FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 1997, március 21-23

A különböző dendritcsúcs túlhűlési modellek alapján végzett számítások összehasonlítása a kísérleti adatokkal

Kuti István, Roós András

Bevezetés

A gyakorlatban használatos ötvözetek nagy része dendritesen kristályosodik, a kristályosodás során szilárdoldat keletkezik, mikrodúsulás lép fel melynek hatására a szilárd fázisban kialakul egy sajátos koncentrációeloszlás és a túlhűlés hatására nemegyensúlyi fázisok is keletkezhetnek. A szilárdoldatok kristályosodása modellezésének egyik kulcskérdése ezért a szilárd/olvadék határfelület hőmérsékletének, azaz a túlhűlésnek a meghatározása.

Az első modell amelyik számol a különböző túlhűlésekkel a minimális túlhűlés hipotézise alapján, a Burden és Hunt [1] modell. Ezt a modellt Laxmanan [2] fejlesztette tovább, a dendritcsúcs stabil növekedése, az úgynevezett marginális stabilitás feltételezése alapján. Ma úgy tűnik, hogy a legjobban használható, a fizikai valóságot leginkább megközelítő modell a Kurz, Giovanola és Trivedi (KGT) [3, 4] modell.

Az általunk fejlesztett program segítségével az összes ismert hatást (termodinamikai korrekció, kinetikai, dendritcsúcs görbület okozta, összetéti, gradiens és termikus túlhűlés) figyelembe véve a dendritcsúcstúlhűlést és a primer dendritágtávolságot számítjuk a fenti modellek alapján az egyszerűség kedvéért először csak kétalkotós ötvözetrendszerek esetén. Ez a szoftver könnyen alkalmazható a többalkotós rendszerek esetén is. A számítási eredményeket Al-Si, Al-Cu és Succinonitril-Aceton ötvözeteken mért kísérleti adatokkal hasonlítjuk össze.

A túlhűlések típusai

A szilárdoldatok kristályosodásának a leírására kidolgozott modellünk a következő feltételezéseken alapul: az szilárd/olvadék határfelületen helyi egyensúly van amelyet a nemegyensúlyi fázisdiagram határoz meg, a megoszlási hányados (k) sebességfüggő, a dendritcsúcs túlhűl.

Az irodalomban a következő típusú túlhűlések találhatók: a termodinamikai korrekció (ΔT_v), a kinetikai túlhűlés (ΔT_k), a dendritcsúcs görbület okozta túlhűlés (ΔT_r), az összetéti túlhűlés (ΔT_c), a

gradiens túlhűlés (ΔT_g), és a termikus túlhűlés (ΔT_t). Ezek mindegyike megváltoztatja a hőmérsékletet és/vagy a koncentrációt a dendritcsúcsnál.

Alapvetően kétféle túlhűlést különböztethetünk meg, amelyek megváltoztatják a fázisdiagramot (ilyen a termodinamikai korrekció, a kinetikai túlhűlés és a dendritcsúcs görbülete okozta túlhűlés), és amelyek megváltoztatják a dendritcsúcs hőmérsékletét (ilyen az összetételi, a gradiens és a termikus túlhűlés) a nemegyensúlyi, sebességfüggő likvidusz hőmérsékletéhez képest.

Az első három túlhűlés összege tehát az egyensúlyi és a sebességfüggő likvidusz hőmérsékletek különbségét adja, a következő három túlhűlés összege pedig a sebességfüggő likvidusz hőmérséklet és a szilárd/olvadék határfelület hőmérsékletének különbségével egyenlő (1. ábra). Ekviaxiális kristályosodás esetén nem lép fel a gradiens, irányított kristályosodás esetén pedig a termikus túlhűlés.

Az összegzett túlhűlés az egyensúlyi likvidusz hőmérséklet és a szilárd/olvadék határfelület hőmérsékletének a különbségével egyenlő $\Delta T_{\text{üp}} = \Delta T_v + \Delta T_k + \Delta T_r + \Delta T_c + \Delta T_g + \Delta T_t$

Az effektusok részletes magyarázata a [5] -ben található. A különböző modellek csak az összetételi túlhűlés számításában különböznek. Az összes többi túlhűlést azonosan számolják, csak a dendritcsúcs sugara más.

A számítások elvégzéséhez mindenképp az egyensúlyi fázisdiagramok pontos ismerete szükséges. Az egyensúlyi fázisdiagramok származhatnak termodinamikai számításokból vagy mért diagramokból. A termodinamikai számításokat azonban csak kevés ötvözetrendszer esetén végezték el eddig, ezért a számításaink során az irodalomban található mért diagramokat használtunk.

Az egyensúlyi fázisdiagramok leolvasását igyekszünk minél pontosabban elvégezni, ezért a kapott pontok leolvasási pontatlansága gyakorlatilag elhanyagolható. A keresett közelítő függvénynek át kell mennie ezeken a pontokon. Világos tehát, hogy az általában mérési adatokra a legkisebb négyzetek módszerével fektetett különböző polinomok ebben az esetben nem alkalmazhatók. Az ilyen esetben alkalmazható legalkalmasabb közelítés a **spline** [6] interpoláció.

A kristályosodási front mozgási sebességétől függő megoszlási hányados számítására az Aziz féle folyamatos növekedés modellje [7] által adott egyenletet használtuk. Carrard és társai [8] javaslatára határfelületi diffúzió D_i értékét felső határként az olvadékban lévő diffúzióval közelítettük. A sebességfüggő likvidusz lejtését (m_v) a T_0 értékét valamint a kinetikai túlhűlést a Boettinger és Coriell által adott egyenletekből számítottuk [9, 10].

