

ФИЗИКАЛЫҚ ПРОЦЕСТЕРДІ ҮЛГІЛЕУДІҢ МАТЕМАТИКАЛЫҚ ӘДІСТЕРІ  
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ  
MATHEMATICAL METHODS FOR MODELLING PHYSICAL PROCESSESDOI 10.51885/1561-4212\_2024\_1\_244  
MPHTI 53.39.31А.Р. Толеуова<sup>1</sup>, В.А. Андреященко<sup>2</sup>Карагандинский технический университет имени Абылкаса Сагинова,  
г. Караганда, Казахстан<sup>1</sup>E-mail: rymkul.ainagul@mail.ru\*<sup>2</sup>E-mail: vi-ta.z@mail.ruКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ФОРМИРОВАНИЯ  
АЛЮМИНЕВОЙ МАТРИЦЫ С ПОМОЩЬЮ ПРОГРАММЫ THERMO-CALCTHERMO-CALC БАҒДАРЛАМАСЫНЫҢ КӨМЕГІМЕН АЛЮМИНИЙ МАТРИЦАСЫН  
ҚАЛЫПТАСТЫРУ ПРОЦЕСІН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛДЕУCOMPUTER SIMULATION OF THE PROCESS OF FORMING AN ALUMINUM MATRIX  
USING THE THERMO-CALC PROGRAM

**Аннотация.** На сегодняшний день Республика Казахстан имеет высокий потенциал развития производства, переработки и получения продукции из алюминиевых сплавов местного содержания при условии актуализации модернизации текущих производств или создания новой группы алюминиевых сплавов. Для этого имеются все необходимые ресурсы, а именно: наличие сырья, достаточно дешевая электроэнергия, рост цен на металлы.

Одним из решений данной проблемы является использование современных технологических решений по созданию группы алюминиевых сплавов из отечественного сырья.

Основной целью статьи являлось научное обоснование химического и фазового составов термически стабильных алюминиевых сплавов с повышенным содержанием примесей (прежде всего, кислорода и азота).

Методология научных исследований базируется на разработках в области исследования фазовых равновесий и построения фазовых диаграмм многокомпонентных металлических систем.

В статье приведен анализ диаграммы состояния системы Al – Fe – Si с использованием программы «Thermo-Calc»: построены и проанализированы политемпературные разрезы с целью определения концентрационных границ появления первичных кристаллов Fe-содержащих фаз. На основе расчета параметров первичной кристаллизации Fe- и Al-содержащих фаз показана возможность оценки эффективности легирования данных сплавов такими элементами, как углерод, кислород, азот.

С практической точки зрения комплекс предлагаемых исследований позволит научно обосновать и разработать новые технологии получения и обработки полуфабрикатов и готовых изделий из сплавов на основе алюминия и функциональных материалов с заданной структурой.

**Ключевые слова:** алюминий, сплавы, легирование, разрез политемпературный.

**Аңдатпа.** Бүгінгі таңда Қазақстан Республикасының қазіргі өндірісті жаңғыртуды өзектендіру немесе алюминий қорытпаларының жаңа тобын құру шартымен жергілікті құрамдағы алюминий қорытпаларынан өндіруді, қайта өңдеуді және дайын өнімді алуды дамытудың жоғары әлеуетіне ие. Ол үшін барлық қажетті ресурстар бар, атап айтқанда: шикізаттың болуы, айтарлықтай арзан электр энергиясы және металдар бағасының өсуі.

Бұл мәселенің шешімдерінің бірі – отандық шикізаттан алюминий қорытпалары тобын құру үшін заманауи технологиялық шешімдерді қолдану.

Мақаланың негізгі мақсаты жоғары қоспалары бар (ең алдымен оттегі мен азот) термиялық тұрақты алюминий қорытпаларының химиялық және фазалық құрамдарын ғылыми негіздеу болды.

Ғылыми зерттеу әдістемесі фазалық тепе-теңдікті зерттеу және көп компонентті металл жүйелерінің фазалық диаграммаларын құру саласындағы әзірлемелерге негізделген.

