

## 定向倾斜枝晶生长规律及竞争行为的相场法研究\*

王雅琴 王锦程<sup>†</sup> 李俊杰

(西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2011年9月14日收到; 2011年10月10日收到修改稿)

采用多相场模型对定向凝固过程中倾斜枝晶生长进行了研究, 模拟了单一取向枝晶列的演化规律及不同取向枝晶列汇聚生长竞争淘汰行为. 结果表明, 枝晶尖端过冷度随倾斜角度的增大而增大, 即相同条件下倾斜枝晶尖端位置总是低于非倾斜枝晶; 汇聚生长时择优取向枝晶总是阻挡非择优取向枝晶, 但在抽拉速度较低时, 由于溶质扩散场的相互重叠, 晶界处择优取向枝晶的生长受到相邻非择优枝晶的影响而延缓, 这可能导致非择优取向枝晶淘汰择优取向枝晶.

**关键词:** 相场法, 定向凝固, 尖端过冷度, 生长方向

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

## 1 引言

枝晶生长作为一种典型的非平衡自组织现象, 一直是凝聚态物理的重要研究课题之一. 定向凝固技术已被广泛应用于现代先进材料的制备, 理解其组织演化规律对于实际生产具有重要指导作用. 在过去几十年中, 针对定向凝固中界面形貌及特征尺寸的演化规律已经开展了大量研究, 并建立了较为成熟的理论体系, 如成分过冷理论<sup>[1]</sup>、M-S稳定性理论<sup>[2]</sup>及Warren-Langer模型<sup>[3]</sup>等. 然而现有理论模型均基于热流方向与晶体择优取向保持一致的条件之上, 但在实际定向凝固过程中二者可能并不重合, 此时枝晶将以倾斜状生长, 枝晶实际生长方向 $\mathbf{V}$ 并不与晶体择优取向 $\mathbf{a}$ 重合, 而是位于择优取向与温度梯度方向之间<sup>[4]</sup>, 如图1所示,  $G$ 为温度梯度. 倾斜生长时, 枝晶尖端曲率最大点的法线方向不指向生长方向, 且枝晶主干及二次臂都表现出不对称性. 除单个枝晶外, 倾斜生长时枝晶列内的一次枝晶间距也与非倾斜枝晶有显著不同<sup>[4,5]</sup>. 这些差异使得传统的枝晶生长理论并不适用于倾斜枝晶生长, 因此有必要对其生长机理进行深入研

究. 另外, 在定向凝固单晶制备的选晶过程中, 择优取向枝晶与非择优取向枝晶间的竞争生长是选晶控制的基础及获得完整单晶材料的前提. 近年来, 周亦胄等<sup>[6-8]</sup>研究发现, 在低速定向凝固条件下, 可能出现非择优取向枝晶淘汰择优取向枝晶的反常淘汰现象, 而这一现象出现的根本原因目前尚不清楚. 因此, 深入研究定向倾斜枝晶生长规律及竞争行为具有重要的理论意义及实际应用价值.

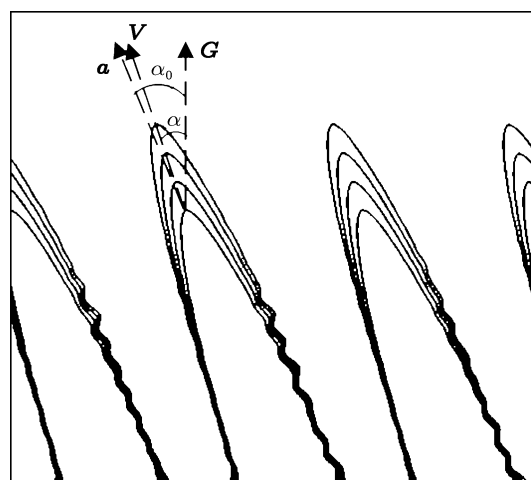


图1 枝晶倾斜生长示意图

\* 国家自然科学基金(批准号: 51071128, 51101124)、国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CB610401)、西北工业大学基础研究基金(批准号: JC201006)和凝固技术国家重点实验室自主研究基金(批准号: 67-QP-2011)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: jchwang@nwpu.edu.cn

由于倾斜枝晶生长的复杂性,目前尚无描述这一过程的理论模型,大多数研究工作<sup>[4,5,9-11]</sup>都是基于透明有机物的实验观测.虽然通过这些实验观测已对倾斜枝晶的生长行为取得了一定程度的认识,但对其生长机理及演化规律都还缺乏深入的理解.相场法是近年来发展起来的研究微观组织演化过程的一种有力工具.针对定向凝固过程中的组织演化过程已经开展了大量的相场模拟研究工作,在解释组织形貌演化规律及机理方面取得了一系列的研究成果<sup>[12-16]</sup>.然而目前的工作都是基于晶体择优取向与热流方向一致条件下的模拟,针对倾斜枝晶生长,特别是倾斜枝晶与非倾斜枝晶的竞争生长过程还缺乏研究.基于上述考虑,本文将通过相场法研究定向凝固过程中单一取向枝晶列倾斜生长行为及两种不同取向枝晶列汇聚生长时的竞争淘汰行为,探讨其内在机理及组织演化规律.

