

# МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕМПЕРАТУРНОГО ІНТЕРВАЛУ ПЛАВЛЕННЯ І ФАЗОВОГО СКЛАДУ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ НІКЕЛЕВИХ СПЛАВІВ

С.В. Максимова, В.В. Воронов, П.В. Ковальчук

ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України. 03150, м. Київ, вул. Казимира Малевича, 11. E-mail: [office@paton.kiev.ua](mailto:office@paton.kiev.ua)

Сучасні припої для паяння жароміцних нікелевих сплавів є складно-легованими сплавами, компоненти яких мають забезпечувати необхідний рівень міцності, жаростійкості, стійкості до високотемпературної корозії та інші експлуатаційні характеристики паяних з'єднань. Однак вишукати оптимальний склад для отримання бажаного комплексу властивостей є нетривіальним завданням, що вимагає значних витрат часу і коштів. В роботі досліджується можливість застосування методу математичного моделювання термодинамічних процесів (CALPHAD) під час розробки багатокомпонентних припоїв для паяння жароміцних нікелевих сплавів. При проведенні досліджень з використанням розрахункової методики CALPHAD визначено температурні інтервали плавлення для низки сплавів системи Ni–Cr–Co–Al–(Me)–Ta. Отримано розрахункові дані з впливу адгезійно-активних елементів IV та V груп періодичної системи елементів на температуру ліквідусу та фазовий склад базового нікелевого сплаву. Зокрема, визначено їх вплив на кількість та термічну стабільність  $\gamma'$ -фази та  $\sigma$ -фази. Отримані за допомогою методу математичного моделювання термодинамічні розрахункові дані використано під час розробки і дослідження низки перспективних припоїв для паяння нікелевих жароміцних сплавів, в тому числі монокристалічного жароміцного нікелевого сплаву ЖС-32ВІ. Бібліогр. 21, рис. 8.

*Ключові слова:* припій, паяння, жароміцні нікелеві сплави, математичне моделювання (CALPHAD), адгезійно-активні компоненти, титан, ніобій, тантал,  $\gamma'$ -фаза,  $\sigma$ -фаза

Експлуатаційні характеристики газотурбінних двигунів і стаціонарних установок багато в чому визначаються властивостями нікелевих жароміцних сплавів (ЖНС), які є основним матеріалом для виготовлення турбінних лопаток [1].

Протягом тривалого часу необхідний рівень характеристик ливарних ЖНС досягався завдяки легуванню нікелевої основи дедалі більшим числом компонентів, сукупна дія яких позитивно впливала на властивості – тривалу міцність, пластичність, втому, опір окисленню та ін. [1, 2]. При цьому протягом тривалого часу емпіричний метод «проб і помилок» був основним при розробці жароміцних нікелевих сплавів [3]. Однак цілком очевидно, що у тому випадку, якщо для легування нікелевих жароміцних сплавів використовують понад 10-15 елементів, знайти оптимальний склад для отримання бажаного комплексу властивостей доволі складно, оскільки потрібні значні витрати часу і коштів. У зв'язку з цим необхідним інструментом стають методи математичного розрахунку та конструювання сучасних жароміцних сплавів [2–7].

Сказане вище справедливо і при розробці припоїв для паяння жароміцних нікелевих сплавів. Оскільки сучасні нікелеві сплави можуть містити більше десяти легуючих елементів, то припої для їх паяння, як правило, також є складно-легованими сплавами, що містять депресанти і елементи,

які забезпечують необхідну міцність, жаростійкість, стійкість до високотемпературної корозії та інші експлуатаційні характеристики паяних з'єднань [4, 8].

У ряді досліджень [6–11] відзначається, що сучасні програми математичного моделювання термодинамічних процесів засновані на фізичних теоріях теплових, дифузійних і термодинамічних явищ, які здатні адекватно відобразити картину фізико-хімічних процесів, що відбуваються в багатокомпонентних нікелевих системах як при кристалізації (охлажденні), так і при нагріванні. Автори показують, що застосування розрахункових методів термодинамічних процесів дозволяють будувати діаграми стану для багатокомпонентних систем в широких інтервалах температур і концентрацій, а також розраховувати тип, об'ємну частку і склад фаз для рівноважних і нерівноважних умов фазових перетворень.

Зокрема, концепція методу CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams) шляхом прогнозування стабільних фаз, їх складу, а також термодинамічних властивостей в тих областях фазової діаграми, де відсутня експериментальна інформація, дає можливість будувати фазові діаграми [12–14].

