

## 铸造镁合金的枝晶生长模拟\*

刘志勇 许庆彦 柳百成

(清华大学机械工程先进成形制造教育部重点实验室, 北京 100084)

**摘要** 根据 hcp 晶体学结构和优先生长方向, 建立了铸造镁合金晶体生长的物理模型, 提出了一种新的随机性模拟方法——虚拟生长中心计算模型. 模型考虑了枝晶生长动力学、各向异性及二次枝晶臂粗化, 采用枝晶形状函数揭示了一次枝晶和二次枝晶的生长演化过程. 引入坐标变换技术可更快速准确计算任意晶向枝晶的生长捕获. 耦合了微观溶质场计算, 得到了更准确的枝晶生长形貌和溶质分布情况. 对 Mg-Al 合金定向凝固和等轴晶生长的模拟验证了本模型的正确性.

**关键词** 数值模拟, hcp 晶体, 枝晶生长, 镁合金

中图分类号 TG244

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(2007)04-0367-07

## MODELING OF DENDRITE GROWTH FOR THE CAST MAGNESIUM ALLOY

LIU Zhiyong, XU Qingyan, LIU Baicheng

Department of Mechanical Engineering, Tsinghua University, Key Laboratory for Advanced Materials Processing Technology, Ministry of Education, Beijing 100084

Correspondent: LIU Zhiyong, Tel: (010)81441333, E-mail: liuzy02@mails.tsinghua.edu.cn

Supported by National Basic Research Program of China (No.2005CB724105) and National Natural Science Foundation of China (No.10477010)

Manuscript received 2006-08-23, in revised form 2006-11-15

**ABSTRACT** Based on the crystallographic structure and preferential growth direction of hcp crystal, a physical model of dendrite growth for the cast magnesium alloy was founded and a new stochastic simulation method named virtual growth center calculation model was proposed. Considering dendrite growth kinetics, anisotropy of grain growth and secondary dendrite arm coarsening, the present model adopted dendrite shape functions to reveal the evolution of primary and secondary dendrite arms. A coordinate transformation technique was introduced to calculate the cell capture of growing dendrites with arbitrary orientations rapidly and accurately. Coupled with the calculation of microscopic solute concentration, the growth morphology of dendrites and solute distribution can be simulated accurately. Applications to the Mg-Al base alloys show the proposed model to be correct.

**KEY WORDS** numerical simulation, hcp crystal, dendrite growth, magnesium alloy

镁合金作为最轻的金属结构材料, 具有密度小、比强度和比刚度高、减振性和散热性好等优点, 在汽车、通讯设备和电子行业中得到了日益广泛的应用. 工业上通常采用 Mg-Al 合金 (含 1.9%—9.5%Al, 质量分数) 制成铸件、锻件、挤压材和轧材, 并可铆接和焊接<sup>[1]</sup>.

镁合金铸件的性能优劣很大程度上取决于在凝固过程中所形成的微观组织和微观缺陷. 微观组织模拟成为预测或再现合金凝固过程中组织演变的一个重要和有效的

工具, 并可通过与性能预测模型结合来推断铸件机械性能, 从而优化工艺设计, 以使最终金属产品获得更好的组织和性能. Beltran-Sanchez 和 Stefanescu<sup>[2]</sup> 基于元胞自动机 (CA) 方法, 建立了低 Péclet 数的二元合金枝晶生长微观模型, 综合考虑了网格的局部曲率、凝固分数、捕获原则和各向异性, 减小了网格划分对模拟结果的影响. 朱鸣芳等<sup>[3]</sup> 应用二维的改进 CA——传输耦合模型, 对流场作用下 Al-3%Cu (质量分数, 下同) 合金枝晶的非对称生长行为进行了模拟研究. 但是, 镁合金属于密排六方 (hcp) 晶系, 而以往的组织模拟技术绝大多数针对立方晶系合金, 无法体现 hcp 晶系的各向异性特征, 故不能准确揭示镁合金晶体生长的组织形貌. 由于 hcp 结构晶体生长建模和验证的复杂性, 目前此类模拟仍处于刚刚起步阶段, 模型很少且不成熟, 针对镁合金微观组织演化的模拟

\* 国家重点基础研究发展计划项目 2005CB724105 和国家自然科学基金项目 10477010 资助

收到初稿日期: 2006-08-23, 收到修改稿日期: 2006-11-15

作者简介: 刘志勇, 男, 1976 年生, 博士生

研究更是鲜有报道. 最近, Janin 等<sup>[4]</sup>采用相场模型针对镁基合金进行了枝晶组织生长模拟, 引入六方各向异性函数描述 hcp 晶体结构, 并对 AZ31 合金的定向凝固及等轴生长进行了模拟. 本文作者也曾针对 AZ91D 压铸镁合金, 考虑了溶质富集和离异共晶组织的形成, 建立了其凝固过程中微观组织演化的数学物理模型, 并采用改进的三维 CA 模型结合压铸镁合金进行了模拟<sup>[5]</sup>. 但为了提高运算效率, 忽略了 hcp 结构晶体的许多细节. 因此有必要开发新的数理模型来针对 hcp 结构的晶体生长进行模拟, 以适应目前有关镁合金凝固理论和应用研究的需要.

