

کاربرد نرم افزارهای شبیه ساز Thermo-Calc و MTDATA در محاسبه نمودارهای فازی سیستم Fe-C-Al-Si

علیرضا کیانی رشید^۱

گروه مهندسی مواد، دانشکده مهندسی شهید نیکبخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان

زاهدان، ایران

fkiana@yahoo.com

دیوید ادموندز^۲

دانشکده مهندسی مواد، دانشگاه لیدز

لیدز، انگلستان

چکیده

Thermo-Cal و MTDATA بسته های نرم افزاری قدرتمندی برای محاسبه های تعادلی و دیاگرام فازی هستند. این نرم افزارها جهت استحاله فازی یا شبیه سازی فرآیند ها قابل کاربرد می باشند که بستگی به نوع پایگاه داده هایی دارد که در اتصال با آنها می باشد. نمودارهای فازی سیستم آهن-کربن-آلومینیم-سیلیسیم (Fe-C-Al-Si) با بکار بردن نرم افزارهای Thermo-Cal و MTDATA و بکارگیری پایگاه داده های SGTE محاسبه گردیدند تا فازهای موجود در درجه حرارتهای متفاوت و محدوده ترکیب شیمیایی مورد نظر در شرایط تعادلی تعیین شوند. مشاهده می گردد که افزایش آلومینیم باعث تغییرات تعادلی آهن - کربن در این ترکیبات آلیاژی می شود. ناحیه آستنیت با افزایش آلومینیم کاهش یافته و برای چدنهای حاوی حدود $Al\ 4/88\%$ یا بیشتر هیچ نشانی از یک ناحیه آستنیتی نمی باشد. نتایج دیگر از عملیات حرارتی و دیلاتومتری در تلفیق با مشاهدات میکروسکوپی نوری و الکترونی بیانگر توافق خوب نمودارهای فازی محاسبه شده برای مقادیر کم و مقدار بالای $Al\ 6/16\%$ می باشد. بهرحال برای $Al\ 4/88\%$ با مشاهدات اختلاف وجود داشته و تجربیات با آلیاژی حاوی این مقدار Al نشان می دهد که واکنش آستنیت در این آلیاژ اتفاق می افتد، درحالیکه شاهدهی بر حضور ناحیه γ در نمودار فازی مربوطه نمی باشد.

واژه های کلیدی: شبیه سازی، آلومینیم، نمودارهای فازی، آستنیت (γ)، ترمودینامیک، دما

(۲) استاد (دکتری مواد)

(۱) استادیار (دکتری مواد - آلیاژهای فلزی)

مقدمه

نمودارهای فازی تعادلی از اهمیت زیادی در مباحث متالورژیکی برخوردار هستند. به کمک این دیاگرامها امکان بررسی ریزساختار آلیاژها، ترکیب شیمیایی آن ها و همچنین تعیین نوع و درصد فازها فراهم می شود [۱-۳]. در این راستا محققین روش های بسیار متنوعی را در زمینه چگونگی رسم آن ها ارائه داده اند که عمدتاً تعداد انبوهی نمونه باید تهیه و با انجام آزمایش های پر دامنه ای این امکان فراهم می شود. در همین ارتباط همواره علاقمندی فراوانی جهت بهره گیری از رایانه ها و سیستم مشابه سازی وجود داشته و بنابراین تعداد قابل توجهی از این نرم افزارها طراحی و استفاده شده اند. نمونه هایی از بسته های نرم افزاری که اخیراً مورد استفاده قرار گرفته اند MTDATA و Thermo-Calc می باشند. توانمندی این نرم افزارها بستگی به پایگاه های اطلاعاتی عظیمی دارد که توسط گروه های علمی سازمان یافته ای همچون SGTE حمایت و امکان کنترل و استاندارد کردن آنها را فراهم می سازند. مفروضات و دانسته های بکار رفته در این نرم افزار بطور کاملاً کنترل شده ای توسط گروه علمی اروپایی ترموداتا گردآوری و ارزیابی شده است که با توسعه علوم و دریافت اطلاعات جدید این نرم افزار بطور پیوسته در حال بهنگام شدن و بهبود می باشد [۴-۷].

