

การโตแบบหลายชั้นในกระบวนการอะลูมิเนียมของนิกเกิลบริสุทธิ์ที่ปรับปรุงด้วยซิลิคอน



วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมโลหการและวัสดุ ภาควิชาวิศวกรรมโลหการ

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ปีการศึกษา 2562

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

Multilayer Growth in Silicon Modified Aluminizing of Pure Nickel



A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering in Metallurgical and Materials Engineering
Department of Metallurgical Engineering
Faculty of Engineering
Chulalongkorn University
Academic Year 2019
Copyright of Chulalongkorn University

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การโตแบบหลายชั้นในกระบวนการอะลูมิเนียมของนิกเกิล บริสุทธิ์ที่ปรับปรุงด้วยซิลิคอน
โดย	นายปรเมศวร์ เดชธรรมรงค์
สาขาวิชา	วิศวกรรมโลหการและวัสดุ
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก	รองศาสตราจารย์ ดร.ปฐมา วิสุทธิพิทักษ์กุล

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้หัวข้อวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่ง
ของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

.....	คณบดีคณะวิศวกรรมศาสตร์
(ศาสตราจารย์ ดร.สุพจน์ เตชวรสินสกุล)	
คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์	ประธานกรรมการ
.....	รองศาสตราจารย์ ดร.ธำชย เหลืองวารนนท์
.....	อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์หลัก
(รองศาสตราจารย์ ดร.ปฐมา วิสุทธิพิทักษ์กุล)	
.....	กรรมการภายนอกมหาวิทยาลัย
(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.นิติ ยงวณิชย์)	
.....	กรรมการภายนอกมหาวิทยาลัย
(ดร.วีระ สอิ่ง)	

5971429521 : MAJOR METALLURGICAL AND MATERIALS ENGINEERING

KEYWORD: Diffusion, Aluminizing, IN 738, Haynes 214

Poramet Dejthammarong : Multilayer Growth in Silicon Modified Aluminizing of Pure Nickel.

Advisor: Assoc. Prof. Patama Visuttipitukul, Ph.D.

Aluminizing is a technique to modify surface of material by adding aluminium atom into substrate. In case of nickel and nickel-based superalloys, aluminide intermetallics formed during aluminizing process are used for preventing oxidation at high temperatures. It is well known that an aluminizing is diffusion-controlled process so that the growth of aluminide layers is time- and temperature-dependence. Estimation of aluminide thickness requires the suitable diffusion coefficients of diffusants where the values, however, greatly depend on the chemical composition of matrix. The scope of this work is to develop a mathematical model using finite difference method to demonstrate the kinetics of aluminide layer growth. The assumptions of this model are as followings: (i) only Al atoms that diffuse into matrix without any outward diffusion and (ii) surface and interface composition are constant and are determined by phase diagram. The model has been validated using thicknesses of aluminide layer formed on nickel-chrome alloy substrate to calculate the diffusion coefficient. The diffusion coefficient obtained from this model is in good agreement with the diffusivity values reported by other researches. The present model can be divided into 2 parts first is 1 species of diffusant (Al) and second part is 2 species of diffusant (Al and Si). In 1 species of diffusant model was employed to estimate diffusion coefficient of aluminium atoms in aluminide layer of Inconel 738 (IN 738) and Haynes 214. The calculated frequency factor (D_0) of IN 738 and Haynes 214 are $4.10 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ and $4.73 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, respectively. The activation energy (Q) are $144.7 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ for IN 738 and $142.5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ for Haynes 214. In 2 species of diffusant model the diffusivity of Al and Si are $D_{\text{Al/Ni}_2\text{Al}_3} = 3.5 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ $D_{\text{Al/NiAl}} = 1.2 \times 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ $D_{\text{Si/Ni}_2\text{Al}_3} = 3.5 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ and $D_{\text{Si/NiAl}} = 1.0 \times 10^{-14} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

CHULALONGKORN UNIVERSITY

Field of Study: Metallurgical and Materials
Engineering

Student's Signature

Academic Year: 2019

Advisor's Signature

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์นี้สำเร็จลุล่วงไปด้วยดี ด้วยความช่วยเหลือจากหลายฝ่าย ผู้วิจัยขอกราบ
ขอบพระคุณที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ รองศาสตราจารย์ ดร.ปฐมา วิสุทธิพิทักษ์กุล ซึ่งได้กรุณาให้ความ
ช่วยเหลือและแนะนำแนวทางที่เป็นประโยชน์ต่องานวิจัยด้วยดีตลอดมา และขอกราบขอบพระคุณ
ผู้ช่วยศาสตราจารย์ สุวันชัย พงษ์สุกิจวัฒน์ ที่ได้ให้ความรู้และคำแนะนำแก่ผู้วิจัยด้วยดีตลอดมา
ตลอดจนขอขอบพระคุณคณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์ทุกท่าน ที่ให้คำแนะนำและข้อคิดเห็นที่เป็น
ประโยชน์ และขอขอบพระคุณเจ้าหน้าที่ประจำภาควิชาวิศวกรรมโลหการทุกท่านที่ได้ให้ความช่วยเหลือ
จนงานวิจัยสำเร็จลุล่วงไปด้วยดี

ท้ายนี้ผู้วิจัยขอกราบขอบพระคุณบิดา มารดา และครอบครัวที่สนับสนุนในด้านต่างๆ ด้วยดี
ตลอดจนสำเร็จการศึกษา และขอบคุณเพื่อนๆ พี่ๆ น้องๆ ที่ให้ความช่วยเหลือและเป็นกำลังใจแก่ผู้วิจัย
ด้วยดีเสมอมา



ปรเมศวร์ เดชธรรมรงค์

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย.....	ค
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ	ง
กิตติกรรมประกาศ	จ
สารบัญ.....	ฉ
สารบัญตาราง.....	ช
สารบัญรูปภาพ.....	ฌ
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 ที่มาและความสำคัญของปัญหา	1
1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย	1
1.3 ขอบเขตการศึกษา.....	2
1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ	2
บทที่ 2 ปรีทอร์ศน์วรรณกรรม.....	3
2.1 นิกเกิล (Nickel).....	3
2.2 โลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิล (Nickel-based superalloys).....	3
2.3 กระบวนการอะลูมิเนียมไนซิง (Aluminizing process).....	4
2.4 แบบจำลอง (Simulation)	8
บทที่ 3 ระเบียบวิธีการศึกษา	12
3.1 แบบจำลองตัวแพร่ 1 ชนิด 1 ชั้นสารประกอบ.....	12
3.1.1 เก็บข้อมูลของ IN 738 และ Haynes 214.....	12
3.1.2 แบบจำลองกายภาพ (Physical model) และระเบียบวิธีเชิงตัวเลขกรณีของตัวแพร่ 1 ชนิด 1 ชั้นสารประกอบ.....	13

3.1.3 การตรวจสอบความแม่นยำ (Validation).....	16
3.1.4 ค่าพลังงานกระตุ้น (Q) และ frequency factor (D_0).....	16
3.2 แบบจำลองตัวแปร 2 ชนิด 2 ชั้นสารประกอบ.....	17
3.2.1 ข้อมูลจากการทำอะลูมิเนียมในเชิงบนนิกเกิลบริสุทธิ์โดยมีซิลิคอนแปรร่วม.....	17
3.2.2 แบบจำลองกายภาพ (Physical model) และระเบียบวิธีเชิงตัวเลขกรณีของตัวแปร 2 ชนิด 2 ชั้นสารประกอบ.....	19
บทที่ 4 ผลการศึกษา.....	20
4.1 ผลการศึกษาแบบจำลองตัวแปร 1 ชนิด 1 ชั้นสารประกอบ	20
4.1.1 ผลการตรวจสอบความแม่นยำ (Validation result).....	20
4.1.2 ผลการประยุกต์ใช้ของแบบจำลองกับชิ้นงาน IN 738 และ Haynes 214.....	22
4.2 ผลการศึกษาแบบจำลองตัวแปร 2 ชนิด 2 ชั้นสารประกอบ	25
บทที่ 5 สรุปผลการทดลอง.....	29
บรรณานุกรม.....	32
ภาคผนวก.....	34
ประวัติผู้เขียน.....	55

สารบัญตาราง

ตาราง	หน้า
ตารางที่ 2.1 องค์ประกอบทางเคมีของโลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิล (Ni-based superalloys) กลุ่มต่างๆ [2]	4
ตารางที่ 3.1 สภาวะที่ทำการทดลองและเฟสที่เกิดของ IN 738 และ Haynes 214.....	12
ตารางที่ 3.2 โครงสร้างจุลภาคของชิ้นงานนิกเกิลที่ผ่านกระบวนการอะลูมิเนียมไนซิงโดยมี	17
ตารางที่ 3.3 ความหนาของชั้นฟิล์มในชิ้นงานที่เสื่อนไซที่มีการเจือ Si ในปริมาณต่าง ๆ.....	18
ตารางที่ 4.1 ความหนาของชั้นเคลือบจากแบบจำลองเทียบผลจากการทดลอง	27



สารบัญรูปภาพ

รูปภาพ	หน้า
รูปที่ 2.1 แผนภูมิสมดุลเฟสของระบบ Ni-Al [4].....	6
รูปที่ 2.2 ค่า Interdiffusion coefficient สำหรับสารประกอบโลหะ Ni_xAl_y ที่มีองค์ประกอบทางเคมีต่างกันในช่วงอุณหภูมิ 800-1,000 °C [6].....	7
รูปที่ 2.3 การแบ่งระยะห่างของชั้นงานสำหรับการคำนวณวิธีแบบซัดแจ็ง.....	10
รูปที่ 3.1 โครงสร้างจุลภาคของชั้นงานที่ผ่านการทำอะลูมิเนียมไนซิงของ IN 738 ที่อุณหภูมิ ก) 800°C ข) 900°C และ Haynes 214 ที่อุณหภูมิ ค) 700 °C ง) 800 °C จ) 900 °C	12
รูปที่ 3.2 แบบจำลองกายภาพของการแพร่แบบ 1 ชนิด.....	13
รูปที่ 3.3 ลักษณะของกราฟที่ได้จากสมการที่ 2.10	14
รูปที่ 3.4 แบบจำลองตำแหน่งของสมการเมื่อมีการเพิ่มเงื่อนไขต่าง ๆ.....	14
รูปที่ 3.5 กลไกการขยับ interface ด้วยสมดุลมวล.....	15
รูปที่ 4.1 ผลการคำนวณจากแบบจำลองของงานวิจัย (เส้นทึบสีส้ม) เทียบกับผลจากแบบจำลองของงานวิจัยของ J.M. Brossard (เส้นประสีดำ).....	20
รูปที่ 4.2 ผลการคำนวณจากแบบจำลองแสดงการควบคุมของกระบวนการแพร่เป็นแบบพาราโบลา.....	21
รูปที่ 4.3 ผลการคำนวณจากแบบจำลองบน IN 738 ได้ความหนาของชั้นเคลือบที่อุณหภูมิ 800 (A) และ 900 (B) องศาเซลเซียส เป็นขนาด 92.4 และ 187.0 μm ตามลำดับ.....	22
รูปที่ 4.4 ความสัมพันธ์ของ Arrhenius จากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้นเคลือบ Ni_2Al_3 กับอุณหภูมิในช่วง 800 – 900°C บนชั้นงาน IN 738.....	23
รูปที่ 4.5 ผลการคำนวณจากแบบจำลองบน Haynes 214 ได้ความหนาของชั้นเคลือบที่อุณหภูมิ 700 (A) 800 (B) และ 900 (C) °C เป็นขนาด 50.0 118.0 และ 218 μm ตามลำดับ	24
รูปที่ 4.6 ความสัมพันธ์ของ Arrhenius จากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้นเคลือบ Ni_2Al_3 กับอุณหภูมิในช่วง 700 - 900°C บนชั้นงาน Haynes 214	25

รูปที่ 4.7 แบบจำลองแสดงความหนาของชั้น diffusion layer และ inter-diffusion layer บนชิ้นงานที่มีการเติม Si ในปริมาณ 9 wt.%..... 27

รูปที่ 4.8 แบบจำลองแสดงความหนาของชั้น diffusion layer และ inter-diffusion layer บนชิ้นงานที่มีการเติม Si ในปริมาณ 13.5 wt.% 28

รูปที่ 4.9 แบบจำลองแสดงความหนาของชั้น diffusion layer และ inter-diffusion layer บนชิ้นงานที่มีการเติม Si ในปริมาณ 18 wt.%..... 28

รูปที่ 5.1 แสดงการเคลื่อนที่ของ moving interface ที่ steady state ($C_1 = C_0$) 30

รูปที่ 5.2 แสดงความสัมพันธ์ของความหนาของชั้น inter-diffusion layer และความเร็วของ interface เมื่อ $v_1 > v_2 > v_3$ และ $C_1 = 5 \text{ at.}\%$ 30



บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญของปัญหา

ในปัจจุบันอุตสาหกรรมมีการพัฒนาและปรับปรุงวัสดุแบบใหม่มาใช้งานเพื่อเพิ่มประสิทธิภาพและความหลากหลายในการใช้งานด้านต่าง ๆ หนึ่งในนั้นคือโลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิล (Ni-based superalloys) เนื่องจากมีความยืดหยุ่นในการใช้งานภายใต้สภาวะที่รุนแรง อีกทั้งยังคงความแข็งแรง (strength) และสมบัติต่าง ๆ ที่อุณหภูมิสูงได้ดีกว่าวัสดุชนิดอื่นเช่น ความต้านทานการกัดกร่อน (corrosion resistance) และออกซิเดชัน (oxidation resistance) ที่อุณหภูมิสูงทำให้โลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิลมีการใช้งานแพร่หลายในอุตสาหกรรมที่ต้องการสมบัติที่ดีที่อุณหภูมิสูง แต่ถึงแม้ว่าโลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิลจะมีสมบัติที่ดีในการใช้งานที่อุณหภูมิสูงแต่เมื่อมีการใช้เป็นระยะเวลาและ/หรือการใช้งานภายใต้สภาวะที่รุนแรงอาจทำให้โลหะกลุ่มนี้เกิดความเสียหายจากการกัดกร่อนและออกซิเดชันขึ้นได้ จึงมีการนำวิธีการปรับปรุงผิว (surface treatment) แบบต่าง ๆ มาประยุกต์ใช้งานกับโลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิลเพื่อป้องกันความเสียหายจากการกัดกร่อนและออกซิเดชันที่อุณหภูมิสูง เช่นการทำไนไตรดิง (Nitriding) คาร์บูไรซิง (Carburizing) และอะลูมิเนียมไนซิง (Aluminizing) เป็นต้น

งานวิจัยนี้จึงสร้างแบบจำลองการแพร่ขึ้นเพื่ออธิบายปรากฏการณ์ที่เกิดและเพื่อหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ (Diffusion coefficient) ในการควบคุมชั้นฟิล์มจากกระบวนการปรับปรุงผิว โดยสามารถนำเอาแบบจำลองนี้ไปประยุกต์ใช้กับวัสดุและการปรับปรุงผิวรูปแบบอื่นได้ อีกทั้งยังทำนายถึงผลลัพธ์โดยการประมาณค่าความหนาในการทดลองการปรับปรุงผิวก่อนการทดลองจริงโดยกำหนดเวลา อุณหภูมิและตัวแปรอื่น ๆ เพื่อประหยัดวัสดุและจำนวนการทดลองโดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ (Mathematical model)

1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย

เพื่อประมาณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของอะลูมิเนียมในชั้นสารประกอบนิกเกิลอะลูมิเนียมด้วยระเบียบวิธีผลต่างสี่เหลี่ยม

1.3 ขอบเขตการศึกษา

1. ประมาณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของอะลูมิเนียมในช่วงอุณหภูมิ 700 – 1,000 องศาเซลเซียส ($^{\circ}\text{C}$) เป็นเวลา 4 ชั่วโมง
2. ศึกษากระบวนการอะลูมิเนียมในเชิงแบบผงบอนนิกเกิลบริสุทธิ์

1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. สามารถประมาณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่จากการปรับปรุงผิวได้
2. สามารถนำแบบจำลองไปประยุกต์ใช้กับวัสดุชนิดอื่นได้
3. สามารถทำนายถึงความน่าจะเป็นในการทดลอง



บทที่ 2

ปริทรรศน์วรรณกรรม

2.1 นิกเกิล (Nickel)

