



RWTHAACHEN
UNIVERSITY

Calphad-Anwendungen in der Thermophysik

Bengt Hallstedt*

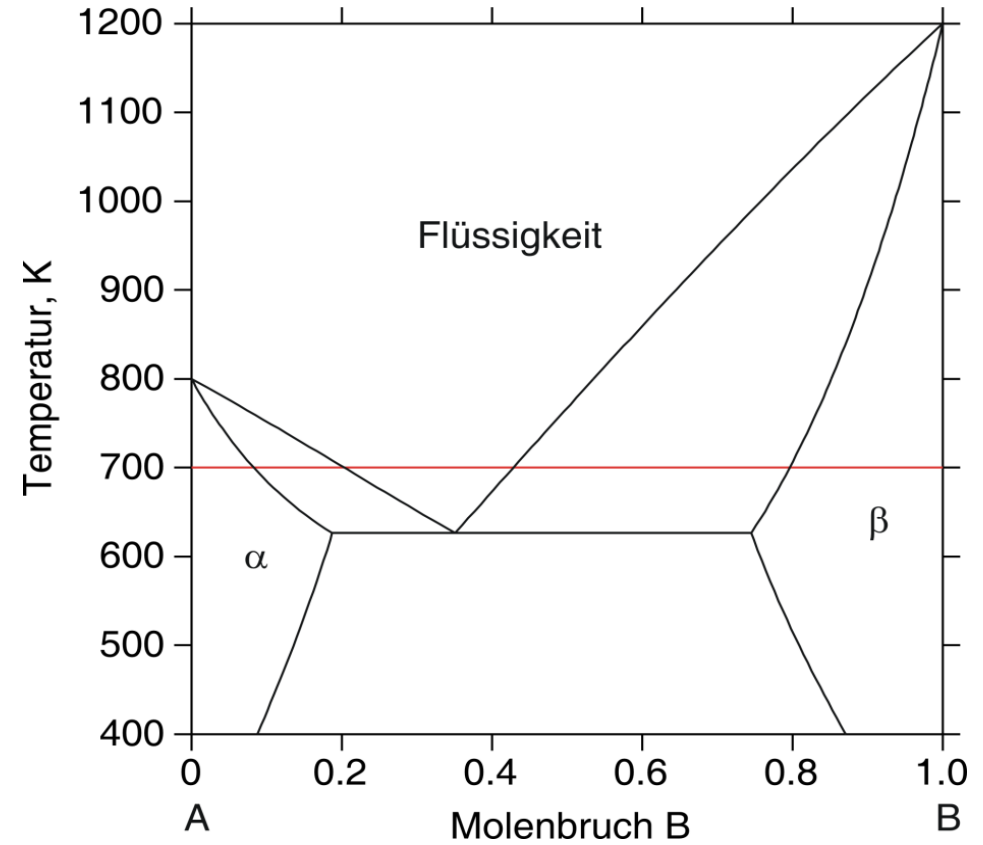
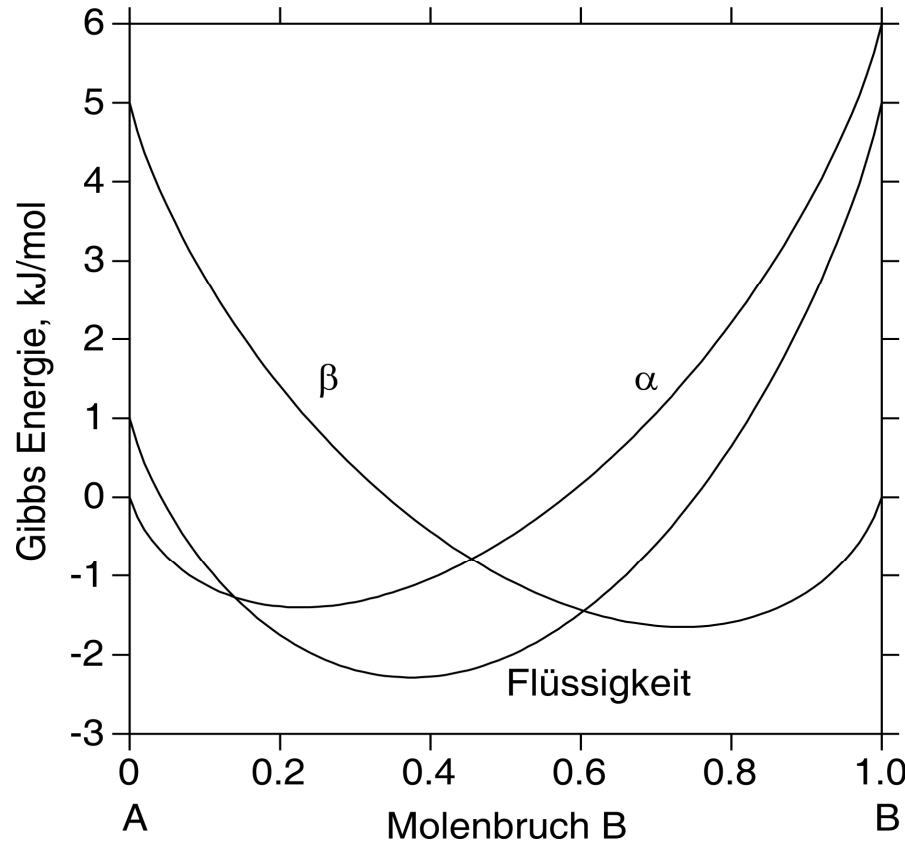
*Institut für Werkstoffanwendungen im Maschinenbau, RWTH Aachen University

AK-Thermophysik, Aachen, 9.-10.3. 2015

- Calphad - Hintergrund
- Methodik und Modelle
- Thermische Effekte (DSC/DTA)
 - Reine Elemente
 - Legierungen
- Dilatometrische Effekte
 - Reine Elemente
 - Legierungen
- Ausblick

Calphad - Hintergrund

Thermochemie und Phasendiagramme



Thermochemie



Phasendiagramm

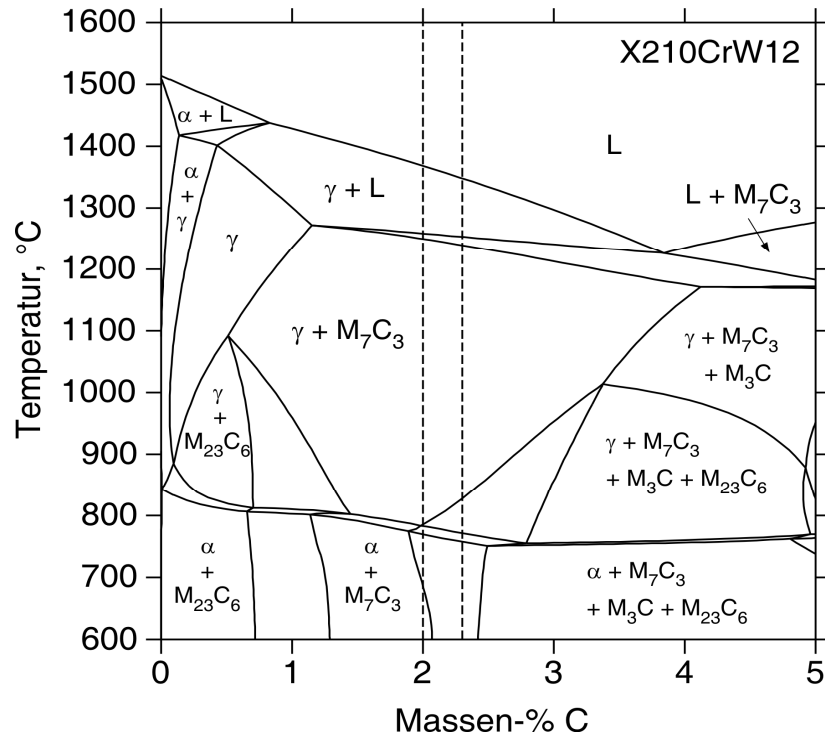
- Eigenschaften
 - Wärmeinhalt/Enthalpie
 - Wärmekapazität
 - Dichte
 - Thermische Ausdehnung
 - (Oberflächenenergie)
 - (Viskosität)

