

界面能各向异性对定向凝固枝晶生长的影响*

张云鹏¹⁾²⁾ 林鑫^{1)†} 魏雷¹⁾ 彭东剑¹⁾ 王猛¹⁾ 黄卫东¹⁾

1) (西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

2) (北京航星机器制造有限公司, 北京 100013)

(2012年10月11日收到; 2013年5月21日收到修改稿)

采用元胞自动机 (cellular automaton, CA) 模型研究了界面能各向异性对二维定向凝固枝晶生长的影响. 模拟结果显示当晶体的择优生长方向与热流方向一致时, 随着界面能各向异性强度的增大, 凝固组织形态由弱界面能各向异性时的海藻晶转变为强界面能各向异性时的树枝晶. 同时, 界面能各向异性强度会影响稳态枝晶尖端状态的选择, 界面能各向异性越强, 定向凝固稳态枝晶尖端半径越小, 尖端界面前沿的液相浓度和过冷度越小. 稳态枝晶生长的尖端状态选择参数与界面能各向异性强度也存在标度律的指数关系, 而枝晶一次间距则受界面能各向异性强度影响较弱. 当晶体的择优生长方向与热流方向呈 -40° 夹角时随着界面能各向异性强度的增大, 凝固组织形态由海藻晶逐渐转变为退化枝晶, 后又逐渐转变为倾斜枝晶.

关键词: 元胞自动机, 枝晶, 界面能各向异性

PACS: 81.30.-t, 68.70.+w

DOI: 10.7498/aps.62.178105

1 引言

凝固组织对材料的最终性能有重要的影响, 凝固组织的形态选择是一个典型的自由边界问题, 固液界面的移动速度以及最终的凝固形态显著地依赖于凝固区域浓度场和温度场的分布. 枝晶是一种基本的凝固组织形态. 基于外界凝固控制条件的不同, 枝晶可呈现自由枝晶生长和定向凝固强制性枝晶生长. 对自由枝晶生长来说, 微观可解性原理^[1-5]指出, 在枝晶的生长过程中, 固液界面各向异性不仅决定着枝晶的生长方向, 同时还在很大程度上影响着枝晶的生长行为. Lin 和 Lan 运用自适应三维相场模型模拟了不同界面能各向异性强度下的自由枝晶形态, 发现强界面能各向异性情况下, 自由枝晶尖端前沿液相的过冷度较低^[6]. 李金富和赵达文同样采用相场模型模拟了不同界面能各向异性强度下的自由枝晶生长, 发现随着界面能各向异性强度的增大, 自由枝晶的尖端生长速度增大, 枝晶的尖端半径减小, 枝晶尖端的稳定性系数

增大^[7].

而对于定向凝固强制性枝晶生长来说, 通常认为枝晶状态的选择受枝晶间相互作用^[8]和界面能^[9]共同影响. 但在决定枝晶状态选择时, 哪一个因素起决定性作用还需要进一步论证. 早期的研究通常忽略了枝晶间相互作用, 直接借鉴自由枝晶生长的临界稳定性原理来描述定向枝晶尖端半径和尖端过冷度的选择^[9]. 然而临界稳定性原理没有考虑界面能各向异性. 1998年, Akamatsu 和 Eavre 在采用 $\text{CBr}_4\text{-8 mol \% C}_2\text{Cl}_6$ 合金进行定向凝固的实验中发现, 界面能各向异性强度会影响定向凝固的组织形貌, 只有当界面能各向异性足够大时, 才可能形成稳定的定向凝固枝晶尖端和枝晶列^[10]. Hunt 等利用基于界面追踪的数值自洽模型^[11], 发现定向凝固枝晶稳态一次间距随界面能各向异性强度的增大而减小, 随后, Steinbach 利用相场模型^[12]也得到了相同的结果. 但是应该注意到, Hunt 的数值自洽模型和 Steinbach 的相场模型最终模拟出的枝晶形态都没有出现二次分枝, 而定向凝固枝晶二次分枝的生长

* 国家自然科学基金 (批准号: 50971102, 51271213), 国家重点基础研究发展计划 (973) (批准号: 2011CB610402), 高等学校学科创新引智计划 (批准号: 08040) 和高等学校博士学科点专项科研基金 (批准号: 20116102110016) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: xlin@nwpu.edu.cn

会对枝晶间的相互作用产生影响, 从而影响枝晶的尖端状态和枝晶间距. 除了相场模型与数值自洽模型外, 元胞自动机模型亦是目前凝固形态演化研究的一个重要手段. 相较于相场模型, 元胞自动机模型建模方法简单, 计算效率高. 相较于数值自洽模型, 元胞自动机模型可以直观的呈现凝固过程中凝固组织形态与各个状态参量的变化. 更为重要的是, 元胞自动机模型可以在呈现凝固复杂花样演化的同时进行更大尺度的模拟计算. 我们在前期采用元胞自动机模型已经研究了界面能各向异性强度对胞晶生长形态影响^[13], 并发现界面能各向异性强度对胞晶分岔特性和稳定胞晶形态具有重要的影响. 在此, 本文在前期工作的基础上, 进一步采用元胞自动机模型对二元合金定向凝固过程中枝晶的生长进行了模拟, 得到了枝晶生长条件下不同界面能各向异性强度下的凝固组织形态, 在保证得到完整的具有二次分枝的枝晶形态的前提下, 分析了界面能各向异性强度对定向凝固枝晶形态和尖端状态选择的影响规律.