นิกเกิลเป็นวัสดุที่มีความเหนียว (ductile) และความแกร่ง (toughness) สูงซึ่งเป็นผลจากการที่นิกเกิลมีโครงสร้างจุลภาคแบบ face centered cubic (FCC) นอกจากนี้นิกเกิลยังมีความสามารถในการใช้งานที่อุณหภูมิสูงได้ดีเนื่องจากโครงสร้างจุลภาคดังกล่าวไม่เกิดการเปลี่ยนแปลงตลอดช่วงอุณหภูมิการใช้งานจนถึงจุดหลอมเหลวที่อุณหภูมิ 1,453 องศาเซลเซียส (°C) กล่าวคือมีความเสถียรทางโครงสร้างในการใช้งานที่อุณหภูมิสูงเป็นอย่างมาก ส่งผลให้มีสมบัติเชิงกลค่อนข้างคงที่ในการใช้งาน ณ อุณหภูมิต่าง ๆ ในขณะที่วัสดุชนิดอื่นตัวอย่างเช่น เหล็ก (Fe) หรือ โคบอลต์ (Co) มีโครงสร้างที่อุณหภูมิห้องและอุณหภูมิสูงแตกต่างกัน ส่งผลให้มีสมบัติเชิงกลไม่คงที่หากนำไปใช้งานในสภาวะที่มีการเปลี่ยนแปลงของอุณหภูมิอาจนำมาซึ่งความเสียหายได้ นอกจากนี้นิกเกิลยังมีความต้านทานการกัดกร่อนได้ดีในสภาวะปกติ (normal atmosphere), น้ำสะอาด, สภาวะ non-oxidizing และในสภาวะการกัดกร่อนจากกลุ่มอัลคาไล (alkali) เป็นต้น นิกเกิลจึงมักถูกนำไปใช้เป็นธาตุผสม (alloying elements) ในวัสดุชนิดอื่น ๆ เนื่องจากช่วยเพิ่มความสามารถในการต้านทานการกัดกร่อน ความสามารถในการใช้งานที่อุณหภูมิสูงและยังเป็นตัวเสถียรเฟส FCC (FCC-stabilizer) ในบางโลหะผสมอีกด้วย จากความสามารถในการใช้งานที่ยืดหยุ่นและหลากหลายทำให้อุตสาหกรรมในปัจจุบันมีการพัฒนาและปรับปรุงนิกเกิลให้ดีขึ้นด้วยการเติมธาตุผสมต่าง ๆ เข้าไปและเรียกกลุ่มของนิกเกิลที่มีการปรับปรุงนี้ว่า โลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิล [1, 2]

2.2 โลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิล (Nickel-based superalloys)

โลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิลเป็นโลหะถูกพัฒนาและปรับปรุงจากกลุ่มนิกเกิลบริสุทธิ์เพื่อให้มีสมบัติที่ดีขึ้นเช่น ความสามารถในการคงความแข็งแรงและทนต่อแรงทางกล ความต้านทานการคืบและออกซิเดชันที่อุณหภูมิสูง โลหะชนิดนี้จึงถูกนำไปใช้งานอย่างแพร่หลายในอุตสาหกรรมการบินและอวกาศ เรือเดินสมุทร ปิโตรเคมี และในโรงผลิตกระแสไฟฟ้าขนาดใหญ่โดยสมบัติเชิงกลที่ดีของโลหะพิเศษกลุ่มนิกเกิลนั้นมาจากการตกตะกอนของ intermetallic gamma prime (γ') บนเนื้อพื้นออสเทนไนต์ (austenite- γ) ที่มีโครงสร้างแบบ FCC โดยตะกอน intermetallic ที่เกิดขึ้นนั้นส่วนใหญ่เป็นการตกตะกอนร่วมของนิกเกิล (Ni) กับไทเทเนียม (Ti) หรืออะลูมิเนียม (Al) นอกจากนี้โลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิลมีการเติมธาตุเจืออื่นเข้ามาเพื่อปรับปรุงสมบัติตามต้องการ ซึ่งจะต้องมีปริมาณ

นิกเกิลไม่น้อยกว่าร้อยละ 40 โดยน้ำหนัก (wt.%) โดยส่วนมากแล้วจะมีนิกเกิลปริมาณ 50-70 wt.% ปริมาณโครเมียม (Cr) อีกประมาณ 10-20 wt.% ซึ่งเกรดที่นิยมใช้ในอุตสาหกรรมจะมีปริมาณโครเมียมอยู่ที่ 20 wt.% โดยนอกจากสองธาตุเจือดังกล่าวข้างต้นแล้วจะมีการเติมธาตุเจือต่าง ๆ เข้าไปตามเกรดเพื่อปรับปรุงสมบัติของโลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิลเช่น โครเมียม โคบอลต์ โมลิบดีนัม (Mo) อะลูมิเนียม ไทเทเนียม (Ti) เหล็ก คาร์บอน (C) โบรอน (B) เซอร์โคเนียม (Zr) ทังสแตน (W) และอื่น ๆ ดังแสดงในตารางที่ 2.1

ตารางที่ 2.1 องค์ประกอบทางเคมีของโลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิล (Ni-based superalloys) กลุ่มต่างๆ [2]

Alloy	Composition, %										
	Cr	Ni	Co	Mo	W	Nb	Ti	Al	Fe	C	Other
Haynes 214	16.00	76.50	4.50	3.00	0.03	...
Inconel 600	15.50	76.00	8.00	0.08	0.25 Cu
Inconel 601	23.00	60.50	1.35	14.10	0.05	0.5 Cu
Inconel 625	21.50	61.00	...	9.00	...	3.60	0.20	0.20	2.50	0.05	...
Inconel 702	15.50	79.50	0.60	3.20	1.00	0.05	0.5 Mn, 0.2 Cu, 0.4 Si
Inconel 721	16.00	71.00	3.00	...	6.50	0.40	2.2 Mn, 0.1 Cu
Inconel 722	15.50	75.00	2.40	0.70	7.00	0.04	0.5 Mn, 0.2 Cu, 0.4 Si
Inconel 751	15.50	72.50	1.00	2.30	1.20	7.00	0.05	0.25 max Cu
Inconel 718	19.00	52.50	...	3.00	...	5.10	0.90	0.50	18.50	0.08 max	0.15 max Cu
Inconel 738	16.00	79.00	3.70	0.05	0.15	...
Nimonic 80A	19.50	73.00	1.00	2.25	1.40	1.50	0.05	0.1 max Cu

อย่างไรก็ตามแม้ว่าโลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิลจะมีความสามารถในการใช้งานที่อุณหภูมิสูงได้ดีแต่เมื่อมีการใช้งานในระยะเวลานานจะทำให้ตะกอนที่มีอยู่ลดจำนวนลง กล่าวคือเกิดการรวมตัวกันของตะกอน (coarsening) ทำให้มีขนาดใหญ่ขึ้นซึ่งส่งผลให้สมบัติเชิงกลแย่งลงและอาจเกิดความเสียหายขึ้นได้ นอกจากนี้ในการใช้งานในสภาวะพิเศษที่อุณหภูมิสูงอาจทำให้เกิดความเสียหายจากออกซิเดชันและการกัดกร่อนร่วมด้วย จึงมีการหาวิธีป้องกันความเสียหายที่จะเกิดขึ้นโดยหนึ่งในวิธีนั้นคือการทำการปรับปรุงผิว (surface treatment) เช่น ไนไตรดิง อะลูมิเนียมไนซิง เป็นต้น [2, 3]

2.3 กระบวนการอะลูมิเนียมไนซิง (Aluminizing process)

กระบวนการอะลูมิเนียมไนซิงคือกระบวนการที่นำอะลูมิเนียมเข้าไปยังผิวของชิ้นงานโดยการแพร่ เกิดเป็นชั้นสารประกอบของอะลูมิเนียมไนซิง ซึ่งชั้นของสารประกอบนี้จะทำหน้าที่เป็นชั้นปกป้องผิวจากออกซิเดชันและการกัดกร่อนในการใช้งานที่อุณหภูมิสูงโดยการสร้างชั้นฟิล์มอะลูมิเนียมสำหรับป้องกัน

พื้นผิวจากสภาพแวดล้อม ซึ่งในกรณีของโลหะผสมพิเศษกลุ่มนิกเกิลที่มีราคาสูงจะช่วยยืดอายุการใช้งานจากการทำอะลูมิเนียมไนซิงและสามารถลดค่าใช้จ่ายในการเปลี่ยนชิ้นส่วนได้อย่างมาก

ในการทำอะลูมิเนียมไนซิงมีหลากหลายวิธีหนึ่งในนั้นคืออะลูมิเนียมไนซิงแบบผง (pack aluminizing or pack cementation) ซึ่งเป็นวิธีที่ทำได้ง่าย สะดวก และเป็นวิธีที่ประหยัดมากที่สุดวิธีหนึ่งโดยในการทำ pack aluminizing นั้นจะต้องมี 3 องค์ประกอบหลักดังนี้

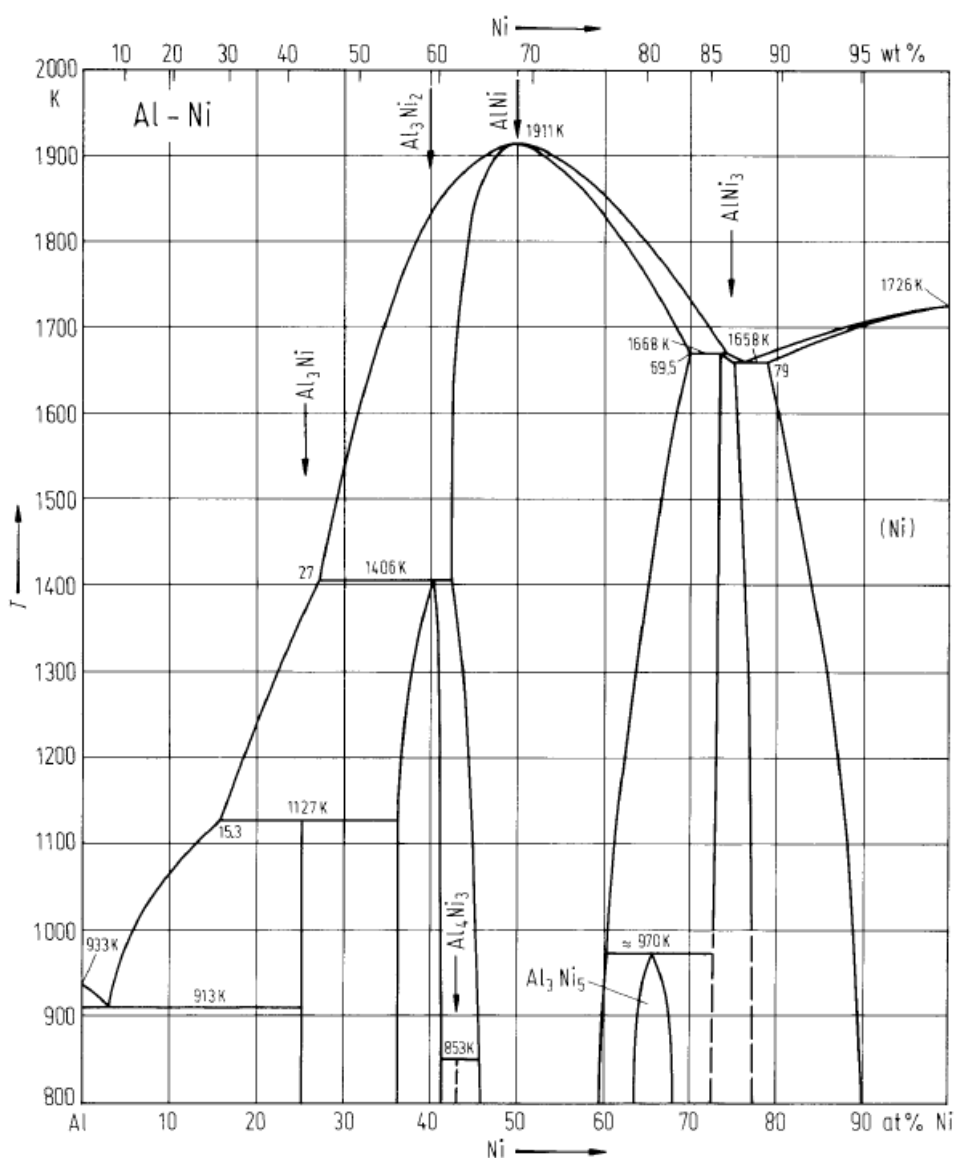
1. แหล่งจ่ายโลหะ (metal source) ในกรณีนี้คือผงอะลูมิเนียม
2. ตัวกระตุ้น (activator)
3. ตัวป้องกันการหลอมติด (inert filler)

ซึ่งในการทำอะลูมิเนียมไนซิงบนนิกเกิลนั้นจะเกิดสารประกอบขึ้นมาได้แก่ NiAl (β), Ni_2Al_3 (δ), Ni_3Al (γ) เป็นต้น โดยเกิดสารประกอบในรูปแบบต่าง ๆ เป็นผลมาจากค่า activity ของอะลูมิเนียม เนื่องจากค่า activity เป็นตัวแปรที่กำหนดถึงตำแหน่งในการทำปฏิกิริยาของธาตุทั้งสองซึ่งค่า activity สามารถแบ่งได้เป็น 2 กรณีหลักๆดังนี้

1. High aluminium activity : ชั้นเคลือบ (coating layer) เกิดจากการแทนที่ของอะลูมิเนียมที่แพร่เข้าไปยังชิ้นงานโดยชั้นฟิล์มที่เกิดขึ้นจะมีเฟสหลักเป็น Ni_2Al_3 (δ) และชั้นเคลือบที่เกิดขึ้นมีความแข็ง (hard film) ที่ดีกว่า NiAl (β) โดยพฤติกรรมแบบ high aluminium activity จะเกิดที่อุณหภูมิต่ำ
2. Low aluminium activity : การโตของชั้นเคลือบเกิดจากการที่นิกเกิลแพร่ออกมาข้างนอกบริเวณผิวโดยจะเกิดเฟสหลักเป็น NiAl (β) โดยชั้นเคลือบที่เกิดขึ้นนี้มีความเหนียว (ductile) และความเสถียรในการใช้งานที่อุณหภูมิสูงมากกว่าเฟส Ni_2Al_3 (δ) นอกจากนี้การที่นิกเกิลแพร่ออกไปยังบริเวณใกล้ผิวทำให้เกิดการขาดแคลนนิกเกิลและอาจเกิดการตกตะกอนระหว่างชั้นฟิล์มกับเนื้อพื้นซึ่งอาจนำไปสู่การรวมตัวของเฟสที่ 2 (secondary phase) กลายเป็นชั้นระหว่างกลาง (intermediate layer) เกิดขึ้นมาได้

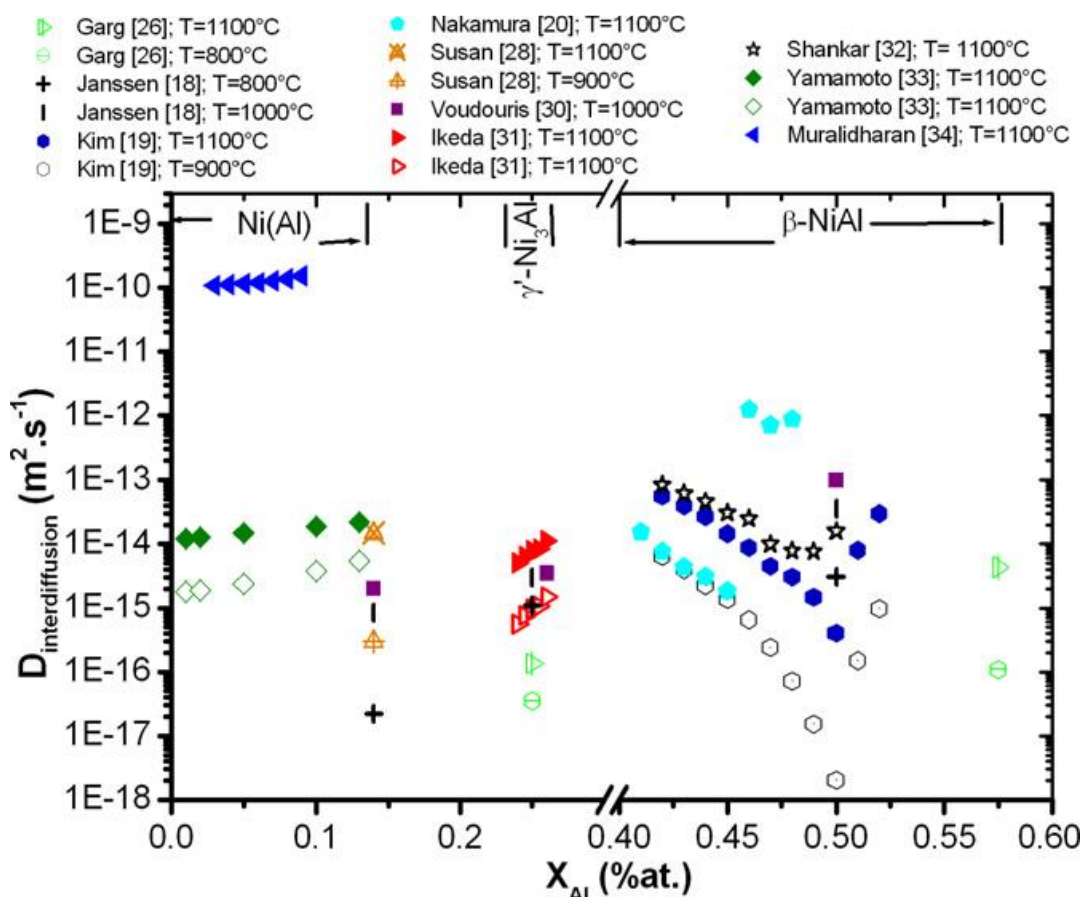
จากที่กล่าวมาข้างต้นชั้นเคลือบเฟส Ni_2Al_3 (δ) ที่ได้จากพฤติกรรมแบบ high aluminium activity จะได้ชั้นเคลือบที่มีความแข็งมากกว่าเฟส NiAl (β) แต่เฟส Ni_2Al_3 (δ) นั้นไม่เสถียรที่อุณหภูมิสูงและอาจเกิดการเปลี่ยนเฟสระหว่างใช้งานเนื่องจากการเปลี่ยนแปลงอุณหภูมิได้ จากการศึกษาผลงานวิจัยพบว่าเมื่อนำชิ้นงานที่มีชั้นเคลือบ Ni_2Al_3 (δ) ไปเข้ากระบวนการทางความร้อน