Так, для багатокомпонентних сплавів на основі Ni типовою є мікроструктура, яка зазвичай складається з твердого розчину ( $\gamma$ -матриці), диспер-

Максимова С.В. – <https://orcid.org/0000-0003-0158-5760>, Воронов В.В. – <https://orcid.org/0000-0002-0410-1154>,

Ковальчук П.В. – <https://orcid.org/0000-0002-2313-5982>

© С.В. Максимова, В.В. Воронов, П.В. Ковальчук, 2021

сних часточок  $\gamma'$ -фази, карбідів та топологічних щільноупакованих фаз (ТЩУ). Для визначення об'ємної частки кожної з цих фаз необхідно володіти оцінкою енергетичних функцій Гіббса [3]. Таким чином, метод CALPHAD об'єднує всю експериментальну інформацію про фазові рівноваги в системі і всю термодинамічну інформацію, отриману при проведенні термохімічних і теплофізичних досліджень.

Найбільш повно це реалізовано в програмному комплексі JMatPro (Java-based Materials Properties) компанії «Sente Software» [15–19].

Даний програмний комплекс призначений для моделювання широкого спектру властивостей багатокомпонентних систем на різній основі (Fe, Al, Ti, Ni, Co та ін.), містить спеціалізовані термодинамічні бази даних для моделювання процесів охолодження (кристалізації) або нагрівання матеріалів.

Метою даного дослідження є визначення можливості прогнозування температурного інтервалу плавлення і фазового складу багатокомпонентних нікелевих сплавів шляхом застосування методів розрахункового конструювання сплавів, а саме – методів комп'ютерної термодинаміки (CALPHAD) у поєднанні з методами статистичної обробки отриманих результатів.

**Методика розрахунків.** Для термодинамічних розрахунків інтервалу плавлення досліджуваних припоїв була використана спеціалізована програма для моделювання властивостей багатокомпонентних сталей та сплавів JMatPro. Даний програмний комплекс дозволяє здійснювати термодинамічні розрахунки для багатокомпонентних систем, в тому числі на нікелевій основі, з визначенням типу, об'ємної частки фаз, що виділяються ( $\gamma$ -,  $\gamma'$ -,  $M_3C$ ,  $M_{23}C_6$ ,  $M_6C$ ,  $M_3B_2$  та ін.), хімічного складу фаз і температурної області їхнього існування.

Термодинамічні розрахунки базуються на оцінці енергетичних функцій Гіббса для кожної фази для заданої температури [13]:

$$\Delta G = \Delta G_0 + \Delta G_i^m + \Delta G_i^{xs},$$

де  $\Delta G_0$  – вільна енергія фази у чистому вигляді;  $\Delta G_i^m$  – ідеальна енергія від змішування компонентів фази;  $\Delta G_i^{xs}$  – надлишкова вільна енергія від змішування компонентів фази.

Вільну енергію ( $\Delta G_m$ ) для багатокомпонентної системи можна представити рівнянням:

$$\Delta G_m = \sum_i x_i \Delta G_0^i + RT \sum_i x_i \ln(x_i) + \sum_i \sum_{j \neq i} x_i x_j \sum_v \Omega_v (x_i - x_j)^v,$$

де  $x_i$  – мольна частка компонента  $i$ ;  $\Delta G_0^i$  – вільна енергія фази для чистого компонента  $i$ ;  $T$  – температура;  $R$  – універсальна газова константа;  $\Omega_v$  – коефіцієнт взаємодії, що залежить від значення  $v$  (на практиці значення  $v$  зазвичай не перевищує 2) [13].

Базова система для розробки експериментальних припоїв для паяння ЖНС обиралась із урахуванням впливу кожного конкретного елемента на властивості жароміцних нікелевих сплавів. В якості основи перспективною є система Ni–Cr–Co–Al–(Me). З огляду на необхідність забезпечення жаростійкості, жароміцності і наближення складу припою до складу основного металу сплави базової системи додатково легували танталом, вольфрамом і молібденом. При цьому межі вмісту в експериментальних припоях алюмінію і танталу були обрані виходячи з міркувань забезпечення жароміцності сплаву за рахунок утворення необхідної об'ємної частки зміцнюючої  $\gamma'$ -фази  $Ni_3(Al, Ta, Ti)$ . Вміст ніобію та титану у сплаві обмежували через здатність даних елементів до ліквідації і локальних оплавлень міждендритних ділянок основного матеріалу під час паяння [2, 20].

