

X. FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2005. március 18-19.

A Fe-Co KÉTALKOTÓS EGYENSÚLYI FÁZISDIAGRAM ESTPHAD MÓDSZERREL TÖRTÉNŐ SZÁMÍTÁSA

Kövér Zsuzsanna Iлона, Roósz András

Abstract

The application of equilibrium phase diagrams (EPhD) is very frequent in phase transformation simulations. It is important to apply in simulation a simple but accurate EPhD calculation method which is based on the knowledge of the curves of the EPhDs as a function. A simple, fast and iteration free approximate calculation method has been developed earlier (ESTPHAD – Estimated Phase Diagrams). The input data may be either experimental values or a data field calculated by CALPHAD or digitalized data from the measured and published graphic EPhDs. By this method important parameters such as the beginning and ending temperatures of solidification or solid state transformation can be determined for each phase. The partition ratios as a function of the concentration can be calculated as well. In this study ESTPHAD is used to estimate the EPhD of Fe-Co binary system.

Az anyagtudományi szimulációs számításoknál nagy jelentőséggel bír egy megfelelő pontosságú és könnyen alkalmazható egyensúlyi fázisdiagram (EPhD) számítási módszer, amely a diagramokban található görbék egyenleteinek ismeretén alapszik. Ennek érdekében a mérési adatokból készített grafikus diagramok digitalizálással nyert adatait felhasználva egy egyszerű, iteráció nélküli közelítő számítási módszert fejlesztettünk ki (ESTPHAD - Estimation of Phase Diagrams). A módszerrel a görbék olyan fontos paraméterei meghatározhatók, mint a különböző fázisátalakulások kezdő és befejező hőmérsékletei, valamint a megoszlási hányadosok. A módszert jelen esetben a Fe-Co fázisdiagram számítására alkalmaztuk.

Bevezetés

Az anyagtudományi szimulációkban gyakran használunk egyensúlyi fázisdiagramokat (EPhD), melyek meghatározása időigényes és bonyolult mérésekkel történik. Az így meghatározott EPhD-k grafikus alakban már régóta léteznek, ilyen formában ezek azonban alkalmatlanok a számítógépes szimulációkban történő felhasználásra.

A diagramok vonalait meg lehet határozni termodinamikai alapokon nyugvó számítási módszerekkel is (pl. CALPHAD - Calculation of Phase Diagrams). Ezek azonban túl azon, hogy időigényesek és sok bemenő adat ismeretét követelik meg, feltételezik a méréssel meghatározott EPhD-k ismeretét is.

A szimulációs számításoknál nagy jelentőséggel bír egy megfelelő pontosságú és könnyen alkalmazható EPhD számítási módszer, amely a diagramokban található görbék egyenleteinek ismeretén alapszik. Ennek érdekében a mérési adatokból készített grafikus diagramok digitalizálással nyert adatait felhasználva egy egyszerű, iteráció nélküli közelítő számítási módszert fejlesztettünk ki (ESTPHAD - Estimation of Phase Diagrams) [1].

Ezzel a módszerrel a fázisátalakulások kezdő és befejező hőmérsékletei, valamint a megoszlási hányadosok határozhatók meg, mint az olvadék ill. a szilárd fázis koncentrációjának függvényei.

Az ESTPHAD módszer lépései

1. A grafikus fázisdiagram elektronikus formává alakítása

A mért adatokból készített grafikus formában lévő EPhD-ket elektronikus képpé kell transzformálni azért, hogy számítógéppel feldolgozhatóvá váljanak. Ez a lépés szkennelés segítségével történik meg. A következő lépésben az EPhD-k görbéit egyenként digitalizáljuk úgy hogy a diagramokba 1-10°C-onként konódákat húzunk és azok két végpontjánál leolvassuk az összetartozó hőmérséklet-koncentráció értékpárokat.

