

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИСКАЖЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЕТОК ГОМОГЕНИЗИРОВАННЫХ ОБРАЗЦОВ ЖАРОПРОЧНЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ НИКЕЛЯ

Баранов М.А.

[e-mail: Baranov183@mail.ru](mailto:Baranov183@mail.ru)

Алтайский государственный технический университет им. И.И.Ползунова

Аннотация. Для сплавов ХН78Т, ХН70Ю, ХН80ТБЮ, ХН77ТЮР, ХН70ВМЮТ, ХН70ВТЮФ выполнено атомно-дискретное моделирование полей атомных смещений, зависящих только от состава сплавов, но не от условий термообработки или эксплуатации деталей. Показано, что в формировании искажений решетки главную роль играет размерный фактор – наибольшие искажения создаются «крупными» атомами – алюминия, титана, ниобия, молибдена, вольфрама. Сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными для образцов, подвергнутых гомогенизации при температуре 1100-1200° С и последующей закалке, доказывает, что степень искаженности решетки преобладающей фазы сплава является индикатором показателей его механических свойств, а компьютерное моделирование правомерно рассматривать в качестве инструмента прогнозирования последних.

Ключевые слова: атом, кристалл, сплав, многокомпонентность, взаимодействие, смещения, моделирование

Известно, что основной причиной многократного различия между теоретическим и наблюдаемым значениями предела текучести в сплавах являются дислокации. Пластическая деформация начинается в той из фаз, где имеет место наиболее благоприятное соотношение между подвижностью дислокаций и средним расстоянием между препятствиями. Как правило, это основная (α или γ) фаза. В этой связи для достижения максимальной прочности сплава исследователи вынуждены сосредоточивать свое внимание и усилия на создании препятствий для скольжения дислокаций в наиболее слабом звене – основной фазе. Такими препятствиями являются любые отклонения реального расположения атомов от геометрически правильной решетки узлов. Некоторые типы несовершенств (точечные дефекты внедрения, мелкодисперсные включения, лес дислокаций, мелкое зерно и др.) создаются искусственным путем – в процессе термомеханической обработки детали – закалки, старения,ковки, прокатки и др. Другие же – естественные – закладываются на этапе формирования состава сплава. Естественные искажения могут иметь место только в решетке многокомпонентного сплава. Вследствие локального несимметричного окружения каждого из атомов метастабильное равновесие кристалла достигается в результате смещений атомов из узлов геометрически правильной решетки. Упрочнение деталей, работающих при сравнительно низких (до 300° С) температурах достигается в основном благодаря искусственным несовершенствам. В деталях из жаропрочных сплавов, предназначенных для работы при температурах выше 600° С процессы релаксации активизируются, что приводит к исчезновению искусственных несовершенств – снятию внутренних напряжений, аннигиляции дислокаций, их стоку на границы зерен, очищению основной фазы от избыточно растворенного в ней углерода и азота путем связывания их в карбиды и нитриды [1]. Особенностью же естественных несовершенств является то, что они не возникают при термомеханической обработке деталей и не исчезают в процессе их эксплуатации. В этой связи естественные несовершенства оказываются важным фактором, обеспечивающим прочностные свойства неупорядоченных сплавов при высоких температурах их эксплуатации. Смещения атомов, обусловленные естественными искажениями невелики, но, будучи «равномерно» распределенными по объему кристалла, они блокируют скольжение дислокаций буквально в каждой их точке. Подтвердить или опровергнуть данные предположения можно лишь путем сопоставления данных о естественных несовершенствах решетки основной фазы с данными о механических свойствах сплавов близких друг к другу по фазовому и химическому составу. Экспериментально возможно определение некоторых величин, характеризующих поле атомных смещений в целом. Выделить же вклад

естественных искажений и получить о них детальное представление удастся путем применения методов компьютерного моделирования. В настоящей работе выполнено моделирование естественных искажений решеток γ -фазы шести известных жаропрочных сплавов на основе никеля и сопоставление результатов моделирования с данными об их механических свойствах.

Метод построения потенциалов межатомного взаимодействия в многокомпонентных сплавах изложен в [2], а процедура поиска равновесной конфигурации кристаллической решетки в [3]. Здесь лишь необходимо отметить, что стартовая конфигурация γ -фазы представляла собой идеальную ГЦК решетку, в каждом узле которой находился атом металла вполне определенного сорта из состава сплава. Вероятность того, что в произвольно взятом узле окажется тот или иной элемент совпадала с заданной атомной концентрацией. Эффекты, обусловленные строением зонного спектра, не рассматривались. В результате моделирования в памяти компьютера формировался «образец» – информация о координатах, сортах и векторах смещений атомов в равновесные положения из узлов идеальной решетки.

В составе исследуемых сплавов ограничено содержание серы, фосфора, углерода, кремния. Требуемые интервалы концентраций металлов приводятся в таблице 1 [4].

Таблица 1.

Содержание элементов в жаропрочных сплавах, вес. %. [4]

Сплав	Al	Ti	V	Cr	F e	Nb	M o	W
ХН78Т	≤ 0.15	0.15- 0.35	-	19- 22	≤ 1.0	-	-	-
ХН70Ю	2.8 -3.5	-	-	26- 29	≤ 1.0	-	-	-
ХН80ТБЮ	0.5 -1.0	1.8- 2.3	-	15- 18	≤ 3.0	1.0 -1.5	-	-
ХН77ТЮР	0.6 -1.0	2.4- 2.8	-	19- 22	≤ 1.0	-	-	-
ХН70ВМ ЮТ	1.7 -2.2	1.0- 1.4	-	14- 16	≤ 3.9	-	3.0 -5.0	4. 0-6.0
ХН70ВМТ ЮФ	2.4 -2.9	1.7- 2.2	0.2 -1.0	13- 16	≤ 5.0	-	2.5 -4.0	5. 0-7.0

Концентрации металлов в модельном сплаве задавались примерно посередине требуемых интервалов, приведенных в таблице 1. Во избежание неоднозначности, маркировка модельных сплавов оставалась той же, что и у соответствующих промышленных. Выраженные в атомных процентах, составы модельных сплавов приводятся в таблице 2.

Таблица 2.

Составы модельных сплавов, ат. %.

