

8. Патент на винахід № 97453 Україна. Спосіб визначення основних параметрів об'ємної структури металевих матеріалів / Т. П. Даніленко, Е. І. Даніленко // Промислова власність. – 2012. – № 3.

9. Даніленко Т. П. Застосування стереології до аналізу металевих зерених структур /

Т. П. Даніленко // Металознавство та обробка металів. – 2010. – № 3. – С. 35–42.

10. Даніленко Т. П. Визначення параметрів об'ємної зеренної структури металевих матеріалів / Т. П. Даніленко // Металознавство та обробка металів. – 2013. – № 1. – С. 38–47.

Поступила 03.04.2015



УДК 669.245.018.044:620.193.53

Наука

С. В. Гайдук /к. т. н./
Запорожский НТУ

Т. В. Тихомирова
Запорожское машиностроительное
КБ «Ивченко – Прогресс»

Применение CALPHAD-метода для расчета количества γ' -фазы и прогнозирования длительной прочности литейных жаропрочных никелевых сплавов

Выполнен анализ экспериментальных данных по количеству γ' -фазы и 100-часовой длительной прочности для 32 известных литейных жаропрочных никелевых сплавов с различным уровнем легирования. Для этих же сплавов представлены результаты расчетов количества γ' -фазы и 100-часовой длительной прочности при разных температурах, полученные методом CALPHAD. Получены оптимальные аппроксимирующие математические модели, обеспечивающие высокую достоверность прогнозирования уровня прочностных характеристик для широкой номенклатуры литейных жаропрочных никелевых сплавов. (Ил. 6. Библиогр.: 7 назв.)

Ключевые слова: литейные жаропрочные никелевые сплавы, легирование, количество γ' -фазы, длительная прочность, математическая модель

The experimental data on the number of γ' -phase and a 100-hour ductility for the 32 known cast Ni-based superalloys, which has different levels of alloying is analyzed. For these alloys the results of calculations the γ' -phase amount and a 100-hour ductility at various temperatures is presented which was obtained by the CALPHAD method. There is received the optimal approximating mathematical models which can be used to ensure high reliability of predicting the strength characteristics for a wide range of Ni-based superalloys.

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

Введение

Успешная реализация ряда основных положений теории легирования литейных жаропрочных никелевых сплавов для ответственных деталей газовых турбин в значительной степени связана с точностью определения объемного содержания основной упрочняющей γ' -фазы при разных температурах. Современный подход с использованием аналитических методов расчета по оптимизации составов перспективных сплавов [1–3] и расчета уровня их прочностных характеристик без проведения многочисленных экспериментальных испытаний придает научным исследованиям большую эффективность и экономичность. Поэтому работы в

данном направлении являются перспективными и актуальными.

В настоящее время исследований, посвященных указанной проблеме, недостаточно. В работах многих авторов приводятся экспериментальные данные по количеству γ' -фазы и прочностным характеристикам для большинства известных отечественных и зарубежных литейных жаропрочных никелевых сплавов, например 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 прогнозирования характеристик длительной прочности сплавов для разных температур во многом зависит от

точности определения объемного количества ($V_{\gamma'}$) γ' -фазы и установления взаимосвязи между суммарным содержанием γ' -образующих элементов в составе сплава ($\Sigma\gamma'$), объемного количества основной упрочняющей γ' -фазы и температурой ее полного растворения ($t_{\text{п.р.}}^{\gamma'}$).

Следует отметить, что в данном направлении проводились определенные исследования. В частности в литературных источниках [4–7] для многих промышленных отечественных и зарубежных литейных жаропрочных никелевых сплавов представлены экспериментальные данные по количеству ($V_{\gamma'}$) γ' -фазы, характеристическим температурам, суммарному содержанию ($\Sigma\gamma'$) γ' -образующих элементов, прочностным характеристикам сплавов. Однако представленные результаты указывают на то, что для разработки новых перспективных составов данный подход нуждается в определенном совершенствовании.

Поэтому необходимы дополнительные исследования с применением аналитических расчетных методов для установления взаимосвязи между характером легирования сплавов, количеством в них основной упрочняющей γ' -фазы при разных температурах, температурой полного растворения γ' -фазы с целью достоверного прогнозирования уровня прочностных характеристик в широком температурном диапазоне для промышленных и перспективных составов литейных жаропрочных никелевых сплавов без проведения многочисленных промежуточных экспериментов.

