

Ti-45at. % Al 合金定向凝固过程中 显微组织演化的计算机模拟

王狂飞^{1)†} 郭景杰²⁾ 米国发¹⁾ 李邦盛²⁾ 傅恒志¹⁾

1) 河南理工大学材料学院, 焦作 454100)

2) 哈尔滨工业大学材料学院, 哈尔滨 150001)

(2007 年 4 月 10 日收到, 2007 年 8 月 31 日收到修改稿)

采用基于溶质扩散控制模型 CA 方法对 Ti-45at. % Al 合金定向凝固过程中显微组织演化过程进行了数值模拟. 模拟结果表明, 在温度梯度较高时, 初生晶核间距无论大小, 均可通过分枝或竞争生长而使一次胞晶/枝晶间距得到调整. 在抽拉速度一定情况下, 随着温度梯度增加, 胞晶/枝晶间距减小, 在温度梯度一定情况下, 随着抽拉速度增大, 观察到胞晶/枝晶混合结构, 混合结构区随温度梯增大而增大. 模拟结果与实验观察相符合.

关键词: Ti-45at. % Al 合金, 定向凝固, 组织演化, 数值模拟

PACC: 6100, 6470K, 6480G, 0650M

1. 引 言

定向凝固过程中, 抽拉速度与温度梯度是两个很重要的参数, 对其凝固组织的形成产生重要的影响. 目前, 定向凝固技术在 Ti-Al 合金叶片铸造方面的应用还不成熟, 特别是在组织演化方面仍有许多问题需要解决. 虽然许多人已对 Ti-Al 合金定向凝固组织演化进行了实验研究^[1,2], 但是由于海绵钛的价格居高不下, 实验费用高, 而且 Ti-Al 合金从液态冷却时, 经历了 $L \rightarrow \beta$ 包晶反应等, 其研究结果仍然是比较零散的, 迫切需要采用新的方法进行研究.

由于数值模拟凝固技术具有实验方法和理论方法所无法比拟的优点, 比如能够定量的研究凝固现象、不受实验条件限制, 成本低、可以直接显示凝固内部发生的各种变化, 因而数值模拟凝固技术已成为研究凝固现象、特别是组织演化的一个重要手段^[3,4]. 对于定向凝固显微组织演化的模拟, 国内外已进行了不同方法的研究^[5-8], 例如, Boettinger 等人^[4]用相场法对 Ni-40at% Cu 合金快速定向凝固条件下胞晶/平面晶转变过程进行了研究, Wang 等人^[7]用 Cellular Automation (CA) 方法对镍基高温合金定向凝固过程进行了模拟. 在国内, 也有一些人对

定向凝固组织演化过程进行了模拟^[5,8], 但对 Ti-Al 合金定向凝固组织演化进行系统模拟尚未见报道. 本文采用基于溶质扩散控制模型的 CA 方法对 Ti-Al 合金定向凝固过程中显微组织演化过程进行了模拟. 模型考虑了溶质在液、固相中的扩散, 针对以往溶质扩散计算进行了修正, 在计算液、固相浓度场时, 利用浓度势的方法, 使液固相浓度场计算得到统一. 另外模型考虑了凝固过程中枝晶前沿存在着随机的热扰动, 并将这种随机的热扰动直接添加到固液界面的迁移上, 使得这种模型能更真实地反映凝固的实际情况. 模拟时, 初始成分选用了相图上发生 $L \rightarrow L + \beta(\text{Ti})$ 转变的合金成分^[9].

2. 数学物理模型

模型建立在以下的假设基础上: 1) 材料的密度为一个常数; 2) 在凝固过程中液体金属的流动可以忽略; 3) 材料的物理性质随温度变化保持常数. 根据上述假设可以建立下列方程.

在温度场控制方程中, 定向凝固条件常采用“冷却温度近似法”^[6,4], 即忽略体系的横向温度扩散而只考虑存在纵向的一维温度扩散, 由此, 体系温度场可表示为

$$T(y) = T_m(C_0) + \alpha(y - V_p t), \quad (1)$$

式中, G 为温度梯度; V_p 为抽拉速度; $T_m(C_0)$ 为定向凝固的体系参考温度.

溶质传导方程

$$\frac{\partial C_l}{\partial t} = \nabla \cdot (D_l \nabla C), \quad (2)$$

式中, C 为溶质浓度, D 为溶质扩散系数, 下标 l 代表固相或液相.

将浓度场定义为浓度势^[7]

$$\begin{aligned} P &= C_l f_s = 0, \\ p &= C_s f_s = 1, \\ p &= C_l^* \theta < f_s < 1, \end{aligned} \quad (3)$$

式中, P 为浓度势. 由此 (1) 式可统一地写成

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \nabla \cdot (D_E \nabla P), \quad (4)$$

式中, \bar{C} 为单元内之平均浓度, $\bar{C} = f_s^{n+1} \cdot C_s + (1 - f_s^{n+1}) \cdot C_l$; D_E 为等效溶质扩散系数, 当两个相邻单元均为固相时 $D_E = D_s$, 否则

$$D_E = \frac{(f_s^i D_s + (1 - f_s^i) D_l + f_s^{i+1} D_s + (1 - f_s^{i+1}) D_l)}{2};$$

k_p 为溶质分配系数.

在固液界面处, 溶质分配系数为一常数,

$$C_s^* = k_p C_l^*.$$

其中, 固液界面处溶质浓度 C_l^* 可根据相图求得

$$C_l^* = C_0 + \frac{(T^* - T_{eq} - \Gamma \bar{K} f(\theta, \varphi))}{m}, \quad (5)$$

式中, C_0 为溶质初始浓度; Γ 为 Gibbs-Thomson 系数; $f(\theta, \varphi)$ 为表示曲率的各向异性函数; m 为液相线斜率. 其中, 固液界面处的曲率可按下式求得^[10]:

$$\bar{K} = \frac{\chi(f_s)_x(f_s)_y(f_s)_{xy} - (f_s)_x(f_s)_{yy} - (f_s)_y(f_s)_{xx}}{((f_s)_x^2 + (f_s)_y^2)^{3/2}}. \quad (6)$$

曲率各向异性函数可由下式求得:

$$f(\theta, \varphi) = 1 + \delta \cdot \cos(4(\varphi - \theta)). \quad (7)$$

在界面迁移的过程中, 固液界面长大速度 V_n^*

由固液两侧溶质扩散控制^[11, 12]

$$V_n^* = (D_s \nabla C_s - D_l \nabla C_l) / (C_l^* - C_s^*). \quad (8)$$

根据 (8) 式, 可求出固相分数增量为^[10]

$$\begin{aligned} \delta f_s &= (1 + \eta(1 - 2\varepsilon)) \\ &\times \left(v_x + v_y - v_x \cdot v_y \cdot \frac{\Delta t}{a} \right) \cdot \frac{\Delta t}{a}, \end{aligned} \quad (9)$$

式中, η 为扰动振幅, 它反映扰动对结果的作用, 为一个常数; δf_s 为每一时间步上的固相分数增量; v_x, v_y 分别为沿 x 和 y 方向上界面推进的速度; Δt 为时间步长 (Δt); ε 为一个随机小数.

$$f_s^{n+1} = f_s^n + \delta f_s, \quad (10)$$

式中, f_s^{n+1} 为第 $n+1$ 步时的固相分数; f_s^n 为第 n 步时的固相分数.

