

相场法模拟 Fe-C 合金定向凝固的液相通道

康永生 赵宇宏 侯华 靳玉春 陈利文

Simulation of liquid channel of Fe-C alloy directional solidification by phase-field method

Kang Yong-Sheng Zhao Yu-Hong Hou Hua Jin Yu-Chun Chen Li-Wen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 188102 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.188102

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.188102>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I18>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

铜箔上生长的六角氮化硼薄膜的扫描隧道显微镜研究

Scanning tunneling microscopy study of h-BN thin films grown on Cu foils

物理学报.2016, 65(11): 116801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.116801>

界面合金化控制柔性 Al/PI 薄膜应力的研究

Study on controlling the stress in flexible Al/PI film by interface alloying

物理学报.2015, 64(21): 216802 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.216802>

潮湿空气对碘化铯薄膜结构和性质的影响

Influence of air exposure on the structure and properties of cesium iodide film

物理学报.2014, 63(14): 146801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.146801>

脉冲敲击技术对 PI 微球表面粗糙度的影响

Influence of pulse tapping technology on surface roughness of polyimide capsule

物理学报.2013, 62(19): 196801 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.196801>

相场法模拟 Fe-C 合金定向凝固的液相通道*

康永生 赵宇宏[†] 侯华 靳玉春 陈利文

(中北大学材料科学与工程学院, 太原 030051)

(2016年6月2日收到; 2016年6月22日收到修改稿)

在定向凝固的研究中, 主要是通过改变推进速度或温度梯度以调节凝固组织, 提升合金铸件性能. 对于不同定向凝固条件下组织的形成及相关性质的研究成为了热点, 本文主要研究在特定定向凝固条件下 Fe-C 合金枝晶尖端分裂后形成的液相通道及推进速度对于液相通道的影响. 研究发现: 在系统各向异性与材料各向异性的综合作用下, 形成了定向凝固液相通道; 且随推进速度的增大, 液相通道内溶质浓度升高, 长度增大, 直径基本维持不变. 通过液相通道相关尺度以及溶质富集的模拟结果分析其造成的晶内偏析的程度, 同时指出可通过适当降低推进速度来减小液相通道溶质偏析的程度.

关键词: 定向凝固, 液相通道, 推进速度, 偏析**PACS:** 81.30.Bx, 71.15.Rf, 68.37.-d**DOI:** 10.7498/aps.65.188102

1 引言

在合金定向凝固和单晶铸件中, 由溶质偏析所造成的诸如雀斑之类的缺陷及微观组织很难在进一步的加工中消除^[1-3], 致使铸件性能大幅度降低. 如何合理地控制溶质偏析, 从而提高铸件性能, 成为了材料学家孜孜不倦的追求. 从凝固过程控制凝固组织, 了解溶质偏析的产生机理及途径, 对于有效、合理地控制铸造缺陷、提升铸件性能有极大的研究意义.

研究表明^[4-8], 影响定向凝固铸件的主要因素包括推进速度和温度梯度. 许多学者通过实验或模拟的方法研究了二者对于最终凝固组织及性能的影响, 取得了不菲的成果. 相场法模拟由于能定量、准确且直观地描述枝晶生长过程, 并且可以耦合各种外部场, 模拟各种复杂条件下的凝固组织变化, 从而在微观组织研究中得到了广泛的应用. Haxhimali 等^[4]率先研究了界面能各向异性作用下 Al-Zn 合金中存在的 DOT 转变, 即 [110]-Hyperbranched-[100] 的转变, 并指出了溶质含量对

于界面能各向异性以及枝晶生长取向转变的影响作用. 随后, 文献^[5, 6]也通过相场法模拟研究 Al-Zn 合金枝晶取向转变, 在定向凝固条件下模拟获得了海藻状晶, 同时获得与实验结果相一致的模拟结果. Morteza 等^[7]对于 Al-Zn 合金枝晶取向转变进行了进一步的研究, 综合多次模拟及实验结果, 研究了在系统各向异性(包括推进速度和温度梯度)与材料各向异性(界面能各向异性)共同作用下枝晶取向转变以及树枝晶到海藻状晶转变的渐变过程. 在以上相场模型的基础上, Salgado-Ordorica 等^[8]将流场耦合至定向凝固相场模型中, 研究了 [110] 取向枝晶尖端分裂形成孪晶的机理, 并成功模拟出自然对流下孪晶的形成过程. 定向凝固技术是在对高温合金的研制中建立和完善起来的, 然而对于铁基高温合金定向凝固的研究并不多见, 多数人都在研究 [110] 枝晶定向凝固过程中的微观组织变化, 很少有人研究在 DOT 转变中位于多枝晶 (hyperbranched) 区域枝晶在定向凝固过程中的微观组织演化. 本文率先通过相场法模拟出 Fe-C 合金定向凝固过程中所形成的液相通道, 并系统地分析了液相通道的形成及其相关性质.