2 模型描述

2.1 温度场和浓度场

整个二维计算区域内的温度沿 y 方向呈线性分布, 即 $T(x, y) = T_L + G_y$, T_L 为合金浓度为 C_0 时的平衡液相温度, x 和 y 分别为计算区域的横纵坐标, G_y 代表 y 方向上的温度梯度. 在定向凝固过程中, 一般情况下结晶潜热相对于外界施加温度梯度来说影响很小, 为了减少模型的计算量, 忽略结晶潜热对温度场的影响.

在计算浓度场时, 模型采用有限差分法来计算溶质扩散. 浓度场的控制方程为

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \left(\frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right) + C_i(1-k) \frac{\partial f_s}{\partial t}, \quad (1)$$

其中, C 是浓度, t 是时间, 下标 i 代表固相或者液相, D_i 表示溶质扩散系数, f_s 为固相分数, k 为溶质分配系数.

2.2 边界条件和固相分数的计算

在计算区域的边界处, 模型采用零通量边界条件. 在固液界面处, 根据 Gibbs-Thomson 方程计算得到界面元胞液相溶质浓度

$$C_1^* = C_0 + \frac{T^* - T_1^{\text{eq}}}{m_1} + \frac{\Gamma K f(\varphi, \theta_0)}{m_1}, \quad (2)$$

然后, 依据界面元胞液相溶质浓度 C_1^* 与该元胞的液相实际溶质浓度 C_1 之间的差值得到该元胞的固相分数增量

$$\Delta f_s = (C_1^* - C_1) / (C_1^*(1-k)), \quad (3)$$

其中, C_0 是合金的原始成分, T^* 是界面前沿的温度, T_1^{eq} 是成分 C_0 对应的平衡液相温度, m_1 为液相线斜率, Γ 是 Gibbs-Thomson 系数, K 是固液界面曲率, $f(\varphi, \theta_0) = 1 - 15\varepsilon \cos(4(\theta_0 - \varphi))$ 是描述界面能各向异性作用的函数, θ_0 为枝晶的择优生长方向与 x 方向的夹角. 对于体心或面心立方晶系, 枝晶生长的择优取向为 $\langle 10 \rangle$ 晶向族, 因此, 对于立方晶系的合金, 也可定义为 $[100]$ 晶向与 x 方向的夹角. 通过改变 θ_0 的值, 可以改变择优生长方向与热流方向的相对位置. φ 为界面法向, φ 可以由固液界面处的固相分数梯度计算得到

$$\varphi = \cos^{-1} \left[\frac{\partial f_s / \partial x}{((\partial f_s / \partial x)^2 + (\partial f_s / \partial y)^2)^{1/2}} \right]. \quad (4)$$

为了提高计算精度, 本文在处理界面元胞时还引入了界面重构技术^[14], 将界面元胞又分成许多小胞, 当固相分数不连续时, 通过对界面元胞的固相和液相分别进行两次双线性插值, 能够在网络内构造出两个固液界面. 界面重构技术细化了界面元胞, 提高了 CA 模型的计算精度, 减小了 CA 模型中存在的风格各向异性.

2.3 曲率的计算

BBS 模型^[15] 和界面追踪模型^[16] 基于如下方程计算界面的曲率:

$$K = \frac{2 \frac{\partial f_s}{\partial x} \frac{\partial f_s}{\partial y} \frac{\partial^2 f_s}{\partial x \partial y} - \left(\frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial x^2} - \left(\frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 \frac{\partial^2 f_s}{\partial y^2}}{\left[\left(\frac{\partial f_s}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial f_s}{\partial y} \right)^2 \right]^{3/2}}, \quad (5)$$

可以看到, 界面处的固相分数梯度对界面曲率的计算至关重要. 但是由于 CA 模型是明锐界面模型, 固液界面处只有一层元胞, 很难准确的得到界面元胞固相分数的偏导数, 所以本文的 CA 模型在求解固相分数偏导数时采用了双线性插值的方法^[17]. 这种计算方法能得到较为准确的固相分数偏导数, 从而提高曲率的计算精度.

