

但是,实际晶粒的取向关系是三维的^[41],除了汇聚关系和发散关系以外,还存在着第三种基本取向关系:异面关系,这要比二维情况的汇聚关系和发散关系复杂很多。现阶段的研究工作只是初步研究了三维取向关系的几何特征和表征方式,以及在三维取向关系下晶粒的竞争生长行为。而对于三维取向关系中晶粒的生长行为和取向特征之间的关联性,以及取向特征、枝晶生长规律、竞争生长的主导因素、控制方式和作用范围等机理方面的问题,仍缺少进一步的深入研究。因此,竞争生长领域未来的另一个研究重点是三维取向关系下晶粒的竞争生长机制,以及竞争生长过程中的主导因素、控制方式和作用范围。

4.3 不同尺度下晶粒竞争生长机制与关联性

现有的关于晶粒竞争生长的研究更多地关注宏观尺度条件下的温度场、溶质场和流场等对晶粒竞争生长行为的影响,或者通过相场模拟等手段研究介观尺度下不同取向枝晶的竞争生长行为。现有的温度场模型和溶质场模型都没有尝试从微观尺度上描述晶粒竞争生长过程,及该过程与显微组织(γ 相、 γ' 相形貌,尺寸,数量,晶体取向,位错组态等)的演化规律之间的联系,未能澄清晶粒竞争生长行为与显微组织特征之间的响应关系,更无法将宏观-介观-微观等多尺度条件下晶粒的竞争生长行为进行归纳总结,明确多尺度条件-竞争生长行为和生长机制-主导因素、控制方式和作用范围之间的响应关系,并在此基础上构建多尺度条件下的竞争生长模型。因此,现有研究在多尺度条件下晶粒的竞争生长机制,特别是微观尺度下晶粒的竞争生长机制,及其与显微组织(γ 相、 γ' 相形貌,尺寸,数量,晶体取向,位错组态等)关联性方面仍处于空白,也是未来竞争生长领域研究的另一个重点。

参 考 文 献

- [1] 陈荣章. 单晶高温合金发展现状[J]. 材料工程, 1995(8): 3-12.
- [2] 胡壮麒, 刘丽荣, 金涛, 等. 镍基单晶高温合金的发展[J]. 航空发动机, 2005(3): 1-7.
- [3] CHEN Q Z, JONES N, KNOWLES D M. The microstructures of base/modified RR2072 SX superalloys and their effects on creep properties at elevated temperatures[J]. Acta Mater., 2002, 50(5): 1 095-1 112.
- [4] SOUZA N D, ARDAKANI M G, MCLEAN M, et al. Directional and single-crystal solidification of Ni-base superalloys: Part I. The role of curved isotherms on grain selection[J]. Metall. Mater. Trans., 2000, A31: 2 877-2 886.
- [5] ARDAKANI M G, SOUZA N D, SHOLLOCK B A, et al. Directional and single-crystal solidification of Ni-base superalloys: Part II. Coincidence site lattice character of grain boundaries[J]. Metall. Mater. Trans., 2000, A31: 2 887-2 893.
- [6] CARTER P, COX D C, GANDIN C A, et al. Process modelling of grain selection during the solidification of single crystal superalloy castings[J]. Mater. Sci. Eng., 2000, A280: 233-246.
- [7] EPISHIN A I, NOLZE G. Investigation of the competitive grain growth during solidification of single crystals of nickel-based superalloys[J]. Crystallogr. Rep., 2006, 51: 710-714.
- [8] DAI H J, GEBELIN J C, NEWELL M, et al. Grain selection during solidification in spiral grain selector[A]. Superalloys[C], PA: US, 2008.
- [9] MENG X B, LI J G, JIN T, et al. Evolution of grain selection in spiral selector during directional solidification of nickel-base superalloys[J]. J. Mater. Sci. Technol., 2011, 27(2): 118-126.
- [10] MENG X B, LU Q, LI J G, et al. Modes of grain selection in spiral selector during directional solidification of nickel-base superalloys[J]. J. Mater. Sci. Technol., 2012, 28(3): 214-220.
- [11] GAO S F, LIU L, WANG N, et al. Grain selection during casting Ni-base, single-crystal superalloys with spiral grain selector[J]. Metall. Mater. Trans., 2012, A43(10): 3 767-3 775.
- [12] DAI H J, SOUZA N D, DONG H B. Grain selection in spiral selectors during investment casting of single-crystal turbine blades: Part I. Experimental investigation[J]. Metall. Mater. Trans., 2011, A42(11): 3 430-3 438.
- [13] DAI H J, DONG H B, SOUZA N D, et al. Grain selection in spiral selectors during investment casting of single-crystal components: Part II. Numerical modeling[J]. Metall. Mater. Trans., 2011, A42(11): 3 439-3 446.
- [14] ESAKA H, SHINOZUKA K, TAMURA M. Analysis of single crystal casting process taking into account the shape of pigtail[J]. Mater. Sci. Eng., 2005, A413-414: 151-155.
- [15] STANFORD N, DJAKOVIC A, SHOLLOCK B, et al. Seeding of single crystal superalloys-role of seed melt-back on casting defects[J]. Scripta Mater., 2004, 50: 159-163.
- [16] SOUZA N D, JENNINGS P A, YANG X L, et al. Seeding of single-crystal superalloys-role of constitutional undercooling and primary dendrite orientation on stray-grain nucleation and growth[J]. Metall. Mater. Trans., 2005, B36: 657-666.
- [17] YANG X L, NESS D, LEE P D, et al. Simulation of stray grain formation during single crystal seed melt-back and initial withdrawal in the Ni-base superalloy CMSX-4[J]. Mater. Sci. Eng., 2005, A413-414: 571-577.
- [18] YANG X L, LEE P D, SOUZA N D. Stray grain formation in the seed region of single-crystal turbine blades[J]. JOM, 2005, 57(5): 40-44.
- [19] NAPOLITANO R E, SCHAEFER R J. The convergence-fault mechanism for low-angle boundary formation in single-crystal castings[J]. J. Mater. Sci., 2000, 35: 1 641-1 659.
- [20] NEWELL M, DEVENDRA K, JENNINGS P A, et al. Role of dendrite branching and growth kinetics in the formation of low angle boundaries in Ni-base superalloys[J]. Mater. Sci. Eng., 2005, A412: 307-315.
- [21] SOUZA N D, NEWELL M, DEVENDRA K, et al. Formation of low angle boundaries in Ni-based superalloys[J]. Mater. Sci. Eng., 2005, A413-414: 567-570.
- [22] POLLOCK T M, MURPHY W H, GOLDMAN E H, et al. Grain defect formation during directional solidification of nickel

