

文章编号:1671-6833(2020)02-0056-05

18CrNiMo7-6 钢渗碳仿真扩散系数模型的研究

秦盛伟, 张玉芳, 张 棒

(郑州大学 抗疲劳制造技术河南工程实验室,河南 郑州 450001)

摘 要: 基于 DEFORM-HT 软件,对 18CrNiMo7-6 钢的气体渗碳工艺进行数值模拟;研究了两种不同的扩散系数模型对合金钢渗碳过程的影响,即考虑温度、碳原子的模型 $D(T,C)$ 和考虑温度、合金元素、碳原子的模型 $D(T,M,C)$;并对 3 种不同渗碳层深度的渗碳工艺进行数值仿真以及试验验证。用机械剥层法测量 3 种渗碳工艺的碳含量沿深度的分布,并与仿真结果进行对比,发现采用 $D(T,M,C)$ 模型的仿真精确度更高;但当渗层深度达到 4 mm 时,表层碳含量的试验结果与模拟相差较大,这是由于 Cr、Mo 等元素在长时间渗碳过程中与碳原子结合形成大量的碳化物,进而降低了碳原子的扩散系数,同时也导致试样的表层碳含量达到 1.0%,高于渗碳工艺最后一段的环境碳势 0.8%。
关键词: DEFORM-HT 软件; 18CrNiMo7-6 钢; 渗碳仿真; 扩散系数; 合金元素; 碳化物
中图分类号: TG156.8+1 **文献标志码:** A **doi:**10.13705/j.issn.1671-6833.2020.03.006

0 引言

在工业 4.0 技术和智能制造引领制造业的背景下,随着计算机数值计算方法的引入和快速发展,热处理的数值模拟大大地提高了人们对热处理过程的控制能力和理解水平^[1-2]。国内外陆续开发出能够进行热处理模拟的有限元软件,比如专用热处理模拟软件 DEFORM-HT^[3]、COSMAP、SYSWELD-HT 等;另外通过在大型通用有限元软件 ABAQUS^[4]、ANSYS、MARC 等添加用户自定义程序,实现热处理过程的理论数学模型,也成为了重要的热处理模拟方法。渗碳工艺是现代工业生产中普遍运用的一种表面硬化工艺,例如轴类零件和齿轮等工件的硬化^[5]。笔者采用 DEFORM 软件对 18CrNiMo7-6 的渗碳工艺进行数值模拟。

扩散系数和传递系数是控制渗碳过程的两大关键因素,其数学模型的选择直接决定着渗碳工艺数值模拟的精确度。多数学者对传递系数大多采用与温度有关的函数模型,并给出了不同的经验公式^[6-7]。扩散系数反映物体内部碳原子扩散速度的快慢,其影响因素有温度、晶体结构、碳浓度、合金元素等,学者们基于不同影响因素提出了各自的数学模型。最早的经典理论认为扩散系数

是温度的函数 $D(T)$,A.G.Guy 和 J.J.Hren^[8] 在“物理冶金学原理”中给出了模型中的扩散激活能等参数。但经典的扩散理论是建立在稀“溶液”的基础上的,而实际的渗碳过程中,碳的质量分数是达到甚至超过饱和值的,所以在第二届国际热处理大会上,C.Borgianni^[9]对扩散理论进行了修正,提出了与温度和碳含量均有关的扩散系数模型 $D(T,C)$,并指出碳的扩散系数随含碳量的增大而增大。随着研究的深入,多数学者提出了基于此模型的经验公式。王顺兴^[10]设计了一组渗碳工艺,根据一维气体渗碳数学模型,由误差最小原则对比实验碳梯度和模拟值结果,计算和确定了扩散系数和传递系数模型的参数。张星^[11]以界限含碳量为判断标准,比较了两种扩散数学模型 $D(T)$ 和 $D(T,C)$ 对一种渗碳工艺的模拟精度,得出后者的吻合度更高。然而在严格意义上,与温度和含碳量有关的扩散系数模型只适用于碳钢,因为合金元素会影响碳原子的传递和扩散过程^[12]。Rowan 等^[13]研究了 4 种不同化学成分合金钢在相同的渗碳工艺下的碳梯度,发现碳化物元素 Cr、Mo 等会降低碳的扩散系数,增大环境碳势与工件表面的传递速度,而使奥氏体稳定的元素 Mn、Ni 等会增大扩散系数,降低传递