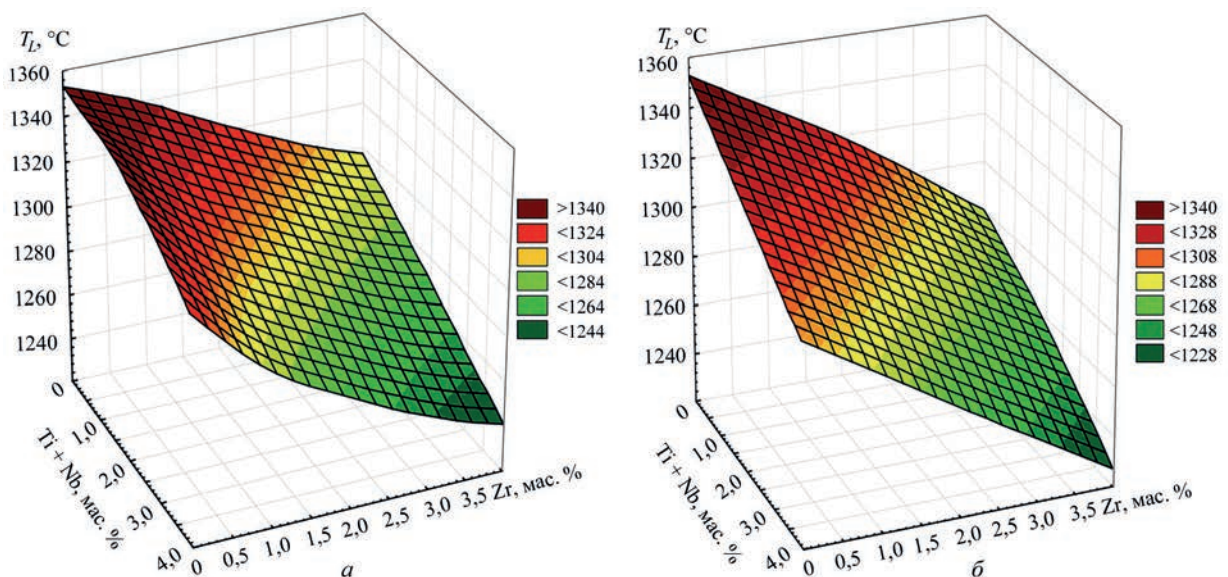


Рис. 1. Поверхні ліквідусу експериментальних припоїв системи Ni–Cr–Co–Al–(Me:Ti, Nb, Zr), що містять 5 (а) та 7,5 мас. % (б) танталу

**Обговорення результатів.** В процесі проведення досліджень отримано низку значень температур ліквідусу і солідусу, а також розрахунковий фазовий склад експериментальних сплавів. Розрахункові дані в подальшому піддавали обробці методами статистичного аналізу з метою побудови поверхонь ліквідусу, які дозволили оцінити вплив легуючих елементів на температуру плавлення сплавів даної системи (рис. 1).

Так, зокрема, встановлено, що збільшення кількості танталу з 2,5 до 10 мас. % у базовому сплаві дозволяє знизити його температуру ліквідусу з 1371 до 1322 °С (рис. 2). Температура солідусу сплаву при цьому знижується з 1340 до 1261 °С. Цілком зрозуміло, що така температура ліквідусу є зависокою для припою, який призначається для паяння жароміцних нікелевих сплавів.

Легування базового сплаву цирконієм майже не змінює температуру ліквідусу, але призводить до суттєвого зниження температури солідусу – до 1060 °С (для сплаву, що містить 2,5 мас. % Та) та до 991 °С (для сплаву, що містить 10 мас. % Та). Зниження температури пов'язано з формуванням низькотемпературної евтектики, що містить у своєму складі цирконій та тантал (рис. 3).

Легування базового сплаву титаном та ніобієм призводить до суттєвого зниження температури

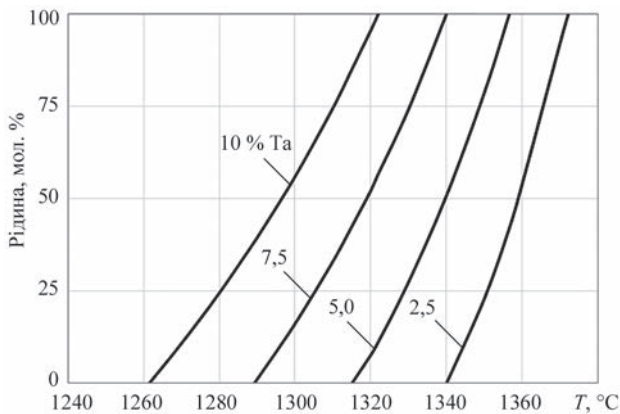


Рис. 2. Залежність інтервалу плавлення від кількості танталу у базовому сплаві системи Ni–Cr–Co–Al–(Me)–Ta

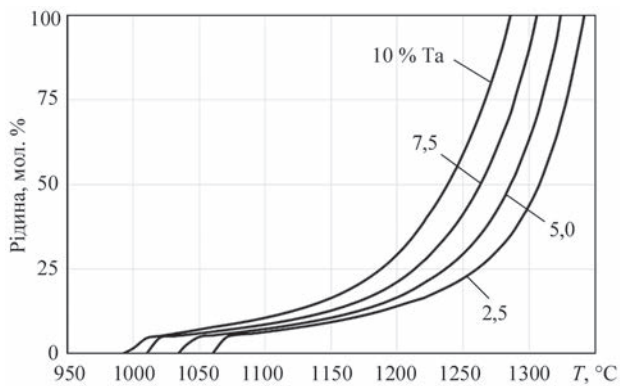


Рис. 3. Залежність інтервалу плавлення від легування танталом та цирконієм базового сплаву системи Ni–Cr–Co–Al–Ta–2Zr

ри плавлення сплаву. При цьому в даному випадку титан (рис. 4, крива 3) чинить більший вплив на зниження температури плавлення за ніобій (рис. 4, крива 2). Проте зниження температури до необхідного рівня вдається досягти лише при одночасному введенні даних елементів та підвищеному вмісті танталу (рис. 4, крива 4).

