

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

УДК 669.245:620.193.5

А. А. ГЛОТКА^{1*}, С. В. ГАЙДУК²

^{1*}Каф. «Физическое материаловедение», Запорожский национальный технический университет, ул. Жуковского, 64, Запорожье, Украина, 69063, тел. +38 (061) 769 82 84, +38 (061) 769 82 82, эл. почта glotka-alexander@ukr.net, ORCID 0000-0002-3117-2687

²Каф. «Физическое материаловедение», Запорожский национальный технический университет, ул. Жуковского, 64, Запорожье, Украина, 69063, тел. +38 (061) 769 82 84, +38 (061) 769 82 82, эл. почта gayduksv@gmail.com, ORCID 0000-0002-5724-9566

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ЖАРОПРОЧНЫХ НИКЕЛЕВЫХ СПЛАВОВ

Цель. Работа предполагает получение прогнозирующих регрессионных моделей, с помощью которых можно адекватно рассчитывать механические свойства монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов (ЖНС) без проведения предварительных экспериментов. **Методика.** Для проведения исследований были выбраны промышленные сплавы для монокристаллического литья отечественного и зарубежного производства. Значения обработаны методом наименьших квадратов с получением корреляционных зависимостей и математических уравнений регрессионных моделей. **Результаты.** Вследствие обработки экспериментальных данных предложено соотношение легирующих элементов, которое может быть использовано для оценки механических свойств и учитывает комплексное влияние основных компонентов сплава. Поскольку размерное несоответствие параметров решетки связано со степенью концентрационного твердорастворного упрочнения фаз, эффективностью дисперсионного упрочнения сплава, скоростью ползучести и другими свойствами монокристаллов, то соотношение легирующих элементов позволяет связать эти свойства с многокомпонентными системами. Приведены регрессионные модели, с помощью которых возможно рассчитать размерное несоответствие, прочность, жаропрочность, количество фазы и плотность сплавов с высокой точностью. Установлены закономерности влияния состава на свойства монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов. Показано, что для многокомпонентных никелевых систем можно с высокой достоверностью прогнозировать мисфит, который оказывает существенное влияние на прочностные характеристики сплавов данного класса. Для монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов увеличение значения мисфита сопровождается снижением предела их кратковременной прочности, поскольку между кристаллическими решетками фаз образуются значительные напряжения, которые способствуют процессам структурной и фазовой нестабильности и приводят к преждевременному разрушению материала. Установлена корреляционная связь между удельной плотностью и средней атомной массой сплавов, а также пределом их кратковременной прочности. **Научная новизна.** Впервые предложено соотношение K_{γ} , с помощью которого можно адекватно прогнозировать свойства монокристаллических жаропрочных сплавов на никелевой основе, а также регрессионные модели для прогнозирования основных характеристик литейных монокристаллических сплавов. **Практическая значимость.** Показано перспективное и эффективное направление в решении задачи прогнозирования основных характеристик, влияющих на комплекс служебных свойств сплавов как при разработке новых монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов, так и при совершенствовании составов известных промышленных марок данного класса.

Ключевые слова: монокристаллические жаропрочные никелевые сплавы; ЖНС; размерное несоответствие; мисфит; прочность; жаропрочность

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

Введение

Наиболее важными деталями газотурбинных двигателей (ГТД) являются лопатки газовой турбины, определяющие максимальную температуру рабочего газа на входе в турбину и, следовательно, удельную мощность, экономичность и ресурс двигателя. Повышение рабочей температуры газа перед турбиной (до 2 000...2 200 К в перспективных двигателях) может быть достигнуто за счет применения лопаток с монокристаллической структурой из литейных жаропрочных никелевых сплавов нового поколения (ЖНС) [1].

Основное преимущество монокристаллических лопаток, по сравнению с обычными поликристаллическими ЖНС, заключается в более высоком сопротивлении высокотемпературной ползучести, обусловленном отсутствием в сплаве границ зерен, поскольку их структура сформирована ветвями одного дендрита, развившегося от монокристаллической затравки [5].

На микроскопическом уровне структура монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов представлена только двумя фазами: частицами γ' -фазы, рассеянными в матрице из сложнолегированного γ -твердого раствора на никелевой основе. Гамма и гамма штрих фазы, как указано выше [5, 9]. В свою очередь частицы интерметаллидной γ' -фазы различаются размерами и состоят из кубоидных микрочастиц, которые разделены нанопрослойками γ фазы.

Упрочнение γ' -фазой обеспечивает длительное сохранение высокой температурной работоспособности сплавов данного класса в широком интервале температур, вплоть до 1 150 °С [3, 7]. Следовательно, важнейшая роль в сопротивлении высокотемпературной ползучести монокристаллических ЖНС принадлежит таким структурно-фазовым характеристикам, как период кристаллических решеток γ - и γ' -фаз, их размерное несоответствие δ или γ/γ' -мисфит, который рассчитывают по формуле $\delta = 2 \cdot ((a_{\gamma'} - a_{\gamma}) / (a_{\gamma} + a_{\gamma'})) \cdot 100 \%$, где a_{γ} и $a_{\gamma'}$ – периоды решеток γ - и γ' -фаз соответственно [4, 6].

