

TERMIKUSAN AKTIVÁLT FOLYAMATOK MODELLEZÉSÉNEK ÚJ LEHETŐSÉGEI

NEW POSSIBILITIES FOR MODELLING OF THERMALLY ACTIVATED PROCESSES

Mucsi András*, Borossay Béla**, Horváth László***, Varga Péter****

ABSTRACT

The paper deals with determination of proper equations for describing the thermally activated metallurgical processes. It gives an overview of the traditional applicable methods and introduces a new approaching way to determine the parameters of isothermal process equations. This new kind of estimation is based on the evaluation of heat treatment trials with arbitrary heat cycles.

BEVEZETÉS

Napjaink egyik legfontosabb feladata a különböző ipari technológiák modellezése. Jelen cikkben a gyártási eljárások közül a hőkezelések egy csoportjának modellezésével foglalkozunk. Fémekben hőmérséklet változtatás hatására lezajló átalakulások gyakran tekinthetők termikusan aktivált folyamatnak. Termikusan aktivált folyamatról beszélünk, ha a szabadentalpia lokális minimumával bíró rendszer termikus fluktuációval győzi le a potenciálgátat és így kerül alacsonyabb szabadenergiájú állapotba. Ilyen folyamatnak tekinthetjük az üvegfém átkristályosodását, szilárd ötvözetekben lezajló kiválási folyamatokat, illetve egyes szövetszerkezeti változásokat. A továbbiakban az újrakristályosító hőkezelés, mint termikusan aktivált folyamat modellezésének egy lehetőségével foglalkozunk.

AZ ÚJRAKRISTÁLYOSODÁS FOLYAMATÁNAK MODELLEZÉSE

Az újrakristályosító hőkezelést képlékeny hidegalakítás után, alakíthatósági jellemzők növelésének céljából alkalmazzák. A folyamat során hevítés hatására a torzult szemcseszerkezetet új kristallitok váltják fel. A folyamatot addig érdemes fenntartani, amíg az átalakult hányad közel 100% lesz, további hőntartás a szemcseszerkezet durvulásához, az ún. szekunder újrakristályo-

sodáshoz vezet. A fizikai tulajdonságok és a szemcseszerkezet változását az idő függvényében az 1. ábrán láthatjuk [5, 7].

Termikusan aktivált folyamatok modellezésének alappilléreit Johnson, Mehl, Avrami és Kolmogorov 1939-41-ben fektette le az ún. kiterjesztett térfogat hipotézissel. Az elmélet szerint az átalakult hányad (X) értékét a következő egyenlettel határozhatjuk meg izotermikus esetben [5,6]:

$$-\ln(1-X) = N_0 \cdot v(0, t) + \left[\int_0^t I(t') \cdot v(t', t) dt' \right] \quad (1)$$

ahol N_0 az újrakristályosodási csírák kezdeti sűrűsége $v(t_0, t)$ a t_0 időpillanatban megjelenő csíra térfogata a t időpontban, $I(t)$ az új nukleáció megjelenésének valószínűsége. Ha a kifejezés jobb oldala állandó hőmérsékleten az időnek egyszerű hatványfüggvénye, akkor az átalakult hányadot (X) a következő összefüggésekkel (Avrami-(2) és Arrhenius(3) egyenlet) írhatjuk le [2,4,5,6]:

$$x = 1 - e^{-k \cdot t^n} \quad (2)$$

$$k = A \cdot e^{-\frac{Q}{R \cdot T}} \quad (3)$$

Q a folyamat aktiválási energiája $\left(\frac{J}{mol}\right)$, A az Arrhenius egyenlet preexponenciális tényezője ún. frekvencia faktor, R az univerzális gázállandó $\left(8.314 \frac{J}{mol \cdot K}\right)$ n az Avrami kitevő, T a hőmérséklet (K), t az idő (s). Amennyiben a folyamat előrehaladtával a hőmérséklet változik, az átalakult hányad integrálással számítható:

$$x(t) = 1 - \exp \left\{ \left[\int_0^t k[T(t')] dt' \right]^n \right\} \quad (4)$$

A (4) integrál számítása igen nehéz feladat, ezért a hevítési függvény különböző formái szerint különböző elméletek születtek a kinetika leírására [3].

