

# JMatPro铸铁模块介绍

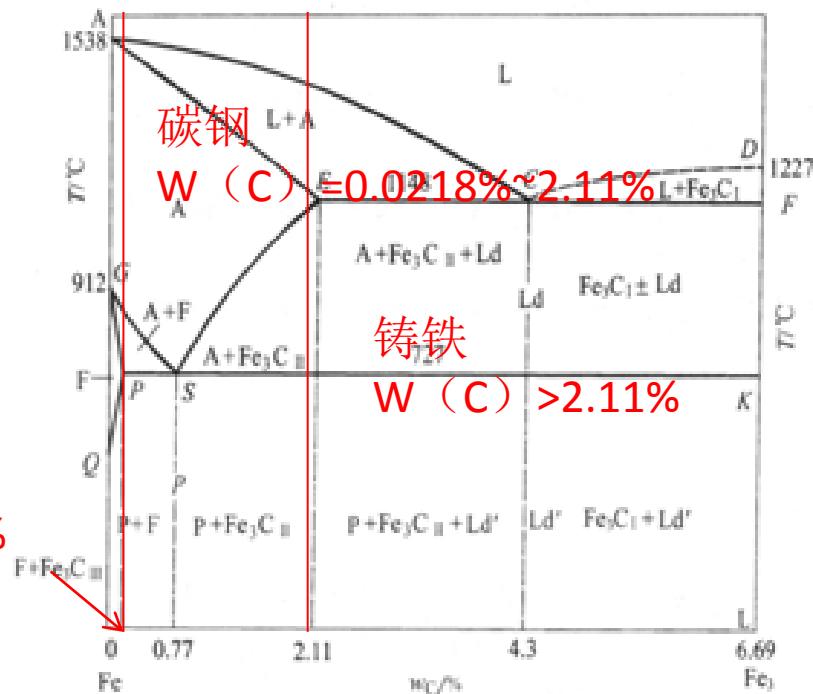
中仿科技  
施翀 (Joy)  
2011年12月

# 目 录

- 铸铁背景知识介绍
- 铸铁模块功能介绍、演示
  - ✓ 热力学计算
  - ✓ 凝固计算
  - ✓ 机械性能计算
  - ✓ 相转变计算

# 背景知识介绍

铸铁：含碳量超过2.11%的铁碳合金



铁碳相图

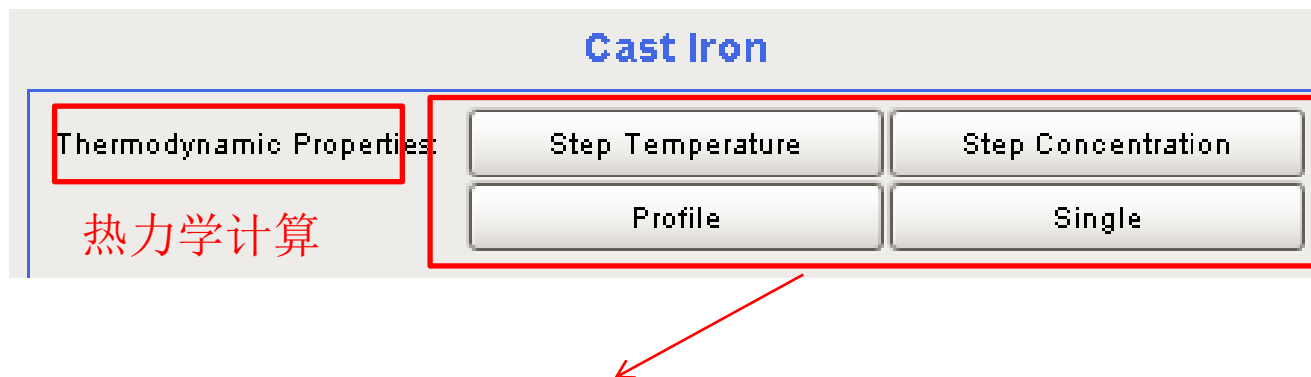
# 铁碳相图的组成相

- ①  $\delta$ 铁素体：存在于1392~1536 $^{\circ}$ C之间
  - ②  $\alpha$ 铁素体：存在于911 $^{\circ}$ C以下
  - ③ 奥氏体 $\gamma/A$ ：碳在 $\gamma$ 铁中的间隙固溶体，面心立方结构，存在于727~1493 $^{\circ}$ C之间
  - ④ 石墨G：形态主要有片状，蠕虫状，团絮状，球状
  - ⑤ 渗碳体 $Fe_3C$ ：铁和碳的间隙化合物
  - ⑥ 莱氏体Ld：奥氏体和渗碳体组成的机械混合物
  - ⑦ 珠光体P：铁素体和渗碳体按层片状交替排列的层状组织
- 碳在铁中的间隙固溶体，体心立方结构
- 铁碳合金中的碳的两种存在形式

