

УДК 669.245.018.044:620.193.53

Канд. техн. наук С. В. Гайдук, канд. техн. наук В. В. Кононов

Запорожский национальный технический университет, г. Запорожье

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ПАРАМЕТРОВ СТРУКТУРНОЙ СТАБИЛЬНОСТИ ЛИТЕЙНЫХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ

Для литейных жаропрочных никелевых сплавов (ЖНС) с различным типом легирования выполнены расчеты методом CALPHAD (JMatPro) химических составов  $\gamma$ -твердых растворов и определены параметры структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_c$  и  $\Delta E$  традиционными методами PHACOMP, New PHACOMP и  $\Delta E$ -методом. На основе математической обработки данных получены универсальные математические регрессионные модели для прогнозирования параметров структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$  по величине  $P_{ТПУ} = Cr / (Cr+Mo+W)$ , соотношения элементов в составе сплава, и расчета параметра  $\bar{M}d_c$  по величине дисбаланса системы легирования  $\Delta E$  литейных ЖНС, вместо известных методов.

**Ключевые слова:** литейные жаропрочные никелевые сплавы, система легирования,  $\gamma$ -твердый раствор; параметры структурной стабильности, регрессионное уравнение, математическая модель.

### Введение

Специфика легирования литейных жаропрочных никелевых сплавов (ЖНС), а также характер распределения легирующих элементов в  $\gamma$ -твердом растворе оказывает существенное влияние на структурную и фазовую стабильность материалов данного класса [1–5].

Успешная реализация ряда основных положений теории легирования литейных ЖНС для ответственных деталей газовых турбин в значительной степени связана с точностью определения химического состава  $\gamma$ -твердого раствора [1, 2, 5, 6]. Современный подход комплексного использования расчетно-аналитических методик для прогнозирования химического состава  $\gamma$ -твердого раствора, а также структурной стабильности разрабатываемых литейных ЖНС без проведения большого количества промежуточных экспериментов придает научным исследованиям большую эффективность, информативность и экономическую целесообразность. Поэтому работы в данном направлении являются актуальными и перспективными.

Следует отметить, что в данном направлении проводятся определенные исследования. В частности, в работах [7–14] представлены результаты исследований зависимости параметров структурной стабильности жаропрочных никелевых спла-

вов от содержания легирующих элементов в их составе. Однако, полученные результаты указывают на то, что данное направление нуждается в совершенствовании и дальнейшем развитии.

### Постановка задачи

К параметрам структурной стабильности относятся:  $P_{ТПУ}$  – соотношение элементов  $Cr / (Cr+Mo+W)$  в составе сплава в ат.%;  $\bar{N}_{V\gamma}$  – суммарное количество электронных вакансий в  $\gamma$ -твердом растворе;  $\bar{M}d_{\gamma}$  – суммарный энергетический уровень  $d$ -орбиталей элементов в  $\gamma$ -твердом растворе;  $\bar{M}d_c$  – суммарный энергетический уровень  $d$ -орбиталей элементов в сплаве;  $\Delta E$  – параметр дисбаланса системы легирования, разность средних концентраций валентных электронов элементов в сплаве.

Основной целью исследований было установление взаимосвязи между прогнозирующими методами PHACOMP [8] и New PHACOMP [9], которые позволяют рассчитывать параметры структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$  и  $\bar{M}d_{\gamma}$  на основе данных о химическом составе  $\gamma$ -твердых растворов литейных ЖНС. Для исследований была сделана выборка промышленных отечественных

и зарубежных литейных ЖНС, которая осуществлялась с позиций достоверного экспериментального определения составов их  $\gamma$ - твердых растворов методом физико-химического анализа [1–6, 10–14].

В таблице 1 представлены химические составы широкого ряда литейных жаропрочных никелевых сплавов, отобранных для расчетных исследований. В процессе исследований были использованы экспериментальные данные о химических составах  $\gamma$ - твердых растворов исследованных литейных ЖНС, а также результаты расчетных данных, полученных методом CALPHAD (JMatPro) [15–17].

Анализ результатов состава  $\gamma$ - твердых растворов для исследованных литейных ЖНС, полученных CALPHAD-методом, в сравнении с экспериментальными данными для этих же сплавов показал, что расчетные данные хорошо согласуются с результатами экспериментов, имеют высокую достоверность и могут использоваться для прогнозирующих расчетов параметров структур-

ной стабильности  $\bar{N}_{\gamma}$  и  $\bar{M}d_{\gamma}$  традиционными методами PHACOMP [8] и New PHACOMP [9] с их известными регрессионными уравнениями (РУ).

Расчетные исследования показали принципиальную возможность использования метода CALPHAD (JMatPro) [15, 16] для расчета составов  $\gamma$ - твердого раствора (ат., %) на основе химического состава сплава, с последующим использованием этих данных для расчета параметров структурной стабильности  $\bar{N}_{\gamma}$  – фактора, параметров  $\bar{M}d_{\gamma}$  и  $\bar{M}d_c$ , а также параметра  $\Delta E$  дисбаланса системы легирования [2, 10, 11], что определяет вероятность выделения типа ТПУ- фаз в структуре литейных ЖНС.

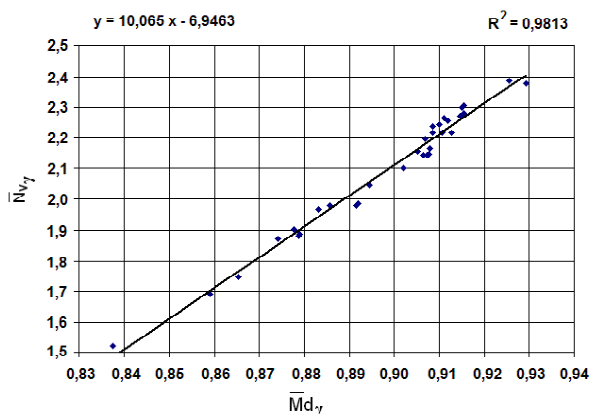
На рисунке 1 приведены расчетные значения параметров структурной стабильности  $\bar{N}_{\gamma}$  и  $\bar{M}d_{\gamma}$  (точки) вместе с аппроксимирующей прямой. Из рисунка видно, что при расчете структурной стабильности широкого ряда литейных ЖНС мето-

