Az Al-Cu-Si ötvözetrendszer korlátozott egyensúlyi fázisdiagramja

Roósz András, Szőke János, Kuti István

1. Bevezetés

Az első - az Al-Cu-Mg ötvözetrendszerre vonatkozó korlátozott egyensúlyi fázisdiagram (RE diagram) számításánál a szilárd/olvadék határfelület túlhűlésével a szerzők [1] nem számoltak. A számításoknál használatos megoszlási hányadosokat a kétalkotós Al-Cu és Al-Mg egyensúlyi fázisdiagramból határozták meg, mert a háromalkotós egyensúlyi fázisdiagramok a megoszlási hányadosokat a kétfázisú területekben nem tartalmazzák. Minthogy a szilárd/olvadék határfelület és az eutektikum túlhűlése igen jelentősen megváltoztatja a mikrodúsulást az RE diagramok csak akkor lesznek használhatók a kristályosodási paraméterek széles tartományában ha ezeket a túlhűléseket figyelembe vesszük.

Hasonlóan sokkal realisabb megoszlási hányadosokat alkalmazva a számított eredmények is realisabbak lesznek. Ha rendelkezésünkre áll termodinamikai függvényekből számított egyensúlyi fázisdiagram, akkor abból a megoszlási hányadosok meghatározhatók. Mivel csak néhány többalkotós ötvözet esetében ismertek a számított egyensúlyi fázisdiagramok, az esetek többségében a méréssel meghatározott diagramokat kell használni a számításokhoz. Erre az esetre egy új becslő eljárást dolgoztunk ki a megoszlási hányadosok meghatározására.

2. Egyensúlyi fázisdiagram

2.1. A szolidusz és a likvidusz felületek közelítése

A mikrodúsulás - ezen keresztül a korlátozott egyensúlyi fázisdiagram (RE diagram) - számítása az egyensúlyi fázisdiagram adataira épül. Mivel - mint azt a bevezetésben említettük, csak néhány esetben ismert a termodinamikai számítások alapján szerkesztett egyensúlyi fázis diagram - a számításainknál a mért diagramokat használtuk. A likvidusz és szolidusz felületek adatainak meghatározása érdekében a háromalkotós egyensúlyi fázisdiagram alumínium sarkát két különböző síksorozattal metszettük. Először a likvidusz és a szolidusz felületeket egyenlő távolságban levő izoterm síkokkal metszettük melyek a két felületből izoterm görbéket vágtak ki. Az izotermák közötti hőmérséklet különbség 5 °C volt. Ezután az

izotermákat 30, a koncentráció síkra merőleges, a hőmérséklet tengelyen keresztülmenő, egymással azonos szöget bezáró síkokkal metszettük. Ezen síkok esetében a Cu/Si érték állandó. A görbék és a síkok metszéseként kapott Cu és Si koncentrációkkal valamint a hőmérséklettel megadott pontokra köbös másodfokú paraméteres spline interpolációs görbéket illesztettünk. Ezekből a görbékből egy adott ötvözet esetében a szolidusz és a likvidusz hőmérsékletek illetve a likvidusz felületek lejtése számíthatók.

2.2. Az egyensúlyi megoszlási hányados számítása

Jól ismert, hogy a megoszlási hányadosok az egyensúlyi fázisdiagramból meghatározhatók, ha a fázisok száma amelyek egy adott hőmérsékleten egymással egyensúlyt tartanak egyenlő vagy nagyobb mint az ötvözetet alkotóinak (szín elemek) száma. Így, három alkotós ötvözetrendszerben a megoszlási hányados ismert, ha a fázisok száma 3 (binér eutektikum kristályosodása) vagy 4 (ternér eutektikum kristályosodása). A fázisok száma négynél több ez esetben nem lehet. Természetesen ismertek a megoszlási hányadosok a háromalkotós rendszerek határain levő kétalkotós rendszerekben minden folyamatnál, mert az egyensúlyban levő fázisok minimális száma 2, ami az alkotók számával megegyezik. Ezeket az ismert értékeket felhasználva egy újabb spline interpoláció segítségével összefüggés kapható a megoszlási hányadosok és az olvadék koncentrációi között.