# 铸铁的分类

类别	组织特征	断口特征	成分特征
灰口铸铁	基体+片状石墨	灰口	C, Si, Mn, P, S或加少量合金元素
球墨铸铁	基体+球状石墨	银白色	同上, $Mg_{残} \geq 0.03\%$ , $RE_{残} \geq 0.02\%$
蠕墨铸铁	基体+蠕虫状石墨	斑点状	同上, 但 $Mg_{残}$ , $RE_{残}$ 量可稍低
可锻铸铁	生坯: 珠光体+莱氏体 退火后: 基体+团絮状石墨	生坯: 白口 退火后: 灰口	低碳, 低硅, 铬 $<0.06\%$
抗磨铸铁	基体+渗碳体	白口	除五元素外, 可加入低, 中, 高合金元素
耐热铸铁	基体+片状或球状石墨	灰口	有Si, Al, Cr系
耐腐蚀铸铁	基体+片状或球状石墨	灰口	主要合金元素Si, Ni

# 一.热力学计算—相图绘制



- ① Step Temperature: 温度—相组成图
- ② Step Concentration & Profile: 合金成分—相组成图
- ③ Single: 固定温度和合金成分的相组成图

## 热力学计算的理论基础（CALPHAD 技术）

根据热力学原理，体系在恒温恒压达到平衡的一般条件：

- (1) 体系的总吉布斯自由能  $G$  达到最小值  $G_{\min}$
- (2) 组元  $i$  在各相中的化学势相等

每一相的摩尔  
吉布斯自由能：

$$G_m = \sum_i X_i G_i^0 + RT \sum_i X_i \ln X_i + \sum_i \sum_j X_i X_j \sum_v \Omega_v (X_i - X_j)^v$$

纯组元的吉  
布斯自由能  
之和

理想混合熵引  
起的自由能增  
加

偏离理想溶液引  
起的超额自由能

# 一.热力学计算—1.Step temperature



Step Temperature: 计算固定合金成分时的温度—相组成图



# 参数设置界面

设置合金成分

	Wt %
Fe	93.66
Al	0.0
Ni	0.0
Ti	0.0
Mo	0.0
Cr	0.0
Cu	0.0
Mg	0.0
Mn	0.5
Nb	0.0
Si	2.4
Ta	0.0
V	0.0
C	3.4
N	0.0
P	0.03

Choice of phases for:  
Cast Iron

<input checked="" type="checkbox"/> LIQUID	<input checked="" type="checkbox"/> AUSTENITE
<input checked="" type="checkbox"/> FERRITE	<input checked="" type="checkbox"/> GRAPHITE
<input checked="" type="checkbox"/> CEMENTITE	<input checked="" type="checkbox"/> M(C,N)
<input checked="" type="checkbox"/> MN	<input checked="" type="checkbox"/> M2(C,N)
<input checked="" type="checkbox"/> M23C6	<input checked="" type="checkbox"/> M7C3
<input checked="" type="checkbox"/> M6C	<input checked="" type="checkbox"/> MG3N2
<input checked="" type="checkbox"/> ALN	<input checked="" type="checkbox"/> CU
<input checked="" type="checkbox"/> M2P	<input checked="" type="checkbox"/> M3P
<input checked="" type="checkbox"/> MS_B81	<input checked="" type="checkbox"/> MNS
<input checked="" type="checkbox"/> MGS	<input checked="" type="checkbox"/> GAS

Temperature:

Consider all stable phases:

Buttons: Select All, Clear All, Start, Help

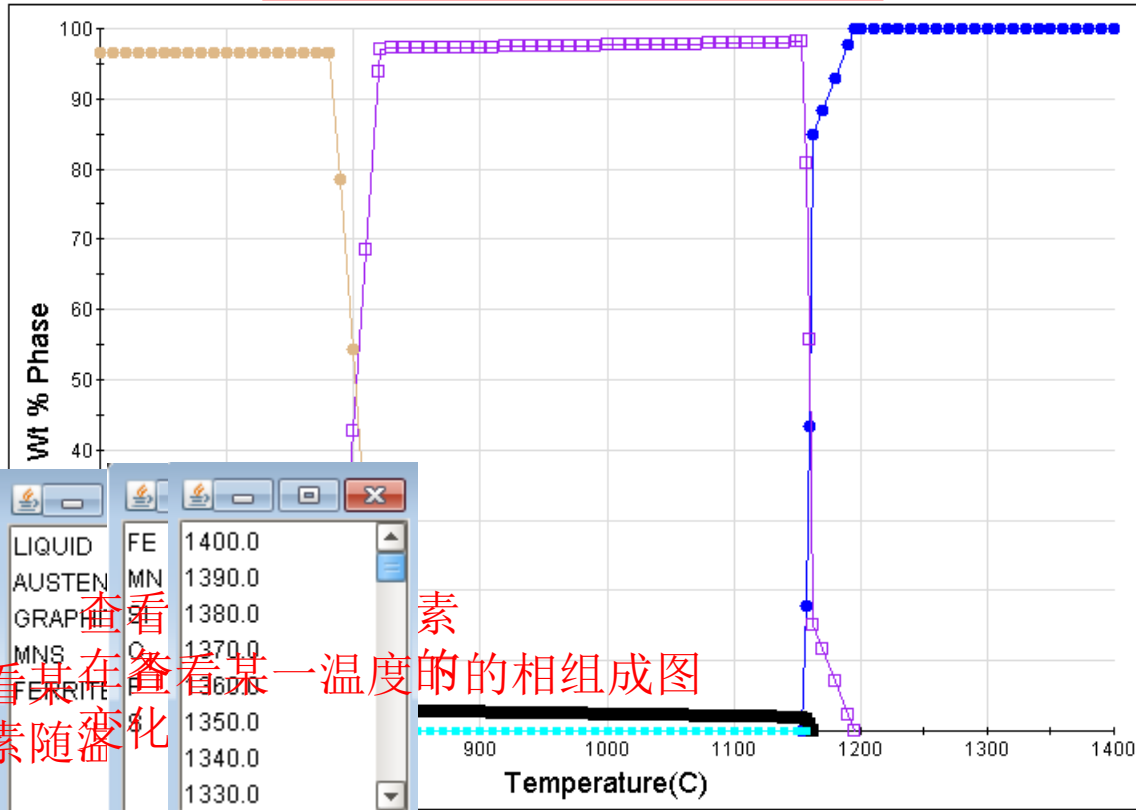
温度设置

是否考虑所有出现的稳态相

# 计算结果

Fe-0.5Mn-2.4Si-3.4C-0.03P-0.01S wt(%)

合金成分固定



- LIQUID
- AUSTENITE
- GRAPHITE
- MNS
- FERRITE

勾选需要显示的相

查看其在某一温度的相组成图  
查看元素随温度变化

LIQUID	FE	1400.0
AUSTEN	MN	1390.0
GRAPHIT	C	1380.0
MNS	O	1370.0
FERRITE	FE	1360.0
	FE	1350.0
	FE	1340.0
	FE	1330.0

查看其在某一温度的相组成图

还给出了热力学函数变化曲线

Data: %Ph Ph El T ΔG α Cp H G S Phases details Options: wt °C

# 一.热力学计算—2.Step Concentration



Step Concentration: 计算固定温度时的合金成分变化—相组成图

# 参数设置界面

File Material Types Options Utilities Help

wt °C Show properties

	Wt %
Fe	93.66
Al	0.0
Ni	0.0
Ti	0.0
Mo	0.0
Cr	0.0
Cu	0.0
Mg	0.0
Mn	0.5
Nb	0.0
Si	2.4
Ta	0.0
V	0.0
C	3.4
N	0.0
P	0.03
S	0.01

SGI#1 Reset

C equivalent: 4.21

**Cast Iron**

Concentration Step Calculation

**Temperature**

Fixed temperature (C): 1000

**Phases**

Take all phases

- Fe
- Al
- Cr
- Cu

**Balancing**

One element  All elements

Element to vary: Al

Composition range (%):

