

Igor Vušanović  
Mašinski fakultet, Podgorica, Crna Gora, Jugoslavija  
Matthew John M. Krane  
School of Materials Engineering, Purdue University  
West Lafayette, Indiana, USA

## MATEMATIČKI MODEL MIKROSEGREGACIJE U Al-Cu-Mg LEGURI SA PROMJENLJIVIM KONCENTRACIJAMA TOKOM OČVRŠĆAVANJA

Originalni naučni rad  
UDC: 669.71'35'721:517.9  
BIBLID: 0350-218X, 27 (2001), 1-4, 25-36

*U radu je predstavljen matematički model za opisivanje fenomena mikrosegregacije tokom očvršćavanja trojne legure Al-Cu-Mg. Makroskopska redistribucija legirajućih elemenata (bakra i magnezijuma) po zapremini kalupa tokom očvršćavanja ima uticaj na redistribuciju legirajućih elemenata koje se odigravaju na nivou kristala, kako na profile koncentracija tako i na relativni odnos faza koje se izdvajaju tokom očvršćavanja. Predstavljeni model omogućava istraživanje uticaja promjena makroskopskih koncentracija bakra i magnezijuma na proces očvršćavanja na mikro nivou. Proračuni su sprovedeni za dvije trojne Al-Cu-Mg legure za tri različita slučaja, kada se srednje koncentracije bakra i magnezijuma ne mijenjaju, kada opadaju i kada rastu u zadatom vremenskom intervalu. Matematički model predstavljen u ovom obliku može biti korišćen u sprezi sa poznatim makrosegregacionim modelima, i predstavlja dobru osnovu za dalju nadgradnju u cilju dobijanja preciznijih mikrosegregacionih modela.*

*Ključne riječi: mikrosegregacija, Al-Cu-Mg legura, redistribucija, očvršćavanje, koncentracije, q faza, S faza, makrosegregacija*

### Uvod

Mikrosegregacija predstavlja proces razdvajanja legirajućih elemenata tokom procesa očvršćavanja, uslijed različite rastvorljivosti elemenata u tečnosti odnosno čvrstoj fazi. Precizna kvantifikacija faza koje se izdvajaju tokom procesa očvršćavanja kao i koncentracije legirajućih elemenata u fazama veoma je važno sa stanovišta određivanja

mehaničkih i fizičkih karakteristika dobijene legure. Takođe, precizne informacije o sastavu i koncentraciji elemenata u fazama je značajno sa stanovišta eventualnih termičkih tretmana dobijene legure. Mikrosegregacioni modeli su takođe značajni kao konstitutivne korelacije kod makroskopskih modela, radi dobijanja zatvorenog sistema jednačina pogodnog za numeričku integraciju [1–5].

Većina danas postojećih modela za opisivanje fenomena mikrosegregacije odnosi se na dvojne legure, dok je pregled modela koji tretiraju legure sa više od dva elementa rjeđi, a njihov pregled je dat u radu [6]. Ne računajući neke izuzetke [7, 8], većina mikrosegregacionih modela nije dizajnirana tako da se može sprezati sa postojećim makroskopskim modelima [3–5] za opisivanje fenomena makro redistribucije elemenata tokom očvršćavanja. Kao spoljašnji uticaj koji kontroliše proces očvršćavanja u većini modela se obično zadaje gradijent entalpije ili temperature, dok su srednje koncentracije legirajućih elemenata konstantne tokom procesa očvršćavanja. Mikrosegregacioni modeli sračunavaju srednju entalpiju i koncentracije legirajućih elemenata tokom očvršćavanja, dok mikrosegregacioni model treba da na osnovu ova tri parametra izvrši proračun sastava faza i profila koncentracija na nivou kristala. U ovom radu prikazan je matematički model mikrosegregacije koji je neravnotežnog karaktera i koji omogućava opisivanje procesa mikrosegregacije sa promjenljivim srednjim koncentracijama tokom procesa očvršćavanja.

### Jednačine matematičkog modela

Osnovne pretpostavke na kojima se zasniva matematički model predstavljen u ovom radu su slične onima koje važe u tzv. Šejlovom (Scheil) modelu očvršćavanja [9], a to su beskonačno brza difuzija u tečnoj fazi i beskonačno spora difuzija u čvrstoj fazi. Na međufaznoj granici tečnost–čvrsto vlada termodinamička ravnoteža tokom procesa očvršćavanja. Tokom procesa ponovnog otapanja difuzija u čvrstoj fazi treba da je dovoljno brza da se na međufaznoj granici između tečnosti i čvrste faze može podrazumijevati termodinamička ravnoteža. Kod većine legura to se ne može uzeti kao realna pretpostavka, jer je koeficijent difuzije u čvrstoj fazi za obično tri reda veličine manji od odgovarajućeg u tečnosti, pa je pretpostavka o ravnoteži na međufaznoj granici netačna [1]. U izvedenim proračunima brzina očvršćavanja je dovoljno velika da se pretpostavka o zanemarivanju difuzije u čvrstoj fazi može uzeti kao prilično dobra, pa je kod procesa ponovnog otapanja koncentracija bakra i magnezijuma u čvrstoj fazi fiksirana vrijednostima sa prethodno uspostavljenih profila koncentracija. Za razliku od čvrste faze koncentracija bakra i magnezijuma u tečnoj fazi se uzima sa površi tečnosti, što predstavlja ravnotežnu vrijednost koja je prihvatljiva zbog znatno veće difuzije u tečnosti i zbog konvektivnog miješanja tečne faze. Mikrosegregacioni model podrazumijeva ravansku geometriju između bočnih dendrita. Rastojanje između bočnih dendrita nije parametar u modelu jer se difuzija u čvrstoj fazi ne računa.

