

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

ПРИМЕНЕНИЕ CALPHAD-МЕТОДА К РАСЧЕТУ ФАЗОВОГО СОСТАВА ЛИТЕЙНОГО СВАРИВАЕМОГО ЖАРОПРОЧНОГО КОРРОЗИОННОСТОЙКОГО НИКЕЛЕВОГО СПЛАВА С ТАНТАЛОМ

Компьютерным моделированием термофизических процессов, основанных на расчетном методе CALPHAD, оценено влияние тантала в исследованном диапазоне легирования от 1,0 до 10,0% (по массе) на фазовый состав многокомпонентной никелевой системы Ni-16Cr-5Co-2,7Al-2,7Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C. Представлены результаты расчетов количества и химического состава отдельных фаз в опытных сплавах с танталом в исследованном диапазоне, в сравнении с исходным составом без тантала.

Ключевые слова: литейные жаропрочные коррозионностойкие никелевые сплавы, система легирования, количество и состав фаз, γ - твердый раствор, γ' - фаза, карбиды, температуры выделения и растворения фаз.

Введение

Анализ химических составов современных отечественных и зарубежных литейных жаропрочных никелевых сплавов показал, что данный класс материалов содержит тантал в довольно широком диапазоне (1–12%) по массе, что объясняется различным содержанием в них хрома, который ограничивает растворимость тантала в γ -твердом растворе никеля. Существенный прогресс в области повышения характеристик жаропрочности литейных никелевых сплавов, особенно с направленной и монокристаллической структурой достигнут за счет легирования танталом, который ранее в отечественных сплавах, не применялся из-за экономических соображений [1–5].

До настоящего времени информации по влиянию отдельных легирующих элементов на количество и химический состав фаз в многокомпонентных никелевых системах явно недостаточно. Вместе с тем, известно, что более половины алюминия может быть замещено титаном, и что небольшая часть хрома, кобальта, вольфрама и других элементов, содержащихся в сплаве, связана в γ' - фазе. При этом, более половины общего количества ниобия и тантала может входить в состав γ' - фазы (30–33%) и γ - твердого раствора, при этом (0,2–0,3%) содержится в карбонитридных фазах типа Nb(C, N), Ta(C, N), но количественной связи между химическим составом сплава и составом фаз не установлено [2–4].

В последнее время для изучения этих вопросов широко применяются различные прогнозирующие математические методы [6–11], а также компьютерное моделирование процессов кристаллизации (охлаждения) или нагрева многоком-

понентных систем, основанное на расчетном методе CALPHAD [12–13]. Компьютерное моделирование данных процессов позволяет проводить прогнозирующие теплофизические расчеты качественного и количественного состава фаз для конкретной многокомпонентной никелевой системы, а также оценить влияние нового вводимого легирующего элемента, например тантала, на количественный и качественный состав фаз.

Расчетный метод CALPHAD является эффективным инструментом для проведения достоверных термофизических расчетов и получения недостающей информации, основанной на надежных физических принципах, что обладает рядом значительных преимуществ по сравнению с известными методами математической статистики.

Постановка задачи

Целью настоящей работы является сравнительная оценка влияния тантала в исследованном диапазоне легирования (1,0–10,0%) на качественный и количественный фазовый состав многокомпонентной системы Ni-16Cr-5Co-2,7Al-2,7Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C (сплав ЖСЗЛС, средний уровень легирования) с помощью расчетного метода CALPHAD. Расчеты, полученные методом компьютерного моделирования, позволят без проведения многочисленных прямых экспериментов рассчитать температуры выделения и растворения отдельных фаз, их тип, количество и химический состав, оценить влияние тантала в исследуемом диапазоне легирования на специфику распределения легирующих элементов в составе фаз, а также с высокой степенью достоверности прогнозировать наиболее

вероятный фазовый состав при окончательном формировании структуры в опытных сплавах после кристаллизации [14–17].

Анализ результатов

В таблицах 1 и 2 приведены данные, полученные методом CALPHAD, по оценке влияния тантала в исследованном диапазоне легирования (1,0–10,0%) на температуры выделения фаз, их тип и количество, которые с наибольшей вероятностью сформируют структуру после кристаллизации сплава системы Ni-16Cr-5Co-2,7Al-2,7Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C.

Результаты, приведенные в таблице 1 показывают, что с повышением содержания тантала в исследованном диапазоне в сплаве вышеприведенной многокомпонентной системы количество основной упрочняющей γ' - фазы увеличивается на ~ 15 %, по сравнению с исходным составом без тантала.

