

单晶高温合金螺旋选晶过程的数值模拟与实验研究

II. 螺旋段

张航¹⁾ 许庆彦¹⁾ 孙长波²⁾ 戚翔¹⁾ 唐宁¹⁾ 柳百成¹⁾

1) 清华大学材料学院先进成形制造教育部重点实验室, 北京 100084

2) 沈阳黎明航空发动机(集团)有限责任公司, 沈阳 110043

摘要 研究了螺旋段在选晶过程中的作用. 基于金相及 EBSD 实验结果, 指出在晶粒竞争生长过程中, 晶粒二次臂取向和初始位置分布特征综合决定了晶粒的竞争优势. 总结提出了选晶过程的两个几何限制机理: 水平方向的二次臂竞争促进作用和竖直方向的一次臂限制作用. 两种模型成功解释了螺旋段对选晶过程的作用. 采用修正的元胞自动机(MCA)技术, 对螺旋段的晶粒竞争生长过程进行了模拟. 研究了晶粒结构及晶体取向随定向凝固过程的变化规律, 并与实验结果进行了对比, 两者吻合较好. 基于模拟与实验的研究, 获得了螺旋参数对选晶行为的影响规律及作用机理, 提出了选晶器螺旋段的设计准则.

关键词 数值模拟, 选晶行为, 晶粒取向, EBSD

THE SIMULATION AND EXPERIMENTAL STUDIES ON GRAIN SELECTION BEHAVIOR OF SINGLE CRYSTAL SUPERALLOY

II. SPIRAL PART

ZHANG Hang¹⁾, XU Qingyan¹⁾, SUN Changbo²⁾, QI Xiang¹⁾, TANG Ning¹⁾, LIU Baicheng¹⁾

1) Key Laboratory for Advanced Materials Processing Technology, Ministry of Education, School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084

2) Shenyang Liming Aero-Engine Group Corporation Ltd., Shenyang 110043

Correspondent: XU Qingyan, associate professor; Tel: (010)62795482, Fax: (010)62773637

Supported by National Basic Research Program of China (No.2011CB706801), National Natural Science Foundation of China (No.51171089), National Science and Technology Major Project (Nos.2011ZX04014-052 and 2012ZX04012-011)

ABSTRACT The spiral selector is the key part for producing single crystal (SX) blades and ensures the integrity of crystal, which mainly includes starter block and spiral part. In this paper, the influence of spiral part on the grain selection process was studied. Both of the metallography results and EBSD results proved that the prior location and the special orientation of the second dendrite arms were important for the grains competitive growth during the directional

项目资助: 国家重点基础研究发展计划项目 2011CB706801, 国家自然科学基金项目 51171089, 以及国家科技重大专项项目 2011ZX04014-052 和 2012ZX04012-011 资助

张航, 男, 19 年生, 博士生

solidification process. Based on the experimental results, two geometrical restrict mechanisms of grain selection were proposed. They were the competitive stimulating effect on the second dendrite arms in horizontal direction, which was resulted from the spiral arc shape, and the growing blocking effect on the primary dendrites in vertical direction, which was resulted from the take-off angle of the spiral part. These models could successfully explain the grain selecting effects of the spiral part. The modified cellular automaton (MCA) technology was used to simulate the grains' competitive growth in spiral part. The changes of grains structure and orientation as the grain growing on were studied. The simulated and experimental results were compared and agreed well. Based on the simulated and experimental results, Influences of structural parameters on the grain selection behavior were proposed. The criteria for designing spiral part were also presented.

KEY WORDS numerical simulation, grain selection behavior, grain orientation, EBSD

定向凝固单晶涡轮叶片是通过选晶器来获得单晶组织的. 选晶器的结构直接影响选晶效果进而影响产品合格率. 传统的选晶器包括缩颈型、转折型、倾斜型和螺旋型等多种结构^[1], 这 4 种选晶器的主要区别在于选晶段(选晶器引晶段以上部分)不同. 螺旋选晶器因具有较好的选晶效果而被广泛采用. 螺旋选晶器的设计参数较多, 而且空间结构复杂, 从而增加了研究的难度.

近年来数值模拟技术已经成为选晶器研究的重要手段. 定向凝固数值模拟于上世纪 90 年代得到了快速的发展, 其研究基于凝固基本理论^[2, 3]、枝晶生长理论^[4-6]以及高温合金材料的研究^[7, 8]. 其中 Gandin 和 Rappaz 等^[9-13]采用元胞自动机 (CA) 结合有限元 (FE) 方法实现了定向凝固过程的温度场与组织模拟, 并研发了 ProCAST 商用软件的定向凝固模块. 我国的科研人员^[14-18]相继开展了定向凝固模拟的相关研究工作, 其中, 文献等^[14-16, 19, 20]采用元胞自动机-有限差分 (CA-FD) 方法实现了定向凝固过程的温度场和组织模拟计算.

国内外学者已经开展了大量选晶方面的研究. Carter 等^[21]研究了螺旋段对枝晶二次臂取向的重要影响. Esaka 等^[22]采用模拟手段分析了二维简化螺旋选晶器的结构参数对选晶效果的影响. Epishin 等^[23]对螺旋选晶器螺旋段不同截面晶粒竞争演化过程进行了实验研究, Seo 等^[24]采用 ProCAST 软件模拟了 3 转折角选晶器的选晶过程并与实验进行了对比分析. 潘冬等^[25, 26]采用数值模拟技术结合 EBSD 实验手段对螺旋段

的截面晶粒分布情况进行了研究. Dai 等^[27-29]采用 ProCAST 软件模拟研究了不同结构的螺旋选晶器, 并与实验进行了对比, 获得了部分参数对选晶作用的定性规律. Jiang 等^[30]对 Ni₃Al 基高温合金的选晶过程进行了研究, Meng 等^[31, 32]采用 ProCAST 软件对不同参数的螺旋选晶器进行了模拟计算, 并与实验结果进行了对比. Gao 等^[33]采用 EBSD 实验技术观察分析了螺旋段横截面晶粒竞争生长特征, 并指出螺旋选晶器的狭长通道的阻碍作用是选晶的主要原因.

本研究采用 CA-FD 方法, 自主开发了单晶叶片定向凝固的数值模拟程序, 对单晶选晶过程进行了模拟计算. 设计了 EBSD 实验方案, 分析了螺旋段截面的晶粒结构及取向特征, 获得了螺旋参数对选晶行为的影响规律及作用机理, 并提出了选晶器螺旋段的设计准则.

