

Диффузионно-кинетическая модель образования и роста интерметаллидной фазы в трехкомпонентных твердых растворах на базе никеля с учетом температурной зависимости коэффициента диффузии

Е.К. Коваленко, Е.А. Валдайцева, Г.А. Туричин

Санкт-Петербургский государственный морской технический университет, Санкт-Петербург, Россия

АННОТАЦИЯ

Актуальность. Никелевые сплавы применяются в различных отраслях благодаря привлекательным механическим свойствам. Никелевые сплавы также активно используются в аддитивном производстве для получения сложнопрофильных изделий. Метод прямого лазерного выращивания сопряжен с высокими скоростями нагрева и охлаждения, на которые можно влиять с помощью параметров выращивания, таких как мощность лазерного излучения и скорость выращивания.

Цель — получение диффузионно-кинетической модели для расчета размера интерметаллидной фазы при различных режимах прямого лазерного выращивания в никелевых сплавах.

Материалы и методы. Рассмотрена модель для расчета размера интерметаллидной фазы в никелевом трехкомпонентном сплаве при условии химической реакции только легирующих элементов друг с другом.

Результаты. Расчет размера интерметаллидной фазы позволит прогнозировать механические свойства изделий при прямом лазерном выращивании до фактического получения изделий. Следующим шагом является валидация данной диффузионно-кинетической модели при условии химической реакции только легирующих элементов друг с другом.

Выводы. В работе представлена модель для расчета размера интерметаллидной фазы из легирующих элементов в трехкомпонентном никелевом сплаве. Модель поможет в прогнозировании размеров интерметаллидов и, следовательно, в прогнозировании механических свойств изделий.

Ключевые слова: диффузионно-кинетическая модель; трехкомпонентные никелевые сплавы; расчет размера включений; прямое лазерное выращивание; аддитивные технологии.

Как цитировать

Коваленко Е.К., Валдайцева Е.А., Туричин Г.А. Диффузионно-кинетическая модель образования и роста интерметаллидной фазы в трехкомпонентных твердых растворах на базе никеля с учетом температурной зависимости коэффициента диффузии // Труды Санкт-Петербургского государственного морского технического университета. 2025. Т. 4, № 1. С. 115–122. DOI: https://doi.org/10.52899/24141437_2025_01_115 DOI: https://doi.org/10.52899/24141437_2025_01_115 Original study article

Diffusion-kinetic model of intermetallidic phase development and growth in three-component Ni-based solid solutions based on diffusion coefficient temperature dependence

Ekaterina K. Kovalenko, Ekaterina A. Valdaytseva, Gleb A. Turichin

Saint Petersburg State Marine Technical University, Saint Petersburg, Russia

ABSTRACT

BACKGROUND: Nickel alloys are used in various industries due to their attractive mechanical properties. Nickel alloys are also widely used in additive manufacturing to make complex-shaped products. The direct laser deposition method implies high heating and cooling rates, which can be influenced by manufacturing parameters such as laser power and manufacture speed. *AIM:* A diffusion-kinetic model will allow to make calculations of the size of the intermetallidic phase in various direct laser deposition modes in Ni alloys.

MATERIALS AND METHODS: This article describes a model for calculating the sizes of the intermetallidic phase in a threecomponent Ni alloy in a chemical reaction between the alloying elements only.

RESULTS: Calculation of the size of the intermetallidic phase will allow to forecast the mechanical properties of products manufactured by direct laser deposition before the actual manufacture. A next step is to validate this diffusion-kinetic model subject to the chemical reaction between the alloying elements only.

CONCLUSIONS: The paper presents a model used to calculate the size of intermetallic phase made of alloying elements in a three-component nickel alloy. The model will help to predict the size of intermetallic compounds and, thus, the mechanical properties of products.

Keywords: diffusion-kinetic model; three-component Ni alloys; calculation of inclusions size; direct laser deposit; additive manufacturing techniques.