در سیستم نرم افزاری MTDATA کاربردهای بیشماری در زمینه های متالورژی، شیمی، علم مواد و علوم دیگر با توجه به داده های در دسترس وجود دارد. با توجه به تنوع زیاد عناصر و امکان آلیاژسازی بیشمار این عناصر امکان جمع آوری اطلاعات موثق جهت کلیه این مواد مشکل و گاهی غیر ممکن به نظر می رسد. با توجه به اینکه کاربران این برنامه ها علاقمند به تهیه نمودارهای فازی و یا مدلسازی جدیدی بر اساس آلیاژهای مورد نظر می باشند، این برنامه ها به گونه ای طراحی و نوشته شده اند که امکان ورود اطلاعات مورد نظر را با توجه به تنوع در ترکیب شیمیایی، خواص و همچنین شرایط خارجی حاکم از نظر سایر پارامترهای ترمودینامیکی فراهم می سازند [۶-۱۰].

از قابلیت های بسیار خوب چدن های حاوی آلومینیم، مقاومت بالای اکسیداسیون در درجه حرارت های بالا، استحکام بالاتر در درجه حرارت اتاق و درجه حرارت های بالا، وزن مخصوص کمتر و قابلیت ماشینکاری بهتر آنها در قیاس با چدن های معمول می باشد [۱۱-۱۶]. در این پژوهش میزان توانمندی تعدادی از نرم افزارهای شبیه ساز در ارتباط با گروه خاصی از این آلیاژهای چدنی تحقیق شده است.

مواد و روش تحقیق

در این تحقیق از بسته های نرم افزاری همانند MTDATA و Thermo-Calc که برای محاسبات نمودارهای فازی طراحی شده اند جهت رسم نمودارهای فازی Fe-C-Al-Si بهره گرفته شد. دامنه ای

از درجه حرارت و تركيب شيميايي براي هر يك از آلياژهاي مورد نظر اختيار گرديد. با انجام محاسبات مربوط به حداقل انرژی گيس، فازهاي پايدار در درجه حرارت و تركيب تعيين و بصورت مقاطع ایزوترمال رسم گرديد (اشكال ۱ الی ۳). جهت اطمینان بیشتر اطلاعات بدست آمده محاسباتی با نتایج تجربی مقایسه گرديد که در بسیاری از موارد از تطابق بسیار خوبی برخوردار بوده و قابل استناد میباشند. پس از آلیاژسازی، مطابق با استاندارد ASTM ۸۰۳۶-۸۰ بلوک هایی از آلیاژهای مورد نظر در قالبهای ماسه سیلیسی ریخته گری گرديد. در این تحقیق تعداد قابل ملاحظه ای ذوب در کوره های بوتی ای و القایی تهیه و ریخته گری شد که تعدادی از آنها در جدول ۱ نشان داده شده است. تجزیه شیمیایی به روش کوانتومتری انجام گرديد و عملیات اوستنیته کردن در دماها و زمانهای نگهداری متفاوتی انجام شد. و قبل و بعد از عملیات حرارتی آزمایشهای متالوگرافی، سختی سنجی و دیلاتومتری انجام شد. تعیین ریزساختار توسط میکروسکوپ های نوری و رویی (SEM) انجام شده و جهت تکمیل آزمایشات از دستگاه دیلاتومتری Diatronic III با سرعت بالا و در شرایط خلا و خنک کردن سریع با گاز خنثی بهره گرفته شد. سرد کردن تا دمای مورد نظر توسط جت های با فشار بالای هلیوم با سرعت سرد کردن $25^{\circ}\text{C}/\text{sec}$ بر روی نمونه های استوانه ایی توخالی با طول ۱۰ mm، با قطر ۳ mm و حفره داخلی ۱/۵mm که امکان سرد کردن سریع را امکان پذیر می سازد انجام گرفت. در همین ارتباط سیکل های عملیات حرارتی متنوعی طراحی و اعمال گرديد تا دگرگونی های فازی در آلياژها تعیین شود [۱۵].

یافته ها

حضور عناصری همانند سیلیسیم و آلومینیم در آلياژهای چدنی باعث افزایش قدرت گرافیت زایی آنها می شود. نمایش اثر این عناصر در دیاگرام آهن و کربن بوسیله مقطعی از سیستم آلياژی Fe-C-Si-Al و به کمک بسته های نرم افزاری شبیه ساز مربوطه قابل نمایش هستند. تاثیر افزایش آلومینیم موجود روی نمودار جزئی Fe-C-Al-Si در اشكال ۱ و ۲ نشان داده شده است. در هر نمودار Al و Si ثابت فرض شده و کربن موجود از صفر تا ۷ درصد تغییر کرده است. دیاگرامهای فازی برای 0.01Al ، 0.048Al ، 0.171Al ، 0.310Al ، 0.488Al و 0.616Al ترسیم شده است. میزان سیلیسیم در تمامی حالات 0.118% میباشد. این دیاگرامها مشابه نمودار فازی آهن-کربن بوده و فازهای فریت، اوستنیت، گرافیت و مذاب در سیستم حضور دارند. یک خط عمودی که در نمودار کشیده شده است بیانگر تركيب شیمیایی آلياژ مربوطه میباشد. مرزهای فازی بیانگر محلی می باشد که یک فاز جدید بوجود می آید یا با افزایش دما ناپدید می شود.