本文建立了模拟铸造镁合金晶体生长的物理模型, 提出了二维虚拟生长中心计算模型, 考虑了枝晶生长动力学和二次枝晶臂粗化, 耦合了微观溶质场计算, 结合镁铝系镁合金进行了微观组织模拟. 通过对单个等轴晶、定向凝固和等轴晶多晶粒生长的模拟结果表明, 本模型具有很好的理论和应用价值.

### 1 数理模型

#### 1.1 镁合金枝晶生长的物理模型

为了准确模拟镁合金的晶粒形核与生长, 必须考虑它的晶体学特征. 镁合金晶体结构的重要特征是具有 hcp 结构, hcp 结构的  $\bar{c}$  轴具有六重对称性. 它在晶体生长上表现出明显的各向异性, 其优先生长方向是  $(10\bar{1}0)$ . 根据实验观察, 在非平衡凝固条件下, 在具有六重对称性的晶体基面上的生长对镁合金枝晶组织起主导影响<sup>[4,6]</sup>. 考虑到实际镁合金枝晶具有非常复杂的树枝状形貌, 本模型采用数学构造的方法简化描述其二维形貌. 假定枝晶二维生长轮廓为图 1a 所示的形状, 暂不考虑 3 次以上的更高次分枝. 采用如下二次曲线方程组描述图 1b 所示的一次枝晶臂形状:

$$\left\{ \begin{aligned} x^2 &= L_{1a}^2 - \Phi_{1a}^2 y^2 \\ x^2 &= L_{1b}^2 - \Phi_{1b}^2 y^2 \\ (x \cos \frac{\pi}{3} + y \sin \frac{\pi}{3})^2 &= L_{1c}^2 - \Phi_{1c}^2 (-x \sin \frac{\pi}{3} + y \cos \frac{\pi}{3})^2 \\ (x \cos \frac{\pi}{3} + y \sin \frac{\pi}{3})^2 &= L_{1d}^2 - \Phi_{1d}^2 (-x \sin \frac{\pi}{3} + y \cos \frac{\pi}{3})^2 \\ (x \cos \frac{2\pi}{3} + y \sin \frac{2\pi}{3})^2 &= L_{1e}^2 - \Phi_{1e}^2 (-x \sin \frac{2\pi}{3} + y \cos \frac{2\pi}{3})^2 \\ (x \cos \frac{2\pi}{3} + y \sin \frac{2\pi}{3})^2 &= L_{1f}^2 - \Phi_{1f}^2 (-x \sin \frac{2\pi}{3} + y \cos \frac{2\pi}{3})^2 \end{aligned} \right. \quad (1)$$

类似地, 采用如下二次曲线方程组描述图 1c 所示的二次枝晶臂形状:

$$\left\{ \begin{aligned} [x \cos(\theta + \frac{\pi}{3}) + y \sin(\theta + \frac{\pi}{3})]^2 &= L_{2a}^2 - \Phi_{2a}^2 [-x \sin(\theta + \frac{\pi}{3}) + y \cos(\theta + \frac{\pi}{3})]^2 \\ [x \cos(\theta + \frac{\pi}{3}) + y \sin(\theta + \frac{\pi}{3})]^2 &= L_{2b}^2 - \Phi_{2b}^2 [-x \sin(\theta + \frac{\pi}{3}) + y \cos(\theta + \frac{\pi}{3})]^2 \\ [x \cos(\theta + \frac{2\pi}{3}) + y \sin(\theta + \frac{2\pi}{3})]^2 &= L_{2c}^2 - \Phi_{2c}^2 [-x \sin(\theta + \frac{2\pi}{3}) + y \cos(\theta + \frac{2\pi}{3})]^2 \\ [x \cos(\theta + \frac{2\pi}{3}) + y \sin(\theta + \frac{2\pi}{3})]^2 &= L_{2d}^2 - \Phi_{2d}^2 [-x \sin(\theta + \frac{2\pi}{3}) + y \cos(\theta + \frac{2\pi}{3})]^2 \end{aligned} \right. \quad (2)$$

式中,  $L_{1a}, L_{1b}, L_{1c}, L_{1d}, L_{1e}, L_{1f}$  为 6 个方向的一次枝晶生长半径;  $L_{2a}, L_{2b}, L_{2c}, L_{2d}$  为 4 个方向的二次枝晶生长半径, 与枝晶尖端生长速度有关;  $\Phi_{1a}, \Phi_{1b}, \Phi_{1c}, \Phi_{1d}, \Phi_{1e}, \Phi_{1f}, \Phi_{2a}, \Phi_{2b}, \Phi_{2c}, \Phi_{2d}$  为形状因子系数, 与晶粒固相率有关;  $\theta$  为二次枝晶臂所在的一次枝晶臂