Таблица 1 – Исследованные литейные ЖНС [1–8, 19–21]

| Марка сплава    | Содержание легирующих элементов, % по массе |      |      |      |     |      |      |      |      |       |      |     |     |       |       |  |
|-----------------|---|------|------|------|-----|------|------|------|------|-------|------|-----|-----|-------|-------|--|
|                 | C   | Cr   | Co   | Al   | Ti  | Mo   | W    | Nb   | Ta   | Hf    | V    | Re  | Ru  | Zr    | B     |  |
| TMS-71          | -   | 6,0  | 6,0  | 5,7  | -   | 6,4  | -    | -    | 8,4  | -     | -    | 2,5 | -   | -     | -     |  |
| ЗМІ-ЗУ [19]     | 0,12  | 13,3 | 5,0  | 3,4  | 4,8 | 0,9  | 7,3  | -    | -    | -     | -    | -   | -   | -     | 0,015 |  |
| CMSX-10         | -   | 2,0  | 3,0  | 5,7  | 0,2 | 0,4  | 5,0  | 0,1  | 8,0  | 0,03  | -    | 6,0 | -   | -     | -     |  |
| ЖС32            | 0,15  | 5,0  | 9,0  | 6,0  | -   | 1,0  | 8,3  | 1,5  | 4,0  | -     | -    | 4,0 | -   | -     | 0,015 |  |
| ЖС6К            | 0,18  | 10,6 | 4,5  | 5,7  | 2,8 | 4,0  | 5,1  | -    | -    | -     | -    | -   | -   | 0,04  | 0,015 |  |
| ЖС6У            | 0,16  | 8,8  | 9,8  | 5,6  | 2,4 | 1,8  | 10,3 | 1,0  | -    | -     | -    | -   | -   | 0,04  | 0,025 |  |
| ЖС26            | 0,15  | 4,9  | 9,0  | 5,9  | 1,0 | 1,1  | 11,7 | 1,6  | -    | -     | 1,0  | -   | -   | -     | 0,015 |  |
| *ЗМІ-ЗУ-М1 [20] | 0,06  | 11,5 | 5,0  | 3,6  | 4,5 | 0,8  | 7,0  | -    | 4,0  | -     | -    | -   | -   | -     | 0,010 |  |
| ЧС70            | 0,09  | 15,8 | 10,7 | 2,8  | 4,6 | 2,0  | 5,5  | 0,2  | -    | -     | -    | -   | -   | 0,050 | 0,020 |  |
| ВЖМ-1           | -   | 2,5  | 11,0 | 5,8  | -   | 2,0  | 1,3  | -    | 8,8  | -     | -    | 9,0 | -   | -     | -     |  |
| ВЖМ-4           | 0,008                                       | 2,5  | 6,0  | 6,0  | -   | 4,0  | 4,0  | -    | 4,5  | -     | -    | 6,5 | 4,0 | -     | 0,004 |  |
| ЖС3ЛС           | 0,09  | 16,0 | 5,0  | 2,7  | 2,7 | 4,0  | 4,0  | -    | -    | -     | -    | -   | -   | 0,015 | 0,015 |  |
| *ЖС3ЛС-М [21]   | 0,10  | 14,5 | 4,5  | 3,0  | 3,0 | 2,0  | 6,5  | -    | 2,5  | 0,3   | -    | -   | -   | 0,015 | 0,015 |  |
| ЖС32Е           | 0,07  | 5,0  | 5,5  | 6,0  | -   | 0,6  | 6,7  | 0,8  | 8,0  | -     | -    | 2,0 | -   | 0,025 | 0,010 |  |
| ВЖЛ12Е          | 0,18  | 9,4  | 9,0  | 5,4  | 4,5 | 3,1  | 1,4  | 0,75 | -    | -     | 0,75 | -   | -   | 0,020 | 0,011 |  |
| CMSX-4          | -   | 6,5  | 9,0  | 5,6  | 1,0 | 0,6  | 6,0  | -    | 6,5  | 0,10  | -    | 3,0 | -   | -     | -     |  |
| IN-939          | 0,15  | 22,5 | 19,0 | 1,9  | 3,7 | -    | 2,0  | 1,0  | 1,4  | -     | -    | -   | -   | 0,100 | 0,010 |  |
| GTD-111         | 0,10  | 14,0 | 9,5  | 3,0  | 5,0 | 1,5  | 4,0  | -    | 3,0  | 0,15  | -    | -   | -   | 0,030 | 0,010 |  |
| IN-738          | 0,10  | 16,0 | 8,5  | 3,4  | 3,4 | 1,75 | 2,6  | 0,9  | 1,75 | -     | -    | -   | -   | 0,050 | 0,010 |  |
| U-500           | 0,07  | 18,0 | 19,0 | 3,0  | 3,0 | 4,2  | -    | -    | -    | -     | -    | -   | -   | 0,05  | 0,007 |  |
| U-700           | 0,06  | 15,5 | 17,0 | 4,7  | 3,5 | 5,0  | -    | -    | -    | -     | -    | -   | -   | 0,02  | 0,030 |  |
| Rene N5         | 0,05  | 7,0  | 7,5  | 6,2  | -   | 1,5  | 5,0  | -    | 6,6  | 0,15  | -    | 3,0 | -   | -     | 0,004 |  |
| Rene N6         | 0,05  | 4,2  | 12,5 | 5,75 | -   | 1,4  | 6,0  | -    | 7,2  | 0,15  | -    | 5,4 | -   | -     | 0,004 |  |
| CM186LC         | 0,07  | 6,0  | 9,0  | 5,7  | 0,7 | 0,5  | 8,0  | -    | 3,0  | 1,4   | -    | 3,0 | -   | 0,005 | 0,015 |  |
| CM247LC         | 0,07  | 8,1  | 9,2  | 5,6  | 0,7 | 0,5  | 9,5  | -    | 3,2  | 1,4   | -    | -   | -   | 0,015 | 0,015 |  |
| Rene 80         | 0,17  | 14,0 | 9,5  | 3,0  | 5,0 | 4,0  | 4,0  | -    | -    | -     | -    | -   | -   | 0,030 | 0,015 |  |
| PWA1422         | 0,14  | 9,0  | 10,0 | 5,0  | 2,0 | -    | 12   | 1,0  | -    | 1,5   | -    | -   | -   | 0,050 | 0,015 |  |
| PWA1480         | -   | 10   | 5,0  | 5,0  | 1,5 | -    | 4,0  | -    | 12,0 | -     | -    | -   | -   | -     | -     |  |
| ЖСКС-1          | 0,10  | 14,0 | 9,0  | 4,0  | 4,0 | 2,0  | 4,0  | 1,0  | 0,5  | -     | -    | -   | -   | -     | 0,015 |  |
| ЖСКС-2          | -   | 13,5 | 9,5  | 4,1  | 3,8 | 2,0  | 4,1  | -    | 2,0  | -     | -    | 1,0 | -   | -     | -     |  |
| CMSX-11B        | 0,002                                       | 12,5 | 7,0  | 3,6  | 4,2 | 0,5  | 5,6  | 0,01 | 5,0  | 0,004 | -    | -   | -   | 0,001 | 0,002 |  |
| CMSX-11C        | 0,002                                       | 14,9 | 3,0  | 3,4  | 4,2 | 0,4  | 4,5  | 0,01 | 5,0  | 0,004 | -    | -   | -   | 0,001 | 0,002 |  |
| TMS-162         | -   | 2,9  | 5,8  | 5,8  | -   | 3,9  | 5,8  | -    | 5,6  | 0,09  | -    | 4,9 | 6,0 | -     | -     |  |
| TMS-196         | -   | 4,6  | 5,6  | 5,6  | -   | 2,4  | 5,0  | -    | 5,6  | 0,10  | -    | 6,4 | 5,0 | -     | -     |  |

\* – сплавы, разработанные в ЗНТУ кафедрой «Физическое материаловедение»

дами PHASOMP и New PHASOMP, для  $\gamma$ -твердого раствора критическое значение параметра  $\bar{N}_{V\gamma}$  не должно превышать величину  $\leq 2,40$ , а критическое значение параметра  $\bar{M}d_\gamma$  не должно превышать величину  $\leq 0,93$ .



