

# 基于微观偏析统一模型及 Thermo-Calc 的 三元合金凝固路径耦合计算 \*

赵光伟 徐达鸣 宋梦华 傅恒志

(哈尔滨工业大学材料科学与工程学院, 先进材料特种凝固加工研究所, 哈尔滨 150001)

杜勇 贺跃辉

(中南大学粉末冶金国家重点实验室, 长沙 410083)

**摘要** 将合金凝固微观偏析统一模型推广到三元合金凝固微观偏析的预测, 并提出了能够计算三元匀晶与共晶合金凝固路径的数值计算方法. 实现了在源代码层次上与热力学计算软件 Thermo-Calc 及其数据库的耦合, 以获取多元合金凝固路径计算所需的凝固热力学数据. 通过 Fe-40V-40Cr, Al-4.5Cu-1.0Si, Al-10Cu-2.5Mg 和 Al-1.49Si-0.64Mg(质量分数, %) 等多元/多相合金在不同冷速下凝固路径的实例计算, 以及与相应的凝固组织定量金相实验结果对比, 验证了本文多元/多相凝固模型和算法的正确性.

**关键词** 多元/多相凝固路径, 微观偏析, Thermo-Calc 耦合计算, 多元铝合金

**中图分类号** TG224

**文献标识码** A

**文章编号** 0412-1961(2009)08-0956-08

## THERMO-CALC LINKED COMPUTATIONS OF SOLIDIFICATION PATHS OF TERNARY ALLOYS USING AN EXTENDED UNIFIED MICROSEGREGATION MODEL

ZHAO Guangwei, XU Daming, SONG Menghua, FU Hengzhi

Institute of Solidification Processing of Materials, School of Materials Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001

DU Yong, HE Yuehui

State Key Laboratory of Powder Metallurgy, Central South University, Changsha 410083

Correspondent: XU Daming, professor, Tel: (0451)86896351, Fax: (0451)86221048,

E-mail: damingxu@hit.edu.cn

Supported by Open Project of State Key Laboratory of Powder Metallurgy of Central South University (No.2008112042)

Manuscript received 2009-01-16, in revised form 2009-05-18

**ABSTRACT** A model for predicting the microsegregation of ternary alloys was developed via extending a previously proposed unified microsegregation model for binary alloys. The present multicomponent/multiphase model retains the advanced features of the previous binary microsegregation model, in which the unified microscale parameter  $\Phi$  takes a general function form to account for more possible influential factors, including the partition coefficient, solid fraction, solid diffusion coefficient, dendrite geometrical morphologies and solidification rate, etc.

The algorithms for calculating the solidification paths of ternary isomorphous and eutectic alloys were proposed, which closely couples with a commercial software package/database of Thermo-Calc via its TQ6-interface in order to directly access to thermodynamic data needed in the multicomponent/multiphase solidification path computations. In the solidification of primary phase and three phases eutectic, solid fraction  $f_s$  was selected to be a control variable when solving the equations of the microsegregation models, while in the solidification of two phases eutectic, temperature was selected to be a control variable as the relationship between the concentrations of solutes  $B$  and  $C$

\* 中南大学粉末冶金国家重点实验室开放课题资助项目 2008112042

收到初稿日期: 2009-01-16, 收到修改稿日期: 2009-05-18

作者简介: 赵光伟, 男, 1981 年生, 博士生

was unknown. In each calculation iterative step, the names and number of the equilibrium phases were obtained from Thermo-Calc, and then saved and compared with the calculation results of the previous step. As the names and number of the equilibrium phases in each solidification stage of ternary eutectic alloys are different, the three solidification types were determined by comparing with the results in the computation process.

The availability and reliability of the proposed multicomponent/multiphase model and algorithms were demonstrated by sample computations for the solidification paths of Fe-40V-40Cr, Al-4.5Cu-1Si, Al-10Cu-2.5Mg and Al-1.49Si-0.64Mg (mass fraction, %) alloys under different solidification/cooling rates, and by comparisons with the experimental results of quantitative measurements of corresponding solidification microstructures.

**KEY WORDS** multicomponent/multiphase solidification path, microsegregation, Thermo-Calc coupled calculation, multicomponent Al alloys

