

二元合金等温凝固过程的相场模型^{*}

龙文元^{1,2)} 蔡启舟¹⁾ 陈立亮¹⁾ 魏伯康¹⁾

¹⁾(华中科技大学材料科学与工程学院模具技术国家重点实验室, 武汉 430074)

²⁾(南昌航空工业学院材料科学与工程系, 南昌 330034)

(2003 年 12 月 17 日收到 2004 年 4 月 27 日收到修改稿)

基于 Ginzberg-Landau 理论, 发展了一个与 WBM 模型和 KKS 模型一致的新相场模型, 并利用该相场模型与溶质场耦合计算, 以 Al-6.5% Cu 合金为例模拟了不同过冷度条件下二元合金凝固过程的等轴枝晶生长过程。研究过冷度对二元合金等温凝固过程的等轴枝晶生长以及溶质场分布的影响。结果表明 随着过冷度的增大, 枝晶的二次枝晶更加发达, 浓度 Peclet 数和枝晶尖端的生长速率增大, 而枝晶尖端的曲率半径减小, 枝晶前沿的溶质富集现象也更严重; 另外, 计算结果与 Ivantsov 理论符合较好。

关键词: 相场法, 枝晶生长, 溶质场, Ivantsov 理论

PACC: 6410, 8130, 6155H

1. 引言

相场法是一种用于描述在非平衡状态中复杂相界面演变强有力的工具。它由引入相场变量 φ 而得名, φ 是一个有序化参数, 表示系统在时间和空间上物理状态($\varphi = 1$ 时表示固相; $\varphi = -1$ 或 0 时表示液相, 在固液界面上 φ 的值在 0—1 之间连续变化)。相场理论是建立在统计物理学基础上的, 以金兹堡-朗道(Ginzburg-Landau)相变理论为基础, 通过微分方程反映扩散、有序化势与热力学驱动力的综合作用。相场方程的解可描述金属系统中固液界面的形态、曲率和界面的移动, 从而避免了跟踪复杂固液界面的困难。目前该方法已成为微观组织模拟中的研究热点, 属于材料科学的前沿研究领域^[1]。

此外, 相场法通过相场与温度场、溶质场、流场及其他外部场的耦合, 可以对直接模拟金属凝固过程固相和液相中的溶质偏析、枝晶分枝的形成、熟化和重熔等复杂的现象, 并能定量地研究固液界面曲率效应、动力学效应、扰动、各向异性对凝固微观组织形成的影响^[1]。

相场法最早是用于模拟纯物质过冷熔体中的枝晶生长^[2-5], 现已发展到研究合金的枝晶生长。用于合金凝固的第一个模型是 Wheeler 等人建立的

(WBM 模型)^[6], 并采用该模型模拟了 Ni-Cu 二元合金等温凝固的枝晶形貌。随后, Warren 等人^[7]采用该模型在尖锐界面条件限制下模拟了凝固过程的枝晶生长和溶质分布, 为了简化模型, 忽略了结晶潜热的释放, 将二元合金的凝固近似地认为是在等温度条件下进行, 以 Ni-Cu 合金为例模拟了二元合金凝固过程中的枝晶形貌, 并研究固相中的溶质扩散系数值对微观偏析的影响。Boettinger 等^[8]对此模型进行改进, 加入了结晶潜热对枝晶生长的影响, 再现了凝固过程中的再辉(recalescence)现象。后来, Loginova 等人^[9]进一步采用该模型模拟了二元合金非等温凝固过程的枝晶形貌, 并将结果与等温凝固过程的结果进行了比较, 也再现了凝固过程中的再辉现象。

WBM 模型是在热力学一致条件下推导的, 并假定固液界面是由浓度相同的固、液相的混合, 从而使得模型中会增加一个额外的双阱势能。最近, Kim 等人^[10]在假定平衡时固液界面是由化学势相同的固、液相的混合基础上, 推导出了一个新的用于合金的相场模型(KKS 模型), 并利用该模型模拟了等温度条件下 Fe-C, Al-Si 等二元合金凝固过程的枝晶生长, 再现了重熔、溶质偏析等合金凝固的重要特征^[10-16]。Ode 等人模拟了 Fe-C 合金中在难熔颗粒推进或吞没过程界面形状随时间的变化^[17]。Seol 等人基于 KKS 模型, 建立了连铸钢的高温应力模型, 研