ضمناً در ارتباط با مقایسه نتایج محاسباتی با موارد تجربی، آلياژهایی از جنس چدن و با تركيب شیمیایی

تقریباً مشابه تهیه و مجموعه ای از آزمایشات بررسی ریز ساختار، سختی سنجی و دیلاتومتری روی آنها انجام گرفت [۱۵]. در این ارتباط ترکیب شیمیایی تعدادی از آلیاژهای ریخته شده در جدول (۱) ارائه گردیده است. شکل ۳ نشاندهنده ریزساختار میکروسکوپی چدن حاوی $4/8Al$ ٪ در حالت ریختگی است. در این ساختار گرافیت های کروی در زمینه فریتی - پرلیتی مشاهده می شوند. در همین ارتباط نمونه های دیگر نیز عمدتاً دارای ساختار مشابهی بوده و صرفاً میزان در صد فازها بر حسب مقدار آلومینیوم تغییراتی را نشان می دهند [۱۵ و ۱۷]. نمونه های متعددی از آلیاژهای با درصد متفاوت از آلومینیوم انتخاب و عملیات حرارتی متنوعی روی آنها انجام گردید. در همین ارتباط ریزساختار میکروسکوپی چدن حاوی $4/8Al$ ٪ که در دمای $920^{\circ}C$ به مدت ۹۰ دقیقه آستنیته و سپس در $350^{\circ}C$ به مدت ۱۰۰ دقیقه آستمپر گردیده در شکل ۴ نمایش داده شده است. تغییرات سختی این دسته از آلیاژها در شکل ۵ و منحنی تغییرات دیلاتومتری آلیاژ $4/8Al$ ٪ در شکل ۶ نمایش داده شده اند.

بحث

با توجه به اشکال ۱ و ۲ ملاحظه می گردد که وجود و حضور عنصر آلومینیم می تواند باعث تغییراتی در محدوده و دامنه فازهای موجود در دیاگرام تعادلی گردد. از جمله نواحی بسیار مهم در این دیاگرام فازی که از اهمیت زیادی، خاصه در فرآیند عملیات حرارتی آلیاژهای آهنی برخوردار است، ناحیه اوستنیت (۷) میباشد. این اشکال بیانگر این واقعیت می باشند که افزایش آلومینیم می تواند وسعت این ناحیه را کاهش دهد که نتیجتاً فرآیندهای عملیات حرارتی و ریز ساختار نهایی آلیاژ را به شدت متاثر می سازد. نمودارهای رسم شده توسط نرم افزارهای مربوطه نشان می دهد که جهت آلیاژی با $4/8Al$ ٪ یا بیشتر، ناحیه آستنیت کاملاً از بین رفته در صورتیکه آزمایشات تکمیلی در زمینه مطالعه ریزساختار، سختی و دیلاتومتری نشاندهنده تغییرات جدی در ساختار این آلیاژها بعد از فرآیند عملیات حرارتی مربوطه میباشد. (اشکال ۶-۳) و می توان نتیجه گرفت که بهره گیری از چنین نرم افزارهایی با تمام توانمندی های مربوطه نیازمند توجه بیشتری بوده و باید با مشابه سازی شرایط عملی، صحت آنها تایید گردد [۱۵].

در ارتباط با آلیاژهای با درصدهای بالاتر از Al ، نمودارهای محاسباتی و آزمایشات انجام شده توافق بسیار خوبی را نشان می دهند و امکان آستنیته کردن این آلیاژها حتی در زمانهای بسیار طولانی و در درجه حرارت های بسیار متفاوت امکان پذیر نبوده که می تواند بیانگر عدم وجود ناحیه ۷ در چنین نمودارهای فازی باشد. تغییر موقعیت خطوط حد فاصل مابین نواحی مختلف فازی بر حسب افزایش درصد آلومینیوم می تواند از اهمیت ویژه ای برخوردار باشد. وجود و حضور عنصری همانند Al باعث تغییرات محسوسی در پتانسیل شیمیایی آلیاژ و قابلیت نفوذ عناصر گردیده و با تغییر حد حلالیت ها و