To cite this article

Kovalenko EK, Valdaytseva EA, Turichin GA. Diffusion-kinetic model of intermetallidic phase development and growth in three-component Ni-based solid solutions based on diffusion coefficient temperature dependence. *Transactions of the Saint Petersburg State Marine Technical University.* 2025;4(1):115–122. DOI: https://doi.org/10.52899/24141437_2025_01_115

Received: 05.02.2025



Accepted: 15.02.2025

Published online: 20.03.2025

ВВЕДЕНИЕ

Жаропрочные сплавы на основе никеля находят широкое применение в аэрокосмической, энергетической, морской и автомобильной промышленности [1–3] благодаря своим технологическим и механическим свойствам, таким как высокие твердость, жаропрочность, усталостная прочность, вязкость разрушения, ударная вязкость, коррозионная стойкость, обеспечиваемым упрочняющими у '/y" фазами.

Никелевые сплавы активно используются в аддитивном производстве для получения сложнопрофильных изделий в более короткие сроки по сравнению с традиционными методами производства. Применение аддитивных технологий позволяет изготавливать детали с механическими свойствами, аналогичными или даже лучшими, чем у деталей, полученных стандартными металлургическими методами. При этом особое внимание следует уделять сочетанию используемых параметров аддитивного производства. Метод прямого лазерного выращивания (ПЛВ) позволяет отказаться от дорогостоящих и трудозатратных операций последующей обработки, таких как горячая изостатическая обработка, термообработка, финишная обработка поверхности и т.д.

Метод ПЛВ сопряжен с высокими скоростями нагрева и охлаждения, что влияет на микроструктуру изделий в виде температурного поля. В свою очередь, на температурное поле оказывают влияние параметры выращивания, среди которых мощность лазерного излучения и скорость выращивания. В многокомпонентных сплавах, к которым относятся жаропрочные сплавы на основе никеля, при кристаллизации, как правило, образуются интерметаллиды, и их размер влияет на механические свойства изделия. Получение диффузионно-кинетической модели позволит производить расчеты размера интерметаллидных фаз при различных режимах прямого лазерного выращивания в никелевых сплавах [4–6].

В работе [5] рассматривали модель для определения размера интерметаллидной фазы Ni₂Al в никелевом сплаве. Расчет температурного поля позволил получить график роста интерметаллидной фазы Ni₃Al в зависимости от времени для заданной температуры термического цикла. Полученная модель дает возможность прогнозировать размер интерметаллических включений, а следовательно, и свойства получаемых изделий. В работе [6] была получена математическая модель роста интерметаллидной фазы при прямом лазерном выращивании для прогнозирования параметров фазы упрочнения, которая позволяет с достаточной точностью определять размер Ni₃Al. Сравнение расчетных и экспериментальных значений размера интерметаллидной фазы в работе показало, что предложенная модель дает удовлетворительные результаты при ограниченном диапазоне скоростей охлаждения. Авторы предположили, что это связано с ростом зерен за счет образования новой фазы и прекращается из-за снижения концентрации компонентов, участвующих в химической реакции, в прилегающей зоне, а рост за счет поглощения соседних зерен не успевает произойти.

Расчет размера интерметаллидной фазы позволит прогнозировать механические свойства изделий при прямом лазерном выращивании до фактического получения изделий. В данной работе рассматривается модель для расчета размера интерметаллидных фаз в трехкомпонентном никелевом сплаве при условии химической реакции только легирующих элементов друг с другом и без участия основного элемента никеля. Следующим шагом является валидация данной диффузионно-кинетической модели при условии химической реакции только легирующих элементов друг с другом.

ВЫВОД УРАВНЕНИЯ

Рассмотрим трехкомпонентный сплав $E_0E_1E_2$, где E_0 — основной элемент, E_1 и E_2 — легирующие элементы. При этом выполняются условия:

$$C_0 \gg C_1^0; \tag{1}$$

$$C_0 \gg C_2^0, \tag{2}$$

где C_0^0, C_1^0, C_2^0 — начальные концентрации элементов E_0, E_1, E_2 в сплаве соответственно.

Будем считать, что элементы E_1 и E_2 взаимодействуют друг с другом и не взаимодействуют с основным матричным элементом E_0 . Тогда химическую реакцию образования интерметаллидов в общем виде можно представить как:

$$mE_1 + nE_2 = (E_1)_m (E_2)_n$$
, (3)

где *m*, *n* — соответствующие стехиометрические коэффициенты.

Для реакции мы можем записать соответствующее кинетическое уравнение химической реакции [7]:

$$\frac{dV}{dt} = K_1(T) \cdot C \cdot S - K_2(T) \cdot S, \qquad (4)$$

где V — объем включения; S — площадь поверхности включения; $K_1(T)$ — константа скорости прямой реакции; $K_2(T)$ — константа скорости обратной реакции; C — поверхностная концентрация легирующих элементов, при реакции с которой возникает новая фаза, в общем случае является функцией времени и координат; T и t — локальные температура и время соответственно.

