

Моделирование предела текучести интерметаллидов $Ni_3(Al,Me)$ монокристаллических сплавов лопаток турбин

И.Х. Бадамшин

ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологии» (УУНиТ), г. Уфа, Россия

Аннотация. Для новых материалов характерна ограниченная информация об их свойствах, необходимая в расчетах напряженно-деформированного состояния лопаток турбин. В этих условиях возникает потребность в теоретических методах расчета упругих, теплофизических и прочностных характеристик, основанных на учете сил межатомного взаимодействия, так как классические методы расчета механики деформируемого твердого тела, основанные на гипотезе сплошности среды, не позволяют этого сделать. Приведены результаты расчета температурной зависимости предела текучести интерметаллидов $Ni_3(Al, Me)$ монокристаллических сплавов лопаток турбин.

Ключевые слова: напряженно-деформированное состояние, пределы упругости и текучести, рабочая лопатка турбины, интерметаллид, монокристалл.

badamshin.ih@ugatu.su

Введение

Для новых перспективных материалов объем экспериментальных данных о характеристиках материала ограничен, а статистические данные отсутствуют.

В таких условиях возникает задача моделирования свойств материала на этапе проектирования элементов конструкций. Классические методы расчета механики деформируемого твердого тела, основанные на гипотезе сплошности среды, не позволяют этого сделать.

В этом случае применение разработанной модели поведения материала, учитывающей силы межатомного взаимодействия [1], позволяет сократить объем экспериментов и длительность проверки свойств нового материала. Кроме того, данная модель, дает возможность восполнить нехватку данных в условиях высоких температур, когда эксперимент провести затруднительно.

Постановка задачи

Рабочие лопатки газовых турбин работают при высоких температурах и напряжениях. В результате в них возникают упругие, пластические деформации и ползучесть. Два последних фактора являются повреждающими. Под действием температуры и напряжений плотность дислокаций возрастает, что приводит к образованию дефектов кристаллической решетки.

Движение и накопление дислокаций в жаропрочном сплаве приводит к образованию микротрещины. На Рис. 1 приведены некоторые модели формирования трещин [2].

В частности, по модели Зинера–Стро–Петча (Рис. 1, (а)), «зарождение трещины происходит в результате блокирования краевых дислокаций у препятствий, подобных границам кристаллических зерен, и создания высокой концентрации растягивающих напряжений в головных участках заблокированных полос скольжения» [2].

По безбарьерной модели Баллафа–Гилмана, «микротрещина образуется внутри плоскости скольжения в результате скопления дислокации у препятствия типа границ зерен» (Рис. 1, (б)) [2].

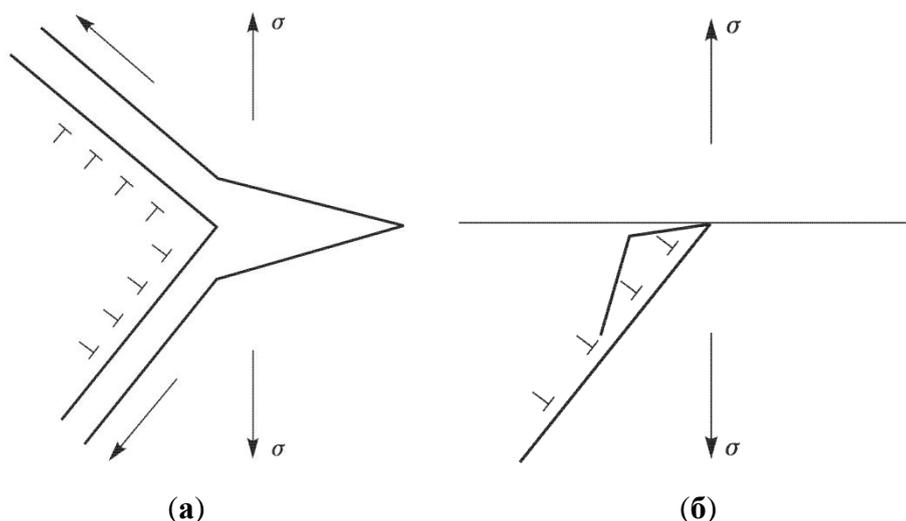


Рисунок 1. Дислокационные модели разрушения:
Зинера-Стро-Петча (а) и Баллафа-Гилмана (б).

