

АНАЛИЗ МЕТОДИК ОПТИМИЗАЦИИ СОСТАВОВ ЖАРОПРОЧНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ

Е.А. Трофимов, Е.Р. Вахитова

Сопоставлены результаты использования различных, опирающихся на электронную структуру компонентов, методик оценки фазовой стабильности жаропрочных никелевых сплавов. Полученные результаты могут быть использованы в ходе совершенствования методик компьютерной оптимизации составов таких сплавов.

Ключевые слова: никелевые сплавы, оптимизация состава, фазовая стабильность.

Жаропрочные сплавы (суперсплавы) на никелевой основе благодаря значительной высокотемпературной прочности вплоть до температур порядка 1000 °С, термической стабильности и высокому сопротивлению коррозии широко используются в аэрокосмической отрасли и энергетике для изготовления деталей ракетных двигателей и газовых турбин [1, 2].

Основным требованием к таким сплавам является стабильность фазовой структуры твёрдого раствора на основе никеля, упрочняющих γ' -фазы и карбидных фаз. Особенности такого типа сплавов являются сложность состава матричной γ -фазы, имеющей никель-хромовую основу, а также неустойчивость (изменчивость) структуры при термической обработке и высокотемпературной эксплуатации, обусловленную взаимодействием матрицы и упрочняющих карбидных и интерметаллидных фаз.

Марочный состав сплавов всегда характеризуется определёнными интервалами допустимых колебаний концентраций компонентов сплава. Как правило, эти интервалы столь широки, что свойства сплавов, формально относимых к одной марке, могут очень сильно отличаться. В связи с этим актуальной является задача оптимизации составов сплавов, сужение коридора их легирования, опираясь на различные аналитические методики.

В силу сложности и многокомпонентности жаропрочных никелевых сплавов полноценный термодинамический анализ фазовой стабильности этих систем с помощью построенных диаграмм состояния (таких, например, как представленные в работах [3–6]) в настоящее время очень затруднён.

Известны методики, позволяющие оценивать фазовый состав никелевых суперсплавов по данным об их составе и представлениям об их электронной структуре на предмет определения того, выделяются ли в объёме таких сплавов вредные, топологически плотноупакованные (ТПУ) фазы, и каково количество образующихся полезных упрочняющих фаз. К числу таких методик относится известный с 60-х годов XX века метод PHACOMP, а также принципиально подобные методы, которые позволяют учесть неоднородность распределения легирующих элементов в микроструктуре

сплава, связывание легирующих добавок в карбидные и другие фазы и т. п. (new-PHACOMP, Solubility index, метод расчёта дисбаланса легирования Г.И. Морозовой). При этом, несмотря на значительные успехи в предсказании условий неустойчивости фазового состава никелевых суперсплавов, в этой области остаётся много нерешённых проблем.

Основной целью настоящего исследования стало сопоставление различных опирающихся на электронную структуру компонентов, методик оценки фазовой стабильности жаропрочных никелевых сплавов.

В ходе настоящей работы разные алгоритмы оценки фазовой стабильности никелевых суперсплавов реализованы в виде проектов в среде Mathcad. Для 75 различных традиционных отечественных и зарубежных никелевых суперсплавов (использованы составы, представленные в [1] и [2]) рассчитаны значения параметров Nv (PHACOMP) [1], Md и Bo , а также Mdy (New-PHACOMP [7]), ΔE (метод расчёта дисбаланса легирования [8–10]). Для вычисления количественных соотношений между фазами, образующими структуру сплава (γ и γ' -фазы, различные карбиды и бориды), использован модифицированный алгоритм, описанный в работе [1].

Некоторые результаты проведённых расчётов и последующего их сопоставления представлены на рис. 1–4.

