



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2022.4.11

УДК 539.3

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОЛЗУЧЕСТИ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ С УЧЕТОМ РАФТИНГА

А.И. Грищенко, А.С. Семенов

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Санкт-Петербург, Россия

### О СТАТЬЕ

Получена: 20 сентября 2022 г.  
Одобрена: 30 ноября 2022 г.  
Принята к публикации:  
12 декабря 2022 г.

#### Ключевые слова:

монокристалл, системы скольжения,  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фазы, ползучесть, микро-структурные модели, конечно-элементная гомогенизация, реологические модели.

### АННОТАЦИЯ

Исследования посвящены разработке и верификации двухуровневой микромеханически мотивированной модели вязкоупругого деформирования двухфазных монокристаллических сплавов на никелевой основе, предсказывающей их поведение при высокотемпературных механических воздействиях с учетом наличия и эволюции микроструктуры. Применение модели актуально при выполнении уточненных расчетов напряженно-деформированного состояния охлаждаемых монокристаллических лопаток газотурбинных двигателей и установок. Формулировка определяющих уравнений для каждой из фаз учитывает анизотропию упругих и вязких свойств, наличие октаэдрических систем скольжения, особенности кубической сингонии, наличие вязких свойств как ниже, так и выше предела текучести. Идентификация параметров моделей для  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз производилась на основе известных кривых ползучести для каждой фазы.

Эффективные свойства монокристаллического сплава с учетом наличия  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз определялись как на основе конечно-элементной гомогенизации для представительного объема, так и с использованием простейших реологических (структурных) моделей материала, рассматривающих последовательное и параллельное соединение фаз. На основе многовариантных вычислительных экспериментов и аналитических оценок определены зависимости вязкоупругих свойств монокристаллических сплавов на никелевой основе от объемной доли  $\gamma'$ -фазы. Предложены феноменологические модели ползучести, учитывающие изменение объемной доли и морфологию  $\gamma'$ -включений.

Результаты моделирования с использованием предложенной двухуровневой микроструктурной модели материала демонстрируют хорошее соответствие с экспериментальными данными для монокристаллического жаропрочного сплава ЖС32.

© ПНИПУ

© Грищенко Алексей Иванович – асс., [gai-gr@yandex.ru](mailto:gai-gr@yandex.ru).  
Семенов Артем Семенович – д.ф.-м.н., доц., [semenov.artem@gmail.com](mailto:semenov.artem@gmail.com).

Alexey I. Grishchenko – Assistant, e-mail: [gai-gr@yandex.ru](mailto:gai-gr@yandex.ru).  
Artem S. Semenov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor,  
e-mail: [semenov.artem@gmail.com](mailto:semenov.artem@gmail.com).



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

# MODELING OF CREEP PROCESSES OF SINGLE-CRYSTAL ALLOYS WITH TAKING INTO ACCOUNT OF RAFTING

A.I. Grishchenko, A.S. Semenov

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

## ARTICLE INFO

Received: 20 September 2022

Approved: 30 November 2022

Accepted for publication:

12 December 2022

### Keywords:

single crystal, slip systems,  $\gamma$  and  $\gamma'$  phases, creep, micromechanical models, finite element homogenization, rheological models.

## ABSTRACT

The research is devoted to the development and verification of a two-level micromechanically motivated model of viscoelastic deformation of two-phase nickel-based single-crystal alloys, predicting behavior under high thermomechanical loading with taking into account the presence of  $\gamma$  and  $\gamma'$  phases. The model is relevant for computations of the stress-strain state of cooled single crystal blades of gas turbine units.

The formulation of the constitutive equations for each of the phases considered the anisotropy of elastic and viscous properties, the presence of octahedral slip systems, the features of the cubic system, and the presence of viscous properties both below and above the yield stress. Model parameters for  $\gamma$  and  $\gamma'$  phases were identified based on known creep curves for each phase.

The effective properties of a single-crystal alloy, considering the presence of  $\gamma$  and  $\gamma'$  phases, were determined both based on finite element homogenization for a representative volume and using the simplest rheological (structural) models of the material, considering the series and parallel connection of phases. Based on multivariant computational experiments and analytical estimates, the dependences of the viscoelastic properties of nickel-based single-crystal alloys on the volume fraction of the  $\gamma'$  phase are determined. Phenomenological creep models that take into account the change in the volume fraction and the morphology of  $\gamma'$  inclusions have been proposed.

The simulation results using the proposed two-level microstructural model of the material demonstrate a good agreement with the experimental data for the ZhS32 single-crystal heat-resistant alloy.

© PNRPU

## Введение

Никелевые жаропрочные монокристаллические сплавы [1; 2] представляют собой класс материалов с уникальными свойствами. К отличительным особенностям данного класса материалов можно отнести крайне высокие показатели длительной прочности и сопротивления высокотемпературной ползучести за счет отсутствия межзеренных границ [3], высокую стойкость к коррозии [1]. В то же время следует отметить анизотропию механических свойств [3–6], а также снижение, по сравнению с поликристаллическими материалами, термоиницированных напряжений и рост сопротивления малоциклового усталости, обусловленные уменьшением модуля упругости в осевом направлении лопаток [4; 5]. Развитие газотурбинных двигателей (ГТД) неотрывно связано с повышением рабочих температур [7; 8] (рис. 1), что, в свою очередь, способствует развитию жаропрочных сплавов. Так, температура газа перед турбиной в двигателях пятого поколения, например в современном российском двигателе ПД-14 [9; 10], достигает 1850 К (1577 °С) [7]. Целевым показателем военных двигателей шестого поколения является достижение температуры 2350 К [7]. Современный российский монокристаллический сплав на никелевой основе ВЖМ4, применяемый для производства лопаток двигателей пятого поколения, в том числе ПД-14 [10], имеет стабильное структурное состояние вплоть до 1473 К (1250 °С) [11], что составляет примерно 90 % от температуры плавления материала [4]. Таким образом, в на-

стоящее время монокристаллические никелевые сплавы являются практически безальтернативными материалами для лопаток газотурбинных двигателей 5-го и 6-го поколений [12]. На макроуровне монокристаллические сплавы на основе никеля обнаруживают свойства кубической симметрии, при которой механические свойства оказываются практически одинаковыми для трех взаимно перпендикулярных направлений.

Монокристаллические сплавы на никелевой основе представляет собой двухуровневый иерархически упорядоченный материал, свойства которого на макро-

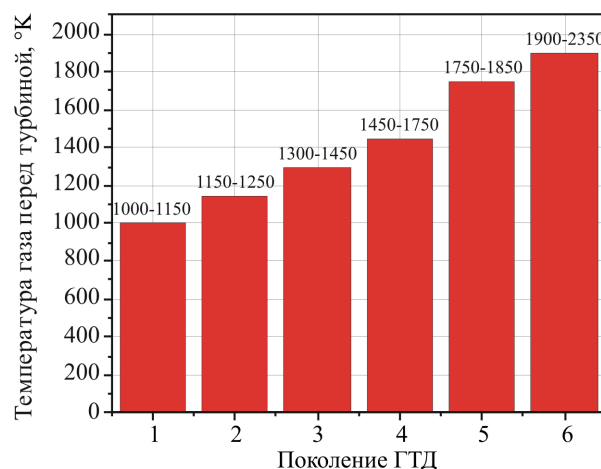


Рис. 1. Температура газа перед турбиной в зависимости от поколения ГТД

Fig. 1. Gas temperature in front of the turbine depending on the generation of gas turbine engines

уровне (уровень деталей ГТД) определяются структурно-фазовым состоянием микроструктуры, ее морфологии и свойствами отдельных ее компонентов. На микроскопическом уровне рассматриваемые материалы представляют собой структуру, которая состоит из двух фаз: матрицы из  $\gamma$ -фазы, формирующейся на основе Ni<sub>3</sub>Al и квазипериодически расположенных дисперсных включений  $\gamma'$ -фазы [2–4] (рис. 2). В изначальном состоянии при нормальных условиях частицы  $\gamma'$ -фазы представляют собой кубоиды со средним размером ~500 нм, разделенные прослойками  $\gamma$ -фазы с поперечным размером 50–90 нм, объемная доля  $\gamma'$ -фазы  $c_{\gamma'}$  составляет порядка 70 % [2; 13].

Различие составов  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз обуславливает несоответствие периодов их кристаллических решеток и, как следствие, отличие коэффициентов линейного температурного расширения [1; 2; 14–19]. Относительную разность периодов кристаллической решетки называют мисфитом:

$$\delta = 2 \frac{a_{\gamma'} - a_{\gamma}}{a_{\gamma} + a_{\gamma'}}, \quad (1)$$

где  $a_{\gamma}$ ,  $a_{\gamma'}$  – периоды решеток отдельных фаз.

Наличие мисфита приводит к возникновению характерных для никелевых жаропрочных монокристаллических сплавов межфазных термических напряжений, что делает необходимым его учет в формулировках многоуровневых моделей неупругого деформирования. В работах [15; 20; 21] показано, что мисфит является одним из факторов, влияющих на жаропрочность монокристаллических сплавов.

Для большинства жаропрочных монокристаллических сплавов на никелевой основе характерное значение мисфита  $\delta$  при температуре 293 К (20 °С) лежит в пре-

делах  $-0,1 \dots -0,2$  % [17] и возрастает по абсолютной величине до значений  $-0,2 \dots -0,4$  % при достижении температуры 1173–1273 К (900–1000 °С) [18; 22].

Другим важным параметром является несоответствие упругих модулей отдельных фаз:

$$m = 2 \frac{M_{\gamma'} - M_{\gamma}}{M_{\gamma} + M_{\gamma'}}, \quad (2)$$

где  $M_{\gamma}$  и  $M_{\gamma'}$  определяются разностью компонент тензоров упругих модулей  $M = C_{1111} - C_{1122}$ .

Для большинства современных никелевых монокристаллических сплавов параметр  $m$  положителен, его величина имеет порядок 0,1 [23].

Структурно-фазовое состояние никелевых монокристаллических сплавов имеет существенную зависимость от напряженного состояния и температуры [3; 13; 24–26]. Структурно-фазовое состояние можно охарактеризовать двумя основными факторами: объемной долей  $\gamma'$ -фазы и морфологией  $\gamma'$ -включений. При температурах, превосходящих 1223 К (950 °С), резкую тенденцию к уменьшению доли упрочняющей фазы имеет ее зависимость от температуры. На рис. 3 представлена температурная зависимость объемной доли  $\gamma'$ -фазы монокристаллических сплавов SRR99, AM1, CMSX-4. Красной линией показана аппроксимация данных на основе уравнения (3).

Зависимость объемной доли  $\gamma'$ -фазы  $c_{\gamma'}$  от температуры может быть получена на основе эмпирической зависимости [27]

$$c_{\gamma'} = A - B e^{-\frac{Q}{RT}}, \quad (3)$$

где  $A$ ,  $B$ ,  $Q$  – параметры модели, значения которых для рассматриваемых сплавов представлены в табл. 1,  $R$  – универсальная газовая постоянная.

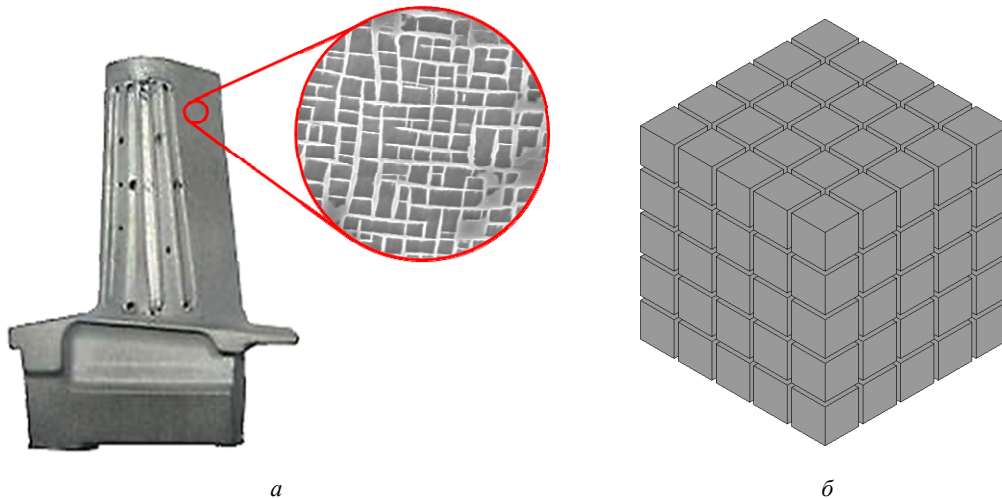


Рис. 2. Микроструктура монокристаллического сплава на никелевой основе [2] (а); 3D-идеализация ( $\gamma$ -фаза не показана) (б)

Fig. 2. Microstructure of a nickel-based single-crystal alloy [2] (a); 3D idealization ( $\gamma$  phase not shown) (b)

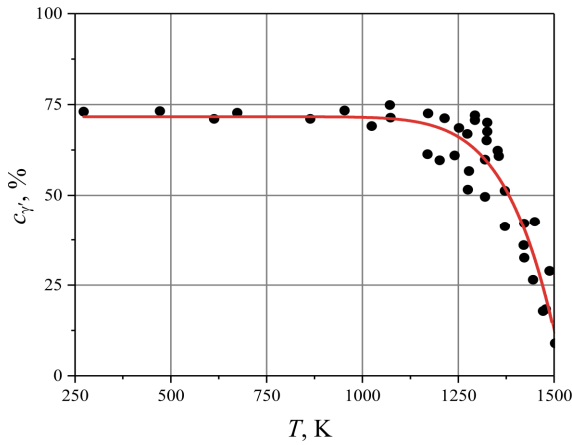


Рис. 3. Зависимость объемной доли  $\gamma'$ -фазы монокристаллических сплавов SRR99, AM1, CMSX-4 от температуры [13]

Fig. 3. Dependence of the volume fraction  $\gamma'$  of the SRR99, AM1, CMSX-4 single-crystal alloys on temperature [13]

Таблица 1/Table 1

Значения параметров уравнения (3)

Values of the equation parameters (3)

Параметр	$A$ , [-]	$B$ , [-]	$Q$ , кДж/моль
Значение	0,71	85071	148

В широком диапазоне температур (вплоть до 1273 К для сплава CMSX-4) для монокристаллических сплавов при изотермической ползучести и выдержках без нагрузки при постоянных температурах объемная доля  $\gamma'$ -фазы остаётся постоянной [23; 28] (рис. 4). При превышении критической температуры доля  $\gamma'$ -фазы имеет тенденцию к уменьшению в процессе ползучести. На рис. 5 представлены зависимости объемной доли  $\gamma'$ -фазы сплава CMSX-4 от времени при высокотемпературной ползучести ( $T = 1323$  К) при одноосном растяжении ( $T = 1323$  К) при одноосном растя-

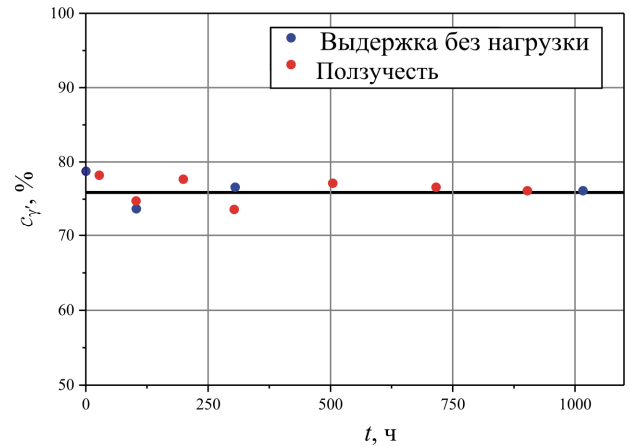


Рис. 4. Зависимость объемной доли  $\gamma'$ -фазы сплава CMSX-4 от времени при изотермической высокотемпературной ползучести при одноосном растяжении и выдержке без нагрузки при  $T = 1273$  К

Fig. 4. Time dependence of the volume fraction  $\gamma'$  of the CMSX-4 alloy phase during isothermal high-temperature creep under uniaxial tension and holding without load at  $T = 1273$  К

жению в направлении  $[001]$  и при сдвиге в плоскости  $(001)$  в направлении  $[01\bar{1}]$ , построенные на основе литературных данных [13].