**Рис. 1.** Корреляционная связь между параметрами структурной стабильности  $\bar{M}d_\gamma$  (New PHASOMP) [9] и  $\bar{N}_{V\gamma}$  (PHASOMP) [8] для исследованных литейных ЖНС

Сопоставление традиционных расчетных методик PHASOMP [8] и New PHASOMP [9] позволило установить зависимость между параметрами  $\bar{M}d_\gamma$  и  $\bar{N}_{V\gamma}$ , в расчете которых используются химические составы  $\gamma$ -твердых растворов. Зависимость между вышеупомянутыми параметрами оптимально аппроксимируется полиномом первой степени (линейной функцией). При этом математическая регрессионная модель  $\bar{N}_{V\gamma} = 10,065 \cdot (\bar{M}d_\gamma) - 6,9463$  имеет высокий коэффициент детерминированности ( $R^2 = 0,9813$ ), что позволяет сделать вывод о принципиальной эквивалентности этих методик при расчете данных параметров, а также о возможности достоверного прогнозирования значений параметров одной методики, опираясь на известные значения другой (см. рис. 1).

При этом, следует отметить, что химические составы  $\gamma$ -твердых растворов, которые рассчитаны методом CALPHAD (JMatPro) [15–17] для комнатной температуры 20 °С, отличаются от составов  $\gamma$ -твердых растворов, рассчитанных для температуры 800 °С. Особенно эта разница наблюдается для  $\gamma$ -твердых растворов по содержанию таких элементов как Al и Ti, которые имеют наибольшие коэффициенты (7,66 и 6,66) в регрессионном уравнении метода PHASOMP [8].

Таким образом, если проводить расчет пара-

метра  $\bar{N}_{V\gamma}$  традиционным методом PHASOMP по составу  $\gamma$ -твердого раствора для 20 °С, где не учитывается содержание Al и Ti в составе  $\gamma$ -твердого раствора, то значения параметра  $\bar{N}_{V\gamma}$  будут занижены. В дальнейшем этот недостаток метода PHASOMP [8] привел к разработке модернизированного метода – New PHASOMP [9].

Следует отметить, что ранее полученная математическая регрессионная модель, которая аппроксимировала зависимость между параметрами  $\bar{N}_{V\gamma}$  и  $\bar{M}d_\gamma$ , рассчитанных по составу  $\gamma$ -твердых растворов для 20 °С, показала более низкий коэффициент детерминированности ( $R^2 = 0,7806$ ).

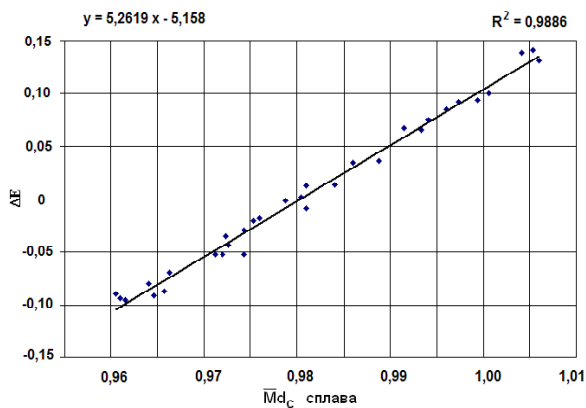
Поэтому, расчеты параметров  $\bar{N}_{V\gamma}$  и  $\bar{M}d_\gamma$  необходимо было скорректировать с учетом вышеуказанных поправок для составов  $\gamma$ -твердых растворов, рассчитанных для температуры 800 °С.

В результате была достигнута более тесная корреляция и полученная новая математическая регрессионная модель заметно улучшила свою аппроксимирующую способность за счет повышения коэффициента детерминированности с ( $R^2 = 0,7806$ ) до ( $R^2 = 0,9813$ ). В результате проведенных расчетных исследований была установлена взаимосвязь и согласованы между собой методы PHASOMP [8] и New PHASOMP [9].

Сопоставление метода New PHASOMP [9] и  $\Delta E$ -метода [2, 10, 11] позволило установить тесную корреляционную связь между параметрами структурной стабильности  $\Delta E$  и  $\bar{M}d_c$ , рассчитанных на основе химических составов исследованных литейных ЖНС.

На рисунке 2 представлены расчетные значения параметров структурной стабильности  $\bar{M}d_c$  и  $\Delta E$  для исследованных литейных ЖНС (точки) вместе с аппроксимирующей прямой.

Из рисунка 2 видно, что зависимость между вышеуказанными параметрами исследованных литейных ЖНС оптимально аппроксимируется линейной функцией. При этом математическая регрессионная модель  $\Delta E = 5,2619 \cdot (\bar{M}d_c) - 5,158$  имеет высокий коэффициент детерминированности ( $R^2 = 0,9886$ ), что позволяет сделать вывод о принципиальной эквивалентности применяемых методик для расчета данных параметров, а также о возможности достоверного прогнозирования значений параметров одной методики, опираясь на известные значения другой.



**Рис. 2.** Корреляционная связь между параметрами структурной стабильности  $\bar{M}d_c$  (New PHASOMP) [9] и  $\Delta E$  ( $\Delta E$ - метод) [2, 10, 11] для исследованных литейных ЖНС

Расчетные исследования  $\Delta E$ - методом [2, 10, 11] литейных ЖНС показали, что при расчете параметра дисбаланса системы легирования сплавов, значения параметра  $\Delta E$  для сбалансированных составов должно находиться в пределах от  $-0,04$  до  $+0,04$ , т. е.  $\Delta E = \pm 0,04$ . Исходя из этого следует, что значения параметра  $\bar{M}d_c$  для литейных ЖНС с учетом сбалансированного легирования составов должны находиться в пределах  $\bar{M}d_c = 0,980 \pm 0,008$  (см. рис. 2), т. е. в диапазоне от 0,972 до 0,988.

