

MS 界面稳定性判据新探

杨爱民^{1,2} 刘林¹

(1. 西北工业大学 2. 西安石油学院)

摘要 给出了定向凝固平界面稳定性新的判据, $(1 + 3k/y_0)\xi + [1 + (1 + k)y_0/4k] \geq 1$ 其中 A 为无量纲速度, $\xi \equiv G_{LS}/mG_c$, y_0 是有关 A 和 ξ 的一个二次方程的根。新判据的最大特点是可直接由凝固参数推断界面的稳定性, 不用解高次方程。发现 MS 绝对稳定性速度 V_a 仅在加权温度梯度 $G_{LS} \rightarrow 0$ 时才是界面稳定性的临界速度。当 $G_{LS} > 0$ 时, V_a 大于实际的临界速度。给出了一个新的绝对稳定性梯度条件, 并求出了最小的绝对稳定性无量纲临界梯度。

关键词 界面稳定性 绝对稳定性 临界速度 定向凝固 温度梯度

分类号 TG111

文章编号 1005-3093(2001)06-0703-05

NEW RESEARCH OF MS INTERFACE STABILITY CRITERION

YANG Aimin^{1,2*} LIU Lin¹

(1. Department of Applied Physics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072

2. Department of Mechanical Engineering, Xi'an Petroleum Institute, Xi'an 710065)

ABSTRACT A new stability criterion has been put up based on the planar interface stability under directional solidification by analyzing MS theory, $(1 + 3k/y_0)\xi + [1 + (1 + k)y_0/4k] \geq 1$ there A is dimensionless velocity, $\xi \equiv G_{LS}/mG_c$ and y_0 is a root of a square equation about A and ξ . The new criterion succeeds in avoiding solution of high grade equation when applied, so that it can be conveniently used to predicate interface stability. A new temperature gradient criterion is also deduced and the minimum dimensionless temperature gradient of absolute stability is proved to be 1/16. It has been indicated that the MS absolute stability velocity V_a is the interface stability critical velocity when generalized temperature gradient $G_{LS} \rightarrow 0$, while the critical velocity may be less than V_a when $G_{LS} > 0$.

KEY WORDS interface stability, absolute stability, critical velocity, directional solidification, temperature gradient

MS 理论^[1,2] 是在稳态无对流情况下定向凝固平界面稳定性理论, 考察了表面张力效应、固液相传热和凝固条件对平界面稳定性的影响, 给出了平界面稳定性判据, 并预言了在高速下

2000 年 10 月 11 日收到初稿; 2001 年 6 月 18 日收到修改稿。

本文联系人: 杨爱民, 西安市 710072, 西北工业大学应用物理系相变研究室

* To whom correspondence should be addressed

的绝对稳定性，一直被认为是该领域的经典理论之一。由于其中的稳定性函数太复杂，分析和应用都有困难。Sekerka 等^[3,4]将其归纳成一个稳定性判定式，但必须解一个三次方程。Kurz 和 Fisher 等^[5,6]在 MS 稳定性理论基础上做了一些简化，给出一个保守判据，但由于该判据依赖 Descartes 定理中关于根的充分条件，其结果有很大的局限性。本文在不作任何简化的情况下得到一个简明的稳定性判据。

1 新的稳定性函数

MS 理论的平界面稳定性函数^[1]为

$$S(\omega) = -\Gamma\omega^2 - (g_l + g_s)/2 + mG_c\{[\omega^* - (V/D)]/[\omega^* - (V/D)/p]\}$$

其中 $g_l = (k_L/\tilde{k})G_L$; $g_s = (k_S/\tilde{k})G_S$, 而 $\tilde{k} = (k_L + k_S)/2$; $p = 1 - k \leq 1$, $\omega^* = (V/2D) + [(V/2D)^2 + \omega^2]^{1/2}$. G_L 为液相温度梯度, k_S 为固相中的导热系数, k_L 为液相中的导热系数, G_c 为界面上液相浓度梯度, V 为界面的移动速度, D 为溶质原子在液相中的扩散系数, m 为液相线斜率, ω 为空间扰动频率, Γ 为吉布斯-汤普森参数。

