



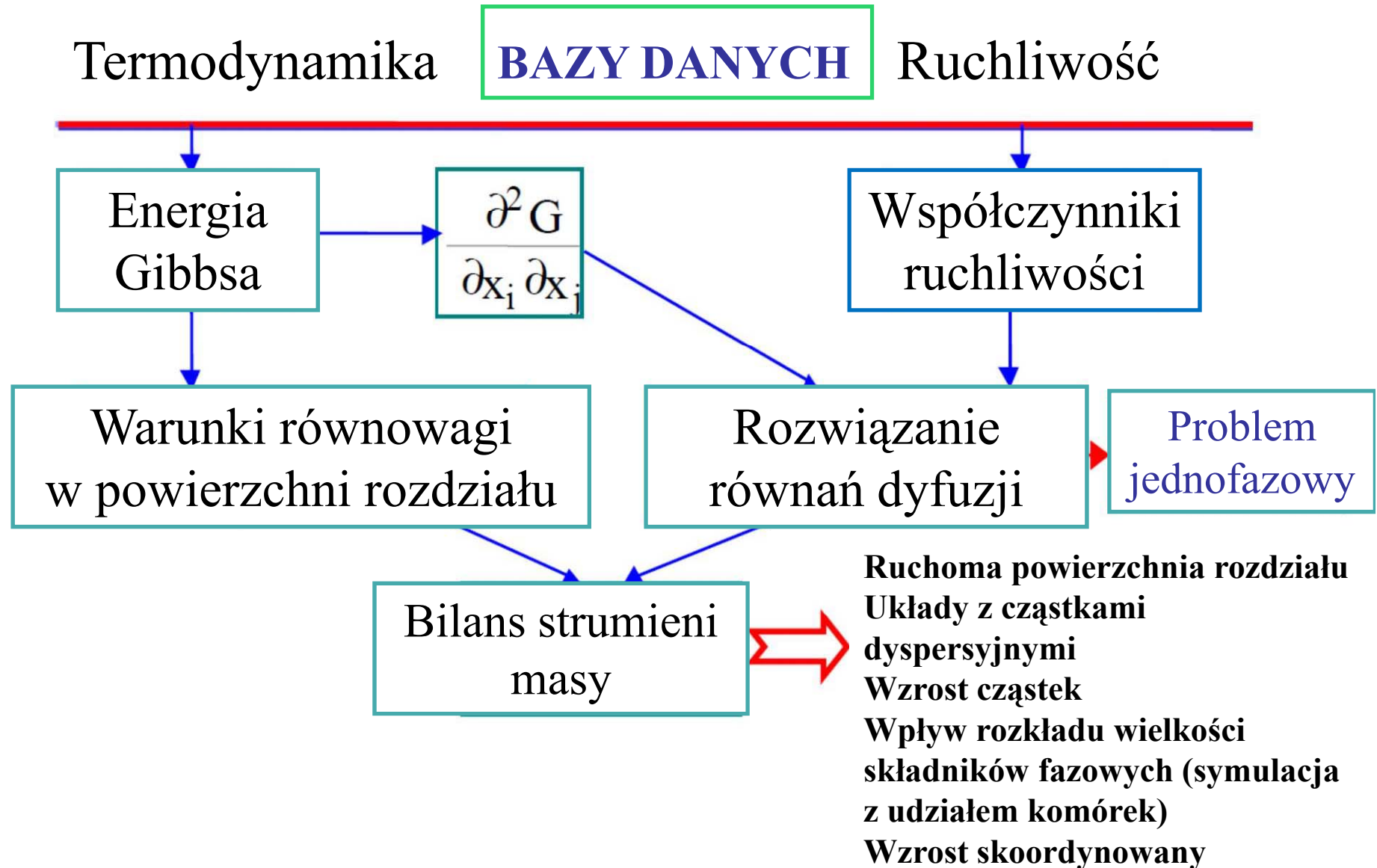
Zastosowanie programu DICTRA do  
symulacji numerycznej przemian  
fazowych w stopach technicznych  
kontrolowanych procesem dyfuzji"

Roman Kuziak  
Instytut Metalurgii Żelaza

**DICTRA** jest pakietem komputerowym przeznaczonym do symulacji reakcji/przemian fazowych zachodzących w układach wieloskładnikowych, których postęp **kontrolowany jest procesem dyfuzji.**

Program był rozwijany w okresie ostatnich 20 lat w KTH Stockholm we współpracy z Instytutem Maxa-Plancka, Düsseldorf.

