

高Cr铸铁中 M_7C_3 碳化物与奥氏体共生长的元胞自动机模拟

张山 张红伟 苗淼 冯苗苗 雷洪 王强

Cellular automaton simulation on cooperative growth of M_7C_3 carbide and austenite in high Cr cast irons

Zhang Shan Zhang Hong-Wei Miao Miao Feng Miao-Miao Lei Hong Wang Qiang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 218102 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210725

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210725>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

温度梯度区域熔化作用下熔池迁移的元胞自动机模拟

Cellular automaton simulation of molten pool migration due to temperature gradient zone melting

物理学报. 2019, 68(4): 048102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181587>

基于心脏腔式结构的心电图元胞自动机建模

A cellular automaton model for electrocardiogram considering the structure of heart

物理学报. 2017, 66(20): 200501 <https://doi.org/10.7498/aps.66.200501>

多路段元胞自动机交通流模型

Multi-section cellular automata model of traffic flow

物理学报. 2017, 66(19): 194501 <https://doi.org/10.7498/aps.66.194501>

基于元胞自动机的气动光学光线追迹算法

Cellular automata ray tracing in two-dimensional aero-optical flow fields

物理学报. 2020, 69(19): 194201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200532>

液态三元Fe-Cr-Ni合金中快速枝晶生长与溶质分布规律

Rapid dendrite growth mechanism and solute distribution in liquid ternary Fe-Cr-Ni alloys

物理学报. 2018, 67(14): 146101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180062>

基于介观元胞自动机的城市区域人员疏散模拟方法

Simulation method of urban evacuation based on mesoscopic cellular automata

物理学报. 2021, 70(10): 100706 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210018>

高 Cr 铸铁中 M_7C_3 碳化物与奥氏体共生长的元胞自动机模拟*

张山¹⁾²⁾ 张红伟^{1)2)†} 苗森¹⁾²⁾ 冯苗苗¹⁾²⁾ 雷洪¹⁾²⁾ 王强¹⁾²⁾

1) (东北大学, 材料电磁过程研究教育部重点实验室, 沈阳 110819)

2) (东北大学冶金学院, 沈阳 110819)

(2021 年 4 月 16 日收到; 2021 年 6 月 15 日收到修改稿)

高铬铸铁中 M_7C_3 碳化物大小适中、弥散均匀分布, 有利于提高合金的耐磨性. 为分析凝固过程中 M_7C_3 碳化物晶粒在基体中的形貌及分布、 M_7C_3 碳化物与奥氏体晶粒生长的相互作用、引起的溶质偏聚对最终 M_7C_3 碳化物粒径分布的影响, 本文开发了 Fe-C-Cr 三元合金小面晶 M_7C_3 碳化物与奥氏体晶粒共生长的二维微观元胞自动机模型, 模型中加入潜热释放对凝固过程温度场的影响, 由 C, Cr 两溶质界面扩散共同确定晶体生长速度, 由凝固路径数据表插值获取液相元胞的溶质平衡浓度, 设定 M_7C_3 碳化物邻胞结构并优化形状因子来保持 M_7C_3 碳化物小面晶形貌, 模拟了 Fe-4%Cr-17%Cr 三元合金 (C 和 Cr 的质量分数分别为 4% 和 17%) 初生 M_7C_3 碳化物和共晶奥氏体晶粒的生长演变过程. 研究表明, M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒各自的生长速度随着界面液相中 C, Cr 溶质的超饱和度和贝克列数的增大而增大; 随着奥氏体的析出和晶粒生长, M_7C_3 碳化物晶粒的生长速度明显增快; 当奥氏体晶粒逐渐接触并包围 M_7C_3 碳化物晶粒时, 两相晶粒生长速度逐渐降低. 凝固过程中, 奥氏体晶粒生长向外排出 C, Cr 溶质, 与吸收 C, Cr 溶质生长的 M_7C_3 碳化物晶粒互补, 致使二者生长互相促进, 最终奥氏体晶粒包围 M_7C_3 碳化物晶粒生长. 预测的冷却曲线与实验冷却曲线变化趋势相符; 最终凝固组织形貌和 M_7C_3 碳化物体积分数与实验相符; 剩余液相、奥氏体中 C, Cr 溶质浓度演变也与 Gulliver-Scheil, Partial Equilibrium, Lever Rule 模型预测结果相符.

关键词: Fe-C-Cr 三元合金, M_7C_3 小面晶, 二相共生长, 元胞自动机

PACS: 81.10.Aj, 61.50.Ah

DOI: 10.7498/aps.70.20210725

1 引言

高铬铸铁被广泛应用于发电厂、矿山、炼钢厂的高耐磨零部件中^[1], 其优异的耐磨性主要来自增强相 M_7C_3 碳化物的高硬度^[2-5]. M_7C_3 碳化物大小适中, 弥散均匀分布于基体中, 有利于提高基体的韧性与合金的耐磨性. 学者们^[6-8] 针对高铬铸铁凝固过程中 Cr/C 比、冷却速率等对 M_7C_3 碳化物、

奥氏体的数量、尺寸、分布等展开了大量实验研究, 本文作者^[9] 也预测了高铬铸铁的凝固路径, 以期改进材料的耐磨性. 对于凝固过程中 M_7C_3 小面晶碳化物在基体中的形貌分布受何影响, M_7C_3 碳化物与奥氏体枝晶生长的相互作用, 引起的溶质偏聚对最终 M_7C_3 碳化物粒径分布作用规律的相关数值模拟未见他人报道.

晶粒生长及形貌演变的数值模拟方法中, 微观元胞自动机 (microscopic-scale cellular automata,

* 国家自然科学基金 (批准号: 51574074, 51425401)、国家自然科学基金钢铁联合研究基金 (批准号: U1460108, U1560207) 和辽宁省教育厅基金 (批准号: L20150183) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: hongweizhang@epm.neu.edu.cn

MCA) 方法能够耦合温度场、溶质场、流场等各物理场演变过程, 有效描述凝固过程中枝晶内部形貌的演化特征, 相比于相场法, MCA 法能够模拟较大尺寸材料的组织演变, 计算耗时较短, 因而被广泛应用于模铸、连铸、定向凝固、增材制造及焊接等过程的组织模拟中^[10,11].

目前, 采用微观元胞自动机方法进行单相枝晶生长的模拟已发展至三元以上合金^[12–18], 为确定多元合金中枝晶的生长速度, 一种做法是采用界面动力学系数与过冷度的乘积来计算, 其界面平衡固相成分、平衡液相线温度通过热力学计算引擎 (如 PanEngine、Thermo-Calc 等) 来获得. 基于此, Zhu 等^[12] 预测了 Al-Cu-Mg 合金中单一枝晶相的微观结构; 戴挺^[13] 等进行了 Al-Cu-Mg-Si 四元合金枝晶生长模拟. 此法未体现多元合金溶质间扩散对生长速度的相互作用关系. 再一种做法是, 生长速度采用局部溶质平衡浓度与实际浓度的差值得求. 如 Zhu 等^[19] 针对 Al-Si 二元合金共晶组织演变的模型, 以及张蕾等^[20] 针对球墨铸铁 (Fe-C 二元合金) 中石墨与奥氏体离异共晶生长的模型. 此方法多针对二元合金. 第三种做法是基于界面生长速度与多溶质生长贝克列 (Pe) 数对应关系, 通过耦合各溶质的超饱和度方程和界面溶质守恒方程求得界面生长速度, 可明确给出多元合金各溶质间扩散对生长速度的相互作用. 其中界面溶质浓度对应的液相线温度及液相线斜率等热力学参数由热力学平衡计算获得. 基于此, 本文作者模拟了 Fe-C-Cr 三元合金凝固过程中奥氏体^[14] 及铁素体+奥氏体包晶相^[15] 的生长速度, 石玉峰等^[16] 模拟了 Al-Si-Mg 三元合金枝晶生长形貌. 另外, Michelic 等^[17] 等基于元胞自动机法改进的 VFT (virtual front-tracking) 模型, 引入外插函数求解界面两侧溶质平衡浓度, 再利用界面溶质守恒方程求得生长速度, 模拟了 Fe-C-Si-Mn-P 五元合金枝晶的生长过程. 在枝晶和第二相晶粒共生长的模拟中, Zhu 等^[19] 模拟了 Al-Si 二元合金共晶组织演变; 张蕾等^[20] 模拟了球墨铸铁 (Fe-C 二元合金) 中石墨与奥氏体依循离异共晶模式的协同竞争生长, 并将石墨晶粒处理成球状. 本课题组张晔韦等^[18] 模拟了亚共晶球墨铸铁 (Fe-C-Si 三元合金) 中石墨与奥氏体的离异共晶生长, 其石墨和奥氏体的生长速度采用上述第三种做法.

本研究中, M_7C_3 碳化物为密排六方 (HCP) 小

面晶结构^[21,22], 在二维截面中呈现六边形形状. 对于小面晶生长过程中形状的保持, Stefan-Kharicha 等^[23] 采用的前沿跟踪模型, 分别计算生长面法和切向速度, 并通过保持晶角位置随邻面生长移动来保持晶面形状, 模拟了热浸镀锌过程中六边形面晶 (Fe_2Al_5) 的生长. 付振南等^[24] 通过特别规定元胞邻居关系及界面单元捕获规则, 模拟了 AZ91D 镁合金中密排六方结构枝晶的生长. 董祥雷等^[25] 在相场模型中引入小面晶各向异性修正方程, 模拟了各向异性稳态六方 GaN 螺旋结构形貌. 综上, 目前仅有学者针对其他体系中相近的六方小面晶形貌进行了模拟, 未见针对 Fe 基三元合金中 M_7C_3 碳化物生长, 尤其是 M_7C_3 碳化物与奥氏体共生长模拟的报道.

本课题组前期工作^[26] 中, 采用微观元胞自动机模型结合传热传质过程, 引入界面溶质贝克列数和超饱和度方程来求解界面多溶质平衡浓度, 模拟了高 Cr 铸铁 (Fe-C-Cr 合金) 凝固过程中 M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒的协同生长过程. 本文进一步加入了潜热释放影响. 将液相元胞溶质平衡浓度更新, 由原采用的 Fe-C 二元合金液相溶质平衡浓度公式, 替换为通过 Gulliver-Scheil (GS) 模型结合热力学平衡计算预测的 Fe-C-Cr 三元合金凝固路径获得; 将相变界面溶质扩散系数由线性插值改为调和插值, 更合理反映相变界面扩散特性; 并优化了 M_7C_3 碳化物形状修正因子. 模拟了 Fe-4%Cr-17%Cr 合金 (C 和 Cr 的质量分数分别为 4% 和 17%, 下同) 凝固过程中 M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒形貌演变及浓度迁移, 深入分析了 M_7C_3 碳化物和奥氏体共生长过程中溶质贝克列数、超饱和度与界面溶质平衡浓度、生长速度之间关系, 预测的冷却曲线和最终凝固组织形貌分别与实验进行了对照, 并将剩余液相和奥氏体中 C, Cr 溶质浓度演变规律与凝固路径预测结果进行了对比.

2 数学模型

建立 Fe-4%Cr-17%Cr 三元合金 M_7C_3 碳化物和奥氏体共生长演变过程二维微观元胞自动机模型.

2.1 基本假设

- 1) 不考虑熔体的流动;
- 2) 忽略动力学过冷;

- 3) 忽略溶质间互扩散;
- 4) 固/液界面始终处于平衡状态;
- 5) 忽略 M_7C_3 碳化物在奥氏体中的生长;
- 6) 热扩散的尺度比溶质扩散高 3—4 个数量级, 全场温度均匀变化.

2.2 温度场

由于热量传递速率远大于溶质扩散速率, 认为温度场均匀变化. 考虑凝固过程中潜热释放的影响, 温度场控制方程如下:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \dot{T} + \frac{L_\gamma}{c_p} \frac{\partial f_\gamma}{\partial t} + \frac{L_M}{c_p} \frac{\partial f_M}{\partial t}, \quad (1)$$

式中, \dot{T} 为冷却速率, 冷却速率的选取参照实验^[22]冷却曲线; L_γ 为奥氏体凝固潜热; L_M 为 M_7C_3 碳化物凝固潜热; c_p 为液相比热容; f_γ 为奥氏体质量分数; f_M 为 M_7C_3 碳化物质量分数.

