



## Моделирование диффузионного насыщения углеродом аустенита, легированного хромом

А.Н. Венедиктов, У.С. Путилова, Р.А. Соколов, О.Ю. Теплоухов, Д.С.

Гультаев

ФГБОУ ВО «Тюменский индустриальный университет», Тюмень

**Аннотация:** Предсказание профилей концентрации углерода в зависимости от параметров цементации возможно с помощью математических моделей, большинство из которых показывают хорошие результаты для аустенита *Fe-C*, не затрагивая влияния легирующих элементов замещения. В работе описано моделирование с использованием метода конечных элементов процесса диффузионного насыщения аустенита системы *Fe-C-Cr* углеродом в ходе цементации на примере стали 15X с учетом влияния температуры, а также приводится практическое подтверждение модели. Для численного решения задачи использовали программу *COMSOL Multiphysics*.

Установлено, что для одностадийного режима цементации применяемая модель диффузии углерода в нелегированном аустените хорошо согласуется с экспериментальными данными для аустенита системы *Fe-C-Cr* стали 15X. Для двухстадийного процесса расчет концентрации углерода в поверхностном слое имеет несколько большее отклонение от экспериментальных данных, чем на большей глубине.

**Ключевые слова:** диффузия углерода, *COMSOL*, метод конечных, науглероживание, цементация, сталь, диффузия, массоперенос, легированный аустенит, моделирование, элементов.

### Введение

Цементация представляет собой процесс химико-термической обработки большой группы современных сталей, целью которого является диффузионное насыщение углеродом поверхностного слоя детали. Данная обработка проводится при высоких температурах порядка 950 °С, когда сталь находится в аустенитном состоянии. В этих условиях происходит поглощение углерода поверхностью и его перераспределение за счет диффузии в поверхностном слое образца. Результатом цементации являются увеличение твердости, прочности и износостойкости поверхности [1-3].

Таким образом, диффузионная подвижность углерода в аустенитной фазе во многом определяет процессы, протекающие при формировании цементованного слоя. Скорость диффузии углерода зависит от многих факторов, основными из которых являются: концентрации углерода,

---

температура и содержание легирующих элементов замещения, находящихся в твердом растворе [4-6].

В многочисленных работах [7-9] показано, что математические модели одно- и двухстадийного диффузионного насыщения углеродом поверхности в ходе цементации хорошо согласуются с экспериментальными данными, а численные методы расчета могут применяться для многофакторного расчета диффузии углерода в аустените - в частности, учитывать концентрацию углерода, степень легированности элементами замещения и температуру [10].

Как правило, для науглероживания применяются низкоуглеродистые и легированные стали с содержанием углерода, не превышающем 0,2 %. Применение сталей с большим содержанием углерода не имеет смысла, так как не обеспечит необходимую разницу свойств между поверхностью и сердцевиной деталей после последующей обработки.

При цементации широко применяются легированные хромом малоуглеродистые сплавы с целью увеличения прочности после термической обработки. Одной из самых распространенных для изготовления малонагруженных деталей является сталь 15X [11, 12].

Большинство моделей процесса цементации показывают хорошие результаты для аустенита  $Fe-C$ , не затрагивая влияния легирующих элементов замещения, поэтому разработка количественных моделей для легированных сталей является актуальной.

В связи с этим была сформулирована цель работы: выяснить применимость известных моделей процесса диффузионного насыщения легированного аустенита углеродом к системе  $Fe-C-Cr$  в процессе цементации на примере стали 15X с учетом влияния температуры и концентрации углерода.

### **Объект и методы исследования**

---

Образцы для исследования диффузии углерода представляли собой цилиндры диаметром 20 мм и длиной 30 мм из стали 15X. Химический состав стали определяли с помощью атомно-эмиссионного спектрометра ДФС-71.

Каждый образец подвергали цементации в течение различного промежутка времени (от 1 до 10 часов), причем цементацию более 5 часов проводили в двухстадийном режиме.

