

文章编号:1000-582X(2002)12-0046-03

# 不同形状钢件表面渗碳扩散过程数值模拟

赖宏,刘天模

(重庆大学材料科学与工程学院,重庆400044)

**摘要:**根据渗碳过程扩散方程,结合必要的边界条件及初值条件,对不同形体的钢制零件在不同渗碳工艺参数下进行数值模拟,得到了碳的浓度分布曲线;比较各种工艺参数对碳浓度分布的影响,其中渗碳温度对碳浓度分布影响较大,不同外形钢件在相同渗碳工艺下碳浓度分布曲线有一定差别。由碳浓度分布曲线调整渗碳工艺参数,可以制定出最佳的渗碳工艺,为工艺设计提供指导。

**关键词:**渗碳;扩散方程;数值模拟

**中图分类号:**TG156.8

**文献标识码:**A

钢件气体渗碳是工业上最广泛的表面强化技术之一<sup>[1]</sup>。不同零件对渗碳层深度和含碳量有不同的要求。传统的设计方法主要靠经验和试验<sup>[2]</sup>,这不仅浪费人力、物力,而且因为试验条件及次数有限,所以确定的工艺也不一定是最佳的,而采用计算机辅助设计渗碳工艺,可以大大缩减工艺设计的时间,并可确保其可靠性。由于渗碳过程涉及各项工艺参数的可靠性、碳在钢件表面的扩散,碳在扩散过程中与基体金属发生反应扩散等一系列复杂的变化过程,因而给渗碳的精确预测与模拟带来困难,但是对于一般情况,渗碳只是为了使钢件表面获得预期的硬度,而硬度主要与碳含量有关,因而在这种情况下可以认为碳只在钢件表面进行扩散。笔者拟对这种情况进行扩散过程的数值模拟,考察不同形体钢件渗碳的表面碳浓度分布曲线。

## 1 渗碳扩散过程数学模型

### 1.1 扩散方程

钢件渗碳过程是一个非稳态扩散过程,即各点的浓度随时间而变化,用扩散第二定律来描述<sup>[3]</sup>,即

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

式中: $D$ 为扩散系数。按照扩散理论, $D$ 服从Arrhenius公式,即

$D = D_0 \exp(-Q/RT)$ ,  $D_0$ 为常数( $m^2/s$ ),  $Q$ 为碳的扩散激活能( $J/mol$ )。文献[4]给出了碳在 $\gamma-Fe$ 和 $\alpha-Fe$ 中的扩散系数,即

$$D_\gamma = 2.0 \times 10^{-5} \exp(-140\,000/8.314T) \quad (2)$$

$$D_\alpha = 0.2 \times 10^{-5} \exp(-84\,000/8.314T) \quad (3)$$

由于渗碳层的深度(约2 mm)与零件尺寸相比是非常小的,所以,渗碳模拟只需对局部进行,没必要对整个零件进行模拟。因而对不同形状的零件可以由一维扩散方程统一表示为<sup>[5]</sup>

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{S}{(x-R)} \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad 0 \leq x \leq x_{\max} \quad (4)$$

式中 $x$ 为表面为0,与表面外法线方向相反; $x_{\max}$ 最大渗碳深度,mm,应大于实际渗碳深度; $R$ 为渗碳表面曲率半径,mm。

各种形体模型 $S$ 值及 $R$ 的意义见表1。

表1 各种形体模型 $S$ 值及 $R$ 的意义

形体名称	$S$ 值	$R$ 的意义
大平板	0	无
长圆柱	1	半径(正)
实心球	2	半径(正)
长环柱	1	内半径(负)

### 1.2 初始条件及边界条件

#### 1.2.1 初始条件

初始条件即指渗碳开始的碳浓度分部,即为钢件的原始碳质量分数,即

$$C|_{t=0} = C_0 \quad (5)$$

#### 1.2.2 内边界条件

由于渗碳只能发生在表面部分,在钢件较深部位,

• 收稿日期:2002-09-03

作者简介:赖宏(1976-),男,四川内江人,重庆大学硕士研究生,主要从事材料强韧化、材料表面强化方向研究。

显然,碳浓度是不变的,也即为钢件的质量分数,即

$$C|_{x=x_{\max}} = C_0 \quad (6)$$

这里,  $x_{\max}$  一定要大于实际希望获得的渗碳层厚度。

### 1.2.3 外边界条件

在渗碳过程中,钢件表面与碳氮发生质量传递过程。碳从气相流入固相的通量正比于炉气碳势( $C_g$ )与表面碳的质量分数之差,即

$$-D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = \lambda (C_g - C|_{x=0}) \quad (7)$$

