

相场法模拟 316L 不锈钢 SLM 过程中的微观组织演化

刘 岩 牛晓峰 李文琪 王浩伟 任 萌
(太原理工大学材料科学与工程学院)

摘 要 利用相场法模拟 316L 不锈钢在 SLM 成形过程中的微观组织演化。结果表明,在凝固过程中,微观组织演化分为平界面生长、平界面失稳、竞争生长和稳定生长 4 个阶段。在凝固过程中,溶质元素会在柱状晶之间和柱状晶尖端位置处聚集,导致溶质浓度值高于液相浓度和固相浓度,形成偏析。稳定生长阶段的微观组织呈现胞状晶形态,与试验观察微观组织一致。

关键词 相场法;SLM;316L;不锈钢

中图分类号 TP311;TG142.7 **文献标志码** A

DOI:10.15980/j.tzzz.2023.07.020

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Microstructure Evolution Simulation during SLM Process by Phase Field Method

Liu Yan, Niu Xiaofeng, Li Wenqi, Wang Haowei, Ren Meng
(College of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Technology)

Abstract: The microstructure evolution of 316L stainless steel during SLM was simulated by using phase field method. The results indicate that during the solidification process, the microstructure evolution is divided into four stages: flat interface growth stage, flat interface destabilization stage, competitive growth stage and stable growth stage. The solute elements accumulate between the columnar crystals and at the tip of the columnar crystals, resulting in the higher solute concentration values than the liquid and solid phase concentrations, leading to segregation. During stable growth stage, the microstructure presents a cell-like crystal morphology, which is consistent with the experimentally observation.

Key Words: Phase Field Method, SLM, 316L, Stainless Steel

选区激光熔化(Selective laser melting, SLM)在航空航天领域已得到大量的应用^[1-2]。与传统成形工艺相比,SLM 技术的优势在于能够实现复杂的形状和内部特征,并且能够节省加工成本,缩短加工时间,且成形零件的力学性能更好^[3]。但是由于其激光能量密度高,熔池微观组织凝固过程中温度梯度大、冷却速率快,导致熔池微观组织的形成过程难以被观测。数值模拟方法可以很好地解决这个问题。目前模拟微观组织常用的方法有相场法、元胞自动机和蒙特卡罗方法。蒙特卡罗法是以最小界面能原理为基础,采用概率模型来模拟晶粒的长大过程。元胞自动机法的主要思想是将模拟区域离散成若干个元胞,并为每个元胞赋予一个初始状态值,在模拟计算过程中,每个元胞的状态按照一定的规则发生改变,并且元胞的状态只受相邻元胞的影响^[4]。相场法是以金兹堡-朗道相变理论为基础,采用统一的控制方程来描述凝固过程中固-液界面的演化过程,计

算过程中无需区分复杂形态的固-液界面,可以耦合温度场、流场、溶质场等,模拟计算外部因素对微观组织的影响,由于这种优点,使得相场法在模拟凝固过程中具有很大的优势^[4]。RAMAZANI A 等^[5]采用相场法研究了在选区激光熔化过程中工艺参数对枝晶臂间距的影响,结果表明,模拟结果的准确性和数值分辨率与凝固速率的比值有关。LINDROSS M 等^[6]采用相场法对 316L 不锈钢在快速凝固过程中的生长模式进行模拟,分析不同凝固条件下 Cr 的偏析模式和柱状晶的生长模式。FALLAH V 等^[7]将相场模型和有限元传热模型耦合,研究了 Ti-Ni 合金在激光粉末沉积过程中,定向凝固条件下的枝晶臂间距演化,并将模拟与试验结果进行了对比,发现二者符合良好。ARISOY Y M 等^[8]首先建立三维有限元传热仿真模型,模拟单道次和多道次的激光粉末床熔融过程,从中提取热数据代入到相场模型中,进行微观组织计算。模拟结果的微观组织凝固方