Мақалада «Thermo-Calc» бағдарламасын қолдана отырып, Al – Fe – Si жүйесінің күй диаграммасының талдауы берілген, құрамында Fe фазалары бар бастапқы кристалдардың пайда болуының концентрациялық шекараларын анықтау мақсатында политермиялық кесінділер салынып талданған. Fe және Al-құрамды фазалардың бастапқы кристалдану параметрлерін есептеу негізінде бұл қорытпаларды көміртегі, оттегі, азот сияқты элементтермен легирлеудің тиімділігін бағалау мүмкіндігі көрсетілген.

Тәжірибелік тұрғыдан алғанда, ұсынылған зерттеулер кешені берілген құрылымы бар алюминий және функционалды материалдар негізінде қорытпалардан жартылай фабрикаттар мен дайын өнімдерді алу мен өңдеудің жаңа технологияларын ғылыми негіздеуге және жасауға мүмкіндік береді.

**Түйін сөздер:** алюминий, қорытпалар, легирлеу, политермиялық кесінді

**Abstract.** To date, the Republic of Kazakhstan has a high potential for the development of production, processing and production of finished products from aluminum alloys of local content, provided that the modernization of current production facilities is updated or a new group of aluminum alloys is created. To do this, there are all the necessary resources, namely: the availability of raw materials, fairly cheap electricity, rising metal prices.

One of the solutions to this problem is the use of modern technological solutions to create a group of aluminum alloys from domestic raw materials.

The main purpose of the article was the scientific substantiation of the chemical and phase compositions of thermally stable aluminum alloys with an increased content of impurities (primarily oxygen and nitrogen).

The methodology of scientific research is based on developments in the field of the study of phase equilibria and the construction of phase diagrams of multicomponent metal systems.

The article presents an analysis of the state diagram of the Al – Fe – Si system using the Thermo-Calc program: polythermal sections were constructed and analyzed in order to determine the concentration boundaries of the appearance of primary crystals of Fe-containing phases. Based on the calculation of the parameters of the primary crystallization of Fe and Al-containing phases, the possibility of evaluating the efficiency of alloying these alloys with elements such as carbon, oxygen, nitrogen is shown.

From a practical point of view, the complex of proposed studies will allow to scientifically substantiate and develop new technologies for the production and processing of semi-finished products and finished products from aluminum-based alloys and functional materials with a given structure.

**Keywords:** aluminium, alloys, alloying, polythermal sections.

*Введение.* В современном мире материаловедения в настоящее время разработка сплавов алюминия и композитов из них приобретает все большее значение. И одним из актуальных решений данного вопроса является механическое сплавление, так как разработка инновационных технологий изготовления различных металлоизделий из алюминиевых сплавов, которые бы обеспечили хорошие эксплуатационные характеристики и повышенные экономические показатели, на сегодняшний день является одной из актуальных задач материаловедения в области получения новых сплавов. Реализация технологии послойного синтеза или использование аддитивных технологий с целью получения металлических изделий значительно ускоряют решение данной задачи и, соответственно, выпуск готовой продукции значительно сокращается.

Аддитивные технологии на сегодняшний день являются одним из наиболее перспективных направлений получения новых материалов.

Для изготовления сложнопрофильных габаритных изделий используют литейные и сварочные технологии или их комбинацию. В зависимости от назначения изделия изготавливаются из различных сплавов, которые могут значительно отличаться по составу и свойствам. Алюминиевые сплавы делятся на две большие группы: деформируемые и литейные. Литейные сплавы по совокупности механических характеристик, как правило, уступают деформируемым сплавам. Деформируемые и литейные сплавы, в свою очередь,

подразделяют на упрочняемые термической обработкой и не упрочняемые термической обработкой [1].

