

相场法模拟流动下非等温多晶粒枝晶生长形貌研究

Research of Simulation Dendritic Growth of Polycrystalline

Non-isothermal Binary Alloys by Phase Field Method

郝丽梅

(西安科技大学 理学院应用物理系, 西安 710054)

HAO Li mei

(Department of Applied Physics, School of Science,

Xi'an University of Science & Technology, Xi'an 710054, China)

摘要: 基于相场方法对包含多晶粒的非等温合金凝固过程进行了二维数值模拟。以 Ni-Cu 合金为例, 展示了多核晶粒形貌的生长过程, 研究了流速、各向异性和过冷度、晶核个数等参数对多枝晶生长形貌的影响。结果表明: 随着模拟时间的增加, 各晶核由独立生长演化为竞争生长; 引入强制流动后, 枝晶上游臂的生长得到促进, 下游臂的生长受到抑制, 垂直臂逐渐向迎流方向倾斜生长; 随着流速的增大, 多枝晶的非对称性增强, 垂直臂在迎流一侧逐渐长出二次枝晶, 而逆流侧保持光滑。随着各向异性值和过冷度的增大, 各枝晶形貌大小均增大。

关键词: 相场方法; 多晶粒; 非等温合金; 各向异性; 过冷度

中图分类号: TG244 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4381(2010)06-0001-06

Abstract: Numerical simulation based on phase field method is developed to describe polycrystalline solidification of the non-isothermal binary alloy, the evolution of the interface morphology is showed and the effect of anisotropy parameter is formulated for Ni-Cu alloy. The results indicate that, with increase in time, all of nuclei grow from independence to competition. The nuclei grows into an asymmetry dendritic with a forced flow, that is, upstream dendritic arm is promoted, downstream is inhibited and tilts to down direction, and perpendicular arms have no obvious change, but tilts to upstream direction. The asymmetry of dendritic shape is intensified as the forced flow velocity is increased, where there is a secondary dendritic in the upstream direction of perpendicular arms, while there is no secondary dendritic in the downstream direction. With increase in anisotropic values or undercooling values, the size of every dendritic increase.

Key words: phase field method; polycrystalline; non-isothermal binary alloy; anisotropy; undercooling

材料的宏观和微观性能在很大程度上受控于凝固微观结构, 几乎所有材料在其生产过程中都要经历一次或多次凝固过程。枝晶是一种典型的凝固组织, 在工程材料中枝晶的形貌将决定材料的最终性能^[1,2]。因此, 研究凝固过程中枝晶的生长规律就显得尤为重要。枝晶的生长会受到传热、传质和动量传输等因素影响。另外, 熔体流动在凝固过程中不可避免, 它会极大改变凝固界面前沿的溶质场和温度场的分布, 进而对枝晶的生长形貌产生重大的影响。因此, 研究流动对枝晶生长形貌的影响规律, 对有效预测和主动控制材料的性能具有重要的意义。然而, 流动的存在使得金属凝固过程变得很复杂, 目前的相关实验报道很少。另一方面, 关于流体流动, 质量和热量的传输以及相变之间的非线性耦合关系的理论研究也存在很大的困

难, 研究人员一般是通过简化理论模型进行求解分析, 因此, 理论上缺乏严格的分析结果。因此, 寻求一种有效方法来研究流动下枝晶的生长规律是该领域的重大课题之一^[3]。

随着计算机的发展, 数值计算为解决以上的问题, 提供了一种新的思路。在过去的几十年里, 相场方法引起了很多研究学者的注意, 它已经成为模拟凝固微观组织演化的一种主要方法, 相场方法通过引入一辅助序参数 ϕ 后, 隐性地将固/液界面的位置包含在相场方程中^[4,5]。在前期的相场法应用中, 相场法还存在很多问题, 其中最突出的问题就是需要选择的界面厚度 W 应远小于热量的边界层厚度, 以此来满足尖锐界面, 但是这极大地增加了计算量, 就是在如今高性能计算机上也很难完成这样繁琐的工作。1996 年, Karma

和 Rappel^[6]通过选取合适的参数,得到了与微观结构同一量级的薄界面厚度 W ,使得相场法取得长足的进展^[7],2001 年, Karma 等^[8]通过引入一反溶质截留项后,有效地消除了异常效应,使得相场法能够合理的模拟二元合金的枝晶生长形貌。2004 年, Blas Echebarría 等^[9]进一步研究了非等温下的合金生长规律。Lan C W 等^[10]研究了流动下非等温枝晶生长的形貌。事实上,材料在凝固过程中一般都将涉及多晶粒的凝固,同时也伴随有流动现象,因此,数值模拟流动下多晶粒的凝固过程显得尤为重要^[7]。在模拟中,一般用多个相场方程来控制多晶粒的生长,这样使得计算量急剧增加^[11,12]。本工作为了节省计算时间,假设多晶粒的择优方向一致,采用一个相场方程同时控制多个晶粒的生长思路,模拟了流动下含有多个晶粒非等温合金的生长相貌,研究了不同流速、各向异性值、过冷度和晶核数等相场参数对多个晶粒生长相貌的影响规律。

