

BÁNYÁSZATI és KOHÁSZATI

LAPOK AZ ORSZÁGOS MAGYAR BÁNYÁSZATI ÉS KOHÁSZATI
EGYESÜLET LAPJA ALAPÍTOTTA PÉCH ANTAL 1868-BAN



Egy alternatív forrás energiaválság idején – az alginit újragondolva
An alternative source in times of energy crisis – alginite reconsidered

Szilágyiné Sebők Szilvia, Vadászi Marianna

FROM THE CONTENTS

AT THE 119TH OMBKE OFFICER RENEWAL DELEGATES' MEETING GERGELY LÁSZLÓ TÓTH WAS ELECTED AS THE NEW PRESIDENT 2

ISTVÁN OMASZTA: Rock splitting, crack formation and propagation 5

GERGELY KŐRÖSY, ANDRÁS ROÓSZ, ÁDÁM VÉGH, TAMÁS MENDE: The ESTPHAD Concept: An Optimised Set of Simplified Equations to Estimate the Equilibrium Liquidus and Solidus Temperatures, Partition Ratios and Liquidus Slopes for Quick Access to Equilibrium Data in Solidification Software Part III: Ternary Eutectic-Type Equilibrium Phase Diagram 14

SZILVIA SZILÁGYINÉ SEBŐK, MARIANNA VADÁSZI: An alternative source in times of energy crisis – alginite reconsidered 38

TAMÁS ISTVÁN TÖRÖK: The metallurgical aspects of the 200-year-old Hungarian Academy of Sciences 43

ÁRPÁD ŐSZ SR.: Effect of hydrogen on its metallic environment when stored underground 47

OSZKÁR GREGA: Early technological development in domestic steel plate production 58

Támogatóink



Magyar Tudományos Akadémia



FémAlk Zrt.



ACUFER Kft.



Magyar Villamos Művek



OMYA Hungária Kft.



Ózdi Acélművek Kft.



MOL Magyarország

Felelős szerkesztő:

Hajnal József

E-mail:
hirfor2000@gmail.com

A Szerkesztőbizottság tagjai:

Bariczáné Szabó Szilvia, Bíró Nóra,
Dr. Dovrtel Gusztáv, Fisch Iván,
Dr. Földessy János,
Dr. Harcsik Béla, Dr. Kóródi István,
Livo László, Lois László,
Molnár József, Molnár Zsolt,
Pali Sándor, Schudich Anna,
Dr. Szabó Tibor, Székács Annamária,
Dr. Szunyog István, Dr. Tardy Pál,
Dr. Török Tamás, Dr. Vadászi Marianna
Dr. Vojuczki Péter

Magyar nyelvi lektorálás:

Keményváriné Nagy Alexandra

Kiadja:

Országos Magyar Bányászati és
Kohászati Egyesület (OMBKE),
1107 Budapest, Hizlaló tér 1.
Telefon/Fax: 1-201-7337
www.ombke.hu

A kiadásért felel:

Tóth Gergely László

Belső tájékoztatásra,
kereskedelmi forgalomba nem kerül.
A közölt cikkek fordítása, utánnyomása,
sokszorosítása és adatrendszerekben való
tárolása kizárólag a kiadó engedélyével
történhet.

A BKL lapszámai az OMBKE
honlapján – www.ombke.hu –
érhetők el.

HU ISSN 3057-9899 (Online)

TARTALOM

Az OMBKE 119. TISZTÚJÍTÓ KÜLDÖTTGYŰLÉSÉN TÓTH GERGELY LÁSZLÓ SZEMÉLYÉBEN ÚJ ELNÖKÖT VÁLASZTOTTA	2
OMASZIA ISTVÁN: Közetek hasítása, a repedés keletkezése és terjedése	5
KŐRÖSY GERGELY, ROÓSZ ANDRÁS, VÉGH ÁDÁM, MENDE TAMÁS: Az ESTPHAD koncepció III. rész: Ternér eutektikus típusú egyensúlyi fázisdiagram	14
SZILÁGYINÉ SEBŐK SZILVIA, VADÁSZI MARIANNA: Egy alternatív forrás energiaválság idején – az alginít újragondolva	38
TÖRÖK TAMÁS ISTVÁN: A 200 éves MTA kohászati vonatkozásai	43
ID. ŐSZ ÁRPÁD: A hidrogén hatása a fémes környezetre föld alatti tárolása esetén	47
GREGA OSZKÁR: Korai technológiafejlesztés a hazai acéllemezgyártásban	58

(for English titles see B2 page)

Címlapon:

Egy alternatív forrás energiaválság idején – az alginít újragondolva

*A hazai kutatás főbb sarokpontjairól a további perspektivikus kutatási
irányokról (publikáció a 38. oldalon)*

A kiadvány a Magyar Tudományos Akadémia támogatásával jelenik meg.

Az OMBKE 119. Tisztújító Küldöttgyűlésén Tóth Gergely László személyében új elnököt választottak

At the 119th OMBKE Officer Renewal Delegates' Meeting Gergely László Tóth was elected as the new president

Az Országos Magyar Bányászati és Kohászati Egyesület 119. alkalmommal rendezte meg Tisztújító Küldöttgyűlését, 2026. május 30-án, Székesfehérváron. A tanácskozás dr. Szombatfalvy Anna elnök megnyitó szavaival kezdődött, majd a jelenlevők elénekelték nemzeti himnuszunkat. Ezt követően Csurgó Lajos, az OMBKE Fémkohászati Szakosztályának elnöke üdvözölte a résztvevőket, majd Gábor Balázs, az Arconic Kőfém ügyvezetője a vendéglátók nevében köszöntötte a tanácskozást.

Kulcsszavak: küldöttgyűlés, gazdálkodás, tervek, határozatok, kitüntetések, elnökválasztás

The 119th Assembly of Delegates of the Hungarian Mining and Metallurgical Society met in Székesfehérvár. The participants of the Assembly listened to the report on the work of the Presidium in the past year, the management and the implementation of the previously adopted resolutions. They decided on the plans and main tasks for 2026. Afterwards, awards were presented.

Keywords: assembly of delegates, management, plans, resolutions, awards, presidential election



Az OMBKE 119. Küldöttgyűlésének résztvevői

Székesfehérváron tartották meg az OMBKE 119. Küldöttgyűlését. Az éppen 134. éves társaság tanácskozása fontos kérdésekről döntött. A 119. Tisztújító Küldöttgyűlés elfogadta az elnökség beszámolóját az elmúlt évi munkáról és a gazdálkodás eredményeiről, megszavazta az előterjesztett Közhasznúsági Jelentést, a 2025. évi költségvetési zárást és mérleget, a

2026. évi költség tervet, valamint a Felügyelőbizottság jelentését.

Kitüntetések, elismerések átadására is sor került. A 119. Küldöttgyűlés *Boross Péter* okleveles kohómérnököt, *Hermann György* okleveles bányamérnököt és *Jármai Gábor* okleveles olajmérnököt az Egysület Tiszteleti Tagjaivá választotta.

A 119. Küldöttgyűlés *Tóth Gergely László* okleveles bányamérnök személyében új elnököt választott.

Az OMBKE további tisztségviselői:

Bányász alelnök: *Dr. Kertész Botond*

Kohász alelnök: *Dr. Fegyverneki György*

Elnökségi tagok:

Bocz András, Csurgó Lajos, Dencs László, Dr. Dovrtel Gusztáv, Kovácsics Árpád, Dr. Pintér Richárd, Dr. Szalontai Lajos



A Küldöttgyűlésen az ifjabb generáció képviselői is jelen voltak



Egy a szavazás pillanataiból

Köszönetnyilvánítás a Küldöttgyűlés után – Közösen az OMBKE megújulásáért!



Tóth Gergely László, az OMBKE elnöke köszönti a Küldöttgyűlés résztvevőit

Kedves Tagtársak, Tisztelt Küldöttek!

Engedjétek meg, hogy elsőként és legfőképpen hálás szívvel megköszönjem azt a megtisztelő bizalmat, amellyel az Országos Magyar Bányászati és Kohászati Egyesület elnöki tisztségére megválasztottatok. Hatalmas megtiszteltetés ez számomra, és ígérem, hogy minden tudásommal és energiámmal e nemes bizalom megszolgálására fogok törekedni a mindennapi munka során.

A mögöttünk álló Küldöttgyűlés nemcsak az eredmény miatt marad emlékezetes, hanem azért a példaértékű összefogásért is, amelyet közösen mutattunk meg.

Különösen büszkék lehetünk arra, hogy milyen kimagasló arányban voltunk jelen, és hogy Egyesületünk már az *első kiírásra határozatképesnek bizonyult*. Ez úton is hálásan köszönöm a Szakosztályok és a Helyi Szervezetek vezetőségének azt az óriási munkát, áldozatvállalást és energiát, amit a tagság mozgósításába fektettek – ez az eredmény a Ti érdemeitek is!

Ez a rendkívüli részvétel egyértelműen bizonyítja, hogy a küldöttek mindannyian a legnagyobb komolysággal és mély felelősségtudattal viseltetnek a mandátumuk iránt. Egyesületünk számos megoldandó feladat

előtt áll. A szombati Küldöttgyűlésen láttuk, hogy egyértelmű szándék van a nehézségek leküzdésére.

A bizalmatok és az előttünk álló feladatok súlya nem engedi a késlekedést. Ahogyan a programomban is ígértem, a tettek embere vagyok: a ránk váró teendők, a szerkezeti átalakítások és a stratégiai feladatok részletes feldolgozásához *már szombat este hozzákezdtam*.

Az elnöki tisztség egy koordináló és irányító szerep, de a valódi sikereket csak együtt, csapatként érhetjük el. Ahhoz, hogy az OMBKE újra erős, az ipar döntéshozóit és a fiatal mérnököket is megszólító, hagyományait mégis büszkén őrző szervezet legyen, egyetlen ember kevés. Ezért a megkezdett úton továbbra is elengedhetetlenül *számítok a szakosztályok, a helyi szervezetek és az egész tagság aktív támogatására, közös munkájára és javaslataira*.

Köszönöm még egyszer a támogatást, a közös jövőbe vetett hiteteket! Induljunk el ezen az úton együtt, egymást tisztelve és segítve!

Jó szerencsét!

Tóth Gergely László,
az OMBKE elnöke

Kőzetek hasítása, a repedés keletkezése és terjedése

Rock splitting, crack formation and propagation

OMASZTA ISTVÁN

Okleveles bányagépész- és bányavillamossági mérnök, okleveles mérnöközgazdász
E-mail: omaszta1957@gmail.com



Az energiaköltség az egyik meghatározó költségelemmé vált. Minden magas energiatartalmú termelési folyamat elemzése és a folyamat optimalizálása rendkívüli fontossággal bír, egy vállalat versenyképességének biztosításához elengedhetetlen. A kőzetek, tágabb értelemben minden talaj- és kőzetbontás nagy energiaigényű folyamat. Ebben a munkafolyamatban két egymáshoz kapcsolódó fizikai jelenség lép fel, a bontószerszám és/vagy gép kopása és a bontószerszámok, a hajtás és energiaellátás és a tartószerkezet kialakításához köthető energiafogyasztás. Energiafogyasztás alatt a bontószerszámok által, a termelési fázisban generált teljes energiaszükségletet értjük, különös szerepet játszik a kőzetbontás energiaszükséglete.

Ebben az írásban, a hasítási folyamat energetikai szemléletű leírását adom meg, ami az [1] és [2] cikkben részben megtörtént, kivéve a repedés keletkezése és terjedése nem került tisztázásra, amit ezennel pótolok. Leírása [2] szerint a kőzetbontásnak elvi szempontból téves, mert a hasítást közelítő függvénnyel modellezi. Ezekben a kvázi statikus kőzethasítási modellekben a repedés terjedésének véges időszükséglete nem jelenik meg, a folyamat mintegy nulla időtartam alatt megy végbe.

A fizikai folyamat dinamikai szemléletű leírása nem tárgya ennek a cikknek. Ez a tanulmány azt a hiányt szándékozik bepótolni, amit [1] 3. fejezetében közelítő jelleggel közöltem. Ez a repedés megindulása és a repedésterjedés leírása.

Kulcsszavak: kőzetek hasítása, energiafogyasztás, kőzethasítási modell

Energy costs have become one of the determining cost elements. The analysis of all high-energy production processes and the optimization of the process are of utmost importance and are essential for ensuring the competitiveness of a company. Rocks, and in a broader sense all soil and rock demolition, are energy-intensive processes. Two interconnected physical phenomena occur in this work process, the wear of the demolition tool and/or machine and the energy consumption associated with the construction of the demolition tools, the drive and energy supply and the supporting structure. Energy consumption is understood as the total energy requirement generated by the demolition tools in the production phase, the energy requirement of rock demolition plays a special role.

In this paper, I will give an energetic description of the cleavage process, which was partly done in [1] and [2], except that the formation and propagation of the crack were not clarified, which I will fill in here. The description of rock breaking according to [2] is fundamentally wrong because it models the cleavage with an approximate function. In these quasi-static rock cleavage models, the finite time requirement for crack propagation does not appear, the process takes place in approximately zero time.

The dynamic description of the physical process is beyond the scope of this article. This paper aims to fill the gap that I have addressed in Chapter 3 of [1], which is the description of crack initiation and crack propagation.

Keywords: rock splitting, energy consumption, rock cleavage model

1. A közethasítás energiaátalakulásai

1.1. Általános energiamérleg

A külső erők munkája – az ékkel történő hasításkor az előtolóerő által végzett mechanikai munka – kifejezhető a közet maradó és rugalmas alakváltozásának energiaszükségletével és a súrlódás legyőzésére fordított mechanikai munkával. Ehhez járul a repedés létrejöttkor keletkező felületek energianövekedése:

$$dW = T(e)de = dW_e + dU_h + dW_s + 2\Gamma b da, \quad (1)$$

ahol, dW a rendszer teljes energiája, T az előtolóerő, p a behatolás mélysége, de az elemi előtolás, da az elemi repedéshossz-növekmény, $W_e(T, Q)$ az ék által a közetben okozott maradó irreverzibilis alakváltozás energiája, amely a Q sugarú tompa él benyomódásának a W_e energiaszükségletét tartalmazza. $dU_h(T, a, t)$ az a rugalmas energia, amelyet az ék behatolása vált ki, ahol a a kialakult repedéshossz és t a meghajlított forgács vastagsága. Továbbá $dW_s(T, a, \theta)$ a súrlódási energiavesztés, ahol θ az ékszög fele és Γ az effektív törési energia egységnyi új b repedésfelületre (b a szerszám szélessége) vonatkoztatott értéke, amely tartalmazza az újonnan elvált felületek energianövekményét $dW_\gamma = \gamma ba$, ahol γ a felületi energia és τ a képlékeny zóna fajlagos alakváltozási munkáját $dW_\tau = \tau b \delta p$, azaz $\Gamma = (\gamma + \tau)$. A gyakorlati számításokhoz lényegesen magasabb értékeket szokás a törési energiára felvenni. Az aprózódással együtt ez a Γ_{eff} érték a 2000 J/m²-t is eléri homokkő ékkel való hasításkor [3].

Megjegyzendő, hogy az egyenlet nem tartalmazza a szerszám ütközése által kiváltott rugalmas hullámok energiáját, a mechanikai súrlódás okozta hőfejlődést és a hasítási folyamatkor a légtérbe leadott rezgési és hőenergia tagot. A közet szekunder törési energiája sem lesz figyelembe véve. Ez a leírás nem veszi figyelembe a szerszámot hajtó gépszerkezet rugalmas szerkezetét és forgó-lengő tömegének energiáját sem.

1.2. Az ékkel történő közetbontás részfolyamatai

A folyamat leírását nem észszerű egy egységesített mérlegegyenlettel leírni, mert négy egymástól teljesen eltérő, egymásba folyamatosan átalakuló mozzanatból áll össze a teljes fizikai esemény:

- ❑ Behatolás 1: A szerszám hegye roncsolva behatol a közetbe. Ez a szakasz az ékhatás kialakulásáig tart (2. fejezet).
- ❑ Behatolás 2: Az ékhatás kiteljesedik. Ez a szakasz a repedés megindulásáig tart (3. fejezet).
- ❑ Törés és a repedés keletkezése, repedések keletkezése (4. fejezet).
- ❑ Repedés kialakulása és terjedése a törésig, azaz az anyag teljes leválásáig (5. fejezet).

Ehhez a témakörhöz szervesen kapcsolódik még egyes közethasítási folyamatok nemlineáris természet (6. fejezet) és a repedéspálya (7. fejezet) elméleti meghatározása. A következőkben ezeket a folyamatokat fogjuk elemezni. A cikket az eredmények alkalmazásával zárom, homokkő hasítása esetére közlök néhány diagrammot (8. fejezet).

2. Behatolás 1: A szerszám $Q \neq 0$ sugarú hegyének behatolása az ékhatás belépéséig (1) szerint

$$dW = T(e)de = dW_e + dW_s \quad (2)$$

az egyenleteket a $T(p)$ előtolóerőre és annak $W(p)$ munkájára (1) szerint közlöm. Ezen a szakaszon az e előtolás értéke $e = p$, (p a behatolás) egyenlő a behatolás mélységével. Az előtoló irányú felületre ható e erővektorok integrálja a behatoló felületre (az él mint hengerpalást) a fél Θ ékszög függvényében kapható. Az integrál határainak a szerszám csúcsát, $\varepsilon = 0$ és az ékfelület kezdetét, $\pi/2 - \theta$ között választjuk:

$$T(\alpha) = 2\sigma_1 b Q \int_{\varepsilon=0}^{\alpha} (\cos \varepsilon + \mu \sin \varepsilon) d\varepsilon,$$

$$\cos \alpha = 1 - \frac{p}{Q}; \quad 0 \leq \alpha \leq \frac{\pi}{2} - \theta,$$

ahol $p(e)$ a behatolás és Q a szerszám élsugara. Következik ebből az integrálból, a $T(p)$ előtoló erő és annak $W(p)$ munkája a $p \in [0, Q(1 - \sin \theta)]$ tartományban:

$$T(p) = 2\sigma_1 b \left(\sqrt{p(2Q - p)} + \mu p \right), \quad (3)$$

$$W(p) = 2\sigma_1 b \left[Q^2 \arccos(1 - p/Q) - (Q - p) \sqrt{p(2Q - p)} \right] + \sigma_1 b \mu p^2, \quad (4)$$
$$p \in [0, Q(1 - \sin \theta)].$$

3. Behatolás 2: Az ékhatás belépése és kiteljesedése a törésig

Feltételezzük, hogy továbbra is jelentős a közet dW_e morzsolódása a behatolási zónában, a közet alakváltozása, a rugalmas energia felhalmozódása még nem jelentős, és a repedés még nem indult meg, $a = 0$. Továbbra is igaz, $de = dp$, $da = 0$, a repedés még mindig nem indul el, csak a feszültség nő (az energia a feszültség növekedésével tárolódik ugyan a közetben, de elhanyagolható, $U_h \sim 0$). Az ék felületén bekövetkező közetroncsolódást W_e -vel vesszük figyelembe. Jelentősen nő az $R(e)$ feszítőerő, amely a folyamat végén a repedés megindulását, $a > 0$, fogja kiváltani. Továbbra is jelentős a súrlódás:

$$dW = T(e)de = dW_e + dW_s. \quad (5)$$

A $T(p)$ előtolóerő a törés bekövetkezéséig, a hajlítási energia elhanyagolásával (1) szerint: $e = p$.

$$T(p) = F_1(\theta) + 2\sigma_1 b(\tan\theta + \mu)(p - p_1),$$

$$p_1 = Q(1 - \sin\theta), \quad (6)$$

ebből integrálással adódik az előtoló erő munkája:

$$W(p) = W(p_1) + F_1(\theta)(p - p_1) + \sigma_1 b(\tan\theta + \mu)(p - p_1)^2; \quad p \geq p_1, \quad (7)$$

ahol $F_1(\theta)$ az első (I) fázisban elért maximális előtolóerő, ahol $p = Q(1 - \sin\theta)$. A levezetések az [1] hivatkozás 2. és 3. fejezetében találhatók.

4. Törés és a repedés keletkezése, repedések keletkezése

Az általánosan kifejezett és idealizált energiamérleget a repedés megindulása után is a lejátszódó fizikai folyamatok szerint kell módosítani. A $G(e, a)$ ún. energiakioldási ráta bevezetésével Griffith vizsgálta repedések terjedésének energetikai feltételeit [4]. Ehhez vegyük a következő általános potenciálfüggvényt:

$$\Pi = W_e + U_h + W_s + 2b\Gamma_{\text{eff}}a - W, \quad (8)$$

ahol W a T előtolóerő mechanikai munkája az e előtolás mellett:

$$W(e, a) = \int_{\zeta=0}^e T(\zeta, a) d\zeta.$$

A repedés megindulásának és terjedésének feltétele, ha a rendszer által felszabadított energiacsökkenés fedezi a képződő új felület energiaszükségletét:

$$G(e, a) = -\frac{1}{b} \frac{\partial \Pi}{\partial a} \geq 2\Gamma, \quad (9)$$

mivel két felület keletkezik. A $G_e(e, a)$ energiakioldási ráta definíciója szerint rendezve kapjuk a repedés egyensúlyi egyenletét és terjedési feltételét:

$$G_e(e, a) = \frac{1}{b} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial a} \right)_e - \left(\frac{\partial U_h}{\partial a} \right)_e - \left(\frac{\partial W_e}{\partial a} \right)_e - \left(\frac{\partial W_s}{\partial a} \right)_e \right] \geq 2\Gamma_{\text{eff}}. \quad (10)$$

A (10) egyenlet egy általános megfogalmazása a jelenségnek, azonban a hasadási folyamat során változnak az egyes komponensek. Ez lehetőséget ad arra, hogy a folyamatot modellezhessük, jobb matematikai leírást találjunk.

$$\left(\frac{\partial W}{\partial a} \right)_e = \int_0^e \left(\frac{\partial T(\zeta, a)}{\partial a} \right)_e d\zeta. \quad (11)$$

A $(\partial \Pi / \partial e)_a = 0$ feltétel mellett:

$$T(e, a) = \left(\frac{\partial U_h}{\partial e} \right)_a - \left(\frac{\partial W_e}{\partial e} \right)_a - \left(\frac{\partial W_s}{\partial e} \right)_a. \quad (12)$$

Magyarázat: A Griffith-féle energiaalapú repedés-kritériumban az energiakioldási ráta definíciója $G = -(1/b)(\partial \Pi / \partial a)$, azonban a parciális deriváltat mindig a kísérlet/peremfeltétel által rögzített vezérlő vál-

tozó állandón tartása mellett kell képezni. Előtolás- (elmozdulás-) vezérelt esetben $e = \text{konstans}$, ezért a $T = T(a)$ terhelés alkalmazkodik, és $G_e = -(1/b) \cdot (\partial \Pi / \partial a)_e$. Erővezérelt esetben $T = \text{konstans}$, ezért az $e = e(a)$ előtolásváltozik, és $G_T = -(1/b) \cdot (\partial \Pi / \partial a)_T$. Ennek megfelelően a külső munkatag deriváltja is különbözik:

$$(\partial W / \partial a)_e = \int_0^e (\partial T / \partial a)_e d\zeta,$$

míg

$$(\partial W / \partial a)_T = T(\partial e / \partial a)_T.$$

Disszipatív tagok (W_e morzsolódás, W_s súrlódás) jelenlétében ez a különbségtétel nem formai, hanem a modell konzisztenciájának feltétele.

A tompa csücs és az ék felületén lokális hidrosztatikus képlékeny zóna alakul ki, ahol a repedés megindulásához, $\Gamma_{\text{init}} > \Gamma_{\text{eff}}$, nagyobb Γ_{init} energiára van szükség, mint annak Γ_{eff} stabil terjedéséhez. A repedés elindulása előtt a $T(e)$ előtolóerő addig nő, míg $G(e, a)_{\text{max}} = 2\Gamma_{\text{init}} > 2\Gamma_{\text{eff}}$ lesz a feltétel. A repedésindítási küszöb és a lokális feszültségkoncentráció erősen függ a szerszám Q tompaságától; ez az indítási erőszintet befolyásolja (nem a tisztán a felületek érintkezéséből adódó kezdeti feltétel). A rugalmas energia $\partial U_h / \partial a = 0$ itt még nem játszik szerepet, a $\partial W_s / \partial a$ súrlódás és a maradó $\partial W_e / \partial a$ alakváltozás mértékadó. Ezért a repedés kialakulása a (10) szerint határesetben, a következő feltétel teljesülésétől függ:

$$\left[\frac{\partial W}{\partial a} - \frac{\partial W_e}{\partial a} - \frac{\partial W_s}{\partial a} \right] \geq 2b\Gamma_{\text{init}}. \quad (13)$$

Az ékerő munkája a törésig a (7) egyenlet szerint $W - W_e - W_s \sigma_1 b(\tan\theta + \mu)e^2$, ahol a $Q = 0$ esetet vettük. Ekkor (13) egyszerűsíthető, ha figyelembe vesszük azt, hogy repedés még csak születőben van, azaz $a = e$: $2\sigma_1(\tan\theta + \mu)e = 2\Gamma_{\text{init}}$. Ekkor az előtolóerő éppen a maximumát éri el, W nem függ a repedésterjedéstől, a repedés méretével nem definiálható. Ekkor a repedéscsücsben kialakuló, az ék benyomulása hatására történő egyensúlyi helyzet megbillenése váltja ki a repedés indulást. Ez az $e_{\text{init}} = \Gamma_{\text{init}} / [\sigma_1(\tan\theta + \mu)]$ behatolás mellett valósul meg. Ekkor indul meg a repedés. Vegyük észre, hogy rideg köztekben nagy törőszilárdság σ_1 (!) esetén az e_{init} székszerűen kicsi, a törés kis behatolásnál létrejön: $T_{\text{init}} = 2b\Gamma_{\text{init}}$.

5. Repedés kialakulása és terjedése a törésig, azaz az anyag teljes leválásáig

A repedés terjedésének stabilitása a következő feltételek mellett alakul: az ékerő a stabil terjedési szakaszban platót ér el, és jó közelítéssel állandó értéket ($\hat{T}$) vesz fel. Ekkor jó közelítéssel a súrlódás játszik szerepet.

Amennyiben elhanyagolható a hajlítás következik:

$$\frac{\partial U_h}{\partial a} + \frac{\partial W_e}{\partial a} = 0,$$

$$\frac{\partial W}{\partial a} = 2b\Gamma_{\text{eff}} + \frac{\partial W_s}{\partial a}. \quad (14)$$

Mivel

$$W = \hat{T} \cdot e, \quad \frac{\partial W}{\partial a} = \hat{T} \frac{\partial e}{\partial a} = \frac{\hat{T}}{da/de},$$

a súrlódás és a maradó alakváltozás tagok elhagyásával (14)-ből az előtolóerő konzervatív értékét nyerjük: $\hat{T}_{\text{eff}} \approx 2b\Gamma_{\text{eff}}$. Első közelítésben tehát az előtolóerő a felületi energiák arányában alakul.

$$\frac{T_{\text{init}}}{\hat{T}_{\text{eff}}} \approx \frac{\Gamma_{\text{init}}}{\Gamma_{\text{eff}}}. \quad (15)$$

Ha egy előtolás-vezérelt rendszert feltételezünk a súrlódási munkavesztés: $W_s = \beta e(\hat{T})$, ahol $\beta = [1 + \tan\theta/\mu]^{-1}$. Az e hossz nem más, mint az ék relatív csúszása a hasadásban, amelyet az előtolás hosszával azonosíthatunk a hasítás során. Mindezt figyelembe véve (15) szerint:

$$\frac{\hat{T}}{\partial a/\partial e} = 2b\Gamma_{\text{eff}} + \frac{\beta}{\partial a/\partial e} \hat{T}. \quad (16)$$

Az egyenlet megoldható az előtolóerőre és a $\partial a/\partial e$ arányra kifejezve. Figyelembevéve, hogy fizikailag csak a $\partial a/\partial e \geq 1$ értékeknek van létjogosultságuk:

$$\frac{\partial a}{\partial e} = \frac{1-\beta}{2b\Gamma_{\text{eff}}} \hat{T}, \quad (17)$$

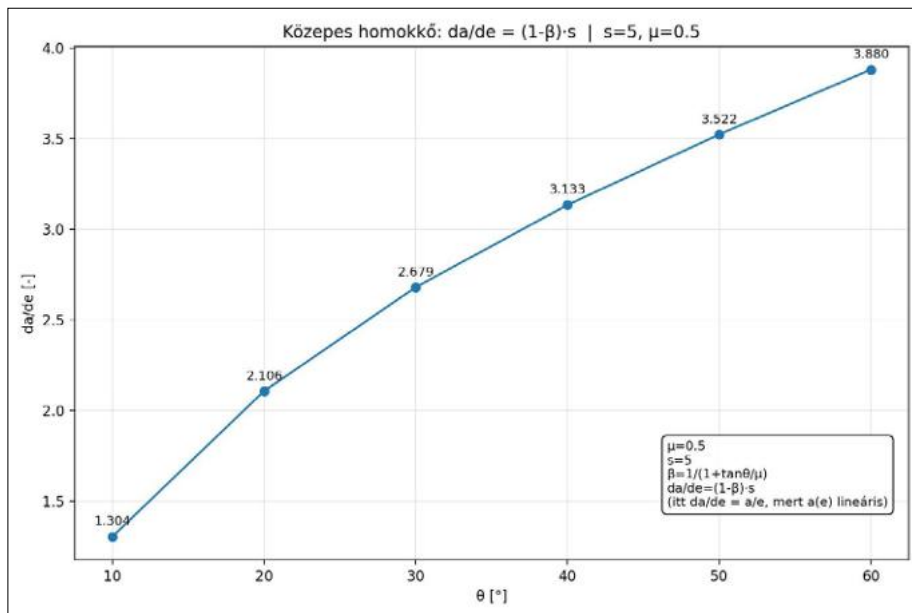
$$a(e) = \left[\frac{1-\beta}{2b\Gamma_{\text{eff}}} \hat{T} \right] e. \quad (18)$$

Látható az összefüggések alapján, ha a repedés hossza és az előtolás hosszához közelít, a μ súrlódás és a θ ékszög hatása kezd érvényre jutni. Viszont fordítva azt is látjuk, hogy nagy előtolóerők esetén a repedés dinamikáját egyre inkább a súrlódás és az ékszög határozza meg. Mit mondhatunk ez esetben az $a(e)$ függvényről? Mivel T konstans, da/de is az, amennyiben a többi paraméter független a -tól. A függvény lineáris, ahol $a = C \cdot e$, $C = f(\mu, \theta, b, \Gamma_{\text{eff}}, \hat{T})$ az iránytangens.

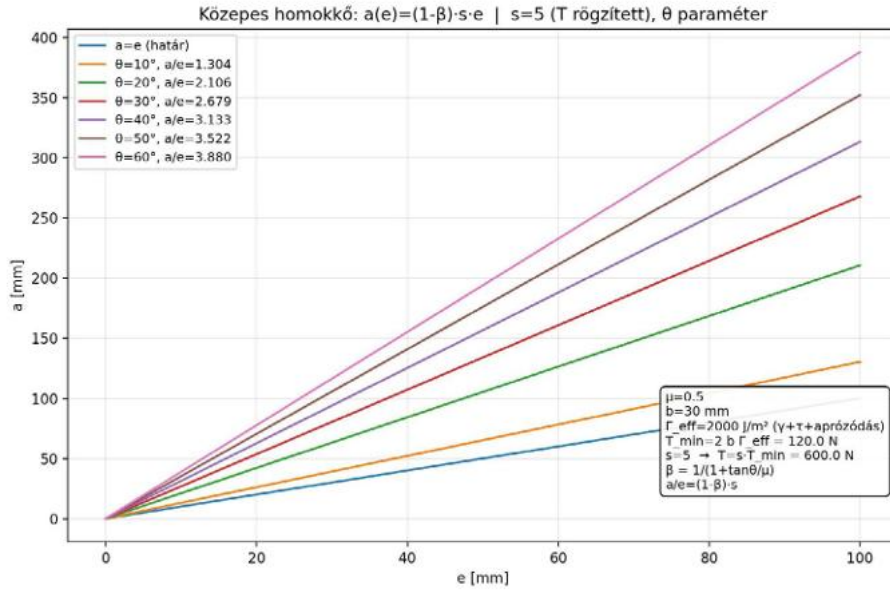
6. Nemlineáris közethasítási folyamatok

Minden, az NME-n végzett bányagépész ismeri a Bocsánczy János professzor által tanított, főleg szén gyalulásának témakörében alkalmazott jövesztési elméletét [5]. Az általa felállított elmélet is egy nemlineáris törésmélet, amely figyelembe veszi a főleg hajlításon alapuló alakváltozást és az azt lezáró törést. Igaz, az elmélete a törést kiváltó feszültségemelkedésre alapozta. Ezt az utat követi sok más szerző is [6, 7]. Mi itt csak egy apró lépéssel, az előző fejezetben alkalmazott egyenleteket kiegészítjük az alakváltozáshoz kötődő dU_h rugalmas energiatárolási taggal. Ez minden bizonyonnyal akkor válik hathatós eszközzé, ha az alakváltozási energia a folyamatban jelentőssé válik. Ehhez természetesen a közet rugalmassága alapvető feltétel. Ilyen közet jellemzően a kvarcit és a gránit. Az (1) általános energiamérleg alapján a repedés az elindulásának pillanatától integrális formában:

$$\int_{\zeta=0}^e T(\zeta) d\zeta = \int_{\eta=0}^a T_e(\eta) d\eta + \int_{\zeta=0}^e \beta T(\zeta) d\zeta + 2b \int_{\eta=0}^a \Gamma(\eta) d\eta.$$



Az $f = da/de$ differenciál ábrázolása homokkő esetére az ékszög függvényében



Az $a(e)$ függvény ábrázolása homokkő esetére az előtolás és az ékszög függvényében

Feltételek:

- Kizárólag az előtolóerő által végzett mechanikai munka fedezi a közethasítás energiaszükségletét, az egyértelműen a $T(\zeta)$ függvényből számítható.
- Az ék behatolásával morzsolódik a kőzet, és ennek az energiavesztesége irreverzibilis és arányos a repedés hosszával: $dW_e = cTda$, ahol c mérésekből meghatározandó tényező. Valójában ezt az energiaveszteséget a Γ értékében szokás figyelembe venni. Ekkor a felületek elválasztásának energiaszükséglete kiegészül a roncsolás terében bekövetkező szekunder őrlés energiaszükségletével. Ez nagyságrendekkel nagyobb, mint az elméleti érték.
- A mechanikai súrlódás a Coulomb-féle elmélet szerint számítható, az ék felülete és a kőzet a leváló forgács által összepréselődik és az így kialakult normálerő súrlódást vált ki. A súrlódási úthossz az ék előtolásával közel egyenlőnek vehető. A súrlódást a 3. fejezet szerinti módon vesszük figyelembe egy $\beta = [1 + \tan\theta/\mu]^{-1}$ tényezővel, ahol az ék hatása is figyelembe lett véve.
- A leváló kőzetforgács hajlításból eredő energia tárolása reverzibilis, azaz az energia a repedés előrehaladtával teljes mértékben a törési energia fedezésére fordítódik. A kőzetforgács ideálisan rugalmas, az ék által okozott M hajlítónyomaték terheli. A forgács vastagsága t , szélessége b , tehát $I = (bt^3)/12$. A forgács hajlított hossza a változik a repedés előrehaladtával, mind $T(e)$, $a(e)$ függvénykapcsolatok (mecha-

nikai munka) határozza meg a folyamatot. Az egyszerűség kedvéért a forgács végén ható koncentrált hajlítóerővel számolunk:

$$U_h = \int_{\eta=0}^a \frac{M(\eta)^2}{2EI} d\eta = \frac{1}{2} T\delta, \quad (19)$$

ahol δ a szabad vég lehajlása: $\delta = (Ta^3)/(3EI)$, tehát

$$U_h = \frac{1}{2} T\delta = \frac{T^2}{6EI} a^3. \quad (20)$$

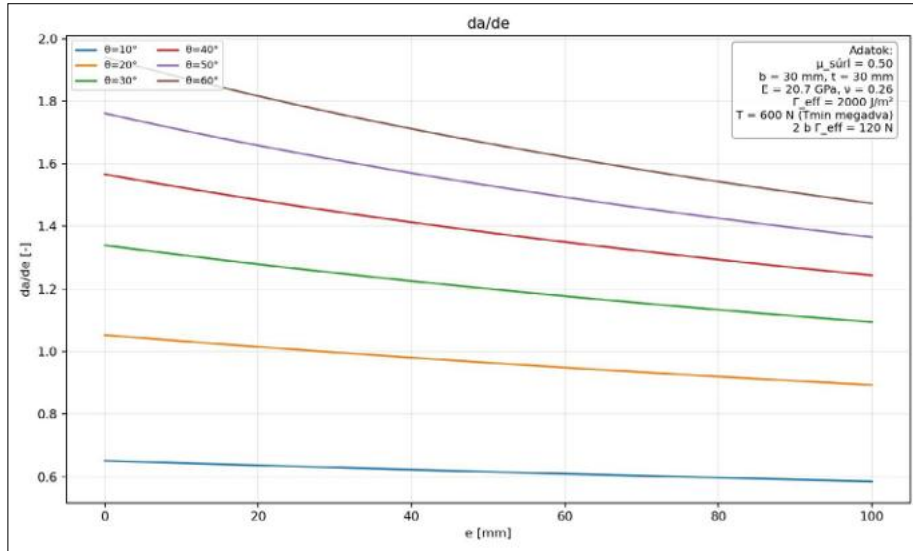
A Γ törési és őrlési energia és a bda elemi a törési felület fogalmát az 1. fejezetben már érintettük. A következőkben feltételezzük, hogy Γ a töréssel teljesen állandó. A maradék alakváltozásokat Γ értékében vesszük figyelembe: $W_e = 0$. A kőzet tökéletesen homogén közeg, és a szilárdsági jellemzők irányfüggetlenek. A (10) feltételt tekintjük. Ebben a fázisban a következő események történhetnek: az ék behatol, és hajlítja a forgácsot, de még nincs törés, ekkor a repedés hosszának hatása elhanyagolható. Ez megfelel a (14) feltételnek. A repedés megindul és terjed, de megakad a -nál és a forgács hajlik, majd eléri a rugalmasan tárolt energia azt a szintet, amely az repedés felületi törési energiáját fedezi:

$$\frac{\partial W}{\partial a} = \frac{\partial U_h}{\partial a} + \frac{\partial W_s}{\partial a} + 2b\Gamma_{\text{eff}}. \quad (21)$$

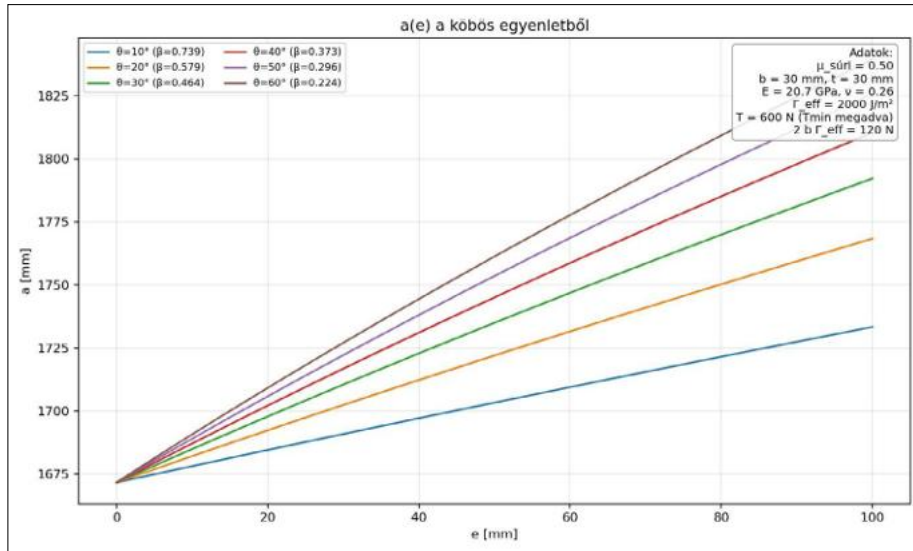
Ebből és (19), (20) alapján adódik:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial a} \left[\int_{\zeta=0}^e T(\zeta) d\zeta \right] &= \frac{\partial}{\partial a} \left(\frac{T^2}{6EI} a^3 \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial a} \left[\int_{\zeta=0}^e \beta T(\zeta) d\zeta \right] + 2b\Gamma_{\text{eff}}. \end{aligned} \quad (22)$$

Ezt rendezve kapjuk:



Az $f = da/de$ differenciál ábrázolása homokkő esetére az előtolás és az ékszög függvényében rugalmas energiátárolás esetére



Az $a(e)$ ábrázolása homokkő esetére az előtolás és az ékszög függvényében rugalmas energiátárolás esetére

$$\frac{da}{de} = \frac{(1-\beta)\hat{T}}{\frac{\hat{T}^2}{2EI}a^2 - 2b\Gamma_{\text{eff}}} \quad (23)$$

Az egyenlet megoldása az $a(e)$ függvény:

$$a^3 - \left(\frac{12b\Gamma_{\text{eff}}EI}{\hat{T}^2} \right) a - \left(\frac{6EI(1-\beta)}{\hat{T}} \right) e = 0. \quad (24)$$

7. A repedési pálya

7.1. A repedési pálya Sih-féle meghatározása

A repedés terjedésének leírása gazdag szakirodalmi anyaggal rendelkezik, ezek mindegyike a valós folyamatot és anyagmodellt egyszerűsítő elv szerinti idealizálásával jut el egy fizikai-matematikai leíráshoz.

