

УДК 621.431.75+620.22:629.7

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ВЛИЯНИЯ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ПЕРИОД КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ МОНОКРИСТАЛЛОВ ТУРБИН АВИАЦИОННЫХ ГТД

© 2012 И. Х. Бадамшин

Уфимский государственный авиационный технический университет

Показана возможность теоретической оценки зависимости периода кристаллической решётки монокристаллов от температуры. Выведена формула этой зависимости. Получена удовлетворительная сходимость с результатами экспериментов. На основе полученной формулы определяются коэффициент теплового расширения и модуль упругости компонентов эвтектического композита.

Эвтектический композит, монокристалл, период кристаллической решётки, коэффициент теплового расширения, модуль упругости.

Введение

Перспективными материалами для рабочих лопаток турбин авиационных ГТД являются эвтектические композиты [1], в состав которых входят нитевидные монокристаллы и дисперсно-упрочнённая монокристаллическая матрица.

Помимо обычных факторов, определяющих свойства композиций, таких как природа и соотношение компонентов, распределение их и др., термическое расширение композиционного материала в значительной степени определяется наличием в нём остаточных напряжений. В композиционном материале возникают напряжения, обусловленные различием коэффициентов теплового расширения компонентов. При некоторой температуре эти напряжения достигают предела текучести матрицы [2].

Для оценки коэффициента теплового расширения композита $a_{км}$ в целом необходимо знать его составляющие: вдоль (a_1) и поперёк (a_2) волокон в зависимости от коэффициентов теплового расширения a_v волокон и a_m матрицы. Для изотропных волокон и матрицы такие соотношения приведены в работах [3, 4]. Для монокристаллов анизотропия коэффициента α может достигать 300 % и более [5].

Задача определения коэффициентов a_v , a_m для монокристаллов решается,

например, с учётом межатомного взаимодействия в кристаллической решётке. Так, коэффициент теплового расширения связан с температурой плавления и может характеризовать силу межатомной связи [5]. Максимальная сила межатомной связи приходится на металлы с максимальными температурами плавления и минимальными значениями коэффициента термического расширения. Соответственно эти металлы имеют и минимальные межатомные расстояния.

Для металлов с кубической решёткой коэффициент α без учёта анизотропии связан с температурой плавления соотношением: $aT_{пл} \cong 0,02$. Кроме того, для веществ с металлическим характером связи имеется эмпирическое соотношение: $\alpha = 7,24 \cdot 10^{-2} / T_{пл}^{1,19}$ [5]. Однако эти соотношения не позволяют устанавливать зависимость коэффициента теплового расширения от эксплуатационной температуры.

Расчёт коэффициента α с учётом ангармонической составляющей колебаний атомов проводится по формуле [6]:

$$a = \frac{1}{x_0} \frac{d\langle x \rangle}{dT} = \frac{3kg}{4b^2x_0}, \quad (1)$$

где g и b - функции потенциала U ; x - расстояние между зарядами; x_0 - расстояние между зарядами в равновесном состоя-

нии; k – постоянная Больцмана; T – температура. Здесь предполагается знание потенциала кристаллической решётки U , для определения которого нет методики аналитического расчёта.

Для оценки коэффициента теплового расширения по формуле Гилмана [5] необходимо знать силу межатомного сцепления σ_c :

$$\sigma_c = 3k/(8\alpha V), \quad (2)$$

где V – средний атомный объём.

Поэтому актуальной является задача разработки аналитической методики расчёта коэффициента теплового расширения применительно к монокристаллам материалов лопаток газовых турбин.

Модель и сравнение с экспериментом

Армирующей фазой в эвтектических композитах является нитевидный монокристалл. В нём рассматривается элементарная атомная ячейка. Кристаллическая решётка находится в равновесном состоянии (силы притяжения уравновешены силами отталкивания). Потенциальная энергия взаимодействия зарядов U_0 – величина постоянная, т. е. решается статическая задача.

Расчёт изменения периода кристаллической решётки вследствие повышения температуры основан на учёте изменения энергии связи двух разноимённых зарядов в атомной ячейке кристаллической решётки, т.е. между узлом решётки и электронным облаком в межузловом пространстве.

