

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕРАВНОВЕСНОГО ПЕРИТЕКТИЧЕСКОГО ПРЕВРАЩЕНИЯ В СИСТЕМЕ Fe-C-M

Щербаков Ю.А., Голод В.М., Савельев К.Д.

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Ход затвердевания сплава в неравновесных условиях рассчитывается с использованием модели, предложенной Шейлем и базирующейся на допущениях о подавлении диффузии в твёрдой фазе при однородном составе жидкости; на поверхности раздела между твёрдой и жидкой фазами поддерживается локальное равновесие.

При перитектической реакции в кристаллизующейся стали α (феррит)+L (жидкость)= γ (аустенит) в трёхкомпонентной системе Fe-C-M рассматривается модель, когда γ -фаза выделяется на поверхности ранее образовавшейся первичной α -фазы и полностью покрывает ее, изолируя от расплава, вследствие чего дальнейший рост γ -фазы происходит диффузионным путём в результате переноса атомов из жидкой фазы в α -фазу через слой растущей γ -фазы. Изменение концентрации компонента М на границах L/ γ и α / γ фаз описывается соотношениями:

$$-dU_M^{L/\gamma} = \frac{U_M^{L/\gamma}(1-K_M^{\gamma/L})}{1-(1-B^{\gamma/L}K_M^{\gamma/L})b^*(1-f_L)} df_L \quad (1)$$

$$-dU_M^{\alpha/\gamma} = \frac{U_M^{\alpha/\gamma}(1-K_M^{\gamma/\alpha})}{1-(1-B^{\gamma/\alpha}K_M^{\gamma/\alpha})a^*(1-f_\alpha)} df_\alpha \quad (2)$$

Здесь a^* , b^* , $(U_M^{L/\alpha})^*$ и $(U_M^{\alpha/L})^*$ -доля выделившейся α -фазы, оставшейся жидкости и мольные доли на момент начала выделения перитектики; $U_X^{y/z}$ - мольная доля компонента X в фазе y на границе с фазой z; $K_X^{y/z}$ - коэффициент распределения компонента X между фазами x и y ($K_M^{\gamma/\alpha} = U_M^{\gamma/\alpha} / U_M^{\alpha/\gamma}$, $K_C^{\gamma/\alpha} = U_C^{\gamma/\alpha} / U_C^{\alpha/\gamma}$); f_L и f_α - доли жидкой и α -фазы при температуре T; B - степень выравнивания концентрации в твёрдой фазе. Уравнения (1) и (2) при B=0 описывают неравновесную модель Шейля, при B=1 - равновесную кристаллизацию на межфазных границах $\gamma-\alpha$ и $\gamma-L$. Для определения зависимости долей твёрдой фазы и жидкости от температуры использован подход Х.Фредрикссона:

$$U_C^0 = U_C^{\alpha/\gamma} a^* f_\alpha + U_C^{\gamma/\alpha} a^* (1-f_\alpha) + U_C^{\gamma/L} b^* (1-f_L) + U_C^{L/\gamma} b^* f_L \quad (3)$$

$$U_C^{\gamma/L} = U_C^{\gamma/\alpha} \quad (4)$$

$$\ln\left(\frac{1 - (U_M^{L/\gamma} + U_C^{L/\gamma})}{1 - (U_M^{\gamma/L} + U_C^{\gamma/L})}\right) = (G^L - G^\gamma) / RT \quad (5)$$

$$\ln\left(\frac{1 - (U_M^{\gamma/\alpha} + U_C^{\gamma/\alpha})}{1 - (U_M^{\alpha/\gamma} - U_C^{\alpha/\gamma})}\right) = (G^\gamma - G^\alpha) / RT \quad (6)$$

где U_M^0 и U_C^0 - мольные доли компонента M и углерода в жидкости; G^z - энергия Гиббса фазы z ; R - универсальная газовая постоянная. Уравнение (3) отражает материальный баланс по углероду в трёх фазах в предположении, что γ -фаза растёт диффузионным путём в сторону жидкости и феррита. Равенство (4) следует из упрощающего допущения о равномерном распределении углерода в аустените. Выражения (5) и (6) являются уравнениями Вант-Гоффа для железа, описывающими равновесие на межфазных границах.

Система уравнений (1-6) позволяет определить границы протекания перитектической реакции, а также изменение количества образующихся фаз и распределение компонентов между фазами в зависимости от интенсивности диффузионного переноса компонентов сплава при превращении. С использованием данной модели были проведены сравнительные расчёты равновесной и неравновесной кристаллизации трехкомпонентных сплавов Fe-C-M.

Работа проведена при совместной финансовой поддержке Министерства образования РФ и Комитета по науке и высшей школе Администрации Санкт-Петербурга (грант PD02-2.10-148).