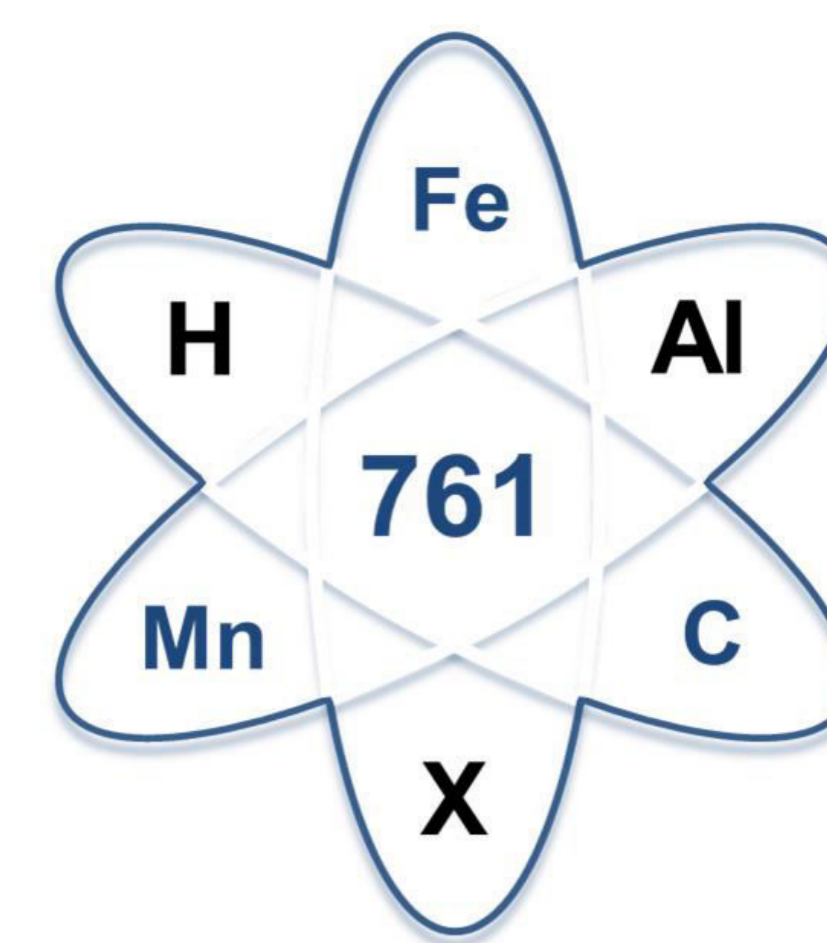


# A3 Thermodynamik

Thermodynamik in Systemen basierend auf Fe-Mn-C



Bengt Hallstedt, Florian Tang

Institut für

Werkstoffanwendungen im Maschinenbau

Ergebnisse 2.Phase

## Motivation

- Die für die Berechnung von Phasendiagrammen, Phasenstabilitäten und thermodynamischen Eigenschaften im System Fe-Mn-Al-C benötigte thermodynamische Grundlage zu liefern
- Diese Grundlage wird benutzt um Phasenumwandlungen (Erstarrung, Seigerung,  $\epsilon$ -Martensitbildung etc) experimentell und simulativ zu studieren
- Entwicklung neuer austenitischer Stähle mit hohem  $\kappa$ -Phasen-Anteil

