

AMPM-ÜBUNG

EINFÜHRUNG IN DAS ARBEITEN MIT THERMOCALC

Prof. Dr.-Ing. Sebastian Weber

1. LEHRINHALTE

Im Rahmen der Vorlesung AMPM werden unterschiedliche metallische Mehrkomponentensysteme vorgestellt, die ihre technologischen Eigenschaften durch eine gezielte thermische oder thermomechanische Prozessierung erhalten. In diesem Zusammenhang spielen stabile und metastabile thermodynamische Gleichgewichte dieser Mehrkomponentensysteme eine entscheidende Rolle. Diese lassen sich in vielen Fällen, bei ausreichend hoher homologer Temperatur, mit der Calphad-Methode berechnen und für die Werkstoffentwicklung und/oder -optimierung nutzen. Wesentliche Vorteile bestehen darin, dass der experimentelle Aufwand zur Erreichung bestimmter Zielgefüge und Eigenschaften reduziert wird und dass Parameterbereiche zugänglich werden, die sich experimentell gar nicht darstellen lassen (bspw. Gibbs-Energie des gamma-Fe bei RT). Diese Übung hat das Ziel, Sie mit der Bedienung einer weit verbreiteten Calphad-Software mit dem Namen „ThermoCalc“ vertraut zu machen und diese zu nutzen, um zunächst einfache Gleichgewichtsberechnungen durchzuführen. In einem zweiten Schritt wird zunächst das metastabile Fe-Fe₃C-Phasendiagramm von Ihnen berechnet, im Anschluss daran ein Gleichgewicht, das sich während eines sogenannten „interkritischen Glühens“ einstellt.

2. LERNZIELE

Mit dieser Übung sind mehrere Lernziele verbunden:

- Kennenlernen der Software ThermoCalc und deren Bedienkonzept
- Durchführung einfacher Berechnungen mit TC
- Berechnung metastabiler Gleichgewichte am Beispiel Fe-Fe₃C
- Berechnung eines Phasengleichgewichts zur IK-Glühung

3. BESCHREIBUNG

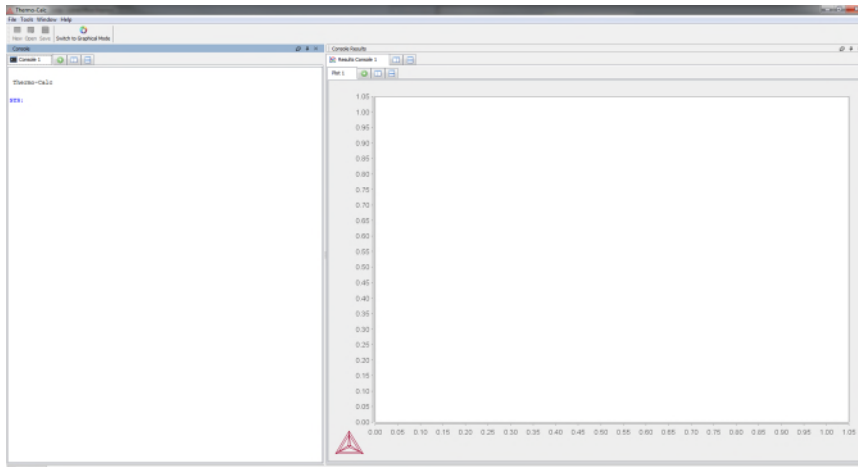
Das Programm ThermoCalc kann im „console mode“ oder „graphical mode“ ausgeführt werden. Bitte nutzen Sie im Rahmen der Übung den Konsolenmodus, der für wiss. Arbeiten mit der Software zu empfehlen ist. Der Aufbau ist modular mit den folgenden für die im Rahmen dieser Übung durchgeführten Berechnungen wesentlichen Modulen:

sys: Systemmodul (u.a. set-log-file)

data: Datenbankmodul (Auswahl der TD-Datenbank, Definition des Systems)

poly-3: Modul zur Minimierung der Gibbs-Energie (GG-Berechnungen)

post: Modul zur Datenaufbereitung und -darstellung



Alle Informationen sind nachschlagbar im Benutzerhandbuch, das sich als pdf-Dokument auf jeder Installation (lokal) befindet und über das „Help“-Menü finden lässt.

