

Голиков Павел Андреевич

**РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ УГЛЕРОДА
В СТАЛЯХ И ЕГО ПРИЛОЖЕНИЕ В МОДЕЛИРОВАНИИ
ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И НАУГЛЕРОЖИВАНИЯ**

Специальности:

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

05.16.01 – Металловедение и термическая обработка металлов
и сплавов

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2011

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
доцент
Васильев Александр Александрович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
профессор
Клявин Олег Владимирович

кандидат технических наук,
доцент
Кисленков Владимир Васильевич

Ведущая организация: ФГУП ЦНИИКМ «ПРОМЕТЕЙ»

Защита состоится «21» марта 2012 г. в 16.00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.229.05 при ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет» по адресу: 195251, СПб, Политехническая ул., д.29, второй учебный корпус, ауд.265.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет».

Автореферат разослан « 09 » февраля 2012 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.229.05
к.ф.-м.н., доцент

Воробьева Т.В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы

Кинетика ряда практически важных фазовых превращений в сталях в значительной степени определяется диффузионной подвижностью атомов углерода в объеме аустенита. К числу таких превращений относятся ферритное, перлитное и, до некоторой степени, бейнитное превращения, происходящие при непрерывном охлаждении аустенита, которое является важным этапом многих промышленно реализуемых технологий. Распад феррито-перлитных структур с образованием аустенита, происходящий при нагреве сталей, является еще одним примером превращения, кинетика которого также контролируется объемной диффузией углерода в аустените. Кроме перечисленных фазовых превращений скорость диффузии углерода в аустените – это один из основных факторов, определяющих кинетику формирования поверхностного науглероженного слоя при цементации сталей. В связи с большой практической значимостью перечисленных превращений и процессов коэффициент диффузии углерода (КДУ) в аустените, который является количественной характеристикой его подвижности, служил и продолжает служить предметом экспериментальных и теоретических исследований.

Диффузионная подвижность углерода в феррите/мартенсите также является важным параметром, определяющим развитие таких практически значимых процессов как, например, отпуск бейнито-мартенситных структур и деформационное старение автомобильных ВН-сталей (**ВН – Bake Hardening**).

Известно, что КДУ в аустените и феррите существенно зависят как от концентрации углерода (случай аустенита), так и концентрации легирующих элементов замещения (ЛЭЗ). Однако эффекты, обусловленные ЛЭЗ, до настоящего времени не получили удовлетворительного количественного описания.

На основании изложенного можно заключить, что **тема данной диссертации**, посвященной разработке количественных моделей для расчета КДУ в аустените и феррите и их приложению к моделированию фазовых превращений и науглероживания современных сталей, **является актуальной.**

Целью работы является создание количественных моделей для расчета КДУ в аустените и феррите и их приложение к моделированию фазовых превращений и науглероживания современных сталей. Для достижения указанной цели в диссертации поставлены и решены следующие **задачи**:

1. Разработаны количественные модели для расчета КДУ в аустените и феррите с учетом влияния концентрации углерода и таких практически важных ЛЭЗ как Mn; Si; Cr; Mo; W; Ni; Co.
2. Разработана математическая модель для описания аустенитного превращения в сталях, базирующаяся на предложенном методе расчета КДУ в легированном аустените, с использованием которой проанализированы эффекты ЛЭЗ на кинетику этого превращения.
3. С помощью математической модели распада аустенита с образованием феррита и перлита, проанализированы эффекты ЛЭЗ на кинетику распада, обусловленные их влиянием на диффузионную подвижность углерода в аустените.
4. Разработана компьютерная программа, позволяющая проводить расчеты КДУ в аустените в зависимости от температуры и его химического состава, а также определять значения параметров универсальной формулы для вычисления этого коэффициента по заданному составу стали.
5. Создан программный модуль, использование которого в совокупности с программным пакетом SimCarb позволяет проводить расчеты профилей науглероживания современных сталей, формирующихся при их газовой цементации.

Научная новизна диссертации состоит в:

1. Разработке новых физически обоснованных моделей для расчета КДУ в аустените и феррите с учетом их химического состава, которые по точности превосходят существующие в настоящее время аналоги.
2. Разработке новой математической модели для описания кинетики аустенитного превращения в сталях, базирующейся на предложенном методе расчета КДУ в легированном аустените.

3. Проведении количественного анализа влияния легирования элементами замещения на кинетику фазовых превращений в сталях и их науглероживания из газовой фазы, показывающего необходимость учета эффектов ЛЭЗ на КДУ в аустените при построении соответствующих математических моделей.

Практическая значимость полученных результатов определяется:

1. Разработкой компьютерной программы CarbDiff, позволяющей на базе предложенной математической модели проводить расчеты КДУ в сложнолегированном аустените и определять значения параметров универсальной формулы для вычисления этого коэффициента по заданному составу стали.
2. Практическим использованием предложенного метода расчета КДУ при модернизации микроструктурных модулей интегральной модели горячей прокатки HSMM (**Hot Strip Mill Model**), позволившей значительно повысить точность расчета конечных механических свойств сталей сортамента стана 2000 ОАО «Северсталь».
3. Созданием программного модуля SimCarb-Diffusivity, использование которого, в совокупности с программным пакетом SimCarb, позволяет проводить расчеты профилей науглероживания современных сталей при газовой цементации с учетом эффектов их сложного легирования.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Физически обоснованные математические модели для расчета КДУ в сложнолегированном аустените и феррите, которые по точности превосходят существующие в настоящее время аналоги.
2. Математическая модель для описания кинетики аустенитного превращения в сталях, базирующаяся на предложенном методе расчета КДУ в легированном аустените.
3. Результаты количественного анализа влияния легирования элементами замещения на кинетику фазовых превращений в сталях и их науглероживания из газовой фазы, которые показывают необходимость учета эффектов ЛЭЗ на КДУ в

аустените при построении соответствующих математических моделей.