Rengeteg hipotézis született arra az esetre ha lineárisan változik a hőmérséklet. Ilyen esetben használhatjuk például a Kissinger, a Flynn-Wall-Ozawa, a Takhor, vagy az Augis-Benett elméletet az egyenletparaméterek becslésére. Ezek az elméletek viszont gyakran csak az

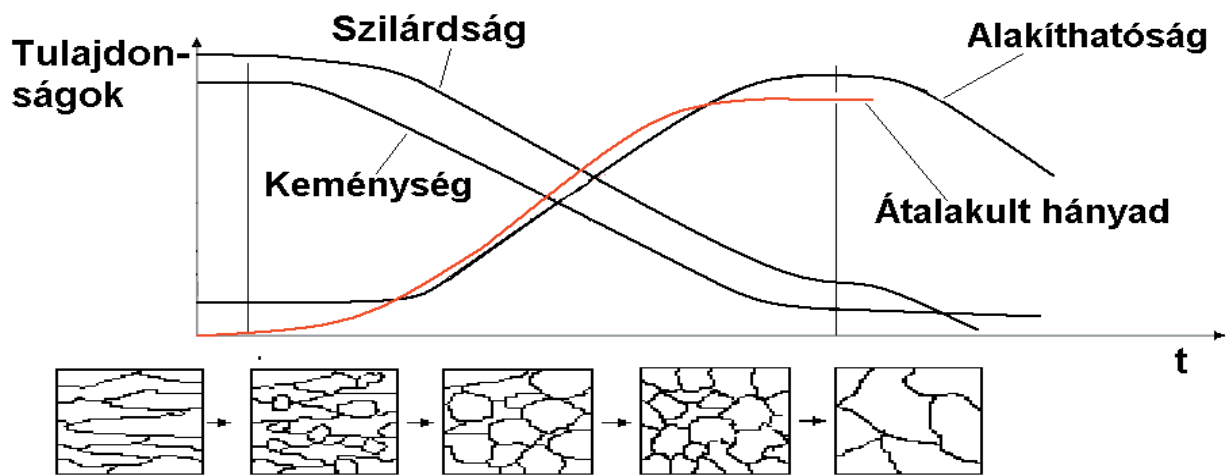
*intézeti mérnök, e-mail: mucusi.andras@bgk.uni-obuda.hu

**intézeti mérnök, e-mail: borossay.bela@bgk.uni-obuda.hu

***főiskolai docens, e-mail: horvath.laszlo@bgk.uni-obuda.hu

****tanársegéd, e-mail: varga.peter@bgk.uni-obuda.hu

Óbudai Egyetem, Bánki Donát Gépész és Biztonságtechnikai Mérnöki Kar



1. ábra: A fizikai tulajdonságok változása az idő függvényében újrakristályosodás során

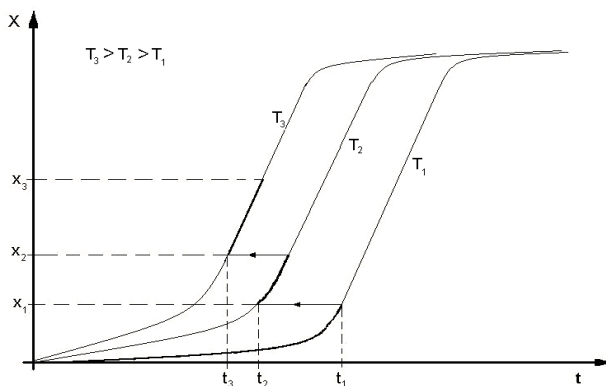
aktiválási energia meghatározására szorítkoznak, a többi egyenletparaméterre vagy egyáltalán nem, vagy igen gyenge becslést adnak. Lineárisan változó hőmérsékletű hőkezelések szinte kizárólag laboratóriumi körülmények mellett valósíthatók meg igen drága eszközökkel.

Jelen cikkben egy olyan módszert mutatunk be, mellyel az izotermikus (2) és (3) egyenletek paramétereit tetszőlegesen változó hőmérsékletű hőkezelések segítségével határozzuk meg.

IZOTERMIKUS EGYENLETPARAMÉTEREK SZÁRMAZTATÁSA VÁLTOZÓ HŐKEZELÉSEK EREDMÉNYEIBŐL

A célunk tehát az, hogy változó hőmérsékletű mérési eredmények segítségével megkeressük az (1) és (2) egyenlet n , Q és A változóit (melyek izotermikus folyamatra vonatkoznak). Mielőtt erre rátérnénk, nézzük meg, hogyan lehet a termikusan aktivált folyamatokat izotermáról változó hőmérsékletre átszámítani.