- base single crystals[A]. Superalloys[C], PA: US, 1992.
- [23] VEHN M M, DEDECKE D, PAUL U, et al. Undercooling related casting defects in single crystal turbine blades[A]. Superalloys[C], Warrendale: US, 1996.
- [24] YANG X L, DONG H B, WANG W, et al. Microscale simulation of stray grain formation in investment cast turbine blades[J]. Mater. Sci. Eng., 2004, A386: 129-139.
- [25] MA D X, POLACZCK A B. Application of a heat conductor technique in the production of single-crystal turbine blades[J]. Metall. Mater. Trans., 2009, B40: 738-748.
- [26] MENG X B, LI J G, ZHANG J, et al. Effect of platform dimension on the dendrite growth and stray grain formation in a Ni-base single-crystal superalloy[J]. Metall. Mater. Trans., 2013, A44: 1 955-1 965.
- [27] MENG X B, LI J G, ZHU S Z, et al. Method of stray grain inhibition in the platforms with different dimensions during directional solidification of a Ni-base superalloy[J]. Metall. Mater. Trans., 2014, A45: 1 230-1 237.
- [28] WALTON D, CHALMERS B. The origin of the preferred orientation in the columnar zone of ingots[J]. Trans. Metall. Soc. AIME, 1959, 215: 447-457.
- [29] CHALMERS B. Principles of Solidification[M]. New York: Wiley, 1964.
- [30] RAPPAZ M, GANDIN C A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes[J]. Acta Mater., 1993, 41: 345-360.
- [31] GANDIN C A, RAPPAZ M. A coupled finite element-cellular automaton model for the prediction of dendritic grain structures in solidification processes[J]. Acta Mater., 1994, 42: 2 233-2 246.
- [32] GANDIN C A, DESBIOLLES J L, RAPPAZ M, et al. A three-dimensional cellular automaton-finite element model for the prediction of solidification grain structures [J]. Metall. Mater. Trans., 1999, A30: 3 153-3 165.
- [33] ZHOU Y Z, VOLEK A, GREEN N R. Mechanism of competitive grain growth in directional solidification of a nickel-base superalloy [J]. Acta Mater., 2008, 56: 2 631-2 637.
- [34] ZHOU Y Z, GREEN N R. Competitive grain growth in directional solidification of a nickel-base superalloy[A]. Superalloys[C], PA: US, 2008.
- [35] LI J J, WANG Z J, WANG Y Q, et al. Phase-field study of competitive dendritic growth of converging grains during directional solidification[J]. Acta Mater., 2012, 60: 1 478-1 493.
- [36] WANG Z J, LI J J, WANG J C, et al. Phase field modeling the selection mechanism of primary dendritic spacing in directional solidification[J]. Acta Mater., 2012, 60: 1 957-1 964.
- [37] TAKAKI T, OHNO M, SHIMOKAWABE T, et al. Two-dimensional phase-field simulations of dendrite competitive growth during the directional solidification of a binary alloy bicrystal[J]. Acta Mater., 2014, 81: 272-283.
- [38] TOURET D, KARMA A. Growth competition of columnar dendritic grains: A phase-field study[J]. Acta Mater., 2015, 82: 64-83.
- [39] TOURET D, SONG Y, CLARKE A J, et al. Grain growth competition during thin-sample directional solidification of dendritic microstructures: A phase-field study[J]. Acta Mater., 2017, 122: 220-235.
- [40] CLARKE A J, TOURET D, SONG Y, et al. Microstructure selection in thin-sample directional solidification of an Al-Cu alloy: In situ X-ray imaging and phase-field simulations[J]. Acta Mater., 2017, 129: 203-216.
- [41] MENG X B, LU Q, ZHANG X L, et al. Mechanism of competitive growth during directional solidification of a nickel-base superalloy in a three-dimensional reference frame[J]. Acta Mater., 2012, 60: 3 965-3 975.
- [42] MENG X B, LI J G, JING C N, et al. Misorientation dependent thermal condition-solute field cooperative effect on competitive grain growth in the converging case during directional solidification of a nickel-base superalloy[J]. Mater. Sci. Technol., 2022, 96: 151-159.
- [43] LU Q, LI J G, JIN T, et al. Competitive growth in bi-crystal of Nibased superalloys during directional solidification[J]. Acta Metall. Sin., 2011, 47: 641.
- [44] LIU Z Y, LIN M, YU D E, et al. Dependence of competitive grain growth on secondary dendrite orientation during directional solidification of a Ni-based superalloy[J]. Metall. Mater. Trans., 2013, A44: 5 113-5 120.
- [45] HU S S, YANG W C, CUI Q W, et al. Effect of secondary dendrite orientations on competitive growth of converging dendrites of Ni based bi-crystal superalloys[J]. Mater. Charact., 2017, 125: 152-161.
- [46] SULZER S, LI Z M, ZAEFFERER S, et al. On the assessment of creep damage evolution in nickel-based superalloys through correlative HR-EBSD and cECCI studies[J]. Acta Mater., 2020, 185: 13-27.
- [47] CLEMENTE A V, KUMAR G N, ALLEHIANI M N, et al. Cross-correlation based high resolution electron backscatter diffraction and electron channelling contrast imaging for strain mapping and dislocation distributions in InAlN thin films[J]. Acta Materialia, 2017, 125: 125-135.
- [48] DING Q Q, LI S Z, CHEN L Q, et al. Re segregation at interfacial dislocation network in a nickel-based superalloy[J]. Acta Mater., 2018, 154: 137-146.
- [49] 赵代银, 何建, 伍林, 等. 陶瓷型芯在高温合金熔模铸造中的应用技术[J]. 特种铸造及有色合金, 2020, 40(9): 999-1 003.
- [50] 贾志宏, 马奥林, 赵玉涛, 等. 单晶高温合金螺旋选晶器选晶行为的模拟和试验研究[J]. 特种铸造及有色合金, 2019, 39(3): 242-246.
- [51] 雷四雄, 杨伟, 郑行, 等. 精铸工艺对 K438 合金组织及高温力学性能的影响[J]. 特种铸造及有色合金, 2019, 39(3): 306-309.
- [52] 郭钊, 周建新, 殷亚军, 等. 基于改进差分网格的高温合金定向凝固数值模拟[J]. 特种铸造及有色合金, 2019, 39(6): 613-618.
- [53] 赵金乾, 李嘉荣. 单晶高温合金小角度晶界组织演化[J]. 特种铸造及有色合金, 2018, 38(2): 122-125.
- [54] 李海松, 李林蓄, 曾洪, 等. 镍基高温合金单晶叶片凝固组织模拟[J]. 特种铸造及有色合金, 2018, 38(12): 1 312-1 316.
- [55] 王锦程, 郭春文, 李俊杰, 等. 定向凝固晶粒竞争生长的研究进展[J]. 金属学报, 2018, 54(5): 657-668.

