УДК 669.017 : 621.785.78

ИССЛЕДОВАНИЕ НАЧАЛЬНОЙ СТАДИИ ЗАРОЖДЕНИЯ ЧАСТИЦ Al_3Sc ПРИ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКЕ Al–Sc СПЛАВОВ

© 2026 В.Ю. Чинов[1], Е.В. Арышенский[1], Д.И. Долгов[1], В.Ю. Арышенский[2], С.В. Коновалов[1]

[1] Сибирский государственный индустриальный университет, Новокузнецк, Россия
[2] Самарский национальный исследовательский университет имени академика с.П. Королева, г. Самара, Россия

Статья поступила в редакцию 07.04.2026

В статье приводятся результаты исследования начальной стадии зарождения частиц Al_3Sc в алюминиево-скандиевых сплавах. Моделирование выполнялось кинетическим методом Монте-Карло при температуре 400 °С в течение 1 с, начальная концентрация Sc составляла 0,1 и 0,2 мас.%. Экспериментально формирование частиц изучали методами измерения электропроводности и микротвердости при 300 и 400 °С, выдержка 2–10 мин. Установлено, что зарождение частиц начинается на самых ранних стадиях термической обработки. Выявлены особенности влияния раннего зарождения частиц на электропроводность и микротвердость сплавов.
Ключевые слова: Al–Sc сплавы, зарождение Al_3Sc, диффузия, кинетический метод Монте-Карло (КМК), дисперсное упрочнение, микротвердость, электропроводность.

DOI: 10.37313/1990-5378-2026-28-4-10-17
EDN: EGDFZZ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-19-00810-П, https://ias.rscf.ru/user/doc/a.w.p.2025.5068.main/18181871.

1. ВВЕДЕНИЕ

Алюминиевые сплавы находят широкое применение во всех отраслях современной промышленности. Дополнительное легирование скандием позволяет существенно улучшить их эксплуатационные свойства, в частности – повысить термостойкость при высоких температурах и улучшить свариваемость [1–4]. Введение скандия способствует значительному уменьшению размера зерен и подавлению образования дендритной структуры [5,6]. Указанные преимущества обусловлены формированием в микроструктуре интерметаллидных частиц Al_3Sc [7]. Поскольку Al_3Sc является единственной упрочняющей фазой в системе Al–Sc, морфология, кинетика выделения и механизмы роста этих преципитатов определяют комплекс механических характеристик сплава.

Однако в процессе термообработки и дальнейшей эксплуатации сплавов при высоких температурах наблюдается рост и коалесценция частиц с последующей потерей ими когерентности, что сопровождается снижением механических характеристик [7–11].

Кинетика выделения частиц Al_3Sc описывается тремя стадиями: зарождением (нуклеацией), ростом и огрублением (коалесценцией). На начальном этапе частицы образуются в ходе распада пересыщенного твердого раствора, затем происходит их рост за счет поглощения скандия из алюминиевой матрицы. После истощения твердого раствора (выхода всего доступного Sc) начинается стадия огрубления: мелкие частицы растворяются, а крупные продолжают расти.

Кинетика роста и огрубления частиц Al_3Sc хорошо изучена как экспериментально (просвечивающая электронная микроскопия, измерение удельной электропроводности и микротвердости) [7–12], так и методами математического моделирования (среднего поля, метод фазового поля, кластерной динамики) [12]. Однако на процессы роста и огрубления частиц Al_3Sc большое влияние оказывает начальная стадия зарождения, кинетика которой исследована недостаточно.

Чинов Вячеслав Юрьевич, младший научный сотрудник, преподаватель кафедры ОМДиМ ЕВРАЗ ЗСМК. E-mail: chinov_vy@sibsiu.ru
Арышенский Евгений Владимирович, доктор технических наук, PhD, профессор, главный научный сотрудник УНИ, заведующий кафедрой ОМДиМ ЕВРАЗ ЗСМК. E-mail: arishenskiy_ev@sibsiu.ru
Долгов Данил Игоревич, лаборант УНИ. E-mail: moryk0205@gmail.com
Арышенский Владимир Юрьевич, доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник ОНИЛ № 4. E-mail: arysh54@mail.ru
Коновалов Сергей Валерьевич, доктор технических наук, главный научный со-трудник УНИ, профессор, проректор по научной и инновационной деятельности. E-mail: konovalov@sibsiu.ru

Для решения этих задач могут быть применены методы математического моделирования [12]. Наиболее подходящим для исследования коротких временных интервалов является кинетический метод Монте-Карло (КМК). Этот стохастический метод позволяет моделировать эволюцию системы во времени на основе случайных событий с заданными вероятностями. КМК позволяет получить сведения о кинетике зарождения частиц по типу Al_3Sc на самых ранних стадиях термообработки [12–16].