1 相场模型

本工作结合 Karma^[8], Tong^[13]和 Lan^[10]等模型,提出了一个强制流动下的非等温合金多晶粒生长的模型。模型中固、液相的扩散系数相等,材料的物性参数不变,流体为不可压缩型。 ϕ 代表相场,其中 $\phi=1$ 为固相, $\phi=-1$ 为液相,在扩散界面区域 $\phi=-1 \sim 1$ 连续变化。相场、溶质场、温度场、质量守恒方程和动量方程(1)~(5)具体为:

$$\tau(n) \frac{\partial \phi}{\partial t} = \vec{y} \cdot (W(n))^2 \vec{y} \phi - \partial_x [W(n) W^\varphi(n) \partial_y \phi] + \partial_y [W(n) W^\varphi(n) \partial_x \phi] + \phi - \phi^3 - \lambda(\theta + M_{Co} U)(1 - \phi^2) \quad (1)$$

$$\left(\frac{1+k}{2} - \frac{1-k}{2} \phi\right) \frac{\partial U}{\partial t} + \frac{1}{2}(1-\phi) \vec{V} \cdot \vec{y} U = \vec{y} \cdot \left(D \frac{1-\phi}{2} \vec{y} U + \vec{j}_a\right) + \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} (1 + (1-k) U) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{1}{2}(1-\phi) \vec{V} \cdot \vec{y} \theta = \alpha \vec{y}^2 \theta + \frac{1}{2} \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (3)$$

$$\vec{y} \cdot \left[\frac{1}{2}(1-\phi) \vec{V}\right] = 0 \quad (4)$$

$$\partial_t \left[\frac{1}{2}(1-\phi) \vec{V}\right] + \frac{1}{2}(1-\phi) \vec{V} \cdot \vec{y} \vec{V} = -\frac{1}{2}(1-\phi) \vec{y} P / \rho + \vec{y} \cdot \left[\nu \vec{y} \left(\frac{1}{2}(1-\phi) \vec{V}\right)\right] + \vec{M}_t^d \quad (5)$$

式中: $\tau(n) = \tau_0 a_s^2(n)$ 为依赖于方向的弛豫时间; $W(n) = W_0 a_s(n)$ 为界面厚度; $a_s(n) = 1 + \gamma \cos[4(\varphi - \varphi_0)]$ 为

界面能各向异性函数; γ 为无量纲各向异性参数; $\varphi = \arctan(\partial_y \phi / \partial_x \phi)$ 为界面法线与水平轴间的夹角; φ_0 为晶粒择优生长方向与 x 轴方向的夹角; $n = -\vec{y} \cdot \vec{\phi} / |\vec{y} \cdot \vec{\phi}|$ 为垂直界面的法线方向; D 为无量纲化溶质扩散系数; α 为无量纲化温度扩散系数; $\lambda = \alpha / a_2$ 为耦合系数; 界面驱动力 $\vec{M}_t^d = -\frac{1}{4} h (1 + \phi)^2 (1 - \phi) \vec{V} / W_0^2$, $h = 2.757$; p , ρ 和 ν 分别为压强、密度和动力学黏度; t 为时间; 以下变量通过 $V \tau_0 / W_0 \rightarrow V$, $U_0 / (W_0) \rightarrow U$, $(p / \rho) (\tau_0 / W_0)^2 \rightarrow (p / \rho)$ 进行无量纲化。

方程(2)中 \vec{j}_a 为反溶质截流项,具体为:

$$\vec{j}_a = \frac{1}{2\sqrt{2}} [1 + (1-k)U] \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\vec{y} \cdot \vec{\phi}}{|\vec{y} \cdot \vec{\phi}|} \quad (6)$$

式(6)仅在扩散界面区域为非零值^[8],通过渐进分析,毛细管长度 d_0 和界面动力学系数 β 将方程(7), (8)引入到相场方程中:

$$d_0 = a_1 W_0 / \lambda \quad (7)$$

$$\beta = a_1 \frac{\tau(n)}{W(n)} \left[1 - a_2 \frac{\lambda W(n)^2}{\tau_0 D}\right] \quad (8)$$

式中 d_0 和 β 分别为毛细管长度和界面动力学系数。此外(8)式中的 a_1 和 a_2 的取值依赖于相场模型中双势阱和其他函数的选择,根据文献[6]选取 $a_1 = 0.8839$, $a_2 = 0.6267$ 。

溶质场、过饱和度、液相线梯度和温度场分别为^[14]:

$$U = \frac{\left(\frac{2C/C_0}{1+k-(1-k)\phi}\right) - 1}{1-k} \quad (9)$$

$$\Omega = \frac{C_l^0 - C_0}{(1-k)C_l^0} \quad (10)$$

$$M = \frac{-m(1-k)}{L/C_p} \quad (11)$$

$$\theta = \frac{T - T_m - mC_0}{L/C_p} \quad (12)$$

式中: C 为扩散界面区域的混合溶度; C_0 为合金凝固前沿的初始溶度; C_l^0 为系统温度下的液相平衡溶度; m 为液相线斜率; L 为凝固释放潜热; C_p 为定压比热容。

