SVEUČILIŠTE U RIJECI
TEHNIČKI FAKULTET

MATEMATIČKO MODELIRANJE I RAČUNALNA SIMULACIJA MIKROSTRUKTURNIH PRETVORBI I MEHANIČKIH SVOJSTAVA PRI GAŠENJU ČELIKA

Doktorska disertacija

Sunčana Smokvina Hanza

Rijeka (2011.)

SVEUČILIŠTE U RIJECI
TEHNIČKI FAKULTET

MATEMATIČKO MODELIRANJE I RAČUNALNA SIMULACIJA MIKROSTRUKTURNIH PRETVORBI I MEHANIČKIH SVOJSTAVA PRI GAŠENJU ČELIKA

Doktorska disertacija

Sunčana Smokvina Hanza

Mentor: Red. prof. dr. sc. Božo Smoljan, dipl. ing.

Rijeka (2011.)

Sažetak

Cilj ove doktorske disertacije bio je istraživanje mehanizama i kinetike mikrostrukturnih pretvorbi te mehaničkih svojstava pri gašenju čelika, a u svrhu što točnijeg definiranja fizikalnih pojava pri gašenju čelika. Sve veći zahtjevi u svezi kvalitete mehaničkih svojstava strojnih dijelova ukazuju na nužnost dobrog poznavanja povezanosti mikrostrukture, kemijskog sastava te mehaničkih svojstava.

Iako je jednostavan za izvođenje, proces gašenja čelika spada u jedan od fizikalno najkompleksnijih inženjerskih postupaka jer pri gašenju čelika nastaje više procesa koji se međusobno isprepliću: fizikalni procesi mikrostrukturnih pretvorbi, procesi izmjene, prijelaza i provođenja topline, procesi stvaranja deformacija i zaostalih naprezanja te procesi formiranja i rasta pukotina.

Na temelju provedenih teorijskih istraživanja, u radu su predložene metode određivanja kinetičkih parametara izotermičkog raspada austenita u ferit, perlit te bainit te izrazi za predviđanje kinetike raspada austenita. Nadalje, predloženi su izrazi za predviđanje vrijednosti termodinamičkih konstanti raspada austenita u ferit, perlit i bainit na temelju kemijskog sastava podeutektoridnih čelika. Također, predloženi su izrazi za procjenu tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika: ferita, perlita, binita i martenzita.

Vlastiti algoritam razvijen u svrhu predviđanja kinetike raspada austenita i tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika implementiran je u računalni program za 3-D simulaciju ohlađivanja uzoraka, čime je omogućena 3-D simulacija raspada austenita pri gašenju čelika.

Za provjeru rezultata računalne simulacije mikrostrukturnih pretvorbi te tvrdoće pri gašenju čelika korišten je nisko-legirani čelik za poboljšanje: 42CrMo4 (DIN).

Rezultati računalne simulacije ukazuju na to da se razvijeni matematički modeli mikrostrukturnih pretvorbi te tvrdoće mogu uspješno koristiti pri predviđanju rezultata raspada austenita za vrijeme gašenja čelika.

Summary

The scope of this doctoral thesis has been the investigation of mechanisms and kinetics of microstructure transformation as well as the study of mechanical properties, with the objective of a more accurate defining of physical phenomena during steel quenching. Increasing technical requirements, relating to the quality of mechanical properties of the engineering components, imply a deep understanding of relations among microstructure, chemical composition and mechanical properties.

Although the process of steel quenching is simple to apply, it is one of the physically most complicated engineering processes, which involves many interacting processes: physical processes of microstructure transformation, processes of heat exchange, transfer and heat conduction, processes of generation of deformation and residual stresses, and processes of crack formation and its growth.

Based on theoretical investigations, methods for determination of kinetics parameters of isothermal austenite decomposition into ferrite, pearlite and bainite have been proposed, as well as equations of austenite decomposition kinetics. Furthermorer, on the basis of the chemical composition of hypoeutectioid steels, equations for the estimation of thermodynamic constants of austenite decomposition into ferrite, pearlite and bainite have been put forward. Equations for the evaluation of the microstructure constituents` hardness have been also presented.

A proper algorithm developed in order to predict the austenite decomposition kinetics as well as the microstructure constituents` hardness has been implemented in the 3-D computer program for a 3-D simulation of the specimen`s cooling, whereby the 3-D simulation of the austenite decomposition during steel quenching is enabled. Low-alloy steel for tempering 42CrMo4 (DIN) has been applied for the verification of results obtained by the computer simulation.

The results of the computer simulation show that developed mathematical models of microstructure transformations and hardness can be efficiently used for the prediction of austenite decomposition during steel quenching.

Predgovor

Matematičko modeliranje i računalna simulacija procesa toplinske obrade čelika u današnje vrijeme postali su neophodan alat za simulaciju, razumijevanje, optimiranje i kontrolu kako postojećih tako i novih procesa toplinske obrade.

Najopćenitije rečeno, gašenje čelika je ohlađivanje čelika s temperature austenitizacije brzinama većim od brzina koje odgovaraju ohlađivanju na mirnom zraku, a uglavnom se provodi u svrhu kaljenja čelika, odnosno dobivanja pretežno martenzitne mikrostrukture ili zadržavanja visokotemperaturne faze u legurama. Jedan od osnovnih zadataka gašenja čelika je postizanje odgovarajućih mehaničkih svojstava čelika bez nastanka loma, uz tolerantnu razinu deformacija i zaostalih naprezanja.

Doktorska disertacija „Matematičko modeliranje i računalna simulacija mikrostrukturnih pretvorbi i mehaničkih svojstava pri gašenju čelika“ podijeljena je u sedam poglavlja.

U uvodnom, prvom poglavlju obrazložena je važnost matematičkog modeliranja i računalne simulacije procesa gašenja čelika, kao posljednje i najvažnije faze pri kaljenju čelika. Također, navodi se hipoteza rada te je opisana metodologija istraživanja tijekom izrade doktorske disertacije.

Na početku drugog poglavlja naslova „Mikrostrukturne pretvorbe pri gašenju čelika“ ukratko je opisan proces gašenja čelika te su navedeni osnovni fizikalni procesi koji se odvijaju pri gašenju. Nadalje, navedeni su uvjeti mikrostrukturnih pretvorbi te opisani mehanizmi raspada austenita u ferit, perlit, martenzit i bainit. Objašnjena je mogućnost prikaza mikrostrukturnih pretvorbi pomoću TTT dijagrama. Budući da se feritna, perlitna te bainitna pretvorba sastoje od procesa nukleacije i rasta, u nastavku drugog poglavlja opisana je termodinamika nukleacije mikrostrukturnih pretvorbi, nakon čega se navode poznati izrazi za definiranje brzine nukleacije klice nove faze te brzine rasta klica ferita i perlita. Brzine nukleacije i rasta klica nove faze su glavni čimbenici kojima je definirana kinetika mikrostrukturnih pretvorbi čiji su osnovni izrazi navedeni u nastavku poglavlja, kao i izrazi kinetike raspada austenita. Pri kraju drugog poglavlja diskutiran je utjecaj legirajućih elemenata na raspad austenita te su prihvaćeni izrazi na temelju kojih će se određivati

kritične temperature raspada austenita u računalnoj simulaciji gašenja čelika. Poglavlje završava kratkim osvrtom na utjecaj stanja naprezanja na mikrostrukturne pretvorbe.

Treće poglavlje naslova „Metode određivanja kinetičkih parametara izotermičkog raspada austenita“ započinje prikazom kinetičkog Avramijevog izotermičkog izraza u inkremenatalnom obliku koji se može primijeniti u predviđanju raspada austenita u neizotermičkim uvjetima pretvorbi te objašnjenjem primjene adicijskog pravila u simulaciji neizotermičkih pretvorbi. U nastavku predložene su metode određivanja kinetičkih parametara izotermičkog raspada austenita kojima je određena kinetika feritne, perlitne te bainitne pretvorbe. Osim poznatim fizikalnim veličinama, kinetički parametri feritne, perlitne te bainitne pretvorbe definirani su i termodinamičkim konstantama čije se vrijednosti određuju kalibracijom. Na kraju poglavlja prikazan je utjecaj kemijskog sastava čelika na vrijednosti termodinamičkih konstanti raspada austenita koji je dobiven na temelju provedenih istraživanja na većem broju podeutektoidnih čelika. Vrijednosti termodinamičkih konstanti verificirane su pomoću izotermičkog dijagrama čelika 42CrMo4 (DIN).

Četvrto poglavlje naslova „Mehanička svojstva čelika u procesu gašenja“ posvećeno je opisu relevantnih mehaničkih svojstava u procesu gašenja s posebnim osvrtom na njihovu ulogu i promjenu u procesu gašenja. Tako su opisane različite vrste deformacija do kojih dolazi pri gašenju, nakon čega su navedeni osnovni kriteriji krhkog loma te uzroci krhkog loma pri gašenju čelika. Budući da mehanička svojstva čelika ovise o mikrostrukturnim sastojcima te o temperaturi, slijedi međusobna povezanost mikrostrukture i mehaničkih svojstava, posebno utjecaj mikrostrukture na tvrdoću, svojstva tečenja te svojstva loma te međusobna povezanost temperature i mehaničkih svojstava, posebno utjecaj temperature na tvrdoću, modul elastičnosti, svojstva tečenja, svojstva loma te na transformacijsku plastičnost mikrostrukturnih sastojaka čelika.

U petom poglavlju naslova „Metode procjene tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika“, na temelju eksperimentalnih podataka podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika te analiziranih teorijskih činjenica, predloženi su izrazi za predviđanje tvrdoće ferita, perlita, bainita i martenita. Tvrdoća se smatra temeljnim mehaničkim svojstvom u procesu gašenja čelika.

U šestom poglavlju naslova „Računalna simulacija mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika“ opisan je 3-D računalni program ohlađivanja čelika te vlastiti računalni

program mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika, s naglaskom na specifičnosti metode predviđanja mikrostrukturnih pretvorbi pri gašenju čelika. Na kraju poglavlja prikazani su rezultati računalne simulacije mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika te njihova eksperimenatalna verifikacija.

U zaključnom, sedmom poglavlju navedeni su zaključci o predloženim metodama određivanja kinetičkih parametara izotermičkog raspada austenita, određivanju termodinamičkih konstanti feritne, perlitne i bainitne pretvorbe na temelju poznatog kemijskog sastava podeutektoidnih čelika, kao i zaključci o predloženim izrazima za predviđanje tvrdoće ferita, perlita, bainita i martenzita. Također, navedeni su zaključci o uspješnosti vlastitog računalnog programa u predviđanju mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika te su dani prijedlozi budućih istraživanja.

Zahvaljujem mentoru red. prof. dr. sc. Boži Smoljanu na ukazanoj pomoći i savjetima tijekom izrade doktorske disertacije.

Zahvaljujem red. prof. dr. sc. Loreti Pomenić na stalnoj podršci i poticanju za vrijeme izrade rada.

Zahvaljujem kolegama Nevenu Tomašiću, Dariju Iljkiću, Mateju Fonoviću i Bernardu Badurini na pomoći tijekom izrade doktorske disertacije.

Rad posvećujem svojoj obitelji.

Autorica

Rijeka, veljača 2011.

Sadržaj

1. Uvod 1
1.1. Ishodište rada 1
1.2. Hipoteza rada 2
1.3. Metodologija rada 2

2. Mikrostrukturne pretvorbe pri gašenju čelika 4
2.1. Općenito o gašenju čelika 4
2.2. Fizikalni procesi pri gašenju čelika 4
2.3. Uvjeti mikrostrukturnih pretvorbi 6
2.4. Mehanizmi raspada austenita 7
2.4.1. Raspad austenita u ferit 7
2.4.2. Raspad austenita u perlit 8
2.4.3. Raspad austenita u martenzit 11
2.4.4. Raspad austenita u bainit 13
2.5. Prikaz mikrostrukturnih pretvorbi pomoću TTT dijagrama 17
2.6. Termodinamika nukleacije mikrostrukturnih pretvorbi 18
2.7. Brzina nukleacije 23
2.8. Brzina rasta klica ferita i perlita 26
2.9. Osnovni izrazi kinetike mikrostrukturnih pretvorbi 27
2.10. Kinetika raspada austenita 32
2.11. Utjecaj legirajućih elemenata na raspad austenita 33
2.12. Utjecaj stanja naprezanja na mikrostrukturne pretvorbe 40

3. Metode određivanja kinetičkih parametara izotermičkog raspada austenita 42
3.1. Prikaz kinetike raspada austenita u inkrementalnom obliku 42
3.2. Primjena adicijskog pravila u simulaciji neizotermičkih pretvorbi 43
3.3. Određivanje parametra k_F raspada austenita u ferit 44
3.4. Određivanje parametra k_B raspada austenita u bainit 47
3.5. Određivanje parametra k_P raspada austenita u perlit 50
3.6. Utjecaj kemijskog sastava na vrijednosti termodinamičkih konstanti raspada austenita u ferit, perlit i bainit 53
3.7. Verifikacija vrijednosti termodinamičkih konstanti pomoću izotermičkog dijagrama 55

4. Mehanička svojstva čelika u procesu gašenja 58
4.1. Uvod 58
4.2. Deformacije u procesu gašenja 59

4.3. Krhki lom u procesu gašenja 66
4.3.1. Osnovni kriteriji krhkog loma 66
4.3.2. Uzroci krhkog loma pri gašenju čelika 69
4.4. Utjecaj mikrostrukture na mehanička svojstva čelika 70
4.4.1. Općenito o utjecaju mikrostrukture na mehanička svojstva 70
4.4.2. Utjecaj mikrostrukture na tvrdoću i svojstva tečenja 70
4.4.3. Utjecaj mikrostrukture na svojstva loma 74
4.5. Utjecaj temperature na mehanička svojstva čelika 78
4.5.1. Općenito o utjecaju temperature na svojstva čelika 78
4.5.2. Utjecaj temperature na tvrdoću 80
4.5.3. Utjecaj temperature na modul elastičnosti 80
4.5.4. Utjecaj temperature na svojstva tečenja 81
4.5.5. Utjecaj temperature na transformacijsku plastičnost 87
4.5.6. Utjecaj temperature na svojstva loma 88

5. Metode procjene tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika 90
5.1. Uvod 90
5.2. Procjena tvrdoće perlita 90
5.3. Procjena tvrdoće martenzita 94
5.4. Procjena tvrdoće bainita 96
5.5. Procjena tvrdoće pri gašenju čelika 100

6. Računalna simulacija mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika 101
6.1. 3-D računalni program ohlađivanja čelika 101
6.2. Računalni program mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika 102
6.3. Specifičnosti metode predviđanja mikrostrukturnih pretvorbi pri gašenju čelika 106
6.4. 3-D računalna simulacija mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika 108
6.5. Eksperimentalna verifikacija rezultata računalne simulacije 110
6.5.1. Metalografska analiza pokusnog uzorka 110
6.5.2. Ispitivanje tvrdoće 112
6.6. Rezultati i analiza rezultata računalne simulacije mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika 112

7. Zaključak 128

Literatura 132
Popis oznaka i simbola 139
Popis slika 147
Popis tablica 150

Prilog **152**
Životopis **157**

1. Uvod

1.1. Ishodište rada

Kompleksnost fizikalnih procesa pri gašenju čelika i činjenica da većina njih nije u dovoljnoj mjeri teorijski objašnjena, razlog su da predviđanje mikrostrukture, mehaničkih svojstava, generiranja toplinskih i strukturnih naprezanja te deformiranja i eventualnog nastanka loma izradaka današnjih dana predstavlja jedan od najvećih prioriteta u računalnoj simulaciji materijala.

Preduvjet uspješnog predviđanja mehaničkih svojstava pri gašenju čelika, koja predstavljaju prvi korak u predviđanju ponašanja materijala u procesu gašenja čelika, je što je moguće točnije predviđanje mikrostrukturnih pretvorbi. Zbog toga modeliranje mikrostrukturnih pretvorbi predstavlja jedan od glavnih izazova u modeliranju procesa gašenja čelika, a također i procesa toplinske obrade općenito. Nedvojbeno je da je primjena materijala u osnovi određena njihovim mehaničkim svojstvima, iz čega se može zaključiti o važnosti predviđanja mehaničkih svojstava u procesu gašenja čelika.

Stoga, sa svrhom što točnijeg definiranja fizikalnih pojava u procesu gašenja čelika, ova doktorska disertacija posvećena je istraživanju mehanizama i kinetike raspada austenita u izotermičkim uvjetima pretvorbi te pri kontinuiranom ohlađivanju čelika s temperature austenitizacije, kao i istraživanju mehaničkih svojstava pri gašenju čelika koja u prvom redu ovise o mikrostrukturi, kemijskom sastavu te temperaturi.

U radu su analizirani postojeći izrazi kinetike mikrostrukturnih pretvorbi te je predložen i dalje razrađivan Avramijev kinetički izraz pogodan za računalnu simulaciju raspada austenita pri gašenju čelika. Također, analizirana su relevantna mehanička svojstva u procesu gašenja te predložene metode određivanja vrijednosti granice razvlačenja te parametara deformacijskog očvršćivanja mikrostrukturnih sastojaka čelika u ovisnosti o temperaturi. Nadalje, predloženi su izrazi za predviđanje tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika pogodni za računalnu simulaciju.

Postavljanje pouzdanih matematičkih modela za računalnu simulaciju mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće u procesu gašenja čelika omogućuje precizno simuliranje te optimiranje i kontrolu rezultata raspada austenita u procesu gašenja čelika.

1.2. Hipoteza rada

U toplinskoj obradi čelika najvažniji je posljednji ciklus obrade, a to je proces ohlađivanja. Kod kaljenja, posljednji ciklus je gašenje kada se uzorak naglo ohlađuje s temperature austenitizacije. Uslijed nagle promjene temperature pri gašenju, u uzorku dolazi do mikrostrukturnih pretvorbi, tj. do raspada austenita. Različitim brzinama ohlađivanja odgovara različit mikrostrukturni sastav čelika, odnosno, postižu se različita mehanička svojstva čelika. Osim o mikrostrukturi, mehanička svojstva pri gašenju čelika ovise i o temperaturi pretvorbe.

Na temelju analize fizikalnih pojava u procesu gašenja čelika, može se postaviti pouzdan matematički model za računalnu simulaciju mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika. Na temelju poznatog kemijskog sastava čelika, računalnom simulacijom može se dovoljno precizno predviđati volumne udjele te tvrdoću mikrostrukturnih sastojaka pri gašenju čelika.

1.3. Metodologija rada

Istraživanja tijekom izrade doktorske disertacije sastojala su se od teorijskih razmatranja, računalne simulacije, eksperimentalnih postupaka te analize rezultata.

U prvom dijelu istraživanja kritički su analizirana dosadašnja teorijska znanja vezana uz mikrostrukturne pretvorbe pothlađenog austenita te su kritički analizirani postojeći izrazi kojima se u literaturi najčešće predviđa kinetika raspada austenita. Na temelju provedene analize i donesenih zaključaka, predložene su metode određivanja kinetičkih parametara izotermičkog raspada austenita te su razvijeni kinetički izrazi kojima je definirana kinetika feritne, perlitne i bainitne pretvorbe. Osim poznatim fizikalnim veličinama, navedeni kinetički parametri izotermičkog raspada austenita definirani su također i termodinamičkim konstantama čije su vrijednosti određene kalibracijom na temelju izotermičkog dijagrama

tako da odstupanja numeričkih od eksperimentalnih krivulja pretvorbi izotermičkog dijagrama budu minimalna. Ovaj postupak određivanja termodinamičkih konstanti pretvorbi primijenjen je na većem broju podeutektoidnih čelika, nakon čega je regresijskom analizom dobivena ovisnost termodinamičkih konstanti o kemijskom sastavu čelika.

U drugom dijelu istraživanja kritički su analizirana mehanička svojstva čelika s osvrtom na njihovu ulogu i promjenu u procesu gašenja. Tako je analizirana ovisnost relevantnih mehaničkih svojstava pri gašenju čelika o mikrostrukturnim sastojcima te o temperaturi pretvorbe. Na temelju analize rezultata dosadašnjih istraživanja i donesenih zaključaka, predloženi su izrazi za procjenu tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika nastalih u izotermičkim uvjetima raspada austenita te pri gašenju čelika.

U trećem dijelu istraživanja, u svrhu 3-D simulacije ohlađivanja čelika te ujedno i 3-D simulacije mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće, proširen je postojeći 2-D model ohlađivanja čelika autora prof. dr. sc. B. Smoljana. Potom je vlastiti matematički model mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće, koji je razvijen za izotermičke uvjete raspada austenita, prilagođen za računalnu simulaciju mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika pri čemu su u obzir uzete specifičnosti kontinuiranog ohlađivanja. Nadalje, vlastiti model mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće implementiran je u 3-D model ohlađivanja čime je omogućena 3-D simulacija mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće u procesu gašenja. Nakon provedene računalne simulacije, uspješnost razvijenog matematičkog modela u predviđanju rezultata raspada austenita pri gašenju čelika verificirana je eksperimentalno primjenom kvantitativne metalografije i ispitivanjem tvrdoće, pri čemu je korišten nisko-legirani čelik za poboljšanje 42CrMo4 (DIN).

U zadnjem dijelu istraživanja izvedeni su zaključci o rezultatima istraživanja, odnosno o primjenjivosti vlastitih matematičkih modela pri računalnoj simulaciji gašenja čelika. Također, izvedeni su zaključci o znanstvenom doprinosu istraživanja te primjeni rezultata istraživanja, kao i prijedlozi budućih istraživanja gašenja čelika.

2. Mikrostrukturne pretvorbe pri gašenju čelika

2.1. Općenito o gašenju čelika

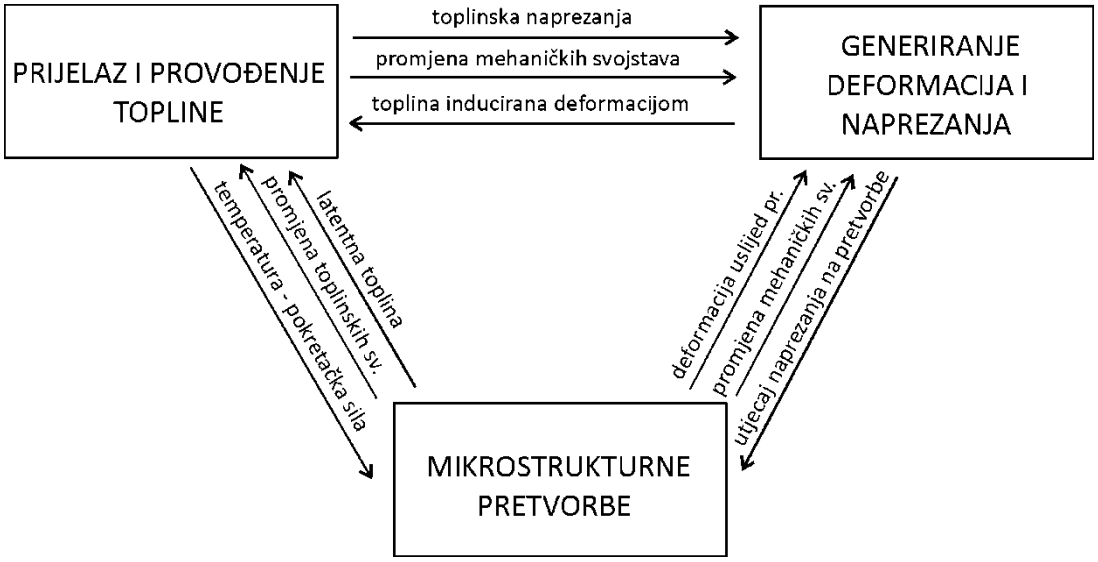
Gašenje spada u postupke toplinske obrade metalnih legura, a provodi se u svrhu postizanja odgovarajućih mehaničkih svojstava legura bez nastanka loma, uz tolerantnu razinu deformacija i zaostalih naprezanja.

Općenito, gašenje čelika je ohlađivanje čelika s temperature austenitizacije brzinama većim od brzina koje odgovaraju ohlađivanju na mirnom zraku. Zbog velikih brzina ohlađivanja, gašenjem se onemogućuju ravnotežne pretvorbe pri ohlađivanju, a legura se udaljuje od stabilnog stanja. Dvije su osnovne vrste gašenja: kaljenje pri kojem se visokotemperaturna faza transformira u novu neravnotežnu fazu te gašenje bez faznih pretvorbi kada se u leguri ustaljuje visokotemperaturna faza.

2.2. Fizikalni procesi pri gašenju čelika

Za vrijeme gašenja čelika dolazi do pojave različitih fizikalnih procesa koji se međusobno isprepliću: prijelaza i provođenja topline, mikrostrukturnih pretvorbi, stvaranja deformacija i zaostalih naprezanja te formiranja i rasta pukotina. Interakcija fizikalnih procesa pri gašenju čelika prikazana je na slici 2.1.

Iako je gašenje čelika kompleksan fizikalni problem, proces provođenja topline aktivira i upravlja procesima mikrostrukturnih pretvorbi te mehaničkim ponašanjem materijala. Glavna pokretačka sila mikrostrukturnih pretvorbi u bilo kojoj točki uzorka je promjena temperature. Pri ohlađivanju dolazi do narušavanja termodinamičke stabilnosti primarne mikrostrukture, što rezultira raspadom austenita. Brzina pretvorbe ovisi o temperaturi i brzini ohlađivanja. Budući da su mikrostrukturne pretvorbe egzotermni procesi, pri njima dolazi do oslobađanja latentne topline.



Sl. 2.1. Fizikalni procesi pri gašenju čelika

Uslijed velikih temperaturnih gradijenata i promjene mehaničkih svojstava s temperaturom, pri gašenju čelika u uzorku dolazi do pojave toplinskih naprezanja. Različite brzine ohlađivanja u različitim točkama uzorka uzrok su toplinskih dilatacija koje se uravnotežuju razvojem unutarnjih naprezanja koja mogu biti uzrok plastičnom tečenju kada njihova vrijednost u bilo kojoj točki prijeđe vrijednost lokalnog naprezanja tečenja.

Današnjih dana, veza između mikrostrukturnih pretvorbi i mehaničkog ponašanja materijala jedna je od najčešćih tema istraživanja u području materijala čiji je osnovni cilj postavljanje metalo-termo-mehaničke teorije kojom se može predvidjeti utjecaj mehaničkog ponašanja materijala na mikrostrukturne pretvorbe te utjecaj mikrostrukturnih pretvorbi na deformaciju materijala [1].

Pri raspadu austenita u niskotemperaturne faze, ferit, perlit, bainit i / ili martenzit, zbog razlike u gustoći austenita i niskotemperaturnih faza dolazi do povećanja volumena koje je popraćeno razvojem deformacije. Uz toplinska naprezanja i transformacijom induciranu plastičnost (TRIP), ove deformacije predstavljaju primarni izvor polja unutarnjih naprezanja.

Promjenom termodinamike i kinetike pretvorbe, stanje naprezanja i stanje deformacije u uzorku utječu na mikrostrukturne pretvorbe. Najčešće uočljiv utjecaj naprezanja na transformacijske dijagrame je pomak kritičnih temperatura i vremena [1,2]. Tako pri određenim stanjima naprezanja, pretvorbe mogu biti inducirane ili, u suprotnom, potpuno

onemogućene. Slično tome, promjenom kritičnih temperatura i brzina pretvorbi, prethodna plastična deformacija primarnog austenita utječe na kasnije mikrostrukturne pretvorbe [3].

Pri gašenju čelika, toplinske deformacije te deformacije uslijed mikrostrukturnih pretvorbi uzrokuju promjenu polja unutarnjih naprezanja. U ekstremnim uvjetima, uslijed unutarnjih naprezanja može doći do loma uzorka. U svakoj točki gašenog uzorka, ovisno o promjeni termo-mehaničkih svojstava s temperaturom i brzinom ohlađivanja, s vremenom dolazi do promjene naprezanja. Kada se pri određenoj temperaturi prijeđe lokalna granica tečenja u bilo kojoj točki uzorka, dolazi do plastičnog tečenja. Ta plastična deformacija rezultira naprezanjima koja ostaju u uzorku nakon gašenja (zaostala naprezanja).

2.3. Uvjeti mikrostrukturnih pretvorbi

Skup atoma i molekula, koji su pod određenim vanjskim utjecajem postigli stanje ravnoteže, sastoji se od jedne ili više homogenih i fizikalno različitih faza. Dvije faze su međusobno različite ukoliko imaju različito agregatno stanje, različito kristalno uređenje ili različit kemijski sastav [4].

Pri promjeni temperature ili tlaka, u metalnim legurama atomi se preraspodjeljuju unutar kristalne rešetke, čime dolazi do promjene mikrostrukture ili kristalne strukture. Ova vrsta fazne pretvorbe naziva se faznom pretvorbom u krutom stanju. Budući da pri faznoj pretvorbi u krutom stanju kemijski sastav nove faze odgovara kemijskom sastavu primarne faze, kada se govori o faznim pretvorbama u krutom stanju zapravo se govori o mikrostrukturnim pretvorbama.

Za ostvarenje fazne pretvorbe potrebno je da se atomi mogu difuzijskim ili bezdifuzijskim mehanizmom postaviti u novi položaj. Zbog toga su za faznu pretvorbu dovoljni sljedeći uvjeti: dovoljna termodinamička nestabilnost (dovoljna razlika trenutnog i stabilnog stanja strukturne građe) te omogućen difuzijski ili bezdifuzijski pomak atoma u odgovarajućim pravcima za stvaranje novog rasporeda atoma, odnosno, za stvaranje nove kristalne rešetke [5].

Većina faznih pretvorbi u krutom stanju sastoji se od procesa nukleacije i rasta. U procesu nukleacije stvaraju se klice nove faze, dok je pomicanje granica nove i primarne faze unutar primarne faze proces rasta klice. Brzina rasta nove faze ovisi o brzini pomicanja faznih

granica. Ukoliko se rast nove faze ostvaruje uz difuziju atoma, govori se o difuzijskoj pretvorbi, a ukoliko se rast nove faze ostvaruje uz bezdifuzijski pomak atoma, riječ je o bezdifuzijskoj martenzitnoj pretvorbi. U pravilu, bezdifuzijski procesi znatno su brži od difuzijskih.

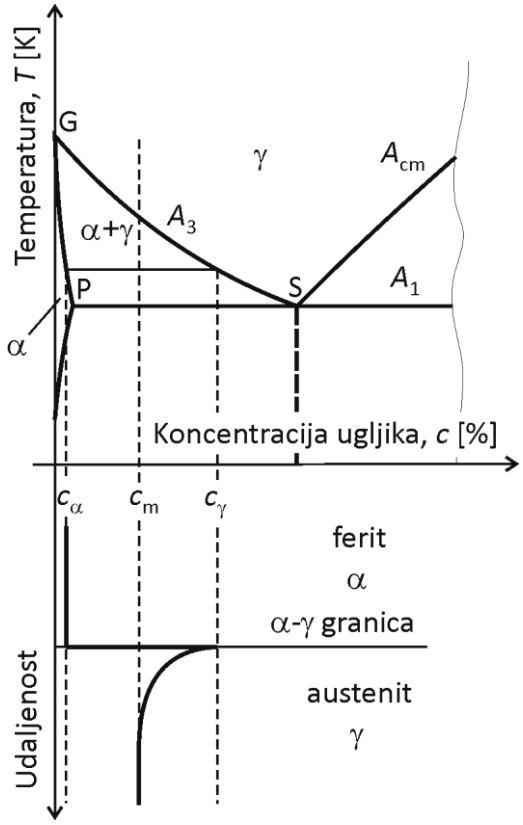
2.4. Mehanizmi raspada austenita

2.4.1. Raspad austenita u ferit

Ferit je faza koja nastaje pri najvišim temperaturama za vrijeme ohlađivanja austenita. Kod čistog željeza, ferit se počinje izlučivati po granicama kristalnih zrna austenita na temperaturi od 910 °C. Kod čelika, do feritne pretvorbe dolazi na temperaturama nižim od kritične temperature A_3 (slika 2.2), čija se vrijednost smanjuje uz povećanje udjela ugljika u čeliku. Tvorba ferita nastaje uz potpunu difuziju metalnih i nemetalnih atoma.

Budući da je topljivost ugljika u feritu približno 100 puta manja od one u austenitu, prilikom feritne pretvorbe ugljik iz ferita prelazi u austenit. Koncentracije ugljika u austenitu i feritu mijenjaju se po krivuljama G-S te G-P u Fe-Fe_3C dijagramu (slika 2.2). Brzina rasta klice ferita određena je koncentracijom ugljika u austenitu i feritu.

Na slici 2.2 prikazan je postupak određivanja karakterističnih koncentracija austenita i ferita. Pretpostavljeno je da na granici faza faze imaju ravnotežnu koncentraciju ugljika, c_α i c_γ, te da koncentracija austenita na udaljenosti većoj od difuzijske udaljenosti, c_m, odgovara koncentraciji ugljika u čeliku, c_0.

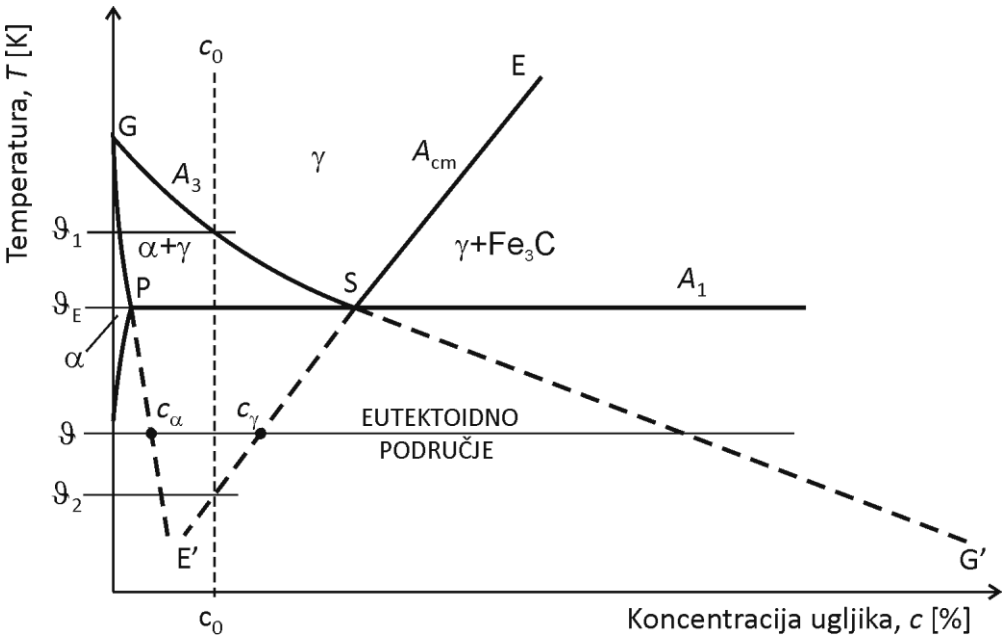


Sl. 2.2. Promjena koncentracija faza pri feritnoj pretvorbi

2.4.2. Raspad austenita u perlit

Perlit je eutektoid sastavljen od eutektoidnih kristalnih zrna ferita i cementita. Nastaje iz austenita pri relativno malim brzinama ohlađivanja i temperaturi nižoj od kritične temperature A_1, uz potpunu difuziju metalnih i nemetalnih atoma.

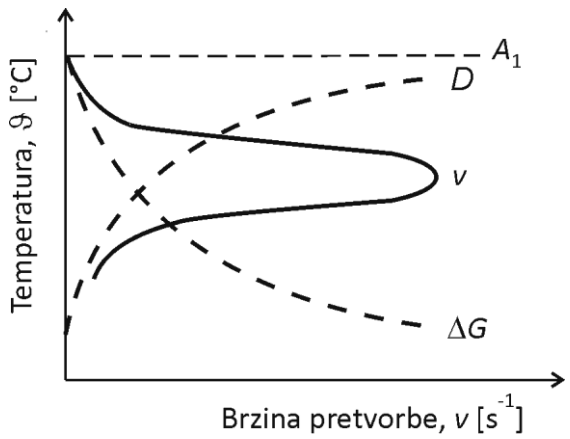
Na slici 2.3 prikazan je ravnotežni dijagram stanja Fe-Fe_3C s ekstrapoliranim solvus linijama prema kojima se određuju karakteristične koncentracije faza pri perlitnoj pretvorbi.



Sl. 2.3. Fe-Fe_3C dijagram

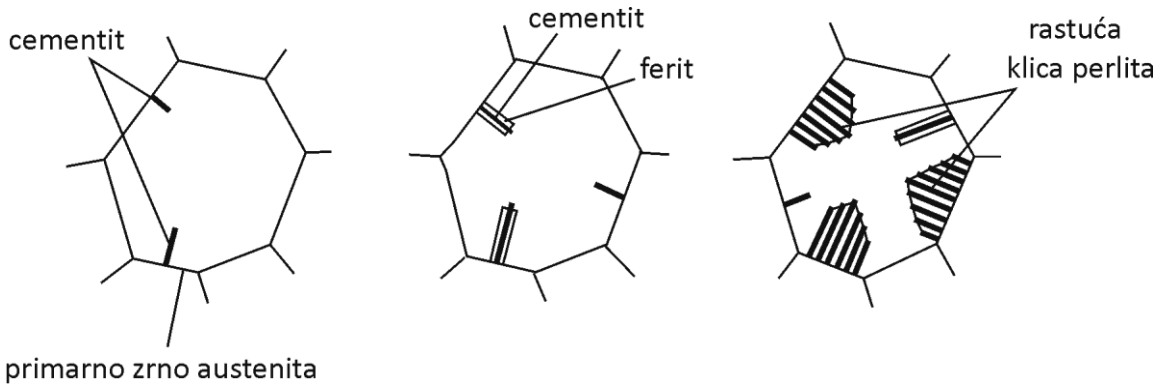
Pri ohlađivanju legure podeutektoidnog sadržaja ugljika c_0 na temperaturu nižu od temperature ϑ_1, dolazi do izlučivanja proeutektoidnog ferita. Pri većem pothlađenju iste legure, na temperaturu ispod eutektoidne ϑ_E, pretvorba pothlađenog austenita također započinje izlučivanjem proeutektoidnog ferita, pri čemu se koncentracija ferita mijenja po ekstrapoliranoj G-P liniji. Budući da se pri izlučivanju proeutektoidnog ferita višak ugljika iz ferita potiskuje u okolna područja austenita, austenit postaje prezasićen ugljikom, a njegova se koncentracija mijenja po liniji E-S-E'. Kada na temperaturi ϑ koncentracija austenita naraste na vrijednost c_γ, započinje perlitna pretvorba, odnosno dolazi do naizmjeničnog raspada austenita na ferit i cementit. Na temperaturi ϑ_2, perlitnoj pretvorbi više ne prethodi izlučivanje proeutektoidnog ferita, već se pothlađeni austenit direktno raspada na ferit i cementit. U pravilu, perlitna pretvorba počinje pojavom klica cementita na granicama zrna austenita, dok ferit nastaje na granici austenita i cementita. Klice rastu prema unutarnjim slojevima austenitnog zrna, pri čemu se okolina cementita osiromašuje ugljikom i pretvara u ferit. Budući da je ravnotežna topivost ugljika u feritu manja od trenutne, ugljik se iz ferita potiskuje u susjedna austenitna područja koja postaju prezasićena ugljikom i dijelom se pretvaraju u cementit.

Da bi došlo do perlitne pretvorbe trebaju biti zadovoljena dva uvjeta: dovoljna razlika između slobodnih energija austenita i perlita, ΔG, te dovoljna difuzija atoma, D. Na slici 2.4 prikazan je utjecaj temperature na vrijednost srednje brzine perlitne pretvorbe.



Sl. 2.4. Utjecaj temperature na srednju brzinu perlitne pretvorbe

Klice perlita niču po granicama zrna austenita, u kutevima ili bridovima te rastu radijalno sve dok ne dođe do sudaranja sa susjednim zrnima perlita [6]. Rast klica perlita u smjeru od granice austenitnog zrna je oko 1.4 puta brži od bočnog rasta [7]. Na slici 2.5 shematski je prikazana perlitna pretvorba.



Sl. 2.5. Shematski prikaz perlitne pretvorbe

Međulamelarni razmak perlita znatno ovisi o temperaturi pretvorbe te se općenito može uzeti da je međulamelarni razmak obrnuto razmjeran pothlađenju ispod temperature A_1 [7]. Na temperaturama tik ispod eutektoidne stvara se meki grubolamelarni perlit, dok na

najnižim temperaturama perlitnog stupnja nastaje finolamelarni tvrđi i čvršći perlit čije se lamele mogu razlučiti tek uporabom elektronskog mikroskopa.

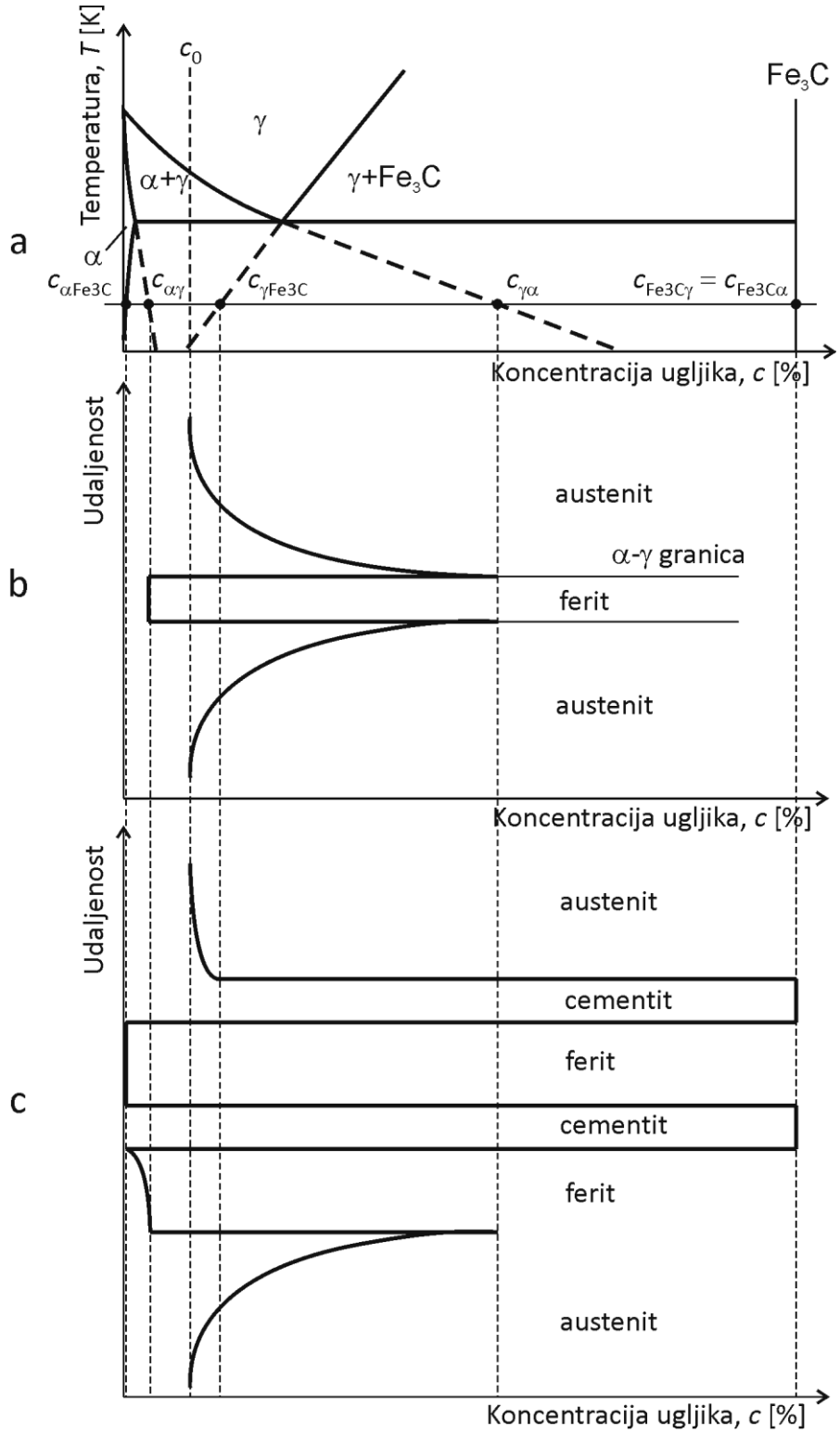
Na primjeru podeutektoidnog čelika, na slici 2.6a prikazan je postupak određivanja karakterističnih koncentracija faza pri perlitnoj pretvorbi, dok je na slikama 2.6b i 2.6c prikazan profil tih koncentracija pri raspadu austenita. Uz koncentraciju austenita na granici s feritom, $c_{\gamma\alpha}$, i koncentraciju austenita na granici sa cementitom, $c_{\gamma Fe3C}$, na slici se nalaze i sljedeće koncentracije: koncentracija ferita na granici sa cementitom, $c_{\alpha Fe3C}$, koncentracija ferita na granici s austenitom, $c_{\alpha\gamma}$, koncentracija cementita na granici s austenitom, $c_{Fe3C\gamma}$, te koncentracija cementita na granici s feritom, $c_{Fe3C\alpha}$.

2.4.3. Raspad austenita u martenzit

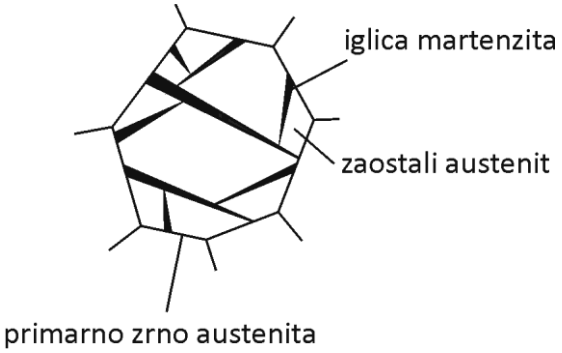
Za razliku od drugih produkata raspada austenita, martenzit nastaje trenutno, brzinom pretvorbe reda veličine 5000 ms^{-1} [5], kada je prilikom ohlađivanja postignuta temperatura niža od temperature početka martenzitne pretvorbe M_s. Martenzitna pretvorba u potpunosti završava kada se pri ohlađivanju postigne temperatura završetka martenzitne pretvorbe M_f. Koncentracija ugljika u martenzitu jednaka je koncentraciji ugljika u primarnom austenitu.

Mehanizam bezdifuzijske martenzitne pretvorbe sastoji se od procesa smicanja: atomi se u rešetki austenita pomiču uzduž karakterističnih pravaca tako da na kraju zauzmu položaje koji odgovaraju rešetki martenzita. Pri martenzitnoj pretvorbi atomi zadržavaju svoje susjede, a usklađeni pomak atoma manji je od polovice dijagonale austenitne kristalne rešetke.

Martenzitna struktura ima karakterističan igličast izgled. Iglica martenzita nastaje na granicama austenitnog zrna i raste u kristalno zrno austenita. Rast se prekida kada martenzitna iglica udari u granicu zrna austenita ili u drugu iglicu. Rast iglice martenzita prikazan je na slici 2.7.



Sl. 2.6. a) Karakteristične koncentracije faza pri perlitnoj pretvorbi; b) profil koncentracija faza pri izlučivanju proeutektoidnog ferita; c) profil koncentracija faza pri eutektoidnoj pretvorbi



Sl. 2.7. Rast iglica martenzita

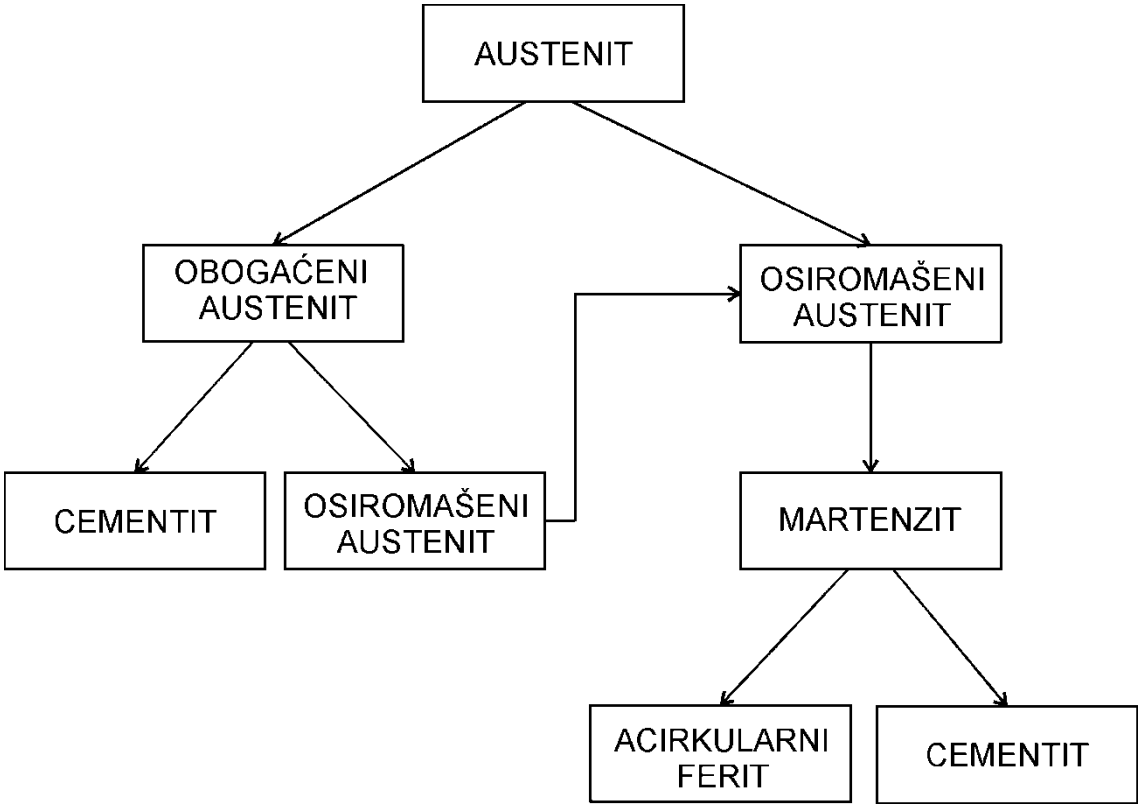
Između iglica martenzita nalazi se zaostali austenit. Veća količina zaostalog austenita u martenzitnoj strukturi nije poželjna, a naročito je nepoželjan zaostali austenit izdvojen kao zasebna faza. Količina zaostalog austenita u mikrostrukturi nakon martenzitne pretvorbe raste s koncentracijom ugljika u primarnom austenitu.

