

Л.І. Гладка, Ю.О. Ляшенко

Черкаський національний університет ім. Б. Хмельницького, Черкаси,  
бульв. Шевченка, 81.

## ДИФУЗІЙНА ГОМОГЕНІЗАЦІЯ ПОТРІЙНОЇ ДВОХФАЗНОЇ СИСТЕМИ Fe-Ni-Cr

*Розглядається чисельна модель розрахунку дифузійної взаємодії в потрійній системі Fe-Ni-Cr в різних конфігураціях зразка: 1) в вигляді дифузійної пари; 2) в конфігурації T-зразка. Задача дифузії розв'язується для потрійної системи при існуванні на діаграмі стану двох фаз та двофазної області з використанням підходів на основі розширення можливостей Calphad [1] і Dictra [2] технологій. Для опису дифузійної взаємодії в двофазній зоні використовується феноменологічний підхід [3-5]. Модельні розрахунки проводяться при взаємоузгодженні термодинамічного і кінетичного підходів для розрахунку ізотермічних розрізів діаграми стану, визначення положень міжфазних границь та конод, розрахунку термодинамічних стимулів та визначення коефіцієнтів масопереносу в однофазних і двофазних областях. В схемі застосовуються концентраційно-залежні коефіцієнти масопереносу, розраховані через коефіцієнти Онзагера з використанням мобільностей і хімічних потенціалів компонентів.*

*Рассматривается численная модель расчёта диффузионного взаимодействия в тройной системе Fe-Ni-Cr в трёх разных конфигурациях образца: 1) в виде диффузионной пары; 2) в конфигурации T-образца. Задача диффузии решается для тройной системы при существовании двух фаз та двофазной области с использованием подходов на основании расширения возможностей Calphad [1] и Dictra [2] технологий. Для описания диффузионного взаимодействия в двофазной зоне используется феноменологический подход [3, 4, 5]. Модельные расчёты производятся для взаимосогласованного термодинамического и кинетического подходов для расчёта изотермических разрезов диаграммы состояния, определения положений междуфазных границь и конод, расчёта термодинамических стимулов и определения коэффициентов массопереноса в однофазных и двухфазных областях. В схеме используются концентрационно-зависимые коэффициенты массопереноса, рассчитанные через коэффициенты Онзагера с использованием мобильностей и химических потенциалов компонентов.*

*The numerical model for calculation of diffusion interaction in ternary Fe-Ni-Cr system is treated in different sample configurations: 1) in the form of a diffusion couple; 2) in T-sample configuration. Diffusion problem is solved for the ternary system, with two phases and a two-phase region being present on the phase diagram, using the approaches based on extended opportunities of Calphad [1] and Dictra [2] techniques. To describe the diffusion interaction in the two-phase zone a phenomenological approach is applied [3, 4, 5]. Model calculations are realized at interconsistency of thermodynamic and kinetic approaches for calculations of isothermal cross-sections of phase diagram, determining the location of interfaces and conodes, calculation of thermodynamic driving forces and finding the coefficient of mass transfer in one- and two-phase regions. The scheme employs concentration-dependent coefficients of mass transfer found by using Onsager's coefficients with components' mobilities and chemical potentials.*

**Ключові слова:** двофазні системи, взаємна дифузія, коефіцієнти Онзагера, CALPHAD, DICTRA.

У випадку потрійних систем актуальним є теоретичне й експериментальне дослідження перерозподілу компонентів в дифузійній зоні при наявності на діаграмі стану двохфазних областей в різних конфігураціях дифузійних зразків.

Використані термодинамічні та кінетичні підходи дозволяють вирішити проблеми, зв'язані з описом дифузії в трикомпонентних сплавах, а саме: 1) створення самоузгодженої моделі побудови діаграми стану та дифузійної взаємодії в потрійній системі з двохфазними областями; 2) розрахунок дифузійного шляху в концентраційному трикутнику; 3) дослідження морфології дифузійної зони в залежності від геометрії зразка, неоднорідності початкового складу та концентраційної залежності дифузійних параметрів. В побудованій моделі рівняння для дифузійних потоків компонентів записані з використанням коефіцієнтів Онзагера і хімічних потенціалів компонентів. Коефіцієнти Онзагера розраховані з використанням коефіцієнтів самодифузії компонентів та термодинамічних множників, які визначалися з виразів для потенціалів Гіббса потрійних фаз. Усереднені коефіцієнти Онзагера у виразі для потоків компонентів в лабораторній системі відліку визначалися через відповідні ефективні коефіцієнти для сусідніх комірок розрахункової сітки [3]. На основі термодинамічно взаємоузгодженої моделі дифузійні процеси промодельовано в системі Fe-Ni-Cr в різних початкових конфігураціях зразка (див. рис. 1). Розраховано дифузійні шляхи, типові для цієї системи, які проходять як через так і поза межами двохфазної області. Розраховані дифузійні шляхи порівняно з експериментальними.

**Постановка задачі.** Моделювання взаємної дифузії проведено для двохфазної системи Fe-Ni-Cr. Початкові конфігурації системи наведено на рис.1.



Рис. 1. Початкові умови розв'язаних задач гомогенізації при дослідженні системи Fe-Ni-Cr в конфігурації: а) дифузійної пари 27Cr-28Ni / 38Cr / 27Cr-28Ni; б) Т-зразка: зверху – чистий Cr; зліва - чистий Fe; справа - чистий Ni.

Розглянута модель базується на рівняннях Онзагера в термінах хімічних потенціалів, які обчислюються на кожному кроці по часу згідно моделі субрегулярного розчину. Розрахунок діаграм стану заснований на формалізмі, який лежить в основі технології CALPHAD [1, 17, 27].

