

浓度相关的扩散系数对定向凝固枝晶生长的影响

楚硕 郭春文 王志军 李俊杰 王锦程

Effect of concentration-dependent diffusion coefficient on dendrite growth in directional solidification

Chu Shuo Guo Chun-Wen Wang Zhi-Jun Li Jun-Jie Wang Jin-Cheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 166401 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190603

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190603>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

定向凝固过程中枝晶侧向分枝生长行为与强制调控规律

Growth behaviors and forced modulation characteristics of dendritic sidebranches in directional solidification

物理学报. 2015, 64(14): 148101 <https://doi.org/10.7498/aps.64.148101>

相场法模拟Fe-C合金定向凝固的液相通道

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

物理学报. 2016, 65(18): 188102 <https://doi.org/10.7498/aps.65.188102>

弱熔体对流对定向凝固中棒状共晶生长的影响

Effect of weak convection on the rod eutectic growth in direction solidification

物理学报. 2016, 65(13): 136401 <https://doi.org/10.7498/aps.65.136401>

各向异性表面张力对定向凝固中共晶生长形态稳定性的影响

Effect of anisotropic surface tension on morphological stability of lamellar eutectic growth in directional solidification

物理学报. 2018, 67(11): 118103 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180186>

各向异性界面动力学与各向异性表面张力的相互作用对定向凝固过程中深胞晶生长的影响

Effects of anisotropic interface kinetics and surface tension on deep cellular crystal growth in directional solidification

物理学报. 2017, 66(10): 106801 <https://doi.org/10.7498/aps.66.106801>

镁基合金自由枝晶生长的相场模拟研究

Phase-field modeling of free dendritic growth of magnesium based alloy

物理学报. 2015, 64(6): 060201 <https://doi.org/10.7498/aps.64.060201>

浓度相关的扩散系数对定向凝固枝晶生长的影响*

楚硕^{1) #} 郭春文^{2) #} 王志军^{1) †} 李俊杰^{1) 3)} 王锦程¹⁾

1) (西北工业大学, 凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

2) (Faculty of Mechanical Engineering, Kyoto Institute of Technology, Kyoto 606-8585, Japan)

3) (西北工业大学, 国防科技工业精密锻造与环轧技术创新中心, 西安 710072)

(2019年4月24日收到; 2019年6月16日收到修改稿)

采用定量相场模型模拟了定向凝固过程中浓度相关的扩散系数对枝晶生长的影响. 模型中, 通过在液相溶质扩散方程中耦合浓度相关的扩散系数实现了浓度依赖的扩散过程. 一系列模拟结果证实了浓度相关的扩散过程对枝晶定向生长具有显著的影响. 结果表明: 溶质扩散系数对溶质浓度耦合强度的增加会增强枝晶间的溶质扩散对尖端排出的溶质原子横向扩散的抑制作用, 造成枝晶尖端固-液界面处的溶质富集程度增加, 从而增加尖端过冷度; 液相中扩散系数的改变对枝晶的尖端半径影响较小, 模拟结果与理论模型计算结果较好吻合; 液相中溶质扩散系数对溶质浓度依赖性的增加会使侧向分枝的振幅逐渐减小; 在对枝晶列的研究中发现, 与溶质浓度相关的扩散系数会增加枝晶列的一次间距, 降低稳态枝晶的尖端位置. 因此, 在溶质分配系数严重偏离1的体系中, 对现有模型的定量实验检验应考虑浓度相关的扩散对尖端过冷度的影响.

关键词: 相场法, 定向凝固, 枝晶生长, 扩散系数**PACS:** 64.70.D-, 81.10.-h, 81.30.-t**DOI:** 10.7498/aps.68.20190603

1 引言

单相合金凝固过程中, 枝晶是最典型的微观结构特征, 直接影响着材料的加工过程及使用性能. 定向凝固是定量研究枝晶生长行为的重要手段, 也是获得具有特殊取向和优异性能的材料的重要方式. 因此, 揭示定向凝固过程中枝晶生长形貌的演化规律, 对揭示材料组织演化和凝固技术的发展具有重要意义.

有很多学者对定向凝固枝晶生长进行了深入的研究, 提出了相关的理论模型, 如 Bower-Brody-Fleming 模型^[1]、Burden-Hunt 模型^[2]、Burden-Hunt-Laxmanan(BHL) 模型^[3]、Kurz-Fisher 模型^[4]、Trivedi 模型^[5]. 这些模型促进了人们对定向凝固的认识并有效地指导了实验研究.

