

**Даниил Дмитриевич Сацкий^{1*}, Андрей Анатольевич Редикульцев¹,
Михаил Львович Лобанов¹**

¹Уральский федеральный университет им. первого Президента РФ Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*daniil.sackii@mail.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА КОАГУЛЯЦИИ ДИСПЕРСНЫХ ВЫДЕЛЕНИЙ ВТОРЫХ ФАЗ ПРИ НЕПРЕРЫВНОМ НАГРЕВЕ

Дисперсные выделения вторых фаз используются при формировании механических и функциональных свойств множества сплавов. Размер и равномерность распределения дисперсных частиц обусловлены их коагуляцией в ходе термических обработок. Так, процесс коагуляции дисперсной фазы AlN в электротехнической анизотропной стали (ЭАС) является инициатором аномального роста зерен ориентировки (110)[001], обеспечивающей высокие магнитные свойства готовой продукции. Разработана методика моделирования процессов коагуляции дисперсных частиц на примере ЭАС. Результаты продемонстрировали значительное влияние скорости нагрева металла на процесс коагуляции. Показано изменение ингибирующей способности частиц различного размера, влияющей на температурный интервал протекания вторичной рекристаллизации.

Ключевые слова: дисперсные частицы, AlN, электротехническая анизотропная сталь, коагуляция, высокотемпературный отжиг

Daniil D. Satskii, Andrey A. Redikultsev, Mikhail L. Lobanov

COAGULATION SIMULATIONS OF SECOND PHASES DISPERSED PRECIPITATIONS DURING CONTINUOUS HEATING

Dispersed precipitations are used in the formation of the mechanical and functional properties of different alloys. The size and uniformity of dispersed particles distribution are due to the occurrence of coarsening during heat treatments. Thus, the coarsening process of the AlN precipitations in grain-oriented steel is the initiator of the anomalous grain growth of the (110)[001] orientation, which ensures high magnetic properties of the finished product. A technique has been developed for modeling the processes of coagulation of dispersed particles using the example of GO steel. The results demonstrated a significant influence of the metal heating rate on the coagulation process. A change in the inhibitory ability of particles of different sizes is shown, which affects the temperature range of secondary recrystallization.

Keywords: precipitations, AlN, second phases, GO steel, coagulation, high-temperature annealing

Развитие современной промышленности во многом обусловлено разработкой и внедрением новейших функциональных и конструкционных сплавов. Одной из возможностей повышения свойств таких материалов является понимание структурных особенностей, обеспечивающих данные материалы необходимыми при эксплуатации характеристиками.

Одним из широко используемых способов повышения механических или функциональных свойств является использование дисперсных фаз в микроструктуре сплава. Дисперсные включения активно применяются при создании жаропрочных материалов (стабилизация кристаллитов при повышенных температурах), высокопрочных сплавов [1, 2] (образование зон Гинье-Престона, дисперсионное упрочнение) и целого ряда функциональных электротехнических сплавов [3, 4] (сверхпроводники, сплавы с высокой коэрцитивной силой, магниты, электротехнические стали).

В каждом случае применения дисперсные фазы оказывают наиболее эффективное влияние в зависимости от различных характеристик (размер, форма, плотность, равномерность распределения). Контроль за перечисленными выше параметрами дисперсных частиц является ключевым процессом получения необходимых функциональных свойств используемого материала. Управление данными характеристиками производится через применение различного рода отжигов: при определенной температуре, зависимой от химического состава вторых фаз, происходит процесс коагуляции частиц – постепенное растворение мелких и рост крупных.

Так, коагуляция частиц AlN при высокотемпературном отжиге (ВТО) ЭАС является одним из ключевых факторов образования выраженной кристаллографической ориентации (110)[001] (текстура Госса), отвечающей за высокие магнитные свойства готовой продукции. Образование текстуры обусловлено корректным протеканием процесса вторичной рекристаллизации (ВР), заключающимся в ингибировании (торможении) нормального роста определенных зерен. Именно в ходе коагуляции частиц AlN происходит освобождение границ кристаллитов ориентировки (110)[001] с последующим их аномальным ростом [5].

Целью работы являлось построение алгоритма численного моделирования процессов коагуляции частиц AlN в ЭАС нитридно-медного варианта производства в ходе непрерывного нагрева при ВТО.

В качестве материала для моделирования коагуляции AlN использовался химический состав ЭАС, производимой по нитридно-медному варианту, взятый из [6], для частиц различного начального размера: 5, 25, 50, 100, 200, 400 нм.

Методика моделирования коагуляции дисперсных фаз в ходе непрерывного нагрева строится на параболическом законе [7]:

$$L = \sqrt{6D\tau}, \quad (1)$$

где L – характеристический диффузионный путь; τ – время диффузионного процесса; D – коэффициент диффузии наименее подвижного

в системе элемента (в данном случае Al), который рассчитывается при температуре процесса (T , [K]) по уравнению Аррениуса:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right), \quad (2)$$

где Q – энергия активации процесса, равная для диффузии алюминия в феррите 245,8 кДж/моль, D_0 – предэкспоненциальный множитель, равный для диффузии алюминия в феррите $-5,15E-04$ м²/с, R – универсальная газовая постоянная – 8,314 Дж/(моль·К).