#### Термодинамічні особливості системи.

Діаграма стану трикомпонентної системи Fe-Ni-Cr при температурі 1200 °C містить α-, γ- фази та двохфазну область. Ізотермічний розріз діаграми стану при T=1200 °C зображено на рис.2б, де α- фаза твердий розчин Fe та Ni на основі хрому, γ- фаза є неперервний твердий розчин компонентів Fe та Ni з хромом. При побудові діаграми стану з використанням чисельних методів оптимізації, знаходимо значення граничних концентрацій на міжфазній границі. При цьому на міжфазній границі повинні виконуватися умови рівноваги α- і γ- фаз:

$$\frac{\partial G^\alpha}{\partial c_1^\alpha} = \frac{\partial G^\gamma}{\partial c_1^\gamma}; \quad \frac{\partial G^\alpha}{\partial c_2^\alpha} = \frac{\partial G^\gamma}{\partial c_2^\gamma} \quad (1)$$

і рівняння для коноди:

$$G^\alpha - c_1^\alpha \frac{\partial G^\alpha}{\partial c_1^\alpha} - c_2^\alpha \frac{\partial G^\alpha}{\partial c_2^\alpha} = G^\gamma - c_1^\gamma \frac{\partial G^\gamma}{\partial c_1^\gamma} - c_2^\gamma \frac{\partial G^\gamma}{\partial c_2^\gamma}, \quad (2)$$

де  $G^\alpha$  і  $G^\gamma$  - потенціали Гіббса  $\alpha$ - і  $\gamma$ - фаз (Дж/моль);  $c_1^\alpha, c_1^\gamma, c_2^\alpha, c_2^\gamma$  - незалежні концентрації компонентів: 1 – Ni, 2 - Cr у  $\alpha$ - і  $\gamma$ - фазах.

Для розрахунку потенціалів Гіббса потрійних фаз використовується наближення субрегулярних розчинів при постійному об'ємі [27, 14].

Для потрійного сплаву вільна енергія Гіббса може бути записана в вигляді:

$$G = c_1 G_1^0 + c_2 G_2^0 + c_3 G_3^0 + RT(c_1 \ln(c_1) + c_2 \ln(c_2) + c_3 \ln(c_3)) + G^{0,g} + G^{id} + G^E, \quad (3)$$

де  $c_1, c_2, c_3$  - атомні частки компонентів 1-Ni, 2-Cr і 3-Fe відповідно ( $c_1 + c_2 + c_3 = 1$ );  $G_1^0, G_2^0, G_3^0$  - вільні енергії змішування Гіббса для  $\alpha$ - та  $\gamma$ - фаз розчину (Дж/моль),  $G^{0,g}$  - енергія початкової намагніченості матеріалу (Дж/моль);  $T$  – температура в Кельвінах.

Вільні енергії Гіббса  $G_1^0, G_2^0, G_3^0$  для  $\alpha$ - та  $\gamma$ - фаз описуються поліномом в залежності від температури:

$$G_i^0 = {}^i C_1 + {}^i C_2 T + {}^i C_3 T \ln T + {}^i C_4 T^2 + {}^i C_5 T^3 + \frac{{}^i C_6}{T} + {}^i C_7 T^7 + \frac{{}^i C_8}{T^9}, \quad (4)$$

де константи  ${}^i C_j, j = \overline{1..8}$  приведені в таблиці 1.

Таблиця 1.

Параметри для обчислення вільної енергії змішування Гіббса  $G_1^0, G_2^0, G_3^0$ ,

Дж/моль [31].

$i=Ni$	$\alpha$ фаза ( $T=1200$ °C)	$\gamma$ фаза ( $T=1200$ °C)	$i=Cr$	$\alpha$ фаза ( $T=1200$ °C)	$\gamma$ фаза ( $T=1200$ °C)	$i=Fe$	$\alpha$ фаза ( $T=1200$ °C)	$\gamma$ фаза ( $T=1200$ °C)
1.	3535,93	-5179,16	1.	-8856,94	-1572,94	1.	1225,7	-236,7
2.	114,298	117,854	2.	157,48	157,643	2.	124,134	132,416
3.	-522,096	-22,096	3.	26,908	-26,643	3.	-23,5143	-24,6643
4.	-4,8407e-3	-4,8407e-3	4.	1,89435e-3	1,89435e-3	4.	-4,39752e-3	-3,75752e-3
5.	0	0	5.	-1,47721e-6	-1,47721e-6	5.	-5,89269e-8	-5,89269e-8
6.	0	0	6.	139250	139250	6.	77358,5	77358,5
7.	0	0	7.	0	0	7.	0	0
8.	0	0	8.	0	0	8.	0	0

Врахування енергії початкової намагніченості матеріалу описане в роботах [26, 27] Саудманом і Агреном з використанням залежності:

$$G^{0,g} = RT \ln({}^i B_0 + 1) g\left(\frac{T}{{}^i T_c}\right), \quad (5)$$

де  ${}^i B_0$  - атомний магнітний момент;  ${}^i T_c$  - температура Кюрі.

Якщо  $\tau = \frac{T}{{}^i T_c}$ , то

$$\text{при } \tau > 1: \quad g(\tau) = \frac{\tau^{-5} / 10 + \tau^{-15} / 315 + \tau^{-25} / 1500}{B_1};$$

$$\text{при } \tau \leq 1: \quad g(\tau) = 1 + \frac{B_2 \tau + B_3 (\tau^3 / 6 + \tau^9 / 135 + \tau^{15} / 600)}{B_1},$$

де  $B_1, B_2, B_3$  - константи для відповідних фаз [26, 27], які приведені в таблиці 2.

Таблиця 2.

Константи для розрахунку початкової намагніченості матеріалів [31, 13]

	$\alpha$ фаза	$\gamma$ фаза
$B_1$	1,410714	2,015306
$B_2$	1,430584	2,452429
$B_3$	-1,558285	-2,342457

Використовувані значення атомних магнітних моментів та температур Кюрі компонентів системи Fe-Ni-Cr у  $\alpha$ - і  $\gamma$ -фазах приведені в таблиці 3.

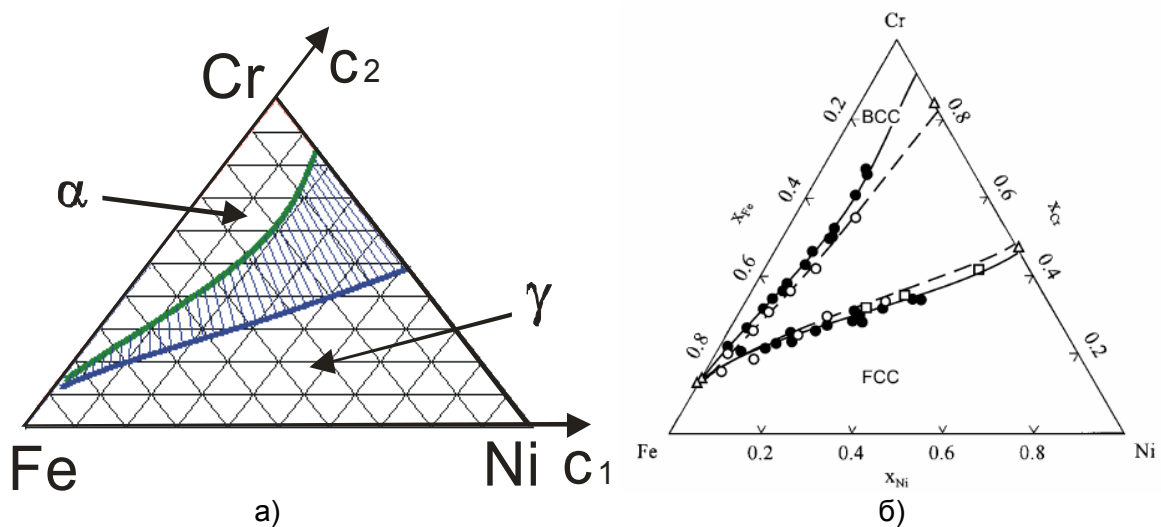
Таблиця 3.