### 符号说明

$\vec{A}_{2N}$	单位几何向量
$f_s$	固相体积分数
$f_L$	液相体积分数
$C_{0i}$	组元 $i$ 的初始浓度
$C_{Li}^{TE}$	组元 $i$ 在三相共晶点的平衡浓度
$\vec{\xi}$	归一化几何权重向量
$C_{Li}^\alpha$	$\alpha$ 相凝固析出阶段组元 $i$ 在液相中的浓度
$C_{Li}^{2E}$	$\alpha + \beta$ 相共晶凝固析出阶段组元 $i$ 在液相中的浓度
$C_{Li}^{3E}$	$\alpha + \beta + \gamma$ 相共晶凝固析出阶段组元 $i$ 在液相中的浓度
$k_i^\alpha$	组元 $i$ 在 $\alpha$ 相中的分配系数
$k_i^\beta$	组元 $i$ 在 $\beta$ 相中的分配系数
$k_i^{2E}$	组元 $i$ 在 $\alpha + \beta$ 共晶相中的分配系数
$D_i^\alpha$	组元 $i$ 在 $\alpha$ 相中的扩散系数
$D_i^\beta$	组元 $i$ 在 $\beta$ 相中的扩散系数
$D_i^{2E}$	组元 $i$ 在 $\alpha + \beta$ 共晶相中的扩散系数
$R_f^\alpha$	$\alpha$ 相的凝固速率
$R_f^{2E}$	$\alpha + \beta$ 共晶相的凝固速率
$\beta_\alpha$	$\alpha$ 相的凝固收缩率
$\beta_{2E}$	$\alpha + \beta$ 共晶相的凝固收缩率
$f_s^\alpha$	$\alpha$ 相的体积分数
$f_s^{2E}$	$\alpha + \beta$ 共晶相的体积分数
$f_\alpha^{2E}$	$\alpha$ 相在 $\alpha + \beta$ 共晶相中所占的体积分数
$f_\beta^{2E}$	$\beta$ 相在 $\alpha + \beta$ 共晶相中所占的体积分数
$\Phi_i^\alpha$	组元 $i$ 在 $\alpha$ 相中的综合微观固相反扩散 (SBD) 参数
$\Phi_i^{2E}$	组元 $i$ 在 $\alpha + \beta$ 共晶相中的综合微观固相反扩散参数
$\varphi_i^\alpha$	枝晶几何形貌修正的 $\alpha$ 相中组元 $i$ 扩散 Fourier 数
$\varphi_i^{2E}$	枝晶几何形貌修正的 $\alpha + \beta$ 共晶相中组元 $i$ 扩散 Fourier 数
$g_\alpha^{2E*}$	$\alpha$ 相在 $\alpha + \beta$ 共晶相凝固前沿的质量分数

$g_\beta^{2E*}$	$\beta$ 相在 $\alpha + \beta$ 共晶相凝固前沿的质量分数
$\theta_i^\alpha$	枝晶间液相成分对组元 $i$ 在 $\alpha$ 相中 SBD 效应的敏感性
$\theta_i^{2E}$	枝晶间液相成分对组元 $i$ 在 $\alpha + \beta$ 共晶相中 SBD 效应的敏感性
$T$	热力学温度

对合金凝固过程中的微观偏析模型化, 进而利用数值计算手段定量预测凝固路径, 对于合金凝固行为的研究及控制, 开发铸造新合金及制定合理的凝固加工工艺具有重要的理论和工程意义. 由于工程应用中的合金多为多元/多相合金, 实现对多元合金凝固路径的数值计算是十分必要的.

多元合金凝固计算始于上世纪 70 年代, Fujii 等<sup>[1]</sup>基于局部溶质再分布方程与 Scheil 和 Lever-rule 凝固模型, 研究了低合金钢的宏观偏析. 而多元合金微观偏析及凝固路径的计算始于 1970 年, Mehrabian 和 Flemings<sup>[2]</sup>基于 Scheil 模型预测了 Ni-Al-Cu 三元合金凝固路径. 由于初期的偏析模型缺乏多元合金的凝固热力学数据, 因此往往采用二元合金系的数据来近似处理<sup>[2,3]</sup>. 随着对微观偏析模型的研究越来越深入, 出现了许多考虑枝晶形貌、枝晶粗化及固相反扩散等因素的模型<sup>[4-8]</sup>. 同时, 材料相变热力学计算技术的出现及实用化解决了多元合金凝固体系热力学数据缺乏的问题, 因此越来越多的偏析模型采用了凝固热力学耦合计算技术<sup>[5-11]</sup>. 总之, 先进的微观偏析模型及准确的热力学数据是一个先进可靠的多元/多相合金体系凝固路径算法所必需的.

Xu 等<sup>[12-14]</sup>导出了一种考虑任意固相反扩散及任意枝晶形貌的微观偏析统一模型. 本文基于文献<sup>[12]</sup>的建模思想, 建立了描述三元匀晶/共晶合金多相凝固的微观偏析模型, 并在此基础上构建了耦合热力学计算软件 Thermo-Calc 及其数据库的多元/多相合金凝固路径的算法. 通过实例计算, 并与相应的实验结果进行比较对该模型进行了检验.

## 1 多元/多相凝固模型

合金凝固中的微观偏析行为与凝固机制密切相关. 多

元合金凝固过程通常会经历多个不同类型的凝固阶段, 因此必须针对各凝固阶段建立相应的微观偏析模型. 三元共晶型合金通常会经历 3 个不同的凝固阶段: 单相凝固、两相共晶凝固与三相共晶凝固, 如图 1 所示. 因此一个完整的三元共晶型合金的凝固微观偏析模型需要对这 3 个阶段的凝固反应均能给以正确合理的描述, 并可自然涵盖“共-共-共”, “匀-共-共”, “匀-匀-共”和“匀-匀-匀”等三元共晶型合金的凝固体系<sup>[15]</sup>.

1.1 多元单相凝固的微观偏析模型

多元单相凝固的溶质再分布的机制与二元合金的单相凝固类似. 当忽略 A-B-C 三元合金系各组元间扩散系数的交互作用时, 对溶质组元  $i(i=B$  或  $C)$  可分别应用以下文献 [12—14] 中的微观偏析计算式:

$$C_{Li}^{\alpha} = C_{0i} [1 - (1 - \Phi_i^{\alpha} k_i^{\alpha}) f_s]^{\frac{k_i^{\alpha} - 1}{1 - \Phi_i^{\alpha} k_i^{\alpha}}} \quad (1)$$

$$\Phi_i^{\alpha} = \theta_i^{\alpha} \varphi_i^{\alpha} / (1 + \theta_i^{\alpha} \varphi_i^{\alpha}) \quad (2)$$

$$\varphi_i^{\alpha} = (D_i^{\alpha} / R_f^{\alpha}) \vec{\xi} \cdot \vec{A}_{2N} \quad (3)$$

$$\theta_i^{\alpha} = (1 + \beta_{\alpha}) k_i^{\alpha} f_s / f_L^2 \quad (4)$$

1.2 两相共晶凝固的微观偏析模型

两相共晶凝固时, 在固/液界面处, 从液相中同时析出如图 1 所示的  $(\alpha + \beta)$  两相共晶结晶层. 本文对该阶段的凝固作了如下假设: (a) 两相共晶凝固依附在初生相上进行, 即假设共晶组织作为一个整体附着在初生相上继续生长; (b) 忽略初生相与两相共晶组织间由于固相反扩散而

