

A szferoidit ausztenitesedésének szimulációja

Az acélok mechanikai tulajdonságait az összetételük mellett az ausztenit hűtése során annak átalakulásakor kialakuló mikroszerkezet határozza meg elsődlegesen. A hűtés során kialakuló mikroszerkezetre hatással van az ausztenit szemnagysága, a durva szemnagysággal bíró ausztenitből kialakuló mikroszerkezet durvább lesz, ami a mechanikai tulajdonságokat jelentősen rontja. Hasonlóan az ausztenit összetétele (pl.: a fel nem oldott karbidok) is befolyásolja a hűtés során kialakuló mikroszerkezetet. A kiinduló szerkezet változatosan befolyásolja az átalakulás folyamatát. Ebben a munkában a szferoiditos mikroszerkezet ausztenitesedésével foglalkozunk.

Bevezetés

A karbonacélok ausztenitesedése csíráképződéssel és csíranövekedéssel zajló, hosszú távú karbon-diffúzió által szabályozott átalakulási folyamat. Ha a munkadarabunkat A_1 fölé hevítjük, benne ausztenitcsírák jelennek meg, majd indulnak növekedésnek. A növekvő csírák előbb-utóbb összetalálkoznak, ausztenit-szemcséket képezve. Ha kellő idő állt rendelkezésre, az összetételtől függően A_3 , illetve A_{cm} fölött a kiinduló szerkezet szülőfázisai (ferrit, cementit) átalakulnak egyfázisú, ausztenites szerkezetté. Hőntartva a darabot az ausztenit szemcsék eldurvulnak. [1-11]

A szferoiditos szövet ausztenitesedésének leírását célzó szimulációk három fő részből épülnek fel: a kiinduló szerkezet létrehozása, a csíráképződés és a csíranövekedés szimulációja. A kiinduló szerkezetek lehetnek egyszerű (csak egy, vagy néhány jellegzetes szövetszerkezeti elemet tartalmazó), illetve valós (digitalizált) mikroszerkezetek. A csíráképződést egy szabadentalpia alapú modell írja le, míg a csíranövekedést a Fick II. diffúziós egyenletek véges differencia módszerrel történő nume-

rikus megoldása. Ezeket a későbbiekben részletesebben ismertetjük. A kiinduló szerkezeteket és a részfolyamatok modelljeit a sejtautomata módszer kapcsolja össze, amelyről érdemes pár szót ejtenünk a szimulációk könnyebb megértéséhez.

A sejtautomaták olyan diszkrét modellek, amelyeket gyakran alkalmaznak a számításelméletben, a matematikában, a fizikában, a komplex rendszerek modellezésében, az elméleti biológiában és a mikroszerkezetek modellezésében. A sejtautomata egy olyan szabályos, tetszőleges dimenziójú rácsrendszer, amely véges számú, azonos méretű rács-elemből épül fel. Ezeket a rács-elemeket nevezzük sejteknek. A sejteknek különféle, véges számú állapota lehet. A sejtautomata egymást követő időlépésekben megvizsgálja minden egyes sejt állapotát. Egy sejt állapota a következő időlépésben a saját és a szomszédai előző időpillanatbeli állapotától függ. A sejtek állapotváltozását egy előre definiált szabályrendszer írja le. Szimulációinkban szinkron, determinisztikus automatákat alkalmaztunk, ami azt jelenti, hogy a rácsrendszer minden egyes sejtjén sorban végighaladva alkalmazzuk az

állapotváltási szabályokat, továbbá az állapotváltozások nem kötöttek valószínűséghez, az előírt esetekben mindig bekövetkeznek [12].

Egyszerű kiinduló mikroszerkezet

A szferoiditos szerkezet lágy, ferrites mátrixba ágyazott kemény, gömbszerű cementit-rögökből áll. Az egyszerű szferoiditos mikroszerkezetet egy rögökből, illetve az azt körülvevő ferritből képeztük úgy, hogy egy 250×250 képpontból álló ferrites tartomány közepébe „rajzoltuk” be a cementit-rögöt. Ezt a szerkezetet láthatjuk (egy ausztenitcsíra kíséretében) a később elemzett *4a ábrán*. A fázisok (ferrit – fehér, cementit – szürke) mennyiségének arányával előállítható a kívánt koncentrációjú kiinduló szerkezet.

