

**Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας**  
**Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών**

**Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία**

**ΤΙΤΛΟΣ: Προσομοίωση Ενανθράκωσης  
του κράματος INCOLOY 800**

Επιβλέπων Καθηγητής: Χαϊδεμενόπουλος  
Γρηγόρης

Μεταπτυχιακή Φοιτήτρια: Πασχάλη Ναταλία

03/10/2012

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η ενανθράκωση είναι ένα από τα προβλήματα διάβρωσης που πραγματοποιούνται σε κράματα υψηλής θερμοκρασίας σε βιομηχανικές διεργασίες όπως η παραγωγή αιθυλενίου, η αναμόρφωση φυσικού αερίου, η αεριοποίηση του άνθρακα, οι οποίες εμφανίζονται σε θερμοκρασίες υψηλότερες από 700°C [1-3]. Επίσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί για μέρη κινητήρων, μεγάλους οδοντωτούς τροχούς μετάδοσης ισχύος, τροχούς αλυσοκινήσεων, μεγάλα εξαρτήματα χωματοουργικών μηχανημάτων κ.α. Η αρχική εργασία μας στον τομέα αυτό πραγματοποιήθηκε σε σίδηρο [4-5], που επεκτείνεται τώρα στην μελέτη της ενανθράκωσης του Incoloy 800 σε Ar-CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub> μίγματα αερίου στη θερμοκρασία εύρους 900-1100°C. Τα μίγματα των αερίων ήταν χωρίς οξυγόνο, έτσι ώστε ο σχηματισμός του οξειδίου [6-8] δεν θα παρεμποδίσει τη διαδικασία ενανθράκωσης.

Για τη διαδικασία της ενανθράκωσης χρησιμοποιήθηκαν δυο προγράμματα. Το πρώτο είναι το **TERMO-CALC** για τον υπολογισμό των θερμοδυναμικών δεδομένων όπως ποσοστά και συστάσεις φάσεων, καρβιδίων, ενδομεταλλικών ενώσεων κ.λ.π. Το δεύτερο πρόγραμμα που χρησιμοποιήθηκε είναι το **DICTRA** για τον υπολογισμό των κινητικών δεδομένων του προβλήματος.

Από την προσομοίωση της ενανθράκωσης του κράματος **INCOLOY 800** προέκυψαν κάποια συγκριτικά διαγράμματα τα οποία οδήγησαν σε συμπεράσματα που θα αναλυθούν παρακάτω εκτενέστερα. Σε γενικές γραμμές, παρατηρήθηκε αύξηση του ποσοστού δέσμευσης άνθρακα με την αύξηση της θερμοκρασίας ενανθράκωσης, αύξηση της τιμής της ενεργότητας, και κατά συνέπεια αύξηση του ποσοστού του άνθρακα αλλά και του βάθους διείσδυσης των καρβιδίων στο κράμα. Κατά ένα γενικό πλάνο προέκυψε ότι η ενανθράκωση του συγκεκριμένου κράματος το οποίο έχει εφαρμογή σε προβλήματα διυλιστηρίων, ήταν ανεπιθύμητη.

Ο σκοπός της εργασίας ήταν η απάντηση των ερωτημάτων σε προβλήματα προσομοίωσης ενανθράκωσης του κράματος INCOLOY 800. Η προσομοίωση έγινε δηλαδή για να προβλεφθεί η ενανθράκωση, ώστε να βοηθήσει στην έγκαιρη αντικατάσταση για παράδειγμα οποιουδήποτε μέρους ενός σωλήνα ή και ολόκληρου εάν χρειαστεί σε ένα διυλιστήριο, ή και οποιουδήποτε υλικού που θα μπορούσε να προσβληθεί από το ανεπιθύμητο αυτό φαινόμενο και να προκαλέσει δυσμενείς συνθήκες, εάν προχωρήσει σε βάθος.

## 1ο ΕΙΣΑΓΩΓΗ – ΟΡΙΣΜΟΣ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

Η ενανθράκωση είναι στην ουσία επιφανειακή σκλήρυνση. Είναι δηλαδή μια θερμική και χημική κατεργασία των χάλυβων, η οποία αποβλέπει στην τοπική βελτίωση των μηχανικών ιδιοτήτων τους, σε περιοχές όπου προβλέπονται υψηλές καταπονήσεις ή συνθήκες έντονης φθοράς. Η μέθοδος αυτή συνιστάται στην αύξηση των ποσοστών περιεκτικότητας του χάλυβα σε άνθρακα ή άζωτο στην επιφάνεια του κατεργαζόμενου αντικειμένου. Αυτό επιτυγχάνεται με τη θέρμανση του αντικειμένου σε περιβάλλον με περίσσεια άνθρακα ή αζώτου. Η ενανθράκωση εισχωρεί σε μεγάλα βάθη που φτάνουν τα 2.5mm και παρουσιάζει καλύτερες μηχανικές ιδιότητες αντοχής και πραγματοποιείται συνήθως με θέρμανση του χάλυβα σε ατμόσφαιρα πλούσια σε μονοξείδιο του άνθρακα (CO) ή υδρογονάνθρακες (HC). Έπειτα συνήθως ακολουθούνται κατεργασίες βαφής.

Ο χάλυβας είναι υλικό, που ανεξάρτητα την πρόσμιξη μετάλλων που τον αποτελούν επιδέχεται βαφή (σκλήρυνση). Σε ό,τι αφορά τα ποσοστά πρόσμιξης των μετάλλων που αποτελείται, αυτά εξαρτώνται από τους στόχους των κατασκευαστών των μετάλλων και την εργασία που έχει γίνει κατά την κατεργασία του χάλυβα ώστε να καταλήγει να έχει συγκεκριμένες μηχανικές ιδιότητες, αντοχές κλπ. ανάλογα τον προορισμό του μετάλλου (επιθυμητές μηχανικές ιδιότητες). Το μόνο υλικό που πρέπει απαραίτητα να εμπεριέχεται στην πρόσμιξη του χάλυβα και σε ποσοστό πάντα μεγαλύτερο του 0.22% είναι ο άνθρακας.

Η ενανθράκωση, γίνεται για τον εξής λόγο: εμποτίζει επιφανειακά το χάλυβα με ξένα άτομα άνθρακα. Αυτό, παρέχει επιπλέον σκλήρυνση στη βαφή του χάλυβα, ενώ στον πυρήνα του μετάλλου διατηρούνται αναλλοίωτες οι φυσικές ιδιότητες (αντοχή, ελαστικότητα κλπ)

Η μελέτη αυτής της εργασίας αφορά την προσομοίωση ενανθράκωσης του κράματος Incoloy 800. Το πρόβλημα είναι πραγματικό και συμβαίνει όταν ορισμένα κράματα εκτεθούν σε περιβάλλοντα με εξαιρετικά υψηλές θερμοκρασίες όπως διυλιστήρια πετρελαίων, τουρμπίνες αεροσκαφών κ.λ.π. Το πρόβλημα της ενανθράκωσης έχει αρνητικές και θετικές συνέπειες αναλόγως την περίπτωση. Κατά τη διάρκεια της ενανθράκωσης του συγκεκριμένου κράματος παρατηρήθηκε απώλεια αντοχής λόγω δέσμευσης του Cr για τον σχηματισμό των καρβιδίων. Το κράμα μελετήθηκε για τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες και για τρεις διαφορετικές τιμές ενεργότητας του άνθρακα (carbon activity). Η δέσμευση του άνθρακα εξαρτήθηκε 1) από την θερμοκρασία, δηλαδή όσο πιο μεγάλη η θερμοκρασία τόσο πιο μεγάλη και η δέσμευση του άνθρακα, και 2) από την ενεργότητα που είναι στην ουσία η δύναμη εισχώρησης του άνθρακα στο κράμα. Δηλαδή χρειάστηκε μεγαλύτερη τιμή ενεργότητας για μεγαλύτερη δέσμευση άνθρακα με σκοπό τη δημιουργία καρβιδίων.

Αυτά οδήγησαν στην ανάγκη διερεύνησης για τη προσομοίωση του κράματος Incoloy 800 με σκοπό να προβλεφτεί το βάθος διείσδυσης από την επιφάνεια του άνθρακα και τα ποσοστά καρβιδίων που δημιουργήθηκαν από αυτόν σύμφωνα με πάντα με το

χρόνο και με τη θερμοκρασία λειτουργίας. Επίσης να γίνει ένα μοντέλο πρόβλεψης συνθηκών και ιδιοτήτων του κράματος μετά το πέρας της διαδικασίας της ενανθράκωσης, ώστε να γίνει διαπίστωση εάν το κράμα μπορεί να χρησιμοποιηθεί πρακτικά ή όχι σε αντίξοες συνθήκες λειτουργίας.

#### Χημική Σύσταση του Incoloy 800

Nickel	Chromium	Copper	Iron	Manganese
30.0-35.0	19.0-23.0	0.75max	39.50min	1.50 max

Carbon	Silicon	Sulfur	Aluminum	Titanium
0.10max	1.00max	0.015max	0.15-0.60	0.15-0.60

Η μικροδομή και οι μηχανικές ιδιότητες των υπερκράματων Incoloy 800 μετά από 15 χρόνια λειτουργίας σε έκθεση αξιολογήθηκαν. Οι μεταλλουργικές παραλλαγές όπως ο σχηματισμός και η ανάπτυξη δευτερογενών ιζημάτων, ο μετασχηματισμός φάσεως καρβιδίου του τιτανίου σε  $Cr_{23}C_6 + Ni_{16}Ti_6Si_7$  και η αποσύνθεση των πρωτογενών καρβιδίων, χαρακτηρίστηκαν κατά τη διάρκεια της μακροχρόνιας αυτής λειτουργίας του Incoloy 800. Αποδείχθηκε ότι κάποια στοιχεία χρωμίου και σιδήρου μετασχηματίστηκαν από στερεό διάλυμα σε καρβίδια κατά τη μακροχρόνια έκθεση. Διαπιστώθηκε ότι, λόγω του σχηματισμού των καρβιδίων κατά την διάρκεια της έκθεσης, η αντοχή και η σκληρότητα του Incoloy 800 βελτιώθηκε, ενώ η ολκιμότητα και η σκληρότητα του μειώθηκαν.

Τα υλικά που εξετάστηκαν ήταν δείγματα  $10 \times 20 \times 40$  mm. Το Incoloy 800 συνθέθηκε από 39.5Fe, 31.1Ni, 17.9Cr, 0.09C, 0.36Ti, 0.25Al, 1.0Mn και 0.7Si. Τα δείγματα παρασκευάστηκαν από δύο σωλήνες. Ο πρώτος ήταν στο διάλυμα (ανοπτημένη κατάσταση) και ο δεύτερος είχε ληφθεί από ένα σωλήνα που ήταν σε λειτουργία για 15 χρόνια σε ένα υδρογονωμένο περιβάλλον στους  $815^{\circ}C$ . Η διάμετρος πάχους και η εξωτερική διάμετρος του σωλήνα ήταν 13,5 χιλιοστών και 320 mm αντίστοιχα. Η μικροδομή του Incoloy 800 στο διάλυμα της ανοπτημένης κατάστασης δείχνει την πλήρη ωστενιτική μήτρα που περιέχει διάφορους τύπους ιζημάτων που βρίσκονται σε αυτή, κατά μήκος των ορίων των κόκκων. Τα αποτελέσματα των μηχανικών δοκιμών του Incoloy 800 τόσο διαλύματος

άνοπτησης όσο και κατά τη διάρκεια της μακροχρόνιας λειτουργίας έδειξαν ότι κατά τη διάρκεια της 15ετούς λειτουργίας η τελική αντοχή σε εφελκυσμό, η γενική αντοχή και η σκληρότητα απόδοση αυξήθηκαν, ενώ η επιμήκυνση και η σκληρότητα μειώθηκαν. [9]

Σύμφωνα με το άρθρο των Schnaas, A και Grabke, H J, σε ωστενιτικά πειράματα κράματων Cr-Ni-Fe, ειδικά το Incoloy 800 ενανθρακώθηκε με μείγματα  $CH_4-H_2$  σε θερμοκρασίες μεταξύ των  $800$  και  $1100^{\circ}C$ . Δημιουργήθηκε ένας εσωτερικός