Відомо, що зміцнення дрібнодисперсними частками  $\gamma'$ -фази матриці  $\gamma$ -твердого розчину забезпечує необхідний рівень працездатності жароміцних нікелевих сплавів при підвищених температурах, завдяки гальмуванню руху дислокацій. Тому під час дослідження мікроструктурних складових було приділено окрему увагу дослідженню впливу легування адгезійно-активними елементами на формування зміцнюючої  $\gamma'$ -фази. Дана фаза складається з інтерметаліду  $Ni_3Al$ , крім алюмінію вона може містити в своєму складі титан, ніобій та тантал [21].

Зокрема, при дослідженні впливу танталу на розрахункову кількість  $\gamma'$ -фази було встановлено, що збільшення кількості танталу (до 10 мас. %) призводить до збільшення температурного ін-

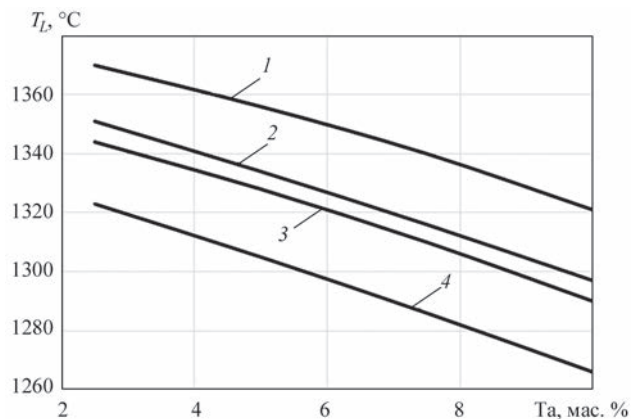


Рис. 4. Залежність температури ліквідусу сплаву системи Ni–Cr–Co–Al–Me–(Nb,Ti) від вмісту адгезійно-активних компонентів: 1 – Та; 2 – Та + 2 Nb; 3 – Та + 2 % Ti; 4 – Та + 2 %Ti + 2 % Nb

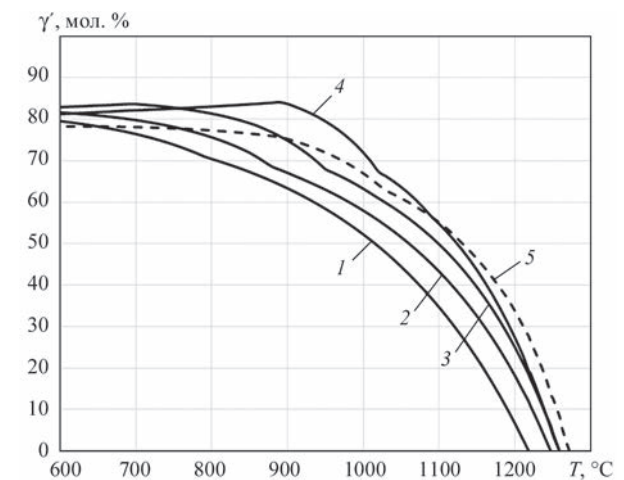


Рис. 5. Залежність об'ємного відсотку  $\gamma'$ -фази від кількості Та у базовому сплаві системи Ni–Cr–Co–Al–(Me): 1 – 2,5 % Та; 2 – 5 % Та; 3 – 7,5 % Та; 4 – 10 % Та; 5 – нікелевий сплав ЖС-32ВІ

тервалу існування  $\gamma'$ -фази (рис. 5), хоча інтервал все ж є дещо меншим ніж у промислового монокристалічного сплаву ЖС-32ВІ (рис. 5, крива 5).

Додаткове легування титаном та ніобієм значно підвищує (до 1100 °С) температуру початку розчинення  $\gamma'$ -фази (рис. 6), хоча і дещо знижує інтервал її існування (до 1210...1225 °С) (рис. 6, криві 3 та 4).

Слід також зазначити, що додаткове легування  $\gamma'$ -утворюючими елементами сприяє невеликому зниженню кількості одного з різновидів ТЩУ фаз ( $\sigma$ -фази), а при одночасному легуванні титаном та ніобієм поява даної фази фіксується лише при температурах вище 600 °С. Проте, з іншого боку, максимальна температура існування у сплаві даної фази теж суттєво підвищується до 1100 °С (рис. 7, крива 4).