# Procedura numeryczna programu DICTRA



# Charakterystyka programu

- ✓ Powiązany z programem ThermoCalc w celu prowadzenia obliczeń termodynamicznych
  - posiada wszystkie moduły programu ThermoCalc + własne moduły
- ✓ Obliczenia prowadzone są w oparciu o bazy danych termodynamicznych oraz bazy danych zawierających współczynniki ruchliwości
  - ilościowy opis dyfuzji w układach wieloskładnikowych
  - współczynniki ruchliwości w prostych fazach i uporządkowanej fazie B2
  - dyfuzja w związkach stechiometrycznych
- ✓ Program napisany jest w języku Fortran z wykorzystaniem metody elementów skończonych; może być uruchamiany w wielu platformach.
- ✓ Geometria: jeden wymiar.
- ✓ Warunki nałożone na granicę międzyfazową:
  - warunek lokalnej równowagi w granicy międzyfazowej
  - skończona ruchliwość granicy międzyfazowej
  - energia powierzchniowa

# Proces dyfuzji

- ✓ Dla faz krystalicznych dyfuzja zachodzi mechanizmem wymiany luka-atom
- ✓ Zakładając jednorodny rozkład luk oraz, że liczba luk jest ustalona przez warunek równowagi, strumień masy składnika k w sieci krystalicznej opisany jest następującym równaniem:

$$J_k^L = -c_k y_{va} M_{kva} \nabla \mu_k$$

gdzie  $M_{kva}$  jest parametrem kinetycznym, który określa prędkość zmiany położenia w przypadku, gdy luka sąsiaduje z atomem k.

## Równania fenomenologiczne

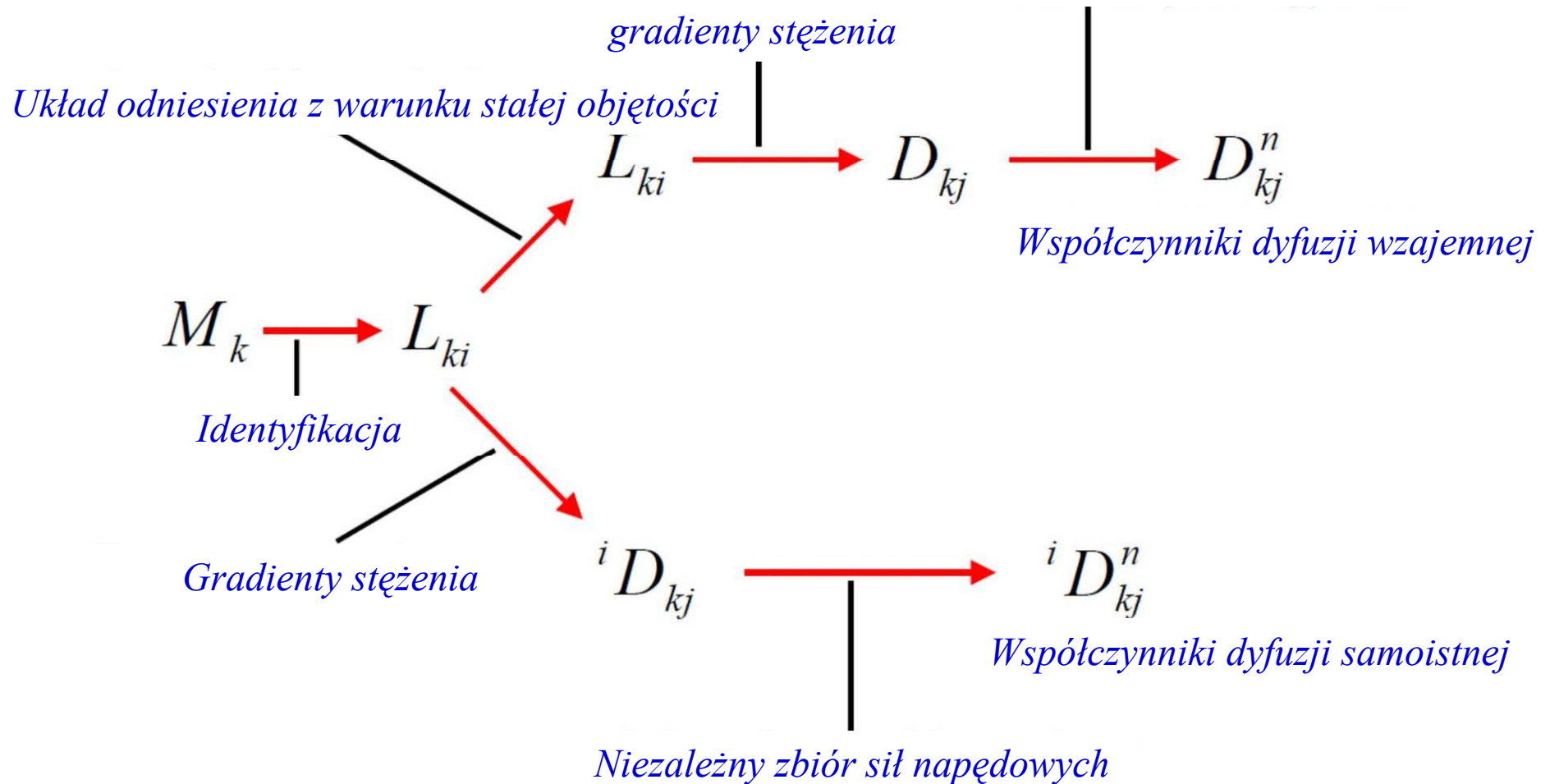
$$J_k^L = -\sum_{i=1}^n L_{ki} \frac{\partial \mu_i}{\partial z} - L_{1T} \frac{\partial T}{\partial z} - L_{1P} \frac{\partial P}{\partial z} - L_{1\phi} \frac{\partial \phi}{\partial z}$$

