

文章编号: 1000-6893(2006)05-0973-06

半固态金属材料 EMS 法制备过程中的 微观组织相场法模拟

余小鲁, 李付国, 任远春, 李淼泉
(西北工业大学 材料学院, 陕西 西安 710072)

Phase-field Simulation of Microstructural Evolution During Preparation of Semisolid Metal Adopting EMS Method

YU Xiao-lu, LI Fu-guo, REN Yuan-chun, LI Miao-quan

(College of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

摘要: 利用相场法模拟了电磁搅拌法(EMS法)制备半固态金属材料(AZ4Cu2Mg合金)过程中微观组织的演变,分析和讨论了宏微观因素,如扰动强度、各向异性强度、固液相中扩散系数比等对微观组织演变的影响。结果表明:界面层厚度的减小,使得固相颗粒的外形轮廓更接近于圆形;固相中扩散系数增加,可以减少微观偏析的程度;扰动强度越大,初生相的微粒越细,其形态越趋向于球形。

关键词: 半固态金属; 微观组织; 相场法; 模拟; 电磁搅拌法

中图分类号: TG249.2; TG146.2; V252 **文献标识码:** A

Abstract: In the process of preparation of semisolid metal materials, a variety of factors would influence the prepared time, the morphology of non-dendritic microstructure. The aim of this work is using phase-field method to simulate non-dendritic growth during preparation of AZ4Cu2Mg semisolid alloy adopting electromagnetic stirring method (EMS method). Several affecting factors such as the disturbance intensity, the anisotropy, the thickness of the interface and the ratio of diffusivity in solid and liquid, etc are considered. It is shown that decreasing the thickness of the interface results in more circular outline perimeter of particles, and increasing the diffusivity in solid can reduce degree of microsegregation. The disturbance intensity in the model can be connected with current intensity of stator or magnetic induction density impressed. Simulation results show that the larger the disturbance intensity or magnetic induction density, the smaller the size and the more globular morphology of original phase in the matrix.

Key words: semisolid metal; microstructure; phase-field method; simulation; electromagnetic stirring method

近年来半固态金属成形技术已成为金属加工技术的热点之一,并得到越来越广泛的应用。与普通金属相比,半固态金属坯料由非枝晶形态的晶粒组成。因此,要实现半固态金属成形,首先必须制备出初生相为非枝晶的半固态金属材料。

半固态材料制备过程中,各种因素会影响到半固态材料的制备时间、组织形态,并最终影响到半固态材料的性能。针对以上影响因素的研究,对半固态材料的制备具有非常重要的科学意义和工程应用前景。

本文在采用电磁搅拌法(EMS法)制备半固态AZ4Cu2Mg合金的基础上,采用近年来在模拟凝固组织、界面形貌^[1]领域广泛选用的相场法来对上半固态材料制备过程中的微观组织演变过

程进行模拟与分析。同时对影响半固态材料制备的宏微观因素,如扰动强度、各向异性强度、固液相中扩散系数比等进行了对比分析,并对其中的一些影响因素结合工程实际进行了讨论。

1 相场法模拟微观组织演化的原理

相场法是以金兹堡-朗道方程(Ginzburg-Landau equation)为基础,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。相场法与处理固-液相变的其他方法相比,其主要区别在于引入了一个新的变量 $\phi(r, t)$,即相场变量。它表示材料在 t 时刻、 r 位置处的有序化数。当 $\phi(r, t)$ 等于0或-1时,表示液相;当 $\phi(r, t)$ 等于1时,表示固相。这样,固液界面就变成了一个具有一定厚度的薄层。在界面上, ϕ 以一定梯度从0到1(或从-1到1)变化。

用相场法模拟凝固微观组织演化的数学模型称之为相场模型。实质上,它是 <与各种外部变量按照能量守恒原理建立起来的一组偏微分方程组。如何抽象物理问题而建立相场模型,是相场法模拟微观组织的关键。相场模型可以通过自由能函数和熵函数建立。无论采用那种方法,都必须满足:(1)能量和熵平衡方程;(2)热动力学驱动力与各种外部场(如温度场、浓度场等)的场通量之间呈线性关系;(3)局部熵变非负。