Спроби додатково знизити кількість  $\sigma$ -фази за допомогою введення у сплав ренію, який, як відомо, є хорошим  $\sigma$ -стабілізатором [6], призводить до

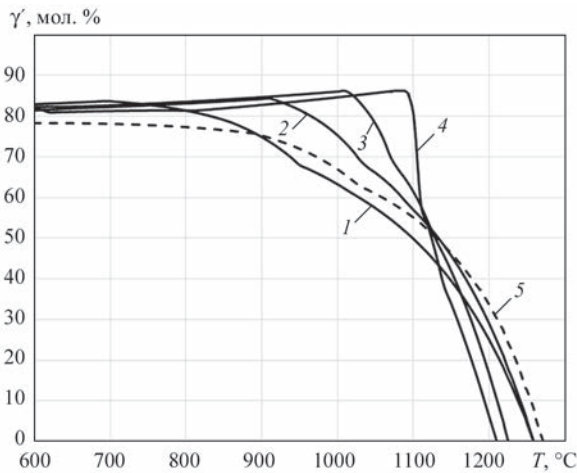


Рис. 6. Залежність об'ємного відсотку  $\gamma'$ - фази у сплаві системи Ni-Cr-Co-Al-Ta-(Nb,Ti) від вмісту адгезійно-активних компонентів: 1 – 7,5 % Ta; 2 – 7,5 % Ta + 2 % Nb; 3 – 7,5 % Ta + 2 % Ti; 4 – 7,5 % Ta + 2 %Ti + 2 % Nb; 5 – жароміцний нікелевий сплав ЖС-32ВІ

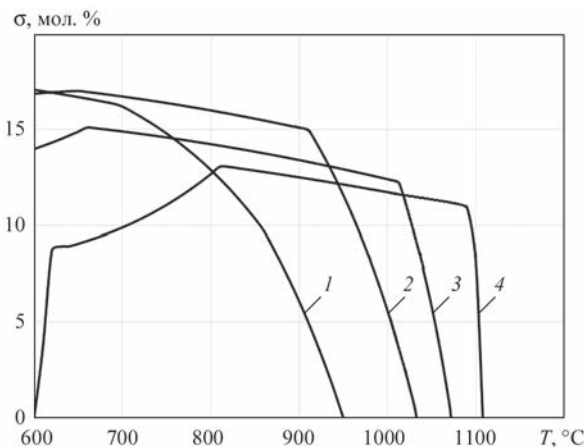


Рис. 7. Залежність об'ємного відсотку  $\sigma$ -фази у сплаві системи Ni-Cr-Co-Al-Ta- (Nb,Ti) від вмісту адгезійно-активних компонентів: 1 – 7,5 % Ta; 2 – 7,5 % Ta + 2 % Nb; 3 – 7, % Ta + 2 % Ti; 4 – 7,5 % Ta + 2 % Ti + 2 % Nb

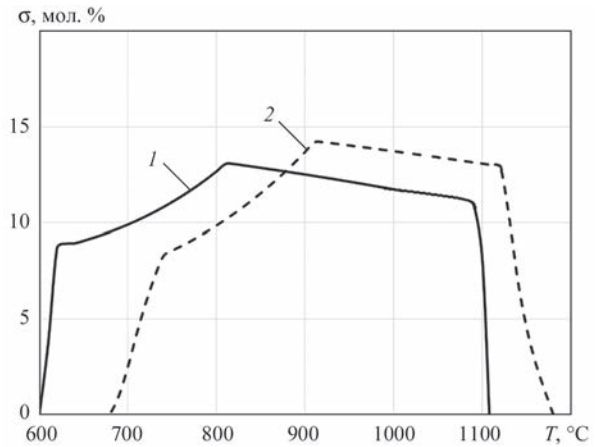


Рис. 8. Залежність об'ємного відсотку  $\sigma$ -фази у сплаві системи Ni-Cr-Co-Al-Ta- (Nb,Ti) від вмісту ренію: 1 – без ренію; 2 – 2 % Re

зміщення інтервалу існування  $\sigma$ -фази від температур 600...1110 до 685...1180 °С (рис. 8).

Отримані за допомогою методу комп'ютерної термодинаміки розрахункові дані було використано під час розробки і дослідження низки перспективних припоїв для паяння монокристалічного жароміцного нікелевого сплаву ЖС-32ВІ.

Таким чином, в процесі проведення досліджень встановлено, що метод математичного моделювання термодинамічних процесів (CALPHAD) з використанням програмного пакету JMatPro, можна з успіхом застосовувати під час створення багатокомпонентних припоїв для паяння жароміцних нікелевих сплавів, зокрема, для прогнозування температури ліквідусу та орієнтовного фазового складу, що дозволить значно зменшити витрати часу та матеріальних ресурсів.

