

镁合金微观偏析相场法定量数值模拟

尧军平^{1,2}, 李翔光¹, 龙文元¹, 张磊¹, 王法军¹, 李文¹

(1. 南昌航空大学 轻合金加工科学与技术国防重点学科实验室, 南昌 330063;
2. 俄亥俄州立大学 工程学院, 哥伦布, 俄亥俄州 43210, 美国)

摘要: 以 AZ91D 合金为例, 模拟研究镁合金凝固时的溶质分布情况, 着重定量分析过冷度 ΔT 对枝晶尖端前沿最高溶质浓度、枝晶干轴对称中心溶质浓度、枝晶尖端溶质扩散层厚度以及溶质偏析比的影响。模拟结果表明: 贫 Al 区主要集中于一次枝晶干和二次枝晶臂的轴对称中心, 过冷度 ΔT 越大, 枝晶尖端前沿溶质浓度 c_L^* 越高, 枝晶干中心溶质浓度 c_S^* 越高, 枝晶尖端前沿溶质扩散层厚度 δ 越小, 偏析比 S_R 越大, 微观偏析越严重, 其具体关系分别为 $c_{L1}^* > c_{L2}^* > c_{L3}^* > c_{L4}^*$ 、 $c_{S1}^* > c_{S2}^* > c_{S3}^* > c_{S4}^*$ 、 $\delta_1 < \delta_2 < \delta_3 < \delta_4$ 和 $S_{R1} > S_{R2} > S_{R3} > S_{R4}$ 。

关键词: 镁合金; 相场法; 微观偏析; 计算机模拟; 密排六方结构

中图分类号: TG111.4 文献标志码: A

Numerical simulation of microsegregation of magnesium alloys quantitatively using phase-field method

YAO Jun-ping^{1,2}, LI Xiang-guang¹, LONG Wen-yuan¹, ZHANG Lei¹, WANG Fa-jun¹, LI Wen¹

(1. National Defence Key Discipline Laboratory of Light Alloy Processing Science and Technology Institute,
Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China;
2. School of Engineering, The Ohio State University, Columbus, OH 43210, USA)

Abstract: Based on the KKS model which couples the phase field, concentration field and temperature field, the phase-field model for the magnesium alloys with hex structure was developed, taking AZ91D magnesium alloy for example, the solute distribution during the metal solidification was simulated, the effects of supercooling (ΔT) on the highest solute concentration in front of the dendrite tip, the solute concentration value in the axis center of dendrite arm, the thickness of solute diffusion layer of aluminum in front of dendrite tip and solute segregation ratio were studied emphatically and quantitatively. The simulation results show that the zone of poor Al distributes in the axisymmetric center of primary dendrite arms secondary dendrite arms, the larger the supercooling ΔT is, the higher the concentration maximum value c_L^* in front of the dendrite tip is, the higher the concentration value c_S^* in the axis center of dendrite arm is, the smaller the boundary thickness δ of concentration in front of the dendrite tip is, the bigger the segregation ratio S_R is and the severer the microsegregation is. The relationships are $c_{L1}^* > c_{L2}^* > c_{L3}^* > c_{L4}^*$, $c_{S1}^* > c_{S2}^* > c_{S3}^* > c_{S4}^*$, $\delta_1 < \delta_2 < \delta_3 < \delta_4$ and $S_{R1} > S_{R2} > S_{R3} > S_{R4}$, respectively.

Key words: magnesium alloy; phase-field method; microsegregation; computer simulation; hexagonal close-packed structure

镁合金具有比强度和比刚度高、密度低、阻尼性和切削加工性好等优点, 是目前实际应用最轻的金属结构材料, 用镁合金生产的铸件具有优良的减振和降

噪性能、耐磨性能、低惯性能、电磁屏蔽性、易回收特性等, 被称为 21 世纪的“绿色”工程材料, 在电子、汽车和航空工业领域有广泛的应用^[1]。由于合金元素

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51164027, 50276023)

收稿日期: 2013-03-14; 修订日期: 2013-11-05

通信作者: 尧军平, 教授, 博士; 电话: 15970613607; E-mail: lixg6836891@126.com

的加入, 镁合金凝固过程中溶质元素的重新分配会造成合金元素在晶粒内部和晶界的分布不均匀, 从而产生微观偏析^[2]。微观偏析可以引起非平衡第二相、气孔和裂纹等的形成, 这些都严重损害镁合金铸件的力学性能。因此, 对镁合金凝固过程中的微观偏析进行定量分析预测就显得十分重要。以前预测合金的微观偏析程度常使用实验方法和分析方法, 但是, 采用这些方法很难观察和测定小枝晶区域内的溶质偏析。此外, 分析模型对实际问题做了很多假设, 因此, 该方法不能特别准确地对实际现象进行描述。相场法作为目前国内外很受重视的模拟凝固微观组织的有力工具, 通过相场与溶质场以及温度场的耦合, 可以对镁合金凝固过程中的固相和液相的溶质偏析进行直接模拟预测, 并据此调整优化生产工艺, 从而得到力学性能更优良的铸件, 所以, 开展镁合金微观偏析相场法定量模拟分析具有很强的现实与学术意义。