1. 螺旋段的实验研究

1.1 螺旋结构设计及实验方案

螺旋选晶器的结构可以分为 3 个部分, 引晶段、螺旋段和过渡段. 其中螺旋段的结构设计是影响选晶效果的关键, 如图 1 所示. 螺旋段的主要结构参数包括: 螺旋段螺距 h_s , 螺径 d_s , 螺旋升角 θ , 以及螺旋线直径 d_w . 其中, 螺距 h_s , 螺径 d_s 和螺旋升角 θ 满足关系式(1):

$$h_s = \pi d_s \tan \theta \quad (1)$$

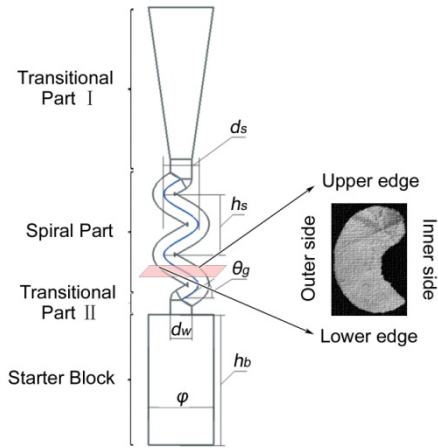


图1 螺旋选晶器的结构及设计参数
Fig.1 Structure and designing parameters of spiral selector (h_s ---pitch of spiral part, d_s ---diameter of spiral part, θ ---take-off angle, d_w ---diameter of spiral line)

螺旋选晶过程包括2个阶段,晶粒在引晶段底端随机形核,并在定向的温度梯度条件下生长并进行竞争和淘汰过程,最终只有1部分最优取向与热流方向接近的晶粒继续生长进入螺旋段;柱状晶生长进入螺旋段后,在特殊结构的限制条件下完成竞争生长,最终有一个晶粒被选择出实现了选晶过程,如果有2个或多个晶粒选择出,则选晶过程失败。

实验中采用的螺旋选晶器参数如表1所示.图2为螺旋选晶器的组模方式.实验步骤包括制壳、浇注、脱壳、解剖、腐蚀等.同时采用EBSD方法分析了不同截面的晶粒分布及取向特征。

表1 螺旋选晶器结构参数表

Table 1 Structural parameters of spiral selectors ($d_w=5$ mm)

Group	h_s , mm	d_s , mm	θ , deg
G1	14	8	29.1
G2	10	8	21.7

Note: θ can be calculated by formula (1)

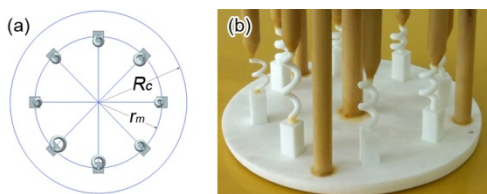


图2 螺旋选晶器的组模方式

Fig.2 Molding pattern of the spiral selector

(a) Molding pattern (top view)

(b) picture of the wax pattern

对选晶器的螺旋段进行截面分析,当螺旋旋转角每增加 90° 时取1个水平截面,并采用Zeiss(Axio Imager A1m)金相显微镜进行金相(OM)分析;采用机械抛光方法对样品进行处理,并使用JEOL 6301F场发射扫描电镜进行EBSD观察.各截面位置如图3所示.截面距引晶段顶面高度如表2所示.

表2 螺旋段的截面与对应高度

Table 2 Corresponding table of height (distance between the top surface of starter block and the position where the corresponding section was cut) and sections in the spiral part ($d_w=5$ mm)

Section	Height, mm	
	G1	G2
S1	1	1
S2	4	4
S3	7.5	6.5
S4	11	9
S5	14.5	11.5
S6	18	14



图3 螺旋截面位置示意图

Fig.3 Schematic of the sections'

positions of the spiral part (S1---S6: the sections of different heights; h_1 --- h_6 : the corresponding heights of sections.)

1.2 实验结果及分析

1.2.1 金相及EBSD取向成像结果

一般情况下,进入到螺旋段的晶粒取向夹角小于 15° .此时通过一次臂取向难以区分不同晶粒,因而需要考虑二次臂的取向差异来分辨不同晶粒.图4所示为螺旋段不同横截面的组织实验结果.由图4b可知,晶粒生长进入螺旋段时,其数目较多;而靠近截面下沿和截面内侧的晶粒的二次臂发生

了小部分侧向生长. 随着凝固过程进行, 上述晶粒的二次臂进一步横向长大, 而靠近螺旋上沿和螺旋外侧的晶粒数目和尺寸都在竞争中减小, 如图 4c 和 d 所示. 随着凝固过程的进行, 最终只有一个晶粒在竞争中获胜, 生长为单晶.

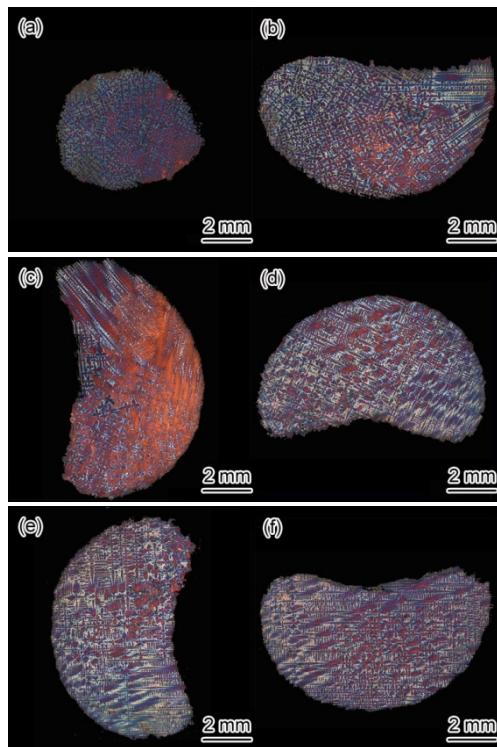


图 4 G1 组螺旋段不同横截面的组织照片
Fig.4 Experimental results of microstructures at different sections in spiral part of G1

(a) S1 (b) S2 (c) S3
(d) S4 (e) S5 (f) S6

图 5 所示为螺旋段不同截面的 EBSD 晶粒取向成像图. 处于过渡段的晶粒边界清晰, 数目较多, 如图 5a 所示. 当晶粒生长进入螺旋段时, 螺旋下沿、内侧的晶粒迅速扩张生长, 最终选择的单晶组织占据整个截面面积, 如图 5f.

