

横向限制下凝固微观组织演化的相场法模拟*

杜立飞¹⁾ 张蓉^{1)†} 邢辉¹⁾ 张利民¹⁾ 张洋¹⁾ 刘林²⁾

1) (西北工业大学理学院, 空间应用物理与化学教育部重点实验室, 西安 710072)

2) (西北工业大学, 凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2012年11月7日收到; 2013年1月15日收到修改稿)

凝固过程中横向限制挡板的存在对晶体微观结构的演化存在重要的影响, 不同性质的横向挡板将产生不同的限制效应, 对最终凝固微观组织形成起着决定性作用. 本文利用非等温相场模型, 定性地模拟了纯金属 Ni 凝固过程中横向限制的存在对其枝晶微观形貌演化的影响, 研究了不同尺寸及性质的横向挡板对枝晶微观结构形成的影响, 讨论了横向限制对不同初始枝晶间距枝晶形貌发展的作用. 计算结果表明, 横向限制挡板的存在将直接影响凝固过程中微观组织的形貌演化过程并最终改变微观结构. 随着横向挡板间距的减小, 微观组织变化更加明显; 挡板初始温度越低, 枝晶形貌改变越明显; 初始枝晶间距越大, 形貌变化越明显; 不同挡板高度对微观结构具有基本相同的影响.

关键词: 相场模拟, 微观组织演化, 横向限制

PACS: 64.70.D-, 82.20.Wt, 61.50.Ah

DOI: 10.7498/aps.62.106401

1 引言

材料的微观组织结构对材料的性能具有决定性的作用, 通过控制凝固条件获得最优微观结构是金属材料设计技术的重要手段^[1-6]. 在实际凝固过程中, 许多工程组件具有非规则的横截面, 例如由定向凝固获得的涡轮叶片就是由不规则截面的影响最终得到的复杂微观结构成品^[7], 这种不规则界面的存在对凝固过程有两个重要的作用: 首先, 热量的传导因界面的存在受到明显影响, 不同导热性质的横向界面有着不同的导热规律; 其次, 界面的存在会明显影响固液界面的推进, 且不同形状和性质的界面对微观组织的形成存在不同程度的影响. 另外, 在合金凝固过程中存在横向界面时, 溶质场的分布也会显著变化. Fabietti 等^[8] 实验研究了定向凝固条件下横向限制对丁二腈凝固过程的影响, 发现横向限制对枝晶尖端生长速度及枝晶间距存在重要影响, 同时横向限制的存在改变了溶质的宏观及微观偏析, 晶体形态也受到一定程度的影响.

王华明等^[9] 研究了侧向约束条件下单晶 Ni 基高温合金的凝固行为及溶质再分配规律, 发现侧向约束条件对单晶 Ni 基高温合金的凝固组织、溶质偏析及溶质再分配均具有极为强烈的影响, 提出侧向约束条件即试样断面变化对单晶 Ni 基高温合金凝固过程的影响实质上是局部凝固工艺参数的影响. 可见, 研究横向限制条件下的凝固行为对理解界面存在对凝固过程中溶质及温度传导规律具有重要意义, 溶质及热量传导的改变将直接影响材料微观结构的形成, 并最终导致材料具有特异的性能. 但是由于实验条件的限制, 目前的实验手段很难精确地测量材料凝固过程的诸多细节, 而采用计算模拟的方法不仅可以有效地节约成本, 还能够有效地反映完整的凝固过程, 并且获得更加丰富的过程参量及数据, 有助于在理论上研究各种实验条件对凝固过程的影响^[10-14]. 本文采用相场模拟的方法, 模拟横向限制存在时纯金属 Ni 单晶的凝固行为, 讨论横向挡板的尺寸及温度对凝固组织微观结构演化的影响规律, 以期对实际铸件凝固过程的控制提供理论指导.