شرایط تعادلی، پایداری فازها را تحت تاثیر قرار می دهد. ساختار نهایی هر قطعه ریختگی متاثر از حضور کلیه عناصر موجود در آن آلیاژ می باشد. در همین ارتباط توجه به ریز ساختار آلیاژهای تهیه شده در تبیین اثر آلومینیوم میتواند بسیار مفید باشد. شکل ۳ نمایش دهنده ریز ساختار آلیاژ Al ۴/۸۸٪ در حالت ریختگی است که متشکل از گرافیت های کروی در زمینه فریتی - پرلیتی است. با انجام عملیات حرارتی آستنیت کردن و آستمپر کردن در ساختار زمینه تغییر جدی ایجاد شده و پس از چنین فرآیندی، زمینه متشکل از فریت بینیتی و آستنیت باقیمانده پرکربن می باشد (شکل ۴). ساختار کاملاً بینیتی در فرآیند عملیات حرارتی آستنیت کردن و آستمپر کردن بیانگر وجود ناحیه ۷ در دیاگرام های فازی است که متاسفانه بسته های نرم افزاری طراحی شده در نمایش صحیح این نواحی محدودیت دارند. از جمله نواقص آنها کمبود اطلاعات مربوط به پایگاه داده هاست. به عنوان مثال در چنین نرم افزارهایی کمبود سیستم فازی Al-C و آلیاژهای دوتایی مربوط کاملاً مشهود و در نتیجه الزام به انتخاب گزینه های دیگر در ارتباط با رسم سیستم Fe-C-Si-Al چنین انحرافی را باعث می شود.

وجود تغییرات سختی برحسب زمان آستنیت کردن نیز جهت آلیاژهای مختلف نیز موید این قضیه است که امکان استحاله زمینه فریتی - پرلیتی این نوع از چدن در محدوده دمایی در نظر گرفته شده ممکن و افزایش سختی در زمان های طولانی تر به معنی درصد بالاتر فاز مارتنزیت، پس از کوئچ کردن نمونه ها تا دمای اطاق می باشد. کاهش مختصر سختی در زمان های طولانی تر ناشی از رشد دانه های آستنیت میباشد (شکل ۵). بعلاوه منحنی های رسم شده توسط روش دیلاتومتری نیز نمایش دهنده انحراف از خط مستقیم در دمای استحاله آستنیت به سایر فازها در مرحله کاهش دما می باشد (شکل ۶).

نتیجه گیری

۱) نمودارهای تعادلی سیستم Fe-C-Al-Si رسم شده در این تحقیق نشان میدهند که افزایش درصد آلومینیم باعث تحولاتی در محدوده و دامنه فازهای متفاوت موجود می گردد.

۲) حضور بیشتر عنصر آلومینیم بیانگر این واقعیت می باشد که از ۰/۰۱٪ تا ۶/۱۶٪، ناحیه اوستنیت در این نمودارهای تعادلی کاهش تدریجی را نشان داده و در درصدهای حدود Al ۴/۸۸٪ و بالاتر این ناحیه بطور کامل حذف گردیده است.

۳) نتایج حاصل از مشاهدات میکروسکوپی، سختی سنجی و دیلاتومتری تأییدی بر صحت این نمودارها در مقادیر کم و بالای آلومینیم بوده و در مقادیر حد واسط اختلاف محسوسی مشاهده می شود که میتواند ناشی از شرایط غیر تعادلی انجماد این آلیاژها و یا فقدان بعضی از اطلاعات در نرم افزارهای موجود جهت ترسیم این نمودارها باشد.

