

РАСЧЕТ КОНЦЕНТРАЦИИ ВАКАНСИЙ ПРИ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКОМ НАГРУЖЕНИИ

А.В. Галактионова, А.К. Емалетдинов

Уфимский государственный авиационный технический университет, г. Уфа,
Российская Федерация
E-mail: g-arina@yandex.ru

Рассмотрено моделирование кинетики вакансий при термомеханическом нагружении, которое включает циклические напряжения растяжения и воздействие температуры. Кинетика вакансий определяется диффузионным уравнением с учетом диффузионных и термических напряжений. Получена система уравнений для неоднородной концентрации вакансий для одномерной задачи, решаемая численными методами.

Ключевые слова: термическое расширение; химический потенциал; диффузионные напряжения; неоднородная концентрация вакансий; термоактивационный механизм.

Эволюция вакансионной системы и зарождение пор под действием циклической термомеханической нагрузки определяют долговечность нанокристаллических двухфазных сплавов, например, жаропрочных сплавов, представляющих собой композиционные материалы, состоящие из кубических зерен γ' фазы размером до 0,5 мкм и соединенных тонкими прослойками матричной γ фазы толщиной до 0,05 мкм [1–3]. В процессе эксплуатации сплавы испытывают комплексное воздействие нескольких эксплуатационных факторов: высоких нагрузок, вибрации, неравномерного циклического нагрева. Под действием термомеханических нагрузок происходит зарождение избыточных неравновесных вакансий, активация диффузионных процессов, рост пор. Парциальные коэффициенты диффузии компонентов различны, что также приводит к возникновению потоков вакансий в зернах и прослойках. Исследование кинетики вакансий, роста и залечивания пор в никелевых жаропрочных сплавах в технологиях залечивания пористости было проведено в работах [4–6]. Однако кинетика возникновения и развития избыточной концентрации вакансий при различных видах термомеханического нагружения, которые возникают при эксплуатации, до настоящего времени не исследована.

Целью работы является проведение расчета концентрации вакансий в одномерной модели при термомеханическом нагружении, включающем циклические напряжения растяжения, температурные напряжения и нагрев до высоких температур с учетом микроструктуры.

Рассмотрим бесконечную изотропную пластину, находящуюся под действием постоянных и циклических растягивающих напряжений вдоль и температурного градиента поперек пластины. Для решения задачи об определении межфазных напряжений нужно рассмотреть периодическую ячейку γ'/γ -микроструктуры, состоящую из γ' -кубоида, окруженного γ -оболочкой, которая в свою очередь состоит из трех γ -пластин, трех γ -брусьев и маленького γ -кубоида (рис. 1). В данной статье исследуется задача с учетом изменения коэффициента диффузии при наличии циклических напряжений и градиента температуры.

В процессе нагружения возникает избыточная неоднородная неравновесная концентрация вакансий. В условиях непрерывного изменения температуры развиваются напряжения,

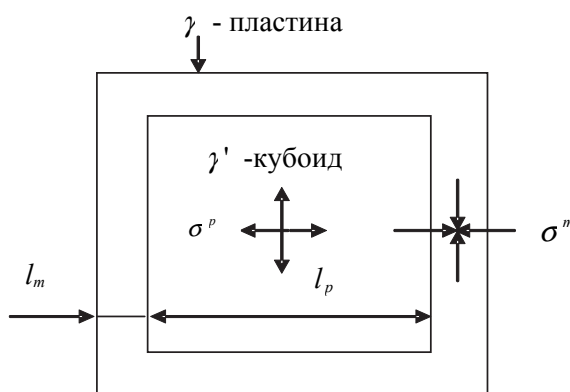


Рис. 1. Схематическая микроструктура жаропрочных никелевых сплавов

возникающие вследствие разницы коэффициентов термического расширения фаз. Кинетика вакансий определяется диффузионным уравнением с источником вакансий по термоактивационному механизму с учетом диффузионных и термических напряжений, а также концентрации напряжений возле включений [7–11]. Межфазные (когерентные) напряжения в γ'/γ -микроструктуре недеформированных жаропрочных никелевых сплавов возникают из-за разности параметров γ - и γ' -решеток.

