

不同模组结构高效制备单晶叶片定向凝固过程的温度场及组织模拟

杨文超, 撒世鹏, 郝文硕, 秦嘉润, 张 军, 刘 林

(西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072)

摘 要: 针对 18 个单晶高温合金叶片高效制备过程中温度场不均匀而导致的杂晶缺陷问题, 设计了 3 种不同的单晶叶片模组结构, 采用 ProCast 软件和 CAFE 模块对第 2 代单晶高温合金 DD6 不同模组结构在高速凝固工艺下的温度场和晶粒组织进行模拟研究, 分析了不同模组结构下叶片的温度场演化和抽拉速率对杂晶的影响。结果表明, 单层模组由于中柱的保温作用较小, 导致叶片近中柱侧的散热效率高于近炉壁侧, 凝固过程固液界面弯曲严重, 凝固过冷大, 杂晶形成倾向大; 通过对单层模组添加套筒, 以加强保温作用, 可有效改善温度场, 减小固液界面弯曲程度, 避免杂晶形核; 而双层叠加模组温度场分布均匀, 凝固过冷小, 杂晶形成倾向小。套筒模组和双层叠加模组在抽拉速率小于 100 $\mu\text{m/s}$ 时均无杂晶形成, 但双层叠加模组将模组直径缩小为其余 2 种模组结构的一半, 降低了对炉体型腔尺寸的要求, 有望实现单晶叶片的高效制备。

关键词: 模组结构; 单晶叶片; 定向凝固; 数值模拟

中图分类号: TG146.1⁺5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)11-3847-10

现代航空工业的发展对航空发动机涡轮叶片热端部件的承温能力和使用性能提出了极高的要求。高温合金在高温高压、高应力、交变载荷、氧化热腐蚀等严苛服役条件下表现优异, 是制备航空发动机涡轮叶片的关键材料^[1]。其中, 镍基高温合金具有良好的高温强度、塑性、抗氧化性、抗热腐蚀性、组织稳定性及使用可靠性, 成为应用最为广泛的高温合金。通过定向凝固工艺, 将镍基单晶高温合金制备成为单晶叶片, 消除了全部晶界, 显著提高了叶片的承温能力和使用寿命。单晶叶片主要通过熔模精铸结合定向凝固来生产, 为提高生产效率, 多采用模组结构一次生产多个叶片。目前行业内生产单晶叶片所普遍使用的模组结构为单层模组结构^[2-4], 即叶片在圆形模组中单层排布。在保证单晶叶片生产能力不变的条件下, 单层模组结构的直径大, 一方面要求激冷板和定向凝固炉型腔尺寸大, 另一方面导致定向凝固过程中叶片左右两侧散热条件不同, 横向温度场分布不均匀, 等温线往往发生弯曲^[5-7], 易出现过渡段杂晶及平台杂晶等凝固缺陷^[8-9], 制约了单晶叶片的生产合格率。为改善传统圆形模组结构的缺陷, 马德新等^[4]设计了一种全新的模组结构, 该模组结构中叶片平行排列, 加热器与

叶片间隔排放, 使叶片两侧具有均匀的温度场, 有效减小了凝固缺陷。此外, Onyszek^[10]报道了一种双层叠加模组结构, 即将单层模组中的叶片上下层叠加进行单晶叶片的制备, 保证叶片数量不变的条件下缩小了模组直径, 但他们并未将这种新型模组结构与原有模组结构进行对比, 其制备叶片的质量尚不清楚。

单晶高温合金叶片定向凝固过程的数值模拟, 可实现对定向凝固过程中温度场、溶质场、应力场、流场等多种因素^[10-14]的可视化观察, 并大大节省因试验试错而花费的时间与资金成本。国内外针对定向凝固过程的模拟仿真从 20 世纪 80 年代开始, 经历了由一维^[15-16]、二维^[17]再到三维^[18-19]的转变, 建立了元胞自动机-有限元 (CAFE)^[8,19-21]、元胞自动机-有限差分 (CAFD)^[9,11-12]、相场 (phase field models) 法^[22-24]、蒙特卡罗 (Monte Carlo) 法^[25-26]等多种模拟方法, 可对宏微物理场^[5,8,14]、介观晶粒组织^[8,19,27]、微观枝晶组织^[11,28]进行多尺度模拟, 成功在定向凝固工艺技术研究^[8,29-30]、选晶过程优化^[21,27-28]、凝固组织及缺陷^[18,31-34]等研究中得到应用。因此, 可通过数值模拟的手段对不同模组结构生产单晶叶片的定向凝固过程进行研究。

收稿日期: 2023-01-06

基金项目: 国家自然科学基金 (52071263); 陕西省自然科学基金 (2021JC-13); 陕西省重点研发计划 (2020ZDLGY13-02)

作者简介: 杨文超, 男, 1985 年生, 博士, 教授, 西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072, 电话: 029-88492227, E-mail: wenchao yang@nwpu.edu.cn

本实验以第 2 代镍基单晶高温合金 DD6 为研究对象, 采用 ProCast 有限元铸造软件对不同模组结构制备 18 个单晶叶片定向凝固过程中的温度场和晶粒组织进行模拟仿真分析, 希望能为单晶叶片的高效制备提供理论和技术支持。

1 实验

1.1 模组结构及网格划分

由于涡轮叶片结构比较复杂, 将涡轮叶片进行了必要的简化以便于模拟仿真, 简化的叶片模型由弯月形叶身、弯月形榫头和平行四边形薄壁缘板构成, 如图 1 所示。

按照 1:1 比例构建了单层模组、套筒模组和双层叠加模组的三维模型, 如图 2 所示。3 种模组均由浇注系统、叶片、选晶器、激冷板及中柱构成, 此外套筒模组还包括套于中柱之外的套筒。3 种模组的叶片生产能力相同, 即 3 种模组均可通过一次制备得到 18 个单晶叶片。由图 2 可见, 双层叠加模组中 2 个叶片上下层叠加排布, 将模组中叶片组数降低到单层模组的一半, 叶片距中柱的距离也缩小至单层模组的一半, 模组直径得到了有效降低, 从而降低了对定向凝固炉型腔尺寸的要求。此外, 从图 2 中还可看出叶片的排布姿态: 叶身在下、缘板和榫头在上, 叶身厚壁一侧靠近中柱, 下文中称之为近中柱侧, 对应于图 1 中正视图的左侧, 叶身薄壁一侧靠近炉壁, 下文中称之为近炉壁侧, 对应于图 1 中正视图的右侧。

进一步简化所使用的高速凝固法的单晶炉体模型, 将炉体模型简化为一个封闭的曲面集合, 包含上加热区、下加热区、隔热挡板和冷却区 4 个部分。然后对模组实体和炉体进行网格划分, 由于模组结构具