Углеродный потенциал в печи поддерживался на уровне 0,8-0,9 %. Именно такое содержания углерода в поверхностном слое цементованной стали считается оптимальным: более высокая концентрация углерода приводит к образованию большого количества карбидов по границам зерен, неблагоприятно сказывающихся на механических свойствах стали.

Формирование феррито-перлитной структуры поверхностного слоя в процессе цементации позволяет использовать металлографический метод для определения концентрации углерода. Анализируя долю перлита в структуре стали на различной глубине, пользуясь таблицей 1, определяли содержание углерода.

Таблица № 1

Зависимость типа структуры от содержания углерода

Доля перлита в структуре, %	Содержание углерода в стали, %
100	0,80
95	0,77
85	0,69
75	0,61
65	0,53
50	0,41
35	0,29
25	0,20
10	0,08
0	0,01

Для решения задачи диффузии использовали численные методы, в частности МКЭ, реализованный в программе *COMSOL Multiphysics*. За основу брали известные и наиболее хорошо зарекомендовавшие себя математические модели науглероживания стали.

### Диффузия углерода в аустените системы *Fe-C*

Процесс науглероживания можно разделить на три стадии. Первая – перенос активного углерода в атмосфере печи к поверхности детали. Вторая стадия описывает реакцию на поверхности заготовки. Окончательная, третья стадия заключается в диффузионном переносе углерода в твердом теле [6] от поверхности в глубь детали, в направлении меньшей концентрации. Такая модель описывает процесс цементации на макроскопическом уровне, не затрагивая межатомные взаимодействия.

Температура ( $T$ ) и концентрация углерода ( $c$ ) являются физическими величинами, играющими основную роль в процессе цементации. Такие переменные, как скорость переноса углерода к поверхности и химический состав атмосферы, имеют второстепенную роль [7].

При расчете переноса углерода во время науглероживания необходимо учитывать ряд физических параметров, определяющих кинетику процесса цементации: коэффициент диффузии углерода в материале ( $D$ ), зависящий от температуры, и коэффициент массопереноса ( $\beta$ ), определяющий поток из атмосферы через поверхность стали атомов углерода ( $j$ ) в процессе цементации.

Коэффициент массопереноса ( $\beta$ ) показывает скорость, с которой углерод поглощается поверхностью из атмосферы печи на начальной стадии цементации. Авторы работы показали [6], что его значение для сталей колеблется от  $1 \cdot 10^{-9}$  до  $2 \cdot 10^{-4}$  см/с при температурах от 800 до 1000 °С.

Величина, характеризующая науглероживающую способность цементующей атмосферы, называется углеродным потенциалом ( $c_p$ ) и

представляет собой процентное содержание углерода в стали, которая достигла термодинамического равновесия с атмосферой.

Согласно первому закону Фика, для трехмерной диффузии поток вещества прямо пропорционален градиенту концентрации:

$$j = -D\nabla c,$$

где  $D = D(T, c)$  - коэффициент диффузии, являющийся функцией концентрации  $c$  и температуры  $T$ . Комбинируя первый закон Фика с уравнением непрерывности, получим параболическое уравнение для нестационарного процесса диффузии углерода в  $\gamma$ -железе (аустените) [13]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(j) = \frac{\partial c}{\partial t} - \operatorname{div}(D(T, c)\nabla c) = 0.$$

Поскольку движущая сила диффузии углерода создается различием в потенциале между поверхностью и образцом, запишем следующее граничное условие 3-ого рода:

$$-D(T, c) \frac{\partial c}{\partial n} \Big|_{\Sigma} = \beta(T)(c - c_p),$$

где  $\beta$  - коэффициент массопереноса, определяющий скорость, с которой углерод поглощается поверхностью во время цементации (для малоуглеродистой стали примем его равным  $6 \cdot 10^{-7}$  см/с);  $c_p$  - содержание углерода в атмосфере печи;  $n$  - внутренняя нормаль к поверхности  $\Sigma$ .