2.4 CA 的俘获规则

摩尔邻居俘获规则和冯·诺依曼邻居俘获规则会产生强烈的网格各向异性^[14], 为了减少模型因为俘获规则引入的网格各向异性, 本文采用 zigzag 邻居俘获规则^[14]. 在 zigzag 邻居俘获规则下, 以某一个元胞为起点, 假设它以摩尔邻居俘获规则俘获了它的邻居, 这些邻居元胞再进行下一步俘获时则采用冯·诺依曼邻居俘获规则, 如此以两种俘获规则交替的形式进行俘获, 元胞就可以按照某种折线的形式向前推进, 减少了轴线和对角方向上的生长便利, 减少了模型的网格各向异性.

2.5 计算所用参数

本文采用丁二腈-0.4mol%丙酮 (SCN-0.4mol%acetone) 合金作为模拟对象, 热物性参数如文献 [18] 所示. 计算区域为 $1000\ \mu\text{m} \times 4000\ \mu\text{m}$ 的二维矩形, 采用正方形单位网格, 边长 Δx 为 $2\ \mu\text{m}$, 界面重构时, 被插值网格又进一步被均分成 10×10 的小网格计算区域的温度梯度 G 设为 $4.8 \times 10^3\ \text{K/m}$. 在上述条件下, 由 KF 模型^[19] 确定的胞枝转变速度 V_{tr} 约为 $8.0 \times 10^6\ \text{m/s}$. 为此, 模拟时采用的取抽拉速度 V 为 $1.0 \times 10^{-4}\ \text{m/s}$, $V \approx 12.5V_{tr}$,

是典型的枝晶生长条件. 计算开始时, 在模型冷端中间位置设置一个晶核. 对于丁二腈-丙酮合金来说, 由于其固相为体心立方结构, 枝晶择优生长方向为 $\langle 100 \rangle$ 晶向族, 这样, 在二维模拟条件下, 枝晶的择优生长方向为 $\langle 10 \rangle$ 晶向族, 意味着枝晶臂可沿晶体的四个晶向择优生长.

3 模拟结果及讨论

3.1 界面能各向异性强度对择优取向枝晶生长的影响

图 1 所示的是不同界面能各向异性系数下得到的相同生长时刻的凝固组织形态. 在此图中, 晶体的择优取向 $[10]$ 晶向设定为与 x 轴平行, 则枝晶的择优生长方向 $[01]$ 与热流方向平行. 当界面能各项异性系数取 0 时, 如图 1(a) 所示, 系统是各向同性的, 此时形成的凝固组织无法得到稳定的界面形态, 尖端始终保持持续的分岔, 这与图 2 所示的 Akamatsu 和 Eavre 在定向凝固实验中将 CBr_4 -8mol% C_2Cl_6 合金生长方向设置成接近于 $[111]$ 晶向, 使系统的界面能各向异性强度很弱时得到的海藻晶的特点相似^[10]. 随着界面能各向异性系数的

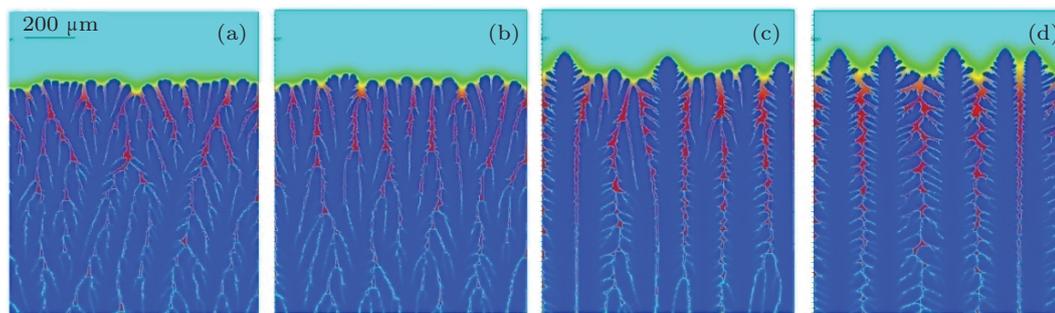


图 1 不同界面能各向异性系数下 SCN-0.4mol%acetone 合金定向凝固的生长形态, $G = 4.8 \times 10^3\ \text{K/m}$, $V = 1.0 \times 10^4\ \text{m/s}$, $\Delta x = 2\ \mu\text{m}$, $\theta_0 = 0^\circ$, 界面能各向异性系数 (a) $\epsilon = 0$; (b) $\epsilon = 0.01$; (c) $\epsilon = 0.02$; (d) $\epsilon = 0.03$

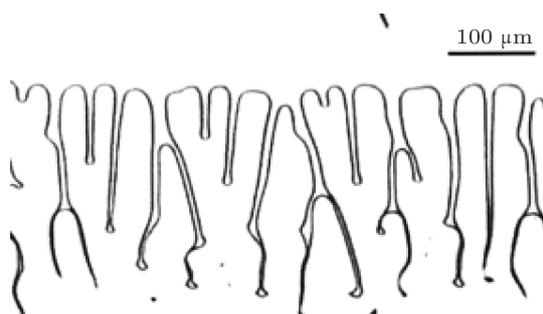


图 2 将 CBr_4 -8 mol% C_2Cl_6 合金生长方向设置成接近于 $[111]$ 晶向时得到的海藻晶形态 $G = 1.1 \times 10^4\ \text{K/m}$, $V = 31.1 \times 10^{-6}\ \text{m/s}$

增大, 定向凝固组织逐渐由海藻晶向树枝晶转变, 在转变的过程中, 凝固组织的生长方向越来越趋向于平行热流方向. 当界面能各向异性系数取 0.02 时, 如图 1(c) 所示, 此时的凝固组织中枝晶与海藻晶并存, 但是枝晶的高度明显领先于海藻晶. 当界面能各向异性系数增大到 0.03 时, 如图 1(d) 所示, 凝固组织为稳定的枝晶列.

