

基于 CA-FE 法的 Cu-Cr-Zr-Ag 合金凝固组织模拟

王 松, 谢 明*, 王塞北, 付作鑫, 沈 月, 杜文佳, 溥存继
(昆明贵金属研究所 稀贵金属综合利用新技术国家重点实验室, 昆明 650106)

摘 要: Cu-Cr系合金因其具有高强度、高导电以及优异的耐磨损性能, 被广泛应用于电气化铁路接触导线、连续铸造结晶器内衬、异步牵引电动机转子以及耐磨电触头等。应用ProCAST软件中的CA-FE法对Cu-0.1Cr-0.08Zr-0.08Ag合金的凝固过程进行了模拟。结果表明: Cu-Cr-Zr-Ag合金凝固时, 铸坯外表面沿模壁产生细晶薄层后, 随之形成几何取向一致的柱状晶, 而铸坯的心部则是由许多粗大的等轴晶所组成。随着冷却速度的加大, 合金铸坯晶粒变得更为细小。模拟结果与实验结果基本吻合, 检验了模型的正确性。

关键词: 金属材料; Cu-Cr-Zr-Ag 合金; 凝固模拟; CA-FE 法; 显微组织

中图分类号: TG146.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 1004-0676(2013)03-0050-05

Simulation of Solidified Microstructures of Cu-Cr-Zr-Ag Alloy Based on CA-FE Method

WANG Song, XIE Ming*, WANG Saibei, FU Zuoxin, SHEN Yue, DU Wenjia, PU Cunji
(State Key Laboratory of Advanced Technologies for Comprehensive Utilization of Platinum Metals,
Kunming Institute of Precious Metals, Kunming 650106, China)

Abstract: Due to high strength, high conductivity and excellent wear resistance, Cu-Cr alloys are widely used in electrified railway contact wire, continuous casting crystallization lining, asynchronous traction motor rotor and wear-resistant electrical contacts. The simulation of the solidification structures in the solidification process of Cu-0.1Cr-0.08Zr-0.08Ag alloy was carried out by CA-FE method in ProCAST. The results show that, during solidification process, along the outer surface of the mold wall, the thin layer of fine grains is produced, and then the columnar grains with consistent geometric orientation are formed, while the core of the casting billet is composed of many equiaxed grains. With the increasing of cooling rate, the grains become smaller. The calculation results fit the experimental ones well, and then the validity of the model is tested.

Key words: metal material; Cu-Cr-Zr-Ag alloy; solidification simulation; CA-FE method; microstructures

Cu-Cr系铜合金因其具有高强度、高导电以及优异的耐磨损性能, 被广泛应用于电气化铁路接触导线、连续铸造结晶器内衬、高炉冷却壁、异步牵引电动机转子、电阻焊电极、大功率耐磨电触头以及集成电路引线框架等^[1-5]。铬、锆、银的复合添加能显著改善铜的中温脆性, 同时能显著提高合金的再结晶温度, 改善合金的抗软化性能。多项强化机制

的综合作用(如固溶强化、细晶强化、第二相强化、时效强化等)使Cu-Cr系铜合金的抗拉强度高于550 MPa并具有一定的塑性加工性能, 导电率大于85%IACS, 抗软化温度高于400℃, 耐磨损性能突出^[6-8]。Cu-Cr系合金已成为当前高强度、高导电铜合金制备和研发采用的主流合金体系之一^[9-12]。利用计算机软件模拟Cu-Cr合金铸件的凝固过程, 可为

收稿日期: 2012-11-06

基金项目: 国家自然科学基金(51164015)、云南省应用基础研究重点基金(2011FA026)、云南省院所技术开发专项基金(2011CF012)资助。

第一作者: 王 松, 男, 硕士, 助工, 研究方向: 高强高导铜合金研究。E-mail: fenmoyejin@qq.com

*通讯作者: 谢 明, 男, 博士, 教授, 研究方向: 粉末冶金材料研究。E-mail: powder@ipm.com.cn

合理设计铸造工艺提供科学依据。通过对铜合金铸件充型过程的仿真模拟, 可以分析工艺参数对合金显微组织的影响, 从而对工艺设计进行优化和验证, 以获得综合性能良好的铜合金铸件^[13-17]。本文建立了Cu-Cr-Zr-Ag合金的凝固模型, 采用Pro-CAST软件对不同冷却条件下Cu-Cr-Zr-Ag合金的凝固过程进行数值模拟, 研究了合金显微组织的形成过程与形成机理, 并对模拟结果进行实验验证。