A folyamatok modellezése változó hőmérsékletű hőkezelések esetén a 2. ábra szerinti módszerrel válik lehetővé [1].



2. ábra: Átalakulási folyamat modellezés változó hőmérséklet esetén

Tegyük fel, hogy egy tetszőlegesen kis intervallumon belül a változó hőmérsékletet konstansnak tekintjük, ekkor a T_1 hőmérsékletre tartozó görbén 0-tól t_1 ideig az (1) egyenlet segítségével kiszámíthatjuk az átalakult hányadot (x_1). Ezután a következő rövid intervallumon megint állandónak tekintjük az előzőhöz képest megváltozott hőmérsékletet (T_2), és kiszámítjuk, hogy ezen a hőmérsékleten mennyi (fiktív) időnek kellett volna eltelnie ahhoz (t_2), hogy éppen x_1 legyen az átalakult hányad. A T_2 hőmérsékletre tartozó görbén megint Δt ideig haladva az $x_2 - x_1$ átalakult hányadot a következőképpen számíthatjuk:

$$x_{2-1} = e^{-k_2 \cdot t_2^n} - e^{-k_2 \cdot (t_2 + \Delta t)^n} \quad (5)$$

Ennek segítségével felírhatjuk a T_2 hőmérsékleten az átalakult hányadot:

$$x_2 = x_1 + x_{2-1} \quad (6)$$

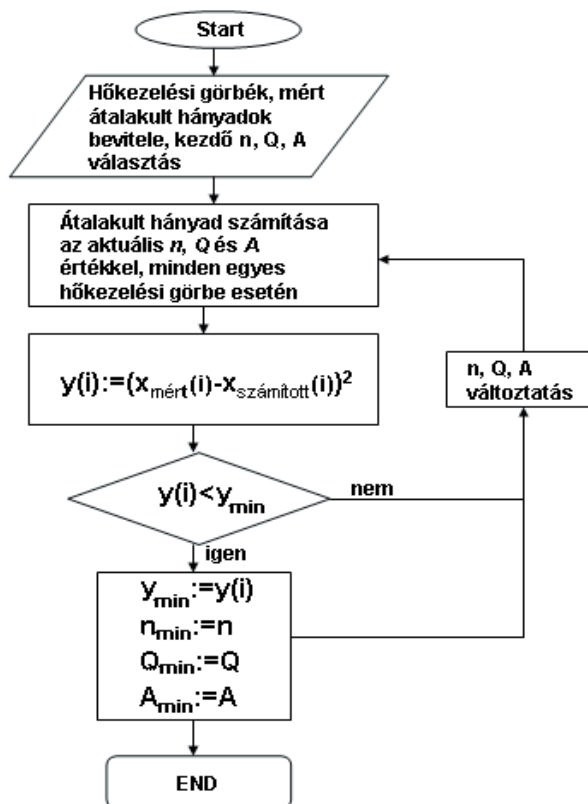
Az így kiszámolt x_2 átalakult hányad segítségével ismét kiszámíthatjuk a T_3 hőmérsékletre tartozó k_3 sebességi állandót és t_3 időt. A ciklus az eddig leírtak szerint ismétlődik tovább.

Ha ismernénk a (2) és (3) összefüggések n , A és Q értékeit, a 2. ábra szerinti módszerrel is kiszámíthatnánk az átalakult hányadot, most viszont az egész módszert visszafelé kell alkalmaznunk. A feladat tehát az, hogy keressük n , A és Q azon értékeit, melyekre igaz, hogy

$$\min \left\{ \sum (x_{\text{mért}} - x(n, A, Q)_{\text{számított}})^2 \right\} \quad (7)$$

azaz keressük azokat az n , A és Q értékeket, melyekkel számolva a mért és a számított értékek a legkevésbé térnek el egymástól. Ez az az új módszer, amellyel tetszőlegesen változó hőkezelésekből származtathatók izotermikus egyenletparaméterek. Az algoritmust a 3. ábrán láthatjuk.

