

用 CA 方法模拟界面能各向异性对胞晶生长形态的影响*

张云鹏 林鑫[†] 魏雷 王猛 彭东剑 黄卫东

(西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2012 年 5 月 8 日收到; 2012 年 6 月 11 日收到修改稿)

用元胞自动机 (Cellular Automaton, CA) 模型研究了界面能各向异性对二维定向凝固胞晶的生长形态的影响, 建立了判定胞晶生长达到稳态的判据. 结果显示, 当界面能各向异性强度非常小时, 胞晶尖端很容易分岔, 胞晶形态不容易稳定. 而当界面能各向异性强度足够大时, 容易形成稳定的胞晶形态, 同时界面能各向异性强度会显著影响稳定胞晶的形态, 界面能各向异性越强, 稳态胞晶间距越小, 胞晶尖端半径越小, 尖端半径与胞晶间距的比值越小, 固液界面前沿的浓度与过冷度越小.

关键词: 元胞自动机, 胞晶, 各向异性

PACS: 81.30.-t, 68.70.+w

1 引言

上世纪 40 年代起, 研究者们就已经开始对凝固形态的形成机理和演化机理展开研究. 其中界面的各向异性性质对凝固形态的影响一直是其中的研究热点之一^[1]. 长期的凝固研究表明, 尽管界面能各向异性很小, 它却能在很大程度上影响凝固微观组织的演化行为. 在合金凝固枝晶的自由生长过程中, 界面能各向异性能够显著地影响其稳定性机理和尖端状态的选择^[2]. 而对于合金的定向凝固来说, 界面形态是由溶质扩散的不稳定作用与温度梯度和界面张力的稳定作用共同决定的, 界面能各向异性同样会对胞晶和枝晶的形态产生显著的影响^[3]. 实际上, 经典枝晶生长理论——微观可解性原理已经指出^[4-7]在枝晶的生长过程中, 固液界面各向异性不仅决定着枝晶的生长方向, 同时还在很大程度上影响着枝晶的生长行为.

研究者们已经发现, 在定向凝固过程中, 当界

面生长速度高于通常的胞枝转变速度时, 若系统的界面能各向异性很弱时, 界面将不会呈现典型的胞/枝晶生长, 而是呈现双胞晶 (doublons)^[8] 或者海藻晶 (seaweeds)^[9] 生长. 也就是说, 界面能各向异性实际上也是决定凝固界面形态的一个重要因素. 为了探究界面能各向异性对定向凝固组织形态的影响, Steinbach 用相场方法模拟了定向凝固枝晶稳定形态受界面能各向异性强度的影响^[10], 发现界面能各向异性强度影响枝晶列的临界间距与尖端形貌. Provatas 等用相场法研究了三甲基乙酸 (PVA)-0.04 wt% 丙酮合金定向凝固过程中界面各向异性强度对树枝晶向海藻晶转变的影响^[11], 发现大的界面能各向异性强度会造成海藻晶向树枝晶转变的临界温度梯度增大. Wang 等研究了界面能各向异性强度对于定向凝固枝晶尖端状态的影响^[12], 认为定向凝固中枝晶尖端状态选择参数与界面能各向异性之间存在标度律的指数关系. 于此同时, 有关界面能各向异性对胞晶生长形态影响的报道却很少. 通常认为, 胞晶是沿热流方向进行

* 国家自然科学基金 (批准号: 50971102, 50901061), 国家重点基础研究发展计划 (973) (批准号: 2011CB610402), 高等学校学科创新引智计划 (批准号: 08040) 和西北工业大学凝固技术国家重点实验室基金 (批准号: 02-TZ-2008) 资助的课题.

[†] E-mail: xlin@nwpu.edu.cn

生长, 而与具体的晶体择优生长取向无关. 但是, 研究者已经在实验中发现, 当胞晶生长的晶体学取向与热流方向不一致时, 胞晶的形态将失去对称性并发生倾斜^[13,14], 也就是说, 胞晶的形态实际上仍然会受到界面的各向异性的影响. 然而界面各向异性究竟如何影响胞晶形态目前仍不清楚^[1].

基于此, 本文采用元胞自动机模型对二元合金定向凝固过程中胞晶的生长过程进行了模型, 考察了胞晶生长不同阶段的形态特征, 以及不同界面能各向异性强度下的胞晶形态, 分析了界面各向异性强度对胞晶形态的影响规律.

2 模型描述

2.1 温度场和浓度场

整个计算区域内的温度沿 y 方向呈线性分布, 即 $T(x, y) = T_L + G_y$, T_L 为合金浓度为 C_0 时对应的平衡液相温度, x 和 y 分别为计算区域的横纵坐标, G 代表计算区域内的温度梯度. 由于在定向凝固过程中, 一般情况下结晶潜热相对于外界施加温度梯度来说影响很小, 因此模型忽略了结晶潜热对温度场的影响.