1 Cu-Cr-Zr-Ag 合金的凝固模型建立及凝固条件设定

1.1 三维几何造型及网格划分

采用铸造过程有限元模拟软件 ProCAST 中的 MESHCAST 模块对铸坯进行有限元网格划分, 并结合三维建模软件 Pro/E, 建立实验所需实体模型, 然后利用 Pro/E 中的 FEM 模块对实体模型划分面网格。利用 ProCAST 软件中的 Meshcast 模块读取。图 1 为网格化铸坯的实体模型, 节点数为 1103, 单元数为 4574, 铸锭尺寸为 $\phi 15 \text{ mm} \times 100 \text{ mm}$ 。

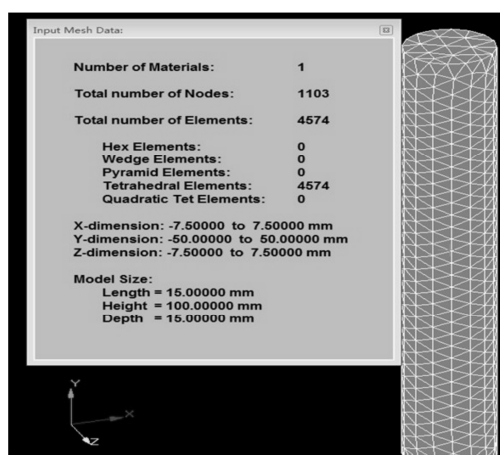


图 1 铸坯模型网格划分

Fig.1 Model grid partition of casting billet

1.2 形核模型

假设凝固以非均匀形核为主, 并考虑到凝固过

程中其他凝固条件对最终晶粒大小和晶粒形态分布的影响, 本研究采用连续形核模型。以假设形核现象发生在一系列不同的形核位置上, 采用连续而非离散的概率函数 $dn/d(\Delta T)$ 来描述形核密度的变化, 其中, dn 是由过冷度 ΔT 增加引起的晶粒密度增加。形核密度变化满足高斯分布。给定过冷度 ΔT 时所形成的晶核密度 $n(\Delta T)$ 可由该分布曲线的积分求得:

$$n(\Delta T) = \int \frac{dn}{d(\Delta T)} d(\Delta T)$$

其中, $dn/d(\Delta T)$ 由下式的高斯分布确定:

$$\frac{dn}{d(\Delta T)} = \frac{n_{\max}}{\sqrt{2\pi}\Delta T_{\sigma}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Delta T - \overline{\Delta T}}{\Delta T_{\sigma}}\right)^2\right]$$

上式中, $\overline{\Delta T}$ 是平均形核过冷度; ΔT_{σ} 是形核过冷度标准偏差; $n_{\max}$ 是正态分布从 0 到 ∞ 积分得到的最大形核密度。

1.3 晶粒生长动力学模型

建立晶粒生长动力学模型是进行晶粒生长模拟的关键, 本研究选用经典的 KGT(Kunur、Giovannola 和 Trivedi)模型, 选择 KGT 模型的原因在于: 一方面该模型描述了快速凝固过程中强制性晶粒尖端的生长, 确立了晶粒生长速度与过冷度的关系; 另一方面考虑了在高凝固速度下溶质陷落、扩散系数随温度的变化关系, 以及有曲率和动力学效应对过冷度的贡献。根据 Rappaz 和 Kurz 对 KGT 模型的研究, 得出晶粒尖端生长速率 v 与过冷度之间简化的关系式为:

$$v(\Delta T) = a_2 \Delta T^2 + a_3 \Delta T^3$$

上式中, a_2 、 a_3 分别为拟合多项式的系数; ΔT 为枝晶尖端总过冷度。

1.4 合金凝固的初始条件和 CA 参数

铜合金的名义成分 Cu-0.1Cr-0.08Zr-0.08Ag, 合金的凝固初始条件为: 浇注温度 1250°C , 浇注速度 3 kg/s , 铸模(包括石墨模、水冷银模和水冷铜模)的初始温度为 25°C 。CA 参数的设定值列于表 1。在 ProCAST 软件中导入合金成分和上述参数, 采用 Scheil 模型进行计算。

