

Универсальная модель прогнозирования фазового состава многокомпонентных латуней на основе данных химического анализа

Святкин Алексей Владимирович*¹, кандидат технических наук,
доцент кафедры «Нанотехнологии, материаловедение и механика»

Костин Глеб Вячеславович, студент кафедры «Нанотехнологии, материаловедение и механика»
Тольяттинский государственный университет, Тольятти (Россия)

*E-mail: astgl@mail.ru

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8121-9084>

Поступила в редакцию 04.06.2024

Пересмотрена 04.10.2024

Принята к публикации 20.11.2024

Аннотация: При разработке технических требований к сплавам важно применять комплексный подход. Сочетая аналитическое и имитационное моделирование, можно уменьшить технологические риски на этапе создания или изменения требований. Реализация данного подхода напрямую зависит от степени учета всех факторов, включенных в модели, а также от их влияния на изменчивость характеристик. Однако известные модели не дают удовлетворительной сходимости с реальными промышленными сплавами. На примере сложнотемпературной латуни ЛМцАЖКС (CuZn13Mn8Al5Si2Fe1Pb) предложен подход, позволяющий описать изменчивость структурного состояния многокомпонентных латуней. Анализ статистических данных химического состава и микроструктуры промышленных партий позволил установить, что матричный раствор сплава представляет собой ($\alpha+\beta$)-латунь и соответствует соотношению фаз при 700 °С на политермическом псевдобинарном разрезе диаграммы Cu–Zn–Mn₂Si₃. Методами рентгеноспектрального анализа исследовано распределение легирующих элементов в основных фазах. Подтверждена полная связанность железа в силицидах и равномерное распределение марганца в горячепрессованном состоянии. Предложен расчет доли кремния, входящего в твердый раствор. Измеренная плотность сплава составляет 7650 кг/м³, расчетная плотность матричного раствора – 8100 кг/м³. На основании уточненных параметров универсальной модели методом Монте-Карло оценили изменчивость микроструктуры в зависимости от требований к химическому составу. Причиной нестабильности технологических свойств является значительная изменчивость соотношения α - и β -фаз. Содержание α -фазы в сплаве изменяется от 37,5 до 66,5 %, β -фазы – от 17,5 до 55,2 %. Имитационная модель, разработанная в рамках исследования, предоставляет возможность не только анализировать существующие сплавы, но и предсказывать поведение новых сплавов, что является критически важным для оптимизации технологических процессов и улучшения эксплуатационных свойств материалов.

Ключевые слова: многокомпонентная латунь; ЛМцАЖКС 70-7-5-2-2-1; стабильность технологических процессов; химический состав специальных латуней; статистическое имитационное моделирование фазового состава; микроструктура латуней; плотность латуни; цинковый эквивалент; силициды.

Для цитирования: Святкин А.В., Костин Г.В. Универсальная модель прогнозирования фазового состава многокомпонентных латуней на основе данных химического анализа // Frontier Materials & Technologies. 2024. № 4. С. 87–95. DOI: 10.18323/2782-4039-2024-4-70-8.

ВВЕДЕНИЕ

Современное массовое производство выдвигает строгие требования к технологичности металлопродукции. Разработка отечественных марок специальных многокомпонентных латуней, не уступающих по технологичности и эксплуатационным характеристикам маркам зарубежных производителей, является актуальной задачей. Повышение стабильности технологичности процессов в массовом производстве рассматривается в рамках теории варибельности [1; 2] и статистического мышления (концепция «шесть сигм») [3]. Управление изменчивостью фазового состава является основным фактором, определяющим технологичность. Снизить время на проектирование требований к сплавам возможно за счет внедрения современных методов статистического моделирования. Одним из таких методов является метод Монте-Карло, основанный на воспроиз-

ведении большого числа выполнений случайного процесса, специально созданного для условий решаемой задачи. Случайный процесс формируют так, чтобы его вероятностные характеристики были равны наблюдаемым или же через них стало бы возможным вычислить искомые величины рассматриваемой задачи.

Сплав ЛМцАЖКС 70-7-5-2-2-1 (далее – ЛМцАЖКС) (европейские аналоги: CuZn13Mn8Al5Si2Fe1Pb – EN, Diel470HT фирмы Diehl) применяется в отечественном автомобилестроении, обладает высокой износостойкостью, но нестабильными технологическими и эксплуатационными характеристиками [4; 5]. Легирующие элементы, такие как алюминий, марганец, железо, кремний, с одной стороны, способствуют повышению механических свойств [6; 7], с другой – разнонаправленно действуют на технологичность литейных процессов и пластичность в горячем и холодном состоянии,

замедляя диффузионные процессы [8; 9]. Свинец, заполняя поры, позволяет повысить обрабатываемость резанием за счет образования мелких прерывистых стружек [10], но также способствует трещинообразованию при штамповке [10; 11]. Поэтому для инжиниринга латунных многокомпонентных сплавов важно понимать, как изменение содержания легирующих элементов отразится на изменчивости фазового состава.

В работах [12; 13] предложены методики оценки фазового состава многокомпонентных латуней на основе расчета цинкового эквивалента с учетом коэффициентов Гийе, предложенных более 100 лет назад [14], но до сих пор активно используемых в технической литературе. Основными положениями методик прогнозирования [12; 13] являются следующие.

1. Расчет цинкового эквивалента (Zn_3) по диаграмме Cu–Zn производится по формуле

$$Zn_3 = \frac{Zn + \sum K_i \cdot C_i}{Cu + Zn + \sum K_i \cdot C_i}, \quad (1)$$

где Cu, Zn – фактическое содержание в сплаве меди и цинка, %;

C_i – содержание в сплаве i -го элемента, %;

K_i – соответствующий коэффициент эквивалентности по Гийе (таблица 1).