- Methoden
 - DSC/DTA
 - Dilatometrie

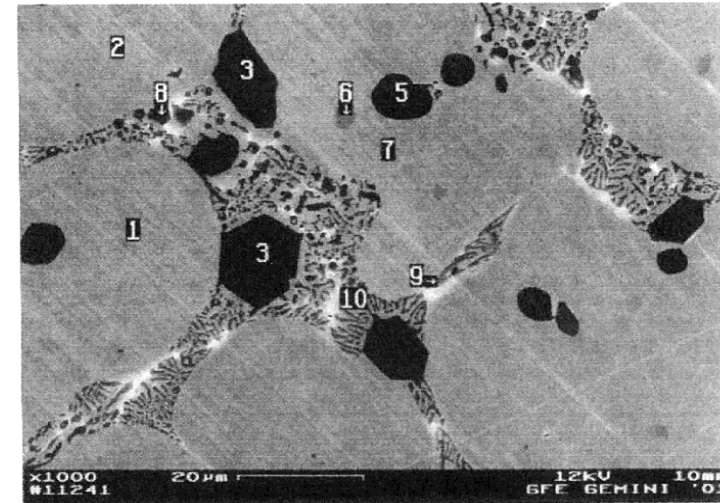
- CALculation of PHAse Diagrams
- Grundlegende Ideen von Larry Kaufman in den 1960ern entwickelt
- Basiert auf der Theorie der heterogenen Gleichgewichte von J.W. Gibbs aus den 1870ern
- Heirat zwischen Konstitutionslehre (Phasendiagramme) und Thermochemie
- Mathematische Beschreibung (Modelle) der Gibbs-Energie jeder Phase
 - Phasendiagramme + vollständige Thermochemie

- **Phasendiagramme** sind „Landkarten“ für Legierungsentwicklung, Wärmebehandlungsstrategien usw., aber im Wesentlichen auf binäre und ternäre Systeme begrenzt.
- **Thermochemie** wird für alle denkbaren Prozesse eingesetzt wo chemische Reaktionen oder Wärmeaustausch stattfinden.
- **Calphad** vereint beides für Systeme mit beliebig vielen Elementen und bildet die Grundlage für weitere Modellierung und Simulation.
- Calphad ist das einzige (theoretische) Werkzeug, das für Phasengleichgewichte und Thermochemie in Systemen mit mehreren Elementen eingesetzt werden kann.