目前, KUNDIN 等^[3]和袁训锋等^[4]所进行的微观组织模拟绝大部分是针对具有 FCC 晶胞的金属(例如 Ni、Al 和 Cu)。而镁合金是典型的 HCP 晶体结构, 具有不同于 FCC 结构晶体的各向异性特征。因此, 要对镁合金凝固过程中的微观偏析进行模拟分析就必须建立适合 HCP 晶体结构金属的数值模型。

在镁合金微观组织相场法模拟方面, EIKEN 等^[5-7]对镁合金进行了二维、三维以及定向凝固微观组织的模拟。WANG 等^[8-9]模拟了镁合金三维等轴晶的生长。MONTIEL 等^[10]对镁合金焊接条件下的微观组织进行了模拟研究。缪家明等^[11]研究了模拟参数对镁合金枝晶生长过程的影响。袁训锋等^[12]基于 WHEELER 等^[13]提出的模型研究了强迫对流对镁合金凝固过程中单晶粒和多晶粒生长行为的影响。但以上工作主要集中于研究镁合金的枝晶生长形貌, 采用相场法定量研究镁合金微观偏析方面的工作尚未见报道。本文作者基于 KIM 等^[14-16]在 WMB 模型的基础上改进获得的 KKS 相场模型, 发展一个耦合相场、溶质场及温度场且适合于 HCP 晶系的相场模型, 以 AZ91D 镁合金为例, 模拟研究镁合金凝固时的溶质分布情况, 定量分析过冷度对枝晶尖端前沿最高溶质浓度、枝晶干轴对称中心溶质浓度、枝晶尖端溶质扩散层厚度以及溶质偏析比的影响。

1 相场模型

1.1 相场控制方程

本文作者采有 KIM 等^[14-16]提出的 KKS 相场模

型, 其相场控制方程表示为

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left[\varepsilon^2 \nabla^2 \phi + \frac{RT}{V_m} h'(\phi) \ln \frac{(1-c_S) \cdot (1-c_L^e)}{(1-c_L) \cdot (1-c_S^e)} - W g'(\phi) \right] \quad (1)$$

式中: 相场变量 $\phi=0$ 代表液态, $\phi=1$ 代表固态; c 为溶质浓度, 上标 e 表示平衡状态, 下标 S 和 L 分别表示固相和液相; R 是气体常数; T 是温度; V_m 是摩尔体积; $h'(\phi)$ 为势函数的导数, $h'(\phi)=30\phi^2(\phi^2-2\phi+1)$; $g'(\phi)$ 为剩余自由能函数的导数, $g'(\phi)=2\phi(2\phi^2-3\phi+1)$; W 为相场参数, M_ϕ 是与界面动力学有关的相场参数, ε 为与界面能有关的参数。

为了考虑界面能各向异性, 可将梯度项系数 ε 表示为

$$\varepsilon = \varepsilon_0 [1 + v \cos(k\theta)] \quad (2)$$

式中: k 为各向异性的模数, 表示系统的对称次数, 为适应六重对称性镁合金的求解, 其值取 6; v 为各向异性强度; θ 表示界面与优先生长方向之间的夹角, $\theta = \arctan(\phi_y / \phi_x)$ 。引入界面能各向异性后, 方程(1)变成:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M_\phi \left\{ \varepsilon^2(\theta) \nabla^2 \phi + \frac{RT}{V_m} h'(\phi) \ln \frac{(1-c_S) \cdot (1-c_L^e)}{(1-c_L) \cdot (1-c_S^e)} - W g'(\phi) - \frac{\partial}{\partial x} \left[\varepsilon(\theta) \varepsilon'(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\varepsilon(\theta) \varepsilon'(\theta) \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] \right\} \quad (3)$$

1.2 溶质场控制方程

在合金的模拟中, 还需要同时求解溶质扩散方程, 其控制方程可表示为

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla [D(\phi) \nabla c] + \nabla [D(\phi) h'(\phi) (c_L - c_S) \nabla \phi] \quad (4)$$

式中: $D(\phi)$ 为体系的溶质扩散系数, $D(\phi)=D_L + h(\phi)(D_S - D_L)$, D_S 和 D_L 分别代表固、液相中的溶质扩散系数。

1.3 温度场控制方程

在研究中, 同时耦合计算了温度场。由凝固过程的传热主导方程式可以得到温度场的控制方程为

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \nabla^2 T + \frac{L}{c_p} h'(\phi) \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (5)$$