2. Учитывается, что свинец находится в свободном состоянии, кремний полностью связан в силицидах, а марганец и железо – частично.

3. Прогнозируемое содержание силицидов оценивается по формуле

$$Me_5Si_3 = (1 + \alpha_{Fe} + \alpha_{Mn} + \alpha_{Ni}) \cdot Si \cdot \frac{\rho_{\text{латуни}}}{\rho_{Me_5Si_3}}, \quad \% \text{ об.}, \quad (2)$$

где α_{Fe} , α_{Mn} , α_{Ni} – коэффициенты связности по кремнию [12; 13];

$\rho_{Me_5Si_3} \approx 6,0 \text{ кг/дм}^3$ – средняя плотность силицидов Fe и Mn.

4. При этом отмечается, что после прессования фиксируется фазовый состав, соответствующий диаграмме Cu–Zn при 500 °C [12] или 400 °C [13].

Однако в указанных работах отсутствуют сведения о проверке качества моделей. При апробации методик на промышленных партиях латуни ЛМцАЖН получены низкие показатели качества моделей¹. Описанный подход представляется обоснованным, но в модели не учтен ряд факторов, которые могут внести значимые погрешности. Плотность латуни соответствует справочным данным для менее легированных латуней. Механизм зарождения и роста силицидов при кристаллизации является диффузионным, поэтому в случае уменьшения скорости кристаллизации количество и размеры силицидов должны возрасти до предельного возможного и заданного химическим составом значения [15]. При возрастании скорости кристаллизации диффузия пройти

не успеет, часть Si, Mn, Fe остается в твердом растворе. Твердый раствор будет изменяться в зависимости от взаимодействия указанных элементов. Поэтому объем силицидов в сплавах зависит от условий охлаждения шашек после разлива. Учитывая переменную растворимость силицидов в латуни в интервале 200...800 °C, положение о полной связанности кремния в силицидах требует перепроверки. В то же время известно, что железо практически не растворяется в латуни, образуя γ -Fe [16]. Для описания равновесного состояния специальных латунных сплавов, легированных Mn и Si, логично использовать псевдобинарный политегермический разрез диаграммы Cu–Zn_e–Mn₅Si₃ (рис. 1). Заметим, что в [17] приводится расчет альтернативных коэффициентов эквивалентности на основе электронных концентраций, рассчитанных как сумма произведений атомной концентрации каждого компонента и числа его коллективизированных электронов.

Цель работы – уточнение универсальной модели прогнозирования на основе сведений о химическом составе фаз многокомпонентной латуни.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ

Объектами работы являлись промышленные партии труб латуни ЛМцАЖКС 70-7-5-2-2-1 (ЛМцАЖКС) в горячепрессованном состоянии (температура нагрева 750 °C).

Была сформирована выборка образцов от 20 реальных промышленных плавок латуни ЛМцАЖКС в горячепрессованном состоянии. Технические требования к химическому составу приведены в таблице 2, там же показаны средние значения по химическим элементам и стандартное отклонение по анализируемой выборке. Для каждого элемента оценивали характер распределения совокупности. Как правило, основные элементы сплава от партии к партии имеют нормальное распределение, примеси – равномерное (прямоугольное). Гипотезу о нормальном распределении проверяли, используя критерий Пирсона.

Далее проводился металлографический анализ для установления реальных структурных соотношений. Результаты соотносили с диаграммой состояния Cu–Zn_e–Mn₅Si₃ (рис. 1). Количественный металлографический анализ проводили с помощью микроскопа Olympus GX51 (Япония) с системой панорамной микроскопии SIAMS 800 (Россия). Долю силицидов ((Fe,Mn)₅Si₃) определяли на нетравленных шлифах в продольном и поперечном сечениях. Количество α - и β -фаз фиксировали после травления (FeCl₃ – 5 г; HCl – 30 мл; H₂O – 100 мл).

Для уточнения химического состава фаз проводили рентгеноспектральный анализ на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) EVO18 Carl Zeiss (ФРГ) с EDX фирмы Bruker (ФРГ). Измерения проводили после изучения полей при увеличении в диапазоне $\times 2000 \dots 7000$ для исключения влияния высокодисперсных силицидов, используя функцию «анализ в точке».

Для проектной деятельности при разработке и корректировке технических требований основным показателем в массовом производстве является статистическая сходимость математического ожидания и стандартного отклонения моделей и прямых наблюдений.

Уточнение плотности раствора выполняли исходя из следующих соображений:

¹ Костин Г.В., Святкин А.В. Оценка адекватности моделей прогнозирования фазового состава кремнисто-марганцевой латуни // Физическое материаловедение: сборник материалов XI международной школы, Тольятти, 11–15 сентября 2023 года. Тольятти: Тольяттинский государственный университет, 2023. С. 163–164. EDN: [QNAСВО](#).