مراجع

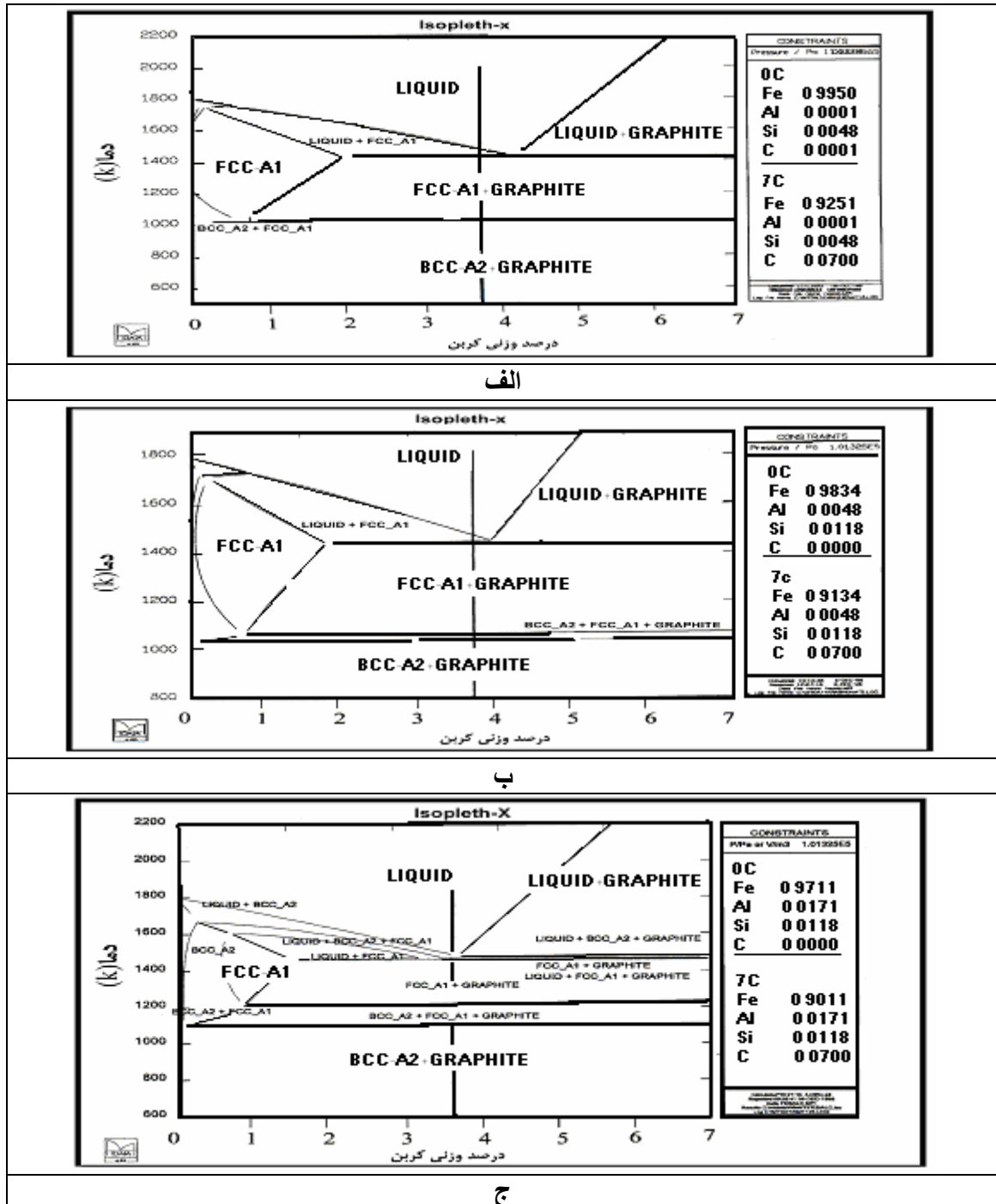
- [1] E. Kotzin, , Metal Casters Reference and Guide, Aug. 1972, , USA, AFS
- [2] H.T. Angus, Cast iron, Physical and Engineering Properties, 1978, London, Butterworths & Co (Publishers) Ltd.
- [3] R. Elliott, Cast Iron Technology, 1988, London, Butterworths & Co. (Publishers) Ltd.
- [4] A.T. Dinsdale, "CALPHAD", SGTE data for pure elements, 15 (4), 1991, pp.317-425.
- [5] G. Eriksson, K. Hack, "ChemSage – A Computer Program for the Calculation of Complex Chemical Equilibria, Metallurgical Trans. B, 1990, V.21B, pp. 1013-1023
- [6] National Physical Laboratory (NPL), Teddington, Middlesex, UK, TW11 OLW, Reproduced by permission of the controller of HMSO, 1999, <http://www.npl.co.uk/npl/cmmt/mtdata/mtdata.htm>
- [7] B.O. Sundman, "Thermo-Cal System, Software Description Form", Department of material science and engineering, Stockholm, Sweden, Jan (1996).
- [8] H.J. Kandiner, S.R. Brinkley, "Calculation of Complex Equilibrium Problem", Ind. Eng. Chem., 1950, V., 42, No. 5, pp. 850-855.
- [9] V. Gleb-Belov, "Thermodynamic Modeling and Thermodynamic Computer Science", Glushko Thermocenter, IHED IVTAN Association of Russian Academy of Sciences, 2003.
- [10] K. Hack, Thermodynamics at work, Institute of Metals, London, 1996.
- [11] J.G. Pearce, K. Bromage, Copper in Cast Iron, 1965, London, Hutchinson & Co. (Publishers) Ltd.
- [12] R.P. Walson, "Aluminium Alloyed Cast Iron Properties Used in Design", AFS, Transactions, 1997, 85: 51-58.
- [13] D.M. Stefanescu, F. Martinez, "Compacted/Vermicular Graphite Cast Irons in the Fe-C-Al System", AFS. Transactions, 1982, 39: 39-46.
- [14] R.J. Smickley, K. B. Rundman, "The Effect of Aluminium on the Structure and Properties of Grey Cast Iron", AFS Transactions, 1981, 89: 205-214.
- [15] A.R. Kiani-Rashid, "The Influence of Aluminium and Heat Treatment Conditions on Austempered Ductile Irons", Ph.D., Thesis, University of Leeds, U.K., 2000.
- [16] A.R. Kiani-Rashid, D.V. Edmonds, "Oxidation Behaviour of Al-Alloyed Ductile Irons at Elevated Temperature", ECASIA,03, Estrel Convention Center, Berlin Germany, 5-10 October 2003, p. 319.