对于浓度场, 模型采用有限差分法来计算溶质扩散. 浓度场的控制方程为

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right) + C_i(1-k) \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (1)$$

其中, C 是浓度, t 是时间, 下标 i 代表固相或者液相, D_i 表示溶质扩散系数, f_s 为固相分数, k 为溶质分配系数.

模型采用零通量边界条件来处理计算区域边界的元胞.

2.2 生长动力学及固液界面的处理

在界面的推进过程中, 界面处固相分数的变化 Δf_s 依据由 Gibbs-Thomson 方程所获得的界面元胞液相溶质浓度 C_1^* 与该元胞的液相实际溶质浓度 C_1 之间的差值进行推算^[15]. 即

$$\Delta f_s = \frac{C_1^* - C_1}{C_1^*(1-k)}, \quad (2)$$

$$C_1^* = C_0 + \frac{T^* - T_1^{\text{eq}}}{m_1} + \frac{\Gamma K f(\varphi, \theta_0)}{m_1}, \quad (3)$$

其中, C_0 是合金的原始成分, T^* 是界面前沿的温度, T_1^{eq} 是成分 C_0 对应的平衡液相温度, m_1 为液相

线斜率, Γ 是 Gibbs-Thomson 系数, K 是固液界面曲率, $f(\varphi, \theta_0)$ 是包含界面能各向异性作用的函数, φ 是界面法向与 x 轴的夹角, θ_0 是晶体的优先生长方向与 x 轴的夹角. 对立方晶系来说, 界面能 γ 可以表示为

$$\gamma(\varphi, \theta_0) = \gamma_0 \cdot \psi(\varphi, \theta_0), \quad (4)$$

$$\psi(\varphi, \theta_0) = 1 + \varepsilon \cos[4(\varphi - \theta_0)], \quad (5)$$

其中 ε 为界面能各向异性系数, γ_0 为平均界面自由能, $\psi(\varphi, \theta_0)$ 是各向异性函数, 根据 Gibbs-Thomson 方程, 函数 $f(\varphi, \theta_0)$ 可以表示为

$$\begin{aligned} f(\varphi, \theta_0) &= \psi(\varphi, \theta_0) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi(\varphi, \theta_0) \\ &= 1 - 15\varepsilon \cos[4(\varphi - \theta_0)], \end{aligned} \quad (6)$$

式中生长角度 φ 可以由固液界面处的固相分数梯度通过下式计算得到:

$$\varphi = \cos^{-1} \left[\frac{\partial f_s / \partial x}{((\partial f_s / \partial x)^2 + (\partial f_s / \partial y)^2)^{1/2}} \right]. \quad (7)$$

模型在处理界面元胞时采用 Zhu 和 Stefanescu^[15] 提出等效扩散系数和等效浓度的处理方法, 将整个计算区域作为单相来处理.

2.3 曲率的计算

模型采用的曲率计算方法与 BBS 模型^[16] 和界面追踪模型^[15] 相似, 即曲率

$$\begin{aligned} K &= \left[2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial y} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y} - \left(\frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2} \right] \\ &\quad \times \left[\left(\frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{-3/2}, \end{aligned} \quad (8)$$

只是在求解固相分数偏导数时, 本文采用了双线性插值的方法进行计算^[17]. 这种方法有效的减小了传统计算固相分数偏导数时由于界面处固相分数不连续而造成的较大的数值误差, 提高了所得曲率的精度.

2.4 CA 的俘获规则

采用最小邻居固相分数修正的冯·诺依曼规则^[18] 作为元胞的捕获规则. 具体来说, 当一个液相元胞被捕获时, 必须同时满足两个条件. 首先, 它至

少要有一个冯·诺依曼邻居是固相. 然后, 这个液相元胞的所有冯·诺依曼邻居的固相分数平均值必须大于某一定值. 对本文的二维模拟来说, 冯·诺依曼邻居只是〈10〉方向的四个邻居, 而确定一个液相元胞被俘获的最小固相分数平均值为 0.18. 这种对冯·诺依曼俘获规则的修正可以有效的减小冯·诺依曼规则给模型引入的网格各向异性, 从而有效地体现出界面能各向异性的作用.

2.5 界面重构

为了提高界面的计算精度. 引入界面重构技术^[17]. 界面重构技术将界面元胞又分成许多小胞, 通过对界面元胞的固相和液相分别进行两次双线性插值, 比较插值元胞中每一个小胞的固相分数插值和液相分数插值的大小, 如果固相分数插值较大, 说明这个小胞是固相, 如果液相插值较大, 说明这个小胞是液相. 这样, 当固相分数不连续时, 能够在—个网格内构造出两个固液界面. 界面重构技术细化了界面元胞, 提高了 CA 模型的计算精度, 并进一步减小了 CA 模型所存在的网格各向异性.

