

Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica  
Wydział Inżynierii Metali i Informatyki Przemysłowej  
Katedra Informatyki Stosowanej i Modelowania

Rozprawa doktorska

**NUMERYCZNE ROZWIĄZANIE RÓWNAŃ DYFUZJI  
Z RUCHOMĄ POWIERZCHNIĄ MIĘDZYFAZOWĄ  
W ZASTOSOWANIU DO MODELOWANIA  
PRZEMIANY AUSTENIT - FERRYT**

**mgr inż. Monika Pernach**

**Promotor: Prof. dr hab. inż. Maciej Pietrzyk**

Kraków 2007

Pragnę złożyć serdeczne podziękowania

Panu prof. dr hab. inż. Maciejowi Pietrzykowi  
za cenne wskazówki, życzliwość i poświęcony czas

Panu prof. dr hab. inż. Jerzemu Pacynie  
oraz Pani mgr inż. Teresie Skrzypek  
za pomoc w wykonaniu badań dylatometrycznych

Panu dr inż. Sławomirowi Kącowi  
za pomoc w wykonaniu pomiarów nanotwardości

Panu mgr inż. Januszowi Stępińskiemu  
za pomoc w badaniach mikroskopowych

Koleżankom i Kolegom  
z Katedry Informatyki Stosowanej i Modelowania  
za praktyczne wskazówki i miłą atmosferę w pracy

Mojej Rodzinie  
za wyrozumiałość i wszelką okazaną pomoc

## Spis treści

Spis najważniejszych oznaczeń	3
1. Wstęp	5
2. Model fizyczny przemiany $\gamma-\alpha$	8
2.1. Wprowadzenie	8
2.2. Termodynamika, mechanizm i kinetyka przemiany $\gamma-\alpha$	9
2.2.1. Termodynamika przemiany $\gamma-\alpha$	9
2.2.2. Mechanizm przemiany $\gamma-\alpha$ i wpływ dyfuzji	12
2.2.3. Kinetyka przemiany $\gamma-\alpha$	17
2.3. Wzrost kierunkowy ferrytu	21
3. Model matematyczny przemiany $\gamma-\alpha$	28
3.1. Metody obliczeniowe zastosowane w modelowaniu przemiany $\gamma-\alpha$	28
3.2. Konwencjonalne modele przemiany $\gamma-\alpha$	32
3.3. Model przemiany $\gamma-\alpha$ dla wzrostu kierunkowego	38
3.4. Model przemiany $\gamma-\alpha$ w stalach stopowych	42
3.5. Problem Stefana	45
3.6. Model struktury austenitu i ferrytu	45
4. Teza pracy	48
5. Własny model przemiany $\gamma-\alpha$	50
5.1. Rozwiązanie metodą różnic skończonych	51
5.2. Rozwiązanie metodą elementów skończonych	53
5.3. Problem Stefana w przemianie fazowej $\gamma-\alpha$	56
5.4. Modelowanie okresu inkubacyjnego	57
5.5. Warunki początkowe i brzegowe modelu	61
5.5.1. Warunki początkowe i brzegowe dla wzrostu ferrytu ziarnistego	61
5.5.2. Warunki początkowe i brzegowe dla wzrostu ferrytu płytkowego	62
5.6. Parametry modelu	63
6. Wyniki własnych symulacji przemiany $\gamma-\alpha$ i ich weryfikacja doświadczalna	65
6.1. Metodyka i zakres badań doświadczalnych	65
6.1.1. Pierwotne ziarno austenitu	67
6.1.2. Segregacja węgla przed frontem przemiany $\gamma-\alpha$	67
6.1.3. Kinetyka przemiany $\gamma-\alpha$	68

6.1.4.	Wzrost równoosiowy ferrytu	68
6.1.5.	Wzrost kierunkowy ferrytu	69
6.2.	Wyniki badań doświadczalnych	70
6.2.1.	Doświadczalne wyznaczenie parametrów przemiany $\gamma-\alpha$ w stalach modelowych	70
6.2.2.	Wyniki pomiaru wielkości ziaren austenitu	72
6.2.3.	Wyniki badań segregacji węgla przed frontem przemiany $\gamma-\alpha$	72
6.2.4.	Wyniki badań kinetyki przemiany $\gamma-\alpha$	74
6.2.5.	Wyniki pomiaru wielkości ziarna ferrytu ziarnistego	75
6.2.6.	Wyniki pomiaru wielkości płytek ferrytu Widmanstättena	77
6.3.	Symulacje numeryczne	79
6.3.1.	Model numeryczny struktury austenitu	80
6.3.2.	Symulacja numeryczna segregacji węgla przed frontem przemiany $\gamma-\alpha$	82
6.3.3.	Symulacja numeryczna kinetyki przemiany $\gamma-\alpha$	87
6.3.4.	Symulacja numeryczna wzrostu ferrytu ziarnistego	93
6.3.5.	Symulacja numeryczna wzrostu ferrytu płytkowego	98
6.4.	Weryfikacja doświadczalna symulacji przemiany $\gamma-\alpha$	100
6.4.1.	Weryfikacja doświadczalna segregacji węgla przed frontem przemiany $\gamma-\alpha$	100
6.4.2.	Weryfikacja doświadczalna wzrostu ferrytu ziarnistego	102
6.4.3.	Weryfikacja doświadczalna wzrostu ferrytu płytkowego	114
7.	Podsumowanie	115
8.	Wnioski	119
9.	Literatura	121
	Aneks I	127
	Aneks II	135

## Spis najważniejszych oznaczeń

$A_1$	temperatura równowagowa przemiany austenitu w perlit
$A_3$	temperatura równowagowa przemiany austenitu w ferryt
$Ac_1$	temperatura przemiany austenitu w perlit podczas nagrzewania
$Ac_3$	temperatura przemiany austenitu w ferryt podczas nagrzewania
$Ar_1$	temperatura przemiany austenitu w perlit podczas chłodzenia
$Ar_3$	temperatura przemiany austenitu w ferryt podczas chłodzenia
$c$	stężenie dyfundującego pierwiastka
$c_0$	stężenie węgla w stali
$c_p$	ciepło właściwe
$c_\alpha$	stężenie równowagowe węgla w ferrycie
$c_\gamma$	stężenie równowagowe węgla w austenicie
$c_{\gamma\alpha}$	stężenie równowagowe węgla na granicy ferryt - austenit
$D$	współczynnik dyfuzji, współczynnik dyfuzji węgla w austenicie
$d_\alpha$	wielkość ziarna ferrytu
$d_\gamma$	wielkość ziarna austenitu
$E, \Delta G_\varepsilon$	energia swobodna odkształceń sprężystych, energia swobodna odkształceń sprężystych w odniesieniu do jednostki objętości zarodka
$f_f$	ułamek ferrytu w odniesieniu do objętości austenitu przed przemianą
$h$	stała Plancka
$I$	strumień dyfuzji
$J$	prędkość zarodkowania
$k_B$	stała Boltzmana
$K$	krzywizna granicy
$M$	ruchliwość granicy
$N$	liczba zarodków nowej fazy w chwili $t$
$Q$	energia aktywacji przemiany
$R$	stała gazowa
$r$	promień cząstki kulistej, promień zarodka
$r^*$	promień krytyczny cząstki kulistej
$T$	temperatura
$t$	czas

$t_c$	czas trwania przemiany $\gamma-\alpha$
$T_x$	temperatura równowagowa
$V$	prędkość wzrostu płytki ferrytu Widmanstättena
$v_{cr}$	prędkość chłodzenia
$V_f$	objętość zarodka
$V_x$	liniowa prędkość przemieszczania się powierzchni międzyfazowej, prędkość ruchu granicy, prędkość wzrostu ziarna ferrytu
$x_f$	ułamek objętości ferrytu
$\Gamma$	częstość przeskoku atomów
$\Gamma_{\gamma-\alpha}$	współczynnik Gibbsa-Thomsona
$\gamma$	energia swobodna powierzchniowa
$\Delta G$	energia swobodna Gibbsa, siła pędna procesu zarodkowania
$\Delta G_V$	energia swobodna aktywacji przemiany w odniesieniu do jednostki objętości zarodka
$\Delta G_A$	energia swobodna aktywacji przemiany
$\Delta t$	krok czasowy
$\Delta x$	krok przestrzenny
$\varepsilon_\gamma$	stopień odkształcenia
$\xi$	położenie powierzchni międzyfazowej
$\rho$	gęstość substancji
$\tau_s$	okres inkubacyjny

## 1. Wstęp

Własności wyrobów ze stali zależą od jej składu chemicznego, składu strukturalnego oraz stanu struktury np. stanu zgniotu. Skład strukturalny determinują przemiany fazowe zachodzące w czasie krystalizacji stali, przeróbki plastycznej na gorąco oraz obróbki cieplnej międzyoperacyjnej i końcowej. Stan struktury można dalej zmieniać na drodze przeróbki plastycznej na zimno. W kształtowaniu własności mechanicznych podstawowe znaczenie mają przemiany fazowe, ponieważ zmieniają własności stali w sposób najsilniejszy.

Przemiany fazowe zachodzące podczas zabiegów wyżarzania, hartowania lub odpuszczania stali węglowych, pozwalają zmieniać wielkość ziaren ferrytu i kolonii perlitycznych, rozdrabniać strukturę perlitu, kształtować morfologię ferrytu w postaci struktur ziarnistych lub płytkowych, powodować koagulację i sferoidyzację cementytu, tworzyć strukturę martenzytyczną, formować struktury odpuszczania. Z przemianami fazowymi związane są w skrajnych przypadkach wielokrotne wzrosty twardości stali, a tym samym silne zmiany granicy plastyczności i granicy wytrzymałości oraz poprawa lub pogorszenie ciągliwości materiału. Przykładowo, w przypadku stali do ulepszania cieplnego 35HM twardość w stanie normalizowanym (860°C, chłodzenie w powietrzu) wynosi 176 HB, w stanie zmiękczonej (680°C, 4 godz., chłodzenie z piecem) - 153 HB, w stanie hartowanej (860°C, chłodzenie w oleju) - 592 HB, w stanie odpuszczonej (600°C, 1 godz.) - 183 HB [1].

W procesach technologicznych liczy się nie tylko uzyskany poziom własności mechanicznych, ale również powtarzalność uzyskiwanych efektów, wyznaczająca osiągnięcia jakościowe. W celu pomyślnej realizacji zadań wytwórczych i jakościowych, procesy przetwórstwa muszą być poddane określonym rygorom technologicznym. Sterowanie parametrami technologicznymi odbywa się w perspektywie zamierzonego celu procesów – uzyskania wyrobu o określonych własnościach, a tym samym o określonej mikrostrukturze. Korekta parametrów technologicznych powinna być oparta na dobrej znajomości ich wpływu na strukturę stali, takiej, by podjęte decyzje prowadziły optymalną drogą do założonego efektu. Konieczne jest zatem stworzenie uniwersalnej bazy wiedzy dotyczącej procesów technologicznych przetwórstwa stali, a głównie przemian fazowych zachodzących podczas nagrzewania i chłodzenia stali.

Opis zjawisk zachodzących w stali podczas przemiany fazowej, a zwłaszcza przemiany ferrytycznej – austenitu  $\gamma$  w ferryt  $\alpha$  (dalej nazywaną przemianą  $\gamma$ - $\alpha$ ), staje się więc ważnym zagadnieniem, które można rozwiązać w oparciu o wyniki badań doświadczalnych, lub wykorzystując dane teoretyczne, posługując się przy tym metodami analitycznymi lub numerycznymi. Badania doświadczalne są z natury rzeczy czasochłonne i kosztowne. Czynniki te

ograniczają ilość parametrów, które można przetestować podczas badań. Analizy numeryczne nie mają tych ograniczeń. Pozwalają one symulować proces technologiczny dla parametrów zmieniających się w szerokim zakresie, ale by dawać wiarygodne wyniki muszą być oparte na doskonałej znajomości teorii procesu i bazować na precyzyjnym matematycznym opisie zjawisk zachodzących podczas przemiany.

Spotykane w literaturze rozwiązania numeryczne przemiany  $\gamma-\alpha$  mają ograniczone zastosowanie praktyczne. W wielu z nich [2-6] wykorzystano równania typu Avramiego opisane w [7,8]. Modele te nie uwzględniają tak istotnego parametru, jak zmiany temperatury, dając dobre wyniki jedynie dla warunków izotermicznych, względnie dla procesów zachodzących ze stałą prędkością chłodzenia. Powstają również modele numeryczne oparte wyłącznie na zależnościach termodynamicznych [9-11], wymagające obszernych baz danych doświadczalnych. Brak jest modeli numerycznych opisujących wzrost kierunkowy ferrytu Widmanstättena, które pozwalałaby na przewidywanie wielkości płytek ferrytu, tak silnie wpływających na własności struktury.

Przy tworzeniu modelu numerycznego przemiany  $\gamma-\alpha$  priorytetem staje się dokładna analiza teoretyczna zagadnienia, ze szczególnym uwzględnieniem najnowszych osiągnięć w dziedzinie modelowania przemian fazowych oraz doświadczalna weryfikacja poprawności działania. Bardzo duże znaczenie ma uwzględnienie w modelu jak największej liczby zjawisk zachodzących w czasie przemiany. Jednym z takich zjawisk jest dyfuzja węgla w austenicie, stąd punktem wyjścia dla rozwiązania przeprowadzonego w niniejszej pracy stała się opisana w publikacjach [12,13] propozycja zastosowania do opisu przemiany  $\gamma-\alpha$  rozwiązania równania dyfuzji z ruchomą powierzchnią międzyfazową (problem Stefana). Takie podejście stwarza możliwość uwzględnienia wpływu zmian temperatury na przebieg przemiany. W modelu opartym o założenie, że wzrastające ziarna ferrytu mają formę kulistą, wykorzystano rozwiązanie równania II prawa Ficka dla dyfuzji w układzie sferycznym. Stosując do obliczeń metodę różnic skończonych wyznaczono zależność wzrostu promienia pojedynczej kuli od czasu, oraz zależność wzrostu ułamka nowej fazy od czasu. Rozwiązanie przeprowadzone dla stałego współczynnika dyfuzji nie było odniesione do rzeczywistych parametrów przemiany. Poprawność działania zastosowanego algorytmu pozwalała jednak na sformułowanie wniosku, że model jakościowo prawidłowo opisuje zjawiska zachodzące podczas przemiany  $\gamma-\alpha$ .

We wcześniejszych pracach autorki [14-17] rozwiązanie numeryczne przemiany  $\gamma-\alpha$  dla wzrostu ferrytu ziarnistego przeprowadzono metodą różnic skończonych dla przypadku jednowymiarowego i trójwymiarowego, a dla przypadku dwuwymiarowego metodą elementów skończonych. Równanie dyfuzji z ruchomą powierzchnią międzyfazową rozwiązano przy założeniu

stanu równowagi termodynamicznej. Początkowe stężenie węgla w austenicie na granicy określano z wykresu fazowego Fe-Fe<sub>3</sub>C. Rozkład węgla w austenicie był wynikiem symulacji numerycznych w kolejnych krokach czasowych. Ruch granicy faz kontrolowano przez bilans masy po jednej i po drugiej stronie granicy powierzchni międzyfazowej. Równanie II prawa Ficka rozwiązywano dla nieruchomej granicy i następnie po każdym kroku czasowym określano nowe położenie granicy. Do modelu wprowadzono współczynnik dyfuzji węgla  $D$  w funkcji zmian temperatury i stężenia. Model uzupełniono o generowanie struktur polikrystalicznych przy wykorzystaniu algorytmu Voronoi. Stworzono również model 2D dla wzrostu ferrytu płytkowego, wykorzystując algorytm Enomoto [18,19].

Celem niniejszej pracy było rozwinięcie koncepcji zawartej w pierwszych publikacjach autorki [14-17] oraz doświadczalna weryfikacja opracowanych modeli. W części pracy związanej z rozwojem modelu skupiono się na przeprowadzeniu analizy wpływu założonego kształtu ziaren ferrytu i austenitu na przebieg przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ , określeniu segregacji węgla przed frontem przemiany oraz na wykonaniu testów numerycznych pozwalających na porównanie i ocenę różnych rozwiązań. Kolejnym celem pracy była ocena dokładności modeli w oparciu o weryfikację doświadczalną uzyskanych wyników. W tym ujęciu opracowany model powinien prawidłowo opisać zjawiska zachodzące przed frontem przemiany, które wpływają na jej kinetykę, zweryfikować możliwość zastosowania rozwiązania równania dyfuzji z ruchomą powierzchnią międzyfazową do modelowania przemiany. Opracowany model powinien dostarczać nowych informacji o zjawiskach zachodzących w obszarze frontu przemiany i, w konsekwencji, stać się przydatnym narzędziem wspomagającym badania naukowe i projektowanie procesów technologicznych.

## 2. Model fizyczny przemiany $\gamma$ - $\alpha$

### 2.1. Wprowadzenie

Przemiany fazowe zachodzące w stanie stałym należą w większości do przemian heterogenicznych, co oznacza, że w czasie trwania przemiany można znaleźć mikroskopowe obszary, które uległy przemianie i takie, w których przemiana nie nastąpiła. W fazie pierwotnej można więc wskazać ośrodki, od których rozpoczyna się przemiana przez zarodkowanie. Według klasycznej teorii zarodkowania proces ten związany jest z fluktuacjami, odpowiadającymi przegrupowaniom atomów w granicach lokalnych objętości. Przemiany heterogeniczne można podzielić na dwie grupy: przemiany zarodkowania i wzrostu oraz przemiany martenzytyczne. Przemiana  $\gamma$ - $\alpha$  należy do pierwszego typu przemian, w których nowa faza powstaje kosztem starej, w następstwie ruchu granicy międzyfazowej polegającego na przemieszczaniu się atomów. Prędkość przemiany zależy wówczas zarówno od prędkości procesów zarodkowania, jak i wzrostu cząstek (wartość wypadkowa prędkości będzie zależna od wolniejszego stadium), a samą przemianę charakteryzują następujące czynniki [7]:

- 1) Czas – w dowolnej temperaturze ilość nowo powstałej fazy wzrasta z czasem, dopóki nie zostanie osiągnięty stan minimalnej energii swobodnej. W przypadku przemian kontrolowanych dyfuzją wymiar liniowy fazy rośnie proporcjonalnie do pierwiastka kwadratowego z czasu.
- 2) Temperatura – dla wystarczająco dużego przedziału czasu, przemiana będzie postępować dopóki nie zajdą wszystkie procesy i dla każdej przemiany można znaleźć temperaturę, poniżej której postęp procesów jest nieznaczny.
- 3) Odształcenie plastyczne – przemiany w stanie stałym zwykle zachodzą szybciej, jeśli poprzedzone są przeróbką plastyczną materiału, albo na zimno, albo na gorąco w temperaturze, w której nie zachodzi rekrytalizacja. Wynika to z kilku powodów. Zarodkowanie może zachodzić łatwiej w obszarach sieci krystalicznej odkształconej plastycznie, ponieważ efektywna siła napędowa jest większa, a bariera energii swobodnej mniejsza. Podobnie energia aktywacji dyfuzji atomowej może być obniżona w obszarach mocno odkształconych. Proces odkształcenia prowadzi, niezależnie od energii aktywacji, do wzrostu gęstości dyslokacji i znacznego, tymczasowego podwyższenia liczby wakancji oraz wzrostu prędkości dyfuzji.
- 4) Skład chemiczny, objętość atomowa, kształt nowej fazy – skład chemiczny i objętość atomowa produktów przemiany nie muszą być w żaden sposób związane z pierwotną fazą. W przypadku, gdy energia powierzchniowa odgrywa ważną rolę, kształt cząstek będzie kulisty, lub przyjmie w przybliżeniu postać równoosiowych wielościanów. Jeśli w czasie przemiany dochodzi do zmiany

objętości, o postępie decyduje energia odkształcenia i kryształy nowej fazy będą przyjmowały kształt płytek lub igieł zorientowanych krystalograficznie względem pierwotnej sieci.

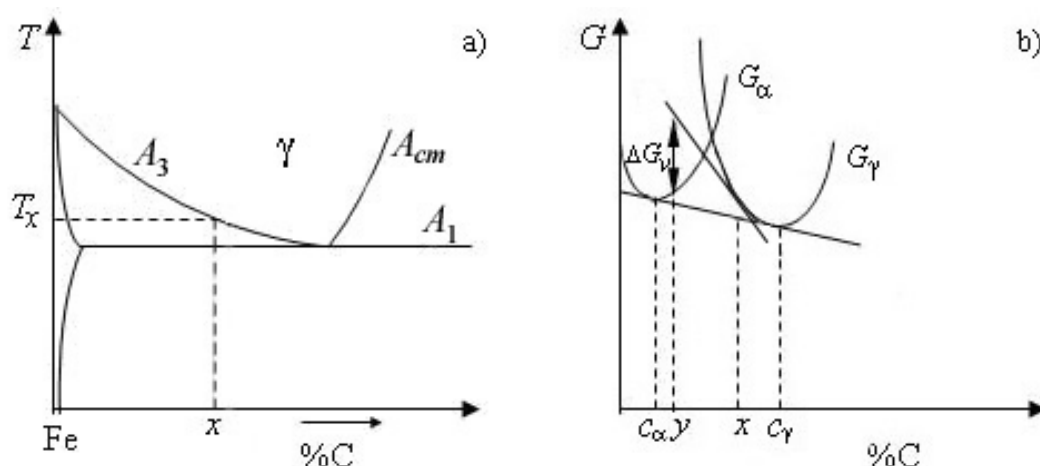
5) Orientacja krystalograficzna – w przypadku struktury Widmanstättena i we wczesnych etapach koherentnego wzrostu wydzielen, sieć krystalograficzna jednej z faz przyjmuje orientację zależną od drugiej. Zależność orientacji występuje zwykle wtedy, gdy dwie fazy powstają jednocześnie, co ma miejsce podczas krzepnięcia stopów eutektycznych, lub przemian eutektoidalnych w stanie stałym.

Przemiany fazowe w stanie stałym są nieodwracalne w sensie termodynamicznym, jak również w sensie fizycznym, ze względu na brak możliwości powrotu atomów do konfiguracji wyjściowej. Dopóki pojedyncze atomy poruszają się niezależnie, nie ma korelacji pomiędzy początkowymi i końcowymi położeniami atomów [7].

## 2.2. Termodynamika, mechanizm i kinetyka przemiany $\gamma-\alpha$

### 2.2.1 Termodynamika przemiany $\gamma-\alpha$

Przemiana austenitu w ferryt w stopach Fe-C, prowadząca do wydzielenia ferrytu podeutektoidalnego, może zachodzić w warunkach chłodzenia izotermicznego lub ciągłego, gdy austenit o odpowiednim składzie zostanie ochłodzony do temperatury poniżej  $A_{r3}$ . Siła pędna procesu zarodkowania  $\Delta G_V$  związana jest z różnicą energii swobodnych  $G$  pomiędzy fazami  $\gamma$  i  $\alpha$ . Na Rys.1 przedstawiono warunki równowagi austenitu i ferrytu dla temperatury  $T_x$ . W stanie równowagi pozostaje austenit o stężeniu węgla równym  $c_\gamma$  i ferryt o składzie  $c_\alpha$ .



Rys.1. Fragment wykresu równowagi Fe-Fe<sub>3</sub>C – (a), położenie krzywych energii swobodnej faz przy temperaturze  $T_x$  – (b) [20].

W temperaturze  $T_x$  bieżące stężenie węgla w austenicie i zarodku ferrytu wynosi odpowiednio  $x$  i  $y$ . Odległość pomiędzy styczną do krzywej  $G_\gamma$  w punkcie  $x$  i krzywą  $G_\alpha$  w punkcie

$y$  określa siłę pędą dla zarodkowania ferrytu  $\Delta G_V$ . W miarę obniżania stężenia  $x$  siła pędą  $\Delta G_V$  rośnie. Obniżenie temperatury przemiany przy ustalonym składzie stali prowadzi będzie do przesunięcia w dół krzywych zmian energii swobodnej i tym samym będzie zwiększać siłę pędą procesu. Zwiększenie siły pędą jest równoznaczne ze wzrostem prędkości zarodkowania [20,21].

Wartość energii swobodnej zależy przede wszystkim od fluktuacji rozmieszczenia atomów względem stanu wyjściowego. Rozróżnia się dwa rodzaje fluktuacji, odpowiednio dla: generalnego przegrupowania atomów w granicach lokalnych objętości oraz dla niewielkich przemieszczeń atomów w całej objętości. Teoria zarodkowania związana jest z pierwszym typem fluktuacji, przy założeniu stabilności układu względem małych fluktuacji oraz istnienia bariery energetycznej. Bariere stanowi zmiana energii powierzchniowej. Powstawaniu cząstek nowej fazy towarzyszy bowiem tworzenie się powierzchni międzyfazowych. Zarodki nowej fazy są bardzo małe i wartość stosunku ich powierzchni do objętości jest wysoka. Obniżenie energii swobodnej wynikające z przemiany niewielkiej objętości fazy metastabilnej w fazę stabilną jest zatem małe w porównaniu z przyrostem energii powierzchniowej. Gdy stopień przechłodzenia rośnie, strata energii spowodowana tworzeniem się nowych powierzchni międzyfazowych może zostać zbilansowana zyskiem energii wynikającym z powstania odkształceń sprężystych, kompensujących różnice objętości. Zmianę energii swobodnej układu spowodowaną powstaniem zarodka o objętości  $V_f$  i powierzchni  $S$  opisuje wyrażenie [20]:

$$\Delta G = V_f(\Delta G_V + \Delta G_\varepsilon) + \lambda V_f \gamma \quad (1)$$

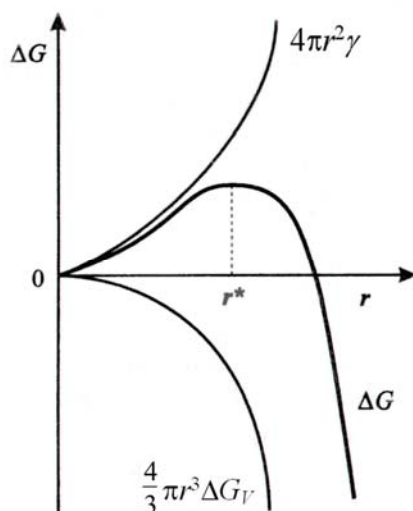
gdzie:  $\lambda = S/V_f$  - współczynnik kształtu zarodka.

Przy analizie procesu zarodkowania cząstek nowej fazy wprowadzane są pewne uproszczenia. Energia swobodna powierzchni międzyfazowej jest niezależna od orientacji krystalograficznej, uwzględniana jest jedynie energia powierzchniowa, a zarodki mają kształt kulisty. Powstająca cząstka krystaliczna o promieniu  $r$  powoduje zmianę energii swobodnej układu opisaną wzorem:

$$\Delta G = \frac{4}{3} \pi r^3 \Delta G_V + 4 \pi r^2 \gamma \quad (2)$$

gdzie:  $\Delta G_V < 0$ .

Na Rys.2 przedstawiono zmianę energii swobodnej powierzchniowej, objętościowej oraz całkowitej w funkcji promienia cząstki kulistej.



Rys.2. Zmiana energii swobodnej powierzchniowej, objętościowej oraz całkowitej w funkcji promienia zarodka  $r$  [20].

Dla małej wartości promienia energia swobodna układu rośnie, ponieważ dominuje energia powierzchniowa. Natomiast dla dużych wartości promienia dominująca staje się energia swobodna objętościowa, zmieniająca się proporcjonalnie do  $r^3$ . Energia swobodna układu rośnie osiągając maksimum dla promienia krytycznego  $r=r^*$ , którego wielkość można określić z warunku  $\partial\Delta G/\partial r=0$ :

$$r^* = -\frac{2\gamma}{\Delta G_V} \quad (3)$$

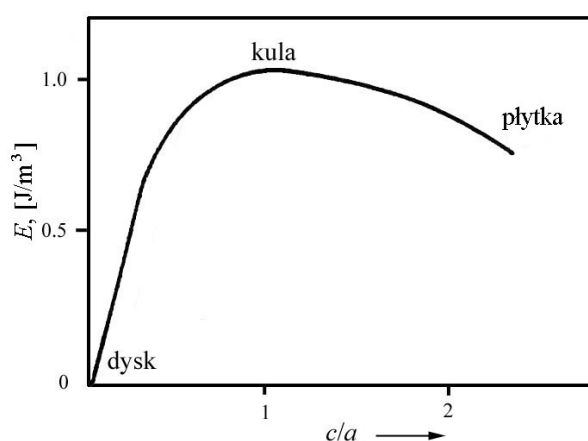
gdzie:  $\Delta G_V < 0$ .

Zarodki o promieniu większym od  $r^*$  stają się zarodkami trwałymi nowej fazy, gdyż ich wzrostowi towarzyszy spadek energii swobodnej, a zarodki o promieniu mniejszym od  $r^*$  mają tendencję do rozpadu, ponieważ ich wzrostowi towarzyszy wzrost energii swobodnej. W przypadku, gdy promień zarodka jest równy promieniowi krytycznemu (zarodek krytyczny), jego szanse na wzrost i rozpad są jednakowe.

W bilansie energetycznym procesu zarodkowania w stanie stałym, poza zmianami funkcji termodynamicznych, uwzględniana jest koherencja granicy międzyfazowej oraz kształt zarodka. Koherencja rozumiana jest jako dopasowanie atomów sąsiadujących ze sobą ziaren w płaszczyźnie granicy. Koherencja, lub jej brak, decyduje o energii granicy międzyfazowej a kształt zarodka wpływa na wielkość odkształceń sprężystych podczas jego wzrostu. Dla uproszczenia modelu określa się kształt zarodka, przyjmując założenie o niekoherentnej powierzchni międzyfazowej, czyli powierzchni niemającej związku sieciowego z austenitem. W większości przypadków

zarodkowania w stanie stałym nie musi bowiem występować pełna koherencja, aby energia powierzchni międzyfazowej była niska. Dzieje się tak np. gdy kryształy ferrytu wydzielające się w austenicie wykazują związek orientacji krystalograficznej opisanej zależnością Kurdjumowa-Sachsa (K-S), w której płaszczyzna {110} ferrytu pozostaje równoległa do {111} austenitu, a kierunek <111> austenitu równoległy do <110> ferrytu.

Na Rys.3 przedstawiono, wynikającą z modelu Nabarro, zależność energii odkształceń sprężystych  $E$  od kształtu zarodka będącego elipsoidą obrotową o półosiach  $a$  i  $c$  i jej modyfikacjami ( $c/a = 1$  - kula,  $c/a > 1$  - kształt płytki,  $c/a < 1$  - kształt dysku) [20-23]. Energia odkształceń sprężystych jest minimalna dla dysku, rośnie do poziomu  $1.0 \text{ J/m}^3$  dla kuli i maleje do  $0.75 \text{ J/m}^3$  dla przypadku płytki.



Rys.3. Zależność energii swobodnej odkształceń sprężystych  $E$  od kształtu zarodka będącego elipsoidą obrotową wyrażonego stosunkiem półosi  $c/a$  [20].

Związek między energią odkształceń sprężystych a energią swobodną odkształceń sprężystych  $\Delta G_\varepsilon$ , odniesioną do jednostki objętości zarodka, dany jest wyrażeniem [20]:

$$\Delta G_\varepsilon = \frac{2}{3} \mu V_w^2 E \quad (4)$$

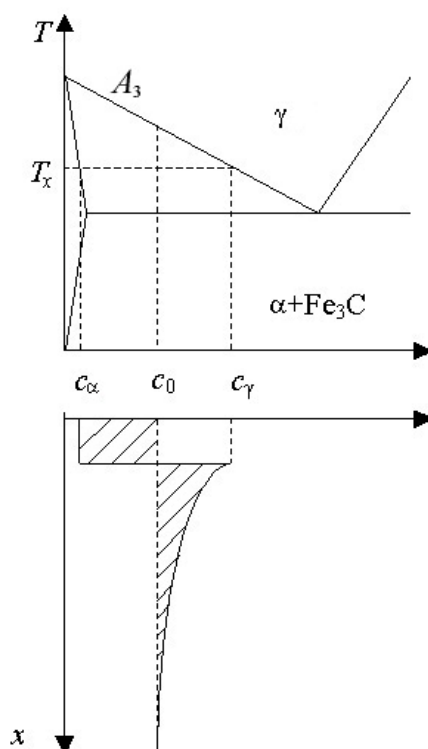
gdzie:  $\mu$  - moduł sprężystości osnowy,  $V_w$  - względna zmiana objętości.

### 2.2.2. Mechanizm przemiany $\gamma$ - $\alpha$ i wpływ dyfuzji

W mechanizmie przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  wyróżnić można zachodzącą równocześnie przebudowę sieci krystalicznej  $\text{Fe}_\gamma$  w  $\text{Fe}_\alpha$  i dyfuzję węgla, która jest uwarunkowana dużymi różnicami w jego rozpuszczalności w austenicie i ferrycie. Zaniedbywane jest przy tym konieczne przemieszczenie

atomów żelaza, gdyż wielkość tych przemieszczeń jest mniejsza od parametru sieci krystalicznej  $Fe_\alpha$ . W przypadku stali nisko i wysokostopowych w mechanizmie przemiany  $\gamma-\alpha$  należy dodatkowo uwzględnić dyfuzję atomów pierwiastków stopowych i domieszek.

Warunki lokalnej równowagi na granicy faz przy założeniu kontrolującego wpływu dyfuzji węgla można określić bezpośrednio z wykresu równowagi [9,20,24]. Na Rys.4 przedstawiono naroże układu Fe- $Fe_3C$  oraz rozkład węgla w austenicie przed rosnącym ziarnem ferrytu dla przemiany izotermicznej.



Rys.4. Fragment wykresu Fe- $Fe_3C$  – (a), rozkład stężenia węgla w austenicie przed rosnącym ziarnem ferrytu – (b) [20].

Austenit o składzie  $c_0$  zostaje szybko ochłodzony do temperatury  $T_x$  i wytrzymywany izotermicznie. W równowadze współistnieją wówczas: ferryt o składzie  $c_\alpha$  i austenit o składzie  $c_\gamma$ . Istotna różnica w równowagowych stężeniach węgla w graniczących fazach powoduje, że powstające zarodki ferrytu oddają węgiel do austenitu, co prowadzi do szybkiego wzrostu stężenia węgla w austenicie, w sąsiedztwie powierzchni międzyfazowej. Dalszy wzrost ferrytu limitowany jest dyfuzją węgla w austenicie. W większej odległości od granicy międzyfazowej stężenie węgla w austenicie pozostaje stałe i wynosi  $c_0$ . Ilość węgla oddanego do austenitu przy ruchu powierzchni międzyfazowej o  $dx$  jest równa iloczynowi objętości powstałego ferrytu i różnicy stężeń węgla w fazach  $\alpha$  i  $\gamma$ . W tym samym czasie, w którym granica międzyfazowa pokonuje drogę  $dx$ , musi

nastąpić dyfuzja węgla ze spiętrzenia przy powierzchni międzyfazowej do wnętrza ziaren austenitu, opisana strumieniem dyfuzji  $I$  [20].

Bilans masy jest następujący:

$$dx(c_\gamma - c_\alpha) = Idt \quad (5)$$

Liniową prędkość przemieszczania się powierzchni międzyfazowej opisuje zatem wyrażenie:

$$V_x = \frac{I}{c_\gamma - c_\alpha} = \frac{-D}{(c_\gamma - c_\alpha)} \left( \frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=\xi} \quad (6)$$

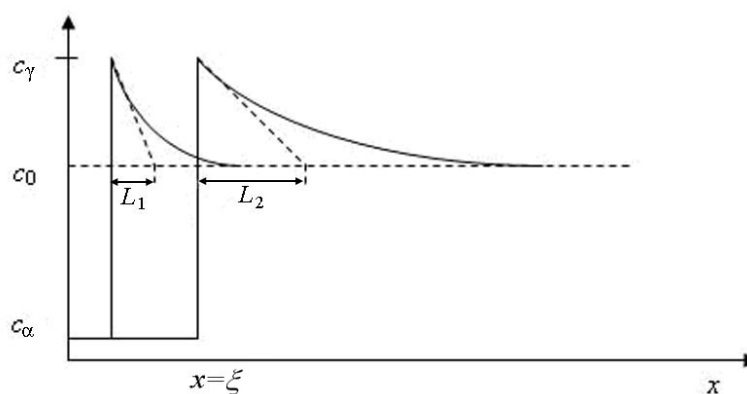
gdzie:  $\left( \frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=\xi}$  - gradient stężenia węgla w austenicie przy powierzchni międzyfazowej.

Ilość węgla oddanego do austenitu jest proporcjonalna do pola pod krzywą rozkładu stężenia, które wzrasta z czasem. W celu scharakteryzowania zmian stężenia węgla w kolejnych położeniach frontu wprowadza się pojęcie efektywnego dystansu dyfuzji  $L$ , zdefiniowanego wyrażeniem:

$$\left( \frac{\partial c}{\partial x} \right)_{x=\xi} = - \frac{c_\gamma - c_0}{L} \quad (7)$$

gdzie:  $L$  – efektywny dystans dyfuzji.

Na Rys.5 przedstawiono schemat zmiany rozkładu stężenia węgla dla dwóch położzeń frontu przemiany. Widoczny jest wzrost efektywnego dystansu dyfuzji  $L$  w miarę postępu przemiany.



Rys.5. Schemat rozkładu stężenia węgla przed frontem rosnącej cząstki ferrytu dla dwóch kolejnych położzeń frontu w warunkach przemiany izotermicznej [20].

Efektywny dystans dyfuzji  $L$  jest wynikiem przypadkowej wędrówki atomów węgla i zgodnie z teorią procesów dyfuzji jest równy  $\sqrt{2Dt}$ . Po wprowadzeniu  $L$  do zależności (6) i uwzględniając (7) liniowa prędkość przemieszczania się powierzchni międzyfazowej  $V_x$  jest opisana wyrażeniem:

$$V_x = \frac{D(c_\gamma - c_0)}{(c_\gamma - c_\alpha)\sqrt{2Dt}} \propto t^{-1/2} \quad (8)$$

Grubość warstwy ferrytu zarodkującego na granicach ziaren zmienia się z czasem zgodnie z zależnością:

$$d = \int_0^t V_x dt \propto t^{1/2} \quad (9)$$

Powyższa zależność dotyczy zarodkowania ferrytu zwanego ferrytem alotriomorficznym. Poza taką formą rozważany jest ferryt idiomorficzny.

Terminem ferryt alotriomorficzny określa się najczęściej ferryt ziarnisty powstający na granicach ziaren austenitu przy najwyższych temperaturach przemiany (800-850°C). Ferryt alotriomorficzny ma tendencję do wzrostu z większą prędkością wzdłuż powierzchni granicznej, niż w kierunku normalnej do tej powierzchni, co wpływa na kształt ziaren ferrytu. Ferryt alotriomorficzny może też zarodkować poza granicami ziaren [9,25].

Termin ferryt idiomorficzny określa ziarna o równoosiowej morfologii, powstające zwykle wewnątrz ziaren na wydzieleniach lub innych zarodkach heterogenicznych, bez kontaktu z granicą ziaren austenitu [9].

Spełnienie zależności (9) związane jest z koniecznością występowania austenitu o wyjściowym stężeniu węgla  $c_0$  przed frontem rosnącego kryształu ferrytu. W chwili, gdy cały nieprzemieniony jeszcze austenit nasyci się węglem do stężenia  $c_\gamma$ , prędkość wzrostu spada do zera. Temperatura wpływa na prędkość wzrostu poprzez zmianę wartości współczynnika dyfuzji węgla  $D$  w austenicie oraz członu  $(c_\gamma - c_0)/(c_\gamma - c_\alpha)$ . Wraz z obniżaniem temperatury przemiany, wspomniane parametry zmieniają się w przeciwnych kierunkach, a prędkość wzrostu osiąga wartość maksymalną przy pewnym przechłodzeniu [20].

Przedstawiony mechanizm wzrostu ferrytu ziarnistego stanowi pewne uproszczenie, ponieważ ziarna ferrytu formowane podczas przemiany  $\gamma-\alpha$  zachodzącej przy dużych przechłodzeniach mogą przyjmować postać płytek Widmanstättena. W przeciwieństwie do form ziarnistych, powierzchnie czołowe płytek ferrytu charakteryzują się silniejszą krzywizną, co powoduje przypowierzchniowe obniżenie równowagowego stężenia węgla. Kinetykę wzrostu płytek należy rozpatrywać oddzielnie dla wzrostu bocznego, kontrolowanego ruchliwością powierzchni międzyfazowej i wzrostu krawędziowego, kontrolowanego dyfuzją węgla. Prezentowany w niniejszej pracy model numeryczny przemiany  $\gamma-\alpha$  uwzględnia wzrost ferrytu płytkowego, wraz z

wymienionymi powyżej cechami charakterystycznymi wzrostu płytek. Zagadnienie wzrostu kierunkowego i wpływu krzywizny powierzchni omówione zostało szerzej w rozdziale 2.3.

Jak już wspomniano, w czasie przemiany  $\gamma-\alpha$  zachodzą równocześnie dwa procesy: przebudowa sieci krystalicznej oraz dyfuzja węgla. Przyjęcie w modelu założenia o kontrolującym wpływie dyfuzji węgla zmusza do pogłębienia interpretacji wielkości współczynnika dyfuzji węgla  $D$  w austenicie. Podstawowym równaniem matematycznym opisującym przemianę  $\gamma-\alpha$ , podobnie jak wszystkie przemiany o charakterze dyfuzyjnym, jest równanie II prawa Ficka [21]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot D \nabla c \quad (10)$$

gdzie:  $\nabla$  - operator Laplace'a.

Współczynnik dyfuzji  $D$  występujący w równaniu związany jest z częstotliwością i prawdopodobieństwem przeskoku atomów w danej sieci krystalicznej [21]:

$$D = \alpha_{lk} a^2 \Gamma \quad (11)$$

gdzie:  $\alpha_{lk}$  - współczynnik zależny od liczby koordynacyjnej sieci (dla sieci A0  $\alpha_{lk} = 1/6$ , A1 lub A3  $\alpha_{lk} = 1/12$ ),  $a$  - długość skoku atomów.

W przypadku, gdy dyfuzja nie jest jednokierunkowa, należy rozpatrzyć przepływ masy w trzech wzajemnie prostopadłych kierunkach. Rozpisując operator  $\nabla$  dla przestrzeni trójwymiarowej otrzymamy następującą postać równania (10):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (12)$$

gdzie:  $D_x, D_y, D_z$  – kierunkowe współczynniki dyfuzji.

Wielkość współczynnika dyfuzji zależy między innymi od gęstości ułożenia atomów, a także od symetrii sieci. W sieci o mniej gęstym ułożeniu wielkość bariery energetycznej przy przeskoku atomu jest mniejsza, łatwiej tworzą się również wakacje. Fe- $\gamma$  ma sieć typu A1 o liczbie koordynacyjnej równej 12 i współczynniku wypełnienia 0.74, natomiast Fe- $\alpha$  ma sieć A2 o liczbie koordynacyjnej równej 8 i współczynniku wypełnienia 0.68. Ze wzoru (11) wynika, że współczynnik dyfuzji jest proporcjonalny do kwadratu odległości przeskoku atomu. Współczynnik dyfuzji dla sieci A2 (Fe- $\alpha$ ) musi więc być większy, niż dla sieci A1 (Fe- $\gamma$ ), ponieważ sieć A2 ma mniejszą gęstość ułożenia [21].

Analizując symetrię kształtu można stwierdzić, że w sieciach o dużej symetrii nie występuje zależność prędkości dyfuzji od kierunku krystalograficznego. W sieciach regularnych typu: A1, A2, w jakich najczęściej krystalizują metale, współczynnik dyfuzji jest izotropowy, tzn.  $D=D_x=D_y=D_z$ . Skalar  $D$  może więc zostać wyłączony przed znak różniczki [26]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right) \quad (13)$$

W kryształach o niższej symetrii obserwuje się zależność współczynnika dyfuzji od kierunku. Na przykład dla Zn krystalizującego w układzie A3, w pobliżu temperatury topnienia prędkość dyfuzji prostopadłej do osi  $\langle 0001 \rangle$  jest około  $10^6$  razy większa, niż prędkość dyfuzji równoległej do osi. Anizotropowy współczynnik dyfuzji jest opisany przez tensor  $D$ . Równanie II prawa Ficka przyjmuje wtedy postać [27]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \mathbf{D} \nabla c, \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & D_{13} \\ D_{21} & D_{22} & D_{23} \\ D_{31} & D_{32} & D_{33} \end{bmatrix} \quad (14)$$

lub:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial x_1} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{11} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{12} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{13} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial c}{\partial x_2} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{21} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{22} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{23} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial c}{\partial x_3} &= \frac{\partial}{\partial x} \left( D_{31} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{32} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_{33} \frac{\partial c}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (15)$$

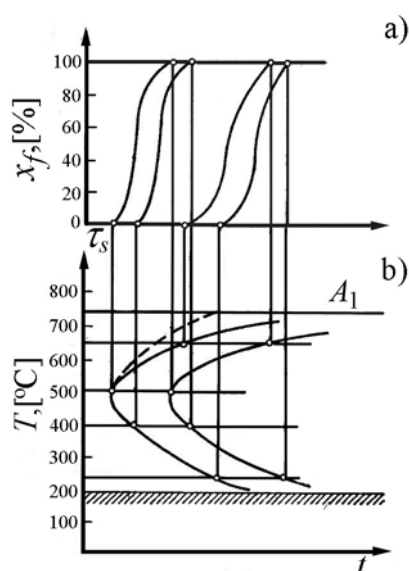
W układach regularnych własności fizyczne materiału są takie same wzdłuż trzech osi sześciangu. Współczynniki dyfuzji przyjmują więc wartości:  $D_{ij}=D_1$ , dla  $i=j$ , oraz  $D_{ij}=0$ , dla  $i \neq j$  [26,28]. Uzasadnia to zastosowanie w modelu przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  izotropowego współczynnika dyfuzji węgla w austenicie.

### 2.2.3. Kinetyka przemiany $\gamma$ - $\alpha$

Kinetyka przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  opisuje zmianę w funkcji czasu udziału objętości fazy powstającej podczas przemiany. W opisie kinetyki uwzględniany jest okres inkubacyjny, a sama krzywa kinetyczna ma postać krzywej typu S. Przemiana  $\gamma$ - $\alpha$  odbywa się poprzez zarodkowanie i wzrost

ziaren ferrytu. O postępie tych procesów decydują funkcje termodynamiczne obu faz oraz procesy dyfuzyjne węgla i pierwiastków stopowych. Wzrost ziaren ferrytu jest równoznaczny z ruchem powierzchni międzyfazowej, który jest opisywany mechanizmem dyfuzyjnym.

Kinetykę przemiany  $\gamma\text{-}\alpha$  można rozpatrywać na wykresach CTP: czas – temperatura - przemiana. Wśród wykresów CTP rozróżnia się wykresy: dla przemian izotermicznych (CTPi) oraz dla przemian zachodzących przy ciągłym chłodzeniu (CTPc). Wykresy budowane są na podstawie krzywych kinetycznych. W okresie czasu od 0 do  $\tau_s$  przemiana nie zachodzi. Jest to tzw. okres inkubacyjny, czyli czas konieczny do utworzenia zarodków. Okres inkubacyjny ulega skróceniu wraz ze wzrostem przechłodzenia. Przemiana odbywa się powoli przy małym przechłodzeniu, co spowodowane jest małą różnicą energii swobodnych faz  $\gamma$  i  $\alpha$ , a także przy dużym przechłodzeniu, co związane jest z niskim współczynnikiem dyfuzji węgla. Największą prędkość przemiany obserwuje się, gdy przemianie ulegnie około 50% początkowej ilości austenitu. Zasady konstrukcji wykresu CTPi przedstawiono na Rys.6.



Rys.6. Krzywe kinetyczne typu S izotermicznej przemiany austenitu w stali podeutektoidalnej dla różnych temperatur – (a), wykres CTPi otrzymany z krzywych S – (b) [29].

Zjawisko okresu inkubacyjnego występuje w procesach aktywowanych cieplnie, które nie rozpoczynają się bezpośrednio w założonej temperaturze przemiany. Zgodnie z teorią Russella [30] okres inkubacyjny  $\tau_s$  jest zdefiniowany jako czas potrzebny na powstanie warunków stanu ustalonego, które odpowiadają w przybliżeniu warunkom na początku przemiany. Koncentracja skupisk atomów, inaczej klasterów lub embrionów, o wymiarze większym od wymiaru krytycznego, jest ustalona przez wzajemne reakcje pomiędzy klasterami i pojedynczymi atomami.

Prędkość zarodkowania, w czasie i bezpośrednio po okresie  $\tau_s$  jest, zgodnie z klasyczną teorią zarodkowania, aproksymowana zależnością sformułowaną przez Russella [30]:

$$J = J_0 \exp\left(-\frac{\tau_s}{t}\right) = \hat{Z}\beta^* n_V \exp\left(-\frac{\Delta G_A}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{\tau_s}{t}\right) \quad (16)$$

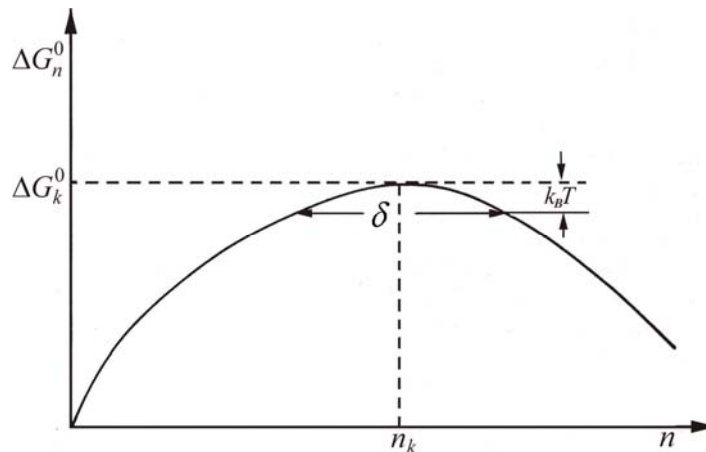
gdzie:  $J_0$  – prędkość zarodkowania w stanie ustalonym,  $\hat{Z}$  - współczynnik objętości Zeldovicha,  $\beta^*$  - współczynnik częstotliwości, czyli prędkość z jaką pojedynczy atom zostaje przyłączony do zarodka krytycznego,  $n_V$  – liczba miejsc zarodkowania na jednostkę objętości.

Procedura określenia okresu inkubacyjnego składa się z wyznaczenia zarodka krytycznego, a następnie obliczenia prędkości z jaką atomy muszą opuścić zarodki, nie pozwalając, by stały się one zarodkami krytycznymi. Na Rys.7 pokazano zmianę energii swobodnej podczas powstawania klasterów oraz obszar krytyczny  $\delta$ , wyrażony przez:

$$\delta = \left[ \frac{-1}{8k_B T} \left( \frac{\partial^2(\Delta G_n^0)}{\partial n^2} \right)_{n_k} \right]^{-1/2} \quad (17)$$

gdzie:  $\Delta G_n^0$  - zmiana energii swobodnej Gibbsa podczas zarodkowania,  $n$  – liczba atomów w klasterze,  $n_k$  – liczba atomów w klasterze dla zarodka krytycznego.

Wielkość zmiany energii swobodnej Gibbsa dla zarodka krytycznego oznaczono na Rys.7 przez  $\Delta G_k^0$ .



Rys.7. Zmiana energii swobodnej Gibbsa podczas powstawania klasterów [30].

Klasterzy zarodkują przy liczbie atomów  $n$  w klasterze większej od  $n_k$ . Mniejsze skupiska mogą ulec rozpadowi. Obszar  $\delta$  ograniczony przez  $\Delta G_k^0 - k_B T$  jest płaski i klasterzy mogą przemieszczać się losowo w tym przedziale. Okres inkubacyjny  $\tau_s$ , czyli czas potrzebny na

utworzenie zarodków, jest sumą czasu losowego przejścia zarodków przez  $\delta$  oraz czasu przemieszczeń  $\tau'$ :

$$\tau_s = \tau + \tau' \quad (18)$$

gdzie:  $\tau$  - czas potrzebny do losowego przejścia klasterów przez obszar krytyczny,  $\tau'$  - czas potrzebny na przejście od  $n_k - \delta/2$  do fazy wyjściowej.

Zgodnie z podstawami teorii dyfuzji, czas potrzebny do losowego przejścia klasterów przez obszar krytyczny  $\delta$  wynosi:

$$\tau = \frac{\delta^2}{2\beta^*} \quad (19)$$

gdzie:  $\delta$  - wielkość obszaru krytycznego wyrażona wzorem (17).

Czas  $\tau'$  potrzebny na przejście od  $n_k - \delta/2$  do fazy wyjściowej opisuje wyrażenie:

$$\tau' = - \int_{n_k - \delta/2}^1 \left( \frac{\beta_n}{k_B T} \frac{\partial \Delta G_n^0}{\partial n} \right)^{-1} dn \quad (20)$$

gdzie:  $\beta_n$  – prędkość atomów zderzających się w klastrze.

W literaturze funkcjonuje również wyrażenie opisujące okres inkubacyjny wyprowadzone przez Enomoto (21) [31], zgodne z modelem Aaronsona [32] oraz Phama (22) [33], wynikające z modelu Zenera [34].

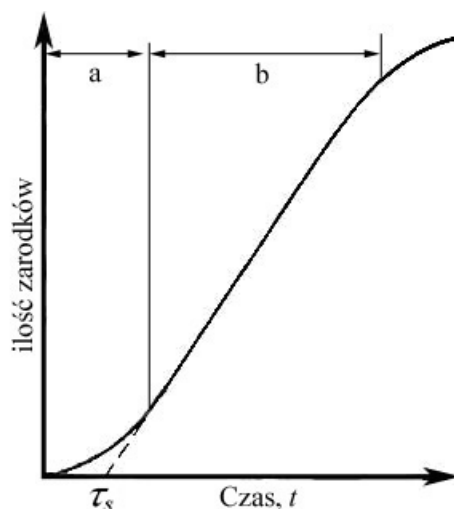
$$\tau_s = K_1 \frac{T}{Dc_0 (\Delta G_n^0)^2} \quad (21)$$

$$\tau_s = A \frac{\exp\left(\frac{Q}{RT}\right)}{(\Delta T_s)^{4.15}} \quad (22)$$

gdzie:  $Q$  - energia aktywacji przemiany,  $K_1$  – współczynnik korelacji,  $\Delta T_s$  – stopień przechłodzenia poniżej  $Ar_3$ ,  $A$  – współczynnik.

Istnieje również doświadczalna metoda określania przybliżonej wartości  $\tau_s$ , której zasady omówiono poniżej, na podstawie krzywej przedstawionej na Rys.8 [30]. Punkt przecięcia prostej, będącej ekstrapolacją liniowej części krzywej, z osią czasu, wyznacza w tej metodzie okres

inkubacyjny  $\tau_s$ . W większości przemian procedura ta pozwala na określenie  $\tau_s$  z dużą dokładnością. W pozostałych przypadkach bardziej poprawną alternatywą będzie przyjęcie  $\tau_s = 0$  [7].



Rys.8. Schematyczna krzywa zarodkowania w zależności od czasu  $t$ : a - zakres stan nieustalonego zarodkowania, b – zakres stanu ustalonego zarodkowania [30].

Przedstawiona powyżej procedura budowy wykresów CTP oraz ich zastosowania posłużyły do opisu kinetyki przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ , symulowanej numerycznie w niniejszej pracy. Natomiast klasyczna teoria zarodkowania Russella wykorzystana została do opisu okres inkubacyjnego.

### 2.3. Wzrost kierunkowy ferrytu

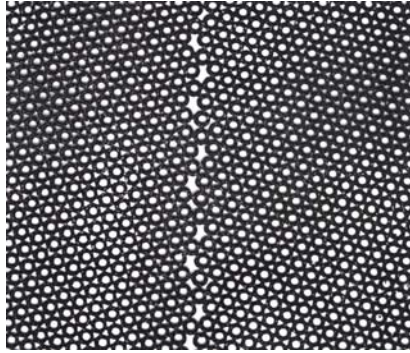
Struktura płytkowa, zwana strukturą Widmanstättena, powstaje w wyniku uprzywilejowanego wzrostu płytek ferrytu na płaszczyznach  $\{111\}$  austenitu. Konsekwencją takiego wzrostu jest wzajemne ułożenie płytek pod kątami  $60$  i  $120^\circ$ , w trzech kierunkach, z zachowaniem takiej samej orientacji krystalograficznej względem osnowy. Kształt zarodka odpowiada warunkom kompromisu pomiędzy energią odkształceń sprężystych i energią powierzchniową, zależną od orientacji krystalograficznej.

Ferryt Widmanstättena zarodkuje bezpośrednio na granicach ziaren austenitu i rośnie wzdłuż ściśle określonych płaszczyzn krystalograficznych. Wynika to z faktu, że wewnątrz ziarna atomy ułożone są regularnie. Natomiast granica stykających się ziaren jest strefą atomowego niedopasowania struktury krystalicznej. Atomy na granicach ziaren są ułożone mniej gęsto, zaburzona jest ciągłość płaszczyzn i kierunków krystalograficznych - atomy są przesunięte z położenia o najniższej energii. Różnice w odstępach atomowych wywołują wzrost naprężeń sprężystych, a to z kolei prowadzi do wzrostu energii granicy ziaren. Konsekwencją większej energii granicy ziaren jest jej uprzywilejowanie w zarodkowaniu nowej fazy.

Płytki Widmanstättena powstają przy dużych przechłodzeniach. Przy małych przechłodzeniach, czyli w przypadku przemiany zachodzącej w wysokiej temperaturze, ruchliwość atomów jest tak duża, że atomy mogą wybierać dowolne drogi dyfuzji i wzrost ziaren ferrytu jest bliski równoosiowemu. W niskich temperaturach, kiedy ruchliwość atomów jest mała, o postępie dyfuzji decydują drogi łatwej dyfuzji: granice ziaren, dyslokacje, granice międzyfazowe [29]. Znaczenia nabiera również czynnik orientacji krystalograficznej osnowy. Jak napisano wcześniej, w fazach o sieciach wysokosymetrycznych czynnik orientacji nie ma statystycznie większego znaczenia. Przy niskich temperaturach zaczyna się ujawniać kierunkowość dyfuzji związana z orientacją krystalograficzną frontu przemiany. Badania doświadczalne ferrytu Widmanstättena wskazują na występowanie związków krystalograficznych ferrytu z austenityczną osnową, zbliżonych do zależności K-S opisanej w rozdziale 2.2.1. Przy takiej orientacji układ atomów w granicy ziaren jest zgodny, co odpowiada niskiej energii granicy międzyfazowej [35].

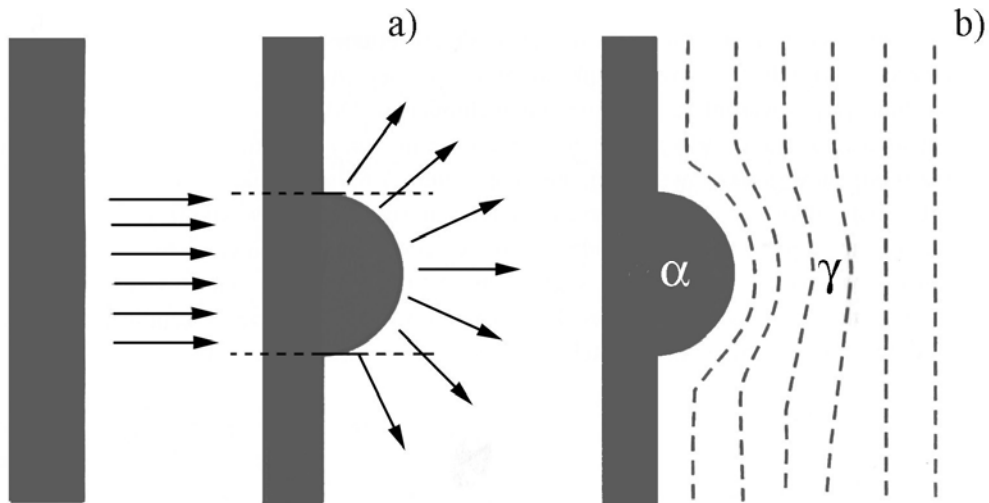
Zakłada się, że prędkość wzrostu płytek ferrytu Widmanstättena jest kontrolowana zarówno dyfuzją węgla w austenicie, jak i ruchliwością powierzchni międzyfazowej, o czym decyduje jej charakter. Płytki ferrytu Widmanstättena ograniczone są bowiem płaskimi granicami półkoherentnymi i zakrzywionymi granicami niekoherentnymi. Granicę półkoherentną przedstawiono schematycznie na Rys.9. Atomy wspólne dla obu ziaren tworzą w płaszczyźnie granicy sieć miejsc koincydentnych, o określonej gęstości koincydencji. Obszary niedopasowania sieciowego kompensują strukturalne dyslokacje granic ziaren. Z gęstością koincydencji ma związek energia powierzchni międzyfazowej. Im lepsze dopasowanie sieciowe, tym niższa energia powierzchni i mniejsza jej ruchliwość. W konsekwencji, jeśli pomiędzy ziarnem ferrytu i austenitu występuje granica półkoherentna, prędkość wzrostu bocznego jest uwarunkowana ruchliwością powierzchni międzyfazowej.

Granice niekoherentne występują wówczas, kiedy ze względów krystalograficznych nie jest możliwe dobre dopasowanie atomów graniczących ze sobą faz. Taka powierzchnia międzyfazowa charakteryzuje się wysoką energią i dużą ruchliwością powierzchni międzyfazowej. W tym przypadku, procesem wolniejszym jest odprowadzenie węgla sprzed rosnącego ziarna ferrytu i prędkość wzrostu krawędziowego kontrolowana jest przez dyfuzję węgla w austenicie [36].



Rys.9. Schematyczne przedstawienie granicy półkoherentnej według Lomera i Nyea [36].