对于一个包含温度场、浓度场和相场的体系,基于自由能函数的相场模型可一般性表示为^[2]

$$\left. \begin{aligned} F &= \int \left[f(\phi, H, c) + \frac{E^2}{2} |\phi|^2 \right] dV \\ \dot{\phi} &= -M_{\phi} \frac{DF}{D\phi} \\ \dot{H} &= M_L \frac{DH}{DH} \\ \dot{c} &= M_c \frac{DC}{DC} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

基于熵函数的相场模型可一般性表示为^[2]

$$\left. \begin{aligned} S &= \int \left[s(\phi, e, c) - \frac{E^2}{2} |\phi|^2 \right] dV \\ \dot{\phi} &= M_e \frac{DS}{D\phi} \\ \dot{e} &= M_{eL} \frac{DE}{DE} \\ \dot{c} &= M_c \frac{DC}{DC} \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

式中: <为相场变量; F 为体系自由能(金兹堡2朗道型); f 为双稳态势函数; H 为体系的焓; c 为浓度; E 为与熵密度相关的梯度系数; S 为体系的熵(金兹堡2朗道型); s 为熵密度; e 为界面能密度; M_ϕ, M_c, M_L, M_e, M_{cL}, M_c 为热动力学参数。

2 半固态晶粒生长的相场法理论模型

2.1 单个晶粒的生长模型

相场模型采用基于熵函数的形式,体系熵的定义式为

$$S = \int \left[s(\phi, e, c) - \frac{E^2}{2} |\phi|^2 \right] dx^3 \quad (3)$$

式中: s 为热力学熵密度; <为相场变量,取值在 0 到 1 之间,固相为 1,液相为 0; e 为界面能密度; c 为溶质 B 在溶液 A 中的浓度; E 为与熵密度相关的梯度系数。为了达到对所研究体系的简化与近似,对于 e, c 梯度校正的可能性给以忽略,并且忽

略体积的变化。

相场变量、浓度和能量的变化形式为

$$\dot{\phi} = M_{\phi} \frac{DS}{D\phi} \quad (4)$$

$$\dot{c} = M_c \frac{DC}{DC} \quad (5)$$

$$\dot{E} = M_e \frac{DE}{DE} \quad (6)$$

为了保证正熵的产生,假设 M_ϕ, M_c, M_e > 0,同时,考虑到能量效应对能量等式(6)以及温度效应对浓度等式(5)的影响都较小,即做出以下假设^[3]

$$\dot{E} U = M_c \frac{DC}{DC} \Big|_{T, y \text{ fixed}} \quad (7)$$

$$\dot{c} U = M_e \frac{DE}{DE} \Big|_{c, y \text{ fixed}} \quad (8)$$

式(4)、式(7)和式(8)及相关假设就构成了半固态晶粒生长的相场法理论模型的基础。

如果考虑各向异性,可将 E 表示为与取向有关的函数,即^[3]

$$E(H) = E_0 [1 + C \cos(kH)] \quad (9)$$

式中: H 为法向与生长主轴的夹角, tan H = < / <_0; E 为不考虑各向异性的 E 的取值,即 E 的平均值; C 为各向异性的强度; k 为常数(一般取为 4 或 6)。

根据式(3),可得

$$\frac{9S}{9c} = \frac{9s}{9c} + E^2 \left[G^2 \right] - E^2 \frac{9}{9x} \left[\frac{9c}{9y} \right] + E^2 \frac{9}{9y} \left[\frac{9c}{9x} \right] \quad (10)$$