同时固相分数增量也要满足溶质守恒, $\bar{C} = f_s^{n+1} \cdot C_s + (1 - f_s^{n+1}) \cdot C_l$, \bar{C} 通过 (4) 式求得, 则

$$f_s^{n+1} = \frac{C_l^* - \bar{C}}{(1 - k_p) \cdot C_l^*}. \quad (11)$$

由于固相分数在每一个时间步长内的变化量不能超过 0.2, 根据 (10) 式和 (11) 式便可确定第 $n+1$ 步时的固相分数.

3. 模拟结果及分析

为了模拟凝固相为 β 相时 TiAl 合金定向凝固过程, 将二维的计算区域剖分为 160×300 个均匀正方形网格, 网格尺寸均为 $5 \mu\text{m}$, 热梯度 (在垂直方向变化) 及抽拉速率在一定范围内改变, 模拟区域的左、右边及下端为浓度无扩散边界. 凝固过程中, 假定熔体内部无形核发生, 在定向凝固底端植入晶核, 其优先结晶生长方向为 100° . 合金物性参数如表 1 所示.

表 1 TiAl 合金相关的热物性参数^[13]

T_L/K	1830
$m(\text{K/at}\%)$	-8.9
k_p	0.63
$D_l(\text{m}^2/\text{s})$	3.0×10^{-9}
$D_s(\text{m}^2/\text{s})$	3.0×10^{-12}
Γ/km	1.5×10^{-7}

根据 TiAl 合金定向凝固显微组织形成规律, 温度梯度变化范围选用 $5-100 \text{ K/mm}$, 抽拉速度范围从平面凝固开始一直到形成胞晶/枝晶为止.

3.1. 晶核数量对凝固过程组织演化的影响

TiAl 合金定向凝固过程中,形核参数对最终显微组织形成起着很重要的作用,因此,首先我们对形核数量对凝固过程组织演化的影响进行了模拟.模拟选用晶核数量为 2,4,6,8,16.通过模拟,可观察到几种现象:1)稳态生长;2)枝晶分枝;3)竞争生长.

Ti-45Al(at.%)合金在温度梯度 5 K/mm、抽拉速度 0.1 mm/s 下晶核数量对枝晶形貌的影响如图 1 所示,由图可见,2 个晶核时的初生晶核间距为

400 μm ,4 个晶核时初生晶核间距为 200 μm ;16 个晶核时初生晶核间距为 50 μm .晶核数量较少时,最终枝晶间距增加到 114 μm ,而且二次枝晶较少(图 1(a));晶核数量增加到 4,枝晶直接从底端植入的晶核中形成,最终枝晶间距保持不变;晶核数量增加到 16,经过竞争生长后,最终枝晶间距减少到 100 μm ,这说明二次枝晶的生长也是通过不断竞争而进行的,而三次枝晶生长方向与定向凝固方向平行,并被其他二次枝晶所阻碍.

由以上模拟可见,在抽拉速度为 0.1 mm/s 情况

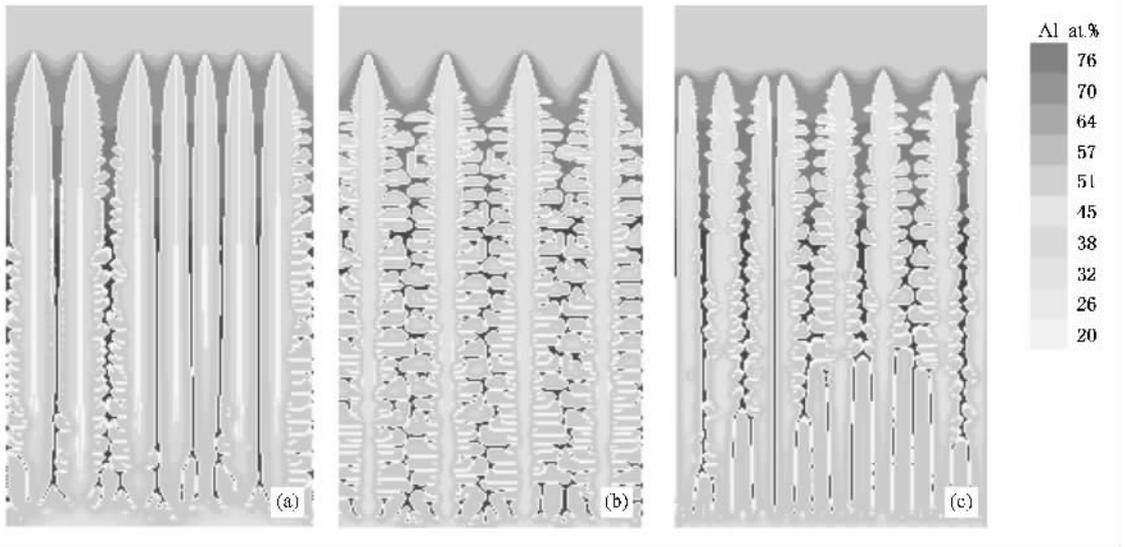


图 1 Ti-45Al(at.%)合金在温度梯度 5 K/mm、抽拉速度 0.1 mm/s 下晶核数量对显微组织晶演变过程的影响 (a)2 (b)4; (c)16

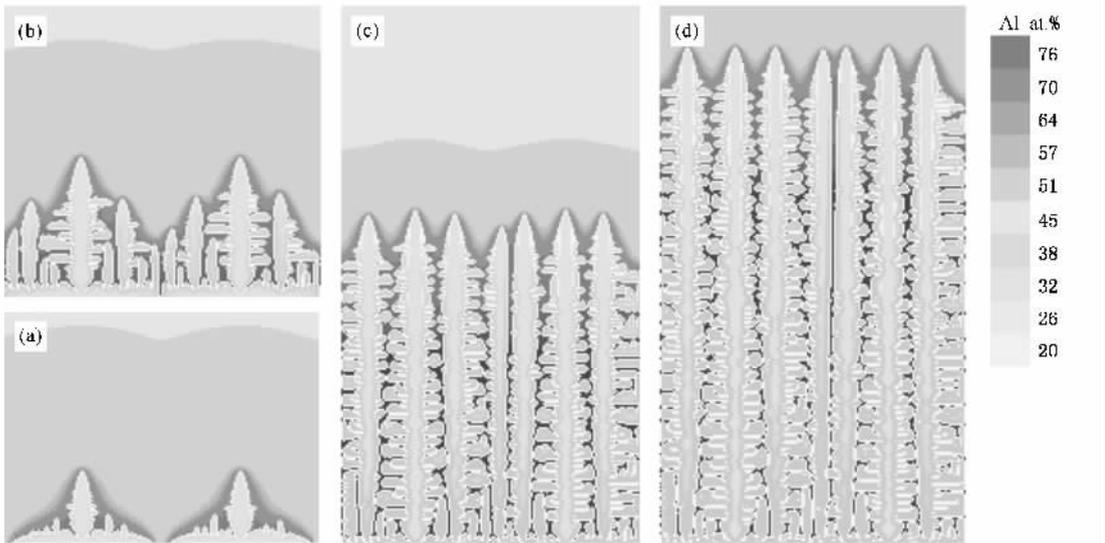


图 2 Ti-45Al(at.%)合金在晶核数量为 2、温度梯度 5 K/mm、抽拉速度为 0.5 mm/s 下显微组织随时间的演变情况 (a) 0.93 s (b) 1.30 s (c) 2.41 s (d) 3.28 s