镍基单晶高温合金定向凝固微观组织模拟及试验验证

夏鹤翔 杨 聪 许庆彦
(清华大学材料学院, 先进成形制造教育部重点实验室)

摘 要 针对定向凝固过程, 建立了镍基单晶高温合金宏观温度场计算模型和微观组织相场计算模型。模拟了定向凝固过程中高温合金单晶试棒的温度场变化, 并基于温度场结果进一步模拟了微观组织生长情况。将模拟结果与试验结果进行对比, 二者较为一致, 验证了计算模型的准确性。结果表明, 定向凝固单晶试棒不同区域的枝晶形貌有较显著差异, 冷却速度较快的区域一次枝晶臂间距较小; 冷却速度较慢的区域枝晶粗大, 具有发达的一次枝晶臂和二次枝晶臂, 且一次枝晶臂间距较大。

关键词 高温合金; 定向凝固; 数值模拟; 相场

中图分类号 TG132.3⁺2 **文献标志码** A

DOI: 10.15980/j.tzzz.2021.11.003 **开放科学(资源服务)标识码(OSID):**



Microstructure Simulation and Experimental Validation of Ni-based Superalloy during Directional Solidification

Xia Huxiang, Yang Cong, Xu Qingyan
(Key Laboratory of Advanced Forming Manufacturing, Ministry of Education,
School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University)

Abstract: The calculation models of macroscopic temperature field and microstructure phase field of Ni-based single crystal superalloy during directional solidification were established. The temperature field change of single crystal rod during directional solidification was simulated. Based on the macroscopic temperature field, the growth of microstructure was simulated. The microstructure of nickel-base single crystal superalloy was compared with the simulation results to verify the accuracy of the calculation model. Both the simulation and experimental results indicate that the dendrite morphology in different regions of single crystal rod after directional solidification has significant difference. The dendrite under high cooling rate presents small primary dendrite arm spacing, while that under low cooling rate is quite coarse, with well-developed primary and secondary dendrite arm as well as large primary dendrite arm spacing.