Установлено, что суммарное количество карбидной фазы практически не изменяется, однако увеличивается более, чем в 2 раза, объемная доля карбидов типа MC с 0,53% в составе без тантала до 1,23% в составе, содержащем тантал 10,0% (по массе). При этом объемная доля карбидов типа

Таблица 1 – Влияние тантала на тип и количество выделившихся фаз в сплаве системы Ni-16Cr-5Co-2,7Al-2,7Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C, рассчитанные методом CALPHAD

Тип и объемная доля выделившихся фаз для температуры 20 °С, % (масс.)					
Ta, %	γ	γ'	MC	M ₂₃ C ₆	M ₃ B ₂
0,0	59,33	38,20	0,53	1,76	0,18
1,0	57,87	39,65	0,60	1,70	0,18
2,0	56,35	41,17	0,68	1,62	0,18
3,0	54,79	42,73	0,77	1,53	0,18
4,0	53,12	44,40	0,86	1,44	0,18
Тип и объемная доля выделившихся фаз для температуры 20 °С, % (масс.)					
Ta, %	γ	γ'	MC	M ₂₃ C ₆	M ₃ B ₂
5,0	51,30	46,22	0,94	1,36	0,18
6,0	49,42	48,10	1,01	1,29	0,18
7,0	47,52	50,00	1,07	1,23	0,18
8,0	45,61	51,91	1,13	1,17	0,18
9,0	43,69	53,83	1,18	1,12	0,18
10,0	44,54	52,98	1,23	1,07	0,18

Таблица 2 – Влияние тантала на температуры выделения фаз в системе Ni-16Cr-5Co-2,7Al-2,7Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C, рассчитанные методом CALPHAD

Температуры растворения (выделения) фаз, °С					
Ta, %	γ	γ'	MC	M ₂₃ C ₆	M ₃ B ₂
0,0	1365,10	1293,76	1330,68	1042,87	1198,41
1,0	1360,00	1290,42	1327,99	1039,36	1199,78
2,0	1354,53	1286,35	1325,03	1034,07	1200,86
3,0	1348,95	1281,51	1321,92	1027,21	1201,75
4,0	1343,16	1275,90	1318,73	1019,29	1202,54
5,0	1337,16	1269,55	1315,53	1010,80	1203,25
6,0	1330,94	1262,48	1312,36	1001,95	1203,91
7,0	1324,49	1254,74	1309,24	991,51	1204,50
8,0	1317,81	1246,37	1306,19	979,06	1205,00
9,0	1310,89	1237,38	1303,22	963,67	1205,41
10,0	1303,72	1227,80	1300,34	950,00	1205,70

$M_{23}C_6$ уменьшается более, чем в 1,5 раза.

Расчеты показывают, что с увеличением содержания тантала в исследованной многокомпонентной никелевой системе, происходит изменение соотношения в механизме карбидного упрочнения в сторону образования большего количества карбидов типа MC. При этом происходит торможение процесса образования менее термодинамически стойких карбидов типа $M_{23}C_6$ с выделением большего количества более благоприятных и термически стабильных карбидов типа MC (табл. 1).

Из рисунка 1 и таблицы 2 видно, что с повышением содержания тантала в исследованной многокомпонентной никелевой системе температура выделения карбидов типа MC несколько снижается, а боридов типа M_3B_2 незначительно

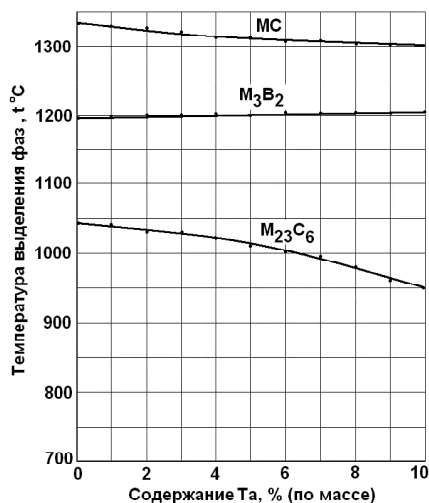


Рис. 1. Влияние тантала на температуры выделения карбидов и боридов в сплаве системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C

повышается, оставаясь при этом достаточно стабильными. В то же время наблюдается заметное снижение температуры выделения (растворения) карбидов типа $M_{23}C_6$ во всем исследованном диапазоне легирования. При этом расчеты также показывают, что в фазовом составе опытных сплавов вероятно выделение незначительного количества боридов типа M_3B_2 (~0,18 %), температура выделения (растворения) которых с увеличением содержания тантала до 10,0 % по массе повышается на ~7 °С, по сравнению с исходным составом без тантала.