σχηματισμός καρβιδίων, ο οποίος ελέγχεται από τη διάχυση του άνθρακα. Εξετάστηκαν δείγματα σε διαφορετικά στάδια της ενανθράκωσης με μεταλλογραφία, χημικά και με ανάλυση ακτίνων-X. Κατόπιν σχηματίστηκαν καρβίδια ενανθράκωσης των τύπων  $M_7C_3$  και  $M_{23}C_6$  ( $M = Cr, Fe, Ni$ ) σε μια ωστενιτική μήτρα Fe-Ni. Μέσω αυτής της διαδικασίας, ο όγκος του υλικού αυξάνεται και συμβαίνουν μεταβολές στη θερμική αγωγιμότητα και τις μαγνητικές ιδιότητες. Η αντίσταση στην οξείδωση του ενανθρακωμένου δείγματος διεισδύει βαθιά και γίνεται εσωτερική οξείδωση στα ενανθρακωμένα δείγματα με  $M_{23}C_6$  στα όρια των κόκκων. Εξαιρετικά ενανθρακωμένα δείγματα με πυκνά καρβίδια  $M_7C_3$  οξειδώνονται και σχηματίζουν ένα προστατευτικό στρώμα  $Cr_2O_3$  πιο αργά από ό, τι το αρχικό υλικό. Ο εσωτερικός σχηματισμός καρβιδίων αλλάζει επίσης τις μηχανικές ιδιότητες πολύ σημαντικά, οι οποίες δοκιμάστηκαν σε εφελκυσμό και εγκοπή με δοκιμές πρόσκρουσης στα 25 και 950 C. Με την αύξηση της ενανθράκωσης, η τάση για ψαθυρή θραύση αυξάνεται. Συνέπεια ανεπιθύμητη, πράγμα το οποίο παρατηρήθηκε και στα αποτελέσματα της δικής μας έρευνας. [10]

Σε μια σειρά ερευνών πραγματοποίησαν οι Smith, Young και Trimm σε μια σειρά από 21 εμπορικά ωστενιτικά και ανθεκτικά στη θερμότητα κράματα τα οποία ενανθρακώθηκαν σε  $H_2-C_3H_6$  ατμόσφαιρες. Εξαιτίας της μείωσης των  $Cr_2O_3$  και  $SiO_2$ , παρέχεται μία δραστηριότητα άνθρακα του ενός. Οι αντιδράσεις πραγματοποιούνται σε θερμοκρασίες μεταξύ των 900 – 1100°C και το προκύπτον βάθος ενανθράκωσης μετρήθηκε μεταλλογραφικά. Όλα τα κράματα έδειξαν κινητική μετά από μια αρχική σύντομη περίοδο ενανθράκωσης, σε χαμηλές θερμοκρασίες με ταχύτερες αντιδράσεις. Συζητούνται οι ενέργειες ενεργοποίησης της ενανθράκωσης σε σχέση με τις διαλυτότητες άνθρακα και τους συντελεστές διάχυσης. Το συμπέρασμα είναι ότι η θεωρία του Βάγκνερ της εσωτερικής οξείδωσης είναι ποσοτικά εφαρμόσιμη σε απλά κράματα, αλλά όχι σε κράματα που περιέχουν προσθήκες δραστικών στοιχείων.

Ο μεταλλογραφικός έλεγχος αποκάλυψε ότι σχηματισμός εσωτερικών καρβιδίων είχε συμβεί στην πραγματικότητα σε δύο ζώνες. Η εμφάνιση των καρβιδίων ήταν συνεχής με τον σχηματισμό του καρβιδίου  $M_{23}C_6$  στην εσωτερική ζώνη και του  $M_7C_3$  στην εξωτερική. Η εξέταση της εξωτερικής επιφάνειας του ενανθρακωμένου δείγματος με περιθλασιμετρία ακτίνων-X έδειξε την παρουσία μιας φάσης που έχει τη δομή  $Cr_7C_3$ , σύμφωνα με τα μεταλλογραφικά στοιχεία. Αυτό το υλικό θεωρείται ότι συνεχίζει την εξωτερική διάβρωση του προϊόντος. [11]

## 2ο ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

Για τις τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα **THERMO-CALC**, για τη διερεύνηση ύπαρξης και τον υπολογισμό, εφόσον βρέθηκαν, των καρβιδίων  $M_{23}C_6$ ,  $M_7C_3$  και  $M_3C$ . [ενδεικτικό παράρτημα 1]

Για πάνω από 25 χρόνια, το Thermo-Calc έχει υπάρξει στην πρώτη γραμμή του επιστημονικού λογισμικού και των βάσεων δεδομένων για τους υπολογισμούς που περιλαμβάνουν υπολογιστική θερμοδυναμική και προσομοιώσεις ελεγχόμενης διάχυσης.

Το Thermo-Calc είναι ένα ισχυρό πακέτο λογισμικού που χρησιμοποιείται για την εκτέλεση θερμοδυναμικών διαγραμμάτων και υπολογισμών σε διαγράμματα φάσεων για συστήματα πολλών συστατικών. Οι υπολογισμοί βασίζονται σε θερμοδυναμικές βάσεις δεδομένων που παράγονται από την αξιολόγηση των πειραματικών δεδομένων χρησιμοποιώντας τη μέθοδο CALPHAD. Οι βάσεις δεδομένων είναι διαθέσιμες για χάλυβες, Ti, Al, Mg, Νί-κράματα, πολλαπλών συστατικών οξειδία και πολλά άλλα υλικά.

Τα κινητικά δεδομένα υπολογίστηκαν με τη βοήθεια του προγράμματος **DICTRA**, για τις τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες. Ο τρόπος λειτουργίας του προγράμματος έχει ως εξής: μετά την είσοδο των δεδομένων (θερμοκρασία, σύσταση, χρόνος, διαστάσεις δοκιμίου κ.λ.π.) με τη χρησιμοποίηση των αντίστοιχων σωστών εντολών κατά την εισαγωγή τους, ξεκινάει το τρέξιμο του προγράμματος σε βήματα (time-steps). Στα πρώτα time-step, και καθώς ο χρόνος ενανθράκωσης των 200 ωρών που έχουμε ορίσει ξεκινάει, απορροφάται ένα μικρό ποσοστό άνθρακα και έχουμε το πρώτο σχηματισμό μικρού ποσοστού των καρβιδίων σε μικρό βάθος διείσδυσης. Καθώς προχωρούν τα time-step και ο χρόνος εξελίσσεται, έχουμε περισσότερη δέσμευση του άνθρακα με αποτέλεσμα δημιουργίας περισσότερων καρβιδίων αλλά και διεύρινη των ήδη υπαρχόντων, και βαθύτερη διείσδυση τους στο κράμα. Τα διαφορετικά αυτά time-step σχηματίζουν σιγά-σιγά τα profil των καμπυλών του άνθρακα και των καρβιδίων. Αυτή η διαδικασία του τρεξίματος του προγράμματος επαναλαμβάνεται για διαφορετικές τιμές θερμοκρασίας και ενεργότητας άνθρακα ώστε να γίνει πλήρης διερεύνηση και σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης, για τη διεξαγωγή συμπερασμάτων. [ενδεικτικό παράρτημα 2]

Το πρόγραμμα Dictra είναι ένα μοναδικό εργαλείο λογισμικού που χρησιμοποιείται για λεπτομερείς προσομοιώσεις διάχυσης ελεγχόμενων μετασχηματισμών των φάσεων για κράματα πολλών συστατικών.

Παραδείγματα τέτοιων εφαρμογών περιλαμβάνουν:

- Τη θερμική επεξεργασία
- Τον μικροδιαχωρισμό κατά την διάρκεια της στερεοποίησης
- Την ανάπτυξη και την διάλυση των ιζημάτων
- Την διεύρινη κόκκων

- Την ενανθράκωση χαλύβων
- Τη διάλυση καρβιδίων κατά τη διάρκεια ωστενιτισμού
- Ομογενοποίηση κραμάτων

Το DICTRA απαιτεί Thermo-Calc απαραίτητους υπολογισμούς για την θερμοδυναμική. Το λογισμικό DICTRA έχει εφαρμοστεί σε πολυάριθμα προβλήματα της πρακτικής και επιστημονικού ενδιαφέροντος.

Οι προσομοιώσεις με DICTRA απαιτούν βάσεις δεδομένων τόσο για: τη θερμοδυναμική των δεδομένων (που χρησιμοποιείται σε Thermo-Calc) και τα κινητικά δεδομένα (χρησιμοποιούνται σε DICTRA). Υπάρχουν διαθέσιμες βάσεις δεδομένων για διαφορετικά υλικά και εφαρμογές, όπως ο χάλυβας, τα υπερκράματα νικελίου ή αλουμινίου.

Παρουσίαση γεωμετρικού μοντέλου και των συνοριακών συνθηκών του προβλήματος.

#### Συνοριακές Συνθήκες

**Κράμα** INCOLOY 800

**Σύσταση** Fe – 32Ni – 21Cr – 0.1C %

**Χρόνοι ενανθράκωσης** 200h στους 900, 1000 και 1100°C

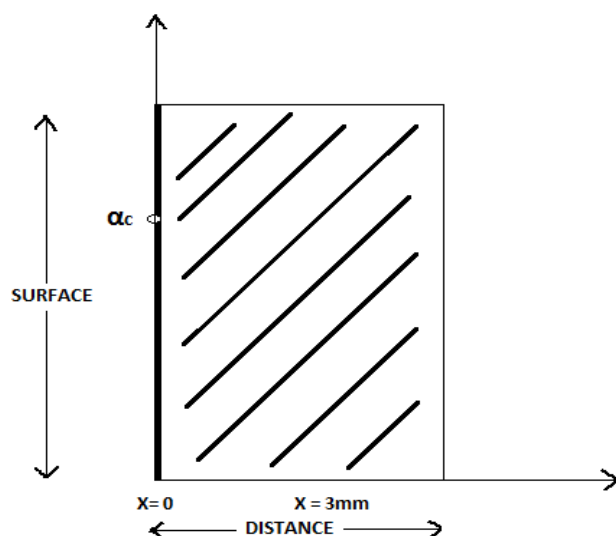
**Ενεργότητα άνθρακα**  $a_c = 0,95$

**Simulation Time** 200h x 3600sec = 720000sec

**Διαστάσεις** 10 x 10 x 3 mm

**Σχηματισμός καρβιδίων**  $M_{23}C_6$ ,  $M_7C_3$  και  $M_3C$

## Γεωμετρικό Μοντέλο



**Σχήμα 1:** Πραγματικό γεωμετρικό μοντέλο του κρμάτος.

Το παραπάνω σχήμα είναι το πραγματικό γεωμετρικό μοντέλο του κρμάτος. Στον άξονα του  $\Psi$  μας δείχνει την επιφάνεια του κρμάτος όπου από εκεί ξεκινάει ο συντελεστής της ενεργότητας να διεισδίδει μέσα στο κρμά καθώς δεσμεύει τον άνθρακα για τη δημιουργία των καρβιδίων. Ο άξονας του  $X$  αντιστοιχεί στην απόσταση διείσδυσης του άνθρακα όπου σχηματίζονται τα καρβίδια, ανάλογα με τη τιμή της ενεργότητας.

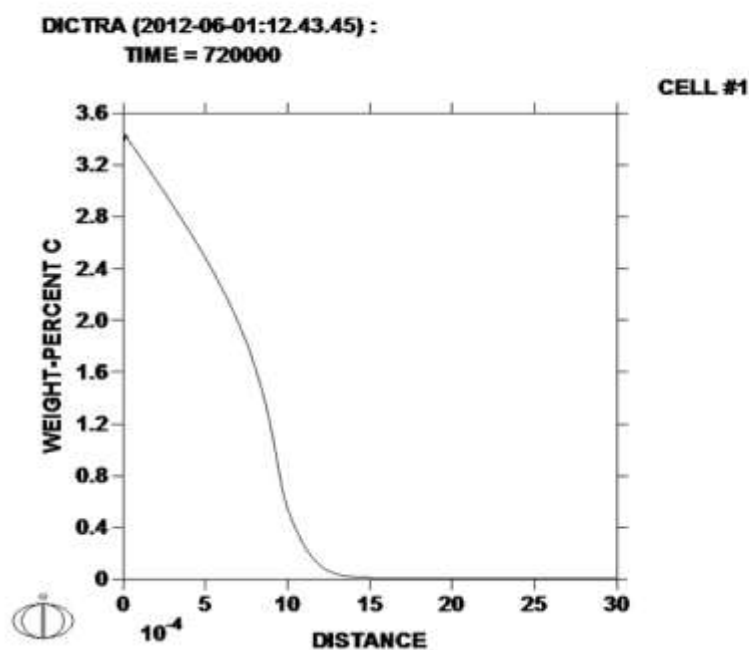


### 3ο ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ

Θα παρουσιαστούν και θα σχολιαστούν τα διαγράμματα για κάθε μία από τις θερμοκρασίες χωριστά αλλά και διαγράμματα συγκεντρωτικών αποτελεσμάτων, της προσομοίωσης της ενανθράκωσης του κράματος Incoloy 800.