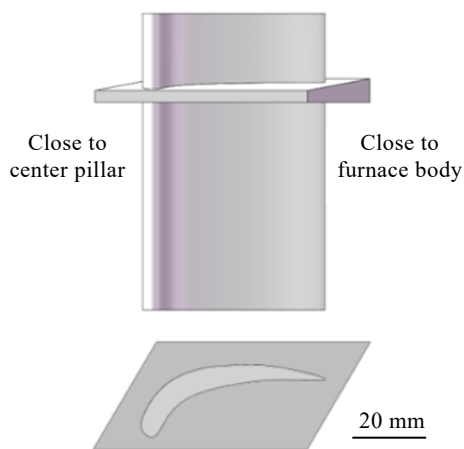


图 1 本研究所使用的简化叶片模型

Fig.1 Simplified blade model used in this study

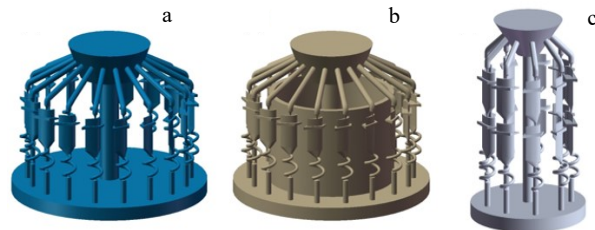


图 2 3 种模组结构示意图

Fig.2 Schematic diagram of three modules: (a) single-layer module, (b) sleeve module, and (c) double-layer superimposed module

有旋转对称的性质, 仅需对模组中的 $1/n$ ($n=18, 9$) 进行网格划分, 再应用 ProCAST 软件中的对称性功能即可实现整个模组的模拟计算, 同时有效减少了计算量, 提高了计算效率, 其网格模型及炉壁辐射参数如图 3 所示。

1.2 温度场模型

利用 ProCAST 软件对 3 种模组定向凝固过程中的温度场演变进行模拟。定向凝固过程中涉及到复杂的热量传输, 主要包括热传导、热辐射和综合换热 3 种类型, 不同类型的传热过程分别对应有不同的控制方程。

热传导: 具体包括叶片、模壳和中柱内部的热传导, 其控制方程如式(1)所示:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda \nabla^2 T + \rho L_f \frac{\partial f_s}{\partial t} \quad (1)$$

式中, ρ 为合金密度, C_p 为合金的等压热容, T 为温度, t 为时间, λ 为热导率, L_f 为结晶潜热, f_s 为固相率。式(1)中等号右侧的第 1 项为热传导项, 第 2 项

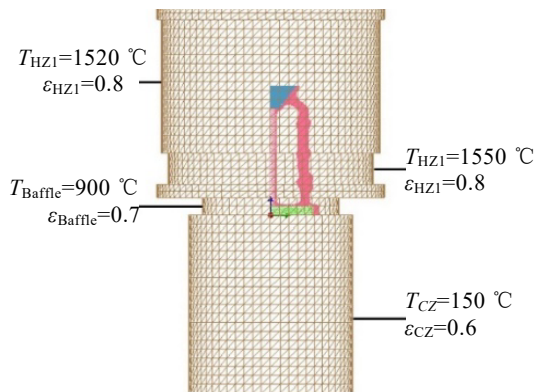


图 3 模拟用有限元网格模型及炉壁辐射参数

Fig.3 Finite element mesh model for simulation and the radiation parameters of furnace wall

为结晶潜热项, 对于叶片而言, 凝固过程发生固液相变而考虑结晶潜热项, 对模壳而言, 在整个凝固过程中均保持固相, 因而不考虑结晶潜热项。

热辐射: 具体包括模壳外表面不同部分间的热辐射; 模壳外表面与隔热挡板和炉体内壁间的热辐射。ProCAST 软件中将包含有 n 个面有限元网格的热辐射处理如下: 面 i 的辐射通量 q_i^{out} 为自身辐射通量与其他 n 个面给予的辐射通量 q_i^{in} 之和, 如式(2)所示:

$$q_i^{\text{out}} = \varepsilon_i \sigma T_i^4 + (1 - \varepsilon_i) q_i^{\text{in}} \quad (2)$$

式中, ε_i 为面 i 的辐射率, σ 为 Stefan-Boltzmann 常数。式(2)中等号右侧的第 1 项为直接辐射能, 第 2 项为面 i 接收到其他 n 个面的辐射后的反射辐射能。面 i 接收到的其他 n 个面的辐射能量可由式(3)计算得到:

$$q_i^{\text{in}} = \sum_{j=1}^n q_j^{\text{out}} F_{ij}, i=1,2,3,\dots,n \quad (3)$$

式中, F_{ij} 为角系数, 表示离开 j 表面而辐射 i 表面的辐射能量比, 每抽拉 5 mm 更新一次角系数。

界面的综合换热: 具体包括已凝固金属与激冷板间的换热; 模壳与激冷板、中柱间的换热; 叶片与模壳之间的换热。利用牛顿冷却定律对不同材料界面之间的换热过程进行描述, 如式(4)所示:

$$q = h(T_i - T_j) \quad (4)$$

式中, q 为换热通量, h 为界面换热系数, T_i , T_j 为 2 种材料界面的温度。

1.3 晶粒组织模型

利用 ProCast 软件与 CAFE 模块对 3 种模组定向凝固过程中的晶粒组织进行模拟。

形核模型:

模壳内熔融高温合金接触到激冷板后, 由于受到激冷作用而在激冷板表面形成许多细小的等轴晶粒, 此外在熔融高温合金的内部, 由于热过冷、成分过冷或杂质粒子的存在也会导致形核。Rappaz 和 Gandin^[35] 利用高斯形核分布定量描述型壳表面和液相内部的形核密度:

$$n(\Delta T) = \frac{N_{\max}}{\sqrt{2\pi\Delta T_o}} \int_0^{\Delta T} \exp\left[-\frac{(\Delta T - \Delta T_{\max})^2}{2\Delta T_o^2}\right] d(\Delta T) \quad (5)$$

式中, $n(\Delta T)$ 是在过冷度为 ΔT 处的总晶核数, $N_{\max}$ 是最大形核密度, ΔT_o 是形核分布的标准方差, $\Delta T_{\max}$ 是平均形核过冷度。将激冷板处的形核规定为面形核, $N_{\max}$ 的单位为 m^{-2} ; 金属熔体内部的形核规定为体形核, $N_{\max}$ 的单位为 m^{-3} 。

生长模型:

上述激冷板表面细小的晶粒一经形核便会开始生长, 晶粒的生长模型可利用 KGT 模型^[36]进行计算:

$$V = a_2 \Delta T^2 + a_3 \Delta T^3 \quad (6)$$

式中, V 为枝晶尖端的生长速度, a_2 , a_3 为与合金成分有关的常数, ΔT 为枝晶尖端过冷度, 可由下式(7)计算:

$$\Delta T = \Delta T_C + \Delta T_T + \Delta T_K + \Delta T_R \quad (7)$$

式中, ΔT_C 、 ΔT_T 、 ΔT_K 、 ΔT_R 分别为枝晶尖端成分过冷度、热过冷度、动力学过冷度和曲率过冷度。由于定向凝固过程温度梯度为正, 故其固液界面前沿不存在热过冷度, 大多数熔化熵较小的合金在正常凝固条件下的动力学过冷度较小, 可以忽略, 所以高温合金定向凝固条件下, 枝晶尖端过冷度包括成分过冷度和曲率过冷度两项。

1.4 模拟参数

所选用的合金为国产第 2 代镍基单晶高温合金 DD6, 其名义成分如表 1 所示, 其热物理性能参数由 ProCAST 中的 Lever 模型计算得到, 计算所得 DD6 合金的液固相线温度分别为 1398.4 和 1355.9 °C, 与实验测得的 1399 和 1342 °C 接近^[37]。激冷板材料选用纯铜, 模壳材料选用氧化铝陶瓷, 中柱与套筒材料选用氧化锆陶瓷, 其热物理性能参数由 ProCAST 数据库给出。

熔融高温合金、模壳、中柱、套筒的初始温度均设定为 1550 °C。激冷板内部有循环水冷, 设定激冷板上表面温度为 400 °C, 下表面温度为 150 °C。模壳与激冷板间的界面换热系数为 $500 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{°C}^{-1}$, 中柱与激冷板、中柱与模壳、套筒与激冷板、套筒与模壳的界面换热系数均设定为 $100 \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{°C}^{-1}$, 合金与模壳、合金与激冷板的界面换热系数与温度有关, 如表 2 所示。模壳与炉壁之间通过热辐射进行换热, 模壳的辐射率为 0.4。炉壁内各部分的温度和辐射率由图 3 给出。

表 1 DD6 合金的名义成分

Table 1 Nominal compositions of DD6 (wt%)

Cr	Co	Mo	W	Ta	Re	Nb	Al	Hf	Ni
4.3	9	2	8	7.5	2	0.5	5.6	0.1	Balance

表 2 温度有关的界面换热系数

Table 2 Temperature-dependended interfacial heat transfer coefficients

Temperature/°C	25	400	1000	1324	1371	1550
Interfacial heat transfer coefficient, $h_{\text{Metal/Mold}}/\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{°C}^{-1}$	150	150	190	350	750	750
Interfacial heat transfer coefficient, $h_{\text{Metal/Chill}}/\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{°C}^{-1}$	80	600	1510	2000	2250	3010

根据 DD6 合金成分所确定的 CAFE 模拟形核参数如表 3 所示, 生长动力学参数选取如下: $a_2=2.3\times 10^{-6}\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}\cdot^{\circ}\text{C}^{-2}$, $a_3=3.3\times 10^{-6}\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}\cdot^{\circ}\text{C}^{-3}$ 。

2 模拟结果

2.1 单层模组结构凝固过程模拟

图 4 所示为抽拉速率为 $100\text{ }\mu\text{m/s}$ 时单层模组结构示意图 4a 及生产单晶叶片时温度场分布的模拟结果 4b~4e。由图可知, 叶片的左侧靠近模组中柱, 为近中柱侧; 叶片的右侧靠近炉体内壁, 为近炉壁侧。图 4b, 4c 为定向凝固过程中固液界面推进到叶身底部时的温度场分布, 固液界面在 380 s 时首先推进到左侧(图 4b), 然后在 420 s 时才推进到右侧(图 4c), 等温线严重下凹且不对称, 等温线左侧倾斜程度显著高于右侧。图 4d₁, 4e₁ 为凝固到叶片缘板附近时的叶身温度场分布, 图 4d₂, 4e₂ 为对应的横截面。随着抽拉过程的进行, 等温线的弯曲程度逐渐减小, 550 s 时缘板左侧(近中柱侧)边角温度已大幅度低于液相线温度, 达到了临界形核过冷度而具有较大的杂晶形成倾向; 固液界面继续推进, 等温线形貌由向下凹陷逐步转变为左高右低, 780 s 时固液界面推进至缘板右侧边角(近炉壁侧), 抽拉继续, 完成整个叶片的凝固。

图 5 所示为不同抽拉速率下单层模组的凝固过冷模拟结果。可以看到, 叶片的凝固过冷随抽拉速率的提升而增大, 叶身的凝固过冷由抽拉速率为 $50\text{ }\mu\text{m/s}$ 时的 $2\sim 3\text{ }^{\circ}\text{C}$ 提升至 $150\text{ }\mu\text{m/s}$ 时的 $3\sim 6\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。值得注意的是, 叶身底部右侧边角的凝固过冷随抽拉速率的提升而快速增大, 当抽拉速率为 $150\text{ }\mu\text{m/s}$ 时已达到 $14\text{ }^{\circ}\text{C}$, 具有非常大的杂晶形成倾向; 叶身底部左侧边角与缘板左侧边角在不同抽拉速率下均具有较大的凝固过冷; 缘板右侧边角的凝固过冷仅略高于叶身, 其杂晶形成倾向较小。不同抽拉速率下, 叶身底部左侧边角及缘板左侧边角的凝固过冷均比对应右侧的凝固过冷大, 表明凝固过程中近中柱侧的散热效果比炉壁散热效果更强烈, 更容易发生过冷。

图 6 所示为不同抽拉速率下单层模组的晶粒组织模拟结果。可以看到在引晶段底部, 熔融高温合金在

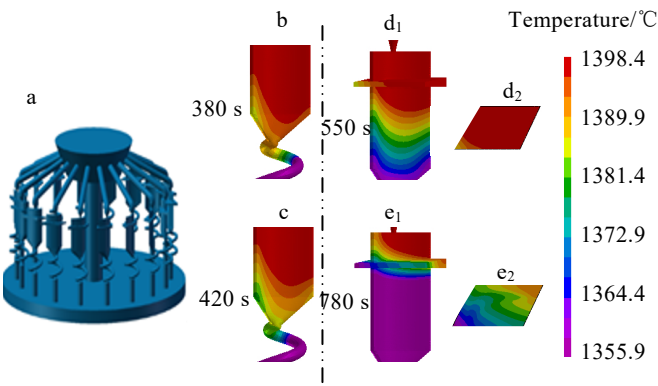


图 4 单层模组结构示意图及其温度场模拟结果

Fig.4 Schematic diagram of single-layer module (a) and its temperature field simulation results at withdrawal rate of $v=100\text{ }\mu\text{m/s}$: (b, c) bottom of the blade, (d₁, e₁) platform, and (d₂, e₂) the cross section of the platform