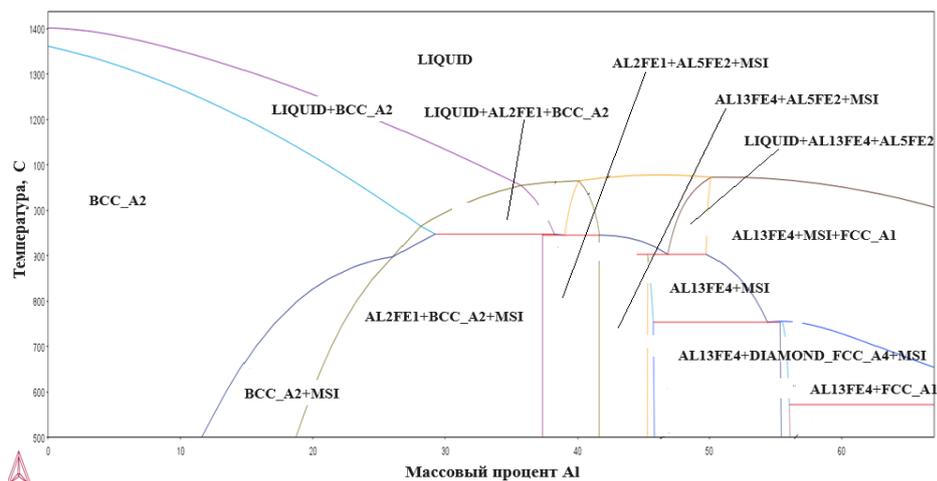
Целью данного исследования является разработка возможной технологии синтеза композиционных керамических материалов системы  $Al_xFe_ySi$  с использованием аддитивного метода для повышения качества структуры материалов и деталей на их основе.

*Материалы и методы исследования.* Для более обоснованного выбора необходимых концентраций легирующих элементов и подбора режимов термической обработки требуется всесторонний анализ, как минимум (без учета примесей и малых добавок, попадающих в сталь при выплавке), тройной системы Al – Fe – Si. Такой анализ был проведен с помощью современной компьютерной программы Thermo-Calc.

Компьютерный продукт Thermo-Calc представляет собой программу для расчета фазовых равновесий, основной принцип работы: алгоритм глобальной минимизации энергии Гиббса многокомпонентных систем. Также с помощью данной программы возможен расчет термодинамических свойств фаз (энергии Гиббса, энтальпии и др.), метастабильных равновесий. Основной характерной чертой этой программы является ее модульность, расширяемость, пополнение банка данных различных элементов для разных систем (металлические, солевые, оксидные, водные растворы и т.д.). Также данная программа позволяет проводить расчет фазовых диаграмм многокомпонентных систем (построение политермических и изотермических разрезов, расчет фазового состава, построение кривых охлаждения), что и было сделано в данной работе.

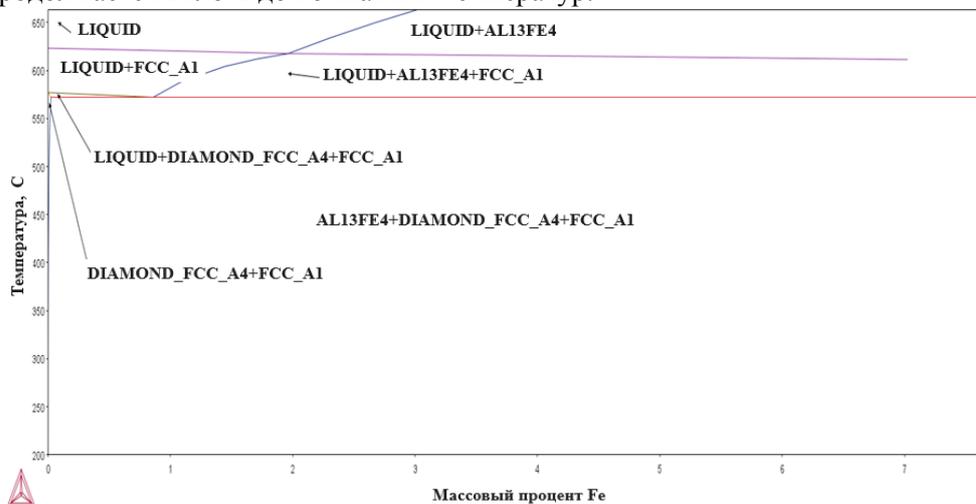
В работе в качестве двух сплавляющих поверхностей рассматривалась сталь 3 и сплав системы  $Al_xFe_ySi$ .

На рис. 1 представлен политермический разрез системы  $Al_{62}-Fe_{30}-Si_8$  при переменном содержании алюминия и постоянном содержании кремния 8 % и железа 30 %. Как видно из данного разреза, кристаллизация сплава начинается с образования твердого раствора алюминия, имеющего решетку ОЦК, далее идет выделение фаз  $Al_2Fe$ ,  $Al_5Fe_2$  в интервале температур 950-1100 °С и протекает данное фазовое превращение вплоть до 550 °С. Также стоит отметить, что при температуре примерно 880 °С имеется твердофазное эвтектоидное превращение по следующей реакции:  $Al_2Fe + Al_5Fe_2 + FeSi \rightarrow Al_{13}Fe_4$ . Образование фазы  $Al_{13}Fe_4$  идет вплоть до комнатной температуры.