Существует множество зависимостей для определения коэффициента диффузии углерода в аустените  $D(T, c)$  в соответствии с кинетическим и термодинамическим поведением углерода в  $\gamma$ -железе [8]. Систематические экспериментальные исследования коэффициента диффузии углерода в аустените  $Fe-C$  были проведены в работах [14, 15].

Созданию различных математических моделей для коэффициента диффузии углерода в аустените  $Fe-C$  посвящен целый ряд исследований [8, 9, 11], в которых было предложено значительное количество простых формул,

включающих эмпирические переменные, найденные с помощью различных экспериментальных методов [16-18].

Среди всех существующих на данный момент формул для расчета коэффициента диффузии углерода в аустените  $Fe-C$  следует особо отметить формулу, полученную *J. Agren* [19] и считающуюся одной из наиболее точных:

$$D(T, c) = 4,53 \cdot 10^{-7} \left( 1 + c(1 - c) \frac{8339,9}{T} \right) \times \exp \left( - \left( \frac{1}{T} - 2,221 \cdot 10^{-4} \right) (17767 - 26436c) \right), \quad (1)$$

где  $c$  – доля узлов подрешетки внедрения, занятая атомами углерода. Формула учитывает зависимость от концентрации углерода как предэкспоненциального фактора коэффициента диффузии углерода, так и эффективной энергии активации его диффузии.

Для моделирования диффузии в чистом аустените воспользуемся формулой из работы [7], являющейся небольшим преобразованием представленной выше зависимости:

$$D(T, c) = 0,000047 \exp(-1,6c - (37000 - 6600c) / 1,987T). \quad (2)$$

Сложнее обстоит дело с аустенитом, легированным элементами замещения, в частности  $Cr$ . Имеется несколько работ, авторы которых предпринимали попытки изменить формулу (1) для учета дополнительного эффекта легирования элементами замещения [11, 12]. Однако предлагаемые модифицированные формулы учитывают влияние легирующих элементов замещения только на термодинамический фактор коэффициента диффузии углерода, оставляя без внимания эффективную энергию активации диффузии углерода.

В основном, попытки использования учета эффективной энергии активации приводят к сложным эмпирическим зависимостям с трудно

подбираемыми коэффициентами, что затрудняет их использование. Для численного моделирования диффузии углерода в аустените  $Fe-C-Cr$  будем отталкиваться от одной из широко распространенной формулы для нелегированного аустенита (2).

### Результаты и обсуждения

Существует два технологических процесса цементации. Использование процесса науглероживания в одну стадию позволяет получить распределение углерода и соответствующее ему распределение твердости, быстро убывающее к сердцевине. При удалении шлифовкой поверхностного слоя определенной толщины, поверхностная твердость может оказаться ниже, чем требуется. Процесс цементации в две стадии позволяет получить распределение углерода с максимумом на некоторой заданной глубине. Дальнейшая механическая обработка удалит более обедненный углеродом слой, и поверхность приобретет необходимые свойства.

Используя описанные выше технологические решения, была построена модель диффузии углерода при цементации низколегированной стали и найдено распределение углерода при одно- и двухстадийном технологическом процессе цементации образца. В дальнейшем рассчитанные зависимости сравнивали с данными, полученными экспериментально.

Модель процесса науглероживания представляла из себя печь, нагретую до температуры  $955\text{ }^{\circ}\text{C}$ , в которую помещался образец, нагретый до этой же температуры. Процессы, происходящие при нагревании, не рассматривались, так как цементация зависит только от микроструктуры материала непосредственно в ходе насыщения углеродом.

Таким образом, до начала процесса цементации образец состоял из 100 % аустенита с содержанием углерода 0,15 %. Содержание углерода в

атмосфере печи составляло 0,8 % и не менялось на протяжении всей первой стадии цементации, длящейся 5 часов.

Вторая стадия цементации начиналась сразу после первой и длилась еще 5 часов при несколько меньшей температуре 855 °С и углеродным потенциалом 0,3 %.

