

Термодинамическое и кинетическое моделирование эволюции выделений в многокомпонентных сплавах

В.В. Попов, И.И. Горбачев



Разработан алгоритм расчета равновесного фазового состава многокомпонентных многофазных сплавов методом компьютерной термодинамики, и осуществлена его программная реализация. Развита новая методика моделирования эволюции ансамбля выделений в многокомпонентных сплавах при термической обработке на различных стадиях, начиная с зарождения и заканчивая стационарной коагуляцией.

При разработке новых сталей и сплавов и оптимизации режимов их термической обработки, как правило, приходится делать трудоемкие и дорогостоящие исследования фазовых и структурных превращений, протекающих в них в процессе производства и обработки.

Объем таких исследований может быть существенно уменьшен в результате проведения термодинамических и кинетических расчетов. В последние годы появилась реальная возможность термодинамического и кинетического моделирования фазовых и структурных превращений в многокомпонентных сплавах. Этому способствовало появление современной высокопроизводительной техники и накопление данных о термодинамических и диффузионных параметрах.

В результате термодинамических расчетов определяется равновесный фазовый состав сплава, и во многих случаях анализ результатов таких расчетов позволяет понять, какие превращения будут протекать в сплаве, и значительно облегчить выбор оптимального состава и режима термической обработки. Однако в настоящее время отсутствуют доступные алгоритмы для проведения термодинамических расчетов в многокомпонентных многофазных системах, а их разработка является исключительно сложной задачей.

В результате наших исследований разработан метод нахождения равновесного фазового состава многокомпонентного сплава, отвечающего минимуму его энергии Гиббса. Этот метод основан на использовании процедуры последовательного квадратичного программирования и большого количества стартовых точек, выбираемых специальным образом с учетом реализованной стратегии расчета. Эта стратегия состоит в том, что сна-

чала рассчитываются все возможные двухфазные системы, затем трехфазные, и т.д.. При этом выбор фазового состава в стартовых точках при расчете фазового равновесия в k -фазной системе осуществляется на основе результатов расчетов для всех возможных $(k-1)$ -фазных систем.

При расчетах пользователь может задать компоненты, которые присутствуют в сплаве (рис.1), и выбрать фазы, возможность образования которых необходимо учитывать при расчетах. Разработанная программа помимо расчетного модуля включает базу термодинамических данных. Хранение термодинамических данных реализовано в текстовых файлах. Для удобства пополнения и обновления правила записи термодинамических параметров таковы, что их вид в текстовом файле

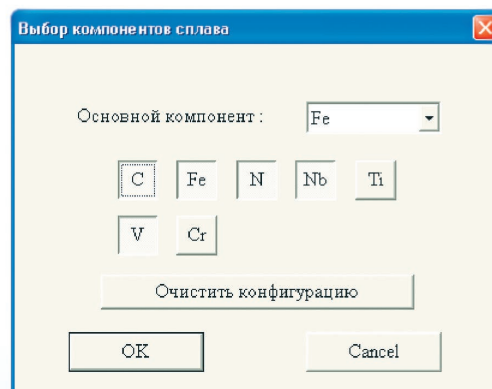


Рис. 1
Выбор компонентов сплава

практически не отличается от того, как они публикуются в литературе.

Существующая на сегодняшний день версия программы ориентирована на расчеты фазовых равновесий в сталях с карбонитридным упрочне-

нием и позволяет проводить расчеты в системах, содержащих до 5 компонентов. Однако разработанный алгоритм дает возможность неограниченно увеличивать количество фаз и компонентов в системе, и эта работа постоянно проводится. Сохранение результатов в текстовом файле позволяет легко импортировать их в любую программу и анализировать.

В качестве примера результатов таких расчетов на рис. 2 представлен график зависимости доли углерода в неметаллической подрешетке карбонитрида от содержаний Nb и Ti в стали при температуре 1150°C.