激冷板的激冷作用下发生异质形核, 形成大量具有随机取向的等轴晶粒, 随着定向凝固抽拉过程的进行, 等轴晶在定向温度梯度的约束下沿着叶片轴向生长成为柱状晶; 具有不同取向的柱状晶沿叶片轴向竞争生长, 晶粒<001>取向与叶片轴向角度偏差较小的晶粒逐步淘汰掉角度偏差较大的晶粒; 随着高度的增加, 柱状晶数量逐步减少, 到引晶段结束时, 仅有少数几个晶粒进入螺旋段; 螺旋段内, 晶粒在螺旋段的几何阻挡作用下发生进一步的竞争淘汰, 最终选出具有良好取向的单一晶粒, 并通过螺旋段生长至叶身与选晶器的过渡段。

由图 6 可见, 不同抽拉速率下, 单层模组所选出

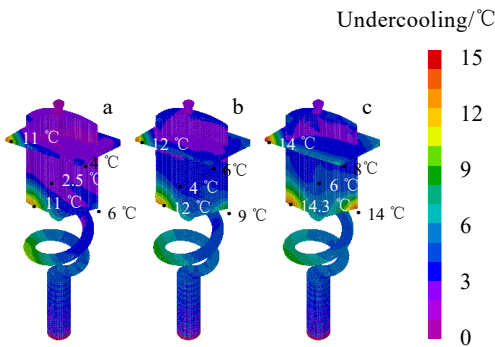


图 5 不同抽拉速率下单层模组的凝固过冷分布

Fig.5 Undercooling distribution of single-layer module at different withdrawal rates: (a) $50\text{ }\mu\text{m/s}$, (b) $100\text{ }\mu\text{m/s}$, and (c) $150\text{ }\mu\text{m/s}$

Table 3 Nucleation parameters of DD6 used for grain structure simulation			
Parameter	ΔT_{max}	ΔT_{σ}	n_{max}
Surface nucleation	2.0	1.0	$1.65\times 10^9\text{ m}^{-2}$
Volume nucleation	16.0	1.6	$9.00\times 10^9\text{ m}^{-3}$

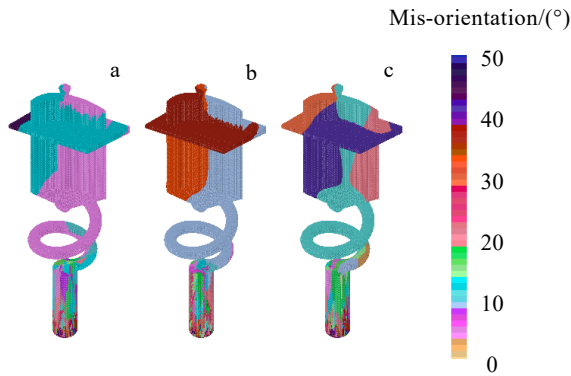


图 6 不同抽拉速率下单层模组的晶粒组织演化模拟

Fig.6 CAFE simulation results of single-layer module at different withdrawal rates: (a) 50 $\mu\text{m/s}$, (b) 100 $\mu\text{m/s}$ and (c) 150 $\mu\text{m/s}$

的单晶<001>取向与叶片轴向的角度偏差均在 15° 以内，抽拉速率对单晶取向无显著影响。但在模拟的 3 种抽拉速率下，叶身左侧底部和缘板边角处均因较大过冷而有杂晶形成，当抽拉速率提升至 150 $\mu\text{m/s}$ 时，叶身右侧底部边角也有杂晶形成。综上，单层模组在 3 种不同的抽拉速率下均有杂晶产生，所生产的单晶叶片不合格。

2.2 套筒模组结构凝固过程模拟

图 7 是套筒模组结构示意图 (7a) 及生产单晶叶片时温度场分布的模拟结果 (7b~7d)，抽拉速率为 100 $\mu\text{m/s}$ 。图中叶片的左侧为近中柱侧，右侧为近炉壁侧。固液界面推进到叶身底部时 (图 7b)，等温线呈向下凹陷，左右基本对称，固液界面同时推进到叶身底部两侧；与未加套筒的单层模组相比，套筒模组在叶身部位的等温线弯曲程度明显降低，等温线的对称性明显改善，糊状区宽度明显缩窄。随着抽拉过程的进行，等温线弯曲程度进一步降低，当固液界面推进到缘板的左侧边角 (图 7c₁, 7c₂) 时，等温线的弯曲程度已接近水平，位于叶身左半部分的等温线逐步向缘板边缘延伸，在缘板左侧边角过冷至临界形核过冷度之前已经到达；抽拉过程继续进行，等温线的平直程度进一步增大，位于叶身处的糊状区逐步推进至缘板处，凝固至整个缘板，最终完成整个叶片的凝固 (图 7d₁, 7d₂)。值得注意的是，套筒模组叶片缘板在完成凝固过程时，左侧边角并非处于孤立过冷区独自凝固，而是由叶身单晶逐步凝固延伸至缘板边角；缘板右侧边角最后凝固时，整个缘板的温度差非常小，仍在 10°C 以内，此过程优于单层模组。

图 8 所示为不同抽拉速率下套筒模组的凝固过冷

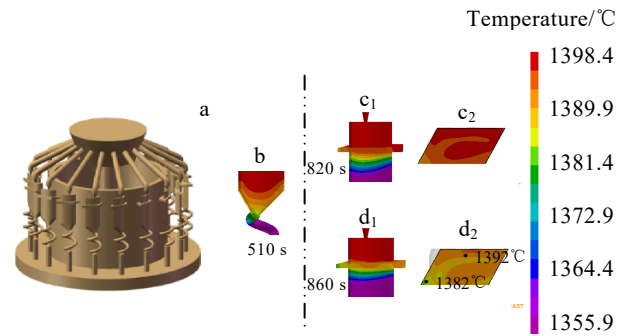


图 7 套筒模组结构示意图及其温度场模拟结果

Fig.7 Schematic diagram of sleeve module (a) and its temperature field simulation results at withdrawal rate of $v=100 \mu\text{m/s}$: (b) bottom of the blade, (c₁, d₁) platform, and (c₂, d₂) the cross section of the platform

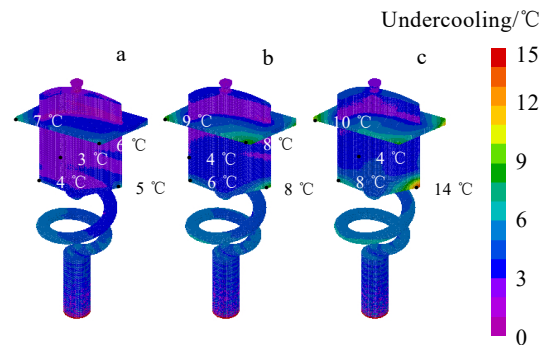


图 8 不同抽拉速率下，套筒模组的凝固过冷分布

Fig.8 Undercooling distribution of sleeve module at different withdrawal rates: (a) 50 $\mu\text{m/s}$, (b) 100 $\mu\text{m/s}$, and (c) 150 $\mu\text{m/s}$

