

УДК 669.018.44:669.017.165

Ю.И. Димитриенко¹, А.Н. Луценко², Е.А. Губарева¹,
Е.И. Орешко², О.А. Базылева², С.В. Сборщиков¹

РАСЧЕТ МЕХАНИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ЖАРОПРОЧНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ МЕТОДОМ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

DOI: 10.18577/2071-9140-2016-0-3-33-48

Рассмотрено численное математическое моделирование механических свойств жаропрочных никелевых сплавов методом многомасштабного моделирования структуры. Исследовано влияние кристаллографической ориентации (КГО) $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ на микроструктуру интерметаллидного сплава ВКНА-1В.

На основании проведенного металлографического анализа принято решение использовать двухуровневую модель структуры сплава типа ВКНА-1В в виде периодической структуры, содержащей две фазы с границей раздела между ними.

Работа выполнена в рамках реализации комплексного научного направления 3.3. «Технология прогнозирования свойств, моделирования и реализации современных процессов конструирования и производства изделий из неметаллических и композиционных материалов с использованием цифровых методов, совместимых с CAD/CAM/CAE и PLM системами» («Стратегические направления развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года») [1].

Ключевые слова: сплав ВКНА-1В, микроструктура, кристаллографическая ориентация, интерметаллид Ni_3Al , монокристаллические сплавы, математическое моделирование, метод многомасштабного моделирования, метод конечных элементов, повреждаемость.

The article considers computational mathematical modeling of mechanical properties of heat resistant nickel alloys by method of multi-scale modeling of structure.

Effect of crystallographic orientation (CGO) $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ on the microstructure of intermetallic alloy VKNA-1V is investigated.

The decision to use two-level structure model of VKNA-1V alloy in the form of the periodic structure containing two phases with section boundary between them is made on the basis of performed metallographic analysis.

The work is executed within implementation of the complex scientific direction 3.3 «Technology of forecasting of properties, modeling and implementation of modern processes of designing and production of products from non-metallic and composite materials with use of the digital methods compatible to CAD/CAM/CAE and PLM systems» («The strategic directions of development of materials and technologies of their processing for the period till 2030») [1].

Keywords: VKNA-1V, microstructure, crystallographic orientation, intermetallide Ni_3Al , monocrystal alloys, mathematical modeling, method of multilarge-scale modelling, finite element method, damage.

¹Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана [Bauman Moscow State Technical University]; e-mail: bauman@bmstu.ru

²Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Государственный научный центр Российской Федерации [Federal state unitary enterprise «All-Russian scientific research institute of aviation materials» State research center of the Russian Federation]; e-mail: admin@viam.ru

Введение

Для производства авиационных газотурбинных двигателей (ГТД) необходимы жаропрочные материалы с повышенными характеристиками длительной прочности при температурах эксплуатации до 1200°C. Таким требованиям отвечают жаропрочные интерметаллидные сплавы на основе никеля (сплав марки ВИН – ВИАМ, интерметаллидный никелевый), из которых изготавливаются детали горячего тракта двигателя (элементы

камеры сгорания, сопловые лопатки, створки направляющего сопла и др.) [2–4].

Повышение рабочей температуры газа перед турбиной может быть достигнуто применением монокристаллических лопаток из сплава марки ВИН нового поколения [5–8]. Главное преимущество монокристаллических лопаток по сравнению с поликристаллическими заключается в более высоком сопротивлении высокотемпературной ползучести благодаря отсутствию в сплаве границ

зерен, так как их структура сформирована ветвями одного дендрита, который развивается от монокристаллической затравки. Этот дендрит пронизывает весь монокристалл множеством ветвей первого и второго порядков. Оси первого порядка дендрита растут вдоль направленного теплового потока, который создается в печи для направленной кристаллизации и совпадает с продольной осью монокристаллической лопатки.

На микроскопическом уровне структура монокристаллических жаропрочных интерметаллидных сплавов представлена только двумя фазами: частицами γ' -фазы (формирующейся на основе интерметаллидного соединения Ni_3Al – упорядоченная ГЦК-структура типа $L1_2$), рассеянными в матрице из γ -твердого раствора легирующих элементов в Ni (неупорядоченная ГЦК-структура). Частицы интерметаллидной γ' -фазы различаются размерами и состоят из кубоидных микрочастиц со средним размером ~ 500 нм (объемная доля $\sim 70\%$), которые разделены нанопрослойками γ -фазы с поперечным размером 50–90 нм; в γ -прослойках присутствуют квазикубоиды нанокристаллов размером 30–50 нм. Основные легирующие элементы преимущественно распределяются в кристаллической решетке γ -фазы, в γ' -фазе атомы этих элементов замещают в кристаллической решетке интерметаллидного соединения Ni_3Al позиции атомов алюминия и/или никеля [9].

В течение длительного времени эмпирический метод «проб и ошибок» был основным при разработке конструкционных материалов. Для сплавов марки ВИН, легированных более чем 15 элементами, нахождение оптимальных состава и комплекса свойств является трудоемкой задачей, требующей больших временных и финансовых затрат. В связи с этим формальные методы компьютерного проектирования современных жаропрочных сплавов становятся необходимым инструментом, позволяющим не только оптимизировать химический состав уже имеющихся промышленных сплавов, но и разрабатывать новые сплавы [1, 10–13].

Цель данной работы – расчет упругопластических характеристик сплава типа ВКНА-1В в зависимости от морфологии фазового состава методом многомасштабного моделирования с использованием конечно-элементных программных вычислительных комплексов МГТУ им. Н.Э. Баумана [14–21].

Материалы и методы

В качестве материала для исследования выбран интерметаллидный сплав марки ВКНА-1В на основе Ni_3Al следующего химического состава, % (по массе): 5,5 Cr; 8,5 Al; 1,1 Ti; 3,3 W; 3,5 Mo; 0,02 Zr; Ni – остальное.

Прутковые (шихтовые) заготовки выплавляли вакуумным индукционным (ВИ) методом, мерные шихтовые заготовки переплавляли методом

ВГНК на установках типа УВНС, что обеспечивает формирование однородной тонкодендритной структуры с меньшими дендритной ликвацией и пористостью [10, 11].

Для получения монокристаллической структуры (МК-структуры) заданной КГО использовали затравки из $Ni-W$, имеющие (как и интерметаллид Ni_3Al) гранцентрированную кубическую решетку (ГЦК). Для исследования структуры и свойств использовали цилиндрические заготовки образцов с МК-структурой и КГО $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ и отклонением от КГО < 10 град.

Микроструктурное исследование сплавов проводили при помощи растрового электронного микроскопа JSM-6490LV фирмы Jeol на микрошлифах после травления. Для этого структуру выявляли в специально подготовленной смеси трех кислот – соляной, серной и азотной.

Для расчета статической прочности моделируемого материала типа ВКНА-1В использован метод конечных элементов (МКЭ) и метод многомасштабного моделирования (МММ).

Метод МКЭ можно использовать для решения задач, моделируемые объекты которых имеют сложные геометрические параметры, в отличие от аналитических методов, которые в основном ориентированы на задачи с объектами, имеющими простую геометрическую форму. Поэтому современные конечно-элементные расчетные комплексы сделали МКЭ распространенным инструментом инженера, выполняющего различные расчеты, в том числе расчеты на прочность [22–30].

Для расчета эффективных упругопрочностных характеристик моделируемого материала типа ВКНА-1В использован МММ [31–34], согласно которому материал моделируется как многоуровневая структура, каждый структурный уровень с номером α которой образован ячейками периодичности (ЯП), состоящими из нескольких фаз. Каждая фаза в свою очередь состоит из ЯП ($\alpha-1$)-го низшего структурного уровня. В результате формируется многоуровневая иерархическая структура, на каждом уровне которой имеются ячейки периодичности. На ЯП каждого α -го структурного уровня формулируются серии нелинейных задач механики деформируемого твердого тела [35]:

$$\begin{cases} \sigma_{ij(pq)}^{\alpha} = 0, & \text{в области } \tilde{V}_{\xi} \\ \sigma_{ij(pq)}^{\alpha} = C_{ijkl}^{\alpha}(I_{\gamma}^{\alpha}, z_{\gamma}^{\alpha}) \varepsilon_{kl(pq)}^{\alpha}, & \text{в области } \tilde{V}_{\xi} \cup \Sigma'_s \cup \Sigma_s \\ \varepsilon_{ij(pq)}^{\alpha} = \frac{1}{2}(U_{i(pq)j}^{\alpha} + U_{j(pq)i}^{\alpha}), & \text{в области } \tilde{V}_{\xi} \\ [U_{i(pq)}^{\alpha}] = 0, \quad [\sigma_{ij(pq)}^{\alpha}] n_j = 0 \end{cases} \text{ на поверхности } \tilde{\Sigma}_{\xi s}, \quad (1)$$

где $U_{i(pq)}^{\alpha}$, $\sigma_{ij(pq)}^{\alpha}$, $\varepsilon_{ij(pq)}^{\alpha}$ – перемещения, напряжения и деформации фаз в ЯП α -го уровня; $\sigma_{ij(pq)j}^{\alpha} = \partial \sigma_{ij(pq)}^{\alpha} / \partial \xi_j$ – производные по локальным координатам ξ_j ; \tilde{V}_{ξ} – область, представляющая 1/8 часть ЯП α -го уровня; $\tilde{\Sigma}_{\xi s}$ – поверхность контакта фаз внутри области \tilde{V}_{ξ} , последние два условия в системе (1) – это

условия идеального контакта фаз; $C_{ijkl}^\alpha(I_\gamma^\alpha, z_\gamma^\alpha)$ – тензор нелинейной упругости, описывающий упругопластические свойства фаз; $I_\gamma^\alpha(\varepsilon_{kl}^\alpha)$ – инварианты суммарного тензора деформаций $\varepsilon_{kl}^\alpha = \sum_{p,q=1}^3 \varepsilon_{kl(pq)}^\alpha$, а $z_\gamma^\alpha(\sigma_{ij}^\alpha)$ – параметры повреждаемости, зависящие от суммарных напряжений

$$\sigma_{kl}^\alpha = \sum_{p,q=1}^3 \sigma_{kl(pq)}^\alpha.$$

К системе (1) присоединяют условия на координатных плоскостях $\Sigma_s = \{\xi^s = 0\}$ и на торцевых поверхностях ЯП $\Sigma'_s = \{\xi^s = 1/2\}$ $S=1, 2, 3$, которые записываются следующим образом:

– при $p=q$ – $U_{i(pq)}^\alpha = (1/2)\bar{\varepsilon}_{pq}\delta_{ip}$, $S_{j(pq)}^\alpha = 0$, $S_{k(pq)}^\alpha = 0$ (2)

на поверхности Σ'_i , $i \neq j \neq k \neq i$;

– при $p \neq q$ – $U_{i(pq)}^\alpha = (1/4)\bar{\varepsilon}_{ip}\delta_{ip}$, $S_{j(pq)}^\alpha = 0$, $U_{k(pq)}^\alpha = 0$

на поверхности Σ'_j , $i, j = \{p, q\}$;

$S_{i(pq)}^\alpha = 0$ – $S_{j(pq)}^\alpha = 0$, $U_{k(pq)}^\alpha = 0$

на поверхности Σ'_k , $i \neq j \neq k \neq i$,

а также

– при $p=q$ – $U_{i(pq)}^\alpha = 0$, $S_{j(pq)}^\alpha = 0$, $S_{k(pq)}^\alpha = 0$ (3)

на поверхности Σ_i , $i \neq j \neq k \neq i$;

– при $p \neq q$ – $U_{i(pq)}^\alpha = 0$, $S_{j(pq)}^\alpha = 0$, $U_{k(pq)}^\alpha = 0$

на поверхности Σ_j , $i, j = \{p, q\}$;

$S_{i(pq)}^\alpha = 0$, $S_{j(pq)}^\alpha = 0$, $U_{k(pq)}^\alpha = 0$

на поверхности Σ_k , $i \neq j \neq k \neq i$.