Цель работы – исследовать образование зародышей частиц Al_3Sc с помощью экспериментальных методов и кинетического метода Монте-Карло.

2. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

2.1. Моделирование

Моделирование выполняли кинетическим методом Монте-Карло. Для этого задавалась трехмерная гранецентрированная кубическая (ГЦК) решетка размером 100×100×1000 элементарных ячеек (всего 4 000 000 узлов) с параметром a=4,05 A˚.

Начальную конфигурацию задавали случайным распределением атомов Al, Sc и вакансий по узлам решетки в соответствии с номинальной концентрацией Sc: 0,1 и 0,2 мас.% (0,06 и 0,12 ат.%). Температуры процесса – 400 ˚C, число шагов – $5e^{11}$. Энергии межатомного взаимодействия $E_{Al\text{-}Al}$=–0,560 эВ и $E_{Sc\text{-}Sc}$=–0.650 эВ взяты из [14–15]. Программа, реализующая метод КМК, написана на языке MATLAB (лицензия 898519) на основании алгоритмов, описанных в работах [14–15] и кратко представленных ниже.

Решетка содержала N_s узлов, в которых распределялись N_a атомов (Al и Sc) и $N_v = N_s - N_a$ вакансий. Для ГЦК-структуры число первых ближайших соседей составляло $Z_1 = 12$ и $Z_2 = 6$ для вторых. В модели использовалась одна вакансия на всю решетку, что потребовало последующей коррекции временного масштаба для перехода к реальному времени.

Эволюцию системы моделировали с использованием алгоритма Бортца–Калоса–Лебовица (BKL). Данный алгоритм исключает отбраковку конфигураций: на каждом шаге переход выбирался непосредственно с вероятностью, пропорциональной скорости перехода.

Для текущей конфигурации с вакансией в фиксированном положении рассчитывали все возможные скорости переходов в новые состояния (обмен вакансии с одним из 12 первых ближайших соседей):

$$\Gamma_i = \nu \cdot \exp\left(\frac{\Delta E_i}{k_B T}\right), \tag{1}$$

где ν – частота попыток (различная для Al и Sc); ΔE_i – энергия активации перехода; k_B – постоянная Больцмана; T – температура.

Полную скорость переходов для текущего состояния вычисляли как сумму частот всех возможных переходов:

$$\Gamma_{\text{total}} = \sum_{i=1}^{12} \Gamma_i . \tag{2}$$

Выбор конкретного перехода осуществляли методом случайного числа. Генерировалось равномерно распределенное случайное число от 0 до 1. Вычислялись частичные суммы. Переход n выбирался из условия:

$$\sum_{i=1}^{n} \Gamma_i < rando\ number \leqslant \sum_{i=1}^{n+1} \Gamma_i. \tag{3}$$

Энергия активации – энергетический барьер, который необходимо преодолеть атому при обмене с вакансией – рассчитывали с учетом локального атомного окружения в первой и второй координационных сферах.

Для обмена вакансии с атомом алюминия использовали выражение:

$$\Delta E_{\text{Al},V} = \Delta E^{(0)}_{\text{Al},V} + \Delta E^{\text{окр}}_{\text{Al},V}, \tag{4}$$

где $\Delta E^{(0)}_{\text{Al},V}$ – энергия активации в чистом алюминии. Поправка на локальное окружение определялась как:

$$\Delta E^{\text{окр}}_{\text{Al},V} = \sum_{i=1}^{Z_1}\left(n^{(1)}_{\text{AlAl}}\varepsilon_{\text{AlAl}} + n^{(1)}_{\text{AlSc}}\varepsilon_{\text{AlSc}} + n^{(1)}_{\text{AlV}}\varepsilon_{\text{AlV}}\right) + \sum_{i=1}^{Z_2}\left(n^{(2)}_{\text{AlAl}}\varepsilon'_{\text{AlAl}} + n^{(2)}_{\text{AlSc}}\varepsilon'_{\text{AlSc}}\right), \tag{5}$$

здесь $n_{AlAl}{}^{(1)}n_{AlSc}{}^{(1)}$ – количество связей алюминий-алюминий и алюминий-скандий в первой координационной сфере; $n_{AlAl}{}^{(2)}n_{AlSc}{}^{(2)}$ – количество связей алюминий-алюминий и алюминий-скандий во второй координационной сфере; $n_{AlV}{}^{(1)}n_{AV}{}^{(1)}$ – количество связей с вакансией. Параметры ε представляли собой эффективные энергии парного взаимодействия.