Az ékkel történő közethatás szempontjából értékes megoldások azok, amelyek számszerűen a legjobban megközelítik a mérési eredményeket: A Sih-féle [8, 9] energiasűrűségi (energiagyűrű) elmélet a repedés-csúcsban fellépő lokális energiasűrűségre alapoz. Lényege az, hogy a repedés mindig abba az irányba terjed, amelyikben a helyi energiasűrűség $S(r, \beta) = (1/2) \cdot \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$, minimális r sugárral éri el a kritikus értéket. A minimális sugárkör egyenértékű azzal, hogy a repedés akkor nő, amikor a repedésnövekedési irányban a helyi energianövekedés (G sűrűség) maximális.

A kritérium a terjedési irányra:

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} = 0, \quad \frac{\partial^2 S(\beta)}{\partial^2 \beta} > 0,$$

ahol

$$S(r, \theta) = \frac{1}{2} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}, \sigma_{kk} = \sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33},$$

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1+\nu}{E} \sigma_{ij} - \frac{\nu}{E} \sigma_{kk} \delta_{ij},$$

és δ_{ij} a Kronecker-delta, egységmátrix, amely indexek egyezésénél $i = j$, $\delta_{ij} = 1$.

Erőssége: a repedés mindenkor lokális irányát, így a repedésgörbe alakját is meghatározza:

$$S(r, \beta) = \frac{1}{2} \left[\frac{1+\nu}{E} \sigma_{ij} \sigma_{ij} - \frac{\nu}{E} \sigma_{kk} \sigma_{kk} \right].$$

A Sih-elmélet szerint a repedés abba az irányba terjed, ahol a $S(r, \beta) = S_c$ kritikus energiasűrűséget elérő gyűrű r_c sugara a legkisebb. Ebből levezethető, hogy ennek a geometriai feltételnek $r(\beta) = r_0 e^{k\beta}$ logaritmikus spirál görbe felel meg. Korlátok: szinguláris repedéscsúcsot feltételez. A repedéscsúcs közelében ez szingulárisan nő ($\sigma_n \propto 1/\sqrt{r}$). A repedésgörbe csak lokális differenciál formában adódik.

7.2. A repedési pálya Griffith-féle elmélet szerinti meghatározásának egy lehetséges alkalmazása

Ékes hasítás közetekben tapasztalatok szerint kiválóan használható módszer [10–12]. Az előzőekben az ék által kiváltott anyagroncsolás, a repedés megindulásának körülményeit, végül a repedésterjedés Griffith-féle elméletre alapozott leírását végeztem el. A repedés-pálya számítását egy konkrét feladaton mutatom be. Alkalmazzuk a [8] elméletet a [2]-ben leírt Evans-féle feladatra úgy, hogy a törésgörbét meghatározzuk. A törésgörbe az $x = p_2$, $y = 0$ pontban kezdődik, ahol

$$p_2 \approx \frac{t}{\sqrt{3}} \cos \theta \sqrt{\frac{\sigma_{2\max}}{\sigma_{1\max}}}, \quad (25)$$

ahol $\sigma_{2\max}$ a repedésre merőleges húzószilárdsági, $\sigma_{1\max}$ a nyomószilárdsági küszöb. A repedés lokális iránya a maximum „hoop stress” kritériummal: $\partial \sigma_{\theta\theta} / \partial \theta = 0$, $\sigma_{\theta\theta} = \max$. megadható. Vegyes módus esetén számolunk a

$$K_I = \sigma \sqrt{\pi a} D_I(x, y), \quad K_{II} = \tau \sqrt{\pi a} D_{II}(x, y) \quad (26)$$

feszültségintenzitási faktorokkal [9, 10]. Az erőhatás a (3), (6), a mechanikai munka (4), (7) függvények írják le [1]. A ψ faktor a móduskeveredést írja le, ahol az ékhatás és a kötőmb széle közelsége miatti kevert feszültségállapot áll fenn. Mivel csavaró igénybevétel kizárt (III), így kétmódusú a terhelés: „nyitó” és „nyíró” mód érvényesül a repedés frontján. A p_2 utáni folyamat maga a terjedő repedés a forgács leválásáig. Ekkor a 4. fejezetben közölt módszer szerint járunk el, az itt ismertetett eljárás szerint (a levezetést itt nem közlöm). A feszültségintenzitási állandókra áll:

$$\psi(x, y) = \frac{K_{II}(x, y)}{K_I(x, y)}. \quad (27)$$

A repedés tovaterjedésének ϕ irányszöge az x tengelyhez képest, annak sorba fejtése után (az első két tagot vettem):

$$\phi = 2 \tan^{-1} \left[\frac{1 \pm \sqrt{1 + 8\psi}}{4\psi} \right] \approx 2\psi - \frac{14}{3} \psi^3 + \frac{102}{5} \psi^5. \quad (28)$$

Ez minden pontban megfelel a repedésgörbe iránytangensének, ha a repedésgörbe a szabad felületnek tart:

$$\frac{dy}{dx} = 2\psi(x, y) - \frac{14}{3} \psi^3 + \frac{102}{5} \psi^5. \quad (29)$$

A görbe az A ($x = p_2$, $y = 0$) pontban indul, és a B ($x = p_2 + l$, t) pontban ér ki a szabad felületre. Az A pontban érinti az x tengelyt, $dy/dx = y' = 0$. A ψ függvény egy közelítése a repedéscsúcsra ható erőter eloszlása alapján, amit az ékerők (x, y) rendszerben értelmezett módusait átviszi a $(\zeta, \eta)^*$ rendszerbe. A (ζ, η) rendszer lokális, a repedésfront pontjához kötött, és a ζ tengely a repedésgörbe $y(x)$ érintője. A transzformáció:

$$\begin{bmatrix} T^* \\ R^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} T \\ R \end{bmatrix}. \quad (30)$$

Vezessük be a repedés kezdőpontjához kötött $k(\mu, \theta) = T/R = (\mu + \tan \theta)/(1 - \mu \tan \theta)$ mechanikai áttételt leíró faktort, ahol R a (repedésre) normál (repedést szétnyitó), T az előtolóerő (repedést nyírással terhelő). Így

$$k^*(\zeta, \eta) = \frac{k + y'}{ky' + 1} \cdot \frac{\mu + \tan \theta}{1 - \mu \tan \theta}.$$

A $\psi(x, y)$ függvény leírásához szükség van még a $D(x, y)$ függvényekre az (I, II) módusokhoz. A megoldást a következő alakban keressük:

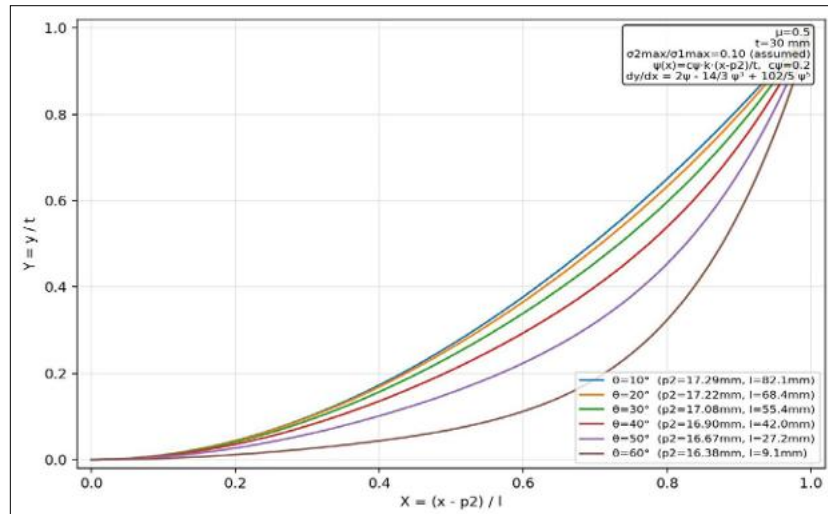
$$y' = F \left(\frac{k + y'}{1 - ky'} \cdot \frac{D_{II}(x, y)}{D_I(x, y)} \right). \quad (31)$$

Az eredmények természetesen csak homogén és izotrop közetre alkalmazhatóak. Az egyenlet megoldása ezúton közelítő függvénnyel történik. A $D_{II}(x, y)/D_I(x, y)$ függvény ismerete itt, amin áll vagy bukik a számítás.

8. Diagramok homokkő hasításának esetére

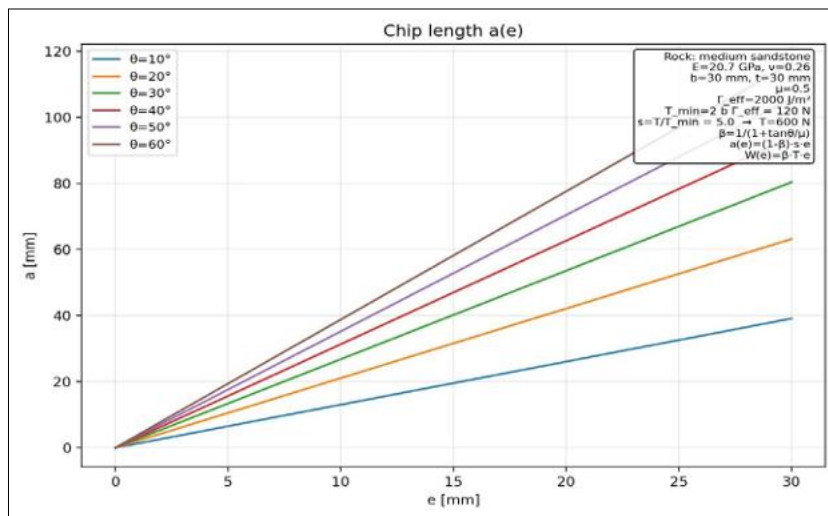
Az Evans-féle megközelítés szerinti eredmények: $D_{II}/D_I \approx c_\psi (x - p_2)/t$, a k tényezővel így $\psi(x, y) = k(\mu, \theta) c_\psi (x - p_2)/t$. A megoldás (25), (31) szerint $(dy/dx) \cdot p_2 = 0$:

8.1. Repedéspályák az ékszög függvényében



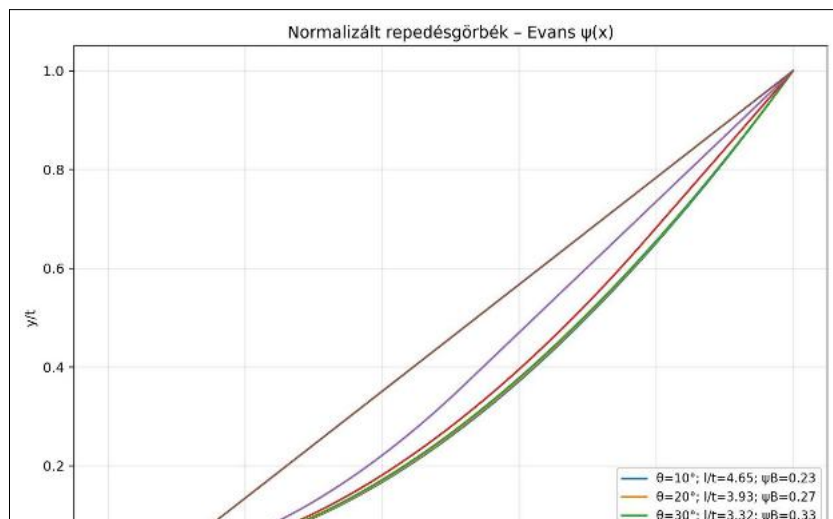
Repedéspályák az ékszög függvényében

8.2. A repedés hossza és az előtolás függvénykapcsolata $a(e)$ az ékszög mint paraméter



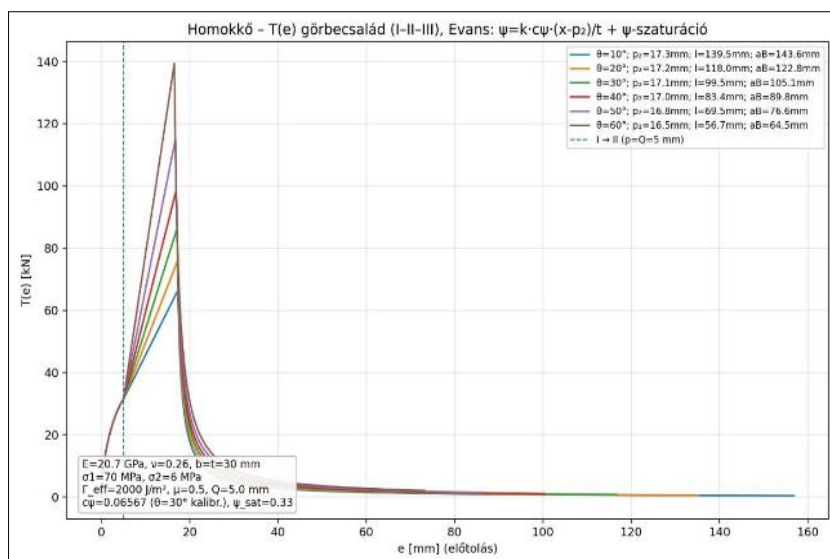
A repedés hossza és az előtolás

8.3. Az eredmények a teljes hasítási folyamatra: repedéspályák



Repedéspályák

8.4. Az eredmények a teljes hasítási folyamatra: Előtolóerő $T(e)$



Előtolóerő $T(e)$

Irodalom

- [1] Omaszta I. (2025): Kőzetek hasításának fizikai folyamatairól. Bányászati és Kohászati Lapok, 158(1), 46–53. <https://doi.org/10.63457/BKL.158.2025.1.5>
- [2] Omaszta I. (2024): Gondolatok Evans közethasítási modelljéről. Bányászati és Kohászati Lapok, 157(2), 19–24. Elérés forrás <https://ojs.mtak.hu/index.php/bkl/article/view/17106>
- [3] Linsbauer H. N., Tschegg E. K. (1986): Fracture energy determination of concrete with wedge splitting test. Engineering Fracture Mechanics, 25(5–6), 707–715.
- [4] Griffith A. A. (1921): The phenomena of rupture and flow in solids. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, 221, 163–198. <https://doi.org/10.1098/rsta.1921.0006>
- [5] Bocsányi J. (1959): Vágathajtó és fejtőgépek vágófejeinek energetikai és forgácsolási kérdései. Kandidátusi értekezés. Magyar Tudományos Akadémia, Budapest.
- [6] Evans A. A., Pomeroy C. D. (1966): The Strength, Fracture and Workability of Coal. Pergamon (Alapmű, sok későbbi bekezdés innen származtatott.)
- [7] Nishimatsu Y. (1972): The mechanics of rock cutting. Int. J. Rock Mech. Mining Sci., 9, 261–270. (A „crushed zone + chip” bontás és erőösszetevők.) [https://doi.org/10.1016/0148-9062\(72\)90027-7](https://doi.org/10.1016/0148-9062(72)90027-7)
- [8] Sih G. C. (1974): Strain-energy-density factor applied to mixed mode crack problems. International Journal of Fracture, 10, 305–321. <https://doi.org/10.1007/BF00035493>
- [9] Erdogan F., Sih G. C. (1963): On the crack extension in plates under plane loading and transverse shear. J. Basic Eng., 85, 519–525. <https://doi.org/10.1115/1.3656897>
- [10] Íréin G. R. (1957): Annales of stresses and strain near the end of a crack traversing a plate. Journal of Applied Mechanics, 24(3), 361–364. <https://doi.org/10.1115/1.4011547>
- [11] Roxborough F. F. (1973): Cutting rocks with picks. The Mining Engineer (picks vágás, kísérleti háttér)
- [12] Kou Shaoquan, Tan Xiangchun, Lindqvist P.-A. (1997): Modelling of excavation depth and fractures in rock caused by tool indentation. Luleå University of Technology, R-99-11.



Az ESTPHAD koncepció*

III. rész: Ternér eutektikus típusú egyensúlyi fázisdiagram

KÖRÖSY GERGELY¹, ROÓSZ ANDRÁS^{1,2,@} , VÉGH ÁDÁM¹, MENDE TAMÁS¹ 

¹Fémteni, Képlékenyalakítási és Nanotechnológiai Intézet, Miskolci Egyetem Anyag- és Vegyészmérnöki Kar,
3515 Miskolc, Egyetemváros

²HUN-REN TKI, Anyagtudományi Kutatócsoport, 3515 Miskolc, Egyetemváros

@E-mail: andras.roosz@uni-miskolc.hu

Másodközlés – Eredeti közlemény:

The ESTPHAD Concept: An Optimised Set of Simplified Equations to Estimate the Equilibrium Liquidus and Solidus Temperatures, Partition Ratios and Liquidus Slopes for Quick Access to Equilibrium Data in Solidification Software Part III: Ternary Eutectic-Type Equilibrium Phase Diagram

Gergely Körösy, András Roósz, Ádám Végh, Tamás Mende

Metals 2026, 16(1), 80.

<https://doi.org/10.3390/met16010080>

A likvidusz- és szolidusz-hőmérsékleteket, a binér eutektikumok megszilárdulásának kezdeti hőmérsékletét, valamint a szilárd oldat megoszlási hányadosait a ternér eutektikus típusú Al-Si-Cu ötvözetrendszer Al-sarkán a termodinamikailag megalapozott ESTPHAD módszerrel számoltuk ki. Kimutattuk, hogy ezek az adatok kiszámíthatók a két binér egyensúlyi fázisdiagram likvidusz- és szoliduszadataiból (elsőrendű becslés), a két binér fázisdiagram és az eutektikus vályúk adataiból (másodrendű becslés), valamint a két binér fázisdiagram, az eutektikus vályúk, valamint egy (harmadrendű becslés) és sok (negyedrendű becslés) likvidusz és szolidusz izoterma adataiból növekvő pontossággal. A számításokhoz egy Thermo-Calc szoftverrel (4.1.0.4995 verzió) működött adatbázist használtunk.

Kulcsszavak: likvidusz- és szolidusz-hőmérséklet, megoszlási hányados, binér és ternér eutektikus típusú egyensúlyi fázisdiagram, Al-Cu-Si ötvözetrendszer

* ESTPHAD (ESTimation of the PHase Diagram) koncepció: Egyszerűsített egyenletek optimalizált rendszere az egyensúlyi likvidusz- és a szolidusz-hőmérsékletnek, a megoszlási hányadosoknak és a likvidusz lejtésének becslésére a kristályosodási szoftver egyensúlyi adatainak gyors meghatározásához

1. Bevezetés

Az anyagtudománnyal (fémötvözetekkel, kerámiákkal, sókkal, polimerekkel vagy szerves vegyületekkel) foglalkozó kutatók számára az egyik legfontosabb információ, annak ismerete, hogy mely fázisok vannak jelen egy anyagrendszerben az állapothatározók (hőmérséklet, nyomás, koncentrációk) adott értékeinél. Ezt az információt az úgynevezett egyensúlyi fázisdiagramok (EPD) tartalmazzák.

A fázisok termodinamikai szempontból akkor vannak egyensúlyban, amikor minden fázis minden alkotójára nézve igaz, hogy a kémiai potenciálok (μ , parciális moláris szabadenergiák) egyenlők. Az egyensúly utalhat a fázisok teljes tömegére, vagy csak a fázisok határfelületére. Az utóbbi alapján felépített diagramok a korlátozott egyensúlyi fázisdiagramok [1, 2].

Az EPD-ben azok a területek (binér EPD-k) vagy térfogati részek (ternér, kvaternér stb., EPD-k), amelyekben különböző fázisok találhatók, vonalakkal, (binér EPD-k), valamint két- vagy többdimenziós felületekkel (ternér, kvaternér stb., EPD-k) vannak elválasztva. Vonalak vagy felületek metszésénél a fázisok száma eggyel nő vagy csökken egy fázisátalakulás miatt. Ezek a fázisátalakulások rendkívül fontosak különböző ipari technológiákban (pl. forma- és folyamatos öntés, hőkezelés).

Az EPD-k kísérleti meghatározása a 19. század második felében kezdődött, amikor az azok meghatározásához szükséges technikai feltételek (pl. termopárok hőmérsékletméréshez, minta-előkészítő technológiák és megfelelő fénymikroszkópok a mikroszerkezetek elemzéséhez) létrejöttek. Az igazi fellendülést a differenciál termikus analízis (DTA, DSC) fejlődése, a röntgendiffrakciós és az elektronmikroszkópos technikák (TEM, SEM) széles körű elterjedése eredményezte.

2. Az EPD-k számítása

Az EPD-k alapján meghatározható az egymással egyensúlyban lévő fázisok koncentrációja, a fázisok tömegaránya, valamint a fázisátalakulás kezdetének és végének hőmérséklete.

Amíg az EPD-ket csak a technológiai tervezésben igénybe vett átalakulási hőmérsékletek meghatározására használták (például likvidusz- és szolidusz-hőmérsékletek az öntési gyakorlatban, az acélok hőkezelésénél az $\alpha \leftrightarrow \gamma$ átalakulás kezdő (major) és befejező (minor) hőmérsékletei), elegendő volt a szükséges adatok meghatározása a grafikusan létező EPD-kból. Az ilyen módon megállapított adatok azonban nem voltak túl pontosak, a hiba akár ± 10 °C-t is elérhetett, ami bizonytalanná tehetette a technológiák tervezését. Az átalakulási folyamatok elméletének (pl. kristályosodás és szilárd fázisú átalakulások) fejlődése lehe-

tővé tette azok számítógépes szimulációját, amihez pedig szükséges az adatok számításal történő meghatározása.

A fázisdiagramok számítási eljárásának (CALPHAD) megjelenéséig [3] és az ezen alapuló szoftverek (Thermo-Calc, FactSage) bevezetéséig az EPD-k csak a mérési eredmények feldolgozásából készült diagramok formájában voltak elérhetők. A kristályosodás és szilárd fázisátalakulások számításainál az átalakulások kezdeti és vég-hőmérsékleteit (likvidusz, szolidusz, major, minor hőmérsékletek) a koncentráció függvényében egyenesekkel (binér EPD-k [4, 5]) és síkfelületekkel (ternér, kvaternér EPD-k) vagy polinomokkal közelítették. Az átalakulási hőmérsékletek és a megoszlási hányadosok számításához szolgáló regressziós függvények egyszerű polinomok voltak, amelyek nem rendelkeztek termodinamikai háttérrel alumíniumötvözetek [6–9], acélok [10–12], kerámiák [13] és sók [14] esetében.

2.1. A CALPHAD módszer

A CALPHAD módszer alapja, hogy a fázisdiagramban előforduló fázisok szabadenergia G függvényei a hőmérséklet és a koncentrációk függvényében ismertek [15–18].

$$\begin{aligned} G^l &= G_A^l X_A + G_B^l X_B + X_A^l X_B^l \Omega \\ &\quad + RT \left(X_A^l \ln X_A^l + X_B^l \ln X_B^l \right) \\ G^s &= G_A^s X_A^s + G_B^s X_B^s + X_A^s X_B^s \Omega \\ &\quad + RT \left(X_A^s \ln X_A^s + X_B^s \ln X_B^s \right) \end{aligned} \quad (1)$$

A tiszta elemek szabadenergia-hőmérséklet függvényei mérésekből ismertek, de az elemek kölcsönhatását leíró Ω nem. A G függvények deriválásával kiszámíthatóak a fázisok parciális moláris szabad energiafüggvényei az alábbiak szerint:

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

$$\mu_A^s = G_A^s + RT \ln X_A^s + X_B^s \Omega^s$$

és

$$\begin{aligned} G_B^l + RT \ln X_B^l + X_A^l \Omega^l \\ = G_B^s + RT \ln X_B^s + X_A^s \Omega^s. \end{aligned} \quad (3)$$

A fent említett Gibbs-feltétel szerint a parciális moláris szabad energiáknak egyenlőnek kell lenniük:

$$\begin{aligned} G_A^l + RT \ln X_A^l + X_B^l \Omega^l \\ = G_A^s + RT \ln X_A^s + X_B^s \Omega^s \end{aligned} \quad (4)$$

és

$$\begin{aligned} G_B^l + RT \ln X_B^l + X_A^l \Omega^l \\ = G_B^s + RT \ln X_B^s + X_A^s \Omega^s. \end{aligned} \quad (5)$$

Három vagy több komponensű rendszerek esetében az egyenletek természetesen jelentősen bonyolultabbak.

A G_A^l , G_A^s , G_B^l , G_B^s , értékei a hőmérséklet függvényében ismertek. Az Ω függvények hőmérséklettől való függését iterációval lehet meghatározni a mérésből származó EPD-adatok alapján. Ezek ismeretében kiszámíthatók az egymással egyensúlyt tartó fázisok (pl. olvadék és szilárd) koncentrációi adott hőmérsékleten. A fentiekből következik, hogy a CALPHAD módszer is csak akkor vezet megbízható eredményekhez, ha a méréseken alapuló EPD ismert. Egy átalakulási folyamat szimulációja során minden lépésben meghatározzák a fázisok koncentrációját egy CALPHAD típusú szoftverrel. Néhány legújabb munka szerzői a termodinamikai adatok CALPHAD típusú számítását használták a kristályosodás során kialakuló makrodúsulás [19, 20], mikrodúsulás [21], a keverékszóna [22], valamint a szilárd fázisú átalakulás [23] szimulációjánál. Több szerző megállapította, hogy ez a módszer nem túl hatékony, mivel különösen időigényes három- vagy többkomponensű ötvözeteknél, ahol a CALPHAD típusú számításokhoz szükséges idő hosszú, és minden véges elem koncentrációját többször kell újra számolni egyetlen időlépésen belül [23–26]. Két módszert fejlesztettek ki a probléma megoldására. Mindkét módszer első lépése az, hogy CALPHAD-alapú szoftverrel készítenek hőmérséklet-koncentrációs térképet. Az ún. tábla módszer esetében [27–29] az adott koncentrációhoz legközelebb álló két (binér rendszer) vagy négy (ternér rendszer) koncentrációhoz tartozó hőmérsékletet megkeresik, majd ezek között meghatározzák az adott koncentrációhoz tartozó hőmérsékletet. A másik módszer esetében regresszióval meghatározzák egy $T(X_B, X_C, \dots)$ polinom állandóit, amely polinommal ezt követően kiszámítható az adott koncentrációhoz tartozó hőmérséklet. Ezeknek a polinomoknak azonban nincs termodinamikai alapja [30–33].

2.2. Az ESTHAD módszer

A két korábbi cikkben bemutatott az ESTPHAD módszer alkalmazását Si-Ge izomorf és Al-Si, Al-Mg eutektikus típusú binér [34], illetve Ag-Au-Pd izomorf ternér [35] EPD-k esetében. A gyakorlatilag használt alumíniumötvözetek többsége eutektikus típusú (pl. Al-Mg-Si, Al-Mg-Cu, Al-Mg-Zn, Al-Cu-Mg, Al-Mn-Si, Al-Mn-Fe). Ebben a cikkben az ESTPHAD módszer használhatóságát az eutektikus Al-Si-Cu ötvözetrendszernek a gyakorlatban használt, az Al-sarokhoz közeli koncentráció tartománya esetén mutatjuk be.

A CALPHAD módszer termodinamikai alapja megegyezik a ESTHAD módszerével, azzal a különbséggel, hogy az elemek közötti kölcsönhatást nem vesszük figyelembe a szabadenergia-függvények felírásakor. A függvények levezetésénél a cél nem az volt, hogy azokkal közvetlenül kiszámíthatók legyenek az egymással egyensúlyban lévő fázisok koncent-

rációi, hanem „csak” az EPD-k görbéinek (binér rendszer) vagy felületeinek (ternér rendszerek) leírására szolgáló $T(X_B)$ vagy $T(X_B, X_C)$ függvények alakjának a meghatározása, amelyek alkalmasak az átalakulás kezdő- és véghőmérsékletének kiszámítására adott koncentrációknál. A függvények állandóit mért, a diagramok digitalizálásából vagy CALPHAD típusú számításokból származó adatokból lehet meghatározni, nagyon hasonlóan a CALPHAD típusú számításokhoz, amelyeknél a szabadenergia Ω függvényeinek állandóit határozzák meg a mért adatokból iterációval.

A ternér Ag-Au-Pd rendszer esetében használt egyenletek felépítésének részletei a [35]-ben láthatók. Ebben a cikkben bemutatjuk azokat az egyenleteket, amelyeket a likvidusz- (T_L) és a szolidusz- (T_s) hőmérsékletek, a binér eutektikum kristályosodás kezdő hőmérsékletének (T_{BE}), a likvidusz (M) lejtéseinek, valamint a megoszlási hányadosoknak (k) a számításához használjuk.

A cikk célja – azon túl, hogy bemutatja az Al-Si-Cu ternér egyensúlyi fázisdiagram Al-sarkánál lévő likvidusz- és szoliduszfelületek számítását az ESTPHAD-módszerrel – megmutatni, hogy korlátozott pontosságú információkat lehet szerezni a ternérrendszer likvidusz- és szolidusz-hőmérsékletéről, valamint a megoszlási hányadosokról, még akkor is, ha csak a ternérrendszert alkotó binérrendszerek és a ternérrendszernek csak bizonyos elemei ismertek (például az eutektikus vályúk adatai, néhány likvidusz- és szolidusz-hőmérsékleti adat). További cél volt annak bemutatása, hogy a számítás pontossága hogyan függ a ternérrendszer likvidusz- és szolidusz-hőmérsékleteinek rendelkezésre álló adataitól.

2.2.1. A likvidusz- (T_L) és szolidusz- (T_s) hőmérsékletek számítása

A T_L és T_s függvények termodinamikai levezetését a [35]-ben bemutatottuk:

$$T_L(X_{Si}^l, X_{Cu}^l) = T_{Al} / \left[F_{AlSi}^l(X_{Si}^l) + F_{AlCu}^l(X_{Cu}^l) + \Delta F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l) + 1 \right], \quad (6)$$

$$F_{AlSi}^l(X_{Si}^l) = A_{AlSi}^l(1,0)X_{Si}^l + A_{AlSi}^l(2,0)(X_{Si}^l)^2 + A_{AlSi}^l(3,0)(X_{Si}^l)^3 + \dots \quad (7)$$

$$F_{AlCu}^l(X_{Cu}^l) = A_{AlCu}^l(0,1)X_{Cu}^l + A_{AlCu}^l(0,2)(X_{Cu}^l)^2 + A_{AlCu}^l(0,3)(X_{Cu}^l)^3 + \dots \quad (8)$$

$$\Delta F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l) = A_{AlSiCu}^l(1,1)X_{Si}^l X_{Cu}^l + A_{AlSiCu}^l(1,2)X_{Si}^l (X_{Cu}^l)^2 + A_{AlSiCu}^l(2,1)(X_{Si}^l)^2 X_{Cu}^l + \dots \quad (9)$$

$$T_s(X_{Si}^s, X_{Cu}^s) = T_{Al} / \left[F_{AlSi}^s(X_{Si}^s) + F_{AlCu}^s(X_{Cu}^s) + \Delta F_{AlSiCu}^s(X_{Si}^s, X_{Cu}^s) + 1 \right], \quad (10)$$

ahol:

$$F_{AlSi}^s(X_{Si}^s) = A_{AlSi}^s(1,0)X_{Si}^s + A_{AlSi}^s(2,0)(X_{Si}^s)^2 + A_{AlSi}^s(3,0)(X_{Si}^s)^3 + \dots, \quad (11)$$

$$F_{AlCu}^s(X_{Cu}^s) = A_{AlCu}^s(0,1)X_{Cu}^s + A_{AlCu}^s(0,2)(X_{Cu}^s)^2 + A_{AlCu}^s(0,3)(X_{Cu}^s)^3 + \dots, \quad (12)$$

$$\Delta F_{AlSiCu}^s(X_{Si}^s, X_{Cu}^s) = A_{AlSiCu}^s(1,1)X_{Si}^s X_{Cu}^s + A_{AlSiCu}^s(1,2)X_{Si}^s (X_{Cu}^s)^2 + A_{AlSiCu}^s(2,1)(X_{Si}^s)^2 X_{Cu}^s + \dots \quad (13)$$

2.2.2. A binér eutektikum kristályosodás T_{BE} kezdő hőmérsékletének számítása

Ha az ötvözet koncentrációja nagyobb, mint a szilárd oldat maximális oldhatósága, a szilárd oldat kristályosodását binér, majd ternér eutektikum kristályosodása követi. A binér eutektikum kristályosodása a T_{BE} kezdő hőmérséklettől a ternér eutektikum T_{TE} hőmérsékletéig tart. Kétféle binér eutektikum kristályosodhat a koncentrációtól függően: $\alpha + Si$ vagy $\alpha + Al_2Cu$.

Ezekben az esetekben a megoszlási hányadosok (és így a konódák) ismertek mind a kísérletileg meghatározott (diagramként ismert), mind a CALPHAD típusú szoftverrel kiszámított TEPD-k esetében. A konódák alkotják a binér eutektikum kristályosodásának kezdetét jelző felületet. Az elmélet szerint a konódák csak akkor találkoznak a sarokpontnál, ha a kristályosodó fázis tiszta elem (ez esetben tiszta Al). Ebben az esetben definiálható a konódák meredeksége (M_{BE}), amely egyenlő X_{Si}^l/X_{Cu}^l vagy X_{Cu}^l/X_{Si}^l értékkel. Ezeket ismerve meghatározható a $T_{BE}(M_{BE})$ függvény. Az ötvözet X_{Si}^l/X_{Cu}^l vagy X_{Cu}^l/X_{Si}^l értékének a behelyettesítése a függvénybe adja a binér eutektikum kristályosodásának kezdeti hőmérsékletét. Ha a konódák nem találkoznak a sarokpontnál, közelítésként használható az átlagos meredekség:

$$M_{BE}^{aver} = (X_{Si}^l/X_{Cu}^l + X_{Si}^s/X_{Cu}^s)/2$$

vagy

$$M_{BE}^{aver} = (X_{Cu}^l/X_{Si}^l + X_{Cu}^s/X_{Si}^s)/2$$

az eutektikum típusától függően. Ha X_{Si}^l/X_{Cu}^l vagy $X_{Si}^l/X_{Cu}^l \approx 0,01$ a hiba elfogadható.

2.2.3. A likviduszfelszín lejtéseinek számítása

A likviduszfelület lejtései számíthatók a likvidusz-hőmérséklet függvényének ($T_L(X_{Si}^l, X_{Cu}^l)$) parciális

deriváltjaként:

$$M_{AlSiCu}^{Si} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l = \text{const.}) = \frac{\partial T_L}{\partial X_{Si}^l} = \frac{T_{Al} \frac{\partial (1 + F_{AlSi}^l(X_{Si}^l) + \Delta F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l))}{\partial X_{Si}^l}}{(1 + F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l))^2} \quad (14)$$

$$= \frac{T_{Al} S_{AlSiCu}^{Si} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l = \text{const.})}{(1 + F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l))^2},$$

$$M_{AlSiCu}^{Si} (X_{Si}^l = \text{const.}, X_{Cu}^l) = \frac{\partial T_L}{\partial X_{Cu}^l} = \frac{T_{Al} \frac{\partial (1 + F_{AlCu}^l(X_{Cu}^l) + \Delta F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l))}{\partial X_{Cu}^l}}{(1 + F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l))^2} \quad (15)$$

$$= \frac{T_{Al} S_{AlSiCu}^{Cu} (X_{Si}^l = \text{const.}, X_{Cu}^l)}{(1 + F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l))^2}.$$

2.2.4. A megoszlási hányadosok (k_{Si}^{AlSiCu} és k_{Cu}^{AlSiCu})

Ha az egyenletek állandóit a CALPHAD típusú számítással kapott adatok alapján számítjuk ki, akkor az előző cikkben alkalmazott közelítő módszer nem szükséges a megoszlási hányadosok kiszámításához, mivel az egyensúlyban levő olvadék- és szilárd fázisok koncentrációja ismert. Az egyenletek levezetését [34, 35]-ben részletesen ismertettük.

$$\ln k_{Si}^{AlSiCu} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l) = \ln k_{Si}^{AlSi} (X_{Si}^l) + \Delta \ln k_{Si}^{AlSiCu} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l), \quad (16)$$

$$k_{Si}^{AlSiCu} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l) = \exp(\ln k_{Si}^{AlSi} (X_{Si}^l) + \Delta \ln k_{Si}^{AlSiCu} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l)), \quad (17)$$

$$\ln k_{Cu}^{AlSiCu} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l) = \ln k_{Cu}^{AlCu} (X_{Cu}^l) + \Delta \ln k_{Cu}^{AlSiCu} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l), \quad (18)$$

$$k_{Cu}^{AlSiCu} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l) = \exp(\ln k_{Cu}^{AlCu} (X_{Cu}^l) + \Delta \ln k_{Cu}^{AlSiCu} (X_{Si}^l, X_{Cu}^l)), \quad (19)$$

ahol:

$$\ln k_{Si}^{AlSi} (X_{Si}^l) = B_{AlSi}^l(0,0) + B_{AlSi}^l(1,0)(X_{Si}^l)^1 + B_{AlSi}^l(2,0)(X_{Si}^l)^2 + B_{AlSi}^l(3,0)(X_{Si}^l)^3 + \dots, \quad (20)$$

$$\ln k_{Cu}^{AlCu} (X_{Cu}^l) = B_{AlCu}^l(0,0) + B_{AlCu}^l(1,0)(X_{Cu}^l)^1 + B_{AlCu}^l(2,0)(X_{Cu}^l)^2 + B_{AlCu}^l(3,0)(X_{Cu}^l)^3 + \dots, \quad (21)$$

és

$$\begin{aligned}\Delta \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) &= B_{\text{AlSiCu}}^l(0,1)(X_{\text{Si}}^l)^0 X_{\text{Cu}}^l \\ &+ B_{\text{AlSiCu}}^l(0,2)(X_{\text{Si}}^l)^0 (X_{\text{Cu}}^l)^2 \\ &+ B_{\text{AlSiCu}}^l(0,3)(X_{\text{Si}}^l)^0 (X_{\text{Cu}}^l)^3 + \dots \\ &+ B_{\text{AlSiCu}}^l(1,1)X_{\text{Si}}^l X_{\text{Cu}}^l + B_{\text{AlSiCu}}^l(2,1)(X_{\text{Si}}^l)^2 X_{\text{Cu}}^l \\ &+ B_{\text{AlSiCu}}^l(1,2)X_{\text{Si}}^l (X_{\text{Cu}}^l)^2 + \dots,\end{aligned}\quad (22)$$

$$\begin{aligned}\Delta \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) &= C_{\text{AlSiCu}}^l(0,1)(X_{\text{Cu}}^l)^0 X_{\text{Si}}^l \\ &+ C_{\text{AlSiCu}}^l(0,2)(X_{\text{Cu}}^l)^0 (X_{\text{Si}}^l)^2 \\ &+ C_{\text{AlSiCu}}^l(0,3)(X_{\text{Cu}}^l)^0 (X_{\text{Si}}^l)^3 + \dots \\ &+ C_{\text{AlSiCu}}^l(1,1)X_{\text{Si}}^l X_{\text{Cu}}^l + C_{\text{AlSiCu}}^l(2,1)(X_{\text{Si}}^l)^2 X_{\text{Cu}}^l \\ &+ C_{\text{AlSiCu}}^l(1,2)X_{\text{Si}}^l (X_{\text{Cu}}^l)^2 + \dots,\end{aligned}\quad (23)$$

3. A függvények állandóinak számítása

3.1. Likvidusz- és szolidusfüggvények állandóinak kiszámítása

A konstansok kiszámításához egy CALPHAD típusú számításból származó adatbázist használtuk. A Thermo-Calc szoftverrel (4.1.0.4995 verzió) az Si- és Cu-olvadék és szilárd fázisainak egyensúlyi koncentrációit 14 izotermán számoltuk, a Cu-koncentrációt 0,001 mol% lépésként változtatva. A molfrakciót átszámítottuk tömeg%-ra, mert gyakorlatban a t%-ot használják.

3.1.1. Elsőrendű becslés: csak az Al-Si és az Al-Cu BEPD ismert

Az $F_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l)$, $F_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l)$ és $F_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s)$, $F_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s)$ függvények adatbázisának a számítása

$$F_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l) = \frac{T_{\text{Al}}}{T_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l)} - 1, \quad (24)$$

$$F_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s) = \frac{T_{\text{Al}}}{T_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s)} - 1$$

és

$$F_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l) = \frac{T_{\text{Al}}}{T_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l)} - 1, \quad (25)$$

$$F_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s) = \frac{T_{\text{Al}}}{T_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s)} - 1.$$

E két adatbázist felhasználva az $F_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l)$, $F_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l)$ és $F_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s)$, $F_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s)$ függvények állandóját regresszióval számoltuk ki. A kiszámított állandók láthatók az 1., 3. és 5. táblázatokban (likvidusz), valamint a 2., 4. és 6. táblázatokban (szolidusz), (első sor: Al-Si, első oszlop: Al-Cu BEPD).