Сплав	A l	T i	V	C r	F e	N i	N b	M o	W
ХН78Т	0. 21	0. 30	0	2 2.59	0. 61	7 6.29		0	0
ХН70Ю	6. 50	0	0	2 9.02	0. 49	6 3.99		0	0
ХН80ТБЮ	1. 59	2. 50	0	1 8.13	2. 55	7 4.43	.8	0	0
ХН77ТЮР	1.	3.	0	2	0.	7		0	0

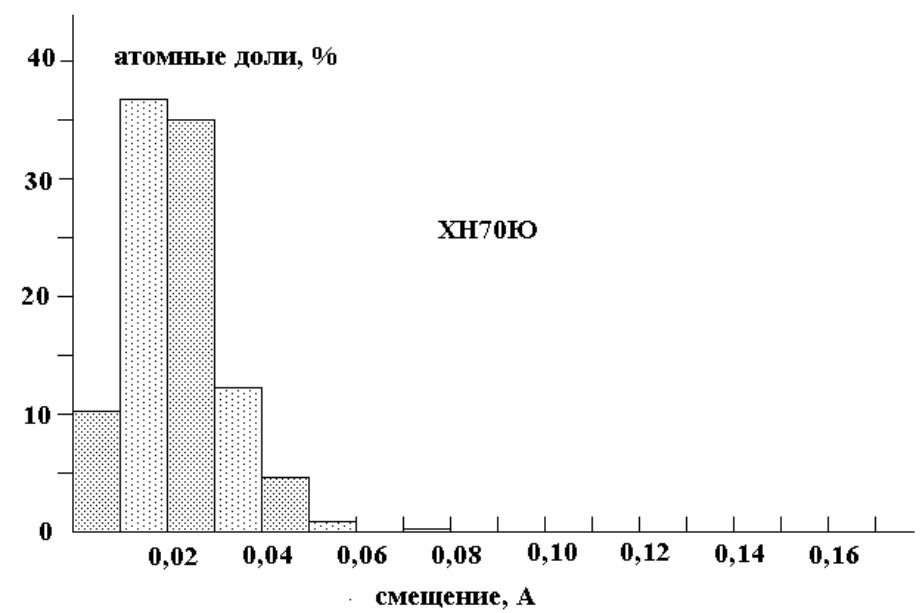
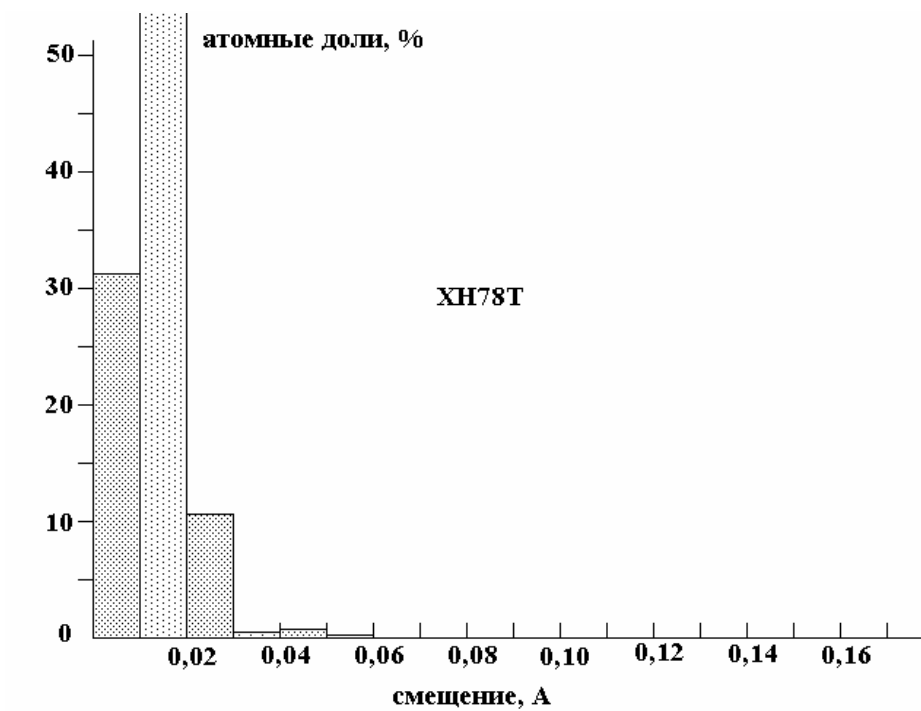
	62	07		2.30	6	2.41			
ХН70ВМ ЮТ	4. 27	1. 54	0	1 7.04	3. 69	6 9.39		2 .46	1 .61
ХН70ВМТ ЮФ	5. 76	2. 38	0 .69	1 6.37	4. 19	6 6.67		2 .02	1 .92

