FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2003. március 21-22.

A Cu-Sn ÖTVÖZETRENDSZER EGYENSÚLYI FÁZISDIAGRAMJÁNAK KÖZELÍTŐ SZÁMÍTÁSA ESTPHAD MÓDSZERREL

Mende Tamás, Roósz András

Abstract:

The numerical data of the equilibrium phase diagrams (EPhD) have been indispensable for simulation of the phase transformation (i.e. solidification, solid state transformation). The liquidus, or major curves and the partition ratio of the phase diagrams coming from measurements or calculation (CALPHAD) were approximated by a function based on adequate thermodynamical calculation. Approaching function of high exacting has been calculated by this procedure, called ESTPHAD. Processing of EPhDs by this method—in this case the alloy system was Cu-Sn—will be a great help and time saving for the simulation of solidification or solid state transformation process.

Az ötvözeinkben hőmérséklet-változás hatására bekövetkező átalakulások leírásához, szimulálásához elengedhetetlen az egyensúlyi fázisdiagramok pontos, számszerű ismerete. Az ESTPHAD módszerrel nagy pontosságú, termodinamikailag magalapozott közelítő függvényeket állíthatunk elő az egyensúlyi fázisdiagramok—jelen esetben a Cu-Sn ötvözetrendszer egyensúlyi fázisdiagramjának—likvidusz, szolidusz, illetve major, minor görbéinek értékeire. Input adatként termikus analízissel, vagy számítással meghatározott fázisdiagramok görbéit használhatjuk [1]. Az ESTPHAD módszert a számítások pontossága, egyszerű használata a gyakorlati célokra alkalmassá teszi.

1. Bevezetés

A kohászati- és anyagtudományokban nagy jelentősége van egy könnyen elvégezhető, mégis a felhasználáshoz szükséges pontosságú egyensúlyi fázisdiagram-számítási módszernek. A Miskolci Egyetem Anyag- és Kohómérnöki Karának Fémteni Tanszékén megalkottunk egy, az előbb említett kritériumoknak megfelelő eljárást (ESTPHAD, *Estimation of Phase Diagrams*). A következőkben a Cu-Sn egyensúlyi fázisdiagram ily módon történő feldolgozását mutatjuk be.

2. Termodinamikai alapok [2., 3.]

Egy kétalkotós rendszerben az egymással egyensúlyt tartó fázisok integrális moláris szabadentalpiája (reguláris oldatokat feltételezve) az alábbiak szerint függ az átalakuló fázis koncentrációjától:

$$G^I = G_A^I X_A^I + G_B^I X_B^I + \Omega^I X_A^I X_B^I + RT(X_A^I \ln X_A^I + X_B^I \ln X_B^I) \quad (1)$$

$$G^{II} = G_A^{II} X_A^{II} + G_B^{II} X_B^{II} + \Omega^{II} X_A^{II} X_B^{II} + RT(X_A^{II} \ln X_A^{II} + X_B^{II} \ln X_B^{II}) \quad (2)$$

Ahol: I, II az átalakuló, illetve a keletkezett fázis
 X koncentráció (móltört vagy tömegszázalék)
 Ω párkölcsönhatási energia
 R gázállandó
 T abszolút hőmérséklet

Az 1., 2. egyenlet alapján a fázisok parciális moláris szabadentalpiája:

$$\mu_A^I = G_A^I + \Omega^I (X_B^I)^2 + RT \ln X_A^I \quad (3)$$

$$\mu_B^I = G_B^I + \Omega^I (X_A^I)^2 + RT \ln X_B^I \quad (4)$$

$$\mu_A^{II} = G_A^{II} + \Omega^{II} (X_B^{II})^2 + RT \ln X_A^{II} \quad (5)$$

$$\mu_B^{II} = G_B^{II} + \Omega^{II} (X_A^{II})^2 + RT \ln X_B^{II} \quad (6)$$

Az ESTPHAD módszer termodinamikai levezetésének alapja, hogy egyensúlyi állapotban az egyensúlyt tartó fázisok parciális moláris szabadentalpiája azonos:

$$\mu_A^I = \mu_A^{II} \quad (7)$$

$$\mu_B^I = \mu_B^{II} \quad (8)$$

A 7. egyenlet alapján levezethető, hogy az átalakulások kezdő hőmérséklete egy polinomiális egyenlettel kiszámolható:

$$T_K = T_0 / (1 + \sum_{i=1}^{\infty} A_{L,M}(i)(c_B^I)^i) = T_0 / (1 + F(c_B^I)) \quad (9)$$