Отношение между объемом включения и площадью его поверхности зависит от формы включения. В начальный момент роста размер включения *а* гораздо меньше типичной толщины слоя диффузии. Поэтому включение можно трактовать как «точечный» источник (или сток) растворенного вещества, и концентрационное поле имеет сферическую симметрию. Этот факт позволяет рассматривать включение как сферическое с эффективным радиусом *а*. Тогда (4) можно переписать следующим образом:

$$\frac{da}{dt} = K_1(T) \cdot C - K_2(T), \tag{5}$$

где *а* — эффективный радиус включения.

118

Константы скорости реакции, в предположении о термофлуктуационном характере образования и разрыва химических связей, получаем из формулы Аррениуса:

$$K_{1,2}(T) = K_{1,2}^{(0)} \cdot \exp(\frac{-Q_{1,2}}{kT}),$$
 (6)

где Q_1, Q_2 — энергия активации прямой и обратной реакции соответственно; k — постоянная Больцмана; $K_1^{(0)}$, $K_2^{(0)}$ — частотный фактор перед экспонентой [8].

Как было показано в [9], скорость гетерогенной реакции определяется, с одной стороны, истинной химической кинетикой на поверхности, а с другой — скоростью транспортировки реагирующих веществ к этой поверхности, т. е. диффузией. В твердых растворах при высоких температурах скорость химического взаимодействия превышает скорость диффузии, поэтому скорость реакции на поверхности растущего включения зависит от концентрации реагирующих компонентов на этой поверхности. Для легирующего компонента поверхностная концентрация будет определяться решением уравнения диффузии для этого компонента. Поэтому скорость транспортировки легирующих элементов E_1 и E_2 будет определяться скоростью диффузии в основном элементе Е_п, а истинная химическая кинетика — легирующим элементом с наименьшей концентрацией на поверхности. Так как мы считаем, что легирующие элементы распределены в сплаве равномерно по всему объему, то можно предположить, что реакция идет во всех направлениях с равной скоростью, а значит, имеет место сферическая симметрия задачи. Оценивая диффузионное число Пекле как Pe << 1, можно пренебречь конвекционным членом, связанным с движением включений через границу. Таким образом, уравнение диффузии рассматривается в одномерной постановке в сферической системе координат, связанной с растущим включением. Тогда для компонентов E_1 и E_2 , соответственно, можем записать:

$$\frac{dC_1(r,t)}{dr} = D_1(T) \triangle C_1(r,t) = D_1(T) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial C_1(r,t)}{\partial r}); \quad (7)$$

$$\frac{dC_2(r,t)}{dr} = D_2(T) \vartriangle C_2(r,t) = D_2(T) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial C_2(r,t)}{\partial r}),$$
(8)

где D_1 и D_2 — соответствующие коэффициенты диффузии компонентов E_1 и E_2 в основном элементе E_0 , которые определяются как

$$D_{1,2}(T) = D_{1,2}^{(0)} \cdot \exp(\frac{-E_{a1,2}}{RT}),$$
(9)

где $D_{1,2}^{(0)}$ — предэкспоненциальные множители; $E_{a1,2}$ — энергия активации диффузии соответствующих компонентов в основном элементе; R — универсальная газовая постоянная.

Граничное условие на поверхности растущего включения будет определяться условием неразрывности потока массы через эту поверхность, т. е. для каждой реакции можем записать:

$$-D_{i} \frac{dC_{i}(r,t)}{dr} \bigg|_{r=a} = K_{1}(T) \cdot C_{j} - K_{2}(T).$$
(10)

Концентрации легирующих элементов в области, где происходит транспортировка *E*₁ и *E*₂ к поверхности, можно описать следующим уравнением:

$$C_0 + C_1 + C_2 = 1. \tag{11}$$

Концентрации легирующих элементов на поверхности включения можно описать следующим уравнением:

$$C_1\Big|_{r=a} + C_2\Big|_{r=a} = 1.$$
 (12)