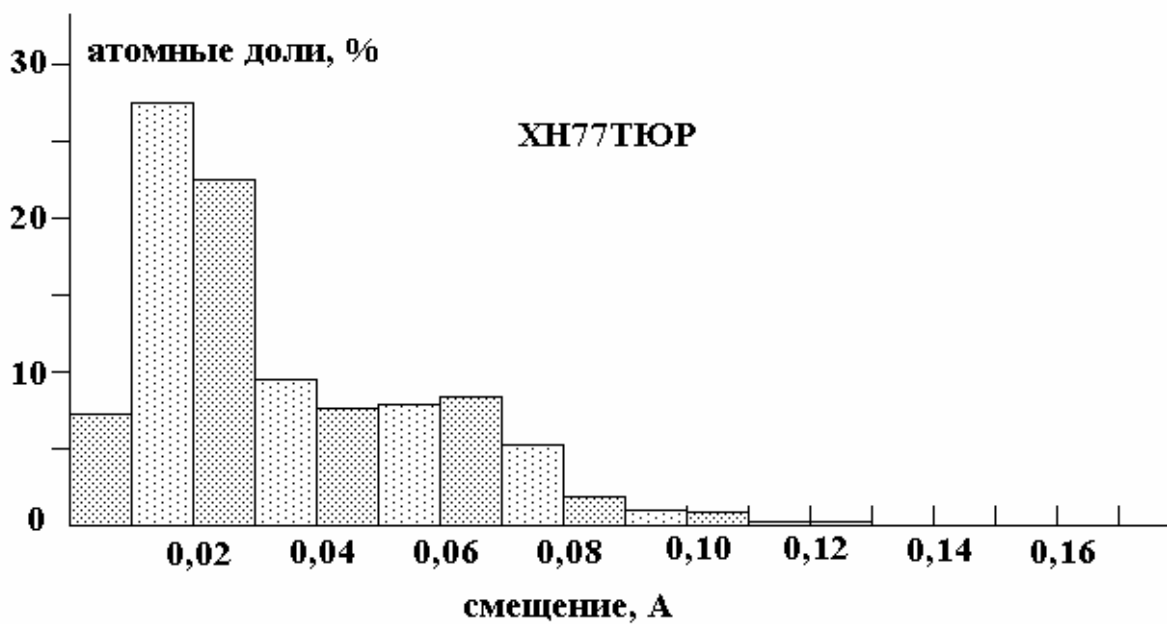
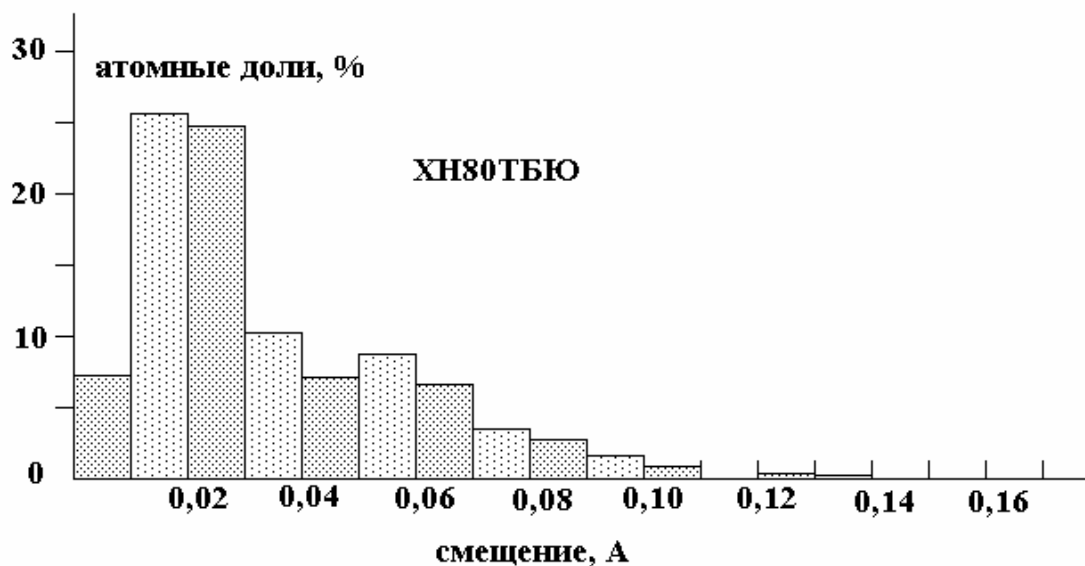
Рассчитанные равновесные значения параметра решетки a_0 γ -фазы, величины среднеквадратичных $\langle S \rangle$ и максимальных S_{\max} атомных смещений из 1000 компактно расположенных атомов в «образце» приведены в таблице 3. Здесь же приводятся и экспериментальные значения пределов упругости $\sigma_{0,2}$, прочности σ_B и твердости НВ образцов соответствующих промышленных сплавов [4], подвергнутых предварительной гомогенизации в течение нескольких часов при температуре 1100–1200⁰С и последующей закалке в воде, водяном душе или на воздухе.

Таблица 3.

Рассчитанные значения параметра решетки a_0 , энергии связи E_B , атомных смещений $\langle S \rangle$ и S_{\max} и измеренные [4] значения $\sigma_{0,2}$, σ_B , НВ жаропрочных сплавов.

Сплав	$a_0, \text{Å}$	$E_B, \text{эВ}$	$\langle S \rangle, \text{Å}$	$S_{\max}, \text{Å}$	$\Sigma_{0,2}, \text{МПа}$	$\Sigma_B, \text{Мпа}$	НВ
ХН78Т	3. 528	4.3 76	0.0 15	0.0 52	196	720	156
ХН70Ю	3. 564	4.3 31	0.0 24	0.0 24	480	750	-
ХН80ТБЮ	3. 527	4.3 91	0.0 42	0.1 52	530	750	190
ХН77ТЮР	3. 530	4.3 67	0.0 41	0.1 39	665	980	255- 321
ХН70ВМ ЮТ	3. 573	4.4 86	0.0 56	0.2 96	588	980	277- 302
ХН70ВМТ ЮФ	3. 592	4.5 03	0.0 66	0.1 80	578- 627	1030- 1117	269- 341