2.4.4. Raspad austenita u bainit

Kada se pri ohlađivanju čelika postigne temperatura početka bainitne pretvorbe B_s, feritna pretvorba ustupa mjesto bainitnoj pretvorbi. Relevantan utjecaj na brzinu raspada austenita u bainit ima samo difuzija intersticijskih atoma ugljika. Bainit je fino dispergirana mješavina ferita i cementita.

Na slici 2.8 shematski je prikazana bainitna pretvorba koja započinje preraspodjelom ugljika unutar pothlađenog austenita, pri čemu se u austenitu stvaraju područja niske koncentracije (osiromašeni austenit) te visoke koncentracije ugljika (obogaćeni austenit). Osnovna razlika u mehanizmu perlitne i bainitne pretvorbe je što se kod bainitne pretvorbe u osiromašenom austenitu, pri smanjivanju njegove koncentracije prema ravnotežnoj, najprije ostvare uvjeti za martenzitnu pretvorbu. Kada vrijednost koncentracije austenita padne na kritičnu vrijednost za martenzitnu pretvorbu, $c_{\alpha M}$, dolazi do tvorbe martenzitne pločice. Prezasićeni ferit koncentracije $c_{\alpha M}$ postaje sve nestabilniji te dolazi do izlučivanja cementita, pri čemu koncentracija ferita pada na koncentraciju prezasićenog acirkularnog ferita, $c_{\alpha ac}$.

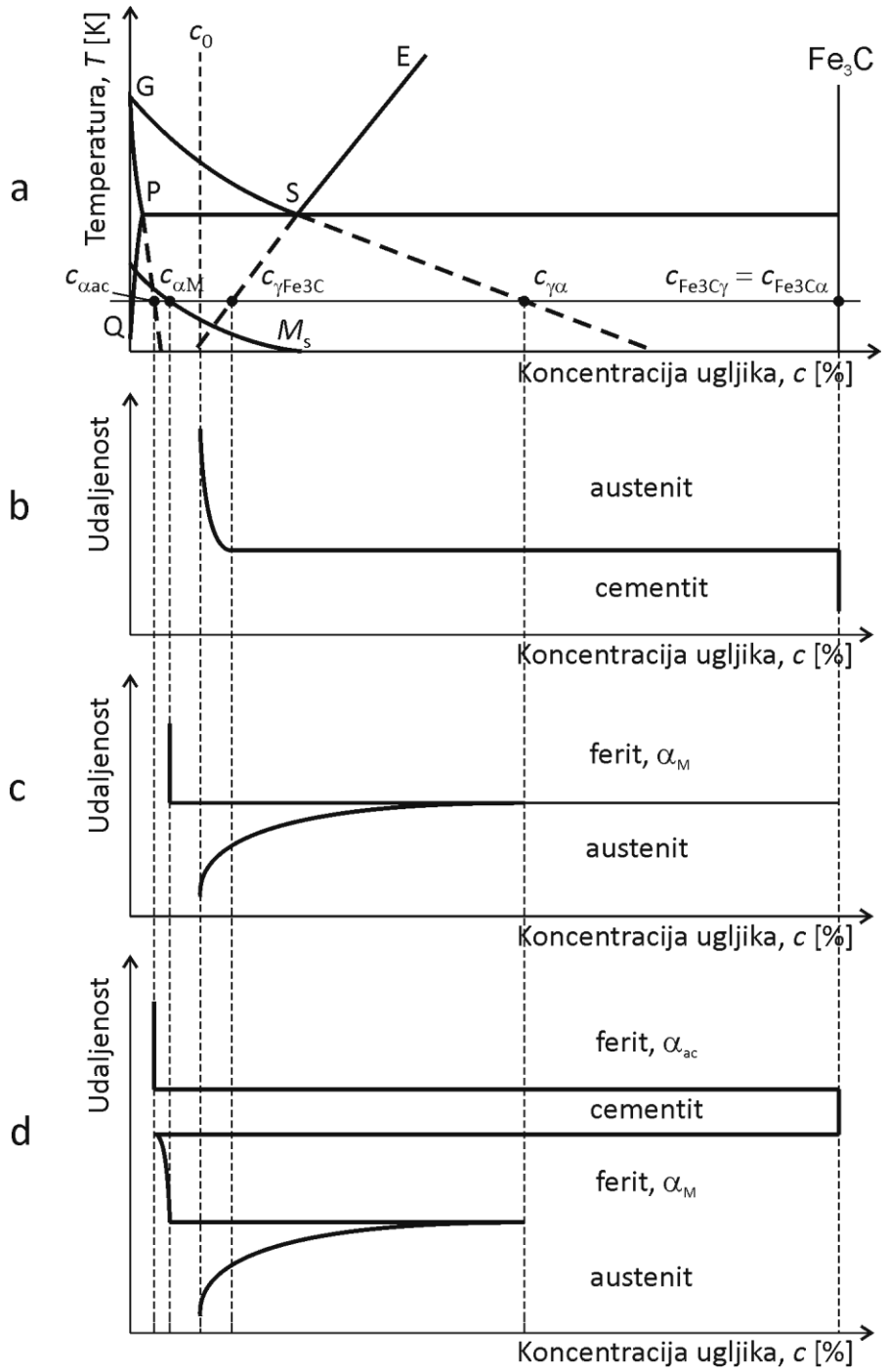
Cementitna pločica raste difuzijom ugljika iz ferita te iz susjednih obogaćenih slojeva austenita koji postaju mjesta za iniciranje formiranja nove feritne faze.



Slika 2.8. Shematski prikaz bainitne pretvorbe [8]

Padom temperature smanjuje se vrijeme inkubacije bainitne pretvorbe iz razloga što je na nižim temperaturama vrijednost kritične koncentracije ugljika u austenitu za smičnu pretvorbu u martenzit veća te je potrebna manja preraspodjela ugljika unutar austenita za stvaranje martenzitne pločice. S druge strane, kako se padom temperature smanjuje difuzija ugljika, tako se povećava vrijeme inkubacije bainitne pretvorbe.

Na primjeru podeutektoidnog čelika, na slici 2.9a prikazane su karakteristične koncentracije faza pri bainitnoj pretvorbi. Koncentracija acirkularnog ferita očitava se po ekstrapoliranoj G-P liniji, koncentracija prezasićenog ferita očitava se po M_s krivulji početka martenzitne pretvorbe, dok se koncentracije austenita na granici sa cementitom i feritom očitavaju po ekstrapoliranoj E-S, odnosno G-S liniji. Na slikama 2.9b i 2.9c prikazani su profili koncentracija faza pri bainitnoj pretvorbi.

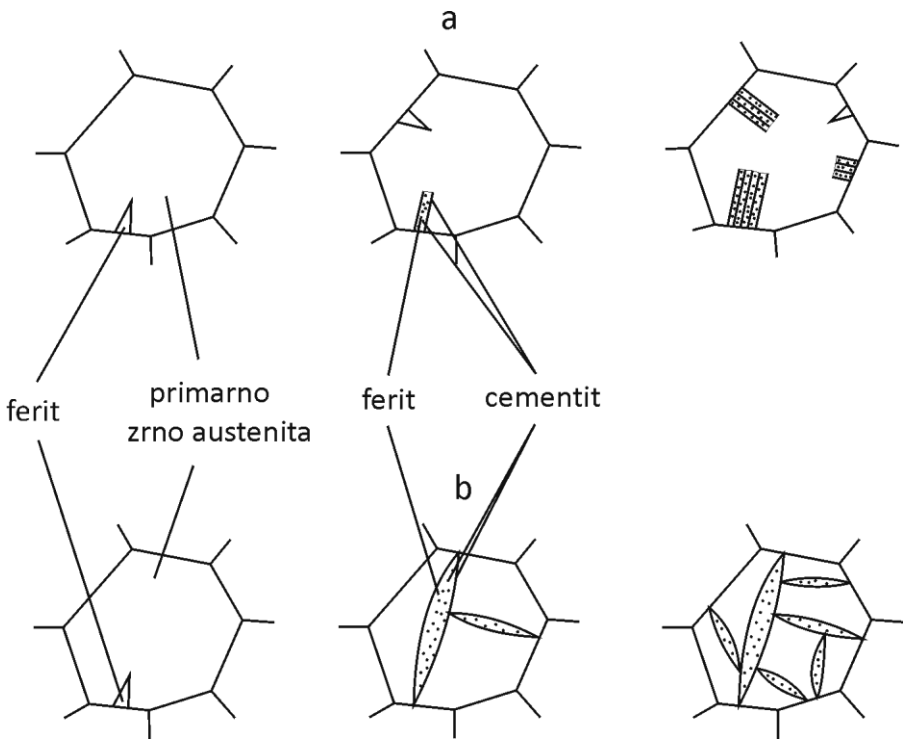


Sl. 2.9. a) Karakteristične koncentracije faza pri bainitnoj pretvorbi;

b, c, d) profili koncentracija faza

Mehanizam bainitne pretvorbe bitno se ne mijenja s temperaturom pretvorbe. Međutim, na višim temperaturama bainitnog područja intenziviraju se difuzijski procesi i nastaje gornji bainit, dok je na nižim temperaturama intenzivniji bezdifuzijski proces i nastaje donji bainit.

Shematski prikaz pretvorbe austenita u bainit prikazan je na slici 2.10. Na slici se mogu vidjeti razlike u mikrostrukturi gornjeg i donjeg bainita; pločice ferita donjeg bainita su šire u odnosu na pločice ferita gornjeg bainita, također, mikrostruktura donjeg bainita puno je sličnija martenzitnoj mikrostrukturi.



Sl. 2.10. Shematski prikaz nastanka: a) gornjeg bainita, b) donjeg bainita

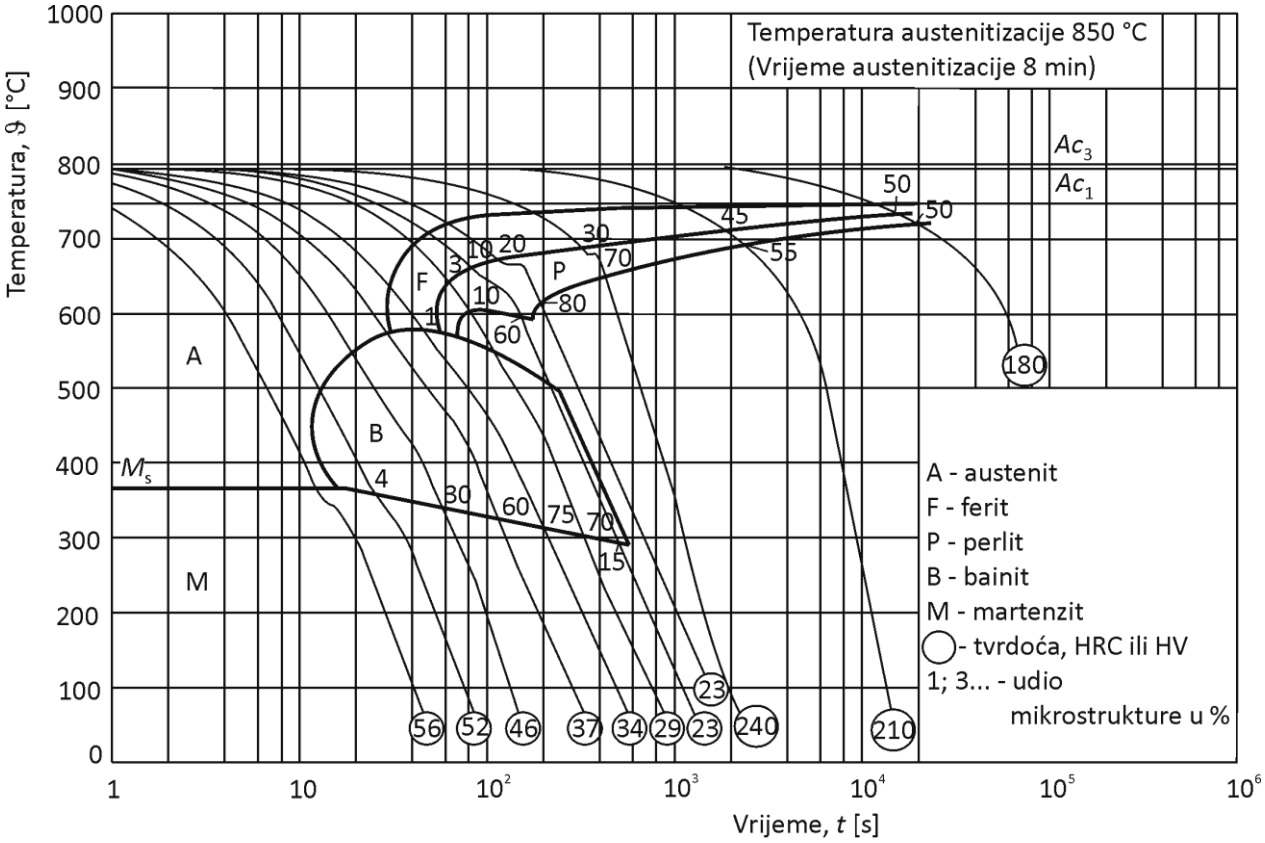
Važna karakteristika bainitne pretvorbe je da se bainitna pretvorba ne odvija do kraja, što se može objasniti na sljedeći način. Bainitna pretvorba započinje na temperaturi B_s koja je niža od temperature metastabilne ravnoteže austenita i ferita, T_0. Budući da za vrijeme bainitne pretvorbe dolazi do obogaćivanja austenita ugljikom, vrijednost temperature T_0 pada te u trenutku kada se u austenitu postigne koncentracija takva da je $B_s = T_0$, bainitna pretvorba završava. Stoga, može se zaključiti da stupanj bainitne pretvorbe uglavnom ovisi o temperaturi: što je temperatura pretvorbe viša, to se stvara manje bainita, a ostaje više zaostalog austenita koji se nakon dužeg vremena može raspasti u perlit.

2.5. Prikaz mikrostrukturnih pretvorbi pomoću TTT dijagrama

Predviđanje rezultata raspada austenita najčešće se temelji na TTT dijagramima koji su nezamjenjivi u jasnom prikazivanju mikrostrukturnih pretvorbi čelika. Ovisno o tome da li prikazuju raspad austenita u izotermičkim uvjetima ili pri kontinuiranom ohlađivanju, razlikuju se dvije vrste TTT dijagrama: IT dijagrami za izotermičke uvjete pretvorbi te CCT dijagrami pri kontinuiranom ohlađivanju.

Oblik TTT dijagrama uvjetovan je djelovanjem dvaju suprotnih čimbenika. Porastom pothlađenja ispod ravnotežne temperature raste termodinamička nestabilnost austenita i zbog toga se pretvorbe pomiču prema kraćim vremenima. Istovremeno, snižavanjem temperature smanjuje se brzina difuzije ugljika i legirajućih elemenata, što je uzrok usporavanju raspada austenita na nižim temperaturama.

Na slici 2.11 prikazan je CCT dijagram čelika 34Cr4 (DIN).



Sl. 2.11. CCT dijagram čelika 34Cr4 [9]

Treba naglasiti da CCT dijagrami opisuju samo one mikrostrukturne pretvorbe koje se odvijaju uzduž krivulja ohlađivanja koje su korištene za izradu dijagrama. U skladu s navedenim proizlazi nedostatak primjene CCT dijagrama, a to je da već i malo odstupanje krivulje stvarnog ohlađivanja od krivulja CCT dijagrama može biti uzrok velikoj razlici rezultata mikrostrukturnih pretvorbi u ohlađenom izratku u odnosu na uzorak korišten za dobivanje dijagrama. Osim toga, pri predviđanju mikrostrukturnih pretvorbi primjenom CCT dijagrama ne uzima se u obzir povijest toplinske obrade i stanje materijala konkretnog izratka.

Rezultati predviđanja mikrostrukturnih pretvorbi primjenom CCT dijagrama ukazuju na znatan utjecaj kemijskog sastava na raspad austenit.

2.6. Termodinamika nukleacije mikrostrukturnih pretvorbi

Na temperaturama koje su više od apsolutne nule, unutar kristalne rešetke javljaju se male vibracije atoma koje mogu dovesti do preraspodjele grupe atoma u novu strukturu koja se razlikuje od primarne strukture legure. Navedena grupa atoma stvara nakupinu atoma čija je slobodna energija veća od slobodne energije primarne strukture, no u nekim je slučajevima nova raspodjela atoma termodinamički pogodnija od primarne te tada svaki prijelaz atoma preko granice primarne i nove faze dovodi do smanjenja ukupne energije sustava.

Svaka materija teži stanju minimalne slobodne energije. Pri određenoj temperaturi i tlaku, slobodna energija legure ovisi o sastavu mikrostrukture, obliku i veličini kristalnih zrna, stanju naprezanja u leguri te o količini kristalnih nesavršenosti. Zanemarivši ostale čimbenike koji utječu na veličinu slobodne energije, može se pretpostaviti da će legura određenog sastava pri određenoj temperaturi poprimiti mikrostrukturu minimalne slobodne energije, odnosno, sastojat će se od onih faza za koje ima minimalnu slobodnu energiju.

U termodinamici mikrostrukturnih pretvorbi, relativna stabilnost sustava najčešće se određuje Gibbsovom slobodnom energijom koja je definirana izrazom:

, (2.1)

pri čemu je *H* entalpija, *T* temperatura te *S* entropija sustava.

Molarna Gibbsova slobodna energija može se definirati tzv. kemijskim potencijalima:

, (2.2)

pri čemu je x_i molarni udio komponente *i* u fazi, dok je μ_i kemijski potencijal komponente *i*. Na primjer, kemijski potencijal μ_A predstavlja Gibbsovu slobodnu energiju *A* atoma u fazi koncentracije x_A. S promjenom koncentracije faze mijenjaju se kemijski potencijali komponenti. U slučaju idealne faze, kemijski potencijali komponenti iznose:

, (2.3)

. (2.4)

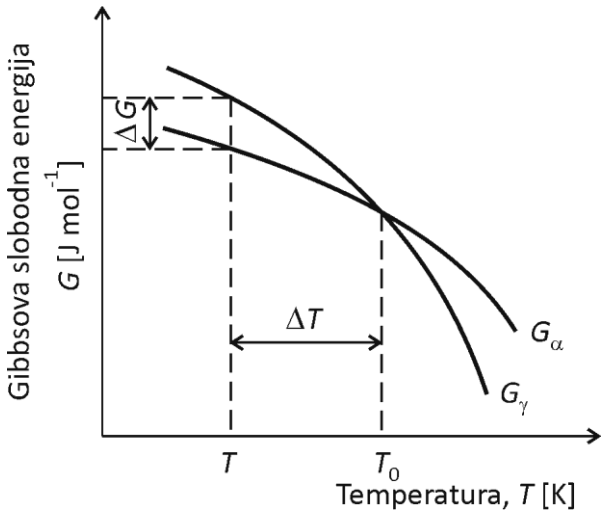
Dvije homogene faze su u ravnoteži kada je kemijski potencijal μ_i pojedine komponente jednak u obje faze, odnosno:

za svaki *i*. (2.5)

Pri određenoj temperaturi i tlaku svaki sustav teži minimumu Gibbsove slobodne energije. Zbog jakih atomskih veza te, stoga, niske vrijednosti entalpije, na niskim temperaturama najstabilnije su krute faze. Na visokim temperaturama najstabilnije su faze s velikom pokretljivošću atoma, poput tekućina i plinova, kod kojih dominira –*TS* član izraza 2.1.
Moguća je svaka pretvorba koja vodi prema smanjenju Gibbsove slobodne energije sustava. Ako su G_1 i G_2 Gibbsove slobodne energije primarne i nove faze, nužan uvjet za faznu pretvorbu je:

(2.6)

Na slici 2.12 prikazana je promjena Gibbsovih slobodnih energija dviju različitih faza ovisno o temperaturi. Temperatura T_0 je ravnotežna temperatura pri kojoj su vrijednosti slobodnih energija α- i γ-faze jednake. Na temperaturama nižim od T_0 slobodna energija α-faze niža je od slobodne energije γ-faze zbog čega γ-faza teži pretvorbi u α-fazu.



Sl. 2.12. Shematski prikaz utjecaja temperature na Gibbsovu slobodnu energiju faza

Temperatura pri kojoj dolazi do faznih pretvorbi pri ohlađivanju uvijek je niža od ravnotežne temperature. Temperaturna razlika, $\Delta T = T_0 - T$, je mjerilo odstupanja od stabilnog stanja i naziva se pothlađenje. Vrijednost pothlađenja raste s porastom brzine ohlađivanja.

Razlika Gibbsovih slobodnih energija primarne i nove faze je pokretačka sila bilo koje fazne pretvorbe. Za pothlađenje ΔT, razlika Gibbsovih slobodnih energija iznosi [10]:

— (2.7)

pri čemu je L latentna toplina.

Pri faznim pretvorbama dolazi do promjene slobodne energije sustava iz sljedeća tri razloga. Na temperaturama na kojima je stabilna α-faza, stvaranje α-faze volumena V_α uzrok je smanjenju volumenske slobodne energije u iznosu $V_\alpha \cdot \Delta G_v$. Nadalje, formiranje novih površina između novonastale i primarne faze uzrok je povećanju slobodne energije sustava za iznos $A \cdot \gamma$. Također, povećanju slobodne energije za iznos $V_\alpha \cdot \Delta G_s$ doprinosi promjena polja naprezanja u leguri pri stvaranju nove faze. Stoga, ukupna promjena slobodne energije sustava pri stvaranju nove faze jednaka je:

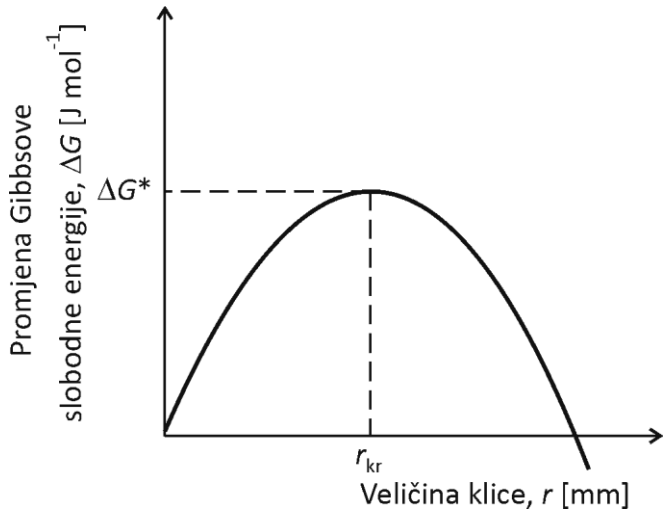
, (2.8)

pri čemu je γ specifična energija po jedinici površine.

Ako se pretpostavi da je klica α-faze oblika kugle radijusa r, ukupna promjena slobodne energije pri formiranju α-faze iznosi:

$$\frac{\quad}{\quad} \qquad . \qquad (2.9)$$

Fazna pretvorba spontano napreduje od trenutka u kojem se s povećanjem klice nove α-faze počinje smanjivati slobodna energija sustava, odnosno, od trenutka u kojem je klica α-faze narasla do kritične veličine, r_{kr}. Na slici 2.13 prikazana je promjena Gibbsove slobodne energije sustava pri nukleaciji klice α-faze faze.



Sl. 2.13. Promjena Gibbsove slobodne energije pri nukleaciji klice nove faze

Diferenciranjem izraza 2.9 može se odrediti kritični radijus klice koji iznosi:

$$\frac{\quad}{\quad}, \qquad (2.10)$$

dok se supstitucijom izraza 2.10 u izraz 2.9 dobiva vrijednost promjene slobodne energije pri formiranju klice kritičnog radijusa, odnosno vrijednost aktivacijske energije za nukleaciju:

$$\frac{\quad}{\quad}. \qquad (2.11)$$

Supstitucijom izraza 2.7 u izraze 2.10 i 2.11 dobivaju se izrazi koji prikazuju ovisnost kritičnog radijusa klice i aktivacijske energije za nukleaciju o pothlađenju:

—— —te (2.12)

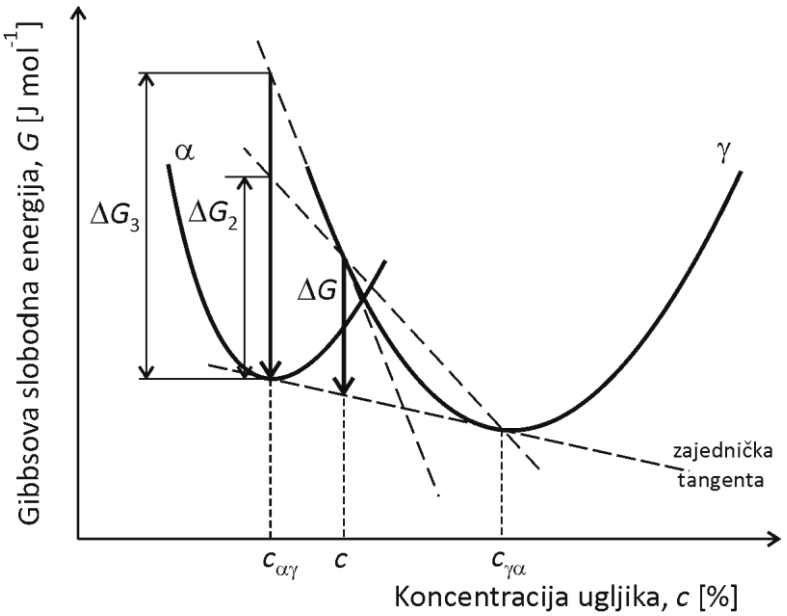
——— ——. (2.13)

Pri predviđanju mikrostrukturnih pretvorbi pri gašenju čelika izraz 2.13 ima vrlo veliku važnost. Iz izraza je vidljivo da se snižavanjem temperature ispod ravnotežne, aktivacijska energija za nukleaciju klice nove faze smanjuje razmjerno kvadratu pothlađenja. Zbog toga je na niskim temperaturama potrebna puno manja aktivacijska energija u odnosu na visoke temperature.

U realnim metalnim legurama, proces nukleacije je znatno potpomognut nesavršenostima mikrostrukture. Zbog toga kod faznih pretvorbi u krutom stanju najčešće ne dolazi do homogene nukleacije čija je karakteristika istovremeno i nasumično stvaranje klica nove faze, već se javlja heterogena nukleacija na mjestima nesavršenosti, kao što su npr. granice kristalnih zrna ili dislokacije. Ukupna promjena slobodne energije pri heterogenoj nukleaciji veća je od ukupne promjene slobodne energije pri homogenoj nukleaciji (izraz 2.8) za vrijednost smanjenja slobodne energije sustava uslijed eliminacije nesavršenosti, ΔG_d [6, 10]. Stoga, ukupna promjena Gibbsove slobodne energije sustava pri heterogenoj nukleaciji jednaka je:

. (2.14)

Na slici 2.14 prikazana je promjena Gibbsove slobodne energije ΔG za vrijeme raspada austenita koncentracije c u ferit, pri čemu preostali austenit postaje obogaćen ugljikom. ΔG_2 je promjena Gibbsove slobodne energije po molu ferita. Koncentracije $c_{\alpha\gamma}$ te $c_{\gamma\alpha}$ su ravnotežne koncentracije α- i γ-faze.



Sl. 2.14. Shematski prikaz Gibbsove slobodne energije ferita i austenita

Na temelju slike 2.14 može se zaključiti da se porastom koncentracije ugljika u austenitu smanjuje promjena Gibbsove slobodne energije pri pretvorbi austenita u ferit.

Potrebno je naglasiti da pokretačka sila pretvorbe austenita u ferit, ΔG, nije pokretačka sila za nukleaciju iz razloga što prve klice ferita znatno ne utječu na promjenu koncentracije austenita. Postupak određivanja promjene Gibbsove slobodne energije po molu stvorenih klica ferita, ΔG_3, također je prikazan na slici 2.14.

2.7. Brzina nukleacije

Brzina nukleacije klice nove faze može se odrediti iz frekvencije f kojom se novi atomi pridodaju klici kritičnog radijusa, čime ona postaje stabilna. Ako broj klica kritičnog radijusa po jedinici volumena iznosi:

— , (2.15)

pri čemu je R univerzalna plinska konstanta, ΔG^* aktivacijska energija za nukleaciju, a N_0 broj atoma primarne faze po jedinici volumena, brzina nukleacije definirana je izrazom:

— . (2.16)

Frekvencija f je kompleksna funkcija koja ovisi o vibracijama atoma, aktivacijskoj energiji za difuziju te o površini kritične klice, a njezina se vrijednost pretpostavlja reda veličine 10^{13} s^{-1} [11].

Brzina nukleacije definirana izrazom 2.16 je konstantne vrijednosti. Ako se pretpostavi eksponencijalna ovisnost brzine nukleacije o vremenu te da se uslijed rasta kritičnih klica za vrijeme nukleacije smanjuje njihov broj, brzina nukleacije može se prikazati izrazom kojeg je predložio Russell [12]:

$$\frac{}{} - , \tag{2.17}$$

pri čemu je Z faktor čija vrijednost približno iznosi 0.05, t_i vrijeme inkubacije, dok je t vrijeme izotermičke pretvorbe.

Uz poznatu ovisnost aktivacijske energije za nukleaciju o pothlađenju (izraz 2.13), brzina nukleacije može se definirati na način:

$$\frac{}{} - , \tag{2.18}$$

pri čemu je $\frac{}{}$.

Budući da frekvencija f ovisi o aktivacijskoj energiji za difuziju te o vibracijama atoma, a time i o temperaturi, u literaturi se često predeksponencijalni faktor iz izraza 2.16 zamjenjuje faktorom $T^{-1/2} \cdot D$ [13,14]. Prihvaćajući navedeno, brzina nukleacije klice nove faze može se definirati izrazom:

$$\frac{}{} - . \tag{2.19}$$

U izrazu 2.19 D je koeficijent difuzije određen izrazom:

$$\frac{}{} , \tag{2.20}$$

pri čemu je D_0 osnovna konstanta materijala te Q aktivacijska energija za difuziju, odnosno, energetska barijera koju atom mora savladati da bi zauzeo nov položaj. Do difuzije će doći kada je dovedena toplinska energija veća od aktivacijske energije.

Vrijednost koeficijenta difuzije ovisi o mnogim čimbenicima od kojih je najvažnija temperatura. Ostali čimbenici relevantni za difuzijske procese su: mehanizam difuzije (zbog manjeg promjera intersticijski atomi lakše difundiraju kroz kristalnu rešetku od supstitucijskih atoma), kristalna rešetka (difuzivnost atoma u BCC rešetki je veća jer BCC kristalna rešetka ima manji faktor atomskog slaganja te veći radijus šupljina), nesavršenosti strukture (brzina difuzije duž granica kristalnih zrna je veća; brzina difuzije raste s brojem vakancija), koncentracija difuzijskih atoma (veća koncentracija atoma ima veći utjecaj na koeficijent difuzije) te vrijeme difuzije (što je vrijeme difuzijskog procesa duže, fronta difundirajućih atoma proširit će se na veću udaljenost).

U tablici 2.1 prikazane su vrijednosti konstante D_0 te aktivacijske energije za difuziju nekih legirajućih elemenata u austenitu i feritu, zajedno s izračunatim pripadajućim vrijednostima koeficijenta difuzije. Na temelju podataka iz tablice vidljivo je da su vrijednosti koeficijenta difuzije intersticijskog atoma ugljika znatno veće od vrijednosti koeficijenta difuzije ostalih supstitucijskih legirajućih elemenata. Također, koeficijenti difuzije legirajućih elemenata u α-fazi veći su od njihovih koeficijenata u γ-fazi, budući da α-faza (ferit) ima BCC kristalnu rešetku.

Tab. 2.1. Koeficijenti difuzije za C, Fe, Cr, Ni, Mn [15,16]

Element	Faza	Konstanta	Aktivacijska energija	Koeficijent difuzije	
		D_0 [m^{2}s^{-1}]	Q [kJmol^{-1}]	ϑ [°C]	D [m^{2}s^{-1}]
C	α	$6.2 \cdot 10^{-7}$	80	700	$3.14 \cdot 10^{-11}$
	γ	$2.3 \cdot 10^{-5}$	148	700	$2.61 \cdot 10^{-13}$
Fe	α	$1.6 \cdot 10^{-4}$	240	700	$2.09 \cdot 10^{-17}$
	γ	$7.0 \cdot 10^{-5}$	286	700	$3.10 \cdot 10^{-20}$
Cr	α	$3.2 \cdot 10^{-4}$	240	700	$4.17 \cdot 10^{-17}$
	γ	$3.5 \cdot 10^{-4}$	286	700	$1.55 \cdot 10^{-19}$
Ni	α	$4.8 \cdot 10^{-5}$	240	700	$6.26 \cdot 10^{-18}$
	γ	$3.5 \cdot 10^{-5}$	286	700	$1.54 \cdot 10^{-20}$
Mn	α	$7.6 \cdot 10^{-5}$	224.5	700	$6.73 \cdot 10^{-17}$
	γ	$5.5 \cdot 10^{-6}$	249.5	700	$2.22 \cdot 10^{-19}$

2.8. Brzina rasta klica ferita i perlita

Kod feritne pretvorbe, do rasta klica ferita dolazi uslijed difuzije atoma ugljika kroz α-γ granicu (slika 2.2). Ako se pretpostavi da je prijelaz atoma kroz α-γ granicu brz i lak proces, brzina rasta klica ferita određena je brzinom kojom višak atoma ugljika iz ferita ulazi u kristalnu rešetku austenita, što ovisi o gradijentu koncentracije austenita dc/dx.

Za jediničnu površinu, do pomaka α-γ granice u iznosu dx doći će kada kroz austenit prođe količina od mola atoma ugljika. Ako fluks atoma kroz jediničnu površinu u vremenu dt iznosi —, izjednačavanjem navedenih izraza slijedi:

— (2.21)

te brzina rasta klice ferita:

— —— —. (2.22)

Prema Zeneru [4], izraz 2.22 pojednostavljeno se može napisati na način:

—— — (2.23)

pri čemu je c_γ koncentracija austenita na granici s feritom (slika 2.2), c_α koncentracija ferita, Δc razlika koncentracije austenita na granici te na udaljenosti koja je veća od difuzijske udaljenosti, , y^D efektivna difuzijska udaljenost, dok je D koeficijent difuzije definiran izrazom 2.20. Koncentracija c_m odgovara koncentraciji ugljika u čeliku, c_0.

Kada je granica između austenita i nove faze konveksne zakrivljenosti prema austenitu, kao što je u slučaju feritne pretvorbe, efektivna difuzijska udaljenost razmjerna je radijusu zakrivljenosti klice rastuće faze, r [4]. Za sferni rast klice, efektivna difuzijska udaljenost jednaka je radijusu zakrivljenosti klice, $y^D = r$.

Prema Zener-Hillertovom modelu [4], vrijednost brzine rasta klice mijenja se u ovisnosti o radijusu zakrivljenosti klice, tako: $G = 0$ za $r = r_{kr}$ te $G \rightarrow 0$ za $r \rightarrow \infty$. Uz uvjet $r = 2r_{kr}$, brzina rasta klice ima maksimalnu vrijednost prikazanu izrazom:

—— ——. (2.24)

Prema izrazu 2.12, s povećanjem pothlađenja ispod kritične temperature feritne pretvorbe smanjuje se kritični radijus klice, a time i efektivna difuzijska udaljenost. Stoga, s povećanjem pothlađenja povećava se brzina rasta klica ferita uslijed smanjenja difuzijske udaljenosti. Suprotno tome, s povećanjem pothlađenja smanjuje se koeficijent difuzije atoma ugljika u austenitu, što ima negativan utjecaj na brzinu rasta klica ferita.

Brzina rasta klice perlita ovisi o brzini kojom višak atoma ugljika iz ferita difundira u cementit, što ovisi o međulamelarnom razmaku perlita [10]. Što je međulamelarni razmak perlita manji, odnosno, što je pothlađenje ΔT ispod temperature A_1 veće, veća je i brzina rasta klice perlita: $G_P \approx \Delta T$. Prema [10], brzina rasta klice perlita definirana je izrazom:

, (2.25)

pri čemu je k termodinamička konstanta. Budući da za mala pothlađenja vrijedi $\Delta T \approx c_{\gamma\alpha}$ - $c_{\gamma Fe3C}$ [10], iz izraza 2.25 slijedi sljedeći izraz kojim je definirana brzina rasta klice perlita [13,17]:

, (2.26)

pri čemu je $c_{\gamma\alpha}$ koncentracija austenita na granici s feritom te $c_{\gamma Fe3C}$ koncentracija austenita na granici s cementitom (slika 2.6). Razlika koncentracija ugljika u austenitu pokreće difuziju ugljika unutar austenita of ferita prema cementitu, a samim time i rast klice perlita.

2.9. Osnovni izrazi kinetike mikrostrukturnih pretvorbi

Kinetika mikrostrukturnih pretvorbi intenzivno se počela istraživati krajem prve polovice 20. stoljeća. Prvi model kinetike difuzijskog raspada austenita, temeljen na brzini nukleacije i brzini rasta zrna nove faze, 1937. godine objavio je Kolmogorov [18]. U literaturi koja obuhvaća istraživanja kinetike difuzijskih mikrostrukturnih pretvorbi, najčešće se citiraju i koriste izrazi Johnsona i Mehla [19] te Avramija [20], koje se može smatrati varijacijom

generalnog rješenja Kolmogorova. Prema početnim slovima imena autora ovi se polu-empirijski izrazi skraćeno nazivaju *JM*, *JMA* ili *KJMA* rješenjem.

Za opisivanje kinetike bezdifuzijske martenzitne pretvorbe predloženi su mnogi empirijski izrazi, ali se najčešće koristi izraz kojeg su 1959. godine predložili Koistinen i Marburger [21].

U tablici 2.2. prikazani su mehanizmi mikrostrukturnih pretvorbi pothlađenog austenita.

Tab. 2.2. Mehanizmi mikrostrukturnih pretvorbi

PRETVORBA	NUKLEACIJA	RAST
Feritna	Difuzijska	Difuzijski
Perlitna	Difuzijska	Difuzijski
Bainitna	Difuzijska	Bezdifuzijski
Martenzitna	Bezdifuzijska	Bezdifuzijski

Ukoliko na određenoj temperaturi dolazi do pretvorbe primarne γ-faze u α-fazu, broj klica α-faze nastalih za vrijeme *t* iznosi:

, (2.27)

pri čemu je *I* brzina nukleacije te *V* volumen γ-faze. Ako se pretpostavi linearna brzina rasta klice, *G*, pri čemu je t_i vrijeme inkubacije, radijus klice α-faze raste prema izrazu:

, (2.28)

dok volumen jedne klice α-faze nastao za vrijeme *t* iznosi:

– . (2.29)

Iz izraza 2.27 i 2.29 proizlazi vrijednost proširenog volumena nove α-faze nastalog za vrijeme *t*:

– , (2.30)

pri čemu je zanemarena činjenica da se uslijed pretvorbe primarne γ-faze u α-fazu volumen primarne faze konstantno smanjuje.

Stvarni volumen α-faze definiran je izrazom:

$$\text{——} \qquad \text{—} \qquad . \tag{2.31}$$

Supstitucijom izraza 2.30 u 2.31, pri čemu je —, slijedi:

$$\text{—} \quad - \qquad , \tag{2.32}$$

odnosno:

$$- \qquad . \tag{2.33}$$

Iz izraza 2.33 proizlazi izraz kojeg su u svrhu određivanja volumnog udjela nove faze predložili Johnson i Mehl [19]:

$$- \qquad . \tag{2.34}$$

Izraz 2.34 odnosi se na slučaj homogene nukleacije te izotropnog rasta klica nove faze (G^3) do kojih dolazi u izotermičkim uvjetima pretvorbe. U izrazu su pretpostavljene konstantne vrijednosti brzine nukleacije te brzine rasta klica.

Za vrijeme mikrostrukturnih pretvorbi pothlađenog austenita moguća su dva mehanizma tvorbe klica nove faze [22]. Ukoliko pri pretvorbi austenita kontinuirano dolazi do nukleacije klica nove faze, zbog čega u svakom trenutku pretvorbe unutar primarne austenitne mikrostrukture postoje klice raznovrsnih veličina, riječ je o mehanizmu nukleacije i rasta. Volumni udio nove faze koja nastaje mehanizmom nukleacije i rasta ovisi o brzini nukleacije te o brzini rasta [22]:

$$- \qquad , \tag{2.35}$$

pri čemu je S površina mjesta pogodnih za nukleaciju. Uočljiva je sličnost izraz 2.34 i 2.35.

Za razliku od kontinuirane nukleacije, pri pretvorbi austenita može doći do nagle potrošnje mjesta pogodnih za nukleaciju te do njihovog zasićenja. Volumni udio nove faze koja nastaje mehanizmom zasićenja ovisi o brzini rasta te o površini mjesta pogodnih za nukleaciju [22]:

. (2.36)

Na temelju navedenog može se zaključiti da su brzine nukleacije i rasta klica te površina i raspodjela mjesta pogodnih za nukleaciju glavni čimbenici kinetike mikrostrukturnih pretvorbi.

Za razliku od Johnsona i Mehla (izraz 2.34), Avrami [20] je utvrdio da pretpostavka o konstantnoj brzini nukleacije ne odgovara eksperimentalnim rezultatima, već da se brzina nukleacije smanjuje s vremenom pretvorbe budući da je broj klica pogodnih za rast sve manji kako sve veći broj klica postaje novo zrno. Također, smatrao je da postoji i temperaturna ovisnost brzine nukleacije, zbog čega pri većim pothlađenjima u primarnoj fazi već postoji određeni broj klica nove faze pogodnih za rast. Stoga je, za određivanje volumnog udjela nove faze u izotermičkim uvjetima pretvorbe Avrami predložio sljedeći izraz:

, (2.37)

pri čemu su k i n kinetički parametri. Vrijednost parametra k ovisi o temperaturi, kemijskom sastavu i veličini kristalnog zrna primarne faze, dok vrijednost parametra n ovisi o tipu pretvorbe, odnosno o mehanizmu nukleacije i geometriji klice. Brza pretvorba povezana je s velikim vrijednostima koeficijenta k. Kod većine difuzijskih pretvorbi rezultati dobiveni izrazom 2.37 dobro se poklapaju s eksperimentalnim rezultatima [23].

Usporedbom izraza 2.34 i 2.37, parametar k može se izraziti na način:

– , (2.38)

dok u slučaju homogene nukleacije i izotropnog rasta konstantne brzine vrijednost parametra n iznosi: $n = 4$.

Vrijednosti kinetičkih parametara k i n najčešće se određuju eksperimentalno ili pomoću TTT dijagrama pretvorbi. Parametar k definiran je Arrheniusovim tipom izraza:

— , (2.39)

pri čemu je k_0 konstanta te Q aktivacijska energija za nukleaciju i rast.

U tablici 2.3 prikazane su eksperimentalno dobivene vrijednosti parametra *n*. Iz tablice se može zaključiti da vrijednost parametra *n* ovisi o mehanizmu i brzini nukleacije te o rastu klica koji može biti trodimenzionalan (klica ima sferni oblik), dvodimenzionalan (klica oblika pločice) ili jednodimenzionalan (klica oblika iglice).

Tab. 2.3. Vrijednosti parametra *n* [4]

Uvjet		n
Polimorfna promjena, nekontinuirana precipitacija, eutektoidna pretvorba	rastuća brzina nukleacije	>4
	konstantna brzina nukleacije	4
	opadajuća brzina nukleacije	3-4
	brzina nukleacije jednaka nuli (zasićenje)	3
	nukleacija na rubu zrna nakon zasićenja	2
	nukleacija na granici zrna nakon zasićenja	1
Difuzijom kontroliran rast	svi oblici rastu iz malih dimenzija, rastuća brzina nukleacije	>2.5
	svi oblici rastu iz malih dimenzija, konstantna brzina nukleacije	2.5
	svi oblici rastu iz malih dimenzija, opadajuća brzina nukleacije	1.5-2.5
	svi oblici rastu iz malih dimenzija, brzina nukleacije jednaka nuli	1.5
	rast čestica značajnog inicijalnog volumena	1-1.5
	iglice konačnih dimenzija, male u odnosu na međusobnu udaljenost	1
	rast dugačkih cilindara (igli)	1
	rast vrlo velikih ploča	0.5
	precipitacija na dislokacijama	~0.67

Volumni udio pothlađenog austenita koji se bezdifuzijskom pretvorbom raspada u martenzit najčešće se određuje na temelju izraza koji je dobiven ispitivanjima legure željeza i ugljika, pri čemu se udio ugljika kretao od 0.37 do 1.1 % [21]:

. (2.40)

Martenzitna pretvorba je atermička jer volumni udio martenzita ne ovisi o vremenu ohlađivanja legure između temperatura početka i kraja martenzitne pretvorbe, već ovisi o temperaturi *T* na koju je uzorak pothlađen ispod temperature M_S. Za većinu čelika konstanta *α* približno iznosi 0.011 K^{-1}. Općenito se smatra da izraz 2.40 najbolje opisuje kinetiku martenzitne pretvorbe za širok raspon pothlađenja.

2.10. Kinetika raspada austenita

Pri ohlađivanju čelika s temperature austenitizacije na temperaturu nižu od kritične temperature A_{e3}, mehanizmom nukleacije i rasta dolazi do raspada austenita u ferit, pri čemu se može pretpostaviti konstantna brzina nukleacije definirana izrazom [13]:

$$\frac{\quad}{\quad}, \tag{2.41}$$

pri čemu je ΔT pothlađenje ispod temperature A_{e3}. Brzina rasta klice ferita određena je koncentracijama ugljika u austenitu i feritu (izraz 2.24). Volumni udio ferita koji nastaje mehanizmom nukleacije i rasta može se odrediti na temelju izraza 2.35.

Na temperaturama nižim od kritične temperature A_{e1}, mehanizmom nukleacije i rasta dolazi do raspada austenita u perlit. Također se može pretpostaviti konstantna brzina nukleacije klica perlita definirana izrazom 2.41, pri čemu je ΔT pothlađenje ispod temperature A_{e1}. Brzina rasta klice perlita definirana je izrazom 2.26, dok se volumni udio perlita može odrediti iz izraza 2.35.

Uvažavajući Avramijev izraz (izraz 2.37) i prethodno navedeno, općenito se za feritnu i perlitnu pretvorbu mehanizmom nukleacije i rasta mogu definirati sljedeće vrijednosti kinetičkih parametara k i n: te – .

Za razliku od feritne i perlitne pretvorbe, bainitna pretvorba dijelom se odvija difuzijskim mehanizmom (nukleacija), a dijelom bezdifuzijskim mehanizmom (rast iglice bainitnog ferita). Budući da za vrijeme bainitne pretvorbe klice ferita rastu vrlo velikom brzinom, brzina njihovog rasta ne utječe na kinetiku bainitne pretvorbe, već se može pretpostaviti da volumni udio bainita isključivo ovisi o brzini nuklecije (izraz 2.19) koja je glavni čimbenik kinetike bainitne pretvorbe.

Važna karakteristika bainitne pretvorbe je da se raspad austenita u bainit ne odvija do kraja. U tom slučaju može se definirati normirani volumni udio bainita [24]:

$$\frac{\quad}{\quad} -. \tag{2.42}$$

Kada se fazna pretvorba odvija do maksimalnog volumena nove faze V_{max}, stvarni volumen nove faze iznosi:

$$\text{———} \quad , \tag{2.43}$$

odnosno:

$$\text{———} \quad , \tag{2.44}$$

pri čemu je —— . Iz izraza 2.44 slijedi:

$$. \tag{2.45}$$

Ako prošireni volumen bainita iznosi [24]:

$$, \tag{2.46}$$

pri čemu je *u* volumen strukturne jedinice bainita, supstitucijom izraza 2.46 u izraz 2.45 te na temelju izraza 2.42, volumni udio bainita može se odrediti na način:

$$. \tag{2.47}$$

Prema literaturnim podacima za bainitnu pretvorbu, ovisno o mehanizmu i brzini nukleacije vrijednost kinetičkog parametra *n* može varirati u širokim granicama: od 0.5 do 3. Stoga se kod bainitne pretvorbe vrijednosti parametara *k* i *n* određuju na temelju eksperimentalnih pokazatelja, uz pretpostavku [25]:

$$- \quad . \tag{2.48}$$

2.11. Utjecaj legirajućih elemenata na raspad austenita

U tablici 2.4 navedeni su najutjecajniji legirajući elementi čelika te njihov utjecaj na svojstva čelika. Gamageni (γ-geni) elementi stabiliziraju austenit i snizuju kritične temperature pretvorbe austenita u ferit, dok alfageni (α-geni) elementi stabiliziraju ferit i povisuju kritične

temperature. Pored toga, legirajući elementi mogu sami ili sa željezom tvoriti karbide i intermetalne spojeve.