2.6 计算所用参数

本文采用丁二腈 -0.1 mol% 丙酮 (SCN-0.1 mol% acetone) 合金作为模拟对象, 热物性参数如文献^[19]所示. 计算区域为 $1000\ \mu\text{m} \times 4000\ \mu\text{m}$ 的二维矩形, 采用正方形单位网格, 边长 Δx 为 $2\ \mu\text{m}$, 界面重构时, 被插值网格又进一步被均分成 10×10 的小网格. 计算区域的温度梯度 G 设为 $10^4\ \text{K/m}$. 在上述条件下, 由成分过冷判据^[20]所确定的定向凝固的平胞转变速度 V_c 约为 $6.5 \times 10^{-6}\ \text{m/s}$, 同时稳态扩散场分析的 KF 模型^[21]认为 V_c/k_0 是胞枝转变速度, 即此时的胞枝转变速度 V_{tr} 约为 $6.5 \times 10^{-5}\ \text{m/s}$. 根据胞晶的生长范围, 选择抽拉速度 V 为 $3 \times 10^{-5}\ \text{m/s}$. 此时的 $V \approx 5V_c$, 计算开始时, 在模型冷端中间部位设置一个晶核, 其优先生长方向平行于计算区域的坐标轴方向.

3 模拟结果及讨论

3.1 胞晶演化过程

当平界面失稳后, 胞晶的生长会先经历了

一个非稳态的过程, 当形成稳定的胞晶列后, 胞晶的生长进入稳态. 由于胞晶的生长是历史相关的^[22], 最终稳定的胞晶形态与其生长过程有关, 所以需要确立一个标准来判定模拟的胞晶的生长是否达到稳态. 图 1 所示的是 CA 方法模拟稳定的胞晶列的形成过程, 界面能各向异性系数 $\varepsilon = 0.02$. 可以看到, 初始界面平界面首先由于扰动而失稳, 然后扰动逐渐发展成为浅胞晶, 随后胞晶间残余液相深度不断增加, 发展为深胞晶, 在整个过程中, 通过胞晶间距一直在进行横向调整, 最终形成稳定的胞晶列. 为了更加准确的描述这一转变过程, 本文考察了胞晶生长不同时刻尖端前沿的液相浓度与过冷度的变化以及不同时刻尖端生长速度的变化. 图 2 和图 3 分别是不同时刻胞晶尖端前沿液相浓度与过冷度, 图 4 所示的是不同时刻胞晶尖端的生长速度. 在 12 s 之前的初始阶段胞晶尖端前沿过冷度较小, 因此生长速度较低. 伴随着试样抽拉过程的进行, 在 12 s 到 15 s 期间, 界面相对等温线后退, 过冷度增大, 生长速度也逐渐增大, 同时尖端前沿液相中的溶质开始堆积. 溶质的堆积减缓了过冷度的增大速度以及生长速度的增大幅度, 在 15 s 到 30 s 期间, 生长速度稍高于抽拉速度, 尖端前沿液相的浓度与过冷度缓慢的减小, 最终在 30 s 后达到了平衡, 此时生长速度等于抽拉速度, 认为胞晶生长达到稳态.

3.2 低界面能各向异性条件下的胞晶形态

图 5 给出了界面能各向异性系数 ε 为 0.013 时胞晶的生长过程. 可以看到, 对于这种较弱的界面能各向异性, 平界面失稳后产生的胞晶尖端很容易分岔, 想要得到稳定的胞晶形态相对较难. 这与 Akamatsu 和 Eavre 采用 CBr_4 -8 mol% C_2Cl_6 合金进行定向凝固胞晶生长所观察到的现象是基本一致的. 他们在实验中发现, 对大多数的晶体学方向来说, 在一个有限的一次间距范围内能够观察到稳定的胞晶形态, 但是, 当生长方向设置成接近于 (111) 晶体取向时, 此时系统的界面能几乎是各向同性的, 在胞晶生长速度下却始终观察不到稳定的胞晶列^[1].

