

УДК 669.018:541.126

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ФАЗОВОГО СОСТАВА ЛИТЫХ АЛЮМИНИЕВО-ЖЕЛЕЗОКРЕМНИЕВЫХ СПЛАВОВ

¹Жилин А.С., ²Ньюкирк Д.У., ¹Ялунина В.Р., ¹Токарев В.В., ^{1,3}Быков В.А.

¹ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет им. первого Президента России Б.Н. Ельцина»,
Екатеринбург, e-mail: a.s.zhilin@urfu.ru;

²Missouri Science and Technology University, Rolla, USA;

³Институт металлургии УрО РАН, Екатеринбург

В настоящей работе показана возможность использования программного продукта Thermo-Calc Software для компьютерного моделирования с целью прогнозирования процессов фазовых превращений в литейных алюминийно-кремниевых сплавах с небольшим легированием железом до 0,5% мас. Данные сплавы широко применяются во многих отраслях промышленности, таких как машиностроение, авиастроение, химические технологии, строительство и другие. В представленной работе описана взаимосвязь между экспериментальными результатами анализа структурного состояния сплавов, полученных на плавках в лабораторных условиях, и данными моделирования в программном продукте Thermo-Calc Software. Моделирование фазового состава сплавов не позволяет полностью получить информацию о реальных компонентах структуры сплавов, однако позволяет прогнозировать температурные интервалы, в которых протекают фазовые превращения в процессе формирования структуры при охлаждении. Полученные температурные границы существования каждой фазы показывают, как изменяется концентрация кремния в анализируемых сплавах: она снижается при охлаждении во всех фазах. Для всех сплавов характерен умеренно узкий интервал кристаллизации. Компьютерное моделирование позволяет произвести выбор новых составов сплавов и технологий для их экспериментального производства на основе смоделированных диаграмм.

Ключевые слова: сплав, моделирование, алюминий, кремний, литье, фазовые превращения, структура

MODELING OF PHASE TRANSFORMATIONS FOR PREDICTION OF PHASE COMPOSITION IN CAST ALUMINUM-IRON-SILICON ALLOYS

¹Zhilin A.S., ²Newkirk D.U., ¹Yalunina V.R., ¹Tokarev V.V., ^{1,3}Bykov V.A.

¹Ural Federal University named after the first Russian President B.N. Yeltsin,

Ekatereburg, e-mail: a.s.zhilin@urfu.ru;

²Missouri Science and Technology University, Rolla, USA;

³Institute of Metallurgy Ural Branch RAS, Ekaterinburg

The present work shows the possibility of using Thermo-Calc software for computer modeling with the aim to predict the phase transformation processes in cast aluminum-silicon alloys with small alloying of iron up to 0.5% by weight. These alloys are widely used in many industries, such as engineering, aircraft, chemical technology, construction and others. The paper describes the relationship between the experimental results of analysis of structural state of alloys obtained by melting in the laboratory and the modeled data in Thermo-Calc software. Modeling of the phase composition of alloys does not allow obtaining information about the real components of the structure, but allows predicting the temperature intervals in which the phase transformations occur during the formation of the structure under cooling. The obtained temperature limits of the existence of each phase show how the concentration of silicon in the alloys changes: it decreases in all phases when the alloy is cooled. All alloys are characterized by a narrow interval of crystallization. Computer modeling allows to make a choice of new compositions of alloys and technologies for their experimental production on the basis of simulated diagrams.

Keywords: alloy, modeling, aluminum, silicon, cast, phase transformation, structure

Алюминиево-кремниевые сплавы, также называемые силуминами, а в особенности их более сложные разновидности, дополнительно легированные магнием, железом и другими металлами, являются наиболее распространенными алюминийевыми сплавами. Эти сплавы широко применяются почти во всех отраслях промышленности, особенно в авиации и химической технологии [1]. Алюминиево-кремниевые сплавы в соответствии с технологией изготовления являются литейными сплавами [2]. Силумины обладают хорошей

тепло- и электропроводностью, высокими механическими и литейными свойствами, коррозионной стойкостью [3]. Данные сплавы, как и другие сплавы, содержат примеси, которые достаточно сильно влияют на свойства. Железо является постоянной примесью в этих сплавах, поэтому все анализируемые составы содержат Fe. Этот металл необходимо вводить для улучшения технологичности сплавов, но при этом он ухудшает тепло- и электропроводность, механические свойства, снижает пластичность и пористость [4].