式中: T 为温度; L 为潜热; c_p 为比热容; $D=\lambda/(\rho c_p)$; λ 为导热系数。

1.4 扰动

扰动可引发枝晶侧向分枝的生长,为了模拟实际凝固过程中界面处的波动和二次或更高次枝晶臂的生长,本文作者在溶质扩散方程中加入随机扰动,即

$$\frac{\partial c}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial c}{\partial t} + 16g(\phi)\chi\dot{\omega}c \quad (6)$$

式中: χ 为取值在 $-1 \sim +1$ 之间的随机数; $\dot{\omega}$ 为与时间有关的扰动强度因子。

2 数值求解

2.1 合金热物性参数

模拟所用 AZ91D 镁合金物性参数如表 1^[14]所列。

表 1 AZ91D 镁合金物性参数^[17]

Table 1 Physical properties of AZ91D magnesium alloy^[17]

Interface energy, $\sigma/(J\cdot m^{-2})$	0.115
Density, $\rho/(kg\cdot m^{-3})$	1 810
Melting point, T_m/K	868
Latent heat of solidification, $L/(kJ\cdot kg^{-1})$	373
Coefficient of thermal conductivity, $k/(W\cdot m^{-1}\cdot K^{-1})$	85
Equilibrium constant, k_e	0.4
Solute diffusivity (liquid), $D_L/(m^2\cdot s^{-1})$	1.8×10^{-9}
Solute diffusivity (solid), $D_s/(m^2\cdot s^{-1})$	1.0×10^{-12}
Specific heat capacity, $c_p/(kJ\cdot kg^{-1}\cdot K^{-1})$	1.3
Molar volume, $V_m/(m^3\cdot mol^{-1})$	10.38×10^{-6}

2.2 数值求解方法

流场控制方程采用 Simple 算法求解,采用显式差分法求解相场和溶质场控制方程,采用 ADI 方法求解温度场控制方程,时间步长 $\Delta t = \Delta x^2 / (5D_l)$, 模拟区域网格划分为 1000×1000 , 相场、浓度场的网格尺寸为 $1.0 \times 10^{-8} m$ 。为了减少计算量,本文作者在数值求解时采用了双重网格技术,温度场的计算网格数为 100×100 , 网格尺寸为 $1.0 \times 10^{-7} m$ 。计算程序是基于 VC++6.0 平台在 Windows xp 系统下开发,采用 tecplot 360 实现计算结果的可视化。

2.3 初始条件和边界条件

假设初始晶核半径为 $R(R=10\Delta x)$, 则

$$(x-a)^2+(y-b)^2 \leq R^2 \text{ 时, } \phi=1, T=T_m-\Delta T \quad (7)$$

$$(x-a)^2+(y-b)^2 > R^2 \text{ 时, } \phi=0, T=T_m-\Delta T \quad (8)$$

式中: x 、 y 分别代表横坐标、纵坐标; (a, b) 代表晶核中心坐标。在计算区域的边界上,温度场采用第一类温度边界条件,相场、溶质场均采用 Zero-Neumann 边界条件。

3 模拟结果与分析

3.1 枝晶形貌与溶质分布

图 1 所示为对 AZ91D 镁合金过冷熔体的凝固过程进行模拟而获得的溶质分布图。由图 1 可见,在 $\{0001\}$ 基面上,整个枝晶沿着 $\langle\bar{1}2\bar{1}0\rangle$ 晶向以对称形式生长,一次枝晶主干间互成 60° 夹角,一次枝晶干与该主干上的二次枝晶臂间也约成 60° 夹角。贫 Al 区主要集中于一次枝晶干和二次枝晶臂的轴对称中心位置,这主要是由于凝固过程枝晶尖端曲率效应引起过冷,使固相线向下移动,而固相中溶质的扩散速度又远远落后于枝晶的生长速度。在液固界面前沿出现了溶质 Al 的富集,其中以一次枝晶干根部液固界面前沿的溶质富集程度最高,这主要是由于镁合金的凝固属于非平衡结晶过程,合金在凝固过程中需要对溶质进行再分配,这导致固相中溶质的浓度低于初始浓度,而液相中溶质的扩散速度也要小于枝晶生长速度,凝固析出的溶质不能及时充分地扩散到液相中,从而在枝晶前沿富集。一次枝晶干根部处的溶质扩散通道由于二次枝晶臂的阻挡而变得狭长,严重阻碍了该处溶质的扩散,从而使该处溶质富集程度最高。另外,由