Значення атомних магнітних моментів та температур Кюрі компонентів системи Fe-Ni-Cr у  $\alpha$ - і  $\gamma$ -фазах [31, 13].

	$i=Ni$		$i=Cr$		$i=Fe$	
	$\gamma$ фаза	$\alpha$ фаза	$\gamma$ фаза	$\alpha$ фаза	$\gamma$ фаза	$\alpha$ фаза
$^i T_c, K$	633	575	367	311,5	67	1043
$^i B_0$	0,52	0,85	0,82	0,008	0,7	2,22

Інші параметри для розрахунку енергії змішування на основі моделі субрегулярних розчинів для системи Fe-Ni-Cr співпадають з параметрами, описаними в роботі [31].

Діаграми стану, розраховані для потрійної системи Fe-Ni-Cr за описаною процедурою, приведені на рис. 2а.



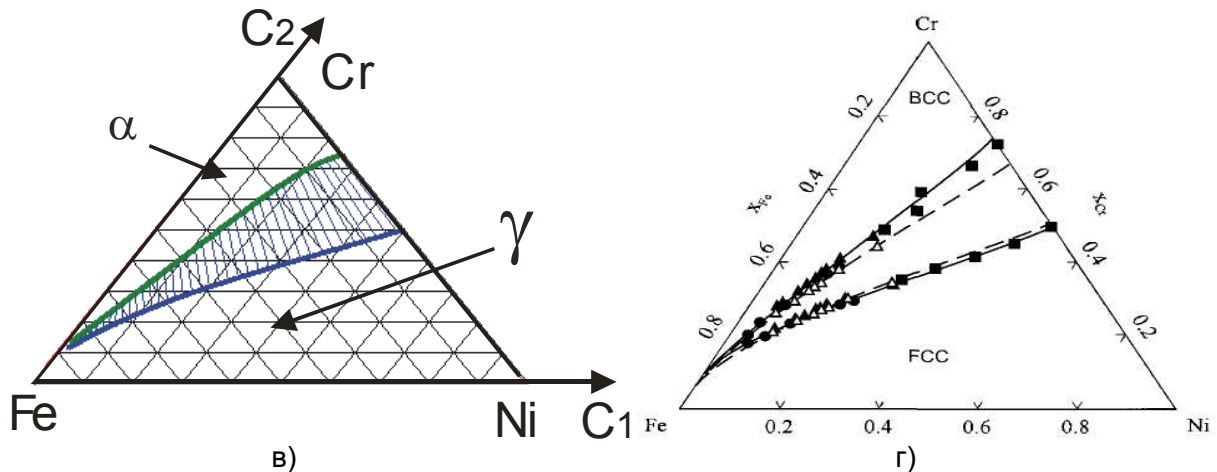


Рис. 2. Діаграма стану з фазовими границями і деякими конодами: а) Ізотермічний розріз модельної діаграми стану потрійної системи Fe-Ni-Cr з двохфазною областю при  $T=1100\text{ }^\circ\text{C}$ ; б) Експериментальна діаграма стану системи Fe-Ni-Cr при  $T=1100\text{ }^\circ\text{C}$  (---) [31]; в) Ізотермічний розріз модельної діаграми стану потрійної системи Fe-Ni-Cr з двохфазною областю при  $T=1200\text{ }^\circ\text{C}$ ; г) Експериментальна діаграма стану системи Fe-Ni-Cr при  $T=1200\text{ }^\circ\text{C}$  (зафарбовані ромби) [31].

### Дифузійні особливості системи.

Рівняння для дифузійних потоків компонентів записуємо, використовуючи коефіцієнти Онзагера і хімпотенціали компонентів. Наприклад, для потоку  $j_i^U$  рівняння має вигляд:

$$j_i^U = -\bar{L}_{ii} \frac{\partial \tilde{\mu}_i}{\partial y} - \bar{L}_{ij} \frac{\partial \tilde{\mu}_j}{\partial y}, \quad i, j = 1, 2; \quad i \neq j, \quad (6)$$

де  $\tilde{\mu}_i$  - приведений хімічний потенціал компонента  $i$ , а  $\bar{L}_{ij}$  - усереднені коефіцієнти Онзагера в двох сусідніх взаємодіючих комірках.

Для розрахунку хімпотенціалів компонентів 1 (Ni), 2 (Cr) і 3 (Fe) використовуються вирази:

$$\begin{aligned} \mu_1 &= g + (1 - c_1) \frac{\partial g}{\partial c_1} - c_2 \frac{\partial g}{\partial c_2}; \\ \mu_2 &= g - c_1 \frac{\partial g}{\partial c_1} + (1 - c_2) \frac{\partial g}{\partial c_2}; \\ \mu_3 &= \frac{1}{c_3} (g - c_1 \mu_1 - c_2 \mu_2), \end{aligned} \quad (7)$$

де  $g$  - потенціал Гіббса, який береться в розрахунку на один атом системи.

Приведений хімічний потенціал компонента  $i$  у формулі (6) є різницею відповідного хімічного потенціала незалежного компонента та хімічного потенціала розчинника (заліза):

$$\tilde{\mu}_i = \mu_i - \mu_3, \quad i = 1, 2$$

Усереднені коефіцієнти Онзагера у виразі (6) для потоків визначаються через відповідні ефективні коефіцієнти  $\bar{L}_{ij}$  для сусідніх комірок:

$$\bar{L}_{ij} = [L_{ij}(n, m) + L_{ij}(n, m - 1)] / 2. \quad (8)$$

Для визначення ефективних коефіцієнтів Онзагера в двофазних комірках використовується модель паралельного з'єднання фаз:

$$L_{ij} = L_{ij}^{\alpha} p^{\alpha} + L_{ij}^{\gamma} p^{\gamma},$$

де  $L_{ij}^{\alpha, \gamma}$  - коефіцієнти Онзагера для складів фаз  $c_1^{\alpha, \gamma}, c_2^{\alpha, \gamma}$  на кінцях коноди, що проходить через усереднений склад  $\bar{c}_1, \bar{c}_2$  двофазної комірки.