Поскольку параметры структурной стабильности  $\bar{M}d_\gamma$  и  $\bar{N}_{V\gamma}$  для литейных ЖНС рассчитывались по составам их  $\gamma$ - твердых растворов, была установлена тесная взаимосвязь между традиционными методами PHASOMP [8] и New PHASOMP [9]. Также была установлена тесная взаимосвязь между параметрами структурной стабильности  $\Delta E$  и  $\bar{M}d_c$ , которые рассчитывались  $\Delta E$ - методом [2, 10, 11] и New PHASOMP [9] по химическому составу литейных ЖНС.

В таблице 2 показано, что комплексный подход и сопоставление параметров  $\bar{N}_{V\gamma}$ ,  $\bar{M}d_\gamma$ ,  $\bar{M}d_c$  и  $\Delta E$  позволил более объективно и надежно прогнозировать параметры структурной стабильности в отношении склонности литейных ЖНС к выделению в структуре вредных ТПУ- фаз различного типа ( $\sigma$ -,  $\mu$ -,  $\eta$ -,  $p$ -).

Были проведены дополнительные расчетные исследования для установления взаимосвязи между химическим составом  $\gamma$ - твердого раствора литейных ЖНС с величинами параметров струк-

турной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$  и  $\bar{M}d_\gamma$ , а также взаимосвязи между величинами параметров  $\bar{M}d_c$  и  $\Delta E$  с характером легирования сплавов данного класса.

Цель исследований – получение универсальных прогнозирующих математических регрессионных моделей для расчета параметров структурной стабильности на основе математической обработки массива данных расчетной статистики для исследованных литейных ЖНС.

С целью получения универсальных математических регрессионных моделей (PM) для статистического анализа данных по параметрам структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$ ,  $\bar{M}d_\gamma$ ,  $\bar{M}d_c$  и  $\Delta E$  использовался метод наименьших квадратов (МНК), который входит в стандартный пакет MS EXCEL [18] программного комплекса Microsoft Office, с построением графиков (линий трендов). Данный подход позволил получить ряд универсальных аппроксимирующих зависимостей типа:  $\bar{N}_{V\gamma} = f(\Pi_{ТПУ})$ ,  $\bar{M}d_\gamma = f(\bar{N}_{V\gamma})$ ,  $\bar{M}d_c = f(\Delta E)$  для прогнозирующих расчетов параметров структурной стабильности литейных ЖНС по величине параметра  $\Pi_{ТПУ} = Cr / (Cr+Mo+W)$ , соотношения элементов в составе литейных ЖНС, и величине параметра  $\Delta E$ .

На рисунках 3–5 и в таблице 3 представлены полученные универсальные математические PM для расчета параметров структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$ ,  $\bar{M}d_\gamma$  по величине соотношения элементов  $\Pi_{ТПУ} = Cr / (Cr+Mo+W)$  в составе литейных ЖНС, а также параметра  $\bar{M}d_c$  по величине  $\Delta E$  дисбаланса системы легирования сплава. Расчеты проводились в атомн. %.

На основании результатов математической обработки данных химических составов  $\gamma$ - твердых растворов исследованных литейных ЖНС с последующим расчетом параметров структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$ ,  $\bar{M}d_\gamma$  традиционными методами PHASOMP [8] и New PHASOMP [9], были получены универсальные математические PM, которые учитывают скорректированный расчет параметров структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$ ,  $\bar{M}d_\gamma$  по химическому составу - твердых растворов при температуре 800 °С, а не 20 °С, как принято в традиционных методиках, в зависимости от величины параметра  $\Pi_{ТПУ} = Cr / (Cr+Mo+W)$ , соотношения элементов в составе литейных ЖНС (см. рис. 3, 4, табл. 3).

**Таблица 2** – Параметры структурной стабильности литейных ЖНС, рассчитанные по регрессионным уравнениям традиционных методик [1, 2, 8–11]

| Марка сплава    | Параметры стабильности, рассчитанные по РУ, ат.% |             |        |                           |
|-----------------|--|-------------|--------|---------------------------|
|                 | $N_V \gamma$                                     | $Md \gamma$ | $Md_C$ | $\Delta E$ [1, 2, 10, 11] |
| TMS-71          | 1,9362   | 0,8918      | 0,9804 | + 0,0017                  |
| ЗМИ-3У          | 2,1431   | 0,9065      | 0,9833 | + 0,0362                  |
| CMSX-10         | 1,6907   | 0,8590      | 0,9616 | + 0,1180                  |
| ЖС-32           | 1,6508   | 0,8676      | 0,9915 | - 0,0865                  |
| ЖС6К            | 2,1464   | 0,9127      | 0,9941 | - 0,0280                  |
| ЖС6У            | 2,0470   | 0,9077      | 0,9994 | - 0,0935                  |
| ЖС26            | 1,7340   | 0,8743      | 0,9641 | +0,0064                   |
| *ЗМИ-3У-М1 [20] | 2,2159   | 0,9106      | 0,9720 | -0,0410                   |
| ЧС-70           | 2,2787   | 0,9192      | 0,9818 | - 0,0344                  |
| ВЖМ-1           | 1,7481   | 0,8654      | 0,9727 | - 0,0429                  |
| ВЖМ-4           | 1,5980   | 0,8778      | 0,9743 | - 0,0296                  |
| ЖС3ЛС           | 2,1542   | 0,9053      | 0,9464 | +0,1316                   |
| *ЖС3ЛС-М [21]   | 2,1435   | 0,9072      | 0,9705 | + 0,0123                  |
| ЖС32Э           | 1,8799   | 0,8788      | 0,9761 | - 0,0180                  |
| ВЖЛ-12Э         | 2,2282   | 0,8915      | 0,9841 | + 0,0130                  |
| CMSX-4          | 1,9668   | 0,8831      | 0,9843 | - 0,0520                  |
| IN-939          | 2,3872   | 0,9254      | 0,9657 | - 0,0873                  |
| GTD-111         | 2,2648   | 0,9110      | 0,9724 | - 0,0349                  |
| IN-738LC        | 2,3782   | 0,9086      | 0,9788 | +0,0020                   |
| U-500           | 2,3727   | 0,9068      | 0,9605 | - 0,0124                  |
| U-700           | 2,3165   | 0,9118      | 0,9600 | - 0,1103                  |
| Rene N5         | 1,9775   | 0,8856      | 0,9712 | - 0,0800                  |
| Rene N6         | 1,8719   | 0,8741      | 0,9646 | - 0,0909                  |
| CM186LC         | 1,8877   | 0,8789      | 0,9753 | -0,0180                   |
| CM247LC         | 2,0992   | 0,9061      | 0,9663 | - 0,0695                  |
| Rene 80         | 2,2166   | 0,9086      | 0,9780 | - 0,0086                  |
| PWA 1422        | 2,0645   | 0,9080      | 0,9540 | - 0,1349                  |
| PWA 1480        | 2,3059   | 0,9154      | 0,9520 | - 0,1409                  |
| ЖСКС-1          | 2,2982   | 0,9149      | 0,9730 | - 0,0391                  |
| ЖСКС-2          | 2,2445   | 0,9100      | 0,9542 | - 0,1384                  |
| CMSX-11B        | 2,3102   | 0,9145      | 0,9666 | -0,0735                   |
| CMSX-11C        | 2,2801   | 0,9155      | 0,9680 | - 0,0621                  |
| TMS-162         | 1,8267   | 0,8873      | 0,9899 | - 0,1589                  |
| TMS-196         | 1,8774   | 0,8862      | 0,9813 | - 0,1333                  |