* 国家自然科学基金(批准号: 51574207, 51574206, 51204147, 51274175)和山西省归国学者基金(批准号: 2013-81)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zyh388@sina.com

由于枝晶尺度较小,一般在几微米,在实验中观察其形貌演化不易操作^[9],本文对于枝晶尖端分裂后形成的液相通道的研究,主要以相场法模拟结果为基础,利用定向凝固原理进行数据分析及处理.首先,介绍了本文模拟所使用的相场模型以及相关相场参数.其次,确定合理的模拟参数,研究推进速度对于枝晶尖端分裂行为以及液相通道的影响.最后,通过综合研究枝晶的形貌及溶质场分布,优化定向凝固参数,减小晶内偏析程度.

2 相场模型

相场法引入了在界面处急剧变化但连续的变量 $\phi(r, t)$,它表示材料在位置 r ,时间 t 处的有序化数($\phi = -1$ 时为液相, $\phi = 1$ 时为固相).这样,固液界面就变成了一个具有一定厚度的薄层.本次模拟所采用的是Ohno和Matsuura^[10,11]改进后包含固相扩散系数的Kurz-Giovanida-Trivedi模型,主要包括相场控制方程以及溶质场控制方程.

首先,定义一个无量纲参数 u :

$$u = \ln \frac{C}{[(C_L^0 + C_S^0)/2 + \phi(C_S^0 - C_L^0)/2]}, \quad (1)$$

则溶质场控制方程及相场控制方程为:

$$\begin{aligned} \tau \frac{\partial \phi}{\partial t} = & \omega^2 \nabla^2 \phi + (\phi - \phi^3) - \frac{\lambda}{1 - k_e} (1 - \phi^2)^2 \\ & \times \left[e^u - 1 + \frac{(x - x_0 - V_P t)(1 - k_e)}{l_T} \right], \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} = & \nabla \cdot \left[\tilde{q}(\phi) D_L e^u \frac{C_L^0 [1 + k_e - (1 - k_e)\phi]}{2} \nabla u \right] \\ & - \nabla \cdot j_{at}, \end{aligned} \quad (3)$$

式中, C 为溶质浓度,上标0表示平衡态,下标S,L分别表示固、液态; t 为枝晶生长时间; D_L 为溶质液相扩散系数; j_{at} 为溶质截留项^[12]; w 为界面宽度; τ 为弛豫时间; λ 为主枝晶间距; k_e 为溶质分配系数; V_P 为推进速度; l_T 为热扩散长度, $l_T = (m_e(k_e - 1)C_L^0)/G$, m_e 为合金液相线斜率, G 为温度梯度; x 为枝晶尖端 X 轴坐标,下标0表示初始晶核位置.

立方对称晶体固液界面界面能表达式如下^[13]:

$$\begin{aligned} \gamma_{sl}(\mathbf{n}) = & \gamma_{sl}^0 \left(1 + a_1 \left(Q - \frac{3}{5} \right) \right. \\ & \left. + a_2 \left(3Q + 66S - \frac{17}{7} \right) + \dots \right), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} Q = & \frac{n_x^4 + n_y^4 + n_z^4}{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^2}, \\ S = & \frac{n_x^2 n_y^2 n_z^2}{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}, \end{aligned} \quad (5)$$

$$w = w_0 \gamma(\mathbf{n}), \quad \tau = \tau_0 \gamma(\mathbf{n})^2. \quad (6)$$

在模拟过程中,通过(6)式将界面能各向异性添加至相场模型中. \mathbf{n} 为界面法向量; γ_{sl}^0 为各向同性的界面能; a_1, a_2 为两个各向异性因子; w 为界面宽度; τ 为弛豫时间;下标0表示初始值即相场模型参数.