## Висновки

В процесі проведення досліджень встановлено, що метод комп'ютерного моделювання термодинамічних процесів (CALPHAD) з використанням програмного пакету JMatPro може бути ефективно застосований під час розробки багатокомпонентних припоїв для паяння жароміцних нікелевих сплавів, зокрема, для прогнозування температури ліквідусу та фазового складу припою.

За результатами проведених розрахункових досліджень встановлено:

- збільшення кількості танталу з 2,5 до 10 мас. % у базовому сплаві системи Ni-Cr-Co-Al-Ta не дозволяє значно знизити його температури ліквідусу та ліквідусу;

- введення у склад базового сплаву цирконію майже не змінює температуру ліквідусу базового сплаву, проте призводить до суттєвого зниження температури солідусу ( 991 °С). Це пов'язано з появою у сплаві низькотемпературної евтектики, що містить у своєму складі цирконій та тантал;

– легування базового сплаву титаном та ніобієм призводить до суттєвого зниження температури плавлення сплаву. При цьому титан чинить більший вплив за ніобій;

– додаткове легування титаном та ніобієм значно підвищує (до 1100 °С) розрахункову температуру початку розчинення  $\gamma'$ -фази (рис. 6), хоча і дещо знижує інтервал її існування (до 1210...1225 °С);

– при дослідженні кривих мікроструктури сплавів встановлено, що додаткове легування  $\gamma'$ -утворюючими елементами сприяє невеликому зниженню кількості  $\sigma$ -фази, а при одночасному легуванні певною кількістю титану та ніобію поява даної фази фіксується лише при температурах вище 600 °С;

– спроби додатково знизити кількість  $\sigma$ -фази за допомогою введення у сплав ренію призводить до зміщення інтервалу існування  $\sigma$ -фази від температури 600...1110 до 685...1180 °С.

### Список літератури

1. Кузнецов В. П., Лесников В. П., Попов Н. А. (2016) *Структура и свойства монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов*. Екатеринбург, Изд-во Урал. ун-та.
2. Каблов Е.Н., Петрушин Н.В., Светлов И.Л., Демонис И.М. (2007) Литейные жаропрочные никелевые сплавы для перспективных авиационных ГТД. *Технология легких сплавов*, 2, 6–16.
3. Zhou, Shihuai, Wang, Yougan, Zhu, J. et al. (2004). Computational Tools for Designing Ni-Base Superalloys. *Proceedings of the International Symposium on Superalloys*. DOI: 10.7449/2004/Superalloys\_2004\_969\_975
4. Каблов Е.Н. (2005) Жаропрочные конструкционные материалы. *Литейное производство*, 7. [Электронный ресурс]. URL: <https://viam.ru/sites/default/files/scipub/2005/2005-204274.pdf> (дата звернення 14.06.2021).
5. Гайдук С.В., Кононов В.В., Куренкова В.В. (2017) Применение комплексной расчетно-аналитической методики для многокритериальной оптимизации составов литейных жаропрочных никелевых сплавов. *Современная электротехнология*, 126, 1, 44–51. DOI: doi.org/10.15407/sem2017.01.08
6. Saunders, N., Fahrman, M., Small, C.J. (2000) The application of CALPHAD calculations to Ni-based superalloys. *Superalloys*, 803–811. DOI: 10.7449/2000/Superalloys\_2000\_803\_811.
7. Markl, M., Müller, A., Ritter, N. et al. (2018) Development of Single-Crystal Ni-Base Superalloys Based on Multi-criteria Numerical Optimization and Efficient Use of Refractory Elements. *Metall. Mater. Trans. A*, 49, 4134–4145. DOI: 10.1007/s11661-018-4759-0
8. Каблов Е.Н. (2001) *Литые лопатки газотурбинных двигателей (сплавы, технология, покрытия)*. Москва, МИСиС.
9. Петрушин Н.В., Чабина Е.Б., Назаркин Р.М. (2012) Конструирование жаропрочных интерметаллидных сплавов на основе  $\gamma'$ -фазы с высокой температурой плавления. Ч. 1. *Металловедение и термическая обработка металлов*, 2, 32–38.
10. Петрушин, Н.В., Чабина Е.Б., Назаркин Р.М. (2012) Конструирование жаропрочных интерметаллидных сплавов на основе  $\gamma'$ -фазы с высокой температурой плавления. Ч. 2. *Там же*, 3, 20–23.
11. Huang, W., Chang, Y.A. (1999) A thermodynamic description of the Cr–Ni–Re–Al system. *Mater. Sci. and Eng. A*, 259, 110–119.
12. Perrut, M. (2015) Thermodynamic Modeling by the CALPHAD Method and its Applications to Innovative Materials. *Aerospace Lab*, 9, 1–11. DOI : 10.1276212015.AL09.10