2.3 溶质扩散方程

在计算区域内引入势函数 P (等效液相成分), 把整个计算区域处理为单相. 统一的溶质扩散方程为

$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_i \frac{\partial P_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_i \frac{\partial P_i}{\partial y} \right), \quad (2)$$

式中 D_i 为溶质扩散系数; 下标 i 代表溶质 C, Cr, 下同. 在液相 L, M_7C_3 碳化物 M, 奥氏体 γ 和界面胞中, P_i 分别为 $C_{L,i}$, $\sum_n \Delta f_M^n C_{L,i}^n$, $C_{\gamma,i}/k_{p,\gamma/L,i}$ 及 $C_{L,i}(1-f_\gamma-f_M) + \sum_n \Delta f_M^n C_{L,i}^n + f_\gamma C_{\gamma,i}/k_{p,\gamma/L,i}$. 这里 $C_{\gamma,i}$ 和 $C_{L,i}$ 为对应的奥氏体和液相的溶质浓度; Δf_M^n 为 M_7C_3 碳化物质量分数增量; $k_{p,\gamma/L,i}$ 为奥氏体/液相界面平衡溶质分配系数.

方程 (2) 离散时, 当两个相邻元胞有 1 个为 M_7C_3 碳化物或奥氏体时界面扩散系数 $D_{i/e}$ 相应取 $D_{M,i}$ 或 $D_{\gamma,i}$, 否则通过调和插值计算界面扩散系数:

$$D_{i/e} = (D_{i/E} \cdot D_{i/P}) / [(1-f_e) D_{i/E} + f_e D_{i/P}], \quad (3)$$

式中, 下标 e 为两元胞界面位置, 下标 P 和 E 为中心元胞和其邻居元胞; 每个元胞中的溶质扩散系数为其中各相的加权平均值, 即 $D_i = f_\gamma D_{\gamma,i} + f_M D_{M,i} + f_L D_{L,i}$; f_e 为界面 e 距 E 元胞中心距离与 P 和 E 元胞中心间距之比, 这里网格均匀, $f_e=1/2$.

\bar{C}_i 为平均溶质浓度:

$$\bar{C}_i = f_M C_{M,i} + f_\gamma C_{\gamma,i} + f_L C_{L,i}, \quad (4)$$

式中, f_L 为液相质量分数, $C_{M,i}$ 为对应的 M_7C_3 碳化物溶质浓度. 浓度场采用无扩散的边界条件: $\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial y} = 0$.

2.4 形核

模型中, 为与实验^[22]结果对照, M_7C_3 碳化物、奥氏体晶粒的形核位置和形核数量参照实验形貌设定. 实际形核数量为形核密度、形核过冷度等的函数关系^[27], 还受铸锭尺寸影响, 同时由形核 Gaussian 分布可知, 增大形核过冷度会减小形核数量. 实验分析表明^[28], 增大冷却速率, 一次、二次枝晶臂尺寸减小, 说明形核数量随冷却速率增大而增大. 由 GS 模型凝固路径预测, Fe-4%Cr-17%Cr 合金中 M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒的析出温度分别是 1304 °C 和 1266 °C, 形核过冷度随机设定. 当元胞局部过冷度大于形核过冷时, 该元胞形核, 单元状态即刻由液态转变为界面元胞, 并被赋予 1 个随机的晶体学取向 θ . 基于奥氏体为四重对称的枝晶状, 奥氏体晶粒的取向范围设为 $[-\pi/4, \pi/4]$; 而 M_7C_3 碳化物晶粒在二维截面具有六重对称性, 其晶粒取向范围设为 $[-\pi/6+2, \pi/6+2]$, 此处+2 是为了区分 M_7C_3 碳化物与奥氏体晶粒而设置.

2.5 生长动力学

2.5.1 界面热力学平衡

界面元胞满足局部热力学平衡条件, 局部温度与液相线温度之间满足 (5) 式:

$$T = T_{L,k} - \Delta T_R - \Delta T_C, \quad (5)$$

式中, T 是界面胞温度; $T_{L,k}$ 是液相线温度 (下标 k 指析出 M 或 γ 相); ΔT_R 和 ΔT_C 分别是曲率过冷和成分过冷.

2.5.2 曲率过冷

曲率过冷表达式为

$$\Delta T_R = \Gamma K f(\varphi, \theta), \quad (6)$$

式中, Γ 为固液界面 Gibbs-Thomson 系数, M_7C_3 碳化物和奥氏体分别对应 Γ_M , Γ_γ ; K 为界面曲率, 采用计数法计算^[29]; $f(\varphi, \theta)$ 为界面各向异性函数. 根据 Gibbs-Thomson 方程, 界面各向异性函数如下:

$$f(\varphi, \theta) = 1 + (1 - k^2) \varepsilon \cos[k(\varphi - \theta)], \quad (7)$$

式中, k 为晶体对称相关数, 对于面心立方晶体, 如

奥氏体取 $k = 4$, 对于密排六方晶体, 如 M_7C_3 碳化物, 取 $k = 6$; ε 为界面能各向异性系数, 界面各向异性大于临界值后会在固液界面上出现晶向缺失现象, 因此界面能各向异性系数 ε 须满足 $\varepsilon \leq |1/(1 - k^2)|$, 否则会出现晶向缺失现象^[30], 导致凝固组织处于热力学不稳定状态, 对于奥氏体, $\varepsilon = 0.04$, 对于 M_7C_3 碳化物, $\varepsilon = 0.025$. θ 为晶体取向; φ 为晶体界面法线方向与参考坐标轴 (x 轴) 的夹角, 由法向定义计算^[26].

2.5.3 成分过冷

界面前沿的成分过冷与界面实际溶质浓度及平衡溶质浓度有关, Fe-C-Cr 三元合金需考虑 C 和 Cr 两种溶质浓度对于成分过冷的影响:

$$\Delta T_C = m_{L/k,C}(C_{0,C} - C_{L,C}^*) + m_{L/k,Cr}(C_{0,Cr} - C_{L,Cr}^*), \quad (8)$$

式中, $m_{L/k,i}$ 为液相线斜率 (下标中 k 指 M, γ 相), $C_{L,C}^*$ 为溶质 C 的界面平衡液相浓度, $C_{L,Cr}^*$ 为溶质 Cr 的界面平衡液相浓度.

2.5.4 界面前沿溶质超饱和度

对于溶质 C 和 Cr 而言, 不考虑溶质之间的互扩散^[31], 界面前沿溶质超饱和度满足

$$\Omega_i = \frac{C_{L,i}^* - C_{0,i}}{C_{L,i}^*(1 - k_{p,S,L,i})} = Iv(Pe_i), \quad (9)$$

设奥氏体/液相界面溶质分配系数为常数, 则

$$C_{L,i}^* = \frac{C_{0,i}}{1 - (1 - k_{p,\gamma/L,i})\Omega_i}, \quad (10)$$

M_7C_3 碳化物晶粒中溶质浓度 $C_{S,i}$ 设为常数, 则 M_7C_3 碳化物/液相界面的液相平衡浓度:

$$C_{L,i}^* = \frac{C_{0,i} - \Omega_i \cdot C_{S,i}}{1 - \Omega_i}, \quad (11)$$

式中, $C_{L,i}^*$ 为界面处溶质的液相平衡浓度; $C_{0,i}$ 为初始液相浓度, 对于 (10) 式, 对应 GS 凝固路径数据表中奥氏体初始析出时的液相溶质浓度. 对于 (11) 式, 分别对应 GS 凝固路径数据表中 M_7C_3 碳化物和奥氏体初始析出时的液相溶质浓度.

$Iv(Pe_i)$ 为溶质 i 的 Ivantsov 函数, $Iv(Pe_i) = (Pe_i) \exp(Pe_i) \int_{Pe_i}^{\infty} \frac{\exp(-x)}{x} dx$;

Pe_i 为溶质 i 贝克列 (Peclet) 数, 表达为

$$Pe_i = \frac{V_n R}{2D_{L,i}}, \quad (12)$$

式中, V_n 为晶粒生长速度, R 为晶粒生长半径.

在相界面处, 生长速度唯一, Pe_C 和 Pe_{Cr} 存在如下关系:

$$Pe_C = \frac{Pe_{Cr} D_{L,Cr}}{D_{L,C}}. \quad (13)$$

通过 (8) — (13) 式, 可确定成分过冷 ΔT_C 与 Cr 溶质贝克列数 Pe_{Cr} 间单一函数关系.

2.6 界面法向速度

M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒生长过程中, 由固液界面处溶质质量守恒, 得到界面元胞的法向生长速度:

$$\mathbf{V}_n(C_{L,i}^* - C_{S,i}^*) = \left[-D_{L,i} \left(\frac{\partial C_{L,i}}{\partial x} + \frac{\partial C_{L,i}}{\partial y} \right) + D_{S,i} \left(\frac{\partial C_{S,i}}{\partial x} + \frac{\partial C_{S,i}}{\partial y} \right) \right] \cdot \mathbf{n}. \quad (14)$$

界面速度分量为

$$V_x = \frac{1}{(C_{L,i}^* - C_{S,i}^*)} \left(-D_{L,i} \frac{\partial C_{L,i}}{\partial x} + D_{S,i} \frac{\partial C_{S,i}}{\partial x} \right) \mu_k, \quad (15)$$

$$V_y = \frac{1}{(C_{L,i}^* - C_{S,i}^*)} \left(-D_{L,i} \frac{\partial C_{L,i}}{\partial y} + D_{S,i} \frac{\partial C_{S,i}}{\partial y} \right) \mu_k. \quad (16)$$

式中 μ_k 为动力学系数 (下标 k 表示 M/L, γ/L 界面). Burelko 等^[32] 采用动力学系数进行生长速度的计算, $\mu_{\gamma/L} = 10^{-3}$, $\mu_{\text{gr}/L} = 10^{-8}$. Zhu 等^[12] 通过比较其模拟与 GS 模型模拟的固相分数随温度变化差异确定界面动力学系数 $\mu_{\gamma/L} = 3 \times 10^{-4}$. 孙玉成^[33] 引入 $[1 - (f_s - \pi/6)]^n$ (n 为经验常数) 对共晶团晶粒生长速度进行修正, 以解决在模拟计算过程中晶粒长大后其晶粒度预测失准的问题. 本研究通过与实验观测到 M_7C_3 碳化物晶粒的大小进行对比, 对 M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒的生长速度进行动力学修正, 动力学系数分别为 $\mu_{M/L} = 4.8 \times 10^{-4}$, $\mu_{\gamma/L} = 2.6 \times 10^{-4}$.

2.7 更新固相分数

晶体的固相分数增量与固-液界面推进速度有关, 可用 (17) 式表示:

$$\Delta f_S = \frac{\Delta t}{\Delta s} \left(V_{x,S} + V_{y,S} - V_{x,S} V_{y,S} \frac{\Delta t}{\Delta s} \right), \quad (17)$$

式中 Δs 为元胞单元尺寸 (单位 m), $\Delta x = \Delta y = \Delta s$.

对于奥氏体晶粒, 为体现界面扰动的因素, 将固相分数增量乘上 1 个扰动函数, 即 $1 + A \times [1 - 2\text{Rand}(\cdot)]$, 其中 A 代表随机扰动振幅, 取值 0.1, $\text{Rand}(\cdot)$ 为 $[0, 1]$ 之间的随机数.

