

镍基合金激光焊凝固组织流体体积法-相场法研究

李奕辰, 王磊*, 李赫, 彭勇, 蔡润欢, 王克鸿

南京理工大学材料科学与工程学院, 江苏 南京 210094

摘要 本文利用宏观传热传质与微观组织演变耦合模型,对激光焊接 IN718 合金的宏观传热传质、微观组织演变过程进行了定量模拟。通过流体体积(VOF)方法对宏观传热过程的熔池形貌与温度场分布进行模拟计算,用温度场分布替代相场控制方程中的相关凝固参数,并将其代入到相场模型中进行微观组织演变过程模拟。结果表明:宏观温度场中 1~4 位置处模拟所得微观组织均呈柱状晶结构;沿着熔池自上而下,凝固速度 R 由 6.7 mm/s 到 3.1 mm/s 逐渐减小,温度梯度 G 由 410 K/mm 到 673 K/mm 逐渐增大,对应的冷却速率 $G \cdot R$ 由 2747 K/s 到 2086.3 K/s 不断下降;1~4 位置处的枝晶间距随着冷却速率下降由 4.52 μm 增大到 7.12 μm ,与实验结果一致;在柱状晶间隙的液相位置处,Nb 元素含量显著升高,且越靠近柱状晶底部 Nb 元素含量越高,其质量分数最高达到了 7.377%;模拟得到的 Laves 相中 Nb 元素的分布呈液滴状,与实验所得 Laves 相的分布近似一致。

关键词 激光技术; 激光焊接; 镍基合金; 数值模拟; 相场模型; 凝固组织

中图分类号 TG402

文献标志码 A

DOI: 10.3788/CJL230905

1 引言

镍基合金具有良好的高温性能、抗氧化性和抗燃气腐蚀能力,已被广泛用来制造航空喷气发动机和各种工业燃气轮机的热端部件^[1-2],具有“超合金”的美誉。目前,在航空、航天、兵器制造等领域^[3-4],激光焊接技术已成为镍基合金的主要连接手段之一。由于激光焊接熔池结晶速度快,镍基合金激光焊接过程容易产生偏析、气孔、裂纹等问题,直接影响了镍基合金激光焊缝的性能^[5]。因此,深入研究镍基合金激光焊接熔池的微观结构和偏析行为,对于控制焊接缺陷的形成和提高激光焊缝的力学性能具有重要意义。激光焊接熔池的凝固过程是一个快速加热后的冷却过程,具有熔池体积小、冷却速度快、液态金属过热等特点,通过传统的实验手段难以对熔池的凝固过程进行实时的完全检测^[6]。

对比其他组织模拟方法,蒙特卡罗法虽然模拟效率高,但缺乏物理基础,难以准确真实地模拟合金的凝固过程^[7]。元胞自动机方法在模拟凝固过程中的晶粒竞争和形态转变方面具有一定优势^[8],但计算结果不够精确,难以对凝固组织的演化过程进行定量计算。相场(PF)法在熔池凝固微观组织演变过程的定量模拟方面有着突出优势,PF 模型可以直接模拟熔池中的凝固行为以及微观结构的演变,例如形貌、枝晶间距和元素偏析等,同时它还定量地考虑了固液界

面曲率、生长动力学、各向异性等对枝晶生长的影响,在焊接、增材制造等加工过程的凝固微观组织模拟中得到了广泛应用^[9]。Wang 等^[10]通过 PF 模型模拟了激光焊接过程中不同焊接条件下柱状晶粒的生长,对柱状晶粒的形貌、枝晶间距和生长方向进行了分析。Radhakrishnan 等^[11]使用 PF 模型预测了激光粉末床熔融镍基合金过程中晶粒的生长,发现晶粒形貌与枝晶间距有关:当枝晶间距小于临界值时,柱状微观结构持续增长;当枝晶间距大于临界值时,柱状结构通过形成次级臂演变成柱状树枝状结构。Mi 等^[12]使用二维 PF 模型研究了 Al-Cu 合金激光焊接过程中不同取向晶粒之间的竞争生长行为,发现横向生长、偏转角和侧边枝晶对枝晶宽度有影响。耿韶宁^[13]采用多尺度数值模拟对铝合金薄板激光焊接过程中的熔池传热和流动行为、凝固参数分布、凝固微观组织演化进行了研究。PF 模型的最大问题在于效率低,一般适用于二元合金,而且多集中于研究较小的局部区域。

笔者以 IN718 合金激光焊接熔池的凝固过程为研究对象,通过建立宏观传热传质模型与微观组织演变的宏-微观耦合模型,计算了激光焊接的宏观传热过程,提取得到了熔池温度历史、凝固速度等熔池凝固条件。利用 PF 模型耦合熔池凝固条件,对激光焊接 IN718 熔池的凝固行为进行定量数值模拟,分析了柱状晶演变、形貌、间距、元素扩散与偏析等重要的凝固

收稿日期: 2023-06-12; 修回日期: 2023-07-10; 录用日期: 2023-08-11; 网络首发日期: 2023-08-20

基金项目: 国家自然科学基金(51905273)

通信作者: *wang1913@njut.edu.cn

过程数据。利用高速摄像技术、扫描电子显微镜技术 (SEM)、能谱 (EDS) 分析等, 验证了激光焊接宏-微观模拟结果的准确性。

2 模型和实验

2.1 宏观传热模型

根据参考文献 [14], 激光焊接宏观传热与熔体流动满足连续性方程、动量守恒方程、能量守恒方程。

激光焊接匙孔、熔池自由表面的瞬态变形由流体体积 (VOF) 模型跟踪, 焊接驱动力、边界条件以及基本假设条件参考文献 [15]。

激光焊接过程中, 由金属蒸气引起的反冲压力的表达式为

$$P_r = AB_0 T_w^{(-1/2)} \exp\left(\frac{-M_a H_v}{N_A k_b T_w}\right), \quad (1)$$

式中: A 为调整系数, 取 0.55; B_0 为调整常数, 取 1.78×10^{10} ; T_w 为匙孔壁面温度; M_a 为原子质量; H_v 为蒸发潜热; N_A 为阿伏伽德罗常数; k_b 为斯蒂芬-玻尔兹曼常数。