В данном случае введены обозначения для векторов усилий $S_{i(pq)}^\alpha \equiv \sigma_{ii(pq)}^\alpha n_i$, а $\bar{\varepsilon}_{ij}^\alpha$ – средние деформации, являющиеся заданными величинами для ЯП α -го уровня.

Для численного решения задач теории упругопластичности (1)–(3) применялся вариант метода переменных параметров упругости [16, 20], с помощью которого задачи (1)–(3) были линеаризованы, а для решения серий линеаризованных задач применялся метод конечного элемента [33, 34] с тетраэдральным 10 узловым конечным элементом. Все программное обеспечение для решения задач (1)–(3) и визуализации расчетов разработано в НОЦ «Суперкомпьютерное инженерное моделирование и разработка программных комплексов» (НОЦ «Симплекс») МГТУ им. Н.Э. Баумана [36].

Для перехода с α -го уровня на $(\alpha+1)$ -й структурный уровень после решения задач (1)–(3) вычисляются эффективные упругопластические соотношения α -го уровня по следующей формуле:

$$\bar{\sigma}_{ij}^\alpha = \sum_{p,q=1}^3 \langle \sigma_{ij(pq)}^\alpha \rangle = \bar{F}_{ij}^\alpha(I_\gamma^\alpha(\bar{\varepsilon}_{kl}^\alpha), z_\gamma^\alpha). \quad (4)$$

Здесь обозначен оператор осреднения по ЯП α -го уровня:

$$\langle \sigma_{ij}^\alpha \rangle = \int_{V_\xi} \sigma_{ij}^\alpha dV_\xi, \quad (5)$$

а $I_\gamma^\alpha(\bar{\varepsilon}_{kl}^\alpha)$ – инварианты тензора деформаций $\bar{\varepsilon}_{kl}^\alpha$; z_γ^α – параметры повреждаемости, зависящие от тензора напряжений $\bar{\sigma}_{ij}^\alpha$. Представляя соотношение (4) в псевдолинейном виде

$$\bar{\sigma}_{ij}^\alpha = \bar{F}_{ij}^\alpha(I_\gamma^\alpha(\bar{\varepsilon}_{kl}^\alpha), z_\gamma^\alpha) = \bar{C}_{ijmn}^\alpha(I_\gamma^\alpha(\bar{\varepsilon}_{kl}^\alpha), z_\gamma^\alpha) \bar{\varepsilon}_{mn}^\alpha \quad (6)$$

и вводя обозначения $\bar{\sigma}_{ij}^{\alpha+1} = \bar{\sigma}_{ij}^\alpha$, $\varepsilon_{ij}^{\alpha+1} = \bar{\varepsilon}_{ij}^\alpha$, $C_{ijmn}^{\alpha+1} = C_{ijmn}^\alpha$, осуществляем переход к определяющим соотношениям $\alpha+1$ структурного уровня.

Определяющие соотношения верхнего структурного уровня представляют собой определяющие соотношения упругопластичности материала в целом.

Численное моделирование эффективных определяющих соотношений многоуровневых материалов методом многомасштабного моделирования осуществляли с помощью специализированного программного комплекса MicroYes, разработанного в НОЦ «Симплекс» МГТУ им. Н.Э. Баумана [36].

Материал фаз полагался изотропным, подчиняющимся модифицированной деформационной теории малых упругопластических деформаций А.А. Ильюшина для активного нагружения [35]. В этом случае тензор нелинейной упругости $C_{ijkl}^\alpha(I_\gamma^\alpha, z_\gamma^\alpha)$, описывающий упругопластические свойства фаз на нижнем структурном уровне $\alpha=1$, имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^\alpha &= C_{ijkl}^\alpha(I_\gamma^\alpha, z_\gamma^\alpha) \varepsilon_{kl}^\alpha = \\ &= \left(K(z) - \frac{2}{3}G(z)(1-\omega) \right) \varepsilon_{kk}^\alpha \delta_{ij} + 2G(z)(1-\omega) \varepsilon_{ij}^\alpha, \end{aligned} \quad (7)$$

где $\omega(I_2(\varepsilon_{ij}^\alpha))$ – функция пластичности А.А. Ильюшина, которую выберем в степенном виде [35];

$$\omega(I_2) = \begin{cases} 0, & I_2 \leq \varepsilon_p \\ 1 - \left(\frac{\varepsilon_p}{I_2} \right)^{1-n}, & I_2 > \varepsilon_p, \end{cases} \quad (8)$$

где n – показатель упрочнения; ε_p – деформация начала текучести материала; $I_2(\varepsilon_{ij}^\alpha)$ – второй инвариант (интенсивность) тензора деформации

$$\begin{aligned} I_2(\varepsilon_{ij}^\alpha) &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{3}} \sqrt{(\varepsilon_{11}^\alpha - \varepsilon_{22}^\alpha)^2 + (\varepsilon_{22}^\alpha - \varepsilon_{33}^\alpha)^2 + (\varepsilon_{11}^\alpha - \varepsilon_{33}^\alpha)^2 + 6(\varepsilon_{13}^{2\alpha} + \varepsilon_{23}^{2\alpha} + \varepsilon_{12}^{2\alpha})}, \end{aligned} \quad (9)$$

$K(z)$ – модуль объемного сжатия материала и $G(z)$ – модуль сдвига, зависящие от параметра повреждаемости z

$$K(z) = K_0 a(z), \quad G(z) = G_0 a(z), \quad (10)$$

где $a(z)$ – функция, описывающая повреждаемость материала:

$$a(z) = \frac{1}{2} (|1 - z^{m_z}| + |1 - z^{-m_z}|), \quad (11)$$

где m_z – константа, $a(z)=1$ (если $z=0$) и $a(z)=0$ (если $z \geq 1$).

Параметр повреждаемости представляет собой функцию от инвариантов тензора напряжений

$$z = \frac{\sigma_u^2}{3\sigma_s^2(1+B_1V(\sigma))} + \left(\frac{1}{\sigma_T^2} - \frac{1}{3\sigma_s^2} \right) \sigma_+^2, \quad (12)$$

в данном случае обозначены первый и второй инварианты тензора напряжений:

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_{11}^\alpha + \sigma_{22}^\alpha + \sigma_{33}^\alpha, \\ \sigma_u &= \frac{1}{\sqrt{2}}((\sigma_{11}^\alpha - \sigma_{22}^\alpha)^2 + (\sigma_{22}^\alpha - \sigma_{33}^\alpha)^2 + (\sigma_{11}^\alpha - \sigma_{33}^\alpha)^2 + \\ &+ 6(\sigma_{13}^{2\alpha} + \sigma_{23}^{2\alpha} + \sigma_{12}^{2\alpha}))^{1/2}, \\ \sigma_- &= \frac{1}{2}(|\sigma| - \sigma), \quad \sigma_+ = \frac{1}{2}(|\sigma| + \sigma), \end{aligned} \quad (13)$$

а σ_T , σ_C , σ_S – пределы прочности при растяжении, сжатии и сдвиге. Константа B вычисляется через пределы прочности статической при сжатии и сдвиге:

$$B = \left(\frac{\sigma_C^2}{3\sigma_S^2} - 1 \right) \frac{1}{\sigma_C}; \quad (14)$$

$V(\sigma)$ – непрерывная положительная функция от первого инварианта σ , описывающая гладкий переход накопления повреждений в областях растяжения и сжатия:

$$V(\sigma) = \begin{cases} 0, & \text{если } \sigma > 0; \\ -\sigma, & \text{если } -\sigma_C < \sigma < 0; \\ \sigma_C, & \text{если } \sigma < -\sigma_C. \end{cases} \quad (15)$$

Модель (12) учитывает различие накопления повреждений в области растяжения и сжатия. Когда параметр повреждаемости достигает значения 1, происходит локальное разрушение материала в некоторой точке. Из этого условия

$$z=1 \quad (16)$$

и выражения (12) получаем следующий критерий прочности материала фазы:

$$\frac{\sigma_u^2}{3\sigma_s^2(1+B_1V(\sigma))} + \left(\frac{1}{\sigma_T^2} - \frac{1}{3\sigma_s^2} \right) \sigma_+^2 = 1. \quad (17)$$

Таким образом, в рамках разработанной модели механическое поведение конкретного материала характеризуется следующим набором констант:

$$K, G, \sigma_T, \sigma_C, \sigma_S, m_z, n, \epsilon_p, \quad (18)$$

которые должны быть определены на основе обработки экспериментальных данных.

Результаты

Для моделирования структуры сплава типа ВКНА-1В проведено исследование его микроструктуры в зависимости от КГО.

На рис. 1 представлена структура образца из сплава ВКНА-1В с КГО <001>, она имеет характерное для интерметаллидного сплава дендритно-ячеистое строение. Видно (рис. 2), что в междендритных областях присутствуют как мелкие, так и крупные участки эвтектики ($\gamma'+\beta$).

Оси дендритов (рис. 3) имеют двухфазную, неоднородную структуру ($\gamma'+\gamma$)-фазы, при этом частицы γ' -фазы окружены тонкими пластичными прослойками γ -твердого раствора. Морфология частиц γ' -фазы в осях дендритов у образца из сплава ВКНА-1В <001> близка к кубической.

Морфология частиц γ' -фазы в междендритных участках образца из сплава ВКНА-1В КГО <001> представлена на рис. 4. Структура в междендритной области состоит из интерметаллида Ni_3Al (γ' -фаза), разделенного пластичными прослойками твердого раствора на Ni-основе (γ -фаза). Частицы γ' -фазы неоднородны.

На рис. 5 показана дендритно-ячеистая структура образца из сплава ВКНА-1В КГО <011>. Видно (рис. 6), что в междендритных областях расположены участки эвтектики ($\gamma'+\beta$), отличающиеся между собой размером. Морфология частиц γ' -фазы образца из сплава ВКНА-1В КГО <011> в осях дендритов имеет произвольную форму (рис. 7).

