

Mg-Gd-Y-Zr 合金凝固组织特征参数模拟 及在航天构件上的应用

王旭阳^{1,2}, 赵雪婷^{1,2}, 袁 勇³, 肖 旅³, 王先飞³, 李中权³, 韩志强^{1,2}

(1.清华大学 材料学院, 北京 100084; 2.清华大学 先进成形制造教育部重点实验室, 北京 100084;

3.上海航天精密机械研究所, 上海 201600)

摘 要:基于 Mg-Gd-Y-Zr 合金凝固组织与工艺条件的关系, 模拟了典型航天构件组织特征参数的分布。浇铸了阶梯形铸件, 并采用热电偶测量了阶梯形铸件不同厚度处在凝固过程中的温度变化。通过观察凝固组织, 并与冷却条件比对, 获得了凝固组织中晶粒尺寸和第二相体积分数与冷却速率的定量关系。采用 ProCAST[®] 软件模拟了典型航天构件的凝固过程, 获得了凝固过程中构件不同部位的冷却速率。利用实验获得的定量关系, 模拟得到了典型航天构件上晶粒尺寸和第二相体积分数的分布。

关键词: Mg-Gd-Y-Zr; 凝固组织; 冷却速率; 晶粒尺寸; 第二相体积分数

中图分类号: TG 146.2⁺2; TG 292 **文献标志码:** A **DOI:** 10.19328/j.cnki.1006-1630.2019.02.007

Simulation on Characteristic Parameters of Solidification Microstructure of Mg-Gd-Y-Zr Alloy and Its Application to Aerospace Components

WANG Xuyang^{1,2}, ZHAO Xueting^{1,2}, YUAN Yong³, XIAO Lü³,

WANG Xianfei³, LI Zhongquan³, HAN Zhiqiang^{1,2}

(1.School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

2. Key Laboratory of Ministry of Education for Advanced Materials Processing Technology, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 3. Shanghai Spaceflight Precision Machinery Institute, Shanghai 201600, China)

Abstract: The distributions of characteristic parameters about the solidification microstructure of a typical aerospace component are simulated based on the relationships between the solidification microstructure and processing conditions of Mg-Gd-Y-Zr alloy. In this study, castings with steps are produced, and thermocouples are employed to record the temperature variation at different thicknesses in the castings. The effects of the cooling rate on the grain size and the fraction of the secondary phase are quantitatively determined by studying the solidification microstructure under different cooling conditions. ProCAST[®] software is utilized to simulate the solidification process of the typical aerospace component, and the distributions of cooling rates are obtained. The distributions of grain sizes and fractions of the secondary phase are acquired based on the cooling rate obtained by the simulation.

Keywords: Mg-Gd-Y-Zr; solidification microstructure; cooling rate; grain size; volume fraction of secondary phase

收稿日期: 2018-11-20; 修回日期: 2018-12-18

基金项目: 国家重点研发计划(2016YFB0701204); 国家科技重大专项(2017ZX04006001)

作者简介: 王旭阳(1995—), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为镁合金铸造过程模拟与仿真。