引起的界面迁移, 即后续共晶凝固时初生相的体积分数不变; (c) 呈层片状或丝状两相共晶显微组织的取向与生长方向一致, 即与凝固界面垂直 (如图 1 所示); (d) 忽略共晶组织两相间的横向扩散, 只考虑  $\alpha, \beta$  两相共晶组织各自内部沿生长方向的固相反扩散, 多元/多相凝固体系内共晶组织的丝/片间距  $\lambda_{\alpha/\beta}$  通常远远小于其初生相组织的枝晶间距  $d_2$ . 基于以上假设, 可将共晶组织等效为一种固相介质, 从而可近似得到如下等效共晶固相生长的微观偏析计算式 ( $i=B$  或  $C$ ):

$$C_{Li}^{2E} = C_{0i} [1 - (1 - \Phi_i^{2E} k_i^{2E}) f_s]^{\frac{k_i^{2E} - 1}{1 - \Phi_i^{2E} k_i^{2E}}} \quad (5)$$

$$\Phi_i^{2E} = \theta_i^{2E} \varphi_i^{2E} / (1 + \theta_i^{2E} \varphi_i^{2E}) \quad (6)$$

$$\varphi_i^{2E} = (D_i^{2E} / R_f^{2E}) \vec{\xi} \cdot \vec{A}_{2N} \quad (7)$$

$$\theta_i^{2E} = (1 + \beta^{2E}) k_i^{2E} f_s / f_L^2 \quad (8)$$

$$k_i^{2E} = g_{\alpha}^{2E*} k_i^{\alpha} + g_{\beta}^{2E*} k_i^{\beta} \quad (9)$$

$$D_i^{2E} = \frac{f_s}{\frac{f_s^{\alpha}}{D_i^{\alpha}} + \frac{f_s^{2E} (g_{\alpha}^{2E} k_i^{\alpha} + g_{\beta}^{2E} k_i^{\beta})}{f_{\alpha}^{2E} k_i^{\alpha} D_i^{\alpha} + f_{\beta}^{2E} k_i^{\beta} D_i^{\beta}}} \quad (10)$$

1.3 三相共晶凝固的微观偏析模型

由于假定凝固界面热力学局部平衡 (通常金属铸造凝固条件下是满足的), 根据相律, 三元合金在三相共晶凝固时其固/液界面处的自由度为 0, 则在固/液界面处各相的成分将保持三元共晶点的平衡成分不变, 即

$$C_{Li}^{3E} \equiv C_{Li}^{TE} \quad (i = B, C) \quad (11)$$

2 数值计算方法

基于局部凝固界面热力学平衡的假设, 三元共-共-共型合金体系存在着 7 种可能的凝固路径组合: (1) 单一的单相凝固; (2) 单一的两相共晶凝固; (3) 单一的三相共晶凝固; (4) 单相凝固 → 两相共晶凝固; (5) 单相凝固 → 三相共晶凝固; (6) 两相共晶凝固 → 三相共晶凝固; (7) 单相凝固 → 两相共晶凝固 → 三相共晶凝固. 因而三元共晶合金凝固路径的正确算法应该解决好凝固的起始点, 各凝固阶段内的凝固起止点、凝固方向以及各凝固反应间的转变等问题.

2.1 凝固起始点的计算

凝固路径的计算首先要找到凝固的起始点以选择正

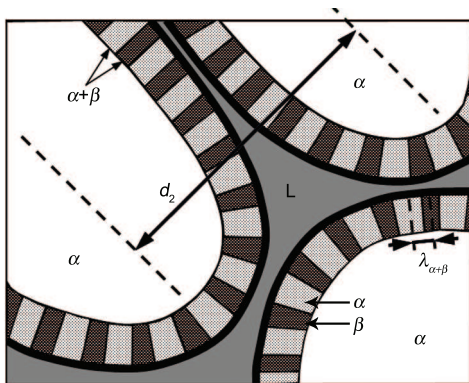


图 1 三元共晶型合金  $\alpha$  枝晶 + 两相共晶  $(\alpha + \beta)$  凝固示意图 (枝晶间液相 (L) 的一部分有可能最后会形成三相共晶  $(\alpha + \beta + \gamma)$ )  
 Fig.1 Schematic growth of  $\alpha$ -dendrites and binary eutectic  $(\alpha + \beta)$  in a ternary solidification system (ternary eutectic  $(\alpha + \beta + \gamma)$  may form from a part of the interdendritic liquid phase (L) in a later solidification stage)

确的凝固反应开始计算。假设界面处平衡，初始成分对应的液相的临界凝固点即为凝固起始点。利用 Thermo-Calc 求解液相温度的方法可计算出凝固起始点的温度、固相种类及其成分。此外，三元共晶合金凝固过程中平衡相的数目与凝固反应类型是一一对应的，因此可以根据平衡相的数目来确定相应的凝固反应。