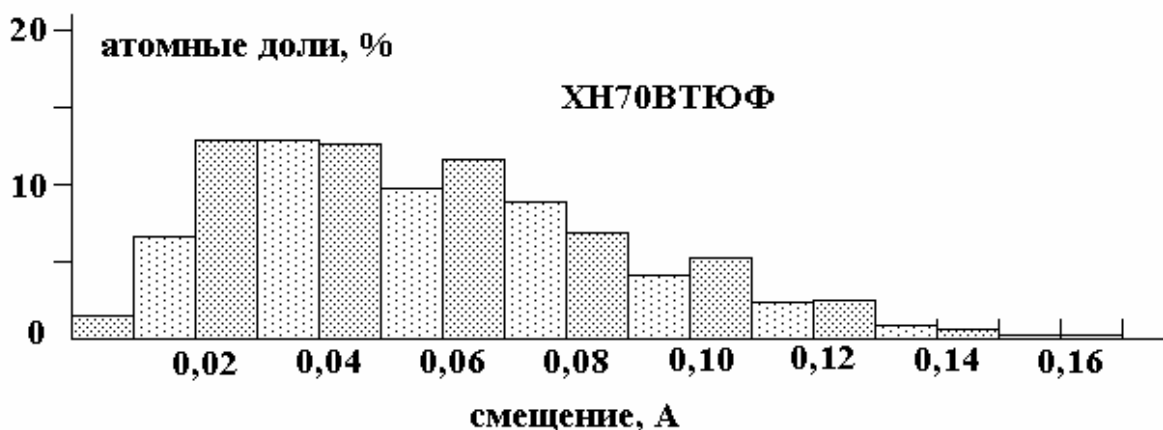
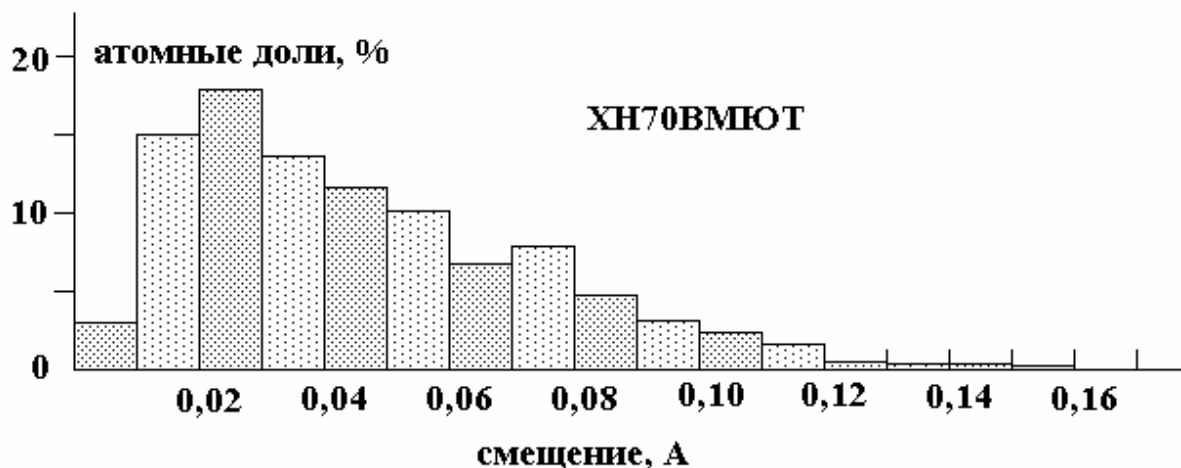
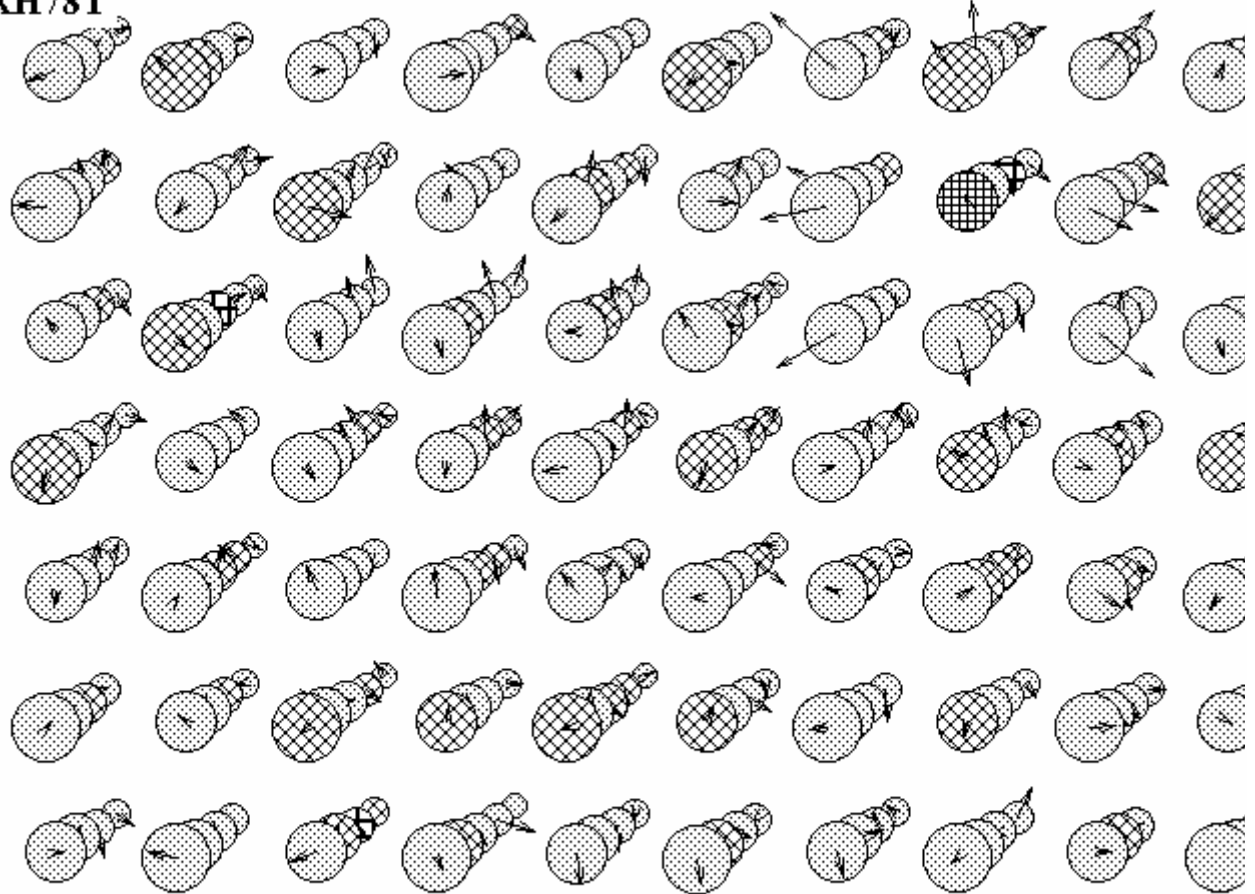


Рис.1. Распределение атомов по величинам их смещений из узлов идеальной ГЦК решетки в исследуемых сплавах.

Непосредственно после такой термообработки влияние искусственных искажений решетки (наклепа, границ зерен, микродисперсных выделений) на прочностные свойства образца оказывается минимальным. Распределение атомов по величинам смещений иллюстрируется на гистограммах, приведенных на рис. 1. Среднеквадратичное смещение $\langle S \rangle$, как мера искаженности решетки, представляет наиболее информативный параметр таблицы 3. С увеличением степени искаженности решетки γ -фазы следует ожидать и увеличения показателей механических свойств сплава – предела упругости $\sigma_{0,2}$, прочности σ_B и твердости НВ.