2 数值求解

2.1 初始条件和边界条件

模拟区域网格选为 700×700 。计算区域内放置五个晶核,且初始晶核半径为 r 并置于区域中心,过冷熔体以一均匀流速 U 从左边界进入,并从相场、溶质场和温度场的梯度均为零的右边界自由流出,区域的

上和下边界采用周期性的边界条件^[13, 15], 具体为:

$$\begin{cases} x_i^2 + y_i^2 > r^2, \phi = 1, \theta = 0, U = 0 \\ x_i^2 + y_i^2 \leq r^2, \phi = -1, \theta = -\Delta, U = -\Omega \end{cases}$$

式中: x, y 分别代表横轴 (100) 和纵轴 (010) 晶轴方向^[17]; 无量纲流速采用 Ud_0/α , x_i, y_i 表示第 i 个晶核位置。

在计算区域边界上, ϕ, θ 和 U 采用 Zero-Neumann 边界条件^[14]

$$\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0, \frac{\partial \theta}{\partial n} = 0, \frac{\partial U}{\partial n} = 0$$

2.2 计算方法

方程 (1) ~ (4) 采用有限差分离散, 时间步长采用 Euler 算法, $\nabla^2 \phi$ 用最近邻和次近邻的九点公式离散以减小离散中所引起格点的各向异性^[6]。时间步长 $\Delta t = 0.008$, 空间步长 $\Delta x = \Delta y = 0.4$, $T_0 = 1$, $d_0 = 0.277$, $W_0 = 1$, $D = 2$, $\Omega = -0.45$, $\Delta = -0.45$, $k = 0.628$, $C_0 = 0.4083$, Prandtl 数 $pr = 0.035$, $\rho = 8.4$, $\gamma = 0.04$, $Ud_0/\alpha = 0.1$, 如不说明以上参数均

不变^[16]。

3 结果与讨论

3.1 流速的影响

图 1 为无流动, 不同时间下多核非等温枝晶生长的相场形貌图, 在所模拟的区域内放置着 A, B, C, D 和 E 五个晶核。从图中可以看出, 由于 B, C, D 和 E 四个晶核均置于边界, 因此只能看到它们的局部生长形貌, 而处于中心的 A 晶核则生长为一完整的沿主轴方向择优生长的自由枝晶, 是本文的主要研究对象。当模拟时间 $t = 20000 \Delta t$ 时, 由于模拟时间较短, 晶核之间的间距足够大而彼此影响很小。随着时间的演化, 晶核均长大, 同时各晶核间的相互影响程度逐渐增强。当模拟时间 $t = 60000 \Delta t$ 时, 由于 A 枝晶的 1 号、3 号和 4 号臂的生长空间足够大而受到的影响很小, 它们呈等臂生长。此外, A 枝晶的 2 号臂由于受到 C 枝晶的 4 号臂的竞争影响而生长受到抑制。