式中  $\lambda$  为碳从气相到固相的质量传递系数,它与温度的关系为  $\lambda = \lambda_0 \exp(-E/RT)$ ,  $\lambda_0$  为常数,  $E$  为反应活化能,两者与材料的性质有关。

## 2 模型求解

对扩散问题的求解,一般是利用差分法进行求解<sup>[6]</sup>。设空间步长为  $\Delta x$ ,时间步长为  $\Delta t$ ,则扩散方程(4)为

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = D \left( \frac{C_{i-1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i+1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{S}{(0.5 + i)\Delta x - R} \cdot \frac{C_{i+1}^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right)$$

$$(i = 1, 2, 3, \dots, M - 3, M - 2; n = 0, 1, 2, \dots) \quad (8)$$

其中上标表示时刻为  $t = n\Delta t$ ,下标  $i$  表示在第  $i$  结点上。将上式整理得

$$-(1 - G)C_{i-1}^{n+1} + (2 + F)C_i^{n+1} - (1 + G)C_{i+1}^{n+1} = FC_i^n \quad (9)$$

其中  $F = \frac{\Delta x^2}{\Delta t D}$ ,  $G = S/(1 + 2i - R/\Delta x)$ 。

当  $i = 0$  时,方程(9)为

$$-(1 - G)C_{-1}^{n+1} + (2 + F)C_0^{n+1} - (1 + G)C_1^{n+1} = FC_0^n \quad (10)$$

将外边界条件用差分法表示为

$$-D \frac{C_0^{n+1} - C_{-1}^{n+1}}{\Delta x} = \lambda (C_g - C_0^n) \quad (11)$$

从式(10)和式(11)中消去  $C_{-1}^{n+1}$ ,得

$$(1 + F + G)C_0^{n+1} - (1 + G)C_1^{n+1} = FC_0^n + (1 - G)\lambda/D \cdot \Delta x (C_g - C_0^n) \quad (12)$$

由内边界条件得

$$C_M^{n+1} = C_0 \quad (13)$$

将  $i = M - 1$  代入式(8)并将式(13)代入得

$$-(1 - G)C_{M-2}^{n+1} + (2 + F)C_{M-1}^{n+1} = FC_{M-1}^n + (1 + G)C_0 \quad (14)$$

将初始条件和式(12)、式(9)、式(14)整理为

$$C_i^0 = C_0 \quad i = 0, 1, 2, \dots, M - 1 \quad (15a)$$

$$(1 + F + G)C_0^{n+1} - (1 + G)C_1^{n+1} = FC_0^n + (1 - G)\lambda/D \cdot \Delta x (C_g - C_0^n) \quad (15b)$$

$$-(1 - G)C_{i-1}^{n+1} + (2 + F)C_i^{n+1} - (1 + G)C_{i+1}^{n+1} = FC_i^n \quad (15c)$$

$$i = 1, 2, 3, \dots, M - 3, M - 2$$

$$-(1 - G)C_{M-2}^{n+1} + (2 + F)C_{M-1}^{n+1} = FC_{M-1}^n + (1 + G)C_0 \quad (15d)$$

上述  $M$  个方程可以解出任意时刻的含碳量。

## 3 渗碳扩散过程模拟计算与讨论

根据以上渗碳过程数学模型,利用 Matlab5.3<sup>[7]</sup> 编制了不同形状钢件表面渗碳过程任意时刻含碳量的计算程序。以某种钢为例,碳在其内部扩散系数为  $D = 2.0 \times 10^{-5} \times 10^6 \times 60 \times \exp(-140\,000/8.314T)$  ( $\text{mm}^2/\text{min}$ ),碳从气相到固相的质量传递系数为  $\lambda = 0.6 \times \exp(-60\,000/8.314T)$  ( $\text{mm}/\text{min}$ )。取最大渗碳层厚度为 3 mm,空间步长为 0.03 mm,时间步长为 1 min。以下定量计算各参数对表层碳浓度分布的影响。

### 3.1 原始含碳量对碳浓度分布的影响

首先,以无限大平板( $S$  为 0)为例,对原始碳含量分别为 0.2%、0.4%、0.6%、0.8% 的钢件,在 900 °C, 1.5% 碳势下渗碳 600 min,计算钢件表面碳浓度分布曲线如图 1 所示。从图中看出,钢中原始碳浓度越接近渗碳碳势,表面碳浓度分布越均匀,碳浓度梯度越小。

