

Popis výsledku – software

Název: Výpočet aktivit prvků, rovnovážné aktivity kyslíku a rozpustnosti plynů

Autor: doc. Ing. Antonín Záděra, Ph.D. (ÚST odbor slévárenství FSI, VUT v Brně)
doc. Ing. Jaroslav Šenberger, CSc. (ÚST odbor slévárenství FSI, VUT v Brně)
Ing. Václav Kaňa, Ph.D. (ÚST odbor slévárenství FSI, VUT v Brně)
Ing. Vítězslav Pernica (ÚST odbor slévárenství FSI, VUT v Brně)
Mgr. Pavel Bartůšek (externí spolupracovník)

Popis:

V rámci projektu TA03011098 byl sestaven termodynamický model v programovém prostředí Access. Ukázka jednotlivých listů sestaveného programu je uvedena na **obr. 1** – **obr. 6**. Na **obr. 1** jsou uvedeny vstupní data, zejména koncentrace jednotlivých prvků v tavenině (chemické složení oceli), aktivity vybraných produktů reakce prvků s kyslíkem a teplotní rozmezí. Pro dané složení jsou s využitím vložené databáze interakčních koeficientů vypočteny aktivity prvků obsažených v tavenině.

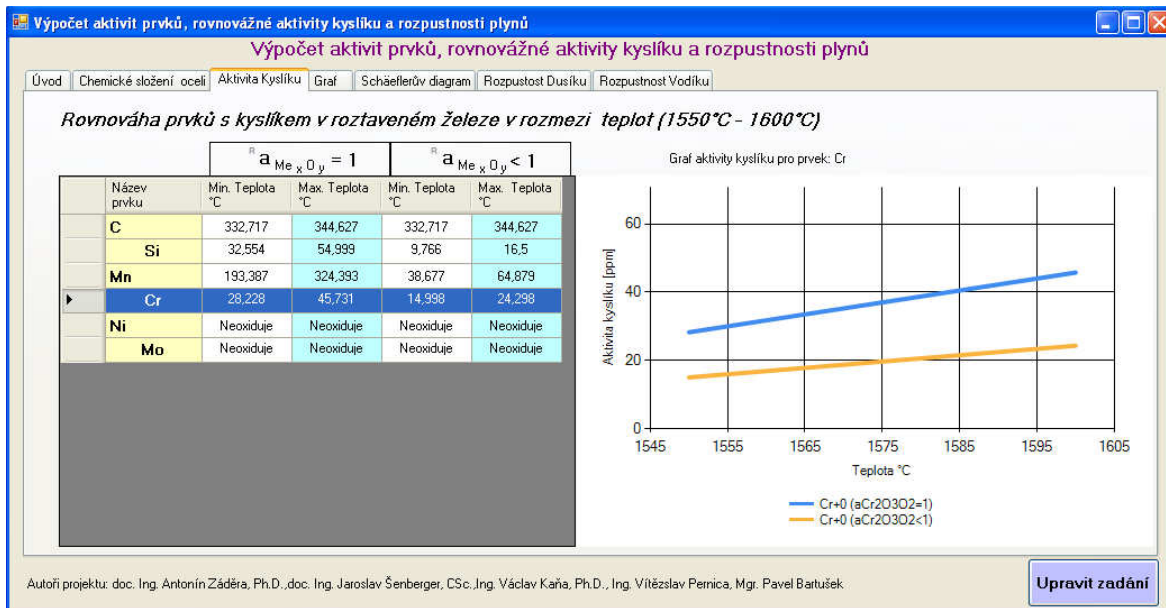
The screenshot shows a software window titled "Výpočet aktivit prvků, rovnovážné aktivity kyslíku a rozpustnosti plynů". The window has a menu bar with options: Úvod, Chemické složení oceli, Aktivity Kyslíku, Graf, Schaefflerův diagram, Rozpustnost Dusíku, and Rozpustnost Vodíku. The main area is divided into several sections:

- Chemické složení oceli:** A table of input fields for element concentrations: C (0.2), Si (0.5), Mn (1), Cr (26), Ni (7), Mo (4), Cu (4), N (0.018), Al (0), Nb (0), V (0), Ti (0), Zr (0), Ca (0), Ce (0).
- Aktivity produktů dezoxidace:** Input fields for activities of Al₂O₃ (0.1), Cr₂O₃ (0.15), SiO₂ (0.09), and MnO (0.2).
- Teplota °C:** Input fields for "Minimální teplota" (1550 °C) and "Maximální teplota" (1600 °C).
- Aktivity prvků v oceli:** A grid of empty output fields for elements C, Si, Mn, Cr, Ni, Mo, Cu, Al, Nb, V, Ti, Zr, Ca, Ce.

