

# JMartPro通用钢模块介绍

中仿科技  
施翀 (Joy)  
2011年12月

# 目 录

- 通用钢背景知识介绍
- 通用钢模块功能介绍、演示
  - ✓ 热力学计算
  - ✓ 凝固计算
  - ✓ 相转变计算
  - ✓ 数据导出
  - ✓ 热物性能计算
  - ✓ 机械性能计算
  - ✓ 渗碳计算

# 背景知识介绍

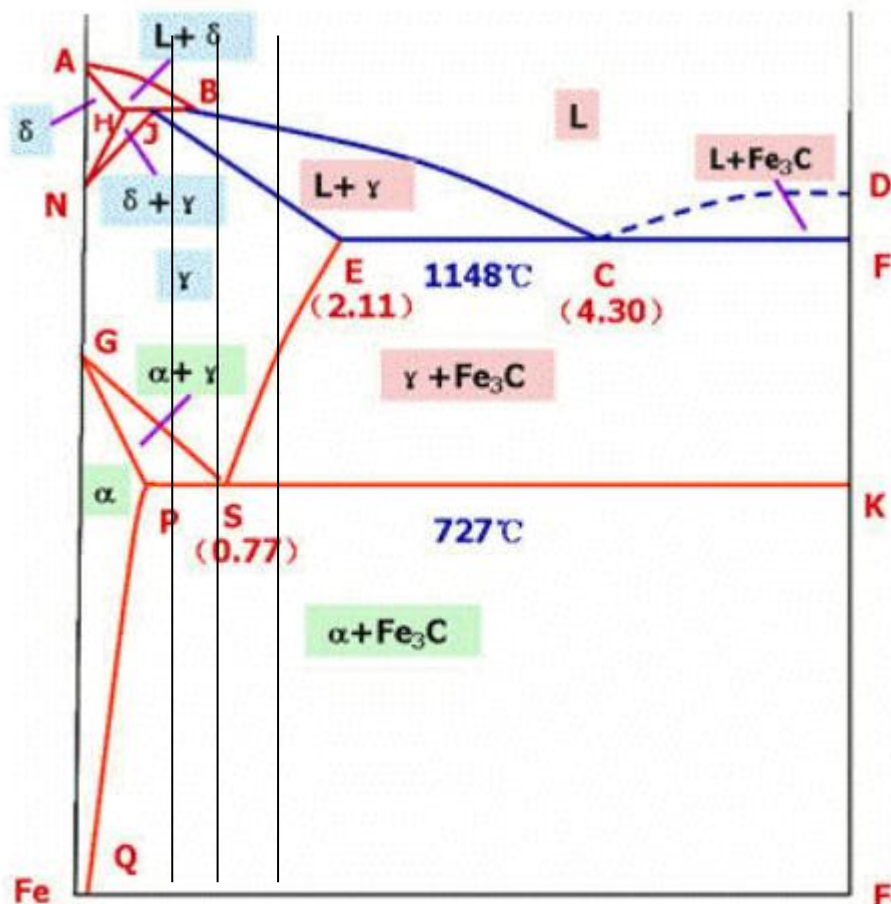
钢：碳含量小于2.11%的铁碳合金

钢的分类：碳钢，除了Si（一般Wt% $\leq$ 0.4%）和Mn（一般Wt% $\leq$ 0.8%）不含其他合金元素的钢

合金钢，还含有其他合金元素（Cr, Ni, Mo...），甚至非金属元素（B, N）的钢

铁碳相图：研究铁碳合金的重要工具

# 铁碳相图



以相组成物标注的铁碳合金相图

铁的同素异晶状态： $\delta$ -Fe， $\gamma$ -Fe， $\alpha$ -Fe

**铁素体** (F/  $\alpha$ ): 碳溶于 $\alpha$ -Fe中形成的间隙固溶体

**奥氏体** (A/  $\gamma$ ): 碳溶于 $\gamma$ -Fe中形成的间隙固溶体

**渗碳体** ( $\text{Fe}_3\text{C}$ ): 铁碳合金中碳的主要存在形式

通用钢分类:

- ① 亚共析钢:  $w(\text{C}) = 0.0218\% - 0.77\%$
- ② 共析钢:  $w(\text{C}) = 0.77\%$
- ③ 过共析钢:  $w(\text{C}) = 0.77\% - 2.11\%$

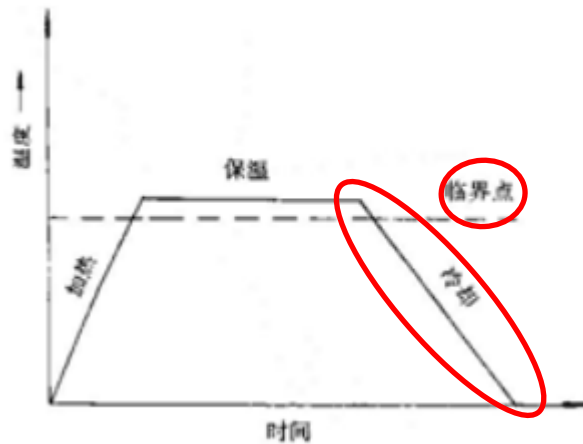
GS线 (A3): 奥氏体转变线

ES线 ( $A_{cm}$ ): 碳在奥氏体中的溶解度曲线

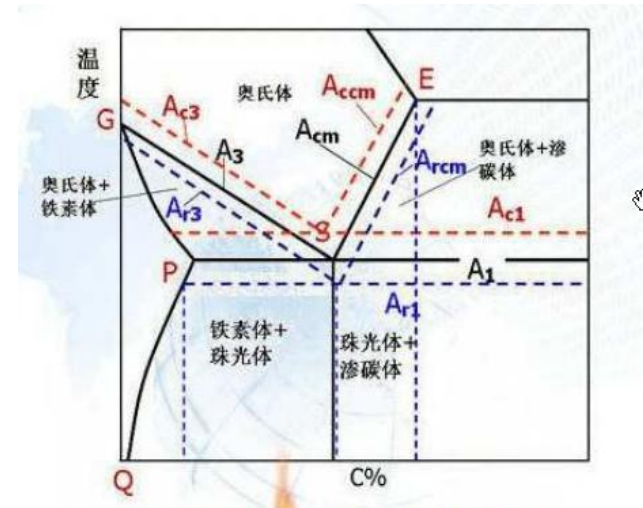
PSK线 (A1): 奥氏体共析转变为**珠光体**  
(铁素体+渗碳体)

# 热处理

热处理：将钢在**固态下**加热到预定温度，保温一定时间，然后以**预定的方式**  
**冷却**到室温的一种热加工工艺



热处理工艺示意图



加热和冷却速度对临界温度的影响

钢之所以能进行热处理，是由于钢在固态下**具有相变**，在固态下不发生相变的金属材料不能用热处理方式强化

# 通用钢模块功能介绍、演示

# 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

Thermodynamic Properties:

Choice of phases for: General Steel

- LIQUID
- FERRITE
- M2(C,N)
- MN
- M6C
- ALN
- LAVES
- G\_PHASE
- Z\_PHASE
- M2P
- MS\_B81
- M3B2
- FE2B
- FE3B
- M2SIO4
- MO\_B2
- SIO2
- TI4C2S2
- AUSTENITE
- CEMENTITE
- M(C,N)
- M23C6
- M7C3
- BN
- CHI
- PI\_PHASE
- CU
- M3P
- MNS
- MB2\_C32
- CR2B
- M2O3
- M3O4
- MULLITE
- SPINEL\_AB204

Temperature:

Consider all stable phases

Select All Clear All

Start Help

参数设置界面

设置合金成分

	Wt %
Fe	100.0
Al	0.0
Cr	0.0
Cu	0.0
Co	0.0
Mn	0.0
Mo	0.0
Nb	0.0
Ni	0.0

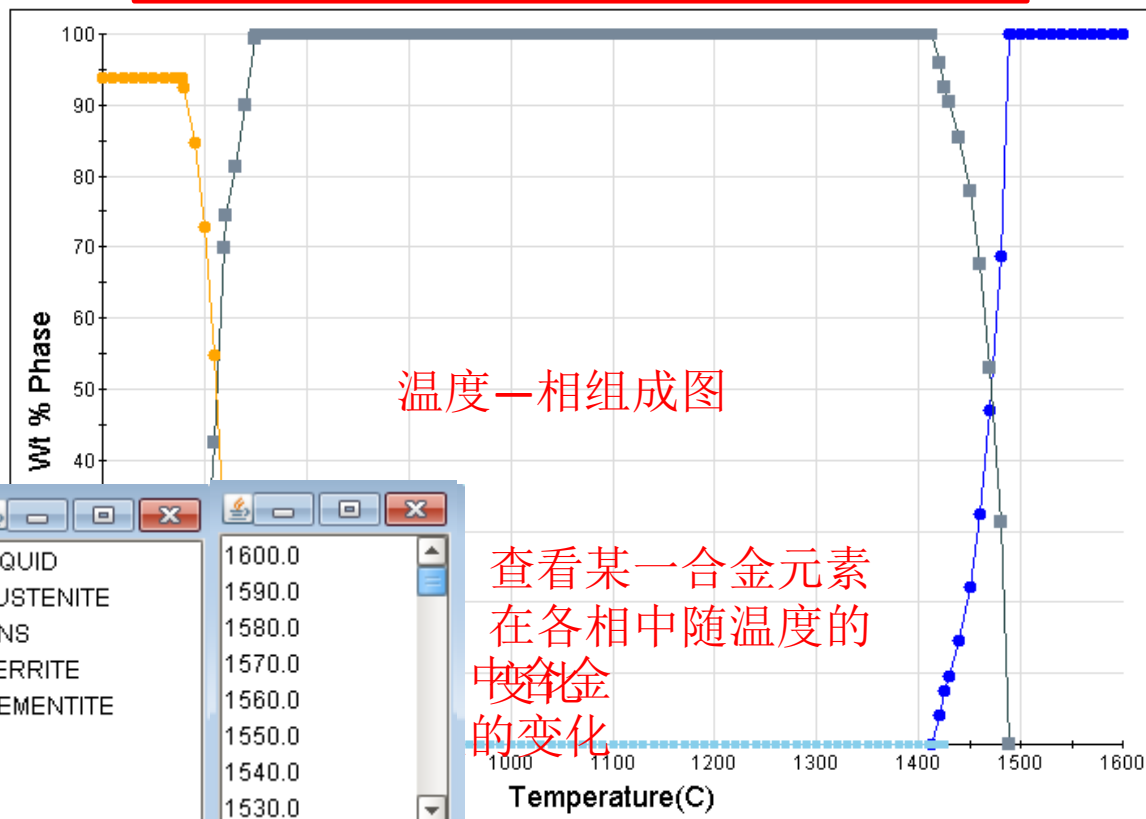
温度设置

是否考虑所有出现的稳态相

计算结果:

Fe-0.71Cr-0.86Mn-1.28Ni-0.26Si-0.41C-0.03P-0.04S wt(%)

合金成分一定



温度—相组成图

查看某一合金元素  
在各相中随温度的  
变化

查看某一温度下的相组成图

还给出了热力学函数变化曲线

勾选需要显示的相

- LIQUID
- AUSTENITE
- MNS
- FERRITE
- CEMENTITE

Clear all

Select all

LIQUID	1600.0
AUSTENITE	1590.0
MNS	1580.0
FERRITE	1570.0
CEMENTITE	1560.0
	1550.0
	1540.0
	1530.0

Data: %Ph Ph EI T  $\Delta G$   $\alpha_i$   $C_p$  H G S Phases details Options: wt °C