2. Az együtthatók meghatározása

A likvidusz ill. a szolidusz görbéket az alábbi egyenletekkel közelítjük:

$$T_L = \frac{T_0}{1 + F(c_L)} \quad \text{illetve} \quad T_S = \frac{T_0}{1 + F(c_S)} \quad (1.a \text{ és } b)$$

Az olvadék ill. a szilárd fázis koncentrációt pedig a megoszlási hányados segítségével a

$$c_S = k(c_L) \cdot c_L \quad \text{illetve} \quad c_L = \frac{c_S}{k(c_S)} \quad (2.a \text{ és } b)$$

egyenlet alapján számítjuk ki, ahol:

$$F(c_L^B) = A(1) \cdot (c_L^B - c_0^B) + A(2) \cdot (c_L^B - c_0^B)^2 + A(3) \cdot (c_L^B - c_0^B)^3 + \dots \quad (3.a)$$

$$F(c_S^B) = C(1) \cdot (c_S^B - c_0^B) + C(2) \cdot (c_S^B - c_0^B)^2 + C(3) \cdot (c_S^B - c_0^B)^3 + \dots \quad (3.b)$$

és T_L, T_S a likvidusz és a szolidusz hőmérséklet
 c_L^A, c_S^A az olvadék és a szilárd fázis koncentráció az A komponensre nézve
 T_0 a tiszta fázis olvadáspontja
 c_0^A a tiszta fázis koncentrációja az A komponensre nézve
 $k(c_L^B), k(c_S^B)$ a megoszlási hányados az olvadék ill. a szilárd fázis koncentrációjának függvényében:

$$\ln k(c_L^B) = B(1) \cdot (c_0^A - c_L^A) + B(2) \cdot (c_0^A - c_L^A)^2 + B(3) \cdot (c_0^A - c_L^A)^3 + \dots \quad (4.a)$$

$$\ln k(c_S^B) = D(1) \cdot (c_0^A - c_S^A) + D(2) \cdot (c_0^A - c_S^A)^2 + D(3) \cdot (c_0^A - c_S^A)^3 + \dots \quad (4.b)$$

A (3.a és b) egyenletek együtthatóit a digitalizált adatokból regresszió-analízis segítségével határozzuk meg. Az így nyert koefficienseket az (1.a és b) egyenletekbe visszahelyettesítve a likvidusz ill. a szolidusz hőmérsékletek meghatározhatók.

Ahhoz, hogy az olvadék ill. a szilárd fázis koncentrációkat is ismerjük, először a megoszlási hányadost kell meghatározni, mely a (4.a) és a (4.b) egyenletek segítségével történik. Ezen egyenletek együtthatóinak meghatározása szintén a digitalizált adatokból regresszió-analízis segítségével történik. A kapott eredményeket a megoszlási hányados megfelelően átrendezett alakjaiba, a (2.a) és a (2.b) egyenletekbe visszahelyettesítve az olvadék ill. a szilárd fázis koncentrációk meghatározhatók.

Az $F(c_L)$ és az $\ln k(c_L)$ illetve az $F(c_S)$ és az $\ln k(c_S)$ függvények megoldásából származó EPhD-k abban különböznek egymástól, hogy ha az együtthatókat az olvadék fázis koncentráció függvényében határozzuk meg, akkor a likvidusz hőmérséklet és a megoszlási hányadoson keresztül a szilárd fázis koncentráció egyértelműen meghatározható, míg a szolidusz hőmérséklet csak iterációval. Ha azonban az együtthatókat a szilárd fázis koncentráció függvényében határozzuk meg, akkor a szolidusz hőmérséklet és a megoszlási hányadoson keresztül az olvadék fázis koncentráció határozható meg egyértelműen, míg a likvidusz hőmérséklet csak iterációval. Tehát a kétfajta számítási mód célja az iteráció kiküszöbölésében rejlik.

A fázisátalakulások hőmérsékletei és megoszlási hányadosai is hasonló módon számíthatók, ha figyelembe vesszük, hogy a likvidusz hőmérsékletet és koncentrációt helyettesítjük a majorral, illetve a szolidusz hőmérsékletet és koncentrációt pedig a minorral.

3. Az adatbázis

A számítást az EPhD-kben található összes görbepárra külön-külön el kell végezni a fent ismertetett módon. Az így nyert függvények együtthatóit táblázatos formában adhatjuk meg, mely táblázatoknak a koefficienseken kívül tartalmazniuk kell a későbbi felhasználáshoz szükséges, vagyis az adott átalakulásra jellemző fontosabb adatokat (az átalakulást, a koncentrációtartományt és a T_0 , c_0 értékeit). Az együtthatók értékes jegyeit 8 karakternek határoztuk meg.

