



УДК 669:621.78.011

Ю.Ф. Титовец, Г.Е. Коджаспиров,
А.С. Груздев, А.А. Васильев

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРОЧНЕНИЯ СПЛАВОВ AL–MG–SI ПРИ МНОГОСТУПЕНЧАТОМ СТАРЕНИИ

Yu.F. Titovets, G.E. Kodzhaspirov,
A.S. Gruzdev, A.A. Vasilyev

AL–MG–SI ALLOYS MULTISTEP AGE-HARDENING SIMULATION

Проведено моделирование дисперсионного упрочнения сплава Al — 1,17 %Mg — 1,17 %Si при простых, а также при сложных многоступенчатых режимах старения. Разработанная компьютерная модель, учитывающая возможность одновременного формирования зон Гинье — Престона и частиц β'' -фазы, позволяет достичь хорошего количественного согласия с экспериментальными данными.

Al–Mg–Si. СТАРЕНИЕ. УПРОЧНЕНИЕ. МЕТАСТАБИЛЬНАЯ ФАЗА.

The paper presents the simulation of yield strength for multistep aging Al — 1,17 % Mg — 1,17 % Si alloy. The model included Guinier–Preston zones and needle-like particles β'' -phase shows good agreement with an experimental data.

Al–Mg–Si. AGE-HARDENING. METASTABLE PHASE.

Важную группу современных конструкционных материалов составляют стареющие металлические сплавы, механические свойства которых формируются при термообработке за счет процессов стадийного выделения дисперсных частиц второй фазы. Их термообработка начинается с закалки от температур выше температуры сольвуса вторичной фазы, в результате чего создается пересыщенный твердый раствор атомов легирующих элементов. Далее материал подвергается процедуре искусственного старения, которая обычно сводится к однократному нагреву и выдержке при некоторой повышенной температуре ниже сольвуса. Применяются также многоступенчатые режимы, представляющие собой последовательность выдержек при разных температурах.

Как правило, подбор оптимальных режимов термообработки стареющих сплавов производится опытным путем. Если не ограничиваться простейшими одноступенчатыми режимами, то использование только эмпирического подхода при оптимизации старения требует проведения

больших объемов экспериментальных исследований и значительных материальных затрат. В этой ситуации весьма полезными могут быть компьютерные модели, позволяющие количественно описывать процесс формирования структуры и изменения свойств сплавов при сложных режимах старения. Понятно, что привлечение таких моделей будет оправданным, если нахождение их параметров можно осуществить на основе сравнительно небольшого объема экспериментальных данных по кинетике старения. Кроме того, модель должна обладать предсказательной способностью и, следовательно, иметь надежную физическую основу.

Настоящая работа посвящена развитию подхода к моделированию упрочнения стареющих сплавов системы Al–Mg–Si, предложенного в [1–3]. В работе показана применимость модели для описания эволюции микроструктуры и количественной оценки изменения механических свойств сплавов системы Al–Mg–Si в процессе многоступенчатых режимов старения в интервале температур от 20 до 250 °С.

Модель эволюции структуры и упрочнения

Для описания эволюции системы фазовых выделений, возникающих при распаде пересыщенного твердого раствора, используется подход, предложенный Кампманном и Вагнером [4]. В рамках этого подхода функция $\rho(R; t)$ распределения частиц по размерам, определяется на основании численного интегрирования уравнения

$$\frac{\partial \rho(R; t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial R} \left(\rho \frac{dR(t)}{dt} \right) = J(R; t), \quad (1)$$

где $J(R; t)$ — скорость зарождения частиц радиуса R в момент времени t . При этом скорость зарождения рассчитывается с помощью уравнения классической теории. Соответствующая модель, известная в литературе как N -модель, была успешно использована для количественного анализа процессов выделения частиц 2-й фазы в некоторых сплавах Al–Mg–Si [1–3, 5].