Phasendiagramme

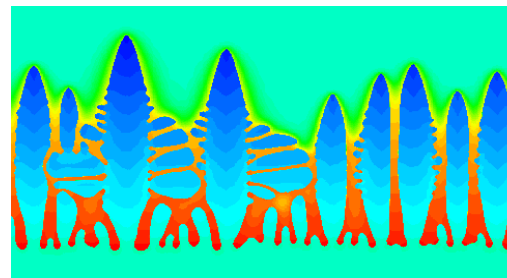


Gefüge

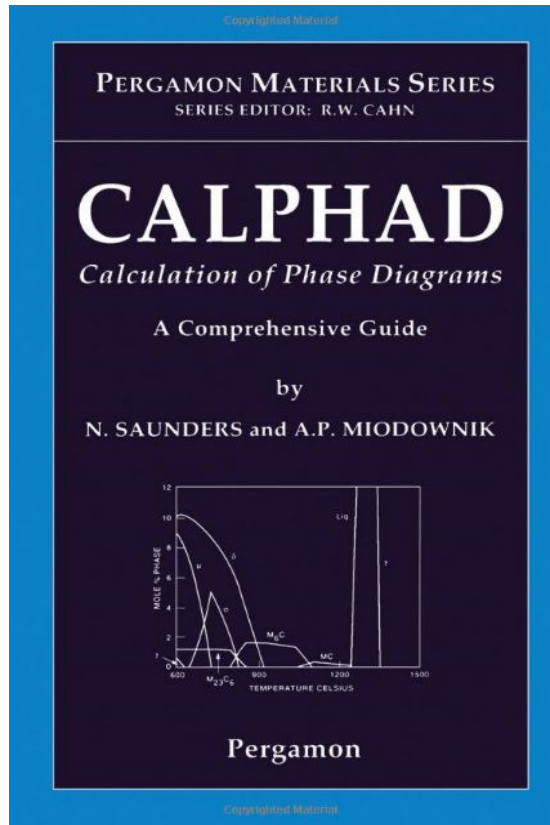


X210CrW12

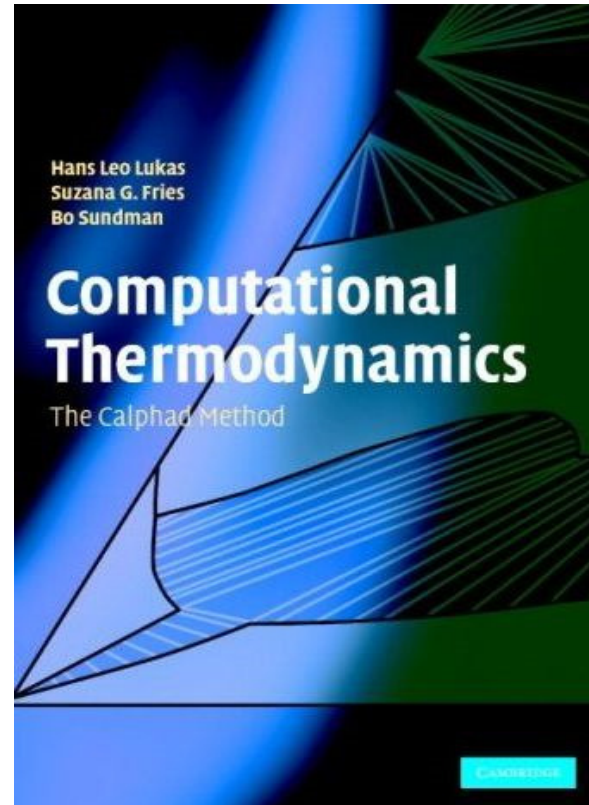
Phasenumwandlungen



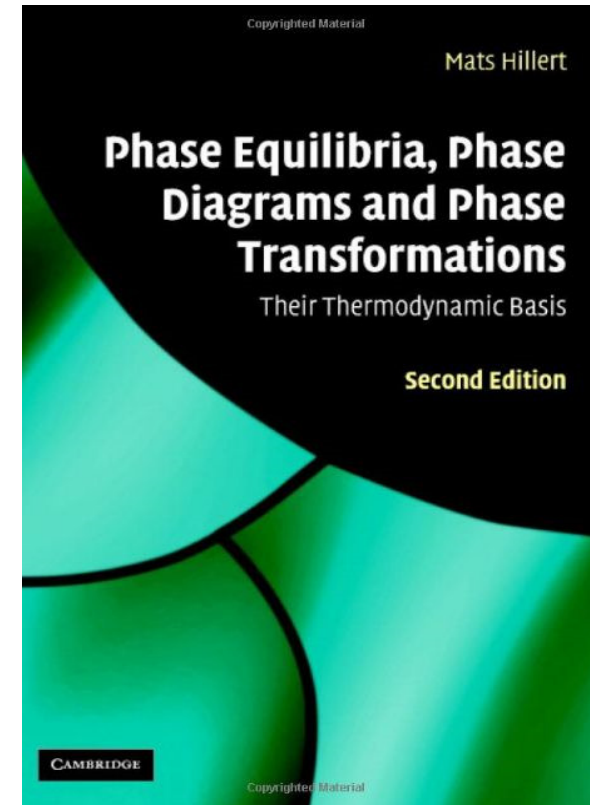
Bücher über Calphad



Saunders, Miodownik
1998



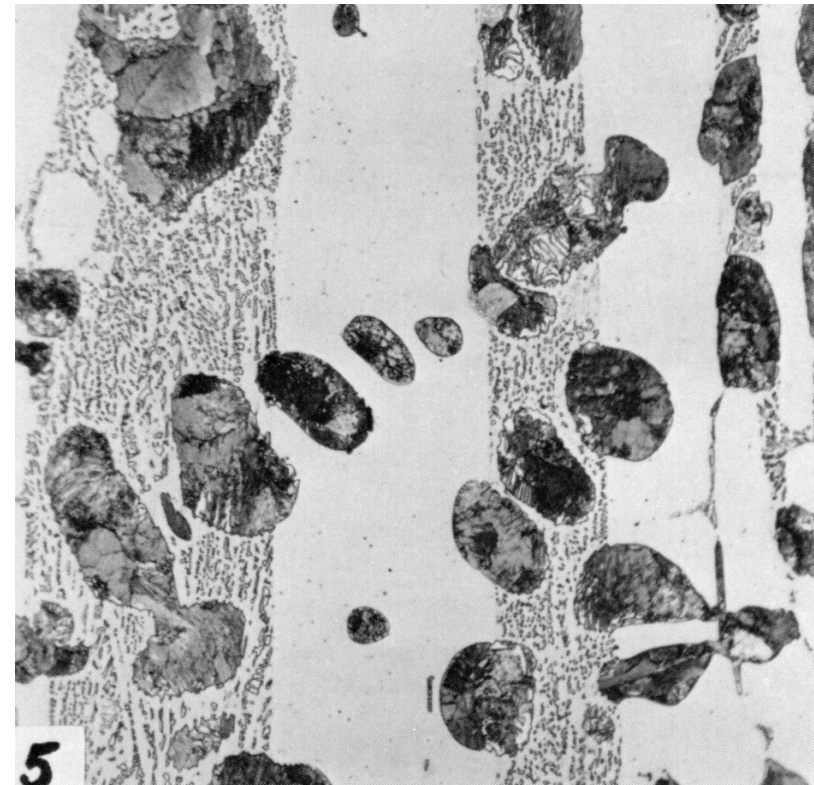
Lukas, Fries, Sundman
2007



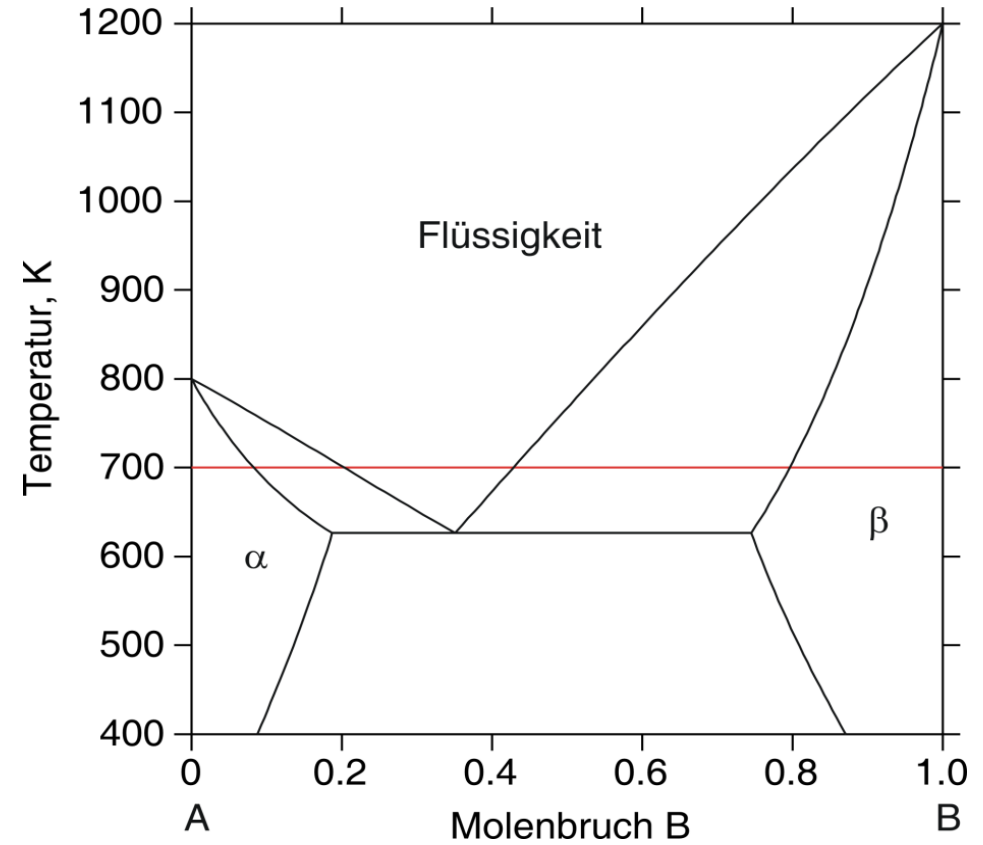
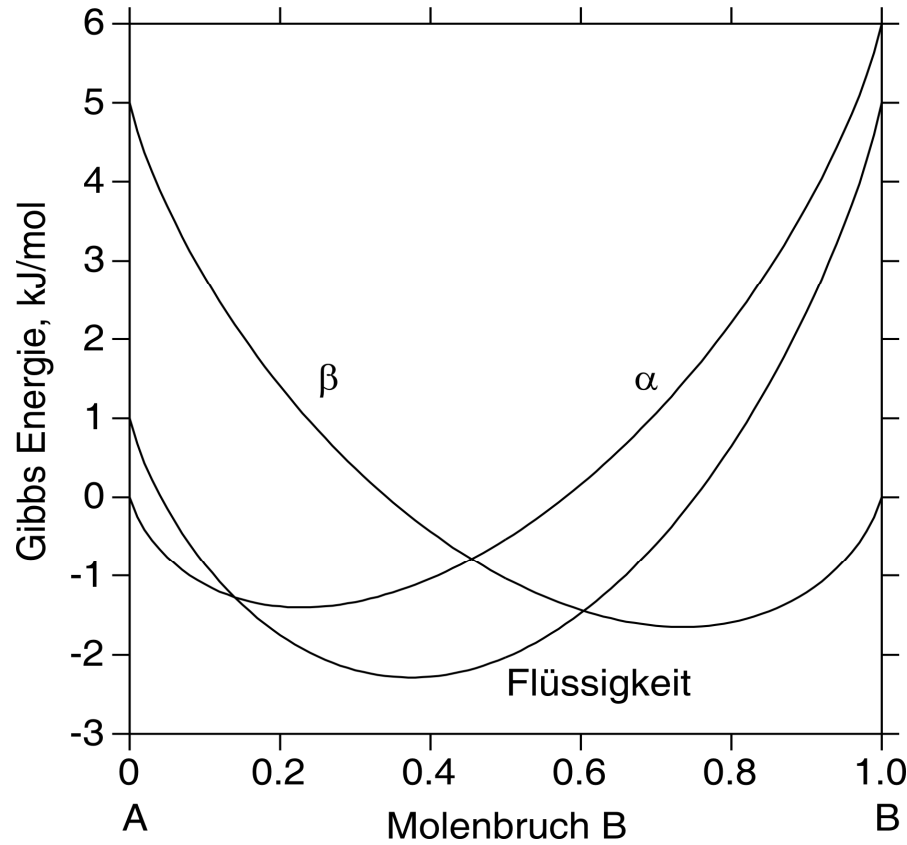
Hillert, 1998, 2008

Methodik und Modelle

Binäre Systeme
+
(Wichtig!)
Ternäre Systeme
+
Extrapolationen
=
Werkstoffe
(mehrere Elemente)