3 数值求解

3.1 初始条件和边界条件

取半径为 r_0 的初始球形晶核:

$$\begin{cases} \phi = 1, & x^2 + y^2 + z^2 \leq r_0^2, \\ \phi = -1, & x^2 + y^2 + z^2 > r_0^2. \end{cases} \quad (7)$$

置初始晶核于计算区域的一角($x, y, z \geq 0$),设枝晶轴对应于直角坐标系的 x 轴、 y 轴、 z 轴,初始界面采用球体形状,它代表凝固开始时的晶核.为了减小计算量,计算取八分之一立方体区域($x, y, z \geq 0$).在计算区域边界上采用Zero-Neumann边界条件^[14].

3.2 材料热物性参数

本文研究对象为Fe-0.5 wt%C合金,模拟选用热物性参数如表1所列.

表1 模拟选用材料物性参数

Table 1. Material properties values chosen for simulation.

Property	Value in simulation
$m_e/\text{K} \cdot (\text{wt}\%)^{-1}$	-65
k_e	0.204
T_M/K	1810
$D_L/\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	2.0×10^{-8}
$D_S/\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	1.0×10^{-9}
$\rho/\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$	7.01×10^{-3}
$L_f/\text{J} \cdot \text{mol}^{-1}$	15170

3.3 相场参数设置

为获得收敛性的模拟结果,本次模拟相关相场参数设置如表2所列. λ 为相场模型参数中的惟一

自由变量,本文中长度和时间分别以界面厚度 w_0 和弛豫时间 τ_0 进行无量纲化计算,具体过程参考文献 [6].

表2 模拟选用相场模型参数

Table 2. Phase-field model parameters for simulation.

Phase-field model parameters	Value in simulation
λ	16
ω_0/m	1.0×10^{-7}
τ_0/s	1.0×10^{-6}

4 结果分析

由于在模拟过程中忽略了动力学因素的影响,为避免模拟结果产生较大误差,定向凝固冷却速度不宜过大.在以下模拟过程中,设定定向凝固温度梯度 $G = 20 \text{ K/mm}$,分别选取不同的推进速度 V_P ,主要研究推进速度对于特定条件下定向凝固过程中液相通道形成的影响.

4.1 界面能各向异性对于枝晶液相通道的影响

研究表明 [4-7,15],在不同的界面能各向异性的影响下,枝晶尖端的生长取向会发生转变.随定向凝固推进速度的增大,枝晶尖端会出现分裂现象,

形成复杂的枝晶形貌.通过图 1 的对比,可以发现:在定向凝固枝晶生长模拟过程中,界面能各向异性也影响着枝晶尖端的分裂行为,使枝晶在更小的速度下发生尖端分裂现象.在谢玉 [16] 对于 Fe-C 合金枝晶生长的研究结果中, $(a_1, a_2) = (0, -0.01)$, $(0.08, -0.01)$, $(0.12, -0.01)$ 分别属于 [110]、多枝晶、[100] 区域.在图 1 的模拟过程中,选定三组界面能各向异性参数进行定向凝固枝晶生长模拟研究.在设定定向凝固条件下,与 Al-Zn 合金模拟结果相比 [5] (如图 1 (b) 所示),并未出现类似海藻状晶,而是出现枝晶尖端分裂现象,形成类似孪晶的对称枝晶结构,与 Salgado-Ordorica 等 [8] 的模拟实验结果相一致.由于在模拟过程中并未考虑流场作用,模拟结果表明在相应的条件下,系统各向异性因素(推进速度和温度梯度,二者平行)抑制了海藻状晶的形成,使分裂后的枝晶尖端仍沿温度梯度方向生长.且形成的枝晶在分裂的原尖端位置形成液相通道,造成了溶质的大量富集.由于界面能各向异性在合金体系内会受到溶质含量的影响 [4],通过调节特定成分合金的界面能各向异性系数可以研究不同成分合金的定向凝固组织变化.同时,选择合适成分的合金有助于改善最终定向凝固组织,减少枝晶尖端分裂现象,从而减低碳内偏析.

