

界面动力学对过冷熔体中球晶生长界面形态的影响*

陈明文¹⁾ 倪 锋¹⁾ 王艳林²⁾ 王自东^{3)†} 谢建新³⁾

1) (北京科技大学数学力学系, 北京 100083)

2) (方大特钢科技股份有限公司, 南昌 330012)

3) (北京科技大学材料加工与控制工程系, 北京 100083)

(2009年11月7日收到; 2010年9月14日收到修改稿)

考虑了在非平衡凝固条件下球晶生长过程中界面动力学系数随界面温度的变化, 利用渐近分析方法求出了在过冷熔体中球晶生长温度场和界面的近似解析解, 研究了非线性界面动力学过冷对于过冷熔体中球晶界面形态和生长速度的影响. 研究表明, 界面动力学系数越大, 球晶的生长速度越快; 反之, 表明界面动力学系数越小, 球晶的生长速度越慢. 与忽略界面动力学的情形比较, 在球晶生长过程中依赖于界面温度变化的界面动力学显著地减缓了晶体生长的速度.

关键词: 球晶, 界面形态, 渐近分析

PACS: 81.10.Fq, 81.10.Aj, 64.70.dg

1. 引 言

晶体生长过程中固相和液相之间的界面形态对于形成晶体的质量和性能有重要的影响. 球晶生长问题是一个含有多个尺度的偏微分方程自由边界问题, 其固液界面也是问题的解的一部分, 这对界面的理论分析提出了一个难解的数学物理问题. Mullins 和 Sekerka^[1]首先研究了球晶生长的界面形态稳定性, 之后许多工作进一步研究了不同的物理参数对于界面形态的影响^[2-10]. 对于典型的金属而言, 在凝固过程中球晶界面的生长速度可达到几百米每秒甚至更高, 这说明液相中粘附到界面上的原子数远远大于固相从界面逃逸到液相的原子数, 凝固将会显著地偏离平衡条件. 界面周围液相原子向界面粘附的快慢决定了晶体生长的速度, 当界面温度低于平衡凝固温度时, 界面开始向液相移动, 紧邻液相的原子活动能力下降不明显, 界面生长速度随界面动力学过冷度的增加呈线性增加. 当界面温度明显低于平衡凝固温度, 即过冷度增加到一定程度时, 紧邻液相的原子由于温度下降, 其活动能力会明显下降, 这样液相原子粘附到界面的数量也

开始下降, 这时界面生长速度仍然会增加, 但是其增长速度将会减慢, 这就变成界面动力学抑制了晶体生长, 因此界面生长速度随界面动力学过冷度的增加呈非线性增加^[11]. 界面动力学对晶体生长的抑制作用通过界面动力学系数体现. 近年来许多工作^[11-20]采用在非平衡凝固条件下界面生长速度 U_1 与界面动力学过冷度 ΔT_k 之间的线性关系研究了界面动力学过冷度等因素对于过冷熔体中凝固界面的影响,

$$\Delta T_k = \frac{1}{\mu} U_1, \quad (1)$$

其中 μ 被视为常数 μ_0 , (被称为界面动力学系数), $\mu_0 = \Delta H M_0 V_0 / (\rho_L R_g T_M^2)$, ΔH 为熔体单位体积的潜热, M_0 为熔体的摩尔质量, V_0 为液相中的声速, R_g 为气体常数, ρ_L 为液相密度, T_M 为纯物质的平衡凝固温度. Turnbull^[21]研究了在金属凝固过程中界面动力学过冷度 ΔT_k 与界面附近温度的变化和界面生长速度 U_1 之间的联系

$$\Delta T_k = \frac{\rho_L R_g T_M T_1 U_1}{\Delta H M_0 V_0}. \quad (2)$$

这说明界面动力学系数 μ 是依赖界面温度 T_1 变化的非线性函数, 其关系式为

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2006CB605205)、国家自然科学基金(批准号: 10972030)、北京科技大学冶金研究基金(批准号: 00009503)和中央高校基本科研业务费专项资金(批准号: FRF-BR-09-085A)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: wangzd@mater.ustb.edu.cn

$$\mu = \frac{\Delta H M_0 V_0}{\rho_L R_g T_M T_1} = \frac{\mu_0 T_M}{T_1}. \quad (3)$$