Matematički model na osnovu koga se vrši sračunavanje profila koncentracija u različitim fazama tokom očvršćavanja sastoji se od bilansnih jednačina masa legirajućih elemenata, entalpije kao i odgovarajućih jednačina kojima je opisan trojni fazni dijagram legure Al-Cu-Mg:

$$h_m = f_s c_s T + (1 - f_s)(c_L T + h_L^0) \quad (1)$$

$$C_m^i = f_j \bar{C}_j^i (1 - f_s) C_L^i, \quad (i = \text{Cu, Mg}; j = 1, 2, 3, 4) \quad (2)$$

gdje su indeksom  $j$  predstavljane faze koje se izdvajaju tokom očvršćavanja, dok maseni udio čvrste faze u smješi  $f_s$  predstavlja sumu masenih udjela svih čvrstih faza ponaosob ( $f_s = \sum_j f_j$ ), a konstanta  $h_L^0 = (c_s - c_L) T_{EUT} - h_f$ . Srednje koncentracije legirajućih elemenata ( $C_m^i$ ) i entalpija smješe ( $h_m$ ) su vrijednosti koje se mijenjaju tokom procesa očvršćavanja i kontrolisane su makroskopskim fenomenima transporta. U ovom radu entalpija se smanjuje konstantnim gradijentom od 1500 kJ/kg za svaki vremenski korak, dok su promjene srednjih masenih koncentracija bakra i magnezijuma zadate u tablici 1.

**Tablica 1. Početne koncentracije legura i gradijenti promjena tokom očvršćavanja**

Slučaj	Legura	$C_m^{\text{Cu}}$ tež. %	$C_m^{\text{Mg}}$ tež. %	$dC_m^{\text{Cu}} / dt$ tež. %/s	$dC_m^{\text{Mg}} / dt$ tež. %/s	$t_{\text{poč}} / \text{s}$	$t_{\text{kraj}} / \text{s}$
1	1	5,0	1,0	–	–	–	–
2	1	5,0	1,0	–0,30	–0,07	30	35
3	1	5,0	1,0	0,30	0,07	30	35
4	2	6,0	3,5	–	–	–	–
5	2	6,0	3,5	0,3	0,175	30	35
6	2	6,0	3,5	–0,3	–0,175	30	35
7	3	3,9	0,9	–	–	–	–
8	4	15	1,0	–	–	–	–

Srednja koncentracija bakra i magnezijuma u čvrstoj fazi ( $\bar{C}_j^i$ ) sračunava se integralisanjem profila koncentracija do trenutne vrijednosti masenog udjela čvrste faze  $f_s$ :

$$f_s \bar{C}_j^i = \int_0^{f_s} C_j^i df_s, \quad (i = \text{Cu, Mg}; j = 1, 2, 3, 4) \quad (3)$$

Izdvajanje određenih čvrstih faza iz rastopa legure definisano je faznim dijagramom legure. Fazni dijagram legure Al-Cu-Mg definisan je sa jednačinom površi tečnosti i tzv. parcijalnim koeficijentima uzetih prema [11]:

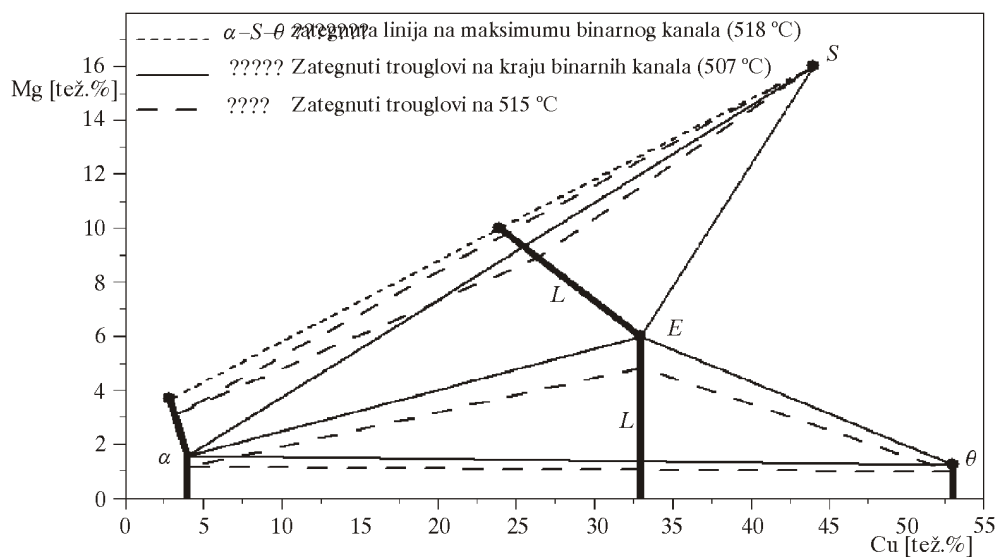
$$T_{LIQ} = 660 - 339,4 C_L^{\text{Cu}} - 538,5 C_L^{\text{Mg}} - 438,8 C_L^{\text{Mg}} C_L^{\text{Cu}} \quad (4)$$