合金凝固过程中, 溶质扩散是决定枝晶生长的重要物理过程. 理论模型一般将液相中溶质扩散系数简化为一个常数. 但是, 当溶质分配系数远远偏离1时, 界面前沿溶质边界层的成分从界面处的 c_{∞}/k 到初始的 c_{∞} 存在较大的变化. 实际情况中, 扩散系数对浓度具有一定的依赖性. Shampine^[6] 提出局部的扩散系数可以表示为与浓度相关的函数. Lee 等^[7] 通过对 Al-Cu 合金定向凝固的实验发现, 凝固过程中局部的扩散系数与浓度相关. Dahlbrog 等^[8] 通过对 Al-Cu 合金的实验研究也发现, 合金成分不同时 Al 和 Cu 具有不同的扩散系数. 因此, 枝晶生长过程中, 存在较大浓度变化的浓度扩散边界层内, 扩散系数将成为依赖浓度的变量.

液相中溶质扩散系数是影响枝晶生长动力学的重要参数. 枝晶生长的尖端过冷度、尖端半径、一次臂主干、侧向分枝等都与扩散系数密切相关. 然而浓度相关的扩散系数对枝晶生长的影响至今

* 国家重点研发计划 (批准号: 2017YFB1103303) 资助的课题.

共同第一作者.

† 通信作者. E-mail: zhjwang@nwpu.edu.cn

没有得到有效评估. 一方面, 可变系数的扩散方程的理论分析相对复杂, 几乎不可能得到解析解; 另一方面, 扩散系数随浓度变化在实验过程中很难定量测量, 对枝晶生长的影响无法直接建立联系. 定量相场模型已经被证实可以定量地描述枝晶生长, 是研究这一问题的理想工具.

通过采用相场法对定向凝固微观组织演化过程已经做了大量的模拟研究^[9-12]. 基于此, 通过溶质扩散系数与溶质浓度之间的耦合关系, 本文采用定量相场模型研究定向凝固过程中枝晶在液相可变扩散系数下的生长行为, 发现可变扩散系数对定向凝固枝晶尖端过冷度及侧向分枝的生长具有重要影响.

2 模拟方法

2.1 相场方程和溶质场方程

利用相场计算定量地再现实验中观察到的凝固微观组织演化过程, 是微观组织演化研究的重要方法之一^[13]. Karma^[14]提出的定量相场模型消除了弥散界面带来的非平衡效应. 薄界面渐进分析表明, Karma 定量相场模型与描述单相二元合金凝固过程的尖锐界面模型等价^[15], 因此定量相场计算结果为数学/物理模型的精确数值解, 可以真实地反映凝固微观组织的演化过程. 本文主要采用文献^[11]中的定量相场模型. 相场变量 $\phi = 1$ 代表固相, $\phi = -1$ 代表液相. 相场演化方程为

$$\begin{aligned} & \tau_0 \left(1 - (1-k) \frac{z + (mc_\infty/k)/G}{l_T} \right) (\partial_t \phi - V_p \partial_z \phi) \\ &= \nabla \cdot (W(\theta)^2 \nabla \phi) - \partial_x [W(\theta) W'(\theta) \partial_y \phi] \\ & \quad + \partial_y [W(\theta) W'(\theta) \partial_x \phi] + \phi - \phi^3 + f_n \\ & \quad - \lambda (1 - \phi^2)^2 \left(U + \frac{z + (mc_\infty/k)/G}{l_T} \right). \end{aligned} \quad (1)$$

溶质场方程为

$$\begin{aligned} & \partial_t c - V_p \partial_z c \\ &= \nabla \cdot \left[D_L \frac{1 - \phi}{1 + k - (1-k)\phi} \nabla c \right. \\ & \quad + \left(D_L \frac{1 - \phi}{1 + k - (1-k)\phi} + \frac{W_0}{\sqrt{2}} \frac{(\partial_t - V_p \partial_z \phi)}{|\nabla \phi|} \right) \\ & \quad \left. \times \frac{c(1 - \phi)}{1 + k - (1-k)\phi} \nabla \phi \right], \end{aligned} \quad (2)$$

其中, $W(\theta) = W_0(1 + \gamma_4 \cos 4\theta)$,

$$\begin{aligned} U &= \left(\frac{2kc/c_\infty}{1 + k - (1-k)\phi} - 1 \right) / (1 - k), \\ f_n &= \alpha_n r_g (1 - \phi^2), \\ l_T &= |m| c_\infty (1 - k) / (kG). \end{aligned}$$

其中, W_0 为界面厚度参数, τ_0 为界面弛豫时间参数, λ 为耦合常数, γ_4 为界面能各向异性强度系数, θ 为界面方向与界面能择优取向间的夹角, r_g 为在 $(-1, +1)$ 之间呈高斯分布的随机变量, α_n 为与界面厚度有关的噪声强度系数, $(1 - \phi^2)$ 保证了噪声只在固/液界面上存在. 模型参数与实际物性参数的对应关系为: $d_0 = a_1 W_0 / \lambda$, $\tau_0 = a_2 \lambda W_0^2 / D$, 其中 $d_0 = \Gamma / (m c_\infty (1 - k) / k)$ 为溶质毛细长度.

