

图书基本信息

书名：<<热力学、动力学计算技术在钢铁材料研究中的应用>>

13位ISBN编号：9787030345103

10位ISBN编号：703034510X

出版时间：2012-5

出版时间：科学出版社

作者：苏航等著

页数：240

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## 内容概要

《热力学、动力学计算技术在钢铁材料研究中的应用》以作者长期在钢铁材料研发工作中积累的  
有关材料热力学、动力学方法的成功应用经验为基础，结合国内外最新研究进展，系统介绍  
了CALPHAD相图计算方法和热力学原理，以及各种材料热力学、动力学计算软件及相应的数据库，  
并以最流行的Thermo—Calc / DICTRA软件系统为例，重点讨论了如何利用这类方法和软件计算材料  
的一些基本热力学、动力学性质，最后介绍了运用该方法解决钢铁材料研究、生产中实际应用问题的  
系统案例。

《热力学、动力学计算技术在钢铁材料研究中的应用》适合从事钢铁材料研发、生产的科技人员和工  
程技术人员阅读使用，也可作为大专院校相关专业师生的教学参考用书。

## 书籍目录

- 序前言第1章 绪论第2章 基于CALPHAD的材料热力学、动力学模拟2.1 材料热力学计算简史2.2 材料相图计算2.2.1 计算相图的兴起2.2.2 CALPHAD相图计算的热力学原理2.2.3 CALPHAD相变动力学计算模型2.2.4 合金集团型数据库2.3 材料热力学计算的特点和发展趋势2.3.1 CALPHAD热力学计算的特征和优势2.3.2 材料热力学计算的发展方向2.4 本章总结参考文献第3章 材料热力学、动力学计算软件及数据库简介3.1 Thermo—Calc及DICTRA系统3.1.1 开发历史3.1.2 系统组成3.1.3 功能及应用3.2 FactSage系统3.2.1 开发历史3.2.2 系统组成3.2.3 功能及应用3.3 Pandat系统3.3.1 开发历史3.3.2 系统组成3.3.3 功能及应用3.4 JMatPro系统3.4.1 开发历史3.4.2 系统组成3.4.3 功能及应用3.5 主要数据库资源3.5.1 SGTE数据库3.5.2 NIST数据库3.5.3 Thermo—Calc数据库3.5.4 FactSage数据库3.5.5 HSC热力学数据库3.5.6 THERMOCALC热力学数据库3.5.7 MTDATA热力学数据库3.5.8 国内的材料热力学数据库3.6 本章总结参考文献第4章 材料热力学、动力学方法基础算例4.1 二元相图的计算4.1.1 计算目的4.1.2 计算对象4.1.3 计算方法与程序4.1.4 计算实例4.2 三元相图的计算4.2.1 计算目的4.2.2 计算对象4.2.3 计算方法与程序4.2.4 计算实例4.3 平衡相变点的计算4.3.1 计算目的4.3.2 计算对象4.3.3 计算方法与程序4.3.4 计算实例4.4 相变驱动力的计算4.4.1 计算目的4.4.2 计算对象4.4.3 计算方法与程序4.4.4 计算实例4.5 热力学平衡状态变量的计算4.5.1 计算目的4.5.2 计算对象4.5.3 计算方法与程序4.5.4 计算实例4.6 多组元体系相图及性质图的计算4.6.1 计算目的4.6.2 计算对象4.6.3 计算方法与程序4.6.4 计算实例4.7 凝固计算4.7.1 计算目的4.7.2 计算对象4.7.3 计算方法与程序4.7.4 计算实例4.8 DICTRA计算元素扩散问题4.8.1 计算目的4.8.2 计算对象4.8.3 计算方法与程序4.8.4 计算实例4.9 动力学数据的获取4.9.1 计算目的4.9.2 计算对象4.9.3 计算方法与程序4.10 本章小结参考文献第5章 材料热力学、动力学计算应用实例5.1 含Cu钢表面裂纹的控制5.1.1 项目背景5.1.2 研究对象5.1.3 研究方法与结果5.1.4 产品(技术)应用情况5.2 氧化物冶金领域的应用5.2.1 项目背景5.2.2 研究对象5.2.3 研究方法与结果5.2.4 产品(技术)应用情况5.3 相图计算在节镍型不锈钢设计上的应用5.3.1 项目背景5.3.2 研究对象5.3.3 研究方法与结果5.3.4 产品(技术)应用情况5.4 海洋平台用高强度特厚钢板的合金设计5.4.1 项目背景5.4.2 研究对象5.4.3 研究方法与结果5.4.4 产品(技术)应用情况5.5 合金元素对车轮钢的相变热力学及动力学的影响5.5.1 项目背景5.5.2 研究对象5.5.3 研究方法和结果5.5.4 产品(技术)应用情况5.6 V-N微合金化技术与Thermo—Calc热力学计算5.6.1 项目背景5.6.2 研究对象5.6.3 研究方法和结果5.6.4 产品(技术)应用情况5.7 LNG储罐用9Ni低温钢的精细组织结构研究5.7.1 项目背景5.7.2 研究对象5.7.3 研究方法和结果5.7.4 产品(技术)应用情况5.8 本章小结参考文献