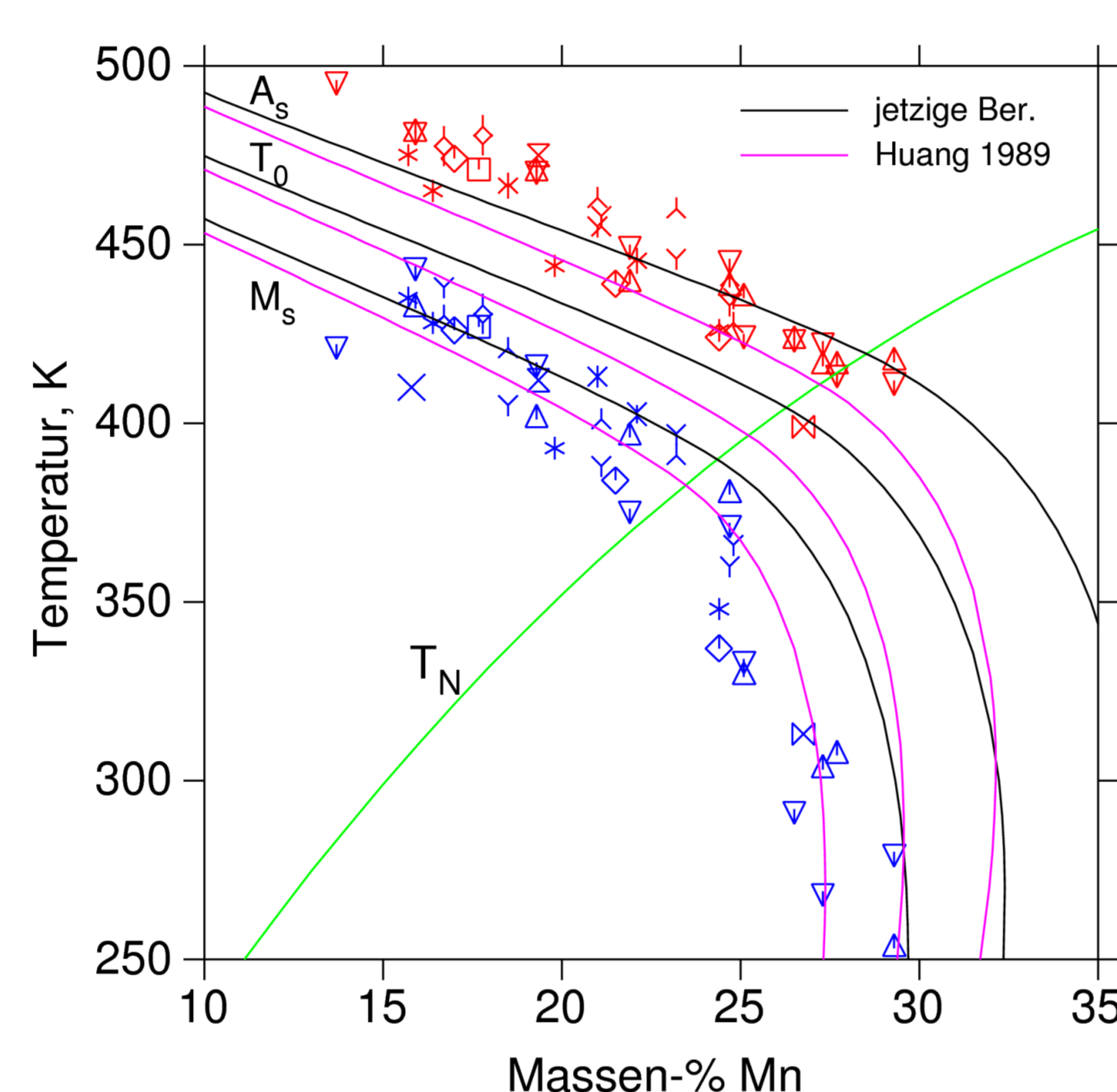
## Methoden

- Thermodynamische Auswertung nach der Calphad-Methode, basierend auf experimentellen Phasendiagramm Daten, thermodynamischen Daten und *ab initio* Berechnungen der Phasenstabilitäten
- Einsatz des thermodynamischen Modells um Phasendiagramme, Phasenstabilitäten, treibende Kräfte und weitere thermodynamische Eigenschaften zu berechnen
- Auswertung der  $T_0$ -Linie zwischen  $\gamma$  und  $\epsilon$  zur Berechnung der Stapelfehlerenergie und Martensit-Start-Temperaturen