表面张力的表达式为

$$\sigma = \sigma_m^0 + \frac{d\sigma}{dT}(T - T_m), \quad (2)$$

式中: T_m 为熔点; T 为某时刻的温度; $\frac{d\sigma}{dT}$ 为表面张力温度系数; σ_m^0 为纯金属在熔点时的表面张力。

根据 Boussinesq 近似, 密度梯度变化引起的浮力值的表达式为

$$F = -\rho_0 \beta (T - T_l) g, \quad (3)$$

式中: T_l 为液相线温度; ρ_0 为 Boussinesq 参考密度项; g 为重力加速度的大小; β 为热膨胀系数。

对于匙孔壁面, 将激光吸收、热吸收、辐射及蒸发的一系列热边界条件作为能量方程的源项, 其表达式为

$$S_E = q(r, z) - \epsilon(T^4 - T_0^4) - h_{\text{conv}}(T - T_0) - WH_v, \quad (4)$$

$$\lg W = 2.52 + 6.121 - \frac{18836}{T} - 0.5 \lg T, \quad (5)$$

式中: $q(r, z)$ 是吸收的激光能量; T_0 是环境温度; h_{conv} 是对流系数; ϵ 是表面辐射发射率; W 是蒸发速率。

热源模型如图 1(a) 所示, 其中: q_m 表示热源中心轴上的热流密度值; r_e, r_i, z_e, z_i 分别是热源上下表面的半径以及热源上下表面的位置。在垂直于中心轴的每个平面上, 热源中心线处的峰值功率密度呈线性变化, 分布半径呈抛物线减小。因此, 该模型本质上是具有不同峰值功率密度和分布参数的高斯平面热源的叠加。其具体推导见文献 [16], 表达式为

$$q(r, z) = Q_0 \left(\frac{1-X}{z_e - z_i} z - \frac{1-X}{z_e - z_i} z_e + 1 \right) \cdot \exp \left[-\frac{3r^2}{(z^2/\rho + b)^2} \right], \quad (6)$$

式中: Q_0 是热源上表面的热流峰值, $Q_0 = \frac{3Q}{\pi(1 - e^{-3})(A + B)}$, 其中 Q 为热源的有效功率, A, B 为计算系数; X 为下表面和上表面的热流比值; ρ, b 为计算系数。

根据激光焊接 IN718 合金实验数据建立激光焊接网格模型, 如图 1(b) 所示。选取实际模型的一半作为计算域, 计算域的尺寸为 $40 \text{ mm} \times 6 \text{ mm} \times 8 \text{ mm}$ 。计算域包括两个子域, 上部区域是 2 mm 厚的空气层, 下部区域是 6 mm 厚的 IN718 合金域。尺寸为 0.25 mm 的细网格用于会发生传热传质的焊缝区域 (焊缝区域的尺寸为 $30 \text{ mm} \times 3 \text{ mm} \times 8 \text{ mm}$), 尺寸为 0.5 mm 的粗网格用于其他区域。如图 1 所示, 网格全为六面体网格, 时间步长为 $2 \times 10^{-5} \text{ s}$ 。在热源公式中设置热源的有效功率为 0.9。模拟过程中材料对激光的吸收率为 0.9。采用有限体积法进行离散求解。热源能量的传递是通过网格节点进行的, 在涉及与流体相关的数值计算时, 为了获得稳定的解, 使用迎风格式对节点的物理场数值进行离散化。

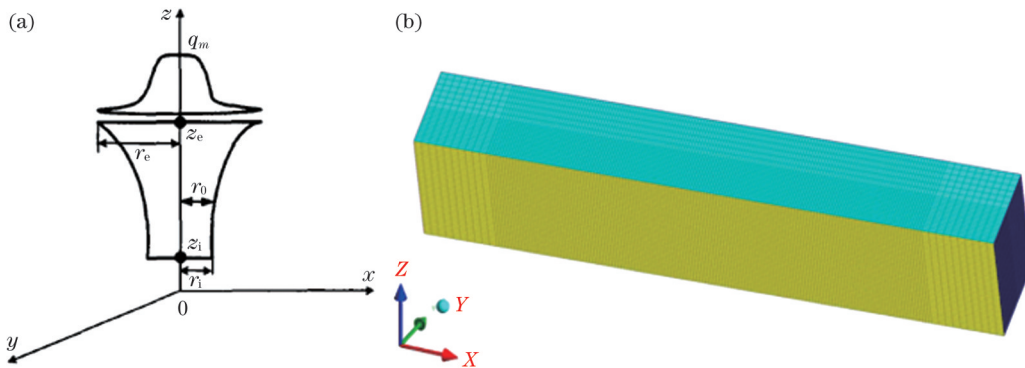


图 1 热源模型示意图以及网格模型。(a) 热源模型示意图; (b) 网格模型

Fig. 1 Schematic of heat source model and grid model. (a) Schematic of heat source model; (b) grid model

2.2 微观 PF 模型

本文使用的 PF 模型的详细推导和验证可参考文献[17]。单相二元合金凝固过程中的 PF 控制方程表示为

$$\tau_0 a_s(\hat{n})^2 \left[1 - (1-k) \frac{z - \int_0^t R(t') dt'}{l_T} \right] \frac{\partial \phi}{\partial t} = \omega^2 \vec{\nabla} \left[a_s(\hat{n})^2 \vec{\nabla} \phi \right] + \phi - \phi^3 - \lambda g(\phi) \left[U + \frac{\int_0^t R(t') dt'}{l_T} \right], \quad (7)$$

其中,

$$a_s(\hat{n}) = 1 + \gamma_4 \cos(4\theta), \quad (8)$$

$$\tau_0 = a_2 \lambda W_0^2 / D, \quad (9)$$

$$\lambda = \frac{a_1 W_0}{\Gamma |m| c_\infty \left(\frac{1}{k} - 1 \right)}, \quad (10)$$

$$l_T = [|m| (1-k) c_\infty] / (kG), \quad (11)$$

$$g(\phi) = (1 - \phi^2)^2, \quad (12)$$

式中: z 表示枝晶界面位置; ω 为界面厚度; Γ 为 Gibbs-Thomson 系数; k 为平衡分配系数; c_∞ 为溶质的初始质量分数; $a_s(\hat{n})$ 为各向异性参数; R 为凝固速度; θ 表示固液界面法线与枝晶轴之间的夹角; ϕ 为相场参量; $g(\phi)$ 为双阱函数; U 为过饱和场; τ_0 为界面弛豫时间; W_0 为弥散界面宽度; D 为扩散系数; λ 为耦合系数; m 为液相线斜率; $a_1 = 5\sqrt{2}/8$; $a_2 = 47/75$; c 为溶质的质量分数; l_T 表示合金凝固的温度区间; G 为温度梯度。

浓度场演化方程表示为

$$\left(\frac{1+k}{2} - \frac{1-k}{2} \phi \right) \frac{\partial U}{\partial t} = \vec{\nabla} \left\{ D_1 q(\phi) \vec{\nabla} U + \frac{1}{2\sqrt{2}} W [1 + (1-k)U] \frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\vec{\nabla} \phi}{|\vec{\nabla} \phi|} \right\} + \frac{1}{2} [1 + (1-k)U] \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad (13)$$