Для торможения развития трещины жаропрочные сплавы для рабочих лопаток турбин упрочняются дисперсными частицами – γ' - фазой. Дисперсные частицы этой фазы создают препятствия для движения дислокаций и, следовательно, развитию трещин (ломаные линии на Рис. 2).

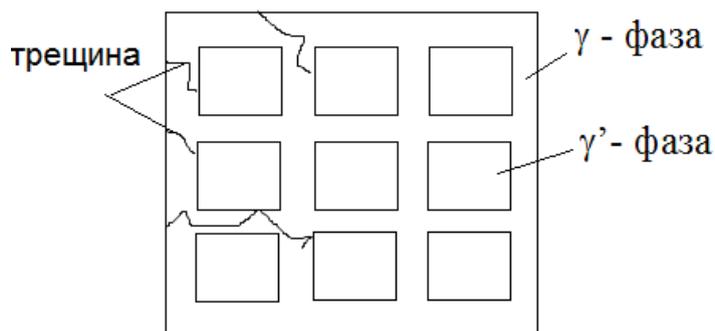


Рисунок 2. Схема дисперсно-упрочненной структуры жаропрочного сплава.

Известно [3], что система легирования и термообработка определяют свойства сплава. В том числе такие, как предел текучести. Последний, свою очередь, определяет характеристики пластической деформации, а следовательно, характеристики ползучести. При этом, чем выше предел текучести, тем выше сопротивление жаропрочного сплава ползучести.

Необходимо отметить, что температурные зависимости пределов текучести и ползучести при некоторой температуре расходятся. Тем больше, чем выше температура. В качестве примера на Рис. 3 [3] приведена температурная зависимость пределов текучести и ползучести сплава ЭИ826.

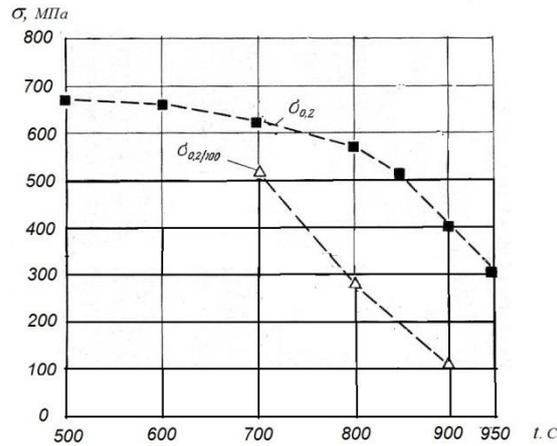


Рисунок 3. Температурная зависимость пределов текучести и ползучести сплава ЭИ826.

Одной из причин развития трещин является малоцикловая усталость. В этом случае применение в модели термоусталости кратковременных характеристик пластичности дает завышенные результаты расчета числа циклов до разрушения (в частности, по модели Мэнсона). Учитывая данное обстоятельство, необходимо оценивать характеристики малоцикловой усталости с учетом деформации ползучести.

При этом необходимо иметь соответствующие диаграммы ползучести для данного материала. Иначе говоря, при использовании деформации ползучести в расчетах малоцикловой усталости учитывается релаксация напряжений с течением времени, а также эффект Баушингера.

В конечном итоге температурная зависимость предела текучести γ' - фазы и твердого раствора является одним из важнейших факторов, определяющих такие характеристики жаропрочного сплава, как:

- технологичность;
- длительная прочность и ползучесть;
- малоцикловая усталость (термоусталость).

В связи с этим возникает задача моделирования температурной зависимости предела текучести жаропрочных сплавов, в частности, γ' - фазы.

Метод решения задачи и результаты

Допущения.

1. Рассматривается бездефектная кристаллическая решетка материала.
2. Природой упругости кристаллической решетки является электростатическое взаимодействие ее зарядов.
3. Рассматривается статическое равновесие сил притяжения и отталкивания в кристаллической решетке.
4. Расчет ведется для элементарной атомной ячейки, свойства которой, в силу симметрии монокристалла, распространяются на макрообъем материала.
5. Анизотропию свойств элементарной атомной ячейки определяют ее наиболее плотноупакованные кристаллографические плоскости и кристаллографические направления, соответствующие этим плоскостям. В частности, для кубической решетки плоскости и направления показаны на Рис. 4.