Цель исследования: существуют разные технологии, которые позволяют ежедневно получать большое количество конечной продукции на промышленных предприятиях [5]. Поэтому целью настоящей работы является улучшение технологичности сплавов для увеличения эффективности технологического процесса. В рамках настоящей работы предметом исследования являются фазовые превращения в анализируемых сплавах, поскольку разработка материала с передовыми свойствами может быть произведена только с учетом глубокого понимания распределения структурных составляющих в сплавах и их влияния на свойства. Основной структурной составляющей алюминиево-кремниевых сплавов является эвтектика Al-Si. Настоящая работа демонстрирует, как компьютерное моделирование может помочь в поиске составов экспериментальных сплавов, которые будут в дальнейшей работе получены металлургическими методами.

Материалы и методы исследования

Материалом исследования являлись сплавы на основе алюминия, содержащие различное количество кремния, от 0 до 12% Si (по массе), а также небольшое количество железа (до 0,5% по массе). Анализируемые составы сплавов приведены в таблице. Выбор приведенных составов объясняется особенностями технологии производства сплавов – тем, что железо улучшает заполнение формы при производстве сплава по литейным технологиям. Поэтому необходимо знать, какие железосодержащие фазы будут формироваться в процессе производства. С алюминием железо образует интерметаллические фазы различных типов. Вариация кремния также необходима для лучшего понимания интервалов кристаллизации каждого состава.

Моделирование было реализовано на программном обеспечении «ThermoCalc Software 9.0» в Институте материаловедения, Университет науки и технологий Миссури, штат Миссури, США.

Анализируемые сплавы

Сплав	Химический состав		
	Al (%)	Si (%)	Fe (%)
Сплав 1	92%	6%	2%
Сплав 2	94%	4%	2%
Сплав 3	96%	2%	2%
Сплав 4	93,5%	6%	0,5%
Сплав 5	95,5%	4%	0,5%
Сплав 6	97,5%	2%	0,5%

Результаты исследования и их обсуждение

При моделировании составов были получены кривые распределения фаз в зави-

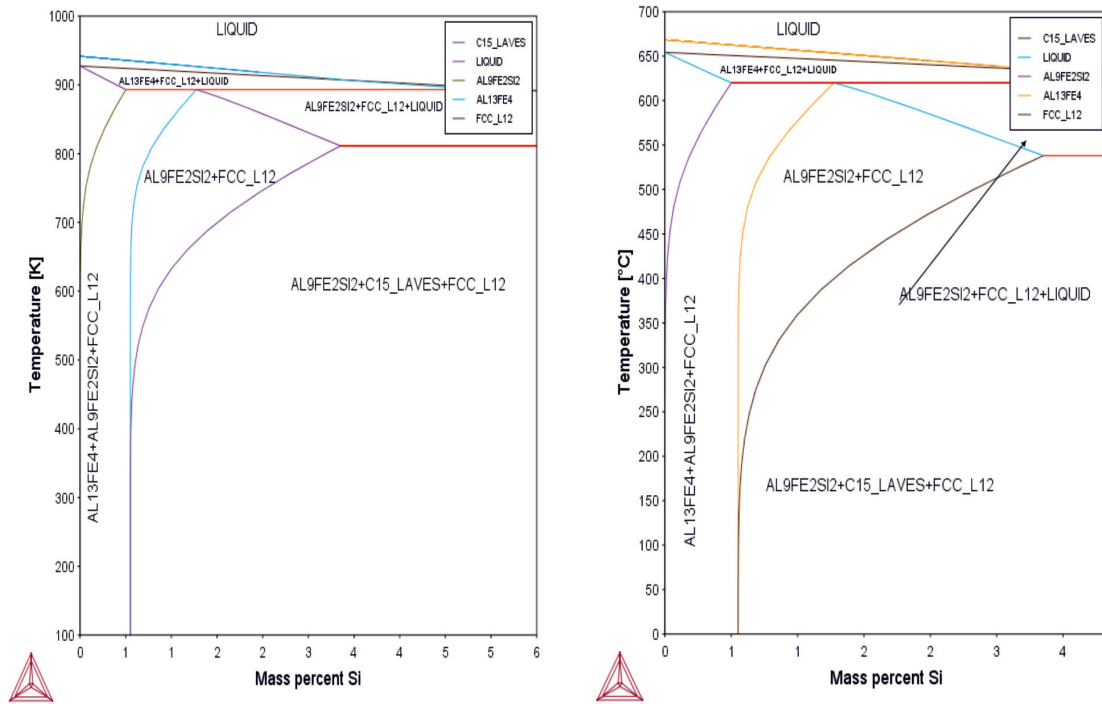
симости от изменения концентрации кремния (рис. 1, 2). На полученных фазовых диаграммах можно определить области существования твердых растворов, кристаллизацию вторичных фаз и равновесные кривые жидкой и твердой фаз. Моделируемые результаты соответствуют теоретическим представлениям [2–3]. Добавление железа влияет на стабильность железосодержащих фаз в превращениях «жидкая фаза + твердая фаза = твердая фаза». Полученные температурные границы существования каждой фазы показывают, как изменяется концентрация кремния: она снижается при охлаждении во всех фазах. Во всех сплавах наблюдается умеренно узкий интервал кристаллизации.