通信作者: 韩志强(1968—), 男, 副教授, 主要研究方向为轻量化材料与工艺、材料基因关键技术和集成计算材料工程。

袁 勇(1980—), 男, 研究员, 主要研究方向为镁合金材料和热处理技术。

0 引言

镁合金作为一种重要的轻金属材料,具有密度小、比刚度大、易于切削加工等优点,在航空航天领域中有着重要的应用^[1-2]。其中,Mg-Gd-Y-Zr 合金因在高温环境下具有良好的抗蠕变性和耐腐蚀性而被用于制造重要的航天装备^[3-4],如舱体结构件。然而,这类铸件形状复杂、壁厚不均匀,在实际生产中铸件不同部位的冷却速率差异较大,给组织性能的控制带来挑战。很多学者针对冷却速率对 Mg-Gd-Y-Zr 合金凝固组织(尤其是晶粒尺寸和第二相体积分数)的影响开展了较深入的研究^[5-6]。ZHOU 等^[7]研究发现,在 17.4~253.5 K/s 的冷却速率范围内,随着冷却速率的提高,Mg-Gd-Y-Zr 合金的平均晶粒尺寸减小,第二相体积分数下降,且合金的微观偏析程度减小。除冷却速率外,Zr 元素作为影响晶粒尺寸的重要因素也引起了许多学者的关注^[8]。例如,JIANG 等^[9]研究了 Zr 含量对砂型铸造 Mg-Gd-Y-Zr 合金的微观组织、拉伸性能和疲劳行为的影响。研究结果表明:当 Zr 含量从 0.3% 增加到 0.5% 时,晶粒尺寸减小,且相较于疲劳性能,Zr 含量对合金拉伸性能的影响更为显著。彭卓凯等^[10]提出 Zr 含量的提高可有效促进异质形核,增大形核密度,实现组织晶粒的细化。然而,这些研究更多关注的是冷却速率和 Zr 含量对 Mg-Gd-Y-Zr 合金微观组织特征的定性影响,针对航天实际用特定成分合金的定量关系的研究还较少。

近年来,随着计算机技术的不断发展,铸造过程宏微观计算模拟的研究和应用得到迅速发展。ProCAST® 作为目前铸造过程宏观模拟的主要商用软件之一,被应用于凝固过程模拟和宏观缺陷预测^[11-14]。如 LI 等^[15]基于实验结果,利用 ProCAST® 软件模拟 WE54 合金的凝固过程,并确定了 WE54 合金砂型铸造的 Niyama 判据值,以此预测凝固过程中 WE54 合金的缩松缩孔缺陷。目前,很多研究关注流场、温度场的模拟,以及宏观缺陷的预测。工程实际中,除缺陷的预测外,组织特征(如晶粒尺寸和第二相体积分数)的预测也非常重要。对于 Mg-Gd-Y-Zr 合金而言,冷却速率与 Zr 含量对晶粒尺寸和第二相体积分数有重要影响。如果能确定凝固组织特征参数与工艺条件之间的定量关系,并将其与宏观温度场模拟结果相结合,则能有效预测构件凝固组织特征参数的分布,这对工艺设计具有重要意义。

本研究中,设计浇铸 Mg-Gd-Y-Zr 合金阶梯形

铸件,并采用热电偶测量凝固过程中阶梯形铸件不同厚度处的温度变化。通过观察不同冷却速率下合金的凝固组织,确定凝固组织中晶粒尺寸和第二相体积分数与冷却速率的定量关系。采用 ProCAST® 软件模拟典型航天构件的凝固过程,获得构件不同部位的冷却速率。利用实验获得的定量关系,模拟典型航天构件上晶粒尺寸和第二相体积分数的分布。

1 研究方法

1.1 实验方法

通过熔炼纯镁锭(99.95%)和中间合金(Mg-25Gd,Mg-25Y,Mg-30Zr)获得成分如表 1 所示的 Mg-Gd-Y-Zr 合金。考虑典型 Mg-Gd-Y-Zr 合金铸件的主要壁厚范围,浇铸如图 1 所示的 5 级阶梯形铸件。通过布置于铸件中不同位置的热电偶记录浇铸过程中相应位置的温度数据,经数据处理,获得了不同位置的冷却速率。使用线切割方法在每个测温点位置附近选取边长为 6 mm 的立方块样品,用于凝固组织特征观察。其中,铸态样品经混合溶液处理后,可在金相显微镜下观察到第二相分布和大小,通过图像处理软件可对金相照片中的第二相体积分数进行统计。铸态组织的金相照片中晶界不明显,不利于统计合金的晶粒尺寸。经文献^[16]调研可知,Mg-Gd-Y-Zr 合金在 510 ℃ 下进行固溶,铸态组织中非均匀的溶质溶解于初生相中,且晶粒不会明显长大,经溶液腐蚀后,晶界会比较明显,有利于统计晶粒尺寸。因此,本研究采用了在 500 ℃ 下保温 6 h 的固溶方案。

表 1 Mg-Gd-Y-Zr 合金成分
Tab. 1 Chemical components of Mg-Gd-Y-Zr alloys %

元素质量分数	Gd	Y	Zr	Mg
第 1 组	9.70	4.27	0.58	余量
第 2 组	11.04	5.99	1.26	余量
第 3 组	12.42	6.07	1.94	余量