收稿日期:2022-10-12;修改稿收到日期:2022-11-23
基金项目:国家自然科学基金资助项目(51874209);山西省科技重大专项资助项目(20191102007);中央引导地方科技发展资金资助项目(YDZJSX2022A012)
第一作者简介:刘岩,男,1996 年出生,硕士研究生,太原(030024),E-mail:941855802@qq.com
通信作者:牛晓峰,男,1982 年出生,教授,太原(030024),E-mail:niuxiaofeng@tyut.edu.cn
引用格式:刘岩,牛晓峰,李文琪,等. 相场法模拟 316L 不锈钢 SLM 过程中的微观组织演化[J]. 特种铸造及有色合金, 2023, 43(7):963-966.
LIU Y, NIU X F, LI W Q, et al. Microstructure evolution simulation during SLM process by phase field method[J]. Special Casting & Non-ferrous Alloys, 2023, 43(7):963-966.

向与试验结果基本一致。YANG M 等^[9]建立了关于粉末床熔融(Powder bed fusion, PBF)的三维相场模型来模拟晶粒演变过程,该相场模型包括形核理论、粉末颗粒和基底的初始晶粒结构。模拟结果再现了 PBF 过程中的晶粒演化过程,包括晶粒形核、长大、外延生长、晶粒重溶和晶粒粗化等,模拟结果与试验结果基本一致。ACHARYA R 等^[10]采用相场模型模拟了 PBF 过程中的微观结构演化。模拟内容包括凝固过程中的溶质偏析、枝晶尺寸、枝晶取向、枝晶形态和表面粗糙度等,并将模拟结果与试验结果进行对比。相场模拟结果表明,枝晶取向与表面粗糙度和扫描速度有很大的关系,溶质元素的偏析程度是决定枝晶间距的主要因素。肖文甲^[11]基于传热传质理论和金兹堡-朗道相变理论,利用宏观瞬态的三维传热传质模型耦合薄界面分析的定量相场法,建立了适用于激光增材制造凝固组织模拟的多尺度模型,研究了熔池凝固行为和枝晶生长行为,动态再现激光增材制造凝固过程中的溶质元素分布以及倾斜枝晶生长和竞争行为。KUNDIN J 等^[12]利用相场模型实现对镍基合金在 SLM 过程中的平衡相、亚稳相以及晶粒形态的预测,PFM 预测的微观结构与试验结果符合良好,而且模拟结果显示的浓度曲线表明了凝固过程中溶质元素的偏析。

本研究采用相场法模拟 SLM 成形 316L 不锈钢过程中的微观组织演化过程,重点分析微观组织生长过程和溶质元素的分布,并将熔池微观组织模拟结果与试验微观组织进行对比,表明模拟结果的准确性,旨在为其应用提供参考。

1 相场模型

在相场模型中^[13],用两个变量描述熔池液相随时间和空间的变化:序参量 $\varphi(r, t)$ 和浓度变量 $U(r, t)$, $\varphi = +1$ 表示固相, $\varphi = -1$ 表示液相, $-1 < \varphi < +1$ 表示固-液界面, U 表示 Cr 浓度。对于凝固过程中的温度场变化而言,由于合金组织生长主要受溶质扩散控制,热扩散系数远小于溶质扩散系数,因此,采用冻结温度近似法模拟温度场变化。温度场表达式是: $T(y, t) = T_0 + G(y - vt)$, T_0 为参考平面温度, G 为垂直于界面的温度梯度, v 为凝固速度。将 316L 不锈钢简化为 Fe-Cr 二元合金进行处理^[14],凝固过程中的二维演化方程为:

$$\tau_0 \left[1 - (1 - k) \frac{y - vt}{l_T} \right] \frac{\partial \phi}{\partial t} = W(n)^2 \nabla^2 \phi + \phi - \phi^3 - \lambda (1 - \phi^2) \left(U + \frac{y - vt}{l_T} \right) \quad (1)$$

$$\left(\frac{1 + k}{2} - \frac{1 - k}{2} \phi \right) \frac{\partial U}{\partial t} = \nabla \cdot \left(D \frac{1 - \phi}{2} \nabla U + j_{at} \right) + \frac{1}{2} [1 + (1 - k)U] \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (2)$$

