

# AMPM-ÜBUNG

## HIGH NITROGEN STEELS (HNS)

Prof. Dr.-Ing. Sebastian Weber

### 1. MOTIVATION UND LEHRINHALTE

Im Rahmen der Vorlesung haben Sie gelernt, dass Stickstoff als Legierungselement für eine begrenzte Auswahl an Stählen genutzt wird und in diesen technologische Vorteile mit sich bringt, in der Regel als interstitiell gelöstes Element mit ähnlichen Eigenschaften wie Kohlenstoff. Im Unterschied zu allen anderen in Stählen genutzten Legierungselementen ist die zentrale Herausforderung des Legierens mit Stickstoff dessen Tendenz, zu N<sub>2</sub> zu rekombinieren und in diesem gasförmigen Zustand aus der Schmelze oder dem Feststoff zu entweichen. Computational Thermodynamics basierend auf der Calphad-Methode sind in diesem Zusammenhang ein sehr nützliches Werkzeug für die Prozess- und Legierungsentwicklung, was Sie im Rahmen dieser Übung an ausgewählten Beispielen, die sich an den Inhalten der Vorlesung orientieren, fachlich vertiefen werden.

### 2. LERNINHALTE

Die Übung umfasst die folgenden Themenbereiche:

- Die Berechnung von Phasengleichgewichten unter Einbezug der Gasphase zur Berechnung von Löslichkeitsgrenzen für N in Stählen.
- Die Berechnung der N-Löslichkeit in reinem Eisen als f(p).
- Berechnungen zur Beeinflussung der Phasenanteile mit N und zusätzlich von Partitionierungseffekten in N-legiertem Duplex-Stahl.
- Eine Analyse der konventionellen Prozessierbarkeit (unter Normaldruck) des austenitischen Stahls „Jindal J4“ mit thermodynamischen Berechnungen.
- [FORTGESCHRITTEN]: Die Simulation des Gasaufstickens eines martensitischen Cr-Stahls (SolNit-M-Verfahren) mit Dictra.

### 3. LERNZIELE

Nach der Teilnahme an dieser Übung werden die Studierenden:

- ein Verständnis der Löslichkeit von N in Schmelzen auf Fe-Basis entwickelt haben.
- die Druckabhängigkeit der N-Löslichkeit entsprechend des Sievertschen Quadratwurzelgesetzes an einem Beispiel berechnet haben.
- die Rolle von N als Legierungselement in Duplexstahl verstanden haben.
- nachvollziehen können, wie sich die Prozessierbarkeit einer N-legierten austenitischen Stahls mit Calphad bewerten lässt.
- [FORTGESCHRITTEN]: wissen, was das SolNit-M-Verfahren bedeutet und wie mit Dictra eine daran orientierte Gasaufstickung simuliert werden kann.

## 4. AUFGABEN

- 4.1. Das Ziel dieser Berechnung ist es, die Löslichkeitsgrenze für N in einer Eisenschmelze unter Normalbedingungen zu berechnen. Definieren Sie dazu unter Nutzung der Datenbank TCFE10 ein System, das außer Fe und N keine weiteren Elemente enthält und reduzieren Sie anschließend das „phase set“ mit „reject / restore“ auf die Phasen BCC\_A2, FCC\_A1, LIQUID und GAS. Berechnen Sie dann für  $T=1800^{\circ}\text{C}$  und Normaldruck ein Gleichgewicht, das die Phasen LIQUID und GAS enthält. Verändern Sie im nächsten Schritt die Randbedingungen derart (mit dem „change-status“-Befehl), dass Sie die maximale N-Löslichkeit in der Schmelze für diese Temperatur und Normaldruck erhalten.
- 4.2. Knüpfen Sie an das Ergebnis aus Aufgabe 3.1 an und berechnen die Druckabhängigkeit der N-Löslichkeit (0,1 bis 5 MPa) unter isothermen Randbedingungen ( $T=1800^{\circ}\text{C}$ ). Vergleichen Sie Ihr Ergebnis mit dem aus der Vorlesung, das für  $T=1600^{\circ}\text{C}$  berechnet wurde, und diskutieren  
Gemeinsamkeiten und Unterschiede.
- 4.3. In dieser Aufgabe berechnen Sie zunächst für  $T=1150^{\circ}\text{C}$  ein Phasengleichgewicht für einen Duplexstahl 1.4462 mit den Mittelwerten der auf den VL-Folien angegebenen Zusammensetzung und 0,2 Ma.-% N. Beantworten Sie für diese erste Berechnung die folgenden Fragen:
- Welche Phasen liegen in welchen Anteilen vor?
  - Wie partitionieren die enthaltenen Elemente und welche Systematik erkennen Sie?
  - Ändern Sie nun den N-Gehalt auf 0,1 Ma.-% und berechnen erneut ein Gleichgewicht. Was verändert sich im Vergleich zu der ersten Berechnung?
- Legen Sie nun die Temperatur als Variable fest und variieren diese zwischen  $1100^{\circ}\text{C}$  und  $1300^{\circ}\text{C}$ . Tragen Sie den Volumengehalt des Ferrits als  $f(T)$  auf und vergleichen das Ergebnis mit dem Diagramm des „Mager“-Duplexstahls aus den VL-Folien. Definieren Sie abschließend die Randbedingungen derart, dass Sie die exakte Temperatur erhalten, bei der die Mengenanteile beider Phasen 50% betragen.
- 4.4. Verwenden Sie für diese Aufgabe die „typical composition“ des Stahls Jindals J4 (ohne P und ohne S) und berechnen für  $T=1050^{\circ}\text{C}$  ein Gleichgewicht. Finden Sie nun durch Variation der Randbedingungen heraus, in welchem Temperaturbereich ein einphasiger austenitischer Zustand vorliegt. Erhöhen Sie anschließend die Temperatur auf  $T=1500^{\circ}\text{C}$  (schmelzflüssiger Zustand) und überprüfen, ob Stickstoff bei dieser Temperatur in der Schmelze gelöst bleibt oder partiell ausgast. Erhöhen Sie die Temperatur auf  $T=1800^{\circ}\text{C}$  und führen die Überprüfung erneut durch. Wieviel N könnten Sie bei dieser Temperatur maximal in der Schmelze lösen (unter Normaldruck) und warum ist dieser Wert höher als der für reines Eisen (vgl. Aufgabe 4.1)?
5. [FORTGESCHRITTEN]  
Simulation SolNit-M für X20Cr13 mit Dictra