Коефіцієнти Онзагера розраховуються по формулах переходу від системи відліку, зв'язаної з кристалічною ґраткою, у лабораторну систему відліку:

$$\begin{aligned} L_{11}^{\alpha, \gamma} &= (1 - c_1)L_1^{\alpha, \gamma} + \frac{c_1^2}{c_3}L_3^{\alpha, \gamma}; & L_{12}^{\alpha, \gamma} &= -c_1(L_2^{\alpha, \gamma} + \frac{c_2}{c_3}L_3^{\alpha, \gamma}); \\ L_{21}^{\alpha, \gamma} &= -c_2(L_1^{\alpha, \gamma} + \frac{c_1}{c_3}L_3^{\alpha, \gamma}); & L_{22}^{\alpha, \gamma} &= (1 - c_2)L_2^{\alpha, \gamma} + \frac{c_2^2}{c_3}L_3^{\alpha, \gamma}. \end{aligned} \quad (9)$$

Тут використано взаємозв'язок між коефіцієнтами Онзагера і коефіцієнтами самодифузії:

$$L_i^{\alpha, \gamma} = \frac{c_i D_i^{*(\alpha, \gamma)}}{RT}.$$

Якщо концентраційний склад комірки попадає безпосередньо в одну з фаз  $\alpha$  - чи  $\gamma$ -, то при розрахунку коефіцієнтів Онзагера вибираються коефіцієнти дифузії мічених атомів у відповідних фазах. Якщо концентраційний склад попадає в двофазну область, наприклад, у точку із середньою концентрацією  $\bar{c}_1, \bar{c}_2$  компонентів в комірці, то:

1. визначається конода, яка проходить через точку  $\bar{c}_1, \bar{c}_2$ . Це дозволяє визначити граничні концентрації ( $c_1^{\alpha}, c_2^{\alpha}, c_1^{\gamma}, c_2^{\gamma}$ ).

2. розраховуються об'ємні частки фаз з співвідношень:  
 $p^{\gamma} = \frac{\bar{c}_1 - c_1^{\alpha}}{c_1^{\gamma} - c_1^{\alpha}}; p^{\alpha} = 1 - p^{\gamma}$ , де  $p^{\gamma}, p^{\alpha}$  - об'ємні частки фаз  $\gamma$  і  $\alpha$  в комірці із середніми концентраціями  $\bar{c}_1, \bar{c}_2$ .

В проведених розрахунках використано коефіцієнти Онзагера, визначені на основі коефіцієнтів самодифузії, які залежать від концентрації. Коефіцієнти самодифузії в фазах розраховуються через мобільності елементів (див. рис. 3) для системи Fe-Ni-Cr за формулами [2]:

$$M_i = \frac{D_i^*}{RT} = M_i^0 \exp\left(-\frac{Q_i}{RT}\right) \frac{1}{RT}, \quad i=1,2,3; \quad M_i^0 = \exp\left(\frac{\Theta_i}{RT}\right). \quad (10)$$

Параметри  $\Theta_i$  та  $-Q_i$  для системи Fe-Ni-Cr визначаються за Calphad наближенням [2]:

$$\begin{aligned} \Phi_i &= c_1 \cdot \Phi_i^1 + c_2 \cdot \Phi_i^2 + c_3 \cdot \Phi_i^3 + c_1 \cdot c_2 \left( {}^0\Phi_i^{1,2} + (c_1 - c_2) \cdot {}^1\Phi_i^{1,2} \right) + \\ &+ c_1 \cdot c_3 \left( {}^0\Phi_i^{1,3} + (c_1 - c_3) \cdot {}^1\Phi_i^{1,3} \right) + c_2 \cdot c_3 \left( {}^0\Phi_i^{2,3} + (c_2 - c_3) \cdot {}^1\Phi_i^{2,3} \right) \end{aligned}$$

де  $c_1, c_2, c_3$  - концентрації компонентів Ni, Cr, Fe у відповідних фазах, значення  $\Phi_i^j, \Phi_i^{i,j}, \Phi_i^{i,j,k}$  - відповідно функції  $M_i^0$  та  $Q_i$ , значення яких взяті з програмного продукту DICTRA [2].