Для обмена вакансии с атомом скандия использовалось аналогичное выражение:

$$\Delta E_{\text{Sc},V} = \Delta E^{(0)}_{\text{Sc},V} + \Delta E^{\text{окр}}_{\text{Sc},V} \tag{6}$$

с соответствующими членами, учитывающими связи скандий-скандий, скандий-алюминий и скандий-вакансия.

Поскольку в моделировании использовалась одна вакансия, концентрация вакансий в модели C_V^{sim} значительно превышала реальную равновесную концентрацию C_V^{real}. Для перехода к реальному времени вводили поправочный коэффициент, учитывающий это различие:

$$\Delta t_{\text{real}} = \Delta t_{\text{MC}} \cdot \frac{C_V^{\text{sim}}}{C_V^{\text{real}}}. \quad (7)$$

Кластеризация атомов Sc происходила по следующему принципу:

На первом этапе формировались центры атомов Sc для образования кластера (частицы) с условием, что 12 первичных соседей – это атомы Al, а во вторичных соседях должен быть хотя бы один атом Sc из 6 возможных.

На втором этапе происходила кластеризация этих атомов по заранее заданному радиусу. Кластеризация считалась успешной, если количество атомов Sc в кластере было $n \geq 13$. Если количество атомов Sc было меньше заданного условия, кластер обозначался как шум и разъединялся.

На третьем этапе производился подсчет количества атомов Sc и Al для вычисления среднего радиуса кластера по формуле:

$$R_{\text{ср.}} = \left(\frac{3a^2 n}{8\pi}\right)^{1/3}, \quad (8)$$

где a – параметр решетки; n – количество атомов в частице.

На четвертом этапе вычислялся объем частицы по формуле:

$$\text{V} = \frac{4}{3}\pi R_{\text{ср.}}^{\ 3}. \quad (9)$$

На последнем этапе производился подсчет некластеризованных атомов Sc для определения количества атомов, оставшихся для дальнейшего роста частицы.

2.2 Эксперименты

Для апробации результатов моделирования были проведены экспериментальные исследования на сплавах с содержанием Sc 0,1 и 0,2 мас.% (0,06 и 0,12 ат.%). Химический состав сплавов приведен в таблице 1.

Таблица 1. Химический состав сплавов

Образец	Cu %	Mn %	Fe %	Si %	Sc %	Al %
1	2	2	<0,2	<0,2	0,1	ост.
2	2	2	<0,2	<0,2	0,2	ост.

Сплавы отливали в медный кокиль размером 20х40х400 мм со скоростью охлаждения 2 °С/с. Для приготовления расплава использовали алюминий марки А85, лигатуру марки Al–Sc2, легирующие таблетки марки Mn90Al10. Все шихтовые материалы перед загрузкой в печь резали ленточной пилой на мерные куски размером не более 50х50 мм. Плавку проводили в печи марки Xtoki. После затвердевания слиток извлекали из кокиля и охлаждали в воде. Отжиг слитков выполняли в муфельной электрической печи при 300, 400 ˚С. Режимы термообработки приведены в таблице 2.

Таблица 2. Режимы термообработки

Образец	Температура, ˚С	Время, мин
1–300	300	2, 5, 10
2–300	300	2, 5, 10
1–400	400	2, 5, 10
2–400	400	2, 5, 10

Удельную электропроводность измеряли согласно ГОСТ 27333–87 вихретоковым измерителем электрической проводимости цветных металлов ВЭ-27НЦ/4-5 (относительная погрешность ± 2 %, температура 25…30 °С).

Микротвердость определяли на цифровом стационарном твердомере HV-1000 методом Микро-Виккерса путем вдавливания алмазного индентера пирамидальной формы в поверхность образца с определенным испытательным усилием.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В ходе экспериментальных исследований сплавов системы Al–Sc (образцы 1 и 2 с содержанием Sc 0,1 и 0,2 мас.% соответственно) установлено, что резкое падение твердости, вызванное снятием остаточных напряжений [16], сменяется процессом зарождения вторичных частиц типа $L1_2$ (Al_3Sc). Уже при температуре 300 °C этот процесс фиксируется в первые минуты изотермической выдержки (рис. 1). Наблюдаемый рост микротвердости в интервале 2–10 мин обусловлен образованием мелкодисперсных когерентных частиц Al_3Sc, которые эффективно тормозят движение дислокаций, реализуя механизм дисперсного упрочнения.

