

МОДЕЛИРОВАНИЕ УПРОЧНЕНИЯ СПЛАВА Al-Mg-Si МЕЛКОДИСПЕРСНЫМИ ЧАСТИЦАМИ ПРИ СТАРЕНИИ

А.С. Груздев^{1*}, Г.Е. Коджаспиров¹, А.И. Рудской¹

¹Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
ул. Политехническая, д. 29, г. Санкт-Петербург, Россия

*e-mail: gruzdev_spb@mail.ru

Аннотация. Описаны результаты моделирования упрочнения стареющих сплавов Al-Mg-Si с учетом последовательности метастабильных состояний сплава, возникающих при старении после закалки. Учет основных упрочняющих выделений – зон Гинье-Престона и β'' -фазы позволяет описать упрочнение в условиях многоступенчатого старения. Использование функции распределения частиц и учет формы выделений позволяет с достаточно высокой точностью интерпретировать экспериментальные данные по изменению предела текучести сплава в процессе старения и, соответственно, предсказать прочность сплава.

1. Введение

Развитие современной техники предъявляет высокие требования к конструкционным материалам, в частности к алюминиевым сплавам, которые благодаря своим свойствам находят широкое применение. В настоящее время стареющие сплавы алюминия используются в качестве конструкционных материалов в строительстве, авиа – и автомобилестроении. Их растущее применение обусловлено сочетанием комплекса высоких механических свойств, достигаемых в результате дисперсионного упрочнения при термообработке, низкой плотности, высокой коррозионной стойкости и хорошей обрабатываемости. К важнейшим алюминиевым сплавам относятся термически упрочняемые сплавы системы *Al-Mg-Si* (сплавы серии 6XXX), содержащие в качестве дополнительных легирующих элементов *Fe, Mn, Si*.

Сплавы 6XXX отличаются исключительной сложностью процесса распада твердого раствора, протекающего с формированием последовательности метастабильных состояний, ход которого существенно зависит от состава сплава и режима старения. В силу метастабильной природы всех продуктов распада, за исключением частиц β -фазы, строгих подходов к расчету термодинамических движущих сил в настоящее время не существует, поэтому для количественной оценки используют различные приближения. В процессе термических воздействий после закалки, например при старении, происходит сложная, многостадийная трансформация выделений в условиях сильного и долговременного вакансационного пересыщения. Распад пересыщенного твердого раствора происходит с образованием зон Гинье-Престона (ЗГП) и частиц β'' -фазы, именно они определяют основной прирост прочности, который сильно зависит от применяемых режимов старения сплава. Большое влияние на кинетику оказывает наличие долгоживущих закалочных вакансий, эффективно поникающих энергию активации процесса выделения. Еще до недавнего времени (конец XX века) подбор режимов старения проводился экспериментально и

требовал больших материальных затрат, поэтому основное распространение получили простые, одноступенчатые режимы старения. При использовании многоступенчатых режимов термообработки, которые по сравнению с одноступенчатыми позволяют повысить прочностные свойства, требуются значительные экспериментальные усилия, что существенно ограничивает внедрение таких режимов. Компьютерное моделирование позволяет заметно понизить экспериментальную трудоемкость.

Число работ по моделированию процессов старения в последнее время заметно выросло, охватывает не только систему *Al-Mg-Si*, но и сплавы с другой системой легирования: *Al-Li*, *Ti-Ni*, *Al-Ni*, *Al-Cu*, *Cu-Co*, *Al-Zn-Mg*, *Fe-C*, *Al-Sc*, *Al-Mn-Mg*, *Al-Mg-Ge*. Однако предложенные модели имеют несколько ограничений, во-первых, рассматривается одна упрочняющая фаза и используются изотермические режимы старения, что не позволяет учесть многостадийность процесса выделения и описать упрочнение при многоступенчатых режимах. Во-вторых, используются слишком грубые зависимости между структурными изменениями в сплаве и механическими свойствами, что дает большую ошибку по сравнению с экспериментальными данными и не позволяет выбрать режимы, обеспечивающие максимальные прочностные свойства.