Valós kiinduló mikroszerkezet

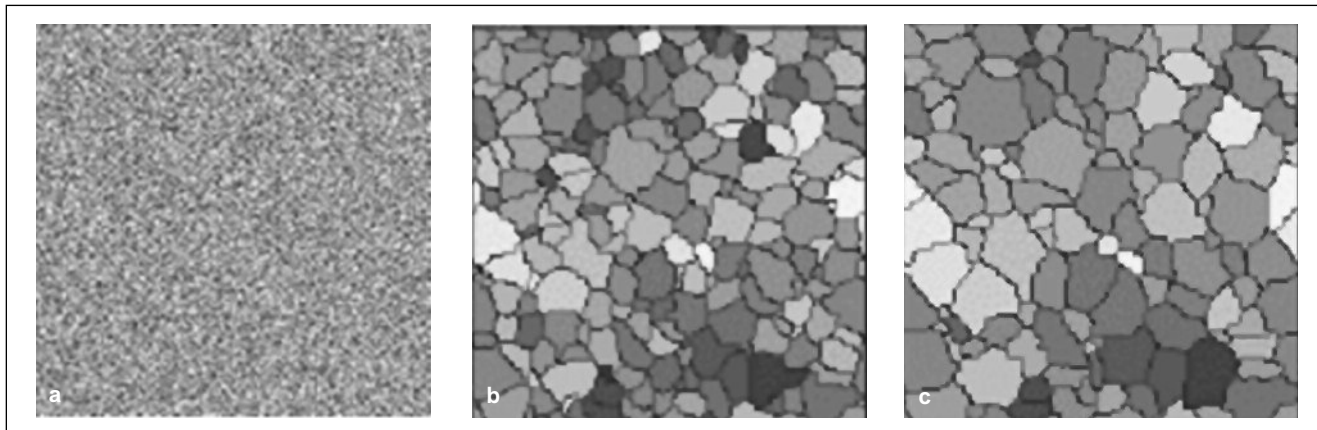
Ezeket a kiinduló szerkezeteket két lépésben hoztuk létre. Először egy szemcsedurvulás szimulációt felhasználva [13] tetszőlegesen eldurvított, egyfázisú szemcsehatár-hálózatokat állítottunk elő. A szimulációk indításakor minden képpont egy-egy szemcse, ezek durvulnak el, létrehozva a nagyobb szemcséket (*1. ábra*). A kapott szemcsehatárok ferrit szemcsehatároként szolgálnak majd a szferoiditos kiinduló szerkezetben. A második lépésben digitalizált felvételeket használtunk fel: opening művelettel eltüntettük az apró hibákat a képekről, majd ráillesztettük a mátrixra a felvétel cementit-rögjeit. Az így kapott szerkezetet láthatjuk a *10a ábrán* (fázisok: ferrit – fehér, cementit – fekete), amelyre később térünk ki részletesen. A szerkezetre jellemző paraméterek:

$$\bar{d}_{rög} = \frac{\sum_{i=1}^n d_{rög}^i}{n} \quad (1)$$

a cementit-rögök átlagos átmérője;
 $d_{rög}^{min}$, $d_{rög}^{max}$ – a cementit-rögök minimális és maximális átmérői.

Karacs Gábor a Miskolci Egyetem Műszaki Anyagtudományi Karának a Fémtani, Képlékenyalakítási és Nanotechnológiai Intézetében tudományos segédmunkatárs. 2001-ben a Gépészmérnöki Karon szerzett villamosmérnöki diplomát, informatika szakirányon. 2004-ben az Anyag- és Kohómérnöki Karon végzett okl. anyagmérnök-ként, anyaginformatika ágazaton, anyagtervező szakirányon. 2005 és 2008 között az MTA fiatal kutatója. 2008-ban PhD abszolutóriumot szerzett. Kutatási területe az ausztenitesedés modellezése, szimulációja. Oktatott tantárgyai: Anyagszerkezettan II., Szerkezetvizsgálat.

Roósz András életrajzát lapunk 2008/5. számában közzeltük. Roósz András 2010-ben az MTA rendes tagja lett.



1. ábra. Szemcsedurvított egyfázisú szerkezetek

A csíráképződés modellezése

A folyamat termodinamikai hajtóereje a ferrit+cementit mikroszerkezet és az auszénit szabadentalpiája közti különbség:

$$\Delta G_a = G_\gamma - G_{\alpha+cem} \quad (2)$$

A modell szerint minden sejtnak (az atomokhoz hasonlóan) termikus szabadentalpiája (G_T) van, amely a Maxwell-Boltzmann-eloszlást követi. A modell minden sejthez véletlenszerűen rendel hozzá egy értéket minden időlépésben [13].

Követve a klasszikus csíráképződési elméletet, a csíráképződés sebessége (I) a következő:

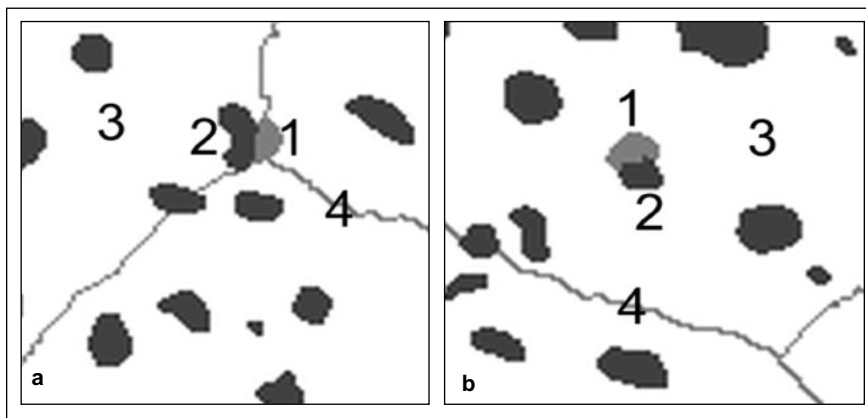
$$I = K_1 N \frac{kT}{h} \exp\left(-\frac{\Delta G_n + (\Delta G_a - \Delta G_{str})}{RT}\right) = K_2 \exp\left(-\frac{\Sigma \Delta G}{RT}\right) \quad (3)$$

$$\Delta G_n = \frac{16}{3} \pi \frac{\gamma^3}{\Delta G_\gamma} \quad (4)$$

$$\Delta G_\gamma = L \frac{T_0 - T}{T_0} = L \frac{\Delta T}{T_0} \quad (5)$$

$$\Delta G_n = \frac{16}{3} \pi \frac{\gamma^3 T_0^2}{RL^2} \frac{1}{T(T_0 - T)} = K_3 \frac{1}{T(T_0 - T)} \quad (6)$$

ahol N – területegységre eső csíráképző helyek száma; ΔG_{str} – a határ struktúrájából származó szabadentalpia; T – abszolút hőmérséklet; T_0 – az átalakulás egyensúlyi hőmérséklete; k – Boltzmann-állandó; R – egyetemes gázállandó; h – Planck-állandó; γ – auszénit/ferrit határenergia; L – az átalakulás látens hője; K_1, K_2, K_3 – konstansok. Auszénitcsíra ott jöhet



2. ábra. Csíráképződés a ferrit szemcsék határán (a), ferrit szemcsékben (b) (1-auszénitcsíra, 2-cementit, 3-ferrit, 4-ferrit szemcsehatár)

létre, ahol $G_T > \Sigma \Delta G$. A csírák a gyakorlati hőkezelések esetében többnyire a ferrit szemcsehatárok és a cementittrögök határain képződnek, a ferrit szemcsehatároktól távolabb csak ritkán jönnek létre. A szimulációk követik a valóságot, a 2. ábrán a két különféle csíráképződési helyen létrejövő, majd növekvő csírákat láthatjuk.

