

采用元胞自动机法模拟二元规则共晶生长*

吴孟武 熊守美†

(清华大学机械工程系, 汽车安全与节能国家重点实验室, 北京 100084)

(2010年7月6日收到; 2010年8月22日收到修改稿)

基于元胞自动机方法, 建立了二元规则共晶生长的数值模拟模型. 该模型耦合宏观温度场, 考虑了溶质扩散、成分过冷以及曲率过冷等重要因素, 实现了二元规则共晶的稳态层片生长. 以共晶模型合金为对象, 研究了定向凝固条件下不同过冷度、初始层片间距、温度梯度及凝固速率对共晶两相生长形貌及层片间距的影响, 再现了两相在溶质扩散及界面能的相互作用下通过形核、分岔、湮没及合并等机理实现共晶层片间距的调整. 模拟得到的结果与 Jackson-Hunt 模型及前人实验结果规律一致. 将模型扩展到三维系统, 验证了二元规则共晶生长三维模拟的可行性.

关键词: 规则共晶, 生长形貌, 层片间距, CA 方法

PACS: 81.30.Fb, 02.70.-c

1. 引言

共晶生长存在于许多重要结构材料和功能材料的液固相变中, 是凝聚态物理和材料科学领域的重要研究课题^[1,2]. 二元共晶生长涉及两个固态子相在一个液态母相中的竞争形核和协同生长, 是二元及多元合金系的一种基本凝固方式. 在相似条件下, 共晶凝固形成的微观组织特征尺寸(如共晶层片间距)比固溶体合金一次枝晶间距小, 因此共晶凝固组织通常缺陷少, 具有较好的综合性能; 特别是在制备自生复合材料方面, 具有重要的价值^[3]. 在共晶凝固组织中, 共晶两相的相对含量及层片间距对材料的性能具有重要的影响. 其中, 共晶两相的相对含量从某种程度上来说基本由合金成分来确定; 而两相凝固生长形貌及层片间距则受过冷度、温度梯度及凝固速率等工艺条件的影响^[4]. Jackson 和 Hunt^[5] 在单边模型框架下, 假设通量和温度的边界条件是整个界面取平均的结果, 建立了经典共晶凝固理论. 该理论系统地描述了共晶成分规则共晶层片的稳态生长, 并导出了共晶生长速率及界面平均过冷度与层片间距的关系模型. 随后,

以 JH 理论为基础, 共晶生长理论有了新的发展^[6-9], 使得理论适用范围更广, 同时更符合共晶凝固实验结果及实际情况.

近年来, 计算机数值模拟技术作为预测合金凝固过程中组织演变的有效工具, 得到了快速发展. 通过对共晶凝固过程的再现和组织特征的有效预测, 共晶生长模拟能够考察凝固界面局部微观动力学过程, 定量研究工艺参数对共晶组织的影响规律. 在微观组织模拟技术中, 相场法利用能量密度泛函统一处理各种复杂的热力学体系问题, 通过相场标量 ϕ 来区分固相和液相, 跟踪两相热力学状态的变化, 从而自动生成弥散的界面. 自 Steinbach 等人^[10] 提出多相场的概念后, 相场法已广泛的应用于模拟多元多相系统相变过程^[11-14]. 然而相场模型的界面厚度限制了其模拟尺度, 使得计算量较大, 效率较低; 同时为了缩短计算时间, 相场模型常采用高于常规工艺条件下的大过冷度, 对实际工艺凝固过程进行模拟预测较困难. 另外, 相场模型中, 界面厚度及相关动力学参数较难确定, 也限制了相场法的应用. 元胞自动机 (cellular automaton, CA) 方法以随机处理方法为手段, 同时结合形核物理机理和晶体生长动力学理论, 具有一定的物理基础, 能够在

* 国家科技重大专项 (批准号: 2009ZX04014-082), 国家高技术研究发展计划 (批准号: 2009AA03Z114) 和日本东洋机械金属株式会社国际合作项目 (批准号: 083000148) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: smxiong@tsinghua.edu.cn

微观尺度上刻画枝晶生长形貌;同时,耦合宏观温度场,CA方法能够在更大尺度上描述晶粒度及柱状晶-等轴晶转变(CET)等.因此,CA方法近年来发展较快,并在实际中获得了广泛的应用^[15-17].另外,采用CA方法,易于将模型扩展到多元多相及三维系统,计算效率较高;耦合宏观温度场,能够用于实际凝固过程的定性及定量模拟. Brown^[18]采用CA方法与有限差分相耦合建立了一种简单三维模型,用于模拟Pb-Sn合金共晶生长. Zhu等人^[19,20]基于改进CA方法,研究了不同工艺下规则及非规则共晶的生长,模拟结果与实验结果吻合较好. Ohsasa等人^[3]则通过模拟定向凝固条件下的共晶两相生长,将模拟结果与JH理论进行了比较.

基于以上论述,本文采用元胞自动机方法,建立二元规则共晶生长的数值模拟模型.耦合宏观温度场,从而实现二元规则共晶的稳态层片生长;同时,系统地研究定向凝固条件下不同过冷度、初始层片间距、温度梯度及凝固速率对共晶两相生长形貌及层片间距的影响,将模拟得到的结果与理论模型及前人实验结果进行比较.最后,将模型扩展到三维系统,对于理解三维条件下共晶生长过程中的形态演化具有重要的指导意义.