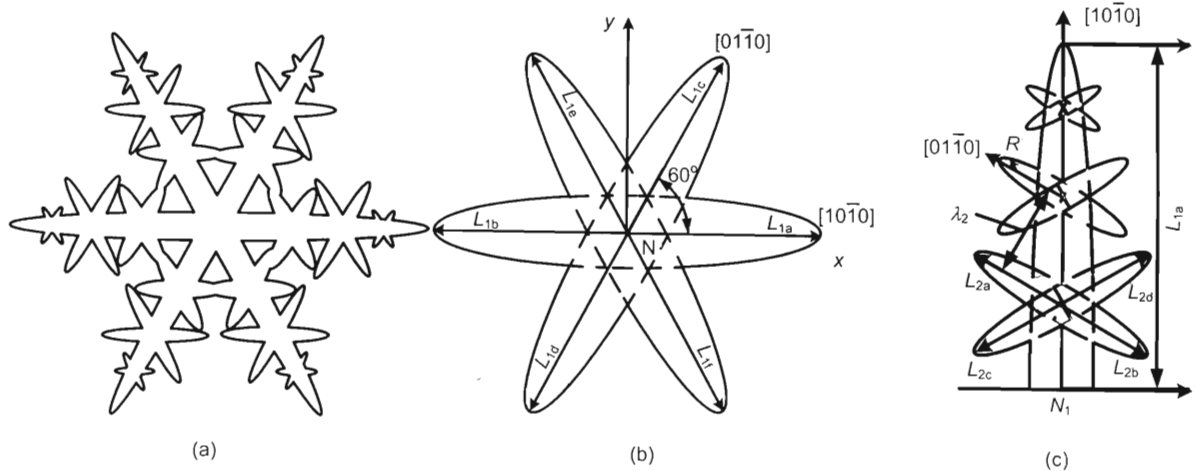


图 1 枝晶晶粒轮廓及枝晶臂生长半径示意图

Fig.1 The profile of a dendrite and growth radius of dendrite arms

(a) the profile of a dendrite (b) primary dendrite arms (c) secondary dendrite arms

对于  $x$  轴的夹角 (各项参数关系详见文献 [7, 8], 数值算法参见文献 [9]).

图 1c 中的  $\lambda_2$  表示二次枝晶臂间距. 根据 Kattamis 等 [10] 提出的二次枝晶粗化模型

$$\lambda_2 \propto \left[ \frac{\sigma DT_1 \theta_f}{mLx_1(k_0 - 1)} \right]^{1/3} \quad (3)$$

式中,  $\sigma$  为界面能,  $D$  为溶质扩散系数,  $T_1$  为液相线温度,  $\theta_f$  为部分凝固时间,  $m$  为液相线斜率,  $L$  为熔化潜热,  $x_1$  为二次枝晶之间液体的浓度,  $k_0$  为溶质分配系数. 许多研究者都测过  $\lambda_2$  与凝固条件的关系, 但大多都是用与冷却速率  $R_c$  的关系来讨论的. 由于无法将  $R_c$  直接体现在式 (3) 中, 本文采用了  $1/R_c$  这个参数, 并且有  $\lambda_2 = \epsilon(1/R_c)^{1/3}$ ,  $\epsilon$  是与合金相关的系数 [11].

### 1.2 连续形核与生长动力学

凝固过程中两种基本的形核机理是均质形核和异质形核, 而针对工业上常用的铸造镁合金, 通常在熔炼过程中需要采用碳质孕育法进行变质处理, 其原理是镁合金溶液中的碳化物在高温下分解出 C 原子, C 原子和 Al 化合, 形成大量弥散的  $Al_4C_3$  高熔点质点, 可作为结晶时的非均质晶核, 以达到细晶强化的作用, 因此本文采用异质形核过程的连续形核模型 [12].

枝晶的生长过程一般采用枝晶尖端半径和生长速度这两个物理量来表征. 模型方面采用 Kurz 等 [13] 描述枝晶尖端生长的动力学模型 (KGT 模型), 模型中考虑了生长速度对溶质分配系数、扩散系数及相图的影响.

### 1.3 溶质扩散模型

本文中的溶质场主要由液相和固相中的溶质扩散控制, 不考虑对流引起的溶质转移. 对于微观计算区域边界及两相交界的单元, 采用零扩散的边界条件来处理.

溶质扩散方程为

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \left( \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right) \quad (4)$$

式中,  $C_i$  为溶质浓度;  $t$  为时间;  $D_i$  为溶质扩散系数, 其下标  $i$  可为 S(固相) 或 L(液相).

固 / 液界面存在局部平衡

$$C_S^* = kC_L^* \quad (5)$$

式中,  $C_L^*$  ( $C_S^*$ ) 为在界面处的液 (固) 相溶质浓度,  $k$  为溶质平衡分配系数.

为了保持固 / 液界面的溶质守恒, 溶质再分配采用数值算法来处理.

