

相场法模拟热耦合强度对纯 Ni 枝晶生长的影响

赵宇宏, 刘卫津, 侯 华

(中北大学, 山西 太原 030051)

摘 要: 基于 Karma 的薄界面极限相场模型, 研究了相场和温度场耦合强度对过冷纯 Ni 熔体中枝晶生长行为的影响。模拟结果表明: 随着热耦合强度的减弱, 相场受温度场的影响作用减弱, 固-液相界面前沿扰动变大, 主枝出现二次枝晶并逐渐发达粗化, 其粗化方式由缩颈熔断向枝晶臂合并方式转变。同时, 枝晶尖端的生长速率增大、曲率半径减小。瞬态过程中枝晶尖端生长速度大于稳态生长速度, 随着生长过程的进行, 枝晶尖端生长速度逐渐降低, 直至达到稳态值, 计算结果与微观可解理论吻合良好。

关键词: 相场法; 耦合强度; 微观可解理论; 二次枝晶

中图分类号: TG244

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2014)04-0841-05

相场模型^[1,2]是以金兹堡-朗道理论^[3]为基础, 通过引入相场变量 ϕ ($\phi=1$ 时表示固相; $\phi=-1$ 或 0 时, 表示液相), 用微分方程来体现扩散、有序化势和热力学驱动的综合作用^[4,5], 可在避免跟踪复杂固-液界面的条件下模拟凝固微观组织, 其可行性好, 物理模型清晰, 与 Monte Carlo 法、元胞自动机法相比较, 更加接近过程的物理本质^[6], 已广泛应用于热质传输、晶体生长动力学、晶体生长形貌演化、显微结构等研究中。

相场法通过与温度场、流场及其他外部场的耦合, 可对金属的凝固组织进行真实有效的模拟^[7-9]。本工作基于相场模型, 以过冷纯镍熔体为对象, 研究相场和温度场耦合强度对枝晶生长的影响, 有助于进一步研究材料工艺-组织-性能之间的规律。

1 相场模型和理论求解

1.1 耦合温度场的相场方程

纯物质非等温凝固相场模型的基本方程采用 Karma 等提出的薄界面极限下的相场模型,

$$\tau(n)\partial_t\phi = \nabla \cdot W(n)^2 \nabla \phi + [\phi - \lambda u(1 - \phi^2)](1 - \phi^2) + \partial_x [W(n)|\nabla \phi|^2 \frac{\partial W(n)}{\partial(\partial_x \phi)}] + \partial_y [W(n)|\nabla \phi|^2 \frac{\partial W(n)}{\partial(\partial_y \phi)}] \quad (1)$$

$$\partial_t u = D\nabla^2 u + \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (2)$$

其中, $W(n)$ 为界面厚度, $\tau(n)$ 为弛豫时间, D 为热扩散

系数, λ 为耦合因子。

根据 Karma^[10]的渐近分析, 将相场模型参数和尖锐界面模型^[8]参数联系起来, 即:

$$d_0(n) = a_1 \frac{\omega(n)}{\lambda} \quad (3)$$

$$\beta(n) = \frac{a_1 \tau(n)}{\lambda \omega(n)} \left[1 - a_2 \lambda \frac{\omega(n)^2}{D\tau(n)} \right] \quad (4)$$

式中, $d_0 = \frac{\sigma T_m c_p}{L^2}$, 为毛细长度, σ 为表面能, $\beta(n)$ 为各向异性的界面动力学系数, $a_1=0.8839$, $a_2=0.6237$, 由式(5)可以看出, 要消除界面动力学系数对枝晶生长的影响, 耦合系数^[11]应该满足:

$$\lambda = \frac{D\tau(n)}{a_2 \omega(n)^2} = 1.6033 \frac{D\tau(n)}{\omega(n)^2} \quad (5)$$