2. 模型与算法

2.1. 模型描述

针对非小平面-非小平面规则共晶 α, β 两相在共晶成分液相中的协同竞争生长,在CA模型中,将CA网格单元状态分为五种:0为液相单元,1为 α 液相界面单元,2为 β 液相界面单元,3为 α 固相单元,4为 β 固相单元.在每个微观时间步长内,CA单元各控制变量(溶质浓度、生长速率、固相率等)及状态值由共晶两相及液相溶质扩散方程及生长动力学方程控制更新.当 α 液相及 β 液相界面单元固相率达到1时,便转变为 α, β 固相单元,开始对周围的液相单元进行捕获.在二维情况下,本文规定当液相单元周围8个邻居单元中至少有3个单元为 α 固相单元时,则液相单元变为 α 液相界面单元;当液相单元周围8个邻居单元中至少有3个单元为 β 固相单元时,则液相单元变为 β 液相界面单元;否则,液相单元状态值保持不变. JH理论模型^[5]系统地描述了共晶成分规则共晶层片的稳态生长,并导

出了共晶生长速率及界面平均过冷度与层片间距的关系模型.该理论认为稳态层片生长行为在一定的层片间距范围内能够存在,且最小过冷度条件为层片共晶定向凝固生长的状态点.图1中, λ_m 为最小过冷层片间距,共晶层片间距在范围 $(\lambda_m - \lambda_M)$ 内能够稳定存在.当共晶层片间距小于 λ_m 时,虽然共晶层片间距减小有利于界面前沿溶质扩散,但此时共晶凝固导致界面能增大,共晶层片形态受毛细力的作用,使得共晶两相将通过湮没及合并机理以此调整共晶层片间距至稳态生长.当共晶层片间距大于 λ_M 时,此时 α 液相界面前沿溶质严重富集, β 液相界面前沿溶质严重匮乏,共晶层片间距将通过形核及分岔机理进行调整.

在本文模型中,为了考察共晶两相在溶质扩散及界面能的相互作用下通过形核、分岔、湮没及合并等机理实现共晶层片间距的调整,本文在计算共晶两相生长速率时,考虑了成分过冷以及曲率过冷等重要因素.另外,为了引入界面前沿共晶两相由于扩散不充分造成溶质富集及匮乏导致的形核及分岔机理,模型中定义了相关形核机理,下面将分别予以介绍.

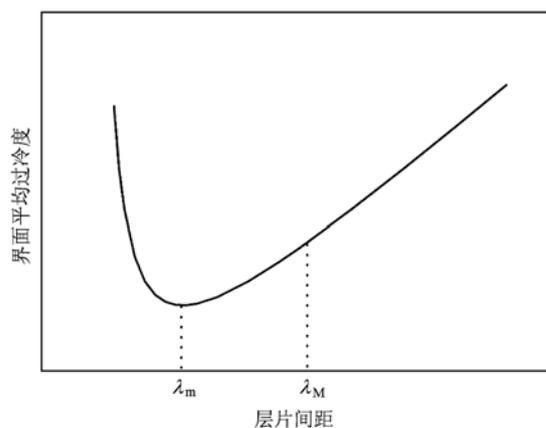


图1 层片间距与界面平均过冷度之间关系^[5]

2.2. 浓度场计算

本文中,假设溶质扩散只在宏观网格单元内部发生,即在边界条件的处理上采用封闭边界,认为宏观网格与外界无溶质交换,且不考虑对流对溶质场的影响.假设共晶凝固界面平衡,满足 $L \rightarrow \alpha(C_{\alpha 0}) + \beta(C_{\beta 0})$,同时不考虑固相中的溶质扩散,则二元共晶合金中液相溶质扩散方程为

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} = D_l \cdot \nabla^2 C_l + (C_l - C_{\alpha 0}) \times \frac{\partial f_{s,\alpha}}{\partial t} + (C_l - C_{\beta 0}) \frac{\partial f_{s,\beta}}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\delta f_s = \frac{v(t_n) \delta t}{l}, \quad (5)$$

式中, t 为时间, C_l, D_l 分别为单元液相溶质浓度和液相溶质扩散系数, $C_{\alpha 0}$ 及 $C_{\beta 0}$ 分别为共晶 α, β 两相溶质浓度, $f_{s,\alpha}, f_{s,\beta}$ 分别为单元 α, β 相固相分数. (1) 式等式右边第二项表示共晶凝固界面前沿由于 α 相固相分数增加排出溶质, 使得界面前沿溶质富集; 右边第三项表示由于 β 相固相分数增加吸收溶质, 使得界面前沿溶质匮乏. 本文中, 假设液相溶质扩散系数等热物性参数为常量, 不随温度等变化. 采用显示有限差分法对(1)式求解, 差分时间步长由液相溶质扩散系数及界面单元生长速率决定.

2.3. 生长动力学及固相分数的计算

采用与 Charbon^[21] 及 Zhu 等人^[19] 相同的方法计算规则共晶界面单元生长速率, 将界面单元生长速率表示为熔体过冷度的函数, 有

$$v = a \cdot \Delta T^2, \quad (2)$$

式中, v 为界面单元生长速率; a 为动力学生长因子, 本文中取值 10^{-5} m/sK^2 , 与文献^[19] 相同; ΔT 为界面单元过冷度, 由下式计算得到:

$$\Delta T(t_n) = T_E - T(t_n) + m_i \times [C(t_n) - C_E] - \Gamma_i \overline{K}_i(t_n), \quad (3)$$

式中, $\Delta T(t_n)$ 为 t_n 时刻界面单元过冷度; T_E 为共晶平衡凝固温度; $T(t_n)$ 为 t_n 时刻 CA 单元温度, 由宏观温度场插值得到; m_i 为液相线斜率, Γ_i 为 Gibbs-Thomson 系数, 对于 α, β 两相, m_i 及 Γ_i 取值不同, 且 $m_\alpha < 0, m_\beta > 0$; $\overline{K}_i(t_n)$ 为界面单元曲率. 本文忽略动力学过冷, 单元总过冷度由三部分构成, (3) 式等式右边第一、二项代表热过冷 ΔT_T , 第三项代表成分过冷 ΔT_C , 第四项代表曲率过冷 ΔT_r . 其中, 界面单元曲率采用计数法^[16] 进行计算, 有

$$\overline{K}_i = \frac{1}{\Delta s} \left(1 - 2 \frac{f_{s,i} + \sum_{j=1}^n f_{s,i}(j)}{n+1} \right), \quad (4)$$

式中, Δs 为 CA 单元网格步长; $f_{s,i}$ 及 $f_{s,i}(j)$ 分别为界面单元及周围邻近单元的固相率, 在二维情况下, 取 $n = 8$; (4) 式中, 对于 α, β 两相需分别计算曲率值.

