

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Факультет технологии и исследования материалов

Кафедра физико-химии литейных сплавов и процессов

К.Д. Савельев

## ПРИКЛАДНАЯ ТЕРМОДИНАМИКА И КИНЕТИКА

Учебное пособие

Санкт-Петербург  
2011

## СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	3
Раздел 1. Термодинамические модели сплавов.....	4
Занятие 1. Термодинамическое описание энергии Гиббса чистых компонентов.....	4
Занятие 2. Расчет энергии Гиббса фаз в двухкомпонентной системе.....	6
Занятие 3. Условия гетерогенных фазовых равновесий в металлических системах.....	8
Раздел 2. Термодинамическое моделирование затвердевания сплавов.....	10
Занятие 4. Расчет диаграммы состояния двухкомпонентной системы.....	10
Занятие 5. Расчет проекций и сечений диаграммы состояния трехкомпонентной системы.....	14
Занятие 6. Моделирование равновесного затвердевания сплавов .....	22
Раздел 3. Кинетика затвердевания сплавов .....	28
Занятие 7. Моделирование неравновесного затвердевания сплавов .....	28
Приложение 1 .....	39
Приложение 2 .....	40

## **ВВЕДЕНИЕ**

Учебное пособие предназначено для магистров 1 года обучения, изучающих учебную дисциплину «Прикладная термодинамика и кинетика».

При изучении названной учебной дисциплины предусмотрены только практические занятия. Теоретические положения изучаются студентами самостоятельно по рекомендованной для каждого занятия литературе, составляя краткий конспект.

Содержание учебной дисциплины состоит из двух блоков. В первом студенты выполняют самостоятельный расчет температурно-концентрационных условий фазовых равновесий для заданных двойных систем. Во втором блоку студенты осваивают функциональные возможности прикладного пакета для термодинамического моделирования ThermoCalc.

Результаты освоения содержания учебной дисциплины проверяются на экзамене.

## Раздел 1. Термодинамические модели сплавов

### Занятие 1. Термодинамическое описание энергии Гиббса чистых компонентов

#### Цели занятия

1. Изучение математических моделей, используемых для описания термодинамических параметров фаз простого вещества.
2. Закрепление навыков выполнения вычислений с использованием стандартного программного обеспечения (электронных таблиц), графического отображения получаемых данных.
3. Формирование умения работать с периодической литературой на иностранном языке.

#### Задачи занятия

1. Актуализация знаний по вопросам теории термодинамического описания свойств простых веществ.
2. Изучение способа представления энергии Гиббса фазы простого вещества по системе CALPHAD.
3. Расчет температурной зависимости энергии Гиббса жидкой и твердой фазы для чистых компонентов заданной двухкомпонентной системы.

#### Теоретические положения для самостоятельного изучения

Термодинамика жидких сплавов. Уравнение Гиббса-Дюгема [1, стр. 9 – 13]. Относительные и избыточные термодинамические функции [1, стр. 13 – 17].

Описание энергии Гиббса фаз чистых компонентов [2, стр. 9 – 10 или 3, стр. 7 – 8].

Модели идеальных, атермальных, регулярных и субрегулярных растворов [1, стр. 21 – 22; 3, стр. 10 – 13].

#### Рекомендуемая литература

1. Морачевский А.Г. Термодинамика расплавленных металлических и солевых систем. – М.: Металлургия, 1987. – 240 с.
2. Голод В.М., Савельев К.Д. Вычислительная термодинамика в материаловедении: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. – 218 с.
3. Савельев К.Д., Голод В.М. Моделирование процессов и объектов в металлургии. Термодинамическое моделирование многокомпонентных литейных сплавов на основе железа: Курс лекций. - СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. - 63 с.
4. Dinsdale A. SGTE data for pure elements // CALPHAD. 1991. V. 15. № 4.

#### Порядок выполнения практической работы

1. Изучить с использованием рекомендованной литературы основные теоретические положения. Составить краткий конспект.
2. Ознакомиться со способом описания энергии Гиббса фазы простого вещества по [2].
3. Используя электронные таблицы, построить вычислительные функции для расчета энергии Гиббса  $G$  жидкой (liq) и твердой (sol) фазы для двух простых веществ (А и В) в соответствии с индивидуальным заданием (таблица 2). В качестве состояния сравнения (SER – stable element reference) использовать энтальпию фазы, устойчивой при 298 К ( $H^{\text{SER}}$ ). При несоответствии модификации фазы сравнения у элемента-основы сплава и легирующего компонента необходимо рассчитать энергию Гиббса сначала для той модификации фазы сравнения, которая используется для второго компонента, а затем пересчитать ее в энергию Гиббса фазы той модификации, которая используется для элемента-основы сплава.

Например, в двойной системе Al-Si для алюминия при 298 К устойчива ГЦК фаза (fcc), а для кремния – фаза типа алмаза (dia). Поэтому при определении энергии Гиббса для кремния вычисления проводятся для фазы типа алмаза (столбец  $G_{\text{B}}^{\text{SER}}$ ), ГЦК фазы (столбец  $G_{\text{B}}^{\text{sol}}$ )

и жидкой фазы (столбец  $G_B^{liq}$ ), а для алюминия – для ГЦК фазы (столбец  $G_A^{sol}$ ) и жидкой фазы (столбец  $G_A^{liq}$ ).

Результаты расчета рекомендуется выполнять в виде таблицы 1. Лист книги целесообразно обозначить G0.

Таблица 1 – Расчет энергии Гиббса чистых компонентов

$T$	$T$	$G_A^{sol}$	$G_A^{liq}$	$G_B^{SER}$	$G_B^{sol}$	$G_B^{liq}$
°C	К	Дж/моль				
300	573					
301	574					
...	...					

Для контроля в приложении 1 приведены температурные функции энергии Гиббса ряда элементов.

4. Рассчитать значения энергии Гиббса названных выше фаз в заданном интервале температур.
5. Построить графики зависимости энергии Гиббса фаз от температуры для каждого простого вещества в одной системе координат (всего два графика). Пример построения графиков для кремния приведен на рисунке 1.

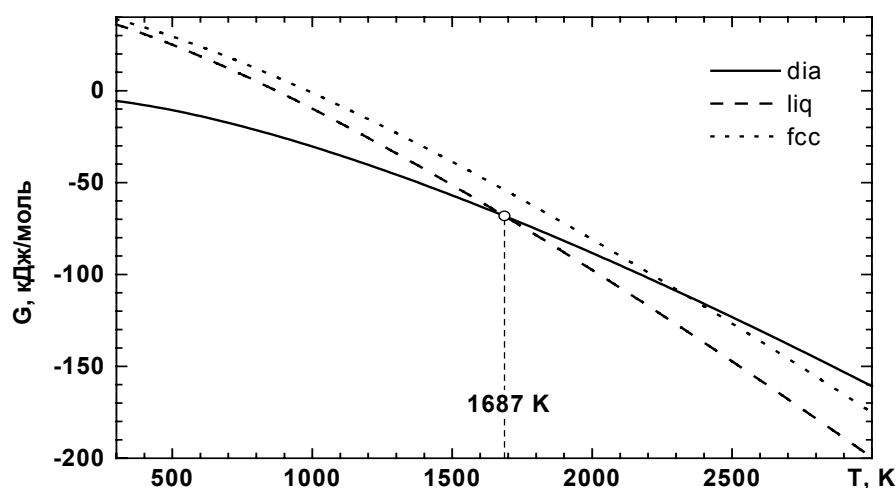


Рисунок 1 – Температурная зависимость энергии Гиббса ряда фаз чистого кремния

6. Описать полученные зависимости. Сравнить их с приведенными в литературе с целью убедиться в их идентичности для проверки правильности построенных функций.
7. Графически определить температуру плавления компонентов. Сравнить полученное значение с результатами экспериментальных определений.
8. Включить результаты расчетов, их описание и анализ в отчет.

Таблица 2 – Варианты индивидуальных заданий

№ варианта	Система А-В	Вид твердого раствора	Интервал температур, К	Температуры, °C
1	Al-Si	ГЦК (fcc)	300-3000	650, 625, 600, 577
2	Al-Mg	ГЦК (fcc)	300-2000	600, 550, 500, 450
3	Al-Zn	ГЦК (fcc)	300-2000	620, 590, 560, 510
4	Al-Cu	ГЦК (fcc)	300-2000	610, 590, 570, 550
5	Cu-Mg	ГЦК (fcc)	300-2000	1000, 900, 800, 725

## **Занятие 2. Расчет энергии Гиббса фаз в двухкомпонентной системе**

### *Цели занятия*

1. Изучение математических моделей, используемых для описания термодинамических параметров растворов замещения и внедрения.
2. Закрепление навыков выполнения вычислений с использованием стандартного программного обеспечения (электронных таблиц), графического отображения получаемых данных.
3. Формирование умения работать с периодической литературой на иностранном языке.

### *Задачи занятия*

1. Актуализация знаний по вопросам теории термодинамического описания свойств сплавов.
2. Изучение способа представления энергии Гиббса растворов замещения и внедрения по системе CALPHAD.
3. Расчет концентрационной зависимости энергии Гиббса жидкой и твердой фазы (твердого раствора) для ряда температур заданной двухкомпонентной системы.

### *Теоретические положения для самостоятельного изучения*

Интегрирование уравнения Гиббса-Дюгема. Границы изменения термодинамических свойств [1, стр. 19 – 21, 22 – 26].

Модели субрегулярных растворов замещения и внедрения для двухкомпонентной системы [2, стр. 16 – 18 или 3, стр. 8 – 11].

Расчет избыточных термодинамических функций многокомпонентных систем по данным о бинарных системах [1, стр. 137 – 146].

### *Рекомендуемая литература*

1. Морачевский А.Г. Термодинамика расплавленных металлических и солевых систем. – М.: Металлургия, 1987. – 240 с.
2. Голод В.М., Савельев К.Д. Вычислительная термодинамика в материаловедении: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. – 218 с.
3. Савельев К.Д., Голод В.М. Моделирование процессов и объектов в металлургии. Термодинамическое моделирование многокомпонентных литейных сплавов на основе железа: Курс лекций. - СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. - 63 с.
4. Статья на иностранном языке, содержащая описание термодинамических параметров стабильных фаз двойной системы (в соответствии с индивидуальным заданием).

### *Порядок выполнения практической работы*

1. Изучить с использованием рекомендованной литературы основные теоретические положения. Составить краткий конспект.
2. Ознакомиться со способом описания энергии Гиббса раствора замещения и внедрения по [2 или 3]. Записать в отчет математические формулы, описывающие модели температурно-концентрационной зависимости энергии Гиббса, и их расшифровки.
3. Используя электронные таблицы, построить вычислительные функции для расчета температурно-концентрационной зависимости энергии Гиббса жидкой фазы и твердого раствора замещения для обоих компонентов системы в соответствии с индивидуальным заданием. Состав сплава задавать в атомных долях с шагом 0,001.

Для контроля в приложении 2 приведены выражения для расчета избыточной энергии Гиббса ряда двойных систем.

Вычисления удобно произвести в виде таблицы 3. Для этого столбцы с расчетом энергии Гиббса чистых компонентов скопировать на следующий лист книги в электронных таблицах, задать одинаковую температуру во всех строках первого столбца и дополнить таблицу столбцами для задания  $x_B^{liq}$ , расчета  ${}^0G^{liq}$ ,  $id_G^{liq}$ ,  $ex_G^{liq}$ ,  $G^{liq}$ , задания  $x_B^{sol}$ , расчета  ${}^0G^{sol}$ ,  $id_G^{sol}$ ,  $ex_G^{sol}$ ,  $G^{sol}$ .

Таблица 3 – Расчет концентрационной зависимости энергии Гиббса жидкой и твердой фаз

T	$G_B^{liq}$	$x_B^{liq}$	${}^0G^{liq}$	$id G^{liq}$	$ex G^{liq}$	$G^{liq}$	$x_B^{sol}$	${}^0G^{sol}$	$id G^{sol}$	$ex G^{sol}$	$G^{sol}$
°C	Дж/моль	-	Дж/моль				-	Дж/моль			
600											
600											
...											

4. Рассчитать концентрационные зависимости энергии Гиббса названных выше фаз при заданных температурах (см. таблицу 2) для всего диапазона концентраций.
5. Построить на одном графике концентрационные зависимости энергии Гиббса обеих фаз (для каждой температуры в своей системе координат). Пример построения графика для системы Al-Si при температуре 600 °C приведен на рисунке 2.

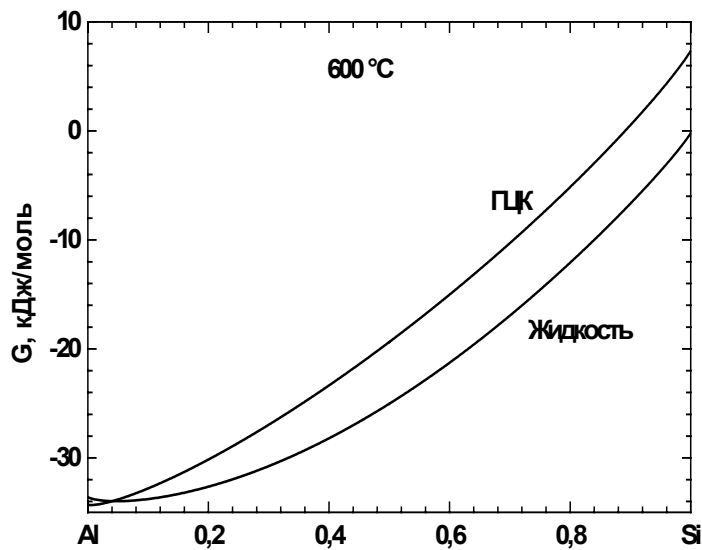


Рисунок 2 – Концентрационная зависимость энергии Гиббса жидкой и твердой фазы в системе Al-Si при 600 °C

6. Описать полученные зависимости, обратив при этом внимание на область пересечения кривых и взаимное положение кривых в разных интервалах концентраций. Ход кривых в области пересечения представить в более крупном масштабе (см. рисунок 3).

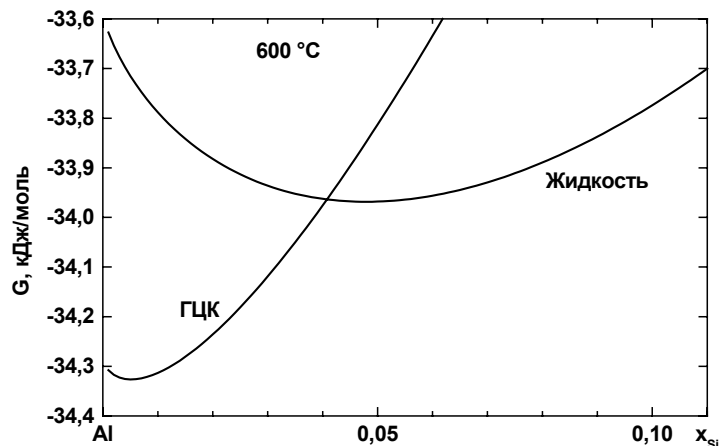


Рисунок 3 – Ход кривых энергии Гиббса жидкой и твердой фазы в системе Al-Si при 600 °C в области пересечения графиков

7. Включить результаты расчетов, их описание и анализ в отчет.

### **Занятие 3. Условия гетерогенных фазовых равновесий в металлических системах**

#### *Цели занятия*

1. Изучение способа расчета химического потенциала компонента в фазе на основе модельного описания ее энергии Гиббса для двух- и многокомпонентной системы; приемов расчета температурно-концентрационных параметров фазовых равновесий.
2. Закрепление навыков выполнения вычислений с использованием стандартного программного обеспечения (электронных таблиц), графического отображения получаемых данных.
3. Формирование умения выполнять анализ и оценку результатов вычислительных экспериментов.

#### *Задачи занятия*

1. Актуализация знаний по вопросам термодинамических условий гетерогенных многофазных равновесий.
2. Изучение способов расчета химического потенциала компонента в двух- и многокомпонентной системе.
3. Расчет химических потенциалов компонентов в жидкой и твердой фазах для ряда температур заданной двухкомпонентной системы.
4. Расчет температурно-концентрационных параметров двухфазного равновесия.

#### *Теоретические положения для самостоятельного изучения*

Химический потенциал и условия равновесия в двухкомпонентных [1, стр. 12 – 13, 108 – 109] многокомпонентных системах [2, стр. 19 – 20, 32 – 36].

Правило натянутой нити [4, стр. 182 – 185].

Порядок расчета химического потенциала в двухкомпонентной [1, стр. 13] и многокомпонентной системах [3, стр. 15-16].

#### *Рекомендуемая литература*

1. Морачевский А.Г. Термодинамика расплавленных металлических и солевых систем. – М.: Metallurgia, 1987. – 240 с.
2. Голод В.М., Савельев К.Д. Вычислительная термодинамика в материаловедении: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. – 218 с.
3. Савельев К.Д., Голод В.М. Моделирование процессов и объектов в металлургии. Термодинамическое моделирование многокомпонентных литейных сплавов на основе железа: Курс лекций. - СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. - 63 с.
4. Люпис К. Химическая термодинамика материалов. – М.: Metallurgia, 1989. – 503 с.

#### *Порядок выполнения практической работы*

1. Изучить с использованием рекомендованной литературы основные теоретические положения. Составить краткий конспект.
2. Ознакомиться с математическими выражениями, описывающими химический потенциал компонента в фазе двух- [1] и многокомпонентной системы [2, 3], на основе энергии Гиббса. Записать в отчет математические формулы и их расшифровки.
3. Используя электронные таблицы, построить вычислительные функции для расчета химического потенциала компонентов в жидкой и твердой фазе для обоих компонентов системы в соответствии с индивидуальным заданием.

