

# 不锈钢中MnS夹杂物引起局部腐蚀的有限元模拟研究

金莹, 李文超

国家材料服役安全科学中心, 北京科技大学, 北京, 中国

**简介:** 设计了一个包含基质, 钝化膜和MnS夹杂物的三个电化学活性相的有限元方法模型来研究MnS夹杂物颗粒在不锈钢中的局部腐蚀。

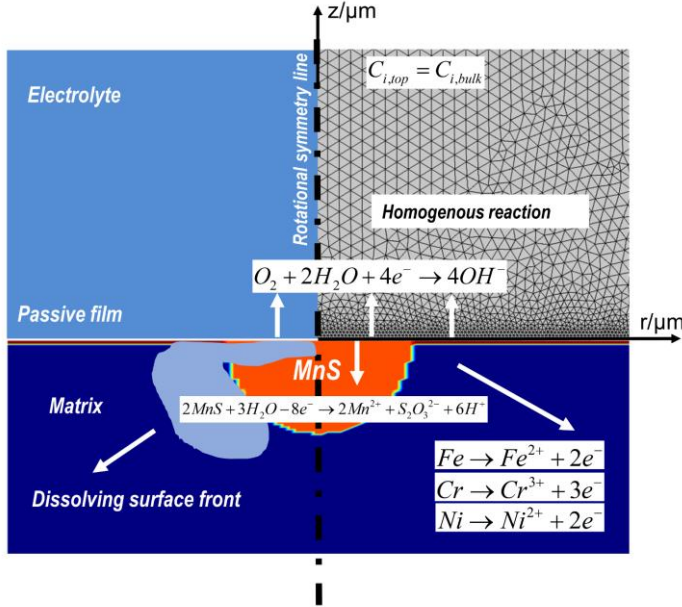


图 1. 腐蚀模型的示意图, 包括不锈钢基体, MnS夹杂物颗粒和钝化膜。图的右侧(网格区域)显示了本模型中使用的计算区域和边界条件

**计算方法:** 电极反应的边界条件是输入的电化学极化曲线数据, 电解质域内的动力学控制方程为能斯特普朗克方程、高斯定律以及电中性方程, 同时考虑了金属离子水解反应的动力学过程。

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\nabla(-D_i \nabla C_i + C_i u - Z_i m_i F C_i \nabla \phi_l) + R_i$$

$$i_l = F \sum_{i=1}^n Z_i (-D_i \nabla C_i - Z_i m_i F C_i \nabla \phi_l)$$

$$m_i = \frac{D_i}{RT} \quad \nabla_i l = 0 \quad \sum Z_i C_i = 0$$

$$R_i = k_{forward} \prod_r C_r^\xi(r, \theta, z, t) - k_{backward} \prod_p C_p^\zeta(r, \theta, z, t)$$

**结果:** 随着腐蚀的进行, 由于表面积变化, 三相之间的混合电势降低, 这随后引起MnS的极性转变。结果, MnS夹杂物首先溶解, 然后夹杂物和基质一起溶解, 最后, MnS的溶解停止, 仅基质溶解并在夹杂物下方形成沟槽, 沟槽中的O<sub>2</sub>浓度和pH值轻微降低。

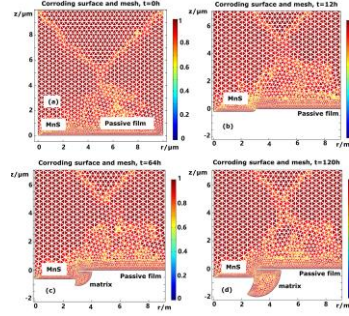


图 2. 腐蚀时间分别为 0 (a), 12 (b), 64 (c), 120 (d) 小时时的腐蚀表面和网格的大小和质量。三角形表示网格大小, 颜色表示网格质量。

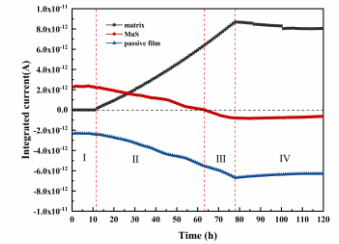


图 3. 积分电流在基质, MnS和无源膜上的时间演化。正值表示阳极电流, 负值表示阴极电流

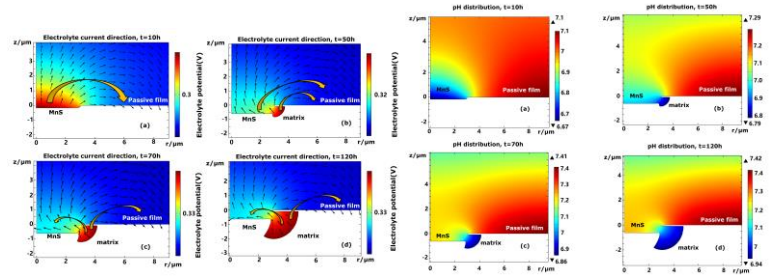


图 4. 在腐蚀时间分别为 10 (a), 50 (b), 70 (c), 120 (d) 小时的情况下, 基体/钝化膜/ MnS周围的电解液电流方向。箭头指示电流方向, 颜色指示电解质中的电势分布

图 5. 在腐蚀时间分别为 10 (a), 50 (b), 70 (c), 120 (d) pH分布。颜色表示局部pH值

**结论:** 基于不锈钢基体三相, MnS夹杂物和钝化膜之间的腐蚀动力学, 模拟了由微电流效应触发的嵌在不锈钢中的MnS夹杂物颗粒周围的局部腐蚀。数值模拟考虑了局部电化学反应, 传质, 均相反应的耦合, 并通过追踪腐蚀边界的运动来模拟了整个局部腐蚀过程的传播路径模拟结果表明, 这种微电腐蚀过程的演化是由MnS溶解开始的, 然后夹杂物和基体同时溶解, 最后MnS夹杂物停止溶解并变成阴极, 从而使基体变成唯一的阳极(“沟槽”过程)。还预测了腐蚀产物的沉积动力学和腐蚀区域周围的pH分布。

## 参考文献:

1. L. Yin, Y. Jin, C. Leygraf, and J. Pan, *Electrochim. Acta*, 192, 310 (2016). 32
2. L. Yin, Y. Jin, C. Leygraf, N. Birbilis, and J. Pan, *J. Electrochem. Soc.*, 164, C75 (2017)
3. L. Yin, Y. Jin, C. Leygraf, N. Birbilis, and J. Pan, *J. Electrochem. Soc.*, 164 (13) C768-C778 (2017)