KORLÁTOZOTT EGYENSÚLYI FÁZISDIAGRAMOK SEBESSÉGFÜGGŐ VONLAINAK MEGHATÁROZÁSA

Tokaji Zsolt
Szőke János
Dr Roósz András

The new modern methods on the field of material science are the virtual research techniques based on computer models. From economical point of view with the help of the computer models one can save investigation cost and time. The program system called Tersol for Windows made in the Physical Metallurgy department at the University of Miskolc is modelling the ternary systems of solid solution type alloys like Al-Cu-Si.

The module developed by myself is the part of the Tersol for Windows system evaluating the data base of the ternary system. Under the processing the module systematise the independent data converting to a different format.

The module determine the contour line of a range of the alloy system. The type of the contour line in an exact cooling rate case could be the contour lines of the secondary dendrite arms distance, the amount of the binary and ternary eutectic and the final temperature of the solidification.

1. Bevezetés

Az anyagtudományi kutatások modern módszerei között előkelő helyet foglalnak el a számítógépes modellezésen alapuló ún. virtuális kutatási technikák. Ezzel költség- és időkímélő kísérleteket lehet végezni, ami napjainkban igen fontos szempont. A Miskolci Egyetem Fémtani Tanszékén készülő *Tersol for Windows* nevű programrendszer szilárdoldat típusú (a kristályosodás szilárdoldat keletkezésével kezdődik) ötvözetek ternér rendszereinek (Al-Cu-Si) kristályosodását modellezi.

Az általam írt, később a programrendszerbe beilleszthető kiértékelő modul dolgozza fel a program által szolgáltatott adatmezőket. A feldolgozás során elvégzi a különálló adatok rendszerezését, majd azok megadott formában történő ábrázolását a már működő rendszer adottságainak figyelembevételével.

Az feldolgozás során el kellett készítenem a kijelölt ötvözetartományra érvényes izovastagság vonalakat, amely a szintvonalas térképekhez hasonlóan az azonos szekunder dendritágtávolság, binér- és ternér eutektikum mennyiség,

valamint a kristályosodás befejező hőmérséklet értékeit jelöli az előre megadott szinteken, egy adott lehűlési sebesség esetén.

2. A Tersol for Windows program által szolgáltatott adatok

A jellemzett felületek egy 5 fokosként növekvő, 5-től 85 fokig terjedő, ötvözővonalanként 40 pontból álló diszkrét ötvözetartományok.(1.ábra)

1. ábra

E felületek pontjainak jellemzői ötvözővonalanként fix formátumú szöveges fájlokba vannak felsorolva. Ezek a következők:

- a kristályosodás befejező hőmérséklete,
- a kristályosodás kezdő hőmérséklete,
- ternér eutektikum mennyisége,
- binér eutektikum mennyisége,
- eutektikum kristályosodásának kezdő hőmérséklete.

A pont ötvözőarányát a fájl nevéből lehet meghatározni. Ehhez a *Tersol for Windows* program előállít még egy állományt, ami az ötvözetartomány jellemzőit tartalmazza. Ez is egy fix formátumú szöveges fájl, amiben megtalálható az ötvözővonal lépésének izofoka ($\Delta\alpha$), egy görbe pontjainak száma, görbénként a paraméterérték.

3. Az adatok feldolgozása

Mivel a felületek diszkrét pontok formájában adottak, szükség van egy olyan módszerre, amellyel legalább a síkgörbék $Paraméter=f(Z)$ függvény alakban kezelhetők. Erre azért van szükség, mert a paraméterértékeket az ismert pontok közötti metszéseknél is ki kell tudni számítani. Erre alkalmas a *szplájn interpoláció*.

Én köbös (harmadrendű a közelítő polinom), másodrendű (az érintők és a görbületek is megegyeznek az érintkezési pontokban) interpoláló szplájnt használtam. Ennek egyszerűbb változatát a szekunder dendritágtávolság, a binér és ternér eutektikum mennyiségek izometszeteinek meghatározásánál, bonyolultabb, paraméteres alakját a kristályosodás befejező hőmérsékletét jellemző felület izogörbéinek meghatározásánál használtam.

A paraméterezéssel elérhető, hogy a síkgörbe valóságosabb legyen, a különböző tengelyirányokban jelentkező léptékkülönbség (Z irányban több száz °C, X irányban esetleg néhány tized százalék ötvöztartalom) ne legyen zavaró. További előnye, hogy Z szempontjából nem monoton görbénél is meghatározható egy tetszőleges Z szinthez tartozó paraméterérték (ez alapján az összetétel), mivel ez az összes metszetet visszaadja, míg az előző csak az elsőt.

Minden síkgörbét elmetszve az adott Z szintnél kapjuk meg az adott szinthez tartozó izogörbe pontjait. (2. ábra) Ha további, egymástól azonos távolságra lévő szinteken is meghatározzuk a metszéspontokat, akkor kapjuk meg a felület izogörbéit. Ezek nagyon szemléletesek, könnyen meghatározható egy adott összetételnél a jellemző (szekunder dendritágtávolság, binér és ternér eutektikum mennyiség, kristályosodás befejező hőmérséklet) értéke.

2. ábra
247

Összefoglalva:

Sikerült a *Tersol for Windows* program által szolgáltatott diszkrét adatpontok feldolgozására egy olyan módszert kidolgozni ami viszonylag pontos, gyors és hűen követi a valóságos felületek irányát. A pontosság könnyen növelhető az ötvözővonal pontjainak számának növelésével, több ötvözővonal alkalmazásával.

A későbbiekben valószínűleg mi is pontosabban fogjuk ábrázolni a felületeket és csökkenteni fogjuk a lefedett ötvözőtartományt, hogy a homogén terület jobban látható legyen.

Tokaji Zsolt V. évfolyamos kohómérnök hallgató
Miskolci Egyetem, 3515 Miskolc-Egyetemváros