Таблица 1. Коэффициенты эквивалентности цинка в латунях
Table 1. Equivalence coefficients of zinc in brasses

Элемент	Si	Al	Mn	Fe	Ni	Sn	Pb	Mg
По Гийе [14]	10,0	5,0	0,5	0,9	-1,3	2,0	1,0	2,0
По Ефремову [17]	6,0	4,0	-0,2	-	-0,6...1,5	1,7	-	1,7

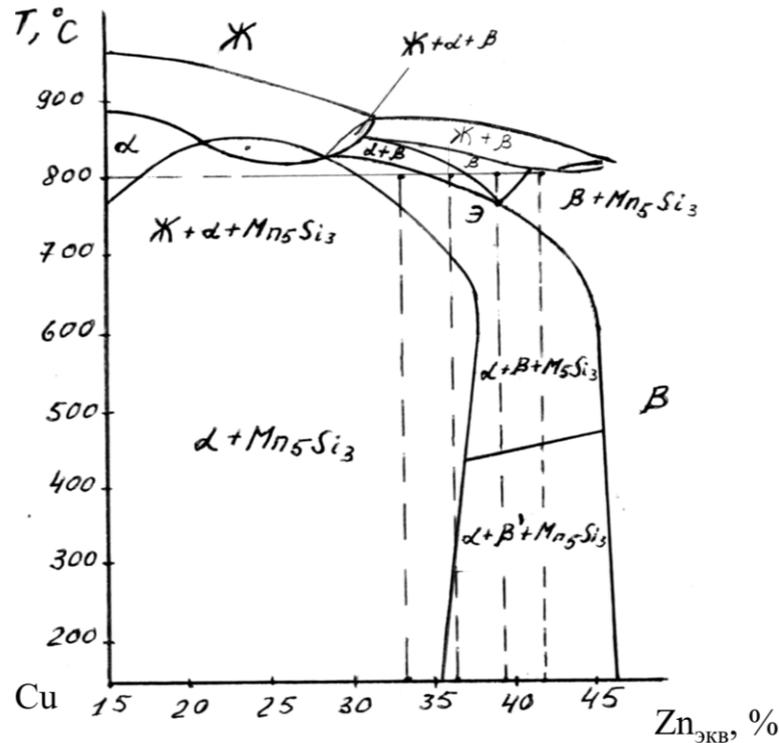


Рис. 1. Псевдобинарный политермический разрез диаграммы Cu-Zn-Mn₅Si₃ с постоянным содержанием силицидов.

Источник: Котляров И.В., Копыл М.Д., Тропотов А.В. Специальные латунные сплавы для колец синхронизаторов: оптимизация составов и технологических процессов // Проблемы развития автомобилестроения в России: сборник избранных докладов II-IV международных научно-практических конференций. Тольятти: ТГУ, 1996. С. 130-134. С. 131.

Fig. 1. Pseudo-binary polythermal section of the Cu-Zn-Mn₅Si₃ diagram with a constant content of silicides.

Source: Kotlyarov I.V., Kopyl M.D., Tropotov A.V. Special brass alloys for synchronizer rings: optimization of compositions and technological processes. Problemy razvitiya avtomobilestroeniya v Rossii: sbornik izbrannykh dokladov II-IV mezhduнародnykh nauchno-prakticheskikh konferentsiy. Tolyatti, TGU Publ., 1996, pp. 130-134, p. 131.

$$M = M_{\text{мат}} + M_{\text{MeSi}}, \quad (3)$$

где M – масса образца;

$M_{\text{мат}}$ – масса матричного раствора;

M_{MeSi} – масса силицидов.

Раскрыв формулу для нахождения массы образца, получаем

$$\rho \cdot V = \rho_{\text{мат}} \cdot V_{\text{мат}} + \rho_{\text{MeSi}} \cdot V_{\text{MeSi}}, \quad (4)$$

где ρ – общая плотность образца, измеренная по ГОСТ 20018-74;

V – объем образца, принятый равным 1;

$$\rho_{\text{MeSi}} = 5990 \text{ кг/м}^3;$$

согласно закону стереометрической металлографии о соответствии объемов фаз и площадей:

$V_{\text{мат}} \approx S_{\text{мат}}$, $V_{\text{MeSi}} \approx S_{\text{MeSi}}$ – объемы, занимаемые матрицей и силицидами соответственно, рассчитываются по данным металлографического анализа;

$S_{\text{мат}}$ и S_{MeSi} – доля площади поверхности, измеренная металлографическим анализом матричного твердого раствора и силицидов соответственно.

Для установления фактической плотности латуни измерили образцы от 20 партий сплава ЛМЦАЖКС.

После уточнения методики прогнозирования фазового состава провели имитационное моделирование его изменчивости методом Монте-Карло по 500 итерациям.

Таблица 2. Химический состав компонентов сплава ЛМцАЖКС, мас. %
Table 2. Chemical composition of the CuZn13Mn8Al5Si2Fe1Pb alloy components, wt. %

Элемент	Al	Cu	Fe	Mn	Ni	Pb	Si	Sn	Zn	Примеси
Норма	5,0–6,0	69,5–71,5	1,4–2,4	6,5–7,5	≤0,1	0,6–1,2	1,7–2,5	≤0,1	ост.	≤0,5
Среднее	5,35	70,06	1,61	7,10	0,07	0,88	1,87	0,03	12,98	0,13
Стандартное отклонение	0,16	0,41	0,12	0,17	0,02	0,04	0,06	0,02	0,43	0,02
Распределение	+	+	+	+	–	+	+	–	+	–

Примечание. «+» соответствует нормальному распределению, «–» – прямоугольному, количество α-фазы не менее 50 %.

Note. “+” corresponds to normal distribution, “–” corresponds to rectangular distribution, the α-phase amount is not less than 50 %.

При этом среднее значение соответствовало середине поля допуска, стандартное отклонение рассчитывали по правилу «шести сигм»:

$$6\sigma = \frac{\text{ВГД} - \text{НГД}}{6}, \quad (5)$$

где ВГД и НГД – верхняя и нижняя границы поля допуска.

Значение элемента для каждой итерации:

$$\Xi_1 = \bar{\Xi} \pm K_3 \cdot \sigma, \quad (6)$$

где Ξ – соответствующий элемент химического состава; K_3 – случайный коэффициент от 0 до 1, сгенерированный для соответствующего распределения.