在自由凝固实验中, 改变外界的凝固条件会产生两种不同形态的分枝, 一种是我们经常见到的传统意义上形状对称的分枝, 另一种则是形状不对称

的分枝, 这种分枝常被称作“doublons”^[20,21]. 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. 也就是说, 存在一个过冷度的临界值 ΔT_c , 当分枝尖端前沿液相的过冷度大于这个临界值时, 分枝的形态为非对称的“doublons”形态, 小于临界值时, 分枝的形态为传统的对称形态. 同时, 这个过冷度的临界值会随着界面能各向异性强度的增大而增大. 在定向凝固过程中, 当界面能各向异性非常小时, 凝固组织形态为非稳定的海藻晶形态. 这种海藻晶可以看做是由许多“doublons”形态的分枝通过不断地产生和淘汰形成的. 因此可以认为“doublons”是海藻晶的基本组成部分^[22]. 于是, 定向凝固组织是海藻晶还是枝晶归结于固液界面前沿液相过冷度使新形成的分枝选择“doublons”形态还是对称形态. 从图 1 所示的模拟结果可以看出, 从图 1(a) 到 (d), 随着界面能各向异性系数的增大, 凝固组织的界面前沿越来越靠近热端, 也就是说界面前沿的过冷度逐渐减小. 同时, 过冷度临界值 ΔT_c 随着界面能各向异性强度的增大而增大. 两方面的共同作用使得界面能各向异性强度越大, 越有利于传统对称分枝形态的形成, 越不利于“doublons”形态的形成. 这种改变对凝固组织的影响就表现为使凝固组织形态逐渐由海藻晶转变为树枝晶.

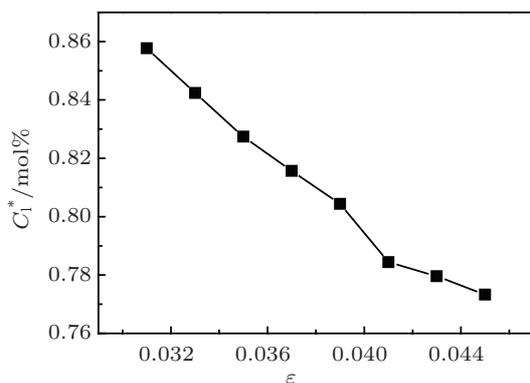


图 3 不同界面能各向异性系数下 SCN-0.4mol%acetone 合金定向凝固得到的枝晶尖端前沿液相的浓度 C_1^* , $G = 4.8 \times 10^3 \text{ K/m}$, $V = 1.0 \times 10^4 \text{ m/s}$, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$, $\theta_0 = 0^\circ$

由此可见, 界面能各向异性强度对定向凝固组织的稳定形态有重要的影响, 影响着凝固组织能否以稳定的形态进行生长. 模型中, 当界面能各向异性系数为 0.03 时, 得到的凝固组织已经为稳定的枝晶列. 若继续增大界面能各向异性系数, 即可进一步研究界面能各向异性强度对定向凝固稳态枝晶生长的影响规律. 图 3 至图 5 给出了稳态枝晶尖端

液相浓度, 过冷度与尖端半径随界面能各向异性系数的变化关系. 可以看出, 随着界面能各向异性系数的增大, 稳态枝晶尖端前沿的液相浓度与过冷度减小, 同时稳态枝晶的尖端半径也减小. 由此可见, 界面能各向异性强度会对定向凝固稳态枝晶尖端状态的选择产生重要影响.

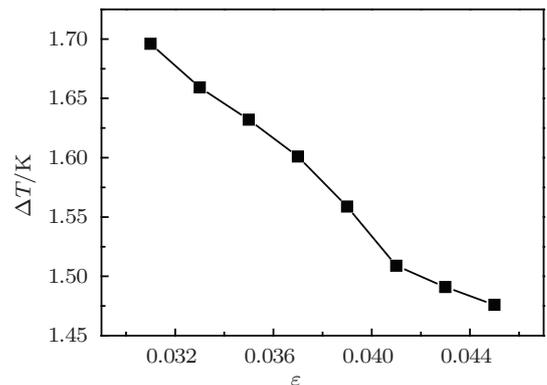


图 4 不同界面能各向异性系数下 SCN-0.4mol%acetone 合金定向凝固得到的枝晶尖端前沿液相的过冷度 ΔT , $G = 4.8 \times 10^3 \text{ K/m}$, $V = 1.0 \times 10^4 \text{ m/s}$, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$, $\theta_0 = 0^\circ$