式中: ϕ 为引入的相场参量, $\phi = -1$ 时为液相, $\phi = +1$ 时为固相; $q(\phi) = (1 - \phi)/2$ 。

用过饱和场 U 来表示溶质偏析过程, 过饱和场 U 描述为

$$U = \frac{1}{1-k} \left[\frac{2kc/c_\infty}{1-\phi+k(1+\phi)} - 1 \right]. \quad (14)$$

在忽略潜热和对流的影响后, 为得到与温度场分布相关的相场控制方程, 采用焊接过程中所谓的“冻结温度近似”假设, 得到温度表达式^[18]为

$$T - T_s = G(t) \left(z - Z_0 - \int_0^t R dt' \right), \quad (15)$$

式中: z 为枝晶界面位置; T_s 表示固相线温度; Z_0 表示平行枝晶生长方向的起始界面位置。

耦合方程(11)、(15)可以得到

$$\frac{z - \int_0^t R dt'}{l_T} = \frac{k(T - T_s)}{|m|(1-k)c_\infty}. \quad (16)$$

为了考虑动态变化的凝固速度 R 和温度梯度 G 的非线性变化, 本文将这两个控制条件分别表达成与时间相关的函数。与温度场分布相关的 PF 控制方程为

$$\tau_0 a_s(\hat{n})^2 \left[1 - (1-k) \frac{k(T - T_s)}{|m|(1-k)c_\infty} \right] \frac{\partial \phi}{\partial t} = \omega^2 \vec{\nabla} \left[a_s(\hat{n})^2 \vec{\nabla} \phi \right] + \phi - \phi^3 - \lambda g(\phi) \left[U + \frac{k(T - T_s)}{|m|(1-k)c_\infty} \right]. \quad (17)$$

PF 模拟的计算域尺寸为 $1000\Delta x \times 500\Delta y$ ($\Delta x = \Delta y = 0.8\omega$, 其中 $\omega = 1 \times 10^{-7}$ m), 对应的实际空间面积为 $64 \mu\text{m} \times 32 \mu\text{m}$ 。相场模型的总凝固时间 $t_0 = \tau_0 n dt$, n 为总计算步数, dt 为时间步长, $t_0 = 0.022$ s。

IN718 合金的物理化学性能^[19]见表 1。

2.3 实验方法

实验装置如图 2 所示, 实验中使用的激光器为 IPG YLS-6000 型激光器, 激光头为 Precitec P0255, 将其固定在 AR-4600 机械臂上。母材为 IN718 合金, 其尺寸为 $250 \text{ mm} \times 100 \text{ mm} \times 6 \text{ mm}$ 。实验中设置激光

表 1 IN718 的材料参数^[19]
Table 1 Material properties of the IN718 alloy^[19]

Parameter	Symbol	Unit	Value
Solidus temperature	T_s	K	1533
Liquidus temperature	T_l	K	1609
Evaporation temperature	T_b	K	3104
Density of solid metal	ρ_s	kg/m ³	7734
Density of liquid metal	ρ_l	kg/m ³	7578
Stefan-Boltzmann-constant	k_b		5.67×10^{-8}
Specific heat of solid metal	C_s	J/(kg·K)	435
Specific heat of liquid metal	C_l	J/(kg·K)	755
Initial solute concentration (mass fraction)	c_∞		5.08%
Liquid diffusion coefficient	D	m ² /s	3×10^{-9}
Liquidus slope	m	K/%	-10.5
Anisotropy	γ_4		0.02
Equilibrium partition coefficient	k		0.48
Gibbs-Thomson coefficient	Γ	K·m	3.65×10^{-7}
Temperature coefficient of surface tension	$\frac{\partial \gamma}{\partial T}$	N/(m·K)	-3.7×10^{-4}
Thermal conductivity of solid metal	K_s	W/(m·K)	11.4
Thermal conductivity of liquid metal	K_l	W/(m·K)	31.3
Thermal emissivity	h	W/(m ² ·K)	100
Radiation emissivity	ϵ		0.3
Thermal expansion coefficient	β	K ⁻¹	1.3×10^{-5}
Surface tension	γ	N/m	1.8

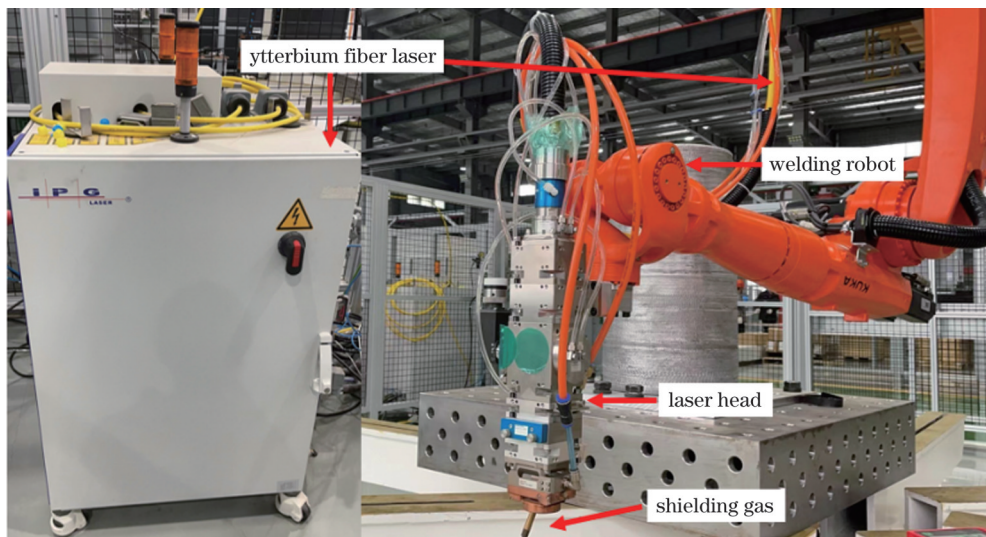


图 2 实验装置图

Fig. 2 Experimental apparatus

功率为 3000 W, 激光扫描速度为 30 mm/s, 进行单道扫描。采用纯氩气作为保护气体, 气体流量为 10 L/min。在焊接时, 用高速摄像机 (Phantom VEO41 0L) 结合 CAVITAR 高频脉冲激光采集焊接过程中熔池上表面的照片, 高速摄像机的分辨率为 1280×800, 采集频率为 5000 frame/s。焊接完成后, 通过线切割得到金相试样, 试样经砂纸打磨抛光处理后, 使用 35%FeCl₃ 水溶液与浓盐酸按 5:1 体积比配制的氯化