Получение набора случайных чисел и построение регрессионных моделей проводили с помощью «Пакета анализа» Microsoft Excel.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Результаты металлографического исследования по 20 партиям сплава ЛМцАЖКС в таблице 3 приведены в виде среднего и стандартного отклонения. Фазы α и β' изменяются в достаточно широком диапазоне: α=43,1...63,2 %, β'=26,0...53,6 %. Доля силицидов (Fe,Mn)₅Si₃ в сплаве стабильна между пар-

тиями сплава и составляет 9,2...12,5 % при стандартном отклонении, равном 0,4 %.

В результате анализа выборки по плотности установлено, что сплав ЛМцАЖКС имеет плотность 7650±20 кг/м³. Тогда из формулы (4) следует, что плотность матрицы латуни ЛМцАЖКС равна ≈8100 кг/м³.

При изучении микроструктуры установлено, что сплав ЛМцАЖКС представляет собой 4-компонентную систему и состоит из преимущественно равноосных зерен (α+β')-твердого раствора, силицидов и структурно-свободных включений свинца. Последующее исследование на электронном микроскопе подтвердило практически полное отсутствие признаков эвтектоидного распада. β'-фаза состоит из дисперсных пластин, ориентированных поперечно направлению прессования (рис. 2). Интерметаллиды представлены двумя основными типами – крупными первичными силицидами (Fe,Mn)₅Si₃ и вторичными дисперсными стержневидными включениями Mn₅Si₃.

Статистика по химическому составу α- и β'-фаз приведена в таблице 4. Химический состав α- и β'-фаз достаточно стабилен от партии к партии. Установлено, что железо связано полностью в силицидах – (Fe,Mn)₅Si₃, кремний неравномерно распределен в твердом растворе и входит в состав α-фазы с содержанием 0,14±0,09 % мас., в состав β'-фазы – с содержанием 0,06±0,05% мас. Марганец достаточно равномерно распределен между α- и β'-фазами с концентрацией 2,72...2,75 %. Алюминий выявляется в обеих фазах, несмотря на то, что относится

Таблица 3. Результаты металлографического исследования микроструктуры сплава ЛМцАЖКС
Table 3. Results of metallographic study of the CuZn13Mn8Al5Si2Fe1Pb alloy microstructure

Показатель	α-фаза, об. %	β-фаза, об. %	α/β	(Fe, Mn) ₅ Si ₃ , об. %
Среднее	52,2	36,3	1,5	11,5
Стандартное отклонение	4,8	6,3	0,4	0,9
Минимум	43,1	26,0	0,9	9,2
Максимум	63,2	53,6	2,4	12,5

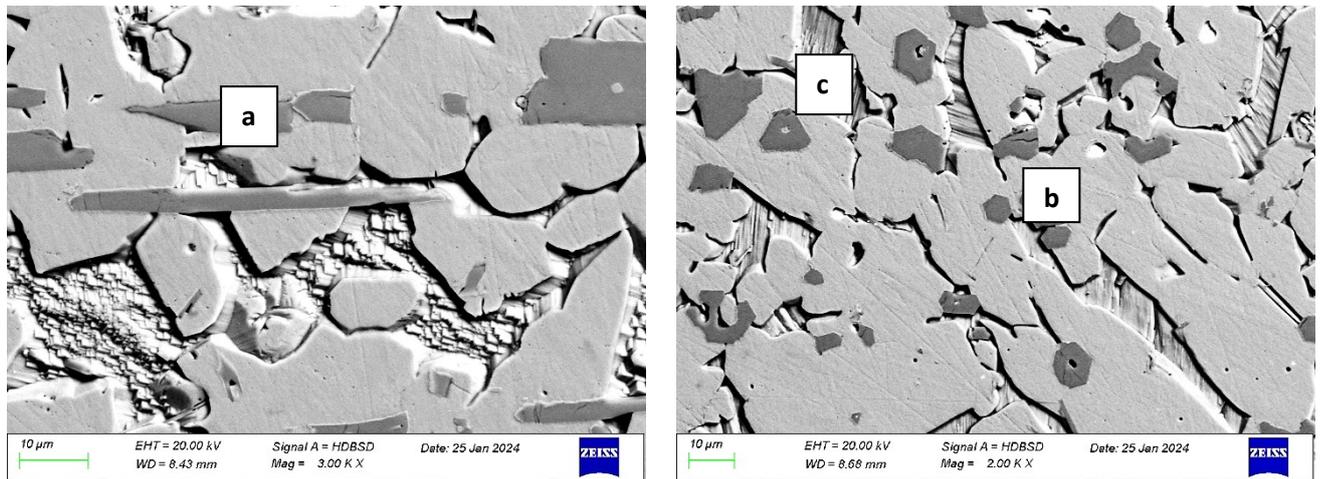


Рис. 2. Микроструктура сплава ЛМцАЖКС:
a – сечение в направлении прессования; *b* – радиальное сечение; *c* – вид пластин β -фазы с радиальным сечением
Fig. 2. Microstructure of the CuZn13Mn8Al5Si2Fe1Pb alloy:
a – section in the pressing direction; *b* – radial section; *c* – view of the β -phase plates with the radial section

Таблица 4. Статистика химического состава α - и β -фаз
Table 4. Statistics of chemical composition of α - and β -phases

Элемент	α -фаза						β -фаза					
	Al	Si	Mn	Cu	Fe	Zn	Al	Si	Mn	Cu	Fe	Zn
\bar{X}	4,78	0,14	2,72	78,80	0	13,63	7,72	0,05	2,75	74,83	0	14,69
σ	0,29	0,09	0,12	0,26	0	0,20	0,44	0,06	0,14	0,55	0	0,29

к β -образующим элементам. В α -фазе концентрация алюминия составляет $4,78 \pm 0,29$ %, в β '-фазе – $7,72 \pm 0,44$ %.