3. A szilárd/olvadék határfelület és az eutektikum hőmérsékletének számítása

Az irodalomban az alábbi hatások ismertek amelyek megváltoztatják a szilárd/olvadék határ hőmérsékletét: termodinamikai korrekció, kinetikus, görbületi, összetételi, gradiens és termikus túlhűlés. Ezek magyarázata az [2]-ben található részletesen. Meg kell jegyezni, hogy az oszlopos (irányított) növekedésnél ($G > 0$) nincs termikus túlhűlés mert az olvadék a határfelület előtt mindig túlhevített állapotban van. Az első három túlhűlés összege az egyensúlyi és a nemegyensúlyi likvidusz hőmérséklet közötti különbséggel, míg a negyedik és az ötödik túlhűlés összege a nemegyensúlyi likvidusz hőmérséklet és a dendrit csúcs hőmérséklete közötti különbséggel egyenlő.

4. A koncentráció eloszlás számítása a szilárd fázisban

A modellben a szekunder dendritágot lemezszerűnek tételeztük fel. Ez a közelítés egyszerűsítette a diffúziós egyenlet (Fick II) megoldását. Minthogy a dendrites szerkezet nagy része szekunder dendritágból áll, ez az egyszerűsítés nem okoz nagy hibát a számításokban. Az olvadékban a diffúzió elég gyors ahhoz, hogy a szekunder dendritágakban a koncentrációt kiegyenlítse. A koncentráció eloszlást a Fick II. egyenlet mindkét ötvözőre történő szimultán megoldásával nyerjük. A megoldásnál figyelembe vesszük a helyi egyensúlyt a határon. a diffúziós egyenletet implicit véges differencia módszerrel oldottuk meg (módosított Crank-Nicholson módszer).

A számítás eredményeként az alábbiakat lehet meghatározni:

- (i) a koncentráció eloszlás a szilárd és az olvadék fázisokban a kristályosodás közben és a végén,
- (ii) a kristályosodási út a likvidusz és a szolidusz felületeken,
- (iii) a kristályosodás befejező hőmérséklete
- (iv) a binér és ternér eutektikum mennyisége
- (v) a primer és szekunder dendritág távolság

5. Eredmények

Az 1.ábrán látható az általunk vizsgált összetétel tartományban a dendritcsúcs hőmérséklete (a kisebb felület), valamint az egyensúlyi likvidusz felület (nagyobb felület). A kristályosítás $G=320\,000\text{ K/m}$ hőmérséklet gradiens és $v=1\text{ m/s}$ dendritcsúcs sebesség mellett történt, a vizsgált összetétel tartomány $0\div 6\text{ t\% Cu}$ és $0\div 2\text{ t\% Si}$ volt.

1. ábra

A 2. ábrán a kristályosodás befejező hőmérséklete és az eutektikum keletkezésének kezdő hőmérséklete látható 0.1 K/s ($G=102\text{ K/m}$, $v=10^{-3}\text{ m/s}$). A vékony vonallal jelzett felület az egyensúlyi, a vastag a nemegyensúlyi szolidusz felület.

2. ábra

IRODALOM

- [1] A. Roósz, H. E. Exner: Ternary restricted-equilibrium phase diagram II. Practical application: Aluminium-rich corner of the Al-Cu-Mg system. *Acta Metallurgica*, 38, 1990, 2009-2016.
- [2] W. Kurz and D. J. Fisher: *Fundamentals of Solidification*, 3rd ed., Trans Tech Publications, Aedermannsdorf, Switzerland, 1989.

Roósz András, Dsc. Egyetemi Tanár

szőke János, doktorandusz hallgató

Kuti István, doktorandusz hallgató

Miskolci Egyetem, Anyagtudományi Intézet, Fémtani Tanszék, H-3515 Miskolc, Egyetemváros, Hungary

Tel: 36-46-365111/2277, Tel/Fax: 36-46-365924