铁盐酸水溶液进行腐蚀, 腐蚀 10 s 后进行显微组织观察。采用扫描电镜 (SEM) 对焊缝组织进行分析, 并通过能谱仪 (EDS) 对析出相进行成分分析。

3 模拟结果分析

3.1 宏观传热模拟结果

熔池呈椭球状拖尾形貌, 其前端可见激光焊接匙孔, 如图 3(a) 所示, 熔池温度范围覆盖熔点温度到沸

点温度。温度处于固相线温度与液相线温度之间的区域为固液相共存区。模拟所得熔池上表面温度与高速摄像结果的对比如图 3(b) 所示,模拟所得熔池横截面与焊缝横截面的金相形貌基本一致,如图 3(c) 所示,符合激光焊接过程中传热和熔池凝固的特点。在熔池凝固过程中,组织转变过程快速且复杂,为进一步研究

熔池凝固过程与组织转变之间的关系,对熔池中不同位置处的凝固条件进行提取,特征点位置如图 3(d) 所示。不同位置处的温度历史如图 4 所示。在熔融金属、固液相共存区以及固相区提取温度历史数据点,并使用线性差值的方法得到 PF 法计算域内各个节点的温度分布。

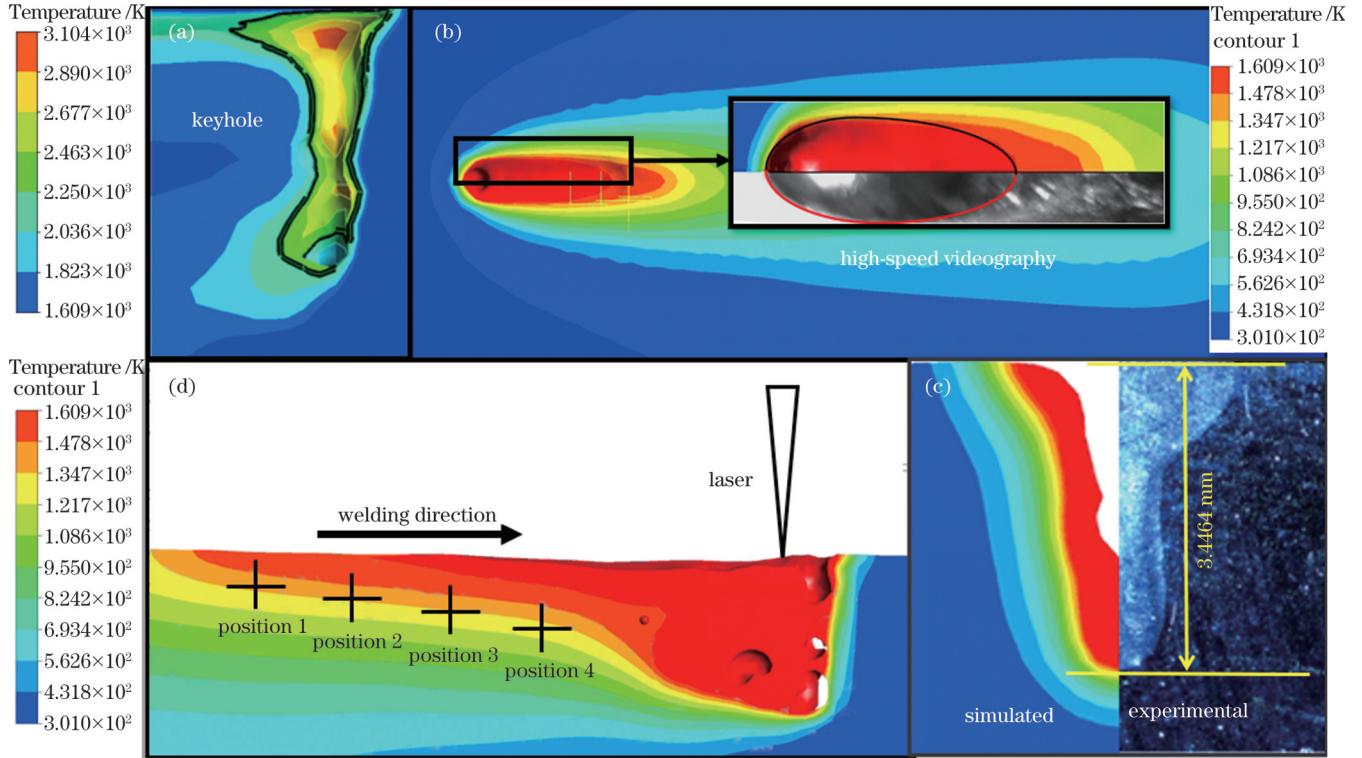


图 3 温度场模拟结果。(a)激光匙孔;(b)熔池上表面;(c)熔池的横截面;(d)熔池的纵向截面

Fig. 3 Temperature field simulation results. (a) Laser keyhole; (b) upper surface of the molten pool; (c) cross-section of the molten pool; (d) longitudinal cross-section of the molten pool

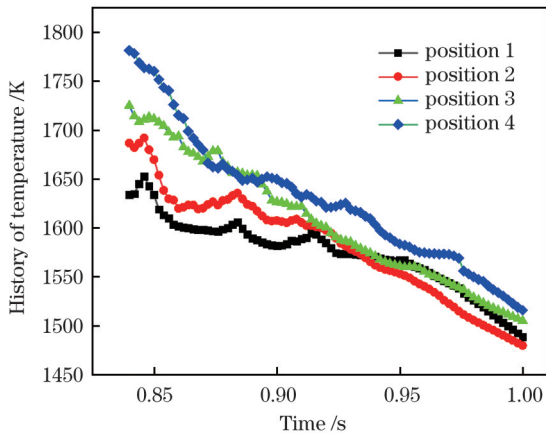


图 4 提取点的温度历史曲线

Fig. 4 History of the temperature of the extraction points

3.2 微观模拟结果

3.2.1 枝晶形貌

图 5 为位置点 3 处固液界面的演变过程,该演变过程可分为平面晶推进、界面失稳、竞争生长、稳定生长 4 个阶段。在平面晶推进阶段,界面形态保持不变;随

着固液界面不断向前推移,溶质聚集在固液界面前引起成分过冷,如图 5(a) 所示。当溶质偏析达到一定值时,固液界面开始失稳,形成许多细小的晶核,如图 5(b) 所示。不同晶核间的尖端速度、生长取向不同,晶核间互相竞争生长,生长速度较快的枝晶吞并生长较慢的细小枝晶,最终形成较为粗大的柱状晶且柱状晶稳定生长,如图 5(c) 和图 5(d) 所示。

3.2.2 枝晶间距

模拟熔池中 1~4 位置点的熔池凝固条件,并将测得的枝晶间距与模拟结果进行对比。模拟微观组织与实验微观组织如图 6 所示,可以发现模拟组织与实验组织均为柱状晶结构并且形貌一致。对模拟组织与实验组织的枝晶间距进行测量,测量结果展示在图 6 中。枝晶间距公式为 $\lambda_s = L/n$, 其中 λ_s 为枝晶间距, L 为所测量的长度, n 为所包含的柱状晶个数。