* 国家自然科学基金(批准号: 10176009)及江西省材料科学与工程研究中心开放基金(批准号: ZX200301017)资助的课题。

究了枝晶形貌对碳钢的机械强度的影响^[18]。龙文元等人^[19,20]也利用该模型研究了Al-Cu二元合金等温和非等温凝固过程的枝晶生长。KKS模型中,它是假定合金熔体为稀溶液,主要适用于低二元合金凝固过程的模拟。赵代平等人^[21]基于Karma模型模拟铝合金的三维枝晶生长。

本文基于Ginzberg-Landau相变理论,在假定平衡时固液界面处固、液相的化学势相同而溶质浓度不同的基础上,将发展了一个新的二元合金相场模型。并将其与枝晶前沿的浓度场进行耦合计算,模拟二元合金等温凝固过程中枝晶生长的演变过程以及浓度场的分布情况。

2. 控制方程

2.1. 相场方程

相场变量随时间的变化被假定与自由能的变化函数成正比,即

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M \frac{\delta F}{\delta \phi}, \quad (1)$$

式中 M 为与界面驱动力有关的相场移动速率,Helmholtz自由能函数 F 可表示为

$$F = \int_v \left[\frac{1}{2} \epsilon^2 |\nabla \phi|^2 + \mathcal{J}(\phi, c, T) \right] dV, \quad (2)$$

相场方程可表示为

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M[\epsilon^2(\theta)\nabla^2\phi - f_\phi]. \quad (3)$$

自由能密度定义为固相和液相的自由能密度分别乘以固相和液相的分数,再加上剩余自由能的和,即可表示为

$$\mathcal{J}(\phi, T) = h(\phi)f^S + (1 - h(\phi))f^L + Wg(\phi), \quad (4)$$

式中 $h(\phi)$ 为势函数, $g(\phi)$ 为剩余自由能函数。在本文中取 $h(\phi) = \phi^3(10 - 15\phi + 6\phi^2)$, $g(\phi) = \phi^2(1 - \phi)^3$, f^S 和 f^L 分别为固、液相的自由能, W 为相场参数。

固液界面处是浓度不同的固、液相的混合,平衡时固液相的化学势相同。因此固、液相的自由能可以表示为

$$\begin{aligned} f^S(c_S, T) &= c_S \mu_A^S + (1 - c_S) \mu_B^S, \\ f^L(c_L, T) &= c_L \mu_A^L + (1 - c_L) \mu_B^L, \end{aligned} \quad (5)$$

式中 μ_A^S , μ_A^L , μ_B^S 和 μ_B^L 分别是组元 A , B 固、液相的化学势, c_S , c_L 分别是固、液相中的溶质浓度。

假定液体熔体为理想溶液,固溶体为稀规则溶液,对稀固溶体溶液,溶质 B 服从亨利定律,溶剂 A 服从 Raoult 定律,则有

$$\begin{aligned} \mu_B^S &= \mu_B^{OS} + \frac{RT}{V_m} \ln \gamma_B^S c_S, \\ \mu_B^L &= \mu_B^{OL} + \frac{RT}{V_m} \ln c_L, \\ \mu_A^S &= \mu_A^{OS} + \frac{RT}{V_m} \ln (1 - c_S), \\ \mu_A^L &= \mu_A^{OL} + \frac{RT}{V_m} \ln (1 - c_L), \end{aligned} \quad (6)$$