#### Για τους 900°C

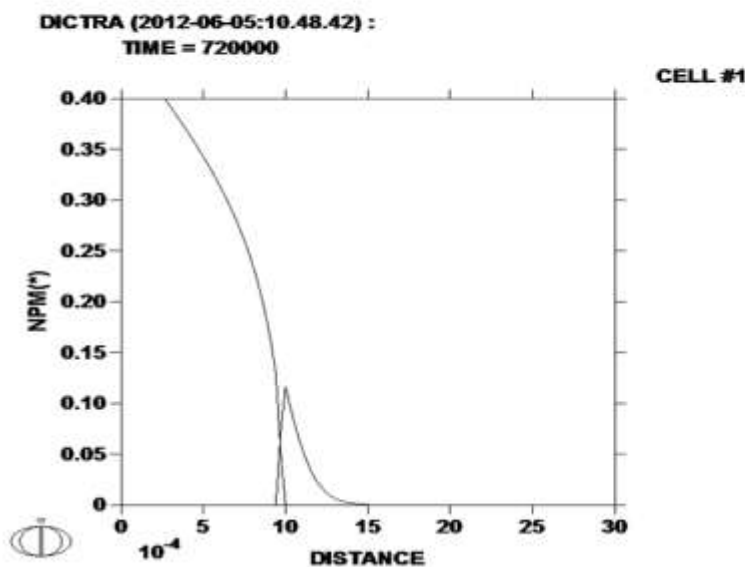
Αρχικά παρουσιάζεται στους 900°C και για ενεργότητα άνθρακα 0.95 το διάγραμμα για το προφίλ του άνθρακα. Έχουμε μείωση του ποσοστού του C σχεδόν κατακόρυφα γιατί έχουμε δέσμευση αρκετής ποσότητας C για να ξεκινήσει η διαδικασία της ενανθράκωσης, ώστε να μπορέσουν να σχηματιστούν τα καρβίδια. Παρατηρούμε ότι σε χαμηλές θερμοκρασίες το βάθος διείσδυσης του άνθρακα είναι χαμηλότερο και καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία, αυξάνεται και αυτό. Κάτι που θα διαπιστώσουμε καλύτερα βλέποντας τα συγκεντρωτικά διαγράμματα παρακάτω.



**Σχήμα 2:** Διάγραμμα του profil C σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης για 900° C

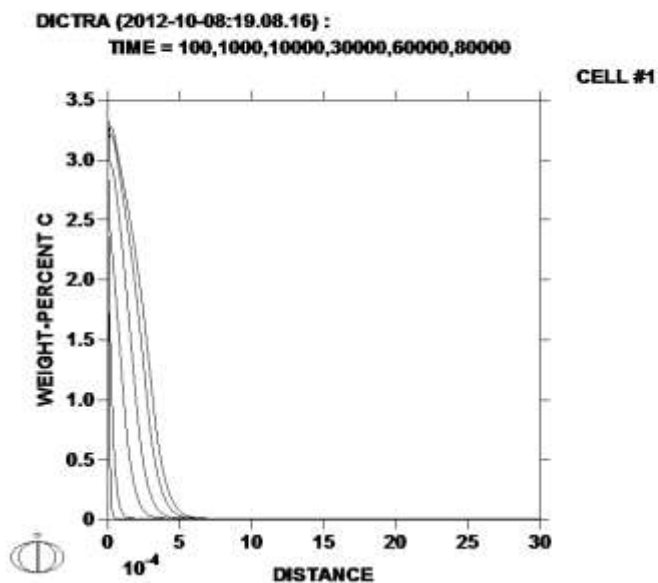
Στο παρακάτω ενδεικτικό διάγραμμα βλέπουμε το σχηματισμό καρβιδίων για την ίδια θερμοκρασία και την ίδια τιμή ενεργότητας. Ο άξονας των καρβιδίων έχει οριστεί να φτάνει μέχρι 0.40 και έτσι στο διάγραμμα φαίνεται μόνο η περιοχή της τομής των καρβιδίων και όχι η ωστενιτική περιοχή του κράματος. Τα υποφαινόμενα καρβίδια που δημιουργούνται αντιστοιχούν στα  $M_{23}C_6$  και  $M_7C_3$ . Το καρβίδιο  $M_{23}C_6$  μετά το πέρας της ολοκλήρωσης του χρόνου ενανθράκωσης (200h), μετατρέπεται στο

καρβίδιο  $M_7C_3$ . Το καρβίδιο  $M_7C_3$  περιέχει αυξημένα ποσά χρωμίου Cr, πράγμα που βοηθάει στο μετασχηματισμό καθώς εξελίσσεται η ενανθράκωση.



**Σχήμα 3:** Διάγραμμα των καρβιδίων σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης

Ακολουθεί παραμετρική μελέτη ως προς το χρόνο και πάλι για την ίδια θερμοκρασία και την ίδια ενεργότητα ( $900^{\circ}\text{C}$  και  $a_c=0.95$ ) για χρόνους 30.000, 60.000 και 80.000 sec.

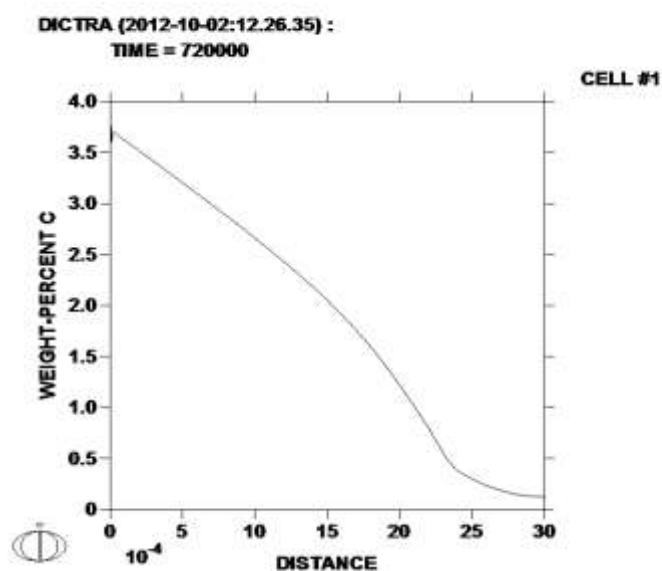


**Σχήμα 4:** Παραμετρική μελέτη ως προς το χρόνο για το profil του C για τους  $900^{\circ}\text{C}$ .

Στην ουσία η παραμετρική μελέτη ως προς το χρόνο είναι η εξέλιξη της διαδικασίας της ενανθράκωσης όπως προχωράνε τα time-steps στο Dictra. Παρουσιάζεται το profil του C στα 100, 1000 έως και 80000 δευτερόλεπτα και μας δείχνει πόσο μετατοπίζεται η καμπύλη καθώς με την πάροδο του χρόνου δεσμεύεται όλο και περισσότερη ποσότητα άνθρακα και διεισδύει περισσότερο μέσα στο υλικό.

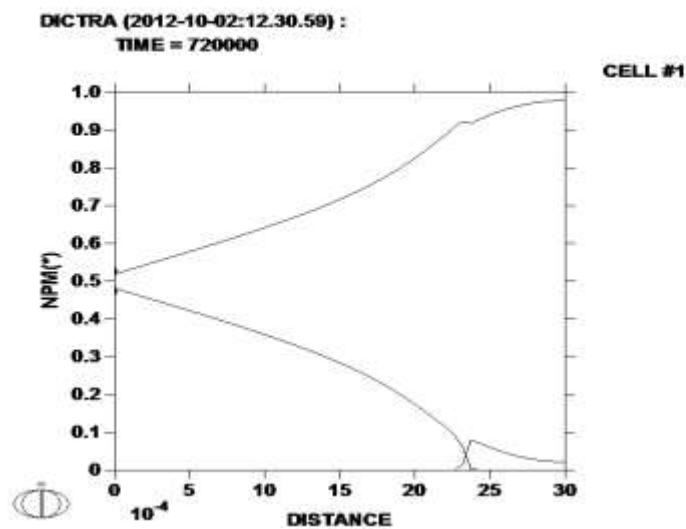
### ΓΙΑ ΤΟΥΣ 1000°C

Διάγραμμα συνολικής συγκέντρωσης του άνθρακα καθώς αυξάνεται η απόσταση. Εδώ βλέπουμε πως καθώς ανέβηκε η θερμοκρασία στους 1000°C, έχουμε πολύ μεγάλη μετατόπιση της καμπύλης προς τα δεξιά ξεπερνώντας τα 3mm στον άξονα της απόστασης σε σύγκριση με τους 900°C που κατέβαινε σχεδόν κατακόρυφα στα 12mm.

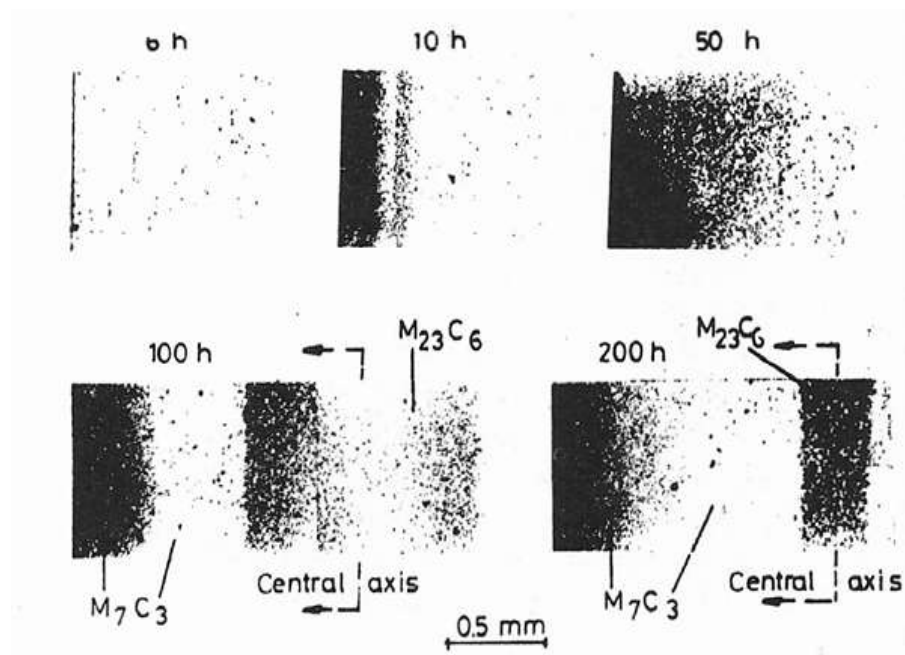


**Σχήμα 5:** Διάγραμμα του profil C σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης για 1000°C.

Διάγραμμα του ποσοστού των καρβιδίων.



**Σχήμα 6:** Διάγραμμα για το σχηματισμό καρβιδίων σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης.

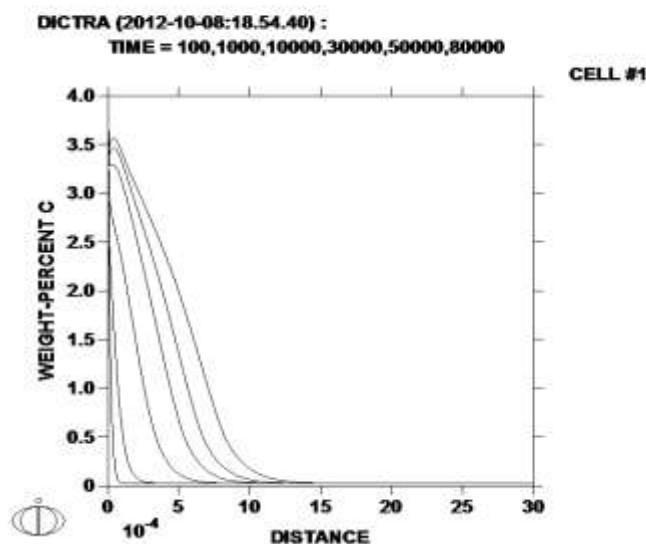


**Σχήμα 7:** Μορφολογία της μικροδομής ενανθρακωμένων δειγμάτων του Incoloy 800 στους 1000°C και για ενεργότητα άνθρακα 0.95.

Το διάγραμμα αυτό από το άρθρο *Matamala Carburization Fe-Ni-Cr 1988* είναι για 1000°C και μας δείχνει τον σχηματισμό των καρβιδίων για 6, 10, 50, 100 και 200h. Η έντονη διαφορά ανάμεσα στις 100 και στις 200h είναι ο πυκνός σχηματισμός του  $M_{23}C_6$  καρβιδίου στις 200h ενώ στις 100h ήταν σχεδόν ανύπαρκτο. Όπως και η περιοχή του  $M_7C_3$  καρβιδίου διευρύνθηκε εκτεταμένα. Άρα βλέπουμε και στο άρθρο αλλά και στα αποτελέσματα μας ότι με την αύξηση της θερμοκρασίας και του χρόνου επώασης η ύπαρξη των καρβιδίων γίνεται πιο αισθητή καθώς και η διαδικασία της ενανθράκωσης. Η κεντρική περιοχή του δείγματος μειώνεται σε πλάτος όταν ο χρόνος ενανθράκωσης αυξάνεται και περιέχει λιγότερο  $M_{23}C_6$  καρβίδιο. Σύμφωνα με τους Schnaas και Grabke [10], το καρβίδιο  $M_7C_3$  περιέχει αυξημένες ποσότητες χρωμίου καθώς η ενανθράκωση διεισδύει σε βάθος. Σε περιοχές με υψηλότερο χρώμιο η 'επίθεση' είναι λιγότερο εμφανής.