如果忽略界面形态弯曲的变化,用平界面的平衡凝固温度代替弯曲界面的温度,那么界面温度 T_1 等于纯物质的平衡凝固温度 T_M ,这是界面生长速度 U_1 与界面过冷度之间线性关系(1)式的情形.对于纯熔体而言,当考虑由原子粘附引起的动力学过冷时,在固液界面上总的温度过冷度 ΔT_{total} 由热过冷度 ΔT 、曲率过冷度 ΔT_R 和界面动力学过冷度 ΔT_K 组成,即

$$\Delta T_{total} = \Delta T + \Delta T_R + \Delta T_K. \quad (4)$$

(4)式表明界面动力学过冷度将影响界面形态的变化和生长速度. Li 等^[22]利用界面动力学过冷与界面生长速度的关系(2)式研究了在非平衡凝固过程中平直界面的形态稳定性. 研究表明,依赖于界面温度变化的界面动力学系数导致了绝对稳定性判据的显著改变. 本文利用渐近分析方法求出在非平衡凝固条件下球晶生长问题的近似解析解,研究界面动力学系数对于球晶生长界面形态和生长速度的影响.

2. 数学模型

考虑过冷液相熔体中球晶的生长,假定熔体为各向同性的,球晶的初始半径为 r_0 ,远场温度为 T_∞ ($T_\infty < T_M$, T_M 为纯物质的平衡凝固温度). 利用文献[15]中所采用的无量纲化,其中选择球晶的初始半径 r_0 作为长度尺度,界面的特征速度 $V = k_L \Delta T / (r_0 \Delta H)$ 作为速度尺度, r_0/V 作为时间尺度,过冷度 $\Delta T = T_M - T_\infty$ 作为温度尺度. 采用球坐标系,设球晶界面为 $r = R(\theta, \varphi, t)$,球晶的界面将固相 ($r < R(\theta, \varphi, t)$) 与液相 ($r > R(\theta, \varphi, t)$) 分开,球晶生长在液相和固相的温度控制方程分别为

$$\varepsilon \frac{\partial T_L}{\partial t} = \nabla^2 T_L, \quad (5)$$

$$\varepsilon \frac{\partial T_S}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T_S. \quad (6)$$

在球晶界面上,温度满足连续性条件

$$T_L = T_S. \quad (7)$$

考虑由原子附着引起的界面动力学过冷,由(4)式得到 Gibbs-Thomson 条件

$$T_1 = 2\Gamma K - \beta C M_K U_1 T_1 - \beta M_K U_1. \quad (8)$$

能量守恒条件为

$$(1 + 2\Gamma C K) U_1 = \mathbf{n} \cdot \nabla (k T_S - T_L). \quad (9)$$

在远场,温度场满足远场条件:当 $r \rightarrow \infty$ 时,

$$T_L \rightarrow -1. \quad (10)$$

以及球晶生长的初始条件:当 $t = 0$ 时,

$$T_L(r, \theta, \varphi, 0) = T_{L0}(r, \theta, \varphi),$$

$$T_S(r, \theta, \varphi, 0) = T_{S0}(r, \theta, \varphi),$$

$$R(\theta, \varphi, 0) = 1. \quad (11)$$

这里 T_L 和 T_S 分别为液相温度和固相温度, $\varepsilon = \frac{\Delta T}{\Delta H / (c_p \rho_L)}$, ∇^2 为 Laplace 算子, $\kappa = \kappa_S / \kappa_T$, κ_T 和 κ_S 分别为液相和固相的热扩散率, K 为界面的局部平均曲率, $\Gamma = \gamma T_M / (r_0 \Delta T \Delta H)$, γ 为各向同性的表面张力参数, ΔH 为熔体单位体积的潜热,参数 M_K 与 μ_0 成反比例关系,即 $M_K = \rho_L R_g T_M^2 / (\Delta H \Delta T M_0)$, $C = \Delta T / T_M$, $\beta = V / V_0$, $k = k_S / k_L$, k_L 和 k_S 分别为液相和固相的热传导系数, \mathbf{n} 为界面的单位外法向量. 本文假定固相和液相的密度相等,并且忽略浮力和热膨胀的作用.

3. 解的渐近展开

在金属凝固过程中,当 Stefan 数 $S = \Delta H / (c_p \rho_L \Delta T)$ 的量级很大时, $\varepsilon \ll 1$. 本文选择 ε 为小参数,对温度场和球晶界面按照这个小参数作渐近展开. 当 $\varepsilon \rightarrow 0$ 时,

$$T_L = T_{L0} + \varepsilon T_{L1} + \dots, \quad (12)$$

$$T_S = T_{S0} + \varepsilon T_{S1} + \dots, \quad (13)$$

$$R = R_0 + \varepsilon R_1 + \dots. \quad (14)$$

界面的平均曲率 K 按照小参数 ε 展开为

$$2K = -\frac{2}{R_0} + \frac{\varepsilon}{R_0^2} (\Lambda + 2) R_1 + \dots, \quad (15)$$

其中

$$\Lambda = \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (16)$$

将(12)–(14)式连同(15)和(16)式代入(5)–(11)式,比较关于 ε^n 的系数得到各阶近似项满足的方程.