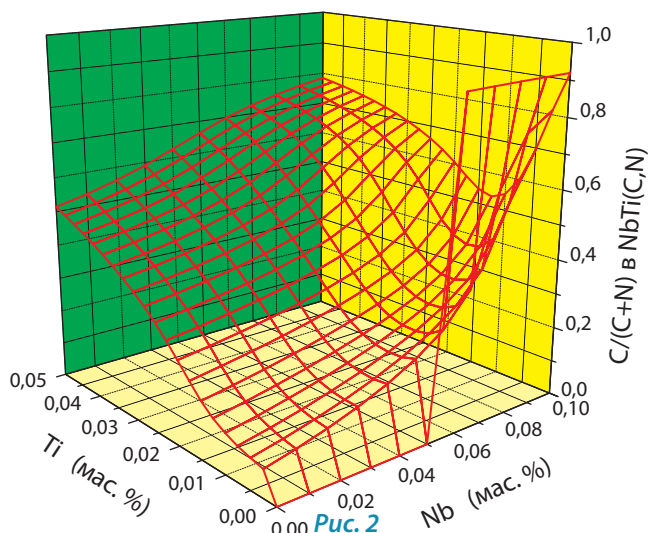


Рис. 2
Зависимость доли C в неметаллической подрешетке $(Nb,Ti)(C,N)$ от содержаний Nb и Ti в стали с 0,004 %N и 0,1% C при 1150°C.

Кинетические расчеты более сложны, требуют построения специальных физических моделей и знания большого количества не только термодинамических, но и диффузионных параметров.

До сих пор расчеты кинетики эволюции выделений проводились почти исключительно для двухкомпонентных сплавов, и при этом использовались различные допущения. Нами были разработаны методы, использующие минимальное количество допущений, позволяющие моделировать эволюцию выделений в многокомпонентных сплавах на различных стадиях, и осуществлена их численная реализация.

Методы расчета кинетики роста и растворения

выделений в многокомпонентных сплавах используют допущение об одинаковом размере частиц, но учитывают возможность перекрытия диффузионных полей различных выделений и диффузию в них. Эти методы основаны на совместном решении дифференциальных уравнений диффузии, уравнений массового баланса и трансцендентных термодинамических уравнений, определяющих условия локального равновесия на межфазных границах.

Для расчетов эволюции полидисперсного ансамбля выделений на различных стадиях разработан новый численный метод, основанный на использовании приближения среднего поля, при котором диффузионное взаимодействие частиц разных размерных классов с матрицей рассматривается в полевых ячейках, концентрации компонентов на границах которых одинаковы (рис.3).

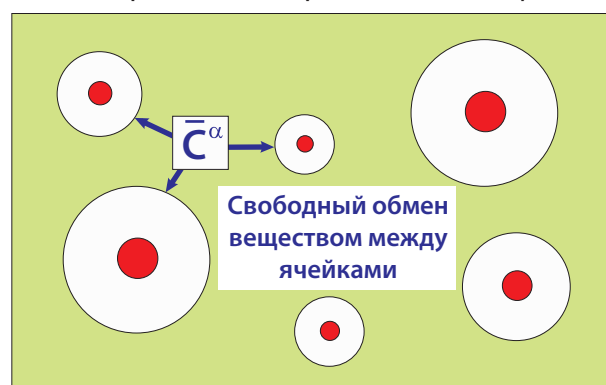


Рис. 3

Геометрическая схема моделей эволюции выделений, построенных на основе приближения среднего поля

Разработанный метод позволяет моделировать эволюцию выделений на всех стадиях, начиная со стадии зарождения и кончая стационарной коагуляцией. С использованием разработанных алгоритмов выполнены расчеты эволюции выделений в сталях и сплавах различного состава с различным исходным распределением частиц по размерам, различным исходным составом выделений и т.п. Сравнение результатов расчетов с экспериментом показало их удовлетворительное согласие.

Более подробно с представленными результатами и выводами можно ознакомиться в публикациях [1-9].

¹ Попов В.В. Моделирование превращений карбонитридов при термической обработке сталей. Екатеринбург: УрО РАН, 2003, 378 с.

² Popov V.V. Phil. Mag. 82 (2002) 1

³ Попов В.В., Горбачев И.И. ФММ 98 (2004) 11

⁴ Попов В.В., Горбачев И.И. ФММ 99 (2005) 69

⁵ Акимова Е.Н., Горбачев И.И., Попов В.В. Мат. моделирование. 17 (2005) 85

⁶ Popov V.V., Gorbachev I.I., Alyabieva J.A. Phil. Mag. 85 (2005) 2449

⁷ Popov V.V., Gorbachev I.I. Mater. Sci. Eng. Techn., 37 (2005) 477.

⁸ И.И. Горбачев, В.В. Попов, Е.Н. Акимова. ФММ 102 (2006) 22

⁹ Popov V.V., Gorbachev I.I. Defect and Diffusion Forum 267 (2007) 171.