μ_A^{OS} , μ_A^{OL} , μ_B^{OS} 和 μ_B^{OL} 分别是组元 A , B 固、液相的标准化学势。

熔化自由能(T)的近似式

$$\begin{aligned} \mu_B^{OL} - \mu_B^{OS} &= \Delta H_{mB}(1 - T/T_B), \\ \mu_A^{OL} - \mu_A^{OS} &= \Delta H_{mA}(1 - T/T_A), \end{aligned} \quad (7)$$

式中 ΔH_{mB} , ΔH_{mA} 分别是纯 B 和 A 的熔化热, T_B , T_A 分别是纯 B 和 A 的熔点。

将(7)(6)和(5)式代入(4)式,并求导可以得到

$$\begin{aligned} f_\phi &= h'(\phi) \left\{ c \cdot \left(\frac{RT}{V_m} \ln \frac{c_S}{c_L} - \Delta H_{mB}(1 - T/T_B) + \Delta H_m^B \right) \right. \\ &\quad \left. + (1 - c) \cdot \left(\frac{RT}{V_m} \ln \frac{(1 - c_S)}{(1 - c_L)} - \Delta H_{mA}(1 - T/T_A) \right) \right\} \\ &\quad + W'_g(\phi), \end{aligned} \quad (8)$$

式中 $\Delta H_m^B = RT/V_m \ln \gamma_B^S$ 。

该模型与 WBM 模型和 KKS 模型是一致的。WBM 模型和 KKS 模型相当于该模型的一个特殊情况。当假设界面处的固、液相的溶质浓度相同,即 $c_S = c_L$ 时,则与 WBM 模型基本一致;而当假设合金为稀溶液时即溶质浓度 c 近似为零时,则和 KKS 模型基本一致。

2.2. 溶质扩散方程

在合金的模拟中,还需要同时解溶质扩散方程,其扩散方程用自由能密度表示^[10],即

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\frac{D(\phi)}{f_{ee}} \nabla f_e \right), \quad (9)$$

式中 M , ϵ 和 W 为相场参数, $D(\phi)$ 为溶质扩散系数, f_e 和 f_{ee} 为自由能密度 f 对浓度的一阶、二阶偏微分。

在界面区域的溶质浓度 c 是固相和液相的质量分数的和。另外在两相平衡时,界面区域中任意点的固、液相的化学势相等,即

$$c = h(\phi)c_S + (1 - h(\phi))c_L,$$

$$\mu^S(c_S(x,t)) = \mu^L(c_L(x,t)). \quad (10)$$

3. 计算参数的选择

3.1. 相场参数

相场参数 ϵ 和 W 与界面能、界面厚度有关, M 与界面动力系数有关. 则它们可表示为^[10]

$$\sigma = \frac{\epsilon \sqrt{W}}{3\sqrt{2}}, 2\gamma = 2.2\sqrt{2} \frac{\epsilon}{\sqrt{W}}, \quad (11)$$

$$M^{-1} = \frac{\epsilon^2}{\sigma} \frac{RT}{V_m} \frac{1 - k^e}{\mu^k m^e}, \quad (12)$$

式中 σ 为界面能, λ 为界面厚度, μ^k 为动力系数, R 为气体常数, T 为温度, V_m 为摩尔体积, m^e 为液相线斜率, k^e 为平衡常数, c 为溶质浓度, 下标 S, L 分别表示固相和液相.

通常金属界面能具有各向异性, 因此, 引入与界面能有关的参数

$$\epsilon(\theta) = \epsilon(1 + v \cos(k\theta)), \quad (13)$$

式中 k 为各向异性的模数, 通常取 4; v 为各向异性强度, θ 为界面与优先生长方向间的夹角, 即 ϕ 在 x, y 轴方向的斜率 $\tan\theta = \phi_x/\phi_y$.

3.2. 扰动

为了模拟实际凝固过程中界面处的波动, 我们在计算加入随机的扰动. 本文以一种简单的方式在相场方程加入扰动, 即

$$\partial c / \partial t \rightarrow \partial c / \partial t + 16g(\phi)\chi\omega \cdot c, \quad (14)$$

式中 χ 为取值在 -1 和 +1 之间随机数, ω 为与时间有关的相扰动强度因子. $16g(\phi)$ 用来强制扰动在固液界面中出现, $\varphi = 0.5$ 处可能出现最大扰动, 远离界面将迅速减小.