A csíranövekedés modellezése

A 3a ábrán láthatjuk a sferoidit átalakulását, ahol az egyik cementittrög egy része már feloldódott, auszénitburok veszi körül azt. A 3b ábra a koncentrációeloszlást mutatja az 1-5. pontok között (x irány esetén). Az egyensúlyi koncentrációkat a vas-karbon fázisdiagramból kapjuk. A γ, α, Fe_3C fázisok $dx_\gamma, dy_\gamma, dx_{\alpha/Fe_3C}, dy_{\alpha/Fe_3C}, dx_{\gamma/Fe_3C}, dy_{\gamma/Fe_3C}$ vastagsággal történő megváltozása x és y irányokban a (7-9) egyenletekből adódik:

$$dx_\gamma dy_\gamma (C_\gamma^{\alpha/\gamma} - C_\alpha^{\alpha/\gamma}) = D_\alpha \left(\frac{\partial C_\alpha}{\partial x} \right)_{\alpha/\gamma} +$$

$$+ \frac{\partial C_\alpha}{\partial y} \Big|_{\alpha/\gamma} dt + D_\gamma \left(\frac{\partial C_\gamma}{\partial x} \Big|_{\alpha/\gamma} + \frac{\partial C_\gamma}{\partial y} \Big|_{\alpha/\gamma} \right) dt \quad (7)$$

$$dx_{\alpha/Fe_3C}^{Fe_3C} dy_{\alpha/Fe_3C}^{Fe_3C} (C_{Fe_3C} - C_{\alpha/Fe_3C}^\alpha) = D_\alpha \left(\frac{\partial C_\alpha}{\partial x} \Big|_{\alpha/Fe_3C} + \frac{\partial C_\alpha}{\partial y} \Big|_{\alpha/Fe_3C} \right) dt \quad (8)$$

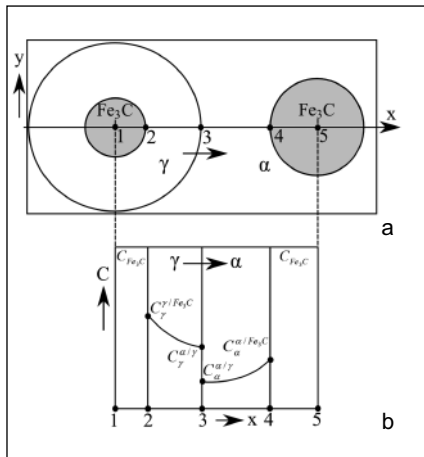
$$dx_{\gamma/Fe_3C}^{Fe_3C} dy_{\gamma/Fe_3C}^{Fe_3C} (C_{Fe_3C} - C_{\gamma/Fe_3C}^\gamma) = D_\gamma \left(\frac{\partial C_\gamma}{\partial x} \Big|_{\gamma/Fe_3C} dt + \frac{\partial C_\gamma}{\partial y} \Big|_{\gamma/Fe_3C} \right) dt \quad (9)$$

A határfelületen a koncentrációgradiensek kiszámításához meg kell oldani a Fick II. egyenleteket is mindkét fázisban:

$$\frac{\partial C_\alpha}{\partial t} = D_\alpha \left(\frac{\partial^2 C_\alpha}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_\alpha}{\partial y^2} \right) \quad (10)$$

$$\frac{\partial C_\gamma}{\partial t} = D_\gamma \left(\frac{\partial^2 C_\gamma}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_\gamma}{\partial y^2} \right) \quad (11)$$

A különféle fázishatárok karbonkoncentrációit az ESTPHAD-módszer [14] felhasználásával határoztuk



■ 3. ábra. Szferoidit átalakulása (a), koncentrációeloszlás (b)

meg, amely polinomokkal közelíti a fázisdiagramok, esetünkben a vas-cementit rendszer görbéit.

Az egyenletrendszert explicit véges differencia módszerrel oldottuk meg. Neumann-szomszédságot alkalmazva az i -, j -edik sejt koncentrációja a h -adik időlépésben:

$$C(\alpha)_{i,j}^h = C(\alpha)_{i,j}^{h-1} + \frac{D_\alpha \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \cdot (C(\alpha)_{i-1,j}^{h-1} + C(\alpha)_{i+1,j}^{h-1} + C(\alpha)_{i,j-1}^{h-1} + C(\alpha)_{i,j+1}^{h-1} - 4 \cdot C(\alpha)_{i,j}^{h-1}) \quad (12)$$

$$C(\gamma)_{i,j}^h = C(\gamma)_{i,j}^{h-1} + \frac{D_\gamma \cdot \Delta t}{\Delta x^2} \cdot (C(\gamma)_{i-1,j}^{h-1} + C(\gamma)_{i+1,j}^{h-1} + C(\gamma)_{i,j-1}^{h-1} + C(\gamma)_{i,j+1}^{h-1} - 4 \cdot C(\gamma)_{i,j}^{h-1}) \quad (13)$$

ahol

h – időlépések (CAS) száma; i – sorok száma; j – oszlopok száma; D_α , D_γ – az alfa és gamma fázisokba a karbon diffúziós tényezője; Δt – egy időlépés; Δx – egy cella (x és y irányú) mérete.