下,虽然凝固初始晶核间距不同,但是在随后的凝固过程中,通过枝晶分枝或竞争生长而使一次枝晶间距得到调节.在其他条件与图 1 相同时,将抽拉速度提高到 0.5 mm/s,模拟结果如图 2 和图 3 所示.图 2 中,初始晶核间距为 400 μm 时,凝固 2.41 s 后,一次枝晶间距达到 133 μm .图 3 中,初始晶核间距为 50 μm 时,凝固 2.03 s 后,一次枝晶间距达到 114 μm .图

4 显示了晶核数量对枝晶间距的影响曲线,由图可见,抽拉速度较低或较高时,一次枝晶间距随晶核间距变化趋势相同:晶核间距较大时,一次枝晶间距有通过分枝而减小的趋势;晶核间距较小时,一次枝晶间距有通过竞争生长而增大的趋势;晶核间距范围在 150—300 μm 时,一次枝晶间距与植入晶核间距相比,未发生明显变化.

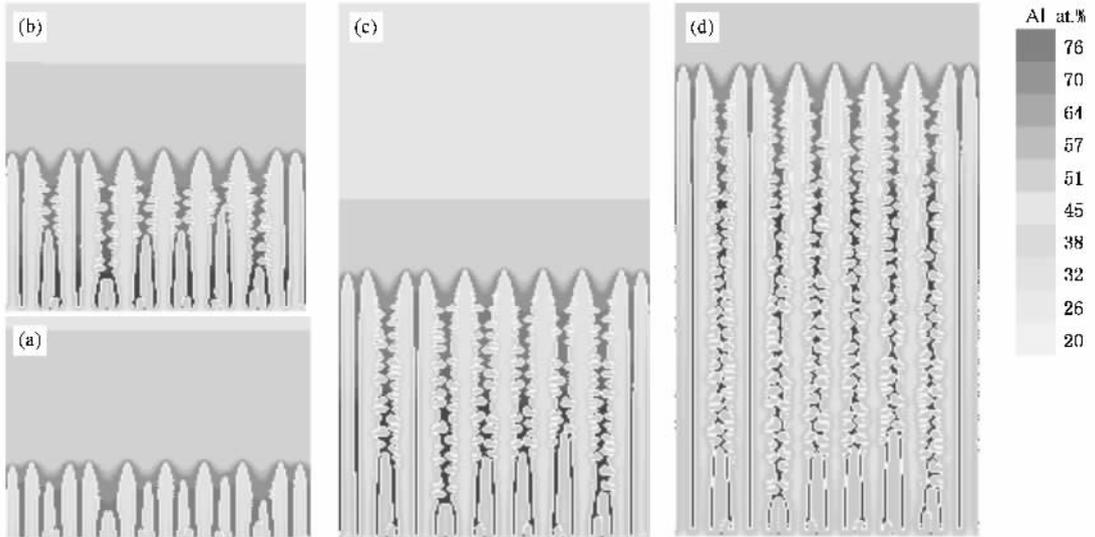


图 3 Ti-45Al(at.%)合金在晶核数量为 16、温度梯度 5 K/mm、抽拉速度为 0.5 mm/s 下显微组织随时间的演变情况 (a) 1.03 s (b) 1.53 s (c) 2.04 s (d) 3.16 s

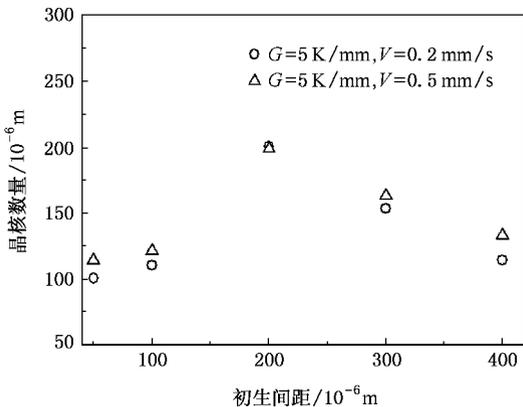


图 4 晶核数量对稳态初生间距的影响

3.2. 温度梯度对定向凝固过程组织演化的影响

为了模拟温度梯度对凝固过程组织演化的影响,选用温度梯度范围为 5—100 K/mm,抽拉速度范围为 0.1—1.0 mm/s,合金成分为 45Al(at.%) ,植入 4 个晶核.

抽拉速度为 0.1 mm/s,不同温度梯度下组织演化过程如图 5 所示,由图可见,温度梯度较低时,凝固形态为枝晶结构,在二次枝晶根部出现较高成分的溶质,凝固过程中一次枝晶与二次枝晶分岔处明显存在颈缩(图 5(a)).温度梯度增大到 10 K/mm 时,由于冷却速度增大,从底端晶核中直接分枝数量增多,凝固形态为胞晶/枝晶混合结构(图 5(b)).温度梯度增大到 20 K/mm,为胞晶结构,但一次初生间距明显减小(图 5(c)).温度梯度增加到 40 K/mm 后,凝固初始阶段,除可见由模拟区域底端 4 个晶核形核生长的痕迹外,基本以平面生长,但随着平界面干扰的出现,如溶质波动等,界面先出现凸起,形成胞晶,胞晶间距进一步减小,同时,也可看见胞晶之间开始融合(图 5(d))(e)).当温度梯度增加到 100 K/mm 时,由于界面波动很小,可看成以近平面方式凝固(图 5(f)).