液相单元由于形核及捕获转变为界面单元时, 单元固相率开始增加, 有

式中, δt 为微观时间步长; $v(t_n)$ 为 t_n 时刻界面单元生长速率; l 为固相单元中心至邻居界面单元中心距离, 本文采用冯·纽曼邻居单元定义方式, 因此 l 等于 CA 网格单元对角线长 $\sqrt{2}\Delta s$; δf_s 即为在 δt 时间内界面单元固相率增量. 当界面单元固相率 f_s 达到 1 时, 若界面单元为 α 液相界面单元, 则单元转变为 α 固相单元, 状态值为 3; 若界面单元为 β 液相界面单元, 则单元转变为 β 固相单元, 状态值为 4. 单元转变为固相单元后, 开始对周围的液相单元进行捕获.

2.4. 形核分岔机理的处理

为了考察共晶两相在溶质扩散及界面能相互作用下的生长形貌, 再现共晶两相通过形核、分岔、湮没及合并等机理实现层片间距的调整, 本文在生长动力学共晶两相生长速率计算时, 考虑了界面溶质富集或匮乏及曲率对过冷度的影响; 同时, 由于共晶两相界面前沿扩散不充分造成溶质富集或匮乏, 将可能导致共晶相在另一相界面凹坑处的形核及生长, 对此本文在 Zhu 等人^[19] 的基础上, 通过改进定义形核机理: 在 α 液相界面处, 当 $\overline{K}_\alpha(t_n) < 0$ 且 $C_l - C_E > \Delta C_{1,\text{def}}$ 时, β 相开始形核, 单元变为 β 液相界面单元; 在 β 液相界面处, 当 $\overline{K}_\beta(t_n) < 0$ 且 $C_E - C_l > \Delta C_{2,\text{def}}$ 时, α 相开始形核, 单元变为 α 液相界面单元. 对于本文中的共晶模型合金, 取 $\Delta C_{1,\text{def}} = 1.8$, $\Delta C_{2,\text{def}} = 1.5$.

3. 模拟结果及讨论

3.1. 不同过冷度下的共晶生长

以本文建立的二元规则共晶生长数值模型, 采用表 1 中的热物性参数, 模拟了共晶模型合金不同过冷度下的层片生长. CA 单元网格步长为 $0.5 \mu\text{m}$, 在 400×600 个 CA 单元底部按照共晶 α, β 两相体积分数交替种入 α, β 形核核心, 使得共晶两相的初始层片间距为 $50 \mu\text{m}$. 液相初始溶质浓度为共晶成分 C_E . 图 2 分别示出了熔体热过冷度 ΔT_T 恒为 $1.0 \text{ K}, 3.0 \text{ K}$ 及 10.0 K 时共晶两相的生长形貌. 其中, 白色区域代表共晶 α 相, 黑色区域代表共晶 β 相, 灰色区域代表液相及界面单元. 灰度越高, 代表

溶质浓度越高. 图 2(a) 中, 熔体过冷度较小, 共晶两相生长速率较慢, 使得溶质扩散较充分; 但由于共晶初始层片间距较大, 在共晶凝固界面前沿, 仍然出现溶质富集或匮乏. 当溶质富集或匮乏达到模型规定值时, 在共晶相的凹坑处将出现另一相的形核及生长. 图 2(b) 中, 由于熔体过冷度较大, 共晶两相生长速率较大, 共晶界面前沿溶质来不及扩散, 在共晶两相凝固开始不久, 即在界面处出现了 α, β 两相的形核, 使得共晶层片间距减小. 图 2(c) 中, 处于大过冷条件下的共晶两相层片间距迅速减小, 共晶两相生长形态由层片状向纤维状转变. 可以看到, 模拟得到的结果与 JH 理论模型保持一致. 过冷度越大, 共晶层片间距越小, 共晶两相通过形核及分岔机理调整共晶层片间距; 同时, 过冷度越大, 共晶两相生长速率越大, 在大过冷情况下共晶形态将由

层片状向纤维状转变.

表 1 共晶模型合金的各参数取值^[19]

参数及其物理意义	取值
共晶温度 T_E/K	356.0
共晶成分 $C_E/wt\%$	8.4
α 相溶质浓度 $C_{\alpha 0}/wt\%$	5.08
β 相溶质浓度 $C_{\beta 0}/wt\%$	16.18
α 相体积分数 f_α	0.676
β 相体积分数 f_β	0.324
α 相液相线斜率 $m_\alpha/K \cdot (wt\%)^{-1}$	-0.5
β 相液相线斜率 $m_\beta/K \cdot (wt\%)^{-1}$	0.5
液相溶质扩散系数 $D_l/m^2 \cdot s^{-1}$	1.0×10^{-9}
α 相 Gibbs-Thomson 系数 $\Gamma_\alpha/m \cdot K$	1.5×10^{-7}
β 相 Gibbs-Thomson 系数 $\Gamma_\beta/m \cdot K$	1.5×10^{-7}