Równania te nazwane są równaniami fenomenologicznymi ponieważ nie wynikają one z żadnego modelu, lecz z obserwowanych warunków równowagi.

Jeśli analizowany jest układ w warunkach izotermicznych, izobarycznych i izopotencjalnych mamy:

$$J_k^L = -\sum_{i=1}^n L_{ki} \frac{\partial \mu_i}{\partial z} \quad \left( J_k^L = -L_{kk} \frac{\partial \mu_k}{\partial z} \right)$$

# Przekształcenie współczynników ruchliwości w współczynniki dyfuzji



# Równania fenomenologiczne

## Dane doświadczalne

${}^i D_{kj}^n$  Współczynnik dyfuzji wewnętrznej

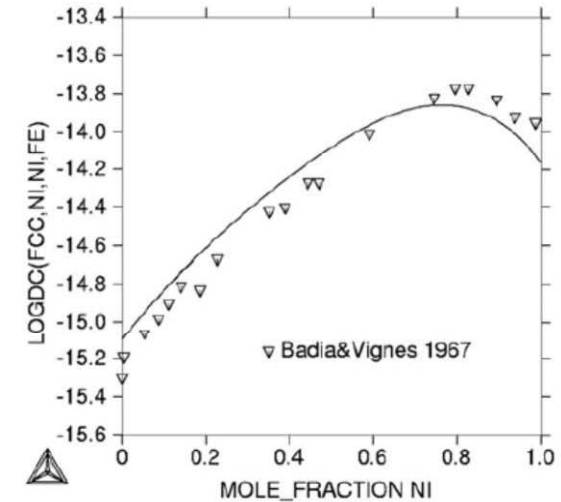
DI(phase,k,j,n)  
LOGDI(phase,k,j,n)

$D_A^*$  Współczynnik dyfuzji znaczników

DT(phase,A)  
LOGDT(phase,A)

$\tilde{D}_{kj}^n$  Współczynnik dyfuzji wzajemnej

DC(phase,k,j,n)  
LOGDC(phase,k,j,n)



Baza danych  
kinetycznych

$RT \ln(RTM_i)$



## Modelowanie

$$M_i = \frac{1}{RT} \exp\left(\frac{\Delta G_i}{RT}\right) \quad \Delta G_i = -Q_i + RT \ln(M_i^0)$$

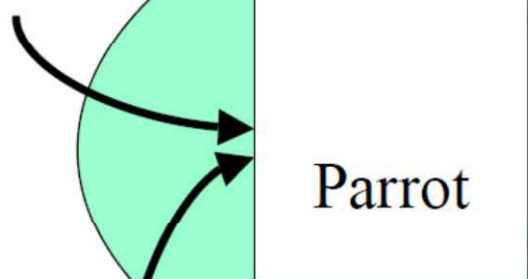
$$\begin{aligned} \Delta G_i = & \sum_j \sum_m y_j^I y_m^{II} \Delta G_i^{j:m} + \sum_j \sum_{k>j} \sum_m y_j^I y_k^I y_m^{II} \Delta G_i^{j,k:m} \\ & + \sum_j \sum_n \sum_{m>n} y_j^I y_n^{II} y_m^{II} \Delta G_i^{j:n,m} \end{aligned}$$

# Opracowanie modelu

# Zastosowanie

Dane termodynamiczne

- układy równowag fazowych
- pomiaru aktywności
- pomiaru entalpii
- pomiaru ciepła właściwego



Baza danych termod.