抽拉速度为 1.0 mm/s,不同温度梯度下组织演化过程如图 6 所示,由图可见,由于抽拉速度较高,不论温度梯度多大,凝固形态均为枝晶.温度梯度较

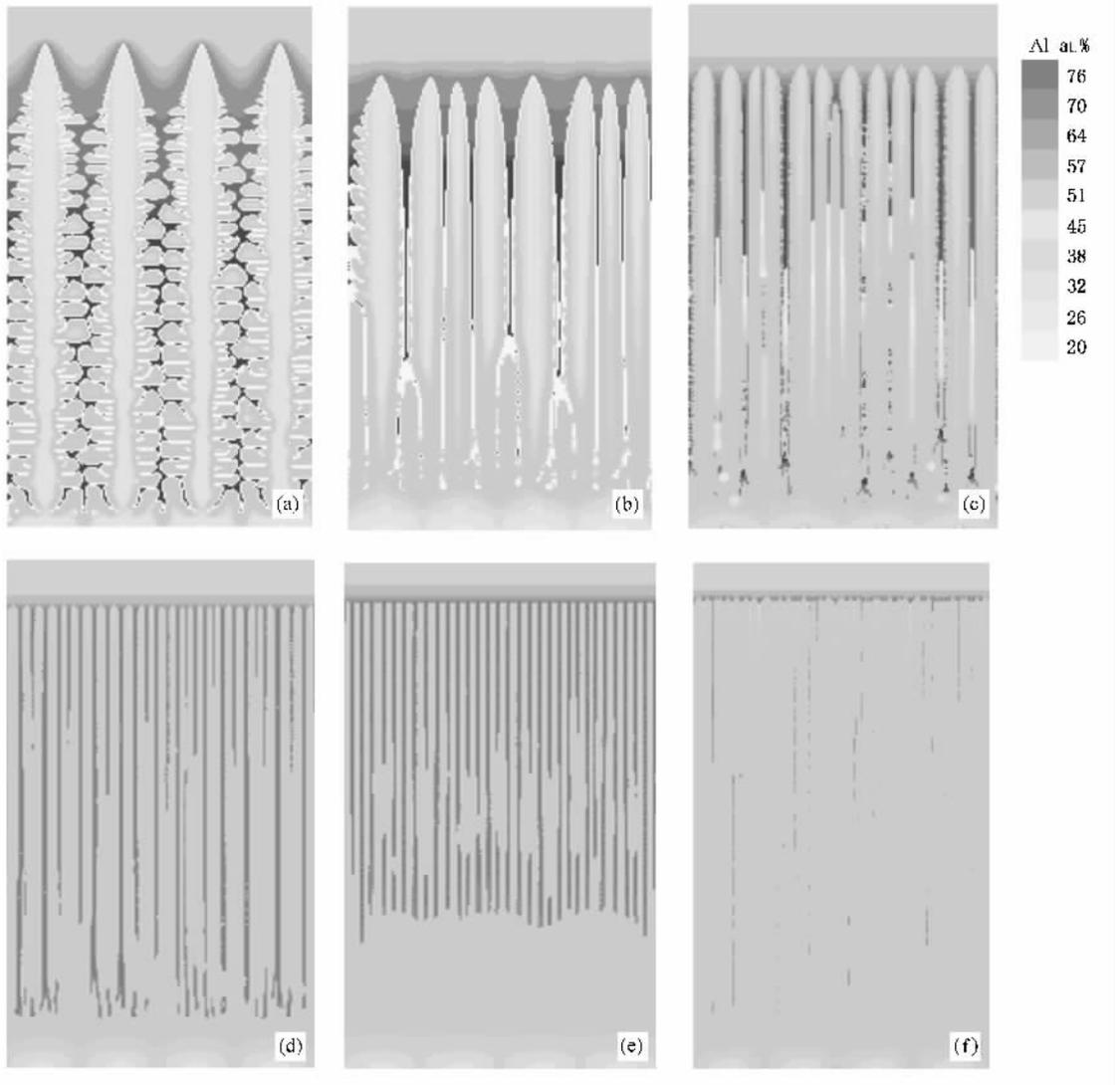


图5 Ti-45Al (at. %)合金在晶核数量为4、抽拉速度0.1 mm/s、不同温度梯度下的显微组织晶演变过程 (a) 5 K/mm (b) 10 K/mm (c) 20 K/mm (d) 40 K/mm (e) 70 K/mm (f) 100 K/mm

低时,凝固一段距离后,三次枝晶臂开始形成,并且未被二次枝晶所阻碍,一次枝晶间距减小(图6(a));当温度梯度增大到10 K/mm时,由于冷却速度增大,一些三次枝晶直接在底端形成(图6(b));温度梯度增大到15 K/mm,从底端分枝及凝固过程中分枝明显增多,一次枝晶间距减少到 $72\ \mu\text{m}$,同时观察到相互平行两枝晶相邻面无二次枝晶或者出现很少的二次枝晶(图6(c)),这与文献[14]中观察到现象相符合;温度梯度增加到30 K/mm后,可以看出,三次枝晶全部在底端形成,一次枝晶间距进一步减小(图6(d)–(f)).

对抽拉速度为0.25 mm/s、0.5 mm/s下温度梯度对组织演化影响进行模拟,得到温度梯度与枝晶间距的关系图,如图7所示,由图可见,在抽拉速度一

定情况下,随着温度梯度增加,胞晶/枝晶间距减小,另外,也看到,温度梯度大于10 K/mm时,对于 $V_p = 0.1\ \text{mm/s}$,凝固界面形态主要为胞晶,胞晶间距明显小于枝晶间距;对于 $V_p = 1.0\ \text{mm/s}$,凝固界面形态主要为枝晶,一次枝晶间距明显大于胞晶; V_p 介于两者之间时,为胞晶/枝晶混合结构,一次胞晶/枝晶间距介于两者之间.

Kurz等人^[15]假设柱晶端为旋转抛物面,得到一次胞晶/枝晶间距与温度梯度的关系:

$$\lambda_1 = \sqrt{\frac{\chi(\Delta T - \Delta T^*)}{G}} \cdot R^{1/2}, \quad (12)$$

式中 ΔT 为合金结晶温度间隔, $\Delta T = mc_0(1 - k_p)/k_p$; ΔT^* 为柱晶生长端部过冷度,在本模拟中,如果不考虑潜热影响,可认为 $\Delta T^* \approx 0$; R 为柱晶尖端半