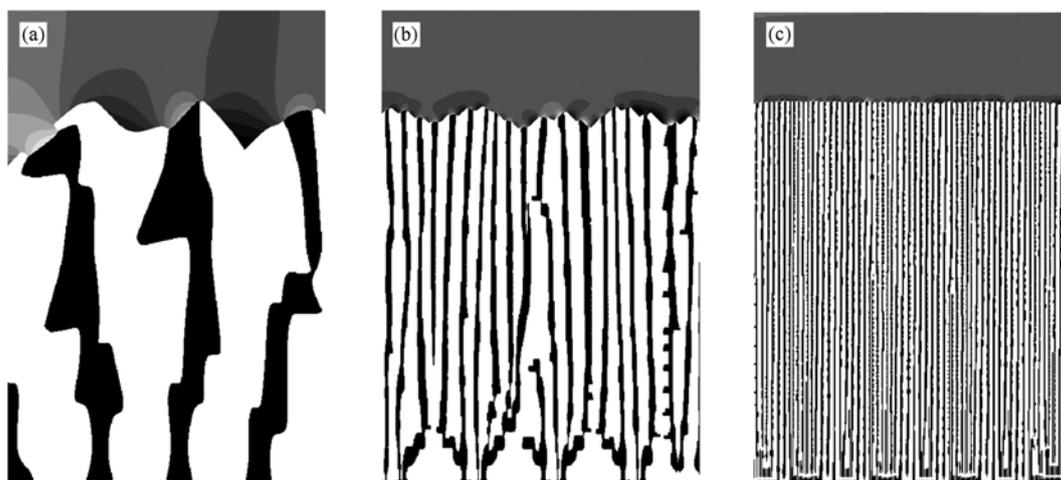


图 2 不同过冷度下的共晶生长 (a) $\Delta T_T = 1.0 K$; (b) $\Delta T_T = 3.0 K$; (c) $\Delta T_T = 10.0 K$

图 3 所示为热过冷度恒为 1.0 K, 共晶两相总固相率为 0.38 时生长形貌及界面前沿成分分析. 图 3(a) 中直线 A-A 及 B-B 分别为对 α 相及 β 相界面前沿垂直方向成分分析, 直线 C-C 为对两相界面前沿水平方向成分分析. 图 3(b) 中, 可以看出, α 相界面前沿溶质富集, β 相界面前沿溶质匮乏; 离开界面前沿一定距离, 液相单元溶质浓度趋于均匀, 但浓度值略高于共晶成分 (图中虚线即代表共晶成分). 分析原因, 虽然初始时按照共晶两相体积分数设置形核核心, 但在两相生长过程中, 由于波动使得已凝固 α 相体积分数高于理论值; 而 α 相生长的过程中存在溶质的排出, 因此出现远离界面前沿液相溶质浓度略高于初始共晶成分的情况. 图 3(c) 中, 可以看到, 水平方向从 β 相界面前沿到 α 相界面前沿

溶质浓度逐渐升高, 由匮乏到富集; 图中溶质浓度曲线最低点对应直线 C-C 离 β 相最近点.

3.2. 不同初始层片间距下的共晶生长

为了研究一定工艺条件下的共晶层片稳态生长及对应的层片间距, 本文模拟了定向凝固不同初始层片间距下的共晶生长. 仍然采用表 1 中的热物性参数 (下同), 设置底部 CA 单元初始温度为共晶温度 T_E , 计算区域 y 方向存在正的温度梯度 $G_L = 10 K/mm$, 且以 $C_R = 0.2 K/s$ 的冷却速率进行冷却, 则共晶定向凝固速率 $V = 20 \mu m/s$. 模型中, CA 单元网格步长为 $0.2 \mu m$, 在 CA 单元底部仍然按照共晶两相的体积分数交替种入形核核心, 使得初始层片间距分别为 $5 \mu m, 12 \mu m, 20 \mu m$ 及 $25 \mu m$. 其中, 在

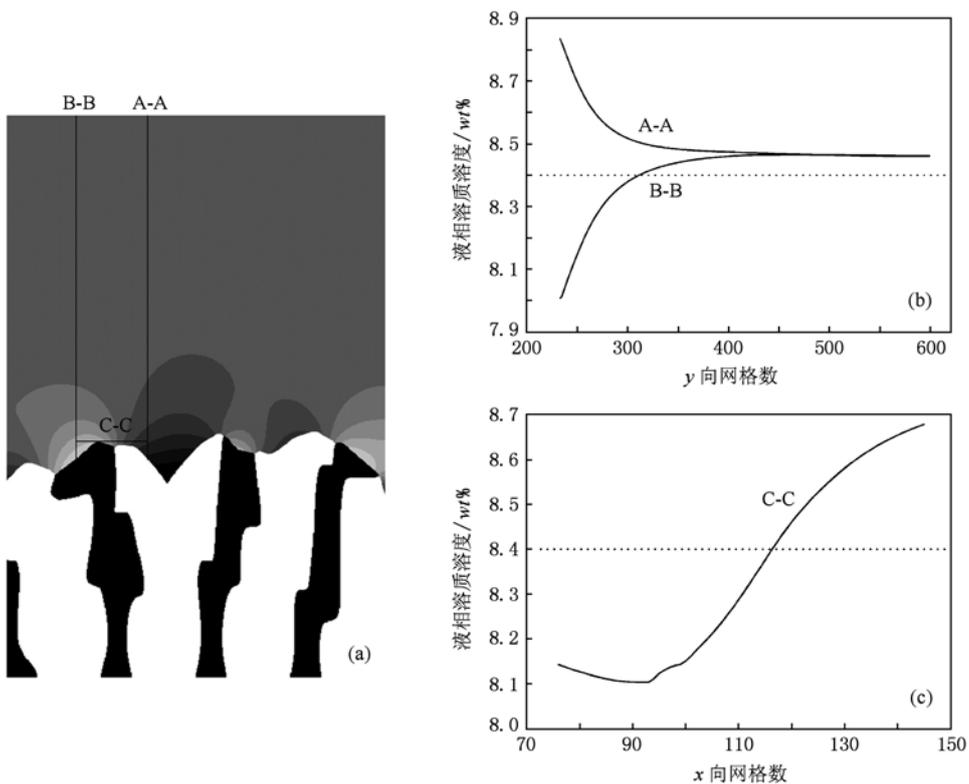


图3 热过冷度 $\Delta T_T = 1.0$ K, 共晶总固相率为 0.38 时的生长形貌及界面前沿成分分析 (a) 生长形貌; (b) 界面前沿垂直方向成分分析; (c) 界面前沿水平方向成分分析