[17] علیرضا کیانی رشید، محمد علی گل‌عذار، "الگوی جدایش میکروسکوپی آلومینیم و سیلیسیم در ریز ساختار زمینه چدن‌ها با گرافیت کروی"، استقلال، نشریه مهندسی دانشگاه صنعتی اصفهان، سال ۲۲، شماره ۲، اسفند ۱۳۸۲، ص ۱۷۷-۱۸۸

جدول ها و اشکال

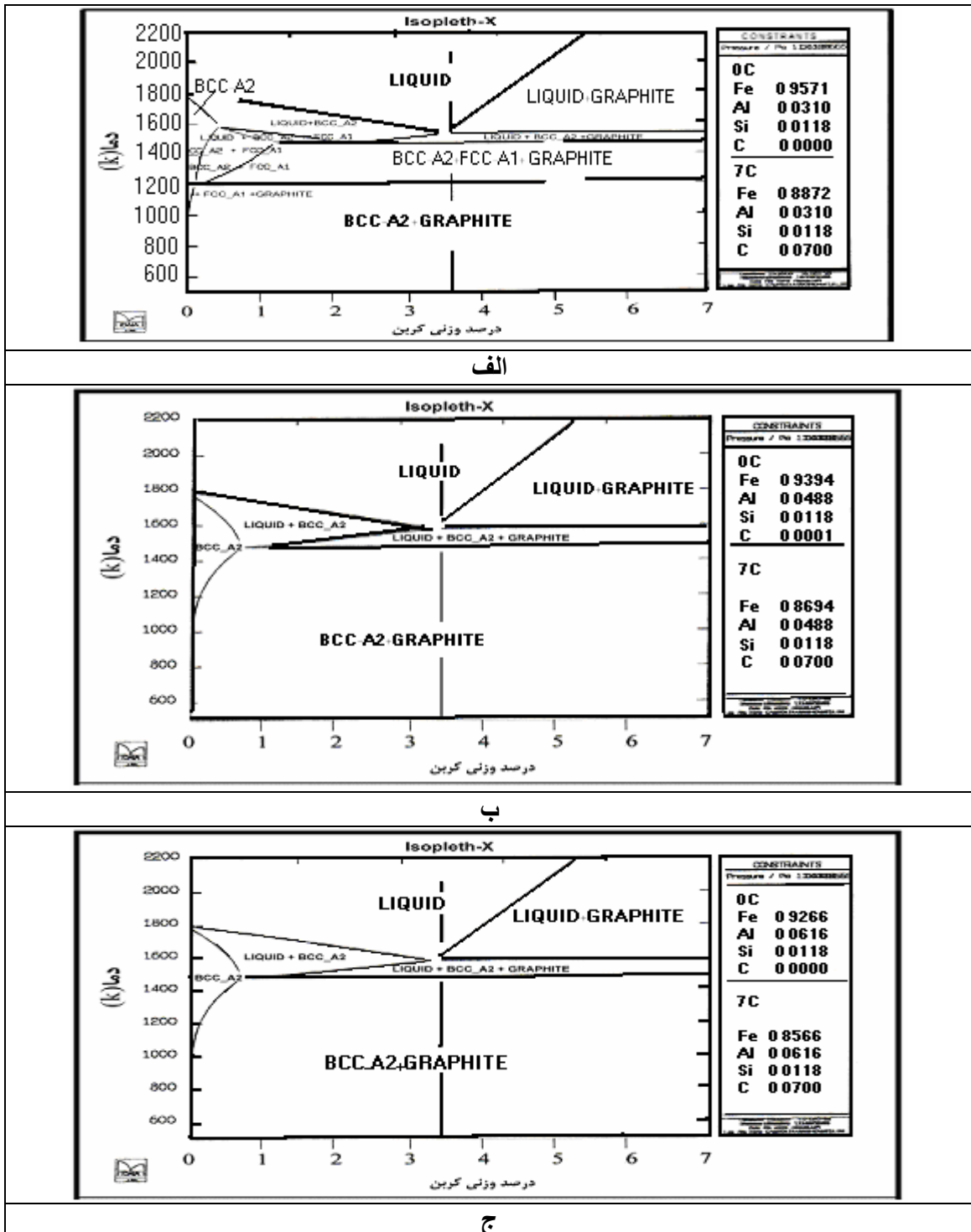
جدول ۱: ترکیب شیمیایی آلیاژها، درصد وزنی (wt%)