式中, τ_0 为弛豫时间; k 为平衡分配系数; W_0 为扩散界面厚度; D 为溶质扩散系数; λ 为耦合常数; $W(n)$ 为各向异性函数, $W(n) = W_0 [1 + \delta (1 + \cos 4\theta)]$; δ 为各向异性强度; θ 为凝固界面与法向和参考方向之间的夹角; n 为单位界面法向向量; l_T 为热扩散长度, $l_T = \frac{|m| c_\infty (1 - k)}{G}$; j_{at} 为反溶质截留项, $j_{at} = \frac{1}{2\sqrt{2}} W_0 [1 + (1 - k)U] \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}$ 。柱状晶相场模拟参数见表 1。采用有限元软件求解式(1)、式(2)。

表 1 柱状晶相场模拟参数^[13-14]

Tab.1 Phase field simulation parameters of columnar crystal					
τ_0/s	k	δ	W_0/m	$D/(m^2 \cdot s^{-1})$	λ
0.000 1	0.791	0.007	1.0×10^{-7}	3.0×10^{-9}	18.05

2 模拟结果和分析

2.1 相场模型验证

图 1 为相场模型序参量在不同时刻的分布情况。可以看出,相场序参量从左端点到右端点,从 -1 变化到 +1。明显看出,不同时刻相场序参量在固-液界面处发生相似的阶跃型变化,即液态凝固为固态,符合相场序参量的变化规律,证明所建立的相场模型是正确的。

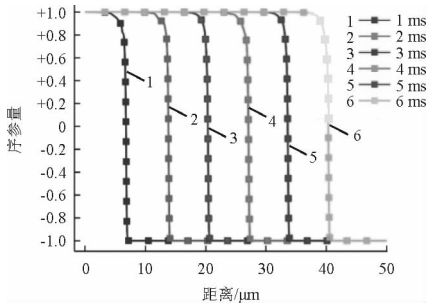


图 1 50 μm 线段上相场序参量分布
Fig.1 Distribution of phase field order parameters on 50 μm line segment

2.2 微观组织形貌

利用相场模型,模拟 316L 不锈钢的微观组织演化过程,见图 2。可以看出,SLM 加工过程中熔池内部微观组织的生长主要经历了 4 个阶段,分别是平界面生长阶段、平界面失稳阶段、竞争生长阶段和稳定生长阶段。在平界面生长阶段,界面形态以平面晶的形式向前推进凝固,见图 2a。之后由于不稳定的能量交换起伏会导致平界面失稳,表现为在固-液界面上出现细小的枝晶

凸起,见图 2b。当继续凝固时,晶粒形貌主要由竞争生长机制决定。晶粒之间的竞争生长是由各个晶粒具有不同的尖端生长速度和生长方向引起的。在竞争生长阶段,一些尖端速度较大,生长方向与温度梯度方向一致的晶粒将吞并周围的晶粒,最终形成粗大的柱状晶,

落后于相邻枝晶的枝晶尖端不再生长,其在生长阶段被淘汰。随后的一段时间内主要发生枝晶生长淘汰,同时枝晶阵列横向调整彼此间距,在此过程中,一次枝晶臂间距会增大,见图 2c。柱状晶的生长最终将进入稳定生长阶段,此时柱状晶的形貌基本保持稳定,不发生较

