

УДК 669.245.018.044:620.193.53

С. В. ГАЙДУК¹, Т. В. ТИХОМИРОВА²¹ Запорожский национальный технический университет,² Запорожское машиностроительное конструкторское бюро «Ивченко-Прогресс»,
Запорожье, Украина**ПРИМЕНЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА γ - и γ' - ФАЗ И ПАРАМЕТРОВ ФАЗОВОЙ СТАБИЛЬНОСТИ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ**

Выполнен анализ экспериментальных данных составов γ - и γ' - фаз для 32 известных литейных жаропрочных никелевых сплавов с различным уровнем легирования. Для этих сплавов методом CALPHAD проведен расчет химических составов γ - и γ' - фаз и выполнен сравнительный анализ экспериментальных и расчетных данных. Показано, что результаты расчетов составов γ - и γ' - фаз, полученные методом математического моделирования, обладают высокой степенью достоверности и хорошо согласуются с экспериментальными данными и могут использоваться для расчета параметров фазовой стабильности \bar{N}_v , $\bar{M}_d\gamma$, \bar{M}_dC , ΔE широкого номенклатурного ряда литейных жаропрочных никелевых сплавов.

Ключевые слова: литейные жаропрочные никелевые сплавы; легирование; γ - твердый раствор; γ' - фаза; параметры фазовой стабильности; математическая модель.

Введение

Установление связи между характером и уровнем легирования для широкого номенклатурного ряда отечественных и зарубежных промышленных жаропрочных никелевых сплавов со спецификой распределения легирующих элементов в основных упрочняющих фазах (γ - и γ' -) оказывает существенное влияние на термодинамические и структурные характеристики жаропрочных материалов данного класса, а также на механизм их упрочнения [1-5].

Успешная реализация ряда основных положений теории легирования литейных жаропрочных никелевых сплавов для ответственных деталей газовых турбин в значительной степени связана с точностью определения химического состава γ - и γ' - фаз [1, 2, 5, 6]. Современный подход с использованием расчетных методик для прогнозирования химического состава фаз, а также фазовой стабильности известных и перспективных сплавов без проведения большого количества промежуточных экспериментов придает научным исследованиям большую эффективность, информативность и экономическую целесообразность. Поэтому работы в данном направлении являются актуальными и перспективными.

В настоящее время исследований, посвященных указанной проблеме, недостаточно. В работах многих авторов [1-8] приводятся экспериментальные данные химического состава основных упрочняющих фаз (γ - и γ' -) для большинства известных

отечественных и зарубежных литейных жаропрочных никелевых сплавов (ЖС6К, ЖС6У, ЖС-26, ЖС-32, ВЖМ1, ВЖМ4, PWA1480, CMSX-4, CMSX-10, CMSX-11B, CMSX-11C, Rene N5, N6, TMS-71 и др.). Вместе с тем, достоверность расчета значений параметров фазовой стабильности \bar{N}_v (метод PHACOMP [8]), $\bar{M}_d\gamma$ и \bar{M}_dC (метод New PHACOMP [9]), ΔE (расчет дисбаланса легирования, ΔE -метод [6, 10, 11]), прогнозирующих вероятность образования охрупчивающих пластинчатых выделений топологически плотноупакованных (ТПУ) фаз из γ - твердого раствора в литейных жаропрочных никелевых сплавах, зависит от точности определения химического состава основных упрочняющих γ - и γ' - фаз в этих сплавах. Поэтому необходимы дополнительные исследования для установления взаимосвязи между уровнем и характером легирования сплавов с величинами параметров фазовой стабильности \bar{N}_v , $\bar{M}_d\gamma$, \bar{M}_dC и ΔE .

Следует отметить, что в данном направлении проводились определенные исследования. В частности, в работах [10-15] представлены данные и зависимости для параметров \bar{N}_v и \bar{M}_dC , $\bar{M}_d\gamma$ и ΔE от содержания легирующих элементов (ат.%) в составе сплавов. Однако представленные результаты указывают на то, что данный подход нуждается в определенном совершенствовании.