Az ESTPHAD módszer alkalmazása a Fe-Co fázisdiagramra

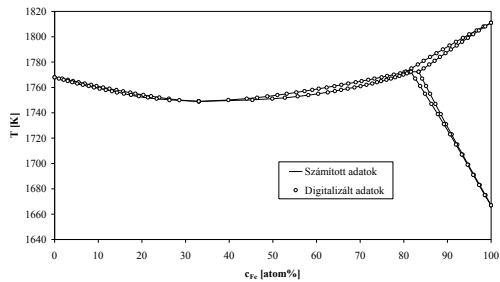
A fent bemutatásra került ESTPHAD EPhD számítási módszert jelen esetben a Fe-Co kétalkotós egyensúlyi fázisdiagram számítására alkalmaztuk. A regresszió-analízis eredményeképp kapott együtthatók az **1. táblázat**ban találhatóak.

A **1-2 ábrák**on láthatók a digitalizált és a számított EPhD-k. Az ESTPHAD módszer pontosságának ellenőrzése érdekében összehasonlítottuk a digitalizált és a számított likvidusz ill. szolidusz (vagy major ill. minor) hőmérséklet különbségeket, valamint az olvadék ill. a szilárd fázis (vagy major ill. minor) koncentráció különbségeket a vas koncentrációjának függvényében (**3-4. ábrák**).

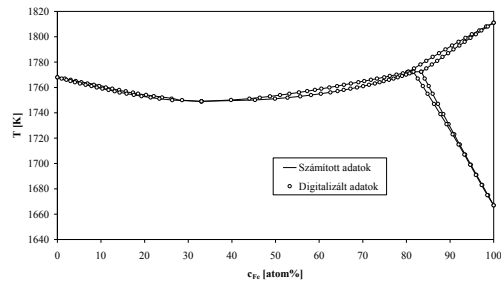
A diagramokon megfigyelhető, hogy az eltérés maximum ± 6 K illetve ± 1 atom%. Ha figyelembe vesszük, hogy kb.1000 K nagyságú tartományban dolgoztunk és azt is, hogy a hőmérsékletmérés hibája K-es nagyságrendű, akkor megállapítható, hogy a módszer jól alkalmazható a kétalkotós EPhD-k közelítésére.

Tartomány	T_i együtthatók	lnk c_i együtthatók	T_S együtthatók	lnk c_S együtthatók	Tartomány	T_i együtthatók	lnk c_i együtthatók	T_S együtthatók	lnk c_S együtthatók
0-33,028 $L \rightarrow \gamma$	A(1) 3,3574657E-04 A(2) 1,7199999E-05 A(3) -1,4013913E-06 A(4) 4,5166047E-08 A(5) -5,6597524E-10	B(1) -2,0962786E-01 B(2) 3,7553070E-02 B(3) -2,5954227E-03 B(4) 7,8051982E-05 B(5) -8,5056407E-07	C(1) 5,7496562E-04 C(2) -1,0459576E-05 C(3) 3,8443710E-07 C(4) -1,2722761E-08 C(5) 1,1640837E-10	D(1) -2,0496540E-01 D(2) 3,8162936E-02 D(3) -2,7397862E-03 D(4) 8,5521009E-05 D(5) -9,6491715E-07	88,394-100 $L \rightarrow \delta$	A(1) -9,0708170E-04 A(2) 2,9767852E-05 A(3) 2,6153632E-06 A(4) 1,3633786E-07 A(5) 2,6788732E-09	B(1) -1,8246892E-03 B(2) 2,7056103E-03 B(3) 4,4873250E-06 B(4) 2,9264811E-07 B(5) 6,6917355E-09	C(1) -1,1098532E-03 C(2) 4,5610802E-05 C(3) 5,5468402E-06 C(4) 3,5427947E-07 C(5) 8,4725033E-09	D(1) -2,2089489E-03 D(2) 5,3147965E-05 D(3) 1,1211524E-05 D(4) 8,4793067E-07 D(5) 2,2462308E-08
33,028-81,624 $L \rightarrow \gamma$	A(1) -2,2445888E-03 A(2) -9,1952497E-05 A(3) -2,2209870E-06 A(4) -2,6152811E-08 A(5) -1,1618237E-10	B(1) 1,6008745E-02 B(2) 1,6733421E-03 B(3) 5,8203716E-05 B(4) 9,2269816E-07 B(5) 5,5733479E-09	C(1) -1,8743694E-03 C(2) -5,1646504E-05 C(3) -9,6295386E-07 C(4) -1,0430777E-08 C(5) -4,6127090E-11	D(1) 1,7746037E-02 D(2) 1,8468270E-03 D(3) -9,6220367E-05 D(4) 8,7102148E-07 D(5) 4,8452706E-09	81,624-100 $\delta \rightarrow \gamma$	A(1) 3,6833222E-03 A(2) 2,7389444E-05 A(3) 2,8370515E-06 A(4) 1,3483350E-07 A(5) 2,5142419E-09	B(1) 1,5943102E-03 B(2) 5,1262201E-04 B(3) 6,8915929E-06 B(4) 3,5715619E-06 B(5) 7,3812817E-08	C(1) 3,1558880E-03 C(2) -1,3507170E-04 C(3) -1,8142676E-05 C(4) -9,1061660E-07 C(5) -1,6965302E-08	D(1) 1,4690540E-03 D(2) 4,4514025E-04 D(3) 5,7052656E-05 D(4) 2,7667679E-06 D(5) 5,1036668E-08

