

УДК 669.539.219.3

Г.П.Черепанов (6 курс, каф. ФМиКТМ), А.А.Васильев, к.ф.-м.н., доц.

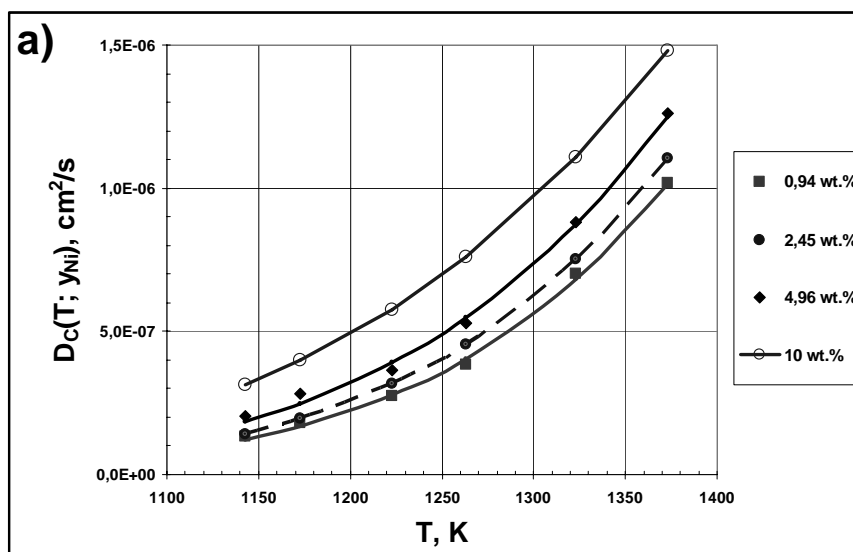
## КОЛИЧЕСТВЕННОЕ ОПИСАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ЗАВИСИМОСТЕЙ КОЭФФИЦИЕНТА ДИФФУЗИИ УГЛЕРОДА В ЛЕГИРОВАННОМ АУСТЕНИТЕ

Величина коэффициента диффузии углерода в аустените в зависимости от химического состава представляет значительный интерес, поскольку кинетика многих практически важных фазовых превращений в сталях определяется диффузионной подвижностью углерода в этой фазе. Известно, что рассматриваемый коэффициент диффузии существенно зависит как от концентрации углерода, так и от концентрации легирующих элементов замещения [1]. При этом концентрационные эффекты, обусловленные элементами замещения, до настоящего времени не получили удовлетворительного количественного описания. В работе предлагается обобщение микроскопической модели для расчета коэффициента химической диффузии углерода в зависимости от его концентрации [2], которое позволяет получить выражение, учитывающее дополнительный эффект легирующего элемента замещения.

В рамках используемой модели с помощью метода средних энергий показано [2], что для твердого раствора углерода в аустените коэффициент его химической диффузии можно записать в виде:

$$D(y_C) = D_0 \exp(v_{CC}^* y_C) \left( 1 + \frac{u_{CC}}{RT} y_C (1 - y_C) \right) \exp\left( -\frac{\Delta U_0 + v_{CC} y_C}{RT} \right), \quad (1)$$

где  $D_0$  – постоянный множитель;  $\Delta U_0$  – барьер активации миграции атома углерода в чистом  $\gamma$  – железе;  $u_{CC}, v_{CC}, v_{CC}^*$  – параметры модели, появление которых обусловлено эффектами взаимодействия атомов углерода, которое учитывается в парном приближении ( $v_{CC}^* = \theta v_{CC} / R$ , где  $\theta \approx 0.4$  [3]);  $y_C$  – доля узлов подрешетки внедрений, занятых атомами углерода;  $R$  и  $T$  имеют обычные значения. Отметим, что выражение (1) по структуре полностью совпадает с хорошо известным выражением для коэффициента диффузии углерода в аустените [3], полученным в рамках иной микроскопической модели. Такое совпадение позволяет сделать вывод об эквивалентности обоих подходов.