Для сплава XH78T величина $\langle S \rangle$ оказывается наименьшей, а столбцы соответствующей гистограммы сконцентрированы в ее левой части. Поэтому для данного сплава следует ожидать наибольшую склонность к пластической деформации, что полностью подтверждается минимальными значениями твердости, пределов упругости и прочности. Очевидно, что большое количество хрома в составе этого и других сплавов введено для обеспечения коррозионной и окалиностойкости. Но вследствие близких размеров атомов никеля и хрома, влияние последнего на упрочнение этих сплавов оказывается незначительным. Гораздо больший эффект оказывают «крупные» атомы – в данном случае – алюминия и титана. На рис. 2 представлена компьютерная проекция одной из бесчисленных атомных конфигураций, которая может возникнуть в решетке реального сплава XH78T.

XH78T



○ -Al; ▣ -Ti; ▤ -Cr; ▥ -Fe; ● -Ni;

Рис. 2. Проекция кристаллической решетки сплава XH78T.

ХН70Ю

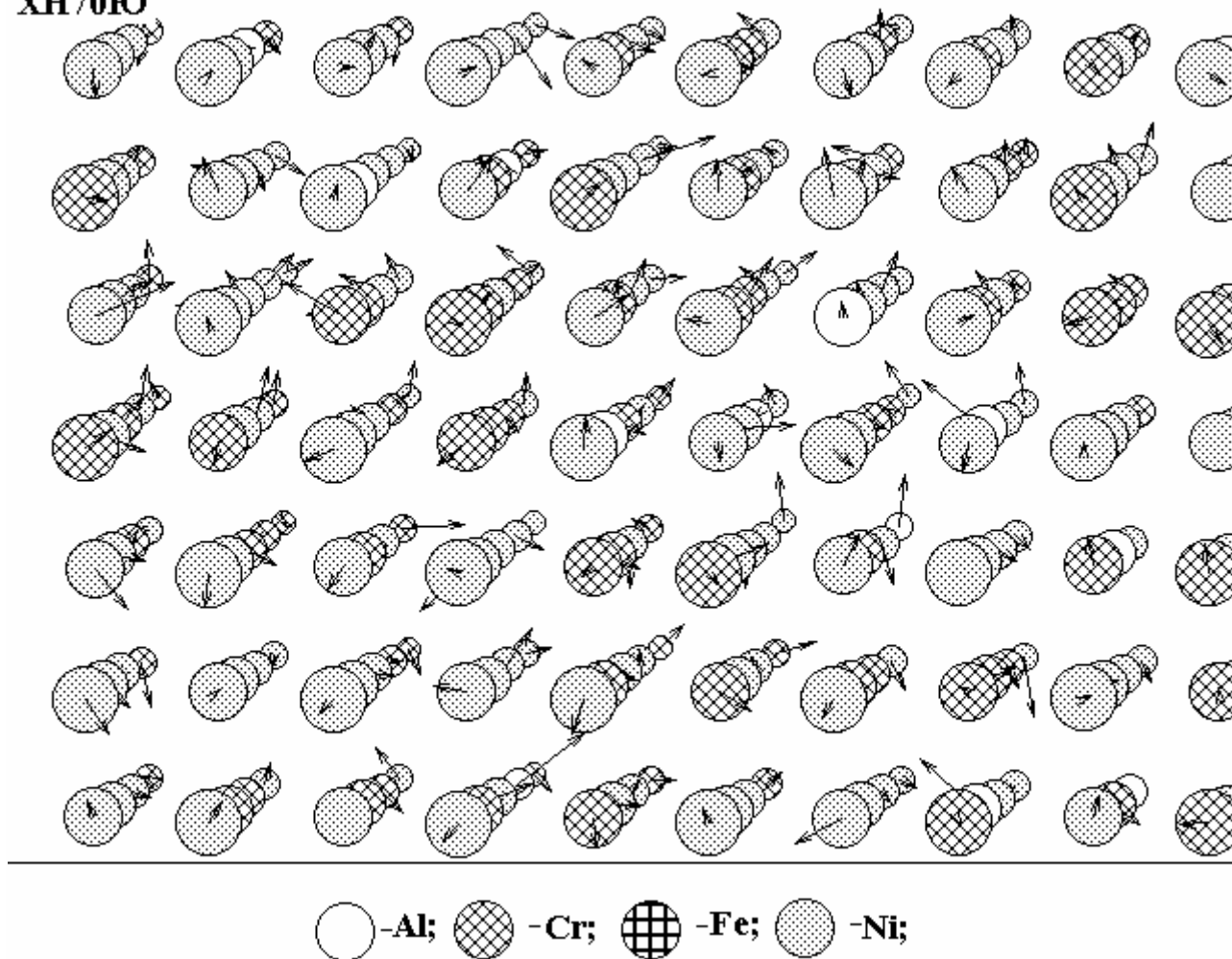


Рис. 3. Проекция кристаллической решетки сплава ХН70Ю.