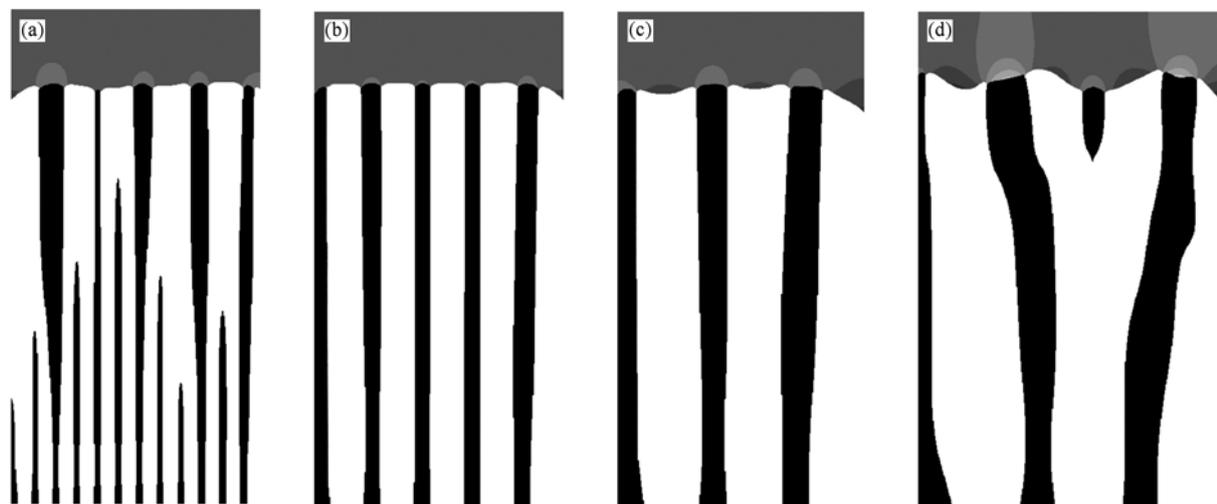


图4 不同初始层片间距下的共晶生长 (a) 5 μm ; (b) 12 μm ; (c) 20 μm ; (d) 25 μm

设置初始层片间距为 5 μm , 12 μm 及 20 μm 时, 取 CA 单元网格数 300×600 ; 设置初始层片间距为 25 μm 时, 取 CA 单元网格数 375×600 . 图 4(a) 中, 可以看到, 在初始层片间距为 5 μm 的情况下, 由于初始层片间距小于最小过冷层片间距 λ_m , 虽然共晶界面前沿溶质扩散较充分, 但此时共晶两相界面能

较大, 使得共晶两相通过湮没及合并机理调整共晶层片间距. 图 4(b) 中, 共晶两相呈现规则稳态生长形态, 界面前沿溶质扩散与界面能保持平衡, 两层片间距保持不变. 图 4(c) 中, 在初始层片间距为 20 μm 的情况下, 共晶两相仍然呈现规则稳态生长, 但此时界面前沿已经存在一定的溶质富集或匮乏.

继续增大初始层片间距至 $25\ \mu\text{m}$, 共晶界前沿溶质的富集或匮乏导致了共晶相在另一相的凹坑处的形核及生长; 此时初始层片间距已经超过了此种工艺条件下共晶模型合金的最大层片间距 λ_M , 共晶两相通过形核及分岔机理调整共晶层片间距. 可以看到, 模拟结果与 JH 理论模型保持一致, 共晶两相通过溶质扩散及界面能的相互作用调整共晶层片间距至稳态生长, 层片间距在一定范围 ($\lambda_m - \lambda_M$) 内能够稳定存在. 本文通过进一步的模拟其他不同初始层片间距及扩大计算区域至共晶两相呈现稳态生长, 得到上述工艺条件下共晶模型合金的稳态层片间距范围为 $12 - 22\ \mu\text{m}$.

3.3. 不同温度梯度下的共晶生长

采用本文建立的二元规则共晶生长数值模型,

模拟了定向凝固不同温度梯度下的共晶生长. 模型中, CA 单元网格步长为 $0.2\ \mu\text{m}$, 单元网格数为 300×600 . 共晶定向凝固速率 V 固定为 $20\ \mu\text{m/s}$, 设置共晶初始层片间距为 $5\ \mu\text{m}$, 底部 CA 单元初始温度为共晶温度 T_E . 图 5 所示为温度梯度 G_L 分别为 $80\ \text{K/mm}$, $40\ \text{K/mm}$, $10\ \text{K/mm}$ 时共晶两相生长形貌. 为了保持共晶凝固速率 V 恒定, 对应的冷却速率 C_R 分别为 $1.6\ \text{K/s}$, $0.8\ \text{K/s}$, $0.2\ \text{K/s}$. 图 5 (a) 中, 共晶两相呈现规则稳态生长形态, 两相层片间距保持不变. 图 5 (b) 及 (c) 中, 随着温度梯度的不断减小, 共晶两相通过湮没及合并机理调整共晶层片间距, 使得两相层片间距越来越大. 可以看到, 模拟得到的结果与 Cadirli 等人^[22] 基于 Pb-Sn 共晶实验结果规律一致, 温度梯度越小, 共晶层片间距越大.