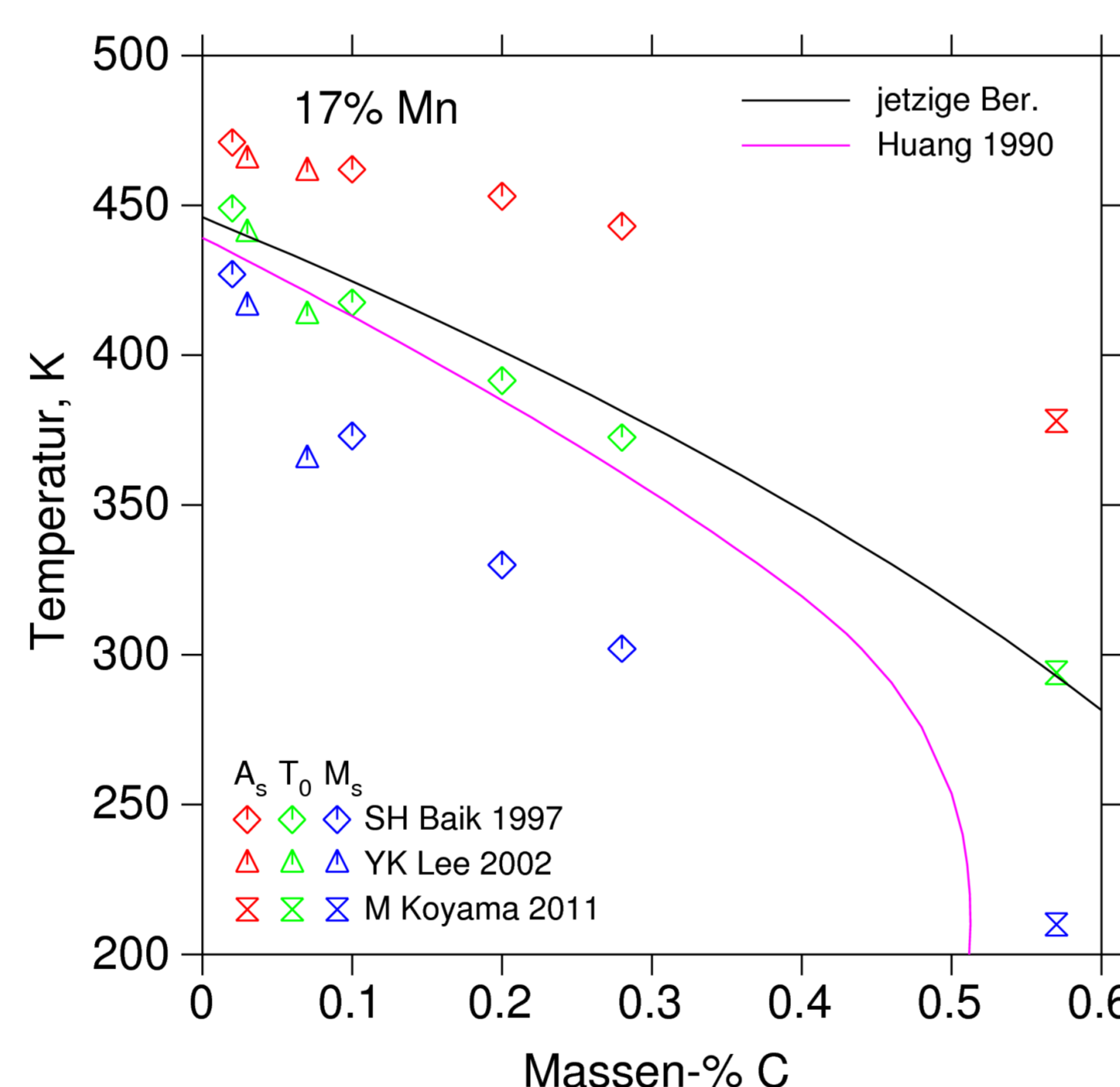
## Ergebnisse

- Zuverlässige Modellierung des System Fe-Mn-Al-C, besonders im Hinblick auf Austenit-, Ferrit-Zementit- und  $\kappa$ -Phase
- Die Modellierung der meta- und instabilen Ordnungsphasen ( $L1_2$ ,  $L1_0$  bzw.  $B2$ ,  $B3_2$ ,  $D0_3$ ) des Al-Mn-Systems konnte mit Hilfe von *ab initio* Daten durchgeführt werden
- Berechnung der Stapelfehlerenergie mit dem thermodynamischen Modell von Olson und Cohen:  