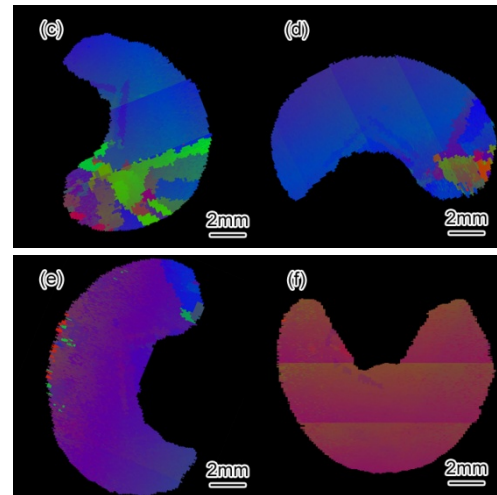
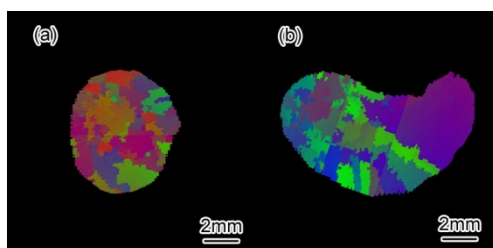


图 5 G2 组螺旋段不同截面 EBSD 的晶粒取向成像图

Fig.5 EBSD grains' orientation images of different sections in spiral part of G2

(a) S1 (b) S2 (c) S3
(d) S4 (e) S5 (f) S6

1.2.2 晶粒生长特征分析

(1) 螺旋下沿的晶粒竞争生长

螺旋选晶过程中螺旋下沿的晶粒呈现扩张生长, 如图 4 和 5 所示. 图 6 为螺旋下沿晶粒侧向扩张生长过程. 螺旋下沿的二次臂沿 $[100]$ 和 $[010]$ 方向扩张生长, 不同取向枝晶在二次臂方向的生长长度不同, 出现了明显的竞争生长现象. 由图 6a 可知, 晶粒 A 和晶粒 B 的二次臂沿 $[100]$ 方向同时生长, 且两者二次臂晶向存在一定夹角, 出现了竞争. 当各晶粒继续生长, 螺旋旋转 90° 之后, 晶粒生长结果如图 6b 所示. 此时, 晶粒 A 和晶粒 B 尺寸都有所变大. 晶粒 A 沿的二次臂生长停止, 而沿 $[010]$ 方向的二次臂快速生长, 并完全占据了螺旋上沿. 而晶粒 B 的 $[100]$ 方向二次臂受到圆弧侧壁阻碍而停止生长. 由图 6 可知, 晶粒 A 靠近螺旋下沿和螺旋内侧, 因而具有明显的位置优势有利于晶粒二次臂扩张生长. 而晶粒 B 靠近螺旋外侧, 不具有空间优势而最终被淘汰.

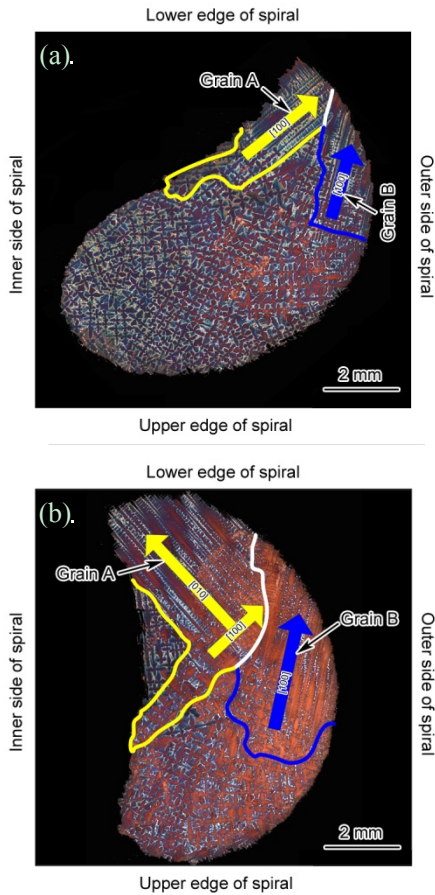


图6 螺旋下沿晶粒扩张生长
Fig.6 Extending growth at the lower edge of spiral part

(a) S2 (b) S3

由上述分析, 从金相实验结果及 EBSD 取向成像结果可知螺旋段通过提供弯曲的几何结构, 促进各晶粒二次臂在水平方向的

发生竞争生长, 从而对部分晶粒的淘汰, 完成选晶过程. 其中靠近螺旋上沿和螺旋内侧的晶粒在竞争生长中具有较大的位置优势, 极易被选择出来并长大为最终的单晶组织.

(2) 螺旋上沿的晶粒竞争淘汰

由图 5 可知, 螺旋下沿的晶粒二次臂扩张生长是快速淘汰其他晶粒的一个因素. 但是通过研究发现, 螺旋上沿的晶粒数目及晶粒占据的截面面积随螺旋上升过程也在不断减小.

图 7 为螺旋上沿区域与螺旋下沿区域 {001} 晶面极图对比结果. 可以看出, 螺旋下沿的杂晶淘汰过程较快, 当到达 S4 截面时已经成为一个晶粒. 而螺旋上沿的杂晶淘汰过程较慢, 当到达 S6 截面时仅剩余一个晶粒. 并且由图 5f 可知, 到达 S6 截面时, 已经形成了单晶组织.

由上述分析可知, 螺旋上沿也存在一定晶粒竞争淘汰作用, 只是其对杂晶的淘汰速度要小于螺旋下沿.

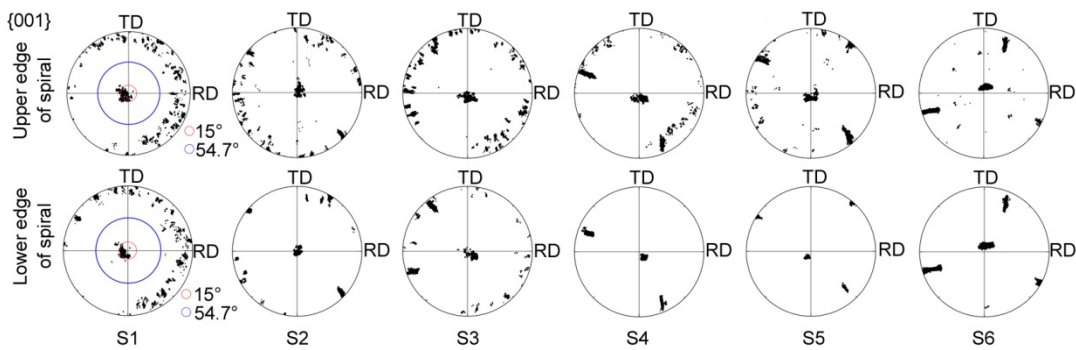


图 7 螺旋上下沿晶粒 {001} 晶面极图

Fig.7 Pole figures of {001} crystal face at upper edges and lower edges of spiral

