

Predikce deformačního chování předslitiny Al-35Ta v software Digimat

Prediction of Deformation Behaviour of the Al-35Ta Master Alloy Using the Digimat Software

Ing. Martin Pohludka, Ph.D.; Ing. Daniel Petlák; Ing. Martin Kraus, Ph.D.

VŠB – Technická univerzita Ostrava, Fakulta metalurgie a materiálového inženýrství, Regionální materiálově technologické výzkumné centrum, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava-Poruba, Česká republika

Práce má dva cíle – přípravu předslitiny Al-35Ta (hm. %) a predikci jejího deformačního chování s pomocí software Digimat. První cíl byl uskutečněn pomocí procesu plazmové metalurgie a vakuového indukčního lití. Výsledkem byl kompaktní vzorek předslitiny s takovou teplotou tavení, která byla blízká teplotám tavení přechodových kovů, jako je titan či nikl. Mikrostruktura předslitiny byla tvořena hliníkovou maticí a nahodile orientovanými dendrity fáze Al_3Ta . Provedená tlaková zkouška prokázala nízkou mechanickou pevnost předslitiny a určila hodnoty Youngova modulu pružnosti $E = 20,26$ GPa a smluvní meze kluzu $R_{p0,2} = 93,19$ MPa. Simulace deformačního chování předslitiny byla provedena v modulu FE-Digimat, který umožňuje generovat tzv. reprezentativní objemový element. Výsledky simulace vedly k závěru, že při maximální nastavené deformaci vznikají ložiska s maximálním napětím mezi styčnými plochami dendritů fáze Al_3Ta , které jsou zároveň možnými místy iniciace trhliny. Srovnání napěťově deformačních křivek získaných z experimentu a simulace potvrdilo dobrou shodu – hodnota indexu korelace činila $I = 0,8923$.

Klíčová slova: software Digimat; tlaková zkouška; předslitina Al-35Ta

Metals with a high melting point, such as tungsten, molybdenum or tantalum, etc. are very important part of commercial alloys applied in an aircraft or automotive industry. Alloying of these alloys with these metals positively affects their high-temperature mechanical properties. However, high melting temperatures of these metals make a use of classic processes of an alloy preparation impossible. A solution to this problem can be a preparation of a suitable master alloy by plasma metallurgy. The aim of this paper was a preparation of the Al-35Ta (wt. %) master alloy and a prediction of its deformation behaviour using the Digimat software. The master alloy was prepared by a process of plasma metallurgy and vacuum induction melting. The final sample of the master alloy had such melting temperature, which was close to melting temperatures of transition metals, such as titanium or nickel. The microstructure of the master alloy consisted of an aluminium matrix and random oriented dendrites of the Al_3Ta -phase. A compression test has confirmed low mechanical strength of the master alloy and estimated values of the Young's modulus $E = 20.26$ GPa and the nominal yield strength (0.2 % offset) $YS_{0.2} R_{p0.2} = 93.19$ MPa. A simulation process of the master alloy deformation behaviour was carried out using the modulus of FE-Digimat which made it possible to generate the so-called representative volume element. The results of the simulation led to a conclusion that special places with maximal stress situated among contact areas of the Al_3Ta -phase dendrites formed at the maximal set strain. These places can be initiatory places for cracks. A comparison of the stress-strain curves for experimental and simulation data has confirmed correctness of fitting – the value of correlation index was $I = 0.8923$.

Key words: Digimat software; compression test; Al-35Ta master alloy

Moderní slitiny aplikované např. v leteckém nebo automobilovém průmyslu, případně v biomedicíně, jsou často legovány tzv. vysokotavitelnými kovy, které zlepšují jejich mechanické vlastnosti. Do této skupiny kovů náleží také tantal. Aplikace tantalu jako legujícího prvku jsou rozsáhlé. V medicíně se využívá pro své biokompatibilní vlastnosti [1, 2], zatímco v niklových superslitinách zlepšuje vysokoteplotní pevnost a odolnost vůči creepu [3, 4].