Как было отмечено выше, при высокотемпературной ползучести происходит изменение морфологии  $\gamma'$ . При растяжении вдоль главных кристаллографических осей никелевых монокристаллов изначально кубоидные частицы  $\gamma'$ -фазы вытягиваются в направлении, совпадающим или перпендикулярном приложенной нагрузке, коалесцируют между собой, образуя так называемую рафт-структуру [1–4; 22; 23; 26; 29–31]. В случае, если  $\gamma'$ -частицы срашиваются в стержни или пластины, ориентированные перпендикулярно направлению приложенной нагрузки, говорят о рафтинге N-типа, в противном

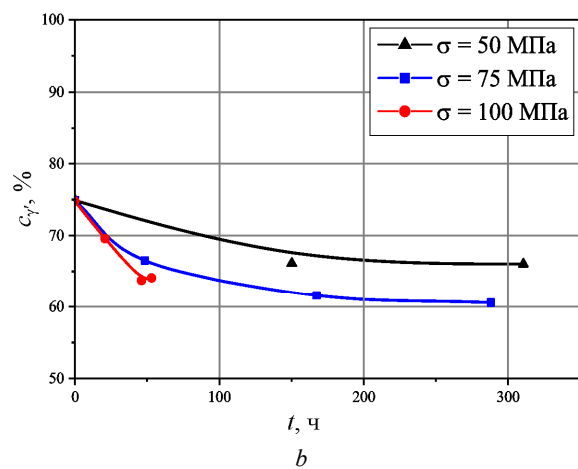
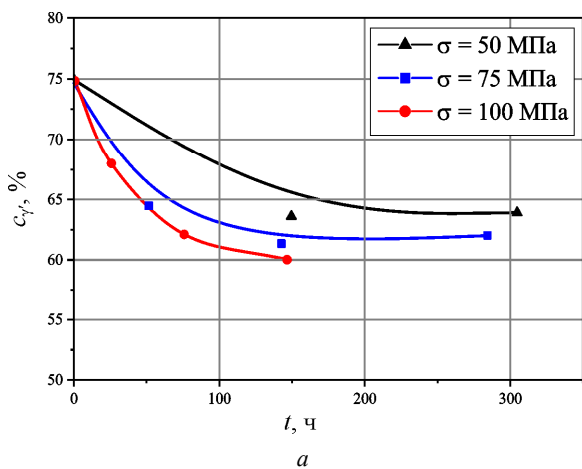


Рис. 5. Зависимость объемной доли  $\gamma'$ -фазы сплава CMSX-4 от времени при высокотемпературной ползучести ( $T = 1323$  К) при:  $a$  – одноосном растяжении в направлении  $[001]$ ;  $b$  – при сдвиге в плоскости  $(001)$  в направлении  $[01\bar{1}]$

Fig. 5. Dependence of the volume fraction  $\gamma'$  of the CMSX-4 alloy phase at high-temperature creep ( $T = 1323$  К) with  $a$ ) uniaxial tension in the  $[001]$  direction and  $b$ ) with shear in the  $(001)$  plane in the  $[01\bar{1}]$  direction on time

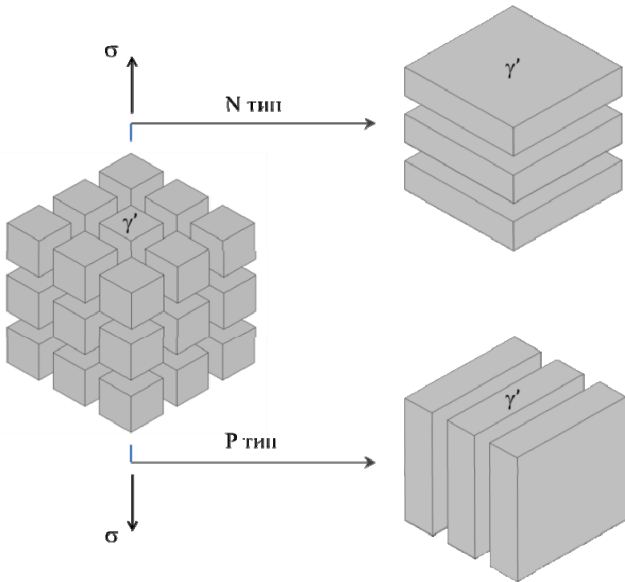


Рис. 6. Схема эволюции микроструктуры монокристаллических сплавов на никелевой основе при высокотемпературной ползучести (рафтинг)

Fig. 6. Scheme of the evolution of the microstructure of nickel-based single-crystal alloys during high-temperature creep (rafting)

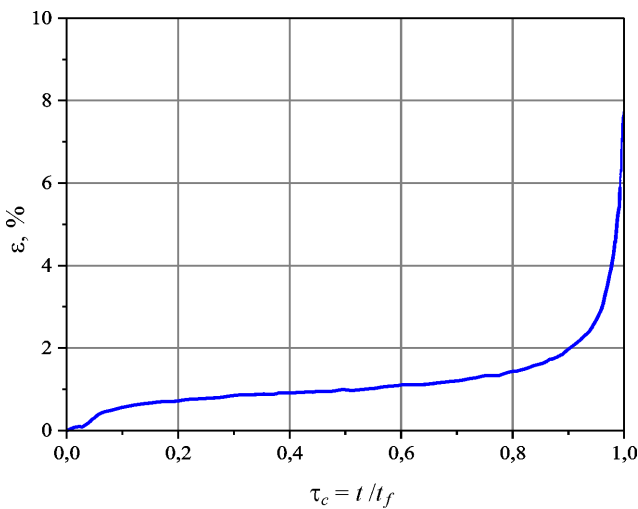


Рис. 7. Кривая ползучести монокристаллического сплава TMS-138 при 1373 К (1100 °С) и 137 МПа [39] для ориентации [001]. По оси абсцисс отложен безразмерный параметр  $\tau_c$ , равный отношению текущего времени к времени разрушения образца

Fig. 7. Creep curve of the TMS-138 single-crystal alloy at 1373 K (1100 °C) and 137 MPa [39] for the [001] orientation. The abscissa shows the dimensionless parameter  $\tau_c$ , which is equal to the ratio of the current time to the sample destruction time

случае речь идет о рафтинге Р-типа (рис. 6). Для большинства современных жаропрочных монокристаллических сплавов реализуется рафтинг N-типа. В общем случае тип рафтинга зависит от знаков и величин параметров  $\delta$  и  $m$ , а также от знака приложенной нагрузки.

Изменение морфологии  $\gamma'$ -включений наблюдается, например, при обследовании лопаток газовых турбин после их эксплуатации [19; 22; 32–34]. Как отмечается

в работе [30], рафтинг имеет существенное влияние на механические свойства сплавов и, как следствие этого, на надежность ответственных элементов ГТД. Рафтинг приводит к снижению жаропрочных свойств сплавов [29], возрастанию скорости ползучести [35]. Рафтинг N-типа способствует снижению сопротивления малоциклового усталости [36–38].

Эволюция микроструктуры в процессе ползучести (рис. 7) показана на рис. 8 [39] для сплава TMS-138. Рафт-структура образуется на первой, неустановившейся стадии ползучести (см. рис. 8, a, b), на второй стадии морфология  $\gamma'$ -включений практически не меняется, однако толщина  $\gamma'$ -пластин несколько увеличивается, тогда как продольные размеры уменьшаются [17] (см. рис. 8, c). На третьей, ускоренной стадии ползучести за счет возникновения синусоидальных возмущений на поверхности раздела  $\gamma$ -матрицы и  $\gamma'$ -включений происходит образование зигзагообразных пластин (рис. 8, d) вплоть до топологической инверсии микроструктуры (см. рис. 8, e).

Изменение морфологии  $\gamma'$ -включений при приложении нагрузки вдоль кристаллографических осей монокристалла сопровождается двумя процессами – изменением формы и дальнейшей коалесценцией включений (рафтинг), а также их однородным (изотропным) укрупнением [31]. В этом случае изменение морфологии может описано с помощью двух геометрических параметров – периодом микроструктуры в направлении приложения нагрузки  $\lambda_{[001]}$ , расстоянием между отдельными включениями в том же направлении  $w$  (рис. 9). Удобным представляется использование безразмерного параметра  $\xi$ , характеризующего степень рафтинга и определяемого следующим образом:

$$\xi = \frac{w - w_{cube}}{w_{raft} - w_{cube}}, \quad (4)$$

где  $w_{cube}$  – ширина горизонтальных каналов между включениями в исходном материале,  $w_{raft}$  – ширина каналов после срачивания включений,  $0 \leq \xi \leq 1$ .

Значения  $w_{cube}$  и  $w_{raft}$  могут быть найдены из следующих соотношений:

$$w_{cube} = \left(1 - \sqrt[3]{c_{\gamma'}}\right) \lambda_{[001]}, \quad (5)$$

$$w_{raft} = (1 - c_{\gamma'}) \lambda_{[001]}. \quad (6)$$

Период микроструктуры в направлении приложения нагрузки  $\lambda_{[001]}$  независим от уровня нагрузки [31]. Его изменение от температуры может быть определено на основе эмпирической зависимости:

$$\lambda_{[001]} = \lambda_{[001]}^0 \left[1 + D_0 \exp\left(-\frac{Q_\lambda}{RT}\right) t\right]^a. \quad (7)$$

Степень рафтинга  $\xi$  может быть найдена из следующего соотношения:

$$\xi = 1 - \exp\left[-A_0 \exp\left(-\frac{Q_\xi}{RT}\right) \left(1 + \frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^p t\right]. \quad (8)$$

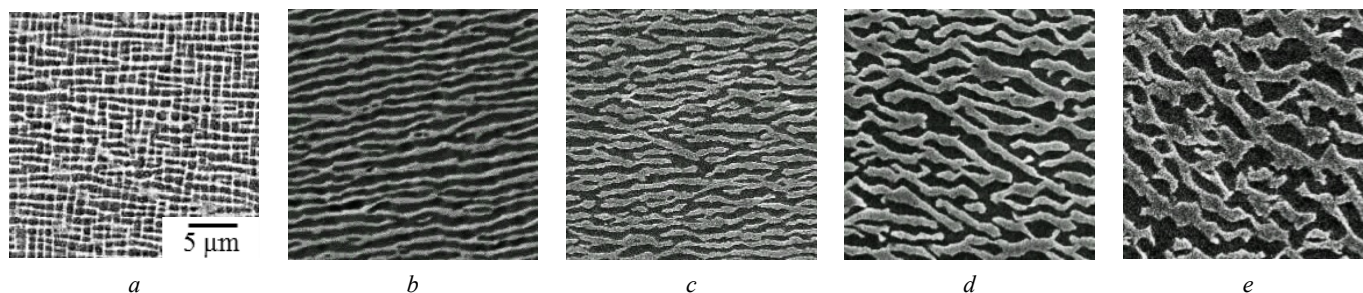


Рис. 8. Эволюция микроструктуры монокристаллического сплава TMS-138 в процессе высокотемпературной ползучести при 1373 К (1100 °С) и 137 МПа [39]:  $a - \tau_c = 0,03$ ;  $b - \tau_c = 0,1$ ;  $c - \tau_c = 0,5$ ;  $d - \tau_c = 0,95$ ;  $e - \tau_c = 1$

Fig. 8. Evolution of the microstructure of the TMS-138 single-crystal alloy during high-temperature creep at 1373 K (1100 °C) and 137 MPa [39]:  $a - \tau_c = 0.03$ ;  $b - \tau_c = 0.1$ ;  $c - \tau_c = 0.5$ ;  $d - \tau_c = 0.95$ ;  $e - \tau_c = 1$

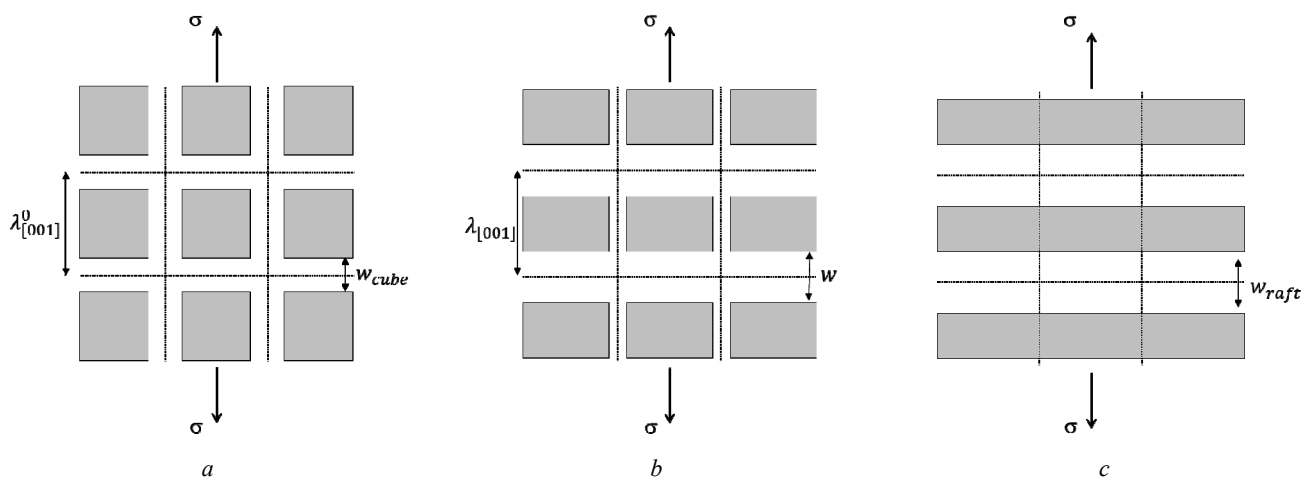


Рис. 9. Схема эволюции микроструктуры при высокотемпературной ползучести:

$a$  – исходное состояние ( $\xi = 0$ );  $b$  – промежуточное состояние ( $0 < \xi < 1$ );  $c$  – образование рафт-структуры ( $\xi = 1$ )

Fig. 9. Scheme of microstructure evolution at high temperature creep:  $a$  – initial state ( $\xi=0$ );  $b$  – intermediate state ( $0 < \xi < 1$ );  $c$  – formation of a raft structure ( $\xi=1$ )

Для сплава CMSX-4 параметры моделей (7) и (8) принимают следующие значения [31]:  $\lambda_{[001]}^0 = 0,709 \mu\text{m}$ ,  $a = 0,0745$ ,  $D_0 = 5,2 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$ ,  $Q_\lambda = 243 \text{ КДж/моль}$ ,  $A_0 = 1,16 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$ ,  $Q_\xi = 405 \text{ КДж/моль}$ ,  $p = 9,83$ ,  $\sigma_0 = 955 \text{ МПа}$ .