A j -, i -edik cella átlagkoncentrációja a h -, t -edik lépésben:

$$\bar{C}(\alpha/\gamma)_{j,i}^{h-1} = f_\alpha^{h-1} C_{\alpha/\gamma}^{h-1} + f_\gamma^{h-1} C_\gamma^{h-1} \quad (14)$$

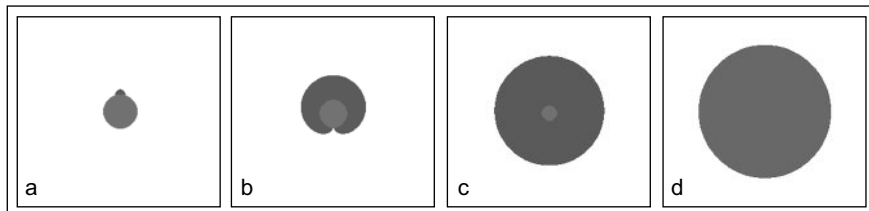
és

$$f_\alpha^{h-1} = (\bar{C}(\alpha/\gamma)_{j,i}^{h-1} - C_{\alpha/\gamma}^{h-1}) / (C_{\alpha/\gamma}^{h-1} - C_\alpha^{h-1}) \quad (15)$$

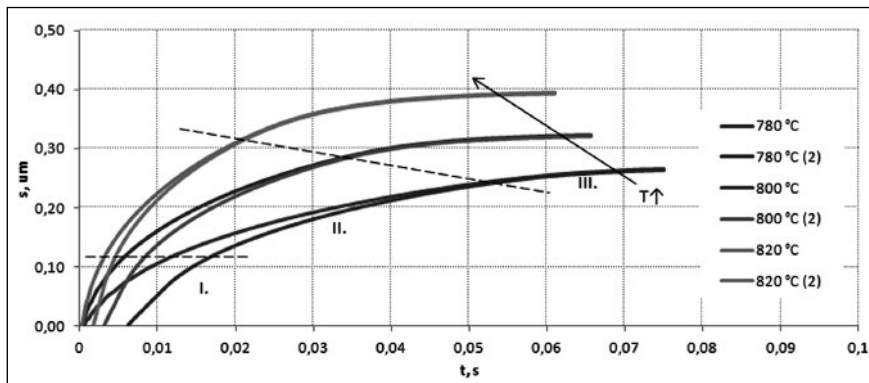
ahol

f_α és f_γ – a ferrit és az ausztenit tömeghányada a cellában. Az átlagkoncentráció a h -adik lépésben:

$$\Delta \bar{C}(\alpha/\gamma)_{i,j}^h = f_\alpha^{h-1} \frac{D_\alpha \Delta t}{\Delta x^2} (C_{i-1,j}^{h-1} - C_{\alpha/\gamma}^{h-1}) + f_\gamma^{h-1} \frac{D_\gamma \Delta t}{\Delta x^2} (C_{i+1,j}^{h-1} - C_\gamma^{h-1}) \quad (16)$$



■ 4. ábra. Egy cementittrög és az azt körülvevő ferrit ausztenitesedése. Növekedésnek indult ausztenitcsíra (a), a körbenövés előtti pillanat (b), körszerű növekedés (c) és az átalakulás vége (d)



■ 5. ábra. Az ausztenit ferrit felé való elmozdulása az idő függvényében

mat a (14-17) egyenletekkel írható le annyi kivétellel, hogy az egyenletekben kicseréljük C_{γ/Fe_3C} -t C_{α/Fe_3C} -re, illetve D_γ -t D_α -ra.

Szimuláció egyszerű mikroszerkezeten

A korábban említett módszerrel 0,15% átlag karbon koncentrációjú kiinduló szerkezetet modelleztünk. Ennél az összetételnél A_3 hőmérséklet alatt a szerkezet nem képes teljesen ausztenitesedni, a cementit feloldódása után a még meglévő ferrit egy része átalakul, majd a növekedés megáll, ahogy az egyensúlyi fázisdiagram adott izotermáján lévő egyensúlyi állapot beáll. Ezzel a szerkezettel tesztelhetjük, hogy a szimulációban is így történik-e a növekedési folyamat.

Csíraképződési modellt ilyen egyszerű szerkezeten nem alkalmaztunk, csak a növekedés kinetikáját kívántuk vizsgálni. Ahhoz, hogy a növekedés elindulhasson, egy ausztenitcsírat kellett elhelyez-

nünk a ferrit/cementittrög határának egy pontján, amely aztán növekedésnek indult. A szimulációból kiragadott képeken (4. ábra) megfi-

Az ausztenit tömeghányadának változása:

$$\Delta f_\gamma^h = \Delta \bar{C}(\alpha/\gamma)_{i,j}^h / (C_{\alpha/\gamma}^{h-1} - C_\alpha^{h-1}) \quad (17)$$

A sejt ausztenitté válik (ausztenit-ferrit határ, gamma oldal), ha az átlagkoncentrációja eléri a $C_{\alpha/\gamma}$ értéket. Hasonlóan a cementit/ausztenit határ esetén:

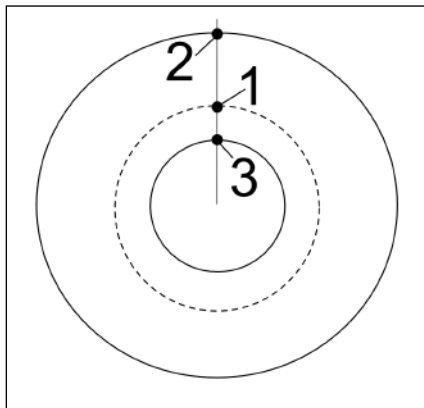
$$\bar{C}(\gamma/Fe_3C)_{j,i}^{h-1} = f_{Fe_3C}^{h-1} C_{Fe_3C}^{h-1} + f_\gamma^{h-1} C_{\gamma/Fe_3C}^{h-1} \quad (18)$$

$$f_\gamma^{h-1} = (C_{Fe_3C}^{h-1} - \bar{C}(\gamma/Fe_3C)_{j,i}^{h-1}) / (C_{Fe_3C}^{h-1} - C_{\gamma/Fe_3C}^{h-1}) \quad (19)$$

$$\Delta \bar{C}(\gamma/Fe_3C)_{i,j}^h = f_\gamma^{h-1} \frac{D_\gamma \Delta t}{\Delta x^2} (C_{i-1,j}^{h-1} - C_{\gamma/Fe_3C}^{h-1}) \quad (20)$$

$$\Delta f_\gamma^h = \Delta \bar{C}(\gamma/Fe_3C)_{i,j}^h / (C_{\gamma/Fe_3C}^{h-1} - C_{Fe_3C}^{h-1}) \quad (21)$$

A sejt ausztenitté válik (ausztenit-cementit határ, gamma oldal), ha koncentrációja C_{γ/Fe_3C} -re csökken. A cementit/ferrit határ esetén a folya-

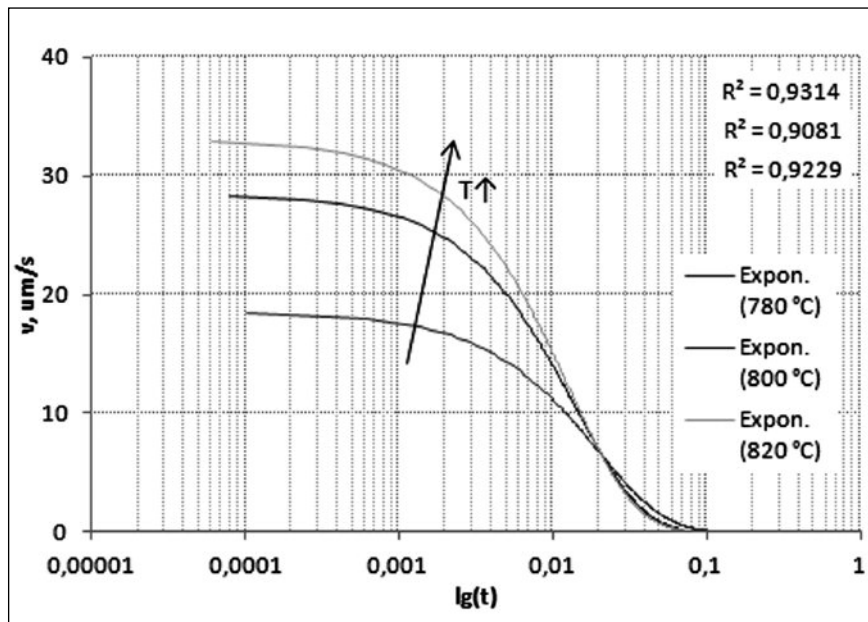


■ 6. ábra. Az egyszerű szerkezet átalakulása. Egy képzeletbeli egyenes mentén: 1 – az ausztenitcsíra „képződési helye”, ausztenit/ferrit és ausztenit/cementit határ a folyamat kezdetén, 2 – ausztenit/ferrit határ a növekedés előrehaladtával, 3 – cementit/ausztenit határ a folyamat előrehaladtával

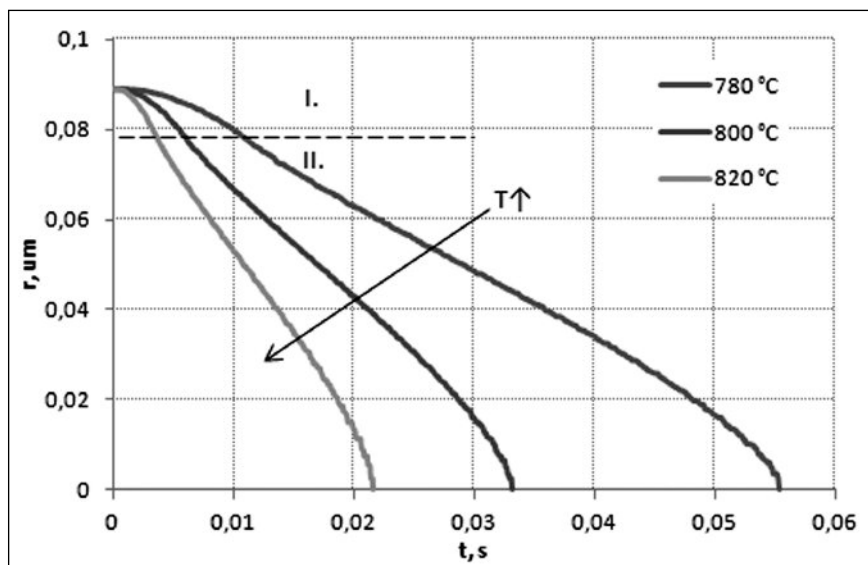
gyelhető, hogy az ausztenitcsíra először körbenövi a cementitrögöt, majd teljesen elfogyasztja azt. A növekedés többféle kinetikával zajlik. Amíg az ausztenit nem növi teljesen körbe a rögöt, addig a növekedése ferriten és auszteniten keresztüli karbondiffúzióval megy végbe. Ezután a növekedés már csak auszteniten keresztüli karbondiffúzióval zajlik. A cementit az átalakulás során teljesen feloldódik, de elfogyásának pillanatában az ausztenit növekedése még nem áll meg, az ausztenitben oldott karbon egy része még az auszteniten keresztül az ausztenit/ferrit határra diffundál, a ferrit így átalakul. A növekedés csak az adott hőmérsékletnek megfelelő egyensúlyi összetétel eléérésekor fejeződik be.