式中, T_m 为熔体温度, $\omega(n)$ 为表征界面厚度的各向异性因子的一个函数, $\tau(n)$ 为表征固液界面原子运动的参量。渐近分析将材料参数 d_0 、 D 与模型参数联系在一起, d_0 和 D 本应根据材料特性来决定, 本工作从方便取值和节约计算量的角度采用无量纲化值, 通过改变热扩散系数的大小来改变温度场耦合强度。

1.2 热扩散方程

在研究中, 潜热影响通过在相应的温度场网格中相场变量的变化量之和来估计^[12]。这样热扩散方程可表示为:

收稿日期: 2013-04-30

基金项目: 国家自然科学基金资助(50975263, 51204147, 51274175); 科技部国际合作资助项目(2011DFA50520); 教育部博士点新教师基金(20101420120005)

作者简介: 赵宇宏, 女, 1974 年生, 博士, 教授, 中北大学材料科学与工程学院, 山西 太原 030051, 电话: 0351-3557118, E-mail: zyh388@sina.com

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D\Delta^2 T + \frac{L}{c_p} h'(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (6)$$

式中, D 是热扩散系数, T 表示温度, L 表示潜热; c_p 是比热容。

2 计算参数的确定

2.1 初始条件和边界条件

假设初始晶核半径为 r_0 , 则:

$$x^2 + y^2 \leq r_0^2 \text{ 时, } \phi = 1, u = 0 \quad (7)$$

$$x^2 + y^2 \geq r_0^2 \text{ 时, } \phi = -1, u = -\Delta \quad (8)$$

式中, x, y 分别是横坐标和纵坐标; Δ 是无量纲过冷度; 在相场计算区域, 选择 Zero-Neumann 边界条件^[13]。

2.2 数值计算方法

为了差分方便, 对于相场和温度场的控制方程都采用均匀网格显示算法, 即向前 Euler 法。引入空间步长 $\Delta x, \Delta y$, 且 $\Delta x = \Delta y$; 时间步长 Δt 。为了获得可靠和稳定的计算结果, 空间步长 Δx 和时间步长 Δt 应满足 $\Delta x \leq W_0$ 和 $\Delta t \leq \frac{\tau_0 \Delta x^2}{5W_0^2}$

为了计算二次枝晶臂间距 $\lambda(z)$ 和幅值 $A(z)$, 首先要计算一个稳态的枝晶主干尖端形状 $x_0(z)$, 然后再计算耦合强度系数为 λ 的枝晶主干尖端形状 $x_0(z, t)$, 则

$$A(z) = \sqrt{\langle [x(z, t) - x_0(z)]^2 \rangle} \quad (9)$$

$$\langle \lambda(z) \rangle = \frac{2V(t_2 - t_1)}{N(z)} \quad (10)$$

式中, z 是距枝晶主干尖端的距离, V 是枝晶主干尖端速度, $N(z)$ 表示在距枝晶主干尖端 z 处在 $(t_2 - t_1)$ 时间内曲线 $x(z, t)$ 极值点的个数。

2.3 物性参数

Ni 的物性参数^[14]如表 1 所示。

3 模拟结果与分析

3.1 热耦合强度对枝晶形貌的影响

热耦合系数 λ 是非常重要的参数, 它决定着热量和凝固的联系, 对晶粒的生长具有绝对的控制作用。图 1 中 1a、1c、1e 与 1b、1d、1f 分别为采用表 1 模拟参

表 1 Ni 的热物性参数
Table 1 Thermal properties of Ni

Parameter	Value
T_m/K	1728
$L/J \cdot cm^{-3}$	2350
$\beta/cm \cdot (ks)^{-1}$	0.1572
$D_T/cm^2 \cdot s^{-1}$	0.155
$C_p/J \cdot K \cdot cm^{-3}$	5.42
$\sigma/J \cdot cm^{-2}$	3.7×10^{-5}