В рассматриваемой модели необходимо решить задачу массо- и теплопереноса в твердых телах. Программная среда *COMSOL Multiphysics* позволила связать два этих процесса [20]. В силу осевой симметрии задача решалась в двумерной постановке.

На рис. 1 а показано распределение углерода в поверхностном слое образца после окончания первой фазы науглероживания в течение 5 часов, а соответствующий профиль содержания углерода показан на рис. 2. На рис. 1 б можно видеть расчетное распределение углерода в образце после 10 часов цементации, то есть окончания второй фазы.

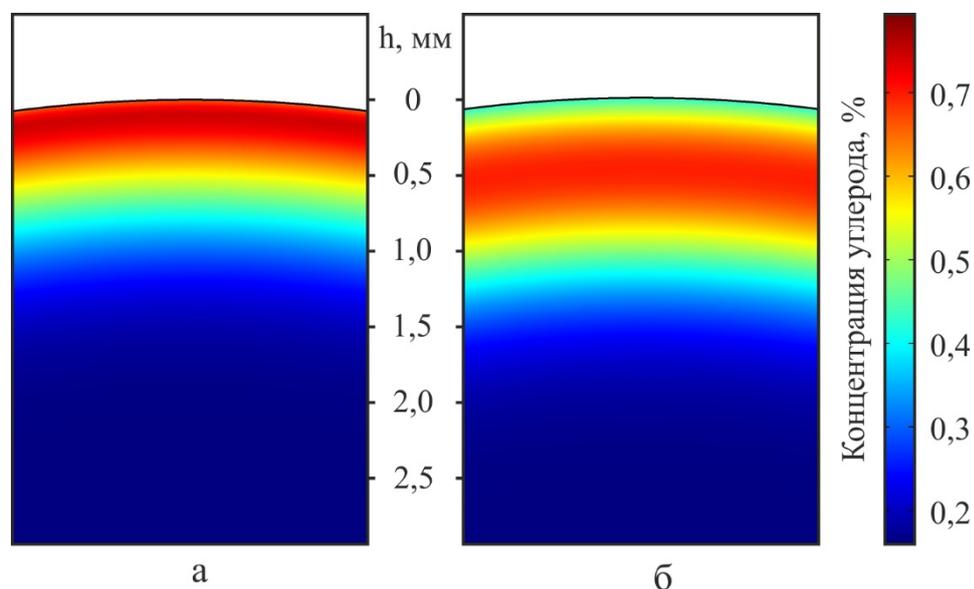


Рис. 1. – Распределение углерода в поверхностном слое образца после 5 часов (а) и 10 часов (б) одно- и двухстадийного процесса цементации соответственно

На графике (рис. 2) можно наблюдать плавное снижение концентрации углерода с глубиной. Кривая изменяется в соответствии с законом диффузии, что подтверждает диффузионную природу процесса цементации и правомерность использования законов диффузии. Хорошее согласование с экспериментальными данными наблюдается по всей толщине диффузионного слоя с корреляцией 0,93.