Tab. 2.4. Legirajući elementi čelika te njihov utjecaj na svojstva čelika

Legirajući elementi	Utjecaj na svojstva čelika			
	γ-geni	α-geni	karbido-tvorci	posebni utjecaji
Ni	●			koči feritnu pretvorbu; povisuje žilavost i snižava prijelaznu temperaturu; čelici s > 7 %Ni, < 0.1 %C i 18 %Cr su austenitne strukture od vrlo niskih temp. sve do temp. solidusa
Mn	●		●	usporava nukleaciju perlita; znatno povećava prokaljivost; čelici s > 12 %Mn su austenitne strukture neovisno o udjelu Cr
Co	●			sprječava rast zrna pri visokim temp.; poboljšava R_m pri povišenim temp. zbog čega se dodaje čelicima za rad pri povišenim temp.
Cu	●			povisuje omjer R_e/R_m; u udjelima > 0.4 % omogućuje precipitacijsko očvršćivanje
V		●	●	usitnjava primarno austenitno zrno; u udjelima > 0.4 % povisuje otpornost na trošenje
Ti		●	●	u većim udjelima djeluje na precipitacijsko očvršćivanje
W		●	●	usporava difuziju ugljika u austenitu; sprječavanjem rasta zrna utječe na povišenje žilavosti; povisuje trajnu čvrstoću pri povišenim temp.
Mo		●	●	usporava difuziju ugljika u austenitu; koči perlitnu pretvorbu; povećava prokaljivost; utječe na sitnozrnatost čelika; sprječava pojavu visokotemperaturne krhkosti popuštanja; povisuje trajnu čvrstoću pri povišenim temp.
Si		●		ubrzava izlučivanje proeutektoidnog ferita; potiskuje izlučivanje cementita iz austenita pa se u strukturi zadržava austenit obogaćen ugljikom; povisuje čvrstoću, a posebno R_e
Cr		●	●	koči feritnu pretvorbu; niskougljični čelici s < 0.1 %C i > 15 %Cr (bez γ-genih) su feritne strukture od sobne sve do temp. solidusa; povećava prokaljivost čelika; snižava temp. M_s i time omogućuje kaljenje čelika u ulju i na zraku

Iako se pod utjecajem legirajućih elemenata ravnoteža pojedinih faza bitno mijenja u kvantitativnom i kvalitativnom smislu, osnovne fazne pretvorbe koje nastaju na kritičnim temperaturama u suštini ostaju iste kao i kod binarnog sustava Fe-Fe_3C.

Najznačajnija praktična značajka legirajućih elemenata je njihova sposobnost da usporavaju difuzijske procese neophodne za difuzijske pretvorbe. Zbog toga većina legirajućih

elemenata pomiče krivulje difuzijskih pretvorbi u TTT dijagramima u desno, a temperature M_s i M_f prema dole.

Kod nisko-legiranih i legiranih čelika, vrijednosti kritičnih temperatura pretvorbi mogu se odrediti korištenjem analitičkih izraza ili direktno iz TTT i ravnotežnih dijagrama faznih pretvorbi. U tablici 2.5 navedeni su empirijski izrazi za izračunavanje kritične temperature feritne pretvorbe na temelju kemijskog sastava čelika, dok su u tablici 2.6 navedeni empirijski izrazi za izračunavanje kritične temperature perlitne pretvorbe.

Tab. 2.5. Kritične temperature feritne pretvorbe

Kritična temperatura feritne pretvorbe, °C	Autor, godina
* *v* ... brzina ohlađivanja	Blás, 1989. [26]
	Choquet, 1985. [26]
	autor nije poznat [26]
	autor nije poznat [26]
* *h* ... debljina ploče	Ouchi, 1982. [26]
	Shiga, 1981. [26]
	Pickering, 1986. [26]
	Lusk i Lee, 1999. [27]

* u obzir uzet utjecaj brzine ohlađivanja na kritičnu temperaturu

Tab. 2.6. Kritične temperature perlitne pretvorbe

Kritična temperatura perlitne pretvorbe, °C	Autor, godina
	Andrew, 1965. [28]
	Lusk i Lee, 1999. [27]

U računalnoj simulaciji mikrostrukturnih pretvorbi pri gašenju nisko-legiranog čelika 42CrMo4 (DIN), za određivanje vrijednosti temperatura A_{e3} i A_{e1} koristit će se izrazi Luska i Leea iz tablica 2.5 i 2.6. Osim pojedinačnog utjecaja legirajućih elemenata na kritične temperature pretvorbi, ovi izrazi u obzir uzimaju i interaktivno djelovanje elemenata.

Za razliku od feritne i perlitne pretvorbe koje započinju pri vrlo malom pothlađenju, čelik mora biti znatno pothlađen ispod temperature metastabilne ravnoteže austenita i martenzita, T_0, da bi započela martenzitna pretvorba. Temperatura početka martenzitne pretvorbe, M_s, izrazito ovisi o temperaturi T_0. Na primjer, za sustav željezo-ugljik, pri čemu udio ugljika iznosi 0.05 – 1.3 %C, temperatura M_S je 200 °C niža od temperature T_0 [29].

Temperatura M_s ima znatan utjecaj na kinetiku martenzitne pretvorbe, morfološki tip martenzita te na substrukturu martenzitnog, gašenog čelika [30], zbog čega se utjecaj legirajućih elemenata na martenzitnu pretvorbu određuje preko njihovog utjecaja na temperaturu M_s. Najveći utjecaj na snižavanje temperature M_s te na sužavanje područja martenzitne pretvorbe ima ugljik. Utjecaj ostalih legirajućih elemenata na temperaturu M_s smanjuje se sa smanjenjem udjela ugljika u čeliku.

U tablici 2.7 kronološkim redom prikazani su empirijski izrazi za izračunavanje temperature početka martenzitne pretvorbe na temelju kemijskog sastava, zajedno s pripadajućim vrijednostima temperature M_s za čelik 42CrMo4.

Tab. 2.7. Kritične temperature martenzitne pretvorbe

Temperatura početka martenzitne pretvorbe, M_s [°C]		Autor, godina
Izraz	42CrMo4 (DIN)	
	329	Payson i Savage, 1944. [31]
	329	Carapella, 1944. [32]
	323	Rowland i Lyle, 1946. [33]
	338	Grange i Stewart, 1946. [34]
	340	Nehrenberg, 1946. [35]
	338	Steven i Haynes, 1956. [36]
	344	Andrew, 1965. [28]
	340	
	364	Liu, 1981. [37]
	363	
	330	nisu navedeni [30]
	386	nisu navedeni [38]
	357	Li i ostali, 1998. [39]

U računalnoj simulaciji mikrostrukturnih pretvorbi pri gašenju čelika 42CrMo4, temperatura M_s odredit će se na temelju pretposljednjeg izraza iz tablice 2.7. Na temelju navedenog izraza te poznate ovisnosti temperatura M_s i T_0, $M_s \approx T_0 - 200$, temperatura metastabilne

ravnoteže austenita i martenzita „čistog“ željeza iznosi T_0 = 745 °C, što se dobro poklapa s eksperimentalno određenom temperaturom T_0 = 750 °C [29].

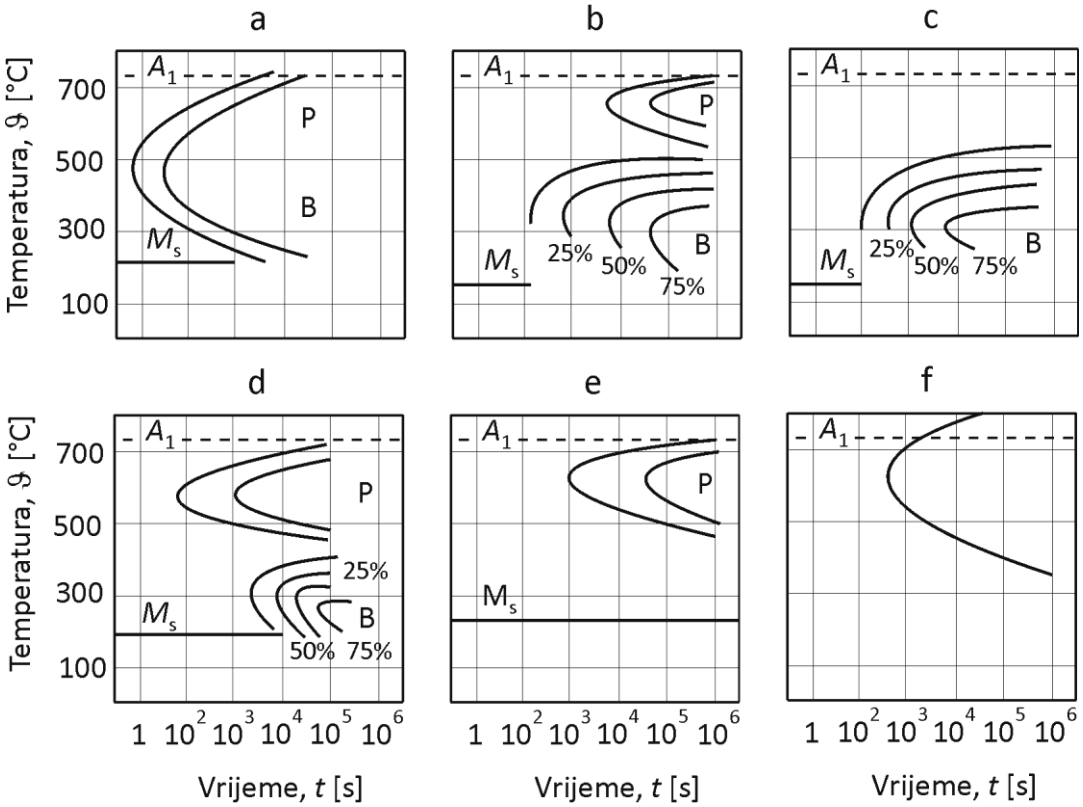
Utjecaj legirajućih elemenata na kinetiku bainitne pretvorbe manji je od njihovog utjecaja u slučaju perlitne pretvorbe. U tablici 2.8 prikazani su empirijski izrazi za izračunavanje temperature početka bainitne pretvorbe na temelju kemijskog sastava, zajedno s pripadajućim vrijednostima temperature B_s za čelik 42CrMo4.

Tab. 2.8. Kritične temperature bainitne pretvorbe

Temperatura početka bainitne pretvorbe, B_s [°C]		Autor, godina
Izraz	42CrMo4 (DIN)	
	584	Steven i Haynes, 1956. [36]
	553	Kirkaldy, 1983. [40]
	529	Suehiro, 1987. [41]
	557	Zhao, 2000. [42]
	584	Lee, 2002. [43]

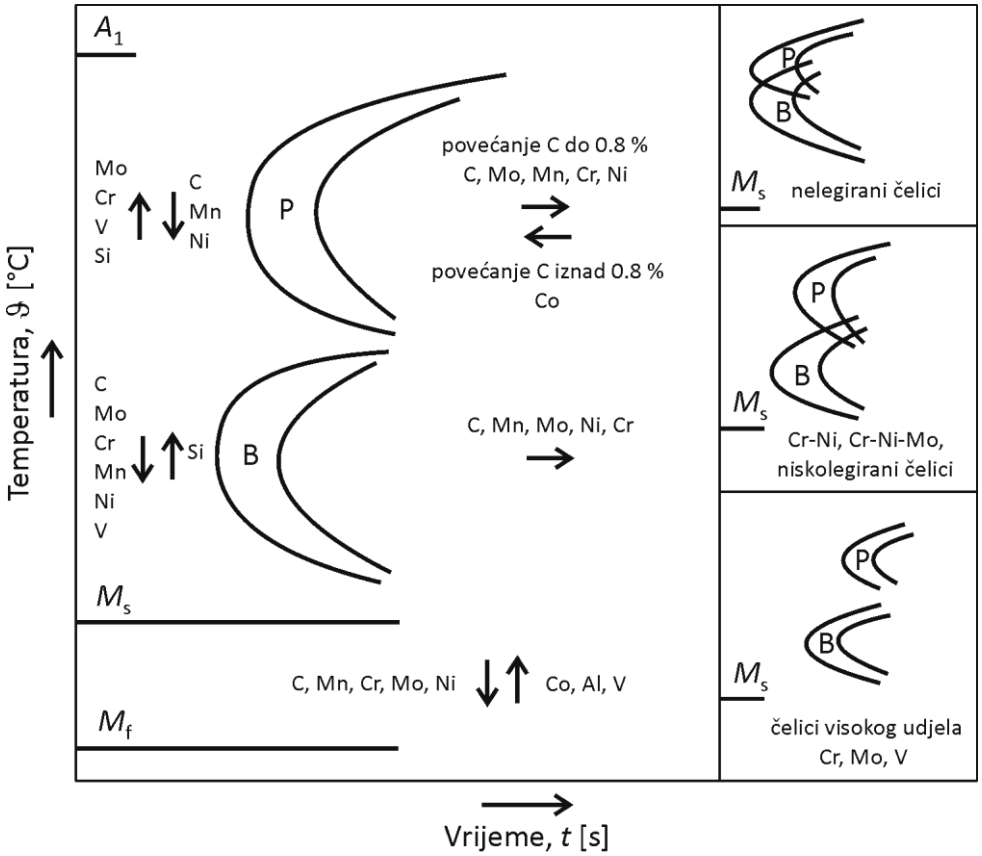
U računalnoj simulaciji mikrostrukturnih pretvorbi pri gašenju čelika 42CrMo4, temperatura početka bainitne pretvorbe odredit će se na temelju izraza Stevena i Haynesa iz tablice 2.8, koji se vrlo uspješno primjenjuje kod nisko-legiranih čelika kemijskog sastava u granicama: 0.1-0.55 % C, 0.2-1.7 % Mn, 0.1-0.35 % Si, 0.0-5.0 % Ni, 0.0-3.5 % Cr te 0.0-1.0 % Mo [24,36].

Kao što je već rečeno, kinetika raspada austenita ovisi o mnogim čimbenicima, ali u prvom redu o kemijskom sastavu austenita. Ovisno o legirajućim elementima čelika, moguće je razlikovati šest osnovnih varijanti dijagrama izotermičkih pretvorbi, koje su prikazane na slici 2.15.



Sl. 2.15. Osnovne varijante IT dijagrama: a) ugljični i nisko-legirani čelici bez karbidotvornih elemenata, b) legirani čelici s karbidotvornim elementima, do 0.4-0.5 %C, c) legirani čelici s Cr, Ni, Mo, W, do 0.2-0.25 %C, d) legirani čelici s karbidotvornim elementima, iznad 0.4-0.5 %C, e) visoko-legirani čelici visokog udjela Cr, f) visoko-legirani austenitni čelici [30]

Na slici 2.16 prikazan je utjecaj legirajućih elemenata na temperature i brzine pretvorbi pri kontinuiranom ohlađivanju čelika.



Sl. 2.16. Utjecaj legirajućih elemenata na CCT dijagram [38]

2.12. Utjecaj stanja naprezanja na mikrostrukturne pretvorbe

Naprezanja koja se zbog nejednolike brzine ohlađivanja te različitih uvjeta faznih pretvorbi generiraju u obratku za vrijeme gašenja čelika, utječu na kritične temperature, vrijeme početka i kraja raspada austenita te na količinu novonastalih faza. Utjecaj naprezanja na difuzijske pretvorbe raste s temperaturom [44].

Istraživanja difuzijskih pretvorbi pod utjecajem naprezanja pokazala su da promjena stanja naprezanja ne utječe na brzinu rasta, ali znatno utječe na brzinu nukleacije klice nove faze. Općenito, generirana naprezanja smanjuju vrijeme inkubacije te dovode do naglog zasićenja mjesta nukleacije [44]. Budući da kinetički parametri *k* i *n* direktno ovise o vremenima početka i kraja raspada austenita, utjecaj stanja naprezanja na kinetiku difuzijskih pretvorbi često se uzima u obzir preko modificiranih vrijednosti vremena inkubacije i parametara *k* i *n* [2,44,45].

U odnosu na difuzijske pretvorbe, utjecaj stanja naprezanja na raspad austenita puno je veći kod martenzitne pretvorbe. Smično te jednoosno vlačno ili tlačno naprezanje podižu vrijednost M_s temperature, dok je hidrostatsko naprezanje snižava. Visoka vrijednost M_s temperature znači veću količinu produkata pretvorbe. Također, stanje naprezanja utječe i na vrijednost konstante a iz izraza 2.40. U literaturi su predloženi izrazi koji uzimaju u obzir utjecaj stanja naprezanja na vrijednost M_s temperature [2], konstante a [45] te na udio martenzita [46,47].

U ovoj doktorskoj disertaciji, utjecaj stanja naprezanja na termodinamiku i kinetiku raspada austenita pri gašenju čelika nije uzet u obzir pri modeliranju mikrostrukturnih pretvorbi.

3. Metode određivanja kinetičkih parametara izotermičkog raspada austenita

3.1. Prikaz kinetike raspada austenita u inkrementalnom obliku

Za numeričku analizu primjenom računala, kinetiku raspada austenita pogodno je definirati u inkrementalnom obliku. Stoga, Avramijev izotermički izraz sveden je na inkrementalan oblik na sljedeći način. Ako se iz Avramijevog izraza izluči vrijeme:

, (3.1)

, (3.2)

dobiva se ono vrijeme koje je potrebno za tvorbu volumnog udjela nove faze *X*:

. (3.3)

Diferenciranjem Avramijevog izraza slijedi:

. (3.4)

Supstitucijom izraza 3.3 u izraz 3.4 dobiva se sljedeći izraz:

(3.5)

te nakon njegovog sređivanja:

. (3.6)

Izraz 3.6 može se napisati i u inkrementalnom obliku:

, (3.7)

pri čemu je volumni udio novonastale faze nastao za vrijeme koraka pretvorbe *N*, vrijeme koraka pretvorbe *N*, volumni udio novonastale faze nastao u prethodnih *N*-1 koraka, dok su *k* i *n* kinetički parametri.

Ukupni volumni udio novonastale faze za vrijeme izotermičkog raspada austenita iznosi:

. (3.8)

Vrijednosti kinetičkih parametara *k* i *n* iz izraza 3.7 određuju se inverznom metodom ili kalibracijom tako da odstupanja eksperimentalnih rezultata od numeričkih rezultata, uz pretpostavljene ulazne veličine, budu minimalna.

3.2. Primjena adicijskog pravila u simulaciji neizotermičkih pretvorbi

Prema adicijskom pravilu, neizotermička pretvorba može se opisati sumom niza izotermičkih pretvorbi, pri čemu je ukupno vrijeme potrebno za postizanje određene količine pretvorbe u neizotermičkim uvjetima jednako sumi vremena potrebnih da se zadana količina pretvorbe dobije izotermički, sve dok se ne postigne jedinična vrijednost:

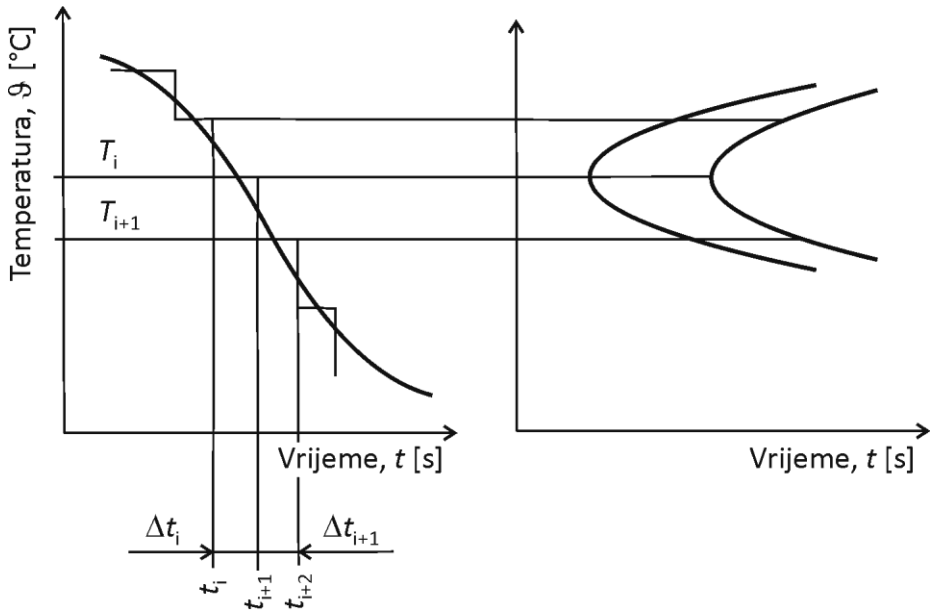
, (3.9)

pri čemu je t_a izotermičko vrijeme za postizanje volumnog udjela X_a, dok je *t* vrijeme za postizanje volumnog udjela X_a u neizotermičkim uvjetima. Adicijsko pravilo može se napisati i u inkrementalnom obliku:

. (3.10)

Adicijsko pravilo temelji se na pretpostavci da je količina pretvorbe na određenoj temperaturi isključivo funkcija temperature te volumnog udjela novonastale faze koji je već prisutan na toj temperaturi. Na slici 3.1 shematski je prikazano predviđanje raspada

austenita pri kontinuiranom ohlađivanju na temelju adicijskog pravila i izotermičkog dijagrama.



Sl. 3.1. Shematski prikaz primjene adicijskog pravila i IT dijagrama

Uz dovoljno mali vremenski interval Δt_i, kontinuirano ohlađivanje uzorka može se aproksimirati stupnjevitim ohlađivanjem, pri čemu za svaki korak ohlađivanja vrijede izotermički uvjeti raspada austenita.

Budući da prema izrazu 3.7 volumni udio novonastale faze za vrijeme koraka pretvorbe *N* jedino ovisi o volumnom udjelu faze nastalom u prethodnih *N-1* koraka te o temperaturi koja utječe na vrijednost kinetičkog parametra *k*, slijedi da se izotermički izraz 3.7 može direktno primijeniti u predviđanju raspada austenita u neizotermičkim uvjetima pretvorbi, s time da se vrijednost kinetičkog parametra *k* računa za svaki korak ohlađivanja *N* [48].

3.3. Određivanje parametra k_F raspada austenita u ferit

Kao što je navedeno u poglavlju *2.10 Kinetika raspada austenita*, pretpostavljene su sljedeće vrijednosti kinetičkih parametara feritne pretvorbe koja se odvija mehanizmom nukleacije i rasta:

te – .

Brzina nukleacije te brzina rasta klice ferita definirane su izrazima:

$$\qquad \text{te} \tag{3.11}$$

$$\qquad , \tag{3.12}$$

pri čemu je ΔT pothlađenje ispod temperature A_{e3}, c_γ koncentracija austenita na granici s feritom, c_α koncentracija ferita, c_0 koncentracija čelika te y^D efektivna difuzijska udaljenost definirana izrazom:

$$\qquad , \tag{3.13}$$

Na temelju izraza 3.11 do 3.13 vrijednost kinetičkog parametra k_F iznosi:

$$\qquad , \tag{3.14}$$

odnosno može se pisati da je:

$$\qquad . \tag{3.15}$$

Uz poznate fizikalne veličine, u izrazu 3.15 pojavljuju se termodinamičke konstante k_1, k_2 te n_1 koje je potrebno odrediti kalibracijom tako da odstupanja eksperimentalnih od numeričkih rezultata budu minimalna. Fizikalni smisao ovih empirijskih veličina je sljedeći: konstanta k_1 povezana je s energijom nukleacije ferita, dok konstanta k_2 uzima u obzir utjecaj legirajućih elemenata na izgled Fe-Fe_3C dijagrama koji je zanemaren pri izračunavanju koncentracija faza.

Da bi se odredile vrijednosti konstanti k_1, k_2 te n_1, najprije je potrebno odrediti vrijednost koeficijenta k_F za tri temperature, a potom riješiti sustav tri jednadžbe s tri nepoznanice.

Na temelju navedenog u poglavlju *2.4.2. Raspad austenita u perlit*, pretpostavljeno je da se feritna pretvorba ne odvija do kraja, već do maksimalnog volumena $V{\cdot}V_{rF}$. Linearna temperaturna ovisnost volumena V_{rF} može se odrediti na temelju Fe-Fe_3C dijagrama, uz

sljedeće pretpostavke; na temperaturama A_{e3} te B_s vrijednost volumena V_{rF} iznosi $V_{rF} = 0$, dok na temperaturi A_{e1} poprima maksimalnu vrijednost $V_{rF} = c_0 / 0.8$. Na temelju navedenog, volumen V_{rF} definiran je sljedećim izrazima:

$$\text{———} \quad \text{—}, \qquad \text{za } A_{e3} > T \geq A_{e1}, \tag{3.16}$$

$$\text{———} \quad \text{—}, \qquad \text{za } A_{e1} > T \geq B_s. \tag{3.17}$$

Na temelju izraza 2.45, za feritnu pretvorbu može se pisati:

$$, \tag{3.18}$$

pri čemu normirani volumni udio ferita iznosi —. Ako prošireni volumen ferita iznosi:

$$- \qquad , \tag{3.19}$$

supstitucijom izraza 3.19 u izraz 3.18 slijedi:

$$\text{—} \qquad - \qquad , \tag{3.20}$$

odnosno:

$$- \qquad . \tag{3.21}$$

Uz – može se pisati:

$$, \tag{3.22}$$

odnosno:

$$\text{———} \qquad . \tag{3.23}$$

Nakon integriranja lijeve i desne strane izraza 3.23 slijedi:

$$. \tag{3.24}$$

Za male vrijednosti normiranog volumnog udjela ferita vrijedi da je , stoga se izraz 3.24 može pisati na način:

. (3.25)

Za vrijeme inkubacije ferita t_i očitano iz IT dijagrama, iz izraza 3.25 slijedi vrijednost koeficijenta k_F za bilo koju temperaturu:

. (3.26)

Iz izraza 3.24 slijedi normirani volumni udio ferita koji iznosi:

. (3.27)

Ako se na temelju izraza 3.27 ponovi postupak prikazan u poglavlju *3.1 Prikaz kinetike raspada austenita u inkrementalnom obliku*, dobiva se izraz kojim je definiran normirani volumni udio ferita nastao mehanizmom nukleacije i rasta za vrijeme koraka pretvorbe *N:*

. (3.28)

Za prvi korak ohlađivanja, N=1, može se pretpostaviti vrlo mala vrijednost prethodno nastalog ferita, na primjer $\xi_F^{(0)}$ = 0.00001. U bilo kojem trenutku pretvorbe, stvarni volumni udio ferita može se odrediti iz izraza .

3.4. Određivanje parametra k_B raspada austenita u bainit

Na temperaturama nižim od temperature B_s, feritna pretvorba ustupa mjesto bainitnoj pretvorbi koja se ne odvija do kraja, već do maksimalnog volumena $V \cdot V_{rB}$.

Prema navedenom u poglavlju *2.10 Kinetika raspada austenita*, volumni udio bainita definiran je izrazom:

, (3.29)

dok je brzina nukleacije bainita definirana izrazom:

$$\qquad (3.30)$$

Supstitucijom izraza 3.30 u izraz 3.29 dobiva se:

$$\qquad (3.31)$$

odnosno:

$$\qquad (3.32)$$

Na temelju izraza 2.48 može se pisati:

$$\qquad (3.33)$$

Iz izraza 3.33 može se odrediti vrijeme bainitne pretvorbe:

$$\qquad (3.34)$$

Ako je te , za vrlo mali vrijedi da je , stoga se može pisati:

$$\qquad (3.35)$$

Na niskim temperaturama u pravilu austenit se u potpunosti raspada u bainit zbog čega se za niske temperature pretvorbe može pretpostaviti da je $V_{rB} \approx 1$, odnosno $\xi_B \approx X_B$. Uz tu pretpostavku može se odrediti kinetički parametar n_B pomoću izraza:

$$\qquad (3.36)$$

pri čemu su t_i i $t_{0.99}$ vremena početka (inkubacije) i kraja izotermičke bainitne pretvorbe očitana iz IT dijagrama čelika.

Nazivnik izraza 3.35 je funkcija temperature pa se za vrijeme inkubacije i konstantnu temperaturu može pisati:

$$\frac{}{} \quad , \tag{3.37}$$

odnosno da je:

$$\frac{}{} \quad \frac{}{} . \tag{3.38}$$

Za poznato vrijeme inkubacije na određenoj temperaturi očitano iz IT dijagrama, na temelju izraza 3.38 može se odrediti vrijednost koeficijenta k_B.

Za 99 % raspadnutog austenita vrijedi:

$$\frac{}{} \quad \frac{}{} \quad , \tag{3.39}$$

pri čemu je pretpostavljena linearna temperaturna ovisnost volumena V_{rB}:

$$\tag{3.40}$$

Vrijednosti koeficijenata a_0 i a_1 mogu se odrediti na temelju dvije temperature i njima pripadajućih vrijednosti volumena V_{rB}.

Na temelju izraza 3.35 i 3.37 proizlazi vrijednost koeficijenta k_B:

$$\frac{}{} \quad \frac{}{} \quad . \tag{3.41}$$

Uz poznate fizikalne veličine, u izrazu 3.41 pojavljuju se termodinamičke konstante k_6, k_7 i k_8 koje je potrebno odrediti kalibracijom tako da odstupanja eksperimentalnih od numeričkih rezultata budu minimalna. Konstanta k_6 povezana je s aktivacijskom energijom za difuziju ugljika u austenitu, dok je konstanta k_7 povezana s aktivacijskom energijom za nukleaciju bainita. Budući da je potrebno odrediti vrijednost triju empirijskih konstanti, najprije je

potrebno odrediti vrijednosti koeficijenta k_B za tri temperature, a potom riješiti sustav tri jednadžbe s tri nepoznanice.

Uz prethodno određenu vrijednost kinetičkog parametra n_B, definiranu temperaturnu ovisnost volumena V_{rB} te uz poznate vrijednosti konstanti k_6, k_7, k_8, odnosno k_B, u potpunosti je definirana kinetika bainitne pretvorbe.

Na temelju izraza 3.39 može se odrediti volumni udio bainita koji iznosi:

$$\text{—} \quad , \tag{3.42}$$

te normirani volumni udio bainita:

$$\text{—} \quad \text{—} \quad . \tag{3.43}$$

Ako se na temelju izraza 3.43 ponovi postupak prikazan u poglavlju *3.1 Prikaz kinetike raspada austenita u inkrementalnom obliku*, dobiva se izraz kojim je definiran normirani volumni udio bainita nastao za vrijeme koraka pretvorbe *N:*

$$\text{—} \quad \text{—} \quad \text{———} \quad \text{—} \quad . \tag{3.44}$$

Za prvi korak ohlađivanja, N=1, može se pretpostaviti vrlo mala vrijednost prethodno nastalog bainita, na primjer $\xi_B^{(0)}$ = 0.00001. U bilo kojem trenutku pretvorbe, stvarni volumni udio bainita može se odrediti iz izraza .

3.5. Određivanje parametra k_P raspada austenita u perlit

Na temperaturama nižim od A_{e1}, u preostalom pothlađenom austenitu koji se nije raspao u ferit ili bainit dolazi do perlitne pretvorbe čija je kinetika neovisna o kinetici prethodne feritne, odnosno bainitne pretvorbe. Na temperaturama $A_{e1} > T \geq B_s$ preostali volumen koji je na raspolaganju za perlitnu pretvorbu iznosi $V \cdot V_{rP1}$, dok na temperaturama $T < B_s$ preostali volumen iznosi $V \cdot V_{rP2}$, pri čemu su $V_{rP1} = 1 - V_{rF}$ te $V_{rP2} = 1 - V_{rB}$.

Kao i kod feritne pretvorbe, na temelju navedenog u poglavlju *2.10 Kinetika raspada austenita*, pretpostavljene su sljedeće vrijednosti kinetičkih parametara perlitne pretvorbe uz mehanizam nukleacije i rasta:

te – ,

pri čemu su brzina nukleacije te brzina rasta klice perlita definirane izrazima:

te (3.45)

. (3.46)

U prethodnim izrazima ΔT je pothlađenje ispod temperature A_{e1}, $c_{\gamma\alpha}$ koncentracija austenita na granici s feritom te $c_{\gamma Fe3C}$ koncentracija austenita na granici s cementitom. Na temelju izraza 3.45 i 3.46 određena je vrijednost kinetičkog parametra k_P:

, (3.47)

odnosno može se pisati da je:

. (3.48)

Uz poznate fizikalne veličine, u izrazu 3.48 pojavljuju se termodinamičke konstante k_3, k_4 te k_5 koje se izračunavaju tako da odstupanja eksperimentalnih od numeričkih rezultata budu minimalna. Konstanta k_3 povezana je s energijom nukleacije perlita, konstanta k_4 uzima u obzir utjecaj legirajućih elemenata na karakteristične koncentracije faza pri perlitnoj pretvorbi, dok je konstanta k_5 povezana s aktivacijskom energijom za difuziju. Da bi se odredile vrijednosti konstanti k_3, k_4 te k_5, najprije je potrebno odrediti vrijednost koeficijenta k_P za tri temperature, a potom riješiti sustav tri jednadžbe s tri nepoznanice.

Na temelju izraza 2.45, za perlitnu pretvorbu može se pisati:

, (3.49)

pri čemu normirani volumni udio perlita iznosi ——, dok je . Ako proširenu volumen perlita iznosi:

– , (3.50)

supstitucijom izraza 3.50 u izraz 3.49 slijedi:

— – , (3.51)

odnosno:

– . (3.52)

Uz – može se pisati:

, (3.53)

odnosno:

—— . (3.54)

Nakon integriranja lijeve i desne strane izraza 3.54 slijedi:

(3.55)

Za male vrijednosti normiranog volumnog udjela perlita vrijedi da je , stoga se izraz 3.55 može pisati na način:

. (3.56)

Za vrijeme inkubacije perlita očitano iz IT dijagrama, iz izraza 3.56 slijedi vrijednost koeficijenta k_P za bilo koju temperaturu:

———— ————. (3.57)

Iz izraza 3.55 slijedi normirani volumni udio perlita koji iznosi:

$$\frac{}{} \quad , \tag{3.58}$$

Kao i kod feritne i bainitne pretvorbe, na temelju izraza 3.58 određen je normirani volumni udio perlita nastao za vrijeme koraka pretvorbe *N* koji iznosi:

$$\frac{}{} \quad \frac{}{} \quad . \tag{3.59}$$

Za prvi korak ohlađivanja, *N*=1, može se pretpostaviti vrlo mala vrijednost prethodno nastalog perlita, na primjer $X_P^{(0)} = 0.00001$.

Prikazana metoda određivanja koeficijenta k_P te normiranog volumnog udjela perlita vrijedi i na temperaturama nižim od B_s temperature. U tom slučaju, u navedenim izrazima umjesto relativnog volumena V_{rP1} treba stajati volumen V_{rP2}.

3.6. Utjecaj kemijskog sastava na vrijednosti termodinamičkih konstanti raspada austenita u ferit, perlit i bainit

U prethodnim poglavljima prikazane su metode određivanja termodinamičkih konstanti kojima je u potpunosti definirana kinetika izotermičkog raspada austenita u ferit, perlit i bainit. Izračunate vrijednosti termodinamičkih konstanti ovise o kemijskom sastavu, odnosno vrijede za samo jedan čelik.

Stoga, s ciljem kvalitativnog i kvantitativnog definiranja utjecaja kemijskog sastava na izotermički raspad austenita, vrijednosti termodinamičkih konstanti istraživane su na većem broju podeutektoidnih čelika čiji je kemijski sastav prikazan u tablici 3.1.

U tablici 3.2 prikazane su empirijske vrijednosti termodinamičkih konstanti istraživanih podeutektoidnih čelika, određene metodama prikazanim u prethodnim poglavljima.

Tab. 3.1. Kemijski sastav podeutektoidnih čelika [9]

Čelik	Maseni udio kemijskog elementa, %									
	C	Si	Mn	P	S	Cr	Cu	Mo	Ni	V
42CrMo4	0.38	0.23	0.64	0.019	0.013	0.99	0.17	0.16	0.08	<0.01
Ck45	0.44	0.22	0.66	0.022	0.029	0.15	-	-	-	0.02
28NiCrMo74	0.30	0.24	0.46	0.030	0.025	1.44	0.20	0.37	2.06	<0.01
34Cr4	0.35	0.23	0.65	0.026	0.013	1.11	0.18	0.05	0.23	<0.01
25CrMo4	0.22	0.25	0.64	0.010	0.011	0.97	0.16	0.23	0.33	<0.01
36Cr6	0.36	0.25	0.49	0.021	0.020	1.54	0.16	0.03	0.21	<0.01
41Cr4	0.44	0.22	0.80	0.030	0.023	1.04	0.17	0.04	0.26	<0.01

Tab. 3.2. Vrijednosti termodinamičkih konstanti podeutektoidnih čelika

Pretvorba	Mehanizam pretvorbe	Konstanta	Čelik						
			42CrMo4	Ck45	28NiCrMo74	34Cr4	25CrMo4	36Cr6	41Cr4
FERITNA	Nukleacija i rast	k_1	$2.5\cdot10^{5}$	$2.5\cdot10^{5}$	-	$2.5\cdot10^{5}$	$2.5\cdot10^{5}$	$2.5\cdot10^{5}$	$2.5\cdot10^{5}$
		k_2	$2.5315\cdot10^{-5}$	$1.7441\cdot10^{-4}$	-	$9.0625\cdot10^{-10}$	$6.3183\cdot10^{-8}$	$8.8213\cdot10^{-9}$	$1.1941\cdot10^{-9}$
		n_1	4.6297	5.2095	-	2.3955	3.3200	2.5230	2.3547
PERLITNA	Nukleacija i rast	k_3	9831085	76767479	16492913	31355038	43316272	56142707	93514410
		k_4	$5.2932\cdot10^{-11}$	$9.8057\cdot10^{-5}$	$2.1918\cdot10^{-19}$	$6.1325\cdot10^{-12}$	$8.6385\cdot10^{-17}$	$2.5088\cdot10^{-17}$	$5.4094\cdot10^{-12}$
		k_5	40501	-92146	214273	47324	149610	151598	46211
BAINITNA	Nukleacija	k_6	-102121	51128	-101946	-15089	-77442	-34123	-16704
		k_7	$7.3418\cdot10^{8}$	$2.4803\cdot10^{9}$	$2.0943\cdot10^{9}$	$2.5027\cdot10^{9}$	$2.5966\cdot10^{6}$	$2.2482\cdot10^{9}$	$1.6819\cdot10^{9}$
		k_8	$3.8475\cdot10^{7}$	$1.1746\cdot10^{20}$	$8.1265\cdot10^{7}$	$8.0362\cdot10^{14}$	$6.6340\cdot10^{10}$	$2.7482\cdot10^{12}$	$4.2311\cdot10^{13}$
		n_B	1.52769	2.30043	1.09856	1.58602	1.12141	1.51777	1.74637
		a_0	2.892442	1.000000	-	2.349733	2.794667	3.587317	2.881892
		a_1	-0.002907	0.00000	-	-0.002139	-0.002667	-0.003902	-0.002973

Ovisnost termodinamičkih konstanti o kemijskom sastavu čelika određena je regresijskom analizom. Relevantni kemijski elementi koji su uključeni u regresijsku analizu su ugljik, krom, molibden i nikal. U istraživanim podeutektoidnim čelicima također se još nalaze mangan i silicij kao redoviti pratitelji, stoga ovi elementi nisu uključeni u regresijsku analizu.

Ovisnost termodinamičkih konstanti feritne, perlitne i bainitne pretvorbe o udjelima ugljika, kroma, molibdena i nikla prikazana je sljedećim izrazima:

, (3.60)

, (3.61)

, (3.62)

, (3.63)

, (3.64)

, (3.65)

, (3.66)

, (3.67)

, (3.68)

, (3.69)

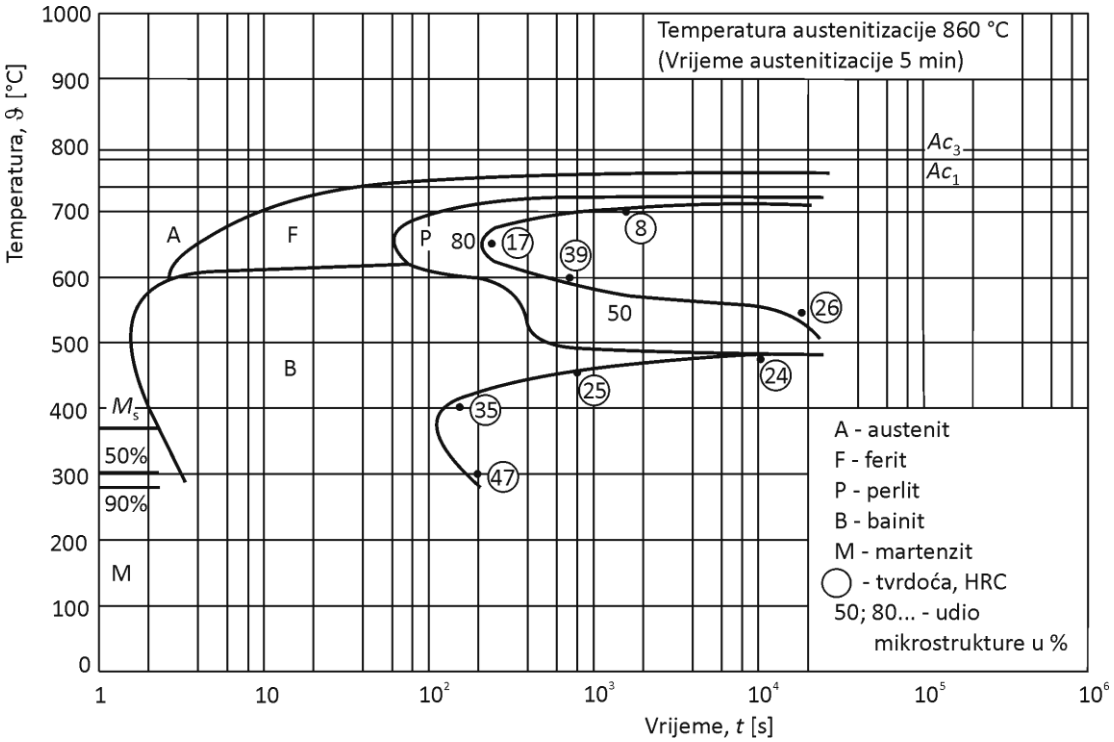
(3.70)

Na temelju predloženih izraza, za bilo koji kemijski sastav podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika mogu se odrediti termodinamičke konstante feritne, perlitne te bainitne pretvorbe.

3.7. Verifikacija vrijednosti termodinamičkih konstanti pomoću izotermičkog dijagrama

Vrijednosti termodinamičkih konstanti određene na temelju kemijskog sastava čelika verificirane su usporedbom eksperimentalnih i numerički određenih krivulja izotermičkog

dijagrama čelika 42CrMo4 (DIN), čiji je kemijski sastav prikazan u tablici 3.1. Izotermički dijagram čelika 42CrMo4 prikazan je na slici 3.2.



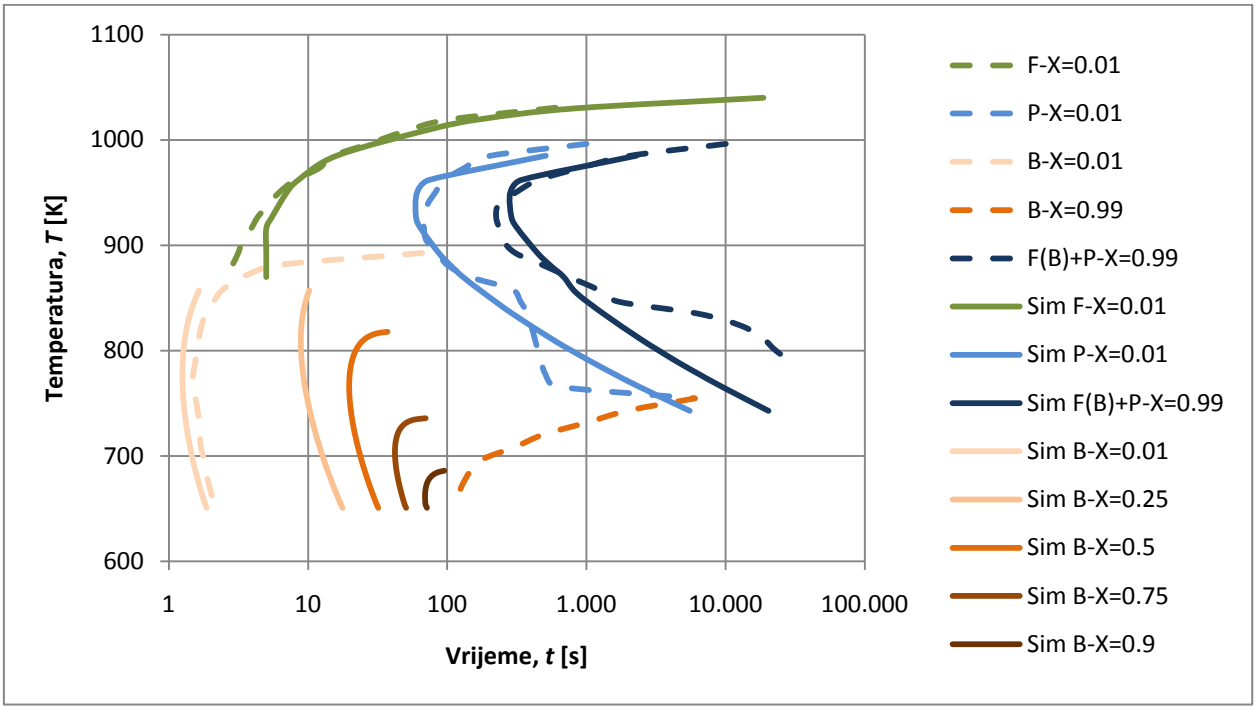
Sl. 3.2. IT dijagram čelika 42CrMo4 [9]

Za kemijski sastav čelika 42CrMo4, na temelju izraza 3.60 do 3.70 dobivene su sljedeće vrijednosti termodinamičkih konstanti: k_1 = 2.5·10^5, k_2 = 3.8321·10^{-5}, n_1 = 4.6923, k_3 = 27988177, k_4 = 1.1450·10^{-11}, k_5 = 51728, k_6 = -99033, k_7 = 3.2308·10^8, k_8 = 5.4488·10^7, n_B = 1.4923, a_0 = 2.989028 te a_1 = -0.003041.

Kinetički parametri feritne, perlitne te bainitne pretvorbe, k_F, k_P te k_B, određeni su pomoću izraza 3.15, 3.48 te 3.41. Uz termodinamičke konstante, u navedenim izrazima koriste se i druge veličine čije vrijednosti iznose: D_0 = 2.3·10^{-5} m^{2}s^{-1}, Q_{dif} = 1.48·10^5 Jmol^{-1}, R = 8.314 Jmol^{-1}K^{-1}, S = 170153 m^{-1}. Karakteristične koncentracije faza određene su na temelju Fe-Fe$_3$C dijagrama te iznose: c_γ = 1186.661·exp(-7.2834·10^{-3}·T) %C, c_α = 0.1592 - 1.3423·10^{-4}·T %C, $c_{\gamma\alpha}$ = 9.6782 - 8.82·10^{-3}·T %C, $c_{\gamma Fe3C}$ = -0.5248 + 1.28·10^{-3}·T %C. Vrijednosti kritičnih temperatura raspada austenita izračunate su iz izraza predloženih u poglavlju *2.12. Utjecaj legirajućih elemenata na raspad austenita*, a za čelik 42CrMo4 iznose: A_{e3} = 774 °C = 1047 K, A_{e1} = 733 °C = 1006 K, B_s = 584 °C = 857 K te M_s = 385 °C = 659 K.

Na temelju poznatih vrijednosti kinetičkih parametara feritne, perlitne i bainitne pretvorbe te izraza 3.28, 3.44 i 3.59 izračunata su vremena početka i kraja izotermičkog raspada austenita koja su potom ucrtana u IT dijagram čelika.

Na slici 3.3 isprekidanim krivuljama prikazan je eksperimentalni izotermički dijagram čelika 42CrMo4, dok su numerički određena vremena početka i kraja raspada austenita prikazana punim krivuljama. Također, u dijagram su ucrtane krivulje koje odgovaraju udjelima bainita od 25 %, 50 %, 75 % te 90 %.



Sl. 3.3. Usporedba eksperimentalnih i numeričkih krivulja izotermičkog raspada austenita čelika 42CrMo4

Na slici 3.3 vidljivo je dobro poklapanje eksperimentalnih te numerički određenih krivulja IT dijagrama. Stoga, može se zaključiti da se na temelju izraza 3.60 do 3.70 s velikom točnošću mogu odrediti termodinamičke konstante feritne, perlitne te bainitne pretvorbe, čime se izbjegava korištenje empirijskih veličina u kinetičkim izrazima izotermičkog raspada austenita.

4. Mehanička svojstva čelika u procesu gašenja

4.1. Uvod

Mehanička svojstva čelika u procesu gašenja odgovorna su za ponašanje materijala za vrijeme gašenja, stoga je predviđanje relevantnih mehaničkih svojstava prvi korak u predviđanju mehaničkog ponašanja materijala za vrijeme gašenja.