В таблицах 3–6 и на рисунках 2–4 представлены результаты расчетов наиболее вероятного химического состава фаз после кристаллизации многокомпонентной системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C без тантала и с танталом в исследованном диапазоне легирования (1,0–10,0%) по массе.

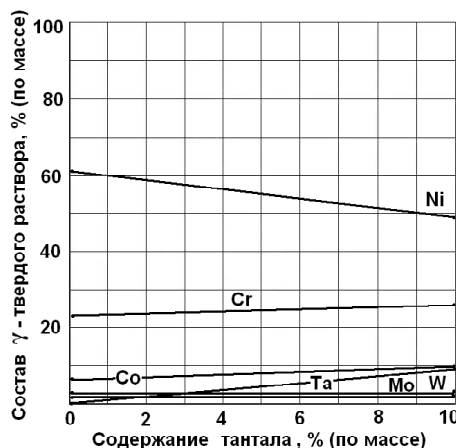


Рис. 2. Влияние тантала на распределение элементов в составе γ- твердого раствора сплава системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C

Таблица 3 – Расчетный химический состав γ- твердого раствора сплава системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C без тантала и с танталом

Ta, % (по массе)	Химический состав γ- твердого раствора при 20 °С, % (масс.)									
	Ni	Cr	Co	Al	Ti	Mo	W	Ta	C	B/Zr
0,0	62,08	23,13	7,43	0,51	-	3,89	2,96	-	-	-/-
1,0	60,90	23,95	7,74	-	-	3,68	2,81	0,92	-	-/-
2,0	59,20	24,83	8,07	-	-	3,46	2,65	1,79	-	-/-
3,0	57,40	25,77	8,42	-	-	3,25	2,49	2,67	-	-/-
4,0	55,70	26,39	8,82	-	-	3,12	2,39	3,58	-	-/-
5,0	54,42	26,41	9,13	-	-	3,06	2,47	4,51	-	-/-
6,0	53,32	26,37	9,31	-	-	2,96	2,61	5,43	-	-/-
7,0	52,21	26,31	9,48	-	-	2,86	2,76	6,38	-	-/-
8,0	51,10	26,23	9,65	-	-	2,76	2,92	7,34	-	-/-
9,0	50,03	26,11	9,81	-	-	2,66	3,09	8,30	-	-/-
10,0	48,88	26,06	9,98	-	-	2,57	3,24	9,27	-	-/-

Сравнительные результаты таблицы 3 и рисунка 2 показали, что с повышением содержания тантала в исследованном диапазоне (1,0–10,0%) в сплаве вышеприведенной многокомпонентной системы повышается его содержание в γ' -твердом растворе и его химический состав изменяется. Результаты расчетов по распределению легирующих элементов в γ' -твердом растворе на основе никеля показали, что в его составе присутствуют: хром (23–26%), кобальт (7–9%), которые по своему содержанию почти в 1,5–2 раза выше их среднего содержания в сплаве (Cr – 16,0%) и (Co – 5,0%) соответственно. Содержание молибдена и вольфрама в твердом растворе незначительно ниже, чем их содержание в составе среднего уровня легирования. С увеличением содержания тантала повышается его содержание в составе γ' -твердого раствора во всем исследованном диапазоне легирования. Так, при содержании тантала 10% по массе его концентрация в γ' -твердом растворе составляет 9,27%. При этом наблюдается повышение концентрации хрома на ~3% и кобальта на ~2% при снижении никеля на ~14% (см. табл. 3).

Анализ результатов таблицы 4 и рисунка 3 показал, что с повышением содержания тантала в исследованном диапазоне (1,0–10,0%) в сплаве системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C изменяется химический состав γ' -фазы.

Расчеты показывают, что тантал являясь γ' -образующим элементом, входит в состав γ' -фазы. При этом следует отметить, что, тантал влияет на общее количество выделяющейся γ' -фазы в опытных составах (см. табл. 1) и заметно изменяет ее химический состав (табл. 4), тем самым улучшая термическую стабильность за счет повышения температуры полного растворения в γ' -твердом растворе (табл. 2).