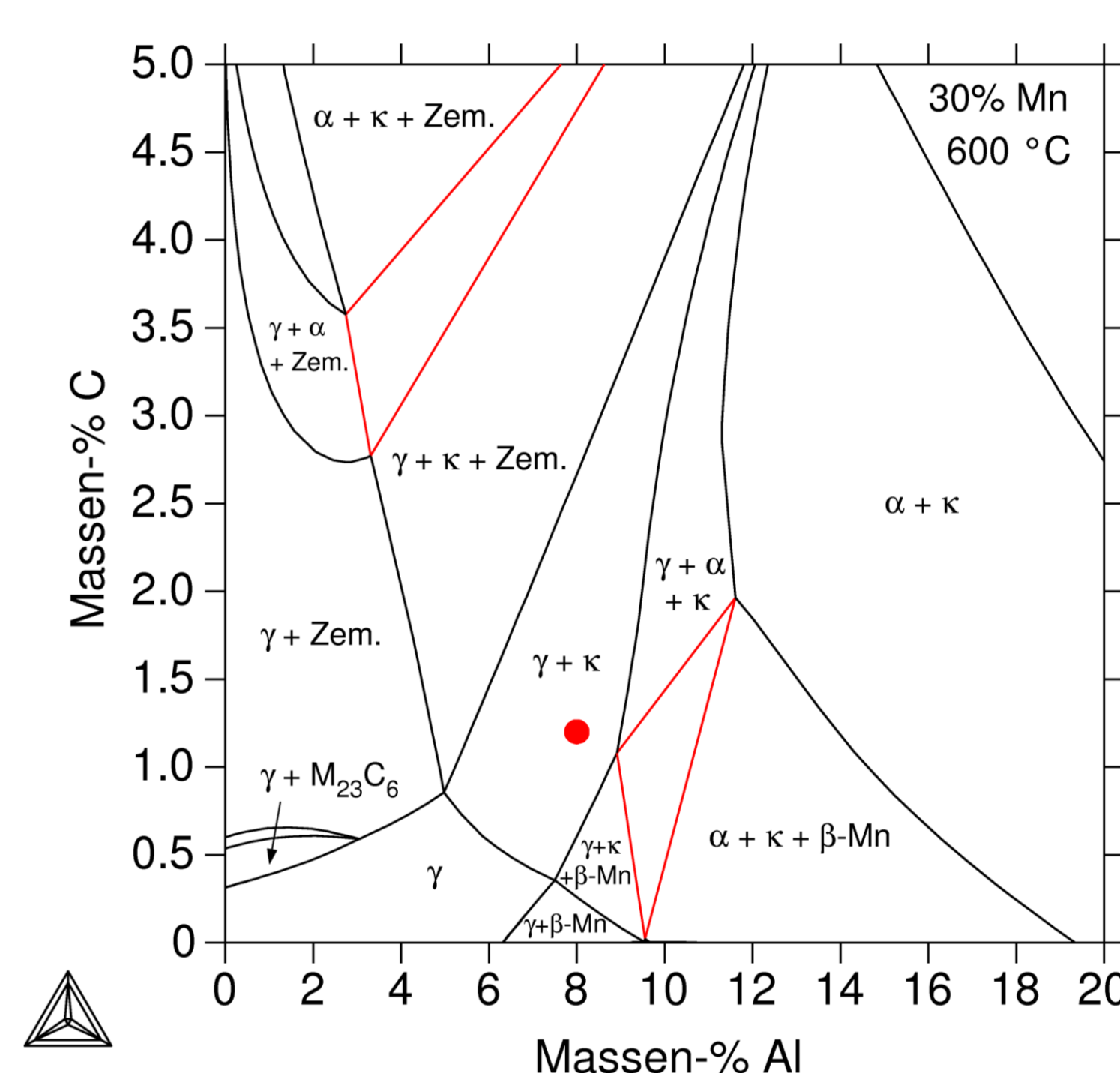
$$SFE = 2\rho_A \Delta G^{\gamma \rightarrow \epsilon} + 2\sigma^{\gamma/\epsilon}$$
- Direkte Darstellung der  $M_S$ -Temperaturen aus der Differenz der Gibbs-Energien.



Martensit-Start-Temperaturen ( $M_S$ ) für  $\epsilon$ -Martensit, Austenit-Start-Temperaturen ( $A_S$ ) für die Rückumwandlung (System Fe-Mn)