## 2 多相场模型的建立

### 2.1 相场方程和溶质扩散方程

考虑到区分不同取向晶粒的需要,本文采用 Steinbach 等<sup>[17]</sup>及 Kim 等<sup>[18]</sup>提出的多相场模型,以  $\phi_1$  代表液相,  $\phi_2, \phi_3, \dots, \phi_n$  代表不同取向的晶粒.相场演化方程为

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} = -\frac{2}{n} \sum_{j \neq i}^n S_{ij} M_{ij} \left[ \frac{\delta F}{\delta \phi_i} - \frac{\delta F}{\delta \phi_j} + \Delta g_{ij} \right], \quad (1)$$

其中  $M_{ij}$  为相场动力学系数,  $S_{ij}$  为阶梯函数,  $\phi_i > 0$  时  $S_{ij} = 1$ ,  $\phi_i = 0$  时  $S_{ij} = 0$ ,  $N$  为节点处所有非零相场变量的个数,  $\delta F/\delta \phi_i$  和  $\Delta g_{ij}$  的表达式分别如下:

$$\frac{\delta F}{\delta \phi_i} = \sum_{j \neq i} \left[ \frac{\varepsilon_{ij}^2}{2} \nabla^2 \phi_j + \omega_{ij} \phi_j \right], \quad (2)$$

$$\Delta g_{ij} = \begin{cases} 0 & (i \neq 1, j \neq 1) \\ 6\phi_1(1 - \phi_1)\Delta S(T_m - T - mc_L) & (i = 1, j \neq 1) \\ -6\phi_1(1 - \phi_1)\Delta S(T_m - T - mc_L) & (i \neq 1, j = 1) \end{cases} \quad (3)$$

其中  $\Delta S$  为熔化熵,  $T$  为温度,  $T_m$  为材料熔点,  $c_L$  为液相浓度,  $m$  为液相线斜率,  $\varepsilon_{ij}$  为梯度能系数,  $\omega_{ij}$  为双阱势能的高度,当  $i$  为 1 时,  $\varepsilon_{ij}, \omega_{ij}$  代表

固/液界面的参数,记为  $\varepsilon_{SL}$  和  $\omega_{SL}$ ,其他条件下为固/固界面参数,记为  $\varepsilon_{SS}$  和  $\omega_{SS}$ .它们与界面能  $\sigma$  和界面厚度  $2\xi$  之间满足如下关系:

$$\varepsilon_{SL} = \frac{4}{\pi} \sqrt{\xi_{SL}\sigma_{SL}}, \quad \omega_{SL} = \frac{2\sigma_{SL}}{\xi_{SL}}, \quad (4)$$

$$\varepsilon_{SS} = \frac{4}{\pi} \sqrt{\xi_{SS}\sigma_{SS}}, \quad \omega_{SS} = \frac{2\sigma_{SS}}{\xi_{SS}}. \quad (5)$$

通过调整固/液界面能  $\sigma_{SL}$  和固/固界面能  $\sigma_{SS}$  之间的比值,可实现不同的晶界润湿情况.采用薄界面分析,可得到相场动力学系数与界面动力学系数之间的关系.本文模拟条件下,由于生长速度较低,可忽略界面动力学效应,即将界面动力学系数设为 0,得到相场动力学系数为

$$M_{SL} = \frac{V_m}{RT} \frac{\sigma_{SL}}{(1-k)^2} \frac{\sqrt{2\omega_{SL}}}{c_L^e \varepsilon_{SL}^3 \zeta_{SL}}, \quad (6)$$

其中  $V_m$  为摩尔体积,  $R$  为气体常数,  $k$  为溶质分配系数,  $c_L^e$  液相平衡浓度,  $\zeta_{SL}$  为与固相及液相平衡浓度相关的系数.

在忽略固相扩散且增加反溶质截留项以消除非真实界面效应情况下,浓度扩散场方程为

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \phi_1 D_L \nabla c_L + \nabla \left( \frac{\varepsilon_{SL}}{\sqrt{2\omega_{SL}}} (c_L - c_S) \times \sqrt{\phi_1(1 - \phi_1)} \frac{\partial \phi_1}{\partial t} \frac{\nabla \phi_1}{|\nabla \phi_1|} \right), \quad (7)$$

其中  $D_L$  为液相扩散系数,  $c_S$  为固相浓度.