Экспериментально установлено, что влияние легирующих элементов на период кристаллической решетки γ' -фазы слабее, чем

γ твердого раствора в многокомпонентных жаропрочных сплавах на основе никеля. Мисфит γ/γ' определяется главным образом теми легирующими элементами, которые наиболее сильно увеличивают период решетки γ -твердого раствора. Такими элементами, в порядке возрастания влияния на период решетки γ -фазы, являются Ru, Re, Mo, W, Nb и Ta [2, 10, 11].

Цель

Основная цель данной работы – получение прогнозирующих регрессионных моделей, с помощью которых можно адекватно рассчитывать механические свойства монокристаллических ЖНС без проведения предварительных экспериментов.

Методика

Для экспериментально-теоретических исследований температурной работоспособности была сформирована рабочая выборка сплавов, состоящая из известных промышленных ЖНС для монокристаллического литья отечественного и зарубежного производства, следующих марок: CMSX2, CMSX3, CMSX4, CMSX10, AM1, 203E, TUT92, PWA1484, PWA1480, SRR99, NASAIR100, SMP14, R162, TMS71, TMS75, ReneN4, ReneN5, ReneN6, SC180, MC2, ЖС36, ЖС30М, ЖС40, ЖС47. Выборка сплавов осуществлена с позиции разнообразия химических составов (систем легирования), которые по содержанию основных элементов охватывают широкий диапазон легирования.

Полученные значения были обработаны в программном комплексе Microsoft Office в пакете EXCEL методом наименьших квадратов с получением корреляционных зависимостей типа «параметр – свойство» и математических уравнений регрессионных моделей (линий трендов), которые оптимально описывают эти зависимости.

Результаты

С учётом того, что в сопротивлении высокотемпературной ползучести монокристаллических ЖНС роль принадлежит такому структурному параметру, как размерное несоответствие

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

δ (γ/γ' -мисфит), которое зависит от системы легирования, актуальной является задача получения оптимальной регрессионной модели для расчета данной характеристики на основе химического состава сплавов класса монокристаллических ЖНС.

Все компоненты, используемые при легировании ЖНС, можно условно разделить на три группы: растворяющиеся основным образом в γ -твердом растворе (Co, Cr, Mo, W, Re), растворяющиеся преимущественно в γ' -фазе (Al, Ti, Ta, Hf) и карбидообразующие элементы (Ti, Ta, Hf, Nb, V, W, Mo, Cr). Типичная микроструктура сплава ЗМИ-3У с монокристаллической структурой представлена на рис. 1. Её основными фазовыми составляющими являются γ -твердый раствор и упрочняющая γ' -фаза. Таким образом, разделение легирующих элементов сводится к двум группам.

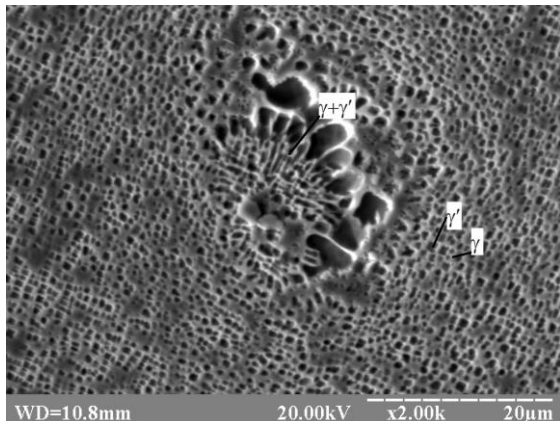


Рис. 1. Типичная структура монокристаллических ЖНС

Fig. 1. Typical structure of single-crystal heat-resistant nickel base alloys

С другой стороны, в состав γ' -фазы (Ni_3Al) входят такие элементы как: Ti, Nb, Cr, Co, Mo, W, V и др. Но их содержание в γ' -фазе и влияние на ее объемную долю в структуре различно. Это влияние связано со способностью этих элементов образовывать с никелем стабильные интерметаллидные фазы типа Ni_3Me . Отсюда следует, что на мисфит и механические свойства сплавов оказывают влияние не только элементы, которые относятся к γ' -образующим, но и те, которые классифицируют как γ -твердорастворные упрочнители.

В результате анализа и обработки экспериментальных данных предложено соотношение легирующих элементов:

$$K_{\gamma} = \frac{\sum_{\gamma} (\text{Al}+\text{Ti}+\text{Nb}+\text{Ta}+\text{Hf})}{0,2 \sum_{\gamma} (\text{Cr}+\text{W}+\text{Mo}+\text{Re}+\text{Co}+\text{Ru})},$$

в котором калибровочный коэффициент 0,2 был определен эмпирическим путем. Это соотношение учитывает комплексное влияние основных компонентов сплава в массовых процентах на механические свойства. Поскольку размерное несоответствие параметров решетки связано со степенью концентрационного твердорастворного упрочнения γ - и γ' -фаз, эффективностью дисперсионного упрочнения сплава, скоростью ползучести и другими свойствами монокристаллов, то соотношение K_{γ} позволяет связать эти свойства с многокомпонентными системами.