2. 螺旋段晶粒竞争生长机理

根据上述实验结果, 在螺旋截面下沿和

螺旋内侧出现了明显的晶粒的二次臂扩张生长, 导致部分晶粒在竞争中被淘汰; 靠近

螺旋上沿和螺旋外侧的晶粒生长受到限制而部分被淘汰。对上述实验规律进行总结, 提出螺旋选晶器的两个重要选晶机制。

2.1 晶体几何限制生长机制 I ——水平方向的二次臂竞争促进作用

晶粒进入到螺旋段时, 最优取向与 z 方向(热流反方向)夹角较小, 一般小于 15° [25], 此方向上晶粒竞争生长弱化。螺旋段的

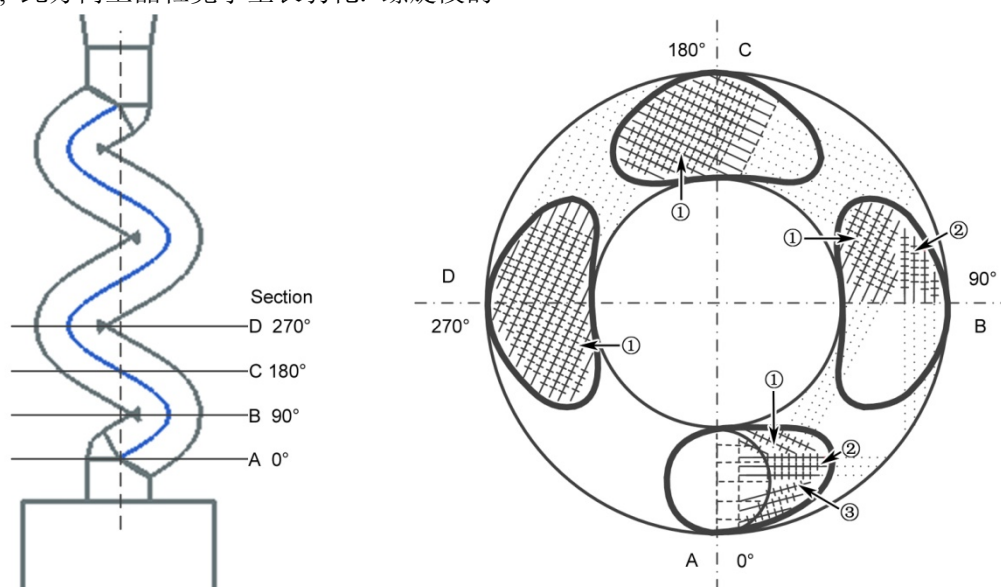


图 8 螺旋段晶粒二次臂竞争生长二维投影示意图

Fig.8 The 2D projected schematic diagram of grains second dendrite arm competition growth in spiral part

(a) the positions of sections

(b) schematic of grain competition

凝固过程中, 当晶粒在引晶段完成竞争生长后, 进入过渡段时有一定数目晶粒留存。这些晶粒的最优生长方向 $[001]$ 与 z 方向夹角较小, 但其二次臂即 $[010]$ 和 $[100]$ 方向分布随机。

这些晶粒继续生长并进入螺旋段, 如图 8b 中 A 截面。靠近螺旋下沿的晶粒沿 $[010]$ 和 $[100]$ 方向的二次臂开始快速生长, 但是由于圆弧几何结构限制, 部分晶粒的二次臂生长受到限制。这个过程中发生了激烈的晶粒竞争生长。图 8 的晶粒①, 晶粒②和晶粒③发生了二次臂的竞争生长。

当晶粒继续生长, 螺旋上升并旋转 90° 之后, 靠近螺旋下沿晶粒的二次臂充分生长, 晶粒尺寸变大, 如图 8b 所示 B 截面中的晶粒①和晶粒②。其中晶粒①更靠近螺旋下沿和螺旋内侧, 其晶粒尺寸最大。主要原因为: 一方面晶粒①靠近螺旋下沿和螺旋内侧, 需要向前扩延生长较小的距离即可生长到达凝固界面前沿, 因而在竞争生长中占据时间优势; 另一方面晶粒①已经长大的枝晶贯穿螺旋线宽度

主要作用为提供几何限制条件从而促进二次臂的竞争生长, 实现选择单晶的目的。

为了说明水平方向上的晶粒二次臂竞争生长和选择机制, 对螺旋段进行二维俯视图投影。图 8 为螺旋段晶粒二次臂竞争生长二维投影示意图, 其中加粗线表示对三维实体进行横向剖切后获得的截面边际线。

(dw), 其阻碍了其他靠近螺旋外侧和螺旋前沿的晶粒沿螺旋通道继续生长, 导致晶粒①在竞争生长中占据空间优势。所以晶粒①的尺寸较大, 如图 8b 中 B 截面所示。

随着凝固进行, 晶粒①继续生长, 而晶粒②生长完全被晶粒①和圆弧几何结构所阻碍。当生长到达图 8b 中 C 截面时, 晶粒①已经完全占据了螺旋下沿。而螺旋外侧的晶粒②则被竞争生长所淘汰。进而当晶粒继续生长达到图 8b 中 D 截面时, 晶粒①可能会占据整个截面, 而形成单晶组织。

上述模型成功解释了螺旋段是通过提供水平方向的圆弧几何限制条件来促进晶粒二次臂的竞争生长。同时模型指出了靠近螺旋下沿和螺旋内侧的晶粒在竞争生长中具有几何优势, 更容易并被选择出来生长为最终的单晶组织。

该模型指出晶粒二次臂取向、位置分布及螺旋段水平圆弧结构都是影响选晶过程的因素, 该模型是对已有实验结果的总结和提炼。

2.2 晶体几何限制生长机制 II——竖直方向的一次臂限制作用

螺旋选晶器主要通过螺旋升角的设计, 提供晶粒生长的几何限制条件, 实现对部分晶粒的淘汰作用, 其在纵向的选晶行为类似于倾斜型选晶器^[22].

图 9 为不同升角螺旋选晶器的晶体限制淘汰二维示意图. 当螺旋升角较大为 θ_1 时, 在同样的生长高度 H 时, 晶粒⑤和晶粒⑥被淘汰. 如图 9b 所示, 当升角减小为 θ_2 时, 在同样的生长高度 H 时, 晶粒②---⑥均被淘汰, 仅剩余晶粒①能够继续生长. 当升角减小为 θ_3 时, 在同样的生长高度 H 时, 晶粒②---⑥均被淘汰, 晶粒①生长也被抑制, 其侧枝保持继续生长. 在图 9c 中, 当生长高度到达 $h(h<H)$ 时, 晶粒②~⑥已经被淘汰, 仅剩余晶粒①能够继续生长.

由上述分析可知, 螺旋升角提供的几何限制条件与螺旋边界的倾斜程度以及底边直径 a 直接相关. 对二维情况, 当满足 $H > a \cdot \tan\theta$, 螺旋升角的几何限制淘汰作用将得到充分发挥, 仅有靠近螺旋下沿的晶粒 (如晶粒①) 被选择出. 对实际三维条件, 应当满足 $hs > H$; 但是由于螺旋角的复杂结构以及凝固过程温度场的倾斜分布将导致不同角度枝晶生长的速度有所差异, 影响选晶效果. 所以需要提供的螺距 hs 也应远大于 $dw \cdot \tan\theta$, 才能满足成功选择出单晶组织的条件.