$$k^{\text{Cu}} = \frac{(C_L^{\text{Cu}})^*}{C_L^{\text{Cu}}} = 0,12 \quad (5)$$

$$k^{Cu} = \frac{(C^{Mg})^*}{C_L^{Mg}} = 0,32 \quad 0,52C_L^{Cu} \quad 1,82C_L^{Mg} \quad (6)$$

gdje je  $(C^i)^*$  ravnotežna koncentracija legirajućih elemenata u čvrstoj fazi tokom procesa očvršćavanja. Koncentracija bakra i magnezijuma u čvrstim fazama ( $\alpha, \theta, S$ ) i odgovarajuće koncentracije u tečnosti tokom sekundarnog očvršćavanja ( $L \rightarrow \alpha + \theta$  ili  $L \rightarrow \alpha + S$ ) definisane su pravilom zategnutog trougla kao na sl. 1, gdje su prikazani za temperature 507 °C i 515 °C. Tokom eutektičkog očvršćavanja kada se iz tečnosti simultano izdvajaju tri čvrste faze ( $L \rightarrow \alpha + \theta + S$ ), koncentracije bakra i magnezijuma u čvrstim fazama mogu se sračunati iz trougla čija su tjemena spojena sa eutektičkom tačkom na sl. 1.

Proces očvršćavanja odigrava se na sledeći način: kompletno posmatrani domen



Slika 1. Koncentracije bakra i magnezijuma u tečnosti i čvrstim fazama tokom očvršćavanja duž  $\alpha-\theta$  i  $\alpha-S$  binarnih kanala (Lazare, Lesoult)

koji je u tečnoj fazi sa temperaturom koja se računa prema (4), hladi se tako što se entalpija smanjuje za 1500 kJ/kg za svaki posmatrani vremenski korak integracije ( $Dt=1$  s). Entalpija smješe se stalno upoređuje sa vrijednostima entalpija u karakterističnim tačkama ( $h_{LIQ}$  za prelaz  $L \rightarrow a$ , zatim  $h_{BIN}$  za prelaz  $L \rightarrow \alpha + q$  ili  $L \rightarrow + S$ ,  $h_{EUT}$  za prelaz  $L \rightarrow + + S$  i konačno  $h_{SOL}$  koja definiše kraj procesa očvršćavanja) i na taj način se definiše trenutni režim očvršćavanja. Kompletan prikaz metodologije određivanja graničnih entalpija koje definišu režim očvršćavanja dat je u radu 3 .

Na primjer, kada je entalpija smješe  $h_{LIQ} < h_m < h_{BIN}$  legura se nalazi u fazi primarnog očvršćavanja kada se iz tečnosti izdvaja primarna a faza  $L \rightarrow \alpha$ . Sistem jednačina (1–6) rešava se simultano i određuju se  $T, f_L, f_j, \bar{C}_j^i, (C_j^i)^*, C_L^i (i = Cu, Mg; j = a)$

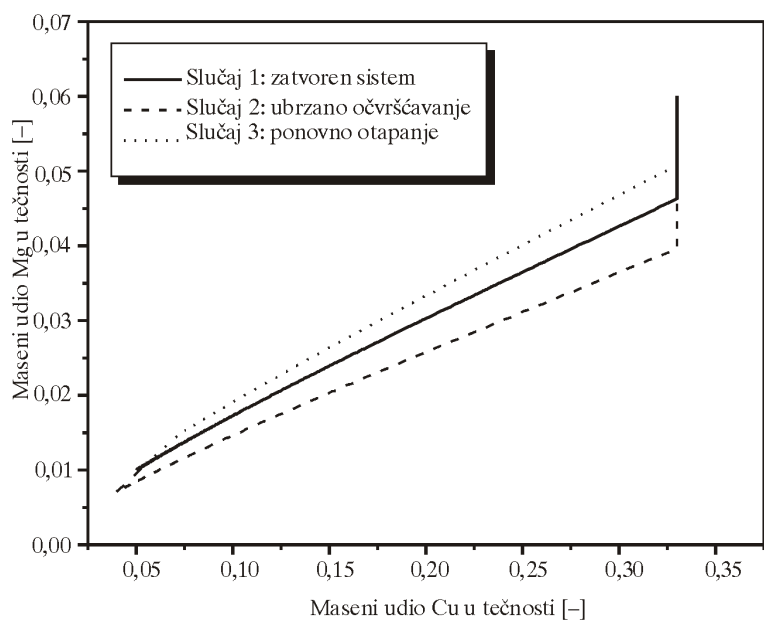
на основу дефинисаних физичких карактеристика легуре ( $c_s, c_L, h_f$ ) као и енталпије смјеше и средњих концентрација bakра и магнезијума у смјеши ( $h_m, C_m^{\text{Cu}}, C_m^{\text{Mg}}$ ) које се одређују из једначина макромодела. Једначина (3) у развијеном облику за Cu и Mg има следећи облик:

$$f_s \bar{C}^{\text{Cu}} \int_0^{f_{a,\text{old}}} C^{\text{Cu}} df = (f - f_{,\text{old}})(C^{\text{Cu}}) \quad (7)$$