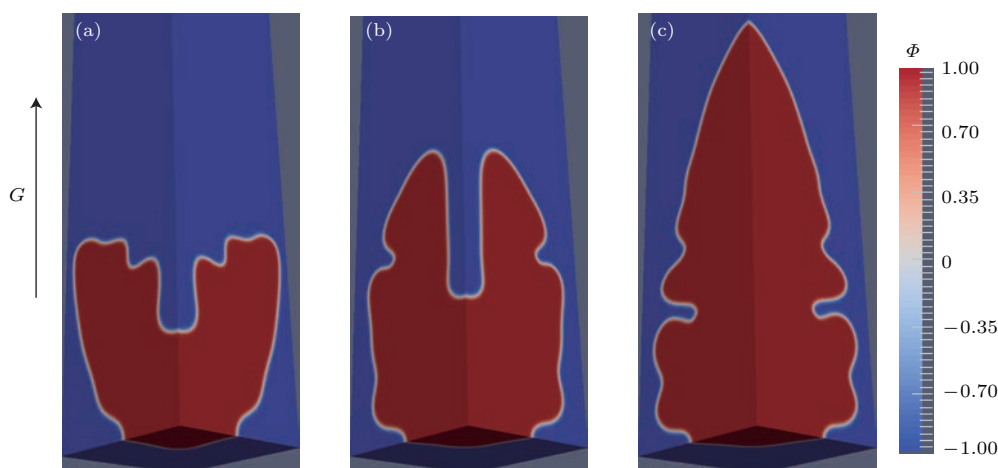


图1 (网刊彩色) 不同各向异性下定向凝固模拟结果 $V_P = 4 \text{ mm/s}$, $t = 800$ (a) $(0, -0.01)$; (b) $(0.08, -0.01)$; (c) $(0.12, -0.01)$

Fig. 1. (color online) Phase-field results for DS with varying anisotropy parameters and $V_P = 4 \text{ mm/s}$, $t = 800$: (a) $(0, -0.01)$; (b) $(0.08, -0.01)$; (c) $(0.12, -0.01)$.

4.2 枝晶尖端分裂速度

Morteza 等 [7] 以 Mg-Al 合金为例进行相场模拟研究发现,随推进速度的增大,当枝晶尖端曲率

过冷度增大至与溶质过冷度近似时,会致使枝晶尖端分裂,从而改变枝晶尖端取向.枝晶尖端生长速度的变化能够明显表征枝晶尖端分裂过程,在界面能各向异性作用下,定向凝固枝晶尖端更早地出现

分裂现象. 图2为不同推进速度下的三维枝晶形貌, 可以看出, 随推进速度增大, 枝晶尖端在更早的阶段分裂形成液相通道, 且液相通道长度也随之变

长, 新分裂形成枝晶上二次枝晶生长迅速. 由于模拟中选用参数抑制了分裂后枝晶的径向生长, 故而并未形成取向随机的海藻状晶.

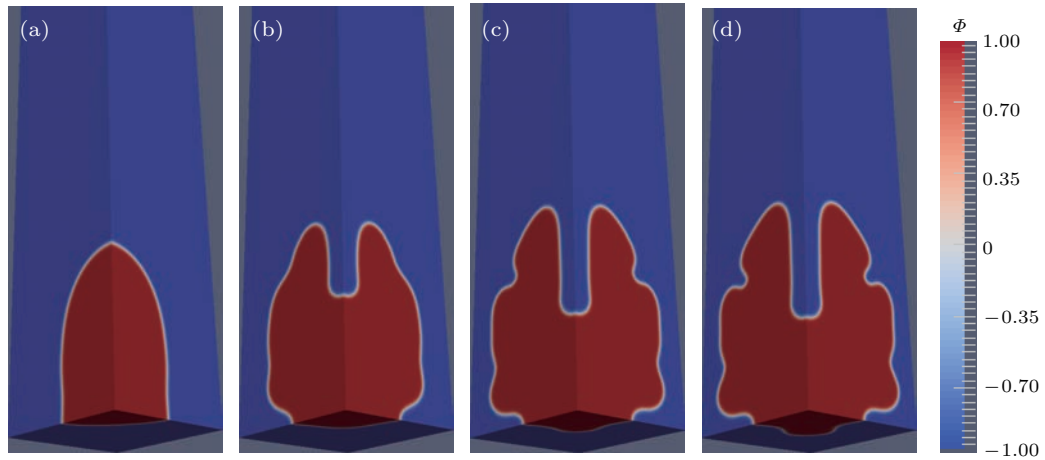


图2 (网刊彩色) 不同推进速度下定向凝固枝晶三维形貌 (a) 2 mm/s; (b) 4 mm/s; (c) 6 mm/s; (d) 8 mm/s
 Fig. 2. (color online) The variation of the dendrite 3D morphology in different pulling velocities: (a) 2 mm/s; (b) 4 mm/s; (c) 6 mm/s; (d) 8 mm/s.