首阶近似项 T_{L0} , T_{S0} 和 R_0 满足如下方程和边界条件:

$$\nabla^2 T_{L0} = 0, \quad (17)$$

$$\nabla^2 T_{S0} = 0, \quad (18)$$

界面条件:在界面上,当 $r = R_0(t)$ 时,

$$T_{S0} = T_{L0}, \quad (19)$$

$$[1 + \beta C M_K R'_0] T_{S0} = -\frac{2\Gamma}{R_0} - \beta M_K R'_0, \quad (20)$$

$$\left(1 - \frac{2\Gamma C}{R_0}\right)R'_0 = k \frac{\partial T_{S0}}{\partial r} - \frac{\partial T_{L0}}{\partial r}. \quad (21)$$

远场条件: 当 $r \rightarrow \infty$ 时,

$$T_{L0} \rightarrow -1, \quad (22)$$

界面的初始条件: 当 $t = 0$ 时,

$$R_0(0) = 1. \quad (23)$$

一阶近似项 T_{L1}, T_{S1} 和 R_1 满足如下的方程和边界条件:

$$\frac{\partial T_{L0}}{\partial t} = \nabla^2 T_{L1}, \quad (24)$$

$$\frac{\partial T_{S0}}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T_{S1}. \quad (25)$$

界面条件: 在界面上,

$$T_{L1} - T_{S1} + \Delta G_1 R_1 = 0, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} & [1 + \beta C M_K R'_0] T_{S1} + [1 + \beta C M_K R'_0] G_{1S} R_1 \\ & = \frac{\Gamma(\Lambda + 2) R_1}{R_0^2} - \beta M_K \frac{1 + C T_{S0} R'_1}{1 - \beta R'_0}, \end{aligned} \quad (27)$$

$$\begin{aligned} & \left(1 - \frac{2\Gamma C}{R_0}\right)R'_1 + \frac{\Gamma C R'_0}{R_0^2}(\Lambda + 2) R_1 \\ & = k \frac{\partial T_{S1}}{\partial r} - \frac{\partial T_{L1}}{\partial r} - \Delta G_2 R_1, \end{aligned} \quad (28)$$

其中

$$\Delta G_1 = \left(\frac{\partial T_{L0}}{\partial r} - \frac{\partial T_{S0}}{\partial r} \right)_{r=R_{B0}},$$

$$G_{1S} = \left(\frac{\partial T_{S0}}{\partial r} \right)_{r=R_{B0}},$$

$$\Delta G_2 = \left(\frac{\partial^2 T_{L0}}{\partial r^2} - k \frac{\partial^2 T_{S0}}{\partial r^2} \right)_{r=R_{B0}}.$$

界面的初始条件: 当 $t = 0$ 时,

$$R_1(r, \theta, \varphi, 0) = 0. \quad (29)$$

类似地, 可得到各阶近似项所满足的方程和边界条件.

因为边界条件(22)式与角 θ 和 φ 无关, 所以 Laplace 方程(17)和(18)的解的形式为 $a_0(t) + b_0(t)/r$, 代入界面条件(19)和(20)式和远场条件(22)式, 得到

$$T_{L0} = -1 + \frac{b_0(t)}{r}, \quad (30)$$

$$T_{S0} = \frac{-2\Gamma - \beta M_K R_0 R'_0}{R_0 [1 + \beta C M_K R'_0]}, \quad (31)$$

其中

$$b_0(t) = \frac{R_0 - 2\Gamma - (1 - C)\beta M_K R_0 R'_0}{1 + \beta C M_K R'_0}. \quad (32)$$

从界面条件(21)式得到 R_0 满足的微分方程

$$R_0 R'_0 = \frac{R_0 - 2\Gamma - (1 - C)\beta M_K R_0 R'_0}{(R_0 - 2\Gamma C) [1 + C M_K \beta R'_0]}. \quad (33)$$

方程(33)与界面初始条件(23)式可确定 $R_0 = R_0(t)$. 当忽略界面动力学时, $M_K = 0$, 方程(33)与文献[3,6]的结果一致.