在宏观模拟结果中提取不同位置的凝固速度 R 和温度梯度 G , 沿着熔池边界自上而下,凝固速度 R 由 6.7 mm/s 逐渐减小到 3.1 mm/s, 温度梯度 G 由 410 K/mm 逐渐增大到 673 K/mm, 结果如图 7(a) 所示。对应冷

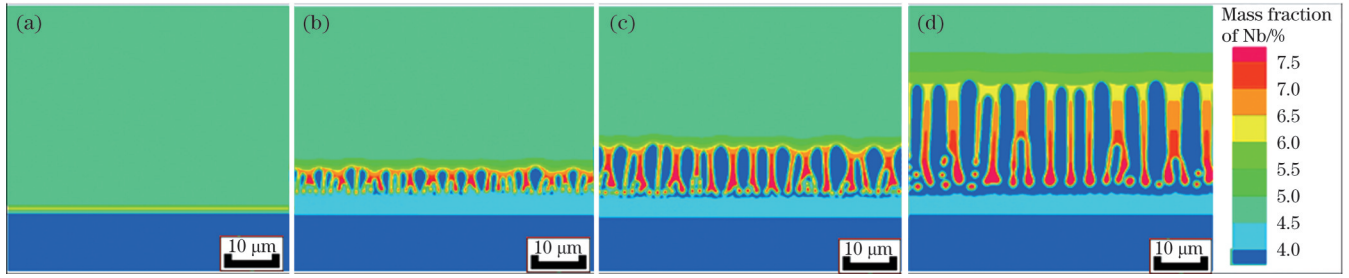


图 5 微观结构演变过程。(a)平面晶推进;(b)界面失稳;(c)竞争生长;(d)稳定生长

Fig. 5 Microstructure evolution process. (a) Planar crystal propulsion; (b) interface instability; (c) competitive growth; (d) stable growth

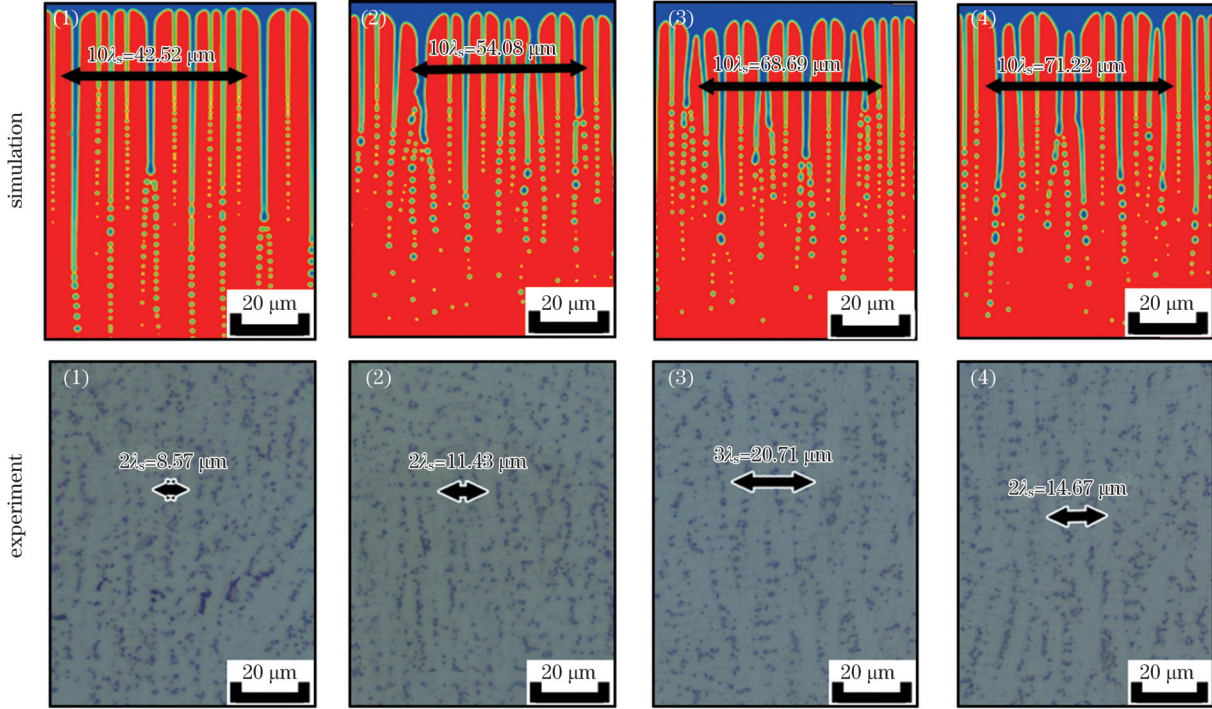


图 6 模拟与实验微观组织的枝晶间距对比

Fig. 6 Comparisons of primary dendrite arm spacing for simulated and experimental microstructures

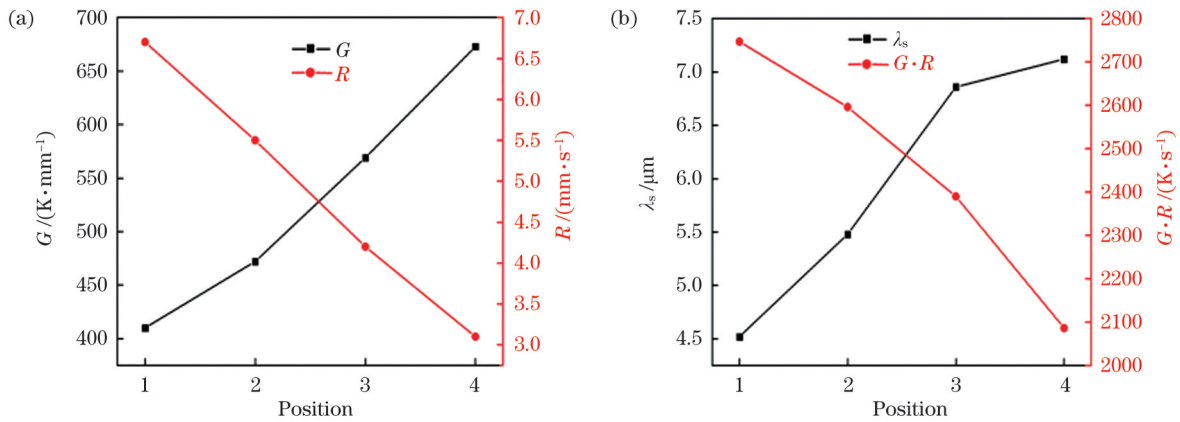


图 7 不同位置处的参数。(a)提取的凝固参数;(b)枝晶间距与冷却速率

Fig.7 Parameters in different positions. (a) Extracted solidification parameters; (b) the primary dendrite arm spacing and cooling rate