4. 数值计算

本文选用 Al-6.5% Cu 为研究合金. 计算中使用到的 Al-6.5% Cu 合金物性参数如表 1 所示.

在计算时, 采用显式有限差分法同时求解方程 (3) 和 (9). 计算的时间步长受浓度场计算的限制, 即 $\Delta t < \Delta x^2 / 4D_L$, D_L 为液相中的溶质扩散系数, 为此在计算中选择 $\Delta t = \Delta x^2 / 5D_L$. 由于枝晶是对称的, 为了节省时间只计算枝晶生长的四分之一区域, 枝晶轴对应着直角坐标系的 X 轴和 Y 轴, 相场和溶质场

的计算网格数为 800×800 , 网格尺寸为 1.5×10^{-8} m, 初生晶核设为一个网格数为 15×15 的三角形.

表 1 Al-6.5% Cu 合金的物性参数

物性参数	Al-6.5% Cu
界面能 σ (J/m ²)	0.093
熔点温度 T_A (K)	933.3
熔点温度 T_B (K)	1358
凝固潜热 ΔH_{mA} (J/m ³)	1.07×10^6
凝固潜热 ΔH_{mB} (J/m ³)	1.728×10^6
液相溶质扩散系数 D_L (m ² /s)	3.0×10^{-9}
固相溶质扩散系数 D_S (m ² /s)	3.0×10^{-13}
液相线斜率 m_e (K/mol)	-640.0
平衡常数 k_e	0.14

数值计算和结果显示都是采用 VC++ 6.0 为编程语言, 利用上述的模型和计算方法编写了二维枝晶生长模拟的应用程序和结果可视化显示程序.

5. 结果与分析

本文模拟了初始温度分别为 900K, 895K 和 890K 时等温凝固过程的枝晶生长, 并在模拟中加入强度为 0.01 的扰动. 研究了过冷度对等温凝固枝晶生长过程的影响. 计算是在 P4-2.4GHz 的微机上进行的.

5.1. 枝晶形貌

图 1 是凝固时间 $t = 0.45$ ms 时合金等温凝固时二维枝晶形貌的模拟结果, 其中 (a) 初始温度为 900K, (b) 初始温度为 895K, (c) 初始温度为 890K. 图中的黑色区域是固相, 白色区域是液相, 两者之间的过渡区域是固/液界面区域.

从图中可以看得出 (c) 图初始温度最低, 即过冷度最大, 其枝晶最发达. 枝晶不仅具有发达的二次枝晶臂, 而且还出现了三次枝晶臂. 同时一次枝晶主干也会变得更细一些. 而在 (a) 图中只出现了少量的二次枝晶臂, 同时一次枝晶主干也要粗一些. 这表明过冷度大可以促进枝晶的生长, 二次枝晶臂也更发达. 当过冷度足够大时还会出现三次枝晶臂, 另外, 二次枝晶臂的生长又会使一次枝晶主干变细.

图 2 是枝晶生长过程中温度对枝晶尖端生长速率和曲率半径的影响曲线. 从图中可以看出, 随着温度的升高, 枝晶尖端的生长速度减小, 而枝晶尖端的曲率半径增大, 基本上是近似的线性变化关系. 从图