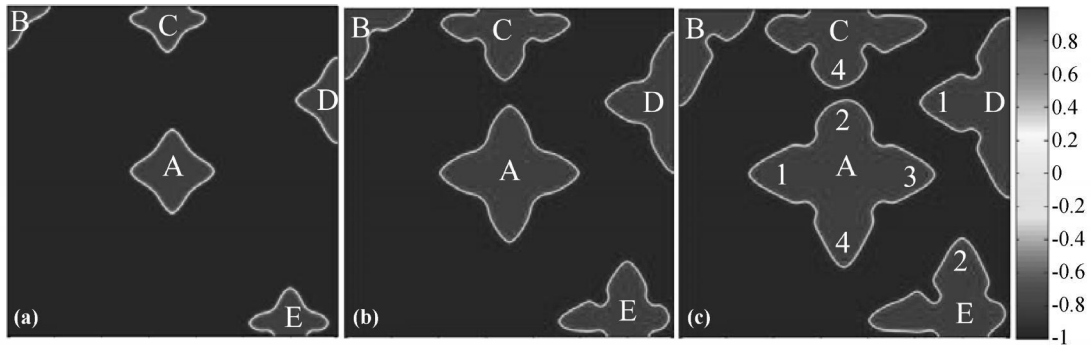


图 1 无流动, 不同时间下多晶核生长的相场形貌图

(a) 20000 Δt ; (b) 40000 Δt ; (c) 60000 Δt

Fig. 1 The polycrystalline phase field shape for various time without flow

(a) 20000 Δt ; (b) 40000 Δt ; (c) 60000 Δt

当引入从左向右大小为 $Ud_0/\alpha = 0.10$ 的强制流动后, 晶核生长形貌的对称性遭到严重的破坏, 如图 2 所示。对比图 1 和图 2 可以看出: A 枝晶的上游臂 (即 1 号臂) 比无流动下对应的长, 说明它的生长受到促进作用; 相反, 下游臂 (即 3 号臂) 比无流动下对应的短, 其生长受到抑制; 垂直臂 (即 2 号和 4 号臂) 受到的影响较小, 但它们向迎流方向倾斜生长。随着时间的演化, 各枝晶臂受到的影响程度加剧, 并且枝晶臂在迎流一侧长出侧边枝。当 $t = 60000 \Delta t$ 时, A 枝晶和 D 枝晶的 1 号臂之间的大小出现显著差异, 其原因主要是: A 枝晶的 2 号臂和 C 枝晶的 4 号臂有效地阻挡了熔体的流动, 以及 D 枝晶的 1 号臂与周围枝晶的竞争生长所致。另外, A 枝晶的 2 号臂由于受到 C 枝晶 4 号臂

的竞争生长影响, 导致它与 A 枝晶的 4 号臂的生长形貌不同。

从图 3 可以看出, 当进一步增大流速时, 多核枝晶变得更发达, 非对称性增强, 垂直臂向迎流方向倾斜生长, 并在迎流一侧逐渐长出发达的二次枝晶而逆流一侧保持光滑, 其原因主要是: 在熔体流动的作用下, 上游臂生长释放的潜热和溶质很容易被带走, 使得上游臂尖端周围的温度梯度和溶质梯度明显增加, 生长得到促进, 同时, 这些热量和溶质绕过垂直臂随着熔体向下游方向流动, 堆积在下游臂周围, 使得溶质梯度和温度梯度明显减小, 从而抑制了它的生长, 而由于垂直臂周围的温度梯度和溶质梯度很大的差异, 导致其逐渐向迎流方向倾斜生长。对比图 2(c) 与图 3 可以进一

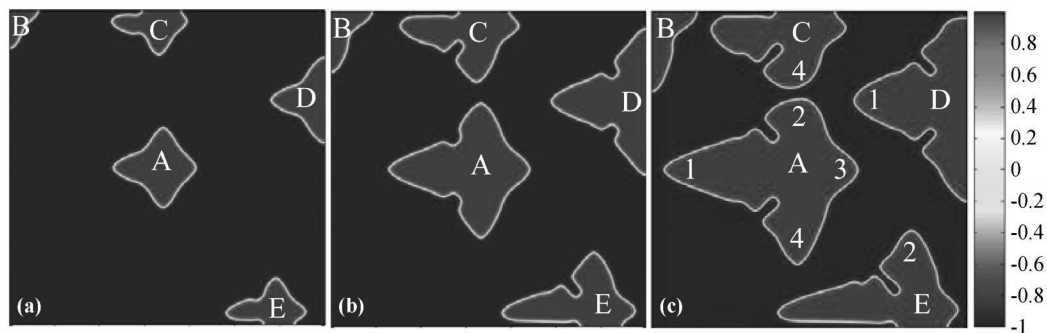


图 2 流速 $Ud_0/\alpha = 0.10$, 不同时间下多晶核生长的相场形貌图

(a) $20000\Delta t$; (b) $40000\Delta t$; (c) $60000\Delta t$

Fig. 2 The polycrystalline phase field shape for various time at $Ud_0/\alpha = 0.10$

(a) $20000\Delta t$; (b) $40000\Delta t$; (c) $60000\Delta t$

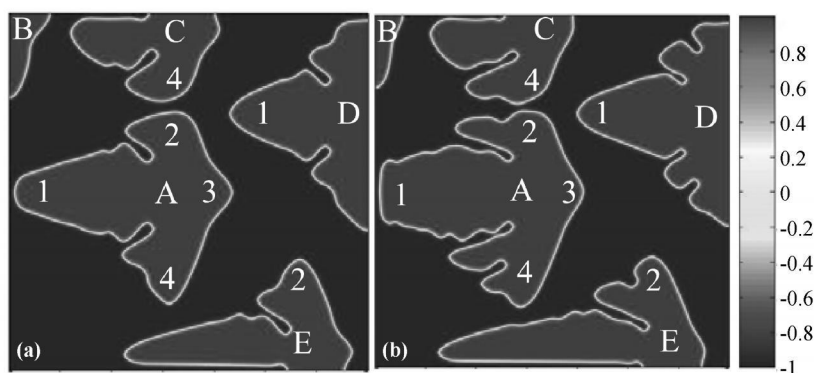


图 3 $t = 60000\Delta t$, 不同流速下, 多晶核枝晶生长的形貌图 (a) 0.15; (b) 0.25

Fig. 3 The polycrystalline phase field shape at various flow velocity with $t = 60000\Delta t$ (a) 0.15; (b) 0.25

