中,数值模拟了溶剂金属蒸发速率增加的情况,并分析了掺杂金属的导热率及参量($Re \times Pr$)对溶剂金属蒸发速率的影响.

[1] Wee H K et al 1989 *Int. J. Mass Transfer* **9** 1765

[2] Srinivasan J and Basu B 1986 *Int. J. Heat Mass Transfer* **4** 563

[3] Pimpulkar S M and Ostrach S 1981 *J. Cryst. Growth* **55** 614

[4] McClelland M A 1995 *Int. J. for Numerical Methods in Fluids* **20** 603

[5] Basu B et al 1991 *Acta Metall Mater* **39** 725

[6] Jue T C 1999 *Heat and Mass Transfer* **35** 149

[7] Singh A K et al 1999 *Heat and Mass Transfer* **35** 39

[8] Bo Y, Wang D W and Ying C T 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1535 (in Chinese) [薄 勇、王德武、应纯同 2002 物理学报, **51** 1535]

[9] Xiao J X and Wang D W 1999 *J. Tsinghua Univ. (Sci. & Tech.)* **39** 56 (in Chinese) [肖踞雄、王德武 1999 清华大学学报(自然科学版) **39** 56]

Numerical analysis of alloy molten pool heated by electron gun

Bo Yong Wang De-Wu Ying Chun-Tong

(*Department of Engineering Physics , Tsinghua University , Beijing 100084 , China*)

(Received 17 July 2002 ; revised manuscript received 28 August 2002)

Abstract

The physical model for a square alloy molten pool heated by an electron gun is described by the Navier-Stokes , energy and species concentration equations . The velocity , temperature and concentration distributions of the two-dimensional pool are analyzed by the finite difference method . The relations between the metal solvent evaporation rate and Rayleigh number Re , Prandtl number Pr , Grashof number Gr and Lewis number are studied in detail . In general , the solvent evaporation rate increases with decreasing Rayleigh number , decreasing Prandtl number , increasing Grashof number and increasing Lewis number , so the power use ratio of the electron gun increases . On this basis , such metal solutes as wolfram , neodymium and chromium is intermingled to such involatile metal solvents as thorium , platinum , ytterbium and ruthenium , and the numerical results indicate that the metal solvent evaporation rate increases .

Keywords : liquified alloy , capillary flow , buoyancy flow ; molten pool

PACC : 4725Q , 7215C