4. Компьютерная программа CarbDiff, позволяющая проводить расчеты КДУ в аустените в зависимости от температуры и его химического состава, а также определять значения параметров универсальной формулы для вычисления этого коэффициента по заданному составу стали.
5. Программный модуль SimCarb-Diffusivity, использование которого в совокупности с программным пакетом SimCarb позволяет рассчитывать профили науглероживания современных сложнолегированных сталей, формирующиеся при их газовой цементации.

Достоверность результатов. Достоверность результатов, полученных в работе, обеспечивается корректным применением физически обоснованных подходов к построению математических моделей исследуемых процессов; тщательным отбором достоверных экспериментальных данных, использованных при калибровке математических моделей; количественным согласием результатов расчетов с совокупностью существующих экспериментальных данных.

Личный вклад соискателя. Автор участвовал в постановке задач исследования и создании математических моделей, самостоятельно разработал и реализовал процедуры калибровки моделей для расчета КДУ в аустените и феррите, разработал компьютерную программу CarbDiff для вычисления КДУ в сложнолегированном аустените.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, основных результатов и выводов, списка литературы из 111 наименований и 2 приложений. Работа изложена на 176 страницах, содержит 58 рисунок и 16 таблиц.

Апробация результатов работы. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на Всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов «XXXV Неделя Науки СПбГПУ» (СПбГПУ, 20-25 ноября, 2006, СПб); Международной конференции «The International Society for Optics and Photonics» (SPIE'06, 19-25 июня 2006, Ольштын,

Польша); X международном семинаре «New Approaches to High-Tech: Nondestructive Testing and Computer Simulations in Science and Engineering» (NDTCS'06, 5-8 июля 2006, Ольштын, Польша); Всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов «XXXVI Неделя Науки СПбГПУ» (СПбГПУ, 26-30 ноября 2007, СПб); XIX уральской школе металловедов-термистов «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов» (4-8 февраля 2008, Екатеринбург); XX уральской школе материаловедов-термистов «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов» (1-5 февраля 2010, Пермь); международной конференции «Materials Science and Engineering 2010» (MSE'10, 24-26 августа 2010, Дармштадт, Германия).

Публикации. По теме диссертации опубликовано 9 печатных работ, 2 из которых – в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ, и получено 1 свидетельство государственной регистрации программы для ЭВМ.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении дано обоснование актуальности работы, кратко изложено содержание диссертации; сформулированы ее цель и задачи, научная новизна, практическая значимость и основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлен обзор экспериментальных исследований диффузии углерода в аустените и феррите, который показывает, что ЛЭЗ существенным образом влияют на диффузионную подвижность углерода в этих фазах. При этом наблюдаемые эффекты ЛЭЗ в значительной степени обусловлены изменением эффективной энергии активации диффузии углерода. Отмечен сложный характер влияния легирования Si на диффузию углерода в аустените: при температурах $\geq 1000^\circ\text{C}$ легирование этим элементом приводит к снижению КДУ, а при температурах $\leq 950^\circ\text{C}$, напротив, к его значительному повышению.

Проведен обзор существующих моделей для расчета КДУ в аустените и феррите, на основании которого сделан вывод, что эффекты ЛЭЗ до настоящего времени не получили адекватного количественного описания. Дан краткий анализ использования КДУ в

аустените при моделировании процессов фазовых превращений в сталях и их науглероживания.

На основании сделанных выводов сформулированы задачи исследования.

Вторая глава посвящена изложению физически обоснованной количественной модели для расчета КДУ в сложнoleгированном аустените. Существенной особенностью разработанной модели является учет эффекта не только концентрации углерода, но и практически важных ЛЭЗ.

Аналитическое выражение для КДУ в легированном аустените получено в два этапа. Сначала, на основе микроскопического рассмотрения диффузии углерода с использованием метода средних энергий¹⁾ получена формула для двухкомпонентного аустенита Fe-C. После чего, результат обобщен для аустенита Fe-C-X и КДУ, $D_C(T; y_C; y_X)$, представлен в виде:

$$D_C(T; y_C; y_X) = D_{C0} \left(1 - y_C(1 - y_C) \frac{2((1 - y_X)L_{Cva}^{Fe}(T) + y_X L_{Cva}^X(T))}{RT} \right) \times \exp\left(\frac{\theta(\Delta U_C(y_C) + \alpha_X y_X + \gamma_X y_X y_C)}{R}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_C(y_C) + \alpha_X y_X + \gamma_X y_X y_C}{RT}\right). \quad (1)$$

где $y_C; y_X$ – концентрации углерода и легирующего элемента замещения X (доли заполнения узлов соответствующих подрешеток); $\Delta U_C(y_C) = \Delta U_{C0} + \alpha_C y_C$ – эффективный барьер активации миграции углерода в сплаве Fe-C; $L_{Cva}^X(T)$ – термодинамические параметры; $D_{C0}; \Delta U_{C0}; \alpha_C; \theta; \alpha_X; \gamma_X$ – эмпирические параметры модели.