步看出: A 枝晶的 1 号臂由于受到边界效应的影响而变形和停止生长, 并且它上面的侧边枝受到竞争生长的影响而未形成明显的二次枝晶。由于 A 枝晶的 2 号臂和 C 枝晶的 4 号臂变得更加发达, 更加有效地阻挡了熔体流动, 使得 A 枝晶的 1 号臂和 D 枝晶的 1 号臂的形貌差异更加明显。大流速下的 A 枝晶垂直臂上迎流一侧的二次枝晶变得更加粗大, 其生长方向更加趋向流动方向。

3.2 各向异性的影响

各向异性是表征凝固过程中表面张力、界面厚度及其动力学各向异性的程度。在枝晶生长过程中, 由于各向异性的不同, 枝晶的生长形貌会出现明显的差异^[17]。因此, 有必要进一步研究各向异性参数对多核枝晶生长形貌的影响。图 4 为流速 $Ud_0/\alpha = 0.1$, $t = 60000\Delta t$, 不同各向异性 γ 下多晶核生长的相场形貌图。从图中可以看出: 当 $\gamma = 0.02$ 时, A、D 枝晶的上游臂之间并无显著差别, 而 A、C 枝晶的存在明显差别, 这主要是由于 B 枝晶对熔体的阻挡作用及竞争影响所致。当 γ 增大为 0.06 时, 不同枝晶间的形貌差异非常明显, A 枝晶的 1 号臂主干上生长出明显的侧边

枝, 而 D 枝晶则较光滑。随着各向异性值的增加, 各枝晶臂均变长, 上游臂的生长优势更加明显, 晶核间的生长影响也逐渐加强。

不同各向异性下多核枝晶生长的情况可从枝晶臂中心溶质分布图进一步分析, 为了避免计算区域对枝晶臂尖端溶质的影响, 选择 $t = 20000\Delta t$ 下的 A 枝晶上游臂的中心溶质分布。图 5 为 $t = 20000\Delta t$, 不同各向异性下 A 枝晶上游臂中心溶质与 X 轴关系图, 其中峰值右边为 A 枝晶固相的溶质分布, 左边为液相的溶质分布。从图中可以看出: 不同 γ 下的液相平衡溶质浓度相等; 固/液界面区域出现溶质的富集, 这可认为是: 凝固过程中存在溶质的再分配, 固相溶质的浓度低于初始浓度, 而熔体溶质的扩散速度小于枝晶的生长速度, 凝固析出的溶质不能充分扩散到熔体中, 而富集在枝晶的尖端所致; 随着 γ 的增大, 在固/液界面处溶质堆积的程度明显减小, 其原因可认为是: 当 γ 较大时, 枝晶生长的择优性加强, 加快了溶质的传输而减弱了溶质堆积现象。另外, 固相中心的溶质浓度比液相的低, 这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, 而造成固相平衡成分有所降低, 固相

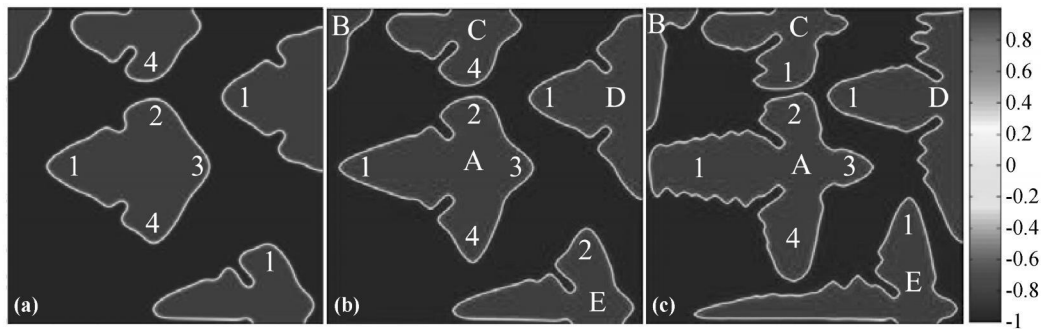


图4 流速 $Ud_0/\alpha = 0.1$, $t = 60000\Delta t$, 不同各向异性 γ 下多晶核生长的相场形貌图 (a) 0.02; (b) 0.04; (c) 0.06

Fig.4 The polycrystalline phase field shape under various anisotropic value at $Ud_0/\alpha = 0.1$ with $t = 60000\Delta t$ (a) 0.02; (b) 0.04; (c) 0.06

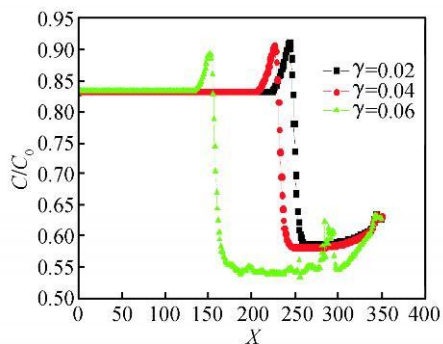


图5 $t = 20000\Delta t$, 不同各向异性下 A 枝晶上游臂中心溶质与 X 轴关系图

Fig.5 The upstream arm concentration as a function of X axis at various anisotropic value with $t = 20000\Delta t$ for A dendritic