非齐次方程(24)和(25)的解可以表示为下面的球谐函数级数展开:

$$T_{L1} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n f_{n,m}(r, t) Y_{n,m}(\theta, \varphi), \quad (34)$$

$$T_{S1} = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n d_{n,m}(r, t) Y_{n,m}(\theta, \varphi), \quad (35)$$

其中 $Y_{n,m}$ 为球谐函数, $f_{n,m}(r, t)$ 和 $d_{n,m}(r, t)$ 为待定函数. 将(34)和(35)式代入方程(24)和(25)得到

$$f_{0,0} = \frac{A_{0,0}}{r} + \frac{r}{2} \frac{db_0(t)}{dt}, \quad (36)$$

$$d_{0,0} = B_{0,0} + \frac{r^2}{6\kappa} \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right), \quad (37)$$

$$f_{n,m} = \frac{A_{n,m}}{r^{n+1}} \quad (n = 1, 2, 3, \dots; m = 0, 1, 2, \dots, n), \quad (38)$$

$$d_{n,m} = B_{n,m} r^n \quad (n = 1, 2, 3, \dots; m = 0, 1, 2, \dots, n), \quad (39)$$

其中 $A_{n,m}, B_{n,m}$ 为待定函数. 将界面一阶项 R_1 表示为球谐函数级数展开

$$R_1 = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n g_{n,m}(t) Y_{n,m}(\theta, \varphi), \quad (40)$$

其中 $g_{n,m}(t)$ 为待定函数, 将(34)–(40)式代入界面条件(26)–(28)式得到: 当 $n = 0, m = 0$ 时,

$$\begin{aligned} & A_{0,0} - B_{0,0} R_0 + \Delta G_1 g_{0,0}(t) R_0 \\ & + \frac{1}{2} \frac{db_0(t)}{dt} R_0^2 - \frac{R_0^3}{6\kappa} \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) = 0, \\ & [1 + \beta C M_K R'_0] \left[B_{0,0} + \frac{R_0^2}{6\kappa} \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) \right] \\ & + [1 + \beta C M_K R'_0] G_{1S} g_{0,0}(t) \\ & = \frac{2\Gamma}{R_0^2} g_{0,0}(t) - \frac{\beta M_K}{1 - \beta R'_0} g'_{0,0}(t) \left(1 - C + \frac{C b_0(t)}{R_0} \right), \\ & \left(1 - \frac{2\Gamma C}{R_0} \right) g'_{0,0}(t) + 2\Gamma C R'_0 \frac{g_{0,0}(t)}{R_0^2} \\ & = \frac{k R_0}{3\kappa} \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) + \left(\frac{A_{0,0}}{R_0^2} - \frac{1}{2} \frac{db_0(t)}{dt} \right) \\ & - \Delta G_2 g_{0,0}(t). \end{aligned}$$

从上述方程组解得,当 $n=0, m=0$ 时,

$$g'_{0,0}(t) = -\frac{Q_2}{Q_1}g_{0,0}(t) - \frac{Q_3}{\kappa Q_1}, \quad (41)$$

$$A_{0,0} = \frac{Q_4}{Q_1}g_{0,0}(t) + \frac{Q_5}{\kappa Q_1}, \quad (42)$$

$$B_{0,0} = \frac{Q_6}{R_0 Q_1}g_{0,0}(t) + \frac{Q_7}{\kappa Q_1}, \quad (43)$$

其中

$$Q_1 = (1 - C)\beta M_{\kappa} R_0^2 + \beta C M_{\kappa} R_0 b_0(t) + R_0^2 (R_0 - 2\Gamma C) (1 - \beta R'_0) + \beta C M_{\kappa} R'_0 R_0^2 (R_0 - 2\Gamma C) (1 - \beta R'_0),$$

$$Q_2 = (2\Gamma C R_0 R'_0 - 2\Gamma + 2\beta \Gamma C^2 M_{\kappa} R_0 (R'_0)^2 + \beta C M_{\kappa} R'_0 b_0(t) + b_0(t)) (1 - \beta R'_0),$$

$$Q_3 = \left[-\frac{1}{3} k R_0^4 (1 + \beta C M_{\kappa} R'_0) \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) + \kappa R_0^3 (1 + \beta C M_{\kappa} R'_0) \frac{db_0(t)}{dt} \right] (1 - \beta R'_0),$$

$$Q_4 = -2C\Gamma R_0 b_0(t) (1 - \beta R'_0) + 2\Gamma R_0 (R_0 - 2\Gamma C) (1 - \beta R'_0) + 2\beta \Gamma C^2 M_{\kappa} R'_0 R_0 b_0(t) + \beta C M_{\kappa} R'_0 R_0 (R_0 - 2\Gamma C) (1 - \beta R'_0) b_0(t) + 2\beta C M_{\kappa} b_0^2(t) + 2\beta (1 - C) \Gamma C M_{\kappa} R'_0 R_0^2 + R_0^2 (1 - \beta R'_0) b_0(t) + 2\beta (1 - C) M_{\kappa} R_0 b_0(t),$$