当 $S(\omega) \leq 0$ 时, 界面是稳定的; 当 $S(\omega) > 0$ 时, 界面是不稳定的。只要求解 $S(\omega) \leq 0$ 即可得到平界面稳定性的一般性判据了。但 $S(\omega)$ 是一个高次方程不容易求解。其实, 由于对稳定性有意义的只是 $S(\omega)$ 的正负而非其大小, 因而可以将影响 $S(\omega)$ 正负的部分分离出来。因为 $\frac{\omega^* - (V/D)}{\omega^* - (V/D)p} = \frac{[1 + (2\omega D/V)^2]^{1/2} - 1}{[1 + (2\omega D/V)^2]^{1/2} - 1 + 2k} = \frac{y}{y + 2k}$, $y = [1 + (2\omega D/V)]^{1/2} - 1 \geq 0$, $\omega^2 = y(y + 2y)[V/(2D)]^2$, 令 $G_{LS} = (g_l + g_s)/2$, 则有 $S(\omega) = S(y) = -\Gamma(V/2D)^2y(y + 2) + mG_cy/(y + 2k) - G_{LS} = \{-\Gamma(V/2D)^2y^3 - 2(k + 1)\Gamma(V/2D)^2y^2 + [-4k\Gamma(V/2D)^2 + mG_c - G_{LS}]y - 2kG_{LS}\}/(y + 2k) = (ay^3 + by^2 + cy + d)/(y + 2k)$, 这里 $S_1(y) = ay^3 + by^2 + cy + d$.

其中

$$a = -\Gamma(V/2D)^2 \leq 0, b = 2(k + 1)a \leq 0, c = 4ka + mG_c - G_{LS}, d = -2kG_{LS} \leq 0$$

$$G_{LS} = [k_L/(k_s + k_L)]G_L + [k_S/(k_s + k_L)]G_s \quad (1)$$

可见 $S(\omega)$ 的正负决定于 $S_1(y)$ 的正负。 $S_1(y) \leq 0$, 界面是稳定的; $S_1(y) > 0$, 界面是不稳定的。

2 稳定性分析

由 $S_1(y) = ay^3 + by^2 + cy + d$, $S'_1(y) = 3ay^2 + 2by + c$ 和 $S''_1(y) = 6ay + 2b \leq 0$ 可知, 在 $S'_1(y_0) = 0$ 处 $S_1(y)$ 有极大值。且

$$y_0 = (-b - \sqrt{b^2 - 3ac})/3a \quad (2)$$

为了保证界面的稳定对所有的扰动频率 $y(\omega)$ 都成立, 要求 $S_1(y_0) \leq 0$ 。

因为 $S_{1\max}(y) = S_1(y_0) = ay_0^3 + by_0^2 + cy_0 + d$, 将 $S'_1(y_0)=0$ 代入上式:

$$S_{1\max}(y) = S_1(y_0) = (b/3)(y_0 + c/b)^2 - (c^2 - 3bd)/(3b) \quad (3)$$

界面的稳定性条件 $S_{1\max}(y) \leq 0$ 变成

$$(by_0 + c)^2 \geq c^2 - 3bd \text{ 或 } c \leq -(by_0^2 + 3d)/(2y_0) \quad (4)$$

现定义 $\xi \equiv G_{LS}/mG_c$, 由 $mG_c = \Delta T_0 V/D$ 和式 (1), 式 (4) 变为

$$(1 + \frac{3k}{y_0})\xi + (1 + \frac{k+1}{4k}y_0)A \geq 1 \quad (5)$$

其中 $y_0 > 0$. 对于 y_0 不存在或为负, 由 (2) 式知, 此即 $c \leq 0$ ($A + \xi \geq 1$) 的情形. 显然此时 $S_1(y) = ay^3 + by^2 + cy + d$ 必然成立, 即界面已经是稳定的了. 将 (5) 式中 y_0 的形式略加改变, 即可使不等式 (5) 在上述情况下也成立, 从而得到完整的新界面稳定性判据

$$(1 + \frac{3k}{y_0})\xi + (1 + \frac{k+1}{4k}y_0)A \geq 1 \quad (6)$$

其中 $y_0 = -2(k+1)/3 + (2/3)\sqrt{(k+1)^2 + 3k|(1-\xi)/A - 1|}$.