Линейное сканирование показало, что концентрационные пики марганца обусловлены только переходом от матричного раствора к силицидам. Между α - и β -фазами марганец распределен равномерно. Определенное по правилу «шести сигм» количество α -фазы в сплаве изменяется от 37,5 до 66,5 %, β '-фазы – от 17,5 до 55,2 %.

Опираясь на полученные результаты, применили иной подход: расчет по кремнию выполняли, учитывая положение, что в латуни ЛМцАЖКС кремний образует с железом и марганцем стабильный силицид $(Fe, Mn)_5Si_3$, а железо полностью связано в силицидах. Поскольку центр интерметаллида обогащен железом, а периферия – марганцем [18], то количество кремния, связанного железом, составляет

$$Si_{Fe} = \frac{3}{5} \cdot \frac{Fe \cdot Ar(Si)}{Ar(Fe)}, \quad (7)$$

где Fe – концентрация железа в сплаве;
 $Ar(Fe)$ – атомная масса железа, равная 55,845 а. е. м.;
 $Ar(Si)$ – атомная масса кремния, равная 28,086 а. е. м.

Доля кремния, связанная с марганцем:

$$Si_{Mn} = \frac{3}{5} \cdot \frac{Mn \cdot Ar(Si)}{Ar(Mn)}, \quad (8)$$

где Mn – концентрация марганца в сплаве;
 $Ar(Mn)$ – атомная масса марганца, равная 54,938 а. е. м.

Количество кремния в матрице:

$$Si_{\text{мат}} = Si - Si_{Fe} - Si_{Mn}. \quad (9)$$

Сравнивая результат определения количества общего кремния в сплаве с количеством растворенного в матрице кремния, установили, что возможно использовать уравнение регрессии

$$Si_{\text{мат}} = 0,07 \cdot Si + 0,03. \quad (10)$$

Анализируя таблицу 2 и сопоставляя с диаграммой Cu–Zn– $((Fe, Mn)_5Si_3)$ (рис. 1), установили, что полученные результаты соответствуют соотношению фаз при температуре 700 °С, что несколько отличается от работ [12; 13]. В таком случае формулы по методам прогнозирования приобретают вид:

$$\alpha_{\text{пресс}} = \frac{41,6 - \text{Zn}_3}{41,6 - 34,4}, \quad (11)$$

$$\alpha_{\text{отжига}} = \frac{45,6 - \text{Zn}_3}{45,6 - 36,5}. \quad (12)$$

Аналогично [12] полученный результат умножаем на коэффициент K , учитывающий весовую долю свинца и силицидов, корректируя количество кремния в соответствии с расчетом (7)–(10):

$$K = \frac{100 - \text{Pb}_{(\text{объем})} - (\text{Fe, Mn})_5\text{Si}_3(\text{объем})}{100}. \quad (13)$$

Объемную долю свинца и силицидов определяем в соответствии с формулой [12]:

$$W_{\text{объем}} = W_{\text{мас}} \cdot \frac{\rho_{\text{латуни}}}{\rho_{\text{к}}}, \quad (14)$$

где $W_{\text{мас}}$ – массовая доля соответствующего вещества; $\rho_{\text{латуни}}$ и $\rho_{\text{к}}$ – плотности латуни и соответствующего вещества.

Далее проводили расчет коэффициента детерминации R^2 для методик [12; 13] и по формулам (9)–(12), используя коэффициенты Гийе [14] и Ефремова [17]. При расчете по [14; 17] во всех случаях получаем однофазную α -латунь. Показатели расчетов по (11)–(14) приведены в таблице 5.

Расчет цинкового эквивалента по таблице 4 показал, что для α -фазы $\text{Zn}_3=33,0\%$, для β -фазы $\text{Zn}_3=41,8\%$, что соответствует α -фазе при $750\text{ }^\circ\text{C}$, β -фазе при $700\text{ }^\circ\text{C}$ на диаграмме (рис. 1). Результат соответствует данным, полученным при металлографическом анализе.

Исходя из действующих требований (таблица 2) определили минимальное и максимальное количество α - и β -фаз в сплаве: α -фаза=39...70% ($\alpha \geq 50\%$ в 88% случаев), β -фаза=18...50%. При этом в 99% случаев в микроструктуре преобладает α -фаза.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Известно [18], что силициды в сплаве представляют собой соединение $(\text{Fe, Mn})_5\text{Si}_3$. Однако признаков эвтектоидного распада $\beta \rightarrow \alpha + \beta$, установленного ранее в [18], не выявлено. Микроструктура сплава ЛМцАЖКС в приведенной работе исследована в отожженном состоянии, что и является причиной различия в результатах. Таким образом,

в промышленно производимом сплаве ЛМцАЖКС после прессования эвтектоидный распад высокотемпературной β -фазы практически полностью подавлен, и сплав находится в неравновесном состоянии. Высокая изменчивость микроструктуры $\alpha/\beta=0,9...2,4$ является фактором, определяющим нестабильность технологических свойств.

Микроструктура сплава с точки зрения технологичности не является оптимальной, так как основные операции технологического процесса связаны с горячим деформированием. В работе [19] показано, что корректировка алюминия на 0,4% мас. позволяет значимо стабилизировать процесс, качественно не изменяя требований нормативов. В нашем случае при содержании алюминия 5,3...6,0% α -фаза составит 40...65% ($\alpha \geq 50\%$ в 67% случаев), β' -фаза – 23,5...50%. С точки зрения качественного повышения технологичности целесообразно обеспечить соотношение α - и β -фаз 50/50 [17]. Это возможно получить, ограничивая содержание меди до 68,45...70,40%, алюминия – 5,3...6,0%. Тогда количество α -фазы равно 28,5...58,3% ($\alpha \geq 50\%$ в 18% случаев), β -фазы – 30...61%. Известно, что максимальная износостойкость обеспечивается при количестве β' -фазы 45...50%, α -фазы – 30...45% [20; 21]. Такое соотношение соответствует содержанию меди 68,8...70,7%, алюминия – 5,5...6,1%. Для предотвращения образования силицидов неблагоприятной формы концентрацию кремния в сплаве рекомендуется ограничивать до не более чем 2,2% [18].