Poly

Baza wsp. ruchliwości

Dictra

Opis termodynamiczny

Dane kinetyczne

- dyfuzja znaczników
- dyfuzja chemiczna
- etc.

Opis kinetyczny

# Etapy modelowania

- ✓ Poznanie badanego układu, selekcja danych doświadczalnych
  - studia literaturowe
- ✓ Stworzenia pliku startowego dla analizowanego układu
  - definicja parametrów
- ✓ Stworzenie pliku doświadczalnego
  - stworzenie pop file
- ✓ Ocena parametrów ruchliwości wykorzystanych w modelu
  - wykorzystanie modułu Parrot
- ✓ Porównanie wyników symulacji z wynikami doświadczalnymi
  - wykorzystanie modułu DICTRA
- ✓ Stworzenie bazy danych dla współczynników ruchliwości
  - dodanie do istniejących baz

# Baza danych zawierająca wsp.ruchliwości

## **MOB2**

Najbardziej uniwersalna baza danych  
stosowana jest dla stali/stopy\_Fe, oraz stopów Ni, Al i innych

**75 elementów:** Ag, Al, Am, As, Au, B, Ba, Be, Bi, C, Ca, Cd, Co, Cr, Cs, Cu, Dy, Er, Fe, Ga, Gd, Ge, Hf, Hg, Ho, In, Ir, K, La, Li, Lu, Mg, Mn, Mo, N, Na, Nb, Nd, Ni, Np, Os, P, Pa, Pb, Pd, Pr, Pt, Pu, Rb, Re, Rh, Ru, S, Sb, Sc, Se, Si, Sm, Sn, Sr, Ta, Tb, Tc, Te, Th, Ti, Tl, Tm, U, V, W, Y, Yb, Zn and Zr

**Fazy ze zdefiniowanymi wsp. dyf: BCC\_A2, CEMENTITE, FCC\_A1, FE4N, HCP\_A3, LIQUID**

*Wyznaczone dane dla układów dwuskładnikowych:*

**BCC\_A2: C-Fe, C-Cr, Cr-Fe, Cr-N, Cr-Ni, Fe-N, Fe-Ni**  
**FCC\_A1: Al-Cr, Al-Ni, C-Fe, C-Ni, Cr-Fe, Cr-Ni, Fe-N, Fe-Ni, Fe-Si**  
**HCP\_A3: C-Fe, Fe-N**  
**FE4N: C-Fe, Fe-N**

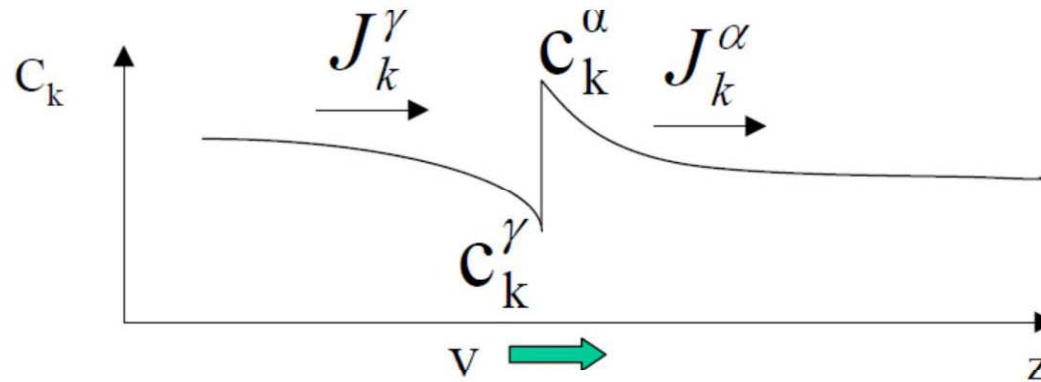
*Wyznaczone dane dla układów trójskładnikowych*