Показано, что увеличение содержания кремния в сплавах приводит к различиям начала и конца кристаллизации, положению интервалов кристаллизации и положению превращений «жидкая фаза + твердая фаза = твердая фаза». Наличие не всех смоделированных фаз в реальных сплавах было подтверждено металлографией, однако в процессе кристаллизации при низких скоростях охлаждения жидкая фаза может иметь зоны с аномальным химическим составом, которые образуются за счет снижения содержания легирующих элементов в жидкой фазе, расположенной между кристаллами растущих твердых растворов. В то время как кристаллы твердого раствора или химического соединения растут, содержание легирующих элементов в жидкой фазе значительно снижается. Это приводит к образованию зон с неравномерным распределением легирующих элементов в жидкой фазе.

Предполагается, что железосодержащие фазы при высокой температуре насыщаются кремнием. Это приводит к диффузии кремния из железосодержащих фаз в процессе дальнейшего охлаждения до 250 °С.

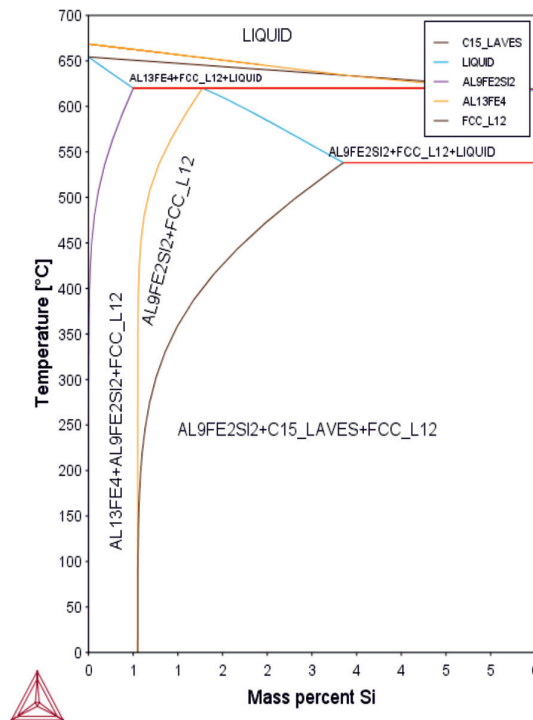
Заключение

Таким образом, моделирование позволяет получить представление о фазовом составе в высокотемпературной области и ожидаемых температурных интервалах фазовых превращений, а также о значениях изменений процентного содержания элементов в фазах во время кристаллизации при низких скоростях охлаждения. На основе смоделированных диаграмм становится возможным произвести выбор новых составов сплавов и технологий для их экспериментального производства.



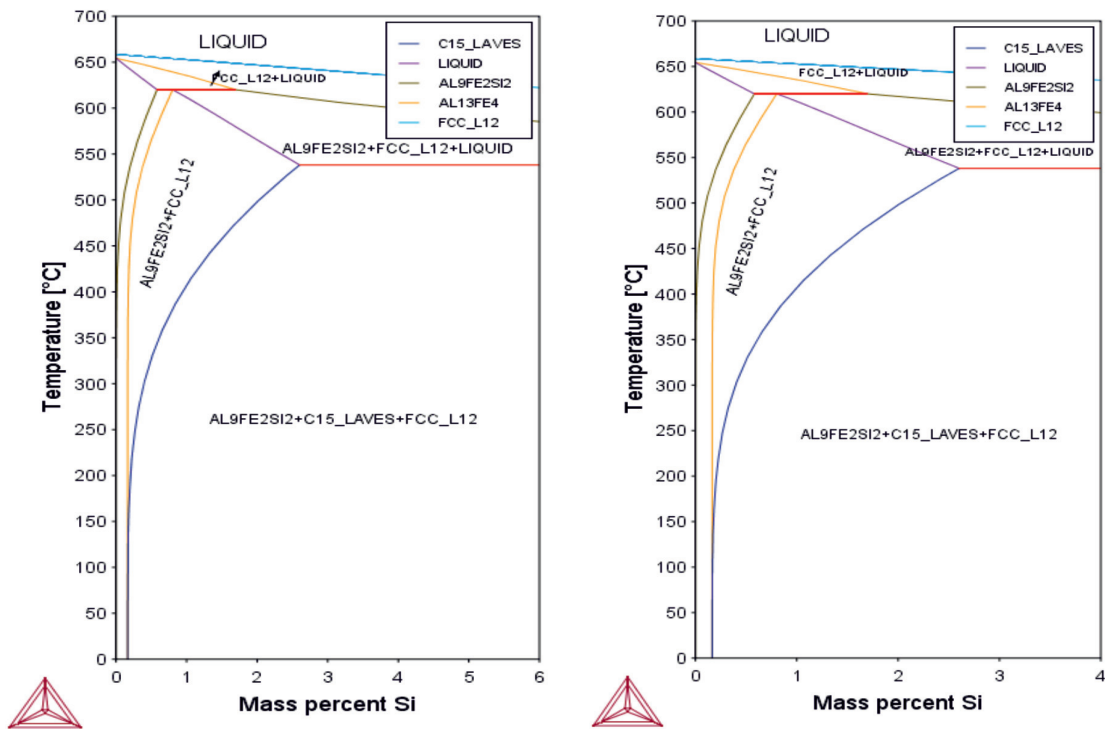
a)