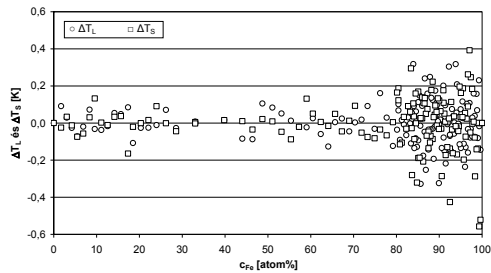
1. táblázat: A Fe-Co fázisdiagram együtthatói



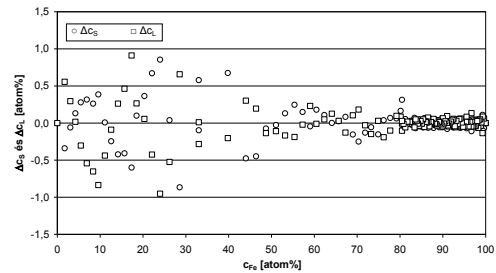
1. ábra: A számított Fe-Co fázisdiagram, amikor a közelítő függvény az $F(c_L)$ volt



2. ábra: A számított Fe-Co fázisdiagram, amikor a közelítő függvény az $F(c_S)$ volt



3. ábra: A digitalizált és számított likvidusz (v. major) ill. szolidusz (v. minor) hőmérséklet-különbségek a vas koncentráció függvényében



4. ábra: A digitalizált és számított olvadék (v. major) ill. szilárd (v. minor) fázis koncentráció-különbségek a vas koncentráció függvényében

Összefoglalás

Összefoglalásként elmondható, hogy mivel az ESTPHAD módszer nemcsak a kristályosodás likvidusz és szolidusz görbéit írja le elég jó pontossággal, hanem a fázisátalakulások major és minor görbéit is, ezért a módszer viszonylag bonyolult EPhD-k számítására is alkalmas.

Irodalom

A. Roósz, G. Kaptay: The ESTPHAD Concept, Z. Metalkunde (under construction)

Zs. Kövér, A. Roósz: Application of the ESTPHAD method to calculation of the equilibrium phase diagram of Al-Fe alloy system, GÉPÉSZET 2004 Proceedings of the Fourth Conference on Mechanical Engineering vol.1 pp.111-115

H. Okamoto: Phase Diagrams of Binary Iron Alloys, copyright 1993 by ASM International, printed in the United States of America, ISBN: 0-87170-469-2, p. 93-101.

Kövér Zsuzsanna Ilona¹, **Dr Roósz András**²/doktorandusz¹, egyetemi tanár²

MTA-MFA¹/H-1525. Budapest, P.O.Box 49.

Miskolci Egyetem², Fémteni Tanszék²/H-3515. Miskolc, Egyetemváros

Tel.: (36-1) 392-2797 Fax.:(36-1) 392-2226 E-mail: koverzs@mf.kfki.hu