



УДК 621.74.01:669.14

К.И. Емельянов, В.М. Голод

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРНОЙ МИКРОНЕОДНОРОДНОСТИ НА РАЗВИТИЕ ДЕНДРИТНОЙ ЛИКВАЦИИ ПРИ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ СТАЛИ

K.I. Emel'ianov, V.M. Golod

INFLUENCE OF STRUCTURAL MICROHETEROGENEITY ON DEVELOPMENT OF DENDRITE SEGREGATION DURING CRYSTALLIZATION OF STEEL

В статье представлена методика численного моделирования дендритной ликвации в процессе кристаллизации многокомпонентных перитектических сплавов. Адекватность модели подтверждена данными локального спектрального анализа ликвации марганца, хрома и никеля. Результаты расчета выявляют системную взаимосвязь химической и структурной микронеоднородности стали.

КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ СТАЛИ. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ. ДЕНДРИТНАЯ ЛИКВАЦИЯ. СТРУКТУРНАЯ МИКРОНЕОДНОРОДНОСТЬ.

In article the technique of numerical modelling of dendrite segregation during crystallization of multi-component peritectic alloys is presented. Adequacy of model is confirmed by data of the local spectrum microanalysis of manganese, chrome and nickel. Results of calculation reveal system interrelation of chemical and structural microheterogeneity of a steel.

STEEL CRYSTALLIZATION. COMPUTER MODELING. DENDRITE SEGREGATION. STRUCTURAL MICROHETEROGENEITY.

Одной из центральных задач компьютерного моделирования кристаллизации является прогнозирование химической микронеоднородности, оказывающей влияние на качество литого металла. Сложный характер сопряженных процессов, протекающих при кристаллизации, (теплообмен, кристаллизация, диффузия) обуславливает необходимость применения численных моделей для исследования кинетики и факторов, определяющих формирование дендритной ликвации.

В качестве объекта исследования был выбран сплав перитектического типа. В связи с чем, моделируя дендритную ликвацию, рассматривали диффузионное перераспределение компонентов сплава при последовательном выделении твердых растворов и их перитектическом превращении. С целью системного анализа диффузионных процессов, протекающих на фоне термической и структурной эволюции

кристаллизующегося металла, соответствующий программный модуль был интегрирован в ранее разработанную комплексную модель неравновесной кристаллизации диффузионно-контролируемого перитектического превращения [1].

Дендритная ликвация развивается в микромасштабе вторичного междуосного промежутка λ_2 , который изменяется во времени в результате коалесценции [2] и в широком диапазоне варьируется по величине в пределах дендритной мезоячейки [3]. В связи с чем задачу моделирования диффузионного перераспределения компонентов сплава между фазами решали для статистического ансамбля вторичных дендритных ветвей. Была реализована серия вычислительных экспериментов по моделированию дендритной ликвации при заданной одинаковой локальной продолжительности τ_{LS} кристаллизации для ветвей с различным значением λ_2 . Результаты моделирования позволяют оценить отклонение

концентрации компонентов сплава C_{\min} на оси и C_{\max} на периферии дендритных ветвей от их средней концентрации C_0 в зависимости от конечной величины формирующихся междуосных промежутков λ_2 .

Диффузионное перераспределение компонентов сплава по сечению вторичной дендритной ветви. Расчет дендритной ликвации в масштабе микрочаеки размером $\lambda_2/2$ (рис. 1) в δ - и γ -фазах при затвердевании стали производили путем численного решения уравнения Фика для ветвей цилиндрической морфологии для условий на межфазных границах, определяемых — согласно принципу локального равновесия — значениями концентрации углерода на равновесной диаграмме многокомпонентного сплава [4]:

$$\frac{dC_N}{d\tau} = D_S \left(\frac{C_{N+1} - 2C_N + C_{N-1}}{dR^2} + \frac{1}{R_N} \frac{C_{N+1} - C_{N-1}}{2dR} \right), \quad (1)$$

где C_N — концентрация компонента сплава в N -м узле расчетной сетки; D_S — коэффициент диффузии в твердой фазе; dR — шаг расчетной сетки; τ — время.