2.2 耦合溶质扩散方程

Shampine 等^[6]在经典的扩散方程 $\partial c / \partial t = \partial (D \partial c / \partial x) / \partial x$ 中提出了扩散系数与浓度有关的函数关系:

$$D(c) = D_0 + 0.25 \eta_0^2 \left[1 - \left(\frac{1 - c}{1 - c_0} \right)^2 \right], \quad (3)$$

式中, c_0 为液相中的初始浓度, 本文选为 0.01 at.%; c 为溶质浓度, 且 $c = c_l [1 + k - (1 - k)\phi] / 2$ ^[15]. 对上式进行无量纲化处理, 得

$$D(c) = D_0 + 0.25 \eta_0^2 \left[1 - \left(\frac{100 - \frac{2c}{(1-\phi) + (1+\phi)k}}{99} \right)^2 \right], \quad (4)$$

式中, 无量纲化后的扩散系数 $D_0 = 1$, c 为液相溶质浓度, k 为浓质平衡分配系数. 本文选择正相关性, 即扩散系数随溶度的增加而增加. 其中, 参数 η_0^2 衡量扩散系数对溶质浓度依赖性, 为耦合强度因子. 当 $\phi = -1$, 即为液相时, 将方程 (4) 耦合到溶质场方程可得

$$\begin{aligned} & \partial_t c - V_p \partial_z c \\ &= \nabla \cdot \left[D(c) \frac{1 - \phi}{1 + k - (1-k)\phi} \nabla c \right. \\ & \quad + \left(D(c) \frac{1 - \phi}{1 + k - (1-k)\phi} + \frac{W_0}{\sqrt{2}} \frac{(\partial_t - V_p \partial_z \phi)}{|\nabla \phi|} \right) \\ & \quad \left. \times \frac{c(1 - \phi)}{1 + k - (1-k)\phi} \nabla \phi \right], \end{aligned} \quad (5)$$

体现液相扩散系数对浓度的依赖性.

2.3 物性参数

实验中通常采用类金属透明系合金来研究凝固过程, 而丁二腈-香豆素 (SCN-C152)^[16] 已在凝固微观组织演化原位观察实验中得到了较深入的研究, 这里选取以丁二腈为基准的模型合金作为研究对象. 其物性参数列于表 1.

表 1 材料物性参数
Table 1. Material physical parameters.

物性参数	取值
熔点温度/K	500
初始浓度/at. %	0.01
平衡分配系数	0.3
液相线斜率/K·at. % ⁻¹	-200
液相中的扩散系数/m ² ·s ⁻¹	0.45 × 10 ⁻⁹
Gibbs-Thomson系数/K·m	6.48 × 10 ⁻⁸

3 结果与讨论

在定向凝固枝晶生长的模拟过程中, 采用线性温度梯度近似 20 K/cm, 不考虑潜热对枝晶尖端生长的影响, 只考虑溶质扩散对尖端生长的影响^[17]. 在不同的抽拉速度条件下, 通过设置不同的耦合强度, 观察扩散系数对溶质浓度依赖性的强弱对枝晶生长的影响.

3.1 耦合强度对枝晶形貌及溶质场的影响

图 1 给出了三种抽拉速度不同耦合强度因子下得到的稳态枝晶生长形貌. 结果表明, 在三种抽拉速度下, 扩散系数的浓度耦合强度对枝晶生长均带来了显著影响. 如图所示, 随着耦合强度的增加, 枝晶主干保持不变, 枝晶尖端位置逐渐向冷端移动, 且侧向分枝的振幅逐渐减小.

我们提取了在 $v_p = 32 \mu\text{m/s}$, $\eta_0^2 = 80$ 的模拟条件下枝晶的边界浓度和尖端前沿液相中的浓度, 并将其代入 (4) 式中, 计算出液相中与溶质浓度相关的扩散系数, 结果如图 2 所示. 总体而言, 扩散系数随浓度的变化在 25% 以内. 可以看出, 当在液相的溶质场扩散方程中耦合浓度相关的扩散方程后, 液相中溶质的扩散系数会随溶质浓度的增加而增加, 而且枝晶根部处液相的扩散系数高于枝晶尖端前沿液相的扩散系数. 因此, 通过在液相的溶质

场方程中耦合浓度相关的扩散方程, 会增强枝晶间的溶质原子沿枝晶尖端方向的扩散能力, 进而抑制从尖端排出的溶质原子横向扩散过程, 造成尖端处溶质原子的富集程度增加.