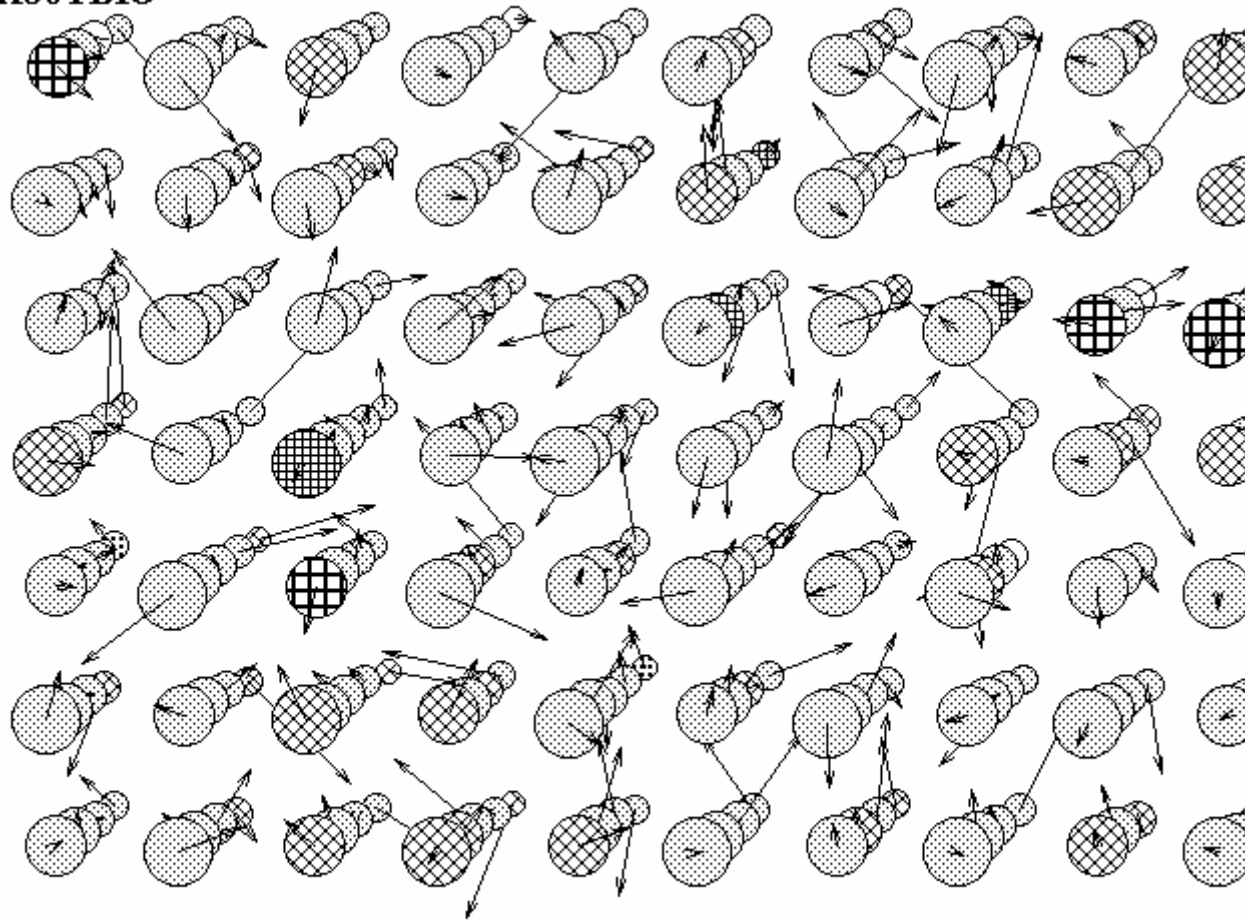
Векторы атомных смещений на этом и других рисунках для наглядности увеличены в 25 раз. Из-за малой концентрации ни один атом алюминия не попал в исследуемый «образец». В то же время, в зоне рассмотрения оказался единственный атом титана. На рис. 2 явно прослеживается создаваемое им поле атомных смещений, охватывающее не менее двух координационных сфер.

В сплаве ХН70Ю (рис.3.) содержание алюминия увеличено до 6.5 ат.%. И это, безусловно, сказывается как на величине среднеквадратичного смещения (0.024 \AA) так и на пределе упругости, который увеличивается до 480 МПа.

В сплавах ХН80ТБЮ и ХН77ТЮР примерно одинаковое суммарное содержание «крупных» атомов – алюминия, титана, ниобия. Ожидаемые искажения решеток этих сплавов почти одинаковы, что подтверждается близким характером распределения атомов по величинам их смещений (рис. 1.). На практике же наблюдается существенное различие в их механических свойствах. Причем, для сплава ХН77ТЮР экспериментальные показатели выше, а рассчитанные среднеквадратичные смещения – ниже. Данное обстоятельство объясняется наличием в составе реального сплава ХН77ТЮР малого количества бора. Распределяясь по междоузлиям и обладая значительным дальним действием, атомы бора существенно искажают и упрочняют решетку γ -фазы. В модельном сплаве влияние бора не учитывалось.

На рис.3 приводится атомная конфигурация решетки сплава ХН80ТБЮ. Здесь прослеживаются поля атомных смещений, создаваемые атомами Al, Ti, Nb. Однако вследствие взаимного наложения этих полей, указать, чем обусловлено смещение того или иного атома становится труднее по сравнению со сплавом ХН78Т.