13. Saunders, N. (1996) Phase Diagram Calculations for Ni-based Superalloys. *Superalloys*, 101–110.
14. Lukas, H.L., Fries, S.G., Sundman, B. (2007) *Computational thermodynamics: the Calphad method*. Cambridge University Press.
15. <https://www.senteseoftware.co.uk/jmatpro>
16. Saunders, N., Guo, Z., Li, X. et al. (2003) Using JMatPro to Model Materials Properties and Behavior. *JOM*, 55, 12, 60–65. DOI:10.1007/s11837-003-0013-2
17. Сидоров А. (2015) JMatPro – программный пакет для моделирования свойств сталей и сплавов. САПР и графика. *Современные технологии – в промышленность*, 3, 2–4.
18. Tapia, A.S. (2006) *Computational Design Of Nickel Based Superalloys For Industrial Gas Turbine Components*. University Of Florida.
19. Schillé, J.-P., Guo, Z., Saunders, N., Miodownik, A.P. (2011) Modeling Phase Transformations and Material Properties Critical to Processing Simulation of Steels. *Materials and Manufacturing Processes*, 26, 1, 137–143. DOI: 10.1080/10426910903153059
20. Петрушин Н.В., Оспенникова О.Г., Висик Е.М. и др. (2012) Жаропрочные сплавы низкой плотности. *Литейное производство*, 6 [Электронный ресурс]. URL: <https://viam.ru/sites/default/files/scipub/2011/2011-205933.pdf> (дата звернення 29.01.2021)
21. Морозова Г.И. (1992) *Феномен  $\gamma'$ -фазы в жаропрочных никелевых сплавах*. [Электронный ресурс]. URL: <https://viam.ru/sites/default/files/scipub/1992-201097.pdf> (дата звернення 29.01.2021)

### References

1. Kuznetsov, V.P., Lesnikov, V.P., Popov, N.A. (2016) *Structure and properties of monocrystalline high-temperature nickel alloys*. Ekaterinburg, Izd-vo Ural. Un-ta [in Russian].
2. Kablov, E.N., Petrushin, N.V., Svetslov, I.L., Demonis, I.V. (2007) Casting heat-resistant nickel alloys for perspective aircraft GTE. *Tekhnologiya Lyogkikh Splavov*, 2, 6–16 [in Russian].
3. Zhou, Shihuai, Wang, Yougan, Zhu, J. et al. (2004). Computational tools for designing Ni-Base superalloys. In: *Proc. of the Int. Symposium on Superalloys*. DOI: 10.7449/2004/Superalloys\_2004\_969\_975
4. Kablov, E.N. (2005) Heat-resistant structural materials. *Liteynoe Proizvodstvo*. 7. URL: <https://viam.ru/sites/default/files/scipub/2005/2005-204274.pdf>
5. Gaiduk, S.V., Kononov, V.V., Kurenkova, V.V. (2017) Application of integrated calculation-analytic method for multi-criterion optimizing of compositions of casting heat-resistant nickel alloys. *Suchasna Elektrometal*. 126, 1, 44–51. DOI: doi.org/10.15407/sem2017.01.08 [in Ukrainian].
6. Saunders, N., Fahrman, M., Small, C.J. (2000) The application of CALPHAD calculations to Ni-based superalloys. *Superalloys*, 803–811. DOI: 10.7449/2000/Superalloys\_2000\_803\_811.
7. Markl, M., Müller, A., Ritter, N. et al. (2018) Development of single-crystal Ni-Base superalloys based on multi-criteria numerical optimization and efficient use of refractory elements. *Metall. Mater. Trans. A*, 49, 4134–4145. DOI: 10.1007/s11661-018-4759-0
8. Kablov, E.N. (2001) *Cast blades of gas turbine engines (alloys, technology, coatings)*. Moscow, MISiS [in Russian].
9. Petrushin, N.V., Chabina, E.B., Nazarkin, R.M. (2012) Development of heat-resistant intermetallic alloys based on  $\gamma'$ -phase with high melting temperature. Pt 1. *Metallovedenie i Termicheskaya Obrabotka Metallov*, 2, 32–38 [in Russian].
10. Petrushin, N.V., Chabina, E.B., Nazarkin, R.M. (2012) Development of heat-resistant intermetallic alloys based on  $\gamma'$ -phase with high melting temperature. Pt 2. *Ibid.*, 3, 20–23 [in Russian].
11. Huang, W., Chang, Y.A. (1999) A thermodynamic description of the Cr–Ni–Re–Al system. *Mater. Sci. and Eng. A*, 259, 110–119.
12. Perrut, M. (2015) Thermodynamic Modeling by the CALPHAD method and its applications to innovative materials. *Aerospace Lab*, 9, 1–11. DOI : 10.1276212015.AL09.10
13. Saunders, N. (1996) Phase diagram calculations for Ni-based superalloys. *Superalloys*, 101–110.