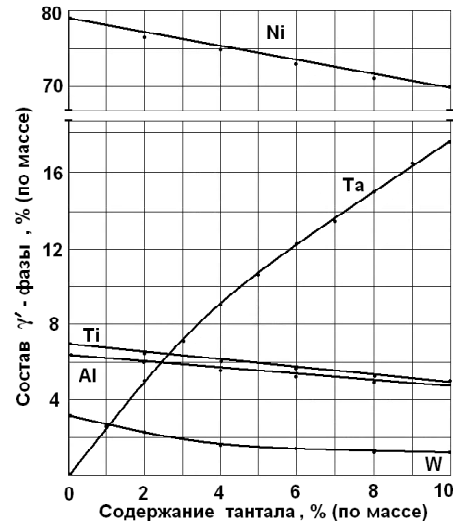


Рис. 3. Влияние содержания тантала на распределение элементов в составе γ' -фазы сплава системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C

Так, при содержании тантала 10,0% по массе, его количество в составе γ' -фазы составляет (16,72%). При этом снижается количество никеля на ~10%, а алюминия, титана и хрома по ~2%. Количество кобальта остается стабильным, в то время как постепенно снижаются концентрации молибдена и вольфрама.

Расчеты по распределению легирующих элементов в химическом составе γ' -фазе на основе интерметаллида Ni_3Al показали, что содержание алюминия ~6,3% и титана ~6,9%, основных γ' -образующих элементов, приблизительно в 2 раза выше, чем их содержание в составе сплава среднего уровня легирования (Al ~2,7%) и (Ti ~2,7%) соответственно. Наряду с кобальтом,

Таблица 4 – Расчетный химический состав γ' -фазы

Ta, % (по массе)	Химический состав γ' -фазы при 20 °С, % (масс.)									
	Ni	Cr	Co	Al	Ti	Mo	W	Ta	C	B/Zr
0,0	78,29	2,67	1,90	6,32	6,97	0,60	3,25	-	-	-/-
1,0	77,22	2,31	1,79	6,19	6,72	0,49	2,80	2,48	-	-/-
2,0	76,22	2,01	1,71	6,04	6,48	0,39	2,39	4,76	-	-/-
3,0	75,25	1,76	1,64	5,90	6,25	0,31	2,02	6,87	-	-/-
4,0	74,29	1,55	1,59	5,74	6,02	0,26	1,73	8,82	-	-/-
5,0	73,36	1,37	1,55	5,57	5,79	0,22	1,55	10,59	-	-/-
6,0	72,49	1,22	1,50	5,40	5,56	0,19	1,43	12,21	-	-/-
7,0	71,66	1,10	1,46	5,24	5,35	0,16	1,32	13,71	-	-/-
8,0	70,88	1,00	1,43	5,08	5,16	0,14	1,23	15,08	-	-/-
9,0	70,13	0,91	1,40	4,92	5,08	0,12	1,14	16,30	-	-/-
10,0	69,93	0,89	1,37	4,86	5,00	0,11	1,12	16,72	-	-/-

в состав γ' -фазы входит вольфрам, содержание которого несколько ниже, чем в исходном составе без тантала. Установлено, что при содержании тантала 3,0% по массе концентрация его в составе γ' -фазы заметно повышается и составляет 6,87%. При дальнейшем увеличении содержания тантала в диапазоне (3,0–10,0%) его концентрация в составе γ' -фазы повышается более, чем в 2 раза (табл. 4, рис. 3).

Анализ результатов расчетов, приведенных в таблице 5 и на рисунке 4 показал, что с повышением содержания тантала в исследованном диапазоне (1,0–10,0%) в сплаве системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C химический состав карбидов типа MC существенно изменяется.

Расчеты показали, что тантал является мощным карбидообразующим элементом, так как составляет основу карбидов типа MC. При этом следует отметить, что положительно влияя на объемную долю карбидов данного типа (см. табл. 1), тантал существенно изменяет их химический состав (табл. 5) и улучшает морфологию, что позитивно повлияет на прочностные характеристики. Так, расчеты состава карбидов типа MC показали, что в их состав входят титан и вольфрам, концентрация которых заметно снижается при содержании тантала 1,0% по массе. Дальнейшее увеличение содержания тантала в исследованном диапазоне легирования (1,0–10,0%) приводит к существенному снижению концентраций титана, а также углерода в составе карбидов типа MC. При содержании в опытном составе тантала 10,0% он является основой карбидов типа MC, при этом концентрация вольфрама снижается почти в 50 раз.