Установлено, что размерное несоответствие δ имеет экспоненциальную зависимость (рис. 2, а) с предложенным соотношением: $\delta = 0,0045 \text{ EXP}(1,6775 K_{\gamma})$; относительная погрешность $\pm 3,32$ %. Увеличение соотношения K_{γ} приводит к повышению δ , что связано с уменьшением количества γ -растворных упрочнителей и увеличением γ' -образующих элементов, которые влияют на параметры кристаллических решеток фаз. Показано, что для многокомпонентных никелевых систем (монокристаллических ЖНС) можно с высокой достоверностью прогнозировать мисфит, который оказывает существенное влияние на прочностные характеристики сплавов данного класса.

Установлено, что зависимость предела σ_b кратковременной прочности сплавов от величины мисфита (рис. 2, б) оптимально описывается логарифмической зависимостью $\sigma_b = -52,32 \ln(\delta) + 1\,179,9$ с относительной погрешностью $\pm 3,74$ %. Для монокристаллических ЖНС увеличение абсолютного значения мисфита сопровождается снижением предела их кратковременной прочности, поскольку между кристаллическими решетками γ - и γ' -фазы образуются значительные напряжения, которые способствуют процессам структурной и фазовой нестабильности, что приводит к преждевременному разрушению материала.

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

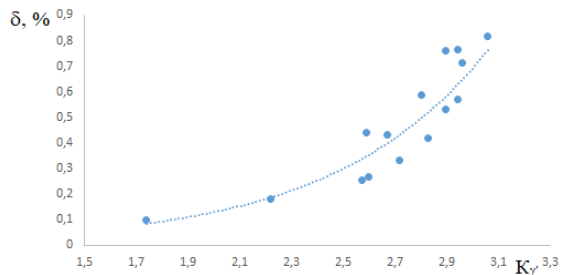
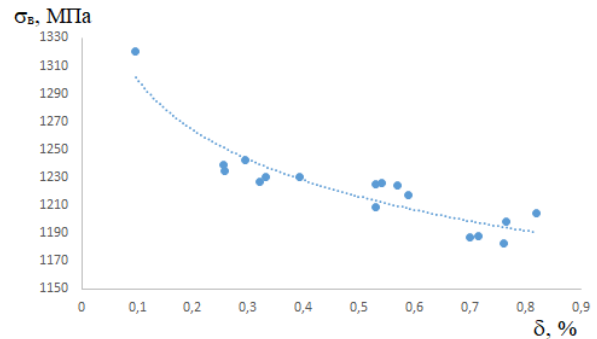
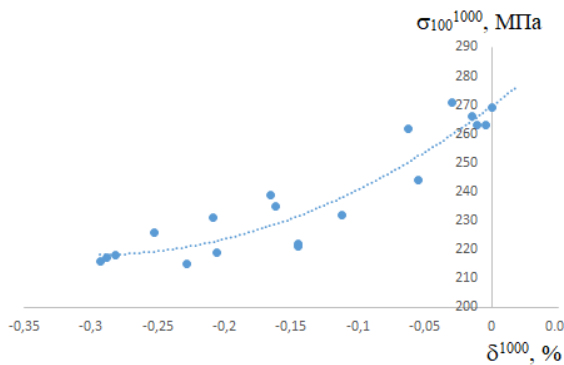
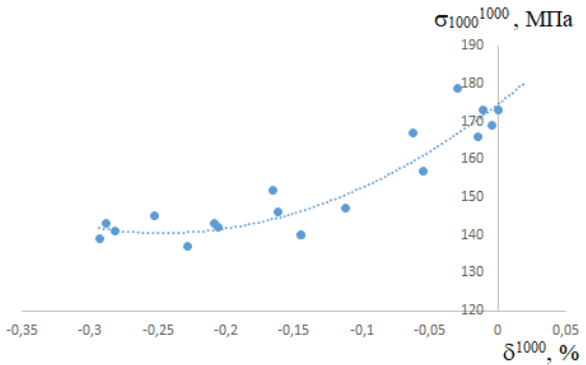
a – a*b – b**в – c**г – d*

Рис. 2. Корреляционная зависимость свойств монокристаллических ЖНС от величины мисфита δ и соотношения K_γ в их составе:

a – зависимость величины мисфита δ от величины соотношения K_γ ; *b* – зависимость предела кратковременной прочности σ_b от мисфита δ при 20 °С;

в, г – зависимость пределов 100- и 1 000-часовой длительной прочности от мисфита при 1 000 °С

Fig. 2. Correlation dependence of the properties of single-crystal heat-resistant nickel base alloys on the misfit value δ and the ratio K_γ in their composition:

a – dependence of the misfit value δ on the value of the K_γ ratio; *b* – dependence of the short-term strength limit σ_b on misfit δ at 20 °С; *c, d* – dependence of the limits of 100 and 1 000 hours of long-term strength on misfit at 1 000 °С