U procesu gašenja, tvrdoća se smatra temeljnim mehaničkim svojstvom. Ona se može definirati i kao otpornost materijala prema lokalnoj plastičnoj deformaciji. Ostala relevantna mehanička svojstva u procesu gašenja su: modul elastičnosti, granica razvlačenja, koeficijent i eksponent deformacijskog očvršćivanja, koeficijent transformacijske plastičnosti te specifična oslobođena elastična energija. Navedena svojstva ujedno predstavljaju osnovne pokazatelje otpornosti deformaciji i krhkom lomu do kojih može doći za vrijeme gašenja.

Mehanička svojstva čelika ovise o mikrostrukturnim sastojcima te o temperaturi. Budući da pri gašenju čelika dolazi do mikrostrukturnih pretvorbi, a time i do promjene sastava mikrostrukture, mehanička svojstava čelika konstantno se mijenjaju pri ohlađivanju s temperature austenitizacije.

Zbog različitih brzina ohlađivanja u različitim točkama uzorka te zbog velikih temperaturnih gradijenata, pri gašenju se u uzorku generiraju unutarnja naprezanja koja mogu dovesti do deformiranja uzorka, a u ekstremnim uvjetima i do loma. Kada generirana unutarnja naprezanja u bilo kojoj točki uzorka prijeđu lokalnu granicu tečenja, dolazi do plastične deformacije koja rezultira naprezanjima koja ostaju u uzorku i nakon gašenja (zaostala naprezanja). Kada naprezanja ili deformacije u vrhu pukotine prijeđu njihove kritične vrijednosti, dolazi do rasta pukotine pri čemu se unutar materijala stvaraju nove površine te uništava kohezija materijala. Nastajanje loma može se predvidjeti korištenjem odgovarajućih kriterija loma koji se temelje na relevantnim mehaničkim svojstvima. Pri gašenju čelika moguća su dva mehanizma lokalnog loma: krhki lom odvajanjem te duktilni lom kojem prethodi lokalna plastična deformacija. Budući da duktilnom lomu prethodi pretjerana

plastična deformacija, njezino sprječavanje najčešće ujedno znači i sprječavanje duktilnog loma. Da bi se spriječio krhki lom, maksimalno naprezanje mora biti manje od kritičnog naprezanja koje dovodi do krhkog loma. Kritično naprezanje ovisi o otpornosti materijala na lom te o prirodi postojeće pukotine. Sklonost krhkom lomu povećava se sniženjem temperature, povećanjem brzine deformacije te troosnim stanjem naprezanja.

U skladu s navedenim, u poglavlju 4.2 prikazane su različite vrste deformacija koje nastaju u uzorku za vrijeme procesa gašenja te su analizirana ona mehanička svojstva koja definiraju otpornost materijala prema deformaciji. Poglavlje 4.3 odnosi se na krhki lom pri gašenju čelika. U ovom poglavlju opisani su osnovni kriteriji krhkog loma te uzroci krhkog loma za vrijeme gašenja. Budući da mehanička svojstva čelika ovise o mikrostrukturnim sastojcima te o temperaturi, u poglavljima 4.4 i 4.5 analiziran je utjecaj mikrostrukture i temperature na relevantna mehanička svojstva pri gašenju čelika.

4.2. Deformacije u procesu gašenja

Kao posljedica fizikalnih procesa prijelaza i provođenja topline te mikrostrukturnih pretvorbi do kojih dolazi za vrijeme procesa gašenja, pri ohlađivanju se u uzorku javljaju različite vrste deformacija: elastična ε^{e}, plastična ε^{p}, toplinska ε^{th}, deformacija uslijed mikrostrukturnih pretvorbi ε^{tr} te deformacija uslijed transformacijske plastičnosti ε^{tp}. Ukupna deformacija može se smatrati sumom navedenih deformacija [49,50]:

. (4.1)

Elastična deformacija čelika proizlazi iz povratnih pomaka atoma, a kod većine metalnih materijala postoji do deformacija približnih 0.005 [15]. Najveće naprezanje koje u materijalu još ne uzrokuje prvo nepovratno klizanje je granica elastičnosti materijala σ_E. Budući da se σ_E teško određuje, u inženjerskim svrhama se kao granica elastičnog ponašanja metala koriste granica razvlačenja R_e te konvencionalna granica razvlačenja R_p.

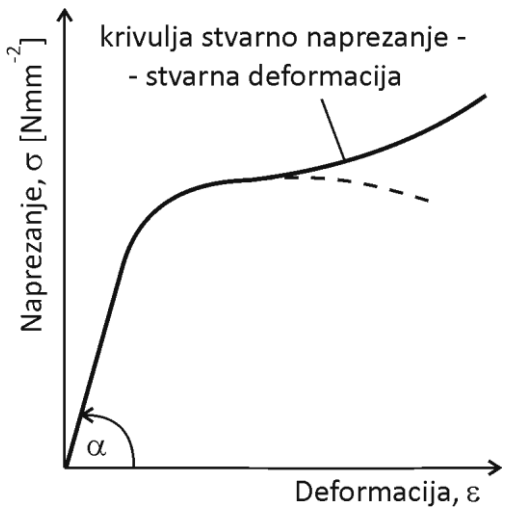
Odnos naprezanja i deformacije u elastičnom području prikazan je Hookovim zakonom:

. (4.2)

Modul elastičnosti, E, i σ_E definiraju otpornost materijala prema elastičnoj deformaciji. Na atomskoj razini, makroskopski elastična deformacija manifestira se u promjeni međuatomarne udaljenosti i istezanju međuatomarnih veza. Stoga je veličina modula elastičnosti mjera otpornosti prema razdvajanju susjednih atoma, a ovisi o jakosti kemijske veze između atoma te o parametrima kristalne rešetke. Modul elastičnosti proporcionalan je nagibu tangente krivulje sila kemijske veze – međuatomarna udaljenost u točki ravnotežne udaljenosti između atoma r_0:

— . (4.3)

Budući da se veličina sile kemijske veze ne mijenja s promjenom kristalne strukture, modul elastičnosti je jedno od najneosjetljivijih mehaničkih svojstava na promjenu mikrostrukture u procesu gašenja čelika. Vrijednost modula elastičnosti mijenja se s promjenom temperature. Za razliku od elastičnog područja, u području plastičnosti deformacije nisu jednoznačno određene naprezanjima, već ovise o povijesti opterećenja. Na slici 4.1 prikazana je krivulja stvarno naprezanje – stvarna deformacija za slučaj jednoosnog vlačnog opterećenja.



Sl. 4.1. Krivulja stvarno naprezanje – stvarna deformacija

Vrijednosti stvarnog naprezanja i stvarne deformacije određuju se na temelju trenutnih vrijednosti površine poprečnog presjeka uzorka S i mjerne duljine uzorka L prema izrazima:

–, (4.4)

— — —, (4.5)

pri čemu su S_0 i L_0 početne vrijednosti površine poprečnog presjeka te mjerne duljine uzorka. Ukoliko je uzorak opterećen u plastičnom području, ukupna deformacija sastoji se od elastične i plastične deformacije. Za male vrijednosti deformacije vrijedi:

. (4.6)

Osnovni pokazatelj otpornosti materijala prema plastičnoj deformaciji je granica razvlačenja R_e. Kada se pri gašenju čelika na određenoj temperaturi prijeđe vrijednost granice razvlačenja u bilo kojoj točki uzorka, dolazi do pojave plastičnih deformacija.

Vrijednost granice razvlačenja materijala ovisi o mikrostrukturnim parametrima. Najpoznatija je njezina ovisnost o veličini kristalnog zrna koju su za uvjete vlačnog opterećenja postavili Hall i Petch:

, (4.7)

pri čemu je σ_i otpor gibanju dislokacija na kliznim ravninama, k_Y konstanta, dok je d promjer kristalnog zrna. Izraz 4.7 vrijedi pri svakoj vrijednosti plastične deformacije, sve do loma.

Karakteristika plastične deformacije metalnih materijala je da se s povećanjem smične deformacije kontinuirano povećava smično naprezanje potrebno za klizanje. Ukoliko naprezanje nastavlja rasti, povećava se gustoća dislokacija, a time i broj barijera deformaciji, zbog čega deformacija može napredovati tek uz povećanje opterećenja. Utjecaj gustoće dislokacija, ρ, na vrijednost naprezanja pri kojem dolazi do tečenja kod polikristalnih materijala može se prikazati Taylorovim dislokacijskim modelom:

, (4.8)

pri čemu je α konstanta, μ modul smicanja, dok je b veličina Burgersovog vektora.

U području plastičnih deformacija sve do trenutka lokalne kontrakcije poprečnog presjeka krivulja stvarno naprezanje – stvarna deformacija može se aproksimirati izrazom:

(4.9)

pri čemu su K i n parametri deformacijskog očvršćivanja. Uz granicu razvlačenja, koeficijent K i eksponent n su ona mehanička svojstva kojima je određena otpornost materijala prema plastičnoj deformaciji.

Koeficijent K odgovara stvarnom naprezanju pri stvarnoj deformaciji $\varepsilon = 1$, dok je eksponent n definiran izrazom:

$$\qquad (4.10)$$

Eksponent n može poprimati vrijednosti od $n = 0$ kod idealno plastičnih materijala do $n = 1$ kod idealno elastičnih materijala. Kod većine materijala n iznosi od 0.1 do 0.5 [51].

U tablici 4.1 prikazane su vrijednosti parametara deformacijskog očvršćivanja nekih čelika pri sobnoj temperaturi.

Tab. 4.1. Vrijednosti parametara n i K za čelike pri sobnoj temperaturi [51]

Vrsta čelika	Stanje	n	K [MPa]
0.05 % C	žaren	0.26	531
SAE 4340	žaren	0.15	641
0.6 % C	kaljen pa popuštan pri 538 °C	0.10	1572
0.6 % C	kaljen pa popuštan pri 704 °C	0.19	1227

Uslijed kontinuirane promjene temperature za vrijeme procesa gašenja čelika, u materijalu dolazi do pojave toplinske deformacije čija je vrijednost određena izrazom [1,52]:

$$, \qquad (4.11)$$

pri čemu je α_i koeficijent toplinskog rastezanja i-tog mikrokonstituenta (faze), X_i njegov volumni udio te δ_{ij} Kroneckerov tenzor.

Također, pri raspadu austenita u sekundarne faze dolazi do deformacije uslijed mikrostrukturnih pretvorbi kao posljedice povećanja volumena u području pretvorbi. Deformacija uslijed mikrostrukturnih pretvorbi određena je izrazom [1,53]:

$$, \qquad (4.12)$$

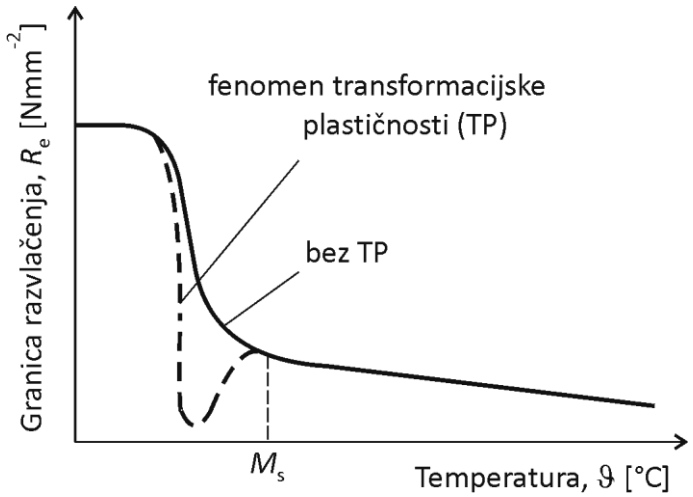
pri čemu je — strukturna dilatacija uslijed pretvorbe austenita u *i*-tu fazu te X_i volumni udio *i*-te faze. Na primjer, strukturna dilatacija na sobnoj temperaturi uslijed potpune martenzitne pretvorbe ugljičnog čelika koncentracije do 1 %C iznosi [54]:

— , (4.13)

pri čemu je %C maseni udio ugljika. Ukoliko se pretvorba austenita u potpunosti odvija u bainitnom ili perlitnom stupnju, relativna promjena volumena je manja.

Za vrijeme pretvorbe austenita u sekundarne faze, uslijed razlike volumena kristalnih struktura austenita i sekundarnih faza, u čeliku dolazi do mikroskopskog plastičnog tečenja [55]. Do plastičnog tečenja pri mikrostrukturnim pretvorbama može doći pri naprezanjima nižim od granice razvlačenja materijala. Taj fenomen znatnog pada otpornosti plastičnoj deformaciji pri mikrostrukturnim pretvorbama naziva se transformacijska plastičnost.

Postoji nekoliko objašnjenja fenomena transformacijske plastičnosti. Na primjer, kod martenzitne pretvorbe transformacijska plastičnost može se objasniti privremenim gubitkom granice razvlačenja materijala, što je rezultat pomicanja atoma iz njihovih originalnih položaja. Na slici 4.2 shematski je prikazan pad granice razvlačenja pri martenzitnoj pretvorbi.



Sl. 4.2. Shematski prikaz pada granice razvlačenja pri martenzitnoj pretvorbi

Promjene dimenzija uzorka uslijed mikrostrukturnih pretvorbi, a stoga i vrijednosti transformacijske plastičnosti, još su veće ukoliko je uzorak dodatno vlačno opterećen.

Najpoznatiji model transformacijske plastičnosti je Greenwood-Johnsonov model [56], u kojem je pretpostavljeno sljedeće: kombinacija vanjskog naprezanja i unutarnjih naprezanja koja nastaju uslijed pretvorbe dovodi do koncentracija naprezanja koje lokalno prelaze granicu razvlačenja materijala; do tečenja dolazi isključivo u najslabijoj fazi; klizanje na granici faza utječe na dodatnu deformaciju; orijentacija sekundarnih faza dovodi do vrlo visoke deformacije u određenim smjerovima, relativnim na smjer vanjskog naprezanja.

Sukladno istraživanjima Greenwooda i Johnsona, plastična deformacija koja nastaje u uzorku za vrijeme pretvorbe austenita u uvjetima jednoosnog vlačnog naprezanja, σ, iznosi:

$$\text{[illegible]} \tag{4.14}$$

i ovisi o granici razvlačenja najslabije faze – austenita te o relativnoj promjeni volumena.

Ako se pri predviđanju transformacijske plastičnosti u obzir uzme udio raspadnutog austenita u mikrostrukturi, *m*, transformacijska plastičnost iznosi [57]:

$$\text{[illegible]} \tag{4.15}$$

Iako se većina istraživanja transformacijske plastičnosti odnosi na martenzitnu pretvorbu, transformacijska plastičnost nije ograničena samo na bezdifuzijsku pretvorbu, već se fenomen transformacijske plastičnosti javlja i pri difuzijskim pretvorbama austenita u bainit i perlit.

Općenito, transformacijska plastičnost može se prikazati izrazom [49,58]:

$$\text{[illegible]} \tag{4.16}$$

pri čemu je *K* koeficijent transformacijske plastičnosti, σ naprezanje, dok je *f*(*P*) funkcija koja opisuje kinetiku transformacijske plastičnosti, odnosno razvoj transformacijske plastičnosti u ovisnosti o volumnom udjelu nove faze *P*. Prema definiciji funkcija *f*(*P*) poprima sljedeće vrijednosti: *f*(*P*) = 0 za *P* = 0 te *f*(*P*) = 1 za *P* = 1.

Vrijednost koeficijenta *K* ovisi o tipu pretvorbe i o temperaturi, stoga se zasebno određuje za svaku vrstu pretvorbe na sljedeći način. Pretvorba je završena kada volumni odio nove faze poprimi vrijednost *P* = 1, odnosno kada je *f*(*P*) = 1. Ako se vrijednost deformacije ε^{tp} za *P* = 1

grafički prikaže u ovisnosti o naprezanju, dobiva se linearna ovisnost ovih veličina, pri čemu je koeficijent *K* tangens kuta kojeg ovaj pravac zatvara s σ-osi:

—. (4.17)

Osim eksperimentalnih metoda, u literaturi su predloženi izrazi za izračunavanje koeficijenta *K* na temelju poznatih osnovnih fizikalnih svojstava materijala (tablica 4.2).

Tab. 4.2. Izrazi za izračunavanje vrijednosti koeficijenta transformacijske plastičnosti

Koeficijent transformacijske plastičnosti, *K*	Autor, godina
– — —	Greenwood i Johnson, 1965. [56]
– — —	Abrassart, 1972. [59]
– — —	Leblond, Devaux, Devaux, 1989. [60]

Na temelju izraza u tablici 4.2. općenito se može pisati:

— —. (4.18)

Nedostatak ovog izraza je taj što se pretpostavlja ista vrijednost konstante *k* za sve vrste faznih pretvorbi pothlađenog austenita. Također, nije točno definirano da li je vrijednost granice razvlačenja klasična vrijednost ili umanjena, budući da se fenomen transformacijske plastičnosti veže uz privremeni gubitak granice razvlačenja materijala.

Danas se u literaturi mogu naći samo eksperimentalne vrijednosti koeficijenta *K* u ovisnosti o vrsti pretvorbe, koje su za čelik 42CrMo4 prikazane u tablici 4.3.

Tab. 4.3. Koeficijenti transformacijske plastičnosti čelika 42CrMo4

Koeficijent transformacijske plastičnosti, *K* [10^{-6} MPa^{-1}]			Literatura
Perlit	Bainit	Martenzit	
41.8		50.8	[53,61]
/	/	42	[52]
133	86	/	[62]

U tablici 4.4 navedeni su izrazi za izračunavanje funkcije $f(P)$, pri čemu su α i k parametri čije se vrijednosti eksperimentalno određuju. Također, u tablici je naznačena primjenjivost ovih izraza.

Tab. 4.4. Izrazi za izračunavanje vrijednosti funkcije $f(P)$

Br.	Funkcija $f(P)$	Primjena		Autor, godina
		DP*	MP*	
1.			•	Abrassart, 1972. [59]
2.		•	•	Dasalos, 1981. [63]
3.	—	•	•	Sjöström, 1985. [64]
4.		•	•	Leblond, 1989. [60]
5.	–	•		Fischer, Sun, Tanaka, 1996. [65]

* DP – difuzijska pretvorba; MP – martenzitna pretvorba

4.3. Krhki lom u procesu gašenja

4.3.1. Osnovni kriteriji krhkog loma

Kao posljedica generiranja toplinskih naprezanja uslijed velikih brzina ohlađivanja te naprezanja uslijed mikrostrukturnih pretvorbi, pri gašenju čelika stvaraju se mikropukotine koje u materijalu predstavljaju koncentratore naprezanja. Pri dovoljno visokim vrijednostima generiranih unutarnjih naprezanja pri gašenju, mikropukotine postaju mjesta inicijacije makropukotina te može doći do krhkog loma uzorka.

Ovisno o ponašanju materijala u uvjetima opterećenja, postoje različiti kriteriji rasta pukotine. Najčešće se koristi kriterij naglog rasta pukotine pri linearno-elastičnom ponašanju materijala, tzv. K-koncept [66]. Prema njemu, do naglog i nezaustavljivog rasta pukotine će doći kada naprezanje u vrhu pukotine dosegne kritičnu vrijednost, odnosno, kada faktor intenzivnosti naprezanja K_I dosegne kritičnu vrijednost K_{Ic} koja se naziva lomna žilavost te je prikazana izrazom:

— (4.19)

pri čemu je σ_c kritično naprezanje pri kojem dolazi do loma, a polovica duljine pukotine, dok je Y bezdimenzijski koeficijent, reda veličine 1, koji ovisi o veličini i obliku tijela i pukotine te o položaju i orijentaciji pukotine u odnosu na polje naprezanja. Uz poznatu vrijednost K_{Ic} materijala može se predvidjeti opterećenje koje uzorak s pukotinom određenih dimenzija može izdržati bez nastanka loma.

Prema Griffithovom energetskom kriteriju loma [67], do nestabilnog rasta pukotine će doći kada je elastična energija oslobođena uslijed rasta pukotine jednaka ukupnoj energiji potrebnoj za rast pukotine, odnosno, kada vrijednost specifične oslobođene elastične energije G_I dosegne kritičnu vrijednost G_{Ic} prikazanu izrazom:

——. (4.20)

Kod krhkih materijala specifična oslobođena elastična energija jednaka je dvostrukoj specifičnoj površinskoj energiji pukotine:

. (4.21)

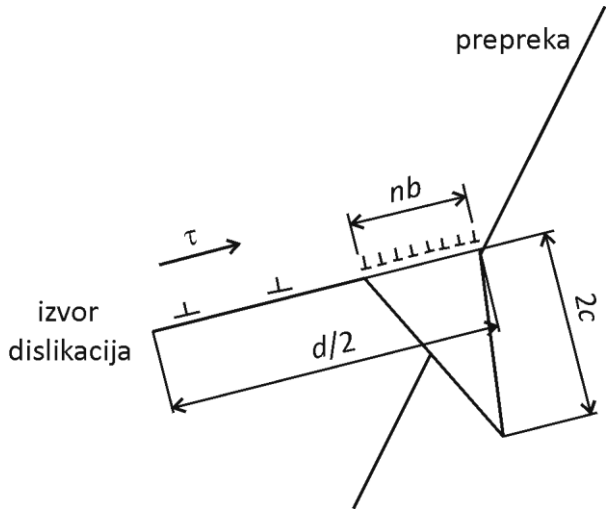
Za razliku od krhkih, kod plastičnih materijala energija potrebna za rast pukotine pretežno se sastoji od plastične energije koja se troši na razvoj plastične deformacije u vrhu pukotine.

Vrijednost lomne žilavosti za pojedini materijal određuje se normiranim ispitivanjima ispitnih uzoraka sa zarezom na koji se nastavlja uska pukotina definirane veličine. Pri određivanju lomne žilavosti gašenog uzorka, zarez i uska pukotina rade se prije postupka kaljenja. Budući da pri kaljenju dolazi do povećanja radijusa vrha pukotine, uz činjenicu da kod krhkih materijala s povećanjem radijusa vrha pukotine raste vrijednost kritičnog naprezanja loma, može se zaključiti da se u procesu gašenja čelika lomna žilavost ne može smatrati osnovnim pokazateljem otpornosti krhkom lomu.

Osnovni pokazatelj otpornosti krhkom lomu u procesu gašenja čelika je specifična oslobođena elastična energija uz primjenu energetskog kriterija loma.

Mikropukotine koje su odgovorne za krhki lom odvajanjem u procesu gašenja čelika u početku nisu prisutne u materijalu, već nastaju uslijed procesa deformacije za vrijeme gašenja.

Na slici 4.3 prikazan je model formiranja mikropukotine gomilanjem bridnih dislokacija čiji se izvor nalazi u središtu kristalnog zrna promjera *d*.



Sl. 4.3. Model formiranja mikropukotine gomilanjem bridnih dislokacija

Proces krhkog loma odvajanjem započinje mikroplastičnom deformacijom kada uslijed smičnog naprezanje koje djeluje na kliznoj ravnini, dolazi do gomilanja dislokacija na prepreci. Pri određenoj kritičnoj vrijednosti naprezanja dislokacije se spajaju u mikropukotinu visine *nb* i duljine 2*c*. Mikropukotina nastavlja stabilno rasti mikroplastičnom deformacijom sve dok traje gomilanje dislokacija. Kada primijenjeno naprezanje dosegne kritičnu vrijednost, dolazi do nestabilnog rasta mikropukotine. Za razliku od smičnih naprezanja, vlačna naprezanja ne utječu na proces nukleacije mikropukotine, već su potrebna za nestabilni rast pukotine.

Do nukleacije mikropukotine će doći kada je rad smičnog naprezanja τ na udaljenosti *nb* jednak zbroju rada povratnog naprezanja koje se suprotstavlja gibanju novih dislokacija, τ_i, na istoj udaljenosti te rada utrošenog na stvaranje novih lomnih površina.

Lomno naprezanje koje je potrebno za rast mikropukotine ovisi o svojstvima gomilanja dislokacija, veličini kristalnog zrna te o specifičnoj energiji za rast pukotine koja može uključivati i energiju plastične deformacije.

Kod većine metalnih materijala dokazano je da rast mikropukotine kroz jaku prepreku predstavlja najteži korak u procesu loma. Stoga, veličina kristalnog zrna ima znatan utjecaj na krhki lom. Ispod određene vrijednosti veličine zrna, pri lomu je prisutna znatna duktilnost.

4.3.2. Uzroci krhkog loma pri gašenju čelika

Do nukleacije mikropukotina pri gašenju čelika najčešće dolazi na temperaturama znatno nižim od temperature M_s, pri čemu mikropukotine nastaju na površini gašenog uzorka i rastu prema jezgri. Stvaranje mikropukotina pri martenzitnoj pretvorbi rezultat je velike relativne promjene volumena koja prati tu pretvorbu, a općenito se tendencija stvaranju mikropukotina povećava s povećanjem prokaljivosti i udjela ugljika u čeliku [68]. Do stvaranja mikropukotine će doći kada je deformacija u vrhu rastuće pločice martenzita dovoljna za stvaranje pukotine unutar pločice ili na granici rastućih pločica [69].

Ako do krhkog loma pri gašenju čelika dolazi na temperaturama višim od M_s temperature, uzrok lomu su toplinska naprezanja uslijed velikih brzina ohlađivanja te nejednolikog ohlađivanja uzorka na površini.

Postoje i mnogi drugi uzroci krhkog loma o kojima treba voditi računa pri gašenju čelika [70]. Na primjer, uzrok krhkom lomu može biti nejednoliko strujanje sredstva za gašenje oko uzorka zbog čega se površina uzorka nejednoliko ohlađuje te dolazi do generiranja toplinskih naprezanja. Nejednoliko ohlađivanje u dubini uzorka također pogoduje stvaranju mikropukotina.

Struktura čelika prije postupka kaljenja također utječe na mogućnost loma pri gašenju, stoga svaka struktura mora biti specifično pripremljena za postupak kaljenja kako bi se kaljenjem postigli odgovarajući rezultati bez loma uzorka.

Krhki lom može biti i posljedica prekomjernih brzina zagrijavanja ili lokalnog pregrijavanja uzorka, kada na tim mjestima dolazi do okrupnjavanja kristalnih zrna. S povećanjem veličine kristalnog zrna raste broj i veličina mikropukotina. Prekomjerne temperature austenitizacije pogoduju krhkom lomu jer povećavaju temperaturnu razliku površine i jezgre uzorka što rezultira većim unutarnjim naprezanjima. Također, s temperaturom austenitizacije raste kristalno zrno austenita.

Kako bi pri gašenju čelika došlo do loma, u uzorku se trebaju nalaziti koncentratori naprezanja koji lokalno povećavaju vrijednost naprezanja preko kritične vrijednosti potrebne za lom. Osim mikropukotina, koncentratori naprezanja mogu biti geometrijski, poput tragova alata na površini uzorka, oštrih kutova ili područja nagle promjene debljine uzorka. Zbog toga, odgovarajuća prethodna strojna obrada uzorka ima vrlo važnu ulogu u sprječavanju

loma pri gašenju čelika. Nadalje, uzrok loma pri gašenju čelika mogu biti uključci koji se nalaze u materijalu, najčešći sulfidi, silikati i oksidi ili sakupljene nečistoće koji se također ponašaju kao koncentratori naprezanja. Neodgovarajući kemijski sastav i njemu neodgovarajući uvjeti gašenja također mogu dovesti do loma.

4.4. Utjecaj mikrostrukture na mehanička svojstva čelika

4.4.1. Općenito o utjecaju mikrostrukture na mehanička svojstva

Osnovno obilježje mehaničkim svojstvima čelika daju mikrostrukturni sastojci od kojih je čelik sastavljen. Ipak, kad se govori o povezanosti mikrostrukture i mehaničkih svojstava čelika treba imati u vidu i druge čimbenike koji mogu utjecati na mehanička svojstva, poput: legirajućih elemenata, veličine kristalnih zrna, unutarnjih naprezanja, heterogenosti mikrostrukture i kristalnih nesavršenosti.

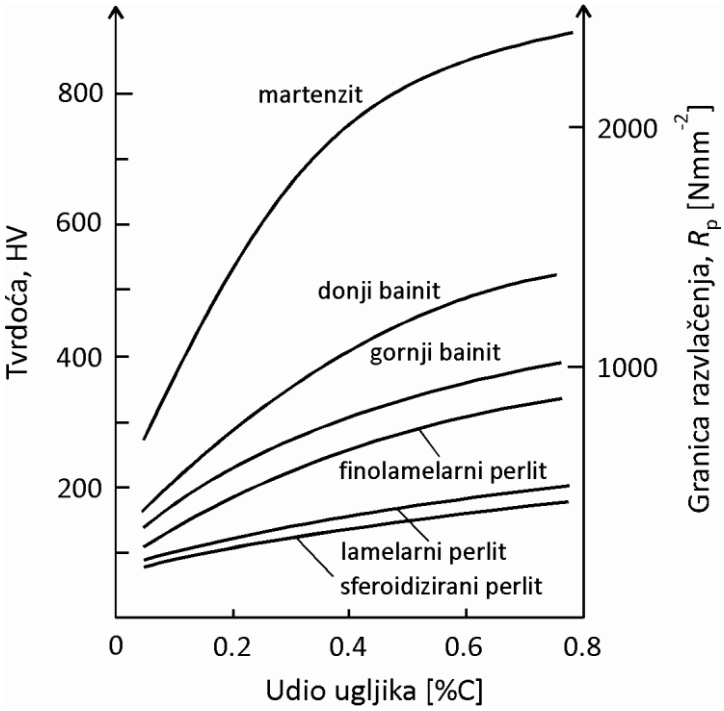
Pri gašenju čelika dolazi do raspada austenita u sekundarne faze koje se mogu svesti na dvije osnovne: α-fazu te željezni karbid (cementit). Bez obzira da li se cementit nalazi u sastavu perlita ili bainita njegov se kemijski sastav ne mijenja, već se mijenjaju oblik te dimenzije cementita o kojima ovise njegova mehanička svojstva. Za razliku od cementita, ovisno o mikrostrukturi koju gradi, α-faza mijenja oblik, dimenzije te sadržaj ugljika koji ovisi o temperaturi nastanka α-faze, dok kod martenzita ovisi o sadržaju ugljika u čeliku. Stoga, mehanička svojstva α-faze ovise o njezinom obliku, dimenzijama te kemijskom sastavu.

4.4.2. Utjecaj mikrostrukture na tvrdoću i svojstva tečenja

Na slici 4.4 prikazane su orijentacijske vrijednosti tvrdoće i granice razvlačenja mikrostrukturnih sastojaka nelegiranog čelika u ovisnosti o udjelu ugljika u čeliku.

Od svih mikrostrukturnih sastojaka, ferit ima najmanju tvrdoću i čvrstoću te najveću plastičnost. Tvrdoća i čvrstoća perlita ovise o udjelima ferita i cementita te o obliku i veličini cementita. Zbog izdvajanja cementita i smanjenja udjela ugljika u feritnoj fazi za vrijeme bainitne pretvorbe, tvrdoća bainitne mikrostrukture manje ovise o udjelu ugljika nego kod

martenzita. Na primjer, pri povećanju sadržaja ugljika u čeliku od 1 %, tvrdoća bainita raste za približno 190 HV, dok tvrdoća martenzita raste za približno 950 HV [24].



Sl. 4.4. Ovisnost tvrdoće i granice razvlačenja mikrostrukturnih sastojaka o udjelu ugljika u čeliku

U slučaju izotermičkog raspada austenita na bainit i perlit, čak i kada se perlit i bainit stvaraju na istoj temperaturi, mikrotvrdoća bainita je manja od one perlita, što se može objasniti na način da perlit nastaje iz obogaćenog austenita zbog čega u strukturi sadrži puno veći udio cementita nego bainit [24].

Najznačajniji utjecaj na mehanička svojstva bainita ima cementit čiji se oblik, dimenzije te dispergiranost u feritnoj fazi mijenjaju s temperaturom pretvorbe. Donji bainit ima homogeniju mikrostrukturu te stoga povoljniji odnos mehaničkih svojstava od gornjeg bainita kod kojeg postoji veća mogućnost izdvajanja zasebne feritne ili cementitne faze.

Visoka tvrdoća i čvrstoća martenzita posljedica su očvršćivanja ferita intersticijskim atomima ugljika koji dovode do distorzije rešetke martenzita te do vrlo otežanog kretanja dislokacija. Martenzit s visokim udjelom ugljika izrazito je tvrd i krhak, zbog čega se čelici martenzitne mikrostrukture obavezno popuštaju nakon gašenja. Kod čelika udjela ugljika od 0.1 do 0.6 %C, tvrdoća martenzita može se odrediti na temelju empirijskog izraza [54]:

. (4.22)

Ako se mikrostruktura čelika sastoji od više mikrostrukturnih sastojaka te ako su poznate njihove tvrdoće i volumni udjeli, u velikom broju istraživanja je dokazano da se ukupna tvrdoća čelika na određenoj temperaturi može odrediti na temelju tzv. *zakona mješavine* [71]:

, (4.23)

, (4.24)

pri čemu je X_i volumni udio *i*-tog mikrokonstituenta, HV_i njegova tvrdoća, dok je HV ukupna tvrdoća mikrostukture čelika.

Za razliku od tvrdoće, pri predviđanju ostalih mehaničkih svojstava čelika, u obzir se mora uzeti i interaktivno djelovanje pojedinih mikrostrukturnih sastojaka, zbog čega izrazi 4.23 i 4.24 nisu primjenjivi.

Kod čelika feritno-perlitne mikrostrukture, s povećanjem udjela ugljika u čeliku, odnosno s povećanjem udjela perlita, vrijednost granice razvlačenja i vlačne čvrstoće raste, dok se kontrakcija koja je mjera duktilnosti materijala smanjuje. Na temelju vrijednosti granice razvlačenja i vlačne čvrstoće za različite udjele ugljika može se zaključiti da perlit povećava intenzitet deformacijskog očvršćivanja [72]. Neovisno o vrlo visokoj tvrdoći perlitnih zrna, feritna matrica može se lako deformirati. Osim što porast udjela perlita direktno povećava granicu razvlačenja, također, budući da se veličina zrna ferita smanjuje povećanjem udjela perlita, perlit ima i indirektan utjecaj na povećanje granice razvlačenja preko povećanja vrijednosti $d^{-1/2}$. Budući da plastično tečenje te kontrakcija poprečnog presjeka vlačno opterećenog uzorka dovode do smanjenja udaljenosti između susjednih zrna perlita, odnosno do značajnog otpora daljnjoj deformaciji ferita, povećanje udjela perlita ima znatno veći utjecaj na povećanje vlačne čvrstoće, nego granice razvlačenja čelika.

U literaturi su analizirani utjecaji različitih mikrostrukturnih parametara i kemijskog sastava na granicu razvlačenja čelika feritno-perlitne mikrostrukture. Općenito, predloženi izrazi su kombinacija izraza Halla i Petcha (izraz 4.7) te utjecaja kemijskog sastava na granicu razvlačenja pri sobnoj temperaturi. Na primjer, granica razvlačenja čelika većinom feritne mikrostrukture može se odrediti iz izraza [72]:

, (4.25)

pri čemu K iznosi 88 MPa za ohlađivanje na zraku te 62 MPa za ohlađivanje u peći, $N_{(f)}$ je udio slobodnog dušika u rešetci ferita, dok je d_{α} srednja veličina zrna ferita. Mangan i silicij utječu na povećanje granice razvlačenja uslijed očvršćivanja ferita legiranjem stvaranjem supstitucijskih kristala mješanaca.

Za razliku od prethodnog, sljedeći izraz prikazuje utjecaj mikrostrukturnih parametara na granicu razvlačenja čelika perlitne mikrostrukture [72]:

, (4.26)

pri čemu je P veličina kolonije perlita, d_{γ} veličina zrna austenita, dok je S međulamelarna udaljenost perlita koja ima najveći utjecaj na vrijednost granice razvlačenja.

Najznačajniji utjecaj na čvrstoću martenzita ima udio ugljika u martenzitu. Nakon bezdifuzijske pretvorbe austenita u martenzit, atomi ugljika ostaju „zarobljeni“ unutar rešetke martenzita te predstavljaju barijere gibanju dislokacija, što se smatra osnovnim razlogom visoke čvrstoće martenzita. Osim toga, za vrijeme martenzitne pretvorbe stvara se velik broj novih dislokacija koje međusobnim ograničavanjem gibanja pridonose čvrstoći.

Kod nisko-ugljičnih čelika martenzitne mikrostrukture veličina zrna primarnog austenita također ima važan utjecaj na čvrstoću martenzita. Smanjenje veličine zrna austenita dovodi do znatnog povećanja čvrstoće martenzita, budući da se iglice martenzita nalaze u skupinama čije dimenzije direktno ovise o veličini austenitnog zrna.

Sljedeći izraz prikazuje utjecaj substrukture martenzita te udjela ugljika na granicu razvlačenja nisko-ugljičnog čelika martenzitne mikrostrukture [72]:

. (4.27)

Osim na granicu razvlačenja, veličina zrna ima značajan utjecaj i na vrijednost eksponenta deformacijskog očvršćivanja. Prema [73], ovisnost eksponenta n o veličini zrna ferita prikazana je sljedećim izrazom:

———. (4.28)

Granice kristalnih zrna, karbidi te fini sulfidni precipitati također imaju utjecaj na vrijednost eksponenta *n* [74]. Što je manja udaljenost između dispergiranih čestica u feritnoj matrici, to je manja vrijednost eksponenta *n*.

4.4.3. Utjecaj mikrostrukture na svojstva loma

Pokazatelji žilavosti materijala, odnosno otpornosti rastu pukotina, ovise o mikrostrukturi, uvjetima okoline, stanju naprezanja te o geometriji strojnog dijela. Osim mikrostrukture, ostali pokazatelji mogu se lako definirati, dok potpuno definiranje mikrostrukture obuhvaća definiranje veličine kristalnog zrna, raspodjele faza unutar mikrostrukture, raspodjele i veličine čestica i precipitata unutar mikrostrukture te definiranje kemijskog sastava čelika, faza te čestica i precipitata [75].

Najbolji odnos između žilavosti i granice razvlačenja postiže se homogenom raspodjelom legirajućih elemenata, gustoćom dislokacija, precipitatima te sitnozrnatošću mikrostrukture. Od svih navedenih mehanizama očvršćivanja, jedino se smanjenjem veličine kristalnog zrna povećavaju granica razvlačenja te omjer žilavosti i granice razvlačenja. Kod svih ostalih mehanizama očvršćivanja, s povećanjem granice razvlačenja dolazi do smanjenja omjera žilavosti i granice razvlačenja [54].

Najhomogeniju raspodjelu očvršćujućih elemenata te najveći omjer žilavosti i granice razvlačenja ima popušteni martenzit. Sljedeća najbolja mikrostruktura je popušteni bainit koji je nastao na niskim temperaturama. S obzirom na omjer žilavosti i granice razvlačenja, najgora je feritno-perlitna mikrostruktura.

Općenito, u literaturi se najčešće prikazuju rezultati istraživanja utjecaja veličine kristalnog zrna na lomnu žilavost čelika koja se naglo smanjuje s povećanjem kristalnog zrna. Kad je kristalno zrno jednako ili veće od plastične zone u vrhu pukotine, lomna žilavost poprima konstantnu vrijednost [76].

Budući da se s povećanjem volumnog udjela austenita povećava lomna žilavost čelika, kod čelika većeg udjela ugljika, kod kojih nakon ohlađivanja postoji znatna količina zaostalog austenita, volumni udio austenita mora se uzeti u obzir pri predviđanju lomne žilavosti [76]. Austenit apsorbira energiju loma te na taj način usporava daljnji rast pukotine.

U slučaju heterogene mikrostrukture, osim veličine kristalnih zrna te kristalnih granica, utjecaj na svojstva tečenja i loma imaju veličina pojedine faze te koncentracija granica između faza. Rezultati istraživanja utjecaja granica faza na svojstva loma čelika 42CrMo4 feritno-bainitno-martenzitne mikrostrukture ukazuju da je visoka koncentracija granica između ferita i bainita te ferita i martenzita odgovorna za krhki lom odvajanjem [77].

Mikrostruktura čelika najčešće je heterogena te sadrži karbidne precipitate te nemetalne uključke koji imaju utjecaj na tip loma. Kod čelika sferoidizirane mikrostrukture, veličina i raspodjela karbida u feritnoj matrici značajno utječu na lomnu žilavost čelika [77]. Homogena raspodjela karbida te karbidi što manjih dimenzija pogoduju povećanju lomne žilavosti.

U sljedećim tablicama sažeto je prikazan utjecaj mikrostrukturnih parametara na vrijednost lomne žilavosti čelika (tablica 4.5) te specifične oslobođene elastične energije kod krhkog loma odvajanjem (tablica 4.6).

Tab. 4.5. Utjecaj mikrostrukturnih parametara na lomnu žilavost čelika

Mikrostrukturni parametar	Utjecaj na lomnu žilavost, K_{Ic}
veličina kristalnog zrna	povećanjem zrna povećava se K_{Ic} kod austenitnih i feritnih čelika
nelegirani zaostali austenit	malo povećanje K_{Ic}
legirani zaostali austenit	znatno povećanje K_{Ic}
karbidi	smanjenje K_{Ic} uslijed povećanja tendencije odvajanja
nečistoće (P, S, As, Sn)	smanjenje K_{Ic} uslijed krhkosti popuštanja
sulfidi te krupni karbidi	smanjenje K_{Ic} uslijed promicanja nukleacije pukotina
visok udio ugljika (> 0.25 %)	smanjenje K_{Ic} uslijed lagane nukleacije pukotina
udio martenzita u gašenom čeliku	povećanje K_{Ic}
udio ferita i perlita u gašenom čeliku	smanjenje K_{Ic} kod martenzitnih čelika

Tab. 4.6. Utjecaj mikrostrukturnih parametara na specifičnu oslobođenu elastičnu energiju [78]

Mikrostrukturni parametar		Utjecaj na specifičnu oslobođenu elastičnu energiju
veličina kristalnog zrna	$d \uparrow$	$G_{Ic} \downarrow$ ($K_{Ic} \downarrow$)
vlačno naprezanje potrebno za tečenje u jednom kristalu	$\sigma_i \uparrow$	
rad pri rastu pukotine odvajanjem unutar kristalnog zrna	$\gamma_m \downarrow$	
rad pri rastu pukotine odvajanjem preko granice kristalnog zrna	$\gamma_B \downarrow$	
parametar koji definira ovisnost granice tečenja o veličini kristalnog zrna	$k_Y \uparrow$	
Prirast naprezanja uz prirast deformacije	$d\sigma/d\varepsilon \uparrow$	

$\downarrow$ - smanjenje; $\uparrow$ - povećanje

S gledišta analize loma, od čelika feritno-perlitne mikrostrukture interesantni su čelici udjela ugljika manjeg od 0.03 %C kod kojih perlit ima vrlo mali utjecaj na žilavost te čelici s visokim udjelom ugljika kod koji perlit ima direktan utjecaj na žilavost. Mali dodaci ugljika „čistom“ željezu povećavaju veličinu i broj karbida koji se formiraju na granicama zrna. Te „nečistoće“ olakšavaju stvaranje mikropukotina smanjenjem parametra γ_m.

Kod podeutektoidnih čelika udjela ugljika od 0.3 do 0.8 %C, prijelazna temperatura iz duktilnog u krhki lom, T_p, definirana je veličinom zrna te parametrom σ_i proeutektoidnog ferita [78]. U granicama od 0.2 do 0.6 %C, temperatura T_p je konstantna budući da se izjednačavaju utjecaji parametra σ_i te veličine kristalnog zrna na prijelaznu temperaturu.

Kod čelika pretežno feritno-perlitne mikrostrukture, udjela ugljika do 0.25 %C, prijelazna temperatura može se odrediti iz izraza [72]:

, (4.29)

pri čemu je $N_{(f)}$ udio slobodnog dušika u rešetci ferita, d_α srednja veličina zrna ferita, dok je X_P volumni udio perlita.

Vrijednost prijelazne temperature kod čelika pretežno perlitne mikrostrukture iznosi [72]:

, (4.30)

pri čemu je P veličina kolonije perlita, dok je d_γ veličina zrna austenita.

Općenito, smanjenje austenitnog zrna povećava otpornost prema inicijaciji pukotina, dok povećanje razmaka između perlitnih lamela utječe na povećanje otpornosti prema rastu pukotina. Također, žilavost perlitnog čelika može se povećati sferoidizacijom, pri čemu se smanjuje vrijednost parametra σ_i.

Karakteristike loma čelika bainitne mikrostrukture ovise o čvrstoći, a time i o temperaturi transformacije. Kod gornjeg bainita, kao i kod perlita, površine loma prolaze kroz više bainitnih zrna, odnosno, može se zaključiti da je veličina austenitnog zrna efektivna veličina zrna. Na to ukazuje usklađenost površina odvajanja unutar pločica ferita nastalih iz istog austenitnog zrna. Kod donjeg bainita površine odvajanja u acirkularnom feritu nisu usklađene te je efektivna veličina zrna zapravo veličina feritne pločice. Stoga, budući da je pločica acirkularnog ferita 10 do 100 puta manja od austenitnog zrna, prijelazna temperatura donjeg bainita znatno je niža u odnosu na gornji bainit.

Sljedeća mikrostrukturna značajka čelika bainitne mikrostrukture je raspodjela karbida. Kod gornjeg bainita karbidi su izlučeni uzduž granica zrna te povećavaju krhkost snižavanjem parametra γ_m. Kada su karbidi homogeno raspoređeni u feritu, kao što je slučaj popuštenog donjeg bainita, γ_m raste. Stoga, relativno viša vrijednost γ_m te smanjenje efektivne veličine zrna kod donjeg bainita uzrok su nižoj prijelaznoj temperaturi u odnosu na gornji bainit.

Kod čelika martenzitne mikrostrukture, velika prezasićenost ugljikom, što za posljedicu ima visoku vrijednost σ_i te vrlo male iglice martenzita uzrok su vrlo visokoj tvrdoći i granici razvlačenja nepopuštenog martenzita. Međutim, prisutnost unutarnjih naprezanja, visoka vrijednos σ_i te zaostali austenit koji ima veliku efektivnu veličinu zrna za lom, uzrok su izrazitoj krhkosti nepopuštenog martenzita. Stoga, u svrhu dobivanja stabilne martenzitne mikrostrukture potrebno je popuštanje čelika.

4.5. Utjecaj temperature na mehanička svojstva čelika

4.5.1. Općenito o utjecaju temperature na svojstva čelika

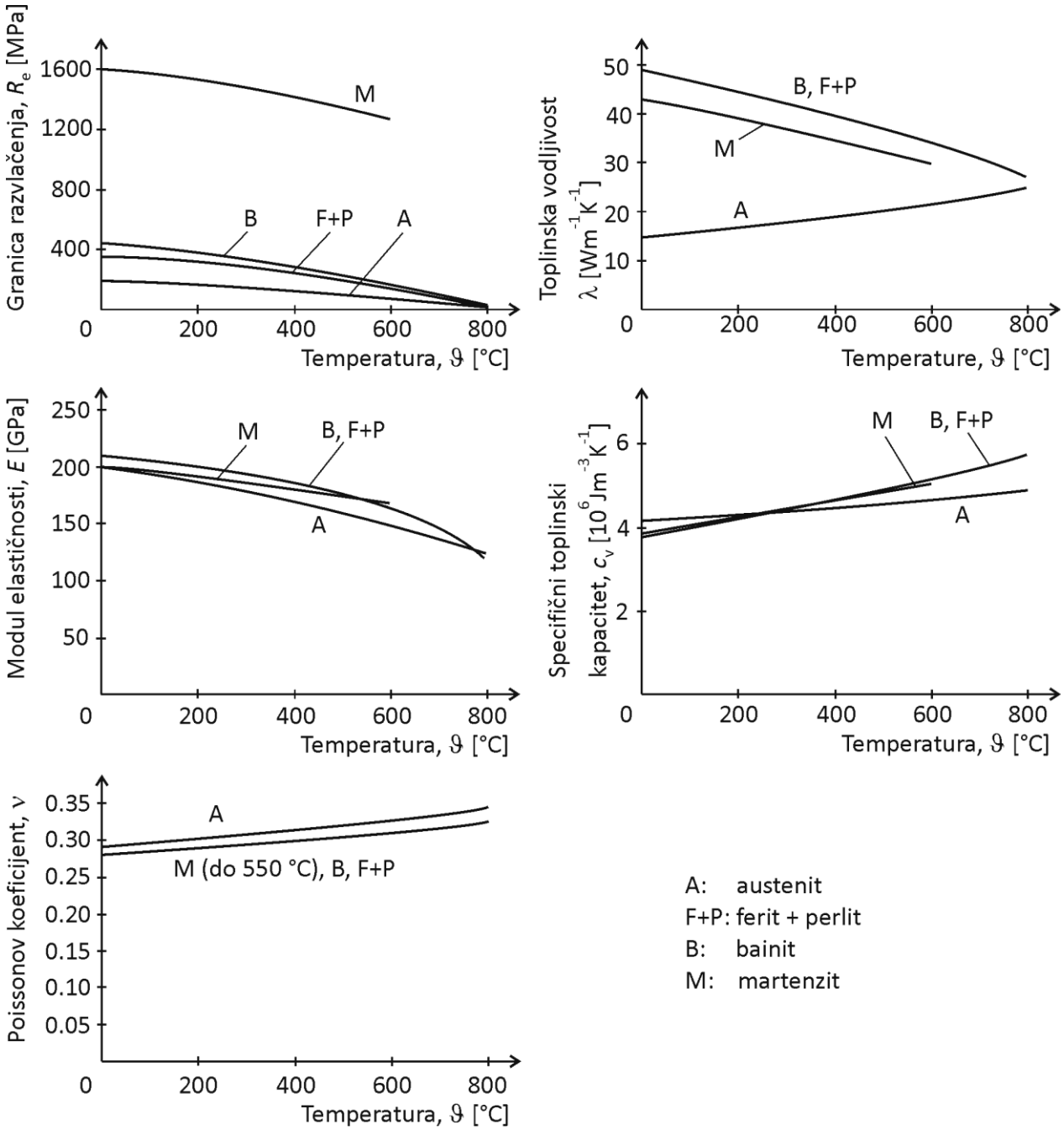
Budući da se porastom temperature naglo povećava pokretljivost atoma, difuzijski procesi imaju značajan utjecaj na mehanička svojstva čelika pri povišenim temperaturama. Porast temperature uzrok je većoj koncentraciji vakancija te većoj pokretljivosti dislokacija [57]. Također, pri povišenim temperaturama može doći do nepredvidivih kombinacija mehanizama deformacije. Stoga, pri predviđanju mehaničkih svojstava čelika u obzir se mora uzeti utjecaj temperature na mehanička svojstva.