Диффузионный путь атомов Al (1) принимался за размер области, в которой растет частица AlN максимального диаметра, соответствующего термодинамическому равновесию. Таким образом, с каждым i -ым шагом расчета увеличивается время и температура системы, параллельно повышающие D_{Al} и, соответственно, расстояние, проходимое атомами.

Происходящий в ходе ВТО процесс покидания азотом полосы ЭАС учитывался через зависимость $m_{AlN}(T, [N], [Al])$, показывающая массу сформированной AlN в металле в зависимости от температуры и содержания фазообразующих элементов. В ходе расчета происходит повышение температуры системы, сопровождающееся постепенным растворением частиц AlN в матрице. В связи с высокими температурами нагрева азот [N] покидает металл все интенсивнее (D_N гораздо выше D_{Al}). Через стехиометрическую зависимость находилась масса ушедшего азота и, при следующем шаге, учитывалось уменьшенное содержание [N] в системе. Таким образом, расчет повторялся с постепенным снижением концентрации азота в металле.

Результаты моделирования коагуляции частиц AlN с учетом покидания азотом полосы представлены на рисунке 1.

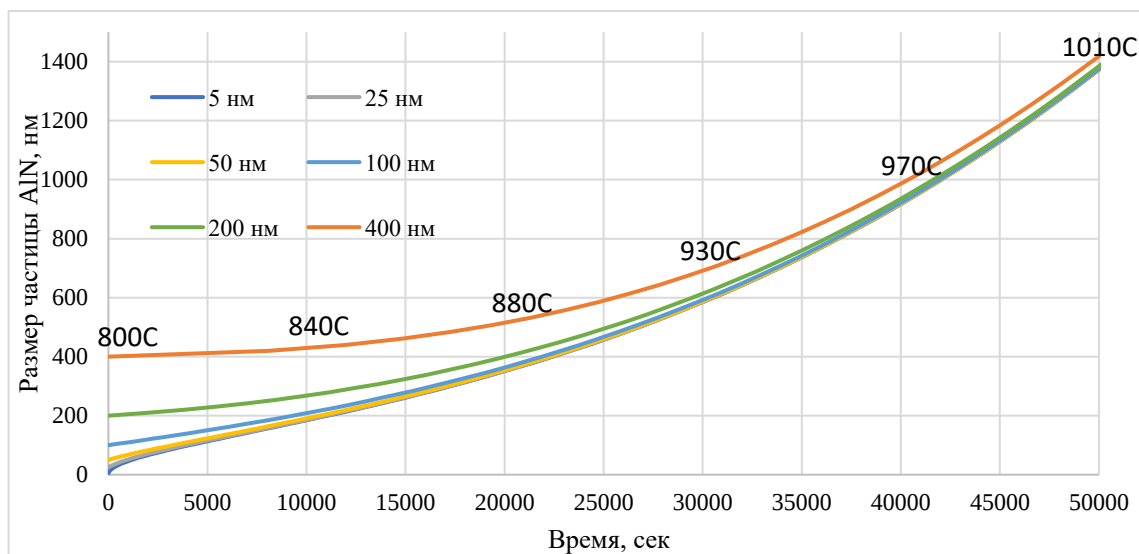


Рис. 1 Рост частиц AlN различных начальных размеров в ходе непрерывного нагрева с уходом азота

В ходе нагрева при ВТО происходит постепенный рост частиц AlN всех размеров. При температуре около 1000 °C размеры частиц сближаются до одной величины ~1,5 мкм, конечный размер (при 1140 °C) составляет ~3 мкм.

Остановка роста частиц связана с достижением температуры полного растворения AlN.

Моделирование показывает равнозначный рост частиц с увеличением температуры, таким образом, можно сделать вывод о значительном влиянии именно температуры системы и скорости ее увеличения на процессы коагуляции дисперсных фаз. Самый интенсивный рост частиц прослеживается в интервале 950...1100 °C.

На рисунке 2 изображена зависимость ингибирующей способности частиц от изменения температуры системы. Из кривых заметно, что при повышении температуры происходит ослабление ингибирующей способности частиц AlN. Кривые для различных первоначальных размеров частиц отличаются в связи с резким повышением размера дисперсных фаз и параллельным снижением их дисперсности.

При этом начальный размер частиц оказывает основное влияние на значение ингибирующей способности: интенсивная коагуляция мелкой дисперсной фазы приводит к более резкому снижению ингибирующей способности, что ведет к ранней инициации процесса ВР. Замедленное увеличение размеров крупных частиц приводит к более продолжительной стабилизации матрицы, что не позволяет протекать ВР в низких температурных интервалах.