Rozpatrując wzrost krawędziowy kontrolowany dyfuzją węgla należy uwzględnić jeszcze jeden efekt. W rzeczywistych warunkach front przemiany fazowej nie jest idealnie płaski. Lokalne zmiany prędkości wzrostu powodują zaburzenia sferyczne frontu. W ich miejscu zaczyna działać tzw. efekt punktowy dyfuzji, co schematycznie przedstawiono na Rys.10.

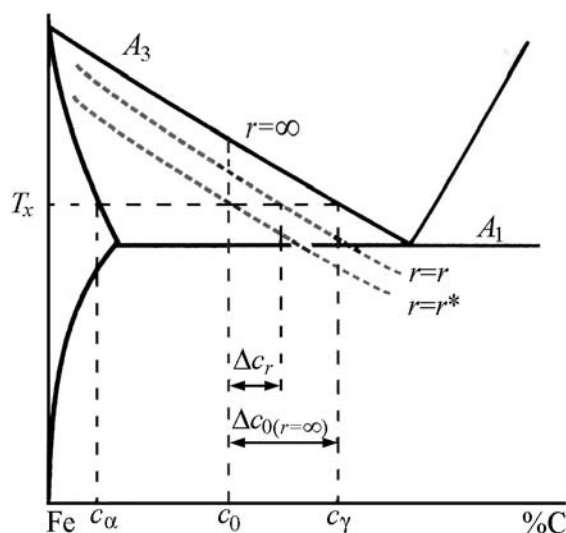


Rys.10. Kierunki dyfuzji węgla przed płaską i zakrzywioną powierzchnią międzyfazową – (a), linie izokontencji węgla w miejscu zaburzenia na froncie przemiany – (b) [20].

Gradient stężenia węgla przed zakrzywioną powierzchnią jest bardziej stromy, następuje tu zagęszczenie linii izokontencji. Ruch powierzchni czołowej jest zależny od prędkości odprowadzania nagromadzonego węgla. Dla bardziej stromego gradientu prędkość przemieszczania się powierzchni jest większa [20].

W modelu własnym przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przyjęto warunki równowagi lokalnej. Pozwala to na obliczanie dla danej temperatury stężenia granicznego  $c_{\gamma-\alpha}$  węgla na granicy faz z krzywej  $A_3$  układu Fe-Fe<sub>3</sub>C. Równowagowe stężenie węgla w austenicie przy powierzchni międzyfazowej dla temperatury  $T_x$  wynosi  $c_\gamma$ , co pokazano na Rys.11. Dotyczy to warunków równowagi przy płaskiej powierzchni międzyfazowej. Dla zakrzywionej powierzchni stężenie równowagowe zmniejsza się. Dla każdej wartości przechłodzenia istnieje krytyczny promień krzywizny, przy którym  $c_\gamma(r^*)=c_0$ .

Różnica pomiędzy równowagowym stężeniem węgla przy powierzchni międzyfazowej i średnim stężeniem węgla w austenicie  $\Delta c_0 = (c_\gamma - c_0)$  jest największa dla płaskiej powierzchni i maleje ze wzrostem jej krzywizny [20].



Rys.11. Wpływ krzywizny powierzchni międzyfazowej na temperaturę  $A_3$  [20].

Charakter powierzchni międzyfazowej ma także wpływ na kierunek wzrostu płytek. Wzrost boczny prowadzi do zwiększenia powierzchni granic wysokoenergetycznych, dlatego preferowany jest wzrost krawędziowy, ponieważ prowadzi do obniżenia energii układu.

Analizując zakończenie płytki, przypominającej swoim kształtem ostrze, można spodziewać się wystąpienia efektu kapilarności. Na ostrze płytki będzie działała energia powierzchni międzyfazowej, odpowiednik napięcia powierzchniowego, sprzyjająca wydłużeniu płytki. Siłą równoważącą będzie gradient stężenia.

Drugim czynnikiem sprzyjającym powstawaniu płytek Widmanstättena jest wielkość ziarna austenitu. Węgiel w dużym ziarnie może spokojnie dyfundować, co będzie sprzyjać wzrostowi ferrytu. W drobnoziarnistym austenicie rosnący ferryt podnosi szybko stężenie węgla wewnątrz ziarna, redukując przez to przesylenie i utrudniając wzrost płytek.

Przeprowadzona analiza wskazuje na pewną analogię pomiędzy wzrostem płytek Widmanstättena i form dendrytycznych. W przypadku płytek ferrytu nie tworzą się jednak odgałęzienia boczne, co może być wynikiem dobrego dopasowania sieci ferrytu i austenitu na powierzchniach bocznych płytek i w konsekwencji minimalizacji wpływu czynnika termodynamicznego na wzrost tych powierzchni. Nie ma więc przyczyny, która prowadziłyby do pojawienia się niestabilności płaskiej powierzchni międzyfazowej, a w konsekwencji do powstania zaburzeń rozwijających się w odgałęzienia boczne [20].

W literaturze [37] rozważane są następujące teorie wzrostu płytek ferrytu Widmanstättena: geometrii dyfuzyjnej, minimalizacji energii odkształcenia, struktury oraz teoria energii międzyfazowej.

Według teorii geometrii dyfuzyjnej, zaproponowanej przez Mehla i Barretta [38], płytki rosną omówionym powyżej mechanizmem dyfuzji punktowej na powierzchniach czołowych. Prędkość ich wzrostu jest spowodowana stromym gradientem stężenia wokół powierzchni czołowych, większym, niż w przypadku powierzchni bocznych. Wpływ orientacji krystalograficznej jest pomijany. Uwzględnienie jedynie efektu punktowego nie uzasadnia wzajemnych relacji krystalograficznych płytek i osnowy zgodnie z zależnościami K-S i N-W.

Teoria minimalizacji energii odkształcenia, opisana przez Nabarro [22], oparta jest na stwierdzeniu, że cząstki mogą rozwijać się jedynie w taki sposób, by minimalizować energię odkształcenia. Tymczasem kształt płytek Widmanstättena zależy o wiele bardziej od energii powierzchniowej i struktury, niż od energii odkształcenia. Model Nabarro przedstawiono w rozdziale 2.2.1.

W teorii struktury i teorii energii międzyfazowej rozróżnia się dwa odmienne podejścia do zagadnienia wzrostu płytek, prezentowane odpowiednio przez Smitha [37] i Aaronsona [7,37].

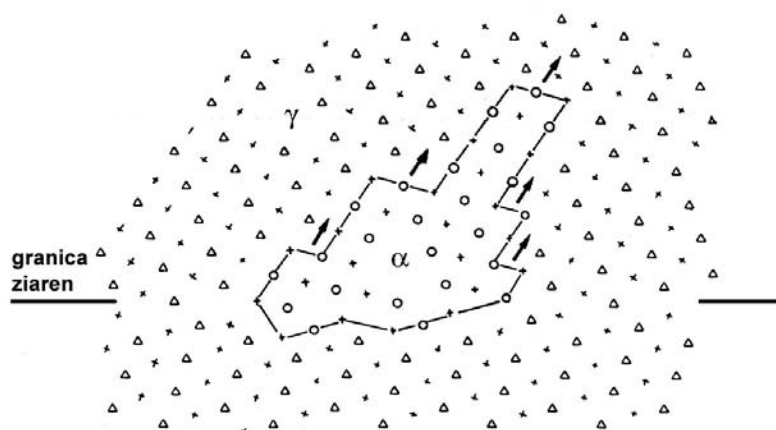
Smith przedstawił ścisłą zależność pomiędzy strukturą i charakterem przemieszczania granicy międzyfazowej. Zgodnie z nią granice niekoherentne o strukturze izotropowej przemieszczają się szybciej w podwyższonych temperaturach, ponieważ szybciej poruszają się atomy przechodzące przez i wzdłuż granicy. Ruch granic częściowo koherentnych uzależniony jest od ruchu dyslokacji w kierunku prostopadłym do granicy. Nagromadzenie energii odkształceń jest głównym ograniczeniem przemieszczania granic tego typu, jak również granic koherentnych. Na podstawie przeprowadzonej klasyfikacji granic Smith analizował wpływ stopnia przechłodzenia poniżej temperatury równowagowej na morfologię powstającego ferrytu. Wzrost granic częściowo koherentnych oraz koherentnych przy niskich przechłodzeniach, wymaga zbyt dużej energii odkształcenia, przy jednocześnie małej zmianie energii swobodnej. Przy dużych stopniach przechłodzenia zmiana energii swobodnej jest wystarczająca dla wzrostu granicy niekoherentnej, co tłumaczy powstawanie płytek Widmanstättena.

Teoria Smitha jest słuszna dla granic niekoherentnych. W przypadku granic częściowo koherentnych oraz koherentnych, założenie znacznego wpływu nagromadzonej energii odkształceń na ruch powierzchni międzyfazowej nie jest zgodne z rzeczywistością.

Aaronson na podstawie przeprowadzonych badań oraz studiów teoretycznych wnioskował, iż o mechanizmie przemieszczania się powierzchni międzyfazowej decyduje jej struktura. Ruch granicy może być rozpatrywany jako ruch pojedynczych atomów poprzez granicę. Wysokie

współczynniki dyfuzji pozwalają, według autora [37], na szybkie przechodzenie atomów przez granicę i prędkość ruchu granicy jest kontrolowana dyfuzją objętościową dalekiego zasięgu. Przy analizie zmian energii powierzchni międzyfazowej wzrastającej płytki uwzględniony został efekt kapilarności.

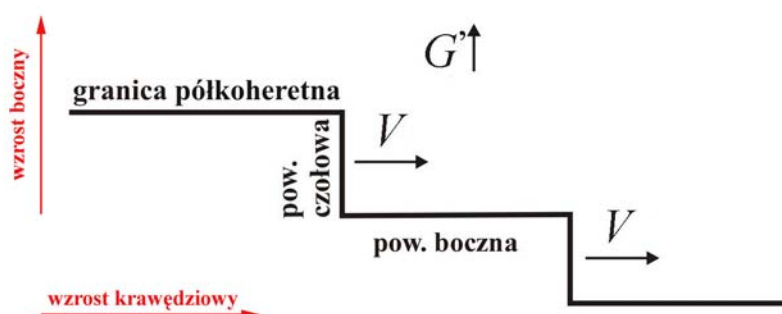
Aaronson zaproponował nową teorię wzrostu kierunkowego mechanizmem progowym. Płaskie powierzchnie boczne płytek ferrytu Widmanstättena są częściowo koherentne z austenitem. Zgodnie z koncepcją Aaronsona [7,37,39] ruch takich granic następuje za pomocą mechanizmu progowego, co potwierdzają obserwacje powierzchni płytek na transmisyjnym mikroskopie elektronowym. Mechanizm ten wpływa znacząco zarówno na kinetykę wzrostu, jak i na morfologię wydzieleni płytkowych. Na Rys.12 przedstawiono schematycznie wczesne stadium powstawania ferrytu Widmanstättena. Płytki ferrytu zarodkuje na granicy ziaren i rośnie tarasowo w jednym kierunku.



Rys.12. Schemat wczesnego stadium wzrostu płytek Widmanstättena w obszarze granicy ziaren austenitu [40].

Przy pewnym przechłodzeniu, zarodkowanie ferrytu na graniach ziaren austenitu może być spowodowane defektami sieci austenitu. Schemat wzrostu płytki mechanizmem progowym przedstawiono na Rys.13. Ruch powierzchni międzyfazowej determinują: częstotliwość powstawania progów, ich wysokość i prędkość migracji w kierunku bocznym  $G^\perp$ . Progi mają wysokość od jednego do kilkuset atomów i są nierównomiernie rozmieszczone. Składają się one z nieuporządkowanych powierzchni czołowych oraz częściowo koherentnych powierzchni bocznych. Jak już wspomniano, granice częściowo lub całkowicie koherentne nie mogą się przemieszczać, ponieważ powodowałyby to wzrost granicy niekoherentnej i, w konsekwencji, wzrost energii układu. Wzrost krawędziowy z prędkością  $V$  jest więc spowodowany przejściami atomów węgla przez nieuporządkowane powierzchnie czołowe progów. Przemieszczanie progów powoduje

spiętrzenie węgla przed ich powierzchnią czołową. W konsekwencji prędkość wzrostu krawędziowego jest kontrolowana dyfuzją węgla w fazie macierzystej.



Rys.13. Schemat wzrostu płytek ferrytu mechanizmem progowym [39].

Przy niskim przesyceniu, zdefiniowanym jako różnica między stężeniem równowagowym i rzeczywistym przy danej temperaturze, oczekuje się małej prędkości ruchu progów. Co więcej, pola dyfuzji zaczynają na siebie nachodzić. Natomiast przy wysokim przesyceniu progi mogą się przemieszczać szybko, tworząc płytkę ferrytu. Zarodki poszczególnych progów powstające w późniejszym stadium przemiany charakteryzuje niskie przesycenie oraz tendencja do tworzenia form alotriomorficznych.

W mechanizmie progowym preferowane jest powstawanie i ruch progów o orientacji krystalograficznej spełniającej zależność K-S [39].

Obserwacje mikrostruktury wskazują na losowe, nierównomierne usytuowanie progów. Odległość pomiędzy nimi oraz ich ilość jest najmniejsza na początku przemiany i wzrasta z czasem. Kinsman [41] obliczył średnią odległość pomiędzy progami na powierzchni czołowej płytek ferrytu, uzyskując dla początkowych czasów przemiany dobrą zgodność z wartościami obserwowanymi w doświadczeniu.

W modelu przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla wzrostu kierunkowego przyjęto, za Aaronsonem [7,37,39], że wzrost ferrytu Widmanstättena następuje mechanizmem progowym i kontrolowany jest dyfuzją węgla w austenicie. Wyniki uzyskane przez Kinsmana [41] zastosowano w niniejszej pracy do określenia wysokości progów.

### 3. Model matematyczny przemiany $\gamma$ - $\alpha$

#### 3.1. Metody obliczeniowe zastosowane w modelowaniu przemiany $\gamma$ - $\alpha$

Rozwiązanie równania różniczkowego cząstkowego (10) metodami analitycznymi jest zagadnieniem skomplikowanym, dlatego stosuje się metody przybliżone. Do najczęściej stosowanych metod przybliżonych należą metoda różnic skończonych (MRS) oraz metoda elementów skończonych (MES), które zastosowano w niniejszej pracy.

Zasady MRS przedstawiono poniżej na przykładzie rozwiązania równania II prawa Ficka (10) dla przypadku jednowymiarowego i stałego współczynnika dyfuzji:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (23)$$

Metoda różnic skończonych powstała jako przybliżona metoda rozwiązywania problemów brzegowych opisanych równaniami różniczkowymi, a następnie rozszerzono jej zakres zastosowań na problemy sformułowane w postaci wariacyjnej. W wyniku aproksymacji metodą różnic skończonych, wartości pochodnych w równaniach różniczkowych są zastępowane poprzez ilorazy różnicowe odpowiedniego rzędu lub funkcje rozwijane w szereg Taylora, określone na dyskretnym zbiorze izolowanych punktów zwanym siatką. W rezultacie powstają równania wyznaczające przybliżone wartości rozwiązania, które zostają rozwiązane z uwzględnieniem warunków brzegowych i początkowych. Zagadnienie różnicowe nie musi mieć tych samych własności, co zadanie wyjściowe. Istotne jest więc sprawdzenie poprawności postawionego zadania oraz zbieżności rozwiązania przybliżonego do rozwiązania dokładnego [42].

W metodzie różnic skończonych rozpatrywany jest obszar  $V \subset R^2$  ograniczony powierzchnią zamkniętą  $S$  i obszar  $\bar{V} = V \cup S$  oraz funkcja  $c(x,t)$ , gdzie  $x, t \in \bar{V}$ . Na obszar  $\bar{V} = \{x : 0 \leq x \leq x_n, t : 0 \leq t \leq t_n\}$  naniesiona zostaje siatka prostokątna o kroku przestrzennym  $\Delta x > 0$  i kroku czasowym  $\Delta t > 0$ . Węzłom siatki przypisane zostają wartości funkcji  $c(x,t)$  oznaczone symbolem  $c_{j,k}$ , a następnie zostają zdefiniowane operatory różnicowe: przedni, wsteczny i centralny. Operator różnicowy przedni  $n$ -tego rzędu funkcji  $c(x,t)$  określa wyrażenie:

$$\delta_p^n c_{j,k} = \sum_{i=0}^n (-1)^i \binom{n}{i} c_{j+n-i,k}, \quad \delta_p^1 c_{j,k} = c_{j+1,k} - c_{j,k} \quad \text{dla } n=1 \quad (24)$$

gdzie:  $\binom{n}{i}$  - symbol Newtona.

Operator różnicowy wsteczny  $n$ -tego rzędu funkcji  $c(x,t)$  można przedstawić w postaci:

$$\delta_w^n c_{j,k} = \sum_{i=0}^n (-1)^i \binom{n}{i} c_{j-i,k}, \quad \delta_w^1 c_{j,k} = c_{j,k} - c_{j-1,k} \quad \text{dla } n=1 \quad (25)$$

Natomiast operator różnicowy centralny  $n$ -tego rzędu funkcji  $c(x,t)$  wyraża zależność:

$$\delta_c^n c_{j,k} = \sum_{i=0}^n (-1)^i \binom{n}{i} c_{j+\frac{1}{2}n-i,k}, \quad \delta_c^1 c_{j,k} = c_{j+\frac{1}{2},k} - c_{j-\frac{1}{2},k} \quad \text{dla } n=1 \quad (26)$$

gdzie:  $i, j, k$  – indeksy węzła,  $\delta_p, \delta_w, \delta_c$  - operatory różnicowe,  $n$  – rząd pochodnej funkcji.

Operatory różnicowe (24)-(26) zostają wykorzystane do utworzenia ilorazów różnicowych  $c_{j,k}(x,t)$ :

$$c_{j,k}^{(p)}(x,t) \cong \frac{\delta_p^n c_{j,k}}{\Delta x^n}, \quad c_{j,k}^{(v)}(x,t) \cong \frac{\delta_w^n c_{j,k}}{\Delta x^n}, \quad c_{j,k}^{(c)}(x,t) \cong \frac{\delta_c^n c_{j,k}}{\Delta x^n}, \quad (27)$$

Iloraz różnicowy (27) przybliża pochodną  $n$ -tego rzędu funkcji  $c(x,t)$  przy założeniu, że  $\Delta x > 0$  i  $\Delta t > 0$  są dostatecznie małe i funkcja  $c(x,t)$  ma ciągłą pochodną  $n$ -tego rzędu w przedziale zawierającym wszystkie węzły, na których utworzona została różnica  $n$ -tego rzędu [42].

Równanie różniczkowe sprowadzone do postaci różnicowej zostaje rozwiązane po nałożeniu warunków początkowych i brzegowych na wartości funkcji w węzłach siatki. Rozwiązanie przybliżone jest pewną funkcją dyskretną  $\bar{c} = \bar{c}(x,t)$ . Warunek początkowy dla równania (23) jest określony przez wartość  $c(x,t)$  funkcji, we wszystkich węzłach siatki i dla czasu  $t=0$ :

$$c(x,0) = c_a(x), \quad 0 \leq x \leq x_n \quad (28)$$

Warunek brzegowy dla równania (23) jest, albo warunkiem brzegowym pierwszego rodzaju czyli Dirichleta (29), albo warunkiem drugiego rodzaju, czyli Neumana (30), który dotyczy osi symetrii.

$$c(\xi,t) = \varphi(t), \quad c(x_n,t) = \psi(t), \quad 0 \leq t \leq t_n \quad (29)$$

gdzie:  $x=0, x=x_n$  wyznaczają brzegi obszaru  $\bar{V}$ .

$$\frac{\partial c}{\partial x} = 0 \quad (30)$$

Warunek Dirichleta zakłada ciągłość funkcji  $c(x,t)$  na  $\bar{V} = \{x : 0 \leq x \leq x_n, t : 0 \leq t \leq t_n\}$  oraz ciągłość funkcji  $\varphi(t), \psi(t)$  w przedziale  $\langle 0, t_n \rangle$  [43].

Rozwiązywane równanie różniczkowe oraz warunki początkowe i brzegowe zawierają pewne wielkości fizyczne, które mogą być obarczone błędami wynikającymi z pomiarów lub stosowanych uproszczeń modelowych. Dokładność rozwiązania zależy także od wymiaru siatki. Bardziej dokładne przybliżenie jest otrzymywane dla dostatecznie gęstych siatek.

Problemem pozostaje stabilność metody względem prawej strony równania (10) i warunku początkowego (28) związana z wpływem zmiany funkcji  $c(x,t)$  i funkcji  $\xi(x)$  na rozwiązanie różnicowe.

Wprowadzając parametr  $\sigma$ , od którego zależą równania różnicowe dla danego zagadnienia brzegowego, stabilność metody różnicowej względem prawej strony równania i warunku początkowego oraz jednostajna zbieżność rozwiązania różnicowego  $\bar{c} = \bar{c}(x,t)$  do rozwiązania dokładnego  $c=c(x,t)$ , zostaje zapewniona dla  $\sigma \geq 1 - \frac{\Delta x^2}{2\Delta t}, 0 \leq \sigma \leq 1$  [43].

Rozwiązanie równania (10) MRS dla przypadku dwuwymiarowego, oraz trójwymiarowego i dowolnego obszaru jest zagadnieniem trudnym, dlatego w niniejszej pracy dla tych przypadków zastosowano metodę elementów skończonych (MES).

W rozwiązaniu MES równań różniczkowych po przeprowadzeniu dyskretyzacji obszaru  $\bar{V}$ , czyli utworzeniu siatki elementów skończonych połączonych ze sobą w węzłach, dokonuje się interpolacji szukanej funkcji, tak by zachować ciągłość na granicach poszczególnych elementów. Następnie do układu równań utworzonych dla przyjętej siatki elementów wprowadzone zostają warunki brzegowe. Ostatecznie postępowanie numeryczne sprowadzone zostaje do rozwiązania układu równań dając wartości poszukiwanej funkcji w węzłach.

Poszukiwane jest rozwiązanie równania różniczkowego (10) zapisanego w układzie dwuwymiarowym:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} \right) \quad (31)$$

Rozwiązanie dla równania (31) przyjmuje postać:

$$c \approx c_k \equiv \sum_{i=1}^m a_i \phi_i(x) + \phi_0(x) \quad (32)$$

gdzie:  $a_i$  - współczynniki, które mają być wyznaczone,  $\phi_i(x), \phi_0(x)$  - funkcje dobierane w taki sposób, aby po podstawieniu do równania (32) spełnione zostały warunki brzegowe,  $m$  - liczba liniowo niezależnych równań.

W rozwiązaniu MES wykorzystano sformułowanie wariacyjne zagadnienia oparte na twierdzeniu Eulera. Zgodnie z tym twierdzeniem rozwiązanie dowolnego równania cząstkowego w obszarze  $\bar{V}$  jest równoważne ze znalezieniem funkcji minimalizującej poniższą całkę przy założeniu, że funkcja  $c$  spełnia te same warunki brzegowe co analizowane równanie [44,45]:

$$J = \int_V F\left(x, y, c, \frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial c}{\partial y}\right) dV + \int_S G\left(x, y, c, \frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial c}{\partial y}\right) dS \quad (33)$$

gdzie:  $F, G$  – dowolne funkcje zależne od współrzędnych  $x, y$  funkcji  $c(x,y)$  oraz pochodnych  $\partial c/\partial x, \partial c/\partial y$ , przy czym funkcja  $F$  odpowiada bezpośrednio równaniu różniczkowemu, natomiast  $G$  warunkom brzegowym.

Funkcja  $c$ , która daje minimum funkcjonału (33), rozwiązuje równanie Eulera w postaci:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial c} - \nabla \left[ \frac{\partial F}{\partial (\nabla c)} \right] &= 0 && \text{w obszarze } \bar{V} \\ \frac{\partial G}{\partial c} - \nabla \left[ \frac{\partial G}{\partial (\nabla c)} \right] &= 0 && \text{na powierzchni } S \end{aligned} \quad (34)$$

W metodzie elementów skończonych poszukuje się takich wyrażen  $F$  i  $G$  pod całką w równaniu (33), dla których zależności (34) przyjmują postać identyczną z rozwiązywanym równaniem (31) z odpowiednimi warunkami brzegowymi (29). Równanie Eulera (34) przedstawia zatem warunek konieczny istnienia ekstremum następującego funkcjonału [46,47].

$$J = \int_V \left\{ \frac{D}{2} \left[ \left( \frac{\partial c}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial c}{\partial y} \right)^2 \right] \right\} dV - \int_S qcdS \quad (35)$$

Obszar  $\bar{V}$  zostaje podzielony na elementy skończone, w których szukana funkcja  $c$  jest opisana przez iloczyn wektora funkcji kształtu i wektora wartości w węzłach, zgodnie z równaniem [45]:

$$c = \mathbf{n}^T \mathbf{c} \quad (36)$$

gdzie:  $\mathbf{n} = \{n_1, n_2, \dots, n_n\}^T$  – wektor funkcji kształtu,  $\mathbf{c} = \{c_1, c_2, \dots, c_n\}^T$  – wektor wartości funkcji stężenia w węzłach siatki.

Minimalizacja funkcjonału (33) wymaga obliczenia pochodnych cząstkowych  $J$  względem składowych wektora  $\mathbf{c}$ . W wyniku różniczkowania otrzymujemy układ równań, którego rozwiązaniem są wartości szukanej funkcji  $c$  w węzłach siatki.

Zaletą metody MES w porównaniu z metodą MRS jest możliwość stosunkowo łatwego dokonywania rozwiązań dla skomplikowanych kształtów obszaru, ogólnych warunków brzegowych oraz zmiennych i nieliniowych własności materiałowych. Przejrzysta struktura i uniwersalność metody MES pozwala na tworzenie oprogramowania ogólnego zastosowania, które w łatwy sposób można uzupełniać kolejnymi aplikacjami.

### 3.2. Konwencjonalne modele przemiany $\gamma$ - $\alpha$

Konwencjonalne modele przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  spotykane w literaturze w różnym stopniu uwzględniają szczegóły rzeczywistych zjawisk zachodzących podczas przemiany. Modele te najczęściej wykorzystują elementy teorii Avramiego [8]. Teoria ta, stosowana do opisu zarodkowania i wzrostu nowej fazy, oparta jest na zależnościach funkcyjnych pomiędzy liczbą zarodków i objętością rosnącej nowej fazy. Model Avramiego zakłada, że układ podlegający przemianie fazowej jest złożony z zarodków nowej fazy. Zarodki te są cząsteczkami nietrwałymi, rozmieszczonymi losowo w objętości. Podczas przemiany niektóre z cząstek rosną, osiągając krytyczną wielkość (ziarna nowej fazy), inne pozostają w stanie utajonym (bez wzrostu). Rozważany jest więc materiał w stanie metastabilnym. Na początku przemiany fazowej liczba podstawowych zarodków nowej fazy na jednostkę objętości wynosi  $N_0$ . Zarodki pojawiają się i znikają, ale zakłada się, że ich ilość pozostaje stała w czasie przemiany. Analizując czynniki wpływające na liczbę zarodków uwzględnia się dwa mechanizmy. W pierwszym mechanizmie zarodki oznaczone przez  $N'$  zaczynają rosnąć i stają się ziarnami nowej fazy. W drugim, zarodki oznaczone przez  $N''$  zostają pochłonięte przez rosnące ziarna, które zajmują miejsca wcześniej

zajmowane przez te zarodki. Zmiana liczby zarodków, które w czasie  $dt$  ulegają przemianom w ziarna w jednostce objętości, wynosi:

$$dN' = PNdt \quad (37)$$

gdzie:  $P$  – prawdopodobieństwo przekształcenia zarodków w ziarna w jednostce czasu.

Zmiana liczby wchłoniętych zarodków w jednostce objętości w czasie  $dt$  jest dana zależnością:

$$dN'' = N_p dV \quad (38)$$

gdzie:  $N_p$  - liczba zarodków nowej fazy w chwili początkowej  $t = 0$ ,  $dV$  – zmiana objętości w jednostce objętości nowej fazy w czasie  $dt$ .

Całkowita zmiana liczby zarodków w jednostce objętości wynosi:

$$dN = -dN' - dN'' \quad (39)$$

W przypadku, gdy wartość  $P$  jest tak duża, że prawie wszystkie zarodki ulegają przemianom w ziarna, człon  $dN''$  można zaniedbać. W konsekwencji zależność (39), uzupełniona wyrażeniem (37), przyjmuje postać:

$$\frac{dN}{dt} = -\frac{dN'}{dt} = -PN \quad (40)$$

Zakładając, że temperatura oraz koncentracja zarodków jest stała w czasie przemiany, obie strony zależności (40) można podzielić przez  $N$ :

$$\frac{1}{N} \frac{dN}{dt} = -P \quad \text{lub} \quad \frac{d}{dt} [\ln N(t)] = -P \quad (41)$$

W wyniku całkowania powyższego wyrażenia w granicach od  $t = 0$  do  $t$  otrzymuje się zależność:

$$\ln N(t) - \ln N(0) = -Pt \quad \text{lub} \quad \ln \left[ \frac{N(t)}{N_0} \right] = -Pt \quad (42)$$

W konsekwencji liczbę zarodków  $N(t)$  nowej fazy, w jednostce objętości, w chwili  $t$ , opisuje wyrażenie:

$$N(t) = N_0 \exp(-Pt) \quad (43)$$

W oparciu o analizę liczby zarodków i objętości nowej fazy powstało równanie Avramiego, opisane szczegółowo w literaturze [8]. Równanie to ma postać:

$$x_\alpha = 1 - \exp[-(kt)^n] \quad (44)$$

gdzie:  $x_\alpha$  - ułamek objętości nowej fazy po czasie  $t$ ,  $k$  - stała prędkości przemiany,  $n$  - wykładnik potęgowy.

Stała prędkości przemiany  $k$  zależy od temperatury zgodnie z zależnością:

$$k = B \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (45)$$

gdzie:  $B$  - współczynnik proporcjonalności.

Rozwiązania modelowe oparte na równaniach Avramiego dają dobre wyniki dla warunków izotermicznych oraz dla stałych prędkości chłodzenia, zawodzą przy skomplikowanych przebiegach zmian temperatury [8].

Większość modeli przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  zakłada warunki termodynamicznej równowagi na granicy faz, tzw. lokalnej równowagi. Klasycznym przykładem jest fizyczny model Zenera, rozwinięty przez Hillerta [7,48]. Położenie granicy międzyfazowej  $\xi$  jest w tym modelu funkcją czasu:

$$\xi = \beta \sqrt{Dt} \quad (46)$$

gdzie:  $\beta$  - bezwymiarowy współczynnik zależny od równowagowego stężenia węgla, całkowitego stężenia węgla i założonej geometrii.

Badania doświadczalne potwierdzają poprawność modelu Zenera [48]. Model znajduje szerokie zastosowanie w symulacjach numerycznych przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  [49,50].

Istnieją również rozwiązania modelowe analizujące przemianę  $\gamma$ - $\alpha$  przy założeniu stanu nierównowagi na granicy faz, w tym model mieszany (mixed mode) [10]. Siła pędna dla migracji granicy jest dana wówczas przez różnicę potencjałów chemicznych  $\Delta\mu_{Fe}$  na granicy faz w austenicie i ferrycie. Przegrupowanie węgla wywiera wpływ na siłę napędową ruchu granicy, co zostaje uwzględnione w modelu. Model mieszany uwzględnia zarówno ruchliwość granicy, jak i dyfuzję węgla w austenicie.

Strumień dyfuzji węgla przechodzącego przez granicę faz można zapisać, po przekształceniu zależności (6), w postaci:

$$I = V_x (c_\gamma - c_\alpha) \quad (47)$$

Strumień dyfuzji węgla w austenicie przedstawia pierwsze prawo Ficka:

$$I_D = -D \left( \frac{dc_\gamma}{dx} \right) \quad (48)$$

Strumień dyfuzji węgla na granicy  $\Delta I$  będący wynikiem różnicy strumieni (47) i (48), ujmuje zależność pomiędzy ruchliwością granicy i dyfuzją węgla:

$$\Delta I = V_x (c_\gamma - c_\alpha) + D \left( \frac{dc_\gamma}{dx} \right) \quad (49)$$

Prędkość ruchu granicy jest wtedy opisana wyrażeniem:

$$V_x = M \Delta \mu_{\text{Fe}} \quad (50)$$

gdzie:  $M$  – ruchliwość granicy międzyfazowej,  $\Delta \mu_{\text{Fe}}$  - różnica potencjałów chemicznych żelaza, przy czym:

$$\Delta \mu_{\text{Fe}} = \mu_{\text{Fe}}^\gamma (c_\gamma) - \mu_{\text{Fe}}^\alpha (c_\alpha) \quad (51)$$

Potencjały chemiczne  $\mu_{\text{Fe}}^\gamma$  i  $\mu_{\text{Fe}}^\alpha$  na granicy faz zależą od lokalnego stężenia węgla w austenicie i ferrycie.

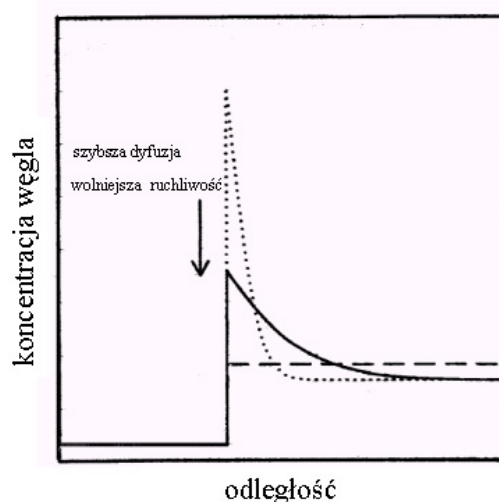
Ruchliwość granicy międzyfazowej w funkcji temperatury przyjmuje postać:

$$M = M_0 \exp \left( - \frac{\Delta G_A}{RT} \right) \quad (52)$$

gdzie:  $M_0$  – współczynnik przedwykładniczy.

Rozkład stężenia węgla, przedstawiony na Rys.14, jest określony przez procesy dyfuzji węgla z jednej strony i ruchliwość granicy międzyfazowej z drugiej strony. Linia kropkowana przedstawia rozkład węgla dla warunków lokalnej równowagi (powolna dyfuzja, wysoka ruchliwość granicy). Wartość stężenia węgla na granicy jest wartością równowagową. Linia kreskowana oznacza przemianę z kontrolowaną granicą (szybka dyfuzja, mała ruchliwość),

natomiast linia ciągła model mieszany. W modelu mieszanym rozkład stężenia jest określany przez współczynnik dyfuzji  $D$  oraz prędkość ruchu granicy  $V_x$ . Stężenie na granicy spada, kiedy współczynnika dyfuzji rośnie, a ruchliwości granicy maleje.



Rys.14. Rozkład stężenia węgla w austenicie przed rosnącym ziarnem ferrytu [10].

Model mieszany charakteryzuje się dobrą zgodnością z wynikami doświadczalnymi dla prędkości wzrostu i rozkładu stężenia, ale jedynie dla wysokiego stężenia węgla w stali [10].

W literaturze opisane zostały również modele numeryczne [51,52] dla przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  wykorzystujące rozwiązanie zaproponowane przez Suehiro [6]. Model Suehiro oparty jest na różniczkowych równaniach kinetyki. Etap zarodkowania ferrytu opisuje równanie w postaci:

$$\frac{dx_f}{dt} = (k_1 S J V_x^3)^{0.25} \left[ \ln \left( \frac{1}{1-x_f} \right) \right]^{0.75} (1-x_f) \quad (53)$$

gdzie:  $k_1$  – stała materiałowa,  $S$  – względna powierzchnia ziarna.

Wzrost zarodków ferrytu wyraża zależność:

$$\frac{dx_f}{dt} = k_f \frac{6}{D} V_x (1-x_f) \quad (54)$$

gdzie:  $k_f$  - parametr modelu.

Natomiast prędkość wzrostu ferrytu ziarnistego opisuje równanie w postaci:

$$V_x = \frac{1}{2r} D \frac{c_{\gamma\alpha} - c_\alpha}{c_\gamma - c_\alpha} \quad (55)$$

gdzie:  $r$  - promień ferrytu ziarnistego.

Model Suehiro pomija wpływ kształtu ziaren austenitu na kinetykę przemiany  $\gamma-\alpha$ , a uwzględnia jedynie wpływ wielkości tych ziaren. Przykładem zastosowania równania Suehiro jest model numeryczny dla stali odkształcanej plastycznie w zakresie dwufazowym [52]. W pracy tej analizie poddano stal niskowęglową, przeprowadzając obok symulacji numerycznych, badania dylatometryczne dla stałych prędkości chłodzenia z zakresu 0.5-77°C/s. Wyniki zestawione w postaci wykresu CTPc, posłużyły do weryfikacji modelu przemiany  $\gamma-\alpha$ .

Istnieją również modele przemiany oparte o zależności empiryczne. Przykładem jest model Hodgsona i Gibbsa [53], który pozwala określić wielkość ziarna ferrytu dla stali węglowo-manganowych. Hodgson i Gibbs przeprowadzili rozwiązanie dla przemiany  $\gamma-\alpha$  zachodzącej w czasie obróbki cieplno-plastycznej, dlatego poniższa zależność uwzględnia prędkość chłodzenia i stopień odkształcenia ziarna austenitu:

$$d_{\alpha} = (1 - 0.45\sqrt{\varepsilon_r}) \left\{ (\beta_0 + \beta_1 C_{eq}) + (\beta_2 + \beta_3 C_{eq}) v_{cr}^{-0.5} + \beta_4 [1 - \exp(-\beta_5 d_{\gamma})] \right\} \quad (56)$$

gdzie:

$$C_{eq} = C + \frac{Mn}{6}$$

dla  $C_{eq} < 0.35$ :  $\beta_0 = -0.4$ ,  $\beta_1 = 6.37$ ,  $\beta_2 = 24.2$ ,  $\beta_3 = -59.0$ ,  $\beta_4 = 22.0$ ,  $\beta_5 = 0.015$

dla  $C_{eq} > 0.35$ :  $\beta_0 = 22.6$ ,  $\beta_1 = -57.0$ ,  $\beta_2 = 3$ ,  $\beta_3 = 0$ ,  $\beta_4 = 22.0$ ,  $\beta_5 = 0.015$

Wpływ odkształcenia austenitu na wielkość ziarna ferrytu analizowali również Sellars i Beynon [54] formułując poniższą zależność:

$$d_{\alpha} = 1.4 + 5v_{cr}^{-0.5} + 22[1 - \exp(-1.5 \cdot 10^{-2} d_{\gamma})] \quad (57)$$

Przeprowadzona analiza istniejących modeli fizycznych przemiany  $\gamma-\alpha$  wykazała, że dyfuzja kontrolująca przemianę jest opisywana w sposób przybliżony. Wykorzystywane jest analityczne rozwiązanie równania Ficka przy założeniu wielu uproszczeń. W konsekwencji wpływ dyfuzji zostaje ograniczony do jednego parametru, jakim jest efektywny dystans dyfuzji w równaniu (7). Tymczasem współczesne metody numeryczne pozwalają na dokładne rozwiązywanie różniczkowych równań cząstkowych z uwzględnieniem, nieliniowości, złożonych warunków brzegowych i początkowych oraz skomplikowanych kształtów rozpatrywanego obszaru. Pozwoliło to autorce na podjęcie decyzji o zastosowaniu w niniejszej pracy modelu opartego na rozwiązaniu równania dyfuzji z ruchomą powierzchnią międzyfazową, przy założeniu warunków równowagi termodynamicznej i rzeczywistych warunków procesu. Model ten uzupełniony o parametry właściwe dla zarodkowania i wzrostu ziaren stwarza możliwość obliczania zmiany objętości faz w

warunkach zmieniającej się temperatury. Wzory (56) i (57) posłużyły do wstępnej weryfikacji, otrzymanych w wyniku symulacji numerycznych, wielkości ziarna ferrytu.

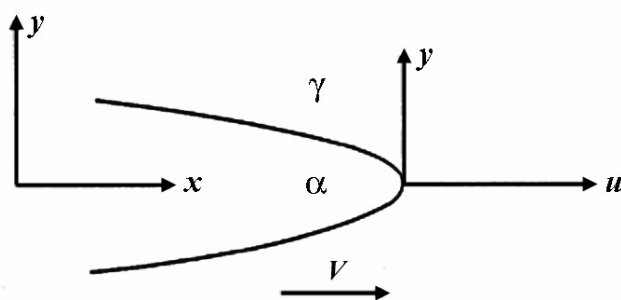
### **3.3. Model przemiany $\gamma$ - $\alpha$ dla wzrostu kierunkowego**

W literaturze [55,56] przedstawione zostały liczne badania doświadczalne powstawania płytek Widmanstättena. Wynika z nich, że podczas wzrostu płytek prawie cała energia swobodna przemiany jest pochłonięta przez dyfuzję węgla w austenicie. Potwierdza to słuszność założenia o kontrolującym wpływie dyfuzji węgla na wzrost płytek Widmanstättena.

Powstało wiele modeli opisujących morfologię wzrostu kierunkowego kontrolowanego dyfuzją. Część z nich opiera się na założeniu, że płytka rośnie ze stałą prędkością. Oznacza to istnienie rozwiązania równania dyfuzji dla stanu ustalonego. Osiągnięcie stanu ustalonego jest możliwe, gdy warunki wzrostu płytki pozwalają by promień krzywizny krawędzi płytki nie zmieniał się w czasie wzrostu. W konsekwencji pierwsze modele prezentowane w literaturze, wśród nich model Zenera – Hillerta [56] i Trivediego oparty na modelu Ivantsova [57], miały następujące wspólne założenia:

- kształt ostrza płytki aproksymowany jest walcem parabolicznym,
- granica przesuwa się jednostajnie w kierunku normalnej do tej granicy,
- stężenie węgla na granicy wynika z warunku lokalnej równowagi,
- stężenie węgla wewnątrz nowej fazy jest stałe i równe  $c_\alpha$ ,
- energia odkształcenia sprężystego nie jest uwzględniana,
- stężenie substancji rozpuszczonej jest mniejsze w wydzieleniu, niż w fazie macierzystej.

Publikacje najczęściej odwołują się do modelu Zenera – Hillerta, w którym kształt płytki ferrytu Widmanstättena przybliżony jest cylindrem parabolicznym. Na Rys.15 przedstawiono schematycznie krawędź płytki rosnącej w kierunku  $x$ . Niewiadomymi w tym zagadnieniu są: kształt granicy i rozkład stężenia węgla w fazie  $\gamma$ . W oparciu o obserwacje doświadczalne, według których płytki Widmanstättena rosną ze stałą prędkością, układ stacjonarny zostaje przekształcony na układ ruchomy poruszający się ze stałą prędkością, zdefiniowany przez  $u = x - Vt$ , z początkiem w ostrzu płytki.



Rys.15. Schemat krawędzi płytki rosnącej w kierunku  $x$  [56].

Zagadnienie jest rozpatrywane przy założeniu stałego stężenia węgla wzdłuż całej granicy międzyfazowej płytki. Zależność pomiędzy prędkością wzrostu i przesyleniem  $\Omega$  zapisano w postaci:

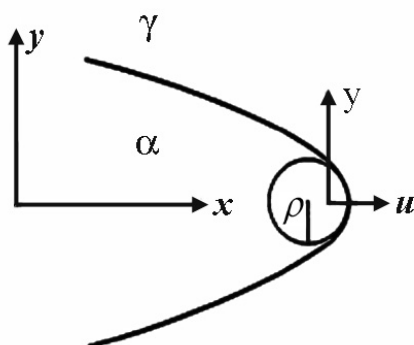
$$\frac{V}{D} \equiv \frac{1}{2} \Omega \frac{1}{r} \left( 1 - \frac{r_c}{r} \right) \quad (58)$$

przy czym:

$$\Omega = \left( \frac{c_{\gamma\alpha} - c_0}{c_0 - c_\alpha} \right), \quad r_c = \frac{\sigma}{RTk^{\gamma\alpha}(c_{\gamma\alpha} - c_0)} \quad (59)$$

gdzie:  $\sigma$  - napięcie powierzchniowe,  $k^{\gamma\alpha}$  - współczynnik termodynamiczny.

Model Trivediego [57], będący rozwinięciem modelu Ivantsova, uwzględnia efekt kapilarności i kinetyki granicy międzyfazowej. Trivedi analizował wzrost wydzielania o kształcie walca parabolicznego z promieniem krzywizny  $\rho$ . Dokonał transformacji układu stacjonarnego na ruchomy układ współrzędnych, w którym  $u = (X-Vt)/\rho$  i  $y = Y/\rho$ . Początek nowego układu współrzędnych jest położony w ognisku paraboli, co przedstawiono na Rys.16.



Rys.16. Schemat krawędzi walca parabolicznego z promieniem krzywizny  $\rho$  [56].

Stężenie graniczne opisano zależnością:

$$c_{\gamma\alpha} = c_{\gamma\alpha}^0 (1 - \Gamma_1 DK) - \left( \frac{Vn}{\mu_0} \right) \quad (60)$$

gdzie:  $c_{\gamma\alpha}^0$  - stężenie równowagowe w fazie macierzystej przy płaskiej granicy,  $K$  - krzywizna granicy,  $Vn$  - prędkość każdego elementu na granicy,  $\mu_0$  - współczynnik kinetyki granicy,  $\Gamma_1$  - stała kapilarności.

Równanie wzrostu ma zatem postać:

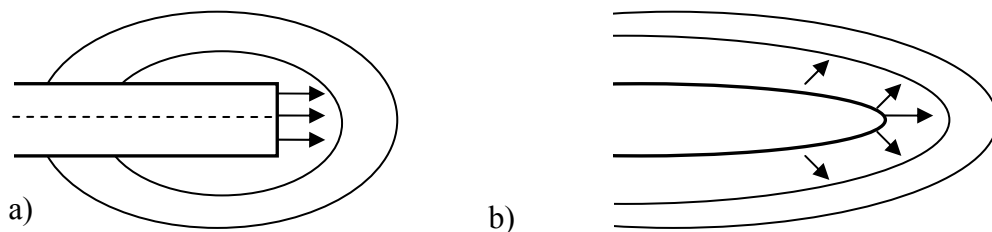
$$\Omega_0 = (\pi p)^{1/2} \exp^p \operatorname{erfc}(p^{1/2}) \left[ 1 + \left( \frac{v}{vc} \right) \Omega \cdot S1 + \left( \frac{\rho c}{\rho} \right) \Omega \cdot S2 \right] \quad (61)$$

gdzie:  $p = \frac{V\rho}{2D}$  - liczba Pecleta,  $\rho c = \frac{c_0^{\gamma-\alpha} \Gamma_1 D}{c_0^{\gamma-\alpha} - c^0}$ ,  $vc = \mu_0 (c_0^{\gamma-\alpha} - c^0)$ ,  $S1, S2$  - funkcje zależne od gęstości  $\rho$ .

Równania wzrostu Zenera – Hillerta i Trivediego nie dają jednoznacznej wartości prędkości wzrostu  $V$  dla danego przesylenia oraz niewłaściwie ujmują efekt kapilarności wzdłuż granicy.

W rozwiązaniu Trivediego [57] przy wzroście płytki zakłada się utrzymanie stałego kształtu, czyli walca parabolicznego. Kiedy stężenie zmienia się wzdłuż granicy z powodu dużej kapilarności, kształt granicy odchyła się znacznie od paraboli. Rozwiązanie Trivediego obowiązuje tylko wtedy, gdy zmiana stężenia wzdłuż granicy nie jest na tyle duża, aby kształt płytki odbiegał od założonego kształtu.

Odmienne podejście w opisie wzrostu płytek Widmanstättena zaproponował Atkinson [40,58]. Założył on, że ostrze płytki składa się z pary połączonych progów, których wysokość jest równa promieniowi ostrza. Kształt płytki oraz schematyczne porównanie strumienia dyfuzji, a także rozkład stężenia wokół ostrza płytki w modelach Atkinsona i Trivediego, pokazano na Rys.17.



Rys.17. Rozkład stężenia oraz strumień dyfuzji wokół ostrza płytki: a) model Atkinsona [58], b) model Trivediego [57].

Atkinson założył strumień dyfuzji w jednym kierunku oraz stały gradient stężenia wzdłuż czołowej powierzchni płytki. Przechodzenie atomów tylko w jednym kierunku powoduje, że prędkość wydłużania płytki jest duża nawet przy niskim przesyleniu, co jest zgodne z obserwacjami doświadczalnymi.

W oparciu o założenia Atkinsona powstał numeryczny model Enomoto [18-19]. Wykazuje on dobrą zgodność jakościową z rozważaniami teoretycznym i wynikami doświadczeń. Wykonane przez Enomoto obliczenia pokazują, że prędkość wzrostu bocznego maleje monotonicznie z czasem, osiągając stałą wartość, natomiast rośnie wraz ze wzrostem przesylenia. Prędkość wzrostu krawędziowego opisana jest parabolicznym prawem wzrostu. Model zakłada stały gradient stężenia (UG – uniform gradient) i stałą prędkość ruchu progów (UV – uniform velocity).

W modelu wzrostu kierunkowego zaproponowanym przez Enomoto [18,19] drugie prawo Ficka (31) jest zapisane w ruchomym układzie współrzędnych, związanym z frontem płytki:

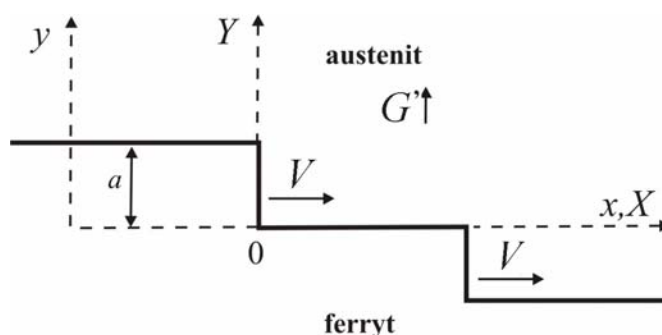
$$\frac{\partial U}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} + V \frac{\partial U}{\partial X} \quad (62)$$

Takie przekształcenie jest możliwe, ponieważ progi rosną ze stałą prędkością, co wykazały analityczne oraz doświadczalne badania Trivedi [57], Atkinsona [58] i Jonesa [59]. W równaniu (62) wprowadzono znormalizowane wartości stężenia ( $U$ ), prędkości ( $V$ ) i czasu ( $\tau$ ) zdefiniowane następująco:

$$U = \frac{(c - c_0)}{(c_{\gamma\alpha} - c_\infty)}, \quad V = \frac{av}{D}, \quad \tau = \frac{Dt}{a^2} \quad (63)$$

gdzie:  $U$  - bezwymiarowe stężenie węgla,  $V$  – prędkość ruchu progów,  $a$  – wysokość progów,  $v$  – bezwymiarowa prędkość wzrostu płytki.

Schematyczną ilustrację zastosowanego rozwiązania pokazano na Rys.18.



Rys.18. Układ progów w ruchomym układzie współrzędnych [18].

Przedstawione powyżej rozwiązanie wzrostu kierunkowego ferrytu mechanizmem progowym, zaproponowane przez Enomoto [18-19], zostało wykorzystane w niniejszej pracy do modelowania wzrostu ferrytu płytkowego.

### 3.4. Model przemiany $\gamma$ - $\alpha$ w stalach stopowych

Pierwiastki stopowe wywierają znaczący wpływ na przebieg przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ . Pierwiastki silnie węglotwórcze, takie jak Nb, V, Ti i Mo, obniżają aktywność węgla segregując na granicy faz i w konsekwencji powodują powstanie siły hamującej przemianę  $\gamma$ - $\alpha$  (z ang. solute drag effect) [49]. Na zmniejszenie prędkości przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  wpływają również pierwiastki substytucyjne stabilizujące austenit, takie jak np. Mn, Ni, które dyfundują znacznie wolniej niż węgiel [9,60]. W modelach przemian fazowych kontrolowanych dyfuzją zachodzących w stalach stopowych zakłada się zwykle globalną równowagę termodynamiczną pomiędzy istniejącymi fazami. Warunkiem takiej równowagi jest równość potencjałów chemicznych wszystkich składników faz  $i$  [20]. W przypadku przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  warunek ten przyjmuje postać:

$$\mu_i(\gamma) = \mu_i(\alpha) \text{ dla wszystkich } i \quad (64)$$

Warunki rzeczywiste w jakich zachodzą przemiany fazowe praktycznie uniemożliwiają osiągnięcie stanu równowagi globalnej, dlatego konieczne jest wprowadzanie pojęcia ograniczonej równowagi tzw. pararównowagi [61,62]. Pojęcie to zostało zaproponowane przez Hultgrena [48]. W celu opisanego stanu pararównowagi należy uwzględnić odmienny wpływ pierwiastków międzywęzłowych i substytucyjnych na przemianę  $\gamma$ - $\alpha$ , ze względu na dużą różnicę w ich ruchliwości, spowodowanej różnymi mechanizmami dyfuzji. Współczynnik dyfuzji substytucyjnych pierwiastków stopowych znacznie różni się od współczynnika dyfuzji międzywęzłowego węgla i może dojść do zatrzymania dyfuzji pierwiastków stopowych. Przykładowo w układzie Fe-Mn-C węgiel dyfunduje ze znaczną prędkością, natomiast mangan dyfunduje tak wolno, że ferryt dziedziczy z austenitu całą jego zawartość. Węgiel jest w równowadze lokalnej na granicy faz. W stanie pararównowagi zrównoważenie potencjału chemicznego możliwe jest dzięki dyfuzji węgla między składnikami fazowymi stali. Stosunek stężenia manganu do stężenia żelaza jest stały dla fazy  $\gamma$  i  $\alpha$ . W konsekwencji warunek pararównowagi dla układu Fe-Mn-C przyjmuje postać [49]:

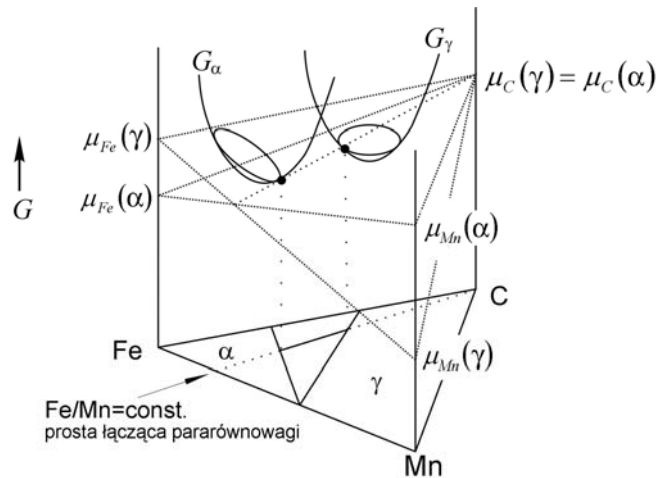
$$\mu_C(\gamma) = \mu_C(\alpha)$$

$$[\mu_{Fe}(\gamma) - \mu_{Fe}(\alpha)] + \frac{x_{Mn}^0}{x_{Fe}^0} [\mu_{Mn}(\gamma) - \mu_{Mn}(\alpha)] = 0 \quad (65)$$

$$\frac{x_{Mn}(\gamma)}{x_{Fe}(\gamma)} = \frac{x_{Mn}(\alpha)}{x_{Fe}(\alpha)} = \frac{x_{Mn}^0}{x_{Fe}^0}$$

gdzie:  $\mu_i(\gamma), \mu_i(\alpha)$  - potencjał chemiczny składnika  $i$  odpowiednio w fazie  $\gamma$  i  $\alpha$ ,  $x_i(\gamma), x_i(\alpha)$  - stężenie składnika  $i$  odpowiednio w fazie  $\gamma$  i  $\alpha$ ,  $x_i^0$  - stężenie początkowe składnika  $i$ ,  $i$  - kolejne składniki układu Fe-Mn-C.

Warunki pararównowagi dla układu Fe-Mn-C przedstawiono w sposób schematyczny na Rys.19. Płaszczyzny styczne odpowiednio do powierzchni swobodnej austenitu oraz ferrytu obrazują warunki pararównowagi na granicy faz zgodnie z którymi potencjał chemiczny węgla jest taki sam w obu fazach, a różnica potencjałów żelaza jest równoważona przez różnicę potencjałów pierwiastków stopowych. Płaszczyzny te przecinają się wzdłuż linii, której rzut na płaszczyznę Fe-Mn-C daje tzw. prostą łączącą pararównowagi (z ang. tie-line), dla której stosunek żelaza do manganu jest stały [51,63].

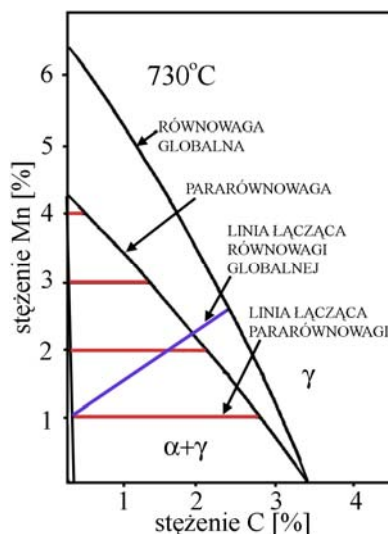


Rys.19. Schematyczne przedstawienie warunków pararównowagi w układzie Fe-Mn-C [51].

W oparciu o bazy danych termodynamicznych m.in. ThermoCalc, Calphad oraz badania doświadczalne, tworzone są układy podwójne i potrójne, które uwzględniają warunki pararównowagi oraz warunki równowagi globalnej.

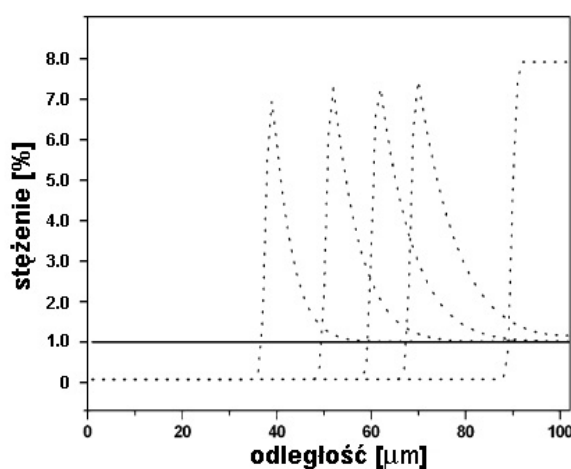
Na Rys.20 przedstawiono przekrój układu Fe-Mn-C dla temperatury 730°C i warunków pararównowagi, otrzymany z obliczeń oraz warunków równowagi globalnej, otrzymany z badań doświadczalnych [63]. Na wykres naniesiono proste łączące pararównowagi (kolor czerwony) oraz prostą łączącą równowagi globalnej (kolor niebieski). Granice faz  $\gamma$  i  $\alpha$  będących w stanie

pararównowagi znajdują się wewnątrz obszaru współistnienia tych faz w stanie równowagi globalnej [51,63].



Rys.20. Przekrój układu Fe-Mn-C dla warunków pararównowagi oraz równowagi globalnej [63].

Założenie warunków pararównowagi można znaleźć w wielu modelach przemiany  $\gamma-\alpha$  w stalach stopowych [62–67]. Modele te przyjmują najczęściej założenie o kontrolującym wpływie dyfuzji węgla na przemianę i wykorzystują układy równowagi potrójne i podwójne do określania równowagowego stężenia węgla. Na Rys.21 pokazano rozkłady stężenia węgla oraz manganu uzyskane z modelu numerycznego [62], w którym przyjęto warunki pararównowagi. Linia przerywana oznacza stężenie węgla, a linią ciągłą stężenie manganu w kolejnych krokach czasowych, w zależności od położenia. Stała wartość manganu obrazuje przyjęte warunki pararównowagi, zgodnie z którymi zawartość pierwiastka substytucyjnego w nowej fazie jest taka sama, jak w fazie macierzystej.



Rys.21. Rozkłady stężenia węgla (linia przerywana) oraz manganu (linia ciągła) dla przemiany  $\gamma-\alpha$  zachodzącej w temperaturze 600°C w stali zawierającej 0.22%C i 0.85%Mn [62].

Założenie warunków pararównowagi wykorzystano w niniejszej pracy przy tworzeniu modelu numerycznego przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ , zachodzącej w układzie Fe-Mn-C. Zastosowane w modelu układy równowagi Fe-Mn-C dla wybranych stali stopowych zostały przedstawione w rozdziale 4.4.

### **3.5. Problem Stefana**

Problem Stefana, lub inaczej zjawisko ruchomej granicy międzyfazowej, dotyczy procesów transportu masy i ciepła w materiałach, w których zachodzą przemiany fazowe np. topnienie, rekrytalizacja, krzepnięcie. Problemem Stefana określa się również model matematyczny opisujący położenie granicy, które zmienia się w czasie, przy zastosowaniu równań dyfuzji połączonych z nieliniowymi warunkami brzegowymi na granicy.

Analityczne rozwiązanie zagadnienia jest skomplikowane, ponieważ nieznane jest położenie granicy i dodatkowo warunki brzegowe na granicy zmieniają się nieliniowo. Stosowane są więc rozwiązania numeryczne, które uwzględniają zmiany temperatury lub strumienia z czasem. Istnieją trzy główne podejścia do rozwiązania problemu Stefana: metoda śledzenia frontu (front-tracking), metoda unieruchomienia frontu (front-fixing) oraz metoda front-obszar (front-domain).

Metoda front-tracking polega na ciągłym śledzeniu położenia granicy, przy czym dyfuzja jest rozwiązywana dla nieruchomej siatki. W metodzie front-fixing wprowadza się współrzędne krzywoliniowe odpowiednio dopasowane do analizowanej przestrzeni. Wadą metody jest możliwość rozwiązywania tylko prostych kształtów geometrycznych. Zastosowanie metody front-domain, inaczej metody wariacyjnej nierówności lub metody entalpii, ogranicza się do przypadku, gdy cała granica międzyfazowa ma takie samo stężenie [68-70]. W niniejszej pracy w modelu przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  zastosowano metodę front-tracking.

