

Samenvatting van het eindwerk: 'Berekenen van fase-diagrammen voor loodvrije soldeerlegeringen op basis van Bi-In-Sn-Zn'

Nele Moelans

Departement Metaalkunde en Toegepaste Materiaalkunde, K.U. Leuven

September 2002

Tijdens het eindwerk werd, gebruik makend van de CALPHAD-methode (CALculation of PHase Diagrams), een thermodynamische gegevensbank voor legeringen op basis van de componenten Bi, In, Sn en Zn opgesteld. Ze bevat de nodige parameters om het verloop van de Gibbs energie als functie van de temperatuur en de samenstelling te kunnen beschrijven voor alle fasen die voorkomen in het systeem. Uitdrukkingen voor de bijdrage tot de Gibbs energie vanwege de zuivere componenten en vanwege de binaire interacties tussen de componenten konden, mits enkele aanpassingen, worden overgenomen van eerder uitgevoerde optimalisaties voor de binaire legeringen uit het systeem (Bi-In, In-Sn, Bi-Zn, ...). De parameters in de uitdrukkingen voor de ternaire interacties werden geoptimaliseerd aan de hand van experimentele gegevens uit de literatuur. Daarbij werden constitutionele data (d.i. informatie over de ligging van fasegrenzen) en thermochemische data (zoals activiteiten en mengenthalpieën) gebruikt. Bijdragen tot de Gibbs energie vanwege interacties tussen meer dan drie componenten werden verwaarloosd. Met deze uitdrukkingen voor de Gibbs energie werden liquidusoppervlakken, verticale en isotherme doorsneden en thermodynamische functies voor het Bi-In-Sn-Zn legeringssysteem (en de deelsystemen) berekend en vergeleken met de experimentele gegevens. Eveneens werd de ligging van de invariante reacties berekend voor het quaternaire systeem en voor zijn vier ternaire deelsystemen.

De gegevensbank werd opgesteld voor gebruik bij de ontwikkeling van loodvrije soldeerlegeringen. Fase-diagrammen verschaffen namelijk informatie over een aantal eigenschappen die belangrijk zijn bij de selectie en evaluatie van nieuwe soldeerlegeringen, zoals de liquidus- en solidustemperatuur, de aanwezigheid van invariante reacties, de fracties en samenstelling van de aanwezige fasen. Andere eigenschappen zoals oppervlaktespanning en viscositeit van het soldeersel kunnen in verband worden gebracht met thermodynamische functies. Om dit te illustreren werden drie Bi-In-Sn-Zn legeringen geselecteerd als mogelijke plaatsvervangers voor de veel gebruikte 37Pb-63Sn (gew%) soldeerlegering en werden hun eigenschappen voorspeld aan de hand van fase-diagrammen en thermodynamische eigenschappen berekend op basis van de parameters uit de geoptimaliseerde gegevensbank. Tevens werd nagegaan in hoever laagsmeltende Bi-In-Sn-Zn legeringen kunnen worden gebruikt als soldeerlegering. Met deze informatie kan verder experimenteel onderzoek efficiënter verlopen.

Alle berekeningen werden uitgevoerd met het computerprogramma Thermo-Calc.