A dendritcsúcs görbülete okozta, az összetételi és a termikus túlhűlés kiszámításához ismerni kell a dendritcsúcs sugarát. A Kurz, Giovanola és Trivedi modellben a dendritcsúcs sugarának a kiszámításához az adott egyenlet megoldásához a Van Wijnjaarden, Dekker és Brent féle módszert [11] alkalmaztuk nemlineáris, transzcendens függvények gyökeinek a közelítésére. Kiinduló közelítő

értéknek a Burden és Hunt modell alapján számított értéket használjuk. Az Ivantsov függvényt az Abramovitz [5] féle módszerrel közelítettük.

A dendritcsúcs határfelületénél a C_L^* és a C_S^* koncentrációk kis határmozgási sebesség esetén az egyensúlyi fázisdiagram által meghatározottak. Ha a határfelület előre mozog, a szilárd fázisból a többlet ötvöző atomok ($C_L^* > C_L$ mert $k < 1$) a szilárd/olvadék határfelületen át az olvadékba kell átlépjenek. Ha azonban a határfelület nagy sebességgel szalad előre, akkor ez csak részben történik meg, így az ötvöző atomok egy része a szilárd fázisban marad, megnövelve annak koncentrációját az egyensúlyi értékhez viszonyítva, míg az olvadékfázisban ellenkezőleg, csökken a koncentráció. Ez a jelenség a termodinamikai korrekció. A görbült határfelület energiája nagyobb mint a sík határfelület energiája, ez az oka a dendritcsúcs görbület okozta túlhűlésnek. A dendritcsúcs előtt kialakuló diffúziós mező hatására megemelkedő koncentráció (solute built up) okozza az összetételi túlhűlést. Irányított kristályosodás során a dendrit töve és csúcsa közötti koncentrációkülönbség hatására végbemenő diffúzió az oka a gradiens túlhűlésnek. Az ekvixiális kristályosodás során keletkező latens hő megemeli az olvadék hőmérsékletét a dendritcsúcs előtt. Ez a jelenség az oka a termikus túlhűlésnek.

Eredmények

A számításokat az Al-1wt%Si, Al-2wt%Cu [12], Al-6wt%Cu [13] és a Succinonitril 1.3 wt% Aceton kétalkotós ötvözetek esetén mutatjuk be.

A 2. ábrán a vízszintes tengelyen a Succinonitril 1.3 wt% Aceton kétalkotós ötvözet esetén a Kurz, Giovanola és Trivedi modell alapján számított primer dendritág távolság értékeket, a függőleges tengelyen pedig Réger [14] mérési eredményeit tüntettem fel. Az ábrán jól látható a mért és a számított értékek elfogadható egyezése.

1.ábra. a túlhűlések típusai

- 1 M. H. Burden and J. D. Hunt: Cellular and Dendritic Growth I+II, J. Cryst. Growth 22 (1974) pag. 99-108, 99-116.
- 2 V. Laxmanan: Dendritic Solidification I. Analysis of Current Theories and Models, Dendritic Solidification II. A Model for Dendritic Growth under an Imposed Thermal Gradient, Acta metallurgica 33 (1985) pag. 1023-1035, 1037-1049.
- 3 W. Kurz, B. Giovanola and R. Trivedi: Theory of Microstructural Development during Rapid Solidification, Acta metall. 34 (1986) pag. 823-830.
- 4 W. Kurz, B. Giovanola and R. Trivedi: Microsegregation in Rapidly Solidified Ag-15wt%Cu, J. Cryst Growth 91 (1988) pag. 123-125.
- 55 W. Kurz and D. J. Fisher: Fundamentals of Solidification, 3rd ed., Trans Tech Pub., Aedermannsdorf, Switzerland (1989).
- 6 I. D. Faux and M. J. Pratt: Computational geometry for design and manufacture, Ellis Horwood Ltd., 1987, pag. 156-162.
- 7 M. J. Aziz: Appl. Phys., 53, 1982, pag. 1158.
- 8 M. Carrard, M. Gremaud, M. Zimmermann and W. Kurz: Acta Metall. Mater., 40, 1992, pag. 983.
- 9 W. J. Boettinger and S. R. Coriell: Rapid Solidification Materials and Technologies edited by P. R. Sahm, H. Jones and C. M. Adam, NATO, 1986.
- 10 W. J. Boettinger, S. R. Coriell and R. Trivedi: Proc. 4th Conf. Rapid Solidification Processing, Principles and Technologies, Santa Barbara, edited by R. Mehrabian and P. A. Parrish, 1987.
- 11 W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling: Numerical Recipes, The Art of Scientific Computing, Example Book in Pascal, Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- 12 M. H. Burden and J. D. Hunt: Cellular and Dendritic Growth I+II, J. Cryst. Growth 22 (1974) pag. 109.
- 13 D. G. McCartney and J. D. Hunt: Acta Metallurgica, 29, (1981) pag. 1851.
- 14 M. Réger: Ph. D. disszertáció előkészítő anyag

2.ábra A primer dendritág távolság

Kuti István, doktorandusz hallgató

Roósz András, DSc. Egyetemi tanár

Miskolci Egyetem, Anyagtudományi Intézet, Fémteni Tanszék H-3515 Miskolc,
Egyetemváros, Hungary, Tel: 36-46-365111/2277, Tel/fax: 36-46-365924