### **3.6. Model struktury austenitu i ferrytu**

Modele przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  spotykane w literaturze zakładają różny kształt ziaren austenitu i ferrytu. Zgodnie z analizą teoretyczną i skalą wzorców wg ASTM [29] najlepszym przybliżeniem ziaren austenitu i ferrytu jest dla układu 2D sześciokąt foremny [56,71-73]. Obliczenia przeprowadzone na wielokątach i wielościanach przy założeniu, że z każdego naroża ziarna austenitu rośnie ziarno ferrytu, są długotrwałe. Stosuje się dlatego modele alternatywne. W układzie 2D jest to model wzrostu okręgu w okręgu, natomiast w układzie 3D kuli w kuli [71,74]. Takie uproszczenie kształtu, ze względu na brak krawędzi i naroży na których odbywa się zarodkowanie

ferrytu, z jednej strony ułatwia obliczenia, ale może w znacznym stopniu wpływać na przewidywany przez model przebieg przemiany  $\gamma-\alpha$ . Określenie wpływu założonego kształtu na wzrost ferrytu jest jednym z celów niniejszej pracy.

Modele przemiany  $\gamma-\alpha$  przedstawione w rozdziałach 3.2 i 3.3 dotyczyły powstawania pojedynczych ziaren, lub płytek ferrytu. Nie uwzględniano wyjściowej mikrostruktury austenitu i nie opisywano ukształtowanej w wyniku przemiany mikrostruktury ferrytu. Dla kompletnego opisu przemiany  $\gamma-\alpha$  konieczne jest wygenerowanie modelowych struktur austenitu i ferrytu w układzie 2D i 3D. Najczęściej struktura austenitu jest generowana przy wykorzystaniu algorytmu Voronoi. Takie rozwiązanie spotyka się m.in. w pracach te Velthiusa [75], Nygardsa [23], Grujicica [76], Leeuwena [71], Narayana [77] oraz Kopa [78].

Przedstawiony poniżej model te Velthiusa i in. [75] opisuje rozwój mikrostruktury podczas przemiany  $\gamma-\alpha$ . W modelu tym ilość zarodków  $N(t)$  określa funkcja zarodkowania w postaci:

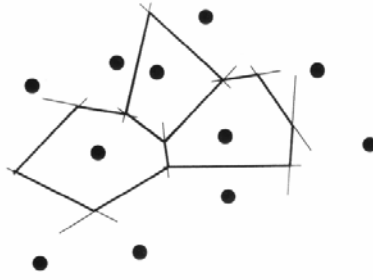
$$N(t) = \frac{N_0}{1 + (N_0 - 1) \exp\left(-\frac{t - \tau_s}{t_1}\right)} \quad (66)$$

gdzie:  $N_0$  – liczba potencjalnych miejsc zarodkowania,  $t_1$  – stała czasowa prędkości zarodkowania.

Wartość  $N_0$  zależy od ilości naroży ziaren austenitu  $N_p$  i jest przyjmowana jako  $N_0 = 0.5N_p$ . Funkcja zarodkowania (66) daje pojedynczy zarodek przy  $t = \tau_s$  [75].

Przy niskich prędkościach chłodzenia ferryt zarodkuje przeważnie w narożach ziaren austenitu. Centralne położenia ziaren austenitu są generowane losowo np. rozkładem Poissona, przy założeniu pewnej minimalnej odległości pomiędzy nimi [23, 73, 75, 79, 80].

W oparciu o wygenerowane centralne położenia ziaren budowane są ziarna austenitu przez wykorzystanie algorytmu Voronoi tworzenia komórek. Mikrostruktura Voronoi jest topologicznie równoważna mikrostrukturze metali. Każda komórka spełnia, tak jak pojedyncze ziarno, twierdzenie Eulera  $V - E + F = 2$  i zależność  $V = 2F - 4$  ( $V$ ,  $E$ ,  $F$  oznaczają odpowiednio: liczbę wierzchołków, krawędzi i ścian komórki). Ponadto kąty pomiędzy płaszczyznami i krawędziami spełniają kryterium minimum energii powierzchniowej [24,73]. Algorytm Voronoi wykorzystuje zbiór losowo położonych punktów do podzielenia przestrzeni na mniejsze obszary, przy czym jedna komórka Voronoi powstaje dla jednego punktu. Tworzenie komórek dla przypadku dwuwymiarowego zostało przedstawione schematycznie na Rys.22.



Rys.22. Schematyczne przedstawienie algorytmu Voronoi [23].

Linie proste dzielą na połowę odległość pomiędzy położonymi najbliżej siebie punktami, a z przecięcia prostych powstają wierzchołki wielokątów. W konsekwencji w każdym wierzchołku (narożu) wielokąta (ziarna) łączą się trzy linie (granice ziaren) [23]. Analogiczne rozwiązanie może być stosowane dla problemów przestrzennych. Miejsca zarodkowania ferrytu są wybierane losowo spośród naroży ziaren austenitu. Rozrastające się ziarna ferrytu zderzają się ze sobą, kiedy suma ich promieni jest większa, niż odległość pomiędzy ich środkami. W ten sposób powstaje część wspólna ziaren, która w obliczeniach rzeczywistej objętości ziaren musi być odejmowana od objętości ziaren. Prawdopodobieństwo powstania takiej sytuacji jest uzależnione m.in. od ilości ziaren ferrytu i rozmieszczenia naroży ziaren austenitu w danej objętości [75].

Algorytm Voronoi został zastosowany w niniejszej pracy do wygenerowania struktury austenitu, oraz zasymulowania wzrostu ziaren ferrytu o założonym kształcie sześciokątów foremnych w narożach ziaren austenitu, przy czym prędkość wzrostu ziaren ferrytu pochodziła z modelu przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  prezentowanego w niniejszej pracy. W modelu opartym na założeniu, że ziarna ferrytu rosną w każdym narożu ziarna austenitu nie uwzględniono zmiany ilości zarodków z czasem zgodnie z zależnością (66). Możliwość zderzenia ziaren i w konsekwencji powstawania części wspólnej ziaren została wyeliminowana poprzez wprowadzenie warunku o symetrii układu, polegającego na tym, że ziarno ferrytu rosnące w narożu sześciokątnego ziarna austenitu, nie może być większe niż połowa odległości między sąsiednimi narożami. W rezultacie otrzymano informacje o ilości i średniej wielkości ziaren austenitu i ferrytu w strukturze, oraz informacje o rozmieszczeniu w objętości obydwu faz.

Numeryczny opis materiału wraz z symulacją przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  oraz numeryczną analizą stanowi tzw. cyfrową reprezentację materiału, która może znaleźć zastosowanie w modelach numerycznych dla stali odkształcanych w zakresie dwufazowym.

W modelu przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla wzrostu równoosiowego przyjęto zgodnie z danymi literaturowymi [29,71,78,80], że ziarna austenitu i ferrytu mają dla rozwiązania 2D kształt sześciokątów.

#### 4. Teza pracy

W oparciu o przedstawioną w poprzednich rozdziałach analizę danych literaturowych oraz wyniki wstępnych badań przeprowadzonych przez Autorkę sformułowano następującą tezę:

**Modelowanie przemiany ferrytycznej  $\gamma-\alpha$  z zastosowaniem numerycznego rozwiązania równania dyfuzji z ruchomą powierzchnią międzyfazową powinno dać, w odniesieniu do wartości doświadczalnych, poprawne wyniki symulacji wzrostu ferrytu ziarnistego i płytkowego, dla różnych gatunków stali, w warunkach zmiennych prędkości chłodzenia, przy uwzględnieniu w modelu matematycznym odpowiedniego kształtu pierwotnego ziarna austenitu i wzrastającego ziarna ferrytu.**

Do weryfikacji poprawności postawionej tezy konieczne było opracowanie modelu przemiany fazowej  $\gamma-\alpha$ , opartego na rozwiązaniu równania dyfuzji z ruchomą powierzchnią międzyfazową, pozwalającego na:

- określenie wpływu założonego kształtu ziarna austenitu i ferrytu, prędkości chłodzenia, zawartości węgla i wybranych pierwiastków stopowych na przebieg przemiany, wielkość ziaren powstałego ferrytu oraz ułamek objętości fazy ferrytycznej,
- generowanie mikrostruktury austenitu i ferrytu,
- określenie parametrów kinetycznych przemiany  $\gamma-\alpha$  dla stali o założonym składzie chemicznym.

W założeniu model dotyczy przemiany  $\gamma-\alpha$  dla równoosiowego i kierunkowego wzrostu fazy ferrytycznej. Do opracowania modelu wykorzystano współczesną teorię kinetyki i termodynamiki zjawisk zachodzących w czasie przemiany  $\gamma-\alpha$  oraz zastosowano nowoczesne rozwiązania numeryczne do opisu procesów dyfuzji zachodzących w otoczeniu granicy. Procedura tworzenia modelu obejmowała:

- analizę modeli fizycznych i matematycznych przemiany  $\gamma-\alpha$ ,
- wybór modelu oraz rozwiązania numerycznego przemiany  $\gamma-\alpha$ ,
- wybór kształtu reprezentującego ziarna austenitu i ferrytu,
- wygenerowanie wielokątów Voronoi reprezentujących strukturę austenitu w układzie 2D,
- przeprowadzenie rozwiązania założonego modelu metodą różnic skończonych w układzie 1D, 2D oraz 3D,

- przeprowadzenie rozwiązania założonego modelu metodą elementów skończonych w układzie 2D,
- wprowadzenie do modelu rozwiązania dla kierunkowego wzrostu ziaren – ferryt Widmanstättena w układzie 2D.

Poprawność działania modelu zamierzono sprawdzić przez porównanie wyników symulacji numerycznych wykonanych dla różnych warunków przemiany z wynikami przeprowadzonych badań doświadczalnych na stalach niskowęglowych z mikrododatkami, dla przypadku wzrostu równoosiowego, oraz na stali średniowęglowej dla wzrostu kierunkowego. Wpływ zawartości węgla na postęp przemiany zamierzano badać w warstwie nawęglonej, wytworzonej na stali niskowęglowej z mikrododatkami. W ten sposób analizowano rolę węgla przy stałej zawartości pierwiastków stopowych i domieszek. Do weryfikacji modelu wykorzystano badania dylatometryczne oraz badania metalograficzne, polegające na ujawnianiu, obserwacji i ilościowym opisie mikrostruktury próbek stali, poddanych różnym zabiegom obróbki cieplnej.

## 5. Własny model przemiany $\gamma-\alpha$

Jak przedstawiono powyżej podstawowe znaczenie w modelowaniu przemiany  $\gamma-\alpha$  ma przyjęty kształt ziaren fazy wyjściowej i fazy końcowej przemiany. Modele własne zbudowano w przestrzeni jedno-, dwu- i trójwymiarowej dla następujących kształtów ziaren austenitu i ferrytu:

### model 1D

miarą postępu przemiany był stosunek długości odcinków (model 1)

### model 2D

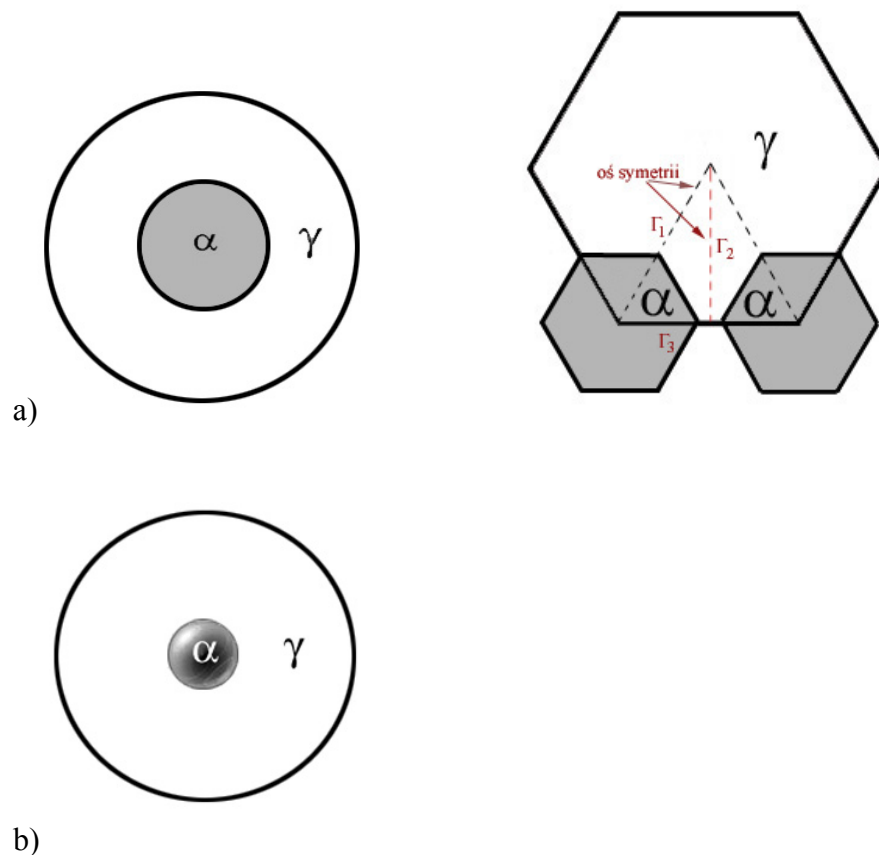
koło w kole (model 2)

sześciokąt w sześciokącie (model 4)

### model 3D

kula w kuli (model 3)

Przyjęte kształty przedstawiono na schematycznie na Rys.23.



Rys.23. Ziarno austenitu z rosnącym ziarnem ferrytu: a) rozwiązanie 2D, b) rozwiązanie 3D.

W modelach zakładających kształt wielokąta przyjęto, że ziarna ferrytu rosną w narożach ziaren austenitu. Założono symetrię układu i w konsekwencji analizowano 1/12 sześciokąta, co pokazano na Rys.23b (czerwoną linią przerywaną zaznaczono oś symetrii).

W celu opisu procesów dyfuzyjnych podczas przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  zastosowano rozwiązania II prawa Ficka (10) w układzie jednowymiarowym (23) dla modelu 1 oraz w układzie dwuwymiarowym (31) dla modelu 4. Do modelu „koło w kole” wprowadzono rozwiązanie II prawa Ficka w układzie cylindrycznym w postaci:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) \quad (67)$$

gdzie:  $r$  – współrzędna promieniowa.

Przyjęty układ współrzędnych cylindrycznych pozwalał na odwzorowanie rzeczywistych procesów dyfuzyjnych, przy zmianie stężenia węgla wzdłuż promienia i stałym stężeniu w osi.

Procesy dyfuzyjne towarzyszące przemianie  $\gamma$ - $\alpha$  dla przypadku rozwiązania 3D „kula w kuli” opisano II prawem Ficka we współrzędnych sferycznych. Stężenie węgla jest wówczas zgodnie z równaniem (68) funkcją promienia kuli.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) \quad (68)$$

Jak już wspomniano, w modelu 1D oraz w modelach zakładających kształt koła i kuli zastosowano MRS, natomiast w przypadku kształtu sześciokąta wykorzystano MES.

### 5.1. Rozwiązanie metodą różnic skończonych

W modelu wzrostu równoosiowego ferrytu do rozwiązania równania dyfuzji w układzie jednowymiarowym (23), cylindrycznym (67) i sferycznym (68) zastosowano metodę różnic skończonych. Wykorzystano jawny schemat całkowania po czasie, w którym zamiany pochodnej funkcji na iloraz różnicowy dokonano wprowadzając iloraz przedni dla pierwszej pochodnej oraz iloraz centralny dla drugiej pochodnej funkcji  $c(r,t)$  zgodnie z równaniem (27).

Po przekształceniach równanie dyfuzji (23) przybliżone zostaje schematem różnicowym w postaci:

$$c_{j,k+1} = \left( 1 - 2 \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \right) c_{j,k} + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} (c_{j-1,k} + c_{j+1,k}) \quad (69)$$

Równanie dyfuzji (67) przybliżone zostaje następującym schematem różnicowym:

$$c_{j,k+1} = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left[ c_{j-1,k} + \left( 1 + \frac{\Delta x}{r} \right) c_{j+1,k} + \left( \frac{\Delta x^2}{D\Delta t} - 2 - \frac{\Delta x}{r} \right) c_{j,k} \right] \quad (70)$$

gdzie:  $k=1,2,\dots,n,n+1$ ,  $\Delta x=r/n$ .

Analogicznie schemat różnicowy dla równania (68) wyraża zależność:

$$c_{j,k+1} = \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left[ c_{j-1,k} + \left( 1 + \frac{2\Delta x}{r} \right) c_{j+1,k} + \left( \frac{\Delta x^2}{D\Delta t} - 2 - \frac{2\Delta x}{r} \right) c_{j,k} \right] \quad (71)$$

W modelu wzrostu kierunkowego ferrytu do rozwiązania równania różniczkowego (62) zastosowano schemat DuForta – Frankela (DF) [18,70]. Jest to schemat jawny, wykorzystywany w numerycznych rozwiązaniach równań transportu masy, ciepła oraz przepływu płynów. Pochodną czasową oraz przestrzenną zapisuje się za pomocą ilorazu różnicowego centralnego:

$$\frac{\partial U}{\partial \tau} = \frac{U_{i,j,k+1} - U_{i,j,k-1}}{2\Delta t} \quad (72)$$

$$\frac{\partial U}{\partial X} = \frac{U_{i+1,j,k} - U_{i-1,j,k}}{2\Delta x} \quad (73)$$

Druga pochodna zapisana jest dla trzech poziomów czasowych ( $k-1, k, k+1$ ):

$$\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} = \frac{U_{i+1,j,k} - U_{i,j,k+1} - U_{i,j,k-1} + U_{i-1,j,k}}{(\Delta x)^2} \quad (74)$$

W konsekwencji schemat różnicowy przyjmuje postać:

$$(1 + 4n)U_{i,j,k+1} = 2n \left\{ \left( 1 + \frac{V_k \Delta x}{2} \right) U_{i+1,j,k} + \left( 1 - \frac{V_k \Delta x}{2} \right) U_{i-1,j,k} \right\} + 2n(U_{i,j+1,k} + U_{i,j-1,k}) + (1 - 4r)U_{i,j,k-1} \quad (75)$$

gdzie:  $i, j$  – wskaźniki dla współrzędnych,  $k$  – wskaźnik dla czasu,  $n = \Delta t / \Delta x^2$ .

Taki zapis pozwala na uzyskanie bezwarunkowej stabilności  $|\sigma|^2 \leq 1$ , czyli braku ograniczeń na stosunek wymiarów siatki czasowej do przestrzennej [70]. Prędkość ruchu progu jest wyrażona przez iloczyn przesycenia  $\Omega$  i gradientu pola dyfuzji  $M_{j,k}$ :

$$V_k = \Omega M_{j,k} \quad (76)$$

$$M_{j,k} = \frac{U_{1,j,k} - U_{-1,j,k}}{2\Delta x}$$

Wielkość przemieszczenia progu jest sumą iloczynów prędkości cząstkowych i kroków czasowych:

$$\Xi_k = \sum_{k=0}^{k-1} V_k \Delta t \quad (77)$$

Modele przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ , wykorzystujące MRS do rozwiązania równania różniczkowego cząstkowego, zaimplementowano w programie MATLAB v.6.5. Stworzono także interfejs graficzny użytkownika w środowisku GUIDE, by ułatwić wprowadzanie danych wejściowych.

## 5.2. Rozwiązanie metodą elementów skończonych

Zgodnie z analizą metody elementów skończonych przedstawioną w rozdziale 3.1 do rozwiązania różniczkowego równania dyfuzji (10) zastosowano rachunek wariacyjny. Poszukiwano funkcji  $c$ , która da najmniejszą wartość funkcjonału (35). Funkcjonał ten podobnie jak równanie (31) spełnia warunek brzegowy (29). Po przeprowadzeniu dyskretyzacji obszaru stężenie wewnątrz elementu opisuje iloczyn wektora funkcji stężeń w węzłach elementu oraz wektora funkcji kształtu, zgodnie z równaniem (36).

Po wprowadzeniu zależności (36) do (35) funkcjonał  $J$  przyjmuje postać:

$$J = \int_V \left\{ \frac{D}{2} \left[ \left( \sum \frac{\partial N_i}{\partial x} c_i \right)^2 + \left( \sum \frac{\partial N_i}{\partial y} c_i \right)^2 \right] - Q \sum N_i c_i \right\} dV - \int_S q \sum N_i c_i dS \quad (78)$$

Poszukiwanie minimum dyskretyzowanego funkcjonału (78) względem składowych wektora  $\mathbf{c}$  prowadzi do układu równań liniowych:

$$\frac{\partial J}{\partial c_j} = \int_V c \left[ \sum \left( \frac{\partial N_i}{\partial x} c_i \right) \frac{\partial N_j}{\partial x} + \sum \left( \frac{\partial N_i}{\partial y} c_i \right) \frac{\partial N_j}{\partial y} \right] dV - \int_V Q N_j dV - \int_S q N_j dS = 0 \quad (79)$$

Układ równań (79) zapisany w postaci macierzowej przyjmuje postać:

$$\mathbf{Hc} = \mathbf{f}$$

$$H_{ij} = \int_V (\nabla N_i)^T D (\nabla N_j) dV \quad (80)$$

$$f_i = \int_S q N_i dS + \int_V Q N_i dV$$

gdzie:  $\mathbf{H}$  – macierz dyfuzji zawierająca pochodne funkcji kształtu i własności ośrodka,  $\mathbf{f}$  – wektor warunków brzegowych,  $q$  – strumień masy na granicy obszaru,  $Q$  – ciepło generowane w wyniku przemiany fazowej.

Rozwiązanie układu równań (80) daje wartości stężenia  $c_i$  w węzłach siatki elementów dla stacjonarnego transportu masy, kiedy  $\partial c/\partial t=0$ . Modelowanie przemiany  $\gamma-\alpha$  wymaga przeprowadzenia rozwiązania dla niestacjonarnego przepływu masy. W skończonych i odpowiednio krótkich przedziałach czasowych pochodne cząstkowe stężenia są rozpatrywane tylko jako funkcje  $x, y$ . Rozwiązaniem równania (31) jest zatem układ równań w postaci:

$$\mathbf{H}\mathbf{c} + \mathbf{C} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{c} - \mathbf{f} = 0 \quad (81)$$

Przy czym macierz  $\mathbf{C}$  jest zdefiniowana jako:

$$C_{ij} = \int_V N_i N_j dV \quad (82)$$

Założenie, że w jednym kroku czasowym stężenie w węzłach zmienia się liniowo z czasem, prowadzi do zależności:

$$\mathbf{c} = \{N_0, N_1\} \begin{Bmatrix} \mathbf{c}_i \\ \mathbf{c}_{i+1} \end{Bmatrix} \quad (83)$$

Funkcje kształtu względem czasu w równaniu (83) mają postać:

$$N_0 = \frac{\Delta t - t}{\Delta t}, \quad N_1 = \frac{t}{\Delta t} \quad (84)$$

gdzie:  $\Delta t$  – przedział czasu,  $\mathbf{c}_i$  i  $\mathbf{c}_{i+1}$  wartości stężenia w węzłach odpowiednio dla  $t = 0$  i  $t = \Delta t$ .

Pochodną stężenia po czasie dla zależności (83) opisuje wyrażenie:

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = \left\{ \frac{\partial N_0}{\partial t}, \frac{\partial N_1}{\partial t} \right\} \begin{Bmatrix} \mathbf{c}_i \\ \mathbf{c}_{i+1} \end{Bmatrix} = \frac{1}{\Delta t} \{-1, 1\} \begin{Bmatrix} \mathbf{c}_i \\ \mathbf{c}_{i+1} \end{Bmatrix} \quad (85)$$

Do rozwiązania równania (85) zastosowano metodę ważonych residuum. W metodzie tej poszukiwana całka dla równania różniczkowego (81) ma postać:

$$\int_0^{\Delta t} \frac{t}{\Delta t} \left[ \mathbf{H} \{N_0, N_1\} \begin{Bmatrix} \mathbf{c}_i \\ \mathbf{c}_{i+1} \end{Bmatrix} + \mathbf{C} \left\{ \frac{\partial N_0}{\partial t}, \frac{\partial N_1}{\partial t} \right\} \begin{Bmatrix} \mathbf{c}_i \\ \mathbf{c}_{i+1} \end{Bmatrix} - \mathbf{p} \right] dt = 0 \quad (86)$$

Po podstawieniu funkcji kształtu całka (86) opisana jest zależnością:

$$\int_0^{\Delta t} \frac{t}{\Delta t} \left[ \left( \frac{\Delta t - t}{\Delta t} \mathbf{c}_i + \frac{t}{\Delta t} \mathbf{c}_{i+1} \right) \mathbf{H} + (-\mathbf{c}_i + \mathbf{c}_{i+1}) \frac{\mathbf{C}}{\Delta t} - \mathbf{p} \right] dt = 0 \quad (87)$$

Przyjęcie w metodzie ważonych residuum, że funkcja wagi jest równa funkcji kształtu danej równaniem (84), jest równoznaczne ze schematem całkowania po czasie Galerkina.

Równanie (87) po całkowaniu i przekształceniach zapisane jest w postaci:

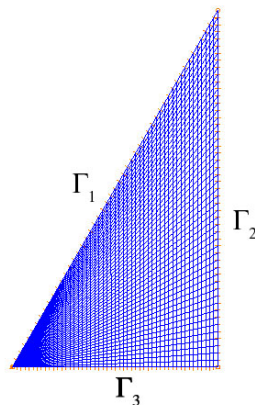
$$\hat{\mathbf{H}} \mathbf{c} = \hat{\mathbf{p}} \quad (88)$$

gdzie:  $\mathbf{c}$  – wektor stężenia w węzłach na końcu przedziału czasowego, oraz:

$$\hat{\mathbf{H}} = \left[ 2\mathbf{H} + \frac{3}{\Delta t} \mathbf{C} \right] \quad \hat{\mathbf{p}} = \left[ -\mathbf{H} + \frac{3}{\Delta t} \mathbf{C} \right] \mathbf{c}_i - 3\mathbf{p} \quad (89)$$

Rozwiązanie układu równań (88) pozwala obliczyć wartości stężenia w węzłach siatki na końcu kroku czasowego  $\Delta t$ , przy zadanych tych wartościach na początku kroku czasowego. Wartości końcowe stężeń dla jednego kroku czasowego stają się wartościami początkowymi dla następnego kroku. W ramach pracy Autorka przystosowała istniejący w Katedrze Informatyki Stosowanej i Modelowania program MES obliczający przepływ ciepła do modelowania dyfuzji. Do programu wprowadzone zostały odpowiednie warunki brzegowe oraz równania opisujące współczynnik dyfuzji w funkcji temperatury i lokalnego stężenia węgla.

Jak wspomniano w rozdziale 3.6 w modelu przemiany  $\gamma-\alpha$  dla wzrostu równoosiowego założono, że pojedyncze komórki austenitu i ferrytu mają kształt sześciokąta foremnego dla przypadku 2D. Rozpatrywano wzrost ziaren ferrytu w narożach ziarna austenitu. Obszar rozwiązania 2D, przy założonej symetrii układu oraz przyjętą siatkę elementów pokazano na Rys.24.

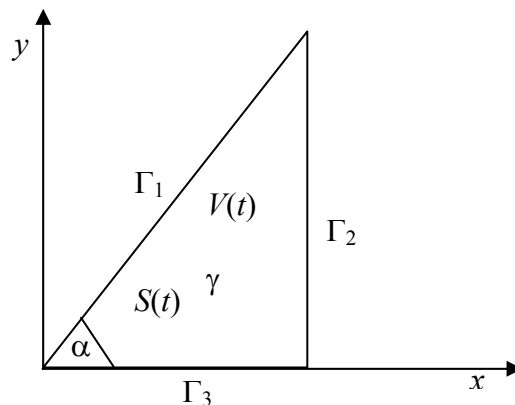


Rys.24. Obszar rozwiązania 2D z naniesioną siatką elementów.

Do rozwiązania modelu przemiany  $\gamma-\alpha$ , który zakłada kształt obszaru przedstawiony na Rys.24, wykorzystano pakiety: MATLAB 6.5, własny program MES oraz komercyjny program ADINA v.8.1. Stworzono również interfejs graficzny w środowisku GUIDE. W czasie całej przemiany  $\gamma-\alpha$  w sposób ciągły zmienia się obszar rozwiązania. Program ADINA nie ma funkcji remeshingu, dlatego symulacje numeryczne prowadzono iteracyjnie. W pakiecie MATLAB przygotowano plik z danymi dla programu ADINA: definiowano obszar rozwiązania, wraz z warunkami brzegowymi. Rozwiązanie równania różniczkowego przeprowadzono przy wykorzystaniu modułu analizy pól termicznych ADINA-T, traktując dyfuzję ciepła jako dyfuzję masy. Otrzymywano plik wynikowy zawierający wartości stężeń w węzłach, które następnie interpolowano do nowego obszaru zdefiniowanego w MATLABIE.

### 5.3. Problem Stefana w przemianie fazowej $\gamma-\alpha$

Wyznaczenie położenia granicy międzyfazowej, prędkości jej ruchu oraz rozkładu temperatury wewnątrz obszaru jest niezwykle ważnym elementem modelowania przemiany fazowej  $\gamma-\alpha$ . Do opisu modelu matematycznego dla zagadnienia dwuwymiarowego wzrostu sferycznego zastosowano w pracy [68] schemat obszaru rozwiązania, w postaci 1/12 sześciokąta foremnego, przedstawiony na Rys.25.



Rys.25. Schematyczne przedstawienie obszaru dla zastosowanego w pracy [68] do rozwiązania problemu Stefana.

Obszar austenitu określono jako  $V(t)$ , granicę międzyfazową jako  $S(t)$ , a granice zewnętrzne opisano przez  $\Gamma_i$ ,  $i \in \{1,2,3\}$ . W fazie  $\gamma$  stężenie węgla  $c(x,y,t)$  spełnia równanie (31). Warunek początkowy jest następujący:

$$c(x, y, 0) = c_0(x, y), \quad (x, y) \in V(0) \quad (90)$$

Na granicach zewnętrznych strumień dyfuzji węgla jest równy zero:

$$\frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}(x, y, t) = q = 0, \quad (x, y) \in \Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3 \quad (91)$$

gdzie:  $\mathbf{n}$  – jednostkowy wektor normalny skierowany na zewnątrz granicy,  $q$  – strumień masy występujący w równaniu (80).

Stężenie na granicy międzyfazowej spełnia równanie:

$$c(x, y, t) = c_{\gamma\alpha} \quad (92)$$

Określenie położenia granicy wymaga wprowadzenia dodatkowego warunku brzegowego. W celu jego sformułowania należy przeanalizować wybrany fragment granicy międzyfazowej  $S(t)$ . Dla małych kroków  $\Delta t$  przemieszczenie następuje w kierunku prostopadłym do granicy. Przyjmuje się oś  $x$  wzdłuż normalnej. Położenie granicy jest lokalnie opisane zależnością:  $x = S(t)$ . Rozpatrywany jest kontrolny obszar wielkości  $\Delta x, \Delta y$ . Bilans stężenia węgla jest wówczas następujący:

$$[S(t + \Delta t) - x] \Delta x \Delta y c_\gamma = [S(t + \Delta t) - x] \Delta x \Delta y c_\alpha - D \frac{\partial c}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta t \quad (93)$$

Dzieląc wyrażenie (93) przez  $\Delta x \Delta y \Delta t$  i wprowadzając założenie, że  $\Delta t \rightarrow 0$  powstaje zależność:

$$(c_\alpha - c_\gamma) \frac{dS}{dt} = D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (94)$$

W rezultacie dodatkowy warunek brzegowy ma postać:

$$(c_\alpha - c_\gamma) \mathbf{V}(x, y, t) = D \frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}(x, y, t) \quad (95)$$

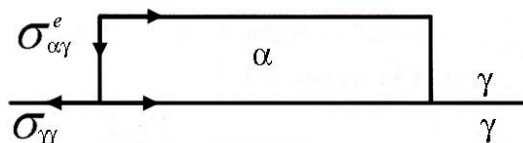
W modelu numerycznym przemiany  $\gamma-\alpha$ , prezentowanym w niniejszej pracy, przy określeniu położenia granicy międzyfazowej  $\xi$  wykorzystano warunek (95).

#### 5.4. Modelowanie okresu inkubacyjnego

W rozdziale 2.2.3 omówiono sens fizyczny okresu inkubacyjnego, jego wpływ na przemianę  $\gamma-\alpha$  oraz sposób wyznaczania. Poniżej przedstawiono przyjęte założenia, dotyczące kształtu zarodka.

Wyrażenie opisujące okres inkubacyjny  $\tau_s$  przyjmuje różną postać w zależności od kształtu zarodka krytycznego, rodzaju zarodkowania (heterogeniczne, homogeniczne) oraz stopnia dopasowania granicy. Na kształt zarodka wpływa lokalna geometria oraz energia międzyfazowa miejsc potencjalnego zarodkowania. Doświadczalne określenie kształtu zarodka dla poszczególnych miejsc zarodkowania nie jest obecnie możliwe. Podjęte zostały natomiast próby w celu

analitycznego wyznaczenia kształtu optymalnego. Najczęściej stosowanym rozwiązaniem jest model opracowany przez Enomoto i Aaronsona [81], określany jako model „pillbox”. Schemat zarodka wykorzystywany w tym modelu przedstawiono na Rys.26.



Rys.26. Koherentny zarodek o kształcie prostokąta,  $\sigma_{\alpha\gamma}^e$  – energia niekoherentnej granicy austenit/ferryt,  $\sigma_{\gamma\gamma}$  – energia granicy ziaren austenitu [81].

Model „pillbox” zakłada niską energię granicy międzyfazowej, a więc częściowe lub całkowite dopasowanie granicy. Przyjęte założenie jest słuszne dla opisu przemiany  $\gamma-\alpha$ , ponieważ granica międzyfazowa jest w tym przypadku koherentną granicą niskoenergetyczną. Kwestią sporną może być natomiast założenie w modelu uprzywilejowanych miejsc zarodkowania na powierzchniach ziaren austenitu. Badania doświadczalne wskazują bowiem, że zarodki pojawiają się przeważnie w narożach ziaren austenitu.

Do sformułowania własnego modelu wykorzystano wzór Lange’go [81], który wyrażenie (16) sprowadził do postaci:

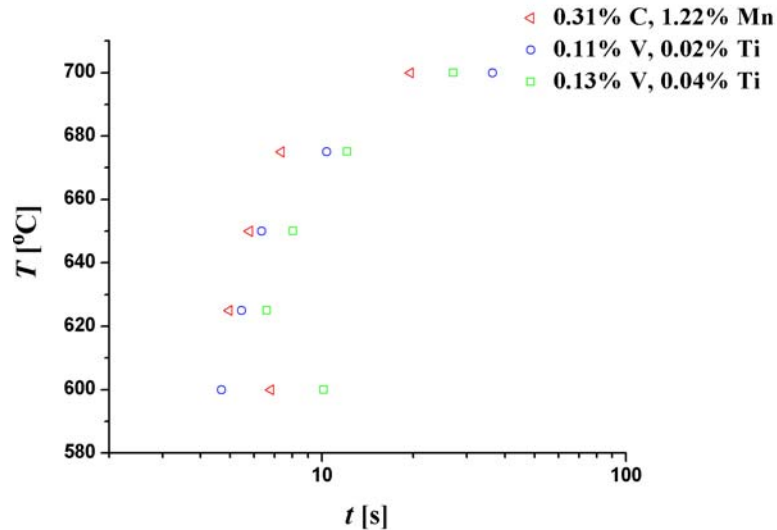
$$J \propto \left\{ -\frac{12k_B T \sigma_{\alpha\gamma}^e a_{\gamma\alpha}^4}{Dx_c v_\alpha^2 \Delta G_v^2} \right\} \quad (96)$$

gdzie:  $v_\alpha = 8.785 \times 10^{-30} \text{ m}^3$  – objętość atomu żelaza w ferrycie,  $a_{\gamma\alpha}$  – wartość średnia parametrów sieci krystalicznej fazy austenitu i ferrytu dla danej temperatury i składu chemicznego,  $x_c$  – ułamek molowy węgla w stali,  $\sigma_{\alpha\gamma}^e$  – energia międzyfazowa krawędzi.

Z porównania wyrażen (16) i (96), wzór opisujący okres inkubacyjny przemiany  $\tau_s$  dla zarodkowania heterogenicznego właściwego dla przemiany  $\gamma-\alpha$  przyjmuje postać:

$$\tau_s = \frac{12k_B T \sigma_{\alpha\gamma}^e a_{\gamma\alpha}^4}{Dx_c v_\alpha^2 \Delta G_v^2} \quad (97)$$

Wykres zależności (97) dla wybranych trzech gatunków stali przedstawiono na Rys.27. Krzywe wskazują na wzrost okresu inkubacyjnego wraz ze wzrostem zawartości węgla. Przeprowadzone w literaturze [49,82] porównanie przedstawionych wyników z danymi doświadczalnymi wykazuje, że błąd obliczeń nie przekracza 10%.



Rys.27. Okres inkubacyjny przemiany izotermicznej  $\gamma$ - $\alpha$  obliczony z zależności (97) dla trzech stali średniowęglowych [82].

Wartości parametrów sieci krystalicznej austenitu i ferrytu zastosowane w obliczeniach wyznaczono w oparciu dane doświadczalne dla stali niskostopowej. Zależności te uwzględniają udział pierwiastków stopowych [83]:

- dla ferrytu

$$a_{\alpha} = 0.28664 + (3a_{Fe}^2)^{-1} [(a_{Fe} - 0.0279x_C^{\alpha})^2 (a_{Fe} + 0.2496x_C^{\alpha}) - a_{Fe}^3] - 0.003x_{Si}^{\alpha} + 0.006x_{Mn}^{\alpha} + 0.007x_{Ni}^{\alpha} + 0.003x_{Mo}^{\alpha} + 0.005x_{Cr}^{\alpha} + 0.0096x_V^{\alpha} \quad (98)$$

- dla austenitu

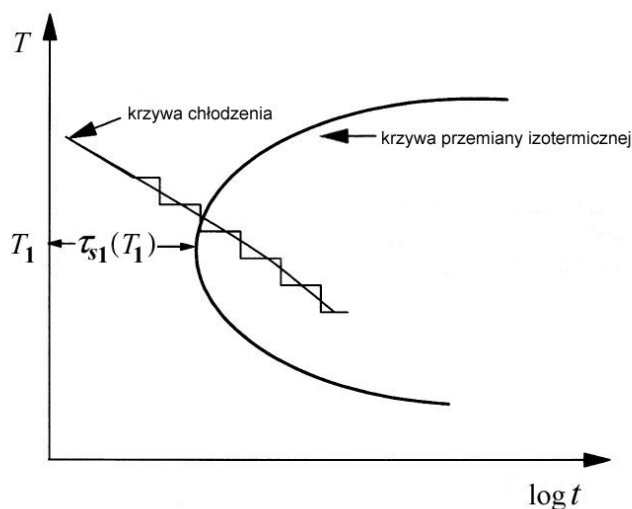
$$a_{\gamma} = 0.3573 + \sum_{i=1}^n a_i w_i^{\gamma} \quad (99)$$

$$\sum_{i=1}^n a_i w_i^{\gamma} = 3.3 \cdot 10^{-1} w_C^{\gamma} + 9.5 \cdot 10^{-3} w_{Mn}^{\gamma} - 2.0 \cdot 10^{-3} w_{Ni}^{\gamma} + 6.0 \cdot 10^{-3} w_{Cr}^{\gamma} + 3.1 \cdot 10^{-2} w_{Mo}^{\gamma} + 1.8 \cdot 10^{-2} w_V^{\gamma} \quad (100)$$

gdzie:  $x_i$  – ułamek molowy pierwiastka  $i$  w ferrycie,  $a_{Fe} = 0.2873 \pm 0.0001$  [nm] – standardowa wartość parametru sieci czystego żelaza w temperaturze pokojowej [84],  $w_i^{\gamma}$  - ułamek wagowy pierwiastka stopowego,  $a_i$  – zmiany parametru sieciowego w austenicie spowodowane stężeniem dodawanych pierwiastków stopowych.

Możliwość adaptacji zależności (97) do warunków nie izotermicznych stworzyła reguła addytywności Sheila. Reguła ta oparta jest na założeniu, że okres inkubacyjny przemiany przebiegających przy ciągłym chłodzeniu można przedstawić jako sumę krótkich okresów

izotermicznych. Podczas wytrzymania izotermicznego w temperaturze  $T_i$  realizowany jest ułamek  $\Delta\tau_{si}/\tau_{si}$  całkowitego okresu inkubacyjnego przemiany. Oznacza to, że chwilowa prędkość przemiany zależy tylko od temperatury i ułamka objętości poddanej przemianie, ale nie od historii zmian temperatury [85,86]. Graficzną interpretację reguły addytywności przedstawiono na Rys.28.



Rys.28. Schematyczne przedstawienie reguły addytywności [86].

Zapis matematyczny reguły jest następujący:

$$\sum_{i=1}^n \frac{\Delta\tau_{si}}{\tau_{si}} = 1 \quad \text{lub} \quad \int_{t_0}^t \frac{dt}{\tau_{si}(T)} = 1 \quad (101)$$

gdzie:  $\Delta\tau_{si}$  – czas wytrzymania izotermicznego w temperaturze  $T_i$ ,  $\tau_{si}$  - okres inkubacyjny przemiany izotermicznej zachodzącej w temperaturze  $T_i$ .

Przemiana w warunkach anizotermicznych zaczyna się wówczas, gdy suma cząstkowych okresów inkubacyjnych będzie równa jedności.

Wyrażenie (97) oraz reguła zdefiniowana zależnością (101) pozwoliły obliczyć okres inkubacyjny przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  w modelu numerycznym opracowanym w niniejszej pracy. Otrzymane wartości dla przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  zachodzącej w warunkach izotermicznych oraz przy ciągłym chłodzeniu zostały zweryfikowane doświadczalnie.

## 5.5. Warunki początkowe i brzegowe modelu

### 5.5.1. Warunki początkowe i brzegowe dla wzrostu ferrytu ziarnistego

W modelach numerycznych przemiany dla wzrostu sferycznego, temperatury początku  $Ar_1$  i końca przemiany  $Ar_3$  określono z krzywych dylatometrycznych. Warunkiem początkowym była stała wartość stężenia w austenicie. Warunek brzegowy na powierzchni międzyfazowej był zgodny z warunkiem Dirichleta (29). Na pozostałych powierzchniach obowiązywał warunek Neumanna (30).

Dla dyfuzji w układzie 1D opisanej równaniem (23), przyjęto następujący warunek początkowy oraz warunki brzegowe na granicy faz:

$$c(x,0) = c_0, \quad \xi \leq x \leq d_\gamma \quad (102)$$

$$\frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}(d_\gamma, t) = 0 \quad (103)$$

$$c(\xi, t) = c_{\gamma\alpha} \quad (104)$$

gdzie:  $\mathbf{n}$  – wektor jednostkowy prostopadły do granicy ziaren austenitu.

Dla dyfuzji w układzie cylindrycznym opisanej równaniem (67) oraz dyfuzji w układzie sferycznym opisanej równaniem (68) przyjęto następujący warunek początkowy i warunek brzegowy:

$$c(r,0) = c_0, \quad R_0 \leq \xi \leq r, \quad \xi \leq r \leq R \quad (105)$$

$$\frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}(R, t) = 0 \quad (106)$$

$$c(\xi, t) = c_{\gamma\alpha} \quad (107)$$

gdzie:  $R$  - promień koła/kuli reprezentującej ziarno austenitu,  $R_0$  - promień koła/kuli reprezentującej ziarno ferrytu.

W modelu 2D, zakładającym kształt wielokąta, równanie (31) rozwiązano po nałożeniu następujących warunków początkowych i brzegowych:

$$c(x, y, 0) = c_0 \quad (108)$$

$$\frac{\partial c}{\partial \mathbf{n}}(x, y, t) = 0, \quad (x, y) \in \Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3 \quad (109)$$

$$c(\xi, t) = c_{\gamma\alpha} \quad (110)$$

gdzie:  $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$  - oznaczają krawędzie oraz ściany ziaren austenitu przedstawione na Rys.24.

Dane termodynamiczne, takie jak stężenia:  $c_\alpha$ ,  $c_{\gamma\alpha}$ ,  $c_{\gamma\beta}$ , wyznaczone zostały w funkcji temperatury w oparciu o układy równowagi pochodzące z programu Thermocalc. Stężenie węgla w austenicie  $c_\gamma$  określano na podstawie zależności [78,86]:

$$c_\gamma = \frac{c_0 - f_f c_\alpha}{1 - f_f} \quad (111)$$

Ułamek  $f_f$  jest zdefiniowany jako stosunek objętości ferrytu do objętości pierwotnego ziarna austenitu. Natomiast ułamek objętości ferrytu  $x_f$  jest stosunkiem objętości ferrytu do maksymalnej możliwej objętości ferrytu w danych warunkach, co wyraża zależność:

$$x_f = \frac{(c_{\gamma\alpha} - c_0)}{f_f (c_{\gamma\alpha} - c_\alpha)} \quad (112)$$

Stężenie początkowe  $c_0$  jest średnim stężeniem węgla w stali. Spadek temperatury w czasie chłodzenia z prędkością  $v_{cr}$  jest określony zależnością:  $T = T_0 - v_{cr} t$ .

Podczas przemiany musi być spełniona zasada zachowania masy, czyli tyle węgla pojawi się w austenicie, ile wydyfunduje z obszaru ferrytu. Obliczane jest pole pod krzywą zmian stężenia węgla w austenicie. Przesunięcie frontu przemiany następuje w momencie, w którym spełniony został warunek:

$$\int_{\xi}^{d_\gamma} c(x) dx - c_0 (d_\gamma - \xi) \geq dx (c_0 - c_\alpha) \quad (113)$$

Przyjęcie warunku (113) oznacza, że ruch granicy odbywa się o stały krok  $dx$ , w momencie kiedy do austenitu odprowadzona została wystarczająca masa węgla, aby ruch granicy był uzasadniony.

### 5.5.2. Warunki początkowe i brzegowe dla wzrostu ferrytu płytkowego

Model wzrostu ferrytu płytkowego Widmanstättena oparto na rozwiązaniu równania Ficka, zapisanego w ruchomym układzie współrzędnych (62), przyjmując znormalizowane wartości stężeń  $U$  zdefiniowane zależnością (63). Zgodnie z teorią przedstawioną w rozdziale 3.3, wprowadzono następujące warunki początkowe:

$$\begin{aligned}
U_{0,0,0} &= c_0 \\
U_{i,0,0} &= 0 \quad \text{dla } i = 0, \dots, a \\
U_{i,j,0} &= 0 \quad \text{w fazie } \gamma
\end{aligned}
\tag{114}$$

gdzie:  $a$  – wysokość progu.

Do określenia warunków brzegowych wykorzystano wiedzę o mechanizmie powstawania ferrytu Widmanstättena zawartą w rozdziale 3.3. W konsekwencji, w modelu zastosowano dwa warunki brzegowe: stałego gradientu (UG) oraz stałej prędkości (UV). Przy założeniu, że atomy mogą się przemieszczać wyłącznie w kierunku  $x$  (Rys.18), warunek brzegowy na powierzchni bocznej progu ma postać:

$$U_{i,-1,k} = U_{i,1,k} \quad \text{dla } i = 0, \dots, a \tag{115}$$

Przesycenie w punkcie 0 jest stałe w czasie całej przemiany.

$$\begin{aligned}
\Omega_{0,0,k} &= \text{const} \\
U_{0,0,k} &= c_0
\end{aligned}
\tag{116}$$

## 5.6. Parametry modelu

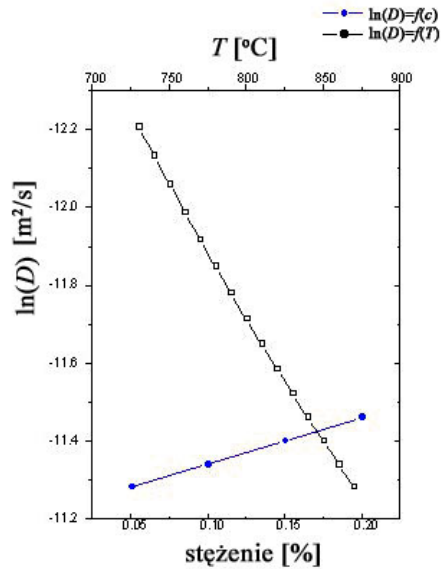
Głównym źródłem błędów w symulacji przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  są niedokładności w określeniu wartości współczynników dyfuzji węgla w austenicie. Podczas przemiany ustawicznie zmienia się bowiem stężenie węgla w austenicie, a sama przemiana zachodzi przy określonej temperaturze, lub w pewnym zakresie temperatur. W niniejszej pracy czynniki te uwzględniono w zadawanych wartościach współczynnika dyfuzji węgla. W przedmiotowej literaturze spotykano różne modele parametrów dyfuzyjnych, oparte głównie na pomiarach współczynnika dyfuzji w zależności od temperatury i stężenia węgla [4,87]. W prezentowanym modelu matematycznym zastosowano równanie opisujące współczynnik dyfuzji w funkcji stężenia węgla i temperatury, w postaci:

$$D = 4.53 \times 10^{-7} \left[ 1 + y_c(1 - y_c) \frac{8339.9}{T} \right] \exp \left[ - \left( \frac{1}{T} - 2.221 \times 10^{-4} \right) (17767 - 26436 y_c) \right] \tag{117}$$

gdzie:  $y_c = x_c / (1 - x_c)$ .

Zależność (117) została wyprowadzona przez Agrena [88] w oparciu o wielkości pomiarowe zawarte w pracach Wellsa, Batza i Mehla [88]. Zależność ta daje dobre wyniki dla całego zakresu temperatur  $A_{r3}$ -  $A_{r1}$ , co zostało między innymi wykazane w pracach [88-90].

Na Rys.29 przedstawiono wykres zależności współczynnika dyfuzji węgla od temperatury i stężenia węgla w stopie uzyskane z zależności (117). Przy wyborze tej zależności kierowano się przesłanką, iż w zakładanym w niniejszej pracy przedziale zmian temperatur oraz zmian stężenia węgla w austenicie, zależności mają charakter liniowy w układzie  $\ln(D)=f(T)$ .



Rys.29. Wpływ temperatury przemiany i stężenia węgla w austenicie na wartości współczynników dyfuzji węgla wg zależności Agrena [88].

Zgodnie z analizą teoretyczną przedstawioną w rozdziale 2.2.2, w prezentowanym modelu przemiany  $\gamma-\alpha$  zastosowano izotropowy współczynnik dyfuzji węgla, właściwy dla sieci o wysokiej symetrii.

## 6. Wyniki własnych symulacji przemiany $\gamma-\alpha$ i ich weryfikacja doświadczalna

### 6.1. Metodyka i zakres badań doświadczalnych

Zaproponowany model matematyczny pozwalał na symulację przemiany  $\gamma-\alpha$  dla stali o określonych zawartościach węgla i pierwiastków stopowych, austenitizowanych przy różnych temperaturach oraz chłodzonych z różnymi prędkościami. W numerycznym opisie mechanizmu i kinetyki przemiany ograniczono się do symulacji: segregacji węgla przed frontem przemiany, równoosiowego wzrostu ziaren ferrytu, kierunkowego wzrostu płytek ferrytu, zmian udziału fazy ferrytycznej podczas przemiany, stanowiących główne charakterystyki przemiany  $\gamma-\alpha$  oraz do generowania struktury austenitu. Znajomość segregacji węgla przed frontem przemiany miała podstawowe znaczenie, gdyż w modelu numerycznym założono kontrolujący wpływ dyfuzji węgla.

Segregację wyrażono poprzez rozkład stężenia węgla i pierwiastków stopowych w ziarnach austenitu przed frontem przemiany, równoosiowy wzrost ziaren ferrytu opisano zmianą średnicy ziarna ferrytu, a kierunkowy wzrost płytek ferrytu poprzez wydłużenie płytek. Zmianę udziału fazy ferrytycznej podczas przemiany  $\gamma-\alpha$  wyznaczały zdefiniowane w rozdziale 5.5 ułamki: ferrytu  $f_f$  i objętości ferrytu  $x_f$ .

Segregację rozumiano jako niejednorodność stężenia pierwiastków przed frontem przemiany. W opisie segregacji posługiwano się również terminem spiętrzenie, określającym charakterystyczną formą segregacji, opisaną np. dla węgla rozkładem stężenia pokazanym na Rys.5.

Wyznaczone numerycznie parametry przemiany planowano uzależnić od stężenia węgla, temperatury i czasu przemiany oraz prędkości chłodzenia. Wyniki symulacji miały też posłużyć do wyznaczenia temperatur  $Ar_{3p}$ ,  $Ar_{3k}$ . Wyrażenie (97) posłużyło natomiast do wyznaczenia wartości okresu inkubacyjnego  $\tau_s$ .

Teza pracy sformułowana w rozdziale 4 wiązała ocenę poprawności zaproponowanego modelu z porównaniem wyników symulacji z wynikami badań doświadczalnych. Program badań doświadczalnych był zbieżny z przedstawionym wyżej zakresem symulacji numerycznej przemiany  $\gamma-\alpha$ . W przeprowadzonych badaniach posłużono się metodami metalograficznymi opisu mikrostruktury próbek stali, poddanych różnym wariantom obróbki cieplnej. Ponadto przeprowadzono pomiary dylatometryczne próbek, które dostarczyły informacji o rzeczywistych parametrach przemiany  $\gamma-\alpha$  w badanych stalach - temperaturach początku i końca przemiany  $\gamma-\alpha$ , a w przypadku przemiany izotermicznej określenie wielkości okresu inkubacyjnego.

Materiał próbek stanowiły stale: z wytopów doświadczalnych, zwane dalej stalami modelowymi, stal niskostopowa o podwyższonej wytrzymałości, stal średniowęglowa do ulepszania

cieplnego oraz stale ze zmienną zawartością węgla, uzyskiwaną na drodze nawęglania. Skład analizowanych stali przedstawiono w tablicy I.

**Tablica I Skład chemiczny analizowanych stali**

	<b>C</b>	<b>Mn</b>	<b>V</b>	<b>Cu</b>	<b>Al</b>	<b>Mo</b>	<b>N</b>	<b>Si</b>	<b>P</b>	<b>S</b>	<b>Cr</b>	<b>Ni</b>	<b>Nb</b>
<b>I</b>	0.1	1.53	0.056	0.023	0.003	-	0.005	0.075	0.018	0.016	0.005	0.022	-
<b>II</b>	0.18	1.4	0.1	-	0.04	-	0.018	0.34	0.021	0.024	0.02	0.02	-
<b>15G2ANb</b>	0.15	1.22	-	-	0.055	-	-	0.30	0.02	0.015	-	-	0.027
<b>St3S</b>	0.16	0.43	-	-	0.005	0.01	-	0.23	0.006	0.015	0.01	0.02	-
<b>C56D</b>	0.54	0.62	-	0.15	0.005	0.02	-	0.19	0.015	0.017	0.09	0.07	-

Stale I, II, 15G2ANb (PN-86/H-84018) należą do grupy stali konstrukcyjnych o podwyższonej wytrzymałości. Dodatek niobu w stali 15G2ANb i wanadu w stalach I i II wpływał na zahamowanie rozrostu ziarna, ponieważ tworzyły się, wykazujące dużą dyspersję, stabilne węgliki oraz węglikoazotki tych pierwiastków. Dodatek manganu obniżał prędkość przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  [21]. Stale konstrukcyjne o podwyższonej wytrzymałości znajdują szerokie zastosowanie w przemyśle, ze względu na korzystne własności i niskie koszty produkcji. Wykonywane są z nich między innymi konstrukcje spawane i zgrzewane z blach uniwersalnych oraz grubych prętów [92].

W pracy wykorzystano również wyniki badań doświadczalnych na stali St3S wykonane w Instytucie Metalurgii Żelaza w Gliwicach. Umożliwiło to dostęp do danych termodynamicznych i kinetycznych oraz modelu numerycznego przemian zachodzących w tej stali [52]. Stal St3S (tablica I) należy do stali niestopowych, konstrukcyjnych, ogólnego przeznaczenia (PN-88/H-84020). Znajduje ona zastosowanie na konstrukcje spawane, nośne i przenoszące obciążenia dynamiczne, a także na części konstrukcji zbiorników ciśnieniowych, urządzeń dźwigowych oraz do produkcji rur.

Przy doborze wyżej wymienionych stali kierowano się możliwością odniesień do danych literaturowych [31,55,56], a także dążeniem do uproszczenia składu strukturalnego próbek do struktury ferrytycznej, z małym udziałem perlitu. Stale różniły się zawartością węgla w zakresie 0.1÷0.18%C.

Stal C56D należy do gatunku stali do ulepszenia cieplnego (PN-EN 10083-2+A1:1999), stosowanych na części maszyn, pojazdów i konstrukcji, w tym na części średnio obciążone i odporne na ścieranie, takie jak koła, wieńce, wały zębate, osie oraz mało obciążone sprężyny [92]. Przy wyborze stali dążono do zapewnienia czytelności struktury Widmanstättena na tle struktury perlitycznej, co możliwe było dla stali o zawartości węgla powyżej 0.4%. Średnia zawartość węgla w stali C56D wynosi 0.54%, a manganu 0.62%.

Próbki nawęglone pozwoliły na doświadczalne wyznaczenie wpływu zawartości węgla na postęp przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ , przy niezmienniej zawartości pozostałych składników stali. Do nawęglania

wybrano próbki stali modelowej II. Wytworzenie w stali gradientu stężenia węgla zmuszało do uwzględnienia tego faktu w interpretacji wyników, co zostało opisane w rozdziale 6.1.4.

### 6.1.1. Pierwotne ziarno austenitu

Określona doświadczalnie wielkość ziaren austenitu była wprowadzana do modelu numerycznego przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla wzrostu równoosiowego. Kształt ziaren austenitu miał natomiast weryfikować strukturę austenitu wygenerowaną algorytmem Voronoi.

W celu określenia wielkości oraz kształtu pierwotnego ziarna austenitu przy założonej temperaturze austenityzowania zastosowano metodę siatki cementytu [29]. Metoda ta polega na powolnym chłodzeniu austenityzowanej stali nadeutektoidalnej do temperatury  $A_{r1}$ , na skutek czego na granicy ziaren wydziela się siatka cementytu wtórnego  $Fe_3C_{II}$ . W badaniach dysponowano stalami niskowęglowymi I, II oraz 15G2ANb. Konieczne było zatem nawęglenie próbek w przyjętej temperaturze austenityzowania i doprowadzenie do wydzielenia cementytu wtórnego na granicach pierwotnego ziarna austenitu. Próbki zostały nawęglone w temperaturach: 960°C (stal I), 920°C (stal II), 870°C (stal 15G2ANb), przez okres 5 h, a następnie chłodzone z piecem z prędkością 0.05°C/s.

Zastosowane warunki nawęglania pozwoliły na uzyskanie w stali modelowej I, struktury nadeutektoidalnej i w konsekwencji pomiaru dokonano na siatce cementytu drugorzędowego  $Fe_3C_{II}$ . Przy powierzchni próbek ze stali II oraz stali 15G2ANb, otrzymano strukturę eutektoidalną i w związku z tym do pomiarów użyto siatkę ferrytu, w strefie warstwy nawęglonej o strukturze ferrytyczno-perlitycznej.

Pomiary pierwotnego ziarna austenitu, tożsamego z oczkami siatki ferrytu lub cementytu, wykonano metodą siecznych, na kopiach mikrostruktur. Zastosowano 10 pól widzenia o powiększeniu 400x, rzucając na każde pole po 40 siecznych.

### 6.1.2. Segregacja węgla przed frontem przemiany $\gamma$ - $\alpha$

Segregację węgla w ziarnach austenitu przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  badano na zglądach poprzecznych prętów  $\varnothing 6$  ze stali modelowej II, nawęglanych, przy temperaturze 960°C, przez okres 5 godzin, w ośrodku o potencjale węglowym 1.2%C. Obróbkę cieplną próbek nawęglonych przedstawiono w rozdziale 6.1.4. Badano rozkład stężenia węgla w martenzycie strefy ferrytyczno-martenzytycznej, w okolicy rosnących ziaren ferrytu. Zawartość węgla w martenzycie odpowiadała zawartości tego pierwiastka w austenicie, w określonym stadium przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ . Wysokotemperaturowy stan procesów dyfuzyjnych w austenicie zatrzymano poprzez hartowanie. Biorąc pod uwagę problemy analityczne określenia lokalnej zawartości węgla na poziomie 0.01%C,

do opisu segregacji posłużono się pośrednią metodą pomiaru nanotwardości. Przyjmując za Bainem [91] proporcjonalność twardości martenzytu do zawartości węgla uznano, że rozkład nanotwardości powinien dobrze reprezentować rzeczywistą segregację węgla przed frontem przemiany i stanowić odniesienie dla wyników symulacji numerycznej. Pomiary przeprowadzono na urządzeniu Nano-Hardness Tester firmy CSM Instruments w Katedrze Inżynierii Powierzchni i Analiz Materiałów AGH, przy obciążeniu 10 mN. Pomiary wykonano dla obszarów o średniej zawartości 0.4% C.

### 6.1.3. Kinetyka przemiany $\gamma$ - $\alpha$

Kinetykę przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ , reprezentowaną zmianą ułamka objętości fazy ferrytycznej w czasie, badano na próbkach przygotowanych w sposób analogiczny do próbek z badań segregacji. Pomiar ułamka fazy ferrytycznej wykonywano metodą siatki na mikrofotografiach struktury obserwowanych przy powiększeniu 400x. Analizowany obszar wyznaczały założone średnie zawartości węgla: 0.2%C, 0.3%C, 0.4%C i 0.5%C, z odchyleniem  $\pm 0.05\%$ , a obliczony udział fazy ferrytycznej reprezentował przyjętą dla mierzonego obszaru średnią zawartość węgla. Na obszar ten rzucono statystycznie 918 węzłów siatki. Zastosowana procedura pozwalała na pomiary ilościowe w obszarze  $200 \times 650 \mu\text{m}$ , z dokładnością dla  $0.2\%C \pm 0.05\%C$  i taka wartość odchylenia standardowego została uwzględniona dla wszystkich przypadków zawartości węgla.