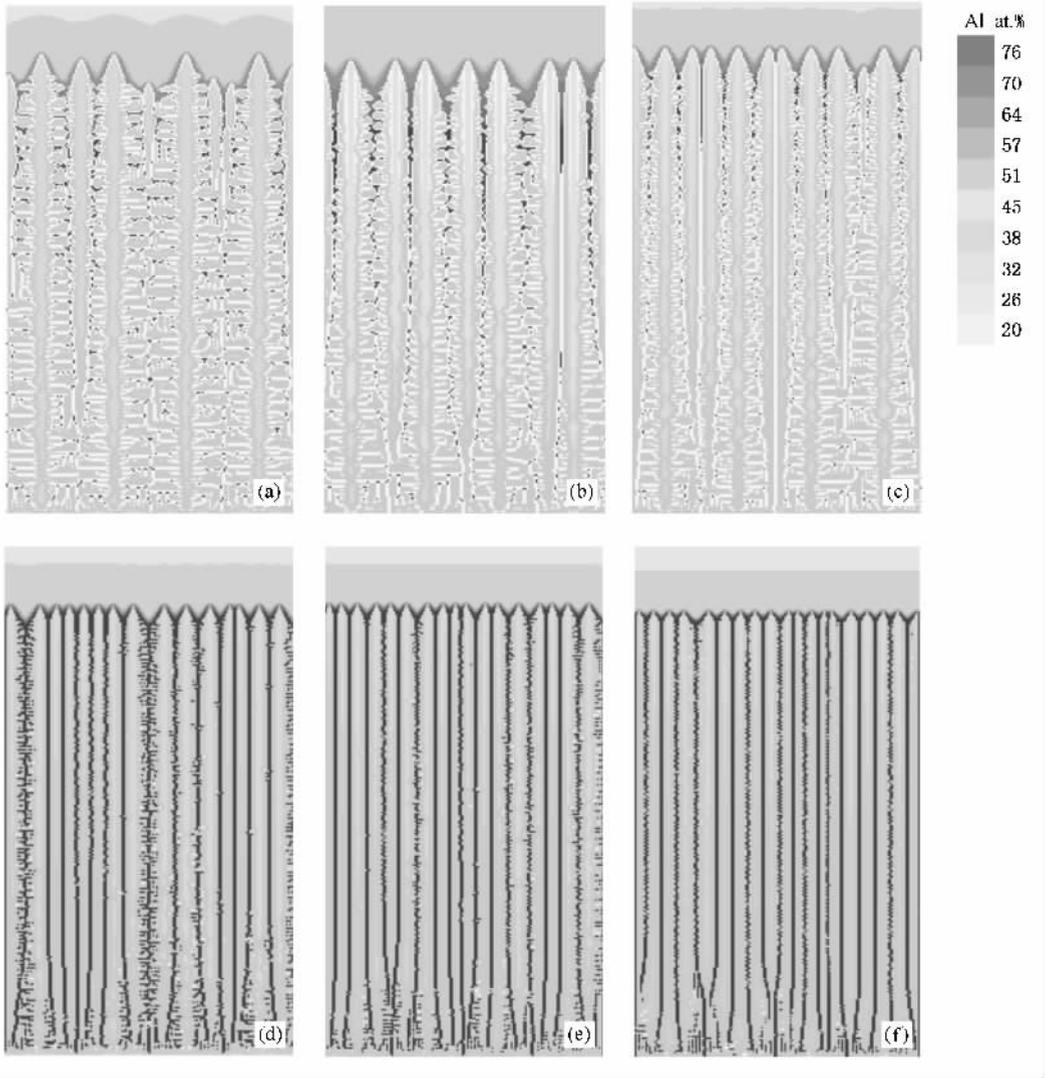


图 6 Ti-45Al (at.%) 合金在晶核数量为 4, 抽拉速度 1 mm/s, 不同温度梯度下的显微组织晶演变过程 (a) 5 K/mm; (b) 10 K/mm (c) 15 K/mm (d) 30 K/mm (e) 50 K/mm (f) 100 K/mm

径, 对低速枝晶生长, $\lambda_1 V^2$ 是一常数; λ_1 为一次胞晶/枝晶间距。

由(12)式可见, 在抽拉速度一定时, 随着温度梯度增大, 柱晶一次间距减小, 模拟结果与其相符合。

3.3. 抽拉速度对凝固过程组织演化的影响

由上述模拟可见, 温度梯度小于 10 K/mm, 抽拉速度大于 0.1 mm/s 时, 凝固组织形态枝晶或者胞晶/枝晶混合结构, 而温度梯度高于 30 K/mm 时, 凝固组织随抽拉速度变化经历了胞晶 → 枝晶转变。为此, 本节选用温度梯度为 10 K/mm, 20 K/mm, 模拟了抽拉速度对凝固过程组织演化的影响。图 8 首先给出了最终凝固形态为胞晶时的演化过程, 由图可见, 在显示的计算框架内, 在模拟区域底端, 开始凝固阶段是

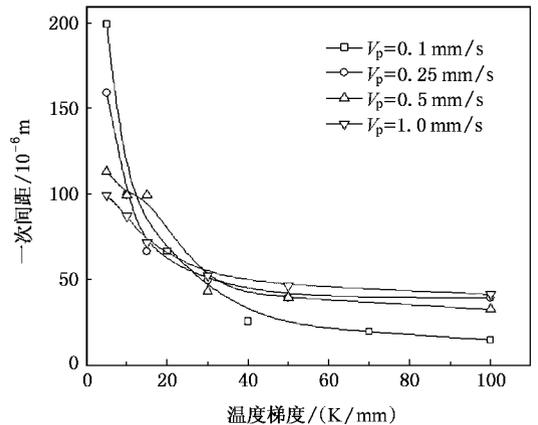


图 7 温度梯度 G_L 对一次间距的影响

以分属于四个晶核的晶粒进行生长. 由于抽拉速度较慢, 整个固液界面可看作以近平面方式凝固, 但各晶粒间明显存在晶界. 随着凝固的进行, 晶粒之间沟槽深度明显增大, 形成“凸起”, 由于受成分过冷及扰动的影响, 胞晶首先在凸起边缘形成(图 8(a)), 同时我们也可看到, 由于胞晶尖端附近溶质富集程度增大和正的温度梯度, 以及胞晶之间存在着激烈的竞争生长, 一些胞晶被淹没或被抑制生长. 剩余胞晶不断地向前方液相中生长, 并逐渐粗化. 在生长一段距离后, 一些胞晶从其尖端分岔(图 8(b)), 胞晶尖端半径变小, 其前沿液相溶质横向扩散距离变短, 胞晶间距逐渐变得均匀(图 8(c))(d)).

凝固组织随冷却速度的变化如图 9 所示. 抽拉速度为 0.001 mm/s 时, 凝固开始阶段, 凝固界面首先从所置入晶核开始生长, 因而形成凸起, 但由于抽拉速度很小, 由晶核形成的扰动随时间而减弱, 固/液界面逐渐变为平面, 但凝固一段距离后, 如果又出现扰动, 则由于固液界面前液中溶质浓度逐渐增大,

成分过冷作用凸现, 扰动不会消失反而增大, 首先出现凸起(图 9(a)). 结合图 9(e), 可以推断, 凝固界面在以平面生长过程中, 一些凸起首先在平界面两端开始形成并逐渐向平面中心发展, 进而发生平/胞转变. 抽拉速度增加到 0.005 mm/s 时, 由四个晶核形成的晶粒凸起不会消失. 相反在成分过冷作用下, 逐渐形成许多胞晶, 由于抽拉速度小, 过冷度小, 胞晶间距较小(图 9(b)). 抽拉速度增加到 0.02 mm/s 时, 可以看到, 由于冷却速度相对较大, 在凸起边缘首先出现的胞晶生长最早, 很快抑制了其他胞晶长大, 胞晶数量减小(图 9(c)). 继续增加抽拉速度, 虽然凸起边缘胞晶生长较早, 但由于凸起中间部位溶质向两边扩散, 所形成的胞晶成分过冷影响小, 长大速度更大, 因而胞晶生长变得不均匀(图 9(d)). 增加抽拉速度到 0.15 mm/s 时, 由于胞晶是直接到底端植入晶核中形成, 胞晶数量增加(图 9(e)). 将抽拉速度增加到 0.3 mm/s, 枝晶生长速度加快, 出现规则的枝晶结构.