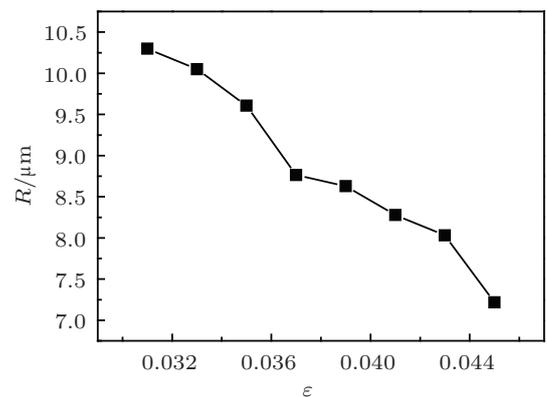


图 5 不同界面能各向异性系数下 SCN-0.4mol%acetone 合金定向凝固得到的枝晶尖端半径 R , $G = 4.8 \times 10^3 \text{ K/m}$, $V = 1.0 \times 10^4 \text{ m/s}$, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$, $\theta_0 = 0^\circ$

临界稳定性原理^[23]认为, 枝晶尖端是处于尖端分岔不稳定性和侧向分枝不稳定性之间的一种临界状态, 该状态可以用一个与毛细长度、热扩散长度以及枝晶尖端半径相关的无量纲参数 σ^* , 即尖端稳定性参数^[24-26]来描述. $\sigma^* = l_t d_0 / R^2$, $d_0 = \Gamma C_p / L_v$, 为毛细长度, $l_t = 2D_L / V$, 为过冷熔体中的热扩散长度, C_p 为合金比热, L_v 为结晶潜热. 对自由生长枝晶来说, 微观可解性理论^[2-5]和整体界面波理论^[27]都认为 σ^* 受界面能各向异性系数的影响, 存在 $\sigma^* = K(15\epsilon)^{7/4}$ 的指数规律, 其中 K 为常数, 微观可解性理论取 $K = 0.81$, 整体界面波理论取 $K = 1.09$. 而对于定向凝固枝晶来说, 可以

近似地假设^[28]

$$\sigma^* = 2D\Gamma / (VmC_1^*(k-1)R^2). \quad (6)$$

图 6 所示的是根据 CA 模型模拟结果按照 (6) 式的形式计算得到的不同界面能各向异性强度下的定向凝固枝晶稳态尖端状态选择参数 σ^* . 尖端状态选择参数 σ^* 随界面能各向异性强度的增大呈幂指数变化, 对其进行拟合, 得到 $\sigma^* = (0.04831 \pm 0.00449)(15\epsilon)^{(2.20078 \pm 0.17833)}$ 可见, 定向凝固中稳态枝晶的尖端状态选择参数与界面能各向异性强度同样存在标度律的指数关系, 但标度律的系数和指数与自由枝晶生长有所不同.

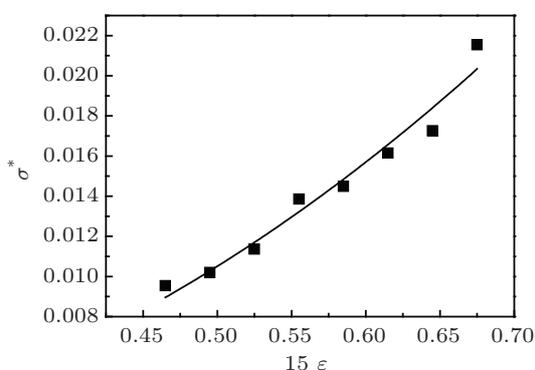


图 6 不同界面能各向异性系数下 SCN-0.4mol%acetone 合金定向凝固得到的枝晶尖端状态选择参数 σ^* , $G = 4.8 \times 10^3$ K/m, $V = 1.0 \times 10^4$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$, $\theta_0 = 0^\circ$

图 7 所示的是 CA 模型在不同界面能各向异性系数下得到的稳态枝晶一次间距选择范围, 同时给出了平均一次间距的模拟结果以及通过 (7) 式所示的 Hunt 的一次间距模型^[29]得到的枝晶一次间距的计算结果.

$$\lambda_1^2 = \frac{4\sqrt{2}R}{G} [m_1C_1^*(k-1) - GD_L/V]. \quad (7)$$

Hunt 模型的计算结果显示定向凝固稳态枝晶一次间距会随着界面能各向异性系数的增大而减小, 但是 CA 模型的模拟结果却显示稳态枝晶的一次间距随着界面能各向异性系数的增大无论是变化幅度还是规律性都不太显著. CA 模型中出现的界面能各向异性系数对定向凝固的稳态尖端状态选择有重要的影响, 而对于稳态枝晶的一次间距影响却很小的原因可能在于, 枝晶尖端的尺度很小, 能够对周围环境中浓度与温度的变化快速的响应, 并作出相应的状态调整, 而稳态枝晶一次间距的尺度较大, 不具备这种快速的状态调整能力. 具体说来, 对于尖端状态的选择来说, 只有当一次枝晶间距比较小时, 枝晶间的相互作用才会影响枝晶尖端状态的选