Морфология частиц γ' -фазы в междендритных участках образца из сплава ВКНА-1В КГО <011> представлена на рис. 8. Структура в междендритном участке состоит из интерметаллида Ni_3Al (γ' -фаза), разделенного пластичными прослойками твердого раствора на Ni-основе (γ -фаза). Частицы γ' -фазы неоднородны.

Структура сплава ВКНА-1В КГО <111> показана на рис. 9 – она имеет дендритно-ячеистое строение. Видно (рис. 10), что в междендритных областях расположены равномерные участки эвтектики ($\gamma'+\beta$)-фазы, на границе γ -фазы выделяется вторичная γ' -фаза (рис. 10, з). Морфология частиц γ' -фазы образца из сплава ВКНА-1В КГО <111> в осях дендритов близка к треугольной (рис. 11).

Морфология частиц γ' -фазы в междендритных участках образца из сплава ВКНА-1В КГО <111> представлена на рис. 12. Структура междендритных областей состоит из интерметаллида Ni_3Al (γ' -фаза), разделенного пластичными прослойками твердого раствора на Ni-основе (γ -фаза). Частицы γ' -фазы неоднородны.

Таким образом, на основании проведенного металлографического анализа можно отметить, что микроструктура интерметаллидного сплава типа ВКНА для КГО <001>, <011> и <111> имеет дендритно-ячеистое строение. Оси дендритов состоят из интерметаллида Ni_3Al (γ' -фаза), разделенного прослойками твердого раствора на основе Ni (γ -фаза). В зависимости от КГО морфология γ' -фазы в осях дендритов изменяется: для КГО <001> – близка к квадратной форме, для КГО

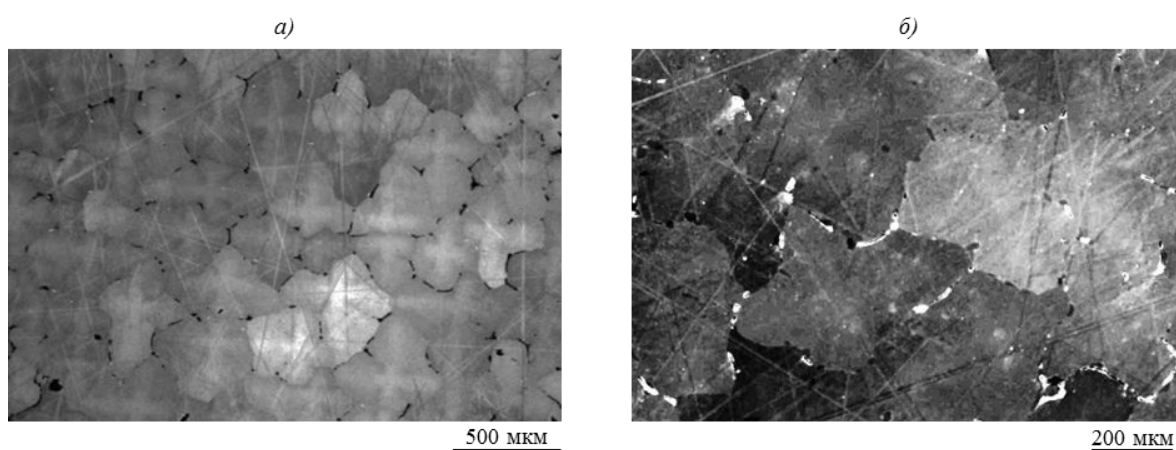


Рис. 1. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО <001>

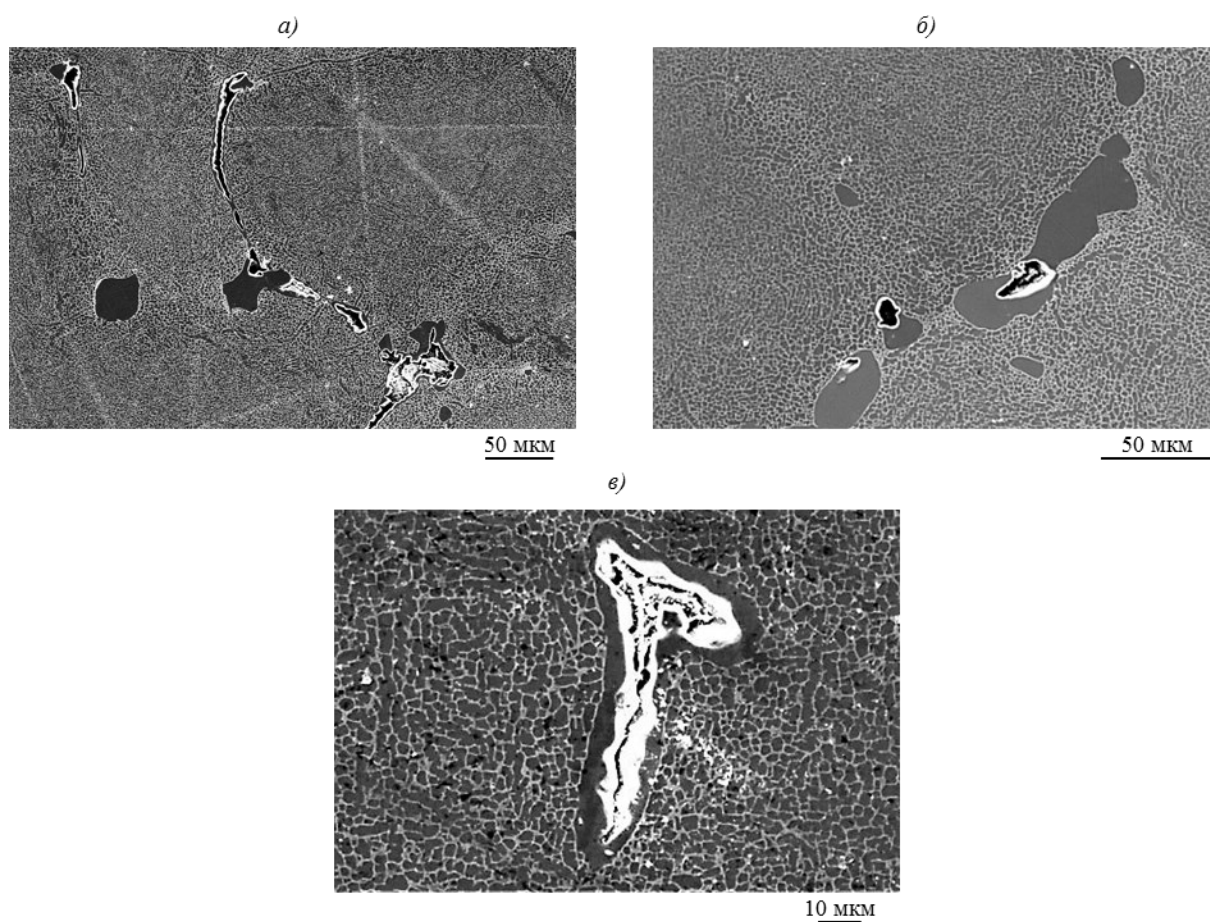


Рис. 2. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО <001> с эвтектикой ($\gamma'+\beta$) в междендритных областях

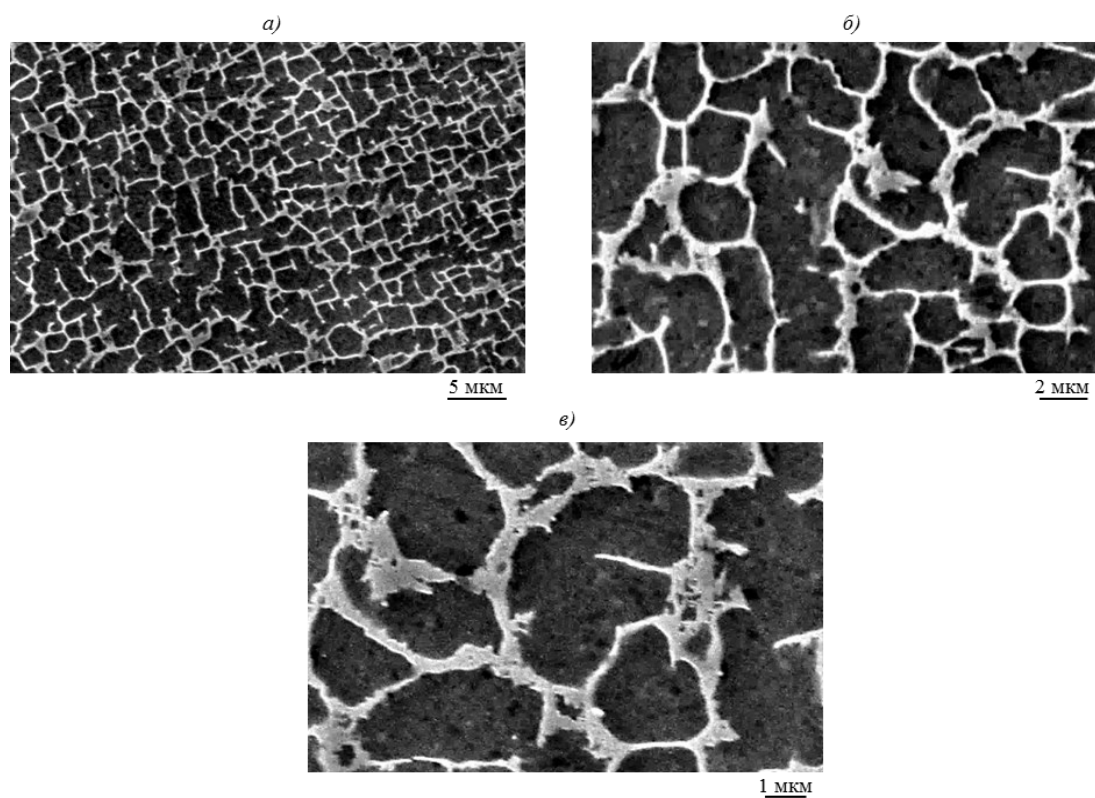


Рис. 3. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО $\langle 001 \rangle$ с морфологией частиц γ' -фазы в осях дендрита