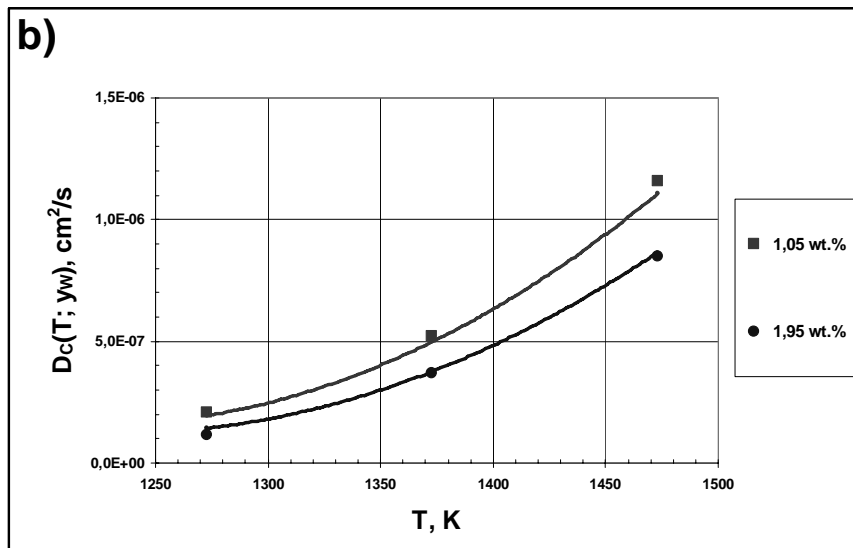


Рис. 1. Расчетные кривые температурных зависимостей и экспериментальные значения коэффициента диффузии углерода в аустените, легированном Ni (a) и W (b). Содержание углерода в аустените, легированном Ni и W, составляет 0.4 и 0.2 wt.%, соответственно

Используя приближение средних энергий, можно обобщить (1) на практически важный случай диффузии углерода в твердых растворах  $Fe-X-C$ , дополнительно содержащих легирующий элемент замещения  $X$ . Для этого, учитывая изменения энергетических параметров модели, вызванные влиянием элемента замещения, в формуле (1) нужно произвести следующие замены:  $\Delta U_0 \Rightarrow \Delta U_0 \times (1 + \alpha_X y_X)$ ;  $u_{CC} \Rightarrow u_{CC} \times (1 + \beta_X y_X)$ ;  $v_{CC} \Rightarrow v_{CC} \times (1 + \gamma_X y_X)$ , где  $y_X$  – доля узлов решетки, занятых атомами  $X$ . В результате получим:

$$D(y_C; y_X) = D_0 \exp(v_{CC}^*(y_X) y_C) \left( 1 + \frac{u_{CC}}{RT} y_C (1 - y_C) \times (1 + \beta_X y_X) \right) \times \exp\left( -\frac{\Delta U_0 \times (1 + \alpha_X y_X) + v_{CC} \times (1 + \gamma_X y_X) y_C}{RT} \right). \quad (2)$$

Набор значений эмпирических параметров в выражении (2) может быть определен на основании экспериментальных данных о концентрационных зависимостях эффективного коэффициента диффузии углерода в аустените при разных температурах [2].

Результаты расчета коэффициента диффузии углерода в аустените, легированном Ni и W, полученные для оптимальных наборов параметров модели, а также его экспериментальные значения, представлены на рис. 1. Из приведенных результатов следует, что полученное в работе выражение для коэффициента диффузии позволяет с хорошей точностью описывать как эффект ускорения (Ni, рис. 1a), так и эффект замедления (W, рис. 1b) диффузии углерода, наблюдаемый при легировании аустенита элементами замещения.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. М.А.Кристал. Механизм диффузии в железных сплавах. «Металлургия», Москва (1972).
2. А.А.Смирнов. Теория диффузии в сплавах внедрения. «Наукова Думка», Киев (1982).
3. J.Agren. Scripta Met., 20, 1507 (1986).