Энергия электростатической связи двух разноимённых зарядов атома в кристаллической решётке в соответствии с законом Кулона

$$U_0 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \frac{1}{2} a_0}, \quad (3)$$

где e – элементарный заряд, равный заряду электрона; $p = 3,14$; a_0 – период кристаллической решётки; e_0 – электрическая постоянная; $a_0/2$ – расстояние между разно-

имёнными зарядами (узлом кристаллической решётки и электронным облаком).

Тепловая энергия атома при нагреве ячейки монокристалла на величину ΔT определяется как

$$U_T = c_v^1 \Delta T, \quad (4)$$

где c_v^1 – теплоёмкость атома при постоянном объёме. В соответствии с законом Дюлонга и Пти

$$c_v^1 = c_v/N_A = 3k = 4.1421 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}, \quad (5)$$

где N_A – число Авогадро.

Энергия связи двух разноимённых зарядов атома в ячейке кристаллической решётки вследствие нагрева уменьшается на величину

$$\Delta U = U_0 - U_T. \quad (6)$$

Изменение среднего расстояния Dx между зарядами вследствие нагрева кристаллической решётки

$$\Delta x = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \frac{1}{2} \Delta U}. \quad (7)$$

Изменение периода кристаллической решётки вследствие нагрева

$$Da_0 = Dx - a_0/2.$$

После преобразований зависимость изменения периода кристаллической решётки от температуры примет следующий вид [7]:

$$\Delta a_0 = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{\frac{e^2}{a_0} - c_v^1 \Delta T 2pe_0} - a_0 \right). \quad (8)$$

Вследствие периодичности и симметрии бездефектного монокристалла свойства элементарной атомной ячейки передаются кристаллической решётке. Поэтому для атомной ячейки и кристаллической решётки в целом коэффициент теплового расширения определяется как

$$\alpha = \Delta a_0 / (a_0 \Delta T). \quad (9)$$

Необходимо отметить, что изменение периода кристаллической решётки от температуры зависит от силы химической связи.

Расчёт силы химической связи взаимодействия двух атомов выполняется на основе вихревой модели атома. Последовательность расчёта (на примере молекулы водорода) следующая.

Для упрощения расчёта вихревая модель атома (рис.1, а) заменяется механической моделью с сосредоточенными массами протона и электрона (рис.1, б).

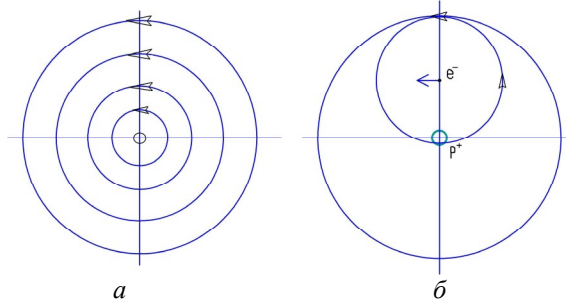


Рис. 1. Модель атома:

а - вихревая; б - со сосредоточенными массами

Из уравнения сохранения энергии, связывающего кинетическую энергию и потенциал ионизации атома водорода $U = 21,7071 \cdot 10^{-19}$ Дж:

$$m_e V_S^2 / 2 = U, \quad (10)$$

определяется средняя суммарная скорость движения электрона по орбите в атоме водорода V_S , которая, в свою очередь, является среднеарифметической орбитальной V_o и вращательной V_e скоростей электрона.

Радиус электрона r_e принимается в соответствии с вихревой моделью атома (рис. 1, а, б), т.е. $r_e = 0,5 r_H$.

Центростремительное ускорение электрона в атоме водорода определяется по формуле

$$a = \frac{V_\Sigma^2}{2(2r_e)}. \quad (11)$$

Центростремительная сила в одном из взаимодействующих атомов водорода

определяется как $F_1 = m_d a$, где m_d , кг – доля взаимодействующей массы атома, показанная на рис.2 в виде заштрихованной области.