却速率 $G \cdot R$ 由 2747 K/s 逐渐下降到 2086.3 K/s, 枝晶间距从熔池顶部的 4.52 μm 增大到熔池底部的 7.12 μm , 如图 7(b) 所示。与 Kurz 等^[20] 和 Hunt 等^[21] 的数值模型相比, PF 模型的计算结果更为准确且与实验结果更接

近, 表现出一致的规律性, 如图 8 所示。

3.2.3 Nb 元素偏析

分析熔池凝固过程中 Nb 元素的偏析行为有助于控制析出相的生成与分布, 从而进一步改善组织

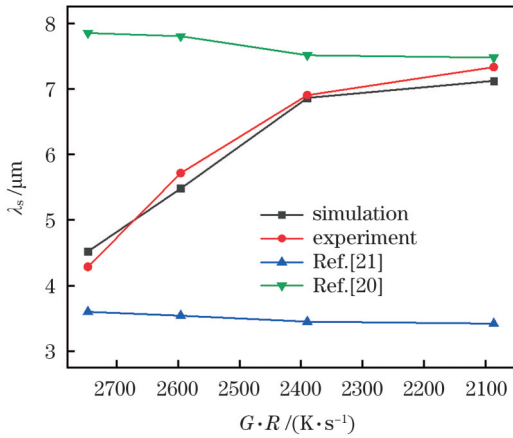


图 8 实验与模拟的枝晶间距对比

Fig.8 Comparison of simulated and experimental primary dendrite arm spacings

和力学性能。在熔池凝固过程中,随着柱状枝晶生长,固相中溶解度较低的 Nb 元素不断通过固液界面向液相中扩散。沿着枝晶生长方向,位置点 2 处柱状晶轴线上 Nb 元素的分布如图 9(a)所示。在固

相一侧,Nb 元素的质量分数低于平衡含量(质量分数,5.08%);沿着枝晶生长方向向前,Nb 元素的含量呈降低趋势,在枝晶前端固液界面交界附近,固相中的 Nb 元素含量达到最低点(将枝晶前沿固相一侧 Nb 元素质量分数的最低值记为 C_{min})。Nb 元素含量在枝晶前沿液相一侧迅速上升并达到峰值,将峰值处 Nb 元素的质量分数记为 C_{max} ;在远离固液界面的液相区域,Nb 元素含量逐渐降低至平衡含量。垂直于柱状晶生长方向上 Nb 元素质量分数的模拟结果如图 9(b)所示。可见,Nb 元素含量呈明显的周期性变化,变化周期与物相形态密切相关。IN718 合金的溶质分配系数小于 1,溶质元素趋向于在枝晶间隙位置偏析富集。模拟结果显示,在固相枝晶内部,Nb 元素含量显著降低,并且由于凝固过程中溶质再分配造成的偏析,Nb 元素最低含量出现在柱状晶的中心。在柱状晶间隙的液相位置处,Nb 元素含量显著升高,而且越靠近柱状晶底部 Nb 元素含量相对越高,最高质量分数达到了 7.377%。

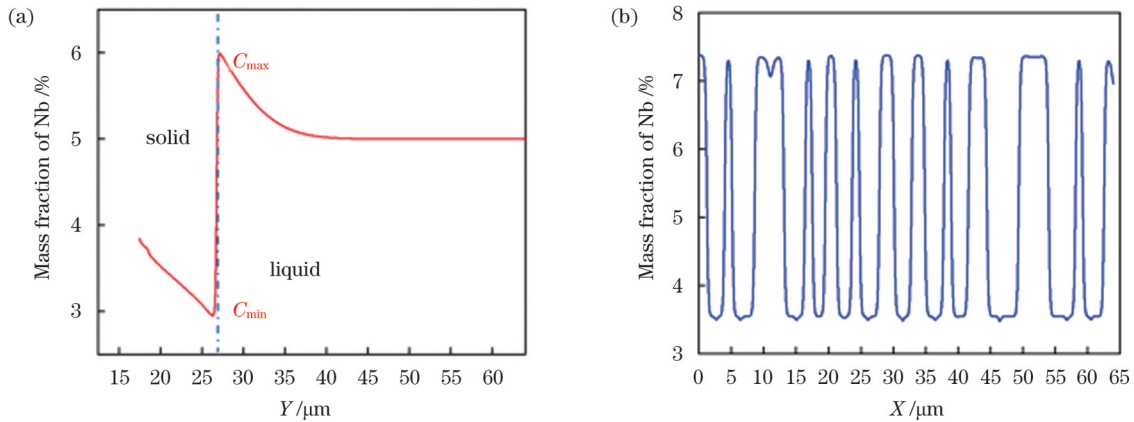


图 9 Nb 元素分布。(a)沿枝晶生长方向的 Nb 元素分布;(b)垂直于枝晶生长方向的 Nb 元素分布

Fig.9 Nb element distribution. (a) Distribution of Nb element along the dendrite growth direction; (b) distribution of Nb element perpendicular to the dendrite growth direction

模拟所得的柱状晶组织与 Nb 元素分布如图 10 所示,Nb 元素的最高质量分数约为 9.5%。IN718 熔池凝固过程包括开始的 $L \rightarrow L + \gamma$ 阶段与最后的 $L \rightarrow \gamma + \text{Laves}$ 阶段,其中基体 γ 相中的 Nb 元素含量较低,而 Laves 相中的 Nb 元素含量较多。IN718 熔池凝固方式是:先析出的基体 γ 相作为溶剂,Nb 作为溶质元素随后析出并生成 Laves 相^[22-23]。可以用实验得到的 Laves 相分布对模拟结果进行验证。实验结果显示,IN718 熔池凝固后析出的 Nb 元素富集的 Laves 相呈液滴状分布在 γ 相基体中,Laves 相的分布与模拟的 Nb 元素偏析位置的分布近似一致。