В работах [12–14] межфазные напряжения рассчитывали в двумерном приближении (плоское деформированное состояние). Согласно принятым допущениям, напряженное состояние периодической ячейки описывается двумя компонентами напряжений σ^m и σ^p (рис. 1).

За счет работы термомеханических нагрузок происходит зарождение избыточных вакансий. Кинетика изменения плотности избыточных вакансий в первом приближении описывается уравнением [7]

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla D \nabla c = \frac{c - c_0}{\tau_0}, \quad (1)$$

где c – избыточная плотность вакансий, c_0 – равновесная плотность вакансий, τ_0 – среднее время жизни вакансий до поглощения стоками (дислокациями, границами и др.), D – коэффициент диффузии вакансий. Характерное время жизни вакансии до поглощения в стоке оценивается выражением [7]

$$\tau_0 = l^2 p / D, \quad (2)$$

где l – среднее расстояние между стоками, p – коэффициент прилипания вакансии. В зависимости от плотности стоков время жизни вакансий может изменяться от 10 до 10^3 с.

В упругом поле напряжений σ и температур T в изотропной среде вакансии будут обладать химическим потенциалом, который может быть представлен в виде [7]

$$\mu = kT \ln\left(\frac{c}{c_0}\right) - \frac{1}{3} \Omega \sigma + \frac{k_T}{cD} T, \quad (3)$$

где Ω – мощность вакансии, характеризующая изменение объема кристалла при образовании в нем вакансии, $\Omega = 3 \cdot 10^{-29} \text{ м}^3$, k_T – термодиффузионное отношение, $\sigma = 0 \div 1,8 \cdot 10^8 \text{ Па}$. Первое слагаемое описывает диффузию вакансий, второе и третье слагаемые характеризуют дрейфовое движение вакансий под действием неоднородных напряжений и температуры соответственно. Равновесная концентрация вакансий определяется соотношением

$$c_0 = \exp\left(\frac{-E + \alpha \Omega}{kT}\right), \quad (4)$$

где E – энергия образования вакансии. Систему уравнений (1)–(4) необходимо дополнить граничными условиями. На неравновесную концентрацию вакансий оказывают влияние концентрационные и диффузионные напряжения, циклическая термомеханическая нагрузка. Величина концентрационных напряжений зависит от размерного несоответствия атомов и модулей сжимаемости компонентов. Диффузионные напряжения возникают вследствие неравных встречных потоков атомов компонентов. В первом приближении в линейной теории упругости суммарные напряжения будут определяться выражением [5–8]

$$\sigma(r) = \sigma_0 + K_0 \Omega c + \sigma_1 - K_0 \alpha_T T(r), \quad (5)$$

где σ_0, σ_1 – значения напряжений центробежных растяжения и вибрационных соответственно, $T = 1193 \div 1293 \text{ К}$, K_0 – модуль всестороннего сжатия, α_T – коэффициент теплового расширения. Первое слагаемое описывает растягивающие центробежные напряжения, второе и третье слагаемые характеризуют концентрационные и вибрационные напряжения, последнее – термоупругие напряжения.