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2010CB631202) 和西北工业大学基础研究基金 (批准号: JC201272) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: xbw101@nwpu.edu.cn

2 相场模型及数值求解

纯金属凝固过程的相场模型包含两个相场变量, $\phi(\mathbf{r}, t)$ 和 $T(\mathbf{r}, t)$. 其中序参量 $\phi(\mathbf{r}, t)$ 是空间 \mathbf{r} 和时间 t 相关的变量, 且定义 $\phi = 0$ 代表固相, $\phi = 1$ 代表液相; $T(\mathbf{r}, t)$ 表示温度场. 纯金属 Ginzburg-Landau 形式的体系自由能^[15] 可表示为

$$F(\phi, m) = \int \left[f(\phi, m) + \frac{1}{2} \varepsilon^2 |\nabla \phi|^2 \right] d\mathbf{r}, \quad (1)$$

其中, ε 是界面自由能系数, $f(\phi, m)$ 为双势自由能密度函数, 其形式可取为

$$f(\phi, m) = \frac{1}{4} \phi^4 - \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3} m \right) \phi^3 + \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{2} m \right) \phi^2, \quad (2)$$

式中, m 为控制自由能势阱的参数. 界面能各向异性通过 $\varepsilon = \varepsilon_0 (1 + \delta \cos(j(\theta - \theta_0)))$ 引入, 其中 δ 表示各向异性强度, j 为各向异性模数, θ 为最优生长方向与参考方向的夹角, θ_0 为参考角度. 相场变量的控制方程可表示为时间相关的 Ginzburg-Landau 方程

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = - \frac{\delta F}{\delta \phi}, \quad (3)$$

其中 τ 为相场参量. 将 (1) 式代入 (3) 式, 化简得到相场控制方程

$$\tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \varepsilon' \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \varepsilon' \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \nabla \cdot (\varepsilon^2 \nabla \phi) + \phi (1 - \phi) \left(\phi - \frac{1}{2} + m \right), \quad (4)$$

(3) 式中可引入随机噪声 $a\phi(1-\phi)\chi$, a 为噪声强度, χ 为 $\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$ 的随机数. m 是温度相关参数, 定义为

$$m(T) = (\alpha/\pi) \tan^{-1} [\gamma(T_e - T)], \quad (5)$$

式中, T_e 为平衡温度, $\alpha < 1$ 以保证 $|m(T)| < 1/2$.

温度场控制方程可由热扩散方程获得

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla^2 T + K \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad (6)$$

其中 T 为无量纲温度, K 为无量纲潜热. 利用有限差分方法数值求解方程 (4) 和 (6), 计算所有参数见表 1. 关于不同大小物理量对枝晶形貌演化的影响可以参考文献 [15] 中的讨论. 由于本文主要研究横向挡板存在对枝晶生长形貌的影响, 故在计算过程中各个物理量保持恒定, 以保证枝晶生长具有相对稳定的形态.

表 1 模拟中无量纲参数取值

参数	ε_0	τ	α	γ	a	δ	j	$\Delta x, \Delta y$	Δt	K
数值	0.01	0.0003	0.9	10.0	0.005	0.04	4	0.03	0.002	1.5

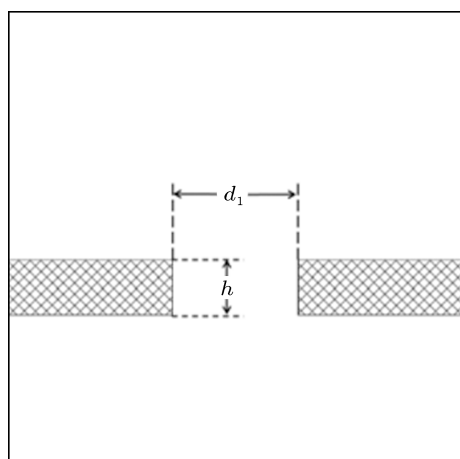


图 1 模拟中横向挡板示意图

计算区域大小为 $800\Delta x \times 800\Delta y$, 挡板示例见图 1, 矩形挡板间距定义为 d_1 , 挡板高度为 h . 初始时在计算区域底部引入等距分布的晶核, 整个区域温

度全部为 T_e , 挡板温度具有一定的初始过冷度 ΔT . 计算中边界条件取周期性边界条件.

