



MODELOWANIE POCZĄTKOWEGO ETAPU WZROSTU AUSTENITU
Z PRZECHŁODZONEJ CIECZY W UKŁADZIE Fe-C-Si METODĄ POŁA FAZOWEGO

Marek Wróbel¹, Andriy Burbelko², Daniel Gurgul³

¹⁻³Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie,
Wydział Odlewnictwa

23 Reymonta Street, 30-059 Krakow, Poland

¹marek.wrobel@agh.edu.pl

Słowa kluczowe: Modelowanie krystalizacji, Pole Fazowe, CALPHAD

1. Wstęp

Znane dotychczasowe modele matematyczne krystalizacji do wyznaczenia składu chemicznego powstających faz wykorzystują równowagowe współczynniki rozdziału. Oznacza to, że zawartość poszczególnych składników (i) w powstającej fazie stałej (s) jest jednoznacznie związana ze składem chemicznym cieczy macierzystej (l):

$$X_{i,s} = X_{i,l} \cdot k_i \quad (1)$$

gdzie: k_i – równowagowy współczynnik rozdziału pierwiastka i , $X_{i,l}$, $X_{i,s}$ – stężenie pierwiastka i w fazie ciekłej i stałej, odpowiednio. W rozwiązaniach modelowych przyjmuje się najczęściej, że współczynniki rozdziału są wartościami stałymi. W układach dwuskładnikowych założenie takie będzie precyzyjnym jedynie dla specyficznego kształtu linii likwidus i solidus (np. gdy te linie są proste i przecinają się w temperaturze likwidus czystego składnika).

2. Opis modelu

W modelu krystalizacji wielofazowej zarówno temperaturę likwidus cieczy wieloskładnikowej, jak i zmienne równowagowe współczynniki rozdziału poszczególnych składników można wyznaczać za pomocą narzędzi Calphad [1,2]. Metoda Calphad pozwala również na wyznaczenie współczynników rozdziału w warunkach równowagi termodynamicznej. Wiadomo natomiast, że z powodu nierównowagowego charakteru krystalizacji w warunkach przemysłowych wartość tego współczynnika może zależeć od szybkości krystalizacji.

Wiadomo, że P faz w układzie S -składnikowym będą znajdowały się ze sobą w warunkach równowagi termodynamicznej, jeżeli dla każdego ze składników będzie spełniony warunek jednakowego potencjału chemicznego jego atomów w poszczególnych fazach:

$$\mu_{i,1} = \mu_{i,2} = \dots = \mu_{i,P} \quad \text{dla } i = 1 \dots S \quad (2)$$

W przypadku gdy warunek (2) dla dowolnego pierwiastka i oraz dowolnej pary faz α i β nie jest spełniony, wypadkowy strumień dyfuzyjny atomów składnika i spowodowany różnicą potencjałów $\mu_{i,\alpha}$ i $\mu_{i,\beta}$ będzie dążył do wyrównania potencjałów chemicznych tego pierwiastka w sąsiednich fazach. Natężenie przepływu jest proporcjonalne różnicy tych potencjałów:

$$j_{i,\alpha/\beta} = K_{i,\alpha/\beta} (\mu_{i,\alpha} - \mu_{i,\beta}) \quad (3)$$

gdzie $K_{i,\alpha/\beta}$ – współczynnik kinetyczny.

W przypadku, gdy sąsiadują ze sobą obszary tej samej fazy o zróżnicowanym składzie chemicznym współczynnik kinetyczny jest równy odpowiedniemu współczynnikowi dyfuzji. Zaproponowano w przypadku kontaktu pomiędzy dwoma fazami wyznaczać współczynnik kinetyczny jako średnią wagową współczynników dyfuzji sąsiadujących faz, wykorzystując jako wagę funkcję pola fazowego [3-4].

W pracy przedstawiono wyniki modelowania początkowego etapu wzrostu ziarna austenitu w układzie trójskładnikowym Fe-C-Si. W modelu założono warunki izotermiczne. Równanie Allen'a-Cahn'a:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -M_{\phi} \left[\frac{\partial f}{\partial \phi} - \varepsilon_{\phi}^2 \nabla^2 \phi \right] \quad (4)$$

zostało wykorzystane do wyprowadzenia równania różnicowego na ewolucję pola fazowego ϕ

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t \cdot \left\{ M_{\phi} \varepsilon_{\phi}^2 \cdot \left[\nabla^2 \phi - \frac{W_A}{\varepsilon_{\phi}^2} \cdot \frac{dg}{d\phi} \right] - M_{\phi} (f_{FCC} - f_{LIQ}) \cdot \frac{dp}{d\phi} \right\} \quad (5)$$

gdzie: ϕ^n , ϕ^{n+1} – wartość zmiennej ϕ w bieżącym i kolejnym kroku czasowym; Δt – krok czasowy; M_{ϕ} – dodatnia mobilność związana z kinetyką interfejsu; ε_{ϕ} – współczynnik gradientu energii swobodnej; W_A – bariera energetyczna przejścia pomiędzy fazami; $g(\phi)$ – funkcja z dwoma minimami; $p(\phi)$ – funkcja interpolacyjna; f_{FCC} – molowa energia swobodna austenitu; f_{LIQ} – molowa energia swobodna cieczy.

Obliczenia termodynamiczne zostały wykonane za pomocą oprogramowania Thermo-Calc, a ich zaimplementowanie w modelu jest realizowane poprzez wykorzystanie interfejsu TQ. Dla zadanego składu chemicznego oraz temperatury wyznaczono równowagę termodynamiczną i potraktowano molową wartość energii swobodnej austenitu (f_{FCC}) jako punkt odniesienia – minimum energii swobodnej, do której dąży rozważany układ. Następnie wyznaczono, dla tych samych warunków, molową wartość energii swobodnej cieczy z zastrzeżeniem, że brak jest obecności fazy stałej – model przechłodzonej cieczy. Różnica pomiędzy tymi wartościami stanowi energię pędzą krystalizacji. Parametry równania (2) wybrano na podstawie danych [5].

3. Wyniki

W pracy przedstawiono wpływ stopnia przechłodzenia oraz energii aktywacji – bariery energetycznej, którą muszą pokonać atomy fazy ciekłej aby przejść do sieci krystalicznej austenitu – na prędkość poruszania się frontu krystalizacji.

Podziękowania

Pracę wykonano w ramach projektu AGH nr 15.11.170.483.

Literatura

- [1] Saunders N., Miodownik A.P. CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams): A Comprehensive Guide. Elsevier, 1998, p. 478
- [2] Lukas H., Fries, S.G., Sundman B. Computational Thermodynamics, The Calphad Method. Cambridge University Press, 2007, p. 324
- [3] Boettinger W. J. et al., *Annu. Rev. Mater. Res.*, 32 (2002), pp. 163–194
- [4] Provatas N, Elder K, *Phase-Field Methods in Materials Science and Engineering*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA (2010)
- [5] Warren J. A., Boettinger W. J., *Acta Metall. Mater.*, Vol 43, No. 2 (1995), pp. 689-703