### 2.2 单相凝固的计算

三元体系中单相凝固时，固/液界面的自由度为 2，反映在相图上，凝固可以在某一单相区的液相面上进行，因此，不同的凝固条件下，凝固方向及由此导致的凝固路径是不同的。具体的凝固方向是通过求解微观偏析方程组来确定的，根据此时微观偏析方程组的特点，本文以固相体积分数  $f_s$  作为控制变量，对于一定的  $f_s$  采用“不动点迭代法”<sup>[16]</sup> 来进行数值求解。在每一步的迭代运算中，先利用 Thermo-Calc 进行平衡计算来获得与成分对应的温度、平衡凝固相及其组成成分等，然后计算平衡分配系数、扩散系数等。在计算中，每次迭代前均对固相分数  $f_s$  和计算得到的平衡相进行判断： $f_s \geq 1$  则表明凝固结束，终止计算； $f_s < 1$ ，且平衡相与原凝固反应的平衡相不同，则表明将要进入新的凝固反应阶段，需要求解新的反应类型

及对应的新的凝固起始点。本文通过在两相共晶沟两侧对  $f_s$  变量进行二分法相平衡计算来获得判据。

### 2.3 两相共晶凝固的计算

两相共晶凝固时，固/液界面的自由度降为 1，反映在三元相图上，凝固将沿着两相共晶沟的空间曲线进行，即  $B, C$  两组元的成分满足一定的函数约束关系。由于两组元成分间的约束关系是未知的，故在两相共晶凝固时，以液相温度作为控制变量。在给定温度下，利用 Thermo-Calc 可首先算得出液相成分、两相共晶凝固相的种类及其组成。在计算过程中，当  $f_s < 1$ ，且平衡相为三个固相时，说明两相共晶凝固结束，并将进入三相共晶凝固。此时，由于三相共晶凝固时的 4 个平衡相已经确定，可获得三元共晶点处的液相成分、温度及固相成分。

### 2.4 三相共晶凝固的计算

进入三相共晶凝固，此时达到局部平衡，固/液界面的自由度进一步降为 0，结晶温度、液、固相成分均保持不变，直到凝固结束。因此，仍然以固相分数为控制变量，按步长  $\Delta f_s$  依次计算，其它各参数在凝固过程中不改变。综上所述，本文三元共晶合金凝固路径总体算法流程图如图 2 所示。

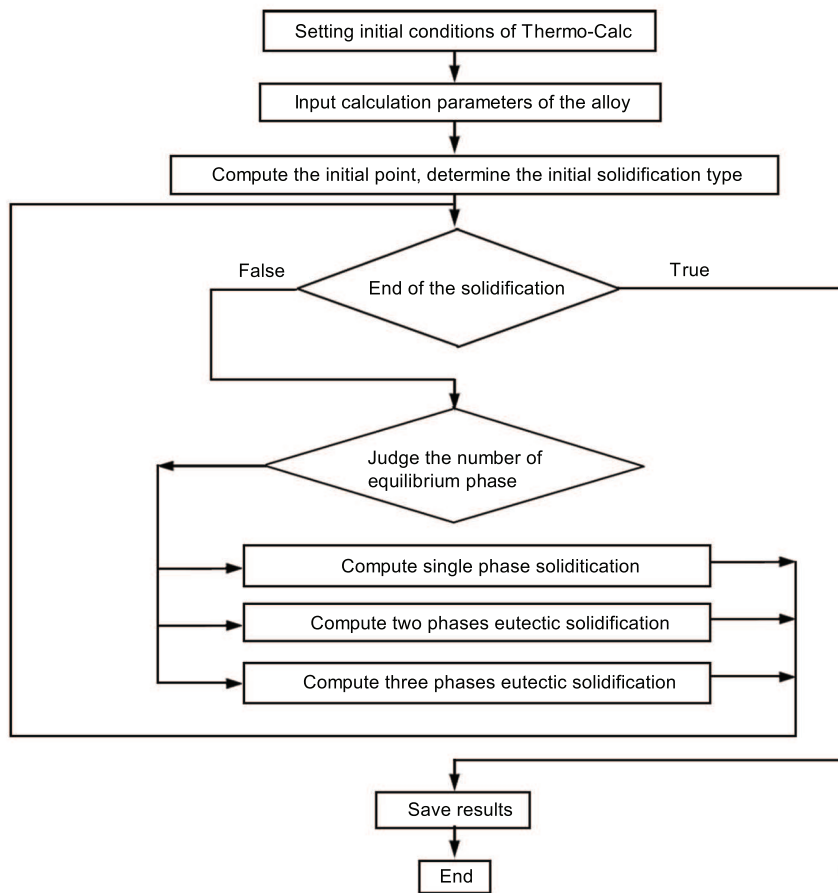


图 2 三元共晶合金凝固路径计算流程

Fig.2 Flow chart of solidification path calculation for a ternary eutectic system