Start: 1.28 End: 0 Step: 0.2

Start calculation Help

选择一种合金元素平衡元素

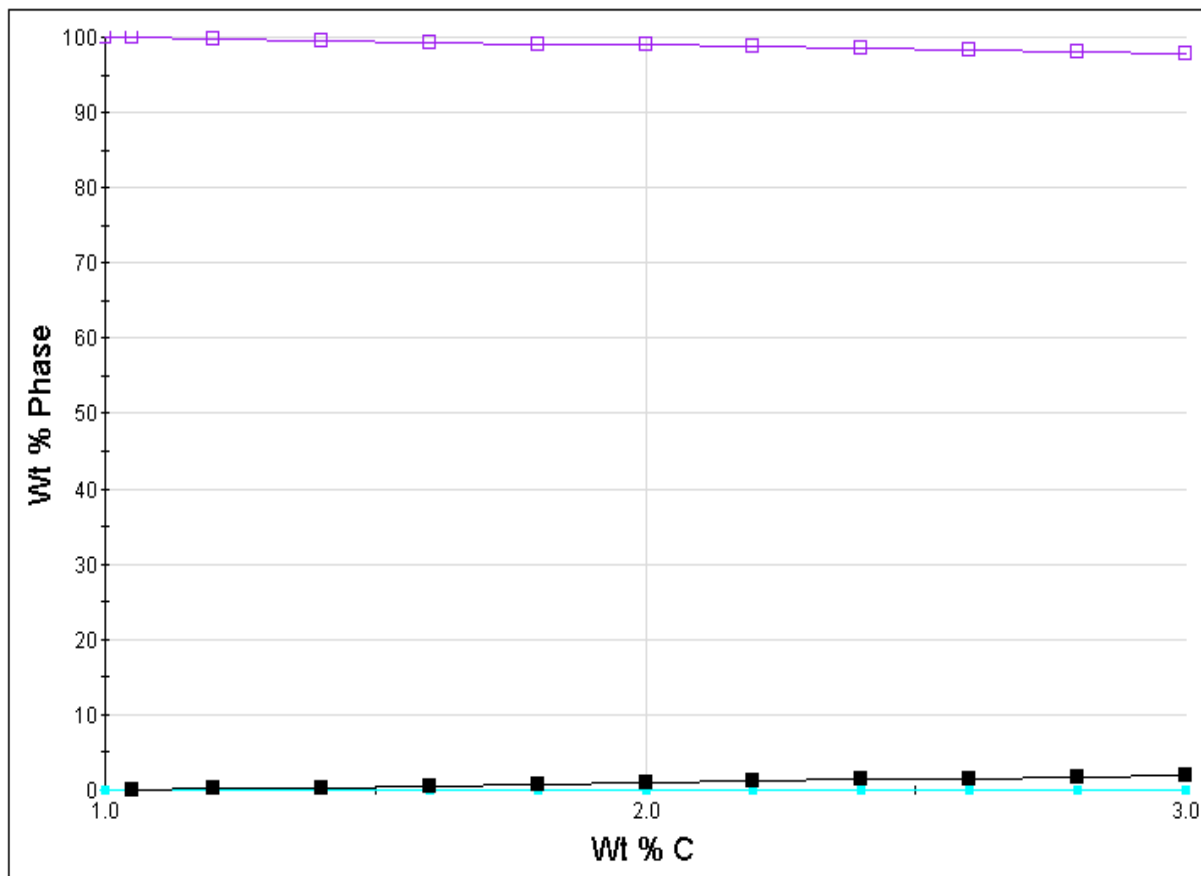
固定温度

选择平衡元素

除了成分变化以外的合金元素全为平衡元素

# 计算结果

Fe-0.35Mn-2.5Si-1.0C-0.01N-0.03P-0.04S wt(%)