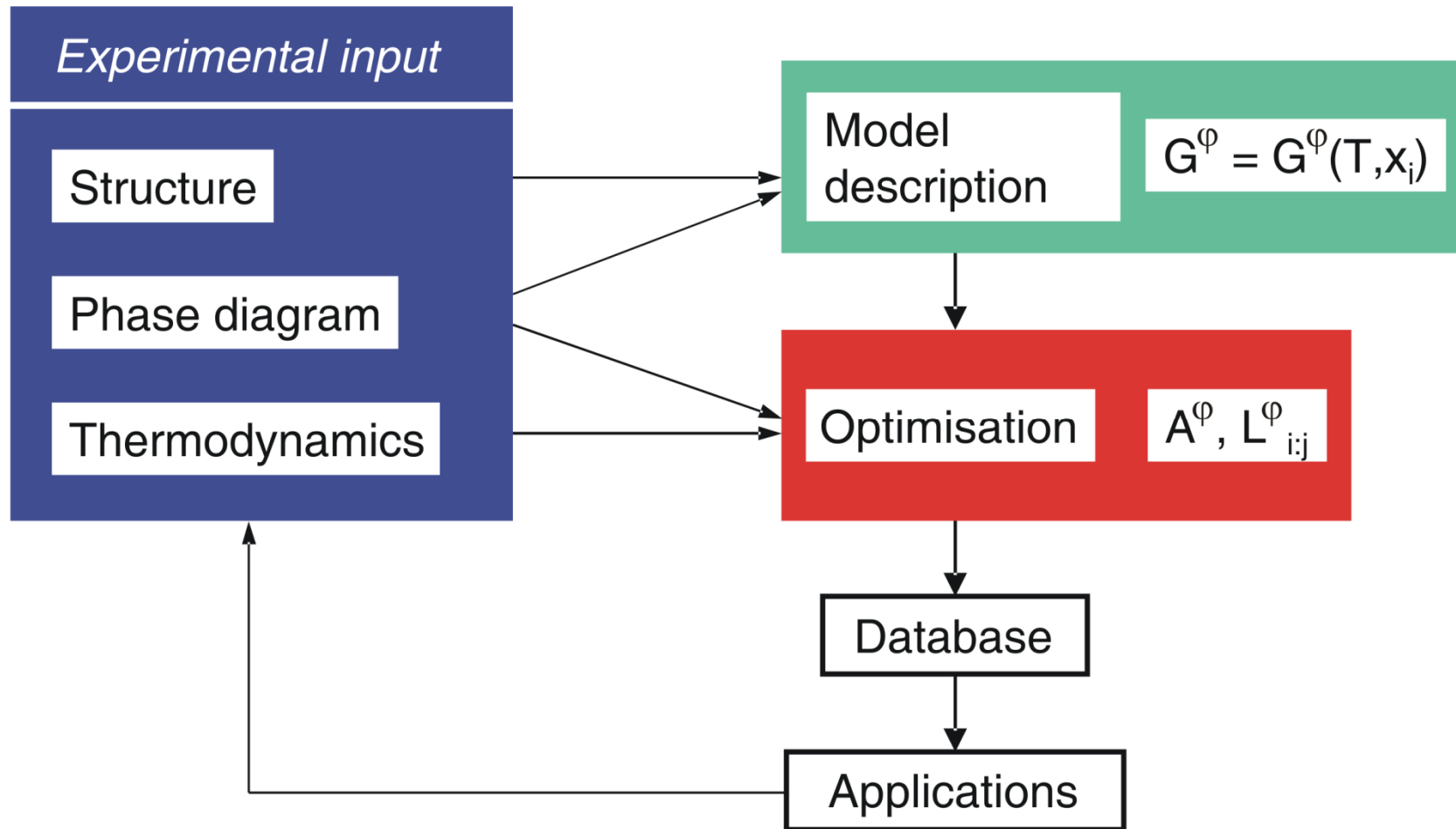
Thermochemie und Phasendiagramme

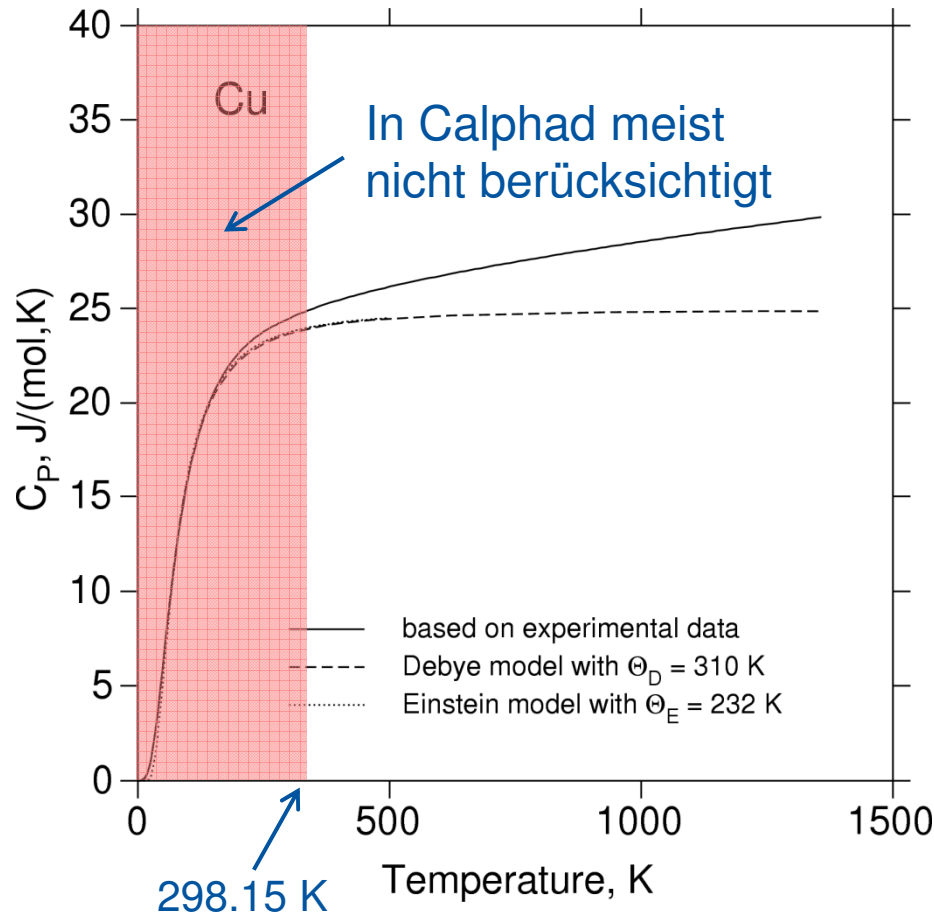


Thermochemie



Phasendiagramm





Gibbs energie:

$$G - H^{ref} = A + BT + CT \ln T + DT^2 + E/T + FT^3$$

Wärmekapazität:

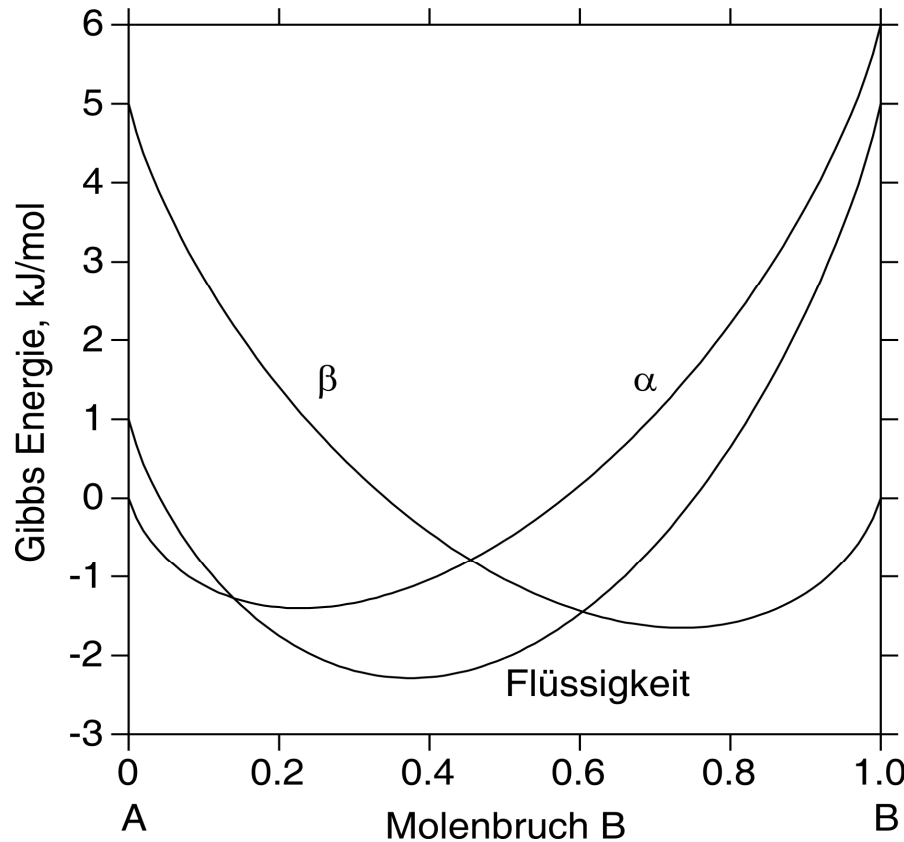
$$c_p = -C - 2DT - 2ET^{-2} - 6FT^2$$

$$H = G - T \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_P$$

$$c_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_P = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_P$$

SGTE unary database:

A.T. Dinsdale, *Calphad*, **15**, 317-425 (1991)



Allgemein:

$$G_m = \sum \circ G_i - TS^{ideal} + {}^E G_m$$

Für jede Phase:

$$G_m = x_A \circ G_A + x_B \circ G_B$$

$$+ RT(x_A \ln x_A + x_B \ln x_B)$$

$$+ x_A x_B [{}^0 L + (x_A - x_B) {}^1 L + \dots]$$

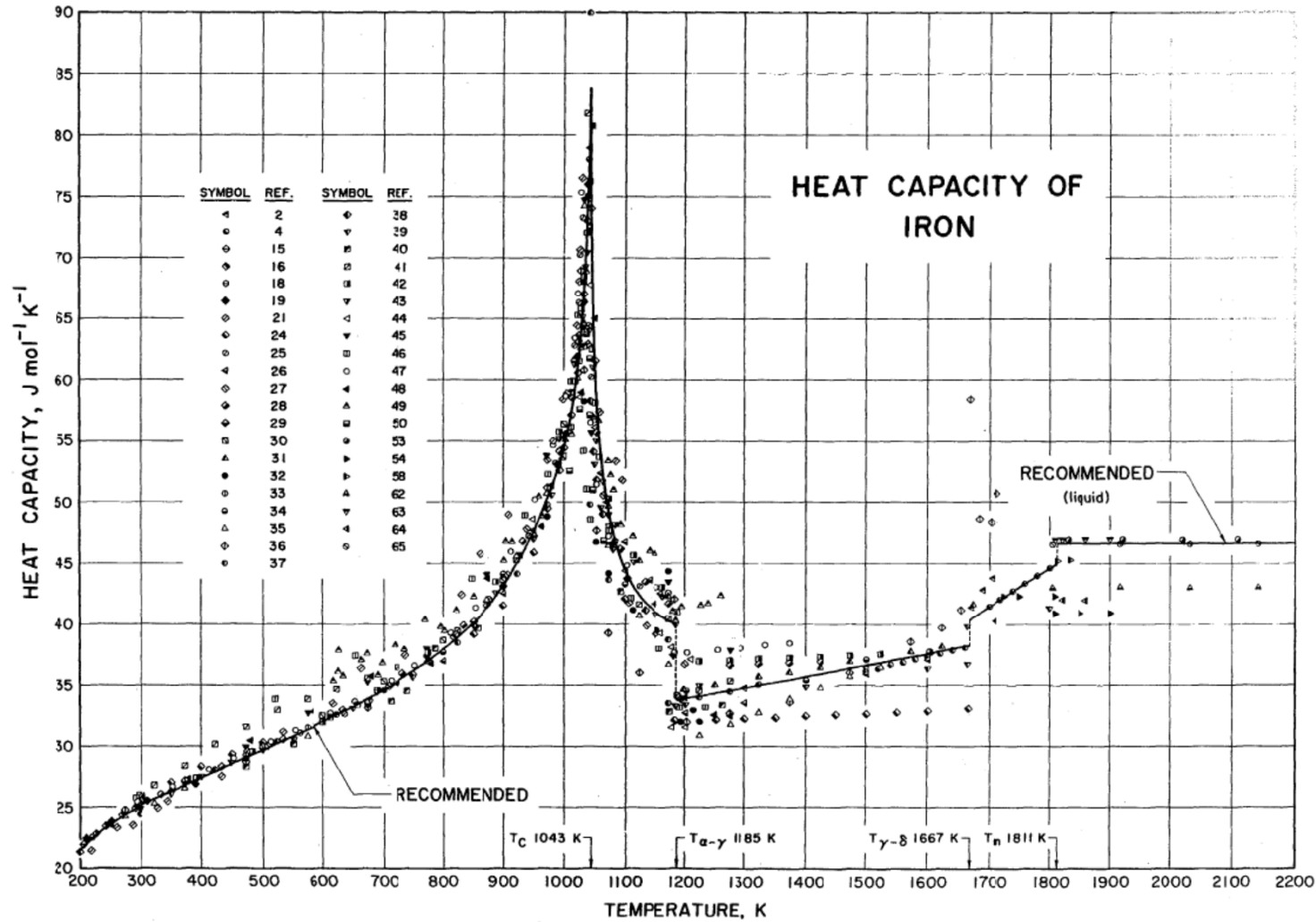
Redlich-Kister Polynom

Compound energy Formalismus:

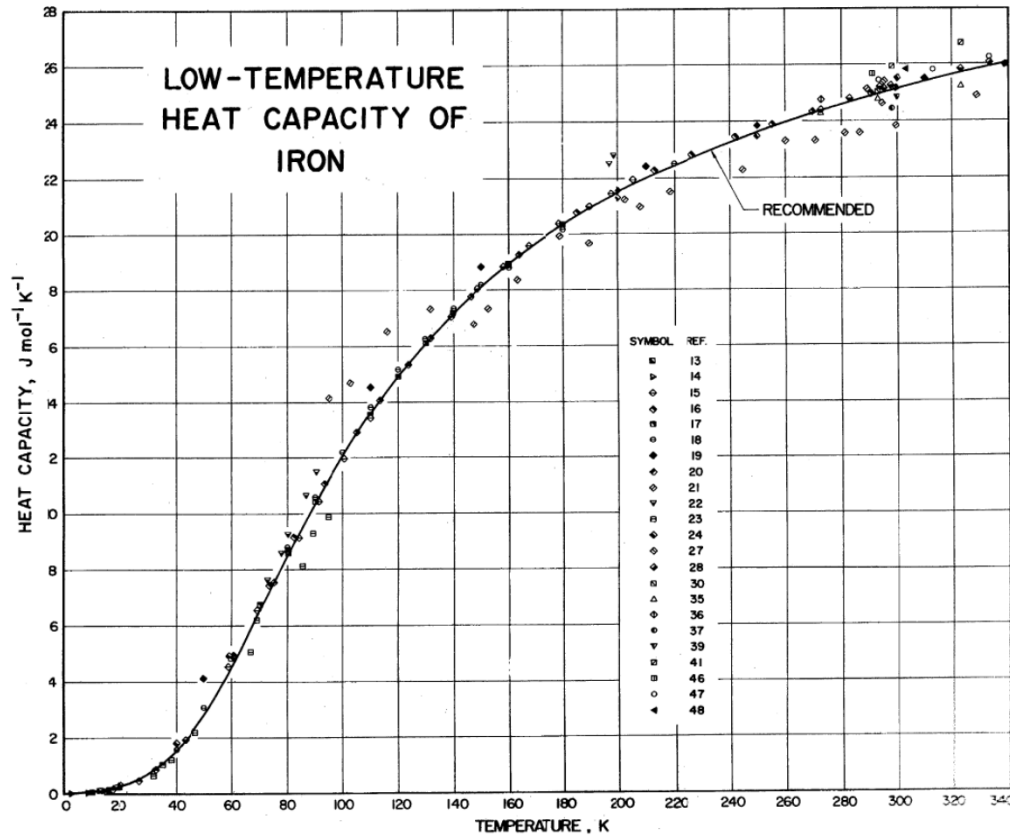
M. Hillert, *J. Alloys Compd.*, **320**, 161–71 (2001)

Thermische Effekte (DSC/DTA)

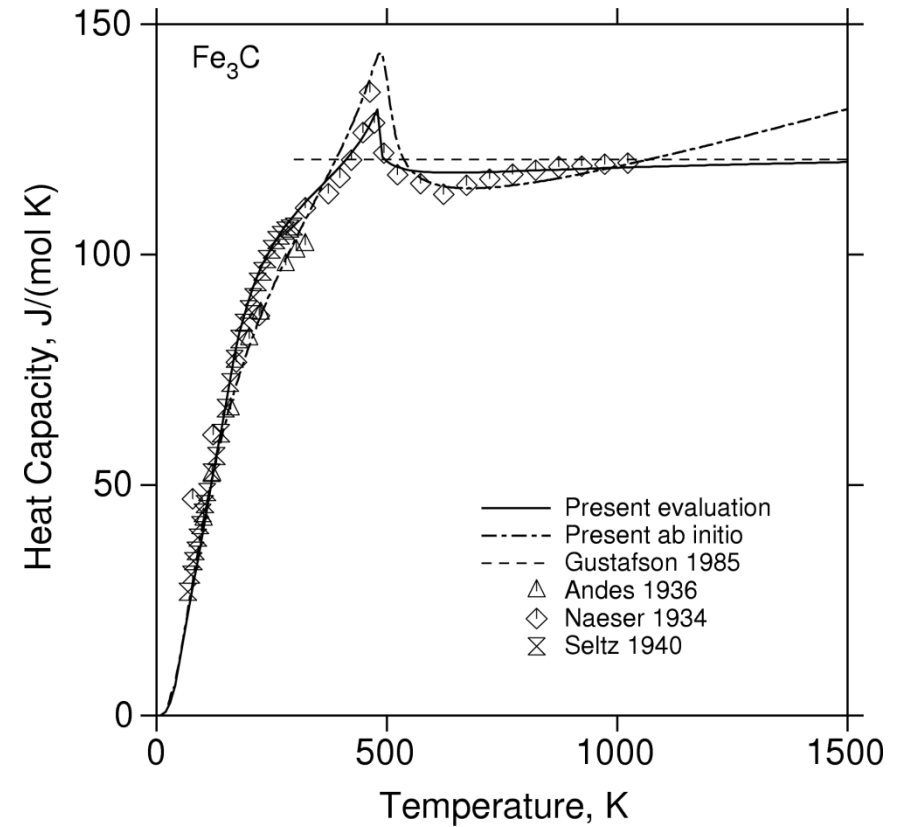
Wärmekapazität von Fe und Fe₃C



P.D. Desai, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **15**, 967-83 (1986)