### 3 计算实例及实验

#### 3.1 计算实例

上述三元共晶型凝固体系的多相微观偏析模型及凝固路径算法, 适用于不含包晶反应的所有种类的三元合金凝固体系. 本文选取“匀-匀-匀”(Fe-40V-40Cr(质量分数, %, 下同))和“共-共-共”(Al-4.5Cu-1.0Si和Al-10Cu-2.5Mg)这两种三元凝固体系进行计算, 计算所用的参数见表 1. 图 3 为 Fe-40V-40Cr 合金对应不同固相反扩散 (SBD) 参数  $\Phi$  时的凝固路径计算结果. 可以看出, 随着  $\Phi$  的减小, 合金的凝固路径经历的“路程”明显延长, 即  $\Phi$  值越小时, 最后凝固部分的成分偏离合金初始成分越大. 图 4 和 5 所示分别为 Al-4.5Cu-1.0Si 和 Al-10Cu-2.5Mg 合金的计算结果. 由于所选成分靠近各自系统中  $\alpha$  相的最大固溶线, 因此对凝固速率很敏感. 由图 4 可知, 快速凝固条件下, Al-4.5Cu-1.0Si 经历了单相凝固、两相共晶凝固、三相共晶凝固 3 个阶段, 其中两相共晶组织含量非常少, 几乎可以忽略, 且经历的是偏向  $\text{Al}_2\text{Cu}$  相一侧的两相共晶沟; 而当凝固速度较低时, 只经历了单相凝固, 且其凝固路径的趋势是进入偏向 Si 相一侧的共晶沟. 由图 5 可知, 快速凝固条件下, Al-10Cu-2.5Mg 同样经历了 3 个凝固反应, 而低速凝固时, 凝固在两相共晶凝固区就结束了. 计算结果表明, 低速凝固时初生相的含量要大于快速凝固时, 而快速凝固可能经历低速凝固时不会发生的凝固过程.

#### 3.2 实验验证

3.2.1 实验方法及结果 合金凝固过程中的微观偏析受多种因素的影响, 除合金本身的物性参数以外, 冷却

表 1 计算所用的参数

Table 1 Parameters used in calculation

Parameter	Value
Solidification shrinkage of Al <sup>[17]</sup>	0.043
$D_{\text{Cu}}^\alpha$ in Al-4.5Cu-1.0Si, $\text{mm}^2\text{s}^{-1}$ [18]	$48\exp(-16069/T)$
$D_{\text{Si}}^\alpha$ in Al-4.5Cu-1.0Si, $\text{mm}^2\text{s}^{-1}$ [18]	$202\exp(-16069/T)$
$D_{\text{Cu}}^\alpha$ in Al-10Cu-2.5Mg and Al-1.49Si-0.64Mg, $\text{mm}^2\text{s}^{-1}$ [19]	$29\exp(-15600/T)$
$D_{\text{Mg}}^\alpha$ in Al-10Cu-2.5Mg and Al-1.49Si-0.64Mg, $\text{mm}^2\text{s}^{-1}$ [19]	$37\exp(-14900/T)$
Density of $\alpha$ phase, $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ [19]	2.7
Density of $\text{Al}_2\text{Cu}$ , $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ [20]	4.34
Density of $\text{Mg}_2\text{Si}$ , $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ [19]	2.00
Density of Si, $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ [19]	2.33

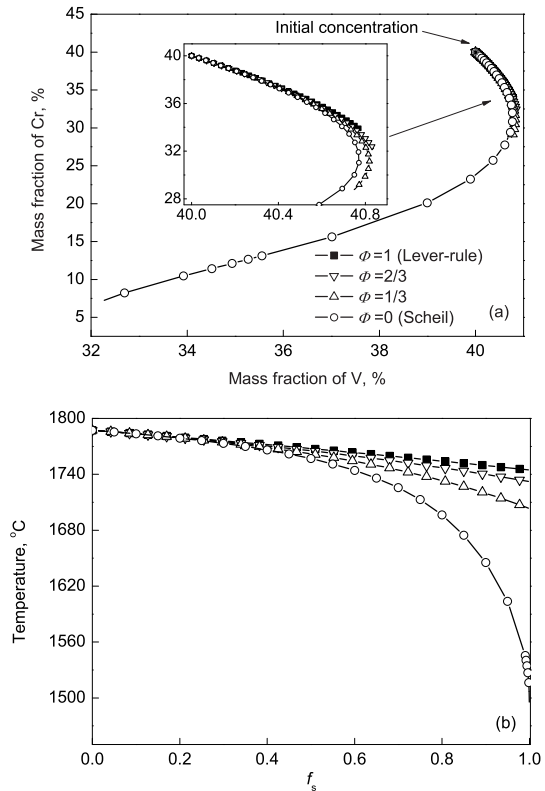


图 3 Fe-40V-40Cr 的液相成分及固相体积分数随温度的变化曲线

Fig.3 Liquid component (a) and solid fraction  $f_s$  vs temperature (b) of Fe-40V-40Cr alloy with different  $\Phi$

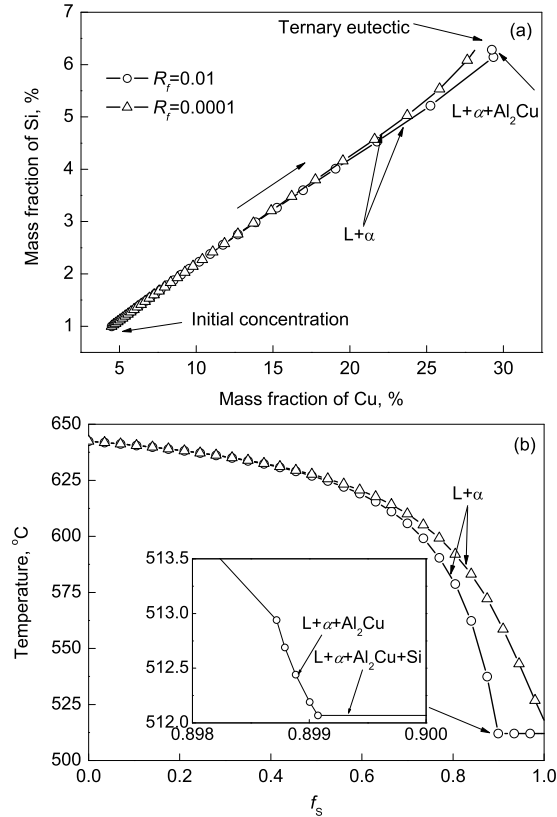


图 4 Al-4.5Cu-1.0Si 的液相成分及固相体积分数随温度的变化曲线

Fig.4 Liquid component (a) and solid fraction vs temperature (b) of Al-4.5Cu-1.0Si alloy with different  $R_f$