表 1 CA 参数

Tab.1 Parameters of CA

铸模	$a_2/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-3})$	$a_3/(\text{m}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-3})$	$T_{s,\max}/\text{K}$	$T_{s,\sigma}/\text{K}$	$n_{s,\max}/(\text{m}^{-2})$	$T_{v,\max}/\text{K}$	$T_{v,\sigma}/\text{K}$	$n_{v,\max}/(\text{m}^{-3})$
水冷银模	3.41×10^{-8}	2.4×10^{-7}	10	1	1×10^8	10	2	1×10^7
水冷铜模	3.19×10^{-8}	2.3×10^{-7}	6	1	1×10^8	5	1	1×10^7
石墨模	2.86×10^{-8}	2.1×10^{-7}	4	0.5	1×10^8	3	0.5	1×10^7

注: 面形核参数下标为 s, 体形核参数下标为 v。

2 模拟结果及分析

2.1 水冷铜模铸锭的微观组织模拟结果

水冷铜模冷却条件下铜合金的微观凝固组织模拟结果及其金相照片如图 2 所示,不同颜色代表不同晶粒的取向。由图 2(a)~(e)可看出,在铜合金铸坯外表面,沿模壁薄层金属液体中产生了大量晶核,形成了许多细小的等轴晶粒,这个区域较窄。紧接细晶外壳出现一层柱状晶粒所组成的柱状晶区。各柱状晶的长轴大致与模壁垂直,表现出几何取向的一致性。铸坯的心部是由许多粗大的等轴晶所组成。在凝固开始时,在铸件的外表面虽然有很

多细小晶粒形成,但仅仅有一小部分晶粒成功长大,这部分晶粒一致向液体内伸展,形成了与模壁垂直的粗大柱状晶体。在生长的柱状晶前沿的液相区中仍有一小部分晶粒形核,在柱状区前沿形成了小的“孤岛”。随着凝固的进行,热梯度降低,柱状晶前端的过冷液相区变宽,柱状晶粒慢慢长大在铸坯心部剩余的液相区中,热梯度的缓慢降低导致铸坯心部出现等轴晶。图 2(f)为相同条件下铜合金的金相照片,对比图 2(e)和图 2(f)可知,模拟结果与实际相一致,说明利用 PoCAST 软件,选取合适的物性参数与边界条件,能够较好地模拟铜合金的凝固过程,为生产实践提供参考。