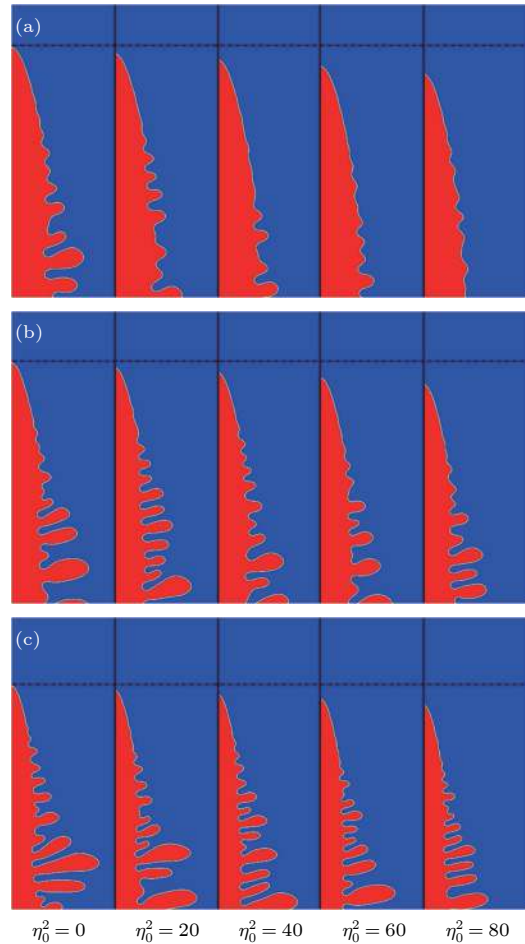


图 1 耦合强度对枝晶尖端生长形貌的影响 (a) $v_p = 20 \mu\text{m/s}$; (b) $v_p = 32 \mu\text{m/s}$; (c) $v_p = 50 \mu\text{m/s}$

Fig. 1. Effect of coupling intensities on the morphology of dendrite tip growth: (a) $v_p = 20 \mu\text{m/s}$; (b) $v_p = 32 \mu\text{m/s}$; (c) $v_p = 50 \mu\text{m/s}$.

在正温度梯度下, 固-液界面前沿中存在成分过冷, 会使平界面失稳, 进而生长为具有侧向分枝的枝晶, 而且枝晶侧向分枝的发达程度与成分过冷的大小有关. 因此图 1 中侧向分枝的振幅随耦合强度的增加而减小这一现象可以通过成分过冷判据^[18]进行定性的解释:

$$\frac{G_L}{V} = \frac{mc_0}{D_L} \left(\frac{1-k}{k} \right) = \frac{\Delta T_0}{D_L}, \quad (6)$$

其中, G_L 为液相线温度梯度, V 为界面生长速度, m 为液相线斜率, c_0 为合金平均成分, k 为平衡溶质分配系数, D_L 为液相溶质扩散系数, ΔT_0 为平

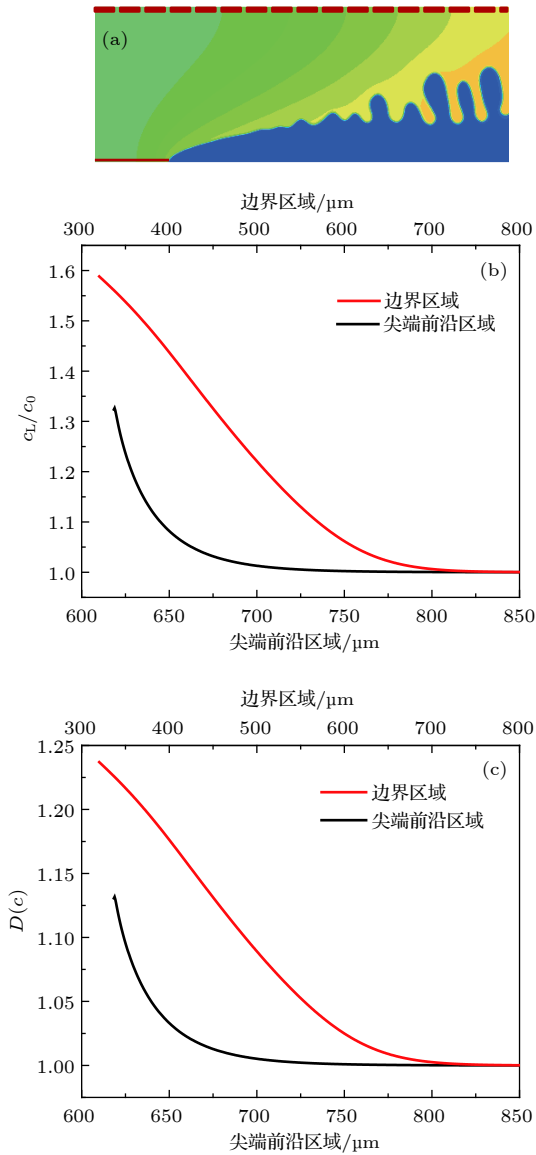


图 2 $v_p = 32 \mu\text{m/s}$, $\eta_0^2 = 80$ 时枝晶尖端前沿 (实线) 与边界 (虚线) 处液相的溶质场特征 (a) 溶质场; (b) 溶质浓度; (c) 与浓度相关的扩散系数

Fig. 2. The solute field along the full line and the hidden line of the channel when $v_p = 32 \mu\text{m/s}$ and $\eta_0^2 = 80$: (a) Solute field; (b) solute concentration; (c) concentration-dependent diffusion coefficient.