Уравнение (1) модифицировали для решения задачи с подвижными межфазными границами [5], так как на каждом шаге расчета $d\tau$ происходит последовательное движение фронта превращения (δ/γ) или фронта кристаллизации (L/δ , L/γ) при

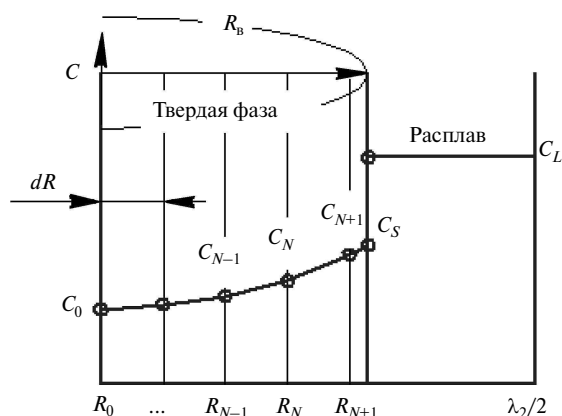


Рис. 1. Схема к расчету диффузионного перераспределения компонентов сплава в масштабе $\lambda_2/2$ (симметричная модель) с подвижной границей фронта кристаллизации при переменном радиусе R_b вторичной дендритной ветви

выделении из расплава (L) твердой фазы состава $C_S = kC_L$ [4].

Эволюция междуосных промежутков λ_2 происходит одновременно с движением фронта кристаллизации за счет коалесценции соседних дендритных ветвей [3]. Для моделирования эволюции микроструктуры при увеличении λ_2 от начального значения λ_{20} использовали уравнение [4]

$$d(\lambda_2^3) = \frac{\Gamma\tau}{\varphi} \frac{dm}{\sum_{(i)} \frac{p_i(C_L)_i (1 - (1 - \sigma_i k_i))}{(D_L)_i}}, \quad (2)$$

где i — индекс компонента сплава; τ_k — продолжительность коалесценции; m — доля твердой фазы; φ — коэффициент, учитывающий принятую модель коалесценции [3, 6]; σ — коэффициент, учитывающий частичное прохождение диффузии в твердой фазе ($\sigma = 2\alpha/(1+2\alpha)$ для $\alpha = 8D_S\tau_k/\lambda_2^2$) при формировании состава жидкой фазы $(C_L)_i$; D_L , D_S — коэффициент диффузии соответственно в расплаве и твердой фазе; p — тангенс угла наклона поверхности ликвидуса; k — коэффициент распределения; Γ — коэффициент Гиббса — Томсона. Уравнение (2) позволяет учесть как прямое (физико-химические факторы, геометрия диаграммы состояния и др.), так и косвенное (теплофизические параметры процесса) влияние на λ_2 кинетики изменения состава жидкой фазы через аддитивный вклад каждого i -го компонента.

Проверка адекватности реализованной методики анализа дендритной ликвации была проведена путем сопоставления расчетного распределения компонентов сплава Fe — 0,1 % C — 1,2 % Mn — 1,06 % Cr — 2,0 % Ni по сечению дендритных ветвей второго порядка с результатами микрорентгеноспектрального анализа (рис. 2) в осевой зоне диаметром 80 мм образцов исследуемой стали, залитой в стальной кокиль.

Исследованные компоненты сплава имеют значения коэффициентов распределения меньше единицы ($k < 1$ — см. таблицу), что приводит к их накоплению в расплаве и, соответственно, к увеличению концентрации по сечению дендритной ветви. Немонотонный характер кривых, наблюдаемый на графиках, объясняется количественным различием характера перераспределения компонентов при формировании γ -фазы на завершающем этапе перитектического пре-

вращения из первичной δ -фазы на межфазной границе (δ/γ) и из расплава — на границе (L/γ). В результате на графиках распределения концентрации по сечению дендритной ветви наблюдается перегиб кривой, отмечающий границу начала выделения γ -фазы [3].

Как следует из сопоставления экспериментальных данных с результатами расчета, разработанная модель диффузионного перераспределения компонентов сплава дает их хорошее совпадение, что позволяет использовать ее для анализа дендритной ликвации.

Структурная микронеоднородность литого металла [3] обусловлена формированием неоднородного массива значений междоусных промежутков $(\lambda_2)_i$ в мезомасштабе отдельного дендрита и его ближайших соседей. Процесс формирования начальных боковых ветвей $(\lambda_0)_i$ носит нестационарный характер по термическим и концентрационным условиям на вершине и боковой поверхности первичного ствола. Сложная морфология дендритного кристаллита, отличающегося значительной межфазной поверхностью и большим размахом ее кривизны, вызывает развитие ряда механизмов диффузионной коалесценции боковых ветвей, связанных с их растворением и/или слиянием под действием капиллярного эффекта Гиббса — Томсона [6], и приводит к появлению структурной микронеоднородности, которая характеризуется гистограммой распределения междоусных промежутков (рис. 3, а) в широком интервале значений λ_2 [3]. Как видно из представленных результатов металлографического анализа, размах экспериментальных значений достигает 140 мкм при среднем значении $(\lambda_2)_{\text{ср}} \approx 90$ мкм. Полученные данные, характерные для промышленных сплавов, свидетельствуют о необходимости учета влияния структурной микронеоднородности на формирование дендритной ликвации с целью выявления их закономерных связей.