\*- сплавы, разработанные в ЗНТУ на кафедре «Физическое материаловедение»

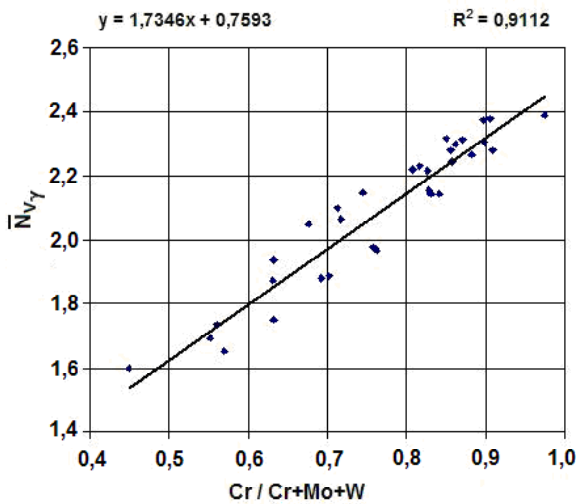


Рис. 3. Корреляционная связь между параметром структурной стабильности  $P_{ТПУ} = Cr / (Cr+Mo+W)$  и величиной  $\bar{N}_{v\gamma}$  – фактора

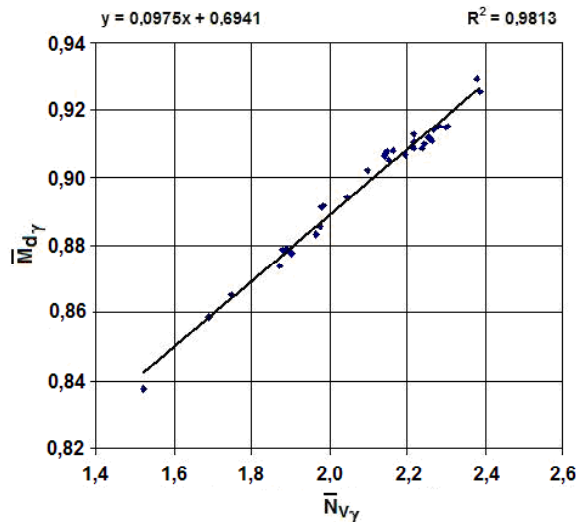


Рис. 4. Корреляционная связь между параметрами структурной стабильности  $\bar{N}_{v\gamma}$  и  $\bar{M}d_{\gamma}$  для литейных ЖНС

После обработки данных по параметру  $\Delta E$  дисбаланса системы легирования исследованных литейных ЖНС известным  $\Delta E$ - методом (ВИАМ) [2, 10, 11], была установлена корреляционная зависимость между параметрами структур-

ной стабильности  $\bar{M}d_c$  и  $\Delta E$  дисбаланса системы легирования и получена универсальная математическая РМ для расчета параметра структурной стабильности сплавов  $\bar{M}d_c$  по величине параметра  $\Delta E$  (рис. 5, табл. 3).

На рисунках 3–5 и в таблицах 2–4 показано, что между параметрами структурной стабильности  $\bar{N}_{v\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$  и величиной параметра  $P_{ТПУ} = Cr / (Cr+Mo+W)$ , соотношения элементов в составе литейных ЖНС, существует тесная взаимосвязь. Также установлена тесная взаимосвязь между параметром  $\bar{M}d_c$  и величиной параметра  $\Delta E$ , дисбаланса системы легирования литейных ЖНС, что оптимально аппроксимируются линейными функциями, имеющие общий вид:  $y = ax+b$ .

В качестве примера в таблице 5 представлены сравнительные результаты расчетов параметров структурной стабильности для известного промышленного сплава ЗМИ-3У [19], рассчитанные по полученным математическим РМ, в сравнении с результатами расчетов по известным регрессионным уравнениям традиционных методов РНАСОМР [8], New РНАСОМР [9]  $\Delta E$  - метода [2, 10, 11].

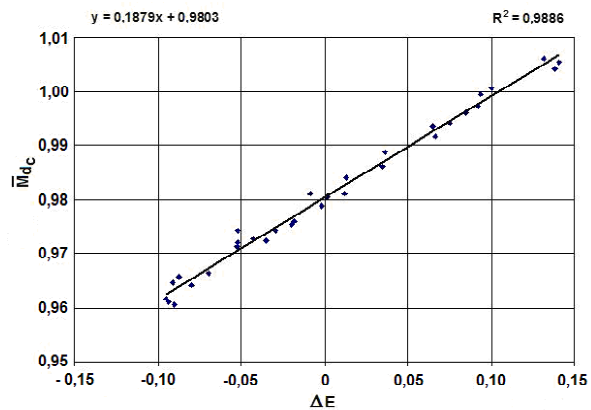


Рис. 5. Корреляционная зависимость параметра структурной стабильности  $\bar{M}d_c$  от величины параметра  $\Delta E$  дисбаланса системы легирования литейных ЖНС

Таблица 3 – Математические регрессионные модели для расчета параметров структурной стабильности литейных ЖНС

| Расчетный параметр     | Условия стабильности | $R^2$  | Вид регрессионных моделей   |
|------------------------|----------------------|--------|---|
| $P_{ТПУ}$              | -                    |        | $P_{ТПУ} = Cr / (Cr + Mo + W)$ , % ат.                                      |
| $\bar{N}_{v\gamma}$    | $\leq 2,40$          | 0,9112 | $\bar{N}_{v\gamma} = 1,7346 \cdot (P_{ТПУ}) + 0,7593$                       |
| $\bar{M}d_{\gamma}$    | $\leq 0,93$          | 0,9813 | $\bar{M}d_{\gamma} = 0,0975 \cdot (N_{v\gamma}) + 0,6941$                   |
| $\Delta E$ [2, 10, 11] | $0,00 \pm 0,04$      | -      | $\Delta E = \Sigma E_i \cdot C_i - 0,036 \cdot \Sigma A_i \cdot C_i - 6,28$ |
| $\bar{M}d_c$           | $0,980 \pm 0,008$    | 0,9886 | $\bar{M}d_c = 0,1879 \cdot (\Delta E) + 0,9803$                             |