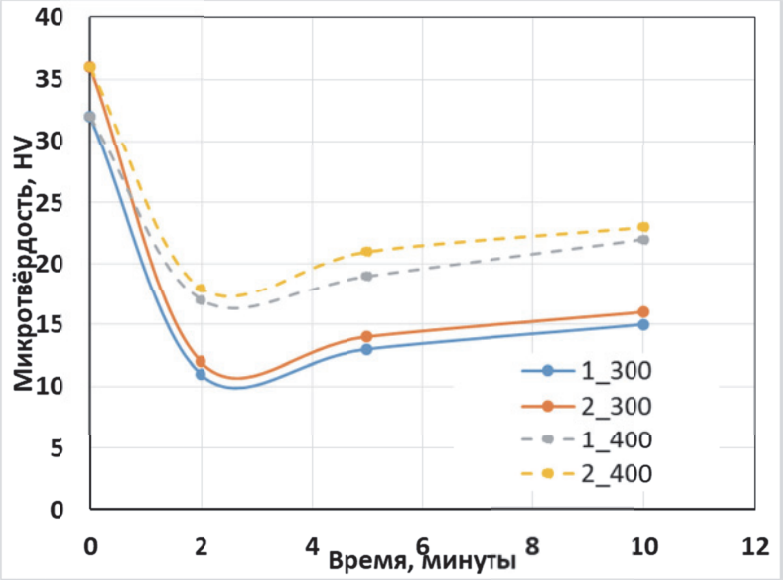

Рис. 1. Зависимость микротвердости от времени выдержки при температурах 300 и 400 °C: образец 1 (0,1 мас.% Sc) и образец 2 (0,2 мас.% Sc)

Повышение концентрации Sc с 0,1 до 0,2 мас.% увеличивает микротвердость в среднем на 9 % благодаря большей плотности центров зарождения из-за более высокого пересыщения твердого раствора. Рост температуры старения до 400 °C ускоряет диффузионные процессы, что приводит к повышению микротвердости в среднем на 55 % относительно значений при 300 °C. Дальнейшие увеличение температуры до 500 °C сохраняет тенденцию к увеличению микротвердости. В среднем каждое повышение температуры дает рост микротвердости в 1,5 раза. Полученные данные указывают на ускоренную кинетику выделения частиц Al_3Sc при повышенных температурах и согласуется с классическими представлениями о термически активируемой диффузии в системах Al–Sc.

Интересные результаты показали замеры электропроводности (рис. 2). При длительных выдержках, сопровождающихся выделением частиц Al_3Sc, обычно наблюдается рост электропроводности. Однако в данном случае зафиксирована иная картина: сначала электропроводность растет, а затем снижается. Начальный рост электропроводности связан с выделением атомов скандия из пересыщенного твердого раствора. Матрица обедняется атомами Sc, которые являются эффективными центрами рассеяния электронов, что и приводит к повышению электропроводности.

Последующее снижение электропроводности, несмотря на продолжающееся уменьшение концентрации Sc в твердом растворе, обусловлено конкурирующим процессом – образованием многочисленных наноразмерных выделений фазы Al_3Sc. Эти частицы, подобно избыточным дислокациям, создают поля упругих напряжений в кристаллической решетке. Возникающие искажения решетки сами становятся центрами рассеяния электронов, и этот эффект начинает доминировать над эффектом снижения рассеяния за счет обеднения матрицы, что и приводит к падению электропроводности.

Таким образом, наблюдается классический конкурирующий процесс: вклад от двух противоположных факторов меняется со временем. При дальнейшей выдержке, по мере роста частиц, вклад от обеднения матрицы превысит эффект искажений решетки, что приведет к последующему росту электропроводности.