Az Al-Cu BEPD likvidusz és a szilárd hőmérsékletei a következők:

$$T_L = T_{\text{Al}} / [F_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l) + F_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l) + 1] \quad (26)$$

és

$$T_s = T_{\text{Al}} / [F_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s) + F_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s) + 1]. \quad (27)$$

3.1.2. Másodrendű becslés: a BEPD-k és a binér eutektikus vályúk ismertek

Bizonyos esetekben, a BEPD-k mellett csak a binér eutektikus vályúk adatai ismertek. Ebben az esetben az $F_{\text{AlSiCu}}^{l,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}})$ és $F_{\text{AlSiCu}}^{s,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}})$ függvényeket az alábbi adatbázis adataiból számoltuk ki:

$$\begin{aligned}F_{\text{AlSiCu}}^{l,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) &= \frac{T_A}{T_{\text{AlSiCu}}^{l,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}})} - 1 \\ &= F_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l) + F_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l) \\ &+ \Delta F_{\text{AlSiCu}}^{l,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}})\end{aligned}\quad (28)$$

és így:

$$\begin{aligned}\Delta F_{\text{AlSiCu}}^{l,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) &= F_{\text{AlSiCu}}^{l,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) \\ &- F_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l) - F_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l),\end{aligned}\quad (29)$$

$$\begin{aligned}F_{\text{AlSiCu}}^{s,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}}) &= \frac{T_A}{T_{\text{AlSiCu}}^{s,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}})} - 1 \\ &= F_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s) + F_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s) \\ &+ \Delta F_{\text{AlSiCu}}^{s,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}})\end{aligned}\quad (30)$$

és így:

$$\begin{aligned}\Delta F_{\text{AlSiCu}}^{s,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}}) &= F_{\text{AlSiCu}}^{s,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}}) \\ &- F_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s) - F_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s).\end{aligned}\quad (31)$$

A $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^{l,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}})$ és $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^{s,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}})$ adatbázis adataiból regresszióval számoltuk ki a $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^{l,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}})$ és $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^{s,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}})$ függvények állandóit (1. és 2. táblázat).

A TEPD likvidusz és szolidusz hőmérsékletei a következők:

$$\begin{aligned}T_L &= T_{\text{Al}} / [F_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l) + F_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l) \\ &+ \Delta F_{\text{AlSiCu}}^{l,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) + 1]\end{aligned}\quad (32)$$

$$\begin{aligned}T_s &= T_{\text{Al}} / [F_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s) + F_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s) \\ &+ \Delta F_{\text{AlSiCu}}^{s,\text{eut}}(X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}}) + 1].\end{aligned}\quad (33)$$

3.1.3. A BEPD-k, a binér eutektikus vályúk és néhány adat (harmadrendű becslés), illetve sok adat (negyedrendű becslés) ismert a TEPD likvidusz- és szolidusz-függvényeiről

1. táblázat. Likvidusz-hőmérséklet a BEPD-k és az eutektikus vályúk adatai alapján számítva. Elsőrendű és másodrendű becslés

T_{AlCuSi}^l	$(X_{\text{Si}}^l)^0$	$(X_{\text{Si}}^l)^1$	$(X_{\text{Si}}^l)^2$	$(X_{\text{Si}}^l)^3$	
$(X_{\text{Cu}}^l)^0$	0	0,006259277	9,09114E-05	2,84167E-06	Binary Al-Si
$(X_{\text{Cu}}^l)^1$	0,002928252	0,000146803	-2,54818E-06		
$(X_{\text{Cu}}^l)^2$	-5,17929E-06	5,40796E-06			
$(X_{\text{Cu}}^l)^3$	1,23057E-06	-7,59466E-08			
	Binary Al-Cu				

2. táblázat. Szolidusz-hőmérséklet a BEPD-k és az eutektikus vályúk adatai alapján számítva. Elsőrendű és másodrendű becslés

T_{AuCuSi}^s	$(X_{\text{Si}}^s)^0$	$(X_{\text{Si}}^s)^1$	$(X_{\text{Si}}^s)^2$	
$(X_{\text{Cu}}^s)^0$	0	0,062168995	0,000768388	Binary Al-Si
$(X_{\text{Cu}}^s)^1$	0,027873196	0,001484473		
$(X_{\text{Cu}}^s)^2$	3,59926E-05	-0,000763994		
$(X_{\text{Cu}}^s)^3$	-0,000128955			
	Binary Al-Cu			

A legtöbb esetben a TEPD merőleges vetületben, izotermákkal ismert. Ebben az esetben a BEPD-k mellett ismertek a binér eutektikus vályúk és néhány likvidusz- és szolidusz-hőmérsékleti adat (pl. csak egy izoterma, harmadrendű becslés), negyedrendű becslés (14 izoterma). Ebben az esetben az $F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l)$ és $F_{\text{AlSiCu}}^s(X_{\text{Si}}^s, X_{\text{Cu}}^s)$ értékeket ezekből az adatokból számoltuk ki.

$$F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) = \frac{T_A}{T_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l)} - 1$$

$$= F_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l) + F_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l) + \Delta F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) \quad (34)$$

és így

$$\Delta F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) = F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) - F_{\text{AlSi}}^l(X_{\text{Si}}^l) - F_{\text{AlCu}}^l(X_{\text{Cu}}^l), \quad (35)$$

$$F_{\text{AlSiCu}}^{s, \text{eut}}(X_{\text{Si}}^s, X_{\text{Cu}}^s) = \frac{T_A}{T_{\text{AlSiCu}}^s(X_{\text{Si}}^s, X_{\text{Cu}}^s)} - 1$$

$$= F_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s) + F_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s) + \Delta F_{\text{AlSiCu}}^s(X_{\text{Si}}^s, X_{\text{Cu}}^s) \quad (36)$$

és így

$$\Delta F_{\text{AlSiCu}}^s(X_{\text{Si}}^s, X_{\text{Cu}}^s) = F_{\text{AlSiCu}}^s(X_{\text{Si}}^s, X_{\text{Cu}}^s) - F_{\text{AlSi}}^s(X_{\text{Si}}^s) - F_{\text{AlCu}}^s(X_{\text{Cu}}^s). \quad (37)$$

A $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l)$ és $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^s(X_{\text{Si}}^s, X_{\text{Cu}}^s)$ adatbázis adataiból a $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l)$ és $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^s(X_{\text{Si}}^s, X_{\text{Cu}}^s)$ függvények állandóit regresszióval számoltuk ki (harmadrendű becslés: 3. táblázat: likvidusz, 4. táblázat: szolidusz, negyedrendű becslés: 5. táblázat: likvidusz, 6. táblázat: szolidusz).

3. táblázat. Likvidusz-hőmérséklet a BEPD-k, az eutektikus vályúk és egy (830 K) izoterma adataiból számítva. Harmadrendű becslés

T_{AlCuSi}^l	$(X_{\text{Si}}^l)^0$	$(X_{\text{Si}}^l)^1$	$(X_{\text{Si}}^l)^2$	$(X_{\text{Si}}^l)^3$	
$(X_{\text{Cu}}^l)^0$	0	0,006259277	9,09114E-05	2,84167E-06	Binary Al-Si
$(X_{\text{Cu}}^l)^1$	0,002928252	5,5654E-05	5,9301E-06		
$(X_{\text{Cu}}^l)^2$	-5,17929E-06	5,22492E-06			
$(X_{\text{Cu}}^l)^3$	1,23057E-06				
	Binary Al-Cu				

4. táblázat. Szolidusz-hőmérséklet a BEPD-k, az eutektikus vályúk és egy (830 K) izoterma adataiból számítva. Harmadrendűbecslés

T_{AuCuSi}^s	$(X_{\text{Si}}^s)^0$	$(X_{\text{Si}}^s)^1$	$(X_{\text{Si}}^s)^2$	
$(X_{\text{Cu}}^s)^0$	0	0,062168995	0,000768388	Binary Al-Si
$(X_{\text{Cu}}^s)^1$	0,027873196	0,001484473		
$(X_{\text{Cu}}^s)^2$	3,59926E-05	-0,000763994		
$(X_{\text{Cu}}^s)^3$	-0,000128955			
	Binary Al-Cu			

5. táblázat. Likvidusz-hőmérséklet a BEPD-k, az eutektikus vályúk 14 izoterma adataiból számítva. Negyedrendű becslés

T_{AuCuSi}^l	$(X_{\text{Si}}^l)^0$	$(X_{\text{Si}}^l)^1$	$(X_{\text{Si}}^l)^2$	$(X_{\text{Si}}^l)^3$	
$(X_{\text{Cu}}^l)^0$	0	0,006259277	9,09114E-05	2,84167E-06	Binary Al-Si
$(X_{\text{Cu}}^l)^1$	0,002928252	5,5654E-05	5,9301E-06		
$(X_{\text{Cu}}^l)^2$	-5,17929E-06	5,22492E-06			
$(X_{\text{Cu}}^l)^3$	1,23057E-06				
	Binary Al-Cu				

6. táblázat. Szolidusz-hőmérséklet a BEPD-k, az eutektikus vályúk és 14 izoterma adataiból számítva. Negyedrendű becslés

T_{AuCuSi}^s	$(X_{\text{Si}}^s)^0$	$(X_{\text{Si}}^s)^1$	$(X_{\text{Si}}^s)^2$	
$(X_{\text{Cu}}^s)^0$	0	0,062168995	0,000768388	Binary Al-Si
$(X_{\text{Cu}}^s)^1$	0,027873196	0,002143483	-0,000655231	
$(X_{\text{Cu}}^s)^2$	3,59926E-05	-0,000687929		
$(X_{\text{Cu}}^s)^3$	-0,000128955			
	Binary Al-Cu			

A TEPD likvidusz- és szolidusz-hőmérsékletei a következők:

$$T_L = T_{\text{Al}} / \left[F_{\text{AlSi}}^l (X_{\text{Si}}^l) + F_{\text{AlCu}}^l (X_{\text{Cu}}^l) + \Delta F_{\text{AlSiCu}}^l (X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) + 1 \right] \quad (38)$$

$$T_s = T_{\text{Al}} / \left[F_{\text{AlSi}}^s (X_{\text{Si}}^s) + F_{\text{AlCu}}^s (X_{\text{Cu}}^s) + \Delta F_{\text{AlSiCu}}^s (X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}}) + 1 \right]. \quad (39)$$

3.1.4. A binér eutektikumkristályosodás kezdő hőmérséklete ($T_{BE}(M_{BE})$) állandóinak számítása

Ahogy a 2.2.2. pontban említettük, két különböző binér eutektikum kristályosodhat, ha az ötvözet koncentrációja nagyobb, mint a szilárd oldat maximális

oldhatósága. A binér eutektikum kristályosodásánál a konódák mind a CALPHAD típusú számítással, mind a diagramok digitalizálása útján kapott adatok esetében ismertek. Megállapítottuk, hogy a konódák meredekségének a hőmérséklet függése egy egyszerű függvénnyel megadható, amellyel a binér eutektikum kristályosodásának kezdő hőmérséklete kiszámítható. A számítás részletei az Eredmények pontban találhatóak.

3.2. Likviduszfelületi lejtések állandóinak számítása

Az $M_{\text{AlSiCu}}^{\text{Si}}$ és $M_{\text{AlSiCu}}^{\text{Cu}}$ likviduszfelületi lejtések a $T_L(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l)$ függvény parciális deriváltjai. Mivel a függvények nevezőjének állandói ismertek, csak a számláló deriváltjának állandói láthatók alább:

7. táblázat. Az $S_{\text{AlSiCu}}^{\text{Cu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l = \text{const.})$ függvény állandói a BEPD-ek, az eutektikus vályúk és a 14 izoterma adataiból számítva, a likvidusz-hőmérséklet számításnál negyedrendű becslést használva

$S_{\text{AlSiCu}}^{\text{Cu}}$	$(X_{\text{Cu}}^l)^0$	$(X_{\text{Cu}}^l)^1$	$(X_{\text{Cu}}^l)^2$	
$(X_{\text{Si}}^l)^0$	0,002928252	$2 \times -5,17929\text{E-}06$	$3 \times 1,23057\text{E-}06$	Binary Al-Cu
$(X_{\text{Si}}^l)^1$	5,5654E-05	$2 \times 5,22492\text{E-}06$		
$(X_{\text{Si}}^l)^2$	5,9301E-06			

8. táblázat. Az $S_{\text{AlSiCu}}^{\text{Si}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l = \text{const.})$ függvény állandói a BEPD-ek, az eutektikus vályúk és a 14 izoterma adataiból számítva, a likvidusz-hőmérséklet számításnál negyedrendű becslést használva

$S_{\text{AlSiCu}}^{\text{Si}}$	$(X_{\text{Si}}^l)^0$	$(X_{\text{Si}}^l)^1$	$(X_{\text{Si}}^l)^2$	
$(X_{\text{Cu}}^l)^0$	0.006259277	$2 \times 9.09114\text{E-}05$	$3 \times 2.84167\text{E-}06$	Binary Al-Si
$(X_{\text{Cu}}^l)^1$	5.5654E-05	$2 \times 5.9301\text{E-}06$		
$(X_{\text{Cu}}^l)^2$	5.22492E-06			

$$\begin{aligned}
 S_{\text{AlSiCu}}^{\text{Si}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l = \text{const.}) &= \frac{\partial}{\partial X_{\text{Si}}^l} F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) \\
 &= A_{\text{AlSi}}^l(1,0) + 2A_{\text{AlSi}}^l(2,0)(X_{\text{Si}}^l)^1 + \\
 &+ 3A_{\text{AlSi}}^l(3,0)(X_{\text{Si}}^l)^2 + A_{\text{AlSiCu}}^l(1,1)X_{\text{Cu}}^l \\
 &+ A_{\text{AlSiCu}}^l(1,2)(X_{\text{Cu}}^l)^2, \\
 &+ 2A_{\text{AlSiCu}}^l(2,1)(X_{\text{Si}}^l)^1 X_{\text{Cu}}^l + \dots,
 \end{aligned} \quad (40)$$

$$\begin{aligned}
 S_{\text{AlSiCu}}^{\text{Cu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l = \text{const.}) &= \frac{\partial}{\partial X_{\text{Cu}}^l} F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) \\
 &= A_{\text{AlCu}}^l(0,1) + 2A_{\text{AlCu}}^l(0,2)(X_{\text{Cu}}^l)^1 + \\
 &+ 3A_{\text{AlCu}}^l(0,3)(X_{\text{Cu}}^l)^2 + A_{\text{AlSiCu}}^l(1,1)X_{\text{Si}}^l \\
 &+ 2A_{\text{AlSiCu}}^l(1,2)X_{\text{Si}}^l(X_{\text{Cu}}^l)^2 \\
 &+ A_{\text{AlSiCu}}^l(2,1)(X_{\text{Si}}^l)^2 + \dots
 \end{aligned} \quad (41)$$

Az $S_{\text{AlSiCu}}^{\text{Si}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l = \text{const.})$ és $S_{\text{AlSiCu}}^{\text{Cu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l = \text{const.})$ függvények állandói a 7. és 8. táblázatban található (TL Negyedrendű becslése). Ezeknek a táblázatoknak az Elsőrendű sora mutatja a BEPD-k esetén az állandókat.

3.3. A megoszlási hányados függvények állandóinak számítása

Ahogy a 3.1. szakaszban is említettük, az egyensúlyi Si- és Cu-koncentrációkat a Thermo-Calc-kal számoltuk ki, így a k_{Si} és k_{Cu} közvetlenül az X_{Si}^l , X_{Si}^s és X_{Cu}^l , X_{Cu}^s koncentrációs párokból számíthatók voltak:

$$\begin{aligned}
 k_{\text{Si}} &= X_{\text{Si}}^s / X_{\text{Si}}^l, \quad k_{\text{Cu}} = X_{\text{Cu}}^s / X_{\text{Cu}}^l, \\
 X_{\text{Si}}^s &= X_{\text{Si}}^l k_{\text{Si}}, \quad X_{\text{Cu}}^s = X_{\text{Cu}}^l k_{\text{Cu}}.
 \end{aligned} \quad (42)$$

3.3.1. Elsőrendű becslés

Hasonlóan a likvidusz- és szolidusz-hőmérsékletekhez,

9. táblázat. $\ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSi}}$ a BEPD-k és az eutektikus vályúk adataiból számítva. Másodrendű becslés

$\ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSi}}$	$(X_{\text{Si}}^l)^0$	$(X_{\text{Si}}^l)^1$	$(X_{\text{Si}}^l)^2$	$(X_{\text{Si}}^l)^3$
$(X_{\text{Cu}}^l)^0$	-2,288892406	0,01197891	0,00032586	Binary Al-Si
$(X_{\text{Cu}}^l)^1$	0,005118707	0,000448357	-2,20231E-06	
$(X_{\text{Cu}}^l)^2$	0,00035785			

10. táblázat. $\ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlCu}}$ a BEPD-k és az eutektikus vályúk adataiból számítva. Másodrendű becslés

$\ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlCu}}$	$(X_{\text{Cu}}^l)^0$	$(X_{\text{Cu}}^l)^1$	$(X_{\text{Cu}}^l)^2$	
$(X_{\text{Si}}^l)^0$	-2.280465486	-2.25824E-05	0.000453888	Binary Al-Si
$(X_{\text{Si}}^l)^1$	0.043426906	0.0002552	2.50114E-06	
$(X_{\text{Si}}^l)^2$	-0.002892515			

11. táblázat. $\ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}$ a BEPD-k és az eutektikus vályúk és 14 izoterma adataiból számítva. Negyedrendű becslés

$\ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}$	$(X_{\text{Si}}^l)^0$	$(X_{\text{Si}}^l)^1$	$(X_{\text{Si}}^l)^2$	$(X_{\text{Si}}^l)^3$
$(X_{\text{Cu}}^l)^0$	-2,288892406	0,01197891	0,00032586	Binary Al-Si
$(X_{\text{Cu}}^l)^1$	0,005118707	0,000448357	-2,20231E-06	
$(X_{\text{Cu}}^l)^2$	0,00035785			

12. táblázat. $\ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}$ a BEPD-k és az eutektikus vályúk és 14 izoterma adataiból számítva. Negyedrendű becslés

$\ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}$	$(X_{\text{Cu}}^l)^0$	$(X_{\text{Cu}}^l)^1$	$(X_{\text{Cu}}^l)^2$	$(X_{\text{Cu}}^l)^3$
$(X_{\text{Si}}^l)^0$	-2.280465486	-2.25824E-05	0.000453888	Binary Al-Cu
$(X_{\text{Si}}^l)^1$	0.022447756	-6.438E-05	2.63906E-05	
$(X_{\text{Si}}^l)^2$	-0.001012122			

csak az Al-Si és Al-Cu BEPD-adatokat használtuk fel a megoszlási hányadosok meghatározásához. A $\ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l)$ és a $\ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Cu}}^l)$ függvények (B_{AlSi}^l és B_{AlCu}^l) állandóit regresszióval határozták meg. A 9. és 11. táblázat első sorában a $\ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}$, a 10. és 12. táblázat első sorában a $\ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}$ látható.

3.3.2. Másodrendű becslés

A megoszlási hányadosokat a BEPD-k megoszlási hányadosaiból és az eutektikus vályúk koncentráció párjaiból határoztuk meg. Ez a számítási verzió azért érdekes, mert grafikus TEPD esetén csak ezek a konódák ismertek a TEPD-ekben.

$$k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) = X_{\text{Si}}^{s,\text{eut}} / X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, \quad (43)$$

$$k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) = X_{\text{Cu}}^{s,\text{eut}} / X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}, \quad (43)$$

$$\ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) = \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSi}}(X_{\text{Si}}^l) + \Delta \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}), \quad (44)$$

$$\Delta \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) = \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) - \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSi}}(X_{\text{Si}}^l) \quad (45)$$

és

$$\ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) = \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSi}}(X_{\text{Cu}}^l) + \Delta \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}), \quad (46)$$

$$\Delta \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) = \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}}) - \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSi}}(X_{\text{Cu}}^l). \quad (47)$$

A $\Delta \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}})$ és $\Delta \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}})$ függvények állandóit regresszióval határoztuk meg, és a 9. táblázatban ($\ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}$), illetve a 10. táblázatban ($\ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}$) láthatók.

3.3.3. Harmadrendű becslés

Ebben az esetben a konódák ismertek a BEPD-ekben, az eutektikus vályúkban és a likvidusz és szolidusz felületek (izotermák) között.

$$k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) = X_{\text{Si}}^s / X_{\text{Si}}^l, \quad (48)$$

$$k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) = X_{\text{Cu}}^s / X_{\text{Cu}}^l,$$

$$\ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) = \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSi}}(X_{\text{Si}}^l) + \Delta \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l), \quad (49)$$

$$\ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) = \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSi}}(X_{\text{Cu}}^l) + \Delta \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l), \quad (51)$$

$$\Delta \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) = \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) - \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSi}}(X_{\text{Cu}}^l). \quad (52)$$

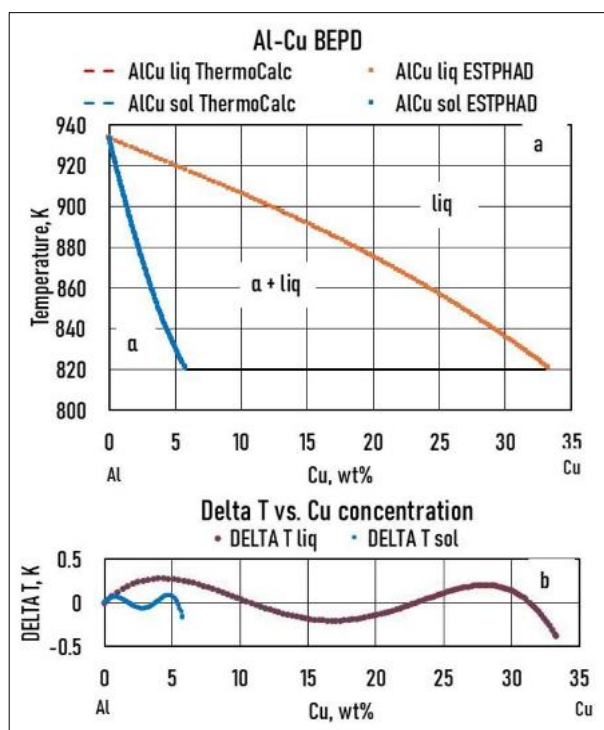
A $\Delta \ln k_{\text{Si}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}})$ és $\Delta \ln k_{\text{Cu}}^{\text{AlSiCu}}(X_{\text{Si}}^{l,\text{eut}}, X_{\text{Cu}}^{l,\text{eut}})$ függvények állandóit regresszióval határoztuk meg, és a 11. és 12. táblázatban szerepelnek.

4. Eredmények

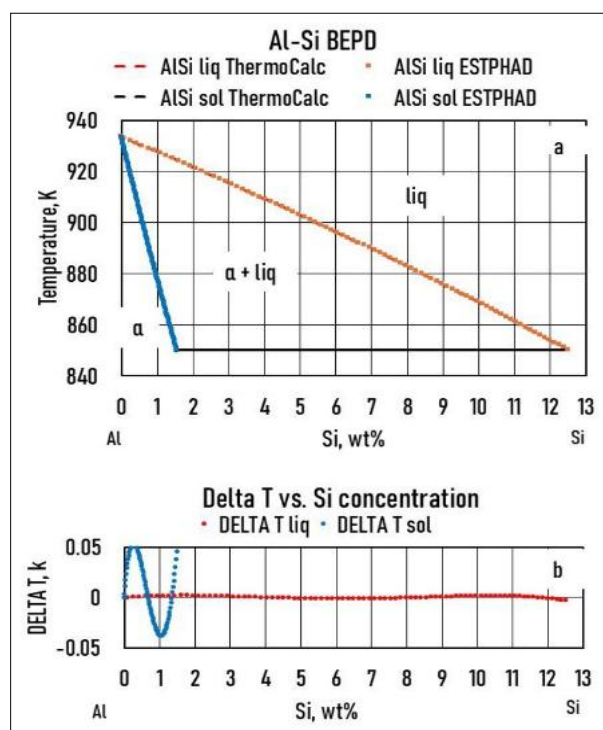
4.1. Likvidusz- és szoliduszizotermák

4.1.1. Elsőrendű becslés

A BEPD-k likvidusz- és szoliduszfüggvényeinek ismeretében kiszámítottuk az Al-Si-Cu TEPD likvidusz és szolidusz izotermáit, feltételezve, hogy a Si- és Cu-atomok kölcsönhatása az olvadék és a szilárd fázisokban elhanyagolható, azaz $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^l(X_{\text{Si}}^l, X_{\text{Cu}}^l) = 0$, és $\Delta F_{\text{AlSiCu}}^s(X_{\text{Si}}^s, X_{\text{Cu}}^s) = 0$. Az Al-Si és Al-Cu BEPD-k számított likvidusza és szolidusza az 1a. és 2a. ábrán látható, az 1b. és 2b. ábra a Thermo-Calc és az EST-PHAD számítások eredményei közötti különbséget



1. ábra. (a): Az Al-Cu BEPD likvidusza (piros vonal) és szolidusza (kék vonal), amelyeket Thermo-Calc (folytonos vonal) és ESTPHAD (jelölők) számítottunk ki. (b): a két számítás eredménye közötti különbség (DELTA T)

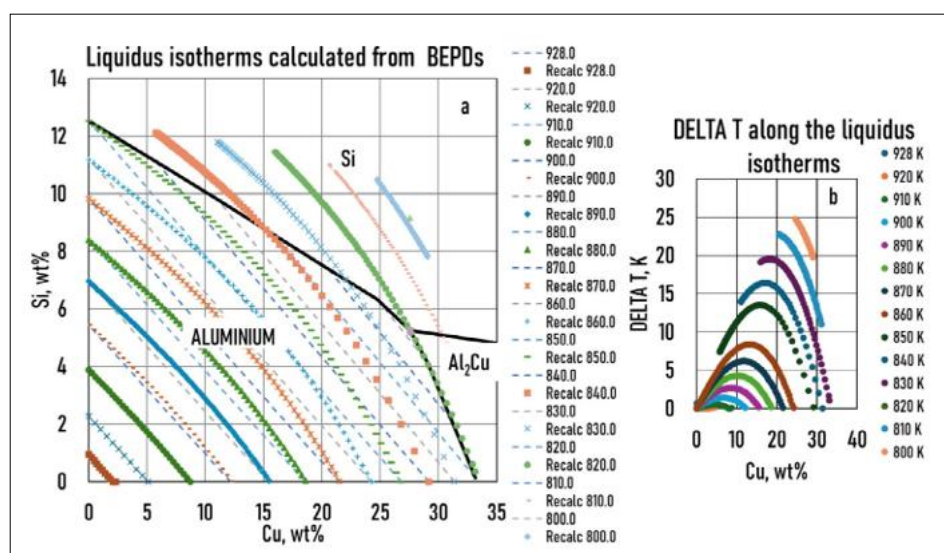


2. ábra. (a): Az Al-Si BEPD likvidusza (piros vonal) és szolidusza (kék vonal), amelyeket Thermo-Calc (folytonos vonal) és ESTPHAD (jelölők) számítottunk ki. (b): a két számítás eredménye közötti különbség (DELTA T)

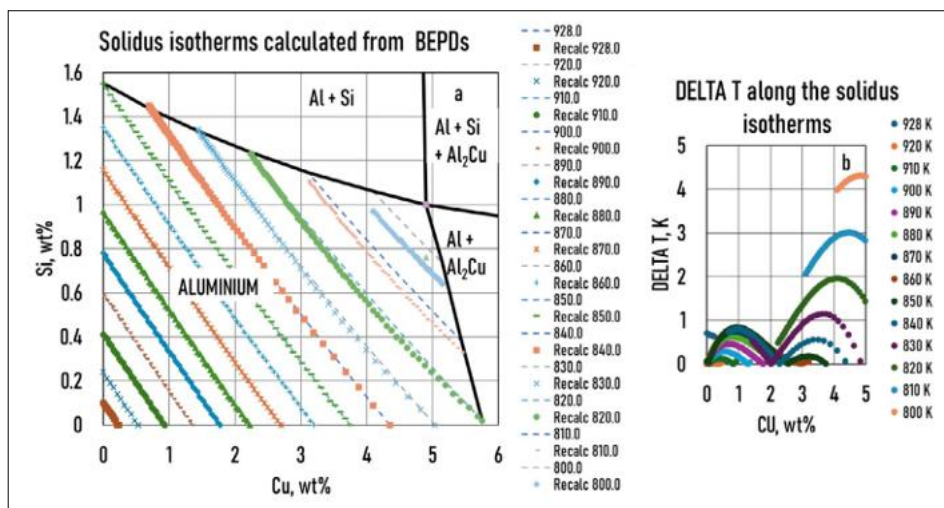
(DELTA T) mutatják. A két BEPD-függvény segítségével kiszámíthatók a TEPD likvidusz- ((27) egyenlet)) és szolidusz- ((28) egyenlet) hőmérsékletei. Az Al-sarokban kiszámított likvidusz- és szoliduszizotermák a 3a. és 4a. ábrán láthatók. A 3b. és 4b. ábra a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások közötti hőmérséklet-különbséget (DELTA T) mutatják az izotermák mentén a Cu-koncentráció függvényében.

4.1.2. Másodrendű becslés

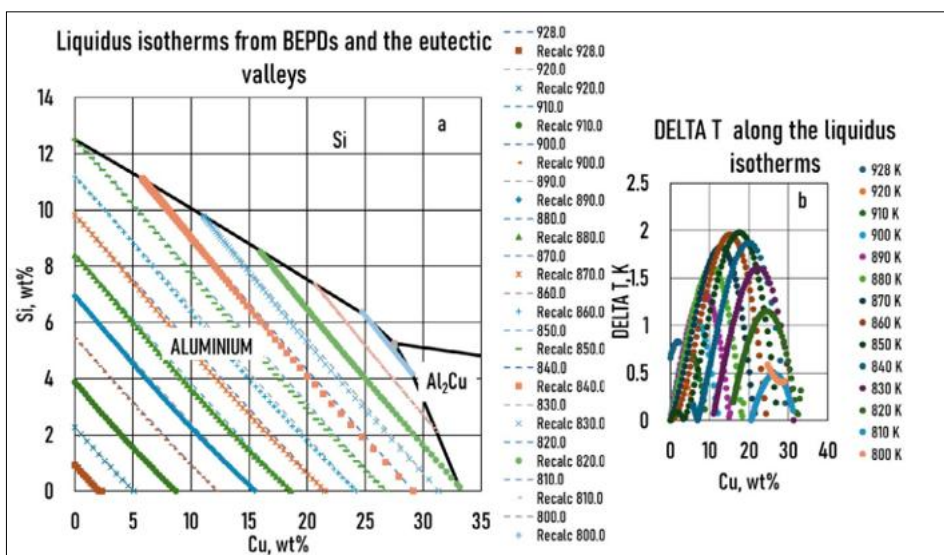
Számos esetben csak a BEPD-k és az eutektikus vályúk koncentrációs párai ismertek. Ezekben az esetekben az eutektikus vályúk adatai arra is használhatók, hogy a likvidusz- ((33) egyenlet) és a szolidusz- ((34) egyenlet) hőmérsékleteket az elsőrendű becslésnél pontosabban kiszámítsuk. Az Al-sarokban számított likvidusz- és szoliduszizotermák az 5a. és



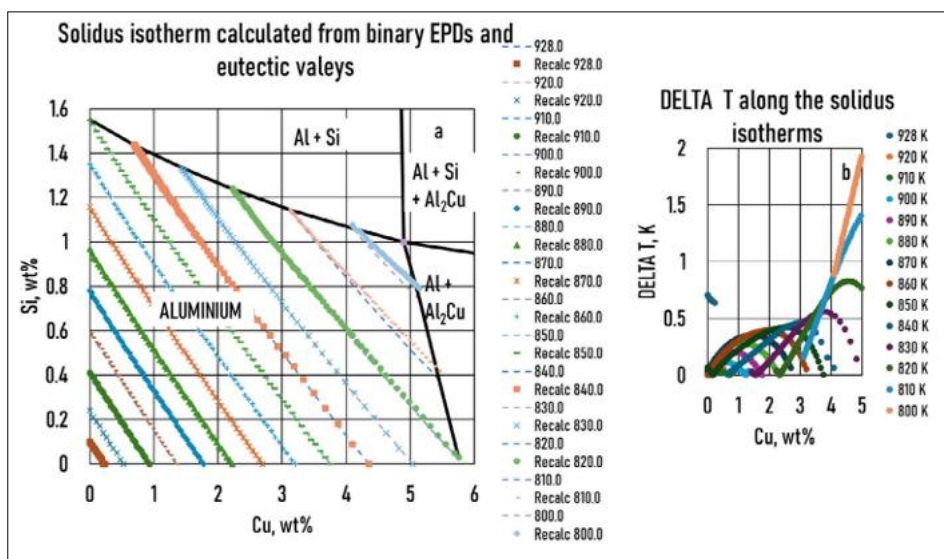
3. ábra. (a): Likviduszizotermák elsőrendű becslése. (b): hőmérséklet-különbség (DELTA T) a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások eredményei között az izotermák mentén



4. ábra. (a): Szoliduszizotermák elsőrendű becslése. (b): hőmérséklet-különbség (ΔT) a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások eredményei között az izotermák mentén



5. ábra. (a): Likviduszizotermák másodrendű becslése. (b): hőmérséklet-különbség (ΔT) a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások eredményei között az izotermák mentén



6. ábra. (a): Szoliduszizotermák másodrendű becslése. (b): hőmérséklet-különbség (ΔT) a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások között az izotermák mentén

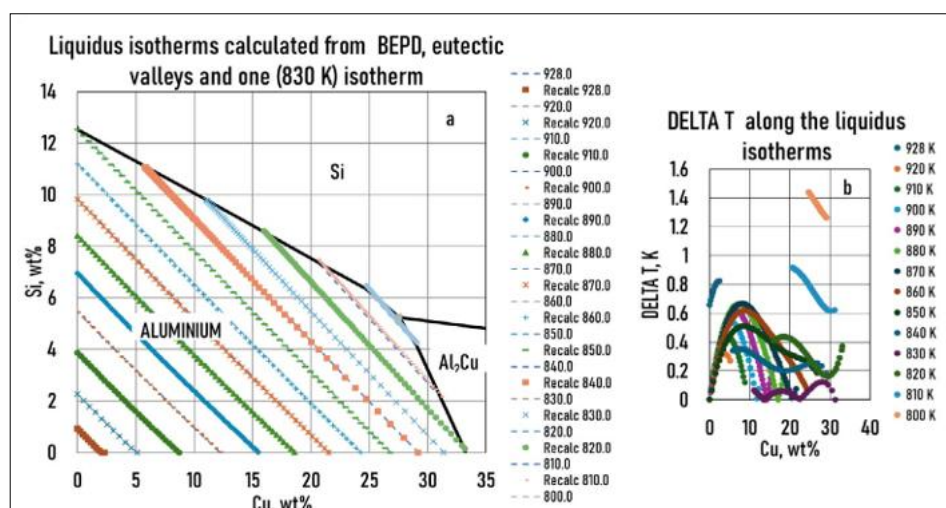
13. táblázat. A számításnál használt izotermák száma és adataik

	Harmad és negyedrendű becslés							Másod- rendű becslés	Elsőrendű becslés
	Az izotermák száma								
Hőmérséklet, K	14	7	5	4	3	2	1		
928	X	X	X	X	X	X			
920	X								
910	X	X							
900	X		X						
890	X	X		X					
880	X				X				
870	X	X	X						
860	X								
850	X	X		X					
840	X		X						
830	X	X			X	X	X		
820	X								
810	X	X	X	X					
800	X								
Az izotermák adatai- nak a száma	722	349	254	194	74	75	63		
Eut. vályú adata	10	10	10	10	10	10	10	10	
Al-Cu adata	123	123	123	123	123	123	123	123	123
Al-Si adata	83	83	83	83	83	83	83	83	83
Összes adat	938	565	470	410	354	291	279	216	206
DELTA T *, K likv.	0.083	0.088	0.087	0.09	0.12	0.126	0.128	0.79	8.96
DELTA T *, K szol.	0.147	0.15	0.175	0.18	0.22	0.23	0.23	0.35	0.94
DELTA T _{aver} * a különbség az összes adattal számolt ESTPHAD és CALPHAD eredményei között									

6a. ábrán láthatók. Az 5b. és 6b. ábra a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások közötti hőmérséklet-különbséget (DELTA T) mutatják az izotermák mentén a Cu-koncentráció függvényében.

4.1.3. Harmadrendű és negyedrendű becslés

A mért TEBD diagramok esetében ismert néhány likvidusz- és szolidusz-hőmérséklet vagy néhány izoterma a likvidusz- és szoliduszfelületen. A Thermo-Calc



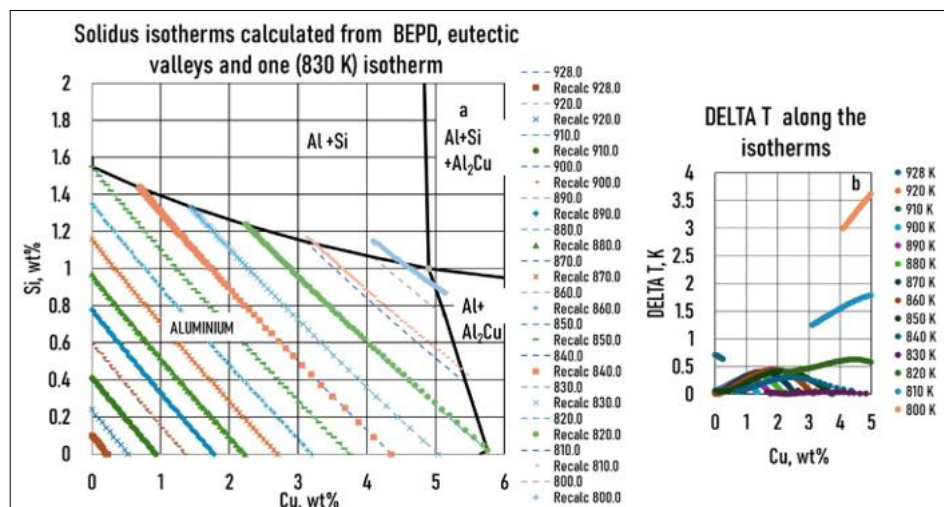
7. ábra. (a): Likviduszizotermák harmadrendű becslése egy (830 K) izoterma adatainak használatával, (b): hőmérséklet-különbség (DELTA T) a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások adatai között az izotermák mentén

számítások esetében mindkét felületen ismert néhány izoterma. Az adatok mennyisége befolyásolja a számítás pontosságát. Az adatszám hatásának vizsgálatához számításokat végeztünk a BEPD-k, az eutektikus vályúk és az 1, 2, 3, 4, 5 és 14 (mind) izotermák adatainak felhasználásával. A hőmérséklet, az izotermák száma és a számításoknál használt adatok száma a 13. táblázatban látható. A számítást a (39) és (40) egyenletekkel végeztük. A számított likvidusz- és szoliduszizotermák a BEPD-k, az eutektikus vályúk és egy izoterma (850 K) adatai alapján a 7a. és 8a. ábrán (harmadrendű becslés) láthatók, valamint amikor a (negyedrendű becslés) minden 14 izoterma adatát használtuk (9a. és 10a. ábra). A Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások közötti hőmérséklet-különbség (DELTA T) az izotermák mentén látható a 7b. és 8b. ábrán (harmadrendű becslés), a 9b. és 10b. ábrán (negyedrendű becslés) a likvidusz és a szolidusz esetében.

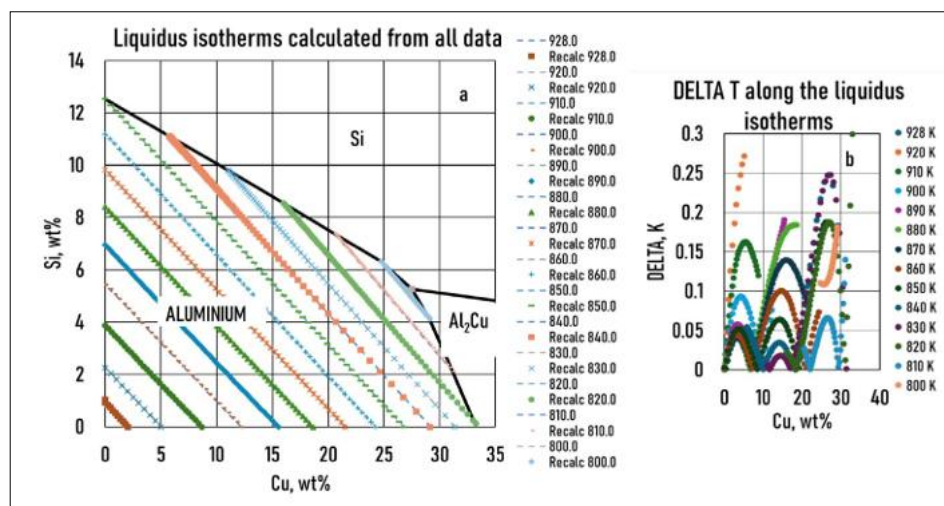
A ternér diagramokban, a DELTA T és DELTA Si táblázatokban Cu-koncentráció az abszolút értéket jelenti!

