

«Исследование механизмов упрочнения, остаточных напряжений и микроструктуры высокопрочных алюминиевых сплавов»

Авторский коллектив:

Гизо Бокучава¹, Юлия Горшкова¹, Игорь Папушкин¹, Виталий Турченко¹, Рикардо Фернандес², Гаспар Гонсалес-Донсель², Лаура Миллан², Джованни Бруно³, Габриэль Кронбергер⁴, Патрис Халодова⁵

¹ – ЛНФ ОИЯИ

² – Национальный центр металлургических исследований, CSIC, Испания

³ – Федеральный институт исследования и испытаний материалов, Германия

⁴ – Лаборатория эвристических и эволюционных алгоритмов, Университет прикладных наук Верхней Австрии, Австрия

⁵ – Исследовательский центр Ржеж, Республика Чехия

Представленный [цикл работ](#) посвящен изучению высокопрочных алюминиевых сплавов, которые обладают высокой механической прочностью при невысокой плотности, что делает их идеальным конструкционным материалом для использования в различных отраслях промышленности, включая авиа- и ракетостроение, авто-, судо- и приборостроение, строительство и т.д. Однако зачастую при температурах выше 200 °С их механические характеристики ухудшаются из-за усиления процесса ползучести, при котором материал медленно деформируется под воздействием постоянной нагрузки при повышенных температурах. В основном ползучесть материала вызвана двумя факторами: диффузией атомов, приводящей к образованию дефектов в кристаллической решетке, и термальной активацией дислокаций, способствующей их более легкому движению в кристаллической решетке. Поэтому ползучесть материала может приводить к уменьшению прочности и деформации конструкций, а также к снижению устойчивости к разрушению под длительной нагрузкой.

Для решения проблемы ползучести в высокопрочных алюминиевых сплавах применяются различные методы. Один из них – добавление легирующих элементов, которые приводят к образованию дисперсных частиц вторичных фаз (карбиды, нитриды и т.д.), что способствует упрочнению материала и повышает устойчивость сплава к ползучести. Другой метод – проведение специальных термических обработок, которые могут привести к изменению размера и формы зерна, что помогает стабилизировать дислокационную структуру сплава и ограничивает движение дислокаций, и тем самым уменьшает склонность материала к ползучести. Однако проблема ползучести в высокопрочных алюминиевых сплавах все еще является предметом активных исследований во всем мире, направленных на разработку новых сплавов и технологических процессов для повышения прочности и стабильности этих материалов. Улучшение прочностных характеристик алюминиевых сплавов при повышенных температурах в перспективе позволит заменить более дорогие легкие сплавы (например, титановые или магниевые) в промышленных изделиях. В связи с этим особым предметом интереса является исследование механизмов ползучести алюминиевых сплавов при различных температурах и механизмов упрочнения в зависимости от термообработки, а также распределение остаточных макро- и микронапряжений в промышленных изделиях из данных материалов, что в полной мере отражено в тематике представленного цикла работ.

В работах [1-2] изучались две серии образцов алюминиевых сплавов коммерческих марок 2014Al и 2124Al, подвергнутые термообработке старением с различной продолжительностью. По результатам исследований комплементарными экспериментальными методами, включающими сканирующую электронную микроскопию (СЭМ), нейтронную и рентгеновскую дифракцию, а также малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН), было установлено, что помимо основной фазы алюминия в данных сплавах присутствуют выделения наноразмерных дисперсных частиц вторичных фаз (преципитатов). Получены данные об эволюции фаз преципитатов, а также других параметров микроструктуры изучаемых сплавов (параметры кристаллической решетки,

микродеформации, размеры частиц, содержание фаз) в зависимости от длительности термообработки. На основе этих данных сделаны модельные расчеты, которые позволили для алюминиевых сплавов 2014Al и 2124Al оценить упрочняющие вклады от атомов твердого раствора и от precipитатов в уравнении ползучести, связывающем нормированную деформацию ϵ с нормированным напряжением σ и, таким образом, описать поведение данных материалов при деформации ползучести.

Другим важным фактором, заметно влияющим на поведение ползучести алюминиевых сплавов, является конфигурация дислокационной структуры в материале. В работе [3] с помощью дифракции нейтронов и дифракции отраженных электронов (EBSD) изучалось деформационное поведение двух материалов (чистого алюминия Al-99.8% и сплава Al-3.85%Mg), которые обладают очень разными характеристиками ползучести. В случае алюминия Al-99.8% при ползучести формируется субзеренная структура, а в случае Al-Mg сплава образуются дислокационные леса (структуры из однородно распределенных дислокаций). Сопоставление данных дифракции нейтронов и EBSD-КАМ позволило сделать выводы о корреляции между дислокационными субструктурами, генерируемыми при ползучести, микродеформацией и ориентацией кристаллов, унаследованными от процесса экструзии, что приводит к разному поведению материалов при деформации ползучести.