Azért, hogy a növekedési modell kinetikát ellenőrizzük, különböző hőmérsékleten futtatásokat végezve megvizsgáltuk az ausztenitfront mozgását a ferrit felé, a cementitrög átmérőjének változását és az ausztenit mennyiségének változását.

Az 5. ábra görbéi az ausztenit határ ferrit felé való elmozdulását írják le az idő függvényében. Kétféle módszerrel számoltuk a front elmozdulását, így mindhárom hőmérséklethez két görbe tartozik. Az első esetben (5. ábra) egy egyenes mentén (ami keresztülhalad a rög középpontján, illetve a növekedésnek indult csírán) vizsgáltuk a front mozgását (6. ábra), míg a másik esetben (a 5. ábra (2) görbéi) az ausztenit és a mindenkori



■ 7. ábra. A ferrit felé növekvő ausztenitfront sebessége



■ 8. ábra. A cementitrög sugarának változása az idő függvényében

cementitrög területének különbségéből határoztuk meg az elmozdulást. A kapott görbepárok nem esnek teljesen egybe, különösen igaz ez a folyamat elején, ami azzal magyarázható, hogy a (2)-es esetben a növekedés kezdetén az ausztenit mennyisége még kevesebb, mint a nem feloldódott cementitrögé, ezért ott nem tudjuk a második módszerrel számolni a megtett (átlag)távolságot, mert az ausztenit és cementit fázisok mennyiségének különbsége negatív számot eredményezne. Ez a magyarázat arra is, hogy a (2) görbék nem az origóból indulnak. A római számokkal jelölt tartományok az eltérő kinetikával történő növekedést jelölik. Az I. szakaszban az ausztenit körbenövi a cemen-

titrögöt, a II. tartományban a növekedés egyre inkább körszerűen zajlik, de már csak auszteniten keresztüli diffúzióval. A III. szakaszban a cementit már elfogyott, a növekedés lelassul, majd befejeződik, a görbék elapadosnak. A 5. ábra görbéit deriválva kapjuk meg az ausztenitfront mozgásának sebességét a ferrit irányába. A 7. ábra a front növekedési sebességének időtől való függését mutatja meg.

A 8. ábrán a cementitrög sugarának változását mutatjuk be az idő függvényében. A sugár változása közel lineáris, eltekintve a folyamat elejétől és végétől. Előbbinek oka, hogy ekkor még (I. szakasz) az ausztenit nem nötte körül teljesen a cemen-

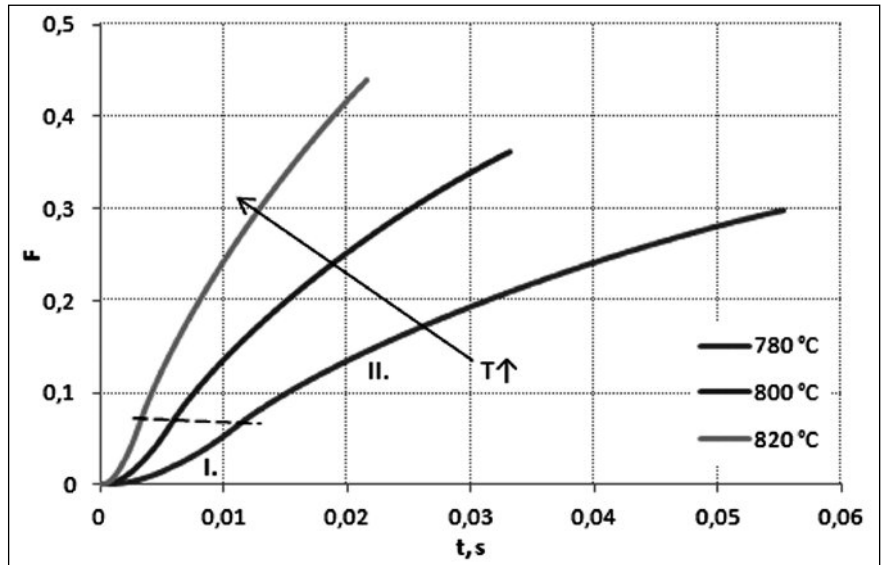
rögöt, az auszteniten keresztüli difúzió nem a rög teljes felületéről szállít karbont. Utóbbi a cementit-rög geometriájával magyarázható. Amikor már csak néhány képpontból áll a rög, elveszti körszerűségét, ami hatással van sugarának számítására. Az ausztenitfront cementit-rög felé mozgását nem ábrázoltuk, de belátható, hogy az szintén lineáris, hiszen a megtett út a kiinduló rög sugarának és a mindenkor i rög sugarának különbségéből számítható (6. ábra, az 1-es és 3-as pont távolsága).

Az ausztenit mennyiségének változását láthatjuk a 9. ábrán. Az I. szakaszt elhagyva az átalakult hányad \sqrt{t} -vel arányosan változik. A III. szakaszt az eltérő kinetika miatt nem ábrázoltuk.