## 2 计算模型与算法

### 2.1 虚拟生长中心计算模型

为了模拟 hcp 晶体的枝晶生长, 本文提出了虚拟生长中心计算模型. 虚拟生长中心是指枝晶臂的生长中心并非实际晶核, 而是数值计算中假设的一次和二次枝晶臂在

不同优先生长晶向上的生长计算中心. 生长计算中心分为一次枝晶生长中心和二次枝晶生长中心两类. 虚拟生长中心的设置具有明确的物理意义, 并与实际晶向具有几何对应关系.

图 2 是虚拟生长中心模型示意图. 图中标志着 N 的  $\otimes$  代表原始晶核,  $\circ$  表示微观单元节点,  $\bullet$  表示原始晶核某一优先生长晶向上的虚拟生长中心, 相邻单元之间的距离为  $l$ . 微观单元在模拟开始时都为液态, 相状态标志  $P_i=0$ . 在某一时刻  $t_0$ , 假定  $[10\bar{1}0]$  晶向与  $x$  轴成  $\theta$  角的一个初生相晶粒在微观单元中心 N 形核. 此微观单元被设为原始晶核单元, 相状态标志设置为  $P_N=1$ , 晶向与  $x$  轴的夹角为  $\theta$ . 考虑到枝晶生长的各向异性, 原始晶核单元 N 将会衍生出 6 个虚拟生长中心  $N_1-N_6$ , 它们与原始晶核重合, 将成为 6 个优先生长方向上一次枝晶臂的生长中心.

以  $[10\bar{1}0]$  晶向的一次枝晶生长为例, 其虚拟生长中心为  $N_1$ . 由于忽略了晶粒的形核半径, 所以在  $t_1$  时刻, 一次枝晶臂生长长度

$$L_{1a}^{t_1} = \int_{t_0}^{t_1} v_{1a} d\tau \quad (6)$$

式中,  $v_{1a}$  为沿着  $[10\bar{1}0]$  优先生长方向的一次枝晶尖端生长速度, 是虚拟生长中心  $N_1$  在一次枝晶臂生长前沿的局部过冷度  $\Delta T_{1a}$  的函数. 即

$$v_{1a} = f[\Delta T_{1a}(\tau)] \quad (7)$$

枝晶尖端生长速度和过冷度之间的关系由枝晶尖端动力学模型给出. 经过  $\Delta t$  时间后, 生长尖端将捕获到前方的微观单元, 这时过冷度  $\Delta T_{1a}(t_1 + \Delta t)$  将根据新捕获的微观单元温度来计算. 如果在模拟计算域内存在一个不均匀的温度场, 在各优先生长方向上的过冷度将会不

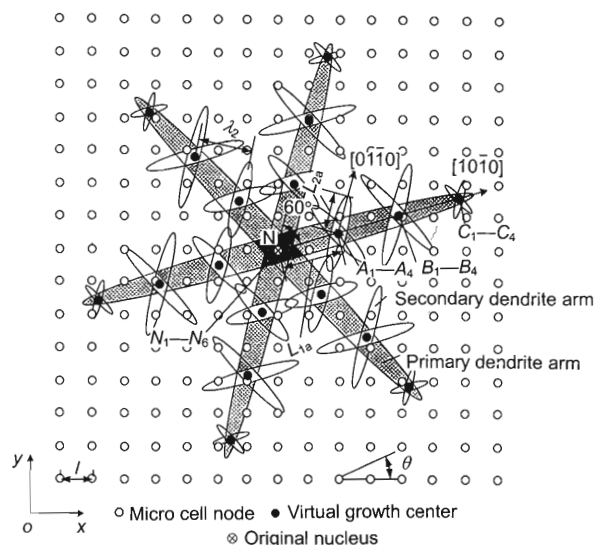


图 2 枝晶虚拟生长中心模型示意图  
Fig.2 Schematic of virtual growth center model of dendrites

同, 根据 KGT 动力学模型, 其生长速度会有差别. 因此, 一次枝晶臂的生长体现了受温度场影响的各向异性.

在几个时间步长的计算后, 设在  $t_n$  时刻, 以  $N_1$  为核心的一次枝晶臂的生长长度将达到二次枝晶间距  $\lambda_2$  ( $\lambda_2$  与冷速相关). 这时, 在此一次枝晶臂上将新产生 4 个虚拟生长中心 (图 2 中表示为  $A_1$ — $A_4$ , 它们各代表 4 个优先生长方向上二次枝晶的虚拟生长中心). 将与虚拟生长中心最近邻的微观单元设为生长中心单元, 相状态设置为  $P_A=1$ , 晶向夹角可由原始晶核晶向夹角  $\theta$  计算求得. 此时生长中心单元与虚拟生长中心并不重合. 以  $[01\bar{1}0]$  晶向的虚拟生长中心  $A_1$  为例, 晶向夹角为  $\theta + \pi/3$ , 取其最近邻微观单元为生长中心单元, 在  $t_2$  时刻二次枝晶臂生长长度  $L_{2a}^{t_2}$  为

$$L_{2a}^{t_2} = \int_{t_n}^{t_2} v_{2a} d\tau \quad (8)$$

式中,  $v_{2a}$  为沿着  $[01\bar{1}0]$  晶向的二次枝晶尖端生长速度, 是虚拟生长中心  $A_1$  在二次枝晶臂生长前沿的局部过冷度  $\Delta T_{2a}$  的函数. 即

$$v_{2a} = f[\Delta T_{2a}(\tau)] \quad (9)$$

经过  $\Delta t$  后, 过冷度  $\Delta T_{2a}(t_n + \Delta t)$  将根据新捕获的微观单元温度来计算. 因此, 二次枝晶臂的生长也体现了受温度场影响的各向异性.