Весьма важным аспектом для промышленного применения высокопрочных алюминиевых сплавов является изучение напряженно-деформированного состояния в изделиях из данных материалов. Как правило, в результате механической или термической обработки, а также при внешней нагрузке в материале образца возникают остаточные напряжения 1-го рода (макронапряжения), которые довольно легко определяются с помощью дифракционных методов. Макронапряжения являются приблизительно однородными по величине и направлению на протяжении макроскопических масштабов в материале, превышающих размеры нескольких зерен, и уравниваются во всем объеме образца. В работах [4-5] методом дифракции нейтронов изучались распределения остаточных макронапряжений в цилиндрических образцах из алюминиевых сплавов 5083Al и 2014Al, подвергнутых закалке и отжигу. Показано, что в закаленных цилиндрических образцах возникает параболический профиль распределения остаточных макронапряжений, унаследованный от процесса экструзии [4]. При этом максимальная величина остаточного напряжения в закаленном образце упрочняемого старением сплава 2014Al почти в 2 раза ниже, чем в нестаревшем сплаве 5083Al. Это различие полностью согласуется с результатами работы [5], в которой на основе численных расчетов по методу конечных элементов (МКЭ) установлено, что уровень остаточных макронапряжений зависит не только от термических и механических свойств сплавов, а также от параметров деформационного упрочнения материала и размеров (диаметров) цилиндрических образцов.

Кроме того, на основании анализа формы дифракционных пиков было сделано предположение о наличии значительных остаточных напряжений 2-го рода (однородных микронапряжений) в исследуемых сплавах из-за термообработки. Эти микронапряжения являются приблизительно однородными по величине и направлению на протяжении микроскопических масштабов в материале и уравниваются в пределах одного зерна. Остаточные микронапряжения зачастую возникают из-за неодинаковых упругих свойств и предела текучести в отдельных зернах материала, поэтому их определение является весьма нетривиальной задачей. Адекватная оценка уровня остаточных микронапряжений в материале имеет большое значение для оптимизации технологических процессов, поскольку они могут быть причиной усталостного повреждения и коррозионного растрескивания конструкций.

Для решения этой проблемы в работах [6-8] предложен оригинальный метод расчета остаточных микронапряжений в закаленном цилиндрическом образце экструдированного однофазного сплава 5083Al. Численные расчеты были выполнены с помощью генетического алгоритма (ГА), который представляет собой эвристический метод решения задач оптимизации на основе биологического принципа естественного отбора и является одной из разновидностей метода эволюционных вычислений – направления в классе методов искусственного интеллекта (ИИ). Входными данными для ГА являются профили нейтронных дифракционных пиков от

кристаллитов с определенной ориентацией $\langle hkl \rangle$, измеренные на нейтронном фурье-стресс-дифрактометре ФСД на реакторе ИБР-2 в ЛНФ ОИЯИ, и параметры микроструктуры, полученные методом дифракции отраженных электронов (EBSD). Алгоритм ГА присваивает значение напряжения каждому кристаллиту в соответствии с измеренными профилями нейтронных дифракционных пиков и микроструктурными параметрами кристаллитов. С помощью ГА решалась задача символьной регрессии, в ходе которой выполнялся поиск математической функции, описывающей зависимость межплоскостного расстояния кристаллической решетки d_{hkl}^n от микроструктурных параметров материала: $d_{hkl}^n = d_{hkl}^n(A_n, I_n, AR_n, S_n)$, где A_n – площадь кристаллита, I_n – количество соседних кристаллитов, AR_n – соотношение сторон кристаллита, S_n – наклон кристаллита или, $tg(\theta)$, где θ – угол между направлением длинной оси кристаллита и радиальной осью образца, n – номер кристаллита из всех измеренных EBSD. В работе [6] методом ГА, реализованном в программе HeuristicLab, было найдено наилучшее допустимое выражение для $d_{hkl}^n(A_n, I_n, AR_n, S_n)$, среди математического дерева всех возможных решений, которое полностью воспроизводит профиль дифракционного пика (111) и предсказывает значение d_{hkl}^n для каждого кристаллита n с ориентацией $\langle 111 \rangle$. Таким образом, в результате расчетов методом ГА были вычислены деформации кристаллической решетки и построена карта остаточных микронапряжений для всех кристаллитов с ориентацией $\langle 111 \rangle$ (Рис. 1). Более полное исследование на основе данных, измеренных в различных точках образца, и в котором рассмотрены семейства кристаллитов $\langle 111 \rangle$, $\langle 200 \rangle$, $\langle 220 \rangle$, $\langle 311 \rangle$, представлено в работе [7]. Кроме того, в работе [8] на примере закаленного цилиндрического образца из алюминиевого сплава 5083Al показано преимущество комбинированного использования алгоритма ГА и метода баланса напряжений для определения параметра недеформированной решетки d_0 по сравнению с обработкой отдельных дифракционных пиков или всего дифракционного спектра в целом по методу Ритвельда.