ในสภาวะสุญญากาศจะทำให้เกิดพฤติกรรมการแปลงเฟส (phase transformation) จาก Ni_2Al_3 (δ) ไปเป็น NiAl (β) ที่มีความเหนียวและเสถียรทางความร้อนมากกว่า แต่อย่างไรก็ตามการเกิด $\delta - \beta$ transformation จะมีการเปลี่ยนแปลงขนาดความหนาโดยรวม (overall thickness) ของชั้นฟิล์มที่เกิดขึ้น ซึ่งยากต่อการควบคุมขนาดจึงไม่เป็นที่นิยมในการทำ เมื่อพิจารณาจากแผนภูมิสมดุลเฟส (phase equilibrium diagram) ดังแสดงในรูปที่ 2.1 พบว่าเฟส NiAl (β) นั้นมีความเสถียรในการใช้งานทางความร้อนมากกว่าเฟส Ni_2Al_3 (δ) [1, 3-5]



รูปที่ 2.1 แผนภูมิสมดุลเฟสของระบบ Ni-Al [4]

นอกจากนี้ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ (diffusion coefficient) ยังเป็นอีกหนึ่งตัวแปรสำคัญในกระบวนการอะลูมิเนียมในเชิง เนื่องจากเป็นหนึ่งในตัวแปรที่กำหนดรูปแบบของการเกิดขึ้นสารประกอบและพฤติกรรมต่าง ๆ รวมถึงสามารถควบคุมความหนาที่เกิดขึ้นอีกด้วย จึงมีงานวิจัยศึกษาวิธีในการหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ด้วยวิธีต่าง ๆ [6-10] โดยนาย J.M. Brossard และคณะได้ทำการรวบรวมค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ระหว่างอะลูมิเนียมกับนิกเกิลภายใต้ช่วงอุณหภูมิ 800-1,000°C ด้วยกระบวนการอะลูมิเนียมในเชิงบนนิกเกิลดังแสดงในรูปที่ 2.2



รูปที่ 2.2 ค่า Interdiffusion coefficient สำหรับสารประกอบโลหะ Ni_xAl_y ที่มีองค์ประกอบทางเคมีต่างกันในช่วงอุณหภูมิ 800-1,000 °C [6]

โดยพบว่า อะลูมิเนียมสามารถละลายอยู่ในเนื้อพื้นนิกเกิลแบบสารละลายของแข็ง (solid solution) เป็นปริมาณถึงร้อยละ 0.14 โดยอะตอม (at.%) โดยไม่เกิดการแปลงเฟสเป็นเฟสอื่น จากนั้นเมื่อมีความเข้มข้นเพิ่มมากขึ้นจะเกิดการเปลี่ยนแปลงเฟสเป็น Ni_3Al (γ) ในช่วงความเข้มข้นประมาณ 0.14-0.40 at.% ของอะลูมิเนียม และในช่วง 0.40-0.58 at.% จะเกิดเป็น $NiAl$ (β) โดยจากรูปจะพบว่าที่เฟสและอุณหภูมิเดียวกันนั้นมีค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ที่แตกต่างกันยกตัวอย่างเช่น

จากงานวิจัยของ Muralidharan และ Yamamoto ที่ทำการทดลองที่อุณหภูมิ 1,100°C และเป็นช่วงที่อะลูมิเนียมละลายอยู่ในนิกเกิลแบบสารละลายของแข็ง โดยพบว่าค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่มีค่าอยู่ที่ 1×10^{-10} ตารางเมตรต่อวินาที (m^2s^{-1}) และ 1×10^{-14} ถึง 1×10^{-15} m^2s^{-1} ตามลำดับ หรือในงานวิจัยของ Nakamura ที่ทำการทดลองที่อุณหภูมิ 1,100°C โดยเกิดเป็นเฟส NiAl (β) และมีอะลูมิเนียมประมาณ 0.45 at.% จะมีค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่อยู่ประมาณ 1×10^{-15} m^2s^{-1} ในขณะที่งานวิจัยของ Kim มีค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่อยู่ประมาณ 1×10^{-14} m^2s^{-1} ซึ่งจะเห็นได้ว่าค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่มีค่าต่างกันมาก [1, 6]

2.4 แบบจำลอง (Simulation)

ระเบียบวิธีผลสี่บเนื่อง (Finite Difference Method, FDM) คือระเบียบวิธีเชิงตัวเลข (numerical method) ชนิดหนึ่งที่ใช้สำหรับการประมาณค่าในการแก้ปัญหสมการเชิงอนุพันธ์ (differential equation) เพื่อหาผลเฉลยโดยประมาณ ซึ่งมีแนวคิดหลักสำหรับกระบวนการ FDM คือการแบ่งระยะทั้งหมดของ $t_0 \leq t \leq t_{\max}$ เป็น M ส่วนของความกว้าง $\Delta t = (t_{\max} - t_0) / M$ และประมาณค่าลำดับที่ 1 และ 2 ในสมการเชิงอนุพันธ์สำหรับแต่ละจุดเชื่อมด้วย central difference formulas นอกจากนี้การใช้ FDM แก้ปัญหาจำเป็นต้องกำหนดเงื่อนไขขอบเขต (boundary condition) และเงื่อนไขเริ่มต้น (initial condition) ด้วย ในส่วนของการนำ FDM มาใช้ในการประมาณค่าปัญหาสำหรับการถ่ายเทมวล (mass transfer) ต้องพิจารณาว่าปริมาณมวลของสารชนิดนั้นที่สะสมอยู่ ณ ตำแหน่งและเวลาหนึ่ง เกิดจากผลต่างระหว่างปริมาณมวลของสารชนิดดังกล่าวที่เข้ามาและปริมาณมวลของสารที่ออกไป จากนั้นประยุกต์เข้ากับกฎการแพร่ข้อที่หนึ่งของฟิกส์ (Fick's first law) ดังสมการที่ 2.1-2.2

$$J_x - J_{x+\Delta x} = A \Delta x \frac{\partial c}{\partial t} \quad \text{สมการที่ 2.1}$$

$$J_x = -DA \frac{\partial c}{\partial x} \quad \text{สมการที่ 2.2}$$

โดยที่	J_x	คือปริมาณสารที่เข้าพื้นที่หน้าตัดที่ตำแหน่ง x (จำนวนของสารต่อเวลา, amount/s)
	$J_{x+\Delta x}$	คือปริมาณสารที่เข้าพื้นที่หน้าตัดที่ตำแหน่ง $x+1$ (จำนวนของสารต่อเวลา, amount/s)
	A	คือพื้นที่หน้าตัด (ตารางเมตร, m^2)
	Δx	คือผลต่างของระยะทาง (เมตร, m)

$\partial C/\partial x$ คืออนุพันธ์อันดับสองของความเข้มข้นที่แปรผันกับระยะทาง (จำนวนต่อลูกบาศก์เมตรต่อเมตร, amount/m⁴)

$\partial C/\partial t$ คืออนุพันธ์อันดับหนึ่งของความเข้มข้นที่แปรผันกับเวลา (จำนวนต่อลูกบาศก์เมตรต่อเวลา, amount/m³.s)

แทนสมการ 2.1 ลงในสมการที่ 2.2 และประยุกต์เข้ากับอนุกรมเทย์เลอร์ (Taylor series) จะได้สมการที่ 2.3

$$-DA \frac{\partial C}{\partial x} - \left[-DA \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(DA \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Delta x - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(DA \frac{\partial C}{\partial x} \right) (\Delta x)^2 - \dots \right] = A \Delta x \frac{\partial C}{\partial t}$$

สมการที่ 2.3

เมื่อ $\Delta x \rightarrow 0$ จะได้สมการที่ 2.4

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) = \frac{\partial C}{\partial t}$$

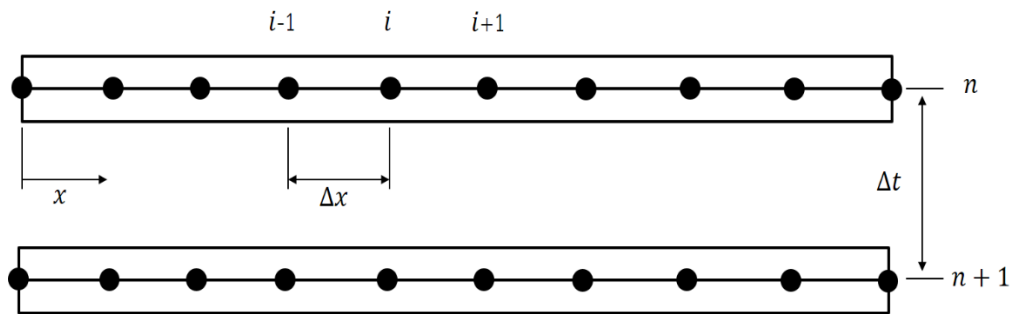
สมการที่ 2.4

เมื่อกำหนดให้ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่คงที่ไม่เปลี่ยนแปลงตามความเข้มข้น จะได้สมการที่ 2.5

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{\partial C}{\partial t}$$

สมการที่ 2.5

Finite difference method สามารถแบ่งออกเป็น 3 วิธีการคิด คือ ระเบียบวิธีแบบชัดแจ้ง (explicit method) ระเบียบวิธีแบบปริยาย (implicit method) และระเบียบวิธีของแครนจ์-นิโคลสัน (Crank-Nicolson method) เพื่อความสะดวกในการคำนวณ จึงทำการพิจารณาการแพร่ในทิศทางใดทิศทางหนึ่ง สำหรับการแก้ปัญหาคำนวณด้วย Finite difference method โดยผู้วิจัยเลือกวิธีแบบชัดแจ้ง (explicit method) ในการคำนวณเนื่องจากมีความรวดเร็วในการดำเนินการมากกว่าวิธีอื่นถึงแม้ว่าจะมีความแม่นยำน้อยกว่า อย่างไรก็ตามจากการตรวจสอบความแม่นยำพบว่าการใช้วิธีแบบชัดแจ้งมีความแม่นยำเพียงพอต่อการทำงานในการคำนวณของงานวิจัย ซึ่งวิธีดังกล่าวเริ่มด้วยการแบ่งความยาวของชิ้นงานเท่าๆ กันแทนด้วย Δx ซึ่งแทนตำแหน่งที่ระยะดังกล่าวด้วยเครื่องหมายจุด และใช้สัญลักษณ์ $i-1, i, i+1$ ดังรูปที่ 2.3 โดยมีช่วงเวลาที่น่าสนใจ (time step) เป็น n และที่ช่วงเวลาถัดไปเป็น $n+1$ โดยมีความต่างเท่ากับ Δt [11]



รูปที่ 2.3 การแบ่งระยะห่างของชิ้นงานสำหรับการคำนวณวิธีแบบชัดแจ้ง

จากสมการที่ 2.5 ตัวแปรอนุพันธ์อันดับหนึ่งของความเข้มข้นที่แปรผันกับเวลา ($\partial C/\partial t$) และอนุพันธ์อันดับสองของความเข้มข้นที่แปรผันกับระยะทาง ($\partial^2 C/\partial x^2$) ต้องเปลี่ยนให้เป็นความสัมพันธ์ระหว่างความเข้มข้นของสารที่ตำแหน่ง $i-1, i, i+1$ โดยใช้การประมาณจากค่าผลต่างไปข้างหน้า (forward difference) และการประมาณผลต่างแบบตรงกลาง (Central difference) ตามลำดับดังสมการที่ 2.6-2.7 [12]

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} \quad \text{สมการที่ 2.6}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \quad \text{สมการที่ 2.7}$$

โดยที่ C_i^{n+1} คือความเข้มข้นของสารที่ตำแหน่ง i ณ เวลา $n+1$ (จำนวนต่อลูกบาศก์เมตร, amount/m³)

C_i^n คือความเข้มข้นของสารที่ตำแหน่ง i ณ เวลา n (จำนวนต่อลูกบาศก์เมตร, amount/m³)

C_{i+1}^n คือความเข้มข้นของสารที่ตำแหน่ง $i+1$ ณ เวลา n (จำนวนต่อลูกบาศก์เมตร, amount/m³)

C_{i-1}^n คือความเข้มข้นของสารที่ตำแหน่ง $i-1$ ณ เวลา n (จำนวนต่อลูกบาศก์เมตร, amount/m³)

แทนสมการที่ 2.6-2.7 ลงในสมการที่ 2.5 จะได้สมการที่ 2.8-2.9

$$D \left(\frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} \right) = \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} \quad \text{สมการที่ 2.8}$$

$$\alpha (C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n) = C_i^{n+1} - C_i^n \quad \text{สมการที่ 2.9}$$

โดยที่ $\alpha = \frac{D\Delta t}{(\Delta x)^2}$ และ $\alpha \leq 0.5$

ซึ่งเมื่อนำสมการที่ 2.9 มาจัดรูปใหม่ได้เป็นสมการที่ 2.10

$$C_i^n = C_i^0 + \Delta t \left[D \left(\frac{C_{i-1}^0 - 2C_i^0 + C_{i+1}^0}{\Delta x^2} \right) \right]$$

สมการที่ 2.10

โดยที่

- C_i^n คือความเข้มข้นที่ตำแหน่ง i ของเวลาใหม่
- C_i^0 คือความเข้มข้นที่ตำแหน่ง i ของเวลาเก่า
- C_{i-1}^0 คือความเข้มข้นที่ตำแหน่งก่อนหน้า i ของเวลาเก่า
- C_{i+1}^0 คือความเข้มข้นที่ตำแหน่งหลัง i ของเวลาเก่า
- Δt คือผลต่างของเวลา
- D คือค่าสัมประสิทธิ์ของการแพร่
- Δx คือผลต่างของระยะทางระหว่าง i และช่องถัดไป

โดยมีค่า $\Delta t \leq 0.5 * (\Delta x^2) / D$

บทที่ 3

ระเบียบวิธีการศึกษา

3.1 แบบจำลองตัวแพร่ 1 ชนิด 1 ชั้นสารประกอบ

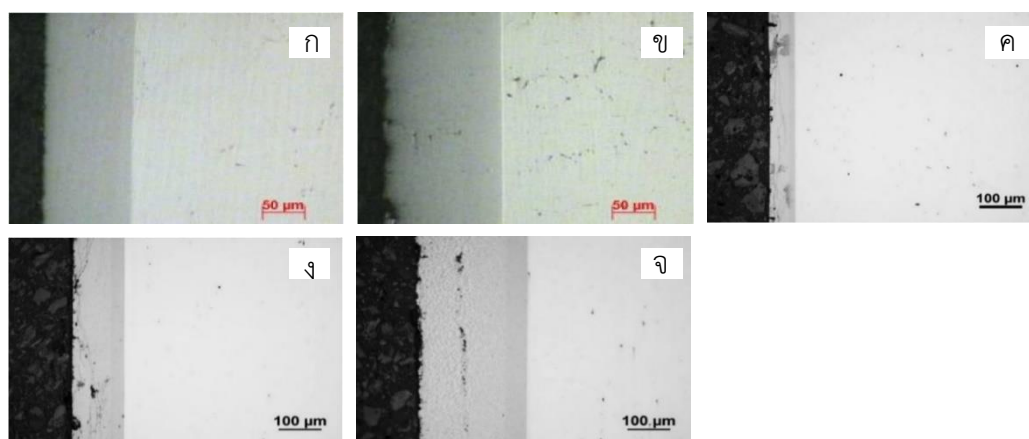
3.1.1 เก็บข้อมูลของ IN 738 และ Haynes 214

ในงานวิจัยนี้ได้ทำการจำลองพฤติกรรมการแพร่ของการทำอะลูมิเนียมไนซิงแบบตัวแพร่ชนิดเดียว (อะลูมิเนียม) บน IN 738 และ Haynes 214 จากงานวิจัยของ สิริธรรมา จันทรศักดิ์สูง และ งานวิจัยของ ปสุตา กิรติมาศ ตามลำดับพบว่าวัสดุทั้งสองชนิดเมื่อทำการอะลูมิเนียมไนซิงที่อุณหภูมิในช่วง 700 – 900 องศาเซลเซียส ($^{\circ}\text{C}$) จะพบชั้นของ intermetallic ดังแสดงในตารางที่ 3.1