Сопоставление параметров использованных методик позволило обнаружить, что зависимость между любой парой параметров из Nv , Md , Mdy , ΔE оптимальным образом аппроксимируется полиномом первой степени. При этом во всех парах наблюдаются достаточно высокие по модулю линейные коэффициенты корреляции (от 0,7806 до 0,8863). Это позволяет сделать вывод о принципиальной эквивалентности рассматриваемых методик и о возможности оценки значений критических параметров одной методики, опираясь на известные критические значения другой. Известно, что автор метода расчёта дисбаланса легирования [8–10] рекомендует, чтобы значение ΔE никелевых сплавов находилось в интервале от $-0,04$ до 0. Нетрудно посчитать, что в этом случае оптимальное

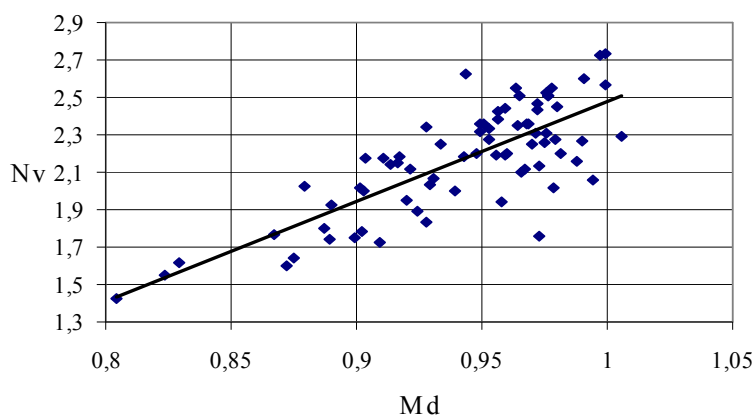


Рис. 1. Сопоставление рассчитанных значений параметров Md (New-РНАСОМР) и Nv (РНАСОМР) никелевых суперсплавов (точки) и аппроксимирующая прямая ($Nv = 5,3208Md - 2,8436$). Коэффициент корреляции $r = 0,7806$

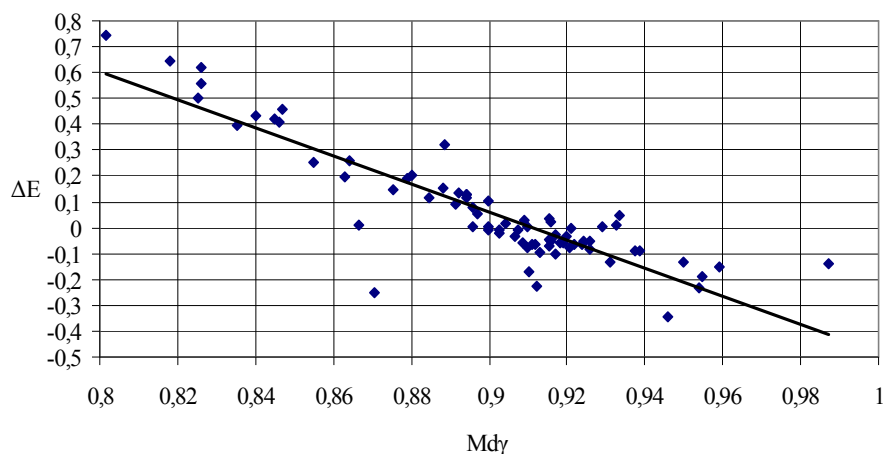


Рис. 2. Сопоставление рассчитанных значений параметров $Mдγ$ (New-РНАСОМР) и ΔE (метод расчёта дисбаланса легирования) никелевых суперсплавов (точки) и аппроксимирующая прямая ($\Delta E = -5,4336Mдγ + 4,9504$). Коэффициент корреляции $r = -0,8863$