3 模拟结果及分析讨论

3.1 横向限制对枝晶形貌演化过程的影响

图 2(a)–(f) 给出了横向限制存在时枝晶形貌的演化过程. 初始枝晶间距 $d_0 = 100\Delta x$, 挡板高度 $h = 100\Delta y$, 挡板间距 $d_1 = 200\Delta x$. 未碰到挡板之前, 主枝晶臂向上自由生长; 在枝晶尖端接触横向挡板时, 尖端生长被限制, 由于模拟中挡板被假设为完全润湿, 且挡板温度低于液相温度, 所以固相接触挡板后沿其边缘快速生长, 绕过挡板, 且在挡板拐角处快速发育出新的枝晶臂, 与通过挡板间隙的枝晶臂形成竞争生长, 如图 2(c) 所示. 同时, 固相绕过挡板后沿挡板上边缘快速生长, 且发育出新的枝晶

臂向上生长, 可见, 横向挡板的存在, 导致绕过挡板后的枝晶形貌发生明显变化: 通过挡板间隙的枝晶继续向上发展, 但其靠近挡板一侧的二次枝晶发展受到绕过挡板新形成的枝晶臂的限制; 由挡板处发育第一条枝晶臂存在相对发达的二次枝晶, 但挡板

上边缘重新发展的枝晶臂的间距明显变小, 且基本不存在二次枝晶臂. 图 2(g) 给出了侧向约束条件下单晶 Ni 基高温合金的凝固组织^[9], 可以看到断面的存在, 使合金凝固组织的发展在断面前后发生了明显的规律性变化, 与相场模拟的结果基本一致.

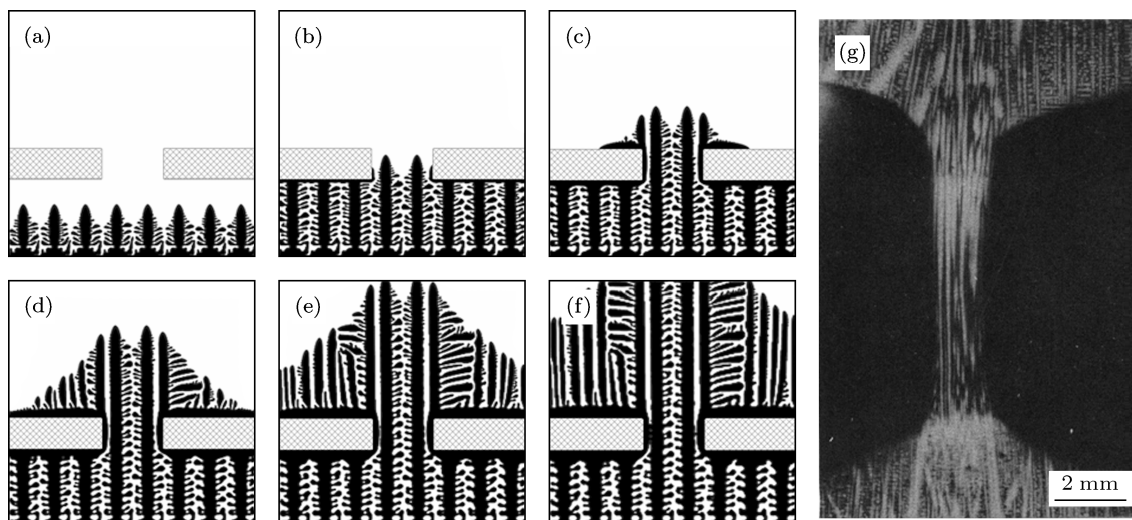


图 2 矩形挡板存在时枝晶形貌演化过程 (a) 2000 时间步; (b) 4000 时间步; (c) 6000 时间步; (d) 8000 时间步; (e) 10000 时间步; (f) 12000 时间步; (g) 实验结果

3.2 挡板尺寸对枝晶生长形态的影响

图 3 给出了挡板高度 $h = 100\Delta y$ 时, 不同挡板间距条件下的枝晶生长的微观结构. 由 2.1 可知, 挡板的存在不仅阻碍其下方枝晶的生长, 还可以引发新的枝晶发育, 并且对由挡板间隙穿过的枝晶的侧向二次枝晶发展存在明显影响. 挡板间距较大时, 大部分的枝晶由挡板间隙通过, 枝晶形貌只在靠近挡板处受到影响, 使其二次枝晶臂形态发生改变. 随着挡板间距减小, 越来越多的枝晶生长被挡板的限制, 而由挡板新发育的枝晶形貌明显区别于初始的枝晶形貌: 挡板拐角处形成的枝晶在靠近挡板一侧有着发达的二次枝晶臂, 由挡板上边缘发展的枝晶臂的速度减缓, 枝晶间距减小, 且几乎不存在二次

枝晶. 随着挡板间距的继续减小, 此类效应逐渐加强. 由此可见, 挡板间距对枝晶形貌及生长速度存在明显的影响.