遵循同样的捕获原则, 可计算其它方向一次枝晶臂和二次枝晶臂的生长过程, 最终形成整个初生相枝晶晶粒.

在计算新的二次枝晶生长中心单元的坐标时, 由于虚拟生长中心与生长中心单元一般情况下并不重合, 因此将产生一定程度的偏心. 但由于采用原始晶核单元坐标而不是最近邻的生长中心单元坐标作为参考坐标, 二次枝晶生长中心单元坐标仅在对应的虚拟生长中心最近邻摆动. 这种处理方法可有效抑制任意角度的晶粒生长中心对优先

方向的偏移现象.

### 2.2 坐标变换与生长捕获

在多晶粒的微观组织模拟中, 晶粒数量较多且晶向随机, 而以往的微观组织 CA 模型由于捕获规则和网格划分的限制, 往往只能针对  $0^\circ$ ,  $90^\circ$  和  $45^\circ$  几个特殊晶向角度进行模拟, 不适合任意晶向的多晶粒枝晶组织模拟. 结合本文提出的物理模型, 引入了坐标变换方法. 此方法便于在数值计算上确定枝晶晶粒在坐标系中的位置和晶向, 易于快速、准确计算不同取向的枝晶晶粒对周围液相单元的捕获<sup>[14]</sup>.

对于 hcp 晶系金属或合金, 若将晶体择优生长方向  $[10\bar{1}0]$  晶向与坐标轴  $x$  方向进行绑定处理, 则通过坐标变换方法即可确定每一个新生晶核的晶体取向<sup>[15,16]</sup>. 在给定直角坐标系  $o^0x^0y^0$  中, 任一坐标系  $o^1x^1y^1$  都可以通过对原坐标系施加一次平移变换 ( $o^0x^0y^0$  至  $o^1x^m y^m$ ) 和一次定轴旋转变换 ( $o^1x^m y^m$  至  $o^1x^1y^1$ ) 得到, 如图 3 所示.

由坐标系  $o^0x^0y^0$  到坐标系  $o^1x^1y^1$  的坐标变换公式可以表示为

$$\begin{bmatrix} x^1 \\ y^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\cos \theta & \sin \theta \end{bmatrix} \left( \begin{bmatrix} x^0 \\ y^0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} a^1 \\ b^1 \end{bmatrix} \right) \quad (10)$$

由于 hcp 晶粒具有六重对称性, 因此  $0 \leq \theta < \pi/3$ .

通过坐标变换的方法可以界定不同晶向的一次枝晶或二次枝晶在原坐标系中的生长捕获区域. 若此区域内尚有液相单元, 则发生捕获, 液相单元转变为固相单元; 若此区域内已无液相单元, 则标志以此单元为生长中心的枝晶臂生长结束 (即已经与周围晶粒发生碰撞并被固相单元包围). 在下一时间步长时, 则此中心单元将不再进入生长迭代计算. 随着凝固过程的进行, 生长结束的生长中心单元越来越多, 计算越来越快, 因此大大缩短了总模拟时间.

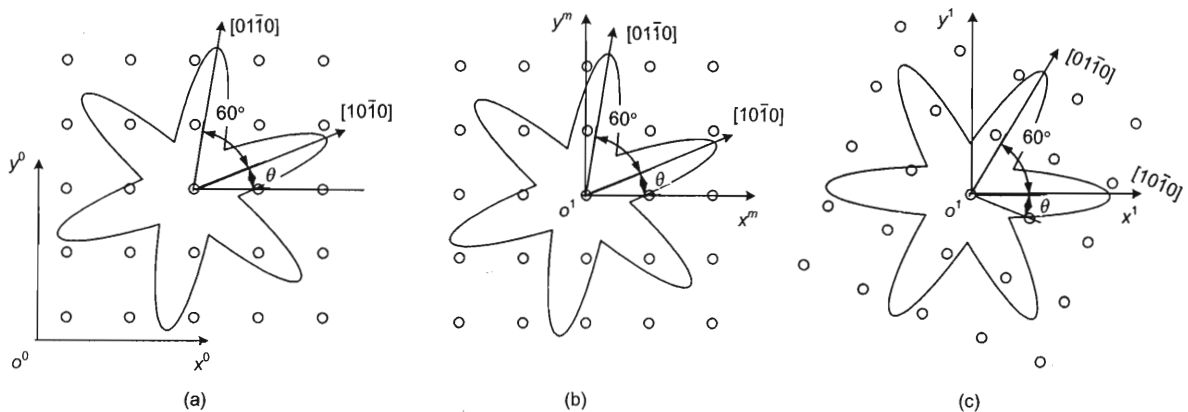


图 3 枝晶优先生长方向的坐标变换示意图

Fig.3 Coordinate transformation of preferential growth direction of dendrite

(a) original location and orientation (b) translation of coordinate (c) rotation of coordinate