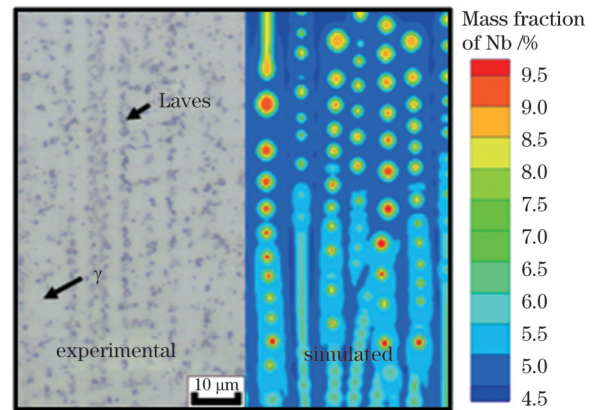


图 10 实验结果与溶质场模拟结果对比

Fig.10 Comparison of experimental and solute field simulated results

SEM 扫描结果如图 11(b)所示,对图示位置进行 EDS 点扫分析,结果如图 11(a)、(c)所示。基体 γ 相的

点扫结果显示 Nb 元素的质量分数约为 4.7%，Laves 相的点扫结果显示 Nb 元素的质量分数约为 9.8%。

Laves 相中的 Nb 元素含量与基体 γ 相中的相比显著增高,证明了模拟结果的准确性。

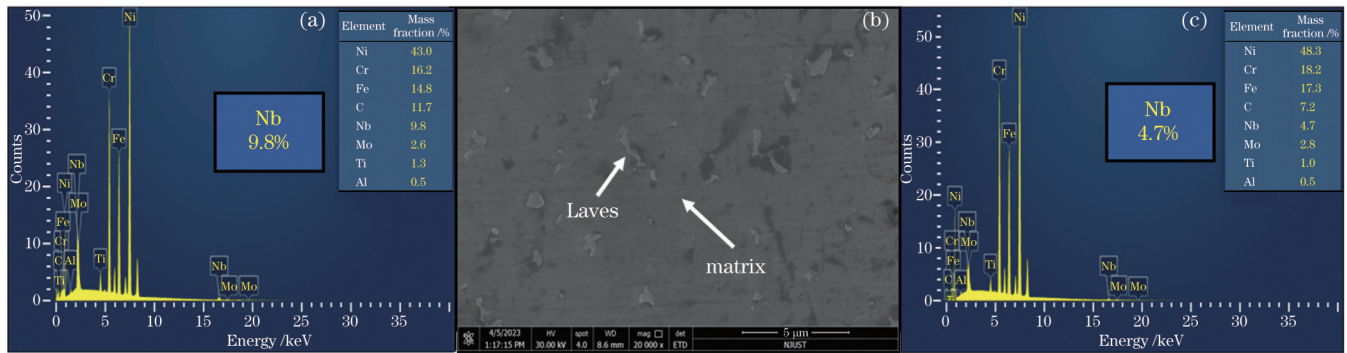


图 11 SEM和EDS分析结果。(a)Laves相的EDS分析结果;(b)SEM图;(c)基体的EDS分析结果

Fig. 11 SEM and EDS analysis. (a) EDS result of Laves phase; (b) SEM image; (c) EDS result of the matrix

4 结 论

本文建立了宏观传热传质与微观组织演变的宏观耦合模型,对IN718合金激光焊接熔池宏观传热以及微观组织的动态凝固过程进行了模拟研究,得到如下结论:

1) 宏观模拟所得熔池形貌、尺寸与实验结果一致。数据显示,从熔池顶部到底部,凝固速度 R 由 6.7 mm/s 逐渐减小到 3.1 mm/s,温度梯度 G 由 410 K/mm 逐渐增大到 673 K/mm,对应冷却速率 $G \cdot R$ 由 2747 K/s 逐渐下降到 2086.3 K/s。

2) PF 模拟结果表明,微观组织呈明显的柱状晶结构,枝晶间距从熔池顶部的 4.52 μm 增大到熔池底部的 7.12 μm ,比 Kurz 等^[20]和 Hunt 等^[21]的模型更加贴近实验测量结果。

3) 模拟结果表明,Nb 主要在枝晶间隙富集偏析,呈液滴状分布在基体中,而且越靠近柱状晶底部含量相对越高,与实验结果一致。

本文研究了激光焊接 IN718 合金微观组织转变过程与元素偏析行为,丰富了镍基合金激光焊接熔池凝固理论,为激光焊接 IN718 合金中裂纹、气孔等缺陷形成过程的数值求解奠定了基础。

参 考 文 献

- [1] 张杰,张群莉,姚建华,等.激光熔覆 IN718 合金工艺优化及界面组织性能分析[J].中国激光,2022,49(16):1602021.
Zhang J, Zhang Q L, Yao J H, et al. Optimization of laser cladding process and analysis of interface microstructure and properties of IN718 alloy[J]. Chinese Journal of Lasers, 2022, 49(16): 1602021.
- [2] 王予,黄延禄,杨永强.同轴送粉激光定向能量沉积 IN718 的数值模拟[J].中国激光,2021,48(6):0602115.
Wang Y, Huang Y L, Yang Y Q. Numerical simulation on coaxial powder feeding laser directional energy deposition of IN718[J]. Chinese Journal of Lasers, 2021, 48(6): 0602115.
- [3] 李旺,杨立军,黄一鸣,等.TC4钛合金激光焊接等离子体电信号熔透特征研究[J].中国激光,2022,49(22):2202018.
Li W, Yang L J, Huang Y M, et al. Study on penetration

characteristics of plasma electric signal in laser welding of TC4 titanium alloy[J]. Chinese Journal of Lasers, 2022, 49(22): 2202018.

- [4] 黄嘉森,蔡创,刘致杰,等.Inconel690镍基合金/SUS304不锈钢激光焊接接头组织与力学性能[J].光学学报,2023,43(10):1014001.
Huang J S, Cai C, Liu Z J, et al. Microstructure and mechanical properties of laser welded Inconel690 nickel-based alloy/SUS304 stainless steel joints[J]. Acta Optica Sinica, 2023, 43(10): 1014001.
- [5] Asta M, Beckermann C, Karma A, et al. Solidification microstructures and solid-state parallels: recent developments, future directions[J]. Acta Materialia, 2009, 57(4): 941-971.
- [6] 王磊. 2A14 铝合金激光焊接熔池微观组织演变相场法研究[D].南京:南京航空航天大学,2018.
Wang L. Study on microstructure evolution of molten pool in laser welding of 2A14 aluminum alloy by phase field method[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2018.
- [7] 刘芸. 铝锂合金激光焊接熔池凝固过程微观组织建模与仿真研究[D].南京:南京航空航天大学,2018.
Liu Y. Modeling and simulation of microstructure in solidification process of Al-Li alloy laser welding pool[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2018.
- [8] Yin H, Felicelli S D. Dendrite growth simulation during solidification in the LENS process[J]. Acta Materialia, 2010, 58(4): 1455-1465.
- [9] Yu F Y, Wei Y H, Liu X B. The evolution of polycrystalline solidification in the entire weld: a phase-field investigation[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2019, 142: 118450.
- [10] Wang L, Wei Y H, Chen J C, et al. Macro-micro modeling and simulation on columnar grains growth in the laser welding pool of aluminum alloy[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, 123: 826-838.
- [11] Radhakrishnan B, Gorti S B, Turner J A, et al. Phase field simulations of microstructure evolution in IN718 using a surrogate Ni - Fe - Nb alloy during laser powder bed fusion[J]. Metals, 2018, 9(1): 14.
- [12] Mi G Y, Xiong L D, Wang C M, et al. Two-dimensional phase-field simulations of competitive dendritic growth during laser welding[J]. Materials & Design, 2019, 181: 107980.
- [13] 耿韶宁. 铝合金薄板激光焊接熔池凝固组织演变的多尺度模拟研究[D].武汉:华中科技大学,2020.
Geng S N. Multi-scale simulation study on solidification structure evolution of molten pool in laser welding of aluminum alloy sheet [D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2020.