При низких температурах старения распад практически завершается на стадии образования сферических зон Гинье — Престона (ЗГП), которые в этих условиях вносят основной вклад в упрочнение. В практически важном интервале температур искусственного старения (100–200 °С) основной эффект упрочнения обусловлен образованием предвыделений β'' -фазы, имеющих форму иголок, вытянутых в направлениях $\langle 100 \rangle$. В модели учитываются только ЗГП и частицы β'' -фазы, поскольку именно их формирование практически полностью определяет процесс упрочнения сплавов вплоть до максимальных значений в интервале температур от комнатной до 200 °С. При этом зарождение и рост предвыделений описываются в рамках приближения сферической формы формирующихся частиц. Применимость такого приближения при описании зарождения частиц несферической формы в рамках классической теории зарождения обосновывается в [1]. Действительная форма частиц β'' -фазы будет непосредственно учтена на этапе расчета упрочнения, обусловленного влиянием этих частиц.

При моделировании распада, предусматривающего образование ЗГП и предвыделений частиц β'' -фазы, их зарождение предполагается независимым. Другими словами, зарождение происходит гомогенно в доступных для этого областях объема, что соответствует эксперимен-

тальным данным [6]. На каждом временном шаге алгоритм расчета изменения функции распределения последовательно применяется для двух функций: $\rho_{i \text{ЗГП}}$ и $\rho_{i \beta''}$. Средняя концентрация твердого раствора, рассчитываемая на текущем временном шаге, определяется суммарным приращением объема всех частиц.

Моделирование распада в течение неизотермических периодов (нагрев/охлаждение) процедуры термообработки сплава проводится в приближении аддитивного суммирования элементарных изотермических вкладов. На каждом временном шаге температура изменяется в соответствии с заданной средней скоростью нагрева/охлаждения материала, значения всех температурно-зависимых параметров модели пересчитываются, после чего очередной цикл расчетов повторяется по описанному алгоритму.

Предел текучести сплава представлен в виде суперпозиции вкладов: $\sigma(t, T) = \sigma_0 + \Delta\sigma_{\text{тр}}(t, T) + \Delta\sigma_{\phi}(t, T)$. Здесь σ_0 — предел текучести алюминиевой матрицы; $\Delta\sigma_{\text{тр}}(t, T)$ — приращение предела текучести, связанное с изменением концентрации твердого раствора; $\Delta\sigma_{\phi}(t, T)$ — вклад частиц выделений.

Упрочняющий эффект, обусловленный твердым раствором, вычисляется по формуле $\Delta\sigma_{\text{тр}}(t, T) = \alpha_{\text{Si}} C_{\text{Si}}(t, T) + \alpha_{\text{Mg}} C_{\text{Mg}}(t, T)$, в которой $C_{\text{Si}}(t, T)$ и $C_{\text{Mg}}(t, T)$ — атомные концентрации атомов Si и Mg в твердом растворе; $\alpha_{\text{Si}} = 22,1$; $\alpha_{\text{Mg}} = 14,3$ МПа/ат. % — постоянные твердорастворного упрочнения. Текущие значения концентраций $C_{\text{Si}}(t, T)$ и $C_{\text{Mg}}(t, T)$ определяются из условия сохранения суммарного числа атомов легирующих элементов в единице объема материала.

Основной вклад в упрочнение обусловлен взаимодействием дислокаций с частицами выделений. Для вклада ЗГП, характеризующихся отсутствием сформировавшейся упорядоченной структуры: $\Delta\sigma_{\phi \text{ЗГП}}(t, T) = \alpha_{\text{ЗГП}} f_{\text{ЗГП}}^{1/2}(t, T)$, где $f_{\text{ЗГП}}(t, T)$ — объемная доля ЗГП; $\alpha_{\text{ЗГП}}$ — постоянная зонного упрочнения, которая является подгоночным параметром модели. Вклад ЗГП в упрочнение, как правило, значительно меньше, чем от основных упрочняющих выделений β'' -фазы.

Согласно данным микроструктурных исследований, в процессе роста поперечный размер

игольчатой частицы β'' -фазы изменяется незначительно. Частицы растут по направлению $Al_{<100>}$. Преимущественное скольжение дислокаций идет в плоскостях $\{111\}$, при этом площадь сечения перерезания остается постоянной. В связи с этим можно силу, требуемую для перерезания рассматриваемых частиц, считать постоянной и описывать процесс упрочнения от частиц β'' -фазы, используя функциональную зависимость $\Delta\sigma_{\beta''} \propto \lambda^{-1}$ [1].