Наряду с рассмотренными эмпирическими моделями, описывающими процесс эволюции фазового состава, широко представлены термодинамически мотивированные модели [26; 30; 40–42]. Отдельно следует выделить работы, посвященные прямому моделированию процессов эволюции  $\gamma/\gamma'$ -микроструктуры [43–46].

Турбинные лопатки современных ГТД работают в условиях высокотемпературной ползучести, что делает актуальной разработку соответствующих моделей. Для прогнозирования напряженно-деформированного состояния монокристаллических лопаток при сложных программах термомеханического нагружения можно рассматривать два основных подхода [6; 47–51]:

- применение феноменологических моделей ползучести, описывающих поведение материала на макроскопическом уровне [6; 52–56],
- применение микромеханических моделей, учитывающих, что неупругие деформации происходят в соот-

ветствии с механизмом скольжения по активным системам скольжения и в значительной мере зависят от кристаллографической ориентации монокристалла по отношению к направлению внешнего воздействия [1; 6; 52; 57; 58].

На данный момент существует достаточно большое количество микромеханических [1; 6; 47–53; 57–66] и феноменологических [6; 52–56] моделей неупругого деформирования, однако модели, учитывающие наличие  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз при высокотемпературной ползучести, находятся на стадии разработки [1; 35; 46; 67].

Целью исследования является разработка многоуровневой микромеханически мотивированной модели ползучести монокристаллических сплавов на никелевой основе, учитывающей наличие  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз. Аналогичные исследования для упругопластических моделей рассмотрены в работе [68].

## 1. Модели отдельных фаз монокристаллического материала

В монокристаллических материалах неупругие деформации происходят в соответствии с механизмом скольжения по активным системам скольжения и суще-

ственно зависят от кристаллографической ориентации монокристалла по отношению к направлению внешнего воздействия.

При использовании микромеханических моделей материала для каждой из фаз учитывалась анизотропия упругих и вязких свойств, особенности кубической сингонии. Предполагалось, что течение в отдельной фазе монокристаллического материала представляет собой результат возможного скольжения в  $N$ -системах скольжения, характеризующихся нормалью к  $\alpha$ -й плоскости скольжения  $\mathbf{n}^\alpha$  и направлением скольжения  $\mathbf{l}^\alpha$  ( $\alpha = 1, \dots, N$ ).

Монокристаллические сплавы с ГЦК решеткой, к которым в том числе относятся и монокристаллические сплавы на никелевой основе, имеют двенадцать октаэдрических систем скольжения вида  $\{111\} \langle 011 \rangle$  (рис. 10, *a*), шесть кубических систем скольжения вида  $\{001\} \langle 011 \rangle$  (рис. 10, *b*). Учет двойникования в настоящей работе не производился.

В случае малых деформаций имеем [1; 63–66; 69; 70]:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^p, \quad (9)$$

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \sum_{\alpha=1}^N \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{P}^\alpha, \quad (10)$$

где тензор Шмида  $\mathbf{P}^\alpha$  определяется следующим образом:

$$\mathbf{P}^\alpha = \frac{1}{2} (\mathbf{n}^\alpha \mathbf{l}^\alpha + \mathbf{l}^\alpha \mathbf{n}^\alpha) = (\mathbf{n}^\alpha \mathbf{l}^\alpha)^{Sym}. \quad (11)$$

В рамках вязкоупругой модели предполагается, что скорость накопления неупругой деформации определяется вкладом всех активных систем скольжения, т.е. таких, в которых касательные напряжения  $\tau^\alpha$  отличны от нуля.

Определяющие уравнения линейно-упругого анизотропного материала имеют вид:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = {}^4\mathbf{C} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (12)$$

где  ${}^4\mathbf{C}$  – тензор упругих податливостей четвертого ранга, в случае кубической симметрии определяемый тремя независимыми константами.

Выбор конкретной формы выражения для скорости неупругих сдвиговых деформаций  $\dot{\gamma}^\alpha$  зависит от класса рассматриваемых явлений (пластичность, вязкопластичность, вязкоупругость), а также от особенностей неупругого деформирования рассматриваемого монокристалла.

Множители  $\dot{\gamma}^\alpha$ , характеризующие интенсивность неупругого деформирования в  $\alpha$ -системе скольжения для вязкоупругой модели, вычисляются на основе уравнений:

- модель Нортона для стадии II

$$\dot{\gamma}^\alpha = A^\alpha |\tau^\alpha|^n \text{sign}(\tau^\alpha), \quad (13)$$

- обобщенная модель Нортона (теория упрочнения) для стадии I (неустановившаяся) и II (установившаяся)

$$\dot{\gamma}^\alpha = A^\alpha |\tau^\alpha|^n (\gamma^\alpha)^m \text{sign}(\tau^\alpha), \quad (14)$$

- обобщенная модель Нортона (теория течения) для стадии I и II

$$\dot{\gamma}^\alpha = A^\alpha |\tau^\alpha|^n t^m \text{sign}(\tau^\alpha), \quad (15)$$

- модель Гецова – Кабелевского для стадии I и II

$$\dot{\gamma}^\alpha = A^\alpha |\tau^\alpha|^n (\gamma^\alpha - \gamma_{\text{revers}}^\alpha)^m \text{sign}(\tau^\alpha). \quad (16)$$

где  $\tau^\alpha = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}^\alpha$ .

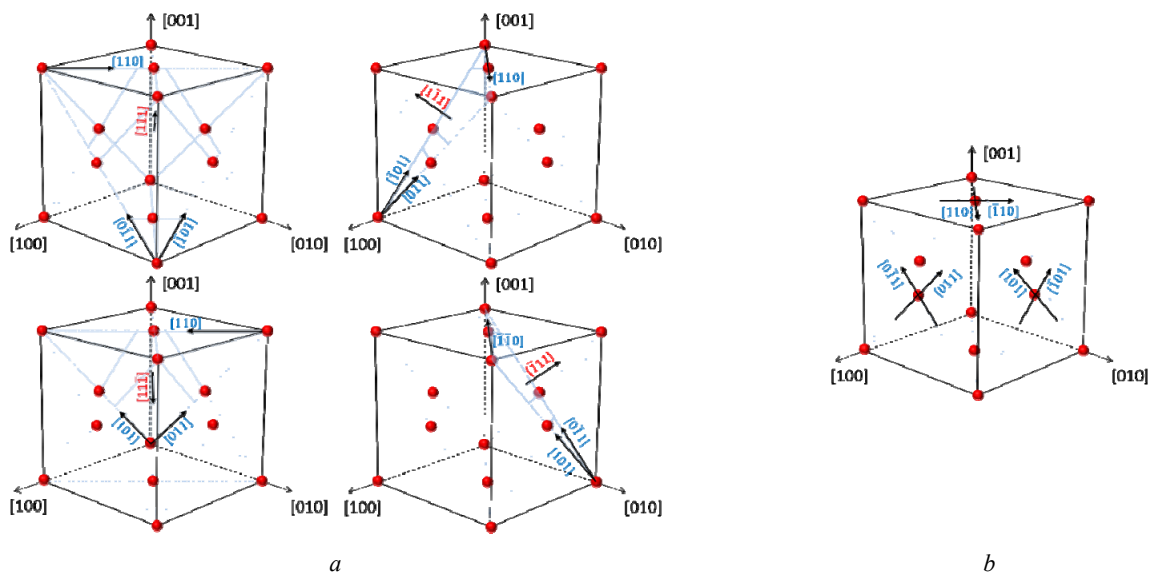


Рис. 10. Системы скольжения в монокристалле с кубической гранецентрированной решеткой: *a* – октаэдрические, *b* – кубические

Fig. 10. Slip systems in a single crystal with a cubic face-centered lattice: *a* – octahedral, *b* – cubic

В случае одноосного растяжения вдоль направления [001] для заданной истории изменения  $\sigma = \mathbf{e}_{[001]} \mathbf{e}_{[001]} \sigma_{[001][001]}$  активными являются 8 эквивалентных друг другу октаэдрических систем скольжения, кубические системы скольжения неактивны. Интегрирование (10) с учетом (9) дает для моделей (13)–(16) следующие выражения для осевых деформаций:

- модель Нортона для стадии II

$$\varepsilon_{[001][001]} = \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{[001]}} + \frac{8A_{oct}}{6^{\frac{n_{oct}+1}{2}}} \sigma_{[001][001]}^{n_{oct}} t, \quad (17)$$

- обобщенная модель Нортона (теория упрочнения) для стадии I и II

$$\varepsilon_{[001][001]} = \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{[001]}} + \frac{8}{\sqrt{6}} \left( \frac{A_{oct} (1-m_{oct})}{6^{\frac{n_{oct}+1}{2}}} \sigma_{[001][001]}^{n_{oct}} t \right)^{\frac{1}{1-m_{oct}}}, \quad (18)$$

- обобщенная модель Нортона (теория течения) для стадии I и II

$$\varepsilon_{[001][001]} = \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{[001]}} + \frac{8A_{oct}}{6^{\frac{n_{oct}+1}{2}} (m_{oct} + 1)} \sigma_{[001][001]}^{n_{oct}} t^{m_{oct}+1}, \quad (19)$$

- модель Гецова – Кабелевского для стадии I и II

$$\varepsilon_{[001][001]} = \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{[001]}} + \frac{8}{\sqrt{6}} \left[ \left( \frac{A_{oct} (1-m_{oct})}{6^{\frac{n_{oct}+1}{2}}} \sigma_{[001][001]}^{n_{oct}} t - \gamma_{revers}^{1-m_{oct}} \right)^{\frac{1}{1-m_{oct}}} + \gamma_{revers} \right]. \quad (20)$$

В случае одноосной деформации вдоль направления [111] для заданной истории изменения  $\sigma = \mathbf{e}_{[111]} \mathbf{e}_{[111]} \sigma_{[111][111]}$  активными являются 12 октаэдрических систем скольжения и 3 эквивалентных друг другу кубические системы скольжения. Вклад кубических систем скольжения, без учета октаэдрических, в осевые деформации определяется следующим образом:

- модель Нортона для стадии II

$$\varepsilon_{[111][111]} = \frac{\sigma_{[111][111]}}{E_{[111]}} + A_{cube} \left( \frac{\sqrt{2}}{3} \right)^{n_{cube}} \sigma_{[111][111]}^{n_{cube}} t, \quad (21)$$

- обобщенная модель Нортона (теория упрочнения) для стадии I и II

$$\varepsilon_{[111][111]} = \frac{\sigma_{[111][111]}}{E_{[111]}} + \left[ A_{cube} (1-m_{cube}) \left( \frac{\sqrt{2}}{3} \right)^{n_{cube}} \sigma_{[111][111]}^{n_{cube}} t \right]^{\frac{1}{1-m_{cube}}}, \quad (22)$$

- обобщенная модель Нортона (теория течения) для стадии I и II

$$\varepsilon_{[111][111]} = \frac{\sigma_{[111][111]}}{E_{[111]}} + \frac{A_{cube}}{(m_{cube} + 1)} \left( \frac{\sqrt{2}}{3} \right)^{n_{cube}} \sigma_{[111][111]}^{n_{cube}} t^{m_{cube}+1}, \quad (23)$$

- модель Гецова – Кабелевского для стадии I и II

$$\varepsilon_{[111][111]} = \frac{\sigma_{[111][111]}}{E_{[111]}} + \left[ \left( A_{cube} (1-m_{cube}) \left( \frac{\sqrt{2}}{3} \right)^{n_{cube}} \sigma_{[111][111]}^{n_{cube}} t - \gamma_{revers}^{1-m_{cube}} \right)^{\frac{1}{1-m_{cube}}} + \gamma_{revers} \right]. \quad (24)$$

Уравнения (17)–(24) могут быть использованы для идентификации параметров моделей (13)–(16) для октаэдрических систем скольжения на основе экспериментов по одноосному растяжению монокристаллических сплавов с ГЦК-решеткой вдоль направления [001] (при растяжении вдоль данного направления кубические системы скольжения неактивны). Соответствующие параметры модели для кубических систем скольжения могут быть определены из опытов по одноосному растяжению вдоль направления [111] с использованием уравнений (21)–(24) с учетом ранее найденных констант-моделей для октаэдрических систем скольжения.

## 2. Представительный объем двухфазного монокристаллического материала

На микроуровне монокристаллические сплавы на никелевой основе представляют собой композит, состоящий из  $\gamma$ -матрицы и квазипериодически расположенных дисперсных включений  $\gamma'$ -фазы (рис. 11). В связи с этим возможно введение представительных объемов (ПО) с различной степенью упрощения реальной ситуации. ПО может вводиться для материалов со статически однородным распределением характеристик при условии сепарабельности масштабов неоднородностей. При выполнении данных условий возможно введение понятия наименьшего объема, который содержит всю статистическую информацию относительно распределения и морфологии неоднородностей материала. В таком случае для любого объема больших размеров его свойства можно получить последовательными переносами или дополнительными реализациями известных статистических характеристик.