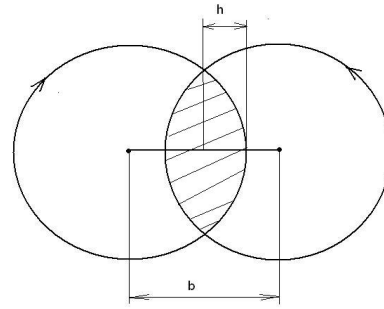


Рис. 2. Схема связи двух атомов

Поскольку плотность принимается постоянной, то доля взаимодействующей массы пропорциональна доле взаимодействующих объёмов. Объём шарового сегмента (заштрихованная область для одного атома) определяется по известным соотношениям из элементарной математики. Причём, $h = r_H - b/2 = 0,136 - 0,074/2 = 0,099$ нм (рис. 2).

Тогда $F_1 = m_d \cdot a = 4,8 \cdot 10^{-9}$ Н.

Справочное значение энергии химической связи молекулы водорода E_H составляет $436 \cdot 10^3$ Дж/моль. Тогда энергия связи одного атома водорода определяется через число Авогадро N_A

$$E^1 = E_H / 2N_A = 362,12 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}, \quad (12)$$

а сила химической связи как $F_2 = E^1 / h = 3,65 \cdot 10^{-9}$ Н. То есть результаты расчёта силы химической связи по вихревой модели атома F_1 имеют расхождение в 31% с силой F_2 , полученной по справочному значению энергии химической связи, что подтверждает адекватность вихревой модели атома.

Таким образом, результаты расчёта a_0 в зависимости от температуры, приведённые в табл. 1 для некоторых металлов, удовлетворительно сходятся с экспериментальными данными (рис.3) работы [5].