При взаимодействии одиночных избыточных вакансий в поле напряжений и температур возникают неустойчивости, приводящие к образованию кластеров вакансий. Избыточная плотность вакансий c определяется выражением

$$\Delta c = c - c_0 = c_0 \frac{\Delta D}{D} + c_0 \exp\left(\frac{\alpha \Omega}{kT}\right), \quad (6)$$

где $\Delta D = D_m - D_p$; D_m, D_p – коэффициенты диффузии в пластине и кубоиде соответственно. Решение системы уравнений (1)–(6) возможно только численными методами. Для упрощения задачи рассмотрена усредненная по срединной линии γ' -кубоида, одномерная стационарная задача для слоистой системы, состоящей из γ'/γ -микроструктуры с толщиной l_p/l_m соответственно, где $l_p = 0,5 \cdot 10^{-6}$ м, $l_m = 0,05 \cdot 10^{-6}$ м [7, 8]. Задача рассматривается при условии, что величины зависят только от координаты x . На границах заданы условия непрерывности для концентрации и плотности потока вакансий.

На рис. 2 приведены относительные профили неоднородной концентрации вакансий в γ'/γ -микроструктуре, полученные при численных расчетах стационарной одномерной задачи и показывающие пространственные распределения вакансий вдоль оси x . Рис. 3 и рис. 4 показывают изменение избыточной плотности вакансий при воздействии вибрационных напряжений и температуры, соответственно. Изменения значений Δc на рис. 3 соответствуют переменным воздействиям вибрационных напряжений с течением времени.

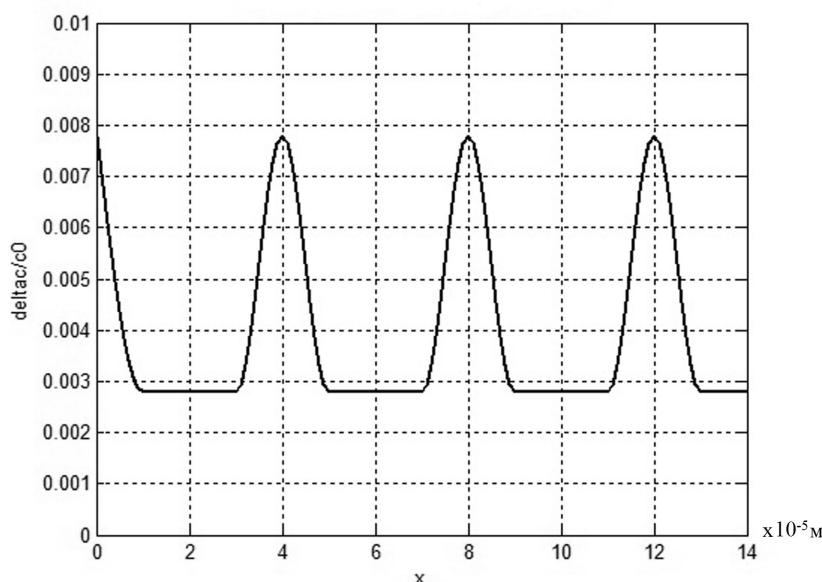


Рис. 2. Профиль зависимости неоднородной стационарной концентрации вакансий от расстояния x в зернах γ' -фазы и γ -прослойке при действии растяжения $\sigma_0 = 1,8 \cdot 10^8$ Па и температуры $T = 1100$ К

При моделировании использованы следующие значения параметров: $\sigma_0 = 180$ МПа, $\alpha_{Tm} = 18,1 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$, $\alpha_{Tp} = 11,9 \cdot 10^{-6} \text{ К}^{-1}$, $T = 1100$ К, $D_p = 3,2 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$, $D_m = 2 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$, $\sigma_1 = 5 \cdot 10^7$ Па, $\tau_0 = 10$ с.

Таким образом, в наноструктурном сплаве при термомеханической нагрузке возникает значительное пересыщение неравновесных вакансий.

Рассматривая решетку с избыточными вакансиями как пересыщенный раствор, можно рассмотреть различные механизмы их релаксации, например, образование и рост пор. В рамках механизма диффузионно-деформационной неустойчивости при достижении критического значения избыточных вакансий может возникнуть явление восходящей диффузии, когда малые локальные флуктуационные превышения концентрации вакансий начинают расти. Рост обусловлен снижением энергии Гиббса в области повышенной концентрации вакансий, вызванным действием термомеханических напряжений. Для зависимости скорости роста флуктуации \dot{r}_F от времени можно использовать уравнение [7] $\dot{r}_F \cong D \Delta c_v / r c_0$.