В монокристаллических сплавах на никелевой основе частицы  $\gamma'$ -фазы образуют квазипериодическую трехмерную решетку (см. рис. 2). Соответственно, в таком случае в качестве ПО можно рассматривать единичное включение  $\gamma'$ -фазы, окруженное  $\gamma$ -матрицей. Также стоит отметить вклад взаимодействия дислокаций на границе раздела фаз на их взаимное воздействие. Для учета дислокаций на межфазной границе возможно введение дополнительной фазы и соответствующего ей



интерфейсного слоя [71]. Другим распространенным подходом является добавление дополнительных слагаемых в уравнение для касательных напряжений  $\tau^\alpha$  [72]. Однако существенным недостатком данных подходов является необходимость большого количества экспериментальных данных, требуемых для идентификации их параметров. В связи с этим в работе принята гипотеза об идеальном контакте между отдельными фазами,

предложенная в работе [73]. Достоверность применяемых моделей и гипотез подтверждается результатами экспериментальной верификации. Конечно-элементная (КЭ) модель одного из простейших вариантов ПО представлена на рис. 11. На рис. 12 показаны представительные объемы с различными долями  $\gamma'$ -фазы, используемые в дальнейшем. КЭ-модели ПО для разных степеней рафтинга  $\xi$  представлены на рис. 13.

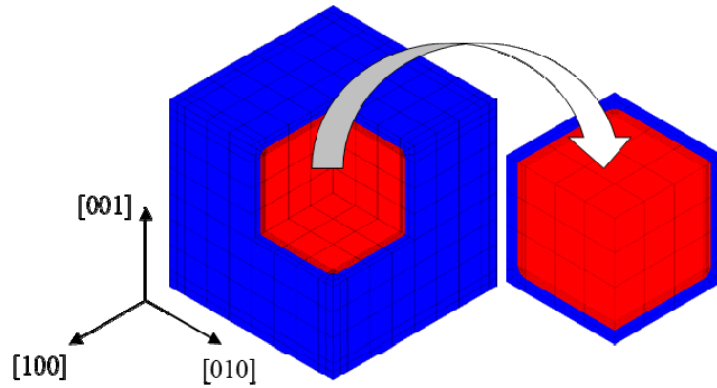


Рис. 11. Конечно-элементная модель ПО  $\gamma / \gamma'$ -микроструктуры монокристаллического сплава на никелевой основе (объемная доля  $\gamma'$ -фазы 70 %,  $\xi = 0$ ). Справа на рисунке изображен фрагмент ПО соответствующий его 1/8 части

Fig. 11. Finite element model of the representative volume  $\gamma / \gamma'$  of the microstructure of a nickel-based single-crystal alloy (volume fraction of the  $\gamma'$  phase is 70 %,  $\xi = 0$ ). On the right in the figure, a representative volume fragment corresponding to its 1/8 part is shown

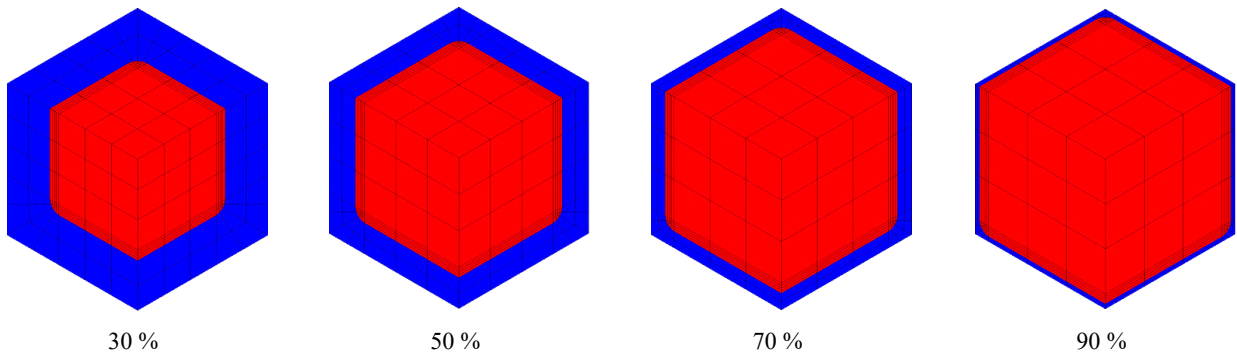


Рис. 12. Конечно-элементные модели ПО  $\gamma / \gamma'$ -микроструктуры монокристаллического сплава на никелевой основе с разной объемной долей  $\gamma'$ -фазы,  $\xi = 0$  (показана 1/8 часть ПО)

Fig. 12. Finite element models of the representative volume of the  $\gamma / \gamma'$  of the microstructure of a nickel-based single-crystal alloy with different volume fractions of the  $\gamma'$  phase,  $\xi = 0$  (1/8 of the representative volume is shown)

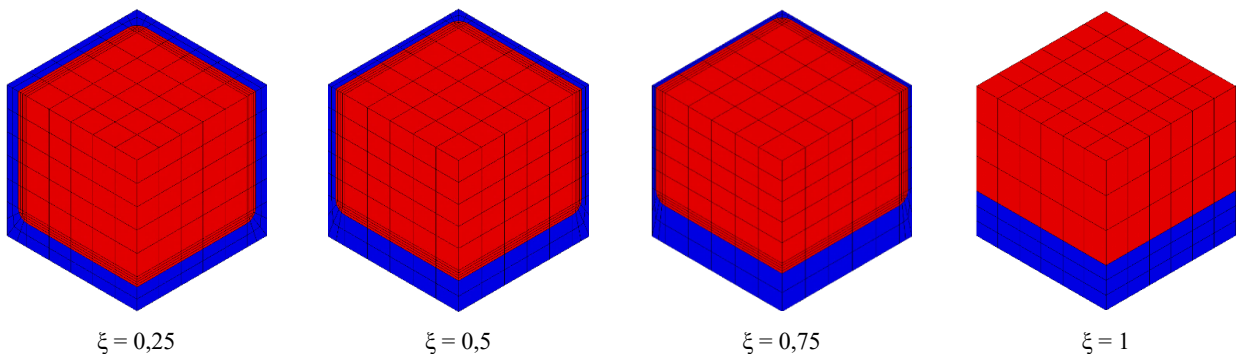


Рис. 13. Конечно-элементные модели ПО  $\gamma / \gamma'$ -микроструктуры монокристаллического сплава на никелевой основе для разных степеней рафтинга  $\xi$ , объемная доля  $\gamma'$ -фазы 70 % (показана 1/8 часть ПО)

Fig. 13. Finite element models of the representative volume of the  $\gamma / \gamma'$  of the microstructure of a nickel-based single-crystal alloy for different degrees of rafting  $\xi$ , the volume fraction of the  $\gamma'$  phase is 70 % (1/8 of the representative volume is shown)

### 3. Определение эффективных свойств двухфазного монокристаллического материала

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{V_{ПО}} \int_{V_{ПО}} \sigma dV. \quad (29)$$

#### 3.1. Конечно-элементная гомогенизация

Определение эффективных свойств монокристаллических сплавов с различной долей  $\gamma'$ -фазы и разными степенями раффинга  $\xi$  осуществлялось при помощи метода КЭ гомогенизации. При проведении расчетов использовались определяющие уравнения нелинейно вязкоупругого материала (9)–(16).

Нелинейные краевые задачи решались в трехмерной квазистатической постановке. В основе применяемого в расчетах КЭ программного комплекса PANTOCRATOR [75] используется уравнение виртуальных работ:

$$\int_V \sigma \cdot \delta \varepsilon dV = \int_V \mathbf{f}_V \cdot \delta \mathbf{u} dV + \int_{S_\sigma} \mathbf{f}_S \cdot \delta \mathbf{u} dS, \quad (25)$$

где  $\delta \varepsilon = (\nabla \delta \mathbf{u})^S$ ,  $\mathbf{f}_V$  и  $\mathbf{f}_S$  – заданные объемные и поверхностные силы. Следствием (25) могут быть получены уравнения равновесия  $\nabla \cdot \sigma + \mathbf{f}_V = \mathbf{0}$  в объеме и силовые граничные условия  $\mathbf{n} \cdot \sigma|_{S_\sigma} = \mathbf{f}_S$ . Для исключения твердотельных движений необходимо задание кинематических граничных условий.

Рассматриваемые краевые задачи КЭ-гомогенизации для представительного объема в форме куба (рис. 11) решались со статическими граничными условиями (на трех некопланарных гранях) и условиями симметрии на остальных трех гранях ПО:

$$\mathbf{n} \cdot \sigma|_{S_\sigma} = \mathbf{n} \cdot \bar{\sigma}^*, \quad (26)$$

$$\mathbf{u}|_{S_\sigma} = \mathbf{0}. \quad (27)$$

Условие (26) обеспечивает выполнение условия эргодичности  $\overline{\sigma \cdot \varepsilon} = \bar{\sigma} \cdot \bar{\varepsilon}$ , что гарантирует существование и единственность решения соответствующих краевых задач, а также равенство энергий при деформировании гомогенизованного и гетерогенного материала ПО. Выбор данного типа граничных условий обусловлен простотой их реализации для задач ползучести, подразумевающей приложение силовых граничных условий. Использование других типов граничных условий, например условий периодичности, приводит к значительным трудностям при их программной реализации. При решении задач гомогенизации нагрузка прикладывалась вдоль кристаллографического направления [001].

Для определения гомогенизованного напряженно-деформированного состояния использовались осредненные по представительному объему значения тензоров деформаций и напряжений, полученные в КЭ-решении:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{V_{ПО}} \int_{V_{ПО}} \varepsilon dV, \quad (28)$$

Используемые в расчетах упругие характеристики  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз для случая кубической симметрии приведены ниже в табл. 2. Параметры обобщенной модели Нортон в форме теории упрочнения представлены в табл. 3.

Таблица 2/Table 2

Упругие характеристики  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз [66]

Параметр	$\gamma$ -фаза	$\gamma'$ -фаза
$E_{[001]}$ , ГПа	84,3	95,1
$\nu_{[001][010]}$ , [-]	0,4	0,4
$G_{[001][010]}$ , ГПа	96,67	100,11

Таблица 3/Table 3

Параметры модели ползучести (14)  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз [2]

	$\gamma$ -фаза	$\gamma'$ -фаза
$A$ , (МПа) <sup>-n</sup>	$1,99 \cdot 10^{-41}$	$0,61 \cdot 10^{-51}$
$n$ , [-]	4,24	5,36
$m$ , [-]	0	0

Решение нелинейных краевых задач ползучести ПО гетерогенной структуры получено на основе инкрементально-итерационных процедур с использованием КЭ программного комплекса PANTOCRATOR [75], обладающего возможностью получения КЭ-решения краевых задач с использованием микроструктурных упруго-пластических, вязкоупругих и упруговязкопластических моделей деформирования материала, а также встроенными средствами процедуры гомогенизации гетерогенных сред.

Реализуемый подход основан на предположении, что механические свойства жаропрочных монокристаллических сплавов на макроуровне полностью определяются структурно-фазовым состоянием его микроструктуры и могут быть определены методом конечно-элементной гомогенизации. Это позволяет сформулировать феноменологические модели ползучести на макроуровне, которые учитывают изменение объемных долей отдельных фаз и их морфологии.

Верификация предложенного подхода осуществлялась путем сравнения результатов КЭ-гомогенизации с экспериментальными кривыми ползучести сплава ЖС-32 [76] на макроуровне. Сравнение проведено для сплава в исходном состоянии и после старения при 1323 К (1050 °С) в течение 1500 ч. Объемная доля  $\gamma'$ -фазы составляет 70 % для материала в исходном состоянии и 58 % после старения. Сравнение кривых ползучести, полученных при температуре 1323 К (1050 °С), нагрузке 150 МПа, приложенной вдоль кристаллографического направления [001], с результатами КЭ-гомогенизации представлено на рис. 14. Наблюдается удовлетворительное соответствие результатов расчета экспериментальным данным в широком диапазоне времен выдержки под нагрузкой.

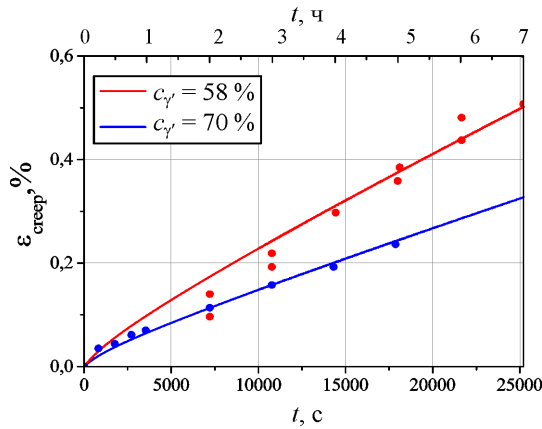


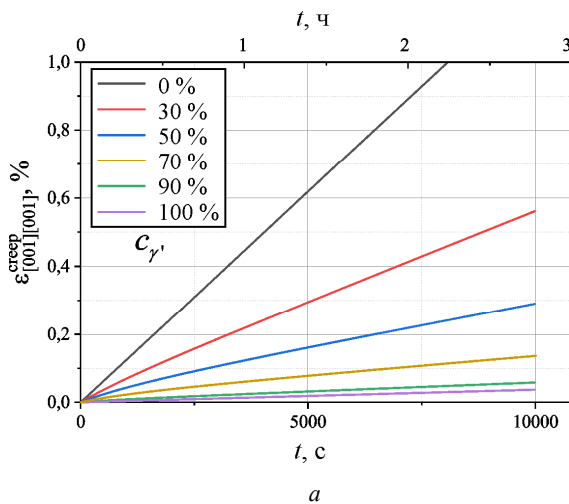
Рис. 14. Сравнение результатов КЭ гомогенизации с экспериментом

Fig. 14. Comparison of the results of FE homogenization with experiment

На основе предложенной модели были построены кривые ползучести для монокристаллических сплавов на никелевой основе для разных объемных долей  $\gamma'$ -фазы (см. рис. 12) для аналогичных экспериментальными значениями нагрузки и температуры. Полученные результаты представлены на рис. 15. Установлено, что скорость ползучести возрастает с уменьшением объемной доли  $\gamma'$ -фазы.