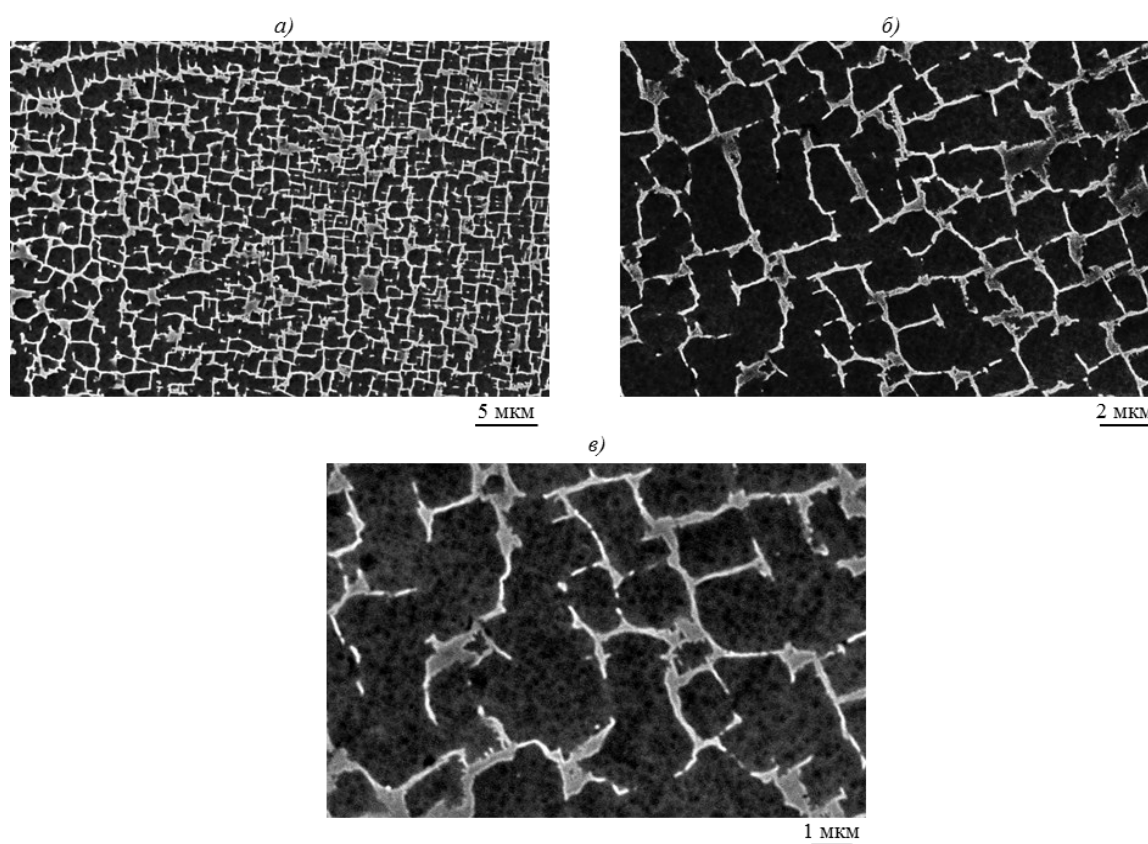


Рис. 4. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО $\langle 001 \rangle$ с морфологией частиц γ' -фазы в междендритных участках

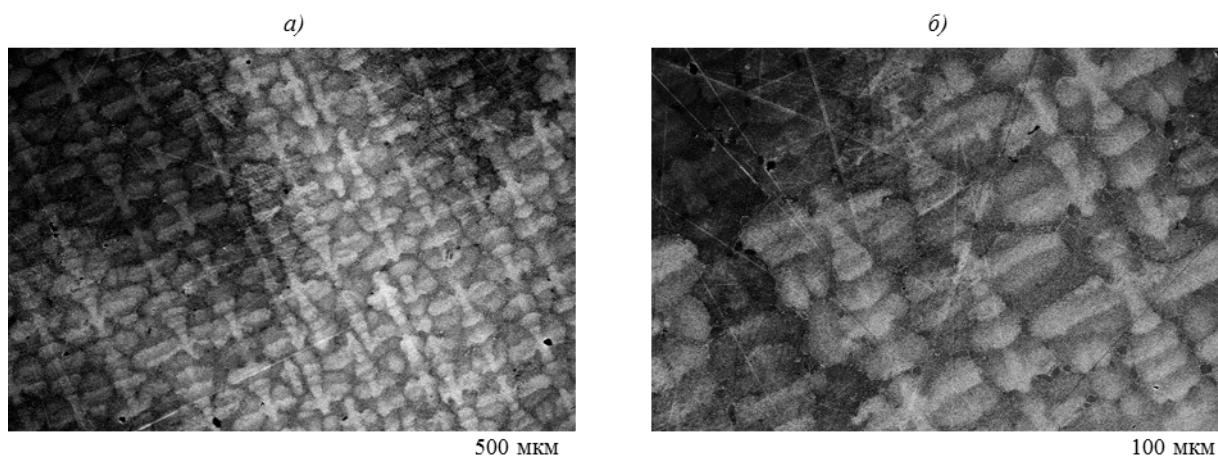


Рис. 5. Дендритно-ячеистая структура образца из сплава ВКНА-1В КГО <011>

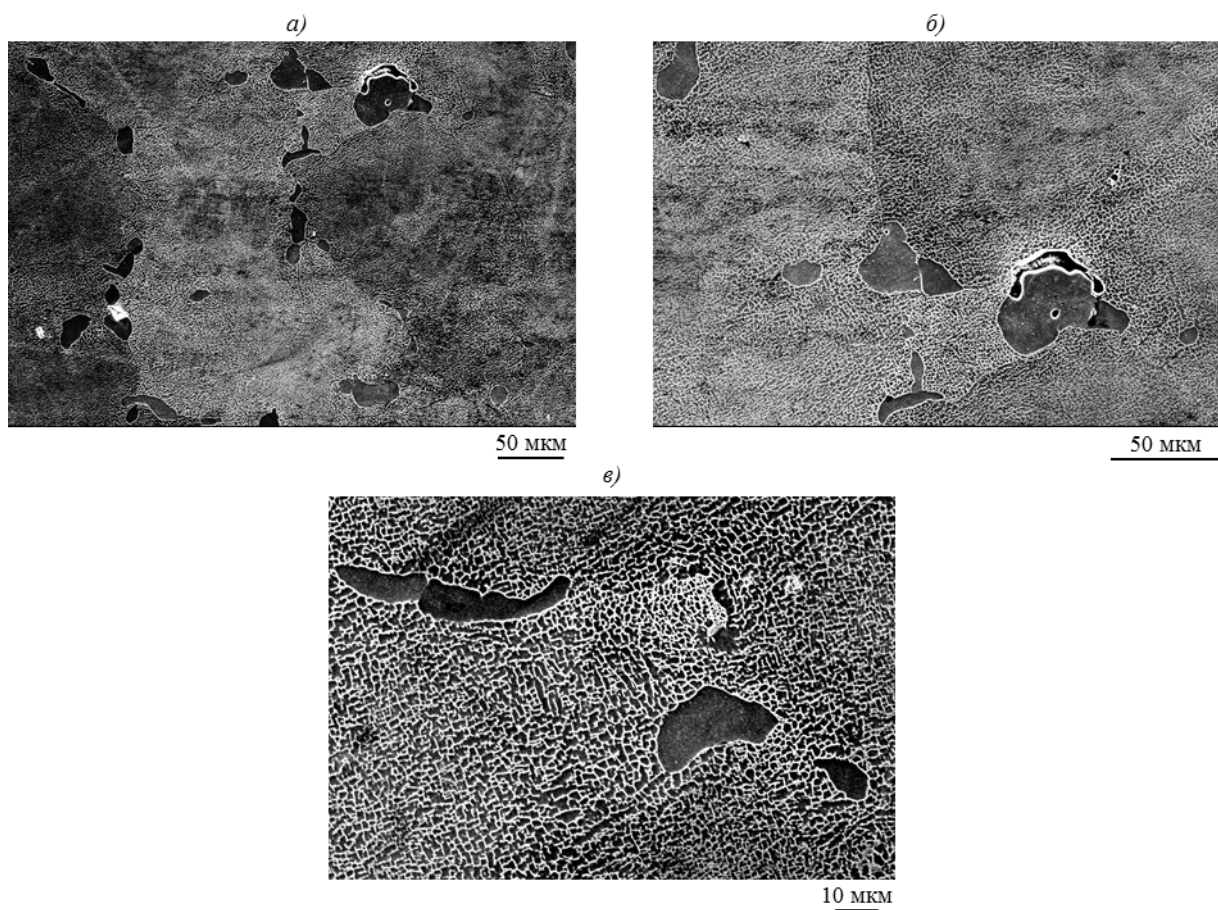


Рис. 6. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО <011> с эвтектикой ($\gamma'+\beta$) в междендритных областях

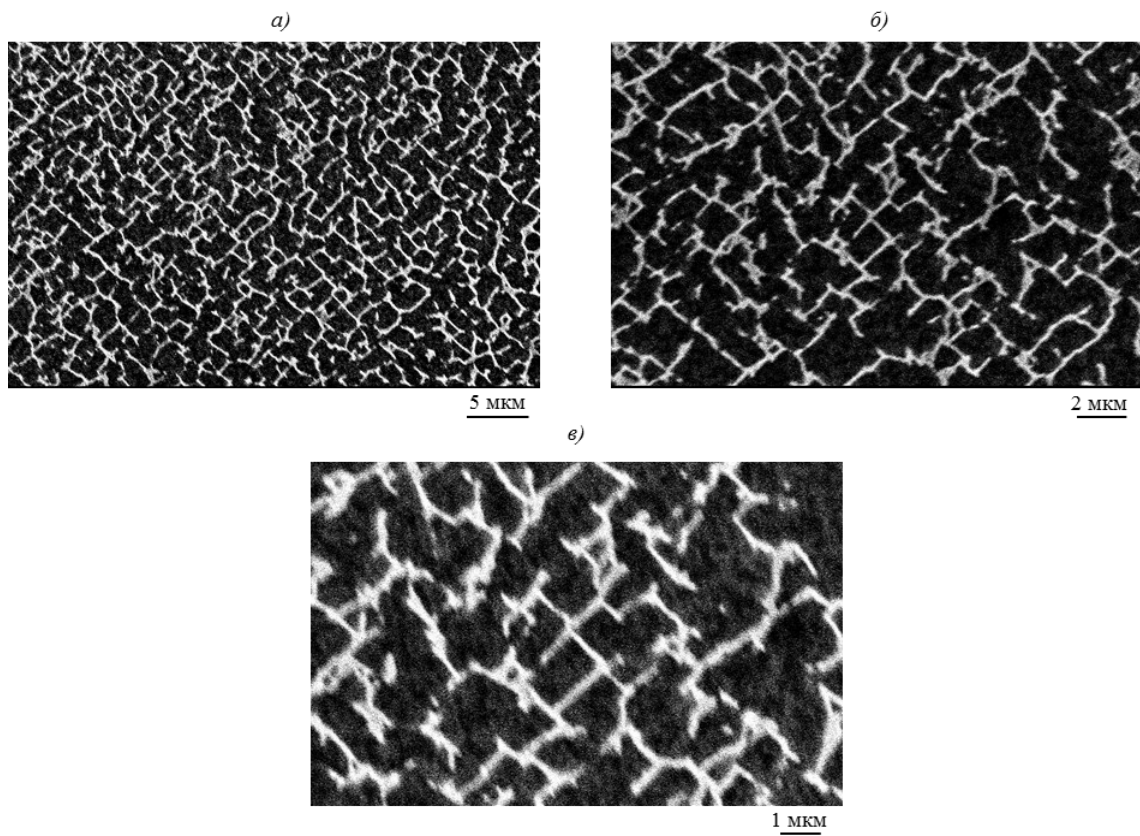


Рис. 7. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО $\langle 011 \rangle$ с морфологией частиц γ' -фазы в осях дендрита