Hlavní problém přípravy těchto slitin představují vysoké teploty tavení vysokotavitelných kovů (T_M pro tantal je

3017 °C). Efektivním řešením problému je využití plazmové metalurgie [5], pomocí níž lze připravit vhodné předslitiny, jejichž teplota tavení není tak vysoká, a proto mohou být použity při přípravě komerčních slitin běžnými postupy, jako např. vakuovým indukčním tavením [6].

Digimat je softwarovým produktem výrobce e-Xstream engineering [7] určeným pro modelování materiálů. Využívají jej hlavně projektanti, materiáloví vědci a specialisté ve výrobě kompozitních materiálů k přesné predikci nelineárního mikro-mechanického chování

komplexních mnohofázových kompozitních materiálů a struktur, tvořených kompozity s polymerní, pryžovou nebo kovovou maticí [7, 8].

Digimat využívá několik pracovních modulů. Nejběžnější z nich je modul FE-Digimat, který pracuje na principu homogenizace metodou konečných prvků [8, 9]. Používá se ke generování reprezentativního objemového elementu velkého druhu materiálových mikrostruktur (např. plastů, pryží, kovů atd.). Modul FE-Digimat má zabudovaný vlastní generátor síťový, výpočetní zařízení i procesor pro zpracování výsledků. Umožňuje také připojení na software Abaqus/CEA [10], ANSYS Workbench [11] a Marc [12].

1. Experiment

1.1 Příprava předslitiny Al-35Ta

Předslitina Al-35Ta (hm. %) byla připravena tavením vstupních komponent čistého hliníku a tantalu v plazmové peci s horizontálním krystalizátorem na Katedře nezelezných kovů, rafinace a recyklace VŠB – Technické univerzity Ostrava. Vsázka byla umístěna na měděný krystalizátor a roztavena argonovým plazmovým obloukem o pracovní teplotě přibližně 4800 °C. K utužení předslitiny došlo účinkem intenzivního chlazení krystalizátoru vodou.

Z důvodu nízké homogenity předslitiny Al-35Ta po plazmovém tavení, byl ingot sekundárně přetaven ve vakuové indukční peci Supercast 13 v ústavu Regionálního materiálově technologického výzkumného centra VŠB – Technické univerzity Ostrava. Pracovní teplota výhřevu pece nepřesáhla 1800 °C. Předslitina byla odstředivě odlita do grafitové kokily. Byly tak získány kompaktní odlitky tvaru válců o průměru podstavy 20 mm (obr. 1)



Obr. 1 Odlitky předslitiny Al-35Ta (hm. %) po vakuovém indukčním tavení

Fig. 1 Castings of the Al-35Ta (wt. %) master alloy after a vacuum induction melting process

Z příčného řezu odlitku předslitiny Al-35Ta byl připraven metalografický vzorek za účelem ověření chemického složení, zdokumentování mikrostruktury a provedení jeho kvantitativní obrazové analýzy. Všechna pozorování byla použita při simulaci struktury předslitiny Al-35Ta v software Digimat a predikci jejího deformačního chování, které bylo ověřeno provizorní tlakovou zkouškou. Jednotlivé závěry jsou shrnuty v následující kapitole.

2. Výsledky

2.1 Chemické složení a mikrostruktura

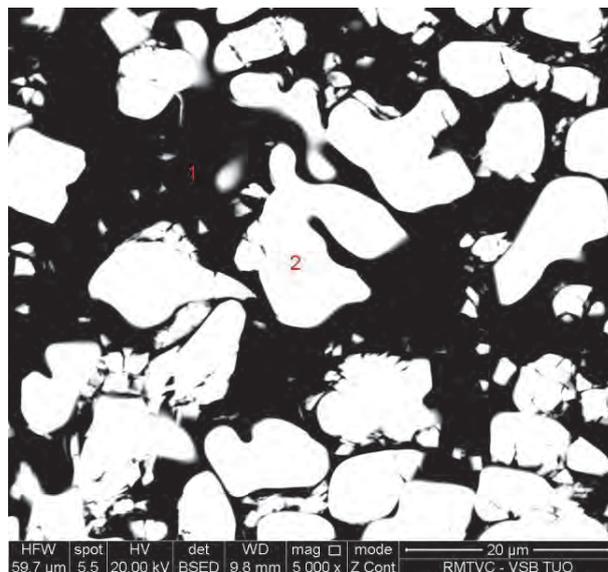
Chemické složení předslitiny Al-35Ta bylo ověřeno pomocí řádkovacího elektronového mikroskopu QUANTA FEG 450 vybaveného sondou APOLLO X. Výsledky plošné analýzy jsou uvedeny v tab. 1 a potvrzují shodu s nominálním složením.