中溶质的扩散速度又远小于枝晶生长速度, 使得固相中溶质来不及扩散所致^[18]。

3.3 过冷度的影响

过冷度是液态金属凝固的驱动力, 对多晶粒枝晶的生长过程也具有重要的影响。图6为流速 $Ud_0/\alpha = 0.1$, $t = 60000\Delta t$, 不同过冷度下多晶核生长的相场界面图。从图中可以看出, 随着过冷度的增大, 各枝晶臂均逐渐变长, 垂直臂逐渐向迎流方向倾斜生长, 各枝晶间的形貌差别也逐渐增强。上游臂的主干上逐渐长出更多的侧边枝, 原因可认为是: 当过冷度较小时, 界面原子层厚度、结构起伏和能量起伏强度较小, 一次枝晶与周围过冷液体界面稳定, 因而一次晶轴界面非常平滑, 没有出现侧向分枝, 正如图6(a)所示; 随着过冷度的增加, 结构起伏和能量起伏强度也随之增强, 一次晶轴与周围过冷液体的界面变得不稳定, 枝晶臂主干上长出的侧边枝就越多。另外, 施加流动抑制了逆流一侧的侧边枝的形成而保持枝晶臂光滑。

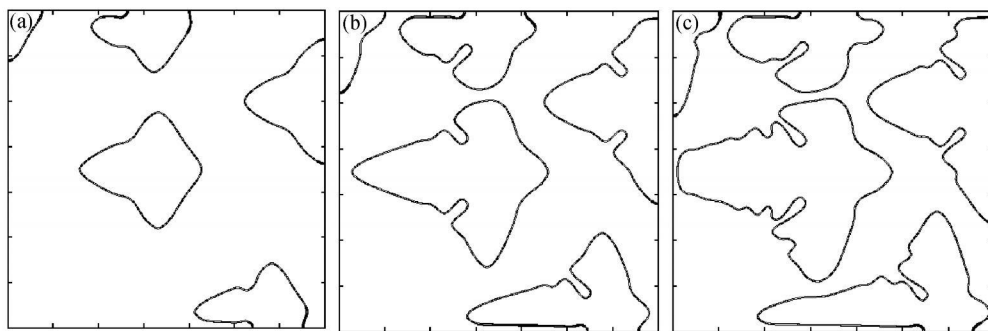


图6 流速 $Ud_0/\alpha = 0.1$, $t = 60000\Delta t$, 不同过冷度下多晶核生长的相场界面图

(a) 0.25; (b) 0.45; (c) 0.55

Fig.6 The polycrystalline phase field interface shape under various undercooling value at $Ud_0/\alpha = 0.1$ with $t = 60000\Delta t$ (a) 0.25; (b) 0.45; (c) 0.55

图7为 $t = 40000\Delta t$, 不同过冷度下 A 枝晶上游臂中心溶质与 X 轴关系图。

从图7可以看出, 随着过冷度的增大, 枝晶臂中心的溶质浓度和固/液界面处的溶质堆积程度均呈增加

趋势。其原因是: 当过冷度增加时, 相图上的液相线和固相线的交点(凝固点)右移, 凝固时的平衡浓度增大, 致使固相中的最低浓度增大; 另一方面, 大过冷度下的枝晶生长速度大。因此, 大过冷度下的固/液界面上富

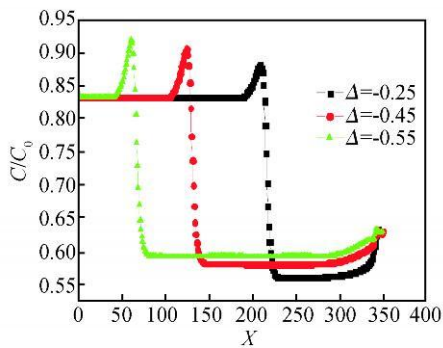


图 7 $t = 40000\Delta t$, 不同过冷度下 A 枝晶上游臂中心溶质与 X 轴关系图

Fig. 7 The upstream arm concentration as a function of X axis at various undercooling value with $t = 40000\Delta t$ for A dendritic

集了更多的溶质。

3.4 晶核个数的影响

模拟的晶核越多, 枝晶间的影响就越多, 生长形貌就越复杂。图 8 为流速 $U d_0/\alpha = 0.1$, $t = 60000\Delta t$, 不同晶核数下的相场形貌图。从图中可以看出, 当模拟区域只有一个晶核时, 在流动的作用下, 上游臂生长最快, 下游臂最慢, 而垂直臂以流动方向对称生长并向迎流侧倾斜生长。当晶核个数增大到 5 时, A 枝晶 2 号臂生长受到邻近晶核的竞争生长而与图 8(a) 中的明显不同。当晶核个数进一步增大到 8 时, A 枝晶的 1 号臂受到下面晶核的影响而又与图 8(b) 中的明显不同, A 枝晶的形貌变得更加复杂, 即在流动的作用和晶核间的竞争生长影响下, 晶核的生长变得更加复杂而呈现多样性。