图 4 给出了挡板间距 $d_1 = 200\Delta x$ 时, 不同高度挡板时的枝晶形貌转变. 挡板高度对枝晶形貌改变不大, 但会明显改变穿过挡板的枝晶与挡板新发育枝晶间的竞争生长关系: 挡板高度较小时, 穿过挡板间隙的枝晶生长速度明显大于挡板新发育的枝晶; 随着挡板高度增大, 晶体沿挡板边缘的快速生长使挡板上方能够快速发出新的枝晶, 且挡板高度增到一定程度后, 挡板拐角处发育枝晶生长速度将超过穿过间隙的枝晶, 如图 4(d) 所示, 但沿挡板上边缘的固相生长明显减缓.

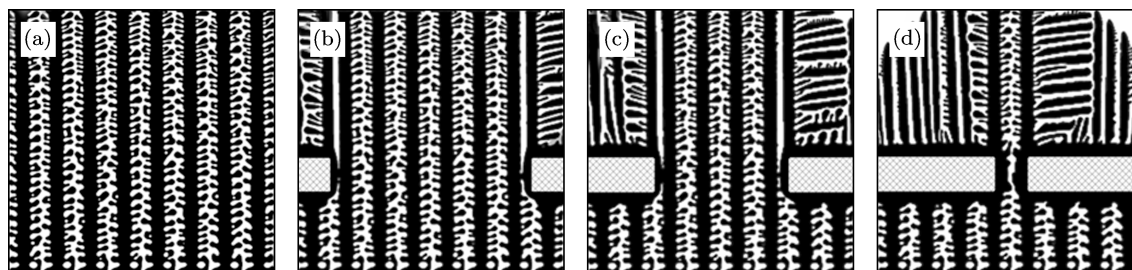


图 3 不同挡板间距下的枝晶形貌 (a) 无挡板; (b) $d_1 = 600\Delta x$; (c) $d_1 = 400\Delta x$; (d) $d_1 = 100\Delta x$

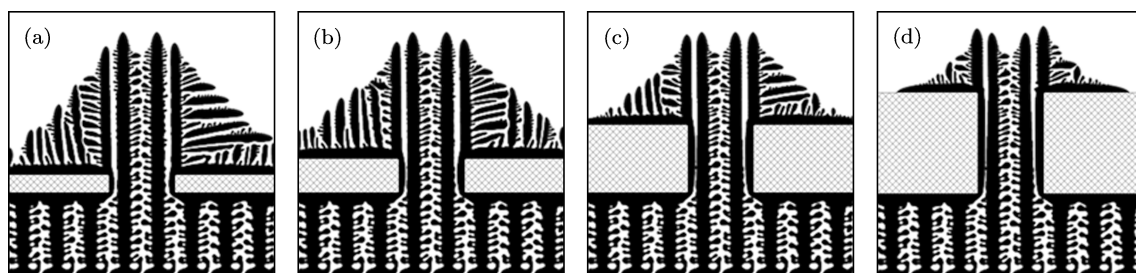


图4 不同挡板高度下的枝晶形貌 (a) $h = 50\Delta x$; (b) $h = 100\Delta x$; (c) $h = 200\Delta x$; (d) $h = 300\Delta x$

3.3 挡板初始温度对枝晶生长形态的影响

除了挡板尺寸对枝晶演化过程存在明显影响, 我们设置了不同初始温度 (T_0) 的挡板, 研究挡板温度对枝晶演化的不同影响, 计算结果见图 5. 挡板初始温度直接影响了整个计算区域的温度分布, 挡板具有较大初始过冷度时, 初始枝晶的主枝晶轴变得粗大, 且二次枝晶发育受到明显限制, 如图 5(c) 所

示. 在枝晶绕过挡板间隙时, 挡板初始温度越低, 枝晶生长速率越大, 且低的挡板初始温度明显促进固相的生长, 绕过挡板间隙的枝晶形貌越发达. 当挡板初始温度低到一定程度时, 如图 5(d) 所示, 枝晶碰到挡板前, 成柱状晶形式生长, 绕过挡板后以挡板上边缘拐角为中心发育成为等轴晶, 枝晶形态发生明显的转变.