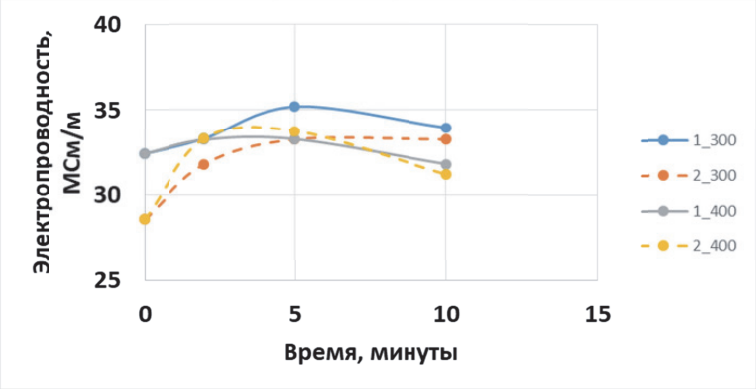

Рис. 2. Зависимость удельной электропроводности от времени выдержки при температурах 300 и 400 °С: образец 1 (0,1 мас.% Sc) и образец 2 (0,2 мас.% Sc)

При температуре старения 300 °С характер изменения электропроводности зависит от концентрации Sc. В сплаве с 0,1 % Sc падение электропроводности происходит на всем протяжении нагрева, тогда как в сплаве с 0,2 % Sc за все время исследования наблюдается только рост. Это различие объясняется разной плотностью зародышей частиц Al_3Sc и кинетикой их роста. При более высокой концентрации скандия (0,2 %) образуется больше зародышей, которые конкурируют за растворенный скандий. Их рост замедлен, и за время эксперимента они не успевают достичь критического размера, при котором поля упругих напряжений становятся достаточными для рассеяния электронов. В этих условиях доминирует эффект обеднения матрицы, и электропроводность растет. В сплаве с 0,1 % Sc плотность зародышей ниже, каждый из них растет быстрее и достигает критического размера, что вызывает спад электропроводности. Более высокая твердость сплава с 0,2 % Sc не противоречит наблюдаемой картине: упрочнение определяется прежде всего количеством частиц и расстоянием между ними, а уже потом их размером. Множество мелких субкритических частиц эффективно тормозят дислокации, но еще не создают искажений решетки, влияющих на электропроводность.

При 400 °С диффузия резко ускоряется, и даже в сплаве с 0,2 % Sc частицы за минуты достигают размеров, достаточных для возникновения полей напряжений, поэтому падение электропроводности наблюдается и для этого состава. Чтобы подтвердить раннее зарождение частиц Al_3Sc, провели моделирование кинетическим методом Монте-Карло в течение первой секунды при 400 °С для сплавов с 0,1 и 0,2 % (рис. 3).

Полученное распределение частиц в течение 1 секунды представлено на рисунке 4.

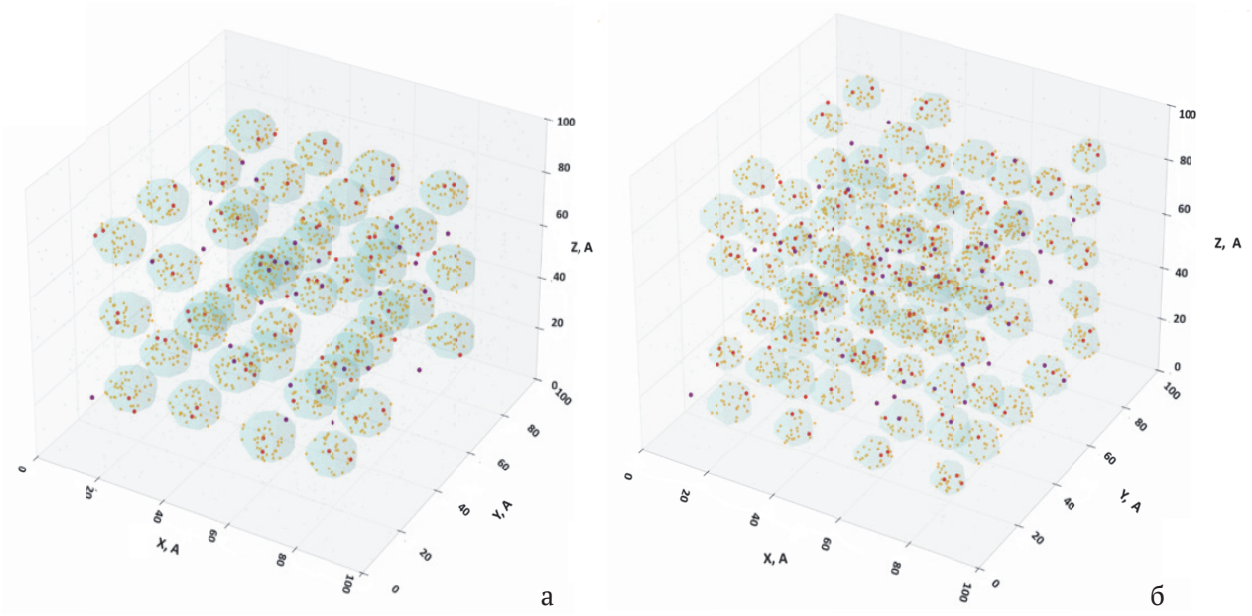

Рис. 3. Моделирование выделения частицы Al_3Sc в расчетной ячейке 100x100x100 (в ангстремах): красные точки – атомы Sc в частицах Al_3Sc; фиолетовые – атомы Sc в алюминиевой матрице; оранжевые – атомы Al в частицах Al3Sc:
а – образец 1 (0,1 мас.% Sc); б – образец 2 (0,2 мас.% Sc)