模拟结果。结果显示，叶片的凝固过冷随抽拉速率的提升而增大，但叶身底部右侧边角的增加速度很快，在抽拉速率为 150 $\mu\text{m/s}$ 时已达到 14°C 左右，杂晶形成倾向非常大。值得注意的是，叶身底部左侧边角的过冷小于其余各个边角的凝固过冷，具有最小的杂晶形核倾向。以抽拉速率为 100 $\mu\text{m/s}$ 为例 (图 8b) 考察凝固过冷模拟结果：叶身大部分区域的凝固过冷为 4°C ，叶身底部边角处的凝固过冷均略高于叶身，且位于右侧的叶身底部边角凝固过冷更大，约为 8°C ；缘板边角处的过冷均大于叶身，缘板右侧边角的凝固过冷为 8°C ，缘板左侧边角的凝固过冷略高于右侧边角，为 9°C 。尽管叶片的各个边角处的凝固过冷均大于叶身，但仍没有达到合金的临界形核过冷度，杂晶

形成倾向较小。套筒模组凝固过冷与单层模组凝固过冷相比, 叶片近中柱侧的凝固过冷明显降低; 近炉壁侧无明显变化, 缘板凝固过冷小而叶身底部右侧边角凝固过冷度大。

图 9 所示为不同抽拉速率下套筒模组的晶粒组织模拟结果。结果显示, 抽拉速率的改变对选晶过程无明显影响, 套筒模组所选出的单晶<001>取向均与叶片轴向的偏差小于 15° , 未表现出明显差异。抽拉速率为 50 及 $100 \mu\text{m/s}$ 时, 套筒模组叶片中均无杂晶产生, 但当抽拉速率提升至 $150 \mu\text{m/s}$ 时, 叶身底部右侧边角处由于达到临界形核过冷度, 导致了杂晶形核。综上, 套筒模组生产合格单晶叶片的抽拉速率上限为 $100 \mu\text{m/s}$ 。

相较于单层模组, 套筒模组未对选晶过程造成明显影响, 2 种模组结构均选出了具有良好取向的单个晶粒。套筒模组虽未降低叶片近炉壁侧的杂晶形成倾向, 但有效抑制了模组叶片近中柱侧的杂晶形成, 在较低抽拉速率下可完成合格单晶叶片的制备。

2.3 双层叠加模组结构凝固过程模拟

图 10 所示为双层叠加模组示意图 (10a) 及生产单晶叶片时固液界面推进到下层叶片 (图 10b, 10c) 和上层叶片 (图 10d) 的叶身底部时的温度场模拟结果, 抽拉速率为 $100 \mu\text{m/s}$ 。图中叶片的左侧为近中柱侧, 叶片的右侧为近炉壁侧。由图 10b, 10c 可见, 当固液界面推进到下层叶片的叶身底部时, 等温线向下凹陷, 呈现准对称的特征, 固液界面几乎同时推进到叶身底部的两侧。由图 10d 可见, 当固液界面推进到上层叶片时等温线的下凹程度降低且具有良好的对称形貌, 固液界面同时推进到叶身底部的左右边角, 表明上层叶片的凝固过程并非下层叶片的简单重复。

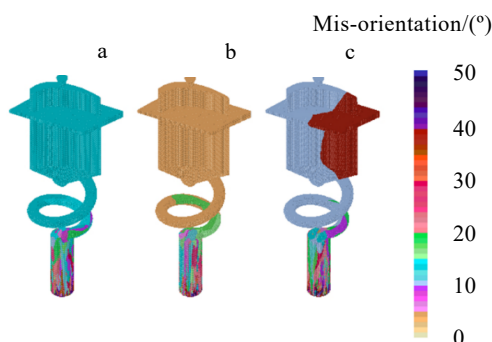


图 9 不同抽拉速率下套筒模组的晶粒组织演化模拟

Fig.9 CAFE simulation results of sleeve module at different withdrawal rates: (a) $50 \mu\text{m/s}$, (b) $100 \mu\text{m/s}$, and (c) $150 \mu\text{m/s}$

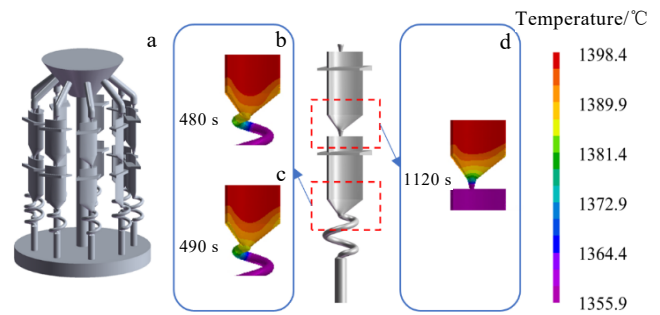


图 10 双层叠加模组结构示意图及其叶身底部的温度场模拟结果

Fig.10 Schematic diagram of double-layer superimposed module (a) and its temperature field simulation results of the bottom of the blade at withdrawal rate of $v=100 \mu\text{m/s}$: (b, c) bottom blade, and (d) above blade

与单层模组相比, 双层叠加模组的等温线凹陷程度明显降低, 等温线的对称性得到了明显改善, 糊状区宽度也有所降低; 与套筒模组相比, 在等温线弯曲程度、对称性方面双层叠加模组的下层叶片略差, 但上层叶片与套筒模组叶片基本相同。

图 11 所示为双层叠加模组生产单晶叶片, 固液界面推进到下层叶片 (图 11a₁~11b₂) 和上层叶片 (图 11c₁~11d₂) 的缘板时的温度场模拟结果, 抽拉速率为 $100 \mu\text{m/s}$ 。由图可见, 随抽拉进行, 固液界面由叶身底部逐步推进到缘板处, 等温线逐渐平直, 当 750 s 时, 下层叶片叶身内略弯曲的等温线向左延伸至缘板左侧边角处, 此时缘板左侧边角的温度略低于液相线温度而未达到临界形核过冷度; 抽拉过程继续, 等温线的弯曲程度进一步减小, 等温线向右延伸至缘板右侧边角, 逐步完成下层叶片的凝固, 固液界面进入上层叶片。上层叶片在缘板处的温度场分布与下层叶片相近, 凝固过程类似, 但上层叶片在缘板处的凝固表现优于下层叶片, 体现在等温线的弯曲程度更小、糊状区的宽度更窄。与单层模组结构相比, 双层叠加模组在缘板处的温度场分布明显更优, 上下两层叶片的缘板左侧均没有在叶身固液界面推进到缘板前产生大的过冷而处于孤立过冷区, 无杂晶形成。整个缘板在凝固的过程中, 温度分布比较均匀, 缘板内温差较小, 在 15°C 以内。但与套筒模组相比, 双层叠加模组在以上方面的表现略显逊色。