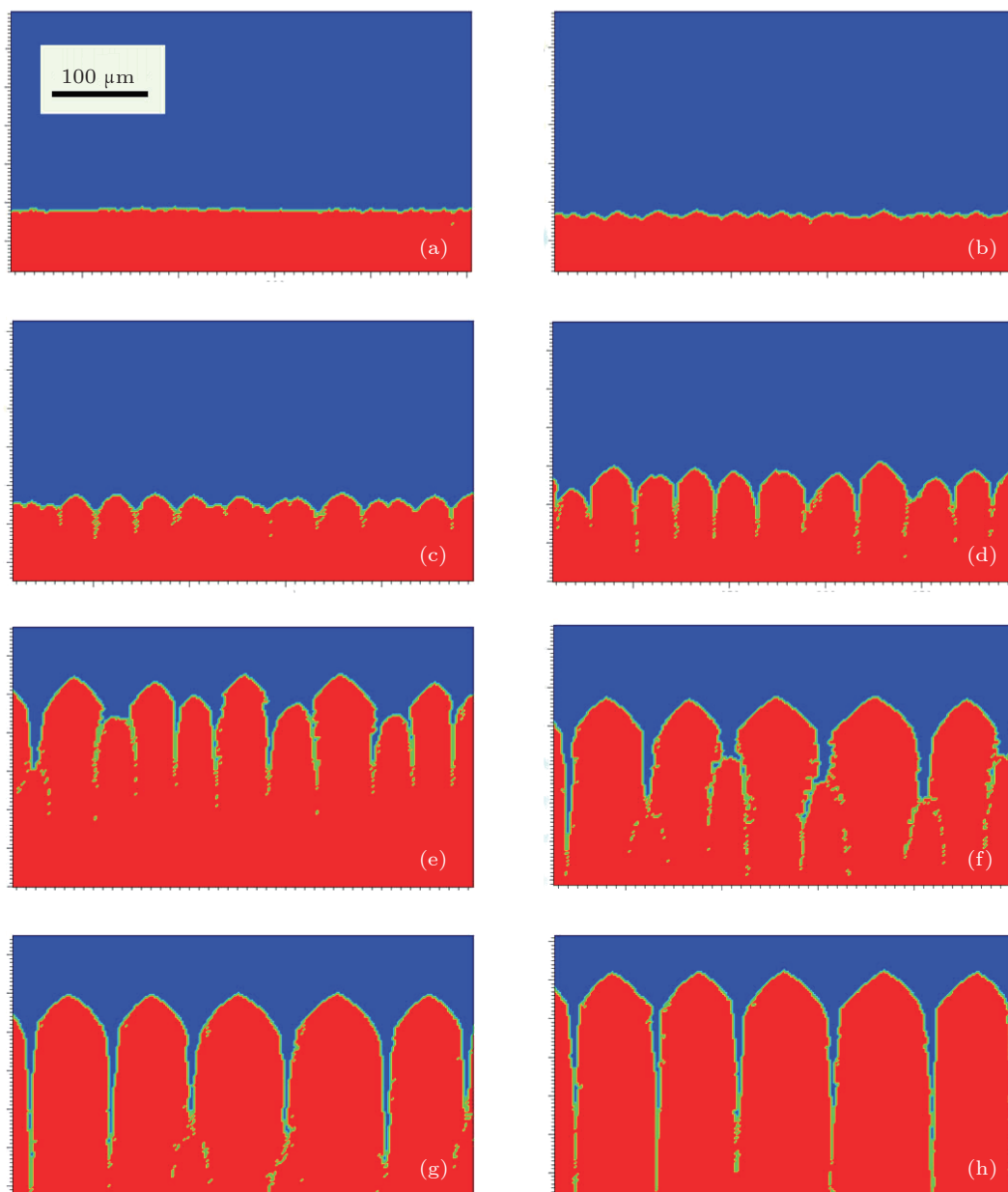


图1 不同时刻 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固的固液界面形貌 (a), (b), (c), (d), (e), (f), (g), (h) 对应的生长时刻依次为 6 s, 9 s, 12 s, 15 s, 18 s, 21 s, 24 s, 30 s ($G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\varepsilon = 0.02$, $\Delta x = 2.0 \mu\text{m}$)

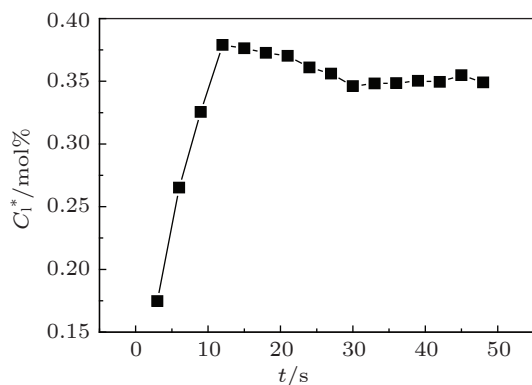


图2 不同凝固时刻 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固胞晶尖端前沿液相浓度 C_1^* ($G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\varepsilon = 0.02$, $\Delta x = 2.0 \mu\text{m}$)

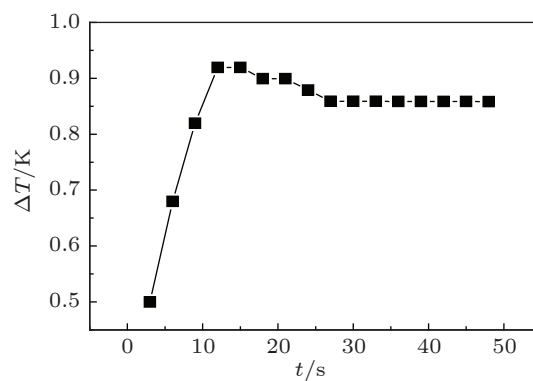


图3 不同凝固时刻 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固胞晶尖端前沿液相过冷度 ΔT ($G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\varepsilon = 0.02$, $\Delta x = 2.0 \mu\text{m}$)