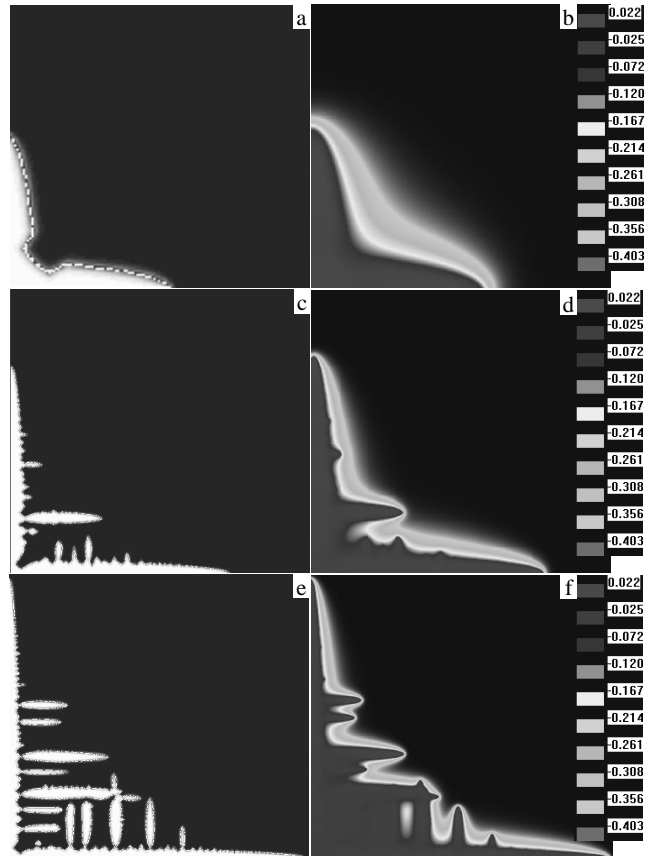


图 1 耦合强度对枝晶生长形貌的影响

Fig.1 Influence of coupling strength on dendrite growth morphology: (a, c, e) phase distribution, (b, d, f) temperature distribution; (a, b) $\lambda=7.659$, (c, d) $\lambda=6.383$, (e, f) $\lambda=4.255$

数, 并分别对 $\lambda=4.255, 6.383, 7.659$ 的 3 种情况进行模拟计算, 迭代相同的时间, 所得到的凝固枝晶相场形貌和温度场分布。

从温度场分布图可知, 枝晶生长过程中由于释放凝固潜热, 从而固相面移动速率大, 释放的潜热多, 热量来不及扩散, 因此枝晶尖端固-液界面处温度梯度最大, 而在枝晶根部由于界面移动速率小, 因此温度梯度最小。从图 1 还可看出, 当耦合强度 λ 为 7.659 时, 晶体比较光滑, 生长速度缓慢, 凝固潜热释放后有足够的时间扩散, 温度边界层较厚。随着热耦合系数减小, 枝晶生长速度加快, 界面前沿变得不稳定, 二次分支逐渐增多, 温度边界层变薄, 潜热向外界扩散较快, 有利于侧向分支的生长, 枝晶逐渐出现侧向分支发达的形貌。

3.2 热耦合强度对枝晶尖端生长行为的影响

图 2 和图 3 分别是计算得到的不同温度场耦合强度下的枝晶尖端生长速度 $v_{ip} = \frac{Vd_0}{D}$ 和枝晶尖端半径

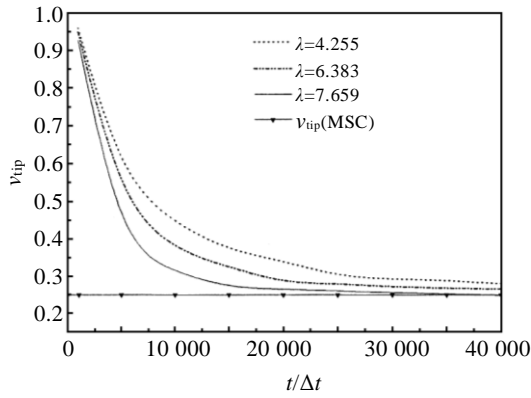


图 2 耦合强度对瞬态阶段枝晶尖端生长速度的影响
Fig.2 Influence of coupling strength on the transient v_{tip}