Таким образом, учитывается анизотропия свойств элементарной атомной ячейки монокристалла.

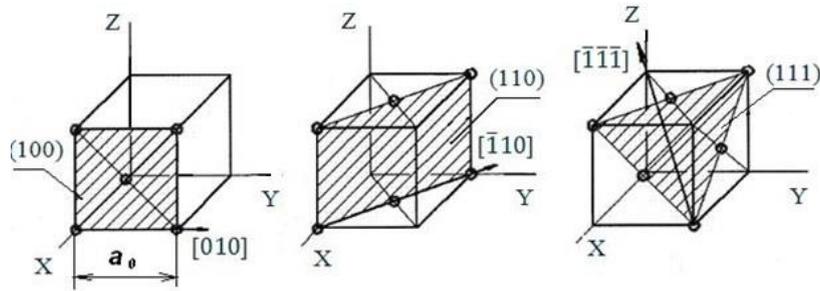


Рисунок 4. Направления и плоскости кристаллической ГЦК-решетки.

6. В монокристаллах пластическая деформация развивается при суммарном местном напряжении, превышающем его предел упругости. Известно [4], что диаграмма «напряжение-деформация» нитевидных монокристаллов имеет «зуб текучести». При этом точка 2 на Рис. 5, (б) соответствует максимальному напряжению или пределу упругости нитевидных монокристаллов.

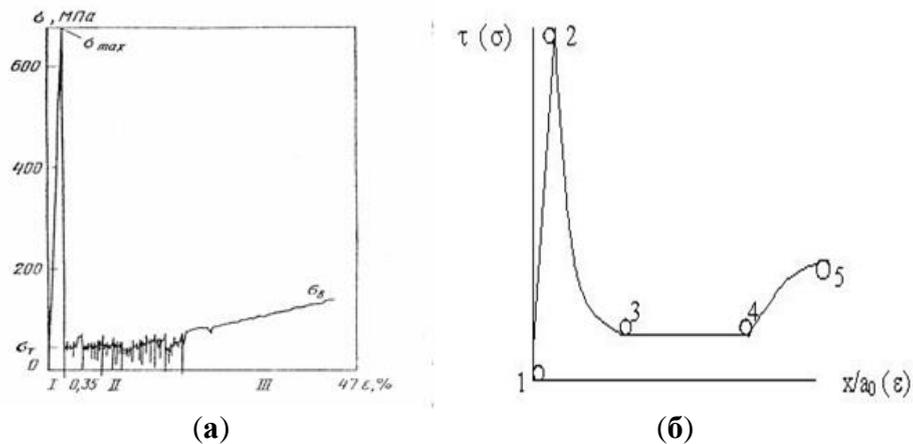


Рисунок 5. Математическая модель диаграммы «напряжение - деформация» нитевидных монокристаллов (а) эксперимент [4]; (б) расчетная модель; 1-2-3 – монокристалл; 3-4-5 – поликристалл.

7. Пластическая деформация развивается в результате движения краевой дислокации.

8. В качестве модели интерметаллида $Ni_3(Al, Me)$ рассматривается элементарная атомная ячейка, представленная на рис. 6. В основе лежит ячейка решетки Ni_3Al (Рис.6, (а)) [5]. Легирование интерметаллида $Ni_3(Al, Me)$ моделируется замещением атома алюминия (Рис. 6, (б)).

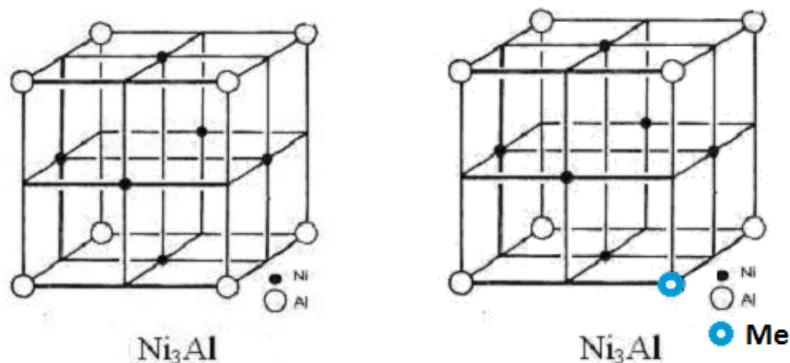


Рисунок 6. Ячейка решетки Ni_3Al .