Вычисление химического потенциала производят по формулам:

$$\mu_A^\varphi = G^\varphi - x_B \frac{\partial G^\varphi}{\partial x_B}; \quad \mu_B^\varphi = G^\varphi + (1 - x_B) \frac{\partial G^\varphi}{\partial x_B}.$$

Для выполнения расчетов скопировать лист книги электронных таблиц, полученный в работе 2, и дополнить его столбцами для задания  $\Delta x$ , расчета  $\mu_A^{\text{liq}}$ ,  $\mu_A^{\text{sol}}$ ,  $\mu_A^{\text{liq}} - \mu_A^{\text{sol}}$ ,  $(\mu_A^{\text{liq}} - \mu_A^{\text{sol}})^2$ ,  $\mu_B^{\text{liq}}$ ,  $\mu_B^{\text{sol}}$ ,  $\mu_B^{\text{liq}} - \mu_B^{\text{sol}}$ ,  $(\mu_B^{\text{liq}} - \mu_B^{\text{sol}})^2$ . Вычисление химических потенциалов



требует трех строк таблицы для реализации трехточечной схемы расчета производной от энергии Гиббса по концентрации легирующего компонента.

Во второй строке задается значение концентрации легирующего компонента  $x_B$  в твердой или в жидкой фазе в той точке, в которой производится расчет; в первой строке концентрация вычисляется по формуле  $x_B - \Delta x$ , в третьей –  $x_B + \Delta x$ . Тогда во второй строке значения химического потенциала компонента могут быть рассчитаны по формулам

$$\mu_A^\varphi = G^\varphi \Big|_{x_B^\varphi} - x_B^\varphi \frac{G^\varphi \Big|_{x_B^\varphi + \Delta x} - G^\varphi \Big|_{x_B^\varphi - \Delta x}}{2 \cdot \Delta x}; \quad \mu_B^\varphi = G^\varphi \Big|_{x_B^\varphi} + (1 - x_B^\varphi) \frac{G^\varphi \Big|_{x_B^\varphi + \Delta x} - G^\varphi \Big|_{x_B^\varphi - \Delta x}}{2 \cdot \Delta x}.$$

4. С использованием результатов работы 2 определить графически составы жидкой и твердой фаз, находящихся в равновесии при заданной температуре, методом натянутой нити (построением общей касательной).

5. С использованием построенных вычислительных функций уточнить составы равновесных фаз путем одновременного расчета химических потенциалов двух компонентов в обеих фазах и их сопоставления методом подбора концентраций жидкой и твердой фаз, задаваемых во второй строке таблицы. При подборе руководствоваться значениями квадратов разности химических потенциалов компонента в твердой и жидкой фазах, которые должны уменьшаться в процессе подбора состава фазы. Значение  $\Delta x$  выбирать в интервале  $10^{-5} \dots 10^{-7}$ .

Уточнение производить до достижения точности состава в  $\pm 0,01$  % ат. Форма для расчетов приведена в таблице 4 (вспомогательные столбцы опущены).

Таблица 4 – Расчет химических потенциалов компонентов

$T, K$	$x_B^{liq}$	$G^{liq}$	$x_B^{sol}$	$G^{sol}$	$\Delta x$	$\mu_A^{liq}$	$\mu_A^{sol}$	$\mu_A^{liq} - \mu_A^{sol}$	$(\mu_A^{liq} - \mu_A^{sol})^2$	$\mu_B^{liq}$	$\mu_B^{sol}$	$\mu_B^{liq} - \mu_B^{sol}$	$(\mu_B^{liq} - \mu_B^{sol})^2$
873						–	–	–	–	–	–	–	–
873													
873						–	–	–	–	–	–	–	–

6. Нанести значения химических потенциалов компонентов при соответствующих температурах на графики, полученные в работе 2. Построить общую касательную. Пример построения показан на рисунке 4.

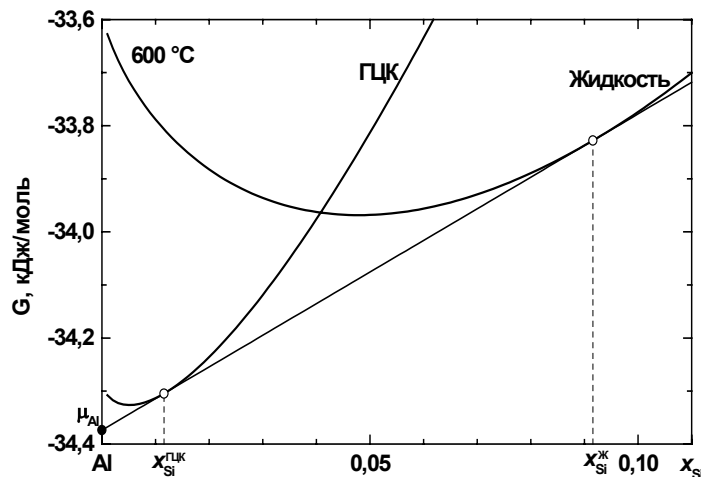


Рисунок 4 – Построение общей касательной к концентрационной зависимости энергии Гиббса жидкой фазы и твердого раствора в системе Al-Si при 600 °C

- Нанести полученные значения концентраций при заданных температурах на экспериментальные диаграммы состояния двухкомпонентной системы.
- Оценить расхождения расчетных и экспериментальных данных. Дать им объяснение.
- Привести в отчете результаты расчетов, их описание и анализ.
- Сформулировать в отчете выводы по работам 1-3.

## Раздел 2. Термодинамическое моделирование затвердевания сплавов

### Занятие 4. Расчет диаграммы состояния двухкомпонентной системы

#### Цели занятия

1. Изучение методов расчета диаграмм состояния двухкомпонентных систем.
2. Изучение способов выполнения вычислений с использованием программного комплекса Thermo-Calc. Оценка точности выполнения расчетов с использованием термодинамических моделей.
3. Формирование умения работать с электронными ресурсами на иностранном языке.

#### Задачи занятия

1. Изучение метода пошагового расчета диаграммы состояния.
2. Изучение способов задания исходных данных, расчета двухфазных равновесий и двойной диаграммы состояния с использованием программного комплекса Thermo-Calc.
3. Выполнение расчетов критических температур, равновесных составов фаз и диаграммы состояния заданной двухкомпонентной системы.

#### Теоретические положения для самостоятельного изучения

Методы расчета диаграммы состояния. Пошаговый расчет диаграммы состояния [1, стр. 22 – 32; 2, стр. 201 – 203, 260 – 264].

Функциональность программного комплекса ThermoCalc [3].

#### Рекомендуемая литература

1. Голод В.М., Савельев К.Д. Вычислительная термодинамика в материаловедении: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. – 218 с.
2. Люпис К. Химическая термодинамика материалов. – М.: Металлургия, 1989. – 503 с.
3. Сайт [www.thermo-calc.com](http://www.thermo-calc.com).

#### Порядок выполнения практической работы

1. Изучить с использованием рекомендованной литературы и электронных ресурсов сети Internet основные теоретические положения. Составить краткий конспект.
2. Ознакомиться с интерфейсом программного комплекса Thermo-Calc.

Главное окно программы показано на рисунке 5. В нем расположены главное меню, пиктограммы, кнопки управления.

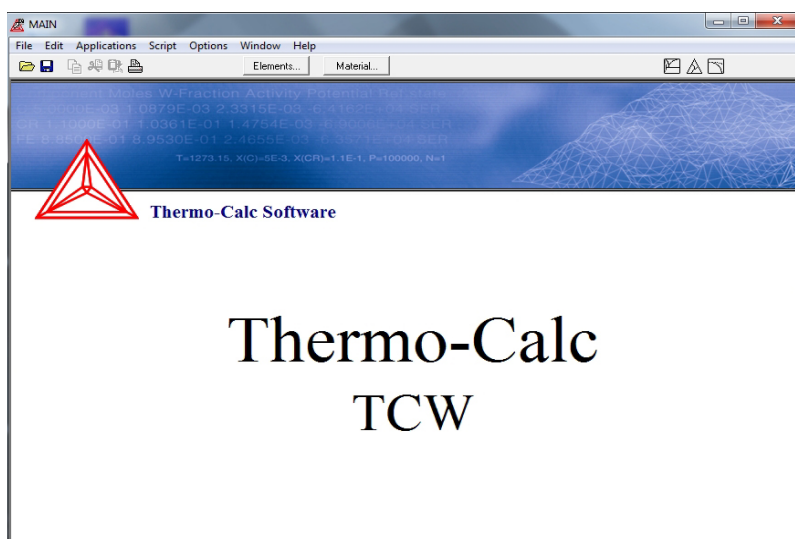
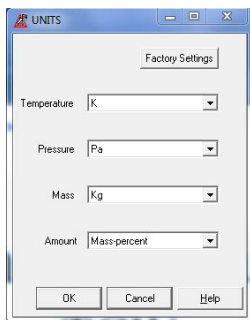
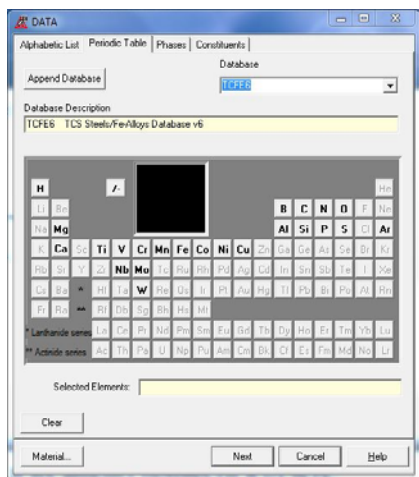


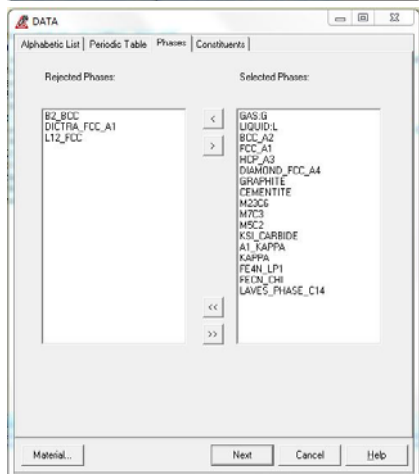
Рисунок 5 – Главное окно программы Thermo-Calc



Единицы измерения температуры, массы, давления и состава сплава устанавливаются при выборе пункта главного меню **Options** и **Unit...**. Для этого открывается окно **UNITS**.

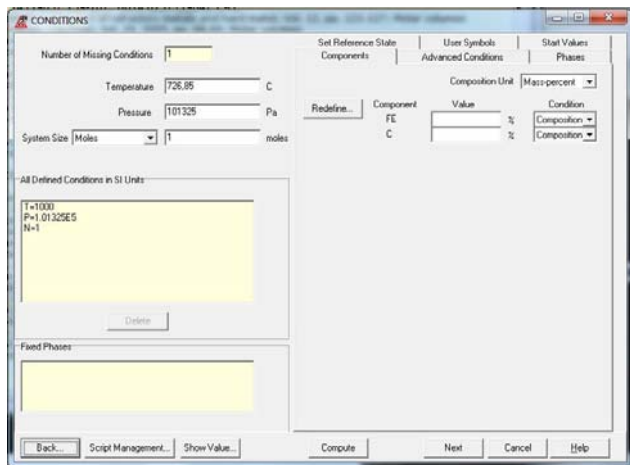


Для начала работы с программой необходимо задать качественный состав исследуемого сплава путем нажатия кнопки **Elements...** главного окна, после чего открывается окно **Data** с открытой вкладкой **Periodic Table**. На этой вкладке необходимо выбрать одну из доступных баз данных в поле **Database**. При этом в поле с изображением периодической системы химических элементов будут доступны кнопки элементов, включенных в выбранную базу данных. Нажатием на эти кнопки необходимо выбрать элементы, входящие в исследуемую систему. Перечень выбранных элементов отображается в поле **Selected Elements**.



Перечень фаз, участвующих в системе (равновесии), задается на вкладке **Phases** окна **DATA**.

Участвующие в системе фазы должны быть перечислены в поле **Selected Phases**, исключенные – в поле **Rejected Phases**. Перенос фаз из одного поля в другое осуществляется кнопками **<** и **>**. Кнопки **<<** и **>>** переносят списки фаз из одного поля в другое.

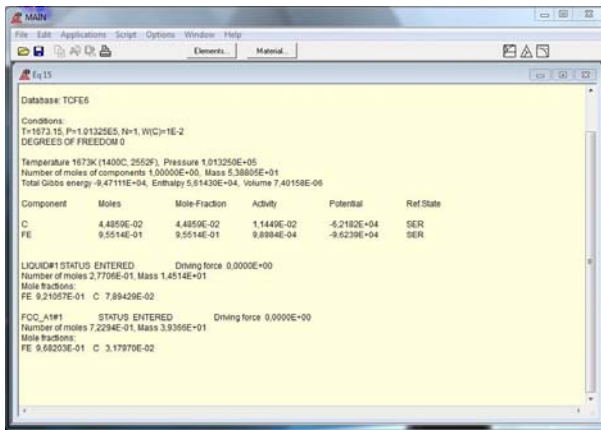


При нажатии на кнопку **Next** окна **DATA** открывается окно **CONDITIONS**. В этом окне задаются параметры для расчета отдельных фазовых равновесий. Поля с желтым фоном не заполняются, они служат для отображения информации.

В поле **Number of Missing Conditions** отображается число переменных, которые необходимо задать. Расчет начинается только в том случае, когда значение этого поля равно 0.


Температура, при которой рассчитывается равновесие задается в поле **Temperature**, давление – в поле **Pressure**.

Количественный состав сплава задается на вкладке **Component** в полях **Value**. Для принятия значения полем необходимо после ввода цифр выйти из поля клавишей **Tab**.



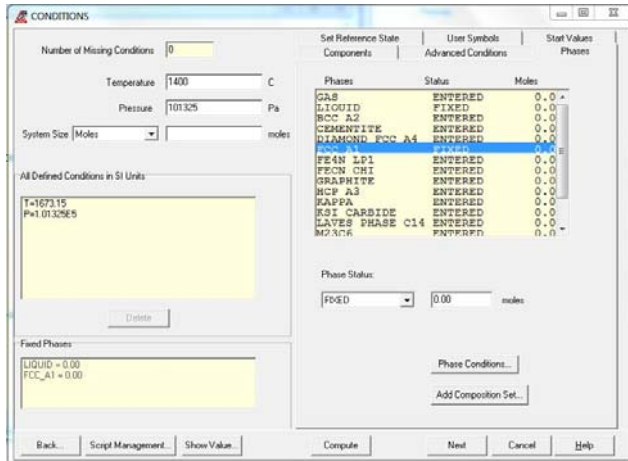
После задания всех необходимых параметров расчет запускается кнопкой **Compute**.

Результаты расчетов выдаются в текстовом окне, открывающемся в главном окне программы.

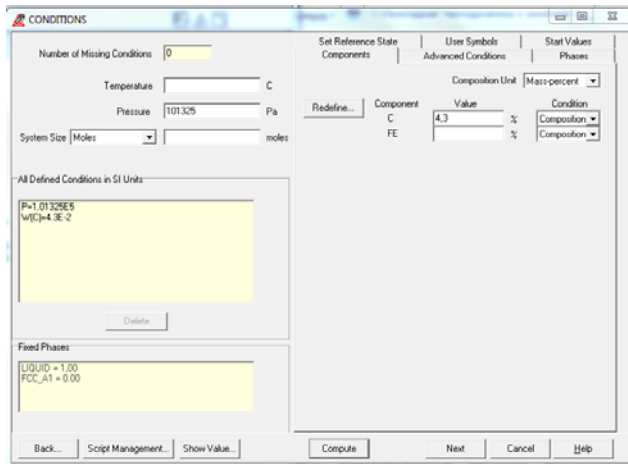
Установки для расчета могут быть сохранены путем использования иконки  или пункта главного меню **File** и **Save** или **Save as....**

Отдельный порядок действий предусмотрен для выполнения вычислений с определенным фазовым составом системы.

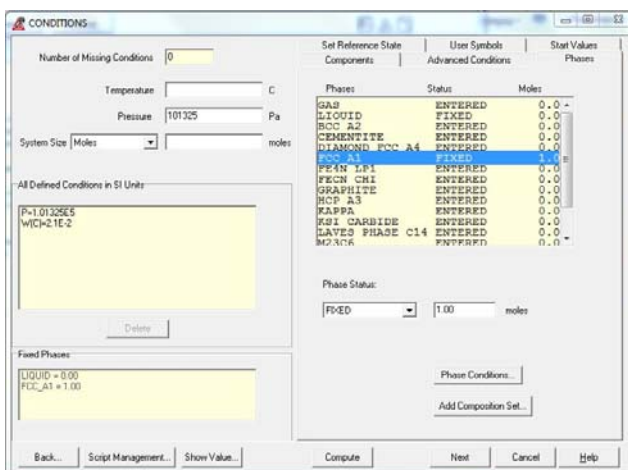
Например, при вычислении равновесного состава двух выбранных фаз для заданной температуры: выделяют имя каждой фазы в списке **Phases**, статус фазы назначают **FIXED** в поле **Phase Status**. В поле **Temperature** задают необходимую температуру. Из поля **All Defined Conditions in SI Units** удалить условие  $N=1$ , выделив соответствующую строку и нажав кнопку **Delete**.



Для расчета температуры ликвидуса сплава необходимо зафиксировать жидкую и твердую фазы в системе и задать количество жидкости, равное 1 (моль, массовая или атомная доля и т.д.). Для жидкости задается также число молей (1.00) в поле **Phase Status**. Состав сплава задается на вкладке **Components**. Температуру из условий расчета удаляют.




Для расчета температуры солидуса сплава необходимо зафиксировать жидкую и твердую фазы в системе и задать количество твердой фазы, равное 1 (моль, массовая или атомная доля и т.д.). Для твердой фазы задается также число молей (1.00) в поле **Phase Status**. Состав сплава задается на вкладке **Components**. Температуру из условий расчета удаляют.