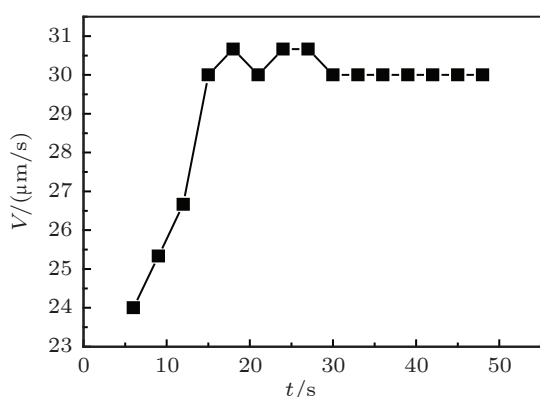


图4 不同凝固时刻 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固的尖端生长速度 V ($G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\epsilon = 0.02$, $\Delta x = 2.0 \mu\text{m}$)

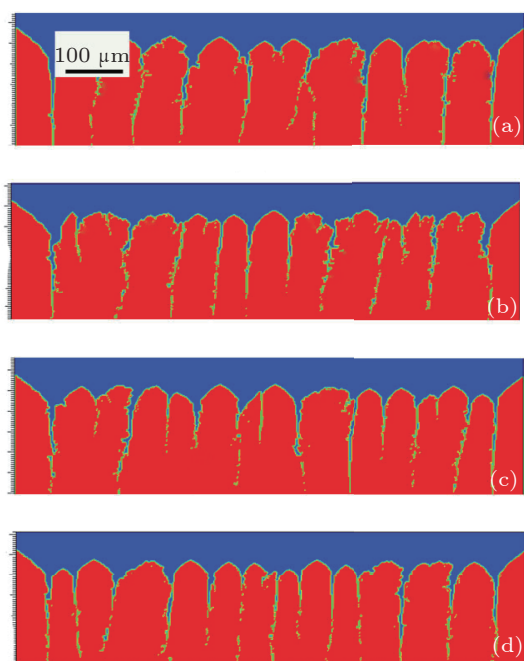


图5 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固不同时刻的界面形态, $\epsilon = 0.013$, $G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\Delta x = 2.0 \mu\text{m}$, (a), (b), (c), (d) 对应的生长时刻依次为 30 s, 60 s, 90 s, 120 s

3.3 不同界面各向异性强度对稳定胞晶形态的影响

Steinbach^[10] 的相场模拟结果显示, 界面能各向异性强度对定向凝固枝晶的稳定形态有显著的影响. 从前一节的结果可以看出, 界面能各向异性强度同样显著的影响着胞晶的稳定形态, 甚至影响到其能否以稳定的形态进行生长. 为此, 本节进一步比较了当界面能各向异性较强时, 界面能各向异

性系数对胞晶生长的影响规律. 图 6 所示的是丁二腈 -0.1 mol% 丙酮 (SCN-0.1 mol% acetone) 合金在温度梯度 $G = 10^4$ K/m, 抽拉速度为 $30 \mu\text{m/s}$, 界面能各向异性系数 ϵ 分别取 0.015, 0.020, 0.025, 0.03 时获得的稳定胞晶形貌. 图 7 和图 8 所示的分别是不同的界面能各向异性系数下获得的胞晶间距与胞晶尖端半径. 可以看出, 随着界面能各向异性系数的增大, 胞晶尖端曲率越来越大, 胞晶间距越来越小. 图 9 所示的是不同界面能各向异性系数条件下得到的稳定胞晶列的尖端半径与胞晶间距的比值, 可以看到, 随着界面能各向异性系数的增大, 尖端半径和胞晶间距的比值逐渐减小. 图 10 所示的是在同一生长时刻不同界面能各向异性系数下生长的胞晶的尖端位置以及尖端附近沿胞晶轴向的浓度 C 的分布, 横坐标的零点位置是模拟凝固的开始点, 在经历了相同的生长时间后, 胞晶的尖端位置随着界面能各向异性系数的增大越来越靠近热端. 图 11 和图 12 所示的分别是胞晶生长达到稳态后, 不同界面能各向异性系数下模拟的胞晶尖端前沿的浓度和过冷度. 可以看出, 随着界面能各向异性系数的增大, 尖端前沿液相的浓度越来越小, 尖端过冷度越来越小.

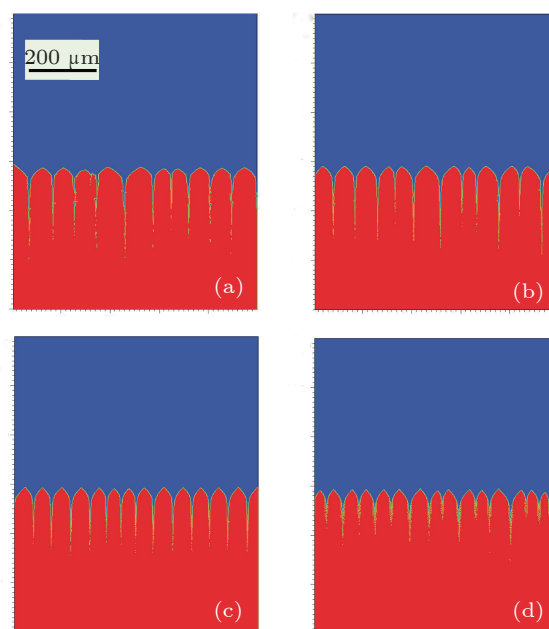


图6 不同界面能各向异性系数下 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固的生长形态, $G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$, $t = 102$ s, 界面能各向异性系数 (a) $\epsilon = 0.015$; (b) $\epsilon = 0.02$; (c) $\epsilon = 0.025$; (d) $\epsilon = 0.03$

