

非晶合金药型罩压力铸造过程的数值模拟

赵孝孝, 蒋博宇, 汪明明, 曹立军, 冯宏伟, 龚留奎, 黄伟

(中国兵器科学研究院宁波分院, 浙江宁波 315000)

摘要: 采用ProCAST软件研究了Cu-Zr-Al-Er系非晶合金药型罩压力铸造过程中温度变化及凝固行为。结果表明: 非晶合金在H13钢模中, 在1 096 °C的压力铸造工艺下, 27.5 s内即可完成浇注系统的充型与凝固。不同浇注温度和铸型材料模拟结果表明, 合金在2.5 s内均可冷却到玻璃化转变温度(T_g)以下, 满足Cu基非晶合金的形成条件。通过压力铸造制备出非晶合金药型罩坯料, 在CNC加工后可得到表面质量优良的非晶药型罩样品。XRD和DSC测试表明, 压力铸造的药型罩为非晶态组织。

关键词: 非晶合金; 压力铸造; 数值模拟; 冷却速率; 温度场

非晶态合金是熔体经过快速冷却得到的一种短程有序和长程无序结构的固态材料, 显微组织中不存在晶界、位错和层错等晶体缺陷。临界直径大于1 mm的非晶态合金称为块体非晶合金(Bulk Metallic Glasses)。块体非晶合金中具有强度高、硬度高、耐腐蚀、弹性极限大和超塑性等优异性能^[1-2]。在军工领域, 非晶合金具有远高于晶态材料的断裂强度, 力学性能要优于传统金属, 同时密度比纯铜更大, 具备了应用在破甲药型罩上的可能^[3]。目前, 非晶合金在军工领域主要应用于穿甲弹芯、含能破片以及药型罩等毁伤材料中^[4]。

非晶合金的数值模拟起步于20世纪90年代^[5], 随着Inoue等人对大块非晶合金系的广泛开发^[6], 非晶合金凝固过程的数值模拟工作逐渐增多。在非晶合金研制初期, 相应的数值模拟工作主要通过单辊甩带法、双辊轧制法以及铜模铸造法制备过程中熔体冷却速率的计算来判断其是否满足非晶合金的临界冷却速率^[7-8]。郝秋红等^[9]模拟了Zr基非晶合金铸造过程的充型与凝固, 控制方程选择不可压缩粘性流体和标准k- ϵ 模型, 建立了三维有限元模型。以准确模拟压力铸造中非晶合金凝固过程的温度场作为重点, 邱克强等^[10]建立了液固相模具的界面换热关系式, 对非晶合金凝固时的温度场进行数据采集, 发现界面换热系数与温度呈正相关。Yang等^[11]对水平连铸工艺(HCC)进行模拟, 得到非晶合金在连铸工艺下的临界厚度。王飞龙^[12-13]研究了铸型材料对非晶合金微观结构的影响, 模拟发现凝固过程中有微量晶化存在。金渊哲^[14]对锆基非晶合金压铸过程进行了数值模拟, 发现可通过增大高速压射速度与降低初始温度提升冷却率。Duggan^[15]等研究证明了精确的建模利于降低非晶合金铸造的实验成本与工作量。Qiu等人通过Vit1合金建立了与熔化和凝固过程相关的热力学平衡模型, 以推导出液体到玻璃固体相变过程中的固化玻璃化转变温度范围^[16]。

压力铸造是近年来非晶合金制备的一种新型手段, 本文采用ProCAST仿真软件, 对不同铸造温度和铸型材料条件下的Cu基非晶合金药型罩压力铸造过程温度场变化和凝固行为进行模拟仿真。采用H13钢铸造模具制备非晶合金药型罩, 药型罩开口直径为86 mm, 壁厚为3 mm。

作者简介:

赵孝孝(2000-), 女, 硕士研究生, 研究方向为战斗部材料数值模拟。E-mail: xiaoxzhao2000@163.com
通信作者:
蒋博宇, 男, 博士, 副研究员。
E-mail: jiangbydut@126.com

中图分类号: TG249.2⁺8
文献标识码: A
文章编号: 1001-4977(2025)02-0218-09

基金项目:
国防重点实验室基金(WDZC-2021-6)。
收稿日期:
2024-10-11 收到初稿,
2024-11-03 收到修订稿。

1 试验与方法

1.1 模型建立及网格划分

非晶合金药型罩压力铸造系统由浇道、主体以及排气系统等构成。非晶合金熔体充型时间与传统合金相比较慢，故采用压力铸造方式促进充型。非晶合金在凝固时不发生结晶行为，可忽略凝固潜热。如图1所

示为非晶合金压力铸造过程中铸型的网格划分情况，采用建模软件对铸型建模，ProCAST中的Visual Mesh模块对三维模型进行网格划分。本文所用的压力铸造过程三维体网格数为1 199 460个。将三维网格文件导入Visual Cast模块中，进行铸造过程模拟。模具材料分别选取H13钢、紫铜和石墨三种常用铸造模具。