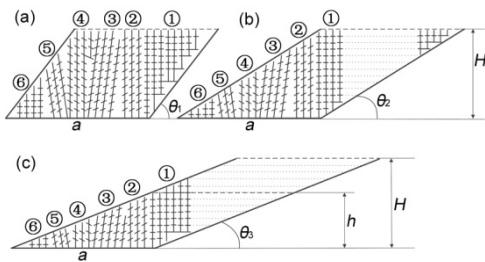


图 9 $\theta_1 < \theta_2 < \theta_3$ 螺旋升角的限制淘汰作用示意图

Fig.9 Schematic diagram of geometry restricting and obsoleting effect of spiral take-off angle ($\theta_1, \theta_2, \theta_3$ ---different take-off angles; H ---a certain growth height; h ---the height that grains②---⑥ were eliminated by competition growth; a ---the width of growth passageway in 2D)

(a) Inclined growing channel with the angle of

θ_1

(b) inclined growing channel with the angle of

θ_2

(c) inclined growing channel with the angle of

θ_3

竖直方向的一次臂限制作用是螺旋段晶粒竞争生长的另一个重要机制. 此模型解释了螺旋升角 (θ) 与螺距 (hs) 及螺旋线直径 (dw) 之间关系对选晶效果的影响; 指出了晶粒具有的初始位置优势 (如接近螺旋下沿的晶粒①) 是晶粒在竞争中被选择出的关键. 模型成功解释了图 5 与图 7 的实验所示的螺旋上沿晶粒竞争生长的变化过程.

综上所述, 水平方向的二次臂竞争促进作用和竖直方向的一次臂限制作用是螺旋选晶的两个重要几何限制机理. 其解释了螺旋段在水平方向提供的圆弧结构条件对枝晶二次臂竞争生长的促进作用以及在竖直方向上通过螺旋升角对枝晶一次臂的限制淘汰作用. 实际螺旋选晶器是两种作用机制的叠加, 合理设计螺旋圆弧直径 (ds) 及螺旋升角 (θ)、螺距 (hs)、螺旋线直径 (dw) 将直接影响螺旋选晶效果.

2.3 基于螺旋段晶粒竞争生长机理的建模

元胞自动机 (CA) 方法是通过定义一系列作用规则反映元胞之间的短程或长程作用, 从而模拟微观组织的演化过程的.

本工作采用修正的元胞自动机方法 (MCA), 考虑上述晶体几何限制生长机制 I 和 II, 对螺旋选晶过程进行计算机数值模拟.

螺旋段的选晶作用主要为几何结构限制, 因此恰当选择微观组织模拟的网格尺寸是合理反映螺旋选晶机制的关键. 凝固过程的组织演化 CA 模型可以采用式 (2) 进行描述:

$$\zeta_{i,j,k}^t = \prod_{x=T,\Delta T,C,V,\dots} f(x_{i,j,k}^t) \times \prod_{\tau=1}^{\Gamma} f^{\tau-n\Delta T} (\zeta_{i-l,j-m,k-n}^{\tau-n\Delta T}, l \in [-L, L], m \in [-M, M], n \in [-N, N]) \quad (2)$$

式 (2) 中, $\zeta_{i,j,k}^t$ 为 t 时刻 (i, j, k) 单元的态变量值;

$f(x)$ 为元胞自动机所规定的变换规则; $x_{i,j,k}^t$ 为 t 时刻 (i, j, k) 单元的具体物理量, 可能为 T (温度), ΔT (温度变化), C (溶质), V (体积) 等等; Γ 表示时间

作用域大小; L, M, N 表示空间作用域大小; Γ, L, M, N 都为正整数.

对于有限差分 (FD) 选择正六面体单元作为元胞, 令 Ψ 为耦合不同维度的参数.

$$\Psi = L + M + N \quad (3)$$

式(3)中, 当 $\Psi \leq 1$ 时, 组成作用域为 von Neumann 类型元胞; 当 $\Psi \leq 2$ 时, 组成作用域为摩尔类型元胞; $\Psi \leq 3$ 时, 组成作用域为所有邻接元胞. CA 模型在多种尺度系统都是适用的, 而具体适用尺度由式(3)中的整数单位所确定. 定义 δl 为离散单元空间步长, 在模拟计算中考虑所有邻近元胞作用

($\Psi \leq 3$) 情况, 则微观作用长度 $l(\psi)$ 满足以下条件:

$$l(\psi) \leq 3 \cdot \delta l \quad (4)$$

$$l(\psi) \leq \lambda_1 \quad (5)$$

式中, λ_1 为枝晶一次臂间距. 根据上述分析, 在考虑几何结构限制条件下, 选择合理的网格尺寸是反映螺旋选晶过程的关键. 因此模拟中微观作用长度应满足条件式(5). 因而模拟网格单元步长近似为 $\delta l \approx \lambda_1 / 3$. 实际定向凝固过程中枝晶平均间距 $\overline{\lambda_1}$ 约为 $0.3 \text{ mm}^{[34]}$, 本研究测量枝晶平均间距为 0.32 mm (如图 4 所示). 因此模拟螺旋选晶几何限制生长过程中离散单元空间步长 δl 约取为 10^{-4} m .

3. 螺旋段晶粒生长的数值模拟研究

3.1 螺旋段晶体生长的模拟与实验对比

本研究对螺旋选晶器中的晶体生长进行了模拟计算, 计算结果如图 10 所示. 模拟中采用宏微观耦合算法, 其中宏观温度场网格单元尺寸为 $0.6 \text{ mm} \times 0.6 \text{ mm} \times 0.6 \text{ mm}$, 微观组织计算采用网格单元尺寸为 $0.15 \text{ mm} \times 0.15 \text{ mm} \times 0.15 \text{ mm}$. 材料为国产第二代单晶高温合金 DD6. 模拟采用的基本参数如表 3 所示.

表 3 DD6 合金的热物性参数^[25, 35]

Tab. 3 The thermophysical parameters of DD6 superalloy^[25, 35]

Parameters	Value
Liquidus, K	1672

Solidus, K	1615
Specific heat, kJ/(kg · K)	0.773
Density, kg/m ³	8780
Latent heat, kJ/kg	99

图 10 为螺旋段不同横截面的晶粒结构模拟结果. 图中的晶粒竞争选择过程与晶体几何限制生长机制 I 的竞争生长过程分析结论基本一致. 最终靠近螺旋下沿及螺旋内侧的晶粒扩张生长, 形成单晶组织.