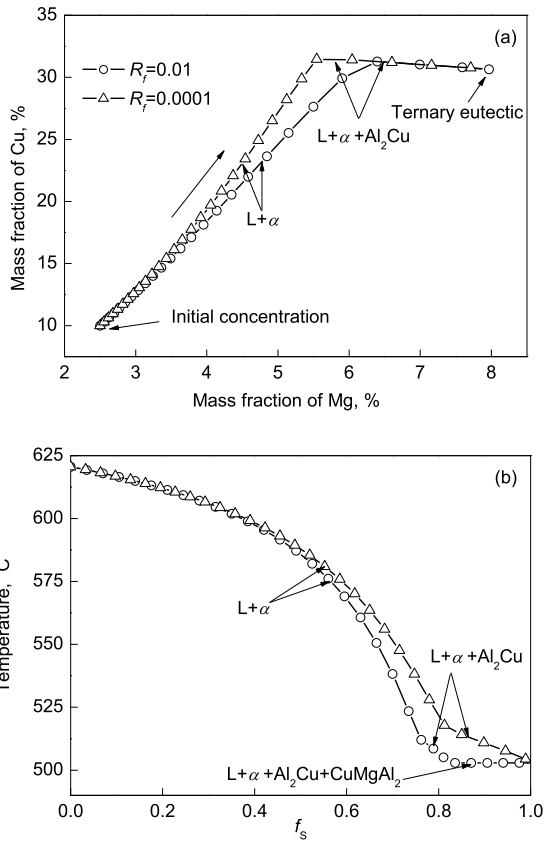


图 5 Al-10Cu-2.5Mg 的液相成分及固相体积分数随温度的变化曲线  
 Fig.5 Liquid component (a) and solid fraction vs temperature (b) of Al-10Cu-2.5Mg alloy with different  $R_f$

速度对凝固过程中的固相反扩散能力有重要影响, 因此会影响微观偏析, 进而对凝固路径产生影响。

本文以 Al-1.49Si-0.64Mg 三元合金为研究对象, 为了获取不同冷却速率, 本文选取了 3 种导热能力不同的材质制作铸型, 分别为石墨型、水玻璃砂型及硅酸铝纤维毡保温型 (铸件型腔表面涂刷 ZnO 涂料)<sup>[15]</sup>。经实验测定可知, 本文选择的这 3 种铸型材质所获得的凝固冷却速率之间各相差约一个数量级。铸型外尺寸均为直径 110 mm, 高 92 mm 的圆柱, 型腔为深 60 mm 的倒圆台 (上底直径 35 mm, 下底直径 30 mm)。为测定各材质铸型中合金试样的凝固速度, 使用标定过的 K 型热电偶及八通道高速数据计算机采集系统 (ECON 系列) 测定并采集各凝固试样冷却过程中的温度数据, 测温位置在型腔中央距离铸型顶面 25 mm 处。测得各铸型中合金的冷却曲线如图 6 所示。从图 6 所示的冷却曲线的对比可以看出, 石墨型的冷却能力最强, 砂型的冷却能力次之, 保温型的冷速最慢。分析各冷却曲线可知, 各合金试样的凝固路径都经历了单相凝固  $\rightarrow$  两相共晶凝固  $\rightarrow$  三相共晶凝固阶段。

砂型及保温型凝固试样的电子背散射 (EBSD) 像分别如图 7a 和 b 所示。由于该合金两相共晶组织的量很少, 所以两相共晶组织与三相共晶组织无法分辨开来。图 7a

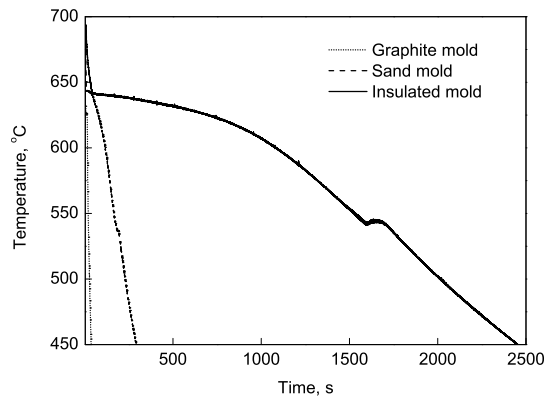


图 6 Al-1.49Si-0.64Mg 合金在 3 种不同铸型中的冷却曲线  
 Fig.6 Cooling curves of the Al-1.49Si-0.64Mg alloy in the three different molds