1.2 模拟方法

为实现典型构件铸造过程的数值模拟和凝固组织特征预测,需要对典型构件进行数模修整、网格优化、边界条件设定、数据处理等。使用 UG® 软件补充构建砂型数模,并对数模内部存在的不合理几何元素进行修改,以提高网格划分的可行性。图 2 为

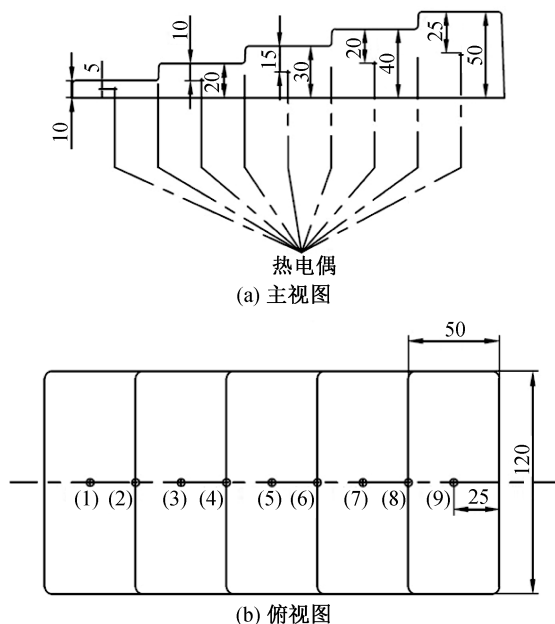


图1 阶梯形铸件的示意图(mm)

Fig. 1 Schematic diagram of casting with five steps (mm)

典型构件的数模示意图。完成数模构建及修整后,进行2D网格划分及检测,进而生成3D网格。针对典型构件进行结构尺寸分析,铸件圆筒部分的高厚比超过35,且平均壁厚不超过20 mm。进行铸件划分网格时需要注意:最薄壁厚处网格层数不少于3层;不同密度网格的相互融合性;计算精度与计算效率的平衡。因此在优化时,首先需要确定主要薄壁厚度,优先设置网格尺寸;其次采用最小尺寸的整数倍进行不同位置的网格划分,以确保不同尺寸网格的有效连接性;最后扩大砂型表面的网格尺寸,以实现从壁厚表面到砂型表面网格尺寸增大的效果,有效减少小尺寸网格的数量,缩短计算时间。典型构件的2D网格划分和3D网格划分结果如图3所示。

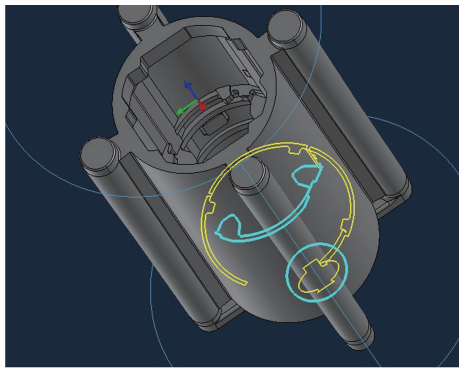
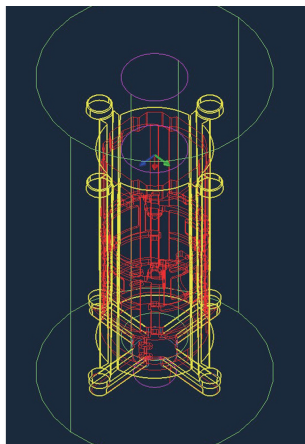
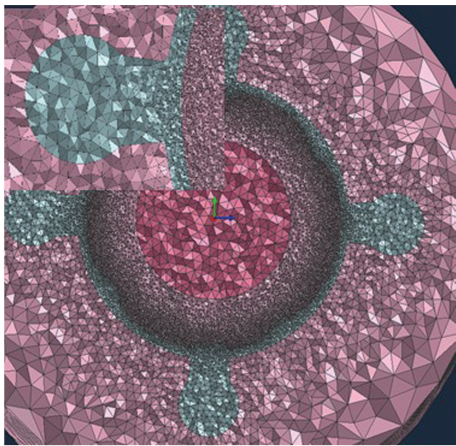