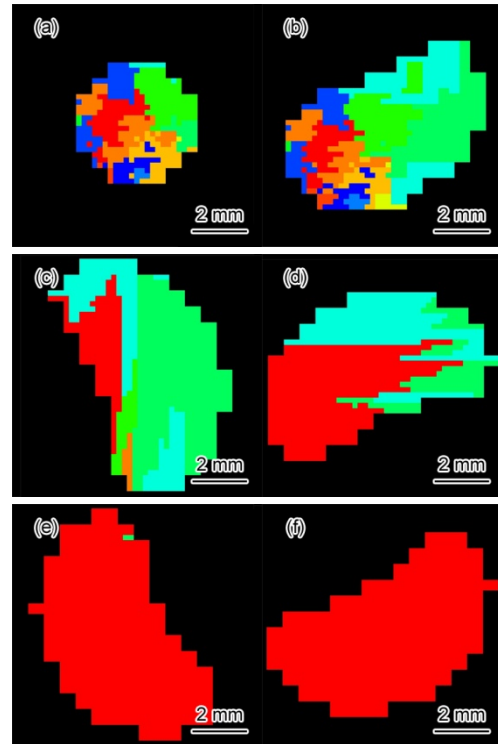


图 10 G1 组螺旋段不同横截面的晶粒结构模拟结果

Fig.10 Simulation results of grain structure of different sections in spiral part of G1

(a) S1 (b) S2 (c) S3

(d) S4 (e) S5 (f) S6

从图 5 和图 10 可以看出, 模拟结果基本反映了实际螺旋选晶器螺旋段的竞争生长过程, 而实验结果可以清晰地反映一次枝晶的形貌及间距特征, 同时能够观察二次臂的扩张生长特征; 模拟计算能够清晰反映不同晶粒的竞争分布, 体现晶粒在螺旋几何限制条件下的动态生长过程.

图 11 为不同晶粒的取向成像图. 从图中可以看出, 当晶粒进入过渡段时, 晶粒[001]取向与 z 方向夹角均小于 15° , 当截面位置高度大于 14.5 mm

时, 夹角已经趋于 0° , 选择出的晶粒取向符合要求.

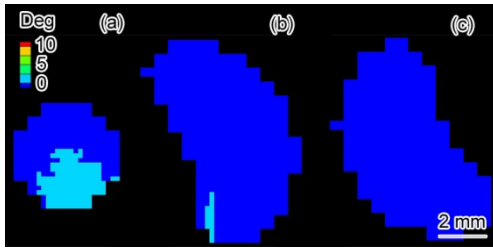


图 11 螺旋段横截面的晶粒[001]取向与 z 方向夹角模拟结果

Fig.11 Simulation results of angles between [001] orientation and z direction of some sections in spiral part

(a) S1 (b) S3 (c) S5

3.2 螺旋结构参数对选晶影响规律的模拟研究

采用模拟技术对螺旋结构参数与选晶作用进行研究. 由图 10 和图 11 可知, 进入螺旋段的晶粒数目较多, 且晶粒的[001]取向与 z 方向(热流反方向)的夹角都在 15° 以内. 选晶器设计的要求有两点: (1)获得单晶的取向与 z 方向夹角小于 15° ; (2)获得单晶的位置不能太高(一般 1---2 倍 h_s 以内). 对 (1)要求, 由前文引晶段的研究结果可知, 当定向凝固条件合适时, 进入螺旋段的晶粒基本符合标准. 当[001]取向满足条件时, [010]和[100]方向的二次臂便成为影响选晶过程的关键, 也直接决定了获得单晶的位置.

表 4 模拟计算中螺旋选晶器结构参数表

Tab.4 The structure parameters of spiral selectors for simulation calculation ($dw=5$ mm, $hs=14$ mm)

Group	d_s , mm	θ , deg
M1	8	29.1
M2	10	24.7
M3	12	20.4
M4	14	17.7

表 4 给出模拟计算中采用的螺旋选晶器结构参数, 其中选晶器统一采用两圈螺旋结构. 考虑二次臂的随机分布特征, 对表中每组参数模型开展 10 次计算, 统计获得单晶的高度及单晶取向值.

图 12 与图 13 分别为不同结构参数螺旋选晶器凝固过程的温度场及糊状区分布变化云图. 由图可知, 温度场分布基本符合定向凝固一维传热特征.

而图 13c 中, 糊状区分布较宽, 并且出现了温度场反常分布区域, 图中黑色框所示. 在这种温度场反常区域中极易出现杂晶形核及生长现象, 不利于单晶选晶过程. 这种区域的出现与众多因素有关, 螺旋段结构设计、抽拉速度等等. 而主要由于螺旋段圈数过多和螺旋升角较小, 造成单向散热条件较差; 同时来自下部冷区的辐射也会对该区域直接辐射降温, 造成温度局部过冷.

因而螺旋圈数过多和螺旋升角较小都不利于选晶过程. 设计上以选出单晶组织为原则, 尽量减小螺旋圈数.

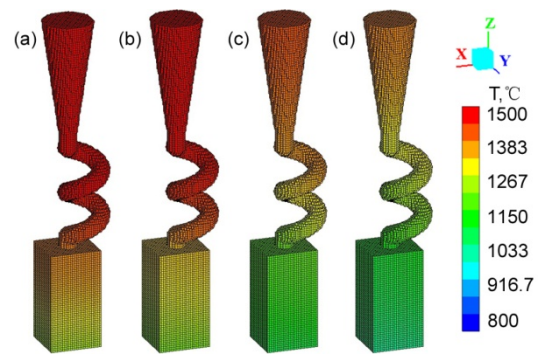


图 12 M2 组定向凝固温度场的模拟计算结果

Fig.12 The simulation results of directional solidification temperature fields of M2 group

(a)30%, 630 s (b)50%, 840 s

(c)65%, 1200 s (d)75%, 1350 s

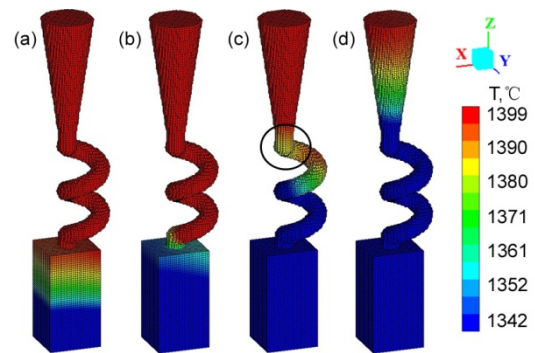


图 13 M2 组定向凝固过程中糊状区的变化

Fig.13 The changes of mushy zone during the directional solidification process of M2 group

(a)30%, 630 s (b)50%, 840 s

(c)65%, 1200 s (d)75%, 1350 s

图 14 为 M2 组定向凝固过程的组织模拟计算结果. 图中对应给出了凝固分数为 30%, 50%, 65%和 75%时的组织分布, 当凝固分数大于 50%时, 晶体生长到达螺旋段, 开始了二次臂的竞争生长过程.