1. Постановка задачи

Известны методики, позволяющие оценивать фазовый состав жаропрочных никелевых сплавов по данным об их химическом составе и представлении об их электронной структуре, что дает информацию о том, выделяются ли в объеме таких сплавов вредные ТПУ- фазы, и каково количество образующихся полезных упрочняющих фаз. К числу таких методик относится известный метод PHACOMP, а также принципиально подобные методы, которые позволяют учесть неоднородность распределения легирующих элементов в микроструктуре сплава - New PHACOMP и расчет дисбаланса системы легирования ΔE- метод. При этом, несмотря на определенные успехи в прогнозировании условий неустойчивости фазового состава литейных жаропрочных никелевых сплавов, в данной области остается еще много нерешенных проблем.

Основной целью данной работы является сопоставление экспериментальных данных с расчетными составами γ и γ' - фаз с последующим использованием их для расчета параметров фазовой стабильности с применением разных аналитических методик для широкого номенклатурного ряда литейных жаропрочных никелевых сплавов.

Составы 32 литейных жаропрочных никелевых сплавов выбирались с позиций достоверного экспериментального определения их химического состава γ - и γ' - фаз от уровня, характера и степени легирования [1-8]. Выбор обусловлен еще и тем, что сплавы от 1-го до 5-го поколений охватывают широкую область легирования по основным элементам: (Cr = 2,5-22,5 мас. %; Co = 0-15 мас. %; W = 0-12 мас. %; Mo = 0-6 мас. %; Ti = 0-5 мас. %; Al = 2,5 -6,5 мас. %; Nb = 0-3 мас. %; Ta = 0-12 мас. %; Hf = 0-2 мас. %; Re = 0-9 мас. %; Ru = 0-6 мас. %; V = 0-1 мас. %). Следует отметить, что среди них имеются сплавы, в составе которых отсутствуют некоторые легирующие элементы.

Так, например, в сплавах ЖС32, ВЖМ1, ВЖМ4 отсутствуют титан и гафний; в сплавах PWA1422, PWA1480 отсутствует молибден; в сплавах ЖС6К, PWA1480 отсутствует ниобий; в сплавах ЧС-70, ЗМИ-3У отсутствуют ниобий, тантал и гафний; в сплавах ЖС6У тантал и гафний и т.д. В рассматриваемом перечне присутствуют сплавы, легированные значительным количеством элементов, оказывающих максимальное влияние на жаропрочность при высоких температурах (сплавы ЖС6У, ЖС26 до 12 мас.%W; сплав ВЖМ1 до 9 мас.%Re; сплав PWA1480 до 12 мас.%Ta и т.д.).

На рисунке 1 представлен диапазон по содержанию основных легирующих элементов, входящих

в составы 32 исследованных литейных жаропрочных никелевых сплавов.

3. Анализ результатов

В процессе исследований был проведен аналитический анализ результатов экспериментальных данных по составам γ - и γ' - фаз 32 известных отечественных и зарубежных литейных жаропрочных никелевых сплавов, приведенных в работах [1-8, 15]. Составы фаз, приведенные в вышеуказанных работах, определены экспериментально физико-химическим анализом жаропрочных никелевых сплавов, в которых после стандартной для каждого сплава режима термической обработки упрочняющая γ' - фаза выделена практически полностью, и сами фазы находятся в равновесии друг с другом. Отсюда следует, что химические составы γ - и γ' - фаз будут справедливы до тех температур, при которых растворение γ' - фазы отсутствует, т. е. до температуры начала растворения γ' - фазы ($t_{н.р. \gamma'}$), поскольку выше этой температуры количество фаз и их химический состав изменяются.

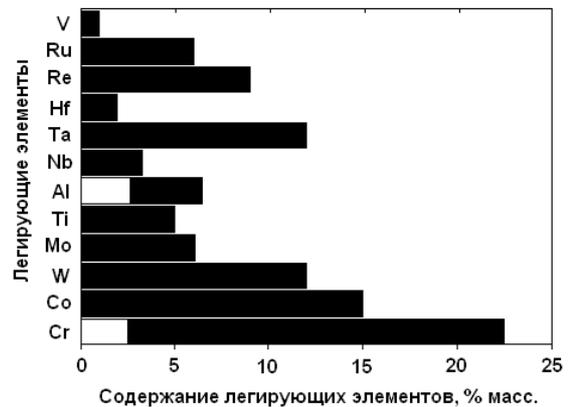


Рис. 1. Диапазон содержания по основным легирующим элементам, охватывающих составы 32 исследованных литейных жаропрочных никелевых сплавов

Сравнительный анализ составов сплавов в % (ат.) с расчетными химическими составами γ - твердых растворов и γ' - фаз, полученные методом CALPHAD показал, что полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными, приведенными в работах [1-8, 15,16].