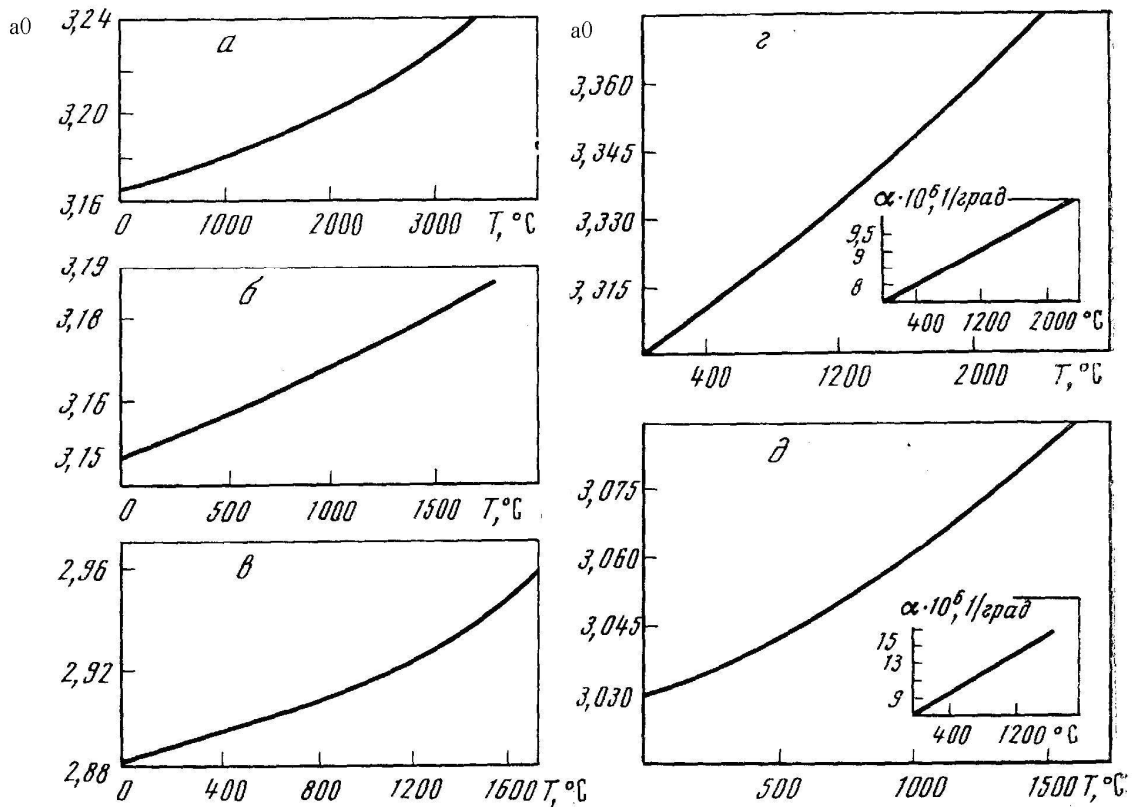


Рис. 3. Экспериментальная зависимость периодов кристаллической решётки от температуры
 а – W; б – Mo; в – Cr; г – Nb; д – V [5]

Таблица 1. Результаты расчёта периода кристаллической решётки

T, °C	Период кристаллической решётки, $a_0 \cdot 10^{10}$ м														
	W			Mo			Cr			Nb			V		
	Рас- чёт	Экспе- ри- мент	Рас- хож- де- ние, %	Рас- чёт	Экпе- ри- мент	Расхо- жде- ние, %	Рас- чёт	Экпе- ри- мент	Рас- хож- де- ние, %	Рас- чёт	Экпе- ри- мент	Рас- хож- де- ние, %	Рас- чёт	Экпе- ри- мент	Рас- хож- де- ние, %
20	3,165	3,165	0	3,147	3,147	0	2,884	2,884	0	3,3002	3,300	0,00	3,0271	3,0271	0
100	3,170	3,166	0,12	3,147	3,149	0,06	2,888	2,885	0,10	3,305	3,303	0,06	3,031	3,032	0,03
200	3,174	3,167	0,22	3,151	3,151	0,15	2,892	2,887	0,17	3,310	3,305	0,15	3,035	3,034	0,03
300	3,179	3,17	0,28	3,156	3,153	0,22	2,895	2,891	0,13	3,315	3,307	0,24	3,040	3,036	0,03
400	3,183	3,171	0,37	3,160	3,155	0,31	2,899	2,894	0,17	3,320	3,310	0,30	3,044	3,039	0,13
500	3,188	3,172	0,50	3,165	3,157	0,41	2,903	2,897	0,20	3,325	3,313	0,36	3,048	3,042	0,16
600	3,193	3,174	0,59	3,170	3,160	0,44	2,907	2,900	0,24	3,330	3,315	0,45	3,052	3,045	0,19
700	3,197	3,175	0,69	3,174	3,162	0,53	2,911	2,904	0,24	3,335	3,318	0,51	3,056	3,048	0,22
800	3,202	3,177	0,78	3,179	3,165	0,56	2,915	2,907	0,27	3,340	3,321	0,57	3,061	3,053	0,26
900	3,207	3,178	0,91	3,183	3,167	0,66	2,918	2,910	0,27	3,345	3,324	0,63	3,065	3,057	0,26
1000	3,211	3,180	0,97	3,188	3,169	0,75	2,922	2,915	0,27	3,351	3,327	0,72	3,069	3,060	0,26
1100	3,216	3,181	1,10	3,193	3,171	0,81	2,926	2,920	0,27	3,356	3,330	0,78	3,074	3,065	0,29
1200	3,221	3,183	1,19	3,197	3,174	0,88	2,930	2,922	0,27	3,361	3,333	0,84	3,078	3,070	0,29
1300	3,226	3,185	1,28	3,202	3,176	0,97	2,934	2,927	0,23	3,366	3,336	0,89	3,083	3,075	0,26
1400	3,231	3,188	1,34	3,207	3,178	1,06	2,938	2,934	0,13	3,372	3,340	0,95	3,087	3,079	0,26
1500	3,236	3,190	1,44	3,212	3,182	1,09	2,942	2,940	0,07	3,377	3,343	1,01	3,091	3,084	0,25
1600		3,192			3,185			2,948			3,347				

Эти результаты могут быть получены для других элементов и их соединений. Они в дальнейшем используются для определения:

- коэффициента теплового расширения [7];
- модуля упругости [8];
- предела упругости [9]

и других характеристик компонентов эвтектических композитов.