从图 14c 中可见，靠近螺旋内侧的晶粒在竞争生长中具有明显优势，进而淘汰其他晶粒，并最终生长成单晶组织。

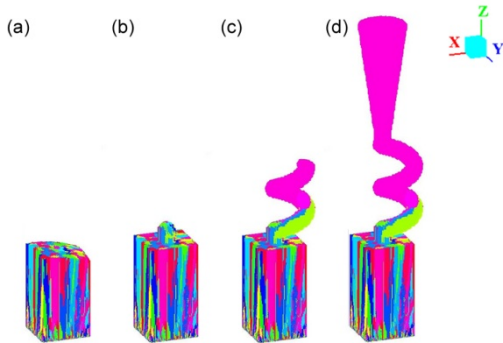


图 14 M2 组定向凝固组织计算结果
Fig.14 The simulation results of directional solidification microstructure growth of M2 group

(a)30%, 630 s (b)50%, 840 s
(c) 65%, 1200 s (d)75%, 1350 s

对不同螺旋直径 d_s 的凝固组织模拟计算结果进行对比，如图 15 所示。当晶粒进入螺旋段后，因为 d_s 参数不同，晶粒竞争生长情况各异，单晶组织出现位置高度不同。从图中可以看出，当 d_s 增大时，单晶形成高度位置逐渐降低。

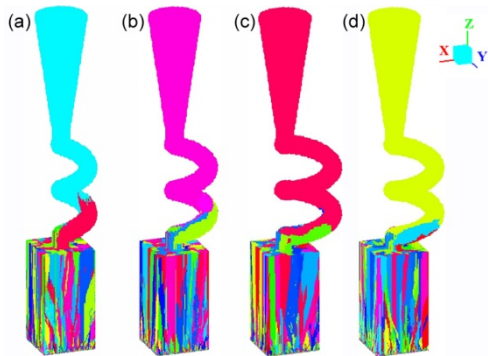


图 15 不同参数的螺旋选晶器定向凝固模拟组织计算结果

Fig.15 The simulation results of directional solidification microstructure growth of spiral selector with different parameters

(a) $d_s=8$ mm (b) $d_s=10$ mm
(c) $d_s=12$ mm (d) $d_s=14$ mm

考虑晶粒的二次臂随机分布特征，对不同 d_s 的螺旋选晶器进行了多次模拟计算，并统计分析单晶

形成高度位置和 d_s 参数的相互关系。

图 16 为单晶形成高度位置分析图。图中分布多段弧形曲线，其中，弧形的半径等于 $d_s/2$ 。弧形的弧度范围采用以下步骤确定：首先确定螺旋选晶器单晶出现位置，同时测算该位置距离螺旋段起始位置的圆弧旋转角度记为单晶形成角度；根据单晶形成角度和半径确定各组实验结果在图 16 中的对应点，从而形成图中所示的弧度范围。弧形半径表示了当螺旋段 d_s 不同时，单晶形成的位置（对应单晶形成角度）有所不同；弧度范围表示了不同 d_s 的螺旋选晶器单晶出现位置的可能范围。

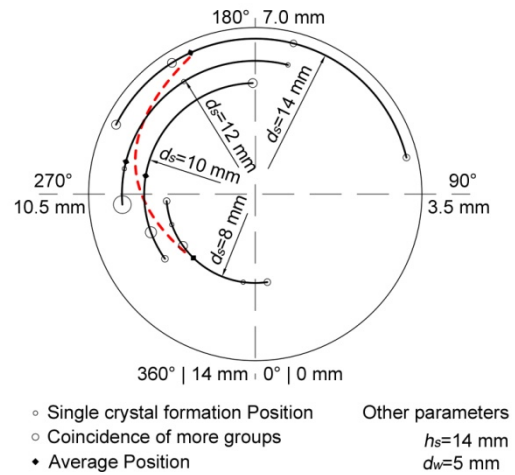


图 16 单晶形成高度位置

Fig.16 The height of single crystal formed

从图 16 可以看出，单晶组织的形成位置具有如下特征：

(1) d_s 增大时，单晶形成角度减小，对应位置降低。当 d_s 由 8 mm 增大至 14 mm 时，单晶形成角度平均值由 314.9° （对应高度为 12.2 mm）降低至 204.6° （对应高度为 8.0 mm）。图 17 为单晶形成角度平均值与 d_s 的线性关系图。

特征 (1) 的成因分析如下：在 h_s 不变的条件下，当 d_s 增大时，根据式 (1)，螺旋升角 θ 减小。根据晶体几何限制生长机制 I， d_s 增大有利于促进晶粒二次臂水平方向的竞争生长，使晶粒竞争淘汰加快，单晶形成高度位置降低；另一方面，根据晶体几何限制生长机制 II， θ 减小，加强了竖直方向的几何限制淘汰作用，使单晶形成高度位置降低。因此， h_s 不变时，增大 d_s 或者减小 θ ，都将增强几何限制生长作用，使单晶形成高度位置降低。

(2) d_s 增大，单晶形成角度范围加宽。当 d_s 由 8

mm 增大至 14 mm 时, 单晶形成角度范围由 93.4° 增大至 155.3° , 如图 16 所示. 因而, ds 较大时单晶形成高度位置的稳定性较差.

特征 (2) 的成因分析如下: 由晶体几何限制生长机制 I 和 II 分析可知, 晶粒竞争优势是晶粒的位置优势和晶粒二次臂取向优势的综合体现. 当 ds 增大时, 水平方向的二次臂竞争促进作用 (机制 I) 被强化, 具有二次臂取向优势的晶粒可能快速阻碍其他晶粒并在较低位置形成单晶组织; 同时, 垂直方向的一次臂限制作用 (机制 II) 被强化, 具有位置优势的晶粒可能快速生长并在较低位置形成单晶组织. 上述两种机制作用下的随机现象同时存在, 强化了晶粒竞争生长的随机性特征, 因而单晶形成角度范围明显较宽. 反之, 当 ds 较小时, 两种模型的强化作用同时被减弱, 只有同时具有二次臂生长优势和初始位置分布优势的晶粒才可能竞争淘汰其他晶粒形成单晶组织, 因此选晶过程的随机性被弱化, 单晶形成角度范围也将变窄.

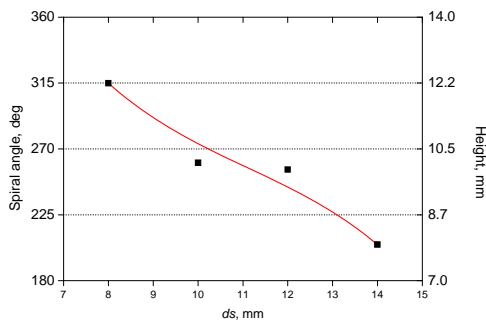


图 17 单晶形成角度平均值与 ds 的关系图
Fig.17 Relationship chart between ds and the single crystal average appearing height

4. 结论

(1) 采用 EBSD 及金相实验技术, 获得了螺旋选晶器不同高度位置的晶粒结构及晶粒取向, 分析了螺旋选晶过程的晶体竞争生长行为, 指出具有位置优势和取向优势的晶粒在竞争中更容易被选择出. 根据实验结果, 提出了晶粒几何限制生长的两个重要机制, 从原理上解释了水平方向的二次臂竞争促进作用 (机制 I) 和垂直方向的一次臂限制作用 (机制 II) 是螺旋段的主要工作机制.