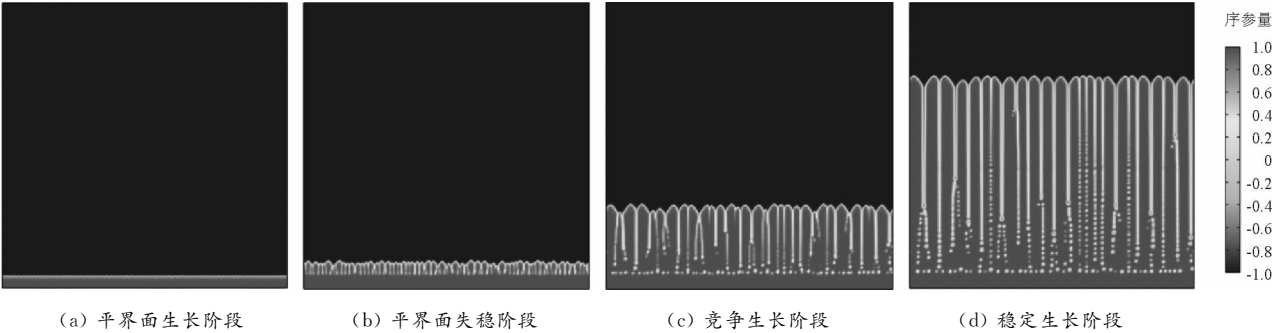


图 2 熔池微观组织形貌演变过程

Fig.2 Microstructure evolution of melt pool

大变化,最终形成的柱状晶具有胞状晶特征,见图 2d。
从图 2 可以看出,柱状晶的间距随着凝固的进行不断增大。从平界面生长阶段进入到平界面失稳阶段后,在界面上出现许多细小凸起的晶粒,此时的晶粒间距较小。在竞争生长阶段,具有生长优势的晶粒会吞并周围的晶粒,形成较为粗大的柱状晶,柱状晶的间距也会随之增大。到达稳定生长阶段后,柱状晶的间距达到最大值,约为 7.5 μm 。

2.3 浓度场

在 SLM 熔池凝固过程中,溶质元素的扩散将直接

影响扩散界面处溶质的分配,形成溶质偏析。利用相场模型可以模拟 SLM 熔池凝固的溶质扩散过程,进而定量分析凝固过程中的溶质偏析程度。在整个凝固过程中,扩散界面处的溶质浓度随着凝固的进行不断发生变化。图 3 为不同凝固阶段的溶质分布情况。可以看出,浓度分布展示的枝晶形貌与相场序参量展示的完全一致。SLM 熔池的凝固进入稳定阶段后,柱状晶的形貌不会发生较大的变化,但是溶质还会不断地扩散。在稳定阶段,相邻柱状晶之间的溶质浓度较大,会出现溶质偏析现象,降低零件的力学性能。