Среднее расстояние между игольчатыми стопорами в плоскости $\{111\}$ $\lambda(t, T) \propto [\rho(t, T)\bar{L}(t, T)]^{-1/2}$. Здесь $\bar{L}(t, T)$ — средняя длина игольчатых частиц. Полагая, что $L(t, T) \propto R(t, T)$ (рост игольчатой и сферической частицы имеет одинаковый функциональный вид), для вклада в упрочнение от частиц β'' -фазы получим [1]: $\Delta\sigma_{\beta''}(t, T) = \alpha_{\beta''} \{\rho(t, T)\bar{R}(t, T)\}^{1/2}$, здесь $\rho(t, T)$ — объемная плотность игольчатых частиц; $\bar{R}(t, T)$ — средний размер частиц; $\alpha_{\beta''}$ — константа упрочнения, являющаяся подгоночным параметром модели.

Учитывая распределение частиц по размерам, которое генерируется моделью эволюции микроструктуры, полученную формулу можно обобщить следующим образом. Для вклада в упрочнение от частиц из i -го размерного интервала $[R_i; R_{i+1}]$, имеем: $\Delta\sigma_{\beta''i}(t, T) = \alpha_{\beta''} \{\rho_i(t, T)\bar{R}_i(t, T)\}^{1/2}$, где $\rho_i(t, T)$ — число частиц в i -м интервале размеров, а $\bar{R}_i(t, T)$ их средний размер.

При использовании функции распределения лучшее согласие с экспериментом дает средне-

геометрическое усреднение. Поэтому упрочнение от рассматриваемых частиц рассчитывалось с использованием формулы

$$\Delta\sigma_{\beta''}(t, T) = \alpha_{\beta''} \left\{ \sum_i (\Delta\sigma_{\beta''i}(t, T))^2 \right\}^{1/2} = \alpha_{\beta''} \left\{ \sum_i \rho_i(t, T)\bar{R}_i(t, T) \right\}^{1/2}. \quad (2)$$

Для полного вклада в упрочнение от фазовых выделений запишем так:

$$\Delta\sigma_{\phi}(t, T) = \sqrt{(\alpha_{3ГП} f_{3ГП}(t, T))^2 + \alpha_{\beta''}^2 \sum_i \rho_i(t, T)\bar{R}_i(t, T)}. \quad (3)$$

Результаты моделирования

Естественное старение как часть технологического процесса, который неизбежно имеет место при складировании и транспортировке полуфабрикатов, предваряет их термическую обработку. Длительность и температурный режим такого старения, как правило, не нормируются, хотя для сплавов рассматриваемой системы эти параметры могут существенно менять их механические свойства после окончательной термообработки.

Модель позволяет учесть влияние низкотемпературного предварительного старения на изменение окончательного уровня предела текучести. В качестве примера на рис. 1 представлено сравнение результатов моделирования двухступенчатого старения (20 °С/24 часа + 160 °С) с данными эксперимента для сплава Al — 1,17Mg — 1,17Si.