Показано, что при температуре испытаний 1000 °С зависимость пределов 100- и 1 000- часовой длительной прочности от величины мисфита (рис. 2, *в, г*) оптимально описывается полученными моделями $\sigma_{100}^{1000} = 587,7\delta^2 + 347,96\delta + 269,65$ с относительной погрешностью $\pm 3,46$ % (рис. 2, *в*); $\sigma_{1000}^{1000} = 561,4\delta^2 + 276,64\delta + 174,65$ с относительной погрешностью $\pm 3,6$ % (рис. 2, *г*). Эти зависимости показывают, что при температуре 1 000 °С значение размерного несоответствия близко к нулю, сплавы имеют лучшие показатели длительной прочности. Из вышерассмотренных зависимостей можно сделать вывод, что при разработке

новых составов сплавов или совершенствовании составов известных промышленных марок данного класса, нужно закладывать высокие абсолютные значения мисфита при комнатной температуре (рис. 2, *б*). Это связано с тем, что с повышением температуры изменится размерное несоответствие параметров решеток γ - γ' -фаз, а при температуре эксплуатации желательно иметь величину мисфита близкой к нулю (рис. 2, *в, г*), что снизит когерентные напряжения и обеспечит улучшение структурно-фазовой стабильности и, следовательно, повысит длительную прочность.

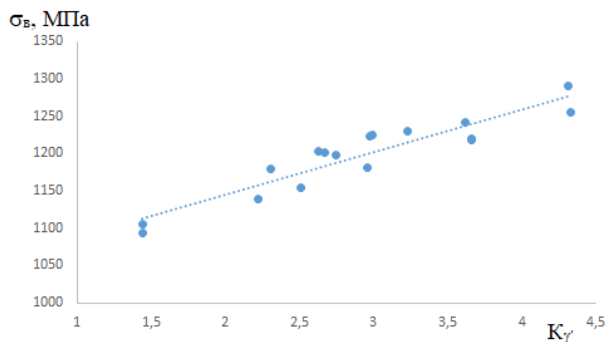
Установлено, что предложенное соотношение K_γ имеет тесную корреляцию с пределами

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

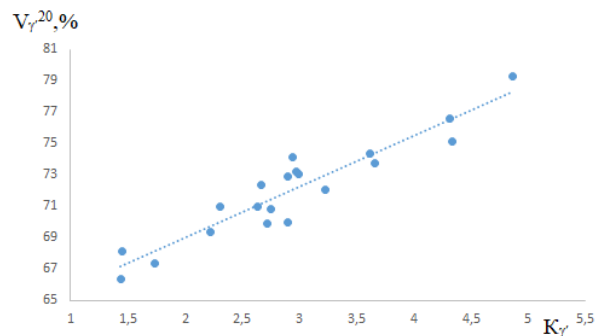
кратковременной (σ_b) и длительной (σ_{100} , σ_{1000}) прочности, а также с объемной долей γ' -фазы, которая находится в пределах 60–70 % мас. для комнатной температуры и от 45 до 65 % мас. при 1 000 °С в монокристаллических ЖНС (рис. 3). Все эти зависимости имеют линейный характер с положительным угловым коэффициентом и погрешностью не более $\pm 3,8$ %. Такое

поведение объясняется тем, что с увеличением $K_{\gamma'}$ увеличивается объемное количество основной упрочняющей γ' - фазы при комнатной температуре (рис. 3, б) и остаточной при повышенных температурах эксплуатации (рис. 3, д), следственно, повышаются пределы кратковременной (рис. 3, а) и длительной прочности (рис. 3, в) у монокристаллических сплавов.

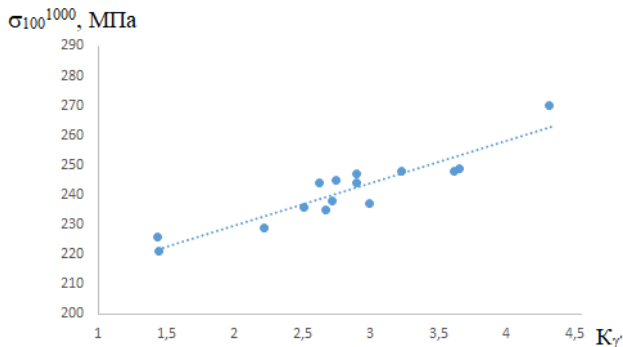
а – а



б – б



в – в



г – г

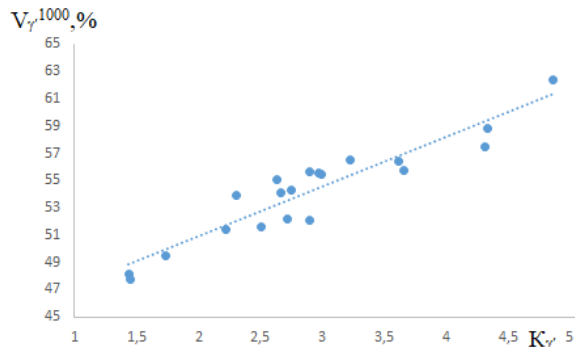


Рис. 3. Зависимость от соотношения $K_{\gamma'}$ в составе монокристаллических ЖНС: а – предела кратковременной прочности; б – объемного количества γ' -фазы при 20 °С; в – пределов длительной прочности; г – остаточного количества γ' -фазы при 1 000 °С