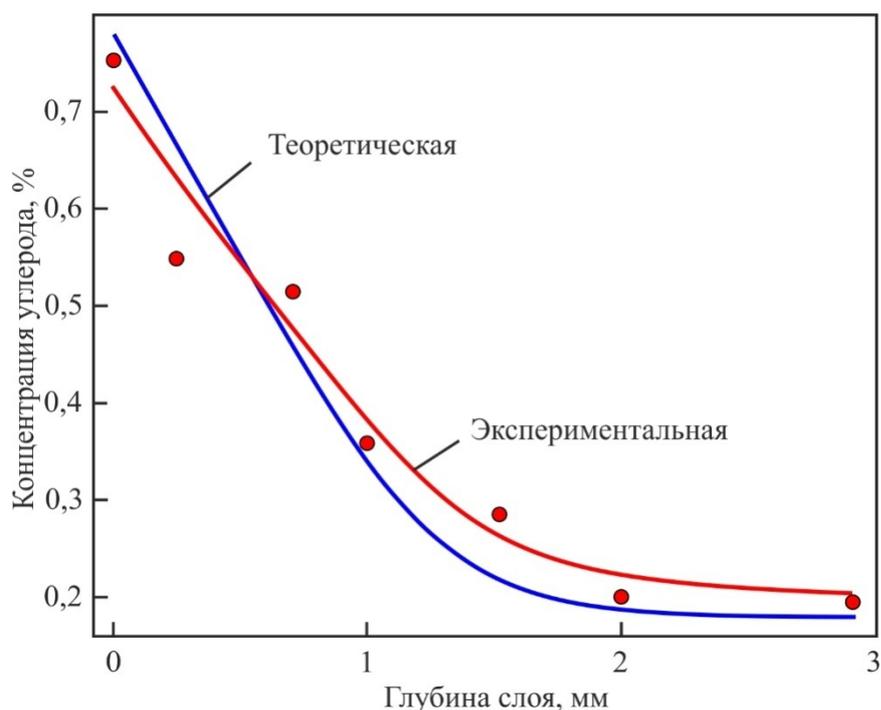


Рис. 2. – Концентрация углерода в цементованном слое после 5 часов выдержки: расчетная и экспериментальная кривые.

Профиль содержания углерода после второй фазы показан на рис. 3.

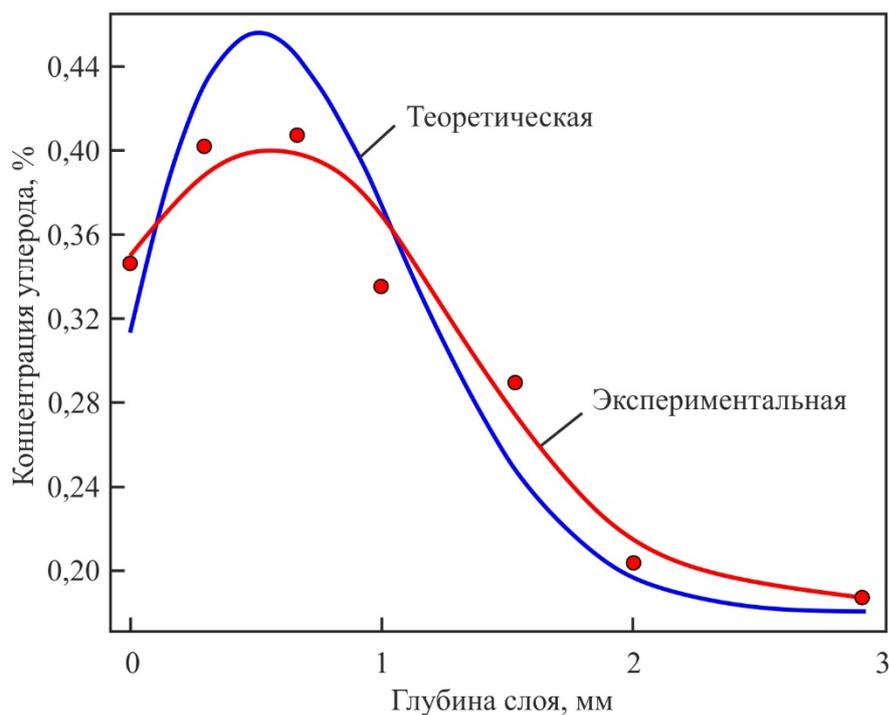


Рис. 3. – Концентрация углерода в цементованном слое после 10 часов выдержки: расчетная и экспериментальная кривые

Из графика видно, что максимум концентрации углерода приходится на глубину 0,5 мм. С практической точки зрения это означает, что можно будет в дальнейшем провести механическую обработку поверхности, не затронув зону максимальной науглероженности. Как следствие этого, механические характеристики поверхности останутся не сниженными [9].