Постановка задачи

Выбор составов жаропрочных никелевых сплавов осуществлялся с позиций достоверного экспериментального определения количе-

ства γ' -фазы в зависимости от уровня, характера и степени легирования, а также обусловлен тем, что исследованные составы охватывают довольно широкую область легирования от 1-го до 5-го поколений сплавов 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. %).

Основной целью данной работы является расчет методом CALPHAD, который позволяет быстро получить недостающую информацию для проведения достоверных прогнозирующих расчетов термодинамических и прочностных характеристик, объемного количества ($V_{\gamma'}$) γ' -фазы и 100-часовой длительной прочности в температурном диапазоне 800–1100 °С для широкого номенклатурного ряда отечественных и зарубежных литейных жаропрочных никелевых сплавов.

Анализ результатов

Сопоставление значений для 32 исследованных сплавов позволило установить взаимосвязь между величинами ($\Sigma\gamma'$) и ($V_{\gamma'}^{20}$). Зависимость между парами вышеуказанных параметров оптимальным образом аппроксимируется полиномом первой степени. При этом математическая модель имеет вид $V_{\gamma'}^{20} = 2,9818 \Sigma\gamma' + 26,321$ и обладает достаточно высоким коэффициентом детерминированности ($R^2 = 0,9682$). На рис. 1 представлены расчетные значения количества основной упрочняющей $V_{\gamma'}^{20}$ γ' -фазы в зависимости от суммарного содержания ($\Sigma\gamma'$) γ' -образующих элементов в сплаве (точки на рис. 1) вместе с аппроксимирующей прямой.

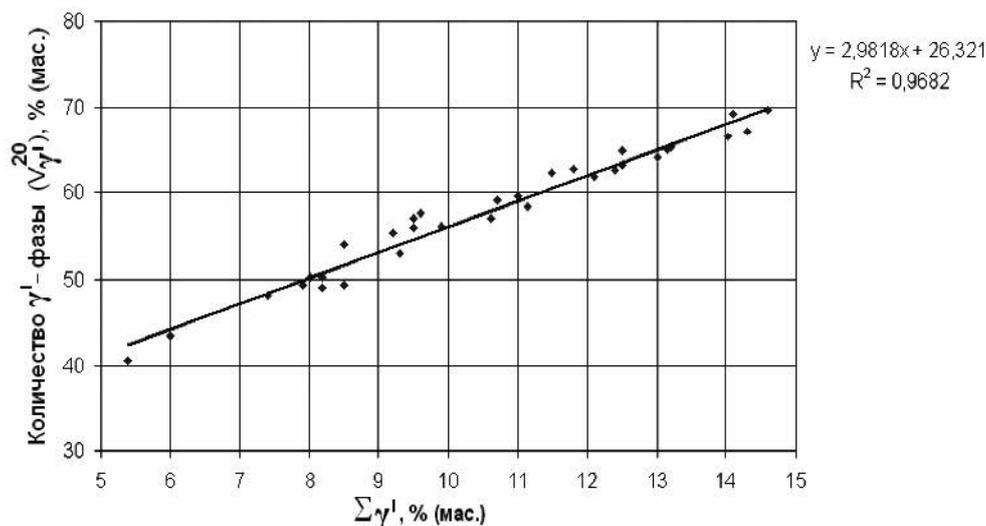


Рис. 1. Влияние суммарного содержания γ' -образующих элементов ($\Sigma\gamma'$) на объемное количество ($V_{\gamma'}^{20}$) γ' -фазы

Сопоставление рассчитанных значений для 32 исследованных сплавов (точки). Аппроксимирующая прямая $V_{\gamma'}^{20} = 2,9818 \Sigma\gamma' + 26,321$. Коэффициент детерминированности $R^2 = 0,9682$

На рис. 2 приведены расчетные значения параметра ($t_{П.Р.}^{\gamma'}$) в зависимости от суммарного содержания γ' -образующих элементов ($\Sigma\gamma'$) в сплаве (точки на рис. 2) вместе с аппроксимирующей прямой. Сопоставление значений для 32 сплавов позволило установить взаимосвязь между величинами ($\Sigma\gamma'$) и ($t_{П.Р.}^{\gamma'}$). Зависимость между параметрами вышеуказанных параметров оптимальным образом аппроксимируется полиномом первой степени. При этом математическая модель имеет вид $t_{П.Р.}^{\gamma'} = 24,807 \Sigma\gamma' + 955,83$ и также обладает достаточно высоким коэффициентом детерминированности ($R^2 = 0,9656$).