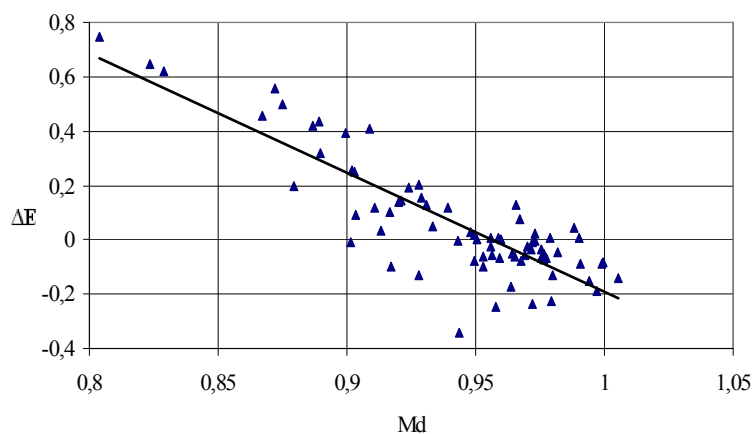


Рис. 3. Сопоставление рассчитанных значений параметров Md (New-РНАСОМР) и ΔE (метод расчёта дисбаланса легирования) никелевых суперсплавов (точки) и аппроксимирующая прямая ($\Delta E = -4,3875Md + 4,1958$). Коэффициент корреляции $r = -0,8545$

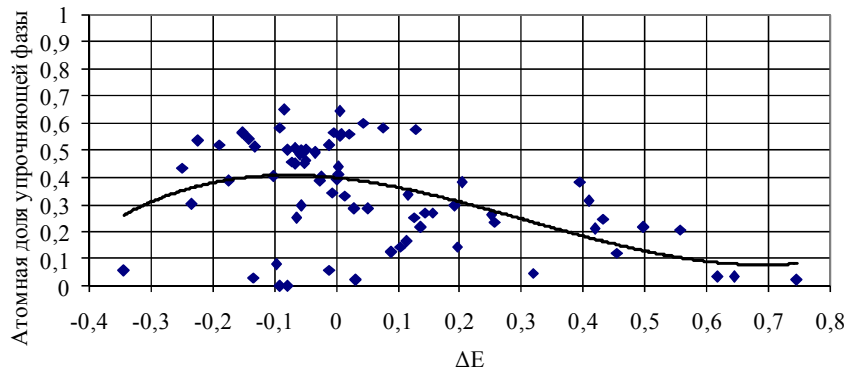


Рис. 4. Сопоставление расчётного значения доли атомов в составе упрочняющей γ' -фазы от общего количества атомов сплава со значением ΔE никелевых суперсплавов. Аппроксимация полиномом третьей степени

значение Md должно лежать в пределах от 0,956 до 0,965 (рядом с этим интервалом находится максимум вычисленного значения доли атомов, входящих в состав γ' -фазы, рис. 4).

Особенно интересным представляется тот факт, что высокие значения линейного коэффициента корреляции характерны не только в парах Nv и $Md\gamma$, Md и ΔE , т. е. между параметрами, вычисляемыми исходя из рассчитываемого состава матричной γ -фазы, и параметрами, вычисляемыми исходя из общего состава сплава соответственно, но и в парах, образованных разнородными параметрами. Это даёт основания при оптимизации состава сплава в некотором приближении отказаться от вычисления состава γ -фазы. Сама эта процедура существенно зависит от состава сплава и допускаемых предположений и даёт неоднозначные результаты. Отказ от неё значительно упрощает процесс расчёта и, судя по результатам нашего сопоставления, практически не влияет на точность оценок.

Важным с точки зрения оптимизации составов никелевых суперсплавов параметром является их плотность. Для упрочнения γ -фазы используются тяжёлые элементы, такие как вольфрам, рений, тантал, молибден. В то же время увеличение массы вращающихся деталей (лопаток и дисков) газовых турбин нежелательно.

В работе [11] предложена формула для расчёта плотности монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов исходя из их средней атомной массы (A_c):

$$d (\text{г/см}^3) = 0,144A_c.$$

Проведённое нами сопоставление результатов расчёта по этой формуле для 21 литейного сплава из [1] с литературными значениями демонстрирует удовлетворительную сходимость данных и, следовательно, применимость приведённой выше формулы для такого рода сплавов (рис. 5). Моделирование плотности деформируемых сплавов, вероятно, требует использования иной зависимости.