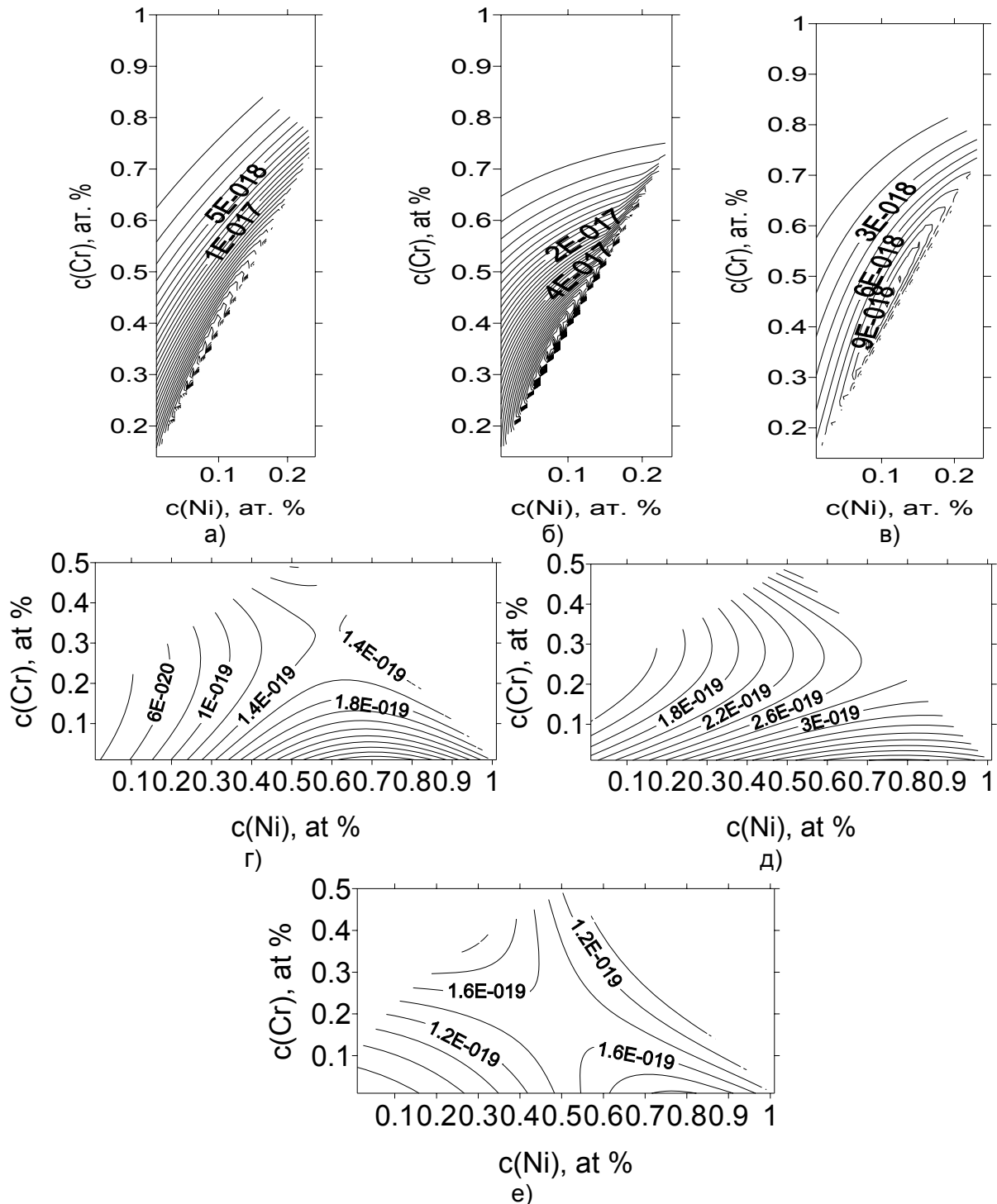
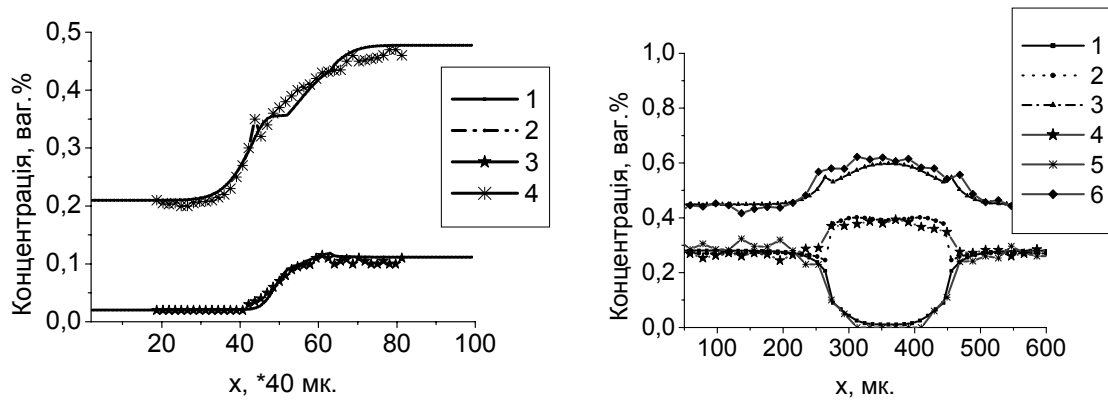


Рис. 3. Концентраційні залежності мобільностей компонентів в системі Fe-Ni-Cr: мобільності компонентів а) Ni; б) Cr; в) Fe в  $\alpha$ -фазі; мобільності компонентів г) Ni; д) Cr; е) Fe в  $\gamma$ -фазі.

**Розрахунок дифузійних шляхів у двофазній потрійній системі Fe-Ni-Cr.** В першому випадку досліджувалась однофазна дифузійна пара ( $\alpha$ -фаза). На рис. 4а приведені розраховані та експериментальні концентраційні профілі після 21 години відпалу однофазної дифузійної пари при  $T=1200^\circ\text{C}$ .



а)

б)

Рис. 4. Розраховані та експериментальні концентраційні профілі відпалу дифузійних пар:

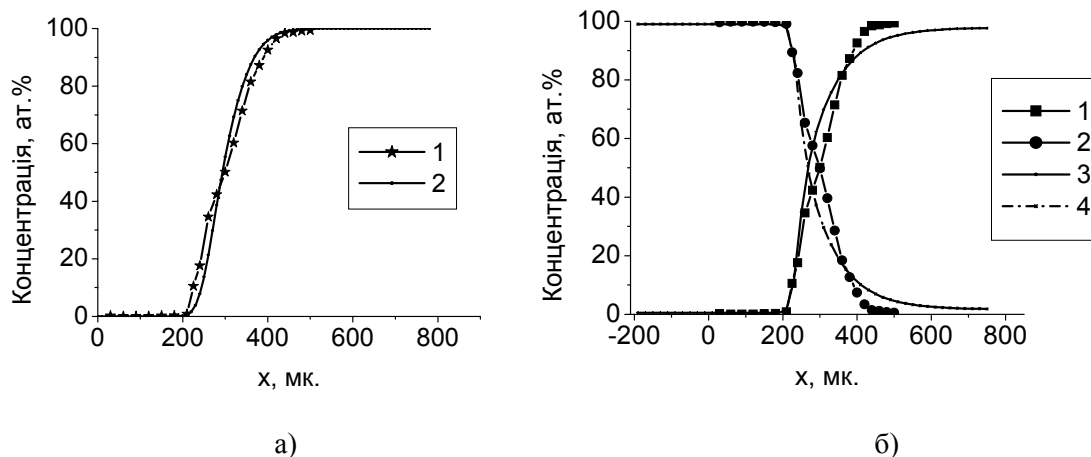
а) однофазна ( $\alpha$ -фаза) дифузійна пара 77.5Fe20Cr2.5Ni і 64Fe30Cr6Ni після відпалу протягом 21 години при  $T=1200$  °C [15]: 1 – розрахований концентраційний розподіл Ni; 2 – розрахований концентраційний розподіл Cr; 3 – експериментальний концентраційний розподіл Ni; 4 – експериментальний концентраційний розподіл Cr;

б) двофазна ( $\gamma/\alpha/\gamma$ ) дифузійна пара 27Cr-28Ni / 38Cr / 27Cr-28Ni після відпалу протягом 1 години при  $T=1100$  °C [16]: 1 – розрахований концентраційний розподіл Ni; 2 – розрахований концентраційний розподіл Cr; 3 – розрахований концентраційний розподіл Fe; 4 – експериментальний концентраційний розподіл Ni; 5 – експериментальний концентраційний розподіл Cr; 6 – експериментальний концентраційний розподіл Fe.