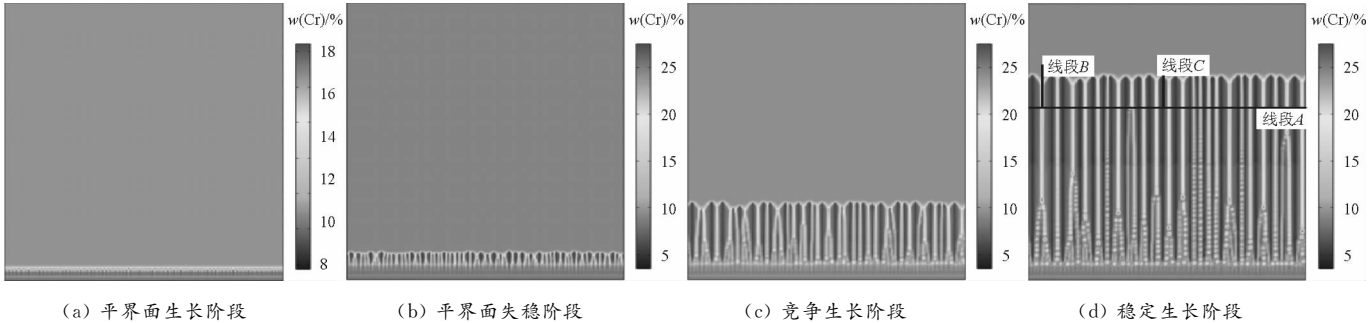


图 3 不同凝固阶段的溶质分布情况

Fig.3 Solute distribution at different stages of solidification

在稳定阶段,分别对相邻柱状晶之间、柱状晶生长模糊区域和柱状晶尖端处的溶质分布情况进行分析,见图 4。图 4a 为沿着垂直于柱状晶生长方向,在柱状晶生长模糊区域的溶质浓度变化情况。可以看出,最低溶质浓度出现在柱状晶的轴线处,然后溶质浓度向两侧逐渐增大,到达相邻柱状晶中间区域时,溶质浓度达到最大值。这也说明在柱状晶的生长过程中,先形成的固相部分,即柱状晶的轴线位置,溶质浓度最低,而在后形成的固相中,溶质浓度将不断增加。图 4b 为沿着柱状晶

生长方向,相邻柱状晶之间的溶质分布情况。可以看出,相邻柱状晶之间的溶质浓度远大于液相中的平衡溶质浓度,形成了较为严重的溶质偏析现象。到达柱状晶尖端附近时,溶质浓度快速下降,最后降低到液相中的平衡浓度。图 4c 为柱状晶尖端位置处的溶质浓度分布图。可以看出,沿着柱状晶的生长方向,溶质浓度在固相中最低,到达柱状晶尖端附近时,溶质浓度迅速增大,并且在柱状晶尖端前沿的液相区内达到最大,然后溶质浓度迅速下降,最终降低到液相中的平衡溶质浓度值。

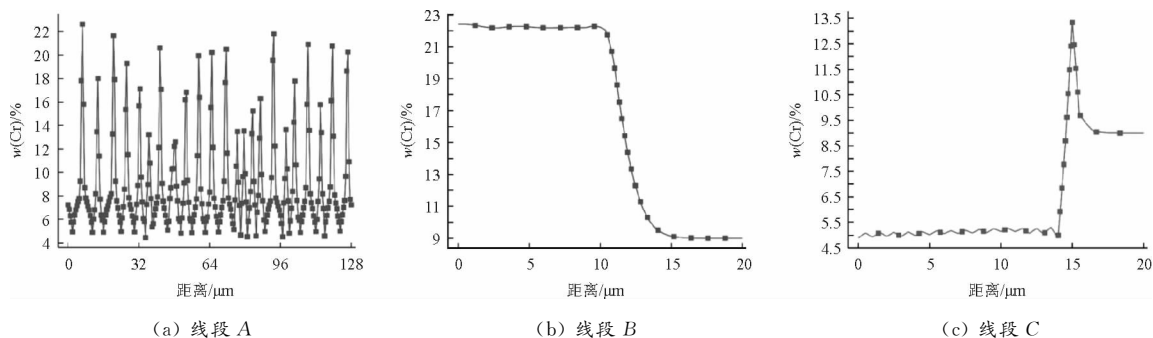
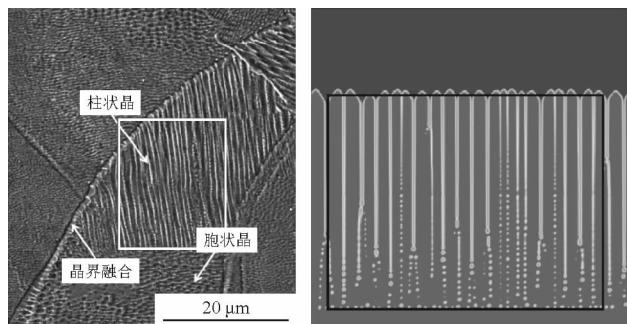


图 4 图 3d 中不同区域溶质变化曲线

Fig.4 Solute variation curve of different regions in Fig.3d

2.4 试验验证

将微观组织形貌模拟结果与文献[15]结果对比,见图 5。从图 5a 可以看出,内部微观组织是柱状晶形态,与图 5b 的模拟微观组织形貌符合,都呈细长条状。



(a) SLM 试验微观组织^[15]

(b) 模拟微观组织

图 5 模拟结果与文献[15]的组织形貌

Fig.5 Simulation results and morphologies in reference [15]