对于 M_7C_3 碳化物晶粒, 为了减小网格各向异性对 M_7C_3 碳化物晶粒形貌的影响, 以及减少 M_7C_3 碳化物晶粒内不完全凝固点的问题, 将 M_7C_3 碳化物晶粒的固相分数增量乘 G , G 是与邻位网格状态有关的形状因子, 其表达式如下:

$$G = \max \left[1, a \left(\sum_{m=1}^4 s_m^I + \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m=1}^4 s_m^{II} + \frac{1}{2} \sum_{m=1}^4 s_m^{III} + \frac{1}{\sqrt{5}} \sum_{m=1}^4 s_m^{IV} \right) \right],$$

$$s^I, s^{II}, s^{III}, s^{IV} = \begin{cases} 0, & f_s < 1, \\ 1, & f_s = 1, \end{cases} \quad (18)$$

式中: s_m^I 为近邻的 4 个网格的状态参数, s_m^{II} 为次近邻的 4 个网格的状态参数, s_m^{III} 为距中心网格为 $2\Delta s$ 的 4 个网格的状态参数, s_m^{IV} 为距中心网格为 $\sqrt{5}\Delta s$ 的 4 个网格的状态参数.

图 1 是不同系数 a 所对应的同一时刻同一位置下碳化物晶粒质量分数图. 可以看出随着系数 a 的不断增大, M_7C_3 碳化物晶粒内不完全凝固点的数量逐渐减小, 当 $a = 0.50$ 时, M_7C_3 碳化物晶粒内完全凝固; 然而当 $a \geq 0.50$, 随着系数 a 的不断增大, M_7C_3 碳化物晶粒的六边形外轮廓偏向弧度化. 因此本模拟最终选取 $a = 0.40$.

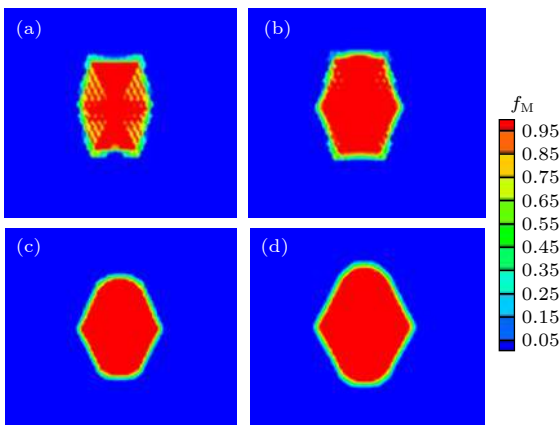


图 1 $t = 99.99$ s 时, 不同系数 a 条件下模拟的 M_7C_3 质量分数图 (a) $a = 0.25$; (b) $a = 0.40$; (c) $a = 0.50$; (d) $a = 0.60$
Fig. 1. M_7C_3 morphology in form of mass fraction with several values of coefficient a at $t = 99.99$ s: (a) $a = 0.25$; (b) $a = 0.40$; (c) $a = 0.50$; (d) $a = 0.60$.

在用 (17) 式求出元胞内的固相分数增量后, 更新元胞新时刻的固相分数:

$$f_s^{n+1} = f_s^n + \Delta f_s. \quad (19)$$

2.8 更新固相浓度

对于奥氏体晶粒内溶质固相浓度, 用 (20) 式更新:

$$C_{S,i} = (C_{S,i}^n f_s^n + k_{p,\gamma/L,i} C_{L,i}^n \Delta f_s) / (f_s^n + \Delta f_s). \quad (20)$$

由 GS 凝固路径预测模型计算, 凝固过程中 C, Cr 溶质在 M_7C_3 碳化物中浓度变化较小, 因此, 本研究将 M_7C_3 碳化物晶粒内溶质固相浓度设为常数.

2.9 M_7C_3 碳化物与奥氏体元胞邻居关系

通过实验观测分析, Fe-4%Cr-17%Cr 合金中的 M_7C_3 碳化物晶粒在二维平面上理想状态具有六重对称的特征, 但实际合金凝固过程中受到一些凝固缺陷等因素的影响, 二维平面观测的结果有的为规则六边形, 有的为近似六边形等状态^[34-36]. 据其形貌特征^[24], 本研究定义了 CA 方法中 M_7C_3 碳化物晶粒的二维邻居单元如图 2 所示, 其中黑色方框为某一 CA 单元, 周围紧邻的 16 个单元为其邻居. 奥氏体晶粒采用 Moore 型邻居单元, 包括最近邻的 8 个元胞, 如图 3 所示.

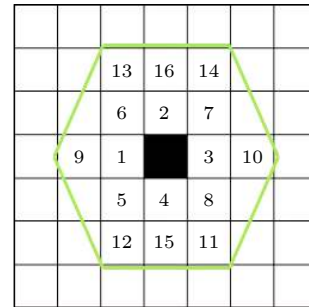


图 2 M_7C_3 元胞邻居单元

Fig. 2. Neighborhood relations for M_7C_3 grain.

2.10 晶粒捕获规则

模拟区域中每个元胞共有 3 种状态: 液相、固相及界面 (固液相区) 状态. 捕获规则定义如下: 液相元胞形核后, 此元胞为界面状态; 当该元胞生长至固相分数为 1 时, 此元胞为固相状态, 周围邻居元胞即时转变为界面元胞. 当某一元胞同时被奥氏体和 M_7C_3 碳化物元胞捕获时, 该元胞变为两相共存的界面胞, 且变为固相元胞后只能各自捕获周

围 8 个邻居元胞; 其余界面元胞成长为固相元胞后, 按奥氏体或 M_7C_3 碳化物各自的邻居关系捕获周围邻居元胞, 逐渐生长.

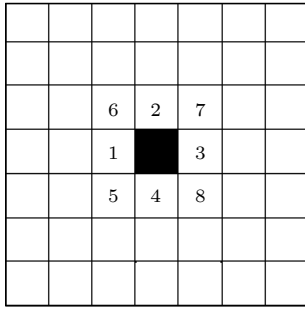


图 3 γ 元胞 Moore 型邻居单元

Fig. 3. Moore neighborhood relations for austenite grain.

2.11 溶质再分配

在生长界面, M_7C_3 碳化物晶粒从界面液相中吸收 C, Cr 溶质 (M/L 界面分配系数均大于 1); 奥氏体晶粒生长向界面液相中排出 C, Cr 溶质 (γ/L 界面分配系数小于 1), 进而引起界面前沿液相溶质重新进行分配.

假设上一时刻界面胞固相溶质浓度为 $C_{S,s,i}^n$, 固相分数为 f_s^n ; 液相溶质浓度为 $C_{L,s,i}^n$, 液相分数为 $(1 - f_M^n - f_\gamma^n)$. 新时刻界面胞固相分数增量为 Δf_s (下标 s 为 M, γ).

1) 当 $\Delta f_s < 1 - f_M^n - f_\gamma^n$, 上一时刻界面胞剩余液相可以满足新时刻固相分数的转变. 新时刻 M_7C_3 碳化物界面胞液相溶质浓度为

$$C_{L,M,i}^{n+1} = \frac{C_{L,M,i}^n(1 - f_M^n - f_\gamma^n) - \Delta f_M C_{S,M,i}^n}{1 - f_M^n - f_\gamma^n - \Delta f_M}. \quad (21)$$

奥氏体界面胞液相的溶质浓度为

$$C_{L,\gamma,i}^{n+1} = \frac{C_{L,\gamma,i}^n(1 - f_\gamma^n - f_M^n) - k_{p,\gamma/L,i} \Delta f_\gamma C_{L,\gamma,i}^n}{1 - f_\gamma^n - f_M^n - \Delta f_\gamma}. \quad (22)$$

若新时刻界面胞液相溶质浓度低于溶质平衡浓度 $C_{L,s,i}^*$, 且不小于 0, 则无需进行溶质再分配. 若新时刻界面胞液相溶质浓度高于溶质平衡浓度 $C_{L,s,i}^*$, 则多出部分溶质 $\Delta C_i = (C_{L,s,i}^{n+1} - C_{L,s,i}^*)(1 - f_M^n - f_\gamma^n - \Delta f_s)$ 均匀分配给界面胞周围有液相的邻居, 界面胞液相溶质浓度修正为 $C_{L,s,i}^{n+1} = C_{L,s,i}^*$. 若新时刻界面胞液相溶质浓度低于 0, 则需要从邻胞吸收溶质 $\Delta C_i = (0 - C_{L,s,i}^{n+1})(1 - f_M^n - f_\gamma^n - \Delta f_s)$, 界面胞液相溶质浓度修正为 $C_{L,s,i}^{n+1} = 0$.

2) 当 $\Delta f_s \geq 1 - f_M^n - f_\gamma^n$, 界面胞剩余液相需完全转变为固相, 并将其修正为 $\Delta f_s = 1 - f_M^n - f_\gamma^n$. 新时刻界面胞已完全转变为固相, 对于 M_7C_3 碳化物需要从邻胞吸收溶质 $\Delta C_i = (C_{S,M,i}^n - C_{L,M,i}^n) \Delta f_M$; 奥氏体则排出溶质 $\Delta C_i = C_{L,\gamma,i}^n(1 - k_{p,\gamma/L,i}) \Delta f_\gamma$.

2.12 时间步长

$$\Delta t \leq 0.2 \min(\Delta s^2 / D_{L,C}, \Delta s^2 / D_{L,Cr}, \Delta s / V_{\max}, \Delta t_0). \quad (23)$$

式中 Δt_0 是初始时间步长.

2.13 计算步骤

- 1) 所有元胞均赋予相同的初始温度和初始浓度, 计算时间步长;
- 2) 温度场考虑潜热释放, 温度缓慢下降 ((1) 式);
- 3) 当达到 M_7C_3 碳化物或奥氏体的形核过冷度, 该元胞转变为界面元胞;
- 4) 计算 M_7C_3 碳化物和奥氏体界面各向异性函数 $f_{(\varphi,\theta)}$ ((7) 式), 求得曲率过冷 ΔT_R ((6) 式);
- 5) 通过 (5) 式, 计算界面元胞成分过冷 ΔT_C ;
- 6) 通过 (8) — (13) 式, 求解界面元胞 Pe_{Cr} , 再求得 Pe_C 和界面平衡浓度 $C_{L,C}^*$, $C_{L,Cr}^*$;
- 7) 液相元胞的平衡浓度按对应温度, 通过 GS 凝固路径预测模型计算的数据表插值获得;
- 8) 求解界面法向生长速度 ((1) — (16) 式) 并更新固相分数 ((17) — (19) 式);
- 9) M_7C_3 碳化物和奥氏体界面胞进行局部溶质再分配 ((21) — (22) 式);
- 10) 计算扩散引起的浓度场变化 ((2) — (4) 式);
- 11) 再重复步骤 2) — 10) 进行时间层循环, 直到全场凝固结束, 计算中止.

表 1 列出了 Fe-4%C-17%Cr 三元合金模拟所用的物性参数 [22,37,38].

3 模拟结果与分析

本研究利用微观元胞自动机方法研究二维空间 Fe-4%C-17%Cr 三元合金中初生相 M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒共生长过程. 选取的计算域参照实验 [22] 显微组织图片尺寸, 确定为 $700 \mu\text{m} \times 520 \mu\text{m}$, 划分为 350×260 个均匀正方形网格, 网格尺寸为 $2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$. 形核位置和形核数量参照实验 [22] 结果进行设置. 熔体初始温度参照实验冷却曲线的

表 1 Fe-4%C-17%Cr 三元合金模拟所用的物性参数 (单位 % 是指质量分数)
Table 1. Physical properties used for Fe-4%C-17%Cr ternary alloy. Unit of % represents mass fraction (wt%).