На рис. 4б приведені результати розрахунків концентраційних профілів сандвіч-подібних дифузійних зразків, які складаються з  $\alpha$ - та  $\gamma$ -фаз та їх порівняння з експериментальними.

Після отримання співпадіння результатів розрахунків на основі розробленої моделі та експериментальних досліджень в конфігурації бінарної пари було проведено моделювання дифузійної взаємодії в конфігурації Т-зразка для системи Fe-Ni-Cr.

На рис. 5 приведені результати розрахунків дифузійної взаємодії в бінарних парах чистих компонентів системи Fe-Ni-Cr та їх порівняння з експериментальними даними.



а)

б)



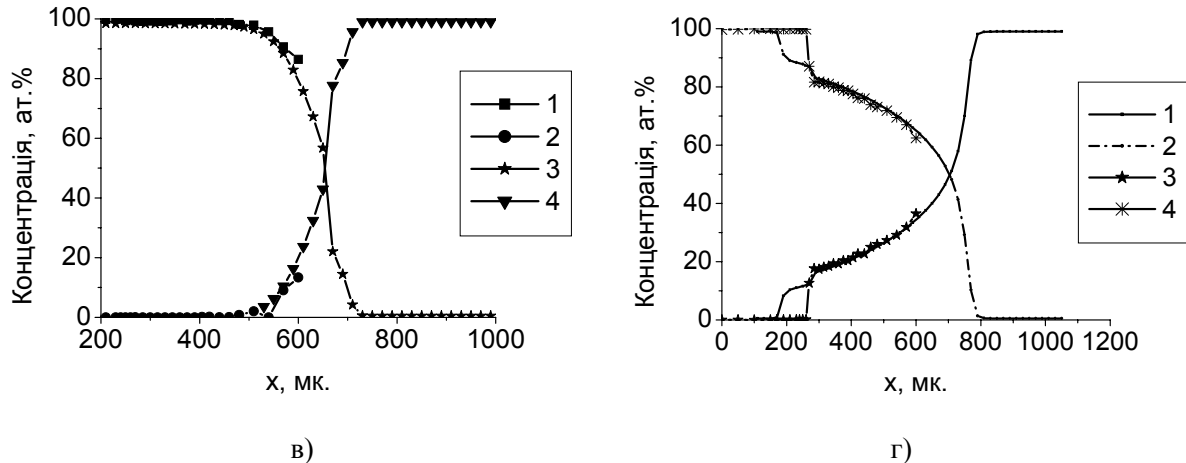


Рис. 5. Концентраційні профілі відпалу дифузійних пар:

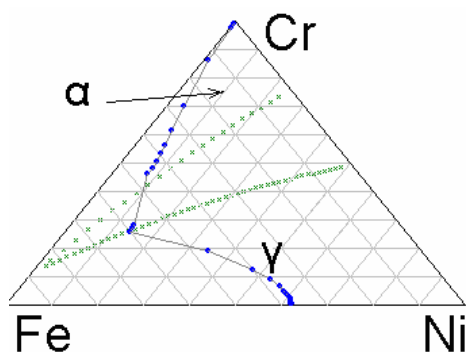
а) розраховані на основі [20] та експериментальні концентраційні профілі відпалу дифузійних пар Fe-Ni і Ni-Fe протягом 96 годин при  $T=1100\text{ }^{\circ}\text{C}$ : 1 – експериментальний концентраційний профіль Ni; 2 – розрахований концентраційний профіль Ni на основі [20];

розраховані та експериментальні концентраційні профілі відпалу дифузійних пар на бінарних сторонах потрійної системи Fe-Ni-Cr в конфігурації T-зразка:

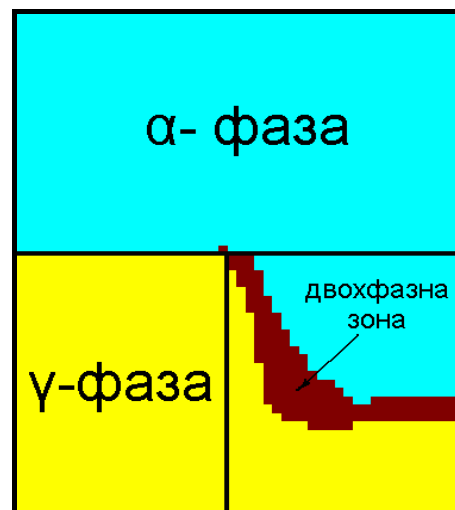
б) в дифузійній парі Fe-Ni і Ni-Fe після відпалу протягом 96 годин при  $T=1100\text{ }^{\circ}\text{C}$ : 1 – експериментальний концентраційний профіль Ni; 2 – експериментальний концентраційний профіль Fe; 3 – розрахований концентраційний профіль Ni; 4 – розрахований концентраційний профіль Fe;

в) в дифузійній парі Fe-Cr і Cr-Fe після відпалу протягом 96 годин при  $T=1100\text{ }^{\circ}\text{C}$ : 1 – розрахований концентраційний профіль Cr; 2 – розрахований концентраційний профіль Fe; 3 – експериментальний концентраційний профіль Cr; 4 – експериментальний концентраційний профіль Fe;

г) в дифузійній парі Ni-Cr і Cr-Ni після відпалу протягом 96 годин при  $T=1100\text{ }^{\circ}\text{C}$ : 1 – експериментальний концентраційний профіль Ni; 2 – експериментальний концентраційний профіль Cr; 3 – розрахований концентраційний профіль Ni; 4 – розрахований концентраційний профіль Cr.