### 2.3 溶质再分配

当液相单元发生形核或液 - 固转变时, 释放出的溶质数量为

$$\Delta C = (1 - k)C_L^* \quad (11)$$

设  $\Delta C_i$  为分配到第  $i$  个液相单元的溶质量, 需满足固 / 液界面的局部溶质守恒

$$\Delta C = \sum_{i=1}^n \Delta C_i \quad (12)$$

式中,  $n$  为相邻单元中液相单元数量.

由于浓度梯度的存在, 必然使得液 - 固转变时的界面溶质释放具有各向异性, 因此液相凝固释放出的溶质量  $\Delta C$  将根据与周围液相单元的溶质浓度差, 分配到与它相邻的液相单元中. 分配原则为

$$\Delta C_i = \phi_c^i (1 - k) C_L^* \quad (13)$$

式中,  $\phi_c^i$  为单元  $i$  的权重分配系数, 由下式计算:

$$\phi_c^i = \frac{C_L^*/C_i}{\sum_{j=1}^n (C_L^*/C_j)} \quad (14)$$

## 3 模型应用

为了对本文建立的虚拟生长中心计算模型进行算例分析和实验验证, 采用 hcp Mg-Al 系列镁合金作为模拟对象.

### 3.1 单个等轴晶生长模拟

图 4a 示出均匀微观温度场条件下, Mg-15%Al(质量分数) 合金单个枝晶生长的模拟结果. 微观计算域为  $0.2 \text{ mm} \times 0.2 \text{ mm}$  的正方形区域, 剖分为  $200 \times 200$  个单元, 冷速为  $20 \text{ K/s}$ , 晶向随机产生. 从图中可以看出, 由于镁合金晶体的优先生长方向为  $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ , 因此枝晶生长表现出明显的各向异性; 与立方晶系枝晶不同, 6 个一次枝晶臂之间互成  $60^\circ$  夹角, 在一次枝晶臂上除主干方向以外的另外 4 个优先生长方向上又会生成二次枝晶臂, 彼此也互成  $60^\circ$  角. 各枝晶臂生长速度又有不同: 在一次臂方向生长最快; 伸向枝晶外的二次臂方向次之; 伸向枝晶内的二次臂方向最慢, 以至受到内部枝晶臂的阻挡而较早停止生长. 上述现象是溶质场影响的结果: 在枝晶生长过程中, 已凝固的固相单元不断捕获周围的液相单元, 液相转变为固相的同时向邻近液相排出大量溶质, 而固 / 液界面处溶质的排出速率远大于溶质在液相中的扩散速率, 因此造成了固 / 液界面处的溶质富集. 根据枝晶生长动力学, 溶质浓度越高, 过冷度越小, 生长速度越小. 在枝晶内部或枝晶臂间的液相中, 由于枝晶臂的阻隔, 溶质无法及时扩散出去, 使得浓度越来越高, 因此伸向此处的枝晶臂生长减缓或停止. 在枝晶生长前沿, 溶质扩散通畅, 且溶质富集程度相对较小, 因此生长速度较快. 在晶体学择优方

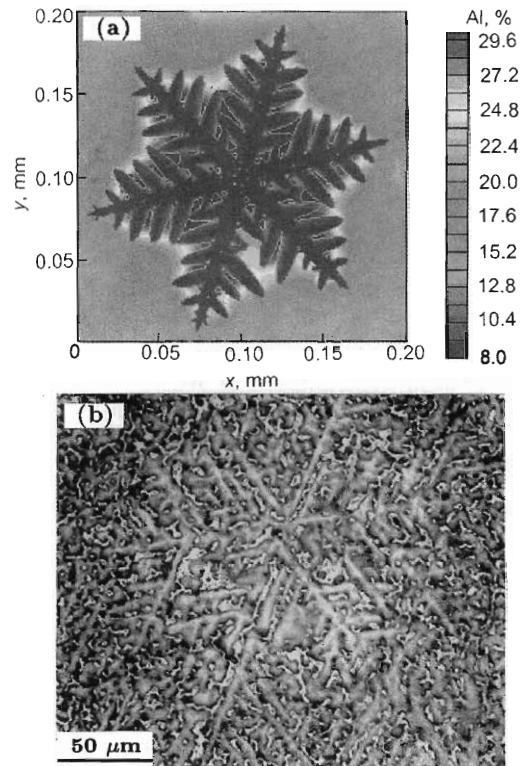


图 4 单个等轴枝晶生长的模拟结果与实际形貌对比

Fig.4 The comparison between simulated result of an equiaxed dendrite and actual morphology  
(a) simulated result  
(b) micrograph of Mg-15%Al casting<sup>[6]</sup>

向和溶质过冷的双重影响下, 形成了如图 4a 所示的复杂等轴晶形貌.