Parameters	Symbol	Unit	Value	Note
Initial composition C	C_{C0}	%	4.00	文献[22]
Initial composition Cr	C_{Cr0}	%	17.00	文献[22]
Austenite nucleation temperature	T_γ	°C	1266.00	GS model
M_7C_3 nucleation temperature	T_M	°C	1304.00	GS model
C partition coefficient at austenite/liquid interface	$k_{p,\gamma/L,C}$	—	0.407	GS model
Cr partition coefficient at austenite/liquid interface	$k_{p,\gamma/L,Cr}$	—	0.576	GS model
Liquidus slope of C at austenite/liquid interface	$m_{L/\gamma,C}$	°C/%	-95.49	GS model
Liquidus slope of Cr at austenite/liquid interface	$m_{L/\gamma,Cr}$	°C/%	6.14	GS model
Liquidus slope of C at M_7C_3 /liquid interface	$m_{L/M,C}$	°C/%	90.37	GS model
Liquidus slope of Cr at M_7C_3 /liquid interface	$m_{L/M,Cr}$	°C/%	15.29	GS model
Diffusion coefficient of C in austenite	$D_{\gamma,C}$	m ² /s	2.57×10^{-10}	GS model
Diffusion coefficient of Cr in austenite	$D_{\gamma,Cr}$	m ² /s	3.67×10^{-14}	GS model
Diffusion coefficient of C in liquid phase	$D_{L,C}$	m ² /s	9.60×10^{-10}	GS model
Diffusion coefficient of Cr in liquid phase	$D_{L,Cr}$	m ² /s	8.23×10^{-10}	GS model
Diffusion coefficient of C in M_7C_3	$D_{M,C}$	m ² /s	0.0	
Diffusion coefficient of Cr in M_7C_3	$D_{M,Cr}$	m ² /s	0.0	
Gibbs-Thomson coefficient at austenite/liquid interface	Γ_γ	m · K	1.9×10^{-7}	文献[37]
Gibbs-Thomson coefficient at M_7C_3 /liquid interface	Γ_M	m · K	6.213×10^{-7}	文献[38]
Latent heat of fusion for austenite	L_γ	J/kg	1.86×10^5	GS model
Latent heat of fusion for M_7C_3	L_M	J/kg	2.38×10^5	GS model
Specific heat capacity	c_p	J/(kg · °C)	839	GS model

起始温度设定为 1334.32 °C, 冷却速率参照石墨铸型 [22] 实验冷却曲线选取, 分为 4 个阶段: M_7C_3 碳化物析出且独立生长阶段 ($T > 1266$ °C), 冷却速率为 4.6 K/s; 奥氏体析出初始阶段 (1220 °C $< T \leq 1266$ °C), 冷却速率为 1.4 K/s; 奥氏体和 M_7C_3 碳化物潜热释放引起模拟区域温度上升阶段 (1194 °C $< T \leq 1220$ °C), 冷却速率为 2.4 K/s; 接近凝固结束潜热作用较小阶段 ($T \leq 1194$ °C), 冷却速率为 2.0 K/s. 随着温度的不断下降, M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒依次形核生长, 直至模拟区域达到最终凝固状态.

本文模拟的 Fe-4%C-17%Cr 合金凝固冷却曲线, 将与文献 [22] 中同成分添加 1.5%Ti (质量分数) 合金及文献 [39] 中 Fe-3.23%C-23.8%Cr 合金 (C 和 Cr 的质量分数分别为 3.23% 和 23.8%) 添加 4%Ti 与否的凝固冷却曲线进行对比.

3.1 合金凝固路径

表 2 列出了上述二种成分合金由 GS 模型预测和在 Fe-C 伪二元相图中的析出相 (M_7C_3 碳化

物、奥氏体、渗碳体) 及对应析出温度. 可以看出, 同一成分 GS 模型预测和 Fe-C 伪二元相图给出的各相析出趋势一致: Fe-4%C-17%Cr 合金中, 添加 Ti 元素后, M_7C_3 碳化物析出温度均变低、奥氏体析出温度变高; 二者给出的各相析出温度差较小. 由表 2 可知, 添加 Ti 元素后, 至固相线或 Cementite (CEM) 相析出, Fe-4%C-17%Cr-1.5%Ti 体系, TiC 体积分数为 3.00%, 奥氏体体积分数为 63.04%, M_7C_3 体积分数为 26.38%; Fe-3.23%C-23.8%Cr-4%Ti 体系, TiC 体积分数为 7.92%, 奥氏体体积分数为 74.28%, M_7C_3 体积分数为 17.80%. 因而冷却曲线的拐点和温度回复主要反映奥氏体和 M_7C_3 相的析出及共生长演变.

由图 4 中 Fe-C 伪二元合金相图可知, 添加 Ti 元素后, 共晶点右移, 导致 Fe-4%C-17%Cr 合金 (图 4(c)—(d)) 中 M_7C_3 碳化物析出温度降低、奥氏体析出温度升高. 但从凝固路径来看, 未改变 $M_7C_3 \rightarrow \gamma$ 析出顺序, 即由无 Ti 添加的 $L \rightarrow M_7C_3 \rightarrow \gamma \rightarrow CEM$, 至添加 Ti 的 $L \rightarrow TiC \rightarrow M_7C_3 \rightarrow \gamma \rightarrow CEM$. 但是, 对于文献 [39] 实验合金成分 Fe-3.23%C-

23.8%Cr, 由于离共晶点较近, 添加 Ti 后, 相变路径已移至共晶点左侧, 析出顺序由无 Ti 添加的 $L \rightarrow M_7C_3 \rightarrow \gamma \rightarrow CEM$, 变为添加 Ti 后, 奥氏体先于 M_7C_3 相析出的 $L \rightarrow TiC \rightarrow \gamma \rightarrow M_7C_3 \rightarrow Solidus$. 但合

金内主要析出相仍为 M_7C_3 和 γ . 对比分析图 4(a) 与图 4(b) 可知, Fe-4%C-17%Cr 合金与 Fe-3.23%C-23.8%Cr 均为过共晶三元合金, 析出相 M_7C_3 与奥氏体及顺序均相同, 冷却曲线拐点和温度回复应相近.

表 2 GS 模型和 Fe-C 伪二元相图中二种成分 Fe-C-Cr 合金析出相及析出温度

Table 2. Phase type and precipitation temperature in two Fe-C-Cr alloys by GS prediction and in Fe-C pseudo binary phase diagram.

Model	Alloy composition	M_7C_3 precipitation temperature/ $^{\circ}C$	γ precipitation temperature/ $^{\circ}C$	CEM precipitation temperature or solidus/ $^{\circ}C$	Phase volume fraction at CEM precipitation temperature or solidus
GS model	Fe-4%C-17%Cr	1304	1266	1194(CEM)	29.91%(M_7C_3) 57.22%(γ)
GS model	Fe-4%C-17%Cr-1.5%Ti	1288	1271	1193(CEM)	26.38%(M_7C_3) 63.20%(γ)
Fe-C phase diagram	Fe-4%C-17%Cr	1305	1266	1239(solidus)	—
Fe-C phase diagram	Fe-4%C-17%Cr-1.5%Ti	1285	1271	1248(solidus)	—
GS model	Fe-3.23%C-23.8%Cr	1305	1297	1193(CEM)	28.18%(M_7C_3) 71.62%(γ)
GS model	Fe-3.23%C-23.8%Cr-4%Ti	1296	1324	1296(solidus)	17.80%(M_7C_3) 74.28%(γ)
Fe-C phase diagram	Fe-3.23%C-23.8%Cr	1305	1296	1292(solidus)	—
Fe-C phase diagram	Fe-3.23%C-23.8%Cr-4%Ti	1295	1328	1295(solidus)	—

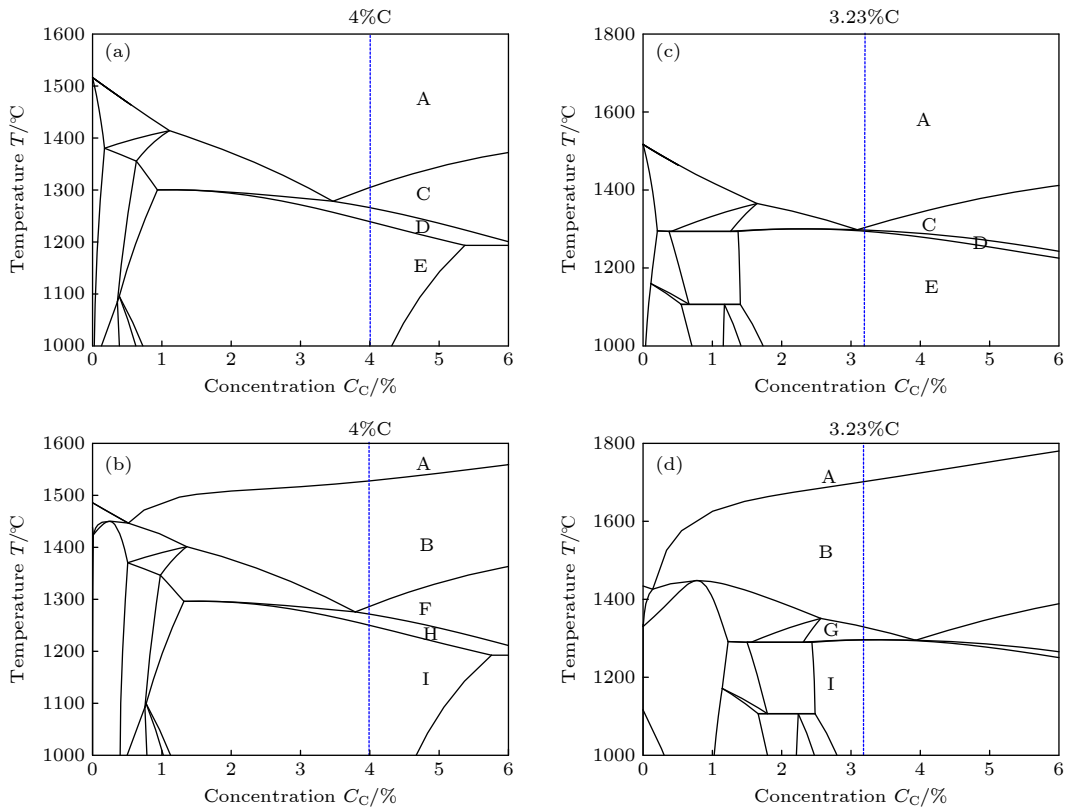


图 4 Fe-C 伪二元合金相图 (A 区, 液相; B 区, 液相 + TiC; C 区, 液相 + M_7C_3 ; D 区, 液相 + M_7C_3 + γ ; E 区, M_7C_3 + γ ; F 区, 液相 + TiC + M_7C_3 ; G 区, 液相 + TiC + γ ; H 区, 液相 + TiC + M_7C_3 + γ ; I 区, TiC + γ + M_7C_3) (a) Fe-C-17%Cr; (b) Fe-C-23.8%Cr; (c) Fe-C-17%Cr-1.5%Ti; (d) Fe-C-23.8%Cr-4%Ti

Fig. 4. Fe-C pseudo binary phase diagram: (a) Fe-C-17%Cr; (b) Fe-C-23.8%Cr; (c) Fe-C-17%Cr-1.5%Ti; (d) Fe-C-23.8%Cr-4%Ti. A zone, Liquid; B zone, Liquid + TiC; C zone, Liquid + M_7C_3 ; D zone, Liquid + M_7C_3 + γ ; E zone, M_7C_3 + γ ; F zone, Liquid + TiC + M_7C_3 ; G zone, Liquid + TiC + γ ; H zone, Liquid + TiC + M_7C_3 + γ ; I zone, TiC + γ + M_7C_3 .

3.2 冷却曲线和相分数演变

图 5 给出了本模拟得到的 Fe-4%C-17%Cr 合金冷却曲线 (黑色). 可以看出, 在温度高于 1266 °C 阶段, 仅有 M_7C_3 碳化物析出, 相分数较少, 潜热释放未对冷却曲线产生明显影响, 冷却曲线基本以恒定冷却速率下降; 至 1266 °C 奥氏体析出, 温度场受到 M_7C_3 碳化物与奥氏体凝固释放潜热的共同作用, 冷却曲线斜率产生改变. 直到 82.51 s 时 (见图 7), 大部分 M_7C_3 碳化物与奥氏体晶粒相互接触, 生长相互促进, 使得凝固过程潜热释放量高于散热量, 模拟域冷却曲线温度回复明显. 82.51—120.19 s, 冷却曲线产生明显温度回复, 温度从 1200.39 °C 升高到 1210.03 °C, 此时间段 M_7C_3 与奥氏体晶粒两相体积分数之和从 24.72% 升高到 68.62%. 随后, M_7C_3 碳化物与奥氏体晶粒生长速度逐渐减小, 随之潜热作用减小, 冷却曲线恢复下降趋势, 直至最终凝固.