Сравнительный анализ расчетных данных, полученных методом CALPHAD, с экспериментальными данными, приведенными в работах [4-7] для этих же сплавов по количеству ($V_{\gamma'}^{20}$) γ' -фазы и значениям температур полного раство-

рения ($t_{П.Р.}^{\gamma'}$) γ' -фазы (рис. 1, 2), показал, что расчетные значения обладают высокой степенью достоверности и могут использоваться для расчета параметров ($V_{\gamma'}^{20}$) и ($t_{П.Р.}^{\gamma'}$), определяющих уровень прочностных характеристик литейных жаропрочных никелевых сплавов.

Полученные значения подтверждают, что с увеличением суммарного содержания γ' -образующих элементов увеличивается объемное количество $V_{\gamma'}^{20}$ основной упрочняющей γ' -фазы и повышается температура ее полного растворения $t_{П.Р.}^{\gamma'}$. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными, представленными в работах авторов [4-7] для этих же сплавов.

На рис. 3-6 представлены расчетные значения, полученные методом CALPHAD по 100-часовой длительной прочности 32 исследованных

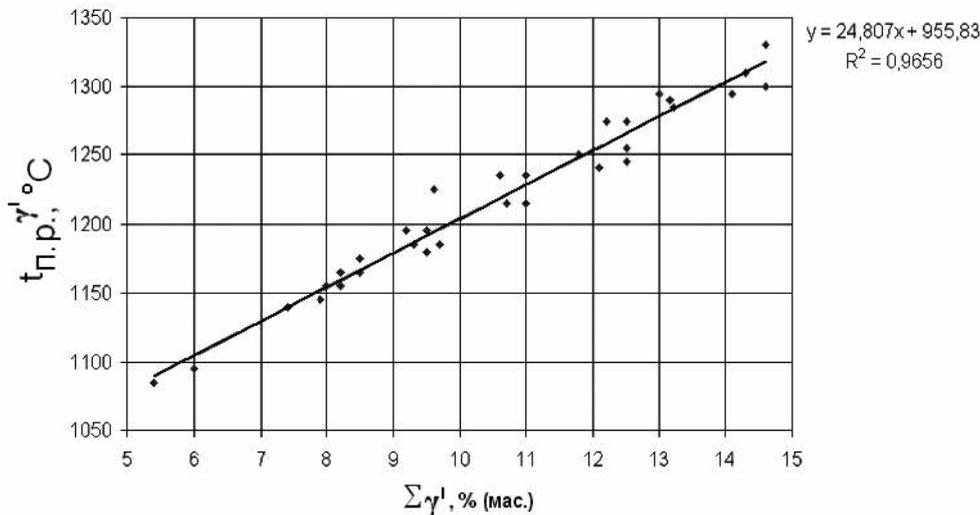


Рис. 2. Влияние суммарного содержания γ' -образующих элементов ($\Sigma\gamma'$) на величину параметра ($t_{П.Р.}^{\gamma'}$) Сопоставление рассчитанных значений для 32 литейных жаропрочных никелевых сплавов (точки). Аппроксимирующая прямая $t_{П.Р.}^{\gamma'} = 24,807 \Sigma\gamma' + 955,83$. Коэффициент детерминированности $R^2 = 0,9656$.