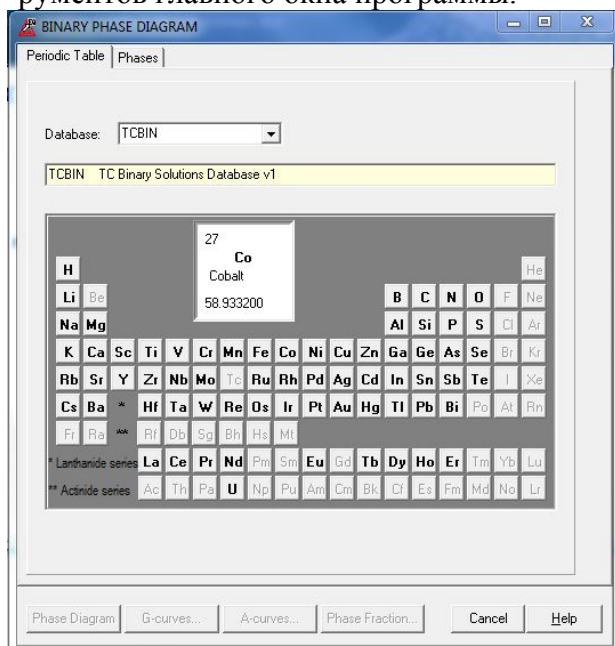


3. Используя демонстрационную базу данных тройных сплавов, выполнить расчеты фазовых равновесий жидкой и твердой фазы для заданных в таблице 2 температур и систем сплавов. Сопоставить их с результатами, полученными при выполнении заданий занятия 3. Результаты и их анализ привести в отчете.

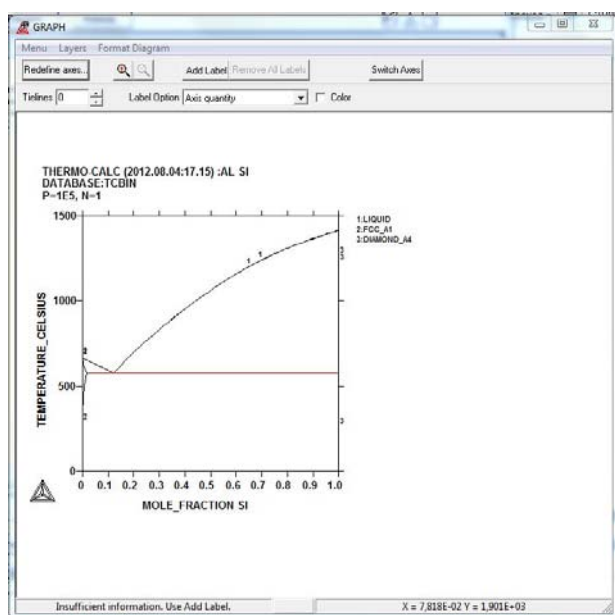
4. Рассчитать температуры ликвидуса, солидуса и неинвариантного фазового равновесия для заданной двухкомпонентной системы (по указанию преподавателя) и сравнить их значения с определенными по экспериментальной диаграмме состояния. Результаты расчетов и их анализ привести в отчете.

5. Выполнить расчет полной диаграммы состояния двухкомпонентной системы в соответствии с заданием. Указать фазовые области диаграммы. Сохранить результаты расчета в электронном виде и включить в отчет.

Расчет двухкомпонентной диаграммы начинают с нажатия кнопки  на панели инструментов главного окна программы.



В открывшемся окне **BINARY PHASE DIAGRAM** выбирают одну из подключенных баз данных в строке **Database**. В поле периодической таблицы выбирают два элемента, диаграмму состояния системы из которых хотят построить. Для визуализации диаграммы нажимают кнопку **Phase Diagram**.



В открывшемся окне **GRAPH** будет показана диаграмма состояния.

Кнопка **Add Label** позволяет расставить на полях диаграммы список фаз, устойчивых в соответствующей температурно-концентрационной области. Удалить обозначения всех фазовых областей позволяет кнопка **Remove All Labels**.

При перемещении курсора в поле диаграммы в строке состояния справа выводятся координаты курсора, что позволяет определить значения конкретных точек диаграммы.

Для сохранения рисунка в графическом формате используют пункт главного меню **Menu** и **Save...** окна **GRAPH**.

6. Выполнить анализ расчетной диаграммы состояния путем сравнения с известной экспериментальной. Дать оценку точности полученной с помощью применения термодинамических моделей диаграммы состояния двухкомпонентной системы.

7. Сформулировать выводы по работе.

## **Занятие 5. Расчет проекций и сечений диаграммы состояния трехкомпонентной системы**

### *Цели занятия*

1. Изучение методики исследования диаграммы состояния трехкомпонентного сплава.
2. Изучение способов выполнения вычислений с использованием программного комплекса Thermo-Calc.
3. Формирование умения работать с программным продуктом по описанию последовательности выполняемых шагов.

### *Задачи занятия*

1. Изучение способов задания исходных данных, расчета параметров затвердевания, проекций и разрезов трехкомпонентной диаграммы состояния, возможностей визуализации полученных результатов с использованием программного комплекса Thermo-Calc.
2. Выполнение расчетов параметров затвердевания в равновесных условиях трехкомпонентного сплава системы Fe-C-Si, претерпевающего перитектическое превращение.
3. Наблюдение температурной эволюции геометрии и размеров фазовых областей трехкомпонентной системы по результатам рассмотрения разрезов и проекций равновесной диаграммы состояния.

### *Теоретические положения для самостоятельного изучения*

Построение диаграмм состояния трехкомпонентных систем. Диаграмма состояния с инвариантной тройной эвтектикой. Диаграмма состояния с моновариантным перитектическим превращением. Проекция поверхности ликвидуса на концентрационный треугольник. Изотермические и политермические разрезы диаграммы состояния трехкомпонентной системы. Изображение хода затвердевания сплава на проекции поверхности ликвидуса.

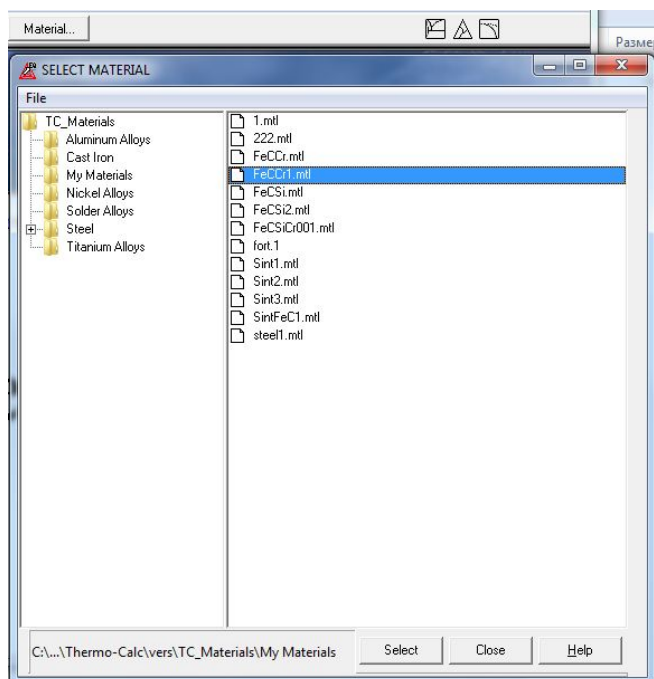
### *Рекомендуемая литература*

1. *Голод В.М., Савельев К.Д.* Вычислительная термодинамика в материаловедении: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. – 218 с.
2. *Захаров А.М.* Диаграммы состояния двойных и тройных систем. – М.: Metallurgia, 1990. – 240 с.
3. *Белов Н.А.* Диаграммы состояния тройных и четверных систем: учебное пособие для вузов. – М.: МИСИС, 2007. – 360 с.

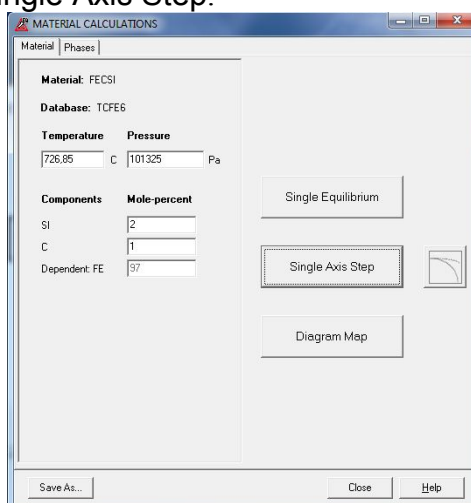
### *Порядок выполнения практической работы*

1. Повторить учебный материал, изученный в курсе «Материаловедение», по теории и методике построения диаграмм состояния трехкомпонентных систем [Захаров, МИСИС]. Обратить особое внимание на диаграмму состояния трехкомпонентной системы с перитектикой. Составить краткий конспект.
2. Рассчитать параметры равновесного затвердевания сплава тройной системы Fe-C-Si с 1 % ат. углерода и 2 % ат. кремния. Для этого выполнить следующие шаги.
  - 2.1. Задать состав материала, используя кнопку **Material...** панели инструментов главного окна программы Thermo-Calc. В дереве материалов открывшегося окна **SELECT MATERIAL** выбрать ветку **My Materials** и файл **FeCSi.mtl**. Для выбора состава сплава нажать кнопку **Select**.

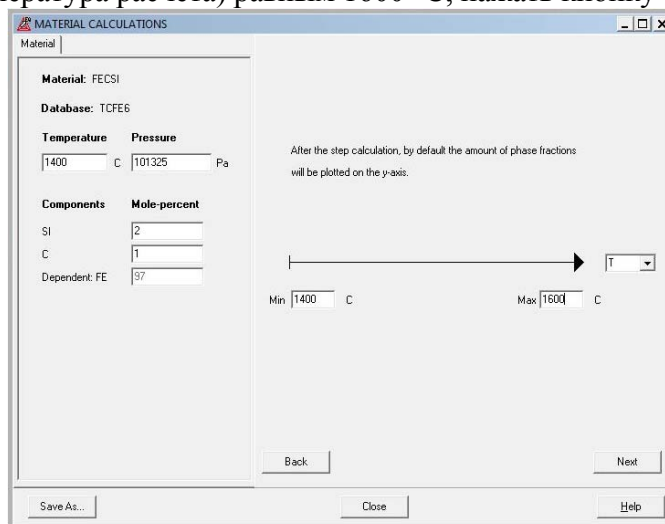




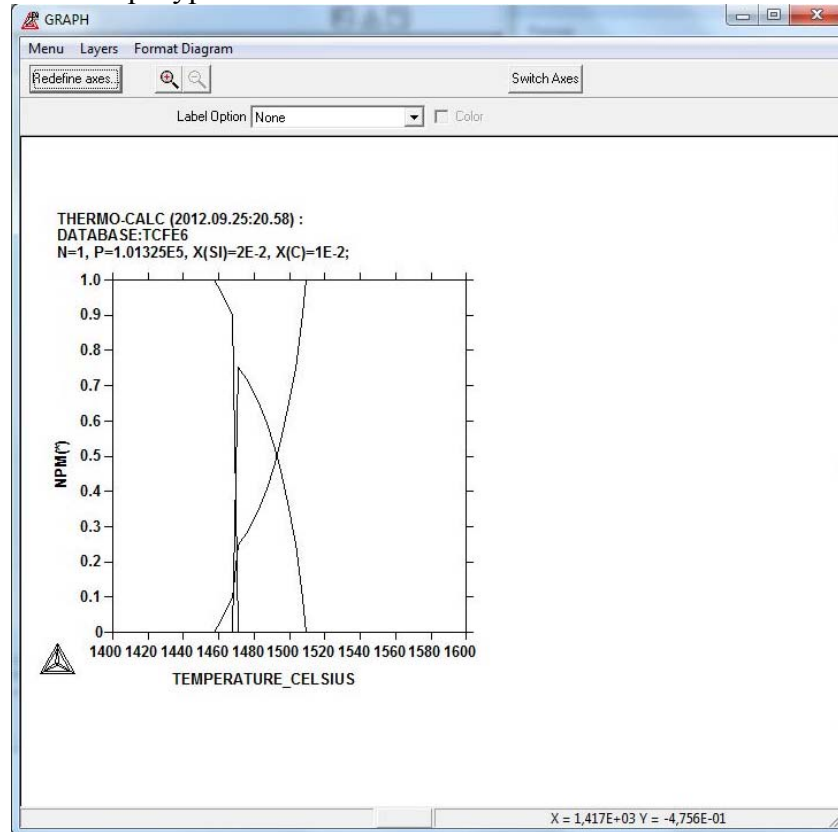
2.2. В появившемся диалоговом окне **MATERIAL CALCULATIONS** проверить состав сплава и нажать кнопку **Single Axis Step**.



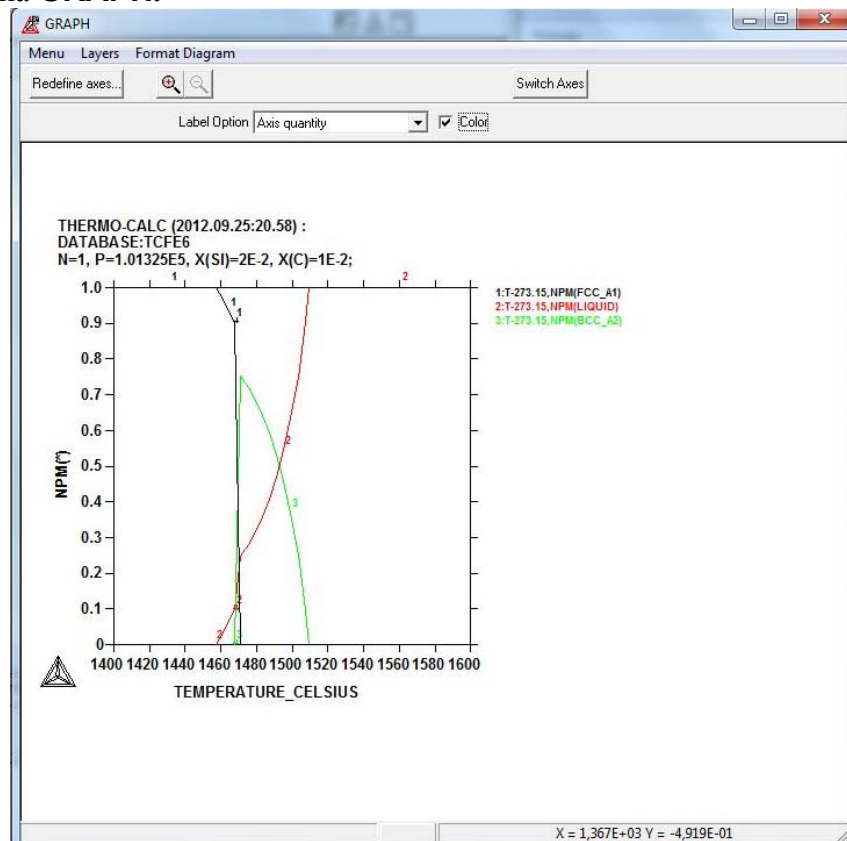
2.3. В расширенном окне **MATERIAL CALCULATIONS** задать параметры: **Temperature** (начальная температура расчета) равным 1400 °C, **Min** (минимальная температура вывода результатов, должна быть ниже или равна параметру **Temperature**) равным 1400 °C, **Max** (максимальная температура расчета) равным 1600 °C, нажать кнопку **Next**.



Открывается окно **GRAPH**, в котором отображается (по умолчанию) зависимость количества фаз от температуры.



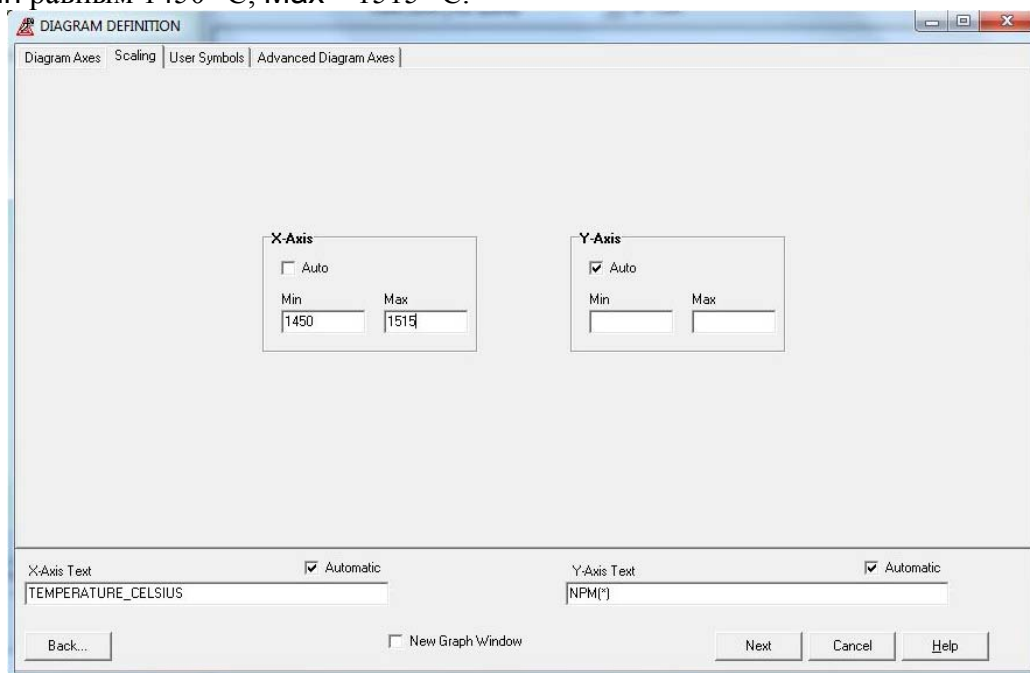
2.4. Отобразить названия выделяющихся фаз путем выбора в списке Label Option пункта Axis Quantity. Дополнительно повысить наглядность можно путем отображения количества фаз разным цветом. Для этого активировать опцию Color на панели инструментов окна **GRAPH**.