Калибровка модели, т.е. определение набора численных значений ее эмпирических параметров, была проведена на основании результатов систематического экспериментального исследования температурно-концентрационных зависимостей КДУ в бинарных Fe-C²⁾ и тройных Fe-C-X³⁾ сплавах (X = Mn; Si; Al; Mo; W; Cr; Ni; Co).

¹⁾ Смирнов А.А. Теория диффузии в сплавах внедрения [Текст] / А.А. Смирнов. – К.: Наукова Думка 1982. – 168 с.

²⁾ Wells C. Diffusion Coefficient of Carbon in Austenite [Text] / C. Wells, W. Betz, R.F Mehl // Trans. Met. Soc. AIME. – 1950. – V. 188. – P. 553-560.

³⁾ Блантер М.Е. Фазовые превращения при термической обработке сталей [Текст] / М.Е. Блантер. – М.: ГНТИЛ по черн. и цвет. металлургии, 1962. – 268с.

На рис.1 представлены результаты расчета КДУ в аустените Fe-C, полученные с использованием разработанной модели и модели J. Ågren⁴, широко используемой до настоящего времени. Приведенные результаты показывают, что разработанная модель/формула обеспечивает заметно более хорошее согласие с экспериментальными данными, чем формула J. Ågren.

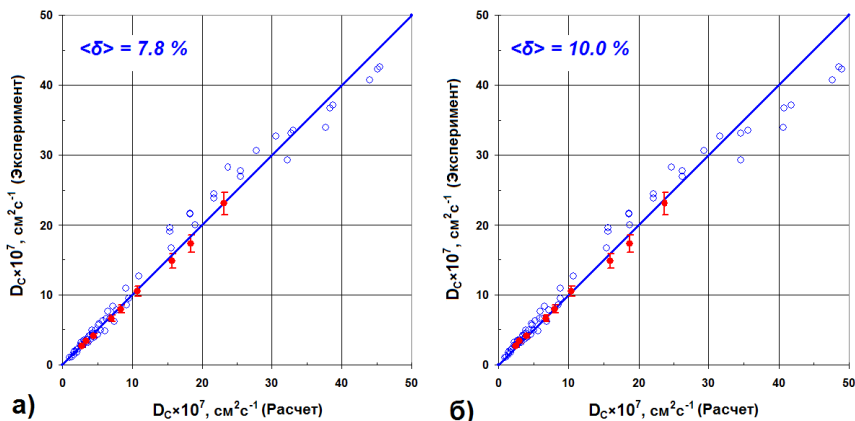


Рис. 1. Результаты расчета КДУ в сравнении с экспериментальными данными для сплавов Fe-C (температуры 800÷1305°C; концентрации углерода 0.02÷1.35 масс.%) : \circ – данные работы²; \bullet – данные работы⁵.

а) разработанная модель; **б)** модель J. Ågren. $\langle \delta \rangle$ – среднее значение абсолютной величины относительной погрешности. «Усы» соответствуют относительной экспериментальной ошибке $\pm 7\%$ от измеряемой величины.

Модель количественно описывает как эффект замедления диффузии углерода, вызываемый карбидообразующими элементами, которые снижают его активность в аустените (Cr; W; Mo, в меньшей степени Mn; Al), так и эффект ее ускорения, при легировании элементами, повышающими активность углерода (Co; Ni). При этом для всех тройных сплавов Fe-C-X, данные для которых использованы при калибровке модели, расхождение ее предсказаний с экспериментом³ не превышает ошибку определения экспериментальных значений КДУ ($\sim 7\%$).

⁴) Ågren J. A Revised Expression for the Diffusivity of Carbon in Binary Fe-C Austenite [Text] / J. Ågren // Scripta Metall. – 1986. – V. 20. – P. 1507-1510.

⁵) Блантер М.Е. Диффузия углерода в аустените [Текст] / М.Е. Блантер // ЖТФ. – 1947. – Т. 17. – С. 1331-1339.

В предположении аддитивности влияния ЛЭЗ на термодинамический фактор и на эффективную энергию активации диффузии углерода, формула (1) для КДУ в тройном сплаве Fe-C-X обобщена на случай многокомпонентного сплава Fe-C-X-...-Z, содержащего набор X, ..., Z ЛЭЗ:

$$D_c(T; y_c; y_x; \dots; y_z) = D_{c0} \left(1 - y_c(1 - y_c) \frac{2 \left((1 - \sum_{s=X}^Z y_s) L_{cv_a}^{Fe}(T) + \sum_{s=X}^Z y_s L_{cv_a}^s(T) \right)}{RT} \right) \times \exp \left(\frac{\theta \left(\Delta U_c(y_c) + \sum_{s=X}^Z \alpha_s y_s + y_c \sum_{s=X}^Z \gamma_s y_s \right)}{R} \right) \exp \left(- \frac{\Delta U_c(y_c) + \sum_{s=X}^Z \alpha_s y_s + y_c \sum_{s=X}^Z \gamma_s y_s}{RT} \right). \quad (2)$$

Проверка предсказательной способности модели (формула (2)) в случае сложнелегированного аустенита была проведена с использованием соответствующих экспериментальных данных.