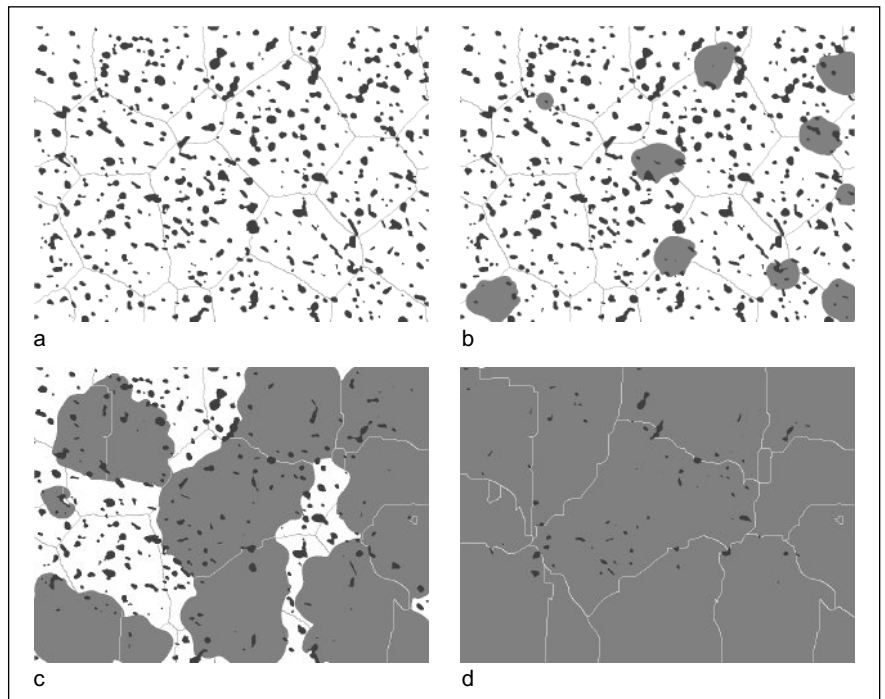
A növekedés a cementit feloldódása után is folytatódik még (4d ábra), de a folyamat lelassul, majd megáll. A 780, 800 és 820 °C-on futtatott szimulációkból a folyamat végén az átalakult hányadok értékeire 0,35, 0,45 és 0,64-ot kaptunk.

Szimuláció valós mikroszerkezeten

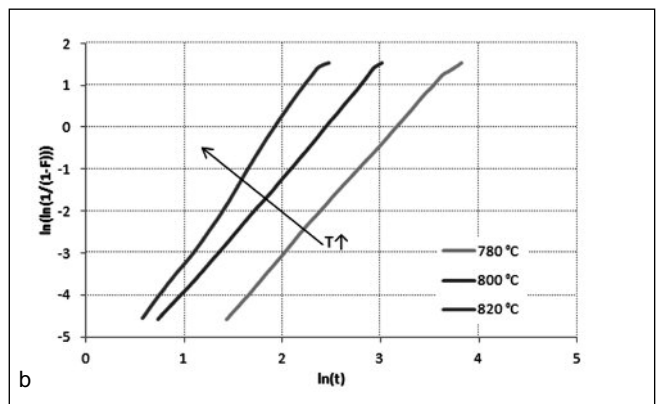
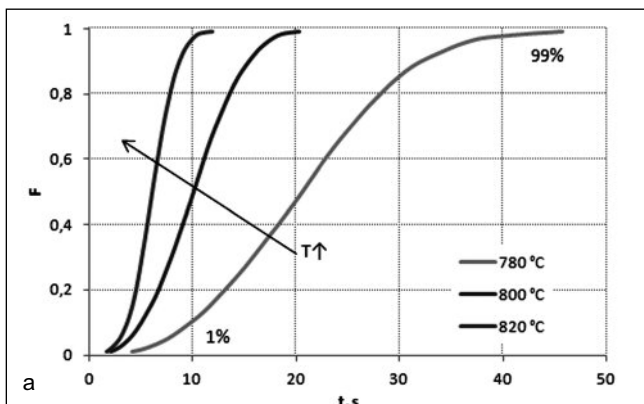
A 10. ábra képsorozatán láthatjuk egy valós, eutektoidos összetételű (0,77% C) mikroszerkezet auszteniteseését. A ferrit szemcsehatár/cementit-rög határokon ausztenitcsírák jönnek létre, majd indulnak növekedésnek. A csíráképződésnél $\Sigma\Delta G$ értéke a ferrit szemcsehatár/cementit határon 125 kJ, a ferrit/cementit határon 145 kJ volt (lásd 2. ábra). A cementit-rögök feloldódnak a növekvő ausztenitben, miközben a ferrit mátrix átalakul. A folyamatra jellemző átalakult hányad-idő, illetve azok logaritmusainak görbéit láthatjuk a 11. ábrán.



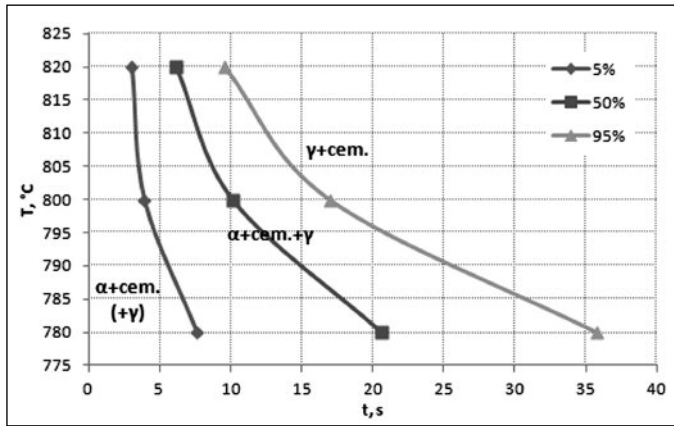
9. ábra. Az ausztenit mennyisége az idő függvényében



10. ábra. Valós szferoiditos szerkezet auszteniteseése



11. ábra. Az átalakult hányad változása az átalakulás során (a), Avrami-egyenesek (b)



■ 12. ábra. Átalakulási diagram izotermás ausztenitesedés esetén

A teljes folyamat kinetikáját a Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov-egyenlet írja le:

$$F = 1 - \exp\left(-B_0 \exp\left(-\frac{Q_R}{RT}\right) t^n\right) \quad (22)$$

ahol F – az átalakult hányad; B_0 , Q_R , n – konstansok. Az eredményekből látható, hogy a szimuláció a fenti kinetikát követi. Az egyenesekből számított Avrami-kitevők 780, 800 és 820 °C-on: 2,59, 2,75 és 3,4.