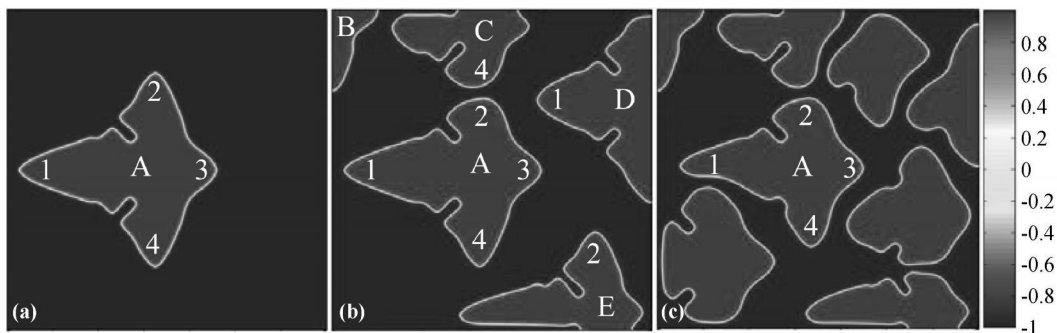


图 8 流速 $U d_0/\alpha = 0.1$, $t = 60000\Delta t$, 不同晶核数下的相场形貌图 (a) 1; (b) 5; (c) 8

Fig. 8 The polycrystalline phase field shape under various nuclei number at $U d_0/\alpha = 0.1$ with $t = 60000\Delta t$ (a) 1; (b) 5; (c) 8

4 结论

(1) 随着模拟时间的演化, 晶核之间由相互独立生长逐渐演化为相互竞争生长。

(2) 施加强制流动后, 晶核生长为非对称的枝晶, 上游臂生长得到促进, 下游臂生长受到抑制, 而垂直臂则向迎流方向倾斜生长。

(3) 随着流速的增大, 多晶粒的非对称性越显著, 迎流一侧的侧边枝越发达, 且生长方向逐渐平行于流动方向, 而逆流一侧的枝晶臂保持光滑。

(4) 随着各向异性值的增大, 枝晶尺寸均增大, 各晶核间的相互影响也逐渐加强, A 枝晶上游臂尖端处的固液界面溶质堆积程度减弱。

(5) 随着过冷度的增大, 枝晶尺寸增大, 各晶核间的相互影响也逐渐加强, A 枝晶上游臂尖端的固相溶质浓度和固/液界面的溶质堆积程度均增强。

(6) 模拟晶核的个数越多, 晶核间的相互影响就越大, 所形成的枝晶形貌就越复杂。

参考文献

- [1] LAN C W. Recent progress of crystal growth modeling and growth control[J]. Chemical Engineering Science, 2004, 59: 1437–1457.
- [2] BOETTINGER W J, WARREN J A, BECKERMANN C. Phase field simulation of solidification[J]. Annu Rev Mater Res, 2002, 32: 163–194.
- [3] ZHU M F, DAI T, LEE S Y, et al. Modeling of dendritic growth in the presence of convection[J]. Science in China Ser E, 2005, 48 (3): 241–257.
- [4] KOBAYASHI R. Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth[J]. Physica D, 1993, 64(3): 410–423.
- [5] HOYT J J, ASTA M, KARMA A. Method for computing the anisotropy of the solid-liquid interfacial free energy[J]. Physical Review Letters, 2001, 86(24): 5530–5533.
- [6] KARMA A, RAPPEL W J. Phase field method for computationally efficient modeling of solidification with arbitrary interface kinetics[J]. Physical Review E, 1996, 53(4): R3017–R3020.
- [7] ASTA M, BECKERMANN C, KARMA A, et al. Solidification microstructures and solid-state parallels: Recent developments, future directions[J]. Acta Materialia, 2009, 57: 941–971.

(下转第 11 页)