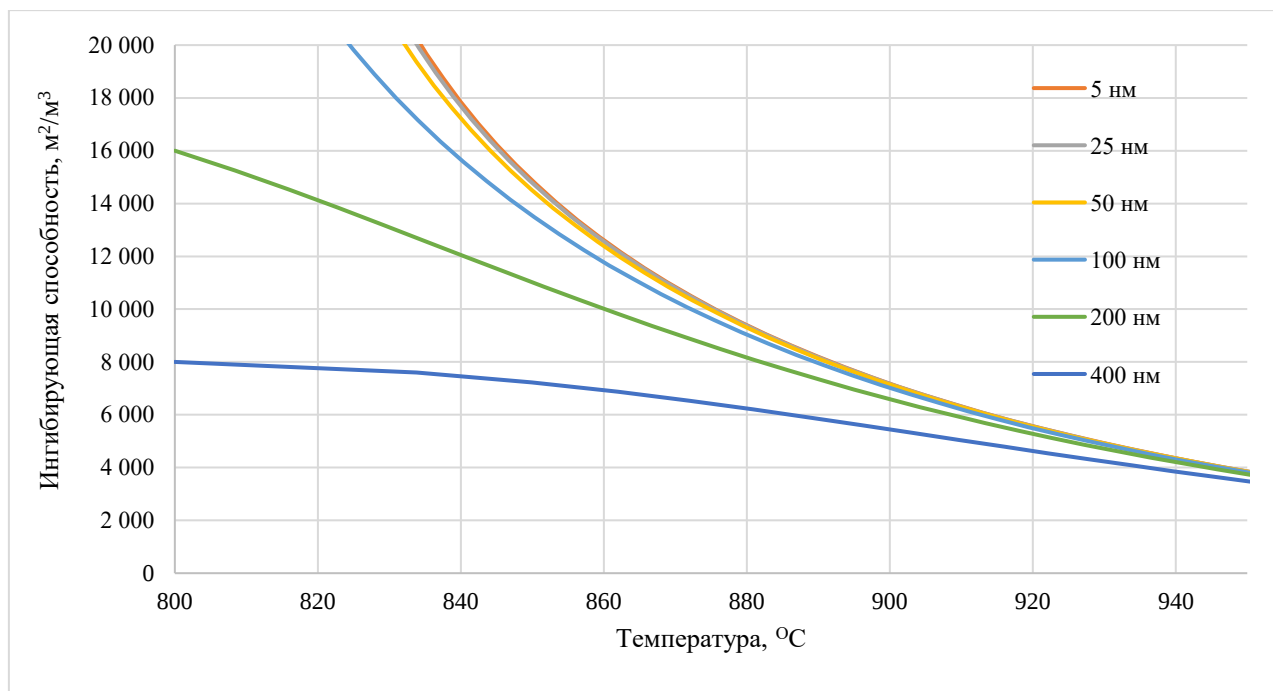


Рис. 2 Изменение ингибирующей способности частиц AlN в ЭАС различного начального размера от температуры нагрева при ВТО

Таким образом показана применимость алгоритма численного моделирования процессов коагуляции частиц AlN в ЭАС нитридно-медного варианта производства в ходе непрерывного нагрева при ВТО. Результаты расчетов продемонстрировали значительное влияние температурно-временных параметров нагрева на процесс коагуляции частиц. Начальный

размер дисперсных фаз влияет на интенсивность коагуляции в ходе повышения температуры.

Благодарности. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-29-00615, <https://rscf.ru/project/23-29-00615/>.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ (REFERENCES)

1. Poletika T. Ti_3Ni_4 precipitation features in heat-treated grain / Poletika T., Girsova S., Lotkov A. // Intermetallics. 2020. V. 127. 106966. 10.1016/j.intermet.2020.106966.
2. An Jeong. Quantification and analysis of NbC precipitation in cold-rolled HSLA steel during annealing process / An Jeong [et al.] // Steel research international. 2023. 95. 10.1002/srin.202300347.
3. Siedliska K. Effect of annealing temperature on structural properties of the co-precipitated delafossite AgFeO_2 / Siedliska K. [et al.] // Materials Research Express. 2019. 6. 086113. 10.1088/2053-1591/ab26f9.
4. Alcântara F.L. Study of Aluminum Nitride Precipitation in Fe-3%Si Steel. / Alcântara F.L. [et al.] // Materials Research. 2013. 16. 1039-1044. 10.1590/S1516-14392013005000090.
5. Gao Qian Characteristic of Precipitate Evolution during High Temperature Annealing in Grain-Oriented Silicon Steel / Gao Qian [et al.] // Metals. 2022. 12. 824. 10.3390/met12050824.
6. Металлофизика материалов для электромашиностроения: учебное пособие / М.Л. Лобанов, А.А. Редикульцев, М.А. Зорина; Мин-во науки и высшего образования РФ.— Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2019.—144 с.
7. Лобанов, М. Л. Методы определения коэффициентов диффузии: учеб. пособие / М. Л. Лобанов, М. А. Зорина. — Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2017. — 100 с.