Η μεταλλογραφία με αντιδραστήριο του Murakami επέτρεψε την παρατήρηση της εσωτερικής ενανθράκωσης με το σχηματισμό του  $M_{23}C_6$  σε δείγματα, τα οποία ενανθρακώθηκαν για 6, 10 και 50 ώρες. Τα δείγματα όμως που ενανθρακώθηκαν για 100 και 200 ώρες, μετασχηματίστηκαν από καρβίδια  $M_{23}C_6$  σε  $M_7C_3$ .

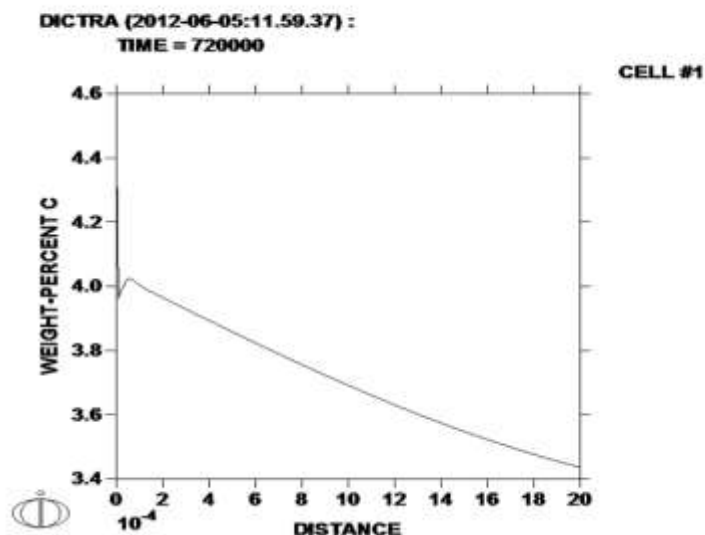
Η παραμετρική μελέτη ως προς το χρόνο δείχνει και αυτή πολύ έντονες αλλαγές και μεγάλες μετατοπίσεις με την αύξηση της θερμοκρασίας για 30.000, 50.000 και 80.000 sec.



**Σχήμα 8:** Παραμετρική μελέτη ως προς το χρόνο για το profil του C για τους 1000°C.

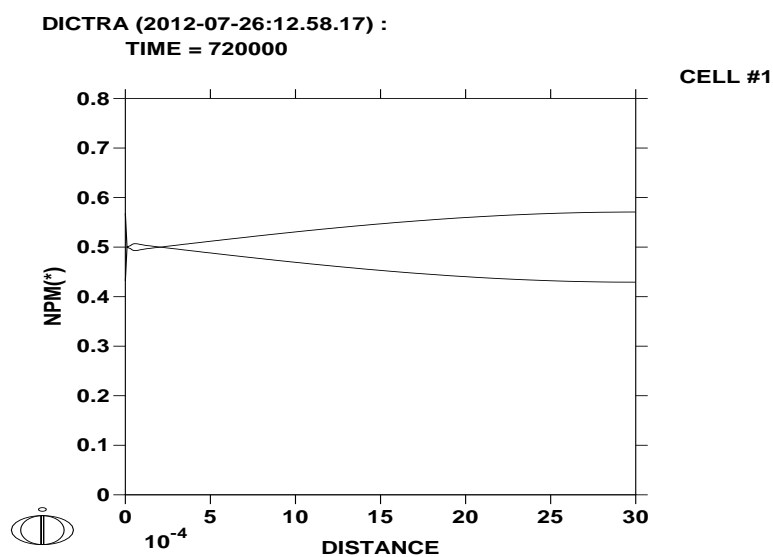
## ΓΙΑ ΤΟΥΣ 1100 °C

Στο διάγραμμα συνολικής συγκέντρωσης C σε αυτή τη θερμοκρασία παρατηρούμε πως το ποσοστό του C ανέβηκε στο 4.1 ενώ στις προηγούμενες θερμοκρασίες κυμαινότανε απο το 3.6 έως το 3.7 .



**Σχήμα 9:** Διάγραμμα του profil C σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης για 1100°C

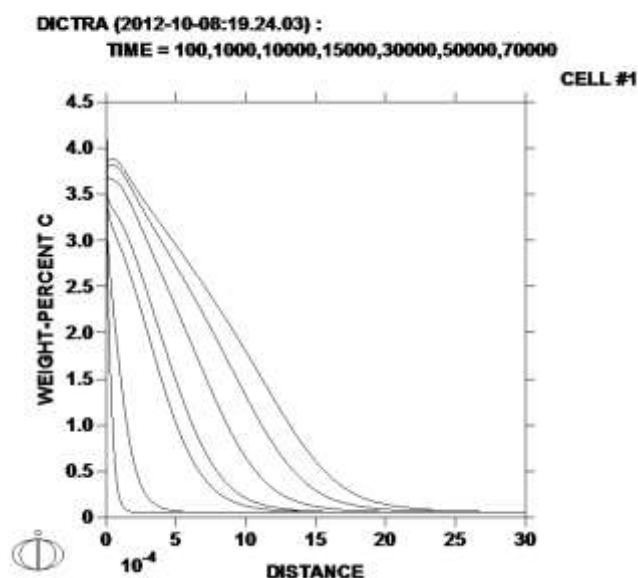
Διάγραμμα καρβιδίων που δημιουργήθηκαν.



**Σχήμα 10:** Διάγραμμα για το σχηματισμό καρβιδίων σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης.

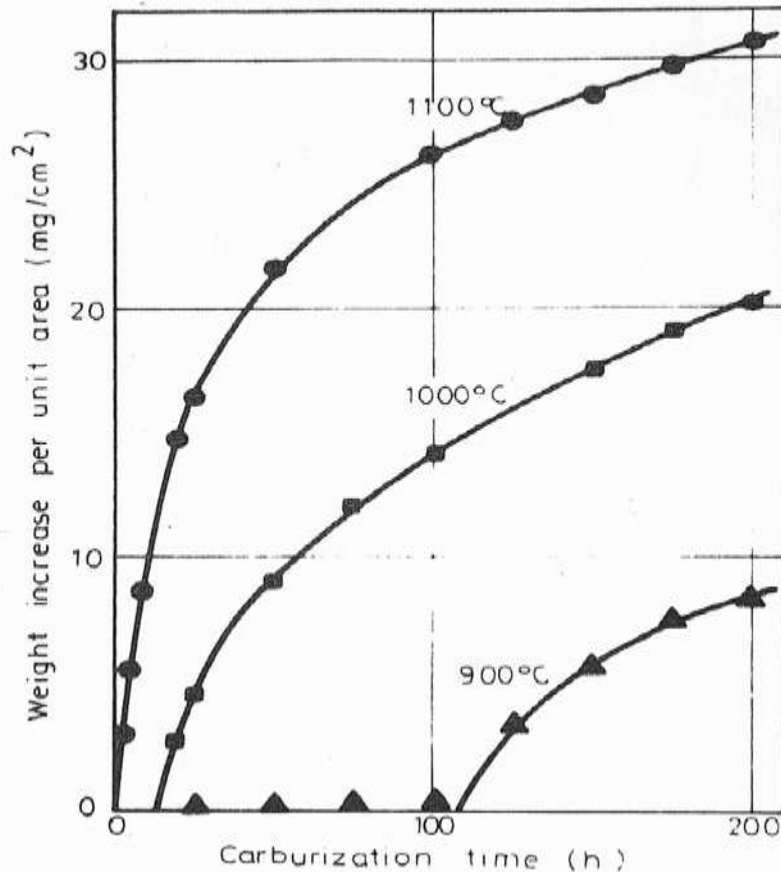
Στην περίπτωση θερμοκρασίας στους 1100°C παρατηρούμε πως δεν σχηματίζονται καρβίδια. Η αιτιολογία αυτού σύμφωνα με το άρθρο είναι γιατί η διεπιφάνεια εξαφανίζεται στους 1100°C και μόνο διευρισμένα καρβίδια  $M_7C_3$  παρουσιάζονται.

Παραμετρική μελέτη και πάλι ως προς το χρόνο



**Σχήμα 11:** Παραμετρική μελέτη ως προς το χρόνο για το profil του C για τους 1100°C.

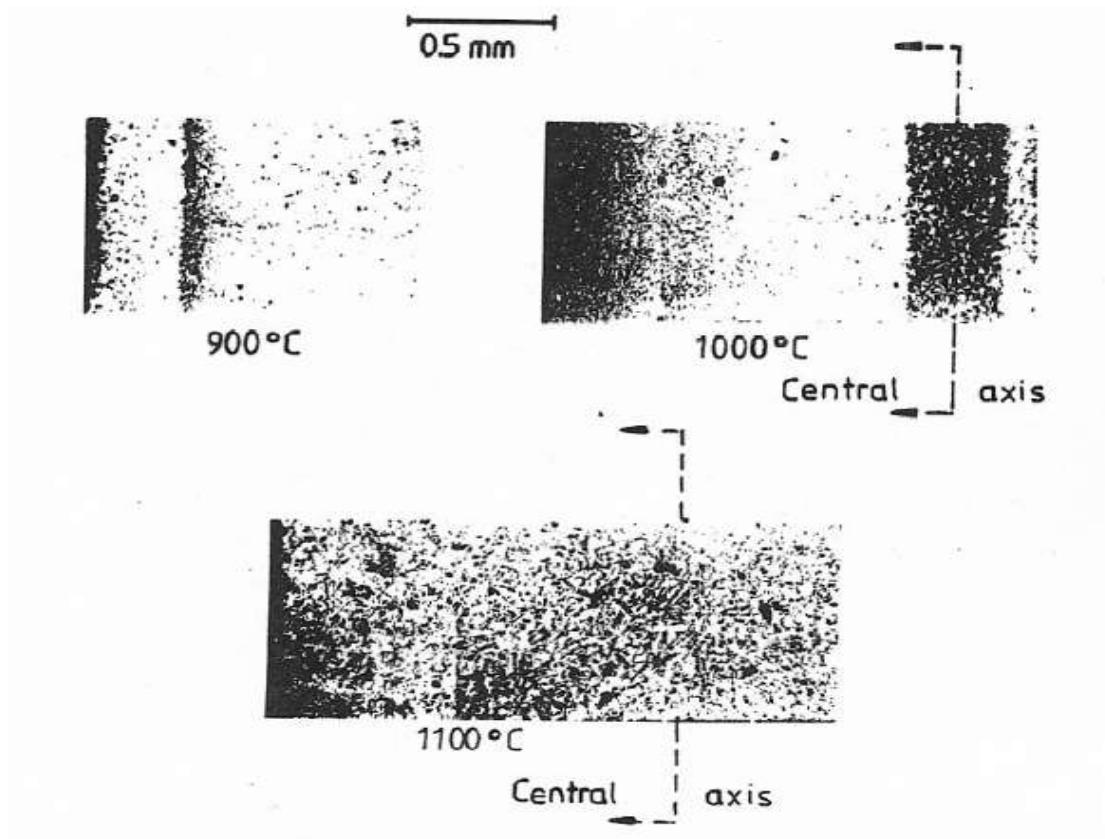
Σύμφωνα με όλα τα παραπάνω βλέπουμε ότι καθώς αυξάνονται οι χρόνοι ενανθράκωσης, αυξάνεται και η ικανότητα δέσμευσης C από το κράμα με τη δημιουργία όλο και μεγαλύτερου ποσοστού καρβιδίων με το Cr, κάτι που φαίνεται και στο διάγραμμα του άρθρου όπου έχει συγκεντρωτικά τις καμπύλες των τριών χρόνων ενανθράκωσης.



**Σχήμα 12:** Μετρήσεις της ενανθράκωση του Incoloy 800 σε Ar-Cl<sub>4</sub>-H<sub>2</sub> ατμόσφαιρες σε διαφορετικές θερμοκρασίες ( $a_c = 0,95$ ).

Η μορφολογία των επιφανειακών αλλαγών του καρβιδίου αλλάζει, όταν αλλάζει και η θερμοκρασία ενανθράκωσης. Σύμφωνα και πάλι με το παραπάνω άρθρο που προαναφέρθηκε, εάν δούμε τα μικρογραφήματα ηλεκτρονίων σάρωσης από τις επιφάνειες των δειγμάτων του κράματος Incoloy 800 που ενανθρακώθηκαν για 200 ώρες στους 900, 1000 και 1100°C, θα καταλίγαμε σε κάποια συμπεράσματα. Στους 900°C η επιφάνεια του καρβιδίου είναι πορώδης, με μια κατανομή βελονών. Καθώς η διάχυση του άνθρακα διευκολύνεται από μια αύξηση της θερμοκρασίας, η επιφάνεια του καρβιδίου γίνεται προοδευτικά όλο και λιγότερο πορώδης. Στους 1100°C τα καρβίδια που σχηματίζονται μετά από 200 ώρες ενανθράκωσης έχουν μια συμπαγή δομή η οποία, λόγω του κορεσμού του άνθρακα στην άκρη του δείγματος.





**Σχήμα 13:** Μορφολογία δομής των δειγμάτων του Incoloy 800 που ενανθρακώθηκαν στους 900, 1000 και 1100°C και ενεργότητα άνθρακα 0.95 για 200 ώρες.