4.2. A binér eutektikumok megszilárdulásának kezdeti hőmérséklete

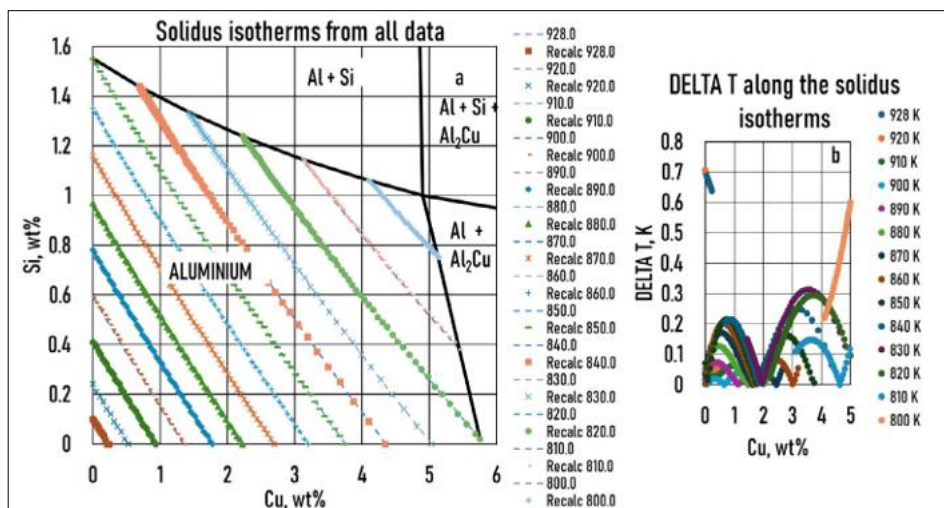
A két binér eutektikum kristályosodásának felületét a ternér eutektikus vályú kanódája választja el, amely felett az Al+Si eutektikum, alatta pedig az Al+Al₂Cu eutektikum kristályosodik. A lejtés kiszámítását úgy kell megválasztani, hogy nulla koncentrációnál (BEPD) értéke ne végtelen, hanem nulla legyen. Ezért a ternér eutektikum vályú feletti (X_{Cu}^l/X_{Si}^l) értékét alatta pedig (X_{Si}^l/X_{Cu}^l) értékét számítottuk ki (14. táblázat). Az X_{Cu}^s/X_{Si}^s és X_{Si}^s/X_{Cu}^s értékeit is kiszámították, amelyek gyakorlatilag megegyeztek az X_{Cu}^l/X_{Si}^l és X_{Si}^l/X_{Cu}^l értékeivel. Ennek következtében igazolódott, hogy a konódák a sarokpontnál találkoznak. Ezeknek az ada-



8. ábra. (a): Szoliduszizotermák harmadrendű becslése egy (830 K) izoterma adatainak használatával. (b): hőmérséklet-különbség (DELTA T) a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások adatai között az izotermák mentén



9. ábra. (a): Likviduszizotermák negyedrendű becslése minden (14) izoterma adatainak használatával. (b): hőmérséklet-különbség (DELTA T) a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások adatai között az izotermák mentén



10. ábra. (a): Szoliduszizotermák negyedrendű becslése minden (14) izoterma adatainak használatával. (b): hőmérséklet-különbség (DELTA T) a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások adatai között az izotermák mentén

14. táblázat. A binér eutektikus konódák meredeksége

M_{BE}	T, K
X_{Cu}^I/X_{Si}^I	
0	850
0,519474	840
1,128312	830
1,868701	819
2,780053	809
3,904228	801
5,245714	798,5
X_{Si}^I/X_{Cu}^I	
0,19	798.5
0,142	800
0,068	810
0	820

toknak a felhasználásával két $T_{BE}(M_{TB})$ függvény állandóit regresszióval határoztuk meg.

A ternér eutektikus vályú felett:

$$T_{BE} = 1,9097 M_{BE}^2 - 19,944 M_{BE} + 850,08, \quad (53)$$

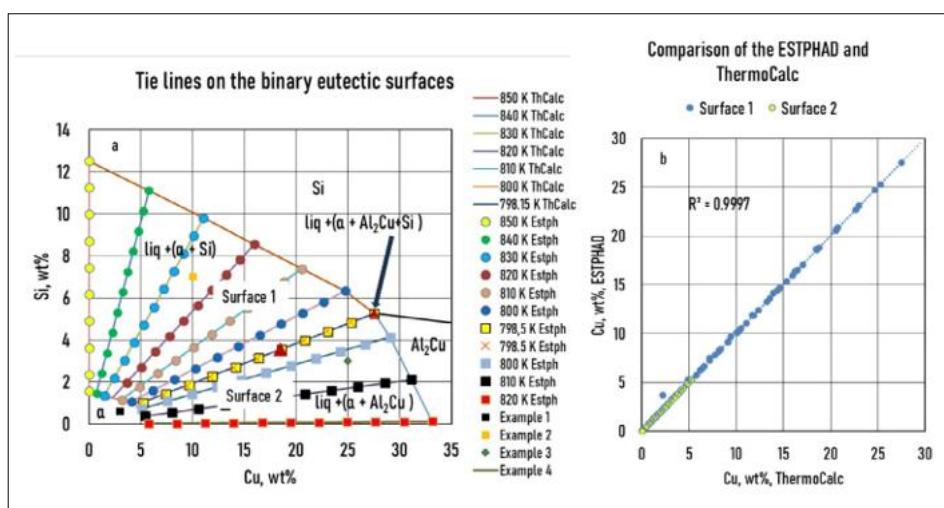
A ternér eutektikus vályú alatt:

$$T_{BE} = 3787,4 M_{BE}^3 - 663,43 M_{BE}^2 - 126,27 M_{BE} + 820,46. \quad (54)$$

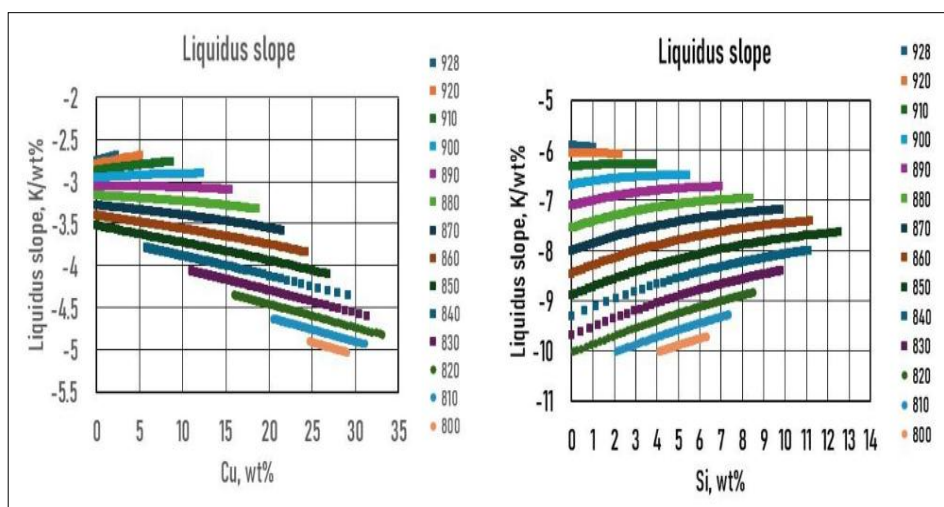
A kristályosodás szimulációnál hasznosak a binér eutektikus vályúk $X_{Si}(X_{Cu})$ függvényei, melyek ismeretében adott X_{Cu} -koncentrációhoz kiszámítható az X_{Si} -koncentráció, és a $T_L(X_{Si}, X_{Cu})$ függvény felhasználásával a koncentrációpárhoz tartozó hőmérséklet.

$$X_{Si}(X_{Cu}) = -0,0006 X_{Cu}^2 - 0,2422 X_{Cu} + 12,563 \quad (\alpha + Si \text{ binér eutektikum}), \quad (55)$$

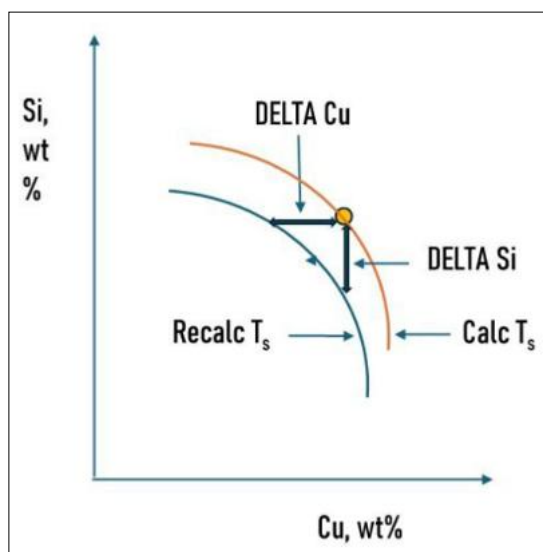
$$X_{Si}(X_{Cu}) = -0,0025 X_{Cu}^2 - 0,8534 X_{Cu} + 31,082 \quad (\alpha + Al_2Cu \text{ binér eutektikum}). \quad (56)$$



11. ábra. (a): Thermo-Calc-cal és ESTPHAD-dal számított konódák. (b): a Thermo-Calc-kal és az ESTPHAD-dal számított konódák adatainak összehasonlítása



12. ábra. (a): $\partial T_L / \partial X_{Si}$ a Cu-koncentráció függvényében. (b): $\partial T_L / \partial X_{Cu}$ szemben a Si-koncentráció függvényével



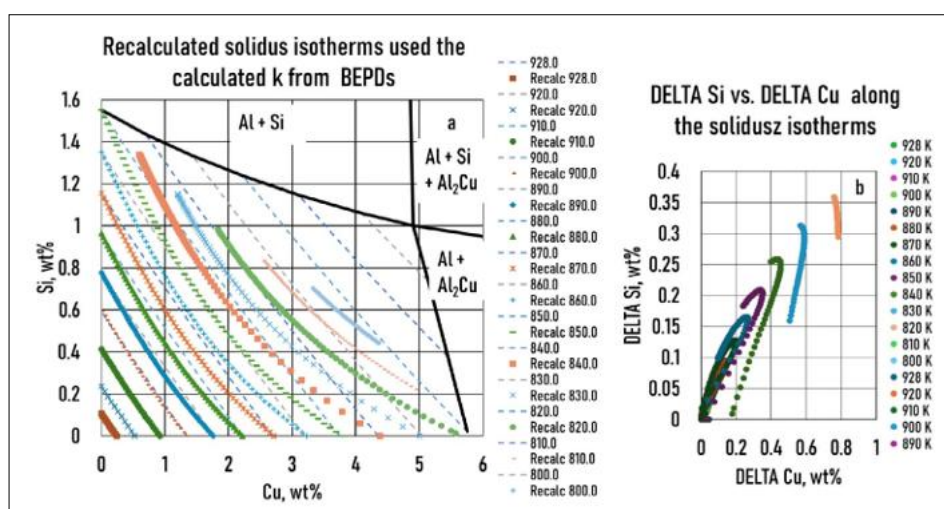
13. ábra. A DELTA Cu és a DELTA Si meghatározásának módszere

4.3. Likviduszlejtés

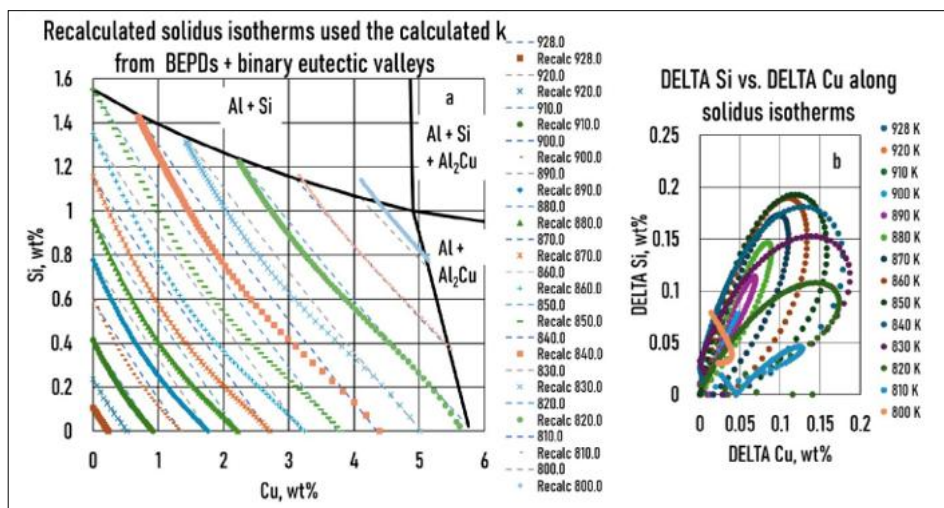
A kristályosodás szimulációja során gyakran szükséges kiszámítani a likviduszfelület lejtéseit. A 7. és 8. táblázat tartalmazza az M_{AlSiCu}^{Si} és M_{AlSiCu}^{Cu} lejtésfüggvények $S_{AlSiCu}^{Si}(X_{Si}^l, X_{Cu}^l = \text{const.})$ és $S_{AlSiCu}^{Cu}(X_{Si}^l, X_{Cu}^l = \text{const.})$ számlálójának az állandóit, amelyeket a likvidusz-hőmérséklet negyedrendű becslése alapján számoltunk ki, az összes izotermát használva. A 12a., b. ábra az M_{AlSiCu}^{Si} és M_{AlSiCu}^{Cu} lejtésfüggvények értékeit a Cu- és Si-koncentrációk függvényében mutatja az adott izoterma mentén.

4.4. A szoliduszizotermák újraszámítása a likviduszizotermákból a megoszlási hányadosokkal

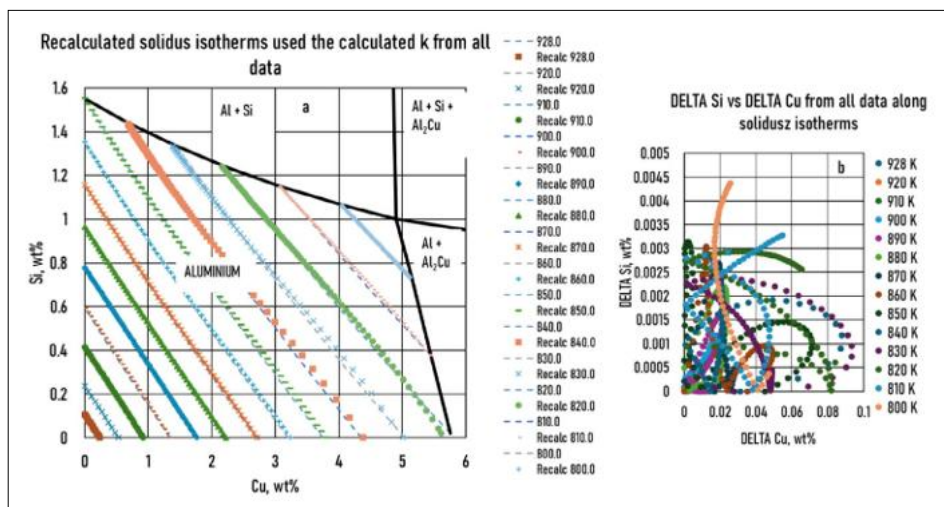
Az újraszámítás célja az volt, hogy meghatározzuk azokat az ötvözetkoncentrációkat, amelyekben elfogadható szoliduszkoncentrációt lehet kapni a (43) egyenlet alapján. Az újraszámítás során a szolidusz-



14. ábra. (a): A szoliduszizotermák újraszámolt eredményei a BEPD-k megoszlási hányadosaival számolva. (b): DELTA Si-koncentráció a DELTA Cu-koncentráció függvényében az izotermák mentén



15. ábra. (a): Újrászámolt szoliduszizotermák a BEPD-k és a binér eutektikus vályúk megoszlási hányadosaival számolva. (b): DELTA Si-koncentráció kontra DELTA Cu-koncentráció az izotermák mentén



16. ábra. (a): Újrászámolt szoliduszizotermák a BEPD, a binér eutektikus vályúk és minden izoterma megoszlási hányadosát használva. (b): DELTA Si-koncentráció a DELTA Cu-koncentráció függvényében az izotermák mentén

koncentrációkat a negyedrendű becsült likvidusz-koncentrációkból újrászámoltuk a likviduszizotermák mentén a megoszlási hányadosokkal. A (34) egyenlet által kiszámított izotermák és az újrászámított izotermák összehasonlításához a DELTA Cu- és DELTA Si-értékeket használtuk (lásd 13. ábra). Az újrászámított koncentrációk felhasználásával újrászámított izotermákat hoztunk létre (14a., 15a. és 16a. ábra). A DELTA Cu és DELTA Si változásának tanulmányozására az izotermák mentén a DELTA Si- és DELTA Cu-értékeket a 14b., 15b. és 16b. ábrákon mutatjuk be.

4.4.1. Elsőrendű becslés

A TEPD megoszlási hányadosait a BEPD-k megoszlási hányadosai alapján becsültük. A szoliduszizotermák koncentrációját ezen két megoszlási hányados alapján újrászámoltuk a likviduszizotermák koncentrációjából az izotermák mentén. Az újra-

számolt szoliduszizotermákat összehasonlítottuk a negyedrendű becsléssel (14. ábra) számított szilárd izotermákkal.

4.4.2. Másodrendű becslés

A TEPD megoszlási hányadosait a BEPD-k megoszlási hányadosainak és a binér eutektikus vályúk konódáiból számított megoszlási hányadosok adataiból számoltuk ki. A szoliduszizotermák koncentrációját ezekkel a megoszlási hányadosokkal újrászámoltuk, a likviduszizotermák koncentrációjából az izotermák mentén. Az újrászámolt szoliduszizotermákat összehasonlítottuk a negyedrendű becsléssel (15. ábra) kiszámított szolidusz izotermákkal.

4.4.3. Harmadrendű becslés

A TEPD megoszlási hányadosait a BEPD-k megoszlási hányadosainak, a binér eutektikus vályúk meg-

oszlási hányadosainak és az összes izoterma adataiból származó számított megoszlási hányadosok adataiból határoztuk meg. A szoliduszizotermák koncentrációját ezekkel a megoszlási hányadosokkal újraszámoltuk a likviduszizotermák koncentrációiból. Az újraszámított szoliduszizotermákat összehasonlítottuk a negyedrendű becsléssel számított szoliduszizotermákkal (16. ábra).

5. Az eredmények értékelése

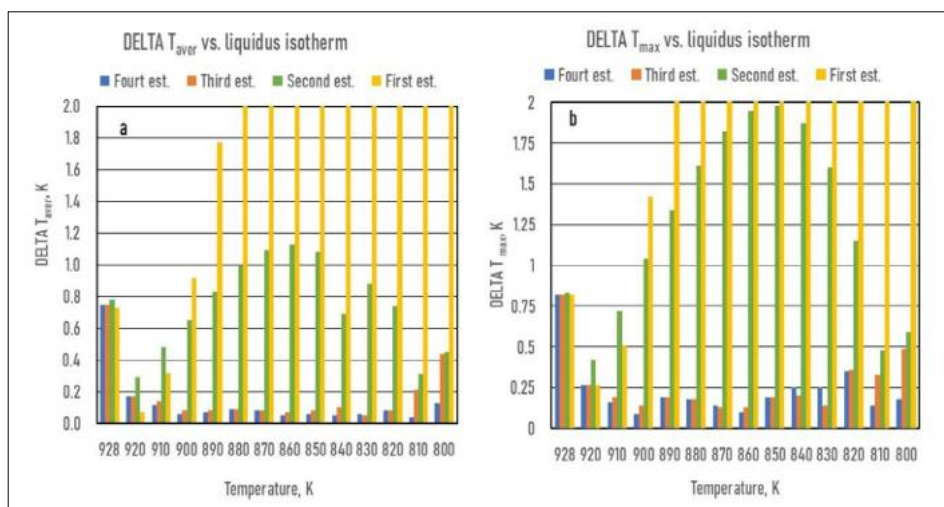
5.1. A BEPD-ok likvidusz- és szoliduszvonalainak számítása

Az ESTPHAD számítás közelíti a Thermo-Calc eredményeit $\pm 0,5$ K (likvidusz) és $0,1$ K (szolidusz) értékekkel Al-Cu BEPD esetében, míg $\pm 0,005$ K (likvidusz) és $0,05$ K (szolidusz) Al-Si BEPD esetében (1b. ábra (Al-Cu) és 2b. ábra (Al-Si)).

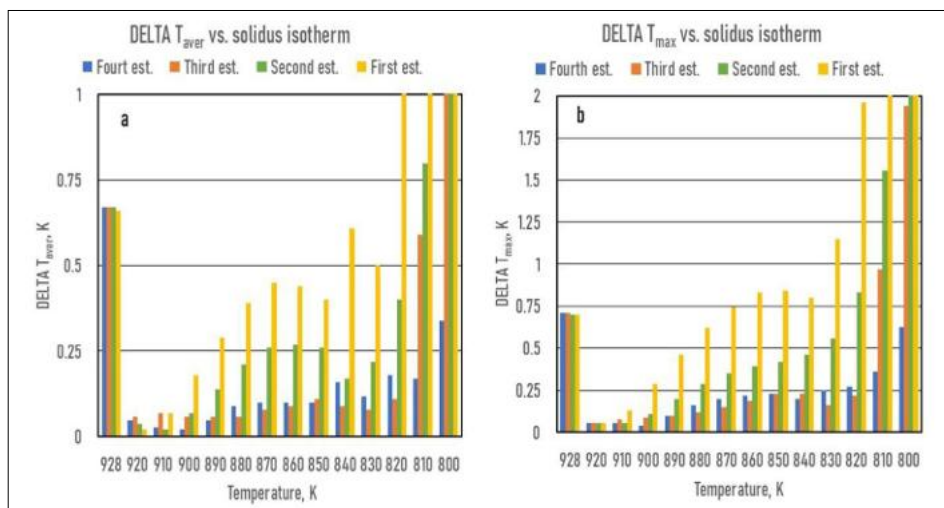
5.2. A TEPD likvidusz- és szoliduszfelületeinek számítása

5.2.1. Elsőrendű becslés

A T_L és T_S függvények állandóit kizárólag a BEPD-ok adatai alapján számítottuk ki ((27) és (28) egyenlet). A likviduszizotermák mentén (3a. ábra) a DELTA T folyamatosan változik két $T_{\min}$ között a Cu-koncentráció függvényében (3b. ábra). Az Al-Si BEPD-nél ($X_{Cu} = 0$) kezdődő és Al-Cu BEPD-nél ($X_{Si} = 0$) végződő izotermánál (928 K és 850 K között) a DELTA $T_{\min}$ -t a BEPD adatok határozzák meg, amelyek nagyon kicsik (lásd 5.1. pont). 850 K alatt a DELTA $T_{\min}$ az Al-Cu BEPD-nél található. Az első izotermánál (928 K) a DELTA $T_{\max}$ és a DELTA T_{aver} közel egyforma, $0,82$ K és $0,73$ K, és nagyobbak, mint a második izotermánál (920 K), ahol $0,27$ K és $0,17$ K. Ahogy a hőmérséklet csökken, a DELTA $T_{\max}$ és a DELTA T_{aver} nő. A DELTA $T_{\max}$ és DELTA T_{aver} 910 K és 900 K alatt kisebbek,



17. ábra. Likvidushőmérséklet-különbség a Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások között négy különböző becslésnél az izoterma-hőmérsékletek függvényében. (a): átlag, (b): maximum



18. ábra. A Thermo-Calc és az ESTPHAD számítások közötti szolidushőmérséklet-különbség négy különböző becslésnél az izoterma-hőmérsékletek függvényében. (a): átlag, (b): maximum

mint 1 K, így az ezen izotermák által határolt koncentrációtartományban az elsőrendű becslés alkalmas a kristályosodás szimulációjához. Természetesen a DELTA $T_{\max}$ nagyobb, mint a DELTA T_{aver} (17. ábra).

A szoliduszizotermák mentén (4a. ábra) a DELTA T folyamatosan változik két DELTA $T_{\min}$ között a Cu-koncentráció függvényében (4b. ábra). Akárcsak a likviduszizotermáknál, az Al-Si BEPD-nél ($X_{\text{Cu}} = 0$) kezdődő és Al-Cu BEPD-nél ($X_{\text{Si}} = 0$) végződő izotermáknál (928 K és 850 K között) a DELTA $T_{\min}$ -t a BEPD adatai határozzák meg, amelyek nagyon kicsik (lásd 5.1. szakasz). 840 K-tól 820 K-ig az izotermák az Al+Si binér eutektikus vályúnál indulnak, és az Al-Cu BEPD-nél érnek véget, míg 810 K és 800 K-nél az izotermák a két binér eutektikus vályú között helyezkednek el. Az első izotermánál (928 K) a DELTA $T_{\max}$ és a DELTA T_{aver} közel egyforma, 0,7 K és 0,66 K, és nagyobb, mint a második izotermánál (920 K), 0,06 K és 0,02 K. Ahogy a hőmérséklet csökken, a DELTA $T_{\max}$ és a DELTA T_{aver} 0,06 K-ról 4,31 K-re, illetve 0,02 K-ról 4,23 K-re nő. A DELTA $T_{\max}$ és a DELTA T_{aver} 840 K-ig, illetve 830 K-ig 1 K-nél kisebb marad (18. ábra).

5.2.2. Másodrendű becslés

A T_L és T_s függvények állandóit a BEPD-k és a két binér eutektikus vályú adatai alapján számoltuk ki. A likviduszizotermák mentén (5a. ábra), ahogy az elsőrendű becslés alapján, a DELTA T két $T_{\min}$ között változik a Cu-koncentráció függvényében (5b. ábra). A másodrendű és az elsőrendű becslés közötti különbség az, hogy minden izoterma az Al-Si BEPD-nél vagy az Al+Si eutektikus vályúnál kezdődik, és az Al-Cu BEPD-nél vagy az Al+Al₂Cu eutektikus vályúnál ér véget, amelyeknél a DELTA T nagyon kicsi. Az első izotermánál (928 K) a DELTA $T_{\max}$ és a DELTA T_{aver}

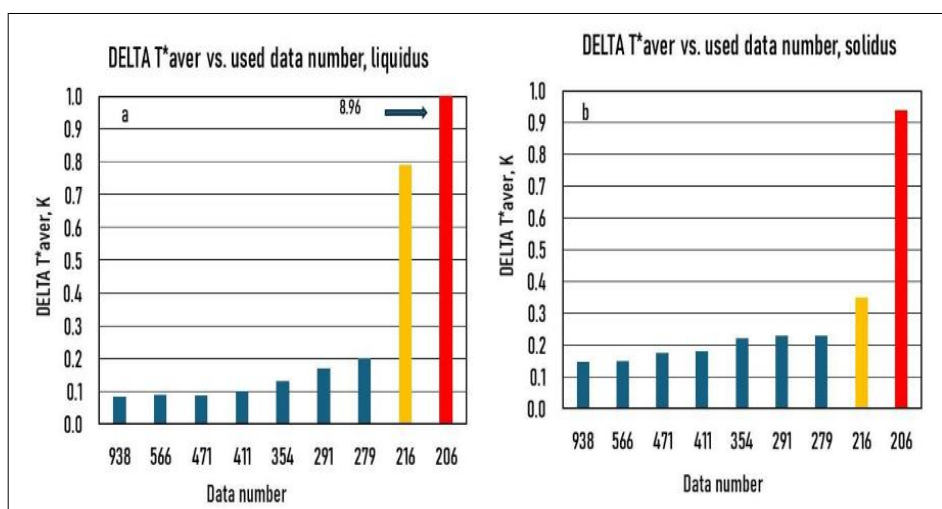
a két becslés típusban, 0,83 K és 0,78 K, és magasabbak, mint a második izotermánál (920 K), 0,42 K és 0,29 K. A DELTA $T_{\max}$ és DELTA T_{aver} folyamatosan nő a hőmérséklet csökkenésével; a DELTA $T_{\max}$ kisebb, mint ~1 K 900 K-ig, de nem haladja meg a 2 K-t, míg a DELTA T_{aver} az izotermák egész tartományában kisebb, mint ~1 K (17. ábra).

Szoliduszizotermák esetében (6a. ábra) a DELTA $T_{\max}$ és DELTA T_{aver} hasonlóan változnak, mint a likviduszizotermák esetében (6b. ábra). A DELTA $T_{\max}$ és DELTA T_{aver} folyamatosan nő a hőmérséklet csökkenésével. A DELTA $T_{\max}$ 820 K-ig míg a DELTA T_{aver} 810 K-ig kisebb, mint 1 K. A ternér eutektikus pontnál ezek 2,1 K és 1,6 K (18. ábra).

5.2.3. Harmadrendű és negyedrendű becslések

A T_L és T_s függvények állandóit a BEPD-k, a két binér eutektikus vályú adatai és néhány izoterma (1-től 14-ig) adatai alapján számoltuk ki. Ebből a számításból kettőt (a harmadrendű becslés, amelyet csak a 830 K izoterma adataival (7a. ábra, likvidusz, 8a. ábra, szolidusz), és a negyedrendű becslés, amelyet 14 izoterma adataival számoltuk ki (9a. ábra, likvidusz, 10a. ábra, szolidusz) részletesen bemutatunk. A munka ezen részének célja, tanulmányozni a likvidusz- és szolidusfelületek (izotermák) adataiból származó adatok hatását. A 13. táblázatban a használt izotermák és a számításokban használt adatok száma látható. A harmadrendű és negyedrendű becslés esetén a felhasznált adatok összesített száma rendre 279, illetve 938.

Likvidusz esetében a DELTA T függvényének alakja, mint a Cu-koncentráció függvénye, mindkét esetben hasonló a másodrendű becsléshez (7b. és 9b. ábra). A harmadrendű becslés esetében a DELTA $T_{\max}$ és a DELTA T_{aver} kisebb, mint a másodrendű becslés esetében. Figyelembe véve a 14 izotermát, a DELTA



19. ábra. A hőmérséklet-különbség a Thermo-Calc és az ESTPAD között az adatszám függvényeként (a): likvidusz, (b): szolidusz

15. táblázat. Számított likvidusz-, szolidusz-, binér és ternér eutektikus hőmérsékletek, likviduszlejtések és megoszlási hányadosok

	C_{Cu} t%	C_{Si} t%	T_L K	T_s K	T_{BE} K	T_{TE} K	Lejtés 1, K/t% Si	Lejtés 2, K/t% Cu	k_{Cu}	k_{Si}
Példa1	3	0,6	921,8	835,3	–	–	–6,01	–2,72	0,10	0,10
Példa 2	10	7	856,6	–	825,4	798,5	–7,75	–3,62	0,12	0,12
Példa 3	25	3	830,4	–	802,3	798,5	–9,18	–4,42	0,15	0,15
Példa4	18,48	3,54	852,6	–	–	798,5	–8,25	–3,86	0,13	0,13

T_{max} és a DELTA T_{aver} rendre kevesebb, mint 0,49 K és 0,44 K, kivéve az első izotermát, ahol ezek rendre 0,82 K és 0,77 K (17. ábra).

A szolidusz-hőmérséklet esetében, amikor csak 1 izoterma adatait használtunk (harmadrendű becslés), a DELTA T_{max} és a DELTA T_{aver} kevesebb, mint 1 K, kivéve a ternér eutektikus pont közelében (810 K és 800 K), ahol ezek rendre 1,94 K és 1,65 K (7b. ábra). Mind a 14 izotermát használva (negyedrendű becslés) a DELTA T_{max} és DELTA T_{aver} számításához, azok kisebbek, mint 0,63 és 0,34 K (18. ábra).

A binér eutektikum megszilárdulásának kezdeti hőmérséklete kiszámítható, mivel ebben az esetben a binér eutektikus vályúk ismertek.

A számítás hibája az ESTPHAD és a Thermo-Calc által számított adatok közötti különbséggel is jellemezhető (DELTA T_{aver}^* a 13. táblázatban).

A 19a. és 19b. ábra a Delta T_{aver}^* -t (a DELTA T_{aver}^* egy becsléstípus átlaga) az adatszám függvényeként mutatják a likvidusz- és szolidusz-hőmérséklet esetén. Egyértelműen látható, hogy a DELTA T_{aver}^* drasztikusan csökken, ahogy a becsléshez használt adatok száma nő (lásd a 13. táblázat adatai számát).

5.3. A binér eutektikum kristályosodásának kezdő hőmérsékletének (T_{BE}) kiszámítása

A 11a. ábra az ESTPHAD és a Thermo-Calc számítások összehasonlítását mutatja. Az 1. és 2. felületek az $\alpha+Si$ és $\alpha+Al_2Cu$ binér eutektikumok kezdő kristályosodási hőmérsékletét mutatják. A 11b. ábrán az ESTPHAD és a termokalkulus kiszámított eredményeit hasonlítjuk össze. Látható, hogy az illeszkedés elfogadható ($R^2 \sim 1$). Ez a tény bizonyítja, hogy az a feltételezés, hogy a konódák az origónál metszik egymást, helyes volt.

5.4. Likvidusz lejtések számítása

A 12. ábra a kiszámított két likviduszlejtést mutatja az izotermák mentén. Az abszolút $\partial T_L / \partial X_{Si}$ értéke folyamatosan nő (12a. ábra), míg az $\partial T_L / \partial X_{Cu}$ abszolút értéke folyamatosan csökken (12b. ábra) a Cu- és Si-koncentráció növekedésével. Mindkét érték nő, ahogy csökken a hőmérséklet.

5.5. Néhány példa

A 11a. ábrán négy összetételt választottunk ki, hogy bemutassák az ESTPHAD módszer használatát. A kiválasztott ötvözetek esetében a kristályosodási folyamatok a következők:

1. példa

$$T_L \rightarrow T_s: \text{liq} \rightarrow \alpha$$

2. példa

$$T \rightarrow T_{BE}: \text{liq} \rightarrow \alpha$$

$$T_B \rightarrow T_{TE}: \text{liq} \rightarrow (\alpha+Si) \text{ (1. felület)}$$

$$T_{TE}: \text{liq} \rightarrow (\alpha+Si+Al_2Cu)$$

3. példa

$$T \rightarrow T_{BE}: \text{liq} \rightarrow \alpha$$

$$T_B \rightarrow T_{TE}: \text{liq} \rightarrow (\alpha+Al_2Cu) \text{ (2. felület)}$$

$$T_{TE}: \text{liq} \rightarrow Si+Al_2Cu$$

4. példa

$$T \rightarrow T_{TE}: \text{liq} \rightarrow \alpha$$

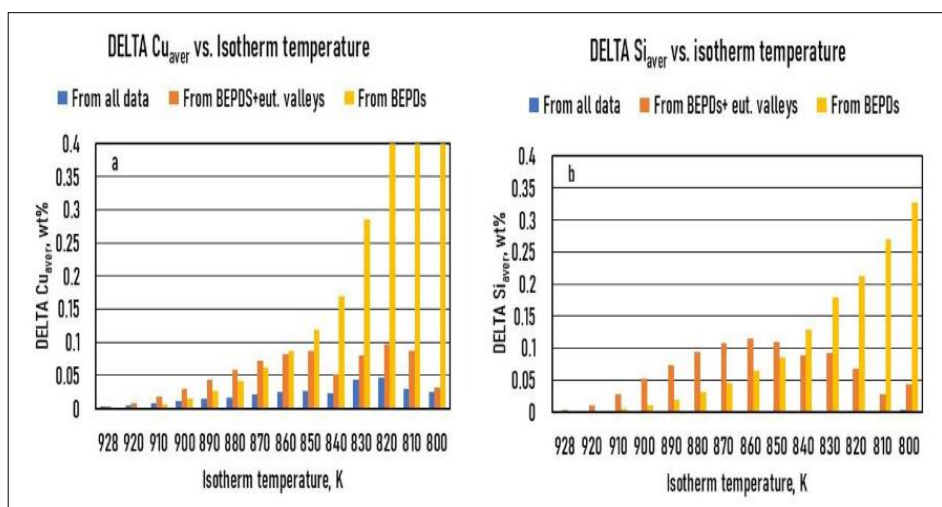
$$T_{TE}: \text{liq} \rightarrow (\alpha+Si+Al_2Cu)$$

A 15. táblázat a kiszámított eredményeket mutatja.

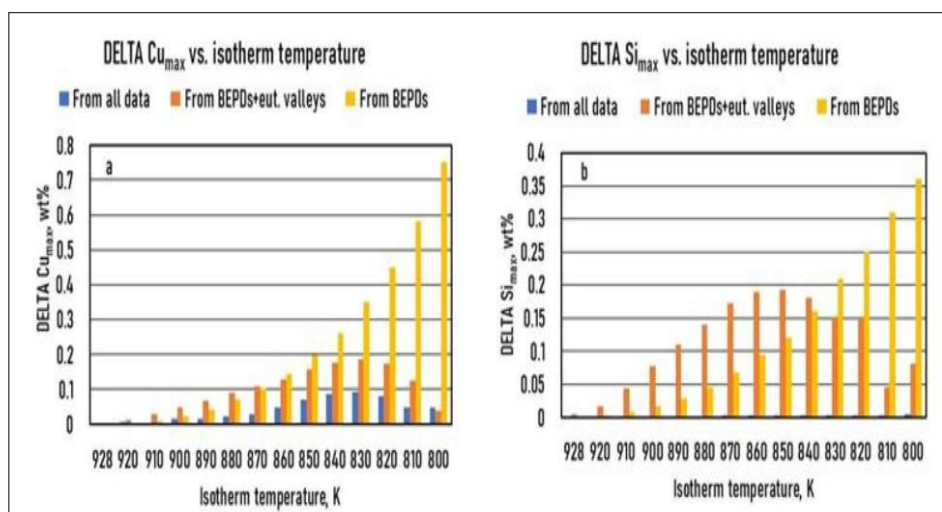
5.6. A szoliduszizoterma újraszámítása a likvidusz-izotermákból megoszlási hányadosok felhasználásával

A megoszlási hányadosok számításának hibája a maximális DELTA Cu_{max} , DELTA Si_{max} és az átlagos DELTA Cu_{aver} , DELTA Si_{aver} értékekkel jellemezhető. Mindkét módszert használjuk. A megoszlási hányadosok értékeit a kristályosítás szimulációjában használják; a gyakorlatban ezek kevésbé érdekesek. A gyakorlatban a fontos adatok a kristályosodás kezdő- és vég hőmérsékletei. A szimulációs eredményeket validálni lehet azzal, hogy a számított koncentrációeloszlásokat összehasonlítják a mért értékekkel. Az EDS mikroszondával megbízhatóan mérhető minimum koncentráció $\sim 0,1$ t%. Ezért ezt az értéket használtuk a különböző becslések értékelésekor.

A négyféle becslés eredményei a 20. és 21. ábrán találhatók.



20. ábra. A számított és újraszámított koncentrációk közötti maximális különbség három különböző típusú becslésnél az izoterma-hőmérsékletek függvényében: (a) DELTA Cu_{max} (b) DELTA Si_{max}



21. ábra. A számított és újraszámított koncentrációk közötti átlagkülönbség három különböző típusú becslésnél az izoterma-hőmérsékletek függvényében. (a) DELTA Cu_{aver} (b) DELTA Si_{aver}

5.6.1. Elsőrendű becslés

A megoszlási hányadosokat a két BEPD adataiból számítottuk ki. Az újraszámolt szoliduszizotermák eredményei a 14a. ábrán láthatóak. Az izotermák az egyik BEPD-től (pl. Al-Cu) indulnak, DELTA Cu és DELTA Si az izotermák mentén folyamatosan nő egy maximumig (DELTA Cu_{max} és DELTA Si_{max}), majd csökken a másik BEPD-ig (Al-Si) (14b. ábra). Ha az izoterma nem két BEPS között van, a DELTA Cu_{max} és a DELTA Si_{max} értéke jelentősen nő, 800 K-nél 0,78 t% és 0,36 t%. 870 K-nál a DELTA Cu_{max} és a DELTA Si_{max} 0,103 t% és 0,068 t%. Így azoknál az ötvözeteknél, amelyek koncentrációja a tiszta Al olvadási hőmérséklete (933 K) és a 870 K likviduszizoterma között van, az elsőrendű becslés alkalmazható a szimulációban. Mivel a DELTA Cu_{aver} és DELTA Si_{aver} kisebb, mint a 860 K-nél kapott maximumnál, (0,086 t% és 0,0631 t%), az átlagot tekintve a határ 860 K (16. ábra).

5.6.2. Másodrendű becslés

A megoszlási hányadosokat a két BEPD és a binér eutektikus vályúk adataiból számítottuk ki. Az újraszámított szoliduszizotermák eredményei a 15a. ábrán találhatóak. Az izotermák mentén a DELTA Cu és DELTA Si hasonlóan változnak, mint az elsőrendű becslésnél, de ezek valamivel nagyobbak, mint az elsőrendű becslés esetében 860 K-ig (15b. ábra). Ennek a magyarázata az, hogy a binér eutektikus vályúk adatainak figyelembe vétele valamivel rontja a számítás pontosságát az Al-sarokhoz közeli izotermák esetében, míg a pontosság jelentősen nő a hármas eutektikus pont közelében.

Az átlagos körülményeket figyelembe véve, a 0,1 t% határ az egész koncentrációs tartományban elérhető (16. ábra).

5.6.3. Harmadrendű becslés

Ezt a típusú újraszámítást nem vizsgáltuk.

5.6.4. Negyedrendű becslés

A megoszlási hányadosokat a két BEPD, a binér eutektikus vályúk és mind a 14 izoterma adataiból számítottuk ki. Az újraszámolt szoliduszizotermák eredményei a 16a. ábrán találhatók. Az izotermák mentén a DELTA Cu és DELTA Si kissé zavarosan változik, de a DELTA Cu_{max} és DELTA Si_{max} kisebbek, mint a másodrendű becslés esetében (16b. ábra).

A DELTA Cu és a DELTA Si mindkét esetben a teljes koncentrációs tartományban kevesebb, mint 0,1 t%.