图2 典型构件的数模示意图

Fig. 2 Geometry model of typical casting



(a) 2D网格划分示意



(b) 3D网格划分结果

图3 网格划分结果

Fig. 3 Results of mesh generation

设置初始条件和边界条件,包括重力大小、重力方向、材料属性、热交换边界、充型条件等,最终实现对充型流动和凝固传热过程的模拟。模拟完成后,根据个性化需求进行结果的可视化。

2 结果与讨论

2.1 冷却速率和Zr含量对晶粒尺寸的影响

对热电偶采集到的冷却曲线中的温度关于时间进行求导后,可获取冷却速率曲线。结合Mg-Gd-Y-Zr合金凝固过程中冷却速率变化特点,可求解阶梯形铸件内不同测温点处的冷却速率。统计金相照片中10个随机视野的晶粒尺寸并求取平均值,总结确定Zr含量和冷却速率对晶粒尺寸的影响。图4为合金固溶处理后的金相图片。结果表明:随着冷却速率的增大,晶粒尺寸减小。当冷却速率相差不大时,随着Zr含量增多,晶粒尺寸减小。

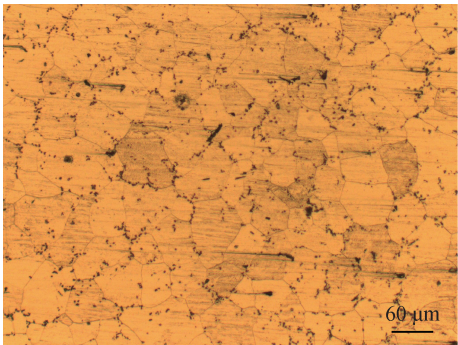


图 4 Mg-Gd-Y-0.58Zr 合金固溶处理后的微观组织 (冷却速率:6.7 K/s)

Fig. 4 Microstructure of Mg-Gd-Y-0.58Zr alloy after solution treatment (cooling rate: 6.7 K/s)

通过数据拟合,可得不同 Zr 含量的 Mg-Gd-Y-Zr 合金的晶粒尺寸与冷却速率之间的定量关系为

$$l = (-18.51\omega_{Zr} + 78.36)\exp(-0.03R_c) \quad (1)$$

式中: l 为晶粒尺寸,单位为 μm ; ω_{Zr} 为 Zr 元素的质量分数,单位为%; R_c 为冷却速率,单位为 K/s 。

2.2 冷却速率对第二相的影响

Mg-Gd-Y-Zr 合金凝固过程中,随着温度的降低,Mg 初生相析出,当温度降低至共晶反应温度时,共晶相析出。共晶中的 $\alpha\text{-Mg}$ 容易依附于初生相, $\beta\text{-Mg}_{24}\text{RE}_5$ 则以第二相的形式分布于铸态组织中。前期研究已针对固溶处理后的金相进行第二相的组织观察,统计不同冷却速率条件下的第二相体积分数。结果表明:当冷却速率从 2.6 K/s 提高至 11.0 K/s 时,第二相体积分数从 12.8% 降低至 4.4%,且第二相更加弥散地分布在晶界上^[6]。通过拟合实验数据可获得第二相体积分数与冷却速率的定量关系为

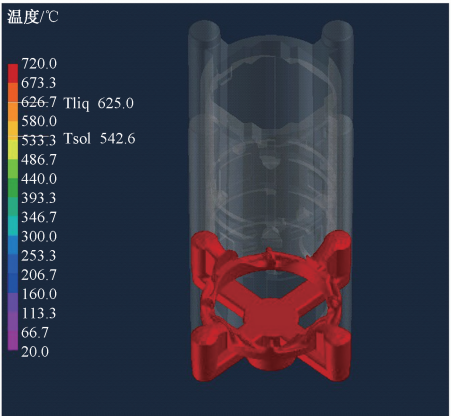
$$f = 0.081(R_c)^2 - 2.0127R_c + 16.83 \quad (2)$$