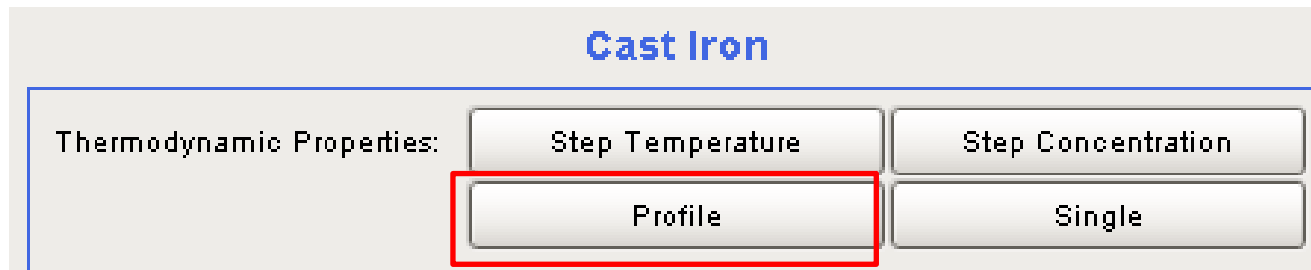
AUSTENITE  
 MNS  
 GRAPHITE

<input checked="" type="checkbox"/> AUSTENITE	TE
<input checked="" type="checkbox"/> MNS	
<input checked="" type="checkbox"/> GRAPHITE	E
Clear all	
Select all	

T= 1000.00 (Balance: all elements)

Data: Data: %Ph Ph El % ΔG α<sub>i</sub> C<sub>p</sub> H G S  Phases details Options: wt °C [Icons]

# 一.热力学计算—3.Profile



Profile: 计算固定温度时的 **多种合金成分同时变化时** 一相组成图

# 参数设置界面

	Wt %
Fe	93.24
Al	0.0
Ni	0.0
Ti	0.0
Mo	0.0
Cr	0.0
Cu	0.0
Mg	0.0
Mn	0.35
Nb	0.0
Si	2.5
Ta	0.0
V	0.0
C	3.83
N	0.01
P	0.03
S	0.04

GG40

C equivalent: 4.67

### Cast Iron

Profile Calculation

Temperature

Fixed temperature (C):

Concentration Intervals

Number of intervals:

Phases

Take all phases

Elements variation

	Start	End
Al	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>
Ni	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>
Ti	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>
Mo	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>
Cr	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>
Cu	<input type="text" value="0.0"/>	<input type="text" value="0.0"/>

GG40  
LGI#1  
LGI#2  
SGI#1  
SGI#2

	Start	End
C	<input type="text" value="3.83"/>	<input type="text" value="0.0"/>
N	<input type="text" value=".01"/>	<input type="text" value="0.0"/>
P	<input type="text" value="0.03"/>	<input type="text" value="0.0"/>
S	<input type="text" value="0.04"/>	<input type="text" value="0.0"/>

确定计算步长

指定多种合金成分同时变化

除Fe以外，Fe为平衡元素

# 一.热力学计算—4.Signal



Singal: 计算同时固定温度和合金成分时的相组成



## 参数设置界面

	Wt %
Fe	93.24
Al	0.0
Ni	0.0
Ti	0.0
Mo	0.0
Cr	0.0
Cu	0.0
Mg	0.0
Mn	0.35
Nb	0.0
Si	2.5
Ta	0.0
V	0.0
C	3.83
N	0.01
P	0.03
S	0.04
GG40	<input type="button" value="Reset"/>
C equivalent: 4.67	

**Cast Iron**  
Single Calculation

Temperatures (C) —

Temperature:

Phases —

Take all phases into account

# 计算结果

Fe-0.35Mn-2.5Si-3.83C-0.01N-0.03P-0.04S wt(%)

Summary of data at T= 1000.0 C

Weight %	FE	MN	SI	C	N	P	S
AUSTENITE	96.05	0.29	2.58	1.04	0.0103	0.0309	<0.01
GRAPHITE	-	-	-	100.0	-	-	-
MNS	0.48	62.67	-	-	-	-	36.85

Values have been rounded ... , to see more digits mouse over the values

Mu	-1751.65	-72990.63	-121238.85	2.46E-6	-311.38	-166808.41	-158344.56
Activity	0.85	0.00101	1.06E-5	1.0	0.97	1.43E-7	3.19E-7

Enthalpy H: 639.74456 J/g      Entropy S: 1.51956 J/(g K)  
 Total Gibb's Energy G: -1294.87980 J/g      Heat Capacity Cp: 0.80291 J/(g K)

Close      Print      Export data      Save as picture

■ AUSTENITE : 97.07 %  
■ GRAPHITE : 2.82 %  
■ MNS : 0.11 %

Phase distribution (Wt%) at T= 1000.0 C