3 结 论

(1)316L 不锈钢 SLM 熔池内部微观组织生长主要经历平界面生长阶段、平界面失稳阶段、竞争生长阶段和稳定生长阶段 4 个阶段。固-液界面以胞状晶的凝固方式进行凝固,最终形成的柱状晶具有胞状晶的形貌特征。在凝固过程中,溶质元素会在柱状晶之间以及柱状晶尖端位置处聚集,柱状晶之间和柱状晶尖端的溶质浓度值明显高于液相浓度值,形成溶质偏析。

(2)通过对比分析了模拟微观组织与试验微观组织。试验结果和模拟结果均表明熔池微观组织具有胞状晶的形貌,且垂直于熔池边界生长。

参 考 文 献

[1] TIAN X Y, WU L L, GU D D, et al. Roadmap for additive manufacturing: Toward intellectualization and industrialization[J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2022, 1(1): 100-114.

[2] KOK Y, TAN X P, WANG P, et al. Anisotropy and heterogeneity of microstructure and mechanical properties in metal additive manufacturing: A critical review[J]. Materials and Design, 2018, 139: 565-586.

[3] 邱云基,申梦清,牛晓峰,等.选区激光熔化 316L 粉末过程数值模拟研究[J].特种铸造及有色合金, 2021, 41(9): 1 092-1 096.

[4] 王磊. 2A14 铝合金激光焊接熔池微观组织演变相场法研究[D].南京:南京航空航天大学,2018.

[5] RAMAZANI A, KUNDIN J, HAASE C, et al. Phase-field modeling of microstructure evolution of binary and multicomponent alloys during selective laser melting(SLM) process[A]. TMS 2019 148th Annual Meeting & Exhibition Supplemental Proceedings [C]. Switzerland: Springer, 2019.

[6] LINDROSS M, PINOMAA T, AMMAR K, et al. Dislocation density in cellular rapid solidification using phase field modeling and crystal plasticity[J]. International Journal of Plasticity, 2022, 148: 103-139.

[7] FALLAH V, AMOOREZAEI M, PROVATAS N, et al. Phase-field simulation of solidification morphology in laser powder deposition of Ti-Nb alloys[J]. Acta Materialia, 2012, 60(4): 1 633-1 646.

[8] ARISOY Y M, CRIALES L E, OZEL T. Modeling and simulation of thermal field and solidification in laser powder bed fusion of nickel alloy IN625[J]. Optics and Laser Technology, 2019, 109: 278-292.

[9] YANG M, WANG L, YAN W T. Phase-field modeling of grain evolutions in additive manufacturing from nucleation, growth, to coarsening[J]. NPJ Computational Materials, 2021, 7(1): 56-65.

[10] ACHARYA R, SHARON J A, STAROSELKY A. Prediction of microstructure in laser powder bed fusion process[J]. Acta Materialia, 2017, 124: 360-371.

[11] 肖文甲. 激光增材制造镍基高温合金枝晶生长的机理研究[D].长沙:湖南大学, 2019.

[12] KUNDIN J, MUSHONGERA L, EMMERICH H. Phase-field modeling of microstructure formation during rapid solidification in Inconel 718 superalloy[J]. Acta Materialia, 2015, 95: 343-356.

[13] ECHEBARRIA B, FOLCH R, KARMA A, et al. Quantitative phase-field model of alloy solidification[J]. Physical Review, 2004, E70: 061 604.

[14] PINOMAA T, LINDROSS M, WALBRUHL M, et al. The significance of spatial length scales and solute segregation in strengthening rapid solidification microstructures of 316L stainless steel[J]. Acta Materialia, 2020, 184: 1-16.

[15] YIN Y J, SUN J Q, GUO J, et al. Mechanism of high yield strength and yield ratio of 316L stainless steel by additive manufacturing[J]. Materials Science & Engineering, 2018, A744: 773-777.

(编辑:刘卫)