系数。Lee 等^[14-15]将前人的扩散模型进行了总结对比,采用一个判断实验数据与经验公式结果吻合程度的评判参数,提出了考虑微量元素 M 的扩散模型 $D(T,M,C)$ 。

笔者采用 2 种扩散系数模型 $D(T,C)$ 和 $D(T,M,C)$ 对 3 种不同渗碳工艺(渗层深度分别为 1、2、4 mm)进行数值模拟。重点考虑合金元素对渗碳过程中扩散系数以及渗层中碳浓度分布的影响。采用机械剥层法测得分别经过 3 种渗碳工艺的试样据表面不同深度的碳含量分布,并与仿真结果对比以进行试验验证。

1 试验材料与方法

1.1 试验材料

试验材料为 18CrNiMo7-6 钢是一种常用的渗碳齿轮钢。经 DF-100 型光电直读光谱仪测得其化学成分如表 1 所示,化学成分符合标准。材料的原始组织为调质态,经调质预处理的材料具有良好的综合力学性能,且组织均匀稳定。

表 1 18CrNiMo7-6 的化学成分的质量分数

Table 1 Chemical composition of 18CrNiMo7-6 steel

%								
C	Si	Mn	S	Al	Cr	Ni	Mo	Fe
0.21	0.34	0.72	0.004	0.04	1.58	1.4	0.26	Bal.

1.2 渗碳工艺的基本理论

渗碳工艺是一个随时间变化的过程,常选用菲克第二定律作为其扩散方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right), \tag{1}$$

式中: C 为含碳量,%; t 为扩散时间,s; x 为沿扩散方向的距离,mm; D 为碳原子在奥氏体中的扩散系数,mm²/s。

初始条件:

$$C|_{t=0} = C_0, \tag{2}$$

式中: C_0 为初始时刻工件的碳浓度分布,%。本研究中 18CrNiMo7-6 的初始碳含量为 0.21%。

外边界条件:

$$-D \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{x=0} = \beta (C_\infty - C_s), \tag{3}$$

式中: C_∞ 为环境碳势,%; C_s 为工件表面的含碳量,%; β 为碳从气相流入固相的传递系数,mm/s,反映为工件表面碳原子的传递速度,常选为与温度有关的函数:

$$\beta = \beta_0 \cdot \exp \left(- \frac{E}{RT} \right), \tag{4}$$

式中: β_0 为常值; E 为激活能,kJ/mol; T 为温度,K。根据文献[7],分别取 $\beta_0 = 0.003\,47\text{ mm/s}$ 、 $E = 34\text{ kJ/mol}$; R 为 $8.314\text{ J/(mol}\cdot\text{K)}$ 。

1.3 渗碳扩散系数的数学模型

模型 1 考虑温度和碳原子的扩散系数模型 $D(T,C)$ ^[16-17]:

$$D(T,C) = D_{0.4} \exp \left(- \frac{Q}{RT} \right) \exp(-B_c(0.4 - C)), \tag{5}$$

式中: Q 为碳原子的扩散激活能, $Q = 141\text{ kJ/mol}$; $D_{0.4}$ 为碳的质量分数为 0.4% 时的扩散常数,决定了渗碳层碳浓度的大小和分布, $D_{0.4} = 25.5\text{ mm}^2/\text{s}$; B_c 为反映碳原子对碳浓度分布规律影响大小的常数,主要对含碳量沿深度分布的斜率产生影响, $B_c = 0.8$ 。

模型 2 考虑温度、碳原子和合金元素的扩散系数模型 $D(T,M,C)$ ^[14]:

$$D(T,M,C) = (0.146 - 0.036\,C(1 - 1.075\,Cr) + \sum k_1 M) \cdot \exp \left(- \frac{144.3 - 15.0C + 0.37C^2 + \sum k_2 M}{RT} \right), \tag{6}$$

式中: M 为合金元素的质量分数,%; k_1 、 k_2 为合金元素的合金参数,其取值如表 2 所示。

表 2 扩散系数模型的合金元素和及其合金参数

Table 2 Alloying parameters for the diffusivity coefficient and the activation energy of carbon in austenite

合金参数	Mn	Si	Ni	Cr	Mo	Al
k_1	-0.031 5	0.050 9	-0.008 5	0.0*	0.303 1	-0.052 0
k_2	-4.366 3	4.050 7	-1.240 7	7.726 0	12.126 6	-6.788 6