Salgado-Ordorica 等^[8]在模拟Al系二元合金孪晶的形成过程中, 同样形成了类似于模拟结果中的液相通道, 他们主要从边界条件及动力学因素角度分析了液相通道的变化, 但并未对其形成条件及原因进行分析. 图3为不同推进速度下枝晶尖端生长速度的变化曲线. 由图3可以看出枝晶尖端生长速度从初始一直减小直至为零, 且推进速度越大, 其减小的速度越快. 图3中箭头标示位置为枝晶尖端分裂的开始位置. 枝晶尖端分裂后, 形成更多的新的尖端, 新的枝晶尖端迅速生长. 在枝晶尖端分裂之后的速度曲线中显示的是原枝晶尖端位置的生长速度. 可以看出, 在枝晶尖端分裂形成新的尖端后, 原位置的生长速度明显降低, 逐渐停止生长.

这是由于新的枝晶尖端快速生长从而向周边区域排出溶质, 导致溶质在原尖端位置大量富集, 阻碍了该处枝晶的生长, 并最终形成了富含溶质的液相通道.

表3为不同推进速度下枝晶尖端分裂的时刻以及尖端分裂速度. 此时, 枝晶尖端分裂生长存在一个推进速度的极小值(约等于1 mm/s), 当推进速度小于极小值时, 枝晶以柱状晶形式生长, 枝晶尖端不分裂且基本无二次枝晶出现. 这是由于主枝晶间距在定向凝固过程中在一定范围内波动^[17-20], 模拟中选定的主枝晶间距限制了二次枝晶的生长. 随推进速度增大, 枝晶尖端开始在更早的阶段分裂, 但其分裂时枝晶尖端速度基本维持在1.2 mm/s左右. 当推进速度由6 mm/s提升至8 mm/s时, 无论是枝晶尖端的分裂时间还是尖端分裂速度均趋向一致, 此时推进速度的提升对于枝晶尖端分裂的意义不大.

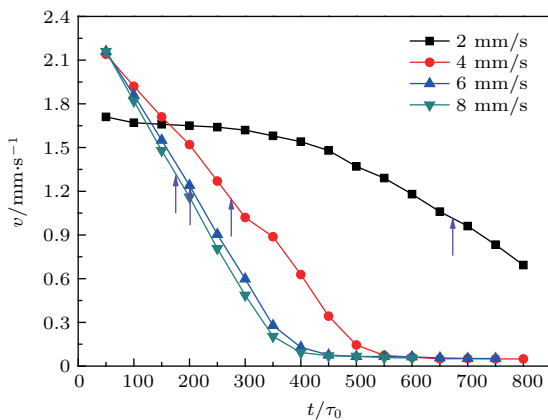


图3 (网刊彩色) 不同推进速度下 +X 枝晶尖端速度变化
 Fig. 3. (color online) Velocity results at +X axis for DS with varying pulling velocities.

表3 不同推进速度下枝晶尖端分裂时间与分裂速度
 Table 3. Tip splitting time and velocity in various pulling velocities.

Pulling velocities/mm·s ⁻¹	Tip splitting time/ τ_0	Tip splitting velocity/mm·s ⁻¹
2	700.9	0.96
4	259.6	1.22
6	182.6	1.32
8	169.2	1.32