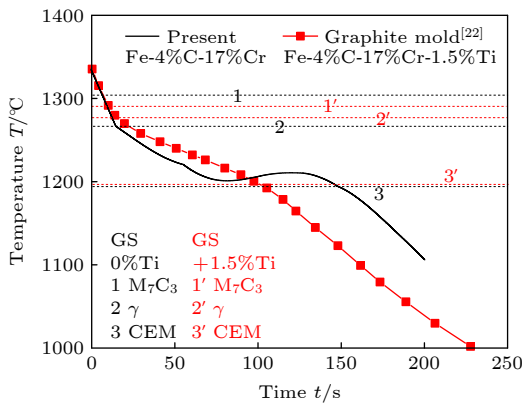


图 5 预测的 Fe-4%C-17%Cr 合金冷却曲线及添加 1.5%Ti 合金石墨型实验冷却曲线 [22] 对比

Fig. 5. Comparison of predicted cooling curve for Fe-4%C-17%Cr alloy and experimental cooling curve with 1.5%Ti addition in graphite mold [22].

本文模拟的 Fe-4%C-17%Cr 合金的实验冷却曲线 [40] 仅监测到 1200 °C 温度以下的相变行为, 未能反映奥氏体和 M_7C_3 相的析出. 为此, 采用文献 [39] 中同为过共晶成分的相近体系 (即 Fe-3.23%C-23.8%Cr 合金添加 4%Ti 与否) 的凝固路径及文献砂型实验冷却曲线 (如图 6 所示) 进行对照分析, 间接验证本模拟冷却曲线的正确性.

将图 5 中模拟得到的 Fe-4%C-17%Cr 合金冷却曲线 (黑色) 与添加 1.5%Ti 后实验冷却曲线 (红色+实心方框) 和图 6 添加 Ti 与否的实验 [39] 冷却曲线进行对比. 本模拟合金添加 Ti 前后冷却曲线

变化趋势与文献合金添加 Ti 前后实验冷却曲线变化趋势相同, 从而验证了本模拟得到的冷却曲线的正确性. 另外, 图 5、图 6 还分别给出 GS 凝固路径计算的两成分合金添加 Ti 与否的析出相顺序, 可以看出, Fe-4%C-17%Cr 合金添加 1.5%Ti 后, 合金的析出相顺序不变; Fe-3.23%C-23.8%Cr 合金添加 4%Ti 后 M_7C_3 与奥氏体析出顺序发生了交换, 但仍以 M_7C_3 和奥氏体为主要相. 图 5 和图 6 中黑色曲线的趋势相近, 拐点和温度回复都发生在 GS 凝固路径预测的相析出温度以下较低温度处, 温度滞后明显, 砂型冷却凝固时间比本模拟石墨型冷却时间更长.

图 7 给出了本模拟过程中奥氏体、 M_7C_3 碳化物和液相体积分数的演变过程. 开始时, 熔体处于完全液相, 初始温度高于 M_7C_3 碳化物形核温度. 在 $t = 7.03$ s 时, 熔体冷却至 M_7C_3 碳化物形核过

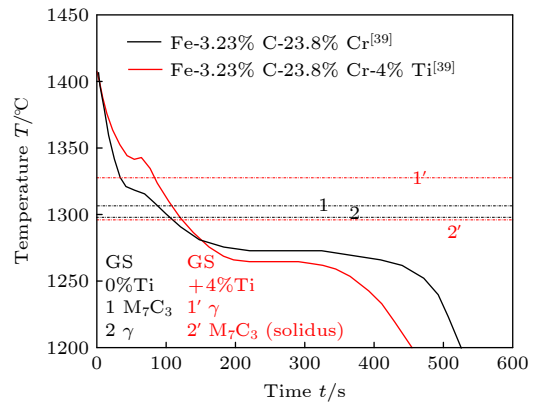


图 6 Fe-3.23%C-23.8%Cr 合金添加 4%Ti 与否砂型实验冷却曲线 [39]

Fig. 6. Experimental cooling curves in sand mold for Fe-3.23%C-23.8%Cr alloy with or without 4%Ti addition [39].

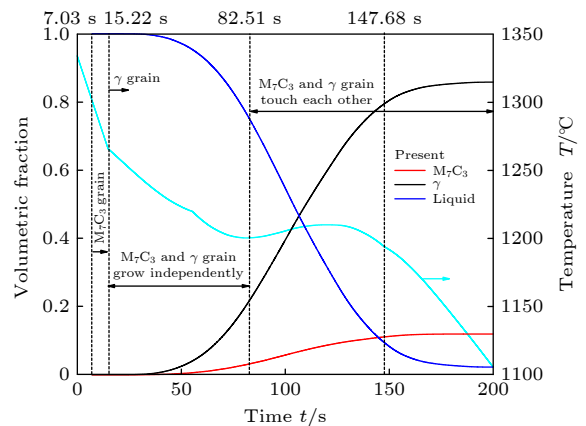


图 7 本模拟冷却曲线及各相质量分数演变

Fig. 7. Predicted cooling curves and evolution of phase mass fraction.

冷度, M_7C_3 碳化物形核, 生长初始阶段 M_7C_3 碳化物相分数增长缓慢, 冷却曲线斜率未发生改变. 在 $t = 15.22$ s 时, 熔体冷却至奥氏体形核过冷度, 降温曲线出现第一个拐点, 表明奥氏体晶粒形核并开始生长. 在 $15.22\text{--}82.51$ s 时大部分 M_7C_3 碳化物与奥氏体晶粒独自生长、未接触. 当时间 $t > 82.51$ s 时, M_7C_3 碳化物与奥氏体晶粒相互接触共同生长, 各相分数增长较快. 冷却曲线发生温度回复阶段, 与模拟过程中 M_7C_3 碳化物、奥氏体相体积分数的快速增长阶段相对应; 冷却曲线温度回复结束之后, M_7C_3 碳化物、奥氏体相体积分数的增长缓慢, 接近最终凝固状态, 冷却曲线又恢复下降趋势. 通过比较 M_7C_3 碳化物晶粒独自生长阶段 ($t < 15.22$ s) 与 M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒共同生长阶段 ($t \geq 15.22$ s), 可以看出合金凝固过程中 M_7C_3 碳化物与奥氏体晶粒的生长主要集中在二者相互接触、共生长阶段. 当 $t = 200.00$ s 时, 模拟区域中合金几乎完全凝固, M_7C_3 碳化物、奥氏体体积分数的和为 97.744%, 剩余液相分数为 2.256%. 此后, 模拟区域内 M_7C_3 碳化物、奥氏体相分数及液相分数随着时间的推移几乎没有改变, 本文以此刻状态为最终凝固状态. 此时已达到 Cementite 相形核温度, 本模拟仅考虑 M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒的生长, 因此, 模拟结束状态时奥氏体枝晶臂间仍存在少量液相.

图 8 给出了本模拟与 GS 模型预测的凝固路径中各相分数随温度的变化曲线, 其中 $1304\text{ }^\circ\text{C}$ 对应图 7 中 7.03 s; $1266\text{ }^\circ\text{C}$ 对应 15.22 s; $1194\text{ }^\circ\text{C}$ 对应 147.68 s; $1200.39\text{ }^\circ\text{C}$ 为模拟冷却曲线温度回复起点; $1151\text{ }^\circ\text{C}$ 为模拟结束温度. 为与实验晶粒尺寸进行比对分析, 本模拟中晶粒生长速度乘了动力学系数 (10^{-4} 数量级). 因此, 图 8 中 $1266\text{ }^\circ\text{C}$ 时模拟的 M_7C_3 碳化物晶粒所占的模拟区域体积分数为 0.0025%, 比 GS 模型预测值小; $1200.39\text{ }^\circ\text{C}$ 时, M_7C_3 碳化物晶粒所占的模拟区域体积分数为 3.15%, 奥氏体晶粒所占的模拟区域体积分数为 21.57%. 此后, M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒相互接触共生长, 快速生长阶段与 GS 凝固路径快速生长阶段相同, 各相分数的整体变化趋势相同, 说明模拟过程各相生长的合理性. 在 $1200.39\text{--}1210.03\text{ }^\circ\text{C}$ 区间, 各相分数曲线非单调增加, 这是由于相分数大幅增加致使潜热释放未及时散出导致温度回复所引起的, 该阶段 M_7C_3 碳化物、奥氏体相分数增

长较快, 潜热释放作用持续增强, 冷却曲线呈现上升趋势. 相比较而言, 图 7 中各相分数随时间的变化曲线呈单调变化, 冷却曲线温度回复与图 8 中潜热释放各相体积分数的在温度回复阶段继续增长相对应.

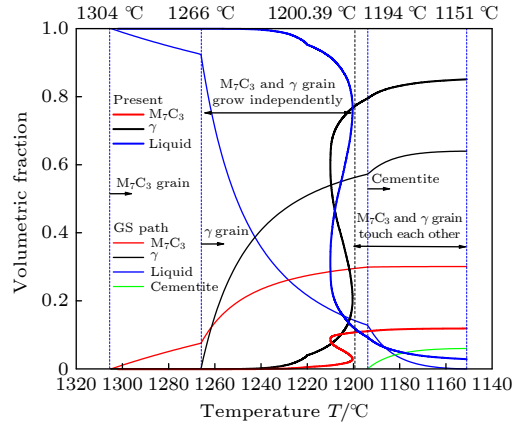


图 8 本模拟与 GS 模型中各相质量分数随温度变化
Fig. 8. Evolution of phase mass fraction with temperature by present model and GS model.

3.3 界面平衡浓度、晶粒生长速度随溶质贝克列数演变

随着凝固进行, 界面前沿的成分过冷不断增大, 溶质超饱和度将不断增大. 图 9 给出了 M_7C_3 碳化物/液相和奥氏体/液相界面液相中溶质 C, Cr 的贝克列数以及溶质界面平衡浓度随溶质 Cr 超饱和度的变化, 均取模拟区域中所有界面胞数据的平均值作图. 可以看出, 随 Cr 超饱和度增大, M_7C_3 碳化物/液相和奥氏体/液相界面液相中溶质贝克列数均增大; 在相同超饱和度下, Cr 溶质贝克列数大于 C 溶质贝克列数, 这与界面液相中溶质贝克列数与溶质的扩散系数成反比 ((12) 式)、而液相中溶质 Cr 扩散系数小于 C 扩散系数 (见表 1) 的规律相一致.

M_7C_3 碳化物/液相界面 C, Cr 溶质液相平衡浓度随 Cr 超饱和度呈下降趋势 (图 9(a)), 与之相反, 奥氏体/液相界面 C, Cr 溶质液相平衡浓度随 Cr 超饱和度呈上升趋势 (图 9(b)). 这是由于 M_7C_3 碳化物/液相界面溶质 C, Cr 的分配系数均大于 1, 而奥氏体/液相界面 C, Cr 溶质的分配系数均小于 1, 由 (10) 式, 碳化物/液相界面溶质液相平衡浓度与超饱和度成反比, 奥氏体界/液相界面溶质液相平衡浓度与超饱和度成正比, 导致随着 Cr 超饱和度增大, 奥氏体/液相界面溶质液相平衡浓度

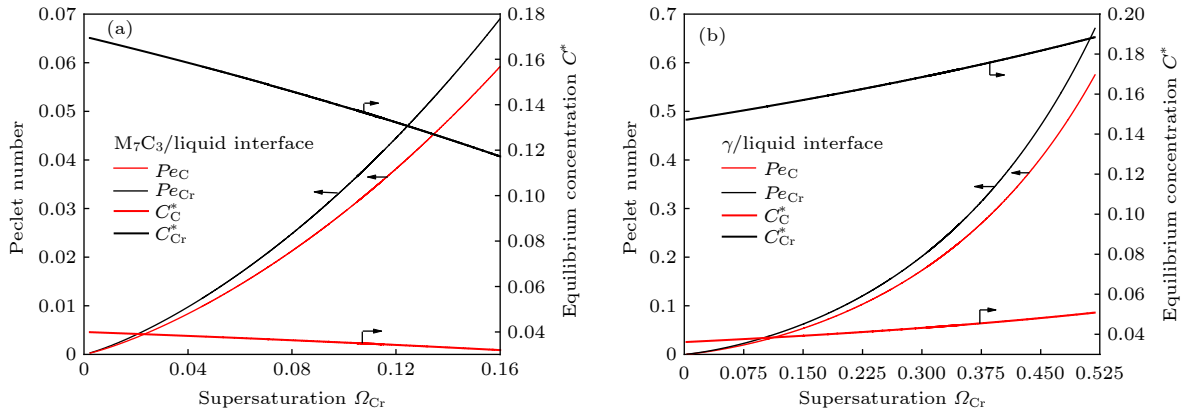


图 9 M_7C_3 碳化物和奥氏体界面液相溶质贝克列数、平衡浓度演变 (a) M_7C_3 界面; (b) 奥氏体界面

Fig. 9. Evolution of solute Peclet number and equilibrium concentration in liquid at M_7C_3 and austenite interface cell: (a) M_7C_3 /liquid interface; (b) austenite/liquid interface.