- [7] XIAO K Q, ZHANG L C, ZARUDI I. Mechanical and rheological properties of carbon nanotube-reinforced polyethylene composites [J]. Composites Science and Technology, 2007, 67(2): 177.
- [8] 陈晓媛, 王港, 黄锐, 等. 聚烯烃/ 纳米碳酸钙复合材料的异常流变行为研究[J]. 中国塑料, 2003, 17(5): 57– 61.
- [9] SUNG Y T, HAN M S, SONG K H, et al. Rheological and electrical properties of polycarbonate/ multi-walled carbon nanotube composites[J]. Polymer, 2006, 47(12): 4434– 4439.
- [10] 张惠峰, 王益庆, 吴友平, 等. 粘土/SBR 纳米复合材料加工性能[J]. 合成橡胶工业, 2003, 26(4): 233– 237.
- [11] 古菊, 贾德民, 罗远芳, 等. 黏土或纳米碳酸钙填充聚合物的结晶性能和流变行为研究[J]. 弹性体, 2006, 16(4): 62– 67.
- [12] MOHANTY S, VERMA K, NAYAK S K. Rheological characterization of PP/jute composite melts [J]. Journal of Applied Polymer Science, 2006, 99(4): 1476– 1484.
- [13] 刘正英, 陈俊, 殷茜, 等. 聚乙烯改性材料流变行为研究进展[J]. 中国塑料, 2003, 17(5): 24– 27.
- [14] 张环, 刘敏江. 填充聚合物的流变行为[J]. 现代塑料加工应用, 2001, 13(3): 58– 62.
- [15] 周持兴. 聚合物流变实验与应用[M]. 上海: 上海交通大学出版社, 2003, 1. 15– 56.
- [16] PAYNE A R. The dynamic properties of carbon black-loaded natural rubber vulcanizates[J]. Journal of Applied Polymer Science, 1962, 6(19): 57– 63.

- [17] PAYNE A R, WHITAKER R E. Low strain dynamic properties of filled rubbers[J]. Rubber Chem Technol, 1971, 44: 440– 479.
- [18] CASSAGNAU P. Payne effect and shear elasticity of silica-filled polymers in concentrated solutions and in molten state[J]. Polymer, 2003, 44: 2455– 2462.
- [19] GAUTHIER C, REYNAUD E, VASSOILLE R, et al. Analysis of the non-linear viscoelastic behaviour of silica filled styrene butadiene rubber[J]. Polymer, 2004, 45: 2761– 2771.
- [20] LION A, KARDELKY C. The payne effect in finite viscoelasticity[J]. International Journal of Plasticity, 2004, 20(7): 1313– 1345.

基金项目: 福建省“ 十一 五 ” 科技重大专项专题(2007HZ0001-1); 国家“ 十一 五 ” 科技支撑计划项目(2007BAC20B01-1); 福建省教育厅资助项目(JB08034)

收稿日期: 2009-11-20; 修订日期: 2010-03-10

作者简介: 游瑞云(1978—), 女, 实验师, 硕士, 现从事环境友好材料的研究. 联系地址: 福建师范大学化学与材料学院(350007), E-mail: you-ruiyun@tom.com

通讯作者: 陈庆华, 联系地址: 福建师范大学化学与材料学院(350007), E-mail: cqhuar@pub5.fz.fj.cn

(上接第 6 页)

- [8] KARMA A. Phase field formulation for quantitative modeling of alloy solidification[J]. Physical Review Letters, 2001, 87(11): 115701– 1– 4.
- [9] ECHEBARRIA B, FOLCH R, KARMA A, et al. Quantitative phase field model of alloy solidification[J]. Physical Review E, 2004, 70: 061604– 1– 22.
- [10] LAN C W, SHIH C J. Efficient phase field simulation of a binary dendritic growth in a forced flow[J]. Physical Review E, 2004, 69: 031601– 1– 10.
- [11] GRÁNÁSY L, PUSZTAI T, WARREN J A. Modelling polycrystalline solidification using phase field theory[J]. J Phys: Condens Matter, 2004, 16 : R1205– R1235.
- [12] 路阳, 王帆, 朱昌盛, 等. 等温凝固多晶粒生长相场法模拟[J]. 物理学报, 2006, 55(2): 780– 785.
- [13] TONG X, BECKERMANN C, KARMA A, et al. Phase field simulation of dendritic crystal growth in a forced flow[J]. Physical Review E, 2001, 63: 061601– 1– 16.
- [14] ROSAM J, JIMACK P K, MULLIS A M. An adaptive, fully implicit multigrid phase-field model for the quantitative simulation of non-isothermal binary alloy solidification[J]. Acta Materialia, 2008, 56 : 4559– 4569.

- [15] AL-RAWAHI N, TRYGGVASON G. Numerical simulation of dendritic solidification with convection: two-dimensional geometry[J]. Journal of Computational Physics, 2002, 180: 471– 496.
- [16] HERLACH D M, ECKLER K, KARMA A, et al. Grain refinement through fragmentation of dendrites in undercooled melts [J]. Materials Science and Engineering A, 2001, 304– 306: 20– 25.
- [17] MULLIS A M. Quantification of mesh induced anisotropy effects in the phase-field method[J]. Computational Materials Science, 2006, 36: 345– 353.
- [18] 龙文元, 蔡启舟, 陈立亮, 等. 二元合金等温凝固过程的相场模型[J]. 物理学报, 2005, 54(1): 256– 261.

基金项目: 西安科技大学培育基金资助课题(200847)

收稿日期: 2009-03-07; 修订日期: 2009-12-20

作者简介: 郝丽梅(1979—), 女, 硕士, 讲师, 主要从事对流与凝固研究. 联系地址: 西安市雁塔中路 58 号西安科技大学理学院应用物理系(710054), E-mail: c2002z@nwpu.edu.cn