9. Влияние температуры на пределы упругости и текучести определяется изменением периода бездефектной кристаллической решетки.

10. Максимальный предел текучести легированной кристаллической решетки моделируется следующим образом.

Под действием нагрузки P краевая дислокация перемещается из точки 1 в точку 2 (Рис.7).

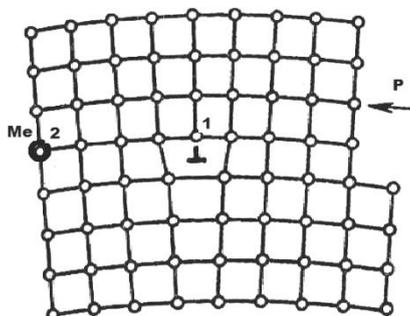


Рисунок 7. Схема движения дислокации.

На этом отрезке 1–2 предел текучести будет определяться свойствами нелегированной элементарной атомной ячейки. Достигнув точки 2, дислокация встретит препятствие в виде легирующего элемента Me . В соответствии с пунктом 7 допущений пластическая деформация прекратится, так как дислокация встретит препятствие. Движение возобновится в случае, когда внешняя нагрузка P будет больше предела упругости (текучести) ячейки с легирующим элементом Me .

11. Предел текучести монокристаллических жаропрочных сплавов определяется его пределом упругости.

12. Физическая сущность пластической деформации и ползучести схожа и определяется наличием и перемещением дислокаций, а различие определяется длительностью процессов.

Расчетные формулы

Тангенциальная составляющая предела упругости при сдвиге в элементарной атомной ячейке монокристалла рассчитывается по теоретической формуле [1]

$$\tau_{\max} = \frac{e^2}{a_0^2 \pi \epsilon_0 A} (1 - \cos^2 \gamma_{\max}) \cos\left(\frac{\pi}{2} - \gamma_{\max}\right), \quad (1)$$

где γ_{\max} – максимальный угол сдвига, соответствующий пределу упругости; A – площадь сдвига.

Предел текучести при растяжении монокристалла рассчитывается по теоретической формуле [1], основанной на механизме перемещения краевой дислокации и электростатической природе межатомного взаимодействия:

$$\tau = c / (x/a_0)^2, \quad (2)$$

где c – коэффициент, определяемый в точке $[\tau_{\max}; x/a_0]$; x – величина перемещения в элементарной атомной ячейке при сдвиге.

Связь между нормальной и тангенциальной проекциями напряжения сдвига бездефектного монокристалла определяется по известной формуле:

$$\sigma = \tau / (\cos \alpha \cdot \cos \beta),$$

где α – угол между горизонтальной плоскостью и плоскостью сдвига; β – угол между плоскостью сдвига и направлением нормального напряжения.

Изменение периода кристаллической решетки вследствие повышения температуры, рассчитывается на основе изменения энергии связи двух разноименных зарядов в кристаллической решетке. Зависимость изменения периода кристаллической решетки от температуры рассчитывается по теоретической формуле [1]:

$$\Delta a_0 = 0,5 \frac{e^2}{\frac{e^2}{a_0} - c'_v \Delta T 2\pi \epsilon_0} - a_0, \quad (3)$$

где Δa_0 – изменение периода кристаллической решетки вследствие теплового воздействия; ΔT – изменение температуры; c'_v – теплоемкость атома при постоянном объеме; ϵ_0 – электрическая постоянная.

Результаты моделирования и сравнительный анализ.

В настоящей работе приведены температурные зависимости пределов упругости и текучести следующих монокристаллических интерметаллидов: Ni_3Al , $Ni_3(Al, Ti)$, $Ni_3(Al, Nb)$, $Ni_3(Al, Hf)$.

В частности, температурные зависимости для Ni_3Al приведены на Рис. 8, где используются экспериментальные данные (синие точки) работы [6].