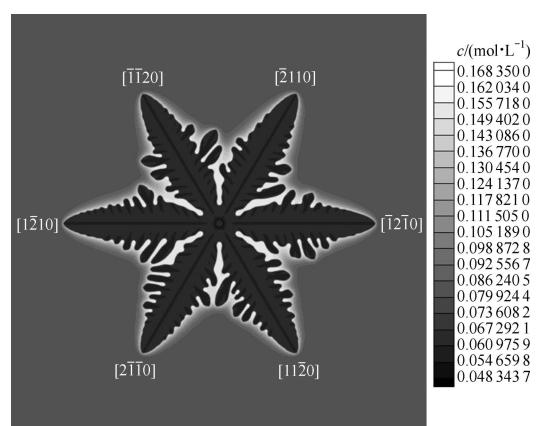


图 1 单个枝晶溶质分布模拟图

Fig. 1 Simulated solute distribution scheme of equiaxed dendrite ($\Delta T=103$ K, $t=6\ 000\Delta t$)

于枝晶尖端生长速度最大, 溶质来不及扩散, 溶质扩散层最薄, 因此, 该处的浓度梯度最大。

图 2 所示为砂型铸件 AZ91D 在光学显微镜偏振光下的枝晶结构金相照片^[18]。对比图 1 和 2 的可以发现, 模拟结果与文献[18]中报道的实验结果在枝晶形貌上十分吻合, 这也在一方面验证了文中模型的可行性与正确性。

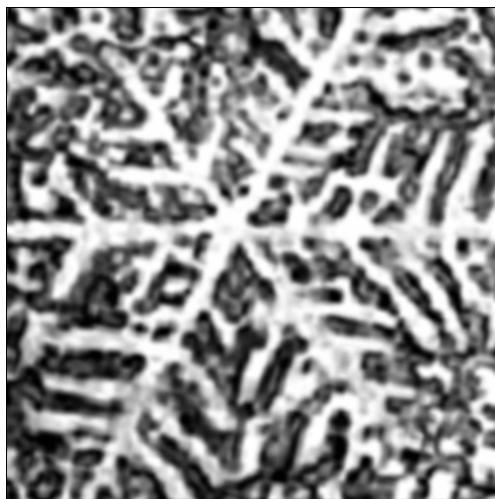


图 2 砂型 AZ91D 铸态的微观组织^[18]

Fig. 2 As-casting microstructure of sand mould AZ91D (under polarized light)^[18]

3.2 过冷度对枝晶尖端前沿最高浓度的影响

图 3 显示的是为不同过冷度下凝固时间 $t=6000\Delta t$ 时一次枝晶干轴对称中心沿 $(1\bar{2}10)$ 晶向的浓度分布情况。图中 c_{L1}^* 、 c_{L2}^* 、 c_{L3}^* 和 c_{L4}^* 分别对应过冷度为 108、103、98 和 93 K 时枝晶尖端前沿固液界面处液

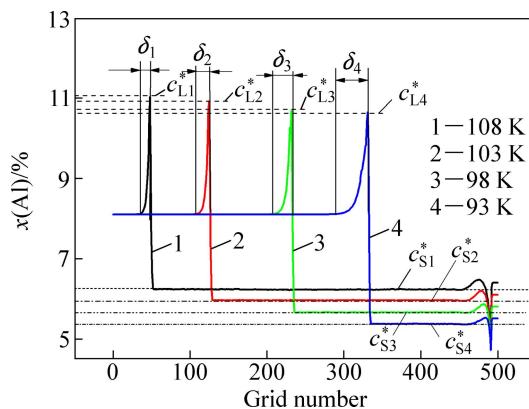


图 3 不同过冷度下一次枝晶干轴对称中心沿 $(1\bar{2}10)$ 晶向的浓度分布

Fig. 3 Concentration distribution under different supercooling ($t=6000\Delta t$)

相一侧的最高溶质浓度, c_{S1}^* 、 c_{S2}^* 、 c_{S3}^* 以及 c_{S4}^* 则分别对应过冷度为 108、103、98 和 93 K 时沿 $(1\bar{2}10)$ 晶向一次枝晶干轴对称中心溶质 Al 的浓度, 而 δ_1 、 δ_2 、 δ_3 和 δ_4 则分别对应过冷度为 108、103、98 和 93 K 时枝晶干尖端溶质扩散层的厚度。从图中可以看出, 过冷度 ΔT 越大, 枝晶干尖端前沿固液界面处液相一侧的最高溶质浓度越高, 即 $c_{L1}^* > c_{L2}^* > c_{L3}^* > c_{L4}^*$ 。这主要是由于镁合金凝固过程中通过溶质再分配向液相中析出溶质 Al, 而溶质 Al 在液相中的扩散速度小于枝晶生长速度, 析出的 Al 来不及充分扩散, 而富集在液固界面前沿, 而 ΔT 越大, 枝晶的生长速度越快(图 4), 溶质 Al 扩散得也越不充分, 则在液固界面前沿的富集也越严重。