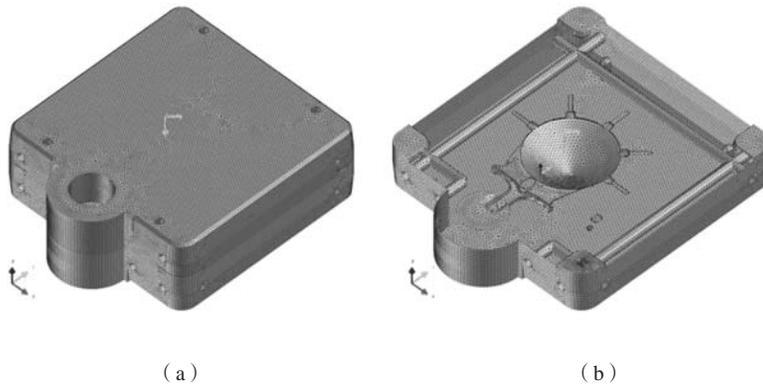


图1 非晶合金药型罩压力铸造网格划分

Fig. 1 Mesh division for pressure casting of the amorphous alloy shaped charge liner

1.2 非晶合金凝固过程的假设

- (1) 非晶合金假设为不可压缩的流体；
- (2) 非晶合金凝固时无结晶现象，没有凝固潜热；
- (3) 非晶合金凝固过程收缩率很小，凝固过程中铸坯的尺寸变化可忽略^[17]。

基于以上假设，非晶合金板压力铸造凝固传热的三维非稳态导热微分方程可表示为：

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) - \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \rho C_p(T) \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1)$$

式中： x, y, z 为直角坐标系的坐标； ρ 为密度； T 为温度； t 为时间； $K(T)$ 为热导率； $\rho C_p \frac{\partial T}{\partial z}$ 为热量传输；

$C_p(T)$ 为比热容。ProCAST说明书中金属-金属界面换热系数 h 推荐值为1 000~5 000。邱克强等人通过计算得到vit1非晶合金与Cu之间的换系数为1 000~3 000^[10]，本文所用换热系数为 $h=2 000$ 。

1.3 非晶合金热物性参数

由于数据库中目前暂时缺少文中所用的非晶合金的各项热物性参数，因此本文所用各项参数均为试验实测值。图2所示。其中比热容 $C_p(T)$ 测试所用设备为美国TA公司生产的差式扫描量热仪，型号为TA，Q2000；热导率 $K(T)$ 测试所用设备为瑞典Hot Disk公司生产的热导率仪，型号为Hot Disk TPS 2500s；粘度

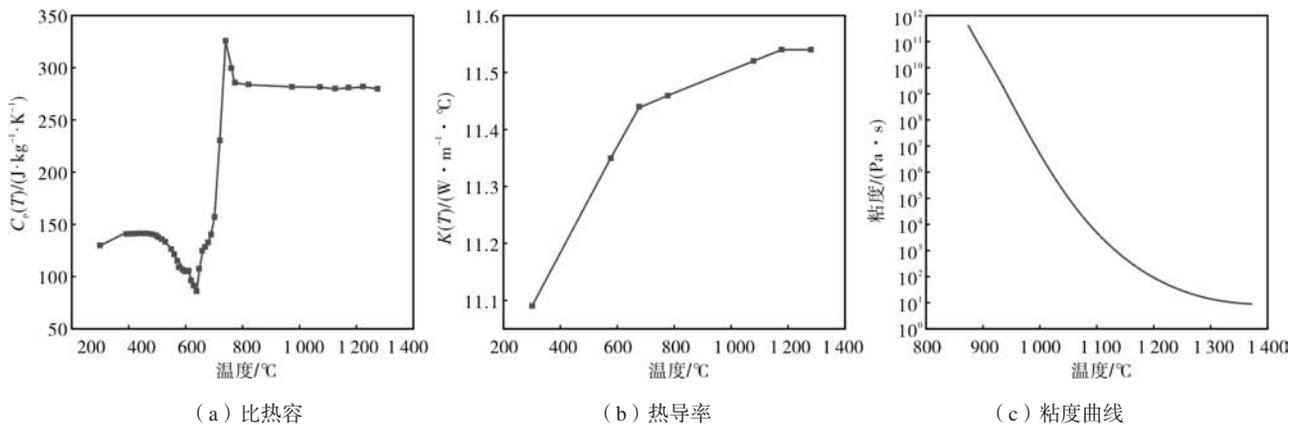
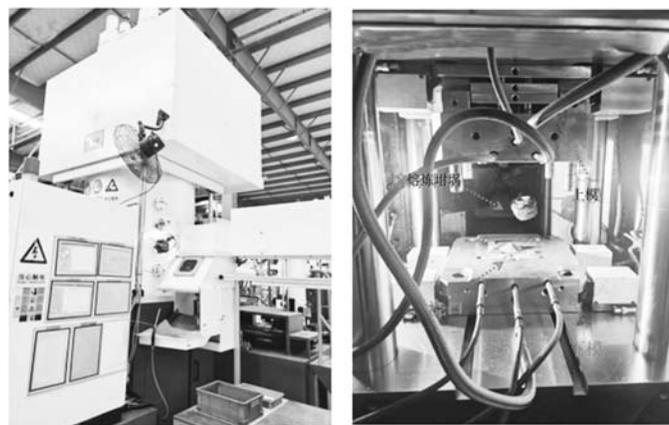
$\lambda(T)$ 测试所用设备为美国Brookfield公司生产的旋转粘度计，型号为brookfield DV-2pro。图2(a)-(c)分别为非晶合金比热容、热导率及粘度随温度的变化曲线，将如图所示参数曲线导入数据库中进行温度场和凝固场模拟。另外采用差热分析仪对非晶合金的液相线温度、固相线温度和玻璃化转变温度进行测试，结果如表1所示。