4.3 液相通道内溶质含量变化

定向凝固组织选择哪一种分枝形态主要取决于分枝尖端前沿液相的过冷度^[21]. 在模拟过程中分枝尖端前沿的过冷度, 主要为溶质富集所产生的成分过冷, 因此, 研究溶质浓度变化对于分析枝晶形貌及成因有重要意义. 随凝固过程的进行, 枝晶尖端分裂形成液相通道, 通道内部溶质大量富集, 从而导致严重的晶内偏析. 图4为推进速度 $V_P = 4 \text{ mm/s}$ 时 $+X$ 轴上 C 浓度的变化曲线, 显然在 $t = 300$ 时液相通道尚未正式形成, 溶质富集区域长度并不明显. 随着枝晶生长过程的进行, 液相通道内部溶质浓度进一步增大, 并达到稳定. 最高浓度区域即为液相通道的对应时刻长度. 由图4可以看出, $t = 600$ 与 $t = 900$ 时, 在液相通道前沿, 其浓度变化近乎一致. 同样说明了在液相通道形成之后, 原枝晶尖端位置基本停止生长. 在液相通道外侧, C 浓度由于在液相中的扩散逐渐减小至液相平衡浓度. 图5为推进速度 $V_P = 4 \text{ mm/s}$, $t = 600$ 时, $X = 90$ 平面上的 C 浓度分布. 图中黑色细线表示浓度为 $0.95\% - 1.0\%$, 浓度差为 0.01% 的等浓度线, 由图中的等浓度线分布可知, 液相通道内溶质含量基本维持在 1.0% 不变, 即在液相通道内部溶质分布均匀.

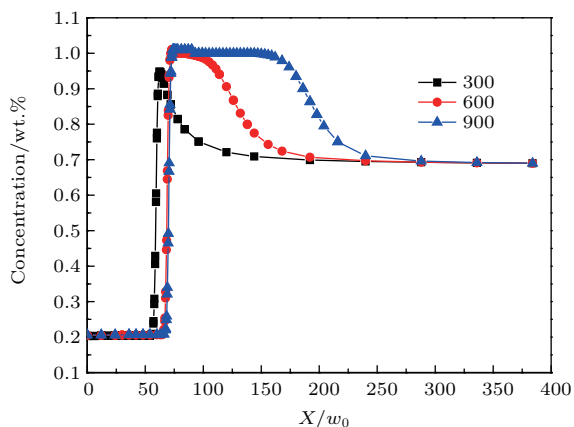


图4 (网刊彩色) $V_P = 4 \text{ mm/s}$ 时液相通道中轴线 C 浓度分布

Fig. 4. (color online) C concentration in liquid channel at different time step with $V_P = 4 \text{ mm/s}$.

图6为同一时刻不同推进速度条件下 $+X$ 轴上 C 浓度变化曲线, 通过对比可以发现, 随推进速度的增大, 最高 C 浓度随之升高, 且在更短的生长

距离内达到最高浓度. 通过对比图6中最高 C 浓度的长度可以发现, 随推进速度的增大, 所形成的液相通道长度增加. 这是由于随推进速度的增大, 枝晶尖端更早分裂, 且分裂后的尖端生长速度更大, 导致溶质富集更加严重, 且液相通道长度增加.

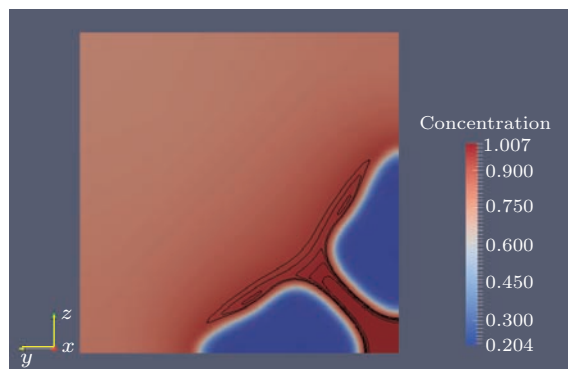


图5 (网刊彩色) $V_P = 4 \text{ mm/s}$, $t = 600$ 时, $X = 90$ 平面上的 C 浓度分布 (百分含量)

Fig. 5. (color online) C concentration in $X = 90$ plane with $V_P = 4 \text{ mm/s}$, $t = 600$ (percent content).

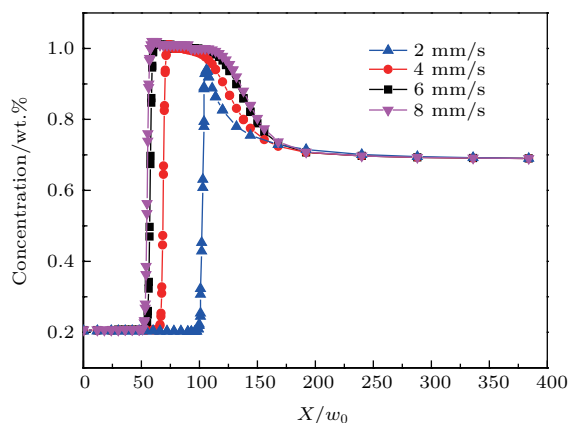


图6 (网刊彩色) 不同推进速度下 $t = 600$ 时液相通道中轴线的 C 浓度分布

Fig. 6. (color online) C concentration in liquid channel in different pulling velocities at $600\tau_0$.