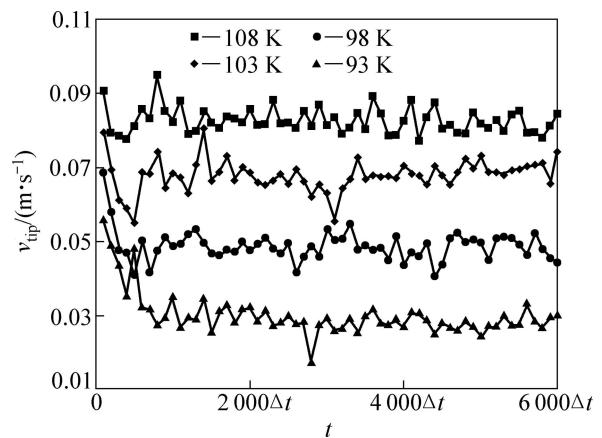


图 4 不同过冷度下的枝晶尖端生长速度与凝固时间的关系

Fig. 4 Relationship between tip growth velocity and solidification time of dendrite at different supercoolings

3.3 过冷度对枝晶干轴对称中心溶质浓度的影响

同时, 从图 3 中还可以看出, 过冷度 ΔT 越大, 一次枝晶干轴对称中心溶质 Al 的浓度也越高, 即 $c_{S1}^* > c_{S2}^* > c_{S3}^* > c_{S4}^*$ 。对于这一现象, 可做如下解释: 1) 过冷度 ΔT 增大, 凝固点在相图上的液相线与固相线右移, 凝固时平衡浓度增大, 从而导致凝固过程固液界面溶质再分配时固相中的浓度增大, 过冷度 ΔT 越大, 固相中溶质浓度越高; 2) 虽然合金的凝固是非平衡结晶过程, 但液固界面处的局部平衡状态是一直存在的, 不管过冷度是大还是小, 液固界面处固相侧溶质浓度 c_S^* 和液相侧溶质浓度 c_L^* 的比值都满足溶质平衡扩散系数 k_0 , 即 $k_0 = c_S^* / c_L^*$, 也就是说 $c_S^* = k_0 c_L^*$, 结合上面的 $c_{L1}^* > c_{L2}^* > c_{L3}^* > c_{L4}^*$, 即可得 $c_{S1}^* > c_{S2}^* >$

$c_{S3}^* > c_{S4}^*$; 3) BOWER 等^[19]通过假设液相均匀混合固相有限扩散, 推导出了液固界面处固相侧溶质浓度 c_S^* 分布情况, 即 BF 模型, 其具体表达式为^[20]

$$c_S^*/k_0 = c_L^* = c_0[1 - (1 - 2\alpha k_0)f_S](k_0 - 1)(1 - 2\alpha k_0) \quad (9)$$

$$\alpha = 4D_S t_f / \lambda^2 \quad (10)$$

式中: c_S^* 为固相溶质浓度; c_L^* 为液相溶质浓度; f_S 为固相分数; α 为固相反扩散因子, 其值决定固相中溶质扩散状况; D_S 为固相溶质扩散系数; t_f 为局部凝固时间, λ 为枝晶间距的一半; c_0 为初始溶质浓度, k_0 为溶质平衡分配系数。

由式(9)和(10)可知, 局部凝固时间 t_f 与 α 成正比, α 参数决定固相中溶质的扩散状况, 也就是说, 局部时间 t_f 越长, 扩散时间越长, 固相中溶质元素扩散越充分, 溶质浓度越低。当过冷度 ΔT 增大时, 枝晶的生长速率也增大(见图 4), 这使得局部的凝固时间 t_f 减小, 溶质扩散时间缩短, 从而使得固相中溶质元素扩散越不充分, 溶质浓度也就越高, 从而有 $c_{S1}^* > c_{S2}^* > c_{S3}^* > c_{S4}^*$ 。

3.4 过冷度对枝晶尖端溶质扩散层厚度的影响

由图 3 可以看出, 过冷度会对枝晶尖端前沿的溶质扩散层厚度 δ 产生影响。为更直观地显示出各枝晶尖端溶质扩散层厚度的关系, 截取相同凝固时间($t=6000\Delta t$)不同过冷度下的枝晶尖端并进行同等倍数放大后再进行比较, 如图 5 所示。由图 5 可见, 过冷度 ΔT 越大, 枝晶尖端前沿溶质扩散层越薄, 即 $\delta_1 < \delta_2 < \delta_3 < \delta_4$ 。这是由于镁合金等轴晶生长时, 从固相中析出的溶质 Al 需通过溶质扩散层释放到液相中去, 溶质扩散的长度 $\lambda_s=D_L/v$ ^[21]。由于枝晶的生长速度 v 随过冷度 ΔT 的减小而减小(见图 4), 故熔体中溶质扩散的长度 λ_s 随过冷度的减小而增大, 这导致包围枝晶尖端的溶质扩散层厚度 δ 更大, 从而有 $\delta_1 < \delta_2 < \delta_3 < \delta_4$ 。