U tablici 4.7 prikazana su mehanička i fizikalna svojstva čelika 42CrMo4 u ovisnosti o temperaturi te udjelu ugljika u čeliku.

Tab. 4.7. Mehanička i fizikalna svojstava čelika 42CrMo4 [53,61]

Svojstvo	Martenzit	Perlit	Bainit	Austenit
Granica razvlačenja R_e [MPa]	445+1375·%C	434-0.64·ϑ+ +0.77·%C·ϑ	491+757·%C- -1.02·%C·ϑ	123-0.1·ϑ- -0.006·%C·ϑ
Modul elastičnosti E [GPa]	209.3-0.076·ϑ			200.2-0.08·ϑ
Poissonov koeficijent ν	0.3			
Koef. deformacijskog očvršćivanja K [10^2MPa]	179+1.3·%C·ϑ	29.5+0.33·%C·ϑ	5.88+226.2·%C·ϑ	45.3-0.04·ϑ
Koef. transformacijske plastičnosti K [10^{-5}MPa^{-1}]	5.08	4.18		/
Gustoća ρ [kg m^{-3}]	7897-248·%C	7861	7576	8156-216·%C
Koef. toplinskog rastezanja α [10^{-6} K^{-1}]	12	14	13	22
Specifični toplinski kapacitet c_V [MJ m^{-3} K^{-1}]	3.76+0.3·%C+6.2·10^{-6}·ϑ^2			4.152+8.4·10^{-4}·ϑ
Toplinska vodljivost λ [W m^{-1} K^{-1}]	30	66.2-37.9·%C-0.049·ϑ		15+0.01·ϑ

Na slici 4.5 prikazan je utjecaj temperature na vrijednosti mehaničkih i fizikalnih svojstava mikrostrukturnih sastojaka čelika. Na slici se može lako uočiti linearna ovisnost prikazanih svojstava o temperaturi.



Sl. 4.5. Utjecaj temperature na mehanička i fizikalna svojstava mikrokostrukturnih sastojaka čelika [57]

4.5.2. Utjecaj temperature na tvrdoću

Utjecaj temperature na vrijednost tvrdoće metalnih materijala može se prikazati izrazom [51]:

, (4.31)

pri čemu su *A* i *B* konstante. Općenito, na dijagramu log(HV) – *T*, temperaturna ovisnost tvrdoće čistih metala prikazana je dvjema ravnim linijama različitog nagiba. Do promjene nagiba linija dolazi pri temperaturi $0.5 \cdot T_M$, pri čemu je T_M temperatura taljenja metala. Konstanta *A* iz izraza 4.31 predstavlja unutarnju tvrdoću koja odgovara tvrdoći čelika pri temperaturi od 0 K te je mjera čvrstoće kemijskih veza unutar kristalne rešetke. Konstanta *B* je temperaturni koeficijent tvrdoće čija se vrijednost određuje iz nagiba krivulje temperaturne ovisnosti tvrdoće.

Izrazom 4.31 moguće je pouzdano odrediti tvrdoću metala u funkciji temperature sve do temperature $0.5 \cdot T_M$, na kojoj dolazi do promjene mehanizma deformacije.

4.5.3. Utjecaj temperature na modul elastičnosti

U procesu gašenja čelika modul elastičnosti je jedno od najneosjetljivijih mehaničkih svojstava na promjenu mikrostrukture, međutim, snižavanjem temperature dolazi do povećanja vrijednosti modula elastičnosti.

Na temelju podataka iz literature [53,57,61] može se prihvatiti sljedeća temperaturna ovisnost modula elastičnosti mikrostrukturnih sastojaka čelika:

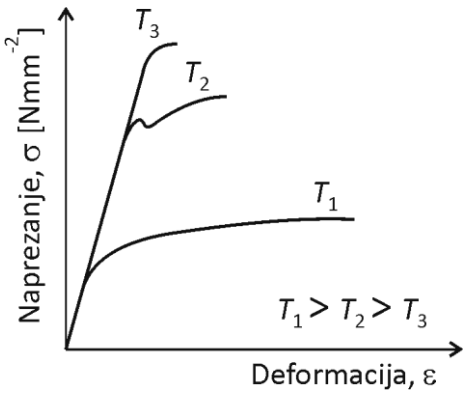
, (4.32)

, (4.33)

pri čemu su E_{F+P}, E_B, E_M te E_A moduli elastičnosti feritno-perlitne mikrostrukture, bainita, martenzita te austenita. Izrazi 4.32 i 4.33 vrijede za sve čelike.

4.5.4. Utjecaj temperature na svojstva tečenja

Na slici 4.6 shematski je prikazan utjecaj temperature na konvencionalni dijagram naprezanje-deformacija mekog čelika. Općenito, u procesu gašenja, snižavanjem temperature povećava se čvrstoća čelika, a smanjuje duktilnosti, tj. sposobnost plastične deformacije prije loma.



Sl. 4.6. Shematski prikaz utjecaja temperature na dijagram naprezanje-deformacija

Utjecaj temperature na vrijednost granice razvlačenja ovisi o tipu kristalne rešetke [51]. Kod metala s BCC rešetkom povećanje temperature uzrok je naglom smanjenju granice razvlačenja, za razliku od metala s FCC rešetkom kod kojih postoji tek neznatna temperaturna ovisnost granice razvlačenja. Različito ponašanje metala s različitim kristalnim rešetkama na povišenim temperaturama može se povezati s prirodom kretanja dislokacija. FCC metali su gušće slagani te se neovisno o temperaturi dislokacije kreću po kliznim ravninama {111}, u smjeru ⟨110⟩. Kod BCC metala s promjenom temperature dolazi do promjene kliznih sustava.

Ako se pretpostavi linearna ovisnost tvrdoće i granice razvlačenja, na temelju izraza 4.31 može se pisati:

. (4.34)

Regresijskom analizom podataka iz literature [51,57] koji se odnose na eutektoidni čelik, sukladno izrazu 4.34, dobivena je sljedeća temperaturna ovisnost granice razvlačenja pojednihih mikrostrukturnih sastojaka čelika:

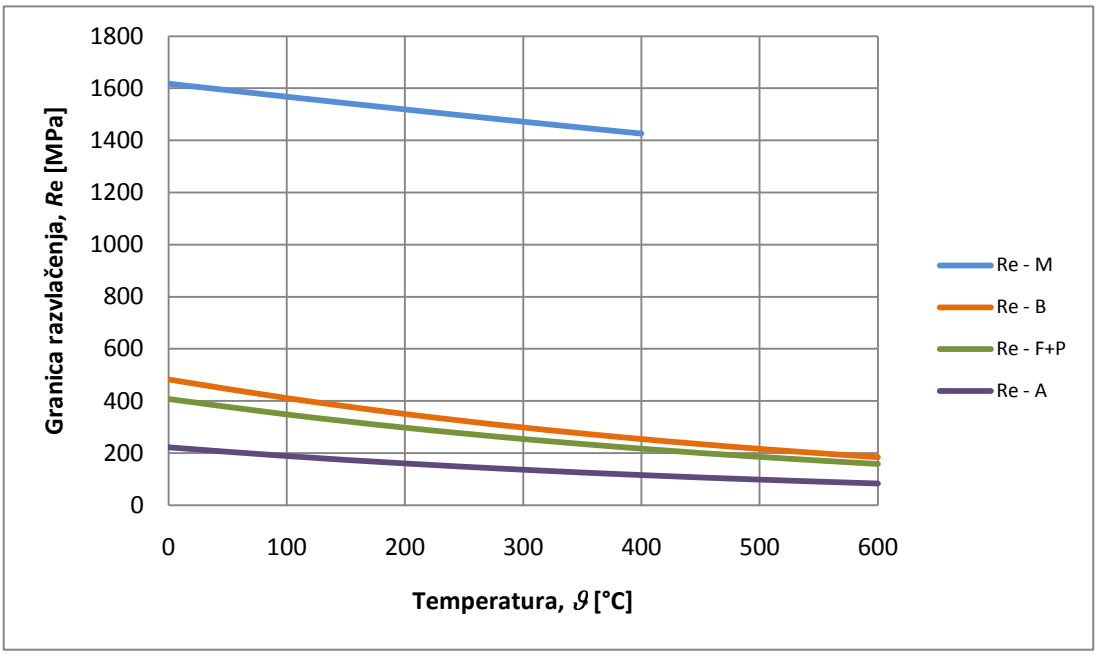
, (4.35)

, (4.36)

, (4.37)

, (4.38)

pri čemu su R_{eF+P}, R_{eB}, R_{eM} te R_{eA} granice razvlačenja feritno-perlitne mikrostrukture, bainita, martenzita te austenita. U navedenim izrazima vrijednosti 625, 746, 1763 te 345 predstavljaju granicu razvlačenja pojedinih mikrokonstituenata pri temperaturi od 0 K. Dobiveni rezultati utjecaja temperature na granicu razvlačenja grafički su prikazani na slici 4.7.



Sl. 4.7. Utjecaj temperature na granicu razvlačenja mikrokonstituenata eutektoidnog čelika

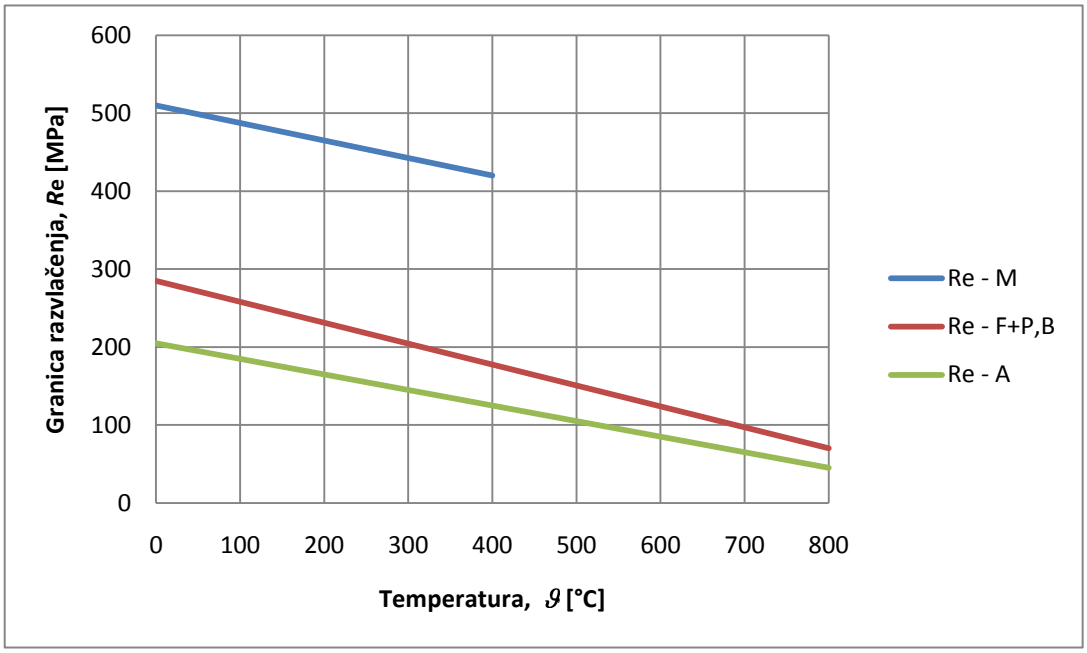
Iako su izrazi 4.35 do 4.38 dobiveni regresijskom analizom podataka koji se odnose na čelik eutektoidne koncentracije, uz odgovarajuće eksperimentalne podatke, prikazanom metodom (izraz 4.34) mogu se dobiti izrazi temperaturne ovisnosti granice razvlačenja mikrostrukturnih sastojaka bilo kojeg istraživanog čelika.

Osim što promjena temperature utječe na vrijednost modula elastičnosti te granice razvlačenja, utjecaj temperature značajan je i u području plastičnih deformacija čelika. Porastom temperature snižava se vrijednost eksponenta deformacijskog očvršćivanja *n*, što

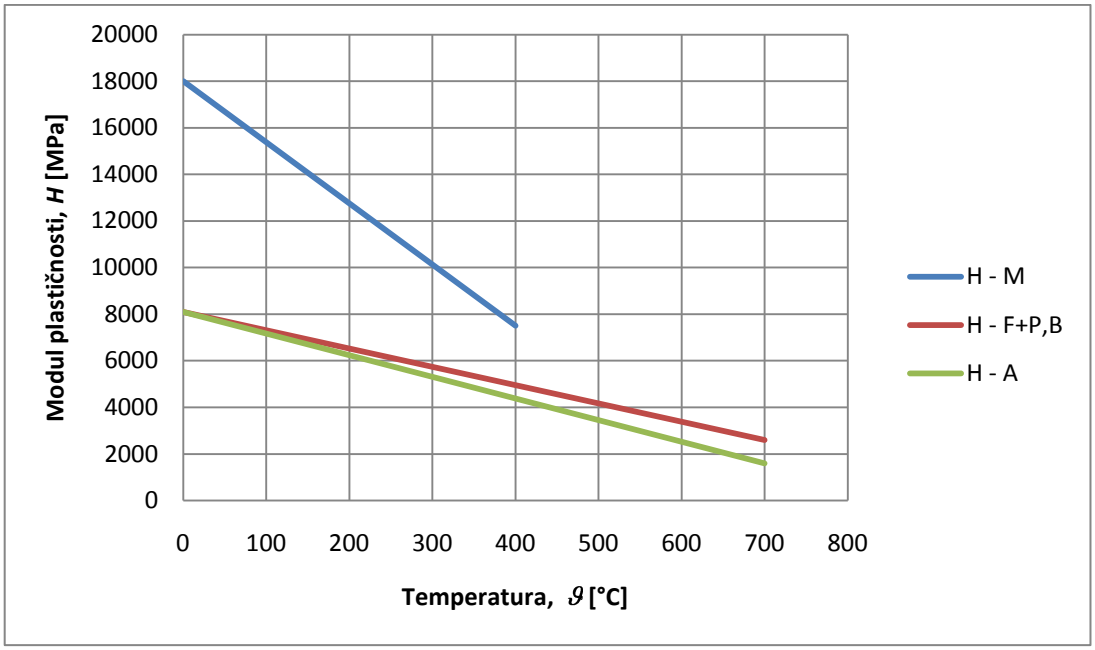
je uzrok položenijoj krivulji naprezanje – deformacija pri višim temperaturama (slika 4.6) te izrazitijoj temperaturnoj ovisnosti vlačne čvrstoće, R_m, u odnosu na granicu razvlačenja [51,79].

Temperaturna ovisnost parametara deformacijskog očvršćivanja *K* i *n* može se predvidjeti pomoću poznate temperaturne ovisnosti granice razvlačenja te modula plastičnosti, *H*. Na temelju literaturnih podataka koji se odnose na ugljični čelik [80,81], u nastavku je prikazana predložena metoda određivanja temperaturne ovisnosti parametara *K* i *n*.

Na slikama 4.8 i 4.9 prikazan je utjecaj temperature na vrijednost granice razvlačenja i modula plastičnosti mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika.



Sl. 4.8. Temperaturna ovisnost granice razvlačenja mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika



Sl. 4.9. Temperaturna ovisnost modula plastičnosti mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika

Ako je modul plastičnosti definiran kao prirast naprezanja uz prirast plastične deformacije:

—, (4.39)

u području plastičnih deformacija krivulja stvarno naprezanje – stvarna deformacija može se aproksimirati izrazom:

, (4.40)

pri čemu konstanta γ iznosi: γ = 0 za izotropno očvršćivanje te γ = 1 za kinematsko očvršćivanje.

Budući da je koeficijent K definiran kao stvarno naprezanje pri stvarnoj deformaciji ε = 1, za slučaj izotropnog očvršćivanja i uz pretpostavku ε^{pl} = 1, izraz 4.40 može se pisati na način:

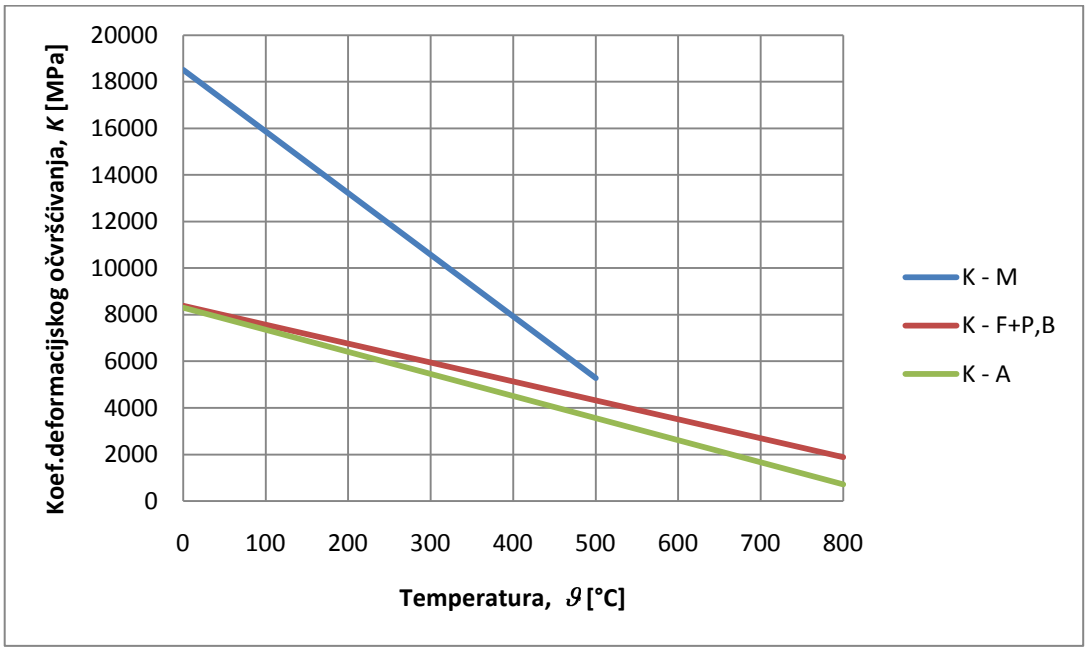
. (4.41)

Na temelju izraza 4.41 te poznate temperaturne ovisnosti granice razvlačenja (slika 4.8) i modula plastičnosti (slika 4.9) dobivena je sljedeća temperaturna ovisnost koeficijenta *K* mikrostrukturnih sastojaka čelika koja je grafički prikazana na slici 4.10:

, (4.42)

, (4.43)

. (4.44)



Sl. 4.10. Modelirana temperaturna ovisnost koeficijenta deformacijskog očvršćivanja mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika

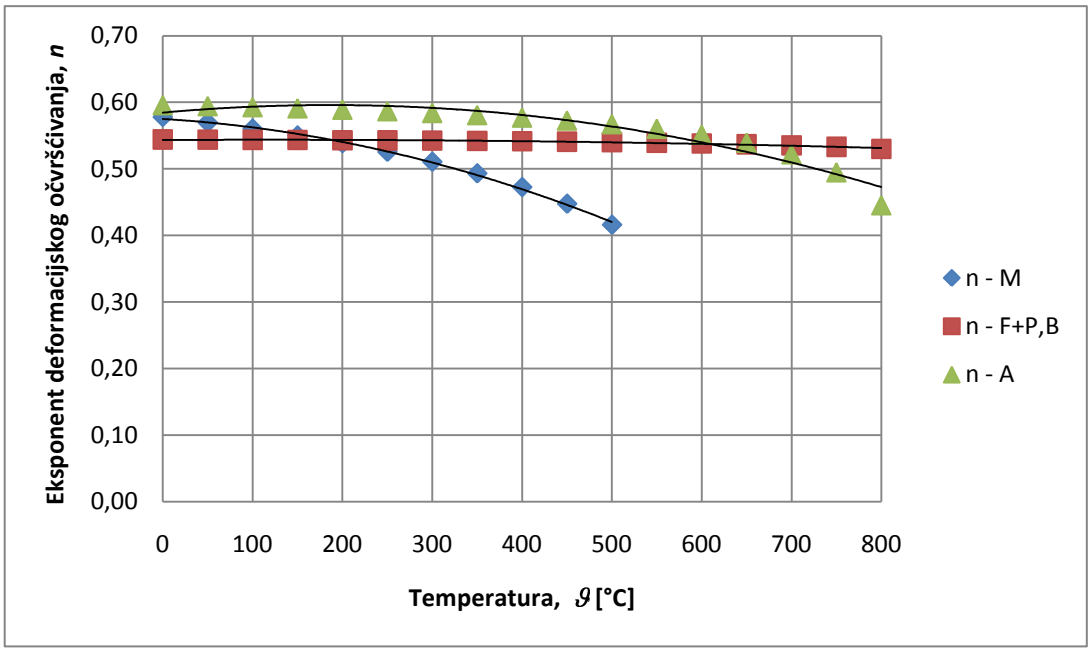
Izraz 4.9 može se napisati na način:

. (4.45)

Uz prethodno izračunatu vrijednost koeficijenta *K* te uz pretpostavku da granici razvlačenja odgovara deformacija u iznosu $\varepsilon = 0.002$, na temelju izraza 4.45 slijedi vrijednost eksponenta *n* definirana izrazom:

———. (4.46)

Na temelju izraza 4.46, izračunate su vrijednosti eksponenta *n* mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika koje su u ovisnosti o temperaturi grafički prikane na slici 4.11.



Sl. 4.11. Modelirana temperaturna ovisnost eksponenta deformacijskog očvršćivanja mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika

Na temelju podataka sa slike 4.11 dobivena je sljedeća temperaturna ovisnost eksponenta deformacijskog očvršćivanja pojednihih mikrokonstituenata čelika:

, (4.47)

, (4.48)

. (4.49)

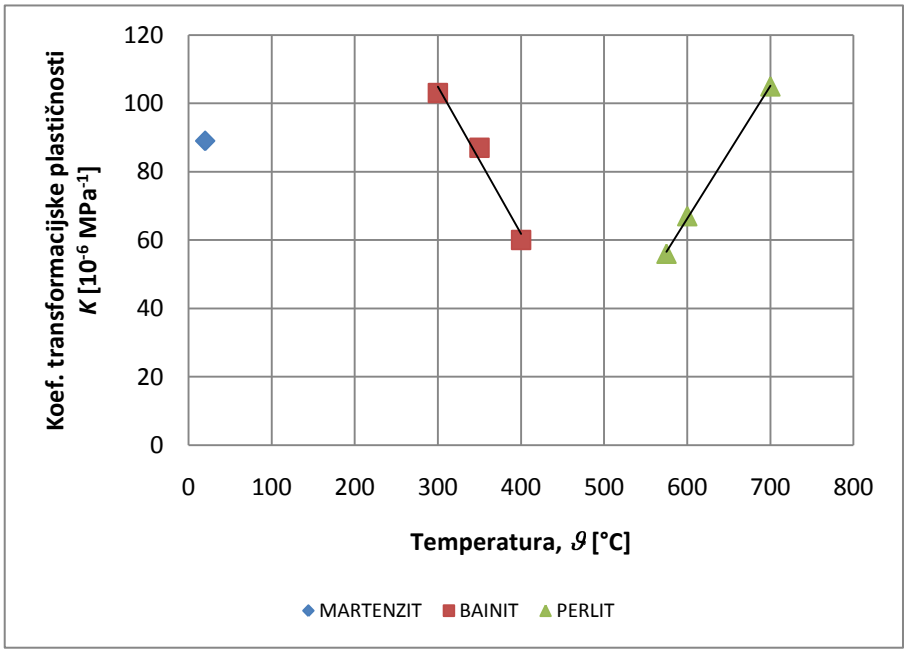
Na temelju navedenog može se uočiti da je temperaturna ovisnost parametara *K* i *n* najizrazitija kod martenzita koji s povećanjem temperature znatno gubi na čvrstoći, uz povećanje duktilnosti.

Uz poznatu temperaturnu ovisnost granice razvlačenja i modula plastičnosti, predloženom metodom može se odrediti temperaturna ovisnost parametara *K* i *n* bilo kojeg istraživanog čelika.

4.5.5. Utjecaj temperature na transformacijsku plastičnost

Kao što je već navedeno, vrijednost koeficijenta transformacijske plastičnosti *K* ovisi o temperaturi pretvorbe jer se s promjenom temperature mijenjaju vrijednosti konstante *k*, granice razvlačenja austenita te strukturne dilatacije uslijed pretvorbe austenita u sekundarne faze (izraz 4.18). Kao i u slučaju utjecaja vrste pretvorbe na vrijednost koeficijenta *K*, u literaturi nisu predloženi izrazi koji definiraju temperaturnu ovisnost koeficijenta *K*, već se mogu naći isključivo eksperimentalni podaci koji prikazuju tu ovisnost. Stoga, u nastavku su analizirani eksperimentalni podaci temperaturne ovisnosti koeficijenta *K* čelika 100Cr6 (DIN).

Na slici 4.12 prikazana je temperaturna ovisnost koeficijenta *K* mikrostrukturnih sastojaka čelika 100Cr6, dobivena pri dodatnom vlačnom opterećenju.



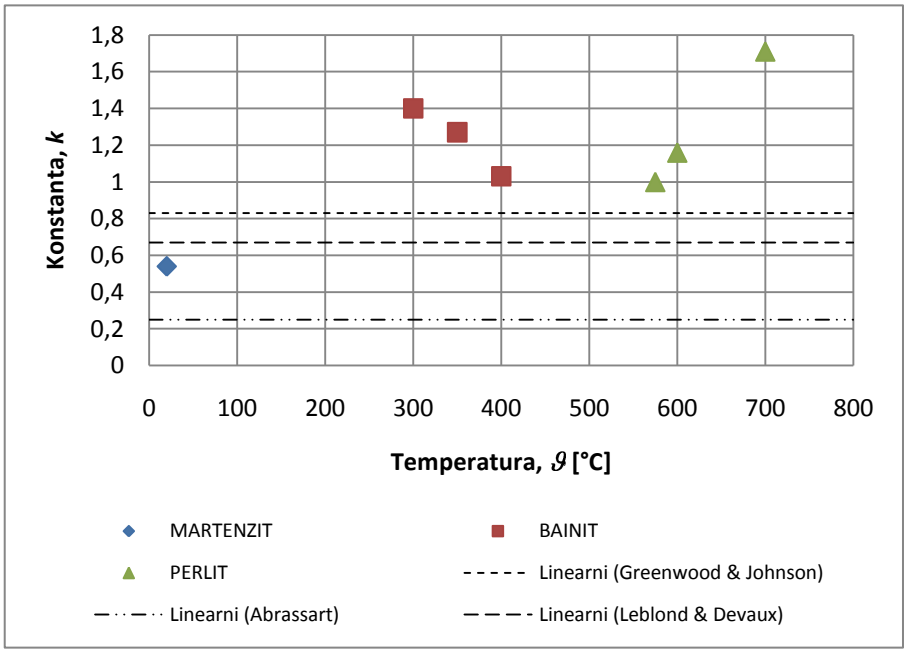
Sl. 4.12. Temperaturna ovisnost koeficijenta transformacijske plastičnosti čelika 100Cr6 [82]

Na slici je vidljivo smanjenje koeficijenta *K* sa snižavanjem temperature perlitne pretvorbe te povećanje koeficijenta *K* sa snižavanjem temperature bainitne pretvorbe. Može se pretpostaviti da ovi rezultati kvalitativno vrijede i kod drugih čelika. Na temelju slike 4.12 dobivena je sljedeća linearna temperaturna ovisnost koeficijenta transformacijske plastičnosti čelika 100Cr6:

, (4.50)

. (4.51)

Na slici 4.13 eksperimentalne vrijednosti konstante *k* uspoređene su s njezinim vrijednostima u izrazima za izračunavanje koeficijenta transformacijske plastičnosti (tablica 4.2).



Sl. 4.13. Usporedba vrijednosti konstante *k* [82]

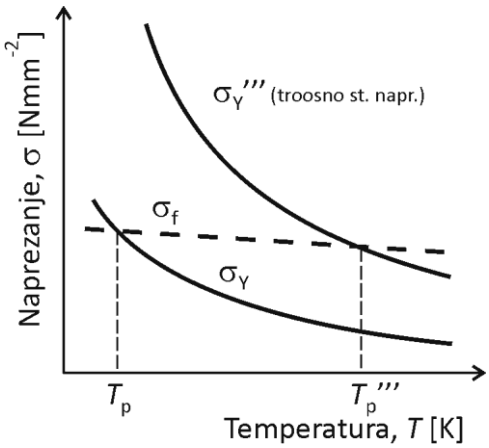
Na slici 4.13 mogu se uočiti velika odstupanja eksperimentalnih i modeliranih vrijednosti konstante *k* koja se mogu objasniti na način da u izrazima za izračunavanje koeficijenta *K* u obzir nije uzeta njegova ovisnost o vrsti pretvorbe te o temperaturi. Eksperimentalne vrijednosti konstante *k* više su u odnosu na modelirane; kod perlitne pretvorbe odstupanja rastu s porastom temperature, dok kod bainitne pretvorbe rastu s padom temperature. U slučaju martenzitne pretvorbe eksperimentalna vrijednost konstante *k* je niža.

4.5.6. Utjecaj temperature na svojstva loma

Kod metala s BCC kristalnom rešetkom, za razliku od granice razvlačenja čije vrijednosti rastu sa snižavanjem temperature, vrijednosti lomnog naprezanja ostaju gotovo konstantne

neovisno o temperaturi, zbog čega na nižim temperaturama dolazi do prijelaza iz duktilnog u krhki lom.

Na slici 4.14 shematski je prikazana temperaturna ovisnost lomnog naprezanja i stvarnog naprezanja pri kojem dolazi do tečenja u uvjetima jednoosnog vlačnog i troosnog stanja naprezanja. U slučaju troosnog stanja naprezanja, vrijednosti naprezanja σ_Y su veće, zbog čega raste vrijednost prijelazne temperature T_p.



Sl. 4.14 Shematski prikaz prijelaza iz duktilnog u krhki lom

5. Metode procjene tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika

5.1. Uvod

U procesu gašenja čelika, tvrdoća se smatra temeljnim mehaničkim svojstvom čelika. Ako je na određenoj temperaturi poznat udio mikrostrukturnih sastojaka čelika te njihova tvrdoća, ukupna tvrdoća čelika na toj temperaturi može se odrediti pomoću tzv. zakona mješavine. Na temelju izračunate tvrdoće čelika, moguće je predvidjeti vrijednosti drugih relevantnih mehaničkih svojstava u procesu gašenja.

Stoga, u sljedećim poglavljima prikazane su metode procjene tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika nastalih u izotermičkim uvjetima raspada austenita. U poglavlju 5.5. prikazana je metoda procjene tvrdoće čelika pri kontinuiranom ohlađivanju.

5.2. Procjena tvrdoće perlita

Budući da u literaturi nisu pronađeni relevantni eksperimentalni podaci koji se odnose na tvrdoću perlitne mikrostrukture, određivanje tvrdoće perlita temelji se na eksperimentalnim vrijednostima tvrdoće feritno-perlitne mikrostrukture, pri čemu je primijenjen zakon mješavine.

Pri postavljanju izraza za predviđanje tvrdoće perlita pretpostavljeno je da tvrdoća perlita ovisi o tvrdoći ferita te o tvrdoći koja proizlazi iz očvrsnuća metalne osnove (ferita) izdvajanjem sekundarne faze (cementita). Očvrsnuće izdvajanjem sekundarne faze može se pretpostaviti u obliku: $\Delta\mathrm{HV} = a_{0c0} + a_{1c0} \cdot c_0$, pri čemu je c_0 maseni udio ugljika u čeliku.

Granica razvlačenja pa tako i tvrdoća perlita povećava se proporcionalno drugom korijenu dimenzije lamela perlita. Uz pretpostavku da se lamela perlita smanjuje proporcionalno pothlađenju ispod ravnotežne temperature A_{e1}, može se pretpostaviti da je promjena tvrdoće uslijed smanjenja dimenzija lamela perlita proporcionalna drugom korijenu pothlađenja pretvorbe austenita u perlit. Također, s pothlađenjem dolazi i do promjene

udjela ugljika u perlitu, stoga se očvrsnuće perlita zbog pothlađenja ispod A_{e1} temperature može pretpostaviti u obliku: $\Delta HV = a_{0\Delta T} + a_{1\Delta T} \cdot c_0 \cdot \Delta T^{1/2}$

Općenito, na temelju navedenog može se pisati da je tvrdoća perlita funkcija udjela ugljika u čeliku i pothlađenja:

. (5.1)

Statističkom analizom eksperimentalnih rezultata može se utvrditi relevantnost pojedinih koeficijenata iz izraza 5.1.

Uz primjenu zakona mješavine, ukupna tvrdoća feritno-perlitne mikrostrukture, HV_{F+P}, može se pisati na način:

, (5.2)

pri čemu su X_F i HV_F volumni udio te tvrdoća ferita. Ako se pretpostavi da tvrdoća ferita ne ovisi o temperaturi nastanka ferita, izraz 5.2 može se pisati na način:

. (5.3)

Koeficijenti iz izraza 5.3 mogu se odrediti regresijskom analizom.

Usporedbom izraza 5.2 i 5.3 dobiveni su sljedeći izrazi kojima je definirana tvrdoća ferita te tvrdoća perlita: $HV_F = a_0 + a_1$ te $HV_P = a_0 + a_2 \cdot c_0 + a_3 \cdot c_0 \cdot \Delta T^{1/2}$.

U tablici 5.1 navedeni su eksperimentalni podaci korišteni pri postavljanju izraza za predviđanje tvrdoće perlita te ukupne tvrdoće feritno–perlitne mikrostrukture podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika.

Regresijskom analizom podataka iz tablice 5.1 dobiven je sljedeći izraz kojim je definirana ukupna tvrdoća feritno-perlitne mikrostrukture:

. (5.4)

iz čega proizlazi izraz za predviđanje tvrdoće perlita:

. (5.5)

Tab. 5.1. Vrijednosti tvrdoće feritno–perlitne mikrostrukture te udjela ferita i perlita za različite temperature izotermičke pretvorbe podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika

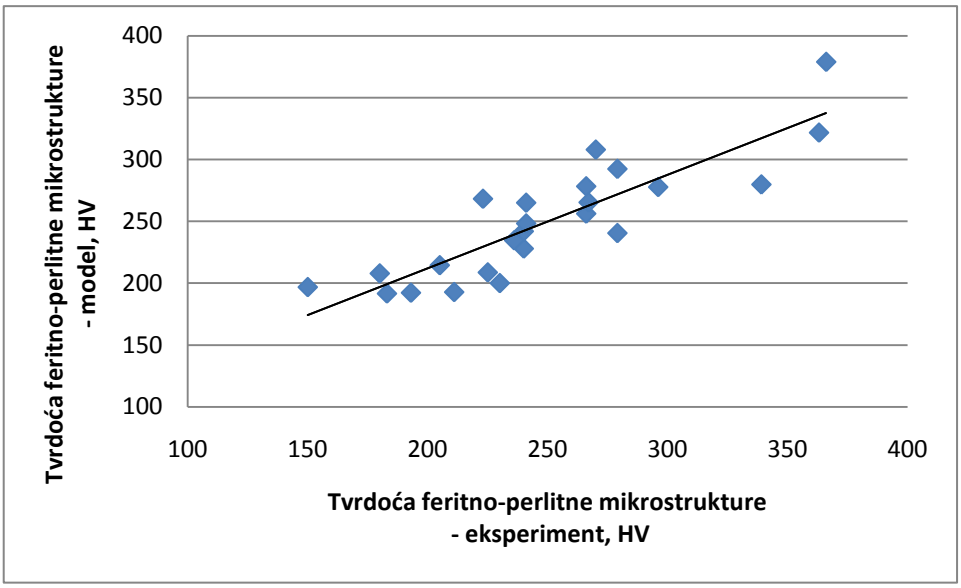
R. br. čelika	Tvrdoća feritno-perlitne mikrostrukture	Udio ferita	Udio perlita	Udio ugljika u čeliku	Temperatura izotermičke pretvorbe
	HV	%	%	%	°C
1.	266	0	100	0.43	705
2.	241	1	99	0.44	685
3.	150	60	40	0.22	675
4.	180	60	40	0.30	675
5.	205	30	70	0.30	670
6.	193	80	20	0.13	665
7.	183	70	30	0.16	665
8.	230	70	30	0.24	665
9.	279	5	95	0.36	665
10.	240	30	70	0.35	660
11.	223	5	95	0.44	660
12.	266	5	95	0.47	660
13.	279	2	98	0.50	655
14.	240	20	80	0.38	650
15.	339	7	93	0.47	645
16.	366	3	97	0.73	630
17.	267	15	85	0.43	615
18.	363	0	100	0.55	615
19.	211	70	30	0.16	610
20.	241	20	80	0.38	600
21.	225	75	25	0.30	550
22.	236	60	40	0.43	550
23.	296	15	85	0.44	545
24.	270	2	98	0.48	526

Vrijednost tvrdoće ferita, $HV_F \approx 200$, dobivena je viša od vrijednosti pretpostavljene na temelju teorijskih i literaturnih podataka, dok vrijednost 116.339 iz izraza 5.5 ima smisao hipotetske minimalne tvrdoće perlita bez doprinosa tvrdoće zbog pothlađenja pretvorbe ispod temperature A_{e1} i udjela ugljika u čeliku.

Treba imati u vidu da su izrazi 5.4 i 5.5 te veličine u njima dobivene statističkom analizom i mogu odstupati od realnih vrijednosti za istraživane čelike.

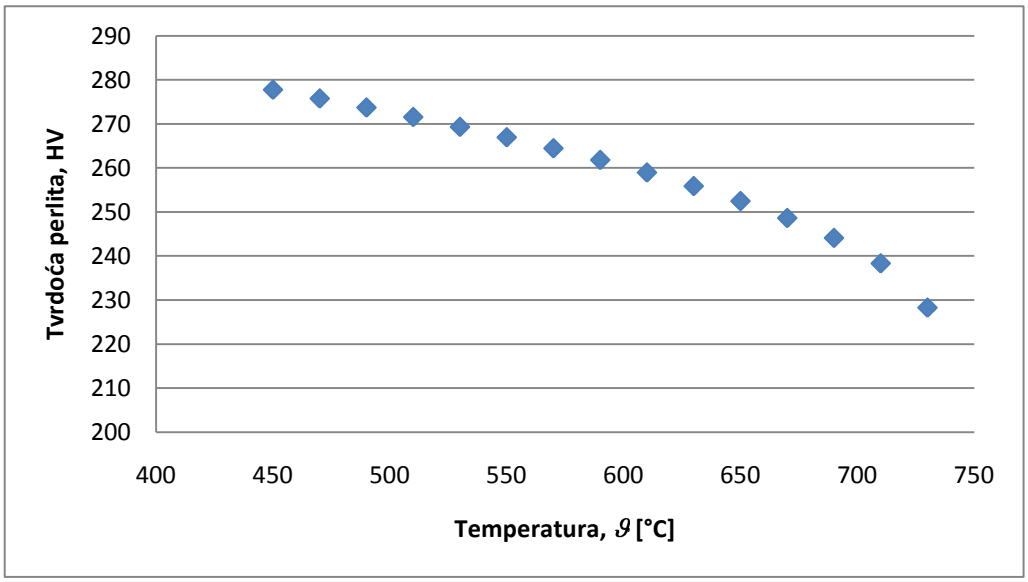
Na slici 5.1 prikazana je usporedba eksperimentalnih vrijednosti tvrdoće feritno-perlitne mikrostrukture (tablica 5.1) te vrijednosti tvrdoće dobivenih na temelju zakona mješavine (izraz 5.4). Na temelju slike može se zaključiti da se izračunate vrijednosti tvrdoće feritno-

perlitne mikrostrukture dobro poklapaju s eksperimentalnim vrijednostima (koeficijent korelacije: R=0.8694).



Sl. 5.1. Usporedba eksperimentalnih i izračunatih vrijednosti tvrdoće feritno-perlitne mikrostrukture podeutektoidnih čelika

Na slici 5.2 prikazane su vrijednosti tvrdoće perlita čelika 42CrMo4 koje su predviđene na temelju izraza 5.5.



Sl. 5.2. Rezultati predviđanja tvrdoće perlita čelika 42CrMo4

5.3. Procjena tvrdoće martenzita

Vrijednost tvrdoće martenzitne mikrostrukture je maksimalna moguća kod čelika određenog kemijskog sastava. U svrhu određivanja tvrdoće martenzita, u literaturi se najčešće koriste izrazi u kojima tvrdoća martenzita ovisi samo o udjelu ugljika u čeliku. Stoga, pri postavljanju izraza za predviđanje tvrdoće martenzita pretpostavljeno je da tvrdoća martenzita proizlazi iz očvrsnuća ferita intersticijskim atomima ugljika te da se može pisati u obliku:

. (5.6)

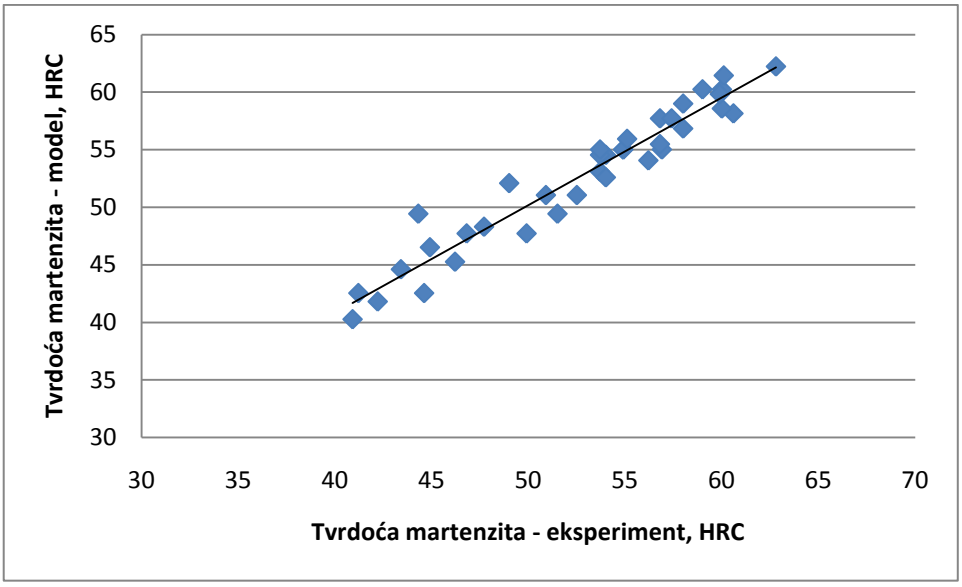
U tablici 5.2 navedeni su eksperimentalni podaci korišteni pri postavljanju izraza za predviđanje tvrdoće martenzitne mikrostrukture podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika.
Regresijskom analizom podataka iz tablice 5.2 dobiven je sljedeći izraz kojim je definirana tvrdoća martenzita podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika:

. (5.7)

Izraz 5.7 sličan je izrazu 4.22 koji se najčešće koristi za određivanje tvrdoće martenzita.
Na slici 5.3 prikazana je usporedba eksperimentalnih vrijednosti (tablica 5.2) i predviđenih vrijednosti tvrdoće martenzitne mikrostrukture (izraz 5.7). Na temelju slike može se zaključiti da se izračunate vrijednosti tvrdoće martenzitne mikrostrukture vrlo dobro poklapaju s eksperimentalnim vrijednostima (koeficijent korelacije: R=0.9665).

Tab. 5.2. Vrijednosti tvrdoće martenzitne mikrostrukture podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika

R. br. čelika	Oznaka čelika (DIN)	Udio ugljika u čeliku	Tvrdoća martenzitne mikrostrukture
		%	HRC
1.	Ck45	0.44	56.8
2.	37MnSi5	0.34	53.7
		0.38	56.9
3.	42MnV7	0.38	54.9
		0.45	60.6
4.	34Cr4	0.30	52.5
		0.37	54.0
5.	36Cr6	0.32	49.0
		0.36	56.2
6.	25CrMo4	0.22	44.9
		0.25	47.7
7.	34CrMo4	0.30	50.9
		0.37	53.7
8.	50CrMo4	0.46	60.0
		0.50	59.0
		0.50	60.0
9.	27MnCrV4	0.24	46.8
		0.24	49.9
		0.27	44.3
		0.27	51.5
		0.33	54.0
10.	42CrV6	0.42	58.0
11.	50CrV4	0.47	58.0
		0.49	59.9
		0.53	60.1
		0.55	62.8
12.	16MnCr5	0.16	41.2
		0.19	43.4
13.	15CrNi6	0.13	40.9
		0.16	44.6
14.	18CrNi8	0.15	42.2
		0.20	46.2
15.	42CrMo4	0.38	53.7
		0.38	54.9
		0.39	56.8
		0.40	55.1
		0.44	57.4



Sl. 5.3. Usporedba eksperimentalnih i izračunatih vrijednosti tvrdoće martenzitne mikrostrukture podeutektoidnih čelika

5.4. Procjena tvrdoće bainita

Pri postavljanju izraza za predviđanje tvrdoće bainita, pretpostavljeno je da tvrdoća bainita ovisi o očvrsnuću ferita izdvajanjem sekundarne faze (perlitni mehanizam očvrsnuća) te o očvrsnuću ferita intersticijskim atomima ugljika (martenzitni mehanizam očvrsnuća), pri čemu na višim temperaturama prevladava perlitni mehanizam, dok na nižim temperaturama prevladava martenzitni mehanizam očvrsnuća. Također, pretpostavljena je i temperaturna ovisnost pojedinog mehanizma očvrsnuća. Općenito, na temelju navedenog može se pisati da ukupna tvrdoća bainita iznosi:

$$\_ \qquad \_\_ \quad \_\_ \quad . \qquad (5.8)$$

U tablici 5.3 navedeni su eksperimentalni podaci korišteni pri postavljanju izraza za predviđanje tvrdoće bainita podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika.

Tab. 5.3. Vrijednosti tvrdoće bainita za različite temperature izotermičke pretvorbe podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika

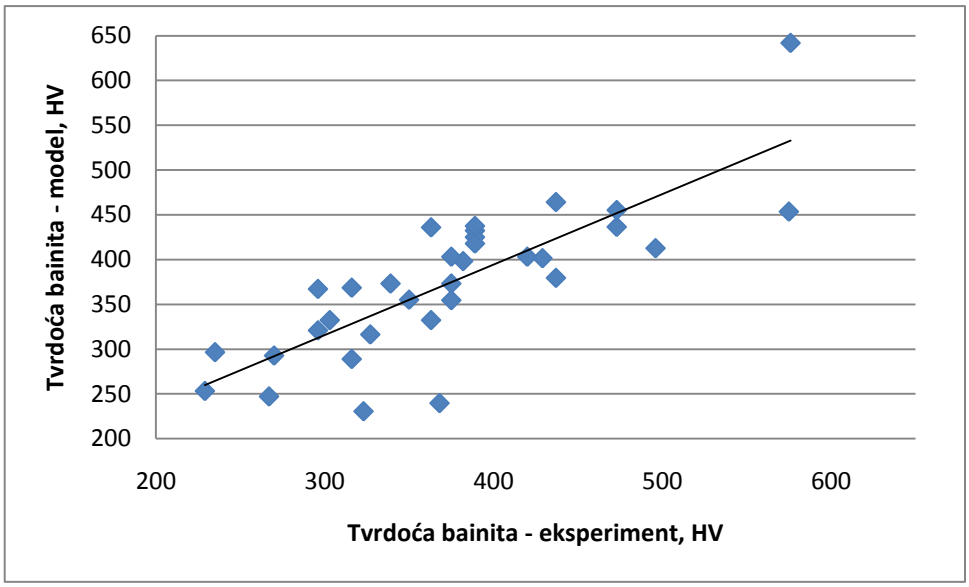
R. br. čelika	Oznaka čelika (DIN)	Udio ugljika u čeliku	Temperatura izotermičke pretvorbe	Tvrdoća bainitne mikrostrukture
		%	°C	HV
1.	Ck45	0.44	455	316
			400	420
2.	37MnSi5	0.38	400	375
3.	42MnV7	0.43	450	296
			400	382
			345	473
4.	34Cr4	0.35	472	296
			405	350
5.	41Cr4	0.44	400	375
6.	36Cr6	0.36	415	375
			372	437
7.	25CrMo4	0.22	405	316
8.	34CrMo4	0.30	478	235
			433	327
			400	363
9.	50CrMo4	0.50	400	389
10.	27MnCrV4	0.24	420	270
11.	42CrV6	0.44	386	496
			330	575
12.	50CrV4	0.55	425	363
			390	437
13.	50CrV4	0.47	390	389
14.	50CrV4	0.47	400	389
			350	473
15.	0.3 %C, 3 %Ni	0.30	400	303
16.	16MnCr5	0.16	460	368
17.	71Si7	0.73	310	576
18.	0.2 %C, 1.2 %Mn, 1 %Cu, 0.6 %Ni	0.20	475	229
19.	0.2 %C, 1 %Mn, 1 %Cu, 0.25 %Mo, 0.8 %Ni	0.19	480	267
20.	0.15 %C, 1.2 %Cr, 0.25 %Ni, 0.3 %V	0.15	475	323
21.	0.45 %C, 2 %Mn	0.48	380	389
22.	0.45 %C, 3.5 %Cr	0.43	395	429
23.	42CrMo4	0.38	400	339

Regresijskom analizom podataka iz tablice 5.3 dobiven je sljedeći izraz kojim je definirana tvrdoća bainita podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika:

$$\text{[illegible]} \quad , \qquad (5.9)$$

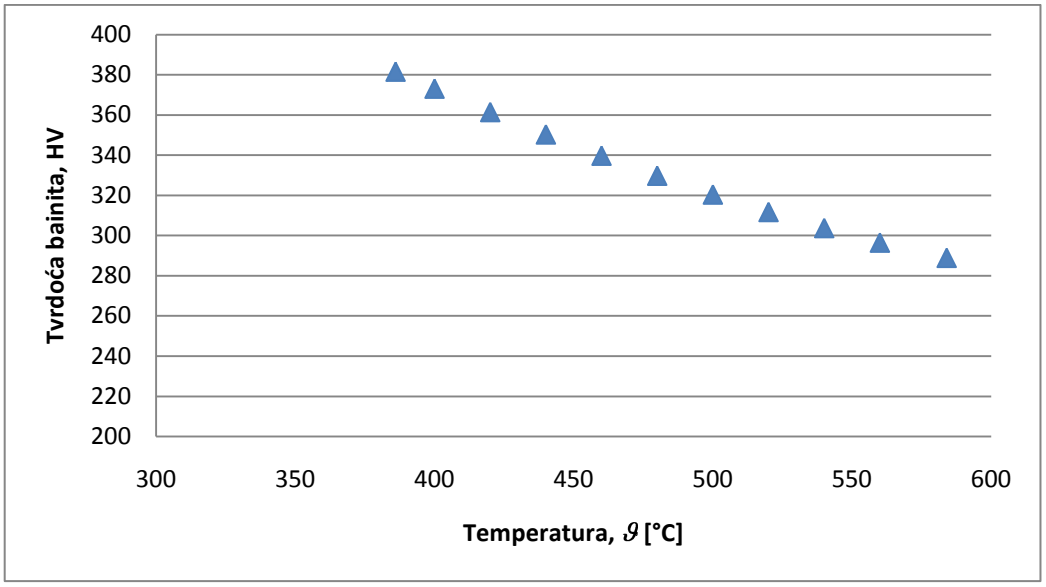
pri čemu je tvrdoća perlita definirana izrazom 5.5. Tvrdoća martenzita u HRC jedinicama definirana je izrazom 5.7, dok je tvrdoće martenzita u HV jedinicama dobivena konverzijom tvrdoće iz HRC u HV jedinice.