## 章节摘录

第1章 绪论 数千年来,人类历史上新材料的研究与开发一直沿用了试错法(trial and error)的模式,经过反复、大量的实验摸索,才能探索到一种更好的材料成分与工艺。

材料研究者和工艺师一直渴望达到这样的自由境界:能够从设计的材料组成和工艺来预知其组织性能,或根据性能要求来设计其组成和工艺。

因此,探知材料的组成、工艺与微观结构,乃至宏观性能之间的关系,一直是新材料研究所关注的焦点和难题。

过去的几十年里,计算模拟技术的日益成熟对材料设计产生了革命性的影响。

各种热力学和动力学模型的组合,使得预测材料加工过程中的成分、结构及性质成为可能。

材料热力学、动力学、温度-应变场分析以及由此发展起来组织模拟、工艺模拟、计算机辅助合金设计及性能预报技术,在先进材料研发和生产工艺研究中的地位日益重要。

针对多元多相体系,将各元素、组元、相的热力学平衡信息以及材料加工过程中的相变动力学(以及化学反应、表面反应、形核、熟化、流体流动性等)信息整合在一个软件系统中,这就是材料热力学、动力学模拟系统。

它们可以为许多不同的领域提供准确的计算服务,如冶金、钢铁/合金、陶瓷、高分子、化工、燃烧、溶液化学、地球化学甚至宇宙化学等。

可以同时考虑的组分或相平衡可多达十几乃至几十种。

这类方法最重要的特性之一就是提供了一种较之实验方法更为快捷的手段,使我们能够在不同外部和内部因素影响下研究热力学平衡以及动力学过程。

这不仅大大简化实验研究工作、缩短研究时间、节约研究经费、缩短新产品开发周期,并且可以模拟极端条件下实际无法进行的实验,有力地促进原始创新和集成创新活动。

对于钢铁材料而言,材料热力学、动力学模拟的意义尤为重大。

因为钢铁是产量最大、应用面最广的材料,其组成元素较多,生产工艺复杂,其中每一个环节的变化都对后续的工艺乃至最终产品的性能产生显著的影响。

以前,钢铁材料的发展很大程度上依赖于工程师的知识和经验,具有很大局限性。

随着近年来研究工作不断深入,物理冶金方面的研究取得了巨大进展,已经能够相当准确地把握钢铁材料内部发生的冶金现象。

因此,钢铁冶金工业已经成为材料热力学、动力学模拟应用最为成功的领域之一。

这种方法上的巨大变化如图1-1所示。

通过热力学、动力学计算,把握材料中每一个关键相的产生、演变过程,了解材料使用状态的相组成,再结合对这些组成相的性质的认识,去设计和预估材料的宏观力学性能、物理性能。

材料热力学计算的三大要素是热力学模型、热力学数据库和热力学软件。

(1) 热力学模型:从热力学基本原理出发,建立材料热力学的数学模型并以算法形式表达出来;(2) 热力学数据:积累和优化各种材料体系的热力学数据,形成各类材料热力学数据库;(3) 热力学软件:利用以上热力学数据库和计算模型,采用最小自由能等优化算法,实现各种条件下复杂体系的相平衡计算,从而获得计算相图或体系平衡的其他信息。

动力学计算以热力学计算为基础,但需要引入以时间为变量的扩散动力学模型和原子移动性数据库,通过大量的迭代运算,获得材料热力学状态随时间的变化关系,因此计算时间也更长。

通过将个性化的热力学基本模型与个性化的材料热力学数据库相结合,使得这些计算软件获得了前所未有的普适性,仅仅通过一些热力学参数的改变,就可以描述绝大多数材料的相变特性和主要物理化学特征。