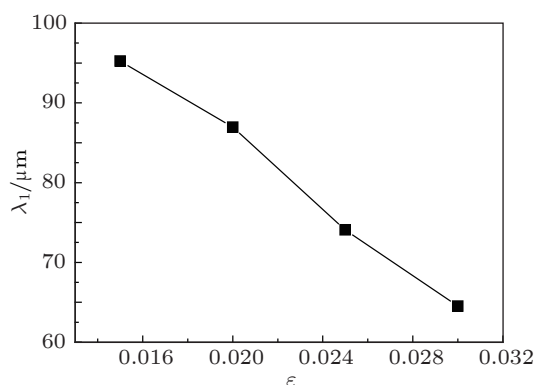


图7 不同界面能各向异性系数情况下 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固得到的稳定胞晶列间距 λ_1 , $G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$

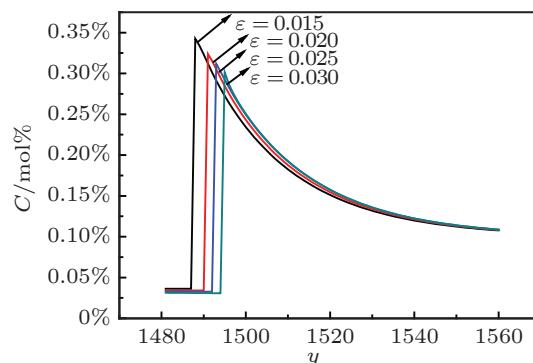


图10 不同界面能各向异性系数下 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固得到的胞晶尖端附近浓度 C 的纵向分布, $G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$

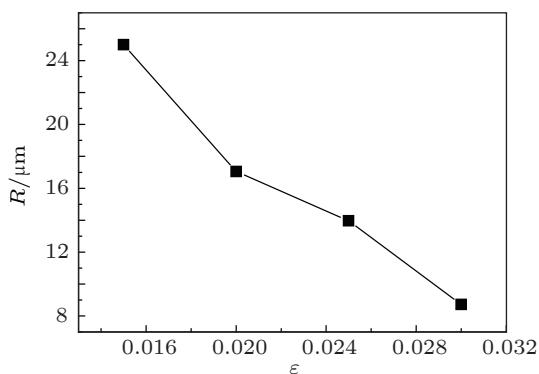


图8 不同界面能各向异性系数情况下 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固得到的稳定胞晶列的尖端半径 R , $G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$

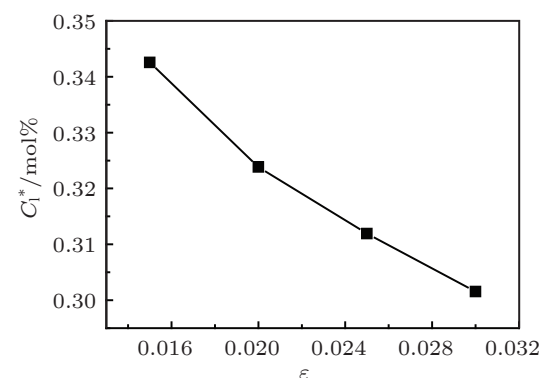


图11 不同界面能各向异性系数情况下 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固得到的稳定胞晶列胞晶尖端前沿的浓度 C_t^* , $G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$

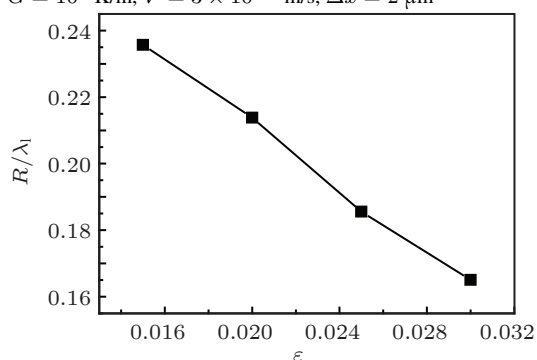


图9 不同界面能各向异性系数条件下 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固得到的胞晶的尖端半径 R 和胞晶间距 λ_1 的比值, $G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$

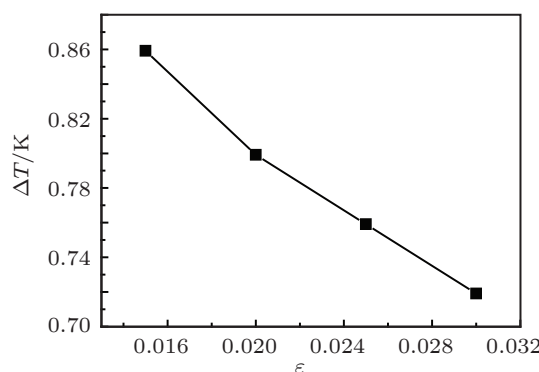


图12 不同界面能各向异性系数情况下 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固得到的稳定胞晶列胞晶尖端前沿的过冷度 ΔT , $G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$