Зависимость развития дендритной ликвации от структурной микронеоднородности представлена на рис. 3, б и в таблице, где приведены расчетные данные об изменении значений минимальной и максимальной концентрации компонентов сплава по сечению дендритных ветвей, имеющих в исследуемом мезообъеме различные значения λ_2 при одинаковой продолжительности кристаллизации.

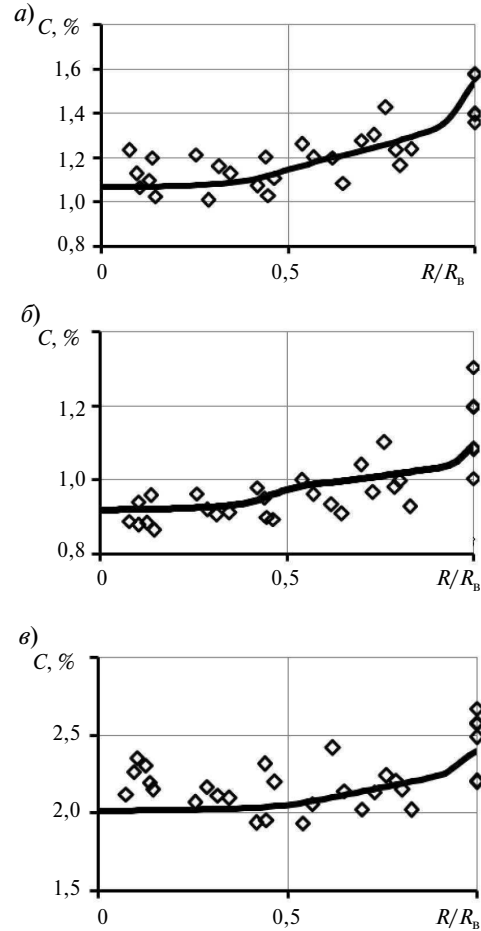


Рис. 2. Расчетные (линия) и экспериментальные (точки) распределения Mn (а), Cr (б) и Ni (в) по сечению дендритной ветви при $\lambda/2 (R_b) = 50$ мкм после полной кристаллизации ($\tau_{LS} = 60$ с; $\varphi = 0,5$)

Первые выделения твердой фазы, имеющие состав $(C_s)_i = k_i(C_0)_i$, в дальнейшем изменяются за счет диффузионного переноса вследствие градиента концентрации по сечению дендритной ветви, поскольку кристаллизация при $k < 1$ сопровождается обогащением жидкой фазы компонентами сплава. Увеличение скорости коалесценции (прироста величины λ_2) приводит к увеличению протяженности пути диффузии, что понижает градиент концентрации (при одинаковой скорости выделения твердой фазы и, соответственно, продолжительности кристаллизации). По этой причине в осевой зоне дендритной ветви концентрация C_{min} , которая находится в пределах $kC_0 < C_{\text{min}} < C_0$, становится тем выше,

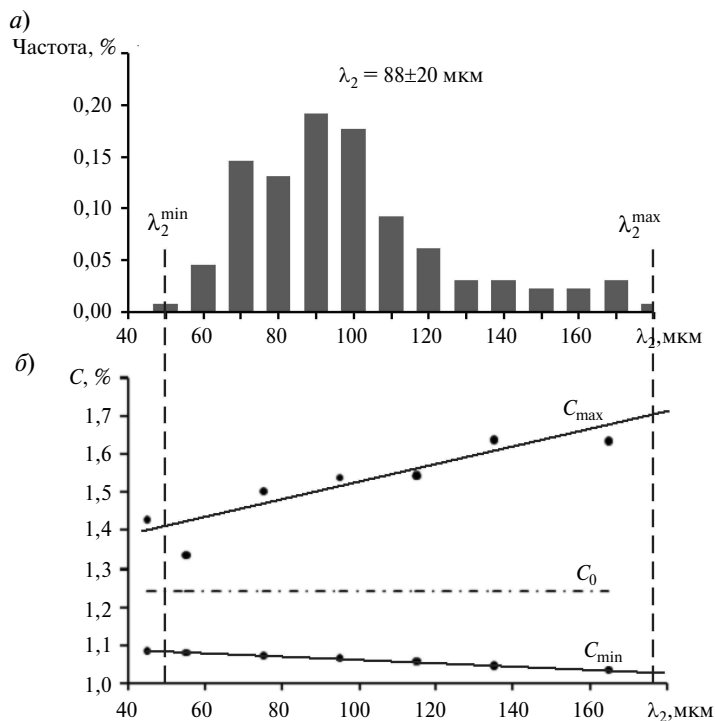


Рис. 3. Взаимосвязь структурной микронеоднородности (а) и параметров дендритной ликвации (б):