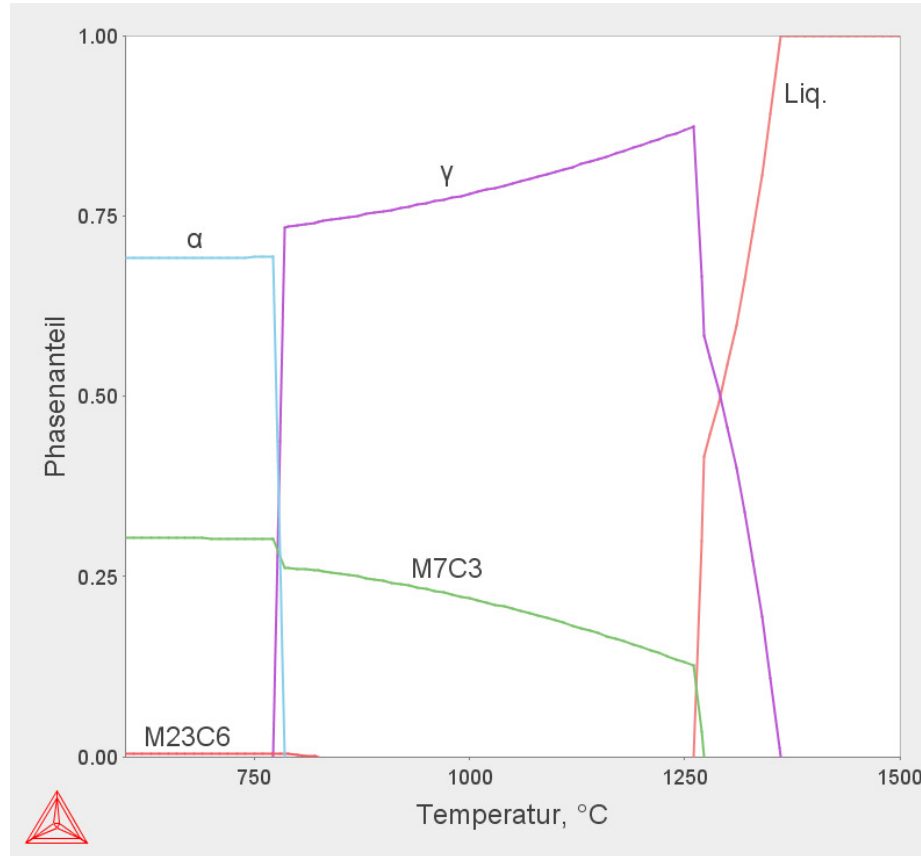
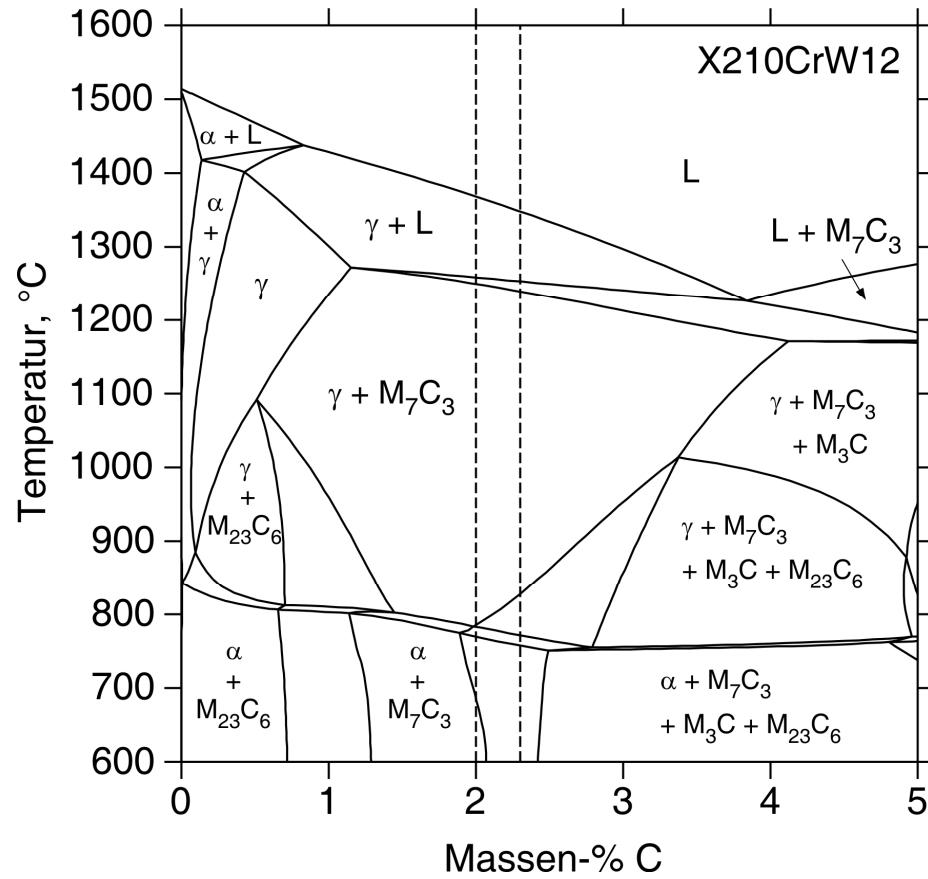


P.D. Desai, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **15**, 967-83 (1986)



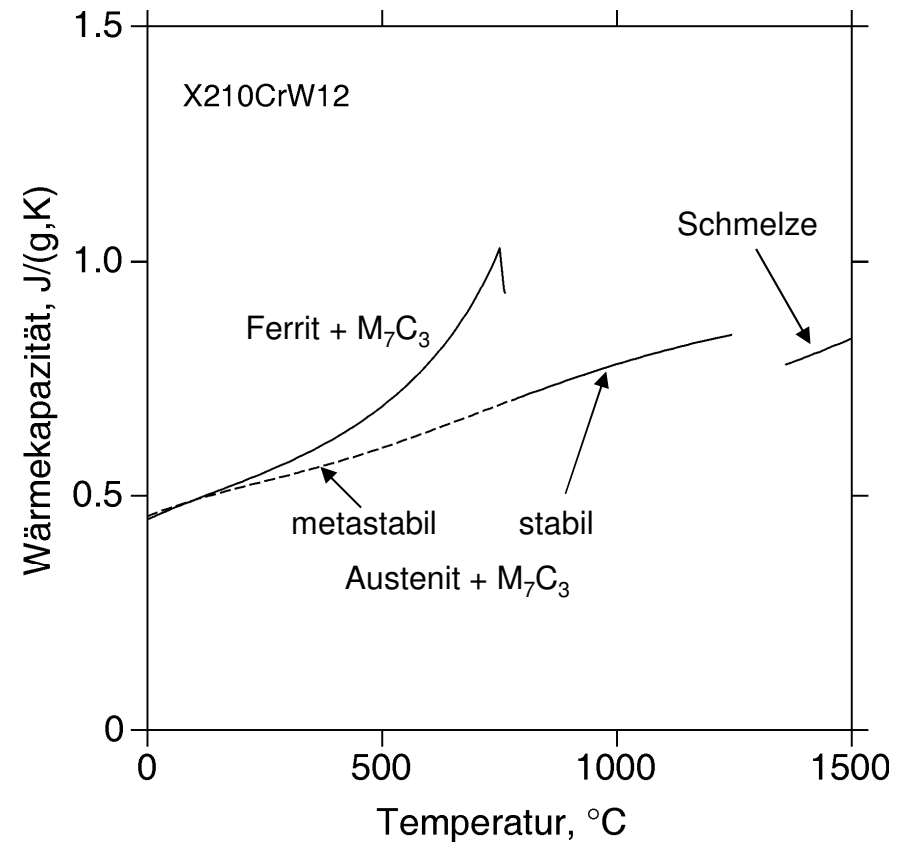
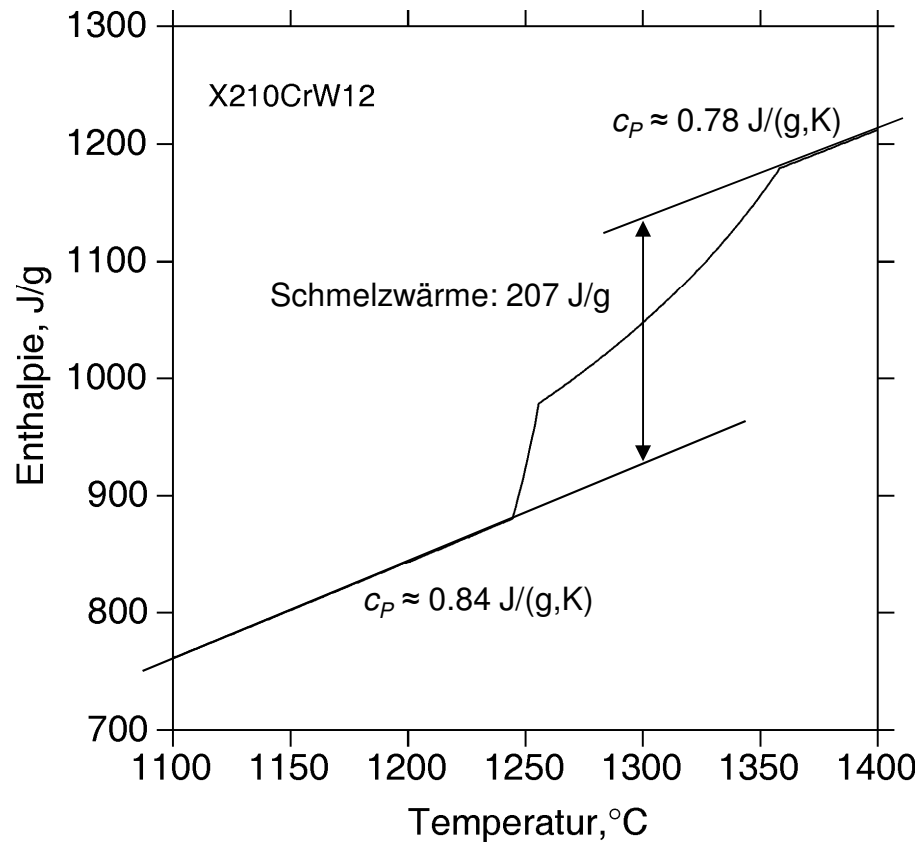
B. Hallstedt et al., *Calphad*, **34**, 129-33 (2010)