Таким образом, проведенные эксперименты показали, что уникальная методика - нейтронная корреляционная фурье-дифрактометрия по времени пролета, используемая на фурье-стресс-дифрактометре ФСД на реакторе ИБР-2, позволяет добиться высокой чувствительности прибора и обеспечивает прецизионное измерение остаточных деформаций и микродеформаций при исследовании современных конструкционных материалов. Совместное использование дифракции нейтронов высокого разрешения и других экспериментальных методов позволило использовать современные подходы для обработки данных с помощью методов искусственного интеллекта для успешного решения ряда сложных задач физического материаловедения, посвященных проблеме ползучести и остаточных (микро)напряжений в высокопрочных алюминиевых сплавах.

Исследования высокопрочных алюминиевых сплавов проводились сотрудниками ЛНФ ОИЯИ в международной коллаборации совместно с Национальным центром металлургических исследований (CENIM, CSIC) (Мадрид, Испания), Федеральным институтом исследования и испытаний материалов (BAM) (Берлин, Германия), Исследовательским центром Ржеж (Ржеж, Чешская Республика), Лабораторией Эвристических и Эволюционных Алгоритмов Университета прикладных наук Верхней Австрии (Хагенберг, Австрия), Мадридским университетом Комплутенсе (Мадрид, Испания).

Работы цикла опубликованы в высокорейтинговых журналах, включая Journal of Alloys and Compounds (IF = 6.371), Journal of Materials Research and Technology (IF = 6.267), Journal of Applied Crystallography (IF = 6.10) и Advanced Engineering Materials (IF = 2.906).

Список публикаций

1. G. Bokuchava, Yu. Gorshkova, R. Fernández, G. González-Doncel, G. Bruno, Characterization of precipitation in 2000 series aluminium alloys using neutron diffraction, SANS and SEM methods, Romanian Reports in Physics, 2019, Vol. 71, No. 1, Article No. 502, pp. 1-12
Q2 IF 1.940 <https://rrp.nipne.ro/2019/AN71502.pdf>
2. R. Fernández, G. Bokuchava, I. Toda-Caraballo, G. Bruno, V. Turchenko, Yu. Gorshkova, G. González-Doncel, Analysis of the combined strengthening effect of solute atoms and precipitates on creep of aluminum alloys, Advanced Engineering Materials, 2020, Vol. 22, 1901355. Q1 IF 2.906 <https://doi.org/10.1002/adem.201901355>
3. R. Fernández, G. Bokuchava, G. Bruno, I. Serrano-Muñoz, G. González-Doncel, On the dependence of creep on the crystal orientation in pure Al and Al-Mg, Journal of Applied Crystallography, 2023, Vol. 56, pp. 764-775.
Q1 IF 6.10 <https://doi.org/10.1107/S1600576723003771>
4. L. Millán, G. Bokuchava, R. Fernández, I. Papushkin, G. González-Doncel, Further insights on the stress equilibrium method to investigate macroscopic residual stress fields: case of aluminum alloys cylinders, Journal of Alloys and Compounds, 2021, Vol. 861, 158506.
Q1 IF 6.371 <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.158506>
5. G. Carro-Sevillano, R. Fernández, G. Bokuchava, L. Millán, G. González-Doncel, Residual stress distribution after quenching treatment obtained from diffraction experiments and simulation by finite element method, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2021, Vol. 15, No. 3, pp. 537-541.
Q3 IF 0.359 <https://doi.org/10.1134/S1027451021030071>
6. L. Millán, G. Bokuchava, J.I. Hidalgo, R. Fernández, G. Kronberger, P. Halodova, A. Sáez, I. Papushkin, O. Garnica, J. Lanchares, G. González-Doncel, Study of microscopic residual stresses in an extruded aluminium alloy sample after thermal treatment, Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques, 2021, Vol. 15, No. 4, pp.763-767.
Q3 IF 0.359 <https://doi.org/10.1134/S1027451021040145>
7. L. Millán, G. Kronberger, R. Fernández, G. Bokuchava, P. Halodova, A. Sáez-Maderuelo, G. González-Doncel, I.J. Hidalgo, Prediction of Microscopic Residual Stresses using Genetic Programming, Applications in Engineering Science (Open access journal), 2023, Vol. 15, 100141. Q2 CiteScore 2.1 <https://doi.org/10.1016/j.apples.2023.100141>
8. L. Millán-García, G. Bokuchava, P. Halodova, A. Sáez-Maderuelo, G. González-Doncel, J.I. Hidalgo, J.M. Velasco, R. Fernández, Using genetic programming and the stress equilibrium method to obtain the un-stressed lattice parameter for calculating residual stresses, Journal of Materials Research and Technology, 2023, Vol. 23, pp. 1543-1558.
Q1 IF 6.267 <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.01.045>