14. Lukas, H.L., Fries, S.G., Sundman, B. (2007) *Computational thermodynamics: The Calphad method*. Cambridge University Press.
15. <https://www.sentesoftware.co.uk/jmatpro>
16. Saunders, N., Guo, Z., Li, X. et al. (2003) Using JMatPro to model materials properties and behavior. *JOM*, 55(12), 60–65. DOI:10.1007/s11837-003-0013-2
17. Sidorov, A. (2015) JMatPro – program package for modeling of properties of steels and alloys. CAD and graphics. *Sovremennye Tekhnologii - v Promyshlennost*, 3, 2–4 [in Russian].
18. Tapia, A.S. (2006) *Computational Design of Nickel Based Superalloys for Industrial Gas Turbine Components*. University of Florida.
19. Schillé, J.-P., Guo, Z., Saunders, N., Miodownik, A.P. (2011) Modeling phase transformations and material properties critical to processing simulation of steels. *Materials and Manufacturing Processes*, 26(1), 137–143. DOI: 10.1080/10426910903153059
20. Petrushin, N.V., Ospennikova, O.G., Visik, E.M. et al. (2012) Heat-resistant alloys of low density. *Litejnoe Proizvodstvo*, 6 [in Russian]. URL: <https://viam.ru/sites/default/files/sci-pub/2011/2011-205933.pdf>
21. Morozova, G.I. (1992) *Phenomenon of  $\gamma'$ -phase in heat-resistant nickel alloys* [in Russian]. URL: <https://viam.ru/sites/files/sci-pub/1992-201097.pdf>

## MATHEMATICAL MODELING OF MELTING TEMPERATURE RANGE AND PHASE COMPOSITION OF MULTICOMPONENT NICKEL ALLOYS

S.V. Maskimova, V.V. Voronov, P.V. Kovalcuk

E.O. Paton Electric Welding Institute of the NAS of Ukraine. 11 Kazymyr Malevych Str., 03150, Kyiv, Ukraine.

E-mail: [office@paton.kyiv.ua](mailto:office@paton.kyiv.ua)

Modern brazing filler metals for brazing high-temperature nickel alloys are complex alloys, where the components should provide the required level of strength, high-temperature resistance, high-temperature corrosion resistance and other service properties of brazed joints. However, establishing the optimum composition to obtain the desired set of properties is a non-trivial task, requiring considerable investment of time and money. The work is a study of applicability of the method of mathematical modeling of thermodynamic processes (CALPHAD) during development of multicomponent brazing filler metals for brazing high-temperature nickel alloys. During performance of investigations, using CALPHAD computational procedure, melting temperature ranges were determined for a number of alloys of Ni–Cr–Co–Al–(Me)–Ta system. Calculated data were obtained on the influence of adhesion-active elements of group IV and V of the periodic table on liquidus temperature and phase composition of the basic nickel alloy. In particular, their impact on the quantity and thermal stability of  $\gamma'$ -phase and  $\sigma$ -phase was determined. Thermodynamic calculated data, obtained with application of mathematical modeling method, were used during development and investigation of a number of promising brazing filler metals for brazing high-temperature nickel alloys, including single-crystal high-temperature nickel alloy ZhS-32VI. 21 Ref., 8 Fig.

*Keywords: brazing filler alloy, brazing, high-temperature nickel alloys, mathematical modeling (CALPHAD), adhesion-active components, titanium, niobium, tantalum,  $\gamma'$ -phase,  $\sigma$ -phase*

Надійшла до редакції 7.07.2021

### ХІ МІЖНАРОДНА КОНФЕРЕНЦІЯ

## Математичне моделювання та інформаційні технології в зварюванні та споріднених процесах

12–16 вересня 2022 р.,  
Одеса, готель «Аркадія»



Національна академія наук України  
Інститут електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України  
Міжнародна Асоціація «Зварювання»

Для участі в конференції необхідно заповнити реєстраційну картку і разом з тезами доповіді направити її в Оргкомітет до 19 серпня 2022 р. До початку конференції будуть видані тези доповідей.

Збірники праць десяти попередніх конференцій «Математичне моделювання та інформаційні технології в зварюванні та споріднених процесах» знаходяться у відкритому доступі на сайті: <https://patonpublishinghouse.com/ukr/proceedings/mmw>

#### Контрольні дати

Надання заявок на участь та тез доповідей  
Розсилка другого інформаційного повідомлення та підтвердження участі  
Оплата реєстраційного внеску

до 19.08.2022 р.

до 05.09.2022 р.

до 12.09.2022 р.

#### Оргкомітет

ІЕЗ ім. Є.О. Патона НАН України  
вул. Казимира Малевича 11,  
м. Київ, 03150, Україна  
тел. / факс: (38044) 200-82-77, 205-22-26  
E-mail: [journal@paton.kiev.ua](mailto:journal@paton.kiev.ua)  
<http://pwi-scientists.com/ukr/mmw2022>