Следует отметить, что с повышением содержания тантала в исследованном диапазоне легирования (1,0–10,0%), его концентрация в составе карбидов типа MC на порядок выше, чем его содержание в опытных составах, что подтверждает его мощную карбидообразующую способность к формированию карбидов типа MC.

Анализ результатов расчетов, представленных в таблице 6 показал, что с повышением содержания тантала в исследованном диапазоне (1,0–10,0%) в сплаве системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C химический состав карбидов типа $M_{23}C_6$ не изменяется и остается стабильным. Тантал не входит в состав карбидов данного типа.

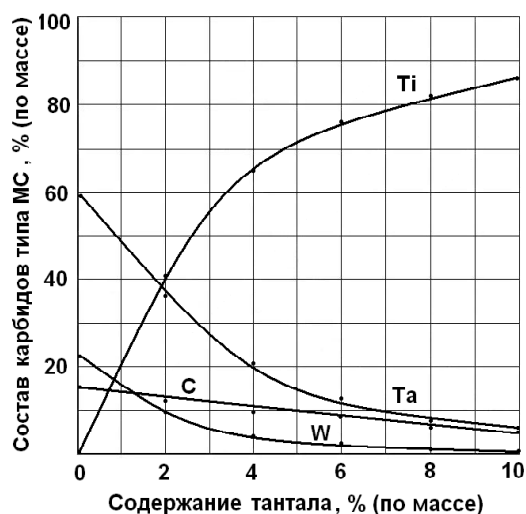


Рис. 4. Влияние тантала на распределение элементов в составе карбидов типа MC в сплаве системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C

Таблица 5 — Расчетный химический состав карбидов типа MC

Ta, % (по массе)	Химический состав карбидов типа MC при 20 °С, % (масс.)									
	Ni	Cr	Co	Al	Ti	Mo	W	Ta	Zr	C
0,0	—	0,87	—	—	59,24	0,88	22,46	—	0,79	15,76
1,0	—	0,70	—	—	47,39	0,79	15,17	21,44	0,67	13,84
2,0	—	0,52	—	—	36,43	0,67	9,22	40,38	0,71	12,07
3,0	—	0,36	—	—	27,49	0,53	5,25	55,00	0,74	10,63
4,0	—	0,25	—	—	20,97	0,42	3,03	65,00	0,75	9,58
5,0	—	0,17	—	—	16,39	0,32	2,47	71,06	0,76	8,83
6,0	—	0,12	—	—	13,12	0,25	1,66	75,81	0,75	8,29
7,0	—	—	—	—	10,52	0,19	1,15	79,54	0,74	7,86
8,0	—	—	—	—	8,40	0,14	0,73	82,47	0,75	7,51
9,0	—	—	—	—	6,73	0,11	0,52	84,63	0,75	7,26
10,0	—	—	—	—	5,83	—	0,46	85,80	0,77	7,14

Таблица 6 – Расчетный химический состав карбидов типа $M_{23}C_6$

Ta, % (по массе)	Химический состав карбидов типа $M_{23}C_6$ при 20 ⁰ C, % (масс.)									
	Ni	Cr	Co	Al	Ti	Mo	W	Ta	C	B/Zr
0,0	4,44	69,31	1,02	–	–	19,93	0,18	–	5,12	–/–
1,0	4,09	69,73	0,98	–	–	19,87	0,21	–	5,12	–/–
2,0	3,77	70,15	0,95	–	–	19,79	0,21	–	5,13	–/–
3,0	3,45	70,57	0,91	–	–	19,69	0,25	–	5,13	–/–
4,0	3,26	70,81	0,90	–	–	19,63	0,27	–	5,13	–/–
5,0	3,25	70,80	0,94	–	–	19,60	0,28	–	5,13	–/–
6,0	3,22	70,81	0,96	–	–	19,57	0,31	–	5,13	–/–
7,0	3,21	70,82	0,98	–	–	19,52	0,34	–	5,13	–/–
8,0	3,19	70,83	1,00	–	–	19,48	0,37	–	5,13	–/–
9,0	3,17	70,85	1,02	–	–	19,43	0,40	–	5,13	–/–
10,0	3,15	70,86	1,04	–	–	19,38	0,44	–	5,13	–/–

При этом следует отметить, что снижая объемную долю карбидов типа $M_{23}C_6$ и температуру их выделения (см. табл. 1, рис. 1), тантал не влияет на их химический состав (табл. 6). Так, при легировании танталом в исследованном диапазоне (1,0–10,0%) химический состав карбидов типа $M_{23}C_6$ остается стабильным, при этом его основу составляют хром (~ 70%) и молибден (~ 20%), что говорит о сильной карбидообразующей способности хрома к формированию карбидов данного типа. При этом количество никеля, кобальта, вольфрама и углерода практически не изменяется.