A futtatási eredményekből megszerkeszthető a sferoiditos szerkezet izotermás ausztenitesedésének átalakulási diagramja, ezt láthatjuk a 12. ábrán.

Kellően sok, teljes futtatás esetén a görbék pontosíthatóak, illetve a diagram kiegészíthető azzal a tartománnyal, ahol a cementit teljesen feloldódott.

Összefoglalás

Célunk sferoiditos kiinduló szerkezettel bíró acélok ausztenitesedésének leírása, közelítése volt szimuláció alkalmazásával. Kiinduló modell szerkezeteket készítettünk, ezeken végeztük el a szimulációkat. Kidolgoztunk egy szabadentalpia alapú csíráképződési modellt, ami különbséget tesz a ferrit szemcsehatárokon, illetve a szemcsén belül keletkező csíráképződési helyek között. Csíranövekedési modellt készítettünk, amely a ferriten és az auszteniten keresztüli karbondiffúziót is tudja számolni.

Az egyszerű kiinduló szerkezeten történt futtatások megmutatták, hogy a növekedési folyamat két eltérő kinetikával írható le. Kezdetben az ausztenitcsíra körbenövi a

cementittrögöt, a folyamatot a ferriten és az auszteniten keresztüli karbondiffúzió irányítja, majd a körbenövés után már csak auszteniten keresztüli diffúzióval történik a növekedés.

A valós szerkezet futtatásai-

ből láthatjuk, hogy a teljes folyamatra jellemző átalakult hányad időbeli változását (11. ábra) valóban a (22)-es Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov-egyenlet írja le. A kapott eredményekből izoterm körülményekre megszerkeszthető az ausztenitesedési diagram (12. ábra).

A szimulációkból az adatok mellett képek is nyerhetők, amelyekkel az egyes részfolyamatok (csíráképződés, csíranövekedés) is jól szemléltethetőek.

Köszönetnyilvánítás

A kutatómunka a TÁMOP-4.2.2/B-10/1-2010-0008 jelű projekt részeként – az Új Magyarország Fejlesztési Terv keretében – az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

Irodalom

- [1] Orlich, I. – Rose, A. – Wiest, P.: Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle, Vols. 3–4, Verlag Stahleisen, M.B.H., Düsseldorf, 1976.
- [2] Bunghardt, K. – Preisendanz, M. – Brandis, M.: „Beitrag zur Kenntnis des Umwandlungsverhaltens von Stahl 50 CrV4,” Arch. Eisenhütt., Vol. 32, 1961, pp. 261–263.
- [3] Schmidtman, E. – Brandis, H.: „Beitrag zur Austenitbildung in unlegierten und niedriglegierten untereutektoidischen Stählen,” Arch. Eisenhütt., Vol. 30, 1959, pp. 83–89.
- [4] Rose, A. – Strassburg, W.: „Kinetik der Austenitbildung unlegierten und niedriglegierter eutektoi-

discher Stähle,” Arch. Eisenhütt., Vol. 27, 1956, pp. 513–520.

- [5] Hillert, M. – Nilsson, K. – Törndahl, L. E.: „Effect of Alloying Elements on the Formation of Austenite and Dissolution of Cementite,” J. Iron Steel Inst., London, Vol. 209, 1971, pp. 49–66.
- [6] Molinder, G.: „A Quantitative Study of the Formation of Austenite and the Solution of Cementite at Different Austenitizing Temperatures for a 1.27 % Carbon Steel,” Acta Metall., Vol. 4, 1956, pp. 565–571.
- [7] Judd, R. R. – Paxton, M. W.: „Kinetics of Austenite Formation Iron a Spheroidized Ferrite-Carbide Aggregate,” Trans. T.M.S.-A.I.M.E., Vol. 242, 1968, pp. 206–215.
- [8] Törndahl, L. E.: 1968, thesis, Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden.
- [9] Dirnfeld, S. F. – Korevaar, B. M. – Van’t Spijker, F.: „The Transformation to Austenite in a Fine Grained Tool-Steel,” Metall. Trans., Vol. 5, 1974, pp. 1437–1444.
- [10] Speiche, G. R. – Szirmai, A.: „Formation of Austenite from Ferrite and Ferrite-Carbide Aggregates,” Trans. T.M.S.-A.I.M.E., Vol. 245, 1969, pp. 1063–1074.
- [11] Roósz, A. – Gácsi, Z. – Fuchs, E.: „Isothermal Formation of Austenite in Eutectoid Plain Carbon-Steel,” Acta Metall., Vol. 31, 1983, pp. 509–517.
- [12] Gaylord, R. J. – Nishidate, K.: „Modelling Nature, Cellular Automata Simulations with Mathematics”, Springer, 1989.
- [13] Geiger, J. – Roósz, A. – Barkóczy, P.: „Simulation of Grain Coarsening in Two Dimensions by Cellular Automaton”, Acta Mater., Vol. 49, 2001, pp. 623–629.
- [14] Roósz, A. – Barkóczy, P. – Farkas, J.: „The ESTPHAD: A Simple Tool for the Simulation of Solidification of Multicomponent Alloys”, SP’07 Proceedings of the Fifth Decennial International Conference on Solidification Processing, Sheffield, United Kingdom, 2007, T.J. International Ltd., Cornwall, United Kingdom, pp. 365–368.