图 12 所示为不同抽拉速率下双层叠加模组的凝固过冷模拟结果。可以看到, 上层叶片各个边角的凝固过冷相对下层叶片更小; 叶身底部及缘板各个边角的凝固过

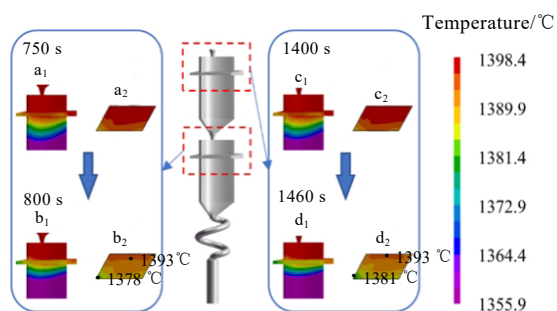


图 11 双层叠加模组缘板的温度场模拟结果

Fig.11 Schematic diagram of double-layer superimposed module and its temperature field simulation results of the platform at withdrawal rate of $v=100 \mu\text{m/s}$: (a₁, b₁) bottom blade, (c₁, d₁) above blade, (a₂, b₂) cross section of the platform of the bottom blade, and (c₂, d₂) cross section of the platform of the above blade

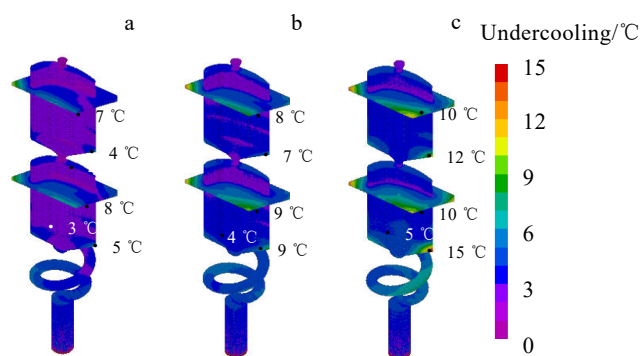


图 12 不同抽拉速率下双层叠加模组的凝固过冷分布

Fig.12 Undercooling distribution of double-layer superimposed module at different withdrawal rates: (a) $50 \mu\text{m/s}$, (b) $100 \mu\text{m/s}$, and (c) $150 \mu\text{m/s}$

冷略高于叶身。双层叠加模组的凝固过冷随抽拉速率的提升而增加, 叶身的凝固过冷由抽拉速率 $50 \mu\text{m/s}$ 时的 3°C 左右逐步增加至 $150 \mu\text{m/s}$ 时的 5°C 左右; 各个边角处的凝固过冷随抽拉速率提升也有不同程度地增加。叶身底部右侧边角凝固过冷的增加程度大于叶身底部左侧边角, 当抽拉速率为 $150 \mu\text{m/s}$ 时, 下层叶片叶身底部右侧边角凝固过冷为 15°C , 已达到临界形核过冷度, 上层叶片叶身底部右侧边角的凝固过冷低于下层叶片; 缘板各个边角的凝固过冷也有所增加, 但在所设置的抽拉速率下, 均未达到临界形核过冷度。

相较于单层模组, 双层叠加模组的凝固过冷与套筒模组的凝固过冷类似, 均有效降低了模组中叶片近

中柱侧的凝固过冷; 但在近炉壁侧, 3 种模组结构无明显区别, 叶身底部均在最大抽拉速率时达到非常大的凝固过冷。

图 13 所示为不同抽拉速率下双层叠加模组的晶粒组织模拟结果。可以看到, 抽拉速率对双层叠加模组的单晶取向无明显影响, 所选单晶的 $\langle 001 \rangle$ 取向与叶片轴向的偏角均小于 15° 。抽拉速率为 $50 \mu\text{m/s}$ 及 $100 \mu\text{m/s}$ 时, 双层叠加模组的叶片内无杂晶产生, 当抽拉速率提升至 $150 \mu\text{m/s}$ 时, 下层叶片右侧有杂晶产生, 与基体单晶一同生长至整个下层叶片, 并且可能影响上层叶片的生长。因此, 双层叠加模组生产合格单晶叶片的抽拉速率上限为 $100 \mu\text{m/s}$ 。

上述研究结果表明, 在高速凝固工艺下, 3 种模组结构通过选晶过程所选出的单个晶粒均具有良好的取向, 表明模组结构对选晶过程无明显影响; 双层叠加模组和套筒模组具有相同的抑制杂晶形成能力, 均可在抽拉速率不高于 $100 \mu\text{m/s}$ 条件下完成合格单晶叶片的制备, 优于单层模组。

3 分析与讨论

图 14 所示为单层模组叶片抽拉速率为 $100 \mu\text{m/s}$ 时, 平台上沿直径方向离炉体内壁不同距离的 3 个位置 (a: $L=30 \text{ mm}$; b: $L=40 \text{ mm}$; c: $L=50 \text{ mm}$) 的温度演化曲线, 可以看到, 3 个位置的温度都随着时间增加而降低, 且同一时刻 a 位置的温度高于 b 位置, b 位置的温度高于 c 位置, 也就是距离炉体内壁越近的位置, 同一时刻的温度越高。所以使用模组结构生产单晶叶片时, 其温度场是不均匀的, 且模组直径越大, 温度场越不均匀。

图 15 所示为 3 种不同模组结构定向凝固过程的温度梯度模拟结果, 抽拉速率为 $100 \mu\text{m/s}$ 。可以看

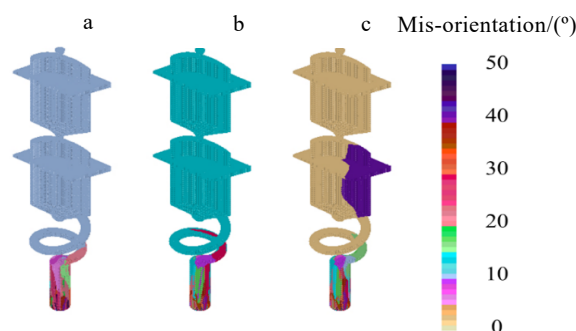


图 13 不同抽拉速率下双层叠加模组的晶粒组织演化模拟

Fig.13 CAFE simulation results of double-layer superimposed module at different withdrawal rates: (a) $50 \mu\text{m/s}$, (b) $100 \mu\text{m/s}$, and (c) $150 \mu\text{m/s}$