6. Összefoglalás, következtetések

Az előző két cikkben [34, 35] bemutattuk a fázisdiagramok becslésének elvét ESTPHAD módszerrel binér és ternér egyensúlyi fázisdiagramok esetében. A módszer használhatóságát binér és ternér izomorf és binér eutektikus egyensúlyi fázisdiagramok esetében igazoltuk. Ebben a cikkben leírtuk a likvidusz, a szolidusz, a binér eutektikumok kristályosodásának kezdeti hőmérsékletének, valamint a megoszlási hányadosoknak a számítási eljárását az Al-Si-Cu eutektikus ternér egyensúlyi fázisdiagramok esetében. A számításokhoz a Thermo-Calc szoftverrel létrehozott adatbázist használtuk. Mind a négy becsléstípus esetén kimutattuk a közelítési hibát. A hibák nagysága alapján meghatároztuk az ötvözetek koncentrációs tartományát, ahol a maximális és átlagos hiba kevesebb, mint 1 K, illetve kevesebb, mint 0,1 t%.

Az Al-Si-Cu TEPD megoszlási hányadosait három különböző becsléssel számítottuk ki az Al-sarokban, ahol a kristályosodás egy Al-szilárd oldattal kezdődik. Ezeknek a megoszlási hányadosoknak a felhasználásával a szoliduszkoncentrációkat újraszámoltuk az izotermák mentén a likviduszkoncentrációkból. Meghatároztuk a maximális és átlagos hibákat az izotermák mentén. Feltételezve, hogy az újraszámított Cu- és Si-koncentrációkban 0,1 wt% az elfogadható hiba (összehasonlítva a kiszámított szilárd izotermák koncentrációjával), nemcsak a gyakorlatban, hanem a kristályosodási szimulációkhoz is megfelel a számítás.

Megállapítottuk, hogy

- Egy korlátozott koncentrációs tartományban, az Al-sarok körül (izotermával határolva) az Al-Si-Cu ternér ötvözet szilárd oldatának likvidusz- és szolidusz-hőmérséklete kiszámítható a binér Al-Si és Al-Cu EPD likvidusz- és szolidusz-hőmérsékletei ismeretében, 1 K pontossággal (elsőrendű becslés). A szoliduszfelületen az izotermákkal határolt koncentrációtartomány sokkal kisebb, mint a lik-

viduszfelületen, amelyet ugyanaz az izoterma határol. Ez a becslő eljárás alkalmazható más TEPD esetén is, ahol csak a két BEEPDP ismert.

- Számos esetben a binér eutektikus vályúk is ismertek a BEPD-k mellett, és ezek hőmérséklet-koncentrációs adatai alapján a szilárd oldat likvidusz- és szolidusz-hőmérséklete 2 K pontossággal kiszámítható az eutektikus vályúk által határolt teljes koncentrációtartományban (másodrendű becslés). A másodrendű becslés kisebb koncentrációs tartományban használható, mint az elsőrendű az Al-sarok közelében, a maximális hibafeltétel alapján. Az átlagos hibafeltételt figyelembe véve, a másodrendű becslés a teljes koncentrációtartományban használható.
- A likvidusz- és a szoliduszfelületek eutektikus vályúinak ismeretében a binér eutektikum kristályosodásának kezdeti hőmérséklete is kiszámítható annak a feltételezésével, hogy az eutektikus vályúk konódái az Al-sarokban metszik egymást.
- A likvidusz- és szoliduszfelületek adatainak (egy vagy néhány izoterma) ismerete alapján a számítás hibája drasztikusan csökken (kisebb mint 1 K) (harmadrendű becslés). Nagy mennyiségű adat (~1000, sok izoterma) (negyedrendű becslés) használatával a pontosság tovább növelhető ($\Delta T_{\text{átlag}}^*$ likvidusz: 0,083 K, szolidusz: 0,147 K), és a számított hőmérsékletek alkalmasak szimulációkhoz.
- A megoszlási hányadosok negyedrendű becslése az egész koncentrációs tartományra alkalmazható, figyelembe véve mind a maximális, mind az átlagos hibát. Megjegyezzük, hogy korrekt megoszlási hányadosok csak a számított TEPD-ből számíthatók.

Ugyanakkor meg kell jegyezni, hogy az ESTPHAD eredményének hibája (mért értékek és az ESTPHAD számított értékei közötti különbség) erősen függ a Thermo-Calc számítás pontosságától.

Az ESTPHAD módszer főbb előnyei:

- A likvidusz- és szolidusz-hőmérsékletek és a megoszlási hányadosok kiszámításához használt egyenleteket termodinamikai alapon dolgoztuk ki más közelítő eljárásokkal szemben;
- Az egyenletek állandói közvetlenül a likvidusz- és szolidusz-hőmérsékletek mért eredményeiből, grafikusan ismert diagramok digitalizálásával szerzett vagy CALPHAD típusú számítások adataiból számíthatók még Excel-lel is, és nincs szükség más szoftverre;
- Az egyenletek használata több nagyságrenddel gyorsítja fel a kristályosodás szimulációját, a CALPHAD típusú számítással azonos pontosság mellett.

Finanszírozás: Ezt a kutatást az Európai Űrügynökség finanszírozta a CETSOL/HUNGARY ESA PRODEX (No. 4000131880/NL/SH) projektek keretében.

Jelölések

<i>Betűszavak</i>	
CALPHAD	CALculation of PHase Diagram
ESTPHAD	ESTimation of PHase Diagram
EPD	egyensúlyi fázisdiagram
BEPD	kétalkotós (binér) egyensúlyi fázisdiagram
TEPD	háromalkotós (ternér) egyensúlyi fázisdiagram
<i>Szimbólumok</i>	
G	az ötvözet szabad energiája
μ_A, μ_B, μ_C	kémiai potenciál
G_A, G_B	az A és B elemek szabad energiája
G_A^l, G_B^l	az A és B elemek szabad energiája olvadékfázisban
G_A^s, G_B^s	az A és B elemek szabad energiája szilárd fázisban
X_A, X_B	az A és B elemek koncentrációja az ötvözetben
X_{Si}^l, X_{Cu}^l	az A, B és C elemek koncentrációja az olvadékfázisban
X_{Si}^s, X_{Cu}^s	az A, B és C elemek koncentrációja a szilárd fázisban
μ_A^l, μ_B^l	az A, B és C elemek parciális moláris szabad energiája az olvadékfázisban
μ_A^s, μ_B^s	az A, B és C elemek parciális moláris szabad energiája a szilárd fázisban
Ω^l, Ω^s	interakciós paraméter az olvadék és szilárd fázisban
T	abszolút hőmérséklet
T_{Al}	az alumínium olvadáspontja
$T_L(X_{Si}^l, X_{Cu}^l)$	az A – B TEPD likvidusz- és szolidusz-hőmérséklete
R	általános gázállandó
$k_{Si}^{AlSi}, k_{Cu}^{AlCu}$	a Si és Cu elemek megoszlási hányadosa az Al-Si és Al-Cu ötvözetekben
$k_{Si}^{AlSiCu}, k_{Cu}^{AlSiCu}$	a Si és Cu elemek megoszlási hányadosa az Al-Si-Cu ötvözetben
$M_{AlSiCu}^{Si}, M_{AlSiCu}^{Cu}$	likviduszlejtés az Al-Si-Cu TEPD-ben
$S_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l)$	számláló a lejtés számításánál
$F_{AlSi}^l(X_{Si}^l), F_{AlSi}^l(X_{Cu}^l)$ és $F_{AlSi}^s(X_{Si}^s), F_{AlSi}^s(X_{Cu}^s)$	adatbázis az $F_{AlSi}^l(X_{Si}^l), F_{AlCu}^l(X_{Cu}^l)$ és $F_{AlSi}^s(X_{Si}^s), F_{AlCu}^s(X_{Cu}^s)$ függvények állandóinak a számításához
$F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l), F_{AlSiCu}^s(X_{Si}^s, X_{Cu}^s)$	adatbázis a $F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l), F_{AlSiCu}^s(X_{Si}^s, X_{Cu}^s)$ függvények állandóinak a számításához
$\Delta F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l), \Delta F_{AlSiCu}^s(X_{Si}^s, X_{Cu}^s)$	adatbázis a $\Delta F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l), \Delta F_{AlSiCu}^s(X_{Si}^s, X_{Cu}^s)$ függvények állandóinak a számításához
$A_{AB}^l(i)$ és $A_{AB}^s(i)$	az $F_{AB}^l(X_B^l)$ és $F_{AB}^s(X_B^s)$ függvények állandói
$A_{AlSi}^l(i)$ és $A_{AlSi}^s(i)$	az $F_{AlSi}^l(X_{Si}^l)$ és $F_{AlSi}^s(X_{Si}^s)$ függvények állandói
$A_{AlCu}^l(i)$ és $A_{AlCu}^s(i)$	az $F_{AlCu}^l(X_{Cu}^l)$ és $F_{AlCu}^s(X_{Cu}^s)$ függvények állandói
$A_{AlSiCu}^l(i)$ és $A_{AlSiCu}^s(i)$	a $\Delta F_{AlSiCu}^l(X_{Si}^l, X_{Cu}^l)$ és $\Delta F_{AlSiCu}^s(X_{Si}^s, X_{Cu}^s)$ függvények állandói
$\ln k_{Si}^{AlSi}(X_{Si}^l), \ln k_{Cu}^{AlCu}(X_{Cu}^l)$	adatbázis a $\ln k_{Si}^{AlSi}(X_{Si}^l)$ és $\ln k_{Cu}^{AlCu}(X_{Cu}^l)$ függvények állandóinak a számításához
$B_{AB}^l(i)$ és $B_{AB}^s(i)$	a $\ln k_{Si}^{AlSi}(X_{Si}^l)$ függvény állandói
$B_{AC}^l(i)$ és $B_{AC}^s(i)$	a $\ln k_{Cu}^{AlCu}(X_{Cu}^l)$ függvény állandói
$\Delta \ln k_{Si}^{AlSiCu}(X_{Si}^l, X_{Cu}^l), \Delta \ln k_{Cu}^{AlSiCu}(X_{Si}^l, X_{Cu}^l)$	adatbázis a $\Delta \ln k_{Si}^{AlSiCu}(X_{Si}^l, X_{Cu}^l)$ és $\Delta \ln k_{Cu}^{AlSiCu}(X_{Si}^l, X_{Cu}^l)$ függvények állandóinak a számításához
$B_{AlSiCu}^l(i)$	a $\Delta \ln k_{Si}^{AlSiCu}(X_{Si}^l, X_{Cu}^l)$ függvény állandói
$C_{AlSiCu}^l(i)$	a $\Delta \ln k_{Cu}^{AlSiCu}(X_{Si}^l, X_{Cu}^l)$ függvény állandói
<i>Alsó indexek</i>	
m, i	az állandók számai
<i>Felső indexek</i>	
l, s	olvadék, szilárd

- [1] Roósz, A.; Exner, H. E. Ternary restricted-equilibrium phase diagram-I. A first report: General principles and definitions. *Acta Metall. Et Mater.* 1990, 38, 2003-2008. [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(90\)90311-4](https://doi.org/10.1016/0956-7151(90)90311-4)
- [2] Roósz, A.; Exner, H. E. Ternary restricted-equilibrium phase diagram-II. Practical application: Aluminium-rich corner of the Al-Cu-Mg system. *Acta Metall. Et Mater.* 1990, 38, 2009-2016. [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(90\)90312-5](https://doi.org/10.1016/0956-7151(90)90312-5)
- [3] Kaufman, L.; Bernstein, H. *Computer Calculation of Phase Diagrams*. Academic Press: New York, NY, USA, 1970.
- [4] Kuz, W.; Fisher, D. J. *Fundamentals of Solidification*, 3rd ed., Trans. Tech. Publications: Bäch, Switzerland, 1992.
- [5] Danntzig, J. A.; Rappaz, M. *Solidification Engineering Science, Materials*; EPFL Press: Lausanne, Switzerland, 2009.
- [6] Zhao, G.; Li, X. Z.; Xu, D.; Guo, J.; Fu, H.; Du, Y.; He, Y. Numerical computations for temperature, fraction of solid phase and composition coupling in ternary alloy solidification with three different thermodynamic data-acquisition method. *Calphad* 2012, 36, 155-162. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2011.07.002>
- [7] Djurdjevic, M. B.; Manasijevic, A.; Odonovic, Z.; Dolic, N. Calculation of likvidusz temperature for aluminium and magnesium alloys applying method of equivalency. *Adv. Mater. Sci. Eng.* 2013, 2013, 170527. <https://doi.org/10.1155/2013/170527>
- [8] Robles Hernandez, F. C.; Djurdjevic, M. B.; Kierkus, W. T.; Sokolowski, J. H. Calculation of the likvidusz temperature for hypo and hypereutectic aluminium silicon alloys. *Mater. Sci. Eng. A* 2005, 396, 271-276. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2005.01.024>
- [9] Farahany, S.; Erfani, M.; Karamoozia, A.; Ourdjini, A.; Idris, M. H. Artificial neural networks to predict of likvidusz temperature in hypoeutectic Al-Si cast alloys. *J. Appl. Sci.* 2010, 10, 3243-3249. <https://doi.org/10.3923/jas.2010.3243.3249>
- [10] Wang, X.; Wang, X.; Wang, B.; Wang, B.; Liu, Q. Differential calculation model for likvidusz temperature of steel. *Steel Res. Int.* 2011, 82, 164-168. <https://doi.org/10.1002/srin.201000080>
- [11] Min, L.; Hongbo, L.; Rongyuan, X.; Xiaorui, C.; Ying, L.; Hao, X.; Caidong, Z.; Zhiqiang, T. Investigation of the likvidusz temperature calculation method for medium manganese steel. *High Temp. Mater. Process.* 2023, 42, 20220285
- [12] Sertucha, J.; Lacaze, J.; Regordosa, A.; Suarez, R. Polynomial description of the Fe-C-Si stable phase diagram for up to 4.5 Wt% Si, including the effect of Cr, Cu, Mn and P. *Int. J. Met.* 2025, 19, 1847-1856. <https://doi.org/10.1007/s40962-024-01428-z>
- [13] Vorozhtcov, V. A.; Pavelina, M. E.; Stolyarova, V. L.; Fedorova, A. V.; Sinelshchikova, O. Y.; Almjashv, V. I. Likvidusz temperatures in the La_2O_3 -SrO-TiO₂-ZrO₂-Fe₂O₃ system: Calculation and experiment. *Ceram. Int.* 2025, 51, 320-330. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2024.10.463>
- [14] Afanasyev, O. S.; Afanasyeva, E. A.; Egorov, G.F. Analytical approximation and numerical simulation of liquid for nonequilibrium multicomponent eutectic systems. *Vestn. Samara State Tech. Univ. Tech. Sci. Ser.* 2022, 30, 6-19. <https://doi.org/10.14498/tech.2022.1.1>
- [15] Zhang, Y.; Hu, B.; Zeng, G.; Liu, S.; Du, Y.; Yin, H. Experimental investigation, thermodynamic modelling and solidified microstructure of the Cu-Ti-Nb ternary system. *Calphad* 2022, 76. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2022.102395>
- [16] Jin, C.; Hu, B.; Zeng, G.; Jing Xie Sheng, S.; Liu, S.; Hu, J. Experimental investigation and CALPHAD modelling of phase equilibria of the Cu-Ag-Zr system. *Calphad* 2022, 79, 102487. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2022.102487>
- [17] Zhang, Y.; Hu, B.; Li, B.; Zhang, M.; Wang, Q.; Du, Y. Experimental investigation and CALPHAD modelling of the Cu-Cr-Si ternary system. *Calphad* 2021, 74, 102324. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2021.102324>
- [18] Zhou, J.-Q.; Hu, B.; Li, B.-F.; Du, Y.; Wang, J. Experimental investigation and thermodynamic modelling of Cu-Nb-Si system. *Trans. Nonferrous Met. Soc. China* 2023, 33, 824-838. [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(23\)66149-7](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(23)66149-7)
- [19] Ferreira, I. L.; Garcia, A.; Nestler, B. On macrosegregation in ternary Al-Cu-Si alloys: Numerical and experimental analysis. *Scr. Mater.* 2004, 50, 407-411. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2003.11.012>
- [20] Du, Q.; Eskin, D. G.; Katgerman, L. Modeling Macroseggregation during direct-chill casting of multi-component aluminium alloys. *Metall. Mater. Trans. A* 2007, 38, 180-189. <https://doi.org/10.1007/s11661-006-9042-0>
- [21] Zhang, C.; Miao, J.; Chen, S.; Zhang, F.; Luo, A. A. CALPHAD-based modelling and experimental validation of microstructural evaluation and microsegregation in magnesium alloys during solidification. *J. Phase Equilib. Diffus.* 2019, 40, 495-507. <https://doi.org/10.1007/s11669-019-00732-0>
- [22] Mikolajczak, P.; Geanau, A.; Ratke, L. Mushy zone calculation with application of CALPHAD technique. *Metals* 2017, 7, 363. <https://doi.org/10.3390/met7090363>
- [23] Grafe, U.; Böttger, B.; Tieden, J.; Fries, S.G. Coupling of multicomponent thermodynamic databases to a phase field model: Application to solidification and solid state transformations of superalloys. *Scr. Mater.* 2000, 42, 1179-1186. [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(00\)00355-9](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(00)00355-9)
- [24] Kattner, U. The thermodynamic modelling of multicomponent phase equilibria. *JOM* 1997, 49, 14-19. <https://doi.org/10.1007/s11837-997-0024-5>
- [25] Greven, K.; Ludwig, A.; Hofmeister, T.; Sahm, R. *Solidification of Metallic Melts in Research and Technology*. Ludwig, A., ed.; Wiley VCH: Weinheim, Germany, 1999; p.119.
- [26] Du, Q.; Eskin, D.G.; Katgerman, L. Modeling macrosegregation during direct-chill casting of multi-component aluminium alloys. *Metall. Mater. Trans. A* 2007, 38, 180-189. <https://doi.org/10.1007/s11661-006-9042-0>
- [27] Dore, X.; Combeau, H.; Rappaz, M. Modelling of microsegregation in ternary alloys: Application to the solidification of Al-Mg-Si. *Acta. Mater.* 2000, 48, 3951-3962. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(00\)00177-4](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(00)00177-4)

- [28] Du, Q.; Eskin, D.G.; Katgerman, L. An efficient technique for describing a multi-component open system solidification path. *Comput. Coupling Phase Diagr. Thermochem.* 2008, 32, 478–484. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2008.06.007>
- [29] Zhao, G.; Xu, D.; Fu, H. Thermo-Calc-based numerical computations for temperature, fraction of solid phase and composition couplings in alloy solidification. *Int. J. Mater. Res.* 2008, 99, 680–688. <https://doi.org/10.3139/146.101675>
- [30] Zhao, G.; Li, X.Z.; Xu, D.; Guo, J.; Fu, H.; Du, Y.; He, Y. Numerical computations for temperature, fraction of solid phase and composition coupling in ternary alloy solidification with three different thermodynamic data-acquisition method. *Calphad* 2012, 36, 155–162. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2011.07.002>
- [31] Qiu, K.; Wang, R. C.; Peng, C. Q. Mathematical model of likvidusz temperature in quaternary aluminium phase diagram. *Adv. Mater. Res.* 2015, 1095, 545–548. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.1095.545>
- [32] Qiu, K.; Wang, R.; Peng, C.; Lu, X.; Wang, N. Polynomial regression and interpolation of thermodynamic data in Al-Si-Mg-Fe system. *Comput. Coupling Phase Diagr. Thermochem.* 2015, 48, 175–183. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2015.01.005>
- [33] Djurdjevic, M. B.; Manasijevic, A.; Odonovic, Z.; Dolic, N. Calculation of likvidusz temperature for aluminium and magnesium alloys applying method of equivalency. *Adv. Mater. Sci. Eng.* 2013, 2013, 170527. <https://doi.org/10.1155/2013/170527>
- [34] Kőrösy, G.; Roósz, A.; Mende, T. The ESTPHAD Concept: An optimised set of simplified equations to estimate the equilibrium likvidusz and szolidusz temperatures, partition ratio and likvidusz slope for quick access to equilibrium data in solidification software, Part I: Binary equilibrium phase diagram. *Metals* 2024, 14, 1266. <https://doi.org/10.3390/met14111266>
- [35] Kőrösy, G.; Roósz, A.; Mende, T. An optimised set of simplified equations to estimate the equilibrium likvidusz and szolidusz temperatures, partition ratio and likvidusz slope for quick access to equilibrium data in solidification software, Part II, Ternary isomorphous equilibrium phase diagram. *Metals* 2025, 15, 803. <https://doi.org/10.3390/met15070803>



Article

The ESTPHAD Concept: An Optimised Set of Simplified Equations to Estimate the Equilibrium Liquidus and Solidus Temperatures, Partition Ratios and Liquidus Slopes for Quick Access to Equilibrium Data in Solidification Software Part III: Ternary Eutectic-Type Equilibrium Phase Diagram

Gergely Kőrösy ¹, András Roósz ^{1,2,*} , Ádám Végh ¹ and Tamás Mende ¹

¹ Institute of Physical Metallurgy, Metal Forming and Nanotechnology, Faculty of Materials and Chemical Engineering, University of Miskolc, 3515 Miskolc, Hungary

² HUN-REN TKI, Materials Science Research Group, 3515 Miskolc, Hungary

* Correspondence: andras.roosz@uni-miskolc.hu

Egy alternatív forrás energiaválság idején – az alginit újragondolva

An alternative source in times of energy crisis – alginite reconsidered

SZILÁGYINÉ SEBŐK SZILVIA¹, VADÁSZI MARIANNA²

¹Miskolci Egyetem, Alkalmazott Földtudományi Intézet, 3515 Miskolc

²Miskolci Egyetem, Kőolaj és Földgáz Intézet, 3515 Miskolc



A magyar alginitkutatás immár öt évtizedes múlttra tekint vissza. A Solti Gábor által a Miskolci Egyetemnek adományozott, az évek során felhalmozott, levéltári dokumentumok tanúsága szerint ez a sajátos, szerves anyagokban gazdag üledékes kőzet nemcsak tudományos szempontból bizonyult izgalmasnak, hanem számos gyakorlati alkalmazás alapját is képezte. A kutatások íve jól kirajzolja, miként vált az alginit a kezdeti geológiai érdekességből komplex, multidiszciplináris vizsgálatok tárgyává. Az eredmények azt mutatják, hogy az alginit továbbra is, sőt, talán egyre inkább stratégiaileg fontos természeti erőforrásként kezelendő, amely jelentős potenciállal rendelkezik a fenntartható mezőgazdaságban, a környezetvédelemben és az anyagtudományban. A Miskolci Egyetem Solti-gyűjteményének mesterséges intelligenciával támogatott feldolgozása új lehetőségeket kínál az interdiszciplináris kutatás és a fenntartható ipari alkalmazások számára. Cikkünkben a teljesség igénye nélkül áttekintjük a hazai kutatás főbb sarokpontjait és további perspektivikus kutatási irányokat ismertetünk.

Kulcsszavak: alginit, adszorpció, energiahordozó, zöld hidrogén

Hungarian alginite research now looks back on five decades of history. According to the archive documents accumulated over the years and donated to the University of Miskolc by Gábor Solti, this unique sedimentary rock rich in organic substance has not only proven to be scientifically exciting but has also formed the basis for numerous practical applications. The arc of research clearly outlines how alginite has evolved from an initial geological curiosity into the subject of complex, multidisciplinary studies. The results show that alginite should continue to be, and perhaps even increasingly, treated as a strategically important natural resource, which has significant potential in sustainable agriculture, environmental protection and materials science. The processing of the Solti collection of the University of Miskolc supported by artificial intelligence offers new opportunities for interdisciplinary research and sustainable industrial applications. In our article, we review the main cornerstones of domestic research without claiming to be exhaustive and present further promising research directions.

Keywords: alginite, adsorption, energy mineral, green hydrogen

1. Bevezetés

2025-ben jelentős adatgyűjteményt adományozott dr. Solti Gábor geológus a Miskolci Egyetemenek. A több mint 600 tétel egy hazai természeti erőforrás, az alginit kutatásának dokumentációja a felfedezéstől a „Kiemelkedő Nemzeti Érték”-ké minősítésig. Az egyetem sokoldalú kutatási, fejlesztési lehetőséget remél a hatalmas adattömeg modern eszközökkel történő feldolgozásától. A munka időközben különös többletjelentőséget, stratégiai fontosságot kapott az energiaforrások terén zajló, kedvezőtlen geopolitikai folyamatok miatt – az ukrán háborútól a Hormuzi szorosig. Cikkünkben röviden bemutatjuk az archívumot, a vizsgálatok kezdeteit, az elképzelt kutatási irányokat, remélve, hogy leendő kutatási partnereink kezébe is eljut kezdeményezésünk, és többen bekapcsolódnak a különböző innovációs, fejlesztési munkákba.

2. Az alginit mint kőzet

A képződmény olyan szerves anyagban dúsult kőzet, amelyben jelentős mennyiségű kerogén képződött a kőzetet alkotó algamaradványok reduktív bomlása nyomán. Bár itthon korábban olajpala elnevezést is kapott, a szervesanyag-tartalma többségében magas szénatomszámú (bitumen) szénhidrogénekből áll.

A MÁFI földtani térképezése nyomán 1974 óta ismert, hogy a Kemenes-háton és a Bakony-hegységben három megkutatott előforduláson (Pula, Gércse, Egyházaskesző) közelítően 150 milló tonna alginit található. Mindhárom előfordulás pliocén bazalt maar krátereiben kialakult, édesvízi tavak üledékeiként keletkezett 20–40 m vastagságban, döntően elhalt barna algák (*Bothriococcus brauni*) és agyagásványok felhalmozódásából [1]. Az előfordulások alaposabb megismerése vezetett egyéb földtani környezetekben

használatú alginit kőzetcsoporthoz felismeréséhez (Borsodi medence, Várpalota, Zsámbék, majd Szendrő, Hidas) [2–5]. Ezeknek a később felderített előfordulásoknak a földtani kutatása, anyaguk minősítése nem történt meg.

A magyarországi kutatási eredmények nyomán több környező szomszédos területen azonosítottak hasonló alginit-előfordulásokat Ausztriában, Szlovákiában [6–8].

Magyarországon pillanatnyilag két helyen termelik az alginitet: Pulán és Gércén. A lelőhelyeket az Alginít Kft. (<https://alginit.hu/index.php/hu/>) és a Vázsonyi Szövetkezeti Kft. (<https://vazsonyiszovetkezetikft.uzleti.hu/>) üzemelteti. Az egyházaskeszői alginit-előforduláson a fedőjében lévő bentonitot bányásszák nyersanyagként.

Az alginit nincs egyedül: a világon hasonló algák alkotott kőzeteket is leírtak a földtani szakemberek másutt és más földtörténeti időszakokból, és több név alatt ismerjük: boghead coal, torbanite, kukkersit, Papierschiefer stb.

3. A Solti-gyűjtemény a Miskolci Egyetemen

Az archívum az adományozás folytán a Miskolci Egyetem tulajdona. Jelenleg az anyag archiválása, osztályozása, digitalizálása folyik.

A gyűjtemény törzsanyagai jelentős részben az 1974–2000 közötti időszakot ölelik fel, főként nem publikált kutatási jelentések, szabadalmi dokumentációk alkotják. A hazai alginittel kapcsolatos információk tömör összefoglalása is meghaladná cikkünk terjedelmét.

A kutatási jelentések az energiatermelésre, a szilikátipari felhasználásokra, az agrárgazdálkodási vizsgálatokra, humán alkalmazásokra vonatkozó információt nyújtanak. Ehhez társulnak az utóbbi év-

tizedekben kiadott, alginit tárgyú hazai és külföldi publikációk bibliográfiái, illetve szabad hozzáférésű egyéb anyagai. A dokumentumokat folyamatosan dolgozzák fel a TEKH Szakkollégium keretében alakult Alginít Munkacsoport, illetve a vele együttműködésben működő partnerei.

Az adatok értékelését nagy mértékben segíti a Mhyner Geoconsulting által



1. ábra. Alginit, Pula

fejlesztett MI-alapú feldolgozás, amely egyre bővülő ismeretanyag alapján tár fel különböző irányú kutatási, alkalmazási, fejlesztési lehetőségeket.

A hozzáférés megoldása még nem végleges, jelenleg az Alginít Munkacsoportozhoz kell a megkeresésekkel fordulni (*Vadászi Marianna*, e-mail: marianna.vadaszi@uni-miskolc.hu).

4. A hazai alginít kutatás – múlt, jelen és jövő egy különleges ásvány tükrében

Leíró és alap kutatások

Az 1970-es és '80-as években induló kutatások elsődleges célja az alginít előfordulások feltárása és földtani jellemzése volt. A dokumentumok szerint a hangsúly ekkor a telepek térképezésén, a keletkezési környezet rekonstruálásán és az anyag alapvető fizikai-kémiai tulajdonságainak meghatározásán volt. Földtani jellegeinek, karakterének felderítésében az egykori MÁFI geológusai és paleontológusai említendők az első helyen. Jámbor és Solti [1] az első terepi leírók, Ravasz [9] a közettani jellemzés közlője. Az alga vizsgálatai a MÁFI belső jelentéseiben és a Magyar Természettudományi Múzeum szakembereinek közleményében is olvasható munkájaként ismertek [10]. Szerves geokémiai tulajdonságait főként a szegedi JATE kutatói elemezték részletesen [11]. A szénhidrogén geokémiai és technológiai vizsgálatai a legnagyobb számban a veszprémi MÁFKI-ben készültek [12]. Bár az alginítet (mint kőzetet) 1973-ban a Magyar Állami Földtani Intézet (MÁFI) geológusai fedezték fel Pulánál, a Miskolci Egyetem (korábban Nehézipari Műszaki Egyetem) folyamatosan jelen volt a nyersanyag tudományos vizsgálatában. A vizsgálatok során hamar nyilvánvalóvá vált, hogy az alginít különleges összetétele – magas szervesanyag-tartalma, jelentős ásványi komponensekkel – egyedülállóvá teszi.

Energetikai hasznosítást célzó kutatások

1974–1985 között a veszprémi Magyar Ásványolaj és Földgáz Kísérleti Intézetben (MÁFKI) kiterjedt kutatás folytatott ennek az anyagnak az energetikai hasznosítására. Számos kutatási erőfeszítés nyomán [13–15] megállapították, hogy az alginít jelentős mennyiségben tartalmaz szénhidrogént, de ebből az akkor elérhető technológiákkal folyékony vagy gáznemű, energetikailag hasznosítható szénhidrogén gazdaságosan nem állítható elő. Ezt követően terelődtek át a kutatások fő vonalai az agráralkalmazások területére.

Mezőgazdasági és talajjavítási alkalmazások

Ezen a téren a kísérletek több állami gazdaságban és kutatóintézetben folytak, de publikus információ csak az 1980-as évek második felétől jelent meg [16]. Számos talajjavítással és mezőgazdasági hasznosítással kapcsolatos kísérlet, megfigyelés indult, amely bizonyította, hogy az alginít vízmegtartó képessége és tápanyag-tartalma miatt ígéretes talajjavító anyag lehet. Több kísérlet igazolta a pozitív hatását a talajszerkezetre és a növények fejlődésére. A kutatók közleményükben [17] az alginítet mint a szerves trágya egyik lehetséges alternatívájaként pozícionálták, amely különösen azokon a helyeken jelenthet kedvező lehetőséget, ahol az istállótrágya nem, vagy nem kellő mennyiségben áll rendelkezésre. Megállapításaik szerint az alginít jelentős humuszképző potenciállal rendelkezik, és egyúttal a talaj víz- és tápanyag-gazdálkodását is javítja, ezért főleg a gyenge termőképességű talajokon alkalmazhatják nagy sikerrel. Nem elhanyagolható szempont az sem, hogy a hagyományos szerves trágyákhoz képest tartósabb hatást biztosíthat. Ezeket a megállapításokat a vázsonyi alginít homoktalajokon folytatott kísérleti eredmények [18] szintén alátámasztották, és megállapították, hogy növeli a homoktalajok víztartó képességét, mérsékli a tápanyag kimosódását a talajból, javítja a talajszerkezetet, és fokozza a növények fejlődését, így a terméshozamot is kedvezően befolyásolja. Savanyú homoktalajokon is vizsgálták az alginít hatását, hasonló eredményekkel [19]. Alginít alkalmazásával a szárazabb időszakokban a növények stressztűrő képessége javult [20]. Egy közlemény a szőlőtermesztésben alkalmazott alginít előnyeit ismerteti, és a fentebb említett kedvező hatásokon kívül kiemeli a gyökérszóna kedvezőbb állapotát, különösen a sekély termőrétegű vagy gyorsan kiszáradó talajú szőlőültetvényeken [21]. Már a korai tanulmányokból és kísérletekből is jól látható tehát, hogy az alginít számos, napjainkra egyre kritikusabbá váló mezőgazdasági problémára lehet orvosság, megőrizve, illetve javítva talajaink szervesanyag-tartalmát és a talajjavításra adott válaszkészségeiket, az aszálykitértiséget csökkentheti. A klímaváltozás szélsőséges epizódjai hatásának mérséklésében is támogatólag lehet jelen, mindemellett költséghatékony, és megfelel a hatályos környezetvédelmi direktíváknak.

A közlemények egyúttal kiemelnek néhány korlátozó tényezőt, mint például a nagy dózisok szükségessége, a szállítási költségek, a helyspecifikus tényezők, mint például talajtípusok, csapadékvizszoonyok hatása az eredményekre. Ezen a területen számos kutatási előzmény után a közelmúltban végzett kísérletek megerősítették, hogy a nagy szervesanyag- és mikroelem-tartalma, kedvező vízmegtartó képessége, kísérő

agyagásvány-tartalma miatt talajok javítására kitűnően felhasználható [22, 23].

Környezetvédelem

Az 1990-es évektől kezdődően hazánkban az alginit érintő kutatások fókuszra egyre inkább a környezetvédelmi alkalmazások felé tolódott. Vizsgálták az alginit szennyezőanyag-megkötő képességét, különösen nehézfémek és szerves szennyezők esetében [24]. Kimutatták, hogy az alginit csökkentette a mobilis fémfrakciókat, javította a talaj stabilizálását, és hozzájárult a fitostabilizáció sikerességéhez. A 2000-es évektől kezdve a kutatás egyre komplexebbé vált, hangsúlyozva az alginit hatékony kationcserélő kapacitását, magas szervesanyag-tartalmát és természetes szorbensként történő felhasználhatóságát a környezetvédelmi alkalmazásokban [25].

Szűrési technológiák

Az elmúlt évtized dokumentumai már egyértelműen innovációorientált kutatási irányokat tükröznek. Kiemelhető az új feldolgozási és aktiválási technológiák fejlesztése, a kombinált anyagok (pl. alginitalapú kompozitok) vizsgálata és olyan speciális alkalmazások, mint a víztisztítási rendszerekben vagy ipari szűrőanyagként való felhasználási lehetőségeinek, módszereinek, alkalmazásainak kutatása [26–28].

5. Tervezett új hazai kutatási stratégiák

A Miskolci Egyetem Műszaki Föld és Környezettudományi Kara évek óta foglalkozik a nem fémes ásványi nyersanyagok, közöttük az alginit előkészítési technológiájával. Kutatásaik a közet fizikai és kémiai tulajdonságainak javítására, az őrlés finomságára, kationcserélő képességének optimalizálására irányultak. Egyik fontos munkájuk volt a hazai és az észt algaközetek összehasonlítása [29], amelyben kimutatták, hogy alapvető fizikai paraméterek tekintetében a hazai alginitek közelítenek az észtországi nagy gazdasági jelentőségű kukersíthez (1. táblázat).

1. táblázat. A hazai és az észtországi algaközetek fizikai paraméterei [29]

Minta	Fűtőérték (kJ/kg)	Hamu (%)	Nedvesség (%)
Pula	3979	59,39	6,06
Gérce	776	77,56	5,85
Észtország	5033	59,35	6,97

Ezek az új megközelítések lehetővé teszik az alginit szerkezetének és működésének mélyebb megér-

tését, különösen a pórusrendszer, a szerves-ásványi kölcsönhatások és az adszorpciós folyamatok terén. Ebben a vonatkozásban fontos cél lesz a hidrogén kinyerése és tárolása lehetőségének vizsgálata.

Az elmúlt években egyre nagyobb hangsúlyt kaptak az ipari szűrőanyagként és víztisztítási komponensként történő alkalmazások. A laboratóriumi és félüzemi vizsgálatok szerint az alginit: biofilmes hordozóközegként, természetes szűrőanyagként, ioncserélő közegként, valamint passzív kármentesítő rendszerek komponenseként is alkalmazható lehet. A legújabb fejlesztési stratégiák már többfunkciós, nagy hozzáadott értékű anyagok előállítására törekсенek. Ennek egyik példája az alginit funkcionális cementes komponensként történő alkalmazása, ahol az anyag belső vízutánpótlást biztosíthat, csökkentheti a zsugorodási repedéseket, javíthatja a hő- és hangszigetelést, valamint részben megőrizheti adszorpciós tulajdonságait cementes környezetben is.

Különösen innovatív kutatási irányt képviselnek azok a vizsgálatok, amelyek az alginitet cementes szigetelő- és retardációs rendszerekben alkalmazzák. Ezek célja olyan hosszú távú okos, passzív védelmi rendszerek fejlesztése, amelyek kombinálják az alacsony permeabilitást, a kémiai puffert hatást és a szennyező komponensek megkötését.

Összességében az alginit kutatási stratégiái mára az egyszerű nyersanyag-hasznosítástól eljutottak a komplex, multifunkcionális környezetipari és anyagtudományi alkalmazásokig, amelyek egyaránt szolgálják a fenntartható nyersanyag-gazdálkodást, a környezetvédelmi technológiák fejlesztését, valamint a nagy hozzáadott értékű innovatív ipari termékek létrehozását.

6. Összegzés

Az alginit a kezdeti geológiai érdekességből komplex, multidiszciplináris vizsgálatok tárgyává vált. A dokumentumok által vázolt fejlődési ív nemcsak a múlt eredményeit mutatja be, hanem egyben irányt is ad a jövő kutatásai számára.

Az előttünk álló időszak kulcskérdése az lesz, hogy a felhalmozott tudást miként sikerül hatékonyan átültetni a gyakorlatba – különös tekintettel a fenntartható gazdálkodásra, a környezetvédelemre és az innovatív anyagfejlesztésre.

A Solti Gábor által adományozott dokumentáció azért különleges, mert tartalmazza azokat a kéziratok kutatási jelentéseket is, amelyek soha nem jelentek meg nyomtatásban, és részben a miskolci laboratóriumok mérésein alapultak az 1980-as években. Az alapvető tulajdonságok megismerésén már nagyrészt sikerült túljutnunk, jelenleg ezek összegzésével akarunk előre haladni. További jelentős eredmények elérése több tudományterület eredményeinek integrálásával

érhető el. A további kutatás indokolt, hiszen még mindig jelentős kiaknázási lehetőségeket rejt magában ez a nyersanyag, különösen, ha lépést akarunk tartani a modern környezetvédelmi és fenntarthatósági kívánalmakkal.

Köszönetnyilvánítás

Elismerésünk illeti dr. Solti Gábort, akinek több évtizedes gyűjtő és megőrző munkája teszi ma lehetővé az alginít újraértékelését. Köszönet illeti a Miskolci Egyetem Könyvtár és Adattár vezetését és dolgozóit az archívum szakszerű elhelyezéseért, digitalizálásáért. Hálásak vagyunk az Alginít Kft.-nek a vizsgálati minták biztosításáért és az Mhyner Geoconsulting Kft.-nek a dokumentációk MI-alapú feldolgozásáért.