В частности, в работе [8] приведены результаты расчёта модуля упругости углеродной нанотрубки (УНТ) и никеля.

Выводы

1. Полученная формула позволяет определять теоретическую зависимость периода кристаллической решётки от температуры и значительно сокращать объём дорогостоящих экспериментов.

2. Результаты расчёта коэффициента теплового расширения армирующей фазы и матрицы эвтектического композита являются исходными данными, в частности, для оценки термических напряжений в материале лопатки турбины.

3. Разработанная методика позволяет использовать её для конструирования новых материалов для лопаток газовых турбин.

Библиографический список

1. Светлов, И. Л. Высокотемпературные Nb-Si композиты – замена монокристаллическим никелевым жаропрочным сплавам [Текст] / И. Л. Светлов // Двигатель. – 2010. – №5. – С.36 – 37.

2. Портной, К. И. Структура и свойства композиционных материалов [Текст] / К. И. Портной, С. Е. Салибеков, И. Л.

Светлов, В. М. Чубаров. – М.: Машиностроение, 1979. – 255 с.

3. Молодцов, Г. А. Применение современных композиционных материалов в самолётостроении. Учебное пособие [Текст] / Г. А. Молодцов. – М.: МАИ, 1984. – 52 с.

4. Васильев, В. В. Основы проектирования и изготовления конструкций летательных аппаратов из композиционных материалов. Учебное пособие [Текст] / В. В. Васильев, А. А. Добряков, А. А. Дудченко, Г. А. Молодцов, Ю. С. Цархов. – М.: МАИ, 1985. – 218 с.

5. Савицкий, Е. М. Монокристаллы тугоплавких и редких металлов и сплавов [Текст] / Е. М. Савицкий, Г. С. Бурханов. – М.: Наука, 1972. – 257 с.

6. Павлов, П. В. Физика твёрдого тела: Учеб.–3-е изд., стер [Текст] / П. В. Павлов, А. Ф. Хохлов. – М.: Высш. шк., 2000. – 494 с.

7. Бадамшин, И. Х. Расчёт упругих и теплофизических характеристик металлов и их тугоплавких соединений для оценки остаточных термических напряжений в эвтектических композитах и теплозащитных покрытиях [Текст] / И. Х. Бадамшин // Тяжёлое машиностроение. – 2007. – № 4. – С.33 – 34.

8. Бадамшин, И. Х. Моделирование упругих характеристик нанокompозитов и нанотрубок [Текст] / И. Х. Бадамшин // Композиты и наноструктуры. – 2011. – №1. – С. 18–23.

9. Бадамшин, И. Х. Расчёт упругих, прочностных и теплофизических характеристик монокристаллических сплавов и нанокompозитов, предназначенных для лопаток газовых турбин [Текст] / И. Х. Бадамшин // Авиадвигатели XXI века [Электронный ресурс]: материалы конф.- Электрон. дан.- М.:ЦИАМ, 2010. – 1696 с.

THEORETICAL ASSESSMENT OF THE INFLUENCE OF TEMPERATURE ON LATTICE SPACING OF AIRCRAFT GAS-TURBINE ENGINE TURBINE MONOCRYSTALS

© 2012 I. Kh. Badamshin

Ufa State Aviation Technical University

The possibility of theoretical assessment of monocrystal lattice spacing dependence on temperature is shown. The formula of the dependence is derived. Satisfactory agreement with the results of experiments is obtained. The thermal expansion factor and the modulus of elasticity of eutectic composite components are determined on the basis of the formula derived.

Eutectic composite, monocrystal, lattice spacing, thermal expansion factor, modulus of elasticity.

Информация об авторе

Бадамшин Ильдар Хайдарович, доктор технических наук, доцент, профессор кафедры авиационных двигателей, Уфимский государственный авиационный технический университет. E-mail: adbadamshin@ugatu.ac.ru. Область научных интересов: испытания и прочность авиационных ГТД.

Badamshin Ildar Khaidarovich, doctor of technical sciences, associate professor, professor of aircraft engines department, Ufa State Aviation Technical University. E-mail: adbadamshin@ugatu.ac.ru. Area of research: testing and strength analysis of aircraft engines.