从基本的热动力学出发,可以得到

$$\frac{9S}{9c} = \frac{9s}{9c} = \frac{L_A - L_B}{T} \quad (11)$$

通过进一步的热动力学推导,即确立相场、浓度和温度的关系,并对模型进行理想化,假设其为等温模型,可得到单个晶粒生长的相场方程和浓度场方程

$$\begin{aligned} \dot{\phi} M_{\phi} &= [E^2 G^2 \phi^2 - (1 - c) H_A - c H_B] + \\ &E^2 \left[\sin(2H) (\phi_{xy} - \phi_{xx}) + 2\cos(2H) \phi_{xy} - \right. \\ &\left. \frac{1}{2} E^2 [G^2 + C] [2\sin(2H) \phi_{xy} - \phi^2 - \right. \\ &\left. \cos(2H) (\phi_{xy} - \phi_{xx}) \right] \end{aligned} \quad (12)$$

$$\dot{c} = M_c D_c \left[\phi c + \frac{V_m}{R} c(1 - c)(H_B - H_A) \phi \right] \quad (13)$$

更详细的表达式为

$$\begin{aligned} \dot{\phi} M_{\phi} &= E^2 \{ (8C^2 S_1^2 - 7C^2 C_1^2 - 6CC_1 + 1) \phi^2 + \\ &[(8C^2 (S_1^2 - C_1^2) - 8CC_1) C_2 - 4CS_2(1 + \\ &CC_1) S_4] (\phi_{xy} - \phi_{xx}) - 8Q(1 + \end{aligned}$$

$$C_4) S_4 C_2 + (C S_4^2 - C_4^2) - C_4) S_2]_{<xy} \} - [(1 - c)H_A + cH_B] [16Kg(\rightarrow) - 1] \quad (14)$$

$$\hat{c} = 30k_6(\rightarrow - 1)^2 \{ [c_x \rightarrow_x + c_y \rightarrow_y] + k_1 c \# (1 - c)(H_B - H_A)(\rightarrow_x^2 + \rightarrow_y^2) \} + D_c [S^2 c + k_1(1 - 2c)(c_x \rightarrow_x + c_y \rightarrow_y)(H_B - H_A) + k_1 c(1 - c) S^2 (H_B - H_A) + k_1 c(1 - c) S \rightarrow (H_B - H_A)] \quad (15)$$

其中:

$$E^2 = \frac{6\sqrt{2}R_D}{T_{mA}[1 + C\cos(4H)]^2} = \frac{6\sqrt{2}R_{DB}}{T_{mB}[1 + C\cos(4H)]^2} \quad (16)$$

$$M_c = (1 - c)M_A + cM_B, M_{A,B} = \frac{(T_{A,B})^2 B_{A,B}}{6\sqrt{2}L_{A,B}D_{A,B}} \quad (17)$$

$$\left. \begin{aligned} S_4 &= \sin(4H), C_4 = \cos(4H) \\ S_2 &= \sin(2H), C_2 = \cos(2H) \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

$$\left. \begin{aligned} H_{A,B} &= W_{A,B}g_c + 30g_{L_{A,B}} \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{mA,B}} \right] \\ g(\rightarrow) &= \rightarrow^2(1 - \rightarrow)^2, g_c(\rightarrow) = 4\rightarrow^3 - 6\rightarrow^2 + 2\rightarrow \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

$$\left. \begin{aligned} D_c &= D_s + (D_L - D_s)p(\rightarrow) \\ p(\rightarrow) &= \rightarrow^3(10 - 15\rightarrow + 6\rightarrow^2) \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

$$\left. \begin{aligned} k_1 &= \frac{V_m}{R}, k_6 = D_L - D_s \\ k_2 &= W_B = \frac{3R_A}{\sqrt{2}T_{mA}D_A}, k_3 = W_A = \frac{3R_B}{\sqrt{2}T_{mB}D_B} \\ k_4 &= 30L_B \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{mB}} \right], k_5 = 30L_A \left[\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{mA}} \right] \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