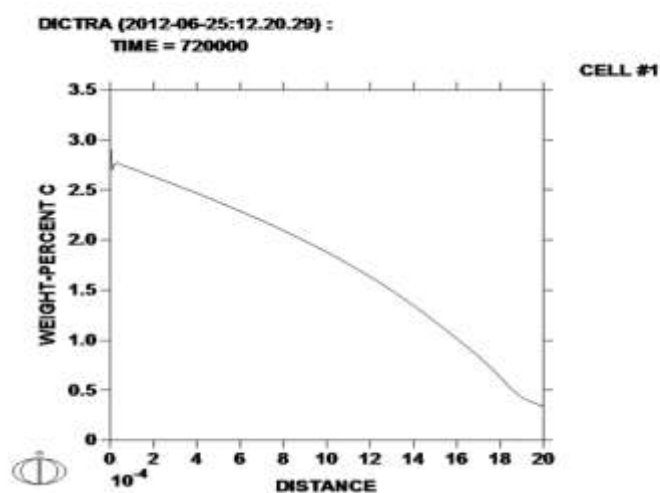
Παραμετρική μελέτη ως προς τη συνοριακή συνθήκη της ενεργότητας άνθρακα  $\alpha_c$ .

Έγινε παραμετρική μελέτη του προβλήματος ως προς τις εξής τιμές ενεργότητας 0.40, 0.60 και 0.80 για τις θερμοκρασίες 900°C, 1000°C και 1100°C.

Θα παρουσιαστεί ενδεικτικά η παραμετρική μελέτη των διαγραμμάτων για τους 1000°C μόνο.

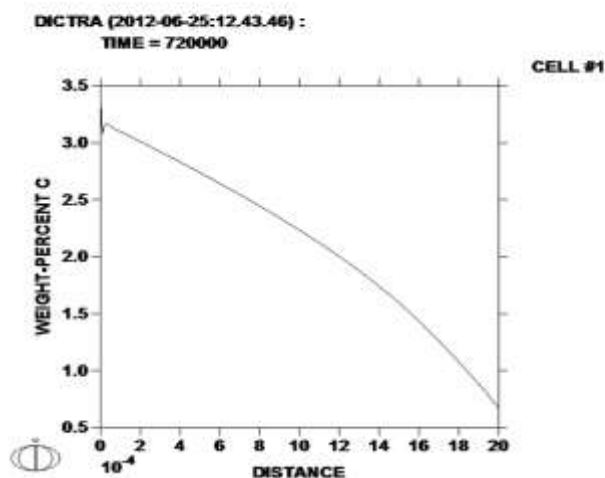
Για  $\alpha_c = 0.40$

### Προφίλ του Άνθρακα



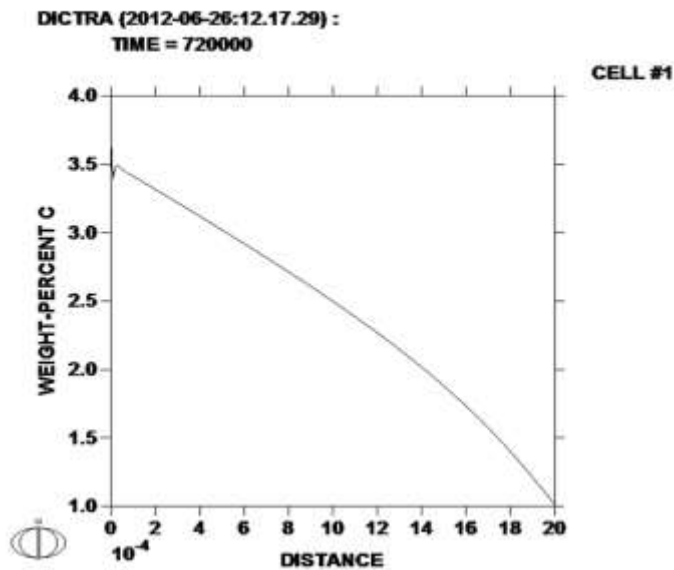
**Σχήμα 14:** Διάγραμμα του profil C σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης για 1000°C και  $\alpha_c = 0.40$ .

Για  $\alpha_c = 0.60$



**Σχήμα 15:** Διάγραμμα του profil C σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης για 1000°C και  $\alpha_c = 0.60$ .

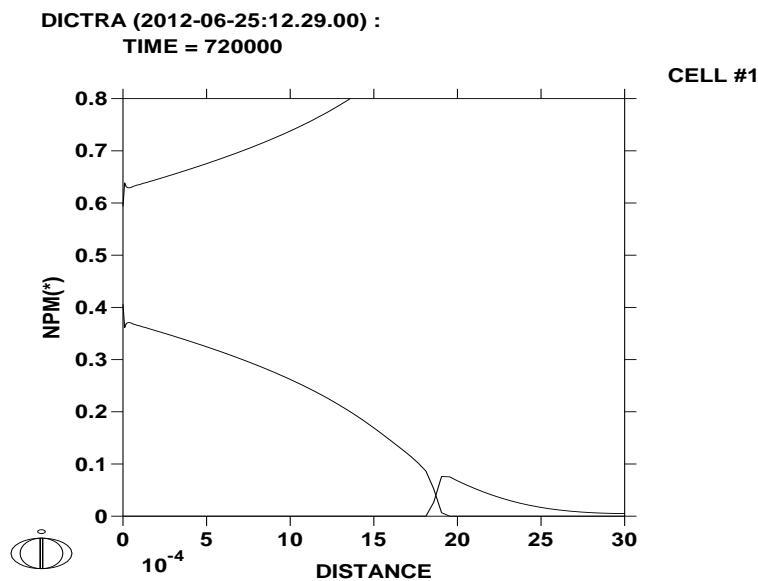
Για  $\alpha_c = 0.80$



**Σχήμα 16:** Διάγραμμα του profil C σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης για  $1000^{\circ}\text{C}$  και  $\alpha_c = 0.80$ .

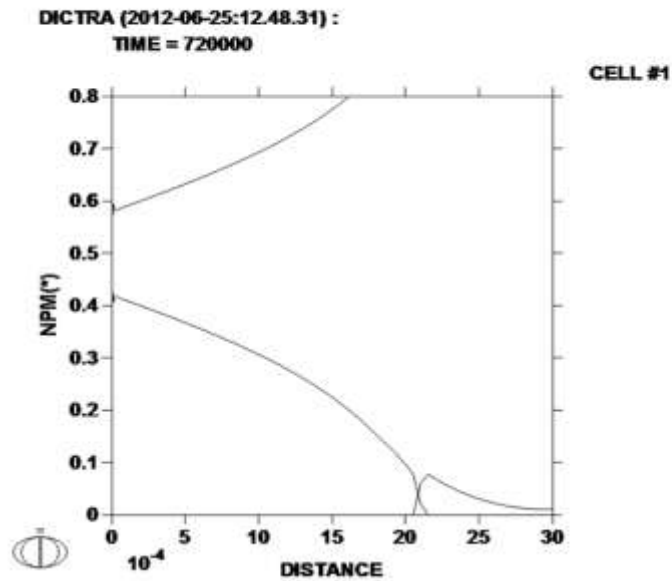
Για  $\alpha_c = 0.40$

Διαγράμματα του Ποσοστού των Καρβιδίων



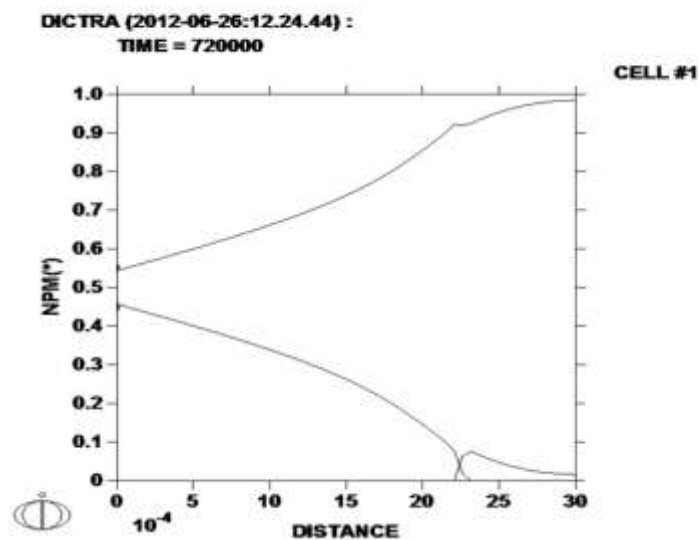
**Σχήμα 17:** Διάγραμμα του ποσοστού των καρβιδίων σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης για  $1000^{\circ}\text{C}$  και  $\alpha_c = 0.40$ .

Για  $\alpha_c = 0.60$



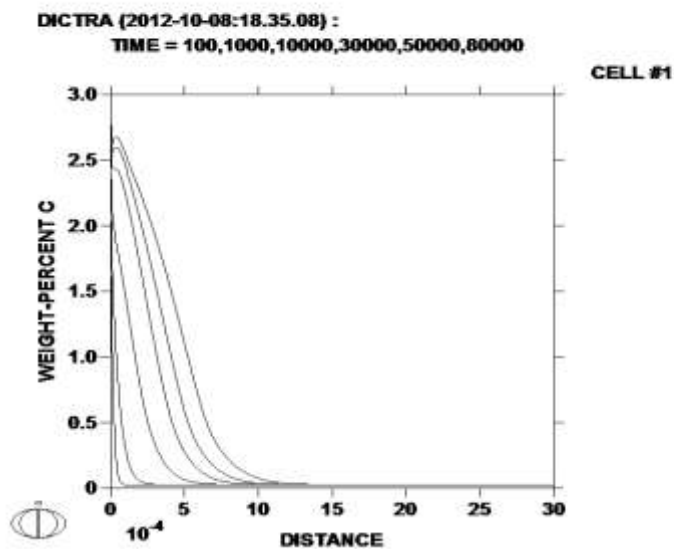
**Σχήμα 18:** Διάγραμμα του ποσοστού των καρβιδίων σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης για  $1000^{\circ}\text{C}$  και  $\alpha_c = 0.60$ .

Για  $\alpha_c = 0.80$

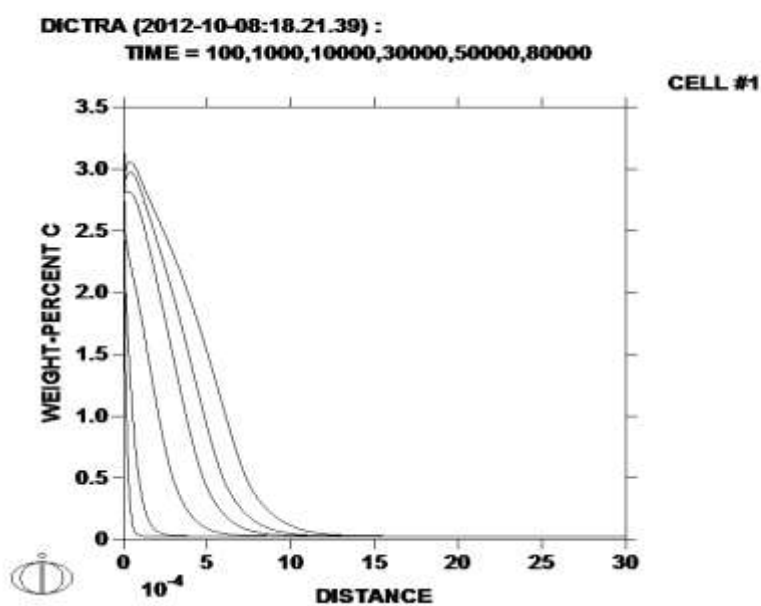


**Σχήμα 19:** Διάγραμμα του ποσοστού των καρβιδίων σε σχέση με την απόσταση διείσδυσης για  $1000^{\circ}\text{C}$  και  $\alpha_c = 0.80$ .

Παραμετρική μελέτη με διαφορετικούς χρόνους ενανθράκωσης για τις ίδιες συνοριακές συνθήκες  $\alpha_c$  0.40, 0.60 και 0.80 στους  $1000^\circ\text{C}$ .



**Σχήμα 20:** Παραμετρική μελέτη ως προς το χρόνο για το profil του C για τους  $1000^\circ\text{C}$  για ενεργότητα άνθρακα  $\alpha_c=0.40$ .

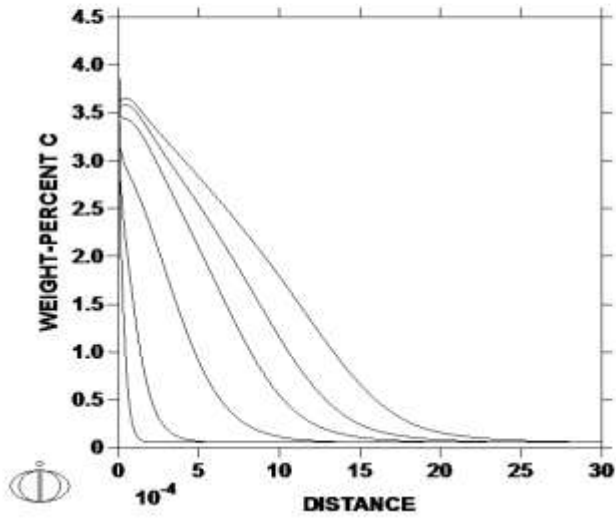


**Σχήμα 21:** Παραμετρική μελέτη ως προς το χρόνο για το profil του C για τους  $1000^\circ\text{C}$  για ενεργότητα άνθρακα  $\alpha_c=0.60$ .