### 6.1.4. Wzrost równoosiowy ferrytu

Badania doświadczalne równoosiowego wzrostu ziaren ferrytu prowadzono na próbkach stali modelowych I i II, stali 15G2ANb oraz stali St3S (tablica I). Wzrost równoosiowy ferrytu badano również na próbkach nawęglonych.

Weryfikacje symulacji równoosiowego wzrostu ziaren ferrytu w badanych stalach modelowych I i II oparto na rzeczywistych parametrach przemiany - wartościach temperatur  $A_{r3}$  i  $A_{r1}$  oraz okresu inkubacyjnego  $\tau_s$ , dla różnych prędkości chłodzenia. Parametry te określono metodą dylatometryczną na dylatometrze Adamel DT1000, w Katedrze Metaloznawstwa i Metalurgii Proszków AGH. Do weryfikacji symulacji przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  w stali 15G2ANb zastosowano natomiast parametry przemiany wyznaczone w oparciu o wykres  $CTP_c$  uzyskany z kart materiałowych stali [93] i przedstawiony na Rys.A1 (Aneks I).

W przypadku stali I, II i 15G2ANb dysponowano również układami równowagi, które pozwoliły na wyznaczenie wartości stężeń:  $c_\alpha$ ,  $c_{\gamma\alpha}$ ,  $c_{\gamma\beta}$ , w zależności od temperatury. Układy równowagi przedstawiono na Rys.A2.

W modelu numerycznym przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla stali St3S wykorzystano wykres CTPc (Rys.A3). W oparciu o ten wykres dokonano porównania rzeczywistych temperatur początku i końca przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  z wartościami obliczeniowymi. Funkcje termodynamiczne opisujące układ równowagi fazowej, zebrane w tabelicy X, użyto jako dane wejściowe do modelu numerycznego.

Wielkości ziaren ferrytu ziarnistego (dalej nazywanych ziarnami ferrytu) mierzono metodą siecznych, dla 10 pól widzenia, na które rzucono po 40 siecznych. Strukturę obserwowano przy powiększeniu 400x.

W przypadku próbek uprzednio nawęglonych analizowany obszar wyznaczały, podobnie jak w badaniu segregacji węgla, założone średnie zawartości węgla: 0.2%C, 0.3%C, 0.4%C i 0.5%C, w przedziale  $\pm 0.05\%$ . Średnie zawartości węgla na przekroju warstwy nawęglonej wyznaczono w oparciu o wykres zmian stężenia węgla z odległością, przedstawiony na Rys.A4, a otrzymany z modelu numerycznego [94]. Przyjęto, że zmierzona średnica ziaren ferrytu będzie reprezentowała przyjętą dla mierzonego obszaru średnią zawartość węgla. Sposób przygotowania próbek był następujący: austenitzowanie przy temperaturze 960°C przez okres 10 minut, chłodzenie z prędkością 0.05°C/s przerywane hartowaniem w wodzie po osiągnięciu przez próbki temperatur: 800°C, 780°C, 760°C i 740°C, a w przypadku temperatury 780°C hartowanie kolejnych próbek po upływie: 1000 oraz 2000 sekund. Ten ostatni zabieg nie był czystym przypadkiem wyżarzania izotermicznego. Próbki chłodzono z prędkością 0.05°C/s z temperatury 960°C i przemiana  $\gamma$ - $\alpha$  rozpoczynała się przy chłodzeniu ciągłym, a kontynuowana była w sposób izotermiczny. Zostało tu uwzględnione w interpretacji wyników badań. Otrzymano w ten sposób próbki o strukturze zmieniającej się na przekroju - od struktury martenzytycznej przy powierzchni bocznej, do struktur ferrytyczno-martenzytycznych w głębi próbek.

#### **6.1.5. Wzrost kierunkowy ferrytu**

Symulacje wzrostu kierunkowego płytek ferrytu Widmanstättena weryfikowano na próbkach stali C56D (tablica I).

Przemiana austenitu w ferryt Widmanstättena zachodzi w ściśle określonych warunkach, które opisano w rozdziale 2.3. Kierując się tymi danymi przeprowadzono austenitzowanie próbek w temperaturach 1000, 1100 i 1200°C, chłodząc je następnie z prędkością 4.0°C/s. Dysponowano również próbką stali po zabiegu normalizowania przy temperaturze 820°C. Długość  $x$  i grubość  $y$  płytek ferrytu Widmanstättena mierzono na mikrofotografiach, a wyniki opracowano statystycznie. Obserwacje mikroskopowe struktur próbek wykonano na mikroskopach metalograficznych AXIO Zeiss oraz Leica.

## 6.2. Wyniki badań doświadczalnych

### 6.2.1. Doświadczalne wyznaczenie parametrów przemiany $\gamma-\alpha$ w stalach modelowych

Na podstawie krzywej dylatometrycznej z badań wstępnych stali modelowej I, przeprowadzonych w celu wyznaczenia punktów przełomowych stali (Rys.A5), określono temperaturę  $A_{c3}=910^{\circ}\text{C}$ . Zgodnie z zasadami doboru temperatury austenitzowania (30 do  $50^{\circ}\text{C}$  powyżej  $A_{c3}$ ), przyjęto jej wartość na równą  $960^{\circ}\text{C}$ . Kolejne próbki chłodzono od tej temperatury z różnymi prędkościami, z zakresu:  $0.05\div 150^{\circ}\text{C/s}$ . Na Rys.A6 przedstawiono krzywe dylatometryczne przemiany zachodzącej dla różnych prędkości chłodzenia  $v_{cr}$ . Dla poszczególnych prędkości chłodzenia określono temperatury  $Ar_{3p}$  i  $Ar_{3k}$ , odpowiadające początkowi i końcowi przemiany  $\gamma-\alpha$ .

Dla stali I wyznaczono ponadto doświadczalnie okres inkubacyjny przemiany  $\gamma-\alpha$  w warunkach izotermicznych. W tym celu próbkę ze stali I nagrzano do temperatury  $960^{\circ}\text{C}$ , następnie schłodzono z prędkością  $150^{\circ}\text{C/s}$  do temperatury  $800^{\circ}\text{C}$  i wytrzymano izotermicznie przez okres 4 godzin. Bardzo długi czas wytrzymania izotermicznego wynikał z faktu, iż nie dysponowano wykresem CTP dla tej stali i w tych warunkach można było zarejestrować zarówno długie, jak i krótkie okresy inkubacyjne. Otrzymałą krzywą zmian wydłużenia próbki z czasem przedstawiono na Rys.A7. Okres inkubacyjny przemiany, wyznaczony jako czas odpowiadający punktowi przegięcia na krzywej, wyniósł 7 sekund.

Temperaturę  $A_{c3}$  dla stali II, równą  $920^{\circ}\text{C}$ , przyjęto w oparciu o wykres CTPc stali zawierającej 0.18%C i 1.5 %Mn [95]. Próbki chłodzono z tej temperatury z prędkościami z zakresu  $0.05\div 5.0^{\circ}\text{C/s}$ . W wyniku interpretacji krzywych dylatometrycznych, przedstawionych na Rys.A8, określono temperatury  $Ar_{3p}$  i  $Ar_{3k}$  oraz wartości okresów inkubacyjnych  $\tau_s$  dla poszczególnych prędkości chłodzenia.

Okres inkubacyjny przemiany izotermicznej  $\gamma-\alpha$  dla stali II określono dylatometrycznie na próbce nagrzanej do temperatury  $920^{\circ}\text{C}$ , następnie schłodzonej z prędkością  $150^{\circ}\text{C/s}$  do temperatury  $750^{\circ}\text{C}$  i wytrzymanej izotermicznie przez okres 2 godzin. Takie same badania wykonano dla przemiany izotermicznej w temperaturze  $800^{\circ}\text{C}$ . Otrzymane krzywe zmian wydłużenia próbki z czasem przedstawiono na Rys.A9.

Temperaturę  $Ar_3$  dla stali 15G2ANb, równą  $870^{\circ}\text{C}$ , przyjęto w oparciu o wykres CTPc dla stali o zawartości 0.15%C i 1.22%Mn. Wyznaczono temperatury  $Ar_{3p}$  i  $Ar_{3k}$  oraz wartości okresów inkubacyjnych  $\tau_s$  dla prędkości chłodzenia z zakresu  $0.05\div 5.0^{\circ}\text{C/s}$ .

Wykres CTPc przedstawiony na (Rys.A3) posłużył do wyznaczenia temperatury  $Ar_3$  ( $Ar_3=850^\circ\text{C}$ ) oraz temperatury  $Ar_{3p}$  i  $Ar_{3k}$  dla stali St3S.

Określone doświadczalnie wartości parametrów przemiany  $\gamma-\alpha$  przy chłodzeniu ciągłym oraz wartości okresu inkubacyjnego przemian izotermicznych dla stali I, II, St3S a także wartości parametrów przemiany wyznaczone z wykresu CTPc dla stali 15G2ANb, zebrano w tablicy II.

**Tablica II Doświadczalne parametry przemiany  $\gamma-\alpha$  w badanych stalach**

<b>Parametry przemiany <math>\gamma-\alpha</math> stali modelowej I</b>						
Prędkość chłodzenia $v_{cr}$ [ $^\circ\text{C/s}$ ]	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
Temperatura $Ar_{3p}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	850±12	-	820±20	-	800±10	720±10
Temperatura $Ar_{3k}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	760±15	-	700±30	-	615±20	480±10
Wartości okresu inkubacyjnego przemiany $\gamma-\alpha$ dla stali modelowej I						
Temperatura przemiany [ $^\circ\text{C}$ ]	800					
Okres inkubacyjny $\tau_s$ [s]	7					
<b>Parametry przemiany <math>\gamma-\alpha</math> stali modelowej II</b>						
Prędkość chłodzenia $v_{cr}$ [ $^\circ\text{C/s}$ ]	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
Temperatura $Ar_{3p}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	845±10	830±5	-	800±10	-	-
Temperatura $Ar_{1k}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	750±10	740±5	-	720±20	-	-
Wartości okresu inkubacyjnego przemiany $\gamma-\alpha$ dla stali modelowej II						
Temperatura przemiany [ $^\circ\text{C}$ ]	800			750		
Okres inkubacyjny $\tau_s$ [s]	3			4		
<b>Parametry przemiany <math>\gamma-\alpha</math> stali 15G2ANb określone z wykresu CTPc</b>						
Prędkość chłodzenia $v_{cr}$ [ $^\circ\text{C/s}$ ]	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
Temperatura $Ar_{3p}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	780±10	-	775±10	760±10	-	-
Temperatura $Ar_{1k}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	660±10	-	650±10	630±10	-	-
<b>Parametry przemiany <math>\gamma-\alpha</math> stali St3S określone z wykresu CTPc</b>						
Prędkość chłodzenia $v_{cr}$ [ $^\circ\text{C/s}$ ]	<b>0.02</b>	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>0.2</b>	<b>0.5</b>	-
Temperatura $Ar_{3p}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	816±10	814±10	812±10	806±10	800±10	-
Temperatura $Ar_{1k}$ [ $^\circ\text{C}$ ]	780±10	775±10	765±10	762±10	755±10	-

### 6.2.2. Wyniki pomiaru wielkości ziaren austenitu

Wielkości pierwotnego ziarna austenitu, niezbędne do wyznaczenia ułamka ferrytu  $f_f$  oraz ułamka objętości ferrytu  $x_f$ , określono zaprezentowaną wcześniej metodą siatki cementytu lub metodą siatki ferrytu [29]. Mikrostruktury badanych stali otrzymane po przeprowadzeniu nawęglania przedstawiono na Rys.A20-Rys.A22. Wyniki pomiaru wielkości pierwotnego ziarna austenitu zebrano w tablicy III. Przy przyjętych temperaturach austenitzowania otrzymano struktury austeniczne o wielkości ziaren od 20 do 72  $\mu\text{m}$ . W eksperymencie zastosowano różne temperatury austenitzowania, co było podyktowane zasadami doboru właściwej temperatury austenitzowania dla danej stali. Zgodnie z teorią przemiany austenicznej przy wyższych temperaturach austenitzowania stwierdzono rozrost ziaren austenitu. Efekt rozrostu był kontrolowany wydzieleniami węgliko-azotków, co najsilniej przejawiało się w stali 15G2ANb.

**Tablica III Zestawienie wielkości pierwotnego ziarna austenitu**

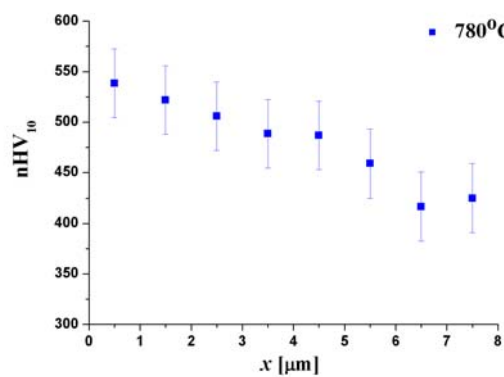
Stal	Temperatura austenitzowania [ $^{\circ}\text{C}$ ]	Wielkość pierwotnego ziarna austenitu $d\gamma$ [ $\mu\text{m}$ ]
I	960	72.0 $\pm$ 8.8
II	920	46.0 $\pm$ 10.0
15G2ANb	870	20.1 $\pm$ 3.2

### 6.2.3. Wyniki badań segregacji węgla przed frontem przemiany $\gamma$ - $\alpha$

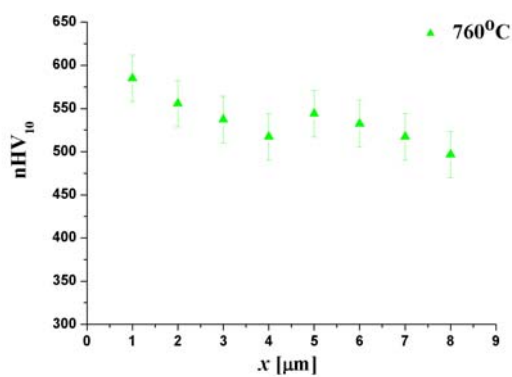
Ocenę segregacji węgla przed frontem przemiany przeprowadzono na podstawie pomiarów nanotwardości w tym obszarze. Wyniki pomiarów nanotwardości martenzytu przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ , na próbkach stali o zawartości 0.4%C, hartowanych po chłodzeniu z prędkością 0.05 $^{\circ}\text{C/s}$  do temperatur: 780 $^{\circ}\text{C}$ , 760 $^{\circ}\text{C}$  i 740 $^{\circ}\text{C}$ , przedstawiono w tablicy IV i na Rys.30.

Tablica IV Wyniki pomiaru nanotwardości martenzytu przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$

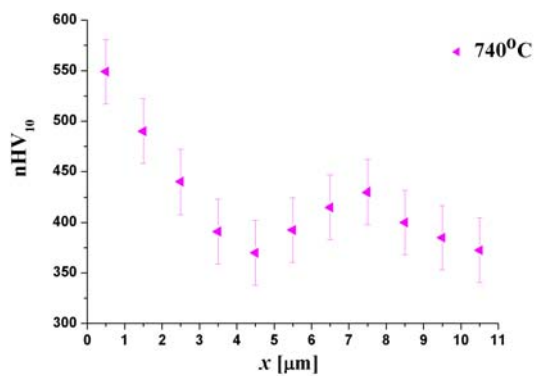
Odległość od frontu przemiany $x$ [ $\mu\text{m}$ ]	Temperatura przemiany $T$ [ $^{\circ}\text{C}$ ]		
	780	760	740
	Nanotwardość $\text{nHV}_{10}$		
0	538 $\pm$ 34	585 $\pm$ 27	549 $\pm$ 32
1	522	556	490
2	506	537	440
3	488	517	391
4	487	544	370
5	459	532	393
6	417	517	415
7	425	496	430
8	-	-	385
9	-	-	373



a)



b)



c)

Rys.30. Rozkład nanotwardości martenzytu przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ : a) 780 $^{\circ}\text{C}$ , b) 760 $^{\circ}\text{C}$ , c) 740 $^{\circ}\text{C}$ .

Uzyskane wyniki wskazują na lokalny wzrost nanotwardości w okolicy powierzchni międzyfazowej ferryt-martenzyt (austenit przed przesyleniem), tym silniejszy, im niższa była temperatura przemiany. Świadczy to o segregacji węgla w austenicie przed frontem przemiany  $\gamma-\alpha$ . Na wykresach doświadczalnych w odniesieniu do linii trendu zaznacza się systematyczny, lokalny wzrost i lokalny spadek nanotwardości w strefie, w której twardość powinna być już stała. Wzrost można interpretować segregacją węgla przed frontem przemiany, poniżej powierzchni zglądu, a lokalne spadki obecnością austenitu szczątkowego, co stanowi dodatkowy dowód segregacji węgla.

#### 6.2.4. Wyniki badań kinetyki przemiany $\gamma-\alpha$

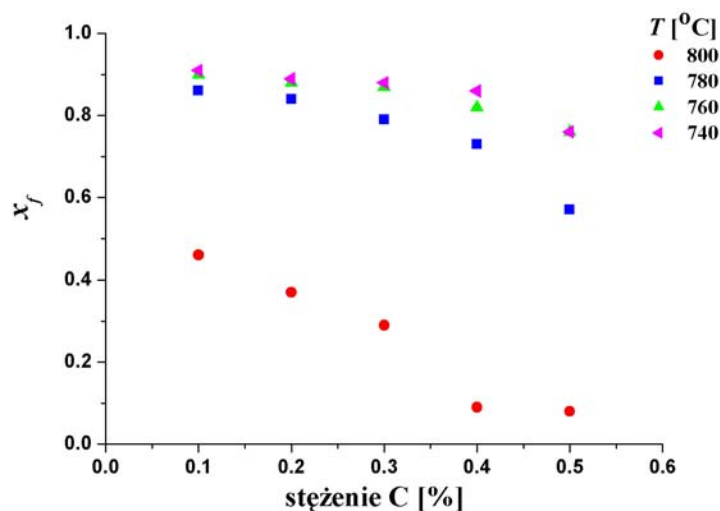
Badania kinetyki przemiany  $\gamma-\alpha$  wykonano zgodnie z metodyką przedstawioną w rozdziale 6.1.3. Doświadczalne wartości ułamka objętości ferrytu  $x_f$ , zdefiniowanego w rozdziale 5.5, zestawiono w tabelicy V oraz na Rys.31. Wykorzystano tu próbki nawęglone, stosowane uprzednio do pomiarów wielkości ziaren ferrytu. Postęp przemiany  $\gamma-\alpha$  zależny był od zawartości węgla w badanym miejscu przekroju próbki, temperatury i czasu trwania przemiany. W warunkach chłodzenia ciągłego z prędkością  $0.05^\circ\text{C/s}$ , przy temperaturze  $740^\circ\text{C}$  uzyskano w stali zawierającej 0.2-0.3%C, postęp przemiany szacowany na 0.87-0.90. W stalach zawierających 0.4-0.5%C udział ferrytu wynosił w tych warunkach do 0.76-0.82. Zróżnicowanie ułamka objętości ferrytu  $x_f$  dla temperatur  $760^\circ\text{C}$  i  $780^\circ\text{C}$  było nieznaczne przy niskich stężeniach węgla, zwiększało się zaś ze wzrostem zawartości węgla. Udział ferrytu wzrastał ze wzrostem czasu wytrzymania próbki przy temperaturze  $780^\circ\text{C}$ , przy czym zaawansowanie przemiany  $\gamma-\alpha$  przed osiągnięciem tej temperatury określono na 0.73-0.87.

**Tablica V Wyniki pomiarów ułamka objętości ferrytu  $x_f$  w próbkach nawęglanych**

	Temperatura [ $^\circ\text{C}$ ]			
	800	780	760	740
Stężenie węgla	Ułamek objętości ferrytu $x_f$			
0.2 %C	0.37	0.85	0.84	0.88
0.3 %C	0.29	0.84	0.79	0.87
0.4 %C	0.09	0.79	0.73	0.82
0.5 %C	0.08	0.73	0.57	0.76

	Czas trwania przemiany [s] przy temperaturze 780°C		
	0	1000	2000
Stężenie węgla	Ułamek objętości ferrytu $x_f$ [ $\mu\text{m}$ ]		
0.2 %C	0.85	0.89	0.91
0.3 %C	0.84	0.88	0.89
0.4 %C	0.79	0.86	0.87
0.5 %C	0.73	0.76	0.79

Wyniki pomiarów zestawione na Rys.31 wskazują na niewielkie zróżnicowanie postępu przemiany w warunkach chłodzenia ciągłego dla temperatur 740-800°C, przy niskich zawartościach węgla w stali. Dla całego badanego zakresu stężeń węgla w stali, postęp przemiany przy 800°C jest zdecydowanie mniejszy, niż ma to miejsce w niższych temperaturach.



Rys.31. Zmiana wielkości ułamka ferrytu  $x_f$  ze zmianą stężenia węgla w stali dla różnych temperatur przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ .

### 6.2.5. Wyniki pomiaru wielkości ziarna ferrytu ziarnistego

Na Rys.A10-Rys.A13 (Aneks II) przedstawiono przykładowe mikrostruktury stali I po chłodzeniu z temperatury 960°C, z prędkościami: 0.05, 1.0, 10.0 i 150°C/s. Obserwacje mikrostruktury stali wskazują, że wielkość ziaren nie jest jednorodna. Lokalnie występują bardzo małe lub bardzo duże ziarna. We wszystkich przypadkach otrzymano strukturę ferrytyczną, o zróżnicowanej wielkości ziaren, z cewntytem trzeciorzędowym  $\text{Fe}_3\text{C}_{\text{III}}$ .

Mikrostruktury stali II otrzymane po chłodzeniu z temperatury 920°C z prędkościami 0.05, 0.1, 5.0°C/s pokazano na Rys.A14-Rys.A16. Widoczna jest struktura ferrytyczno-perlityczna z dużymi koloniami perlitycznymi, w ułożeniu pasmowym.

Na Rys.A17-Rys.A19 zaprezentowano mikrostruktury stali 15G2ANb otrzymane po chłodzeniu z temperatury 870°C, z prędkościami: 0.05, 0.1, 5.0°C/s. Obserwowano mikrostrukturę ferrytyczno-perlityczną, z silną pasmowością strukturalną związaną ze strukturą pierwotną stali (segregacja fosforu). Wyniki pomiarów wielkości ziaren ferrytu zestawiono w tablicy VI.

**Tablica VI Zestawienie doświadczalnych wielkości ziaren ferrytu**

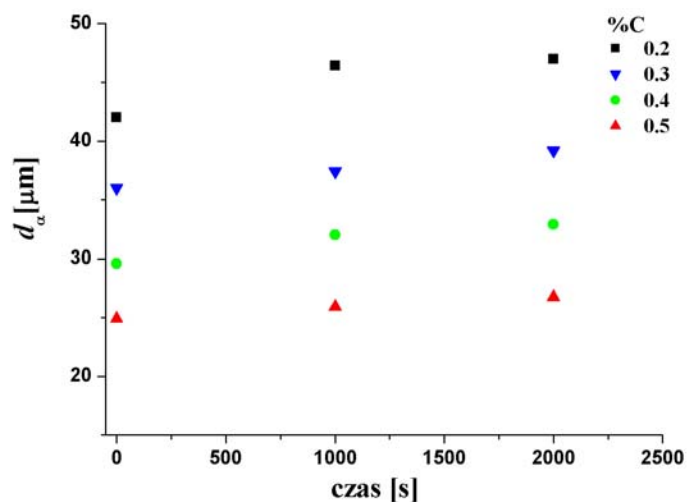
<b>Stal I</b>						
Prędkość chłodzenia $v_{cr}$ [°C/s]	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
Wielkość ziarna ferrytu $d_{\alpha}$ [μm]	45.2±6.2	-	32.0±2.3	-	11.1±2.4	8.0±1.0
<b>Stal II</b>						
Prędkość chłodzenia $v_{cr}$ [°C/s]	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
Wielkość ziarna ferrytu $d_{\alpha}$ [μm]	36.1±5.1	28.2±4.1	-	10.0±2.0	-	-
<b>Stal 15G2ANb</b>						
Prędkość chłodzenia $v_{cr}$ [°C/s]	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
Wielkość ziarna ferrytu $d_{\alpha}$ [μm]	9.1±1.1	-	5.0±0.3	4.2±0.2	-	-

Mikrostruktury próbek stali II poddanej nawęglaniu, a następnie obróbce cieplnej zgodnie z przyjętymi warunkami (rozdział 6.1.4), zaprezentowano na Rys.A23-Rys.A28. Ferryt i pozostające z nim w równowadze zahartowane obszary austenitu są równomiernie rozmieszczone w objętości próbek. Ziarna ferrytu tworzą skupiska, w których mają postać równoosiową i charakteryzują się silnie zróżnicowaną wielkością. Wyniki pomiaru wielkości ziaren zamieszczono w tablicy VII. Obserwuje się słaby wzrost ziaren ferrytu wraz ze zwiększeniem stężenia węgla w stali.

Wpływ czasu wyżarzania badanych próbek przy temperaturze 780°C na wielkość ziaren ferrytu pokazano na Rys.32. Dla poszczególnych obszarów, charakteryzujących się różnym stężeniem węgla, wielkość ziaren rosła wykładniczo. Największe ziarna obserwowano w obszarach nawęglonych do 0.2%C, najmniejsze w obszarach o stężeniu 0.5%C.

Tablica VII Wyniki pomiarów wielkości ziarna ferrytu w próbkach nawęglanych, chłodzonych z prędkością 0.05 i przesyconych w wodzie

	Temperatura [°C]			
	800	780	760	740
Stężenie węgla	Wielkość ziarna ferrytu $d_\alpha$ [ $\mu\text{m}$ ]			
0.2 %C	42.3±9.2	42.0±14.8	47.7±12.5	43.6±11.3
0.3 %C	36.0±10.8	36.0±11.3	43.9±8.4	36.5±10.8
0.4 %C	28.9±7.4	29.6±9.9	32.5±7.9	33.7±9.8
0.5 %C	24.9±5.7	24.9±5.5	24.9±6.3	26.4±7.3
	Czas wytrzymania izotermicznego [s] przy temperaturze 780°C			
	0	1000	2000	
Stężenie węgla	Wielkość ziarna ferrytu $d_\alpha$ [ $\mu\text{m}$ ]			
0.2 %C	42.0±14.8	46.4±14.1	47.0±10.7	
0.3 %C	36.0±11.3	37.4±10.4	39.2±9.4	
0.4 %C	29.6±9.9	32.0±8.2	32.9±7.4	
0.5 %C	24.9±5.5	25.9±7.3	26.74±6.6	



Rys.32. Wpływ czasu wytrzymania, przy temperaturze 780°C, na średnicę ziaren ferrytu  $d_\alpha$ .

#### 6.2.6. Wyniki pomiaru wielkości płytek ferrytu Widmanstättena

Na Rys.A29 przedstawiono mikrostrukturę stali C56D w stanie normalizowanym, a na Rys.A30-Rys.A32 - po chłodzeniu warunkującym powstanie struktury Widmanstättena. W stanie

normalizowanym uzyskano strukturę ferrytyczno-perlityczną. Potwierdza to poprawność przyjętych warunków normalizowania stali. Zastosowanie wyższych temperatur austenitowania od temperatury normalizowania prowadziło do wzrostu ziaren austenitu, a w konsekwencji szybkiego chłodzenia, do utworzenia struktury Widmanstättena.

W mikrostrukturze badanych próbek można było zidentyfikować strukturę ferrytyczno-perlityczną, z ferrytem tworzącym siatkę na granicach pierwotnego ziarna austenitu oraz z ferrytem płytkowym. Rozwój struktury Widmanstättena, wyrażony ilością płytek w mikrostrukturze i ich wielkością, uzależniony był od temperatury austenitowania. Przy temperaturze 1000°C obserwowano pojedyncze płytki ferrytu, lub pozostające w małych skupiskach. Płytki rozpoczynały wzrost na pierwotnych granicach ziaren austenitu, a równoległe z nimi na tych samych granicach tworzyła się siatka ferrytu. W poszczególnych ziarnach obserwowano jedną orientację krystalograficzną płytek, a same płytki wypełniały kilka procent powierzchni ziaren kolonii perlitycznych, otoczonych siatką ferrytu.

W próbkach austenitowanych przy temperaturze 1100°C nasiliła się struktura Widmanstättena. Obserwowano pojedyncze płytki oraz drobne i grube skupiska płytek. W niektórych ziarnach widoczne było charakterystyczne ułożenie skupisk płytek pod kątem 60 i 120°C.

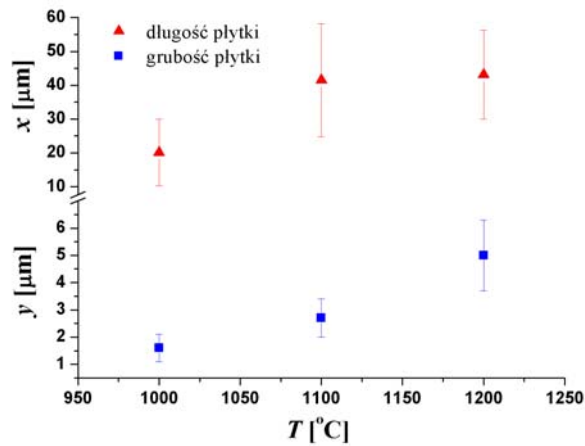
Podwyższenie temperatury austenitowania do 1200°C powodowało zwiększenie długości i grubości płytek oraz zagęszczenie skupisk. Zachowana zostaje siatka ferrytu po granicach pierwotnego ziarna austenitu. W strukturze pojawiają się pojedyncze płytki i ich skupiska, niezwiązane z siatką ferrytu, co miało miejsce przy niższych temperaturach.

Długość oraz grubość płytek mierzono na mikrofotografiach, a opracowane statystycznie wyniki pomiarów umieszczono w tablicy VIII oraz zaprezentowano na Rys.33.

**Tablica VIII Zestawienie wielkości płytek ferrytu Widmanstättena**

<b>Temperatura [°C]</b>	<b>1000</b>	<b>1100</b>	<b>1200</b>
<b>Długość płytki x [µm]</b>	20.1±9.9	41.5±16.7	43.1±13.1
<b>Grubość płytki y [µm]</b>	1.6±0.5	2.7±0.7	5.0±1.3

Wpływ temperatury austenitowania na długość i grubość płytek ma charakter wykładniczy. Zaznacza się silne zróżnicowanie długości płytek. Odchylenie standardowe jest bliskie 40% badanej wielkości. Relatywnie mniejsze jest zróżnicowanie grubości płytek. Odchylenie standardowe tej wielkości wynosi około 27%.



Rys.33. Wpływ temperatury austenitizowania na wymiary  $x, y$  płytek ferrytu.

### 6.3. Symulacje numeryczne

W rozdziałach 5.5.1 i 5.5.2 zdefiniowano warunki początkowe i brzegowe równań modelu matematycznego przemiany  $\gamma-\alpha$ . Powyższe warunki wyrażono funkcjami:  $c_\alpha, c_{\gamma\alpha}, c_{\gamma\beta} = f(T)$ , opartymi na układach równowagi Fe-Mn-C (Rys.A2). Funkcje zastosowane w modelu numerycznym wzrostu równoosiowego ferrytu zebrano w tablicy IX. W modelu numerycznym wzrostu płytek Widmanstättena wykorzystano jedynie średnią zawartość węgla w stali C56D, zgodnie z tablicą I.

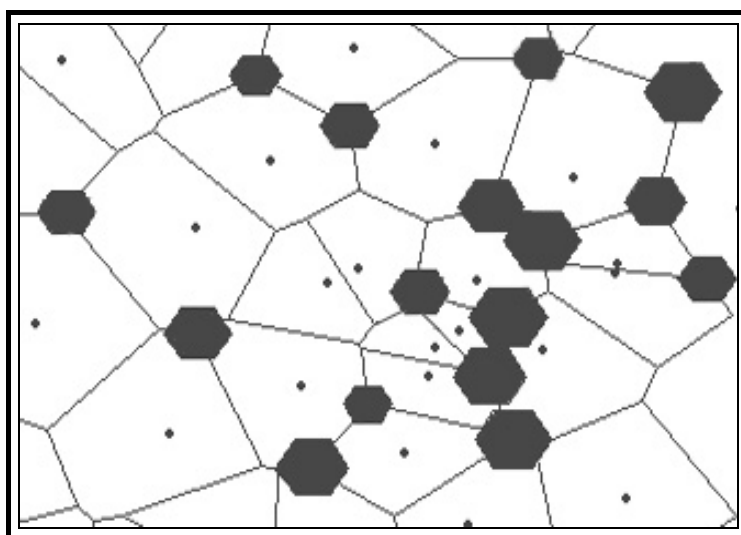
Tablica IX Równania opisujące parametry modelu

<b>Stal St3S</b>	$c_\alpha = 0.0755378 + 0.000294747 T - 4.115975866 \times 10^{-7} T^2$
	$c_{\gamma\alpha} = c_0 - 0.00292826 \Delta T_s + 1.7627787 \times 10^{-5} \Delta T_s^2$ , gdzie: $\Delta T_s = T - A_{r3}$
	$c_{\gamma\beta} = -1.05383 + 0.002485 T$
<b>Stal I</b>	$c_\alpha = -(T-785)/120000$
	$c_{\gamma\alpha} = -(T-845)/210$
	$c_{\gamma\beta} = (T+80.12)/880$
<b>Stal II</b>	$c_\alpha = -(T-795)/120000$
	$c_{\gamma\alpha} = -(T-850)/210$
	$c_{\gamma\beta} = (T+80.12)/880$
<b>Stal 15G2ANb</b>	$c_\alpha = -(T-805)/125000$
	$c_{\gamma\alpha} = -(T-860)/240$
	$c_{\gamma\beta} = (T+80.12)/880$

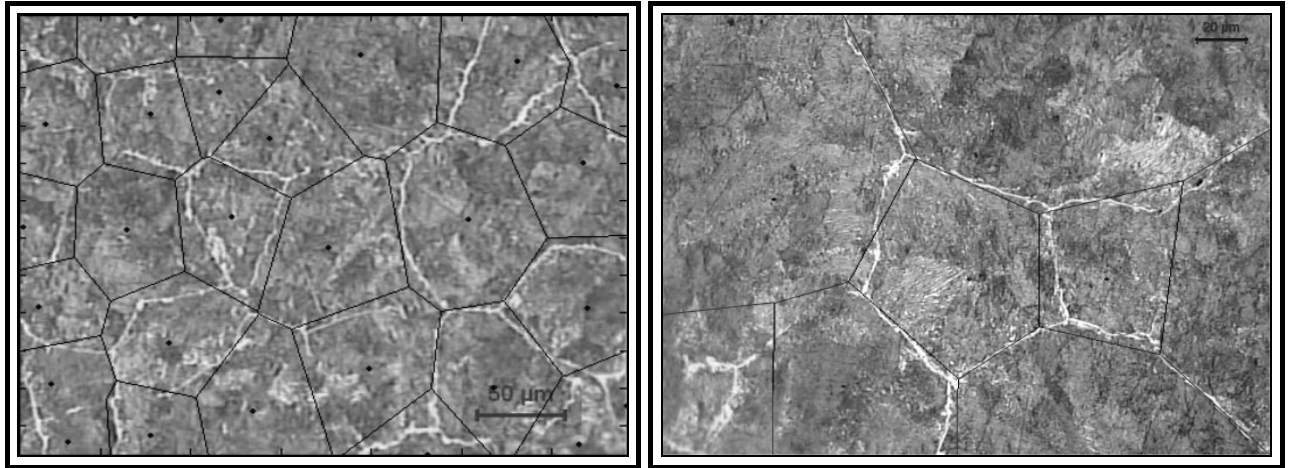
### 6.3.1. Model numeryczny struktury austenitu

Otrzymane w wyniku obliczeń numerycznych wielkości ziaren ferrytu należało odnieść do wielkości ziarna austenitu, w którym dane ziarno rośnie. W tym celu powstał numeryczny model kształtu ziarna austenitu. W modelu tym strukturę austenitu wygenerowano przy wykorzystaniu algorytmu Voronoi, który opisano w rozdziale 3.6. Dane wprowadzane do algorytmu, w tym wielkość obszaru, ilość ziaren, oraz miejsca centralne ziaren, pochodziły z analizy mikrofotografii pierwotnego ziarna austenitu. Na Rys.35-Rys.38 przedstawiono wygenerowaną dla czterech gatunków stali strukturę austenitu, nałożoną na mikrofotografie. Widoczne jest znaczne podobieństwo pomiędzy komórkami Voronoi i rzeczywistymi ziarnami austenitu. Komórki mają prawie taką samą topologię jak ziarna, a więc liczbę ścian, wielkość kątów, średnią wielkość.

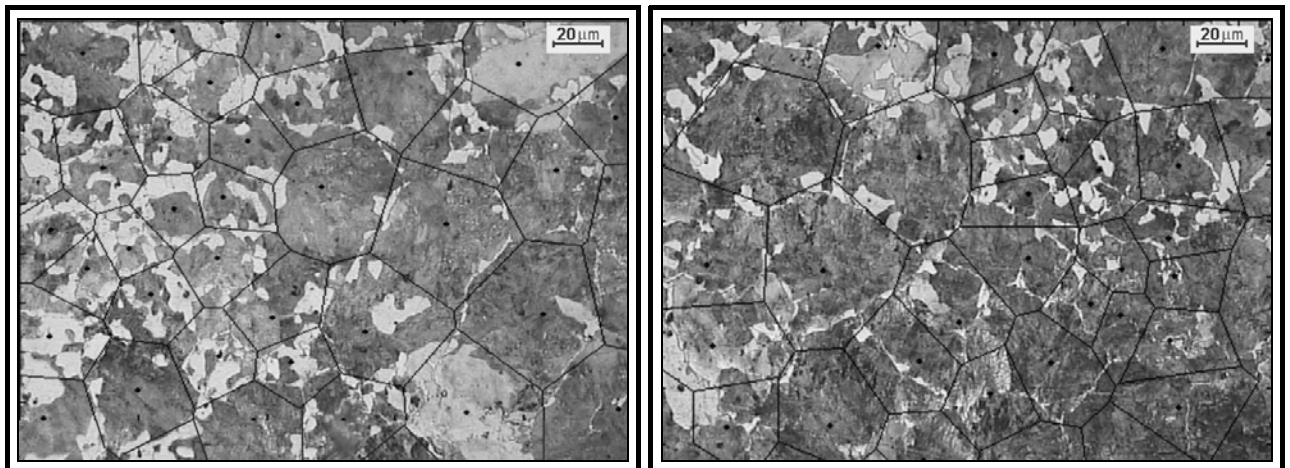
Z naroży wygenerowanych ziaren austenitu symulowano wzrost ziaren ferrytu z prędkością wynikającą z modelu numerycznego przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla sześciokątnych ziaren ferrytu. Do obliczenia liczby zarodków ferrytu zastosowano wzór (66), przy czym wprowadzono wartość  $t_1$  równą  $300s$ . Miejsca zarodkowania określono losowo, rozkładem Poissona. W rezultacie otrzymano, obok graficznego przedstawienia struktury (Rys.34), współrzędne określające położenie naroży i krawędzi poszczególnych ziaren ferrytu i austenitu.



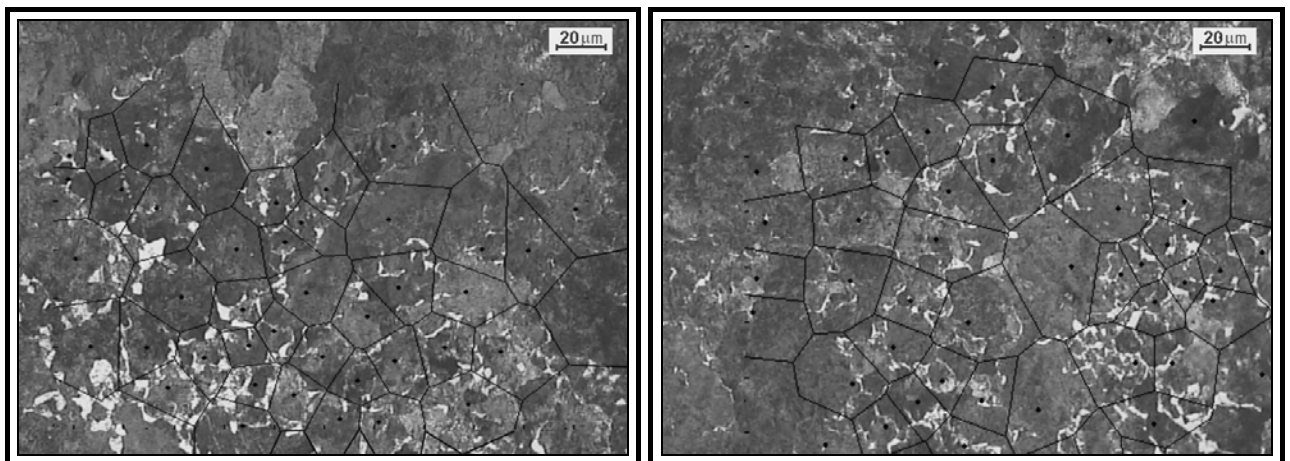
Rys.34. Symulacja numeryczna wzrostu ferrytu ziarnistego w narożach ziaren austenitu wygenerowanego przy pomocy algorytmu Voronoi.



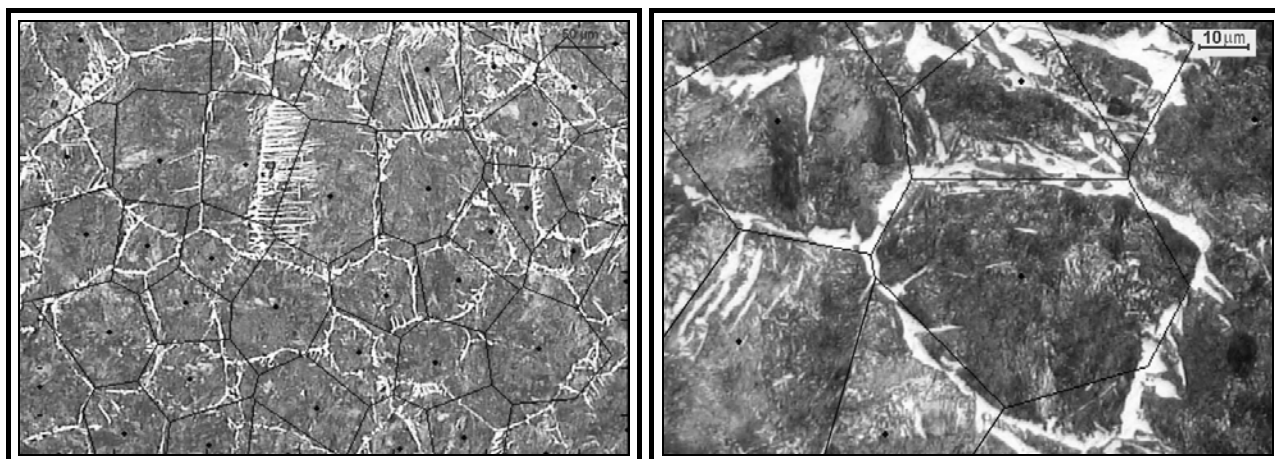
Rys.35. Wygenerowane struktury Voronoi nałożone na mikrografie pierwotnego ziarna austenitu stali I.



Rys.36. Wygenerowane struktury Voronoi nałożone na mikrografie pierwotnego ziarna austenitu stali II.



Rys.37. Wygenerowane struktury Voronoi nałożone na mikrografie pierwotnego ziarna austenitu stali 15G2ANb.



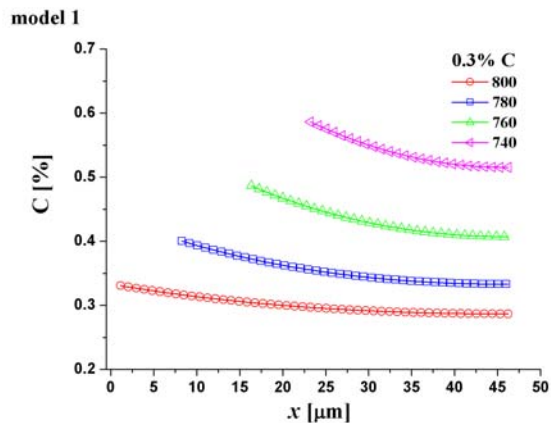
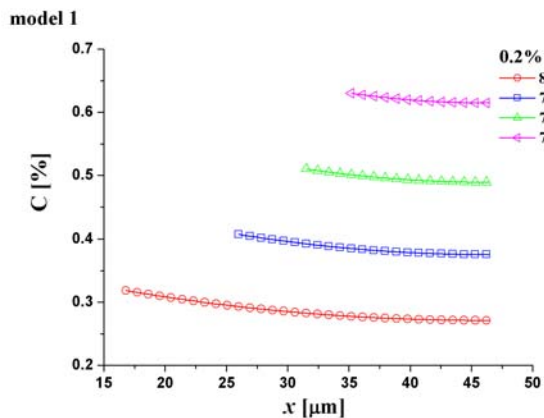
Rys.38. Wygenerowane struktury Voronoi nałożone na mikrografie pierwotnego ziarna austenitu stali C56D.

Przedstawione wyniki symulacji struktury pierwotnej austenitu stanowią mogą w połączeniu z modelem przemiany  $\gamma-\alpha$  cyfrową reprezentację materiału [96,97]. Ponadto pozwalają na określenie średniej wielkości ziarna austenitu, która to wielkość stanowi daną wejściową do modelu numerycznego przemiany ferrytycznej  $\gamma-\alpha$ .

### 6.3.2. Symulacja numeryczna segregacji węgla przed frontem przemiany $\gamma-\alpha$

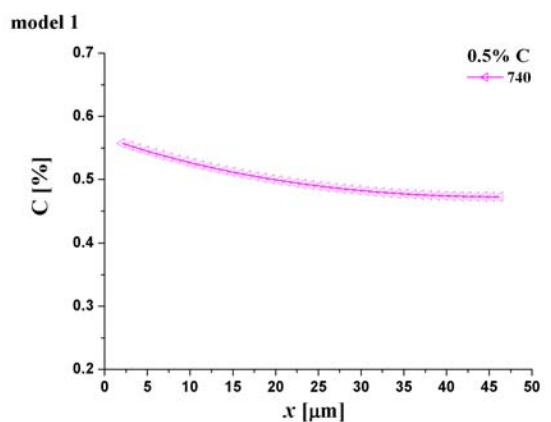
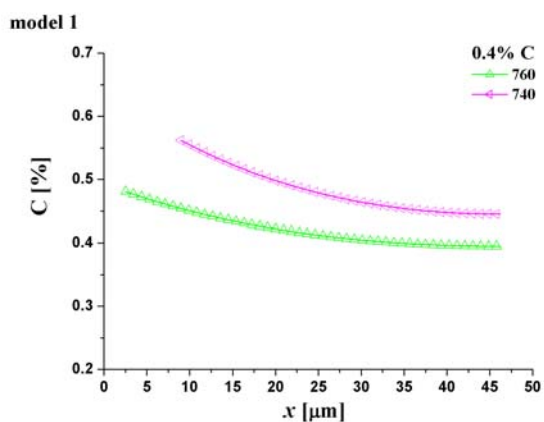
W czasie przemiany  $\gamma-\alpha$  następuje segregacja węgla i pierwiastków stopowych przed frontem przemiany. Symulacje numeryczne segregacji węgla wykonano modelem 1 (stosunek odcinków) oraz modelem 4 (sześciokąt w sześciokącie), dla stali o zawartości węgla od 0.2-0.5%C, przy chłodzeniu ciągłym z prędkością 0.05°C/s. Wyniki symulacji numerycznych zaprezentowane poniżej przedstawiają segregację węgla po zakończeniu przemiany  $\gamma-\alpha$ .

Na Rys.39 przedstawiono symulowaną segregację węgla przed frontem przemiany  $\gamma-\alpha$  w stalach o różnej zawartości węgla. Obliczenia wykonano według modelu 1. W zależności od składu stali zaprezentowano krzywe segregacji dla czterech, dwóch i jednej temperatury. Ograniczenie to wynikało z obniżenia temperatury  $A_{r3p}$  ze wzrostem zawartości węgla w stali poniżej założonych temperatur. Położenie krzywych zmian stężenia na wykresie jest wynikiem przesunięcia frontu przemiany  $\gamma-\alpha$  wzdłuż osi  $x$ . Obserwowano spiętrzenie węgla przed frontem przemiany zależne od składu stali i temperatury przemiany. Ogólnie, spiętrzenie było tym silniejsze, im niższa była temperatura przemiany i wyższa zawartość węgla w stali.



a)

b)

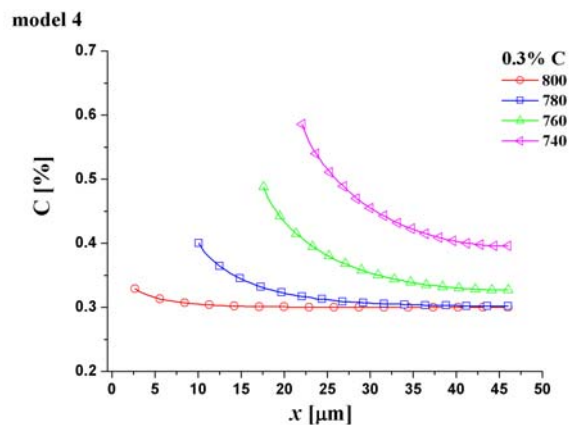
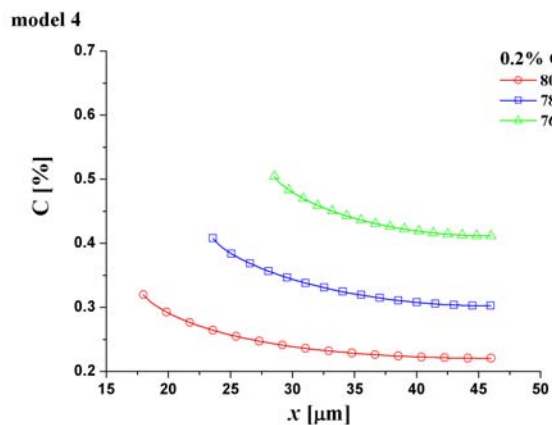


c)

d)

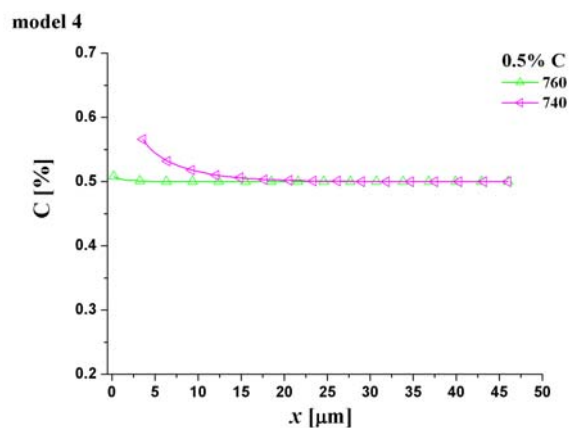
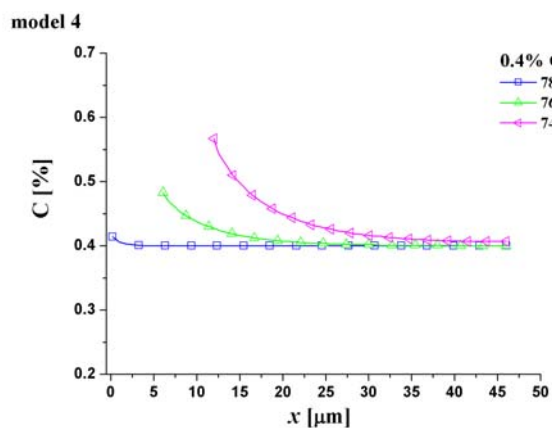
Rys.39. Segregacja węgla przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  w stali o zawartości: a) 0.2%C, b) 0.3%C, c) 0.4%C, d) 0.5%C, obliczona według modelu 1.

Wyniki symulacji numerycznej segregacji węgla przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla modelu 4 przedstawiono na Rys.40. W stali o średniej zawartości węgla 0.2%C zaznacza się dla poszczególnych temperatur silne zróżnicowanie zawartości węgla przed frontem przemiany. Wzrost stężenia węgla w stali powoduje zwiększenie gradientu stężenia węgla z temperaturą, przy czym w pewnej odległości od frontu przemiany krzywe zmian stężenia są dla temperatur 800°C i 780°C ze sobą zgodne. Podobieństwo opisu segregacji węgla dla różnych temperatur jest charakterystyczne dla stali o zawartości 0.4 i 0.5%C.



a)

b)



c)

d)

Rys.40. Segregacja węgla przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  w stali o zawartości: a) 0.2%C, b) 0.3%C, c) 0.4%C, d) 0.5%C, obliczona według modelu 4.

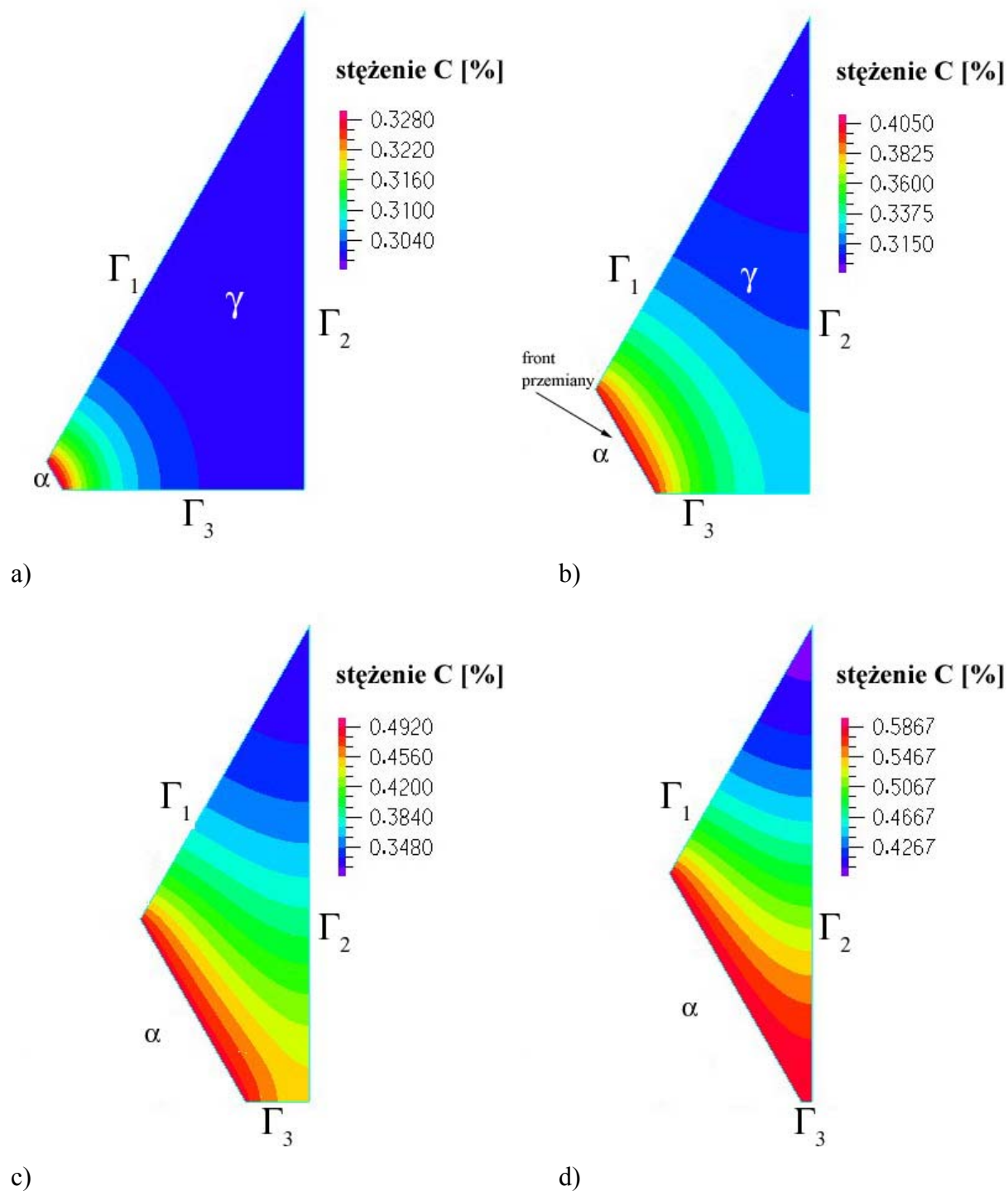
Przedstawiony powyżej jakościowy wpływ warunków przemiany na segregację potwierdzają obliczone wartości gradientów stężenia  $dc/dx$ , zaprezentowane w tabelicy X.

**Tablica X Zestawienie gradientów stężenia węgla  $dc/dx$  przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  pochodzących z modelu numerycznego**

	Temperatura [°C]			
	800	780	760	740
<b>Skład stali</b>	<b>Gradient stężenia <math>dc/dx</math> [mol/cm<sup>3</sup>]</b>			
<b>0.2 %C</b>				
<b>Model 1</b>	0.05	0.06	0.09	0.06
<b>Model 4</b>	0.78	0.82	1.04	-
<b>0.3 %C</b>				
<b>Model 1</b>	0.10	0.26	0.35	0.39
<b>Model 4</b>	0.28	0.80	1.13	1.53
<b>0.4 %C</b>				
<b>Model 1</b>	-	-	0.39	0.61
<b>Model 4</b>	-	0.19	0.52	1.31
<b>0.5 %C</b>				
<b>Model 1</b>	-	-	-	0.22
<b>Model 4</b>	-	-	0.19	0.61

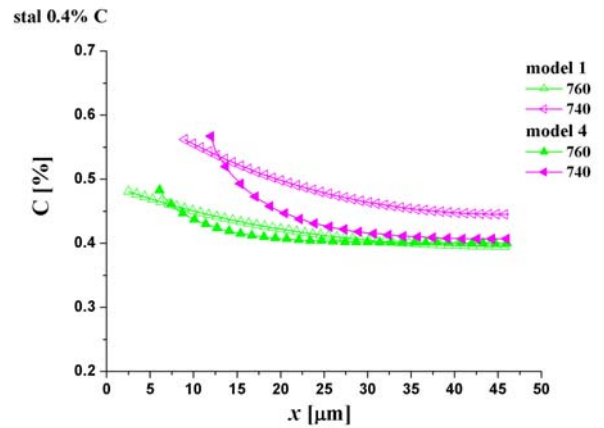
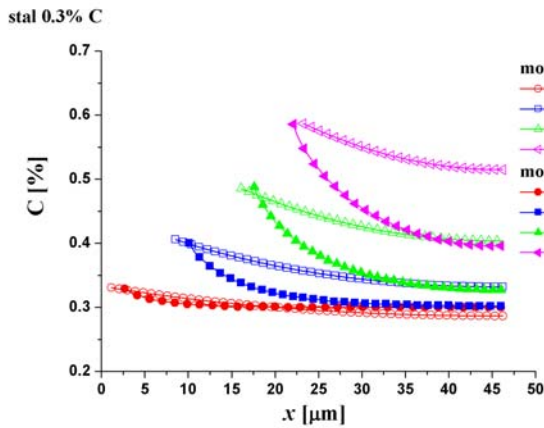
Na Rys.41 przedstawiono linie izokoncentracji węgla przed frontem przemiany obliczone według modelu 4. W modelu rozważano segregację węgla przy wzroście ziarna ferrytu w narożu sześciokąta. Obszar symulacji stanowi wycinek powierzchni sześciokąta foremnego, zdefiniowany na Rys.23a i Rys.25.

Symulacja pokazuje charakter segregacji węgla przed frontem przemiany. W pewnej odległości od frontu przemiany zaznacza się zakłócenie przebiegu linii izokoncentracji, co spowodowane jest założeniem zerowego strumienia dyfuzji węgla na granicy zewnętrznej obszaru rozwiązania  $\Gamma_2$  (por.5.3). Jest to granica wynikająca z symetrii układu i w pewnym etapie rozwiązania uwidacznia się wpływ spiętrzenia pochodzący od sąsiedniego ziarna ferrytu.



Rys.41. Linie izokoncentracji węgla przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy chłodzeniu ciągłym obliczone metodą elementów skończonych dla: a) 800°C, b) 780°C, c) 760°C, d) 740°C. Model 4 (sześciokąt w sześciokącie). Oznaczenia identyczne z Rys.25.

Porównanie wyników obliczeń segregacji węgla według modeli 1 i 4 dla zawartości 0.3%C oraz 0.4%C pokazano na Rys.42. Zgodne ze sobą wyniki dają oba modele dla stężenia 0.3%C i temperatury 800°C oraz stężenia 0.4%C i temperatury 760°C. We wszystkich innych przypadkach model 4 daje większy gradient stężenia węgla niż model 1.



a)

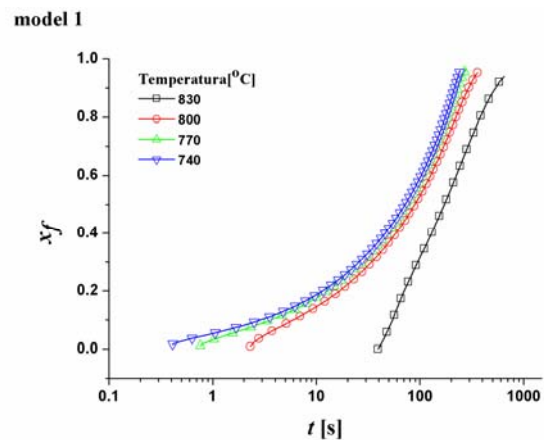
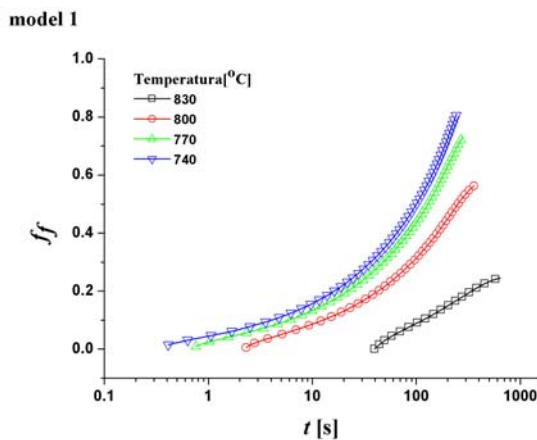
b)

Rys.42. Porównanie segregacji węgla przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  obliczonych zgodnie z modelami 1 i 4 w stali o zawartości: a) 0.3%C, b) 0.4%C.