择, 而通常定向凝固枝晶生长的间距 Peclet 数^[30] 相对较大, 枝晶间的相互作用很弱, 尖端状态的选择主要取决于抽拉速度, 温度梯度以及界面能各向异性, 而与一次间距无关. 因而当外界凝固条件一定时, 界面能各向异性强度会对枝晶尖端状态的选择产生影响. 而对于稳态一次枝晶间距的选择来说, 枝晶间的相互作用对枝晶一次间距有重要的影响. 但是由于一次枝晶间距过大, 通过改变界面能各向异性强度而造成的枝晶尖端前沿液相浓度与温度的变化对枝晶间相互作用产生的影响很小, 对一次间距的影响就很小了, 所以界面能各向异性强度对稳态枝晶一次间距的影响很小. 而 Hunt 一次间距数值模型^[11] 的计算结果和 Steinbach 的相场模型^[12] 的模拟结果显示的稳态枝晶一次间距随界面能各向异性系数的增大而减小的原因可能是, Hunt 模型和 Steinbach 模型得到定向凝固稳态枝晶都没有二次分枝, 相比较具有二次分枝的定向凝固枝晶而言, 其枝晶间的相互作用较弱, 这样也就弱化了枝晶间的相互作用对于稳态枝晶一次间距的影响, 同时强化了界面能各向异性的作用, 而由 Hunt 模型给出的稳态枝晶一次间距与尖端半径的关系可以看出, 小的尖端半径对应小的一次间距, 界面能各向异性系数的增大会导致尖端半径的减小, 所以才会出现一次枝晶间距随界面能各向异性系数的增大而减小的结果. 图 8 给出平均一次枝晶间距与尖端半径的比值随界面能各向异性系数的变化. 可见 λ_1/R 随着界面能各向异性系数的增加有增大的趋势, 这种变化趋势的原因主要是稳态枝晶尖端半径随界面能各向异性系数的增大而减小.

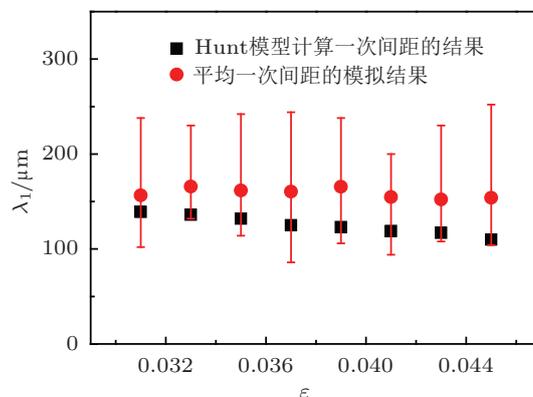


图 7 圆形表示的是不同界面能各向异性系数下得到的 SCN-0.4mol%acetone 合金定向凝固的稳态枝晶一次间距平均值, 最大值, 最小值的模拟结果, 方形表示的是将模拟参数代入 Hunt 的一次间距解析模型得到的不同界面能各向异性的计算结果, $G = 4.8 \times 10^3$ K/m, $V = 1.0 \times 10^4$ m/s, $\Delta x = 2 \mu\text{m}$, $\theta_0 = 0^\circ$

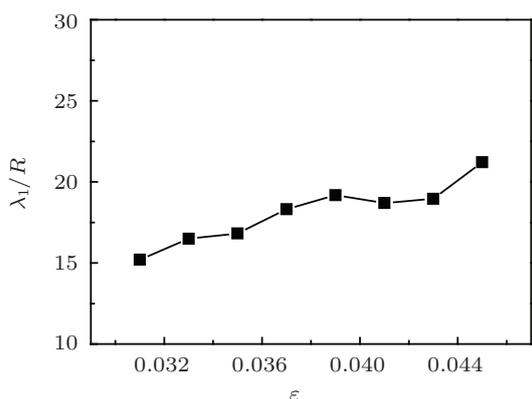


图 8 不同界面能各向异性系数下 SCN-0.4mol%acetone 合金定向凝固得到的稳态枝晶一次间距与尖端半径的比值, $G = 4.8 \times 10^3 \text{ K/m}$, $V = 1.0 \times 10^4 \text{ m/s}$, $\Delta x = 2 \text{ }\mu\text{m}$, $\theta_0 = 0^\circ$