DICTRA (2012-10-08:18.09.41) :

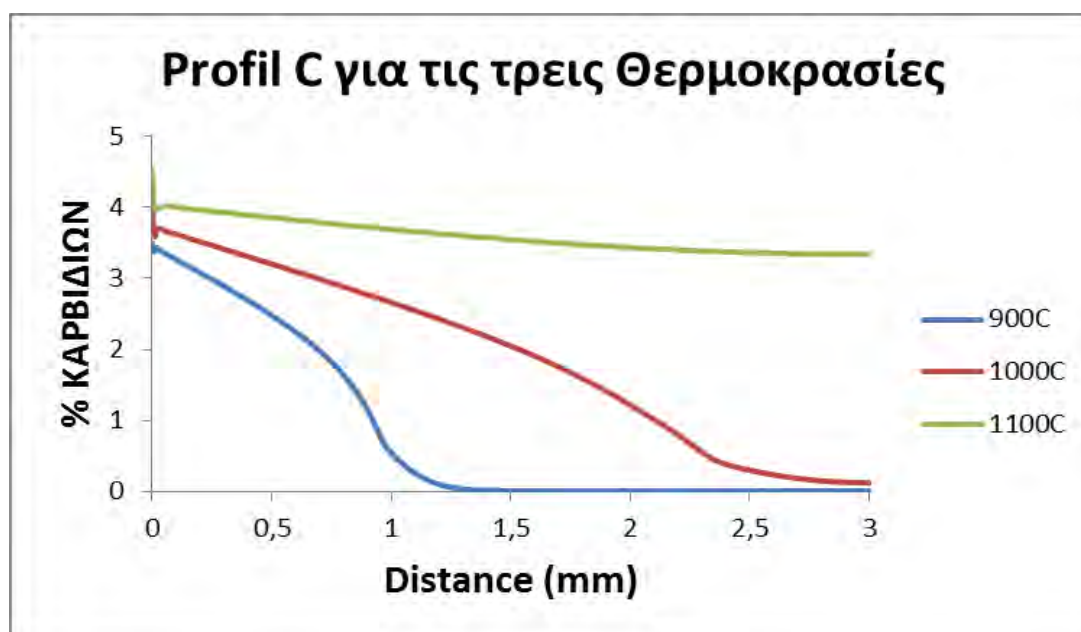
TIME = 100,1000,10000,30000,50000,80000

CELL #1



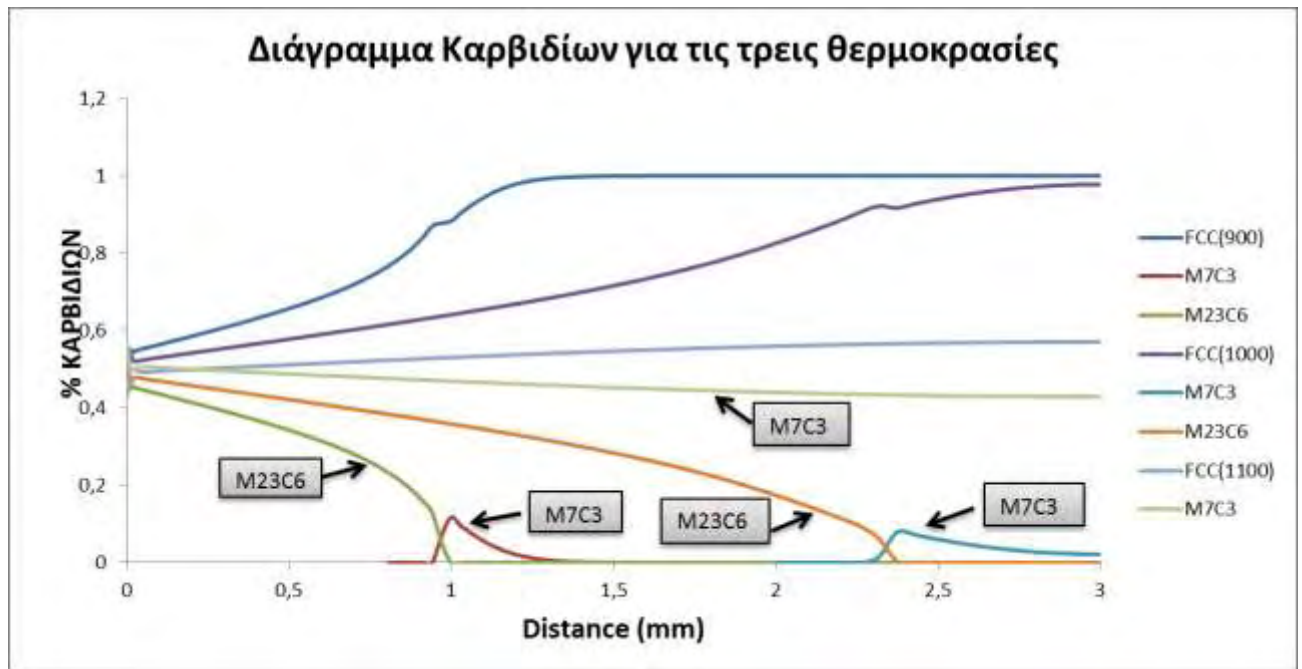
**Σχήμα 22:** Παραμετρική μελέτη ως προς το χρόνο για το profil του C για τους 1000°C για ενεργότητα άνθρακα  $a_c=0.80$ .

## Συγκριτικά Διαγράμματα



**Σχήμα 23:** Συγκριτικό διάγραμμα του profil του C για τις τρεις θερμοκρασίες και για ενεργότητα άνθρακα  $a_c = 0.95$ .

Στο παραπάνω διάγραμμα απεικονίζεται το profil του άνθρακα για τις θερμοκρασίες των 900°C, 1000°C και 1100°C και για ενεργότητα άνθρακα  $a_c = 0.95$ . Ο άξονας των  $x$  δείχνει την απόσταση, δηλαδή το βάθος διείσδυσης του C στο κράμα. Ο άξονας των  $y$  αποτελεί την επιφάνεια του κράματος. Παρατηρείται ότι καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία, το ποσοστό του άνθρακα ανεβαίνει. Αυτό σημαίνει ότι όταν αυξάνεται η θερμοκρασία στο κράμα, χρειάζεται να δεσμευτεί περισσότερη ποσότητα άνθρακα ώστε να γίνει η διαδικασία της ενανθράκωσης, άρα λογικό και να ανεβαίνει πολύ η καμπύλη για τους 1100°C.

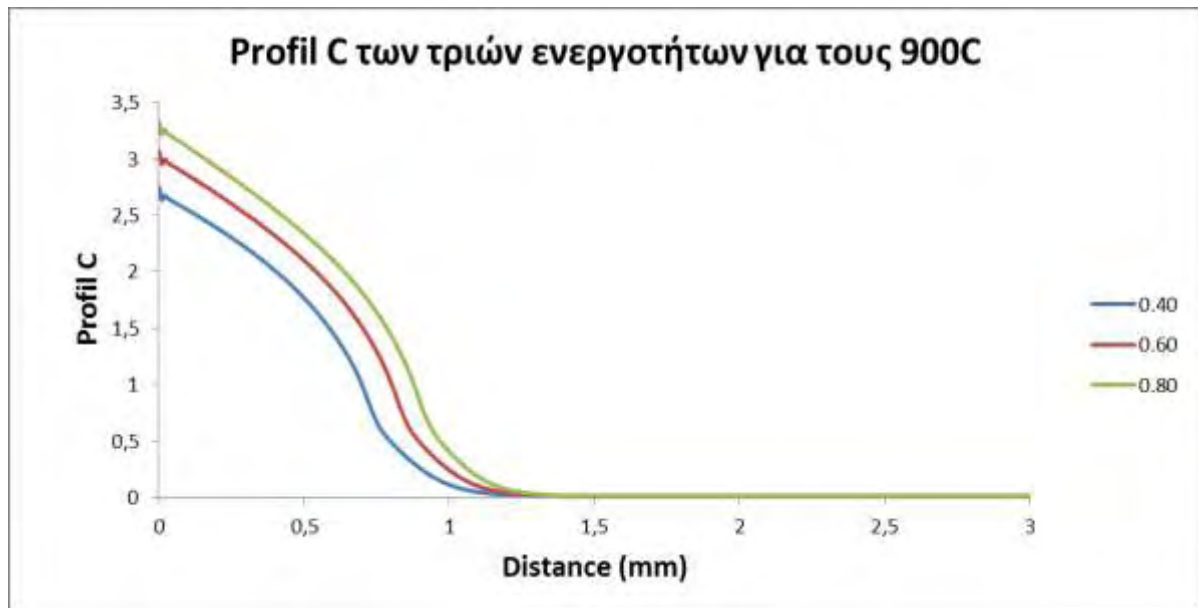


**Σχήμα 24:** Συγκριτικό διάγραμμα του ποσοστού των καρβιδίων για τις τρεις θερμοκρασίες και για ενεργότητα άνθρακα  $a_c = 0.95$

Σε αυτό το διάγραμμα απεικονίζεται η δημιουργία καρβιδίων του κράματος πάλι για τις ίδιες θερμοκρασίες (900°C-1000°C-1100°C) και για την ίδια ενεργότητα άνθρακα (0.95). Οι τρεις πάνω καμπύλες του διαγράμματος αποτελούν την ωστενιτική περιοχή του σιδήρου, δηλαδή την ωστενιτική μήτρα του κράματος. Παρατηρούμε πως σχηματίζονται δυο ειδών καρβίδια, το  $M_{23}C_6$  και το  $M_7C_3$  αλλά μόνο για τις θερμοκρασίες των δυο πρώτων θερμοκρασιών, τους 900°C και τους 1000°C. Σε αυτές τις θερμοκρασίες και κατόπιν το πέρας των 200h που είναι ο προβλεπόμενος χρόνος ενανθράκωσης, σχηματίζεται αρχικά το καρβίδιο  $M_{23}C_6$  το οποίο μετασχηματίζεται στο καρβίδιο  $M_7C_3$ , εξού και τα δυο είδη διαφορετικών καμπυλών που κατέρχονται στον άξονα της απόστασης (άξονας χ). Αυτό συμβαίνει διότι μειώνεται η κεντρική περιοχή σε πλάτος όσο αυξάνεται ο χρόνος ενανθράκωσης και περιέχει λιγότερη ποσότητα καρβιδίου  $M_{23}C_6$ . Το καρβίδιο  $M_{23}C_6$  περιέχει επίσης υψηλά ποσοστά σε Cr, πράγμα που αιτιολογεί την μετατροπή του λεπτού, προστατευτικού στρώματος οξειδίου σε στρώμα καρβιδίου λόγω αύξησης της θερμοκρασίας στο κράμα καθώς εξελίσσεται η ενανθράκωση.

Στους 1100°C έχουμε μόνο το σχηματισμό του καρβιδίου  $M_7C_3$ . Αυτό οφείλεται στον κορεσμό δέσμευσης του άνθρακα με αποτέλεσμα να έχει μια συμπαγή δομή λιγότερο πορώδης και να μην μπορούν να σχηματιστούν καρβίδια. Γι' αυτό και απεικονίζεται έτσι το διάγραμμα για τους 1100°C.



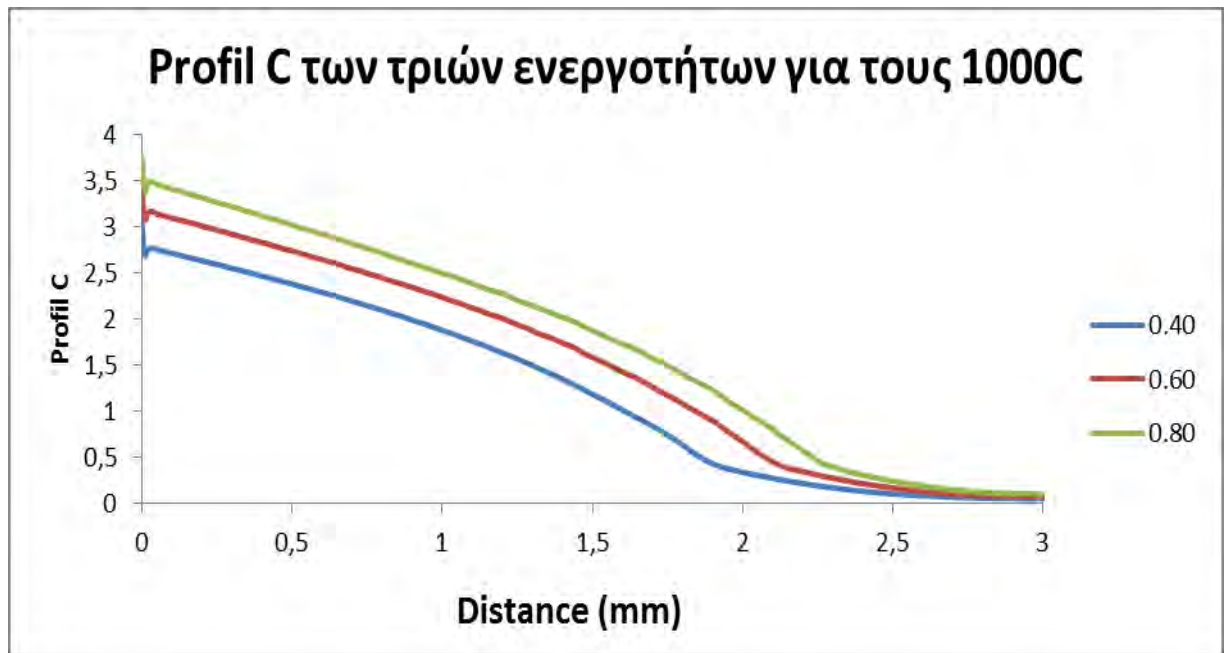


**Σχήμα 25:** Συγκριτικό διάγραμμα του profil του C για τις τρεις ενεργότητες στους 900°C.

Ενεργότητα είναι στην ουσία η δύναμη με την οποία μπαίνει ο C στο κράμα και ξεκινάει η διαδικασία της ενανθράκωσης.