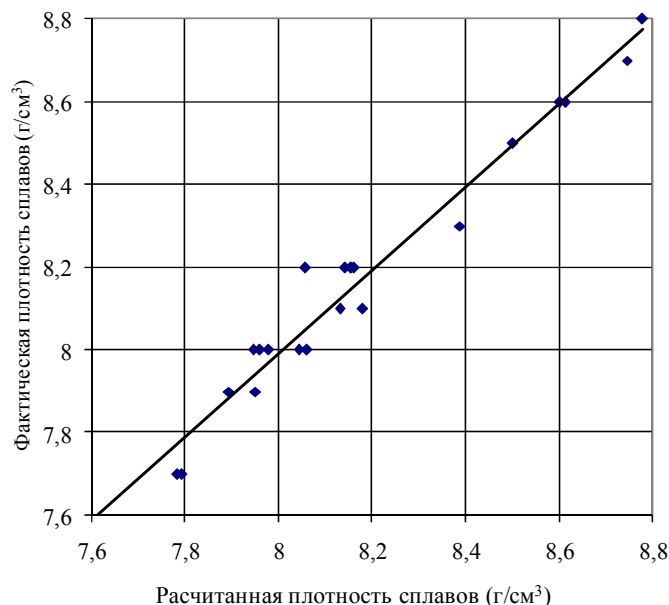


Рис. 5. Сопоставление рассчитанных по формуле из [11] и литературных [1] значений плотностей 21 литейного никелевого суперсплава (точки) и аппроксимирующая прямая. Коэффициент корреляции $r = 0,9810$

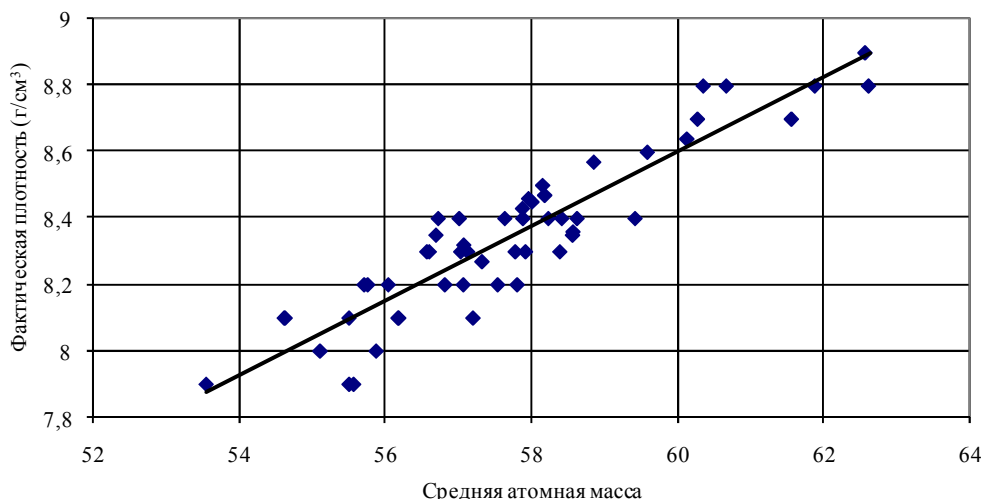


Рис. 6. Сопоставление средней атомной массы и литературных [1, 2] значений плотностей для 53 деформируемых никелевых суперсплавов (точки) и аппроксимирующая прямая. Коэффициент корреляции $r = 0,9184$

Используя данные о составах 53 зарубежных и отечественных деформируемых никелевых суперсплавов [1, 2] и литературные значения плотностей этих сплавов, в настоящей работе получили следующее выражение, связывающее их среднюю атомную массу с плотностью:

$$d \text{ (г/см}^3\text{)} = 0,112A_c + 1,887.$$

Результаты расчёта по этой формуле представлены в виде линии на рис. 6. Следует отметить, что для деформируемых сплавов наблюдается существенно больший разброс фактических значений плотностей относительно расчётных, нежели для литейных сплавов. Из 53 сплавов ошибка более 1 % наблюдалась для 19 сплавов, а из них для 3 сплавов ошибка превысила 2 % (у литейных ошибка более 1 % наблюдалась для 4 из 21 сплава).

Опираясь на представленные результаты, а также на некоторые другие, полученные в ходе работы данные, были разработаны проекты для среды Mathcad, позволяющие для сложных многокомпонентных сплавов, характеризующихся значительными допустимыми колебаниями концентраций легирующих элементов, находить такие составы, которые соответствуют оптимальным значениям специальных параметров методик оценки.