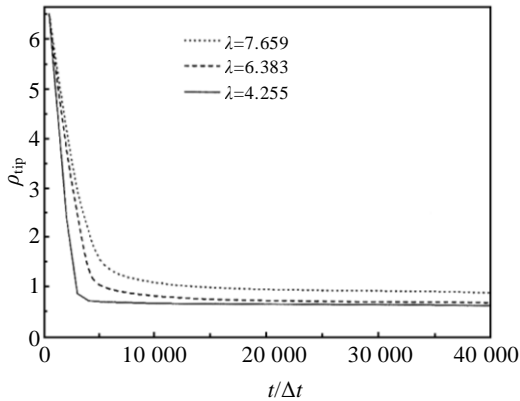


图 3 耦合系数对枝晶尖端半径的影响
Fig.3 Influence of coupling strength on the transient ρ_{tip}

$\rho_{tip} = \frac{\rho}{d_0}$ (其中 d_0 是毛细长度), 并将无量纲生长速度与相同条件下的微观可求解理论解进行了比较。由图 2 可见, 凝固开始时, 在枝晶尖端附近初始温度梯度 $-\Delta/\Delta x$ 远大于稳态值, 结晶潜热向过冷液相中扩散速度大于稳态, 导致瞬态过程中枝晶尖端生长速度大于稳态生长速度。随着生长过程的进行, 热量在凝固前沿不断积累, 热扩散边界层厚度逐渐增加、温度梯度不断降低, 使得热扩散速度降低, 枝晶尖端生长速度逐渐降低, 直至达到稳态值。结合图 2 和图 3 发现, 在所有计算结果中枝晶尖端半径均比生长速度更快达到稳态值, 这与 Almgren 等^[15]的理论分析结果一致。

同时可见, 随着时间的逐步推移, 枝晶尖端生长速度和半径都逐渐收敛, 而且收敛后的枝晶尖端生长速度和微观可解理论(MSC)^[16]符合得较好, 这就证明了本工作的模拟是正确可信的。

还可发现: 当耦合强度比较小时, 枝晶初期生长较

快, 枝晶快速长大, 但由于耦合强度较大时熔体内温度的改变较快, 释放的潜热使熔体内温度快速升高, 过冷度较快消失, 枝晶生长速度快速放慢。

3.3 热耦合强度对二次枝晶生长的影响

对于很多实际使用的合金, 二次枝晶和合金的机械性能有着紧密的关系。Karma 在 Langer 等工作的基础上^[12], 利用 WKB 近似法得到了不同形状针状枝晶二次枝晶间距和幅值的理论解。图 4 和图 5 比较了耦合强度对二次枝晶间距和幅值的影响, 计算结果发现: 随着耦合强度增大, 二次枝晶间距显著地增大, 但二次枝晶幅值则随之减小, 这是由于随着耦合系数的减小, 枝晶生长速度逐渐加快, 从而影响到二次枝晶的生长。

当 2 个生长着的枝晶臂排出的潜热扩散方向相对时, 那么在这 2 个扩散方向的交点处潜热会迅速增加, 温度梯度迅速减小, 造成生长速度减小, 产生潜热积聚。潜热的积聚有两方面作用, 当积聚的潜热过多且分布不

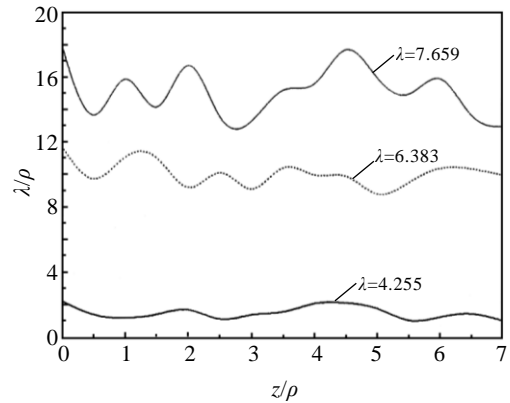


图 4 耦合强度对二次枝晶间距的影响
Fig.4 Influence of coupling strength on the second dendrite space