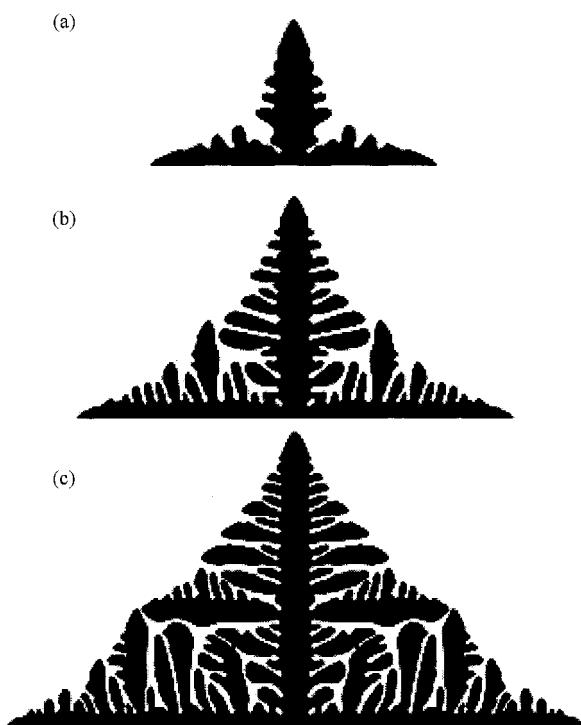


图 1 二维枝晶形貌的模拟结果($t = 0.45\text{ms}$) (a) $T = 900\text{K}$, (b) $T = 895\text{K}$ (c) $T = 890\text{K}$

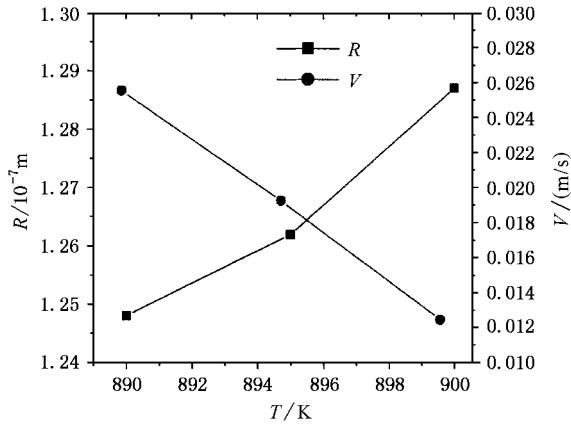


图 2 枝晶尖端生长速度和曲率半径与温度的关系曲线

1 中枝晶形貌的模拟结果也可以直观地看出,它们的凝固时间是一样的,但是,在不同温度下的一次枝晶主干的生长长度是不同的。随着初始温度越低,其长度越长,即枝晶的生长速率越快。这表明过冷度大有利于枝晶的生长,这和凝固理论中晶体连续生长机理是相符合的。

图 3 是采用 KKS 模型^[10]在与图 1(c)同样的边界条件和初始条件下所得到的枝晶形貌模拟结果。图 4 是 Glicksman 等人采用丁二腈进行枝晶生长形

貌实验的结果^[22]。从图 3 可以看到,枝晶有一些小孔隙,枝晶有一定的失真。这是由于 KKS 模型对网格尺寸比较敏感,当网格尺寸为 $1.0 \times 10^{-8}\text{m}$ 时就可以得到较好的枝晶形貌,但是这样所需的计算时间也就要长一些。比较图 1 和图 4 可以看出,采用本模型进行模拟得到的枝晶形貌与实验结果符合得较好。



图 3 采用 KKS 模型的二维枝晶形貌模拟结果($t = 0.45\text{ms}$, $T = 890\text{K}$)

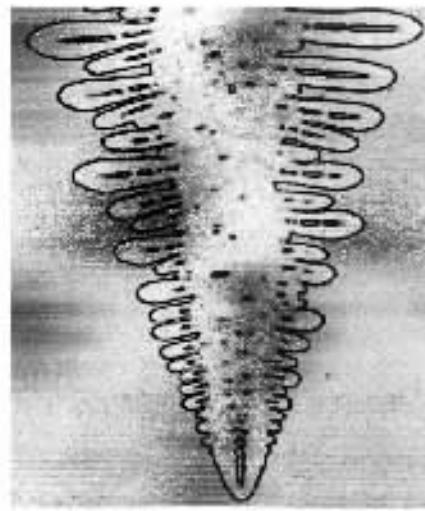


图 4 丁二腈枝晶生长形貌的实验结果^[22]

