

УДК 621.74:669.02/09

Ю. А. Щербаков (5 курс, каф ФХЛСП), В. М. Голод, к.т.н., проф.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ МЕХАНИЗМА ПЕРИТЕКТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ В СИСТЕМЕ Fe-C-M С РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНЬЮ НЕРАВНОВЕСНОСТИ

При термодинамическом моделировании процессов кристаллизации многокомпонентных сплавов важен учёт неравновесности кристаллизации. Поскольку степень подавления диффузии разных компонентов сплава различна, необходимо дополнить существующие термодинамические модели уравнениями, учитывающими диффузию каждого компонента сплава в каждой из образующихся фаз.

Примером решения указанной задачи может служить следующая математическая модель, описывающая перитектическую реакцию α (феррит)+ L (жидкость)= γ (аустенит) в трёхкомпонентном сплаве системы $Fe-C-M$ (где M - некоторый компонент сплава):

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

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

где a^* и b^* , $(U_M^{L/\alpha})^*$ и $(U_M^{\alpha/L})^*$ - доля выделившейся α -фазы, оставшейся жидкости и их мольные доли на момент начала выделения перитектики; $U_X^{y/z}$ - мольная доля компонента X в фазе y на границе с фазой z ; $K_X^{y/z}$ - коэффициенты распределения ($K_M^{\gamma/\alpha} = U_M^{\gamma/\alpha} / U_M^{\alpha/\gamma}$, $K_C^{\gamma/\alpha} = U_C^{\gamma/\alpha} / U_C^{\alpha/\gamma}$); 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 $\gamma-L$. Они должны быть дополнены до замкнутой системы формулами, позволяющими найти температуру и доли твёрдой фазы и жидкости. Кроме термодинамических функций, формально учитывающих равенство химических потенциалов, в математической модели возможен учёт механизма формирования фаз. Применительно к перитектической реакции Х. Фредрикссоном предложены формулы, которые после ряда преобразований принимают вид:

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

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

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

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

где U_M^0 и U_C^0 - мольные доли элемента M и углерода в сплаве; G^z - энергия Гиббса фазы z ; R - универсальная газовая постоянная.

Под механизмом формирования фаз здесь понимается диффузионный механизм роста аустенита, который пространственно разделяет жидкую фазу и первичный феррит. Такой механизм роста зафиксирован в экспериментах с закалкой из жидкого состояния. Уравнение (3) представляет собой материальный баланс по углероду в трёх фазах и следует из предпо-

ложения, что γ растёт диффузионным путём в сторону жидкости и феррита с разными скоростями; межфазная граница при этом плоская. Равенство (4) является допущением, справедливым только в некотором узком интервале температур и необходимым для разрешения системы (1-6). Выражения (5) и (6) есть уравнения Вант-Гоффа, записанные для подрешётки железа.

Система уравнений (1-6) позволяет определить границы протекания перитектической реакции, количество образующихся фаз и распределение компонентов между фазами (ликвацию). С использованием данной модели были проведены сравнительные расчёты равновесной и неравновесной кристаллизации сплавов