**BCC\_A2: C-Cr-Fe**  
**FCC\_A1: Al-Cr-Ni, C-Cr-Fe, C-Fe-Ni**

*Wyznaczone dane dla układów wieloskładnikowych:*

**BCC\_A2: C-Cr-Fe-N-Ni**  
**FCC\_A1: C-Cr-Fe-Ni**

# Powierzchnia rozdziału

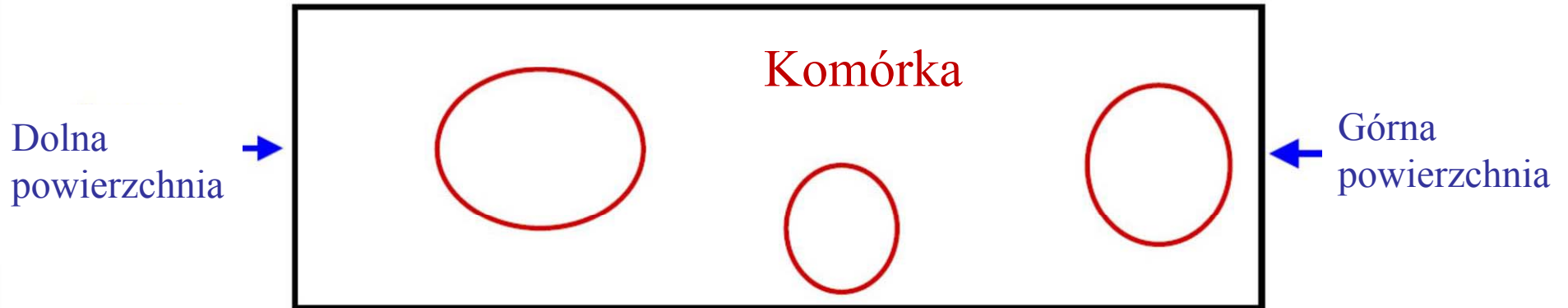


Nieznane: Linia wiążąca, zdefiniowana przez  $n-2$   $a_i$  lub  $\mu_i$   
Prędkość powierzchni międzyfazowej,  $v$

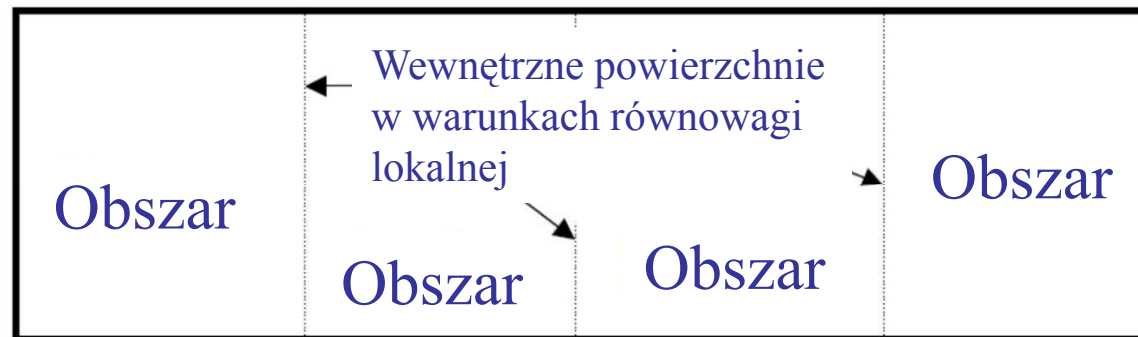
Równania:  $n-1$  równań bilansu strumienia masy,  $v(c_k^\alpha - c_k^\gamma) = J_k^\alpha - J_k^\gamma$

Software: DICTRA

# System



# Komórka



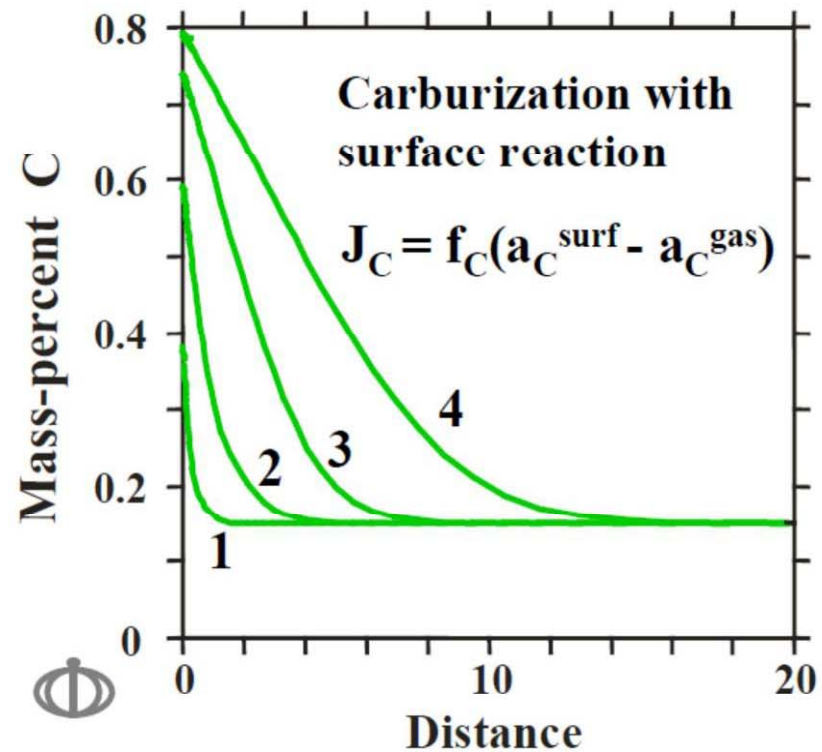
# Warunki brzegowe w programie Dictra

- ✓ Warunki brzegowe mogą być zdefiniowane w funkcji czasu, temperatury i ciśnienia.
- ✓ Można używać różnych funkcji w różnych przedziałach czasu