Fig. 3. Dependence on the $K_{\gamma'}$ ratio in the single-crystal heat-resistant nickel base alloys: а – of the limit of short-term strength; б – the volume amount of the γ' -phase at 20 °С; в – the limits of long-term strength; г – the residual amount of the γ' -phase at 1000 °С

Связь объемной доли γ' -фазы пределами кратковременной и длительной прочности с предложенным соотношением $K_{\gamma'}$ для класса монокристаллических ЖНС адекватно описывают полученными регрессионными моделями:

$$\sigma_b = 57,414 K_{\gamma'} + 1030,1;$$

$$V_{\gamma'}^{20} = 3,2607 K_{\gamma'} + 62,481;$$

$$\sigma_{100}^{1000} = 14,303 K_{\gamma'} + 201,11;$$

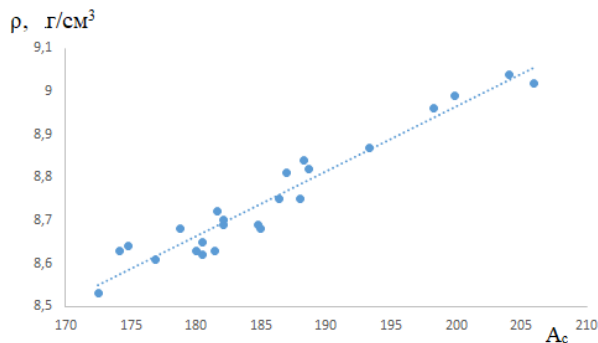
$$V_{\gamma'}^{1000} = 3,6597 K_{\gamma'} + 43,551.$$

Таким образом, полученные модели можно применять для расчетов при прогнозировании механических свойств многокомпонентных никелевых систем (монокристаллических ЖНС) на основе их химического состава.

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

Начиная со второго поколения, в монокристаллические ЖНС введён рений в количестве от 2 до 6 % (в отдельных случаях до 9 %), что значительно увеличило плотность сплавов, а следовательно, и массу готового изделия. Начиная с четвертого поколения, рекомендовано часть рения заменять рутением (от 2–6 %) с целью ограничения плотности монокристаллических ЖНС на уровне, не превышающем 9 г/см^3 . Известно, что плотность ρ тесно коррелирует со средней атомной массой сплава A_c , поэтому авторы предложили регрессионную модель, полученную для многокомпонентных систем легирования монокристаллических ЖНС: $\rho = 0,0151 \cdot A_c + 5,9462$ с погрешностью, не превышающей $\pm 2,6 \%$ (рис. 4, а).

а – а



б – б

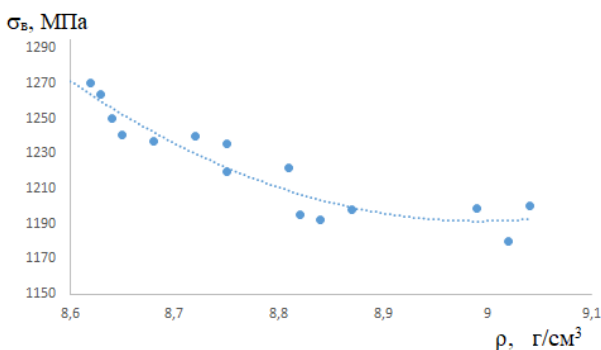


Рис. 4. Зависимость для монокристаллических ЖНС:

а – удельной плотности от средней атомной массы;
 б – предела кратковременной прочности от удельной плотности

Fig. 4. Dependence for single-crystal heat-resistant nickel base alloys:

а – specific density on the average atomic mass;
 б – the limit of short-term strength on specific density

На рис. 4, а показана зависимость удельной плотности от средней атомной массы сплавов, которая имеет линейный характер, поскольку с увеличением количества тугоплавких элементов с высоким значением атомной массы неизбежно будет повышаться плотность монокристаллических сплавов. Установлено, что увеличение удельной плотности приводит к снижению предела кратковременной прочности сплава (рис. 4, б), что оптимально описывает следующая зависимость: $\sigma_b = 521,06\rho^2 - 9370,9\rho + 43324$ с погрешностью $\pm 3,46 \%$. Такая тенденция проявляется вследствие того, что элементы с высокой атомной массой имеют высокую температуру плавления, они упрочняют γ -твердый раствор и не оказывают заметного влияния на интерметаллидное упрочнение сплавов. Полученные регрессионные модели дают возможность прогнозировать удельную плотность и предел кратковременной прочности по удельной плотности сплава как при разработке новых монокристаллических ЖНС, так и при усовершенствовании известных промышленных композиций в рамках марочного состава.

Научная новизна и практическая значимость

Обобщены закономерности комплексного влияния легирующих элементов, которые входят в состав монокристаллических ЖНС, на свойства, которые влияют на их работоспособность.