Учитывая уравнение (12), корректируем правую часть уравнения (10) с помощью коэффициента $b = 1 / (1 - C_0^0)$:

$$-D_{i} \frac{dC_{i}(r,t)}{dr} \bigg|_{r=a} = K_{1}(T) \cdot b \cdot C_{j} - K_{2}(T).$$
(13)

Допустим, что $D_1 < D_2$, тогда D_1 определяет наименьшую скорость подвода из легирующих элементов E_1 . Химическая кинетика на поверхности, в свою очередь, определяется наименьшей концентрацией компонентов E_1 и E_2 , из чего имеем три варианта на поверхности включения: $C_1 < C_2$, $C_1 = C_2$ и $C_1 > C_2$. Таким образом возможны два варианта уравнения (13) при рассмотрении нашего случая реакции только компонентов E_1 и E_2 друг с другом:

$$-D_{1} \frac{dC_{1}(r,t)}{dr}\Big|_{r=a} = K_{1}(T) \cdot b \cdot C_{1} - K_{2}(T) \quad C_{1} \le C_{2};$$
(14)

$$-D_1 \frac{dC_1(r,t)}{dr} \bigg|_{r=a} = K_1(T) \cdot b \cdot C_2 - K_2(T) \quad C_1 > C_2.$$
(15)

На значительном расстоянии от растущих включений концентрация каждого легирующего элемента определяется средним значением C_1^0 и C_2^0 :

$$C_1(r,t)\Big|_{r\to\infty} = C_1^0;$$
 (16)

$$C_2(r,t)\Big|_{r\to\infty} = C_2^0. \tag{17}$$

Таким образом, в противоположность широко известной формулировке этой проблемы [4], где реакция протекает в объеме, в котором имеет место диффузия, в нашем рассмотрении реакция имеет место только на границе слоя диффузии, а именно на поверхности включения, т. е. это задача реакционно-диффузионного типа.

Используем замену переменных:

(

$$U_{1,2}(r,t) = (C_{1,2}(r,t) - C_{1,2}^{0}) \cdot r, \qquad (18)$$

где *r* — координата сферической системы координат, связанной с включением и началом в центре включения. Тогда:

$$C_{1,2}(r,t) = \frac{U_{1,2}(r,t)}{r} + C_{1,2}^{0};$$
(19)

$$\frac{\partial C_{1,2}(r,t)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial U_{1,2}(r,t)}{\partial t};$$
(20)

$$\frac{\partial C_{1,2}(r,t)}{\partial r} = \frac{1}{r} \frac{\partial U_{1,2}(r,t)}{\partial r} - \frac{U_{1,2}(r,t)}{r^2}.$$
 (21)

Сделав замену *r* = *x* + *a* и выполнив соответствующие преобразования, получим системы уравнений

с граничными условиями для включения в декартовой системе координат с началом на поверхности включения:

$$\frac{\partial U_{1,2}(x,t)}{\partial t} = D_{1,2} \frac{\partial^2 U_{1,2}(x,t)}{\partial x^2}; \qquad (22)$$
$$\frac{\partial U_1(x,t)}{\partial t} = \begin{bmatrix} 1 & K_1(T) \cdot b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & K_1(T) \cdot b \end{bmatrix}$$

$$\frac{\partial C_{1}(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=0} = \left[\frac{1}{a} - \frac{M_{1}(x)}{D_{1}(T)}\right] \cdot U_{1}(x,t)\Big|_{x=0} - \frac{a}{D_{1}(T)}\left[K_{1}(T) \cdot b \cdot C_{1}^{0} - K_{2}(T)\right] \qquad C_{1} \le C_{2};$$
(23)

$$\frac{\partial U_{1}(x,t)}{\partial x}\Big|_{x=0} = \left[\frac{1}{a} + \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)}\right] \cdot U_{1}(x,t)\Big|_{x=0} - \frac{a}{D_{1}(T)}\left[K_{1}(T) \cdot b \cdot (1 - C_{1}^{0}) - K_{2}(T)\right] \qquad C_{1} > C_{2}.$$
 (24)

Мы получили систему дифференциальных уравнений в частных производных, с нелинейными граничными условиями. В сборнике [5] приведено аналитическое решение для задачи типа $u_t = k^2 u_{xx}$, 0 < x, $t < +\infty$, с условиями u(x, 0) = 0, $u_x(0, t) - hu(0, t) = -h\phi(t)$.