Ahol: T_K az átalakulás kezdő (likvidusz vagy major) hőmérséklete
 T_0 a tiszta fázis átalakulásának hőmérséklete
 $A_{L,M}(i)$ a polinom koefficiensei
 c_B^I tömegszázalék

A megoszlási hányados számítását a 8. egyenletből vezethetjük le:

$$\ln k_B = B(0) + B(1)c_B^I + B(2)(c_B^I)^2 + B(3)(c_B^I)^3 + B(4)(c_B^I)^4 + \dots \quad (10)$$

Ahol: k_B megoszlási hányados
 $B(i)$ a kiszámolt polinom együtthatói

A 10. egyenletet felhasználva az átalakulás során keletkezett fázis koncentrációja az átalakuló fázis koncentrációjának függvényében számolható:

$$c_B^{\text{II}} = k_B c_B^{\text{I}} \quad (11)$$

3. Eredmények bemutatása, elemzése

Az ESTPHAD módszerrel számolt egyensúlyi fázisdiagramot az ötvözetrendszerben található fázisátalakulások számának megfelelő táblázattal adhatjuk meg. Ezen táblázatok

1. ábra Az a fázis kristályosodásának digitalizált és számított likvidusz, szolidusz görbéje

2. ábra A $\gamma \rightarrow \epsilon$ szilárdfázisú átalakulás digitalizált és számított major, minor görbéi

tartalmazzák a számításoknál szükséges, az adott átalakulásra jellemző fontosabb adatokat, valamint a hőmérséklet és a megoszlási hányados egyenleteiben szereplő koefficienseket (A(i), B(fi)).

Az 1., 2. ábrán látható két

konkrét átalakulásnál (egy kristályosodási, és egy szilárdfázisú átalakulásnál) jól látszik, hogy a számított görbék milyen pontosan illeszkednek az eredeti egyensúlyi fázisdiagram digitalizált pontjaira.

3. ábra A digitalizált és a számított hőmérséklet különbsége az ón koncentráció függvényében (az ábrában az összes átalakulás eredménye szerepel)

4. ábra A digitalizált és a számított koncentráció különbsége az ön koncentráció függvényében (az ábrában az összes átalakulás eredménye szerepel)

A 3., 4. ábráról leolvasható, hogy az átalakulások kezdő hőmérséklete (likvidusz, ill. major görbék) maximum ± 4 K eltéréssel (átlagosan 0,431 K), a kialakuló fázisok koncentrációja (szolidusz, il. minor görbék) pedig maximum $\pm 0,15$ t% eltéréssel (átlagosan 0,016 t%) számolható. Az értékek hullámzását valószínűleg a polinomiális közelítés okozza.

4. Konklúzió

Összefoglalásként elmondható, hogy az ESTPHAD módszerrel előállított polinomok felhasználásával mind a kristályosodás, mind a szilárdfázisú átalakulások hőmérséklet, illetve koncentráció értékei gyorsan, egyszerűen, a gyakorlati életnek megfelelő pontossággal számolhatóak. A módszer tehát a gyakorlati felhasználásra alkalmas.

5. Felhasznált irodalom

- [1.] Metals Handbook: 8th Edition, Metallography, Structures and Phase Diagrams, American Society for Metals, 1973.
- [2.] Roósz A., Kaptay G.: An Advanced Tool for Modelling of Solidification, Z.Met, in press
- [3.] Roósz A., Kaptay G., Farkas J.: Thermodynamics-Based Sémi Empirical Description of Liquidus Surface and Partition Coefficients in Ternary Al-Mg-Si Alloy, Mat. Sci. Fórum, 2002., p323.

Mende Tamás¹, Roósz András² / egyetemi hallgató¹, egyetemi tanár²

Miskolci Egyetem, Anyagtudományi Intézet, Fémtni Tanszék

(+36-46)565-111/15-38

(+36-46)565-201

kohme@freemail.hu