ตารางที่ 3.1 สภาวะที่ทำการทดลองและเฟสที่เกิดของ IN 738 และ Haynes 214

อุณหภูมิ ($^{\circ}\text{C}$)	ชั้นของ intermetallic	
	IN 738	Haynes 214
700	-	Ni_2Al_3 และ NiAl_3
800	Ni_2Al_3 และ NiAl_3	Ni_2Al_3 และ NiAl_3
900	Ni_2Al_3 และ NiAl_3	Ni_2Al_3 และ NiAl_3

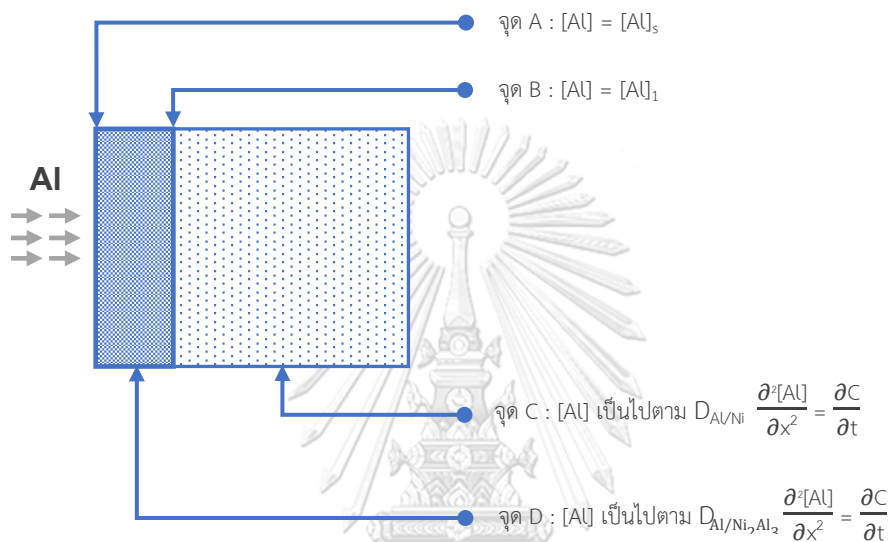
โดยวัสดุทั้งสองชนิดมีเฟสหลักเป็น Ni_2Al_3 ในทุกการทำอะลูมิเนียมไนซิงที่อุณหภูมิ 700 – 900 องศาเซลเซียส อย่างไรก็ตามไม่พบรอยต่อเฟส (interface) ที่ชัดเจนของเฟสทั้งสองดังแสดงในรูปที่ 3.1



รูปที่ 3.1 โครงสร้างจุลภาคของชิ้นงานที่ผ่านการทำอะลูมิเนียมไนซิงของ IN 738 ที่อุณหภูมิ ก) 800 $^{\circ}\text{C}$ ข) 900 $^{\circ}\text{C}$ และ Haynes 214 ที่อุณหภูมิ ค) 700 $^{\circ}\text{C}$ ง) 800 $^{\circ}\text{C}$ จ) 900 $^{\circ}\text{C}$

3.1.2 แบบจำลองกายภาพ (Physical model) และระเบียบวิธีเชิงตัวเลขของตัวแปร 1 ชนิด 1 ชั้นสารประกอบ

จากข้อมูลในหัวข้อที่ 3.1.1 จึงมีการตั้งสมมติฐานในการทำแบบจำลองกายภาพ (physical model) เพื่ออธิบายถึงปรากฏการณ์การแพร่ที่เกิดขึ้นโดยมีแบบจำลองกายภาพดังแสดงในรูปที่ 3.2 ดังนี้



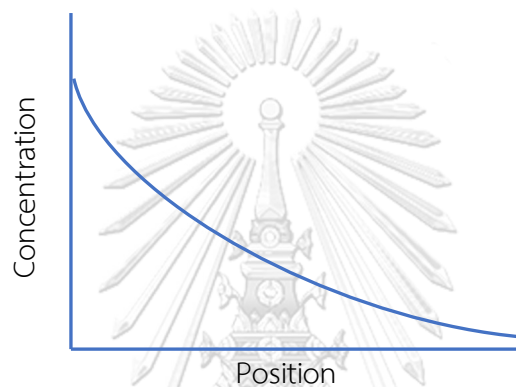
รูปที่ 3.2 แบบจำลองกายภาพของการแพร่แบบ 1 ชนิด

1. การแพร่เป็นการแพร่แบบทิศทางเดียวด้วยอะตอมของอะลูมิเนียมเท่านั้น (high activity aluminizing)
2. ความเข้มข้นเริ่มต้นของชิ้นงานมีค่าเท่ากับ C_0
3. ความเข้มข้นของอะลูมิเนียมที่ผิว (จุด A) และรอยต่อเฟส (จุด B) ได้มาจากการกำหนดค่าโดยอาจกำหนดจากการทดลองหรือจากแผนภูมิเฟส เป็นต้น
4. ความเข้มข้นภายในชั้นของ intermetallic (จุด C) และภายในเนื้อพื้น (จุด D) เป็นไปตามสมการ $D \frac{\partial^2 [Al]}{\partial x^2} = \frac{\partial C}{\partial t}$
5. รอยต่อเฟสเลื่อนด้วยวิธีการสมดุลมวล (mass balance)

จากแบบจำลองข้างต้นจึงมีการแปลงสมการของ differential ให้อยู่ในรูปของสมการระเบียบวิธีผล สืบเนื่องของออยเลอร์เพื่อแก้ปัญหาในการจัดการกับเวลา (พจน์ของ $\frac{\partial C}{\partial t}$) ดังแสดงในหัวข้อที่ 2.4 ใน สมการที่ 2.10 ดังนี้

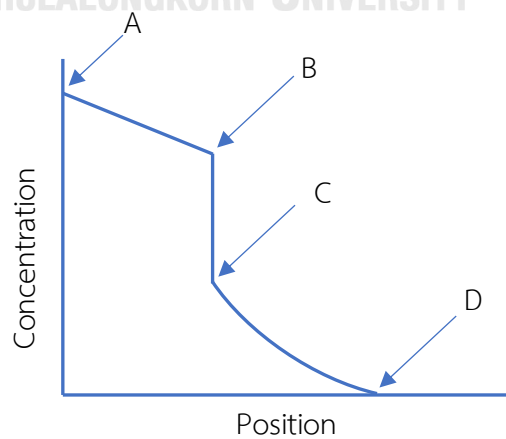
$$C_i^n = C_i^{n-1} + \Delta t \left[D \left(\frac{C_{i-1}^{n-1} - 2C_i^{n-1} + C_{i+1}^{n-1}}{\Delta x^2} \right) \right]$$

โดยจากสมการที่ 2.10 เมื่อนำความสัมพันธ์ของค่าความเข้มข้นและระยะทางมาทำการจัดคู่อันดับบน กราฟจะได้กราฟลักษณะโดยประมาณดังแสดงในรูปที่ 3.3



รูปที่ 3.3 ลักษณะของกราฟที่ได้จากสมการที่ 2.10

จากนั้นเมื่อทำการเพิ่มเงื่อนไขเริ่มต้น (initial condition) เงื่อนไขขอบเขต (boundary condition) และเงื่อนไขในการขยับรอยต่อเฟส (interface moving) จะได้กราฟที่มีลักษณะดังแสดงในรูปที่ 3.4 และมีเงื่อนไขต่าง ๆ ดังนี้



รูปที่ 3.4 แบบจำลองตำแหน่งของสมการเมื่อมีการเพิ่มเงื่อนไขต่าง ๆ

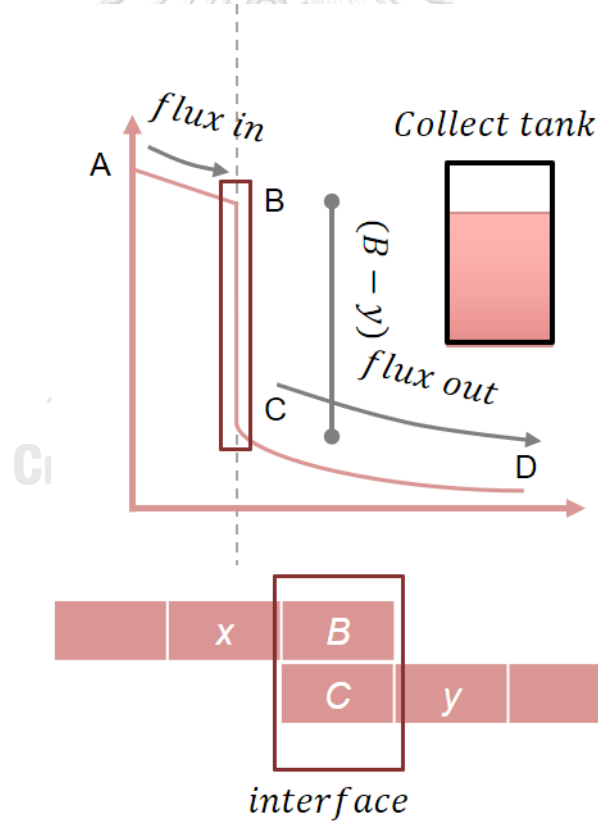
1. เงื่อนไขเริ่มต้น

- $C_i = C_0$ เมื่อ $0 \leq i \leq \text{node}$ สุดท้าย

2. เงื่อนไขขอบเขต

- $C_i = C_5$; เมื่อ $i = a$ และ C_5 คือความเข้มข้นที่ผิว
- $C_i = C_1$; เมื่อ $i = b$ และ C_1 คือความเข้มข้นต่ำสุดของอะลูมิเนียมที่สามารถละลายได้ในเฟส intermetallic (minimum solubility limit in metallic phase)
- $C_i = C_2$; เมื่อ $i = c$ และ C_2 คือความเข้มข้นสูงสุดของอะลูมิเนียมที่สามารถละลายได้ในเฟสเนื้อพื้น (maximum solubility limit in matrix)

3. เงื่อนไขการขยับรอยต่อเฟส



รูปที่ 3.5 กลไกการขยับ interface ด้วยสมดุลมวล

จากสมดุลมวลพบว่ามวลสะสม (collect mass) มีค่าเท่ากับ $\text{flux}_{\text{in}} - \text{flux}_{\text{out}}$ จากข้อความดังกล่าวจึงสมมติให้มีที่เก็บจินตภาพเป็น collect tank ซึ่งมีความจุในการสะสมความเข้มข้นเพื่อใช้ใน

การขยับ interface เป็น $C_{collect}$ (ความเข้มข้นสะสมทั้งหมด) โดยเมื่อ $C_{collect}$ มีค่าถึงจุดวิกฤตค่าหนึ่ง จึงมีการขยับรอยต่อเฟส ซึ่งค่าวิกฤตดังกล่าวมีค่าเท่ากับ $B - y$ โดย y คือค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่ง node ถัดจาก จุด B และมีขั้นตอนการทำงานในการขยับ interface ดังนี้

- ในทุก ๆ time step จะมีการคำนวณเพื่อหาความเข้มข้นส่วนเกิน (∂C) ในแต่ละ time step เพื่อนำไปเก็บสะสมไว้ใน collect tank โดย ∂C มีค่าดังสมการ

$$\partial C = [D_{out}(y - C) - D_{in}(B - x)] \times \frac{timeStep}{\partial x^2} \quad \text{สมการที่ 3.1}$$

เมื่อ D_{out} คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้นเนื้อพื้น

D_{in} คือค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้น layer ข้างนอกที่เกิดขึ้น

∂x คือระยะห่างระหว่าง node 2 node ที่ใกล้กันที่สุด

- จากนั้นเมื่อได้ ∂C แล้วจึงทำการสะสมเพิ่มเข้าไปใน collect tank แล้วจึงทำการคำนวณที่เวลาถัดไป จนกระทั่ง $C_{collect}$ มีค่ามากกว่าเท่ากับค่าวิกฤตจึงทำการเลื่อน interface และลดความเข้มข้นลงเท่ากับ $B - y$ แล้วจึงเริ่มทำการสะสมใหม่จนกระทั่งถึงเวลาที่กำหนด

โดยในการทำงานของตัวแบบจำลองนั้นจะทำการปรับเปลี่ยนค่า D จนมีความหนาของชั้น intermetallic ที่เข้าใกล้กับความหนาชั้น intermetallic ของชิ้นงานทดลอง

3.1.3 การตรวจสอบความแม่นยำ (Validation)

จากเงื่อนไขในหัวข้อที่ 3.1.2 จึงมีการการตรวจสอบความแม่นยำของตัวแบบจำลองด้วยการนำผลลัพธ์ของแบบจำลองไปทำการเปรียบเทียบกับผลของแบบจำลองในงานวิจัยของ J.M. Brossard และคณะ โดยใช้เงื่อนไขในการทดลองเหมือนกัน ยกตัวอย่างเช่น อุณหภูมิ ความเข้มข้น เวลา เป็นต้น

3.1.4 ค่าพลังงานกระตุ้น (Q) และ frequency factor (D_0)

หลังจากการทำ validation เมื่อแบบจำลองผ่านการตรวจสอบความแม่นยำจึงนำไปปรับใช้กับชิ้นงาน IN 738 และ Haynes 214 ดังที่กล่าวไว้ในหัวข้อ 3.1.1 จากนั้นจึงนำผล D ที่ได้มาทำการหาค่า Q และ D_0 จากความสัมพันธ์ของ Arrhenius

3.2 แบบจำลองตัวแพร่ 2 ชนิด 2 ชั้นสารประกอบ

3.2.1 ข้อมูลจากการทำอะลูมิเนียมไนซิงบนนิกเกิลบริสุทธิ์โดยมีซิลิคอนแพร่ร่วม

ในงานวิจัยนี้ได้มีการศึกษาการทำแบบจำลองในการทำอะลูมิเนียมไนซิงบนนิกเกิลบริสุทธิ์โดยมีชนิดของตัวแพร่ 2 ชนิดได้แก่ อะลูมิเนียมและซิลิคอน จากงานวิจัยของบุญฤทธิ์ เฮงประยูร ที่ทำกระบวนการอะลูมิเนียมไนซิงที่อุณหภูมิช่วง 800 – 1,000 องศาเซลเซียส (°C) เป็นเวลา 4 ชั่วโมง พบว่าตามโครงสร้างจุลภาคชิ้นงานมีชั้นฟิล์มเกิดขึ้น 2 ชั้นที่แบ่งแยกได้ชัดเจนโดยสามารถแบ่งได้เป็น diffusion layer และ inter-diffusion layer ดังแสดงในตารางที่ 3.2 และมีสารประกอบที่เกิดขึ้นคือ Ni_2Al_3 และ $NiAl_3$ โดยมีเฟส Ni_2Al_3 เป็นเฟสหลักและมีความหนาของชิ้นงานแสดงดังตารางที่ 3.3

ตารางที่ 3.2 โครงสร้างจุลภาคของชิ้นงานนิกเกิลที่ผ่านกระบวนการอะลูมิเนียมไนซิงโดยมี Si เจือผสมในปริมาณที่ต่างกันจากงานวิจัย [13]

Sample	Quartz	RHA
Si 9 wt.% 800°C 4 ชั่วโมง		
Si 9 wt.% 1000°C 4 ชั่วโมง		
Si 13.5 wt.% 1000°C 4 ชั่วโมง		
Si 18 wt.% 1000°C 4 ชั่วโมง		
* 22.5 wt.% ทั้งชิ้นงานที่เติมควอทซ์และชิ้นงานที่เติม RHA เกิด fully oxidized		

ตารางที่ 3.3 ความหนาของชั้นฟิล์มในชั้นงานที่เงื่อนไขที่มีการเจือ Si ในปริมาณต่าง ๆ [13]

Sample	layer	Quartz (μm)	RHA (μm)
9 wt.% Si 800°C 4 ชั่วโมง	diffusion layer	60.14±3.99	ไม่มีชั้นฟิล์มเกิดขึ้น
	inter-diffusion layer	-	
9 wt.% Si 1000°C 4 ชั่วโมง	diffusion layer	283.92±15.65	281.89±23.80
	inter-diffusion layer	-	3.78±0.91
13.5 wt.% Si 1000°C 4 ชั่วโมง	diffusion layer	172.60±3.10	174.25±3.22
	inter-diffusion layer	7.01±1.77	11.94±2.34
18 wt.% Si 1000°C 4 ชั่วโมง	diffusion layer	เกิดออกไซด์	104.94±3.49
	inter-diffusion layer	ชั้นฟิล์มร้อน	28.77±4.48
* 22.5 wt.% ทั้งชั้นงานที่เติมคอปเปอร์และชั้นงานที่เติม RHA เกิด fully oxidized			