Проверка методики прогнозирования продемонстрировала, что полученная модель обладает коэффициентом детерминации (R^2), равным 0,62, что свидетельствует о приемлемом качестве модели, в отличие от ранее известных моделей [12; 13], что может объясняться изменившимися условиями производства сплава. Положение о полной связанности кремния и использование коэффициентов связанности марганца и железа с кремнием, на наш взгляд, является одним из основных источников погрешности моделей [12; 13]. В результате получено, что предсказанные значения по [12; 13] дают сильно завышенные результаты (на 20...30%) и $R^2 < 0$. Таким образом, на основании предложенной имитационной модели возможно не только провести анализ технологических рисков, но и предсказать поведение новых сплавов со скорректированным или принципиально новым химическим составом, что является критически важным для оптимизации технологических процессов и улучшения эксплуатационных свойств материалов. Ожидается, что результаты данного исследования внесут вклад в развитие технологий производства и переработки многокомпонентных латуней, а также повысят их конкурентоспособность на современном рынке.

Таблица 5. Показатели расчетной модели
Table 5. Calculation model indicators

Среднее по выборке, %			Стандартное отклонение, %			Коэффициент детерминации R^2
α	β	(Fe,Mn) ₅ Si ₃	α	β	(Fe,Mn) ₅ Si ₃	
53,1	35,5	11,5	4,4	4,0	0,4	0,62

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

Статистический анализ промышленных партий латуни ЛМцАЖКС показал, что изменчивость микроstructures сплава, обеспечивающая стабильность технологических и эксплуатационных характеристик, может быть описана аналитическо-имитационной моделью, основанной на коэффициентах Гийе и диаграмме Cu–Zn–((Fe,Mn)₅Si₃).

Выполнено уточнение формулы прогнозирования α-фазы сплава после прессования. При этом установлено соответствие наблюдаемой микроstructures соотношению α- и β-фаз на псевдобинарном политермическом разрезе диаграммы Cu–Zn_c–Mn₅Si₃ при 700 °С. Для горячепрессованного состояния установлена полная связанность Fe в силицидах, наличие остаточного содержания Si в α- и β-фазах и равномерное распределение Mn в α- и β-фазах.

Для повышения технологичности рекомендуется изменить содержание меди и алюминия до 68,45...70,40 % и 5,3...6,0 % соответственно. Предполагается, что максимальная износостойкость обеспечивается содержанием меди на уровне 68,8...70,7 %, алюминия – 5,5...6,1 %.