Aliaj	Al	C	Si	Ni	Mn	P	S	Mg	Fe
%۰/۰۱Al	۰/۰۱	۳/۷۱	۱/۰۸	۰/۰۳	۰/۰۹	<۰/۰۰۵	<۰/۰۰۵	۰/۰۵	باقیمانده
%۰/۴۸Al	۰/۴۸	۳/۶۸	۱/۰۶	۰/۰۴	۰/۰۶	<۰/۰۰۵	<۰/۰۰۵	۰/۰۵	باقیمانده
%۱/۷۱Al	۱/۷۱	۳/۵۸	۱/۱۸	۰/۰۴	۰/۰۷	<۰/۰۰۵	<۰/۰۰۵	۰/۰۵	باقیمانده
%۳/۱۰Al	۳/۱۰	۳/۴۸	۱/۲۴	۰/۰۵	۰/۱۰	<۰/۰۰۵	<۰/۰۰۵	۰/۰۶	باقیمانده
%۴/۸۸Al	۴/۸۸	۳/۴۴	۱/۲۲	۰/۰۵	۰/۱۰	<۰/۰۰۵	<۰/۰۰۵	۰/۰۵	باقیمانده
%۶/۱۶Al	۶/۱۶	۳/۲۵	۱/۲۵	۰/۰۷	۰/۱۰	<۰/۰۰۵	<۰/۰۰۵	۰/۰۶	باقیمانده



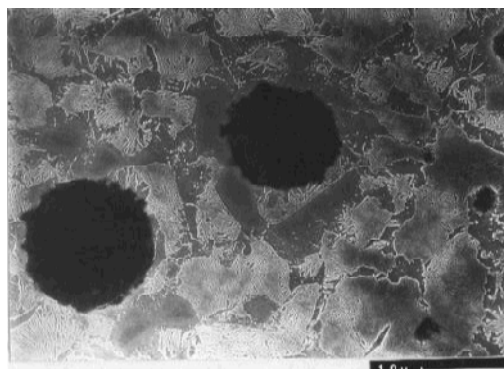
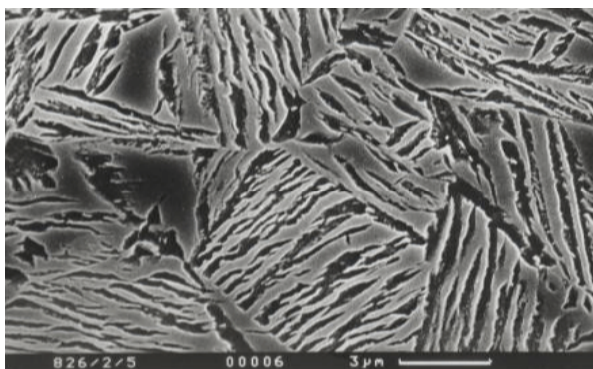
شکل ۱: نمودارهای فازی سیستم (Fe-C-Al-Si) برای آلیاژهای حاوی: الف) Al ۰.۰۰۱٪، ب) Al ۰.۰۴۸٪ و

ج) Al ۱.۷۱٪



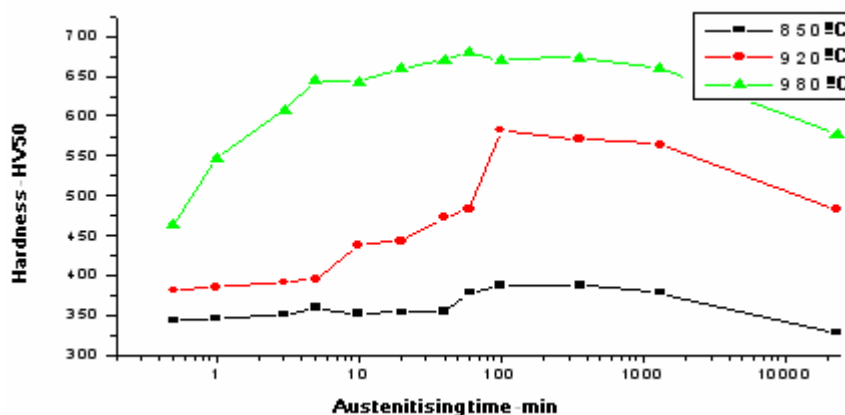
شکل ۲: نمودارهای فازی سیستم (Fe-C-Al-Si) برای آلیاژهای حاوی: الف) Al ۳/۱۰٪، ب) Al ۴/۸٪ و