目前关于定向凝固胞晶生长的解析模型主要有 BHL 模型^[23] 和 Hunt 的一次间距模型^[24]. BHL 模型给出了尖端半径与生长速度及尖端过冷度与生长速度的单值关系

$$R = \left[\frac{2l_c D_L}{\lambda(V - V_{cs})} \right]^{1/2}, \quad (9)$$

$$\frac{\Delta T}{\Delta T_0} = \frac{V_{cs}}{V} + 2\sqrt{2\lambda} \left(\frac{V - V_{cs}}{V_{AS}} \right)^{1/2}, \quad (10)$$

式中, R 为胞晶尖端半径, $l_c = \Gamma/\Delta T_0 k$, 称为毛细长度, V_{cs} 为成分过冷理论^[20] 确定的平界面稳定临

界速度, $V_{AS} = D_L/l_c k^2$, 是 MS 稳定性理论 [25] 定义的绝对稳定性临界速度, ΔT 为胞晶尖端过冷度, ΔT_0 是平衡结晶温度间隔, λ 为比例常数. Hunt 的胞枝晶一次间距的解析模型给出了一次间距和尖端半径的关系

$$\frac{\lambda_1^2}{R} = \frac{4\sqrt{2}}{G} [m_1 C_1^* (k - 1) - GD_L/V], \quad (11)$$

式中 λ_1 为胞枝晶一次间距, C_1^* 为胞枝晶尖端浓度.

这两个模型都不包含界面能各向异性的影响. 而本文的模型中界面能各向异性的作用主要体现在计算平衡界面液相浓度 (3) 式的过程中. 随着界面能各向异性系数 ε 的增大, 起到稳定固液界面作用的界面能效应的 $\Gamma\{1 - 15\varepsilon \cos[4(\varphi - \theta_0)]\}$ 将减小, 界面能稳定效应的减小会造成胞晶尖端的曲率半径 R 的减小. 由 (9) 式尖端半径与生长速度的单值关系可知, 尖端曲率半径 R 的减小会造成生长速度 V 的增大. 而在 (10) 式尖端过冷度与生长速度的对应关系 [23] 中, 由于胞晶生长条件下的 $V - V_{CS}$ 相对于 MS 稳定性理论 [25] 定义的绝对稳定性临界速度 V_{AS} 来说非常小, (10) 式右端第二项的影响非常小, 所以可以认为此时 V 的增大会引起尖端过冷度 ΔT 减小. 由 (11) 式 Hunt 的胞晶间距的解析模型 [24] 可知, 胞晶尖端半径 R 的增大和尖端浓度 C_1^* 的增大会引起胞晶间距 λ_1 的增大. 由此可见, CA 模型的模拟结果是与通过界面能各向异性作用修正后的 BHL 模型和 Hunt 一次间距的解析模型的分析结果相一致. 而产生这种现象的原因是, 界面能各向异性系数 ε 的增大引起了曲率半径 R 的减小, 曲率半径越小, 胞晶尖端的溶质向外排出越容易, 尖端的浓度越小. 由尖端浓度引起的成分过冷是尖端过冷度的重要组成部分, 所以尖端浓度的减小又伴随着尖端过冷度的降低, 也就是说胞晶的尖端位置越来越靠近热端. 由此可见, 界面能各向异性强度会对胞晶的稳定形态产生明显的影响.

(11) 式所表达的 Hunt 的胞枝晶一次间距的解析模型表明, 在胞晶生长达到稳态后, 胞晶间距的平方与尖端半径的比值是尖端浓度 C_1^* 的函数,

图 13 所示的是不同界面能各向异性系数条件下得到的胞晶列的胞晶间距的平方与胞晶尖端半径的比值, 正方形是模拟得到的结果, 圆形是由 Hunt 模型通过计算得到的结果. 可以看到, 二者在定量上存在一定偏差. 产生偏差的主要原因是, Hunt 模型对尖端形状做了一个球形修正 [24], 而本文所用的 CA 模型由于没有考虑凝固潜热的影响, 模拟得到的胞晶尖端半径偏小, 胞晶形状更接近于抛物线, 所以模拟得到的胞晶间距的平方与尖端半径的比值相比于 Hunt 模型会偏大.