На рис.2а представлены расчетные кривые и экспериментальные данные по изменению КДУ в зависимости от концентрации углерода, полученные для стали 8620 (0.21C-0.83Mn-0.25Si-0.65Ni-0.57Cr-0.16Mo)⁶. Видно, что во всем диапазоне изменения концентрации углерода для всех исследованных температур модель дает систематически заниженные значения по сравнению с экспериментом. Поиск причин наблюдаемого расхождения теории и эксперимента привел к заключению, что оно связано с ускоряющим эффектом Si, имеющим место при температурах ниже 1000°C⁷. В тоже время при расчетах КДУ (рис.2а) был использован набор значений параметров $\alpha_{Si}; \gamma_{Si}$ (**Si**↓), соответствующий противоположному эффекту, наблюдаемому при температурах выше 1000°C³. В связи с этим обсуждаемые экспериментальные данные⁶ были использованы для нахождения нового набора значений $\alpha_{Si}; \gamma_{Si}$ (**Si**↑), обеспечивающих эффект ускорения диффузии углерода при легировании Si.

⁶ Rowan O.K. Effect of Alloy Composition on Carburizing Performance of Steel [Text] / O.K. Rowan, R.D. Sisson // J. Phase Equilibria and Diffusion. – 2009. – V. 30. – No.3. – P. 235-241.

⁷ Кристал М.А. Диффузионные процессы в железных сплавах [Текст] / М.А. Кристал. – М.: Металлургиздат, 1963. – 280с.

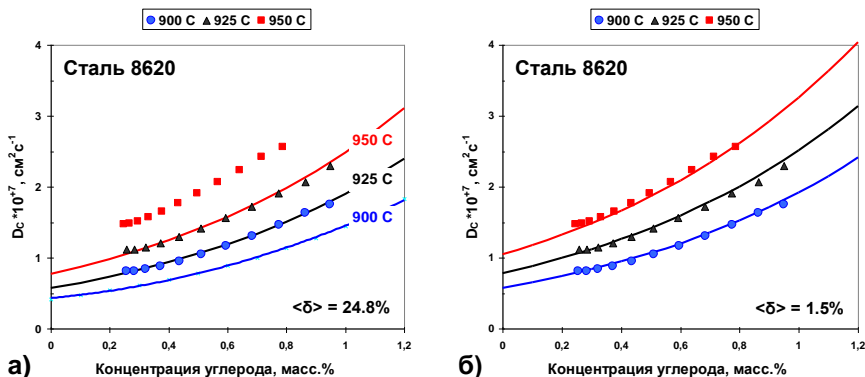


Рис. 2. Сравнение результатов расчета КДУ с экспериментальными данными для стали 8620. Расчеты выполнены с параметрами, соответствующими: а) замедляющему эффекту кремния; б) ускоряющему эффекту кремния.

Из рис.2б видно, что найденный «ускоряющий» набор обеспечивает отличное согласие с данными эксперимента. Использование этого набора параметров для Si позволяет получить хорошее согласие с экспериментом для других комплексно легированных сталей. Отметим, что разработанная модель превосходит по точности расчета КДУ все опубликованные на данный момент альтернативные модели как для бинарных Fe-C, так и тройных Fe-C-X сплавов.

Модель для низколегированных сплавов, была модифицирована и расширена на аустенитные сплавы с высоким содержанием Cr и Ni (≥ 7 масс.%). Значения дополнительных эмпирических параметров, которые потребовалось ввести для учета влияния парных и тройных взаимодействий легирующих элементов (C; Cr; Ni) на эффективную энергию активации диффузии углерода в таких сплавах, были определены на основе набора экспериментальных данных для сплавов Fe-7Cr-C, Fe-17Cr-12Ni и стали 316SS⁸⁾, полученных в широком интервале температур.

Учитывая обсуждаемую в диссертации неоднозначность эффекта легирования Si на диффузионную подвижность углерода важно отметить, что хорошее количественное согласие с данными эксперимента для стали 316SS⁸⁾, содержащей 1%Si, удается получить только, полагая, что Si ее повышает. Этот момент дополнительно

⁸⁾ Agarwala R.P. Diffusion of Carbon in Stainless Steel [Text] / R.P. Agarwala, M.S. Naik, M.S. Anand, A.R. Paul // J. Nucl. Mater. – 1970. – V. 36. – P. 41-47.

подтверждает, что при достаточно низких температурах Si оказывает ускоряющий эффект на диффузию углерода в аустените.

На основании разработанной модели создана компьютерная программа CarbDiff, позволяющая проводить расчеты КДУ в аустените в зависимости от температуры и его химического состава, а также определять значения параметров универсальной формулы для вычисления этого коэффициента по заданному составу стали.

Третья глава посвящена описанию разработанной модели для расчета КДУ в легированном феррите. Аналогично подходу, использованному в случае аустенита, аналитическое выражение для КДУ получено в два этапа. Сначала, с использованием метода средних энергий получена соответствующая формула для феррита Fe-C, которая затем была обобщена для феррита Fe-C-X. С учетом низкой равновесной концентрации углерода в феррите данную формулу можно представить в виде:

$$D_c(T; y_x) = D_{C_0}^\alpha \exp\left(\frac{\beta(\Delta U_{C_0}^\alpha + \alpha_x^\alpha y_x)}{R}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_{C_0}^\alpha + \alpha_x^\alpha y_x}{RT}\right), \quad (3)$$

где $\Delta U_c(y_x) = \Delta U_{C_0}^\alpha + \alpha_x^\alpha y_x$ – эффективный барьер активации миграции углерода в сплаве Fe-X; $D_{C_0}^\alpha$; $\Delta U_{C_0}^\alpha$; β ; α_x^α – эмпирические параметры модели, значения которых были определены с использованием соответствующих экспериментальных данных.