### 6.3.3. Symulacja numeryczna kinetyki przemiany $\gamma$ - $\alpha$

Celem symulacji numerycznych kinetyki przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  było określenie postępu przemiany, zachodzącej przy stałej temperaturze, oraz przy ciągłym chłodzeniu.

Na Rys.43 - Rys.50 przedstawiono wyniki symulacji numerycznych zmian ułamka ferrytu  $f_f$  i ułamka objętości ferrytu  $x_f$  dla stali St3S w zależności od czasu, dla różnych temperatur przemiany z zakresu 830÷740°C, oraz różnych prędkości chłodzenia z zakresu 0.02÷0.5°C/s. Krzywe symulacyjne mają charakter krzywych typu S. Wskazują one na najszybszy przebieg przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla prędkości 0.5°C/s oraz przemiany zachodzącej przy 740°C, a najwolniejszy dla prędkości 0.02°C/s i temperatury 830°C. Typowy charakter krzywych symulacyjnych zanika przy najwyższej temperaturze przeprowadzonych symulacji 830°C i najniższych prędkościach chłodzenia 0.02°C/s.

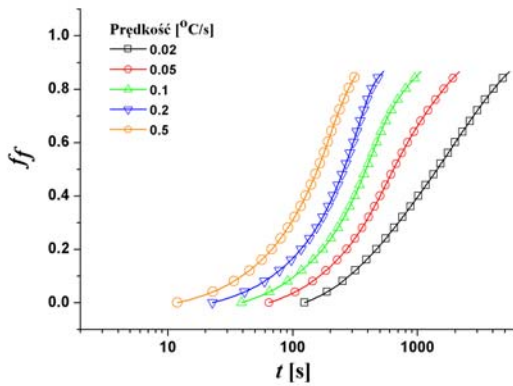


a)

b)

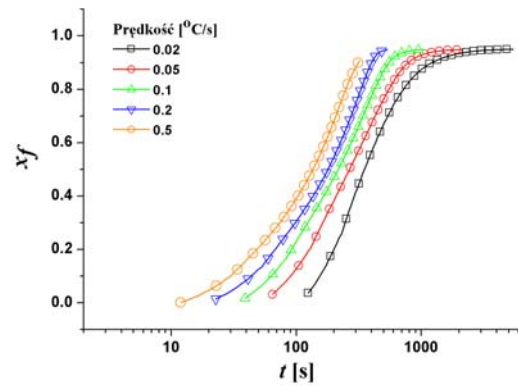
Rys.43. Symulacja numeryczna przemiany izotermicznej  $\gamma$ - $\alpha$  w stali St3S dla modelu 1 (1D): a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

model 1



a)

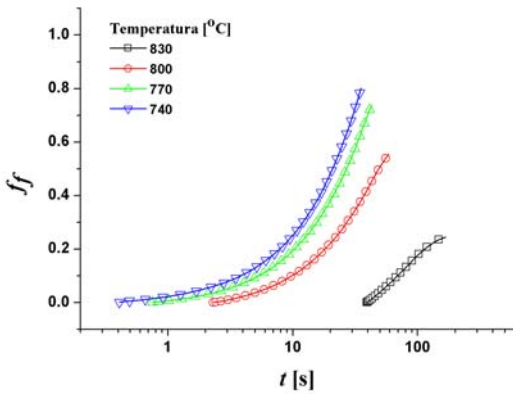
model 1



b)

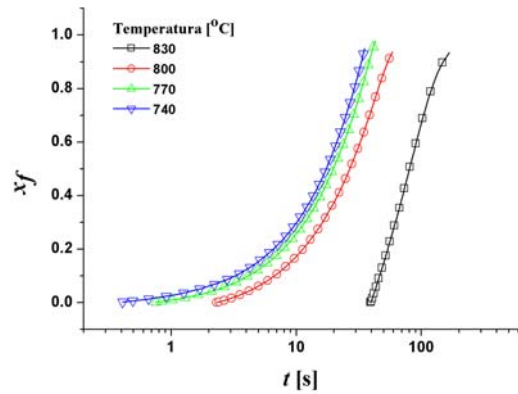
Rys.44. Symulacja numeryczna przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu w stali St3S dla modelu 1 (1D): a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

model 2



a)

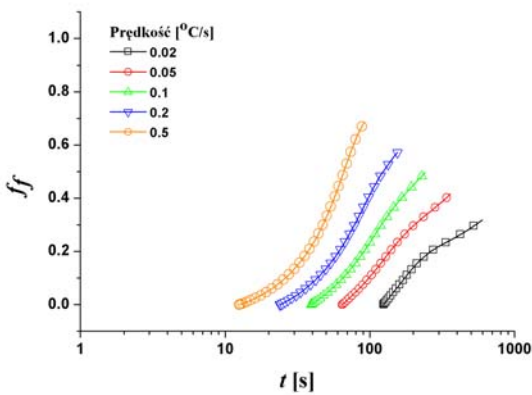
model 2



b)

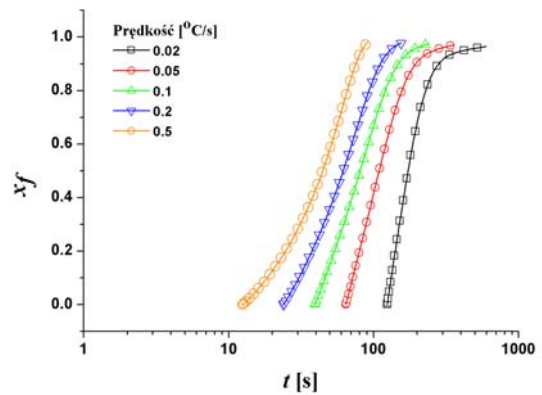
Rys.45. Symulacja numeryczna przemiany izotermicznej  $\gamma$ - $\alpha$  w stali St3S dla modelu 2 (koło w kole): a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

model 2



a)

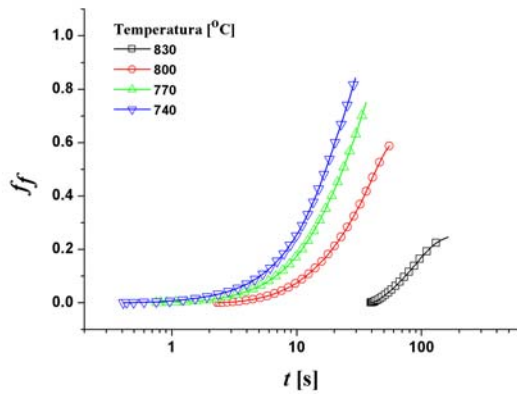
model 2



b)

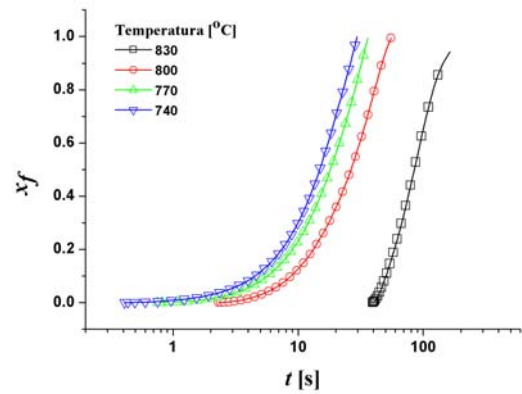
Rys.46. Symulacja numeryczna przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu w stali St3S dla modelu 2 (koło w kole): a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

model 3



a)

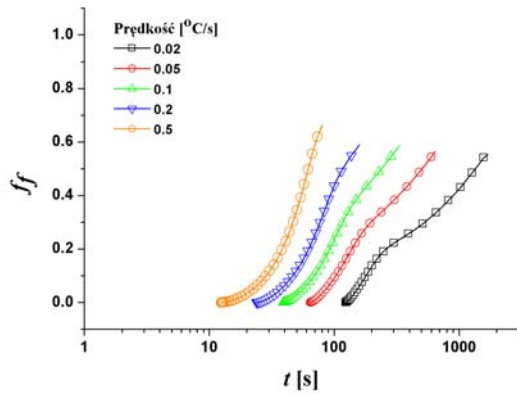
model 3



b)

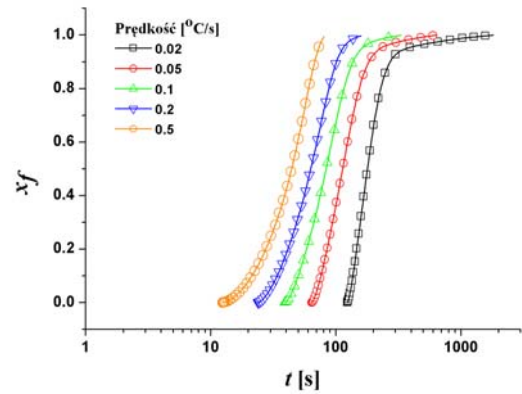
Rys.47. Symulacja numeryczna przemiany izotermicznej  $\gamma$ - $\alpha$  w stali St3S dla modelu 3 (kula w kuli): a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

model 3



a)

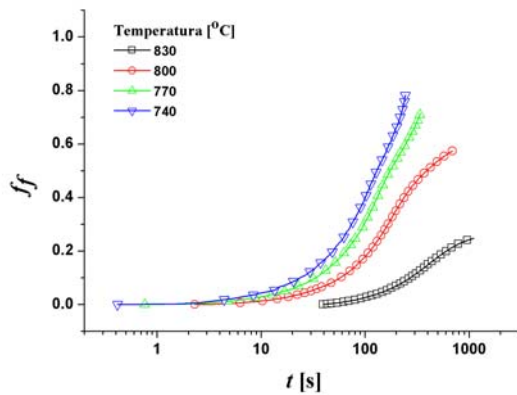
model 3



b)

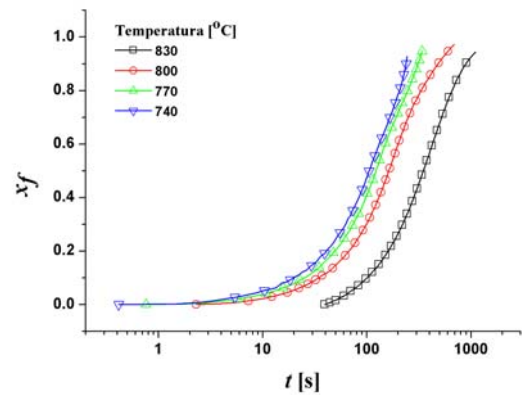
Rys.48. Symulacja numeryczna przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu w stali St3S dla modelu 3 (kula w kuli): a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

model 4



a)

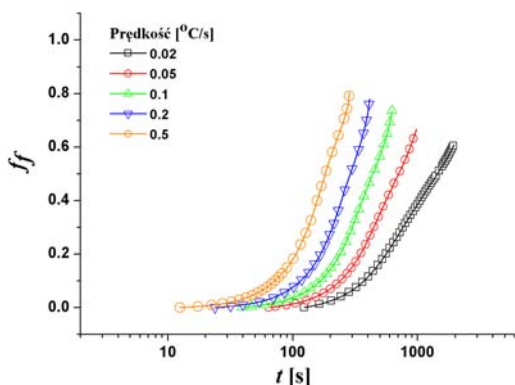
model 4



b)

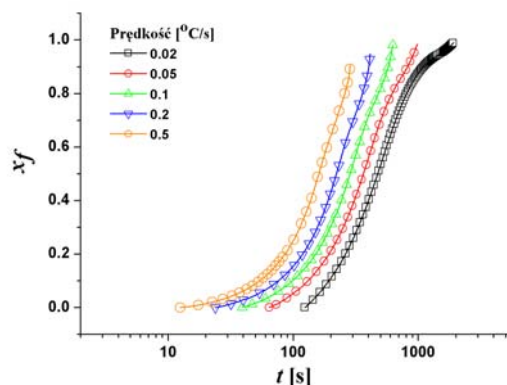
Rys.49. Symulacja numeryczna przemiany izotermicznej  $\gamma$ - $\alpha$  w stali St3S dla modelu 4 (sześciokąt w sześciokącie): a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

model 4



a)

model 4

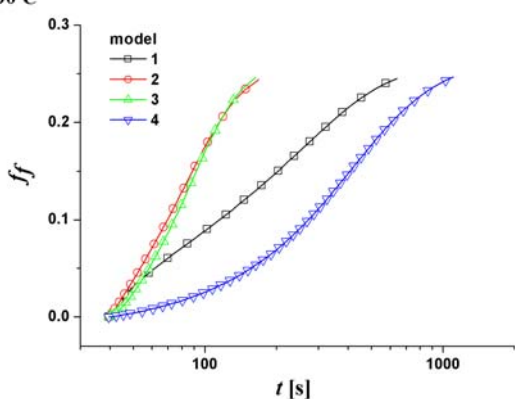


b)

Rys.50. Symulacja numeryczna przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu w stali St3S dla modelu 4 (sześciokąt w sześciokącie): a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

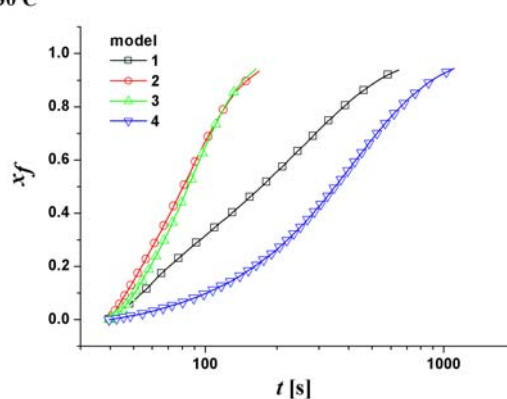
Zastosowane modele symulacji przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  w sposób zróżnicowany opisują przebieg przemiany w stali St3S. Porównanie wyników symulacji wg poszczególnych modeli przedstawiono graficznie na kolejnych rysunkach. Na Rys.51 i Rys.52 porównano wyniki symulacji przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  w warunkach izotermicznych. Przy temperaturze 830°C wartości zbliżone do siebie dały modele 2 i 3, model 4 skrajnie wolny przebieg przemiany, a model 1 przebieg wypośredkowany między wyżej wymienionymi. Przy temperaturze 740°C można mówić o zgodności symulacji modeli 1 i 4, oraz modelu 2 i 3. Na Rys.53 i Rys.54 przedstawiono wyniki symulacji numerycznych przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  zachodzącej przy ciągłym chłodzeniu. Przy stałej prędkości chłodzenia 0.2°C/s i 0.5°C/s, zaobserwowano zgodność wyników symulacji dla modeli 2 i 3 oraz modeli 1 i 4.

830°C



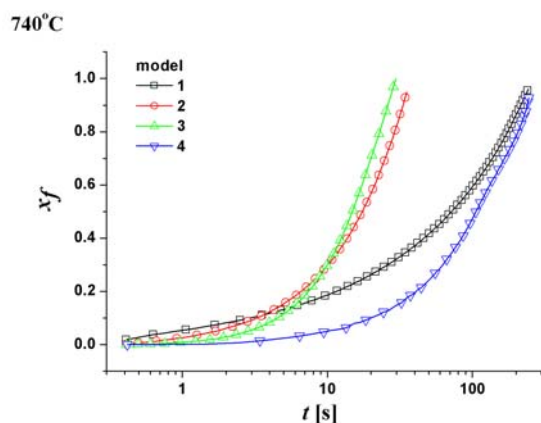
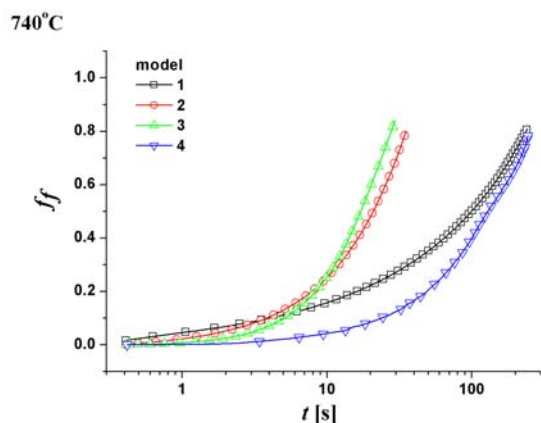
a)

830°C



b)

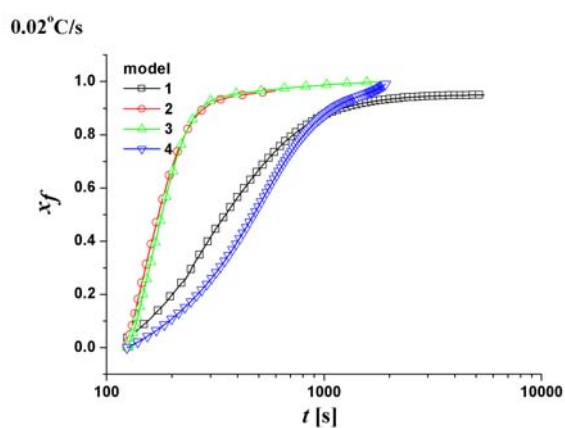
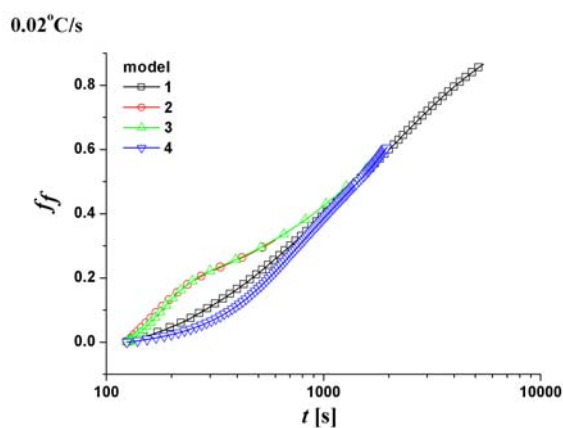
Rys.51. Symulacja numeryczna przemiany izotermicznej  $\gamma$ - $\alpha$  w stali St3S zachodzącej w temperaturze 830°C : a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .



a)

b)

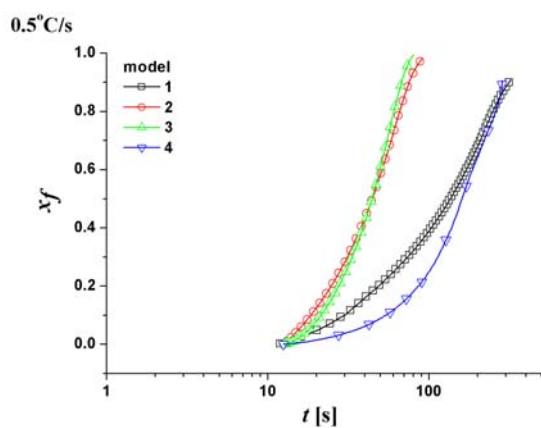
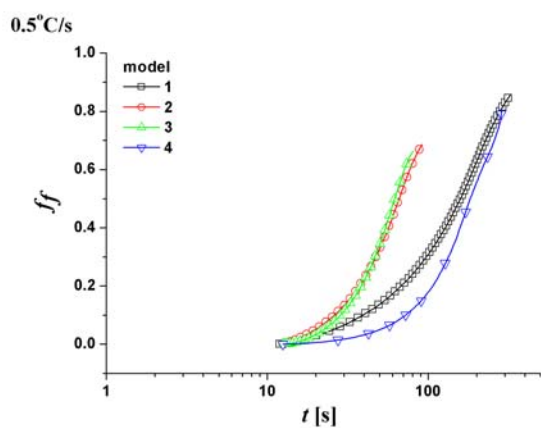
Rys.52. Symulacja numeryczna przemiany izotermicznej  $\gamma-\alpha$  w stali St3S zachodzącej w temperaturze  $740^{\circ}\text{C}$  : a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .



a)

b)

Rys.53. Symulacja numeryczna przemiany  $\gamma-\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu z prędkością  $0.02^{\circ}\text{C/s}$  w stali St3S: a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

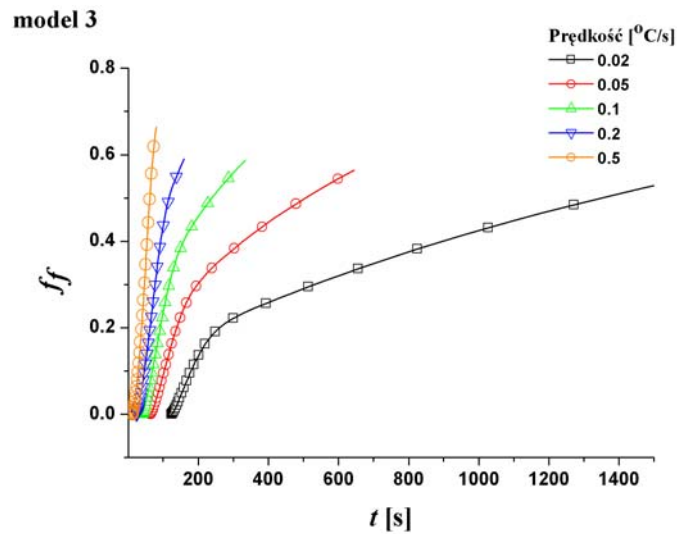


a)

b)

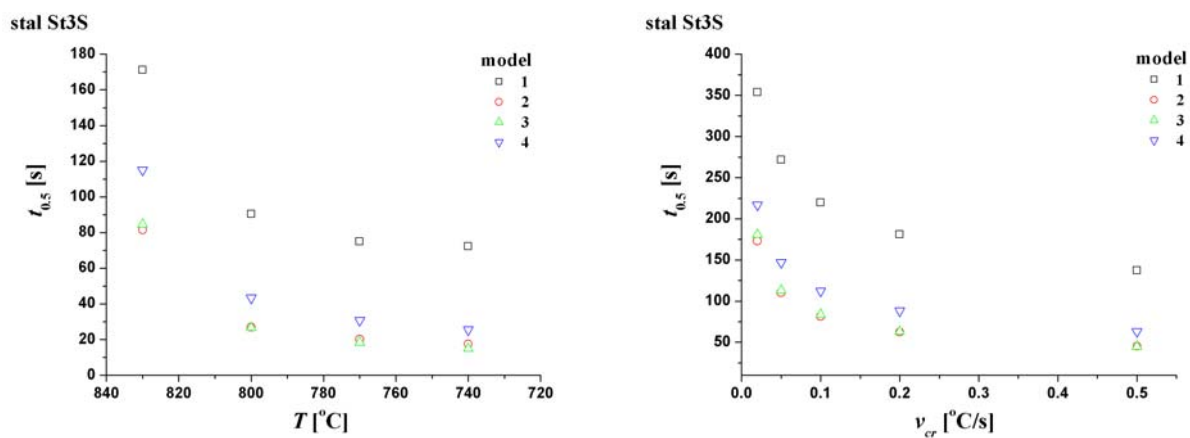
Rys.54. Symulacja numeryczna przemiany  $\gamma-\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu z prędkością  $0.5^{\circ}\text{C/s}$  w stali St3S: a) zmiana ułamka ferrytu  $f_f$ , b) zmiana ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .

Przebieg krzywych kinetycznych dla modelu 3 i różnych prędkości chłodzenia z zakresu austenitu, wykreślonych w skali liniowej czasu  $t$ , pokazano na Rys.55. W skali tej otrzymano wykładnicze krzywe zależności  $x_f(t)$ , a ich charakter jest monotoniczny.



Rys.55. Symulacja numeryczna przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu w stali St3S dla modelu 3 (kula w kuli): a) zmiana ułamka ferrytytu  $f_f$ . Skala liniowa.

Wykazaną graficznie zgodność opisu numerycznego przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla modeli 1 i 4 oraz 2 i 3 można uważać za subiektywną. W celu zobiektywizowania wniosków o poprawności opisu przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  wyznaczono czas odpowiadający maksimum prędkości przemiany, przy  $x_f = 0.5$ , dla stali St3S. Posługując się tym kryterium sporządzono wykresy zależności czasu odpowiadającego  $x_f = 0.5$  od temperatury i prędkości chłodzenia, dla poszczególnych modeli (Rys.56). W granicach błędu można mówić o identyczności wyników dla modeli 2-3-4. Zgodność wyników stwierdzono zarówno na krzywych  $t_{0.5} = f(T)$ , jak i  $t_{0.5} = f(v_{cr})$ .



a)

b)

Rys.56. Porównanie wyników symulacji dla poszczególnych modeli przy: a) różnych temperaturach przemiany, b) różnych prędkościach chłodzenia.

Wyniki symulacji ułamka objętości ferrytu w próbkach nawęglonych, przeprowadzonej dla modelu 1 i modelu 4, zaprezentowano na Rys.57. Opisano zmianę wielkości ułamka objętości ferrytu  $x_f$  w nawęglonej stali modelowej II z temperaturą, w obszarach o różnej zawartości węgla. Obliczenia prowadzono dla prędkości chłodzenia równej 0.05<sup>o</sup>/s. Podczas chłodzenia ułamek objętości ferrytu  $x_f$  zmienia się wykładniczo. Zastosowane modele podobnie opisują kinetykę przemiany w obszarach o 0.2% zawartości węgla. Wielkości ułamka objętości ferrytu przy wyższych zawartościach węgla wyraźniej różnicuje jedynie model 1.



a) b)  
Rys.57. Zmiana wielkości ziarna z temperaturą dla stali o różnej zawartości węgla: a) model 1, b) model 4.

### 6.3.4. Symulacja numeryczna wzrostu ferrytu ziarnistego

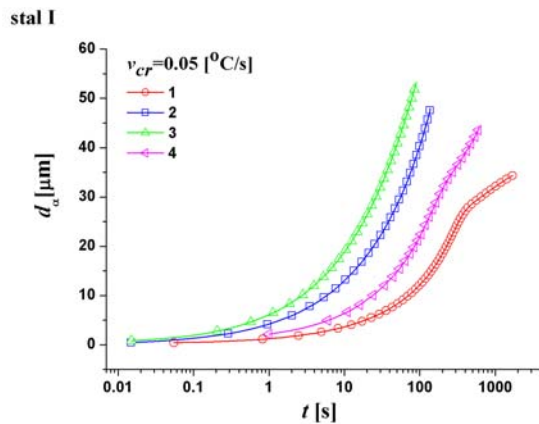
Celem symulacji numerycznych dla wzrostu ferrytu ziarnistego było testowanie zaproponowanych modeli przemiany  $\gamma-\alpha$  i porównanie ich zdolności przewidywania końcowej wielkości ziarna ferrytu, dla zmiennych warunków przemiany.

Opracowany powyżej model przemiany  $\gamma-\alpha$  oparto na założeniu, że wzrost ziarna ferrytu kontrolowany jest procesami dyfuzyjnymi. W rezultacie obliczeń modelowych otrzymano wielkość ziarna ferrytu, dla różnych prędkości chłodzenia założonych stali. Wyznaczono również okres inkubacyjny, a także temperatury początku i końca przemiany.

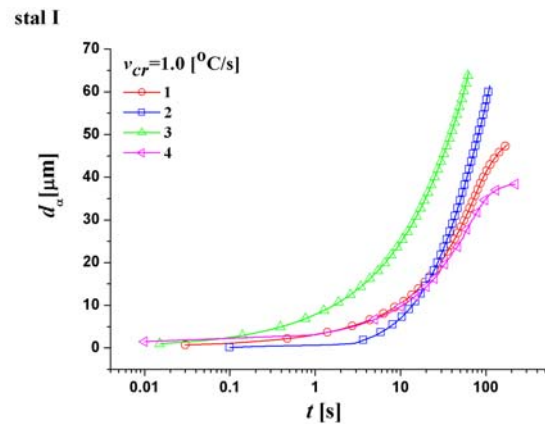
Na Rys.58 - Rys.61 przedstawiono wyniki symulacji wielkości ziarna ferrytu  $d_\alpha = d_\alpha(t)$  dla stali I (Rys.58-Rys.59) oraz stali II (Rys.60), obliczone zgodnie z założonymi modelami geometrycznymi ziarna austenitu i ziarna ferrytu. W legendzie rysunków liczbą „1” oznaczono model liniowy, liczbą „2” model „koło w kole”, liczbą „3” model „kula w kuli”, natomiast liczbą

„4” model „sześciokąt w sześciokącie”. Ze względu na duże zróżnicowanie prędkości chłodzenia wykresy przedstawiają zmiany wielkości ziaren w różnych okresach czasu, od 1 do 1000 sekund.

Najlepszą zgodność opisu zmian wielkości ziaren z czasem przemiany, dla przyjętych modeli numerycznych, otrzymano dla przypadku stali I i prędkości 1.0°C/s. Modele 2,3,4 dały tu prawie identyczne wyniki. Dla stali II zgodność opisu wielkości ziaren zaznaczyła się dla modeli 1 i 2 oraz 3 i 4, we wszystkich przypadkach prędkości chłodzenia.

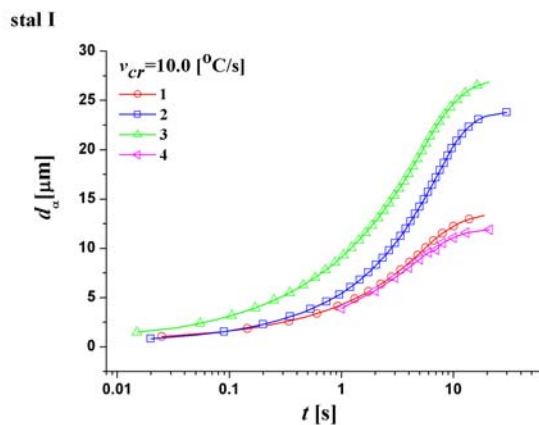


a)

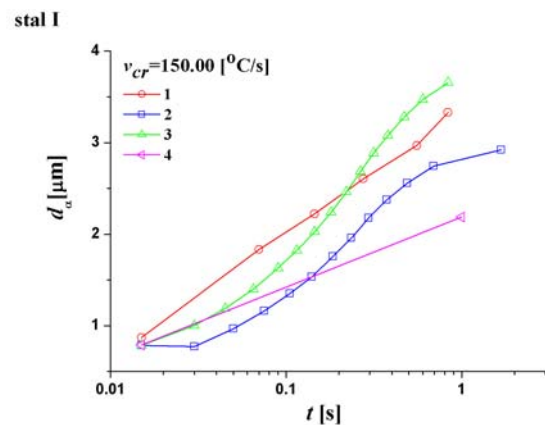


b)

Rys.58. Zmiana wielkości ziarna ferrytu z czasem w stali I podczas przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu z prędkością a) 0.05°C/s , b) 1°C/s.

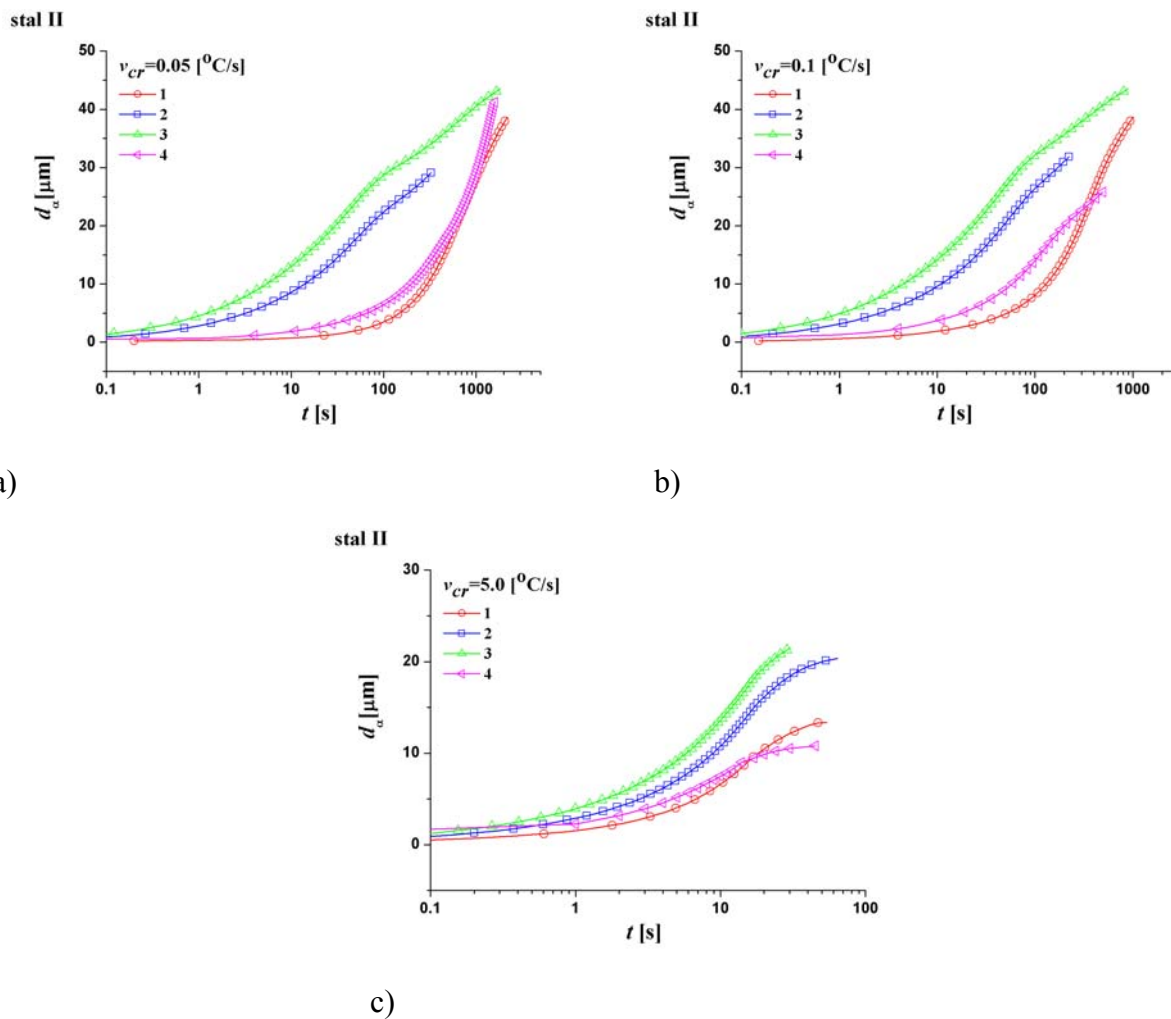


a)



b)

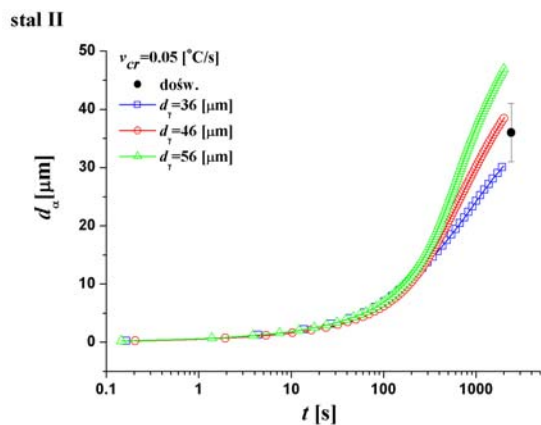
Rys.59. Zmiana wielkości ziarna ferrytu z czasem w stali I podczas przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu z prędkością a) 10°C/s , b) 150°C/s.



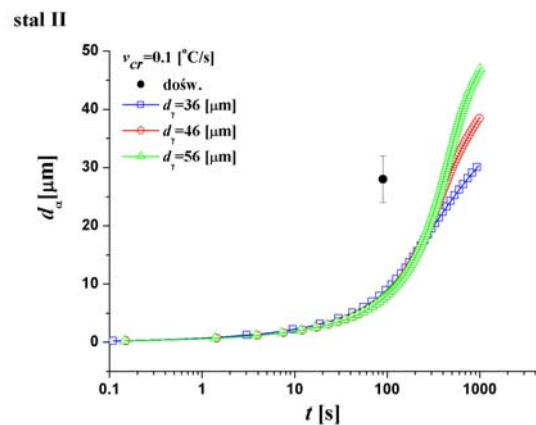
Rys.60. Zmiana wielkości ziarna ferrytu w stali II podczas przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu z prędkością a)  $0.05^{\circ}\text{C/s}$ , b)  $0.1^{\circ}\text{C/s}$ , c)  $5.0^{\circ}\text{C/s}$ .

Wpływ błędu wielkości pierwotnego ziarna austenitu na wielkość ziarna ferrytu po przemianie  $\gamma$ - $\alpha$ , przeanalizowano na przykładzie stali modelowej II i modelu 1. Wielkość pierwotnego ziarna austenitu wyznaczona doświadczalnie wynosiła  $46 \pm 10 \mu\text{m}$ . Symulacje numeryczne wykonano dla trzech wielkości ziarna austenitu  $d_{\gamma}$ : 36, 46, 56  $\mu\text{m}$ , tak, by ująć wartości skrajne błędu wyznaczenia wielkości ziarna austenitu. Wyniki symulacji numerycznej przedstawiono na Rys.61.

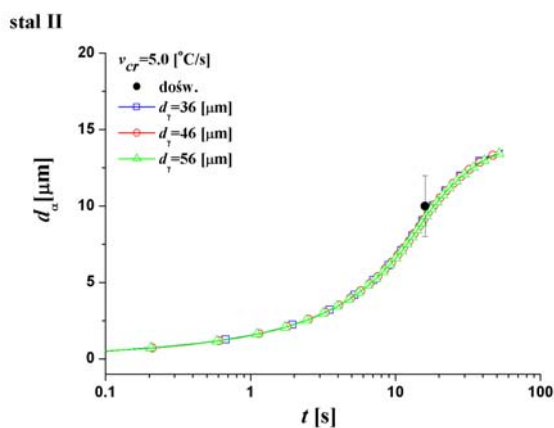
Wyniki świadczą, iż prawie 25% błąd w określeniu wielkości pierwotnego ziarna austenitu nie ma wpływu na wynik symulacji przy dużych prędkościach chłodzenia stali ( $5^{\circ}\text{C/s}$ ) i krótkich czasach przemiany. Zróżnicowanie symulowanej wielkości ziarna ferrytu zaznacza się dla dłuższych czasów przemiany ( $>100\text{s}$ ), przy niskich prędkościach chłodzenia ( $0.05 \pm 0.1^{\circ}\text{C/s}$ ). Przyjęcie większego ziarna austenitu prowadzi do otrzymania większego ziarna ferrytu.



a)



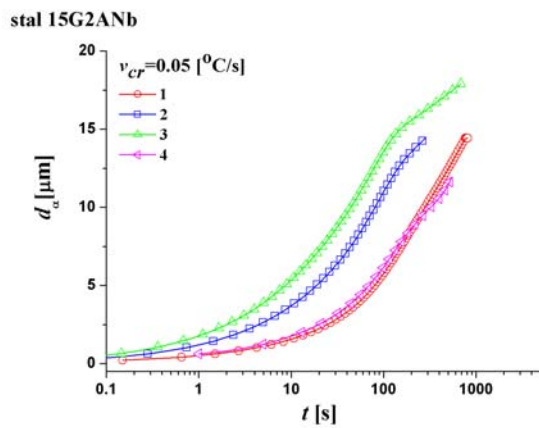
b)



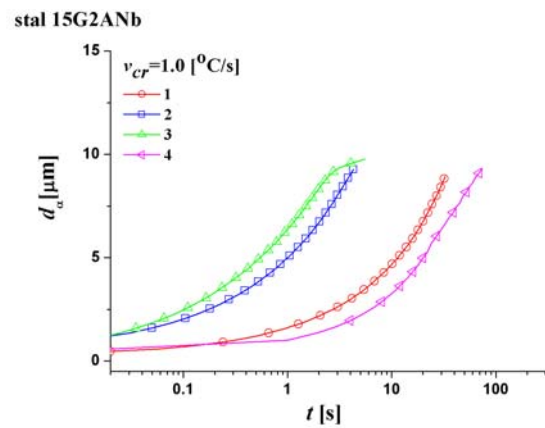
c)

Rys.61. Zmiana wielkości ziarna ferrytu w stali II podczas przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu z prędkością a)  $0.05^{\circ}\text{C/s}$ , b)  $0.1^{\circ}\text{C/s}$ , c)  $5.0^{\circ}\text{C/s}$  dla różnych wielkości pierwotnego ziarna austenitu obliczonego według modelu I.

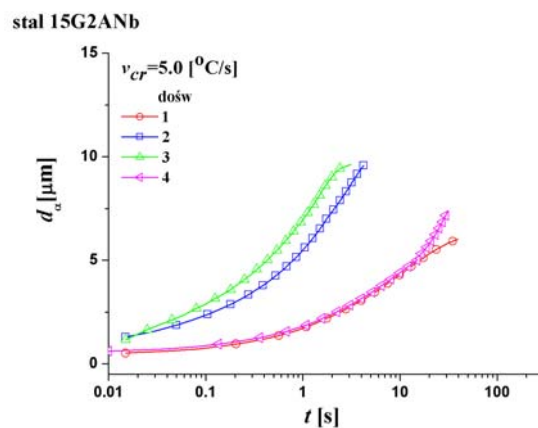
Symulacje przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla stali 15G2ANb dały zgodne ze sobą wyniki wielkości ziaren ferrytu dla modeli 1 i 4 oraz 2 i 3, we wszystkich analizowanych przypadkach prędkości chłodzenia z zakresu  $0.05 \div 5.0^{\circ}\text{C/s}$  (Rys.62).



a)



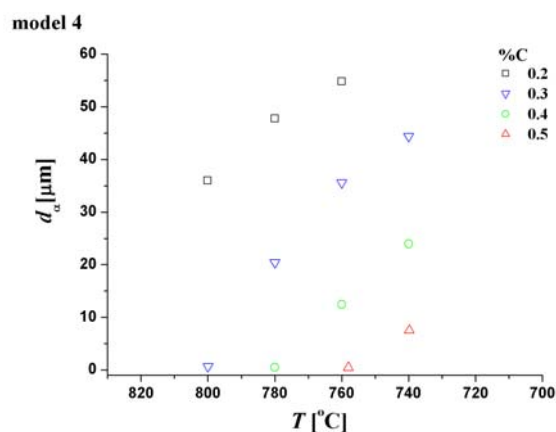
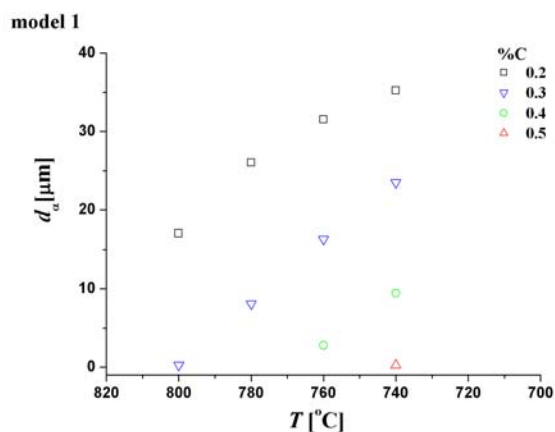
b)



c)

Rys.62. Zmiana wielkości ziarna ferrytu w stali 15G2ANb podczas przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy ciągłym chłodzeniu z prędkością a)  $0.05^{\circ}\text{C/s}$ , b)  $1.0^{\circ}\text{C/s}$ , b)  $5.0^{\circ}\text{C/s}$ .

Wyniki symulacji wzrostu ferrytu w próbkach nawęglonych, przeprowadzonej dla modelu 1 i modelu 4, zaprezentowano na Rys.63. W obszarach o różnej zawartości węgla opisano zmianę wielkości ziaren ferrytu  $d_{\alpha}$  z temperaturą. Obliczenia prowadzono dla prędkości chłodzenia równej  $0.05^{\circ}\text{C/s}$ . Wielkość ziaren zmienia się wykładniczo, przy czym największymi ziarnami charakteryzują się obszary o niskiej zawartości węgla. Zaznacza się silne zróżnicowanie obliczonych wielkości dla poszczególnych modeli. Model 4 wyznacza prawie 1.5 razy większe średnice ziaren, niż model 1.



a)

b)

Rys.63. Zmiana wielkości ziarna z temperaturą dla stali o różnej zawartości węgla: a) model 1, b) model 4.

### 6.3.5. Symulacja numeryczna wzrostu ferrytu płytkowego

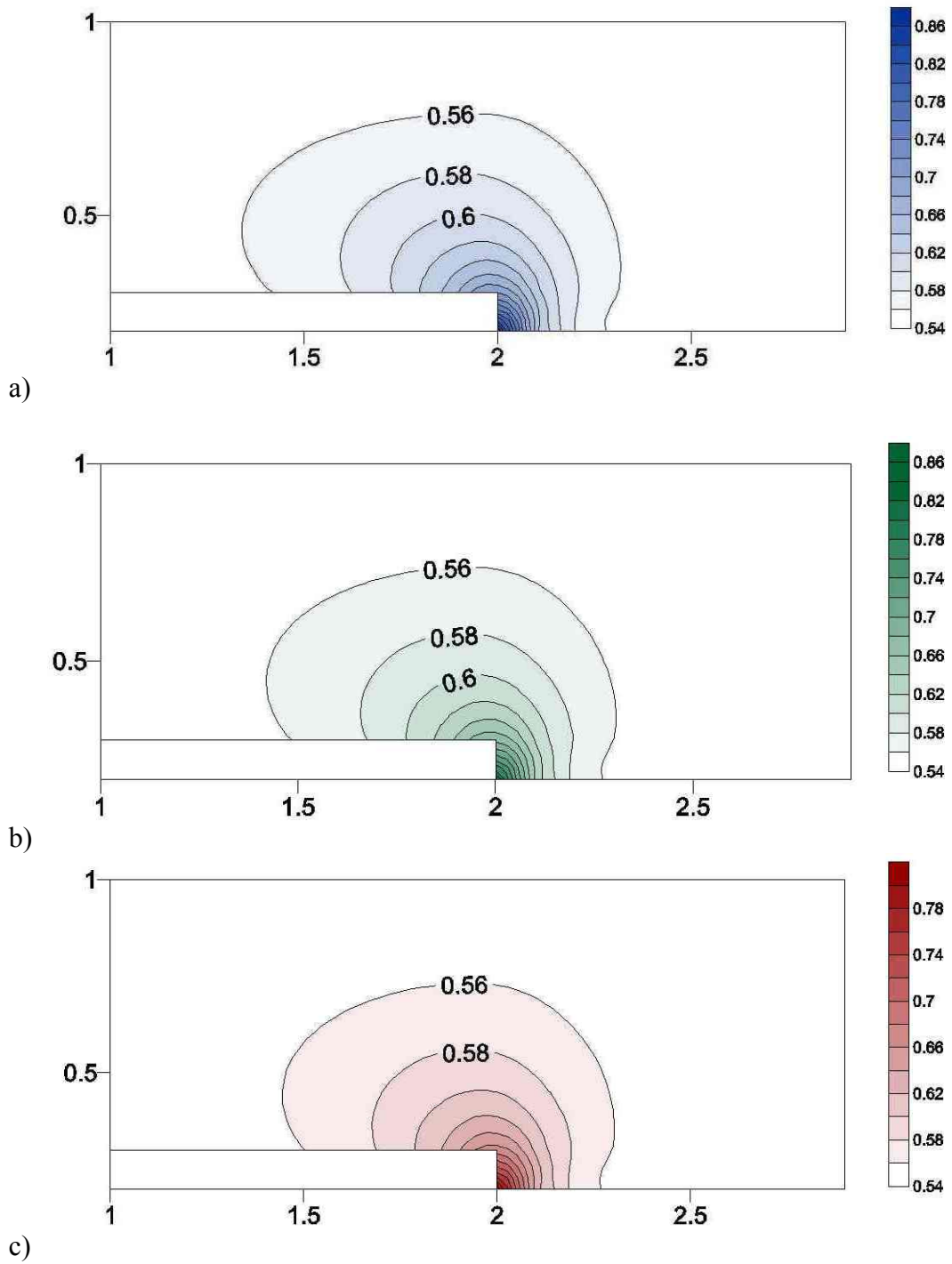
Model wzrostu ferrytu płytkowego w stali C56D oparto na algorytmie zaproponowanym przez Enomoto. Wprowadzone do modelu warunki początkowe i brzegowe omówiono w rozdziale 5.5.2. Wynikiem symulacji był rozkład stężenia węgla wokół progu na płycie ferrytu i końcowa długość płytki ferrytu.

Model pozwolił na określenie długości płytki dla przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  zachodzącej przy różnych temperaturach austenitizowania. Wyniki symulacji zebrano w tablicy XI.

Na Rys.64 przedstawiono linie izokoncetracji węgla przed frontem przemiany dla temperatur austenitizacji 1000°C, 1100°C i 1200°C. Obserwuje się niewielkie zróżnicowanie w rozkładzie stężenia przed frontem dla poszczególnych temperatur, co przekłada się na nieznaczne zróżnicowanie długości płytek. Dla danej temperatury gradient stężenia węgla przed czołem płytki jest prawie 2-krotnie większy, niż przed ściankami bocznymi. Sprzyja to kierunkowemu wzrostowi płytki.

Tablica XI Zestawienie obliczonych wielkości płytek ferrytu Widmanstättena

	Temperatura [°C]		
	1000	1100	1200
Długość płytki $x$ [μm]	27.0	29.5	32.1



Rys.64. Linie izokoncentracyjne węgla przed progiem na płycie ferrytu przy chłodzeniu ciągłym z temperatury austenizacji: a) 1000°C, b) 1100°C, c) 1200°C.

## 6.4. Weryfikacja doświadczalna symulacji przemiany $\gamma-\alpha$

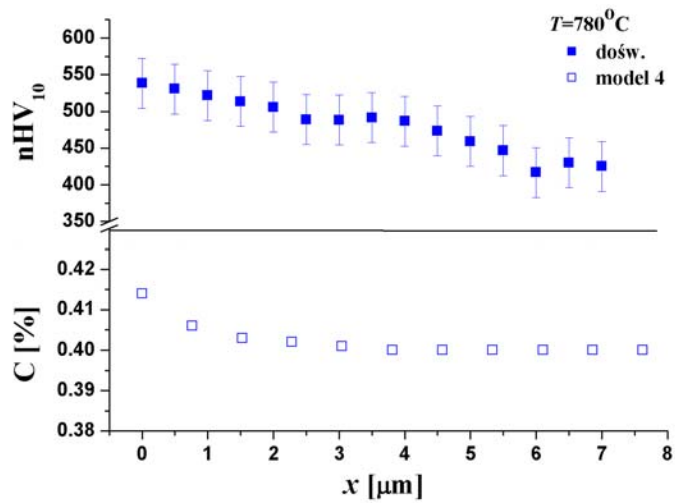
### 6.4.1. Weryfikacja doświadczalna segregacji węgla przed frontem przemiany $\gamma-\alpha$

W tablicy XII oraz na Rys.65 zestawiono wyniki pomiarów nanotwardości zahartowanych ziaren stali nawęglonej, w miejscu o zawartości 0.4%C, z wynikami symulacji numerycznej segregacji węgla przed frontem przemiany. Pomiary i symulacje dotyczyły trzech temperatur przemiany: 740 °C, 760 °C i 780°C.

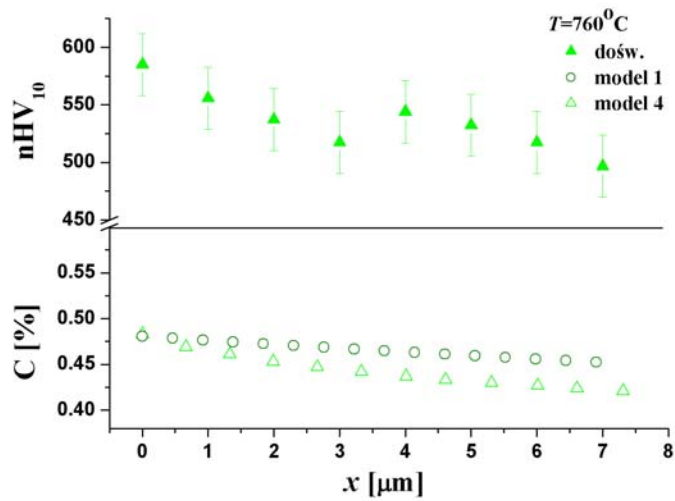
Wyniki pomiaru nanotwardości potwierdzają w sposób jakościowy rezultaty symulacji. Przed frontem przemiany nanotwardość martenzytu jest ok.100-150 jednostek wyższa, niż wewnątrz ziaren. Efekt zaznacza się na głębokości do ok.4  $\mu\text{m}$ , a gradient zmian nanotwardości maleje ze wzrostem temperatury. W tym samym obszarze według symulacji powinna być wyższa zawartość węgla, a poziom tej zawartości zależny jest od temperatury przemiany. Lepsze dopasowanie wyników symulacji i pomiarów nanotwardości dotyczy modelu 4. Porównywane wyniki charakteryzują się w tym przypadku dobrą korelacją liniową, ze współczynnikiem  $R^2=0.98$ , co przy przyjętych założeniach potwierdza poprawność wykonanych symulacji według modelu 4.

**Tablica XII Zestawienie gradientów stężenia węgla  $dc/dx$  i gradientów nanotwardości  $dnHV/dx$  stali przed frontem przemiany  $\gamma-\alpha$**

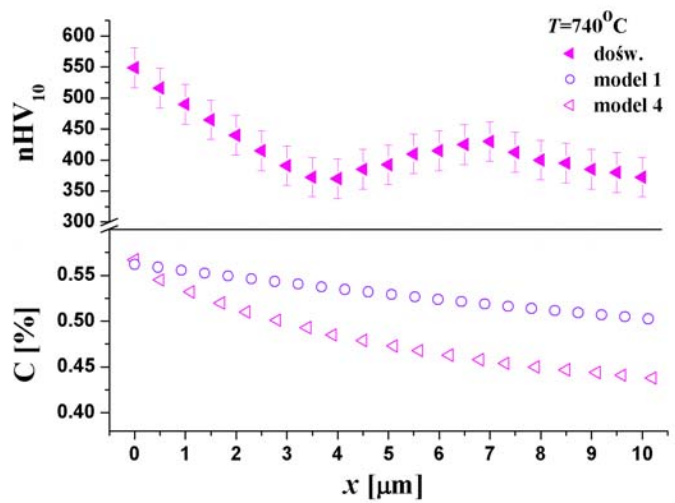
	Temperatura [°C]			
	800	780	760	740
<b>Skład stali</b>	<b>Gradient stężenia <math>dc/dx</math> [mol/cm<sup>3</sup>]</b>			
<b>0.4 %C</b>				
<b>Doświadczenie <math>dnHV/dx</math></b>	-	0.31	0.49	1.52
<b>Model 1</b>	-	-	0.39	0.61
<b>Model 4</b>	-	0.19	0.52	1.31



a)



b)



c)

Rys.65. Porównanie segregacji węgla uzyskanej z symulacji numerycznej przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  za pomocą modelu 1 i 4 z doświadczalnym rozkładem nanotwardości przed frontem przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ : a)  $780^{\circ}\text{C}$ , b)  $760^{\circ}\text{C}$ , c)  $740^{\circ}\text{C}$ .

#### 6.4.2. Weryfikacja doświadczalna wzrostu ferrytu ziarnistego

Przeprowadzone badania doświadczalne przemiany  $\gamma-\alpha$  w analizowanych stalach dostarczyły informacji o następujących parametrach przemiany: wartości temperatur  $Ar_{3p}$  i  $Ar_{3k}$ , wartości okresu inkubacyjnego  $\tau_s$  oraz wielkości ziarna ferrytu, po poszczególnych wariantach obróbki cieplnej badanych stali. W tabelicy XIII zestawiono symulowane parametry przemiany i wielkości ziaren ferrytu z wartościami doświadczalnymi. Szarym wypełnieniem komórek tablic zaznaczono wartości zgodne ze sobą w granicach błęd pomiarów doświadczalnych. W przypadku stali I oraz II, dla których autorka wykonała własne pomiary dylatometryczne, błędy wyznaczono dla każdego z pomiarów. Dla stali 15G2ANb przyjęto błąd pomiarowy równy  $\pm 10^\circ\text{C}$ .

Wyniki zebrane w tabelicy XIII wskazują na zgodność temperatur początku  $Ar_{3p}$  i końca  $Ar_{3k}$  przemiany  $\gamma-\alpha$  z danymi doświadczalnymi, w niektórych przypadkach prędkości chłodzenia i założonych kształtów ziaren ferrytu i austenitu. Dla stali I uzyskano zgodność obliczonych wartości temperatur  $Ar_{3p}$  z danymi doświadczalnymi dla wszystkich prędkości chłodzenia. Natomiast wartości doświadczalnej temperatury końca przemiany  $Ar_{3k}$  były zbliżone do siebie jedynie dla modelu 1, przy prędkościach  $0.05^\circ\text{C/s}$  i  $10.0^\circ\text{C/s}$  oraz modelu 2, przy prędkości  $1.0^\circ\text{C/s}$ .

**Tabela XIII Zestawienie parametrów z symulacji przemiany  $\gamma-\alpha$  wraz z wartościami doświadczalnymi \***

Stal modelowa I						
	Prędkość chłodzenia $v_{cr}$ [ $^\circ\text{C/s}$ ]					
	0.05	0.1	1.0	5.0	10.0	150
<b>Temperatura <math>Ar_{3p}</math> [<math>^\circ\text{C}</math>]</b>						
Doświadczalna	850±12	-	820±20	-	800±10	720±10
Obliczona	839	-	825	-	804	753
<b>Temperatura <math>Ar_{3k}</math> [<math>^\circ\text{C}</math>]</b>						
Doświadczalna	760±15	-	700±30	-	615±20	480±10
Model 1	756	-	645	-	618	600
Model 2	802	-	713	-	543	502
Model 3	804	-	731	-	563	628
Model 4	600	-	514	-	460	413

<b>Stal modelowa II</b>						
	<b>Prędkość chłodzenia <math>v_{cr}</math> [°C/s]</b>					
	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
<b>Temperatura <math>Ar_{3p}</math> [°C]</b>						
Doświadczalna	845±10	830±5	-	800±10	-	-
Obliczona	835	833	-	810	-	-
<b>Temperatura <math>Ar_{3k}</math> [°C]</b>						
Doświadczalna	750±10	740±5	-	720±20	-	-
Model 1	735	734	-	541	-	-
Model 2	822	814	-	490	-	-
Model 3	747	747	-	659	-	-
Model 4	750	735	-	502	-	-
<b>Stal modelowa 15G2ANb</b>						
	<b>Prędkość chłodzenia <math>v_{cr}</math> [°C/s]</b>					
	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
<b>Temperatura <math>Ar_{3p}</math> [°C]</b>						
Doświadczalna	780±10	-	775±10	760±10	-	-
Obliczona	767	-	751	734	-	-
<b>Temperatura <math>Ar_{3k}</math> [°C]</b>						
Doświadczalna	630±10	-	650±10	660±10	-	-
Model 1	724	-	717	536	-	-
Model 2	752	-	746	713	-	-
Model 3	725	-	744	718	-	-
Model 4	737	-	730	514	-	-
<b>Wartości okresu inkubacyjnego przemiany <math>\gamma</math>-<math>\alpha</math> dla stali modelowej I</b>						
	<b>Temperatura przemiany [°C]</b>					
	<b>800</b>					
<b>Okres inkubacyjny <math>\tau_s</math> [s]</b>						
Doświadczalna	7					
Obliczona	10					

Wartości okresu inkubacyjnego przemiany $\gamma$ - $\alpha$ dla stali modelowej II		
	Temperatura przemiany [°C]	
	800	750
Okres inkubacyjny $\tau_s$ [s]		
Doświadczalna	3	4
Obliczona	5	6

\*Szarym wypełnieniem zaznaczono wartości zgodne ze sobą w granicach błędu pomiarów doświadczalnych

Analogiczną zgodność doświadczalnych i obliczonych wartości temperatur początku przemiany  $Ar_{3p}$  otrzymano dla stali II. Temperatry końca przemiany  $Ar_{3k}$  wyznaczały w granicach błędu doświadczalnego modele 1, 3 i 4, ale tylko dla niskich prędkości chłodzenia.

Dużą rozbieżność wyników otrzymano dla stali 15G2ANb, zarówno dla temperatur początku przemiany  $Ar_{3p}$  obliczonych ze wzoru, jak i temperatur końca przemiany  $Ar_{3k}$  wyznaczonych z symulacji numerycznych wszystkimi modelami. Dopuszczając jednak większy błąd pomiaru wartości doświadczalnych ( $\pm 15^\circ\text{C}$ ) można mówić o zgodności wyznaczonych i doświadczalnych temperatur  $Ar_{3p}$ , dla zastosowanych prędkości chłodzenia, oraz o bliskich sobie wartościach temperatur  $Ar_{3k}$  dla poszczególnych modeli obliczeniowych, odbiegających jednak od wartości doświadczalnych.

W części dotyczącej okresu inkubacyjnego  $\tau_s$  porównano wartości doświadczalne i obliczeniowe dla stali I i II. Szacując błąd pomiarów doświadczalnych na poziomie  $\pm 2s$ , można mówić o zgodności prezentowanych wartości.

Obserwowane związki pomiędzy wynikami doświadczalnymi i obliczeniowymi zaprezentowano graficznie w formie fragmentów wykresów CTPc na Rys.66-Rys.69.

W przypadku stali St3S wyniki symulacji odniesiono dodatkowo do danych z modelu w pracy [52], oznaczonych na wykresie jako model [52]. Linie  $Ar_{3p}$  zostały wyznaczone na podstawie przeprowadzonych obliczeń analitycznych temperatury początku przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla składów badanych stali.