式中: f 为第二相体积分数,单位为%。

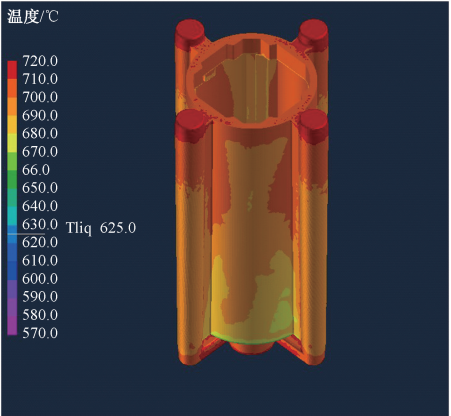
2.3 典型构件组织特征参数模拟

参考典型构件的生产工艺参数,以 0.5 m/s 的入口速度浇注初始温度为 720 $^{\circ}\text{C}$ 的 Mg-Gd-Y-Zr 合金。设置树脂砂型初始温度与室温一致,均为 20 $^{\circ}\text{C}$,铸件与砂型的界面换热系数设置为 200 $\text{W}/(\text{m}^2\cdot\text{K})$ 。通过调用低压铸造模式进行充型过程的模拟,结果如图 5 所示。

充型过程总耗时 5.089 7 s。高温金属液从立缝进入圆筒部分时出现了局部湍流,随着充型时间



(a) $t=0.903\ 9\ \text{s}$



(b) $t=5.089\ 7\ \text{s}$

图 5 典型构件充型模拟结果

Fig. 5 Filling simulation results of typical component

的增加,当液面基本保持一致后,金属液流动平稳。在充型过程中,浇道温度较高,而铸件圆筒部分中厚度较小的部分,如小平台和筋板位置,温度下降较快。但直至充型完成时,铸件内的金属液温度均未降至固相线以下。不考虑冷却速率对固相线和液相线温度的影响,冷却速率为

$$R_c = (T_L - T_s)/\Delta t \quad (3)$$

式中: T_L 和 T_s 分别为液相线温度和固相线温度,单位为 K ; Δt 为凝固时间,单位为 s 。

将 ProCAST[®] 软件计算所得的 Mg-Gd-Y-Zr 合金固液相线温度代入式(3),得到如图 6 所示的冷却速率分布。

铸件主要与树脂砂进行换热,铸件整体热量耗散较慢,冷却速率较小,最大冷却速率为 0.793 K/s 。铸件圆筒主体的壁厚较为均匀,冷却速率差异较小,但在圆筒主体中远离立缝处仍存在基本呈上下对称的冷却速率较大的区域,这主要是因为该区域的铸件厚度较小,且金属液从立缝流动到该区域的流程

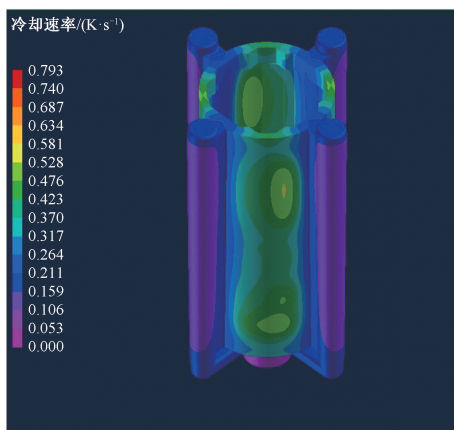


图 6 冷却速率分布

Fig. 6 Distribution of cooling rates

较长,流动阻力较大。此外,位于铸件圆筒内表面处的薄壁筋板和小凸台冷却速率较大,小凸台棱角处的冷却速率为 0.793 K/s 。将冷却速率与晶粒尺寸、冷却速率与第二相体积分数之间的定量关系同宏观模拟的温度场结果相关联,可以获得典型构件的晶粒尺寸和第二相体积分数的分布状况,如图 7, 8 所示。