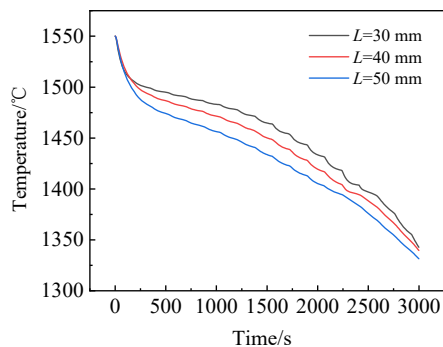


图 14 单层模组叶片平台距炉体内壁不同位置的温度演化曲线

Fig.14 Temperature evolution curves of single-layer module blade platform at different positions from the inner wall of furnace body at withdrawal rate of $v=100 \mu\text{m/s}$

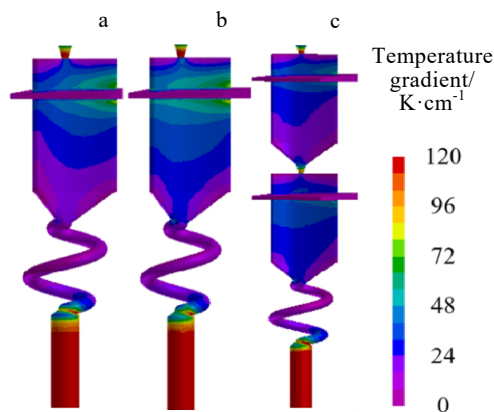


图 15 3 种不同模组结构凝固过程的温度梯度模拟结果

Fig.15 Simulation results of temperature gradient during solidification of three different module structures at withdrawal rate of $v=100 \mu\text{m/s}$: (a) single-layer module, (b) sleeve module, and (c) double-layer superimposed module

到, 在模拟的高速凝固法的工艺条件下, 3 种不同模组结构的温度梯度差异较小, 其叶身温度梯度均在 35 K/cm 左右, 叶身与平台连接的位置温度梯度在 45 K/cm 左右。另外, 双层叠加模组中上下层叶片的温度梯度存在一些差别, 上层叶片底部的温度梯度略小于下层叶片, 大约为 24 K/cm , 其温度梯度仍然在高速凝固法的工艺范围内, 说明所设计的双层叠加模组结构高度的增加不会严重降低上层叶片凝固过程的温度梯度而使其杂晶形成倾向增大, 可以实现单晶叶片的高效制备。

单层模组结构的定向凝固过程中, 由于模组直径大, 温度场严重不均匀, 等温线表现出向下凹陷且不

对称的分布特征, 叶片的各个边角也因在叶身枝晶生长到达之前有较大的凝固过冷而具有非常大的杂晶形成倾向。叶身等温线向下凹陷的原因是叶片边缘的散热大于叶片内部自身的热传导。由于叶片两侧等温线的倾斜程度不同, 需将等温线分为左右两部分以进一步分析原因。对于叶身底部右侧等温线(近炉壁侧), 当模组由加热区抽拉至冷却区时, 该侧由于距离炉体内壁较近而受到较为强烈的辐射散热作用, 辐射散热强度随距炉壁内表面距离的增加而降低, 因此叶身底部右侧等温线边缘高于中心; 对于叶身底部左侧(近中柱侧), 该侧靠近中柱, 由于模组直径大, 削弱了中柱对叶片的保温效果, 导致叶身底部左侧散热强烈, 散热强度随距中柱距离的增大而降低, 因此叶身底部左侧等温线也呈现边缘比中心高的形貌; 此外, 叶片距中柱的距离大于距炉体内壁的距离, 左侧的散热强度大于右侧, 所以叶片等温线左侧倾斜程度大于右侧倾斜程度。随着抽拉过程的进行, 已凝固金属体积分数逐步增加, 固态金属内部导热逐步增强, 逐步与叶片右侧(即近炉壁侧)相当, 但仍低于叶片左侧的散热, 因此等温线逐步由下凹陷转变为左高右低。最后, 对于缘板左侧边角, 由于中柱保温作用的严重缺失, 散热效果非常强烈, 导致凝固过程中叶身固液界面推进到缘板之前已经充分过冷而达到临界形核过冷度, 当固液界面推进至缘板时, 叶片内已凝固金属的导热已经与炉壁对叶片的辐射散热效果相当, 等温线形貌转变为左高右低的倾斜状态, 并逐步推进到缘板右侧边角。叶身及缘板边角处过冷较大的原因是中柱较远而缺失的保温作用和炉体内壁对叶片的辐射散热, 导致叶片边缘所受到的冷却效果较强, 温度下降较快。各个边角在叶身枝晶生长到达缘板之前达到临界形核过冷度而发生杂晶形核, 从而产生杂晶。

相较于单层模组, 套筒模组的等温线弯曲程度小且对称性好, 是由于模组中套筒的添加使叶片与保温体的距离大幅度缩短, 保温效果得到明显改善, 叶身左侧边缘的过快散热得到缓解, 等温线倾斜程度下降。此外, 由于叶片近中柱侧的散热速率得到了降低, 边角处的凝固过冷在叶身枝晶生长至缘板前不至于过大, 杂晶形成倾向减小。

双层叠加模组的温度场分布虽然略差于套筒模组, 但相比于单层模组已得到明显的改善, 并且由于双层叠加模组将叶片到中柱的间距降低到了单层模组的一半, 直接增强了中柱对叶片的保温作用, 从而降低了叶片近中柱侧的散热效率, 叶身底部左侧的等温线倾斜程度得到了显著降低。与套筒模组相比, 二者在温度场分布的微小差异可能与模组叶片与中柱(套

筒) 间距、叶片和中柱(套筒)的热辐射角系数差异有关。因此, 双层叠加模组叶身近中柱侧的凝固过冷在叶身枝晶生长至缘板前不至于过大, 杂晶形成倾向较小。Onyszko^[10]等人成功制备了一种双层叠加模组的模壳并通过定向凝固制备出单晶叶片, 可见双层叠加模组模壳的制备已经有了一定的基础, 通过双层叠加模组模壳有望实现单晶叶片的高效制备。

4 结 论

1) 提出了一种高效制备大批量单晶叶片的双层叠加模组并构建了其三维模型, 以单层模组、套筒模组为对照, 模拟了定向凝固过程中的温度场与晶粒组织。

2) 大批量生产单晶叶片时, 由于单层模组结构直径大, 中柱距叶片过远导致保温作用削弱; 凝固过程的温度场下凹严重, 导致叶身和缘板边角容易发生过冷形核, 产生杂晶, 降低合格率。通过添加套筒可以有效改善叶片凝固过程的温度场从而减少杂晶, 提高单晶叶片合格率。

3) 3 种模组结构在不同抽拉速率下均可选出取向良好的单晶, 单层模组在 3 种抽拉速率下都有杂晶形成, 套筒模组和双层叠加模组不产生杂晶的临界抽拉速率为 100 $\mu\text{m/s}$ 。