- [14] Chang B H, Allen C, Blackburn J, et al. Fluid flow characteristics and porosity behavior in full penetration laser welding of a titanium alloy[J]. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 2015, 46(2): 906-918.
- [15] 庞盛永. 激光深熔焊接瞬态小孔和运动熔池行为及相关机理研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2011.
Pang S Y. Study on transient keyhole and moving molten pool behavior and related mechanism in laser deep penetration welding [D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2011.
- [16] 胥国祥. 激光+GMAW-P复合热源焊缝成形的数值模拟[D]. 济南: 山东大学, 2009.
Xu G X. Numerical simulation of weld formation in laser +GMAW-P hybrid heat source welding[D]. Jinan: Shandong University, 2009.
- [17] Zheng W J, Dong Z B, Wei Y H, et al. Phase field investigation of dendrite growth in the welding pool of aluminum alloy 2A14 under transient conditions[J]. *Computational Materials Science*, 2014, 82: 525-530.
- [18] 余枫怡. 铝铜合金 TIG 熔池凝固过程组织演化的相场法模拟 [D]. 南京: 南京航空航天大学, 2018.
Yu F Y. Simulation of microstructure evolution during solidification of molten pool in aluminum-copper alloy TIG welding by phase field method[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2018.
- [19] Wang L, Li H, Song Y, et al. Investigation of dendrite growth, Nb segregation during laser IN718 deposition via volume of fluid-phase field modeling[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, 21: 404-415.
- [20] Kurz W, Fisher D J. Dendrite growth at the limit of stability: tip radius and spacing[J]. *Acta Metallurgica*, 1981, 29(1): 11-20.
- [21] Hunt J D, Lu S Z. Numerical modeling of cellular/dendritic array growth: spacing and structure predictions[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1996, 27(3): 611-623.
- [22] Maguire M C, Michael J R. Weldability of alloy 718, 625 and variants[M]//Loria E A. *Superalloys 718, 625, 706 and Various Derivatives (1994)*. [S.l.: s.n.], 1994.
- [23] DuPont J N, Notis M R, Marder A R, et al. Solidification of Nb-bearing superalloys: part I. reaction sequences[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1998, 29(11): 2785-2796.

Solidification Microstructure Volume of Fluid Phase Field Model for Laser Welding Nickel-Based Alloys

Li Yichen, Wang Lei*, Li He, Peng Yong, Cai Runhuan, Wang Kehong

School of Materials Science and Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, Jiangsu, China

Abstract

Objective Laser utilization as a heat source to connect nickel-based superalloys has been applied in aviation, aerospace, weapons manufacturing and other fields. Solidification behavior of the laser welding molten pool of nickel-based alloys, including the nucleation, growth, collision and movement of grains, and the diffusion, enrichment and segregation of alloying elements, directly affect nickel-based alloy laser weld performance. Therefore, in-depth research of the solidification behavior of the nickel-based alloy laser welding molten pool is of paramount significance, particularly for laser welding process optimization, welding defect formation control, and the improvement of laser weld mechanical properties.

Methods The macroscopic heat and mass transfer coupling model alongside microstructure evolution is utilized to quantitatively simulate the macroscopic heat and mass transfer, and the microstructure evolution of a laser welded IN718 alloy. The fluid volume (VOF) method is used to simulate the molten pool morphology and temperature field distribution of the macroscopic heat transfer process, and the temperature field distribution replaces the solidification parameter variables relating to the phase field control equation and is brought into the phase field model for microstructure evolution process simulation.

Results and Discussions The simulated and experimental microstructures are shown in Fig. 6, where it can be observed that all tissues are columnar crystal structures with a consistent morphology. As shown in Fig. 7(a), the solidification velocity R and temperature gradient G at different positions were extracted in the macroscopic simulation results. The solidification velocity R gradually decreased from top to bottom with the molten pool boundary, and the temperature gradient G gradually increased. The cooling rate $G \cdot R$ showed a decreasing trend, the dendrite spacing gradually increased, and the results are shown in Fig. 7(b). Compared with the Hunt and Kurz *et al.* numerical models, the phase field model calculated results are more accurate and close to the experimental results, showing consistent regularity, as shown in Fig. 8. The distribution of Nb elements perpendicular to the growth direction of columnar crystals in the simulation results is shown in Fig. 9 (b), this shows obvious periodic changes, and the change period is closely related to the phase morphology, because the IN718 solute partition coefficient is less than 1. Solute elements tend to be segregated and enriched at the dendrite gap position. In the simulation results, the mass fraction of Nb elements inside the solid-phase dendrite is significantly reduced, and the lowest mass fraction occurs at the columnar center owing to segregation caused by solute redistribution during solidification. The mass fraction of Nb element increased significantly at the liquid phase position of columnar crystal gap, and the mass fraction of Nb element in the position was relatively higher than that closer to the bottom of the columnar crystal. From Fig. 10, the Laves phase enriched by the Nb element precipitated from the IN718 molten pool after solidification is distributed in the γ phase matrix in the shape of droplets. The Laves phase morphology and distribution are approximately consistent with the simulated distribution of Nb elements. The SEM results are shown in Fig. 11(b), the EDS spot

scan analysis is performed on the illustrated position, with the test results shown in Figs. 11(a) and (c). The mass fraction of Nb element in the matrix γ is approximately 4.7%. The mass fraction of Nb element in the Laves phase is approximately 9.8%, and the Nb element mass fraction in Laves phase is significantly higher than that in matrix γ . This proves the accuracy and reliability of the simulation results.

Conclusions The results demonstrate that the simulated microstructure grows in a columnar crystal structure. The solidification rate R of the molten pool gradually decreases from top to bottom, the temperature gradient G gradually increases, the cooling rate $G \cdot R$ decreases continuously, and the primary dendrite arm spacing increases with the decrease in cooling rate, from 4.52 to 7.12 μm , which is consistent with the experimental results. The mass fraction of Nb elements in the columnar crystal spacing increased significantly, and this mass fraction was relatively higher near the bottom of the columnar crystals in the liquid phase. The Nb elements are finally distributed in the shape of droplets and approximately consistent with the Laves phase in morphology and distribution, which is also consistent with the experimental results. The microstructure transformation process and elemental segregation behavior of IN718 in laser welding are examined, and the solidification theory of the laser welding molten pool of nickel-based alloys is enriched. Finally, this research provides a foundation for a numerical solution of the defect formation process for laser welding IN718 cracks and pores.

Key words laser technique; laser welding; nickel-based alloy; numerical simulation; phase field model; solidification microstructure