这是迄今为止,具有最广泛成功经验的材料设计理念,如图1-2所示。

正是看到这一发展趋势,2011年6月,美国总统奥巴马宣布了一项超过5亿美元的“先进制造业伙伴关系”计划,其核心内容之一是所谓“材料基因组计划”(materials genome initiative, MGI)。

“材料基因组计划”的目的是为新材料发展提供必要的工具集,通过强大的计算分析减少对物理实验的依赖,加上实验与表征方面的进步,显著加快新材料投入市场的种类及速度,其开发周期可从目前

的10~20年缩短为2~3年。

与“人类基因组计划”相比较，“材料基因组计划”中热力学、动力学参数等基础数据是区别各种材料特征的“基因”，而近年来材料基础数据获取手段的进步可以媲美当年“基因快速测序”手段上的突破。

可以看到，在这些理念和方法的影响下，材料科学的发展已经进入到一个全新的阶段，以材料热力学、动力学模拟为代表的材料计算技术，正在从根本上改变着数千年来经验主义占统治地位的材料研究历史。

第2章 基于CALPHAD的材料热力学、动力学模拟 热力学的基本概念是热力学平衡。

热力学平衡是热力学体系在绝热情况下的一类最终状态，即体系中各点都达到热平衡、机械平衡和化学平衡，并且没有热流。

实践中，如果达到平衡的过程远远快于外界压力、温度、化学成分带来的系统边界的变化，即可近似认为满足绝热条件，这就是“局部平衡假设”。

如燃烧过程一般认为是绝热的，其热损失一般忽略不计。

在化学反应器中，通常也认为化学反应速率远远大于热流速率，因此即使热流存在于反应器中，化学平衡（或局部化学平衡）也可以达成。

两个极端的例子是：火箭发动机中燃烧产物在10-5s内达到平衡，而一些地质反应需要数百万年（10<sup>14</sup>s）才能达到平衡。

材料热力学是经典热力学和统计热力学理论在材料研究方面的应用，其目的在于揭示材料中相和组织的形成规律。

其主要研究对象是：固态材料中的熔化与凝固以及各类固态相变、相平衡关系和相平衡成分的确定、结构上的物理和化学有序性以及各类晶体缺陷的形成条件等。

同样，材料热力学也遵从“局部平衡假设”，为了保证计算的有效性和适用性，必要时还需引入高浓度溶液近似等其他约束条件。

一些新的软件工具通过非线性项的近似处理，也可以对一些亚稳态相平衡做出计算。

简言之，一个典型热力学模型的主要组成部分应包括：（1）热力学平衡的温度、压力参数；（2）体系的化学元素列表、数量及基本性质；（3）体系的组元列表及其热力学性质；（4）相平衡方程；（5）相中各组元的分布；（6）保证平衡假设的其他约束条件，如高浓度溶液的近似处理等。

热力学模型的求解取决于很多基本化学及热力学数据。

因此，现代热力学软件一般都需要以物质的热力学性质数据库为支撑。

数据库的规模及更新速率已成为判断一个热力学模拟软件成熟与否的关键。

从理论模型的提出，到求解方法的探索，再到数据库的建立，再到软件系统的开发和应用，这些构成了材料热力学计算技术发展的基本脉络。

2.1 材料热力学计算简史 如果从1878年吉布斯（Gibbs）提出著名的“相律”开始算起，材料热力学方法已经发展了130余年。

但作为一类独立的模拟研究工具，第一个材料热力学计算软件的出现仅有40余年的历史。

在这一发展过程中，一些著名的研究工作包括：1878年，吉布斯发表了《非均质体系的平衡》这一经典之作，提出了“相律”的概念及理论，成为经典热力学的重要里程碑，奠定了复杂化学反应体系热力学判定的理论基础[1]。