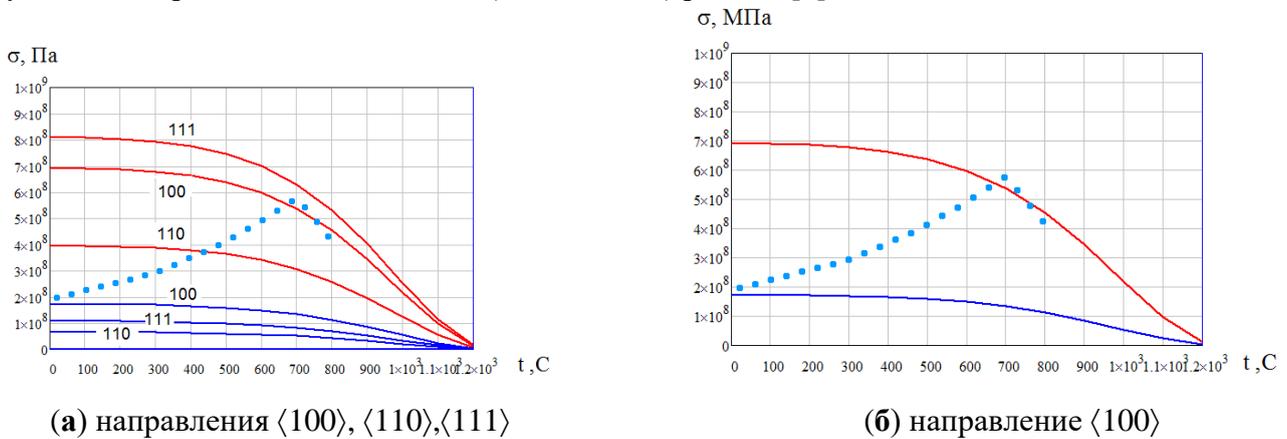
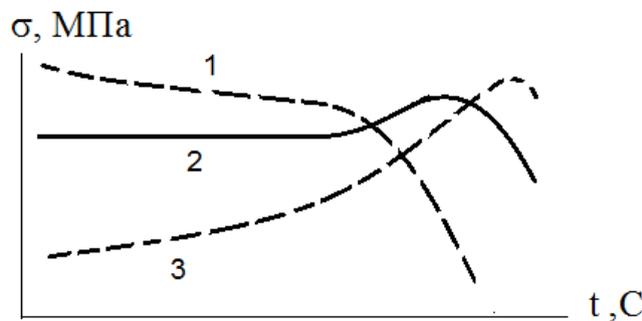


Рисунок 8. Температурные зависимости пределов упругости (красные линии) и текучести (синие линии) монокристаллического интерметаллида Ni_3Al .

Из Рис. 8 видно, что температурная зависимость Ni_3Al является определяющей для качественного обоснования характера кривой для интерметаллидных сплавов типа ВКНА (поз. 3, Рис. 9). Кроме того, для предела упругости $\sigma_y \langle 111 \rangle > \sigma_y \langle 100 \rangle > \sigma_y \langle 110 \rangle$, а для предела текучести $\sigma_T \langle 100 \rangle > \sigma_T \langle 111 \rangle > \sigma_T \langle 110 \rangle$. Это соответствует экспериментальным данным [6].



1 - мало γ^1 – фазы; 2 - 50/50 сплав; 3 - много γ^1 – фазы

Рисунок 9. Влияние доли γ^1 – фазы на предел текучести [6].

В частности, при 20 °С экспериментальная кривая соответствует пределу текучести, а с повышением температуры при достижении максимального значения определяется пределом упругости (Рис. 8, (б)). Это соответствует п. 6 допущений. То есть каждая точка на графике предела упругости соответствует «зубу текучести» при данной температуре.

Кроме того, из Рис. 8, а можно определить, в какой кристаллографической ориентации выращен монокристалл (в данном случае $\langle 100 \rangle$ или $\langle 001 \rangle$).

На Рис. 10–12 приведены температурные зависимости пределов упругости и текучести монокристаллов $Ni_3(Al, Ti)$, $Ni_3(Al, Nb)$, $Ni_3(Al, Hf)$. При этом поз. 1 обозначены экспериментальные данные [6], поз. 2, 3 – расчетные значения пределов упругости и текучести соответственно.

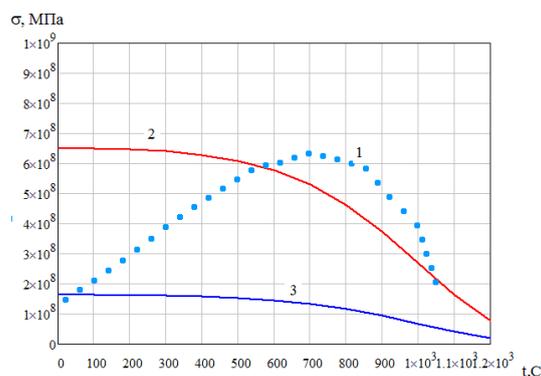


Рисунок 10. Температурные зависимости пределов упругости и текучести $Ni_3(Al, Ti)$, направление $\langle 100 \rangle$.