Анализ зависимости скорости установившейся ползучести от объемной доли  $\gamma'$ -фазы позволяет сформулировать феноменологическую модель ползучести монокристаллических сплавов на никелевой основе, учитывая соотношения между объемными долями отдельных фаз:

$$\dot{\epsilon}_{[001][001]}^{creep}(c_{\gamma'}) = C(D e^{-c_{\gamma'} E} - 1), \quad (30)$$



где  $C, D, E$  – параметры модели, в общем случае зависящие от температуры и прикладываемой нагрузки. Данные параметры определяем на основе вычислительных экспериментов. В рассматриваемом случае данные параметры принимают следующие значения:  $C = 6,75 \cdot 10^{-8} \text{ c}^{-1}$ ,  $D = 19,37$ ,  $E = 0,026$ . Результаты аппроксимации на основе модели (30) показаны красной линией на рис. 15, b.

Для оценки влияния морфологии  $\gamma'$ -включений были проанализированы результаты гомогенизации для сплавов с различной степенью рафтинга (см. рис. 13) при постоянном значении доли  $\gamma'$ -фазы, равном 70 %. Результаты моделирования представлены на рис. 16.

Дальнейший учет влияния степени рафтинга на скорость ползучести может производиться на основе простейшей феноменологической модели:

$$\dot{\epsilon}_{[001][001]}^{creep}(\xi) = F(\xi + G), \quad (31)$$

где  $F, G$  – параметры модели, в общем случае зависящие от температуры и прикладываемой нагрузки, определяемые на основе вычислительных экспериментов и принимающие в рассматриваемом случае значения:  $F = 1,32 \cdot 10^{-8} \text{ c}^{-1}$ ,  $G = 8,4$ . Результаты аппроксимации на основе модели (31) показаны красной линией на рис. 16, b.

Феноменологические модели (30), (31) могут быть обобщены на многоосный случай по аналогии с уравнениями (10), (13):

$$\dot{\epsilon}^p = \sum_{\alpha=1}^N \tilde{C} (D e^{-c_{\gamma'} E} - 1) |\tau^{\alpha}|^n \text{sign}(\tau^{\alpha}) \mathbf{P}^{\alpha}, \quad (32)$$

$$\dot{\epsilon}^p = \sum_{\alpha=1}^N \tilde{F}(\xi + G) |\tau^{\alpha}|^n \text{sign}(\tau^{\alpha}) \mathbf{P}^{\alpha}. \quad (33)$$

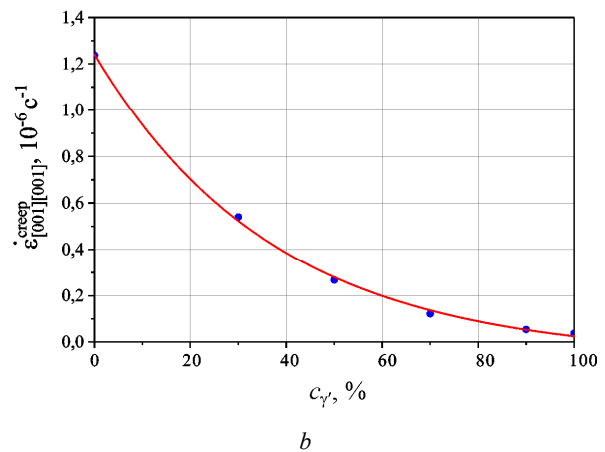


Рис. 15. Результаты КЭ-гомогенизации для ПО с разными долями  $\gamma'$ -фазы,  $\xi = 0$ : a – кривые ползучести; b – зависимость скорости ползучести от объемной доли  $\gamma'$ -фазы. Точками показаны результаты, полученные при помощи КЭ-гомогенизации, результаты аппроксимации на основе модели (30) показаны красной линией

Fig. 15. Results of FE homogenization for the representative volume with different fractions of the  $\gamma'$  phase,  $\xi = 0$ : a – creep curves, b – dependence of the creep rate on the volume fraction of the  $\gamma'$  phase. The dots show the results obtained using FE homogenization, the results of approximation based on model (30) are shown by the red line

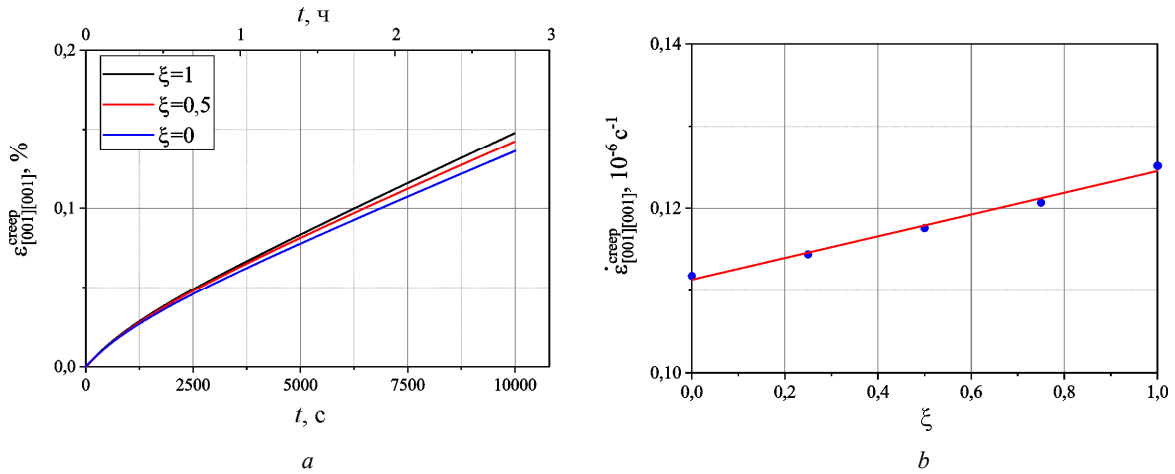


Рис. 16. Результаты КЭ-гомогенизации для ПО различной степени рафтинга: *a* – кривые ползучести; *b* – зависимость скорости ползучести от степени рафтинга  $\xi$ . Точками показаны результаты, полученные при помощи КЭ-гомогенизации, результаты аппроксимации на основе модели (30) показаны красной линией.  $c_\gamma = 70\%$

Fig. 16. Results of FE homogenization for the representative volume with different degrees of rafting: *a* – creep curves; *b* – dependence of the creep rate on the degree of rafting  $\xi$ . The dots show the results obtained using FE homogenization, the results of approximation based on model (30) are shown with the red line.  $c_\gamma = 70\%$

На основе уравнений (32) и (33) в предположении, что параметр  $\tilde{C}$  в (32) зависит от  $\xi$ , а  $D$  и  $E$  не зависят, предлагается комбинированная модель нелинейной вязко-упругости с одновременным учетом рафтинга и концентрации  $\gamma'$ -фазы:

$$\dot{\epsilon}^p = \sum_{\alpha=1}^N H(1 - De^{-c_\gamma E})(\xi + G) |\tau^\alpha|^n \text{sign}(\tau^\alpha) \mathbf{P}^\alpha. \quad (34)$$

Результаты моделирования позволяют заключить, что рафтинг оказывает существенно меньшее влияние на скорость ползучести, нежели изменение объемной доли  $\gamma'$ . Так скорость ползучести материала со степенью рафтинга  $\xi = 1$  увеличивается на 11% по сравнению с исходным материалом. В то же время уменьшение объемной доли на 12%, соответствующее  $\xi = 1$  [76], приводит к более чем двухкратному росту скорости ползучести (см. рис. 15, 16). В связи с этим, так как учет рафтинга требует проведения дополнительных вычислительных экспериментов, при исследовании вязкоупругих свойств монокристаллических сплавов на никелевой основе изменением морфологии  $\gamma'$ -включений можно пренебречь по сравнению с изменением объемной доли  $\gamma'$ -фазы.

### 3.2. Реологические (структурные) модели монокристаллического материала

Эффективные свойства гетерогенных материалов могут быть определены не только на основе метода КЭ-гомогенизации, но и при помощи аналитических оценок на основе реологических (структурных) моделей [77–79]. Простейшие оценки могут быть получены при использовании подходов Рейсса [80] (последовательное соединение элементов) и Фойгта [81] (параллельное

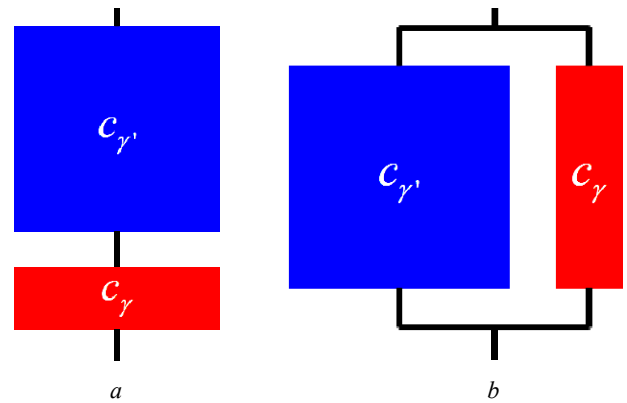


Рис. 17. Реологические (структурные) модели монокристаллических сплавов на никелевой основе: *a* – модель Рейсса; *b* – модель Фойгта

Fig. 17. Rheological (structural) models of nickel-based single-crystal alloys: *a* – Reuss model, *b* – Voigt model

соединение элементов) (рис. 17). Каждый из реологических (структурных) элементов для  $\gamma$ - или  $\gamma'$ -фазы является вязкоупругим.

Модель Рейсса (см. рис. 17, *a*) приводит к следующему выражению для скоростей деформации:

$$\dot{\epsilon} = c_\gamma \dot{\epsilon}_\gamma + c_{\gamma'} \dot{\epsilon}_{\gamma'}. \quad (35)$$

Напряжения в отдельных структурных элементах принимаются равными между собой:

$$\sigma_\gamma = \sigma_{\gamma'}. \quad (36)$$

Скорость неупругих деформаций определяется следующим образом [70; 82]:

$$\dot{\epsilon}^p = c_\gamma \sum_{\alpha=1}^{N_\gamma} \dot{\gamma}_\gamma^\alpha \mathbf{P}^\alpha + c_{\gamma'} \sum_{\alpha=1}^{N_{\gamma'}} \dot{\gamma}_{\gamma'}^\alpha \mathbf{P}^\alpha, \quad (37)$$

где  $c_\gamma, c_{\gamma'}$  – объемные доли  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фазы соответственно ( $c_\gamma + c_{\gamma'} = 1$ ),  $N_\gamma$  и  $N_{\gamma'}$  – число систем скольжения в структурных элементах, соответствующих  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фазе соответственно. В данной работе фазовые переходы не рассматриваются, в связи с этим  $c_{\gamma'}$  является константой.

Интегрирование (37) с учетом (35), (14) и (12) дает следующее выражение для полных деформаций:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{[001][001]} = & \frac{\sigma_{[001][001]}}{E_{Reus}} + \\ & + \frac{8}{\sqrt{6}} \left\{ c_\gamma \left( \frac{A_\gamma (1 - m_\gamma) \sigma_{[001][001]}^{n_\gamma} t}{6^{\frac{n_\gamma}{2}}} \right)^{\frac{1}{1 - m_\gamma}} + \right. \\ & \left. + c_{\gamma'} \left( \frac{A_{\gamma'} (1 - m_{\gamma'}) \sigma_{[001][001]}^{n_{\gamma'}} t}{6^{\frac{n_{\gamma'}}{2}}} \right)^{\frac{1}{1 - m_{\gamma'}}} \right\} \end{aligned} \quad (38)$$

где  $E_{Reus[001]} = \frac{E_{\gamma[001]} E_{\gamma'[001]}}{c_\gamma E_{\gamma'[001]} + c_{\gamma'} E_{\gamma[001]}}$ .

Модель Фойгта (параллельное соединение структурных элементов, рис. 17, b) приводит к следующему выражению для тензора напряжений:

$$\sigma = c_\gamma \sigma_\gamma + c_{\gamma'} \sigma_{\gamma'} \quad (39)$$

Данная модель также подразумевает равенство деформаций в отдельных структурных элементах:

$$\varepsilon_\gamma = \varepsilon_{\gamma'} \quad (40)$$

Ввиду трансцендентности уравнений, получаемых следствием подстановки (39) в (14) относительно напряжений в отдельных структурных элементах, их значения не могут быть определены аналитически и выражены через деформацию явным образом. В связи с этим решение данных уравнений было выполнено численно, при помощи метода Ньютона.

Сравнение скоростей деформаций на установившейся стадии ползучести, полученных при помощи различных реологических моделей, с результатами КЭ гомогенизации и экспериментальными данными представлено на рис. 18. Наилучшее совпадение демонстрируют результаты КЭ-гомогенизации, удовлетворительное совпадение показывает модель Фойгта (39). Наихудшее совпадение демонстрирует модель Рейсса (35), (38).

### Заключение

Предложены микромеханически мотивированные подходы, позволяющие предсказать поведение двухфазных монокристаллических сплавов на никелевой основе при высокотемпературных механических воздействиях с учетом наличия микроструктуры. Рассмотрены два альтернативных подхода для анализа неупругого поведения: (i) численный на основе метода конечно-элементной гомогенизации для двухуровневой модели двухфазного монокристаллического материала с учетом изменения  $\gamma$ - $\gamma'$ -микроструктуры сплава, и (ii) аналитические оценки, используемые в механике композитов, получаемые в предположении равенства напряжений или деформаций в отдельных фазах.

На основе экспериментальных кривых ползучести для сплава ЖС32 проведена верификация предложенных моделей. Выяснено, что наилучшее соответствие дает метод конечно-элементной гомогенизации, несколько

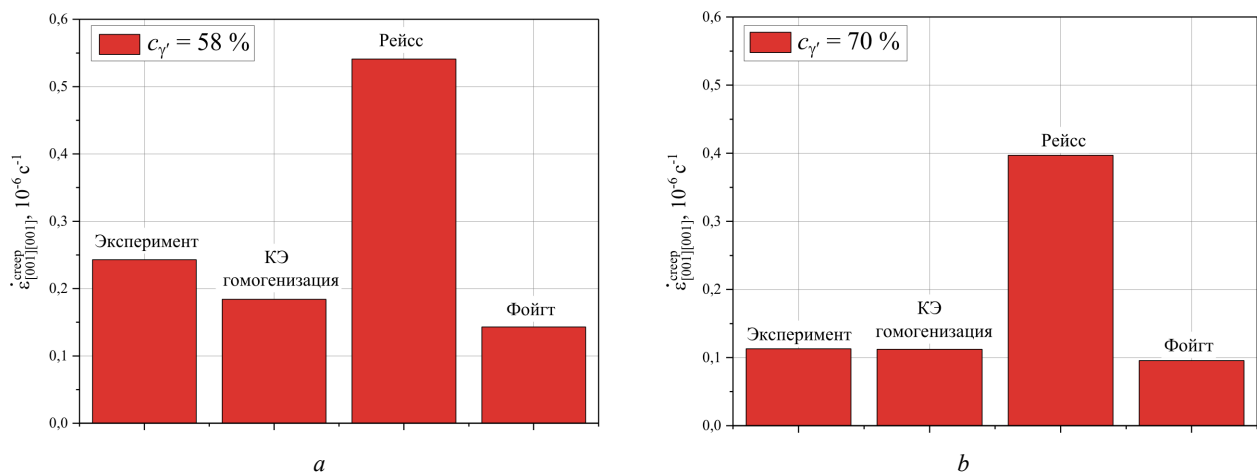


Рис. 18. Сравнение скоростей установившейся ползучести, полученных с помощью различных подходов, с экспериментальными данными по одноосному растяжению сплава ЖС32 [76] ( $\sigma_{[001][001]} = 150$  МПа) с разными значениями объемной доли  $\gamma'$ : a –  $c_{\gamma'} = 58$  %; b –  $c_{\gamma'} = 70$  %

Fig. 18. Comparison of steady-state creep rates obtained using different approaches with experimental data on uniaxial tension of the ZhS32 alloy [76] ( $\sigma_{[001][001]} = 150$  MPa) with different values of the volume fraction  $\gamma'$ : a –  $c_{\gamma'} = 58$  %, b –  $c_{\gamma'} = 70$  %

худшее соответствие демонстрируют аналитические оценки с использованием структурных моделей, основанных на подходе Фойгта. Аналитическая оценка по Рейссу продемонстрировала наибольшее расхождение с экспериментальными данными.