图7为不同推进速度下枝晶在 $Y = 0$ 平面的截面轮廓. 由图7可知, 随推进速度的增大, 枝晶尖端分裂所形成的液相通道的直径基本不发生变化, 且分裂后的枝晶生长加快, 二次枝晶生长良好. 通过对比发现, 液相通道的宽度大于二次枝晶间距, 且通道内部溶质含量高于二次枝晶间溶质含量, 故由于液相通道内溶质富集所造成的偏析较二次枝晶间偏析更为严重. 通过控制推进速度来控制液相通道内部溶质浓度以及液相通道长度, 可以有效地减小晶内偏析程度.

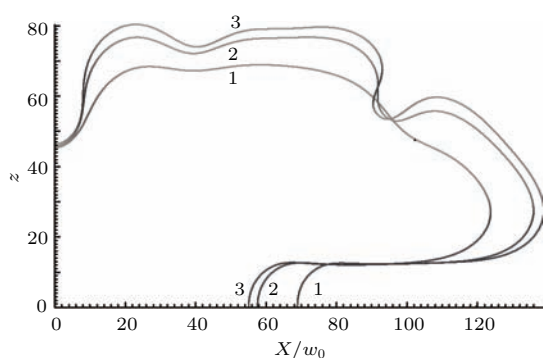


图7 不同推进速度下 $t = 600\tau_0$ 时 $Y = 0$ 平面上枝晶外轮廓线 (1为4 mm/s, 2为6 mm/s, 3为8 mm/s)

Fig. 7. The variation of the dendrite morphology in different pulling velocities at $600\tau_0$ (1, 4 mm/s; 2, 6 mm/s; 3, 8 mm/s).

5 结 论

1) 通过对比不同界面能各向异性参数下定向凝固Fe-C合金枝晶形貌, 确定了在系统各向异性 (包括推进速度、温度梯度等) 与材料各向异性 (界面能各向异性) 共同作用下于多枝晶区域形成了液相通道。

2) 综合研究了定向凝固推进速度对于液相通道的形成、通道内溶质含量以及通道的尺寸的影响: 液相通道的形成存在一个最小推进速度, 约等于1 mm/s; 随推进速度的提高, 液相通道内溶质含量升高, 液相通道长度增加, 但是液相通道的直径基本保持不变。

3) 通过对于定向凝固过程中形成的液相通道的相关计算, 发现可以通过减小推进速度有效地控制由于其产生的晶内偏析, 大大减小晶内偏析程度。

由于在模拟过程中, 未考虑流场对于液相通道的影响作用, 使得模拟结果与实际定向凝固过程存在较大差异, 无法准确预测在定向凝固过程中存在的孪晶、雀斑等缺陷。在下一步的实验计算过程中, 将综合考虑流场作用, 进一步完善定向凝固相场法计算。