Irodalom

- [1] Jámor Á., Solti G. (1976): A Balatonfelvidéken és Kemenesháton felkutatott felső pannóniai olajpala előfordulás földtani körülményei. MÁFI Jelentése az 1974. évről, pp. 193–219., MÁFI, Budapest.
- [2] Radócz Gy. (1980): Alginít indikáció a szarvaskői miocén barnakőszéntelepes rétegsorban. MÁFI Évi Jelentése az 1979. évről, pp. 115–119., MÁFI, Budapest.
- [3] Solti G. (1980): A várpalotai olajpala. MÁFI Évi Jelentése az 1979. évről, pp. 249–265., MÁFI, Budapest.
- [4] Ravasz Cs., Solti G. (1980): Sulphur-, gypsum- and alginite-bearing strata in the Zsámbék Basin. In: *Acta mineralogica-petrographica*, 24(2), 191–207.
- [5] Szentpétery I., Less Gy. (2006): Az Aggtelek–Rudabányai hegység földtana. 89 p. MÁFI, Budapest
- [6] Solti G., Lobitzer H., Kodina L., Ravasz Cs. (1994): Das Vorkommen von "Alginit" (sensu Jámor & Solti 1975) in der Hochriegelschichten von Weingraben (Burgenland, Österreich). In: *Jubiläumsschrift 20 Jahre Geologische Zusammenarbeit Österreich–Ungarn*, pp. 485–492. Wien, ISBN 3-900312-92-3.
- [7] Vass D. (1998): Economic and ecologic importance of the non-metallic deposits in basalt-maars of Southern Slovakia. *Acta Montanistica Slovaca Ročník*, 3(1), 59–70.
- [8] Motyljeva S., Brindza J., Ostrovsky R., Mertvicheva M. (2014): Physical and chemical characteristics of Pincina alginite. https://www.researchgate.net/publication/298717913_Physical_and_chemical_characteristics_of_Pincina_alginite
- [9] Ravasz Cs. (1980): A pulai és gércei olajpala közettani vizsgálata. MÁFI Évi Jelentése az 1974. évről, pp. 221–229., MÁFI, Budapest.
- [10] Fischer O., Hably L. (1991): Pliocene flora from the alginite at Gércé. *Annls hist.-nat. Mus. Natn. Hung.*, 83, 25–47.
- [11] Hetényi M., Martz K., Tóth E. (1977): Contributions to the knowledge of the Hungarian oil shale kerogen I. Preliminary report on the results of the pyrolysis and selective oxidation. *Acta Miner. Petr. Szegediensis*, 23/1, 165–175.
- [12] Arató J., Bella L. (1976): A pulai és gércei olajpala technológiai és kémiai vizsgálata. MÁFI Jelentése az 1974. évről, pp. 287–308. MÁFI, Budapest.
- [13] Jámor Á. (1980): A magyarországi olajpalakutatások eredményei. *Földtani Kutatás XXIII./4.*, Központi Földtani Hivatal, Budapest, pp. 5–8.
- [14] Barta É. (1979): Széles körű összefogással az olajpala hasznosítási lehetőségeit kutatják a Magyar Ásványolaj és Földgáz Kísérleti Intézetében. *Napló*, 35/281., p. 8. (1979. dec. 1.)
- [15] Pápay L. (1980): Several features of the oil-shale kerogen bitumens of Pula (Hungary). *Acta Miner. Petr. Univ. Szeged*, XXIV/1., 113–124.
- [16] Solti G., Szabó P., Ivancsics J. (1986): Új talajjavító: a vázsonyi alginít. *Magyar Mezőgazdaság*, 41(6), 10–11.
- [17] Solti G. (1983): Új szervestrágya: az olajpala. *Kertészet és Szőlészet*, 32(6), 5. (1983. február 10.)
- [18] Solti G., Szabó P., Ivancsics J. (1986): Új talajjavító: a vázsonyi alginít. *Magyar Mezőgazdaság*, 41(6), 10–11. (1986. febr. 6.)
- [19] Szita K. (1987): Az alginít savanyú homokon. *Kertészet és Szőlészet*, 36(4), 9. (1987. január 22.)
- [20] Seléndi Sz. (1987): Alginittel – sokkal gyorsabban. *Kertészet és Szőlészet*, 36(18), 3.
- [21] Juhász T. (1988): Szőlőtrágyázás alginittal. *Kertészet és Szőlészet*, 37, 8. (1988. febr. 11.)
- [22] Kristály F. (2025): A szénalapú talajjavítók szerepe. *Agrárágazat* 2025/4. <https://agraragazat.hu/hir/szenalapu-talajjavitok-szerepe/>
- [23] Ragályi Peter, Kádár Imre, Csathó Péter, Murányi Attila, Radimsky L., Gajdó A. (2019): Effect of Gércé alginite on the fertility of an acidic sandy soil during five years – A gércei alginít öt éves tartamhatása savanyú homoktalaj termékenységére.
- [24] Feigl V., Anton A., Uzinger N., Gruiz K. (2007): Chemical stabilisation combined with phytostabilisation applied to mine waste contaminated soils in Hungary. *Advanced Materials Research*, 20–21, 315–318. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.20-21.315>
- [25] Sári Rauch R.: Study of the sorption properties of alginite to remove organic contaminants. Thesis of PhD dissertation, University of Pannonia Doctoral School of Chemical and Material Science, Veszprém, 2021, pp. 2–6.
- [26] Tica D., et al. (2011): Immobilization of potentially toxic metals using different soil amendments. *Chemosphere*, 85(4), 577–583. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2011.06.085>
- [27] Fazekas B., Pítás V., Thury P., Kárpáti, Á. (2009): Examination of the use of support materials of natural origin in wastewater treatment. *Hungarian Journal of Industrial Chemistry, Veszprém*, 37(1), 1–4. (2009)
- [28] Frišták Vladimír, Pipiška Martin, Nováková Mária, Lesný Juraj, Packová Alena (2015): Sorption separation of cadmium from aqueous solutions by alginite material: kinetic and equilibrium study. *Desalination and Water Treatment*, 56, 379–387. <https://doi.org/10.1080/19443994.2014.935811>
- [29] Lakatos I., Solti G., Földessy J. (2011): Alginít típusú nyersanyagok alternatív energiahordozóként való alkalmazása – Kutatási jelentés.

A 200 éves MTA kohászati vonatkozásai

The metallurgical aspects of the 200-year-old Hungarian Academy of Sciences

DR. TÖRÖK TAMÁS ISTVÁN

Professor emeritus, Miskolci Egyetem, Miskolc



A reformkori magyarországi iparosítással mintegy párhuzamosan megalakult Magyar Tudományos Akadémián (MTA) a kohászat jeles képviselői mind a mai napig képviselik az iparfejlesztésben mindig is fontos metallurgiai szak- és tudományterületeket. A korábbi és a jelenlegi osztálytagolódásban a műszaki-mérnöki tudományok fejlődéséről és átrendeződéséről hosszú évtizedeket átfogó történeti korszakokra vetítve kerülnek bemutatásra olyan kohászati ipartörténeti és a Magyar Tudományos Akadémián belüli szervezeti átalakulások, melyek részben visszatükrözik ebben a kétszáz évben Magyarországon a kohászati/metallurgiai tudományokban bekövetkezett jelentős mértékű változásokat is.

At the Hungarian Academy of Sciences (MTA), which was established roughly parallel to the industrialization of Hungary during the reform era, the prominent representatives of metallurgy still represent their metallurgical specialty and scientific field, which has always been important in the industrial development. Both the previous and current changes in the structure of the academic departments, and the evolution and reorganization of the technical-engineering sciences, are projected onto several decades-long historical eras. Major transformations of the metallurgical industrial history and organizational changes within the Hungarian Academy of Sciences are also presented, which partly reflect the significant changes that have occurred in the metallurgical sciences in Hungary during these two hundred years.

A XIX. század első felében a reformkori Magyarországon a nemesség egyik vezéregyénisége, gróf Széchenyi István kezdeményezésére Magyar Tudós Társaság alakult az ország kulturális és gazdasági fejlesztése felgyorsításának szándékával. E szervezet 1840-től már Magyar Tudományos Akadémia néven működve gyűjtötte össze az ország legkiválóbb gondolkodóit, tudósait, közöttük az iparfejlesztésben érdekelt és aktívan tevékenykedő olyan kiválóságokat is, mint a kohómérnök Kerpely Antalt (1837–1907), aki 1878-ban lett az MTA levelező tagja, majd 1890-ben rendes taggá is megválasztották. Számos előadást tartott az MTA ülésein a vaskohászat, az acélgégyártás és a magyar iparfejlődés kérdéseiről, és ezáltal fontos hozzájárulást tett az MTA ipari és műszaki osztályának későbbi kialakításához.

A Magyar Tudományos Akadémia osztálytagolódását tekintve egyébként 1831-től a kiegyezésig hat osz-

tály: nyelvtudományi, filozófiai, jogtudományi, történettudományi, matematikai és természettudományi működött, és ez utóbbihoz kapcsolódtak a műszaki-mérnöki tudományok képviselői. Ez nem változott az 1869. évi Alapszabály szerint sem, amennyiben a háromra összevont osztályok között ugyanezen a néven működött tovább a III. Matematikai és Természettudományok Osztály, az I. Nyelv és Széptudományi és a II. Bölcsészeti, Társadalmi és Történeti Tudományok Osztályok mellett. Később, az I. és a II. világháborúk között ezeken belül 2-2-2 alosztály is alakult, majd a szovjet mintára átszervezett MTA 1949-től ismét hat osztályra tagolódott, s közöttük a VI. Műszaki Tudományok Osztálya innentől kezdve ezen a néven tovább működve érte meg az MTA 200. éves jubileumát [1].

Az I. és II. világháború közötti időszakban Magyarországon nagymértékben megváltozott az iparszer-

kezet, jórészt a gazdaságot is sújtó, a trianoni békeszerződés utáni jóvátételi kötelezettségek és a világgazdasági recesszió miatt. Ezen időszakban a jelentősebb műszaki-mérnöki kutatás-fejlesztési tevékenységet is folytató fémipari/kohászati vállalkozások és egyéb intézmények között érdemes megemlíteni az alábbiakat:

- Rimamurány–Salgótarjáni Vasmű Rt. (Rima)
- Weiss Manfréd Acél- és Féművek Rt. (Csepel)
- Timföldgyárak (Mosonmagyaróvár, Almásfüzitő) és alumíniumkohók (Csepel, Inota)
- Tungsram Egyesült Izzólámpa és Villamossági Rt. és az Izzólámpa Kutatólaboratórium
- József Nádor Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem – Bánya-, Kohó- és Erdőmérnöki Kar (Sopron)
- Magyar Királyi Állami Anyagvizsgáló Intézet (MAI); Országos Ipari Anyagvizsgáló Intézet (OIAI).

Ezen kohászati ipari vállalkozásoknál és a kapcsolódó vizsgáló laboratóriumokban és egyetemi tanszéken sok kiváló műszaki szakember és tudós mérnök dolgozott, akik reprezentáltsága viszont az MTA tagjai között kevésbé volt jellemző ebben az időszakban. A vaskohászat területéről mégis kiemelhető például Cotel Ernő (1879–1954) tevékenysége, aki a Selmecbányáról (Banska Stiavnica) az I. világháború után Sopronba átköltözött felsőfokú erdészeti-bányászati-kohászati tanintézményben volt egyetemi tanár és tanszékvezető, a Magyar Tudományos Akadémiának

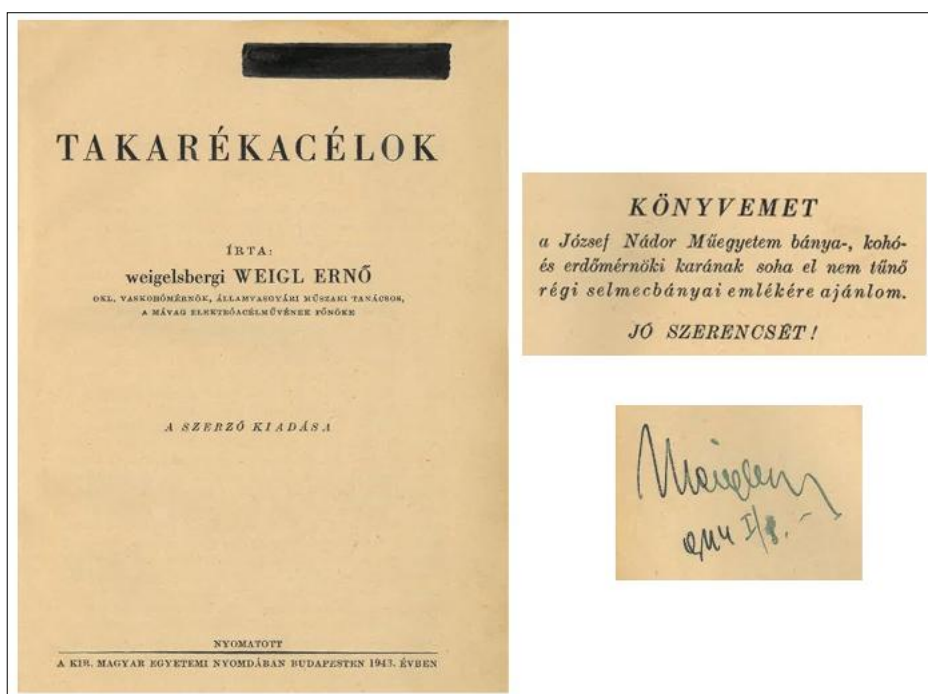
pedig levelező tagja 1945 és 1949 között. Az akkori „bonyolult” politikai viszonyokat is tükrözi, hogy az MTA tagságát – politikai okok miatt – 1949-ben megszüntették, és csak 1989-ben állították vissza.

A II. világháború időszakában Magyarországon a műszaki tudományos tevékenységek a kohászat területén döntően a hadiipar igényeinek a kiszolgálását jelentették, melyre egy példa lehet Weigl Ernő (1900–1975) vaskohómérnök munkássága a Diósgyőri Vasgyárban, ahol 1928-tól üzemmérnök, majd hosszú időn át a diósgyőri gyár főmetallurgusa volt. A háborús évek alatt az acélgyártáshoz szükséges ötvöző anyagok beszerzése lehetetlenné vált, és helyettesítésükre Weigl Ernő és munkatársai pár év alatt 250 féle ún. „takarékcélt” fejlesztettek ki a gyárban (1. ábra).

Az MTA szovjet mintájú átszervezése (1949) utáni időszak a rendszerváltozásig (1989) nagyon sok tekintetben hozott változást a tudományos életben is, részben visszatükrözve például az első öt éves tervben (1950–1954) megfogalmazott erőltetett iparfejlesztési törekvéseket (2. ábra).

Ebben az időszakban Dunapentele mellett (ma Dunaújváros) épült a Sztálin Vasmű (később Dunai Vasmű, Dunafer stb.), Miskolcon pedig új egyetem (Rákosi Mátyás Nehézipari Műszaki Egyetem (ma Miskolci Egyetem) létesült, ahova Sopronból átköltözött a bánya- és kohómérnök-képzést Miskolcon tovább vivő oktatók-kutatók jó része. A vas- és acélgyártás (Dunaújvárosban, Diósgyőrben, Ózdon) és az alumíniumkohászati tevékenységek elsődlegesen

a Dunántúlon (Ajkán, Inotán, Tatabányán, Székesfehérváron), továbbá a Pécs környéki uránérc bányászata és hidrometallurgiai feldolgozása, kohászati fejlesztései – többek között – kiválóan képzett kohómérnökök bevonását is igényelték. Képzésük központja Magyarországon a Miskolci Egyetem Kohómérnöki Kara lett, de sokan külföldön (Szovjetunió, Német Demokratikus Köztársaság) szereztek kohómérnöki oklevelet. Közülük jónéhányan az MTA Tudományos Minősítő Bizottsága (TMB) jóvoltából a *tudományok*



1. ábra. Weigl Ernő könyvének címlapja a szerző aláírásával és ajánlásával. (A 480 oldalas mű 119 ábrát és 135 táblázatot tartalmaz) [2]



2. ábra. Mozgósítás az első öt éves terv célkitűzéseinek teljesítésére [3]

kandidátusa és a tudományok doktora fokozatukat is megszerezhették, általában egyáltalán nem érdemtelenül. A Magyar Tudományos Akadémia Almanachja 1962. évi kiadványában például a Kohászati Bizottság tagjai között az alábbi jól ismert tudósok neveit találjuk (3. ábra).

KOHÁSZATI BIZOTTSÁG	A MAGYAR TUDOMÁNYOS AKADÉMIA ALMANACHJA
A Bizottság elnöke: Verő József akadémikus	
A Bizottság alelnöke: Geleji Sándor akadémikus	
A Bizottság titkára: Debós György, a műszaki tudományok kandidátusa	
A Bizottság tagjai: Balsay István, a KGM Vaskohászati Igazgatóságának főmérnöke Bella Ede, a műszaki tudományok kandidátusa Díószeghy Dániel, a műszaki tudományok kandidátusa, egyetemi tanár Domony András, a műszaki tudományok doktora Énekes Sándor, a műszaki tudományok kandidátusa Hajtó Nándor, a műszaki tudományok kandidátusa Herváth Zoltán, a műszaki tudományok doktora, egyetemi tanár Juhász Ádám, az Álmásfüzítői Timföldgyár főmérnöke Káldor Mihály, a műszaki tudományok kandidátusa, docens Kemény Kornél, az Országos Tervhivatal főmérnöke Kiss Ervin, a műszaki tudományok kandidátusa, docens	Kocsis József, a műszaki tudományok kandidátusa, NIM Színesfémipari Igazgatóság igazgatója Köves Elemér, a NIM Színesfémipari Főosztályának főmérnöke Milner Tivadar akadémikus Nándori Gyula, a műszaki tudományok kandidátusa Pilter Pál, a Dunai Vasmű főmérnöke Simon Sándor, a műszaki tudományok kandidátusa, docens Szele Mihály, a Vasipari Kutató Intézet igazgatóhelyettese Szeless László, a Vasipari Kutató Intézet osztályvezetője Széki Pálma, a műszaki tudományok doktora Várhegyi Győző, a műszaki tudományok kandidátusa Vécsey Béla, a műszaki tudományok kandidátusa Visnyovszky László, a műszaki tudományok kandidátusa Wilhelm Tibor, ny. főmérnök

3. ábra. A Magyar Tudományos Akadémia Kohászati Bizottságának összetétele 1962-ben [4]

Egyébként az MTA VI. Műszaki Tudományok Osztályán belül a Kohászati Bizottság mellett az 1967. évi Almanach szerint az alábbi bizottságok működtek, átfogva a műszaki tudományoknak már akkor is meglehetősen kiterjedt körét (4. ábra).

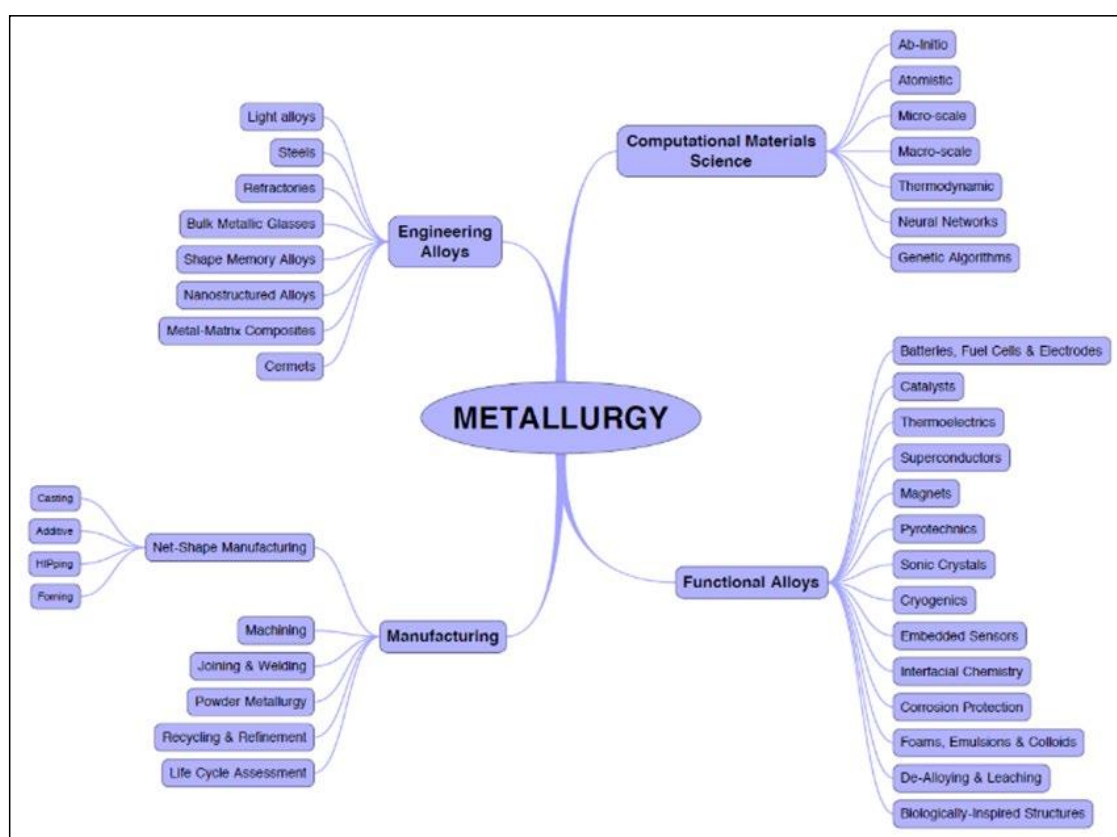
Még az 1970-es és 1980-as években is (a rendszerváltoztatásig) az MTA volt jogosult a már említett tudományos fokozatok kiadására, ami az 1993. évi LXXX. Sz. felsőoktatási törvény és az 1994. évi XL. Sz., az MTA-ról szóló törvény alapján változott meg, miszerint innentől már csak *egyetlen tudományos fokozat* (PhD/DLA) létesült, és a törvény emellett határozott a *habilitáció* és az *MTA doktori* címekről is.

A rendszerváltoztatás utáni Magyarországon a kohászati kutatások iránya is nagyon sokat változott, részben igazodva az Európai Union belül is jelentősen megváltozott trendekhez. Ennek illusztrálására és csak egyetlen egy példaként az 5. ábrán látható azoknak a metallurgiai/kohászati részterületeknek a sora, melyek közül számos feltüntetett irányban a magyarországi kutatóintézeti és egyetemi műhelyekben dolgozó tudós kohómérnök és más végzettségű szakemberek azóta is eredményesen tevékenykednek. Munkásságuk elismeréseként sokuk a Magyar Tudományos Akadémián is kiténtették magukat, de ezen jelenkori időszakra talán kissé később lehet majd elfogulatlanabban visszatekinteni.

Mindenesetre, a Magyar Tudományos Akadémia VI. Műszaki Tudományok Osztályán belül a korábbi Kohászati Bizottság átalakulása után még ma is van képviselője a kohászati tudományoknak elsődlegesen a *Metallurgiai Tudományos Bizottság* [7] tagjai által, melynek éppen a jelenlegi elnöke, dr. Török Béla szervezésében valósulhatott meg Ózdon az „Ipari és Örökségvédelmi Konferencia” 2025. november 20-án, ahol a jelen kivonatolt előadás is elhangzott.

VI. Műszaki Tudományok Osztálya	174
Automatikai Bizottság	174
Elektrotechnikai Bizottság	174
Hőenergetikai Bizottság	175
Áramlás- és Hőtechnikai Gépek Bizottsága	176
Kohászati Bizottság	176
Szál- és Rosttechnológiai Bizottság	177
Híradástechnikai Bizottság	178
Építészetelméleti és Történeti Bizottság	178
Építészettudományi Bizottság	179
Közlekedéstudományi Bizottság	180
Talaj- és Kőzetmechanikai Bizottság	180
Településtudományi Bizottság	181
Vízgazdálkodástudományi Bizottság	181
Anyagvizsgálati és Hegesztési Bizottság	182
Elméleti Mechanikai Bizottság	183
Kinetikai és Kinematikai Bizottság	183
Tartószerkezetek Mechanikája Bizottság	184

4. ábra. Az MTA VI. Műszaki Tudományok Osztályának belső tagolódása 1967-ben [5]



5. ábra. A „Metallurgy Europe Technical Roadmap for 2014–2020” megnevezésű Unió (EUREKA) klaszter-programban megjelölt kitüntetett metallurgiai/kohászati kutatási irányok [6]

Irodalom

- [1] Dr. Huy Diána igazgató (MTA Könyvtára) összeállítása és személyes közlése alapján (2025)
- [2] Weigl Ernő: Takarékcélok, Kir. Magyar Egyetemi Nyomda, Budapest, 1943.
- [3] https://hogyantortent.com/magyar_plakatok_1951/
- [4] A Magyar Tudományos Akadémia Almanachja, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1962, 177. oldal
- [5] A Magyar Tudományos Akadémia Almanachja, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1967, (Tartalomjegyzék, részlet)
- [6] http://www.manufuture.fi/system/redactor_assets/documents/37/Metallurgy_Europe_-_Technical_Roadmap_DRAFT.pdf
- [7] https://mta.hu/vi-osztaly/tudomanyos-bizottsagok-105558#metallurgiai_tudomanyos_bizottsag

A hidrogén hatása a fémes környezetre föld alatti tárolása esetén

Effect of hydrogen on its metallic environment when stored underground

ID. ÖSZ ÁRPÁD



Amennyiben az acéltermék hidrogénatomokat tartalmazó közeggel van kapcsolatban, a hidrogén bediffundál az acélba, ahol különböző csapdahelyeken reverzibilisen vagy irreverzibilisen megkötődhet. A hidrogén kútba épített termelőcsövön keresztül történő be- és kitárolása folyamán a környezetre korrózió és biokémiai korrózió által okozott mechanikai, hidrogén ridegségi és szivárgási hatással van.

Kulcsszavak: hidrogén, föld alatti tárolás, korróziók, ridegedés, szivárgás, mechanikai hatás, kútintegritás, kockázat

If the steel product is in contact with a medium containing hydrogen atoms, hydrogen diffuses into the steel, where it can be reversibly or irreversibly bound at various trap sites. During the injection and withdrawal of hydrogen through the production tubing installed in the well, it has a mechanical, hydrogen embrittlement and leakage effect in its environment caused by corrosion and biochemical corrosion.

Keywords: hydrogen, underground storage, corrosion, embrittlement, leakage, mechanical impact, well integrity, risk

1. Bevezetés

A hidrogéngáz eddigi ismeretek szerint a felszín alatt hosszú távon tárolható. Ahhoz, hogy a felszín alatti hidrogéntárolás sikeresen megvalósítható legyen a gyakorlatban, számos kérdés megválaszolása várat még magára, úgymint a szociális, gazdasági, földtani és nem utolsósorban műszaki kockázatok. A műszaki kockázatok csökkentése érdekében nagyon fontos tisztázni, hogy a hidrogént a föld alá be- és kijuttató kút fémes részeire milyen hatással van ez a közeg. Ezen összeállítás nem anyagmérnököknek, nem vegyészmérnököknek, nem gépészmérnököknek, nem geológusoknak, nem közgazdászoknak és nem is szociológusoknak szól, hanem azoknak a fűtőmérnököknek és termelőmérnököknek, akik mindennap találkoznak a kútkiképzés, a be- és kitárolás, valamint a kútjavítás során a hidrogén hatásaival.

2. Korrózió

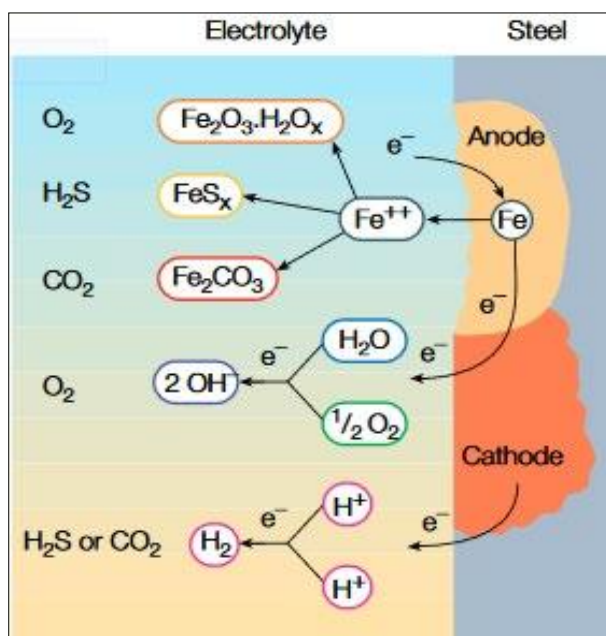
A korrózió valamely anyagnak a környezet hatására, a felületről kiinduló elváltozása, amely kémiai, fizikai-kémiai vagy biológiai folyamatok révén megy végbe. Ha levegő és víz formájában oxigén áll rendelkezésre a fémek, különösen a vasfémek közelében, akkor létrejön egy elektrokémiai reakció, általában oxigénkorrózió, amely a vasat rozsdává oxidálja. Ha azonban hiányzik az oxigén, akkor az úgynevezett savkorrózió vagy hidrogénkorrózió lép fel. A végtermék tiszta hidrogén, a fém oxidálódik. A redoxreakció második része azonban az oxoniumionok redukciója hidrogénné. A fém ionként oldódik. Ez az anyag majdnem egyenletes mennyiségű eltávolítását eredményezi. A hidrogén korrózió mindig akkor fordul elő, ha nincs oxigén. Következően a számtalan korrózió típus közül csak azokat vesszük figyelembe, amelyek kialakulásánál a hidrogén szerepet játszhat, illetve amelyek a hidrogén föld alatti tárolásánál felép(het)nek.

2.1. Elektrokémiai korrózió

Elektrokémiai korrózió a körülmények adottságainak megfelelően kialakult helyi galvánelemek áramtermelő folyamatai következtében lép fel. A korróziós közeg nedves, folyadék, amely vezetőképessé ionokat tartalmaz (elektrolit).

2.1.1. Elektrolitos (galván) korrózió

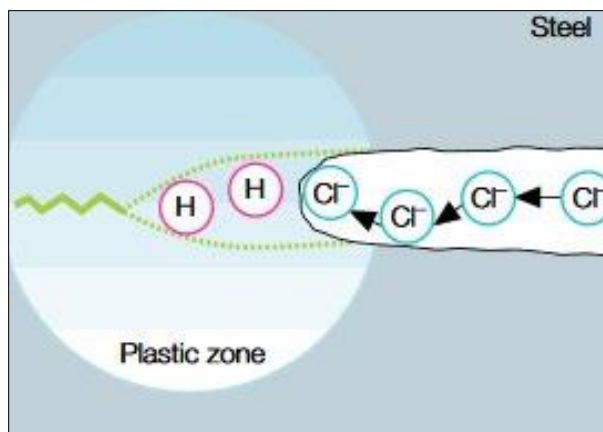
Elektrolitos (galván) korrózió keletkezik minden olyan esetben, amikor két különálló fém vagy fémrész, fázis érintkezik, így közöttük elektromos kontaktus keletkezik, és felületüket elektrolitként ható folyadék fedi. Ilyenkor a nagyobb potenciálú, ún. anódos anyagrészről a kontaktuson át negatív töltésű elektronok áramolnak a kisebb potenciálú, ún. katódos anyagrész felé. Ez a hidrogén föld alatti tárolása folyamán akkor következhet be, ha a hidrogénnel együtt víz (H_2O), oxigén (O_2), szén-dioxid (CO_2) vagy kénhidrogén (H_2S) is, mint szennyezőanyag, jut be a termelőcsőbe (1. ábra).



1. ábra. Az elektrolitos (galván) korrózió

2.1.2. Hajszálrepedéses korrózió

A hajszálrepedéses korrózió az elektrokémiai korrózió egyik fajtája, amelynek az anódos anyagrész oldását, pusztulását a kétféle anyagrész érintkezési helyén valamilyen húzófeszültség olyan keskeny felületre koncentrálja, hogy a megtámadott anyagrész mélyébe hatoló rés, hajszálrepedés keletkezik. A hajszálrepedéses korrózió jellege tehát az, hogy nagyon kevés a korróziós termék, és a megindult repedés rohamosan mélyül, rövid idő alatt az anyag teljes vastagságán átérő repedéssé fokozódhat (2. ábra).



2. ábra. A hajszálrepedéses korrózió

2.1.3. Egyenletes felületi korrózió

Az egyenletes felületi korrózióra való hajlam a szén és gyengén ötvözött acélból készült bélésű csövek, termelőcsövek közös jellemzője. Egyenletes felületi korrózióról akkor beszélhetünk, ha fém károsodását előidéző folyamatok a teljes felületre kiterjedően, azonos sebességgel mennek végbe. Ennek következtében a keresztmetszet, a falvastagság egyenletes csökkenése a szerkezet teherbíró képességének fokozatos csökkenését eredményezi. A szerkezeti elem mechanikai tulajdonságai fokozatosan romlanak. A korrózió ez a formája kevésbé veszélyes, mivel csak hosszú idő alatt vezet nagymértékű károsodáshoz. Adott körülmények között a korrózió sebessége az adott anyagra jellemző értékként meghatározható, mérhető. Jellemzésére alkalmas mérőszámok a fém felületegységéről időegység alatt oldatba ment fém tömege ($g/mm^2/év$), vagy az időegység alatt elkorrodált réteg vastagsága ($mm/év$). Az egyenletes felületi korrózióra való hajlam a szén és gyengén ötvözött acélból készült rendszerelemek közös jellemzője (3. ábra).

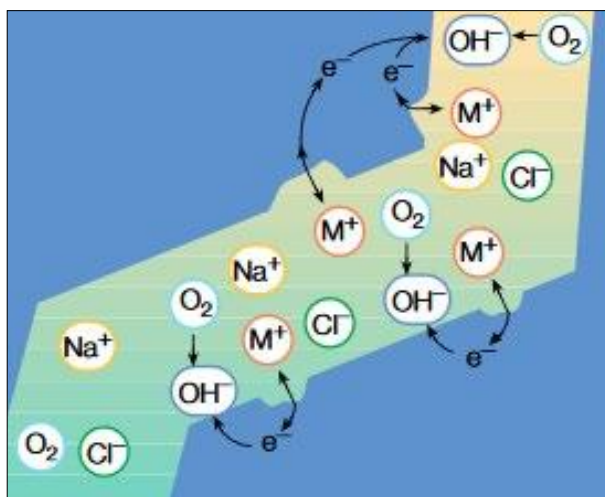


3. ábra. Az egyenletes felületi korrózió

2.1.4. Réskorrózió

Réskorróziós folyamatok játszódnak le a termelőcső és a termelőcső karmantyú menetei között is. Ezekben

a szerkezetekben a fém felületén egyidejűleg léteznek nagy korróziósebességgel oldódó és gyakorlatilag korróziómentes területek. Az aktív-passzív tulajdonságú fémek (Fe, Cr, Ni, Ti, korrózióálló acéltövezetek) felületének nagy része megfelelő elektrolit összetétel esetén passzív állapotban van, ezzel szemben a felület lényegesen kisebb részén a fém aktív állapotban oldódik. Ezek a helyek alacsony potenciálú, aktív, nem szellőzött, viszonylag savas pH-jú rések. A rés belsejében a pH 3-4 körüli érték. Fe_3O_4 és FeCl_2 keletkezése mellett a résfenék potenciálja $-0,3$, illetve $-0,5$ V körül van, amelyet a differenciális szellőzés, a pH és a nagyobb klorid koncentráció együttesen hoz létre. A bemélyedést $\text{Fe}(\text{OH})_3$ -ból álló réteg borítja, és az egészet pozitívabb potenciálú, levegőzött, lúgos zóna veszi körül. Az Fe_2O_3 -mal befedett felület pH-ja 8, és az elektródpotenciál $+0,2$ V. A folyamat tehát egy olyan korróziós cella keletkezését eredményezi, amelynél differenciális szellőzési áramok haladnak az aktív, levegővel nem érintkező mélyedés és a passzív, szellőzött felület között, mégpedig $0,5$ – $0,7$ V potenciálkülönbség mellett. A réskorróziós folyamat kiindulási pontjai lehetnek a nemfémes zárványok, a fémszerkezeti hibák és a fémfelület passzív rétegének helyi hiányosságai is. A résekben lejátszódó korróziós folyamatokban meghatározó szerepet játszik a rés mérete. A résnek ugyanis elég tágnak kell lennie ahhoz, hogy az üzemi közeg bejuthasson a belsejébe, ugyanakkor olyan szűknek, hogy benne pangó közeg alakuljon ki. A korrózió legkedvezőbb feltételi általában mintegy $0,5$ mm szélességű résméret mellett alakulnak ki (4. ábra).

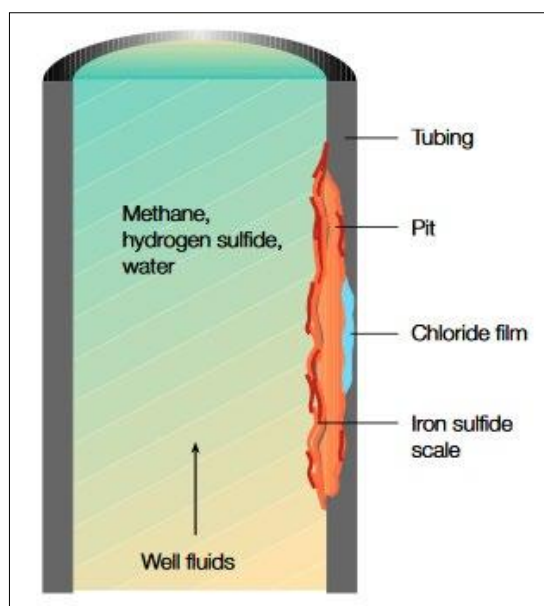


4. ábra. A réskorrózió

2.1.5. Lyukkorrózió

A 10,5% krómtartalom feletti nemesacéloknál a korrózió keletkezését sem lehet eleve kizárni. Hibás kezelés és feldolgozás vagy szerkezeti hiányosságok

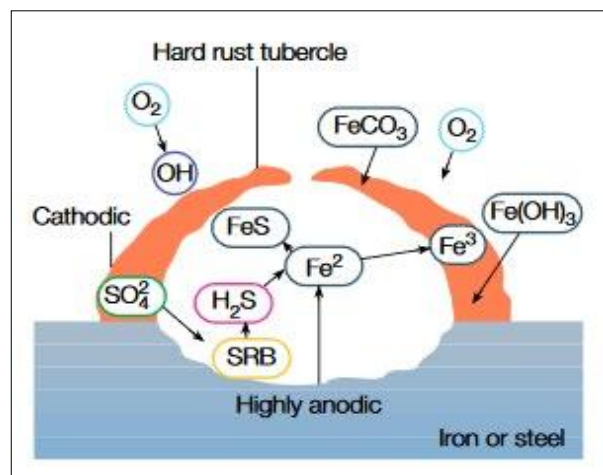
esetén még a 20% feletti krómtartalmú és a 8% feletti nikkeltartalmú ausztenites nemesacélok is korrodálhatnak. A nem rozsdásodó nemesacéloknál a korrózió kialakulásának két oka van: a passzív (védő) réteg nem tudott kialakulni vagy a passzív (védő) réteg megsérült. A lyukkorrózió akkor lép fel, ha a passzív réteg egy adott helyen átszakad. Az átszakadásért a kloridionok felelősek, amelyek az elektrolit jelenlétében a passzív réteg képződéséhez szükséges krómatomokat a nemesfémtől elvonják. A lerakódások, idegen rozsa vagy salakmaradvány jelenléte felerősítheti a lyukkorróziót. A nemesacéloknál kialakuló lyukkorrózió leggyakoribb esete a bemaródásos korrózió, amikor a behatolási mélység kisebb, mint a bemaródás átmérője (5. ábra).



5. ábra. A lyukkorrózió

2.1.6. Hólyagkorrózió

Az elektrokémiai reakcióknak kitett acéloknál vagy a kis szilárdságú acéloknál gyakran előfordul, hogy



6. ábra. A hólyagkorrózió

az acél hólyagossá válik. A disszociációból származó atomos hidrogén abszorbeálódik az acél belsejébe, ahol az irreverzibilis csapdahelyeken megkötődve az atomos hidrogén molekulárisá alakulhat, miáltal nő a nyomás és ez az acél hólyagosodását okozhatja. A hólyagok mérete az acél alakíthatóságának mértékével nő, erőteljes átalakításon átesett acéloknál 2-3 millimétert is elérhet (6. ábra).

2.2. Kémiai korrózió

A kémiai korrózió valamely fém és a gázhalmazállapotú környezete között jön létre, magasabb hőmérsékleten. A kémiai korróziónál a fémek felületén nem fémes jellegű korróziós rétegek alakulnak ki. Kémiai korrózió esetén a fémion (Me^+) és az elektron (e^-) ki lépése közötti távolság $d \leq 1 \text{ \AA}$. Az átlépés molekuláris távolságon belül történik, a fémion és az elektron egy termékbe épül be. A legkisebb mennyiségű folyadék is megváltoztatja a korrózió alaptípusát, kémiai korrózióból víz hatására elektrokémiai korrózió lesz. Az elektrokémiai korrózió sebessége nagyságrendekkel nagyobb a kémiai korrózióénál. A kémiai korróziók közül csak azokat érdemes megemlíteni, amelyek a hidrogén betárolása közben bekerült szennyezőanyagok (víz, kén-hidrogén, szén-dioxid) hatására keletkezik(het)nek.

2.2.1. Oxigén- (O_2 -) korrózió

A rozsda a fémek felületén oxidáció által keletkezett réteg. Rozsda alatt általában a vasrozsdat értjük, amely a vas felületén víz és oxigén hatására képződő hidratált vas-oxidok és vas-hidroxidok keveréke. A folyamat:

- A levegő oxigénje hidroxidionná redukálódik

$$\text{O}_2 + 2\text{H}_2\text{O} + 4e^- = 4\text{OH}^-$$
- A vas lead két elektront

$$\text{Fe} = \text{Fe}^{2+} + 2e^-$$
- A vízben lévő oldott anyagok felgyorsítják ezt a folyamatot, mivel segítik az elektromos vezetést. A keletkező OH^- -ionok és vas(II)-ionok csapadékot alkotnak

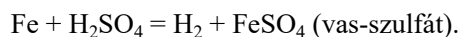
$$\text{Fe}^{2+} + 2\text{OH}^- = \text{Fe}(\text{OH})_2$$
- Ez a csapadék rövidesen rozsdává oxidálódik

$$4\text{Fe}(\text{OH})_2 + \text{O}_2 = 2\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O} + 2\text{H}_2\text{O}$$

2.2.2. Kén-hidrogén- (hidrogén-szulfid, H_2S -) korrózió

A kén-hidrogén vízben jól oldódik, mert a kénhidrogén és a víz molekulái hidrogénkötést képezhetnek egymással. A kénhidrogén a víznek protont is képes átadni, vagyis savként viselkedik (kénsav, H_2SO_4). Vizes oldata gyengén savas kémhatású, savmaradékionja a hidrogén-szulfidion és a szulfidion, sói a szulfi-

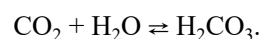
dok. A híg kénsav reakcióba lép a vassal, amelynek egyenlete:



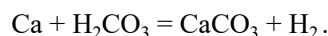
A fémfelületeken szulfid-szennyezés, fémek korróziója és kontakthibák léphetnek fel.