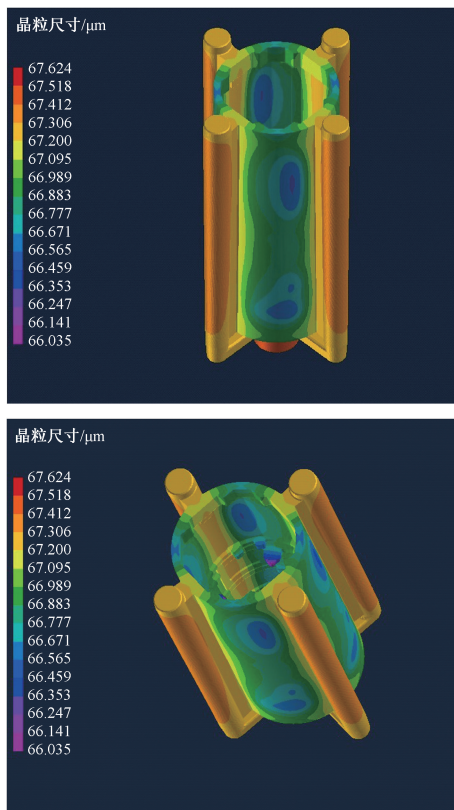


图 7 晶粒尺寸分布

Fig. 7 Distributions of grain sizes

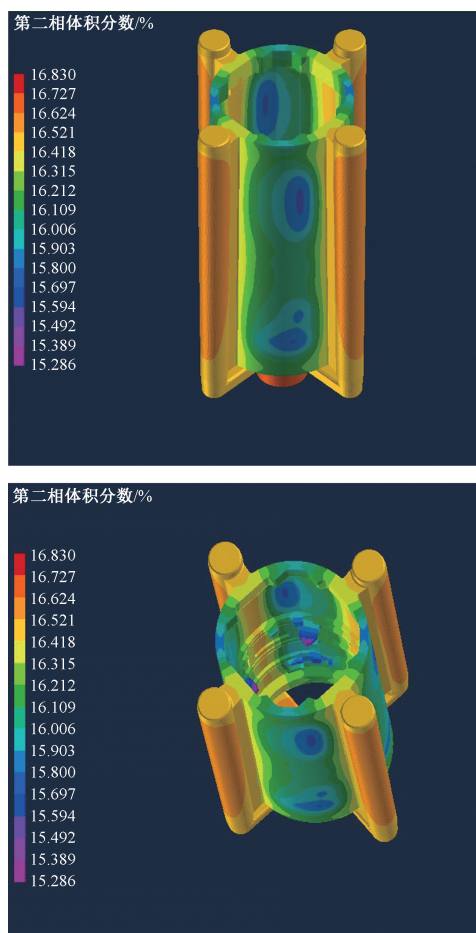


图 8 第二相体积分数分布

Fig. 8 Distributions of volume fractions of secondary phase

铸件整体的晶粒尺寸范围为 $66.035 \sim 67.624 \mu\text{m}$,其中圆筒部分的冷却速率大于浇注系统部分,因此其晶粒尺寸较小。由图 7 可知,圆筒部分的晶粒尺寸小于 $67.412 \mu\text{m}$ 。圆筒主体部分靠近立缝处的晶粒尺寸较大,而在基本呈上下对称的冷却速率较大的区域内,晶粒尺寸低至 $66.671 \mu\text{m}$ 以下。圆筒内壁处的薄壁小凸台厚度较小,与砂型接触的面积大,晶粒尺寸最小可达 $66.035 \mu\text{m}$ 。铸件整体的第二相体积分数分布在 $15.286\% \sim 16.830\%$,浇注系统部分和圆筒部分第二相体积分数相差较小。其中,圆筒部分中靠近浇注系统立缝处的铸件冷却速率较小,其第二相体积分数可达 16.418% 以上,较大于圆筒主体的其他部分的第二相体积分数。圆筒内壁处的小凸台冷却速率分布不均匀,第二相体积分数变化较大,变化范围约在 $15.286\% \sim 16.006\%$ 。