พบว่าเมื่อมีการเจือ Si ในปริมาณที่มากขึ้นจะทำให้ความหนาของชั้น inter-diffusion layer มีความหนาที่เพิ่มมากขึ้นในขณะที่ความหนาของชั้น diffusion layer มีความหนาที่เล็กลง นอกจากนี้จากการทำ EDS แบบ line scan พบว่า Si ที่เจือสามารถพบได้ในบริเวณของ inter-diffusion layer ในปริมาณที่มากกว่าของชั้น diffusion layer เนื่องจาก Si สามารถละลายในสารประกอบ Ni_2Al_3 และ NiAl_3 ได้ในปริมาณที่น้อยจึงถูกผลักออกไปยังชั้น inter-diffusion layer นอกจากนี้การเติม Si ยังส่งผลให้ค่า activity ของ Al ที่ใช้ในการทำอะลูมิเนียมไนซิงมีค่าลดลงทำให้ชั้น diffusion layer มีความหนาลดลงเมื่อปริมาณของ Si เพิ่มมากขึ้นทั้งนี้จากข้อมูลข้างต้นผู้เขียนจึงพิจารณาเลือกเงื่อนไขที่เกิดชั้นเคลือบจากแก้วเคลือบ (RHA) ได้แก่ 9 13.5 และ 18 wt.% ที่ 1000°C เป็นเวลา 4 ชั่วโมงเนื่องจากชั้นเคลือบที่เกิดจาก RHA มีสองชั้นในช่วงเงื่อนไขดังกล่าว

3.2.2 แบบจำลองกายภาพ (Physical model) และระเบียบวิธีเชิงตัวเลขของตัวแปร 2 ชนิด 2 ชั้นสารประกอบ

จากข้อมูลในหัวข้อ 3.2.1 จึงมีการพัฒนาแบบจำลองในหัวข้อ 3.1.2 เพื่อใช้ในการจำลองการแพร่แบบตัวแปร 2 ชนิด ในกรณีนี้คือ Al และ Si โดยเพิ่มเติมจากแบบจำลองเดิมในส่วนของ Si profile ขึ้นมาและกำหนดให้

1. การแพร่ของ Si ไม่ส่งผลต่อการแพร่ของ Al ใน diffusion layer (outer later)
2. การแพร่ของ Si ใน diffusion layer เร็วมาก (Si มีค่าสัมประสิทธิ์การแพร่มากกว่าเท่ากับสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al)
3. เฟสของ inter-diffusion layer ที่มี Si-rich เป็นเฟส NiAl

จากสมมุติฐานข้างต้นจึงแบ่งการคำนวณออกเป็นสองส่วนโดยเพิ่มการคำนวณในส่วนของชั้น inter-diffusion layer ขึ้นมาโดยแสดงเป็นผลในส่วนของ Si profile นอกจากนี้กำหนดให้ interface ระหว่าง diffusion layer และ inter-diffusion layer มีการเลื่อนโดยอ้างอิงจากตำแหน่งของ interface ที่ได้จากการคำนวณใน Al profile และมีลำดับการทำงานดังนี้

- หาตำแหน่งของ interface_t เมื่อ t คือจำนวนรอบ (time loop)
- ถ้าตำแหน่งของ interface_(Si, t=t) = interface_(Al, t=t) : ให้ตำแหน่งของ interface อยู่ที่เดิม (interface ไม่ขยับ)
- ถ้าตำแหน่งของ interface_(Si, t=t) ≠ interface_(Al, t=t) : ให้ตำแหน่งของ interface_(Si, t=t) = interface_(Al, t=t) (ตำแหน่งของ interface ขยับไปเท่ากับตำแหน่งของ interface ใน Al profile) จากนั้นทำการตั้งค่าความเข้มข้นในตำแหน่งที่ interface_{t-1} เคยอยู่มาจาก concentration profile อีกอันที่ทำงานซ้อนไว้
- จากนั้นทำการคำนวณความเข้มข้นที่ตำแหน่งต่าง ๆ ตามสมการที่ 3.1

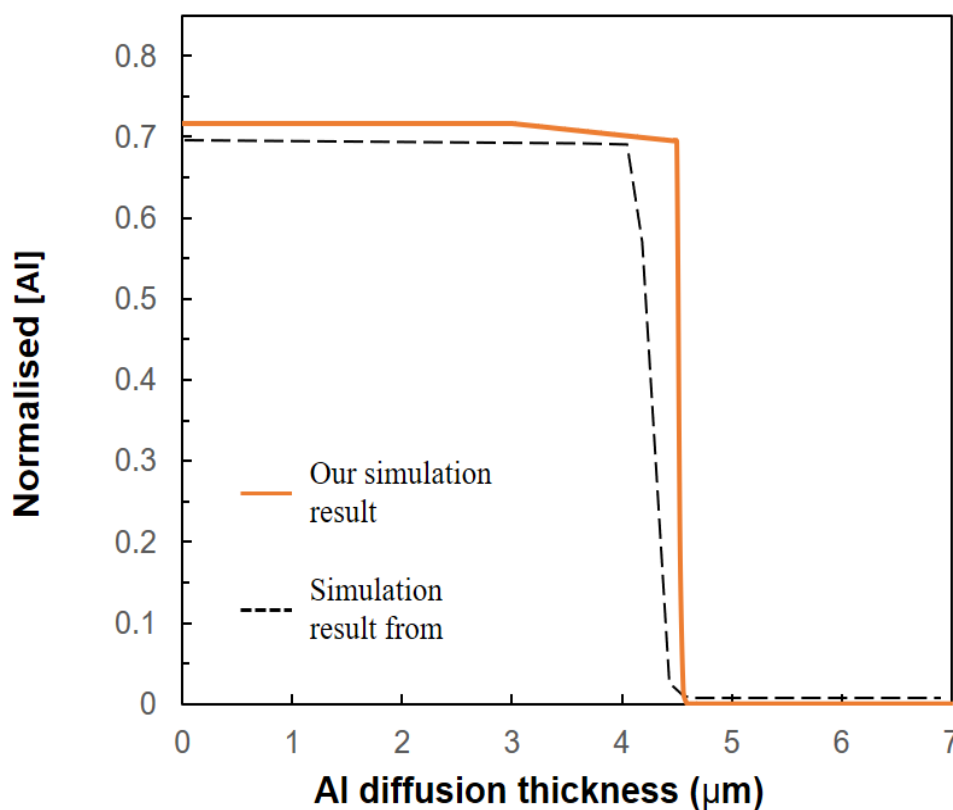
บทที่ 4

ผลการศึกษา

4.1 ผลการศึกษาแบบจำลองตัวแพร่ 1 ชนิด 1 ชั้นสารประกอบ

4.1.1 ผลการตรวจสอบความแม่นยำ (Validation result)

จากผลการคำนวณที่ได้จากแบบจำลองของงานวิจัยนี้พบว่าเมื่อทำอะลูมิเนียมไนซิงที่อุณหภูมิ 600°C เป็นเวลา 1 ชั่วโมงจะได้ชั้นความหนาของชั้นเคลือบที่ได้จากแบบจำลอง (เส้นทึบ) มีค่าประมาณ $4.5\ \mu\text{m}$ ซึ่งใกล้เคียงกับผลจากงานวิจัยของ J.M. Brossard และคณะ [6] ที่ทำอะลูมิเนียมไนซิง บนเงื่อนไขเดียวกันโดยจะมีความหนาของชั้นเคลือบที่ได้จากแบบจำลอง (เส้นประ) ประมาณ $4.4 - 4.5\ \mu\text{m}$ ดังแสดงในรูปที่ 4.1

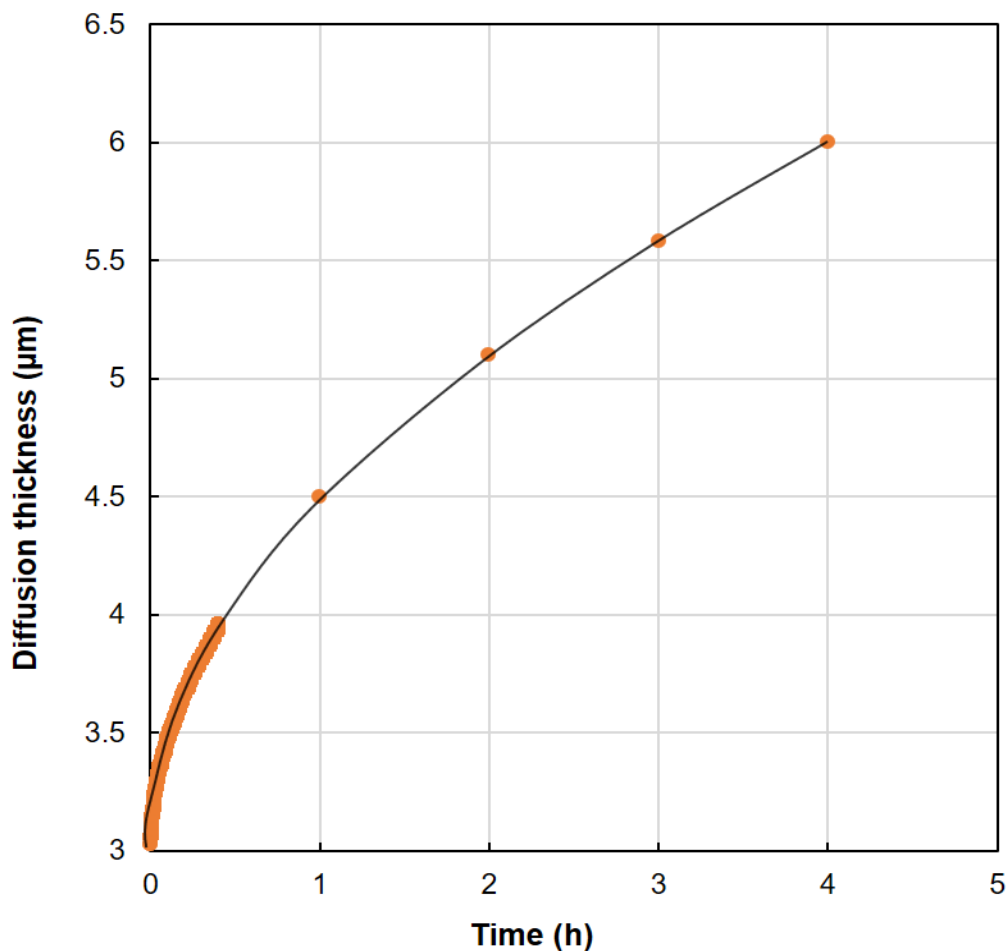


รูปที่ 4.1 ผลการคำนวณจากแบบจำลองของงานวิจัย (เส้นทึบสีส้ม) เทียบกับผลจากแบบจำลองของงานวิจัยของ J.M. Brossard (เส้นประสีดำ)

ซึ่งในการทดสอบหาความแม่นยำของแบบจำลองในงานวิจัยได้ใช้ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่และความเข้มข้นของเฟสต่าง ๆ จากงานวิจัยของ J.M. Brossard โดยมีค่าดังนี้ (1) ความเข้มข้นของอะลูมิเนียม

ที่ผิว (Al surface concentration) มีค่าประมาณ 71.66 at.% (2) ความเข้มข้นต่ำสุดของ อะลูมิเนียมในชั้นเคลือบ (minimum of Al concentration in coating) มีค่าประมาณ 69.48 at.% (3) ค่าความเข้มข้นสูงสุดของอะลูมิเนียมในเนื้อพื้น (maximum of Al solubility limit in the solid-solution region) มีค่าประมาณ 19.81 at.% และ (4) ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของอะลูมิเนียม โดยแบ่งออกเป็น 2 ส่วนได้แก่ ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของอะลูมิเนียมในชั้นเคลือบ Ni_2Al_3 ($D_{Al/Ni_2Al_3} = 1.0 \times 10^{-14} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) และค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของอะลูมิเนียมในเนื้อพื้นนิกเกิล ($D_{Al/Ni(Al)} = 1.5 \times 10^{-18} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$)

นอกจากนี้ยังมีการขยายช่วงเวลาในการจำลองจาก 1 ชั่วโมง เป็น 4 ชั่วโมงเพื่อตรวจสอบว่าแบบจำลองยังคงเป็นการควบคุมด้วยกระบวนการแพร่ (diffusion control) ตามสมมุติฐานอยู่ โดย ผลกราฟแสดงดังรูปที่ 4.2 ซึ่งมีลักษณะแบบพาราโบลาจึงอนุมานได้ว่าแบบจำลองถูกควบคุมด้วย กระบวนการแพร่

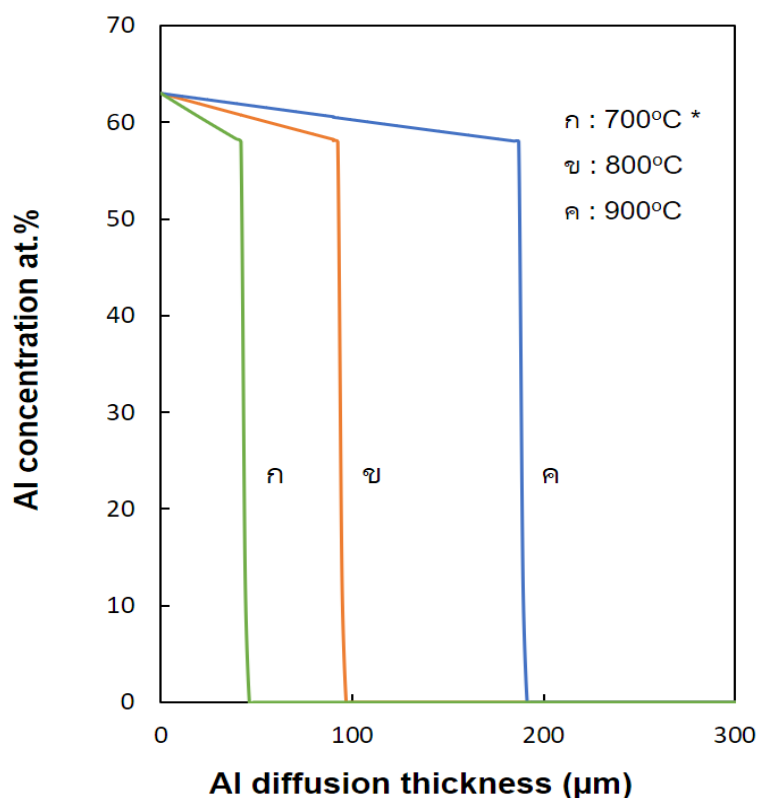


รูปที่ 4.2 ผลการคำนวณจากแบบจำลองแสดงการควบคุมของกระบวนการแพร่เป็นแบบพาราโบลา

จากผลการเปรียบเทียบความหนาจึงสรุปได้ว่า แบบจำลองมีความน่าเชื่อถือและนำไปประยุกต์ใช้กับชิ้นงาน IN 738 และ Haynes 214 เพื่อหาค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของชั้นเคลือบ Ni_2Al_3 ได้

4.1.2 ผลการประยุกต์ใช้ของแบบจำลองกับชิ้นงาน IN 738 และ Haynes 214

ในการนำแบบจำลองมาประยุกต์ใช้กับชิ้นงาน IN 738 ที่ผ่านการทำอะลูมิเนียมไนซิงโดยใช้สมมุติฐานตามเงื่อนไขในการใช้งานของแบบจำลองได้ผลดังแสดงในรูปที่ 4.3 พบว่าความหนาของชั้นเคลือบที่ได้จากแบบจำลองมีขนาดประมาณ 92.4 และ 187.0 μm ในขณะที่ความหนาจริงมีความขนาดประมาณ 92.56 และ 186.08 μm จากการทำอะลูมิเนียมไนซิงที่อุณหภูมิ 800 และ 900°C ตามลำดับ นอกจากนี้ในงานวิจัยได้มีการคำนวณหาความหนาและค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ที่อุณหภูมิ 700°C ขึ้นมาโดยมีความหนาของชั้นเคลือบเท่ากับ 41.8 μm โดยค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ที่ใช้ในการจำลองที่อุณหภูมิต่าง ๆ มีค่าดังนี้