* 在前面的指数部分已考虑。

与模型 1 相比,模型 2 增加了合金元素对碳原子扩散的影响。假定渗碳温度为 915 ℃,两个模型在不同碳含量处的扩散系数分布如图 1 所示。可以看出,相同碳含量下,模型 2 明显低于模型 1 的扩散系数。

2 仿真分析

2.1 仿真模型的建立

采用 DEFORM-HT 软件模拟圆棒试样的渗碳工艺。圆棒为轴对称几何图形,因此建立二维模型,如图 2 所示。以 AB 为对称轴,建立半径为 8.36 mm、长为 2 mm 的二维无限长的几何模型。采用均匀的四边形网格,网格数为 7 000 (已达收敛性要求),在 CD 边施加温度和渗碳

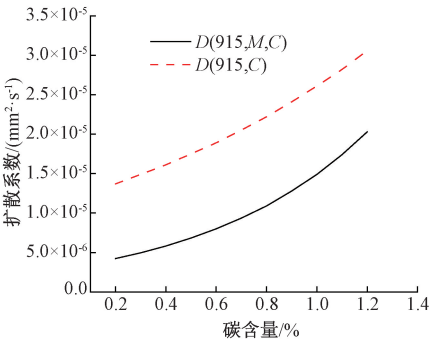


图 1 两种扩散模型的扩散系数对比

Figure 1 Comparison of diffusion coefficients between the two diffusion models

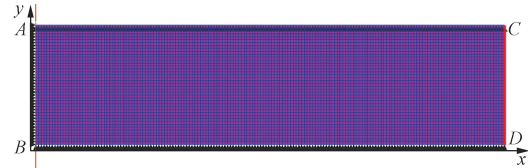


图 2 圆棒试样的几何模型

Figure 2 Finite element model of cylindrical specimen

表 3 3 种渗层深度的渗碳工艺

Table 3 Carburizing process of three kinds of carburized layers

段号	L=1 mm			L=2 mm			L=4 mm		
	段时间/s	温度/℃	碳势/%	段时间/s	温度/℃	碳势/%	段时间/s	温度/℃	碳势/%
1	300	915	0.6	3 600	850	0.6	7 200	860	0.6
2	1 800	915	0.6	300	920	1.15	61 200	925	1.2
3	600	915	1.1	21 000	920	1.15	25 200	925	1.1
4	9 600	915	1.1	300	900	0.95	36 000	925	0.8
5	300	890	0.9	10 800	900	0.95	7 200	830	0.8
6	4 200	890	0.9	300	840	0.8	—	—	—
7	300	830	0.8	2 400	840	0.8	—	—	—
8	3 000	830	0.8	—	—	—	—	—	—

3 实验与仿真结果及其分析

3.1 实验结果

为了测量碳含量沿深度的分布,用 NJFY-CS100 A 碳硫分析仪测量渗碳试样距表面不同深度的含碳量。每个参数测量 3 次取平均值,3 种渗碳工艺的测量结果如图 3 所示。碳硫分析仪是以化学燃烧法为原理,要求试样的质量在 0.1 g 至 0.4 g 之间,取 3 次测量结果的平均值作为不同深度的碳含量。由于渗碳油淬处理后的试样硬度较高,为了降低硬度,改善切削加工性,故对试样进行完全退火处理。采用机械剥层方法制备不同深度处的材料。用车床使用 0.1 mm 的进给量切削并收集铁屑,由于去除的铁屑质量较小,为了便于收集,可把磁铁放置在车刀附近,进而把切削下来的铁屑吸附在磁铁上。

如图 3 中的实验结果所示,18CrNiMo7-6 圆棒

碳势的边界条件,在 AB 边施加 x 方向的力边界条件,AC 和 BD 边施加 y 方向的力边界条件(灰色三角形)。

2.2 仿真的工艺参数

笔者使用气体渗碳法对试样进行渗碳处理。采用氮-甲醇气氛,在 AICHELIN(爱协林)4/1 型箱式多用炉生产线进行渗碳。富化气为丙烷,渗碳过程由电脑程序全自动控制,控制系统为可视化多功操作系统 TP-1200,碳势测量和控制系统采用程序化的 MTK-1000,控温精度≤1℃,碳势均匀度≤±0.05%,碳势控制精度±0.05%。