Сравнительный анализ данных составов γ -, γ' - фаз, полученных методом CALPHAD с экспериментальными данными для тех же сплавов показал, что расчетные данные обладают высокой степенью достоверности и могут использоваться для дальнейших расчетов параметров фазовой стабильности для широкого ряда как известных, так и перспективных

составов литейных жаропрочных никелевых сплавов.

В работе показана принципиальная возможность применения метода CALPHAD для расчета состава γ' - фазы и γ - твердого раствора (ат., %) на основе общего состава сплава, с последующим использованием данных для расчета параметров фазовой стабильности \bar{N}_v - фактора, критериев $\bar{M}d_\gamma$ и $\bar{M}d_C$, а также параметра дисбаланса легирования ΔE , определяющих степень вероятности образования ТПУ- фаз в сплаве.

На рисунке 2 приведены расчетные значения параметров фазовой стабильности \bar{N}_v и $\bar{M}d_\gamma$ (точки) вместе с аппроксимирующей прямой. Сопоставление использованных методик (PHASOMP и New PHASOMP) позволило установить зависимость между парами параметров $\bar{M}d_\gamma$ и \bar{N}_v , в расчете которых используются химические составы γ - твердых растворов. Зависимость между парами вышеуказанных параметров оптимальным образом аппроксимируется полиномом первой степени. При этом математическая модель $\bar{N}_v = 10,065 \bar{M}d_\gamma - 6,9463$ обладает высоким коэффициентом детерминированности ($R^2 = 0,9813$). Это позволяет сделать вывод о принципиальной эквивалентности применяемых методик для данных параметров, а также о возможности достоверного прогнозирования значений параметров одной методики, опираясь на известные значения другой.

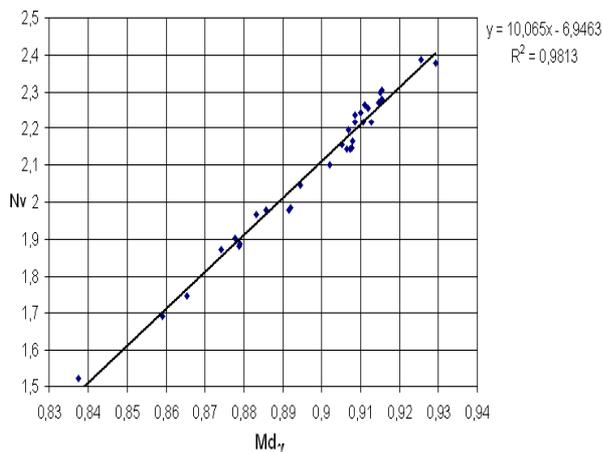


Рис. 2. Сопоставление значений рассчитанных параметров $\bar{M}d_\gamma$ (New PHASOMP) и \bar{N}_v (PHASOMP) для 32 литейных жаропрочных никелевых сплава (точки).
Аппроксимирующая прямая ($\bar{N}_v = 10,065 \bar{M}d_\gamma - 6,9463$).
Коэффициент детерминированности $R^2 = 0,9813$

Однако следует отметить, что химические составы γ - и γ' - фаз, рассчитанные методом CALPHAD для комнатной температуры (20°C) отличаются от

составов γ - и γ' - фаз, рассчитанных для температуры 800°C . Особенно эта разница наблюдается для γ - твердых растворов по элементам Al и Ti, имеющим наибольшие коэффициенты (7,66 и 6,66) при этих элементах, которые участвуют в расчете параметра \bar{N}_v . В то же время, если проводить расчет \bar{N}_v фактора по составу γ - твердого раствора для 20°C , где не учитывается содержание Al и Ti, то значения \bar{N}_v фактора получатся заниженные.