式中: E 为考虑各向异性的能量梯度系数; $R_{A,B}$ 为组元 A, B 的表面能; $D_{A,B}$ 为界面厚度; $T_{mA,B}$ 为组元 A, B 的熔点; T 为等温场的温度; C 为各向异性强度; M_c 为相场迁移率; c 为浓度; $B_{A,B}$ 为线性动力学系数; H 为界面方向 (S_c 与生长主轴之间的夹角); $\rightarrow_{x,y}$ 为相场变量关于 x, y 坐标的一阶偏导; $L_{A,B}$ 为组元 A, B 的熔化潜热; $D_{L,s}$ 为液相和固相中的扩散系数; V_m 为摩尔体积 (文中取组元 A 和 B 的均值); R 为气体常数; A 为扰动强度; K 为随机数。

2.2 多晶粒的相互作用模型

在多晶粒的模拟区域里, 对每个节点设定 Q 个相场变量, 由于体系自由能的最低化要求, 在每个晶粒内部, 只有一个相场变量取值为 1, 其余为

0, 这样就可以通过下标来表示晶粒的取向, 相邻的晶粒被不同的下标区分, 晶界就是两个相场变量连续从 0 到 1 或者是相反变化的区域。当计算区域中可能的晶向数少于总晶粒数时, 就有可能通过晶粒的合并而不是晶界的移动来进行晶粒的长大。

体系的区域自由能密度为^[4]

$$f_0[\rightarrow_q(r, t)] = - \frac{A}{2} \sum_{q=1}^Q \rightarrow_q^2(r, t) + \frac{B}{4} \left[\sum_{q=1}^Q \rightarrow_q^2(r, t) \right]^2 + \left[C - \frac{B}{2} \right] \sum_{q=1}^Q \sum_{s=1}^Q \rightarrow_q(r, t) \rightarrow_s(r, t) \quad (22)$$

式中: A, B, C 为常数 (为了简化计算, 取 $A = B > 0, C > B/2$)。

多晶粒组织的体系总自由能定义为^[4]

$$F(t) = \int f_0[\rightarrow_1(r, t), \rightarrow_2(r, t), \dots, \rightarrow_Q(r, t)] + \sum_{q=1}^Q \frac{k_q}{2} (S_{\rightarrow_q}(r, t))^2 dr \quad (23)$$

由上式可知, 总自由能与相场变量梯度的平方相联系, 因此所有晶界区域都起到增加体系自由能的作用, 因而就产生了晶界消失, 或者是平均晶粒长大的热力学驱动力。从体系自由能随时间的变化可导出相场变量对时间变化的 Ginzburg-Landau 等式, 即晶粒相互作用阶段的相场变量关于时间的一阶导数

$$\frac{\partial \rightarrow_q(r, t)}{\partial t} = - L_q \frac{DF(t)}{D\rightarrow_q(r, t)} = - L_q \left[- A\rightarrow_q(r, t) + B\rightarrow_q^3(r, t) + 2C\rightarrow_q(r, t) \sum_{s \neq q}^Q \rightarrow_s(r, t) - k_q S^2_{\rightarrow_q}(r, t) \right] \quad (24)$$

3 模拟过程

采用的材料为 Al24Cu2Mg 半固态合金, 计算中简化为 Al24Cu 二元合金。相关的热力学参数的取值参见文献[5], 具体见表 1。

由于需要引入扰动来研究界面处的波动 (这种波动引发了现实体系中观测到的组织), 因此可采用两种较简单的方式引入扰动: ① 在相场变量的变化中引入^[3]; ② 从浓度场变量中引入^[6]。以下分别给出引入扰动的关系式

$$\rightarrow_c / M_c - y \rightarrow_c / M_c - 16Kg(\rightarrow) [(1 - c)H_A + cH_B] \quad (25)$$

$$c_{LL} = c_{L_0} [1 + V_s \rightarrow_c^3 (6\rightarrow_c^2 - 15\rightarrow_c + 10)] \quad (26)$$

式中: c_{LL}, c_{L_0} 分别为 L 元素在引入扰动后和引入

前的溶质浓度; V_r 都是取值在 - 1 到 + 1 之间的随机数; A_i 为了扰动的强度。

表 1 热力学参数(A 表示 Al 元素, B 为 Cu 元素)

Table 1 Thermodynamic quantities(A represents pure Al, B represents pure Cu)