## Przykład obliczeń

### Przykłady definiowanych warunków

- układ zamknięty (default)
- zmienna zdefiniowana
- warunki określone dla strumienia masy
- warunki mieszane



# Geometria układu



Wykładnik Geometria

**0**

**Płaska**



**1**

**Cylindryczna**



**2**

**Sferyczna**



# Obszar

osnowa



składający się z płytek



# Siatka

Dolna powierzchnia

Górna powierzchnia

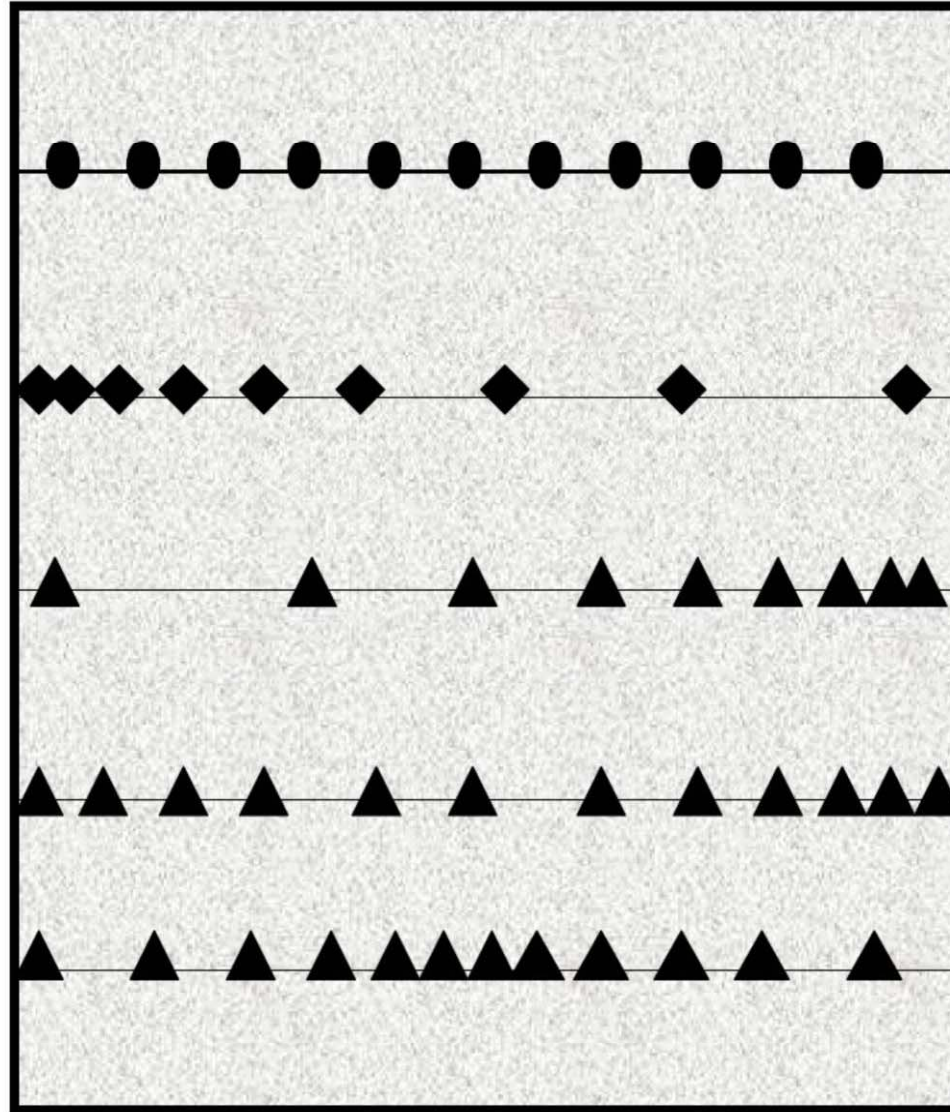
Siatka liniowa

GEO >1

GEO <1

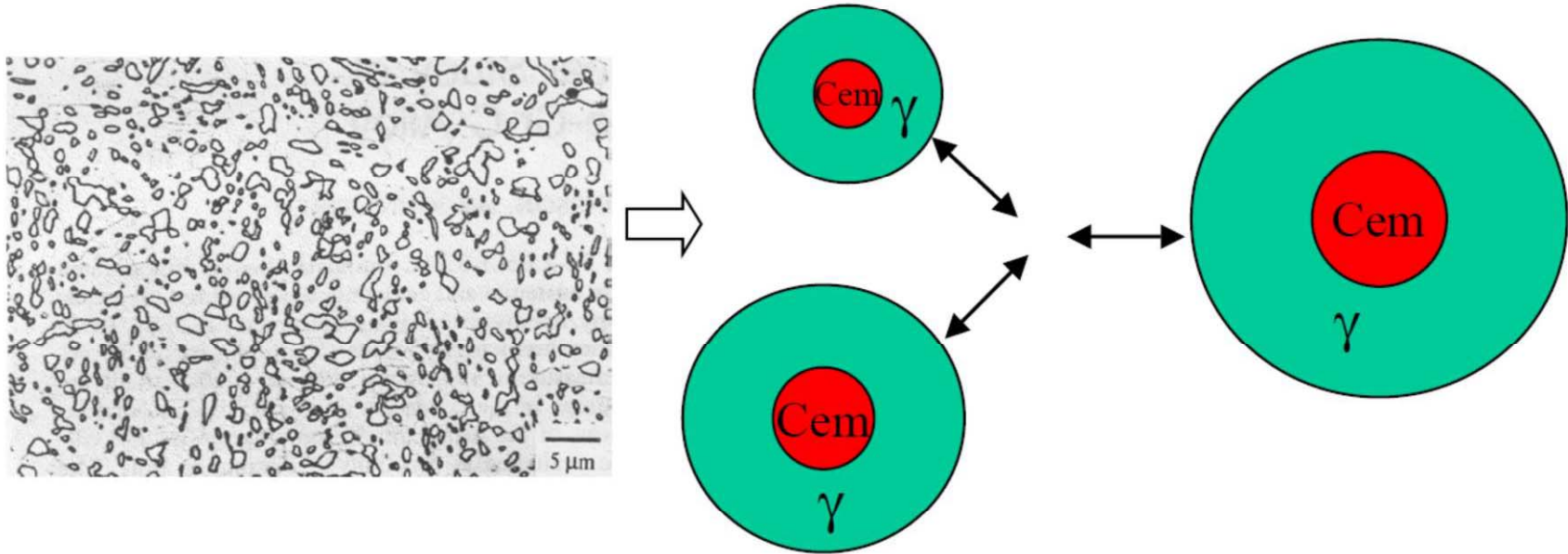
Podwójna

GEO



# Rozpuszczanie cementytu w układzie Fe-Cr-C

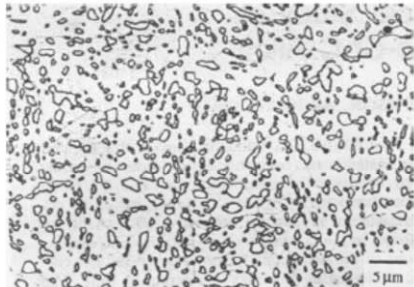
Rozpuszczanie cementytu w 910°C



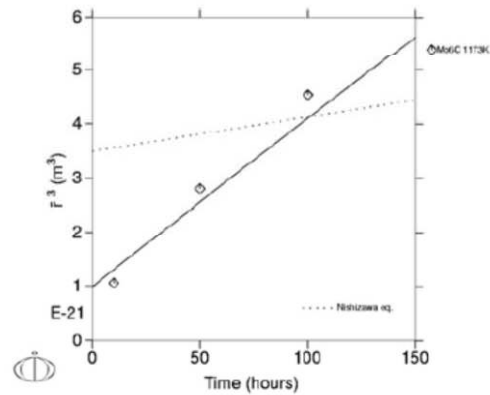
W obliczeniach zdefiniowano trzy komórki o różnych rozmiarach