Впервые предложено соотношение K_γ с помощью которого можно адекватно прогнозировать свойства монокристаллических ЖНС, а также регрессионные модели для прогнозирования основных характеристик литейных монокристаллических ЖНС как при разработке новых составов, так и при совершенствовании известных промышленных марок.

Выводы

1. В данной работе представлены исследования, проведенные моделированием термодинамических процессов выделения фаз и их связей с прочностными характеристиками для монокристаллических никелевых сплавов с разными системами легирования.

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

2. На основе эмпирического подхода получено новое соотношение K_{γ} , по величине которого можно адекватно прогнозировать размерное несоответствие (γ/γ' -мисфит), предел кратковременной прочности, объёмное количество γ' -фазы в структуре, а также пределы 100- и 1 000-часовой длительной прочности для многокомпонентных композиций монокристаллических ЖНС.

3. Приведены регрессионные модели корреляционных зависимостей от размерного несоответствия (γ/γ' -мисфит), которые дают возможность прогнозировать пределы кратковременной и длительной прочности сплавов. Показано, что величина мисфита при температуре эксплуатации должна стремиться к нулю. Это обеспечит повышение структурной стабильности за счет сведения к минимуму структурных напряжений и окажет положительное влияние на прочностные и пластические характеристики ЖНС.

4. Установлена корреляционная связь между удельной плотностью и средней атомной массой сплавов, а также пределом их кратковременной прочности. Показано, что с увеличением удельной плотности предел кратковременной прочности сплавов снижается, поскольку элементы с высокой атомной массой, повышающие удельную плотность, преимущественно упрочняют γ -твердый раствор и не оказывают заметного влияния на интерметаллидное упрочнение сплавов.

5. Показано перспективное и эффективное направление в решении задачи прогнозирования основных характеристик, влияющих на комплекс служебных свойств сплавов, без предварительного проведения экспериментальных исследований как при разработке новых монокристаллических ЖНС, так и при совершенствовании составов известных промышленных марок данного класса.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Влияние термической обработки на дендритную ликвацию и жаропрочность монокристаллов интерметаллидных сплавов на основе Ni_3Al , легированных рением / К. Б. Поварова, О. А. Базылева, А. А. Дроздов [и др.] // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2018. – № 9. – С. 41–47.
2. Гайдук, С. В. Применение CALPHAD-метода для расчета количества γ' -фазы и прогнозирования длительной прочности литейных жаропрочных никелевых сплавов / С. В. Гайдук // *Металлургическая и горнорудная промышленность*. – 2015. – № 6. – С. 64–68.
3. Киселев, Ф. Д. Исследование структуры материала рабочих лопаток турбин авиационных газотурбинных двигателей в процессе эксплуатации / Ф. Д. Киселев // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. – 2018. – Т. 84, № 2. – С. 28–37. doi: 10.26896/1028-6861-2018-84-2-28-36
4. Объёмное нанофазное упрочнение в монокристаллическом никелевом сплаве ЖС36-ВИ [001] после высокотемпературных выдержек / В. П. Кузнецов, В. П. Лесников, И. П. Конеева [и др.] // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2014. – № 4. – С. 3–6.
5. Оспенникова, О. Г. Создание нового поколения жаропрочных литейных и деформируемых сплавов и сталей – залог успешного развития отечественного двигателестроения / О. Г. Оспенникова // *Металлургия машиностроения*. – 2017. – № 4. – С. 17–20.
6. Размерное несоответствие периодов кристаллических решеток γ - и γ' -фаз в монокристаллах жаропрочных никелевых сплавов / Н. А. Протасова, И. Л. Светлов, М. Б. Бронфин, Н. В. Петрушин // *Физика металлов и металловедение*. – 2008. – Т. 106, № 5. – С. 512–519.
7. *Superalloys* / Edited by M. Aliofkhaeaei. – Rijeka, Croatia : IntechOpen, 2015. – 336 p. doi: 10.5772/59358
8. Caron, J. L. Weldability of Nickel-Base Alloys / J. L. Caron, J. W. Sowards // *Comprehensive Materials Processing*. – 2014. – Vol. 6. – P. 151–179. doi: 10.1016/B978-0-08-096532-1.00615-4
9. High Temperature Properties of a Single Crystal Superalloy Pwa1484 Directly Recycled after Turbine Blade Use / S. Utada, Y. Joh, M. Osawa [et al.] // *Superalloys 2016 : Proceedings of the 13th International Symposium of Superalloys*. – Hoboken, 2016. – P. 589–599. doi: 10.1002/9781119075646.ch63
10. Investigation of the Size Effect of Nickel-Base Superalloy Single Crystals Based on Strain Gradient Crystal Plasticity / J. F. Nie, Z. L. Liu, X. M. Liu, X. C. You, Z. Zhuang // *International Journal for Multiscale Computational Engineering*. – 2009. – Vol. 7. – Iss. 3. – P. 227–236. doi: 10.1615/IntJMultCompEng.v7.i3.60