1899年，Roozeboom把相律应用到了多组元系统，把理解物质内可能存在的各种相及其平衡关系提升到了理论阶段。

其后，Roberts-Austen通过实验构建了Fe-Fe<sub>3</sub>C相图的最初的合理形式，使钢铁材料的研究开始有了理论支撑。

20世纪初，Tamman等通过实验建立了大量金属系相图，有力地推动了合金材料的开发，被认为是那个时代材料研究的主流基础性工作。

1923年，路易斯（Lewis）和兰德尔（Randall）出版了《化学物质的热力学与自由能》一书[2]，构筑了热力学理论与实践的桥梁。

此后，布拉格（Bragg）和威廉斯（Williams）利用统计方法建立了自由能理论。

这些工作使热力学的分析研究有可能与材料结构的有序性等微观认识结合起来,意义巨大。

但由于计算工作量很大,直到计算机出现后实际意义上的热力学计算才成为可能。

计算平衡组成的第一批算法由Brinkley和Kandiner在“多元体系平衡组成计算”[3]、“复杂平衡问题的计算”[4]等文章中提出。

他们的算法使用了平衡常数的概念。

此后,White、Johnson和Dantzig在“复杂体系的化学平衡”[5]一文中提出了另一个基于吉布斯自由能最小化的算法。

第一个实用性的、带有物质热力学性质数据库的计算机程序是20世纪60年代由美国国家航空航天局(National Aeronautics and Space Administration, NASA)的Zeleznik、Gordon和McBride开发的[6,7],采用了当时通用的IBM704或7090计算机,此程序可用于计算化学平衡组成、火箭推进剂比冲以及炸药爆轰等。

必须承认,早期的热力学模拟和计算主要是出于火箭发动机设计的需要。

如果没有充分的理论手段研究燃烧过程中数以百计的复杂化学反应,现代火箭发动机是难以开发出来的。

在这些工作的基础上,NASA不断地进行开发和完善,至今已经形成了一个名为CEA(chemical equilibrium with applications)的大型软件包,并在持续更新中(详细情况参见http

://www.grc.nasa.gov/WWW/CEAWeb/ )。

大约在同时,出于军事用途,苏联也开发了类似的软件,用于研究火箭推进剂的燃烧平衡产物[8]。

热力学计算的第二个阶段与冶金工业的发展有关。

传统的冶金化学主要是研究主导反应(或独占反应),但这一近似很不可靠,环境参数(温度、压力、初始组成)的变化往往会改变主导反应的次序。

因此,热力学计算对冶金过程研究提供了极大的帮助。

1971年Eriksson发表的“高压力平衡的热力学研究”[9]就是该领域早期的工作。

1975年Eriksson发表了首个基于吉布斯自由能最小化的计算程序SOLGASMIX,在此基础上逐渐开发了用于计算复杂化学平衡的软件ChemSage,后来又发展成功能更为全面的FactSage软件包[10,11]。

20世纪70年代由Kaufman、Hillert等倡导的相图热力学计算,使金属、陶瓷材料多元相图的研究走进了一个新的发展时期[12]。

在热力学数据库支持下相图计算(calculation of phase diagram, CALPHAD)逐渐成熟,形成了一种平衡研究的CALPHAD模式,其核心是理论模型与热力学数据库的完美结合,从低组元系统合理推算高组元系统的热力学数据。

1973年成立了CALPHAD国际工作组织,专门从事基于热力学数据的合金系及陶瓷系相图的计算工作。

在1976年CALPHAD国际会议上,Lukas展示了进行热力学优化的BINGS和BINKFKT计算程序,它们能根据实验数据广泛同步地进行模型系数的调整,实现热力学和相图实验数据的耦合。

此后,一批通用的相图计算软件在20世纪80年代逐渐崛起,如Thermo-Calc、FACT、Luka和MTDATA等[13]。

Thermo-Calc是CALPHAD模式的典型代表。

1981年瑞典皇家工学院的Sundman教授等领导开发了这一系统,还特别考虑了对非理想体系的计算方法,此系统借助强大的优化算法,配合开放的数据库系统和广泛的数据支持,很快成为冶金、材料领域最为强大的热力学计算工具软件之一。

后来在此基础上又开发了DICTRA计算软件,将功能扩大到扩散动力学过程的计算。

至今该系统仍在不断发展之中[14]。

关于材料热力学发展历程简单汇总如图2-1所示。

目前热力学计算领域形成了众多的算法和软件。

这种多样性首先是由于热力学体系的多样性(如燃烧过程与固态相变差异很大)导致热力学模型众多,其次是由于热力学计算依赖于特定的材料热力学数据库。

但在材料工程领域中，目前居主导地位的是以计算相图（CALPHAD）方法为核心的热力学计算工具，并形成了材料热力学研究的CALPHAD模式或称CALPHAD学派，流行的软件包括Thermo-Calc/DICTRA、FactSage、Pandata、JMatPro等，我们将在下一章重点介绍。

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>