Key Words: Superalloy, Directional Solidification, Numerical Simulation, Phase Field

镍基高温合金在高温下具有良好的组织稳定性和抗氧化腐蚀性, 综合性能优异, 是现代航空发动机和重型燃气轮机中不可替代的热端部件材料, 通常采用定向凝固方式制备^[1,2]。定向凝固过程中, 随着铸件向下抽拉, 铸件不同区域的冷却速度存在差异。不均匀的冷却速度会造成材料组织形态不规则, 容易出现杂晶、雀斑、缩孔、缩松等凝固缺陷^[3~5], 对铸件性能造成不利影响。

高温合金定向凝固研究中, 常规的研究方法分为试验方法和模拟方法。镍基单晶高温合金价格昂贵, 通过试验方法研究耗费大、周期长、工序繁琐^[6]。数值模拟技术作为一种低能耗、高效率、短周期的研究方法, 在镍基高温合金部件制备领域逐渐发展成为不可缺少的工艺流程^[7]。

ELLIOTT A J 等^[8] 和 KERMANPUR A 等^[9] 分别研究了高速凝固法和液态金属冷却法两种定向凝固工艺, 并根据其工艺条件建立了相应的计算模型。唐宁等^[10] 基于有限元和 Pandat 热动力学数据库建立了单晶叶片定向凝固过程的数理模型, 对不同工艺下单晶叶片凝固过程中的温度场、糊状区演变及枝晶二次臂间距进行了仿真, 研究了缺陷形成机理和规律, 计算结果与试验符合度高。

近年来, 数值模拟技术作为一种数学工具, 也逐渐

收稿日期: 2021-04-02
基金项目: 国家科技重大专项资助项目(2017-VI-0003-0073, 2017-VII-0008-0101)
第一作者简介: 夏鹤翔, 男, 1996 年出生, 博士研究生, 北京(100084), E-mail: xiahx18@mails.tsinghua.edu.cn
通信作者: 许庆彦, 男, 1971 年出生, 教授, 北京(100084), E-mail: scjxqy@mail.tsinghua.edu.cn
引用格式: 夏鹤翔, 杨聪, 许庆彦. 镍基单晶高温合金定向凝固微观组织模拟及试验验证[J]. 特种铸造及有色合金, 2021, 41(11): 1 334-1 338.
XIA H X, YANG C, XU Q Y. Microstructure simulation and experimental validation of Ni-based superalloy during directional solidification [J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2021, 41(11): 1 334-1 338.

开始被用来探索一些组织产生原因。D'SOUZA N 等^[11]和 PANG H T 等^[12]对 CMSX-10K 单晶高温合金进行了试验研究,发现枝晶间组织存在两种形貌:细小的 γ/γ' 层片和粗大的 γ' 相。针对高温合金枝晶间组织的形成顺序与凝固末期发生的反应类型,不同学者提出了不同的假设。PANG H T 等^[12]和 HECKL A 等^[13]认为其反应为共晶反应,而 D'SOUZA N 等^[11]和 TERNER M 等^[14]则提出了不同的意见,认为该反应更符合包晶反应的特征。YANG C 等^[15]通过相场法计算枝晶间组织,发现在组织生长过程中 γ 相出现了重熔现象,印证了其枝晶间组织为共晶组织。

本课题对单晶高温合金定向凝固过程中组织生长进行宏、微观模拟研究与试验验证。首先对单晶试棒进行宏观温度场模拟,提取不同区域的温度随时间变化曲线,作为微观组织模拟的温度输入。然后使用多相场模型模拟微观枝晶生长过程,最后进行定向凝固试验,对单晶试棒进行切割和金相分析,得到其枝晶间组织形貌,验证计算模型的准确性,为定向凝固单晶提供参考。

1 数学模型

相场法是以金兹堡-朗道二级相变理论为物理基础,通过计算相变自由能来判断物质是否能够进行相变的组织模拟方法。相场模型中金兹堡-朗道类型的自由能泛函 F 表达式为:

$$F(\{\varphi_\alpha\}, \{\bar{c}_\alpha\}) = \int_{\Omega} f(\{\varphi_\alpha\}, \{\bar{c}_\alpha\}) \quad (1)$$

式中, φ_α 为 α 相的相场变量; $\bar{c}_\alpha$ 为 α 相的成分浓度; Ω 为计算域。其中的自由能密度函数 f 由界面自由能密度函数 $f^{\text{intf}}(\{\varphi_\alpha\})$ 和化学自由能密度函数 $f^{\text{chem}}(\{\varphi_\alpha\}, \{c_\alpha^k\})$ 两部分组成:

$$f = f^{\text{intf}}(\{\varphi_\alpha\}) + f^{\text{chem}}(\{\varphi_\alpha\}, \{c_\alpha^k\}) \quad (2)$$

$$f^{\text{intf}}(\{\varphi_\alpha\}) = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=\alpha+1}^n \frac{4\sigma_{\alpha\beta}}{\eta_{\alpha\beta}} \left(-\frac{\eta_{\alpha\beta}^2}{\pi^2} \nabla \varphi_\alpha \nabla \varphi_\beta + \varphi_\alpha \varphi_\beta \right) \quad (3)$$

$$f^{\text{chem}}(\{\varphi_\alpha\}, \{c_\alpha^k\}) = \sum_{\alpha=1}^n \varphi_\alpha f_\alpha(\bar{c}_\alpha) \quad (4)$$

式中, n 为相的个数; $\sigma_{\alpha\beta}$ 为 α 相与 β 相之间界面能。 $f_\alpha(\bar{c}_\alpha)$ 为 α 相的体积自由能密度函数,与其当前成分相关。

对于多元多相合金体系,稳定状态下体系自由能趋于最小。体系中相随时间的变化可以由体系自由能泛函对相求变得到:

$$\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial t} = - \sum_{\beta \neq \alpha}^i \frac{\tilde{M}_{\alpha\beta}}{i} \left(\frac{\delta F}{\delta \varphi_\alpha} - \frac{\delta F}{\delta \varphi_\beta} \right) \quad (5)$$