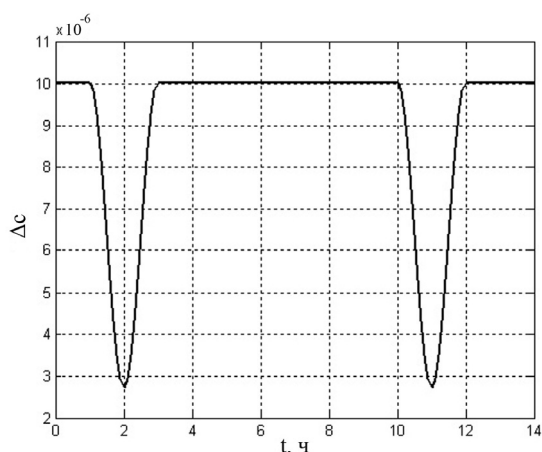


Рис. 3. Изменение избыточной плотности вакансий в зависимости от времени

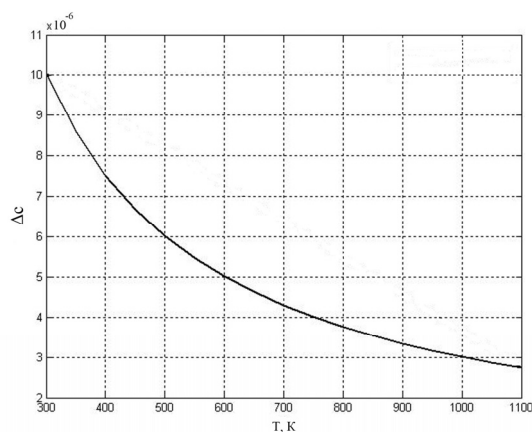


Рис. 4. Изменение избыточной плотности вакансий в зависимости от температуры

Используя параметры для никеля можно оценить время зарождения $t_F \cong 10^{-1}$ с. Благодаря пересыщению вакансий флуктуация может расти в виде поры до размера r_{II} за время t_3 : $r_{II} \cong \sqrt{2D\Delta c_v t_3 / c_0} \cong 0,5 \cdot 10^{-6}$ м.

Исследование жаропрочного никелевого сплава ЖС32-ВИ в монокристаллических охлаждаемых рабочих лопатках ТВО методом растровой электронной микроскопии показало, что при действии растягивающих напряжений при средней температуре 1100К поры размером до 1 мкм образуются в γ' - матрице [4].

Таким образом, полученное соответствие теоретических оценок с экспериментальными данными говорит об адекватности предложенной модели.

Литература

1. Шалин, Р.Е. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов / Р.Е. Шалин, И.Л. Светлов, Е.Б. Качанов. – М.: Машиностроение, 1977. – 336 с.
2. Каблов, Е.Н. Литые лопатки газотурбинных двигателей. Сплавы, технология, покрытия / Е.Н. Каблов. – М.: МИСиС, 2001. – 632 с.
3. Богуслаев, В.А. Технологическое обеспечение эксплуатационных характеристик деталей ГТД / В.А. Богуслаев, Ф.М. Муравченко, П.Д. Жеманюк. – Запорожье: ОАО «Мотор Сич», 2003. – т.1, 2.
4. Орлов, М.Р. Технологическое обеспечение ресурса рабочих лопаток первых ступеней турбины авиационных и наземных газотурбинных двигателей: дис. ... д-ра техн. наук / М.Р. Орлов. – М., 2008. – 203 с.
5. Рост и залечивание пор в монокристаллах жаропрочных сплавов на никелевой основе / Б. Бокштейн, А. Епишин, И. Светлов и др. // Функциональные материалы. – 2007. – Т. 1, № 5. – с. 75–79.
6. Светлов, И.Л. Исследование высокотемпературной ползучести и дефектности структуры монокристаллов никелевого жаропрочного сплава после горячего изостатического прессования / И.Л. Светлов, И.В. Исходжанова, Л.Г. Евченко // Деформация и разрушение материалов. – 2011. – № 3. – С. 28–32.
7. Гегузин, Я.Е. Диффузионная зона / Я.Е. Гегузин. – М.: Наука, 1979. – 343 с.
8. Каблов, Е.Н. Механизмы образования пористости в монокристаллических лопатках турбины и кинетика ее устранения при горячем изостатическом прессовании / Е.Н. Каблов, М.Р. Орлов, О.Г. Оспенникова // Авиационные материалы и технологии. – 2012. – № 8. – С. 48–54.