为了研究合金元素对扩散系数以及碳浓度梯度的影响规律,对渗碳层深度 L=1、2、4 mm 的渗碳工艺进行数值模拟和试验验证,且分别称为工艺 1、工艺 2 和工艺 3。渗碳试样在工厂中随炉渗碳处理,其渗碳工艺参数如表 3 所示。

试样在经过 3 种渗碳工艺后,均在圆棒表层一段距离内形成渗碳层,碳含量从表面的最高值逐渐降低,直至心部的基体碳含量;经过工艺 1 以及工艺 2 后,圆棒的最高碳含量达到 0.8%,渗碳层深度分别为 1 mm 和 2 mm;而经过工艺 3 处理后的圆棒,渗碳层深度达到 4 mm,表层最高碳含量达到 1.0%,明显高于工艺 1 与工艺 2。

3.2 仿真与实验结果的对比与分析

对上述 3 种渗碳工艺分别采用上文 1.3 中的模型 1 和模型 2 进行仿真,将其结果与实验结果对比,如图 3 所示。可以看出,对于 3 种渗碳工艺而言,模型 2 的仿真结果与实验结果的吻合度明显比模型 1 高;特别对于渗碳工艺 1 以及工艺 2,碳梯度的仿真结果与实测结果近乎完全吻合。距表面相同距离处,采用模型 1 模拟的含碳量均显著高于模型 2 的仿真结果。这说明合金元素会影响碳原子的扩散过程。碳原子在扩散过程中,一

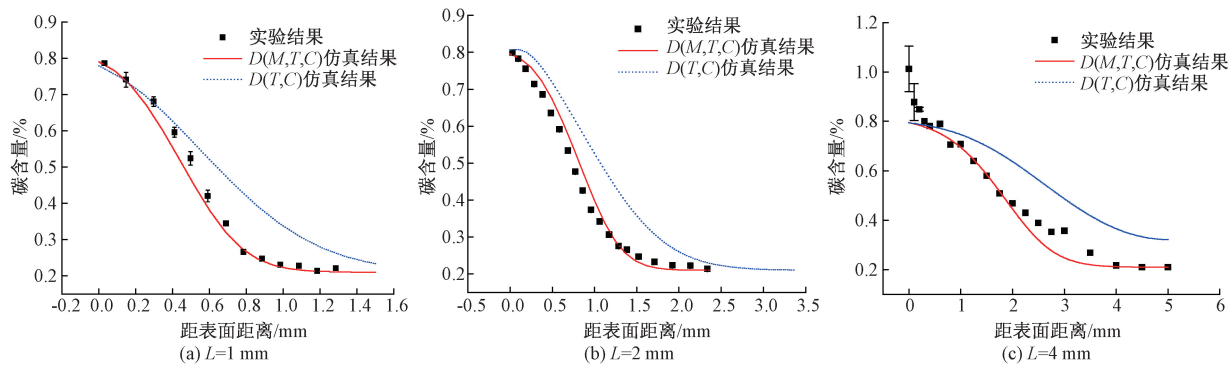


图 3 3 种渗层深度的碳含量实验和模拟结果对比

Figure 3 Comparison between experimental and simulated results of carbon content of three kinds of carburized layers

部分以原子状态进入固溶体中,另一部分则与碳化物元素 Cr、M 等形成置换式合金渗碳体,如 $(\text{Fe,Cr})_2\text{C}_6$ 、 $(\text{Fe,Cr,Mo})_3\text{C}$ 和 $(\text{Fe,Cr})_7\text{C}_3$ 等,进而阻碍碳原子的扩散^[18]。另外,对于非碳化物形成元素 Co、Ni 等,一般以原子状态存在于奥氏体从而造成晶格畸变,反而会提高碳原子在奥氏体中的扩散速度^[19]。因此,对于扩散系数的数学模型的选择,钢中的合金元素必须作为影响因素考虑进去^[20]。