Na slici 5.4 prikazana je usporedba eksperimentalnih vrijednosti (tablica 5.3) i predviđenih vrijednosti tvrdoće bainitne mikrostrukture (izraz 5.9). Na temelju slike može se zaključiti da se izračunate vrijednosti tvrdoće bainitne mikrostrukture zadovoljavajuće dobro poklapaju s eksperimentalnim vrijednostima (koeficijent korelacije: R=0.7222).



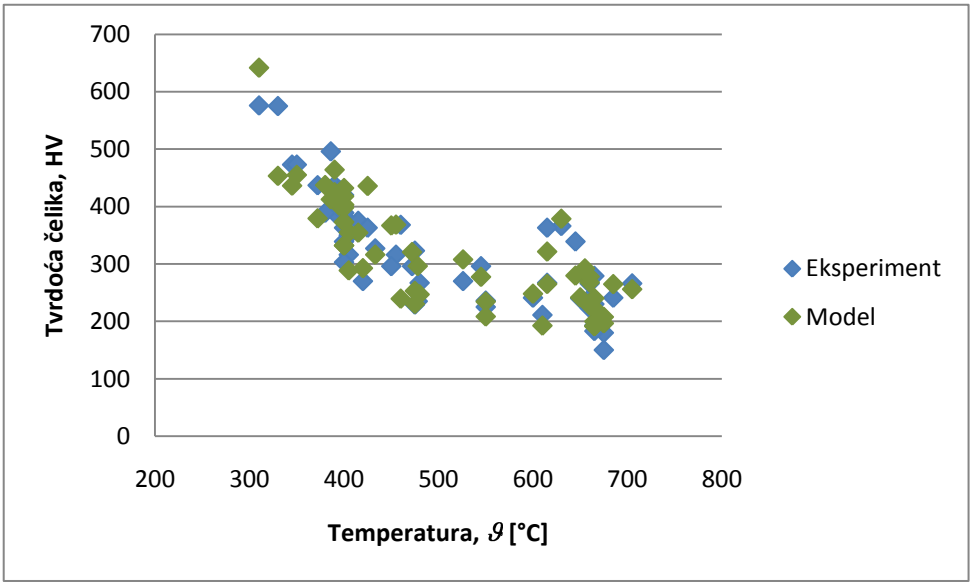
Sl. 5.4. Usporedba eksperimentalnih i izračunatih vrijednosti tvrdoće bainitne mikrostrukture podeutektoidnih čelika

Na slici 5.5 prikazane su vrijednosti tvrdoće bainita čelika 42CrMo4 koje su predviđene na temelju izraza 5.9.



Sl. 5.5. Rezultati predviđanja tvrdoće bainita čelika 42CrMo4

U ovisnosti o temperaturi izotermičke pretvorbe, na slici 5.6 prikazana je usporedba eksperimentalnih i predviđenih vrijednosti tvrdoće podeutektoidnih čelika iz tablice 5.1 i 5.3, koji su korišteni pri postavljanju izraza za procjenu tvrdoće perlita i bainita.



Sl. 5.6. Usporedba eksperimentalnih i predviđenih vrijednosti tvrdoće podeutektoidnih čelika u ovisnosti o temperaturi izotermičke pretvorbe

Na slici 5.6 može se uočiti dobro poklapanje predviđenih i eksperimentalnih vrijednosti tvrdoće podeutektoidnih čelika.

5.5. Procjena tvrdoće pri gašenju čelika

Ukupna tvrdoća mikrostrukture pri kontinuiranom ohlađivanju, poput gašenja čelika, može se odrediti na temelju sljedećeg izraza:

, (5.10)

pri čemu je volumni udio *i*-tog mikrostrukturnog sastojka nastao za vrijeme koraka ohlađivanja *N*, dok je tvrdoća *i*-tog mikrostrukturnog sastojka koja se na temperaturi koraka ohlađivanja *N* izračunava na temelju prethodno predloženih izraza: izraz 5.4 (feritno-perlitna mikrostruktura), izraz 5.5 (perlit), izraz 5.7 (martenzit), izraz 5.9 (bainit).

Također, pri predviđanju tvrdoće čelika u uvjetima kontinuiranog ohlađivanja, u obzir bi trebalo uzeti utjecaj temperature na vrijednosti tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika.

6. Računalna simulacija mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika

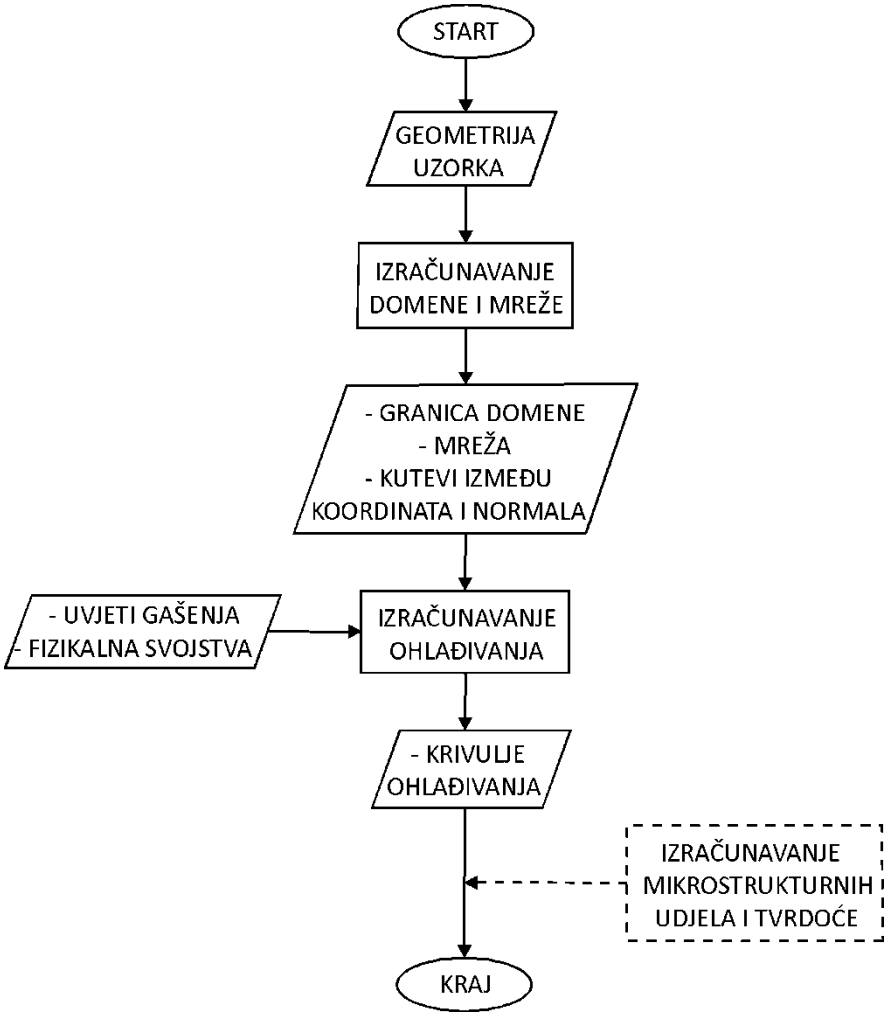
6.1. 3-D računalni program ohlađivanja čelika

U svrhu 3-D računalne simulacije ohlađivanja čelika, odnosno, 3-D računalne simulacije mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika, proširen je postojeći 2-D model ohlađivanja koji se vrlo uspješno koristi u 2-D računalnoj simulaciji tvrdoće nakon gašenja čelika. Računalni program ohlađivanja napisan je u programskom jeziku *Fortran Power Station 4.0*, a kao numerička metoda za rješavanje matematičkog modela ohlađivanja uzorka koristi se metoda konačnih volumena.

Na slici 6.1 shematski je prikazan računalni program ohlađivanja uzorka za vrijeme gašenja [83]. Računalna simulacija ohlađivanja uzorka započinje definiranjem prostorne domene i generiranjem mreže. Prostorna domena definira se pomoću AutoCAD datoteke u kojoj je nactrana baza uzorka za računalnu simulaciju. Gustoća mreže definira se ručno, zadavanjem stranica Δx i Δy konačnog volumena. Nakon definiranja domene i mreže, program generira mrežu pri čemu se baza uzorka diskretizira na konačne kvadrate. Stranica konačnog volumena Δz određuje se na temelju visine uzorka i broja volumena u smjeru osi z. Za sada, 3-D računalnom simulacijom ohlađivanja može se predviđati ohlađivanje osnosimetričnih valjkastih uzoraka čiji je promjer konstantan po visini uzorka.

U drugom dijelu računalne simulacije ohlađivanja, pri izračunavanju krivulja ohlađivanja (krivulja vrijeme – temperatura) u računskim točkama mreže, vremenska domena podijeljena je u niz diskretnih koraka Δt, dok se vrijeme ohlađivanja s temperature austenitizacije na specifičnu temperaturu u konkretnoj točki sustava određuje na temelju izraza [83]:

. (6.1)



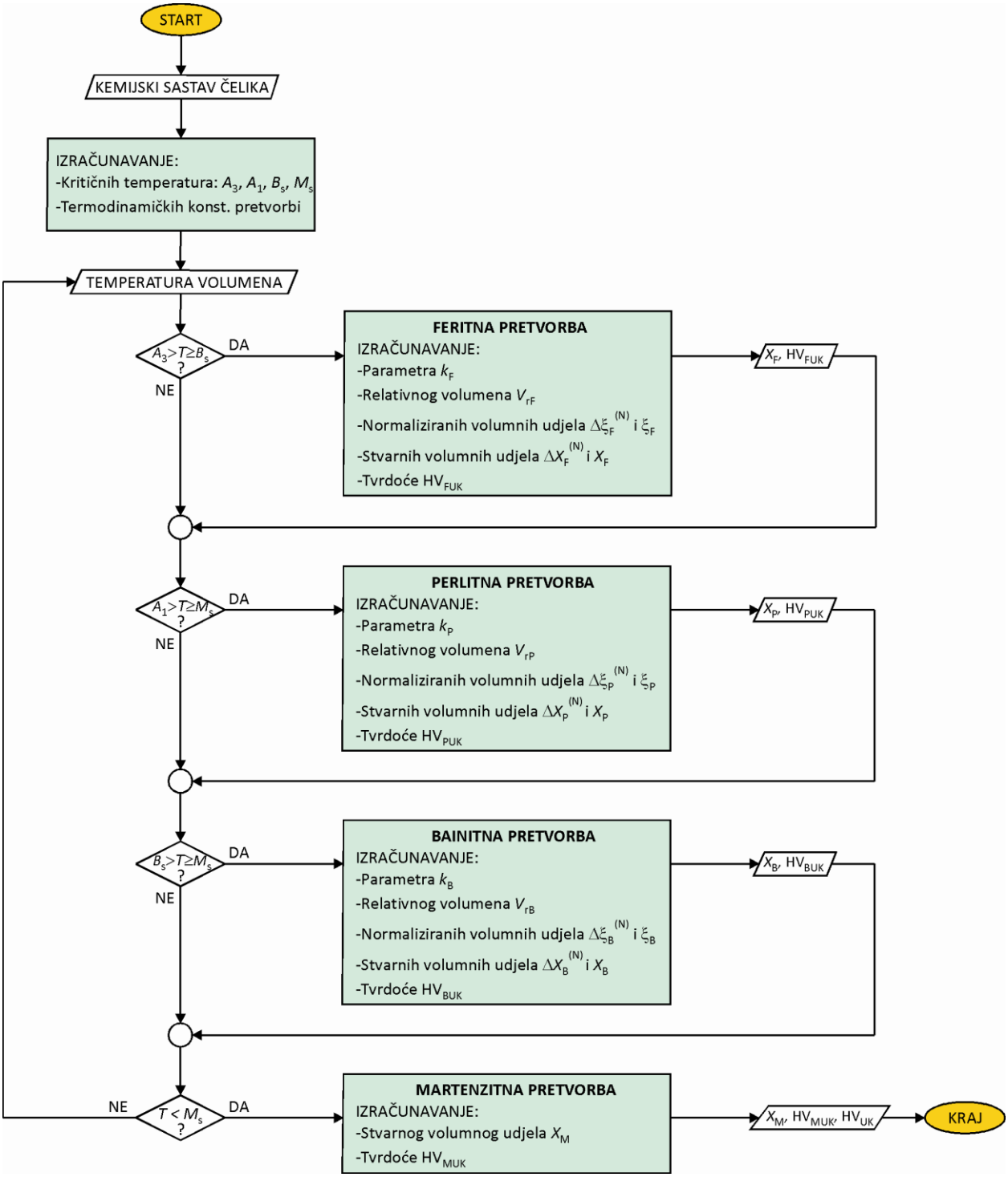
Sl. 6.1. Shematski prikaz računalnog programa ohlađivanja uzorka

6.2. Računalni program mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika

Razvijeni vlastiti računalni program mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika implementiran je u 3-D računalni program ohlađivanja (slika 6.1), čime je omogućena 3-D simulacija raspada austenita pri gašenju čelika.

Na slici 6.2 prikazan je simulacijski algoritam raspada austenita pri gašenju čelika.

Ispis računalnog programa mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika nalazi se u *Prilogu* doktorske disertacije.



Sl. 6.2. Simulacijski algoritam raspada austenita pri gašenju čelika

Računalni program mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika započinje izračunavanjem kritičnih temperatura raspada austenita u ferit, perlit, bainit i martenzit te

izračunavanjem vrijednosti termodinamičkih konstanti pretvorbi na temelju poznatog kemijskog sastava čelika (izrazi 3.60 do 3.70).

Temperaturna područja feritne, perlitne, bainitne i martenzitne pretvorbe u programu su definirana na sljedeći način. Ako u određenom koraku ohlađivanja uzorka s temperature austenitizacije temperatura volumena, T, iznosi $A_3 > T \geq B_s$, dolazi do feritne pretvorbe te se za tu temperaturu (korak ohlađivanja N) izračunavaju: vrijednost kinetičkog parametra k_F (izraz 3.15), vrijednost relativnog volumena V_{rF} (izrazi 3.16 i 3.17) te vrijednost normiranog volumnog udjela ferita nastalog za vrijeme koraka ohlađivanja N, $\Delta\xi_F^{(N)}$ (izraz 3.28). Vrijednost ukupnog normiranog volumnog udjela ferita nastalog u N koraka ohlađivanja izračunava se iz izraza:

. (6.2)

Vrijednost stvarnog volumnog udjela ferita nastalog za vrijeme koraka ohlađivanja N iznosi:

, (6.3)

dok je vrijednost ukupnog stvarnog volumnog udjela ferita nastalog u N koraka ohlađivanja definirana izrazom:

. (6.4)

Također, uz pretpostavku da tvrdoća ferita ne ovisi o temperaturi nastanka ferita, već je konstantna, na kraju feritne pretvorbe program računa ukupnu vrijednost tvrdoće ferita definiranu izrazom:

, (6.5)

pri čemu tvrdoća ferita HV_F iznosi 200, dok je X_F volumni udio ferita nastao za vrijeme feritne pretvorbe.

U slučaju da u određenom koraku ohlađivanja temperatura volumena iznosi $A_1 > T \geq M_s$, dolazi do perlitne pretvorbe za koju se izračunavaju: vrijednost kinetičkog parametra k_P (izraz 3.48), vrijednost relativnog volumena V_{rP} (V_{rP}=1-V_{rF} za $A_1>T\geq B_s$ te V_{rP}=1-V_{rB} za $T<B_s$) te vrijednost normiranog volumnog udjela perlita nastalog za vrijeme koraka ohlađivanja N,

$\Delta\xi_P^{(N)}$ (izraz 3.59). Vrijednost ukupnog normiranog volumnog udjela perlita nastalog u N koraka ohlađivanja definirana je izrazom:

. (6.6)

Vrijednost stvarnog volumnog udjela perlita nastalog za vrijeme koraka ohlađivanja N iznosi:

, (6.7)

dok je vrijednost ukupnog stvarnog volumnog udjela perlita nastalog u N koraka ohlađivanja definirana izrazom:

. (6.8)

Također, za vrijeme perlitne pretvorbe, u svakom koraku ohlađivanja program računa tvrdoću perlita HV_P (izraz 5.5), dok je ukupna vrijednost tvrdoće perlita na kraju perlitne pretvorbe definirana izrazom:

. (6.9)

Ako u određenom koraku ohlađivanja temperatura volumena iznosi $B_s > T \geq M_s$, dolazi do bainitne pretvorbe te se izračunavaju: vrijednost kinetičkog parametra k_B (izraz 3.41), vrijednost relativnog volumena V_{rB} (izraz 3.40) te vrijednost normiranog volumnog udjela bainita nastalog za vrijeme koraka ohlađivanja N, $\Delta\xi_B^{(N)}$ (izraz 3.44). Vrijednost ukupnog normiranog volumnog udjela bainita nastalog u N koraka ohlađivanja definirana je izrazom:

. (6.10)

Uz normirane volumne udjele, za vrijeme bainitne pretvorbe izračunava se i vrijednost stvarnog volumnog udjela bainita nastalog za vrijeme koraka ohlađivanja N (izraz 6.19), $\Delta X_B^{(N)}$, te vrijednost ukupnog stvarnog volumnog udjela bainita nastalog u N koraka ohlađivanja definirana izrazom:

. (6.11)

Također, za vrijeme bainitne pretvorbe, u svakom koraku ohlađivanja program računa tvrdoću bainita HV_B (izraz 5.9), dok je ukupna vrijednost tvrdoće bainita na kraju bainitne pretvorbe definirana izrazom:

. (6.12)

Kada u određenom koraku ohlađivanja temperatura volumena padne ispod M_s temperature, dolazi do martenzitne pretvorbe. Uz pretpostavku da se pri gašenju čelika pothlađeni austenit u potpunosti raspadne u sekundarne faze, vrijednost volumnog udjela martenzita na kraju martenzitne pretvorbe izračunava se na temelju prethodno izračunatih ukupnih stvarnih volumnih udjela ferita, perlita i bainita:

. (6.13)

Ukupna vrijednost tvrdoće martenzita na kraju martenzitne pretvorbe definirana je izrazom:

, (6.14)

pri čemu je tvrdoće martenzita u HV jedinicama dobivena konverzijom tvrdoće iz HRC u HV jedinice. Tvrdoća martenzita u HRC jedinicama definirana je izrazom 5.7.
Ukupna tvrdoća mikrostrukture nakon gašenja čelika iznosi:

. (6.15)

6.3. Specifičnosti metode predviđanja mikrostrukturnih pretvorbi pri gašenju čelika

Specifičnosti metode predviđanja mikrostrukturnih pretvorbi pri gašenju čelika, u odnosu na metodu predviđanja u izotermičkim uvjetima, proizlaze iz različite temperature pretvorbe u svakom koraku ohlađivanja.
U slučaju feritne pretvorbe, kao što je prethodno navedeno, vrijednost normiranog volumnog udjela ferita nastalog za vrijeme koraka ohlađivanja N, $\Delta\xi_F^{(N)}$, izračunava se iz

izraza 3.28, pri čemu vrijednost normiranog volumnog udjela ferita nastalog u prethodnih *N*-1 koraka ohlađivanja iznosi:

———. (6.16)

U izrazu 6.16 $X_F^{(N-1)}$ je stvarni volumni udio ferita nastao u prethodnih *N*-1 koraka ohlađivanja, dok je V_{rF} relativni volumen ferita u koraku ohlađivanja *N*.

Kada vrijednost ukupnog stvarnog volumnog udjela ferita u koraku ohlađivanja *N* (izraz 6.4), $X_F^{(N)}$, postane jednaka ili veća od vrijednosti relativnog volumena V_{rF} za tu temperaturu, feritna pretvorba se prekida, a ukupni stvarni volumni udio ferita nastao za vrijeme feritne pretvorbe iznosi: $X_F = V_{rF}$.

Kao što je već prethodno navedeno, kod perlitne pretvorbe vrijednost relativnog volumena V_{rP} iznosi $V_{rP} = 1 - V_{rF}$ za $A_1 > T \geq B_s$ te $V_{rP} = 1 - V_{rB}$ za $T < B_s$. Ukoliko na temperaturi $A_1 > T \geq B_s$ više ne dolazi do feritne pretvorbe ($V_{rF} < X_F^{(N)}$), relativni volumen perlita iznosi $V_{rP} = 1 - X_F$.

Vrijednost normiranog volumnog udjela perlita nastalog u prethodnih *N*-1 koraka ohlađivanja iznosi:

———, (6.17)

pri čemu je $X_P^{(N-1)}$ stvarni volumni udio perlita nastao u prethodnih *N*-1 koraka ohlađivanja, dok je V_{rP} relativni volumen perlita u koraku ohlađivanja *N*.

Kada vrijednost ukupnog stvarnog volumnog udjela perlita u koraku ohlađivanja *N* (izraz 6.8), $X_P^{(N)}$, postane jednaka ili veća od vrijednosti relativnog volumena V_{rP} za tu temperaturu, perlitna pretvorba se prekida, a ukupni stvarni volumni udio perlita nastao za vrijeme perlitne pretvorbe iznosi: $X_P = V_{rP}$.

Budući da do bainitne pretvorbe dolazi u preostalom pothlađenom austenitu koji se prethodno nije raspao u ferit, ova činjenica mora se uzeti u obzir pri izračunavanju volumnih udjela bainita. Stoga, vrijednost normiranog volumnog udjela bainita nastalog u prethodnih *N*-1 koraka ohlađivanja definirana je izrazom:

————, (6.18)

pri čemu je $X_B^{(N-1)}$ stvarni volumni udio bainita nastao u prethodnih N-1 koraka ohlađivanja, V_{rB} relativni volumen bainita u koraku ohlađivanja N, dok je X_F ukupni stvarni volumni udio ferita nastao za vrijeme feritne pretvorbe.

Vrijednost stvarnog volumnog udjela bainita nastalog za vrijeme koraka ohlađivanja N definirana je izrazom:

. (6.19)

Kada vrijednost ukupnog stvarnog volumnog udjela bainita u koraku ohlađivanja N (izraz 6.11), $X_B^{(N)}$, postane jednaka ili veća od umnoška $V_{rB}\cdot(1-X_F)$ za tu temperaturu, bainitna pretvorba se prekida.

6.4. 3-D računalna simulacija mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika

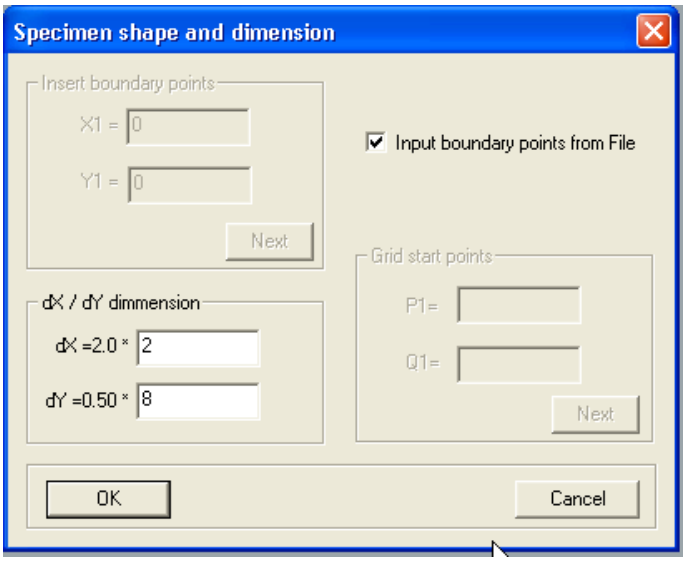
Za računalnu simulaciju mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika odabran je srednje-ugljični, nisko-legirani čelik za poboljšanje 42CrMo4 (DIN), kemijskog sastava prikazanog u tablici 6.1. Navedeni kemijski sastav odgovara kemijskom sastavu šipke iz koje je izrađen uzorak za eksperimentalnu verifikaciju rezultata računalne simulacije. Kemijski sastav šipke analiziran je na optičkom emisijskom spektrometru GDS500A, sa sustavom pobude pomoću tinjajućeg izboja.

Tab. 6.1. Kemijski sastav čelika 42CrMo4

Maseni udio kemijskog elementa, %									
C	Si	Mn	P	S	Cr	Cu	Mo	Ni	V
0.42	0.31	0.63	0.018	0.026	0.97	0.28	0.16	0.21	0.008

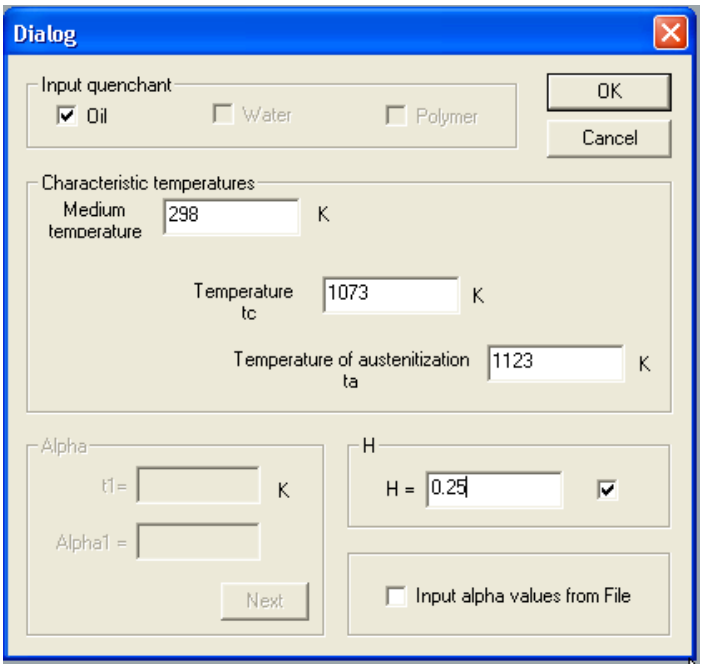
3-D računalna simulacija mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika započinje definiranjem prostorne domene te generiranjem mreže. Za računalnu simulaciju odabran je osnosimetričan valjkasti uzorak dimenzija ϕ 98 $\times$ 98 mm (slika 6.8), mreža 1 $\times$ 1 mm, dok

vrijeme koraka ohlađivanja iznosi 0.5 s. Na slici 6.3 prikazano je korisničko sučelje programa za zadavanje gustoće mreže.



Sl. 6.3. Korisničko sučelje programa za zadavanje gustoće mreže

Na slici 6.4 prikazano je korisničko sučelje programa za zadavanje parametara gašenja. Pri računalnoj simulaciji gašenja čelika primijenjeni su sljedeći parametri procesa: sredstvo za gašenje (ulje), intenzivnost sredstva za gašenje (H = 0.25), temperatura austenitizacije (T_a = 1123 K) te temperatura sredstva za gašenje (T_f = 298 K).



Sl. 6.4. Korisničko sučelje programa za zadavanje parametara gašenja

6.5. Eksperimentalna verifikacija rezultata računalne simulacije

Za verifikaciju rezultata računalne simulacije mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika korišten je osnosimetričan valjkasti pokusni uzorak čiji kemijski sastav (tablica 6.1) te geometrija (ϕ 98 $\times$ 98 mm) odgovaraju uzorku iz računalne simulacije.

U skladu s parametrima gašenja iz računalne simulacije, pri kaljenju pokusnog uzorka primijenjeni su parametri procesa prikazani u tablici 6.2. Pokusni uzorak ugrijavan je u jamskoj električnoj peći, dok je vrijeme držanja uzorka na temperaturi austenitizacije određeno iz izraza [84]:

–. (6.20)

pri čemu je *D* promjer uzorka.

Tab. 6.2. Parametri postupka kaljenja pokusnog uzorka

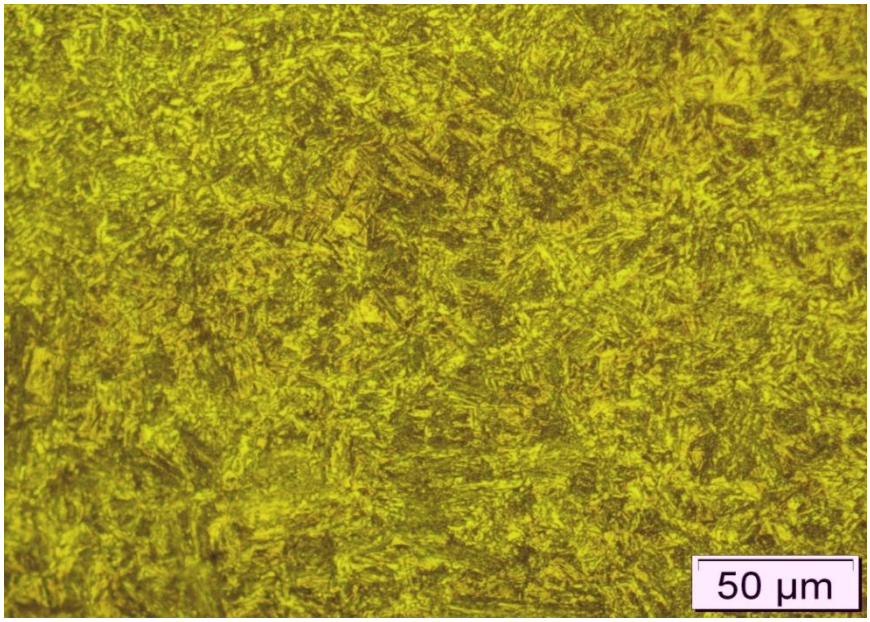
Parametri postupka kaljenja			
Vrijeme ugrijavanja t_{ugr} [min]	Vrijeme držanja $t_{drž}$ [min]	Temperatura austenitizacije ϑ_a [°C]	Intenzivnost ulja za gašenje (mirno ulje) H
68	70	850	0.25

6.5.1. Metalografska analiza pokusnog uzorka

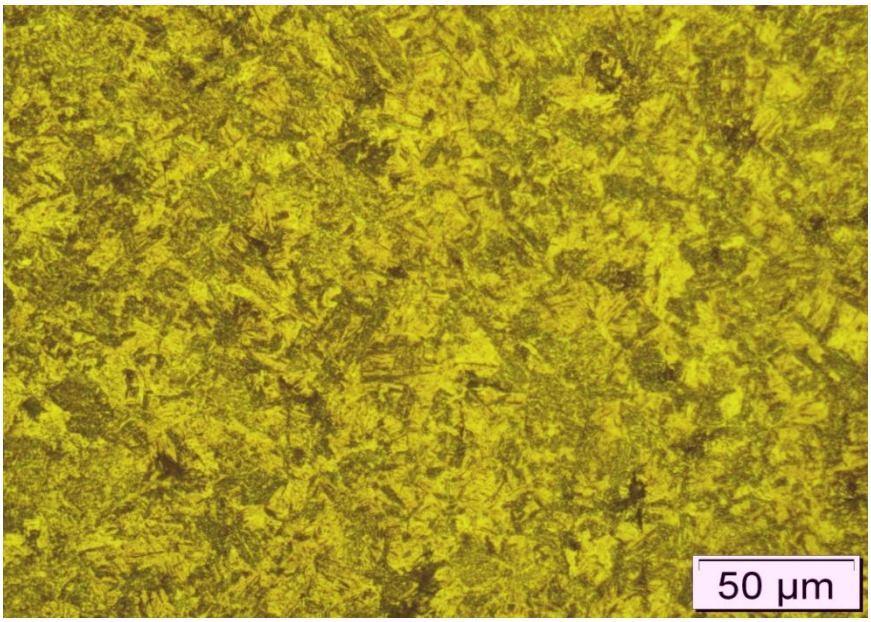
Mikrostruktura pokusnog uzorka nakon gašenja ispitivana je metalografskom analizom. Na slikama 6.5 i 6.6 prikazane su mikrostrukture površine i jezgre središnjeg poprečnog presjeka pokusnog uzorka.

Mikrostruktura površine (pozicija 10 na slici 6.7) pokusnog uzorka čelika 42CrMo4 nakon gašenja sastoji se od bainita i martenzita sljedećih volumnih udjela: $\boldsymbol{X_B \approx 7\ \%}$ te $\boldsymbol{X_M \approx 93\ \%}$.

Mikrostruktura jezgre (pozicija 1 na slici 6.7) pokusnog uzorka čelika 42CrMo4 nakon gašenja sastoji se od ferita, perlita, bainita i martenzita sljedećih volumnih udjela: $\boldsymbol{X_F \approx 7\ \%}$, $\boldsymbol{X_P \approx 3\ \%}$, $\boldsymbol{X_B \approx 53\ \%}$ te $\boldsymbol{X_M \approx 37\ \%}$.



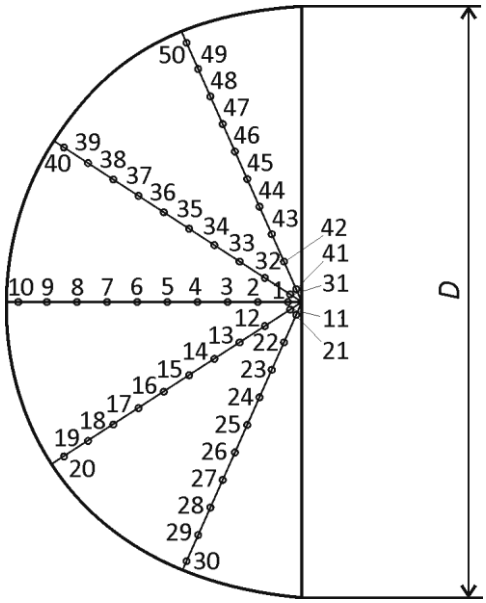
Sl. 6.5. Mikrostruktura površine pokusnog uzorka čelika 42CrMo4 nakon gašenja, nagrizano 3 %-tnom HNO_3 u alkoholu, povećanje 500:1



Sl. 6.6. Mikrostruktura jezgre pokusnog uzorka čelika 42CrMo4 nakon gašenja, nagrizano 3 %-tnom HNO_3 u alkoholu, povećanje 500:1

6.5.2. Ispitivanje tvrdoće

Shematski prikaz pozicija ispitivanja tvrdoće po središnjem poprečnom presjeku pokusnog uzorka prikazan je na slici 6.7, dok su njima pripadajući rezultati ispitivanja tvrdoće prikazani u tablici 6.3. U bazama valjkastog pokusnog uzorka izmjerena je tvrdoća od 53 HRC (sredina) do 55 HRC (rub).



Sl. 6.7. Shematski prikaz pozicija ispitivanja tvrdoće

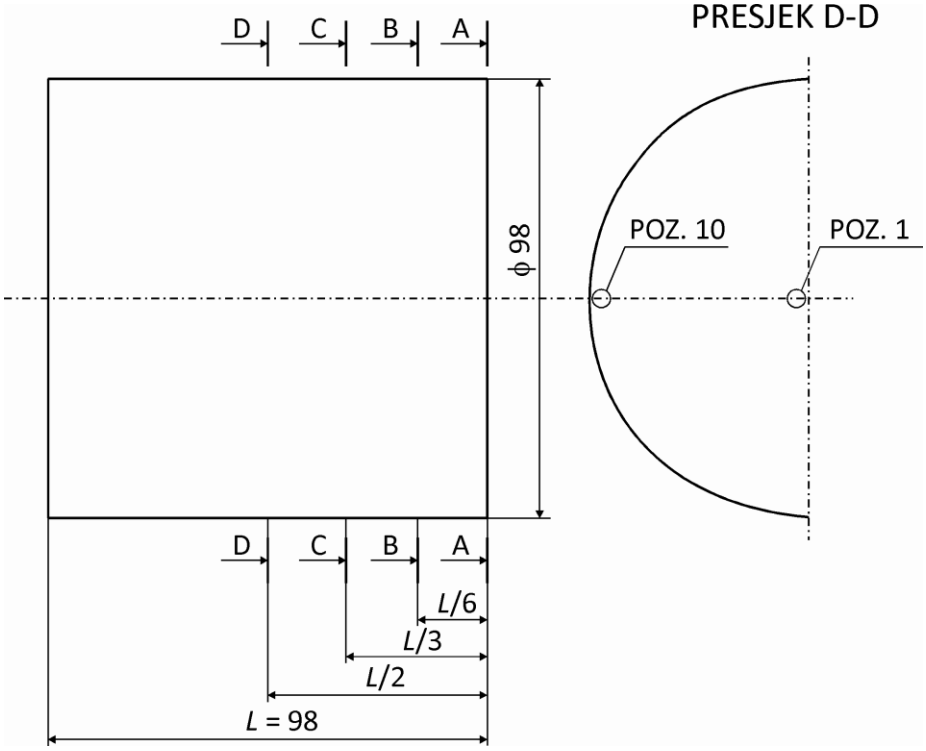
6.6. Rezultati i analiza rezultata računalne simulacije mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika

Na slici 6.8 prikazana je geometrija uzorka za računalnu simulaciju te su definirana četiri poprečna presjeka odabrana za prikaz i analizu rezultata računalne simulacije. Pozicije 1 i 10 na slici 6.8 odgovaraju pozicijama 1 i 10 na slici 6.7.

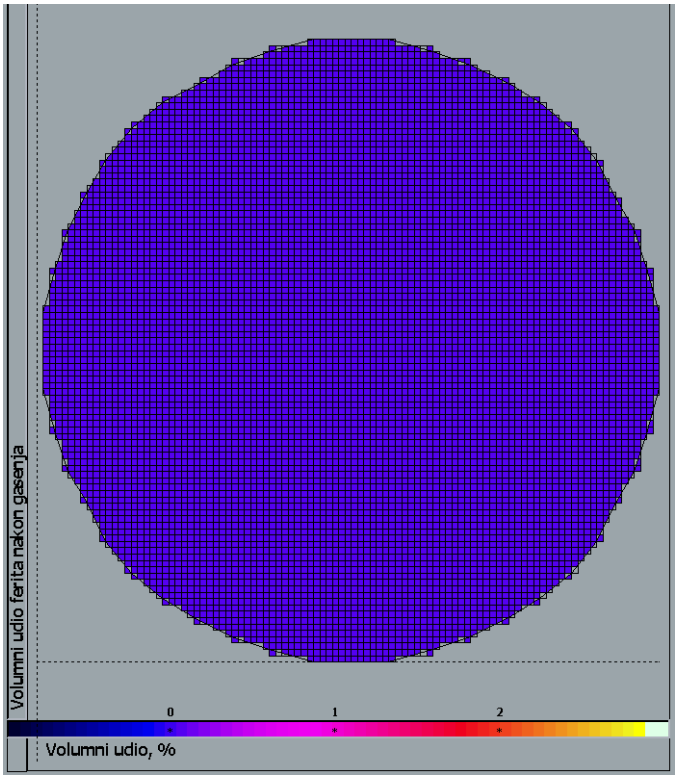
Na slikama 6.9 i 6.10 prikazane su predviđene vrijednosti volumnog udjela ferita nakon gašenja u četiri različita poprečna presjeka uzorka, dok su na slikama 6.11, 6.12, 6.13, 6.14, 6.15 te 6.16 prikazane predviđene vrijednosti volumnih udjela perlita, bainita te martenzita u tim presjecima. Na navedenim slikama, svakoj boji odgovara određena vrijednost volumnog udjela mikrostrukturnog sastojka u konačnom volumenu uzorka, koja se može odrediti pomoću pripadajuće skale boje.

Tab. 6.3. Tvrdoća pokusnog uzorka čelika 42CrMo4 nakon gašenja

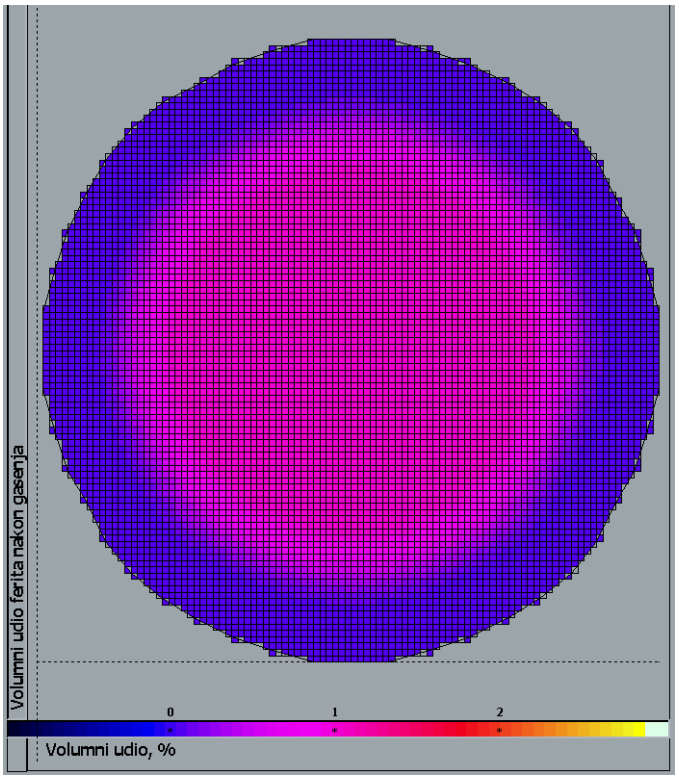
Pozicija ispitivanja		Pozicija ispitivanja		Pozicija ispitivanja	
Broj	Tvrdoća, HRC	Broj	Tvrdoća, HRC	Broj	Tvrdoća, HRC
1	38.5	18	42.8	35	42.4
2	41.0	19	46.5	36	41.5
3	39.8	20	48.3	37	41.5
4	40.5	21	38.1	38	42.0
5	41.3	22	39.0	39	44.8
6	43.8	23	39.1	40	49.3
7	42.2	24	41.6	41	39.4
8	41.5	25	40.8	42	41.5
9	46.0	26	42.0	43	40.7
10	49.0	27	42.5	44	45.0
11	41.2	28	43.7	45	44.8
12	40.5	29	45.0	46	43.5
13	43.0	30	48.5	47	41.8
14	41.0	31	41.0	48	42.1
15	44.0	32	41.0	49	44.5
16	42.3	33	41.0	50	49.3
17	43.0	34	40.3		



Sl. 6.8. Uzorak za računalnu simulaciju

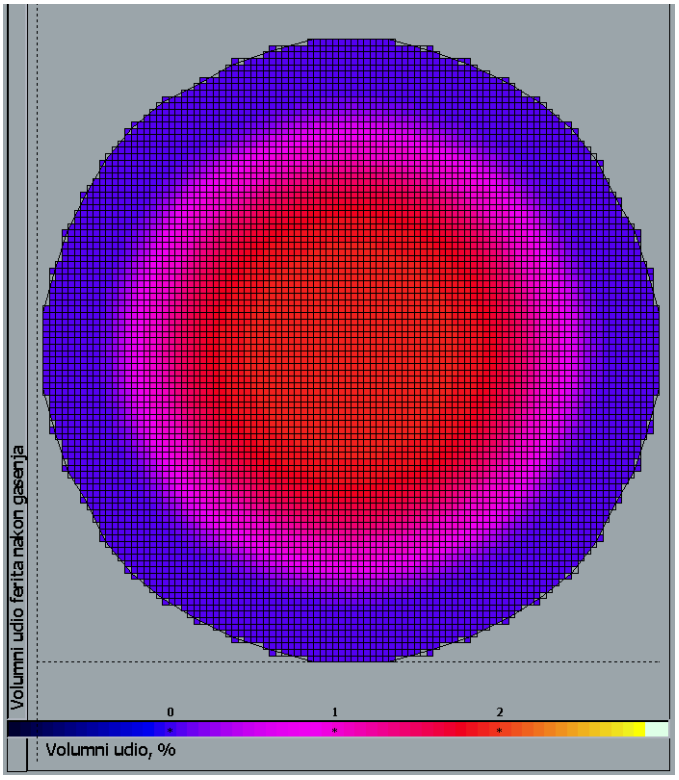


a

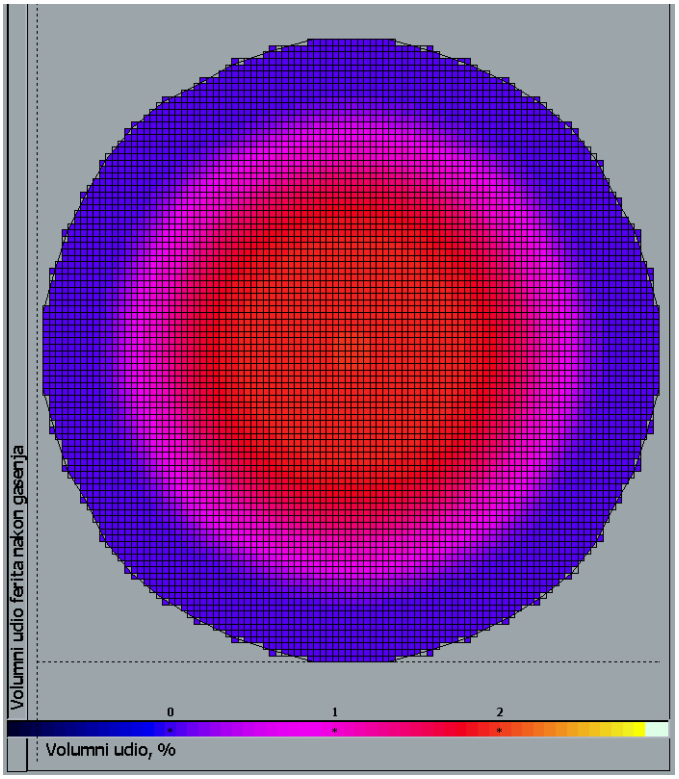


b

Sl. 6.9. Raspodjela volumnih udjela ferita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)