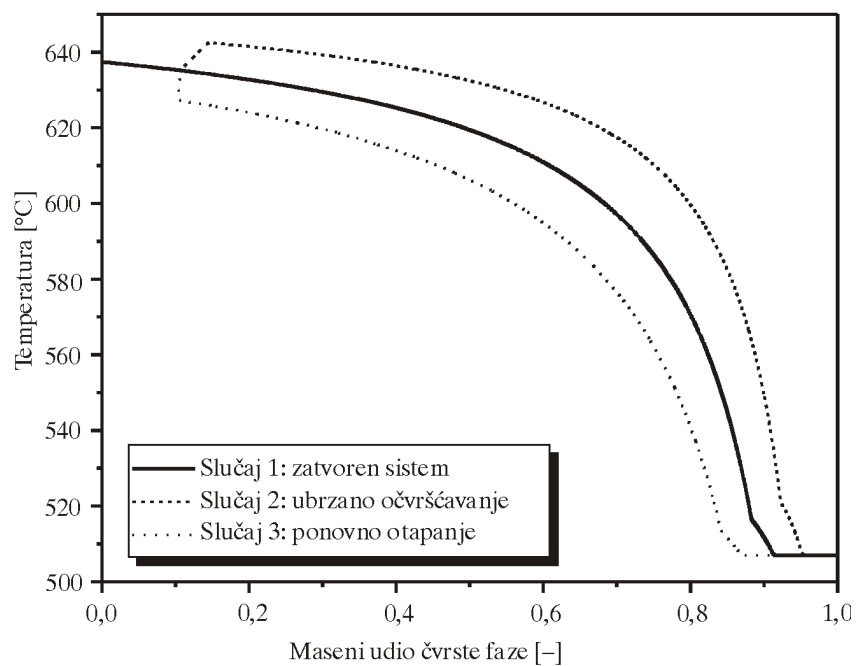
$$f_s \bar{C}^{\text{Mg}} \int_0^{f_{a,\text{old}}} C^{\text{Mg}} df = (f - f_{,\text{old}})(C^{\text{Mg}}) \quad (8)$$

гдје је  $f_a$  тренутна вредност масеног учеšћа чврсте фазе за посматрани временски тренутак а  $f_{a,\text{old}}$  вредност масеног учеšћа чврсте фазе из претходног временског тренутка. Вредности концентрација  $C^i$  су равнотежне вредности из претходних временских тренутака и чине профил концентрација bakра и магнезијума у примарној фази током очвршћавања. С обзиром да је усвојена претпоставка о занемарљивости дифузије у чврстој фази као и одсуства поновног отапања ове вредности остају непромијенјене током процеса очвршћавања. После одређивања температуре учеšће појединих фаза у чврстој легури се одређује на основу правила затегнутог trouгла, а вредност равнотежних концентрација ( $C_i^*$ ) се додају у већ формирани профил концентрација. Нови корак се срачунава са новим вредностима енталпије смјеше и средњим концентрацијама  $h_m, C_m^{\text{Cu}}, C_m^{\text{Mg}}$ .

Представљени модел лако се може модификовати у циљу описивања случаја када се средње концентрације bakра и магнезијума мијенјашу у времену. Промјене средњих концентрација легирајућих елемената током процеса очвршћавања дешавају се у главном услјед струјања течности кроз кашасту (*mushy*) зону, а која је или обогачена или са смањеном концентрацијом легирајућих елемената у односу на почетни састав. Смањивање средњих концентрација доводи до помјерања радне тачке ка Al углу, чиме се повећава и локална температура почетка очвршћавања са чиме се убрзава већ успостављени режим очвршћавања. Супротно, када средње концентрације легирајућих елемената расту радна тачка се помјера ка еутектичкој тачки, са чиме се процес очвршћавања успоравашу чак и са појавом поновног отапања већ формираних чврстих фаза без обзира на негативни градијент енталпије. У случају убрзаног очвршћавања једначине модела остају исте као што су напријед наведене, док је за случај поновног отапања потребно извршити одређене корекције. Као што је већ напријед речено није за очекивати да се на међуфазној граници течност–чврсто формира локална термодинамишка равнотежа јер дифузија у чврстој фази није довољно брза да апсорбује вишак bakра и магнезијума из течности. Знатно реалнија претпоставка је да су вредности концентрација легирајућих елемената у чврстој фази на граници течност–чврсто оне већ претходно формирани током процеса очвршћавања. На овај начин у профилу концентрација bakра и магнезијума у чврстој фази могу се формирати снажни дисконтинуитети чак и када се очвршћавањем формира само једна фаза. Овај феномен видљив је на сликама 4(b) и 6(b) за вредности  $f_s = 0,1$ .