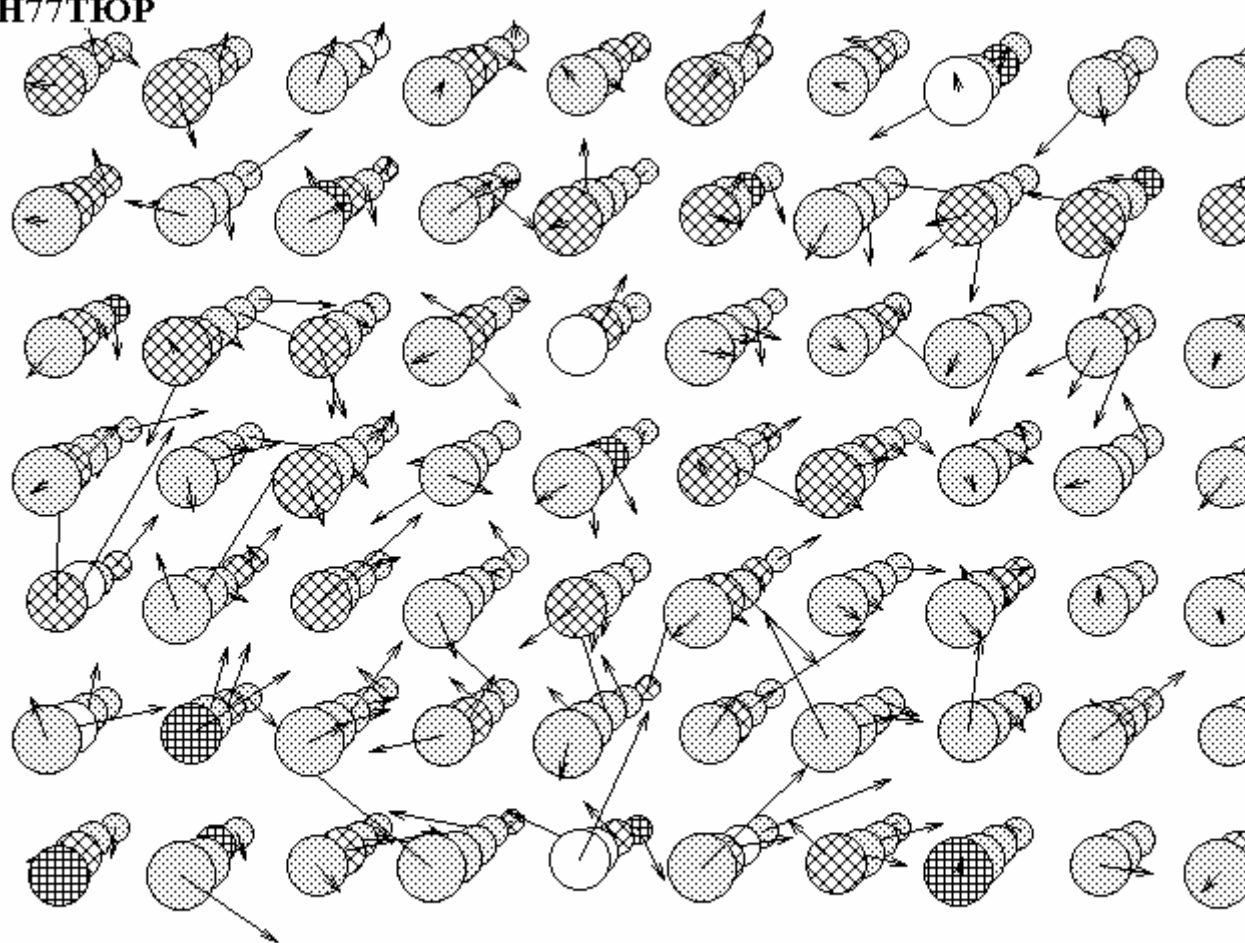
ХН80ТБЮ



○ -Al; ▣ -Ti; ▤ -Cr; ▥ -Fe; ● -Ni; ◐ -Nb;

Рис. 4. Проекция кристаллической решетки сплава ХН80ТБЮ.

ХН77ТЮР

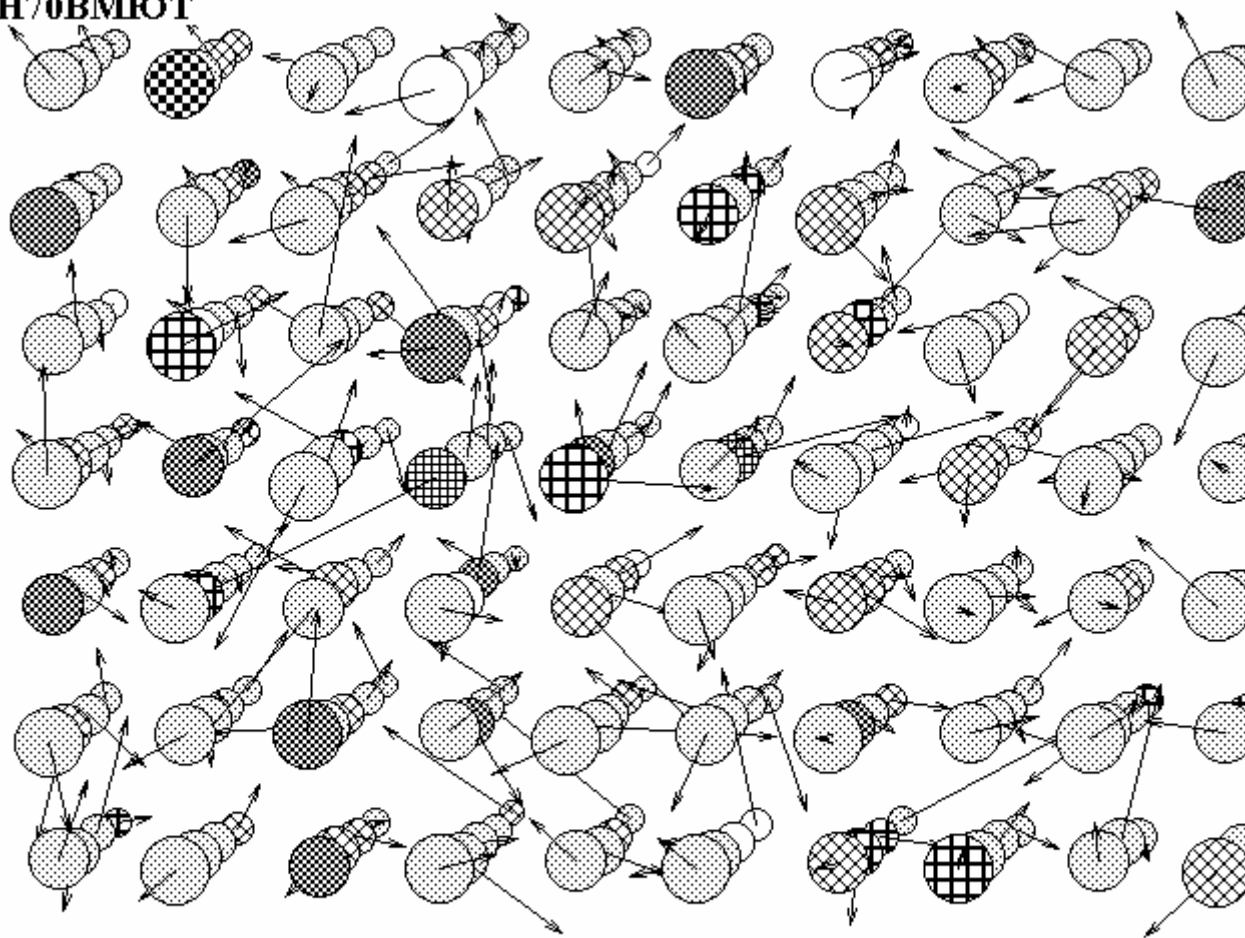


○ -Al; ● -Ti; ⊗ -Cr; ⊕ -Fe; ⊖ -Ni;

Рис. 5. Проекция кристаллической решетки сплава ХН77ТЮР.

Для сплавов ХН70ВМЮТ и ХН70ВМТЮФ характерны большие значения $\langle S \rangle$ (0.056 и 0.066 Å) и более размытые гистограммы атомных смещений (рис. 1). Конфигурации кристаллических решеток данных сплавов и сопутствующие им картины атомных смещений приведены на рис. 4 и 5. Поля смещений, вызываемые отдельными атомами Ti, Mo, W перекрываются и частично компенсируют друг друга. При этом несмещенных атомов почти не остается. Результаты моделирования предсказывают наибольшую степень искаженности для решетки сплава ХН70ВМТЮФ. На «втором месте» находится сплав ХН70ВМЮТ. Такого же соотношения следует ожидать и для показателей их механических свойств. Это полностью подтверждается экспериментальными данными из таблицы 3.