式中, $\tilde{M}_{\alpha\beta}$ 为界面迁移率; i 为网格所含相的个数。

在枝晶组织凝固结束后, γ' 相将在液相和 γ 相的边界上进行异质形核。在微观组织模拟的形核模型中,有两种常见的形核模型,一是 HUNT J D^[16] 提出的瞬时形核模型,二是基于高斯分布的连续形核模型^[17]。其中,瞬时形核模型描述的是金属液在大过冷度下瞬间产生大量形核的过程,与高温合金凝固中 γ' 相的形核条件不符。在高斯形核模型中,认为形核密度与对应的过冷度 ΔT 满足高斯分布关系:

$$\frac{\partial n}{\partial \Delta T} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi} \Delta T_\sigma} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T - \Delta T_N}{\Delta T_\sigma} \right)^2 \right] \quad (6)$$

式中, n 为形核数目; $n_{\max}$ 为最大形核密度; ΔT_N 为平均形核过冷度; ΔT_σ 为形核过冷度方差。对式(6)进行积分即可得到某一过冷度下的形核数目 n :

$$n(\Delta T) = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi} \Delta T_\sigma} \int_0^{\Delta T} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta T - \Delta T_N}{\Delta T_\sigma} \right)^2 \right] d(\Delta T) \quad (7)$$

本课题采用高斯形核模型对 γ' 相形核进行计算。

2 试验方法

为了制备单晶高温合金试样,设计了单晶试棒的定向凝固试验。选用 DD6 镍基单晶高温合金,定向凝固工艺为高速凝固法,激冷盘设置为水冷铜板,冷却区为真空状态,与铸件进行辐射传热冷却。试验中,浇注温度为 1 773 K,型壳预热温度为 1 773 K,保温时间为 10 min,抽拉速度为 3 mm/min。

定向凝固模拟几何模型和取样示意图见图 1。定向凝固试验完成后得到的单晶试棒与浇注系统见图 1a。对单晶试棒进行线切割分解,取对应的引晶段、单晶段中部和单晶段顶部的 3 个试样进行分析,见图 1b。

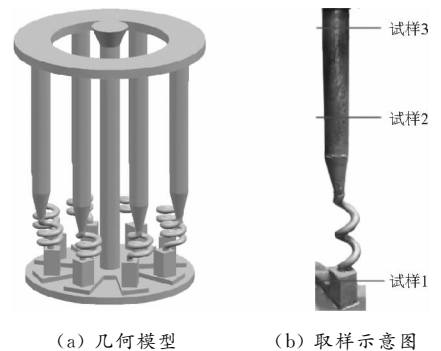


图 1 单晶高温合金定向凝固模拟几何模型和取样示意图
Fig.1 Geometric model of directional solidification simulation of single crystal superalloy and sampling diagram

对试样进行打磨与抛光处理,并在室温下使用卡林试剂(Kalling's reagent, 2.5 g 二水氯化铜+30 mL 盐

酸+70 mL 酒精)对试样的抛光表面进行腐蚀,然后使用蔡司 Axio Scope. A1 型光学显微镜对腐蚀后的试样表面进行观测。

为了定量研究不同区域一次枝晶臂间距的分布,使用面积法对不同截面处的一次枝晶臂间距平均值进行计算:

$$\lambda = c \sqrt{A/N}$$
 (8)

式中, N 为面积 A 内枝晶的个数; c 为常数,通常取值为 1。测量时,选取测量区域中枝晶的总数大于 50,以保证结果的准确性。

3 试验结果及讨论

3.1 模拟结果

3.1.1 宏观温度场模拟

为了研究单晶试棒定向凝固过程中温度场的变化以及不同区域在凝固区间内的冷速,对其进行了宏观温度场模拟。模拟按照实际铸件尺寸进行了建模与有限元网格划分。合金的热物性参数如密度、比热容和导热系数等使用 JmatPro 热力学数据库计算得到,传热系数等参数从文献中获得,具体模拟参数见表 1。

表 1 宏观温度场模拟参数^[18~21]

Tab.1 Simulation parameters of macroscopic temperature field					
热区温度/K	冷区与水冷铜盘温度/K	浇注温度/K	抽拉速度/(mm·min ⁻¹)	铸件与激冷盘传热系数/(W·m ⁻² ·K ⁻¹)	
1 773	293	1 773	3	10 000	
铸件与型壳传热系数/(W·m ⁻² ·K ⁻¹)	水冷铜盘导热系数/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	型壳导热系数/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	铸件和炉壁比辐射率	型壳比辐射率	
600	401	2.5	0.8	0.6	

为了定量分析不同凝固区域的冷却速度和温度梯度,在宏观温度场中提取了图 1b 中 3 个试样的温度曲线。图 2 为 3 个试样在凝固过程中温度随抽拉时间的变化。可以看出,3 个试样的温度曲线变化具有明显差异。试样 1 的温度在液相线温度以上时下降较快,当温

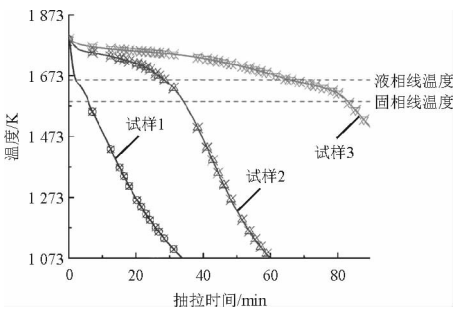


图 2 凝固过程中试样 1~3 中的温度随抽拉时间的变化

Fig.2 The temperature variation of the sampling point with drawing time during the solidification