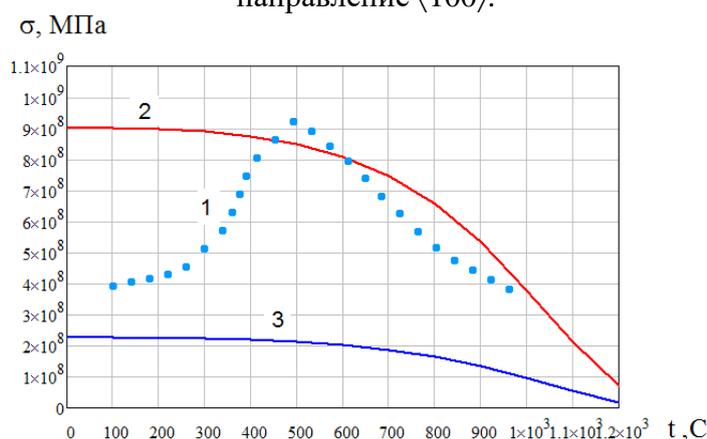


Рисунок 11. Температурные зависимости пределов упругости и текучести $Ni_3(Al, Nb)$, направление $\langle 100 \rangle$.

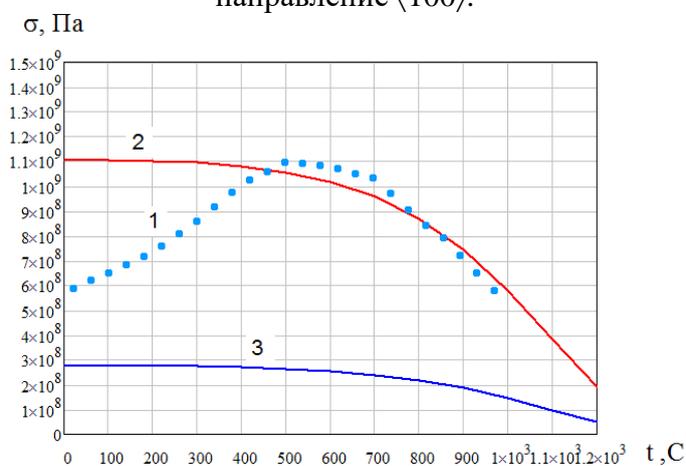


Рисунок 12. Температурные зависимости пределов упругости и текучести $Ni_3(Al, Hf)$, направление $\langle 100 \rangle$.

Как видно из Рис. 10–12, результаты расчета и экспериментальные данные [6] имеют удовлетворительную сходимость. Кроме того, из Рис. 8, а и Рис. 13 видно: для предела упругости $\sigma_y\langle 111 \rangle > \sigma_y\langle 100 \rangle > \sigma_y\langle 110 \rangle$, а для предела текучести $\sigma_T\langle 100 \rangle > \sigma_T\langle 111 \rangle > \sigma_T\langle 110 \rangle$, что также подтверждает [6] адекватность модели.

Полученные температурные зависимости позволяют прогнозировать изменение предела текучести для жаропрочных сплавов в зависимости от состава его легирования.

В частности, построена модель элементарной атомной ячейки, где атом алюминия замещен атомом вольфрама (Рис. 6, (б)). В данном случае механизм перемещения краевой дислокации определяется пунктом 10 допущений. Необходимо отметить, что из всех приведенных примеров легирования интерметаллида Ni_3Al , вариант $\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{W})$ имеет наибольшие значения пределов упругости и текучести. Поэтому данная элементарная атомная ячейка определяет рассматриваемые свойства жаропрочного сплава в целом.

Например, если сравнить температурные зависимости предела упругости $\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{W})$ и предела текучести ЖС32 [6] с учетом кристаллографической ориентации, то обнаружится их удовлетворительная сходимость (Рис. 13). Это соответствует п. 11 допущений.