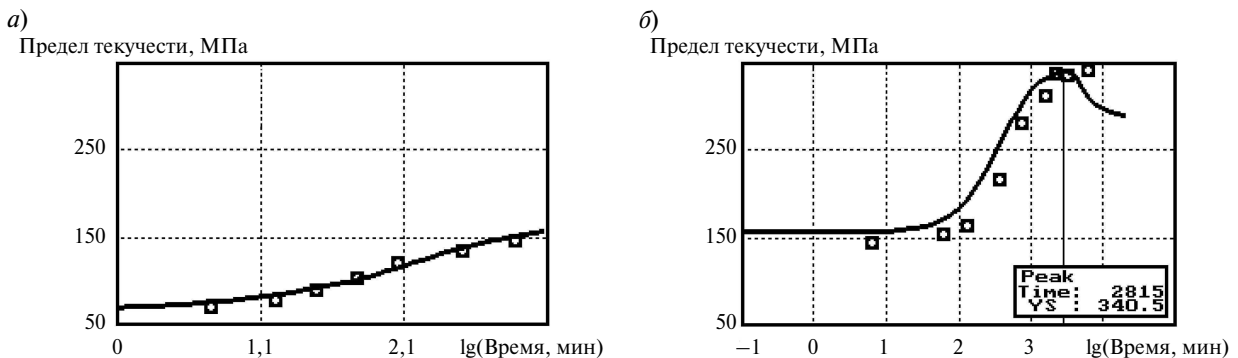
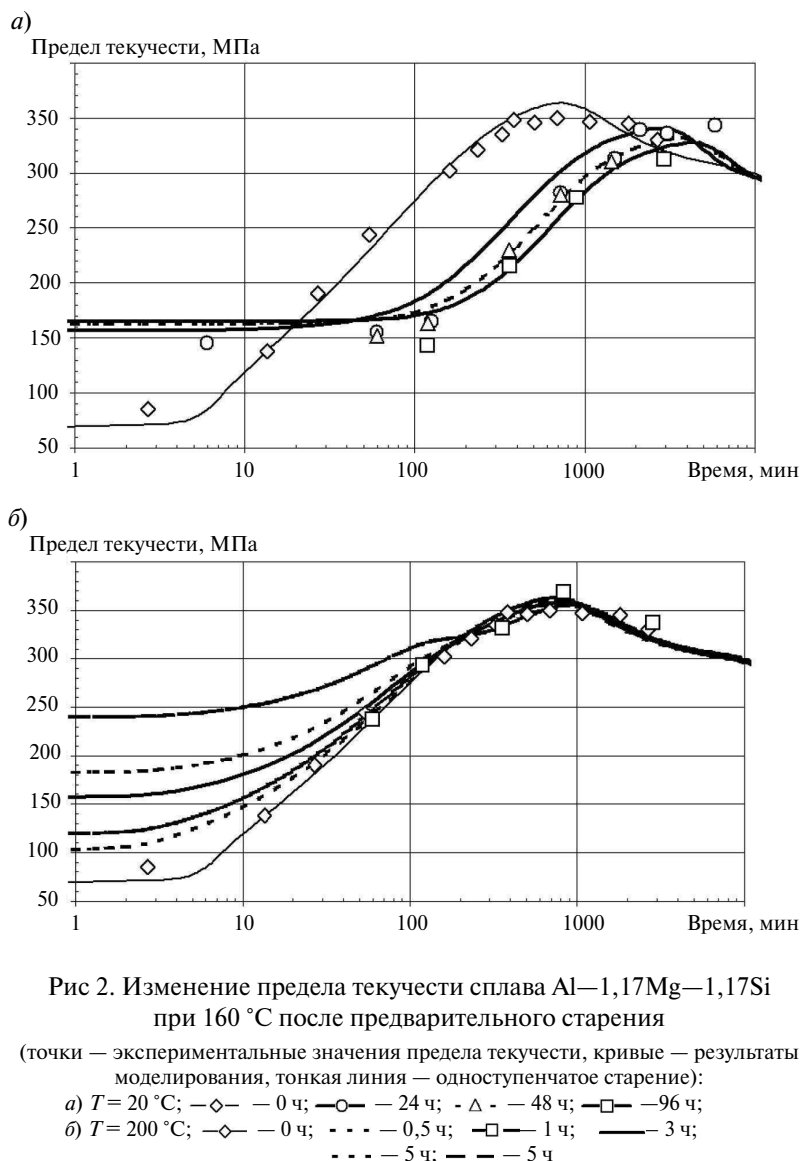


рис. 1. изменение предела текучести сплава Al-1,17Mg-1,17Si в процессе двухступенчатого старения (20 °С, 24 часа; 160 °С). Точками обозначены экспериментальные значения предела текучести, непрерывная кривая — расчетная (экранный снимок программы): а) при $T = 20$ °С; б) при $T = 160$ °С

На рис. 2, а приведены данные по дисперсионному упрочнению при 160 °С после предварительного естественного старения в течение 24, 48 и 163 часов, а также соответствующая кривая, соответствующая ситуации без предварительного старения. Из приведенных данных видно, что естественное старение заметно влияет на величину и положение пика, когда его длительность превышает 24 часа. При этом наблюдается монотонное снижение величины пика предела текучести и увеличение времени до пика с ростом длительности естественного старения. Модель дает хорошее количественное совпадение с экспериментальными данными по времени пика. Согласие с экспериментом по величине пика предела текучести несколько хуже, но наблю-

даемые отклонения близки к экспериментальной погрешности определения этой величины (~ 20 МПа).