考虑到固/液界面能的各向异性,固/液界面梯度能系数  $\varepsilon_{SL}$  写成

$$\varepsilon_{SL} = \varepsilon_0(1 - 3\gamma_4) \left[ 1 + \frac{4\gamma_4}{1 - 3\gamma_4} \times \frac{(\partial \phi_1 / \partial x')^4 + (\partial \phi_1 / \partial y')^4}{[(\partial \phi_1 / \partial x')^2 + (\partial \phi_1 / \partial y')^2]^2} \right], \quad (8)$$

其中  $\gamma_4$  为各向异性系数,  $x'$  和  $y'$  是平行于择优取向方向的坐标轴,由原始的  $x$  轴和  $y$  轴坐标系通过旋转  $\alpha_0$  角度得到,且满足

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial x'} = \cos \alpha_0 \left( \frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right) + \sin \alpha_0 \left( \frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right), \quad (9)$$

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial y'} = \cos \alpha_0 \left( \frac{\partial \phi_1}{\partial y} \right) - \sin \alpha_0 \left( \frac{\partial \phi_1}{\partial x} \right), \quad (10)$$

### 2.2 物性参数

以 Ni 基高温合金为研究对象,考虑到其成分的复杂性,对其进行二元合金线性近似,即将除 Ni 外的其他所有元素归为一类,且假定分配系数和液相线斜率为常数.所需物性参数<sup>[19]</sup>如表 1 所示.

由于固/固界面的性质对枝晶凝固行为,特别是对枝晶尖端行为没有影响,因此这里无需对固/固界面性质做严格设定,本文假定  $\sigma_{SS} = 2.5\sigma_{SL}$ ,  $\xi_{SL} = \xi_{SS}$ ,  $M_{SS} = 0.1M_{SL}$ , 如此设定可保证在平衡条件下晶界被液相润湿,且符合晶界可动性低于固/液界面可动性的一般规律.

表1 材料物性参数

液相线温度 $T_L/K$	1609
固相线温度 $T_S/K$	1593
平衡液相线斜 $m/(K/wt.%)$	-10.9
平衡分配系数 $k$	0.48
液相中的溶质扩散系数 $D_L/m^2 \cdot s^{-1}$	$1.0 \times 10^{-9}$
毛细长度 $d_0/m$	$3.0 \times 10^{-10}$
温度梯度 $G/K \cdot mm^{-1}$	30

### 2.3 数值计算方法

对多相场模型控制方程 (1) 和 (7) 式采用基于均匀网格的有限差分法求解. 单一取向枝晶列条件下, 平行于温度梯度方向的两个边界采用周期性边界条件, 而汇聚生长条件下采用对称边界条

件, 其他两个边界均采用无通量边界条件. 空间步长  $\Delta x = \Delta y = 0.4 \mu m$ , 计算的时间步长受浓度场计算限制, 即  $\Delta t \leq \frac{(\Delta x)^2}{4D_L^2}$ . 在计算中, 设定界面厚度  $2\xi = 5\Delta x$ , 各向异性系数  $\gamma_4 = 0.04$ , 并通过在相场控制方程中加入噪声来引发侧向分支的形成.

## 3 结果与讨论

### 3.1 枝晶倾斜角度

实验观测 [4,5,10] 表明, 在定向凝固过程中, 当晶体择优取向偏离温度梯度方向时, 枝晶的生长方向位于择优取向与温度梯度方向之间, 且受到枝晶间距  $\lambda$  及生长速度  $V$  的影响. 本文首先研究拟单一取向枝晶的倾斜生长时倾斜角度随外界条件的变化规律, 通过模拟结果与实验结果的对比分析来验证模型的可靠性.

图 2 为模拟所得倾斜枝晶生长方向与热流方向夹角  $\alpha$  随择优取向  $\alpha_0$  的变化规律. 由图 2 可见, 倾斜枝晶实际的生长方向位于择优取向与温度梯度方向之间, 且枝晶侧向分枝随  $\alpha_0$  的逐渐增大而呈现明显不对称性, 这与实验结果 [4,10] 相符.

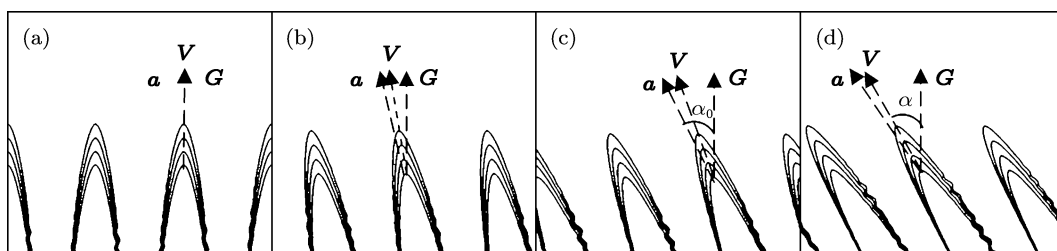


图2  $V = 60 \mu m/s$ ,  $\lambda = 120 \mu m$  时枝晶生长方向随  $\alpha_0$  的变化 (a)  $\alpha_0 = 0^\circ$ ,  $\alpha = 0^\circ$ ; (b)  $\alpha_0 = 10^\circ$ ,  $\alpha = 7.9^\circ$ ; (c)  $\alpha_0 = 20^\circ$ ,  $\alpha = 16.9^\circ$ ; (d)  $\alpha_0 = 30^\circ$ ,  $\alpha = 25.6^\circ$