Установлено, что наиболее существенный вклад в изменение скорости ползучести вносит изменение объемной доли  $\gamma'$ -фазы: так, при изменении объемной доли с 70 до 58 % скорость ползучести на установившейся стадии возрастает более чем в два раза. Изменение морфологии  $\gamma'$ -включений имеют меньшее, по сравнению с изменением объемной доли  $\gamma'$ -фазы, влияние на

скорость ползучести двухфазных монокристаллических сплавов на никелевой основе.

Предложены феноменологические модели ползучести, учитывающие изменение объемной доли и морфологию  $\gamma'$ -включений.

Предложенные подходы могут рассматриваться в качестве базиса для конечно-элементных расчетов охлаждаемых монокристаллических лопаток современных ГТУ при сложном непропорциональном комбинированном термомеханическом воздействии, учитывающих изменение фазового состава и морфологии микроструктуры при длительной эксплуатации.

## Библиографический список

1. Naze L., Maurel V., Eggeler G., Cormier J., Cailletaud G. Nickel base single crystals across length scales. – Elsevier, 2021. – 610 p.
2. Pollock T.M., Tin S. Nickel-based superalloys for advanced turbine engines: chemistry, microstructure and properties // Journal of propulsion and power. – 2006. – Vol. 22, no. 2. – P. 361–374. DOI: 10.2514/1.18239
3. Каблов Е.Н., Толорайя В.Н., Орехов Н.Г. Монокристаллические никелевые ренийсодержащие сплавы для турбинных лопаток ГТД // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2002. – № 7. – С. 7–11.
4. Монокристаллы никелевых жаропрочных сплавов / Р.Е. Шалин, И.Л. Светлов, Е.Б. Качанов, В.Н. Толорайя, О.С. Гаврилин. – М: Машиностроение, 1997, 333 с.
5. Каблов Е.Н., Петрушин Н.В., Елютин Е.С. Монокристаллические жаропрочные сплавы для газотурбинных двигателей // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2011. – № 2. – С. 38–52.
6. Семенов А.С., Беляев М.О., Грищенко А.И. Моделирование процесса возникновения овальности поперечного сечения образцов из монокристаллических жаропрочных никелевых сплавов при растяжении // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2015. – № 2. – С. 153–177. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.2.09
7. Иноземцев А.А., Сандрацкий В.Л. Газотурбинные двигатели. – Пермь: Авиадвигатель, 2006. – 1204 с.
8. Бондаренко Ю.А. Тенденции развития высокотемпературных металлических материалов и технологий при создании современных авиационных газотурбинных двигателей // Авиационные материалы и технологии. – 2019. – Т. 2, № 55. – P. 3–11.
9. Иноземцев А.А. Двигатель ПД-14 – будущее российского авиапрома // Инновации. Открытое акционерное общество «Трансфер-Инновации». – 2013. – Т. 12, № 182. – С. 77–80.
10. Иноземцев А.А. О программе создания авиационных газотурбинных двигателей пятого поколения для семейства самолетов МС-21 // Вестник Пермского федерального исследовательского центра. – 2010. – № 4. – P. 28–46.
11. Каблов Е.Н., Толорайя В.Н., Орехов Н.Г. Монокристаллические никелевые ренийсодержащие сплавы для турбинных лопаток ГТД // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2002. – № 7. – С. 7–11.
12. Каблов Е.Н., Петрушин Н.В., Елютин Е.С. Монокристаллические жаропрочные сплавы для газотурбинных двигателей // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. – 2011. – № 2. – С. 38–52.
13. Serin K., Göbenli G., Eggeler G. On the influence of stress state, stress level and temperature on  $\gamma$ -channel widening in the single crystal superalloy CMSX-4 // Materials Science and Engineering: A. – 2004. – Vol. 387. – P. 133–137. DOI: 10.1016/j.msea.2004.01.114
14. Misfit as a characteristic of the level of interfacial stresses in single-crystal nickel superalloys / A.I. Samoilov [et al.] // Russian Metallurgy. – 2011. – Vol. 3. – P. 71–77. DOI: 10.1134/S0036029511050119
15. Исследование влияния размерного несоответствия периодов кристаллических решеток  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз на характеристики жаропрочности дисперсионно-твердеющих никелевых сплавов / Н.В. Петрушин [и др.] // Известия Академии наук СССР. Металлы. – 1981. – Т. 6. – С. 153–159.
16. Calderon H., Kosterz G. Lattice Misfit and Decomposition in Ni-Al-Mo Alloys. // MRS Proceedings. – 1989. – Vol. 166. – P. 255. DOI: 10.1557/PROC-166-255
17. Высокотемпературная ползучесть монокристаллов никелевых жаропрочных сплавов с ориентацией [001] / А.И. Епишин [и др.] // Материаловедение. – 1999. – Т. 5. – С. 32–42.
18. Nathal M.V., Mackay R.A., Garlick R.G. Temperature dependence of  $\gamma$ - $\gamma'$  lattice mismatch in Nickel-base superalloys // Mater. Sci. Eng. – 1985. – Vol. 75, no. 1–2. – P. 195–205.
19. Biermann H., Strehler M., Mughrabi H. High-temperature measurements of lattice parameters and internal stresses of a creep-deformed monocrystalline nickel-base superalloy // Metallurgical and Materials Transactions A. Springer. – 1996. – Vol. 27, no. 4. – P. 1003–1014.
20. Концентрационная зависимость периодов решеток  $\gamma$ - и  $\gamma'$ -фаз никелевых жаропрочных сплавов / И.Л. Светлов [и др.] // Металлы. – 1991. – Т. 6. – С. 150–157.
21. Development of Next Generation Ni-base Single Crystal Superalloys Containing Ruthenium / Y. Koizumi [et al.] // Journal of The Japan Institute of Metals. Japan Institute of Metals (JIM). – 2003. – Vol. 67, № 9. – P. 468–471.
22. Microstructural degradation of CMSX-4: kinetics and effect on mechanical properties / A. Epishin [et al.] // Superalloys. – 2008. – P. 725–731.
23. Nabarro F.R.N. Rafting in Superalloys // Metallurgical and Materials Transactions. Springer. – 1996. – Vol. 27, № 3. – P. 513–530.
24. Véron M., Bréchet Y., Louchet F. Directional coarsening of Ni-based superalloys: Computer simulation at the mesoscopic level // Acta Materialia. – 1996. – Vol. 44, № 9. – P. 3633–3641.
25. Svoboda J., Lukáš P. Modelling of kinetics of directional coarsening in Ni-superalloys // Acta Materialia. – 1996. – Vol. 44, № 6. – P. 2557–2565.

26. Caccuri V., Cormier J., Desmorat R.  $\gamma'$ -Rafting mechanisms under complex mechanical stress state in Ni-based single crystalline superalloys // *Materials and Design*. – 2017. – Vol. 131. – P. 487–497.
27. Roebuck B., Cox D., Reed R. The temperature dependence of  $\gamma'$  volume fraction in a Ni-based single crystal superalloy from resistivity measurements // *Scripta Materialia*. – 2001. – Vol. 44, № 6. – P. 917–921.
28. Effects of Aging and Stress Aging on Creep Resistance of Single Crystal Ni-base Superalloy CMSX-4 / Y. Kondo [et al.] // *Tetsu-to-Hagané*. Publ by Iron & Steel Inst of Japan. – 1994. – Vol. 80, № 7. – P. 76–81.
29. Experimental characterization and mechanical modeling of creep induced rafting in superalloys / B. Fedelich [et al.] // *Computational Materials Science*. – 2012. – Vol. 64. – P. 2–6.
30. Desmorat R., Mattiello A., Cormier J. A tensorial thermodynamic framework to account for the  $\gamma'$  rafting in nickel-based single crystal superalloys // *International Journal of Plasticity*. – 2017. – Vol. 95. – P. 43–81.
31. Constitutive modelling of creep degradation due to rafting in single-crystalline Ni-base superalloys / B. Fedelich [et al.] // *Materials Science and Engineering: A*. – 2009. – Vol. 510–511. – P. 273–277.
32. Draper S., Hull D., Dreshfield R. Observations of directional gamma prime coarsening during engine operation // *Metallurgical Transactions A*. – 1989. – Vol. 20, № 4. – P. 683–688.
33. Creep damage of single-crystal nickel base superalloys: Mechanisms and effect on low cycle fatigue / A. Epishin [et al.] // *Materials at High Temperatures*. – 2010. – Vol. 27, № 1. – P. 53–59.
34. Mughrabi H. Microstructural aspects of high temperature deformation of monocrystalline nickel base superalloys: some open problems // *Materials Science and Technology*. – 2013. – Vol. 25, № 2. – P. 191–204. DOI: 10.1179/174328408X361436.
35. Grishchenko A.I., Semenov A.S., Getsov L.B. Modeling inelastic deformation of single crystal superalloys with account of  $\gamma / \gamma'$  phases evolution // *Materials Physics and Mechanics*. – 2015. – Vol. 24, № 4.
36. On TMF damage, degradation effects, and the associated TMin influence on TMF test results in  $\gamma/\gamma'$  alloys / D. Arrell [et al.] // *Superalloys 2004*. – TMS, Seven Springs, Champion, PA, USA, 2004. – P. 291–294.
37. Influence of coarsened and rafted microstructures on the thermomechanical fatigue of a Ni-base superalloy / M.M. Kirka [et al.] // *International Journal of Fatigue*. – 2015. – Vol. 81. – P. 191–201.
38. Damage mechanisms in an EB-PVD thermal barrier coating system during TMF and TGMF testing conditions under combustion environment / F. Mauget [et al.] // *International Journal of Fatigue*. – 2017. – Vol. 99. – P. 225–234.
39. Evolution of Raft Structure during Creep Deformation of the Ni-Based Single-Crystal Superalloy TMS-138 / N. Tsuno [et al.] // *Advanced Materials Research*. Trans Tech Publications Ltd. – 2011. – Vol. 278. – P. 19–24.
40. Review of  $\gamma'$  Rafting Behavior in Nickel-Based Superalloys: Crystal Plasticity and Phase-Field Simulation / Z. Yu [et al.] // *Crystals 2020*. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, – 2020. – Vol. 10, № 12. – P. 1095.
41. Tien J.K., Copley S.M. The effect of uniaxial stress on the periodic morphology of coherent gamma prime precipitates in nickel-base superalloy crystals // *Metallurgical Transactions*. – 1971. – Vol. 2, № 1. – P. 215–219.
42. Tien J.K., Copley S.M. The effect of orientation and sense of applied uniaxial stress on the morphology of coherent gamma prime precipitates in stress annealed nickel-base superalloy crystals // *Metallurgical Transactions*. – 1971. – Vol. 2, № 2. – P. 543–553.
43. Modeling the microstructural evolution of Ni-base superalloys by phase field method combined with CALPHAD and CVM / J.C. Wang [et al.] // *Computational Materials Science*. – 2007. – Vol. 39, № 4. – P. 871–879.
44. A phase-field model for creep behavior in nickel-base single-crystal superalloy: Coupled with creep damage / M. Yang [et al.] // *Scripta Materialia*. Pergamon. – 2018. – Vol. 147. – P. 16–20.
45. 45-degree rafting in Ni-based superalloys: A combined phase-field and strain gradient crystal plasticity study / M.A. Ali [et al.] // *International Journal of Plasticity*. Pergamon. – 2020. – Vol. 128. – P. 102659.
46. Guo Z., Huang D., Yan X. Physics-based modeling of  $\gamma/\gamma'$  microstructure evolution and creep constitutive relation for single crystal superalloy // *International Journal of Plasticity*. – 2021. – Vol. 137. – P. 102916. DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102916
47. Расчетное определение ресурса рабочих и направляющих лопаток ГТУ. Часть 2. Монокристаллические материалы / Л.Б. Гецов [и др.] // *Газотурбинные технологии*. – 2011. – № 8. – С. 18–25.
48. Сопrotивление деформированию и разрушению монокристаллических жаропрочных сплавов при статическом и циклическом нагружении / А.С. Семёнов [и др.] // *Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета им. академика С.П. Королёва (национального исследовательского университета)*. – 2014. – № 5–3 (47). – С. 70–79.
49. Конечно-элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин часть 1. Модели материала, критерии разрушения, идентификация параметров / А.С. Семенов [и др.] // *Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета*. – 2019. – Т. 23, № 1. – С. 70–81.
50. Конечно-элементный анализ термоциклической прочности лопаток газовых турбин часть 2. Результаты расчетов / А.С. Семенов [и др.] // *Вестник Уфимского государственного авиационного технического университета*. – 2019. – Т. 23, № 2. – С. 61–74.
51. L. Meric, P. Poubanne, and G. Cailletaud. Single crystal modelling for structural calculations: Part I – Model presentation // *Journal of Mechanical Design*. – 1991. – Vol. 113. – P. 162–170.
52. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Издательство СО РАН, 2019. – 605 с.
53. Multilevel models of inelastic deformation of materials and their application for description of internal structure evolution / P.V. Trusov [et al.] // *Phys. Mesomech*. – 2012. – Vol. 15. – P. 155–175. DOI: 10.1134/S1029959912020038
54. Mandel J. Généralisation de la théorie de plasticité de WT Koiter // *International Journal of Solids and Structures*. – 1965. – Vol. 1, no. 3. – P. 273–295.
55. Hill R. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1966. – Vol. 14, no. 2. – P. 95–102. DOI: 10.1016/0022-5096(66)90040-8
56. Hill R., Rice J.R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1972. – Vol. 20, no. 6. – P. 401–41. DOI: 10.1016/0022-5096(72)90017-8
57. Семенов А.С. Идентификация параметров анизотропии феноменологического критерия пластичности монокри-

таллов на основе микромеханической модели // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. – 2014. – Т. 194, № 2. – С. 15–29.