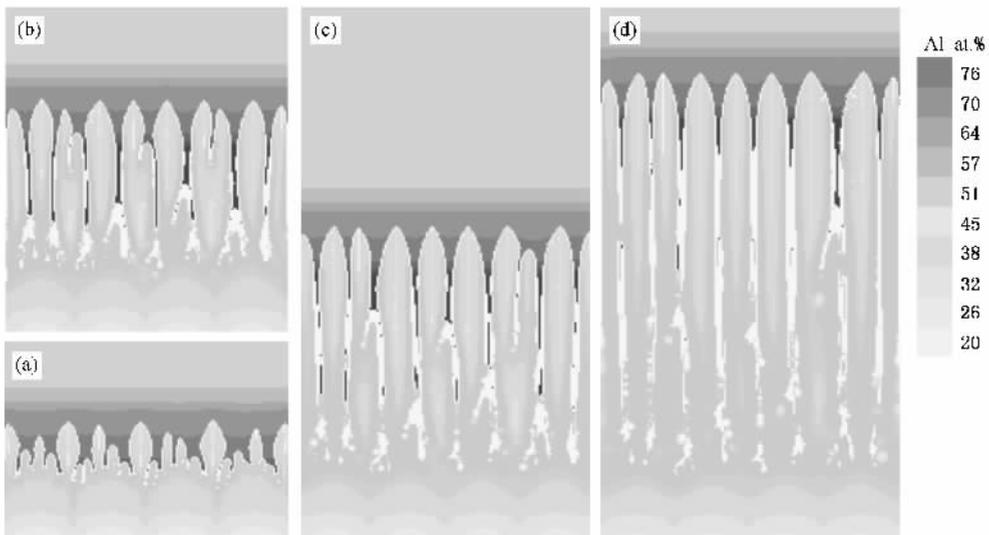


图 8 Ti-45Al (at. %) 合金在晶核数量为 4, 温度梯度 10 K/mm, 抽拉速度为 0.02 mm/s 下显微组织随时间的演变情况
(a) 20.96 s (b) 39.21 s (c) 50.98 s (d) 73.95 s

上述模拟中, 温度梯度较小时, 固液界面形貌变化较大, 如果温度梯度增大, 固液界面形貌随抽拉速度如何变化呢? 为此, 模拟了温度梯度为 20 K/mm 的情况. 由图 10 可见, 抽拉速度为 0.0015 mm/s 时, 从开始凝固阶段, 由晶核形成的凸起逐渐减小. 随着凝固进行, 固相成分逐渐均匀, 在凝固 1120 μm 时, 固相成分接近合金原始成分(图 10(a)), 这与 Tiller 等^[14]所述关于平面生长时特性相似, 即界面溶质成分均是逐步富集的, 直至稳态; 当抽拉速度增加到

0.005 mm/s 时, 凝固初期出现轻微凸起, 但很快变为平界面, 在凝固 1100 μm 时, 固液界面扰动增大, 形成浅胞(图 10(b)). 抽拉速度增加到 0.02 mm/s 时, 凝固初期由晶核形成的凸起导致随后固液界面扰动幅度逐渐增加, 形成细小深胞. 但由于胞晶之间距离较近, 其间液相成分不高, 一些胞晶逐渐合并, 亚晶界消失(图 10(c)). 抽拉速度增加到 0.04 mm/s 以上时, 凝固初期, 胞晶间即出现融合, 以后随着固液界面溶质成分增加, 融合程度减小(图 10(d)). 抽拉速

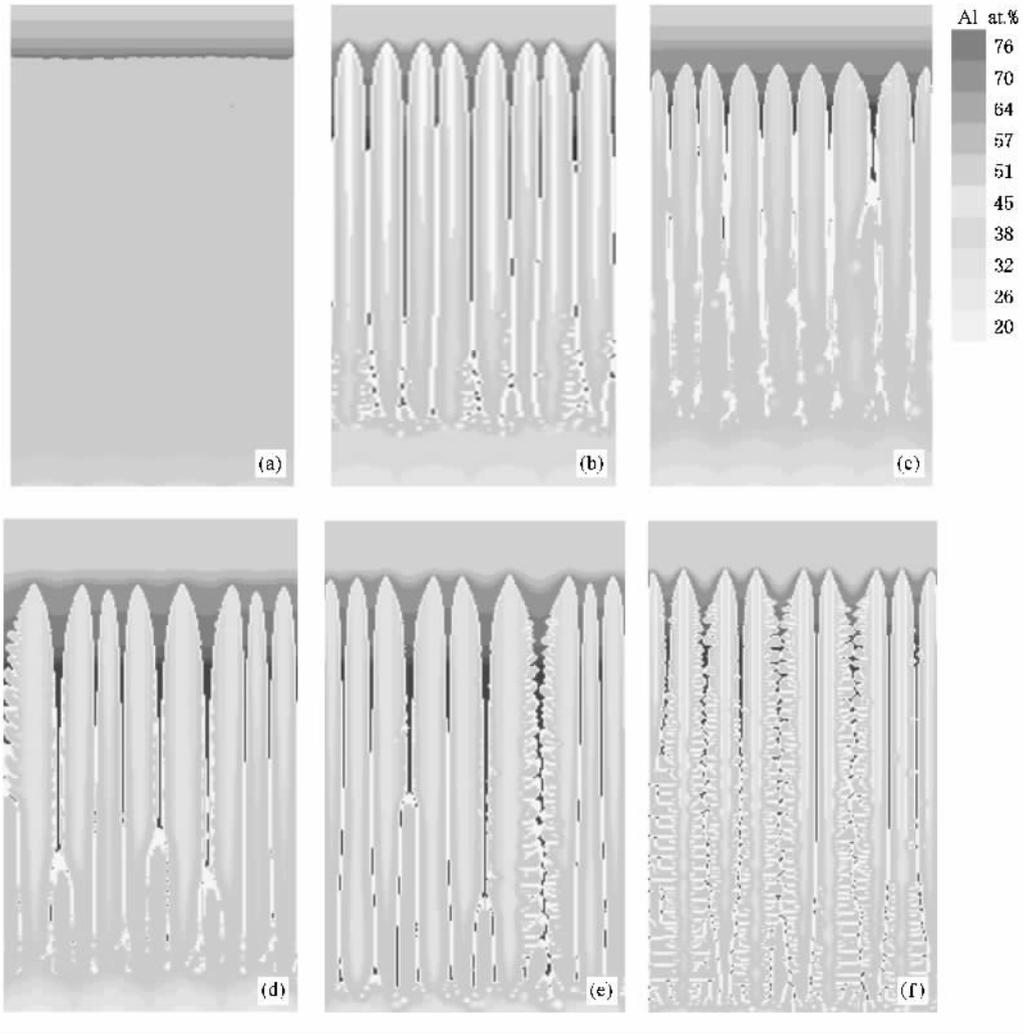


图9 Ti-45Al at.% 合金在晶核数量为4、温度梯度10 K/mm、不同抽拉速度下的显微组织晶演变过程 (a) 0.001 mm/s (b) 0.005 mm/s (c) 0.02 mm/s (d) 0.10 mm/s (e) 0.15 mm/s (f) 0.3 mm/s