На практике для подавления эффекта естественного старения образцы подвергают предварительному старению при 100 °С. Такая обработка заключается в их выдержке в кипящей воде сразу после закалки, которая обычно имеет длительность около 20–60 мин. Разработанная модель позволяет имитировать этот практически важный эффект (эффект стабилизации). На рис. 2, б приведены соответствующие результаты, демонстрирующие влияние стабилизирующего старения сплава Al — 1,17Mg — 1,17Si на ход упрочнения в процессе дальнейшего старения при 160 °С. Видно, что модель предсказывает



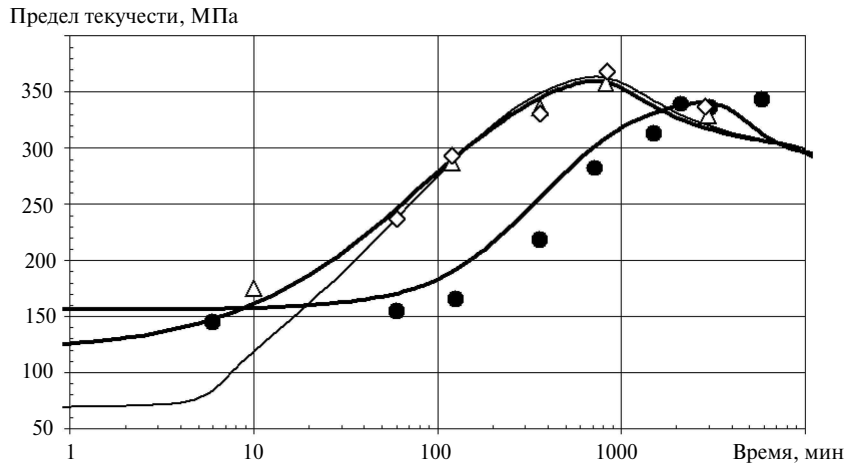


Рис. 3. Изменение предела текучести сплава Al—1,17Mg—1,17Si в процессе одно-, двух- и трехступенчатого старения

(точки — экспериментальные значения; кривые — результаты моделирования):
 —◇— — 160 °С; —●— — ЕС (24 ч) +160 °С; —△— — 100 °С (1 ч) + ЕС (22 ч) +160 °С

наблюдаемый экспериментально эффект минимизации отрицательного влияния естественного старения после часовой стабилизации материала 100 °С. Так из рис. 3 видно, что уже 10 мин выдержки при 100 °С достаточно для практически полной стабилизации микроструктуры сплава при последующем естественном старении. Для максимального ускорения процессов выделения второй фазы при заключительном искусственном старении требуется выдержка около 30 минут при

100 °С. Стабилизирующую обработку, проводимую сразу после закалки, нетрудно вписать в технологический процесс. Положительный эффект, связанный с этим, вполне очевиден.

Другой способ, снижающий отрицательный эффект естественного старения, — это кратковременный нагрев перед искусственным старением. Причем после естественного старения образец подвергается выдержке при температуре выше температуры сольвуса ЗГП, закалке