**Таблица 4** – Значения параметров структурной стабильности исследованных литейных ЖНС, рассчитанных по полученным РМ

| Марка сплава    | Параметры, рассчитанные по математическим РМ, ат.%                  |               |               |        |                           |
|-----------------|---|---------------|---------------|--------|---------------------------|
|                 | $\Pi_{\text{ПЛУ}} = \text{Cr} / (\text{Cr} + \text{Mo} + \text{W})$ | $N_{V\gamma}$ | $Md_{\gamma}$ | $Md_c$ | $\Delta E$ [1, 2, 10, 11] |
| TMS-71          | 0,6336  | 1,8583        | 0,8753        | 0,9806 | + 0,0017                  |
| ЗМИ-3У          | 0,8421  | 2,2200        | 0,9106        | 0,9871 | + 0,0362                  |
| CMSX-10         | 0,5507  | 1,7145        | 0,8613        | 1,0024 | + 0,1180                  |
| ЖС-32           | 0,6228  | 1,8396        | 0,8746        | 0,9518 | - 0,1519                  |
| ЖС6К            | 0,7459  | 2,0531        | 0,8943        | 0,9750 | - 0,0280                  |
| ЖС6У            | 0,7072  | 1,9860        | 0,8877        | 0,9627 | - 0,0936                  |
| ЖС26            | 0,5614  | 1,7331        | 0,8631        | 0,9815 | +0,0064                   |
| *ЗМИ-3У-М1 [20] | 0,8265  | 2,1929        | 0,9079        | 0,9728 | -0,0400                   |
| ЧС-70           | 0,8779  | 2,2821        | 0,9166        | 0,9738 | - 0,0344                  |
| ВЖМ-1           | 0,6326  | 1,8566        | 0,8751        | 0,9722 | - 0,0429                  |
| ВЖМ-4           | 0,4501  | 1,5400        | 0,8442        | 0,9747 | - 0,0296                  |
| ЖС3ЛС           | 0,8254  | 2,1919        | 0,9077        | 1,0027 | +0,1192                   |
| *ЖС3ЛС-М [21]   | 0,8323  | 2,2030        | 0,9089        | 0,9826 | + 0,0123                  |
| ЖС32Э           | 0,6925  | 1,9605        | 0,8852        | 0,9769 | - 0,0180                  |
| ВЖЛ-12Э         | 0,7900  | 2,1296        | 0,9017        | 0,9827 | + 0,0130                  |
| CMSX-4          | 0,7528  | 2,0617        | 0,8951        | 0,9705 | - 0,0520                  |
| IN-939          | 0,9750  | 2,4505        | 0,9330        | 0,9639 | - 0,0873                  |
| GTD-111         | 0,8827  | 2,2904        | 0,9174        | 0,9737 | - 0,0349                  |
| IN-738LC        | 0,9062  | 2,3312        | 0,9214        | 0,9803 | +0,0002                   |
| U-500           | 0,8976  | 2,3163        | 0,9199        | 0,9780 | - 0,0124                  |
| U-700           | 0,8512  | 2,2358        | 0,9121        | 0,9596 | - 0,1103                  |
| Rene N5         | 0,7370  | 2,0377        | 0,8928        | 0,9704 | - 0,0525                  |
| Rene N6         | 0,6310  | 1,8538        | 0,8748        | 0,9632 | - 0,0909                  |
| CM186LC         | 0,7031  | 1,9789        | 0,8870        | 0,9784 | -0,0100                   |
| CM247LC         | 0,7138  | 1,9975        | 0,8889        | 0,9672 | - 0,0695                  |
| Rene 80         | 0,8092  | 2,1629        | 0,9050        | 0,9787 | - 0,0086                  |
| PWA 1422        | 0,7180  | 2,0047        | 0,8896        | 0,9549 | - 0,1349                  |
| PWA 1480        | 0,8984  | 2,3177        | 0,9201        | 0,9538 | - 0,1409                  |
| ЖСКС-1          | 0,8634  | 2,2570        | 0,9142        | 0,9730 | - 0,0391                  |
| ЖСКС-2          | 0,8575  | 2,2467        | 0,9132        | 0,9543 | - 0,1384                  |
| CMSX-11B        | 0,8708  | 2,2698        | 0,9154        | 0,9665 | -0,0735                   |
| CMSX-11C        | 0,9091  | 2,3362        | 0,9219        | 0,9686 | - 0,0621                  |
| TMS-162         | 0,4441  | 1,5296        | 0,8432        | 0,9504 | - 0,1589                  |
| TMS-196         | 0,6288  | 1,8500        | 0,8745        | 0,9553 | - 0,1333                  |

**Таблица 5** – Сравнительные значения параметров структурной стабильности для известного промышленного сплава ЗМИ-3У [19]

| Сплав<br>ЗМИ-3У [19]                | Параметры структурной стабильности |               |               |            |        |
|-------------------------------------|------------------------------------|---------------|---------------|------------|--------|
|                                     | $\Pi_{\text{ПЛУ}}$                 | $N_{V\gamma}$ | $Md_{\gamma}$ | $\Delta E$ | $Md_c$ |
| PHASOMP [8] по РУ                   | -                                  | 2,1431        | -             | -          | -      |
| New PHASOMP [9] по РУ               | -                                  | -             | 0,9065        | -          | 0,9833 |
| $\Delta E$ -метод [2, 10, 11] по РУ | -                                  | -             | -             | +0,0362    | -      |
| Расчет по РМ                        | 0,8421                             | 2,2200        | 0,9106        | -          | 0,9871 |

Сравнительный анализ результатов расчета параметров структурной стабильности для сплава ЗМИ-3У (табл. 2–4) показал, что полученные математические РМ можно с высокой степенью достоверности использовать для прогнозирующих расчетов параметров  $\bar{N}_{V\gamma}$  и  $\bar{M}d_{\gamma}$  вместо традиционных регрессионных уравнений (РУ) известных методик PHASOMP и New PHASOMP.

Показана возможность применения  $\Delta E$ - метода для более точного расчета параметра  $\bar{M}d_c$ , вместо метода New PHASOMP.

На рисунке 6 представлены результаты расчетов параметров структурной стабильности исследованных литейных ЖНС, рассчитанных по полученным математическим регрессионным мо-

делям (см. табл. 3). Из рисунка видно, что при совмещении шкал традиционных методик PHASOMP и New PHASOMP совпадают значения для  $\bar{N}_{V\gamma} = 2,40$  и  $\bar{M}d_{\gamma} = 0,93$ , а также совпадают значения для  $\Delta E = 0,00$  и  $\bar{M}d_c = 0,98$  при совмещении шкал  $\Delta E$  - метода и New PHASOMP.