度增加到0.2 mm/s后,由于冷却速度增加,胞晶间液相成分增加,胞晶间距有所增加(图11(e)(f))。

Ti-45at.% Al合金定向凝固组织的实验结果如图11所示,同时,测出了定向凝固试样在抽拉速度为3 mm/min时,随凝固时间变化的液相中温度分布,由此,计算出该加载功率下体系液相中的温度梯度大约为21.8 K/mm。由图可见,该初始成分合金的液固转变过程对应 β 相的单相生长,当实验抽拉速度为0.004 mm/s时,固液界面较为模糊,这可归因于慢的生长速度下,对流以及合金熔体与刚玉管间发生反应生成污染物等的影响,但整个界面比较平稳, β 相粗大,并观察到两个 β 相晶粒的交界处胞晶最早出现(图11(a));当抽拉速度增大至0.02 mm/s时,可观察到 β 相固液界面完全失稳,形成胞晶结构,有些胞晶还演化成胞状树枝晶,如图11(b)所

示,这说明,在较高温度梯度下, β 相存在平界面向胞晶的微观结构转变,由此可见,试验结果与温度梯度较高时的模拟结果相符合。

综合以上模拟结果及其对其他温度梯度下抽拉速度影响所作的模拟,可以得出抽拉速度对柱状晶间距的影响,如图12所示。计算间距时,凡平行于生长方向的柱状晶均作考虑。可以看出,上述曲线与文献[16]中实验结果(图13)相似。随着抽拉速度增加,按晶体形态不同可将图分为三个区,即胞晶生长区、胞晶/枝晶混合生长区、枝晶生长区。在胞晶生长区,胞晶臂间距随抽拉速度略有减小;在枝晶生长区,枝晶臂间距随抽拉速度增加而减小;在胞晶/枝晶混合生长区,柱状晶间距出现最大值。另外,由上述模拟可见,在从平面 \rightarrow 胞晶转变过程中,固液界面扰动有两种方式引起:1)由不同晶核生长引起界面

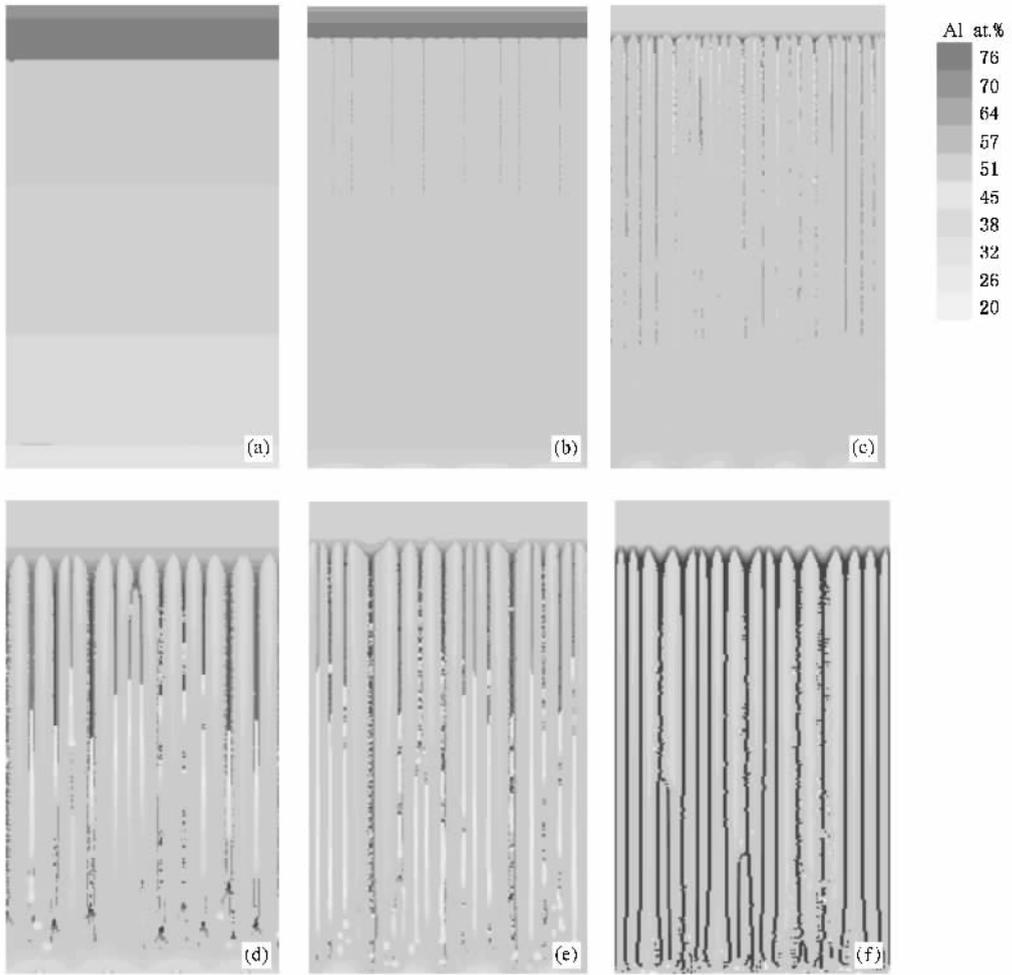


图 10 Ti-45Al(at. %)合金在晶核数量为 4、温度梯度 20 K/mm、不同抽拉速度下的显微组织晶演变过程 (a) 0.0015 m/s (b) 0.005 mm/s (c) 0.02 mm/s (d) 0.04 mm/s (e) 0.2 mm/s (f) 0.5 mm/s

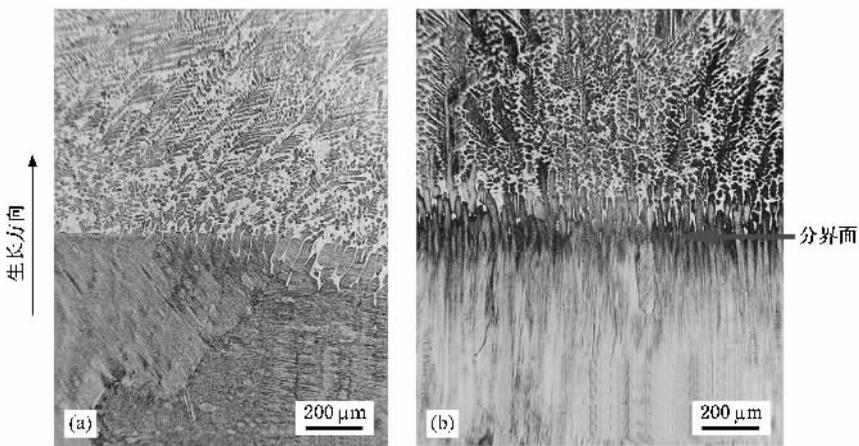


图 11 Ti-45Al(at. %)合金不同生长速度下定向凝固组织 (a) $V_p = 0.004 \text{ mm/s}$ (b) $V_p = 0.02 \text{ mm/s}$