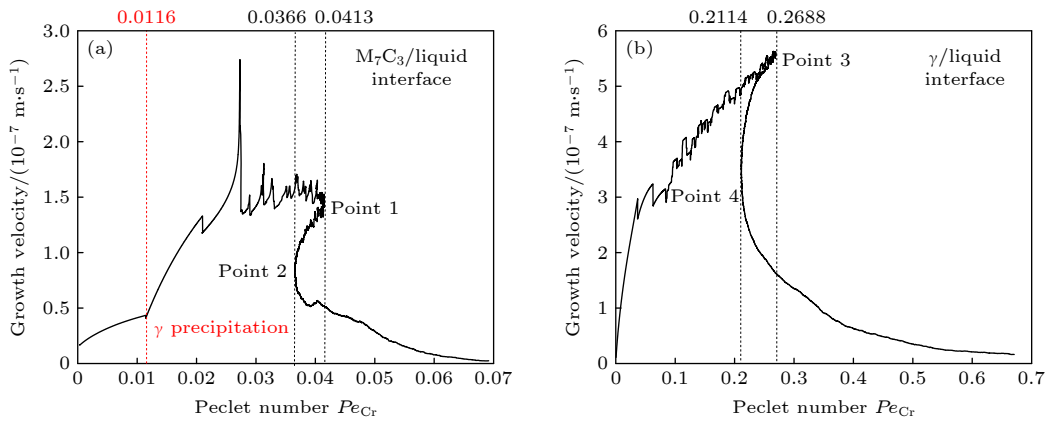


图 10 M_7C_3 碳化物/液相和奥氏体/液相界面生长速度演变: (a) M_7C_3 界面; (b) 奥氏体界面

Fig. 10. Evolution of growth velocity with Pe_{Cr} at M_7C_3 /liquid and austenite/liquid interface: (a) M_7C_3 /liquid interface; (b) austenite/liquid interface.

不断增大, M_7C_3 碳化物/液相界面溶质液相平衡浓度不断减小. 这与奥氏体生长向外排出 C, Cr 溶质, M_7C_3 碳化物生长吸收 C, Cr 溶质的特性相符.

图 10 进一步给出 M_7C_3 碳化物/液相和奥氏体/液相界面生长速度随 Cr 溶质贝克列数的变化曲线, 界面生长速度分别为 M_7C_3 /液相或奥氏体/液相界面各元胞生长速度的平均值. 在 M_7C_3 /液相界面 (图 10(a)), $Pe_{Cr} = 0.0116$ 时, 奥氏体析出, 此后 M_7C_3 碳化物晶粒的生长速度明显增快, 说明二相晶粒相互促进生长. 在 $Pe_{Cr} < 0.0413$ (交点 1) 区间, 晶粒生长速度整体随 Cr 溶质贝克列数的增加逐渐增大, 此处 (交点 1) 对应冷却曲线上温度回复起始位置; $Pe_{Cr} = 0.0366$ (交点 2) 为冷却曲线温度回复达到最大值位置. 同样, 在奥氏体/液相界面处 (图 10(b)), 在 $Pe_{Cr} < 0.2688$ (交点 3) 区间内, 晶粒生长速度随 Cr 溶质贝克列数的增加逐渐

增大, 并在 $Pe_{Cr} = 0.2688$ (交点 3) 时, 生长速度达最大, 此处对应冷却曲线上温度回复起始位置; Pe_{Cr} 下降至 0.2114 (交点 4) 为冷却曲线回复温度达到最大值位置. 在冷却曲线温度开始回复后, 两相晶粒生长速度逐渐降低, 这是由于该时刻已有部分奥氏体晶粒与 M_7C_3 碳化物晶粒相接触, 其后奥氏体晶粒不断包围 M_7C_3 碳化物晶粒, 接触部位越来越多, 晶粒没有继续生长空间, 导致 M_7C_3 碳化物、奥氏体晶粒的平均生长速度降低. 若冷却速率增大, 会加快模拟区域温度的下降, 由 (5) 式可知, 会增加成分过冷和曲率过冷; 通过图 9 和图 10 可知, 随着成分过冷度的不断增大, 贝克列数逐渐增大, 进而会增大 M_7C_3 碳化物和奥氏体独立生长阶段界面的生长速度, 缩短彼此独立生长时间, 相对来说奥氏体晶粒生长速度较快, 会快速包围 M_7C_3 碳化物晶粒, 从而减小 M_7C_3 碳化物尺寸.

3.4 奥氏体、 M_7C_3 碳化物晶粒共生长

图 11 为凝固过程中不同时刻奥氏体晶粒的形貌演变, 以奥氏体相质量分数显示; 图 12 为相应时刻晶粒取向图, 显示出奥氏体晶粒 (绿-蓝颜色晶粒) 与 M_7C_3 碳化物晶粒 (粉-红颜色晶粒) 共同生长过程. $t = 70.83$ s 时刻 (图 11(a) 和图 12(a)), 奥氏体晶粒 A, B, C 与 M_7C_3 碳化物晶粒彼此独立生长; $t = 95.83$ s 时刻 (图 11(b) 和图 12(b)), 奥氏体晶粒 A 的右侧与 M_7C_3 碳化物晶粒左侧接触, 奥

氏体晶粒 A 外轮廓右侧形貌发生改变; $t = 120.83$ s 时刻 (图 11(c) 和图 12(c)), 奥氏体晶粒 B, C 接触到 M_7C_3 碳化物晶粒, 此时奥氏体晶粒 A, B, C 围绕 M_7C_3 碳化物晶粒生长, 呈现出包围趋势; $t = 145.83$ s 时刻 (图 11(d) 和图 12(d)), M_7C_3 碳化物晶粒被奥氏体晶粒完全包围.

图 13 为图 11、图 12 中 $y = 180 \mu\text{m}$ 处红色线位置奥氏体晶粒 A 和 M_7C_3 碳化物晶粒中 C, Cr 溶质浓度的变化曲线. 当 $t = 70.83$ s 时, 奥氏体晶

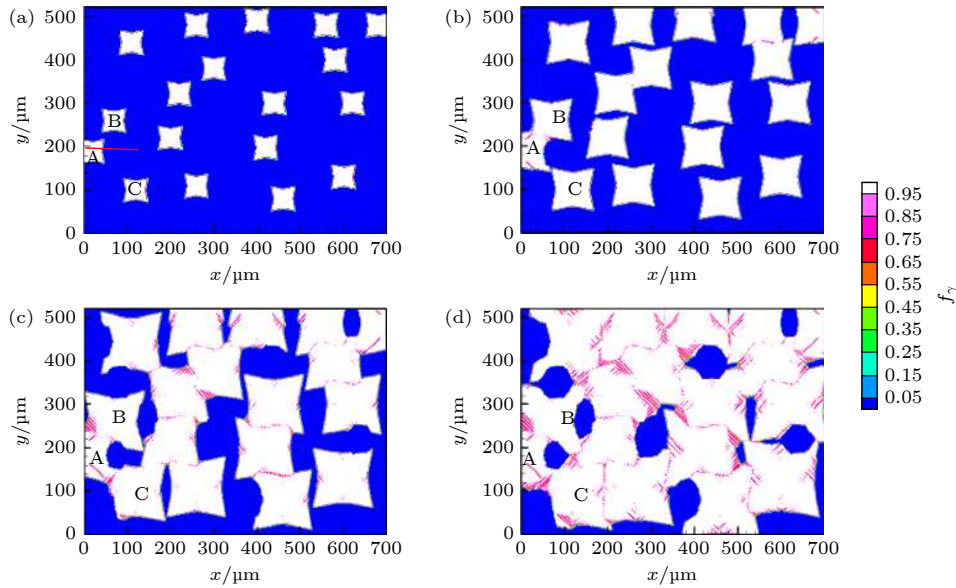


图 11 不同时刻奥氏体晶粒形貌 (a) $t = 70.83$ s; (b) $t = 95.83$ s; (c) $t = 120.83$ s; (d) $t = 145.83$ s

Fig. 11. Morphologies of austenite grains at different moment: (a) $t = 70.83$ s; (b) $t = 95.83$ s; (c) $t = 120.83$ s; (d) $t = 145.83$ s.

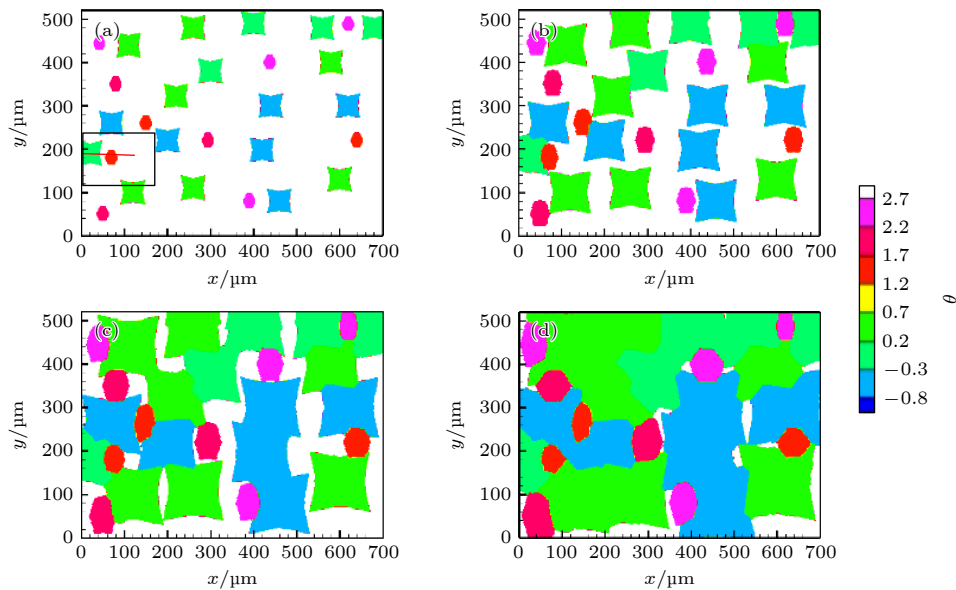


图 12 不同时刻晶粒取向 (a) $t = 70.83$ s; (b) $t = 95.83$ s; (c) $t = 120.83$ s; (d) $t = 145.83$ s

Fig. 12. Crystallographic orientations of M_7C_3 and austenite grains at different moment: (a) $t = 70.83$ s; (b) $t = 95.83$ s; (c) $t = 120.83$ s; (d) $t = 145.83$ s.