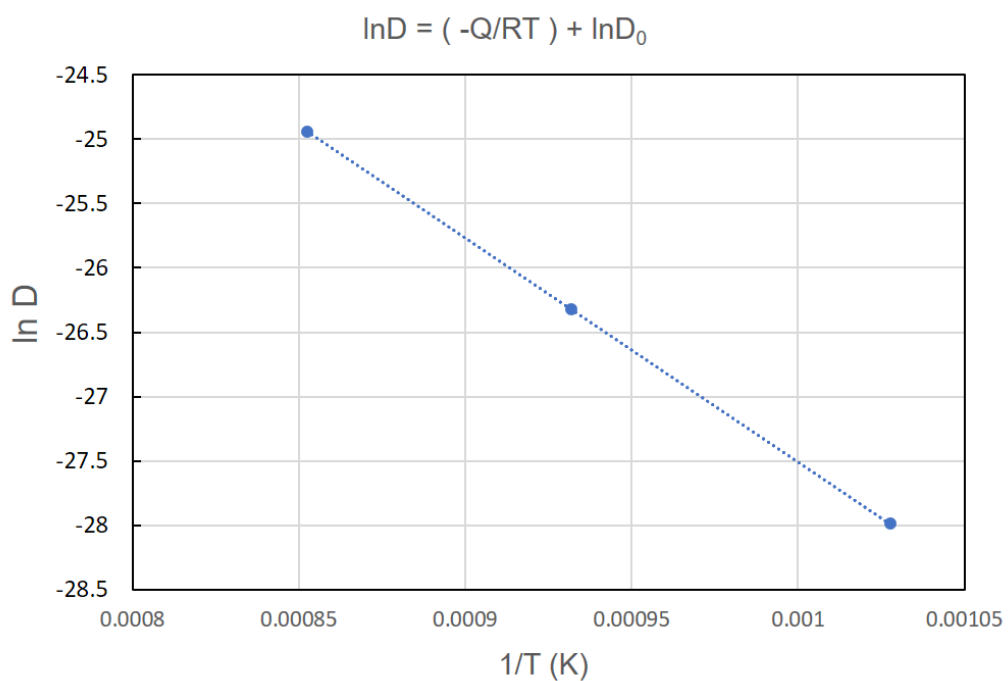


* ผลที่ได้จากการคำนวณด้วยแบบจำลอง

รูปที่ 4.3 ผลการคำนวณจากแบบจำลองบน IN 738 ได้ความหนาของชั้นเคลือบที่อุณหภูมิ 700 (ก) 800 (ข) และ 900 (ค) องศาเซลเซียส เป็นขนาด 41.8 92.4 และ 187.0 μm ตามลำดับ

- ที่อุณหภูมิ 700°C ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้นงาน IN 738 มีค่าเท่ากับ $D_{Al/Ni(Al)} = 7.07 \times 10^{-18} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Al/Ni_2Al_3} = 6.99 \times 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
- ที่อุณหภูมิ 800°C ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้นงาน IN 738 มีค่าเท่ากับ $D_{Al/Ni(Al)} = 8.54 \times 10^{-18} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Al/Ni_2Al_3} = 3.70 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
- ที่อุณหภูมิ 900°C ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้นงาน IN 738 มีค่าเท่ากับ $D_{Al/Ni(Al)} = 1.00 \times 10^{-17} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Al/Ni_2Al_3} = 1.47 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

จากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ดังกล่าวจึงนำไปหาค่าของ D_0 และ Q ตามความสัมพันธ์ของ Arrhenius ($\ln D$ และ $1/T$) โดยผลแสดงดังรูปที่ 4.4 พบว่าค่า D_0 มีค่า $4.09 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $Q = 144.7 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$

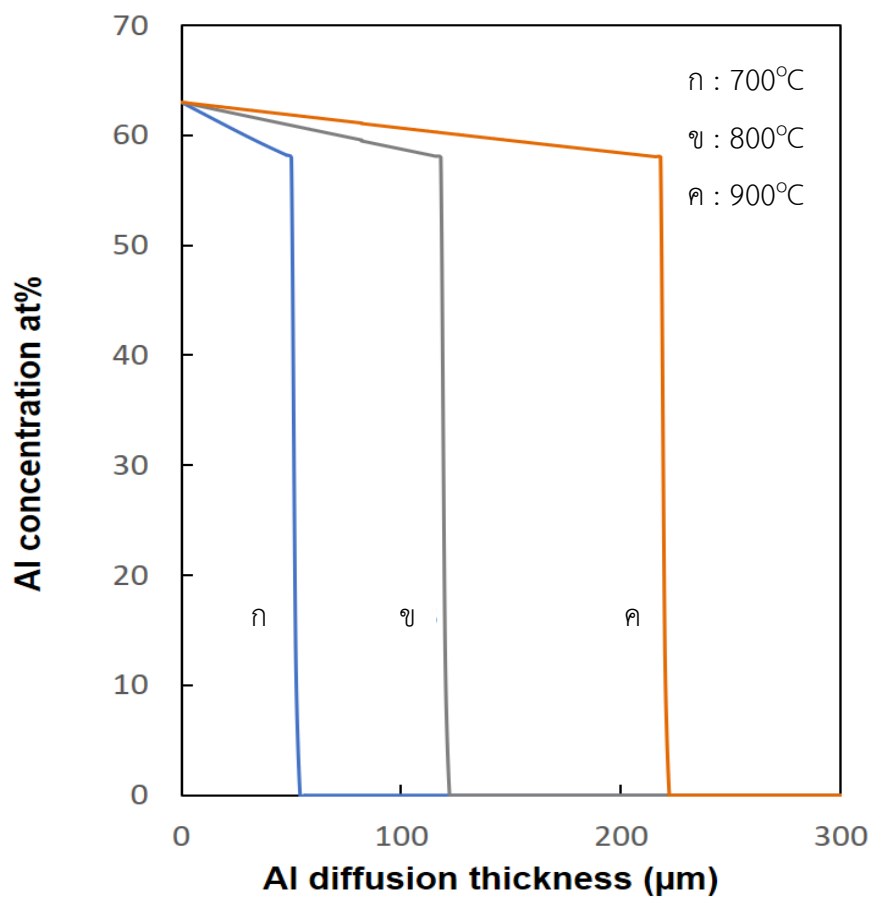


รูปที่ 4.4 ความสัมพันธ์ของ Arrhenius จากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้นเคลือบ Ni_2Al_3 กับอุณหภูมิ ในช่วง 700 – 900°C บนชั้นงาน IN 738

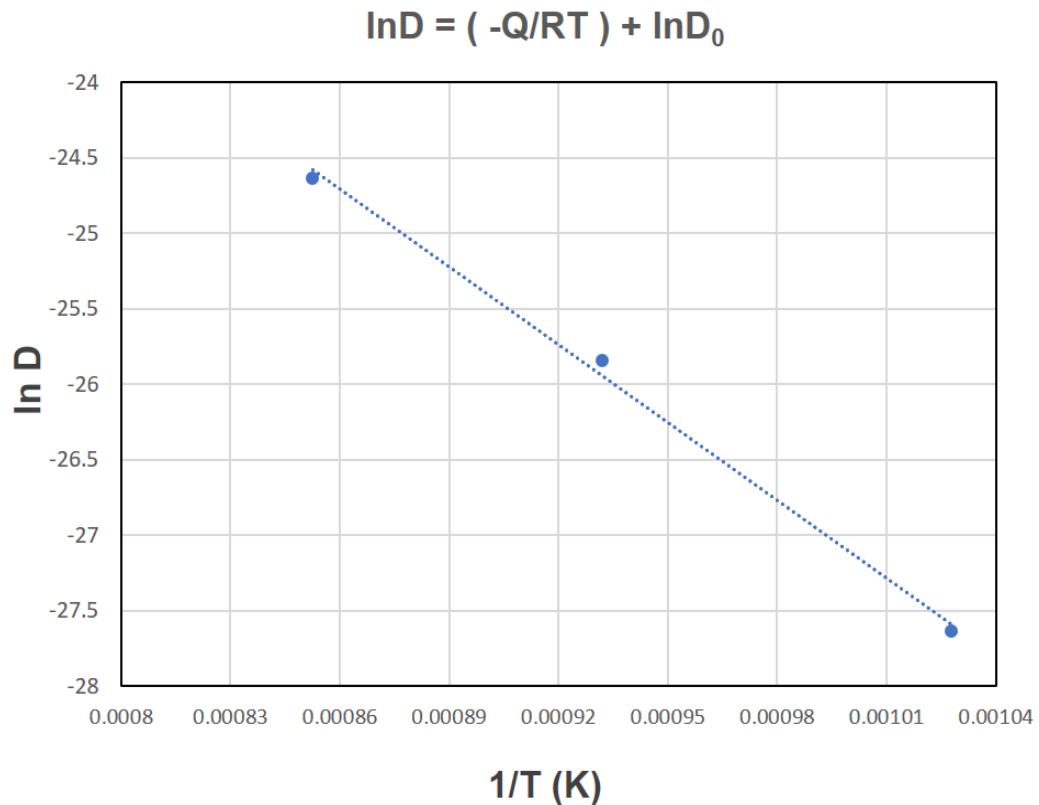
เช่นเดียวกับในกรณีของ IN 738 แบบจำลองได้ประยุกต์ใช้กับ Haynes 214 เพื่อประมาณค่าของสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al เพื่อนำไปหาค่าของ D_0 และ Q โดยมีผลการจำลองความหนาของชั้นเคลือบที่เกิดขึ้นแสดงดังรูปที่ 4.4 ซึ่งมีความหนาที่อุณหภูมิ 700 800 และ 900°C เป็นขนาด 50.0

118.0 และ 218 μm ตามลำดับและกราฟความสัมพันธ์ของ Arrhenius แสดงดังรูปที่ 4.5 โดยค่า D_0 และ Q มีค่าดังนี้

- ที่อุณหภูมิ 700°C ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ $D_{Al/Ni(Al)} = 7.07 \times 10^{-18} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Al/Ni_2Al_3} = 1.00 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
- ที่อุณหภูมิ 800°C ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ $D_{Al/Ni(Al)} = 8.54 \times 10^{-18} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Al/Ni_2Al_3} = 6.00 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
- ที่อุณหภูมิ 900°C ค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ $D_{Al/Ni(Al)} = 1.00 \times 10^{-17} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Al/Ni_2Al_3} = 2.00 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
- ค่า D_0 และ Q มีค่าเท่ากับ $4.73 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $142.5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ตามลำดับ



รูปที่ 4.5 ผลการคำนวณจากแบบจำลองบน Haynes 214 ได้ความหนาของชั้นเคลือบที่อุณหภูมิ 700 (ก) 800 (ข) และ 900 (ค) °C เป็นขนาด 50.0 118.0 และ 218 μm ตามลำดับ



รูปที่ 4.6 ความสัมพันธ์ของ Arrhenius จากค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้นเคลือบ Ni_2Al_3 กับอุณหภูมิ ในช่วง 700 - 900°C บนชิ้นงาน Haynes 214

4.2 ผลการศึกษาแบบจำลองตัวแพร่ 2 ชนิด 2 ชั้นสารประกอบ

ในการจำลองตัวแพร่สองชนิดนั้นตัวงานวิจัยได้อ้างอิงผลจากงานวิจัย [13] ดังที่ได้กล่าวในหัวข้อก่อนหน้า โดยในการทำอะลูมิเนียมโรซิงบนนิกเกิลบริสุทธิ์ที่อุณหภูมิ 1000°C เป็นเวลา 4 ชั่วโมงเกิดชั้นเคลือบแบบสองชั้นโดยมีรอยต่อเฟสที่ชัดเจนและมีเงื่อนไขที่พิจารณาในการทำแบบจำลอง 3 เงื่อนไขได้แก่ 9 13.5 และ 18 wt.% โดยในแบบจำลองมีการกำหนดค่าและสมมุติฐานดังนี้

1. สัมประสิทธิ์การแพร่ของ Si ในเฟส Ni_2Al_3 มีค่าน้อยเท่ากับสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ตามสมมุติฐานของแบบจำลองนี้
2. ในการเพิ่มขึ้นของ Si ที่ส่งผลให้ความหนาของชั้น diffusion layer น้อยลงนั้นเป็นผลมาจากการที่ Si ไปลด activity ของ Al ลงดังนั้นค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al และ Si ในทุกเงื่อนไขมีค่าเท่าเดิมดังนี้

- $D_{Al/Ni_2Al_3} = 3.5 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Al/NiAl} = 1.2 \times 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

- $D_{Si/Ni_2Al_3} = 3.5 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Si/NiAl} = 1.0 \times 10^{-14} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$

3. เนื่องจากการเพิ่มขึ้นของ Si ทำให้ activity ของ Al ลดลงดังนั้นความเข้มข้นที่ผิวของ Al จะลดลงด้วยโดยมีค่าความเข้มข้นที่ตำแหน่งต่าง ๆ ดังนี้

- ในกรณีของการเติม Si 9 wt.% : ค่าความเข้มข้นที่ผิวของ Al = 63 at.% ค่าความเข้มข้นต่ำสุดของ Al ในเฟส Ni_2Al_3 = 58 at.% ค่าความเข้มข้นสูงสุดของ Al ในเฟส NiAl = 56 at.%
- ในกรณีของการเติม Si 13.5 wt.% : ค่าความเข้มข้นที่ผิวของ Al = 60 at.% ค่าความเข้มข้นต่ำสุดของ Al ในเฟส Ni_2Al_3 = 58 at.% ค่าความเข้มข้นสูงสุดของ Al ในเฟส NiAl = 56 at.%
- ในกรณีของการเติม Si 18 wt.% มีค่าความเข้มข้นที่ผิวของ Al = 58.85 at.% ค่าความเข้มข้นต่ำสุดของ Al ในเฟส Ni_2Al_3 = 58 at.% ค่าความเข้มข้นสูงสุดของ Al ในเฟส NiAl = 56 at.%

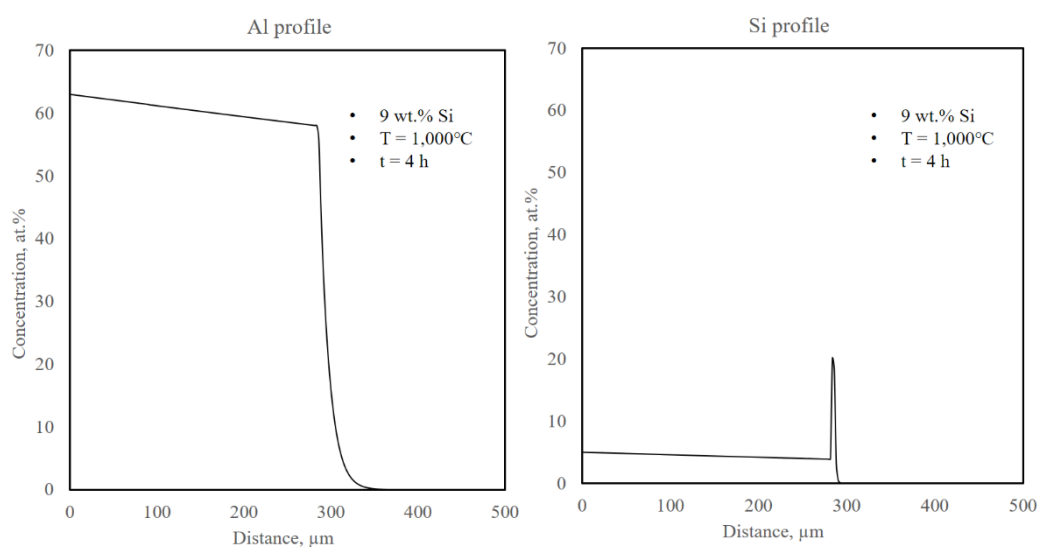
4. ปริมาณสูงสุดของ Si ที่สามารถละลายอยู่ได้ในเฟส Ni_2Al_3 = 5 at.% และใน NiAl = 20 at.%

จากข้อกำหนดข้างต้นได้ผลการจำลองดังแสดงในรูปที่ 4.7 – 4.12 โดยมีความหนาของชั้นเคลือบนอก (diffusion layer) และชั้นเคลือบใน (inter-diffusion layer) แสดงในตารางที่ 4.1 พบว่าความหนาของชั้นเคลือบแรก (diffusion layer) มีขนาด 283.8 176.0 และ 107.8 μm และความหนาของชั้นเคลือบใน (inter-diffusion layer) มีขนาด 6.6 11.0 และ 22.0 μm เมื่อมีการเติม Si ในปริมาณ 9 13.5 และ 18 wt.% ตามลำดับ โดยความหนาของชั้นเคลือบในคำนวณจากตำแหน่งสุดท้ายของ interface ระหว่างชั้นเคลือบนอกและชั้นเคลือบในจนถึงตำแหน่งที่มีความเข้มข้นน้อยกว่า 0.5% ของค่าความสามารถสูงสุดในการละลายในเฟส NiAl