Таким образом, представленные на рисунке 6 комплексные расчетные исследования учитывают принципы сбалансированного легирования составов литейных ЖНС, что позволило скорректировать условия структурной стабильности для литейных ЖНС по параметрам:  $\bar{N}_{V\gamma} \leq 2,40$ ;  $\bar{M}d_{\gamma} \leq 0,93$ ;  $-0,04 \leq \Delta E \leq 0,04$ ;  $0,972 \leq \bar{M}d_c \leq 0,988$ .

Комплексные расчетные исследования показали взаимосвязь данных методик и их принципиальную эквивалентность, что значительно расширило возможности для более объективной и достоверной оценки при прогнозировании параметров структурной стабильности литейных ЖНС.

**Выводы**

1. Сравнительный анализ расчетных данных, полученных методом CALPHAD (JMatPro) по составам  $\gamma$ - твердых растворов, показал возможность использования данных для прогнозирующих расчетов параметров фазовой стабильности литейных ЖНС.

2. Установлена тесная корреляционная связь между соотношением  $\Pi_{ТПУ} = Cr / (Cr+Mo+W)$  и  $\bar{N}_{V\gamma}$  - фактором, которая оптимально аппроксимируется математической моделью  $\bar{N}_{V\gamma} = 1,7346 (\Pi_{ТПУ}) + 0,7593$  с высоким коэффициентом детерминированности ( $R^2 = 0,9112$ ).

3. Между параметрами структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$  и  $\bar{M}d_{\gamma}$ , вычисляемыми по химическому составу  $\gamma$  - твердого раствора показана тесная корреляционная связь, которая оптимальным образом аппроксимируется математической моделью  $\bar{M}d_{\gamma} = 0,0975 \cdot (\bar{N}_{V\gamma}) + 0,6941$  с высоким коэффициентом детерминированности ( $R^2 = 0,9813$ ).

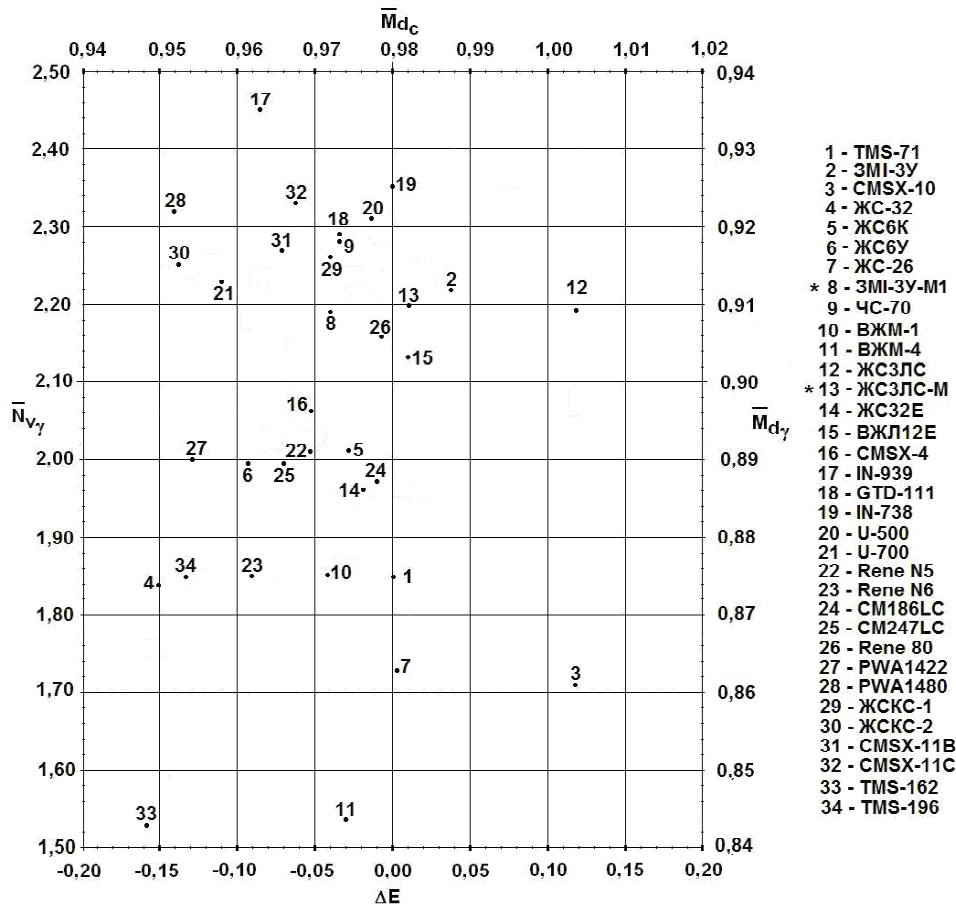


Рис. 6. Значения параметров структурной стабильности  $\bar{N}_{V\gamma}$  -  $\bar{M}d_{\gamma}$ ,  $\Delta E$  -  $\bar{M}d_c$  для литейных ЖНС, рассчитанных по полученным РМ и совмещенных на шкалах традиционных методик PHASOMP, New PHASOMP и  $\Delta E$  - метода



4. Между параметрами структурной стабильности  $\overline{Md}_c$  и  $\Delta E$ , вычисляемыми по химическому составу сплава, также установлена тесная корреляционная связь, которая оптимально аппроксимируется математической моделью  $\overline{Md}_c = 0,1879 \cdot (\Delta E) + 0,9803$  с высоким коэффициентом детерминированности ( $R^2 = 0,9886$ ).

5. Полученные универсальные математические РМ позволяют с высокой степенью достоверности прогнозировать параметры структурной стабильности  $\overline{N}_{\gamma}$ ,  $\overline{Md}_{\gamma}$ ,  $\overline{Md}_c$  вместо известных регрессионных уравнений традиционных методов PHASOMP и New PHASOMP. Показана возможность применения  $\Delta E$ - метода для расчета параметра  $\overline{Md}_c$  по величине  $\Delta E$  дисбаланса системы легирования литейных ЖНС.

6. Показана взаимосвязь и принципиальная эквивалентность традиционных расчетно-аналитических методов, что позволяет при прогнозировании параметров структурной стабильности литейных ЖНС более достоверно и объективно их оценивать.