58. Micromorphic approach to crystal plasticity and phase transformation / S. Forest [et al.] // *Plasticity and beyond*. – Springer, Vienna, 2014. – P. 131–198.

59. Long-term strength determination for cooled blades made of monocrystalline superalloys / L.B. Getsov, A.S. Semenov, V.A. Beschetnov, A.I. Grishchenko S.G. Semenov // *Thermal Engineering*. – 2017. – No. 64. – P. 280–287. DOI: 10.1134/S004036361704004X

60. Asaro R.J., Rice J.R. Strain localization in ductile single crystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1977. – Vol. 25, no. 5. – P. 309–338. DOI: 10.1016/0022-5096(77)90001-1

61. Peirce D., Asaro R.J., Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids // *Acta metallurgica*. – 1983. – Vol. 31, no. 12. – P. 1951–1976. DOI: 10.1016/0001-6160(83)90014-7

62. On the design of single crystal turbine blades / G. Cailletaud [et al.] // *Metallurgical Research & Technology*. – 2003. – Vol. 100, no. 2. – P. 165–172. DOI: 10.1051/metal:2003137

63. Cailletaud G. A micromechanical approach to inelastic behavior of metals // *International Journal of Plasticity*. – 1992. – Vol. 8, no. 1. – P. 55–73. DOI: 10.1016/0749-6419(92)90038-E

64. Non-linear mechanics of materials / J. Besson [et al.]. – Springer Science & Business Media, 2009.

65. Asaro R.J. Crystal plasticity // *J. Appl. Mech.* – 1983. – Vol. 50. – P. 921–934.

66. Busso E.P., Meissonnier F.T., O'dowd N.P. Gradient-dependent deformation of two-phase single crystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2000. – Vol. 48, no. 11. – P. 2333–2361. DOI: 10.1016/S0022-5096(00)00006-5

67. Cormier J., Cailletaud G. Constitutive modeling of the creep behavior of single crystal superalloys under non-isothermal conditions inducing phase transformations // *Materials Science and Engineering: A*. – 2010. – Vol. 527, no. 23. – P. 6300–6312. DOI: 10.1016/J.MSEA.2010.06.023

68. Грищенко А.И., Семенов А.С. Моделирование процессов упругопластического деформирования монокристаллических сплавов // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2022. – Vol. 2. – P. 58–71.

69. Cailletaud G. An overview of the anatomy of crystal plasticity models // *Advanced Engineering Materials*. – 2009. – Vol. 11, № 9. – P. 710–716.

70. Gupta S., Bronkhorst C.A. Crystal plasticity model for single crystal Ni-based superalloys: Capturing orientation and temperature dependence of flow stress // *International Journal of Plasticity*. – 2021. – Vol. 137. – P. 102896. DOI: 10.1016/j.ijplas.2020.102896

## References

1. Naze L., Maurel V., Eggeler G., Cormier J., Cailletaud G. Nickel base single crystals across length scales, *Elsevier*, 2021. – 610 p.

2. Pollock T.M., Tin S. Nickel-based superalloys for advanced turbine engines: chemistry, microstructure and properties. *Journal of propulsion and power*, 2006, Vol. 22, no. 2, pp. 361–374. doi: <https://doi.org/10.2514/1.18239>

3. Kablov E.N., Toloraiya V.N., Orekhov N.G. Monokristallicheskie nikelvyeye renii' soderzhashchie splavy dlia turbinnykh lopatok GTD [Single crystal rhenium-containing nickel alloys for

71. Tinga T., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Incorporating strain gradient effects in a multiscale constitutive framework for nickel-base superalloys // *Philosophical Magazine*. – 2008. – 88: 30–32. – P. 3793–3825. DOI: 10.1080/14786430802337089

72. Ghosh, S., Keshavarz, S., Weber, G. Computational Multiscale Modeling of Nickel-Based Superalloys Containing Gamma-Gamma' Precipitates. In: Altenbach, H., Brünig, M. (eds) *Inelastic Behavior of Materials and Structures Under Monotonic and Cyclic Loading*. *Advanced Structured Materials*, – 2015. – Vol. 57. Springer, Cham. DOI: 10.1007/978-3-319-14660-7\_5

73. Nouailhas, D., Cailletaud, G. Finite element analysis of the mechanical behavior of two-phase single-crystal superalloys // *Scripta Materialia*. – 1996. – Vol. 34. – P. 565–571. DOI: 10.1016/1359-6462(95)00547-1

74. Estevez R., Hoinard G., Franciosi P. Hardening anisotropy of  $\gamma/\gamma'$  superalloy single crystals—II. Numerical analysis of heterogeneity effects // *Acta materialia*. – 1997. – Vol. 45, no. 4. – P. 1567–1584. DOI: 10.1016/S1359-6454(96)00265-0

75. Семенов А.С. PANTOCRATOR – конечно-элементный программный комплекс, ориентированный на решение нелинейных задач механики // Труды V Межд. конф. «Научно-технические проблемы прогнозирования надежности и долговечности констр. и методы их решения». – СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2003. – С. 466–480.

76. Тихомирова Е.А., Рыбников А.И., Гецов Л.Б. Изменение структуры и свойств монокристаллических жаропрочных сплавов в процессе длительной эксплуатации // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2017. – Т. 1. – С. 33–38.

77. Рейнер М. Реология: пер. с англ. – М.: Наука, 1965. – 224 с.

78. Пальмов В.А. Нелинейная механика деформируемых тел. – СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2014. – 792 с.

79. Гохфельд Д.А., Садаков О.С. Пластичность и ползучесть элементов конструкций при повторных нагружениях. – М.: Машиностроение, 1984. – 256 с.

80. Reuß A. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle // *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*. – 1929. – Vol. 9, no. 1. – P. 49–58. DOI: 10.1002/zamm.19290090104

81. Voigt W. Über die Beziehung zwischen den beiden Elasticitätsconstanten isotroper Körper // *Annalen der physik*. – 1889. – Vol. 274, no. 12. – P. 573–587. DOI: 10.1051/JPHYSTAP:018900090020100

82. Estrada Rodas E.A., Gorgannejad S., Neu R.W. Creep-fatigue behaviour of single-crystal Ni-base superalloy CMSX-8 // *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*. – 2019. – Vol. 42, no. 9. – P. 2155–2171. DOI: 10.1002/9781119075646.ch71Citations

turbine engine blades]. *Metallovedenie i termicheskaja obrabotka metallov*. 2002. no. 7. Pp. 7–11.

4. Shalin R.E., Svetlov I.L., Kachanov E.B., Toloraiya V.N., Gavrilin O.S. Monokristally nikelvyekh zharoprochnykh splavov [Single crystals of nickel based superalloys]. *Moscow, Mashinostroenie*, 1997, 333 p.

5. Kablov E.N., Petrushin N.V., Eliutin E.S. Monokristallicheskie zharoprochnye splavy dlia gazoturbinnykh dvigatelei [Single-crystal superalloys for gas turbine engines]. *Vestnik Mosk-*



ovskogo gosud. tekhnicheskogo universiteta im. N.E. Baumana. Seriya «Mashinostroenie», 2011, no. SP2, pp. 38–52.

6. Semenov A.S., Beliaev M.O., Grishchenko A.I. Modelirovanie protsesta voznikoveniia oval'nosti poperechnogo secheniia obraztsov iz monokristallicheskikh zharoprochnykh nikelovykh splavov pri rastiazhenii [Modeling of cross-section ovality of single crystal nickel-based superalloy samples under tension]. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2017, no. 2, pp. 153–177. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.2.09

7. Inozemtsev A.A., Sandratsky V.L. Gazoturbinnyye dvigateli. [Gas turbine engines]. *Perm.: JSC Aviadvigatel*, 2006. 1204 p.

8. Bondarenko YU.A. Tendentsii razvitiya vysokotemperaturnykh metallicheskikh materialov i tekhnologiy pri sozdaniy sovremennykh aviatsionnykh gazoturbinnnykh dvigateley [Trends in the development of high-temperature metal materials and technologies in the production of modern aircraft gas turbine engines]. *Aviation materials and technologies*. 2019. Vol. 2, № 55. pp. 3–11.

9. Inozemtsev A.A. Dvigatel' PD-14 - budushcheye rossiyskogo aviaproma [Engine PD-14 - the future of the Russian aviation industry]. *Innovations. JSC "Transfer-Innovations"*, 2013. V. 12, № 182. pp. 77–80.

10. Inozemtsev A.A. O programme sozdaniya aviatsionnykh gazoturbinnnykh dvigateley pyatogo pokoleniya dlya semeystva samoletov MS-21 [On the program for the creation of fifth-generation aircraft gas turbine engines for the MS-21 aircraft family]. *Bulletin of the Perm Federal Research Center*. 2010. № 4. pp. 28–46.

11. Kablov, E.N., Toloraiya, V.N., Orekhov, N.G. Single-crystal rhenium-bearing nickel alloys for turbine blades of GTE. *Metal Science and Heat Treatment*, 2002. - № 44, pp. 274–278 doi: <https://doi.org/10.1023/A:1021247602507>

12. Kablov E.N., Petrushin N.V., Eliutin E.S. Monokristallicheskie zharoprochnye splavy dlia gazoturbinnnykh dvigatelei [Single-crystal superalloys for gas turbine engines]. *Vestnik Moskovskogo gosud. tekhnicheskogo universiteta im. N.E. Baumana. Seriya «Mashinostroenie»*, 2011, no. SP2, pp. 38–52.

13. Serin K., Göbenli G., Eggeler G. On the influence of stress state, stress level and temperature on  $\gamma$ -channel widening in the single crystal superalloy CMSX-4. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, Vol. 387, pp. 133-137. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2004.01.114>

14. Misfit as a characteristic of the level of interfacial stresses in single-crystal nickel superalloys./ Samoilov, A.I. et al. *Russian Metallurgy*.- 2011, - Vol. 3.- pp. 71–77. doi: <https://doi.org/10.1134/S0036029511050119> T. 3. C. 71–77.

15. Issledovaniye vliyaniya razmernogo nesootvetstviya periodov kristallicheskikh reshetok  $\gamma$  - i  $\gamma'$  - faz na kharakteristiki zharoprochnosti dispersionno-tverdeyushchikh nikelovykh splavov [Study of the influence of the dimensional mismatch between the periods of crystal lattices of  $\gamma$  - and  $\gamma'$  - phases on the characteristics of heat resistance of precipitation-hardening nickel alloys] / Petrushin N.V. et al. *Proceedings of the Academy of Sciences of the USSR. Metals*. -1981. - Vol. 6. -pp. 153–159.

16. Calderon H., Kosterz G. Lattice Misfit and Decomposition in Ni-Al-Mo Alloys. *MRS Proceedings*. 1989. V. 166, 255. doi: 10.1557/PROC-166-255

17. Vysokotemperaturnaya polzuchest' monokristallov nikelovykh zharoprochnykh splavov s orientatsiyey [001] [High-temperature creep of single crystals of nickel heat-resistant alloys with orientation [001] / Epishin A.I. et al. *Materialovedenie*, 1999. - Vol. 5. pp. 32–42.

18. Nathal M.V., Mackay R.A., Garlick R.G. Temperature dependence of  $\gamma$ - $\gamma'$  lattice mismatch in Nickel-base superalloys. *Mater. Sci. Eng.* 1985. Vol. 75, № 1–2. P. 195–205.

19. Biermann H., Strehler M., Mughrabi H. High-temperature measurements of lattice parameters and internal stresses of a creep-deformed monocrystalline nickel-base superalloy. *Metallurgical and Materials Transactions A. Springer*, 1996, Vol. 27, № 4. pp. 1003–1014.

20. Kotsentratsionnaya zavisimost' periodov reshetok  $\gamma$  i  $\gamma'$ -faz nikelovykh zharoprochnykh splavov [Concentration dependence of lattice periods  $\gamma$ - and  $\gamma'$ -phases of nickel heat-resistant alloys] / Svetlov I.L. et al. *Metally*, 1991, no. 6, pp. 150–157.

21. Koizumi Y. et al. Development of Next Generation Ni-base Single Crystal Superalloys Containing Ruthenium. *Journal of The Japan Institute of Metals. (JIM)*, 2003. Vol. 67, № 9. P. 468–471.

22. Microstructural degradation of CMSX-4: kinetics and effect on mechanical properties/ Epishin A. et al. *Superalloys*. 2008, pp. 725–731.

23. Nabarro F.R.N. Rafting in Superalloys. *Metallurgical and Materials Transactions. Springer*, 1996, Vol. 27, no. 3, pp. 513–530.

24. Véron M., Bréchet Y., Louchet F. Directional coarsening of Ni-based superalloys: Computer simulation at the mesoscopic level. *Acta Materialia. Elsevier Ltd*, 1996, vol. 44, no. 9. P. 3633–3641.

25. Svoboda J., Lukáš P. Modelling of kinetics of directional coarsening in Ni-superalloys. *Acta Materialia. Pergamon*, 1996. Vol. 44, № 6. P. 2557–2565.

26. Caccuri V., Cormier J., Desmorat R.  $\gamma'$ -Rafting mechanisms under complex mechanical stress state in Ni-based single crystalline superalloys. *Materials and Design. Elsevier Ltd*, 2017. Vol. 131. P. 487–497.

27. Roebuck B., Cox D., Reed R. The temperature dependence of  $\gamma'$  volume fraction in a Ni-based single crystal superalloy from resistivity measurements. *Scripta Materialia. Pergamon*, 2001. Vol. 44, № 6. P. 917–921.

28. Effects of Aging and Stress Aging on Creep Resistance of Single Crystal Ni-base Superalloy CMSX-4/ Kondo Y. et al. *Tetsu-to-Hagané. Publ by Iron & Steel Inst of Japan*, 1994, vol. 80, no 7, pp. 76–81.

29. Experimental characterization and mechanical modeling of creep induced rafting in superalloys/ Fedelich B. et al. *Computational Materials Science. Elsevier*, 2012. Vol. 64. P. 2–6.