Slika 2. Putanje očvršćavanja tokom očvršćavanja legure 1



Slika 3. Temperaturni profili tokom očvršćavanja legure 1

## Rezultati i diskusija

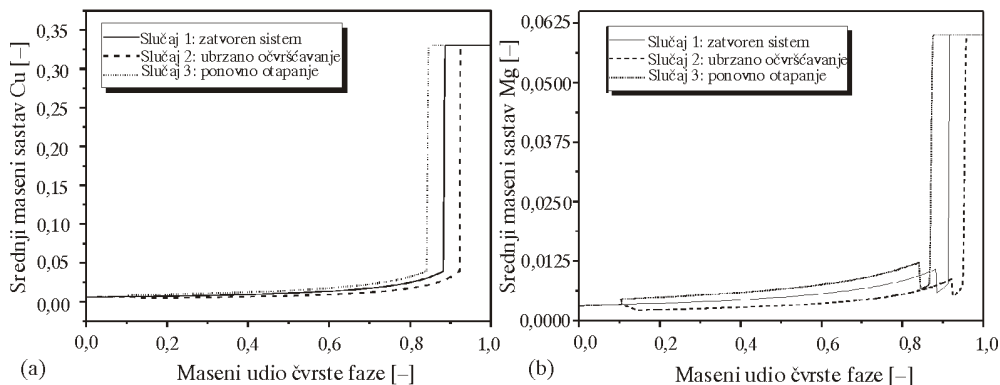
Prve dvije legure koje su odabrane za istraživanje imaju početni sastav koji obezbjeđuje dominantnu primarnu  $\alpha$  fazu u očvrstloj leguri. Primarno očvršćavanje se završava u jednom od dva binarna kanala (duž kojih se izdvajaju  $\theta$  ili  $S$  faza), i konačno proces očvršćavanja se završava sa eutektičkom reakcijom sa simultanim izdvajanjem sve tri faze ( $\alpha, \theta, S$ ) iz tečnosti. Legura 1 ima sastav Al-5 tež.%Cu-1 tež.%Mg kada se tokom sekundarnog očvršćavanja izdvaja  $\theta$  faza ( $L \rightarrow \alpha + \theta$ ), dok se kod legure 2 sastava Al-6 tež.%Cu-3,5 tež.%Mg tokom sekundarnog očvršćavanja izdvaja  $S$  faza ( $L \rightarrow \alpha + S$ ). Za svaku leguru razmatrana su tri slučaja: zatvoren sistem kada su srednje koncentracije bakra i magnezijuma konstantne, otvoren sistem sa smanjivanjem srednjih koncentracija bakra i magnezijuma i otvoren sistem sa povećavanjem srednjih koncentracija bakra i magnezijuma. Promjene srednjih koncentracija bakra i magnezijuma u vremenu su definisane sa odgovarajućim gradijentima i predstavljaju idealizovano uprošćenje onoga što se dešava uslijed strujanja fluida u kašastoj zoni na makro nivou. Redistribucija tečnosti bogate ili osiromašene legirajućim elementima može dovesti do promjena srednjih koncentracija znatno više od  $\pm 25\%$  od nominalne vrijednosti korišćene u ovom radu. Odabrani gradijenti koji obezbjeđuju promjene srednjih koncentracija od  $\pm 25\%$  uzete su na osnovu procjena koje se dobijaju makro modelima očvršćavanja.

Vremenski intervali zajedno sa odabranim gradijentima promjene srednjih koncentracija dati su u tablici 1. Model je takođe iskorišćen za proračun mикросегрегације legura 3 i 4, koje su eksperimentalno istraživane u radu 12. Rezultati proračuna za leguru 1 (slučajevi 1–3) su prikazani na slikama 2–4. Putanja očvršćavanja (sl. 2) za slučaj zatvorenog sistema kreće se niz površinu tečnosti od temperature početka očvršćavanja ( $T_{LIQ} = 637^\circ\text{C}$ ) dok linija ne presiječe binarni kanal na  $T = 512^\circ\text{C}$  kada počinje sekundarno očvršćavanje sa izdvajanjem  $\theta$  sekundarne faze simultano sa primarnom  $\alpha$  fazom. Zavisnost temperature od masenog učešća čvrste faze  $f_s$  koja je prikazana na sl. 3 pokazuje nelinearan karakter promjene tokom primarnog očvršćavanja, dok je tokom kratkog sekundarnog očvršćavanja promjena skoro linearna. Na kraju eutektička reakcija sa kojom se završava očvršćavanje je izotermnog karaktera, što se na dijagramu vidi kao horizontalna linija. Kao što se može vidjeti u tablici 2, 88% očvrstle legure je primarna  $\alpha$

Tablica 2. Masena učešća pojedinih faza tokom očvršćavanja legura 1 i 2

Slučaj	Legura	Primarna faza ( $\alpha$ )	Sekundarna faza ( $\alpha + S$ ili $\alpha + \theta$ )	Eutektična faza ( $\alpha + S + \theta$ )
1	1	0,883	0,030	0,087
2	1	0,923	0,029	0,048
3	1	0,842	0,027	0,131
4	2	0,804	0,136	0,06
5	2	0,738	0,191	0,071
6	2	0,865	0,087	0,048

faza, dok je sekundarna faza svega 3%. Preostalih 9% je u formi eutektičke strukture koja se posljednja izdvaja na kraju očvršćavanja. Profili koncentracija bakra i magnezijuma prikazani su na sl. 4, sa kojih se vidi očekivani porast koncentracije tokom primarnog očvršćavanja.