2. Описание упрочнения в сплаве *Al-Mg-Si*

Для описания упрочнения металлических материалов, используются стандартные подходы, описанные в литературе [1, 2]. Применительно к стареющим *Al* сплавам, особенно, когда дело касается одного типа упрочняющих частиц, такие подходы хорошо проработаны [3, 4]. Так величина предела текучести таких сплавов в общем случае описывается аддитивным вкладом различных механизмов упрочнения и выражается в виде:

$$\sigma_{0.2}(t) = \sigma_0 + \sigma_{me} + \sigma_u + \sigma_{ep} + \sigma_o, \quad (1)$$

где σ_0 – предел текучести чистого алюминия (≈ 10 МПа); σ_{me} – приращение придела текучести, связанное с изменением концентрации твердого раствора; σ_u – вклад от частиц упрочняющей фазы; σ_{ep} – вклад от зернограничного упрочнения; σ_o – вклад в упрочнение от дислокаций. Основной вклад в упрочнение вносят ЗГП и частицы метастабильных фаз, типичное значение σ_u лежит в пределах 100-300 МПа.

При описании старения в алюминиевых сплавах, как правило, ограничиваются рассмотрением сферических частиц радиуса R одной упрочняющей фазы [3]. Другим естественным предположением, используемым при моделировании, является равномерность распределения в матрице и сравнительно малая величина размеров выделения: $R \ll \lambda$, где λ – среднее расстояние между выделениями. В таком предположении среднее расстояние между частицами в плоскости скольжения может быть представлена как функция размера R и объемной доли f . В случае силового преодоления дислокацией точечных стопоров упрочнение может быть записано как [2]:

$$\sigma_u = \frac{MF}{b\lambda}, \quad (2)$$

здесь M – фактор Тейлора, учитывающий число систем скольжения, для *Al* выбирается равным 2.5-3; b – модуль вектора Бюргерса.

Известно, что существует два альтернативных механизма преодоления дислокациями частиц выделений – это их перерезание или огибание, например, по механизму Франка-Рида. В случае перерезания $F(R) = kGbR$, для огибания сила не

зависит от размера $F(R) = 2\Gamma$, здесь $\Gamma = \beta G b^2$ – линейное напряжение дислокации, G – модуль сдвига, k и β – константы. В случае “сильных” стопоров ($F \approx 2\Gamma$) среднее расстояние между ними имеет вид:

$$\lambda = \left(\frac{2\pi}{f} \right)^{1/2} R. \quad (3)$$

В стареющих сплавах, в силу малости размеров, большинство стопоров не являются сильными. При наличии “слабых” областей ($F < 2\Gamma$) используется уточненное значение, полученное Фридлем [2]:

$$\lambda_\phi = \left(\frac{2\sqrt{3}\pi\Gamma}{Ff} \right)^{1/2} R. \quad (4)$$

Выражение (4) хорошо описывает упрочнение от когерентных и полукогерентных частиц. Однако для аморфных выделений неизвестной структуры типа ЗГП это описание не подходит. Для такого случая больше подходит описание, предложенное Кохом [2], в предположении термоактивационного преодоления препятствия:

$$\lambda_K = 1.15 \left(\frac{2\pi}{3f} \right)^{1/2} R. \quad (5)$$

Понятно, что слабые и когерентные ЗГП могут преодолеваться дислокацией только перерезанием. При этом для упрочнения получается выражение, которое не зависит от размера частиц [2]:

$$\sigma_u^K = kMG\sqrt{\frac{3}{2\pi}}f^{1/2} = \alpha_u^{3\Gamma} f^{1/2}. \quad (6)$$

Выражение (6) широко используют для описания упрочнения ЗГП и кластеров [4], а иногда и для описания основных упрочняющих частиц в упрощенных кинетических теориях [3], так как в этом случае нет зависимости от размера частиц и упрочнение может быть описано только с помощью одной зависимостью $f(t, T)$. Так как полукогерентные частицы β'' -фазы являются эффективными стопорами, их необходимо описывать выражением (3) или (4), такой поход наиболее распространен в литературе для описания упрочнения от частиц метастабильных выделений.