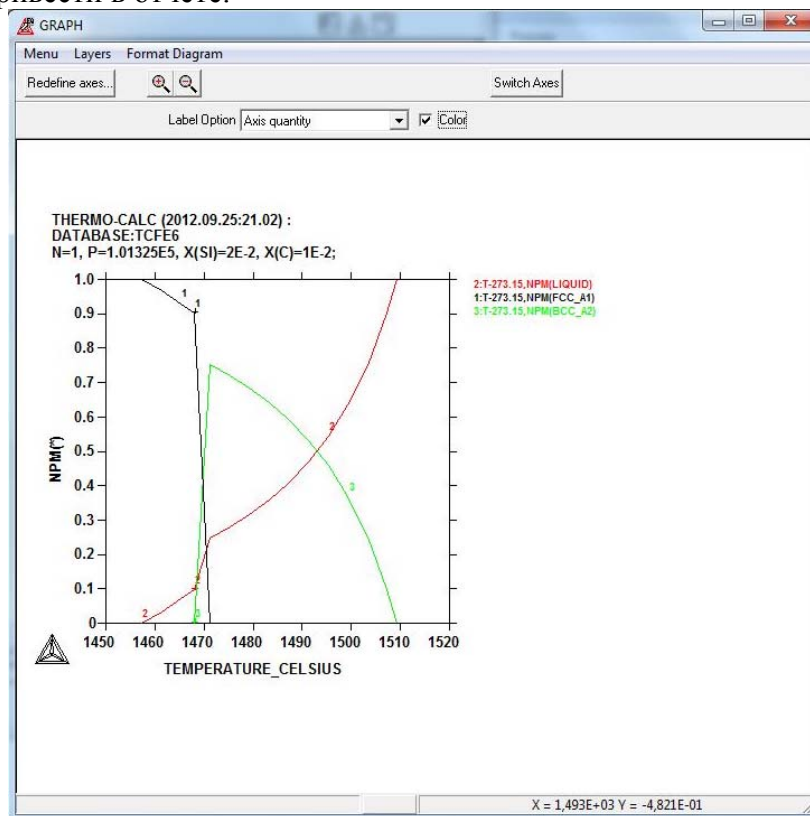
2.5. Полученную диаграмму и ее описание привести в отчете.



3. С использованием полученного графика определить критические температуры сплава: температуру ликвидуса, температуры начала и конца перитектического превращения, температуру солидуса. Для этого изменить градуировку осей на более удобную: выбрать в главном меню окна **GRAPH** пункт **Format Diagram** и **Scaling**. В открывшемся окне **DIAGRAM DEFENITION** на вкладке **Scaling** снять галочку в окне выбора **Auto** для **X-Axis**, задать значение **Min** равным 1450 °C, **Max** – 1515 °C.

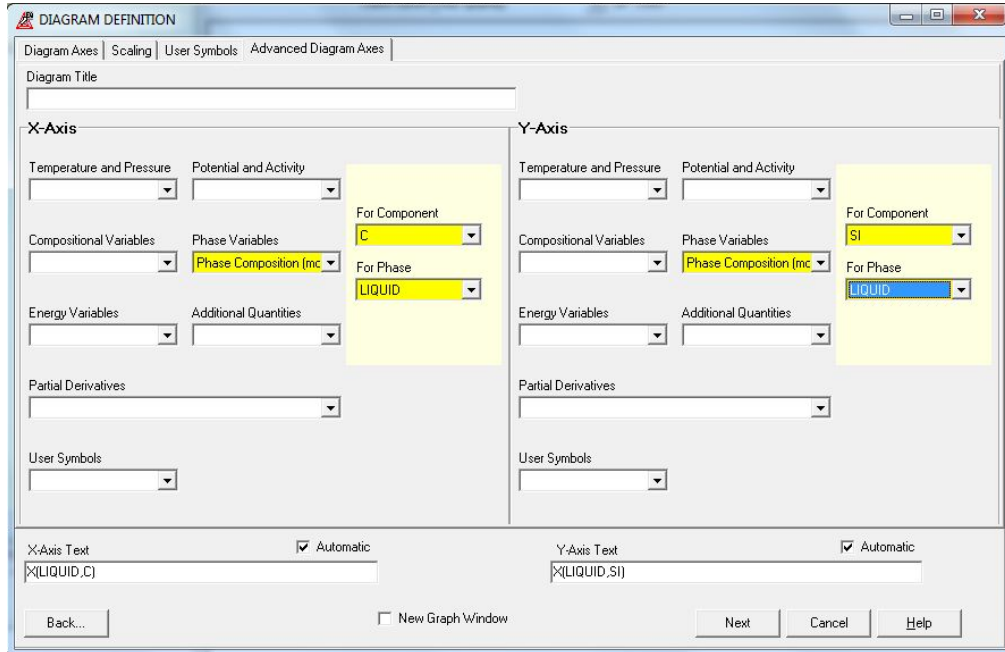


Нажать кнопку **Next**. Шкала оси X диаграммы будет переформатирована, что поможет точнее определить температуры путем указания курсором мыши на поле диаграммы, при этом значения параметров можно прочесть в нижней строке экрана справа. Критические температуры сплава привести в отчете.

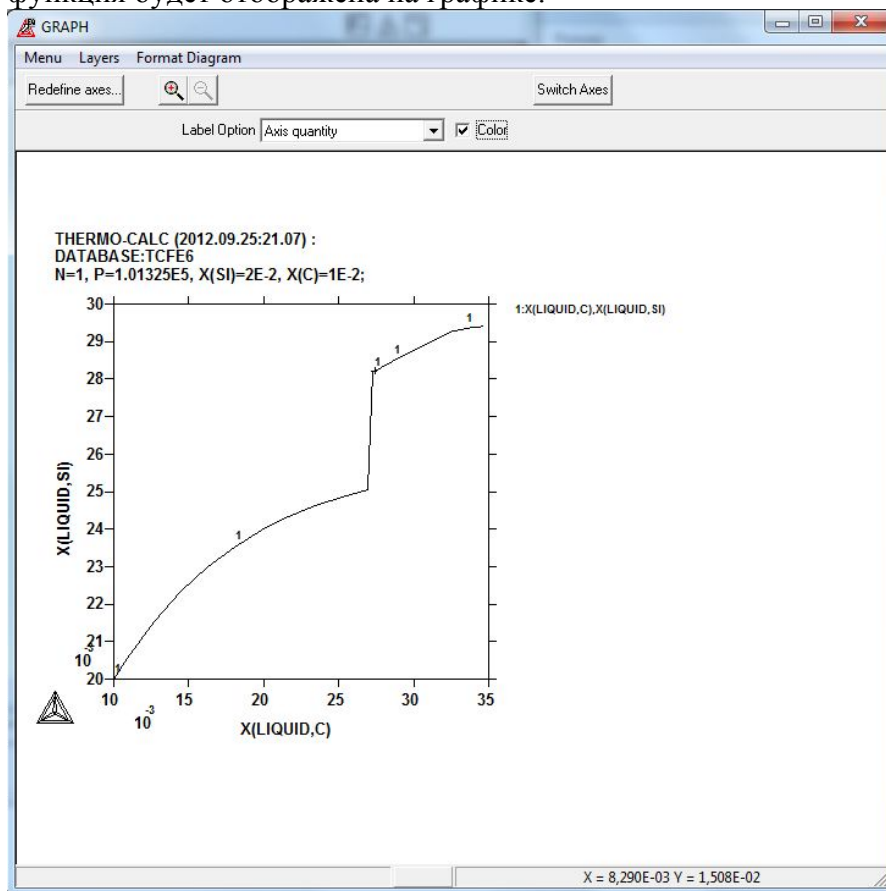


4. Построить ход затвердевания сплава (изменение состава жидкости по компонентам) в прямоугольных осях  $x_{Si}^l = f(x_C^l)$ .


4.1. Выбрать в главном меню окна **GRAPH** пункт **Format Diagram** и **Redefine Axis**. В открывшемся окне **Diagram definition** на вкладке **Advanced Diagram Axis** – для оси X (**X-Axis**) в списке **Phase Variables** выбрать значение **Phase Composition (mole fraction)**; в списке **For Component** – **C**; в списке **For Phase** – **LIQUID**; – для оси Y (**Y-Axis**) в списке **Phase Variables** выбрать значение **Phase Composition (mole fraction)**; в списке **For Component** – **SI**; в списке **For Phase** – **LIQUID** и нажать кнопку **Next**.

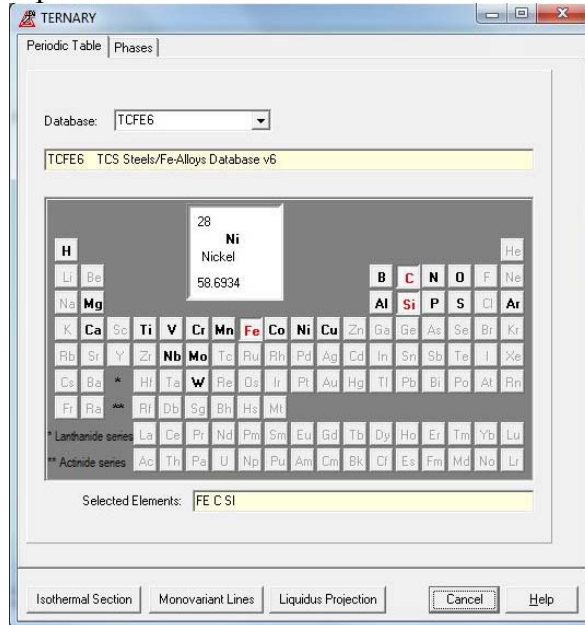


Выбранная функция будет отображена на графике.

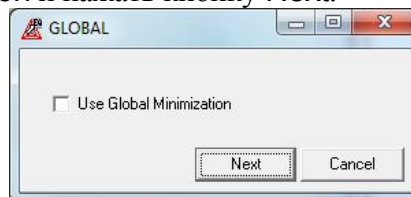


4.2. Зафиксировать наибольший и наименьший состав жидкости по каждому компоненту.

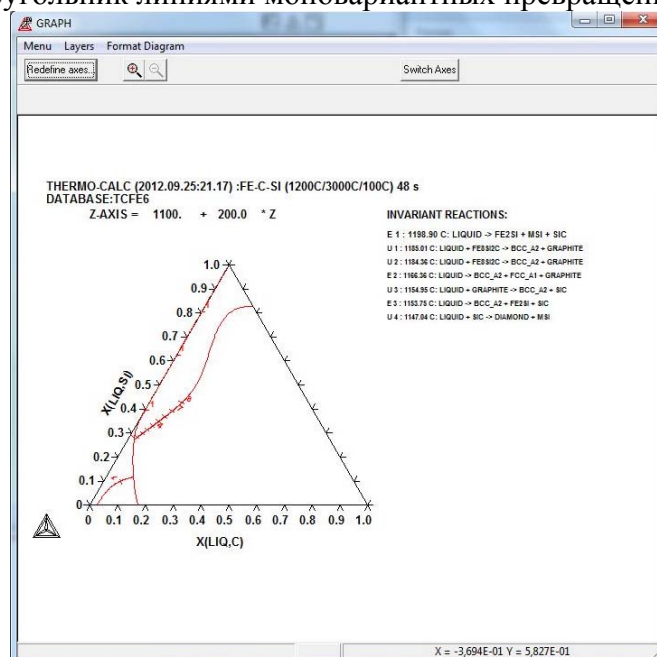
- 4.3. Сохранить результат в \*.exp файле, выбрав в главном меню окна **GRAPH** пункт **Menu** и **Save...**
5. Рассчитать положение моновариантных линий на поверхности ликвидуса.
  - 5.1. Выбрать на панели инструментов окна **MAIN** пиктограмму .
  - 5.2. В открывшемся окне **TERNARY** на вкладке **Periodic Table** в списке **Database** выбрать TCFE6; на поле периодической системы элементов нажать кнопки Fe, C, Si. Выбранные элементы будут отображены в поле **Selected Elements**.



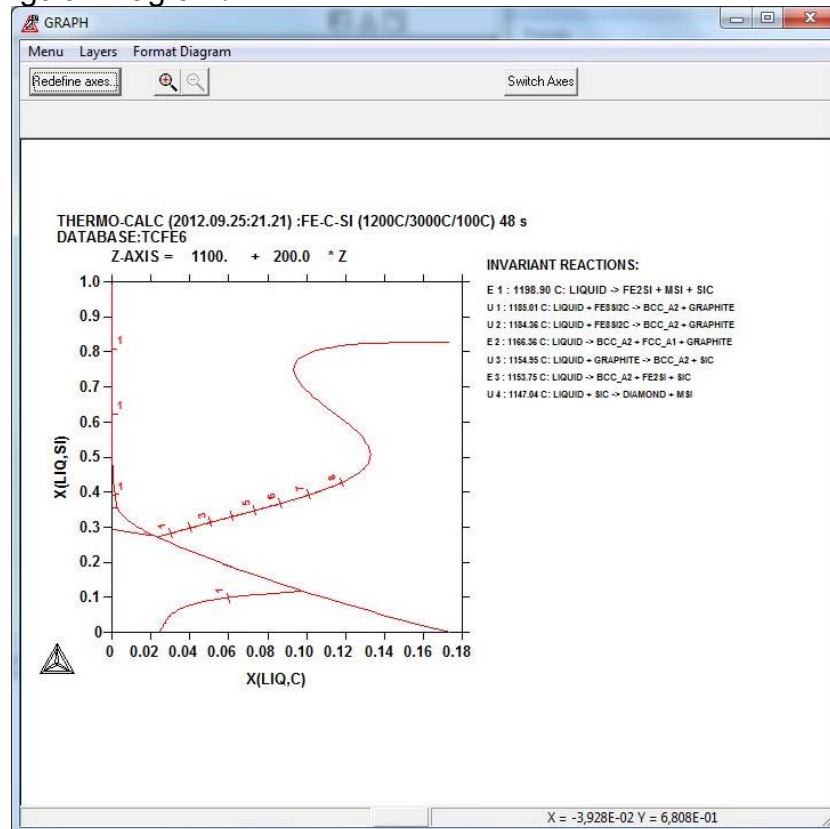
- 5.3. Нажатием кнопки **Monovariant Lines** запустить расчет. В окне **GLOBAL** отметить пункт **Use Global Minimization** и нажать кнопку **Next**.



После окончания расчета откроется окно **GRAPH** с построенными в проекции на концентрационный треугольник линиями моновариантных превращений.



5.4. Отобразить линии моновариантных превращений на графике в прямоугольных осях. Для этого в главном меню окна **GRAPH** выбрать пункт **Format Diagram** и снять галочку с пункта **Triangular Diagram**.



5.5. Задать масштаб осей по наибольшему и наименьшему значению, установленному при выполнении п. 4.

5.6. Сохранить результат расчета в \*.exp файл.

6. Нанести ход затвердевания сплава на проекцию моновариантных линий, полученную при выполнении п. 5.

6.1. В главном меню окна **GRAPH** выбрать пункт **Menu** и **Append/Remove file(s)...** . В появившемся окне **APPEND/REMOVE** нажать кнопку **Add...** и выбрать файл с ходом затвердевания сплава, сохраненный при выполнении п. 4.

6.2. Зафиксировать, в области выделения какой первичной фазы расположена точка состава сплава, какие этапы затвердевания в равновесных условиях он проходит.

6.3. Сохранить результат в \*.exp и \*.jpg файлах.

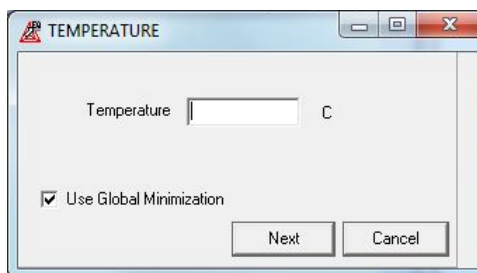
6.4. Полученную диаграмму с описанием этапов затвердевания (п. 6.2) привести в отчете.

7. Рассчитать серию изотермических разрезов диаграммы состояния Fe-C-Si для следующих температур: на 5-10° выше температуры ликвидуса, при температуре ликвидуса, в интервале между температурой ликвидуса и температурой начала перитектического превращения, при температуре начала перитектического превращения, в температурном интервале перитектического превращения, при температуре окончания перитектической реакции, в интервале от температуры окончания перитектического превращения до солидуса, при температуре солидуса, на 5-10° ниже температуры солидуса, а также политермический разрез при Si = 2 % ат.

7.1. Выбрать на панели инструментов окна **MAIN** пиктограмму .

7.2. В открывшемся окне **TERNARY** на вкладке **Periodic Table** в списке **Database** выбрать **TCFE6**; на поле периодической системы элементов нажать кнопки **Fe**, **C**, **Si**. Выбранные элементы будут отображены в поле **Selected Elements**.

7.3. Нажать кнопку **Isothermal Section**. В открывшемся окне **TEMPERATURE** указать ее значение в соответствующих единицах, поставить галочку в поле **Use Global Minimization** и нажатием на кнопку **Next** запустить расчет.



- После окончания расчета откроется окно **GRAPH** с построенным изотермическим сечением. Необходимо задать следующий масштаб осей: X от 0 до 0,06 и Y от 0 до 0,1.
- 7.4. Нанести на поле диаграммы линии сетки, выбрав в главном меню окна **GRAPH** пункт **Format Diagram** и поставить галочку у пункта **Raster**.
  - 7.5. Определить, в какой фазовой области при данной температуре находится точка состава сплава, визуализировав обозначение этой области путем активации кнопки **Add Label** и щелчком в соответствующем поле диаграммы.
  - 7.6. Сохранить результат расчета в файле с расширением \*.jpg.
  - 7.7. Прodelать последовательно расчеты для всех необходимых температур.
  - 7.8. Для расчета политермического разреза задать состав материала, используя кнопку **Material...** панели инструментов главного окна программы Thermo-Calc. В дереве материалов открывшегося окна **SELECT MATERIAL** выбрать ветку **My Materials** и файл **FeCSi.mtl**. Для выбора состава сплава нажать кнопку **Select**.
  - 7.9. В появившемся диалоговом окне **MATERIAL CALCULATIONS** проверить состав сплава и нажать кнопку **Diagram Map**.
  - 7.10. В расширенном окне **MATERIAL CALCULATIONS** задать параметры. Для оси Y: отображаемая переменная  $T$ , Min равным 1000 °C, Max равным 1600 °C. Для оси X: отображаемая переменная  $X(C)$ , Min равным 0, Max равным 2. Нажать кнопку **Next**. По окончании расчета открывается окно **GRAPH**, в котором отображается искомый политермический разрез.
  - 7.11. Нанести на график линии сетки, расставить обозначения фазовых областей.
  - 7.12. Проследить и описать температурную эволюцию фазовых границ и соответствующее изменение положения точки состава сплава относительно границ фазовых областей. Полученные диаграммы и результаты их изучения привести в отчете.
8. Сформулировать выводы по работе.