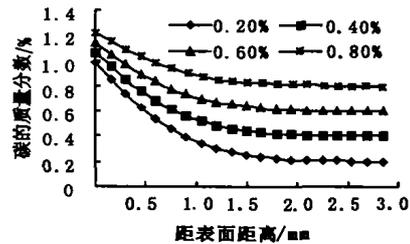


图 1 原始碳含量对表面碳浓度分布的影响

### 3.2 碳势对表面碳浓度分布的影响

在 900 °C,对原始碳含量为 0.3% 的大平板零件分别在 0.8%、1.1%、1.4%、1.7% 的碳势下渗碳 700 min,计算得到各自条件下的碳浓度分布曲线如图 2 所示。

### 3.3 渗碳温度对表面碳浓度分布的影响

根据 Arrhenius 方程,温度越高,扩散系数越大,因而扩散也就越快。图 3 所示为原始碳含量为 0.2% 的平板零件在不同温度下渗碳 600 min 的表面碳浓度分布曲线。渗碳气氛碳势为 1.5%。可见温度对碳浓度分布的影响很大,因而控制渗碳温度对获得理想的表面质量至关重要。

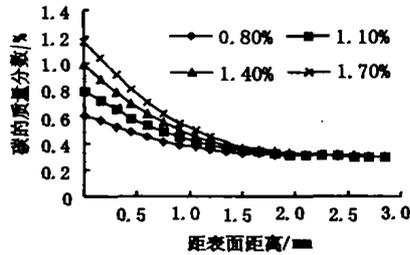


图2 渗碳碳势对表面碳浓度的影响

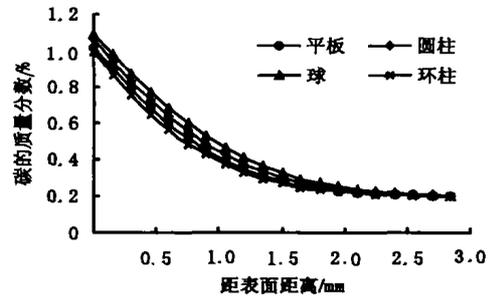


图4 不同形状零件渗层碳浓度的分布

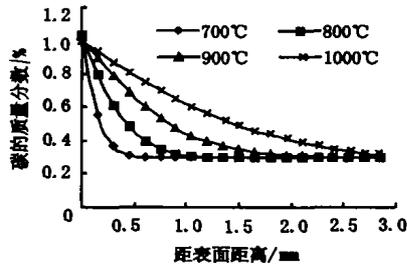


图3 渗碳温度对表面碳浓度的影响

### 3.4 不同形状零件渗层碳浓度的分布差异

实际应用中的钢制零件很少是平面的,一般都具有一定的几何外形,多数为球类、杆类或它们的组合。因而与平面渗碳有一定的差别。在 900 °C, 1.5% 碳势的渗碳气氛中对平面、圆柱、球及环柱进行渗碳模拟计算,零件原始碳含量为 0.2%, 渗碳时间 750 min。假定圆柱、球半径为 10 mm, 同样环柱内半径也为 10 mm。图 4 所示为它们的碳浓度分布图。

## 4 结 论

1) 原始碳含量、渗碳碳势、渗碳温度、渗碳时间及零件外形都对渗碳后的碳浓度分布有影响,其中渗碳温度影响最为显著。

2) 对渗碳过程进行数值模拟,能很快得出碳浓度分布曲线,可以为正确制定渗碳工艺提供指导。

### 参考文献:

- [1] 王万智,唐弄娣. 钢的渗碳[M]. 北京:机械工业出版社, 1985.
- [2] 卜高金-阿列克谢也夫 Г И,席姆斯柯夫 Г В. 钢的气体渗碳[M]. 北京:机械工业出版社, 1960.
- [3] 费豪文 约翰 D. 物理冶金学基础[M]. 上海:上海科学技术出版社, 1980.
- [4] 胡庚祥,蔡询. 材料科学基础[M]. 上海:上海交通大学出版社, 2000.
- [5] 陶文铨. 数值传热学[M]. 西安:西安交通大学出版社, 1988.
- [6] 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.
- [7] 崔怡. MATLAB 5.3 实例详解[M]. 北京:航空工业出版社, 2000.

## Case-carburization Numerical Modeling and Craft Optimization on Steel Parts of Various Shapes

LAI Hong, LIU Tian-mo

(College of Material Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

**Abstract:** According to the diffusion equation of carburizing process and its boundary condition and initial condition, various shapes steel parts are modeled under various case-carburize craft parameters, concentration distribution curves have been obtained. Various craft parameters are compared, and carburizing temperature has more influence on carbon concentration distribution. Various shapes steel parts' carbon concentration distribution curves have some difference. According to the carbon concentration distribution curve, craft parameters can be adjusted in order to obtain the best carburizing craft.

**Key words:** carburizing; diffusion equation; numerical modeling

(责任编辑 陈移峰)