表1 $(\text{Cu}_{47}\text{Zr}_{45}\text{Al}_8)_{98}\text{Er}_2$ 热物性参数
Tab. 1 Thermal property parameters of the $(\text{Cu}_{47}\text{Zr}_{45}\text{Al}_8)_{98}\text{Er}_2$

项目	$(\text{Cu}_{47}\text{Zr}_{45}\text{Al}_8)_{98}\text{Er}_2$
T_1	1 167 K (894 °C)
T_m	1 101 K (828 °C)
T_g	713 K (440 °C)
ρ	7.19 g/cm ³

1.4 非晶合金压力铸造试验

采用真空感应的方式熔炼压铸母合金，在坩埚底部设置带有滤孔的滤渣盘，通过多次除渣后压力铸造用母合金料球。母合金料球在压铸机的坩埚中熔化之后，通过浇口底部浇入铸型之中，通过施加压力完成充型和凝固。非晶合金的压力铸造采用艾克特公司和常州盘星新材料有限公司联合设计的立式压力铸造机进行高压铸造成形，设备型号为Full Time Vacuum 280T，如图3所示。

图2 $(\text{Cu}_{47}\text{Zr}_{45}\text{Al}_8)_{98}\text{Er}_2$ 非晶合金的相关数据图Fig. 2 Data diagram of the $(\text{Cu}_{47}\text{Zr}_{45}\text{Al}_8)_{98}\text{Er}_2$ amorphous alloy

(a) 压铸设备

(b) 型腔

图3 非晶合金真空压铸设备及型腔实物图

Fig. 3 Real picture of the vacuum die casting equipment and mold cavity of the amorphous alloy

2 结果与讨论

2.1 非晶形成合金压力铸造温度场及凝固场模拟

图4和5所示为药型罩铸坯在H13钢模具中充型时的温度场和凝固体积分数的模拟结果。图4左侧条图为温度变化示意图，图5左侧条图为凝固百分数变化示意图。浇注温度设定为高于液相线温度 T_l 100~200 °C，即994~1 094 °C。图中4 (a) - (d) 分别为熔体在1 094 °C和10 MPa初始压力条件下熔体充型时的流动情况。当充型时间为0.13 s时，熔体由浇口进入内浇道，由于充型时间较短，熔体中并未来得及与铸型产生热交换现象，熔体温度仍保持在浇注温度附近。图5凝固场的模拟结果也表明，在充型阶段并未有凝固现象发生。当充型时间为0.22 s时，熔体快速进入模具腔体内，熔体与模具产生热交换，其温度开始出现略微的降低现象，但仍保持在液相线温度之上，凝固场结果中也并未观察到凝固现象出现。当充型时间进一步增加到0.43 s

时，熔体已充入腔体一半左右，可以观察到，熔体温度开始出现大范围降低现象，其中铸件边缘温度与中心相比降低更加明显，凝固场结果中也可发现，在铸件边缘出现了少量凝固现象。随着充型时间进一步增加到0.48 s时，熔体充满整个型腔，药型罩主体部位温度开始显著下降。边缘气道部位的温度由于其宽度较窄，热交换效率较慢，其温降速率与主体部分相比有所减小，但仍有一部分气道温度下降到固相线温度附近。凝固场模拟结果也表明，在充型时间为0.48 s时，在铸件的边缘产生了凝固现象。

图6和图7分别为熔体凝固时的温度和凝固场变化情况。熔体在完成充型过程后，与铸型产生充分的热交换，熔体温度开始显著降低，当凝固时间为0.66 s时，铸件主体大部分温度保持在液相线温度附近。图6的温度场模拟结果表明，药型罩中间部位的温度下降速率高于边部。当凝固时间为2.10 s时，药型罩主体部