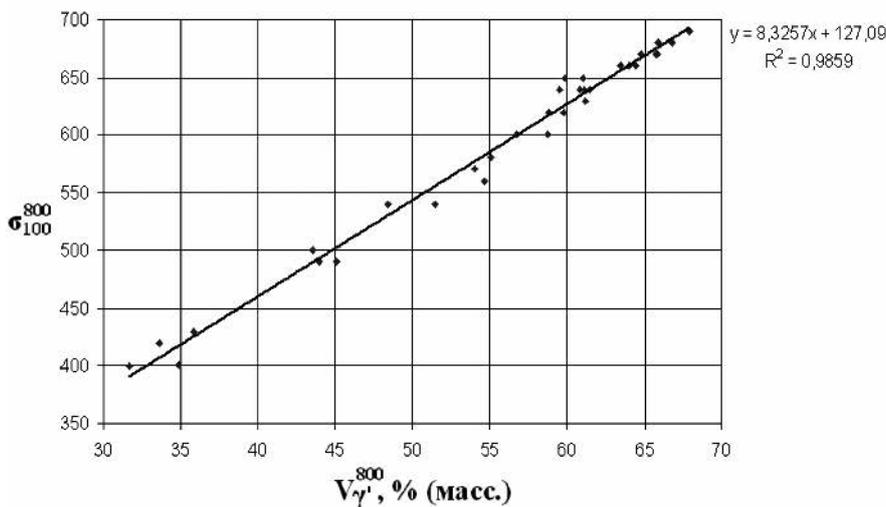


Рис. 3. Зависимость 100- часовой длительной прочности σ_{100}^{800} (МПа) от количества γ' -фазы при 800 °С Сопоставление рассчитанных значений для 32 литейных жаропрочных никелевых сплавов (точки). Аппроксимирующая прямая $\sigma_{100}^{800} = 8,3257 V_{\gamma'}^{800} + 127,09$. Коэффициент детерминированности $R^2 = 0,9859$

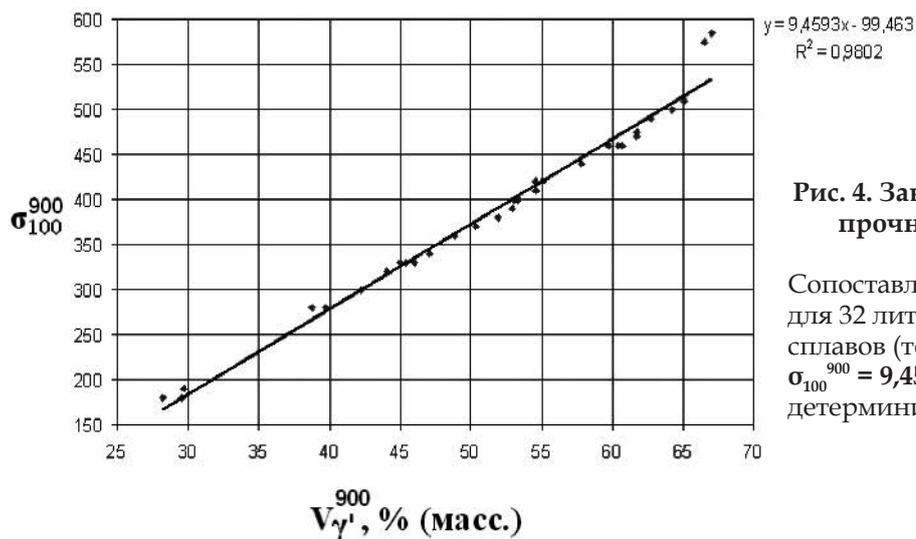


Рис. 4. Зависимость 100-часовой длительной прочности σ_{100}^{900} (МПа) от количества γ' -фазы при 900 °С

Сопоставление рассчитанных значений для 32 литейных жаропрочных никелевых сплавов (точки). Аппроксимирующая прямая $\sigma_{100}^{900} = 9,4593 V_{\gamma'}^{900} - 99,463$. Коэффициент детерминированности $R^2 = 0,9802$