平衡结晶温度区间. 可以看出, 当耦合强度增加时, 枝晶间液相中浓度扩散系数也会随之增加, 从而降低枝晶间液相中的成分过冷, 最终造成侧向分枝的振幅减小.

3.2 耦合强度对尖端状态的影响

枝晶的尖端状态是枝晶生长理论重要的研究内容. 定向凝固过程中枝晶尖端状态的选择主要受枝晶列间的溶质场相互作用^[19] 和界面能各向异性^[20]

的影响, 并完全受界面能和溶质扩散的控制. 其中溶质扩散对尖端状态的选择的研究也主要集中在枝晶列之间溶质场的相互作用. 本文模拟结果表明, 扩散系数对浓度依赖性的强弱对枝晶尖端状态也存在一定的影响.

图 3 给出了不同耦合条件下枝晶的尖端状态. 结果表明, 枝晶的尖端半径几乎不随耦合强度发生

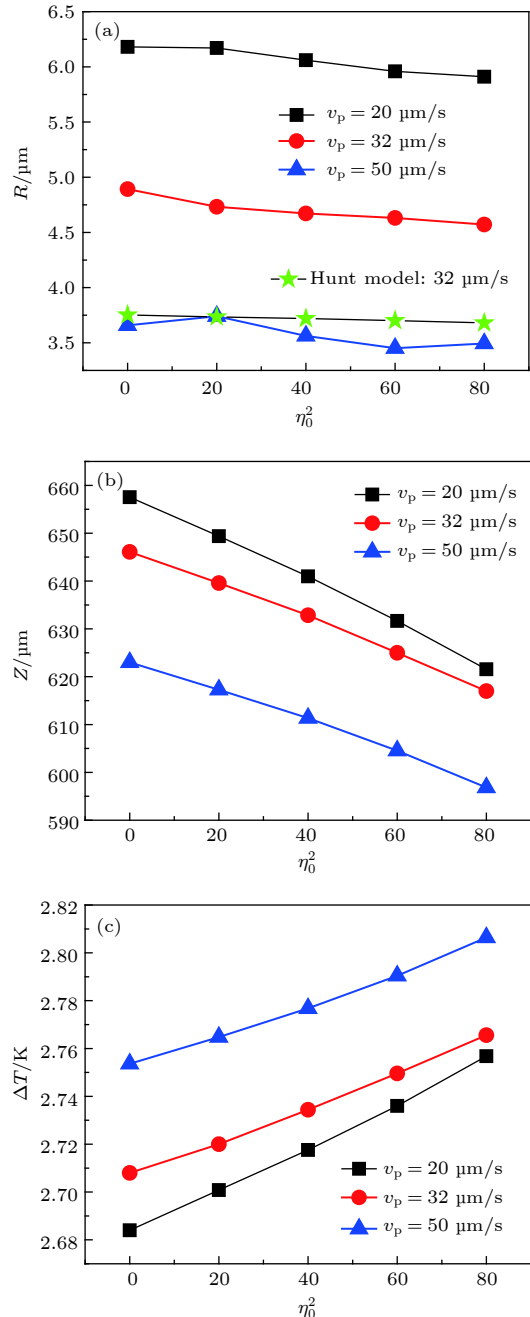


图 3 不同模拟条件下枝晶的尖端特征 (a) 尖端半径; (b) 尖端位置; (c) 尖端过冷度

Fig. 3. The characteristics of dendrite tip with different simulated conditions: (a) Tip radius; (b) tip position; (c) tip undercooling.

变化, 尖端位置随着耦合强度的增加近似呈线性降低, 由于在定向凝固中, 尖端过冷度的大小与界面位置的高低有关, 所以对应的尖端过冷度增加. 而且当抽拉速度为 $20 \mu\text{m/s}$ 时, 对应的枝晶尖端位置和尖端过冷度的曲线斜率较大, 表明在较低速度下受浓度依赖的扩散系数对枝晶尖端的影响较大. 这是由于低速下溶质的扩散边界层增大, 与浓度相关的扩散系数影响范围增加. 图 3(c) 表明, $20 \mu\text{m/s}$ 的抽拉速度下当耦合强度 $\eta_0^2 = 80$ 时的尖端过冷度已经非常接近 $50 \mu\text{m/s}$ 时耦合强度为 0 时的尖端过冷度. 由此可见, 耦合强度对尖端过冷度有显著的影响.