Сначала были найдены значения параметров для чистого феррита (α – Fe). Решение соответствующей оптимизационной задачи выполнено на базе опорного набора экспериментальных данных для КДУ в интервале температур 200÷750° С. В результате получено:

$$D_{C_0}^\alpha = 0.0013 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}; \Delta U_{C_0}^\alpha = 83.38 \text{ кДж/моль}; \beta = 0.00026 \text{ К}^{-1}.$$

На втором этапе обсуждаемой процедуры были найдены параметры α_x^α , определяющие зависимость КДУ в легированном феррите от содержания ЛЭЗ. Значения этих параметров для таких элементов, как Si, Ni, Mo и Cr определены на основании данных экспериментального исследования диффузии углерода в ферритных сплавах различного состава, выполненного методом меченых атомов.

Результаты расчета КДУ для сплавов Fe-X (X = Si, Ni, Mo, Cr) хорошо согласуются с экспериментом⁹⁾ (рис.3а).

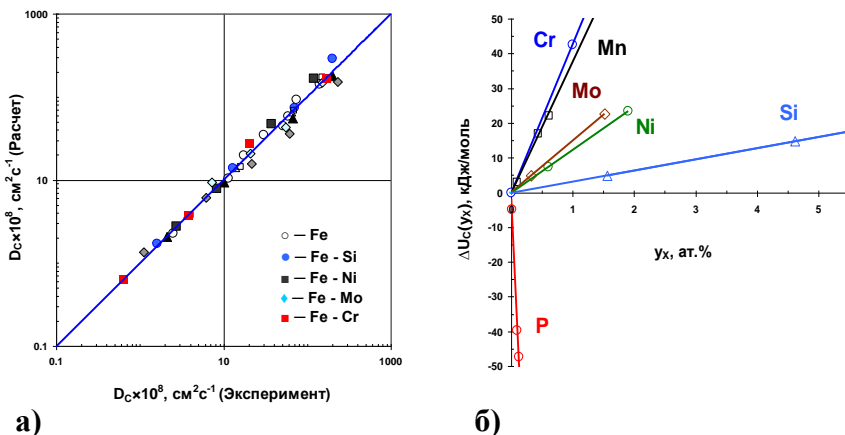


Рис. 3. Результаты расчета КДУ в сравнении с экспериментальными данными для феррита и сплавов Fe-X (X = Si, Ni, Mo, Cr) **(а)** и зависимости приращения энергии активации диффузии углерода от концентрации легирующего элемента **(б)**.

Значения параметров α_X^α для Mn и P были найдены в результате количественного анализа данных экспериментального исследования кинетики деформационного старения низкоуглеродистых автомобильных ВН-сталей. Проведенный анализ показал, что Mn оказывает замедляющий, а P, напротив, сильный ускоряющий эффект на диффузию углерода в феррите, обусловленный снижением ее энергии активации с ростом содержания P (рис.3б). При этом относительная интенсивность эффекта, оказываемого P, более чем на порядок превышает соответствующую интенсивность для Mn, который, аналогично всем ранее рассмотренным ЛЭЗ, повышает энергию активации диффузии углерода. Данный результат коррелирует с тем, что P, внося сильные локальные искажения в кристаллическую решетку феррита (растяжение), имеет максимально высокий (среди элементов замещения) коэффициент его

⁹⁾ Грузин П.Л. Изучение подвижности атомов углерода в стали и сплавах при помощи изотопа C14 [Текст] / П.Л. Грузин, Ю.Ф. Бабикова, Е.В. Борисов и др. // В сб.: Проблемы металловедения и физики металлов. М.: Metallurgizdat, 1958. – С. 327-365.

твердорастворного упрочнения. Это позволяет считать, что аномально сильный эффект Р в твердом растворе, оказываемый на эффективную энергию активации диффузии углерода, связан с его взаимодействием с полями упругих искажений, создаваемыми атомами этого элемента в феррите.

С использованием найденной зависимости энергии активации диффузии углерода в феррите от содержания Mn и P получена представляющая практический интерес эмпирическая формула для предсказания времени возврата площадки текучести при естественном деформационном старении автомобильных ВН-сталей, легированных этими элементами.

Четвертая глава содержит описание кинетической модели $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения, способной учитывать как параметры микроструктуры стали, так и условия ее обработки. Важно отметить, что разработанная модель базируется на развитом в диссертации подходе к расчету КДУ в легированном аустените, который является определяющим кинетическим параметром данного процесса.

Для построения модели $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения рассмотрен вариант роста кристалла аустенита, зародившегося на изолированной частице цементита, в зерне феррита. Поскольку диффузионная подвижность углерода в феррите на два-три порядка выше, чем в аустените, то скорость роста слоя определяется диффузией углерода в аустените на участке от границы с цементитом до противоположной границы с ферритом. В рамках предположения, что в данной области градиент концентрации углерода постоянен, использование первого закона Фика и условий баланса потока углерода на γ/θ - и γ/α - границах позволяет получить уравнение для скорости роста слоя аустенита, G :

$$G = \bar{D}_C \left(\frac{1}{C_\theta - C_{\gamma\alpha}} + \frac{1}{C_{\gamma\alpha} - C_\alpha} \right) \frac{C_{\gamma\theta} - C_{\gamma\alpha}}{X_\gamma}, \quad (4)$$

здесь C_θ и C_α – равновесные концентрации углерода в цементите и феррите; $C_{\gamma\theta}$ и $C_{\gamma\alpha}$ – соответствующие граничные концентрации углерода; X_γ – толщина слоя аустенита; \bar{D}_C – эффективный КДУ в аустенитном слое, значение которого вычисляли для средней концентрации углерода: $\bar{C} = (C_{\gamma\theta} + C_{\gamma\alpha})/2$. Для выражения (4) показано, что среднее относительное отклонение результатов расчета

изменения толщины аустенитного слоя от соответствующих экспериментальных значений не превышает 7%.