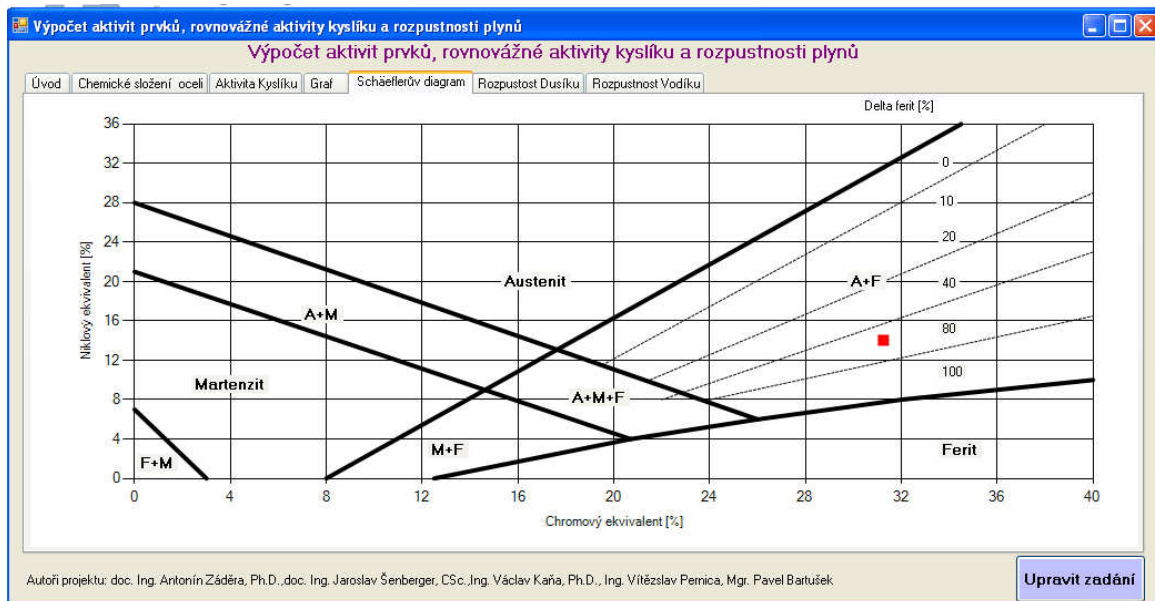
At the bottom left, there is a footer: "Autoři projektu: doc. Ing. Antonín Záděra, Ph.D., doc. Ing. Jaroslav Šenberger, CSc., Ing. Václav Kaňa, Ph.D., Ing. Vítězslav Pernica, Mgr. Pavel Bartůšek". At the bottom right, there is a prominent orange button labeled "Výpočet".

Obr. 1 List vstupních údajů programu dezoxidace oceli

Na druhém listu (**obr. 2**) jsou uvedeny vypočtené aktivity kyslíku v rovnováze s prvky obsaženými v tavenině. Výpočet je proveden pro dva případy. V prvním případě je uvažován vznik čistých oxidů daného prvku, tj. jsou uvažovány jednotkové Raoultovi aktivity produktů dezoxidace (${}^R a_{Me_xO_y} = 1$). Druhý případ výpočtu využívá nejednotkové aktivity produktů dezoxidace, tj. předpokládá vznik komplexních oxidů (${}^R a_{Me_xO_y} < 1$). Na listu je zobrazen i graf pro vybraný prvek, který je možno měnit podle požadavku kliknutím na vybraný prvek v tabulce.

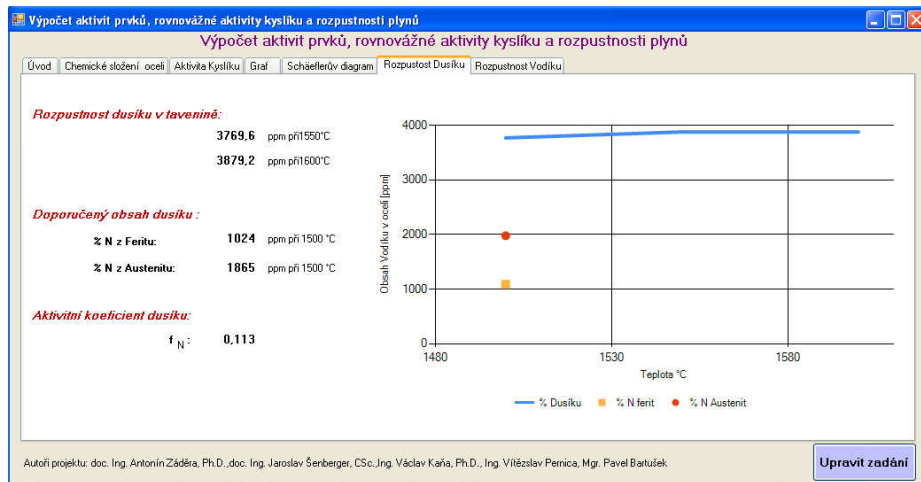


Obr. 2 List vypočtených aktivit kyslíku pro vybrané prvky v programu dezoxidace oceli
 V programu je dále vypočtena hodnota tzv. chromového a niklového ekvivalentu. Jeho hodnota je pro zadané chemické složení oceli vyznačena červeným bodem v Schaefflerově diagramu (**obr. 3**).



Obr. 3 Schaefflerův diagram v programu dezoxidace oceli

Důležitým parametrem při výrobě vysokolegovaných ocelí je maximální rozpustnost dusíku a vodíku v těchto ocelích. Pro zadané chemické složení oceli je vypočtena maximální rozpustnost vodíku a dusíku jednak v tavenině a dále v tuhé fázi. Výpočet rozpustnosti dusíku a vodíku v tuhé fázi je stanoven pro případ feritické a austenitické matrice oceli. Zobrazení výsledků v programu dezoxidace pro případ dusíku je uvedeno v **obr. 4**.



Obr. 4 Rozpustnost dusíku v tavenině a tuhé fázi v programu dezoxidace