$$Q_5 = \frac{1}{2} \beta \kappa (1 - C) M_{\kappa} R_0^4 \frac{db_0(t)}{dt} - \frac{1}{2} \kappa R_0^4 (R_0 - 2\Gamma C) (1 - \beta R'_0) \frac{db_0(t)}{dt} - \frac{1}{2} \beta \kappa C M_{\kappa} R'_0 R_0^4 (R_0 - 2\Gamma C) (1 - \beta R'_0) \times \frac{db_0(t)}{dt} - \frac{1}{3} \beta k R_0^4 (R_0 - C R_0 + C b_0(t)) \times \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) + \frac{1}{2} \beta \kappa C M_{\kappa} R'_0 R_0^3 b_0(t) \frac{db_0(t)}{dt},$$

$$Q_6 = 2\beta (1 - C) \Gamma C^2 M_{\kappa} R_0^2 R'_0 + \beta (1 - C) \times M_{\kappa} R_0 b_0(t) + \beta C M_{\kappa} b_0^2(t) + 2\Gamma R_0 (R_0 - 2\Gamma C) (1 - \beta R'_0) + 2\beta \Gamma C^2 M_{\kappa} R'_0 R_0 b_0(t),$$

$$Q_7 = \beta \kappa (1 - C) M_{\kappa} R_0^3 \frac{db_0(t)}{dt} + \frac{1}{3} \beta M_{\kappa} \Gamma C^2 R_0^4 R'_0 (1 - \beta R'_0) \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right)$$

$$- \frac{1}{3} \beta k M_{\kappa} (1 - C) R_0^4 \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) + \frac{1}{6} \beta (1 - C) M_{\kappa} R_0^4 \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) - \frac{1}{6} R_0^5 (1 - \beta R'_0) \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) + \beta \kappa C M_{\kappa} R_0^2 b_0(t) \frac{db_0(t)}{dt} + \frac{1}{3} \Gamma C R_0^4 (1 - \beta R'_0) \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) - \frac{1}{6} \beta C M_{\kappa} R_0^3 b_0(t) \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) - \frac{1}{3} \beta k C M_{\kappa} R_0^3 b_0(t) \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right) - \frac{1}{6} \beta C M_{\kappa} R'_0 R_0^5 (1 - \beta R'_0) \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right).$$

利用初始条件(29)式,方程(41)的解可以表示为

$$g_{0,0}(t) = -\exp\left(\int_0^t -\frac{Q_2}{Q_1} dx\right) \int_0^t \frac{Q_3}{\kappa Q_1} \exp\left(\int_0^x \frac{Q_2}{Q_1} dt\right) dx; \quad (44)$$

当 $n=1, 2, 3, \dots; m=0, 1, 2, \dots, n$ 时,界面条件(26)–(28)式变为

$$\frac{A_{n,m}}{R_0^{n+1}} - B_{n,m} R_0^n + \Delta G_1 g_{n,m}(t) = 0,$$

$$[1 + \beta C M_{\kappa} R'_0] B_{n,m} R_0^n + [1 + \beta C M_{\kappa} R'_0] G_{1S} g_{n,m}(t) = -\frac{(n-1)(n+2)\Gamma}{R_0^2} g_{n,m}(t) - \beta M_{\kappa} \frac{1 + CT_{s0}}{1 - \beta R'_0} g'_{n,m}(t),$$

$$\left(1 - \frac{2\Gamma C}{R_0}\right) g'_{n,m}(t) + 2\Gamma C R'_0 \frac{g_{n,m}(t)}{R_0^2} = n \hat{k}_{\Gamma} B_{n,m} R_0^{n-1} + \frac{(n+1)A_{n,m}}{R_0^{n+2}} - \Delta G_2 g_{n,m}(t).$$

因为上述界面条件关于 $A_{n,m}, B_{n,m}$ 和 $g_{n,m}(t)$ 都是线性齐次的,所以由界面初始条件(29)式得到当 $n=1, 2, 3, \dots; m=0, 1, 2, \dots, n$ 时,

$$A_{n,m} = 0, \\ B_{n,m} = 0, \\ g_{n,m}(t) = 0. \quad (45)$$

于是温度场一阶近似项可以表示为

$$T_{Li} = \frac{Q_4 g_{0,0}(t)}{Q_1} \frac{1}{r} + \frac{Q_5}{\kappa Q_1} \frac{1}{r} + \frac{r}{2} \frac{db_0(t)}{dt}, \quad (46)$$

$$T_{s1} = \frac{Q_6}{R_0 Q_1} g_{0,0}(t) + \frac{Q_7}{\kappa Q_1} + \frac{r^2}{6\kappa} \frac{d}{dt} \left(\frac{b_0(t)}{R_0} \right), \quad (47)$$

$$R_1 = g_{0,0}(t). \quad (48)$$

因此,我们得到了(12)–(14)式中球晶生长的一阶近似解析解.