Вместе с тем стоит отметить, что используемая модель дает значительное занижение концентрации углерода в поверхностном слое на глубине 0,5 мм, однако экспериментальный и теоретический профили имеют одинаковый вид, и максимумы у них находятся на одинаковом расстоянии от поверхности. Очевидно, это является следствием влияния хрома и использования модели, не учитывающей содержание легирующих элементов, но для практического использования это не является существенно значимым.

## Выводы

В ходе работы был смоделирован процесс цементации образца из стали 15X и рассмотрено два решения для одно и двухстадийного процесса цементации по результатам которого можно сделать следующие выводы.

С некоторыми корректировками модель диффузии углерода для нелегированного аустенита может быть использована для аустенита системы *Fe-C-Cr* стали 15X.

Для двухстадийного процесса расчет концентрации углерода в поверхностном слое имеет более существенное отклонение от экспериментальных данных, чем на большей глубине. Это необходимо учитывать при теоретическом построении профилей содержания углерода в поверхностном слое сталей с легирующими элементами замещения.

Применяемая в работе модель может быть использована для расчета распределения углерода по толщине поверхностного слоя в малоуглеродистой стали с содержанием хрома до 1,5 %, а также для изучения фазовых превращений, происходящих с аустенитом при дальнейшей закалке.

### Литература

1. Венедиктов А.Н., Овсянников В.Е., Венедиктов Н.Л. Определение эффективного коэффициента диффузии вакансий в ультрадисперсном электролитическом железе и его влияния на режимы термической обработки // Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты). 2019. Т. 21. № 3. С. 106-114.

2. Васильев В.И., Овсянников В.Е., Некрасов Р.Ю., Темпель Ю.А. Влияние режимов диффузионного поверхностного легирования на толщину упрочненного слоя деталей транспортно-технологических машин из серого чугуна // СТИН. 2018. № 5. С. 33-35.

3. Какурин Ю.Б., Какурина Н.А., Захаров А.Г. Методика оценки величины коэффициента зернограничной диффузии примеси в металлах на



основе численного решения задачи Фишера // Инженерный вестник Дона. 2013. № 3. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2013/1811](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2013/1811).

4. Turpin T., Dulcy J., Gantois M. Carbon disunion and phase transformations during gas carburizing of high alloyed stainless steels: experimental study and theoretical modeling // Metallurgical and Materials Transactions A. 2005. № 36.P. 2751-2759.

5. Бойко Н.И., Фисенко К.С. Исследование качества поверхности наплавленного металла цилиндрической детали, обработанной в горячем состоянии // Инженерный вестник Дона. 2012. № 2. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2012/746](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2012/746).

6. Гилукьянов Е.Л., Кисленков В.В., Провоторов С.П. Вычисление профиля концентрации углерода при цементации сталей в контролируемой атмосфере природного газа // Metallovedenie i termicheskaya obrabotka metallov. 1981. № 8. С. 9-11.

7. Stickels C.A. Analytical models for the gas carburizing process // Metallurgical and Materials Transactions B. 1989. Volume 20. pp. 535-546.

8. Смирнов А.А. Теория диффузии в сплавах внедрения. К.: НауковаДумка, 1982. 168с.

9. Trivedi R. Effect of Concentration-dependent Diffusion Coefficient on the Migration of Interphase Boundaries // J. Appl. Phys. 1967. Volume 38. pp. 3569-3576.

10. Венедиктов А.Н., Корешкова Е.В., Кулемина А.А. Моделирование диффузионного насыщения аустенита углеродом с учетом температуры в процессе цементации // Инженерный вестник Дона. 2019. № 6. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/N6y2019/6019](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/N6y2019/6019).

11. Thibaux P. Carbon Diffusion Measurement in Austenite in the Temperature Range 500 °C to 900°C // Metal. Mater. Trans. A. 2007. Volume 38. pp. 1169-1176.