如图 3(c) 所示,采用模型 2 时,深度大于 0.7 mm 部分的碳含量仿真结果与实验测量值较吻合,而渗层深度小于 0.7 mm 部分相差较远。采用模型 2 的仿真结果显示,碳含量最高点位于样品表层处且碳浓度为 0.8%,远小于实验值 1.0%。这是由于 DEFORM-HT 软件无法识别并形成碳化物,而 4 mm 渗碳工艺的最后一段环境碳势为 0.8%,直接导致模拟过程中碳原子从表层一直向内扩散而不形成碳化物。但通过样品的 SEM 研究发现,表层高碳含量处生成了大量碳化物,如 $(\text{Fe,Cr})_7\text{C}_3$ 、 $(\text{Fe,Cr})_3\text{C}$ 甚至 Fe_3C 等,如图 4 所示。因为 4 mm 渗层的渗碳工艺的前两段环境碳势分别达到了 1.2%、1.1%,时长分别为 17 h、7 h,这远远高于工艺 1 及工艺 2 中的渗碳时间,长时间的高碳势渗碳使材料表面的碳含量超过了 18CrNiMo7-6 钢在该温度下的饱和碳浓度。并且由于碳化物元素 Cr、Mo 等合金元素的存在,在渗碳过程中阻碍了碳原子的扩散,使试样表层形成大量的碳化物,造成了样品表层碳浓度的实验结果显著高于仿真结果。而对于工艺 1 与工艺 2,由于渗碳时间不够长,大大减少了样品表层形成的碳化物,使实验结果与仿真结果较吻合。

可以发现采用模型 1 得到的碳浓度梯度均高于实测值,如图 3 所示。这说明在不考虑合金元素对碳扩散影响的情况下,碳原子扩散得更快,从

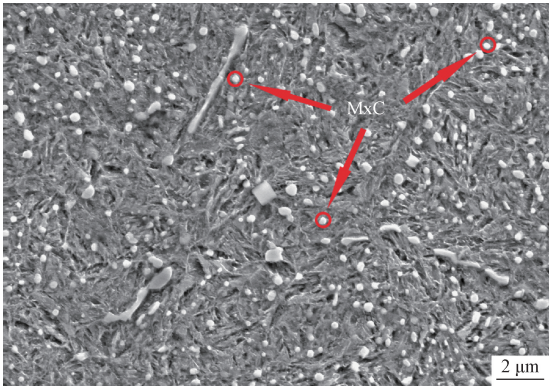


图 4 4 mm 渗层的表层碳化物分布

Figure 4 The surface carbide distribution of 4 mm carburized layer

而使位于渗层相同深度处的碳浓度显著升高。但实际上,合金元素会对渗碳过程中碳原子的扩散产生影响,这种影响既包含了 Cr、Mo 等元素对碳原子扩散的阻碍作用,又有 Mn、Ni 等对碳原子扩散的促进作用,而合金元素的阻碍作用是高于促进作用的,这正好符合上文 1.3 中 $D(T,M,C)$ 扩散系数模型中合金参数的正负取值,如表 2 所示。可见,相较于模型 1,模型 2 更加适合 18CrNiMo7-6 合金钢的渗碳过程仿真。当渗碳工艺达到一定条件时,如高碳势且长时间渗碳(如工艺 3)时,合金元素对碳原子的阻碍作用将更加明显,即大量的碳化物在渗碳层表面形成。由于碳化物的含碳量远高于 0.8%,使得渗层表面的碳含量明显上升,如图 3(c) 所示。可见,对于综合考虑了合金元素、碳含量、温度等影响因素的扩散系数模型 $D(T,M,C)$,其并非适用于合金钢的所有渗碳工艺仿真,在实际工程使用时仍要注意。

4 结论

(1)与碳钢不同,对合金钢渗碳工艺的仿真必须考虑合金元素对碳原子扩散的影响。相比于模型 $D(T,C)$,采用考虑合金元素的扩散系数模

型 $D(T, M, C)$, 使渗碳仿真结果与实验结果吻合度较高。但模型 $D(T, M, C)$ 并非适用于合金钢的所有渗碳工艺仿真, 其使用仍有一定的局限性。

(2) 对于在高碳势下的长时间渗碳工艺而言, 碳化物元素与碳原子形成稳定存在的碳化物, 一方面阻碍碳原子的扩散, 另一方面造成样品表层碳含量的升高。

参考文献:

[1] 赵振业. 中国热处理与表层改性技术路线图[J]. 金属热处理, 2014, 39(4): 156-160.

[2] 赵振业. 发展热处理和表面改性技术, 提升国家核心竞争力[J]. 金属热处理, 2013, 38(1): 1-3.

[3] 王栋, 张晓晴. 基于虚拟现实技术的十字轴锻造过程仿真[J]. 郑州大学学报(工学版), 2016, 37(3): 74-77.