**Рисунок 1.** Политермический разрез тройной системы  $Al_{62}-Fe_{30}-Si_8$  с фиксированным содержанием кремния и алюминия

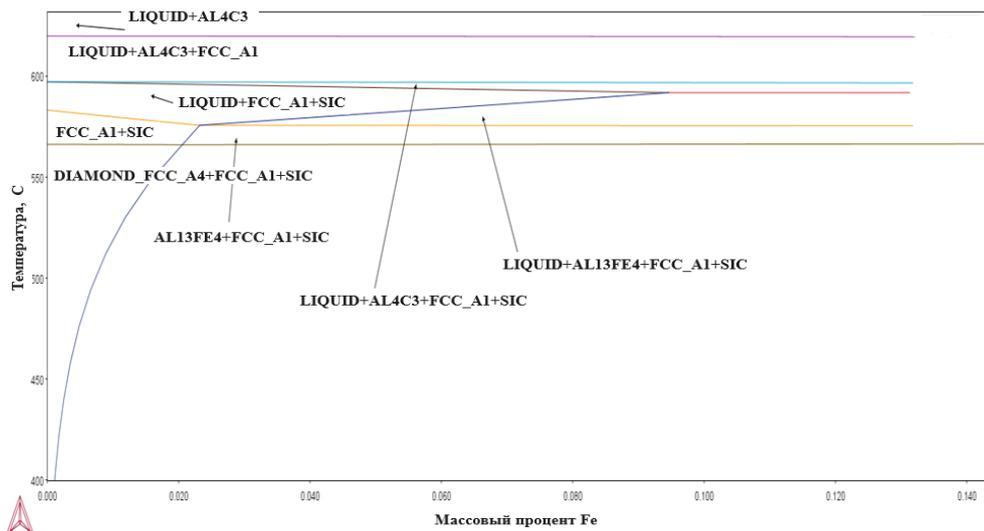
На рис. 2 представлен политермический разрез системы Al72-Fe22-Si6 при переменном содержании железа и постоянном содержании кремния 6 % и алюминия 72 %. На разрезе можно увидеть кристаллизацию сплава с образованием двух фаз: алюминиевого твердого раствора с решеткой ГЦК и фазы Al13Fe4 при температуре 640-650 °С. Образование этих фаз продолжается вплоть до комнатных температур.



**Рисунок 2.** Политермический разрез тройной системы Al72-Fe22-Si6 с фиксированным содержанием кремния и алюминия

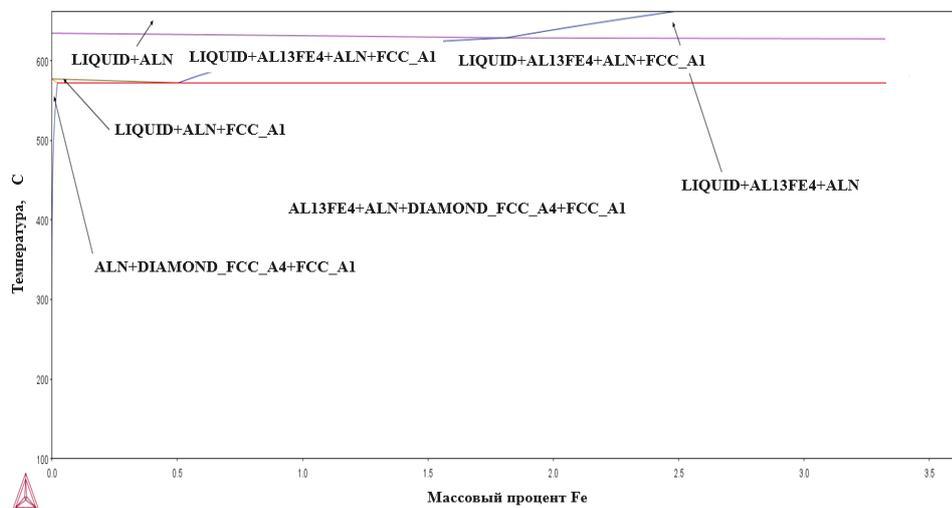
Так как в качестве подложки основного металла была выбрана сталь 3, то далее были построены и проанализированы политермические разрезы с присутствием в сплаве углерода, азота и кислорода, рассмотрено их влияние на фазовые превращения в системе.