а) гистограмма распределения междуосных промежутков λ_2 , построенная по результатам металлографического исследования; б) расчетная концентрация Mn на оси (C_{\min}) и на периферии (C_{\max}) дендритной ветви; C_0 — исходная концентрация

чем больше количество диффундирующего компонента, т. е. менее интенсивно протекает коалесценция и соответствующее увеличение λ_2 .

Вместе с тем, как подтверждается результатами компьютерного моделирования, повышение скорости коалесценции (увеличение λ_2) приводит к более интенсивному накоплению компонентов в расплаве и возрастанию их концентрации C_{\max} в периферийных слоях дендритных ветвей.

В таблице сопоставлено конечное распределение компонентов сплава (Mn, Cr, Ni), достигаемое при формировании ветвей, разделенных различными по величине междуосными промежутками (λ_{\min} – λ_{\max}). К концу кристаллизации благодаря вследствие весьма высокой диффузионной подвижности приобретает практически равномерную концентрацию по сечению ветви и поэтому не отражен в таблице.

Зависимость концентрации компонентов (Mn, Cr, Ni) сплава по сечению дендритной ветви от размера дендритной ячейки λ_2

λ_2 , МКМ	Mn			Cr			Ni, %		
	C_{\min} %	C_{\max} %	$\Delta C/C_0$	C_{\min} %	C_{\max} %	$\Delta C/C_0$	C_{\min} %	C_{\max} %	$\Delta C/C_0$
45 ($\sim \lambda_{\min}$)	1,09	1,43	0,27	1,01	1,12	0,10	1,82	2,21	0,19
95 ($\sim \lambda_{\text{cp}}$)	1,07	1,54	0,38	1,01	1,16	0,14	1,80	2,22	0,21
165 ($\sim \lambda_{\max}$)	1,04	1,64	0,48	1,00	1,19	0,18	1,76	2,40	0,32

Примечание: $\Delta C = C_{\max} - C_{\min}$;
 коэффициенты диффузии, $10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$: $(D_\delta)_{\text{Mn}} \approx 2,1$; $(D_\gamma)_{\text{Mn}} \approx 0,04$; $(D_\delta)_{\text{Cr}} \approx 2,3$; $(D_\gamma)_{\text{Cr}} \approx 0,046$; $(D_\delta)_{\text{Ni}} \approx 1,5$; $(D_\gamma)_{\text{Ni}} \approx 0,018$;
 коэффициенты распределения: $(k_\delta)_{\text{Mn}} \approx 0,72$; $(k_\gamma)_{\text{Mn}} \approx 0,74$; $(k_\delta)_{\text{Cr}} \approx 0,89$; $(k_\gamma)_{\text{Cr}} \approx 0,87$; $(k_\delta)_{\text{Ni}} \approx 0,80$; $(k_\gamma)_{\text{Ni}} \approx 0,84$

Как видно из таблицы, с ростом конечной величины λ_2 при небольшом снижении концентрации компонентов сплава C_{\min} на оси ветви наблюдается увеличение C_{\max} в периферийных слоях, связанное с усилением неравномерного характера процесса кристаллизации. При этом неравномерность распределения различных компонентов при соизмеримых коэффициентах диффузии (D_δ и D_γ) определяется различием величины их коэффициентов распределения (k_δ и k_γ). Наибольшая относительная степень дендритной ликвации ($\Delta C/C_0$) характерна для марганца, который имеет наименьшие по сравнению с хромом и никелем

коэффициенты распределения; хрому, в свою очередь, свойственна наименьшая степень ликвации, так как его коэффициент распределения близок к единице.