[4] 李斌, 方宏远, 王复明. 脱空排水管道高聚物修复前后力学特性分析[J]. 郑州大学学报(工学版), 2019, 40(1): 62-66.

[5] 王栋, 刘昱范, 陈鑫. 18CrNiMo7-6 高速磨削条件下表面质量的试验研究[J]. 郑州大学学报(工学版), 2017, 38(3): 78-81.

[6] 刘博勋, 张幸, 顾剑锋. 基于钢箔渗碳的碳传递系数的精确测定[J]. 金属热处理, 2016, 41(1): 211-216.

[7] 陈卫, 刘勇, 王顺兴. 碳的扩散系数和传递系数的一种计算方法[J]. 河南科技大学学报(自然科学版), 2003, 24(3): 11-13.

[8] GUY A G, HREIV J J. 物理冶金学原理[M]. 徐纪楠, 译. 北京: 机械工业出版社, 1981.

[9] BORGIANNI. 渗碳过程动力学及数学模型的研究[C]//中国机械工程学会热处理学会. 第二届国际材料热处理大会论文集. 北京: 中国机械工程学会

热处理学会编, 1983: 316-323.

[10] 王顺兴, 刘勇. 实用热处理模拟技术[M]. 北京: 机械工业出版社, 2002.

[11] 张星, 唐进元. 17CrNiMo6 钢内齿圈渗碳仿真关键技术研究[J]. 金属热处理, 2015, 40(3): 185-189.

[12] BABU S S, BHADESHIA H K. Diffusion of carbon in substitutionally alloyed austenite [J]. Journal of materials science letters, 1995, 14(5): 314-316.

[13] ROWAN O K, SISSON R D. Effect of alloy composition on carburizing performance of steel [J]. Journal of phase equilibria and diffusion, 2009, 30(3): 235-241.

[14] LEE S J, MATLOCK D K, VANTYNE C J. An empirical model for carbon diffusion in austenite incorporating alloying element effects[J]. ISIJ International, 2011, 51(11): 1903-1911.

[15] LEE S, MATLOCK D K. Carbon diffusivity multi-component austenite [J]. Scripta materialia, 2011, 64(9): 805-808.

[16] 王顺兴, 刘勇, 魏世忠. 气体渗碳数学模型及物理参数的计算[J]. 金属热处理, 2002(1): 36-39.

[17] ZHANG X, TANG J. An optimized hardness model for carburizing-quenching of low carbon alloy steel [J]. Journal of central south university, 2017, 24(1): 9-16.

[18] 胡赓祥, 蔡珣. 材料科学基础[M]. 上海: 上海交通大学出版社, 2000.

[19] 叶健松, 邱春城, 戚正风. 高合金钢固体渗碳及渗层扩散的计算机模拟[J]. 金属热处理, 2001, 26(7): 22-24.

[20] KIM D W, CHO Y G, CHO H H, et al. A numerical model for vacuum carburization of an automotive gear ring[J]. Metals and materials international, 2011, 17(6): 885-890.

Study on Diffusion Coefficient of Carburizing Process
Simulation of 18CrNiMo7-6 Steel

QIN Shengwei, ZHANG Yufang, ZHANG Bang

(Henan Engineering Laboratory of Anti-fatigue Manufacturing Technology, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

Abstract: The gas carburizing process of 18CrNiMo7-6 steel was simulated based on DEFORM-HT software. Two different carbon diffusion coefficient models, the $D(T, C)$ model considering the effect of temperature and carbon atoms as well as the $D(T, M, C)$ model considering the combined effect of temperature alloy and carbon atoms, were compared in this study. Moreover, numerical simulation and experimental verification of three carburizing processes with different depth of carburized layer were carried out in this study. The mechanical stripping method was used to measure the distribution of carbon content along the depth under different carburizing processes, and the comparison with simulation results showed that simulation accuracy with $D(T, M, C)$ theory was higher. However, when the case depth reaches 4mm, a big difference was appeared between the experiment and simulation results of the surface carbon content. The diffusion coefficient of carbon atoms was reduced, due to the Cr and Mo elements could easily combine with carbon atoms to form carbides in the case of long time carburizing. Meanwhile, the formation of carbides led to the high surface carbon content of 1.0%, which was higher than the ambient carbon potential (0.8%) in the last stage of carburizing process.

Keywords: DEFORM-HT software; 18CrNiMo7-6 steel; carburizing simulation; diffusion coefficient; alloying element; carbide