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

11. Müller, J. On the identification of superdislocations in the γ' -phase of single crystal Ni-base superalloys – An application of the LACBED method to complex microstructures / J. Müller, G. Eggeler, E. Spiecker // Acta Materialia. – 2015. – Vol. 87. – P. 34–44. doi: 10.1016/j.actamat.2014.12.029

О. А. ГЛОТКА^{1*}, С. В. ГАЙДУК²

^{1*}Каф. «Фізичне матеріалознавство», Запорізький національний технічний університет, вул. Жуковського, 64, Запоріжжя, Україна, 69063, тел. +38 (061) 769 82 84, +38 (061) 769 82 82, ел. пошта glotka-alexander@ukr.net, ORCID 0000-0002-3117-2687

²Каф. «Фізичне матеріалознавство», Запорізький національний технічний університет, вул. Жуковського, 64, Запоріжжя, Україна, 69063, тел. +38 (061) 769 82 84, +38 (061) 769 82 82, ел. пошта gayduksv@gmail.com, ORCID 0000-0002-5724-9566

ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОНОКРИСТАЛІЧНИХ ЖАРОМІЦНИХ НІКЕЛЕВИХ СПЛАВІВ

Мета. Робота передбачає отримання прогнозних регресійних моделей, за допомогою яких можна адекватно розраховувати механічні властивості монокристалічних жароміцних нікелевих сплавів (ЖНС) без проведення попередніх експериментів. **Методика.** Для проведення досліджень були обрані промислові сплави для монокристалічного лиття вітчизняного й зарубіжного виробництва. Значення оброблено методом найменших квадратів з отриманням кореляційних залежностей і математичних рівнянь регресійних моделей. **Результати.** Унаслідок обробки експериментальних даних запропоновано співвідношення легувальних елементів, яке може бути використане для оцінки механічних властивостей і враховує комплексний вплив основних компонентів сплаву. Оскільки розмірна невідповідність параметрів решітки пов'язана зі ступенем концентраційного твердорозчинного зміцнення фаз, ефективністю дисперсійного зміцнення сплаву, швидкістю повзучості й іншими властивостями монокристалів, то співвідношення легувальних елементів дозволяє пов'язати ці властивості з багатокомпонентними системами. Наведено регресійні моделі, за допомогою яких можна розрахувати розмірну невідповідність, міцність, жароміцність, кількість фази й густину сплавів із високою точністю. Установлено закономірності впливу складу на властивості монокристалічних жароміцних нікелевих сплавів. Показано, що для багатокомпонентних нікелевих систем можна з високою вірогідністю прогнозувати місфіт, який істотно впливає на характеристики міцності сплавів цього класу. Для монокристалічних жароміцних нікелевих сплавів збільшення значення місфіту супроводжується зниженням межі їх короточасної міцності, оскільки між кристалічними решітками фаз утворюються значні напруження, які сприяють процесам структурної й фазової нестабільності й призводять до передчасного руйнування матеріалу. Установлено кореляційний зв'язок між питомою щільністю й середньою атомною масою сплавів, а також межею їх короточасної міцності. **Наукова новизна.** Уперше запропоновано співвідношення $K\gamma'$, за допомогою якого можна адекватно прогнозувати властивості монокристалічних жароміцних сплавів на нікелевій основі, а також регресійні моделі для прогнозування основних характеристик ливарних монокристалічних сплавів. **Практична значимість.** Показано перспективний та ефективний напрямок у розв'язанні задачі прогнозування основних характеристик, що впливають на комплекс службових властивостей сплавів як під час розробки нових монокристалічних жароміцних нікелевих сплавів, так і під час вдосконалення складу відомих промислових марок цього класу.

Ключові слова: монокристалічні жароміцні нікелеві сплави; ЖНС; розмірна невідповідність; місфіт; міцність; жароміцність

О. А. GLOTKA^{1*}, S. V. HAIDUK²

^{1*}Dep. «Physical Materials Science», Zaporizhzhia National Technical University, Zhukovskiy St., 64, Zaporizhzhia, Ukraine, 69063, tel. +38 (061) 769 82 84, +38 (061) 769 82 82, e-mail glotka-alexander@ukr.net, ORCID 0000-0002-3117-2687

²Dep «Physical Materials Science», Zaporizhzhia National Technical University, Zhukovskiy St., 64, Zaporizhzhia, Ukraine, 69063, tel. +38 (061) 769 82 84, +38 (061) 769 82 82, e-mail gayduksv@gmail.com, ORCID 0000-0002-5724-9566