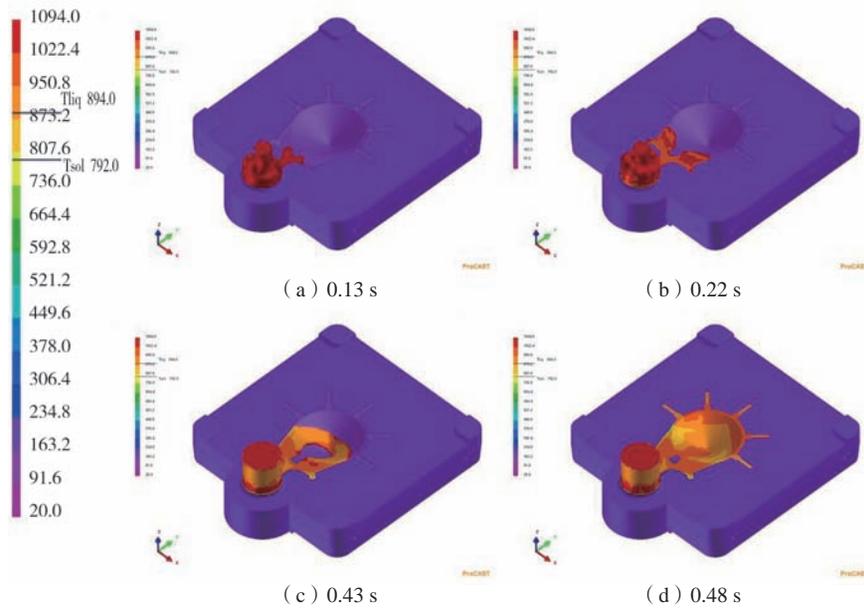


图4 充型过程温度场模拟结果

Fig. 4 Simulation results of the temperature field in the filling process

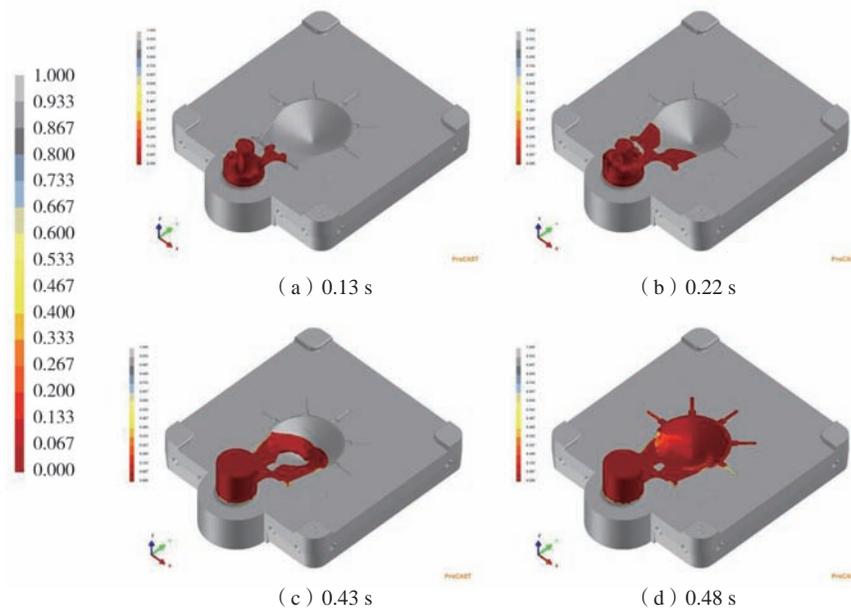


图5 充型过程凝固场模拟结果

Fig. 5 Simulation results of the solidification field in the filling process

位温度已降低到固相线温度以下，铸件边缘处温度下降速度高于中心部位，内浇道处温度也逐渐降低，浇道靠近铸型部位的温度也已降低至固相线温度以下，浇道中间部位仍保持熔融状态。图7凝固场结果也可以观察到，在2.10 s时，药型罩主体部位已经完全凝固，内浇道部分产生了边部凝壳现象。当凝固时间进一步

达到15.5 s和27.5 s时，药型罩的主体温度逐渐冷却至与铸型相同的温度。从凝固场结果可以发现，在15.5 s时，铸件在内浇道的部分的凝固面积达到了浇道横截面的一半以上，当铸件在铸型中冷却至27.5 s时，可以观察到，内浇道部分的熔体也已经完全冷却，因此在1 096 ℃压力铸造工艺下，熔体在极短的0.48 s内即可完