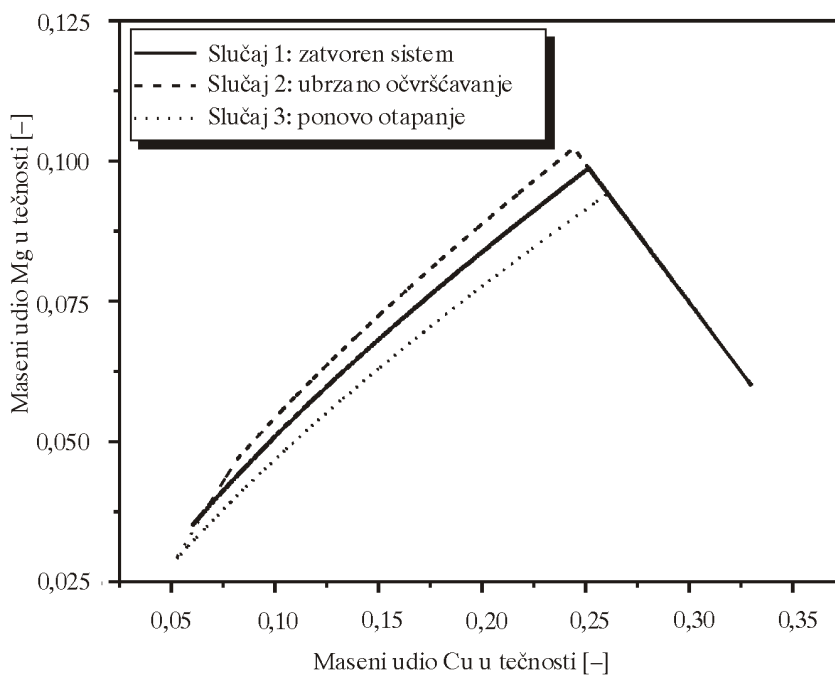
Slika 4. Srednji sastavi u očvrstloj leguri 1: (a) Cu; (b) Mg

Sa početkom sekundarnog očvršćavanja dolazi do skoka koncentracije bakra na 33% uslijed izdvajanja  $\eta$  faze bogate bakrom ( $C^{Cu} = 53\%$ ), dok za magnezijum dolazi do pada jer je u  $\eta$  fazi magnezijum veoma malo zastupljen, što se vidi sa linije L- $\eta$  na 507 °C i 515 °C na sl. 1. Smanjivanjem srednjih koncentracija tokom očvršćavanja legure 1 (slučaj 2 u tablici 1) dolazi do promjena u strukturi dobijene legure. Efekat smanjenja koncentracija bakra i magnezijuma vidljiv je u donjem lijevom dijelu na sl. 2. Pomjeranjem radne tačke bliže čistom aluminijumu dolazi do povećanja temperature na kojoj počinje proces očvršćavanja (jednačina 4) pa samim tim i do ubrzanja procesa očvršćavanja. Ubrzavanjem procesa očvršćavanja dolazi i do povećavanja učešća primarne  $\alpha$  faze u očvrstloj strukturi na račun smanjenja sekundarne i eutektičke faze, kao i do povećanja latentne toplote faznog prelaza u poređenju sa zatvorenim sistemom. S obzirom da slučajevi 1 i 2 imaju isti zadati gradijent entalpije povećanjem latentne toplote kod slučaja 2 dolazi do povećanja temperature da bi bila zadovoljena energijska jednačina (1), što se vidi skokom na dijagramu 3. Temperatura raste do 642 °C što je za 5 °C više od odgovarajuće temperature na površi tečnosti, ali je ipak niža od temperature sa površi tečnosti koja odgovara trenutnim srednjim koncentracijama bakra i magnezijuma. Kada se srednje koncentracije prestanu mijenjati i postanu konstantne temperatura počinje da teži eutektičkoj na isti način kao za slučaj zatvorenog sistema. Kada srednje koncentracije bakra i magnezijuma rastu u definisanom vremenskom intervalu (slučaj 3 u tablici 1), temperatura počinje da se snižava što izaziva lokalno ponovno otapanje već formirane čvrste faze. Ponovno otapanje izazvano povećanjem koncentracija legirajućih elemenata je veoma poznat fenomen koji dovodi do formiranja oblaka čestica čvrste faze u struji tečnog metala tokom očvršćavanja u ingotima [13]. Uslijed ponovnog otapanja dolazi do apsorbovanja latentne toplote od sistema i pada temperature za red veličine 10 °C.



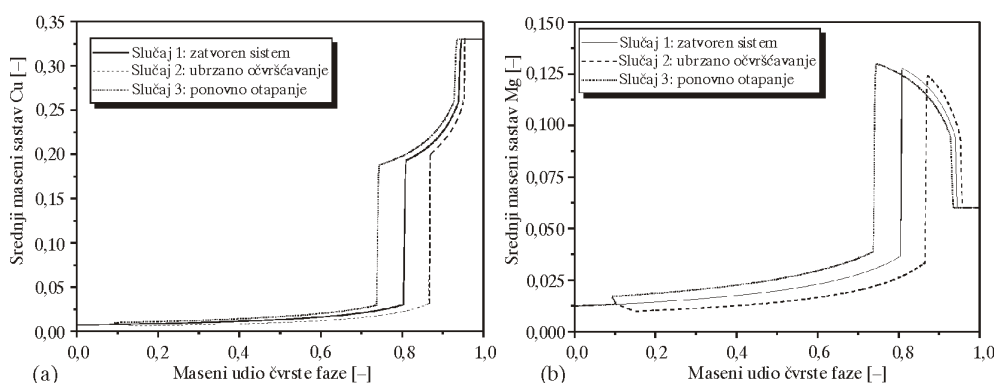
Iznenadne promjene temperature tokom variranja koncentracija koje su prikazane na sl. 3. nisu primijećene kod realnih sistema očvršćavanja bilo eksperimentalnih bilo modelskih analiza fenomena makrosegregacije [14]. One se pojavljuju kod predloženog modela jer je gradijent entalpije fiksiran, dok je kod realnih sistema on definisan lokalnim temperaturnim gradijentom. U realnim procesima očvršćavanja promjene srednjih koncentracija izazvaće lokalno otapanje ili ubrzano očvršćavanje, ali neće doći do formiranja značajnijih temperaturnih gradijenata. Ako se, na primjer, na određenom mjestu desi lokalno otapanje već formirane čvrste faze, oslobođena latentna toplota biće transportovana kondukcijom u lokalno okruženje. Visoki koeficijenti provođenja toplote za sve metale su prevencija da se na tim mjestima ne pojave izraziti temperaturni gradijenti.