5.2. 溶质分布

图 5 是凝固时间 $t = 0.45\text{ms}$ 时枝晶生长过程的溶质分布情况的模拟结果,其中(a)初始温度为 900K (b)初始温度为 895K (c)初始温度为 890K 。

从图 5 可以看到溶质的分布情况与枝晶生长形貌是相符合的。枝晶臂中心 Cu 的浓度要低一些,这是由于凝固过程枝晶尖端曲率效应引起过冷,使固相线向下移动,而固相中溶质的扩散速度又大大落后于枝晶生长速度。枝晶凝固的固、液相界面区域出现 Cu 的富集,这是由于凝固过程的溶质再分配,固相

中 Cu 的浓度低于初始浓度 , 液相中溶质的扩散速度也远小于枝晶生长速度 , 凝固时析出的溶质不能充分扩散到液相中 , 从而富集在枝晶前沿 .

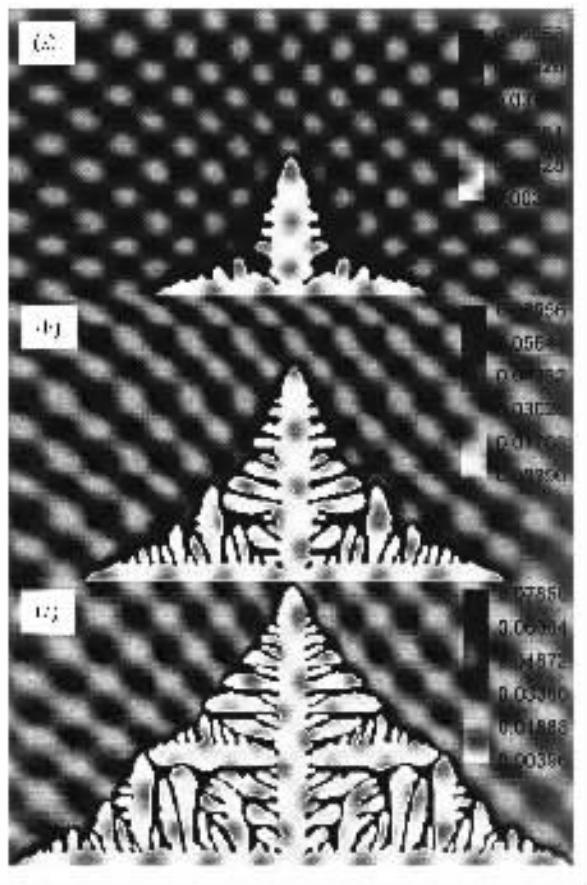


图 5 枝晶生长过程溶质分布的模拟结果($t = 0.45\text{ms}$) (a) $T = 900\text{K}$ (b) $T = 895\text{K}$ (c) $T = 890\text{K}$

在枝晶尖端由于界面移动速率大 , 溶质来不及扩散 , 因此浓度梯度最大 . 另外在被二次晶臂包围的界面区域 , 溶质不易向液相中扩散 , 因此整个区域的溶质浓度比较高 .

图 6 是枝晶尖端固液界面处的浓度分布情况 . 从图中还可以看出初始温度高时的最高溶质浓度和固相中的浓度比初始温度低时要小 , 这是因为一方面由于凝固时的温度升高 , 使凝固点在相图上的液相和固相线左移 , 使平衡时的固、液相的浓度降低 , 从而导致凝固界面的溶质浓度和固相中的降低 ; 另一方面初始温度低的时候枝晶的生长速率快 , 溶质再分配时析出的溶质相多 , 并且析出溶质的扩散不充分 , 从而在固液界面上富集更多的溶质 , 而且初始温度低二次枝晶也更发达 , 有些糊状区域被枝晶包围 , 使得富集的溶质也不容易扩散 , 这样使得最高溶质浓度的差别比固相中溶质浓度的差别要大得多 .