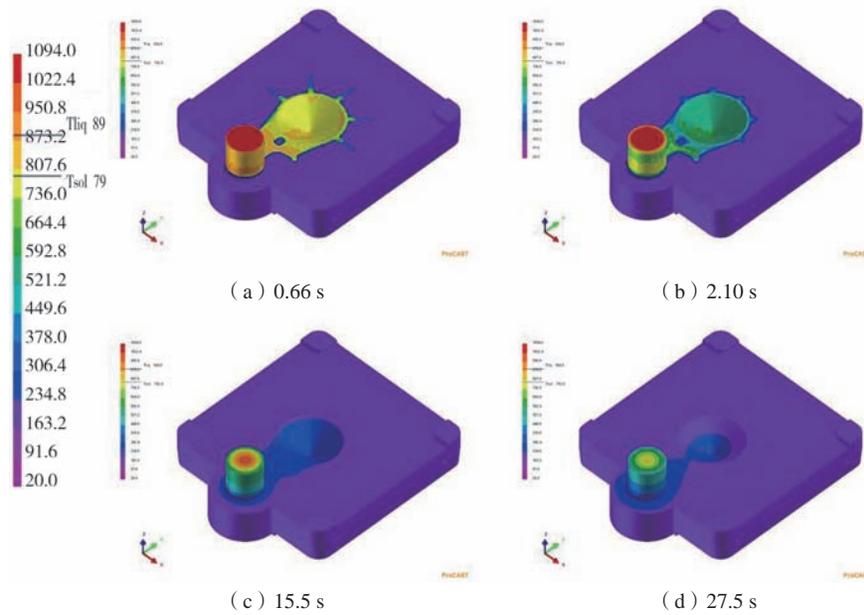


图6 凝固过程温度场模拟结果

Fig. 6 Simulation results of the temperature field during solidification process

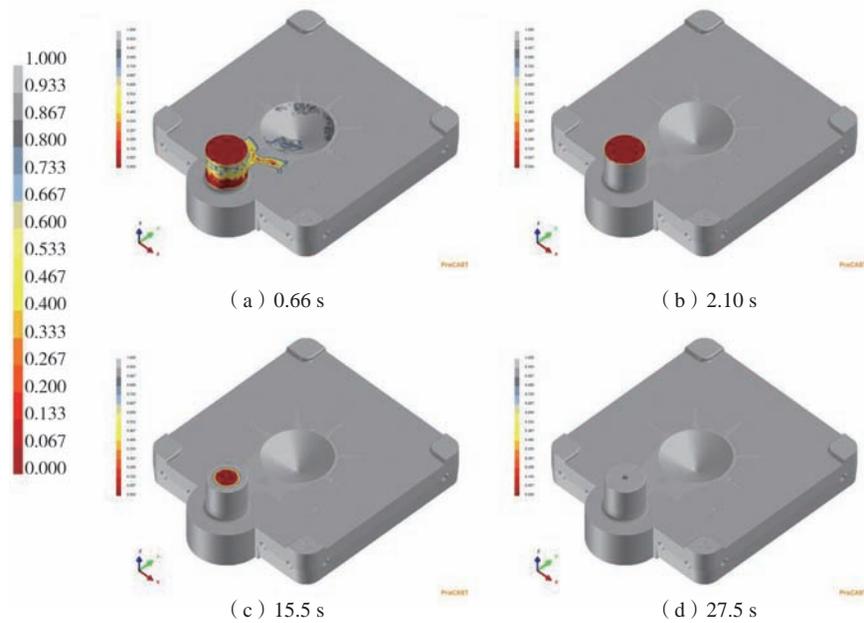


图7 凝固过程凝固场模拟结果

Fig. 7 Simulation results of the solidification field during solidification process

成充型，在27.5 s后完成整个浇注系统的凝固。

为了研究非晶药型罩压力铸造工艺的温度时间曲线，在药型罩铸型上选取3个节点，如图8（a）所示，分析铸件凝固过程的温度变化，分别为药型罩的边部、中间部位和顶部。图8（b）为H13钢模铸造非晶药型罩温降曲线模拟结果，观察局

部放大图可以发现，熔体在液相线温度以上浇注时，在经过短暂的充型时间台阶后，温度快速下降，对温度-时间曲线求导可计算出熔体的瞬时冷却速率。从图中可以发现，在压力铸造的高压加持下，熔体在H13模具钢内的冷却速率可达到100 K/s以上，这一冷却速率远大于Cu基非晶合金所需的临界冷

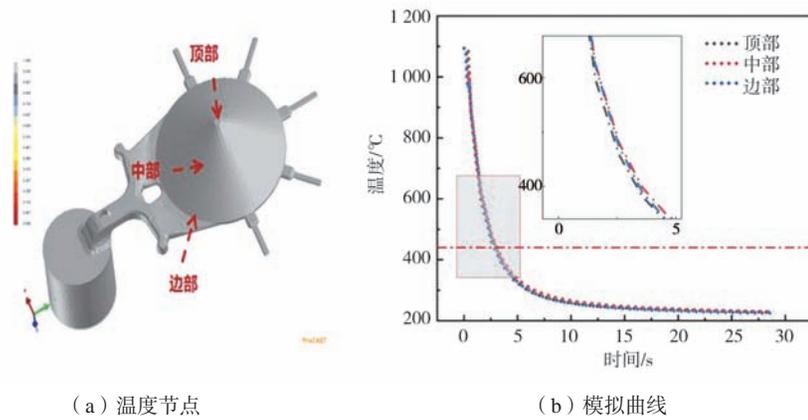


图8 非晶药型罩温度-时间曲线模拟结果

Fig. 8 Simulation results of the temperature-time curve of the amorphous-forming alloy