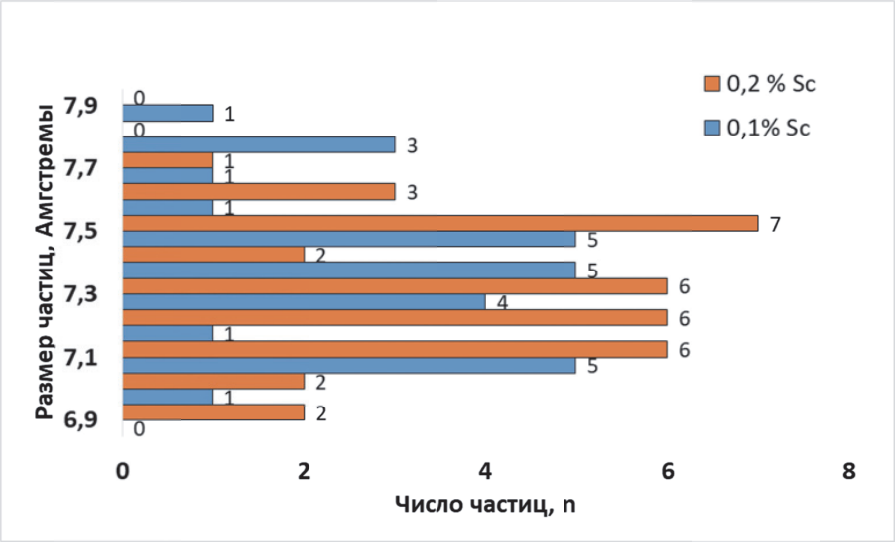

Рис. 4. Распределение частиц Al_3Sc по радиусам частиц для сплавов 0,1 % Sc и 0,2 % Sc

Согласно результатам моделирования, частицы Al_3Sc начинают зарождаться уже в первые секунды термической обработки. Механизм образования частиц следующий. После литья и закалки атомы Sc равномерно распределены в кристаллической решетке алюминия, замещая часть атомов Al в узлах. В решетке также присутствуют вакансии – пустые узлы, концентрация которых значительно выше равновесной благодаря закалке. Это состояние термодинамически нестабильно: свободная энергия системы повышена из-за пресыщения.

При нагреве до температур старения (обычно 300–400 °C) начинается термически активированное движение атомов. Диффузия атомов Sc осуществляется исключительно через обмен с вакансиями: атом Sc, оказавшись рядом с вакансией, может с ней обменяться с некоторой вероятностью местами, совершая элементарный диффузионный прыжок. Таким образом, каждый диффундирующий атом Sc временно образует подвижный комплекс с вакансией, который перемещается по кристаллической решетке. В процессе диффузионного обмена Sc-вакансия, атомы Sc могут встретиться друг с другом.

Когда два или более атомов Sc оказываются в соседних узлах решетки, они могут образовать скопление – докритический кластер, который уже имеет структуру $L1_2$. Это означает, что в системе Al–Sc выделение происходит напрямую, без образования каких-либо промежуточных метастабильных фаз. Однако на данном этапе кластеры еще нестабильны. Полученные кластеры могут либо расти за счет поглощения атомов, либо распадаться, возвращая атомы Sc в раствор. Для дальнейшего роста частица должна иметь размер не менее критического, который на начальном этапе зарождения составляет 0,2 нм.

Моделирование также показало, что повышение концентрации Sc увеличивает количество частиц Al_3Sc примерно в 1,7 раза и уменьшает радиус частиц в среднем на 10%, что согласуется с результатами измерений микротвердости и электропроводности.

Таким образом результаты измерения микротвердости и моделирования кинетическим методом Монте-Карло говорит о том, что, процесс зарождения частиц в Al–Sc сплавах начинает происходить на самых ранних стадиях термообработки.