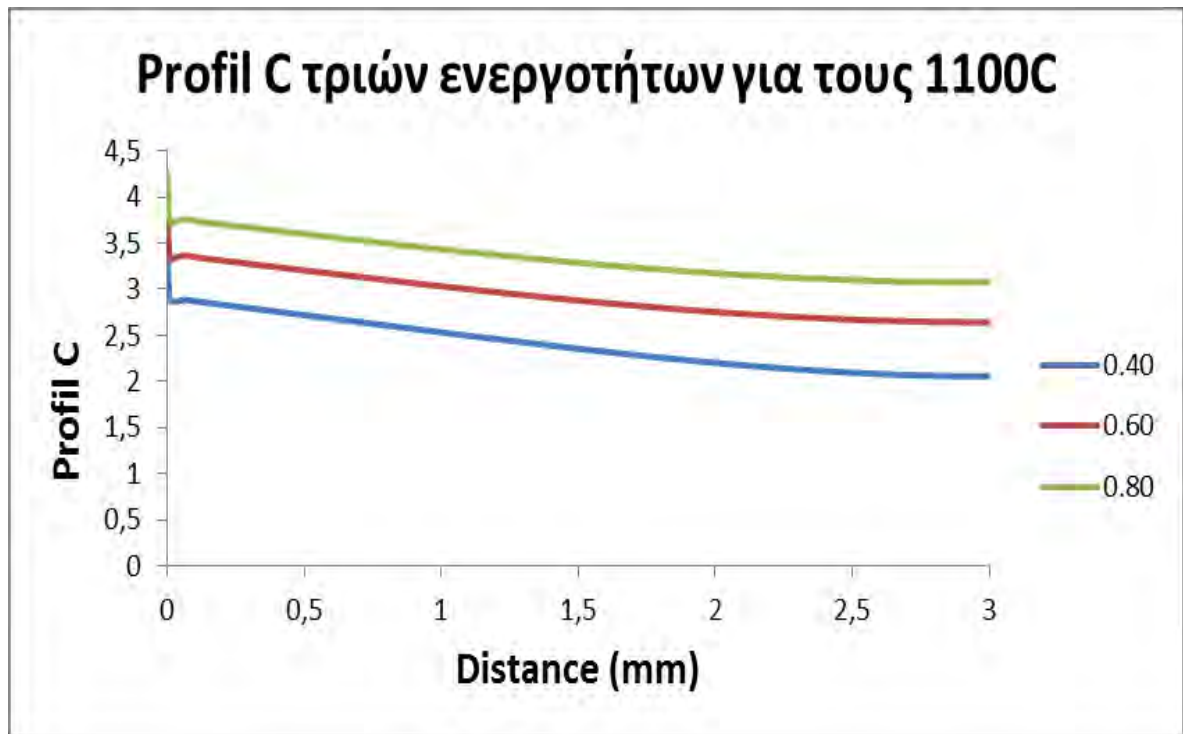
Στο συγκεκριμένο διάγραμμα η θερμοκρασία ενανθράκωσης παραμένει σταθερή στους 900°C, ενώ αλλάζει η τιμή της ενεργότητας (0.40, 0.60, 0.80) όπως φαίνεται στο διάγραμμα. Το κύριο συμπέρασμα είναι ότι καθώς αυξάνεται η τιμή της ενεργότητας, ανεβαίνει-αυξάνεται και καμπύλη του profil του άνθρακα. Αυτό στην ουσία σημαίνει ότι όσο περισσότερη ποσότητα άνθρακα δεσμευτεί, τόσο πιο ψηλά θα είναι η τιμή της ενεργότητας και θα δημιουργηθούν καρβίδια γρήγορα και όχι σε πολύ μεγάλο βάθος διείσδυσης.

Μια άλλη παρατήρηση που θα μπορούσαμε να επισημάνουμε είναι η ισόποση σχεδόν απόσταση μεταξύ των καμπυλών. Εφόσον η τιμή της ενεργότητας αυξάνεται ανά 0.20, έτσι και οι καμπύλες ισαπέχουν μεταξύ τους.



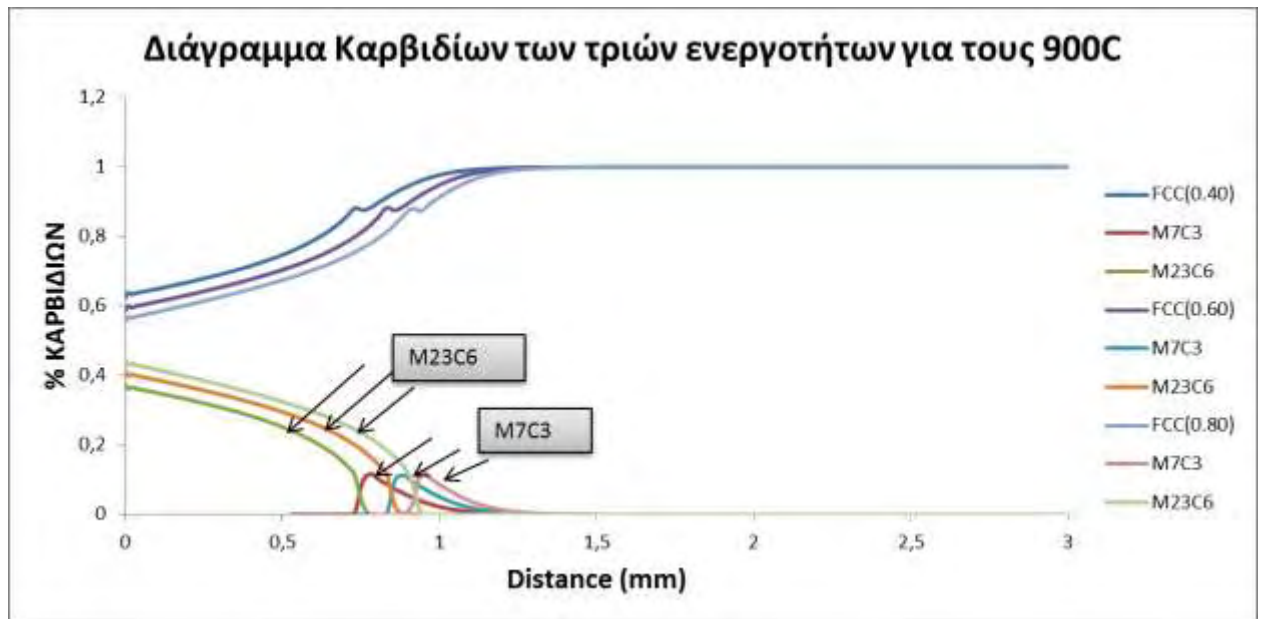
**Σχήμα 26:** Συγκριτικό διάγραμμα του profil του C για τις τρεις ενεργότητες στους 1000°C.

Ίδιο διάγραμμα με το προηγούμενο με τη διαφορά ότι έχει αυξηθεί η θερμοκρασία στους 1000°C. Η διαφορά με το προηγούμενο διάγραμμα των 900°C είναι εμφανής καθώς η αύξηση της θερμοκρασίας έχει μετατοπίσει τις καμπύλες προς τα πάνω και δεξιά. Ισχύει φυσικά πως όσο αυξάνεται η ενεργότητα, αυξάνεται και το ποσοστό δέσμευσης άνθρακα αλλά παρατηρούμε επίσης ότι ο άνθρακας διεισδύει πιο βαθιά στο εσωτερικό του κράματος. Άρα φαίνεται καθαρά η σχέση εξάρτησης του profil του C με την θερμοκρασία και την ενεργότητα.



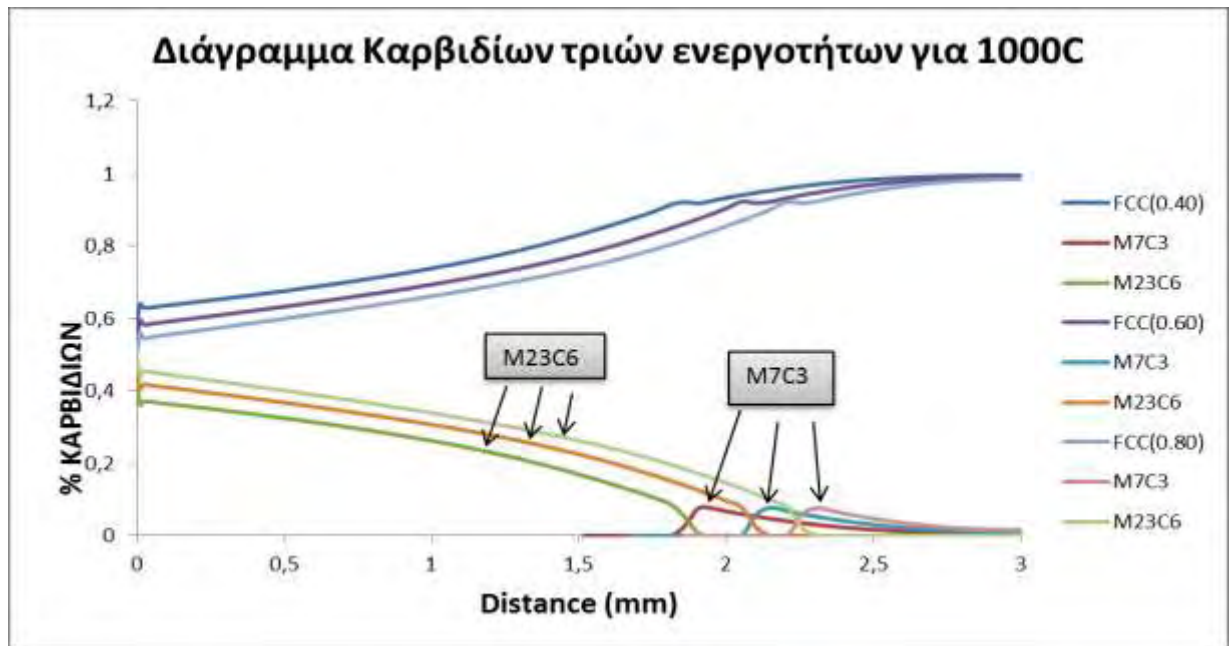
**Σχήμα 27:** Συγκριτικό διάγραμμα του profil του C για τις τρεις ενεργότητες στους 1100°C.

Ακολουθεί το τρίτο διάγραμμα του profil του C για τις τρεις ενεργότητες για την τελευταία θερμοκρασία στους 1100°C. Σε αυτή τη θερμοκρασία όπως αναφέρθηκε και παραπάνω έχουμε κορεσμό δέσμευσης άνθρακα και δεν σχηματίζεται καρβίδιο. Γι' αυτό και το διάγραμμα είναι διαφορετικό με τις καμπύλες να μην κατέρχονται και ακουμπούν στον άξονα της απόστασης. Αυτό σημαίνει πολύ βαθιά διείσδυση που ξεπερνά τα 3mm μελέτης που έχουμε επικεντρωθεί.