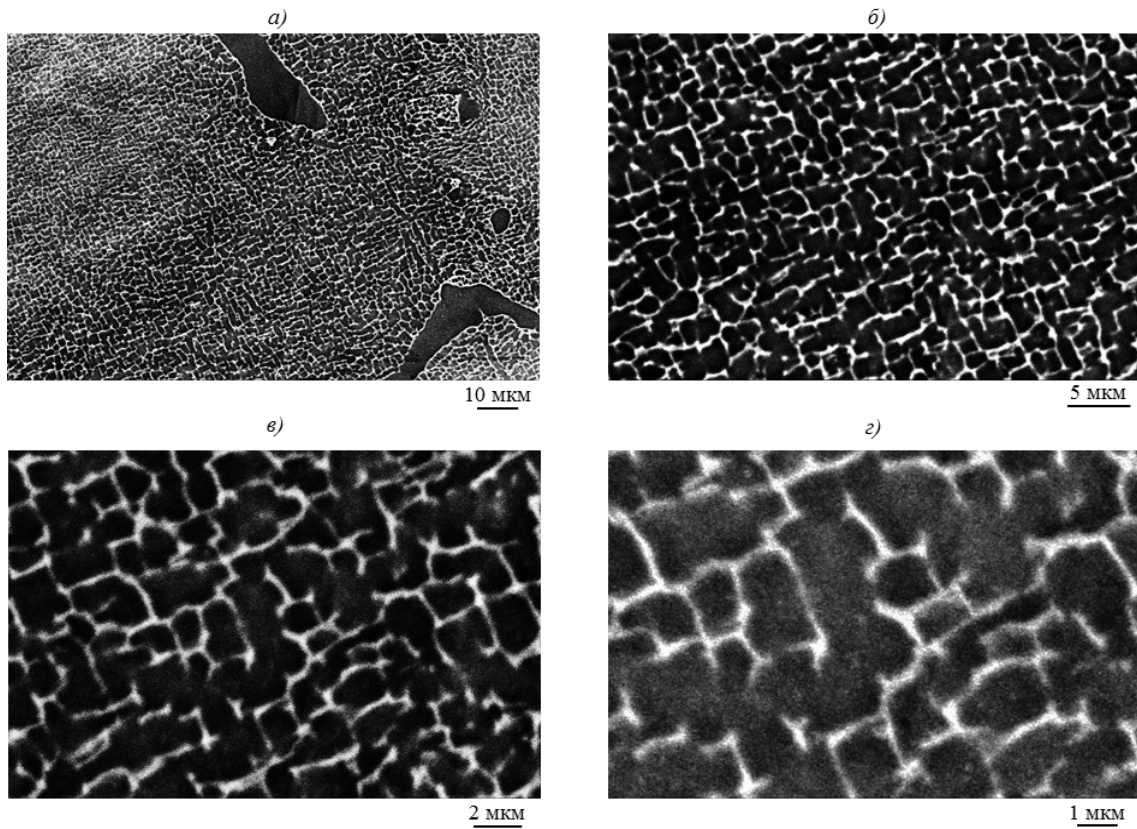


Рис. 8. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО $\langle 011 \rangle$ с морфологией частиц γ' -фазы в междендритных областях

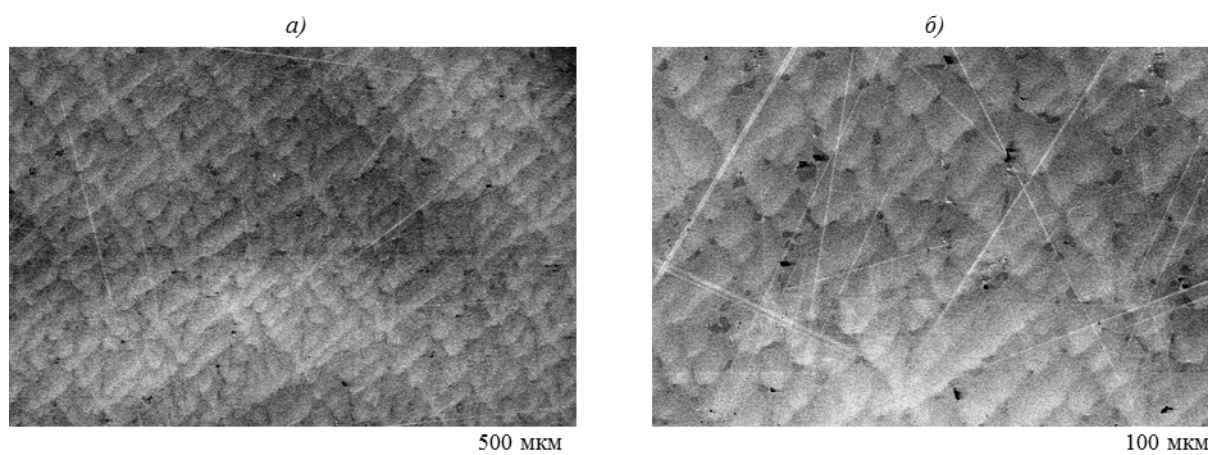


Рис. 9. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО <111> с дендритно-ячеистой структурой

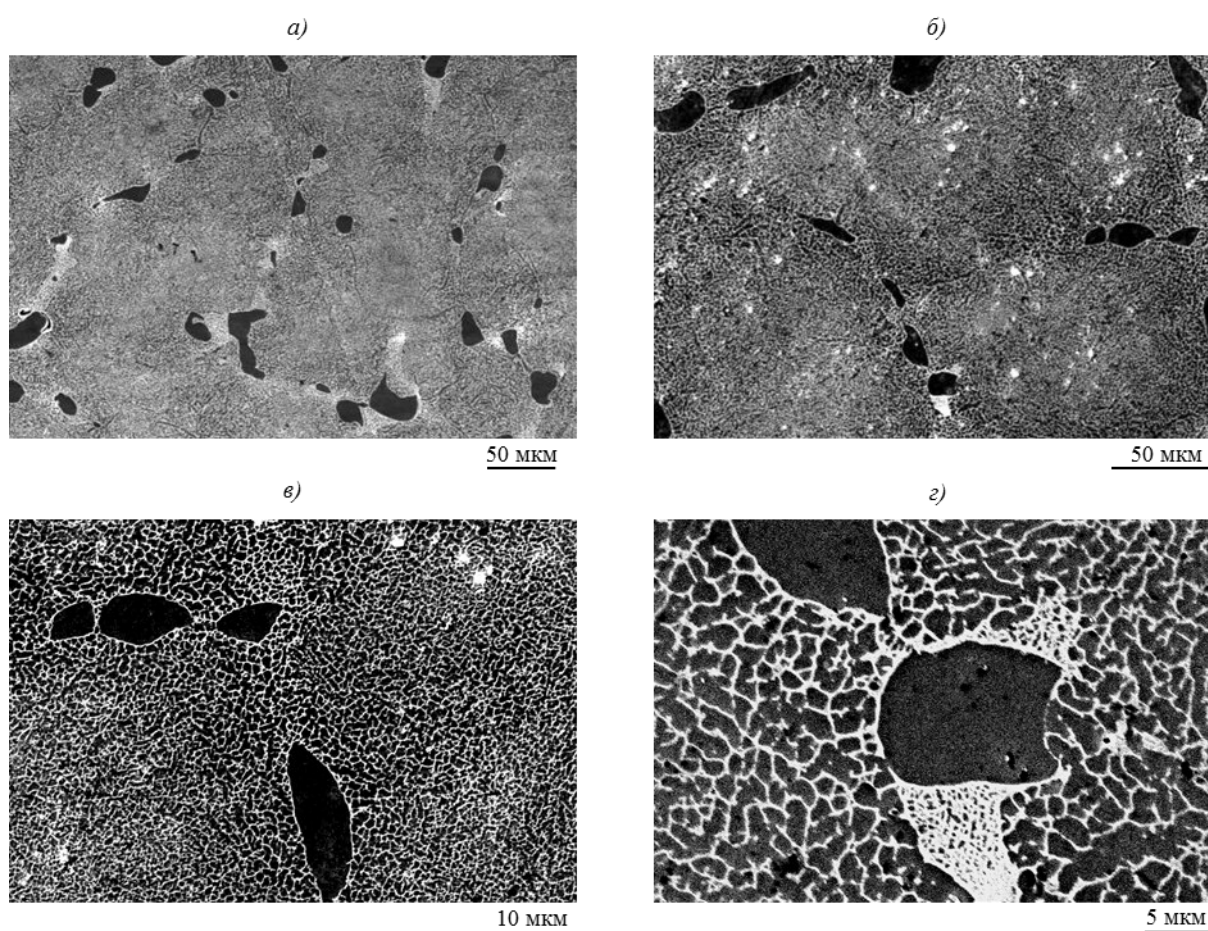


Рис. 10. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО <111> с эвтектикой ($\gamma'+\beta$) в междендритных областях

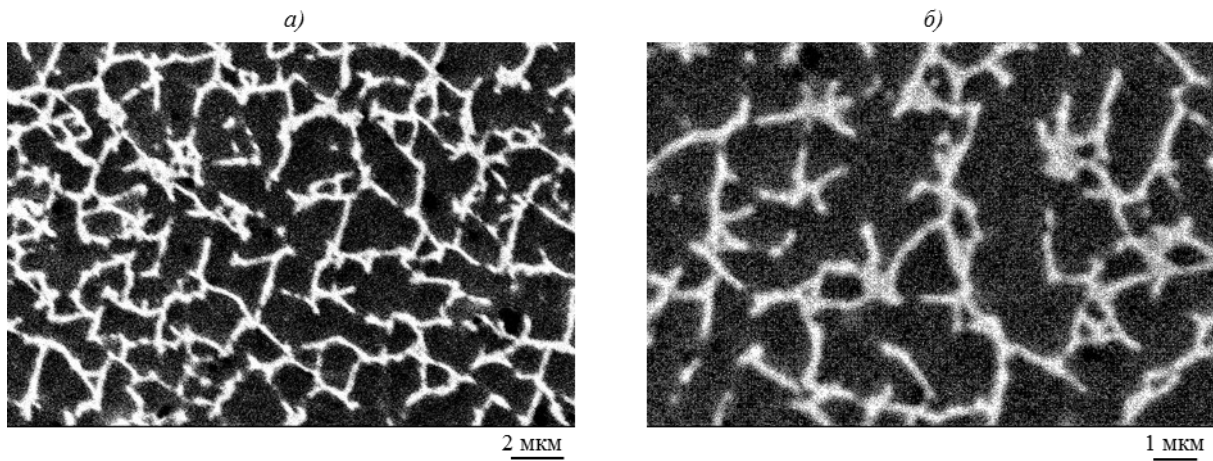


Рис. 11. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО <111> с морфологией частиц γ' -фазы в осях дендрита