Tab. 1 Výsledky plošné analýzy EDS

Tab. 1 Results of an area EDS analysis

Norm. složení	W _{Al}	W _{Ta}
	(hm. %)	
Al-35Ta	67,33 ± 0,76	32,67 ± 0,76

Bodová analýza EDS prokázala přítomnost dvou fází – matriční, kterou tvoří prakticky čistý hliník (bod 1 na obr. 2), a dendritickou, tvořenou fází Al₃Ta (bod 2 na obr. 2). Přesné hodnoty chemického složení jednotlivých fází jsou shrnuty v tab. 2.



Obr. 2 Mikrostruktura předslitiny Al-35Ta, režim zpětně odražených elektronů

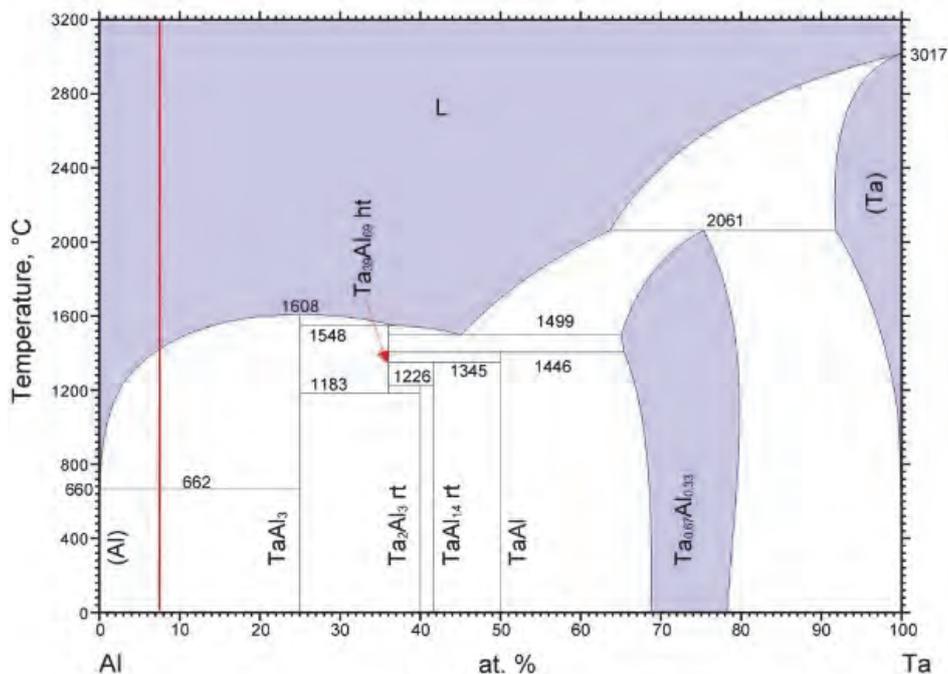
Fig. 2 Microstructure of the Al-35Ta master alloy, back-scattered electron mode

Tab. 2 Výsledky bodové analýzy EDS

Tab. 2 Results of a spot EDS analysis

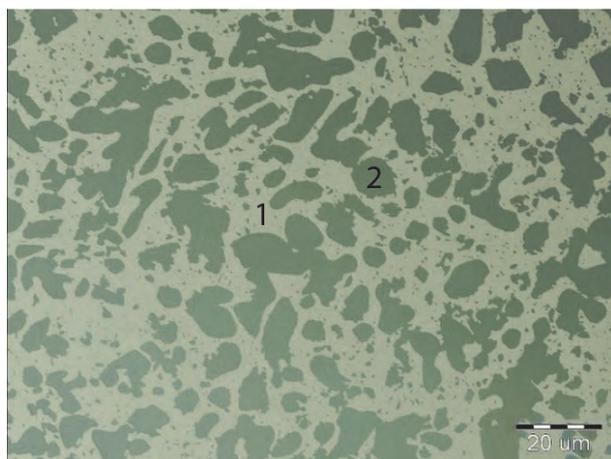
Analyzovaný bod	W _{Al}	W _{Ta}
	(hm. %)	
1	100,00 ± 0,00	0,00 ± 0,00
2	32,20 ± 0,13	67,80 ± 0,13