度达到液相线温度附近时,温度下降速率略有变缓,这是因为液相凝固时释放了大量潜热导致温度下降减缓。试样 2 与试样 3 在固液相线间的曲线斜率相对试样 1 更小,说明其冷速相对更小。

表 2 为计算得出的不同试样的冷速最大值、平均值、最小值和温度梯度平均值。从试样 1 到试样 3,平均冷速从 0.44 K/s 迅速减少到 0.04 K/s,与之对应的平均温度梯度从 8.81 K/mm 减小到 0.81 K/mm。

表 2 不同取样区域的冷速与温度梯度
Tab.2 The cooling rate and temperature gradient at different sampling region

取样点	平均冷速/(K·s ⁻¹)	最大冷速/(K·s ⁻¹)	最小冷速/(K·s ⁻¹)	平均温度梯度/(K·mm ⁻¹)
1	0.44	0.56	0.25	8.81
2	0.16	0.24	0.11	3.16
3	0.04	0.11	0.03	0.81

3.1.2 微观组织模拟

分别对试样 1~3 的中心位置进行了凝固过程枝晶-共晶生长多相场模拟,其中各位置冷却速度使用了图 2 中模拟得到的冷却曲线数据作为输入。模拟中计算域的网格数目为 1 024×1 024,对应的物理域大小约为 820×820 μm²,计算域的边界为第二类边界条件且一阶偏导数为 0,其他计算参数见表 3。多相场模拟中,首先模拟了枝晶生长过程,当温度达到共晶点 1 596.4 K 后,依据高斯形核模型在液相和 γ 枝晶的边界处进行 γ' 形相核。

表 3 高温合金枝晶-共晶凝固多相场模拟参数设置

Tab.3 Parameter setting of multiphase field simulation for dendritic-eutectic solidification of superalloy					
网格大小/μm	固液界面宽/μm	γ'核心直径/μm	固液界面迁移率/(m ⁴ ·J ⁻¹ ·s ⁻¹)	固固界面迁移率/(m ⁴ ·J ⁻¹ ·s ⁻¹)	固液界面能/(J·m ⁻²)
0.8	3.2	3.2	1.5×10 ⁻¹¹	8.0×10 ⁻¹⁶	0.161
固固界面能/(J·m ⁻²)	动力各向异性系数	γ'平均形核过冷度/K	γ'形核过冷度方差/K	最大形核密度/m ⁻¹	时间步长/s
0.025	0.2	5	1	4×10 ⁴	9.75×10 ⁻⁷

图 3 为模拟得到 3 个试样的枝晶-共晶组织生长过程。在试样 1 中,冷速降低,γ 枝晶数目减少,枝晶臂间距增大。枝晶生长结束后,γ'相在枝晶和液相的边界上形核,最后得到了较为粗大的枝晶和枝晶间共晶组织。在试样 2 中,冷速进一步降低,由于处于单晶段,不同枝晶具有一致的晶体取向。模拟得到的枝晶组织具有发达的一次臂,而二次枝晶臂依然不发达,最后在枝晶间形成了较为粗大的共晶 γ' 相。在试样 3 中,平均冷速降低到 0.04 K/s,计算域中只形成一个枝晶,模拟得到的枝晶具有发达的一次和二次枝晶臂,枝晶间的 γ' 相尺寸也较大。