ตารางที่ 4.1 ความหนาของชั้นเคลือบจากแบบจำลองเทียบผลจากการทดลอง

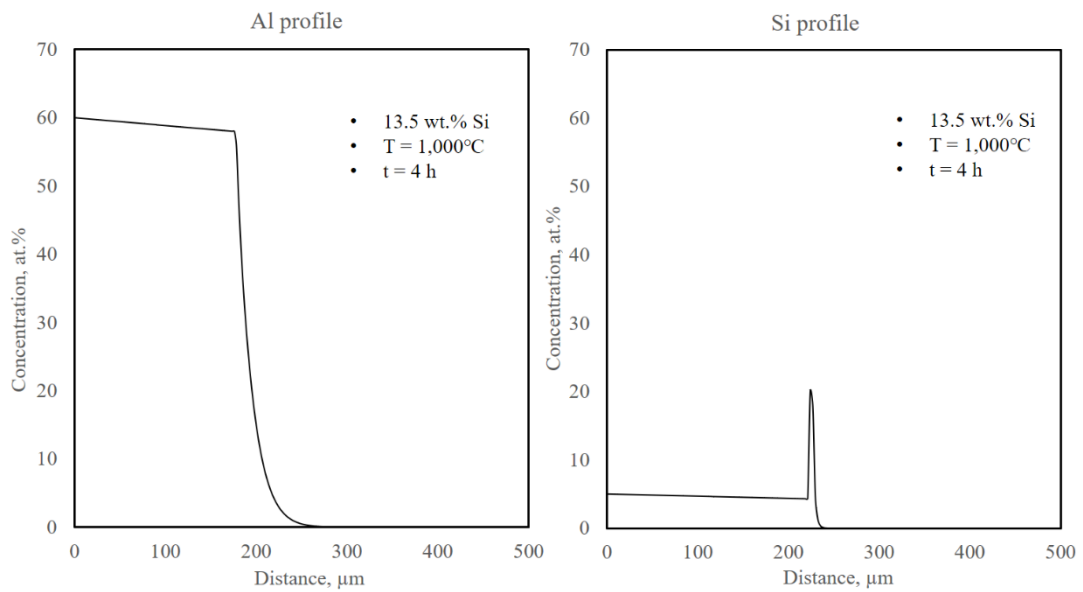
Si (wt.%)	ความหนาชั้น นอกจากแบบจำลอง (μm)	ความหนาชั้น นอกจากการทดลอง (μm)	ความหนาชั้นใน จากแบบจำลอง (μm)	ความหนาชั้นใน จากการทดลอง (μm)
9	283.8	281.89 ± 23.80	6.6	3.78 ± 0.91
13.5	176.0	174.25 ± 3.22	11.0	11.94 ± 2.34
18	107.8	108.94 ± 3.49	22.0	28.77 ± 4.48

ในส่วนของผลจำลองในรูปที่ 4.7 – 4.12 พบว่าเมื่อลดความเข้มข้นของ Al ที่ผิวลงส่งผลให้ interface ระหว่างชั้น diffusion layer และชั้น inter-diffusion layer มีการเคลื่อนที่ที่ช้าลงทำให้ความหนาของชั้น diffusion layer มีขนาดที่ลดลงตาม นอกจากนี้ชั้น inter-diffusion layer ยังมีขนาดที่ใหญ่ขึ้นแสดงดังรูปที่ 4.8 4.10 และ 4.12

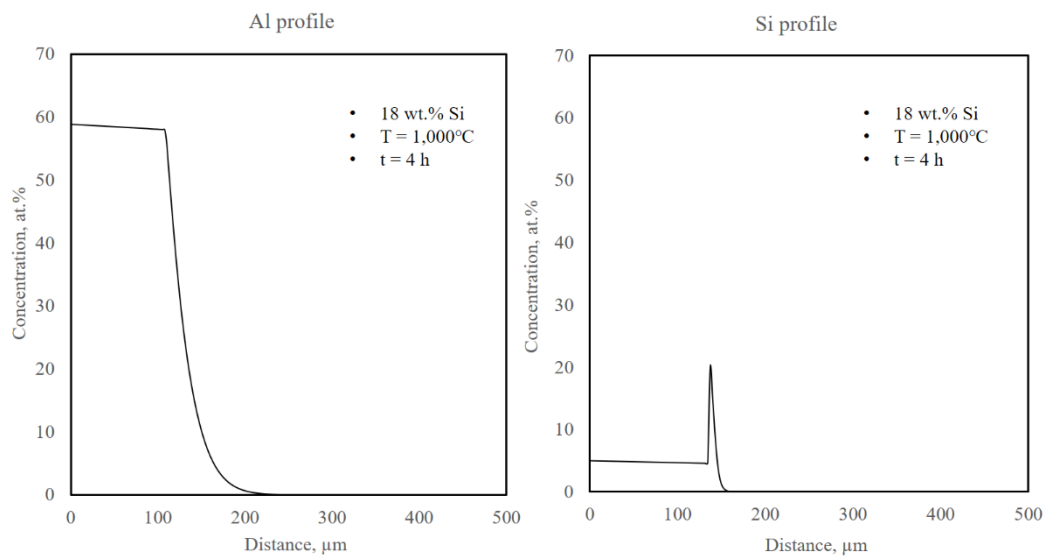


รูปที่ 4.7 แบบจำลองแสดงความหนาของชั้น diffusion layer และ inter-diffusion layer

บนชิ้นงานที่มีการเติม Si ในปริมาณ 9 wt.%



รูปที่ 4.8 แบบจำลองแสดงความหนาของชั้น diffusion layer และ inter-diffusion layer บนชิ้นงานที่มีการเติม Si ในปริมาณ 13.5 wt.%



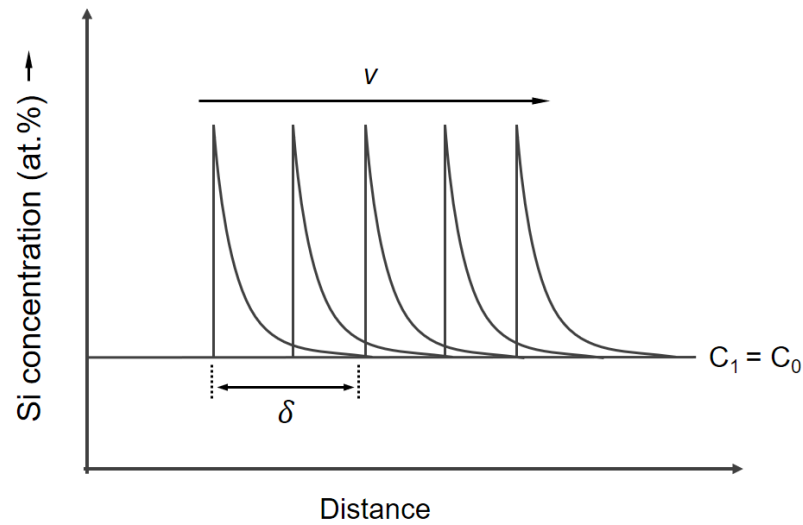
รูปที่ 4.9 แบบจำลองแสดงความหนาของชั้น diffusion layer และ inter-diffusion layer บนชิ้นงานที่มีการเติม Si ในปริมาณ 18 wt.%

บทที่ 5

สรุปผลการทดลอง

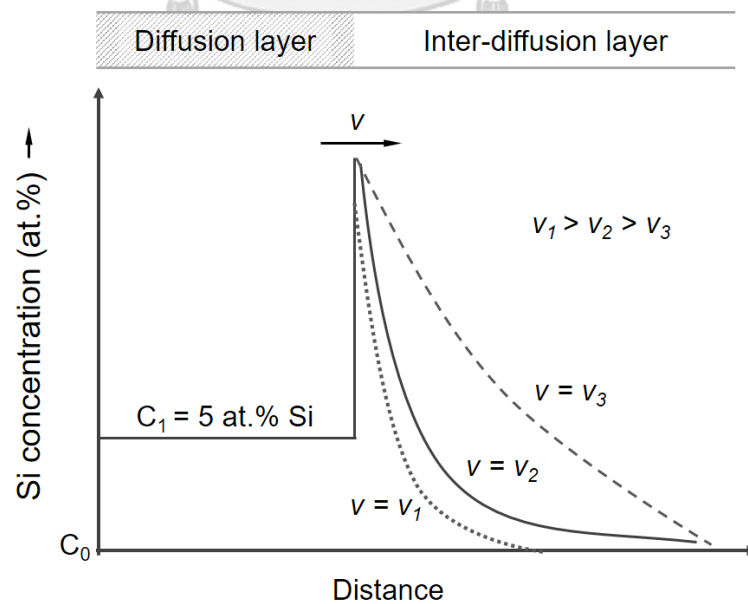
แบบจำลองสามารถประมาณค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชั้นสารประกอบนิกเกิลอะลูมิเนียมไนต์ ได้โดยในกรณีของแบบจำลองการแพร่ 1 ชนิดของ Al ในชิ้นงาน IN 738 มีค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในเฟส Ni_2Al_3 ที่อุณหภูมิ 800°C และ 900°C มีค่าเท่ากับ $D_{Al/Ni_2Al_3} = 3.70 \times 10^{-12} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Al/Ni_2Al_3} = 1.47 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ตามลำดับโดยมีค่าของ D_0 และ Q เท่ากับ $4.73 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $142.5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ตามลำดับ นอกจากนี้ในส่วนงานของ Haynes 214 มีค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในเฟส Ni_2Al_3 ที่อุณหภูมิ 700 800 และ 900°C เท่ากับ 1.00×10^{-12} 6.00×10^{-12} และ $2.00 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ตามลำดับ ส่วนค่า D_0 และ Q ในช่วงอุณหภูมิดังกล่าวมีค่าเท่ากับ $4.73 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $142.5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$ ตามลำดับ โดยค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al ในชิ้นงาน IN 738 และ Haynes 214 มีค่าที่ใกล้เคียงกันในช่วงอุณหภูมิเดียวกันนั้นเป็นผลมาจากส่วนผสมทางเคมี (chemical composition) ที่ใกล้เคียงกันของทั้ง 2 ชิ้นงาน ส่วนในกรณีของแบบจำลองตัวแพร่ 2 ชนิดที่มี Al และ Si เป็นตัวแพร่มีค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Al และ Si ดังนี้ $D_{Al/Ni_2Al_3} = 3.5 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ $D_{Al/NiAl} = 1.2 \times 10^{-13} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ $D_{Si/Ni_2Al_3} = 3.5 \times 10^{-11} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ และ $D_{Si/NiAl} = 1.0 \times 10^{-14} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ซึ่งในกรณีของแบบจำลองตัวแพร่ 2 ชนิดนั้นค่าสัมประสิทธิ์การแพร่ของ Si ในเฟส Ni_2Al_3 เป็นการกำหนดขึ้นเพื่อให้สอดคล้องกับสมมุติฐานของแบบจำลอง

อย่างไรก็ตามในกรณีศึกษาของแบบจำลองตัวแพร่ 2 ชนิด 2 ชั้นสารประกอบนั้นยังพบความคลาดเคลื่อนอยู่บ้างโดยผู้วิจัยพบว่าปัญหาดังกล่าวอาจแก้ไขได้ด้วยความสัมพันธ์ของความเร็วในการเคลื่อนที่ของ moving interface กับความหนาของชั้น inter-diffusion layer ร่วมกับการทำสมดุลมวล อ้างอิงจากทฤษฎีการเคลื่อนที่ของ moving interface ที่มี boundary layer อยู่ข้างหน้า moving interface และเป็น steady state กล่าวคือ $C_1 = C_0$ แสดงดังรูปที่ 5.1



รูปที่ 5.1 แสดงการเคลื่อนที่ของ moving interface ที่ steady state ($C_1 = C_0$)

นั้นจะสามารถพิสูจน์ได้ว่าความหนาของ boundary layer (δ) เป็นไปตามสมการ $\delta \approx D/v$ โดยพบว่าเมื่อ moving interface มีการเคลื่อนที่ที่เร็วขึ้นจะส่งผลให้ความหนาของ boundary layer แคบลงเนื่องจากการความต้องการในการระบายมวลส่งผลให้ flux ที่ interface มากขึ้นตามสมการ $J = -D \frac{\partial C}{\partial x}$ แต่ในกรณีของการทำอะลูมิเนียมในเชิงบนนิทเกิลบริสุทธ์ที่ปรับปรุงด้วยซิลิคอนนั้นจะพบว่าการเคลื่อนที่ของ boundary layer ในชั้น inter-diffusion layer ไม่เป็น steady state กล่าวคือ $C_1 \neq C_0$ แสดงดังรูปที่ 5.2



รูปที่ 5.2 แสดงความสัมพันธ์ของความหนาของชั้น inter-diffusion layer และความเร็วจน interface เมื่อ $v_1 > v_2 > v_3$ และ $C_1 = 5 \text{ at.}\%$

ประกอบกับการเคลื่อนที่ของ boundary layer ถูกควบคุมด้วยการแพร่ทำให้มีความเร็วไม่คงที่จึงไม่สามารถใช้สมการข้างต้นได้ อย่างไรก็ตามความหนาของชั้น inter-diffusion layer ยังคงเป็นไปตามความสัมพันธ์ $\delta \approx 1/v$ ดังกรณีของ steady state ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองโดยจะพบว่า เมื่อความเร็วของ moving interface ช้าลงจากโตที่ควบคุมด้วยการแพร่นั้นความหนาของชั้น inter-diffusion layer จะเพิ่มขึ้น



บรรณานุกรม

- [1] J. R. Davis, *ASM Specialty Handbook: Nickel, Cobalt, and Their Alloys*. Materials Park, OH 44073: ASM International, 2000.
- [2] M. J. Donachie and S. J. Donachie, *Superalloys: A Technical Guide*. ASM International, 2002.
- [3] F. Bozza *et al.*, "Diffusion mechanisms and microstructure development in pack aluminizing of Ni-based alloys," *Surface and Coatings Technology*, vol. 239, pp. 147-159, 2014/01/25 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2013.11.034>.
- [4] B. Predel, "Al-Ni (Aluminum-Nickel): Datasheet from Landolt-Börnstein - Group IV Physical Chemistry · Volume 5A: "Ac-Au – Au-Zr" in SpringerMaterials (https://dx.doi.org/10.1007/10000866_125)," Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [5] V. A. Ravi, T. K. Nguyen, and J. C. Nava, "21 - Aluminizing of steel to improve high temperature corrosion resistance," in *Thermochemical Surface Engineering of Steels*. Oxford: Woodhead Publishing, 2015, pp. 751-767.
- [6] J. M. Brossard, B. Panicaud, J. Balmain, and G. Bonnet, "Modelling of aluminized coating growth on nickel," *Acta Materialia*, vol. 55, no. 19, pp. 6586-6595, 2007/11/01/ 2007, doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.08.025>.
- [7] S. P. Garg, G. B. Kale, R. V. Patil, and T. Kundu, "Thermodynamic interdiffusion coefficient in binary systems with intermediate phases," *Intermetallics*, vol. 7, no. 8, pp. 901-908, 1999/08/01/ 1999, doi: [https://doi.org/10.1016/S0966-9795\(98\)00139-3](https://doi.org/10.1016/S0966-9795(98)00139-3).
- [8] E. Gariboldi, M. Verani, and C. Riva, "Modelling of Phase Evolution during Aluminizing Processes," *Advanced Materials Research*, vol. 278, pp. 228-233, 2011, doi: 10.4028/www.scientific.net/AMR.278.228.
- [9] J. Romanowska, "Aluminum diffusion in aluminide coatings deposited by the CVD method on pure nickel," *Calphad*, vol. 44, pp. 114-118, 2014/03/01/ 2014, doi: <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2013.09.003>.
- [10] H. Wei, X. Sun, Q. Zheng, H. Guan, and Z. Hu, "Estimation of interdiffusivity of the NiAl Phase in Ni–Al binary system," *Acta Materialia*, vol. 52, no. 9, pp. 2645-

2651, 2004/05/17/ 2004, doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.02.012>.

- [11] D. Poirier and G. Geiger, *Transport Phenomena in Materials Processing*. 2016.
- [12] ป. เตชะอำไพ, ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขในงานวิศวกรรม. สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย.
- [13] B. Hengprayoon, "EFFECT OF RICE HUSK ASH ADDITION ON FILM FORMATION IN PACK ALUMINIZING PROCESS FOR PURE NICKEL," Master Thesis, Department of Metallurgical Engineering, Chulalongkorn University, 2560.