ВЫВОДЫ

Экспериментально подтверждено, что процесс зарождения вторичных частиц Al_3Sc типа $L1_2$ начинается на самых ранних этапах термической обработки. Уже в первые минуты (2–10 мин) изотермической выдержки при 300 °C фиксируется рост микротвердости, что свидетельствует об образовании мелкодисперсных выделений, эффективно тормозящих движение дислокаций. Результаты кинетического метода Монте-Карло (КМК) также показали, что зарождение частиц Al_3Sc происходит в течение первой секунды термообработки. Механизм зарождения включает диффузию атомов Sc по вакансионному механизму, их встречу и образование докритических кластеров. Установлено, что на начальном этапе критический размер зародыша составляет приблизительно 0,2 нм. Кластеры, размер которых превышает этот размер, становятся стабильными и способны к дальнейшему росту.

Повышение содержания скандия в сплаве с 0,1 до 0,2 мас.% увеличивает микротвердость в среднем на 9 %. Это обусловлено более высоким пересыщением твердого раствора и, как следствие,

большей плотностью центров зарождения частиц Al_3Sc. Повышение температуры старения с 300 до 400 °С закономерно ускоряет диффузионные процессы, что выражается в существенном (в 1,5 раза при каждом повышении температуры) росте микротвердости. Это указывает на ускоренную кинетику выделения упрочняющей фазы при более высоких температурах.

Вопреки классическим представлениям, на начальных стадиях старения наблюдается не рост, а снижение удельной электропроводности. Данный эффект объясняется конкуренцией двух процессов: выделением Sc из алюминиевой матрицы, что повышает проводимость, и образованием большого количества когерентных наночастиц Al_3Sc, которые создают поля упругих напряжений, усиливающие рассеяние электронов и снижающие проводимость.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Precipitation characteristics and morphological transitions of Al_3Sc precipitates / P. Xu, F. Jiang, M. Tong, Z. Tang, J. Jiang, N. Yan, Y. Peng // Journal of Alloys and Compounds. 2019. Vol. 790. P. 509–516. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.03.256
2. Strengthening mechanisms in Al–Ni–Sc alloys containing Al_3Ni microfibers and Al_3Sc nano-precipitates / C. Suwanpreecha, J.P. Toinin, R.A. Michi, P. Pandee, D.C. Dunand, C. Lim-maneevichitr // Acta Materialia. 2019. Vol. 164. P. 334–346. DOI: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.10.059
3. *Røyset J., Ryum N.* Some comments on the misfit and coherency loss of Al_3Sc particles in Al–Sc alloys // Scripta Materialia. 2005. Vol. 52. P. 1275–1279. DOI: https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2005.02.023
4. *Karnesky R.A., Meng L., Dunand D.C.* Strengthening mechanisms in aluminum containing coherent Al_3Sc precipitates and incoherent Al_2O_3 dispersoids // Acta Materialia. 2007. Vol. 55. P. 1299–1308. DOI: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2006.10.004
5. *Norman A.F., Prangnell P.B., Ewen R.S.M.C.* The solidification behaviour of dilute alumini-um–scandium alloys // Acta Materialia. 1998. Vol. 46. P. 5715–5732.
6. Morphological characteristics of Al_3Sc particles and crystallographic orientation relationships of Al_3Sc/Al interface in cast Al–Sc alloy / K. Yan, Z.W. Chen, Y.N. Zhao, C.C. Ren, W.J. Lu, A.W. Aldeen // Journal of Alloys and Compounds. 2020. Vol. 861. P. 158491. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.158491
7. *Hyde K.B., Norman A.F., Prangnell P.B.* The effect of cooling rate on the morphology of primary Al_3Sc intermetallic particles in Al–Sc alloys // Acta Materialia. 2001. Vol. 49. P. 1327–1337. DOI: https://doi.org/10.1016/S1359-6454(01)00050-7
8. Microalloying Al alloys with Sc: a review / J.Y. Zhang, Y.H. Gao, C. Yang, P. Zhang, G. Kuang, G. Liu, J. Sun // Rare Metals. 2020. Vol. 39. P. 636–650. DOI: https://doi.org/10.1007/s12598-020-01433-1
9. Influence of heat treatment modes on the mechanical properties of aluminum alloys 1570, 1580 and 1590 / E.V. Aryshensky, V.Yu. Aryshensky, A.M. Drits, A.A. Ragazin // Bulle-tin of Samara University. Aerospace engineering, technology and mechanical engineering. 2022. Vol. 21. No. 4. P. 76–87. DOI: 10.18287/2541-7533-2022-21-3-76-87
10. Investigation the structure in cast and deformed states of aluminum alloy, economically al-loyed with scandium and zirconium / P.O. Yuryev, V.N. Baranov, T.A. Orelkina, A.I. Bezrukikh, D.S. Voroshilov, Y.M. Murashkin, E.G. Partyko, I.L. Konstantinov, V.V. Yanov, N.A. Stepanenko // The International Journal of Advanced Manufacturing Technology. 2021. Vol. 115. No. 1–2. P. 263–274. DOI: https://doi.org/10.1007/s00170-021-07206-z
11. Influences of the Al_3Sc particle content on the evolution of bimodal grain structure and me-chanical properties of Al–Mg–Sc alloys processed by hard-plate rolling / H.M. Zhang, M. Zha, H.L. Jia, T. Tian, X.H. Zhang, C. Wang, P.K. Ma, D. Gao, H.Y. Wang // Materials Science and Engineering: A. 2021. Vol. 802. P. 140451. DOI: https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.140451
12. *Deschamps A., Hutchinson C.R.* Precipitation kinetics in metallic alloys: Experiments and modeling // Acta Materialia. 2021. Vol. 220. P. 117338. DOI: https://doi.org/10.1016/j.actamat.2021.117338
13. *Kotalczyk G., Skenderović I., Kruis F.E.* Monte Carlo simulations of homogeneous nucleation and particle growth in the presence of background particles // Tellus B: Chemical and Physical Meteorology. 2019. Vol. 71. No. 1. P. 1554415. DOI: https://doi.org/10.1080/16000889.2018.1554415
14. *Clouet E., Nastar M., Sigli C.* Nucleation of Al_3Zr and Al_3Sc in aluminum alloys: From kinetic Monte Carlo simulations to classical theory // Physical Review B. 2004. Vol. 69. No. 6. P. 064109. DOI: https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.064109
15. Precipitation in Al–Zr–Sc alloys: A comparison between kinetic Monte Carlo, cluster dynam-ics and classical nucleation theory / E. Clouet, M. Nastar, A. Barbu, C. Sigli, G. Martin // arXiv. 2005. № cond-mat/0507259.
16. *Wyatt J.E., Berry J.T., Williams A.R.* Residual stresses in aluminum castings // Journal of Materials Processing Technology. 2007. Vol. 191. No. 1–3. P. 170–173.