图 4b 是枝晶组织充分发展的 Mg-15%Al 合金金属型铸件的显微照片, 可以与图 4a 模拟结果进行定性比照. 从图中可以看出, 镁合金的枝晶组织呈现明显的六重对称性, 一次枝晶臂与二次枝晶臂之间的角度具有明显的  $60^\circ$  角关系. 可见模拟结果与实验结果中表现出来的枝晶组织特征非常相似.

### 3.2 定向凝固模拟

图 5 为 AZ31 合金定向凝固的模拟结果与文献报道的实验对比. 模拟的微观域为  $1.2 \text{ mm} \times 1.2 \text{ mm}$  的正方形区域, 剖分为  $300 \times 300$  个单元. 模拟中设置与实验相同的温度场条件, 在垂直方向温度梯度为  $10 \text{ K/mm}$ , 自上而下温度依次降低, 冷却速度为  $1.5 \text{ K/s}$ .

为了再现柱状枝晶生长的竞争生长特征, 在计算区域的长度方向每  $80 \mu\text{m}$  种下一个初始晶核, 共 15 个晶核种子并各自具有随机晶向 (与温度梯度方向的夹角). 图 5a 是模拟组织的溶质分布图, 晶向夹角不同的各晶核同时向上生长, 在主枝晶干方向又产生了二次枝晶臂. 与立方晶系枝晶最显著的不同是枝晶干与枝晶臂之间的夹角是  $60^\circ$  而非  $90^\circ$ . 由于优先生长方向的影响, 与垂直方向晶向夹角较小的枝晶臂生长较快, 随着液相的冷却而较早进入上

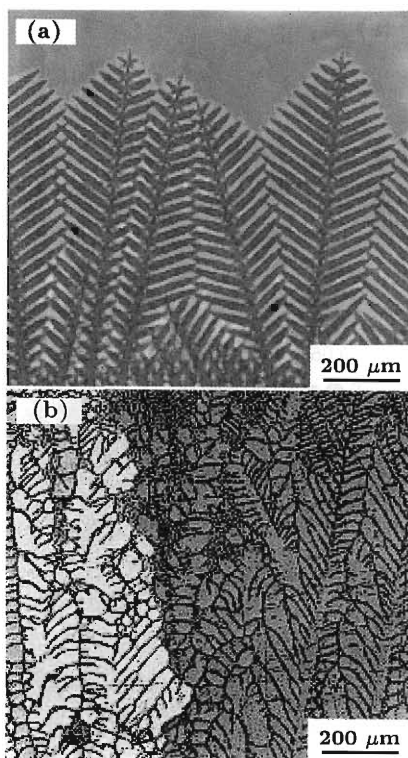


图 5 AZ31 合金定向凝固的模拟结果与实验 [4] 对比图

Fig.5 Comparison of simulated (a) and experimental [4] (b) microstructures of directional growth of AZ31 alloy

部熔体中, 从而抑制了其它枝晶臂的生长. 最后只有少数晶向与温度梯度夹角较小的枝晶臂发展充分, 保持了竞争优势, 形成了定向凝固组织的主体, 而其它晶向与温度梯度方向夹角较大的枝晶, 只能存在于底部区域, 无法进一步长大. 图 5b 是文献 [4] 报道的实验结果. 通过对比可以看出, 模拟结果与文献报道结果表现出的枝晶形貌近似.

### 3.3 等轴晶多晶粒生长模拟

等轴晶多晶粒生长模拟可以预测微观组织参数, 如晶粒度、枝晶间距、枝晶组织和析出相组织. 采用本文提出的虚拟生长中心模型对 Mg-9.21%Al 合金等轴枝晶进行多晶粒模拟, 计算区域设为  $0.5 \text{ mm} \times 0.5 \text{ mm}$ , 为表现出二次枝晶臂的细节, 每个方向划分成 500 个均匀正方形单元, 单元空间步长为  $1 \mu\text{m}$ .

图 6 是枝晶不同凝固进程的枝晶组织图 (用不同的灰度表示不同的晶粒取向). 整个计算域设为均匀温度场, 初始温度为液相线温度, 冷却速率设为  $40 \text{ K/s}$ . 从图中可以看出, 本模型可以模拟随机取向的多枝晶生长演化, 且能够表现二次枝晶臂生长的细节. 从图 6a 中可以看到, 在计算域内随机分布的等轴枝晶已经产生了二次枝晶臂, 形成六重对称性的雪花状枝晶形貌. 枝晶晶粒互相接触并竞争生长, 先形核的晶粒较大且抑制后形核晶粒的生长, 在两个或多个晶粒之间的晶粒生长受到空间限制和局部溶质富集的影响, 而使其一次枝晶臂或二次枝晶臂减慢生长