ج) Al ۶/۱۶٪

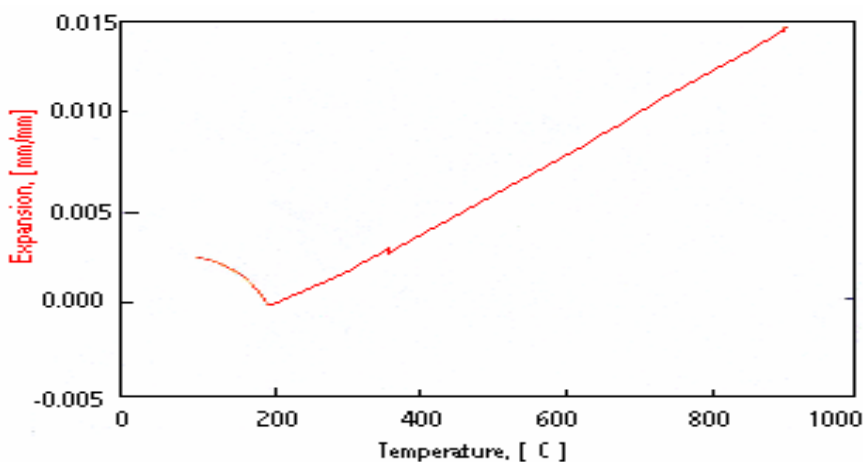


شکل ۴ ریزساختار میکروسکوپی SEM چدن حاوی Al 4/88 که در دمای 920°C به مدت ۹۰ دقیقه آستنیته و سپس در 350°C به مدت ۱۰۰ دقیقه آستمپر گردیده است. زمینه متشکل از لایه های فریت بینیتی و آستنیت باقیمانده پر کربن می باشد.

شکل ۳ ساختار میکروسکوپی SEM چدن نشکن حاوی Al 4/88 در حالت ریختگی، ریزساختار شامل کره های گرافیت در زمینه فریتی-پرلیتی می باشد. (محلول اچ : نایتال ۲٪)



شکل ۵ تغییرات سختی بر حسب زمان آستنیته کردن آلیاژ چدن حاوی Al 4/88 برای دماهای متفاوت آستنیته کردن



شکل ۶ نمونه ای از منحنی تغییرات درجه حرارت بر حسب انبساط از فرآیند عملیات حرارتی (دیلاتومتری) استفاده شده برای چدنهای داکتیل Al 4/88 اوستنیته شده در 920°C به مدت ۱۰ min و آستمپر شده در 350°C بعد از ۱ min

The Application of MTDATA and Thermo-Calc Simulation Softwares for Calculation of Fe-C-Al-Si System Phase Diagrams

A.R.Kiani-Rashid¹

Department of Materials, Faculty of Engineering
University of Sistan & Baluchestan
Zahedan, Iran
fkiana@yahoo.com

D.V.Edmonds²

Department of Materials
University of Leeds
Leeds, UK
d.v.edmonds@leeds.ac.uk

ABSTRACT

MTDATA and Thermo-Cal are powerful software packages for equilibrium and phase diagram calculations. They can be applied in phase transformation or process simulations depending the kind of databases they are connected to. The iron-carbon-aluminium-silicon (Fe-C-Al-Si) system phase diagrams have been calculated using MTDATA and Thermo-Cal softwares and using SGTE databases to determine the phases present over various temperature and composition ranges at equilibrium. It can be seen that the aluminium content modifies the iron-carbon equilibrium at this alloy composition. The austenite region decreases with increasing Al content, and for cast irons containing about 4.88%Al or more, there is no evidence of an austenite zone. Further results from heat treatment and dilatometry combined with optical and electron microscopy showed good agreement with the calculated phase diagrams for low and the high 6.16%Al addition. However, there was a difference with observations for the 4.88%Al. Experiments with an alloy containing this Al content have shown that the austenitic reaction does occur in this alloy, whereas there is no evidence that a γ -field is present in the corresponding phase diagram.

Keywords: Simulation, Aluminium, Phase Diagrams, Austenite (γ), Thermodynamic, Temperature

1) Ph.D. (Assistant Professor of Materials Engineering)

2) Ph.D. (Professor of Materials Engineering)