由于枝晶间浓度的显著富集, 且高于枝晶尖端的浓度, 受浓度依赖的扩散系数会促进枝晶间的溶质向枝晶尖端方向扩散. 为了进一步探究耦合强度的大小对液相中溶质流动的影响以及造成枝晶尖端位置和尖端过冷的原因, 图 4 给出了当抽拉速度为 $32 \mu\text{m/s}$ 时, 不同耦合强度下枝晶的尖端浓度及尖端位置附近的边界浓度. 结果表明, 在同一速

度下, 随着耦合强度的增加, 枝晶尖端前沿及尖端位置附近对应的边界浓度在逐渐增加. 结合 3.1 节对溶质场的分析可知, 在相同的速度下, 造成枝晶尖端位置降低以及尖端过冷度增加的主要原因是耦合强度的逐渐增加会增强枝晶间的溶质扩散对尖端排出的溶质原子横向扩散的抑制作用, 从而造成枝晶尖端位置的溶质富集程度逐渐增加.

在相同的耦合强度下, 尖端过冷度随抽拉速度的增大而减小. 这一变化规律可以依据 BHL 模型^[3]解释. BHL 模型给出的胞/枝晶列尖端过冷度公式为

$$\Delta T_c = \frac{D_L G}{V} + \lambda R \left[\frac{mVC_0(k-1)}{D_L} - kG \right], \quad (7)$$

(7) 式中等号右边第二项反映枝晶生长的横向扩散. 模拟中 D_L 并非是一个常数, 但是其变化相对于抽拉速度的变化非常微小, 可以近似采用 BHL 模型对尖端过冷度的变化进行分析. 此时尖端过冷度主要受抽拉速度的控制, 随抽拉速度的增大而增大.

图 3(a) 给出了不同速度下枝晶尖端半径与耦合强度的关系. 发现枝晶的尖端半径并没有发生太大的变化. 对于这一现象, 可以依据 Hunt 模型^[21]给出的枝晶尖端半径与一次间距的公式进行解释:

$$R = \left(\frac{G\lambda_1^2}{4\sqrt{2}} \right) \frac{1}{mC_t(k_0-1) - GD_L/V}. \quad (8)$$

模拟过程中, 枝晶的一次间距 λ_1 保持不变. 所以当在相同的抽拉速度下, 根据模型, D_L 为常数时, C_t 的增加会导致尖端半径的减小. 但是由于液相的扩散系数与溶质的浓度有关, 所以枝晶的尖端半径受尖端前沿液相的浓度 C_t 和液相中溶质的扩散系数 D_L 共同影响. 扩散系数对浓度依赖性的增加会导致液相中溶质的扩散系数的增加, 尖端处的浓度和扩散系数同时增大 (如图 4(b)). 将不同耦合强度下的尖端浓度和扩散系数代入到 Hunt 模型^[21]中, 计算所得的尖端半径在 $3.75 \mu\text{m}$ 左右, 与模拟结果吻合较好, 误差在 $1 \mu\text{m}$ 左右.

在相同的耦合强度下, 相当于保持液相中溶质的扩散系数不变, 尖端半径主要受抽拉速度控制, 随抽拉速度的增加而减小. 枝晶尖端溶质的浓度和扩散系数的变化量相对于速度的变化量对 (8) 式中的尖端半径影响较小, 可以忽略.

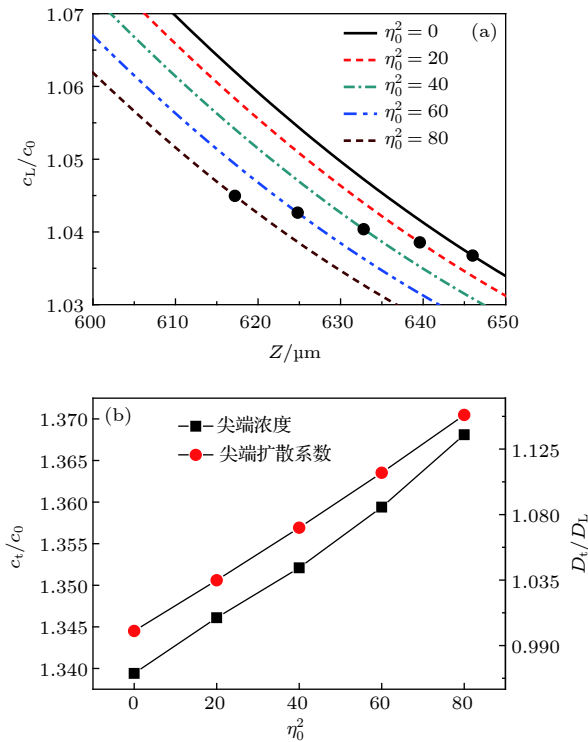


图 4 $v_p = 32 \mu\text{m/s}$ 时不同耦合强度下枝晶尖端附近的浓度特征 (a) 边界浓度; (b) 尖端浓度与尖端扩散系数

Fig. 4. Concentration characteristics near the dendrite tip under different coupling intensities with $v_p = 32 \mu\text{m/s}$: (a) Boundary concentration; (b) tip concentration and tip diffusion coefficient.