а)



б)

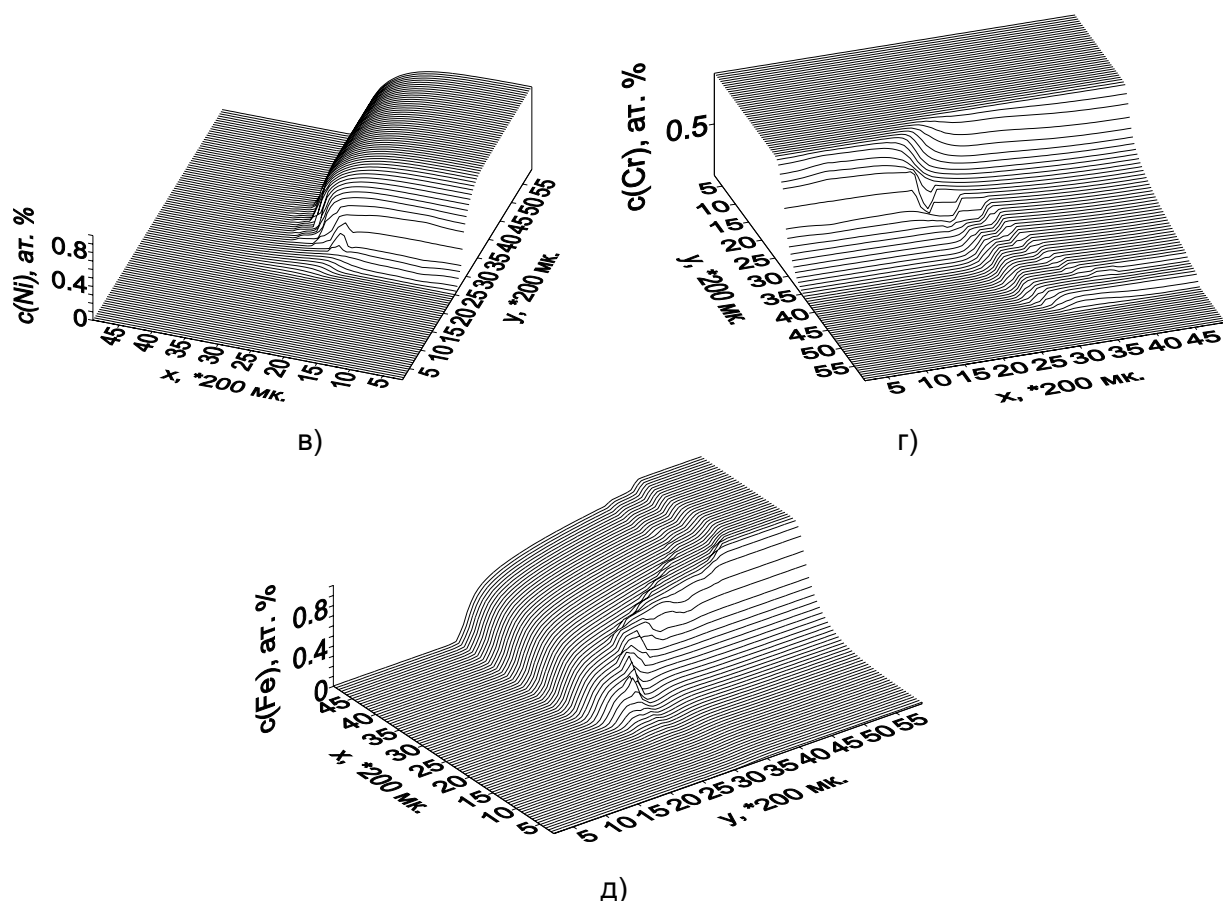


Рис. 6. Результати розрахунку дифузійної взаємодії в конфігурації Т-зразка протягом 96 годин при  $T=1100\text{ }^{\circ}\text{C}$  : а) дифузійний шлях вздовж вертикального розрізу Т-зразка; б) області розміщення фаз в Т-зразка після відпалу; в) концентраційний розподіл Ni після відпалу; г) концентраційний розподіл Cr; д) концентраційний розподіл Fe.

З діаграми стану видно, що двофазна область на стороні Ni-Cr ширша, чим на стороні Fe-Cr. Під час розрахунків отримано, що біля границі Fe-Cr виникає двофазна зона, яка доростає до центру Т-зразка. Взаємна дифузія Fe і Ni під час відпалу сприяє виникненню двофазної зони в центрі Т-зразка в області з високим вмістом заліза.

Результати моделювання вказують, що під час відпалу має місце досить значне дифузійне перемішування атомів хрому і заліза. Серед факторів, що призводять до такого результату можна назвати підвищену дифузійну рухливість атомів Cr в  $\alpha$ -фазі при високих концентраціях заліза (див. рис. 3б).

### Висновки

В роботі побудована модель взаємоузгодженого розрахунку термодинамічних властивостей, ізотермічного розрізу діаграми стану та дифузійної взаємодії в двовимірній модельній системі Fe-Ni-Cr. Моделювання проведено з використанням термодинамічних підходів для опису потенціалів Гіббса, закладених в Calphad-технології та мобільностей компонентів, взятих з баз даних DICTRA. Додатково використаний розроблений феноменологічний підхід [3-5] для опису дифузійних процесів в двофазних зонах потрійних систем.

В результаті розрахунків отримані часові залежності двовимірних концентраційних розподілів компонентів, проаналізовано вплив концентраційної залежності коефіцієнтів дифузії на поведінку системи Fe-Ni-Cr під час гомогенізації в різних початкових конфігураціях дифузійних зразків. Результати

моделювання можуть бути застосовані для розв'язку оберненої задачі дифузії методі Т-зразка.

**Подяки.** Робота частково підтримана Державним фондом фундаментальних досліджень України № Ф25.4/162 за договором Ф25/133-2008 „Фазоутворення в умовах швидкісної пластичної деформації і струму” від 14.05.2008 та Міністерством освіти та науки України, № державної реєстрації 0106U004021 „Вплив нерівноважних дефектів на кінетику наноструктурних перетворень”.