В случае рассмотрения ансамбля упрочняющих частиц, имеющих диапазон размеров, а не частиц одного размера, можно записать [4]:

$$\sigma_u = \frac{M\bar{F}}{b\lambda} = \frac{M}{b\lambda} \int F(R)\rho(R)dR. \quad (7)$$

В таком случае более полно используется информация о размерах частиц. Если функция распределения $\rho(R)$ представлена ступенчатой функцией $\{N_i\}$, то вместо интегрирования используют суммирование [3]:

$$\sigma_u = \frac{M\bar{F}}{b\lambda} = \frac{M}{b\lambda} \frac{1}{\sum N_i} \sum_i N_i F_i, \quad F_i = \begin{cases} 2\Gamma \frac{R_i}{R_c}, & R_i < R_c \\ 2\Gamma, & R_i \geq R_c \end{cases}. \quad (8)$$

Здесь R_c – критический радиус перехода от механизма перерезания к огибанию, для $Al-Mg-Si$ выбирается около 5 нм [3]. Подставив λ в виде (4) получим выражение для упрочнения как функции среднего радиуса $\bar{R}(t, T)$, объемной доли $f(t, T)$ и функции распределения $\{N_i(t, T)\}$:

$$\sigma_{pt} = \frac{M}{2b\bar{R}} \left(\frac{3f}{\pi\Gamma} \right)^{1/2} \left[\frac{\sum_i N_i F_i}{\sum_i N_i} \right]^{3/2}, \quad F_i = \begin{cases} 2\Gamma \frac{R_i}{R_c}, & R_i < R_c \\ 2\Gamma, & R_i \geq R_c \end{cases}. \quad (9)$$

Выражение (9) получено в предположении сферических частиц. В этом случае справедливо выражение (4) и (5), т.е. расстояние между двумя частицами не зависит от их размеров. Однако в сплавах $Al-Mg-Si$ мы имеем систему игольчатых частиц, поэтому нахождение среднего радиуса \bar{R} задача не тривиальная. В этой ситуации весьма полезными могли оказаться такие модели упрочнения, в которых нет зависимости от \bar{R} , но более полно используется информация о функции распределения частиц по размерам.

Подход к расчету основного упрочнения, вносимого частицами β'' -фазы, имеющих форму иголок, ориентированных вдоль направлений типа $\langle 100 \rangle$ алюминиевой матрицы, описан в работе [5]. Согласно данным микроструктурных исследований [6], в процессе роста поперечный размер частиц β'' -фазы изменяется незначительно. Частицы растут вдоль направления $Al_{\{100\}}$ (Рис. 1). Преимущественное скольжение дислокаций идет в плоскостях $\{111\}$, при этом площадь перерезания остается постоянной, силу F_m можно считать постоянной и описывать процесс упрочнения, согласно (3), от частиц β'' -фазы одной функциональной зависимостью $\Delta\sigma_{\beta''} \propto \lambda^{-1}$.

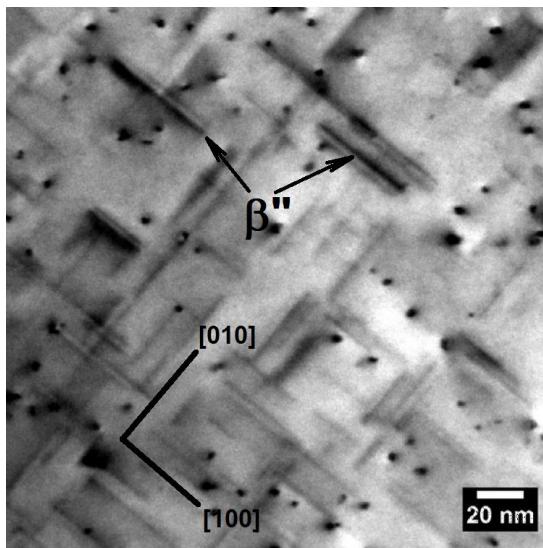


Рис. 1. Структура сплава $Al-Mg-Si$, состаренного при 180°C (Просвевающая электронная микроскопия).