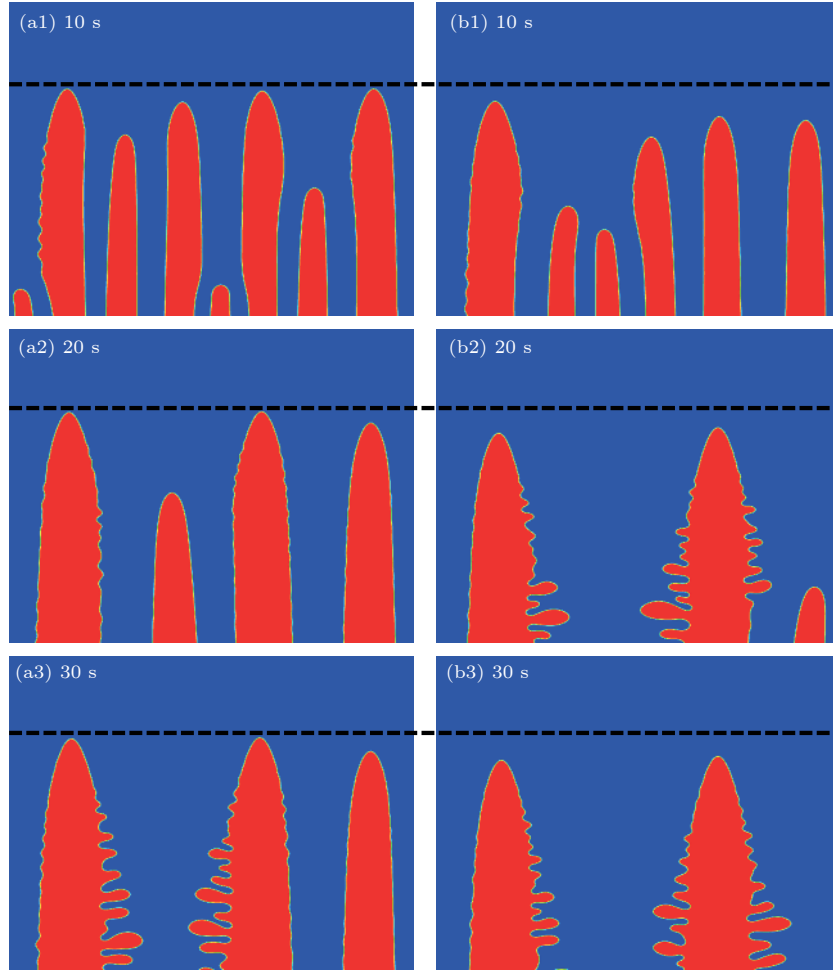


图 5 (a1)—(a3) $\eta_0^2 = 0$ 时枝晶列的演化过程; (b1)—(b3) $\eta_0^2 = 80$ 时枝晶列的演化过程

Fig. 5. (a1)–(a3) The evolution of dendrite columns when $\eta_0^2 = 0$; (b1)–(b3) the evolution of dendrite columns when $\eta_0^2 = 80$.

3.3 耦合强度对枝晶列的影响

对于枝晶列的研究,我们选取了 $\eta_0^2 = 0, 80$, 所模拟的区域宽度为 $400 \mu\text{m}$, 抽拉速度为 $50 \mu\text{m/s}$, 模拟结果如图 5 所示. 由图可见, 在枝晶列不断演化的过程中, 扩散系数与浓度不相关时的枝晶数量均大于扩散系数与浓度相关时的枝晶数量. 当扩散系数与浓度相关时, 稳态枝晶的尖端位置也显著降低.

在枝晶列演化的过程中, 最终的稳态一次间距取决于枝晶间距调整的演化历程. Hunt-Lu 相互作用模型^[22]认为枝晶间距的生长竞争通过溶质场相互作用反映出来, 对于两个相邻枝晶, 间距较大的枝晶前沿溶质会向间距较小的枝晶扩散, 导致小间距枝晶的尖端溶质富集, 尖端逐渐淹没, 最终被淘汰掉. 通过 3.2 节的分析可知, 当扩散系数与溶质浓度相关时, 会增加枝晶尖端的溶质富集程度, 降低枝晶的尖端位置. 图 5 的模拟结果表明这种现象

在枝晶列的生长中同样存在. 当扩散系数与溶质浓度相关时, 由于枝晶尖端前沿溶质富集程度的增加, 会造成枝晶淹没淘汰更容易发生.

4 结 论

通过在液相溶质扩散方程中耦合浓度相关的扩散系数, 采用定量相场模型探究了可变扩散系数对枝晶的溶质场以及枝晶生长行为的影响. 研究发现, 液相中溶质扩散系数对溶质浓度依赖性的增加, 会增强枝晶间的溶质扩散对枝晶尖端排出的溶质原子横向扩散的抑制作用, 造成枝晶尖端固-液界面处的溶质富集程度升高. 对于给定一次间距的枝晶, 侧向分枝的振幅会逐渐减小. 浓度相关的扩散系数对枝晶的尖端半径影响有限, 其模拟结果与理论模型计算较为吻合. 对于枝晶列, 这种扩散效应会造成枝晶淹没淘汰更容易发生, 增加稳态枝晶列的一次间距, 增加尖端过冷度.