На рис. 3 изображен политермический разрез системы Al70-Fe22-Si6-C2 при переменном содержании железа и постоянном содержании кремния 6 % и алюминия 72 %. Из разреза видно, что образование фаз Al4C3 и Al13Fe4 идет при достаточно низких температурах. Можно предположить, что частицы железа, находящиеся в расплаве, первоначально вступают во взаимодействие с алюминием и образуют на пограничных слоях фазу Al13Fe4. Вместе с этим, в расплаве, прилегающем к частице, образуется карбид алюминия Al4C3. Нужно отметить, что карбид алюминия Al4C3 образуется непрерывно в интервале температур 680-400 °С. Также параллельно идет образование карбида кремния SiC по всему сечению разреза.



**Рисунок 3.** Политермический разрез тройной системы Al70-Fe22-Si6-C2

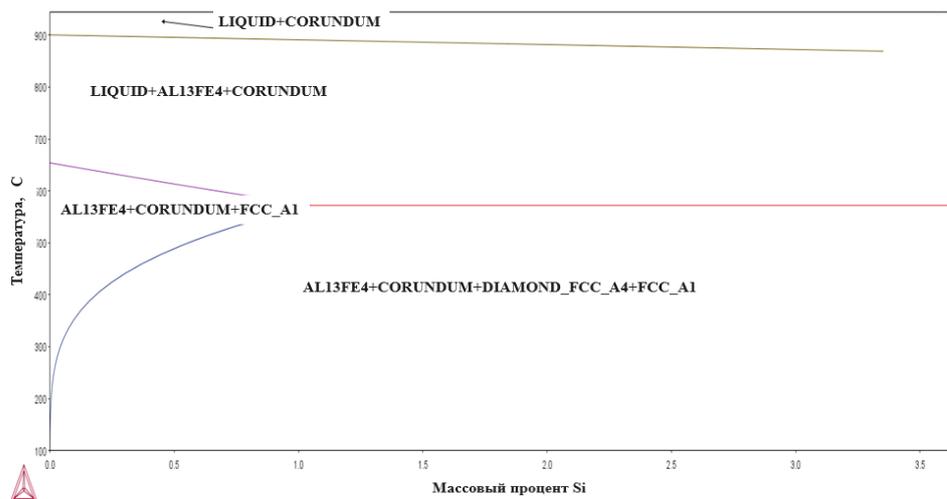
На рис. 4 изображен политермический разрез фазовой диаграммы состава Al84-Si4-Fe10-N2. Нитрид алюминия AlN начинает образовываться при температуре примерно 660-680 °C в виде пленки. При дальнейшем понижении температуры образуется поликристаллическая пленка с содержанием гексагональной фазы FCC\_A1. Нитрид алюминия относится к группе переходных металлов, что является актуальным для получения новых материалов. Изучение полиморфизма нитридов переходных металлов актуально для получения новых материалов. Нитрид алюминия обладает уникальным сочетанием физических характеристик, имеющих большое значение в практическом применении.



**Рисунок 4.** Политермический разрез тройной системы Al84-Fe10-Si4-N2

На рис. 5 изображен политермический разрез фазовой диаграммы состава Al84-Si4-Fe10-O2. Почти одновременно при температуре примерно 900 °C из жидкого алюминиевого раствора начинают кристаллизоваться фазы Al13Fe4 и Al2O3. Очевидно, что оксидная пленка будет образовываться на стыке между основным металлом и наплавляемым

материалом.



**Рисунок 5.** Политермический разрез тройной системы Al<sub>84</sub>-Fe<sub>10</sub>-Si<sub>4</sub>-O<sub>2</sub>

*Результаты и их обсуждение.* С использованием программы Thermo-Calc проведен количественный анализ тройной фазовой диаграммы Al<sub>x</sub>Fe<sub>y</sub>Si с добавлением примесей углерода, кислорода и азота. При анализе политермических сечений были определены оптимальные концентрации элементов и температуры, при которых в сплаве будут присутствовать основные фазы – упрочнители, отвечающие за высокие механические характеристики исследуемого материала.