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. В предположении, что рост игольчатой и сферической частицы имеет одинаковый

функциональный вид $L(t, T) \propto R(t, T)$, вклад в упрочнение от частиц запишем как:

$$\Delta\sigma_{\beta''}(t, T) = \alpha_{\beta''} \left\{ \rho(t, T) \bar{R}(t, T) \right\}^{1/2}, \quad (10)$$

здесь $\rho(t, T)$ – объемная концентрация игольчатых частиц; $\bar{R}(t, T)$ – средний размер частиц; $\alpha_{\beta''}$ – константа упрочнения, являющаяся подгоночным параметром модели.

Учитывая распределение частиц по размерам, которое определяется моделью эволюции микроструктуры, формулу (10) можно обобщить следующим образом. Для вклада в упрочнение от частиц из i -ого размерного интервала $[R_i; R_{i+1}]$, в соответствии с (10) имеем:

$$\Delta\sigma_{\beta''}^i(t, T) = \alpha_{\beta''} \left\{ \rho_i(t, T) \bar{R}_i(t, T) \right\}^{1/2}, \quad (11)$$

где $\rho_i(t, T)$ число частиц в i -ом интервале размеров, а $\bar{R}_i(t, T)$ их средний размер.

Используя связь между объемной долей, концентрацией и размером частиц ($f \sim \rho R^3$), запишем упрочнение (10), вносимое частицами β'' -фазы в виде:

$$\sigma_{\beta''}(t, T) = \alpha_{\beta''} \frac{f_{\beta''}^{1/2}(t, T)}{\bar{R}_{\beta''}(t, T)}, \quad (12)$$

Таким образом, упрочнение частиц зависит как от объемной доли $f_{\beta''}(t, T)$, так и от их размера $\bar{R}_{\beta''}(t, T)$. На Рис. 2 приведены кривые, отражающие зависимость предела текучести от времени выдержки при старении.

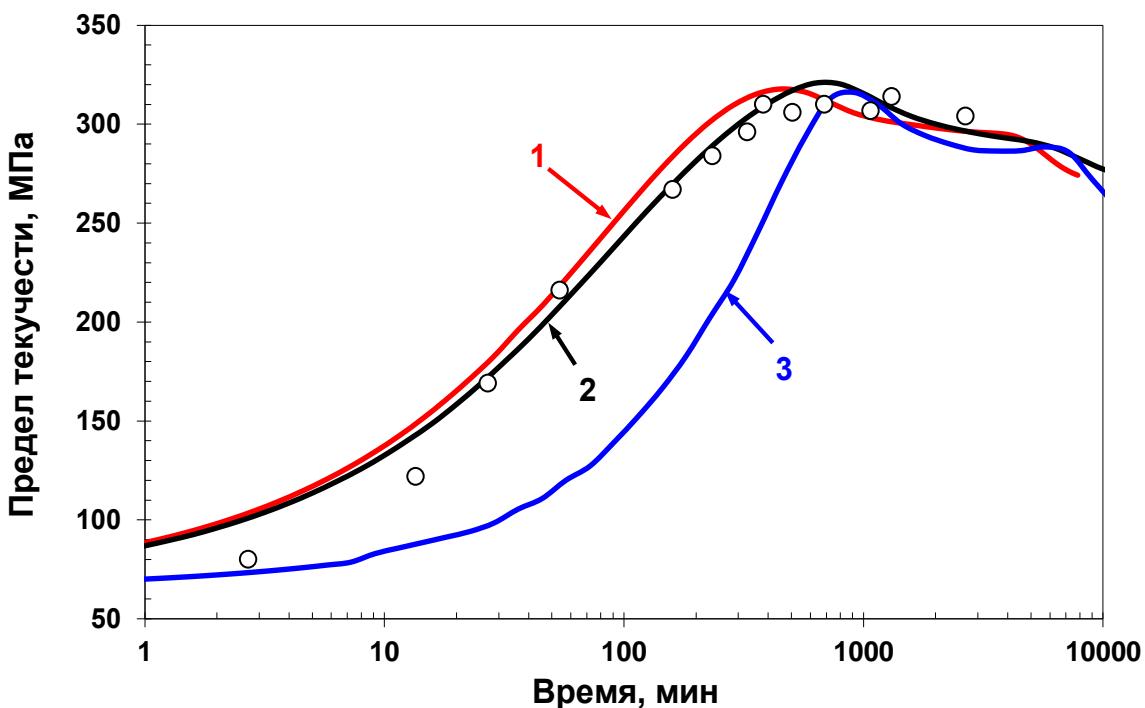


Рис. 2. Зависимость предела текучести от длительности выдержки при старении: кривая 1 – на основе объемной доли и среднего радиуса; кривая 2 – с использованием функции распределения (среднегеометрическое усреднение); кривая 3 – с использованием функции распределения (среднеарифметическое усреднение).