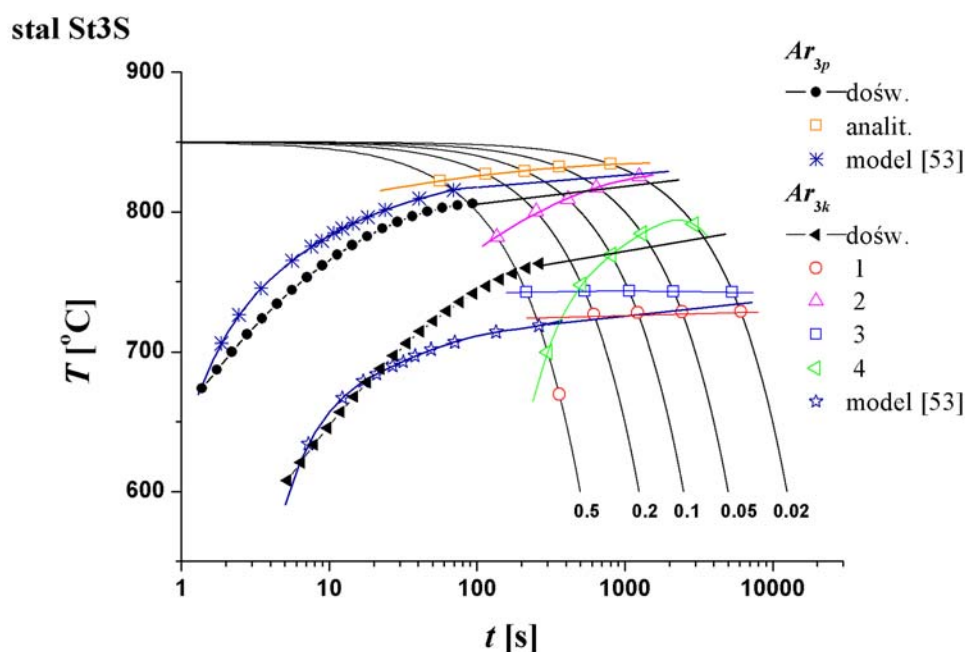
Na zbiorczym wykresie CTPc dla stali St3S linie początku przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  wyznaczone metodą analityczną oraz według modelu [52], są w granicach błędu zgodne z danymi doświadczalnymi. Większe zróżnicowanie między danymi doświadczalnymi i wynikami symulacji zaobserwowano dla końca przemiany  $\gamma$ - $\alpha$ . Zbieżność pomiarów i obliczeń temperatur końca przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  obserwuje się w przypadku modelu [52] i modelu 1 oraz, z pewnym małym odchyleniem, modelu 3. W modelu z pracy [52], identyfikowanym metodą analizy odwrotnej

(inverse), współczynniki modelu dobrano tak by dostać zgodność wyników obliczeń i pomiarów doświadczalnych. W przypadku modeli 1 i 3 stosowane zależności oparte były na ogólnych wartościach fizycznych i nie uwzględniały współczynników dopasowania.

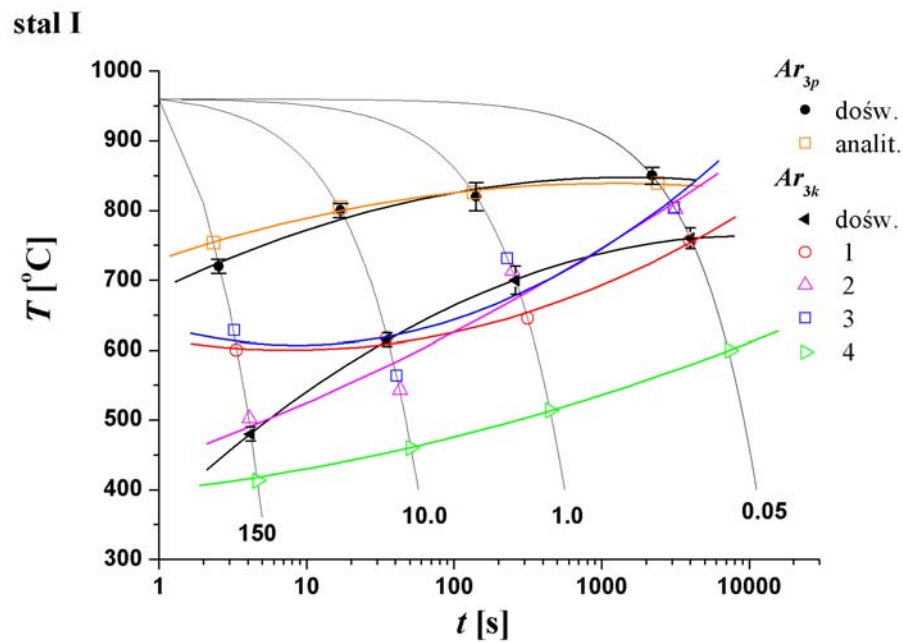
Linie wyznaczone symulacyjnie zgodnie z modelami 1,2,3 i linie doświadczalne na wykresie CTPc dla stali I mają zbliżony do siebie przebieg (Rys.67). Znaczne zróżnicowanie przebiegu tych linii obserwuje się dla obliczeń wg modelu 4.

W przypadku wykresu CTPc dla stali II (Rys.68) zaznacza się zbieżność linii wyznaczonej według modelu 2 z liniami początku przemiany wyznaczonej doświadczalnie i analitycznie, dla niskich prędkości chłodzenia (0.05 i 0.1°C/s) Przy dużej prędkości chłodzenia (5°C/s) zróżnicowanie wyników symulacji i wyników doświadczenia jest bardzo duże. Linie końca przemiany zgodne z danymi doświadczalnymi, wyznaczają modele natomiast 1,3,4.

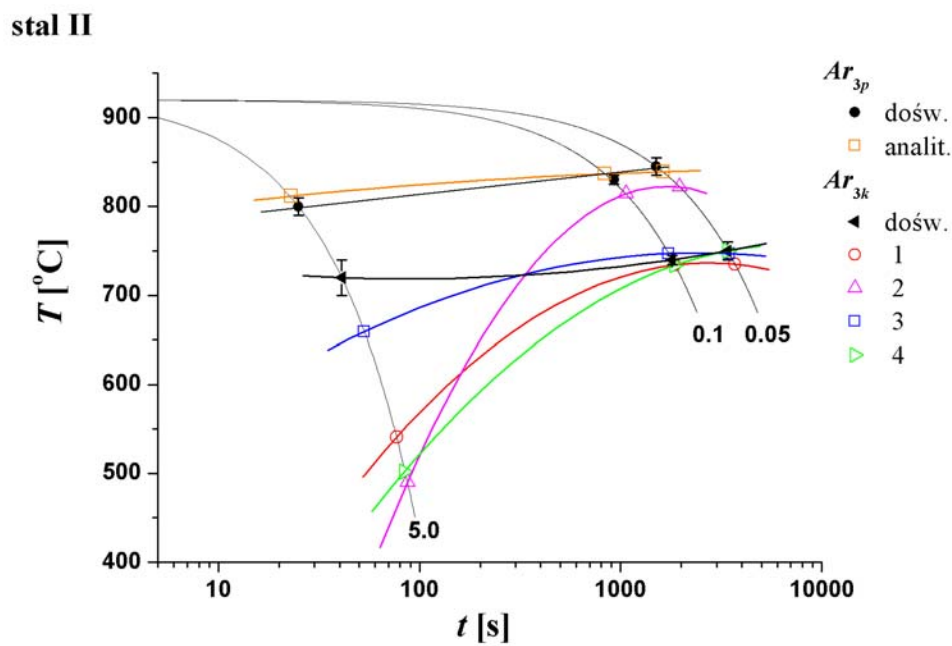
Analogiczny przebieg linii początku przemiany  $\gamma-\alpha$  wyznaczonych analitycznie i doświadczalnie można stwierdzić na wykresie CTPc dla stali 15G2ANb (Rys.69). Znaczne odchylenie od wyników doświadczalnych wykazują wyniki symulacji temperatury końca przemiany. Związane to może być z pasmowością strukturalną zastosowanych próbek stali, co miało wpływ na wyniki doświadczalne, a nie zostało uwzględnione w obliczeniach.



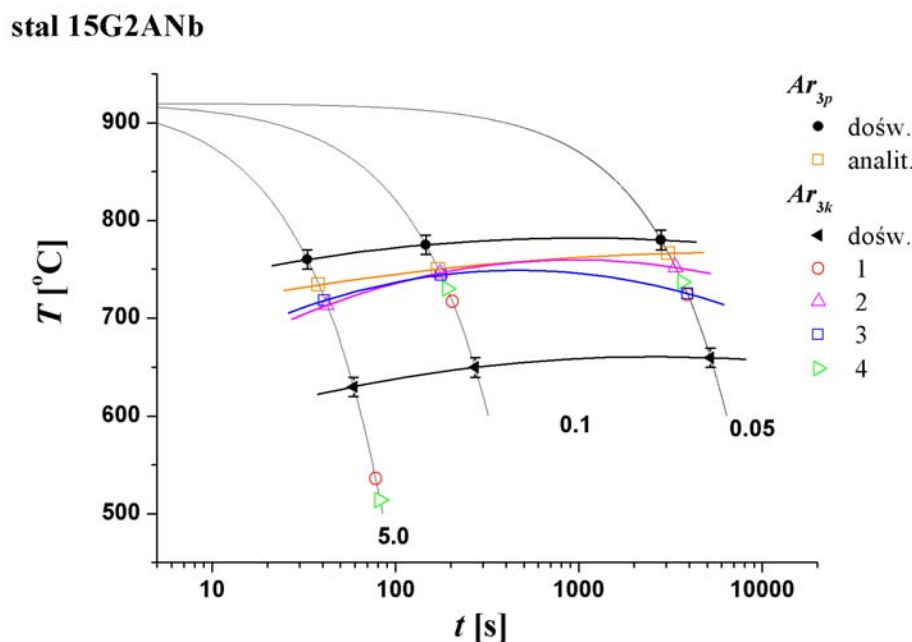
Rys.66. Wykres CTPc dla stali St3S otrzymany z obliczeń oraz z próby dylatometrycznej.



Rys.67. Wykres CTPc dla stali I otrzymany z obliczeń oraz z próby dylatometrycznej.



Rys.68. Wykres CTPc dla stali II otrzymany z obliczeń oraz z próby dylatometrycznej.



Rys.69. Wykres CTPc dla stali 15G2ANb otrzymany z obliczeń oraz z próby dylatometrycznej.

W tablicy XIV porównano wyniki obliczeń wielkości ziarna ferrytu z wynikami doświadczeń. Jak widać z przedstawionego porównania, symulacja numeryczna wielkości ziaren, prowadzona dla modeli numerycznych: 1, 2, 3, 4 oraz empirycznych zależności Hodgsona [53] i Sellarsa [54], dała wyniki o różnej zgodności z wynikami doświadczalnymi. Największą dokładność w porównaniu z danymi doświadczalnymi w stalach I i II wykazują wyniki uzyskane według modelu 4. Zależność Hodgsona nie dała poprawnych wyników w żadnym analizowanym przypadku, natomiast z zależności Sellarsa uzyskano wyniki zbliżone do doświadczalnych jedynie dla niskich prędkości chłodzenia (0.05°C/s, 0.1°C/s).

W przypadku stali 15G2ANb wynik zgodny z doświadczeniem otrzymano jedynie z modelu 4, dla prędkości 0.05°C/s. Prawdopodobną przyczyną rozbieżności wyników doświadczalnych i modelowych była pasmowość strukturalna obserwowana w strukturze stali (Rys.A17-Rys.A19). Pierwotna segregacja fosforu w próbkach tej stali wpłynęła na pasmowy układ ferrytu i perlitu i na wielkość ziaren ferrytu, co nie zostało uwzględnione w obliczeniach numerycznych. We wszystkich przypadkach wartości doświadczalne były niższe od wartości numerycznych.

**Tablica XIV Zestawienie wielkości ziaren ferrytu z symulacji przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  wraz z wartościami doświadczalnymi**

<b>Stal I</b>						
$d_{\alpha}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$v_{cr}$ [ $^{\circ}\text{C/s}$ ]					
	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
Doświadczalna	45±6	-	34±5	-	12±2	8±1
Model 1	34.34	-	47.63	-	13.32	3.33
Model 2	48.02	-	61.48	-	23.77	2.92
Model 3	53.24	-	64.52	-	26.85	3.65
Model 4	44.13	-	38.42	-	11.89	2.11
Model Hodgsona	31.5	-	20.4	-	18.2	17.5
Model Sellarsa	39.1	-	21.8	-	18.4	17.2
<b>Stal II</b>						
$d_{\alpha}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$v_{cr}$ [ $^{\circ}\text{C/s}$ ]					
	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
Doświadczalna	36±5	28±4	-	11±3	-	-
Model 1	38.66	38.69	-	13.34	-	-
Model 2	30.90	30.56	-	20.32	-	-
Model 3	43.53	43.51	-	21.51	-	-
Model 4	41.33	25.81	-	10.79	-	-
Model Hodgsona	26	21	-	13	-	-
Model Sellarsa	39	32	-	19	-	-
<b>Stal 15G2ANb</b>						
$d_{\alpha}$ [ $\mu\text{m}$ ]	$v_{cr}$ [ $^{\circ}\text{C/s}$ ]					
	<b>0.05</b>	<b>0.1</b>	<b>1.0</b>	<b>5.0</b>	<b>10.0</b>	<b>150</b>
Doświadczalna	11±0.9	-	5.0±0.3	4.2±0.2	-	-
Model 1	14.42	-	8.92	6.02	-	-
Model 2	14.45	-	9.27	9.57	-	-
Model 3	17.90	-	9.76	9.63	-	-
Model 4	11.90	-	9.31	7.37	-	-
Model Hodgsona	17	-	9	8	-	-
Model Sellarsa	29	-	12	9	-	-

Duże zróżnicowanie numerycznych i doświadczalnych wielkości ziaren ferrytu oraz ułamka objętości ferrytu  $x_f$  obserwowano dla próbek nawęglonych (tablica XV i XVI). W zastosowanych warunkach obróbki cieplnej uzyskiwano doświadczalnie zdecydowanie większe ziarna ferrytu  $d_\alpha$  i wyższe ułamki ferrytu  $x_f$ . Przyczyn takiego stanu rzeczy można doszukiwać się w pierwotnym gradiencie stężenia węgla  $dc/dx$ , wywołanym nawęglaniem próbki. Skłoniło to do modyfikacji modelu matematycznego przemiany dla próbek nawęglonych. Skutkiem obecności dodatkowego gradientu może być intensywniejsza dyfuzja węgla ze spiętrzenia węgla, co przyspiesza kolejne elementarne przemieszczenia frontu przemiany, a tym samym ułatwia wzrost ziaren ferrytu i zwiększa udział ułamka ferrytu.

**Tablica XV Zestawienie doświadczalnych wielkości ziarna ferrytu w próbkach nawęglonych chłodzonych z prędkością 0.05 i przesyconych z wartościami obliczonymi**

	Temperatura [°C]			
	800	780	760	740
<b>Stężenie węgla</b>	<b>Wielkość ziarna <math>d_\alpha</math> [<math>\mu\text{m}</math>]</b>			
<b>0.2%C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	42.3±9.2	42.0±14.8	47.7±12.5	43.6±11.3
<b>Model 1</b>	17.04	26.01	31.53	35.21
<b>Model 4</b>	35.98101	45.7	46	
<b>0.3 %C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	36.0±10.8	36.0±11.3	43.9±8.4	36.5±10.8
<b>Model 1</b>	0.24	8.06	16.35	23.48
<b>Model 4</b>	0.65	20.41	35.55	44.41
<b>0.4 %C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	28.9±7.4	29.6±9.9	32.5±7.9	33.7±9.8
<b>Model 1</b>	-	1.62	3.00	9.21
<b>Model 4</b>	-	0.49	12.44	23.95
<b>0.5 %C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	24.9±5.7	24.9±5.5	24.9±6.3	26.4±7.3
<b>Model 1</b>	-	-	-	0.24
<b>Model 4</b>	-	-	0.42	7.49

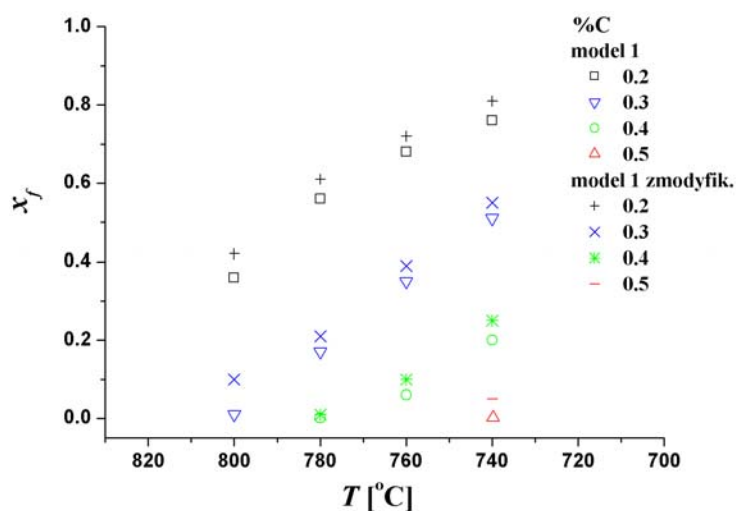
	Czas trwania przemiany [s] przy temperaturze 780°C		
	0	1000	2000
<b>Stężenie węgla</b>	<b>Wielkość ziarna <math>d_{\alpha}</math> [<math>\mu\text{m}</math>]</b>		
<b>0.2 %C</b>			
<b>Doświadczenie</b>	42.0±14.8	46.4±14.1	47.0±10.7
<b>Model 1</b>	30.39	30.39	30.39
<b>Model 4</b>	47.46	49.01	49.58
<b>0.3 %C</b>			
<b>Doświadczenie</b>	36.0±11.3	37.4±10.4	39.2±9.4
<b>Model 1</b>	24.17	24.17	24.17
<b>Model 4</b>	21.50	34.03	35.04
<b>0.4 %C</b>			
<b>Doświadczenie</b>	29.6±9.9	32.0±8.2	32.9±7.4
<b>Model 1</b>	20.03	20.72	20.95
<b>Model 4</b>	12.19	19.56	25.07
<b>0.5 %C</b>			
<b>Doświadczenie</b>	24.9±5.5	25.9±8.3	26.74±6.6
<b>Model 1</b>	17.03	17.72	18.18

Na Rys.70 przedstawiono symulacje przeprowadzone według zmodyfikowanego schematu (model 1 zmodyfik.). Wyniki symulacji wskazują na większe ziarno ferrytu i większy udział ułamka w odniesieniu do poprzednich obliczeń, ale nadal odbiegają od wartości doświadczalnych.

**Tablica XVI Zestawienie doświadczalnych wielkości ułamka objętości ferrytu w próbkach nawęglanych chłodzonych z prędkością 0.05 i przesyconych z wartościami obliczonymi**

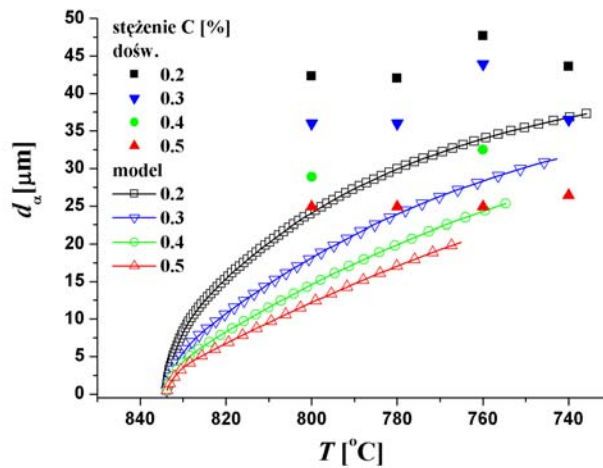
	Temperatura [°C]			
	800	780	760	740
<b>Stężenie węgla</b>	<b>Wielkość ułamka objętości ferrytu <math>x_f</math></b>			
<b>0.2%C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	0.37	0.85	0.84	0.88
<b>Model 1</b>	0.36	0.56	0.68	0.76
<b>Model 4</b>	0.30	0.53	0.69	-
<b>0.3 %C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	0.29	0.84	0.79	0.87
<b>Model 1</b>	0.01	0.17	0.35	0.51
<b>Model 4</b>	0.002	0.03	0.11	0.25
<b>0.4 %C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	0.09	0.79	0.73	0.82
<b>Model 1</b>	-	0.001	0.06	0.20
<b>Model 4</b>	-	0.003	0.02	0.38
<b>0.5 %C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	0.08	0.73	0.57	0.76
<b>Model 1</b>	-	-	-	0.002
<b>Model 4</b>	-	-	0.025	0.13
	<b>Czas trwania przemiany [s] przy temperaturze 780°C</b>			
	<b>0</b>	<b>1000</b>	<b>2000</b>	
<b>Stężenie węgla</b>	<b>Wielkość ułamka objętości ferrytu <math>x_f</math></b>			
<b>0.2 %C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	0.85	0.89	0.91	
<b>Model 1</b>	0.66	0.66	0.66	
<b>Model 4</b>	0.54	0.59	0.60	
<b>0.3 %C</b>				
<b>Doświadczenie</b>	0.84	0.88	0.89	
<b>Model 1</b>	0.52	0.52	0.52	
<b>Model 4</b>	0.23	0.28	0.29	

<b>0.4 %C</b>			
<b>Doświadczenie</b>	0.79	0.86	0.87
<b>Model 1</b>	0.43	0.45	0.455
<b>Model 4</b>	0.02	0.03	0.03
<b>0.5 %C</b>			
<b>Doświadczenie</b>	0.73	0.76	0.79
<b>Model 1</b>	0.37	0.39	0.40

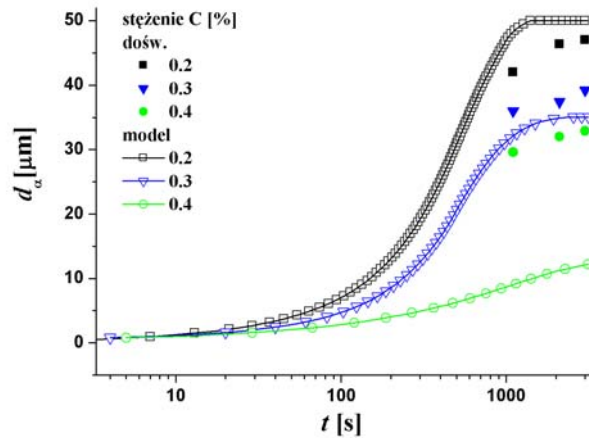


Rys.70. Zmiana ułamka objętości ferrytu z temperaturą obliczona z uwzględnieniem pierwotnego gradientu stężenia.

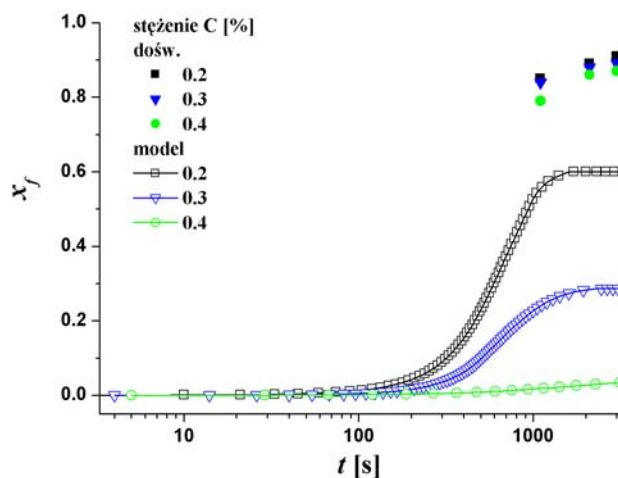
W przypadku stali nawęglanych wyniki symulacji i pomiarów doświadczalnych porównano na wykresach zależności wielkości ziarna ferrytu  $d_\alpha$  od zawartości węgla, dla różnych temperatur, prędkości chłodzenia i czasu trwania przemiany (Rys.71-Rys.72). Na Rys.73 i Rys.74 zestawiono natomiast wartości doświadczalne i obliczeniowe (wg modelu 4) zmian wielkości ułamka ferrytu z czasem przemiany przy temperaturze 780°C, dla różnych zawartości węgla w stali oraz zmian ułamka ferrytu z zawartością węgla w stali, przy różnych temperaturach przemiany. W wszystkich przypadkach wyniki symulacji dały niższe wartości ułamków ferrytu od wartości uzyskanych na drodze doświadczalnej.



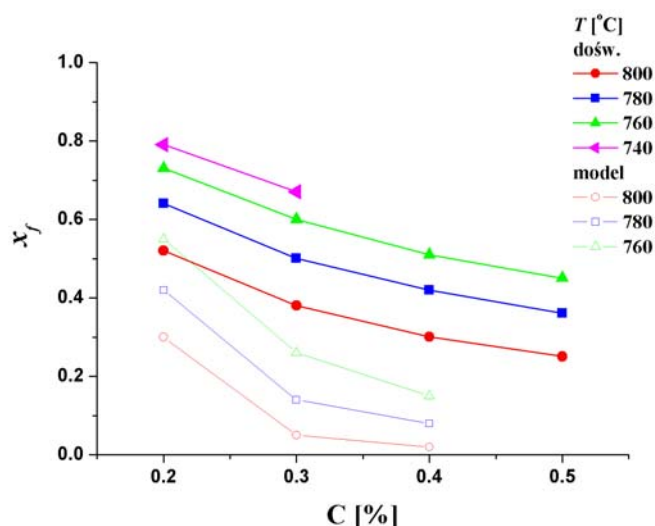
Rys.71. Zmiana wielkości ziarna ferrytu w czasie przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  przy stałej prędkości chłodzenia dla modelu 1 i stali nawęglanej.



Rys.72. Zmiana wielkości ziarna ferrytu z czasem w stali nawęglanej, wytrzymywanej izotermicznie w temperaturze 780°C, podczas przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla modelu 1.



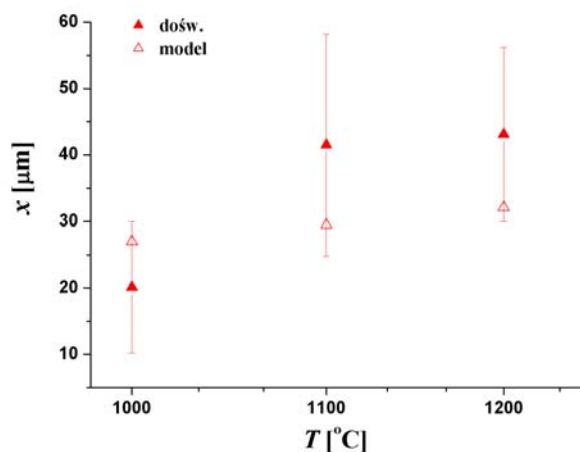
Rys.73. Zmiana wielkości ułamka ferrytu z czasem w stali nawęglanej, wytrzymywanej izotermicznie w temperaturze 780°C, podczas przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla modelu 4.



Rys.74. Zmiana ułamka ferrytu z temperaturą w czasie przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla modelu 4 i stali nawęglanej.

### 6.4.3. Weryfikacja doświadczalna wzrostu ferrytu płytkowego

Weryfikacje doświadczalne symulacji wzrostu kierunkowego ferrytu przedstawiono na Rys.75. Ograniczono się do zaprezentowania zmian długości płytek z temperaturą austenitowania. Zmian szerokości płytek nie analizowano, ze względu na ograniczenia modelu numerycznego. Doświadczalnie i symulacyjnie uzyskano analogiczne zmiany długości płytek z temperatura austenitacji. Długość płytek ferrytu rosła z temperaturą austenitowania, co wiązało się z rozrostem ziarn austenitu. W granicach błędu pomiarowego uzyskano zgodność wyników symulacji numerycznych długości płytek ferrytu z danymi doświadczalnymi, co świadczy o poprawności zastosowanej metody obliczeniowej.



Rys.75. Zmiana długości płytki ferrytu z temperaturą austenitowania.

## 7. Podsumowanie

Celem niniejszej pracy było numeryczne rozwiązanie równania dyfuzji z ruchomą powierzchnią międzyfazową i ocena możliwości zastosowania tego rozwiązania do modelowania przemiany austenit - ferryt. Przedmiotem modelowania była przemiana  $\gamma-\alpha$  w stalach. Przyjęto generalne założenie o kontrolującym wpływie dyfuzji węgla na przebieg przemiany. Postawiono tezę, że przy tym założeniu model matematyczny oparty na rozwiązaniu II prawa Ficka dla przypadku ruchomej powierzchni międzyfazowej pozwoli na poprawną symulację przemiany  $\gamma-\alpha$  w odniesieniu do wartości doświadczalnych, dla różnych gatunków stali, zmiennych temperatur przemiany i zmiennych prędkości chłodzenia z zakresu austenitu.

W modelu zastosowano izotropowy współczynnik dyfuzji węgla w funkcji stężenia i temperatury. Warunki początkowe i brzegowe rozwiązania równania II prawa Ficka na powierzchni międzyfazowej przyjęto zgodne z warunkami Dirichleta, przy czym wartości stężeń odpowiadały warunkom pararównowagi w układzie Fe-Mn-C. Na pozostałych powierzchniach obowiązywał warunek Neumanna.

Sformułowano własny model matematyczny przemiany  $\gamma-\alpha$  oparty na rozwiązaniu równania dyfuzji dla czterech kształtów ziaren austenitu i ferrytu, w układach: 1D (model 1 - liniowy), 2D (model 2 - koło w kole, model 4 - sześciokąt foremny w sześciokącie foremnym) i 3D (model 3 - kula w kuli). Rozwiązanie równania dyfuzji przeprowadzono metodą różnic skończonych oraz elementów skończonych, przy pomocy pakietu MATLAB 6.5 własnego oprogramowania oraz komercyjnego programu ADINA v.8.1. Wyniki symulacji wyrażono w postaci wykresów zmian wielkości ziaren ferrytu  $d_\alpha$ , zmian ułamka ferrytu  $f_f$  i ułamka objętości ferrytu  $x_f$  oraz krzywych segregacji węgla przed frontem przemiany.

Do modelowania kierunkowego wzrostu ferrytu zastosowano rozwiązanie II prawa Ficka dla mechanizmu progowego, z wykorzystaniem algorytmu Enomoto [18,19]. W modelu nie uwzględniono wpływu ruchliwości powierzchni międzyfazowej na przebieg wzrostu płytek ferrytu, zakładając, że dyfuzja jest jedynym mechanizmem kontrolującym wzrost płytek. Do modelu wprowadzono dwa warunki brzegowe: stałego gradientu (UG) oraz stałej prędkości (UV). Rozwiązania równania dyfuzji dokonano metodą różnic skończonych przy pomocy pakietu MATLAB 6.5. Wyznaczono długość płytek dla 3 temperatur austenitowania i stałej prędkości chłodzenia.

Efektym symulacji numerycznych równoosiowego wzrostu ferrytu były krzywe typu S, przedstawiające kinetykę przemiany  $\gamma-\alpha$  zachodzącej w założonych warunkach, oraz charakter

wzrostu ziaren ferrytu. Przebieg krzywych był zgodny z teorią przemiany  $\gamma-\alpha$  w założonych stalach [20,21]. Na wyniki symulacji wpływ miał zarówno przyjęty kształt ziaren austenitu i ferrytu, jak i wielkość pierwotnych ziaren austenitu. Zbliżone do siebie wyniki symulacji uzyskano dla modelu liniowego (model 1) oraz modelu sześciokąt w sześciokącie (model 4).

W obliczeniach wykorzystywano doświadczalną wielkość pierwotnego ziarna austenitu oraz termodynamiczne wykresy pararównowagi dla założonych składów chemicznych stali. Przyjętą procedurę obliczeniową uzasadnia fakt, że wielkość pierwotnego ziarna austenitu wprowadzana do programu zasadniczo wpływa na wynik symulacji numerycznych. Wpływ założonych warunków termodynamicznych przemiany nie był w pracy analizowany, co uniemożliwiło oszacowanie błędu symulacji.

W zastosowanym modelu przemiany  $\gamma-\alpha$  podstawowe znaczenie miała segregacja węgla przed frontem przemiany. Przebudowa sieci A1 w A2 jest możliwa po odprowadzeniu węgla sprzed frontu przemiany. Rezultatem symulacji numerycznych segregacji była krzywa rozkładu stężenia węgla przed frontem przemiany, zweryfikowana przez porównanie z krzywymi rozkładu nanotwardości. Otrzymano zgodną zależność gradientów stężenia węgla i nanotwardości oraz odpowiadający rzeczywistości wzrost gradientu z obniżeniem temperatury.

Weryfikacja poprawności symulacji przemiany  $\gamma-\alpha$  dla równoosiowego wzrostu ferrytu została dokonana przez porównanie otrzymanych wyników z badaniami doświadczalnymi. Wyniki doświadczalne otrzymano metodami metalograficznymi na próbkach stali różniących się zawartością węgla, na próbkach stali nawęglonej, a w przypadku badań wzrostu kierunkowego na próbkach stali C56D. Próbki poddawano obróbce cieplnej w założonych warunkach, tożsamyh z warunkami wprowadzanymi do obliczeń numerycznych. Badania doświadczalne stworzyły możliwość weryfikacji wszystkich najważniejszych parametrów otrzymywanych z symulacji numerycznych przemiany  $\gamma-\alpha$ , a więc wielkości ziarna, ułamka objętości ferrytu, segregacji węgla, temperatur początku i końca przemiany. Dało to możliwość całościowego spojrzenia na symulacje numeryczne przemiany, zarówno pod kątem parametrów przemiany, jak i jej „produktu”.

Baza doświadczalna może być z powodzeniem wykorzystana do weryfikacji modeli numerycznych przemian fazowych w zakresie dwufazowym. Porównania dokonano metodą tabelaryczną oraz wykresną, z uwzględnieniem doświadczalnych błędów pomiarowych.

Analiza uzyskanych wyników potwierdza zgodność jakościową i, w pewnym zakresie, ilościową modelu z doświadczeniem. We wszystkich badanych przypadkach występowała zgodność jakościowa, zaznaczały się jednak różnice ilościowe, co ogranicza możliwości zastosowania modelu do rozwiązywania praktycznych problemów technologicznych.

Poprawność numerycznego opisu kinetyki przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  weryfikowano na wykresach CTPc. Zaznaczone tam doświadczalne i obliczone linie początku przemiany oraz linie końca przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  wskazują na zgodność opisu numerycznego i doświadczalnego jedynie dla stali modelowej 1 i 2 oraz dla modelu 4. Żaden z modeli nie określił zgodnie z danymi doświadczalnymi zmian ułamka objętości ferrytu.

Doświadczalna weryfikacja wyników symulacji przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  pozwoliła na ocenę poprawności modelu opartego na rozwiązaniu równania dyfuzji dla przypadku ruchomej powierzchni międzyfazowej. Stwierdzono poprawność przyjętego rozwiązania jako modelu przemiany dla stali o niskiej zawartości węgla, dla wysokich temperatur przemiany i niskich prędkości chłodzenia. Zastosowany model pozwala na otrzymanie prawidłowych wielkości ziarna ferrytu oraz zbliżonej do rzeczywistości segregacji węgla przed frontem przemiany. Zdecydowanie negatywne wyniki weryfikacji otrzymano dla stali charakteryzującej się strukturą pasmową.

Próbki nawęglone wykazały duże zróżnicowanie wielkości ziarna ferrytu i ułamka objętości ferrytu w porównaniu z wynikami pomiarów doświadczalnych. Obecność pierwotnego gradientu stężenia węgla wpływa stymulująco na wzrost wielkości ziaren ferrytu i ułamka objętości ferrytu. Można sądzić, że stwierdzona rozbieżność pomiędzy wynikami symulacji i badań doświadczalnych wymaga korekty założeń wprowadzonych do modelu. Podjęte w tym zakresie próby przybliżają wyniki symulacji do wielkości pomiarowych.

Największe znaczenie dla prawidłowego opisu przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  ma założony kształt ziaren. Wpływa on zarówno na końcową wielkość ziarna ferrytu, wielkość ułamka ferrytu w trakcie przemiany, jak i na segregację węgla przed frontem przemiany. Symulacje numeryczne potwierdzają założenie, zgodne ze skalą ASTM, że najlepszym przybliżeniem ziarna austenitu i ferrytu jest sześciokąt foremny.

Opracowany model przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  dla wzrostu równoosiowego można z powodzeniem wykorzystać do określania wielkości ziarna ferrytu, temperatury początku przemiany i segregacji pierwiastków przed frontem przemiany.

Założenie kontrolującego wpływu dyfuzji węgla na przebieg przemiany nie pozwala jednak na w pełni prawidłowy opis kinetyki przemiany, co potwierdzają błędne wyniki dotyczące zmiany ułamka ferrytu w czasie przemiany, szczególnie w jej początkowym etapie. Przyjęcie w modelu przemiany  $\gamma$ - $\alpha$  jedynie kontrolującego wpływu dyfuzji węgla jest zbyt dużym uogólnieniem. W rozważanych stalach przed frontem segreguje Mn i Si. Zmieniają one aktywność węgla, co należy uwzględnić w obliczeniach. Mangan ponadto ściąga węgiel w austenicie, co może prowadzić do łącznej segregacji Mn i C. Dalsze badania powinny również uwzględnić zjawiska zachodzące na

powierzchni międzyfazowej, na przykład powstawanie wydzielen węglików, a także zmianę liczby zarodków wraz z temperaturą przemiany i prędkością chłodzenia. W badanym zakresie temperatur w stali o zawartości 0.2%C, ilość zarodków może maleć do połowy maksymalnej wielkości, przy nieznacznej zmianie przechłodzenia [98,99]. Przyjęcie w modelu założenia, że w każdym narożu ziarna austenitu rośnie ziarno ferrytu jest więc zbyt dużym uproszczeniem. W rezultacie wielkości ziarna i ułamka ferrytu są mniejsze niż to wynika z badań doświadczalnych.

Wyniki pracy wykazują, że sam model dyfuzji nie może być kompletnym modelem przemiany ferrytycznej. Opracowany model ma jednak duże znaczenie poznawcze i może być narzędziem wspomagającym badania naukowe oraz projektowanie procesów technologicznych. Przeprowadzone symulacje dają możliwość przewidywania przebiegu zjawisk zachodzących przed frontem przemiany. W obecnej postaci model wykorzystywany jest do opisu procesów zachodzących w materiale w skali mikro, zatem może on stanowić podstawę konwencjonalnego modelu wieloskalowego, typu hierarchicznego [100].

Jednym z wyników pracy jest program komputerowy wykorzystujący metodę elementów skończonych do modelowania dyfuzji przed frontem przemiany ferrytycznej. Autorka przystosowała opracowany w Katedrze Informatyki Stosowanej i Modelowania program MES, obliczający transport ciepła, do symulacji dyfuzji. Wprowadziła do tego programu odpowiednie warunki brzegowe i równania opisujące współczynnik dyfuzji węgla, a także model ruchu granicy międzyfazowej oparty na rozwiązaniu problemu Stefana. W konsekwencji powstał program, który umożliwi Autorce dalsze badanie zjawisk zachodzących w czasie przemian fazowych. W programie możliwe jest wprowadzanie w łatwy sposób takich elementów jak powiązanie warunku brzegowego na granicy fazowej z wielkością krzywizny tej granicy, uwzględnienie energii granicy w opisie kinetyki przemiany oraz szereg innych zjawisk, których opisanie wymaga dostępu do kodów źródłowych czyli nie może być wykonane w programach komercyjnych. Opracowany program stanowił będzie narzędzie wspomagające badania naukowe nad modelowaniem przemian fazowych.

## 8. Wnioski

1. Model przemiany  $\gamma-\alpha$  z zastosowaniem numerycznego rozwiązania równania dyfuzji z ruchomą powierzchnią międzyfazową daje, w odniesieniu do wartości doświadczalnych, poprawne wyniki symulacji: segregacji węgla przed frontem przemiany oraz wzrostu ferrytu ziarnistego i płytkowego, dla różnych gatunków stali, w warunkach zmiennych temperatur przemiany i prędkości chłodzenia, co uzasadnia słuszność sformułowanej tezy.
2. Poprawność opracowanego modelu przemiany ferrytycznej  $\gamma-\alpha$  wyraża się zgodnością jakościową wyników symulacji z doświadczeniem, we wszystkich analizowanych przypadkach oraz zgodnością ilościową dla: niskich zawartości węgla w stali (0.1-0.2%C), relatywnie wysokich temperatur przemiany, niskich prędkości chłodzenia (0.05-0.1°C/s).
3. Za poprawną można uznać przyjętą procedurę obliczeniową. W symulacjach przemiany  $\gamma-\alpha$  w badanych stalach można więc z powodzeniem stosować rozwiązanie II prawa Ficka z warunkami początkowymi i brzegowymi Dirichleta, w których wartości stężeń odpowiadały warunkom pararównowagi w układzie Fe-Mn-C, a zależny od stężenia pierwiastków i temperatury przemiany współczynnik dyfuzji węgla  $D$  miał postać izotropową.
4. W modelach numerycznych przemiany  $\gamma-\alpha$  podstawowe znaczenie ma dobór właściwego kształtu pierwotnego ziarna austenitu i wzrastającego w nim ziarna ferrytu. W symulacjach wielkości ziarna ferrytu  $d_\alpha$  i ułamka ferrytu  $x_f$  najlepsze wyniki otrzymano dla modelu 2D - sześciokąt w sześciokącie. Porównywalne z nimi były wyniki modelu liniowego.
5. Zastosowany model poprawnie opisuje segregację węgla przed frontem przemiany, co można zweryfikować pomiarami nanotwardości, wykorzystując liniową zależność twardości martenzytu od zawartości węgla, pod warunkiem przesylenia austenitu graniczącego z ferrytem.
6. W symulacjach przemiany  $\gamma-\alpha$  w stalach nawęglonych należy uwzględnić pierwotny gradient stężenia węgla, a nie jego lokalne stężenie. Obecność gradientu wpływa stymulująco na wzrost wielkości ziaren ferrytu  $d_\alpha$  i ułamka objętości ferrytu  $x_f$ .
7. Ograniczenia zakresu poprawności zastosowanego modelu przemiany  $\gamma-\alpha$  świadczą, że przyjęcie założenia o kontrolującej roli dyfuzji węgla jest w przeprowadzonych obliczeniach zbyt dużym uogólnieniem. W ewentualnej rozbudowie modelu należy uwzględnić zjawiska zachodzące na powierzchni międzyfazowej, segregację innych pierwiastków stopowych stali przed frontem przemiany, a także zmianę liczby zarodków z temperaturą.

8. Opracowany model jest konkurencyjny w odniesieniu do innych modeli numerycznych przemiany ferrytycznej  $\gamma-\alpha$ , gdyż pozwala opisać kinetykę przemiany w warunkach dowolnych zmian temperatury.
9. Na rezultaty symulacji numerycznej wzrostu ferrytu podczas przemiany  $\gamma-\alpha$  nie ma wpływu zastosowana metoda rozwiązania równania różniczkowego cząstkowego. Zarówno MRS, jak i obydwie programy MES dają poprawne wyniki.
10. Opracowany model przemiany  $\gamma-\alpha$  może być zastosowany do określenia wpływu: założonego kształtu ziarna austenitu i ferrytu, prędkości chłodzenia, zawartości węgla i wybranych pierwiastków stopowych, na wielkość ziaren powstałego ferrytu  $d_\alpha$ , ułamek objętości fazy ferrytycznej  $x_f$ , segregację węgla przed frontem przemiany, w stalach niskowęglowych oraz w stalach nawęglonych. Model pozwala również na generowanie struktury austenitu algorytmem Voronoi.
11. Zaproponowany model numeryczny, opisujący przemianę ferrytyczną  $\gamma-\alpha$  w skali mikro, może stanowić podstawę konwencjonalnego modelu wieloskalowego, typu hierarchicznego.
12. Stworzona baza doświadczalna może posłużyć do weryfikacji modeli przemiany  $\gamma-\alpha$ , wspomagać badania naukowe i procesy technologiczne.

## 9. Literatura

1. Staub F., Atlas metalograficzny struktur, Stal, WNT, Warszawa, 1964.
2. Cheng L.M., Hawbolt E.B., Meadowcroft T.R., Modeling of airt precipitation in low carbon steels, *Scr. Mater.*, 41, 1999, 673-678.
3. Kempen A.T.W., Sommer F., Mittemeijer E.J., The kinetics of austenite-ferrite phase transformation of Fe-Mn: differential thermal analysis during cooling, *Acta Mater.*, 50, 2002, 3545-3555.
4. Varma M.R., Sasikumar R., Pillali S.G.K., Nair P.K., Cellular automaton simulation of microstructure evolution during austenite decomposition under continuous cooling conditions, *Bull. Mater. Sci.*, 24, 2001, 305-312.
5. Serajzadeh S., Modelling of temperature history and phase transformations during cooling of steel, *J. Mater. Process. Techn.*, 146, 2004, 311-317.
6. Suehiro, M., Senuma, T., Yada, H., Sato, K., Application of mathematical model for predicting microstructural evolution to high carbon steels, *ISIJ Int.*, 32, 1992, 433-439.
7. Christian J.W., The theory of transformation in metals and alloys, 1-2, Wyd. Pergamon, Londyn, 2002.
8. Faleiros A.C., Rabelo T.N., Thim G.P., Oliveira M.A.S., Kinetics of Phase Change, *J. Mat. Res.*, 3, 2000, 51-60.
9. Bhadeshia H.K.D.H., Diffusional formation of ferrite in iron and its alloys, *Progr. Mater. Sci.*, 29, 1985, 321-386.
10. Krielaart G.P., Sietsma J., van der Zwaag S., Ferrite formation in Fe-C alloys during austenite decomposition under non-equilibrium interface conditions, *Mater. Sci. Eng. A*, A237, 1997, 216-223.
11. Odqvist J., Hillert M., Agren J., Effect of alloying elements on the  $\gamma$  to  $\alpha$  transformation in steel. I, *Acta Mater.*, 50, 2002, 3211-3225.
12. Mitkowski W., Wzrost ziaren ferrytu w austenicie, *Mat. Konf. KomPlasTech 2001*, ed. Grosman F., Piela A., Pietrzyk M., Kusiak J., Korbielów, 2001, 71-76.
13. Mitkowski W., Pietrzyk M., Zagadnienie ruchomej granicy w zastosowaniu do modelowania przemiany austenit-ferryt, *Przegląd Mechaniczny*, 1, 2001, 22-25.
14. Mitkowski W., Suliga M., Pietrzyk M., Możliwości modelowania przemian fazowych przez rozwiązanie równań dyfuzji z ruchomą granicą, *Mat. Konf. Teoria i inżynieria procesów metalurgicznych*, ed. Norwisz J., Jarosz P., Gargul K., KTiIPM AGH, 2003, 239-251.

15. Suliga M., Pietrzyk M., Mitkowski P., Ocena rozwiązania 2D i 3D równania dyfuzji z ruchomą granicą w zastosowaniu do modelowania przemian fazowych, *Rudy i Metale Nieżelazne*, 48, 2003, 517-521.
16. Suliga M., Pietrzyk M., Możliwości modelowania dyfuzyjnych przemian fazowych przez rozwiązanie MES równania dyfuzji z ruchomym brzegiem, *Mat. 11. Konf. Informatyka w Technologii Metali KomPlasTech'2004*, ed. Grosman F., Piela A., Pietrzyk M., Kusiak J., Zakopane, Akapit, 2004, 231-238.
17. Pernach M., Pietrzyk M., Numeryczny model wzrostu ferrytu płytkowego, *Mat. 13. Konf. Informatyka w Technologii Metali KomPlasTech'2006*, ed. Szeliga D., Pietrzyk M., Kusiak J., Szczawnica, Akapit, 2006, 259-265.
18. Enomoto M., Computer modeling of the growth kinetics of ledged interphase boundaries-I. Single step and infinite train of steps, *Acta Mater.*, 35, 1987, 935-945.
19. Enomoto M., Computer modeling of the growth kinetics of ledged interphase boundaries-II. Finite trains of step, *Acta Mater.*, 35, 1987, 947-956.
20. Kędzierski Z., *Przemiany fazowe w metalach i stopach*, Wyd. AGH, Kraków, 1988.
21. Przybyłowicz K., *Podstawy teoretyczne metaloznawstwa*, Warszawa, 1999.
22. Nabarro F.R.N., The Strains Produced by Precipitation in Alloys, *Proc.Roy.Soc.*, 175, 1940, 519-538.
23. Nygård M., Gudmundson P., Micromechanical modeling of ferritic/pearlitic steels, *Mat. Sci. Eng.*, A325, 2002, 435-443.
24. Blicharski M., *Przemiany fazowe*, Wyd. AGH, Kraków, 1990.
25. Capdevila C., Caballero F.G., Garcia de Andres C., Modeling of kinetics of austenite-to-allotriomorphic ferrite in 0.37C-1.45Mn-0.11V microalloyed steel, *Metall. Trans. A*, 32A, 2001, 661.
26. Cottrell A.H., *Theoretical structural metallurgy*, Wyd. Arnold Ltd., Londyn, 1957.
27. Gottstein G., *Physikalische Grundlagen der Materialkunde*, Wyd. Springer-Verlag, Berlin, 2001.
28. Girifalco L.A., *Wędrowka atomów w kryształach*, PWN, Warszawa, 1964.
29. Przybyłowicz K., *Metaloznawstwo*, Wyd. Naukowo-Techniczne, Warszawa, 1994.
30. Russel K.C., Grain boundary nucleation kinetics, *Acta Mater.*, 17, 1969, 1123-1131.
31. Enomoto M., Prediction of TTT-diagram of proeutectoid ferrite reaction in iron alloys from diffusion growth theory, *ISIS Int.*, 32, 1992, 297-305.
32. Lange III W.F., Enomoto M., Aaronson H.I., Precipitate nucleation kinetics at grain boundaries, *Int. Mater. Review*, 34, 1989, 125-150.

33. Pham T.T., Hawbolt E.B., Brimacombe J.K., Predicting the onset of transformation under noncontinuous cooling conditions, *Metall. Mater. Trans.*, 26A, 1995, 1987-1992.
34. Zener C., Kinetics of the decomposition of austenite, *Trans. AIME*, 167, 1946, 550-583.
35. Porter D.A., Easterling K.E., Phase transformation in metals and alloys, Wyd. Chapman&Hall, Londyn, 1993.
36. Ishida Y., Order structures and dislocations in bubble raft grain boundary, *J.Mat.Sci.*, 72, 1972, 72-83.
37. Zacky V.F., Aaronson H.I., Decomposition of austenite by diffusional processes, Interscience Publishers, Nowy Jork, 1962.
38. Mehl R.F., Barrett C.S., Smith D.W., Studies upon the Widmanstätten structure. IV. The iron-carbon alloys, *Trans. AIME*, 105, 1953, 215.
39. Shiflet G.J., Mangan M.A., Meng W.G., Growth by ledges, *Interface Sc.*, 6, 1998, 133-154.
40. Enomoto M., Thermodynamics and kinetics of the formation Widmanstätten ferrite plates in ferrous alloys, *Metall. Trans. A*, 25A, 1994, 1947-1955.
41. Kinsman K.R., Eichen E., Aaronson H.I., Thickening kinetics of proeutectoid ferrite plates in Fe-C Alloys, *Metall. Trans. A*, 6A, 1975, 303-317.
42. Kački E., Małolepszy A., Romanowicz A., *Metody numeryczne dla inżynierów*, Łódź, 2000.
43. Fortuna Z., Macukow B., Wąsowski J., *Metody numeryczne*, Warszawa, 1993.
44. Reddy J.N., *An introduction to the Finite element method*, Nowy Jork, 1993.
45. Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., *The finite element method*, Wyd. Butterworth-Heinemann College, Londyn, 1, 2000.
46. Majchrowski M., Równania różniczkowe, <http://alpha.mini.pw.edu.pl/~mm/konw/>
47. Claes J., *Numerical solution of partial differential equations by the finite element method*, Cambridge, 1995.
48. Hillert M., Nature of local equilibrium at the interface in the growth of ferrite from alloyed austenite, *Scr. Mater.*, 46, 2002, 447-453.
49. Lee K.J., Lee J.K., Kang K.B., Kwon O., Mathematical modelling of transformation in Nb microalloyed steels, *ISIJ Int.*, 32, 326-334.
50. Enomoto M., Local conditions at moving  $\alpha/\gamma$  boundaries of proeutectoid ferrite transformation in iron alloys, *Metall. Trans. A*, 37, 2006, 1703.
51. Kuziak R., *Matematyczne modelowanie i symulacja fizyczna zmian strukturalnych, przemian fazowych oraz procesów wydzieleniowych zachodzących podczas obróbki cieplno – plastycznej stali*, Wyd. IMŻ, Gliwice, 2005.

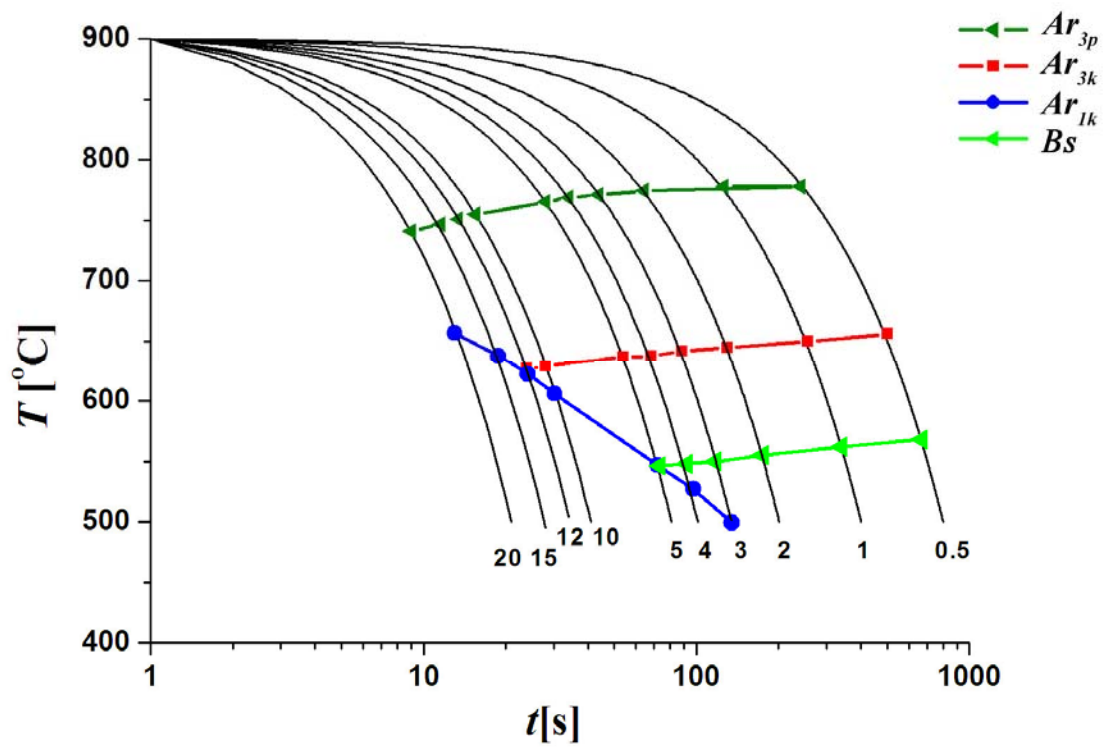
52. Pietrzyk M., Kuziak R., Kondek T., Physical and numerical modelling of plastic deformation of steels in two-phase region, *Mat.* 45. Konf. MWSP, Chicago, 2003, 209-220.
53. Hodgson P.D., Gibbs R.K., A mathematical model to predict the mechanical properties of hot rolled C-Mn and microalloyed steels, *ISIJ Int.*, 32, 1992, 1329-1338.
54. Beynon J.H., Sellars C.M., Modelling microstructure and its effects during multipass hot rolling, *ISIJ Int.*, 32, 359-367.
55. Yang Z.G., Wang J.J., Li C.M., Fang H.S., Zheng Y.K., Ledges in Widmanstätten ferrite observed by scanning tunnelling microscopy, *J. Mater. Sci.*, 17, 1998, 331-333.
56. Van der Ven A., Delaey L., Models for precipitate growth during the  $\gamma \rightarrow \alpha + \gamma$  transformation in Fe-C and Fe-C-M alloys, *Progr. Mater. Sci.*, 40, 1996, 181-264.
57. Trivedi R., The role of interfacial free energy and interface kinetics during the growth of precipitate plates and needles, *Metall. Trans. A*, 1A, 1970, 921-927.
58. Atkinson C., The growth kinetics of ledges during phase transformations: multistep interactions, *Proc. Roy. Soc.*, 384, 1992, 107-133.
59. Jones G.J., Trivedi R., The Kinetics of lateral growth, *J. Crystal Growth*, 29, 1975, 155-166.
60. Liu S.K., Yang L., Zhu D.G., Zhang J., The influence of the alloying elements upon the transformation kinetics and morphologies of ferrite plates in alloy steels, *Metall. Trans. A*, 25A, 1994, 1991-2000.
61. Hillert M., Agren J., On the definitions of paraequilibrium and orthoequilibrium, *Scr. Mater.*, 50, 2004, 697-699.
62. Yeon D.-H., Cha P.-R., Yoon J.-K., A phase field study for ferrite-austenite transitions under para-equilibrium, *Scr. Mater.*, 45, 2001, 661-668.
63. Purdy G.R., The theory of diffusional phase transformation and microstructure, *Mater. Charact.*, 39, 1997, 261-298.
64. Kozeschnik E., Vitek J.M., Ortho-equilibrium and para-equilibrium phase diagrams for interstitial/substitutional iron alloys, *Calphad*, 24, 2000, 495-502.
65. Fazeli F., Militzer M., Application of solute drag theory to model ferrite formation in multiphase steels, *Metall. Trans. A*, 36A, 2005, 1395-1405.
66. Enomoto M., Sonoyama T., Yada H., Kinetics of austenite to ferrite transformation in 3 mass % Mn low carbon steels, *Materials Transactions, JIM*, 39, 1998, 189-195.
67. Hillert M., Effect of alloying elements on the  $\gamma$  to  $\alpha$  transformation in steel, *Acta Mater.*, 50, 2002, 3211-3225.
68. Segal G., Vuik K., Vermolen F., A conserving discretization for the free boundary in a two-dimensional Stefan problem, *J. Comp. Physics*, 141, 1998, 1-21.

69. Savović S., Caldwell J., Finite difference solution of one-dimensional Stefan problem with periodic boundary conditions, *Int. J. Heat Mass Transfer*, 46, 2003, 2911–2916.
70. Neta B., Numerical solution of partial differential equations, Monterey, 2003 .
71. Van Leeuwen Y., Vooijs S., Sietsma J., van der Zwaag S., The effect of geometrical assumptions in modeling solid-state transformation kinetics, *Metall. Mat. Trans. A*, 29A, 1998, 2925-2935.
72. Kop T.A., Remijn P.G.W., Svetchnikov V., Sietsma J., van der Zwaag S., Some observation on the effect of austenitisation conditions on the transformation kinetics in an HSLA steel and related C-Mn steels, *J. Mat. Sci.*, 36, 2001, 1863-1871.
73. Kumar S., Kurtz S.K., Monte-Carlo study of angular and edge length distributions in three-dimensional Poisson–Voronoi Tessellation, *Mater. Charact.*, 34, 1995, 15-27.
74. Chan K.S., Lee J.K., Shiflet G.J., Russel K.C., Aaronson H.I., Generalization of nucleus shape-dependent parameters in the nucleation rate equation, *Metall. Trans. A*, 9A, 1978, 1016-1017.
75. te Velthuis S.G.E., van Dijk N.H., Rekveldt M.Th., Rekveldt M.Th., Sietsma J., van der Zwaag S., A three-dimensional model for the development of the microstructure in steel during slow cooling, *Mat. Sci. Eng.*, A277, 2000, 218-288.
76. Grujicic M., Zhang Y., Determination of effective elastic properties of functionally graded materials using Voronoi cell finite element method, *Mat. Sci. Eng.*, A251, 1998, 64-76.
77. Narayan K.L., Computer modelling of grain microstructure in three dimensions, *Comp. Phys. Commun.*, 93, 1996, 136-140.
78. Kop T.A., van Leeuwen Y., Sietsma J., Modelling the austenite to ferrite phase transformation in low carbon steels in terms of the interface mobility, *ISIJ Int.*, 40, 2000, 713-718.
79. Kumar M., Sasikumar R., Kesavan Nair P., Competition between nucleation and early growth of ferrite from austenite – studies using cellular automation simulations, *Acta Mater.*, 46, 1998, 6291-6303.
80. Kazeminezhad M., Karimi Taheri A., Prediction of ferrite grain size and tensile properties of a low carbon steel, *Mat. Sci. Techn.*, 20, 2004, 106-110.
81. Lange W.F., M. Enomoto M., Aaronson H.I., The kinetics of ferrite nucleation at austenite grain boundaries in Fe-C alloys, *Metall. Trans. A.*, 19A, 1988, 427-439.
82. Capdevila C., Garcia de Andres C., Caballero F.G., Incubation time of isothermally transformed allotriomorphic ferrite in medium carbon steels, *Scr. Mater.*, 44, 2001, 129-134.