参考文献

- [1] Bower T F, Brody H D, Flemings M C 1966 *Trans. AIME* **236** 624
- [2] Burden M H, Hunt J D 1974 *J. Cryst. Growth* **22** 109
- [3] Laxmanan V 1985 *Acta Metall.* **33** 1023
- [4] Kurz W, Fisher D J 1981 *Acta Metall.* **29** 11
- [5] Trivedi R 1980 *J. Cryst. Growth* **49** 219
- [6] Shampine L F 1973 *Quart. Appl. Math.* **30** 441
- [7] Lee J H, Liu S, Miyahara H, Trivedi R 2004 *Metall. Mater. Trans. B* **35B** 909
- [8] Dahlborg U, Besser M, Calvo-Dahlborg M, Janssen S, Juranyi F, Kramer M J, Morris J R, Sordelet D J 2007 *J. Non-Cryst. Solids* **353** 3295
- [9] Li J J, Wang Z J, Wang Y Q, Wang J C 2012 *Acta Mater.* **60** 1478
- [10] Wang Z J, Li J J, Wang J C, Zhou Y H 2012 *Acta Mater.* **60** 1957
- [11] Diepers H J, Ma D, Steinbach D M 2002 *J. Cryst. Growth* **237** 149
- [12] Wang Z J, Wang J C, Yang G C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1246 (in Chinese) [王志军, 王锦程, 杨根仓 2008 物理学报 **57** 1246]
- [13] Boettinger W J, Warren C, Beckermann C, Karma A 2002 *Ann. Rev. Mater. Res.* **32** 163
- [14] Karma A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 115701
- [15] Echebarria B, Folch R, Karma A, Plapp M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 061604
- [16] Losert W, Shi B Q, Cummins H Z 1998 *Proc. Acad. Sci. USA* **95** 431
- [17] Kurz W, Fisher D J (translated by Li J G, Hu Q D) 2010 (in Chinese) [凝固原理 (Beijing: Higher Education Press) p60]
- [18] Tiller W A, Jackson K A, Rutter J W, Chalmers B 1953 *Acta Metall.* **1** 428
- [19] Spencer B J, Huppert H E 1999 *J. Cryst. Growth* **200** 287
- [20] 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]
- [21] Hunt J D 1979 *Solidification of Casting of Metals* (London: The Metals Society) p3
- [22] Hunt J D, Lu S Z 1992 *J. Cryst. Growth.* **123** 17

Effect of concentration-dependent diffusion coefficient on dendrite growth in directional solidification*

Chu Shuo^{1) #} Guo Chun-Wen^{2) #} Wang Zhi-Jun^{1) †}Li Jun-Jie^{1) 3)} Wang Jin-Cheng¹⁾1) (*State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China*)2) (*Faculty of Mechanical Engineering, Kyoto Institute of Technology, Kyoto 606-8585, Japan*)3) (*National Defense Technology Industry Precision Forging and Technology Innovation Center, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China*)

(Received 24 April 2019; revised manuscript received 16 June 2019)

Abstract

Solute diffusion is an important process that determines the dendrite growth during solidification. The theoretical model generally simplifies the solute diffusion coefficient in liquid phase into a constant. Nevertheless, the composition of the boundary layer changes greatly in the solidification process, the diffusion coefficient will no longer be a constant and is dependent on concentration. In this paper, the quantitative phase field model is used to simulate the effect of concentration-dependent diffusion coefficient on dendrite growth in directional solidification. In the model, the concentration-dependent diffusion process is investigated by coupling the concentration-dependent diffusion coefficient in the liquid solute diffusion equation. A series of simulation results confirms that the concentration-dependent diffusion process has a significant effect on the dendrite growth. The results show that the increase of the coupling intensity of solute concentration will enhance the diffusion of solute in the mushy zone between primary dendrites to the dendrite tip, resulting in the increase of solute enrichment at the dendrite tip, thereby increasing the tip undercooling. The variation of diffusion coefficient in liquid phase has little effect on the tip radius of dendrite, and the simulation results are in good agreement with those from the theoretical model. Moreover, the amplitude of dendritic side branches decreases with the increase of solute diffusion coefficient. In the study of dendrite arrays, it is found that the concentration-dependent diffusion coefficient increases the primary spacing and reduce the tip position. The results of this study indicate that for a system with a concentration-dependent coefficient significantly, the effect of concentration-dependent diffusion on tip undercooling and side branches should be considered in the quantitative and experimental verification of the existing model.

Keywords: phase field method, directional solidification, dendrite, diffusion coefficient

PACS: 64.70.D-, 81.10.-h, 81.30.-t

DOI: 10.7498/aps.68.20190603

* Project supported by National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2017YFB1103303).

These authors contributed equally.

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