3 结论

本文通过浇铸阶梯形铸件,获得了不同冷却速率条件下 Mg-Gd-Y-Zr 合金样品。通过统计不同冷却速率条件下样品的晶粒尺寸和第二相体积分数,确定了 Mg-Gd-Y-Zr 合金的晶粒尺寸和第二相体积分数与冷却速率的经验性定量关系。在晶粒尺寸的关系式中考虑了冷却速率和 Zr 含量对 Mg-Gd-Y-Zr 合金晶粒尺寸的共同影响。采用 ProCAST® 软件模拟了典型航天构件充型和凝固过程的温度场,计算出不同部位的冷却速率,并基于 Mg-Gd-Y-Zr 合金凝固组织与工艺条件的经验性定量关系,获得了典型航天构件上晶粒尺寸和第二相体积分数的分布,讨论了典型构件凝固组织特征参数的分布特点。

参考文献

- [1] MORDIKE B L, EBERT T. Magnesium: properties-applications-potential[J]. Materials Science and Engineering: A, 2001, 302(1): 37-45.
- [2] HAN G M, HAN Z Q, LUO A, et al. Microstructure characteristics and effect of aging process on the mechanical properties of squeeze-cast AZ91 alloy[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2015, 641: 56-63.
- [3] XU C, XU S, ZHENG M, et al. Microstructures and mechanical properties of high-strength Mg-Gd-Y-Zn-Zr alloy sheets processed by severe hot rolling[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2012, 524: 46-52.
- [4] ZHENG L, LIU C M, WAN Y C, et al. Microstructures and mechanical properties of Mg-10Gd-6Y-2Zn-0.6 Zr (wt.%) alloy[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2011, 509(35): 8832-8839.
- [5] PANG S, WU G H, LIU W C, et al. Effect of cooling rate on the microstructure and mechanical properties of sand-casting Mg-10Gd-3Y-0.5Zr magnesium alloy[J]. Materials Science and Engineering: A, 2013, 562: 152-160.
- [6] WU K Y, WANG X Y, XIAO L, et al. Experimental study on the effect of cooling rate on the secondary phase in as-cast Mg-Gd-Y-Zr alloy[J]. Advanced Engineering Materials, 2018, 20(3): 1700717.
- [7] ZHOU J X, YANG Y S, TONG W H, et al. Effect of cooling rate on the solidified microstructure of Mg-Gd-Y-Zr alloy[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2010, 39(11): 1899-1902.
- [8] 张新明, 陈健美, 邓运来, 等. Mg-Gd-Y-(Mn, Zr)合金的显微组织和力学性能[J]. 中国有色金属学报, 2006, 16(2): 219-227.
- [9] JIANG L K, LIU W C, WU G H, et al. Effect of chemical composition on the microstructure, tensile properties and fatigue behavior of sand-cast Mg-Gd-Y-Zr alloy[J]. Materials Science and Engineering: A, 2014, 612: 293-301.
- [10] 彭卓凯, 张新明, 陈健美, 等. Zr 在 Mg-9Gd-4Y 合金中的晶粒细化机制[J]. 北京科技大学学报, 2006, 28(2): 148-152.
- [11] TRAVYANOV A Y, PETROVSKIY P V, TURICHIN G A, et al. Prediction of solidification behaviour and microstructure of Ni based alloys obtained by casting and direct additive laser growth[J]. Journal of Materials Science and Technology, 2016, 32(8): 746-751.
- [12] 赵杰, 陈荣发, 黄志刚, 等. 数值模拟在镁合金钉枪枪体压铸工艺优化中的应用[J]. 铸造, 2015, 64(8): 758-761.
- [13] 李峰, 郑福生, 王刚, 等. 基于 ProCAST 的叶轮熔模铸造凝固过程数值模拟[J]. 热加工工艺, 2013, 42(7): 55-57.
- [14] SHARIFI P, JAMALI J, SADAYAPPAN K, et al. Grain size distribution and interfacial heat transfer coefficient during solidification of magnesium alloys using high pressure die casting process[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2018, 34(2): 324-334.
- [15] LI J L, CHEN R S, MA Y Q, et al. Characterization and prediction of microporosity defect in sand cast WE54 alloy castings[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2014, 30(10): 991-997.
- [16] 刘颖卓, 肖旅, 邹文兵, 等. GW63K 耐热镁合金的力学性能优化[J]. 热加工工艺, 2015, 44(24): 210-212.

(本文编辑:姚麒伟)