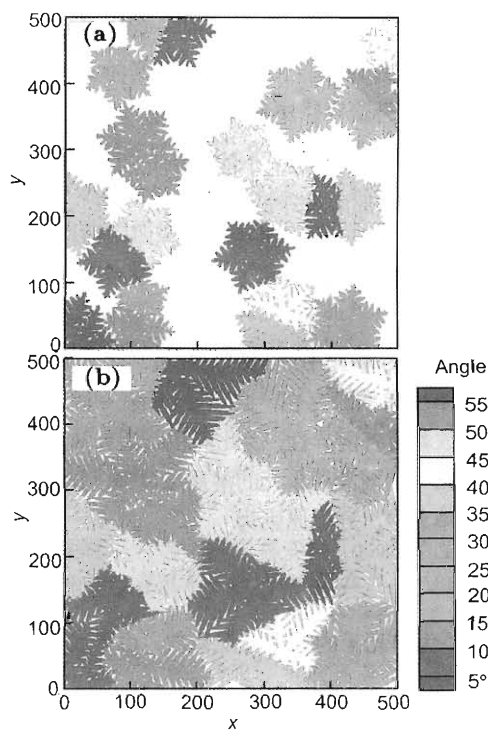


图 6 Mg-9.21Al 合金等轴多晶粒生长模拟的枝晶组织图

Fig.6 Simulated results of dendritic structure of equiaxed poly-grain Mg-9.21%Al alloy at different solidified stages

(a) 50% solidified (b) fully solidified

速度并提前结束生长. 但如果生长前沿不受阻碍, 枝晶臂仍会继续向过冷液相中伸展. 因此, 虽然最初的枝晶具有六重对称的规则形状, 但最终也会形成不规则的枝晶形貌, 如图 6b 所示.

目前关于 hcp 结构的枝晶生长形貌和规律, 在理论和实验研究方面可以借鉴的资料和经验较少, 因此本文所建立的生长模型与模拟结果仍需进一步修正、完善及实验验证.

## 4 结论

(1) 根据 hcp 的晶体学结构和优先生长方向, 建立了铸造镁合金晶体生长的物理模型, 提出一种新的随机性模拟方法——虚拟生长中心计算模型. 该模型能够对任意取向的镁合金枝晶的生长演化进行二维模拟.

(2) 模型考虑了枝晶生长动力学和二次枝晶臂粗化, 采用枝晶形状函数揭示了一次枝晶和二次枝晶的生长演化过程, 体现了 hcp 晶体生长的各向异性.

(3) 通过坐标变换技术解决了任意晶向的一次枝晶和二次枝晶的生长捕获问题.

(4) 耦合了微观溶质场计算, 能够再现固/液界面前沿的溶质富集和凝固组织的枝晶偏析情况.

## 参考文献

- [1] Wu S S, Li D N, Mao Y W. *Foundry*, 2002; 51: 583  
(吴树森, 李东南, 毛有武. 铸造, 2002; 51: 583)
- [2] Beltran-Sanchez L, Stefanescu D M. *Metall Mater Trans*, 2004; 35A: 2471
- [3] Zhu M F, Dai T, Li C Y, Hong C P. *Sci Chin*, 2005; 35E: 673  
(朱鸣芳, 戴挺, 李成允, 洪俊杓. 中国科学, 2005; 35E: 673)
- [4] Eiken J, Bottger B, Steinbach I. In: Gandin C A, Bellet M, eds., *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes-XI*, Warrendale: TMS, 2006: 489
- [5] Liu Z Y, Xu Q Y, Liu B C. *Mater Sci Forum*, in press
- [6] Dahle A K, Lee Y C, Nave M D, Schaffer P L, StJohn D H. *J Light Met*, 2001; 1: 61
- [7] Steinbach I, Beckermann C, Kauerauf B, Li Q, Guo J. *Acta Mater*, 1999; 47: 971
- [8] Li Q, Beckermann C. *Phys Rev*, 1998; 57E: 3176
- [9] Xu Q Y, Feng W M, Liu B C. *J Mater Sci Technol*, 2003; 19: 391
- [10] Kattamis T Z, Coughlin J C, Flemings M C. *Trans Met Soc AIME*, 1967; 239: 1504
- [11] Chang G W, Wāng J Z. *Crystal Growth and Control in the Solidification of Metal*. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2002: 109  
(常国威, 王建中. 金属凝固过程中的晶体生长与控制. 北京: 冶金工业出版社, 2002: 109)
- [12] Thévoz P, Desbiolles J L, Rappaz M. *Metall Trans*, 1989; 20A: 311
- [13] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R. *Acta Metall*, 1986; 34: 823
- [14] Xu Q Y, Feng W M, Liu B C. *Acta Metall Sin*, 2002; 38: 799  
(许庆彦, 冯伟明, 柳百成. 金属学报, 2002; 38: 799)
- [15] Goldstein H. *Classical Mechanics*. Reading Mass, USA: Addison-Wesley Pub. Co. Inc., 1959: 107
- [16] Zare R N. *Angular Momentum*. New York: John Wiley & Sons, 1988: 100