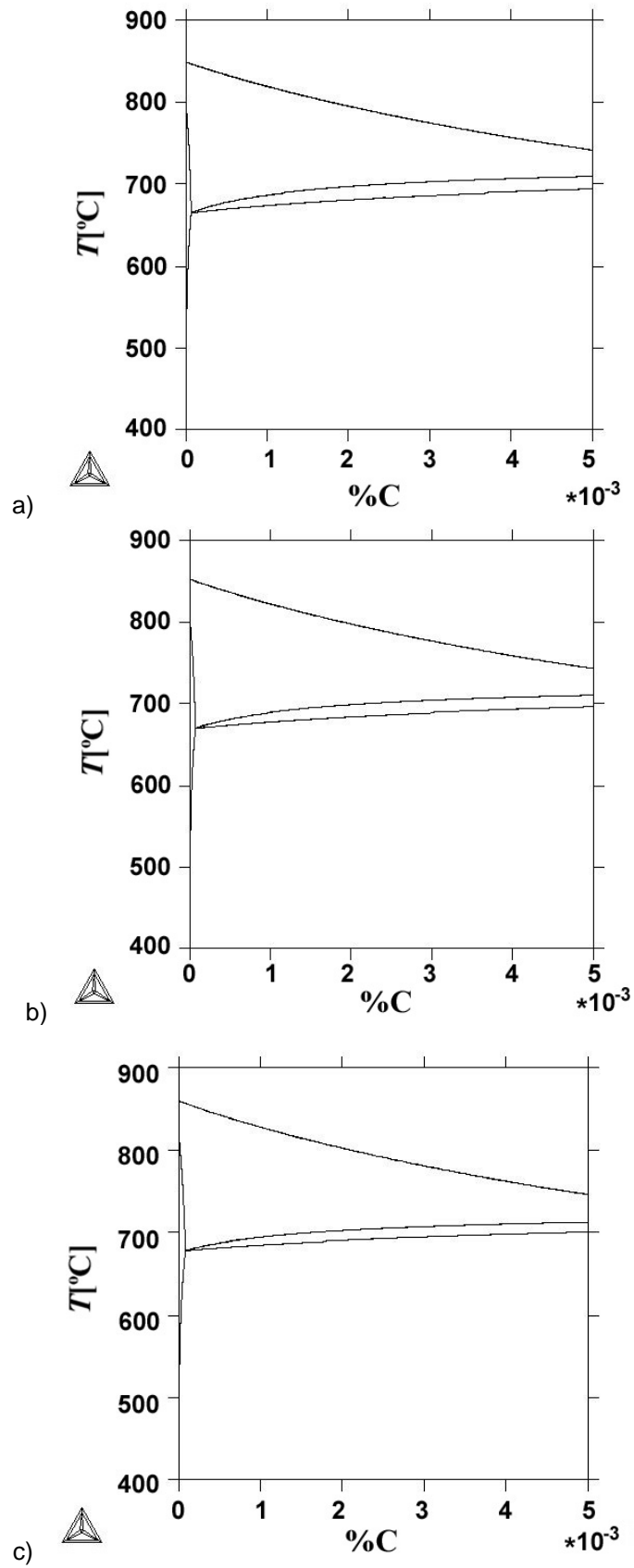
83. Bhadeshia H.K.D.H., David S.A., Vitek J.M., Reed R.W., Stress induced transformation to bainite in Fe-Cr-Mo-C pressure vessel steel, *Mat. Sci. Techn.*, 7, 1991, 686-698.
84. National Bureau of Standards (USA), *Circ. 539*, 43, 1955.
85. Zhu Y.T., Lowe T.C., Application of, and precautions for the use of, the rule of additivity in phase transformation, *Metall. Mater. Trans.*, 31B, 2000, 675-682.
86. Grong Ø., Myhr O.R., Additivity and isokinetic behavior in relation to diffusion controlled growth, *Acta Mater.*, 48, 2000, 445-452.
87. Munirajulu M., Dhindaw B.K., Biswas A., Phase transformation modelling to characterize carbon diffusivity in steel in the presence of Cr, *Scr. Mater.*, 37, 1997, 1693-1699.
88. Agren J., A revised expression for diffusivity of carbon in binary Fe-C austenite, *Scr. Metall. Mater.*, 20, 1986, 1507-1510.
89. Gut S., A computer program for the simulation of the steel carburizing process, *Inżynieria Materiałowa*, 105, 1998, 699-703.
90. Gut S., Computer simulation of multiphase diffusion layers growth, *Inżynieria Materiałowa*, 105, 1998, 695-699.
91. Bain E. C., Paxton H.W., *Alloying Elements In Steel*, ASM, Metals Park, 1961.
92. Dobrzański L.A., *Leksykon Materiałoznawstwa*, Verlag Dashofer, Warszawa, 2005.
93. Baza danych Instytutu Metalurgii Żelaza w Gliwicach, nr ew. 526.
94. Gut S., Computer programs for simulation of growth multiphase diffusion layers, *Mat. Sci. Forum*, 294, 1999, 565-568.
95. Lubuśka A., *Karty materiałowe*, Wyd. Śląsk, Katowice, 9, 1971.
96. Rauch Ł., Madej Ł., Gawąd J., Kusiak J., Pietrzyk M., Digital Materials – nowe kierunki rozwoju symulacji numerycznej procesów przetwórstwa metali, *Hutnik - Wiadomości Hutnicze*, 4, 2007, 208-216.
97. Dawson P.R., Miller M.P., The digital material – an environment for collaborative material design, <http://anisotropy.mae.cornell.edu/downloads/dplab/>.
98. Offerman S.E., van Dijk, N.H., Sietsma J., Grigull S., Grain nucleation and growth during phase transformations, *Sci. Mag.*, 298, 2002, 1003-1005.
99. Offerman S.E., van Dijk, N.H., Sietsma J., van der Zwaag S., Lauridsen E.M., Margulies L., Grigull S., Poulsen H.F., Reply to the discussion by Aaronson et al. to “Grain nucleation and growth during phase transformations” by S.E. Offerman et al., *Scr. Mater.*, 51, 2004, 937-941.
100. Madej L., Burczyński T., Pietrzyk M., Multi scale modelling, multi-physics phenomena and evolving discontinuities in metal forming, *CMMS*, in press.

**Aneks I**

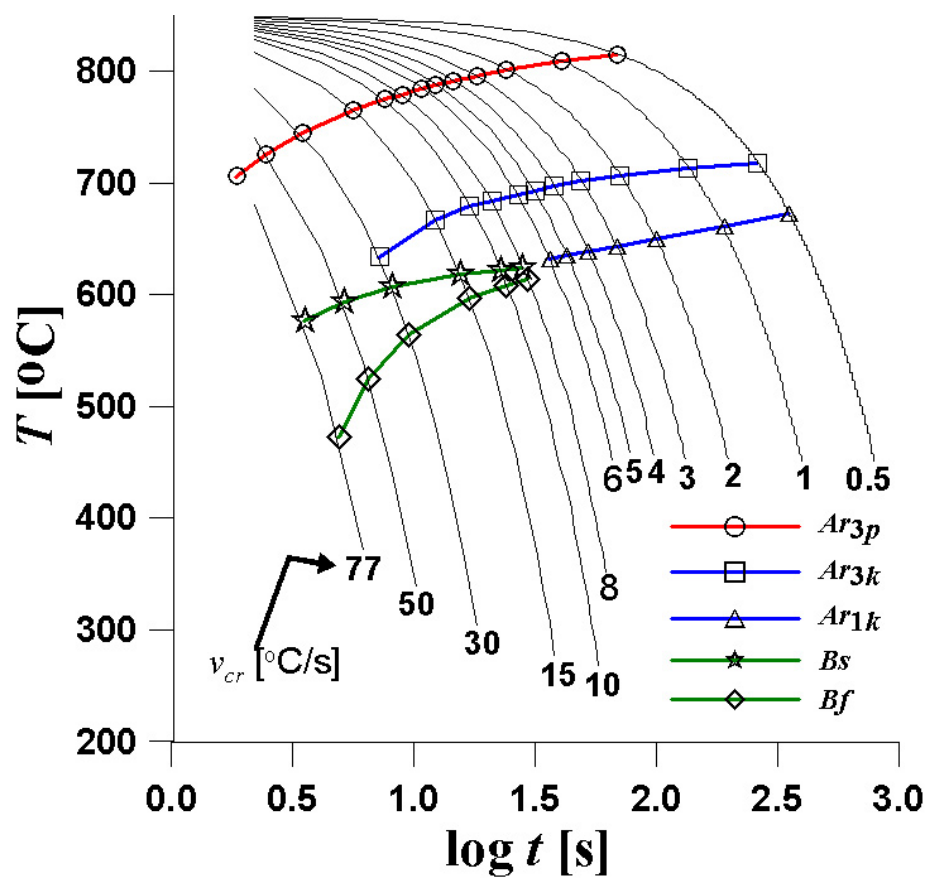
**ZBIÓR KRZYWYCH DYLATOMETRYCZNYCH  
I WYKRESÓW POMOCNICZYCH**



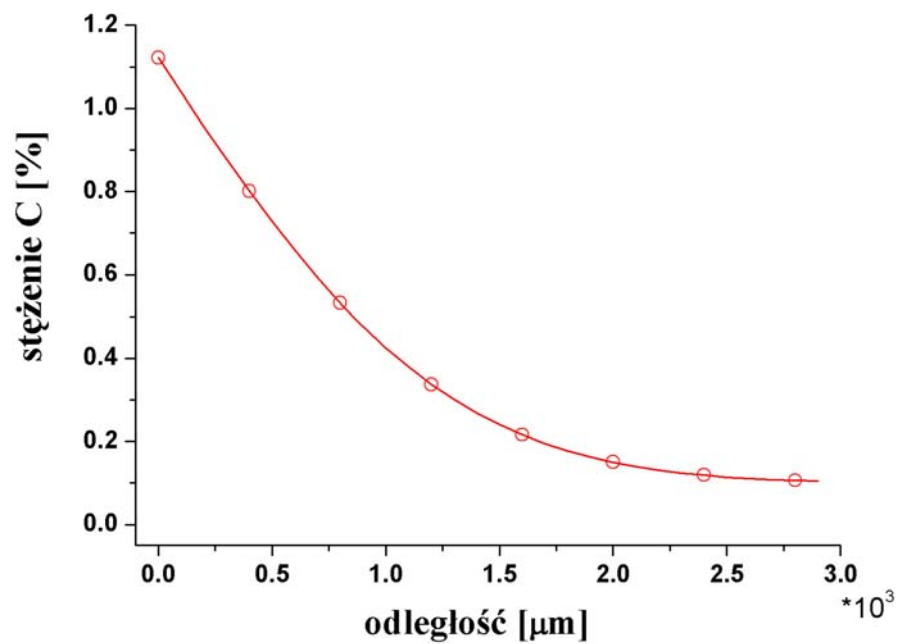
Rys.A1. Wykres CTPi dla stali 15G2ANb [93].



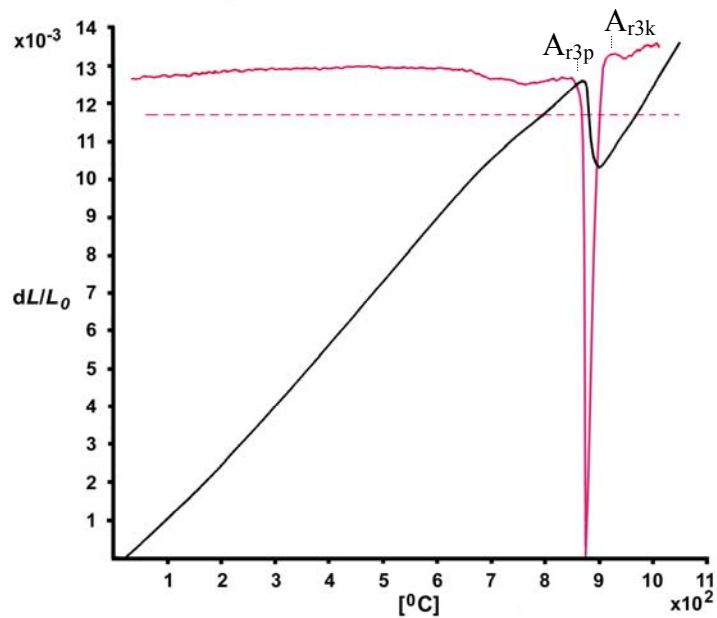
Rys.A2. Fragmenty układów równowagi dla stali: a) I, b) II, c) 15G2ANb.



Rys.A3. Wykres CTPc dla stali St3S.

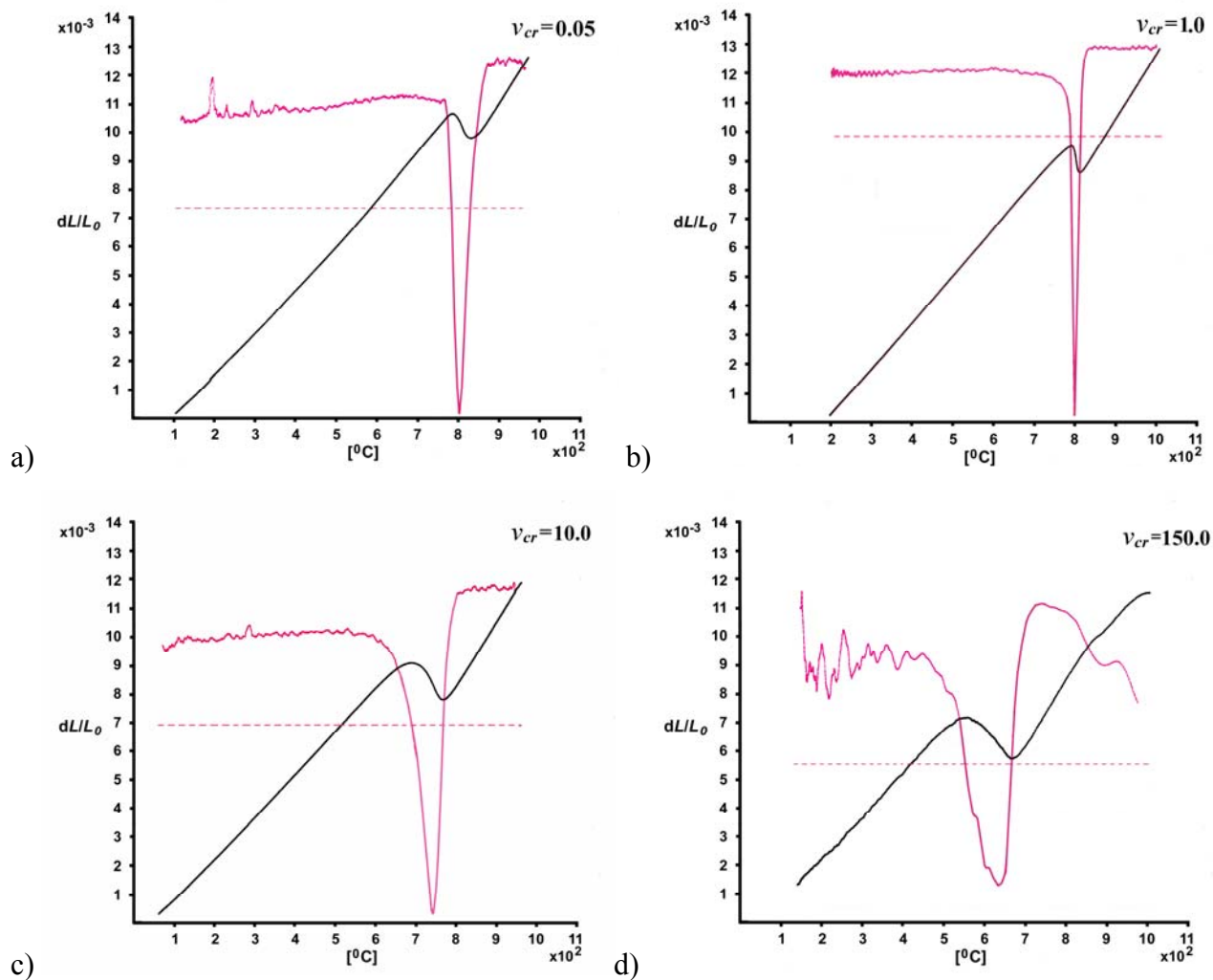


Rys.A4. Wykres zmian stężenia węgla dla stali modelowej II, nawęglanej w temperaturze 960°C przez okres 5 godzin, przy potencjale węglowym 1.2.

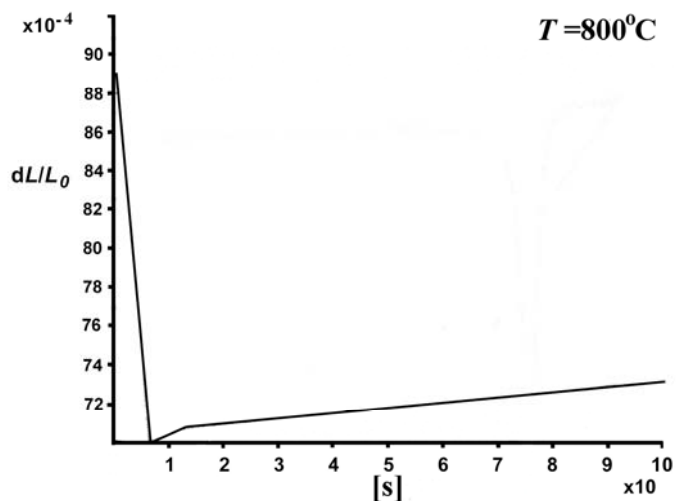


Rys.A5. Krzywa dylatometryczna próbek stali I - badania wstępne.

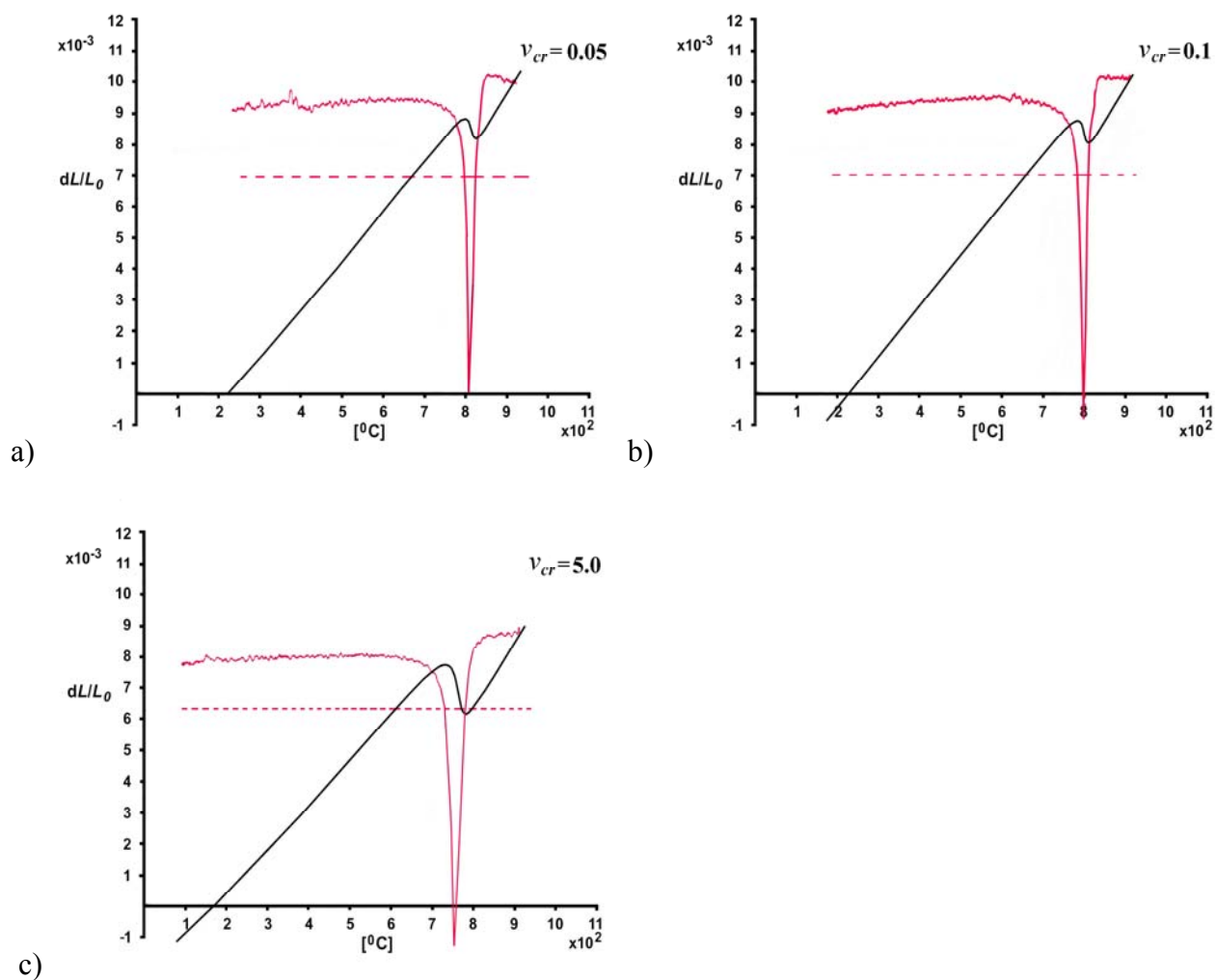
Linia czerwona – krzywa dylatometryczna, linia czarna – krzywa różniczkowa (oznaczenia obowiązują dla wszystkich rysunków przedstawiających krzywe dylatometryczne)



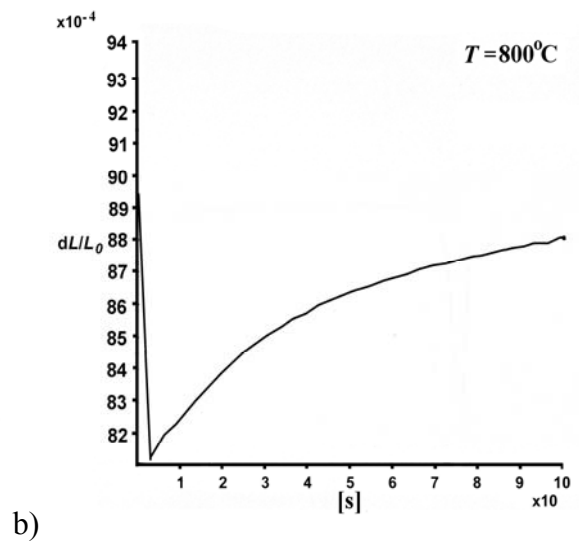
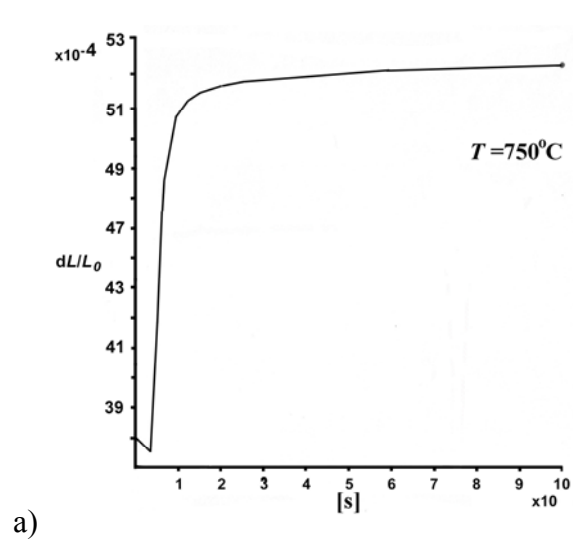
Rys.A6. Krzywe dylatometryczne stali I austenityzowanej przy temperaturze 960°C i chłodzonej z prędkościami: a) 0.05, b) 1.0, c) 10.0, d) 150.0 °C/s.



Rys.A7. Krzywa zmian wydłużenia próbki z czasem dla przemiany izotermicznej zachodzącej w stali I, przy temperaturze 800°C.



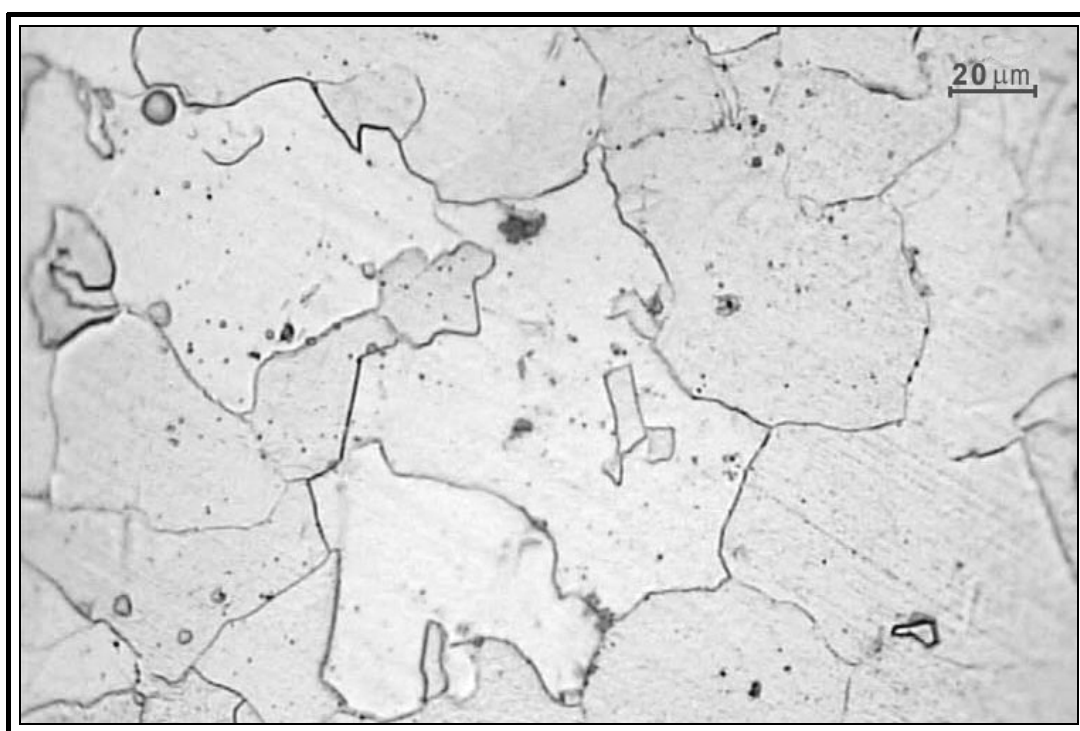
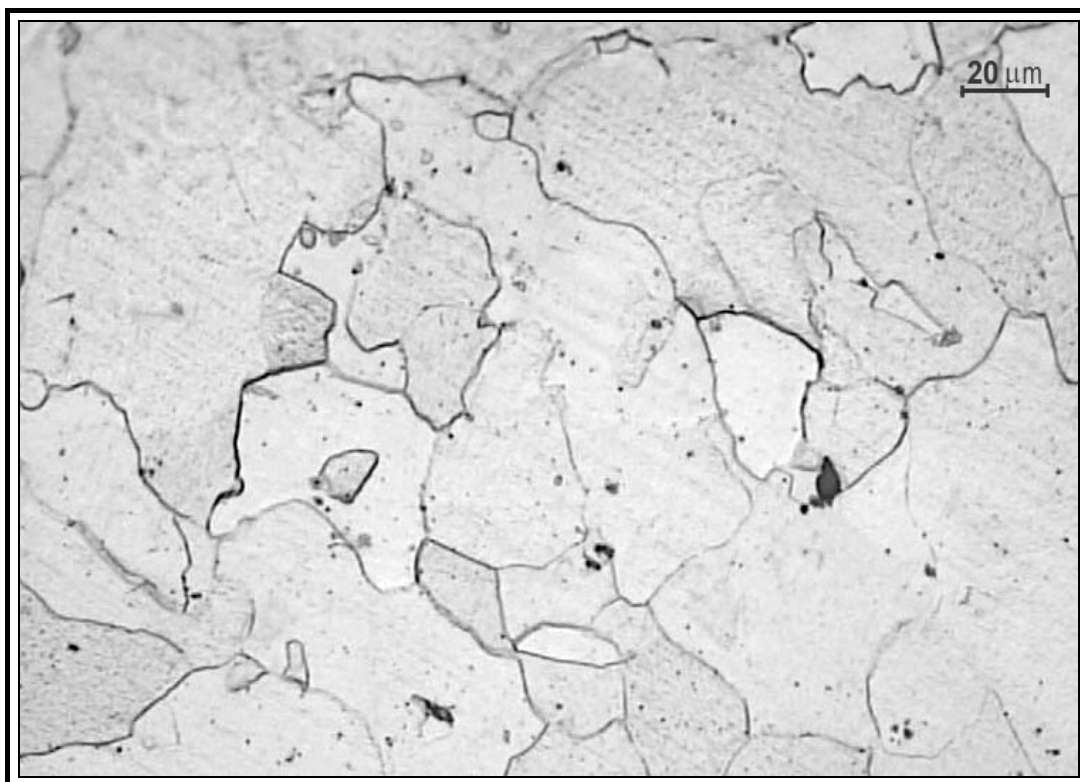
Rys.A8. Krzywe dylatometryczne stali II austenityzowanej przy temperaturze 960°C i chłodzonej z prędkościami: a) 0.05, b) 1.0, c) 5.0 °C/s.



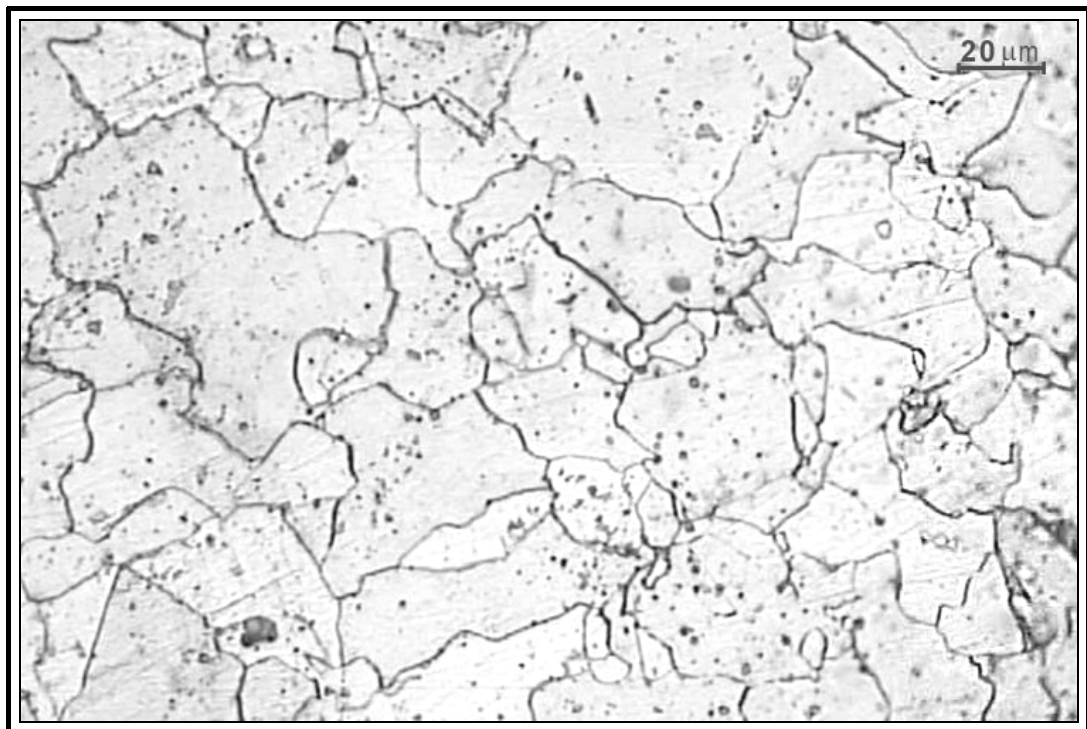
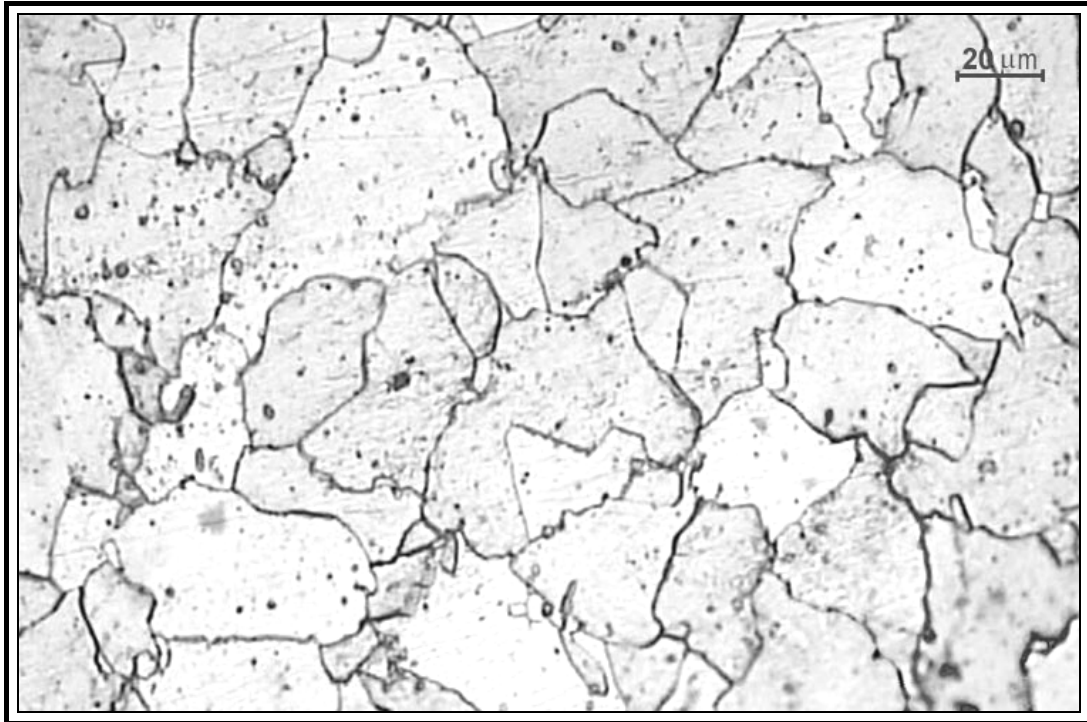
Rys.A9. Krzywa zmian wydłużenia próbki z czasem dla przemiany izotermicznej zachodzącej w stali II, przy temperaturze: a) 750°C, b) 800°C.

**Aneks II**

**ALBUM MIKROSTRUKTUR**



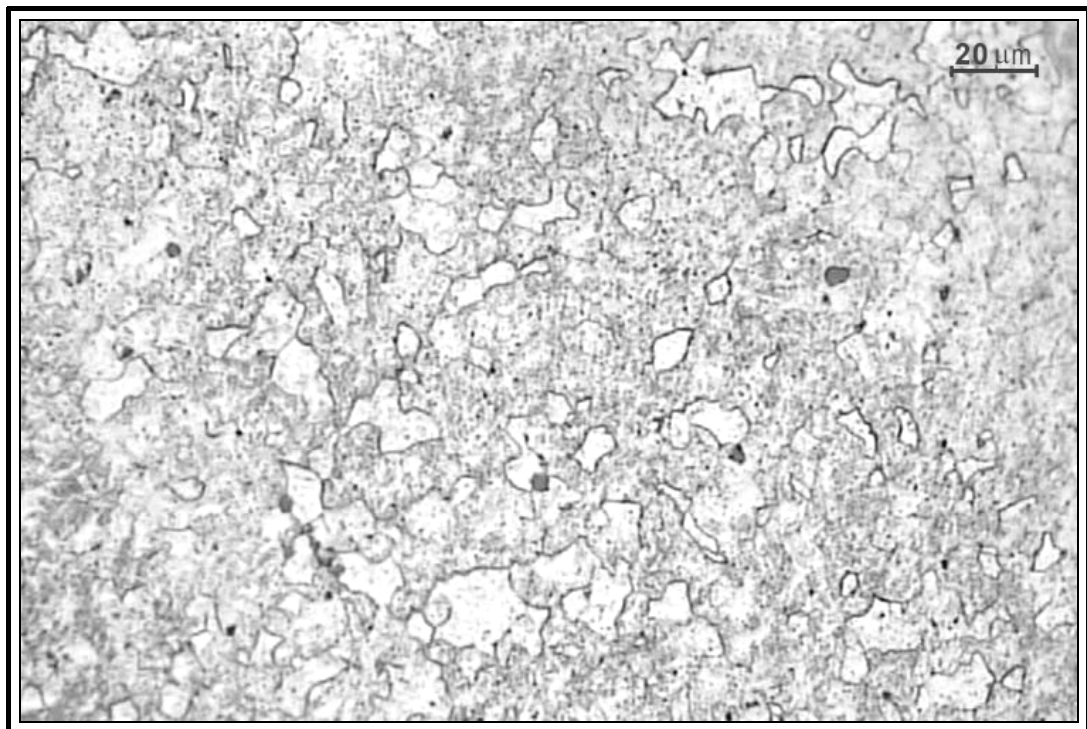
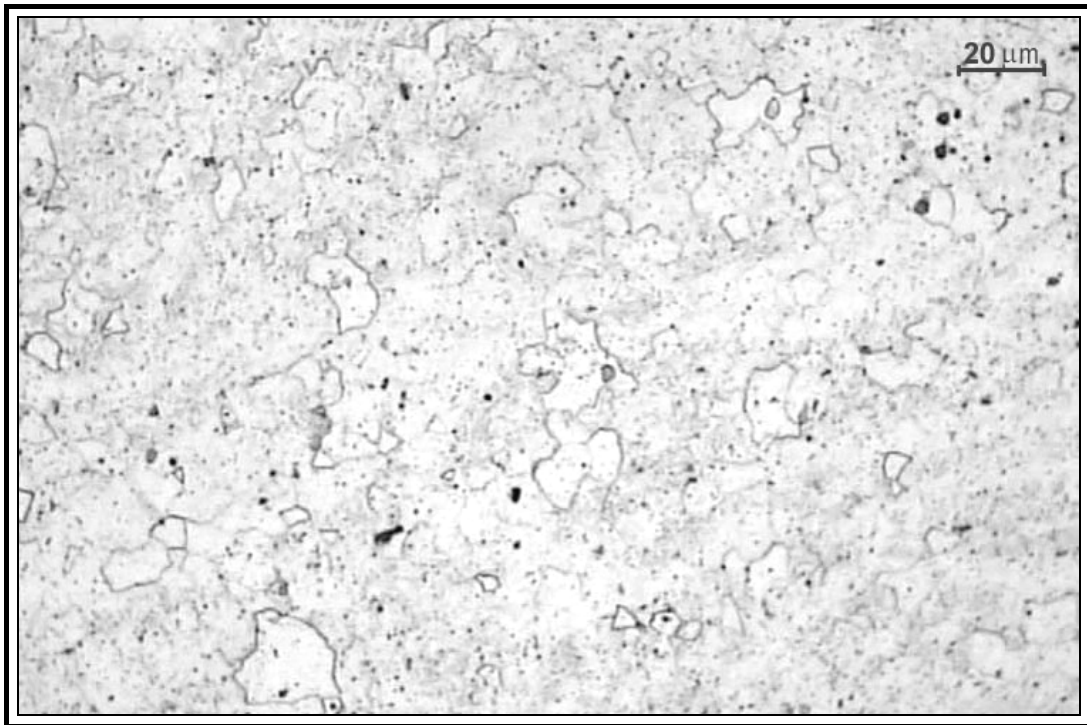
Rys.A10. Przykładowe mikrostruktury stali I austenitzowanej przy temperaturze 960°C i chłodzonej z prędkością 0.05°C/s. Struktura ferrytyczna. Średnia wielkość ziarna  $45.2 \pm 6.2 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitałem.



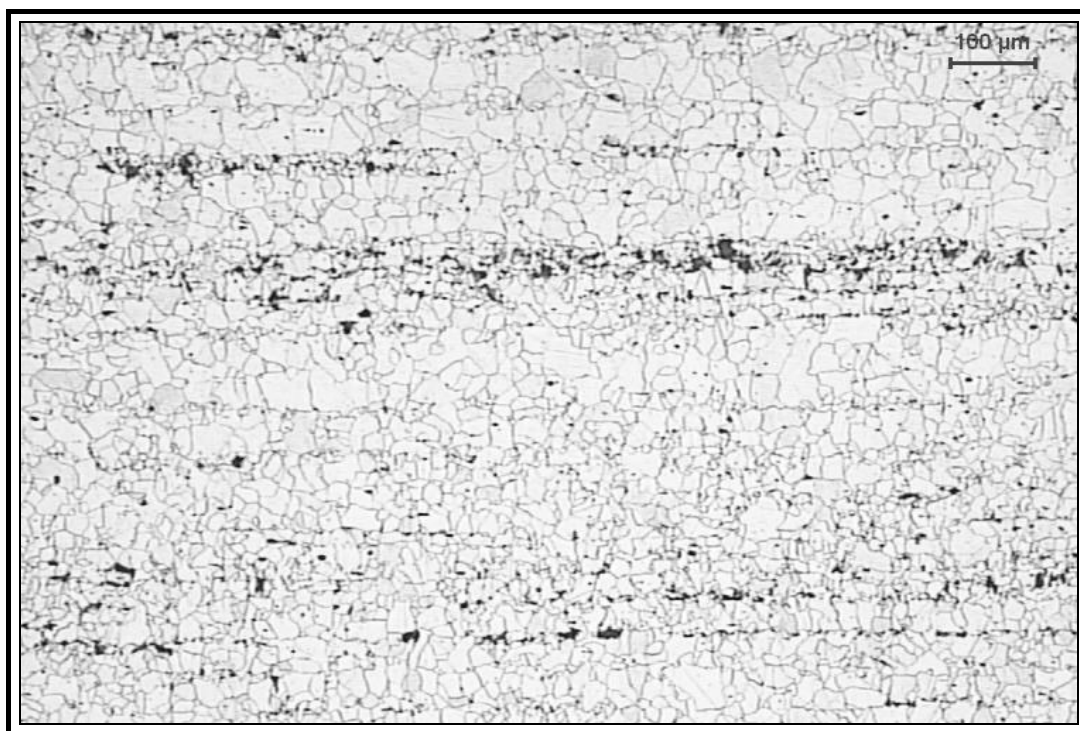
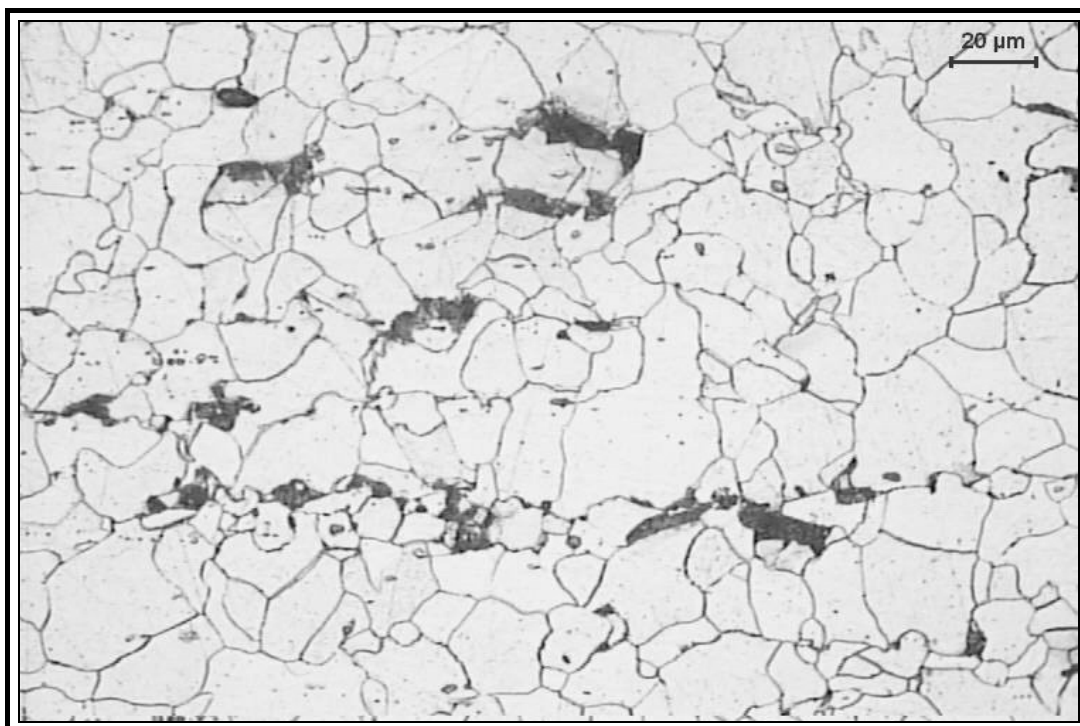
Rys.A11. Przykładowe mikrostruktury stali I austenitzowanej przy temperaturze 960°C i chłodzonej z prędkością 1.0°C/s. Struktura ferrytyczna. Średnia wielkość ziaren  $32.0 \pm 2.3 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitałem.



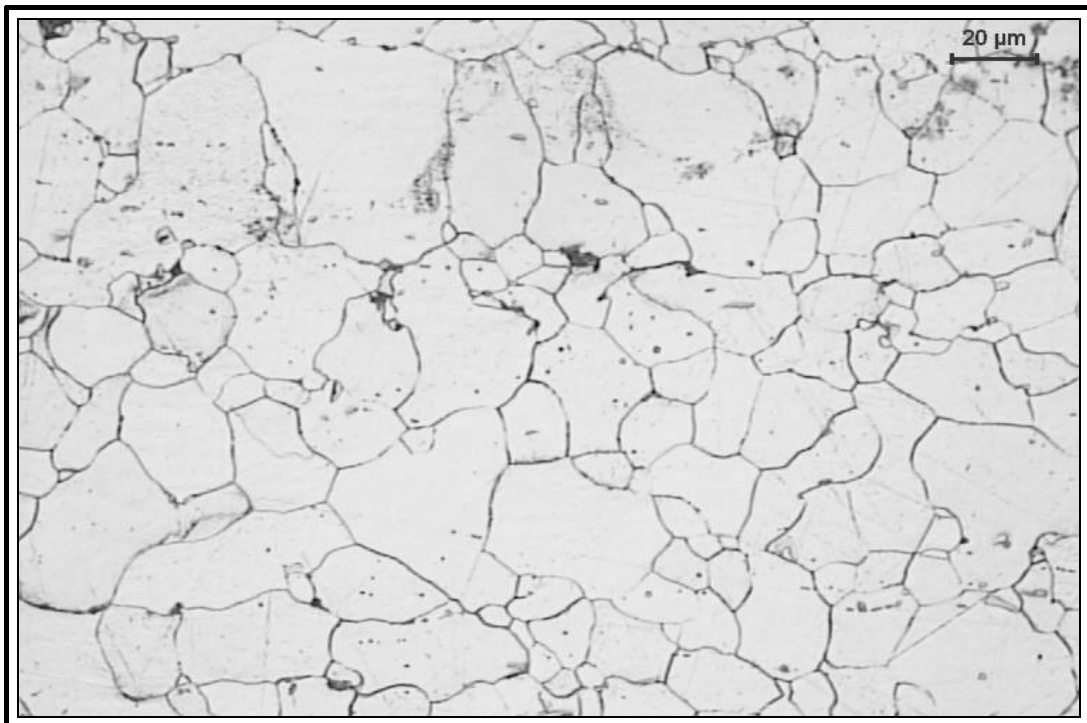
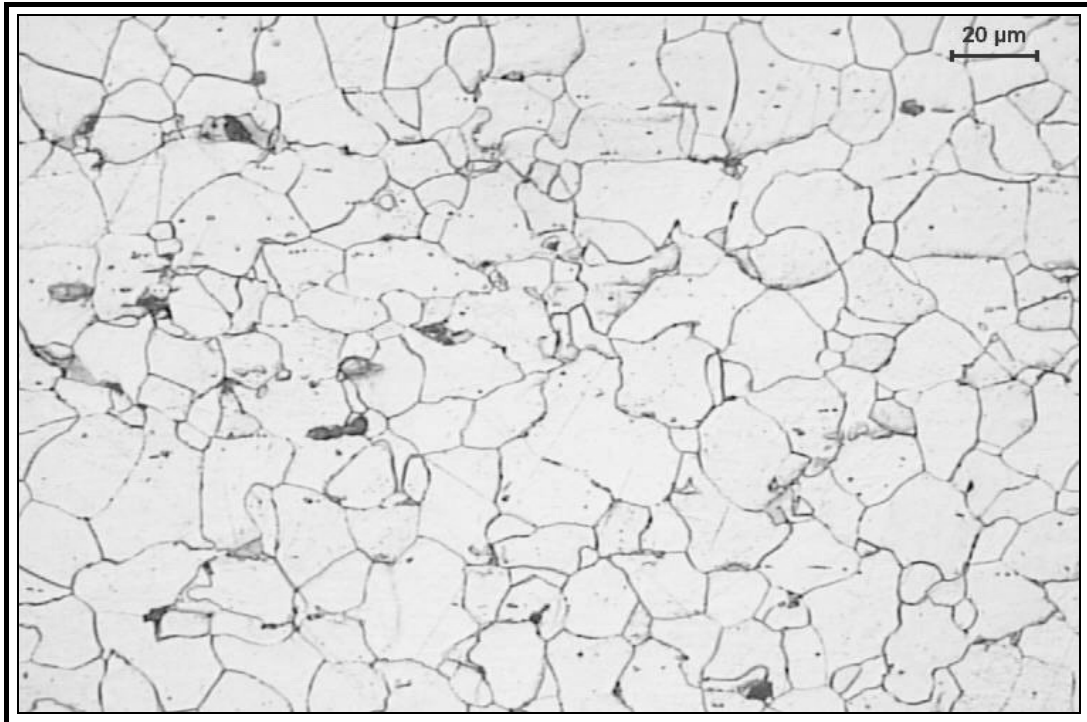
Rys.A12. Przykładowe mikrostruktury stali I austenitzowanej przy temperaturze 960°C i chłodzonej z prędkością 10.0°C/s. Struktura ferrytyczna. Średnia wielkość ziaren  $11.1 \pm 2.4 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitałem.



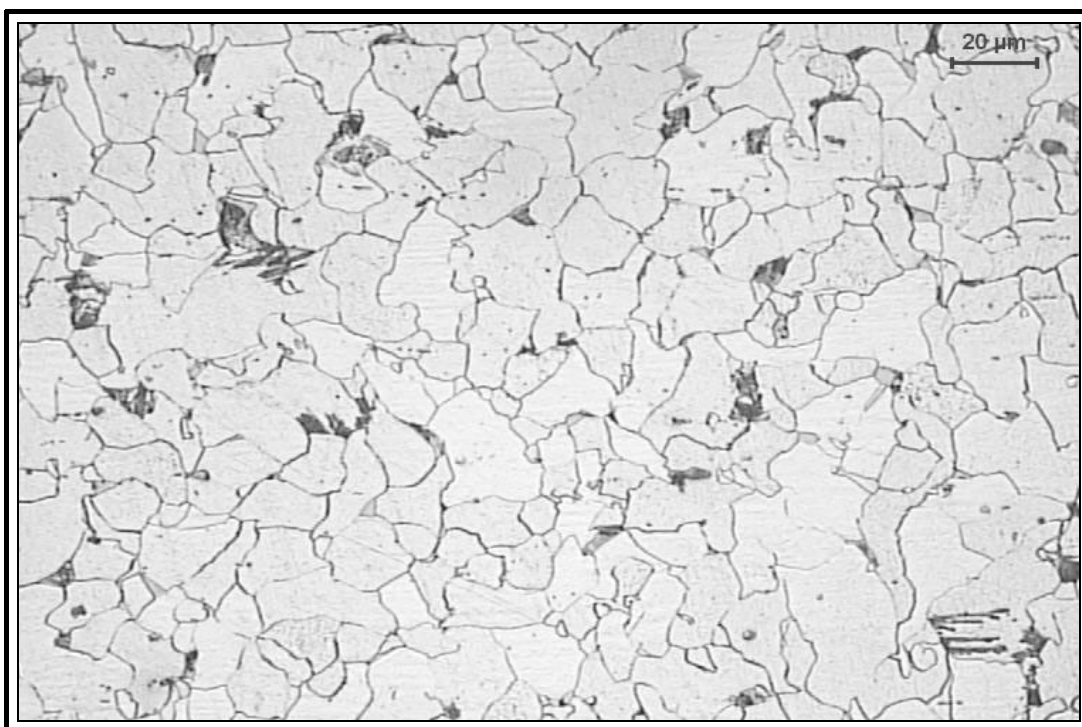
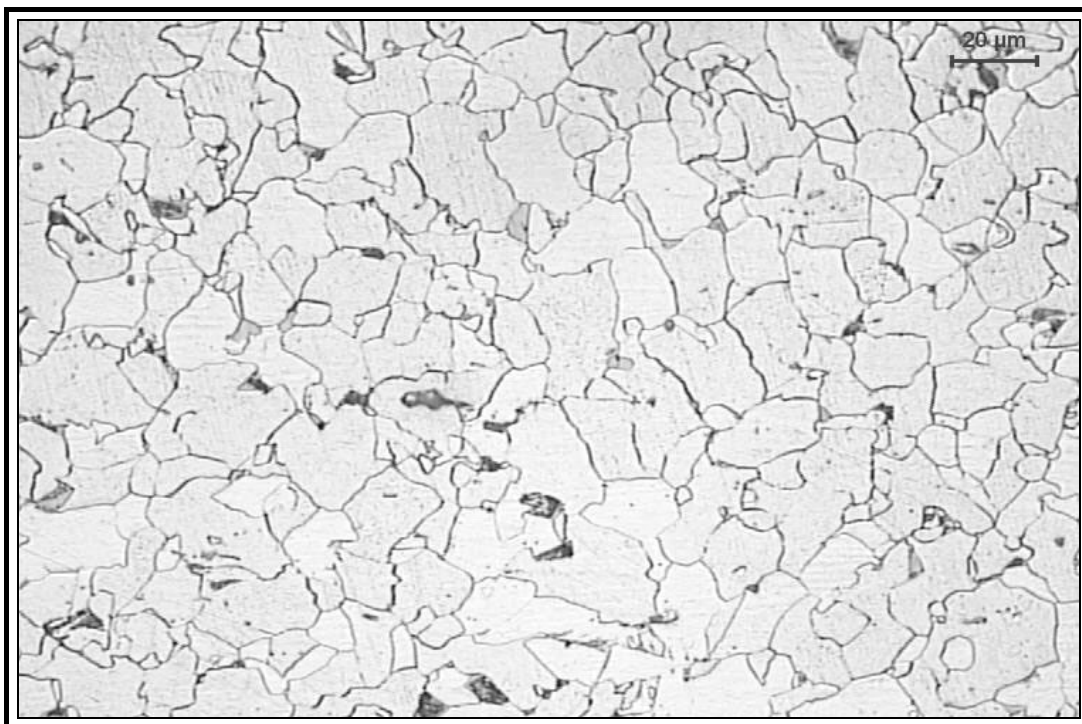
Rys.A13. Przykładowe mikrostruktury stali I austenitzowanej przy temperaturze 960°C i chłodzonej z prędkością 150°C/s. Struktura ferrytyczno-bainityczna. Średnia wielkość ziaren ferrytu  $8.0 \pm 1.0 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitalem.



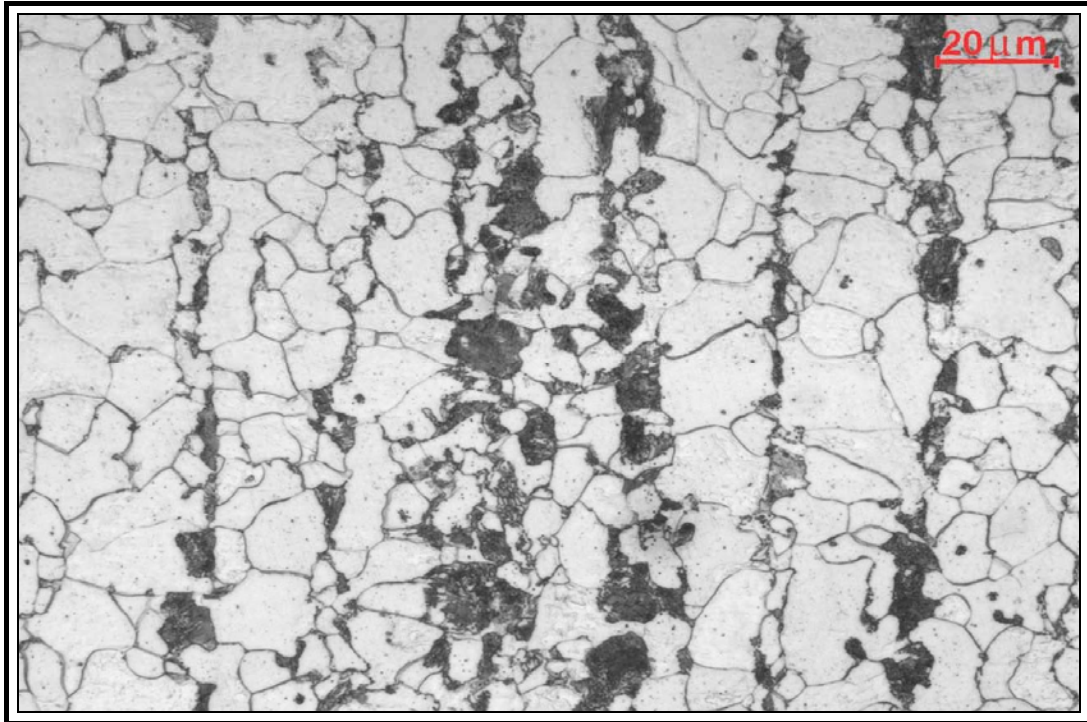
Rys.A14. Przykładowe mikrostruktury stali II austenitzowanej przy temperaturze 920°C i chłodzonej z prędkością 0.05°C/s. Struktura ferrytyczno-perlityczna. Na dolnym zdjęciu, przy powiększeniu 5x mniejszym, zaprezentowano pasmowość strukturalną. Średnia wielkość ziaren ferrytu  $36.1 \pm 5.1 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitałem.



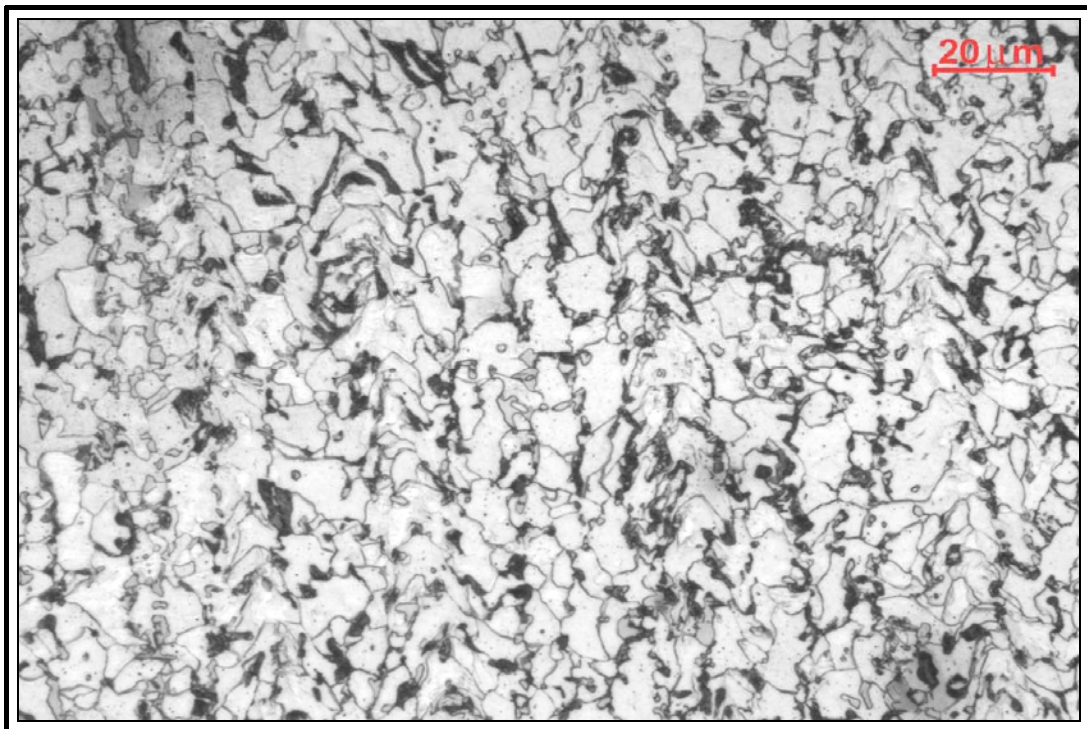
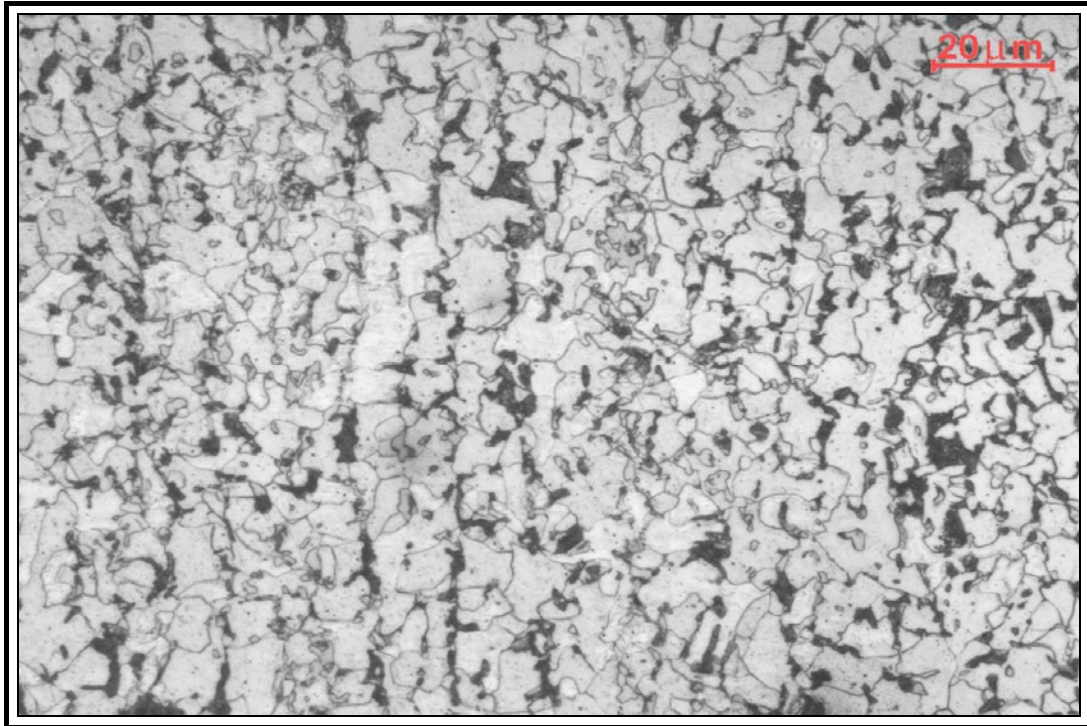
Rys.A15. Przykładowe mikrostruktury stali II austenitzowanej przy temperaturze 920°C i chłodzonej z prędkością 0.1°C/s. Struktura ferrytyczno-perlityczna. Średnia wielkość ziarna  $28.2 \pm 4.1 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitalem.