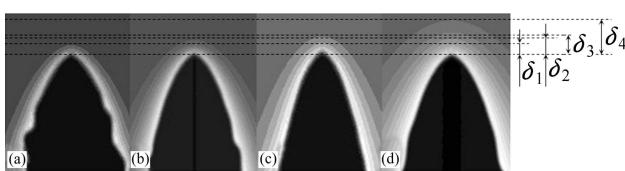


图 5 不同过冷度下枝晶尖端溶质 Al 扩散层的厚度

Fig. 5 Thickness of solute Al diffusion layer of dendrite tip under different supercoolings and $t=6000\Delta t$: (a) $\Delta T=108$ K; (b) $\Delta T=103$ K; (c) $\Delta T=98$ K; (d) $\Delta T=93$ K

3.5 过冷度对溶质偏析比的影响

在通常的铸件生产中常采用偏析比 S_R 来表示微观偏析的大小, 偏析比在数值上等于枝晶间最大溶质浓度与枝晶干最小溶质浓度的比值。为更直观地显示过冷度对微观偏析程度的影响, 计算了不同过冷度下溶质的偏析比曲线(见图 6)。从图 6 中可明显看出, 溶质的偏析比 $S_{R1} > S_{R2} > S_{R3} > S_{R4}$, 即过冷度 ΔT 越大, 微观偏析越严重。这是由于镁合金凝固过程中会通过溶质再分配向液相中析出溶质 Al, 而溶质 Al 在液相中的扩散速度小于枝晶生长速度, 析出的 Al 来不及充分扩散从而富集在液固界面前沿。过冷度 ΔT 越大, 枝晶生长速度越快(见图 4), 单位时间内析出到液相中的溶质就越多, 二次枝晶也越发达, 二次枝晶臂对富集溶质扩散的阻碍作用也越大, 富集的溶质越难扩散, 从而使得最高溶质浓度越大(见图 7)。而固相中溶质扩散系数比液相中的要小得多, 过冷度 ΔT 对枝晶干最低溶质浓度的影响要小得多, 因此, 这最终导致溶质的偏析比越高, 微观偏析越严重。

由以上分析可知, 模拟结果与基于凝固理论分析得到的结论十分吻合, 这也从另一方面验证了模型的可行性和正确性。

微观偏析的存在会降低合金的塑性、韧性和拉伸性能, 因此, 必须对微观偏析予以消除或者减轻。由模拟结果可知, 减小过冷度可以降低合金微观偏析的程度, 但这会使枝晶间距增大, 材料力学性能下降, 均匀化退火时间延长。合理的方法应该是降低初始温度, 使过冷熔体快速凝固得到细小枝晶, 然后再进行长时间的均匀化退火。