却速率 (~20 K/s) [18]。另外对比边部、中部和顶部的时间-温度曲线可发现，其顶部的冷却速率略大于中部和边部，但总体上相差不大，这是因为压力铸造过程的超高速冷却速率所导致的，铸件各部位冷却速率相差较小，有利于形成均匀的非晶态组织，减少铸造应力。

图9为H13钢铸型在不同浇注温度下药型罩铸件的时间-温度曲线，可以发现，在凝固初始阶段，随着浇注温度的提高，熔体的冷却速率逐渐增大。不同浇注温度条件下，熔体均在2.5 s以内即可快速冷却到玻璃化转变温度 (440 °C) 以下，其冷却速率均大于100 K/s。三种铸造温度下，熔体在900 °C以下时的冷却速率基本相同。因此可以发现，在高压铸造的条件下，改变浇注温度对铸件冷却速率的影响较小，说明高压铸造可以为非晶合金的铸造提供较大的工艺窗口。

图10中从左至右分别为非晶药型罩在H13钢、紫铜和石墨模具中的凝固时间模拟结果。从图中可以发现，在不同铸型中，药型罩主体部分在0.47 s内即可完成凝固现象，这与温度场和凝固场的结果相吻合。另外浇道外壁部分冷却时间最长，在H13钢模中的冷却时

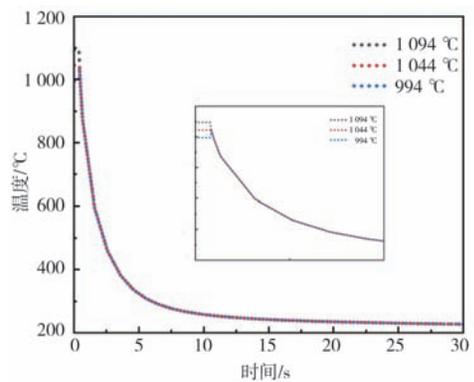


图9 不同浇注温度的时间-温度曲线

Fig. 9 Time-temperature curves of different casting temperatures

间为7.2 s，在铜模中为5.9 s，在石墨模中为7.0 s。

图11为不同模具下，非晶药型罩顶部的温度时间曲线。从图中可以发现，在初始阶段，非晶合金在三种铸型中的冷却速率几乎保持一致。当温度下降到800 °C 以下时，熔体在H13钢中的冷却速度小于在石墨模具中

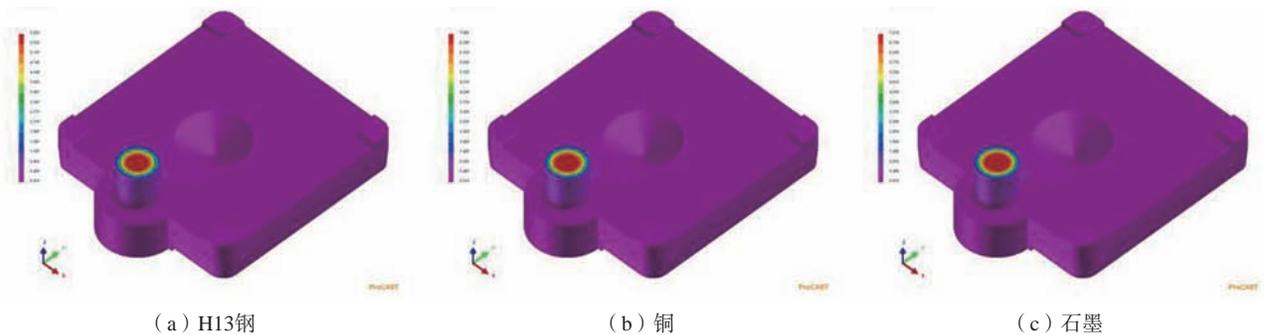


图10 非晶药型罩在不同铸型中的凝固时间

Fig. 10 Solidification time of the amorphous shaped charge liner

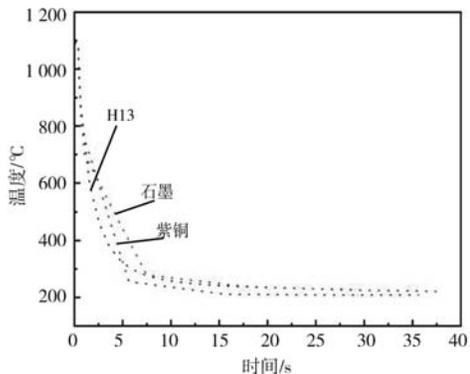


图11 不同模具下药型罩温度的时间-温度曲线

Fig. 11 Time-temperature curves of the mold cover temperature under different molds