Prediction of Microscopic Residual Stresses using Genetic Programming

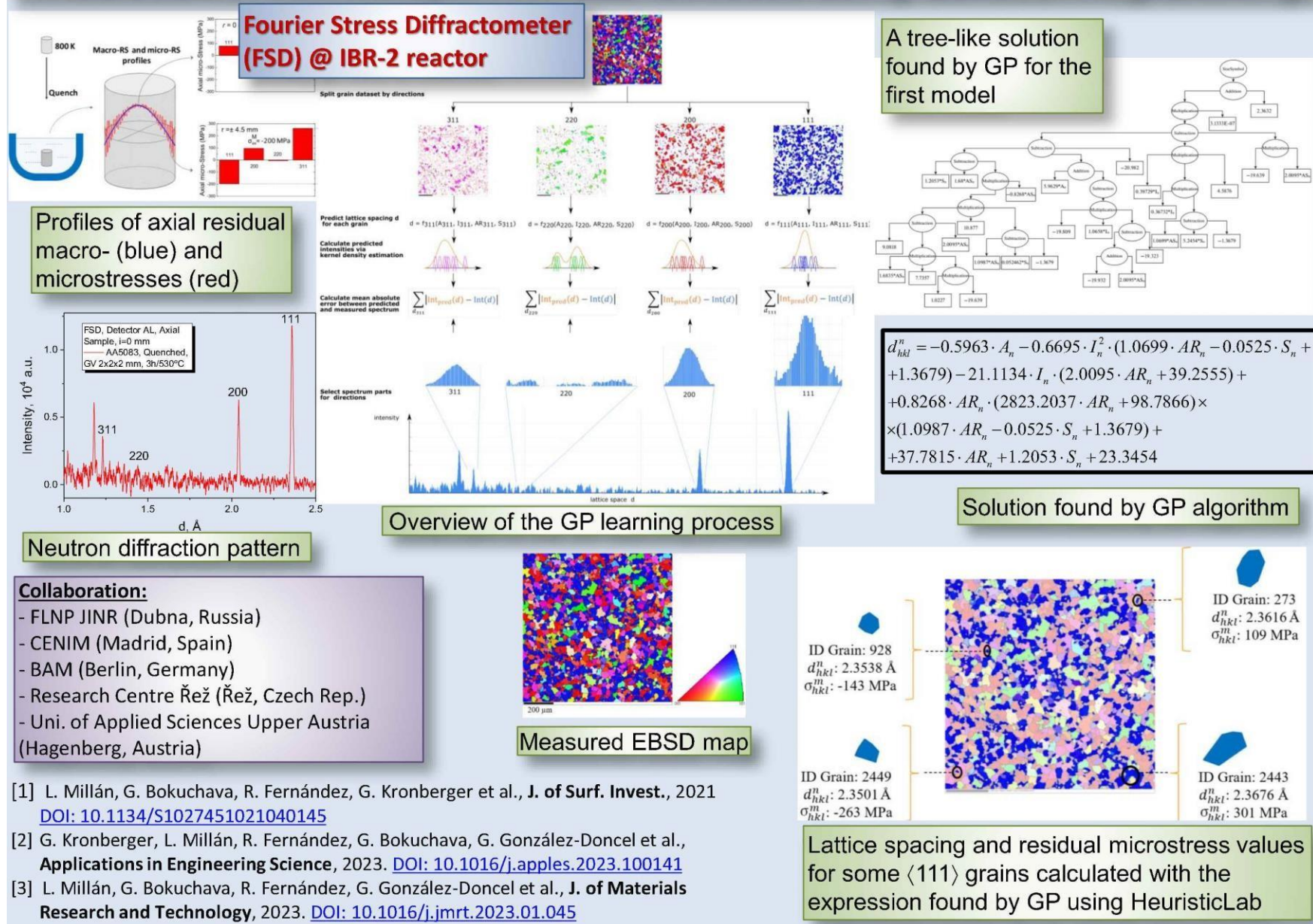


Рис. 1. Схема расчета карты остаточных микронапряжений с помощью генетического алгоритма (ГА) на основе экспериментальных данных нейтронной дифракции (фурье-стресс-дифрактометр ФСД на реакторе ИБР-2) и дифракции отраженных электронов (EBSD)