参考文献

- [1] Karagadde S, Yuan L, Shevchenko N, Eckert S, Lee P D 2014 *Acta Mater.* **79** 168
- [2] Ma D X, Zhou B, Andreas B P 2011 *Adv. Mater. Res.* **278** 428
- [3] Boden S, Eckert S, Gerbeth G 2010 *Mater. Lett.* **64** 1340
- [4] Haxhimali T, Karma A, Gonzales F, Rappaz M 2006 *Nat. Mater.* **5** 660
- [5] Dantzig J A, Napoli P D, Friedli J, Rappaz M 2013 *Metal. Mater. Trans. A* **44** 5532
- [6] Friedli J, Napoli P D, Rappaz M, Dantzig J A 2012 *IOP Conf. Ser.* **33** 012111
- [7] Morteza A, Sebastian G, Nikolas P 2012 *Acta Mater.* **60** 657
- [8] Salgado-Ordorica M, Desbiolles J L, Rappaz M 2011 *Acta Mater.* **59** 5074
- [9] Melendez A J, Beckermann C 2012 *J. Cryst. Growth* **340** 175
- [10] Ohno M, Matsuura K 2010 *Acta Mater.* **58** 5749
- [11] Ohno M, Matsuura K 2009 *Phys. Rev. E* **79** 031603
- [12] Wheeler A A, Boettinger W J, Mcfadden G B 1993 *Phys. Rev. E* **47** 1893
- [13] Fehlnner W R, Vosko S H 1976 *Can. J. Phys.* **54** 2159
- [14] Kurz W, Fisher D J (translated by Li J G, Hu Q D) 2010 *Fundamentals of Solidification* (Beijing: Higher Education Press) pp158 (in Chinese) [库兹 W, 费舍 D J 著 (李建国, 胡侨丹 译) 2010 凝固原理 (北京: 高等教育出版社) 第158页]
- [15] Wang X B, Lin X, Wang L L, Yu H L, Wang M, Huang W D 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 078102 (in Chinese) [王贤斌, 林鑫, 王理林, 宇红雷, 王猛, 黄卫东 2013 物理学报 **62** 078102]
- [16] Xie Y 2012 *Ph. D. Dissertation* (Leicester: University of Leicester) (in Chinese) [谢玉 2012 博士论文 (雷彻斯特市: 雷彻斯特大学)]
- [17] Burden M H, Hunt J D 1974 *J. Cryst. Growth* **22** 109
- [18] Hunt J D, Lu S Z 1996 *Metall. Mater. Trans. A* **27** 611
- [19] Lu S Z, Hunt J D 1992 *J. Cryst. Growth* **123** 17
- [20] Guo C W, Li J J, Ma Y, Wang J C 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 148101 (in Chinese) [郭春文, 李俊杰, 马渊, 王锦程 2015 物理学报 **64** 148101]
- [21] Zhang Y P, Lin X, Wei L, Peng D J, Wang M, Huang W D 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 178105 (in Chinese) [张云鹏, 林鑫, 魏雷, 彭东剑, 王猛, 黄卫东 2013 物理学报 **62** 178105]

Simulation of liquid channel of Fe-C alloy directional solidification by phase-field method*

Kang Yong-Sheng Zhao Yu-Hong[†] Hou Hua Jin Yu-Chun Chen Li-Wen

(Material Science and Engineering Institute, North University in China, Taiyuan 030051, China)

(Received 2 June 2016; revised manuscript received 22 June 2016)

Abstract

In directional solidification, two characteristic parameters determine the dendritic growth: the thermal gradient and the pulling velocity. To achieve the suitable microstructure and improve the performance of casting, they are usually used to resize the pulling velocity or temperature gradient in directional solidification process. The structures obtained under different directional solidification conditions, and their associated properties both have been hot research points. It is difficult to observe the microstructure, which is usually on a micrometer scale, directly in experiment, and the phase-field method becomes a strong tool to understand the dendrite growth pattern. We mainly study the liquid channel formed after Fe-C alloy dendrite tip splitting under the specific condition of directional solidification and analyze the influence on liquid channel of pulling velocity in this paper. We choose the fixed thermal gradient $G = 20$ K/mm which is on the order of the experimental value, and pulling velocity V_P no more than 10 mm/s to keep the cooling rate in the range of low speed in dendrite growth, so that the interface kinetic effect can be neglected. Recent experimental results show the different interfacial energies in various compositions of Al-Zn alloy and Fe-C alloy, then we can investigate a series of directional solidification microstructures with fixed alloy Fe-0.5 wt.%C composition at different interfacial energies in our simulations. We find that the liquid channel is formed as a result of anisotropy competition between system and materials, the length and C concentration of liquid channel increase with the pulling velocity increasing, while the diameter of liquid channel is constant. It is interesting to find that there is a minimum of pulling velocity almost equal to 1 mm/s, the tip will not split and no liquid channel forms in the following steps either when the velocity is smaller than the minimum. We also compare the segregation caused by solute enrichment in liquid channel and solute segregation between dendrite arms in a series of simulations: the former is more serious than the latter. Then we point out the way to reduce the segregation caused by liquid phase channel by reducing the pulling velocity properly. It will be more practical to couple the flow field with other external field, such as magnetic field, in the simulation.

Keywords: directional solidification, liquid channel, pulling velocity, segregation

PACS: 81.30.Bx, 71.15.Rf, 68.37.-d

DOI: 10.7498/aps.65.188102

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51574207, 51574206, 51204147, 51274175) and the Shanxi Provincial Foundation for Returned Scholars(Main Program), China (Grant No. 2013-81).

[†] Corresponding author. E-mail: zyh388@sina.com