Предварительно полученная математическая модель, аппроксимирующая зависимость между парами параметров \bar{N}_v и $\bar{M}d_\gamma$, рассчитанных по составу γ - твердых растворов для 20°C , показала достаточно низкий коэффициент детерминированности ($R^2 = 0,7806$). Поэтому расчет параметров $\bar{M}d_\gamma$ и \bar{N}_v необходимо проводить с учетом вышеуказанных поправок для составов γ - твердых растворов, рассчитанных для температуры 800°C (табл. 1). Полученная математическая модель, аппроксимирующая зависимость между парами параметров \bar{N}_v и $\bar{M}d_\gamma$, обладает высоким коэффициентом детерминированности ($R^2 = 0,9813$).

Таким образом, при расчете фазовой стабильности жаропрочных никелевых сплавов методом PHASOMP критическое значение \bar{N}_v фактора составляет $\leq 2,45$, а допустимое критическое значение $\bar{M}d_\gamma$ для γ - твердого раствора не должно превышать величину $\leq 0,93$ (рис. 2).

На рисунке 3 приведены расчетные значения параметров фазовой стабильности $\bar{M}d_C$ и ΔE для общих составов 32 исследованных литейных жаропрочных никелевых сплавов (точки) вместе с аппроксимирующей прямой. Сопоставление использованных методик (New PHASOMP и ΔE - метод) позволило установить зависимость между парами параметров $\bar{M}d_C$ и ΔE , в расчете которых используются общие составы сплавов.

Зависимость между парами вышеуказанных параметров исследованных сплавов оптимальным образом аппроксимируется также полиномом первой степени. При этом математическая модель $\Delta E = 5,2619 \bar{M}d_C - 5,158$ обладает высоким коэффициентом детерминированности ($R^2 = 0,9886$). Это позволяет сделать вывод о принципиальной эквивалентности применяемых методик для этих параметров, а также о возможности достоверного прогнозирования значений параметров одной методики, опираясь на известные значения другой.

Известно [6, 10-13], что при расчете дисбаланса легирования ΔE - методом, рекомендуемые значения ΔE для жаропрочных никелевых сплавов находятся в пределах от $- 0,04$ до $+ 0,04$. Поэтому оптимальные значения для параметра $\bar{M}d_C$ сплавов должны находиться в пределах от 0,972 до 0,988 (рис. 3).

Таким образом показано, что полученные математические модели обладают высоким коэффициентом детерминированности R^2 , что характерно как для пар параметров \bar{M}_γ и \bar{N}_v , которые вычисляются исходя из рассчитываемого состава матрицы (γ -твердого раствора), так и для пар \bar{M}_C и ΔE , вычисляемых исходя из общего состава сплава. Представленные результаты расчетов для 32 исследованных литейных жаропрочных никелевых сплавов хорошо согласуются с данными, приведенными в работах авторов [1-8, 10-15].

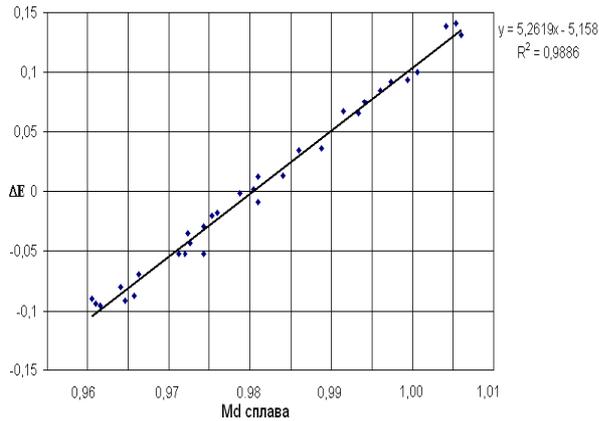


Рис. 3. Сопоставление значений рассчитанных параметров \bar{M}_C (New PHACOMP) и параметра ΔE (расчет дисбаланса легирования ΔE - метод) для 32 литейных жаропрочных никелевых сплавов (точки).