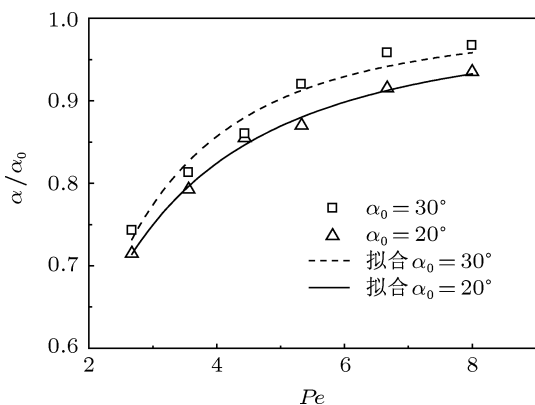


图3 不同  $\alpha_0$  条件下  $\alpha/\alpha_0$  随间距 Péclet 数的变化规律

定义间距 Péclet 数为  $Pe = \frac{\lambda V}{D_L}$ , 图 3 中数据点为择优取向  $\alpha_0$  分别为  $20^\circ$  和  $30^\circ$  时计算所得  $\alpha/\alpha_0$  随  $Pe$  的变化情况. 可以发现, 随着  $Pe$  的增大,  $\alpha/\alpha_0$  逐渐趋于 1, 即  $\alpha$  逐渐趋于  $\alpha_0$ , 这表明枝晶生长的实际倾斜角度随着一次枝晶间距和抽拉速度的增大而增大, 即逐渐从温度梯度方向向择优取向方向偏转, 这与实验结果 [11] 一致. Pocheau 等 [11] 等通过对大量实验结果的总结, 得到如下经验公式:

$$\alpha/\alpha_0 = 1 - \frac{1}{1 + aPe^b}, \quad (11)$$

其中  $a$  和  $b$  为拟合参数. 图 3 中的曲线是由上述

经验公式分别拟合  $\alpha_0 = 20^\circ$  和  $\alpha_0 = 30^\circ$  的模拟结果而得, 其中  $\alpha_0$  为  $20^\circ$  和  $30^\circ$  下拟合参数分别为  $a = 0.54, b = 1.56$  和  $a = 0.41, b = 1.94$ , 可以看到, 模拟结果与经验公式符合较好.

### 3.2 尖端过冷度

在定向凝固中, 尖端过冷度的大小对应于界面位置的高低, 因此直接决定着不同取向晶粒汇聚生长时的淘汰关系. 传统的 Walton-Chalmers<sup>[20]</sup> 理论认为, 倾斜枝晶为了在轴向上与外界抽拉速度保持一致, 其实际尖端速度要大于抽拉速度, 而对非倾斜枝晶而言, 稳态生长时其尖端速度等于抽拉速度. 由于高的尖端生长速度对应大的尖端过冷度, 因此倾斜枝晶的尖端过冷度大于非倾斜枝晶, 即前者尖

端位置低于后者, 故倾斜枝晶会被非倾斜枝晶阻挡淘汰. 但实际上这一尖端动力学规律对自由枝晶凝固成立, 但对定向枝晶生长而言, 其尖端过冷度并非随速度增大单调增大. 理论及实验观测<sup>[21]</sup> 均表明当抽拉速度较低时, 定向枝晶尖端过冷度将随抽拉速度增大而减小, 而当抽拉速度增大到一定程度时尖端过冷度才随速度增大而增大. 下面本文将进一步考察倾斜枝晶生长过程中枝晶尖端过冷度随倾斜角度及一次间距的变化情况.

图 4 为抽拉速度为  $V = 150 \mu\text{m/s}$  及间距为  $\lambda = 120 \mu\text{m}$  条件下倾斜生长形态随枝晶择优取向与热流方向夹角  $\alpha_0$  的变化情况. 由图 4 可知, 随着  $\alpha_0$  的增加, 尖端位置不断降低, 这表明尖端过冷度随着  $\alpha_0$  的增加而不断增加.

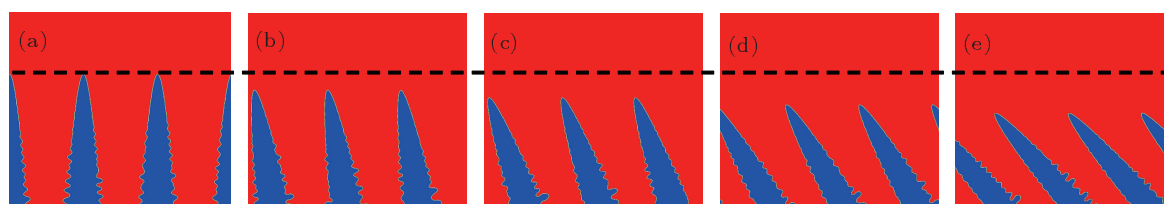


图 4 倾斜生长形态随枝晶择优取向与热流方向夹角的变化 (a)  $\alpha_0 = 0^\circ$ ; (b)  $\alpha_0 = 10^\circ$ ; (c)  $\alpha_0 = 20^\circ$ ; (d)  $\alpha_0 = 30^\circ$ ; (e)  $\alpha_0 = 40^\circ$

图 5 进一步给出了图 4 所示的枝晶尖端过冷度随  $\cos \alpha_0$  的变化规律. 由图 5 可知, 尖端过冷度随  $\cos \alpha_0$  的增加呈现减小趋势. 这是因为倾斜生长时随着  $\cos \alpha_0$  的增大, 溶质沿生长方向的扩散距离不断减小, 因此从固/液界面排除的溶质扩散到远场相对更容易, 使得其尖端浓度更低, 成分过冷更小.