1. Dinsdale A. T.. SGTE data for pure elements // CALPHAD. - Vol. 15.- № 4. -1991. - pp. 317-425.
2. Dictra User's Guide, Version 21., www.thermocalc.com/Products/Dictra.html
3. Гусак А. М., ЖФХ. – 1990. - Вып. 2. – С. 510.
4. Гусак А. М., Ляшенко Ю. А.. Особенности решений уравнений массопереноса в двухфазной зоне тройной системы // ИФЖ. – 1990. – Т. 59, Вып. 5, № 2. – С. 286-292.
5. Ляшенко Ю.А.. Взаимная диффузия в тройных системах с двухфазными областями: подходы и модели // Успехи физики металлов. – 2003. – Т. 4(2). – С. 81-122.
6. Allagher R. G., Nussler H. D. and Spencer P.J.. Computer calculation of multicomponent phase equilibria // Physica. - 1981. - № 103B. - pp. 8-20.
7. Belova I.V., Murch G.E. A new analysis of diffusion in ternary alloys: application to f.c.c. Fe-Ni-Cr alloys // Acta Materialia. – 2002. – Vol 50. - pp. 4617–4627.
8. Chart Tim, Putland Frances and Dinsdale Alan. Calculated phase equilibria for the Fe-Cr-Ni-Si systems ternary equilibria // Calphad. - 1980- Vol. 4 - No. 1 - pp. 27-46.
9. Chuang Ying-Yu, Schmid R. and Chang Y. Austin. Calculation of the equilibrium phase diagrams and the spinodally decomposed structures of the Fe-Cu-Ni system // Acta Materialia. - Volume 33. - № 8 – 1985. – pp. 1369-1380.
10. Danielewski Marek and Wierzba Bartlomiej. Modeling the interdiffusion and reactive-diffusion processes in multicomponent systems // Metallurgical and Materials Transactions. – 2008. – Vol 39B. - pp. 629-638.
11. Dayananda M. A. Phenomenological analysis of diffusion coefficients, correlation and vacancy flux effects in binary substitutional alloys // Acta Metallurgica. – 1981. – Vol 29. - pp. 1151-1157.
12. Dean D.C. and Goldstein J. I. Determination of the Interdiffusion Coefficients in the Fe-Ni and Fe-Ni-P systems below 900C // Metallurgical Transactions. – 1986. – Vol 17a. – No 2. - pp. 1131-1138.
13. Emelianenko Maria, Liu Zi-Kui, Du Qiang. A new algorithm for the automation of phase diagram calculation // Computational Materials Science. - 2006. - № 35. - pp. 61-74.
14. Hillert Mats. Partial gibbs energies from Redlich-Kister polynomials // Thermochemica Acta. – № 129 – 1988. – pp. 71-75.
15. Jonsson Bjorn. Assessment of the mobilities of Cr, Fe and Ni in bcc Cr-Fe-Ni alloys // ISIJ International. - 1995. - Volume 35. - № 11 – 1985. – pp. 1415-1421.
16. Kajihara M. and Kikuchi M.. Analysis of dissolution of  $\alpha$  phase in  $\gamma/\alpha/\gamma$  diffusion couples of the Fe-Cr-Ni system using analytical solutions for semi-infinite diffusion couples // Acta metall, mater. - Volume 43. - № 2 – 1995. – pp. 807-820.
17. Lee Bycong-Joo. On the stability of Cr carbides // CALPHAD. – 1992. – Vol 16. – No 2. - pp. 121-149.
18. Lee Byeong-Joo. Numerical simulation of diffusional reactions between multiphase alloys with different matrix phases // Scripta Materialia. – 1999. – Vol 40. – No 5. - pp. 573–579.
19. Miettinen Jyrki. Thermodynamic reassessment of Fe-Cr-Ni system with emphasis on the iron-rich corner // Calphad. - 1999. - Vol. 23. - No. 2. - pp. 231-248.
20. Million B., Ruzickova J., Velisek J. and Vrestal J. Diffusion Processes in the Fe-Ni System // Materials Science and Engineering. – 1981. – Vol 50. - pp. 43–52.
21. Oriani R. A. Thermodynamic activities in iron-nickel alloys / Acta Metallurgica. – 1953. – Vol 1. - pp. 448-454.
22. Ruzickova J. and Million B. Self-diffusion of the Components in the F.C.C. Phase of Binary Solid Solutions of the Fe-Ni-Cr System // Materials Science and Engineering. – 1981. – Vol 50. - pp. 59-64.

23. Schmidt Harald, Tomiska Josef. Mass spectrometric determination of the thermodynamic excess properties of ternary Fe–Co–Cr melts // *Journal of Alloys and Compounds*. - 2004. - № 385. - pp. 126-132.
24. Sopousek J. and Kruml T.. Sigma-phase equilibria and nucleation in Fe-Cr-Ni alloys at high temperature // *Scripta Materialia*. - 1996. - Vol. 35. - No. 6. - pp. 689-693.
25. Sopousek J., Kroupa A., Dojiva R., Vrestal J. The PD-package for multicomponent isobaric phase equilibrium calculations // *CALPHAD*. – 1993. – No 3. - pp. 229-235.
26. Sundman Bo and Agren John. A regular solution model for phases with several components and sublattices, suitable for computer applications // *Phys. Chem. Solids*. - 1981. - Vol 42. - pp. 297-301.
27. Sundman Bo, Jansson Bo, Andersson Jan-Olof. The Thermo-Calc Databank System // *CALPHAD*. – 1985. – Vol 9. – No 2. - pp. 153-190.
28. Svoboda J., Gamsjager E., Fischer F.D., Fratzl P. Application of the thermodynamic extremal principle to the diffusional phase transformations // *Acta Materialia*. – 2004. – Vol 52. - pp. 959–967.
29. Svoboda J., Vala J., Gamsjager E., Fischer F.D. A thick-interface model for diffusive and massive phase transformation in substitutional alloys // *Acta Materialia*. – 2006. – Vol 54. - pp. 3953–3960.
30. Tomiska J., Vrestal J.. Computation of phase equilibria in the Fe±Ni±Cr system based upon mass spectrometric investigations // *Thermochimica Acta*. - 1998. - № 314. - pp. 155-167.
31. Tomiska Josef. The system Fe–Ni–Cr: revision of the thermodynamic description // *Journal of Alloys and Compounds*. - 2004. - № 379. - pp. 176-187.
32. Tomiska Josef. Thermodynamic activities of alloys // *Thermochimica Acta*. - 1998. - No. 314. - pp. 145-153.
33. Vrestal J., Theiner J., Broz P., Tomiska J. Mass-spectrometric determination of the thermodynamic mixing behavior of liquid ternary Fe-Ni-Cr alloys // *Thermochimica Acta*. – 1998. – Vol 319. - pp. 193-200.
34. Walsae E., De Recat and Pampillo C. Self-diffusion of Ni in Ni-Fe alloys // *Acta Metallurgica*. – 1967. – Vol 16. - pp. 1263-1268.
35. Yang J. and Goldstein J.I. Magnetic Contribution to the Interdiffusion Coefficients in Bcc ( $\alpha$ ) and Fcc ( $\gamma$ ) Fe-Ni Alloys // *Metallurgical and Materials Transactions*. – 2004. – Vol 35a. - pp. 1681-1690.
36. Zherditskii N. T. Effect of structural defects on interdiffusion in the Fe-Mn and Fe-Ni systems // *Novocherkassk Polytechnic Institute. Translated from Metallovedenie i Termicheskaya Obrabotka Metallov*. – 1978. – No 9. - pp. 55-57.

Одержано редакцією 22.10.2008  
Прийнято до публікації 29.10.2008