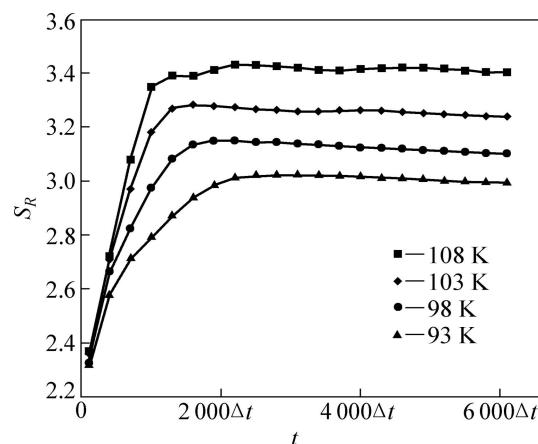


图 6 不同过冷度下元素 Al 的偏析比曲线

Fig. 6 Curves of segregation ratio of Al under different supercoolings

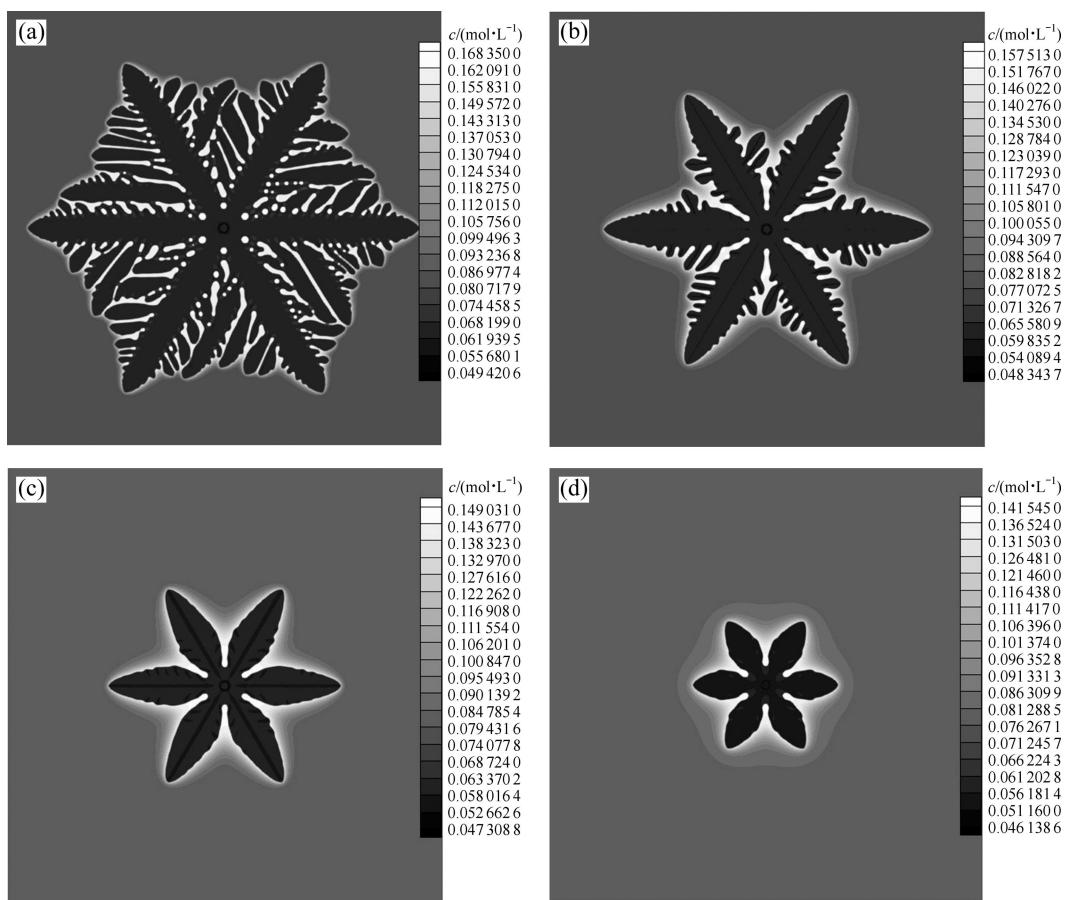


图7 不同过冷度下的溶质分布

Fig. 7 Solute distribution under different supercoolings: (a) $\Delta T=108$ K; (b) $\Delta T=103$ K; (c) $\Delta T=98$ K; (d) $\Delta T=93$ K; $t=6\ 000\Delta t$

4 结论

1) 镁合金贫 Al 区主要集中于一次枝晶干和二次枝晶臂的中心, 溶质富集于液固界面前沿, 枝晶尖端浓度梯度最大。

2) 过冷度 ΔT 会对枝晶尖端前沿的最高浓度 c_L^* 、枝晶干轴对称中心溶质 Al 的浓度 c_S^* 和枝晶尖端前沿溶质扩散层厚度 δ 产生影响。 ΔT 越大, c_L^* 越大, c_S^* 越大, δ 越小, 其具体关系分别为 $c_{L1}^* > c_{L2}^* > c_{L3}^* > c_{L4}^*$ 、 $c_{S1}^* > c_{S2}^* > c_{S3}^* > c_{S4}^*$ 和 $\delta_1 < \delta_2 < \delta_3 < \delta_4$ 。

3) 过冷度 ΔT 会对偏析比 S_R 产生影响。 ΔT 越大, S_R 越大, 微观偏析越严重, 具体关系为 $S_{R1} > S_{R2} > S_{R3} > S_{R4}$ 。

4) 模拟结果和实验结果的对比以及基于凝固理论的分析验证了模型的可行性和正确性。

5) 消除或者减轻微观偏析的合理方法是降低初始温度, 然后再进行长时间的均匀化退火。

REFERENCES

- [1] SCHUMANN S, FRIEDRICH H. Current and future use of magnesium in the automotive industry[J]. Mater Sci Forum, 2003, 419/422(1): 51–56.
- [2] ESKIN D G. Physical metallurgy of direct chill casting of aluminum alloys[M]. London: CRC Press, 2008: 12.
- [3] KUNDIN J, SIQUIERI R, EMMERICH H. A quantitative multi-phase-field modeling of the microstructure evolution in a peritectic Al-Ni alloy[J]. Physica D, 2013, 243(1): 116–127.
- [4] 袁训锋, 丁雨田. 强界面能各向异性下二元 Ni-Cu 合金枝晶生长过程的相场法模拟[J]. 中国有色金属学报, 2011, 21(7): 1656–1663.
- [5] YUAN Xun-feng, DING Yu-tian. Phase-field simulation of dendrite growth process for binary Ni-Cu alloy with anisotropy of strong interface energy[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2011, 21(7): 1656–1663.
- [6] EIKEN J, BÖTTGER B, STEINBACH I. Simulations of microstructure evolution during solidification of magnesium-based alloys[J]. Trans Indian Inst Met, 2007, 60(2/3):