Povećavanje odnosno smanjivanje koncentracije legirajućih elemenata u tečnosti ima znatan uticaj na profile koncentracija legirajućih elemenata u čvrstoj fazi (sl. 4). Za slučaj 2 kada dolazi do smanjivanja srednje koncentracije bakra i magnezijuma, dolazi i do smanjivanja koncentracija Cu i Mg u primarnoj  $\alpha$  fazi. Smanjivanjem koncentracija u  $\alpha$  fazi dovodi do kašnjenja u pojavljivanju sekundarne i tercijarne čvrste faze pa se kod slučaja 2 učešće primarne faze povećava u ukupno očvrstloj masi (porast na 92,3% sa 88,3% za slučaj zatvorenog sistema). Suprotan trend odigrava se kada koncentracije bakra i magnezijuma rastu sa vremenom, tada su koncentracije bakra i magnezijuma u čvrstoj fazi veće dok se učešće primarne faze u očvrstloj leguri smanjuje (84,3%).



Слика 5. Путанје очвршћавња током очвршћавња легуре 2

Rezultati proračuna za leguru 2 prikazani su na sl. 5. i 6. Na sl. 5 prikazane su putanje očvršćavanja za slučajeve 4–6 kada se primarno očvršćavanje završava na binarnom kanalu duž koga se  $S$  faza ( $Al_2CuMg$ ) izdvaja simultano sa  $\alpha$  fazom iz preostalog tečnog rastopa. Binarni kanal ima negativan trend što se tiče koncentracije magnezijuma, dok koncentracija bakra u tečnosti nastavlja da raste sve do eutektičke vrijednosti od 33,2%. Efekti promjene srednjih koncentracija bakra i magnezijuma slični su kao kod legure 1. Smanjivanjem koncentracija Cu i Mg u vremenu dolazi do pomjeranja radne tačke bliže čistom aluminijumu, što pomjera putanju primarnog očvršćavanja na dolje.



Slika 6. Srednji sastavi u očvrstloj leguri 2: (a) Cu; (b) Mg

Za slučaj ubrzanog očvršćavanja putanja primarnog očvršćavanja presijeca binarni kanal na mjestu koje je bliže eutektičkoj tački u odnosu na slučaj zatvorenog sistema. Istovremeno, koncentracije bakra i magnezijuma u čvrstoj fazi su manje (sl. 6) slično kao kod legure 1. Distribucija sastava tokom sekundarnog očvršćavanja direktno je kontrolisana položajem i promjenama koje diktira binarni kanal (smanjivanje koncentracije Mg u tečnosti i rast koncentracije Cu).

U tablici 3. prikazane su uporedne vrijednosti masenih učešća pojedinih faza za dvije legure koje su eksperimentalno istraživane [12], zajedno sa rezultatima dobijenim predloženim modelom. Potrebno je naglasiti da maseni udjeli primarne  $\alpha$  faze koji su dobijeni eksperimentom [12] i koji su prikazani u tablici sadrže u sebi primarnu fazu koja se izdvaja tokom sekundarnog očvršćavanja ( $L \rightarrow \alpha + \theta$ ). Na osnovu rezultata prikazanih u tablici 3. vidljiva su određena gruba slaganja, ali još uvijek nedovoljno precizna. Xie i koautori [12] sprovodili su eksperimente sa nekoliko različitih brzina hlađenja. U ovom radu korišćeni su rezultati za slučaj najbržeg hlađenja u cilju minimiziranja efekata difuzije u čvrstoj fazi. Za slučajeve brzina hlađenja koji su korišćeni (0,039–0,78 K/s), efekat difuzije je vidljiv u masenim udjelima primarne  $\alpha$  faze (manje vrijednosti  $\alpha$  faze za veće brzine hlađenja). Drugi razlog koji može biti uzrok neslaganja rezultata modela i eksperimenta su nepreciznosti vezane za opisivanje faznog dijagrama legure. Za suviše velike vrijednosti parcijalnih koeficijenata modelom će se dobiti manje vrijednosti koncentracija Cu i Mg u čvrstoj fazi, kao i manje učešće primarne  $\alpha$  faze. Efekti koji su doveli

do nepreciznosti modela kao i difuzija u čvrstoj fazi koja se ne može zanemarivati, su predmeti već sprovedenih i budućih istraživanja koja će biti uskoro objavljena na osnovu postojećih rezultata 15, 16 .