定向凝固中倾斜枝晶生长的尖端过冷度不仅受到倾斜生长方向的影响, 也与一次枝晶间距有一定的关系. 理论分析<sup>[4]</sup> 及实验研究<sup>[22,23]</sup> 均表明, 在给定抽拉速度和温度梯度下, 枝晶一次间距并不单一, 而是存在一个较大的允许范围. 在不同的枝晶间距下, 相邻枝晶间的溶质相互作用强度不同, 从而可能造成枝晶尖端过冷度也不同. 图 6 给出了  $\alpha_0 = 20^\circ, V = 60 \mu\text{m/s}$  时不同间距下稳态枝晶倾斜生长形态. 可以看出, 枝晶尖端位置随着枝晶间距的增大略微升高, 并出现侧向分枝, 且枝晶两侧不对称性明显. 图 7 为  $\alpha_0 = 20^\circ$  时倾斜生长尖端过冷度随一次间距的变化, 可见, 枝晶尖端过冷度随一次间距的增加而减小. 一次间距的增加, 有

利于枝晶尖端的横向扩散, 使得枝晶尖端浓度随着一次间距的增加而减小, 尖端成分过冷随之减小, 因此尖端过冷度减小.

以上分析表明, 倾斜枝晶的尖端过冷度随倾斜角度的增大而增大, 即在相同条件下倾斜枝晶尖端位置总是低于非倾斜枝晶, 但二者的差异还受到枝晶一次间距的影响.

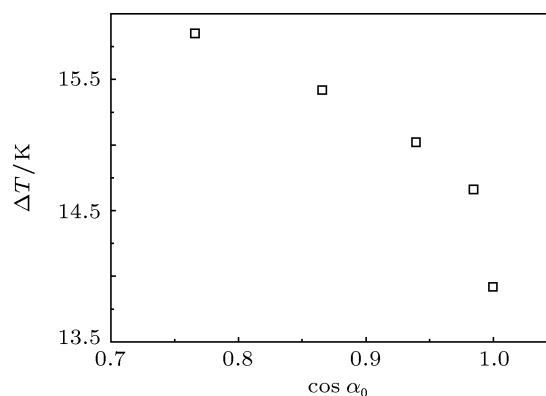


图 5 倾斜枝晶尖端过冷度随  $\cos \alpha_0$  的变化

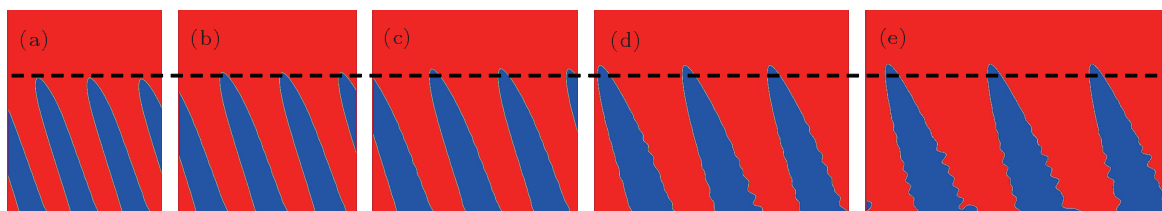


图6  $\alpha_0 = 20^\circ$  时倾斜枝晶生长形态随一次间距的变化 (a)  $\lambda = 80 \mu\text{m}$ ; (b)  $\lambda = 93.3 \mu\text{m}$ ; (c)  $\lambda = 106.7 \mu\text{m}$ ; (d)  $\lambda = 133.3 \mu\text{m}$ ; (e)  $\lambda = 160 \mu\text{m}$

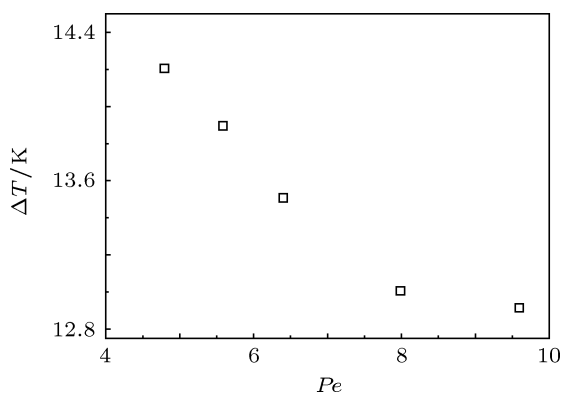


图7  $\alpha_0 = 20^\circ$  时倾斜生长尖端过冷度随间距 Péclet 数的变化

### 3.3 汇聚竞争生长

定向凝固晶粒淘汰过程与倾斜生长有密切联系, 具有不同择优取向的晶粒在倾斜生长过程中的竞争淘汰行为是选晶过程的基础. Walton-Chalmers 理论分析认为, 对汇聚生长而言, 晶体择优取向与热流方向接近的择优枝晶会淘汰晶体择优取向与热流方向偏离较大的非择优枝晶. 然而, 最近的一些实验<sup>[6-8,19]</sup> 表明, 除了经典理论预测的结果之外, 某些情况下非择优枝晶也会淘汰择优枝晶, 但对其原因尚不明确. 为此本文模拟了不同抽拉速度下汇聚晶粒的竞争生长情况.