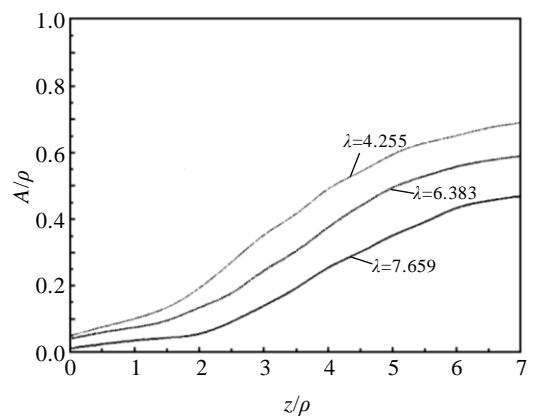


图 5 耦合强度对二次枝晶幅值的影响
Fig.5 Influence of coupling strength on the second dendrite amplitude

均时,尤其是一次枝晶臂和二次枝晶臂之间的潜热积聚过多时,会使部分界面温度迅速升高,等温线出现较大波动,从而促进了新的二次枝晶臂萌生;当潜热的积聚不多时,潜热分布比较均匀,等温线相对比较光滑,二次枝晶臂的产生和生长会被抑制,这样导致更少的潜热产生。由图 1 的枝晶形貌可以进一步看出,随着耦合系数的减小,二次枝晶臂较发达,也就表明产生的潜热较多,等温线波动比较严重,在 $\lambda=7.659$ 时,产生的潜热显然最少,等温线相对较光滑,说明由枝晶臂生长引起的潜热积聚对新的二次枝晶臂的产生有促进作用。

当计算时间足够长,一次枝晶臂足够大时,二次枝晶臂的产生受其他一次枝晶臂排出的潜热影响较小,在时间上呈现周期性,在空间上呈正弦波式发展。此时早期的二次枝晶臂出现粗化现象。在模拟中观察到二次枝晶臂有合并、缩颈熔断、轴向熔化和径向熔化等四种不同的粗化方式。枝晶臂合并主要是那些距离比较近、在初期竞争生长中都能同时生长而且两者之间的固液界面曲率为负并且绝对值较大的枝晶臂。从图 1 中温度场分布和图 5 可以看出,当耦合系数较小($\lambda=4.255$)时,二次枝晶臂间距较小,二次枝晶臂粗化以枝晶臂合并为主,缩颈熔断型的二次枝晶臂主要是由于早期潜热积聚作用,自身根部较细,逐渐被积聚的潜热熔断,如图 1 中耦合系数较大($\lambda=6.383$)时,二次枝晶臂粗化以缩颈熔断型为主。

4 结 论

1) 相场法可真实地模拟纯金属等轴枝晶生长规律,凝固初期,由于枝晶尖端附近温度梯度 $-\Delta/\Delta x$ 远大于稳态值,结晶潜热向过冷液相中扩散速度大于稳态,导致瞬态过程中枝晶尖端生长速度大于稳态生长速度;随着生长过程的进行,热量在凝固前沿不断积累导致热扩散边界层厚度逐渐增加、温度梯度不断降低,枝晶尖端生长速度逐渐降低,直至达到稳态值,模拟结果与微观可求解理论一致。