Как следует из результатов расчетов, при использовании выражения (12), наилучшее согласие с экспериментом, дает выбор в качестве $\bar{R}_{\beta''}(t, T)$ максимального радиуса частиц в системе (Рис. 2, кривая 1). При использовании функции распределения и выражения (11) лучшее согласие с экспериментом дает среднегеометрическое усреднение (Рис. 2, кривая 2). Таким образом, упрочнение от частиц β'' -фазы запишется в виде:

$$\Delta\sigma_{\beta''}(t, T) = \alpha_{\beta''} \left\{ \sum_i (\Delta\sigma_{\beta''}^i(t, T))^2 \right\}^{1/2} = \alpha_{\beta''} \left\{ \sum_i \rho_i(t, T) \bar{R}_i(t, T) \right\}^{1/2}. \quad (13)$$

Используя (6) и (13), для полного вклада в упрочнение от частиц фазовых выделений можно записать:

$$\sigma_u(t, T) = \sqrt{\left(\alpha_{3ГП} f_{3ГП}(t, T) \right)^2 + \alpha_{\beta''}^2 \sum_i \rho_i(t, T) \bar{R}_i(t, T)}. \quad (14)$$

Использованный способ суперпозиции вкладов, вносимых различными типами частиц, дает лучшие результаты, нежели простое суммирование (аддитивная суперпозиция). Этот момент согласуется с тем, что для рассматриваемых типов частиц объемные плотности и вклады в упрочнение являются сопоставимыми. Такой подход позволяет с хорошей точностью описать упрочнение, как в случае одноступенчатых, так и многоступенчатых режимов старения, в том числе, при комнатной температуре [7].

Модель позволяет учсть влияние низкотемпературного предварительного старения на изменение окончательного уровня предела текучести. В качестве примера на Рис. 3 представлено сравнение результатов моделирования двухступенчатого старения (2 стадия старения 160 °C, после старения при 20 °C: 0, 24, 48, 96 часов) с данными эксперимента для сплава Al-1.17Mg-1.17Si.

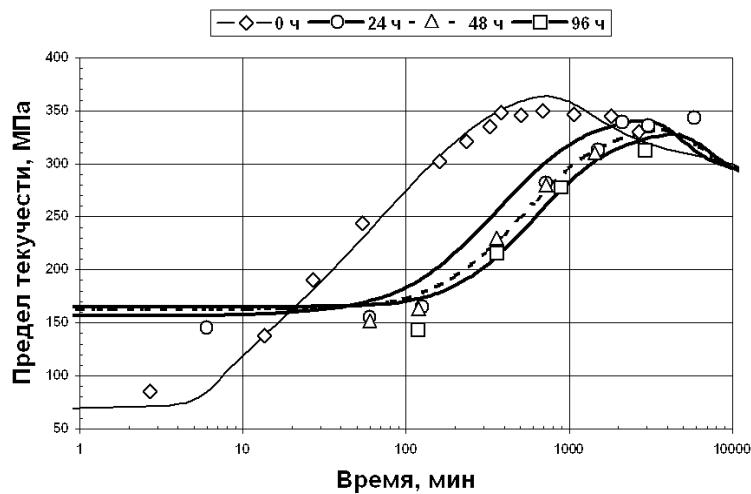


Рис. 3. Изменение предела текучести сплава Al-1.17Mg-1.17Si при 160 °C после предварительного старения (20°C/ 0; 24; 48; 96 час). Точки на кривых – экспериментальные значения предела текучести. Кривые – результаты моделирования (тонкая линия – одноступенчатое старение).

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. На Рис. 4 представлена интегральная кривая, показывающая насколько величина пика предела текучести, достигаемого при 160 °C, зависит от длительности старения при комнатной температуре.