3.2 界面能各向异性强度对倾斜枝晶生长的影响

界面能各向异性强度除了对择优取向枝晶的生长形态有重要的影响外,对倾斜枝晶的生长形态同样影响很大.将晶体择优取向 [10] 晶向与 x 方向的夹角 θ_0 的值设定为 50° ,即与热流平行方向角度最小的枝晶择优生长方向 [01] 与热流方向的夹角为 -40° ,分别将界面能各向异性系数取 0, 0.01, 0.02, 0.025, 0.03, 0.0375, 得到的凝固组织形态如图 9 所示.当界面能各向异性为 0 时,与图 1(a) 类似,获得的凝固组织形态为海藻晶,这时择优取向不起作用.随着界面能各向异性系数的增大,凝固组织形态由海藻晶逐渐向退化枝晶转变,当界面能各向异性系数取 0.02 时,如图 9(c) 所示,得到的凝固组织形态为退化枝晶.所谓的退化枝晶^[31]形态指的是凝固组织具有枝晶的形态同时还有两个分布在热流方向两侧的生长方向.图 9(c) 得到的退化枝晶的枝晶臂生长方向与热流方向的夹角分别为 -27° 和 29° ,枝晶的实际生长方向位于择优取向和热流方向之间.继续增大界面能各向异性系数,凝固组织逐渐由退化枝晶向倾斜枝晶转变,当界面能各向异性系数取 0.0375 时,得到的凝固组织形态为倾斜枝晶(图 9(f)),这时的枝晶一次臂具有唯一的生长方向,该生长方向与热流方向的夹角为 -27° .在这个过程中,使凝固组织形态由海藻晶向退化枝晶转变的原因仍然可归结为分枝前沿过冷度与过冷度临界值 ΔT_c 随界面能各向异性强度的变化.而由退化枝晶向倾斜枝晶转变则是因为随着界面能各向异性强度的增大,枝晶一次臂生长方向与热流方向呈 -27° 方向上的枝晶相对于 29° 方向上的枝晶一

次臂生长优势更加明显,后者逐渐被淘汰,从而形成具有唯一生长方向的倾斜枝晶.

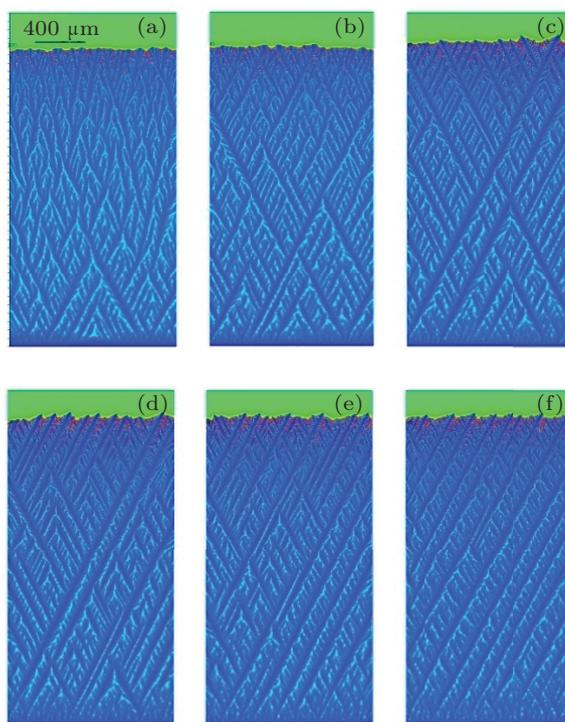


图 9 不同界面能各向异性系数下 SCN-0.4mol%acetone 合金定向凝固的生长形态, $G = 4.8 \times 10^3 \text{ K/m}$, $V = 1.0 \times 10^4 \text{ m/s}$, $\Delta x = 2 \text{ }\mu\text{m}$, $\theta_0 = -40^\circ$, 界面能各向异性系数 (a) $\epsilon = 0$; (b) $\epsilon = 0.01$; (c) $\epsilon = 0.02$; (d) $\epsilon = 0.025$; (e) $\epsilon = 0.03$; (f) $\epsilon = 0.0375$

4 结论

1. 界面能各向异性强度对定向凝固枝晶形态和尖端状态选择有重要的影响.当晶体的择优生长方向与热流方向平行时,在非常小的界面能各向异性强度下,凝固组织形态是没有稳定尖端的海藻晶,随着界面能各向异性强度的增大,凝固组织形态逐渐由海藻晶转变为树枝晶.形成树枝晶后继续增大界面能各向异性强度,稳态枝晶的尖端半径,尖端前沿液相的浓度和过冷度逐渐减小,尖端状态选择参数 σ^* 随着界面能各向异性强度的增大呈幂指数变化.当晶体的择优生长方向与热流方向呈 -40° 夹角时,如果界面能各向异性非常小,凝固组织形态同样是海藻晶,逐渐增大界面能各向异性强度,凝固组织先转变为退化枝晶,然后又由退化枝晶转变为倾斜枝晶.

2. 界面能各向异性强度对定向凝固稳态枝晶间距的选择影响很小.稳态枝晶的一次间距随着界面能各向异性强度的增大变化不明显.