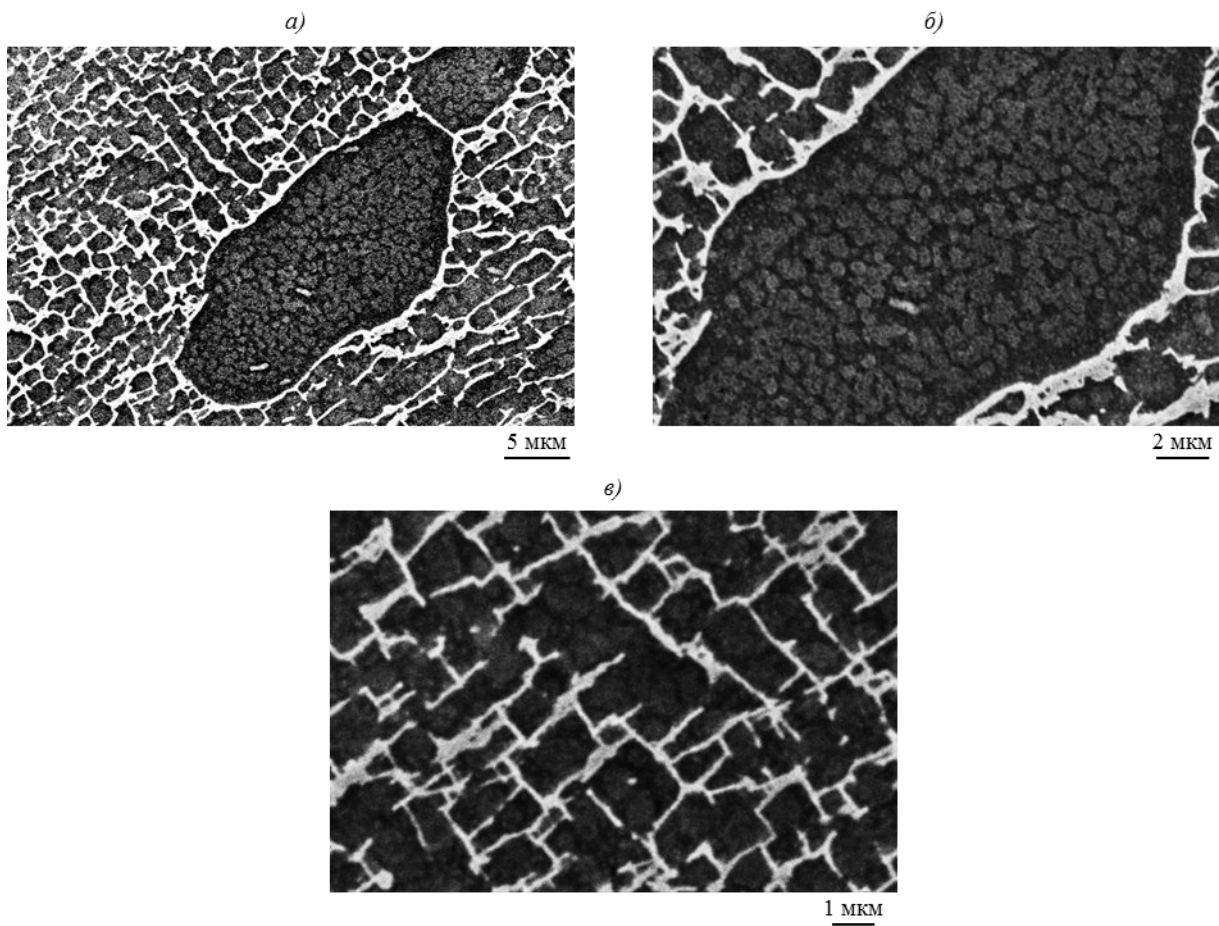


Рис. 12. Микроструктура образца из сплава ВКНА-1В КГО <111> с морфологией частиц γ' -фазы в междендритных участках

$\langle 111 \rangle$ – близка к треугольной форме, для КГО $\langle 011 \rangle$ – имеет произвольную форму.

Воспроизведение реальной микроструктуры при компьютерном моделировании практически невозможно ввиду ее случайного характера. Кроме того, детальное воспроизведение реальной геометрической формы фаз создает сложность при генерации конечно-элементных (КЭ) сеток, существенно увеличивает размер КЭ сетки и, следовательно, продолжительность расчета. В некоторых случаях детально моделируемая сложная геометрическая форма может быть источником концентрации напряжений, которых в действительности не существует в фазах, тем самым создается значительная погрешность расчета или возникают проблемы сходимости решения. Поэтому целесообразно использовать идеализированные модели микроструктуры, которые содержат только наиболее важные особенности геометрической формы микроструктуры. Такая идеализированная многоуровневая структура для жаропрочных монокристаллических сплавов типа ВКНА-1В, которая была разработана в данной работе, показана на рис. 13.

При моделировании структуры сплава типа ВИН использовался иерархический многомасштабный подход с двумя структурными уровнями: мезоуровнем и микроуровнем.

Мезоуровень – группа структурных составляющих, образующих минимальный объем, который можно наделить осредненными свойствами. Микроуровень – более низкий масштабный уровень структурной неоднородности, описывающий морфологию фаз в осях дендритов или в межосном пространстве.

Модель представляет собой двухуровневую периодическую структуру, на первом (верхнем) уровне которой располагаются ячейки периодичности, содержащие три фазы: включения γ' -фазы, образующейся при термообработке сплава, смеси γ' - и γ -фаз, в виде псевдорегулярных призматических включений, а также смеси γ' - и γ -фазы, образующих матрицу; на втором уровне располагаются две ячейки периодичности, состоящие из двух фаз: γ и γ' , с границами раздела фаз, ячейки отличаются разным содержанием фаз. Некоторые из полученных результатов решения задач (1)–(3) для сплава ВКНА-1В приведены на рис. 14, показаны зоны максимальных значений параметра повреждаемости z в ЯП, которые указывают на места зарождения микродефектов в микроструктуре. На рис. 15 показаны различные этапы распространения микроразрушения в мезоструктуре жаропрочного сплава ВКНА-1В при деформировании в направлении $\langle 100 \rangle$.

Проведены расчеты диаграмм деформирования жаропрочных сплавов в области пластичности, прочностных характеристик жаропрочных сплавов при действии различных видов напряженно-деформированного состояния (растяжения,

сжатия, сдвига). Расчетная диаграмма деформирования сплава ВКНА-1В и экспериментальные данные показаны на рис. 16, имеет место достаточно хорошее совпадение результатов, что показывает адекватность разработанной математической модели и возможность ее использования для прогнозирования механических свойств новых сплавов системы легирования $\text{Ni}_3\text{Al-Ti-Cr-W-Mo}$. На рис. 17 показаны диаграммы деформирования сплавов с различным содержанием γ' -фазы.

На втором этапе работ по экспериментальным данным модельных сплавов построены зависимости «фазовый состав–механические свойства» интерметаллидных сплавов на основе никеля системы легирования $\text{Ni}_3\text{Al-Ti-Cr-W-Mo}$. Определены: химический состав, атомная масса, электронная концентрация, дисбаланс, температуры фазовых превращений – ликвидус и солидус, значения структурных параметров (периоды кристаллических решеток γ' - и γ -фаз, мисфит γ/γ' , объемная доля фаз), характеристики кратковременной прочности и текучести при температуре 20°C (табл. 1) [37]. Часть полученных экспериментальных данных использовали для определения констант модели фаз – см. (18). Установлено влияние объемной доли γ' -фазы в исследованных интерметаллидных сплавах (составы с 1 по 43) на статическую прочность (рис. 18).

При температуре 20°C наблюдается повышение предела текучести и снижение предела прочности с повышением объемной доли γ' -фазы – с 85 до 100%, что, вероятно, связано с уменьшением в сплаве количества «вязкой» пластичной γ -фазы.

Полученные экспериментальные зависимости механических свойств сплава типа ВКНА-1В от объемного содержания γ' -фазы [38, 39] и от КГО (табл. 2) использованы для сравнения с результатами расчетов и проверки адекватности предложенных моделей «состав–свойства» жаропрочных интерметаллидных сплавов на основе никеля.

Обсуждение и заключения

На основании проведенного металлографического анализа принято решение использовать двухуровневую модель структуры сплава типа ВКНА-1В. Разработанная модель представляет собой двухуровневую периодическую структуру, на первом (верхнем) уровне которой располагаются ячейки периодичности, содержащие три фазы: включения γ' -фазы, образующиеся при термообработке сплава, смеси γ' - и γ -фаз, в виде псевдорегулярных призматических включений, а также смеси γ' - и γ -фазы, образующих матрицу; на втором уровне располагаются две ячейки периодичности, состоящие из двух фаз: γ' и γ , с границами раздела фаз, ячейки отличаются разным содержанием фаз.

По экспериментальным данным модельных сплавов построены зависимости «фазовый состав–механические свойства» жаропрочных интерме-