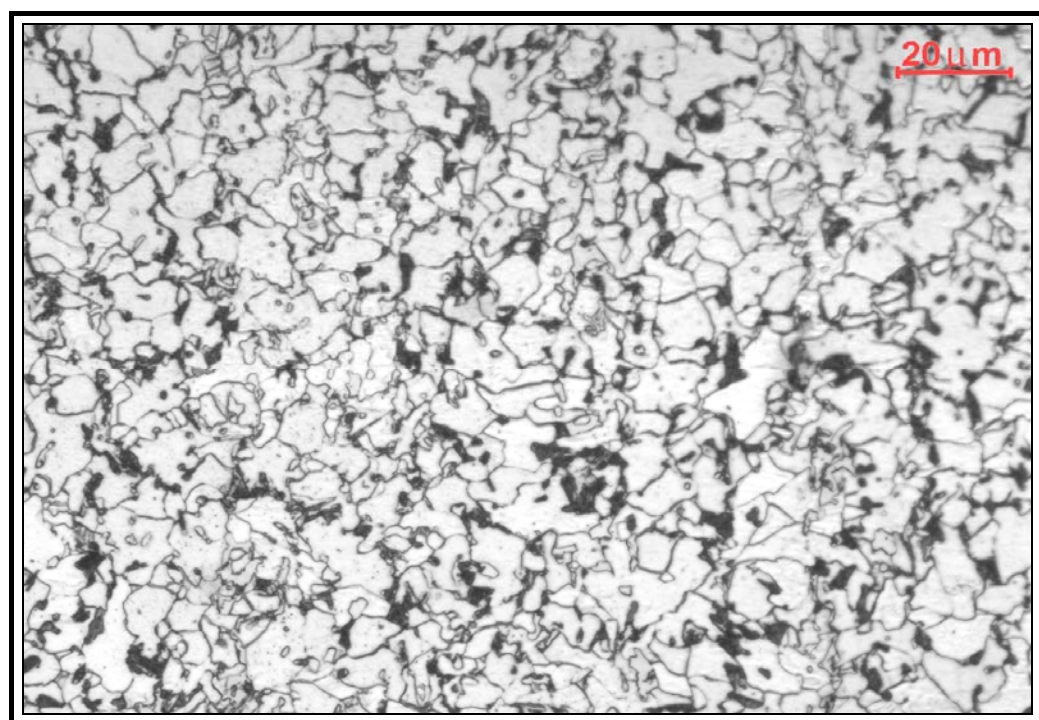
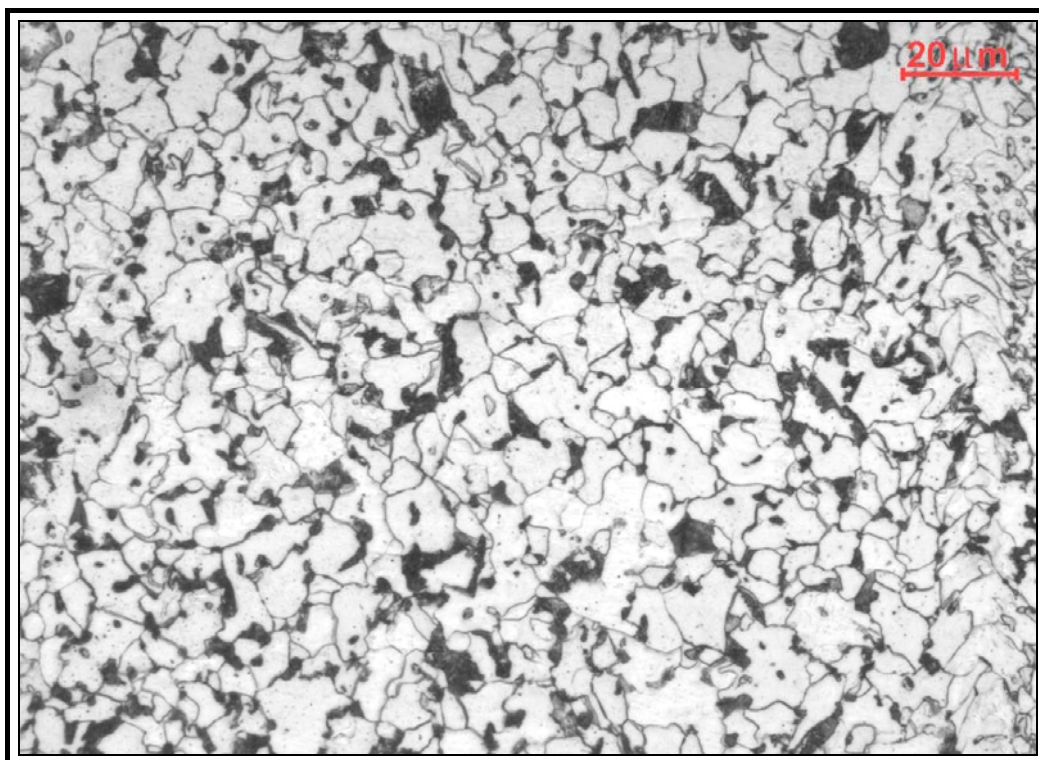
Rys.A16. Przykładowe mikrostruktury stali II austenitzowanej przy temperaturze 920°C i chłodzonej z prędkością 5.0°C/s. Struktura ferrytyczno-perlityczna. Trawiono 6% nitaliem. Średnia wielkość ziarna  $10.0 \pm 2.0 \mu\text{m}$ .



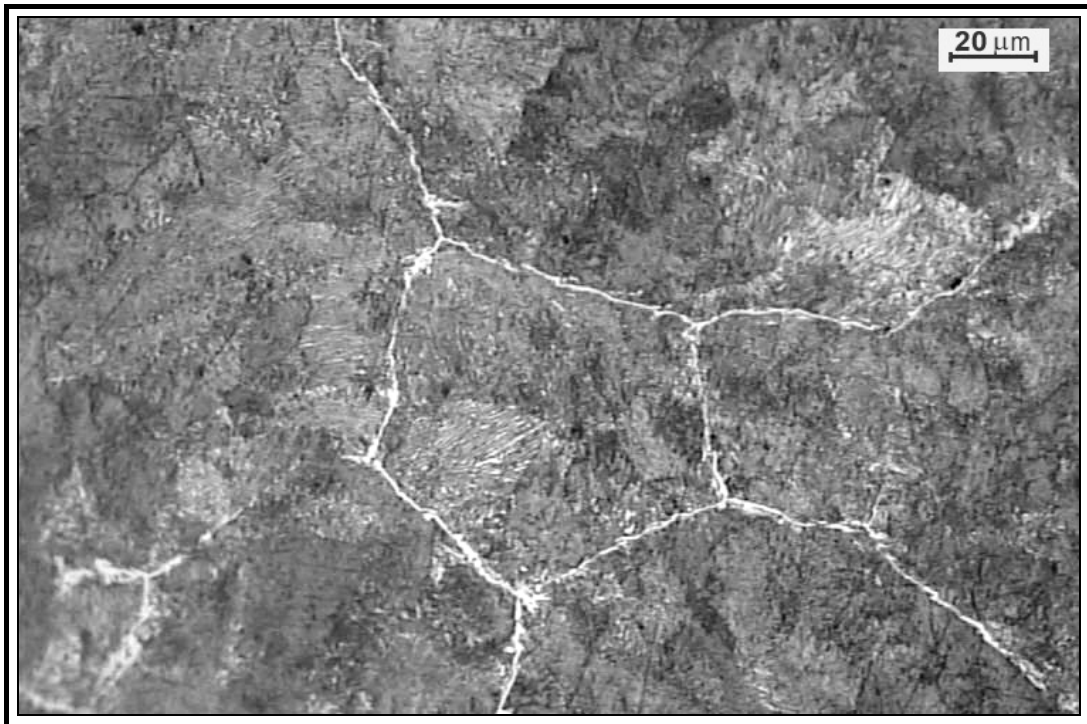
Rys.A17. Przykładowa mikrostruktura stali 15G2ANb austenitzowanej przy temperaturze 870°C i chłodzonej z prędkością 0.05°C/s. Pasmowa struktura ferrytyczno-perlityczna. Średnia wielkość ziarna  $9.1 \pm 1.1 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitalem.



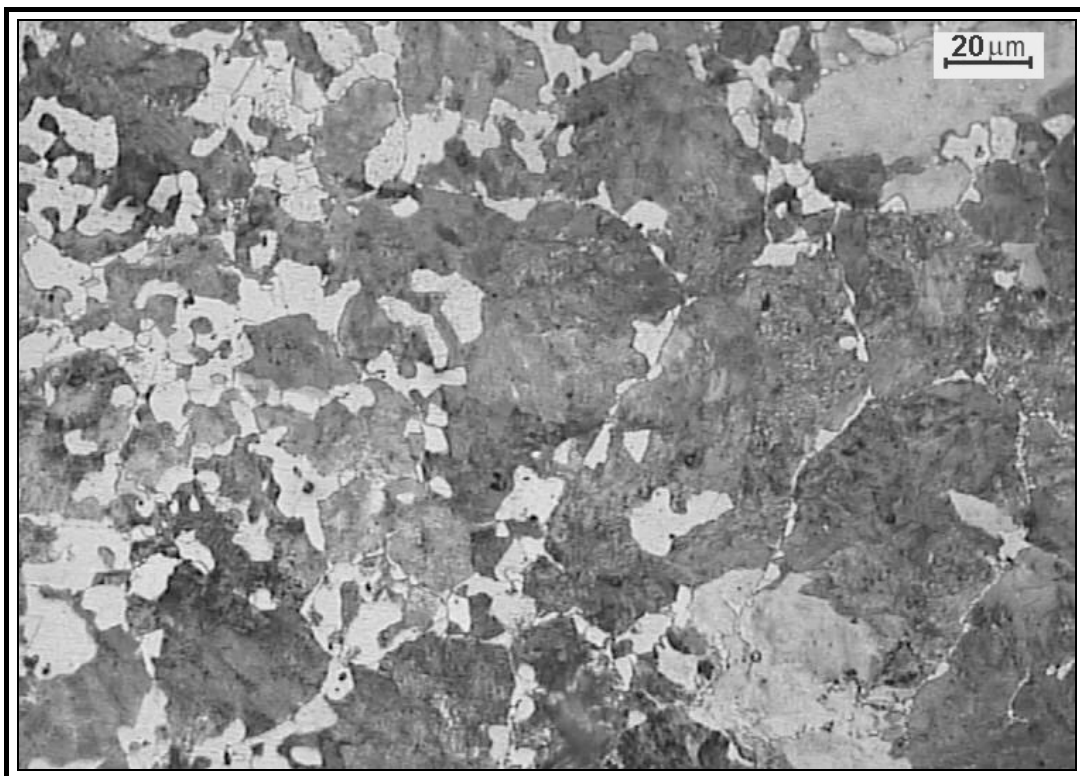
Rys.A18. Przykładowe mikrostruktury stali 15G2ANb austenitzowanej przy temperaturze 870°C i chłodzonej z prędkością 1.0°C/s. Pasmowa struktura ferrytyczno-perlityczna. Średnia wielkość ziarna  $5.0 \pm 0.3 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitałem.



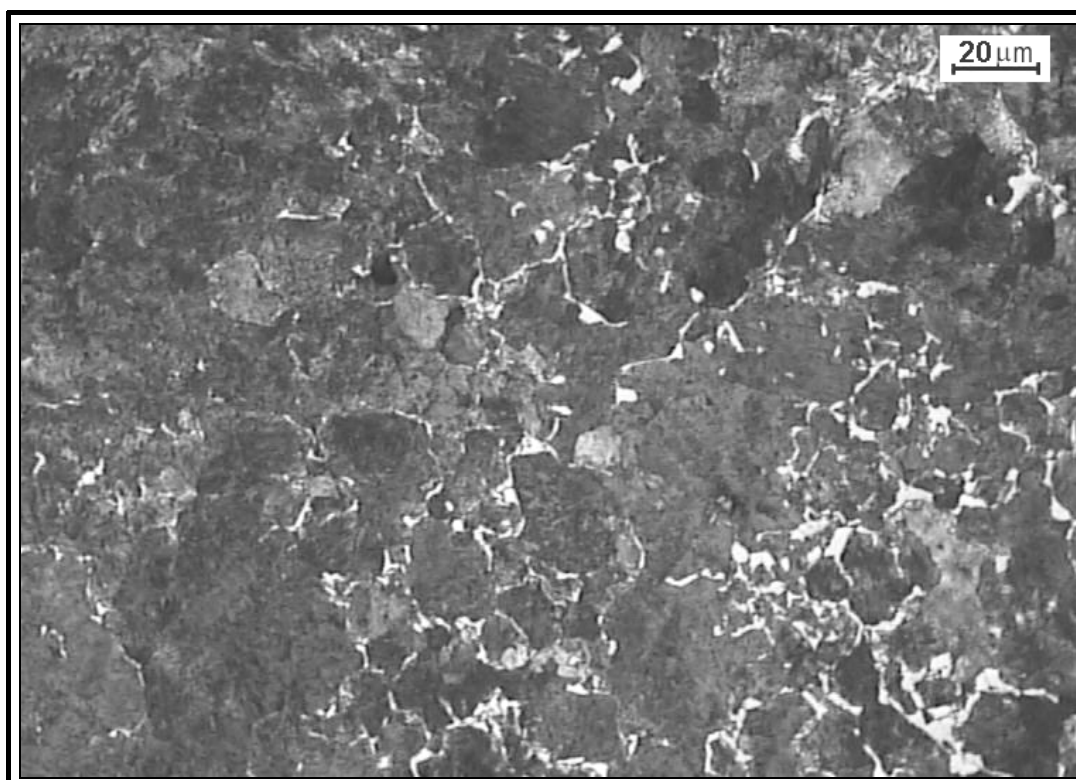
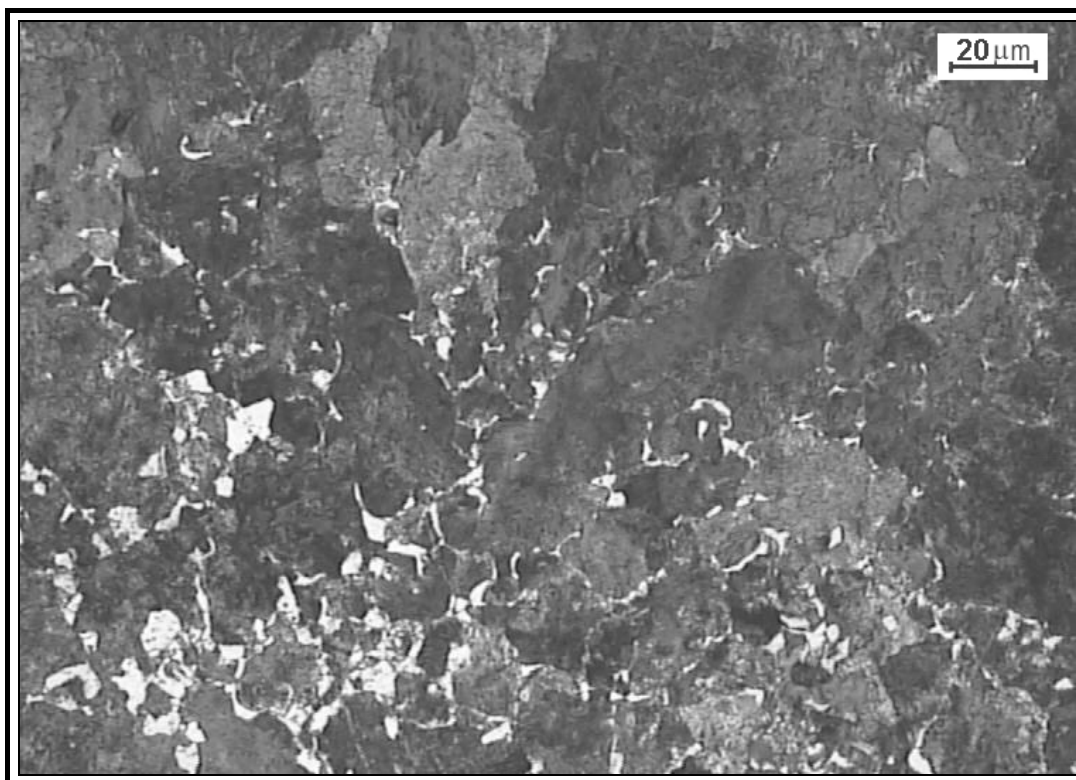
Rys.A19. Przykładowe mikrostruktury stali 15G2ANb austenitzowanej przy temperaturze 870°C i chłodzonej z prędkością 5.0°C/s. Pasmowa struktura ferrytyczno-perlityczna. Średnia wielkość ziarna  $4.2 \pm 0.2 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitałem.



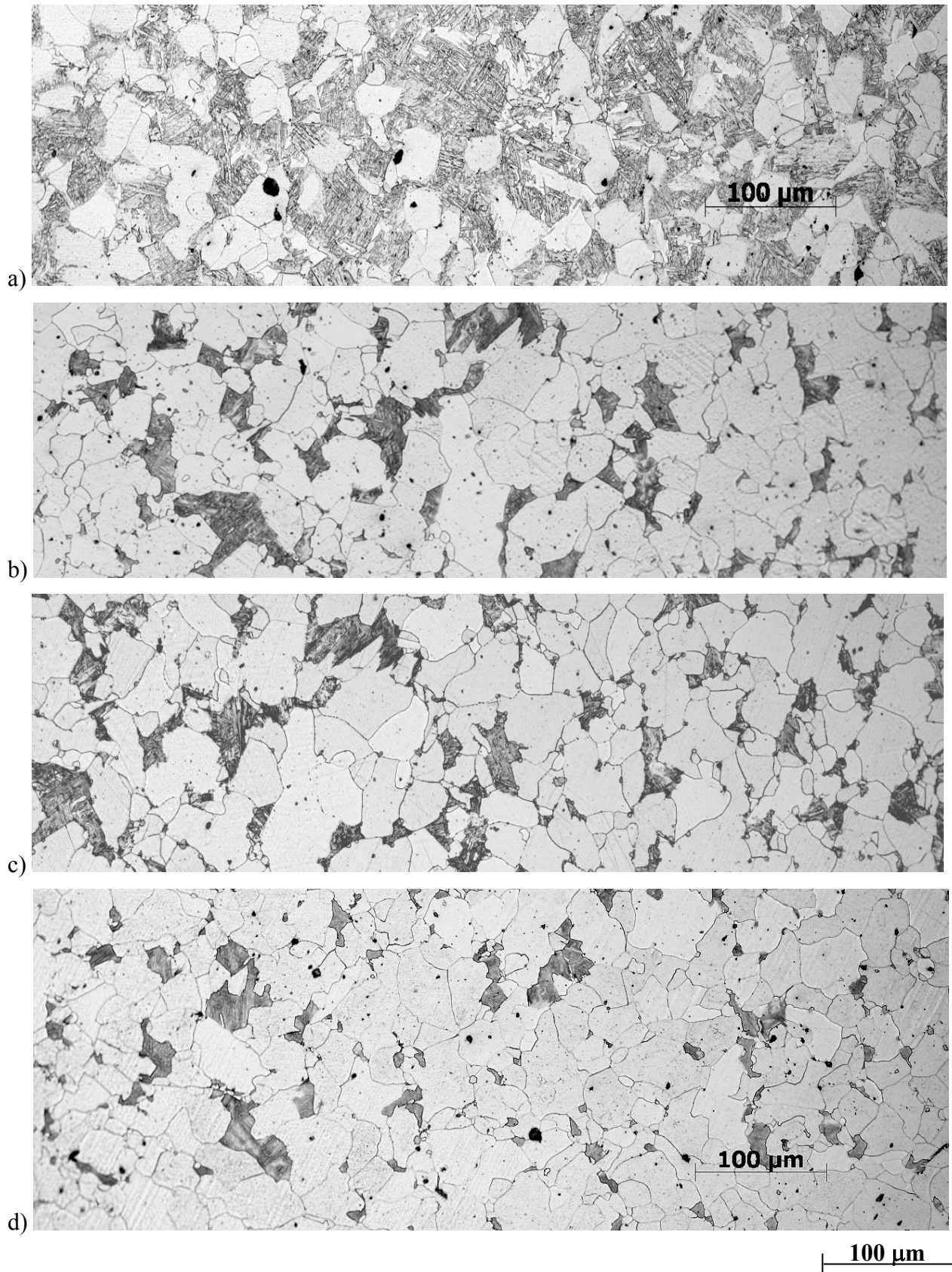
Rys.A20. Pierwotne ziarno austenitu ujawnione metodą siatki cementytu na próbkach stali I. Struktura perlityczna z siatką cementytu wtórnego. Średnia wielkość pierwotnego ziarna austenitu  $72.0 \pm 8.8 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitalem.



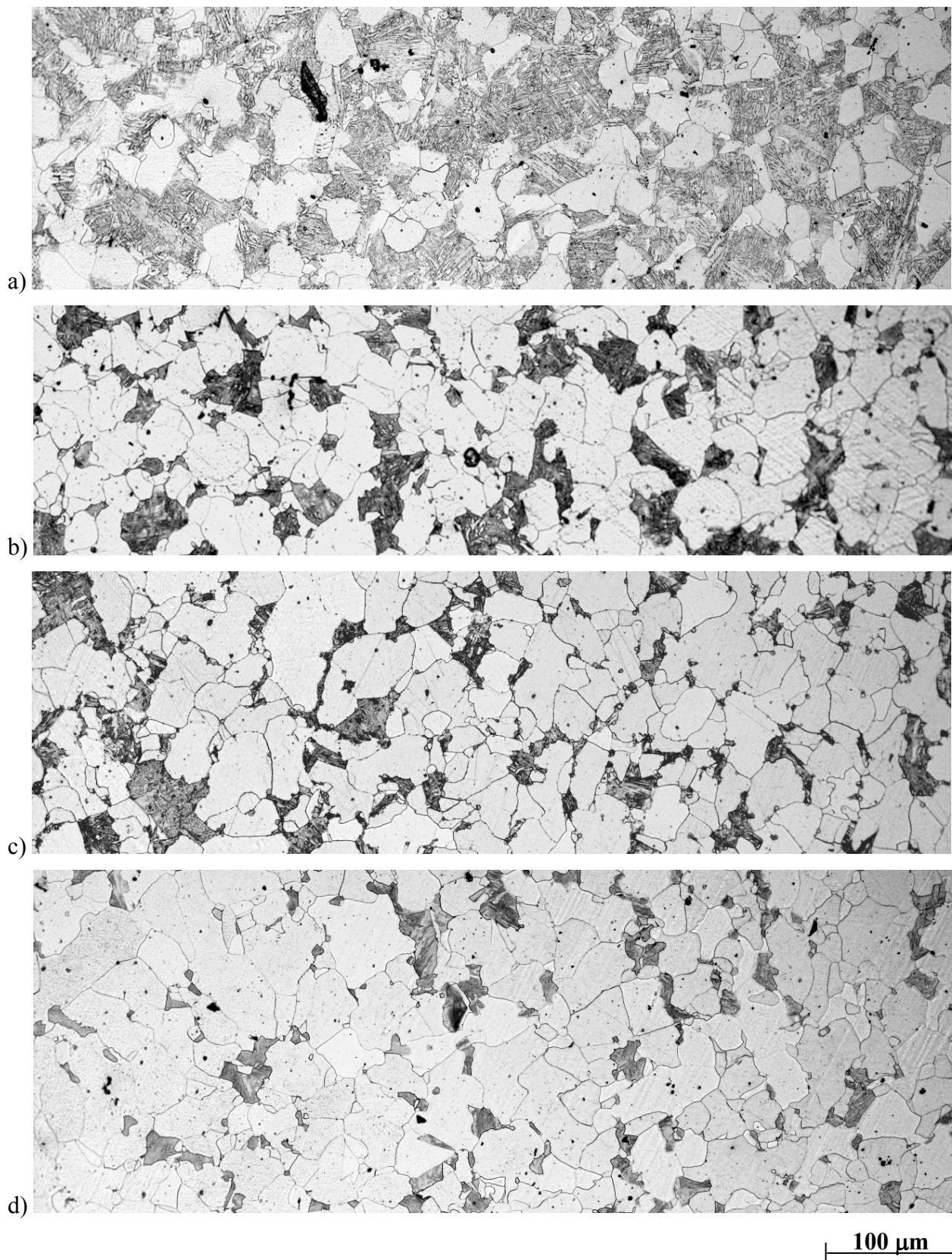
Rys.A21. Pierwotne ziarno austenitu ujawnione metodą siatki ferrytu na próbkach stali II. Struktura ferrytyczno-perlityczna, z siatką ferrytu na granicach kolonii perlitycznych. Średnia wielkość pierwotnego ziarna austenitu  $46.0 \pm 10.0 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitałem.



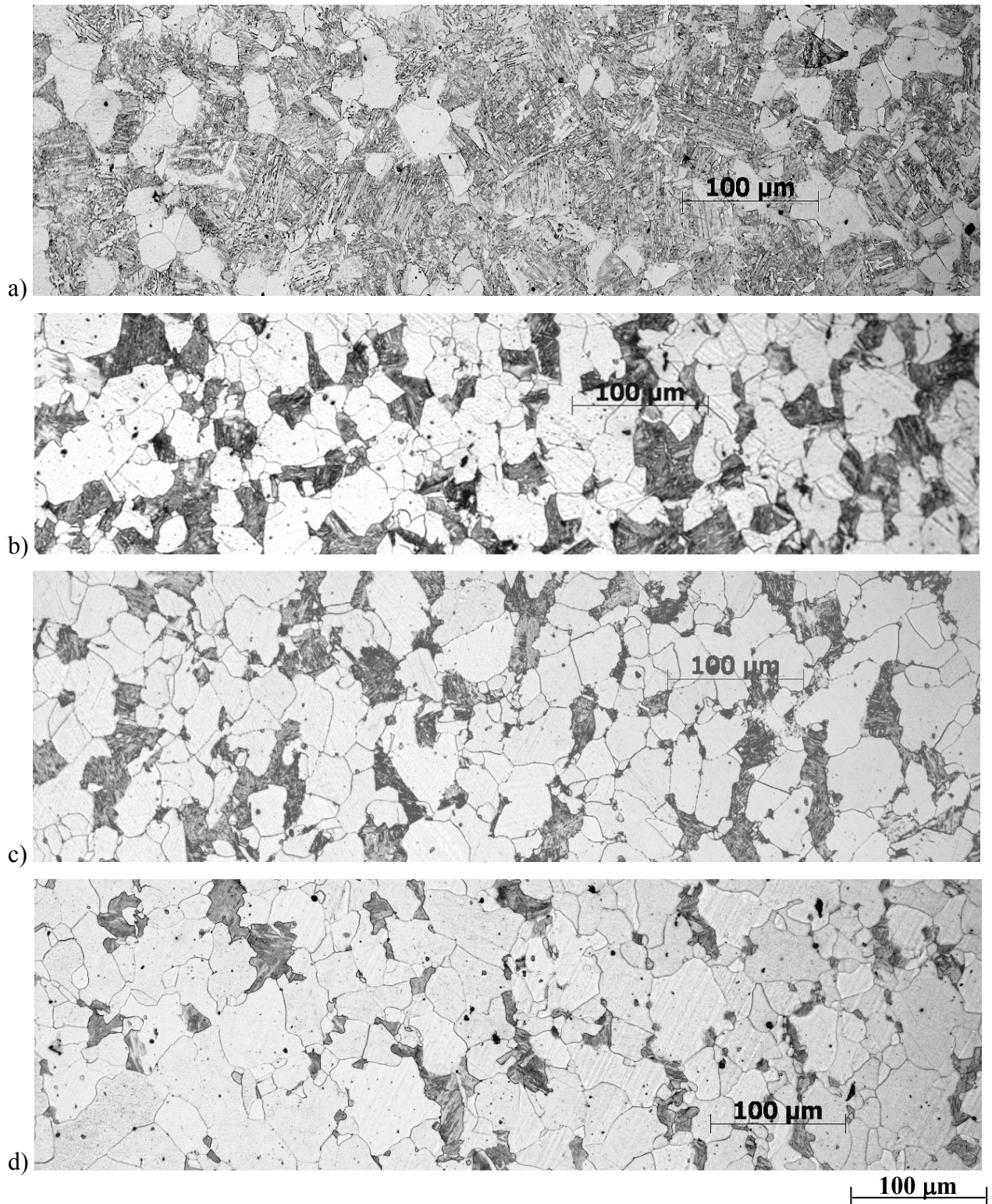
Rys.A22. Pierwotne ziarno austenitu ujawnione metoda siatki ferrytu na próbkach stali 15G2ANb. Struktura ferrytyczno-perlityczna.. Średnia wielkość pierwotnego ziarna austenitu  $20.1 \pm 3.2 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitałem



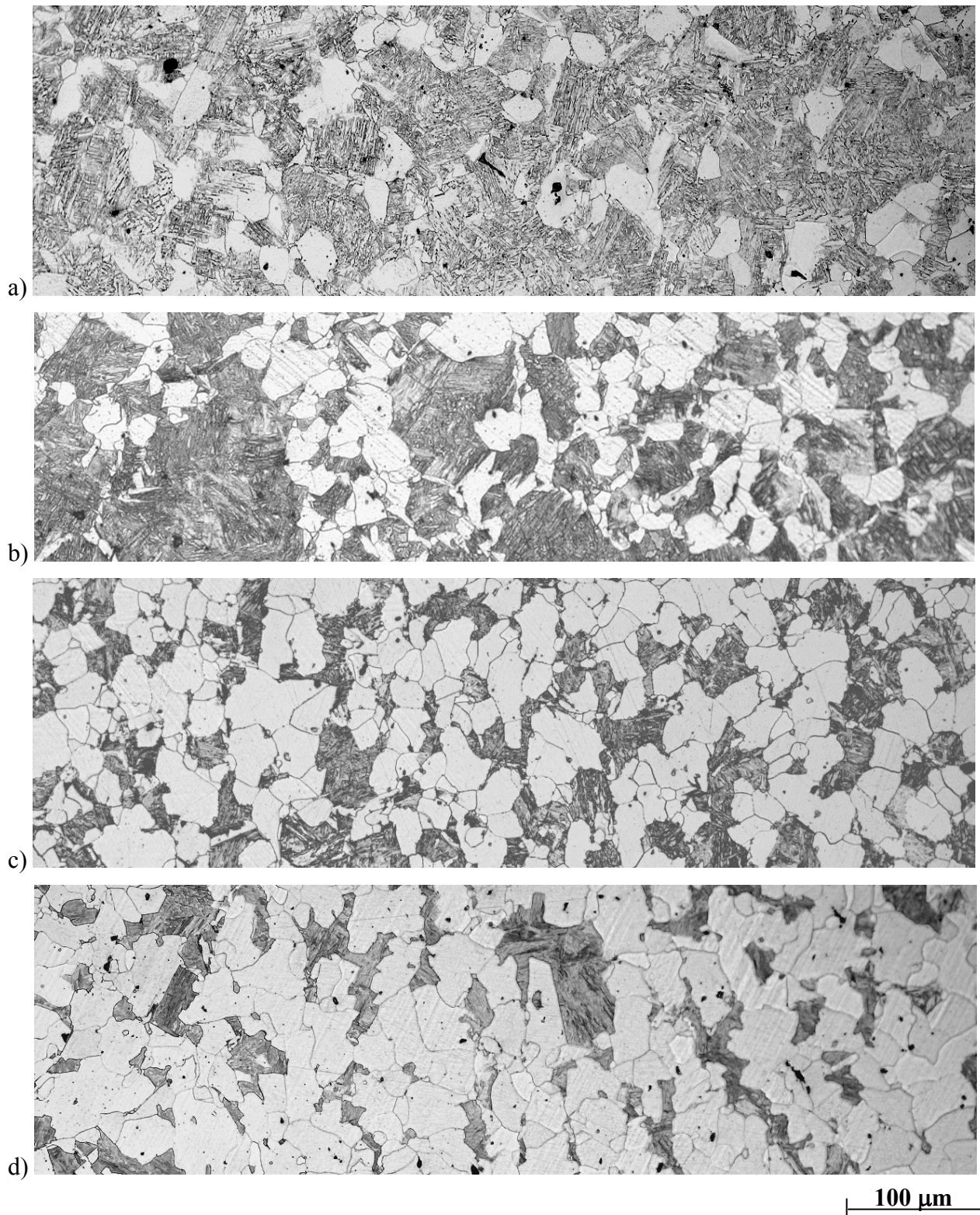
Rys.A23. Przykładowe mikrostruktury stali nawęglonej chłodzonej z prędkością  $0.05^{\circ}\text{C/s}$  do temperatury: a)  $800^{\circ}\text{C}$ , b)  $780^{\circ}\text{C}$ , c)  $760^{\circ}\text{C}$ , d)  $740^{\circ}\text{C}$  i przesycaanej w wodzie. Obszar o zawartości  $0.2\% \text{C}$ . Struktura ferrytyczno-martenzytyczna. Trawiono  $6\%$  nitałem.



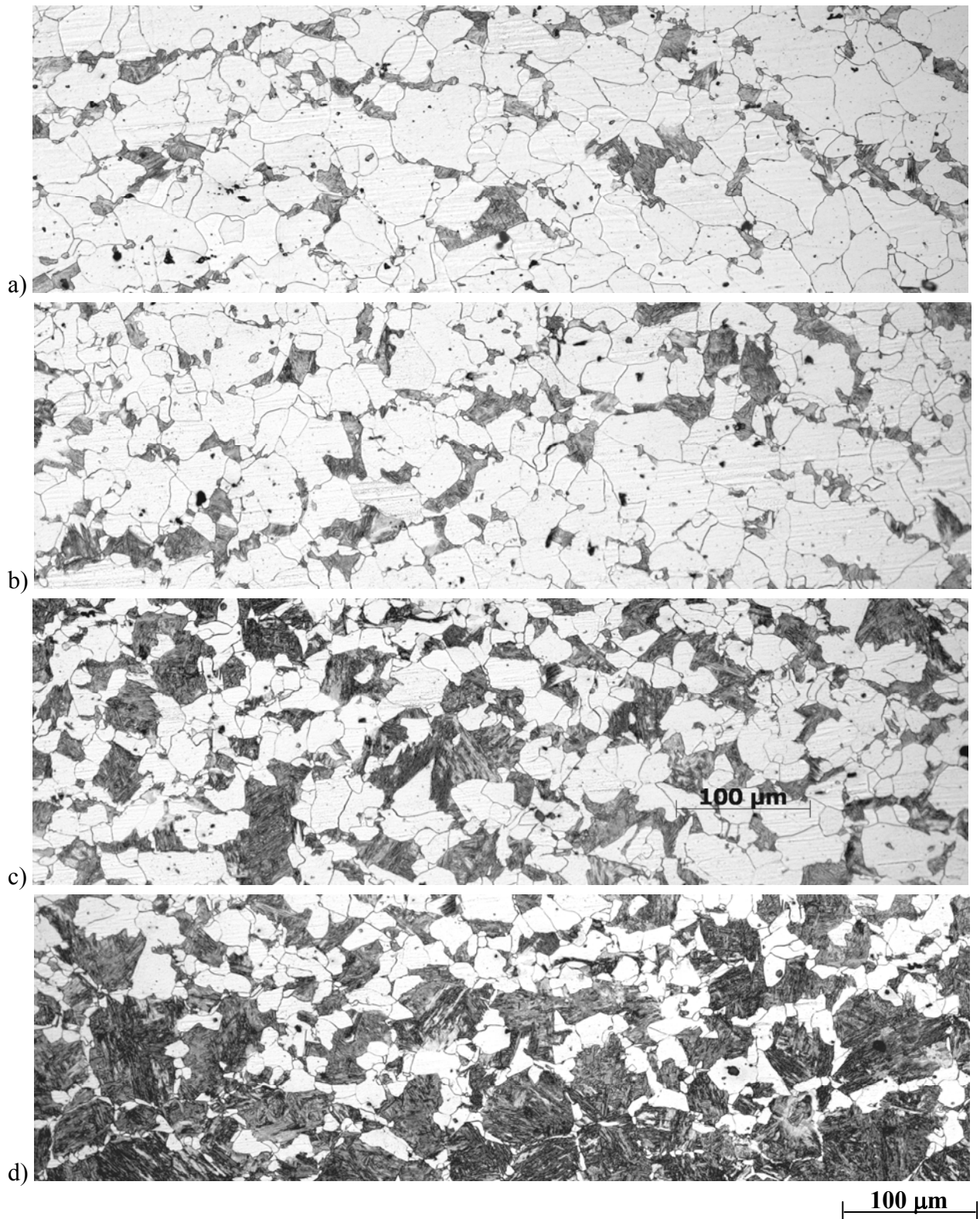
Rys.A24. Przykładowe mikrostruktury stali nawęglonej chłodzonej z prędkością  $0.05^{\circ}\text{C/s}$  do temperatury: a)  $800^{\circ}\text{C}$ , b)  $780^{\circ}\text{C}$ , c)  $760^{\circ}\text{C}$ , d)  $740^{\circ}\text{C}$  i przesycaanej w wodzie. Obszar o zawartości  $0.3\%C$ . Struktura ferrytyczno-martenzytyczna. Trawiono 6% nitalem.



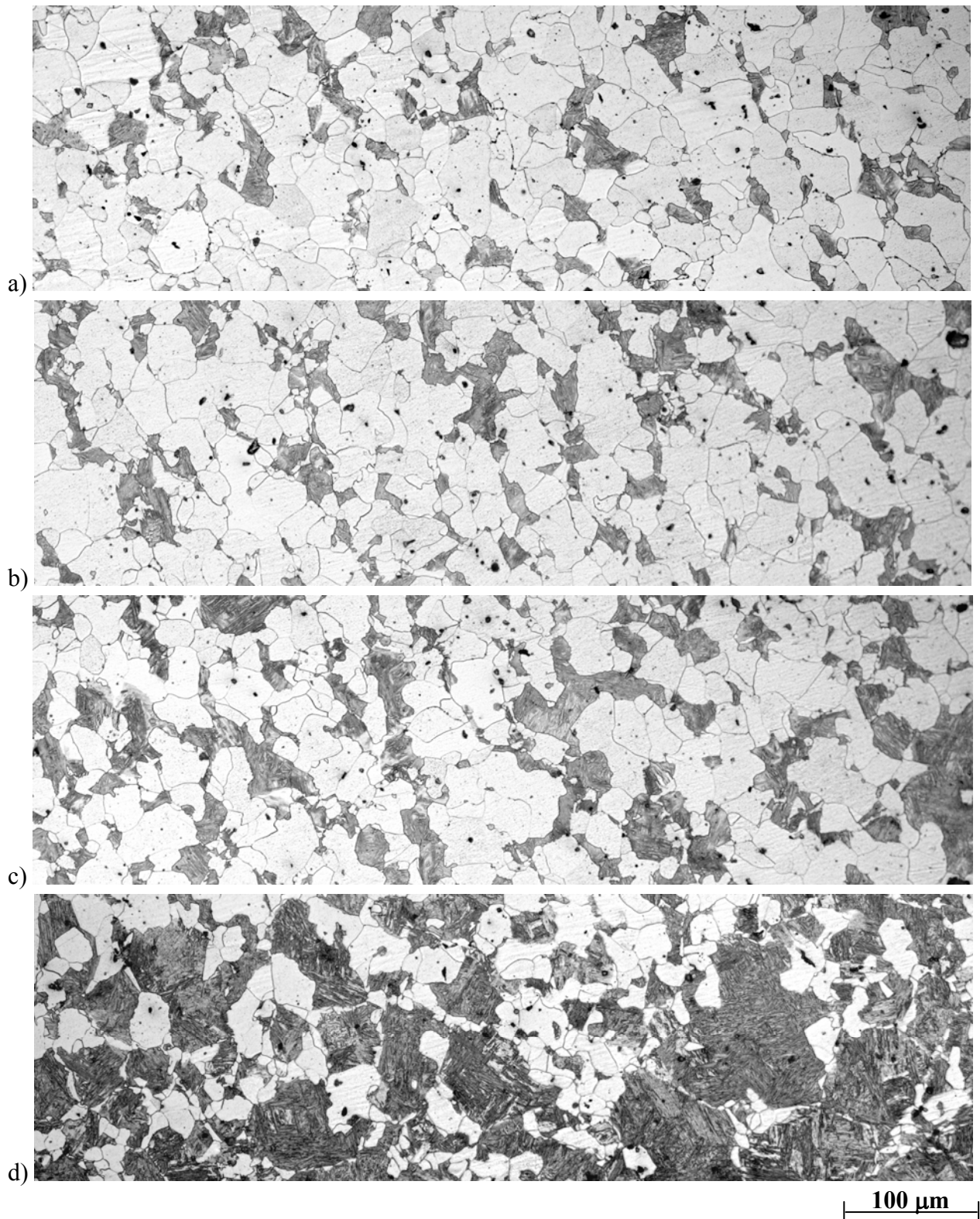
Rys.A25. Przykładowe mikrostruktury stali nawęglonej chłodzonej z prędkością  $0.05^{\circ}\text{C/s}$  do temperatury: a)  $800^{\circ}\text{C}$ , b)  $780^{\circ}\text{C}$ , c)  $760^{\circ}\text{C}$ , d)  $740^{\circ}\text{C}$  i przesycaanej w wodzie. Obszar o zawartości  $0.4\% \text{C}$ . Struktura ferrytyczno-martenzytyczna. Trawiono 6% nitałem.



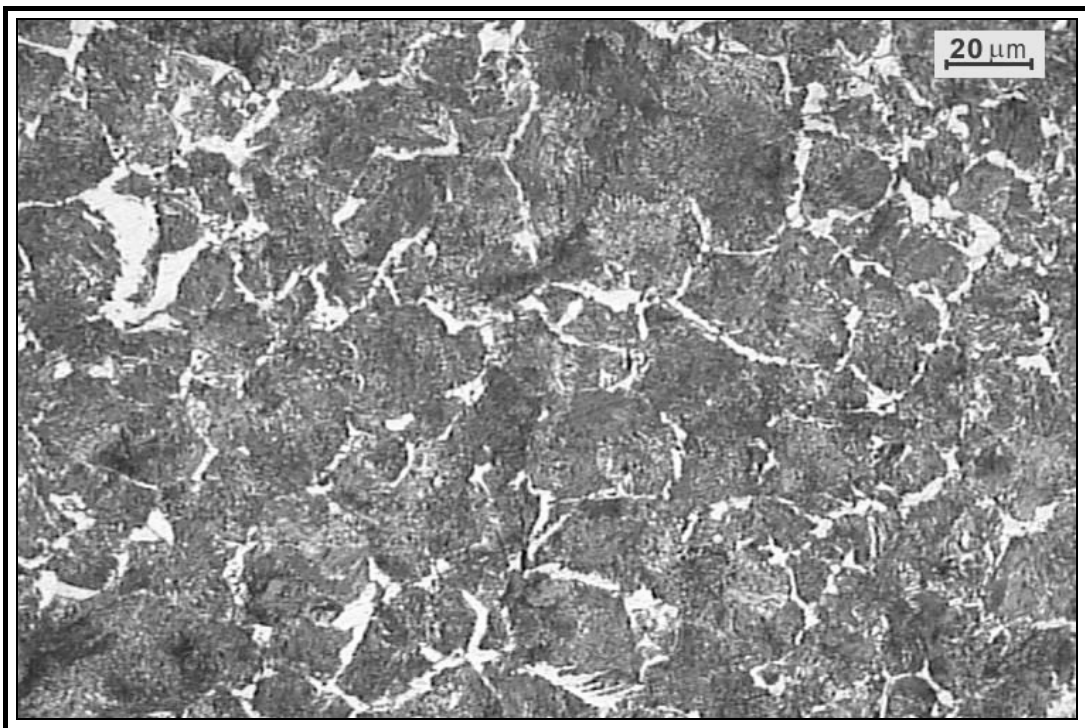
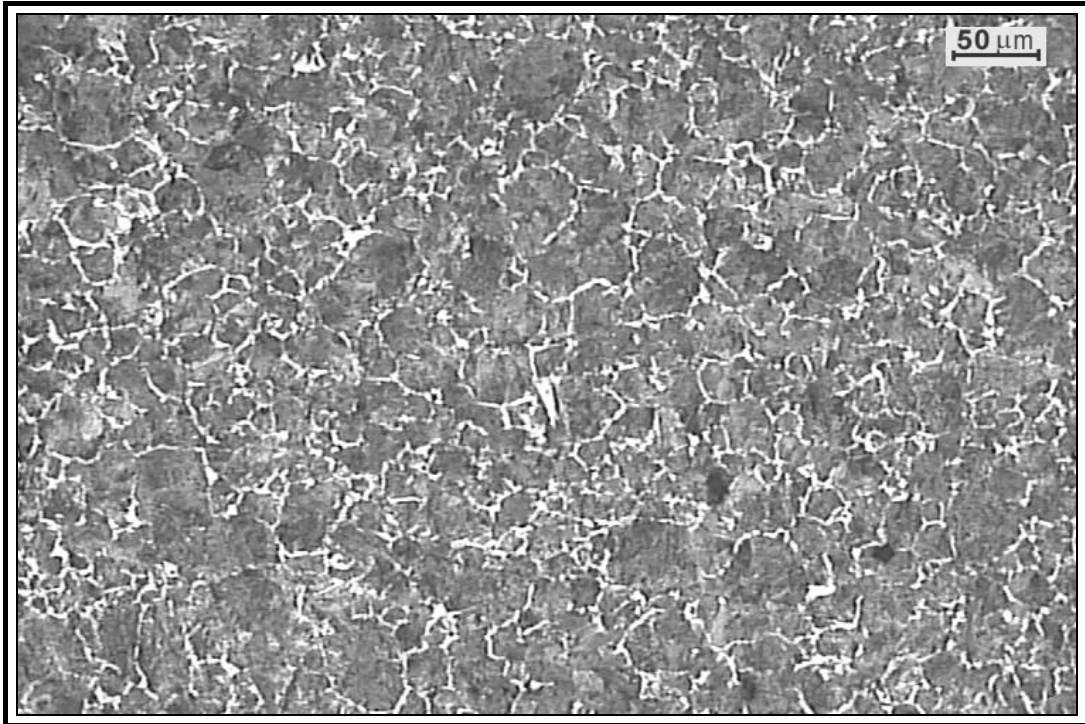
Rys.A26. Przykładowe mikrostruktury stali nawęglonej chłodzonej z prędkością  $0.05^{\circ}\text{C/s}$  do temperatury: a)  $800^{\circ}\text{C}$ , b)  $780^{\circ}\text{C}$ , c)  $760^{\circ}\text{C}$ , d)  $740^{\circ}\text{C}$  i przesycaanej w wodzie. Obszar o zawartości  $0.5\% \text{C}$ . Struktura ferrytyczno-martenzytyczna. Trawiono 6% nitałem.



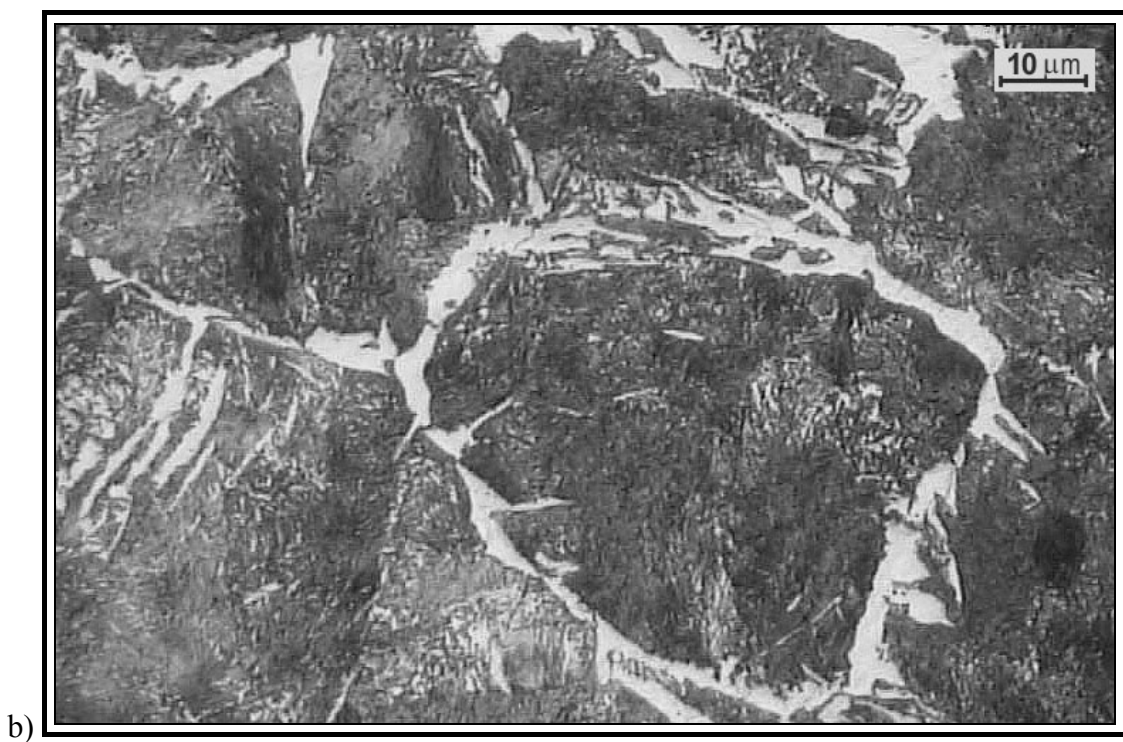
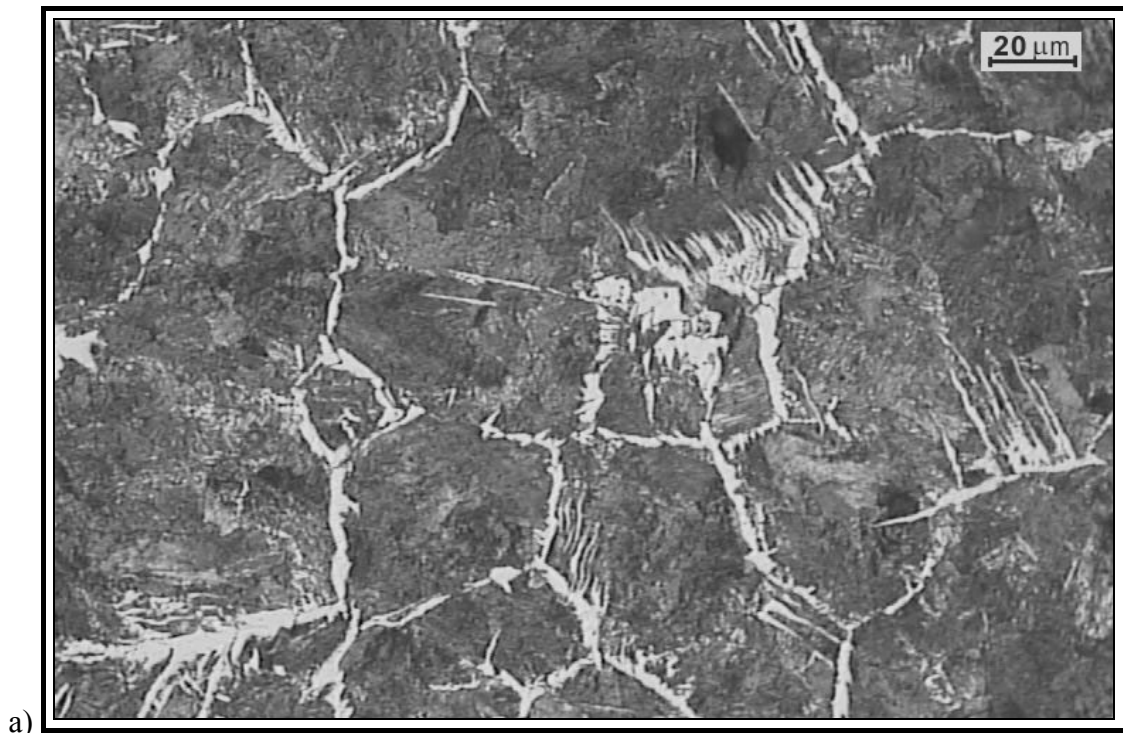
Rys.A27. Przykładowe mikrostruktury stali nawęglonej chłodzonej z prędkością  $0.05^{\circ}\text{C/s}$  do temperatury  $780^{\circ}\text{C}$ , wytrzymanej izotermicznie przez okres 1000 s i przesycanej w wodzie. Obszar o zawartości: a) 0.2%C, b) 0.3%C, c) 0.4%C, d) 0.5%C. Struktura ferrytyczno-martensytyczna. Trawiono 6% nitaliem.



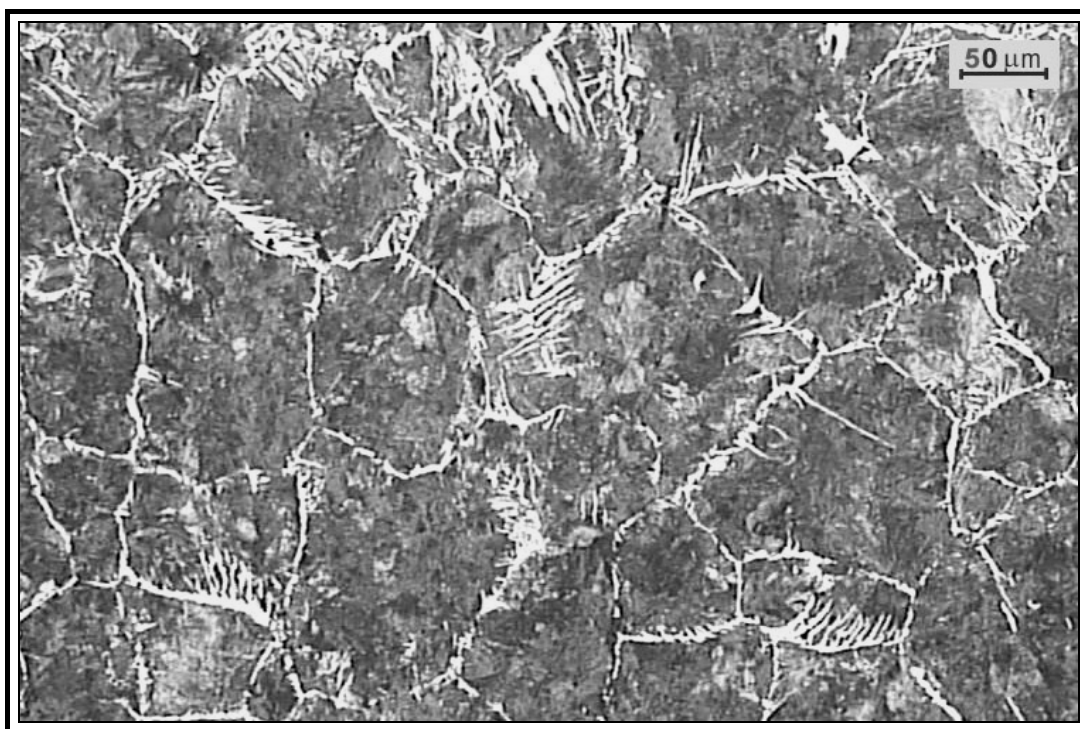
Rys.A28. Przykładowe mikrostruktury stali nawęglonej chłodzonej z prędkością  $0.05^{\circ}\text{C/s}$  do temperatury  $780^{\circ}\text{C}$ , wytrzymanej izotermicznie przez okres 2000 s i przesycanej w wodzie. Obszar o zawartości: a) 0.2%C, b) 0.3%C, c) 0.4%C, d) 0.5%C. Struktura ferrytyczno-martenzytyczna. Trawiono 6% nitaliem.



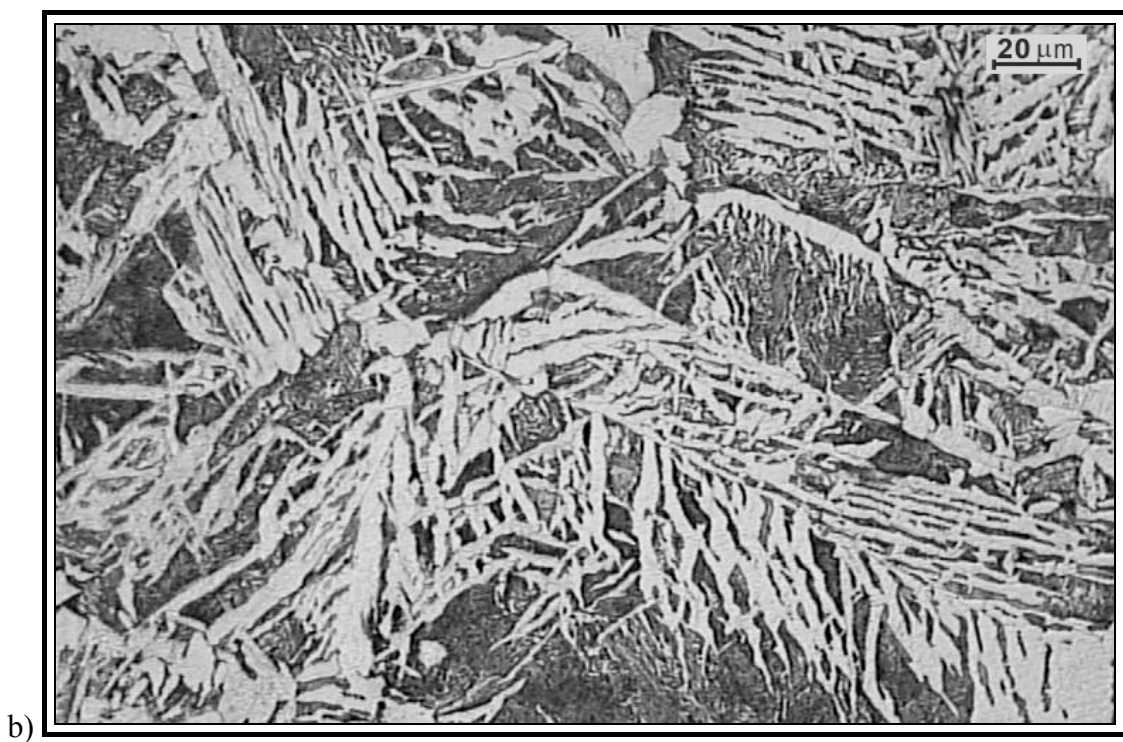
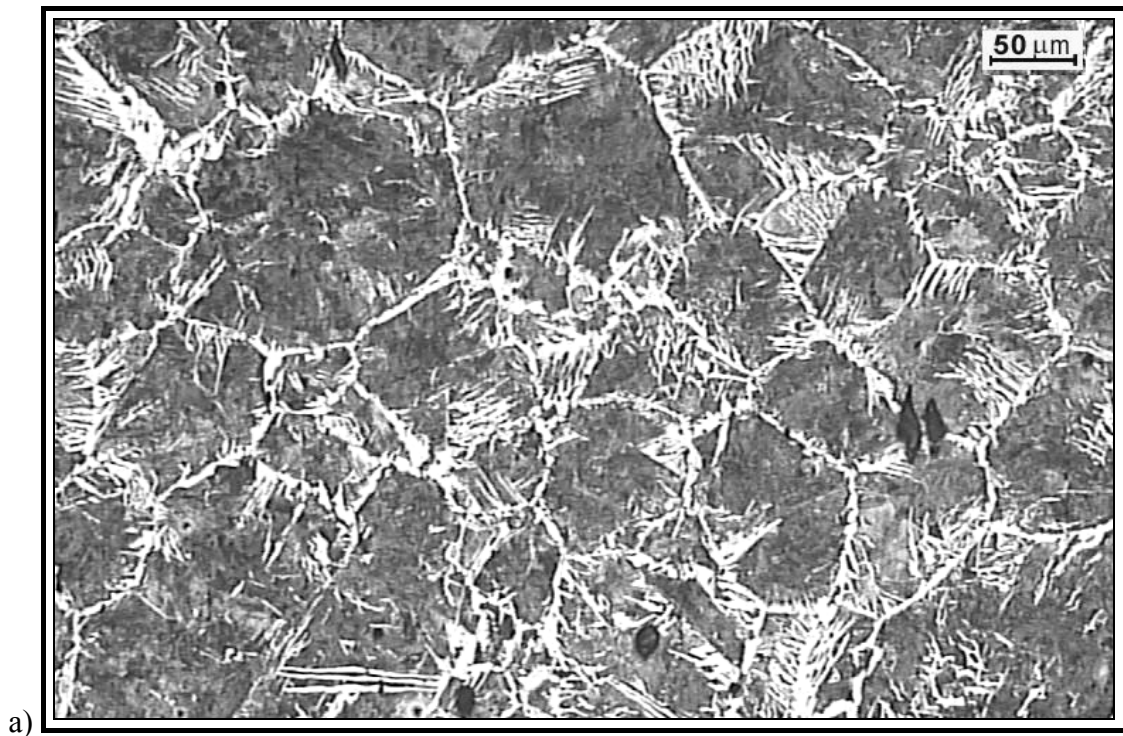
Rys.A29. Struktura stali C56D po zabiegu normalizowania w temperaturze 820°C. Struktura ferrytyczno-perlityczna. Trawiono 6% nitalem.



Rys.A30. Struktura stali C56D po austenityzowaniu w temperaturze 1000°C - (a) oraz morfologia płytek ferrytu na tle struktury perlitycznej - (b). Ferryt w postaci siatki po granicach pierwotnych ziaren austenitu oraz w postaci struktury Widmanstättena. Średnia długość płytki  $20.1 \pm 9.9 \mu\text{m}$ , średnia grubość płytki  $1.6 \pm 0.5 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitałem.



Rys.A31. Struktura stali C56D po austenitowaniu w temperaturze 1100°C. Struktura ferrytyczno-perlityczna. Ferryt w postaci siatki po granicach pierwotnego ziarna austenitu oraz w postaci struktury Widmanstättena. Średnia długość płytki  $41.5 \pm 16.7 \mu\text{m}$ , średnia grubość płytki  $2.7 \pm 0.7 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitalem.



Rys.A32. Struktura stali C56D po austenitizowaniu w temperaturze 1200°C - (a) oraz morfologia płytek ferrytu na tle struktury perlitycznej - (b). Średnia długość płytki  $43.1 \pm 13.1 \mu\text{m}$ , średnia grubość płytki  $5.0 \pm 1.3 \mu\text{m}$ . Trawiono 6% nitaliem.