Рассмотрим наш случай при $C_1 \leq C_2$:

$$k^2 = D_1(T);$$
 (25)

$$h = \frac{1}{a} - \frac{K_1(T) \cdot b}{D_1(T)};$$
(26)

$$p(t) = \frac{a}{D_1(T) \left(\frac{1}{a} - \frac{K_1(T) \cdot b}{D_1(T)}\right)} \left[K_1(T) \cdot b \cdot C_1^0 - K_2(T)\right].$$
(27)

Тогда решение уравнения для U₁ будет выглядеть следующим образом:

$$U_{1}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{t} \frac{a \left[K_{1}(T) \cdot b \cdot C_{1}^{0} - K_{2}(T) \right]}{\sqrt{D_{1}(T)(t-\tau)}} \left[\exp\left\{ -\frac{x^{2}}{4D_{1}(T)(t-\tau)} \right\} - \left(\frac{1}{a} - \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)} \right) \int_{0}^{\infty} \exp\left\{ -\left(\frac{1}{a} - \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)} \right) \xi - \frac{(x+\xi)^{2}}{4D_{1}(T)(t-\tau)} \right\} d\xi \right] d\tau.$$
(28)

Том 4. № 1. 2025

Коэффициенты $K_{1,2}^{(1)}, K_{1,2}^{(1)}, D_{1,2}$, зависят от времени, а значит, и от τ , опосредовано, через зависимость температуры от времени. Размер включения *а* зависит от времени по условию задачи. Теперь, возвращаясь обратно к выражению концентрации, для x = 0 (или r = a) получаем:

$$C_{1}(x,t) = C_{1}^{0} - \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{0}^{t} \frac{a\left[K_{1}(T) \cdot b \cdot C_{1}^{0} - K_{2}(T)\right]}{\sqrt{D_{1}(T)(t-\tau)}} \left[\exp\left\{-\frac{x^{2}}{4D_{1}(T)(t-\tau)}\right\} - \left(\frac{1}{a} - \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)}\right) \int_{0}^{\infty} \exp\left\{-\left(\frac{1}{a} - \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)}\right)\xi - \frac{\xi^{2}}{4D_{1}(T)(t-\tau)}\right\} d\xi\right] d\tau.$$
(29)

Взяв внутренний интеграл, окончательно получаем:

$$\frac{da}{dt} = K_1(T) \cdot b \cdot C_1 - K_2(T); \tag{30}$$

$$C_{1}(x,t) = C_{1}^{0} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{t} \frac{a(\tau) \left[K_{1}(T) \cdot b \cdot C_{1}^{0} - K_{2}(T) \right]}{a(t)\sqrt{D_{1}(T)(t-\tau)}} \left[1 - \sqrt{\pi}We^{w^{2}} (1 - erf[W]) \right] d\tau,$$
(31)

где $W = \left(\frac{1}{a} - \frac{K_1(T) \cdot b}{D_1(T)}\right) \sqrt{D_1(T)(t-\tau)}.$

Рассмотрим наш случай при $C_1 > C_2$:

$$k^2 = D_1(T);$$
 (32)

$$h = \frac{1}{a} + \frac{K_1(T) \cdot b}{D_1(T)};$$
(33)

$$\varphi(t) = \frac{a}{D_1(T) \left(\frac{1}{a} + \frac{K_1(T) \cdot b}{D_1(T)}\right)} \left[K_1(T) \cdot b \cdot (1 - C_1^0) - K_2(T) \right]$$
(34)

Тогда решение уравнения для U_1 будет выглядеть следующим образом:

$$U_{1}(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{t} \frac{a \left[K_{1}(T) \cdot b \cdot (1 - C_{1}^{0}) - K_{2}(T) \right]}{\sqrt{D_{1}(T)(t - \tau)}} \left[\exp \left\{ -\frac{x^{2}}{4D_{1}(T)(t - \tau)} \right\} - \left(\frac{1}{a} + \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)} \right) \int_{0}^{\infty} \exp \left\{ -\left(\frac{1}{a} + \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)} \right) \xi - \frac{(x + \xi)^{2}}{4D_{1}(T)(t - \tau)} \right\} d\xi \right] d\tau.$$
(35)