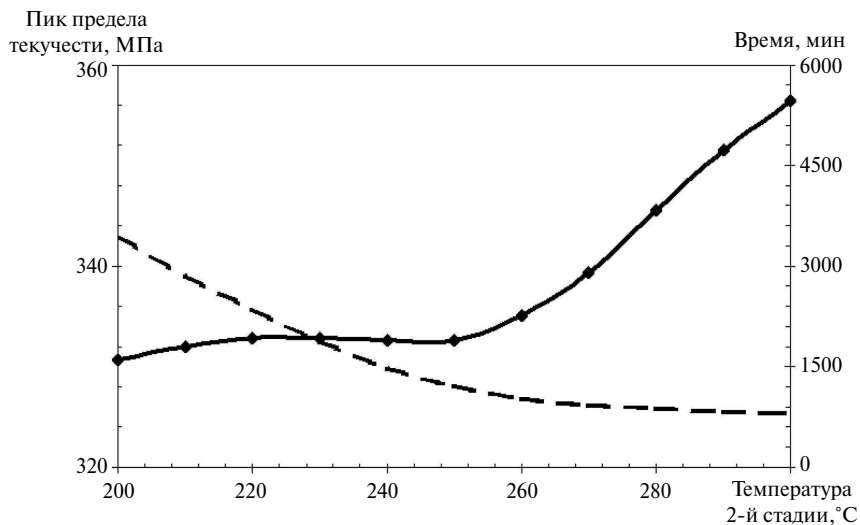


Рис. 4. Зависимости пика предела текучести (сплошные линии) и времени его достижения при 160 °С старении сплава Al—1,17Mg—1,17Si, проводимом после предварительного двухступенчатого старения (20 °С/10000 минут + старение в течение 90 минут при разных температурах) от температуры 2-й стадии

и последующему искусственному старению. При такой обработке ЗПП активно растворяются, что снижает эффект естественного старения. Выдержка при повышенной температуре (~ 200–300 °С) не должна быть слишком длительной, так как это может привести к выделению крупных частиц β''- и β'-фаз и снижению достигаемого предела текучести. Анализ данных, приведенных на рис. 4, позволяет понять некоторые закономерности этого процесса. Значение пика при предварительной обработке при 300 °С практически совпадает с его величиной, получаемой в случае изотермического режима. Форма кривой при подходе к максимальной температуре предварительной стадии старения позволяет предсказать дальнейшее увеличение пика предела текучести. Однако это нельзя утверждать с уверенностью, так как непонятно, что будет происходить с высокотемпературными Mg—Si-фазами, формирование которых в модели не учитывается. Пиковое время монотонно снижа-

ется с ростом температуры до 260 °С. Минимальные значения получаются близкими к одноступенчатому режиму.

Основные результаты и выводы

Разработана модель для количественного описания упрочнения сплавов системы Al—Mg—Si в процессе многоступенчатого старения, хорошо согласующаяся с экспериментальными данными по дисперсионному упрочнению закаленного сплава Al—1,17 %Mg—1,17 %Si в процессе сложных многоступенчатых режимов старения.

Созданная модель может быть рекомендована для практического использования при оптимизации многоступенчатых режимов термообработки сплавов рассматриваемой системы.

Авторы выражают благодарность Н.Л. Кузьмину, В.В. Мирзоеву и В.А. Челнокову за предоставленные экспериментальные данные, а также Н.Ю. Ермаковой за помощь в разработке программного обеспечения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Васильев, А.А.** Моделирование дисперсионного твердения сплавов Al—Mg—Si. — 1. Модель и результаты, полученные для сплава Al + 0,72 % Mg + 0,71 % Si [Текст] / А.А. Васильев, Ю.Ф. Титовец, Б. Бухмаер // Изв. вузов: Цветная металлургия. — 1997. № 2. — С. 36–49.

2. **Васильев, А.А.** Моделирование дисперсионного твердения сплавов Al—Mg—Si. — 2: Моделирование изменения модуля Юнга сплава Al—0,72 % Mg—0,71 % Si при изотермическом старении [Текст] / А.А. Васильев, Н.Л. Кузьмин, А.С. Груздев // Изв. вузов: Цветная металлургия. — 1997. — № 3. — С. 29–32.

3. **Vasilyev, A.A.** Model for commercial 6XXX series aluminium alloys age-hardening simulation [Текст] / A.A. Vasilyev, A.S. Gruzdev, N.L. Kuzmin / Edited by

Melker A.I. // Proc. SPIE. 2006. — Vol. 6253. — P. 625309–1–4.