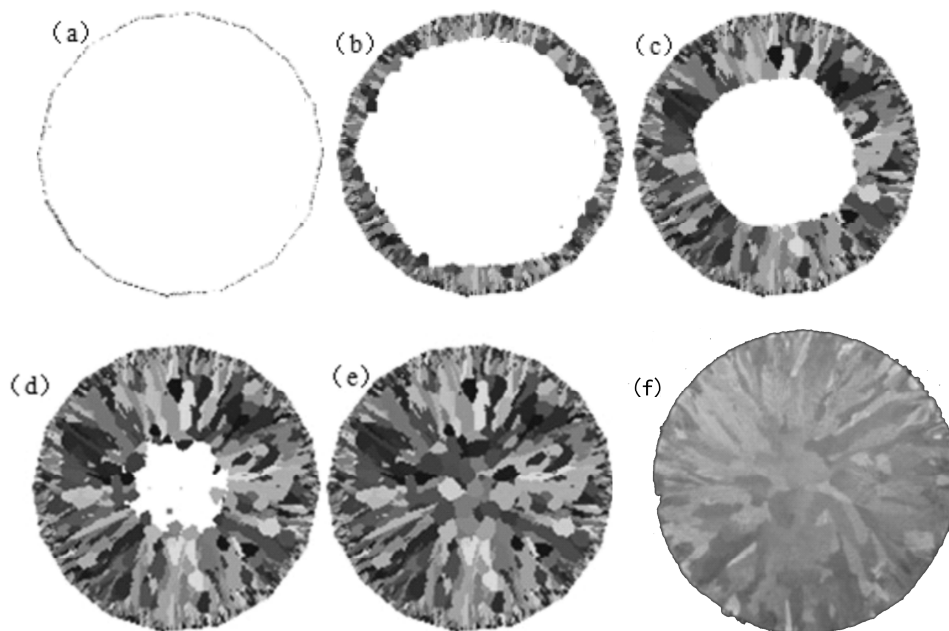


图 2 水冷铜模凝固条件下铜合金模拟晶粒生长过程

Fig.2 Simulation of grain growth process of copper alloy under water-cooled condition

2.2 不同冷却速度对铸锭微观组织的影响

图 3 为不同冷却速度下铜合金铸锭微观组织的模拟结果。由图 3 可以发现,冷却速度较大的水冷银模和水冷铜模的铸件晶粒较小,而冷速最小的石墨模铸锭中心区域有粗大的等轴晶分布,说明高冷速快可以使铸锭晶粒变得细小。同时从图 3(c)中也可以看到,冷却速度最快的水冷银模铸件其柱状晶区比较发达,铸锭中心部分只有少量的等轴晶存在,形成了穿晶组织。这是由于银模模壁的散热快,

已结晶金属的导热性好,液态金属液始终能保持较大的内外温度梯度和方向性散热,柱状晶能一直长大到铸锭中心。而以石墨模为模具,降低了铜合金熔体的冷却速度,柱状晶的生长受到了抑制,剩余液体趋于均匀缓冷状态,加上杂质的作用会在液体中形成许多位向不同的等轴晶粒。由此可知增大冷却速率可以细化晶粒,这与凝固理论一致,但同时应避免冷速过大而形成穿晶组织。

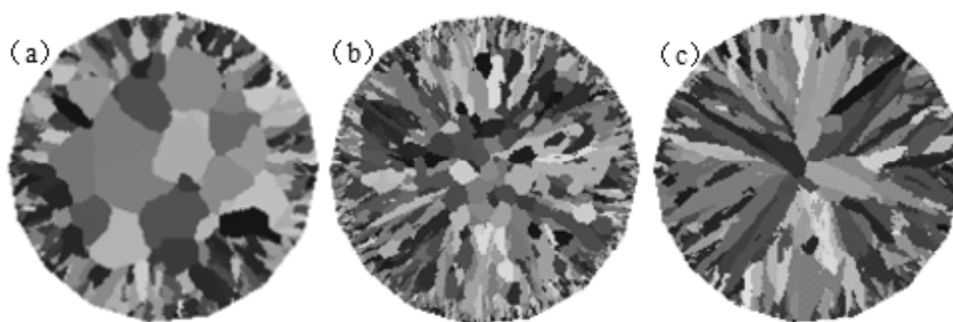


图3 铜合金铸坯微观组织模拟结果

[(a)石墨模、(b)水冷铜模、(c)水冷银模]

Fig.3 Simulation results of copper alloy microstructures

[(a) graphite mold, (b) water-cooled copper mold, (c) water-cooled silver mold]

2.3 铜合金纵截面微观组织的凝固模拟

图4所示为Cu-Cr-Zr-Ag合金凝固过程纵截面微观组织的模拟结果。



图4 Cu-Cr-Zr-Ag合金凝固过程纵截面微观组织模拟

Fig.4 Simulation of longitudinal section microstructures of Cu-Cr-Zr-Ag alloy

当合金熔体浇铸到水冷铜模以后,熔体开始冷却。当温度的下降满足过冷度要求时,合金熔体中便开始形核,以及晶核开始长大。由图4可以看出,合金铸坯首先从模壁处优先形核,生成表层细晶区。细晶区是与模壁接触的液体薄层在剧烈过冷条件下结晶而形成的。剧烈的过冷合金液体、模壁及附在模壁上的杂质均可作为非均匀形核的基底,促使过冷熔体形成大量的核心,进而形成细小、等轴晶粒。由于细晶区结晶较迅速,液体放出的结晶潜热来不及散失,使液固界面的温度升高,细晶区便停止了