Коэффициенты K_1 , K_2 , D_1 зависят от времени, а значит, и от т, опосредовано, через зависимость температуры от времени. Размер включения *а* зависит от времени по условию задачи. Теперь, возвращаясь обратно к выражению концентрации, для x = 0 (или r = a) получаем:

$$C_{1}(x,t) = C_{1}^{0} - \frac{1}{a\sqrt{\pi}} \int_{0}^{t} \frac{a\left[K_{1}(T) \cdot b \cdot (1 - C_{1}^{0}) - K_{2}(T)\right]}{\sqrt{D_{1}(T)(t - \tau)}} \left[\exp\left\{-\frac{x^{2}}{4D_{1}(T)(t - \tau)}\right\} - \left(\frac{1}{a} + \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)}\right) \int_{0}^{\infty} \exp\left\{-\left(\frac{1}{a} + \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)}\right)\xi - \frac{(\xi)^{2}}{4D_{1}(T)(t - \tau)}\right\} d\xi \right] d\tau.$$
(36)

Взяв внутренний интеграл, окончательно получаем:

$$\frac{da}{dt} = K_1(T) \cdot b \cdot (1 - C_1) - K_2(T);$$
(37)

$$C_{1}(x,t) = C_{1}^{0} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{t} \frac{a(\tau) \left[K_{1}(T) \cdot b \cdot (1 - C_{1}^{0}) - K_{2}(T) \right]}{a(t)\sqrt{D_{1}(T)(t - \tau)}} \left[1 - \sqrt{\pi}We^{w^{2}} (1 - erf[W]) \right] d\tau, \qquad (38)$$

rge $W = \left(\frac{1}{a} + \frac{K_{1}(T) \cdot b}{D_{1}(T)} \right) \sqrt{D_{1}(T)(t - \tau)}.$

Уравнения (30) с граничными условиями (31) при $C_1 > C_2$ и (37) с граничными условиями (38) при $C_1 \le C_2$ образуют системы уравнений, решения которых дают изменения концентраций легирующих элементов в твердом растворе трехкомпонентного сплава и размера соответствующих включений, образованных этими легирующими элементами в результате химических реакций друг с другом.

В массе материала в процессе изменения температуры, т.е. при охлаждении, зародыши новой фазы будут образовываться во всем объеме материала. Пока концентрация легирующих элементов и относительный объем включений малы, вероятность столкновения растущих включений тоже мала. Но на конечной стадии роста взаимное влияние растущих включений будет усиливаться из-за уменьшения концентраций легирующих элементов за счет поглощения их другими растущими включениями. Поэтому условия (16) и (17) изменятся и примут вид:

$$C_{1,2}(r,t)\Big|_{r\to\infty} = C_{1,2}^0 - nC'_{1,2}V,$$
 (39)

где *п* — концентрация растущих включений, образованных участием компонентов E_1 и E_2 , $C'_{1,2}$ — концентрация компонентов E_1 и E_2 в включении, определяемая стехиометрическими коэффициентами.

Объемы V определяются в зависимости от формы образующегося включения. Для сферического включения этот параметр равен 4/3 πa^3 , где a — характерный размер включения.

В реальной физической системе из-за разных условий образования и роста зародышей новой фазы размеры включений будут отличаться друг от друга в некотором диапазоне значений. Однако в качестве усредненного значения параметр *п* можно определить, зная предельную растворимость легирующего компонента в основном элементе из диаграммы состояния бинарной системы основной элемент — легирующий элемент. Тогда равновесная концентрация запишется как:

$$C_{1,2}^{0} = C_{1,2}^{\lim}(T) + V_{1,2}^{\lim} n C'_{1,2},$$
(40)

где $C_{1,2}^{\lim}(T)$ — предельная растворимость легирующего элемента в основном элементе, взятая из термодинамической диаграммы, $V_{1,2}^{\lim}$ — предельный объем растущего включения.