图8为抽拉速度较大时 ( $V = 300 \mu\text{m/s}$ ,  $\lambda = 75 \mu\text{m}$ ) 晶粒 A, B 的汇聚生长情况. 可以看到, 当晶粒 A 的一个枝晶  $a_1$  与晶粒 B 的枝晶  $b_1$  尖端相遇时,  $b_1$  被阻挡而  $a_1$  继续生长, 此时  $a_1$  的右侧枝晶主干变光滑, 无侧向分支且有明显的弯曲, 这是由于两枝晶发生相互作用引起的. 当  $a_1$  与  $b_2$  相遇时,  $b_2$  又受到  $a_1$  的阻挡,  $b_2$  也被淹没, 这与传统的 Walton-Chalmers 模型结果<sup>[20]</sup> 一致. 整个过程中, 晶粒 B 并不会被晶粒 A 淘汰, 但也不会淘汰晶粒 A, 两个晶粒将长时间共存. 观察图8(b)和(c)可以发现, 当枝晶  $b_2$  靠近  $a_1$  时,  $a_1$  靠近右侧的枝晶主干变光滑, 但与  $a_2$  的尖端位置基本保持一致, 这

说明枝晶  $b_2$  对  $a_1$  的影响不大, 即二者间的溶质相互作用较小, 枝晶  $b_2$  的淘汰不足以影响枝晶  $a_1$  的尖端生长行为. 图9给出了不同时刻下枝晶  $a_1, a_2$  尖端浓度  $c$  的曲线分布, 由图9可知, 本条件下枝晶  $a_1$  尖端的浓度分布几乎没有变化 (仅尖端浓度略有增大).

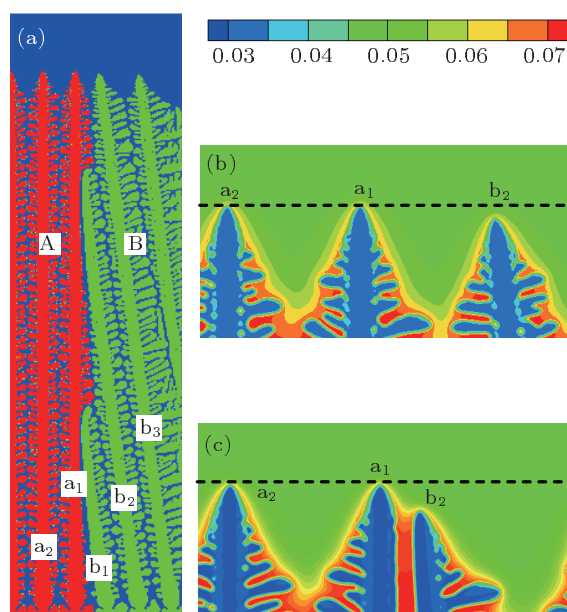


图8  $V = 300 \mu\text{m/s}$  时的汇聚生长 (a) 组织形貌; (b)  $t = 4.0 \text{ s}$  时枝晶尖端区域溶质场; (c)  $t = 5.5 \text{ s}$  时枝晶尖端区域溶质场