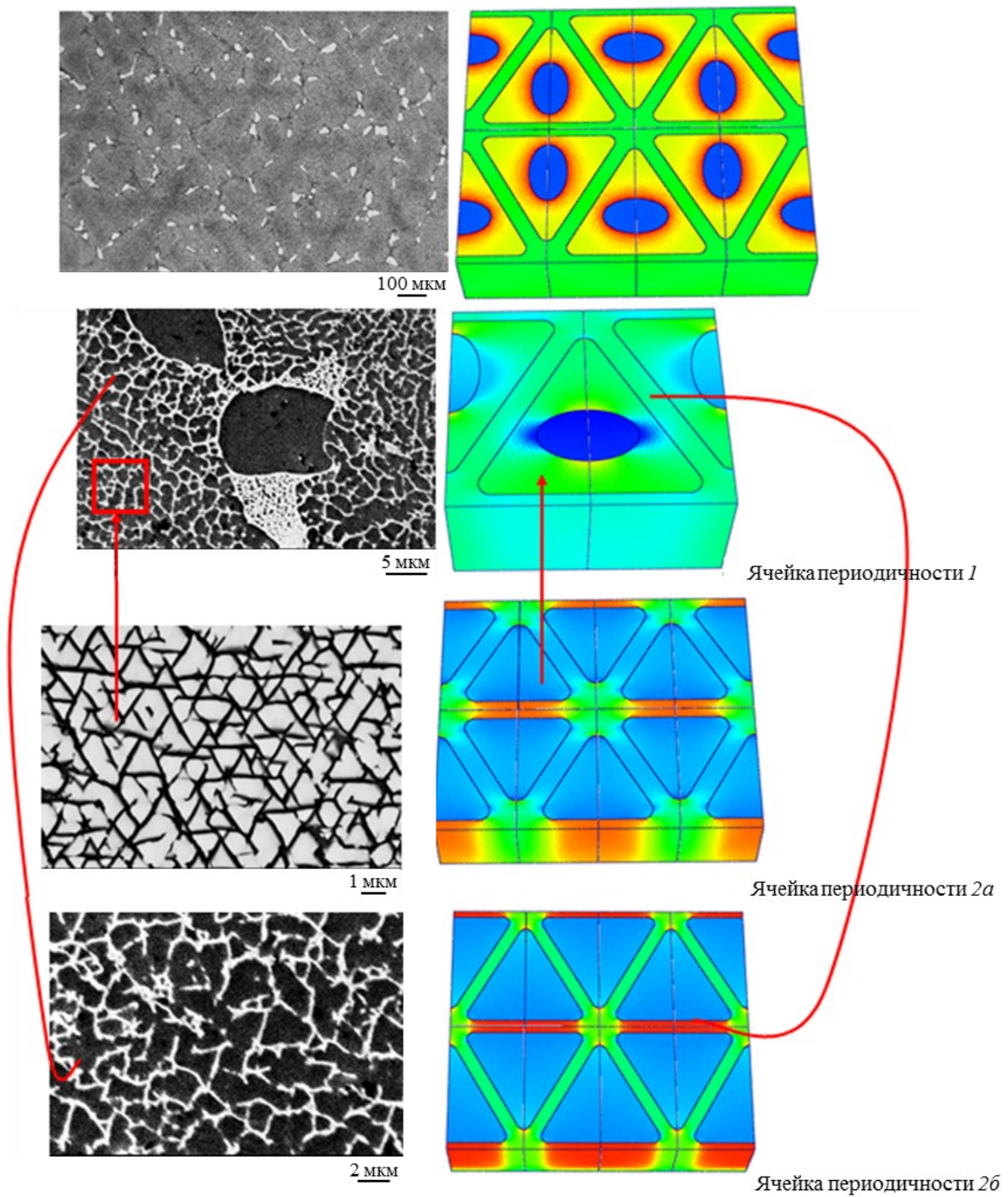


Рис. 13. Двухуровневая модель микромезоструктуры жаропрочного монокристаллического сплава типа ВКНА-1В КГО $\langle 111 \rangle$

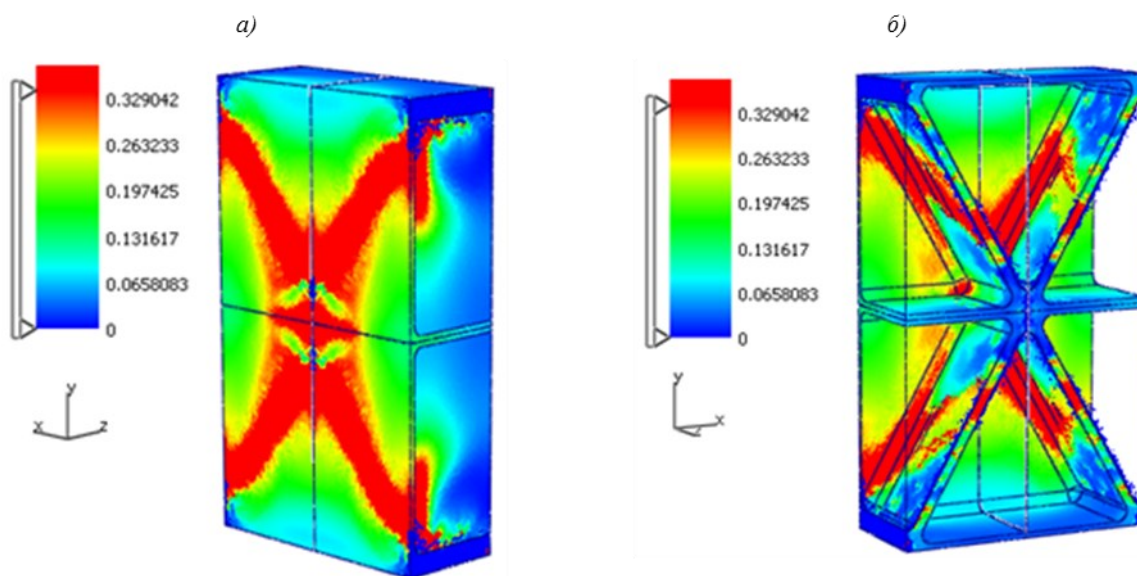


Рис. 14. Распределение параметра повреждаемости z^α в мезоструктуре жаропрочного сплава ВКНА-1В перед началом макроразрушения в γ' - (а) и γ -фазе (б)

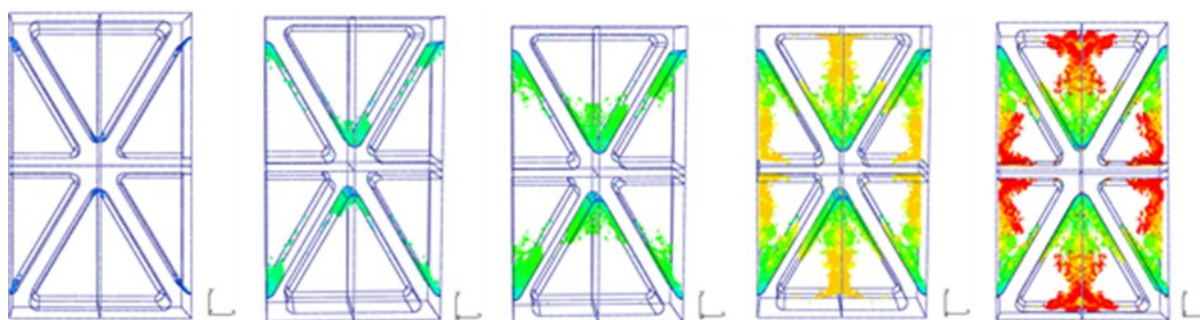


Рис. 15. Различные этапы распространения микроразрушения в мезоструктуре жаропрочного сплава ВКНА-1В при растяжении

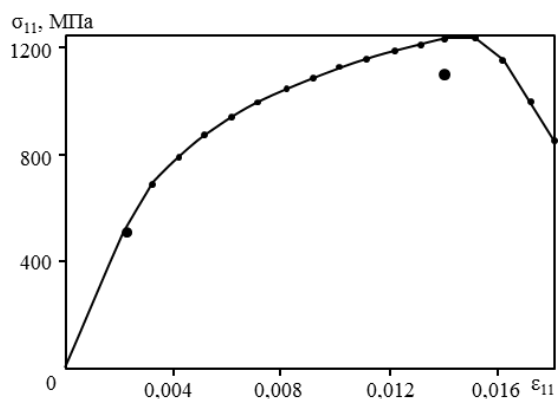


Рис. 16. Диаграмма деформирования при растяжении жаропрочного сплава ВКНА-1В с концентрацией γ' -фазы 48% (● – экспериментальные данные)

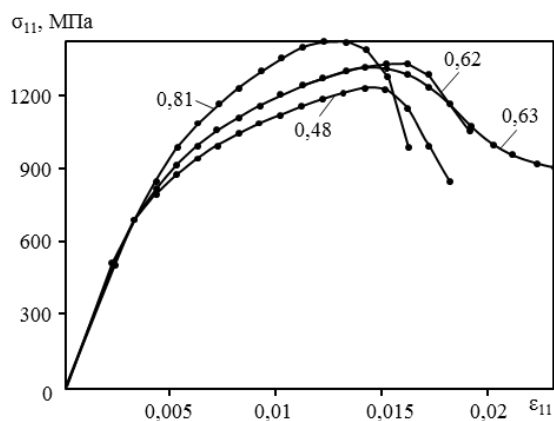


Рис. 17. Расчетные диаграммы деформирования при растяжении жаропрочного сплава ВКНА-1В с различными концентрациями γ' -фазы

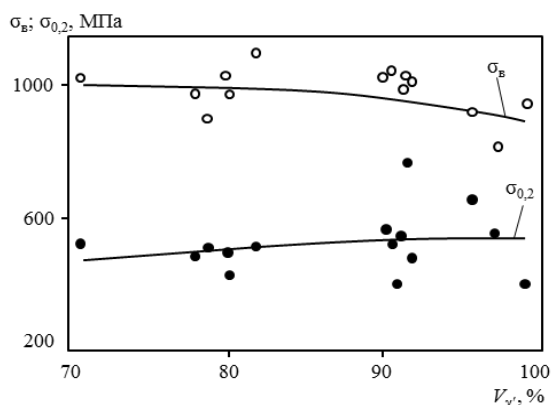


Рис. 18. Зависимости $\sigma_{\text{в}}$ и $\sigma_{0,2}$ от объемной доли γ' -фазы $V_{\gamma'}$ в исследованных интерметаллидных сплавах

Таблица 1

Экспериментально определенные параметры модельных сплавов типа ВКНА-1В для построения математических моделей зависимостей «фазовый состав–механические свойства»

| Сплав (условный номер состава) | Содержание химических элементов, % (по массе) | | | Доля фаз, % (объемн.) | | Температура, °С | | $\sigma_{\text{в}}$ | $\sigma_{0,2}$ |
|--------------------------------|---|------|------|-----------------------|--------------|-----------------|-------|---------------------|----------------|
| | Ni | Al | Ti | $V_{\gamma'}$ | V_{γ} | T_L | T_S | | |
| ВКНА-1В | Основа | 8,5 | 1,5 | 88 | 12 | 1384 | 1354 | 1325 | 608 |
| Модельный сплав 1 | 76,43 | 8,35 | 0,95 | 95,5 | 4,5 | 1345 | 1285 | 922 | 657 |
| ... 43 | 69,80 | 8,30 | — | 95,0 | 5,0 | 1392 | 1365 | 810 | 555 |

Таблица 2

Физико-механические свойства сплава ВКНА-1В при различных структурных состояниях

| КГО | $T_{\text{исп}}$, °С | Модуль упругости, ГПа | $\sigma_{\text{в}}$ | $\sigma_{0,2}$ | δ , % |
|-------|-----------------------|-----------------------|---------------------|----------------|--------------|
| | | | МПа | | |
| <001> | 20 | 150 | 550 | 330 | 55 |
| | 800 | 140 | 840 | 760 | 14 |
| | 1000 | 120 | 550 | 540 | 44 |
| <011> | 20 | 220 | 670 | 400 | 290 |
| | 800 | 175 | 1030 | 1000 | 120 |
| | 1000 | 145 | 540 | 520 | 490 |
| <111> | 20 | 220 | 1350 | 620 | 14 |
| | 800 | 215 | 890 | 670 | 26 |
| | 1000 | 155 | 520 | 430 | 30 |

таллидных сплавов на основе никеля системы легирования $\text{Ni}_3\text{Al-Ti-Cr-W-Mo}$. Определены: химический состав, атомная масса, электронная концентрация, дисбаланс, температуры фазовых превращений – ликвидус и солидус, значения структурных параметров (периоды кристаллических решеток γ' - и γ -фаз, мисфит γ/γ' , объемная доля фаз), характеристики кратковременной прочности и текучести при температуре 20°С. Полученные экспериментальные данные использовали для построения математических моделей зависимости «фазовый состав–механические свойства» сплава типа ВИН.

Установлено влияние объемной доли γ' -фазы в исследованных интерметаллидных сплавах на статическую прочность. Полученные экспериментальные зависимости механических свойств сплава типа ВКНА-1В от объемного содержания γ' -фазы использованы для сравнения с результата-

ми расчетов и проверки адекватности разработанных моделей «состав–свойства» интерметаллидных сплавов на основе никеля.