Работа осуществлена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 11-08-12046-офи-м-2011.

Литература

1. Суперсплавы II: Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок: пер. с англ.: в 2 кн. / под ред. Ч.Т. Симса. – М.: Металлургия, 1995.
2. Масленков, С.Б. Жаропрочные стали и сплавы: справ. изд. / С.Б. Масленков. – М.: Металлургия, 1983. – 192 с.
3. Термическая устойчивость фаз в сплавах железо – хром – азот / Б.И. Леонович, Б.В. Ощеп-

ков, А.В. Григорук, Е.А. Трофимов // Известия вузов. Чёрная металлургия. – 2008. – № 7. – С. 1–7.

4. Леонович, Б.И. Термодинамический анализ системы железо – хром – никель / Б.И. Леонович, Б.В. Ощепков, Е.А. Трофимов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2011. – Вып. 16, № 14 (231). – С. 4–7.

5. Леонович, Б.И. Термодинамическое моделирование системы железо – хром – никель – азот / Б.И. Леонович, Ю.С. Кузнецов, Е.А. Трофимов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2012. – Вып. 18, № 15 (274). – С. 50–52.

6. Трофимов, Е.А. Анализ фазовых равновесий в системах Ni–C–O, Ni–Ca–O и Ni–Al–O в условиях существования жидкого металла / Е.А. Трофимов, Г.Г. Михайлов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2010. – Вып. 14, № 13 (189). – С. 4–7.

7. New PHACOMP and its application to alloy design / M. Morinaga, N. Yukawa, H. Adachi, H. Ezaki // Superalloys 1984 (eds. M. Gell et al.), AIME, 1984. – P. 523–532.

8. Морозова, Г. И. Закономерность формирования химического состава γ'/γ -матрицы многокомпонентных никелевых сплавов / Г.И. Морозова // Доклады Академии наук СССР. – 1991. – № 6. – С. 1413–1416.

9. Аналитический метод оптимизации легирования жаропрочных никелевых сплавов / А.И. Самойлов, Г.И. Морозова, О.С. Афоничева, О.С. Афоничев // Материаловедение. – 2000. – № 2. – С. 14–17.

10. Петрушин, Н.В. Физико-химические и структурные характеристики жаропрочных никелевых сплавов / Н.В. Петрушин, И.Л. Светлов // Металлы. – 2001. – № 2. – С. 63–73.

11. Петрушин, Н.В. Приближённая оценка плотности монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов / Н.В. Петрушин, И.А. Игнатова, Л.А. Дьячкова // Материаловедение и термическая обработка металлов. – 1991. – № 9. – С. 25–27.

Трофимов Евгений Алексеевич, кандидат химических наук, доцент кафедры общей металлургии, Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте. 456209, Челябинская обл., г. Златоуст., ул. Тургенева, 16. Тел.: (3513)665829. E-mail: tea7510@gmail.com.

Вахитова Елена Рафаиловна, студент, Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте. 456209, Челябинская обл., г. Златоуст., ул. Тургенева, 16. Тел.: (3513)665829.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Metallurgy"
2013, vol. 13, no. 1, pp. 103–107*

ANALYSIS OF OPTIMIZATION METHODS OF HEAT-RESISTANT NICKEL-BASE ALLOY COMPOSITIONS

E.A. Trofimov, E.R. Vakhitova

The results of using different methods of phase stability evaluation in heat-resistant nickel alloys, based on the electronic structure of the components, are compared. The obtained results can be used for improving the methods of computer optimization of such alloy compositions.

Keywords: nickel alloys, composition optimization, phase stability.

Trofimov Evgeniy Alekseevich, candidate of chemical science, associate professor of the General Metallurgy Department, Zlatoust Branch, South Ural State University. 16 Turgenev street, Zlatoust, Chelyabinsk region, Russia 456209. Tel.: 7(3513)665829. E-mail: tea7510@gmail.com.

Vakhitova Elena Rafailovna, student, Zlatoust Branch, South Ural State University. 16 Turgenev street, Zlatoust, Chelyabinsk region, Russia 456209. Tel.: 7(3513)665829.

Поступила в редакцию 28 марта 2013 г.