б)



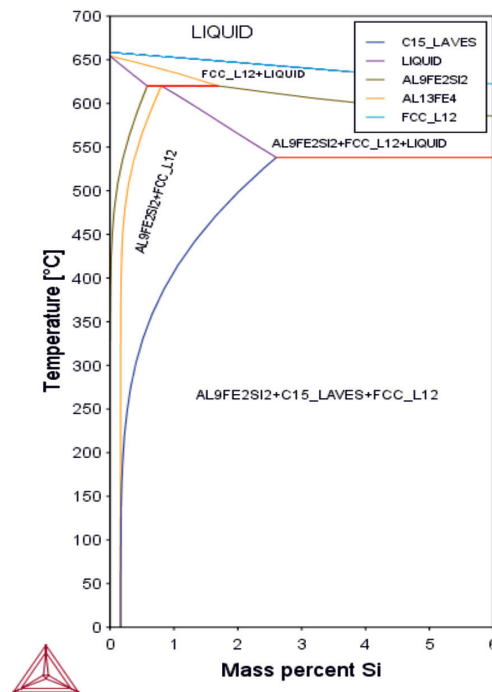
в)

Рис. 1. Полученные фазовые диаграммы:
 а) 92%Al – 6%Si – 2%Fe; б) 94%Al – 4%Si – 2%Fe; в) 96%Al – 2%Si – 2%Fe



a)

b)



c)

Рис. 2. Полученные фазовые диаграммы:
 а) 93,5%Al – 6%Si – 0,5%Fe; б) 95,5%Al – 4%Si – 0,5%Fe; в) 97,5%Al – 2%Si – 0,5%Fe

В последующих работах будет рассмотрено влияние снижения концентрации кремния в каждой фазе на окончательное распределение структурных составляющих в экспериментальных сплавах, работающих при комнатной температуре. Основная цель последующей работы – выяснить, как конечные свойства экспериментальных сплавов коррелируют с прогнозируемыми свойствами, а также провести внедрение современных методов моделирования в процесс разработки сплавов. Это необходимо для более полного понимания процессов формирования реальной структуры.

Список литературы

1. Tanski T., Labisz K., Krupinska B., Krupinski M., Krol M., Maniara R., Borek W. Analysis of crystallization kinetics of cast aluminum-silicon alloy. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2016. vol. 123 (1), pp. 63–74.
2. Kim Y.-M., Kang D.-S., Hong S.-K., Kim Y.-C., Kang C.-S., Choi S.-W. Influence of variation in the silicon content on the silicon precipitation in the Al–Si binary system. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2017. vol. 128 (1), pp. 107–113.
3. Ye H. An overview of the development of Al-Si-alloy based material for engine applications. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2003. vol. 12 (3), pp. 288–297.
4. Taylor J.A. Iron-containing intermetallic phases in Al-Si based casting alloys. 11th International Congress On Metallurgy & Materials Sam/Conamet 2011, 2012. vol. 1, pp. 19–33.
5. Jablonski M., Knych T., Mamala A., Smyrak B., Wojtaszek K. Influence of Fe and Si addition on the properties and structure conductivity aluminium. *Archives of Metallurgy and Materials*, 2017. vol. 62 (3), pp. 1541–1547.