Тогда для сферических включений для комнатной температуры параметр *n* можно определить как:

$$n = \frac{C_{1,2}^0 - C_{1,2}^{\lim} (293)}{\frac{4}{3}\pi (a^{\lim})^3 C'_{1,2}}.$$
 (41)

Таким образом, возвращаясь к системам уравнений (30)–(31) и (37)–(38), можем записать: для $C_1 \leq C_2$

$$\frac{da}{dt} = K_1(T) \cdot b \cdot C_1 - K_2(T); \tag{42}$$

$$C_{1}(x,t) = C_{1}^{0} - n \cdot C_{1}^{\prime} \cdot \frac{4}{3}\pi \cdot a^{3} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{t} \frac{a(\tau) \left[K_{1}(T) \cdot b \cdot C_{1}^{0} - K_{2}(T) \right]}{a(t)\sqrt{D_{1}(T)(t-\tau)}} \left[1 - \sqrt{\pi}We^{w^{2}}(1 - erf[W]) \right] d\tau;$$
(43)

для $C_1 > C_2$

$$\frac{da}{dt} = K_1(T) \cdot b \cdot (1 - C_1) - K_2(T);$$
(44)

$$C_{1}(x,t) = C_{1}^{0} - n \cdot C_{2}^{\prime} \cdot \frac{4}{3}\pi \cdot a^{3} - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{t} \frac{a(\tau) \left[K_{1}(T) \cdot b \cdot (1 - C_{1}^{0}) - K_{2}(T) \right]}{a(t)\sqrt{D_{1}(T)(t - \tau)}} \left[1 - \sqrt{\pi}W e^{w^{2}} (1 - erf[W]) \right] d\tau.$$
(45)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлена модель для расчета размера интерметаллидной фазы из легирующих элементов в трехкомпонентном никелевом сплаве. Модель поможет в прогнозировании размеров интерметаллидов и, следовательно, в прогнозировании механических свойств изделий. В дальнейшем планируется произвести валидацию данной модели.

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Вклад авторов. Все авторы внесли существенный вклад в разработку концепции, проведение исследования и подготовку статьи, прочли и одобрили финальную версию перед публикацией. Личный вклад каждого автора: Е.К. Коваленко — сбор, анализ и обработка материала, написание статьи, редактирование статьи; Е.А. Валдайцева — сбор, анализ и обработка материала, редактирование статьи; Г.А. Туричин — сбор, анализ и обработка материала.

121

Источник финансирования. Авторы заявляют об отсутствии внешнего финансирования при проведении исследования.

Конфликт интересов. Авторы декларируют отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

ADDITIONAL INFORMATION

Authors' contribution. All authors made a substantial contribution to the conception of the study, acquisition, analysis, interpretation of data for the work, drafting and revising the article, final approval

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Jinoop A.N., Paul C.P., Bindra K.S. Laser-assisted directed energy deposition of nickel super alloys: a review // Proc Inst Mech Eng Pt L J Mater Des Appl. 2019. Vol. 233, N 11. P. 2376–2400. doi: 10.1177/1464420719852658

2. Alves Ferreira A., Loureiro Amaral R., Correia Romio P., et al. Deposition of nickel-based superalloy claddings on low alloy structural steel by direct laser deposition // Metals. 2021. Vol. 11, N 8. ID 1326. doi: 10.3390/met11081326

3. Conduit B.D., Illston T., Baker S., et al. Probabilistic neural network identification of an alloy for direct laser deposition // Mater Des. 2019. Vol. 168. ID 107644. doi: 10.1016/j.matdes.2019.107644

4. Alves Ferreira A., Loureiro Amaral R., Correia Romio P., et al. Deposition of nickel-based superalloy claddings on low alloy structural steel by direct laser deposition // Metals. 2021. Vol. 11, N 8. ID 1326. doi: 10.3390/met11081326

5. Alekseev A.V., Valdaytseva E.A., Aleksandrov V.L. Modeling of the formation process of the coherent intermetallides in nickel alloys

REFERENCES

1. Jinoop AN, Paul CP, Bindra KS. Laser-assisted directed energy deposition of nickel super alloys: a review. *Proc Inst Mech Eng Pt L J Mater Des Appl.* 2019;233(11):2376–2400. doi: 10.1177/1464420719852658

2. Alves Ferreira A, Loureiro Amaral R, Correia Romio P, et al. Deposition of nickel-based superalloy claddings on low alloy structural steel by direct laser deposition. *Metals.* 2021;11(8):1326. doi: 10.3390/met11081326

3. Conduit BD, Illston T, Baker S, et al. Probabilistic neural network identification of an alloy for direct laser deposition. *Mater Des.* 2019;168:107644. doi: 10.1016/j.matdes.2019.107644

4. Alves Ferreira A, Loureiro Amaral R, Correia Romio P, et al. Deposition of nickel-based superalloy claddings on low alloy structural steel by direct laser deposition. *Metals.* 2021;11(8):1326. doi: 10.3390/met11081326

5. Alekseev AV, Valdaytseva EA, Aleksandrov VL. Modeling of the formation process of the coherent intermetallides in nickel

of the version to be published and agree to be accountable for all aspects of the study. Personal contribution of each author: E.K. Kovalenko, collection, analysis and processing of material, writing of the article, editing of the article; E.A. Valdaitseva, collection, analysis and processing of material, editing of the article; G.A. Turichin, collection, analysis and processing of material.