- 179–184.
- [6] EIKEN J. Dendritic growth texture evolution in magnesium-based alloys investigated by phase-field simulation[J]. International Journal of Cast Metals Research, 2009, 22(1/4): 86–89.
- [7] BÖTTGER B, EIKEN J, STEINBACH I. Phase field simulation of equiaxed solidification in technical alloys[J]. Acta Mater, 2006, 54: 2697–2704.
- [8] WANG M Y, WILLIAMS J J, JIANG L, CARLO F DE, JING T, CHAWLA N. Dendritic morphology of α -Mg during the solidification of Mg-based alloys: 3D experimental characterization by X-ray synchrotron tomography and phase-field simulations[J]. Scripta Materialia, 2011, 65: 855–858.
- [9] WANG M Y, JING T, LIU B C. Phase-field simulations of dendrite morphologies and selected evolution of primary α -Mg phases during the solidification of Mg-rich Mg-Al-based alloys[J]. Scripta Materialia, 2009, 61: 777–780.
- [10] MONTIEL D, LIU L, XIAO L, ZHOU Y, PRIVATAS N. Microstructure analysis of AZ31 magnesium alloy welds using phase-field models[J]. Acta Mater, 2012, 60: 5925–5932.
- [11] 缪家明, 荆涛, 柳百成. 镁合金枝晶形貌的相场方法模拟[J]. 金属学报, 2008, 44(4): 483–488.
MIAO Jia-ming, JING Tao, LIU Bai-chang. Numerical simulation of dendritic morphology of magnesium alloys using phase field method[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2008, 44(4): 483–488.
- [12] 袁训锋, 丁雨田, 郭廷彪, 胡勇. 强制对流作用下镁合金枝晶生长的相场法数值模拟[J]. 中国有色金属学报, 2010, 20(8): 1474–1480.
YUAN Xun-feng, DING Yu-tian, GUO Tin-biao, HU Yong. Numerical simulation of dendritic growth of magnesium alloys using phase-field method under forced flow[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2010, 20(8): 1474–1480.
- [13] WHEELER A A, MURRAY B T, SCHAEFER R J. Computation of dendrites using a phase field model[J]. Physica D, 1993, 66(1/2): 243–262.
- [14] SUZUKIA T, ODE M, KIM S G, KIM W T. Phase-field model of dendritic growth[J]. J Cryst Growth, 2002, 26(237/239): 125–131.
- [15] KIM S G, KIM W T, SUZUKIA T. Phase-field model for binary alloys[J]. Phys Rev E, 1999, 60(6): 7186–7197.
- [16] KIM S G, KIM W T, SUZUKIA T. Interfacial compositions of solid and liquid in a phase-field model with finite interface thickness for isothermal solidification in binary alloys[J]. Phys Rev E, 1998, 58(3): 3316–332.
- [17] 付振南, 许庆彦, 熊守美. 基于概率捕获模型的元胞自动机方法模拟镁合金枝晶生长过程[J]. 中国有色金属学报, 2007, 17(10): 1567–1573.
FU Zhen-nan, XU Qing-yan, XIONG Shou-mei. Numerical simulation on dendrite growth process of Mg alloy using cellular automaton method based on probability capturing model[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2007, 17(10): 1567–1573.
- [18] KIM S G, KIM W T. Phase field modeling of dendrite growth with high anisotropy[J]. J Cryst Growth, 2005, 275(1/2): 355–360.
- [19] BOWER T F, BRODY H D, FLEMINGS M C. Measurements of solute redistribution in dendritic solidification[J]. Transaction of the Metallurgical Society of AIME, 1966, 236: 624–633.
- [20] CHEN Q, SUNDMAN B. Computation of partial equilibrium solidification with complete interstitial and negligible substitutional solute back diffusion[J]. Materials Transactions, 2002, 43(3): 551–559.
- [21] 朱昌盛, 王智平, 荆涛, 肖荣振. 二元合金微观偏析的相场法数值模拟[J]. 物理学报, 2006, 55(3): 1502–1507.
ZHU Chang-sheng, WANG Zhi-ping, JING Tao, XIAO Rong-zhen. Numerical simulation of solute segregation patterns for a binary alloy using phase-field approach[J]. Acta Physica Sinica, 2006, 55(3): 1502–1507.

(编辑 李艳红)