Таким образом, характерная для литого металла структурная микронеоднородность приводит к появлению и развитию химической микронеоднородности в объеме кристаллизующегося металла. При этом степень развития химической микронеоднородности в значительной степени определяется кинетикой кристаллизации и коалесценции, а также физико-химическими параметрами сплава.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Емельянов, К.И.** Анализ полноты перитектического превращения в зависимости от кинетики затвердевания железоуглеродистых сплавов [Текст] / К.И. Емельянов, В.М. Голод.— XXXIX неделя науки СПбГПУ: Матер. межд. науч.-практ. конф. Ч. VI.— СПб.: Изд-во СПбГПУ, 2010.— С. 15–17.
2. **Голод, В.М.** Дендритная микронеоднородность стальных отливок: обзор исследований и компьютерный анализ [Текст] / В.М. Голод, К.И. Емельянов, И.Г. Орлова.— Сб.: Литейное производство сегодня и завтра. Труды 9 Всеросс. науч.-техн. конф.— СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2012.— С. 436–455.
3. **Емельянов, К.И.** Компьютерное моделирование структурной микронеоднородности при кристаллизации многокомпонентных сплавов [Текст] /

К.И. Емельянов, К.И. Емельянов, В.М. Голод // Литейщик России.— 2013.— № 2.— С. 28–32.

4. **Голод, В.М.** Моделирование и компьютерный анализ кристаллизации многокомпонентных сплавов на основе железа [Текст] / В.М. Голод, К.Д. Савельев, А.С. Басин.— СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2008.— 372 с;

5. **Natsume Y., Shimamoto M., Ishida H.** Numerical modeling of microsegregation for Fe-base multicomponent alloys with peritectic transformation coupled with thermodynamic calculations [Текст] // ISIJ Int.— 2010. Vol. 50, № 12.— P. 1867–1874.

6. **Han Q., Hu H., Zhong X.** Models for the isothermal coarsening of secondary dendrite arms in multicomponent alloys [Текст] // Metall. Mater. Trans.— 1997.— Vol. 28B, № 6.— P. 1185–1187.

REFERENCES

1. **Emel'inaov, K.I.** Analiz polnoty peritekticheskogo prevrashcheniia v zavisimosti ot kinetiki zatverdevaniia zhelezouglerodistykh splavov [Tekst] / K.I. Emel'inaov, V.M. Golod.— XXXIX nedelia nauki SPbGPU. Mater. mezhd. nauch.-prakt. konf. Ch. VI.— SPb.: Izd-vo SPB-GPU, 2010.— С. 15–17. (rus.)
2. **Golod V.M. Emel'ianov K.I., Orlova I.G.** Dendritnaia mikroneodnorodnost' stal'nykh otlivok: obzor issledovaniia i komp'uternyi analiz.— Sb. Liteinoe proizvodstvo segodnia i zavtra [Tekst].— Trudy 9 Vseross. nauch.-tekhn. konf.— SPb, Izd-vo Politekhn. un-ta, 2012.— S. 436–455. (rus.)
3. **Emel'ianov, K.I. Golod V.M.** Komp'uternoie modelirovanie strukturnoi mikroneodnorodnosti pri kristalli-

zatsii mnogokomponentnykh splavov [Tekst] // Liteishchik Rossii.— 2013.— № 2.— С. 28–32. (rus.)

4. **Golod, V.M. Savel'ev K.D., Basin A.S.** Modelirovanie i komp'uternyi analiz kristallizatsii mnogokomponentnykh splavov na osnove zheleza [Text].— SPb.: Izd-vo Politekhn. un-ta, 2008.— 372 s. (rus.)

5. **Natsume Y., Shimamoto M., Ishida H.** Numerical modeling of microsegregation for Fe-base multicomponent alloys with peritectic transformation coupled with thermodynamic calculations [Text] // ISIJ Int.— 2010.— Vol. 50, № 12.— P. 1867–1874.

6. **Han Q., Hu H., Zhong X.** Models for the isothermal coarsening of secondary dendrite arms in multicomponent alloys [Text] // Metall. Mater. Trans.— 1997.— Vol. 28B, № 6.— P. 1185–1187.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ /AUTHORS

ЕМЕЛЬЯНОВ Константин Игоревич — аспирант Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; 195251, ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, Россия; e-mail: bykostya@hotmail.ru

EMEL'IANOV Konstantin I. — St.-Petersburg State Polytechnical University; 195251, Politekhnikeskaya Str. 29, St.-Petersburg, Russia; e-mail: bykostya@hotmail.ru

ГОЛОД Валерий Михайлович — кандидат технических наук профессор Санкт-Петербургского государственного политехнического университета; 195251, ул. Политехническая, 29, Санкт-Петербург, Россия; e-mail: cheshire@front.ru

GOLOD Valery M. — St.-Petersburg State Polytechnical University; 195251, Politekhnikeskaya Str. 29, St.-Petersburg, Russia; e-mail: cheshire@front.ru