2) 随着温度场耦合强度减弱,枝晶生长速度加快,界面前沿变得不稳定,二次分支逐渐增多,温度边界层变薄,潜热向外界扩散较快,枝晶逐渐出现侧

向分支发达并粗化的形貌;同时,枝晶尖端的生长速率增大,而枝晶尖端的曲率半径减小。

3) 温度场耦合强度对二次枝晶的生长有促进作用,当耦合强度由强到弱变化时,二次枝晶趋向于发达并粗化,其粗化方式由缩颈熔断向枝晶臂合并转变。

参考文献 References

- [1] Kobayashi R. *Physica D*[J], 1993, 63: 410
- [2] Wheeler A A, Murraray B T, Schaefer R J. *Physica D*[J], 1993, 66: 243
- [3] Zhao Daiping(赵代平), Jing Tao(荆涛), Liu Baicheng(柳百成). *Acta Phys Sin*(物理学报)[J], 2003, 52: 1737
- [4] Li Mei'e(李梅娥), Yang Gencang(杨根仓), Zhou Yaohe(周尧和). *Acta Phys Sin*(物理学报)[J], 2005, 54: 454
- [5] Zhu Changsheng(朱昌盛), Feng Li(冯力), Wang Zhiping(王智平) et al. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*(机械工程学报)[J], 2008, 45: 30
- [6] Zhu Cangsheng(朱昌盛), Wang Zhiping(王智平), Jing Tao(荆涛) et al. *Acta Phys Sin*(物理学报)[J], 2006, 55: 1502
- [7] Chen Zhi(陈志), Chen Changle(陈长乐), Hao Limei(郝丽梅). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2009, 38(1): 7
- [8] Wang Mingguang(王明光), Zhao Yuhong(赵宇宏), Ren Juan-na(任娟娜). *Acta Phys Sin*(物理学报)[J], 2011, 60: 4
- [9] Long Wenyuan(龙文元), Lü Donglan(吕冬兰), Xia Chun(夏春). *Acta Phys Sin*(物理学报)[J], 2009, 58: 11
- [10] Yu Yanmei(于艳梅), Yang Gencang(杨根仓), Zhao Dawen(赵达文) et al. *Acta Phys Sin*(物理学报)[J], 2001, 50: 2423
- [11] Suzuki T, Kim S G, Kin W T. *Materials Science and Engineering A*[J], 2007, 499: 99
- [12] Karma A, Rappel W. *Phys Rev Lett*[J], 1996, 53: 3017
- [13] Wang S, Sekerka R F. *Phys Rev E*[J], 1996, 53: 3760
- [14] Long Wenyuan(龙文元), Cai Qizhou(蔡启舟), Chen Liliang(陈立亮) et al. *Acta Phys Sin*(物理学报)[J], 2005, 54: 0256
- [15] Jeong J H, Goldenfeld N, Dantzig J A. *Phys Rev E*[J], 2001, 64: 041 602
- [16] Tong X, Beckermann C. *Phys Rev E*[J], 2000, 61: R49

Phase-Field Simulation for Dendritic Growth Behavior of Pure Ni under Different Temperature Coupling Strength

Zhao Yuhong, Liu Weijin, Hou Hua

(North University of China, Taiyuan 030051, China)

Abstract: Based on the diffusion Karma phase field model with thin interface limit, the dendrite growth behavior of pure Ni undercooled melt was simulated under different temperature coupling strength. Results show that as the thermal coupling strength decreases, the impact of the temperature field on the phase field weakens, the solid-liquid interface disturbance increases, and secondary dendrites develop gradually from the main branch. Meanwhile, the dimensionless growth velocity of dendrite tip increases, while the dimensionless dendrite tip radius decreases. Furthermore, at the initial solidification stage, the transient growth velocity of dendrite tip is greater than the theoretical stable growth velocity; with the growth process going on, the growth velocity of dendrite tip gradually decreases until it equals to the theoretical stable value. Therefore, the computational results by the phase-field method are in good agreement with that by the microsolubility theory.

Key words: phase-field model; coupling strength; microscopic solvability theory; secondary dendrites

Corresponding author: Hou Hua, Ph. D., Professor, College of Materials Science and Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, P. R. China, Tel: 0086-351-3557118, E-mail: zyh388@sina.com