# 一.热力学计算—2.Step Concentration



参数设置界面

	Wt %
Fe	96.41
Al	0.0
Cr	0.71
Cu	0.0
Co	0.0
Mn	0.86
Mo	0.0
Nb	0.0
Ni	1.28
O	0.0
Si	0.26
Ta	0.0
Ti	0.0
V	0.0
W	0.0

**General Steel**  
Concentration Step Calculation

**Temperature**

Fixed temperature (C): 1000  
Fe

**Phases**

Fe  
Al  
 Take all phases  
Cr  
Cu

**Balancing**

One element     All elements

Element to vary: Al

Composition range (%):  
Start: 1.28    End: 0    Step: 0.2

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



# 一.热力学计算—3.Profile



参数设置界面

自定义开始成分

General Steel  
Profile Calculation

Temperature: Fixed temperature (C): 1000

Concentration Intervals: Number of intervals: 50

Phases:  Take all phases into account

Elements variation

Element	Start	End
Al	0.0	0.0
Cr	6.8	0.0
Cu	0.0	0.0
Co	0.0	0.0
Mn	0.68	0.0
Mo	0.26	0.0
Nb	0.0	0.0
Ni	2.3	0.0
O	0.0	0.0
Si	0.0	0.0
Ta	0.0	0.0
Ti	0.0	0.0
V	0.0	0.0
W	0.0	0.0
B	0.0	0.0
C	0.03	0.0
N	0.0	0.0
P	0.0	0.0
S	0.0	0.0