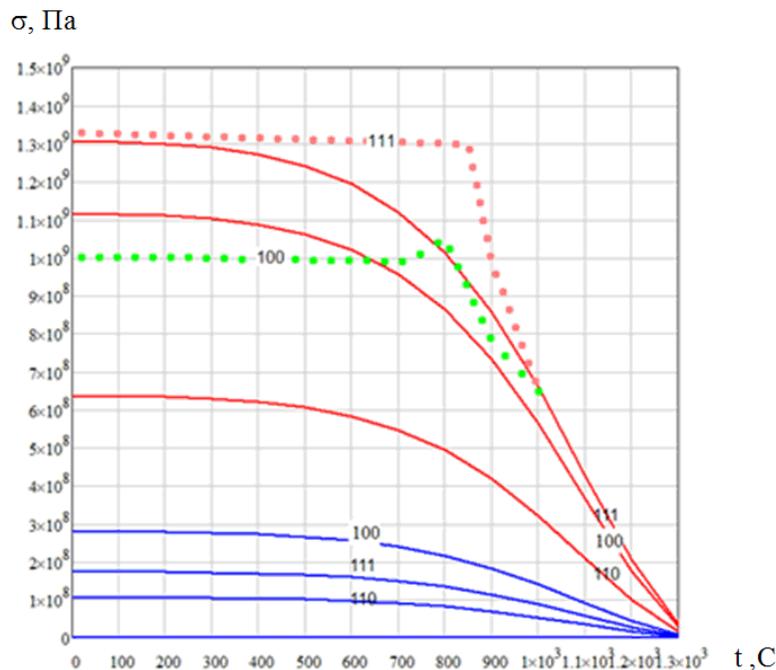


Рисунок 13. Температурные зависимости пределов упругости и текучести $\text{Ni}_3(\text{Al}, \text{W})$ с учетом кристаллографической ориентации. Точки – эксперимент [6].

Таким образом, температурные зависимости пределов упругости и текучести позволяют сформировать исходные данные для термопрочностного анализа элементов конструкций.

Необходимо отметить, что разработанная модель позволяет учитывать технологию изготовления деталей. Так, в работе [7] приведены расчетные модели оценки остаточных напряжений на основе пределов текучести и ползучести.

Заключение

1. Приведена модель, которая позволяет рассчитать пределы упругости и текучести в моно- и поликристаллах.
2. Получены температурные зависимости пределов упругости и текучести монокристаллов с учетом анизотропии, имеющие удовлетворительную сходимость с экспериментами

других авторов [6]. При этом для предела упругости $\sigma_y\langle 111 \rangle > \sigma_y\langle 100 \rangle > \sigma_y\langle 110 \rangle$, а для предела текучести $\sigma_T\langle 100 \rangle > \sigma_T\langle 111 \rangle > \sigma_T\langle 110 \rangle$, что также подтверждает [6] адекватность модели.

3. Теоретический расчет пределов упругости и текучести монокристаллов – составляющих материалов элементов конструкций позволяет сократить объем трудоемких и дорогостоящих экспериментов.

4. Разработанный метод позволяет использовать его для компьютерного моделирования материалов в условиях ограниченного объема экспериментальных данных.

5. Предлагаемая модель позволяет проектировать (моделировать) оптимальную кристаллографическую ориентацию монокристаллов в элементах конструкций, т.е. перейти от выбора материалов к их конструированию [8].

6. Предел текучести монокристаллических жаропрочных сплавов определяется его пределом упругости.

7. Предел текучести (предел упругости) является одним из важных факторов, влияющим на характеристики ползучести и малоциклового усталости.

8. Роль деформации ползучести является определяющей в процессах малоциклового усталости, так как она отражает пластическую деформацию в кристаллических телах с учетом длительности нагружения, в отличие от пластической деформации, определяемой из диаграммы «напряжение-деформация».

Кроме того, при моделировании малоциклового усталости с использованием диаграммы ползучести учитываются факторы, связанные со временем, а именно: релаксация и эффект Баушингера. Последние связаны с перераспределением пластической деформации, которая, в свою очередь, учитывается экспериментальной диаграммой ползучести.