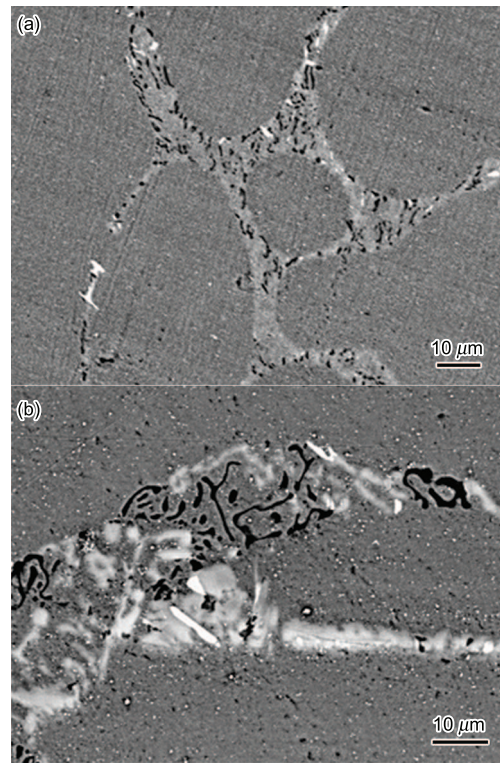


图 7 砂型和保温型铸型中凝固的 Al-1.49Si-0.64Mg 微观组织 EBSD 像  
 Fig.7 EBSD images of Al-1.49Si-0.64Mg alloy solidified in sand mold (a) and insulated mold (b)

中的基体组织为初生相  $\alpha$ , 灰色与黑点状相间区域为  $\alpha + Mg_2Si + Si$  三相共晶组织。在图 7b 中, 基体组织为初生相  $\alpha$ , 黑色区域为  $Mg_2Si$  相 (包含两相共晶及三相共晶中的  $Mg_2Si$  相), 而比基体组织稍亮的相为 Si 相。可以看到, 由于冷却速率减慢, 保温型凝固得到的凝固组织明显比砂型粗大,  $Mg_2Si$  由较均匀的细小的丝棒状变为较粗大的棒状及枝晶组织。另外, 在图 7a 与 b 均出现了少量的白色高亮区域, 能谱 (EDS) 分析表明它们是由合金中的 Fe 杂质 (实测值为 0.062%, 质量分数) 而产生的富 Fe

表 2 不同材质铸型中 Al-1.49Si-0.64Mg 合金的凝固实验结果  
Table 2 Measured results from Al-1.49Si-0.64Mg alloy solidified in different molds

Mold	Solidification	Solidification	Secondary dendrite arm spacing, $\mu\text{m}$	Solidification path
	time, s	rate, $\text{s}^{-1}$		
Graphite mold	10.969	0.0912	35.273	$L+\alpha \rightarrow L+\alpha+\text{Mg}_2\text{Si} \rightarrow L+\alpha+\text{Mg}_2\text{Si}+\text{Si}$
Sand mold	183.633	0.00545	90.352	$L+\alpha \rightarrow L+\alpha+\text{Mg}_2\text{Si} \rightarrow L+\alpha+\text{Mg}_2\text{Si}+\text{Si}$
Insulated mold	1644.380	0.000608	224.090	$L+\alpha \rightarrow L+\alpha+\text{Mg}_2\text{Si} \rightarrow L+\alpha+\text{Mg}_2\text{Si}+\text{Si}$

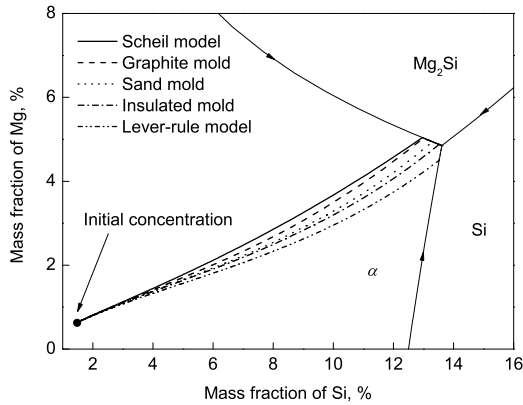


图 8 计算得到的不同凝固冷却速率条件下 Al-1.49Si-0.64Mg 合金的凝固路径

Fig.8 Calculated solidification paths of the Al-1.49Si-0.64Mg alloys under different cooling rates

相. 由冷却曲线结合试样的凝固组织分析可确定各合金试样的凝固路径, 以及凝固时间、平均冷却速率、二次枝晶间距等参数, 结果列于表 2 中.

3.2.2 计算结果与分析 利用本文所编制的三元共晶合金凝固路径计算程序, 对 Al-1.49Si-0.64Mg 合金在不同材质铸型中的凝固过程进行计算. 计算所需的凝固速率、二次枝晶间距、合金成分等参数均为实测值 (见表 2), 其余参数见表 1, 计算得到的合金的凝固路径如图 8 所示. 可见, 由于选取的实验合金成分远离三相共晶点且接近 Si, Mg 在 Al 中的最大固溶线, 因此在不同的冷却速率下的凝固路径差别较大, 在“Lever-rule”条件下甚至会进入该三元合金系另一条共晶沟:  $L+\alpha \rightarrow L+\alpha+\text{Si} \rightarrow L+\alpha+\text{Mg}_2\text{Si}+\text{Si}$ .