Funding source. This study was not supported by any external sources of funding.

Competing interests. The authors declare that they have no competing interests.

during laser treatment // Key Eng Mater. 2019. Vol. 822. P. 438–444. doi: 10.4028/www.scientific.net/KEM.822.438

6. Alekseev A.V., Turichin G.A., Klimova-Korsmik O.G., et al. Simulation of the Ni3Al intermetallic inclusion growth process during direct laser deposition using Ni-based superalloy powder // Materials Today: Proceedings. 2020. Vol. 30-3. P. 756–760. doi: 10.1016/j.matpr.2020.01.562

7. Lopota V., Turichin G., Valdaitseva E., et al. Theoretical investigation and modelling of intermetallic inclusions formation in laser treatment of Al-Mg alloys // SPIE Proc. 2004. Vol. 5399. doi: 10.1117/12.555548

8. Прохоров Н.Н. Физические процессы в металлах при сварке. Т. 1. Москва: Металлургия, 1976. 695 с.

9. Франк-Каменецкий Д.А. Основы макрокинетики. Диффузия и теплопередача в химической кинетике: Учебникмонография. 4-е изд. Долгопрудный: ИД «Интеллект», 2008. 408 с.

alloys during laser treatment. *Key Eng Mater*. 2019;822:438–444. doi: 10.4028/www.scientific.net/KEM.822.438

6. Alekseev AV, Turichin GA, Klimova-Korsmik OG, et al. Simulation of the Ni_3Al intermetallic inclusion growth process during direct laser deposition using Ni-based superalloy powder. *Materials Today: Proceedings.* 2020;30-3:756–760. doi: 10.1016/j.matpr.2020.01.562

7. Lopota V, Turichin G, Valdaitseva E, et al. Theoretical investigation and modelling of intermetallic inclusions formation in laser treatment of Al-Mg alloys. *SPIE Proc.* 2004;5399. doi: 10.1117/12.555548

8. Prokhorov NN. *Physical processes in metals at welding.* Vol. 1. Moscow: Metallurgy; 1976. 695 p. (In Russ.)

9. Frank-Kamenetsky DA. *Fundamentals of macrokinetics. Diffusion and heat transfer in chemical kinetics: Textbook-monograph. 4th ed.* Dolgoprudny: Intellect Publishing House; 2008. 408 p. (In Russ.)

ОБ АВТОРАХ

*Екатерина Константиновна Коваленко; инженер отдела моделирования и информационных технологий; адрес: Россия, 190121, Санкт-Петербург, ул. Лоцманская, д. 3; ORCID: 0009-0000-5437-0056; e-mail: kovalenko.ek@inbox.ru

Екатерина Александровна Валдайцева; начальник отдела моделирования и информационных технологий; ORCID: 0000-0003-2131-9224; eLibrary SPIN: 1797-1043; e-mail: valdaitseva@mail.ru

Глеб Андреевич Туричин, д-р техн. наук, доцент, ректор; eLibrary SPIN: 5739-8224; e-mail: gleb@ltc.ru

* Автор, ответственный за переписку / Corresponding author

AUTHORS' INFO

*Ekaterina K. Kovalenko; Engineer of the Department of Modeling and Information Technology; address: 3 Lotsmanskaya st, 3, Saint Petersburg, 190121, Russia; ORCID: 0009-0000-5437-0056; e-mail: kovalenko.ek@inbox.ru

Ekaterina A. Valdaytseva; Head of the Department of Modeling and Information Technology; ORCID: 0000-0003-2131-9224; eLibrary SPIN: 1797-1043; e-mail: valdaitseva@mail.ru

Gleb A. Turichin; Dr. Sci. (Engineering), Associate Professor, Rector; eLibrary SPIN: 5739-8224; e-mail: gleb@ltc.ru