从(33)和(41)式,球晶界面的生长速度可以表示为

$$\frac{\partial R}{\partial t} \approx R'_0 - \frac{Q_2}{Q_1} g_{0,0}(t) - \frac{Q_3}{\kappa Q_1}. \quad (49)$$

应当指出,球晶界面的近似解析解(12)–(14)式不满足预先给定的初始条件(11)式和液相中远场衰减条件(10)式.这是因为在初始时刻温度有一个瞬变过程,有一个关于时间的边界层,所以假设 $\partial T_L / \partial t = O(1)$, $\partial T_S / \partial t = O(1)$ 不再成立.为此需要求出在初始瞬变阶段的内解.可以证明^[3,11],如果引入时间内变量 $\hat{t} = t/\varepsilon$, 温度场和界面的内解分别用 $\hat{T}_L(r, \theta, \varphi, \hat{t})$, $\hat{T}_S(r, \theta, \varphi, \hat{t})$ 和 $\hat{R}(\theta, \varphi, \hat{t})$ 仍然按照小参数 ε 作渐近展开,并且与所求的近似解析解(12)–(14)式匹配,那么温度场的内解满足预先给定的初始条件^[3,11,16,18].类似地,可以求出在远离界面的温度场的解,并且与所求的近似解析解(12)–(14)式匹配,证明温度在远场满足远场条件(10)式.在晶体生长过程中,相变过程主要发生在固液界面附近的区域,在物理上研究界面动力学系数对于球晶生长的影响只需计算在球面附近区域对界面形态演化的作用.因此,我们得到了(12)–(14)式中球晶生长的一阶近似解析解.图1表明在界面动力学系数影响下球晶半径与时间之间的关系.图2显示球晶界面生长速度与时间之间的关系.图3和图4表示在不同时刻的球晶界面形态,图中实线表示在时刻 $t = 0, 20, 30, 50$ (从内向外) 受到界面动力学过冷影响的球晶界面形态.图5表示不同的界面动力学系数对球晶界面形态的影响.从图1–5可以看出,参数 M_k 越小,球晶的生长速度越快;反之,参数 M_k 越大,球晶的生长速度越慢.参数 M_k 越大,界面动力学过冷度对球晶半径的抑制作用越大.因为界面动力学系数 μ_0 (常数)与参数 M_k 成反比,所以界面动力学系数 μ_0 越大,球晶的生长速度越快;反之,表明界面动力学系数 μ_0 越小,球晶的生长速度越慢.与忽略界面动力学系数的情形比较说明,非线性界面动力学会使界面过冷度显著地减小,从而在球晶生长过程中显著地减缓了晶体生长的速度.

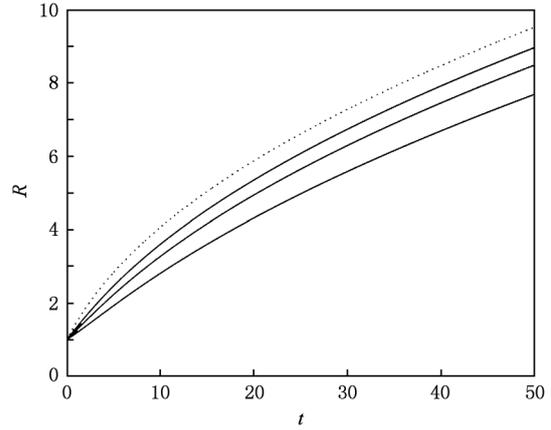


图1 球晶半径 $R = R_0 + \varepsilon R_1$ 随时间的变化 虚线表示未受界面动力学过冷影响,实线表示受界面动力学过冷影响,自上而下 $M_k = 0, 0.50, 1.0, 2.0, \varepsilon = 0.10, \Gamma = 0.30, C = 0.30, \beta = 1, k = 1, \kappa = 1$

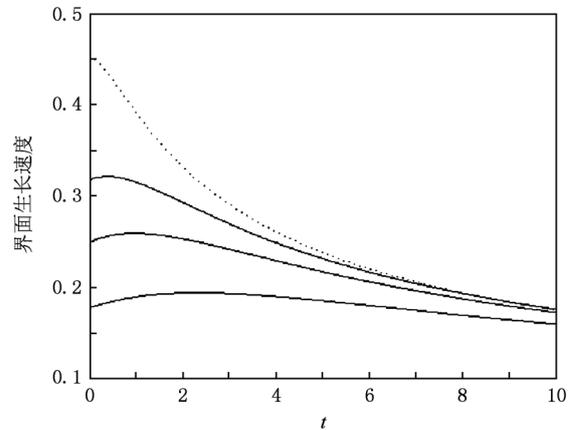


图2 界面生长速度随时间的变化 虚线表示未受界面动力学过冷影响,实线表示受界面动力学过冷影响,自上而下 $M_k = 0, 0.50, 1.0, 2.0, \varepsilon = 0.10, \Gamma = 0.30, C = 0.30, \beta = 1, k = 1, \kappa = 1$