Предложенная модель может быть применена для описания роста аустенитного слоя в условиях высокого перегрева ($T > A_{e3}$), когда большая движущая сила обеспечивает множественное зарождение аустенита на поверхности цементитных пластин и их рост внутри ферритных слоев. Однако в межкритическом интервале температур зарождение аустенита происходит, как показывает эксперимент, преимущественно на границах между зернами феррита и колониями перлита (можно предположить, что предпочтительными местами зарождения в этом случае являются разупорядоченные участки α/θ -границ в местах обрыва цементитных пластин на границе с проэвтектоидным ферритом). Затем, зародившаяся частица аустенита растет внутрь перлитной области. Таким образом, происходит рост аустенита от его границы между перлитом и ферритом в сторону перлита. При этом из условия баланса потока углерода на γ/θ - и γ/α - границах получены следующие выражения для оценки скоростей перемещения этих границ:

$$G_{\gamma/\theta} = \frac{2\bar{D}_C}{\lambda} \frac{C_{\gamma\theta} - C_{\gamma\alpha}}{C_\theta - \bar{C}}, \quad G_{\gamma/\alpha} = \frac{2\bar{D}_C}{\lambda} \frac{C_{\gamma\theta} - C_{\gamma\alpha}}{\bar{C}_\gamma - C_\alpha}, \quad (5)$$

где λ – межпластинчатый интервал в перлите.

Количество перлитных колоний в единице объема можно оценить как $N_G \approx L_p^{-3}$, где L_p – среднее расстояние между перлитными областями. Учитывая особенности образования перлита на поздней стадии распада аустенита в феррито-перлитной стали, принято: $L_p \approx 2d_\alpha$ (здесь d_α – средний размер ферритного зерна в направлении роста аустенитного слоя). Таким образом, если аустенитный слой растет от одной из границ перлитной колонии (среднюю площадь которой можно оценить как $S \approx d_p^2$, где d_p – средний размер колонии), приращение объемной доли γ -фазы V_γ , образовавшейся в перлите, равно:

$$dV_\gamma = (V_{max} - V_\gamma) N_G S G dt = (V_{max} - V_\gamma) \frac{d_p^2}{(2d_\alpha)^3} G dt, \quad (6)$$

где V_{max} – объемная доля перлита в исходной феррито-перлитной микроструктуре. Предложенные выражения (5), (6) для описания роста аустенита в перлите верифицированы с помощью надежных экспериментальных данных.

При моделировании общей кинетики $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения учитывалась следующая стадийность: 1) зарождение кристаллов аустенита на границе между ферритными зёрнами и перлитными колониями; 2) рост данных кристаллов сквозь перлитные колонии, в которых они зародились; при этом, скорость роста аустенита определяется скоростью растворения цементита по уравнению (5); 3) превращение начинается в соседних зёрнах феррита, скорость роста аустенита в ферритной матрице, в первом приближении, определяется согласно уравнению (4); 4) процесс роста прекращается при достижении равновесной доли γ -фазы при данной температуре. Предложенная модель общей кинетики $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения калибрована на представительной базе экспериментальных данных. На рис.4 приведен пример моделирования роста объемной доли аустенита в феррито-перлитной стали 0.14C-1.62Mn-0.42Si¹⁰⁾.

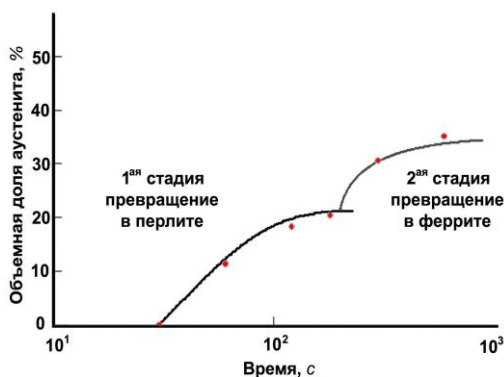


Рис. 4. Рост объемной доли аустенита при температуре 740°C.

Экспериментальные данные показаны точками, а результаты моделирования с учетом стадийности $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения – кривыми.

С помощью предложенной модели общей кинетики $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения проведен количественный анализ степени влияния

¹⁰⁾ Souza M.M. Intercritical Austenization of Two Fe-Mn-C Steels [Text] / M.M. Souza, J.R.C. Guimaraes, K.K. Chawla // Metall. Trans. A. – 1982. – V. 13. – P. 575-579.

легирующих элементов на кинетику роста аустенита. Отчетливо показана важность учета влияния ЛЭЗ на диффузию углерода при моделировании аустенитизации. Так, например, без учета влияния Cr на диффузию углерода модель предсказывает ускорение процесса при легировании этим элементом (за счет влияния на характерные концентрации углерода C_0 ; C_a ; $C_{\gamma 0}$; $C_{\gamma a}$, от которых зависит скорость роста аустенитного слоя) (рис.5а). В то время как учет влияния Cr, замедляющего диффузию углерода, приводит к существенному снижению скорости аустенитизации по сравнению с бинарным сплавом Fe-C (рис.5б). Противоположная ситуация имеет место для Si (рис.5).