Аппроксимирующая прямая

$$(\Delta E = 5,2619 \bar{M}_C - 5,158).$$

Коэффициент детерминированности $R^2 = 0,9886$

Выводы

1. Сравнительный анализ расчетных и экспериментальных результатов показал принципиальную возможность использования расчетных данных о составах γ -, γ' - фаз для прогнозирующих расчетов параметров фазовой стабильности широкого ряда как известных, так и перспективных составов литейных жаропрочных никелевых сплавов.

2. Между парами параметров \bar{M}_γ и \bar{N}_v , вычисляемыми исходя из рассчитываемого состава γ -твердого раствора установлена взаимосвязь, которая оптимальным образом аппроксимируется математической моделью $\bar{N}_v = 10,065 \bar{M}_\gamma - 6,9463$ с высоким коэффициентом детерминированности ($R^2 = 0,9813$).

3. Между парами параметров \bar{M}_C и ΔE , вычисляемыми исходя из общего состава сплава также установлена взаимосвязь, которая оптимальным образом аппроксимируется математической моде-

лью $\Delta E = 5,2619 \bar{M}_C - 5,158$ с высоким коэффициентом детерминированности ($R^2 = 0,9886$).

4. Принципиальная эквивалентность применяемых аналитических расчетных методик для соответствующих пар параметров фазовой стабильности (\bar{M}_γ - \bar{N}_v и \bar{M}_C - ΔE) дает возможность достоверной оценки и прогнозирования значений параметров одной методики, опираясь на известные значения другой.

Литература

1. Кишкин, С. Т. Литейные жаропрочные сплавы на никелевой основе [Текст] / С. Т. Кишкин, Г. Б. Строганов, А. В. Логунов. – М. : Машиностроение, 1987. – 116 с.
2. Жаропрочность литейных никелевых сплавов и защита их от окисления [Текст] / Б. Е. Патон, Г. Б. Строганов, С. Т. Кишкин [и др.]. – К. : Наук. думка, 1987. – 256 с.
3. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов [Текст] / Р. Е. Шалин, И. Л. Светлов, Е. Б. Качанов [и др.]. – М. : Машиностроение, 1997. – 336 с.
4. Каблов, Е. Н. Литые лопатки газотурбинных двигателей (сплавы, технология, покрытия) [Текст] / Е. Н. Каблов. – М. : Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов, М. : МИСИС, 2001. – 632 с.
5. Каблов, Е. Н. Литейные жаропрочные сплавы. Эффект С. Т. Кишкина [Текст] / под общ. ред. Е. Н. Каблова // науч.-техн. сб. к 100-летию со дня рождения С. Т. Кишкина. – М. : Наука, 2006. – 272 с.
6. Каблов, Е. Н. 75 лет. Авиационные материалы. Избранные тр. «ВИАМ» 1932-2007 [Текст] / Юбилейный научно-технический сборник под общ. ред. Е. Н. Каблова. – М. : «ВИАМ», 2007. – 439 с.
7. Жаропрочные сплавы для газовых турбин [Текст] : пер. с англ. / Д. Котсорадис, П. Феликс, Х. Фишмайстер [и др.] ; под ред. Р. Е. Шалина // Материалы Междунар. конф. – М. : Металлургия, 1981. – 480 с.
8. Симс, Ч. Т. Суперсплавы II. Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок [Текст] : пер. с англ. / Ч. Т. Симс, Н. С. Столофф, У. К. Хагель // В 2-х кн. ; под ред. Р. Е. Шалина. – М. : Металлургия, 1995. – 384 с.
9. New PHACOMP and its application to alloy design [Text] / M. Morinaga, N. Yukawa, H. Adachi [et al.] // Superalloys 1984 (eds. M. Gell et al.), AIME, 1984. – P. 523–532.
10. Морозова, Г. И. Компенсация дисбаланса легирования жаропрочных никелевых сплавов [Текст] / Г. И. Морозова // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2012. – № 12. – С. 52-56.
11. Морозова, Г. И. Сбалансированное легирование жаропрочных никелевых сплавов [Текст] /

Г. И. Морозова // *Металлы*. – 1993. – № 1. – С. 38-41.

12. Трофимов, Е. А. Анализ методик оптимизации составов жаропрочных сплавов на основе никеля [Текст] / Е. А. Трофимов, Е. Р. Вахитова // *Вестник ЮУрГУ. Сер. Металлургия*. – 2013. – Т. 13, №1. – С. 103-107.