9. Большаков, В.И. Асимптотические методы расчета композитных материалов с учетом внутренней структуры / В.И. Большаков, В.И. Андрианов, В.В. Данишевский. – Днепропетровск: Пороги, 2008. – 196 с.
10. Ванин, Г.А. Микромеханика композиционных материалов / Г.А. Ванин. – Киев: Наукова Думка, 1985. – 304 с.
11. Кулемин, А.В. Ультразвук и диффузия в металлах / А.В. Кулемин. – М.: Металлургия, 1978. – 200 с.
12. Скубачевский, Г.С. Авиационные и газотурбинные двигатели. Конструкция и расчет деталей / Г.С. Скубачевский. – М.: Машиностроение, 1981. – 550 с.
13. Müller, L. Modelling of thermal misfit stresses in nickel-base superalloy containing high volume fraction of γ' -phase / L. Müller, U. Glatzel, M. Feller-Kniepmeier // Acta metal, mater. – 1992. – Vol. 40, № 6. – P. 1321–1327.
14. Socrate, S. Numerical determination of the elastic driving force for directional coarsening of Ni-superalloys / S. Socrate, D.M. Parks // Acta metal, mater. – 1993. – Vol. 41, № 7. – P. 2185–2209.
15. Расчет термических напряжений и термостойкость анизотропных материалов / А.П. Кривко, А.П. Епишин, И.Л. Светлов, А.И. Самойлов // Проблемы прочности. – 1989. – № 2. – С. 3–9.

Поступила в редакцию 26 июня 2015 г.

DOI: 10.14529/mmph160210

CALCULATION OF VACANCY CONCENTRATION UNDER THERMO-MECHANICAL LOADING

A.V. Galaktionova, A.K. Emaletdinov

Ufa State Aviation Technical University, Ufa, Russian Federation
E-mail: g-arina@yandex.ru

The evolution of vacancy system and pore emergence under the influence of cyclic thermo-mechanical loading determines the durability of the nanocrystalline two-phase alloys such as superalloys, which are composite materials. The emergence of excess non-equilibrium vacancies, the activation of diffusion processes and the pore growth occur under the influence of thermo-mechanical loading. However, kinetics of the emergence and evolution of the excess vacancy concentration at various kinds of thermo-mechanical loading arising during the operation process have not been investigated yet. In this paper, the vacancy concentration in the one-dimensional model for thermo-mechanical loading including cyclic tensile stresses, thermal stresses and heating to high temperature taking into account microstructure is calculated. The considerable supersaturation of non-equilibrium vacancies arises in nanostructured alloys under the influence of thermo-mechanical loading. The rising of diffusion may occur at a critical value of excess vacancies as part of the diffusion-deformation stability mechanism, when small local fluctuation of excess vacancy concentration begins to grow. The growth occurs due to a Gibbs energy decrease in the increased vacancy concentration caused by the influence of thermo-mechanical stresses.

Keywords: thermal expansion; chemical potential; diffusion stresses; inhomogeneous concentration of vacancies; thermal activation mechanism.