## **Занятие 6. Моделирование равновесного затвердевания сплавов**

### *Цели занятия*

1. Изучение методики расчета равновесного затвердевания многокомпонентного сплава.
2. Изучение способов выполнения вычислений с использованием программного комплекса Thermo-Calc.
3. Формирование навыков описания и анализа результатов вычислительных экспериментов.

### *Задачи занятия*

1. Изучение способов создания описания нового материала, расчета параметров равновесного затвердевания многокомпонентного сплава, определения переменных, функций и таблиц пользователя, вывода результатов вычислений программного комплекса Thermo-Calc в численном виде.
2. Выполнение расчетов политемического разреза и параметров затвердевания в равновесных условиях промышленного сплава (стали). Построение термической кривой, зависимостей коэффициентов распределения компонентов между фазами, состава фаз в зависимости от доли выделившейся твердой фазы.
3. Построение и анализ температурных зависимостей теплофизических характеристик сплава в интервале затвердевания.

### *Теоретические положения для самостоятельного изучения*

Математические соотношения, используемые при расчете температурно-концентрационных зависимостей количества, состава фаз и теплофизических параметров сплава при равновесном затвердевании. Алгоритм расчета равновесной кристаллизации сплава.

### *Рекомендуемая литература*

1. *Голод В.М., Савельев К.Д.* Вычислительная термодинамика в материаловедении: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. – 218 с.
2. *Захаров А.М.* Диаграммы состояния двойных и тройных систем. – М.: Металлургия, 1990. – 240 с.
3. *Савельев К.Д., Голод В.М.* Моделирование процессов и объектов в металлургии. Термодинамическое моделирование многокомпонентных литейных сплавов на основе железа: Курс лекций. - СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. - 63 с.

### *Порядок выполнения практической работы*

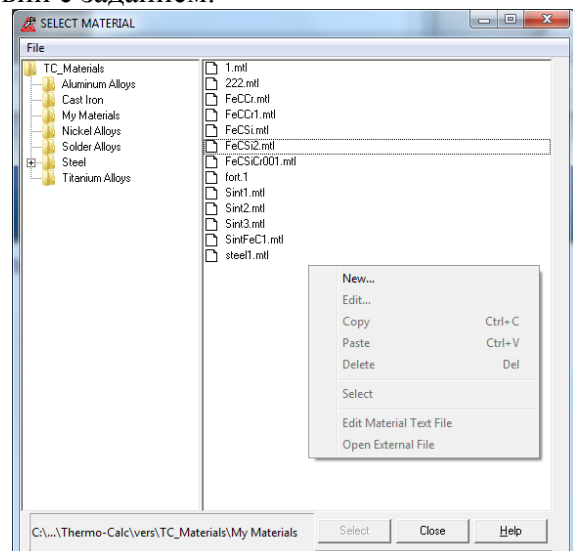
1. Повторить следующий учебный материал: понятие коэффициента распределения компонентов между фазами, микроликвация компонентов в твердой фазе, закономерности затвердевания двух- и трехкомпонентных сплавов в равновесных условиях [1-3]. Составить краткий конспект по результатам самостоятельного изучения указанных выше теоретических положений.
2. Создать новый материал (сталь) в соответствии с заданием.

2.1. Для этого в главном окне программы

нажмите кнопку **Material...**

В дереве сплавов открывшегося окна **SELECT MATERIAL** выбрать **My Materials**. В правом поле окна нажать правую кнопку мыши и выбрать пункт **New...**

2.2. В открывшемся окне **CREATE MATERIAL** задать имя материала в окне **Material Name**, в списке **Database** выбрать **TCFE6**, в списке **Amount Unit** задать **Mass-percent**.





CREATE MATERIAL

Material Name:

Database: TCFE6

Amount Unit: Mass-percent

No	Element	Dependent	Amount
1		<input checked="" type="checkbox"/>	

Delete Element Add Element

Element	Amount
---------	--------

Save As... Save Exit Help

2.3. В поле **Element** задать символ основы сплава – **FE**. Поставить галочку в поле **Dependent**. Нажать кнопку **Add Element**. В нижнем поле появится строчка обозначения элемента-основы системы **FE** с количеством (100) и статусом **DEPENDENT**.

2.4. Последовательно добавить в систему все легирующие элементы системы с составом, соответствующим среднему, выбрав в поле **Element** символ элемента, указав в поле **Amount** его количество и нажав кнопку **Add Element**.

2.5. Для поиска состава сплава используйте сервис сайта [www.protect.gost.ru](http://www.protect.gost.ru), выбрав ГОСТ 977-88 «Отливки стальные. Общие технические условия».

CREATE MATERIAL

Material Name: 08ГДНФЛ

Database: TCFE6

Amount Unit: Mass-percent

No	Element	Dependent	Amount
8		<input type="checkbox"/>	

Delete Element Add Element

Element	Amount	
FE	96,35	DEPENDENT
C	0,1	
SI	0,3	
MN	0,8	
CU	1	
NI	1,35	
V	0,1	

Save As... Save Exit Help

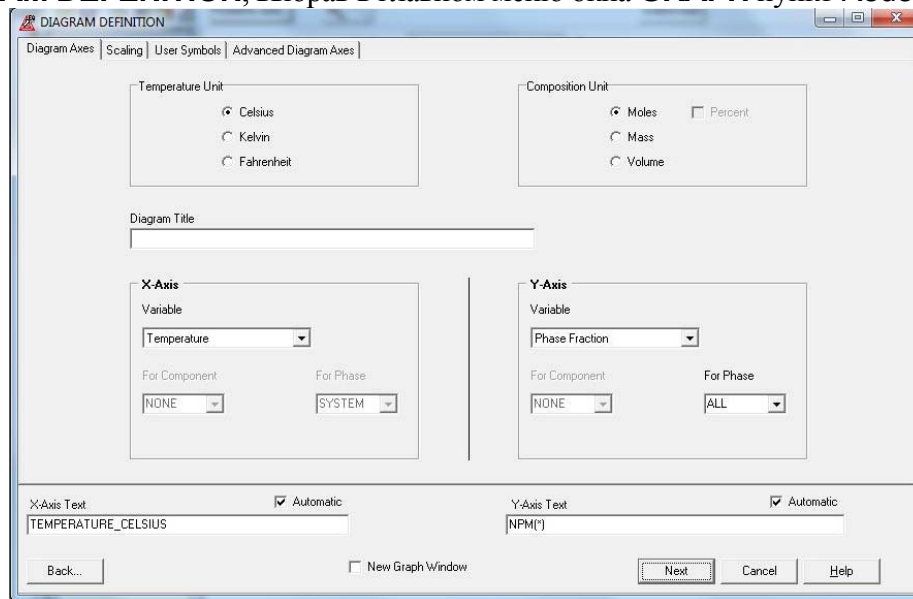
2.6. После ввода количества всех элементов нажать кнопку **Save**. Задайте имя файла. Нажмите кнопку **Сохранить**.

2.7. Закройте окно **CREATE MATERIAL**, нажав кнопку **Exit**.

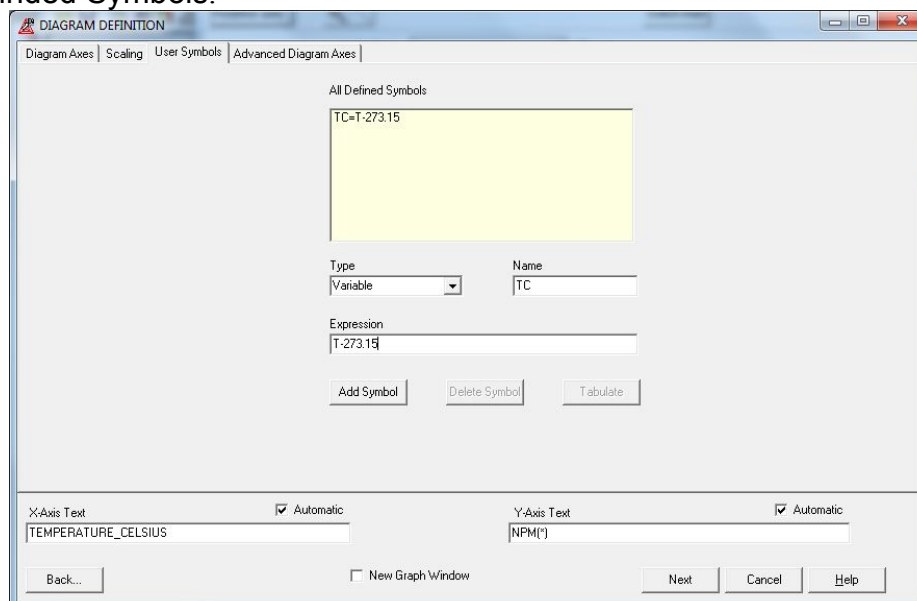
3. Постройте политермический разрез для сплава, выбрав в качестве элемента, состав которого будет изменяться, углерод. Сохраните политермический разрез. Приведите его в отчете с описанием особенностей положения сплава на диаграмме состояния и хода его кристаллизации.
4. Выполните расчет хода равновесного затвердевания сплава. Получите картину распределения количества фаз в зависимости от температуры. Сохраните полученный график. Приведите его в отчете с описанием характера хода установленных зависимостей.
5. Постройте термическую кривую затвердевания сплава (см. п. 5.6). Приведите ее в отчете с описанием установленных особенностей. Приведите спектр выделения твердой фазы в мольных единицах.

5.1. Для этого используйте способ вывода информации в цифровом виде. Для этого необходимо будет задать в программе две новые переменные (температура в градусах Цельсия и доля твердой фазы), создать таблицу их значений и визуализировать ее.

5.2. Для определения переменной «температура в градусах Цельсия» откройте окно **DIAGRAM DEFINITION**, выбрав в главном меню окна **GRAPH** пункт **Redefine Axis...**

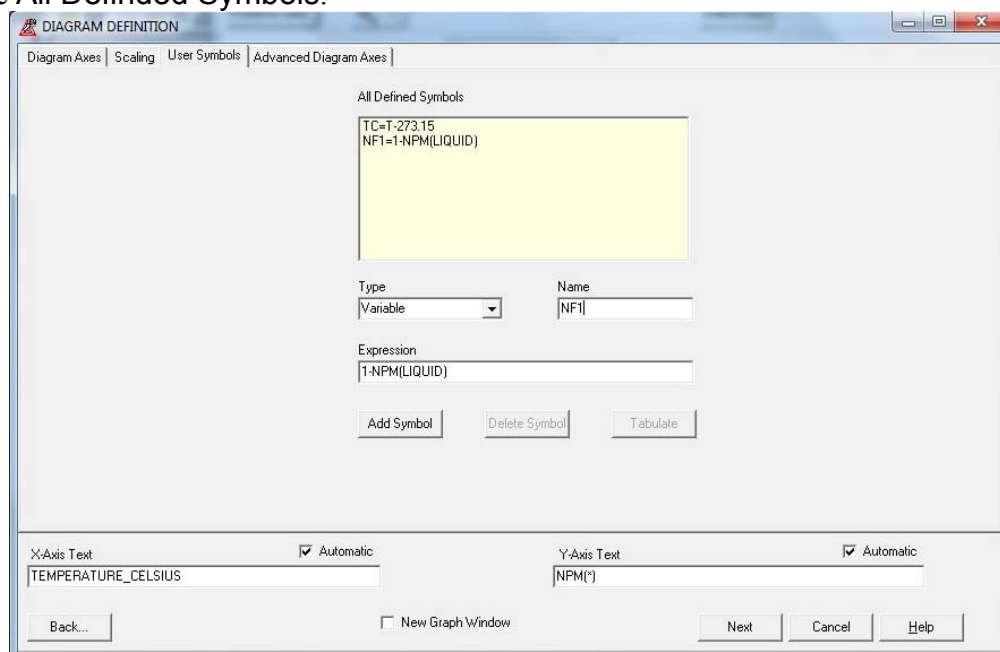


На вкладке **User Symbols** выберите в списке **Type** тип определяемого объекта **Variable** (переменная), задайте в поле **Name** ее имя **TC** (произвольный правильный идентификатор). В поле **Expression** введите определяющее ее значение соотношение:  $T-273.15$ . Нажмите кнопку **Add Symbol**. Выражение  $TC=T-273.15$  появится в информационном поле **All Defined Symbols**.

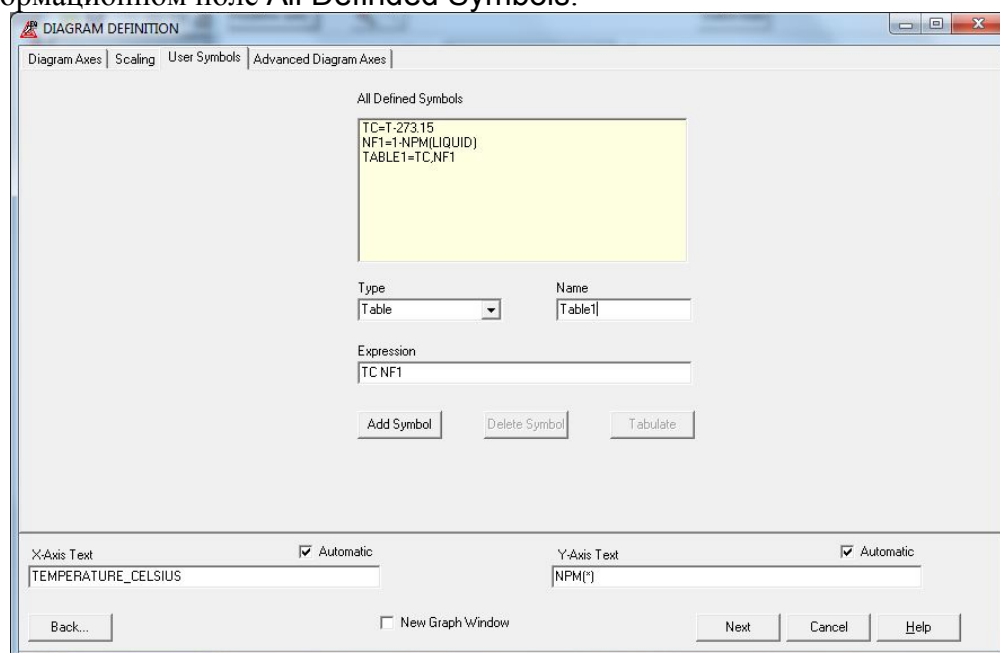




5.3. Далее определите переменную «мольная доля твердой фазы». В списке **Type** выберите тип определяемого объекта **Variable** (переменная), задайте в поле **Name** ее имя *NF1* (произвольный правильный идентификатор). В поле **Expression** введите определяющее ее значение соотношение:  $1-NPM(LIQUID)$ .  $NPM(LIQUID)$  – это внутренняя переменная программы, которая показывает относительное мольное ( $M$ ) количество ( $N$ ) фазы ( $P$ ) жидкость (*LIQUID*). Другими словами мольную долю жидкой фазы<sup>1</sup>. Нажмите кнопку **Add Symbol**. Выражение  $NF1=1-NPM(LIQUID)$  появится в информационном поле **All Defined Symbols**.

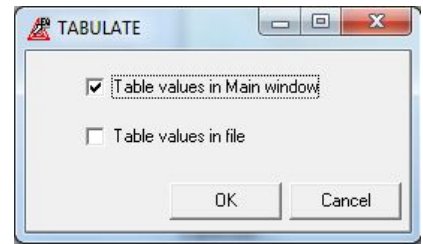


5.4. Определите имя и содержание таблицы, в которую будут входить температура и доля твердой фазы. В списке **Type** выберите тип определяемого объекта **Table** (таблица), задайте в поле **Name** ее имя *Table1* (произвольный правильный идентификатор). В поле **Expression** введите список входящих в нее переменных в нужном порядке через пробел: *TC NF1*. Нажмите кнопку **Add Symbol**. Выражение  $Table1=TC,NF1$  появится в информационном поле **All Defined Symbols**.

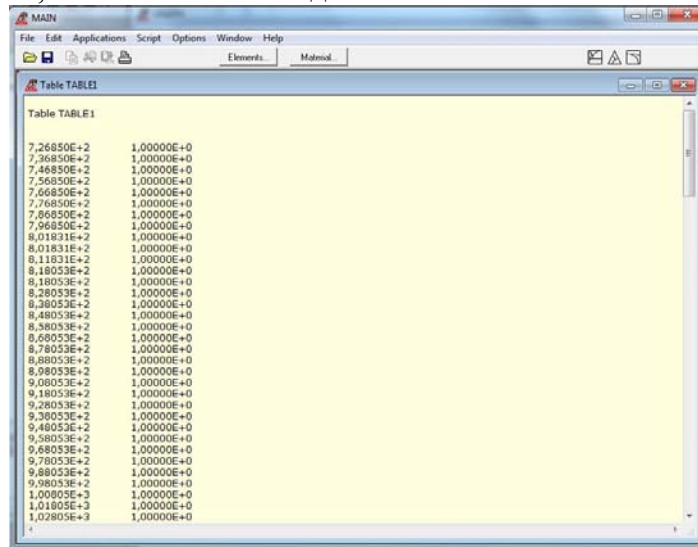


<sup>1</sup> Для получения значения мольной доли другой фазы, например, аустенита, необходимо в скобках указать ее обозначение: *FCC\_AI*.