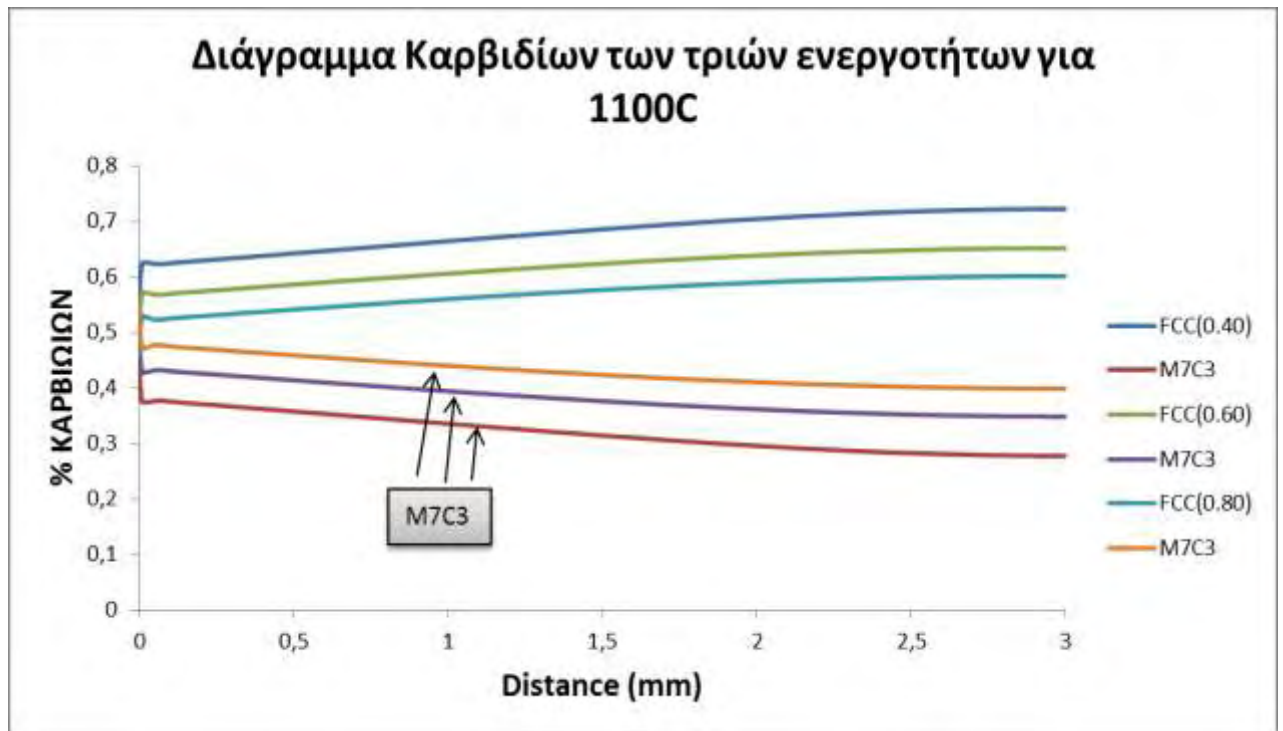
**Σχήμα 28:** Συγκριτικό διάγραμμα καρβιδίων για τις τρεις ενεργότητες στους 900°C.

Εδώ παρουσιάζεται το διάγραμμα καρβιδίων των τριών ενεργοτήτων για τους 900°C. Το κύριο συμπέρασμα που προκύπτει είναι ότι με την αύξηση της ενεργότητας, αυξάνεται και ο σχηματισμός των καρβιδίων. Δηλαδή αυξάνεται η διείσδυση το καρβίδιο  $M_{23}C_6$  μεγαλώνει λίγο ενώ το  $M_7C_3$  παραμένει ίδιο. Αυτό φαίνεται και από τις κορυφές του οι οποίες παραμένουν στο ίδιο ύψος και το μόνο που αλλάζει είναι η διείσδυση. Ότι ο σχηματισμός του καρβιδίου βαθαίνει πιο μέσα στο εσωτερικό του κράματος.



**Σχήμα 29:** Συγκριτικό διάγραμμα καρβιδίων για τις τρεις ενεργότητες στους 1000°C.

Ίδιο διάγραμμα καρβιδίων των τριών ενεργοτήτων αλλά για 1000°C. Η διαφορά με το προηγούμενο διάγραμμα είναι ότι η εμβάθυνση της διείσδυσης έχει προχωρήσει αρκετά καθώς αυξήθηκε η θερμοκρασία ενανθράκωσης, όπως φαίνεται στον άξονα χ της απόστασης. Ο σχηματισμός των καρβιδίων δηλαδή γίνεται πιο βαθιά μέσα στο κράμα.



**Σχήμα 30:** Συγκριτικό διάγραμμα καρβιδίων για τις τρεις ενεργότητες στους 1100°C.

Το τρίτο διάγραμμα καρβιδίων για τις ενεργότητες για θερμοκρασία 1100°C. Αναμενόμενα, το διάγραμμα μας δείχνει ότι δεν σχηματίζονται καρβίδια λόγω υπερκορεσμού δέσμευσης άνθρακα εξαιτίας της υψηλής θερμοκρασίας. Στους 1100°C έχουμε μόνο το σχηματισμό του  $M_7C_3$ .

### Πίνακας ποσοτικής σύγκρισης ως προς το Βάθος Ενανθράκωσης

	Θερμοκρασία (T) σε °C	Βάθος Ενανθράκωσης
$\alpha_c = 0.40$	900	1.48mm
	1000	1.80mm
	1100	3mm
$\alpha_c = 0.60$	900	1.508mm
	1000	1.85mm
	1100	3mm
$\alpha_c = 0.80$	900	1.51mm
	1000	1.88mm
	1100	3mm

Στον παραπάνω πίνακα έχουμε τις τιμές του βάθους ενανθράκωσης για διαφορετικές θερμοκρασίες (900-1000-1100°C) και για διαφορετικές τιμές ενεργότητας άνθρακα. Παρατηρείται συμπερασματικά και από τον ποσοτικό πίνακα ότι 1) με την αύξηση της θερμοκρασίας, αυξάνεται το βάθος ενανθράκωσης αλλά και 2) ότι το βάθος ενανθράκωσης αυξάνεται και με την αύξηση της τιμής της ενεργότητας άνθρακα. Οι δυο αυτοί παράγοντες είναι που επιρεάζουν καθοριστικά το βάθος διεύσησης, όπως είδαμε και στα παραπάνω συγκριτικά διαγράμματα. Στους 1100°C το βάθος διεύσησης είναι και για τις τρεις ενεργότητες και θερμοκρασίες ίδιο λόγω του κορεσμού δέσμευσης άνθρακα από το κράμα, όπως έχουμε εξηγήσει και παραπάνω. Γι' αυτό και η τιμή του βάθους διεύσησης παραμένει σταθερή στα 3mm.

#### **4ο ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ**

Το κράμα INCOLOY 800 ενανθρακώθηκε με αποτέλεσμα το σχηματισμό καρβιδίων  $M_7C_3$ ,  $M_{23}C_6$  και  $M_3C$ . Οι παράγοντες που συνετέλεσαν ώστε να προσδιορίζεται στην κάθε περίπτωση το βάθος διείσδυσης σε αυτή τη διαδικασία, ήταν η ενεργότητα άνθρακα και η θερμοκρασία ενανθράκωσης.

Επίδραση από τη θερμοκρασία: όσο αυξάνεται η θερμοκρασία ενανθράκωσης, αυξάνεται το ποσοστό δέσμευσης του άνθρακα, με σκοπό το σχηματισμό των καρβιδίων και το ποσοστό των καρβιδίων που δημιουργούνται. Σε χαμηλές θερμοκρασίες η επιφάνεια εμφανίζεται πιο πορώδης ενώ σε υψηλότερες πιο συμπαγής.

Επίδραση από την ενεργότητα: όσο αυξάνεται η ενεργότητα άνθρακα, αυξάνεται το ποσοστό δέσμευσης του άνθρακα επίσης αλλά και το βάθος διείσδυσης των καρβιδίων στο κράμα.

Γενικά το πρόβλημα της ενανθράκωσης ενός κράματος μπορεί να έχει είτε αρνητικές είτε θετικές συνέπειες. Στη προκειμένη περίπτωση το πρόβλημα της ενανθράκωσης είναι ένα ανεπιθύμητο φαινόμενο λόγω χαμηλότερων ιδιοτήτων και πτώσης αντοχής.



[ενδεικτικό παράρτημα 1]

Output from POLY-3, equilibrium = 1, label A0 , database: SSOL4

Conditions:

T=1273.15, W(NI)=0.32, W(CR)=0.21, W(C)=1E-3, N=1, P=1E5

DEGREES OF FREEDOM 0

Temperature 1273.15 K ( 1000.00 C), Pressure 1.000000E+05

Number of moles of components 1.00000E+00, Mass in grams 5.56410E+01

Total Gibbs energy -7.16487E+04, Enthalpy 3.53408E+04, Volume 3.41064E-06

Component	Moles	W-Fraction	Activity	Potential	Ref.stat
-----------	-------	------------	----------	-----------	----------

C	4.6325E-03	1.0000E-03	1.6208E-03	-6.8011E+04	SER
---	------------	------------	------------	-------------	-----

CR	2.2472E-01	2.1000E-01	3.0092E-03	-6.1461E+04	SER
----	------------	------------	------------	-------------	-----

FE	4.6727E-01	4.6900E-01	1.3424E-03	-7.0006E+04	SER
----	------------	------------	------------	-------------	-----

NI	3.0338E-01	3.2000E-01	4.4135E-04	-8.1781E+04	SER
----	------------	------------	------------	-------------	-----

FCC\_A1#1 Status ENTERED Driving force 0.0000E+00

Moles 9.8324E-01, Mass 5.4897E+01, Volume fraction 1.0000E+00 Mass fractions:

FE 4.73199E-01 NI 3.23826E-01 CR 2.02721E-01 C 2.54859E-04

M23C6 Status ENTERED Driving force 0.0000E+00

Moles 1.6760E-02, Mass 7.4420E-01, Volume fraction 0.0000E+00 Mass fractions:

CR 7.46950E-01 FE 1.59292E-01 C 5.59663E-02 NI 3.77917E-02

[ενδεικτικό παράρτημα 2]

LOGFILE GENERATED ON PC/WINDOWS NT DATE 2012- 6- 5

go data

switch ssol4

def-species fe ni cr c

rej-ph\*

rest-ph fcc\_a1, m23c6, m7c3, graphite

get

app mob2

def-species fe ni cr c

rej-ph\*

rest-ph fcc\_a1, m23c6, m7c3, graphite

get

```
go d-m
set-cond global T 0 1273; * N
set-reference-state
c
graphite
*
101325
enter-region fasiA
enter-grid fasiA 3e-3 geo 100 1.02
enter-phase act fasiA matrix fcc_a1
1
enter-composition fasiA fcc_a1
1
fe
w-p
C
LINEAR
0.0254859
0.0254859
Cr
LINEAR
20.27
20.27
Ni
LINEAR
32
32
enter-phase
act
fasiA
sph
m7c3
enter-phase
act
```

fasiA  
sph  
m23c6  
enter-composition  
fasiA  
m7c3  
Y  
enter-composition  
fasiA  
m23c6  
Y  
set-cond  
boundary  
lower  
mixed  
activity  
0  
0.95;  
\*  
N  
ZERO\_FLUX  
ZERO\_FLUX  
enter-lab  
volfr\*\*2;  
set-simulation-time  
720000  
YES  
1800  
1E-07  
1E-07  
set-simulation-condition  
0  
1  
2

NO

ACTIVITIES

YES

99

.5

2

NO

YES

set-interactive

sim

## **BIBΛIOΓΡΦΙΑ**

- [1] R. Schueler, Hydrogen Processing (1972), 73.
- [2] R.E. Gackenbach and J.F. Shay, Proc. 26<sup>th</sup> NACE Conf., Philadelphia (1970).
- [3] M.W. Clark, in NACE (ed) Process Industries Corrosion, Texas (1975) 329.
- [4] G. Matamala and P. Cañete: "Carburization and Decarburization Kinetics of Iron in C&H<sub>2</sub> mixtures between 1000-1100°C, "Materials Chemistry and Physics 12. 313-319 (1985).
- [5] G. Matamala: "Carburización de Fe, Ni y aleaciones Fe-Ni-Cr a altas temperaturas en atmósferas CH<sub>4</sub>-H<sub>2</sub>", Tesis de M. Se., Universidad de Concepción, chqk (1982).
- [6] Von K. Ledjeff, A. Rahmel, Monike Schorr, Werkstoffe und Korrosion 31. 83-97 (1980).
- [7] B.N. Greene, Materials Performance, Vol. 18, N° 10 pp. 20-26 (1979).
- [8] M. Danielewski and K. N atesan, Oxidation of Metals, Vol. 12, N" 3 (1977).
- [9] Microstructural changes and mechanical properties of Incoloy800 after 15 years service (2008 Elsevier) R. Dehmlaeib, M. Shamaniana, □, A. Kermanpura
- A Department of Materials Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan 84156-83111, Iran
- B Department of Materials Science and Engineering, Faculty of Engineering, Shahid Chamran University, Ahwaz, Iran
- [10] CHANGES IN MATERIAL PROPERTIES OF AUSTENITIC Cr-Ni-Fe ALLOYS THROUGH CARBURIZATION A. Schnaas, H. J. Grabke, Translated from Werkstoffe and Korrosion; 29: 635 -644 (1978), 19 p., NTIS (US Sales Only), File Number DE85902073
- [11] Carburization Kinetics of Heat-Resistant Steels
- G. M. Smith,\* D. J. Young, t and D. L. Trimmt

Received September 27, 1982; revised December 10, 1982