Zjištěné závěry jsou v souladu s binárním fázovým diagramem Al – Ta (obr. 3), podle něhož sestává mikrostruktura předslitiny Al-35Ta hm. % (tj. Al-7,43Ta at. %) ze dvou fází – tuhého roztoku tantalu v hliníku a fáze Al₃Ta [13].



Obr. 3 Binární fázový diagram Al-Ta
Fig. 3 Binary phase diagram of Al-Ta

Fotodokumentace mikrostruktury předslitiny Al-35Ta byla provedena pomocí optického světelného mikroskopu OLYMPUS GX51 vybaveného digitálním fotoaparátem OLYMPUS DP12. Příklad zdokumentované mikrostruktury je znázorněn na obr. 4. Plocha popsaná číslicí 1 představuje matici předslitiny tvořenou hliníkem a plocha popsaná číslicí 2 dendrity fáze Al_3Ta .



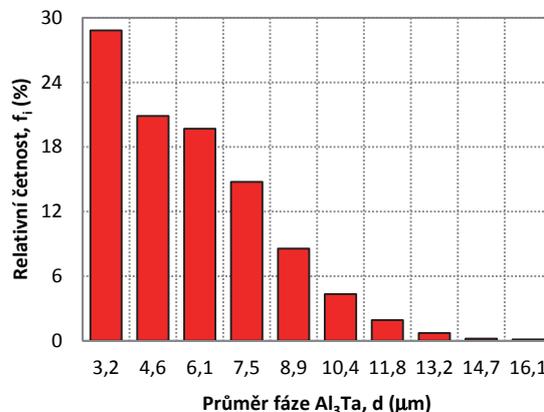
Obr. 4 Mikrostruktura předslitiny Al-35Ta
Fig. 4 Microstructure of the Al-35Ta master alloy

2.2 Kvantitativní obrazová analýza

Pro účely simulace deformačního chování předslitiny Al-35Ta v software Digimat bylo nezbytné statisticky popsat dendrity fáze Al_3Ta pomocí kvalitativní obrazové analýzy. K tomu posloužil software ImageJ [14]. Počátečním předpokladem bylo nahradit komplikova-

nou strukturu dendritů tvořenou jejich vzájemně se křížícími primárními a sekundárními větvemi jednoduchými elipsoidy a následně stanovit jejich objemový podíl, velikost a tvarový faktor, definovaný podílem délky a šířky elipsoidu.

Objemový podíl fáze Al_3Ta činil $48,98 \pm 1,49 \%$. Statistickou analýzou bylo prokázáno, že plocha předslitiny o rozměru $61\,524 \mu\text{m}^2$ obsahuje průměrně 5708 zrn fáze Al_3Ta o velikosti náležející do intervalu od 2,5 do $16,8 \mu\text{m}$. Rozdělení těchto zrn je exponenciální, jak dokazuje obr. 5, s maximem v intervalu od 2,50 do $3,93 \mu\text{m}$. V tomto intervalu leží rovněž střední hodnota, která činí $2,60 \pm 0,13 \mu\text{m}$. Těmto zrnům odpovídá tvarový faktor o střední hodnotě $1,45 \pm 0,01$.



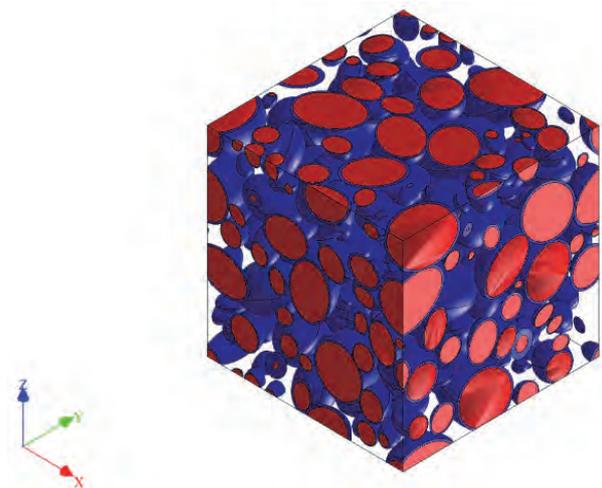
Obr. 5 Rozdělení dendritů fáze Al_3Ta v matici předslitiny Al-35Ta
Fig. 5 Distribution of the Al_3Ta -phase dendrites in the matrix of the Al-35Ta master alloy