4. **Wagner, R.** Homogeneous second phase precipitation / Edited by Haasen P. // Materials Science and Technology [Текст] / R. Wagner, R. Kampmann. — Weinheim: VCH Verlagsgesellschaft mbH. — 1991. Vol. 5. — 648 p.

5. **Esmaeili, S.** A yield strength model for the Al—Mg—Si—Cu alloy AA6111 [Текст] / S. Esmaeili, D.J. Lloyd, W.J. Poole // Acta Mater. — 2003. — Vol. 51, № 8. — P. 2243–2257.

6. **Васильев, А.А.** Исследование кинетики образования метастабильных фаз в закаленных сплавах Al—Mg—Si [Текст] / А.А. Васильев, Н.Л. Кузьмин, А.С. Груздев // ФТТ. — 2011. — Т. 53, № 8. — С. 1576–1581.

REFERENCES

1. **Vasilyev, A.A.** Modeling of commercial Al—Mg—Si alloys age-hardening -1. Model and results obtained for Al+0.72 %Mg+0.71 %Si alloy [Text] / A.A. Vasilyev, Yu.F. Titovets, B. Buhmaer // Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Tsvetn. Metall. — 1997. — № 2. P. 36–49 (rus).

2. **Vasilyev, A.A.** Modeling of commercial Al—Mg—Si alloys age-hardening -2. Model of Young modulus increment for Al+0.72 %Mg+0.71 %Si alloy in the course of isothermal aging [Text] / A.A. Vasilyev, N.L. Kuz'min, A.S. Gruzdev // Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Tsvetn. Metall. — 1997. — № 3. — P. 29–32 (rus).

3. **Vasilyev A.A., Gruzdev A.S., Kuzmin N.L.** Model for commercial 6XXX series aluminium alloys age-hardening simulation / Edited by Melker A.I. // Proc. SPIE. 2006. V. 6253. — P. 625309–1–4.

4. **Wagner R., Kampmann R.** Homogeneous second phase precipitation / edited by Haasen P. // Materials Science and Technology. Weinheim: VCH Verlagsgesellschaft mbH, — 1991. — Vol. 5. — 648 p.

5. **Esmaeili S., Lloyd D.J., Poole W.J.** A yield strength model for the Al—Mg—Si—Cu alloy AA6111// Acta Mater. — 2003. — Vol. 51, № 8. — P. 2243–2257.

6. **Vasilyev, A.A.** Study of the formation kinetics of metastable phases in quenched Al–Mg–Si Alloys [Text] / A.A. Vasilyev, N.L. Kuz'min, A.S. Gruzdev // Physics of the Solid State.— 2011. Vol. 53, № 8.— P. 1658–1663.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ /AUTHORS

ВАСИЛЬЕВ Александр Александрович — кандидат физико-математических наук доцент кафедры механики и процессов управления Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; 195251, ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, Россия; e-mail: vasilyev_aa@mail.ru
VASILYEV Alexander A. — St.-Petersburg State Polytechnical University; 195251, Politekhnicheskaya Str. 29, St.-Petersburg, Russia; e-mail: vasilyev_aa@mail.ru

ГРУЗДЕВ Александр Станиславович — ассистент кафедры радиоэлектронных средств защиты информации Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; 195251, ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, Россия; e-mail: gruzdev_spb@mail.ru
GRUZDEV Alexander S. — St.-Petersburg State Polytechnical University; 195251, Politekhnicheskaya Str. 29, St.-Petersburg, Russia; e-mail: gruzdev_spb@mail.ru

КОДЖАСПИРОВ Георгий Ефимович — доктор технических наук профессор кафедры технологии и исследования материалов Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; 195251, ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, Россия; e-mail: kodjaspirov@mail.ru
KODZHASPIROV Georgij E. — St.-Petersburg State Polytechnical University; 195251, Politekhnicheskaya Str. 29, St.-Petersburg, Russia; e-mail: kodjaspirov@mail.ru

ТИТОВЕЦ Юрий Федорович — доктор физико-математических наук профессор кафедры механики и процессов управления Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; 195251, ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, Россия.

TI TOVETS Yuriy F. — St.-Petersburg State Polytechnical University; 195251, Politekhnicheskaya Str. 29, St.-Petersburg, Russia.