参数	数值
熔点 T_{mA}/K	933.5
熔点 T_{mB}/K	1083.0
表面能 $R_A/(J\#m^{-2})$	0.868
表面能 $R_B/(J\#m^{-2})$	1.104
熔化潜热 $I_A/(J\#m^{-3})$	1.072@10 ⁹
熔化潜热 $I_B/(J\#m^{-3})$	1.831@10 ⁹
固相中的扩散系数 $D_S/(m^2\#s^{-1})$	8.836@10 ⁻¹³
液相中的扩散系数 $D_L/(m^2\#s^{-1})$	8.836@10 ⁻⁹
摩尔体积 V_m/m^3	8.56@10 ⁻⁶
线性动力学系数 $B_A/(m\#k^{-1}\#s^{-1})$	2.5@10 ⁻³
线性动力学系数 $B_B/(m\#k^{-1}\#s^{-1})$	3.9@10 ⁻³

计算模型初始化的工作主要包括:

(1) 设定初始条件和边界条件:

$$\left. \begin{aligned} x^2 + y^2 \leq r^2, u = 0 \\ x^2 + y^2 > r^2, u = -1 \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

式中: x, y 分别为横纵坐标; r 为无量纲过冷度; u 为无量纲温度。在计算区域的边界上, $u = -1$ 采用 Neumann 边界条件。

(2) 根据晶粒的对称性, 取 1/4 的晶粒区域作为计算区域, 其原点(计算的初始点)作为形核点的引入点, 即在此点相邻的区域内, 给定该区域节点的相场变量初始值为 1, 作为晶核, 其余节点为 0, 状态相当于过冷的液相。

(3) 给定浓度场的初始值为 0.1017(液相物质的量浓度)。

(4) 采用恒温场, 模型的温度场根据电磁搅拌法中的液相温度 915.15 K 确定。

采用有限差分法(FDM)求解微分方程。计算区域网格划分为正方形 250@250 个网格, 由于边界条件的引入, 最终网格数定为 252@252, 而对于后半段引入多个晶粒间相互作用时, 网格数为 1005@1005。为了获得可靠稳定的计算结果, 空间步长和时间步长的取值要满足^[3]

$$\Delta x < D \Delta t < \frac{\Delta x^2}{4D_L} \quad (28)$$

4 单个晶粒的计算结果与分析

选取各向异性强度、界面厚度、扩散系数和扰动强度作为晶粒生长的影响因素, 分别分析其数值的变化对半固态晶粒生长的影响效果。

4.1 各向异性强度的引入

计算中给定界面厚度 D 为 121.77 nm(可通过求解纯金属 A 或 B 平面界面上液固共存时的一维等温相场方程而得, 本文假定 $D_A = D_B$), 扰动强度 A 为 0.4。模拟结果见图 1(灰色部分代表固相)。

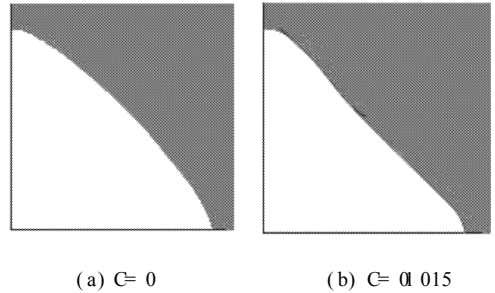


图 1 引入各向异性前后晶粒示意图

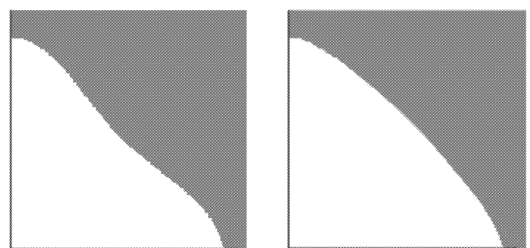
Fig 1 Morphologies of solid phases for the conditions of $C=0$ and $C=0.015$

从图 1(a) 和图 1(b) 的对比可以看出: 引入各向异性后, 晶粒在不同方向的生长带有较明显的差异; 而引入以前, 则可近似认为以形核点为圆心的圆形轮廓区域。而且通过计算两者的固相分数也可以发现有所区别, 可见所用的相场模型对各向异性的依赖性很大。