13. Аналитический метод оптимизации легирования жаропрочных никелевых сплавов [Текст] / А. И. Самойлов, Г. И. Морозова, О. С. Афоничева [и др.] // *Материаловедение*. – 2000. – № 2. – С. 14-17.

14. Морозова, Г. И. Закономерность формирования химического состава γ/γ' -матрицы многокомпонентных никелевых сплавов [Текст] / Г. И. Моро-

зова // *ДАН СССР*. – 1991. – Т. 320, № 6. – С. 1413-1416.

15. Морозова, Г. И. Особенности структуры и фазового состава высокореницевого никелевого жаропрочного сплава [Текст] / Г. И. Морозова, О. Б. Тимофеева, Н. В. Петрушин // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2009. – № 2. – С. 10-16.

16. Saunders, N. *The Application of CALPHAD Calculations to Ni-Based Superalloys [Text]* / N. Saunders, M. Fahrman, C. J. Small ; eds. K. A. Green, T. M. Pollock and R. D. Kissinger // In "Superalloys 2000". – TMS. – Warrendale, 2000. – 803 p.

Поступила в редакцию 14.05.2015, рассмотрена на редколлегии 22.06.2015

Рецензент: д-р техн. наук, проф., проректор Ю. М. Внуков, Запорожский национальный технический университет, Запорожье, Украина.

ЗАСТОСУВАННЯ АНАЛІТИЧНИХ МЕТОДІВ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ХІМІЧНОГО СКЛАДУ γ -, γ' - ФАЗ ТА ПАРАМЕТРІВ ФАЗОВОЇ СТАБІЛЬНОСТІ ЛИВАРНИХ ЖАРОМІЦНИХ НІКЕЛЕВИХ СПЛАВІВ

С. В. Гайдук, Т. В. Тихомирова

Виконано аналіз експериментальних даних складів γ - і γ' - фаз для 32 відомих ливарних жароміцних нікелевих сплавів з різним рівнем легування. Для цих сплавів методом CALPHAD проведено розрахунок хімічних складів γ - і γ' - фаз та виконано порівняльний аналіз експериментальних та розрахункових даних. Показано, що результати розрахунків складів γ - і γ' - фаз, отримані методом математичного моделювання, мають високу достовірність і добре узгоджуються з експериментальними даними та можуть використовуватися для розрахунку параметрів фазової стабільності \bar{N}_v , $\bar{M}d_\gamma$, $\bar{M}d_c$, ΔE широкого номенклатурного ряду ливарних жароміцних нікелевих сплавів.

Ключові слова: ливарні жароміцні нікелеві сплави; легування; γ - твердий розчин, γ' - фаза; параметри фазової стабільності; математична модель.

APPLICATION OF ANALITIC METHODS TO CALCULATE OF CHEMICAL COMPOSITION γ -, γ' - PHASES AND PARAMETRIES PHASE STABILITIES CASTING NI-BASED SUPERALLOYS

S. V. Gayduk, T. V. Tykhomyrova

The experimental analysis of chemical composition γ -, γ' - phases of 32 certain Ni-based superalloys, which have different alloying elements, was executed. There is calculated chemical composition γ -, γ' - phases for this alloys by CALPHAD-method and analyzed results of calculation and experimental data. It is shown that calculations results of the γ - and γ' - phase compositions, is made by methods of mathematical modeling, is has a high degree of reliability and good agreement with experimental data to be used calculating the parameters of the phase stability \bar{N}_v , $\bar{M}d_\gamma$, $\bar{M}d_c$, ΔE broad product range of Ni-based superalloys.

Key words: casting Ni-based superalloys, alloying, γ - matrix, γ' - phase, parameters of phases stabilities, mathematics' model.

Гайдук Сергей Валентинович – канд. техн. наук, ст. науч. сотр. каф. «Прикладное материаловедение», Запорожский национальный технический университет, Запорожье, Украина, e-mail: gayduksv@gmail.com.

Тихомирова Татьяна Владимировна – инженер ГП «Ивченко-Прогресс», Запорожье, Украина, e-mail: tykhonya.tt@gmail.com.