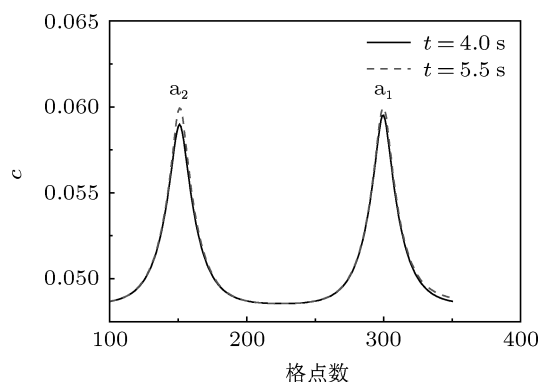


图9  $V = 300 \mu\text{m/s}$  时, 不同时刻下枝晶  $a_1, a_2$  尖端浓度曲线分布

图 10(a) 进一步给出了抽拉速度较小时 ( $V = 60 \mu\text{m/s}$ ,  $\lambda = 125 \mu\text{m}$ ) 晶粒 A, B 的生长情况. 由图 10(b) 可见,  $t = 14.0 \text{ s}$  时, 枝晶  $b_2$  的发展还不足以影响枝晶  $a_1$ , 此时枝晶  $a_1$  和  $a_2$  尖端位置一致. 随着枝晶  $b_2$  靠近  $a_1$ , 二者间的溶质相互作用逐渐加强, 使得枝晶  $a_1$  尖端的溶质场发生变化, 枝晶  $a_1$  和枝晶  $b_2$  之间横向溶质扩散不出去, 产生溶质富集, 影响枝晶  $a_1$  的生长.  $t = 22.5 \text{ s}$  时, 枝晶  $a_1$  的尖端落后于枝晶  $a_2$ , 如图 10(c) 所示, 这表明由于枝晶  $b_2$  靠近, 枝晶  $a_1$  的生长受到了抑制, 这也为枝晶  $a_1$  的被淘汰创造了条件. 图 11 给出了不同时刻下枝晶  $a_1$ ,  $a_2$  尖端浓度曲线, 可以看到,  $t = 22.5 \text{ s}$  时, 由于枝晶  $b_2$  的靠近, 枝晶  $a_1$  的尖端浓度曲线坡度变缓, 溶度梯度变小, 因此枝晶生长的驱动力变小, 使其生长变缓, 落后于枝晶  $a_2$ . 在枝晶  $a_1$  生长变缓的阶段, 枝晶  $b_3$  有可能超过  $a_1$ , 从而使非择优枝晶有了淘汰择优枝晶的可能性.

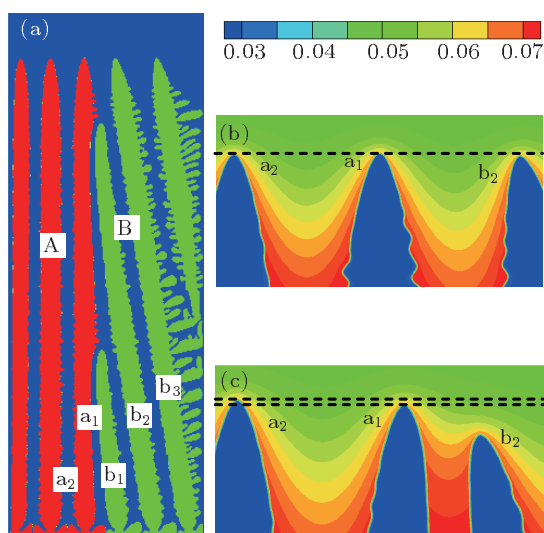


图 10  $V = 60 \mu\text{m/s}$  时的汇聚生长 (a) 组织形貌; (b)  $t = 14.0 \text{ s}$  时枝晶尖端区域溶质场; (c)  $t = 22.5 \text{ s}$  时枝晶尖端区域溶质场

周亦胄等<sup>[6-8]</sup>及 Souza<sup>[24]</sup>指出, 在研究不同取向晶粒的竞争生长时, 除了尖端过冷度之外, 还必须考虑到溶度场的相互作用. 上述模拟中, 在不同取向晶粒靠近时, 晶界处两个枝晶的溶质场发生重叠, 特别是在低速下, 还将导致溶度梯度发生改变, 从而使择优枝晶表现出了生长滞后性. 虽然在本文模拟中没有出现择优枝晶被淘汰的现象, 但模拟结果也显示了在低速条件下非择优枝晶淘汰择优枝晶的可能性. 本文模拟结果中未出现非择优取向枝晶淘汰择优取向枝晶, 其可能原因是: 一方面由于本文模拟中给定的抽拉速度仍然较大, 其溶质扩散长度较短, 枝晶间的溶质相互作用仍然相对较

弱, 此时非择优取向枝晶淘汰择优取向枝晶是一个非常漫长的过程, 因此在有限的计算时间内很难观测到反常淘汰现象; 另一方面, 由于目前本文模拟在二维条件下进行, 此时晶界处的择优枝晶仅与一个非择优枝晶相邻, 而在实际的三维空间中, 晶界处的择优枝晶将与多个非择优枝晶相邻, 因此溶质相互作用将更强, 非择优取向枝晶淘汰择优取向枝晶更易发生. 另外, 枝晶间的相互作用除了上述因素外, 还可能受到枝晶倾斜角度、温度梯度及扩散系数的影响. 枝晶倾斜角度越小, 温度梯度越大, 相邻枝晶尖端之间的距离就越小, 其相互作用越强. 由于扩散长度  $L_D = D/V$ , 抽拉速度越小, 溶质扩散系数越大, 则扩散长度越大, 枝晶间的相互作用越强, 则可能更容易发生择优取向枝晶被淘汰的反常现象.