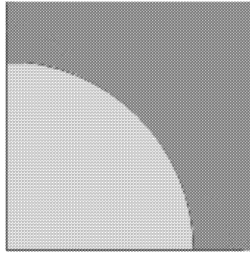
4.2 界面厚度的影响

为了分析界面层厚度对晶粒生长的影响规律, 将界面层厚度 121.77 nm 分别增大 4 倍和减小 1/2, 依此分析 3 种界面厚度下晶粒的生长情况, 即计算中分别取 $D_{A,B}$ 为 631.85 nm, 121.77 nm 和 61.385 nm, 扰动强度 A 为 0.4。模拟结果见图 2。

从计算角度看, 对于界面层厚度, 应在满足 $\Delta x < D$ 的前提下, 取得尽量小的 D 值, 这样有利于提高计算精度。由图 2(a) 和 (b) 可知, (b) 中固相颗粒的外形轮廓要比 (a) 中的更接近于圆形。随着界面厚度的进一步减小, 固相颗粒的形状近于球形, 如 (c) 所示。



(a) $D_{A,B} = 631.85 \text{ nm}$ (b) $D_{A,B} = 121.77 \text{ nm}$



(c) $D_{B} = 6385 \text{ nm}$

图 2 不同界面厚度下晶粒生长情况($t = 300\Delta t, \Delta t = 31.5 \text{ Ls}$)

Fig 2 Morphologies of solid phases with $D_B = 6385 \text{ nm}$, $D_B = 12177 \text{ nm}$ and $D_B = 6385 \text{ nm}$

4.3 扩散系数的影响

计算中取界面厚度 D_B 为 12177 nm , 固液相中扩散系数比分别为 10^{-4} 和 10^{-1} , 即

$$\frac{D_S}{D_L} = \frac{81836 @ 10^{-13}}{81836 @ 10^{-9}} = 10^{-4}$$

$$\frac{D_S}{D_L} = \frac{81836 @ 10^{-10}}{81836 @ 10^{-9}} = 10^{-1}$$

扰动强度 A 为 0.15 。前 24 个节点的溶质浓度值见表 2 ($t = 300\Delta t, \Delta t = 31.5 \text{ Ls}$)。

表 2 不同固液相中扩散系数比条件下前 24 个节点的溶质浓度值 ($@10^{22}$)

Table 2 The solute concentrations of the former 24 nodes with different ratios of diffusivity in solid and liquid ($@10^{-2}$)

$D_S/D_L = 10^{-4}$		$D_S/D_L = 10^{-1}$	
11 472 407	11 472 302	11 674 824	11 038 014
11 472 407	11 472 731	11 674 824	11 699 116
11 473 299	11 474 144	11 699 520	11 699 604
11 475 298	11 476 784	11 699 601	11 699 581
11 478 603	11 480 732	11 699 661	11 699 622
11 483 123	11 485 709	11 699 665	11 699 654
11 488 409	11 491 142	11 699 669	11 699 668
11 493 837	11 496 430	11 699 677	11 699 670
11 498 862	11 501 115	11 699 690	11 699 665
11 503 352	11 505 644	11 699 702	11 699 660
11 507 620	11 513 025	11 699 710	11 699 655
	11 513 798		11 699 712
	11 462 104		11 699 714

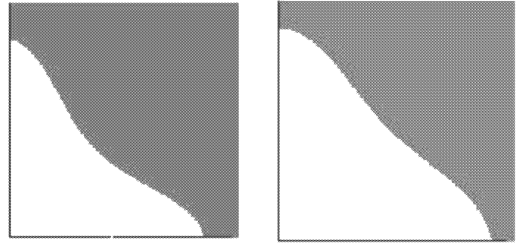
由表 2 可知, 固液相中扩散系数比为 10^{-1} 时, 前 24 个节点溶质浓度值的偏差程度要比固液相中扩散系数比为 10^{-4} 时要小。可见, 固液相中扩散系数比增加, 即固相中扩散系数增加, 可以减少微观偏析的程度。