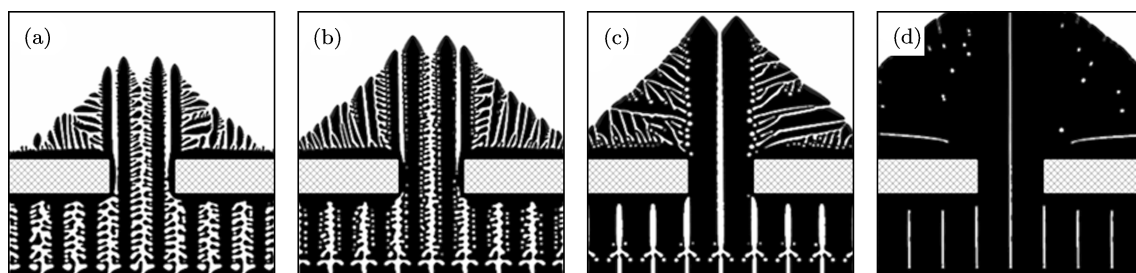


图5 不同初始挡板温度下的枝晶形貌 (a) $T_0 = 1.01\Delta T$; (b) $T_0 = 1.1\Delta T$; (c) $T_0 = 1.2\Delta T$; (d) $T_0 = 1.4\Delta T$

3.4 初始枝晶间距对枝晶生长形态的影响

图 6 给出了挡板间距一定 ($d_1 = 200\Delta x$) 时, 不同初始枝晶间距条件下的枝晶微观形貌. 固相绕过挡板生长时, 会沿着间隙边缘形成二次枝晶臂较发达的新主枝晶轴, 故在初始枝晶间距较大时, 绕过挡板间隙的枝晶间距明显减小, 且由挡板上边缘新

发育的枝晶的间距更小; 当初始枝晶间距等于挡板间隙时, 通过挡板间隙的枝晶臂由于充足的发展空间, 二次枝晶臂变得发达, 挡板上方枝晶间距仍然会减小; 当初始枝晶间距小于挡板间距时, 通过挡板间隙的枝晶臂按原轨迹继续生长, 但是与两侧重新生成的枝晶臂形成竞争生长, 最后发育成不规则的结构.

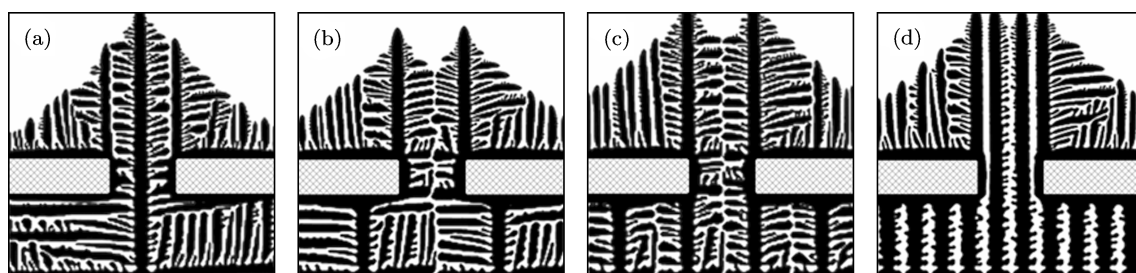


图6 不同初始枝晶间距下的枝晶形貌 (a) $d_0 = 800\Delta x$; (b) $d_0 = 400\Delta x$; (c) $d_0 = 200\Delta x$; (d) $d_0 = 80\Delta x$

4 结论

凝固过程中横向限制的存在对晶体微观结构的形成有着重要的影响. 本文以相场计算模拟的方法, 研究了不同尺寸和初始过冷度的横向挡板对 Ni 纯金属枝晶生长形态的影响, 同时讨论了横向挡板对不同初始枝晶间距的枝晶生长过程的作用. 研究发现: 枝晶生长过程中碰到横向挡板时, 枝晶的生长会直接被挡板下边缘限制, 但固相绕过挡板后会沿挡板上边缘快速发展, 并发育出新的枝晶臂, 明显改变枝晶的发展过程. 挡板间隙越小, 枝晶形貌的改变越明显, 挡板初始温度越低, 固相在挡板附近的生长越迅速, 越能明显改变枝晶微观结构. 大

厚度的挡板将加速挡板发育新枝晶的速度, 改变其与穿过挡板间隙枝晶的竞争生长关系. 对不同初始枝晶间距的枝晶生长过程, 横向挡板对枝晶间距的影响不同: 初始枝晶间距小于挡板间隙时, 枝晶形貌只在挡板边缘处发生明显改变; 初始枝晶间距接近挡板间隙时, 由挡板发育出的新枝晶与穿过挡板间隙的枝晶形成竞争生长; 当初始枝晶间距远远大于挡板间隙时, 横向挡板将显著改变绕过挡板后的枝晶间距及微观结构. 可见横向挡板的存在可以作为一种材料制备过程中的微观结构控制方法, 来改变晶体生长形态以得到具有相对优异结构的材料, 实现材料设计.