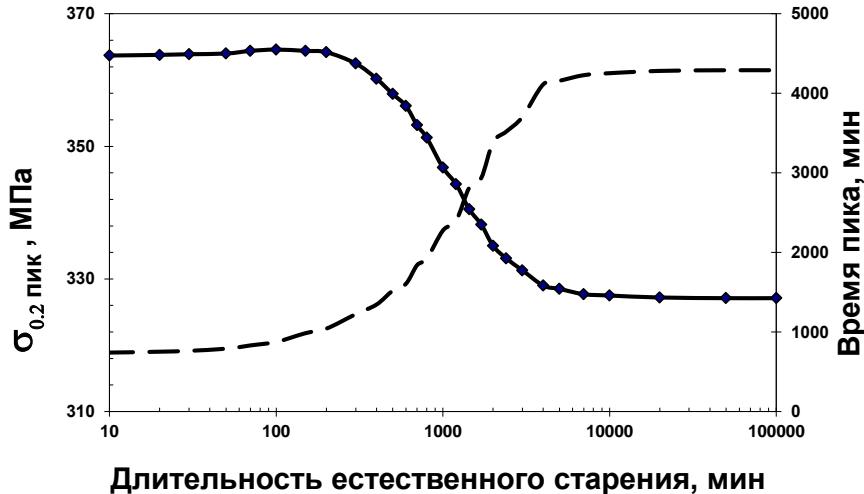


Рис. 4. Зависимость пика предела текучести (сплошные линии) и времени достижения пика при 160°C старении для сплава Al-1.17Mg-1.17Si от длительности предварительного естественного старения.

На практике для подавления эффекта естественного старения образцы подвергают предварительному старению при 100 °C. Такая обработка заключается в их выдержке в кипящей воде сразу после закалки, которая обычно имеет длительность ~20÷60 минут. Разработанная модель позволяет имитировать этот практически важный эффект (эффект стабилизации). На Рис. 5 приведены соответствующие результаты, демонстрирующие влияние стабилизирующего старения сплава Al-1.17Mg-1.17Si на ход упрочнения в процессе дальнейшего старения при 160 °C.

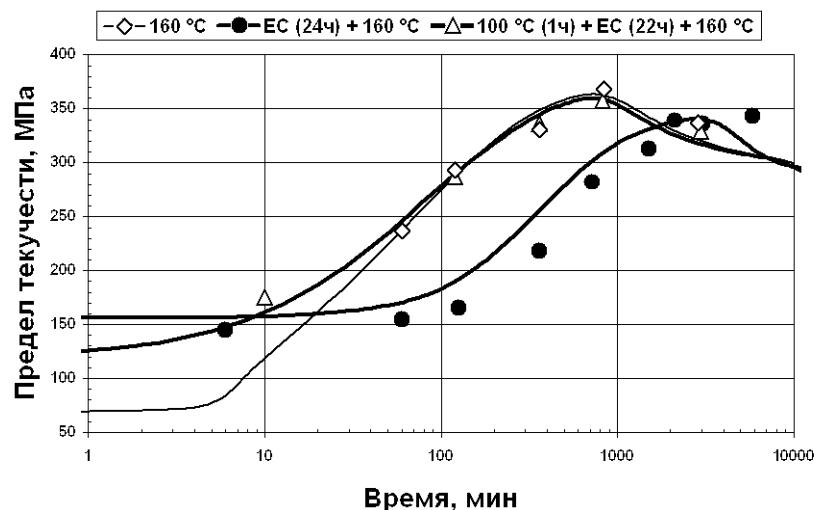


Рис. 5. Изменение предела текучести сплава Al-1.17Mg-1.17Si в процессе одно-, двух- и трехступенчатого старения. Точки – экспериментальные значения. Кривые – результаты моделирования.

Видно, что модель предсказывает наблюдаемый экспериментально эффект

минимизации отрицательного влияния естественного старения после часовой стабилизации материала при 100 °С. Стабилизирующую обработку, проводимую сразу после закалки, нетрудно вписать в технологический процесс. Положительный эффект, связанный с этим, довольно очевиден (Рис. 5).