2.2.3. Szén-dioxid- (CO_2 -) korrózió

A szén-dioxid normál körülmények között légnemű, gázhalmazállapotú vegyület, a szén egyik oxidja. Vízben kismértékben oldódik (0,145 g/100 ml), a vízzel gyengén savas szénsavat képez. A szénsav bomlékony, gyenge sav, sói a karbonátok és a hidrogén-karbonátok. A vízben oldott CO_2 kémiai egyensúlyban van a szénsavval:



A szénsav egyes fémeket hidrogén fejlődése közben old, miközben karbonátok képződnek:

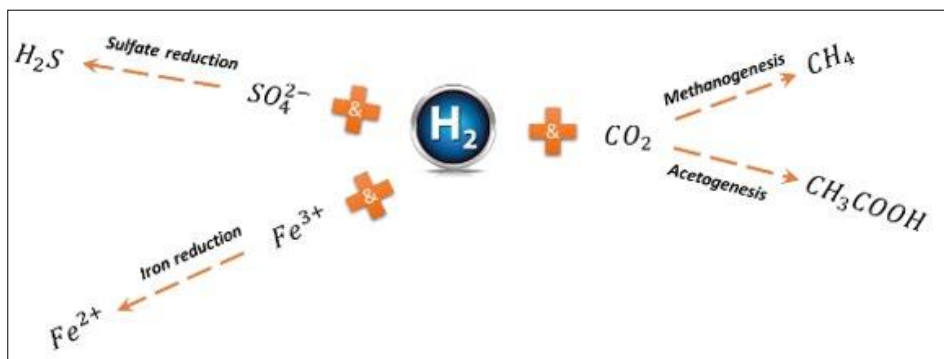


2.3. Mikrobiológiai korrózió

Mikrobiológiai korrózióról akkor beszélünk, ha fémek korrózióját mikroorganizmusok okozzák közvetlenül vagy közvetetten, az általuk termelt korrozív anyagok révén. A mikrobiológiai korrózióért felelős baktériumok közül a leggyakoribbak a szulfidokból vagy kénhidrogénből szulfátot, azaz kénsavat képző *Thiobacillus* vagy *Acidithiobacillus* nemzetség tagjai, a vasat oxidáló baktériumok, melyek a vasból vas-hidroxidot vagy vas-oxidot képeznek, miközben energiát nyernek. A szulfátlélegző baktériumok szulfidokat, illetve kén-hidrogént képeznek a szulfátokból, ilyenkor a kén-hidrogén korrozív hatásával kell számolnunk. Egy sor baktérium képes szerves savakat, lúgos vegyületeket termelni, amelyek szintén korróziót okozó anyagok. Az anaerob biokorrózió igen nagy problémát jelent(het), mivel az oxigén független mikroorganizmusok bizonyos enzimek termelése révén mintegy 10-szeres korróziósebességet okoznak, továbbá kén-hidrogént szabadítanak fel. Ennek az anaerob korrózióknak a legfőbb felelősei a szulfátredukáló baktériumok. A *Methanotrophic*, az *Acetotrophic* és *Hydrogenetrophic* baktériumok több mint 40 fajtája 4 biokémiai hatást vált(hat) ki a hidrogén föld alatti tárolásakor: metánképződés, acetátképződés, szulfátsökkenés és vasesökkenés. Ezek a baktériumok legjobban 90 bar nyomáson és 97 °C hőmérsékleten fejtik ki hatásukat.

A négy biokémiai hatás:

- Metánképződés: $\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 = \text{CH}_4 + 2\text{H}_2\text{O}$
 (ahol a CO_2 gáz van a tárolt H_2 -ben)



7. ábra. A négy biokémiai hatás

Szulfátredukáló baktériumok:
oxigénmentes környezetben a katódon képződő hidrogént használják fel szulfát redukcióra

$$8 \text{ H}_{\text{adszorbeált}} + \text{SO}_4^{2-} \rightarrow \text{S}^{2-} + 4\text{H}_2\text{O}$$

A katódon adszorbeálódott hidrogént, amely fékezi a korróziót eltávolítja, így a korrózió gyorsul

A képződő szulfid megtámadja fémet és laza fém-szulfidot képez

8. ábra. A mikrobiológiai folyamat által előidézett elektrokémiai korrózió

- ❑ Acetátképződés: $2\text{CO}_2 + 4\text{H}_2 = \text{CH}_3\text{COOH} + 2\text{H}_2\text{O}$
- ❑ Szulfátsökkenés: $\text{SO}_4^{2-} + 5\text{H}_2 = \text{H}_2\text{S} + 4\text{H}_2\text{O}$ (ahol a SO_4^{2-} szulfát vízben oldott)
- ❑ Vascsökkenés: $3\text{Fe}_2^{3+}\text{O}_3 + \text{H}_2 = 2\text{Fe}_3^{2+}\text{O}_4 + \text{H}_2\text{O}$ (ahol a Fe_2^{3+} vasoxid a termelőcső felületéről származik) (7. és 8. ábra)

2.4. Helyi baktérium korrózió

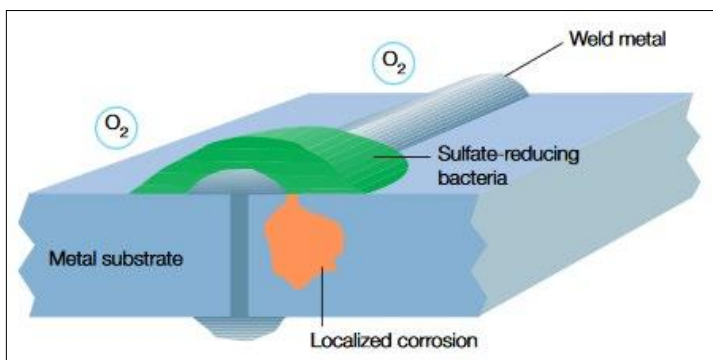
Amikor a béléscső és a termelőcső közötti gyűrűstér nem inhibált vízzel van feltöltve, a hegesztés környezetében helyi baktérium korrózió alakul(hat) ki. Ugyanis, a hegesztési varrat mellett folyamatosan létrejöhet lyukkorrózió, és az emiatt keletkezett mélyedésbe szulfát-csökkentő baktériumtelepek alakul(hat)

nak ki. Ezek a baktériumok kén-hidrogént (H_2S) termelnek, amely felgyorsítja a korróziós folyamatot (9. ábra) [1–4].

3. Korrózió mechanikai hatásai

3.1. Bemaródás

Bemaródás a fémek felületének elhasználódása külső tényezők, jelen esetben korrózió hatására. A korrózió bármely formája során a fémek felületén kialakuló fellazult és elmorzsolódott anyagot a hidrogén ki- és betárolásának mozgása elsodorja, elszállítja és így a fémfelületen bemaródások keletkeznek. Ezek a bemaródások nagyobb felületet biztosítanak a további korrózióknak és ezáltal növekszik az anyagvesztés.



9. ábra. A helyi baktériumkorrózió

3.2. Erózió

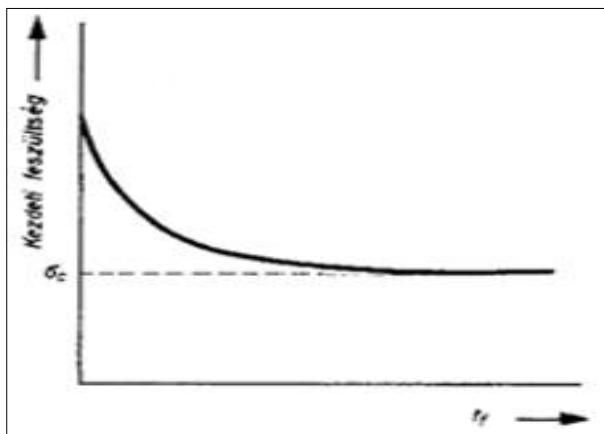
A hidrogén ki- és betárolásának mozgása során szálított, a korrózió által létrejött fellazult és elmorzsolódott anyag, mint eróziós (koptató) erő, a fémfelületet tovább koptatja. Az erózió által okozott kár nem olyan gyors, mint a korrózió. Lassú folyamat, a fém kopás-mechanizmusa eleinte csupán néhány atomnyi vagy néhány mikrométernyi méretben károsít. Azonban az idő, valamint a ki- és betárolási ciklus növekedésével már olyan intenzitást érhetnek el és olyan méreteket ölthetnek, hogy mikroszkóppal és/vagy szabad szemmel is láthatóvá válnak.

3.3. Eróziós korrózió

Az eróziós korrózió az anyag felületének a mechanikai hatások miatt bekövetkező lebomlása. A nagy sebességgel áramló – esetenként szilárd részecskéket is tartalmazó – gáz mechanikai (koptató) hatása és a korrózió együttesen bemaródásokat okoz. A károsodás mértékére jelentős hatással van a gáz áramlási sebessége. Ahol erős örvénylés lép fel vagy nagy sebességgel ütközik a gáz a fémfelülethez (belső átmérőváltozás), ott további jelentős károsodás keletkezik.

3.4. Feszültségkorróziós törés

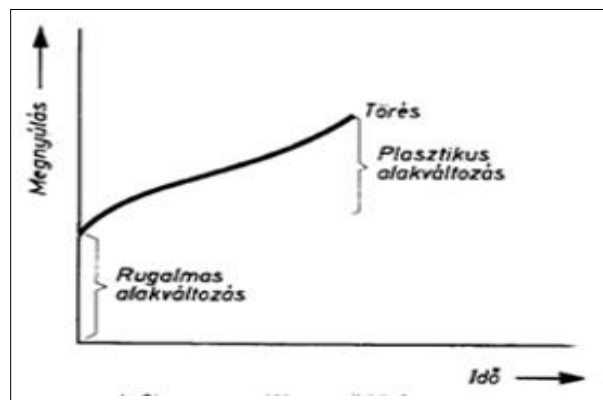
A feszültségkorróziós törés a szerkezeti anyagok (mechanikai) feszültség és a korróziós közeg együttes hatására következik be. A két igénybevétel együttes jelenléte egymás hatását fokozza. A károsodást kiváltó feszültség lehet hegesztés következtében visszamaradó belső feszültség vagy a csövek menetes összecsaparása során keletkezett külső feszültség. A külső feszültségek esetében csak a húzófeszültségek veszélyesek korróziós szempontból, a nyomófeszültség nem. A belső feszültségek általában veszélyesebbek, mert megjelenésük váratlan, értékük az azonos



10. ábra. A tönkremeneteli idő és a kezdeti feszültség összefüggése

anyagban is eltérő lehet. A károsodáshoz vezető feszültség általában megközelíti az anyag folyáshatárát, a károsodás kialakulásához jelentős indukciós idő szükséges. A feszültségkorrózió elsősorban a fém/ötvezet anyagi minőségétől, a korróziós közegtől és a feszültség nagyságától függ. Ha egy fém feszültség és korróziós közeg együttes hatásának van kitéve, általános tapasztalat, hogy minél nagyobb a kezdeti feszültség, annál rövidebb a tönkremeneteli idő (t_f). Létezik egy minimális feszültség, amely alatti igénybevétel esetén feszültségkorróziós törés még igen hosszú idő alatt sem következik be – ez a küszöbfeszültség (σ_c) (10. ábra).

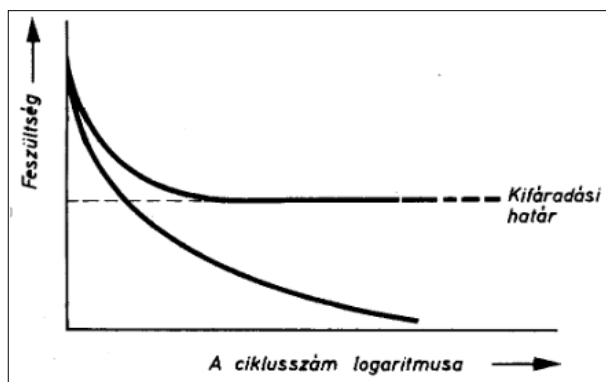
Amennyiben a mechanikai feszültség nagyon nagy, az anyag gyors törésére kerül sor, nincs idő arra, hogy a korróziós közeg kifejtse hatását. A küszöbfeszültségtől nagyobb, de azonnali törést nem okozó állandó terhelés esetén, először is egy rugalmas deformáció következik be. Ezt követően az anyag többkevesebb plasztikus alakváltozást szenved el, miközben repedések keletkeznek és haladnak tovább. Ebben a folyamatban a korróziós közeg is részt vesz. A repedések miatt a hatékony keresztmetszet folyamatosan csökken, és amikor az egységnyi (ép) keresztmetszetre eső feszültség eléri a szakítószilárdságot, bekövetkezik a törés (11. ábra). A hőmérséklet növekedése általában elősegíti a feszültségkorróziós károsodást.



11. ábra. A fém megnyúlása az idő függvényében

3.5. Korróziós kifáradás

Korróziós kifáradásnak – a feszültségkorrózióknak megfelelő egyirányú igénybevétellel ellentétben – a váltakozó vagy fluktuáló feszültségnek (hidrogén be- és kitáplálás váltakozása, nyomásváltozások, áramlási sebesség változások, hőmérsékletváltozások stb.) kitétt fémek korróziós közegben történő tönkremenetelét nevezik. A feszültségkorrózió csak adott fémeken és közegekben keletkezik, a korróziós kifáradás ellenben gyakorlatilag minden fémeken és közegekben előfordul. A korróziós kifáradás függ a feszültségváltozások számától, az ún. ciklusszámtól (12. ábra).



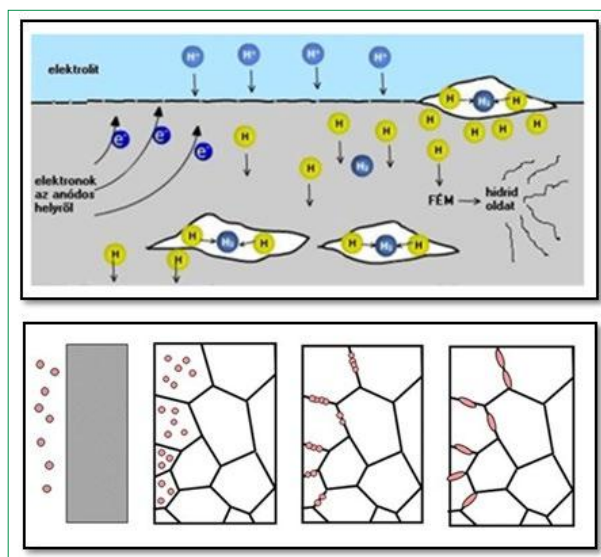
12. ábra. A feszültség és a ciklusszám összefüggése

A felső görbe a korrózió nélküli kifáradásra, az alsó pedig a korróziós közegben történő kifáradásra vonatkozik. A korrózió nélküli kifáradás görbéje a ciklusszám növelésekor a határérték felé tart, ezt nevezik az anyag kifáradási határának. Fémek a kifáradási határ alatti feszültségek gyakorlatilag végtelen számú ismétlését képesek elviselni törés nélkül. Korrózív közegben gyakorlatilag nincs kifáradási határ, a törés a megfelelő ciklusszámnál mindenféleképpen bekövetkezik. Az anyagok viselkedését azzal a legnagyobb feszültséggel szokták jellemezni, amelyen a megadott számú ciklust még törés nélkül elviseli. A korróziós közegtől mentes fázisztás általában egyetlen törést idéz elő az anyagban. Korróziós kifárasztáskor általában több repedést találnak egymás mellett, a repedések transzgranulárisak (szemcsén túliak). Azonos időtartam esetén a nagyobb igénybevételi frekvencia károsabb, azonos ciklusszám esetén viszont kisebb frekvenciánál van nagyobb károsodás, mert több idő áll rendelkezésre a korrózió kifejlődéséhez. Általános tapasztalat szerint nincs szoros összefüggés a korróziós kifáradással szembeni ellenállás és a fém szakítószilárdsága között, a közepesen ötvöztött acélok csak kicsivel bírják jobban az ilyen igénybevételt. Az általános korrózióknak jobban ellenálló króm-acélok viszont a korróziós kifárasztást jobban tűrik. A feszültségkorrózióknak kitett szerkezetek élettartamát igen nehéz előre megbecsülni, és a veszélynek kitett szerkezetek üzem közbeni ellenőrzése is problematikus a szokásos roncsolásmentes vizsgálati módszerekkel. Ezért a feszültségkorrózió megelőzésében arra kell törekedni, hogy ennek veszélyét teljesen kizárják.

4. Hidrogénridegedés

A hidrogénridegedés lényege, hogy bizonyos körülmények között az elemi hidrogén bediffundál az acélszerkezetek kristályrácsaiba és ott felhalmozódhat. A fémbe diffundáló hidrogénatomok megváltoztatják annak mechanikai tulajdonságait, az atomok közti kötést gyengítve a fémot rideggé teszik. Húzó igénybevételnél ez a hatás a repedés hegye előtt halad né-

hány atomnyi távolságban, és repedés előrehaladását okozza. A hidrogén eredetét tekintve a jelenség nem specifikus. A hidrogén annál inkább fokozza a fém ridegedését, minél kisebb annak a plasztikus deformálhatósága, minél nagyobb a szakítószilárdsága, illetve a hidrogéntartalma. A fémekben lévő atomos hidrogén az üregekben, zárványok felületén molekulákká rekombinálódhat, ami óriási nyomást kifejtve segíti a repedések kialakulását. Lágymű acélokon a hidrogénmolekulák keletkezése a felülethez közel hólyagok megjelenésével is jár. A hidrogénridegedés előfordul nagyszilárdságú ferrites és martenzites acélokon is, igen sok hidrogént tartalmazó közeg esetén. A rozsdamentes acélok kevésbé hajlamosak a hidrogénfelvételre. A hidrogénridegedés ellen legjobb védelem a hidrogénfelvétel megakadályozása szerves vagy szervetlen bevonatok és megfelelő szerkezeti anyagok alkalmazásával (13. ábra).



13. ábra. A hidrogénridegedés

5. Szivárgás

A hidrogén szivárgása nyomáskülönbség vagy gravitáció hatására fellépő nagy sebességű gázmozgás. A hidrogén molekulája igen kicsi és igen kis tömegű, a legkönnyebb gáz (sűrűsége 14,4-szer kisebb a levegőnél), a hőmozgási sebessége igen nagy (0 °C-on 1845 m/sec), nagy a diffúziósebessége és az apoláros molekulaszervezete miatt a vízben gyakorlatilag nem oldódik. Ezért a legkisebb résekben (korróziós lyukak és repedések, menet-tömítetlenség, egyéb tömítetlenségek, hibás hegesztési varrat stb.) keresztül minden fluidumot megelőzve a tároló kútból nagy sebességgel tör a felszínre. Szintelen és szagtalan, a levegővel keveredve potenciális tűz- és robbanásveszélyes, a külső légtérbe kiszivárgó hidrogéngáz spontán meggyulladhat. Hidrogén- és oxigéngáz 2:1 térfogatarányú keveréke az ún. durranógáz, meggyújtásakor igen hevesen

robban. Továbbá a hidrogénlángok, amellet, hogy nagyon forróak, szinte láthatatlanok, és így véletlen égési sérülésekhez is vezethetnek [5].

6. Be- és kitárolás közbeni korrózió

A hidrogén föld alatti tárolása ciklikusan történik. Egy tárolási ciklus (T_c) három szakaszból áll: betárolás (T_{be}), tárolás ($T_{tárol}$) és kitárolás (T_{ki}). Mindhárom szakaszban vannak állandó korróziós tényezők, de van a szakaszokra külön-külön jellemző korrózió is. A korrózió típusát és mértékét befolyásolja:

- ❑ a tárolt hidrogén (H_2) koncentrációja (10–100%);
- ❑ a hidrogénnel együtt tárolt metán (CH_4) koncentrációja (0–90%);
- ❑ a tárolt gáz vagy gázkeverék szárazsága és tisztasága;
- ❑ a szennyezőanyagok (H_2O , O_2 , H_2S , CO_2) mennyisége;
- ❑ a nyomás és a hőmérséklet, valamint azok változása;
- ❑ a termelőcsőben kialakult feszültségek és azok változása;
- ❑ a be- és kitárolási sebesség;
- ❑ a tárolási idő;
- ❑ a termelőcső kémiai, fizikai és mechanikai tulajdonságai.

Az előző fejezetekben felsorolt korróziótípusok és korróziós hatások külön-külön is, illetve együttesen is hat(hat)nak.

7. A tárolás feltételei

7.1. Idő

Az idő a tárolás feltételei közül az egyik megfoghatatlan tényező. Az egy tárolási ciklus (T_c) három időszakaszból áll: betárolási idő (T_{be}), tárolási idő ($T_{tárol}$) és kitárolási idő (T_{ki}).

$$T_c = T_{be} + T_{tárol} + T_{ki}.$$

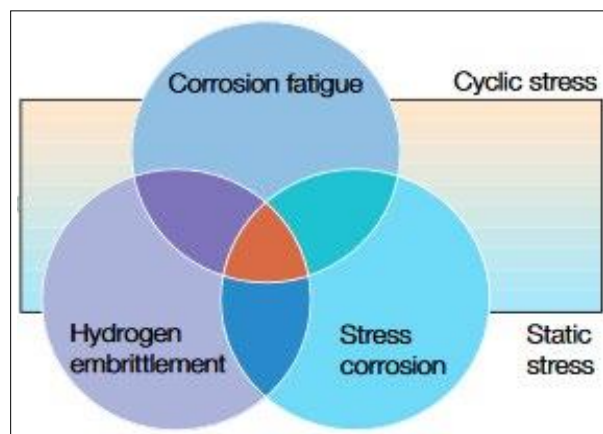
A betárolási időt a tárolóréteg nyelőképessége, a betárolandó gáz mennyisége, a kompresszor, a szállító vezeték és a termelőcső kapacitása határozza meg. A betároláskor fellépő dinamikus mechanikai hatások (nyomás- és hőmérsékletváltozás) következtében kialakuló feszültségváltozások és a betárolás közbeni korrózió minél kisebb betárolási sebességet kíván(na) meg.

A tárolási idő a tárolt gáz felhasználásának függvénye, amely tárolási ciklusonként lehet állandó, de lehet változó is. A megváltozott feszültségek állandósulása a minél hosszabb tárolási időt, a kialakuló korrózió pedig a minél rövidebb tárolási időt kíván(na) meg.

A kitárolási idő gyorsaságánál ugyanaz mondható el, mint a betárolási időnél, illetve a kitárolás időegység alatti mennyiségét a felhasználó és a fogyasztó határozza meg. A kitároláskor fellépő dinamikus mechanikai hatások (nyomás- és hőmérsékletváltozás) következtében kialakuló feszültségváltozások és a kitárolás közbeni korrózió minél lassabb kitárolási sebességet kíván(na) meg.

7.2. Ciklusszám

A ciklusszám a tárolás feltételei közül a másik megfoghatatlan tényező. A ciklusok számát elsősorban a fogyasztói és felhasználói igények határozzák meg. A tároló kút szempontjából olyan szerkezeti anyagok kiválasztása szükséges, amely mind a hidrogén jelenlétét, mind pedig nagymérvű ciklusszámot elviselje. A termelőcsőben kialakult sztatikus feszültségek, a hidrogénridegedés, a feszültségekorrózió és a korróziós kifáradás mellett a ciklikusság miatt kialakult feszültségek is hozzájárulnak a termelőcső tönkremeneteléhez. Ciklusszámot előre kiszámolni vagy kalkulálni nem lehet, azt a gyakorlat fogja megmutatni (14. ábra).



14. ábra. A ciklusszám hatása

8. A hidrogén által okozott egyes hatások

A szénacélok hidrogén indukálta meghibásodását általában a hidrogén szilárdsági tulajdonságokra, a kifáradásos repedések növekedési sebességére és a törési szívósságra gyakorolt hatása alapján értékeli.

8.1. A hidrogén nyomásának hatása

A szénacélokban a hidrogén okozta ridegedés mértéke növekszik a hidrogéngáz parciális nyomásának növekedésével, ugyanakkor a mechanikai tulajdonságokra való hatása alacsony nyomáson nagyobb, nagyobb nyomáson pedig kisebb hatása van. A mechanikai tulajdonságok elsősorban a fém hidrogéntartalmától

függenek. Egyes esetekben a mechanikai tulajdonságok korrelálnak a hidrogén nyomásának négyzetgyökével, mivel egy adott nyomástartományban a hidrogén egyensúlyi rácskoncentrációja a hidrogénnyomás négyzetgyökével változik. Azonban jobb a nyomás helyett a hidrogén fugacitását (beszívargását) figyelembe venni, mivel a fugacitás határozza meg a fémbe oldott hidrogén rácskoncentrációját nagy nyomáson. A fugacitás számítása:

$$f = p \cdot \exp\{b/RT\},$$

ahol

p : a hidrogéngáz parciális nyomása (MPa);

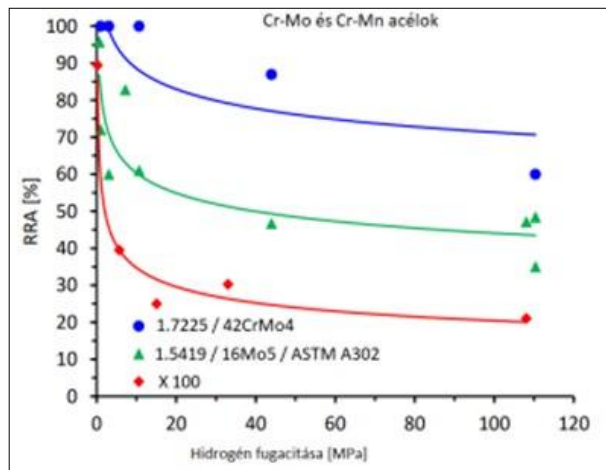
b : állandó, hidrogén esetén $15,84 \text{ cm}^3/\text{mol}$;

R : általános gázállandó, $8,314 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$;

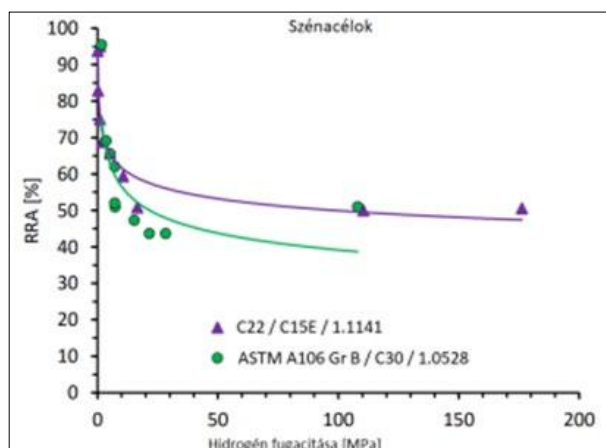
T : hőmérséklet (K).

Megjegyzés: szobahőmérsékleten és alacsony nyomáson $f \approx p$.

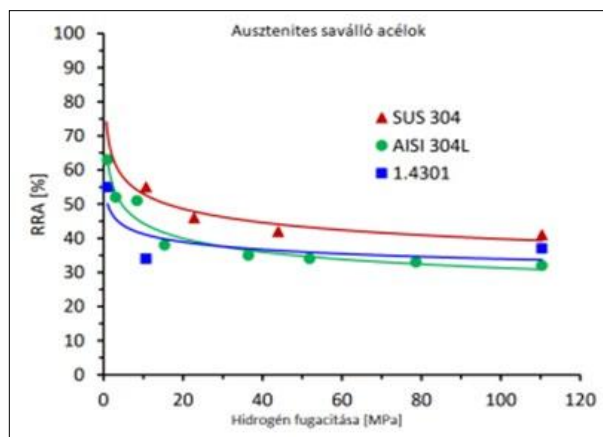
A hidrogén hatása a nyomás növekedésével erősödik, majd fokozatosan állandósul, azonban igen magas nyomáson – jellemzően 200 MPa felett – a hatása ismét erősödhet (15., 16., 17. és 18. ábra).



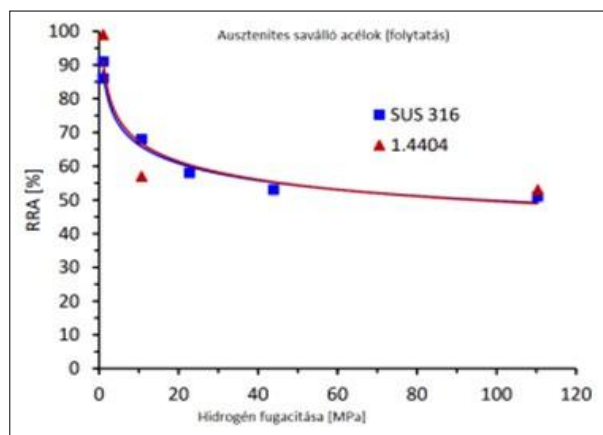
15. ábra. A Cr-Mo és Cr-Mn acélok ridegedése a fugacitás függvényében



16. ábra. A szénacélok ridegedése a fugacitás függvényében



17. ábra. A Cr-Ni ötvözetű, ausztenites korrozíóálló acélok ridegedése a fugacitás függvényében



18. ábra. Az ausztenites Cr-Ni-Mo ötvözetű, korrozíóálló acélok ridegedése a fugacitás függvényében

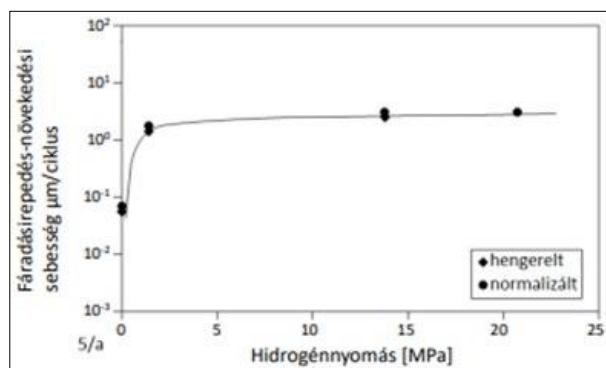
8.2. A szennyezőanyagok hatása

Vizsgálatokat végeztek, hogy mely szennyezőanyagok azok, amelyek inhibitoroként működnek, azaz jelenlévő hatásuk csökkenti vagy esetleg kiküszöböli a hidrogénnek a szénacélok mechanikai tulajdonságokra gyakorolt káros hatásait. Az oxigén (O_2), a szén-monoxid (CO), a kén-dioxid (SO_2), a nitrogén-dioxid (NO_2) és a szén-diszulfid (CS_2) azok a szennyezőanyagok, amelyek hatásosnak bizonyultak azért, hogy akadályozzák a fém hidrogénfelvételével járó felületi reakciókat. Általában elmondható, hogy a szennyezőanyagok abszolút parciális nyomása az a változó, amely a hidrogén hatásának visszaszorításáért felelős, ezért a szennyező gáz(ok) koncentrációja egyre nagyobb jelentőségűvé válik a hidrogéngáz nyomásának növekedésével.

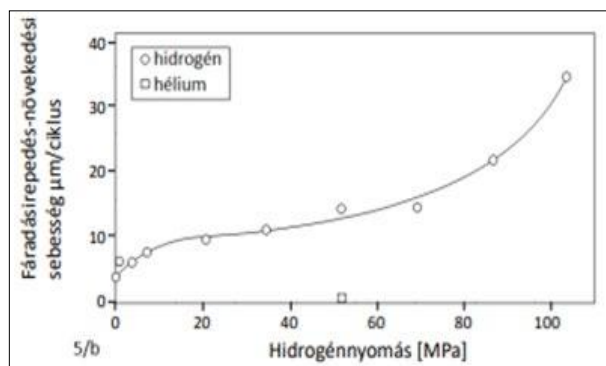
8.3. A hidrogén hatása a kifáradási-repedésnövekedési sebességére

A szerkezeti fémekben, vegyileg semleges légkörben mért kifáradási-repedésnövekedési sebességet (ango-

lul: *fatigue crack growth rate*, FCGR) a hidrogénes környezet tízszeresére vagy akár annál nagyobb mértékben is növelheti. Egy küszöbnyomás felett a mechanikai tulajdonságok nem változnak tovább (19. és 20. ábra).



19. ábra. A kifáradási-repedésnövekedési sebesség a hidrogénnyomás függvényében az SA-100 acélnál



20. ábra. A kifáradási-repedésnövekedési sebesség a hidrogénnyomás függvényében az HY-100 gyengén ötvözött acélnál

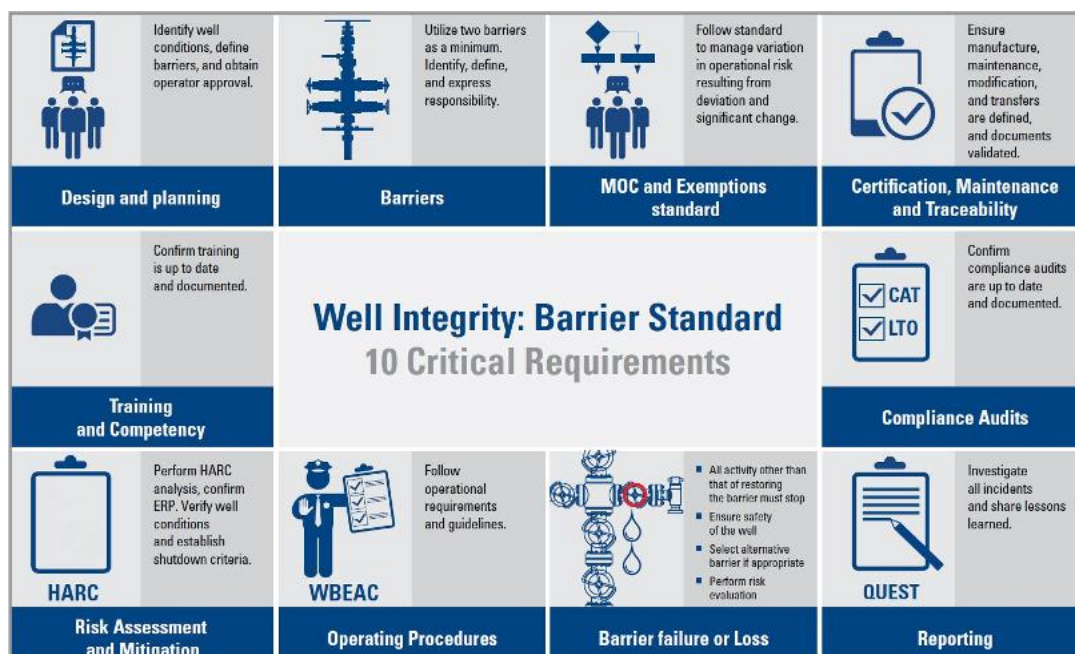
8.4. Terhelési frekvencia hatása

A mechanikai rendszereket gyakran éri tartósan ciklikus, illetve harmonikus terhelés, melynek hatására a szerkezet szintén harmonikus válasszal reagál. A harmonikus válaszanális egy lineáris szerkezet időben szinuszosan változó terhelés(ek) hatására bekövetkező egyensúlyi választ adja meg (tranziens rezgések vizsgálatára nem alkalmas). Ez segíti feltárni a gerjesztett rezgéseknek kitett szerkezet viselkedését (kifáradás, rezonancia stb.). A válaszanális során megállapították, hogy az FCGR a csökkenő terhelési frekvenciával növekszik. Ez a tendencia nem folytatódik a végtelenségig, az FCGR a frekvencia csökkenésével egy felső platót ér el, vagyis csökkenő frekvenciával addig nő, amíg el nem ér egy határfrekvenciát, ez alatt az FCGR független a frekvenciától. Ferrites acélok esetében a technológiai szempontból releváns tartomány $20 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ alatt van, ekkor a plató körülbelül a 0,1–1 Hz alatti frekvenciákon kezdődik. Ezen terhelési ciklus időtartama elegendő ahhoz, hogy a hidrogén bediffundáljon a fémbe, és teljes mértékben telítse a repedéscsúcsot [6].

9. Kútintegritás

A kútintegritás azoknak a műszaki, üzemeltetési és szervezési feladatoknak az összessége, amelyet annak érdekében kell megtenni, hogy a hidrogén föld alatti tárolásának kockázatát minimálisra csökkentsék a kút teljes élettartama során. A kútintegritás 10 legfontosabb eleme:

- legjobban megvalósítható méretezés és tervezés;
- legalább két biztonsági zárás létrehozása;
- változások kezelése és utasítások szükség szerinti módosítása;



21. ábra. A kútintegritás elemei

- ❑ gyártási, karbantartási és módosítási tanúsítványok megléte és érvényessége;
- ❑ felülvizsgálatok naprakész teljesítése és dokumentálása;
- ❑ bekövetkezett események és azokból levont tanulságok ismertetése;
- ❑ biztonsági zárás(ok) meghibásodásának vagy elvesztésének kezelése;
- ❑ üzemeltetési utasítások megléte és folyamatos karbantartása;
- ❑ kockázatok felmérése és csökkentése;
- ❑ folyamatos szakmai képzés, szükséges szaktudás biztosítása és dokumentálása (21. ábra).

10. Kockázatelemzés

A kockázatmenedzsment az öt menedzsment funkciónak (5MF) a kockázatok elleni védekezésre, illetve ennek vezetői feladataira történő vonatkoztatását, valamint az öt menedzsment funkció megvalósítását jelenti. A kockázatmenedzsment öt funkciója:

- ❑ Kockázattervezés: magába foglalja a kockázattervezés megtervezését és megszervezését, a kockázatok feltérképezését és beazonosítását, a kockázatok elemzését, valamint a kockázatok elleni védekezés megtervezését.
- ❑ Kockázatkezelés: tartalmazza a kockázatkezelés kivitelezésének és végrehajtásának megszervezését, a folyamatszervezést, a technológiák, eljárások, ügyrendek és munkaköri feladatok szabályozását, valamint a vonatkozó kézikönyvek és kezelési útmutatók elkészítését.
- ❑ Irányítás: feladata a kockázatkezelés végrehajtásának irányítása.
- ❑ Ellenőrzés: feladata a kockázattervezés, kockázatkezelés és végrehajtás ellenőrzése.
- ❑ Továbbfejlesztés: tartalmazza a teljes kockázatmenedzsment továbbfejlesztését, a tanulságok feljegyzését és hasznosítását.

A kockázatelemzés a kockázatmenedzselési eljárásban a lehetséges kockázatok azonosítása, csoportosítása és besorolása az üzemeltetés ideje alatt (része a kútintegritásnak is). A hidrogén föld alatti tárolásakor három kockázati szint különböztethető meg:

- ❑ alacsony [1];
- ❑ közepes [2];
- ❑ magas [3].

A hidrogén föld alatti tárolásakor négy kockázati csoportot lehet felállítani:

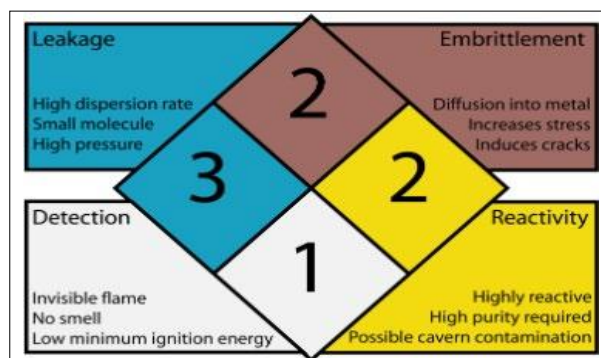
- ❑ reakcióképesség;
- ❑ ridegedés;
- ❑ szivárgás;
- ❑ észlelés.

Reakcióképesség: ide sorolható a tárolt hidrogén tisztasága, a korróziós, a biokémiai és a mechanikai hatások – kockázati szint 2.

Ridegedés: ide sorolható a hidrogénridegedés, a feszültségek növekedése/váltakozása és az előidézett repedések, meghibásodások – kockázati szint 2.

Szivárgás: ide sorolható a hidrogén kis molekula mérete miatti hatások, a nagy nyomás és a nagy diszperzió-sebesség – kockázati szint 3.

Észlelés: ide sorolható a hidrogén szagtalansága, az alacsony gyulladási és robbanási energia és a láthatatlan égés – kockázati szint 1. (22. ábra).



22. ábra. A kockázati szintek

11. Befejezés

Ez az összeállítás egy rövid összefoglalója annak, hogy a hidrogénnek milyen hatása van a fémek környezetére föld alatti tárolása esetén. Nem több és nem kevesebb célja, hogy a föld alatti tárolásban közreműködő műszaki szakembereknek felhívja a figyelmét a megoldandó mindennapi problémákra (anyagkiválasztás, technológia meghatározása, biztonság stb.). Bizonyára a jövőben még számtalan kutatás, tanulmány és publikáció készül el ebben a témában, de remélem, hogy ez az összeállítás mindennek egy kiindulási pontja lesz.

Irodalom

- [1] Denis Brondel, Randy Edwards, Andrew Hayman, Donald Hill, Shreekant Mehta, Tony Semerad: Corrosion in the oil industry. Oilfield Review, April 1994.
- [2] Understanding the Impact of Corrosion on the Oil and Gas Industry. CDI Products, September 10, 2024.
- [3] Syed Hasnain Ali Pirzada: Corrosion in oil and gas industries: A review. Oilfield Review, November 2022.
- [4] Olha Zvirko, Oleksandr Tsyurulnyk, Sebastian Lipiec, Ihor Dzioba: Evaluation of corrosion, mechanical properties and hydrogen embrittlement of casing pipe steels with different microstructure. Materials, 14(24), 2021, 7860. <https://doi.org/10.3390/ma14247860>
- [5] Kovács Judit, Lukács János: Hidrogénnel kapcsolatos károsodási módok acélsövek esetén. Multidiszciplináris Tudományok, 13(1) 2023. december. <https://doi.org/10.35925/j.multi.2023.1.15>
- [6] Mérő Tamás, Lovas László: A hidrogén hatása egyes acélok mechanikai tulajdonságaira. Anyagvizsgálók Lapja, 2022/II.