#### Список литературы

1. Каблов Е. Н. Литейные жаропрочные сплавы. Эффект С.Т. Кишкина : науч.-техн. сб.: к 100-летию со дня рождения С. Т. Кишкина / Под общ. ред. Е. Н. Каблова. – М. : Наука, 2006. – 272 с.
2. Каблов Е. Н. 75 лет. Авиационные материалы. Избранные труды «ВИАМ» 1932-2007. / Юбилейный научно-технический сборник под общ. ред. Е. Н. Каблова. – М. : «ВИАМ», 2007. – 439 с.
3. Кишкин С. Т. Литейные жаропрочные сплавы на никелевой основе / Кишкин С. Т., Строганов Г. Б., Логунов А. В. – М. : Машиностроение, 1987. – 116 с.
4. Жаропрочность литейных никелевых сплавов и защита их от окисления / [Б. Е. Патон, Г. Б. Строганов, С. Т. Кишкин и др.]. – К. : Наук. думка, 1987. – 256 с.
5. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов / Р. Е. Шалин, И. Л. Светлов, Е. Б. Качанов [и др.]. – М. : Машиностроение, 1997. – 336 с.
6. Каблов Е. Н. Литые лопатки газотурбинных двигателей (сплавы, технология, покрытия) / Е. Н. Каблов. – Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов, Государственный научный центр Российской Федерации. – М. : МИСИС, 2001. – 632 с.
7. Жаропрочные сплавы для газовых турбин. Материалы международной конференции / [Д. Котсорадис, П. Феликс, Х. Фишмайстер и др.]; пер. с англ. под ред. Р. Е. Шалина. – М. : Metallurgia, 1981. – 480 с.
8. Симс Ч. Т. Суперсплавы II. Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок / Ч. Т. Симс, Н. С. Столофф, У. К. Хагель; пер. с англ. : в 2-х кн. : под ред. Р. Е. Шалина. – М. : Metallurgia, 1995. – 384 с.
9. New PHASOMP 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.
10. Морозова Г. И. Компенсация дисбаланса легирования жаропрочных никелевых сплавов / Г. И. Морозова // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2012. – № 12. – С. 52–56.
11. Морозова Г. И. Сбалансированное легирование жаропрочных никелевых сплавов / Г. И. Морозова // Металлы. – 1993. – № 1. – С. 38–41.
12. Трофимов Е. А. Анализ методик оптимизации составов жаропрочных сплавов на основе никеля / Е. А. Трофимов, Е. Р. Вахитова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2013. – Т. 13. – №1. – С. 103–107.
13. 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.
14. Морозова Г. И. Закономерность формирования химического состава  $\gamma'/\gamma$ - матрицы многокомпонентных никелевых сплавов / Г. И. Морозова // ДАН СССР. – 1991. – Т. 320. – № 6. – С. 1413–1416.
15. Saunders N. The Application of CALPHAD Calculations to Ni-Based Superalloys / N. Saunders, M. Fahrman, C.J. Small // In «Superalloys 2000» eds. K.A. Green, T.M. Pollock and R.D. Kissinger. – TMS. – Warrendale. – 2000. – P. 803–811.
16. Сидоров А. JMatPro – программный пакет для моделирования свойств сталей и сплавов / А. Сидоров // САПР и графика. Современные технологии – в промышленность. – 2015. – С. 2–4.
17. Сидоров А. JMatPro – программный пакет для моделирования свойств сталей и сплавов / А. Сидоров // САПР и графика. Современные технологии – в промышленность. – 2015. – С. 2–4.17.
18. Семенищенков А. Microsoft Excel. Приемы и методы практического программирования /

- А. Семенищенков. – Брянск: «Злато», 1999. – 305 с.
19. Паспорт на жаропрочный коррозионностойкий никелевый сплав ЗМИ-3У (ХН64ВМКЮТ) / А. Д. Коваль, С. Б. Беликов, А. Г. Андриенко и др.: утв. проректор по научной работе Н.С. Гамов. – Запорожье, 1995. – 30 с.
20. Пат. 77606, Україна, МПК<sup>6</sup> С22С 19/05. Ливарний жароміцний корозійностійкий нікелевий сплав / С.В. Гайдук, А.Г. Андриенко, В. В. Кононов та ін.; заявник і дотримувач Запорізький нац. техн. ун-т. – № а 2005 07748; заявл. 04.08.05; опубл. 15.12.06, Бюл. №12. – 16 с.
21. Пат. 67814, Україна, МПК<sup>6</sup> С22С 19/05. Ливарний жароміцний корозійностійкий нікелевий сплав / С.В. Гайдук, А.Д. Коваль, А.Г. Андриенко, В.В. Кононов та ін.; заявник і дотримувач Запорізький нац. техн. ун-т. – № у 2011 08648; заявл. 11.07.11; опубл. 12.03.12, Бюл. №5. – 6 с.

Поступила в редакцію 14.02.2017

**Гайдук С.В., Кононов В.В. Прогнозування параметрів структурної стабільності ливарних жароміцних нікелевих сплавів**

*Для ливарних жароміцних нікелевих сплавів (ЖНС) з різним типом легування виконано розрахунки методом CALPHAD (JMatPro) хімічних складів  $\gamma$ -твердих розчинів і визначено параметри структурної стабільності  $\bar{N}_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_c$  і  $\Delta E$  традиційними методами PHACOMP, New PHACOMP і  $\Delta E$ -методом. На основі математичної обробки даних отримано універсальні математичні регресійні моделі для прогнозування параметрів структурної стабільності  $\bar{N}_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$  за величиною  $P_{ТПУ} = Cr / (Cr+Mo+W)$ , співвідношення елементів у складі сплаву, і розрахунку параметра  $\bar{M}d_c$  за величиною дисбалансу системи легування  $\Delta E$  ливарних ЖНС, замість відомих методів.*

**Ключові слова:** ливарні жароміцні нікелеві сплави, система легування,  $\gamma$ -твердий розчин параметри структурної стабільності, регресивне рівняння, математична модель.

**Gayduk S., Kononov V. Structural stability parameters forecast for high-temperature nickel-base cast alloys**

*Calculation of  $\gamma$ -solid solution chemical composition has been carried out by CALPHAD (JMatPro) technique and the structural stability parameters  $\bar{N}_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_c$  and  $\Delta E$  have been determined by traditional PHACOMP, New PHACOMP and E techniques for high-temperature nickel-base cast alloys (HTNA) with different type of alloying. On the base of mathematical data processing, instead of the known techniques, there have been obtained universal mathematical regression models for the forecast of the structural stability parameters  $\bar{N}_{\gamma}$ ,  $\bar{M}d_{\gamma}$  by the relation of the elements in chemical composition of the alloys  $P_{TCP} = Cr / (Cr+Mo+W)$ , and for calculation of parameter  $\bar{M}d_c$  unbalance of the alloying system  $\Delta E$  is used.*

**Key words:** high-temperature nickel-base cast alloys,  $\gamma$ -solid solution, structural stability parameters, regression equation, mathematical model.