4.4 扰动强度的工程背景及其影响

计算中取界面厚度 D_B 为 12177 nm , D_S 为

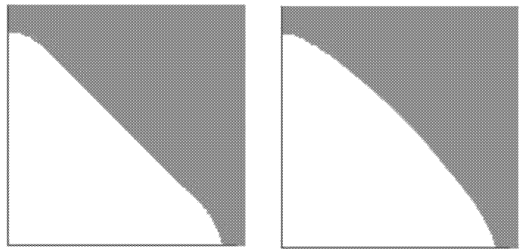
$81836 @ 10^{-13} \text{ m}^2/\text{s}$, D_L 为 $81836 @ 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ 。

图 3 给出了不同扰动强度下的晶粒生长情况, 可以看出随着扰动的增加, 晶粒逐渐趋向球形。



(a) $A = 0.02$

(b) $A = 0.1$



(c) $A = 0.3$

(d) $A = 0.4$

图 3 不同扰动强度下的晶粒生长情况 ($t = 500\Delta t, \Delta t = 31.5 \text{ Ls}$)

Fig 3 Morphologies of solid phases with different A

本文的扰动强度是基于以电磁搅拌法制备半固态材料的工程背景而引入的。电磁搅拌法制备半固态材料的过程中, 在电磁搅拌的作用下, 熔体流动导致枝晶臂的熔化, 随后在稍微过冷的液体中, 即可形成一个新的晶体。此外, 熔体流动导致了枝晶臂的机械断裂, 断裂的枝晶臂也可以形成一个新的晶体, 这也会造成晶粒的倍增。晶粒倍增的程度与电磁搅拌强度密切相关, 总的说来, 搅拌强度越大, 晶粒倍增现象就越明显, 晶粒也就越细小。但如果电磁搅拌强度大到某种程度后, 细化晶粒的作用就不显著了。此外, 在半固态合金的凝固搅拌过程中, 加大电磁搅拌强度, 通过抑制晶粒的合并生长, 也可使晶粒细化, 从而能避免初生相微粒的簇集, 使其更均匀地分散在基体中。

因此, 从工程角度出发, 计算模型中的扰动强度可与定子电流强度或外加磁感应强度联系起来。扰动强度越大, 即磁感应强度越大, 初生相的微粒越细, 其形态就越趋向于球形, 在基体上的分布也就越均匀。

实际计算中发现, 当扰动达到 0.45 以上时, 晶粒的生长开始满足需要 (本文中单个晶粒生长阶段以晶粒的尖端达到计算区域作为依据)。

5 多晶粒相互作用的计算结果

模型对不同的晶粒赋予不同的相场变量下标,即通过下标编号来表示其晶向。本文从简化计算角度出发,给定5个晶粒,将这5个晶粒的相场变量值作为多晶粒相互作用阶段的初始值。对计算区域内每个节点设定5个相场变量,在第 q 晶粒区,将第 q 个晶粒的节点值赋给相应的第 q 个相场变量,在其余区域,即 $q \neq s$ 时(q 表示相场变量的编号, s 表示区域编号),节点初始值为0。