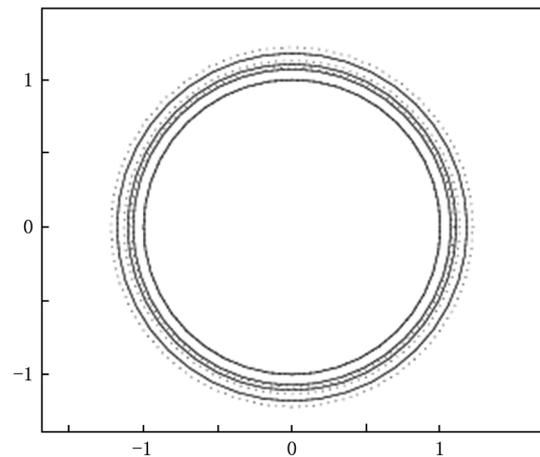


图3 不同时刻的球晶界面形态截面 从内向外实线分别表示在时刻 t 为 $0, 20, 30, 50$ 受到界面动力学过冷影响的球晶界面形态,虚线表示在相应的时刻未受界面动力学过冷影响的界面形态, $M_k = 0.25, \varepsilon = 0.10, \Gamma = 0.30, C = 0.30, \beta = 1, k = 1, \kappa = 1$

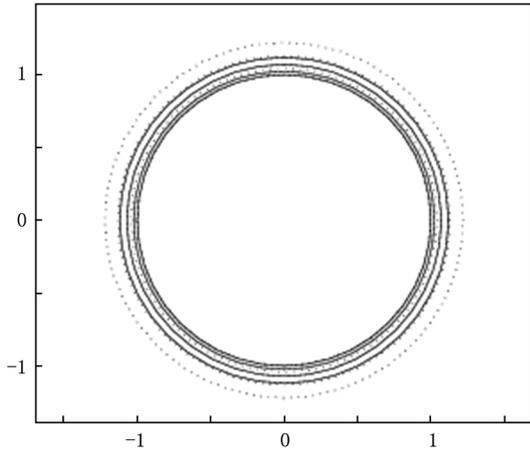


图4 不同时刻的球晶界面形态截面 从内向外实线分别表示在时刻 $t=0, 10, 30, 50$ 受到界面动力学过冷影响的球晶界面形态,从内向外虚线表示在相应的时刻未受界面动力学过冷影响的界面形态, $M_k=1.0, \varepsilon=0.10, \Gamma=0.30, C=0.30, \beta=1, k=1, \kappa=1$

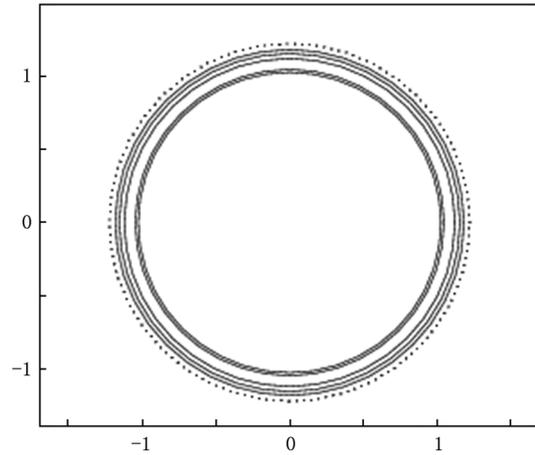


图5 受到界面动力学过冷影响的球晶界面形态截面 从外向内 M_k 分别为 $0.0, 0.25, 0.50, 1.0, 5.0, 10.0, t=50, \varepsilon=0.10, \Gamma=0.30, C=0.30, \beta=1, k=1, \kappa=1$

4. 结 论

考虑了在非平衡凝固条件下界面动力学系数随界面局部温度的变化,建立了在过冷熔体中包括表面张力参数、界面动力学系数的球晶生长模型,利用渐近分析方法求出了温度场和界面的一阶近似解析解,研究了界面动力学过冷对于过冷熔体中

的球晶界面形态和生长速度的影响.研究表明:界面动力学系数越大,球晶的生长速度越快;反之,表明界面动力学系数越小,球晶的生长速度越慢.与忽略界面动力学系数的情形比较后发现,非线性界面动力学会使界面过冷度显著地减小,从而在球晶生长过程中显著地减缓了晶体生长的速度.