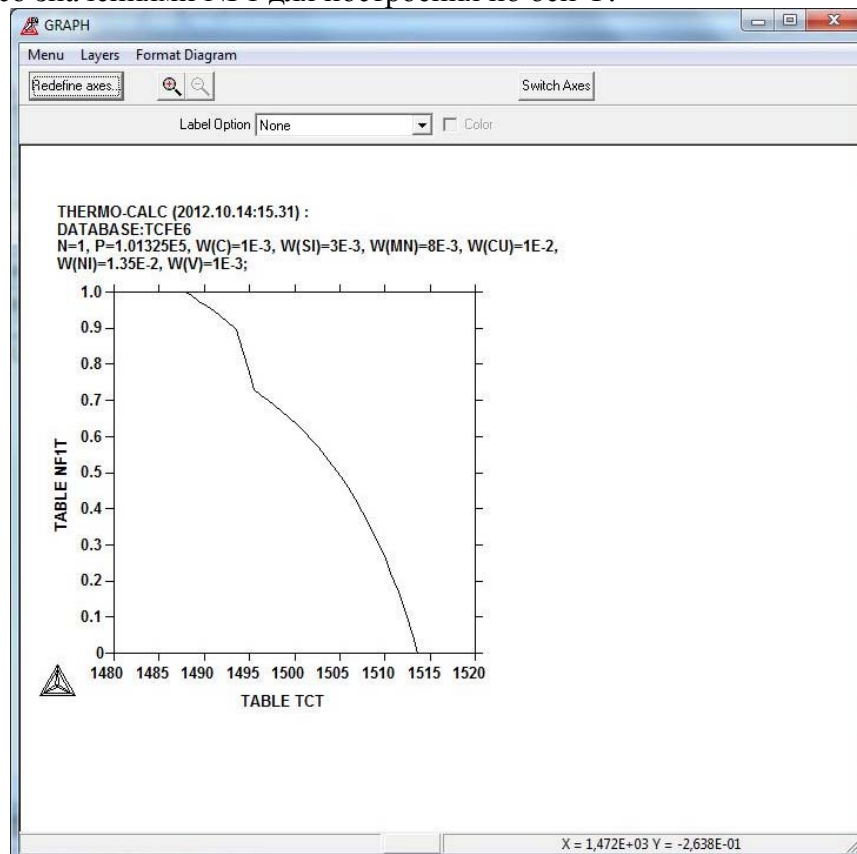
5.5. Выведите значения изучаемых переменных в виде таблицы. Для этого выделите в информационном поле All Definded Symbols строку  $Table1=TC,NF1$  и нажмите кнопку Tabulate. В открывшемся окне **TABULATE** поставьте галочку против опции Table values in Main window. Нажмите кнопку Ok.



В окне **MAIN** появится окно Table **TABLE1** с числовой информацией, которую нужно привести в отчете, исключив лишние данные.



5.6. Для построения термической кривой затвердевания сплава необходимо определить дополнительные таблицы, в первой из которых будут собраны только значения TC, а во второй - только NF1. Каждой таблице нужно присвоить свое имя. При построении графика выбрать на вкладке Advanced Diagram Axes окна **DIAGRAM DEFENITION** в поле User Symbols имя таблицы со значениями TC для построения по оси X, и имя таблицы со значениями NF1 для построения по оси Y.



6. Постройте графики зависимости состава твердого раствора от количества выделившейся твердой фазы для двух-трех компонентов (по указанию преподавателя) исследуемого сплава. Приведите их в отчете с описанием характера возможной микроликвации компонентов на разных этапах затвердевания сплава. Для построения графика создайте таблицу, в которую будут включены массовые доли компонентов в фазах, например, углерода в аустените:  $W(FCC\_A1, C)$  и функцию для расчета доли твердой фазы (аналогично переменной NF1).

7. Постройте графики изменения энтальпии фаз от температуры, теплоемкости фаз от температуры. Для одновременного отображения нескольких кривых используйте табличный способ вывода. Обозначение молярной энтальпии: НМ – для системы, НМ(LIQUID) – для жидкой фазы, НМ(FCC\_A1) – для ГЦК твердого раствора и т.д.

Для расчета теплоемкости (производная от энтальпии по температуре) необходимо задать функции пользователя, присвоив им имена, а в поле **Espression** ввести комбинацию имени функции, от которой берется производная, знака «точка» и обозначения переменной, по которой производится дифференцирование (температура): для системы НМ.Т, для жидкости НМ(LIQUID).Т (имя переменной, например, CL), для ГЦК твердого раствора НМ(FCC\_A1).Т (имя переменной, например, CF). Также необходимо создать пользовательскую функцию – среднюю теплоемкость фаз, задав в поле **Espression** комбинацию:

$$NPM(LIQUID)*CL+NPM(FCC\_A1)*CF+... .$$

Для одновременного вывода на график кривых теплоемкостей системы, всех фаз и средней теплоемкости фаз необходимо использовать табличный способ вывода.

Опишите установленные особенности хода кривых. На основании полученных данных определите полную теплоту затвердевания сплава.

8. Рассчитайте коэффициенты распределения двух-трех компонентов (по указанию преподавателя) между выбранным твердым раствором (фазой переменного состава) и жидкостью. Для этого используйте способ ввода переменных пользователя и табличный способ вывода информации. Обозначение мольной доли X компонента «углерод» в фазе «жидкость»: X(LIQUID, C).

Опишите закономерности перераспределения компонентов между жидкой и выбранной твердой фазой на различных этапах кристаллизации.

9. Сформулируйте выводы по работе.

## Раздел 3. Кинетика затвердевания сплавов

### Занятие 7. Моделирование неравновесного затвердевания сплавов

#### *Цели занятия*

1. Изучение методики расчета затвердевания многокомпонентного сплава с использованием модели нормальной неравновесной кристаллизации Шейля.
2. Изучение способов выполнения вычислений с использованием программного комплекса Thermo-Calc.
3. Формирование навыков описания и анализа результатов вычислительных экспериментов.

#### *Задачи занятия*

1. Изучение способов расчета параметров затвердевания по модели Шейля многокомпонентного сплава.
2. Выполнение расчетов параметров затвердевания в неравновесных условиях синтетического сплава системы Fe-C-Si. Построение зависимостей состава фаз от доли выделившейся твердой фазы, термической кривой затвердевания сплава.
3. Построение и анализ температурных зависимостей количества выделяющихся фаз в интервале затвердевания.
4. Сопоставление хода затвердевания сплава в равновесных и неравновесных условиях затвердевания.

#### *Теоретические положения для самостоятельного изучения*

Модель нормальной неравновесной кристаллизации Шейля: допущения модели, физический смысл модели, закономерности распределения компонентов в фазах.

Прямая и обратная ликвация компонентов в твердой фазе.

Математические соотношения, используемые при расчете температурно-концентрационных зависимостей количества, состава фаз и теплофизических параметров сплава при неравновесном затвердевании. Алгоритм расчета неравновесной кристаллизации сплава.

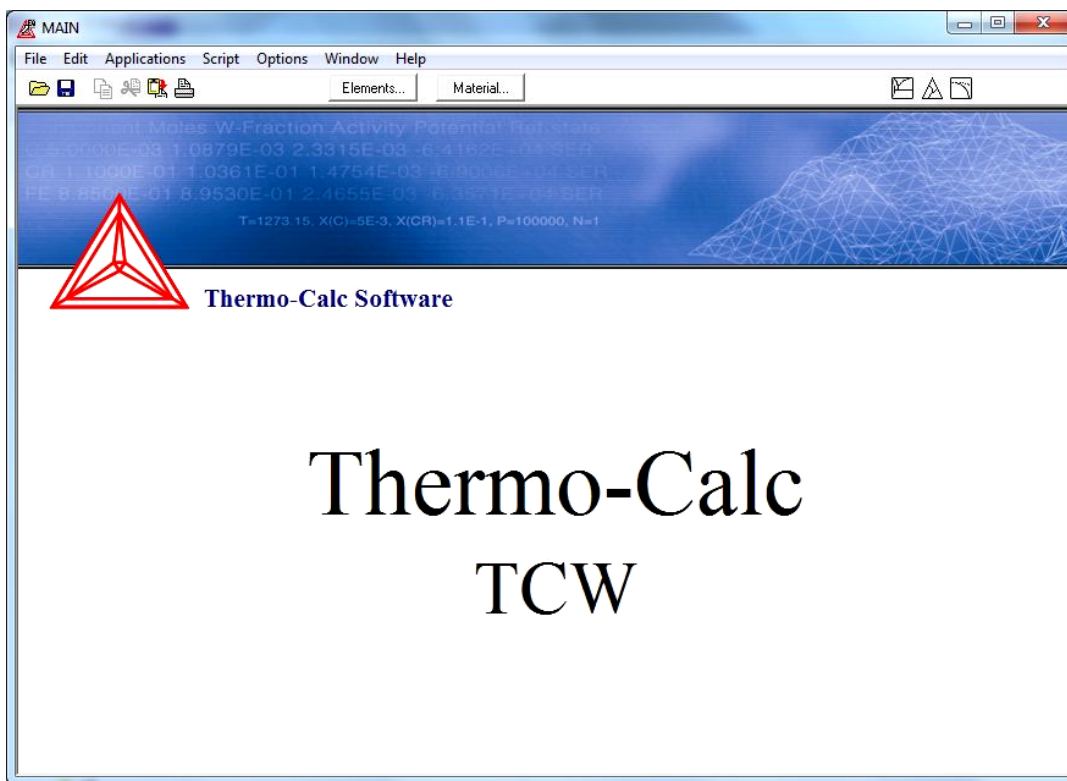
#### *Рекомендуемая литература*

1. Голод В.М., Савельев К.Д. Вычислительная термодинамика в материаловедении: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2010. – 218 с.
2. Савельев К.Д., Голод В.М. Моделирование процессов и объектов в металлургии. Термодинамическое моделирование многокомпонентных литейных сплавов на основе железа: Курс лекций. - СПб.: Изд-во СПбГТУ, 2001. – 63 с.
3. Голод В.М., Савельев К.Д. Теория литейных процессов: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехнического университета, 2012. – 98 с.

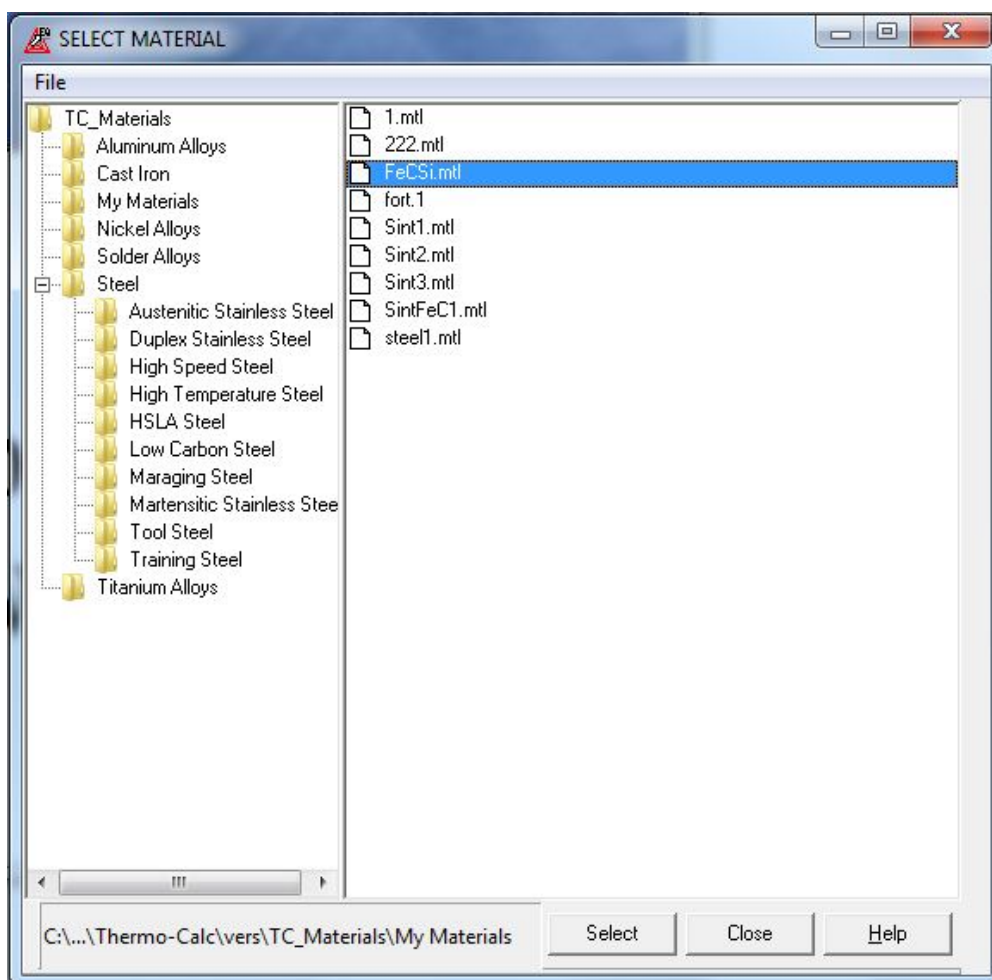
#### *Порядок выполнения практической работы*

1. Изучить материал, вынесенный на самостоятельное освоение [1-3]. Составить краткий конспект основных теоретических положений, математических соотношений и алгоритмов.
2. Рассчитать параметры неравновесного затвердевания сплава.
  - 2.1. Из списка материалов пользователя выбрать сплав железа с 2 % ат. кремния и 1 % ат. углерода.

В главном окне **MAIN** программы нажать кнопку Material...



В дереве сплавов открывшегося окна **SELECT MATERIAL** выбрать My Materials. В правом поле окна из списка выбрать пункт FeCSi.mtl и нажать кнопку Select.



2.2. В открывшемся окне **MATERIAL CALCULATIONS** проверить состав сплава и перейти к заданию параметров расчет неравновесного затвердевания, нажав на кнопку



**MATERIAL CALCULATIONS**

Material | Phases |

**Material:** FECSI  
**Database:** TCFE6

**Temperature** **Pressure**  
726,85 C 101325 Pa

**Components** **Mole-percent**

Si	2
C	1
Dependent: FE	97

Single Equilibrium

Single Axis Step

Diagram Map

Save As... Close Help

2.3. В открывшемся окне **SCHEIL CONDITIONS** указать начальную температуру расчета **Start Temperature** равной 1550 °C, шаг расчета по температура **Temperature Step** равным 0,2 °C. Запустить расчет нажатием кнопки **Next**.

**SCHEIL CONDITIONS**

Number of Missing Conditions: 0

Start Temperature: 2000 C

Temperature Step: 1 C

Composition Unit: Mole-percent

Allow BCC -> FCC

Component	Value	Fast Diffuser
C	1	<input type="checkbox"/>
FE		<input type="checkbox"/>
SI	2	<input type="checkbox"/>

Redefine Components...

All Defined Conditions in SI Units

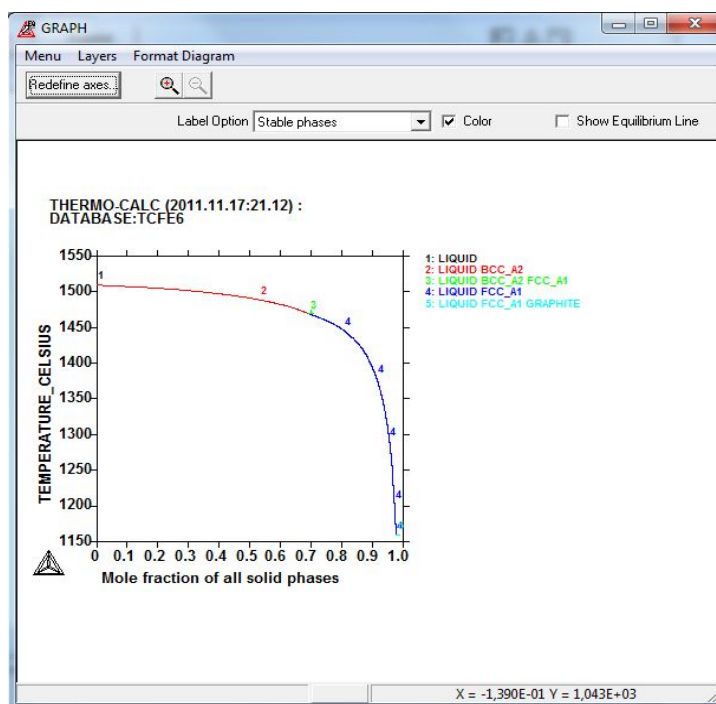
```
T=2273,15
X(C)=0,01
X(SI)=0,02
```

Delete

Next Cancel Help

2.4. После завершения расчета программа выводит окно **GRAPH**, в котором отображается «термическая» кривая затвердевания сплава в виде зависимости температуры от

доли выделившейся твердой фазы (последняя играет роль «времени») с разделением цветом этапов затвердевания сплава.



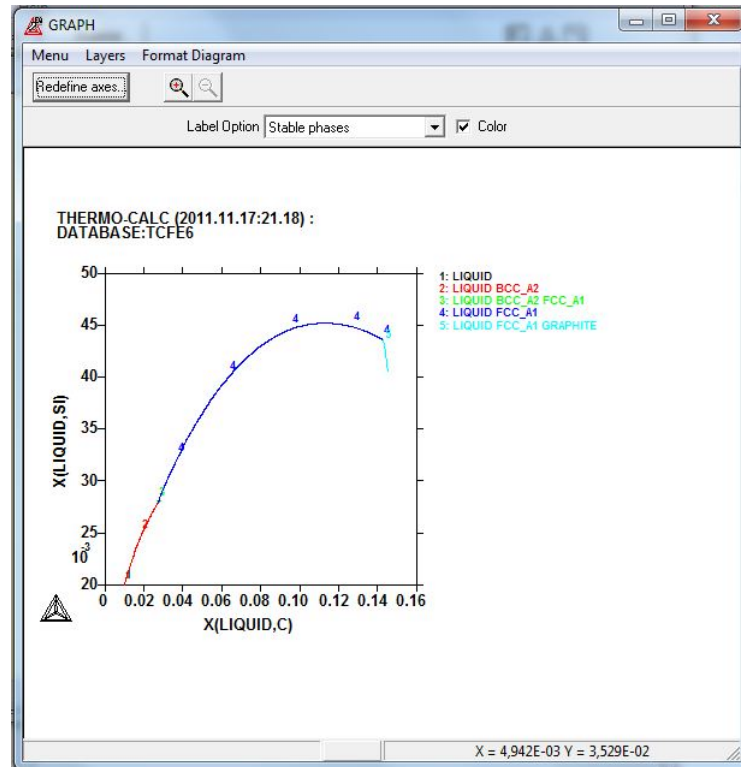
Сохраните изображение в графическом формате. Приведите его в отчете с описанием установленных особенностей.