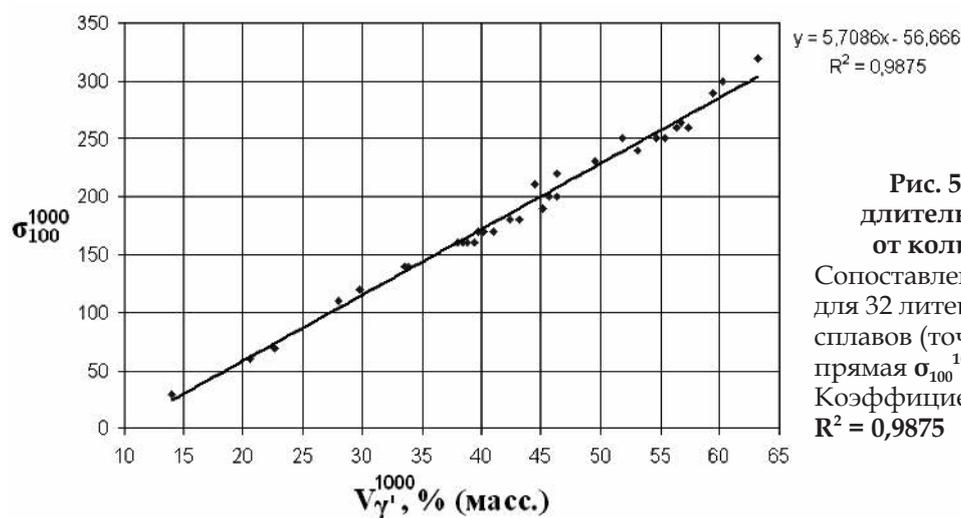


Рис. 5. Зависимость 100-часовой длительной прочности σ_{100}^{1000} (МПа) от количества γ' -фазы при 1000 °С

Сопоставление рассчитанных значений для 32 литейных жаропрочных никелевых сплавов (точки). Аппроксимирующая прямая $\sigma_{100}^{1000} = 5,7086 V_{\gamma'}^{1000} - 56,666$. Коэффициент детерминированности $R^2 = 0,9875$

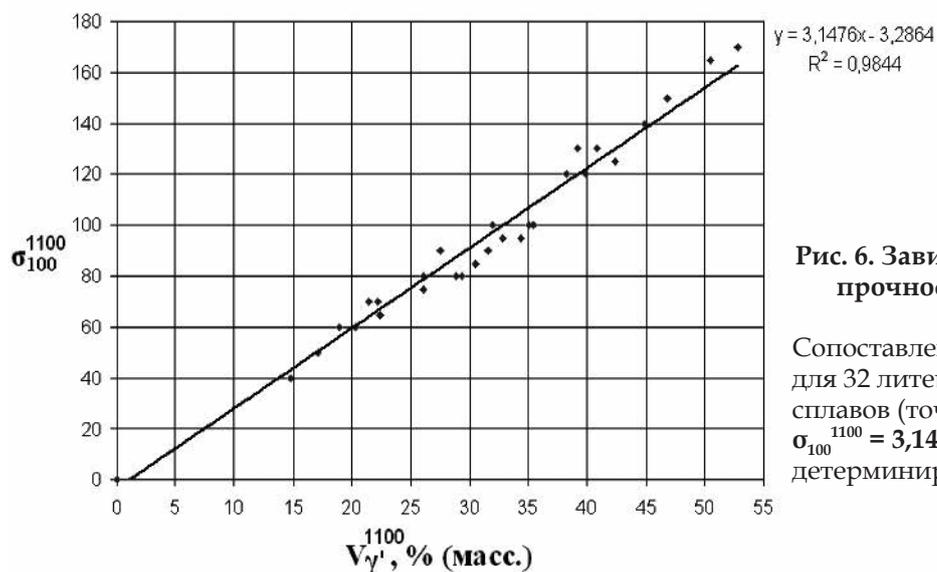


Рис. 6. Зависимость 100-часовой длительной прочности σ_{100}^{1100} (МПа) от количества γ' -фазы при 1100 °С

Сопоставление рассчитанных значений для 32 литейных жаропрочных никелевых сплавов (точки). Аппроксимирующая прямая $\sigma_{100}^{1100} = 3,1476 V_{\gamma'}^{1100} - 3,2864$. Коэффициент детерминированности $R^2 = 0,9844$

сплавов при температурах 800, 900, 1000 и 1100 °С в зависимости от количества ($V_{\gamma'}$) γ' -фазы в них при этих же температурах. В ходе расчетных исследований установлена взаимосвязь между парами параметров $V_{\gamma'}^{800} - \sigma_{100}^{800}$, $V_{\gamma'}^{900} - \sigma_{100}^{900}$, $V_{\gamma'}^{1000} - \sigma_{100}^{1000}$, $V_{\gamma'}^{1100} - \sigma_{100}^{1100}$, которые оптимальным образом аппроксимируются математическими моделями с высокими коэффициентами детерминированности, более чем 0,98.