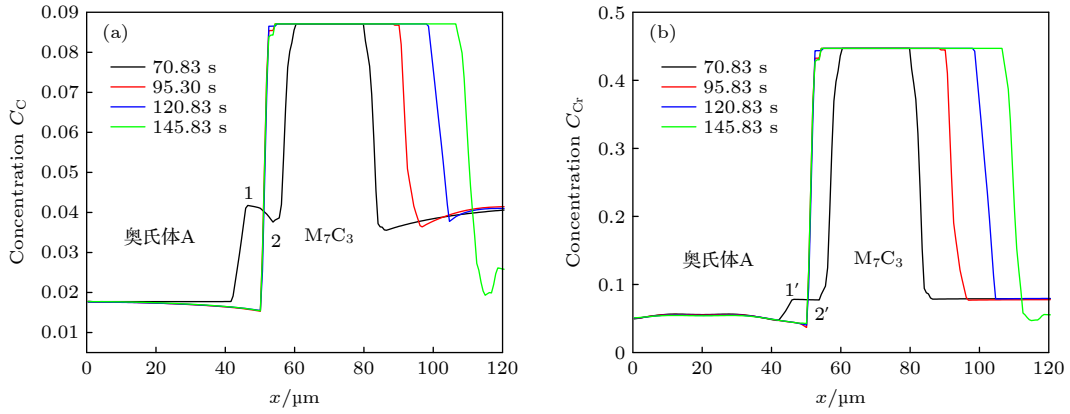


图 13 奥氏体晶粒 A 和邻近 M_7C_3 碳化物晶粒周围溶质浓度的演变: (a) C 浓度; (b) Cr 浓度

Fig. 13. Evolution of solute concentration around austenite grain A and adjacent M_7C_3 carbide grain: (a) C concentration; (b) Cr concentration.

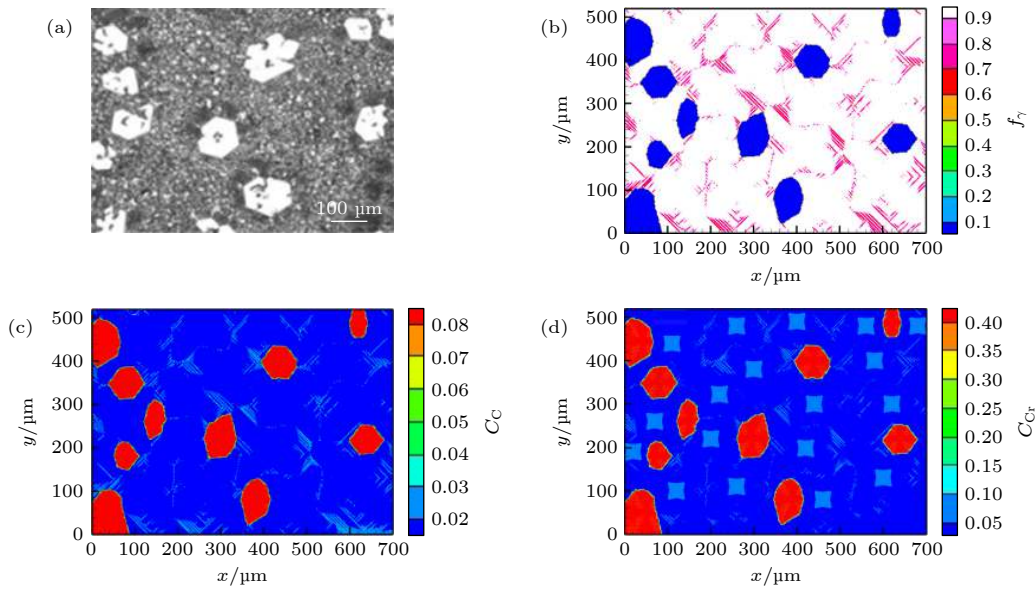


图 14 Fe-4%C-17%Cr 合金实验^[22]和预测的凝固组织 (a) 实验凝固形貌; (b) 本模拟奥氏体质量分数; (c) 本模拟 C 浓度场; (d) 本模拟 Cr 浓度场

Fig. 14. Experimental^[22] and predicted solidification microstructure for Fe-4%C-17%Cr alloy: (a) experimental microstructure; (b) predicted austenite mass fraction; (c) predicted C concentration field; (d) predicted Cr concentration field.

粒 A 与 M_7C_3 碳化物晶粒未接触, 此时奥氏体晶粒和 M_7C_3 碳化物晶粒中间尚有液相区域 (图 13(a) 对应 1—2 段; 图 13(b) 对应 1'—2' 段) 与图 12(a) 黑色框内奥氏体晶粒和 M_7C_3 碳化物晶粒之间的液相区域相对应; 当 $t = 95.83$ s 时, 奥氏体晶粒和 M_7C_3 碳化物晶粒接触; 当 $t = 120.83, 145.83$ s 时 M_7C_3 碳化物晶粒左侧边界几乎未发生改变, 仅 M_7C_3 碳化物晶粒的右侧向外生长. 随着时间的推移, M_7C_3 碳化物晶粒逐渐长大, 并最终被奥氏体晶粒完全包围. 由图 13 还可知, M_7C_3 碳化物晶粒内 C, Cr 溶质的浓度高于界面液相浓度, 奥氏体晶粒

内的 C, Cr 溶质浓度低于界面液相溶质浓度, 这与 M_7C_3 /液相及奥氏体/液相界面溶质分配规律相符.

3.5 最终凝固组织形貌及体积分数与实验对比

图 14 给出 Fe-4%C-17%Cr 合金在石墨型冷却条件下显微组织^[22](图 14(a)) 与相同条件下本模拟的最终凝固结果 (图 14(b)—(d)). 其中, 图 14(b) 为以奥氏体质量分数显示的晶粒形貌, 图中蓝色区域为 M_7C_3 碳化物晶粒, 白色区域为奥氏体晶粒, 红色区域为奥氏体晶臂处剩余液相区; 图 14(c) 和

图 14(d) 为模拟的最终凝固时的 C, Cr 溶质浓度分布. 通过 Image-Pro Plus 6.0 软件测得实验显微组织图中 M_7C_3 碳化物体积分数为 12.00%, 本模拟的 M_7C_3 碳化物体积分数为 11.94%, 模拟结果与实验结果中 M_7C_3 碳化物晶粒大小形貌均相近.

3.6 剩余液相与奥氏体中溶质浓度

3.6.1 剩余液相中 C, Cr 溶质浓度演变

图 15 为本模拟 (黑色曲线) 与 GS (各溶质在固相无扩散, 红色曲线)、PE (C 溶质在固相充分扩散、Cr 无扩散, 绿色曲线)、LR (各溶质在固相充分扩散, 蓝色曲线) 模型预测的剩余液相中溶质 C, Cr 浓度的变化趋势对比. 本模拟的剩余液相溶质浓度由所有元胞中剩余液相溶质总和除以剩余总液相分数得到. 凝固初期, M_7C_3 碳化物先行析出, 其生长过程中会吸收液相中的 C, Cr 溶质, 所以 C, Cr 溶质都为下降趋势; γ 相析出后, γ 生长过程中向液相中排出 C, Cr 溶质 ($k_{p,\gamma/L,C} < k_{p,\gamma/L,Cr} < 1$), 但由于 M_7C_3 碳化物生长所需的 Cr 溶质量较多 ($C_{M,Cr} = 44.7\%$, $C_{M,C} = 8.71\%$), 所以 M_7C_3 与 γ 共生长阶段, 液相中 C 浓度逐渐增加而 Cr 浓度持续减小. 可以看出, 从初始浓度点到与相图中 γ/M_7C_3 相界线相交阶段为 M_7C_3 碳化物形核析出、独自生长阶段; 奥氏体析出对应曲线与相界线交点, 此时模拟区域变为液相、 M_7C_3 碳化物和奥氏体三相区, 曲线沿着相图中 γ/M_7C_3 相界线行走, 直至 CEM 相析出结束 (对应右下三相交界点), 这与 GS, PE, LR 模型预测曲线符合很好, 验证了本模拟的合理性.

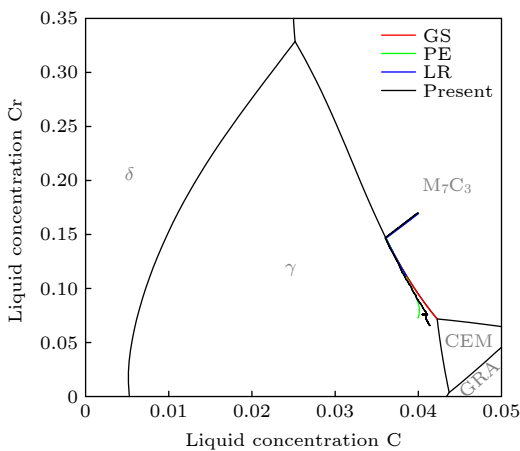


图 15 剩余液相中 C, Cr 溶质浓度演变

Fig. 15. Evolution of C and Cr concentration in residual liquid.

3.6.2 奥氏体中 C, Cr 溶质浓度演变

图 16 给出了本模拟的奥氏体中 C, Cr 溶质浓度随奥氏体体积分数的变化曲线及与 GS, PE, LR 模型曲线的对比. 本模拟中 C, Cr 溶质在奥氏体中有限扩散, 为对比 GS 结果, 亦给出 C, Cr 溶质在奥氏体中 $D_\gamma = 0$ 结果. 图 16(a) 中初期 C 溶质有扩散曲线在无扩散曲线上方, 在奥氏体相分数约为 0.42 时交叉, 之后变为无扩散曲线在有扩散曲线上方. 这种趋势是由于, 交叉点处为奥氏体和 M_7C_3 碳化物快速生长阶段, 奥氏体中溶质 C 的扩散系数比 Cr 大 4 个数量级, 奥氏体晶粒和 M_7C_3 碳化物晶粒接触、包围 M_7C_3 晶粒后, 缓慢的凝固过程为奥氏体晶粒中 C 溶质扩散提供了更长的时间, 进而导致 C 浓度低于无扩散结果. 图 16(b) 中 Cr 溶质无扩散曲线在有扩散曲线上方, 二者浓度值几乎重合, 这是因为 Cr 溶质扩散系数较小 ($3.67 \times 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$), 接近 0 的缘故. 总体来看, 奥氏体中 C

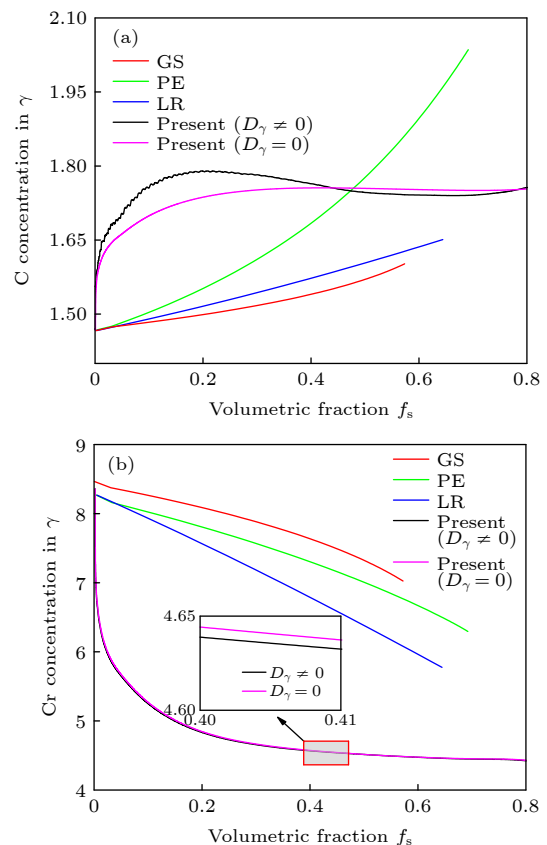


图 16 奥氏体中 C, Cr 溶质浓度演变与凝固路径模型对比 (a) C 浓度; (b) Cr 浓度

Fig. 16. Comparison of C and Cr solute concentration evolution in austenite with GS, PE and LR solidification path prediction: (a) C concentration; (b) Cr concentration.