3 新判据的性质

3.1 各参数对稳定性的影响

由式 (6) 可得到的各参数对稳定性的影响示于图 1. 由图可见, 当 $\xi \rightarrow 0$ 时, 只有 $A \rightarrow 1$ 才能保证界面的稳定性, 而当 $\xi > 0$ 时, $A < 1$ 也可以保证稳定性; 当 $A \rightarrow 0$ 时, 保证稳定的 ξ 并不趋于同一值. 这是因为由 ξ 的定义式 $\xi = G_{LS}/mG_c = G/A$ 可以看出, 当 $A \rightarrow 0$ 时, 无论 G 多大都会使 $\xi \rightarrow 1$ 或更大从而使界面稳定, 只是 G 不同则 ξ 的临界值不同. 对于每一个 k 值都存在一个温度梯度的最大值 G^* , 在该值以上达到一个与速度无关的绝对稳定性. 并且 G^* 随 k 值的减小而增加. 当 $k \rightarrow 0$ 时, 在式 (6) 中将 y_0 的定义式代入, 忽略 k 的高次项后得到 $\sqrt{G} = \sqrt{A} - A$, 故 $A=1/4$ 时, 温度梯度最大值 $G^*=0.0625$. 该值正是保证绝对稳定性的最小温度梯度临界值, 即 $G > G^*$ 时, 对任意值的 k 和任意速度 V 界面都是稳定的.

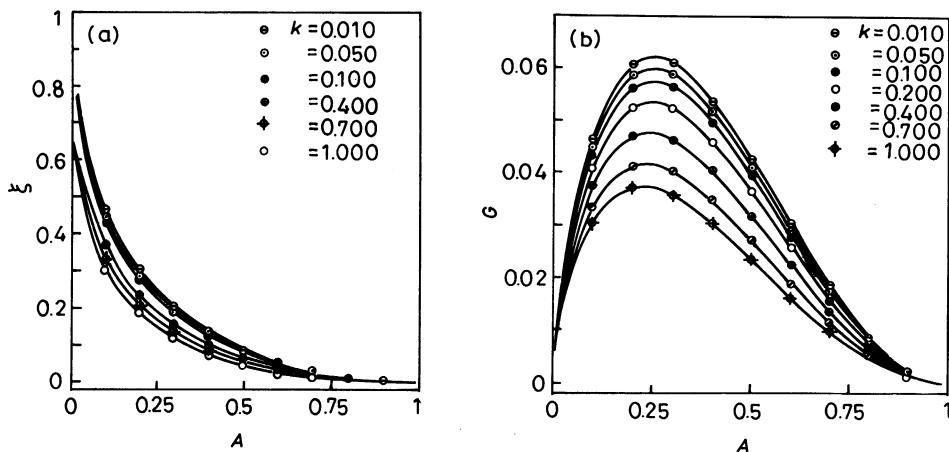


图 1 参数 ξ (a) 和温度梯度 G (b) 与无量纲凝固速度 A 的关系

Fig.1 Relationship between dimensionless advancing velocity A (a) and parameter ξ ($\equiv G_{LS}/mG_c$) (b) and temperature gradient G ($= G_{LS}/(\Delta T_0^2/k\Gamma)$)

3.2 与其它判据的关系

利用参量 A 和 ξ , 可将各判据分别表示. 成分过冷判据 (CS): $\xi > 1$; MS 绝对稳定性判据: $A > 1$; KF 判据: $A + \xi > 1$. 亦将新判据写成 $A + \xi + [(3k/y_0)\xi + (k+1)y_0/4kA] \geq 1$, 比较各式显然其他判据都是新判据的一些特例, 而新判据式 (6) 是一个普适的判据.

3.3 绝对稳定性判据

3.3.1 绝对稳定性临界速度判据 为了讨论凝固速率单独对界面稳定性作用, 在式 (6) 令 $\xi = 0$, 将 y_0 的定义式带入上式知, 仅当 $A \geq 1$ 时才成立. 这与图 1 的结果是一致的. 所以仅当 $\xi = 0$ 时, 式 $A \geq 1$ 才是稳定性的一个充分必要条件. 若 $\xi > 0$, 则会因它的稳定作用, 即使 $A < 1$, 即 $V \leq V_a$ (MS 绝对稳定性速度), 界面仍可能保持稳定; 即界面的实际稳定性临界速度 V^* 的大小与温度梯度有关. 而 V_a 也仅在 $\xi \rightarrow 0$ (即 $G_{LS} \rightarrow 0$) 时才能作为界面稳定性的临界条件. 当 $\xi > 0$ 时, 实际上临界速度 $V^* < V_a$. 绝对稳定性已为实验所证实^[7,8], 但理论预测临界点与实验值有较大的差距^[9,10], 温度梯度的作用被忽视可能是原因之一, 因为在实际过程中温度梯度总是存在的.