Литература:

1. Бадамшин И.Х. От четырех к одному. Силы внутриатомного взаимодействия и прочность материалов: монография – 2-е изд., перераб. и доп. / И.Х. Бадамшин. – Москва: Издательский дом Академии естествознания, 2016. –134 с. [Badamshin I.H. From four to one. The forces of intraatomic interaction and the strength of materials: monograph – 2nd ed., reprint. and add. / I.H. Badamshin. – Moscow: Publishing House of the Academy of Natural Sciences, 2016. -134 p. (in Russian)]
2. Матвиенко Ю.Г. Модели и критерии механики разрушения. / Ю.Г. Матвиенко – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. -328 с [Matvienko Yu.G. Models and criteria of destruction mechanics. / Yu.G. Matvienko – Moscow: FIZMATLIT, 2006. -328 p. (in Russian)]
3. Химушин Ф.Ф. Жаропрочные стали и сплавы. / Ф.Ф. Химушин – М.: Металлургия. 1969.- 752 с. [Khimushin F.F. Heat-resistant steels and alloys. / F.F. Khimushin - Moscow: Metallurgy. 1969.- 752 p. (in Russian)]
4. Светлов, И. Л. Машина для механических испытаний нитевидных кристаллов (усов) / И. Л. Светлов // Заводская лаборатория. –1964. –№9. –С. 1133–1136. [Svetlov, I. L. Machine for mechanical testing of filamentous crystals (moustache) / I. L. Svetlov // Factory Laboratory. 1964. – No. 9. –pp. 1133-1136. (in Russian)]
5. Кристаллография и дефекты кристаллической решетки. Учебник для вузов/ Новиков И. И., Розин К. М. М.: Металлургия, 1990, 336 с. [Crystallography and crystal lattice defects. Textbook for universities/ Novikov I. I., Rozin K. M. Moscow: Metallurgiya, 1990, 336 p. (in Russian)]
6. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов / Р.Е. Шалин, И.Л. Светлов, Е.Б. Качанов и др. – М.: Машиностроение, 1997. – 336 с. [Single crystals of nickel heat-resistant alloys / R.E. Shalin, I.L. Svetlov, E.B. Kachanov, et al., Moscow: Mashinostroenie Publ., 1997, 336 p. (in Russian)]
7. Бадамшин И. Х. Объединенное моделирование свойств конструируемых жаропрочных сплавов лопаток турбин и технологии их изготовления/ АВИАДВИГАТЕЛИ XXI ВЕКА. Москва 24-27 ноября 2015 г. Сборник тезисов докладов. – М.: ЦИАМ, 2015. – 1133 с. [Badamshin I. H. Combined modeling of the properties of constructed heat-resistant alloys of turbine blades and their manufacturing technologies/ AIRCRAFT ENGINES OF THE XXI CENTU-

RY. Moscow, November 24-27, 2015. Collection of abstracts. Moscow: CIAM, 2015. 1133 p. (in Russian)]

8. Белоусов А.И. Концептуальные подходы к конструированию материалов для лопаток турбин авиационных ГТД / А.И. Белоусов, И.Х. Бадамшин // Изв. вузов. Авиационная техника. Казань, 2015. – №3, С. 73-79. [Belousov A.I. Conceptual approaches to the design of materials for turbine blades of aviation gas turbine engines / A.I. Belousov, I.H. Badamshin // Izv. Vuzov. Aviation Equipment. Kazan, 2015. – No. 3, pp. 73-79. (in Russian)]

Об авторах:

БАДАМШИН Ильдар Хайдарович, д-р техн. наук, доцент, профессор кафедры "Авиационные двигатели", Уфимский университет науки и технологий, 908-350-22-92, badamshin.ih@ugatu.su.

Metadata:

Title: The yield strength modeling of Ni₃(Al,Me) intermetallics of single-crystal alloys of turbine blades.

Author: Ildar Khaidarovich Badamshin, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russia, badamshin.ih@ugatu.su, Scopus Author ID 7 801 455 973.

Abstract: New materials are characterized by limited information about their properties, which is necessary for calculating the stress-strain state of turbine blades. Under these conditions, a need for theoretical methods for calculating elastic, thermophysical, and strength characteristics arises based on taking into account interatomic interaction forces, since classical methods for calculating the mechanics of a deformable solid based on the continuity hypothesis do not allow this. The results of calculating the temperature dependence of the yield strength of Ni₃(Al, Me) intermetallics of single-crystal alloys of turbine blades are presented.

Keywords: stress-strain state, limit of elasticity, yield strength, turbine rotor blade, intermetallic, single crystal.