Предложенная имитационная модель позволит снизить риски отклонений в технологических процессах при корректировке требований к химическому составу и разработке новых марок латуней, совместно легированных алюминием, марганцем, железом и кремнием.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Истомина Е.Е., Куранов М.Н. Механизмы управления промышленным предприятием: принципы бережливого производства // Компетентность. 2020. № 6. С. 38–42. EDN: [IWBBKZ](#).
- Шпер В.Л., Шереметьева С.А., Смелов В.Ю., Хунузида Е.И. Контрольные карты Шухарта – простой, но не лёгкий для применения инструмент анализа данных // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия. 2024. Т. 67. № 1. С. 121–131. DOI: [10.17073/0368-0797-2024-1-121-131](#).
- Трофимова Н.Н. Особенности и перспективы внедрения интегрированной методологии Lean Six Sigma на предприятии // Вестник университета. 2021. № 4. С. 123–129. DOI: [10.26425/1816-4277-2021-4-123-129](#).
- Овчинников А.С., Логинов Ю.Н. Особенности прессования труб из сложнолегированной латуни ЛМцАЖКС // Производство проката. 2012. № 4. С. 38–41. EDN: [PALEBN](#).
- Пугачева Н.Б., Овчинников А.С., Лебедь А.В. Анализ дефектов промышленных заготовок из латуней // Цветные металлы. 2014. № 10. С. 71–77. EDN: [SOVRLB](#).
- Dong Zhuangzhuang, Jie Jinchuan, Dong Bowen, Wang Xianlong, Liu Shichao, Li Tingju. Effect of aluminum addition on microstructure and properties of a novel nickel-silicon-containing brass // Journal of Materials Research. 2020. Vol. 35. P. 1598–1611. DOI: [10.1557/jmr.2020.141](#).
- Hendrawan Ch.N., Setyani A., Pertiwi D.R.K., Sofyan B.T. Effect of 9 wt% Mn addition on cold rolling and annealing behaviour of Cu-31Zn alloy // Materials Today: Proceedings. 2021. Vol. 46. Part 9. P. 3346–3351. DOI: [10.1016/j.matpr.2020.11.476](#).
- Яковцева О.А., Михайловская А.В., Иржак А.В., Котов А.Д., Медведева С.В. Сравнение вкладов действующих механизмов сверхпластической деформации двойной и многокомпонентных латуней // Физика металлов и металловедение. 2020. Т. 121. № 6. С. 643–650. DOI: [10.31857/S0015323020060182](#).
- Яковцева О.А., Кабойи П.К., Иржак А.В., Михайловская А.В. Влияние малой добавки алюминия на особенности и механизмы сверхпластической деформации сплава Cu-Zn с микродуплексной структурой // Физическая мезомеханика. 2023. Т. 26. № 3. С. 62–71. DOI: [10.55652/1683-805X_2023_26_3_62](#).
- Stavroulakis P., Toulfatzis A.I., Pantazopoulos G.A., Paipetis A.S. Machinable Leaded and Eco-Friendly Brass Alloys for High Performance Manufacturing Processes // Metals. 2022. Vol. 12. № 2. Article number 246. DOI: [10.3390/met12020246](#).
- Левин Д.О., Сулицин А.В., Карева Н.Т., Галимов Д.М. Влияние химического состава латуни типа ЛС59-1 на качество водозапорных изделий // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Металлургия. 2022. Т. 22. № 4. С. 38–55. EDN: [IQCHZH](#).
- Котов Д.А., Мысик Р.К., Еремин А.А., Волков М.И., Жукова Л.М. Прогнозирование фазового состава сложнолегированных латуней // Литейщик России. 2005. № 9. С. 17–21.
- Тропотов А.В., Пугачева Н.Б., Рязанцев Ю.В., Жукова Л.М. Исследование остаточных напряжений в изделиях, изготовленных из сложнолегированных латуней // Металловедение и термическая обработка металлов. 2006. № 1. С. 28–32. EDN: [KTYOWP](#).
- Guillet L., Portevin A. Revue de Metallurgie Memoirs XVII. Paris, 1920. 561 p.
- Васильев М.А. Структура и динамика поверхности переходных металлов. Киев: Наукова думка, 1988. 248 с.
- Kamali-Moghaddam S., Häggström L., Ericsson T., Wappling R. Metallurgical behavior of iron in brass studied using Mössbauer spectroscopy // Hyperfine Interact. 2006. Vol. 168. P. 995–999. DOI: [10.1007/s10751-006-9386-2](#).
- Ефремов Б.Н. Латунь. От фазового строения к структуре и свойствам. М.: ИНФРА-М, 2014. 312 с.
- Пугачева Н. Б. Структура промышленных α + β-латуней // Металловедение и термическая обработка металлов. 2007. № 2. С. 23–29. EDN: [KVXIWf](#).
- Святкин А.В., Выбойщик М.А., Гнусина А.М. Влияние метастабильных соединений на склонность к растрескиванию многокомпонентных латуней // Деформация и разрушение материалов. 2024. № 4. С. 32–40. EDN: [OGLZJL](#).
- Курбаткин И.И., Белов Н.А., Райков Ю.Н., Румянцева О.В., Похлебенина Л.А., Антипов В.В. Влияние легирующих элементов и технологических факторов на фазовый состав и свойства латунных труб, применяемых в автомобильной промышленности // Цветные металлы. 2001. № 5. С. 73–76.
- Курбаткин И.И., Мочалов С.Н., Котов В.В., Пружинин И.Ф. Влияние химических элементов на формирование структуры и свойств специальных латуней при их обработке // Цветные металлы. 2000. № 2. С. 85–88.