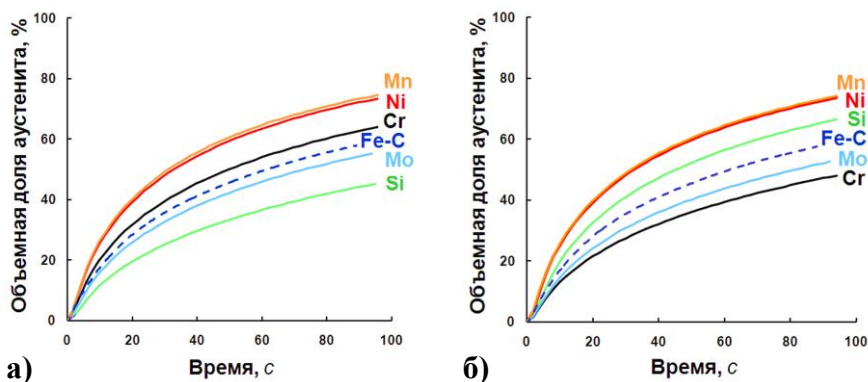


Рис. 5. Результаты моделирования эффекта легирования 1 масс.% элемента замещения X (X = Cr; Mo; Mn; Ni; Si) на кинетику аустенитизации сплавов Fe-C-X при 780°C ($C = 0.1$ масс.%). Штриховая кривая соответствует бинарному сплаву Fe-C. **а)** без учета влияния ЛЭЗ на коэффициент диффузии углерода \bar{D}_C ; **б)** с полным учетом эффекта ЛЭЗ.

Хорошее количественное согласие с экспериментом, полученное с использованием разработанной модели $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения, адекватно учитывающей эффекты ЛЭЗ, показывает, что данную модель можно использовать для проведения количественных оценок в случае сталей сложного состава.

С помощью программы AusTran проведены расчеты кинетики распада аустенита и размера зерна феррита для сталей разного химического состава. Полученные данные демонстрируют, что способ

расчета КДУ в аустените существенным образом сказывается на результатах моделирования.

В пятой главе представлено описание модуля SimCarb-Diffusivity, созданного совместно с разработчиками программного пакета SimCarb¹¹⁾ для проведения расчетов профилей науглероживания современных сталей с учетом влияния ЛЭЗ. С помощью данного модуля и программы SimCarb проведен анализ эффекта комплексного легирования сталей элементами замещения на процесс их науглероживания. Сравнение рассчитанных профилей науглероживания для ряда сталей свидетельствует о существенном влиянии ЛЭЗ на скорость процесса (рис.6а). Согласно полученным результатам, эффективная глубина науглероженного слоя ($cd_{0.35}$) для сталей различного состава отличается в 2 и более раз (рис.6а). При этом наиболее сильный замедляющий эффект оказывают Cr и молибден, а ускоряющий – Si.

Следует отметить, что даже вариации содержания ЛЭЗ в пределах марочных границ существенно влияют на результат цементации. Такие вариации могут приводить к изменениям величины $cd_{0.35}$, превышающим допустимое отклонение (± 0.1 мм) от значения, которое обеспечивается режимом науглероживания, оптимальным в случае стали среднemarочного состава. Поэтому обсуждаемые отклонения фактического состава сталей необходимо учитывать на практике для обеспечения стабильного достижения оптимального результата и, соответственно, требуемого качества изделий. Данный вывод подтверждается результатами расчетов, выполненных для двух практически важных марок стали: 17Cr3 и 18NiCrMo14-6. Расчеты проведены для среднemarочного состава, а также для «ускоряющего» и «замедляющего» составов. В качестве «ускоряющих» выбраны составы, для которых содержание элементов, замедляющих диффузию углерода (Cr, Mo, Mn), соответствует нижней границе, допускаемой марочной спецификацией, а содержание Ni, ускоряющего его диффузию – верхней границе. Для «замедляющих» составов

¹¹⁾ Gegner J. SimCarb – A Powerful Windows Expert Software for Computer-aided Case Hardening Part 1: Nominal/Actual Value Comparison, Process Analysis, Fundamentals, Modeling and Simulation [Text] / J. Gegner // Haerterei-Technische Mitteilungen. – 2009. – V. 64. – No.1. – P. 53-62.

соответствующие концентрации выбраны по противоположному принципу.

На основании полученных данных по моделированию эффекта ЛЭЗ на профили концентрации углерода с помощью программы SimCarb были сделаны оценки изменения твердости поверхностного слоя сталей 17Cr3 и 18NiCrMo14-6 (рис.6б).

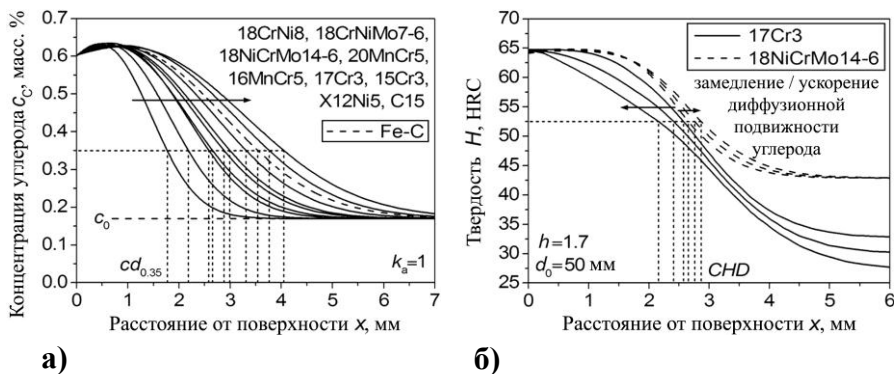


Рис. 6. Результаты моделирования: **а)** профилей науглероживания для сталей 18CrNi8; 18CrNiMo7-6; 18NiCrMo14-6; 20MnCr5; 16MnCr5; 17Cr3; 15Cr3; X12Ni5; C15 (порядок следования соответствующих профилей указан стрелкой); **б)** изменения твердости поверхностного слоя сталей 17Cr3 и 18NiCrMo14-6 в результате вариации их состава в марочных пределах.