扰动,这种扰动在温度梯度较低时尤为明显,形成的胞晶间距相对较大。2)由其他原因引起的扰动,如在本模拟中平界面生长过程中,由随机数引起,而且主

要发生在温度梯度较高时,形成的胞晶间距相对较小。

对于温度梯度为 10 K/mm,枝晶生长阶段,得出

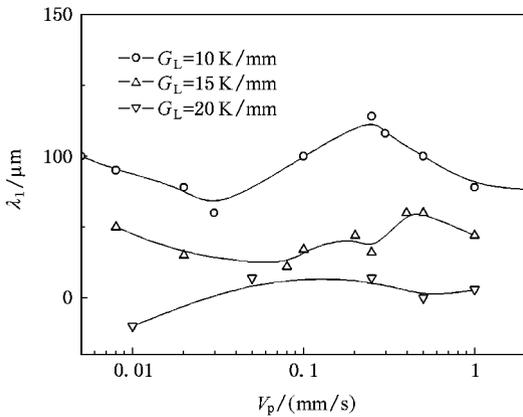
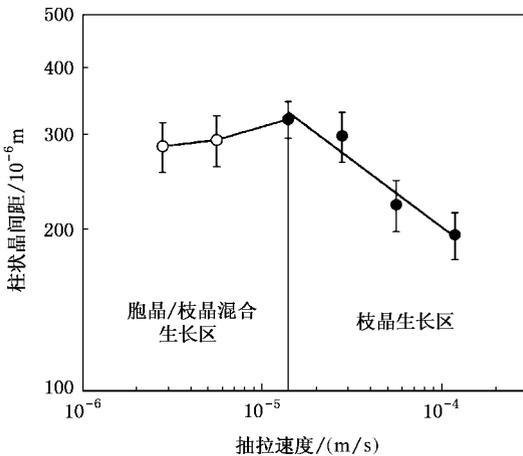


图 12 抽拉速度对柱状晶间距的影响

图 13 Ti-46Al-2W-0.5S(at.%)合金定向凝固过程中抽拉速度对柱状晶间距的影响^[16]

一次枝晶间距拟合方程

$$\lambda_1 = K_1 G_L^{-0.5} V^{-0.24}, \quad (13)$$

其中 $K_1 = 1.296 \times 10^{-3}$ 。

这个拟合曲线与 Kurz 和 Fisher^[15]在稳态枝晶生

长时 推导的一次胞(枝)晶间距模型

$$\lambda_1 = 4.3 \left(\frac{\Gamma D_L \Delta T}{k_0} \right)^{1/4} G_L^{-1/2} V^{-1/4} \quad (14)$$

相近似,只不过在现在的曲线中系数为 5.3。

4. 结 论

利用溶质扩散控制模型对 TiAl 合金定向凝固过程中显微组织演化进行了数值模拟,得出如下结论:

1. 通过晶核数量对枝晶形貌影响的模拟,表明晶核数量对枝晶形貌有重要影响,抽拉速度较低或较高时,一次枝晶间距随晶核间距变化趋势相同,晶核间距较大时,一次枝晶间距有通过分枝而减小的趋势,晶核间距较小时,一次枝晶间距有通过竞争生长而增大的趋势,晶核间距范围在 150—300 μm 时,一次枝晶间距变化明显缩小。

2. 通过温度梯度对组织演化影响的模拟,表明在抽拉速度一定情况下,随着温度梯度增加,胞晶/枝晶间距减小,另外,抽拉速度较小时,凝固界面形态主要为胞晶,胞晶间距明显小于枝晶间距,抽拉速度较大时,凝固界面形态主要为枝晶,一次枝晶间距明显大于胞晶,抽拉速度介于两者之间时,主要为胞晶/枝晶混合结构,一次胞晶/枝晶间距介于两者之间。

3. 通过抽拉速度对组织演化影响的模拟,表明随着抽拉速度增大,凝固形态经历了平面→胞晶→胞状树枝晶→树枝晶转变过程。在从平界面→胞晶转变阶段,温度梯度较高时,胞晶间距较小;在胞晶/枝晶混合生长阶段,胞晶/枝晶间距往往不均匀,增加形核数量有助于改善间距的不均匀度。

[1] Jung I S, Jang H S, Oh M H, Lee J H, Wee D M 2002 *Materials Science and Engineering A* **329-331** 13

[2] Saari H, Beddoes J, Seo D Y, Zhao L 2005 *Intermetallics* **13** 937

[3] Li Q, Li D Z, Qian B N 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3477 (in Chinese) [李强、李殿中、钱百年 2004 物理学报 **53** 3477]

[4] Boettinger W J, Warren J A 1999 *J. Cryst. Growth* **200** 583

[5] Li M E, Yang G C, Zhou Y H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 454 (in Chinese) [李梅娥、杨根仓、周尧和 2005 物理学报 **54** 454]

[6] Zhiqiang B, Sekerka R F 2002 *J. Cryst. Growth* **237** 138

[7] Wang W, Lee P D, McLean M 2005 *Acta Materialia* **51** 2971

[8] Li X Z, Guo J J, Su Y Q, Wu S P, Fu H Z 2005 *Transactions of Nonferrous Metals Society of China* **15** 529

[9] Jung I S, Kim M C, Lee J H, Oh M H, Wee D M 1999 *Intermetallics* **7** 1247

[10] Beltran-Sanchez L, Stefanescu D M 2003 *Metal Mater Trans A* **34** 367

[11] Nastac L, Stefanescu D M 1997 *Mater Sci. Eng.* **54** 391

[12] Nastac L 1999 *Acta Materialia* **47** 4253

[13] Wang K F, Li B S, Mi G F, Guo J J, Fu H Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3337 (in Chinese) [王狂飞、李邦盛、米国发、郭景杰、傅恒

志 2007 物理学报 56 3337]

[15] Kurz W ,Fisher J D 1981 *Acta Metall* 29 12

[14] Tiller W A ,Jackson K A ,Rutter J W ,Chalmers B 1953 *Acta Metall.* 1 428

[16] Lapin J ,Ondrůš L ,Nazmy M 2002 *Intermetallics* 10 1019

Numerical simulation of microstructure evolution during directional solidification of Ti-45at. % Al alloy

Wang Kuang-Fei^{1)†} Guo Jing-Jie²⁾ Mi Guo-Fa¹⁾ Li Bang-Sheng²⁾ Fu Heng-Zhi¹⁾

1 *X School of Materials Science and Engineering ,Henan Polytechnic University ,Jiaozuo 454100 ,China)*

2 *X School of Materials Science and Engineering ,Harbin Institute of Technology ,Harbin 150001 ,China)*

(Received 10 April 2007 ; revised manuscript received 31 August 2007)

Abstract

The microstructural evolution of Ti-45at. % Al alloy during directional solidification was simulated by applying a solute diffusion controlled solidification model ,and the results have showed that under high thermal gradient the stable primary spacing can be adjusted by branching or competitive growth ,irrelevant of the initial seed spacing. In addition ,under a given pulling speed ,increasing thermal gradient decreases primary cell/dendrite spacing ,and under a given thermal gradient ,increasing pulling velocity ,we have observed a cell/dendrite transition region consisting of cells and dendrites ,and which varies with the thermal gradient in a contradicting way ,i. e. increasing the thermal gradient leading to the decrease of the range of the transition region. The simulated results agree reasonably well with experiment results.

Keywords : Ti-45at. % Al alloy , directional solidification , microstructure evolution , numerical simulation

PACC : 6100 , 6470K , 6480G , 0650M

† E-mail :wkf-12@hpu. edu. cn