图4显示的是按不同的计算时间给出一组计算结果($\Delta t = 0.1 \text{ s}$,为多晶粒部分的时间步长)。黑色部分代表固相。

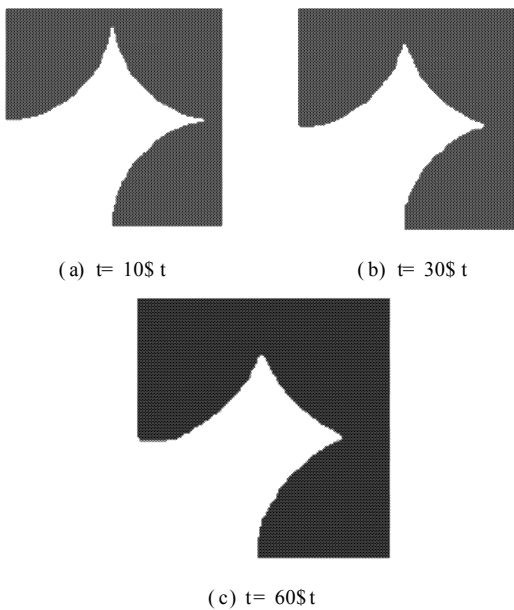


图4 不同时刻的晶粒形态

Fig 4 Morphologies of solid phases at different time

结合半固态材料的需要,将固相体积分数控制在60%左右,由此可得如图5所示的结果。

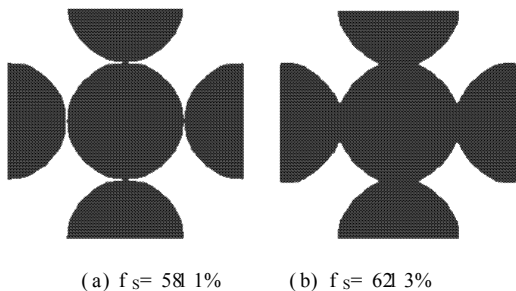


图5 多晶粒生长的模拟结果

Fig 5 Growth of polycrystal with different volume fraction of solid phase

由图5可知,当固相分数大于60%时,固相晶粒部分开始相互接触,形成固态骨架。这将直接导致有别于低固相分数半固态材料的流变学行为。

6 结论

(1) 在模拟半固态材料制备中微观组织演变的相场模型中,主要影响因素有扰动强度、各向异性强度、固液相中扩散系数比和界面厚度等。

(2) 引入各向异性强度后,晶粒在不同方向的生长带有较明显的差异。

(3) 界面层厚度的减小,使得固相颗粒的外形轮廓更接近于圆形,进一步减小,可获得球形轮廓。

(4) 固液相中扩散系数比增加,即固相中扩散系数增加,可以减少微观偏析的程度。

(5) 从工程角度出发,计算模型中的扰动强度可与定子电流强度或外加磁感应强度联系起来。扰动强度越大,即磁感应强度越大,初生相的微粒越细,其形态越趋向于球形。通过计算,本文条件下的扰动强度(数字噪声)最大值应为0.45。

参考文献

- [1] 彭德林, 安阁英. 定向凝固时热溶质对流对 Al/AlLi 共晶生长形态稳定性的影响[J]. 航空学报, 2001, 22(4): 382-384.
Peng D L, An G Y. Effect of thermosolutal convection on morphological stability of Al/AlLi eutectic during directional solidification[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2001, 22(4): 382-384. (in Chinese)
- [2] 张光跃, 荆涛, 柳柳成. 相场方法原理及在微观组织模拟中的应用[J]. 机械工程学报, 2003, 39(5): 629.
Zhang G Y, Jing T, Liu B C. Principle of phase field method and overview on application for simulation of microstructure[J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2003, 39(5): 629. (in Chinese)
- [3] Warren J A, Boettinger W J. Prediction of dendritic growth and microsegregation patterns in a binary alloy using the phase-field method[J]. Acta Mater, 1995, 43(2): 689-703.
- [4] Krill ó C E, Chen L Q. Computer simulation of 3D grain growth using a phase-field model [J]. Acta Materialia, 2002, 50(12): 3057-3073.
- [5] 5 化工百科全书编委会. 化工百科全书[M]. 北京: 化学工业出版社, 2001.
Editorial Committee of Chemical Encyclopedia. Chemical encyclopedia[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2001. (in Chinese)
- [6] Qin R S, Wallach E R. Phase-field simulation of semisolid metal processing under conditions of laminar and turbulent flow[J]. Materials Science and Engineering A, 2003, 357(122): 4254.

作者简介:



余小鲁(1978-) 男,浙江江山人,西北工业大学在读博士研究生。主要研究方向:材料加工及其计算机模拟。E-mail: yxl_7884@sina.com, 联系电话: (029) 88474112 806。

(责任编辑:蔡斐)