**Tablica 3. Uporedni rezultati modela i eksperimenta prema 12**

	Legura	<i>a</i> faza	<i>q</i> faza	Eutektička faza ( <i>a</i> + <i>S</i> + <i>q</i> )
Modelska analiza	3	0,925	0,008	0,067
Mjereni rezultati 12	3	0,958	0,019	0,023
Modelska analiza	4	0,713	0,175	0,112
Mjereni rezultati 12	4	0,792	0,125	0,083

### Zaključak

U radu je prikazano preliminarno istraživanje efekata makroskopske redistribucije legirajućih elemenata na proces mikrosegregacije u Al-Cu-Mg leguri. U tom cilju razvijen je odgovarajući matematički model kojim se mogu predviđati različiti slučajevi očvršćavanja na nivou kristala, kao i mogućnost opisivanja fenomena mikrosegregacije kada su srednje koncentracije bakra i magnezijuma promjenljive što je najčešći slučaj u procesima realnog očvršćavanja u ingotima. Sprovedeni su proračuni za dvije različite legure za tri različita slučaja: kada nema promjena srednjih koncentracija Cu i Mg, kada opadaju i kada rastu sa definisanim gradijentom u definisanom vremenskom intervalu. Izvršeno je uporedno prikazivanje rezultata za sva tri slučaja očvršćavanja na dijagramima na kojima su prikazani temperaturski profili tokom očvršćavanja i profili koncentracija Cu i Mg. Slučajevi otvorenog sistema ( 2 i 3 ) dovode do ubrzanog očvršćavanja i ponovnog otapanja već formirane čvrste faze redom. Ove promjene dovode do promjene sastava dobijene legure, posebno učešća sekundarne i eutektičke faze u očvrstloj leguri. Temperaturske promjene koje su uzrokovane ubrzanim očvršćavanjem i ponovnim otapanjem ne dešavaju se kada se mikrosegregacioni model spreže sa makroskopskim transportnim modelima, ili kada je proces očvršćavanja kontrolisan promjenama temperature, a ne entalpije. Preliminarni rezultati koji su prikazani u ovom radu predstavljaju uvod za istraživanja koja su u toku ili koja će biti sprovedena 15, 16 u najskorijoj budućnosti, a vezana su za razmatranje procesa difuzije u čvrstoj fazi i poboljšanja u opisivanju faznog dijagrama legure.

### Literatura

- 1 Bennon, W. D., Incropera, F. P., *Int. J. Heat Mass Trans.*, 30 (1987), 2161
- 2 Schneider, M. C., Beckermann, C., *Int. J. Heat Mass Trans.*, 38 (1995), 3455
- 3 Krane, M. J. M., Incropera, F. P., Gaskell, D. R., *Int. J. Heat Mass Trans.*, 40 (1997), 3828

- 4 Schneider, M. C., Beckermann, C., *Metall. Mater. Trans. A*, 26A (1995), 2373
- 5 Swaminathan, C. R., Voller, V. R., *Int. J. Heat Mass Trans.*, 40 (1997), 2859
- 6 Kraft, T., Chang, Y. A., *JOM*, 49:7, (1997), 20
- 7 Voller, V. R., in: *Solidification 1998* (Eds. S. P. Marsh *et al.*), TMS, 1998, 27
- 8 Voller, V. R., in: *Modeling of Casting, Welding and Advanced Solidification Processes, IX*, (Eds. P. R. Sahm *et al.*), Shaker, Verlag, 2000, 607
- 9 Kurtz, W., & Fisher, D. J., *Fundamentals of Solidification*, 4th ed., TransTech Publications, 1998
- 10 Rettenmayr, M., Warkentin, O., Exner, H., *Zeit. für Metallkunde*, 88 (1997), 617
- 11 Lacaze, J., Lesoult, G., *ISIJ International*, 35 (1995), 658
- 12 Xie, F. Y., Kraft, T., Zuo, Y., Moon, C.-H., Chang, Y. A., *Acta. Mater.*, 47 (1999), 489
- 13 Beckermann, C., Gu, J. P., Boettinger, W. J., *Metall. Mater. Trans. A*, 31A (2000), 2545
- 14 Krane, M. J. M., Incropera, F. P., Gaskell, D. R., *Metall. Mater. Trans. A*, 29A (1998), 843
- 15 Cefalu, S., M. S. thesis, School of Materials Engineering, Purdue University, 2001
- 16 Vušanović, I., Ph. D. dissertation, Faculty of Mechanical Engineering, University of Montenegro, Podgorica, Montenegro, Yugoslavia2002

## Abstract

### MICROSEGREGATION DURING SOLIDIFICATION OF Al-Cu-Mg ALLOYS WITH VARYING COMPOSITION

Igor VUŠANOVIĆ and  
Matthew John M. KRANE

A model is presented to examine the effect of macroscopic redistribution on local microsegregation during solidification of in multicomponent alloys. The macroscopic effects are felt through local changes in mixture composition that can affect the solidification behavior and composition profiles of the alloys. Calculations were made for the solidification of two Al-Cu-Mg alloys for three cases in which the composition remains the same, decreases, or increases. Variations in composition lead to changes in composition profiles and relative amounts of different solid phases. The model in its present form can be used in conjunction with macroscopic solidification models and is the basis for more sophisticated microsegregation models.

*Key words: microsegregation, Al-Cu-Mg alloy, redistribution, solidification, compositions,  $\theta$  phase, S phase, macrosegregation*