Для моделирования механических свойств интерметаллидных монокристаллических сплавов применена деформационная теория пластичности при активном нагружении с учетом эффекта повреждаемости отдельных фаз сплавов при нагружении. В сочетании с методом многомасштабного моделирования эта модель позволяет достаточно адекватно прогнозировать механические свойства сплавов с различным содержанием и морфологией фаз.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках Соглашения о предоставлении субсидии №14.595.21.0002 от 22.08.2014 г., уникальный идентификатор №RFMEFI59514X0002, с использованием оборудования ЦКП «Климатические испытания ФГУП «ВИАМ».

ЛИТЕРАТУРА

1. Каблов Е.Н. Инновационные разработки ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ по реализации «Стратегических направлений развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года» // *Авиационные материалы и технологии*. 2015. №1 (34). С. 3–33.
2. Каблов Е.Н., Бунтушкин В.П., Базылева О.А. Конструкционные жаропрочные материалы на основе соединения Ni_3Al для деталей горячего тракта ГТД // *Технология легких сплавов*. 2007. №2. С. 75–80.
3. Каблов Е.Н., Петрушин Н.В., Елютин Е.С. Монокристаллические жаропрочные сплавы для газотурбинных двигателей // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер.: Машиностроение*. 2011. №SP2. С. 38–52.
4. Поварова К.Б., Базылева О.А., Казанская Н.К., Дроздов А.А. и др. Конструкционные жаропрочные сплавы на основе Ni_3Al : получение, структура и свойства // *Материаловедение*. 2011. №4. С. 39–48.
5. Базылева О.А., Аргинбаева Э.Г., Туренко Е.Ю. Жаропрочные литейные интерметаллидные сплавы // *Авиационные материалы и технологии*. 2012. №S. С. 57–60.
6. Бунтушкин В.П., Бронфин М.Б., Базылева О.А., Тимофеева О.Б. Влияние легирования и структуры отливок на жаропрочность интерметаллида Ni_3Al при высокой температуре // *Металлы*. 2004. №2. С. 107–110.
7. Каблов Е.Н., Бунтушкин В.П., Базылева О.А. Материалы на основе интерметаллида Ni_3Al для получения отливок с регламентированной структурой // *Структура и свойства интерметаллидных материалов с нанозфазным упрочнением*. М.: МИСиС, 2008. С. 182–219.
8. Бондаренко Ю.А., Базылева О.А., Ечин А.Б., Сурова В.А., Нарский А.Р. Высокоградцентная направленная кристаллизация деталей горячего тракта из интерметаллидного жаропрочного сплава ВКНА-1В с монокристаллической структурой // *Литейное производство*. 2012. №6. С. 12–16.
9. Базылева О.А., Туренко Е.Ю., Шестаков А.В. Современные перспективные высокотемпературные интерметаллидные сплавы серии ВИН // *Новости материаловедения*. Наука и техника: электрон. науч.-технич. журн. 2014. №3. Ст. 10. URL: <http://www.materialsnews.ru> (дата обращения: 18.05.2015).
10. Enomoto M., Narada. Analysis of γ/γ' Equilibrium in Ni–Al–X Alloys by the Cluster Variation Method with the Lennard-Jones Potential // *Metallurgical Transactions*. 1989. V. 20A. №4. P. 649–664.
11. Горюнов А.В., Ригин В.Е. Современная технология получения литейных жаропрочных никелевых сплавов // *Авиационные материалы и технологии*. 2014. №2. С. 3–7.
12. Бондаренко Ю.А., Ечин А.Б., Сурова В.А., Нарский А.Р. Влияние условий направленной кристаллизации на структуру деталей типа лопатки ГТД // *Литейное производство*. 2012. №7. С. 14–16.
13. Каблов Е.Н., Петрушин Н.В., Светлов И.Л. Компьютерное конструирование жаропрочного никелевого сплава IV поколения для монокристаллических лопаток газовых турбин // *Литейные жаропрочные сплавы*. Эффект С.Т. Кишкина. М.: Наука, 2006. С. 98–115.
14. Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Юрин Ю.В. Асимптотическая теория термползучести многослойных тонких пластин // *Математическое моделирование и численные методы*. 2014. №4. С. 18–36.
15. Димитриенко Ю.И., Дрогочуб А.Н., Губарева Е.А. Оптимизация многокомпонентных дисперсно-армированных композитов на основе сплайн-аппроксимации // *Наука и образование: электрон. науч.-технич. изд.* 2015. URL: <http://www.technomag.bmstu.ru> (дата обращения: 18.05.2015).
16. Димитриенко Ю.И., Федонюк Н.Н., Губарева Е.А., Сборщиков С.В., Прозоровский А.А. Многомасштабное конечно-элементное моделирование трехслойных сотовых композитных конструкций // *Наука и образование: электрон. науч.-технич. изд.* 2014. №10. URL: <http://www.technomag.bmstu.ru> (дата обращения: 18.05.2015).
17. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В., Соколов А.П., Садовничий Д.Н., Гафаров Б.Р. Численное и экспериментальное моделирование прочностных характеристик сферопластиков // *Композиты и наноструктуры*. 2013. №3. С. 35–51.
18. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В., Соколов А.П. Численное моделирование микроразрушения и прочностных характеристик пространственно-армированных композитов // *Механика композиционных материалов и конструкций*. 2013. Т. 19. №3. С. 365–383.
19. Димитриенко Ю.И., Яковлев Н.О., Ерасов В.С., Федонюк Н.Н., Сборщиков С.В., Губарева Е.А., Крылов В.Д., Григорьев М.М., Прозоровский А.А. Разработка многослойного полимерного композиционного материала с дискретным конструктивно-ортотропным наполнителем // *Композиты и наноструктуры*. 2014. Т. 6. №1. С. 32–48.
20. Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Сборщиков С.В., Базылева О.А., Луценко А.Н., Орешко Е.И. Моделирование упругопластических характеристик монокристаллических интерметаллидных сплавов на основе микроструктурного численного анализа // *Математическое моделирование и численные методы*. 2015. №2. С. 3–22.
21. Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Сборщиков С.В. Конечно-элементное моделирование эффективных вязкоупругих свойств однонаправленных композиционных материалов // *Математическое моделирование и численные методы*. 2014. №2. С. 28–48.
22. Коллеров М.Ю., Егорова М.В., Орешко Е.И., Ртищев С.Н., Карачунский Г.М., Радванская С.Н. Экспериментально-теоретическое обоснование алго-

- ритма раннего ортодонтического лечения детей с односторонней расщелиной губы и неба несъемными аппаратами // *Стоматология детского возраста и профилактика*. 2011. Т. X. №1 (36). С. 23–27.
23. Гусев Д.Е., Коллеров М.Ю., Рудаков С.С., Королев П.А., Орешко Е.И. Оценка биомеханической совместимости имплантируемых опорных пластин из сплавов на основе титана и никелида титана методом компьютерного моделирования // *Титан*. 2011. №3 (33). С. 39–44.
24. Коллеров М.Ю., Гусев Д.Е., Орешко Е.И. Экспериментально-теоретическое обоснование выбора метода и имплантатов для устранения воронкообразной деформации грудной клетки // *Научные труды (Вестник МАТИ)*. 2012. №19 (91). С. 331–336.
25. Коллеров М.Ю., Усиков В.Д., Куфтов В.С., Гусев Д.Е., Орешко Е.И. Медико-техническое обоснование использования титановых сплавов в имплантируемых конструкциях для стабилизации позвоночника // *Титан*. 2013. №1 (40). С. 39–45.
26. Орешко Е.И., Ерасов В.С., Подживотов Н.Ю. Выбор схемы расположения высокомодульных слоев в многослойной гибридной пластине для ее наибольшего сопротивления потере устойчивости // *Авиационные материалы и технологии*. 2014. №54. С. 109–117.
27. Орешко Е.И., Ерасов В.С., Луценко А.Н. Математическое моделирование деформирования конструкционного углепластика при изгибе // *Авиационные материалы и технологии*. 2017 (в печати).
28. Орешко Е.И., Ерасов В.С., Подживотов Н.Ю., Луценко А.Н. Расчет на прочность гибридной панели крыла на базе листов и профилей из высокопрочного алюминий-литиевого сплава и слоистого алюмокомпозитного пластика // *Авиационные материалы и технологии*. 2016. №1 (40). С. 53–61. DOI: 10.18577/2071-9140-2016-0-1-53-61.
29. Орешко Е.И., Ерасов В.С., Луценко А.Н., Терентьев В.Ф., Слизов А.К. Построение диаграмм деформирования в трехмерном пространстве σ - ϵ - t // *Авиационные материалы и технологии*. 2017 (в печати).
30. Орешко Е.И., Ерасов В.С., Луценко А.Н. Особенности расчетов устойчивости стержней и пластин // *Авиационные материалы и технологии*. 2017 (в печати).
31. Димитриенко Ю.И. Метод многоуровневой гомогенизации иерархических периодических структур // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер.: Естественные науки*. 2002. №1. С. 58–73.
32. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Система автоматизированного прогнозирования свойств композиционных материалов // *Информационные технологии*. 2008. №8. С. 31–36.
33. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Численное моделирование композиционных материалов с многоуровневой структурой // *Известия Российской академии наук. Серия физическая*. 2011. Т. 75. №11. С. 1549–1554.
34. Димитриенко Ю.И., Соколов А.П. Многомасштабное моделирование упругих композиционных материалов // *Математическое моделирование*. 2012. Т. 24. №5. С. 3–20.
35. Димитриенко Ю.И. *Механика сплошной среды: учеб. пособ. в 4 т.* М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013. Т. 4: Основы механики твердого тела. 624 с.
36. Димитриенко Ю.И., Сборщиков С.В. Программа *Microutines_NetGazer* для трехмерной визуализации и анимации результатов решения задачи имитационного моделирования микроразрушения композиционных материалов при статических нагрузках, на основе конечно-элементного решения задач на ячейке периодичности: программа для электронных вычислительных машин (программы для ЭВМ). Россия №2015615102; дата поступления 12.03.15; дата госрегистрации Программ для ЭВМ 07.05.15.
37. Аргинбаева Э.Г. Влияние легирования, технологии литья и термической обработки на структуру и свойства интерметаллидных сплавов на основе никеля: автореф. дис. ... канд. техн. наук. 2014. 24 с.
38. Базылева О.А., Бондаренко Ю.А., Тимофеева О.Б., Хвацкий К.К. Влияние кристаллографической ориентации на структуру и свойства сплава ВКНА-1В // *Металлургия машиностроения*. 2012. №4. С. 9–13.
39. Аргинбаева Э.Г., Базылева О.А., Колодочкина В.Г., Хвацкий К.К. Влияние кристаллографической ориентации на структуру и физико-механические свойства интерметаллидного сплава на основе Ni_3Al // *Авиационные материалы и технологии*. 2013. №2. С. 3–7.