- [1] Yokoyama E, Sekeka R F 1992 *J. Cryst. Growth* **125** 389
- [2] Kessler D A, Levine H 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7868
- [3] Amar M B, Pomeau Y 1986 *Euro. Phys. Lett.* **2** 307
- [4] Langer J S 1986 *Phys. Rev. A* **33** 435
- [5] Brener E A 1991 *Adv. Phys.* **40** 53
- [6] Lin H K, Chen C C, Lan C W 2011 *J. Cryst. Growth* **318** 51
- [7] Zhao D W, Li J F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7094 (in Chinese)[赵达文, 李金富 2009 物理学报 **58** 7094]
- [8] Spencer B J, Huppert H E 1999 *J. Cryst. Growth* **200** 287
- [9] Trivedi R 1980 *J. Cryst. Growth* **49** 219
- [10] Akamatsu S, Faivre G 1998 *Phys. Rev. E* **58** 3302
- [11] Lu S Z, Hunt J D 1992 *J. Cryst. Growth* **123** 17
- [12] Steinbach I 2008 *Acta Materialia* **56** 4965
- [13] Zhang Y P, Lin X 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 228106 (in Chinese)[张云鹏, 林鑫 2012 物理学报 **61** 228106]
- [14] Wei L, Lin X, Wang M, Huang W D 2011 *Appl. Phys. A* **103** 123
- [15] Beltran - Sanchez L, Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans. A* **35** 2471
- [16] Zhu M F, Stefanescu D M 2007 *Acta Mater.* **55** 1741
- [17] Wei L, Lin X, Wang M, Huang W D 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 098104 (in Chinese)[魏雷, 林鑫, 王猛, 黄卫东 2012 物理学报 **61** 098104]
- [18] Lipton J, Glicksman M E, Kurz W 1987 *Metall. Trans. A* **18** 341
- [19] Kurz W, Fisher D J 1981 *Acta Metall.* **29** 11
- [20] Ihle T, Muller-krumbhaar 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 3083
- [21] Ihle T, Muller-krumbhaar 1994 *Phys. Rev. E* **49** 2972
- [22] Akamatsu S, Faivre G, Ihle T 1995 *Phys. Rev. E* **51** 4751
- [23] Langer J S 1980 *Rev. Mod. Phys.* **52** 1
- [24] Langer J S, Muller-krumbhaar 1978 *Acta Metall.* **26** 1681
- [25] Langer J S, Muller-krumbhaar 1978 *Acta Metall.* **26** 1689
- [26] Langer J S, Muller-krumbhaar 1978 *Acta Metall.* **26** 1691
- [27] Xu J J 1996 *Phys. Rev. E* **53** 5051
- [28] Warren J A, Langer J S 1993 *Phys. Rev. E* **47** 2702
- [29] Hunt J D 1979 *Solidification of Casting of Metals.* (London: The Metals Society) p3
- [30] Wang Z J 2009 *Ph.D. Dissertation* (Xi'an: Northwestern Polytechnical University) (in Chinese)[王志军 2009 博士学位论文(西安: 西北工业大学)]
- [31] Akamatsu S, Faivre G, Ihle T 1995 *Phys. Rev. E* **51** 4751

Effect of interface energy anisotropy on the dendritic growth in directional solidification*

Zhang Yun-Peng¹⁾²⁾ Lin Xin^{1)†} Wei Lei¹⁾ Peng Dong-Jian¹⁾
Wang Meng¹⁾ Huang Wei-Dong¹⁾

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

2) (Beijing Hangxing Technology Development Co. Ltd., Beijing 100013, China)

(Received 11 October 2012; revised manuscript received 21 May 2013)

Abstract

The dendritic growth patterns in directional solidification with different amplitudes of solid-liquid interface energy anisotropy were investigated using the two-dimensional cellular automata (CA) model. It is shown that when the preferred growth direction of the crystal was the same as the direction of thermal gradient, the solidification pattern would transform from seaweed to dendrite with the increase of amplitude of interface energy anisotropy. The amplitude of interface energy anisotropy could also influence the morphology of dendritic tips. As the amplitude of interface energy anisotropy increased, the dendritic tip radius, the liquid concentration ahead of the tip and the tip undercooling decreased. A power law relationship existed between the stability parameter of dendritic tip and the amplitude of interface energy anisotropy in directional solidification. The primary arm spacing changed little with the increase of interface energy anisotropy. When the angle between the preferred growth direction of the crystals and the direction of thermal gradient was 40° , and the amplitude of interface energy anisotropy increased, the solidification pattern would transform from seaweed to degenerated dendrite and finally to tilted dendrite.

Keywords: cellular automata model, dendrite, interface energy anisotropy

PACS: 81.30.-t, 68.70.+w

DOI: 10.7498/aps.62.178105

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50971102, 51271213), the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610402), the Programme of Introducing Talents of Discipline to Universities (Grant No. 08040), and the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education, China (Grant No. 20116102110016).

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