References

1. Shalin P.E., Svetlov I.L., Kachanov, E.B. *Monokristally nikelovykh zharoprochnykh splavov* [Monocrystals of nickel heat-resisting alloys]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1977, 336 p. (in Russ.).
2. Kablov E.N. *Litye lopatki gazoturbinykh dvigateley. Splavy, tekhnologiya, pokrytiya* [Cast blades of gas-turbine engines. Alloys, technology coating]. Moscow, MISiS Publ., 2001, 632 p. (in Russ.).

3. Boguslaev V.A., Muravchenko F.M., Zhemanyuk P.D. *Tekhnologicheskoe obespechenie ekspluatatsionnykh kharakteristik detaley GTD. Ch. 1, 2.* [Technological support for performance of GTE parts. Part 1, 2]. Zaporozh'e, Motor Sich Publ., 2003. (in Russ.).
4. Orlov M.R. *Tekhnologicheskoe obespechenie resursa rabochikh lopatok pervykh stupeney turbiny aviatsionnykh i nazemnykh gazoturbinnnykh dvigateley: dis. ... d-ra tekhn. nauk* [Technological support for the resource rotor blades of the first stages of the turbine aviation and land-based gas turbine engines. Dr. eng. sci. diss.]. Moscow, 2002, 215 p. (in Russ.).
5. Bokshiteyn B., Epishin A., Svetlov I., Esin V., Rodin A., Link T. *Functional Materials*. 2007, Vol. 1, no. 5, pp. 75–79. (in Russ.).
6. Svetlov I.L., Iskhodzhanova I.V., Evchenov L.G. *Deformatsiya i razrushenie materialov*, 2011, no. 3, pp. 28–32. (in Russ.).
7. Geguzin Ya.E. *Diffuzionnaya zona* [Diffusion zone]. Moscow, Nauka Publ., 1979, 343 p. (in Russ.).
8. Kablov E.N., Orlov M.R., Ospennikova O.G. *Aviatsionnye materialy i tekhnologii*, 2012, no. 8, p. 48–54. (in Russ.).
9. Bol'shakov V.I., Andrianov V.I., Danishevskiy V.V. *Asimptoticheskie metody rascheta kompozitnykh materialov s uchetom vnutrenney struktury* [Asymptotic methods of calculation of composite materials based on the internal structure]. Dnepropetrovsk, Porogi Publ., 2008, 196 p. (in Russ.).
10. Vanin G.A. *Mikromekhanika kompozitsionnykh materialov* [Micromechanics of composite materials]. Kiev: Naukova Dumka Publ., 1985, 304 p. (in Russ.).
11. Kulemin A.V. *Ul'trazvuk i diffuziya v metallakh* [Ultrasound and diffusion in metals]. Moscow, Metallurigiya Publ., 1978, 200 p. (in Russ.).
12. Skubachevskiy G.S. *Aviatsionnye i gazoturbinnnye dvigateli. Konstruktsiya i raschet detaley* [Air and gas turbine engines. Structure and calculation of details]. Moscow, Mashinostroenie Publ., 1981. 550 p. (in Russ.).
13. Müller L., Glatzel U., Feller-Kniepmeier M. Modelling of thermal misfit stresses in nickel-base superalloy containing high volume fraction of γ' -phase. *Acta metal, mater*, 1992, Vol. 40, no. 6, pp. 1321–1327. DOI: 10.1016/0956-7151(92)90433-f
14. Socrate S., Parks D.M. Numerical determination of the elastic driving force for directional coarsening of Ni-superalloys. *Acta metal, mater*, 1993, Vol. 41, no. 7, pp. 2185–2209. DOI: 10.1016/0956-7151(93)90389-a
15. Krivko A.P., Epishin A.P., Svetlov I.L., Samoylov A.I. *Problemy prochnosti*, 1989, no. 2, pp. 3–9. (in Russ.).

Received June 26, 2015