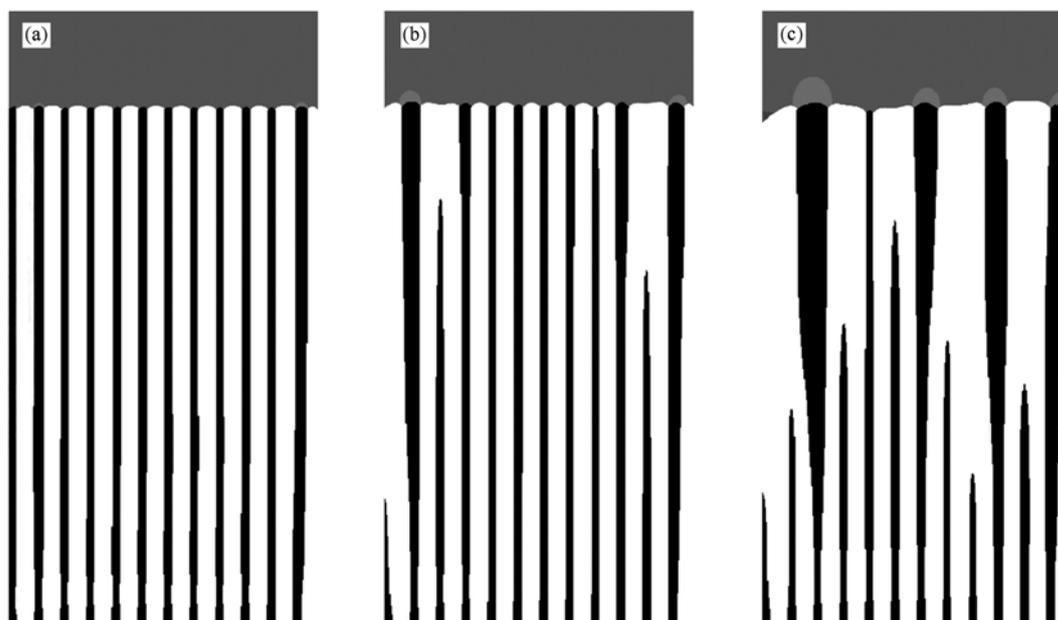


图 5 不同温度梯度下的共晶生长 (a) $80\ \text{K/mm}$; (b) $40\ \text{K/mm}$; (c) $10\ \text{K/mm}$

3.4. 不同凝固速率下的共晶生长

JH 理论模型^[5] 导出了共晶生长速率及界面平均过冷度与最小过冷层片间距的关系模型, 该模型认为生长速率越大, 共晶层片间距越小, 且二者之间满足 $\lambda_m^2 V = K_2 / K_1 = \text{const}$, 其中 K_1, K_2 与材料热物性参数有关. 为此, 本文模拟了定向凝固不同凝固速率下的共晶生长, 将模拟得到的结果与理论模型进行比较. 模型中, CA 单元网格步长为 $0.2\ \mu\text{m}$, 单元网格数为 300×600 . 设置底部 CA 单元初始温度

为共晶温度 T_E , 定向凝固温度梯度 G_L 固定为 $10\ \text{K/mm}$, 共晶初始层片间距为 $12\ \mu\text{m}$. 如图 6 所示为共晶凝固速率 V 分别为 $20\ \mu\text{m/s}$, $60\ \mu\text{m/s}$, $100\ \mu\text{m/s}$ 时共晶两相的生长形貌, 此时对应的冷却速率 C_R 分别为 $0.2\ \text{K/s}$, $0.6\ \text{K/s}$, $1\ \text{K/s}$. 图 6 (a) 中, 共晶两相呈现规则稳态生长形态, 界面前沿溶质扩散与界面能保持平衡, 两相层片间距保持不变. 图 6 (b) 及 (c) 中, 随着凝固速率的不断增大, 共晶界面前沿溶质来不及扩散, 使得共晶两相通过形核及分岔机理调整共晶层片间距, 两相层片间距越来越小. 可以

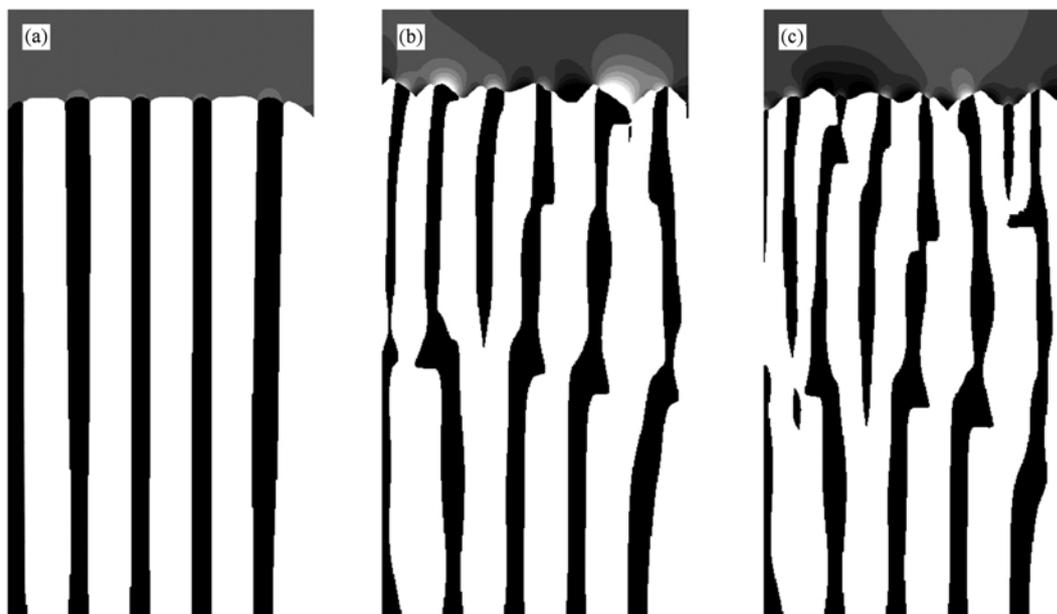


图6 不同凝固速率下的共晶生长 (a) 20 μm/s; (b) 60 μm/s; (c) 100 μm/s

看到,模拟结果与 JH 理论模型保持一致,共晶生长速率越大,层片间距越小.