ภาคผนวก

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

รหัสคำสั่ง (code) ในการสร้างแบบจำลองการแพร่แบบ 1 ชนิด

```

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <string>
using namespace std;
#include <time.h>
#include <unistd.h>
int main ()
{
    int elementSurface = 5000;
    int processTime =250000;
    float
        initialConcentration = 0,
        surfaceConcentration = 78,
        upperPhasel = 69,
        lowerPhasel = 13,
        length = 20,
        diffX = 2e-6,
        diffusivity = 1e-14, //Ni2Al3
        diffusivityii = 1.5e-18, //Ni(Al)
        timeStep = 0.0288,
        constant,
        constantii;
    int mainloop=0;
    int position[processTime];
    //Display the input values
    printf("\n\nInitial concentration (quantity/m^3) : %f\n", initialConcentration);
    printf("Surface concentration (quantity/m^3) : %f\n", surfaceConcentration );
    printf("Total length (m) : %f\n", length);
    printf("dx (m) : %.10f\n", diffX);

```

```

printf("Diffusivty (m-2/sec) : %.20f\n", diffusivity);
printf("Diffusivtyii (m-2/sec) : %.20f\n", diffusivityii);
printf("Time step (sec) : %f\n\n\n", timeStep);
//Create an space collect data
float Input[elementSurface];
float Output[elementSurface];
int i=0;
int step = 0;
//Insert initial value
for (i=0; i<=(elementSurface-1); i++) //Change VERA
{
    Input[i] = initialConcentration;
    Output[i] = initialConcentration;
}
Output[0]=surfaceConcentration;
Input[0]=surfaceConcentration;
Input[1]=upperPhasel;
Input[2]=lowerPhasel;
Output[1]=upperPhasel;
Output[2]=lowerPhasel;
constant = (timeStep*diffusivity)/(diffX*diffX);
constantii = (timeStep*diffusivityii)/(diffX*diffX);
printf("constant = %f\n",constant);
printf("constantii = %f\n",constantii);
float collect = 0 ;
float dC = 0 ;
float x=0;
float y=0;

do
{

```

```

//Calculate zone (write data to Output)
for (step=0 ; step<=(processTime-1); step++)
{
    printf("loop step = %d\n",step);
    printf("mainloop = %d\n",mainloop);
    for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
    {
        if (Input[i] == upperPhasel && Input[i+1] == lowerPhasel)
        {
            Output[i]= upperPhasel ;
        }
        else if(Input[i] == lowerPhasel && Input[i-1] == upperPhasel)
        {
            Output[i]= lowerPhasel ;
        }
        else if(Input[i] >= upperPhasel && Input[i+1] != lowerPhasel )
        {
            Output[i]= Input[i]+(constant*( Input[i-1] - (2*Input[i]) +
            Input[i+1] ));
        }
        else if(Input[i] <= lowerPhasel && Input[i-1] != upperPhasel )
        {
            Output[i]= Input[i]+(constantii*( Input[i-1] - (2*Input[i]) +
            Input[i+1] ));
        }

        else printf("Something error at calculate zone");
    }
}

```



```

//find position and data of flux at interface
for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
{
if (Output[i] == upperPhasel && Output[i+1]==lowerPhasel)
{
x = Output[i-1];
y = Output[i+2];
printf("x = %.20f  y = %0.20f \n",x,y);
}
}
//collect position of interphase

for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
{
if (Output[i] == upperPhasel && Output[i+1]==lowerPhasel)
{
position[step] = i ;
i = (elementSurface-1);
}
}
//flux calculate to mass

dC = (((diffusivityii*(y-lowerPhasel))-(diffusivity*(upperPhasel-
x)))*(timeStep/(diffX*diffX))) ;
printf("dC = %.20f \n",dC);

//collect mass
collect = collect + dC ;
printf("collect = %.20f \n",collect);
if(collect>upperPhasel-y)
{
{

```

```

//interphase moving
    for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
        {
            {
                if (Output[i]== upperPhasel && Output[i+1] ==
                    lowerPhasel )
                    {

                        Output[i+1]=upperPhasel;
                        Output[i+2]=lowerPhasel;
                        collect = collect-(upperPhasel-y);
                        i = (elementSurface-1);
                    }
                }
            }
        }
    } //end of checking mass over
//copy an concentration profile to the old step one
for (i =1 ; i<=(elementSurface-1) ; i++)
{
    Input[i]=Output[i];
}

//end for one step loop

}

if (mainloop==0)
    {

```

```
FILE *x = fopen("concentration profile0.text","w");
    if (x == NULL)
    { printf ("Error opening file !\n");
      exit (1);
    }

```

```
for (i=0; i<=(elementSurface-1); i++)
    { fprintf(x,"%0.30f\n",Output[i]);
    }
fclose(x);

```

```
FILE *b = fopen("interphase position0.text","w");
    if (b == NULL)
    { printf ("Error opening file !\n");
      exit (1);
    }

```

```
for (i=0; i<=(processTime-1); i++)
    { fprintf(b,"%d\n",position[i]);
    }
fclose(b);

```

```
}

```

```
else if (mainloop==1)

```

```
{

```

```
FILE *y = fopen("concentration profile1.text","w");
    if (y == NULL)
    { printf ("Error opening file !\n");

```

```

        exit (1);
    }

    for (i=0; i<=(elementSurface-1); i++)
        { fprintf(y,"%0.30f\n",Output[i]);
        }
    fclose(y);

    FILE *c = fopen("interphase position1.text","w");
    if (c == NULL)
        { printf ("Error opening file !\n");
        exit (1);
        }

    for (i=0; i<=(processTime-1); i++)
        { fprintf(c,"%d\n",position[i]);
        }
    fclose(c);
}

}

else if (mainloop==2)
{

    FILE *z = fopen("concentration profile2.text","w");
    if (z == NULL)
        { printf ("Error opening file !\n");
        exit (1);
        }
}

```

```

for (i=0; i<=(elementSurface-1); i++)
{ fprintf(z,"%0.30f\n",Output[i]);
}
fclose(z);

```

```

FILE *d = fopen("interphase position2.text","w");
if (d == NULL)
{ printf ("Error opening file !\n");
exit (1);
}

for (i=0; i<=(processTime-1); i++)
{ fprintf(d,"%d\n",position[i]);
}
fclose(d);
}

```

จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY

```

mainloop++ ;
}
while (mainloop<2);

```

```

//export concentration profile to file .text
FILE *f = fopen("concentration profile3.text","w");
if (f == NULL)
{ printf ("Error opening file !\n");

```

```
        exit (1);
    }

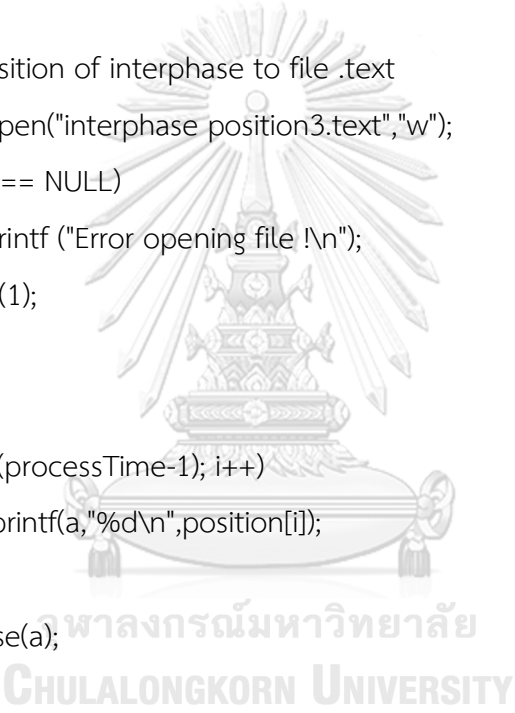
    for (i=0; i<=(elementSurface-1); i++)
        { fprintf(f,"%0.30f\n",Output[i]);
        }
    fclose(f);

    //export position of interphase to file .text
    FILE *a = fopen("interphase position3.text","w");
    if (a == NULL)
        { printf ("Error opening file !\n");
        exit (1);
        }

    for (i=0; i<=(processTime-1); i++)
        { fprintf(a,"%d\n",position[i]);
        }
    fclose(a);

return 0;

}
```



รหัสคำสั่ง (code) ในการสร้างแบบจำลองการแพร่แบบ 2 ชนิดส่วนที่ 1 (Si profile ในชั้นของ Si-rich layer)

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <string>
using namespace std;
#include <time.h>
#include <unistd.h>

int main ()
{
    int elementSurface = 100000;
    int processTime =50000;
    float
        AinitialConcentration = 0,
        AsurfaceConcentration = 63,
        AlupperPhasel = 58,
        AllowerPhasel = 56,
        length = 20,
        diffX = 2.2e-6,
        diffusivity = 3.5e-11,
        diffusivityll = 1.2e-13,
        timeStep = 0.0576,
        constant,
        constantll,

    //Si profile
        SiinitialConcentration = 0,
        SisurfaceConcentration = 5,
```

```

SiupperPhasel = 20,
SiflowerPhasel = 5,
diffusivityIII = 6.686e-13,
constantIII;

int interphasel[processTime],
    interphasell[processTime];

//Display the input values
printf("\n\n\nInitial concentration (quantity/m^3) : %f\n", AlinitialConcentration);
printf("Surface concentration (quantity/m^3) : %f\n", AlsurfaceConcentration );
printf("Total length (m) : %f\n", length);
printf("dx (m) : %.10f\n", diffX);
printf("Diffusivity (m-2/sec) : %.20f\n", diffusivity);
printf("Diffusivityii (m-2/sec) : %.20f\n", diffusivityII);
printf("Time step (sec) : %f\n\n\n", timeStep);

//Create an space Alcollect data
float AlInput[elementSurface];
    float AlOutput[elementSurface];
float SiInput[elementSurface];
    float SiOutput[elementSurface];
int i=0,
    j=0;
int step = 0;

//Insert initial value
for (i=0; i<=(elementSurface-1); i++) //Change VERA
{
    AlInput[i] = AlinitialConcentration;
    AlOutput[i] = AlinitialConcentration;

```



```

        SiInput[i] = SiinitialConcentration;
        SiOutput[i] = SiinitialConcentration;
    }
    AlOutput[0]=AlsurfaceConcentration;
    AlInput[0]=AlsurfaceConcentration;
    SiOutput[0]=SisurfaceConcentration;
    SiInput[0]=SisurfaceConcentration;

    AlInput[1]=AlupperPhasel;
    AlInput[2]=AllowerPhasel;
    AlOutput[1]=AlupperPhasel;
    AlOutput[2]=AllowerPhasel;

    SiInput[1] = SiupperPhasel;
    SiOutput[1] = SiupperPhasel;

    constant = (timeStep*diffusivity)/(diffX*diffX);
    constantII = (timeStep*diffusivityII)/(diffX*diffX);
    constantIII = (timeStep*diffusivityIII)/(diffX*diffX);
    printf("constant = %f\n",constant);
    printf("constantII = %f\n",constantII);
    printf("constantIII = %f\n",constantIII);

    float Alcollect = 0 ;
    float Sicollect = 0 ;
    float AldC = 0 ;
    float SidC = 0 ;
    float xl=0;
    float yl=0;
    float xII=0;

```

```

float yll=0;

//Calculate zone (write data to AOutput)

int mainloop =0 ;
do
{
step=0;

do
// for (step=0 ; step<=(processTime-1); step++)
{
printf("loop step = %d\n",step);
for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
{
if (AInput[i] == AlupperPhasel && AInput[i+1] == AllowerPhasel)
{
AOutput[i]= AlupperPhasel ;
}
else if(AInput[i] == AllowerPhasel && AInput[i-1] == AlupperPhasel)
{
AOutput[i]= AllowerPhasel ;
}

else if(AInput[i] >= AlupperPhasel && AInput[i+1] != AllowerPhasel )
{
AOutput[i]= AInput[i]+(constant*( AInput[i-1] - (2*AInput[i]) +
AInput[i+1] ));
}
}
}

```

```

else if(AllInput[i] <= AllowerPhasel && AllInput[i-1] != AlupperPhasel )
    {
        AllOutput[i]= AllInput[i]+(constantII*( AllInput[i-1] - (2*AllInput[i] ) +
        AllInput[i+1] ));
    }

else printf("Something error at calculate zone");
    }
for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
    {
        if ( Silnput[i] == SiupperPhasel && Silnput[i-1] ==
        SisurfaceConcentration )
            {
                SiOutput[i] = SiupperPhasel ;
            }
        else if (Silnput[i] == SisurfaceConcentration && Silnput[i+1] ==
        SisurfaceConcentration)
            {
                SiOutput[i] = SisurfaceConcentration ;
            }
        else if (Silnput[i] == SisurfaceConcentration && Silnput[i+1] ==
        SiupperPhasel)
            {
                SiOutput[i] = SisurfaceConcentration ;
            }

        else if (Silnput[i] <= SiupperPhasel )
            {
                SiOutput[i]= Silnput[i]+(constantIII*( Silnput[i-1] - (2*Silnput[i] ) +
                Silnput[i+1] ));
            }
    }

```

```
else printf("Something error at Si calculate zone");
```

```
}
```

```
//find position and data of flux at interface
```

```
for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
```

```
{
```

```
if (AOutput[i] == AlupperPhasel &&
```

```
AOutput[i+1]==AllowerPhasel)
```

```
{
```

```
xl = AOutput[i-1];
```

```
yl = AOutput[i+2];
```

```
printf("xl = %.20f   yl = %0.20f \n",xl,yl);
```

```
}
```

```
}
```

```
//Alcollect interphasel of interphase
```

```
for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
```

```
{
```

```
if (AOutput[i] == AlupperPhasel &&
```

```
AOutput[i+1]==AllowerPhasel)
```

```
{
```

```
interphasel[step] = i ;
```

```
i = (elementSurface-1);
```

```
}
```

```

    }

    //Sicollect interphasel of interphase
    for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
    {
        if (SiOutput[i] == SiupperPhasel && SiOutput[i-
            1]==SisurfaceConcentration)
        {

            interphasell[step] = i ;

            i = (elementSurface-1);
        }
    }

    //flux calculate to mass
    AldC = (((diffusivityll*(yl-AllowerPhasel))-diffusivity*(AlupperPhasel-
        xl)))*(timeStep/(diffX*diffX)) ;
    printf("AldC = %.20f \n",AldC);

    //Alcollect mass

    Alcollect = Alcollect + AldC ;
    printf("Alcollect = %.20f \n",Alcollect);

//interphase moving process
    if(Alcollect>AldC)
    {

```

```

{
//interphase moving
for (i=1 ; i<=(elementSurface-1); i++)
{
{
if (AlOutput[i]== AlupperPhasel &&
AlOutput[i+1] == AllowerPhasel )
{
AlOutput[i+1]=AlupperPhasel;
AlOutput[i+2]=AllowerPhasel;
Alcollect = Alcollect-(AlupperPhasel-yl);
if (SiOutput[i] == SiupperPhasel && SiOutput[i-
1]==SisurfaceConcentration)
{
Sicollect = Sicollect+SiInput[i];
SiOutput[i] = SisurfaceConcentration ;
SiOutput[i+1] = SiupperPhasel ;

xll = SiOutput[i+1]; //SiupperPhasel 20
yll = SiOutput[i+2]; //i+2
printf("xll = %.20f  yll = %0.20f\n",xll,yll);

}

SidC = xll - yll ;
if (Sicollect > SidC)

```

```

    {
    for (j=1 ; j<=(elementSurface-1); j++)
    {
    if (SiOutput[j] == SiupperPhasel && SiOutput[j-
    1]==SisurfaceConcentration)
                                                {

    SiOutput[j+1] = SiupperPhasel;
    Sicollect = Sicollect - SidC ;
    j = (elementSurface-1);
    }
    }
    }
    i = (elementSurface-1);
    }
    }
    }
    }
    } //end of checking mass over
//copy an concentration profile to the old step one
for (i =1 ; i<=(elementSurface-1) ; i++)
{
    AlInput[i]=AlOutput[i];
    SiInput[i]=SiOutput[i];
}
//end for one step loop
step++ ;
}
while ( step<processTime );

mainloop++ ;
}

```

```
while (mainloop<5);
```

```
//Display data and export file
```

```
//export concentration profile to file .text
```

```
FILE *f = fopen("concentration profile.text","w");
```

```
if (f == NULL)
```

```
{ printf ("Error opening file !\n");
```

```
exit (1);
```

```
}
```

```
for (i=0; i<=(elementSurface-1); i++)
```

```
{ fprintf(f,"%0.30f\n",AlOutput[i];
```

```
}
```

```
fclose(f);
```

```
FILE *c = fopen("Si concentration profile.text","w");
```

```
if (f == NULL)
```

```
{ printf ("Error opening file !\n");
```

```
exit (1);
```

```
}
```


 จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
 CHULALONGKORN UNIVERSITY

```
for (i=0; i<=(elementSurface-1); i++)
```

```
{ fprintf(f,"%0.30f\n",SiOutput[i];
```

```
}
```

```
fclose(f);
```

```
//export position of interphase to file .text
```

```
FILE *a = fopen("interphase position.text","w");
```

```
if (a == NULL)
```

```
{ printf ("Error opening file !\n");
```



```
        exit (1);
    }

    for (i=0; i<=(processTime-1); i++)
        { fprintf(a,"%d\n",interphasel[i]);
        }
    fclose(a);

    FILE *b = fopen("interphasel position.txt","w");
    if (b == NULL)
        { printf ("Error opening file !\n");
        exit (1);
        }

    for (i=0; i<=(processTime-1); i++)
        { fprintf(a,"%d\n",interphasel[i]);
        }
    fclose(a);

return 0;

}
```

ประวัติผู้เขียน

ชื่อ-สกุล	นายปรเมศวร์ เดชธรรมรงค์
วัน เดือน ปี เกิด	10 มีนาคม 2537
สถานที่เกิด	กรุงเทพฯ
ที่อยู่ปัจจุบัน	333 หมู่ที่ 7 ต.ลำไทร อ.วังน้อย จ.พระนครศรีอยุธยา 13170
ผลงานตีพิมพ์	Modelling of nickel aluminide layer growth on IN 738 and Haynes 214 in pack aluminizing



จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
CHULALONGKORN UNIVERSITY