Korai technológiafejlesztés a hazai acéllemezgártásban

Early technological development in domestic steel plate production

GREGA OSZKÁR 

Címzetes egyetemi tanár,

Miskolci Egyetem, Anyag- és Vegyészmérnöki Kar, Miskolc, E-mail: grega.oszkar@drgrega.hu



A dolgozat a Dunafernnél a közelmúltban lezajlott események tükrében visszatekint az 1990-es évek második felében lezajlott stratégiai fejlesztési tevékenységre, ami a Dunaferri technológiováltását készítette volna elő.

Kulcsszavak: piacképesség, technológiai váltás

The thesis looks back at the development work carried out in the second half of the 1990s, which prepared Dunaferri's technological change, in light of recent events at Dunaferri.

Keywords: marketability, technological change

Előzmények

A Dunaferri 2023 októberben kezdődő, a Liberty Steel által végrehajtott, Európa első zöld acélját „belengető” privatizációja, 2024-ben a vállalkozás szupersebességű csődjével zárult, és felszámolásba torkolt. A zöld acél gyártását hangsúlyozó, ma már láthatóan propaganda céllal hangoztatott, a tényleges fejlesztési célt – már akkor nyilvánvalóan – még gondolati szinten sem tartalmazó privatizáció, a „nincs új a nap alatt” vagy a „djéjà vu” érzést, ezzel együtt a Dunafernnél mintegy 25 évvel korábban megalkotott stratégiai technológiováltási koncepciót idézi emlékezetünkbe. A cikk ezeket a törekvéseket tekinti át, mintegy utalva a hazai szakemberek előrelátó kreativitására.

A Dunaferri műszaki fejlesztési tevékenysége az 1990-es években

A Dunaferri Zrt. 1992. évre kialakult szervezeti struktúrája egy kvázi állami tulajdonú, de az európai gazdasági térbe illeszkedő szervezetet eredményezett, meghatározóan új menedzsmenttel. Ezen belül a stratégiai

műszaki fejlesztési tevékenység a műszaki vezérigazgató-helyettes szervezetéhez tartozó, műszaki fejlesztési igazgatóság hatáskörébe került, ahol ugyancsak új vezetővel és több új munkatárssal folyt a tevékenység.

A műszaki fejlesztés stratégiájában döntő változás állt be, a technológiaközpontú műszaki fejlesztést a piaci, termékközpontú marketingbázisú tevékenység vette át. Ennek szellemében 1994-től a világ, ezen belül az európai acélpiaci események, tendenciák, ezzel összefüggésben a strukturális változások nyomán követése folyamatosan zajlott. A változásokat folyamatában összevetették a Dunaferri alaptechnológiai lehetőségeivel, a végső cél a Dunaferri piacképességének megtartásához esetlegesen szükséges technológia, elemenkénti vagy teljes technológiováltási stratégia szintű előkészítése.

Az elemző munka során az alábbiak összesítése történt meg. A Dunaferri alaptechnológiája a létesítés időpontjának (1949) megfelelő szovjet technológiai színvonalon működő integrált acélgyártási technológia (ércsugorító mű – nagyolvasztós nyersvasgyártás – oxigén konverter – vertikális kétszálas folyamatos öntőmű – hatállványos folytatólagos meleghengerny – 1,6–1,8 millió tonna melegen hengerelt tekercs kibocsátásával. Ennek bázisán az alaptechnológia megújításához az alábbi szempontokat vettük figyelembe:

- a jelenlegi és várható piaci lehetőségek, erősödő verseny;

- ❑ a hosszabb távon tervezett termelőkapacitás nagysága;
- ❑ a világ acéliparában alkalmazott technológiák fejlődése által kínált lehetőségek;
- ❑ alapanyagok és energiahordozók biztosításának lehetőségei;
- ❑ az EU-csatlakozás követelményei;
- ❑ vállalatok és piacok globalizációja.

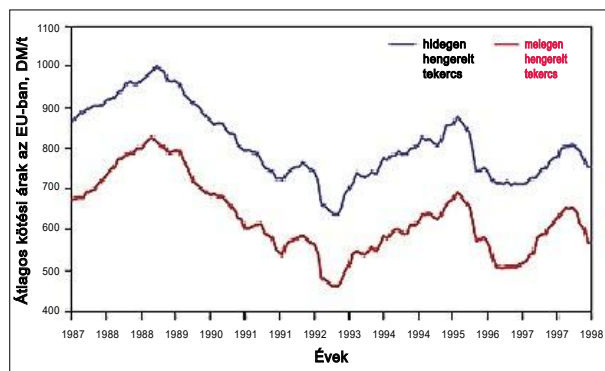
Az elgondolás szerint, a fenti szempontok szem előtt tartásával a megvalósítandó technológiai struktúrának az alábbi kritériumokat mindenképpen teljesítenie kell:

- ❑ a termelékenység növekedjen, miközben nő az energiafelhasználás hatékonysága;
- ❑ megfelelő rugalmasságot biztosítson a piaci kereslet változásának gazdaságos kezeléséhez;
- ❑ javítható legyen a késztermék minősége;
- ❑ elégítse ki az aktuális környezetgazdálkodási kritériumokat;
- ❑ eredményezzen hatékony munkaerő-felhasználást.

A szükséges döntések meghatározásához folyamatos elemző munkával a következő jelenségeket vettük figyelembe:

Piaci tendenciák

Az acéllemezpiac változásait az 1988–1998 időszakban vizsgáltuk. Mindkét termék, a melegen és hidegen hengerelt lemeztekercesek ára a vizsgált időszak meghatározott periódusaiban maximumos görbe szerint változott, a maximumok és minimumok egyre kisebb értékű megjelenésével. A csökkenő ciklusidők azt eredményezték, hogy a gyártók számára egyre rövidebb olyan időszakok állnak rendelkezésre, amikor tartalékokat tudnak felhalmozni a következő, dekonjunkturális időszak finanszírozására. Ebből következik, hogy az önköltség típusú ár nem alkalmazható, a Dunafernek csak árkövetési lehetősége volt (1. ábra) [1]. Különösen érvényes ez az integrált technológiát működtető vállalkozásokra, így a Dunaferre is.



1. ábra. Ártendenciák az EU acélpiacán

1. táblázat. Nyersvasgyártó-kapacitás az EU-ban

Régió	Év	Nyersvas-termelés, kt/év	Nagyolvasztók száma, db	Fajlagos termelés, t/év
EU 12	1980	95 202	332	287 000
EU 15	1990	99 124	100	991 000
EU 27	2003	113 162	58	1 951 000
Dunafer	2000	1 200	2	600 000

2. táblázat. Az EU-ban működő nagyolvasztók termelő-képessége és száma

1.	2.	3.	4.	5.
Ország	Üzem	Nagyolvasztó kt/év	Nagyolvasztók száma	Nyersvas-termelés kt/no/év
Ausztria	Donawitz	1 370	2	685
	Linz	4 340	3	1 447
Belgium	Ghent	4 430	2	2 215
Cseho.	Ostrava	3 200	3	1 067
	Trinec	2 100	2	1 050
Finno.	Raahe	2 400	2	1 200
Franciao.	Dunkerque	6 800	3	2 267
	Fos-Sur-Mer	5 160	2	2 580
Németo.	Brema	3 960	2	1 980
	Dillingen	4 790	2	2 395
	Duisburg	11 600	4	2 900
	Eisenhüttenstadt	2 340	2	1 170
	Salzgitter	4 800	2	2 400
Magyaro.	Dunaújváros	1 310	2	655
Olaszo.	Taranto	9 590	4	2 398
Hollandia	Ijmuiden	6 310	2	3 155
Lengyelo.	Dabrowa Gornica	4 500	2	2 250
	Krakkó	1 310	1	1 310
Románia	Fgalati	3 250	2	1 625
Szlovákia	Kassa	2 850	2	1 425
Spanyolo.	Gijon	4 480	2	2 240
Svéd.	Lulea	2 200	1	2 200
	Öxelesund	1 800	2	900
UK	Port Talbot	4 770	2	2 385
	Scunthorpe	3 590	3	1 197
Összesítés/átlag			25	1 804

Nyersvasgyártó kapacitásváltozások

Az 1985 és 2000 közötti, a bemutatott ciklikusságból következő, kedvezőtlen költségkihatások csökkentésére a gyártóművek a kapacitások struktúrájának az átalakításával reagáltak. 1985 és 1995 között (a volt Szovjetuniót kivéve) 115 nagyolvasztót állítottak le, 75,2 Mt nyersvasgyártási kapacitás megszüntetésével. Ugyanezen időszak alatt 34 kohó épült 56,4 Mt kapacitással. Észak-Amerikában 13 Mt volt a leépített kapacitás, amit nem pótoltak, ugyanakkor jelentős, 18,6 Mt kapacitásbővítés történt Ázsiában. Összességében Kínában és Dél-Koreában 30 Mt kapacitást telepítettek [2].

A kapacitásváltozások részletesebb elemzéséből kitűnik, hogy a leállított nagyolvasztók átlagos kapacitása 0,65 Mt/év volt, míg az új nagyolvasztóknak 1,7 Mt/év. Igen tanulságos jelenség a Thyssen Krupp Steel AG (TKS) nyersvasgyártási szerkezetének változása 1996 és 2000 között. Az időszak kezdetén 12 Mt nyersvasat nyertek 31 kohóból, 2000-ben ugyanezt a kapacitást 5 kohó képviselte. A nagyolvasztók térfogatnövelése négy fontos technológiai tényezőnél (fajlagos üzemi költség, munkaerő-szükséglet, munkakörülmények, környezetterhelés) javulást eredményezett, ugyanakkor a rugalmasság tekintetében – természetesen – romlás következett be.

Az 1. táblázatban közel az elemzett időszak nagyolvasztói kapacitásai láthatók.

Egy másik megközelítésben az EU-ban működő nagyolvasztókat országonként és művenként is vizsgáltuk, az összesítés a 2. táblázatban látható.

Az 1. táblázatból látható, hogy a Dunaferri nagyolvasztói az átlagos 0,645 t/év kapacitástól is kisebb termelőképességgel bírtak, miközben az átlagos nagyolvasztó termelőképesség az 1. és a 2. táblázat értékei szerint 1,8 és 1,9 millió tonna/év érték közé esett; mintegy háromszorosa a Dunaferri nagyolvasztói kapacitásoknak.

Acélgyártó kapacitásváltozások

1994 és 1997 között Európában 12 vállalatnál 14 új elektrokemence épült (3. táblázat).

A 14 kemencéből 11 konverteres technológia kiváltására, 700 és 1400 kt/év, közötti, összesen 8 600 000 t/év termelőképességgel. Ezekből az acél-művekből 4 nevesítetten melegen hengerelt lemez gyártására épült, 85–140 tonna betéttömegű kemencékkel, összesen 2 500 000 tonna termelőképességgel, 4 vállalatnál.

A Dunaferri költség szintjét alapvetően meghatározó metallurgiai fázis (nagyolvasztós nyersvasgyártás, LD-konverter) kapacitásméreteit összevetve az itt bemutatott európai technológiai tendenciákkal, erős figyelemmel az európai piaci beágyazottságra (60–70% exportkényszer) meg kellett állapítanunk, hogy a műszaki színvonala stratégiai inflexiók ponthoz érke-

3. táblázat. Az EU-ban 1994–97 között épült EAF-kemencék

Vállalat	Üzembe helyezés	Elektrokemence	Kapacitás	Megjegyzés	Acéltermék
ESF Feralpi, Riesa	1994	1 × 70 t	350	Új telepítés	
Henningsdorfi elektro-acélmű	1994	2 × 70 t	900	Elektropótlás	
Georgsmarienhütte	1994	1 × 125 t DC	400	KMS kiváltás	HSLA acélok
Preussag Stahl, Peine	1995	1 × 100 t DC	750	LD-AC kiváltás	Nehéz acélszerkezet
Thüringer Stahlwerk, Unterwellenborn	1995	1 × 120 t DC	700	OBM kiváltás	Könnyű acélszerkezet
Usines G. Boel, La Louvière, Belgium	1993	1 × 85 t DC	500	LD kiváltás	Melegen heng. tekercs
Arbed, Schifflange, Luxemburg	1994	1 × 95 t	900	LD kiváltás	Rúd és huzal
Arbed, Differdange, Luxemburg	1995	1 × 135 t DC	1000	LD kiváltás	
Arbed, Belval, Luxemburg	1997	1 × 155 t DC	1400	LD kiváltás	Szerkezeti acél
Unimetal, Gandrange, Franciaország	1994	1 × 150 t DC	1350	LD kiváltás	Acélhuzal
Cockerill Sambre, Marcinelle, Belgium	1996	1 × 140 t	600	LD kiváltás	Melegen heng. tekercs
ACB, Bilbao Spanyolország	1996	2 × 130 t	1000	LD kiváltás	Melegen heng. tekercs

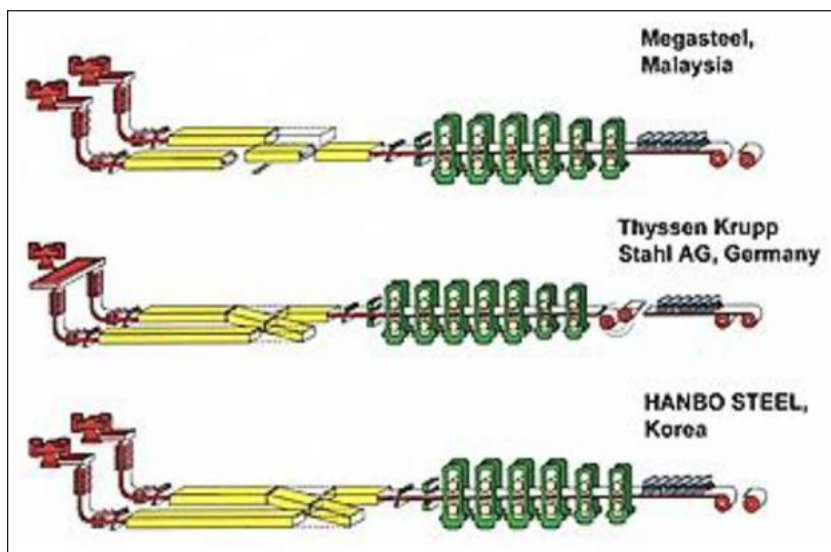
zett, amikor a költséghatékony termelés már csak morfogenetikus beavatkozással lehetséges [3].

Döntésünknek irányt szabott az acéliparban terjedő új, rugalmas, költség- és energiahatékony technológiai struktúra, az ún. miniacélmű koncepció, ami nem méretet, volument, hanem új termelés-szervezési koncepciót jelent. A döntés irányát tovább rögzítette a lemezgyártási technológiában az 1990-es évek elején kialakuló új technológia, a végmérethez közeli öntés és a hengerlés összekapcsolása, ami a folyékony és alakítási fázist kvázi egy technológiai egységbe integrálja.

Végmérethez közeli öntő-hengerlő technológiák

Viszonylag új technológiai szerkezet az ún. miniacélművek kategóriája, amelyek kialakulását az acéllemezgyártásban a villamos ívkemencék primer olvasztóberendezésként való versenyképes alkalmazhatósága, és a vékonybrammaöntő eljárások megjelenése és agresszív terjedése tette lehetővé. Ez a technológiai szerkezet főképpen a fejlesztésben korábban elmaradt egyesült államokbeli, és a távolkeleti országok acéliparára volt jellemző, de Európában is több ilyen üzem működött. A leginkább elterjedt, az SMS Group német berendezésgyártó CSP öntő-hengerlő berendezéséből – vizsgálataink idején – már 25 működött miniacélműves struktúrában, de a technológia megjelent az integrált művekben is (TKS Duisburg).

A vékonybramma öntőgépek fő jellemzője a klasszikus öntőgépeken öntött brammák 180–300 mm



3. ábra. CSP-berendezés párhuzamos telepítési (szalagátadási) lehetőségei

vastagságával szemben az 50–70 mm-es brammavastagság, amit a kristályosító speciális kialakításával érnek el. Az öntött kvázi előlemez közvetlenül egy temperáló kemencén át jut a folytatólagos meleghengergorra. A temperáló kemencében történik az előlemez hőmérsékleti és összetételi (diffúziós) kiegyenlítése. A technológia eredménye az 1 mm-től kisebb lemezvastagság, ami a 2. ábrán látható.

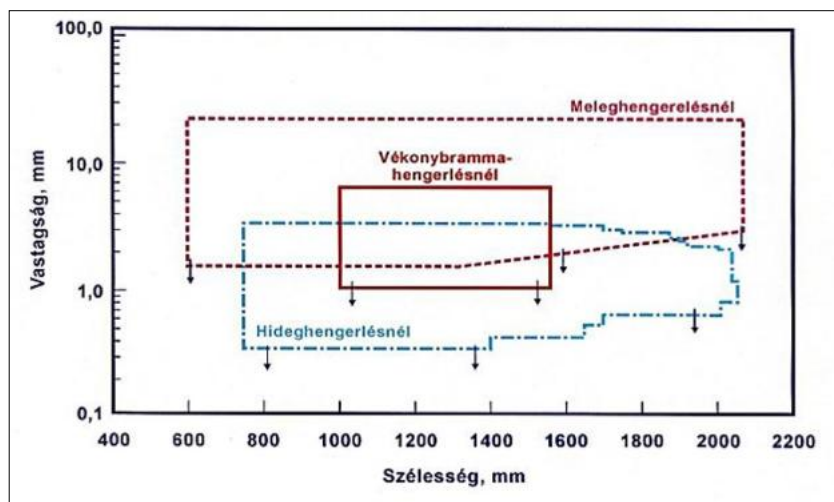
A technológia alkalmazása lehetővé teszi vékony (0,8 mm), melegen hengerelt, pácolt, dresszírozott lemezek gyártását, ami – kiváltva bizonyos hideghengerműi minőségeket – új termékként jelenhet meg a piacon.

Sajátosságaiból eredően az eljárás egy technológiai sor esetén kb. 1,0–1,5 Mt/év melegen hengerelt tekercs gyártására alkalmas, de az öntőmű és a hengergor különböző ütemideje lehetővé teszi a duplikálást. Általában a telepítéskor csak alapozott párhuzamos sor későbbi telepítésével a mű termelőképessége ugyanazon hengergorral duplázható. A párhuzamos

sorok közötti szalagátadási lehetőségeket mutatják a 3. ábrán bemutatott telepítési módok.

Az elképzeléseink megerősítésére az SMS közreműködésével részletekbe menő látogatást tettünk néhány, CSP vékonybrammaöntő berendezésekkel működő miniacélműben (4. táblázat) [4].

Látogatásaink a szürkével kiemelt üzemekben történtek. A CSP-technológia első példányát az SMS a NUCOR-nál építette 1989-ben. A Steel Dynamics gépe néhány évvel később, közel egyidőben a spanyol berendezéssel épült. A második amerikai és a



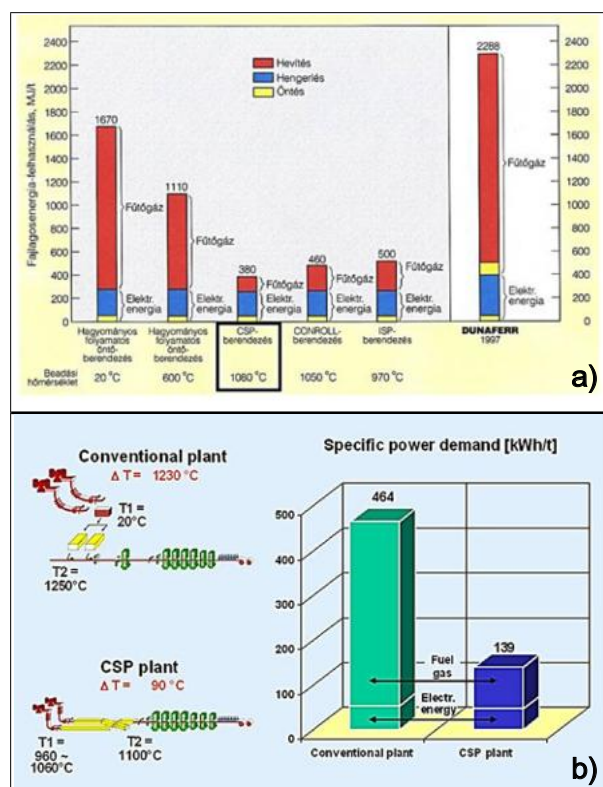
2. ábra. Különböző hengerlési módokkal elérhető szalaggeometria

4. táblázat CSP-berendezések referencialistája

Üzem/Helyszín	Indítás (év)	Kapacitás (Mt/év)
Nucor Steel – Crawfordsville (USA)	1989	~0,99 Mt/év (kb. 1 Mt)
Nucor Steel – Hickman (USA)	1992	~1–1,5 Mt/év*
Nucor Steel – Gallatin (USA)	1995	~1–1,5 Mt/év*
SDI Butler (USA)	1995	~1–1,5 Mt/év*
Nucor Riverdale & Berkeley (USA)	1996	~1–1,5 Mt/év*
SDI Columbus (USA)	2007	~1,5 Mt/év*
Big River Steel (USA)	2016	~1,5 Mt/év*
SDI Sinton – CSP® Nexus (USA)	2021	~2,7 Mt/év (nexus)
Hyundai Steel (KOR)	1995	~1–1,5 Mt/év*
Hylsa (Mexikó)	1995	~1–1,5 Mt/év*
Megasteel (Malajzia)	1998	~1–1,5 Mt/év*
Hebei Handan (Kína)	1999	~1–1,5 Mt/év*
Baotou Iron & Steel (Kína)	2001	~1–1,5 Mt/év*
Maanshan Iron & Steel (Kína)	2003	~1–1,5 Mt/év*
Wuhan Iron & Steel (Kína)	2009	~1–2,5 Mt/év*
Essar Steel – Hazira (India)	2011	~2,5 Mt/év
Tata Steel – Jamshedpur (India)	2012	~1–1,5 Mt/év*
ACB-Bilbao (Spanyolország)	1996	~1–1,5 Mt/év*
Thyssen Krupp (Németország)	1999	~1–1,5 Mt/év*
Tata Steel – IJmuiden (Hollandia)	2000	~1–1,5 Mt/év*
AM Saldanha (Dél-Afrika)	1998	~1–1,5 Mt/év*
Al-Ezz Dekheila (Egyiptom)	1999	~1–1,5 Mt/év*
JSW Steel – Dolvi (India)	2026*	~4,0 Mt/év (terv)

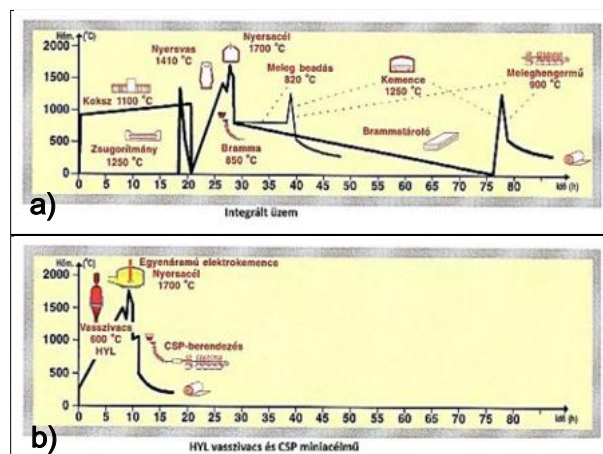
spanyol látogatásnál még módunk volt konzultálni az installációt végző SMS-munkatársakkal. Különösen figyelemre méltó volt a spanyolországi (Bilbao) ACB esete, ahol egy 2 Mt/év kapacitású integrált mű teljes leállítását miniacélmű létesítésével helyettesítették.

A döntés előtti utolsó látogatásunk a Thyssen Kruppnál történt, ahol megismerkedhettünk a konverteres acélművel kombinált megoldással. Azonos időben az SMS felsőszintű vezetőinek a prezentációját is meghallgathattuk, majd tárgyalásra került sor, ahol az elnök-vezérigazgató vezetésével a műszaki vezérigazgató-helyettes és a műszaki fejlesztési igazgató vett részt. A koncepcionális döntést az elnök-vezérigazgató még a repülőtéren meghozta, ami szerint a Dunaferri középtávú technológiafejlesztési tervét erre a technológiára alapozva kell kidolgozni.

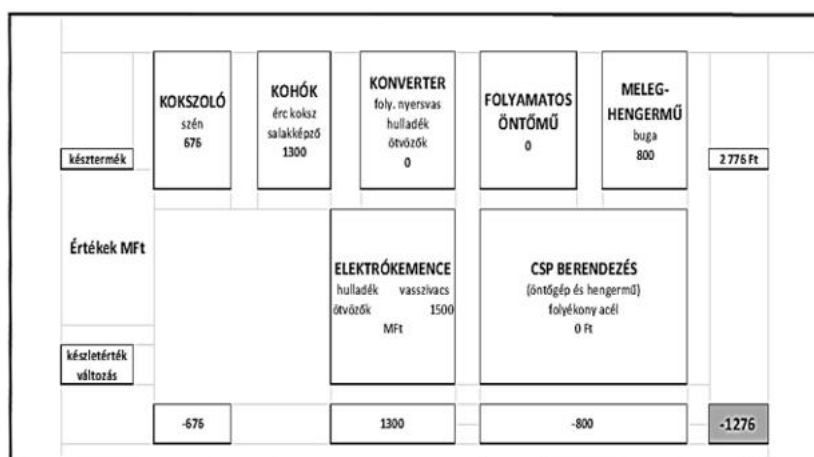


4. ábra. Integrált és miniacélmű energiafelhasználása

A megvalósítási tanulmányterv elkészítését megelőzően a látogatási helyszíneken a technológiai szemlélyzettől és a telepítést végző SMS-munkatársaktól gyűjtött, továbbá a referenciák alapján szerethető információk bázisán meghatároztuk a várható technológiai előnyöket. A 4. ábrán a két technológia energiaigényében jelentkező különbségeket érzékeltetjük. A 4a. ábra a teljes technológiai folyamat fajlagos energiafelhasználását, míg a 4b. ábra a fajlagos energia-felhasználást a klasszikus öntési-hengerlési technológia és a CSP összehasonlításában mutatja. A nyilvánvaló többszörös különbség a hideg beadás és a közvetlen hengerlés technológiája közötti hőmérsék-



5. ábra. Integrált és miniacélmű hőmérséklet-lefutása



6. ábra. Különböző technológiai rendszerben működő acélművek készletfinanszírozása

let-különbségből adódik, ami az 1230 vs. 90 °C-ból következik.

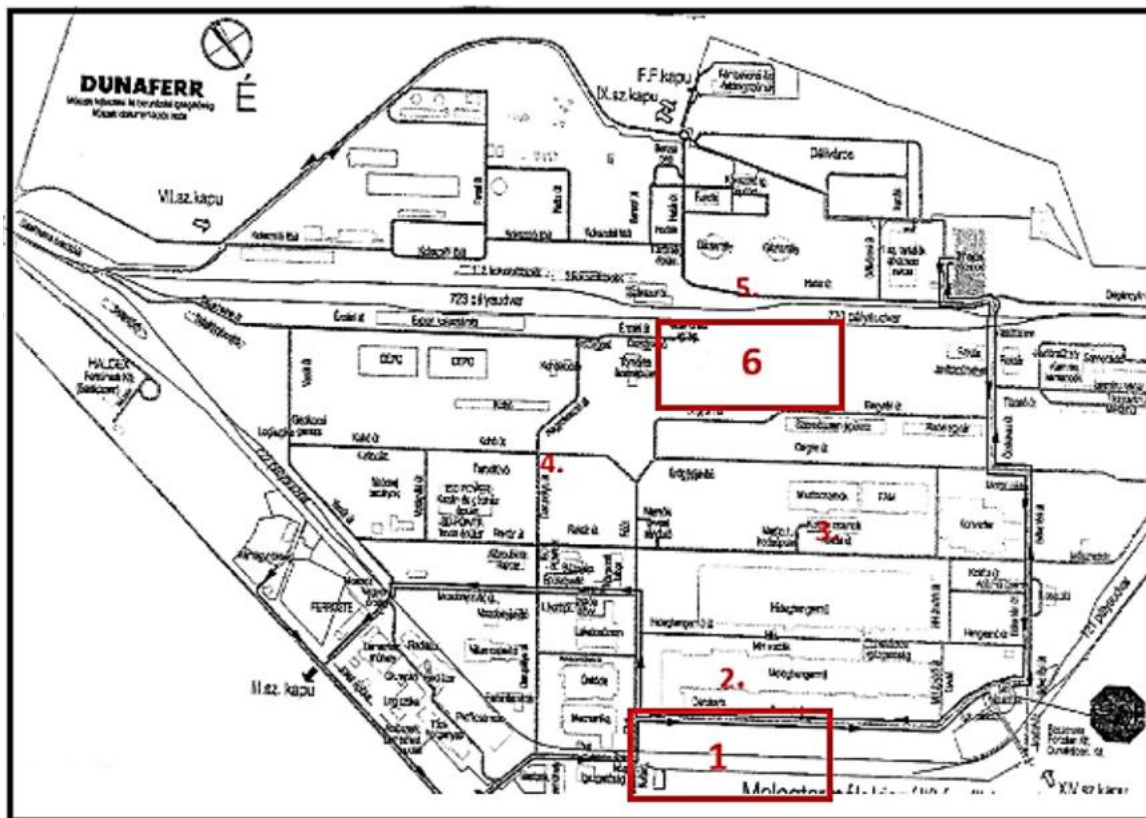
Az 5. ábra az integrált acélmű és egy direktredukciós művel együtt működő miniacélmű hőmérséklet-lefutását mutatja be.

Az 5. ábra több információt is tartalmaz. Az integrált műre jellemző többszöri lehűtés-melegítés alátámasztja a 4. ábrán látható fajlagosenergia-felhasználásban jelentkező meghatározó különbséget, ugyanakkor a technológiai időben mutatkozó különbség a rendelésfogadás-kiszállítás rugalmasságára utal.

A 6. ábrán azonos termékmennyiség alap- és kiegészítő anyagigényének készletfinanszírozása látható. A mintegy 35%-os különbség a pénzügyi gazdálkodás finanszírozási terheinek könnyítését jelenti.

A megvalósítás tanulmányterve

Az üzemlátogatási tapasztalatok, az SMS szakembereivel folytatott konzultációk, a bemutatott energetikai és finanszírozási vonatkozások egyértelművé tették a döntést a technológiaváltás mellett. A döntést követően az SMS a Dunaferri megbízásából elkészí-



7. ábra. Dunaferri miniacélmű telepítési helyszínváltozatok

tette a létesítés tanulmánytervét a teljes miniacélmű struktúrára. A telepítési helyszínt 6 változatban vizsgálták. Az alapfeltétel volt, hogy a meglévő mű az új technológiával a beüzemelés kezdeti időszakában párhuzamosan működik, ebből következően az 1. és a 6. helyszínnek volt realitása (7. ábra).

A technológia metallurgiai részének alapanyagellátása és az ehhez illeszkedő aktuális technológia 6 változatban készült:

1. 100% acélhulladék, kosaras adagolással;
2. 70% acélhulladék és 30% szilárd nyersvas, folyamatosan adagolva;
3. 100% acélhulladék folyamatosan adagolva VERTICON előmelegítőn keresztül;
4. 30% acélhulladék folyamatosan adagolva és 70% DRI-, ill. HBI-fedélen keresztül adagolva;
5. 30% acélhulladék folyamatosan adagolva és 70% HBI-fedélen keresztül;
6. 40% acélhulladék folyamatosan adagolva, 40% HBI-/DRI-fedélen keresztül, 20% folyékony nyersvas.

A betétösszeállítási változatokból látható, hogy az előre nem látható, de várhatóan változó alapanyagellátási források (acélhulladék ellenőrizetlen exportpiaca, kapacitásbővülés stb.) bármely változatára szolgáltat megoldást. A leírásból az is kitűnik, hogy a tervezés feltételezett egy direktredukciós és betét-előmelegítő technológiát is. A bemutatott változatoknak az eljárástechnikai háttérét az SMS berendezésgyártó háttére megfelelő referenciákkal tudta biztosítani.

A CSP-öntőgépet egyszálásra tervezték, 1,0–1,1 Mt évi termelőképességgel azzal a lehetőséggel, hogy későbbi bővítés esetén párhuzamos kiépítéssel biztosítható a termelés duplázása.

A tanulmányterv teljes részletességgel tartalmazta a beruházás megvalósításához szükséges teendőket, az üzemeltetési költségeket, a beruházás költségigényét, a személyzeti igényeket, a gyártható acélminőségeket, médiumellátási részleteket, környezetvédelmi vonatkozásokat. Az SMS finanszírozási ajánlatot is tett két év türelmi időt követő 10 év törlesztési idővel.

A technológiaváltási elképzelés a leírtak szerinti állapotig jutott el, amely a 1994-től 2000-ig terjedő időszak munkáit összegezte. Ekkor a Dunafer mentedsmentjében – itt nem részletezendő, de nem szak-

mai okok miatt bekövetkezett – teljes váltást előidéző csere történt, ami egyben a stratégiai elképzelés halálát is jelentette.

Összefoglalás, konklúzió

A Dunafer elképzelt, de meg nem valósult technológiaváltása megelőzte korát. A technológia sajátosságaiból következik, hogy kb. 5 évvel az üvegházhatású gáz kibocsátás korlátozását megalapozó Kiotói Egyezmény megszületése előtt a zöld acélgyártás koncepciója valósult volna meg, olyan emissziós értékekkel, amely a későbbi, ilyen irányú tevékenység szükségességéből következően az erőforrásokat a piacképesség és a gazdaságosság javítására fordíthatta volna.

Mivel a technológiaváltás jelentős létszámleépítést is eredményezett volna, a hat évig tartó átgondolt fejlesztési tevékenység csak nagyon szerény transzparenciával működhetett, így az előnyök jelentősége nagyon szűk szakmai körben volt tudatosítható. Gátló tényező volt az Acélművek Kft. felsővezetőinek szakmai szűklátókörűsége alapuló gátló magatartása is. Az eltelt mintegy 25 év indirekt módon az elképzelés életképességét igazolta, a követő események nyílegyenes lejtőn vezettek a Dunafer elmúlásához.

A következő hibás döntés az első privatizációs pályázat létszámtartási kötelezettsége volt, amelyre a komoly, integrált piaci háttérrel rendelkező két pályázó cég nem vállalkozhatott. A nyertes vállalkozás a türelmi idő lejártá után olyan mértékű létszámleépítést valósított meg, amilyen szinten a miniacélmű működött volna. A szépséghiba a konzerválódott, régi integrált technológia.

Mint hogy a technológiaváltás alapvető indoka az adott kapacitású integrált technológia már középtávú versenyképtelensége volt, természetes következmény volt a piacképesség elvesztése, amihez a változó tulajdonosi viszonyokkal összefüggő kompetenciahiányos menedzsment magatartása jelentősen hozzájárult.

Irodalom

- [1] Metall Bulletin. 1998. augusztus 27.
- [2] The State of the – EUROPEAN European Blast Furnace Committee
- [3] Recessziós folyamatok és kezelésük lehetőségei az acéliparban. BKL Kohászat 136(1), 2003, 7–10.
- [4] Tanulmányutak tapasztalatai.

Szerzői életrajzok

GREGA OSZKÁR okleveles kohómérnök 1972-ben végzett a Nehézipari Műszaki Egyetem (NME) Kohómérnöki Karán. Három évig a Borsodi Ércelőkészítő Mű technológusa, 1975-től az NME Vaskohászattani Tanszékén adjunktus. 1991-től a Dunaferr műszaki fejlesztési igazgatója, majd a DAM Steel Rt. műszaki és termelési igazgatója. 2003-tól 2009-ig, nyugdíjazásáig a Miskolci Egyetem Vaskohászattani Intézeti Tanszékének a vezetője. Jelenleg címzetes egyetemi tanár a Miskolci Egyetemen és a SteelTech-Center vezető szakértője. Euromenedzser, szakokleveles közgazda, Lean szakmérnök, igazságügyi szakértő. 2024-ben Ózd város Pro Urbe kitüntetésétje.

OMASZTA ISTVÁN 1985-ben szerzett diplomát az NME-n Bányagépész és Villamosmérnök szakon. Ezt követően az Országos Érc- és Ásványbányák Vállalatnál tervezőmérnökként, majd tervezési osztályvezető helyettesként dolgozott. Ez idő alatt elvégezte a Budapesti Közgazdaságtudományi Egyetem mérnök-közgazdász szakát. 1990-ben az ausztriai Allgaier Verfahrenstechnik GmbH, Hofkirchen fejlesztőmérnöke lett. A Montanuniversität Leoben (Ausztria) magánhallgatójaként a végeselemes módszerek használatát sajátította el. 2000-től a Semperit Technische Produkte GmbH, Wimpasing nemzetközi projektvezetőjeként dolgozott magyarországi műanyag- és gumiipari fejlesztéseken és Kínában. 2008–2015-ig a GWT GmbH munkatársaként fatüzelésű erőművek fejlesztésén és hatásfokának javításán dolgozott. 2015-től 2022-ig, nyugdíjba vonulásáig az Edtmayer Systemtechnik GmbH, Wien szenior projektvezetőjeként tervező- és fejlesztőmérnökként tevékenykedett energetikai területen mint energetikai tanácsadó és fejlesztő mérnök.

ID. ŐSZ ÁRPÁD aranyokleveles olajmérnök, menedzser szakmérnök. 1969-ben szerzett olajmérnöki diplomát Miskolcon, a Nehézipari Műszaki Egyetem Bányamérnöki Karán, majd 1993-ban menedzser szakmérnöki diplomát a Veszprémi Egyetemen. 1969-től 2015-ben történt nyugdíjazásáig – 46 éven keresztül – a kőolaj- és földgázbányászat területén fűrészi-, lyukbefejezési- és kútjavítási tevékenységgel, azok tervezésével, irányításával és ellenőrzésével foglalkozott a Kőolajkutató Vállalatnál és a MOL Nyrt.-nél. Dolgozott az Egyesült Arab Emírátsokban (Abu Dhabi) és Irakban (Kurdisztán). Az OMBKE tiszteleti tagja és a MMK aranygyűrűs mérnöke.

DR. SZILÁGYINÉ DR. SEBŐK SZILVIA geológus diplomáit és doktori fokozatát a Szegedi Tudományegyetemen szerezte. Korábban a MOL Csoport Kutatás-Termelés Divíziójának Oroszországi Kutatás és Mezőfejlesztés, valamint Rezervoár Technológia szervezeteiben dolgozott, ahol kutatási, mezőfejlesztési és nemzetközi projektértékelési feladatok mellett 3D tároló- és szedimentológiai modellezéssel, valamint geológiai és geofizikai értelmezésekkel foglalkozott. Jelenleg a Miskolci Egyetem Alkalmazott Földtudományi Kutatóintézetének tudományos munkatársa. Szakmai érdeklődése a nyersanyagkutatás, a szénhidrogén- és geotermikus rendszerek, valamint a kritikus és másodnyersanyagok földtani és hasznosítási kérdéseire irányul. Oktatóként és kutatóként fontosnak tartja a földtudományok gyakorlati alkalmazhatóságának, társadalmi jelentőségének és széles körű megismertetésének elősegítését.

VADÁSZI MARIANNA a Miskolci Egyetem, Műszaki Föld- és Környezettudományi Karán az intézet átszervezésével a Gázmérnöki Intézeti Tanszék vezetője, egyetemi docens, Fokozat: PhD (2003), MBA (2010), Okleveles olaj- és gázmérnök (MSc. 2001), okleveles földtudományi mérnök/hidrogeológus (MSc. 1999) 2019-től a Kőolaj és Földgáz Intézet egyetemi docense, a hidrogéngazdaság értékláncát ezen időszakról kezdi kutatni. 2023-ban megalapította a hidrogénellátási szakmérnökképzést, melynek máig szakvezetője. Oktatási tevékenysége a gáz- és olajmérnök-hallgatók részére szorosan kapcsolódik a gázelőkészítés, felszín alatti gáztárolás, megújuló energiák, fenntartható energiagazdálkodás és geotermikus energiahasznosítás témakörökhöz. A Geotermikus szakmérnök/szakember-képzés szakvezetője. Kutatásának kiemelt fókuszterülete a hidrogén geológiai formációkban történő tárolása, a hidrogén földgázrendszerben történő szállítása, a hidrogéngazdaság kiépítése és hidrogén formájában történő energiátárolás megoldásai. Kutatói, oktatói és tudományos eredményei elismerésül 2025-ben a Miskolci Egyetem érdemes oktató kitüntetéssel jutalmazta.

További szerzők:

KÖRÖSY GERGELY¹, ROÓSZ ANDRÁS^{1,2}, VÉGH ÁDÁM¹, MENDE TAMÁS¹

¹Fémtni, Képlékenyalakítási és Nanotechnológiai Intézet, Miskolci Egyetem Anyag- és Vegyészmérnöki Kar, Miskolc, Egyetemváros

²HUN-REN TKI, Anyagtudományi Kutatócsoport, Miskolc, Egyetemváros

TÖRÖK TAMÁS ISTVÁN

Professor emeritus, Miskolci Egyetem

FÉMALK



A FÉMALK ZRT. MÁR
TÖBB MINT HARMINC ÉVE
MEGHATÁROZÓ SZEREPLŐJE
AZ AUTÓIPARNAK.

CSATLAKOZZ
CSAPATUNKHOZ!

WWW.FEMALK.HU/KARRIER