INVESTIGATION OF THE INITIAL STAGE OF AL_3Sc PARTICLE NUCLEATION DURING HEAT TREATMENT OF Al–Sc ALLOYS

© 2026 V.Yu. Chinov[1], E.V. Aryshevsky[1], D.I. Dolgov[1], V.Yu. Aryshevsky[2], S.V. Konovalov[2]

[1] Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia
[2] Samara National Research University named after Academician S.P. Korolev, Samara, Russia

The initial stage of Al_3Sc particle nucleation in aluminium-scandium alloys was investigated. Kinetic Monte Carlo simulations were performed at a temperature of 400 °C for 1 s with initial Sc concentrations of 0.1 and 0.2 wt.%. Experimentally, particle formation was studied by measuring electrical conductivity and microhardness at 300 and 400 °C with holding times of 2–10 min. It was found that particle nucleation begins at the earliest stages of heat treatment. The effects of early nucleation on the electrical conductivity and microhardness of the alloys were revealed.
Keywords: Al–Sc alloys, Al_3Sc nucleation, diffusion, kinetic Monte Carlo method (KMC), dispersion strengthening, microhardness, electrical conductivity.

DOI: 10.37313/1990-5378-2026-28-4-10-17
EDN: EGDFZZ

Vyacheslav Chinov, Junior Researcher, Lecturer at the Department of OMDiM EVRAZ ZSMK. E-mail: chinov_vy@sibsiu.ru
Evgeny Aryshensky , Doctor of Technical Sciences, PhD, Professor, Chief Researcher of the University, Head of the Department of OMDiM EVRAZ ZSMK. E-mail: arishen-skiy_ev@sibsiu.ru
Danil Dolgov, Laboratory Assistant at UNI. E-mail: moryk0205@gmail.com
Vladimir Aryshensky , Doctor of Technical Sciences, Professor, Chief Researcher at ONIL No. 4. E-mail:arysh54@mail.ru
Sergey Konovalov, Doctor of Technical Sciences, Chief Researcher at the University, Professor, Vice-Rector for Research and Innovation. E-mail: konovalov@sibsiu.ru