Анализ политермических и изотермических сечений и определение фазового состава при различных температурах дает возможность прогнозировать оптимальный состав и структуру стали.

Данные, представленные в статье, являются начальным этапом при выполнении исследований по разработке технологии синтеза композиционных керамических материалов системы Al<sub>x</sub>Fe<sub>y</sub>Si с использованием аддитивного метода для повышения качества структуры материалов на их основе. В дальнейшем будет проведен полный термодинамический анализ по подбору оптимальных концентраций легирующих элементов с целью разработки рационального режима термической обработки исследуемого сплава.

*Благодарности:* настоящее исследование выполнено при финансировании Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (Грант № AP19675471) «Разработка технологии синтеза композиционных керамических материалов системы Al<sub>x</sub>Fe<sub>y</sub>Si с использованием аддитивного метода».

#### Список литературы

1. Щицын Ю.Д., Кривоносова Е.А., Неулыбин С.Д., Ольшанская Т.В., Никулин Р.Г., Федосеева Е.М., Терентьев С.А. Использование плазменной наплавки для аддитивного формирования заготовок из алюминиевых сплавов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Машиностроение, материаловедение. – 2019. – № 2 (21). – С. 63-72.
2. Сайт об алюминии. Проект компании RUSAL, лидера мировой алюминиевой отрасли. – URL: <https://aluminiumleader.ru/application/transport/> (accessed 15 March 2019).
3. Xinyue Lan et. al. Developing Al-Fe-Si alloys with high thermal stability through tuning Fe, Si contents and cooling rates // Intermetallics. – 2022. – V.144. – Article 107505.

4. J.L. Ni, F. Hu, S.J. Feng, X.C. Kan, Y.Y. Han, X.S. Liu Soft magnetic properties of FeSiAl/carbonyl iron composites with high magnetic permeability and low magnetic loss // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2021. – V.887. – Article 161337.
5. Sun C. et al. Modification of Iron-Rich Phase in Al-7Si-3Fe Alloy by Mechanical Vibration during Solidification // *Materials*. – 2023. – V. 16. – №. 5. – P. 1963.
6. Toleuova A. et al. Modifying and micro-alloying effect on carbon steels microstructure // *Solid State Phenomena*// 6th International Conference on Industrial Engineering, ICIE. - 2021/ - V. 316. – P. 359 – 363.
7. Kulikov V., Aubakirov D., Kvon S., Dostaeva A., Shcherbakova E. Use of Wear-Resistant materials in the Kazakhstani metallurgical industry // *Metallurgist*. – 2019. – V. 62 (9-10). – P. 1068 – 1072.
8. Rumana H. et al. Sahajwalla Surface modification of high carbon steel through microstructural engineering // *Materials Characterization*. – 2019. – P. 116-122.
9. Toleuova A. et al. Calculating and experimental studying phase transformations in the Al-Zr-Fe-Si system alloys // *Metalurgija*. – 2020. – V. 59 (4). – P. 543 – 546.
10. Bajaj P. et al. Steels in additive manufacturing: A review of their microstructure and properties // *Materials Science and Engineering: A*. – 2020.
11. Махонина Ю.В. и др. Образование и влияние побочных фаз  $Al_4C_3$ ,  $Al_3Ti$  на процесс СВС композиционного сплава Al – 10%TiC // *Современные материалы, техника и технологии*. – 2018. - №4 (19). – С. 59-64.
12. Andreyachshenko V.A. Evolution of Al-Si-Mn-Fe aluminum alloy microstructure in the equal-channel angular pressing with back pressure. *Materials Letters* 254 (2019), 433–435. – doi.org/10.1016/j.matlet.2019.07.127.
13. Andreyachshenko V.A., Isheva Y., Mazhit A., Imangazinova D. ECAP-treated aluminium alloy AA2030: microstructure and mechanical properties. *Materials and Technology* 53 (2019) 6, 805-810. – DOI 10.17222/mit.2018.250.
14. Z.Y. Wu, L. Kang, X.W. Liao, H. Kong, H.C. Wang, R. Wang Realizing high-resistivity and low-loss Fe–Si–Al based soft magnetic powder cores through interfacial chemistry regulation//*Ceramics International*. – 2023. – V.49. – P.19870-19878.
15. Jing Li, Xiaoling Peng, Yanting Yang, Hongliang Ge Preparation and characterization of MnZn/FeSiAl soft magnetic composites // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2019. – V. 426. – P.132-136.
16. Novák P. et al. Effect of nickel and titanium on properties of Fe-Al-Si alloy prepared by mechanical alloying and spark plasma sintering // *Materials*. – 2020. – V. 13. – №. 3. – P. 800.