为了定量研究共晶两相生长速率与层片间距的关系,本文进一步的模拟了其他不同凝固速率下共晶两相生长.通过本文 3.2 节的方式,得到了不同凝固速率下共晶模型合金的稳态层片间距范围,如图 7 所示.其中,共晶两相生长速率由两种方式得到:一种是直接通过定向凝固速率 $V = C_R/G_L$ 得到,另外一种则在模型中通过记录共晶两相稳态生长至一定距离所需要的时间计算得到.通过比较,两种方式得到的共晶生长速率差别较小.从图 7 中可以看出,共晶两相生长速率越大,层片间距越小,同时稳态层片间距范围也越小.通过对最小层片间距 λ_m 与共晶生长速率 V 的曲线拟合,两者近似满足

$\lambda_m = 49.1849V^{-0.47945}$, 即 $\lambda_m^2 V^{0.9589} = 2.42 \times 10^3 \mu\text{m}^3/\text{s}$. 可以看到,拟合的结果与 JH 理论模型关于共晶生长速率与最小层片间距关系的结论基本相同.

3.5. 三维共晶生长

相对于二维模拟而言,三维模拟能够更精确地再现共晶两相各向异性生长情况,对于理解三维条件下共晶合金实际生长过程的形态演化规律具有重要的指导意义.本文将模型扩展到三维空间,模拟了定向凝固不同凝固速率下的三维共晶生长情况.在金属-金属规则共晶生长中,当两相体积分数相近,即一相的体积分数在 $1/\pi - 1/2$ 之间时,两相均以层片状结构出现;当一相的体积分数小于 $1/\pi$ 时,该相将以棒状结构出现.本文共晶模型合金中, β 相体积分数 f_β 为 0.324, 在 $1/\pi - 1/2$ 之间,因此共晶两相将以层片状形式生长.模型中,CA 单元网格步长 0.2 μm,单元网格数为 $150 \times 150 \times 150$,沿着 X 方向设置共晶两相初始层片间距为 5 μm.设置 Z 方向底部 CA 单元初始温度为共晶温度 T_E ,沿着 Z 方向温度梯度 G_L 为 80 K/mm.如图 8 所示为共晶两相在凝固速率 V 分别为 20 μm/s, 12.5 μm/s, 5 μm/s 时的三维生长形貌及沿着 Y 方向中心 $Y = 75$ 处所做的二维剖面.此时对应的冷却速率 C_R 分别为 1.6 K/s, 1.0 K/s, 0.4 K/s.从图 8(a) 及 (d) 中可以看出,共晶两相沿着 Z 方向呈现规则稳态层片生

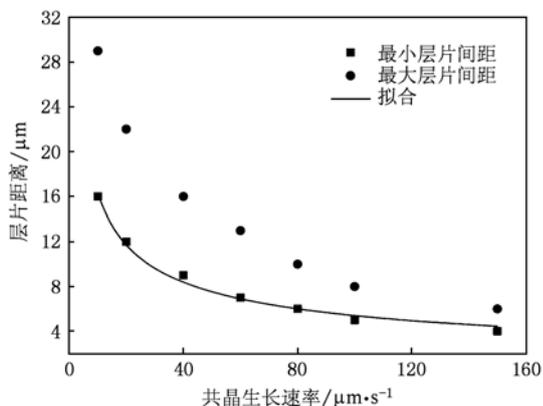


图7 不同凝固速率下的共晶稳态层片间距范围

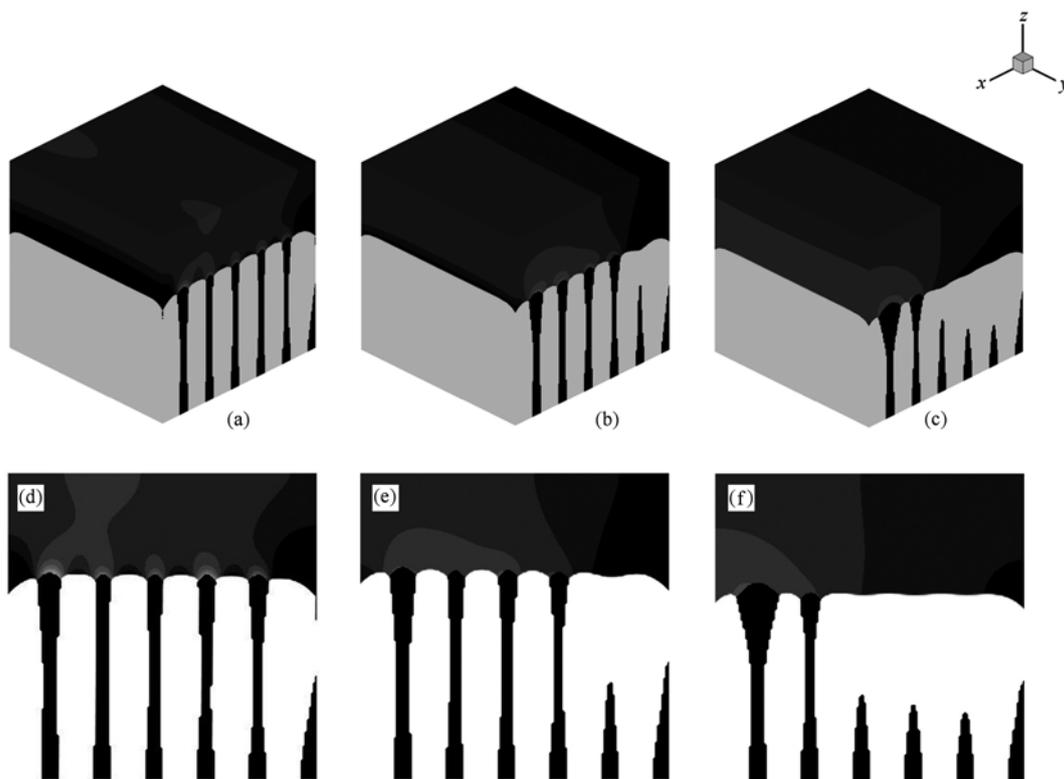


图8 不同凝固速率下的共晶三维生长形貌及沿着Y方向中心 $Y = 75$ 处的二维剖面 (a), (d) $20 \mu\text{m/s}$; (b), (e) $12.5 \mu\text{m/s}$; (c), (f) $5 \mu\text{m/s}$

长,共晶层片间距基本不变.图8(b),(c)及(e),(f)中,随着凝固速率的不断减小,共晶两相通过湮没及合并机理使得层片间距越来越大.将图8(a)及(d)与图5(a)相同工艺下共晶生长进行比较,共晶三维模拟得到的层片间距与二维模拟结果相近,验证了将模型扩展到三维生长的能力.