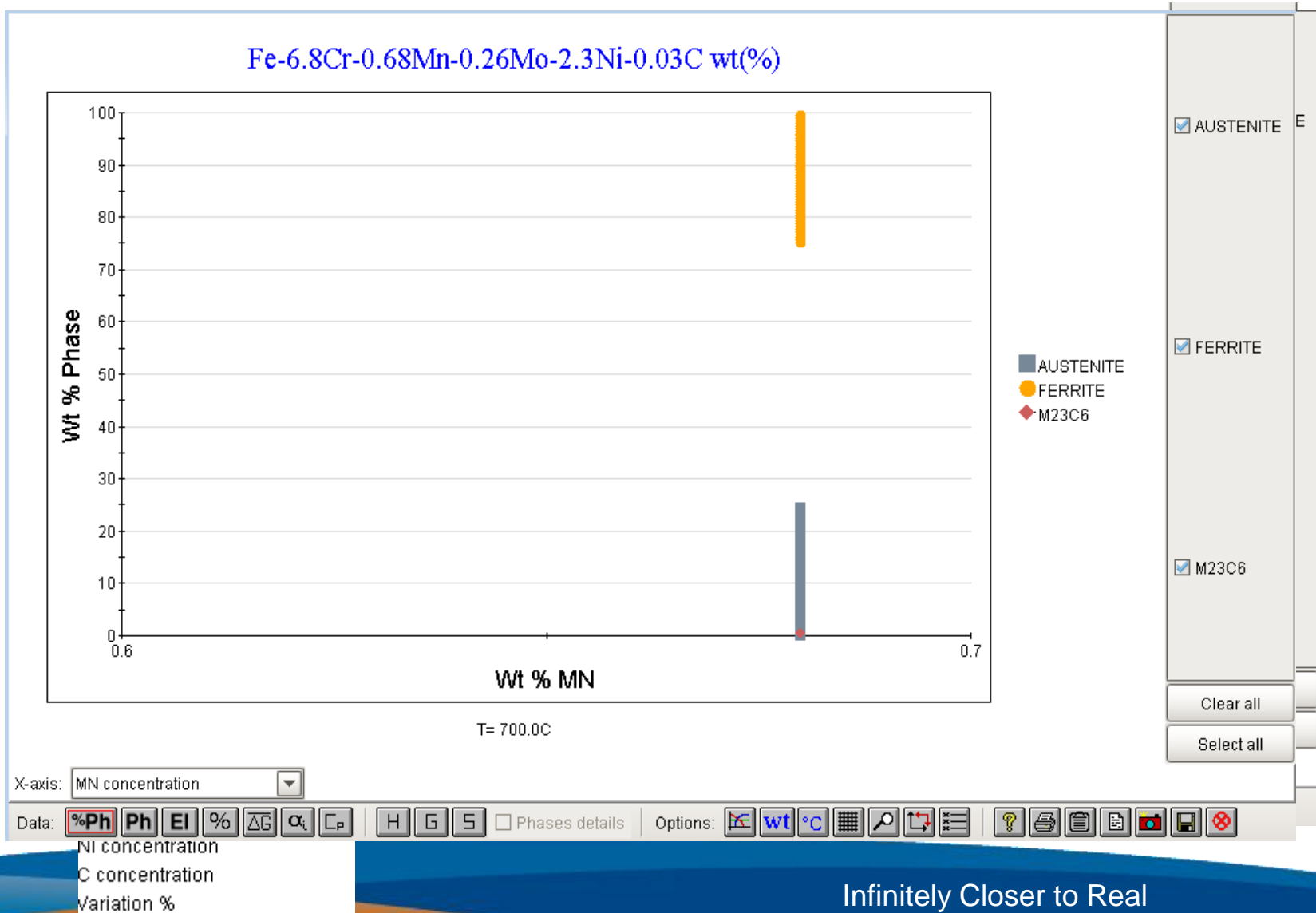
Allow different start

**Set end from saved compo**

一次设定多种合金的成分变化  
默认Fe为平衡元素

将已保存的合金成分作为结束成分

计算结果:



Infinitely Closer to Real  
无限接近真实!

# 一.热力学计算—4.Signal



参数设置界面

	Wt %
Fe	89.93
Al	0.0
Cr	6.8
Cu	0.0
Co	0.0
Mn	0.68
Mo	0.26
Nb	0.0
Ni	2.3
O	0.0
Si	0.0

**General Steel**  
Single Calculation

Temperatures (C)

Temperature: 1000

Phases

Take all phases into account

Start calculation Help

# 计算结果:

Fe-6.8Cr-0.68Mn-0.26Mo-2.3Ni-0.03C wt(%)

Summary of data at T= 700.0 C

Weight %	FE	CR	MN	MO	NI	C
AUSTENITE	86.94	7.05	1.42	0.15	4.42	0.0168
FERRITE	91.35	6.38	0.43	0.22	1.62	<0.01
M23C6	21.34	59.21	1.3	12.34	0.55	5.27
Values have been rounded ... , to see more digits mouse over the values						
Mu	-676.29	-11396.06	-39683.97	-31307.87	-30330.57	-37656.76
Activity	0.92	0.24	0.00741	0.0209	0.0236	0.00952

Enthalpy H: 458.38336 J/g      Entropy S: 1.25854 J/(g K)  
 Total Gibb's Energy G: -766.36621 J/g      Heat Capacity Cp: 1.21411 J/(g K)

Close    Print    Export data    Save as picture

FERRITE : 75.08 %  
 AUSTENITE : 24.43 %  
 M23C6 : 0.49 %

Phase distribution (wt%) at T= 700.0 C



切换2D和3D  
 显示不同形式的图

以列表形式给出每一相中的合金成分



# 更多资源请关注

中仿科技年会专栏:

<http://conference.cntech.com.cn>

中仿科技网络研讨会:

<http://webinar.cntech.com.cn>

中仿科技公开培训:

<http://training.cntech.com.cn>

中仿科技市场活动报名:

<http://seminar.cntech.com.cn>

中仿科技资源下载中心:

<http://down.cntech.com.cn>

中仿社区:

<http://i.cntech.com.cn>

中国视频教程网:

<http://www.cax.cn>

中国仿真互动:

<http://www.simwe.com>