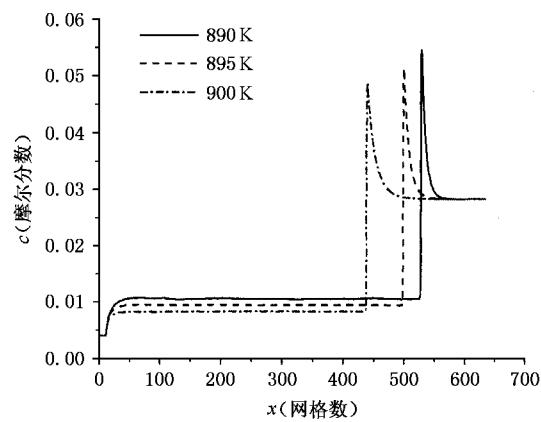


图 6 枝晶尖端固液界面处的浓度分布曲线

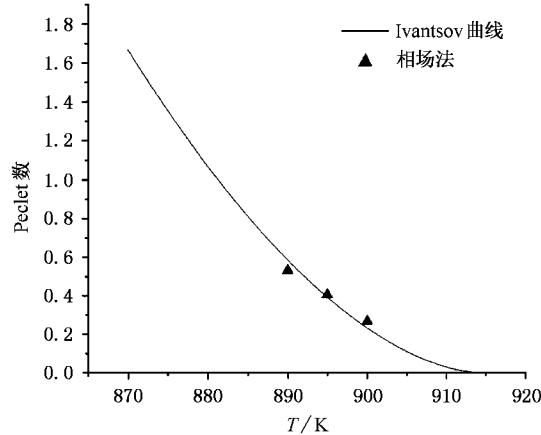


图 7 Peclet 数与温度的关系曲线

5.3. 与经典枝晶生长理论的比较

在 Ivantsov 理论中 , 假定枝晶为旋转抛物线体 , 则枝晶尖端曲率半径、生长速度与枝晶尖端前沿固、液界面区域的溶质浓度的关系可表示为

$$I(P_c) = \Omega, \quad (15)$$

式中 Ω 为合金凝固的无量纲过饱和浓度 , 即 $\Omega = (c_L - c_0)/(c_L(1 - k))$.

P_c 为 Peclet 数 , $P_c = VR/(2D_L)$.

$I(P_c)$ 为 Ivantsov 函数 , 可表示为

$$I(P_c) = P_c \exp(-P_c) E_1(P_c), \quad (16)$$

E_1 为一指数积分函数 ,

$$E_1(P_c) = \int_{P_c}^{\infty} \frac{\exp(-z)}{z} dz.$$

图 7 是 Ivantsov 理论和数值模拟中凝固温度与 Peclet 数的关系曲线 , 从图中可以看到 , 随着温度的升高 , 模拟结果与 Ivantsov 理论解析结果的 Peclet 数

都是减小的，并且符合较好。

6. 结 论

1. 基于 Ginzberg-Landau 理论，本文发展了一个新的相场模型，该模型与 WBM 模型和 KKS 模型是一致的，但比它们更符合实际的凝固情况。采用该相场模型可以逼真地模拟自由枝晶的生长过程，通过引入浓度扰动可以模拟二次或更高次晶臂生长等复杂的枝晶形貌。

2. 过冷度增大可以促进枝晶的生长，从而可得到更发达的二次枝晶臂，二次枝晶臂生长又使一次枝晶臂变细。

3. 过冷度增大会使枝晶尖端的生长速率增大，曲率半径减小，浓度 Peclet 数也增大，并且与 Ivantsov 理论中枝晶的生长机理是符合的。

4. 枝晶生长过程中枝晶尖端的浓度梯度最大，另外在被二次晶臂包围的界面区域，溶质浓度最高。而且过冷度越大溶质在固液界面上的富集现象也越严重，固相中的溶质浓度也越高。