#### References

1. SHCHicyn YU.D., Krivonosova E.A., Neulybin S.D., Olshanskaya T.V., Nikulin R.G., PHedossyeva E.M., Terentyev S.A. Ispol'zovanie plazmennoj naplavki dlya additivnogo formirovaniya zagotovok iz alyuminievyh splavov // *Vestnik Permskogo nacional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mashinostroenie, materialovedenie*. – 2019. – №2 (21). – S. 63-72.
2. Sajt ob alyuminii. Proekt kompanii RUSAL, lidera mirovoj alyuminievoj otrasli. – URL: <https://aluminiumleader.ru/application/transport/> (accessed 15 March 2019).
3. Xinyue Lan et. al. Developing Al–Fe–Si alloys with high thermal stability through tuning Fe, Si contents and cooling rates // *Intermetallics*. – 2022. – V.144. – Article 107505.
4. J.L. Ni, F. Hu, S.J. Feng, X.C. Kan, Y.Y. Han, X.S. Liu Soft magnetic properties of FeSiAl/carbonyl iron composites with high magnetic permeability and low magnetic loss // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2021. – V.887. – Article 161337.
5. Sun C. et al. Modification of Iron-Rich Phase in Al-7Si-3Fe Alloy by Mechanical Vibration during Solidification // *Materials*. – 2023. – V. 16. – №. 5. – P. 1963.
6. Toleuova A. et al. Modifying and micro-alloying effect on carbon steels microstructure // *Solid State Phenomena*// 6th International Conference on Industrial Engineering, ICIE. – 2021. – V. 316. – P. 359-363.
7. Kulikov V. et al. Use of Wear-Resistant materials in the Kazakhstani metallurgical industry // *Metallurgist*. – 2019. – V. 62 (9-10). – P. 1068-1072.
8. Rumana H. et al. Sahajwalla Surface modification of high carbon steel through microstructural engineering // *Materials Characterization*. – 2019. – P. 116-122.
9. Toleuova A. et al. Calculating and experimental studying phase transformations in the Al-Zr-Fe-Si system alloys // *Metalurgija*. – 2020. – V. 59 (4). – P. 543 – 546.
10. Bajaj P. et al. Steels in additive manufacturing: A review of their microstructure and properties //

Materials Science and Engineering: A. – 2020.

11. Mahonina YU.V. i dr. Obrazovanie i vliyanie pobochnyh faz  $Al_4C_3$ ,  $Al_3Ti$  na process SVS kompozitsionnogo splava Al – 10%TiC // *Sovremennyye materialy, tekhnika i tekhnologii*. – 2018. – № 4 (19). – S. 59-64.
  12. Andreyachshenko V.A. Evolution of Al-Si-Mn-Fe aluminum alloy microstructure in the equal-channel angular pressing with back pressure. *Materials Letters* 254 (2019), 433-435. – doi.org/10.1016/j.matlet.2019.07.127
  13. Andreyachshenko V.A., Isheva Y., Mazhit A., Imangazinova D. ECAP-treated aluminium alloy AA2030: microstructure and mechanical properties, *Materials and Technology* 53 (2019) 6, 805-810. DOI 10.17222/mit.2018.250
  14. Z.Y. Wu, L. Kang, X.W. Liao, H. Kong, H.C. Wang, R. Wang Realizing high-resistivity and low-loss Fe–Si–Al based soft magnetic powder cores through interfacial chemistry regulation // *Ceramics International*. – 2023. – V. 49. – P. 19870-19878.
  15. Jing Li, Xiaoling Peng, Yanting Yang, Hongliang Ge Preparation and characterization of MnZn/FeSiAl soft magnetic composites // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2019. – V. 426. – P. 132-136.
  16. Novák P. et al. Effect of nickel and titanium on properties of Fe-Al-Si alloy prepared by mechanical alloying and spark plasma sintering // *Materials*. – 2020. – V. 13. – №. 3. – P. 800.
- 
-