4) 双层叠加模组减小了模组直径, 改善了凝固过程的温度场, 避免叶身和缘板边角形成大的过冷且上下层叶片的温度梯度差异较小, 上下叶片的杂晶形成倾向均较小, 可以实现单晶叶片的高效制备。

参考文献 References

- [1] Reed R C. *The Superalloys: Fundamentals and Applications*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2006: 1
- [2] Li Shifeng(李世峰), Zhang Dinghua(张定华), Bu Kun(卜 昆) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(3): 559
- [3] Du Yingliu(杜应流), Ge Bingming(葛丙明), Wang Xingfang(汪兴芳) *et al. China Patent*(中国专利), CN107931523A[P]. 2018
- [4] Ma Dexin(马德新). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2015, 51(10): 1179
- [5] Yu Jing(于 靖), Xu Qingyan(许庆彦), Li Jiarong(李嘉荣) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2007, 43(10): 1113
- [6] Li Jiarong, Liu Shizhong, Zhong Zhengang. *Journal of Materials Science & Technology*[J], 2002, 18(4): 315
- [7] Li Jiarong, Liu Shizhong, Yuan Hailong *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2003, 19(6): 532
- [8] Wang Ning, Liu Lin, Gao Sifeng *et al. Rare Metal Materials*

and Engineering[J], 2013, 42(12): 2558

- [9] Tan Wei(谭 伟), Xue Xin(薛 鑫), Yu Tao(于 涛) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2022, 54(4): 1348
- [10] Onyszko A, Kubiak K. *Archives of Metallurgy and Materials*[J], 2009, 54(3): 765
- [11] Xu Zili, Li Zhonglin, Zhang Hang *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2017, 46(7): 1856
- [12] Yan Xuewei, Guo Xiong, Liu Yanling *et al. Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2019, 29(2): 338
- [13] Tang Ning, Sun Changbo, Zhang Hang *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2013, 42(11): 2298
- [14] Ren Neng, Li Jun, Panwisawas Chinnapat *et al. Acta Materialia*[J], 2021, 206: 116 620
- [15] Jasinski T, Rohsenow W M, Witt A F. *Journal of Crystal Growth*[J], 1983, 61(2): 339
- [16] Jasinski T, Witt A F, Rohsenow W M. *Journal of Crystal Growth* [J], 1984, 67(2): 173
- [17] Masatoshi Saitou, Akira Hirata. *Journal of Crystal Growth*[J], 1991, 113(1): 147
- [18] Gao Sifeng, Liu Lin, Zhang Jun *et al. China Foundry*[J], 2015, 12(2): 118
- [19] Seo Seong-moon, Kim In-soo, Jo Chang-yang *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2007, 449: 713
- [20] Guo Rufeng(郭如峰), Liu Lin(刘 林), Li Yafeng(李亚峰) *et al. China Foundry*(铸造)[J], 2014, 63(2): 7
- [21] Meng Xiangbin, Li Jinguo, Jin Tao *et al. Journal of Materials Science & Technology*[J], 2011, 27(2): 118
- [22] Karma Alain, Rappel Wouter-Jan. *Physical Review E*[J], 1998, 57(4): 4323
- [23] Wang Zhiping(王智平), Xiao Rongzhen(肖荣振), Zhu Chang-sheng(朱昌盛) *et al. Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 2006, 35(S2): 369
- [24] Folch R, Plapp M. *Physical Review E*[J], 2005, 72(1Pt1): 011602
- [25] Brown S G R, Spittle J A. *Materials Science and Technology* [J], 1989, 5(4): 362
- [26] Spittle J A, Brown S G R. *Acta Metallurgica*[J], 1989, 37(7): 1803
- [27] Dai H J, Dong H B, D'souza N *et al. Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2011, 42a(11): 3439
- [28] Xing Hui, Ji Mingyue, Dong Xianglei *et al. Materials & Design*[J], 2020, 185: 108 250
- [29] Jin Haipeng, Li Jiarong, Yu Jing *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2010, 39(5): 767

- [30] Elliott A J, Pollock T M. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2007, 38(4): 871
- [31] Miller J M, Yuan L, Lee P D *et al.* *Acta Materialia*[J], 2014, 69: 47
- [32] Li Yafeng(李亚峰). *Study on Stray Grain Formation in the Platform of Ni-Based Single Crystal Superalloys Turbine Blade*(镍基单晶高温合金涡轮叶片平台杂晶缺陷研究)[D]. Xi'an: Northwestern Polytechnical University, 2018
- [33] Yang X L, Lee P D, D'souza N. *JOM*[J], 2005, 57(5): 40
- [34] Wang W, Kermanpur A, Lee P D *et al.* *Journal of Materials Science*[J], 2003, 38(21): 4385
- [35] Gandin Ch A, Rappaz M, Tintillier R. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 1993, 24(2): 467
- [36] Lipton J, Glicksman M E, Kurz W. *Materials Science and Engineering*[J], 1984, 65(1): 57
- [37] High temperature Materials Branch of the Chinese Society of Metals(中国金属学会高温材料分会). *China Superalloys Handbook*(中国高温合金手册) [M]. Beijing: Standards Press of China, 2012

Temperature Field and Microstructure Simulation of Directional Solidification Process of Single Crystal Blade Prepared Efficiently with Different Module Structures

Yang Wenchao, Sa Shipeng, Hao Wenshuo, Qin Jiarun, Zhang Jun, Liu Lin

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

Abstract: For the stray grain problem of 18 single crystal blades in high efficiency preparation due to the non-uniform temperature field, three different module structures with the same production capacity were designed. The high rate solidification of DD6 Ni-based superalloy under different module structures was simulated by ProCast software and CAFE model, and the influence of the temperature field evolution and the withdrawal rate on stray grains was analyzed. The results show that the solid-liquid interface of the single-layer module becomes curved seriously because the cooling efficiency of side close to the center pillar is higher than that of the side close to the furnace body due to weak heat preservation effect of center pillar, and it has a large undercooling and tendency to form stray grains. By adding a sleeve to the single-layer module to increase the heat preservation effect, the temperature field can be changed effectively, and the degree of bending is reduced to avoid the nucleation of stray grain. The double-layer superimposed module has a uniform temperature field and a low undercooling, which can decrease the tendency of stray grain effectively. Both the double-layer superimposed module and the sleeve module can form a complete single crystal when the withdrawal rate is below 100 $\mu\text{m/s}$, while the diameter of the double-layer superimposed module reduces to a half of the diameter of the other two modules, which can reduce the requirement for size of furnace body, achieving efficient preparation of single crystal blades.

Key words: module structure; single crystal blade; directional solidification; numerical simulation

Corresponding author: Yang Wenchao, Ph. D., Professor, State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, Tel: 0086-29-88492227, E-mail: wenchao yang@nwpu.edu.cn