延伸,最终得到一层很薄的细晶区结晶层。当细晶区形成后,模壁温度逐渐升高,散热减缓,合金液体过冷度减小,形核率急剧降低。细晶区中部分生长速度较快的晶体便沿着垂直于模壁的散热反方向生长,而其侧向生长因相邻晶粒干扰而受阻,因而形成柱状晶区。在中心液体中,可依靠外来夹杂产生非均匀形核,另外,由于浇铸时液体金属的流动、冲刷,也可将一些小晶粒推至铸坯中心,形成晶核。晶核在中心过冷液体中的生长不具有方向性,从而形成等轴晶体。

3 结论

(1) 采用ProCAST软件能够较好地模拟不同的冷却条件下Cu-Cr-Zr-Ag合金凝固各阶段的显微组织,预测了铸件内部晶粒的形状及其分布部位。

(2) Cu-Cr-Zr-Ag合金凝固时,铸坯外表面沿模壁产生细晶薄层后,接着便形成几何取向一致的柱状晶,而铸坯的心部则是由许多粗大的等轴晶所组成。随着冷却速度的加大,合金铸坯晶粒变得更为细小。

(3) 凝固模拟结果与实验结果基本吻合,检验了所选模型的正确性。合金凝固过程的模拟结果可为优化铸造工艺提供一定的科学依据。

参考文献:

- [1] 王志强,钟云波,饶显君,等. Cu-Cr-Zr合金在施加直流电流时效后的电性能和力学性能[J]. 中国有色金属学报, 2012, 22(5): 1106-1111.
Wang Zhiqiang, Zhong Yunbo, Rao Xianjun, et al. Electrical and mechanical properties of Cu-Cr-Zr alloy aged under imposed direct continuous current[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2012, 22(5): 1106-1111.