Полученные математические модели, приведенные на рис. 3–6, обладают высокой степенью достоверности и могут применяться для расчета и экстраполяции значений 100-часовой длительной прочности σ_{100}^{800} , σ_{100}^{900} , σ_{100}^{1000} , σ_{100}^{1100} для широкого номенклатурного ряда как промышленных, так и перспективных составов литейных жаропрочных никелевых сплавов нового поколения в широком температурном диапазоне.

Полученные результаты подтверждают, что с увеличением суммарного количества γ' -образующих элементов в составе повышается температура полного растворения γ' -фазы, и, соответственно, большее ее количество остается при высоких температурах, что повышает уровень 100-часовой длительной прочности сплавов. Результаты расчетов 100-часовой длительной прочности для исследованных сплавов хорошо согласуются с экспериментальными данными для тех же сплавов, представленных в работах авторов [4–7].

Выводы

1. Установлена взаимосвязь между парами расчетных параметров $\Sigma\gamma' - V_{\gamma'}^{20}$ и $\Sigma\gamma' - t_{п.р.}^{\gamma'}$, которая оптимальным образом аппроксимируется с полученными оптимальными математическими моделями $V_{\gamma'}^{20} = 2,9818 \Sigma\gamma' + 26,321$ и $t_{п.р.}^{\gamma'} = 24,807 \Sigma\gamma' + 955,83$ с достаточно высокими коэффициентами детерминированности $R^2 = 0,9682$ и $R^2 = 0,9656$.

2. Установлена взаимосвязь между парами параметров $V_{\gamma'}^{800} - \sigma_{100}^{800}$, $V_{\gamma'}^{900} - \sigma_{100}^{900}$, $V_{\gamma'}^{1000} - \sigma_{100}^{1000}$, $V_{\gamma'}^{1100} - \sigma_{100}^{1100}$, которая оптимальным образом аппроксимируется математическими моделями с высокими коэффициентами детерминированности, более 0,98.

3. Показан принципиальный подход по применению метода CALPHAD для расчета вышеуказанных параметров, который дает возможность достоверного прогнозирования одних значений параметров, опираясь на известные значения других параметров без проведения многочисленных экспериментов.

Библиографический список

1. Логунов А. В. Методологические основы автоматизированного проектирования жаропрочных сплавов на никелевой основе. Ч. I / А.В. Логунов, Ю. Н. Шмотин, Д. В. Данилов // Технология металлов. – 2014. – № 5. – С. 3–9.
2. Saunders N. The Application of CALPHAD Calculations to Ni-Based Superalloys / N. Saunders, M. Fahrman, C. J. Small // Superalloys 2000 / eds. K. A. Green, T. M. Pollock and R. D. Kissinger. – TMS. – Warrendale. – 2000. – P. 803–811.
3. Small C. J. The Application of CALPHAD Techniques in the Development of a New Gas-Turbine Disk Alloy / C. J. Small, N. Saunders // Materials Research Society Bulletin. – April. – 1999. – P. 22.
4. Saunders, N. Phase-Diagram Calculations for Ni-based Superalloys // In Superalloys 1996 / J. D. Kissinger, D. J. Deye, D. L. Anton, A. D. Cetel, M. V. Nathal, T. M. Pollock and D. A. Woodford (eds.) // The Minerals, Metals & Materials Society: Warrendale, PA. – 1996. – P. 101–110.
5. Морозова Г. И. Закономерность формирования химического состава γ'/γ -матрицы многокомпонентных никелевых сплавов / Г.И. Морозова // ДАН СССР. – 1991. – Т. 320. – № 6. – С. 1413–1416.
6. Морозова Г. И. Особенности структуры и фазового состава высокорениевого никелевого жаропрочного сплава / Г. И. Морозова, О. Б. Тимофеева, Н. В. Петрушин // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2009. – № 2. – С. 10–16.
7. Erickson G. L. The Development of the CMSX-11B and CMSX-11C Alloys for Industrial Gas Turbine Application / G. L. Erickson // Superalloys. – 1996. – P. 45–62.

Поступила 18.09.2015

Metallurgical and Mining
Industry

www.metaljournal.com.ua