3. Выводы

- 1) Установлено, что упрочнение стареющих сплавов системы Al-Mg-Si зависит как от объемной доли, так и размера частиц фаз, выделяющихся в процессе старения.
- 2) С помощью математического моделирования описан вклад основных выделений – ЗГП и β'' -фазы в упрочнение стареющих сплавов Al-Mg-Si с учетом последовательности метастабильных состояний после закалки в условиях многоступенчатого старения.
- 3) На основе анализа структурных исследований метастабильных выделений в сплаве Al-Mg-Si предложено описание упрочнения сплава в процессе старения, учитывающее форму частиц в процессе их роста, а также распределение частиц по размерам.
- 4) Использование функции распределения частиц, учет формы выделений и рассмотрение конкурирующих между собой двух упрочняющих фаз позволяет с высокой точностью описать экспериментальные данные по изменению предела текучести сплава в процессе старения, в том числе многоступенчатого, которое позволяет достичь повышения прочности сплава.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (Проект 14.750.31.0018).

Литература

- [1] А. Келли, Р. Николсон, *Дисперсионное твердение* (Металургия, М., 1966).
- [2] B. Reppich, In: *Materials Science and Technology*, ed. by R.W. Cahn, P. Haasen, E.J. Kramer (VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 1993), Vol. 6.
- [3] O.R. Myhr, Ø. Grong, S.J. Andersen // *Acta Materialia* **49** (2001) 65.
- [4] A. Deschamps, Y. Brechet // *Acta Materialia* **47** (1999) 293.
- [5] А.А. Васильев, Ю.Ф. Титовец, Б. Бухмаер // *Известия вузов: Цветная Металлургия* **2** (1997) 36.
- [6] S. Esmaeili, X. Wang, D.J. Lloyd, W.J. Poole // *Metallurgical and Materials Transactions A* **34(3)** (2003) 751.
- [7] Ю.Ф. Титовец, Г.Е. Коджаспиров, А.С. Груздев, А.А. Васильев // *Научно-технические Ведомости ТВ СПбГПУ* **178** (2013) 169.

MODELLING OF THE FINE PRECIPITATES EFFECT STRENGTHENING OF AI-MG-SI ALLOYS UNDER AGEING

A.S. Gruzdev^{1*}, G.E. Kodzhaspиров¹, A.I. Rudskoy¹

¹St.Petersburg State Polytechnical University,
Polytechnicheskaya, 29, St. Petersburg, Russia

*e-mail: gruzdev_spb@mail.ru

Abstract. The paper presents the results of modelling by numerical simulation of the fine precipitates effect on the strengthening of Al-Mg-Si alloys under ageing. The sequence of

metastable modes including Genie-Preston Zones (GPZ) and needle-like β'' -phase particles arised during the multistep ageing in the alloy are taken into account when the strengthening effect described by the model. The utilization of the distribution function of the particles and account for the shape of precipitates allows to interpret the experimental results by changing of yield strength during ageing with a high precision and correspondingly to predict strength of the alloy.

Acknowledgment

This work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (Project 14.z50.31.0018).

References

- [1] A. Kelly, R.B. Nicholson, *Precipitation hardening* (Oxford, Pergamon Press, 1963).
- [2] B. Reppich, In: *Materials Science and Technology*, ed. by R.W. Cahn, P. Haasen, E.J. Kramer (VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim, 1993), Vol. 6.
- [3] O.R. Myhr, Ø. Grong, S.J. Andersen // *Acta Materialia* **49** (2001) 65.
- [4] A. Deschamps, Y. Brechet // *Acta Materialia* **47** (1999) 293.
- [5] A.A. Vasilyev, Yu.F. Titovets, B. Buhmaer // *Izvestia Vysshih Uchebnih Zavedenii: Tsvetnaia Metallurgy* **2** (1997) 36 (in Russian).
- [6] S. Esmaeili, X. Wang, D.J. Lloyd, W.J. Poole // *Metallurgical and Materials Transactions A* **34(3)** (2003) 751.
- [7] Yu.F. Titovets, G.E. Kodzhaspurov, A.S. Gruzdev, A.A. Vasilyev // *Scientific and Technical Statements SPbSPU* **178** (2013) 169 (in Russian).