Как отмечалось выше, в фазовом составе исследованных опытных сплавов возможно выделение небольшого количества (0,18%) боридов типа M_3B_2 расчетного состава, которые содержат хром в пределах (19,95–20,15%), молибден (71,60–71,34%) и бор (8,16–8,17%).

Результаты приведенных расчетов хорошо согласуются с расчетными [6–10] и экспериментальными данными [1–4, 18, 19], полученными на известных промышленных жаропрочных никелевых сплавах.

Выводы

1. С повышением содержания тантала в исследованном диапазоне (1,0–10,0%) в сплаве системы Ni-16Cr-5Co-3Al-3Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C количество γ' - фазы увеличивается на 15% по массе, при этом, также увеличивается содержание тантала и в химическом составе γ' - фазы. За счет этого повышается температура ее полного растворения в γ - твердом растворе более, чем на 30 °C, а следовательно, повышается ее термическая стабильность.

2. Суммарное количество карбидной фазы в исследованной многокомпонентной никелевой системе практически не изменяется при легиро-

вании танталом в исследованном диапазоне, однако увеличивается объемная доля термически более стойких карбидов типа MC и уменьшается количество менее стойких карбидов типа $M_{23}C_6$.

3. С повышением содержания тантала в исследованном диапазоне легирования (1,0–10,0%), его концентрация в составе карбидов типа MC заметно повышается, при этом одновременно снижаются концентрации титана и вольфрама, что подтверждает мощную карбидообразующую способность тантала к образованию карбидов типа MC на своей основе.

4. При легировании танталом в исследованном диапазоне (1,0–10,0%) химический состав карбидов типа $M_{23}C_6$ практически не изменяется. Тантал не входит в их состав, а основу карбидов данного типа составляет хром (~ 70%). При этом, в состав карбидов данного типа может входить до ~ 20% молибдена, а также незначительное количество никеля до 4,5%.

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. 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.
3. 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.