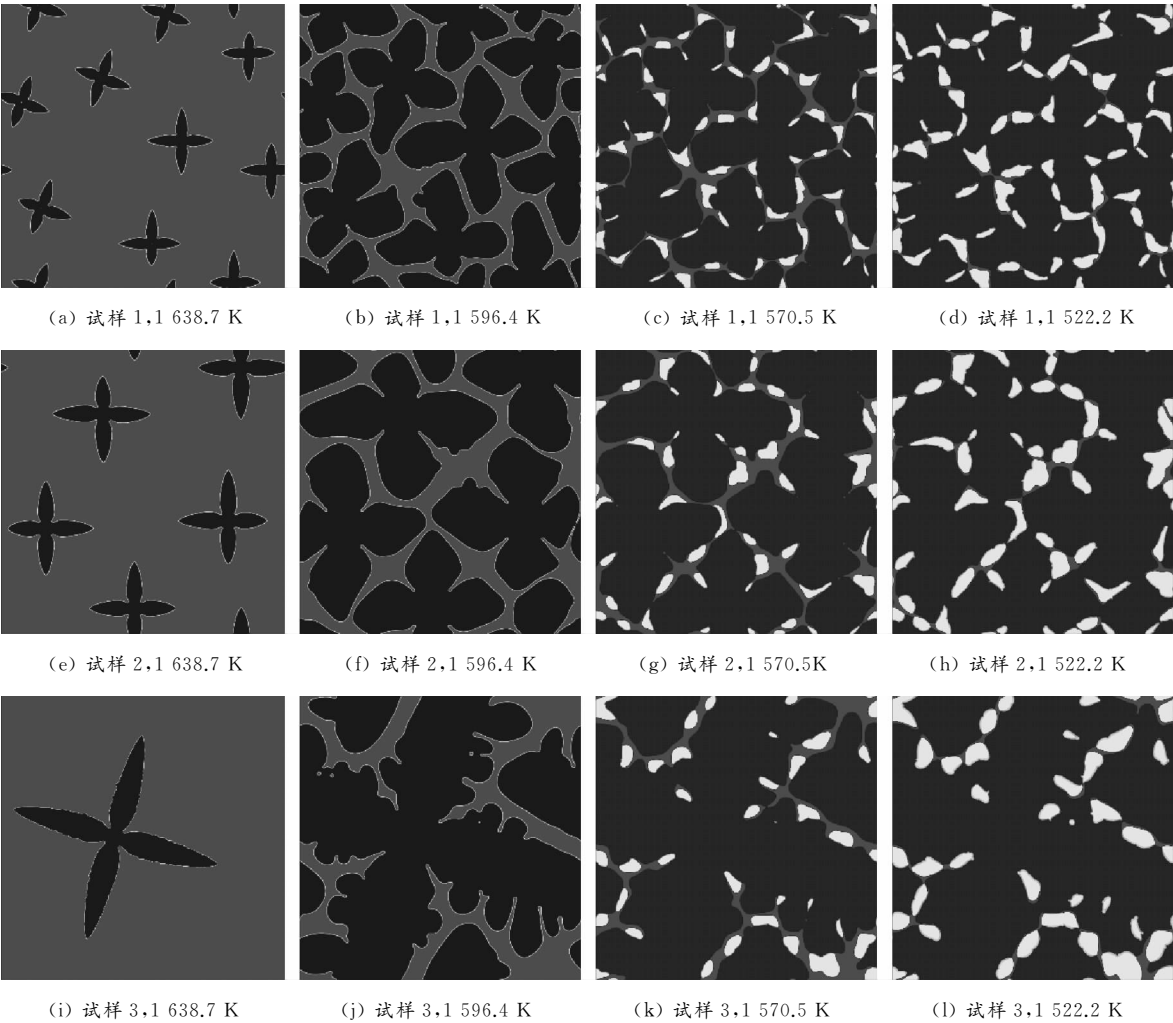


图 3 多场模拟得到的合金枝晶与共晶组织(灰色为液相,黑色为 γ 相,浅色为 γ' 相)

Fig.3 Dendrite and eutectic structure of superalloy by multiphase field simulation

3.2 试验验证

图 4 为定向凝固试样组织。可以看到不同区域的枝晶形貌有着显著的差异。由于腐蚀剂的作用,不同取向的枝晶显示了不同的颜色。位于引晶段的试样 1,枝晶具有不一致取向,位于单晶段的试样 2 和试样 3,枝晶取向一致。试样 1 中,大部分枝晶具有一致取向,枝

晶具有明显的一次枝晶臂,但是没有二次枝晶臂出现。试样 2 中,全部枝晶具有一致的取向,枝晶的一次枝晶臂间距较大,部分枝晶形成了不发达的二次枝晶臂。在试样 3 中,枝晶形貌粗大,形成了发达的一次枝晶臂和二次枝晶臂,一次枝晶臂间距很大。对比图 3 中的模拟结果,可见模拟得到的枝晶和枝晶间组织形貌与试验结

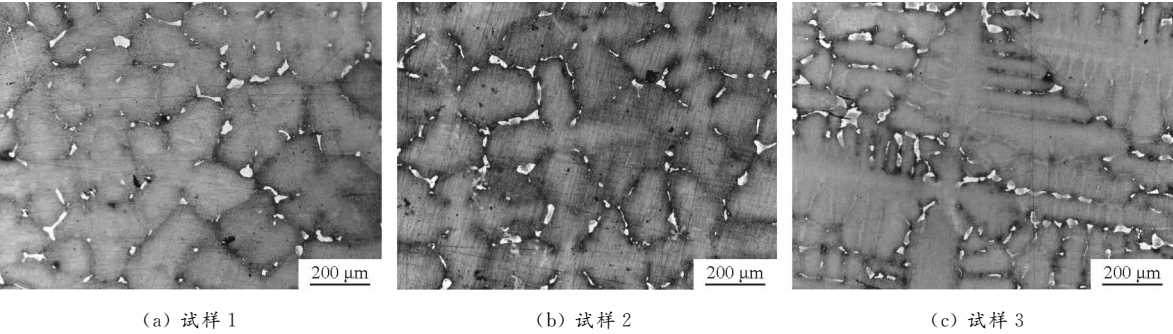


图 4 单晶高温合金试棒横截面金相组织

Fig.4 Cross-section metallographic structure of superalloy rod

果一致。

表 4 为测量得到的一次枝晶臂间距平均值、最小值

和最大值。从试样 1 到试样 3,平均一次枝晶臂从 268.4 μm 显著增加到 689.4 μm ,与之对应的是枝晶的一次臂

和二次臂越来越发达,而测量结果中一次枝晶臂间距最大值约是最小值的 2 倍。试验测量的一次枝晶臂间距与模拟结果相比偏差较小,宏、微观模拟具有一定的准确性。

表 4 不同区域试样一次枝晶臂间距试验与模拟结果

Tab.4 The experimental and simulated results of primary dendrite arm spacing at various regions μm