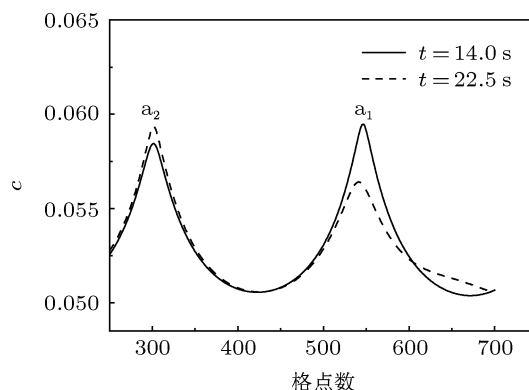


图 11  $V = 60 \mu\text{m/s}$  时, 不同时刻下枝晶  $a_1$ ,  $a_2$  尖端浓度曲线分布

## 4 结论

采用多相场模型研究了定向凝固条件下单一取向枝晶列倾斜生长时实际生长方向和尖端过冷度的演化规律, 以及两种不同取向枝晶列汇聚生长时的竞争淘汰行为. 结果表明, 倾斜枝晶的实际生长方向位于温度梯度与晶体择优取向之间, 并随着抽拉速度和一次枝晶间距的增大而逐渐从温度梯度方向向择优取向方向偏转, 模拟所得偏转行为与实验经验公式相符; 倾斜枝晶的尖端过冷度随着倾斜角度的增大而增大, 即相同条件下倾斜枝晶尖端位置总是低于非倾斜枝晶, 但二者的差异还受到枝晶一次间距的影响; 汇聚生长过程中, 当抽拉速度较低时, 非择优枝晶靠近择优取向枝晶, 会使择优取向枝晶尖端的浓度梯度变小, 生长驱动力也变小, 枝晶生长变得迟缓, 造成枝晶间的溶质相互作用增强, 从而可导致非择优取向枝晶淘汰择优取向枝晶.

- [1] Tiller W A, Jackson K A, Rutter J W 1953 *Acta Metall.* **1** 428
- [2] Mullins W W, Sekerka R K 1964 *J. Appl. Phys.* **35** 444
- [3] Warren J A, Langer J S 1993 *Phys. Rev. E* **47** 2702
- [4] Deschamps J, Georgelin M, Pocheau A 2008 *Phys. Rev. E* **78** 011605
- [5] Akamatsu S, Ihle T 1997 *Phys. Rev. E* **56** 4479
- [6] Zhou Y Z, Volek A, Green N R 2008 *Acta Mater.* **56** 2631
- [7] Zhou Y Z, Green N R 2008 *Superalloys* Champion, USA, September 14–18, 2008 p317
- [8] Zhou Y Z, Jin T, Sun X F 2010 *Acta Metall. Sin.* **46** 1327 (in Chinese) [周亦胄, 金涛, 孙晓峰 2010 金属学报 **46** 1327]
- [9] Okada T, Saito Y 1996 *Phys. Rev. E* **54** 650
- [10] Pocheau A, Deschamps J, Georgelin M 2007 *JOM* **59** 71
- [11] Pocheau A, Deschamps J, Georgelin M 2010 *Phys. Rev. E* **81** 1539
- [12] Yu Y M, Yang G C, Zhao D W, Lü Y L 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2423 (in Chinese) [于艳梅, 杨根仓, 赵达文, 吕衣礼 2001 物理学报 **50** 2423]
- [13] Karma A, Sarkissian A 1996 *Metall. Mater. Trans. A* **27** 635
- [14] Zhu Y C, Wang J C, Yang G C, Yang Y J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5542 (in Chinese) [朱耀产, 王锦程, 杨根仓, 杨玉娟 2007 物理学报 **56** 5542]
- [15] Folch R, Plapp M 2003 *Phys. Rev. E* **68** 010602
- [16] 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]
- [17] Steinbach I, Pezzolla F, Nestler B 1996 *Phys. D* **94** 135
- [18] Kim S G, Kim W T, Suzuki T 2004 *J. Cryst. Growth* **261** 135
- [19] Yang X L, Dong H B, Wang W 2004 *Mater. Sci. Eng. A* **386** 129
- [20] Walton D, Chalmers B 1959 *Trans. Metall. Soc. AIME* **215** 447
- [21] Burden M H, Hunt J D 1974 *J. Cryst. Growth* **22** 99
- [22] Huang W, Geng X, Zhou Y 1993 *J. Cryst. Growth* **134** 105
- [23] Trivedi R, Shen Y, Liu S 2003 *Metall. Mater. Trans. A* **34** 395
- [24] Souza N D, Aradakani M G, Wagner A 2002 *J. Mater. Sci.* **27** 481

# Phase field modeling of the growth and competition behavior of tilted dendrites in directional solidification\*

Wang Ya-Qin Wang Jin-Cheng<sup>†</sup> Li Jun-Jie

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

(Received 14 September 2011; revised manuscript received 10 October 2011)

## Abstract

The multi-phase field model is employed to simulate the growth of tilted dendrites during directional solidification. In this simulation, the evolution of a single oriented dendritic array and the overgrowth behavior between two converging grains with different orientations are studied. The simulated results show that the dendritic tip undercooling increases with the tilt angle, which means that the tip position of tilted dendrite is always lower than that of the non-tilted in the same condition. The favorably oriented grain always blocks the unfavorably oriented one in the case of converging growth. However, when the pulling velocity is low, the growth of the preferred crystalline orientation dendrites at the grain boundary is lagged by the immediate unfavorably ones because of the solutal interaction, which may result in the fact that the unfavorably oriented grain overgrows the favorably oriented one.

**Keywords:** phase field method, directional solidification, tip undercooling, growth direction

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

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51071128, 51101124), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610401), the Fundamental Research Fund of Northwestern Polytechnical University, China (Grant No. JC201006), and the Free Research Fund of State Key Laboratory of Solidification Processing, China (Grant No. 67-QP-2011).

<sup>†</sup> E-mail: jchwang@nwpu.edu.cn