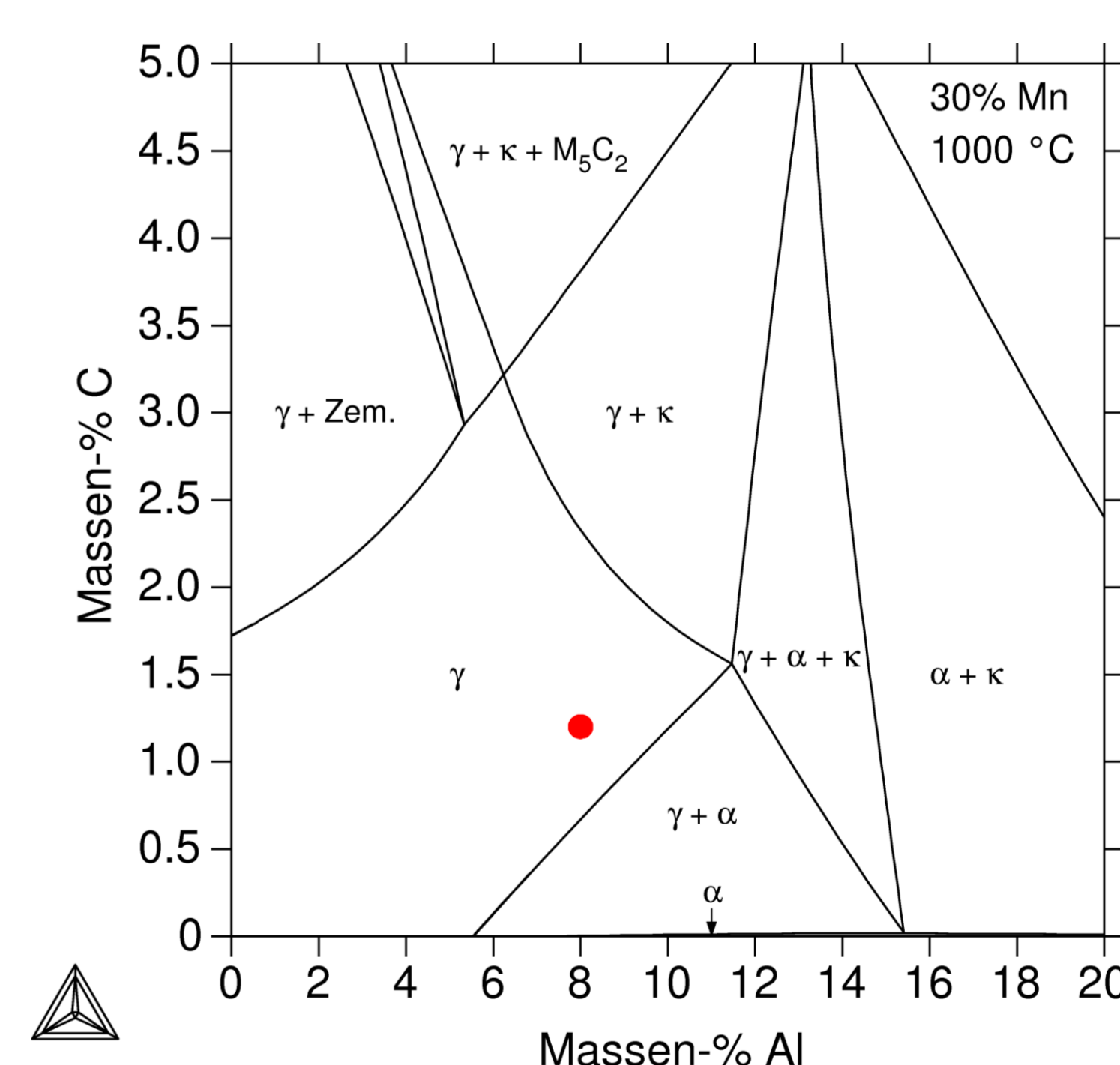


$T_0$ -Temperatur ( $\Delta G^{\gamma \rightarrow \epsilon} = 0$ ) in Abhängigkeit des C-Gehalt einer Legierung mit 17 Massen-% Mn (System Fe-Mn-C)



Berechneter Schnitt für 30 Massen-% Mn im System Fe-Mn-Al-C bei 600°C.

Der rote Punkt zeigt die in C8 hergestellte Legierung im Zweiphasengebiet  $\gamma + \kappa$ .



Berechneter Schnitt für 30 Massen-% Mn im System Fe-Mn-Al-C bei 1000°C.

Der rote Punkt zeigt die in C8 hergestellte Legierung im austenitischen Zustand.

## Impact

- Ordnungsmodellierung Fe-Mn-Al  $\rightarrow$  C1
- Legierungsentwicklung  $\gamma + \kappa \rightarrow$  C8, A5
- Mechanismenkarten  $\rightarrow$  A5
- Dreiphasengebiet  $\alpha + \gamma + \beta\text{-Mn} \rightarrow$  C3

Die im SFB entwickelte Datenbank wird bei Arcelor-Mittal (Metz) für die Entwicklung von neuen „low-density“ Stählen eingesetzt.

Wichtige Veröffentlichungen:

- ▶ D. Djurovic; B. Hallstedt; J. von Appen; R. Dronskowski: Calphad, 2011, vol. 35, pp. 479–491.
- ▶ S. Lintzen; J. von Appen; B. Hallstedt; R. Dronskowski: J. Alloys Compd., 2013, vol. 577, pp. 370–375.
- ▶ I. Zuazo; B. Hallstedt; B. Lindahl; M. Selleby; M. Soler; A. Etienne; A. Perlade; D. Hasenpouth; V. Massardier-Jourdan; S. Cazottes; X. Kleber: JOM, 2014, vol. 66, pp. 1747–1758.



RWTH AACHEN UNIVERSITY