ХН70ВМЮТ



○ -Al; ▨ -Ti; ▩ -Cr; ▧ -Fe; ▪ -Ni; ● -Mo; ▩ -W;

Рис. 6. Проекция кристаллической решетки сплава ХН70ВМЮТ.

ХН70ВМТЮФ

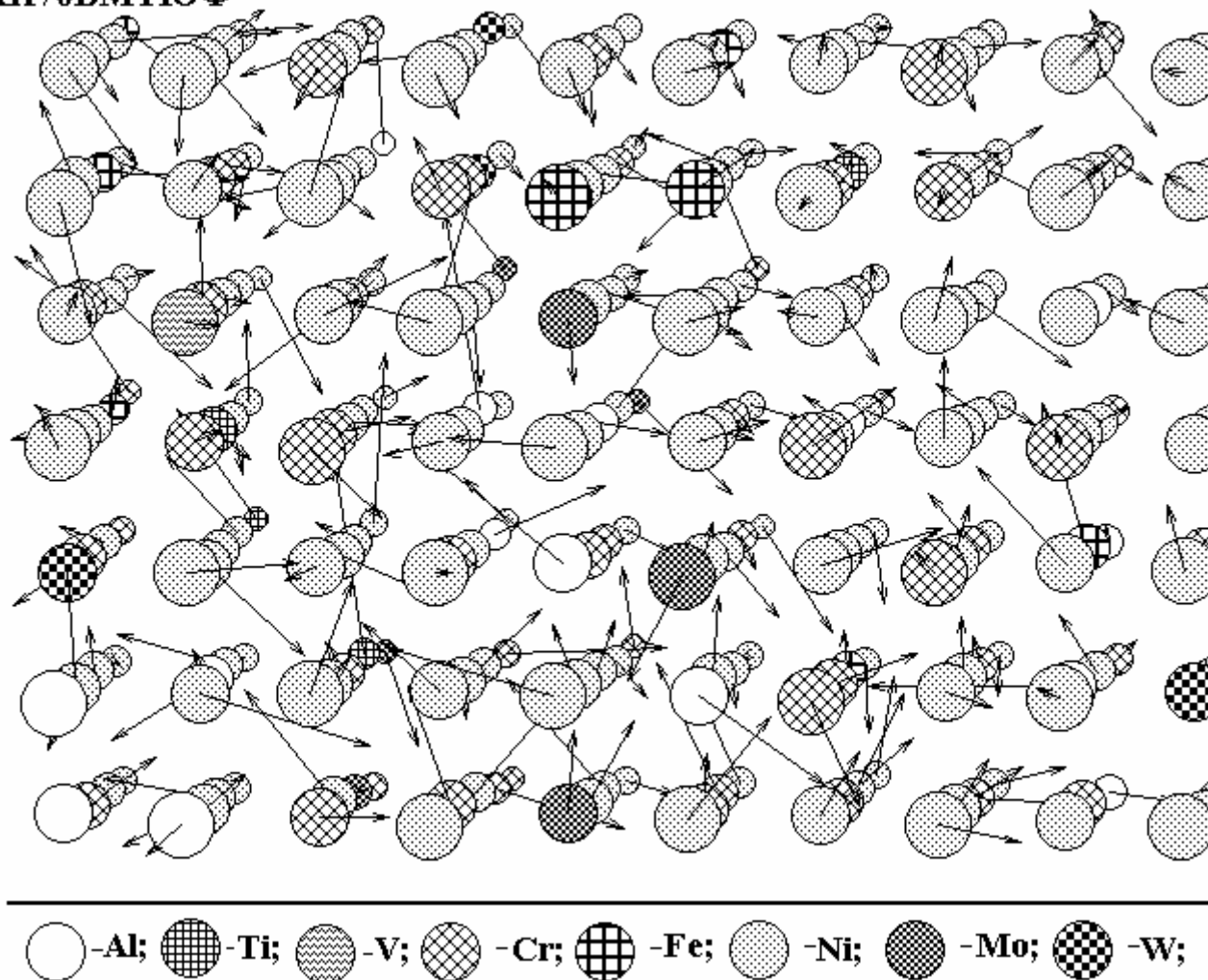


Рис. 7. Проекция кристаллической решетки сплава ХН70ВМТЮФ.

Параметр S_{\max} оказывается менее информативным, чем $\langle S \rangle$, поскольку в его определении велика роль случайного фактора. Что же касается параметра решетки a_0 и энергии связи E_B , то в прогнозировании механических свойств сплава они оказываются почти бесполезными.

Таким образом, проведенные исследования показывают, что именно степень искаженности кристаллической решетки, представленную среднеквадратичными смещениями, компьютерными проекциями решеток, физическим уширением линий дебаеграмм или каким-либо другим образом, правомерно считать индикатором механических свойств сплава. В этой связи, атомно-дискретное моделирование равновесного метастабильного состояния решетки основной фазы сплава становится инструментом прогнозирования его свойств.

Решение проблемы многокомпонентности в описании межатомных взаимодействий позволяет существенно расширить класс доступных для компьютерного исследования материалов и, в частности, открывает возможность применения данного подхода к описанию искусственных решеточных искажений, которые, например, реализуются в сплавах внедрения. При этом искусство моделирования должно заключаться в преобразовании информации о составе сплава и предварительной термомеханической обработке образца в информацию о стартовой конфигурации его кристаллической решетки.

Список литературы

1. Гуляев А.П. Металловедение. – М.: Металлургия, 1977. – 647 с.
2. Баранов М.А. Сферическая симметрия электронных оболочек атомов и стабильность кристаллов // Электронный физико-технический журнал. – 2006. – Т.1. – С. 34-48. Режим доступа <http://eftj.secna.ru/vol1/06013r.pdf>
3. Баранов М.А., Дубов Е.А. Поля атомных смещений в кристаллах неупорядоченных сплавов ХН35ВТ и ХН35ВТЮ // Физика металлов и металловедение. – 2007. – Т. 104. – № 3. – С. 314-318.
4. Марочник сталей и сплавов. Под ред. А.С. Зубченко. 2-е изд. – М.: Машиностроение, 2003. – 783 с.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и администрации Алтайского края. Проект № 08–08–98007.