REFERENCES

- Istomina E.E., Kuranov M.N. Principles of lean production in industrial enterprise management mechanisms. *Kompetentnost*, 2020, no. 6, pp. 38–42. EDN: [IWBBKZ](#).
- Shper V.L., Sheremeteva S.A., Smelov V.Yu., Khunuzidi E.I. Shewhart control charts – A simple but not easy tool for data analysis. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Chernaya metallurgiya*, 2024, vol. 67, no. 1, pp. 121–131. DOI: [10.17073/0368-0797-2024-1-121-131](#).
- Trofimova N.N. Features and prospects of implementation of the integrated Lean Six Sigma methodology at the enterprise. *Vestnik universiteta*, 2021, no. 4, pp. 123–129. DOI: [10.26425/1816-4277-2021-4-123-129](#).
- Ovchinnikov A.S., Loginov Yu.N. Special aspects of pressing pipes from complex alloyed LMtAZhKS brass. *Proizvodstvo prokata*, 2012, no. 4, pp. 38–41. EDN: [PALEBN](#).
- Pugacheva N.B., Ovchinnikov A.S., Lebed A.V. Analysis of defects of industrial brass blanks. *Tsvetnye metally*, 2014, no. 10, pp. 71–77. EDN: [SQVRLB](#).
- Dong Zhuangzhuang, Jie Jinchuan, Dong Bowen, Wang Xianlong, Liu Shichao, Li Tingju. Effect of aluminum addition on microstructure and properties of a novel nickel-silicon-containing brass. *Journal of Materials Research*, 2020, vol. 35, pp. 1598–1611. DOI: [10.1557/jmr.2020.141](#).
- Hendrawan Ch.N., Setyani A., Pertiwi D.R.K., Sofyan B.T. Effect of 9 wt% Mn addition on cold rolling and annealing behaviour of Cu-31Zn alloy. *Materials Today: Proceedings*, 2021, vol. 46, part 9, pp. 3346–3351. DOI: [10.1016/j.matpr.2020.11.476](#).
- Yakovtseva O.A., Mikhaylovskaya A.V., Kotov A.D., Medvedeva S.V., Irzhak A.V. Comparison of contributions of the mechanisms of the superplastic deformation of binary and multicomponent brasses. *Physics of Metals and Metallography*, 2020, vol. 121, no. 6, pp. 582–589. DOI: [10.1134/S0031918X20060186](#).
- Yakovtseva O.A., Kaboyi P.K., Irzhak A.V., Mikhaylovskaya A.V. Influence of minor aluminum addition on the superplastic deformation of a microduplex Cu–Zn alloy. *Physical Mesomechanics*, 2023, vol. 26, no. 5, pp. 533–541. DOI: [10.1134/s1029959923050065](#).
- Stavroulakis P., Toulfatzis A.I., Pantazopoulos G.A., Paipetis A.S. Machinable Leaded and Eco-Friendly Brass Alloys for High Performance Manufacturing Processes. *Metals*, 2022, vol. 12, no. 2, article number 246. DOI: [10.3390/met12020246](#).
- Levin D.O., Sulitsin A.V., Kareva N.T., Galimov D.M. Effects of chemical composition of brass alloy type LS59-1 on the quality of ball valves. *Vestnik Yuzhno-Uralskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Metallurgiya*, 2022, vol. 22, no. 4, pp. 38–55. EDN: [IQCHZH](#).
- Kotov D.A., Mysik R.K., Eremin A.A., Volkov M.I., Zhukova L.M. Prediction of phase composition of complex alloyed brasses. *Liteyshchik Rossii*, 2005, no. 9, pp. 17–21.
- Tropotov A.V., Pugacheva N.B., Ryazantsev Yu.V., Zhukova L.M. A study of residual stresses in articles produced from complexly-alloyed brass. *Metal Science and Heat Treatment*, 2006, vol. 48, no. 1-2, pp. 31–35. DOI: [10.1007/s11041-006-0039-5](#).
- Guillet L., Portevin A. *Revue de Metallurgie Memoirs XVII*. Paris, 1920. 561 p.
- Vasilev M.A. *Struktura i dinamika poverkhnosti perekhodnykh metallov* [Structure and Dynamics of the Surface of Transition Metals]. Kiev, Naukova dumka Publ., 1988. 248 p.
- Kamali-Moghaddam S., Häggström L., Ericsson T., Wappling R. Metallurgical behavior of iron in brass studied using Mössbauer spectroscopy. *Hyperfine Interact*, 2006, vol. 168, pp. 995–999. DOI: [10.1007/s10751-006-9386-2](#).
- Efremov B.N. *Latuni. Ot fazovogo stroeniya k strukture i svoystvam* [Brasses. From phase composition to structure and properties]. Moscow, INFRA-M Publ., 2014. 312 p.
- Pugacheva N.B. Structure of commercial $\alpha + \beta$ brasses. *Metal Science and Heat Treatment*, 2007, vol. 49, no. 1-2, pp. 67–74. DOI: [10.1007/s11041-007-0013-x](#).
- Svyatkin A.V., Vyboyschik M.A., Gnusina A.M. Effect of metastable compounds on susceptibility to cracking of multicomponent brasses. *Deformatsiya i razrushenie materialov*, 2024, no. 4, pp. 32–40. EDN: [OGLZJL](#).
- Kurbatkin I.I., Belov N.A., Raykov Yu.N., Rumyantseva O.V., Pokhlebenina L.A., Antipov V.V. Effect of alloying elements and technological factors on phase composition and properties of brass tubes used in the automotive industry. *Tsvetnye metally*, 2001, no. 5, pp. 73–76.
- Kurbatkin I.I., Mochalov S.N., Kotov V.V., Pruzhinin I.F. The influence of chemical elements on the formation of the structure and properties of special brasses during their processing. *Tsvetnye metally*, 2000, no. 2, pp. 85–88.

Universal model for predicting the phase composition of multicomponent brasses based on chemical analysis data

*Aleksey V. Svyatkin**¹, PhD (Engineering),

assistant professor of Chair “Nanotechnology, Materials Science and Mechanics”

Gleb V. Kostin, student of Chair “Nanotechnology, Materials Science and Mechanics”

Togliatti State University, Togliatti (Russia)

*E-mail: astgl@mail.ru

¹ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8121-9084>

Received 04.06.2024

Revised 04.10.2024

Accepted 20.11.2024

Abstract: When developing technical requirements for alloys, it is important to apply an integrated approach. Combining analytical and simulation modelling, it is possible to reduce technological risks at the stage of creating or modifying requirements. The implementation of this approach directly depends on the degree of consideration of all factors included in the models, as well as on their influence on the variability of characteristics. However, known models do not provide satisfactory convergence with real industrial alloys. Using the example of a complex-alloyed CuZn13Mn8Al5Si2Fe1Pb brass, an approach is proposed that allows describing the variability in the structural state of multicomponent brasses. The analysis of statistical data on the chemical composition and microstructure of industrial batches, made it possible to establish that the alloy matrix solution is a ($\alpha+\beta$)-brass, and corresponds to the phase ratio at 700 °C on the polythermal pseudo-binary cross-section of the Cu–Zn–Mn₅Si₃ diagram. The distribution of alloying elements in the main phases was studied using X-ray spectral analysis. The complete binding of iron in silicides and uniform distribution of manganese in the hot-pressed state were confirmed. A calculation of the silicon proportion in the solid solution was proposed. The measured density of the alloy is 7650 kg/m³, while the calculated density of the matrix solution is 8100 kg/m³. Based on the updated parameters of the universal model, the authors used the Monte Carlo method to assess the variability of the microstructure in relation to the requirements for the chemical composition. The instability of technological properties is attributed to significant variability in the ratio of the α - and β -phases. The content of the α -phase in the alloy ranges from 37.5 % to 66.5 %, while the β -phase varies from 17.5 % to 55.2 %. The simulation model developed in this study enables both to analyse the existing alloys and to predict the behaviour of new alloys. This is critically important for optimising technological processes, and improving the operational properties of materials.

Keywords: multicomponent brass; CuZn13Mn8Al5Si2Fe1Pb; stability of technological processes; chemical composition of special brasses; statistical simulation modelling of phase composition; brass microstructure; brass density; zinc equivalent; silicides.

For citation: Svyatkin A.V., Kostin G.V. Universal model for predicting the phase composition of multicomponent brasses based on chemical analysis data. *Frontier Materials & Technologies*. 2024. No. 4. P. 87–95. DOI: 10.18323/2782-4039-2024-4-70-8.