2.3 Simulace v software Digimat

Pro definování reprezentativního objemového elementu je nezbytné charakterizovat jeho matriční a inkluzní složku. V případě struktury předslitiny Al-35Ta byla matrice tvořena hliníkem a inkluze dendrity fáze Al₃Ta. Inkluze byly následně definovány těmito parametry:

- objemový podíl 40 %,
- tvar: elipsoid o tvarovém faktoru 1,45,
- distribuce: načteno rozdělení z obr. 5,
- orientace: nahodilá.

Protože reálnou mikrostrukturu předslitiny Al-35Ta tvořily tvarově složité dendrity a nikoli jednoduché elipsoidy, byly povrchy inkluzí v reprezentativním objemovém elementu pokryty vrstvou mezifáze Al₃Ta o celkovém objemovém podílu 10 %, u níž bylo povoleno vzájemné překrývání. Vzhledem k nahodilé orientaci inkluzí mohla být velikost reprezentativního objemového elementu shodná pro všechny osy $x = y = z = 48,25 \mu\text{m}$. Výsledná podoba reprezentativního objemového elementu je znázorněna na obr. 6.



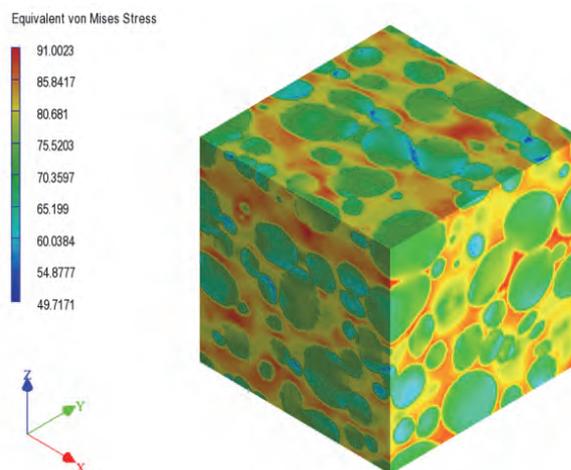
Obr. 6 Reprezentativní objemový element předslitiny Al-35Ta
Fig. 6 Representative volume element of the Al-35Ta master alloy

Reprezentativní objemový element byl zatěžován mechanicky v tlaku ve směru osy x do maximální deformace 20 %. Výsledky průběhu simulace tlakové zkoušky předslitiny Al-35Ta v software Digimat jsou znázorněny na obr. 7 a 8 pomocí rozdělení von Misesova napětí na reprezentativním objemovém elementu.

K interpretaci výsledků simulace je nezbytné vyjít z několika předpokladů:

- 1) reprezentativní objemový element představuje kompozit sestávající z hliníkové matrice a inkluzí tvořených dendrity fáze Al₃Ta,
- 2) jednotlivé kompozitní složky mají různé mechanické vlastnosti,
- 3) dendrity obsahující Ta jsou tvrdší a pevnější než hliníková matrice.

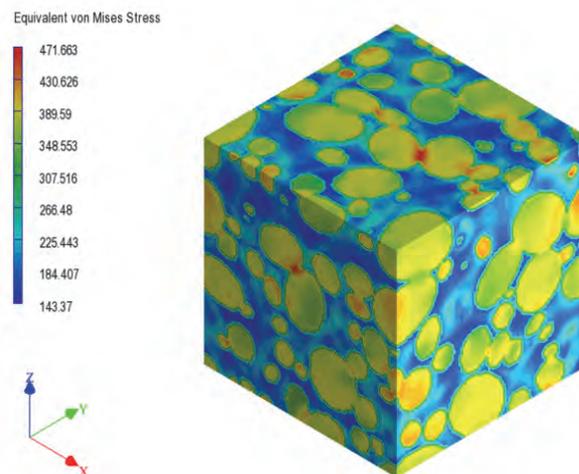
Deformace matrice v intervalu elastické deformace tlakové zkoušky je větší než deformace inkluzí. To se projevívá výskytem maxim von Misesova napětí na styčných plochách mezi maticí a inkluzemi. Minimální von Misesovo napětí se naopak nachází na styčných plochách mezi inkluzemi fáze Al₃Ta, protože se jako pevnější složka kompozitu deformují méně (obr. 7).