试样	PDAS 最大值(试验)	PDAS 最小值(试验)	PDAS 平均值(试验)	PDAS 平均值(模拟)	PDAS 试验与模拟偏差
1	380.8	160.2	268.4	247.0	7.97%
2	480.7	231.7	360.2	366.1	1.64%
3	923.5	577.4	689.4	741.2	7.51%

4 结 论

(1)根据高温合金定向凝固物理过程,建立了镍基单晶高温合金定向凝固宏、微观模拟模型。计算了定向凝固过程中单晶试棒的温度场变化,并将得到的温度曲线作为微观相场的输入条件,进一步模拟了微观组织形核和生长情况。

(2)进行了单晶试棒定向凝固试验,并从上至下截取了 3 个截面,并对截面中心金相组织进行了观察。试验得到的枝晶组织形貌与模拟结果一致,验证了计算模型的可行性以及准确性。

(3)模拟和试验结果表明定向凝固单晶试棒中不同区域的枝晶形貌有着显著的差异。单晶试棒下部,枝晶胞状结构明显,一次枝晶臂间距较小。单晶试棒上部,枝晶形貌粗大,具有发达的一次枝晶臂和二次枝晶臂,一次枝晶臂间距较大。

参 考 文 献

[1] KEAR B H, THOMPSON E R. Aircraft gas turbine materials and process[J]. Science, 1980, 208(5): 847-856.

[2] 张建,楼浪洪,李辉.重型燃气轮机定向结晶叶片材料与制造工艺[J].中国材料进展, 2013, 32(1): 12-23.

[3] 赵新宝,刘林,杨初斌,等. 镍基单晶高温合金凝固缺陷研究进展[J]. 材料工程, 2012(1): 93-98.

[4] MA D X, ANDREAS B P. The geometrical effect on freckle formation in the directionally solidified superalloy CMSX-4[J]. Metallurgical & Materials Transactions, 2014, A45(3): 1 435-1 444.

[5] ZHENG L, ZHANG G, XIAO C, et al. The interdendritic-melt solidification control (IMSC) and its effects on the porosity and phase change of a Ni-based superalloy [J]. Scripta Materialia, 2014, 74: 84-87.

[6] 许庆彦,杨聪,柳百成. 镍基高温合金定向凝固过程枝晶组织相场模拟研究[J]. 航空制造技术, 2019, 62(19): 14-20.

[7] 唐宁,张航,许庆彦,等. 空心叶片 LMC 定向凝固温度场和微观组织模拟[J]. 特种铸造及有色合金, 2014, 34(6): 561-565.

[8] ELLIOTTA J, POLLOCK T M. Thermal analysis of the bridgman

and liquid-metal-cooled directional solidification investment casting processes[J]. Metallurgical&Materials Transactions, 2007, A38 (4): 871-882.

[9] KERMANPUR A, RAPPAZ M, VARAHRAM N, et al. Thermal and grain-structure simulation in a land-based turbine blade directionally solidified with the liquid metal cooling process[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2000, B31(6): 1 293-1 304.

[10] 唐宁,孙长波,张航,等. 高温合金单晶叶片定向凝固过程的宏-微观数值模拟[J]. 稀有金属材料与工程, 2013, 42(11): 2 298-2 303.

[11] D’SOUZA N, DONG H B. Solidification path in third-generation Ni-based superalloys, with an emphasis on last stage solidification [J]. Scripta Materialia, 2007, 56(1): 41-44.

[12] PANG H T, DONG H B, BEANLAND R, et al. Microstructure and solidification sequence of the interdendritic region in a third generation single-crystal nickel-base superalloy[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2009, A40(7): 1 660-1 669.

[13] HECKL A, RETTIG R, CENANOVIC S, et al. Investigation of the final stages of solidification and eutectic phase formation in Re and Ru containing nickel-base superalloys[J]. Journal of Crystal Growth, 2010, 312(14): 2 137-2 144.

[14] TERNER M, YOON H Y, HONG H U, et al. Clear path to the directional solidification of Ni-based superalloy CMSX-10: A peritectic reaction[J]. Materials Characterization, 2015, 105: 56-63.

[15] YANG C, XU Q Y, SU X L, et al. Multiphase-field and experimental study of solidification behavior in a nickel-based single crystal superalloy[J]. Acta Materialia, 2019, 175: 286-296.

[16] HUNT J D. Steady state columnar and equiaxed growth of dendrites and eutectic[J]. Materials Science and Engineering, 1984, 65(1): 75-83.

[17] RAPPAZ M, GANDINC A. Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes[J]. Acta Metallurgica et Materialia, 1993, 41(2): 345-360.

[18] FRANKE M M, HILBINGER R M, LOHMÜLLER A, et al. The effect of liquid metal cooling on thermal gradients in directional solidification of superalloys: Thermal analysis[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2013, 213 (12): 2 081-2 088.

[19] KONRAD C H, BRUNNER M, KYRGYZBAEV K, et al. Determination of heat transfer coefficient and ceramic mold material parameters for alloy IN738LC investment castings[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2011, 211(2): 181-186.

[20] ELLIOTT A J, POLLOCK T M, TIN S, et al. Directional solidification of large superalloy castings with radiation and liquid-metal cooling: A comparative assessment[J]. Metallurgical & Materials Transactions, 2004, A35(10): 3 221-3 231.

[21] ELLIOTT A J, POLLOCK T M. Thermal analysis of the bridgman and liquid-metal-cooled directional solidification investment casting processes[J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2007, A38(4): 871-882.

(编辑:彭瑾)