- [1] Asta M, Beckermann C, Karma A, Kurz W, Napolitano R, Plapp M, Purdy G, Rappaz M, Trivedi R 2009 *Acta Mater.* **57** 941
- [2] Yan Z M, Li X T, Cao Z Q, Zhang X A, Li T J 2008 *Mater. Lett.* **62** 4389
- [3] Yasuda H, Toh H, Iwai H, Morita K 2007 *ISIJ Int.* **47** 619
- [4] Yao W J, Dai F P, Wei B B 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 508
- [5] Wang N, Wei B B 2004 *Chin. Phys. Lett.* **21** 1120
- [6] Li H, Wang G H, Bian X F, Zhang L 2001 *Chin. Phys. Lett.* **18** 495
- [7] Li S F, Zhang D H, Bu K 2012 *Rare Met. Mater. Eng.* **41** 559 (in Chinese) [李世峰, 张定华, 卜昆 2012 稀有材料与工程 **41** 559]
- [8] Fabietti L M, Seetharaman V, Trivedi R 1990 *Metall. Trans. A* **24** 1299
- [9] Wang H M, Tang Y J, Zhang J H, Li A, Zhang Z Y, Yu Y, Hu Z Q 1993 *Mater. Sci. Prog.* **7** 99 (in Chinese) [王华明, 唐亚俊, 张静华, 李敖, 张志亚, 于洋, 胡壮麒 1993 材料科学进展 **7** 99]
- [10] Li J J, Wang J C, Xu Q, Yang G C 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1514 (in Chinese) [李俊杰, 王锦程, 许泉, 杨根仓 2007 物理学报 **56** 1514]
- [11] Shi Y F, Xu Q Y, Liu B C 2012 *Acta Metal. Sin.* **48** 41 (in Chinese) [石玉峰, 许庆彦, 柳百成 2012 金属学报 **48** 41]
- [12] Wang G, Xu D S, Yang R 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 343 (in Chinese) [王刚, 徐东生, 杨锐 2009 物理学报 **58** 343]
- [13] Lu Y L, Chen Z, Lai Q B, Zhang J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 319 (in Chinese) [卢艳丽, 陈铮, 来庆波, 张静 2009 物理学报 **58** 319]
- [14] Pan S Y, Zhu M F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 228102 (in Chinese) [潘诗琰, 朱鸣芳 2012 物理学报 **61** 228102]
- [15] Kobayashi R 1993 *Physica D* **63** 63410

Phase-field simulation of solidified microstructure evolution in the presence of lateral constraint*

Du Li-Fei¹⁾ Zhang Rong^{1)†} Xing Hui¹⁾ Zhang Li-Min¹⁾
Zhang Yang¹⁾ Liu Lin²⁾

1) (*Key Laboratory of Space Applied Physics and Chemistry,*

Ministry of Education, School of Science, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

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

(Received 7 November 2012; revised manuscript received 15 January 2013)

Abstract

Lateral constrain in the presence of melting has a significant effect on microstructure evolution of crystal growth, and this effect is related to the size and property of lateral constrain, thus determining microstructure formation during solidification. In the paper, microstructure evolution in the presence of lateral constrain during the solidification of pure Ni metal is simulated using a non-isothermal phase-field model. Effects of size and properties of lateral constrain are simulated and studied, also microstructures formed at different initial dendritic arm distances are discussed. Results indicate that the presence of lateral constrain has a direct influence on pattern evolution which determines the microstructure formation. Microstructure changes significantly with lateral constrain distance turning small, initial constrain temperature low becoming low and initial dendrite arm distance growing. Different heights of lateral constrains have almost the same effects on microstructure change during solidification.

Keywords: phase-field simulation, microstructure evolution, lateral constraint

PACS: 64.70.D-, 82.20.Wt, 61.50.Ah

DOI: 10.7498/aps.62.106401

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2010CB631202), and the NPU Foundation of Fundamental Research, China (Grant No. JC201272).

† Corresponding author. E-mail: xbw101@nwpu.edu.cn