X210CrW12: Das Phasendiagramm



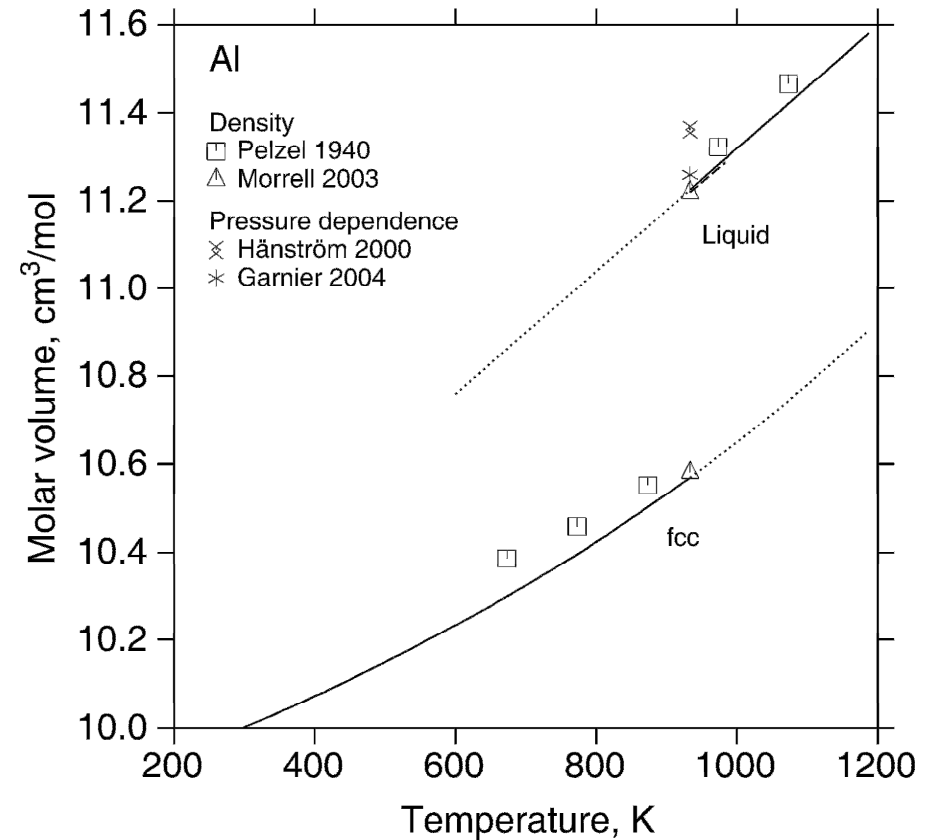
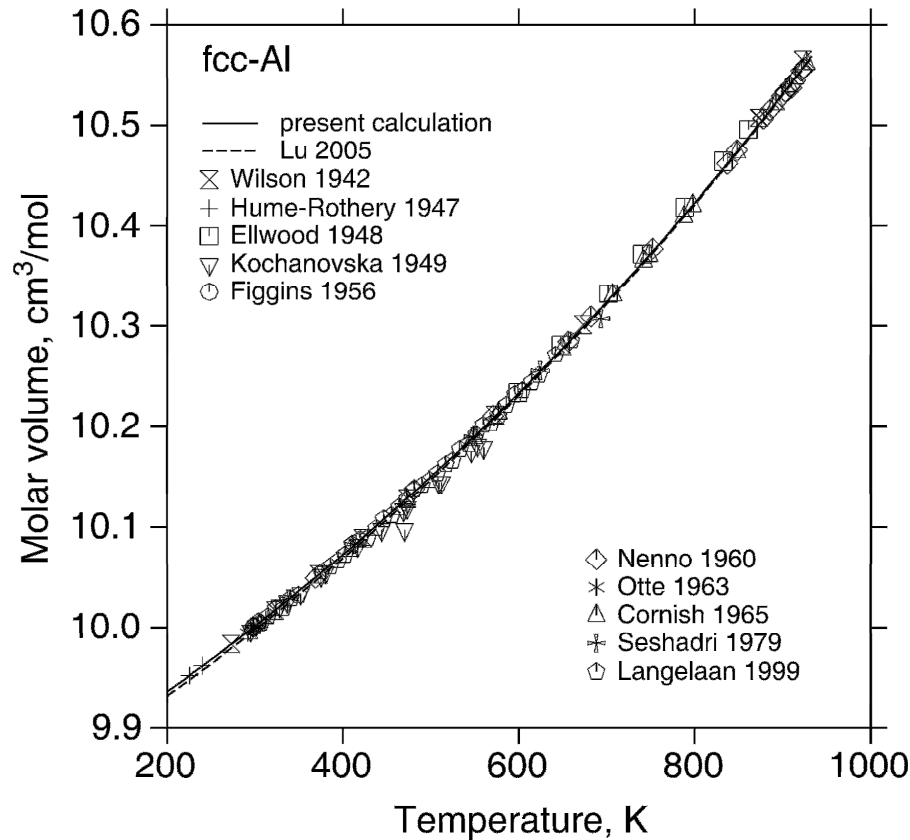
Zusammensetzung: 2,15%C, 0,30%Mn, 0,30%Si, 12,0%Cr, 0,7%W

X210CrW12: Wärmehalt und Wärmekapazität



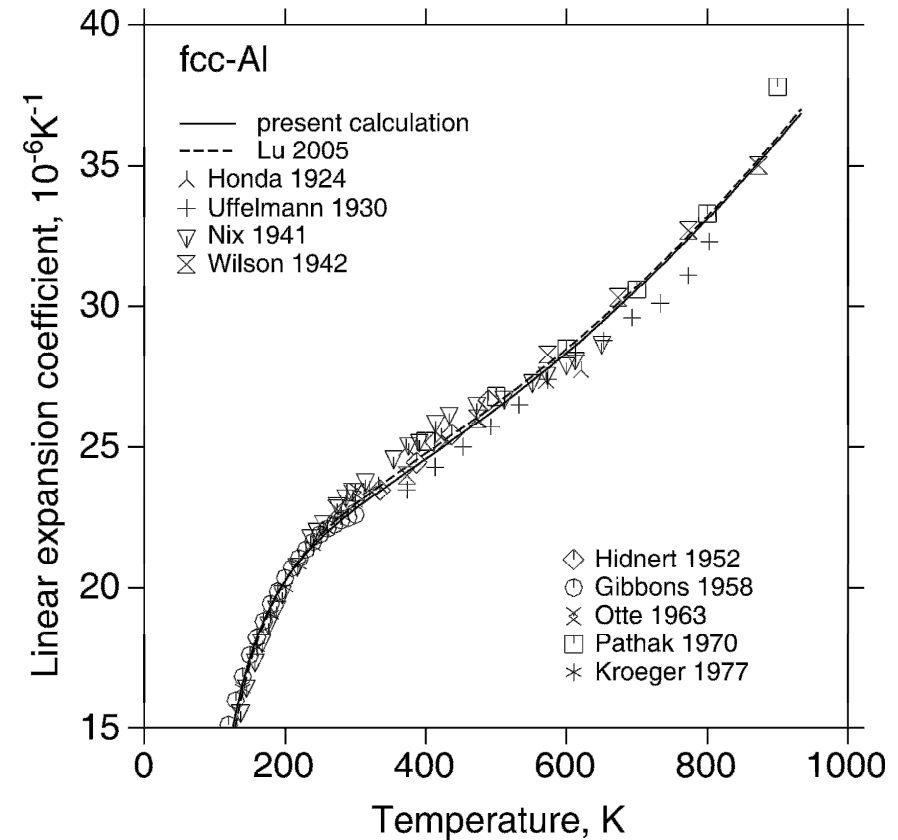
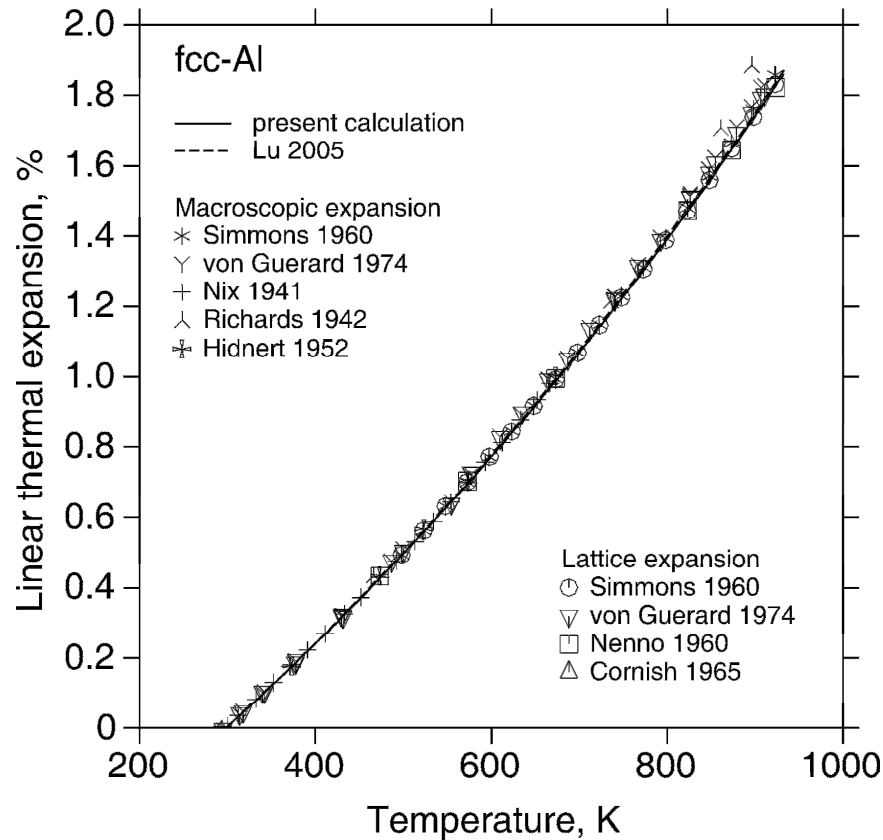
Dilatometrische Effekte