Obr. 7 Rozdělení von Misesova napětí na reprezentativním objemovém elementu pro mez kluzu

Fig. 7 Von Mises stress distribution in a representative volume element at the yield stress

Po přechodu meze kluzu, tedy v intervalu plastické deformace, slouží inkluze fáze Al₃Ta jako zpevňující částice, mezi jejichž společnými styčnými plochami se kumuluje maximální von Misesovo napětí (obr. 8). V těchto místech se pravděpodobně iniciují trhliny.



Obr. 8 Rozdělení von Misesova napětí na reprezentativním objemovém elementu při maximální deformaci 20 %

Fig. 8 Von Mises stress distribution in a representative volume element at the maximal strain of 20 %

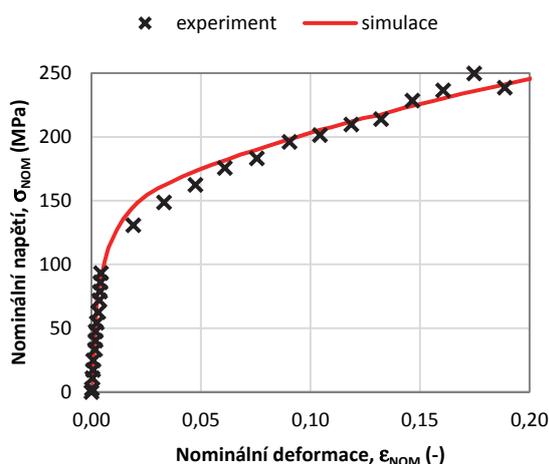
Simulacemi v software Digimat se zabývají publikace [15, 16].

2.4 Tlaková zkouška

Nakonec byla provedena provizorní tlaková zkouška, pro ověření přesnosti výsledků simulace. Z odlitku

předslitiny Al-35Ta byl vysoustružen malý válec o průměru 5 mm a délce 8 mm, který byl podroben tlakové zkoušce na univerzálním testovacím zařízení Walter Bai TMS Lfv na VŠB – Technické univerzitě Ostrava. Tlaková zkouška proběhla při pokojové teplotě a rychlosti posunu přičníku $2 \text{ mm} \cdot \text{min}^{-1}$.

Na obr. 9 jsou srovnány výstupy z tlakové zkoušky předslitiny Al-35Ta v podobě grafické závislosti napětí na deformaci pro experiment i simulaci. Korelační index mezi oběma soubory dat nabývá hodnoty $I = 0,8923$, což dokazuje dobrou shodu mezi experimentálním měřením a výsledky provedené simulace.



Obr. 9 Grafické srovnání výsledků tlakové zkoušky předslitiny Al-35Ta pro experiment a simulaci

Fig. 9 Graphical comparison of results of compression test of the Al-35Ta master alloy for experiment and simulation

Hodnoty vybraných inženýrských konstant, které byly odečteny z obou křivek na obr. 9, jsou uvedeny v tab. 3. Jedná se o Youngův modul pružnosti a smluvní mez kluzu.

Tab. 3 Hodnoty vybraných inženýrských konstant
Tab. 3 Values of chosen engineering constants

Druh analýzy	E	R _{p0,2}
	(GPa)	(MPa)
experiment	20,26	93,19
simulace	16,59	102,77

Závěr

Procesy plazmové metalurgie a vakuového indukčního tavení byla připravena předslitina Al-35Ta (hm. %). Vyšetření mikrostruktury pomocí elektronové mikroskopie prokázalo, že předslitina sestává ze dvou strukturních útvarů – matrice, tvořené hliníkem, a dendritů, tvořených fází Al₃Ta. Tlaková zkouška prokázala nízkou mechanickou pevnost předslitiny a pomohla stanovit některé inženýrské konstanty, jako jsou Youngův modul pružnosti $E = 20,26 \text{ GPa}$ a smluvní mez kluzu $R_{p0,2} = 93,19 \text{ MPa}$.