感谢加拿大 McGill 大学徐鉴君教授给予的指导和帮助.

- [1] Mullins W W, Sekerka R F 1963 *J. Appl. Phys.* **34** 323
- [2] Golovin A A, Davis S H 1998 *Physica D* **116** 363
- [3] Davis S H 2001 *Theory of Solidification* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [4] Maruyama M, Kawabata K 2002 *J. Cryst. Growth* **237**—**239** 164
- [5] Murray B T, Coriell S R, Chernov A A, McFadden G B 2000 *J. Cryst. Growth* **218** 434
- [6] Zhu Z H, Ge P W, Xu Z Y, Huo C R 1998 *Chin. Phys.* **7** 801
- [7] Liu Y C, Chen W C, Huo C R, Ge P W 1999 *Chin. Phys.* **8** 881
- [8] Yu Y M, Yang G C, Zhao D W, Lü Y L, Karma A, Beckermann C 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2423 (in Chinese) [于艳梅、杨根仓、赵达文、吕衣礼、Karma A, Beckermann C 2001 物理学报 **50** 2423]
- [9] Zhu Z H, Hong Y, Ge P W, Yu Y D 2004 *Chin. Phys.* **13** 1982
- [10] Zhao D W, Li J F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7094 (in Chinese) [赵达文、李金富 2009 物理学报 **58** 7094]
- [11] Xu J J 2006 *Introduction to Kinetics of Solidification and Stability Theory of the Interface* pp18—21, p58 (Beijing: Science Press) (in Chinese) [徐鉴君 2006 凝固过程动力学与交界面稳定性理论导引 (北京:科学出版社) 第18—21, 58页]
- [12] Sekerka R F 2004 *J. Cryst. Growth* **264** 530
- [13] Cristini V, Lowengrub J 2002 *J. Cryst. Growth* **240** 267
- [14] Cristini V, Lowengrub J 2004 *J. Cryst. Growth* **266** 552
- [15] Li S W, Lowengrub J S, Leo P H, Cristini V 2005 *J. Cryst. Growth* **277** 578
- [16] Chen M W, Wang Z D, Sun R J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1819 (in Chinese) [陈明文、王自东、孙仁济 2007 物理学报 **56** 1819]
- [17] Chen M W, Wang Z D, Xu J J 2007 *Sci. China E* **37** 644 [陈

- 明文、王自东、徐鉴君 2007 中国科学 E **37** 644]
- [18] Chen M W, Wang Z D, Xie J X, Xu J J 2008 *Acta Mech. Sin.* **24** 681
- [19] Chen M W, Lan M, Yuan L, Wang Y Y, Wang Z D, Xu J J 2009 *Chin. Phys. B* **18** 1691
- [20] Wang Z D, Wang X W, Wang Q S, Shi H I, Xu J J 2009 *Nanotechnology* **20** 075605
- [21] Turnbull D 1981 *Metall. Trans.* **12A** 695
- [22] Li J F, Yang G C, Zhou Y H 2000 *Mater. Res. Bull.* **35** 1775

Effect of interface kinetics on the interface morphology of a spherical crystal in the undercooled melt*

Chen Ming-Wen¹⁾ Ni Feng¹⁾ Wang Yan-Lin²⁾ Wang Zi-Dong^{3)†} Xie Jian-Xin³⁾

1) (Department of Mathematics and Mechanics, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

2) (Fangda Special Steel Technology Company Limited, Nanchang 330012, China)

3) (Department of Materials Processing and Control Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

(Received 7 November 2009; revised manuscript received 14 September 2010)

Abstract

The change of the interface kinetic coefficient with the interface temperature under the non-equilibrium solidification condition is considered in the growth model of a spherical crystal. The first-order approximation solutions of temperature and interface for the spherical crystal growth in the undercooled melt are obtained by the asymptotic analysis method. The effects of the nonlinear interface kinetic undercooling on the interface morphology and the growth velocity of the spherical crystal in the undercooled melt are studied. The results show that as the interface kinetic coefficient increases, the growth velocity of the spherical crystal increases; as the interface kinetic coefficient decreases, the growth velocity of the spherical crystal decreases. Compared with the situation of neglecting interface kinetics, the nonlinear interface kinetics during crystal growth significantly decreases the growth velocity of the spherical crystal.

Keywords: spherical crystal, interfacial morphology, asymptotic analysis

PACS: 81.10.Fq, 81.10.Aj, 64.70.dg

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2006CB605205), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10972030), the Metallurgy Research Foundation of University of Science and Technology Beijing, China (Grant No. 00009503), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (Grant No. FRF-BR-09-085A).

† Corresponding author. E-mail: wangzd@mater.ustb.edu.cn