(2) 基于晶粒几何限制生长机制进行数理建模分析, 合理选择模拟尺度. 对不同螺旋直径参数的螺旋选晶器进行模拟计算, 获得了定向凝固过程

中不同凝固百分比的温度场、糊状区, 以及组织分布的结果. 从温度场角度分析, 指出螺旋段的结构会破坏单向热流传输特点, 过多的螺旋圈数不利于选出单晶组织. 同时, 通过大量模拟计算结果, 统计了螺旋直径变化对单晶形成高度位置的影响. 结合晶体几何限制生长机制, 指出螺旋直径增加时, 选晶作用被加强, 单晶形成高度位置降低, 因此可以适当减小螺旋圈数. 但是螺旋直径的增加将导致晶粒竞争优势的随机性被强化, 晶粒可能形成位置范围变大. 实际的螺旋段设计应综合考虑二者的影响.

参考文献

- [1] Goulette M J, Spilling P D, Arthey R P. In: Kortovich C S, Bricknell R H, eds., *Superalloys 1984*. Warrendale, PA: TMS, 1984: 167
- [2] Kurz W, Fisher D J, translated by Mao X M, Bao G Q. *Fundamentals of Solidification*. Xi'an: Northwestern Polytechnical University Press, 1987: 20
(Kurz W, Fisher D J 著, 毛协民, 包冠乾译, 凝固原理. 西安: 西北工业大学出版社, 1987: 20)
- [3] Glicksman M E. *Principles of Solidification an Introduction to Modern Casting and Crystal Growth Concepts*. New York: Springer Science Business Media, 2011: 305
- [4] Kurz W, Fisher D J. *Acta Mater*, 1981; 29: 11
- [5] Kurz W, Giovanola B, Trivedi R. *Acta Metall*, 1986; 34: 823
- [6] Oldfield W. *Mater Sci Eng*, 1973; 11: 211
- [7] Reed R C. *The Superalloys Fundamentals and Applications*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2006: 121
- [8] Shi C X, Zhong Z Y. *Acta Metall Sin*, 2010; 46: 1281
(师昌绪, 仲增墉. 金属学报, 2010; 46: 1281)
- [9] Gandin C A, Rappaz M, Tintillier R. *Metall Mater Trans*, 1994; 25A: 629
- [10] Gandin C A, Rappaz M. *Acta Mater*, 1997; 45: 2187
- [11] Gandin C A, Rappaz M. *Acta Metall Mater*, 1994; 42: 2233
- [12] Gandin C A, Desbiolles J L, Rappaz M, Thevoz P. *Metall Mater Trans*, 1999; 30 A: 3153

- [13] Rappaz M, Gandin C A. *Acta Metall Mater*, 1993; 41: 345
- [14] Tang N, Xu Q Y, Liu B C. *Spec Cast Nonferrous Alloys*, 2011; 31: 1028
(唐宁, 许庆彦, 柳百成. 特种铸造及有色合金, 2011; 31: 1028)
- [15] Pan D, Xu Q Y, Liu B C. *Acta Metall Sin*, 2010; 46: 294
(潘冬, 许庆彦, 柳百成. 金属学报, 2010; 46: 294)
- [16] Yu J, Xu Q Y, Cui K, Liu B C. *Acta Metall Sin*, 2007; 43: 731
(于靖, 许庆彦, 崔锴, 柳百成. 金属学报, 2007; 43: 731)
- [17] Guo Y G, Li S M, Liu L, Fu H Z. *Acta Metall Sin*, 2008; 44: 365
(郭勇冠, 李双明, 刘林, 傅恒志. 金属学报, 2008; 44: 365)
- [18] Shan F W, Huang W D, Lin X, Wei L. *Acta Metall Sin*, 2008; 44: 1042
(单博炜, 黄卫东, 林鑫, 魏雷. 金属学报, 2008; 44: 1042)
- [19] Liu B C. *China Mechan Eng*, 2000; 11: 76
(柳百成. 中国机械工程, 2000; 11: 76)
- [20] Zhang H, Xu Q Y, Tang N, Pan D, Liu B C. *Sci China (Engl Lett)*, 2011; 54E: 3191
- [21] Carter P, Cox D C, Gandin C A, Reed R C. *Mater Sci Eng*, 2000; A280: 233
- [22] Esaka H, Shinozuka K, Tamura M. *Mater Sci Eng*, 2005; A413: 151
- [23] Epishin A I, Nolze G. *Crystall Rep*, 2006; 51: 710
- [24] Seo S M, Kim I S, Lee J H, Jo C Y, Miyahara H, Ogi K. *Met Mater Int*, 2009; 15: 391
- [25] Pan D. *PhD Dissertation*, Tsinghua University, Beijing, 2010
(潘冬. 清华大学博士学位论文, 北京, 2010)
- [26] Pan D, Xu Q Y, Liu B C, Li J R, Yuan H L, Jin H P. *JOM*, 2010; 62: 30
- [27] Dai H J, D'Souza N, Dong H B. *Metall Mater Trans*, 2011; 42A: 3430
- [28] Dai H J, Dong H B, D'Souza N. *Metall Mater Trans*, 2011; 42A: 3439
- [29] Dai H J, Gebelin J, Newell M, Reed R C, D'Souza N, Brown P D, Dong H B. In: Reed R C, Green K A, Caron P, Gabb T P, Fahrman M G, Huron E S, Woodard S R, eds., *Superalloy 2008*, Warrendale, PA: TMS, 2008: 367
- [30] Jiang L, Li S, Han Y. *Procedia Eng*, 2012; 27: 1135
- [31] Meng X, Li J, Jin T, Sun X, Sun C, Hu Z. *J Mater Sci Technol*, 2011; 27: 118
- [32] Meng X B, Lu Q, Zhang X L, Li J G, Chen Z Q, Wang Y H, Zhou Y Z, Jin T, Sun X F, Hu Z Q. *Acta Mater*, 2012; 60: 3965
- [33] Gao S F, Liu L, Wang N, Zhao X B, Zhang J, Fu H Z. *Acta Metall Sin*, 2011; 47: 1251
(高斯峰, 刘林, 王柠, 赵新宝, 张军, 傅恒志. 金属学报, 2011; 47: 1251)
- [34] Liang Z J. *PhD Dissertation*, Tsinghua University, Beijing, 2003
(梁作俭. 清华大学博士学位论文, 北京, 2003)
- [35] Editorial Committee. *Practical Handbook of Engineering Materials. Version 2*, Beijing: China Standards Press, 2002: 771
(丛书编委会. 工程材料实用手册. 第2版; 北京: 中国标准出版社, 2002: 771)