30. Desmorat R., Mattiello A., Cormier J. A tensorial thermodynamic framework to account for the  $\gamma'$  rafting in nickel-based single crystal superalloys. *International Journal of Plasticity. Pergamon*, 2017. Vol. 95. P. 43–81.

31. Constitutive modelling of creep degradation due to rafting in single-crystalline Ni-base superalloys/ Fedelich B. et al. *Materials Science and Engineering: A. Elsevier*, 2009. Vol. 510–511, № C. pp. 273–277.

32. Draper S., Hull D., Dreshfield R. Observations of directional gamma prime coarsening during engine operation. *Metallurgical Transactions A. Springer-Verlag*, 1989. Vol. 20, № 4. pp. 683–688.

33. Creep damage of single-crystal nickel base superalloys: Mechanisms and effect on low cycle fatigue/ Epishin A. et al. *Materials at High Temperatures*. 2010. Vol. 27, № 1. P. 53–59.

34. Mughrabi H. Microstructural aspects of high temperature deformation of monocrystalline nickel base superalloys: some open problems. *Taylor & Francis*, 2013. Vol. 25, № 2. P. 191–204. doi: <https://doi.org/10.1179/174328408X361436>.

35. Grishchenko A.I., Semenov A.S., Getsov L.B. Modeling inelastic deformation of single crystal superalloys with account of  $\gamma$  /  $\gamma'$  phases evolution. *Materials Physics and Mechanics*. 2015. Vol. 24, № 4.

36. On TMF damage, degradation effects, and the associated TMin influence on TMF test results in  $\gamma/\gamma'$  alloys/ Arrell D. et al.

In: Green, K.A., Pollock, T.M., Harada, H., Howson, T.E., Reed, R.C., Schirra, J.J., Walston, S. (Eds.), *Superalloys 2004*. TMS, Seven Springs, Champion, PA, USA, 2004. pp. 291–294.

37. Influence of coarsened and rafted microstructures on the thermomechanical fatigue of a Ni-base superalloy/ Kirka M.M. et al. *International Journal of Fatigue*. Elsevier, 2015. Vol. 81. P. 191–201.

38. Damage mechanisms in an EB-PVD thermal barrier coating system during TMF and TGMF testing conditions under combustion environment/ Mauget F. et al. *International Journal of Fatigue*. Elsevier, 2017. Vol. 99. pp. 225–234.

39. Evolution of Raft Structure during Creep Deformation of the Ni-Based Single-Crystal Superalloy TMS-138/ Tsuno N. et al. *Advanced Materials Research*. Trans Tech Publications Ltd, 2011. Vol. 278, pp. 19–24.

40. Review of  $\gamma'$  Rafting Behavior in Nickel-Based Superalloys: Crystal Plasticity and Phase-Field Simulation/ Yu Z. et al. *Crystals 2020*. Multidisciplinary Digital Publishing Institute, 2020. Vol. 10, № 12. pp. 1095.

41. Tien J.K., Copley S.M. The effect of uniaxial stress on the periodic morphology of coherent gamma prime precipitates in nickel-base superalloy crystals. *Metallurgical Transactions* 1971 2:1. Springer, 1971. Vol. 2, № 1, pp. 215–219.

42. Tien J.K., Copley S.M. The effect of orientation and sense of applied uniaxial stress on the morphology of coherent gamma prime precipitates in stress annealed nickel-base superalloy crystals. *Metallurgical Transactions* 1971 2: 2. Springer, 1971. Vol. 2, № 2. pp. 543–553.

43. Modeling the microstructural evolution of Ni-base superalloys by phase field method combined with CALPHAD and CVM/ Wang J.C. et al. *Computational Materials Science*. Elsevier, 2007, Vol. 39, no. 4. pp. 871–879.

44. Yang M. et al. A phase-field model for creep behavior in nickel-base single-crystal superalloy: Coupled with creep damage/ Yang M. et al. *Scripta Materialia*. Pergamon, 2018. Vol. 14, pp. 16–20.

45. 45-degree rafting in Ni-based superalloys: A combined phase-field and strain gradient crystal plasticity study/ Ali M.A. et al. *International Journal of Plasticity*. Pergamon, 2020. Vol. 128. P. 102659.

46. Guo Z., Huang D., Yan X. Physics-based modeling of  $\gamma/\gamma'$  microstructure evolution and creep constitutive relation for single crystal superalloy. *International Journal of Plasticity*. 2021 137: 102916 doi: 10.1016/j.ijplas.2020.102916

47. Raschetnoye opredeleniye resursa rabochikh i napravlyayushchikh lopatok GTU. Ch. 2. Monokristallicheskiye materialy [Computational definition of the resource of working and guide blades of gas turbines. Part 2. Monocrystalline materials] / Getsov L.B. [et. all]. *Gazoturbinnyye tekhnologii*, 2011, no. 8, pp. 18–25.

48. Soprotivlenie deformirovaniyu i razrusheniyu monokristallicheskikh zharoprochnykh splavov pri staticheskom i tsiklicheskom nagruzhenii [Deformation and fracture of single-crystal superalloys under static and cyclic loading]. / Semenov A.S. [et. all]. *Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo universiteta im. S.P. Koroleva*, 2014, Vol. 47, no. 5-3, pp. 66-75.

49. Semenov A.S., Grishchenko A.I., Kolotnikov M.Ye., Getsov L.B. Konechno-elementnyi analiz termotciclicheskoi prochnosti lopatok gazovykh turbin chast' 1. Modeli materiala, kriterii razrusheniia, identifikatsiia parametrov / [Finite-element analysis of thermal fatigue of gas turbine blades. Part 1. Material models, fracture criteria, parameter identification]. *Vestnyk Ufimskogo gosudarstvennogo aviatcionnogo tekhnicheskogo universiteta*, 2019, Vol. 23, no. 1.

50. Semenov A.S., Grishchenko A.I., Kolotnikov M.Ye., Getsov L.B. Konechno-elementnyi analiz termotciclicheskoi prochnosti lopatok gazovykh turbin chast' 2. Rezultaty raschetov / [Finite-element analysis of thermal fatigue of gas turbine blades. Part 2. Results of computations]. *Vestnyk Ufimskogo gosudarstvennogo aviatcionnogo tekhnicheskogo universiteta*, 2019, Vol. 23, no. 2.

51. L. Meric, P. Poubanne, and G. Cailletaud. Single crystal modelling for structural calculations: Part I – Model presentation. *Journal of Mechanical Design*, 1991, vol. 113, pp. 162-170.

52. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevnyye modeli mono- i polikristallicheskikh materialov: teoriya, algoritmy, primery primeneniya / [Multilevel models of single- and polycrystalline materials: theory, algorithms, examples of application]. *Novosibirsk: Publishing House of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences*, 2019, 605 p.

53. Multilevel models of inelastic deformation of materials and their application for description of internal structure evolution / Trusov P.V. [et. all]. *Phys. Mesomech*, 2012, vol. 15. pp 155–175. doi: <https://doi.org/10.1134/S1029959912020038>

54. Mandel J. Généralisation de la théorie de plasticité de WT Koiter. *International Journal of Solids and structures*, 1965, vol. 1, no. 3, pp. 273-295.

55. Hill R. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1966, vol. 14, no. 2, pp. 95-102. [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(66\)90040-8](https://doi.org/10.1016/0022-5096(66)90040-8)

56. Hill R., Rice J.R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1972, Vol. 20, no. 6, pp. 401-41. [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(72\)90017-8](https://doi.org/10.1016/0022-5096(72)90017-8)

57. Semenov A.S. Identifikatsiia parametrov anizotropii fenomenologicheskogo kriteriia plastichnosti dlia monokristallov na osnove mikromekhanicheskoi modeli [Identification of anisotropy parameters of phenomenological plasticity criterion for single crystals on the basis of micromechanical model]. *Nauchno-tekhnicheskie vedomosti S.-Peterburgskogo gosudarstvennogo politekhnicheskogo universiteta. Fiz.-mat. nauki*. 2014. vol. 194, no. 2, pp. 15-29.

58. Micromorphic approach to crystal plasticity and phase transformation / Forest S. [et al.]. *Plasticity and beyond*, Springer, Vienna, 2014, pp. 131-198.

59. Getsov L.B., Semenov A.S., Besschetnov V.A., Grishchenko A.I., Semenov S.G., Long-term strength determination for cooled blades made of monocrystalline superalloys. *Thermal Engineering*, 2017. no. 64, pp. 280-287. <https://doi.org/10.1134/S004036361704004X>

60. Asaro R.J., Rice J.R. Strain localization in ductile single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1977, Vol. 25, no. 5, pp. 309-338. DOI: [https://doi.org/10.1016/0022-5096\(77\)90001-1](https://doi.org/10.1016/0022-5096(77)90001-1)

61. Peirce D., Asaro R.J., Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta metallurgica*, 1983, Vol. 31, no. 12, pp. 1951-1976. [https://doi.org/10.1016/0001-6160\(83\)90014-7](https://doi.org/10.1016/0001-6160(83)90014-7)

62. On the design of single crystal turbine blades / Cailletaud G. [et al.]. *Metallurgical Research & Technology*, 2003, Vol. 100, no. 2, pp. 165-172. <https://doi.org/10.1051/metal:2003137>

63. Cailletaud G. A micromechanical approach to inelastic behavior of metals. *International Journal of Plasticity*, 1992, Vol. 8, no. 1, pp. 55-73. [https://doi.org/10.1016/0749-6419\(92\)90038-E](https://doi.org/10.1016/0749-6419(92)90038-E)

64. Besson J. et al. Non-linear mechanics of materials. *Springer Science & Business Media*, 2009.

65. Asaro R.J. Crystal plasticity. *J. Appl. Mech.* 1983. Vol. 50. P. 921–934.
66. Busso E.P., Meissonnier F.T., O'dowd N.P. Gradient-dependent deformation of two-phase single crystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, Vol. 48, no. 11, pp. 2333-2361. [https://doi.org/10.1016/S0022-5096\(00\)00006-5](https://doi.org/10.1016/S0022-5096(00)00006-5)
67. Cormier J., Cailletaud G. Constitutive modeling of the creep behavior of single crystal superalloys under non-isothermal conditions inducing phase transformations. *Materials Science and Engineering: A*, 2010, Vol. 527, no. 23, pp. 6300-6312. <https://doi.org/10.1016/J.MSEA.2010.06.023>
68. Grishchenko A.I., Semenov A.S. Modeling of the elastoplastic deformation process of single crystal superalloys. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2022, no. 2, pp. 58-72. DOI: 10.15593/perm.mech/2022.2.06
69. Cailletaud G. An overview of the anatomy of crystal plasticity models. *Advanced Engineering Materials*, 2009, Vol. 11, no. 9. pp. 710–716.
70. Gupta S., Bronkhorst C.A. Crystal plasticity model for single crystal Ni-based superalloys: Capturing orientation and temperature dependence of flow stress. *International Journal of Plasticity*, 2021, Vol. 137, pp. 102896. <https://doi.org/10.1016/j.ijplas.2020.102896>
71. Tinga T., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Incorporating strain gradient effects in a multiscale constitutive framework for nickel-base superalloys. *Philosophical Magazine*, 2008, 88: 30-32. pp. 3793-3825, <https://doi.org/10.1080/14786430802337089>
72. Ghosh, S., Keshavarz, S., Weber, G. Computational Multiscale Modeling of Nickel-Based Superalloys Containing Gamma-Gamma' Precipitates. In: Altenbach, H., Brünig, M. (eds) *Inelastic Behavior of Materials and Structures Under Monotonic and Cyclic Loading. Advanced Structured Materials*, – 2015, Vol 57. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-319-14660-7\\_5](https://doi.org/10.1007/978-3-319-14660-7_5)
73. Nouailhas, D., Cailletaud, G. Finite element analysis of the mechanical behavior of two-phase single-crystal superalloys. *Scripta Materialia*, -1996 Vol. 34, pp 565-571. [https://doi.org/10.1016/1359-6462\(95\)00547-1](https://doi.org/10.1016/1359-6462(95)00547-1)
74. Estevez R., Hoinard G., Franciosi P. Hardening anisotropy of  $\gamma/\gamma'$  superalloy single crystals–II. Numerical analysis of heterogeneity effects. *Acta materialia*, 1997, Vol. 45, no. 4, pp. 1567-1584. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(96\)00265-0](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(96)00265-0)
75. Semenov A.S. PANTOCRATOR – konechno-elementnyi programmnyi kompleks, orientirovannyi na reshenie nelineynykh zadach mehaniki [PANTOCRATOR – the finite element program specialized on the non-linear problem solution], in *Proc. of the Vth Int. Conf. on scientific and engineering problems of predicting the reliability and service life of structures. St.-Petersburg*. 2003, pp. 466-480.
76. Tikhomirova E.A., Rybnikov A.I., Getsov L.B. Changes in the structure and properties of single-crystal refractory alloys under long-term operation. *Met Sci Heat Treat*, 2017. - Vol. 59. -pp. 34–38 doi: <https://doi.org/10.1007/s11041-017-0098-9>
77. Reiner M. Reologiya [Rheology]. - *Moscow: Nauka*, 1965. – 224 p.
78. Palmov V.A. Nelineinaya mehanika deformiruemykh tel [Nonlinear Mechanics of Deformable Bodies]. *St. Petersburg, SPbPU Publ.*, 2014, 793
79. Gokhfeld D.A., O.S. Sadakov Plastichnost' i polzuchest' e'lementov konstruktsii pri povtorny'kh nagruzheniiakh [Plasticity and Creep of Structural Elements Under Repeated Loading]. *Moscow, Mashinostroenie*, 1984, 256 p.
80. Reuß A. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 1929, Vol. 9, no. 1, pp. 49-58. <https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104>
81. Voigt W. Über die Beziehung zwischen den beiden Elastizitätskonstanten isotroper Körper // *Annalen der physik*, 1889, Vol. 274, no. 12, pp. 573-587. <https://doi.org/10.1051/JPHYSTAP:018900090020100>
82. Estrada Rodas E.A., Gorgannejad S., Neu R.W. Creep-fatigue behaviour of single-crystal Ni-base superalloy CMSX-8. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2019, Vol. 42, no. 9, pp. 2155-2171. <https://doi.org/10.1002/9781119075646.ch71Citations>

**Финансирование.** Исследование частично финансируется Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках программы Исследовательского центра мирового уровня: Передовые цифровые технологии (соглашение № 075-15-2020-311 от 20.04.2022).

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Financing.** The research is partially funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the World-class Research Center program: Advanced Digital Technologies (contract No. 075-15-2022-311 dated 20.04.2022).

**Conflict of interest.** The authors declare no conflict of interest.