4. Кишкин С. Т. Литейные жаропрочные сплавы на никелевой основе / Кишкин С. Т., Строганов Г. Б., Логунов А. В. – М.: Машиностроение, 1987. – 116 с.
5. Симс Ч.Т. Суперсплавы II. Жаропрочные материалы для аэрокосмических и промышленных энергоустановок / Ч. Т. Симс, Н. С. Столофф, У. К. Хагель; пер. сангл. под ред. Р. Е. Шалина. – М.: Металлургия, 1995. – Кн. 1, 2. – 384 с.
6. Ганеев А. А. Разработка методики автоматизированного проектирования литейных никелевых стоматологических сплавов / А. А. Ганеев, Е. Ф. Шайхутдинова // Вестник УГАТУ. – 2011. – Т. 15. – № 5(45). – С. 47–53.
7. Ганеев А. А. Технология синтеза литейных жаропрочных никелевых сплавов, основанная на концепциях активного и пассивного экспериментов / А. А. Ганеев, П. Н. Никифоров // Ползуновский альманах. – 2004. – № 4. – С. 142–145.
8. Жуков А. А. Оценка температуры полного растворения γ' - фазы жаропрочных никелевых сплавов на основе анализа двойных диаграмм состояния / А. А. Жуков, О. А. Смирнова // Заготовительные производства в машиностроении. – 2004. – № 11. – С. 44–47.
9. Аналитический метод оптимизации легирования жаропрочных никелевых сплавов / [А.И. Самойлов, Г.И. Морозова, А.И. Кривко и др.] // Материаловедение. – 2000. – № 2. – С. 14–17.
10. Шайхутдинова Е.Ф. Синтез сплавов с применением интеллектуальных математических методов / Е. Ф. Шайхутдинова, А. А. Ганеев, А. И. Мезенцева // Ползуновский альманах. – 2011. – № 4. – С. 5–9.
11. Шкляев С. Э. Современные возможности компьютерного моделирования металлургических процессов / [С. Э. Шкляев, Л. Н. Маркова, Л. Т. Афанасьева и др.] // Электрометаллургия. – 2012. – № 12. – С. 39–43.
12. 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. – 803 p.
13. Горбачев И. И. Термодинамическое моделирование системы Fe-V-Nb-C-N на основе CALPHAD-метода / И. И. Горбачев, В. В. Попов // Физика металлов и металловедение. – 2011. – Т. 111. – № 5. – С. 518–525.
14. Попов В. В. Анализ растворимости карбидов, нитридов и карбонитридов в сталях методами компьютерной термодинамики. I. Описание термодинамических свойств. Метод расчета / В. В. Попов, И. И. Горбачев // Физика металлов и металловедение. – 2004. – Т. 98. – № 4. – С. 11–21.
15. Попов В. В. Анализ растворимости карбидов, нитридов и карбонитридов в сталях методами компьютерной термодинамики. Растворимость карбидов, нитридов и карбонитридов в системах Fe-V-C, Fe-V-N и Fe-V-C-N / В. В. Попов, И. И. Горбачев // Физика металлов и металловедение. – 2005. – Т. 99. – № 3. – С. 69–82.
16. Горбачев И.И. Анализ растворимости карбидов, нитридов и карбонитридов в сталях методами компьютерной термодинамики. III. Растворимость карбидов, нитридов и карбонитридов в системах Fe-Ti-C, Fe-Ti-N и Fe-Ti-C-N [Текст] / И. И. Горбачев, В. В. Попов // Физика металлов и металловедение. – 2009. – Т. 108. – № 5. – С. 1–12.
17. Горбачев И. И. Термодинамическое моделирование карбонитридообразования в сталях C-V-N-Ti / И. И. Горбачев, В. В. Попов, А. Ю. Пасынков // Физика металлов и металловедение. – 2012. – Т. 113. – № 10. – С. 1226–1035.
18. Вертоградский В. А. Исследование фазовых превращений в сплавах типа ЖС методом ДТА [Текст] / В. А. Вертоградский, Т. П. Рыкова // Жаропрочные и жаростойкие стали и сплавы на никелевой основе. – М.: Наука, 1984. – С. 223–227.
19. Пигрова Г. Д. Карбидные фазы в многокомпонентном суперсплаве на основе Ni-Co-W-Cr-Ta-Re / Г. Д. Пигрова, А. И. Рыбников // Физика металлов и металловедение. – 2013. – Т. 114. – № 7. – С. 647–650.

Поступила в редакцию 06.11.2014

Гайдук С.В., Кононов В.В. Застосування CALPHAD-методу до розрахунку фазового складу ливарного зварюваного жароміцного корозійностійкого нікелевого сплаву з танталом

Комп'ютерним моделюванням термофізичних процесів, заснованих на розрахунковому методі CALPHAD, оцінений вплив танталу в дослідженому діапазоні легування від 1,0 до 10,0% (за масою) на фазовий склад багатоконпонентної нікелевої системи Ni-16Cr-5Co-2,7Al-2,7Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C. Представлені результати розрахунків кількості і хімічного складу окремих фаз в дослідних сплавах з танталом в дослідженому діапазоні, порівняно з вихідним складом без танталу.

Ключові слова: ливарні жароміцні корозійностійкі нікелеві сплави, система легування, кількість і склад фаз, γ - твердий розчин, γ' - фаза, карбіди, температури виділення і розчинення фаз.

Gayduk S., Kononov V. Application of CALPHAD-method for phase composition calculation of cast weldable high-temperature corrosion-resistant nickel-base alloy containing tantalum

By computer modeling of thermal physical processes based on calculating method CALPHAD there has been estimated tantalum influence within investigated alloying range from 1 to 10 %, by mass, on phase composition of multi-component system Ni-16Cr-5Co-2,7Al-2,7Ti-4W-4Mo-0,015Zr-0,015B-0,09C. The calculated results of quantity and chemical composition of separate phases in the experimental alloys containing tantalum within the investigated range have been represented in comparison with the initial composition, free of tantalum.

Key words: *high-temperature corrosion-resistant nickel-base cast alloy, quantity and composition of phases, γ - solid solution, γ' - phase, carbides, temperatures of phases precipitation and solution.*