的冷却速度，更小于铜模中的冷却速度，但总体下降趋势较小。可发现，非晶合金在H13钢中的冷却速度已可满足Cu基非晶合金的形成能力要求（ $\sim 20\text{ }^{\circ}\text{C/s}$ ），综合考虑铜模具的高成本以及石墨模具强度不足等问题，选择H13钢作为模具材料是合适的。

2.2 非晶合金药型罩制备

通过感应熔炼得到如图12 (a) 所示的料球，图12 (b, c) 分别为未除渣和除渣后压铸药型罩毛坯实物图，对比可以发现，料球未除渣时，药型罩虽然能仍具有较好的成形性，但铸件内部存在较多的裂纹，这是因为杂质元素在熔体凝固过程中成为了异质形核的质点，使得合金凝固过程中发生部分晶化，导致所形



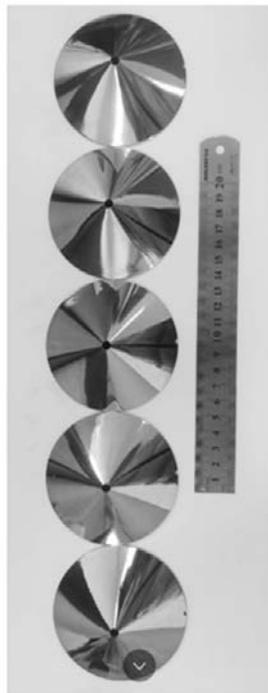
(a) 非晶合金感应熔炼料球



(b) 药型罩毛坯 (未除渣)



(c) 药型罩毛坯 (除渣)



(d) 非晶合金药型罩样品

图12 非晶合金药型罩

Fig. 12 Amorphous alloy shaped charge liners

成的金属间化合物与非晶合金基体间容易产生裂纹，因此得到的铸件出现大范围开裂。图12 (c) 所示为去除杂质后的非晶合金药型罩铸件，可以发现铸件充型性能优良，表面质量良好。

将压力铸造成形的药型罩毛坯进行CNC机械加工与抛光后，得到表面质量优良的非晶药型罩样品，如图12 (d) 所示。该样品在CNC加工过程中并未出现加工裂纹，表明压力铸造非晶合金药型罩的组织均匀性较好，并未产生明显的热应力与加工应力。

图13 (a) 和 (b) 分别为非晶合金药型罩的XRD图谱和DSC测试曲线，从测试结果中可知，XRD图谱中只在 38° 附近存在一个漫散射峰，其他晶态衍射峰不明显，表明铸件主要为非晶态组织。DSC曲线中在700 K附近出现明显的玻璃化转变 (T_g) 的吸热行为，随后存在一个较宽的过冷液相区间和放热峰，这是非晶合金的典型热力学特征。以上结果均表明压力铸造制备的药型罩为非晶态组织。

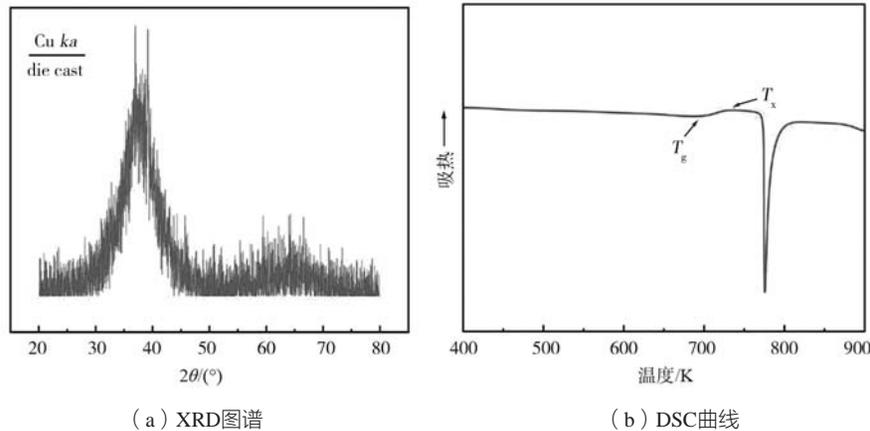


图13 非晶合金药型罩

Fig. 13 Curves of the amorphous shaped charge liner

3 结论

(1) 非晶药型罩铸坯在H13钢模具和1 096 ℃的压力铸造工艺下,熔体在0.48 s内产生凝固现象,0.66 s充型完成,2.10 s主体部位完全凝固,在27.5 s完成系统浇注凝固,熔体在极短时间内完成充型和凝固。

(2) 在压力铸造的高压加持下,改变熔体温度和铸型材料,合金均在2.5 s以内即可快速冷却到玻璃化转

变温度(440 ℃)以下,冷却速率可达到100 K/s以上,满足Cu基非晶合金的形成能力要求(~20 ℃/s)。

(3) 真空压力铸造制备的非晶合金药型罩经过CNC机械加工与抛光后,未产生加工裂痕,表面质量与组织均匀性良好,XRD与DSC测试结果表明其组织为非晶态组织。

参考文献:

- [1] INOUE A, TAKEUCHI A. Recent development and application products of bulk glassy alloys [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59 (6): 2243-2267.
- [2] 汪卫华. 非晶态物质的本质和特性 [J]. *物理学进展*, 2013, 33 (5): 177-351.
- [3] 尚春明, 施冬梅, 张云峰, 等. Zr基非晶合金毁伤研究进展 [J]. *兵器装备工程学报*, 2020, 41 (7): 182-186.
- [4] 陈亮, 祖旭东, 黄正祥, 等. Zr基非晶合金药型罩射流的成型研究 [J]. *弹道学报*, 2022, 34 (1): 65-71.
- [5] CAI Z, ZHU M. Simulation of air gap formation in slab continuous casting mould [J]. *Ironmaking & Steelmaking*, 2014, 41 (6): 435-446.
- [6] INOUE A, WANG X M, ZHANG W. Developments and applications of bulk metallic glasses [J]. *Rev Adv Mater Sci*, 2008, 18 (1): 1-9.
- [7] ZHANG C Y, YUAN G, ZHANG Y X, et al. Stress and deformation during solidification of amorphous alloys causes microstructural inhomogeneity [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2021, 53 (1): 1-6.
- [8] ZHU Z W, ZHANG H F, WANG H, et al. Influence of casting temperature on the thermal stability of Cu-and Zr-based metallic glasses: Theoretical analysis and experiments [J]. *Journal of Materials Research*, 2008, 23 (10): 2714-2719.
- [9] 郝秋红. Zr基块体非晶合金铸造凝固过程的数值模拟 [D]. 秦皇岛: 燕山大学, 2010.
- [10] 邱克强, 谢挺举, 张伟, 等. 非晶合金凝固过程模拟与界面换热关系 [J]. *沈阳工业大学学报*, 2017, 39 (5): 496-500.
- [11] YANG E R, DING T, SUN W C, et al. Numerical simulation and experimental verification of thermal profile and solidification in horizontal continuous casting of bulk metallic glass [J]. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2024, 33 (14): 6895-903.
- [12] WANG F L, HAO Q H, YU P F, et al. Numerical simulation and experimental verification of large-sized Zr-based bulk metallic glass ring-shaped parts in casting process [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2022, 32 (2): 581-920.
- [13] 王飞龙. 铸型材质对锆基块体非晶合金性能的影响及铸造成形研究 [D]. 秦皇岛: 燕山大学, 2021.
- [14] 金渊哲. 锆基非晶合金压铸过程数值模拟 [D]. 秦皇岛: 燕山大学, 2020.

- [15] DUGGAN G, BROWNE J D. Modelling and simulation of twin-roll casting of bulk metallic glasses[J]. Transactions of the Indian Institute of Metals, 2009, 62 (4-5) : 417-421.
- [16] ZHANG W, XIANG Q C, MA C Y, et al. The glass transition during liquid metal solidification exemplified by a Zr-based glass-forming alloy: experiments and numerical simulations [J]. AIP Advances, 2020, 10 (8) : 085225.
- [17] 蒋博宇. Cu基非晶合金水平连铸工艺与强韧化处理研究 [D].大连: 大连理工大学, 2021.
- [18] ZHANG Q S, GUO D Y, WANG A M, et al. Preparation of bulk $Zr_{55}Al_{10}Ni_3Cu_{30}$ metallic glass ring by centrifugal casting method [J]. Intermetallics, 2002, 10 (11-12) : 1197-1201.

Numerical Simulation of the Pressure Casting Process of Amorphous Alloy Shaped Charge Liner

ZHAO Xiao-xiao, JIANG Bo-yu, WANG Ming-ming, CAO Li-jun, FENG Hong-wei, GONG Liu-kui, HUANG Wei

(China Ordnance Science and Research Institute Ningbo branch, Ningbo 315000, Zhejiang, China)

Abstract:

By using ProCAST software, the temperature change and solidification behavior of Cu-Zr-Al-Er-based amorphous alloy shaped charge liner were studied during the pressure casting process. The results showed that the amorphous alloy could complete the filling and solidification process of the pouring system within 27.5 s at a pressure casting process of H13 steel at 1 096 °C. The simulation results of different pouring temperatures and mold materials showed that the alloy could cool to below the glass transition temperature (T_g) within 2.5 s, meeting the formation conditions of Cu-based amorphous alloy. Non-crystalline alloy shaped charge liner billet were prepared by high pressure casting, and high-quality amorphous shaped charge liner samples were obtained by CNC machining. The XRD and DSC tests showed that the pressure-cast shaped charge liner presented amorphous microstructure.

Key words:

amorphous alloy; pressure casting; numerical simulation; cooling rate; temperature field