Výsledky simulace deformačního chování předslitiny provedené v software Digimat napomohly pochopit způsob jejího porušení. Do meze kluzu je hliníková matrice předslitiny namáhána více než dendrity tvořené fází Al₃Ta, avšak při maximální nastavené deformaci se koncentrátoři napětí kumulují na styčných plochách mezi jednotlivými dendrity. Tato místa lze proto pokládat za pravděpodobné lokality iniciace trhlin. Grafický výstup tlakové zkoušky předslitiny Al-35Ta pro experimentální a simulační data prokázal dobrou shodu (hodnota indexu korelace $I = 0,8923$). Software Digimat lze proto pokládat za hodnotný nástroj pro predikci deformačních chování materiálů.

Poděkování

Tato práce vznikla při řešení projektu č. LO1203 „Regionální materiálově technologické výzkumné centrum – program udržitelnosti“ financovaného z Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy.

Literatura

- [1] LIU, J. et al. Microstructure, mechanical behavior and biocompatibility of powder metallurgy Nb-Ti-Ta alloys as biomedical material. *Materials Science and Engineering C*, 71 (2017) 512–519.
- [2] HUSSEIN, A. H. et al. Biocompatibility of new Ti-Nb-Ta base alloys. *Materials Science and Engineering C*, 61 (2016) 574–578.
- [3] POHLUDKA, M. et al. Ni₃Al-B alloys and their mechanical properties at high temperatures. In *Metal 2016: 25. výroční mezinárodní konference o metalurgii a materiálech*, 25. – 27. května 2016, Hotel Voroněž I, Brno Česká republika, EU, roč. 25, s. 1498–1503.
- [4] UCHIC, M. D. et al. Sigmoidal creep of Ni₃(Al, Ta). *Intermetallics*, 9 (2001), 1053–1061.
- [5] JUŘICA, J. et al. Preparation and properties of master alloys Nb-Al and Ta-Al for melting and casting of γ -TiAl intermetallics. *Materiálův inženýring: Materials and Technologies*, 49 (2015) 1, 27–30.
- [6] POHLUDKA, M. et al. Microstructure and properties of the Ni-Al-B alloys after directional solidification. *Chemické listy*, 109 (2012) S13, 511–512.
- [7] Digimat – The Nonlinear Multi-scale Material and Structure Modeling Platform [on-line], [cit. 2017-10-11]. Dostupný z WWW: <http://www.mscsoftware.com/product/digimat>
- [8] Digimat – Documentation [on-line], [cit. 2017-10-11]. Dostupný z WWW: <http://www.mscsoftware.com/product/digimat>
- [9] YALIN, Y. et al. Stress transfer analysis of unidirectional composites with randomly distributed fibers using finite element method. *Composites: Part B*, 69 (2015) 278–285.
- [10] Abaqus/CEA [on-line], [cit. 2017-10-11]. Dostupný z WWW: <http://www.3ds.com/products-services/simulia/products/abaqus/>
- [11] ANSYS Workbench [on-line], [cit. 2017-10-11]. Dostupný z WWW: <http://www.ansys.com/Products/Platform>
- [12] Marc [on-line], [cit. 2017-10-11]. Dostupný z WWW: <http://www.mscsoftware.com/product/marc>
- [13] Alloy phase diagram database [online], [cit. 2017-10-11]. Dostupný z WWW: <http://www1.asminternational.org/asmenterprise/apd/>
- [14] ImageJ [on-line], [cit. 2017-10-11]. Dostupný z WWW: <https://imagej.nih.gov/ij/>
- [15] POHLUDKA, M. et al. Modelování progresivních materiálů v software Digimat. *Hutnické listy*, 69 (2016) 6, 22–27, ISSN 0018-8069.
- [16] AMIRMALEKI, M. et al. 3D Micromechanical modelling of dual phase steels using the representative volume element method. *Mechanics and Materials*, 101 (2016), 27–39.