- [2] Dadras M M, Morris D G. Examination of some highstrength, high-conductivity copper alloys for high temperature applications[J]. Scripta Materialia, 1998, 38(2): 199-205.
- [3] 谢明, 张吉明, 王松, 等. 高强高导 CuCr 合金的显微组织与性能研究[J]. 电工材料, 2011(4): 10-13.
Xie Ming, Zhang Jiming, Wang Song, et al. Research on properties and microstructures of CuCr alloy of high strength and high conductivity[J]. Electrical Engineering Materials, 2011(4): 10-13.
- [4] 贾淑果, 刘平, 宋克兴, 等. Cu-Cr-Zr 原位复合材料的组织与性能[J]. 中国有色金属学报, 2010, 20(7): 1334-1338.
Jia Shuguo, Liu Ping, Song Kexing, et al. Microstructures and properties of Cu-Cr-Zr in-situ composites[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2010, 20(7): 1134-1338.
- [5] 慕思国, 曹兴民, 汤玉琼, 等. 时效态 Cu-Cr-Zr-Mg-RE 合金的组织与性能[J]. 中国有色金属学报, 2007, 17(7): 1112-1118.
Mu Siguo, Cao Xingmin, Tang Yuqion, et al. Microstructure and properties of aging Cu-Cr-Zr-Mg-RE alloy[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2007, 17(7): 1112-1118.
- [6] 刘克明, 陆德平, 周海涛, 等. 形变 Cu-Cr-Ag 原位复合材料组织和性能[J]. 稀有金属材料与工程, 2011, 40(11): 1931-1935.
Liu Keming, Lu Deping, Zhou Haitao, et al. Microstructure and properties of Cu-Cr-Ag in-situ composites[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2011, 40(11): 1931-1935.
- [7] 王庆娟, 徐长征, 郑茂盛, 等. 高性能 Cu-Cr-Ag 合金的软化性能[J]. 特种铸造及有色合金, 2006, 26(11): 691-693.
Wang Qingjuan, Xu Changzheng, Zheng Maosheng, et al. Soften behaviors of Cu-Cr-Ag alloy with high performance[J]. Special Casting & Nonferrous Alloys, 2006, 26(11): 691-693.
- [8] Xie Haofeng, Mi Xujun, Huang Guojie, et al. Effect of thermo-mechanical treatment on microstructure and properties of Cu-Cr-Zr-Ag alloy[J]. Rare Metals, 2011, 30(6): 650-656.
- [9] 宋练鹏, 尹志民, 孙伟, 等. 形变热处理对 Cu-Ag-Cr 和 Cu-Ag-Zr 合金组织和性能的影响[J]. 材料热处理学报, 2006, 27(6): 66-69.
Song Lianpeng, Yin Zhimin, Sun Wei, et al. Influence of thermo-mechanical processing on microstructure and mechanical properties of Cu-Ag-Cr and Cu-Ag-Zr alloys[J]. Transactions of Materials and Heat Treatment, 2006, 27(6): 66-69.
- [10] 刘勇, 刘平, 田保红, 等. 接触线用微合金化 Cu-Ag-Cr 合金时效析出行为和电磨损机理探讨[J]. 材料热处理学报, 2007, 28(S1): 34-37.
Liu Yong, Liu Ping, Tian Baohong, et al. Discuss on aging characteristics and electrical sliding wear resistance of trace alloyed Cu-Ag-Cr alloy contact wire[J]. Transactions of Materials and Heat Treatment, 2007, 28(S1): 34-37.
- [11] 刘勇, 刘平, 李伟, 等. Cu-Cr-Zr-Y 合金时效析出行为研究[J]. 功能材料, 2005, 36(3): 377-379.
Liu Yong, Liu Ping, Li Wei, et al. Aging precipitation behavior of Cu-Cr-Zr-Y alloy[J]. Journal of Functional Materials, 2005, 36(3): 377-379.
- [12] 刘勇, 刘平, 李伟, 等. Cu-Cr-Zr-Ce 合金时效行为和电滑动磨损性能研究[J]. 摩擦学学报, 2005, 25(3): 265-269.
Liu Yong, Liu Ping, Li Wei, et al. Aging behavior and electrical sliding wear properties of Cu-Cr-Zr-Ce alloy[J]. Tribology, 2005, 25(3): 265-269.
- [13] 胡红军. ProCAST 软件的特点及其在铸件成形过程中的应用[J]. 热加工工艺, 2005(1): 70-71.
Hu Hongjun. Function of FEM software ProCAST and application in casting[J]. Hot Working Technology, 2005(1): 70-71.
- [14] 邱桂永, 韩建民, 杨智勇, 等. 凝固模拟参数设置合理性的检验方法研究及应用[J]. 铸造, 2007, 56(9): 952-955.
Qiu Guiyong, Han Jianmin, Yang Zhiyong, et al. Research and application of rational verification methods of parameter setting for solidification simulation[J]. Foundry, 2007, 56(9): 952-955.
- [15] 宋玉华, 颜永年, 张人佶, 等. 铸件/铸型边界模型对用于 RT 的凝固模拟精度影响的研究[J]. 清华大学学报: 自然科学版, 2001, 41(2): 16-20.
Song Yuhua, Yan Yongnian, Zhang Renji, et al. Influence of boundary model between casting and mold on the accuracy of numerical simulation for rapid tooling[J]. Journal of Qinghua University: Science and Technology, 2001, 41(2): 16-20.
- [16] 胡红军, 杨明波, 罗静, 等. ProCAST 软件在铸造凝固模拟中的应用[J]. 材料科学与工艺, 2006, 14(3): 293-295.
Hu Hongjun, Yang Mingbo, Luo Jing, et al. Application of the software ProCAST in the casting of solidification simulation[J]. Materials Science and Technology, 2006, 14(3): 293-295.
- [17] 王宥宏, 孙占波, 宋晓平, 等. Cu-Cr 合金快淬带的凝固数值模拟[J]. 中国有色金属学报, 2005, 15(7): 1045-1050.
Wang Youhong, Sun Zhanbo, Song Xiaoping, et al. Numerical simulation of single roller melt spinning for solidification process of Cu-Cr alloy[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2005, 15(7): 1045-1050.