---

12. Lee S.-J. Carbon Diffusivity in Multi-component Austenite // *Scr. Mater.* 2011. Volume 64. pp. 805-808.
13. Блантер М.Е. Диффузия углерода в аустените // *ЖТФ.* 1947. Т. 17. С. 1331-1339.
14. Wells C. Diffusion Coefficient of Carbon in Austenite // *Trans. Met. Soc. AIME.* 1950. Volume 188. pp. 553-560.
15. Smith R.P. The Diffusivity of Carbon in Iron by the Steady-state Method // *Acta Metall.* 1953. Volume 1. pp. 578-587.
16. Collin R. A Mathematical Model for Predicting Carbon Concentration Profiles of Gas-carburized Steel // *J. Iron and Steel Inst.* 1972. Volume 210. № 10. pp. 785-789.
17. Goldstein J.I. Diffusion Modeling of the Carburization Process // *Metall. Trans. A.* 1978. Volume 9A. pp. 1515-1525.
18. Tibbetts G.G. Diffusivity of Carbon in Iron and Steels at High Temperatures // *J. Appl. Phys.* 1980. Volume 51. № 9. pp. 4813-4816.
19. Agren J. A Revised Expression for the Diffusivity of Carbon in Binary Fe-C Austenite // *Scr. Metall.* 1986. Volume 20. pp. 1507-1510.
20. Lucia Panizzi. On a mathematical model for case hardening of steel. Berlin, 2010. 96 p.

### References

1. Venediktov A.N., Ovsyannikov V.E., Venediktov N.L. *Obrabotka metallov (tekhnologiya, oborudovanie, instrumenty).* 2019. Т. 21. № 3. pp. 106-114.
  2. Vasil'ev V.I., Ovsyannikov V.E., Nekrasov R.Yu., Tempel' Yu.A. *STIN.* 2018. № 5. pp. 33-35.
  3. Kakurin Yu.B., Kakurina N.A., Zakharov A.G. *Inzenernyj vestnik Dona.* 2013. № 3. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2013/1811](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n3y2013/1811).
-



4. Turpin T., Dulcy J., Gantois M. Metallurgical and Materials Transactions A. 2005. № 36. pp. 2751-2759.
5. Boyko N.I., Fisenko K.S. Inzenernyj vestnik Dona. 2012. № 2. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2012/746](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/n2y2012/746).
6. Giluk'yanov E.L., Kislenkov V.V., Provotorov S.P. Metallovedenie i termicheskaya obrabotka metallov. 1981. № 8. pp. 9-11.
7. Stickels C.A. Metallurgical and Materials Transactions B. 1989. Volume 20. pp. 535-546.
8. Smirnov A.A. Teoriya diffuzii v splavakh nedreniya [Diffusion theory in implant alloys]. K.: Naukova Dumka, 1982. 168 p.
9. Trivedi R. J. Appl. Phys. 1967. Volume 38. pp. 3569-3576.
10. Venediktov A.N., Koreshkova E.V., Kulemina A.A. Inzenernyj vestnik Dona. 2019. № 6. URL: [ivdon.ru/ru/magazine/archive/N6y2019/6019](http://ivdon.ru/ru/magazine/archive/N6y2019/6019).
11. Thibaux P. Metal. Mater. Trans. A. 2007. Volume 38. pp. 1169-1176.
12. Lee S.-J. Scr. Mater. 2011. Volume 64. pp. 805-808.
13. Blanter M.E. ZhTF. 1947. T. 17. pp. 1331-1339.
14. Wells C. Trans. Met. Soc. AIME. 1950. Volume 188. pp. 553-560.
15. Smith R.P. Acta Metall. 1953. Volume 1. pp. 578-587.
16. Collin R. J. Iron and Steel Inst. 1972. Volume 210. № 10. pp. 785-789.
17. Goldstein J.I. Metall. Trans. A. 1978. Volume 9A. pp. 1515-1525.
18. Tibbetts G.G. J. Appl. Phys. 1980. Volume 51. № 9. pp. 4813-4816.
19. Agren J. Scr. Metall. 1986. Volume 20. pp. 1507-1510.
20. Lucia Panizzi. On a mathematical model for case hardening of steel. Berlin, 2010. 96 p.