A megoldást többféle optimumkeresési eljárással megkereshetjük. Az eredmények annál pontosabbak lesznek, minél több hőkezelési görbét használtunk. Általános esetben alakítási mértékenként 7-10 hevítési görbe elegendő. Ha az alakítási mértékek hatását is figyelembe szeretnénk

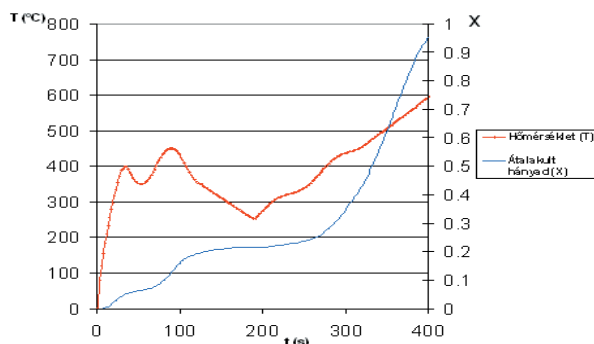


3. ábra: Folyamatábra izotermás egyenletparaméterek származtatásához

venni, akkor a (3) egyenlet A értékét felírjuk az alakítás mértékének függvényeként és annak a függvénynek az állandóit léptetjük az A paraméter helyett. Hasonlóan járhatunk el, ha az alakítás sebességének vagy a kiinduló szemcseméretnek a hatását is modellezni szeretnénk.

ÖSSZEFOGLALÁS

A munkánk eredménye tehát az, hogy tetszőlegesen változó hőkezelések eredményeiből igen jó becslést adhatunk az izotermikus egyenletparaméterek értékére. Ezeket az állandókat felhasználva modellezhetjük egy szintén tetszőlegesen változó hőkezelés időbeli lefolyását. Egy ilyen hőkezelést mutat a 4. ábra.



4. ábra: Tetszőlegesen változó hőkezelés hőmérséklet-idő és átalakult hányad-idő görbéi

A módszert felhasználhatjuk a szemcseszerkezet növekedésének és a szemcsehatármenti nukleációknak a szimulálására is. Mérési eredmények alapján becslést adhatunk egy bonyolult geometriájú darab egyes térfogatrészeiben kialakuló szemcseméret-eloszlásra, illetve információt nyerhetünk a szemcsehatárok tulajdonságairól is.

SUMMARY

Among the thermally activated processes the recrystallisation heat treatment was chosen to demonstrate the usage of the new approach and how to determine the parameters of the equations. In the recrystallisation process new crystals are growing from the material of deformed grains because of the heat cycle. The deformability is increasing, the strength and hardness is decreasing of the material in this treatment, and this property changes can be used to follow the metallurgical processes. Five different materials were used for investigating the recrystallisation process. As a result of laboratory trials and of the introduction of the new approach the process equations of isothermal recrystallisation were derived. Some connections between the parameters of these equations and particular material properties were found. The heat treatment process was modeled by these equations built in special software by which the cost or the duration of the treatment can be optimised. The new method is applicable for modeling other thermally activated processes.

HIVATKOZÁSOK

- [1] GERGELY M.: Az austenit izotermás és folyamatos lehűlés közben végbemenő átalakulásai közötti összefüggések, Bányászati és Kohászati Lapok Kohászat, 104. évf., 1971. 7. sz., (309-313)
- [2] P.N. KALU – D.R. WARYBOA: A JMAK-Microhardness Model for Quantifying the Kinetics of Restoration Mechanisms in Inhomogeneous Microstructure, Acta Materialia, 30 November 2005. (68-75)
- [3] H. BENSOUYAD, D. HAMANA: Analysis Methods for the Determination of Energies Activation and the Study of the Precipitation Reactions in Al-4,5% Weight Cu Alloys, Journal of Engineering and Applied Sciences 3 (7), 2008., (583-586)
- [4] M. RÉGER–S. TAKÁCS–T. RÉTI: Modellierung der Rekristallisationskinetik von Weichstahl. IV. Konferenz „Metallkundliche Probleme der Werkstoffentwicklung“, Freiberg, 13. bis 15. September 1989., p. 153-168.
- [5] E. WOLDT: New Kinetic Model for Primary Recrystallization of Pure Metals. Metallurgical and Materials Transactions, Oktober 2001., Vol. 32A, p. 2465-2473.
- [6] A.G. GUY: Fémfizika. Műszaki Könyvkiadó, Bp., 1978.
- [7] G. BENCHABANE–Z. BOUMERZOUG – I. THIBON–T. GLORANT: Recrystallisation of pure copper investigated by calorimetry and microhardness. Materials Characterisation, 2008, Vol. 59, p. 1425-1428.