3. Переопределить параметры отображения результатов расчетов в графическом окне **GRAPH** для демонстрации хода затвердевания сплава. Для этого нажмите кнопку **Redefine axes...**

3.1. В открывшемся окне **SCHEIL DIAGRAM** по оси X выведите мольную долю углерода в жидкости (Variable – Mole fraction, For Component – C, Phase – LIQUID), а по оси Y – мольную долю кремния в жидкости (Variable – Mole fraction, For Component – Si, Phase – LIQUID). Нажмите кнопку **Next**.



3.2. Содержимое окна **GRAPH** изменится на следующее:



3.3. Измените масштаб по осям: X – от 0 до 0,2; Y – от 0 до 0,05, используя пункт главного меню окна **GRAPH** Format Diagram и Scaling.

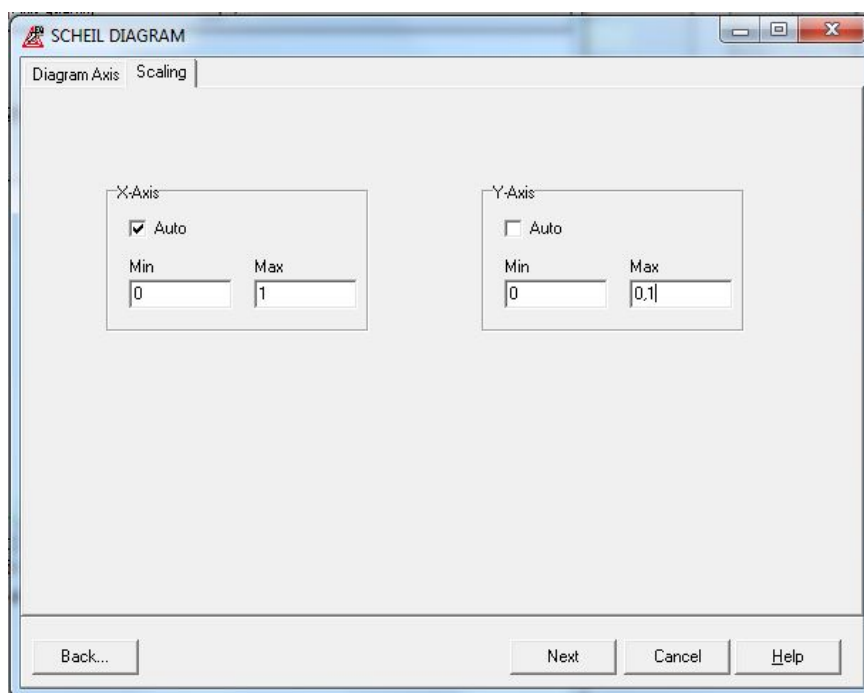
3.4. Сохраните полученную зависимость в графическом формате и в файле \*.exp. Приведите графики в отчете с описанием характера установленных особенностей.

4. Постройте графики зависимости состава по углероду и кремния ГЦК твердого раствора от количества выделившейся твердой фазы. Нажмите кнопку **Redefine axes...** окна **GRAPH**.

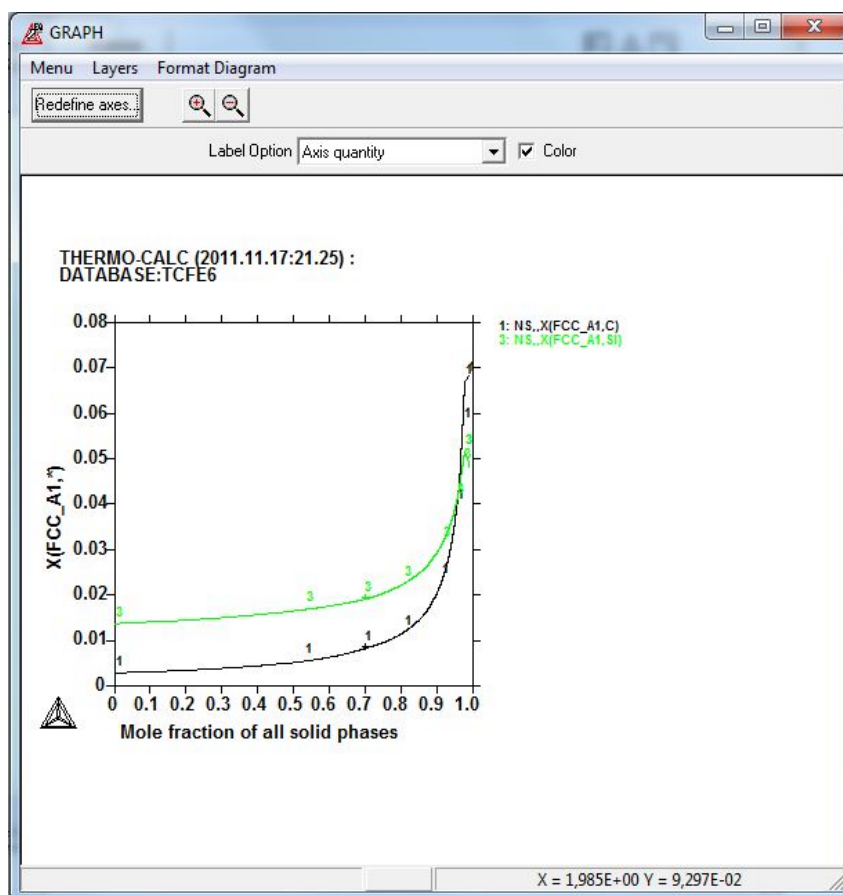
4.1. В окне **SCHEIL DIAGRAM** по оси X отобразите долю твердой фазы (Variable – NS, Phase – NONE), а по оси Y – мольную долю всех компонентов в фазе ГЦК (Variable – Mole fraction, For Component – ALL, Phase – FCC\_A1). Нажмите кнопку **Next**.



4.2. В полученном окне **GRAPH** измените масштаб по оси Y от 0 до 0,08, используя пункт главного меню окна **GRAPH Format Diagram** и **Scaling**. Работайте со вкладкой **Scaling** окна **SCHEIL DIAGRAM**. Нажмите кнопку **Next**.

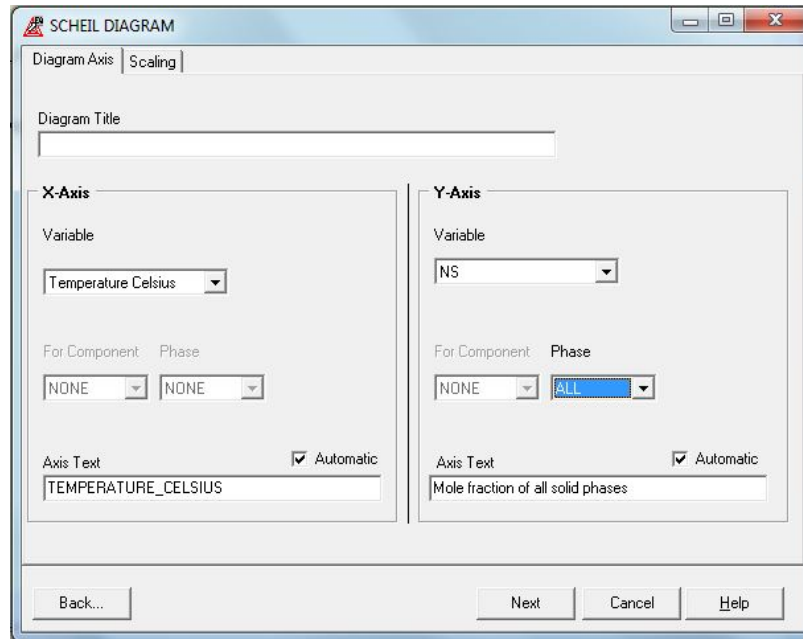


4.3. При этом кривая для железа уйдет из поля зрения.

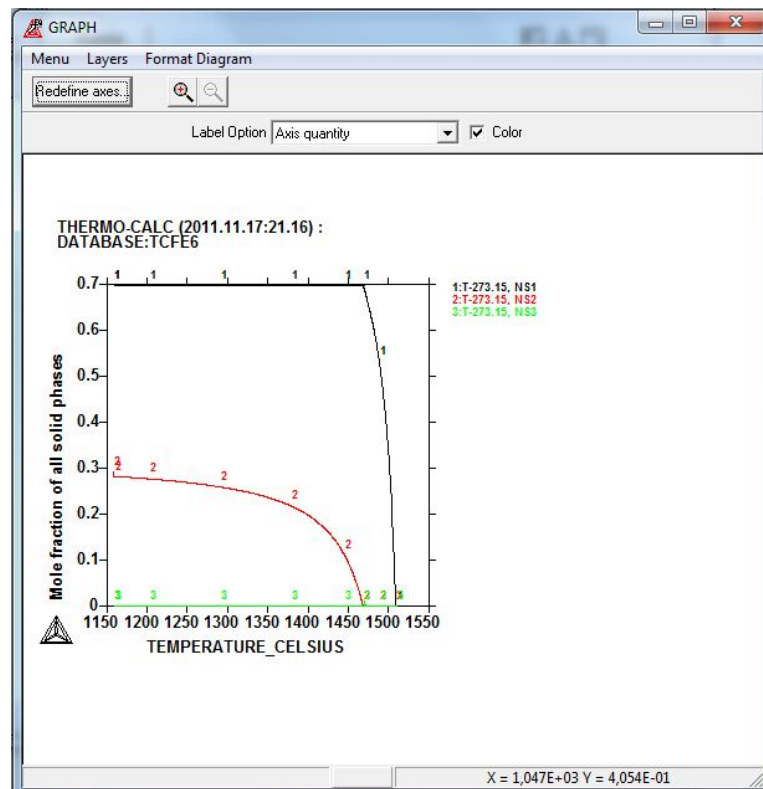


4.4. Сохраните результаты расчета в графическом формате. Приведите их в отчете с описанием характера микроликвации компонентов на разных этапах затвердевания сплава.

5. Постройте температурные зависимости количества выделившихся фаз.
- 5.1. В окне **SCHEIL DIAGRAM** по оси X отобразите температуру (Variable – Temperature Celsius), а по оси Y – мольную долю всех твердых фаз (Variable – NS, Phase – ALL). Нажмите кнопку Next.

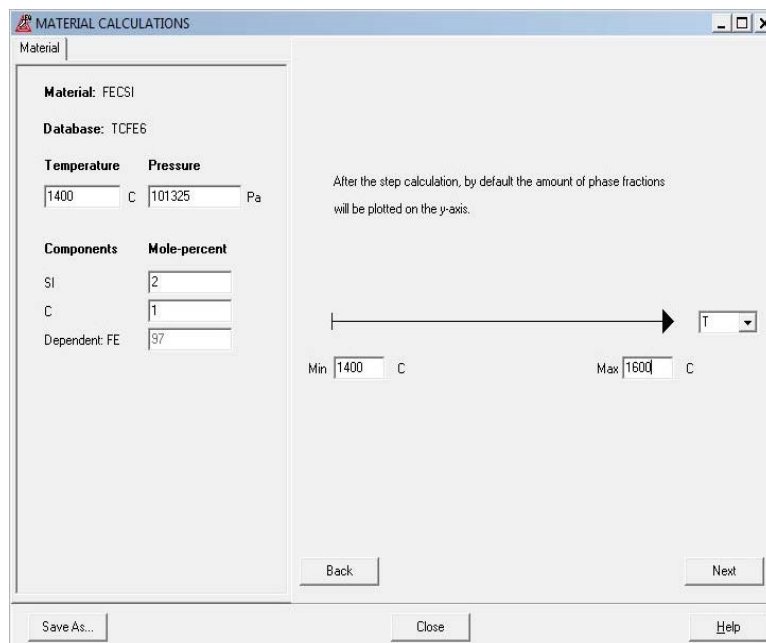


- 5.2. Полученный вид окна **GRAPH** приведен на рисунке ниже. Расшифруйте, какие твердые фазы обозначены цифрами 1, 2, 3.

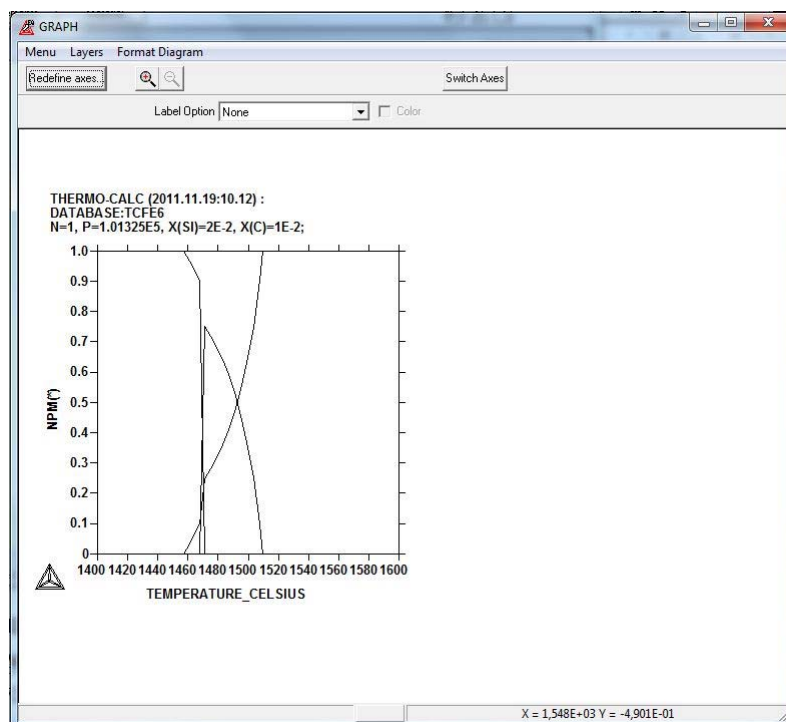


- 5.3. Установите по графику, в каком количестве присутствуют в структуре сплава каждая фаза на момент окончания затвердевания. Результаты приведите в отчете.
- 5.4. Сохраните график в графическом формате. Приведите полученные зависимости в отчете с их описанием и указанием на характерные особенности хода в отличие от условий равновесной кристаллизации, исследованных на занятии № 5.

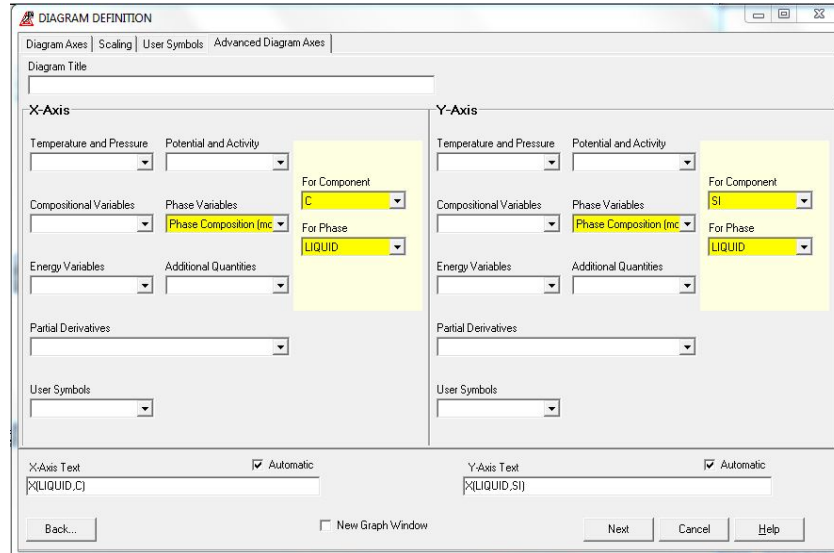
6. Рассчитайте ход затвердевания выбранного сплава в равновесных условиях.
- 6.1. В главном окне **MAIN** программы нажать кнопку **Material...**
  - 6.2. В дереве сплавов открывшегося окна **SELECT MATERIAL** выбрать **My Materials**. В правом поле окна из списка выбрать пункт **FeCSi.mtl** и нажать кнопку **Select**.
  - 6.3. В открывшемся окне **MATERIAL CALCULATIONS** проверить состав сплава и перейти к заданию параметров расчет неравновесного затвердевания, нажав на кнопку **Single Axis Step**.
  - 6.4. В расширенном окне **MATERIAL CALCULATIONS** задать параметры: **Temperature** (начальная температура расчета) равным  $1400\text{ }^{\circ}\text{C}$ , **Min** (минимальная температура вывода результатов, должна быть ниже или равна параметру **Temperature**) равным  $1400\text{ }^{\circ}\text{C}$ , **Max** (максимальная температура расчета) равным  $1600\text{ }^{\circ}\text{C}$ , нажать кнопку **Next**.