4. 结 论

本文基于元胞自动机方法,建立了二元规则共晶生长的数值模拟模型.模型通过考虑溶质扩散、成分过冷、曲率过冷以及在共晶界前沿引入形核机理等实现了共晶两相在溶质扩散及界面能的相互作用下的稳态层片生长.采用本文建立的模型,系统地研究了定向凝固条件下不同过冷度、初始层

片间距、温度梯度及凝固速率对两相生长形貌及共晶层片间距的影响.模拟结果表明:过冷度及温度梯度越大,共晶层片间距越小;共晶生长速率越大,层片间距也越小,且稳态层片间距范围也越小;当共晶初始层片间距小于最小层片间距时,两相将通过湮没及合并机理调整层片间距;当共晶初始层片间距大于最大层片间距时,两相将通过形核及分岔机理调整层片间距;在定向凝固温度梯度 G_L 为 10 K/mm 时,得到的共晶模型合金最小层片间距 λ_m 与共晶生长速率 V 近似满足关系式 $\lambda_m^2 V^{0.9589} = 2.42 \times 10^3 \mu\text{m}^3/\text{s}$;模拟得到的结果与JH理论模型及前人共晶实验结果规律一致.将模型扩散到三维情况,共晶三维模拟得到的结果与二维模拟相似,验证了将模型扩展到共晶三维生长的能力.

- [1] Rosa C D, Park C, Thomas E L, Lotz B 2000 *Nature* **405** 433
 [2] Coriell S R, McFadden G B, Mitchell W F, Murray B T, Andrews J B, Arikawa Y 2001 *J. Cryst. Growth* **224** 145
 [3] Himemiya T, Ohsasa K, Saga T 2010 *Mater. Trans.* **51** 110
 [4] Seetharaman V, Trivedi R K 1988 *Metall. Trans. A* **19** 2955

- [5] Jackson K A, Hunt J D 1966 *Trans. Metal. Soc. AIME* **236** 1129
 [6] Donaghey L F, Tiller W A 1968 *Mater. Sci. Eng.* **3** 231
 [7] Magnin P, Trivedi R 1991 *Acta Metall. Mater.* **39** 453
 [8] Ma D, Jie W Q 1996 *Acta Metall. Sin.* **32** 791 (in Chinese)

- [马东、介万奇 1996 金属学报 **32** 791] *Acta Phys. Sin.* **58** 2797 (in Chinese) [杨玉娟、王锦程、张玉祥、朱耀产、杨根仓 2009 物理学报 **58** 2797]
- [9] Akamatsu S, Plapp M, Faivre G, Karma A 2002 *Phys. Rev. E* **66** 030501
- [10] Steinbach I, Pezzolla F 1999 *Physica D* **134** 385
- [11] Kim S G, Kim W T, Suzuki T, Ode M 2004 *J. Cryst. Growth* **261** 135
- [12] Folch R, Plapp M 2003 *Phys. Rev. E* **68** 010602
- [13] Zhu Y C, Wang J C, Yang G C, Yang Y J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5542 (in Chinese) [朱耀产、王锦程、杨根仓、杨玉娟 2007 物理学报 **56** 5542]
- [14] Yang Y J, Wang J C, Zhang Y X, Zhu Y C, Yang G C 2009
- [15] Gandin C A, Rappaz M 1994 *Acta Metall. Mater.* **42** 2233
- [16] Nastac L 1999 *Acta Mater.* **47** 4253
- [17] Wang W, Lee P D, Mclean M 2003 *Acta Mater.* **51** 2971
- [18] Brown S G R 1998 *J. Mater. Sci.* **33** 4769
- [19] Zhu M F, Hong C P 2002 *Phys. Rev. B* **66** 155428
- [20] Zhu M F, Hong C P 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 1555
- [21] Charbon C, LeSar R 1997 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **5** 53
- [22] Cadirli E, Gündüz M 2000 *J. Mater. Process. Tech.* **97** 74

Modeling of regular eutectic growth of binary alloy based on cellular automaton method^{*}

Wu Meng-Wu Xiong Shou-Mei[†]

(State Key Laboratory of Automobile Safety and Energy, Department of Mechanical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 6 July 2010; revised manuscript received 22 August 2010)

Abstract

Based on cellular automaton method, a numerical model was developed for the regular eutectic growth of binary alloy. By coupling with the macro-temperature field and considering the solute diffusion, the constitutional undercooling and the curvature undercooling, modeling of the steady-state lamellar eutectic growth was achieved. A systematic investigation on eutectic growth morphology and lamellar spacing of a model alloy was made under unidirectional solidification conditions with different undercoolings, initial lamellar spacings, temperature gradients and solidification rates. The results reproduced the adjustment of lamellar spacing of two eutectic phases under the interaction between solute diffusion and surface energy by mechanisms of nucleation, lamellar branching, lamellar termination and overgrowth. The simulated results were in agreement with those predicted by the Jackson-Hunt model and experimental results by other researchers. Finally, the model was extended to three dimensional systems, which verified its feasibility of modeling the three-dimensional eutectic growth.

Keywords: regular eutectic, growth morphology, lamellar spacing, cellular automaton method

PACS: 81.30.Fb, 02.70.-c

^{*} Project supported by the National Science and Technology Major Project of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. 2009ZX04014-082), the National High Technology Research and Development Program of China (Grant No. 2009AA03Z114) and Toyo Machinery & Metal Co., Ltd. (Grant No. 083000148).

[†] Corresponding author. E-mail: smxiong@tsinghua.edu.cn