Aluminium: Molare Volumina

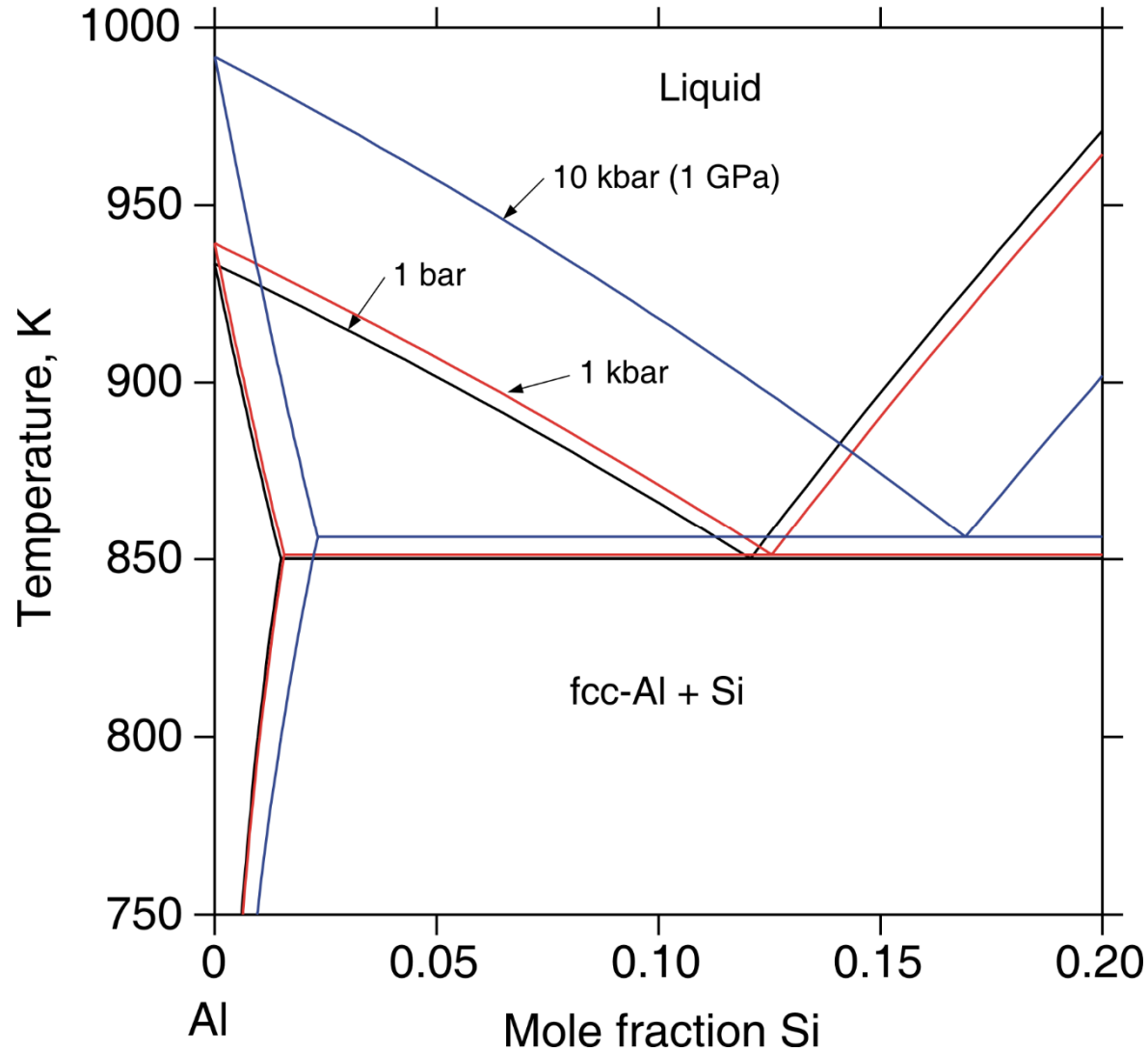


B. Hallstedt, *Calphad*, **31**, 292-302 (2007)

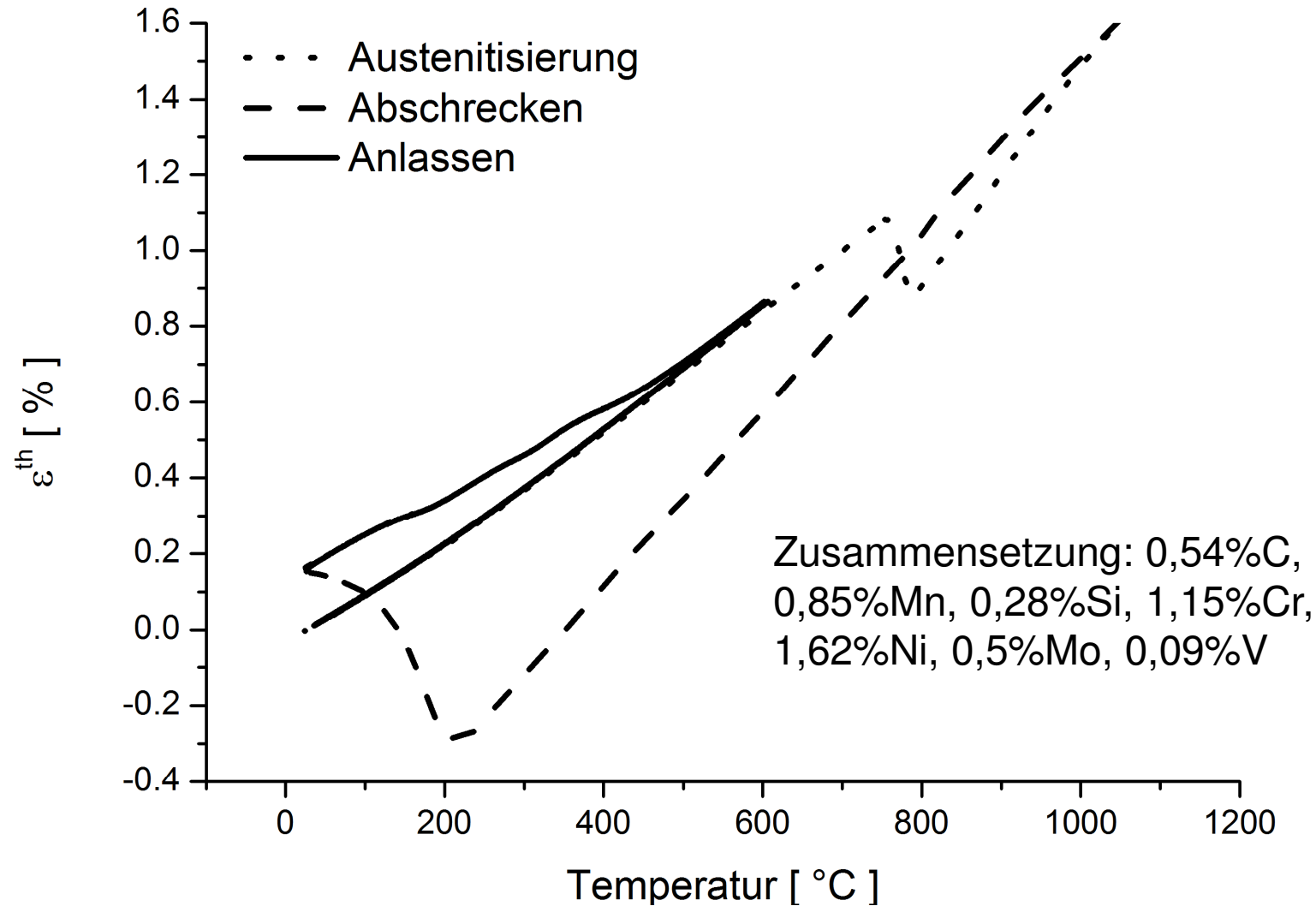
Aluminium: Wärmeausdehnung



Al-Si Phasendiagramm als f(P)



Dilatometer: Umwandlungsverhalten vom Stahl 56NiCrMoV7



- Thermophysik → Calphad
 - Umwandlungstemperaturen
 - Wärmekapazität
 - Umwandlungsenthalpien
 - Dichte / Thermische Ausdehnung

- Calphad → Thermophysik
 - Versuchsauswahl
 - Interpretation der Resultate



Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

Bengt Hallstedt

IWM – Institut für Werkstoffanwendungen im Maschinenbau
RWTH Aachen University
Augustinerbach 4
52062 Aachen

www.iwm.rwth-aachen.de