溶质浓度随凝固的进行呈逐渐增大趋势, Cr 溶质浓度呈持续下降趋势, C, Cr 溶质浓度值虽与 GS, PE, LR 凝固路径曲线存在一定差异, 但 C, Cr 整体变化趋势与 GS, PE, LR 模型曲线演变趋势相同, C, Cr 溶质有无扩散曲线的上下位置与 GS 模型、LR 模型曲线位置对应吻合。

4 结 论

1) 开发了 Fe-C-Cr 三元合金小面晶 M_7C_3 碳化物与枝晶共生长的二维微观元胞自动机模型。模型中加入潜热释放对凝固过程温度场的影响, 由 C, Cr 两溶质界面扩散共同确定晶体生长速度, 由凝固路径数据表插值获取液相元胞的溶质平衡浓度, 通过设定 M_7C_3 碳化物邻胞结构并优化形状因子来保持 M_7C_3 小面晶形貌, 模拟了 Fe-4%C-17%Cr 三元合金初生 M_7C_3 碳化物和共晶奥氏体晶粒的生长演变过程。

2) M_7C_3 碳化物和奥氏体晶粒在液相中各自的生长速度随界面液相中 C, Cr 溶质的超饱和度和贝克利数的增大而不断增大。随着奥氏体的析出和晶粒生长, M_7C_3 碳化物晶粒的生长速度明显增快, 二者生长相互促进。当奥氏体晶粒逐渐接触并包围 M_7C_3 碳化物晶粒, 对应于冷却曲线温度回复开始后, 晶粒没有继续生长空间, 两相晶粒生长速度遂逐渐降低。

3) Fe-4%C-17%Cr 合金凝固过程中, 奥氏体晶粒生长向外排出 C, Cr 溶质, 与吸收 C, Cr 溶质生长的 M_7C_3 碳化物晶粒互补, 致使二者生长互相促进, 最终奥氏体晶粒包围 M_7C_3 碳化物晶粒生长, 奥氏体枝晶形貌趋近 M_7C_3 碳化物晶粒外轮廓。

4) 预测的 Fe-4%C-17%Cr 合金冷却曲线及添加 1.5%Ti 后石墨铸型实验冷却曲线^[22]和 Fe-3.23%C-23.8%Cr 合金添加 4%Ti 与否的砂型实验冷却曲线^[39]的变化趋势相符, 最终凝固组织形貌和 M_7C_3 碳化物体积分数与实验^[22]相符, 剩余液相、奥氏体中 C, Cr 溶质浓度演变与 GS, PE, LR 模型均相符。

5) 实际工程应用中, 通过增大 M_7C_3 形核过冷度 (如进行熔体净化处理), 增加形核密度 (如采取合金化手段, 添加 Ti, V 等合金元素增加 M_7C_3 形核质点) 或增大冷却速率, 可实现减小 M_7C_3 碳化物尺寸和均匀分布。

参考文献

- [1] Siekaniec D, Kopycinski D, Szczesny A, Guzik E, Tyraa E, Nowak A 2017 *Nephron Clinical Practice* **17** 143
- [2] Liu H N, Sakamoto M, Nomura M, Ogi K 2001 *Wear* **250** 71
- [3] Pokusova M, Gabrisova Z, Brusilova A, Pribulova A, Futa P 2020 *Mater. Sci. Forum.* **998** 30
- [4] Filipovic M, Kamberovic Z, Korac M, Gavrilovski M 2013 *Mater. Des.* **47** 41
- [5] Buytoz S, Yildirim M M, Eren H 2005 *Mater. Lett.* **59** 607
- [6] Gong P, Zhao Y, Yang H, Wang N 2017 *Heat Treatment of Metals* **42** 137 (in Chinese) [龚沛, 赵曜, 杨浩, 王宁 2017 金属热处理 **42** 137]
- [7] Chen Z, Wang L L, Zhang H, Fu Y H, Zhong L S, Ye F X 2013 *Hot Working Technology* **42** 8 (in Chinese) [陈哲, 王亮亮, 张哈, 付永红, 钟黎声, 叶芳霞 2013 热加工工艺 **42** 8]
- [8] Tang X H, Chung R, Pang C J, Li D Y, Hinckley B, Dolman K 2011 *Wear* **271** 1426
- [9] Zhang H W, Nakajima K, Gandin C A, He J C 2013 *ISIJ Int.* **53** 493
- [10] Wang T M, Wei J J, Wang X D, Yao M 2018 *Acta Metall. Sin.* **54** 193 (in Chinese) [王同敏, 魏晶晶, 王旭东, 姚曼 2018 金属学报 **54** 193]
- [11] Zhu M F, Xing L K, Fang H, Zhang Q Y, Tang Q Y, Pan S Y 2018 *Acta Metall. Sin.* **54** 789 (in Chinese) [朱鸣芳, 邢丽科, 方辉, 张庆宇, 汤倩玉, 潘诗琰 2018 金属学报 **54** 789]
- [12] Zhu M F, Cao W, Chen S L, Hong C P, Chang Y A 2007 *J. Phase Equilib. Diffus.* **28** 130
- [13] Dai T, Zhu M F, Chen S L, Cao W S, Hong J Z 2008 *Acta Metall. Sin.* **10** 1175 (in Chinese) [戴挺, 朱鸣芳, 陈双林, 曹伟生, 洪俊杓 2008 金属学报 **10** 1175]
- [14] Zhang H W, Gandin C A, Hamouda H B, Tourret D, Nakajima K, He J C 2010 *ISIJ Int.* **50** 1859
- [15] Zhang H W, Gandin C A, Nakajima K, He J C 2012 *IOP Conf Series: Materials Science Engineering* **33** 012063
- [16] Shi Y F, Xu Q Y, Liu B C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 108101 (in Chinese) [石玉峰, 许庆彦, 柳百成 2012 物理学报 **61** 108101]
- [17] Michelic S C, Thuswaldner J M, Bernhard C 2010 *Acta Mater.* **58** 2738
- [18] Zhang X W 2019 *Master's Dissertation* (Shenyang: Northeastern University) (in Chinese) [张晔韦 2019 硕士学位论文 (沈阳: 东北大学)]
- [19] Zhu M F, Hong C P, Stefanescu D M, Chang Y A 2007 *Metall. Mater. Trans. B.* **38** 517
- [20] Zhang L, Zhao H L, Zhu M F 2015 *Acta Metall. Sin.* **51** 148 (in Chinese) [张蕾, 赵红蕾, 朱鸣芳 2015 金属学报 **51** 148]
- [21] Ma S Q, Xing J, He Y, Li Y F, Huang Z F, Liu G Z, Geng Q J 2015 *Mater. Chem. Phys.* **161** 65
- [22] Liu Q, Zhang H W, Wang Q, Zhou X K, Jonsson P G, Nakajima K 2012 *ISIJ Int.* **52** 2210
- [23] Stefan-Kharicha M, Kharicha A, Zaidat K, Reiss G, Essl W, Goodwin F, Wu M H, Ludwig A, Mugrauer C 2020 *J. Cryst. Growth* **541** 125667
- [24] Fu Z N, Xu Q Y, Xiong S M 2007 *J. Nonferrous Met. China* **17** 1567 (in Chinese) [付振南, 许庆彦, 熊守美 2007 中国有色金属学报 **17** 1567]
- [25] Dong X L, Xing H, Chen C L, Sha S, Wang J Y, Jin K X 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 58 (in Chinese) [董祥雷, 邢辉, 陈长乐, 沙沙, 王建元, 金克新 2016 物理学报 **65** 58]
- [26] Zhang H W, Zhang S, Wang Y C, Hao Y Z, Miao M, Nakajima K, Lei H, Wang Q, He J C 2020 *IOP Conf Series: Materials Science and Engineering* **861** 012046

- [27] Gandin C A 1993 *Acta Metallurgica et Materialia* **41** 345
- [28] Flemings M C, Poirier D R, Barone R V, Brody H D 1970 *J. Iron Steel Inst.* **208** 371
- [29] Nastac L 1999 *Acta Mater.* **47** 4253
- [30] Eggleston J J, Mcfadden G B, Voorhees P W 2001 *Phys. D* **150** 91
- [31] Rappaz M, Boettinger W J 1999 *Acta Mater.* **47** 3205
- [32] Burbelko A A, Gurgul D, Kaptur K W, Gorny M 2012 *Arch. Foundry Eng.* **12** 11
- [33] Sun Y C 2012 *Ph. D. Dissertation* (Shandong: Shandong University) (in Chinese) [孙玉成 2012 博士学位论文 (山东: 山东大学)]
- [34] Wang J, Qi X, Xing X, Shi Z J, Zhou Y F, Yang Q X 2019 *Mater. Res. Express* **6** 0865h3
- [35] Liu S, Zhou Y F, Xing X, Wang J B, Ren X J, Yang Q X 2016 *Sci. Rep.* **6** 1
- [36] Coronado J J 2011 *Wear* **270** 287
- [37] Beltran S L, Stefanescu D M 2004 *Metall. Mater. Trans. A.* **35** 2471
- [38] Liu S, Wang Z, Shi Z, Zhou Y F, Yang Q X 2017 *J. Alloy. Compd.* **713** 108
- [39] Kopycinski D, Guzik E, Siekaniec, Szczesny A 2015 *Arch Foundry Eng* **15** 35
- [40] Liu Q 2013 *Ph. D. Dissertation* (Stockholm, Sweden: KTH Royal Institute of Technology)

Cellular automaton simulation on cooperative growth of M_7C_3 carbide and austenite in high Cr cast irons*

Zhang Shan¹⁾²⁾ Zhang Hong-Wei^{1)2)†} Miao Miao¹⁾²⁾
Feng Miao-Miao¹⁾²⁾ Lei Hong¹⁾²⁾ Wang Qiang¹⁾²⁾

1) (*Key Laboratory of Electromagnetic Processing of Materials,
Ministry of Education, Northeastern University, Shenyang 110819, China*)

2) (*School of Metallurgy, Northeastern University, Shenyang 110819, China*)

(Received 16 April 2021; revised manuscript received 15 June 2021)

Abstract

M_7C_3 carbide's amount, size, morphology and distribution in the microstructure contribute much to the wear resistance of high chromium cast irons. In the present paper, a two-dimensional microscopic cellular automaton model for the growth of the faceted M_7C_3 carbide together with the austenitic dendrite grains in an Fe-4%C-17%Cr ternary alloy is developed to obtain the evolution of M_7C_3 carbide grain morphology, the concentration redistribution and their interaction during the growth of M_7C_3 carbide and austenite grains, and also the total influence on the final M_7C_3 carbides' size. The model includes the effect of latent heat release on the temperature drop. The grain growth velocity is determined by both the diffusion of C solute and the diffusion of Cr solute at the S/L interface. The equilibrium concentration in liquid cells is interpolated from the tabulated solidification path which is prescribed by Gulliver-Scheil approximation coupling with the thermodynamic equilibrium calculation. The morphology of the faceted M_7C_3 carbide is maintained through setting its neighborhood relations and optimizing its shape factor at grain growth. The results show that the individual grain growth velocity for M_7C_3 carbide and austenite increases with the increase of the supersaturation and Peclet number of solute C and Cr. The austenite precipitation and grain growth obviously speed up the growth velocity of M_7C_3 carbide grains. While with the austenite grains gradually touching and enveloping the M_7C_3 carbide grain, the growth velocities for both kinds of grains decrease. The rejection of solute C and Cr during austenite grain growth complements the absorption of solute C and Cr during M_7C_3 carbide grain growth, thus promoting their growth. The predicted cooling curve fits with the evolution tendency of the experimental one. The predicted final solidification microstructure and M_7C_3 carbide amount in volume fraction are in agreement with the experimental ones. Furthermore, both C solute concentration distribution and Cr solute concentration distribution in both residual liquid and austenite are consistent with the predictions by the Gulliver-Scheil, partial equilibrium and lever rule model.

Keywords: Fe-C-Cr ternary alloy, faceted M_7C_3 , cooperative growth, cellular automaton

PACS: 81.10.Aj, 61.50.Ah

DOI: 10.7498/aps.70.20210725

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51574074, 51425401), the National Natural Science Foundation of China and Shanghai Baosteel (Grant Nos. U1460108, U1560207), and the Natural Science Foundations of Liaoning Province, China (Grant No. L20150183).

† Corresponding author. E-mail: hongweizhang@epm.neu.edu.cn