图 9 给出了不同冷却速率下 Al-1.49Si-0.64Mg 合金的初生  $\alpha$  相和共晶相的体积分数的计算结果和实验测量结果 (测量采用 Image-Pro Plus 金相定量分析软件进行, 由于本文所选合金系生成的凝固组织中两相共晶的含量非常少, 因此本文将两相共晶与三相共晶合并统计). 可以看到, 实验测得的共晶相含量随凝固速率的加快而增加, 保温型、砂型及石墨型中凝固试样的共晶相含量 (体积分) 分别为 3.03%, 4.26% 和 8.73%. 计算结果与实验测量结果接近, 但总体看来共晶相含量略低于实验结果, 这是因为合金试样中含有少量的杂质元素 Fe, 从而出现了

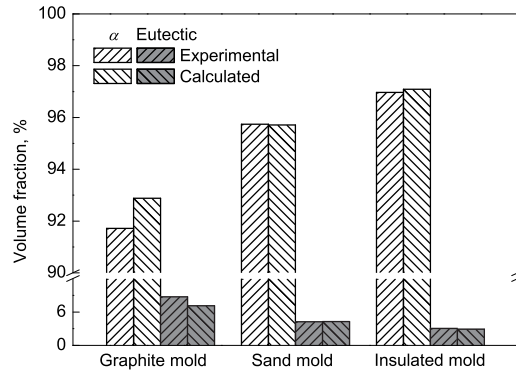


图 9 不同冷却速率条件下 Al-1.49Si-0.64Mg 合金初生  $\alpha$  相和共晶相的体积分数的计算值与实验值比较

Fig.9 Comparison of the volume fractions of  $\alpha$ -primary and eutectic phases between the calculated and measured results on the Al-1.49Si-0.64Mg samples solidified under different cooling rates

少量的富 Fe 相, 该相总与三相共晶共存, 从而使得实验统计结果偏大.

## 4 结论

(1) 将合金凝固微观偏析统一模型推广应用到三元合金凝固微观偏析的预测, 在源代码层次上实现了与热力学计算软件 Thermo-Calc 及数据库密切耦合, 建立并编制了能够计算三元匀晶与共晶类合金凝固路径的数值计算方法及 FORTRAN 计算程序. 对不同固相反扩散参数及凝固速率等条件下 Fe-V-Cr, Al-Cu-Si, Al-Cu-Mg 及 Al-Si-Mg 等系的三元合金凝固路径的实例计算表明, 本文建立的模型及 Thermo-Calc 耦合算法是成功、有效的.

(2) 对在不同冷却能力铸型中凝固的 Al-1.49Si-0.64Mg 合金试样进行了凝固冷却曲线的测定及微观凝固组织的定量分析, 应用本文模型和程序进行的相应凝固路径及组织含量的计算结果与实验定量分析数据吻合较好, 进一步验证了本文模型及算法的正确性.

(3) 本文进行的多元/多相合金凝固路径的实例计算还表明, 对于同一合金成分的合金 (特别是当成分远离三相共晶点时), 当凝固冷却速率不同时其凝固路径的改变不但会引起非平衡凝固二次析出含量的变化, 还可能会导致析出二次相的种类变化.

## 参考文献

- [1] Fujii T, Poirier D R, Flemings M C. *Metall Trans*, 1979; 10B: 331
- [2] Mehrabian R, Flemings M C. *Metall Trans*, 1970; 1: 455
- [3] Cornelissen M C M. *Ironmaking Steelmaking*, 1986; 13(4): 204
- [4] Roósz A, Exner H E. *Acta Metall Mater*, 1990; 38: 375
- [5] Xie F Y, Kraft T, Zuo Y, Moon C H, Chang Y A. *Acta Mater*, 1999; 47: 489
- [6] Kraft T, Rettenmayr M, Exner H E. *Modell Simul Mater Sci Eng*, 1996; 4: 161
- [7] Zhao G W, Xu D M, Fu H Z. *Int J Mater Res*, 2008; 128: 680
- [8] Vušanović I, Šarler B, Krane M J M. *Mater Sci Eng*, 2005; A413-414: 217
- [9] Jie W Q, Zhang R J, Zhi H. *Mater Sci Eng*, 2005; A413-414:497
- [10] Larouche D. *Calphad*, 2007; 31: 490
- [11] Du Q, Jacot A. *Acta Mater*, 2005; 53: 3479
- [12] Xu D M. *Metall Mater Trans*, 2001; 32B: 1129
- [13] Xu D M, Fu H Z, Guo J J, Jia J, Li Q C. *J Harbin Inst Technol*, 2003; 35: 1156
- (徐达鸣, 傅恒志, 郭景杰, 贾 钧, 李庆春. 哈尔滨工业大学学报, 2003; 35: 1156)
- [14] Xu D M, Guo J J, Fu H Z. in Jones H ed., *SP07- Proceedings of the 5th Decennial International Conference on Solidification Processing*, Sheffield: University of Sheffield, 2007: 94
- [15] Song M H, *Master Disertation*, Harbin Institute of technology, Harbin, 2008  
(宋梦华. 哈尔滨工业大学硕士论文, 哈尔滨, 2008)
- [16] Wu B Y, Wang M D, Ding X H, LI D H. *Theory of Numerical Analysis*. Beijing: Science Press, 2003: 11  
(吴勃英, 王德明, 丁效华, 李道华. 数值分析原理. 北京: 科学出版社, 2003: 11)
- [17] Xu D M. *Metall Mater Trans*, 2002; 33B: 451
- [18] Ganesan M, Thuinet L, Dye D, Lee P D. *Metall Mater Trans*, 2007; 38B: 557
- [19] Doré X, Combeau H, Rappaz M. *Acta Mater*, 2000; 48: 3951
- [20] Mondolfo L F. *Aluminum Alloys: Structure and Properties*. London: Butterworths, 1976: 253
- [21] Thermo-Calc Software A B. *ThermoCalc Software User' Guid (Version R)*. Stockholm Technology Park, 2006