-
- [1] Long W Y , Cai Q Z and Wei B K 2003 *Foundry* **52** 161 (in Chinese) 龙文元、蔡启舟、魏伯康 2003 铸造 **52** 161]
 - [2] Kobayashi R 1993 *Physica D* **63** 410
 - [3] Wheeler A A , Murray B T and Schaefer R J 1993 *Physica D* **66** 243
 - [4] Wang S L , Sekerka R F , Wheeler A A , Murray B T , Coriell S R , Braun R J and McFadden G B 1993 *Physica D* **69** 189
 - [5] Yu Y M , Yang G C , Zhao D W , Karma A and Beckermann C 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2423 (in Chinese) 于艳梅、杨根仓、赵达文、Karma A , Beckermann C 2001 物理学报 **50** 2423]
 - [6] Wheeler A A , Boettinger W J , McFadden G B 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7424
 - [7] Warren J A and Boettinger W J 1995 *Acta Metall. Mater.* **43** 689
 - [8] Boettinger W J and Warren J A 1996 *Metall. Mater. Trans. A* **27** 657
 - [9] Loginova I , Amberg G and Agren J 2001 *Acta Mater.* **49** 573
 - [10] Kim S G , Kim W T and Suzuki T 1999 *Phys. Rev. E* **60** 7186
 - [11] Kim S G and Kim W T 2001 *Mater Sci. Eng. A* **304—306** 281
 - [12] Lee J S and Suzuki T 1999 *ISIJ International* **39** 246
 - [13] Ode M and Suzuki T 2002 *ISIJ International* **42** 368
 - [14] Ode M , Suzuki T , Kim S G and Kim W T 2000 *Sci. Technol. Adv. Mater.* **2000(1)** 43
 - [15] Ode M , Kim S G and Suzuki T 2001 *ISIJ International* **41** 1076
 - [16] Suzuki T , Ode M , Kim S G and Kim W T 2002 *Journal of Crystal Growth* **237—239** 125
 - [17] Ode M , Kim S G , Kim W T and Suzuki T 2001 *ISIJ International* **41** 345
 - [18] Seol D J , Oh K H , Cho J W , Lee J E and Yoon U 2002 *Acta Materialia* **50** 2259
 - [19] Long W Y , Cai Q Z , Chen L L , Wei B K 2004 *Transactions of Nonferrous Metals Society of China* **14** 291
 - [20] Long W Y , Cai Q Z and Wei B K 2003 *Foundry* **52** 695 (in Chinese) 龙文元、蔡启舟、陈立亮、魏伯康 2003 铸造 **52** 695]
 - [21] Zhao D P , Jing T , Liu B Ch 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1737 (in Chinese) 赵代平、荆涛、柳百成 2003 物理学报 **52** 1737]
 - [22] Glicksman M E , Koss M B and Winsa E A 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 573

Phase-field modeling of isothermal solidification in binary alloy^{*}

Long Wen-Yuan^{1,2)} Cai Qi-Zhou¹⁾ Chen Li-Liang¹⁾ Wei Bo-Kang¹⁾

¹⁾ State Key Laboratory of Die Technology , College of Material Science and Engineering , Huazhong University
of Science and Technology , Wuhan 430074 , China)

²⁾ Department of Materials Science and Engineering , Nanchang Institute of Aeronautical Technology , Nanchang 330034 , China)

(Received 17 December 2003 ; revised manuscript received 27 April 2004)

Abstract

A new phase-field model is developed based on the Ginzberg-Landau theory , which is consistent with WBM model and KKS model. The dendritic growth process during the solidification in a Al-6.5% Cu binary alloy was simulated using the phase-field model. Solute diffusion equation was solved simultaneously. The effects of undercooling on the dendritic growth and solute profile in isothermal solidification of binary alloy were investigated. The results indicate that the dendritic has well-developed secondary arms with the increase of undercooling. Correspondently , the solute Peclet number and the tip speed increases , the tip radius decreases , and the solute segregation in solid-liquid interface increases . The results agree well with Ivantsov theory .

Keywords : phase-field method , dendritic growth , solute profile , Ivantsov theory

PACC : 6410 , 8130 , 6155H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10176009) and by Research Center of Material Science and Engineering of Jiangxi Province , China (Grant No.ZX200301017).