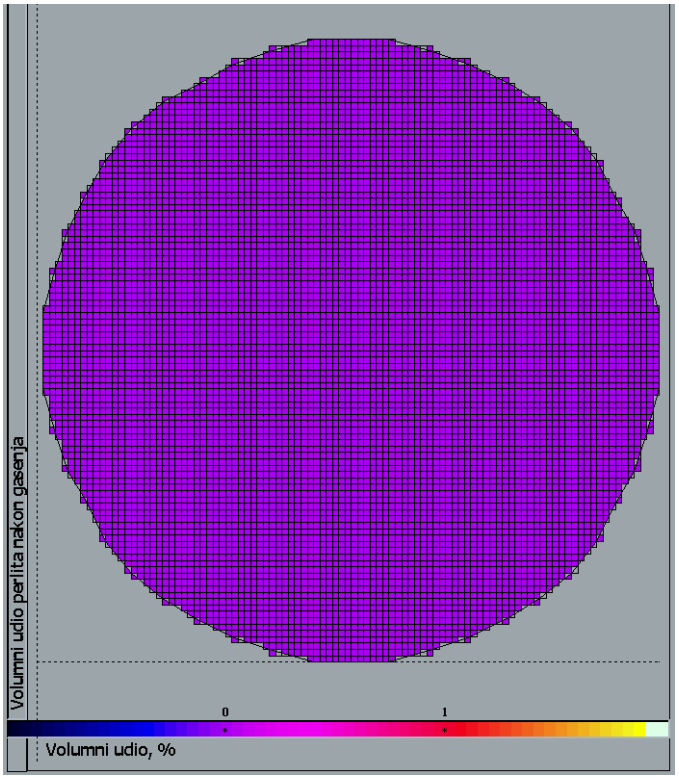


a

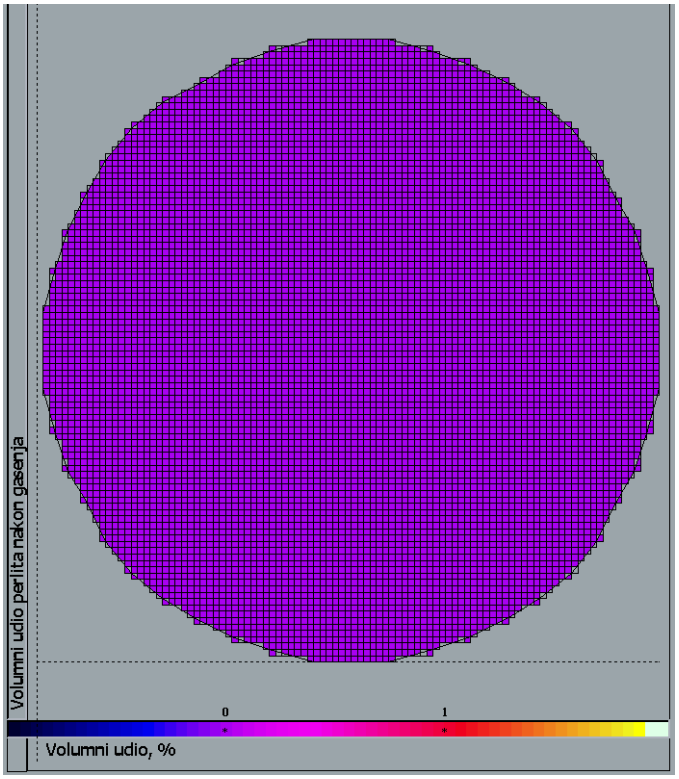


b

Sl. 6.10. Raspodjela volumnih udjela ferita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)

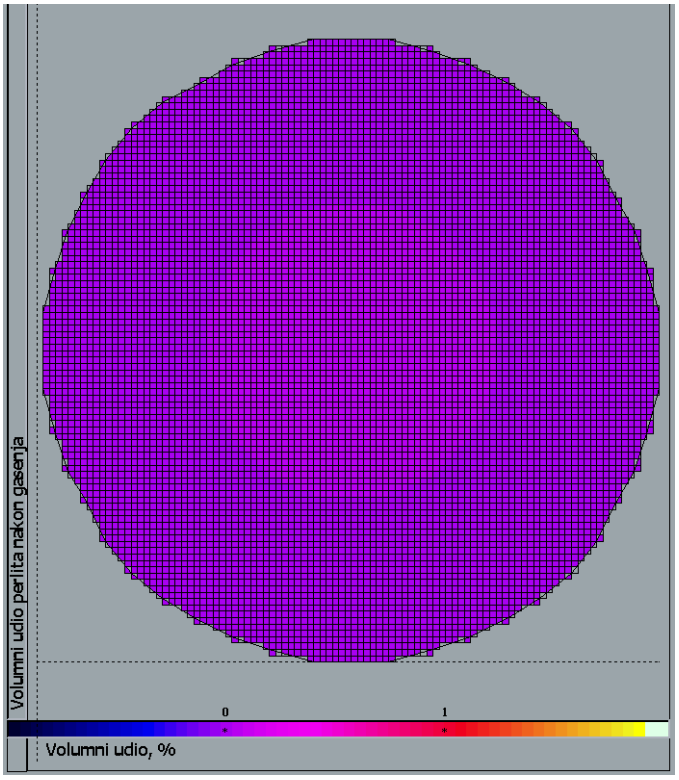


a

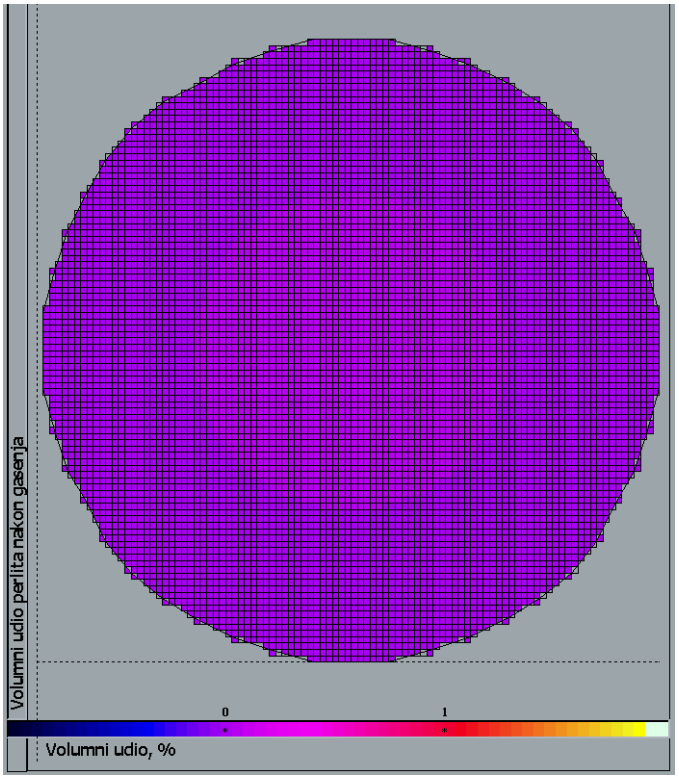


b

Sl. 6.11. Raspodjela volumnih udjela perlita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)

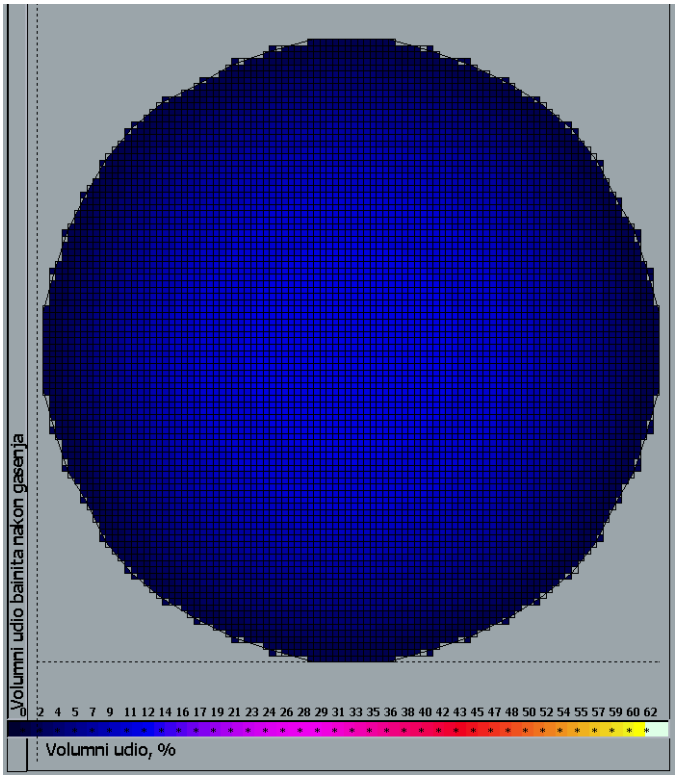


a

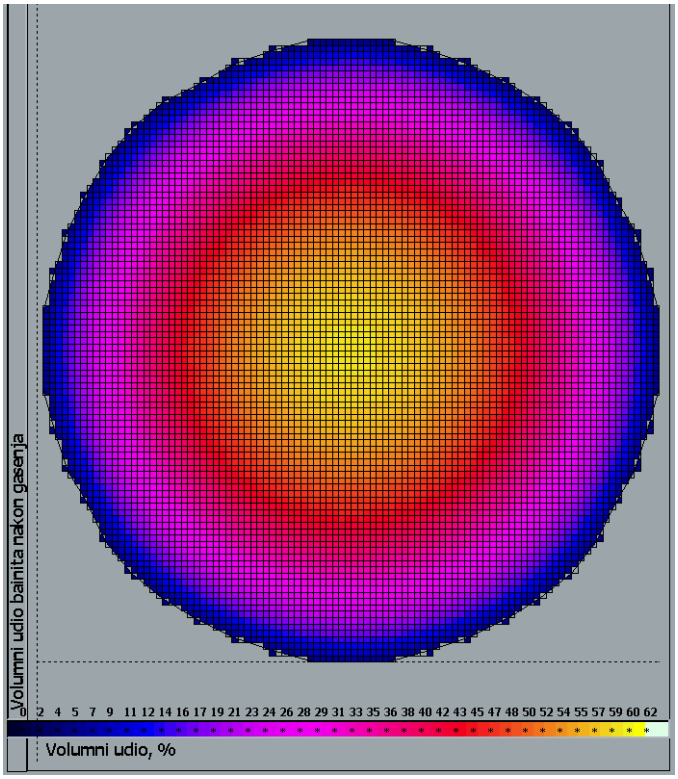


b

Sl. 6.12. Raspodjela volumnih udjela perlita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)

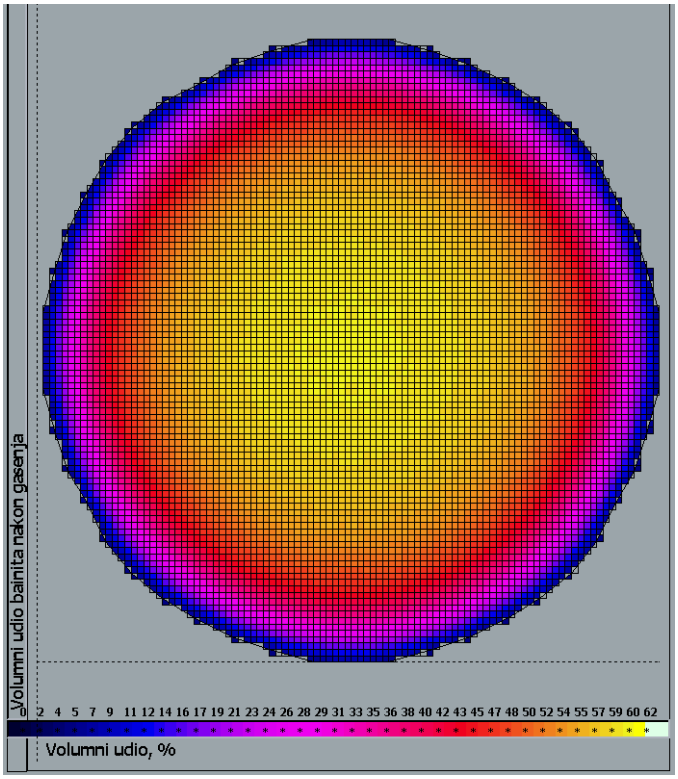


a

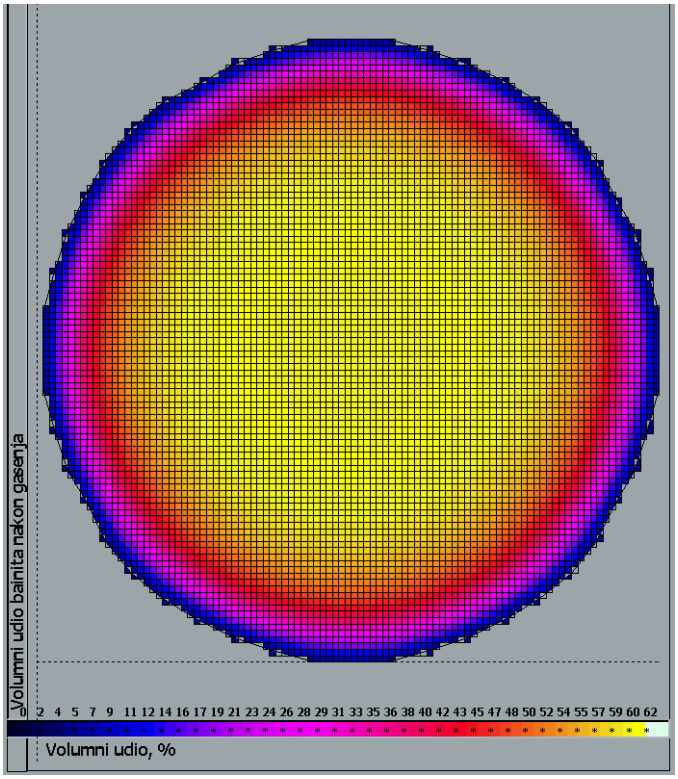


b

Sl. 6.13. Raspodjela volumnih udjela bainita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)

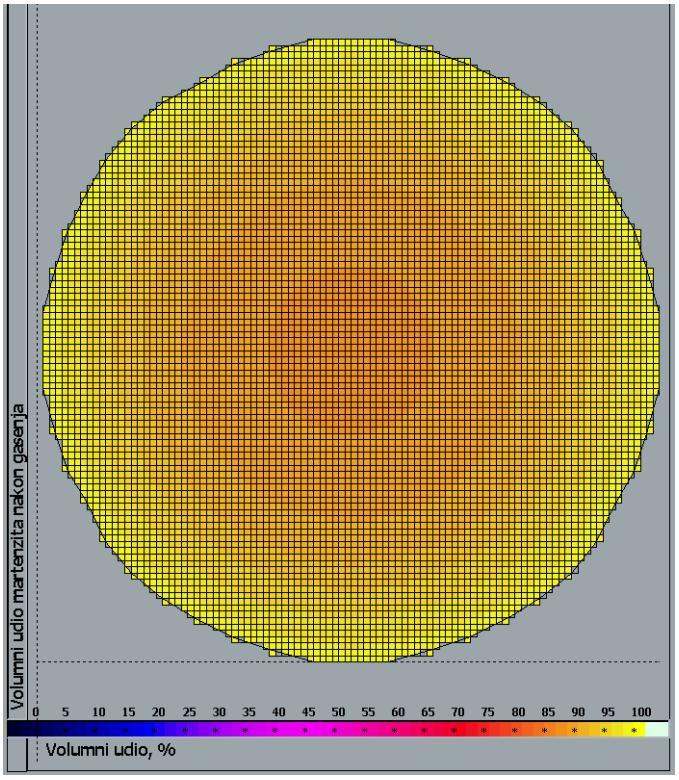


a

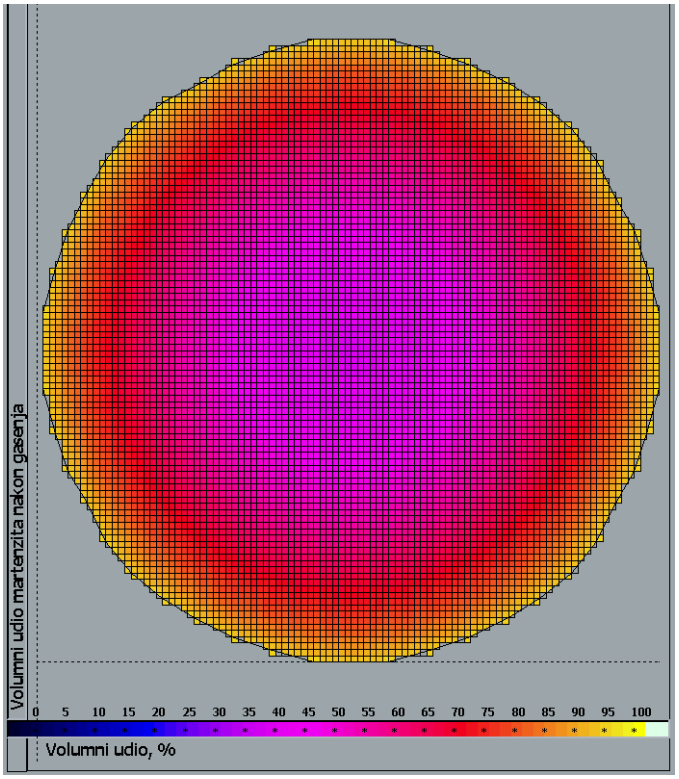


b

Sl. 6.14. Raspodjela volumnih udjela bainita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)

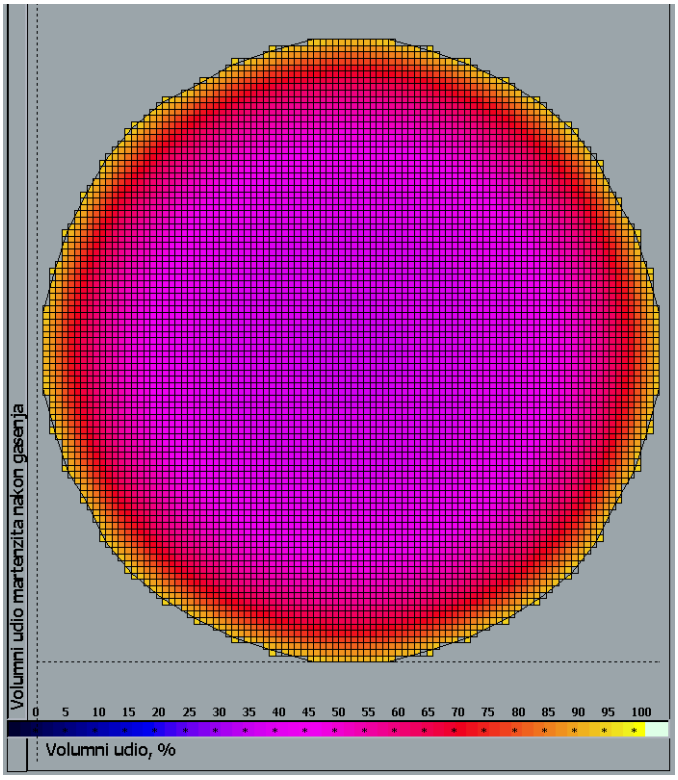


a

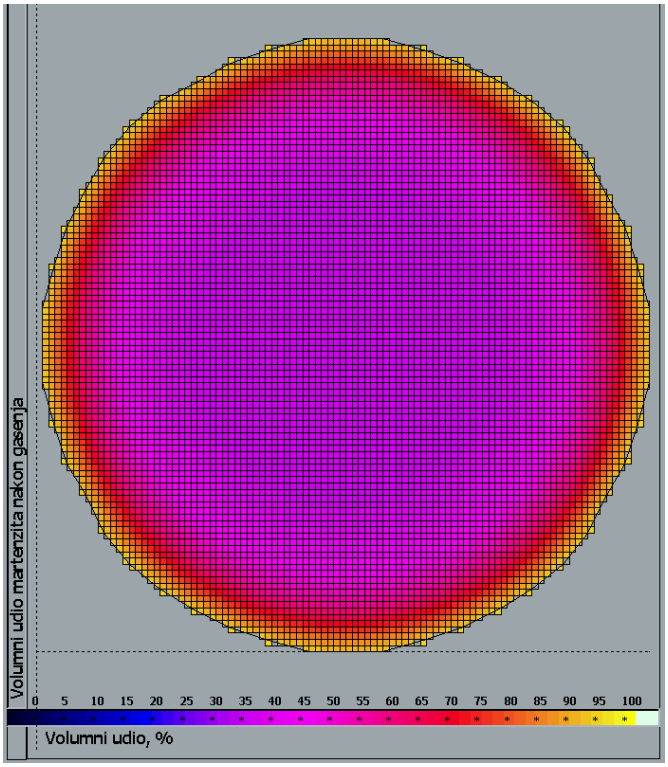


b

Sl. 6.15. Raspodjela volumnih udjela martenzita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)



a



b

Sl. 6.16. Raspodjela volumnih udjela martenzita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)

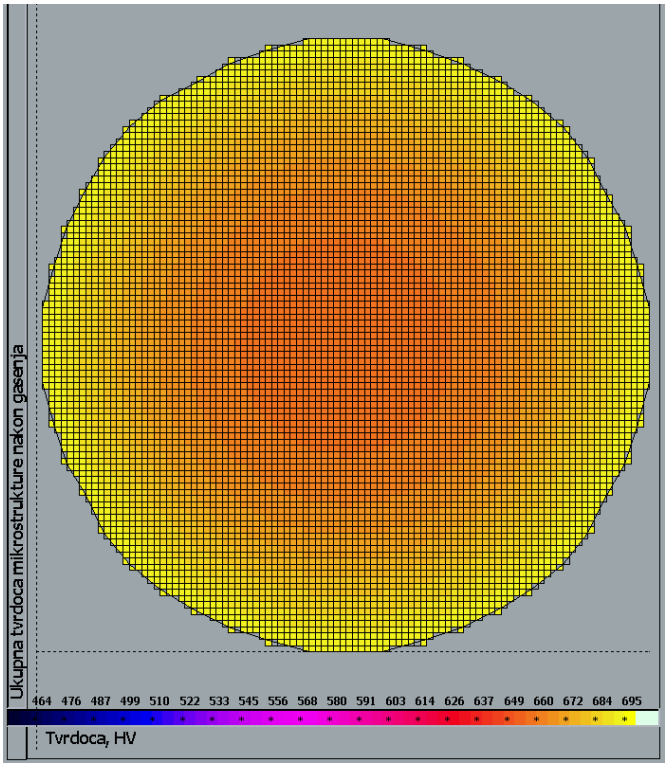
U tablici 6.4 prikazane su predviđene minimalne i maksimalne vrijednosti volumnih udjela mikrostrukturnih sastojaka čelika nakon gašenja u presjecima A-A, B-B, C-C te D-D (slike 6.9, 6.10, 6.11, 6.12, 6.13, 6.14, 6.15 te 6.16).

Tab. 6.4. Predviđene minimalne i maksimalne vrijednosti volumnih udjela ferita, perlita, bainita i martenzita nakon gašenja

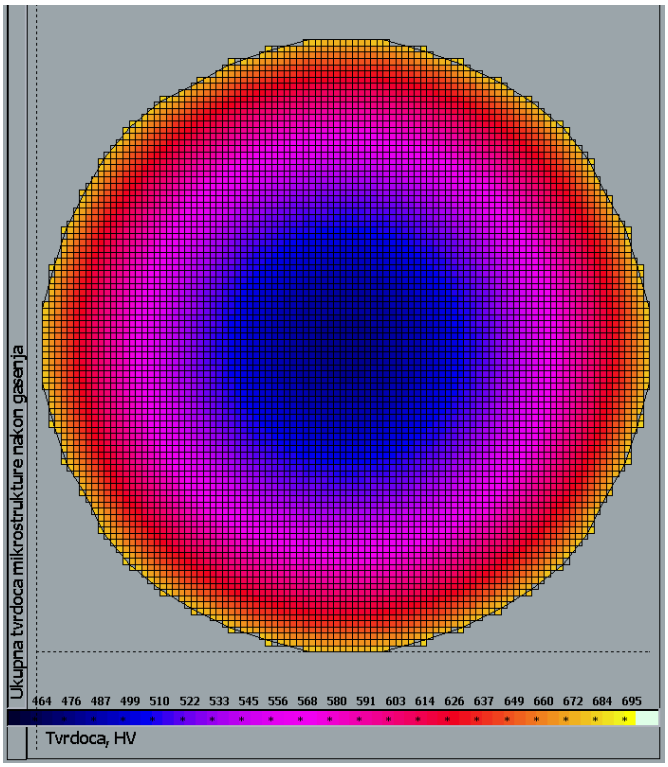
		Volumni udio mikrostrukturnog sastojka, %			
Poprečni presjek uzorka		A-A	B-B	C-C	D-D
FERIT	Minimalna vr.	0	0	0	0
	Maksimalna vr.	0	1.00	1.90	1.94
PERLIT	Minimalna vr.	$1.11 \cdot 10^{-4}$	$1.26 \cdot 10^{-4}$	$1.26 \cdot 10^{-4}$	$1.26 \cdot 10^{-4}$
	Maksimalna vr.	$1.43 \cdot 10^{-4}$	$3.91 \cdot 10^{-3}$	$2.67 \cdot 10^{-2}$	$4.13 \cdot 10^{-2}$
BAINIT	Minimalna vr.	0.73	4.17	4.66	4.66
	Maksimalna vr.	11.35	59.70	60.80	61.87
MARTENZIT	Minimalna vr.	88.65	39.30	37.27	36.22
	Maksimalna vr.	99.27	95.83	95.34	95.34

Na temelju prethodnih slika i tablice 6.4 može se zaključiti da predviđena raspodjela volumnih udjela mikrostrukturnih sastojaka čelika odgovara očekivanim rezultatima. U bazi uzorka (presjek A-A), gdje se pri gašenju postižu najveće brzine ohlađivanja, računalnom simulacijom dobivene su najmanje vrijednosti volumnih udjela ferita i bainita te najveće vrijednosti volumnog udjela martenzita u odnosu na ostale poprečne presjeke. Najveće vrijednosti volumnog udjela bainita te najmanje vrijednosti volumnog udjela martenzita dobivene su u središnjem poprečnom presjeku uzorka (presjek D-D). Također, za bilo koji poprečni presjek, na slikama je uočljivo znatno smanjenje volumnog udjela martenzita te znatno povećanje volumnog udjela bainita s porastom udaljenosti od površine uzorka, odnosno, sa smanjenjem brzine ohlađivanja. U skladu s očekivanim, računalnom simulacijom dobivene su zanemarive vrijednosti volumnog udjela perlita.

Na slikama 6.17 i 6.18 grafički su prikazane predviđene vrijednosti ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja u četiri poprečna presjeka uzorka, dok su u tablici 6.5 prikazane njihove minimalne i maksimalne vrijednosti u tim presjecima.

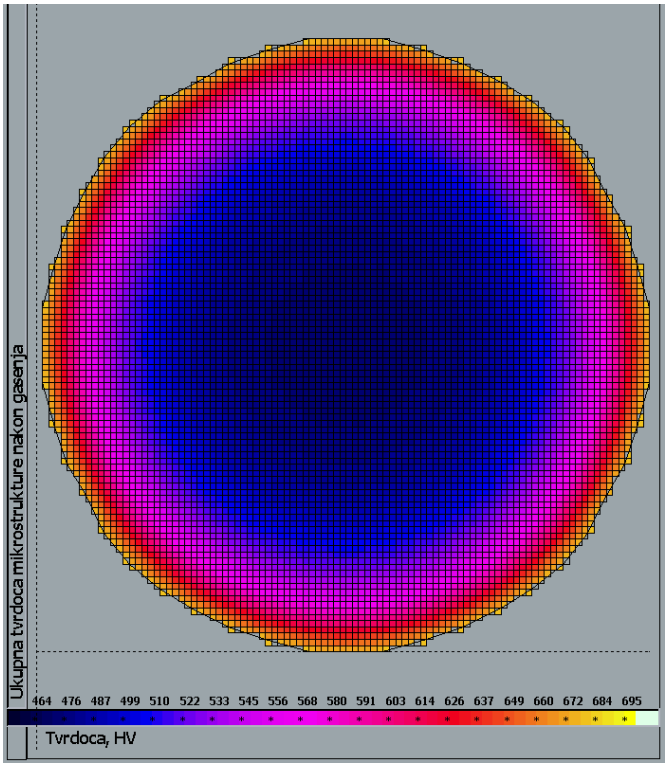


a

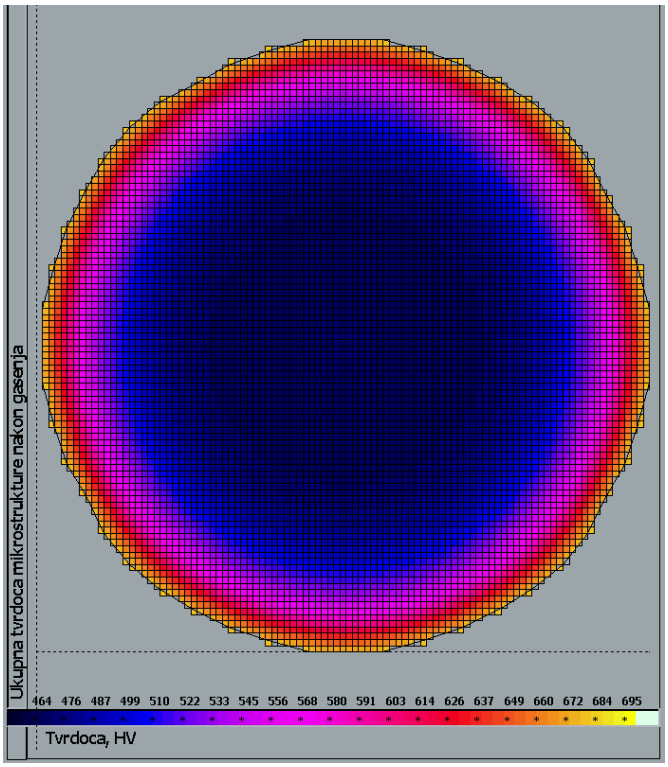


b

Sl. 6.17. Raspodjela ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)



a



b

Sl. 6.18. Raspodjela ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)

Tab. 6.5. Predviđene minimalne i maksimalne vrijednosti ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja

	Tvrdoća mikrostrukture čelika HV_{UK}			
Poprečni presjek uzorka	A-A	B-B	C-C	D-D
Minimalna vrijednost	659.60	479.72	469.50	465.63
Maksimalna vrijednost	695.67	683.85	682.29	682.28

Na temelju slika 6.17 i 6.18 te tablice 6.5 može se zaključiti da predviđena raspodjela ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja odgovara očekivanim rezultatima. Najveće vrijednosti tvrdoće odnose se na bazu uzorka (presjek A-A) gdje se mikrostruktura čelika najvećim dijelom sastoji od martenzita vrlo visoke tvrdoće, dok su najmanje vrijednosti tvrdoće dobivene u središnjem poprečnom presjeku uzorka (presjek D-D). U bilo kojem poprečnom presjeku uzorka, s porastom udaljenosti od površine uzorka dolazi do smanjenja ukupne tvrdoće mikrostrukture, što je posljedica smanjenja volumnog udjela martenzita.

U svrhu verifikacije rezultata računalne simulacije mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće, predviđene vrijednosti volumnih udjela ferita, perlita, bainita i martenzita te ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja uspoređene su s eksperimentalnim rezultatima.

Za središnji poprečni presjek uzorka (presjek D-D), u tablici 6.6 prikazane su predviđene vrijednosti volumnih udjela mikrostrukturnih sastojaka čelika te ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja te njima pripadajući rezultati eksperimentalnih ispitivanja. U tablici se može uočiti zanemarivo malo odstupanje predviđenog od stvarnog volumnog udjela martenzita na površini i u jezgri uzorka. Odstupanje predviđene od stvarne vrijednosti volumnog udjela bainita na površini uzorka također je zanemarivo. Nešto veća odstupanja predviđenih i eksperimentalnih vrijednosti volumnih udjela ferita i bainita odnose se na jezgru uzorka. To se može objasniti na način da se kod čelika vrlo teško može zasigurno odvojiti završetak feritne od početka bainitne pretvorbe, što može utjecati na ulazne fizikalne veličine u kinetičkim izrazima raspada austenita, a stoga i na predviđene vrijednosti volumnih udjela ferita i bainita.

Tab. 6.6. Usporedba predviđenih i eksperimentalnih vrijednosti volumnih udjela mikrostrukturnih sastojaka i ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja

		Volumni udio mikrostrukturnog sastojka, %				Tvrdoća mikrostrukture čelika, HV
		FERIT	PERLIT	BAINIT	MARTENZIT	
POVRŠINA (POZ. 10 na slici 6.8)	Računalna simulacija	0	0	7.91	92.09	671.21
	Eksperiment	0	0	7	93	490
JEZGRA (POZ. 1 na slici 6.8)	Računalna simulacija	1.94	0	61.08	36.95	468.03
	Eksperiment	7	3	53	37	367

Iako je tvrdoća pokusnog uzorka ispitivana Rockwellovom metodom, zbog lakše usporedbe vrijednosti tvrdoće, eksperimentalne vrijednosti tvrdoće u tablici 6.6 prikazane su u HV jedinicama. Važno je napomenuti da se pri uspoređivanju predviđenih i eksperimentalnih vrijednosti tvrdoće u obzir mora uzeti točnost Rockwellove metode koja iznosi $\pm$ 2 HRC.

Na temelju usporedbe predviđenih i eksperimentalnih vrijednosti tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja može se uočiti da su predviđene vrijednosti tvrdoće na površini i u jezgri uzorka veće u odnosu na rezultate eksperimentalnih ispitivanja. Također, i u bazama pokusnog uzorka računalnom simulacijom predviđene su veće vrijednosti tvrdoće od 660 do 696 HV (slika 6.17a, tablica 6.5), dok izmjerene vrijednosti tvrdoće iznose od 560 HV (sredina) do 610 HV (rub). Odstupanja predviđenih od eksperimentalnih vrijednosti tvrdoće mikrostrukture čelika posljedica su predloženog izraza za procjenu tvrdoće martenzita, prema kojem tvrdoća martenzita isključivo ovisi o očvrsnuću ferita intersticijskim atomima ugljika. Tvrdoća martenzita koja se dobiva na temelju izraza 5.7 približno je veća za 3 do 4 HRC u odnosu na pripadajuću eksperimentalnu vrijednost. Upravo je to iznos za koji se smanji tvrdoća martenzita pri gašenju čelika kada dolazi do popuštanja martenzita.

Iz usporedbe predviđenih i eksperimentalnih vrijednosti volumnih udjela mikrostrukturnih sastojaka čelika nakon gašenja može se zaključiti da se razvijenim vlastitim računalnim programom za simulaciju mikrostrukturnih pretvorbi pri gašenju čelika s vrlo velikom točnošću mogu predviđati volumni udjeli ferita, perlita, bainita i martenzita. Također, na temelju usporedbe predviđenih i eksperimentalnih vrijednosti tvrdoće mikrostrukture čelika

nakon gašenja može se zaključiti da se računalnom simulacijom dobivaju nešto više vrijednosti tvrdoće, zbog čega bi se u izrazima za predviđanje tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja trebalo uzeti u obzir smanjenje tvrdoće martenzita pri gašenju uslijed popuštanja martenzita.

7. Zaključak

Osnovni cilj doktorske disertacije *Matematičko modeliranje i računalna simulacija mikrostrukturnih pretvorbi i mehaničkih svojstava pri gašenju čelika* bio je istraživanje mehanizama i kinetike mikrostrukturnih pretvorbi te mehaničkih svojstava pri gašenju čelika, kao i razvijanje vlastitog računalnog programa za simulaciju mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika.

Istraživanja tijekom izrade doktorske disertacije sastojala su se od teoretskih razmatranja, računalne simulacije, eksperimentalnih postupaka te analize rezultata.

U svrhu postavljanja izraza i razvijanja algoritma za predviđanje kinetike raspada austenita pri gašenju čelika, polazilo se od pretpostavke da se predviđanje kinetike raspada austenita pri gašenju čelika (kontinuiranom ohlađivanju) može temeljiti na rezultatima raspada austenita u izotermičkim uvjetima pretvorbi, uz primjenu adicijskog pravila.

Na temelju provedenih teorijskih istraživanja zaključeno je sljedeće. Do raspada austenita pri gašenju čelika dolazi na dva osnovna načina: difuzijskom pretvorbom pri čemu nastaje ferit, perlit i/ili bainit te bezdifuzijskom martenzitnom pretvorbom. Sve difuzijske pretvorbe sastoje se od procesa nukleacije koji se odvija difuzijskim mehanizmom te od procesa rasta klica. Kod feritne i perlitne pretvorbe proces rasta je također difuzijski, za razliku od bainitne pretvorbe kada klice rastu bezdifuzijskim mehanizmom. Stoga, za feritnu i perlitnu pretvorbu koje se odvijaju mehanizmom nukleacije i rasta zaključeno je da njihova kinetika pretvorbe ovisi o brzini nukleacije te o brzini rasta. Budući da klice ferita kod bainitne pretvorbe rastu bezdifuzijskim mehanizmom uz vrlo veliku brzinu, za bainitnu pretvorbu je zaključeno da brzina rasta ne utječe na kinetiku pretvorbe, već da volumni udio bainita isključivo ovisi o brzini nukleacije koja je glavni čimbenik kinetike bainitne pretvorbe. Također, zaključeno je da se feritna i bainitna pretvorba ne odvijaju do kraja, već do određenog maskimalnog volumena koji ovisi o temperaturi pretvorbe, nakon čega, u preostalom pothlađenom austenitu, započinje perlitna pretvorba.

U svrhu predlaganja i daljnjeg razvijanja izraza za predviđanje kinetike difuzijskih pretvorbi u izotermičkim uvjetima pretvorbi, analizirani su postojeći izrazi koji se koriste u literaturi i

njihovi nedostaci. Zaključeno je da se volumni udjeli ferita, perlita i bainita mogu vrlo uspješno predviđati na temelju kinetičkog Avramijevog izotermičkog izraza, u kojem je kinetika mikrostrukturnih pretvorbi definirana kinetičkim parametrima *n* i *k*. Prema literaturnim podacima, kod feritne i perlitne pretvorbe prihvaćena je vrijednost kinetičkog parametra *n* jednaka četiri, dok je kod bainitne pretvorbe zaključeno da vrijednost kinetičkog parametra *n* može varirati u širokim granicama, zbog čega se određuje na temelju eksperimentalnih pokazatelja. Za bilo koju vrstu difuzijske pretvorbe vrijednost kinetičkog parametra *k* također se određuje na temelju eksperimentalnih pokazatelja.

U nastavku, predložene su metode određivanja kinetičkih parametara izotermičkog raspada austenita kojima je određena kinetika feritne, perlitne i bainitne pretvorbe. U predloženim izrazima, kinetički parametri definirani su poznatim fizikalnim veličinama, ali i termodinamičkim konstantama čije se vrijednosti određuju kalibracijom pomoću izotermičkog dijagrama čelika. Nadalje, kako bi se izbjeglo korištenje ovih empirijskih veličina u kinetičkim izrazima raspada austenita, vrijednosti termodinamičkih konstanti određene su za veći broj podeutektoidnih čelika, što je omogućilo regresijsku analizu kojom je dobivena kvalitativna i kvantitativna ovisnost termodinamičkih konstanti o kemijskom sastavu čelika. Predloženi izrazi za izračunavanje termodinamičkih konstanti na temelju kemijskog sastava čelika verificirani su pomoću izotermičkog dijagrama čelika 42CrMo4 te je zaključeno da se s velikom pouzdanošću mogu koristiti pri predviđanju kinetike raspada austenita.

Na temelju provedenih teorijskih istraživanja, s naglaskom na utjecaj mikrostrukture i temperature pretvorbe na mehanička svojstva pri gašenju čelika, zaključeno je sljedeće. U procesu gašenja tvrdoća se smatra temeljnim mehaničkim svojstvom. Ostala relevantna mehanička svojstva u procesu gašenja su: modul elastičnosti, granica razvlačenja, koeficijent i eksponent deformacijskog očvršćivanja, koeficijent transformacijske plastičnosti te specifična oslobođena elastična energija. Mehanička svojstva ovise o mikrostrukturnim sastojcima te o temperaturi, zbog čega se kontinuirano mijenjaju pri ohlađivanju s temperature austenitizacije.

Ako je na određenoj temperaturi poznat udio mikrostukturnih sastojaka čelika te njihova tvrdoća, ukupna tvrdoća čelika na toj temperaturi može se odrediti pomoću tzv. zakona mješavine. U slučaju predviđanja ostalih mehaničkih svojstava, zakon mješavine nije

primjenjiv jer se u obzir mora uzeti interaktivno djelovanje mikrostrukturnih sastojaka. Poteškoće u predviđanju relevantnih mehaničkih svojstava mikrostrukturnih sastojaka u procesu gašenja čelika prikazane su u teoretskoj raspravi.

U svrhu razvijanja izraza za procjenu tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika u izotermičkim uvjetima pretvorbi polazilo se od sljedećih zaključaka. Tvrdoća ferita ne ovisi o temperaturi nastanka ferita, već je konstantne vrijednosti. Tvrdoća perlita ovisi o tvrdoći ferita te o tvrdoći koja proizlazi iz očvrsnuća metalne osnove (ferita) izdvajanjem sekundarne faze (cementita), odnosno, ovisi o udjelu ugljika u čeliku te o pothlađenju ispod A_{e1} temperature. Tvrdoća martenzita proizlazi iz očvrsnuća ferita intersticijskim atomima ugljika, odnosno, isključivo ovisi o udjelu ugljika u čeliku. Tvrdoća bainita ovisi o očvrsnuću ferita izdvajanjem sekundarne faze (perlitni mehanizam) te o očvrsnuću ferita intersticijskim atomima ugljika (martenzitni mehanizam), pri čemu na višim temperaturama prevladava perlitni, a na nižim martenzitni mehanizam očvrsnuća. Također, zaključeno je da pojedini mehanizam očvrsnuća ovisi o temperaturi.

Vlastiti algoritam razvijen u svrhu predviđanja kinetike raspada austenita u ferit, perlit, bainit i martenzit u izotermičkim uvjetima pretvorbi te u svrhu procjene tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka čelika implementiran je u vlastiti računalni program za simulaciju mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju čelika koji se temelji na adicijskom pravilu, pri čemu su u obzir uzete specifičnosti metode predviđanja mikrostrukturnih pretvorbi u kontinuiranim uvjetima ohlađivanja.

Na temelju eksperimentalne verifikacije rezultata računalne simulacije zaključeno je da se razvijenim vlastitim računalnim programom vrlo uspješno mogu predviđati volumni udjeli ferita, perlita, bainita i martenzita pri gašenju podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika, kao i njihove tvrdoće.

Razvijeni vlastiti računalni program omogućuje predviđanje rezultata raspada austenita u uvjetima kontinuiranog ohlađivanja na temelju kemijskog sastava čelika čime je izbjegnuto korištenje empirijskih veličina u kinetičkim izrazima raspada austenita te stoga predstavlja značajan znanstveni doprinos u području računalne simulacije gašenja čelika.

Zbog tematike koju obrađuje, ova doktorska disertacija predstavlja dobar temelj budućim istraživanjima iz područja gašenja čelika. U prvom redu, u nastavku istraživanja 3-D model

ohlađivanja trebao bi se modificirati na način da omogući 3-D računalnu simulaciju mikrostrukturnih pretvorbi i tvrdoće pri gašenju uzoraka kompleksnije geometrije. Također trebalo bi postaviti izraze za predviđanje ostalih relevantnih mehaničkih svojstava mikrostrukturnih sastojaka pri gašenju čelika. Time bi u potpunosti bilo omogućeno predviđanje mehaničkog ponašanja materijala, odnosno, predviđanje unutarnjih naprezanja, deformacija i eventualnog nastanka loma pri gašenju čelika.

Literatura

1. Şimşir, C., Gür, C. H. Simulation of Quenching // *Handbook of Thermal Process Modeling of Steels* / Gür, C. H., Pan, J. (ur.). Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2009. Str. 341-425.

2. Pan, J. S., Gu, J. F., Hu, M. J., Chen, X. Computer simulation of complex components during quenching process and its application in industry // *Proc. of the 7th Int. Seminar of IFHT: Heat Treatment and Surface Engineering of Light Alloys* / Lendvai, J., Réti, T. (ur.). Budapest, Hungary: Hungarian Scientific Society of Mechanical Engineering, 1999. Str. 217-227.

3. Bhadeshia, H. K. D. H., Christian, J. W. Bainite in steel // *Metallurgical Transactions A, Physical Metallurgy and Materials Science*. 21 (1990), 4; 767-797.

4. Christian, J. W. *The Theory of Transformation in Metals and Alloys: Part 1*, 3rd edition. Amsterdam: Pergamon Press, Elsevier Science, 2002.

5. Smoljan, B. *Toplinska obradba čelika, sivog i nodularnog lijeva*. Zagreb: Hrvatsko društvo za toplinsku obradbu i inženjerstvo površina, 1999.

6. *ASM Handbook; Volume 4. Heat Treating*, 7th edition. ASM International, 2006.

7. Christian, J. W. *The Theory of Transformation in Metals and Alloys: Part 2*, 3rd edition. Amsterdam: Pergamon Press, Elsevier Science, 2002.

8. Pirš, J. *Toplinska obrada metala*. Rijeka: Tehnički fakultet Sveučilišta u Rijeci, 1992.

9. Rose, A., Hougardy, H. *Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle*, Düsseldorf: Verlag Stahleisen, 1972.

10. Porter, D. A., Easterling, K. E., Sherif, M. Y. *Phase Transformations in Metals and Alloys*, 3rd edition, CRC Press, Taylor & Francis Group, 2009.

11. *Physical Metallurgy*. 4th edition / Cahn, R. W., Haasen, P. (ur.). North-Holland, 1996.

12. Russell, K. C. *Phase Transformations*. ASM Metals Park, Ohio, 1970.

13. Suehiro, M. A mathematical model for predicting temperature of steel during cooling based on microstructural evolution // *Proc. of the 11th Congress of IFHTSE and 4th ASM Heat Treatment and Surface Engineering Conference in Europe: Vol. 1* / Florence, Italy: Associazione Italiana di Metallurgia, 1998. Str. 11-20.

14. Enomoto, M., Aaronson, H. I. // *Metallurgical and Materials Transactions A*. 17 (1986); 1385-1397.

15. Callister, W. D. *Materials Science and Engineering: An Introduction*, 4th edition. John Wiley & Sons, Inc., 1997.

16. Gamsjäger, E., Svoboda, J., Fischer, F. D. Austenite to ferrite phase transformation in low-alloyed steels // *Computational Materials Science*. 32 (2005); 360-369.

17. Liu, J., Yanagida, A., Sugiyama, S., Yanagimoto, J. The analysis of phase transformation for the prediction of microstructure change after hot forming // *ISIJ International*. 41 (12) (2001); 1510-1516.

18. Kolmogorov, A. N. Statističeskaja teorija krystalizacii metallov (na ruskom) // *Izvestiya Akadedemii nauk SSSR: Seriya Matimaticheskaya*. 3 (1973); 355-359.

19. Johnson, W. A., Mehl, R. F. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth // *Transactions AIME*. 135 (1939); 416-419.

20. Avrami, M. Kinetics of phase change I: General theory // *Journal of Chemical Physics*. 7 (1939), 12; 1103-1112.

21. Koistinen, D. P., Marburger, R. E. A general equation describing the extent of the austenite – matensite transformation in pure iron – carbon alloys and plain carbon steel // *Acta Metallurgica*. 7 (1959), 1; 59-60.

22. Cahn, J. W. Grain boundary nucleated reactions // *Acta Metallurgica*. 4 (1956); 449-459.

23. Shi, W. Physical Metallurgy of Thermal Processing // *Handbook of Thermal Process Modeling of Steels* / Gür, C. H., Pan, J. (ur.). Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2009. Str. 89-119.

24. Bhadeshia, H. K. D. H. *Bainite in Steels: Transformations, Microstructure and Properties*. 2nd edition. Maney Publishing, 2001.

25. Pan, Y.-T. *Measurement and Modelling of Diffusional Transformation of Austenite in C-Mn Steels: Dissertation*. Institute of Materials Science and Engineering of the National Sun Yat-Sen University, Taiwan, 2001.

26. Gorni, A. A. *Steel Forming and Heat Treating Handbook*, 2009. (www.gorni.eng.br/e/Gorni_SFHTHandbook.pdf; 23. 6. 2009.)

27. Lusk, M. T., Lee, Y. A global material model for simulating the transformation kinetics of low alloy steels // *Proc. of the 7th Int. Seminar of IFHT: Heat Treatment and Surface Engineering of Light Alloys* / Lendvai, J., Réti, T. (ur.). Budapest, Hungary: Hungarian Scientific Society of Mechanical Engineering, 1999. Str. 273-282.

28. Andrew, K. W. Empirical formulae for the calculation of some transformation temperatures // *Journal of Iron and Steel Institute*. 203 (1965); 721-729.

29. Liu, C., Zhao, Z., Northwood, D. O., Liu. Y. A new empirical formula for the calculation of M_s temperatures in pure iron and super-low carbon alloy steels // *Journal of Materials Processing Technology*. 113 (2001); 556-562.

30. *Steel Heat Treatment Handbook: Metallurgy and Technologies*. 2nd edition / Totten, G. E. (ur.). CRC Press, Taylor & Frances Group, 2007.

31. Payson, P., Savage, C. H. // *Transactions ASM*. 33 (1944); 261.

32. Carapella, L. A. // *Metals Progress*. 46 (1944); 108.

33. Rowland, E. S., Lyle, S. R. // *Transactions ASM*. 37 (1946); 27.

34. Grange, R. A., Stewart, H. M. // *Transactions AIME*. 167 (1946); 467.

35. Nehrenberg, A. E. // *Transactions AIME*. 167 (1946); 494.

36. Steven, W., Haynes, A. G. The temperature of formation of martensite and bainite in low alloy steels // *Journal of Iron and Steel Institute*. 183 (1956); 349-359.

37. Liu, Y. X. *Principle of Heat Treatment*. Peking: China Mechanical Industry Press, 1981.

38. *Handbook of Mechanical Alloy Design* / Totten, G. E., Xie, L., Funatani, K. (ur.). CRC Press, Taylor & Frances Group, 2004.

39. Meyer, M., Vanderschueren, D., De Cooman, B. C. The influence of the substitution of Si by Al on the properties of cold rolled C-Mn-Si TRIP steels // *ISIJ International*. 39 (1988), 8; 813-822.

40. Kirkaldy, J. S., Venugopalan, D. Prediction of microstructure and hardenebility of low alloy steels // *Phase Transformations in Ferrous Alloys* / Marder, A. R., Goldstein, J. I. (ur.). Philadelphia: The Metallurgical Society of AIME, 1983. Str. 125-148.