3.3.2 绝对稳定性临界梯度判据 为了探求温度梯度单独对界面稳定性的作用, 将新判据式 (6) 写成: $f_1(V_c/V) + f_2(V/V_a) \geq 1$. 这里, $f_1 = 1 + 3k/y_0$, $f_2 = 1 + (k+1)y_0/4k$, 则有 $(V - V_a/2f_2)^2 \geq (V_a/2f_2)^2 - (f_1 f_2)V_a V_c$. 满足该不等式的一个充分条件是其右边非正, 即 $V_a \geq 4f_1 f_2 V_c$. 将各项展开为 $G_{LS} \geq \frac{\Delta T_0^2}{4k\Gamma(1+3k/y_0)[1+(1+k)y_0/4k]}$, 进一步将上式分母取极小值得 $G_{LS} \geq \frac{\Delta T_0^2}{kT(\sqrt{3(k+1)}+2)^2}$ 或 $G \geq \frac{1}{(\sqrt{3(k+1)}+2)^2}$ 此式为新的绝对梯度稳定性判据. 当温度梯度足够大时, 界面对整个速度范围都是稳定的. 应用此式比文献 [11,12] 给出的结果更方便. 代入典型数据 $\Delta T_0=10K$, $D=5\times 10^{-5} \text{ mm}^2 \text{ s}^{-1}$, $k=0.5$, $\Gamma=10^{-4} \text{ K mm}$, 由 $G_{LS} = G_L$ 得 $G_L^* = 1.18 \times 10^5 \text{ K/mm}$, 如此高的稳定梯度在一般凝固条件下是达不到的, 只有在激光束快速凝固的条件下才有可能达到. 由于上式给出的是一个保守条件, 因而实际的临界温度梯度会小一些.

3.4 $k=0$ 时的稳定性

当 $k=0$ 时, $d=0$, 由稳定性方程 (3) 可知, 仅在 $c < 0$, 即 $A + \xi \geq 1$ 条件下界面才是稳定的. 可见用 A 和 ξ 表达稳定性比用 G 和 A 更恰当.

4 结语

给出了 MS 平界面稳定性的新判据, MS 界面绝对稳定性速度仅在温度梯度为 0 时才是界面稳定的临界速度. 当温度梯度大于 0 时, 实际的界面稳定性临界速度要更小些; 给出了由温度梯度决定的绝对稳定性充分条件, 并证明了绝对稳定性临界梯度最小值为 $G^*=0.0625$, $k=0$ 时界面稳定的条件为 $A + \xi \geq 1$.

参 考 文 献

- 1 W.W.Mullins, R.F.Sekerka, J.Appl.Phys., **35**, 444(1964)
- 2 R.F.Sekerka, J.Appl.Phys., **36**, 265(1965)
- 3 R.F.Sekerka, In: Crystal Growth, edited by H.S.Peiser, (Oxford, Pergamon Press, 1967) p.691
- 4 S.R.Coriell, R.F.Sekerka, J.Crystal Growth, **61**, 499(1983)
- 5 W.Kurz, D.J.Fisher, Fundamentals of Solidification, (Aedermannsdorf, Trans Tech, 1984) p.184
- 6 W.Kurz, D.J.Fisher, Fundamentals of Solidification, (Switzerland, Trans Tech, 1989) p.226
- 7 Q.Y.Pan, X.Lin, W.D.Huang, Y.H.Zhou, G.L.Zhang, Mater.Res., **33**, 1621(1998)
- 8 S.C.Gill, W.Kurz, Acta Metall. Mater., **43**, 139(1995)
- 9 H.Jones, Mater.Sci.Eng., **A137**, 77(1991)
- 10 冯 端, 金属物理学 I (北京, 科学出版社, 1998) p.252
(FENG Duan, *Metal Physics* I (Beijing, Science Press, 1998) p.252)
- 11 G.L.Ding, X.Lin, W.D.Huang, Y.H.Zhou, Mater.Res.Bull., **32**, 669(1997)
- 12 林 鑫, 凝固微观亚结构演化与选择, 博士论文, 西北工业大学 (2000)
(LIN Xin, Morphological Evolution and Selection During Unidirectional Solidification PH. D Dissertation, Northwest polytechnical university, (2000))