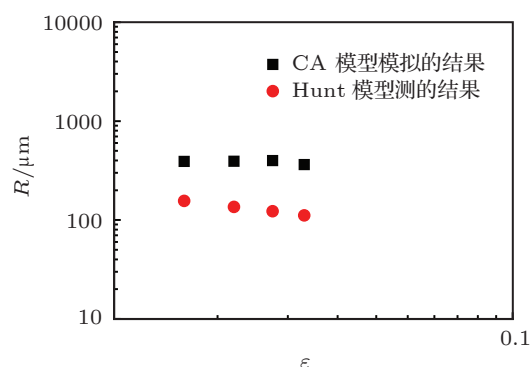


图 13 不同界面能各向异性系数条件下 SCN-0.1 mol% acetone 合金定向凝固得到的胞晶列的胞晶间距 λ_1 的平方与胞晶尖端半径 R 的比值, 正方形是 CA 模型的模拟结果, 圆形是由 Hunt 模型通过计算得到的结果 ($G = 10^4$ K/m, $V = 3 \times 10^{-5}$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$)

4 结论

1. 界面能各向异性很小时, 定向凝固胞晶尖端容易分岔, 胞晶不容易达到稳态. 该结果与实验结果相符合.

2. 界面能各向异性强度对稳态胞晶形态会产生明显的影响, 随着界面能各向异性强度的增大, 稳态胞晶间距和胞晶尖端半径越来越小, 尖端半径与胞晶间距的比值越来越小, 胞晶尖端前沿液相的浓度与过冷度越来越小. 模拟结果与经界面能各向异性修正后的 BHL 模型与 Hunt 的胞枝晶一次间距的解析模型基本一致, 但是在量化上仍有待改善.

[1] Akamatsu S, Faivre G 1998 *Phys. Rev. E* **58** 3302

[2] 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]

[3] Li M E, Yang G C 2007 *Acta Metall. Sin.* **20** 258

[4] Kessler D A, Levine H 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7868

[5] Amar M B, Pomeau Y 1986 *Euro. Phys. Lett.* **2** 307

[6] Langer J S 1986 *Phys. Rev. A* **33** 435

[7] Brener E A 1991 *Adv. Phys.* **40** 53

- [8] Jamgotchian H, Trivedi R, Billia B 1993 *Phys. Rev. E* **47** 4313
 [9] Ben - Jacob E, Deutscher G, Garik P, Goldenfeld N D, Lareah Y 1986 *Phys. Rev.Lett.* **57** 1903
 [10] Steinbach I 2008 *Acta Mater.* **56** 4965
 [11] Provas N, Wang Q, Haataja M, Grant M 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 155502
 [12] Wang Z J 2009 *Ph. D. Dissertation* (Xi'an: Northwestern Polytechnical University) (in Chinese) [王志军 2009 博士学位论文 (西安: 西北工业大学)]
 [13] Trivedi R, Seetharaman V, Eshelman M A 1991 *Metall. Trans. A* **22A** 585
 [14] Coriell S R, Sekerka R F 1976 *J. Cryst. Growth* **34** 157
 [15] Zhu M F, Stefanescu D M 2007 *Acta Mater.* **55** 1741
 [16] Beltran - Sanchez L, Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2471
 [17] Wei L, Lin X, Wang M, Huang W D 2011 *Appl. Phys. A* **103** 123
 [18] Wei L, Lin X, Wang M, Huang W D 2012 *Physica B* **407** 2471
 [19] Lipton J, Glicksman M E, Kurz W 1987 *Metall. Trans. A* **18A** 341
 [20] Tiller W A, Jackson K A, Rutter J W, Chalmers B 1953 *Acta Metall.* **1** 428
 [21] Kurz W, Fisher D.J 1981 *Acta Metall.* **29** 11
 [22] Huang W D, Geng X G, Zhou Y H 1993 *J. Cryst. Growth* **134** 105
 [23] Laxmanan V 1985 *Acta. Metall.* **33** 1023
 [24] Lu S Z, Hunt J D 1992 *J. Cryst. Growth* **123** 17
 [25] Mullins W W, Sekerka R F 1964 *J. Appl. Phys.* **35** 444

Effect of surface tension anisotropy on the growth patterns of cellars in directional solidification*

Zhang Yun-Peng Lin Xin[†] Wei Lei Wang Meng
 Peng Dong-Jian Huang Wei-Dong

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 8 May 2012; revised manuscript received 11 June 2012)

Abstract

The growth patterns of cellars in directional solidification are investigated numerically using the cellular automata (CA) model in two dimensions. A criterion which determine whether the cellars reach stable state is derived from the analysis of simulated results. The simulated results also show that it is easy for tip splitting to appear for cellars when the surface tention anisotropy is very small. So it is hard to obtain stable cellular arrays. However, if the amplitude of surface tention anisotropy is strong enough, it is easy to obtain stable cellular arrays. And the intensity of surface energy anisotropy can considerably influence the stable cellular patterns. The stronger the surface energy anisotropy, the smaller the stable cellular spacing and the cellular tip radius are, and the smaller the ratio between tip radius and cellular spacing, the smaller the tip concentration and the tip undercooling are.

Keywords: cellular automata, cellular growth, anisotropy.

PACS: 81.30.-t, 68.70.+w

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50971102 and 50901061), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610402), the Programme of Introducing Talents of Discipline to Universities (Grant No. 08040), and the Fund of the State Key Laboratory of Solidification Processing in NWPU (Grant No. 02-TZ-2008).

[†] E-mail: xlin@nwpu.edu.cn