PREDICTION OF THE PROPERTIES OF SINGLE-CRYSTAL HEAT-RESISTANCE NICKEL ALLOYS

Purpose. This work aims to obtain predictive regression models, with which, one can adequately calculate the mechanical properties of single-crystal heat-resistant nickel alloys, without conducting preliminary experiments. **Methodology.** Industrial alloys for single-crystal casting of domestic and foreign production were selected for the research. Values were processed by the method of least squares with obtaining correlation dependencies with obtaining mathematical equations of regression models. **Findings.** As a result of processing the experimental data, a ratio of alloying elements has been proposed, which can be used to evaluate mechanical properties, which considers the complex effect of the main alloy components. Since the dimensional mismatch of the lattice parameters is related to the degree of solid-solution concentration hardening of the phases, the efficiency of the dispersion hardening of the alloy, the creep rate and other properties of single crystals, the ratio of alloying elements allows these properties to be associated with multi-component systems. The regression models are given, with the help of which it is possible to calculate the size mismatch, strength, heat resistance, amount of phase and density of alloys with high accuracy. The regularities of the influence of the composition on the properties of single-crystal heat-resistant nickel alloys are established. It is shown that for multicomponent nickel systems it is possible to predict with a high degree of confidence a misfit, which has a significant impact on the strength characteristics of alloys of this class. For single-crystal heat-resistant nickel alloys, an increase in the value of misfit is accompanied by a decrease in the limit of their short-term strength, since considerable stresses form between the crystal lattices of the phases, which contribute to structural and phase instability processes leading to premature destruction of the material. A correlation was established between the specific density and the average atomic mass of the alloys, as well as the limit of their short-term strength. **Originality.** For the first time, we proposed the ratio $K\gamma'$ with the help of which it is possible to adequately predict the properties of single-crystal heat-resistant nickel alloys, as well as regression models for predicting the main characteristics of casting single-crystal alloys. **Practical value.** A promising and effective direction in solving the problem of predicting the main characteristics affecting the complex service properties of alloys both in the development of new single-crystal heat-resistant nickel alloys and in improving the compositions of well-known industrial grades of this class is shown.

Keywords: single crystal heat-resistant nickel alloys; HNA; dimensional discrepancy; misfit; strength; heat resistance

REFERENCES

1. Povarova, K. B., Bazyleva, O. A., Drozdov, A. A., Morozov, A. Y., Arginbaeva, E. G., & Antonova, A. V. (2018). Vliyanie termicheskoy obrabotki na dendritnyuyu likvatsiyu i zharoprochnost monokristallov intermetallidnykh splavov na osnove Ni3Al, legirovannykh reniem. *Metal Science and Heat Treatment*, 9, 41-47. (in Russian)
2. Gayduk, S. V. (2015). Primenenie CALPHAD-metoda dlya rascheta kolichestva γ' -fazy i prognozirovaniya dli-telnoy prochnosti liteynykh zharoprochnykh nikelovykh splavov. *Metallurgical and Mining Industry*, 6, 64-68. (in Russian)
3. Kiselev, F. D. (2018). Microstructural Criteria for Determining Thermo-Mechanical Conditions of Operational Vulnerability of the Working Blades of High-Temperature Gas Turbine Aviation Engines. *Industrial laboratory. Diagnostics of materials*, 84(2), 28-37. doi: 10.26896/1028-6861-2018-84-2-28-36 (in Russian)
4. Kuznetsov, V. P., Lesnikov, V. P., Konakova, I. P., & Popov, N. A. (2014). Volume nanophase hardening in single-crystal nickel alloy ZhS36-VI [001] after high-temperature holds. *Metal Science and Heat Treatment*, 4, 3-6. (in Russian)
5. Ospennikova, O. G. (2017). Sozдание novogo pokoleniya zharoprochnykh liteynykh i deformiruemykh splavov i staley – zalog uspehnogo razvitiya otechestvennogo dvigatelestroeniya. *Metallurgy of Machinery Building*, 4, 17-20. (in Russian)
6. Protasova, N. A., Svetlov, I. L., Bronfin, M. B., & Petrushin, N. V. (2008). Lattice-parameter misfits between the and in single crystals of nickel superalloys. *The Physics of Metals and Metallography*, 106(5), 495-502. (in Russian)
7. Aliofkhaeaei, M. (Ed). (2015). Super alloys. Rijeka, Croatia: IntechOpen. doi: 10.5772/59358 (in English)
8. Caron, J. L., & Sowards, J. W. (2014). Weldability of Nickel-Base Alloys. *Comprehensive Materials Processing*, 6, 151-179. doi: 10.1016/b978-0-08-096532-1.00615-4 (in English)

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

9. Utada, S., Joh, Y., Osawa, M., Yokokawa, T., & Harada, H. (2016). High Temperature Properties of a Single Crystal Superalloy PWA1484 Directly Recycled after Turbine Blade Use. In *Superalloys 2016: Proceedings of the 13th International Symposium of Superalloys* (pp. 589-599). Hoboken. doi: 10.1002/9781119075646.ch63 (in English)
10. Nie, J. F., Liu, Z. L., Liu, X. M., You, X. C. & Zhuang, Z. (2009). Investigation of the Size Effect of Nickel-Base Superalloy Single Crystals Based on Strain Gradient Crystal Plasticity. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 7(3), 227-236. doi: 10.1615/IntJMultCompEng.v7.i3.60 (in English)
11. Müller, J., Eggeler, G. & Spiecker, E. (2015). On the identification of superdislocations in the γ' -phase of single crystal Ni-base superalloys – An application of the LACBED method to complex microstructures. *Acta Materialia*, 87, 34-44. doi: 10.1016/j.actamat.2014.12.029 (in English)

Поступила в редколлегию: 06.11.2018

Принята к печати: 15.03.2019