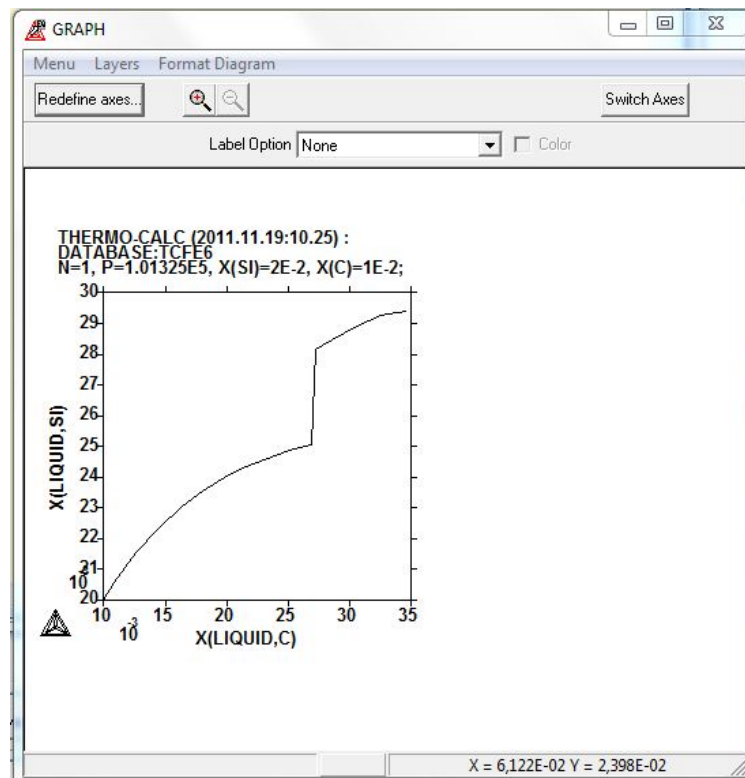
- 6.5. Открывается окно **GRAPH**, в котором отображается (по умолчанию) зависимость количества фаз от температуры.



6.6. Выбрать в главном меню окна **GRAPH** пункт **Format Diagram** и **Redefine Axis**. В открывшемся окне **DIAGRAM DEFINITION** на вкладке **Advanced Diagram Axis** – для оси X (**X-Axis**) в списке **Phase Variables** выбрать значение **Phase Composition (mole fraction)**; в списке **For Component** – **C**; в списке **For Phase** – **LIQUID**; – для оси Y (**Y-Axis**) в списке **Phase Variables** выбрать значение **Phase Composition (mole fraction)**; в списке **For Component** – **SI**; в списке **For Phase** – **LIQUID** и нажать кнопку **Next**.



Выбранная функция будет отображена на графике.



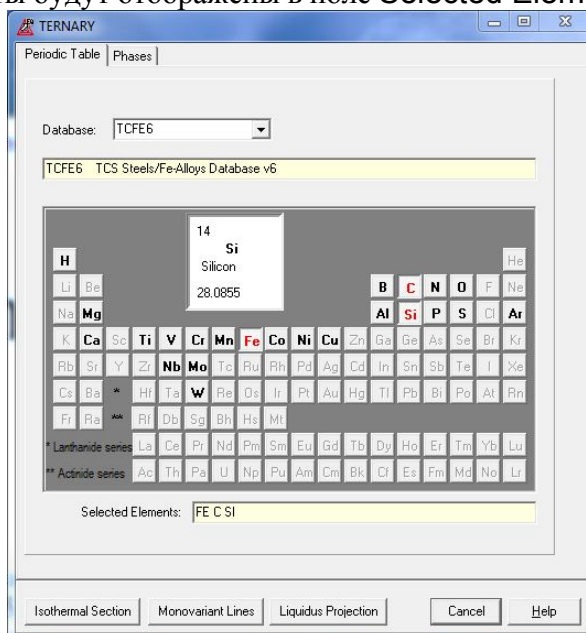
6.7. Изменить масштаб по осям: X – от 0 до 0,2; Y – от 0 до 0,05, используя пункт главного меню окна **GRAPH** **Format Diagram** и **Scaling**.

6.8. Сохранить результат в \*.exp файле, выбрав в главном меню окна **GRAPH** пункт **Menu** и **Save...**

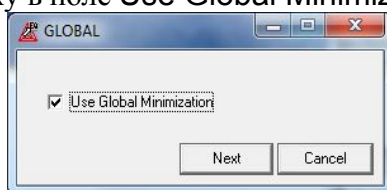
7. Постройте проекцию моновариантных превращений в системе Fe-C-Si на концентрационный треугольник.

7.1. Выбрать на панели инструментов окна **MAIN** пиктограмму .

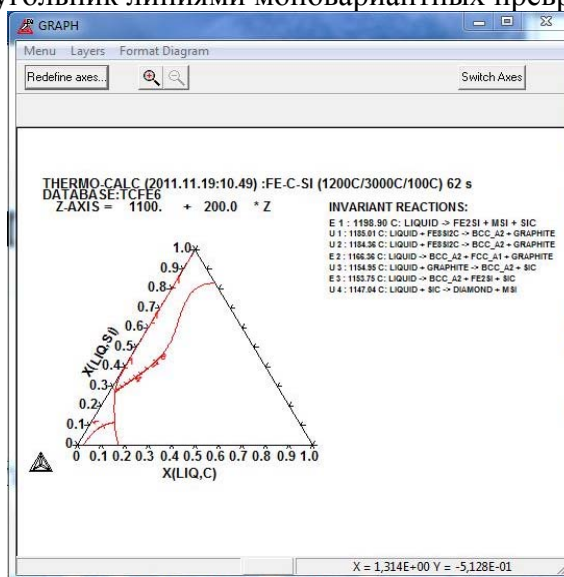
7.2. В открывшемся окне **TERNARY** на вкладке **Periodic Table** в списке **Database** выбрать TCFE6; на поле периодической системы элементов нажать кнопки Fe, C, Si. Выбранные элементы будут отображены в поле **Selected Elements**.



7.3. Нажатием кнопки **Monovariant Lines** запустить расчет. В открывшемся окне **GLOBAL** поставить галочку в поле **Use Global Minimization**.



После окончания расчета откроется окно **GRAPH** с построенными в проекции на концентрационный треугольник линиями моновариантных превращений.



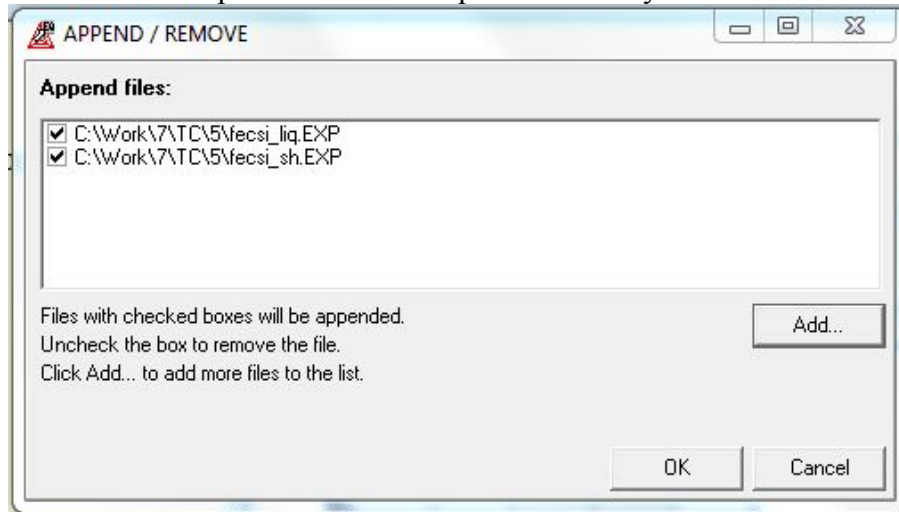
7.4. Отобразить линии моновариантных превращений на графике в прямоугольных осях. Для этого в главном меню окна **GRAPH** выбрать пункт **Format Diagram** и снять галочку с пункта **Triangular Diagram**.

7.5. Измените масштаб по осям: X – от 0 до 0,2; Y – от 0 до 0,05, используя пункт главного меню окна **GRAPH** **Format Diagram** и **Scaling**.

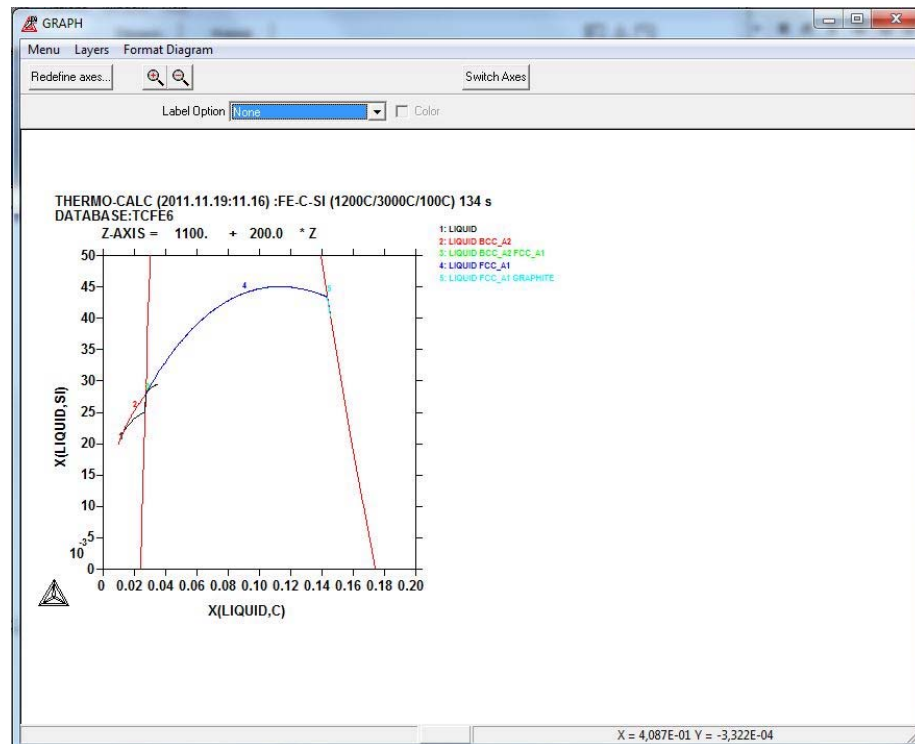
7.6. Сохранить результат расчета в \*.exp файл.

8. Нанесите на проекцию линий моновариантных превращений на концентрационный треугольник ход затвердевания сплава в равновесных и неравновесных условиях.

8.1. В главном меню окна **GRAPH** выбрать пункт **Menu** и **Append/Remove file(s)...**. В появившемся окне **APPEND/REMOVE** нажать кнопку **Add...** и выбрать файлы с ходом затвердевания сплава в равновесных и неравновесных условиях.



8.2. Сохраните полученное изображение в графическом формате.



8.3. Сопоставьте особенности хода затвердевания при разных диффузионных условиях и опишите установленные особенности. Полученные результаты приведите в отчете.

9. Сформулируйте выводы по работе.

**Приложение 1**Температурные зависимости энергии Гиббса  ${}^0G_i^{\phi}$  некоторых чистых элементов  $i$ 

${}^0G_{Al}^{fcc} = -7976.151 + 137.093038 \cdot T - 24.3671976 \cdot T \cdot \ln(T) - 1.884662e-3 \cdot T^2 - 0.877664e-6 \cdot T^3 + 74092/T;$	$T \leq 700$
${}^0G_{Al}^{fcc} = -11276.24 + 223.048446 \cdot T - 38.5844296 \cdot T \cdot \ln(T) + 18.531982e-3 \cdot T^2 - 5.764227e-6 \cdot T^3 + 74092/T;$	$700 < T \leq 933.47$
${}^0G_{Al}^{fcc} = -11278.378 + 188.684153 \cdot T - 31.748192 \cdot T \cdot \ln(T) - 1.231e28T^9;$	$T > 933.47$
${}^0G_{Al}^{liq} = {}^0G_{Al}^{fcc} + 11005.029 - 11.841867 \cdot T + 7.934e-20 \cdot T^7;$	$T \leq 933.47$
${}^0G_{Al}^{liq} = {}^0G_{Al}^{fcc} + 10482.382 - 11.253974 \cdot T + 1.231e28 \cdot T^9;$	$T > 933.47$
${}^0G_{Si}^{dia} = -8162.609 + 137.236859 \cdot T - 22.8317533 \cdot T \cdot \ln(T) - 0.001912904 \cdot T^2 - 3.552e-9 \cdot T^3 + 176667/T;$	$T \leq 1687$
${}^0G_{Si}^{dia} = -9457.642 + 167.281367 \cdot T - 27.196 \cdot T \cdot \ln(T) - 4.2037e30 \cdot T^9;$	$T > 1687$
${}^0G_{Si}^{liq} = {}^0G_{Si}^{dia} + 50696.36 - 30.099439 \cdot T + 2.0931e-21 \cdot T^7;$	$T \leq 1687$
${}^0G_{Si}^{liq} = {}^0G_{Si}^{dia} + 49828.165 - 29.559068 \cdot T + 4.2037e30 \cdot T^9;$	$T > 1687$
${}^0G_{Si}^{fcc} = {}^0G_{Si}^{dia} + 51000 - 21.8 \cdot T;$	
${}^0G_{Mg}^{hcp} = -8367.34 + 143.675547 \cdot T - 26.1849782 \cdot T \cdot \ln(T) + 0.48580e-3 \cdot T^2 + 78950/T - 1.393669e-6 \cdot T^3;$	$T \leq 923$
${}^0G_{Mg}^{hcp} = -14130.185 + 204.716215 \cdot T - 34.308800 \cdot T \cdot \ln(T) + 0.10382e29 \cdot T^9;$	$T > 923$
${}^0G_{Mg}^{liq} = -165.097 + 134.838617 \cdot T - 26.1849782 \cdot T \cdot \ln(T) + 0.48580e-3 \cdot T^2 + 78950/T - 1.393669e-6 \cdot T^3 - 8.017600e-20 \cdot T^7;$	$T \leq 923$
${}^0G_{Mg}^{liq} = -5439.869 + 195.324057 \cdot T - 34.308800 \cdot T \cdot \ln(T);$	$T > 923$
${}^0G_{Mg}^{fcc} = {}^0G_{Mg}^{hcp} + 2600.00 - 0.90 \cdot T;$	
${}^0G_{Zn}^{hcp} = -7285.787 + 118.470069 \cdot T - 23.701314 \cdot T \cdot \ln(T) - 1.712034e-3 \cdot T^2 - 1.264963e-6 \cdot T^3;$	$T \leq 692.68$
${}^0G_{Zn}^{hcp} = -11070.559 + 172.34566 \cdot T - 31.38 \cdot T \cdot \ln(T) + 4.7051e26 \cdot T^9;$	$T > 692.68$
${}^0G_{Zn}^{liq} = {}^0G_{Zn}^{hcp} + 7157.213 - 10.29299 \cdot T - 3.5896e-19 \cdot T^7;$	$T \leq 692.68$
${}^0G_{Zn}^{liq} = {}^0G_{Zn}^{hcp} + 7450.168 - 10.737066 \cdot T - 4.7051e26 \cdot T^9;$	$T > 692.68$
${}^0G_{Zn}^{fcc} = {}^0G_{Zn}^{hcp} + 2969.82 - 1.56968 \cdot T;$	
${}^0G_{Cu}^{fcc} = -7770.458 + 130.485235 \cdot T - 24.112392 \cdot T \cdot \ln(T) - 2.65684e-3 \cdot T^2 + 0.129223e-6 \cdot T^3 + 52478/T;$	$T \leq 1357.77$
${}^0G_{Cu}^{fcc} = -13542.026 + 183.803828 \cdot T - 31.38 \cdot T \cdot \ln(T) + 3.642e29 \cdot T^9;$	$T > 1357.77$
${}^0G_{Cu}^{liq} = {}^0G_{Cu}^{fcc} + 12964.736 - 9.511904 \cdot T - 5.849e-21 \cdot T^7;$	$T \leq 1357.77$
${}^0G_{Cu}^{liq} = {}^0G_{Cu}^{fcc} + 13495.481 - 9.922344 \cdot T - 3.642e29 \cdot T^9;$	$T > 1357.77$

## Приложение 2

Избыточная энергия Гиббса  ${}^{ex}G_{A-B}^{\phi}$  фаз некоторых двухкомпонентных систем A–B

$${}^{ex}G_{Al-Si}^{liq} = x_{Al} \cdot x_{Si} \cdot ((-11655,93 - 0,92934T) + (-2873,45 + 0,2945T) \cdot (x_{Al} - x_{Si}) + (2520) (x_{Al} - x_{Si})^2);$$

$${}^{ex}G_{Al-Si}^{fcc} = x_{Al} \cdot x_{Si} \cdot (-3423,91 - 0,09584T);$$

$${}^{ex}G_{Al-Mg}^{liq} = x_{Al} \cdot x_{Mg} \cdot (-11200 + 9,578T);$$

$${}^{ex}G_{Al-Mg}^{fcc} = x_{Al} \cdot x_{Mg} \cdot ((4945,7 - 1,318T) + (1594,4 - 0,973T) \cdot (x_{Al} - x_{Mg}));$$

$${}^{ex}G_{Al-Zn}^{liq} = x_{Al} \cdot x_{Zn} \cdot (10288 - 3,035T + (-810 + 0,471T) \cdot (x_{Al} - x_{Zn}));$$

$${}^{ex}G_{Al-Zn}^{fcc} = x_{Al} \cdot x_{Zn} \cdot ((6656 + 1,615T) + (6793 - 4,982T) \cdot (x_{Al} - x_{Zn}) + (-5352 + 7,261T) \cdot (x_{Al} - x_{Zn})^2);$$

$${}^{ex}G_{Al-Cu}^{liq} = x_{Al} \cdot x_{Cu} \cdot ((-66622 + 8,1T) + (46800 - 90,8T + 10T \ln(T)) \cdot (x_{Al} - x_{Cu}) + (-2812) \cdot (x_{Al} - x_{Cu})^2);$$

$${}^{ex}G_{Al-Cu}^{fcc} = x_{Al} \cdot x_{Cu} \cdot ((-53520 + 2T) + (38590 - 2T) \cdot (x_{Al} - x_{Cu}) + 1170 \cdot (x_{Al} - x_{Cu})^2);$$

$${}^{ex}G_{Cu-Mg}^{liq} = x_{Cu} \cdot x_{Mg} \cdot (-35864,5 + 2,84952T + (-7090,9) \cdot (x_{Cu} - x_{Mg}));$$

$${}^{ex}G_{Cu-Mg}^{fcc} = x_{Cu} \cdot x_{Mg} \cdot (-15908,5 - 1,50875T);$$