Практическая значимость обсуждаемых эффектов ЛЭЗ требует их дополнительной проверки путем сравнения предсказываемых и экспериментально определенных профилей концентрации углерода.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработаны количественные модели для расчета КДУ в аустените и феррите с учетом влияния концентрации углерода и таких практически важных ЛЭЗ как Mn; Si; Cr; Mo; W; Ni; Co.
2. Разработана математическая модель для описания аустенитного превращения в сталях, базирующаяся на предложенном методе расчета КДУ в легированном аустените,

с использованием которой проанализированы эффекты ЛЭЗ на кинетику этого превращения.

3. С использованием математической модели распада аустенита с образованием феррита и перлита, проанализированы эффекты ЛЭЗ на кинетику распада, обусловленные их влиянием на диффузионную подвижность углерода в аустените.
4. Разработана компьютерная программа, позволяющая проводить расчеты КДУ в аустените в зависимости от температуры и его химического состава, а также определять значения параметров универсальной формулы для вычисления этого коэффициента по заданному составу стали.
5. Создан программный модуль SimCarb-Diffusivity, использование которого в совокупности с программным пакетом SimCarb позволяет проводить расчеты профилей науглероживания современных сталей, формирующихся при их газовой цементации.

В качестве основного вывода можно отметить, что полученные результаты свидетельствуют о важности учета эффектов ЛЭЗ на КДУ в аустените при создании количественных моделей фазовых превращений в современных сталях. Разработанная в диссертации модель для расчета КДУ создает основу для адекватного учета эффекта комплексного легирования сталей на этот важный кинетических параметр указанных превращений.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНЫ В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ:

1. **Голиков П.А.** Моделирование кинетики $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения в сталях [Текст] / П.А. Голиков, Н.Ю. Золоторевский // Материалы всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов «XXXV Неделя Науки СПбГПУ»: 20-25 ноября 2006 г. – СПб. – 2006. – С. 102–103.
2. **Zolotarevsky N.Yu.** Modelling Kinetics of $\alpha \rightarrow \gamma$ Transformation in Steels [Text] / N.Yu. Zolotarevsky, P.A. Golikov // Proc. of SPAS jointly with UWM. – 2006. – V. 10. – P. 93–96.

3. **Zolotarevsky N.Yu.** Modelling Kinetics of $\alpha \rightarrow \gamma$ Transformation in Steels [Text] / N.Yu. Zolotarevsky, P.A. Golikov, Yu.F. Titovets // Proc. of the International Society for Optical Engineers. 2007. – V. 6597. – P. 65970H. DOI:10.1117/12.726721.
4. **Голиков П.А.** О коэффициенте диффузии углерода в аустените [Текст] / П.А. Голиков, А.А. Васильев // Материалы всероссийской межвузовской научно-технической конференции студентов и аспирантов «XXXVI Неделя Науки СПбГПУ»: 26-30 ноября 2007 г. – СПб. – 2007. – С. 156–158.
5. **Васильев А.А.** Модель для расчета коэффициента диффузии углерода в легированном аустените [Текст] / А.А. Васильев, П.А. Голиков // НТ Ведомости СПбГПУ. – 2008. – Т. 53. – № 1. – С. 143–149.
6. **Васильев А.А.** Расчет коэффициента диффузии углерода в легированном аустените [Текст] / А.А. Васильев, П.А. Голиков // Материалы XIX уральской школы материаловедов-термистов «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов»: 4-8 февраля 2008 г. – Екатеринбург. – 2008. – С. 12.
7. **Васильев А.А.** О коэффициенте диффузии углерода в легированном аустените и феррите [Текст] / А.А. Васильев, П.А. Голиков // Материалы XX уральской школы материаловедов-термистов «Актуальные проблемы физического металловедения сталей и сплавов»: 1-5 февраля 2010 г. – Пермь. – 2010. – С. 99.
8. **Vasilyev A.A.** New Model for Computation of Carbon Diffusion Coefficient in Alloyed Austenite and Application to Simulation of Gas Carburizing of Case Hardening Steels [Internet source] / A.A. Vasilyev, P.A. Golikov, J. Gegner // Electronic version of the poster presentation at the MSE'2010 Conference: 24–26 August 2010, Darmstadt, Germany: http://tmslab.spbstu.ru/tmslab/Poster/Poster_6.pdf
9. **Голиков П.А., Васильев А.А.** CarbDiff. Свидетельство о регистрации программы для ЭВМ № 2011614725, Роспатент, М., 16.06.2011.
10. **Голиков П.А.** Моделирование кинетики $\alpha \rightarrow \gamma$ превращения в сталях с феррито-перлитной структурой [Текст] / П.А. Голиков, Н.Ю. Золоторевский, А.А. Васильев // НТ Ведомости СПбГПУ. – 2011. – Т. 129. – № 3. – С. 110–117.