41. Suehiro, M., Senuma, T., Yada, H., Matsumura, Y., Ariyoshi, T. A kinetic model for phase transformation of low carbon steel during continuous cooling // *Tetsu-to-Hagane*. 73 (1987), 8; 1026-1033.

42. Zhao, Z., Guan, X., Wan, C., Lin, C., Northwood, D. O. A re-examination of the B_0 and B_s temperatures of steel // *Materials and Design*. 21 (2000); 207-209.

43. Lee, Y. K. Empirical formula of isothermal bainite start temperature of steels // *Journal of Materials Science Letters*. 21 (2002); 1253-1255.

44. Denis, S., Gautier, E., Sjöström, S., Simon, A. Influence of stresses on the kinetics of pearlitic transformation during continuous cooling // *Acta Metallurgica*. 35 (1987), 7; 1621-1632.

45. Pan, J., Gu, J. Mathematical Foundamentals of Thermal Process Modeling of Steels // *Handbook of Thermal Process Modeling of Steels* / Gür, C. H., Pan, J. (ur.). Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2009. Str. 1-62.

46. Inoue, T., Wang, Z. Coupling between stress, temperature, metallic structures during processes involving phase transformations // *Materials Science and Technology*. 1 (1985); 845-849.

47. Denis, S., Gautier, E., Simon, A., Beck, G. Stress-phase transformation interactions basic principles, modeling and calculation of internal stresses // *Materials Science and Technology*. 1 (1985); 806-814.

48. Ali, S. K., Hamed, M. S., Lightstone, M. F. An efficient numerical algorithm for the prediction of thermal and microstructure fields during quenching of steel rods // *Journal of ASTM International (JAI)*. 5 (2008), 10.

49. Dalgic, M., Irretier, A., Löwisch, G., Zoch, H. W. Transformation plasticity at different phase transformation of a through-hardening bearing steel // *Proc. of the 3rd Int. Conference on Thermal Process Modeling and Simulation* / Budapest, Hungary, 2006. O-II/7.

50. Şimşir, C., Gür, C. H. Simulation of quenching process for predicting temperature, microstructure and residual stresses // *Strojniški Vestnik*. (u objavljivanju).

51. Dieter, G. E. *Mechanical Metallurgy*. Tokyo: McGraw-Hill, Inc., 1976.

52. Rohde, J., Jeppsson, A. Literature review of heat treatment simulations with respect to phase transformation, residual stresses and distortion // *Scandinavian Journal of Metallurgy*. 29 (2000); 47-62.

53. Batista, M., Kosel, F. A sensitivity analysis of heat treatment of steel // *Strojniški Vestnik*. 11/12 (2000); 718-731.

54. *Theory and Technology of Quenching*. / Liščić, B., Tensi, H. M., Luty, W. (ur.). Springer-Verlag, 1991.

55. Bammann, D., Prantil, V., Kumar, A., Lathrop, J., Mosher, D., Callabresi, M., Lusk, M., Krauss, G., Jou, H.-J., Dowling, W., Nikkel, D., Lowe, T., Shick, D. Development of a carburizing and quenching simulation tool: a material model for low-carbon steels undergoing phase transformation // *Proc. of the 2nd Int. Conference on Quenching and Control of Distortion* / Totten, G. E., Howes, M., Sjöström, S., Funatani, K. (ur.). Cleveland: American Society of Metals, 1996. Str. 367-375.

56. Greenwood, G. W., Johnson, R. H. The deformation of metals under small stresses during phase transformations // *Proceedings of the Royal Society A*. 283 (1965); 403.

57. Smoljan, B. Mechanical Metallurgy of Thermal Processing // *Handbook of Thermal Process Modeling of Steels* / Gür, C. H., Pan, J. (ur.). Boca Raton: CRC Press, Taylor & Francis Group, 2009. Str. 121-183.

58. Taleb, L., Cavallo, N., Waeckel, F. Experimental analysis of transformation plasticity // *International Journal of Plasticity*. 17 (2001); 1-20.

59. Abrassart, F. *Influence des Transformations Martensitiques sur las Propretés Mécaniques des Alliages du Système Fe-Ni-Cr-C*. PhD thesis. Université de Nancy, France, 1972.

60. Leblond, J. B., Devaux, J., Devaux, J. C. Mathematical modeling of transformation plasticity in steels – I. Case of ideal-plastic phases // *International Journal of Plasticity*. 5 (1989); 551-572.

61. Grum, J., Kek, T., Zupančić, M., Batista, M., Kosel, F. Measurement and numerical analysis of surface residual stresses occurring under different quenching conditions // *Proc. of the 3rd Int. Conference on Thermal Process Modeling and Simulation* / Budapest, Hungary, 2006. O-I/6.

62. Casotto, S., Pascon, F., Habraken, A. M., Bruschi, S. Thermo-mechanical-metallurgical model to predict distortions of rings during cooling phase after ring rolling operations // *Int. Journal of Machine Tools & Manufacture*. 45 (2005); 657-664.

63. Dasalos, Y. *Comportement dilatométrique et mécanique de l' austénite métastable d' un acier A533*. IRSID Report no. 95349401 MET 44.

64. Sjöström, S. The calculation of phase transformation and residual stresses resulting from quenching of steel // *Numerical Method in Thermal Problems* / Lewis, R. W., Morgan, K. (ur.). Swansea, UK: Pineridge Press, 1985. Str. 1189-1202.

65. Fischer, F. D., Sun, Q.-P., Tanaka, K. Transformation induced plasticity (TRIP) // *Applied Mechanics Review*. 49 (1996), 6; 317-364.

66. Rubeša, D. Mehanika loma // Križan, B. *Osnove proračuna i oblikovanja konstrukcijskih elemenata*. Zagreb: Školska knjiga, 2008.

67. Griffith, A. A. The phenomena of rapture and flow in solids // *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*. 221 (1921); 163.

68. Totten, G. E., Narazaki, M., Blackwood, R. R. Failures related to heat treating operations // *ASM Handbook; Volume 11. Failure Analysis and Prevention*. ASM International, 2002. Str. 192-223.

69. Parrish, G. *Carburizing: Microstructure and Properties*. ASM International, 1999.

70. Blackwood, R. R., Jarvis, L. M., Hoffman, D. G., Totten, G. E. Conditions leading to quench cracking other than severity of quench // www.tenaxol.com/quenchcracking/quenchcracking.htm. 15. 12. 2009.

71. Bowen, R. M. Theory of Mixture // *Continuum Physics: Vol. 3* / Eringen, A. C. (ur.). New York: Academic Press, 1976. Str. 2-129.

72. Krauss, G. *Steels: Heat Treatment and Processing Principles*. Materials Park, Ohio: ASM International, 1989.

73. Morrison, W. B. The effect of the grain size on the stress-strain relationship in low carbon steel // *Transactions ASM*. 59 (1966); 824-846.

74. Hsiao, C.-M., Zhang, T.-Y. Iron and Steels // *Microstructure and Properties of Materials: Volume 2* / Li, J. C. M. (ur.). Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2000. Str. 179-334.

75. Das, S. K., Sivaprasad, S., Das, S., Chatterjee, S., Tarafder, S. The effect of variation on fracture mechanics parameters on HSLA-100 steel // *Materials Science and Engineering A*. 431 (2006); 68-79.

76. Leskovšek, V., Ule, B., Liščić, B. Relations between fracture toughness, hardness and microstructure of vacuum heat-treated high-speed steel // *Journal of Materials Processing Technology*. 127 (2002); 298-308.

77. Lee, S., Kim, S., Hwang, B., Lee, B. S., Lee, C. G. Effect of carbide distribution on the fracture toughness in the transition temperature region of an SA 508 steel // *Acta Materialia*. 50 (2002); 4755-4762.

78. Tetelman, A. S., McEvily, A. J. *Fracture of Structural Materials*, New York: John Wiley & Sons, 1971.

79. Martin, E., Forn, A., Nogue, R. Strain hardening behavior and temperature effect on Al-2124/SiCp // *Journal of Materials Processing Technology*. 143-144 (2003); 1-4.

80. Kang, S. H., Im, Y. T. Thermo-elasto-plastic finite element analysis of quenching process of carbon steel // *Journal of Materials Processing Technology*. 192-193 (2007); 381-390.

81. Nagasaka, Y., Brimacombe, J. K., Hawbolt, E. B., Samarasekera, I. V., Hernandez-Morales, B., Chidiac, S. E. Mathematical model of phase transformations and elasto-plastic stress in the water spray quenching of steel bars // *Metallurgical Transactions A*. 24 (1993); 795.

82. Dalgic, M., Irretier, A., Zoch, H., Löwisch, G. Transformation plasticity at different phase transformation of a through hardening bearing steel // *Int. Journal of Microstructure and Materials Properties*. 3 (1) (2008); 49-64.

83. Smoljan, B. Numerical simulation of as-quenched hardness in a steel specimen of complex form // *Communications in Numerical Methods in Engineering*. 14 (1998); 277-285.

84. Litić, P., Tucaković, K. (ur.). *Termička obrada čelika – mapa A*. Zagreb: Metalbiro, 1975.

Popis oznaka i simbola

SIMBOL	JEDINICA	NAZIV
a	K^{-1}	Konstanta martenzitne pretvorbe
a	mm	Polovica duljine pukotine
a_0, a_1	-	Termodinamičke konstante
a_0, a_1, a_2, a_3, a_{0M}, a_{1M}, a_{0B}, a_{1B}, a_{2B}	-	Koeficijenti tvrdoće mikrostrukturnih sastojaka
A	-	Konstanta
A_1, A_3, A_{cm}	°C, K	Kritične temperature pretvorbi
A_{e1}, A_{e3}, A_{ecm}	°C, K	Ravnotežne kritične temperature pretvorbi
A_{r1}, A_{r3}, A_{rcm}	°C, K	Kritične temperature pretvorbi pri ohlađivanju
b	-	Burgersov vektor
B	-	Konstanta
B_s	°C, K	Temperatura početka bainitne pretvorbe
$c_{Fe3C\alpha}$	%	Koncentracija cementita na granici s feritom
$c_{Fe3C\gamma}$	%	Koncentracija cementita na granici s austenitom
c_m	%	Koncentracija austenita na udaljenosti većoj od difuzijske udaljenosti
c_v	$J\ m^{-3}\ K^{-1}$	Specifični toplinski kapacitet
c_α	%	Koncentracija ferita
$c_{\alpha ac}$	%	Koncentracija acirkularnog ferita
$c_{\alpha Fe3C}$	%	Koncentracija ferita na granici sa cementitom
$c_{\alpha M}$	%	Koncentracija prezasićenog ferita
$c_{\alpha\gamma}$	%	Koncentracija ferita na granici s austenitom
c_γ	%	Koncentracija austenita; koncentracija austenita na granici s feritom pri feritnoj pretvorbi
$c_{\gamma Fe3C}$	%	Koncentracija austenita na granici sa cementitom
$c_{\gamma\alpha}$	%	Koncentracija austenita na granici s feritom
c_0	%	Koncentracija legure
Δc	%	Razlika koncentracije
%C	%	Maseni udio ugljika u leguri
d	mm	Duljina mikropukotine
d	mm	Promjer kristalnog zrna
d_α	mm	Promjer kristalnog zrna ferita
d_γ	mm	Promjer kristalnog zrna austenita

SIMBOL	JEDINICA	NAZIV
D	mm	Promjer pokusnog uzorka
D	$m^2\ s^{-1}$	Koeficijent difuzije
D_0	$m^2\ s^{-1}$	Osnovna konstanta materijala
E	$N\ mm^{-2}$	Modul elastičnosti
E_A	$N\ mm^{-2}$	Modul elastičnosti austenita
E_B	$N\ mm^{-2}$	Modul elastičnosti bainita
E_{F+P}	$N\ mm^{-2}$	Modul elastičnosti feritno-perlitne mikrostrukture
E_M	$N\ mm^{-2}$	Modul elastičnosti martenzita
f	s^{-1}	Frekvencija kojom se novi atomi pridodaju klici kritičnog radijusa
F	N	Sila kemijske veze
G	$mm\ s^{-1}$	Brzina rasta
G	J	Gibbsova slobodna energija
G_m	$J\ mol^{-1}$	Molarna Gibbsova slobodna energija
G_F	$mm\ s^{-1}$	Brzina rasta klice ferita
G_P	$mm\ s^{-1}$	Brzina rasta klice perlita
G_α	$J\ mol^{-1}$	Gibbsova slobodna energija novonastale faze
G_γ	$J\ mol^{-1}$	Gibbsova slobodna energija primarne faze
G_I	$J\ mm^{-2}$	Specifična oslobođena elastična energija ili sila rasta pukotine
G_{Ic}	$J\ mm^{-2}$	Kritična vrijednost specifične oslobođene elastične energije
ΔG	$J\ mol^{-1}$	Razlika Gibbsovih slobodnih energija
ΔG^*	$J\ mol^{-1}$	Aktivacijska energija za nukleaciju
ΔG_d	$J\ mol^{-1}\ mm^{-3}$	Promjena Gibbsove slobodne energije sustava uslijed eliminacije nesavršenosti po jedinici volumena
ΔG_{het}	$J\ mol^{-1}\ mm^{-3}$	Promjena Gibbsove slobodne energije sustava pri heterogenoj nukleaciji
ΔG_s	$J\ mol^{-1}\ mm^{-3}$	Promjena Gibbsove slobodne energije sustava uslijed promjene polja naprezanja u leguri pri stvaranju nove faze po jedinici volumena
ΔG_v	$J\ mol^{-1}\ mm^{-3}$	Promjena volumenske Gibbsove slobodne energije sustava pri stvaranju nove faze po jedinici volumena
h	mm	Debljina ploče
H	J	Entalpija
H	-	Intenzivnost sredstva za gašenje
H	$N\ mm^{-2}$	Modul plastičnosti
HRC	-	Tvrdoća
HRC_M	-	Tvrdoća martenzita
HV	-	Tvrdoća

SIMBOL	JEDINICA	NAZIV
HV_B	-	Tvrdoća bainita
HV_{BUK}	-	Ukupna vrijednost tvrdoće bainita
HV_F	-	Tvrdoća ferita
HV_{FUK}	-	Ukupna vrijednost tvrdoće ferita
HV_{F+P}	-	Tvrdoća feritno-perlitne mikrostrukture
HV_M	-	Tvrdoća martenzita
HV_{MUK}	-	Ukupna vrijednost tvrdoće martenzita
HV_P	-	Tvrdoća perlita
HV_{PUK}	-	Ukupna vrijednost tvrdoće perlita
HV_{UK}	-	Ukupna tvrdoća mikrostrukture nakon gašenja
I	$mm^{-3}\ s^{-1}$	Brzina nukleacije
I_B	$mm^{-3}\ s^{-1}$	Brzina nukleacije klice bainita
I_F	$mm^{-3}\ s^{-1}$	Brzina nukleacije klice ferita
I_P	$mm^{-3}\ s^{-1}$	Brzina nukleacije klice perlita
k	-	Termodinamička konstanta
k	-	Konstanta (kod TP)
k	-	Parametar (kod TP)
k	-	Kinetički parametar raspada austenita
k_B	-	Kinetički parametar raspada austenita u bainit
k_F	-	Kinetički parametar raspada austenita u ferit
k_P	-	Kinetički parametar raspada austenita u perlit
k_Y	-	Konstanta
k_0	-	Konstanta
k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6, k_7, k_8	-	Termodinamičke konstante
K	MPa^{-1}	Koeficijent transformacijske plastičnosti
K	$N\ mm^{-2}$	Koeficijent deformacijskog očvršćivanja
K_A	$N\ mm^{-2}$	Koeficijent deformacijskog očvršćivanja austenita
K_B	$N\ mm^{-2}$	Koeficijent deformacijskog očvršćivanja bainita
K_B	MPa^{-1}	Koeficijent transformacijske plastičnosti bainita
K_{F+P}	$N\ mm^{-2}$	Koeficijent deformacijskog očvršćivanja feritno-perlitne mikrostrukture
K_M	$N\ mm^{-2}$	Koeficijent deformacijskog očvršćivanja martenzita
K_P	MPa^{-1}	Koeficijent transformacijske plastičnosti perlita
K_I	$MPa\ mm^{1/2}$	Faktor intenzivnosti naprezanja
K_{Ic}	$MPa\ mm^{1/2}$	Lomna žilavost
L	$J\ mol^{-1}$	Latentna toplina

SIMBOL	JEDINICA	NAZIV
L	mm	Mjerna duljina uzorka
L_0	mm	Početna mjerna duljina uzorka
m	%	Udio raspadnutog austenita u mikrostrukturi (kod TP)
M_f	°C, K	Temperatura završetka martenzitne pretvorbe
M_s	°C, K	Temperatura početka martenzitne pretvorbe
n	-	Broj klica
n	-	Kinetički parametar
n	-	Eksponent deformacijskog očvršćivanja
n_A	-	Eksponent deformacijskog očvršćivanja austenita
n_B	-	Kinetički parametar bainitne pretvorbe
n_B	-	Eksponent deformacijskog očvršćivanja bainita
n_F	-	Kinetički parametar feritne pretvorbe
n_{F+P}	-	Eksponent deformacijskog očvršćivanja feritno-perlitne mikrostrukture
n_M	-	Eksponent deformacijskog očvršćivanja martenzita
n_P	-	Kinetički parametar perlitne pretvorbe
n_1	-	Termodinamička konstanta
N^*	mm^{-3}	Broj klica kritičnog radijusa po jedinici volumena
N_0	mm^{-3}	Broj atoma primarne faze po jedinici volumena
$N_{(f)}$	%	Slobodan dušik u rešetci ferita
P	mm	Veličina kolonije perlita
P	%	Volumni udio nove faze (kod TP)
Q, Q_{dif}	$J\ mol^{-1}$	Aktivacijska energija za difuziju
r	mm	Radijus klice
r	mm	Međuatomarna udaljenost
r_{kr}	mm	Kritični radijus klice
r_0	mm	Ravnotežna međuatomarna udaljenost
R	$J\ mol^{-1}\ K^{-1}$	Univerzalna plinska konstanta
R_e	$N\ mm^{-2}$	Granica razvlačenja
R_{eA}	$N\ mm^{-2}$	Granica razvlačenja austenita
R_{eB}	$N\ mm^{-2}$	Granica razvlačenja bainita
R_{eF+P}	$N\ mm^{-2}$	Granica razvlačenja feritno-perlitne mikrostrukture
R_{eM}	$N\ mm^{-2}$	Granica razvlačenja martenzita
R_m	$N\ mm^{-2}$	Vlačna čvrstoća
R_p	$N\ mm^{-2}$	Konvencionalna granica razvlačenja
S	$J\ K^{-1}$	Entropija
S	mm	Međulamelarna udaljenost perlita

SIMBOL	JEDINICA	NAZIV
S	mm^{-1}	Površina mjesta pogodnih za nukleaciju po jedinici volumena
S	m^2	Površina poprečnog presjeka uzorka
S_0	m^2	Početna površina poprečnog presjeka uzorka
t	s	Vrijeme
$t_{drž}$	min	Vrijeme držanja na temperaturi austenitizacije
t_i, $t_{0.01}$	s	Vrijeme inkubacije izotermičkog raspada austenita
$t_{ohlađ}$	min	Vrijeme ohlađivanja
$t_{0.99}$	s	Vrijeme završetka izotermičkog raspada austenita
t_{ugr}	min	Vrijeme ugrijavanja
T	K	Temperatura
T_a	K	Temperatura austenitizacije
T_f	K	Temperatura sredstva za gašenje
T_M	K	Temperatura taljenja
T_p	K	Prijelazna temperatura iz duktilnog u krhki lom
T_0	K	Ravnotežna temperatura
T_0	K	Temperatura metastabilne ravnoteže austenita i martenzita
Δt	s	Vremenski interval
$\Delta t^{(N)}$	s	Vrijeme koraka pretvorbe *N*
ΔT	K	Pothlađenje
u	-	Volumen strukturne jedinice bainita
v	s^{-1}	Brzina pretvorbe
v, $v_{ohlađ}$	$°C\ s^{-1}$	Brzina ohlađivanja
v	mm^3	Volumen jedne klice nove faze
V	mm^3	Volumen primarne faze
V_{max}	mm^3	Maksimalni volumen
V_r	-	Relativni volumen
V_{rB}	-	Relativni volumen bainita
V_{rF}	-	Relativni volumen ferita
V_{rP}, V_{rP1}, V_{rP2}	-	Relativni volumen perlita
V_α	mm^3	Volumen nove faze
$V_{\alpha e}$	mm^3	Prošireni volumen nove faze
V_{Be}	mm^3	Prošireni volumen bainita
V_{Fe}	mm^3	Prošireni volumen ferita
V_{Pe}	mm^3	Prošireni volumen perlita
Z	-	Faktor
x_i	%	Molarni udio komponente *i* u fazi
X	%	Volumni udio nove faze

SIMBOL	JEDINICA	NAZIV
X_B	%	Volumni udio bainita
X_F	%	Volumni udio ferita
X_P	%	Volumni udio perlita
X_M	%	Volumni udio martenzita
$X^{(N-1)}$	%	Volumni udio novonastale faze nastao u prethodnih *N-1* koraka
$X_B^{(N-1)}$	%	Volumni udio bainita nastao u prethodnih *N-1* koraka ohlađivanja
$X_F^{(N-1)}$	%	Volumni udio ferita nastao u prethodnih *N-1* koraka ohlađivanja
$X_P^{(N-1)}$	%	Volumni udio perlita nastao u prethodnih *N-1* koraka ohlađivanja
Δx	m	Udaljenost
$\Delta X^{(N)}$	%	Volumni udio novonastale faze nastao za vrijeme koraka pretvorbe *N*
$\Delta X_B^{(N)}$	%	Volumni udio bainita nastao za vrijeme koraka ohlađivanja *N*
$\Delta X_F^{(N)}$	%	Volumni udio ferita nastao za vrijeme koraka ohlađivanja *N*
$\Delta X_P^{(N)}$	%	Volumni udio perlita nastao za vrijeme koraka ohlađivanja *N*
y^D	m	Efektivna difuzijska udaljenost
Y	-	Bezdimenzijski koeficijent
α	K^{-1}	Koeficijent toplinskog rastezanja
α	-	Parametar (kod TP)
α	-	Konstanta
γ	-	Konstanta očvršćivanja
γ	$J\ mol^{-1}\ mm^{-2}$	Specifična energija po jedinici površine
γ_B	$J\ mm^{-2}$	Rad pri rastu pukotine odvajanjem preko granice kristalnog zrna
γ_m	$J\ mm^{-2}$	Rad pri rastu pukotine odvajanjem unutar kristalnog zrna
γ_s	$J\ mm^{-2}$	Specifična površinska energija pukotine
δ_{ij}	-	Kroneckerov tenzor
Δ	-	Strukturna dilatacija
ε	-	Deformacija
ε^e	-	Elastična deformacija
ε^p	-	Plastična deformacija
ε^{th}	-	Toplinska deformacija
ε^{tr}	-	Deformacija uslijed mikrostrukturnih pretvorbi
ε^{tp}	-	Deformacija uslijed transformacijske plastičnosti
λ	$W\ m^{-1}\ K^{-1}$	Toplinska vodljivost

SIMBOL	JEDINICA	NAZIV
μ_i	J mol^{-1}	Kemijski potencijal komponente *i*
ν	-	Poissonov koeficijent
ρ	kg m^{-3}	Gustoća
ρ	mm^{-2}	Gustoća dislokacija
σ	N mm^{-2}	Naprezanje
σ_c	N mm^{-2}	Kritično naprezanje
σ_E	N mm^{-2}	Granica elastičnosti
σ_f	N mm^{-2}	Lomno naprezanje
σ_i	N mm^{-2}	Otpor gibanju dislokacija na kliznim ravninama
$\sigma_{teč}$, σ_Y	N mm^{-2}	Naprezanje pri kojem dolazi do tečenja
τ	N mm^{-2}	Smično naprezanje
τ_i	N mm^{-2}	Povratno naprezanje koje se suprotstavlja gibanju novih dislokacija
ϑ	°C	Temperatura
ξ	%	Normirani volumni udio nove faze
ξ_B	%	Normirani volumni udio bainita
ξ_F	%	Normirani volumni udio ferita
ξ_P	%	Normirani volumni udio perlita
$\xi_B^{(N-1)}$	%	Normirani volumni udio bainita nastao u prethodnih *N-1* koraka pretvorbe
$\xi_F^{(N-1)}$	%	Normirani volumni udio ferita nastao u prethodnih *N-1* koraka pretvorbe
$\xi_P^{(N-1)}$	%	Normirani volumni udio perlita nastao u prethodnih *N-1* koraka pretvorbe
$\Delta\xi_B^{(N)}$	%	Normirani volumni udio bainita nastao za vrijeme koraka pretvorbe *N*
$\Delta\xi_F^{(N)}$	%	Normirani volumni udio ferita nastao za vrijeme koraka pretvorbe *N*
$\Delta\xi_P^{(N)}$	%	Normirani volumni udio perlita nastao za vrijeme koraka pretvorbe *N*

OZNAKA	ZNAČENJE
A	Austenit
B	Bainit
BCC	Volumno centrirana kubična rešetka
CCT	Dijagram faznih pretvorbi pri kontinuiranom ohlađivanju
DP	Difuzijska pretvorba
F	Ferit
FCC	Površinski centrirana kubična rešetka
Fe_3C	Cementit
IT	Dijagram faznih pretvorbi u izotermičkim uvjetima
M	Martenzit
MP	Martenzitna prtevorba
P	Perlit
TP	Transformacijska plastičnost
TTT	Dijagram faznih pretvorbi
α	Novonastala faza
α	Ferit
α_M	Prezasićeni ferit
α_{ac}	Acirkularni ferit
γ	Primarna faza
γ	Austenit

Popis slika

Sl. 2.1. Fizikalni procesi pri gašenju čelika

Sl. 2.2. Promjena koncentracija faza pri feritnoj pretvorbi

Sl. 2.3. Fe-Fe_3C dijagram

Sl. 2.4. Utjecaj temperature na srednju brzinu perlitne pretvorbe

Sl. 2.5. Shematski prikaz perlitne pretvorbe

Sl. 2.6. a) Karakteristične koncentracije faza pri perlitnoj pretvorbi; b) profil koncentracija faza pri izlučivanju proeutektoidnog ferita; c) profil koncentracija faza pri eutektoidnoj pretvorbi

Sl. 2.7. Rast iglica martenzita

Sl. 2.8. Shematski prikaz bainitne pretvorbe

Sl. 2.9. a) Karakteristične koncentracije faza pri bainitnoj pretvorbi; b, c, d) profil koncentracija faza

Sl. 2.10. Shematski prikaz nastanka: a) gornjeg bainita, b) donjeg bainita

Sl. 2.11. CCT dijagram čelika 34Cr4

Sl. 2.12. Shematski prikaz utjecaja temperature na Gibbsovu slobodnu energiju faza

Sl. 2.13. Promjena Gibbsove slobodne energije pri nukleaciji klice nove faze

Sl. 2.14. Shematski prikaz Gibbsove slobodne energije ferita i austenita

Sl. 2.15. Osnovne varijante IT dijagrama: a) ugljični i nisko-legirani čelici bez karbidotvornih elemenata, b) legirani čelici s karbidotvornim elementima, do 0.4-0.5 % C, c) legirani čelici s Cr, Ni, Mo, W, do 0.2-0.25 % C, d) legirani čelici s karbidotvornim elementima, iznad 0.4-0.5 % C, e) visoko-legirani čelici visokog udjela Cr, f) visoko-legirani austenitni čelici

Sl. 2.16. Utjecaj legirajućih elemenata na CCT dijagram

Sl. 3.1. Shematski prikaz primjene adicijskog pravila i IT dijagrama

Sl. 3.2. IT dijagram čelika 42CrMo4

Sl. 3.3. Usporedba eksperimenatalnih i numeričkih krivulja izotermičkog raspada austenita čelika 42CrMo4

Sl. 4.1. Krivulja stvarno naprezanje – stvarna deformacija
Sl. 4.2. Shematski prikaz pada granice razvlačenja pri martenzitnoj pretvorbi
Sl. 4.3. Model formiranja mikropukotine gomilanjem bridnih dislokacija
Sl. 4.4. Ovisnost tvrdoće i granice razvlačenja mikrostrukturnih sastojaka o udjelu ugljika u čeliku
Sl. 4.5. Utjecaj temperature na mehanička i fizikalna svojstava mikrokonstituenata čelika
Sl. 4.6. Shematski prikaz utjecaja temperature na dijagram naprezanje-deformacija
Sl. 4.7. Utjecaj temperature na granicu razvlačenja mikrokonstituenata eutektoidnog čelika
Sl. 4.8. Temperaturna ovisnost granice razvlačenja mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika
Sl. 4.9. Temperaturna ovisnost modula plastičnosti mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika
Sl. 4.10. Modelirana temperaturna ovisnost koeficijenta deformacijskog očvršćivanja mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika
Sl. 4.11. Modelirana temperaturna ovisnost eksponenta deformacijskog očvršćivanja mikrostrukturnih sastojaka ugljičnog čelika
Sl. 4.12. Temperaturna ovisnost koeficijenta transformacijske plastičnosti čelika 100Cr6
Sl. 4.13. Usporedba vrijednosti konstante *k*
Sl. 4.14. Shematski prikaz prijelaza iz duktilnog u krhki lom

Sl. 5.1. Usporedba eksperimentalnih i izračunatih vrijednosti tvrdoće feritno-perlitne mikrostrukture podeutektoidnih čelika
Sl. 5.2. Rezultati predviđanja tvrdoće perlita čelika 42CrMo4
Sl. 5.3. Usporedba eksperimentalnih i izračunatih vrijednosti tvrdoće martenzitne mikrostrukture podeutektoidnih čelika
Sl. 5.4. Usporedba eksperimentalnih i izračunatih vrijednosti tvrdoće bainitne mikrostrukture podeutektoidnih čelika
Sl. 5.5. Rezultati predviđanja tvrdoće bainita čelika 42CrMo4
Sl. 5.6. Usporedba eksperimentalnih i predviđenih vrijednosti tvrdoće podeutektoidnih čelika u ovisnosti o temperaturi izotermičke pretvorbe

Sl. 6.1. Shematski prikaz računalnog programa ohlađivanja uzorka
Sl. 6.2. Simulacijski algoritam raspada austenita pri gašenju čelika
Sl. 6.3. Korisničko sučelje programa za zadavanje gustoće mreže
Sl. 6.4. Korisničko sučelje programa za zadavanje parametara gašenja
Sl. 6.5. Mikrostruktura površine pokusnog uzorka čelika 42CrMo4 nakon gašenja, nagrizano 3 %-tnom HNO_3 u alkoholu, povećanje 500:1
Sl. 6.6. Mikrostruktura jezgre pokusnog uzorka čelika 42CrMo4 nakon gašenja, nagrizano 3 %-tnom HNO_3 u alkoholu, povećanje 500:1
Sl. 6.7. Shematski prikaz pozicija ispitivanja tvrdoće
Sl. 6.8. Uzorak za računalnu simulaciju
Sl. 6.9. Raspodjela volumnih udjela ferita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)
Sl. 6.10. Raspodjela volumnih udjela ferita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)
Sl. 6.11. Raspodjela volumnih udjela perlita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)
Sl. 6.12. Raspodjela volumnih udjela perlita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)
Sl. 6.13. Raspodjela volumnih udjela bainita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)
Sl. 6.14. Raspodjela volumnih udjela bainita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)
Sl. 6.15. Raspodjela volumnih udjela martenzita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)
Sl. 6.16. Raspodjela volumnih udjela martenzita nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)
Sl. 6.17. Raspodjela ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek A-A (slika 6.8), b) presjek B-B (slika 6.8)
Sl. 6.18. Raspodjela ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja u poprečnim presjecima uzorka: a) presjek C-C (slika 6.8), b) presjek D-D (slika 6.8)

Popis tablica

Tab. 2.1. Koeficijenti difuzije za C, Fe, Cr, Ni, Mn
Tab. 2.2. Mehanizmi mikrostrukturnih pretvorbi
Tab. 2.3. Vrijednosti parametra *n*
Tab. 2.4. Legirajući elementi čelika te njihov utjecaj na svojstva čelika
Tab. 2.5. Kritične temperature feritne pretvorbe
Tab. 2.6. Kritične temperature perlitne pretvorbe
Tab. 2.7. Kritične temperature martenzitne pretvorbe
Tab. 2.8. Kritične temperature bainitne pretvorbe

Tab. 3.1. Kemijski sastav podeutektoidnih čelika
Tab. 3.2. Vrijednosti termodinamičkih konstanti podeutektoidnih čelika

Tab. 4.1. Vrijednosti parametara *n* i *K* za čelike pri sobnoj temperaturi
Tab. 4.2. Izrazi za izračunavanje vrijednosti koeficijenta transformacijske plastičnosti
Tab. 4.3. Koeficijenti transformacijske plastičnosti čelika 42CrMo4
Tab. 4.4. Izrazi za izračunavanje vrijednosti funkcije *f*(*P*)
Tab. 4.5. Utjecaj mikrostrukturnih parametara na lomnu žilavost čelika
Tab. 4.6. Utjecaj mikrostrukturnih parametara na specifičnu oslobođenu elastičnu energiju
Tab. 4.7. Mehanička i fizikalna svojstava čelika 42CrMo4

Tab. 5.1. Vrijednosti tvrdoće feritno–perlitne mikrostrukture te udjela ferita i perlita za različite temperature izotermičke pretvorbe podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika
Tab. 5.2. Vrijednosti tvrdoće martenzitne mikrostrukture podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika
Tab. 5.3. Vrijednosti tvrdoće bainita za različite temperature izotermičke pretvorbe podeutektoidnih, nisko-legiranih čelika

Tab. 6.1. Kemijski sastav čelika 42CrMo4
Tab. 6.2. Parametri postupka kaljenja pokusnog uzorka

Tab. 6.3. Tvrdoća pokusnog uzorka čelika 42CrMo4 nakon gašenja

Tab. 6.4. Predviđene minimalne i maksimalne vrijednosti volumnih udjela ferita, perlita, bainita i martenzita nakon gašenja

Tab. 6.5. Predviđene minimalne i maksimalne vrijednosti ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja

Tab. 6.6. Usporedba predviđenih i eksperimentalnih vrijednosti volumnih udjela mikrostrukturnih sastojaka i ukupne tvrdoće mikrostrukture čelika nakon gašenja

Prilog

Program za izračunavanje volumnih udjela mikrostrukturnih sastojaka i tvrdoće pri gašenju čelika

```
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! IZRACUNAVANJE MIKROSTRUKTURNIH UDJELA
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
SUBROUTINE
MICRO(TT,DELTAT,AE3,AE1,BS,aMS,SUMAF,SUMAP,SUMAB,SUMAM,HVUK,IMIN,IMAX,JMIN,JMAX,KZZMIN,KZZ
MAX,KEM)
        DIMENSION AMIFN(200,200,200),SUMAFN(200,200,200),AMIFS(200,200,200),SUMAF(200,200,200)
        DIMENSION AMIPN(200,200,200),SUMAPN(200,200,200),AMIPS(200,200,200),SUMAP(200,200,200)
        DIMENSION AMIBN(200,200,200),SUMABN(200,200,200),AMIBS(200,200,200),SUMAB(200,200,200)
        DIMENSION alnAMIFN(200,200,200),alnAMIPN(200,200,200)
        DIMENSION SUMAM(200,200,200)
        DIMENSION
HVFUK(200,200,200),HVPUK(200,200,200),HVBUK(200,200,200),HVMUK(200,200,200),HVUK(200,200,200)
        DIMENSION TT(200,200,200)
        REAL KEM(10)
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! IZRACUNAVANJE TERMODINAMICKIH KONSTANTI NA TEMELJU KEMIJSKOG SASTAVA
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
!Konstante feritne pretvorbe
ak1=250000
ak2=exp(-4.02-11.11*KEM(1)-1.99*KEM(6)+20.76*KEM(8)-40.99*KEM(9))
an1=6.23-2.25*KEM(1)-0.81*KEM(6)+5.17*KEM(8)-8.83*KEM(9)
!Konstante perlitne pretvorbe
ak3=106003024.20-51200507.88*KEM(1)-19751485.43*KEM(6)-256581910.00*KEM(8)+25605277.23*KEM(9)
ak4=exp(-33.63+61.93*KEM(1)-15.96*KEM(6)+6.20*KEM(8)-3.60*KEM(9))
ak5=97606.14-488262.55*KEM(1)+134064.43*KEM(6)+28612.33*KEM(8)+29497.32*KEM(9)
!Konstante bainitne pretvorbe
ak6=190361.38-288009.61*KEM(1)-76052.87*KEM(6)-693123.59*KEM(8)+78021.58*KEM(9)
ak7=exp(10.37+24.69*KEM(1)+1.24*KEM(6)-9.98*KEM(8)+2.63*KEM(9))
ak8=exp(81.35-73.62*KEM(1)-16.43*KEM(6)-127.88*KEM(8)+14.57*KEM(9))
anB=1.57+1.74*KEM(1)-0.47*KEM(6)-1.79*KEM(8)+0.16*KEM(9)
a0=-1.0130+3.7800*KEM(1)+1.8340*KEM(6)+4.2012*KEM(8)+0.4655*KEM(9)
a1=0.003525-0.006847*KEM(1)-0.002777*KEM(6)-0.006653*KEM(8)-0.001100*KEM(9)
!Ostale konstantne velicine
S=170153
D0=0.000023
Qdif=148000
R=8.314
```

```
c0=KEM(1)
DO 6 KZZ=KZZMIN,KZZMAX
DO 6 J=JMIN,JMAX
DO 6 I=IMIN,IMAX
IF (TT(I,J,KZZ).EQ.298.OR.TT(I,J,KZZ).GE.AE3) GOTO 66
IF(TT(I,J,KZZ).LT.AE3.AND.TT(I,J,KZZ).GE.BS)THEN
!CCCCCCCCCCCCCCCCC
! FERITNA PRETVORBA
!CCCCCCCCCCCCCCCCC
IF(TT(I,J,KZZ).LT.AE3.AND.TT(I,J,KZZ).GE.AE1)VrF=((AE3-TT(I,J,KZZ))/(AE3-AE1))*(c0/0.8)
IF(TT(I,J,KZZ).LT.AE1.AND.TT(I,J,KZZ).GE.BS)VrF=((TT(I,J,KZZ)-BS)/(AE1-BS))*(c0/0.8)
IF(VrF.LT.0.01)VrF=0.01
IF(VrF.GT.0.99)VrF=0.99
IF(SUMAF(I,J,KZZ)/VrF.GT.0.99)GOTO 30
SUMFN=SUMAF(I,J,KZZ)/VrF
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje kinetickog parametra
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
dTemp1=AE3-TT(I,J,KZZ)
ca=0.1592-0.00013423*TT(I,J,KZZ)
cg=1186.661*exp(-0.0072834*TT(I,J,KZZ))
alnakf=log(S)+4*log(D0)
alnakf=alnakf-(4*Qdif/(R*TT(I,J,KZZ)))
alnakf=alnakf-(ak1/(R*TT(I,J,KZZ)*dTemp1**2))
alnakf=alnakf+3*log((cg-c0)/(cg-ca))
alnakf=alnakf+3*log(dTemp1**an1/ak2)
IF(VrF.gt.0.000001)THEN
alnVrF=log(VrF)
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje normiranog udjela
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
alnAMIFN(I,J,KZZ)=log(4.0)+0.25*(alnakf-alnVrF)
AMIFN(I,J,KZZ)=EXP(alnAMIFN(I,J,KZZ))
AMIFN(I,J,KZZ)=AMIFN(I,J,KZZ)*(LOG(1/(1-SUMFN)))**0.75
AMIFN(I,J,KZZ)=AMIFN(I,J,KZZ)*(1-SUMFN)*DELTAT
ELSE
AMIFN(I,J,KZZ)=0
END IF
SUMAFN(I,J,KZZ)=SUMAFN(I,J,KZZ)+AMIFN(I,J,KZZ)
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje stvarnog udjela
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
AMIFS(I,J,KZZ)=AMIFN(I,J,KZZ)*VrF
SUMAF(I,J,KZZ)=SUMAF(I,J,KZZ)+AMIFS(I,J,KZZ)
IF(SUMAF(I,J,KZZ).GE.VrF)SUMAFN(I,J,KZZ)=0.99
IF(SUMAFN(I,J,KZZ).GE.0.99)SUMAF(I,J,KZZ)=VrF
IF(SUMAF(I,J,KZZ).LT.0)SUMAF(I,J,KZZ)=0
```

```
30 CONTINUE
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje tvrdoce
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
HVF=200
HVFUK(I,J,KZZ)=SUMAF(I,J,KZZ)*HVF
END IF
IF(TT(I,J,KZZ).LT.AE1.AND.TT(I,J,KZZ).GE.aMS)THEN
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! PERLITNA PRETVORBA
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
IF(TT(I,J,KZZ).LT.AE1.AND.TT(I,J,KZZ).GE.BS)VrP=1-VrF
IF(TT(I,J,KZZ).LT.AE1.AND.TT(I,J,KZZ).GE.BS.AND.VrF.LT.SUMAF(I,J,KZZ))VrP=1-SUMAF(I,J,KZZ)
IF(TT(I,J,KZZ).LT.BS.AND.TT(I,J,KZZ).GE.aMS)VrB=a0+a1*TT(I,J,KZZ)
IF(TT(I,J,KZZ).LT.BS.AND.TT(I,J,KZZ).GE.aMS)VrP=1-VrB
IF(SUMAP(I,J,KZZ)/VrP.GT.0.99)GOTO 31
SUMPN=SUMAP(I,J,KZZ)/VrP
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje kinetickog parametra
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
dTemp2=AE1-TT(I,J,KZZ)
cga=9.6782-0.00882*TT(I,J,KZZ)
cgfe3c=-0.5248+0.00128*TT(I,J,KZZ)
alnakp=log(S)+4*log(D0)
alnakp=alnakp-(4*(Qdif+ak5)/(R*TT(I,J,KZZ)))
alnakp=alnakp-(ak3/(R*TT(I,J,KZZ)*dTemp2**2))
alnakp=alnakp+3*log(cga-cgfe3c)
alnakp=alnakp+3*log(dTemp2)
alnakp=alnakp-4*log(ak4)
IF(VrP.gt.0.000001)THEN
alnVrP=log(VrP)
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje normiranog udjela
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
alnAMIPN(I,J,KZZ)=log(4.0)+0.25*(alnakp-alnVrP)
AMIPN(I,J,KZZ)=EXP(alnAMIPN(I,J,KZZ))
AMIPN(I,J,KZZ)=AMIPN(I,J,KZZ)*(LOG(1/(1-SUMPN)))**0.75
AMIPN(I,J,KZZ)=AMIPN(I,J,KZZ)*(1-SUMPN)*DELTAT
ELSE
AMIPN(I,J,KZZ)=0
END IF
SUMAPN(I,J,KZZ)=SUMAPN(I,J,KZZ)+AMIPN(I,J,KZZ)
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje stvarnog udjela
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
AMIPS(I,J,KZZ)=AMIPN(I,J,KZZ)*VrP
SUMAP(I,J,KZZ)=SUMAP(I,J,KZZ)+AMIPS(I,J,KZZ)
```

```
IF(SUMAP(I,J,KZZ).GE.VrP)SUMAPN(I,J,KZZ)=0.99
IF(SUMAPN(I,J,KZZ).GE.0.99)SUMAP(I,J,KZZ)=VrP
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje tvrdoce
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
SUMHVP=HVPUK(I,J,KZZ)
HVP=116.339+279.608*c0+8.6262*c0*(dTemp2**0.5)
HVPUK(I,J,KZZ)=AMIPS(I,J,KZZ)*HVP
HVPUK(I,J,KZZ)=SUMHVP+AMIPS(I,J,KZZ)*HVP
31 CONTINUE
END IF
IF(TT(I,J,KZZ).LT.BS.AND.TT(I,J,KZZ).GE.aMS)THEN
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! BAINITNA PRETVORBA
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
IF(SUMABN(I,J,KZZ).GE.0.99)GOTO 32
SUMBN=SUMAB(I,J,KZZ)/(VrB*(1-SUMAF(I,J,KZZ)))
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje kinetickog parametra
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
dTemp1=AE3-TT(I,J,KZZ)
akb=TT(I,J,KZZ)**(-0.5)*D0
akb=akb*exp(-(Qdif+ak6)/(R*TT(I,J,KZZ)))
akb=akb*exp(-ak7/(R*TT(I,J,KZZ)*dTemp1**2))
akb=akb*ak8
IF(VrB.gt.0.000001)THEN
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje normiranog udjela
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
AMIBN(I,J,KZZ)=anB*(akb/VrB)**(1/anB)
AMIBN(I,J,KZZ)=AMIBN(I,J,KZZ)*(LOG(1/(1-SUMBN)))**(1-1/anB)
AMIBN(I,J,KZZ)=AMIBN(I,J,KZZ)*(1-SUMBN)*DELTAT
ELSE
AMIBN(I,J,KZZ)=0
END IF
SUMABN(I,J,KZZ)=SUMBN+AMIBN(I,J,KZZ)
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje stvarnog udjela
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
AMIBS(I,J,KZZ)=AMIBN(I,J,KZZ)*VrB*(1-SUMAF(I,J,KZZ))
SUMAB(I,J,KZZ)=SUMAB(I,J,KZZ)+AMIBS(I,J,KZZ)
IF(SUMAB(I,J,KZZ).GE.VrB*(1-SUMAF(I,J,KZZ)))SUMABN(I,J,KZZ)=0.99
IF(SUMAB(I,J,KZZ).LT.0)SUMAB(I,J,KZZ)=0
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
! Izracunavanje tvrdoce
!CCCCCCCCCCCCCCCCCCC
SUMHVB=HVBUK(I,J,KZZ)
```

```
HRCM=19.51+57.58*c0**0.5
HVM=0.0045*HRCM**3-0.2294*HRCM**2+8.983*HRCM+102.76     !KONVERZIJA IZ HRCM U HVM
HVB=26.3492+HVP*(TT(I,J,KZZ)/BS)+1.0241*HVM*((BS-TT(I,J,KZZ))/BS)*((AE1-TT(I,J,KZZ))/AE1)**0.4
HVBUK(I,J,KZZ)=AMIBS(I,J,KZZ)*HVB
HVBUK(I,J,KZZ)=SUMHVB+AMIBS(I,J,KZZ)*HVB
32 CONTINUE
END IF
IF(TT(I,J,KZZ).LT.aMS)THEN
SUMAM(I,J,KZZ)=1-SUMAF(I,J,KZZ)-SUMAP(I,J,KZZ)-SUMAB(I,J,KZZ)     !UDIO MARTENZITA
HVMUK(I,J,KZZ)=SUMAM(I,J,KZZ)*HVM     !TVRDOCA MARTENZITA
HVUK(I,J,KZZ)=HVFUK(I,J,KZZ)+HVPUK(I,J,KZZ)+HVBUK(I,J,KZZ)+HVMUK(I,J,KZZ)     !UKUPNA TVRDOCA
END IF
66 CONTINUE
6 CONTINUE
RETURN
END SUBROUTINE
```

Životopis

Sunčana Smokvina Hanza rođena je 15. prosinca 1973. godine u Rijeci. Osnovnu školu pohađala je u Matuljima, a srednju školu u Rijeci, pri Centru za kadrove u obrazovanju i kulturi, gdje je maturirala 1992. godine.

Sveučilišni studij strojarstva na Tehničkom fakultetu Sveučilišta u Rijeci upisala je 1992. godine. Diplomirala je na konstrukcijskom smjeru u prosincu 1997. godine s radom *Pogonski most kamiona s bočnim reduktorom*, pod mentorstvom mr. sc. Željka Orlića, dipl. ing. Bila je dobitnica stipendije Sveučilišta u Rijeci za najbolje studente završnih godina.

U srpnju 1998. godine zaposlila se u Brodogradilištu *3. Maj* kao projektantica u Uredu strojnih sistema. Od listopada 2000. godine do svibnja 2010. godine radila je kao znanstvena novakinja na Zavodu za materijale Tehničkog fakulteta Sveučilišta u Rijeci gdje je upisana na Poslijediplomski doktorski studij strojarstva, smjer *Proizvodno strojarstvo*.

Za vrijeme rada na Tehničkom fakultetu, sudjelvala je u nastavi izvođenjem vježbi iz kolegija *Materijali II* na Sveučilišnim preddiplomskim studijima strojarstva i brodogradnje, *Tehnologija materijala* na Sveučilišnom preddiplomskom studiju elektrotehnike, *Materijali* na Stručnim studijima strojarstva i brodogradnje te *Materijali i tehnološki postupci* na Stručnom studiju elektrotehnike.

U okviru *CEEPUS* mreže razmjene studenata, u svibnju 2001. godine boravila je mjesec dana na Sveučilištu u Plzenu, Republika Češka, na Katedri za inženjerstvo materijala.

Od 2000. godine sudjelovala je u više znanstvenoistraživačkih projekata, od kojih se ističu projekti Ministarstva znanosti, obrazovanja i športa: *Računalne simulacije i razvoj materijala* (projekt br. 120004), *Razvoj materijala i procesa računalnim modeliranjem* (projekt br. 0120032) te projekt *Optimiranje parametara i predviđanje rezultata toplinske obrade metala* (projekt br. 069-1201780-2986). Koautorica je 22 znanstvena rada koji su objavljeni u časopisima te u zbornicima skupova.

Aktivno se služi engleskim jezikom. Udana je i majka jednog djeteta.