# Zastosowania Dictry

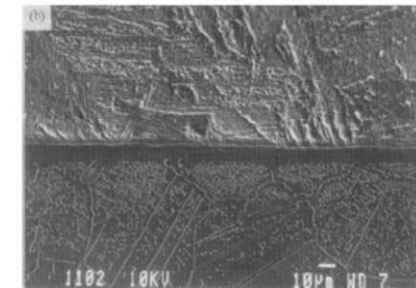
Rozpuszczanie węglików



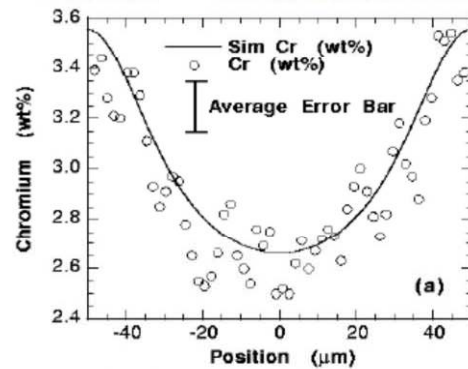
Wzrost cząstek węglików



Dyfuzja węgla w spoinie

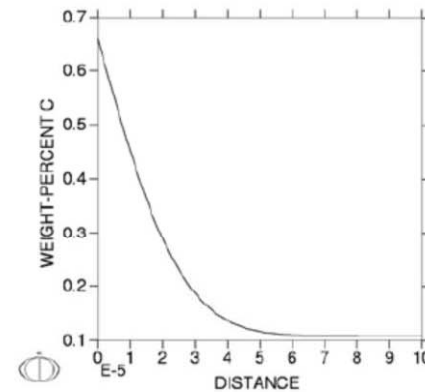


Mikrosegregacja pierwiastków  
podczas krzepnięcia



Lippard et al. *Metall. Mater. Trans. B* 1998

Nawęglanie

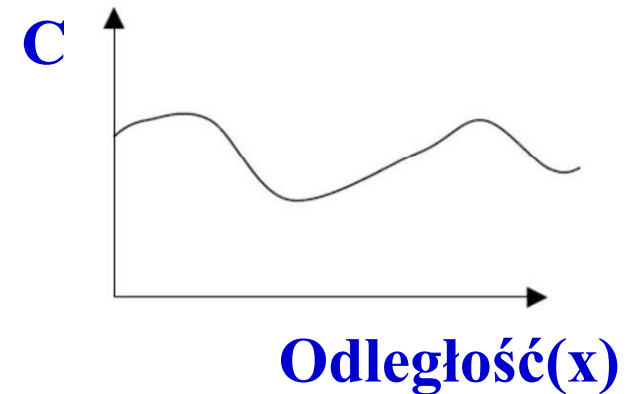
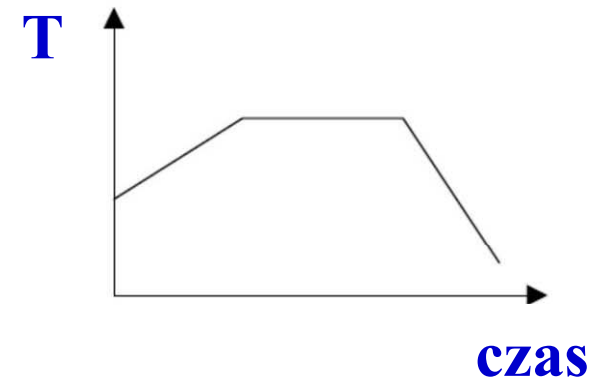


# Zastosowania Dictry

1. Proces krzepnięcia i mikrosegregacji w stalach
2. Spiekanie gradientowe scementowanych węglików
3. Rozrost fazy  $\gamma'$  w stopach Ni
4. Nawęglanie i odwęglanie stali
5. Nawęglanie stopów żaroodpornych
6. Azotowanie i azoto-nawęglanie
7. Przmiana dyfuzyjna austenit/ferryt
8. Wykresy TTT i CTP
9. Dyfuzja w warstwach powierzchniowych
10. Homogenizacja stali i stopów
11. Rozpuszczanie i wzrost cząstek węglików w stalach
12. Skoordynowany wzrost perlitu w stalach

# Możliwości zdefiniowania T i c

- ✓ Temperatura może być zdefiniowana zależnością funkcyjną od czasu;
- ✓ Do tego celu można wykorzystać: +, -, \*, \*\*, SQRT(t), EXP(t), LOG(t), SIN(t);
- ✓ Stężenie pierwiastka można wprowadzić, jako funkcję odległości lub wprowadzić w postaci zbioru;
- ✓ Można wykorzystać również funkcje, np. funkcję błędu, erf(x), funkcję hs(x).



# Podsumowanie

- ✓ Obliczenia z wykorzystaniem DICTRY prowadzone są w oparciu o bazy danych termodynamicznych oraz bazę danych współczynników ruchliwości, wyznaczonych dla układów wieloskładnikowych.
- ✓ Program DIKTRA może być wykorzystany do opracowania baz danych zawierających współczynniki ruchliwości w oparciu o dane doświadczalne.
- ✓ Problem ruchomej powierzchni rozdziału w programie DIKTRA traktowany jest przy założeniu skończonej jej ruchliwości, z uwzględnieniem bilansu strumieni składników stopu i dyfuzji w fazach stechiometrycznych.