Alle Befehle auf der Ebene des „console mode“ können abgekürzt werden, sofern die Abkürzung eindeutig ist. Bereits verwendete Befehle können mit Pfeil-Auf / Pfeil-Ab erneut aufgerufen werden. Die am häufigsten verwendeten Befehle sind nachfolgend aufgeführt:

sys: Systemmodul

set-log-file => erzeugt Log-Datei, nutzbar als Makro (Endung .tcm)
 ? => zeigt alle Befehle des aktuellen Moduls an
 goto_module => wechsel zwischen Modulen
 macro_file_open => öffnet ein Makro

data: Datenbankmodul

switch => wechselt zwischen Datenbanken / zeigt vorh. Datenbanken an
 database_information => zeigt Informationen zur gewählten Datenbank
 define_elements => Elemente des Systems auswählen
 reject => entfernt Phasen, Elemente, Species, Constituents
 restore => fügt Phasen, Elemente, Species, Constituents hinzu
 list_system => stellt z.B. alle Phasen im aktuellen System dar
 get_data => liest Daten auf TD-Datenbank ein

poly-3: Modul zur Minimierung der Gibbs-Energie

set_condition => legt Randbedingungen fest (n=Stoffmenge; T=Temp.; p=Druck;
 $x(z)/w(z)$ =Stoffmengenanteil)
 list_condition => zeigt alle TD-Randbedingungen an (Anzahl Freiheitsgrade muss 0 sein für GG-Berechnung)
 compute_equilibrium => berechnet einen Gleichgewichtszustand
 list_equilibrium => zeigt GG-Zustand an
 set_axis_var => legt Achsenvariablen fest (1 bis 3 möglich)
 step => berechnet GG entlang EINER Variablen
 map => berechnet GG entlang von ZWEI oder DREI Variablen

post: Modul für das Post-Processing

set diagram axis => legt die Achsen des Diagramms fest
 set scaling status => skaliert die Achsen
 plot => plotted ein Diagramm (*Rechtsklick auf Diagramm erlaubt weitere Einstellungen*)

4. AUFGABEN

4.1 Nickel-Kupfer

4.1.1 Berechnen Sie unter Verwendung der Datenbank TCNi10 im System Ni-Cu das Gleichgewicht für $T=1000^{\circ}\text{C}$, 10 Ma.-% Cu bei Normaldruck ($p=101325\text{ Pa}$).

4.1.2 Berechnen Sie unter Verwendung der Datenbank TCNi10 das binäre Phasendiagramm Nickel-Kupfer.

4.1.3 Leiten Sie grafisch die Solidus- sowie die Liquidustemperatur bei 10 Ma.-% Cu ab. Berechnen Sie anschließend die präzisen Werte unter Nutzung des „change status“-Befehls.

4.2 Eisen-Kohlenstoff

4.2.1 Nutzen Sie für Ihre Berechnungen die Datenbank TCFE10. Berechnen Sie zunächst ein Gleichgewicht für einen typischen unlegierten Vergütungsstahl C45 unter der Annahme, dass außer Kohlenstoff kein Legierungselemente enthalten ist, für eine Temperatur von $T=650^{\circ}\text{C}$. Erhöhen Sie nun die Temperatur auf $T=850^{\circ}\text{C}$ und berechnen erneut ein Gleichgewicht. Diskutieren Sie für beiden Temperaturen die Ergebnisse der Berechnung!

4.2.2 Verändern Sie die Randbedingungen Ihrer Berechnung aus 4.2.1 derart, dass das metastabile Fe-Fe₃C-Phasendiagramm resultiert.

4.2.3 Führen Sie nun für C45, eine IK-Berechnung durch, die einem Gleichgewicht im α - γ -Phasengebiet entspricht. Variieren Sie die Temperatur dafür schrittweise und berechnen jeweils ein neues Gleichgewicht, bis das Ergebnis dem eines zweiphasigen α - γ -Zustands entspricht. Zur Orientierung können Sie das Eisen-Kohlenstoff-Phasendiagramm heranziehen.

4.2.4 Fahren Sie mit der Berechnung aus Aufgabe 4.2.3 fort, indem Sie nun einen Zielwert von 60% Austenit und 40% Ferrit als zusätzliche Randbedingung festlegen. Das Berechnungsergebnis ist die dafür notwendige Temperatur, die als Variable freigegeben werden muss.

4.2.5 Analysieren Sie das Berechnungsergebnis aus Aufgabe 4.2.4 hinsichtlich der Verteilung des Elements Kohlenstoff. Was fällt Ihnen auf?

5. EIGENSTUDIUM MIT THERMOCALC

Unter dem folgenden Link können Sie sich, nach Eingabe von Namen und E-Mail-Adresse, eine Education-Edition von ThermoCalc herunterladen. Diese hat einen reduzierten Funktionsumfang, ist aber völlig ausreichend um das Programm besser kennenzulernen und auszuprobieren.

LINK ZUR EDUCATION-EDITION:

<https://thermocalc.com/academia/free-educational-package/#download>