

Untersuchung des Konvektionseinflusses bei der Erstarrung hochmanganhaltigen Stahls mit Hilfe der Phasenfeld Methode

Von der Fakultät für Georessourcen und Materialtechnik der
Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen

zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Naturwissenschaften

genehmigte Dissertation

vorgelegt von **M. Sc.**

Christian Schankies

aus Düren

Berichter:

Univ.-Prof. Prof. h.c. (CN) Dr.-Ing. Dr. h.c. (CN) Dieter G. Senk

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Robert Spatschek

apl. Prof. Dr. rer. nat. Erwin Wosch

Tag der mündlichen Prüfung: 24. August 2016



**Berichte aus dem
Institut für Eisenhüttenkunde**

Christian Schankies

**Untersuchung des Konvektionseinflusses
bei der Erstarrung hochmanganhaltigen Stahls
mit Hilfe der Phasenfeld Methode**

Herausgeber:

Prof. Dr.-Ing. W. Bleck
Prof. Dr.rer.nat. Dr.-Ing.e.h. W. Dahl
Prof. Dr.-Ing. H.W. Gudenau
Prof. Dr.-Ing. D. Senk

Band 4/2016

Shaker Verlag

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2016)

Copyright Shaker Verlag 2016

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-4767-7

ISSN 0943-4631

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Danksagung

Diese Arbeit entstand während der Durchführung des Teilprojekts A8 des Sonderforschungsbereiches 761, das ich während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Metallurgie von Eisen und Stahl des Instituts für Eisenhüttenkunde der RWTH Aachen bearbeitete. Mein besonderer Dank gilt dabei Univ.-Prof. Dr.-Ing. Dieter Senk für die Themenstellung im Rahmen der Erstarrungsforschung des Lehrstuhls sowie die Betreuung und Hilfe beim Erstellen dieser Arbeit. Weiterhin möchte ich mich bei Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Robert Spatschek und apl. Prof. Dr. rer. nat. habil. Erwin A.T. Wosch für die Übernahme der Zweit- bzw. Drittprüfung bedanken. Außerdem gehört mein Dank der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die Bereitstellung der finanziellen Mittel zur Durchführung des Projektes.

Ein besonderer Dank gilt Dr. Joao Rezende für die Unterstützung bei allen Fragen zur Theorie der Erstarrung und für eine tolle Zeit zusammen im Büro. Desweiteren gilt mein besonderer Dank Christoph Lehrenfeld vom IGPM der RWTH Aachen (bis Ende 2014) für die große Unterstützung bei der Entwicklung des Strömungslösers. Mein Dank gilt auch Hamdi für seine Tätigkeit als Hiwi bei mir, sowie Steffen als Hiwi und während seiner Masterarbeit und Gabriel für die unter meiner Betreuung entstandene Masterarbeit.

Bedanken möchte ich mich auch bei allen Freunden und Kollegen während meiner Zeit am Institut für die tolle Zeit und die herausragende Kollegialität. Danke an Petrico, Dennis, Mohammad, Zhiye, Pruet, Tobi, Steve, Gabriel, Joao, Kevin, Sebastian, Matthias, Bernhard, Felix und Hai-Thong.

Als Letztes möchte ich mich noch bei meiner Familie und meinen Freunden für die großartige Unterstützung bedanken.

Kurzzusammenfassung

Die Werkstoffgruppe der Stähle ist heutzutage einer der wichtigsten Werkstoffe für die technische Weiterentwicklung in vielen Bereichen. Moderne Flugzeuge wie der Airbus A 380 oder die Ozeanriesen der Triple-E Baureihe der Maersk Reederei benötigen höchstzuverlässige Werkstoffe mit auf die jeweilige Anwendung optimal abgestimmten Eigenschaften. Ein wichtiges Kriterium für die Zuverlässigkeit ist der Reinheitsgrad. Inhomogenitäten und Mehrphasigkeit im Stahl sind für seine Festigkeit unerlässlich. Allerdings können sie in der Überbeanspruchung Risse oder sogar Brüche hervorrufen. Solche Inhomogenitäten von Legierungselementen treten aufgrund der unterschiedlichen Löslichkeiten in der Schmelze sowie den kristallinen Phasen zwangsläufig während der Erstarrung auf. Die Kenntnis dieser sogenannten Mikrosegierungsverteilung kann im weiteren Prozessverlauf durch beispielsweise Homogenisierungsglügen zur Beseitigung solcher Inhomogenitäten genutzt werden. Für die Verteilung und Stärke der Mikrosegierung spielen unter anderem die Grenzflächenenergie, die zumeist unbekannt ist, und die Unterkühlung der Schmelze eine entscheidende Rolle. Der Einfluss unterscheidet sich dabei deutlich je nach gewählter Legierung. Zur Quantifizierung und Vergleichbarkeit wird einerseits der Segierungsindex, das Verhältnis der maximalen zur minimalen Konzentration, und andererseits der Verteilungskoeffizient herangezogen.

Einen ebenfalls großen Einfluss auf das Erstarrungsgefüge hat die Strömung. Aufgrund der Volumenunterschiede zwischen fester und flüssiger Phase entsteht im Verlauf des Erstarrungsprozesses zwangsläufig eine Strömung, deren Berücksichtigung in Bezug auf die Segierung und die Morphologie eine wichtige Rolle spielt. Es zeigt sich, dass insbesondere

die der Strömung abgewandte Seite (Schattenseite) durch die starken Anreicherungen einen großen Wachstumsnachteil erfährt. Dadurch wird die Symmetrie des Systems gebrochen. Insbesondere Systeme mit schmalen Erstarrungsintervallen zeigen einen besonders starken Einfluss auf die Strömung, da hier durch die Anreicherungen auf der Schattenseite es zu einem Abfall von Liquidus- und Solidustemperatur kommt und damit für isotherme Bedingungen die treibende Kraft minimiert wird und damit die Erstarrung stark gebremst wird.

In dieser Arbeit wird ein Modell entwickelt, mit dem es möglich ist, das polykristalline Gefüge des quarternären Systems Eisen - Mangan - Kohlenstoff - Aluminium unter dem Einfluss der Konvektion zu berechnen und das Seigerungsverhalten der Legierungselemente während der Erstarrung zu untersuchen. Dafür werden zunächst die einzelnen binären und ternären Teilsysteme betrachtet und am Ende das vollständige quarternäre System untersucht. Zur Simulation der Erstarrung auf der mesoskopischen Längenskala hat sich in den letzten Jahren die Phasenfeld Methode zu einem wichtigen Werkzeug entwickelt. Durch Kopplung mit den Navier-Stokes-Gleichungen ist es möglich, den Einfluss der Strömung auf die Erstarrung zu untersuchen.

Abstract

Nowadays steel is one of the most important materials for the technical advancement in many areas. Modern airplanes like the airbus A 380 or the ocean giants of the triple-E class of the Maersk shipping company need highly ambitious materials with properties optimally co-ordinated on the respective use. An important criterion for the reliability is the purity standard. Inhomogenities and multiphases in steel are important for the strength, but they can cause cracks or even breaks in case of overstraining. Such inhomogenities of alloy elements appear on account of the different solubility in the melt as well as the crystalline phases unavoidable during the solidification. The knowledge of this microsegregation distribution can be used in the following processes for example the homogenisation glowing for the removal of this inhomogenities. Among the rest, for the distribution and strength of the microsegregation the interface energy, which is mostly unknown, and the undercooling of the melt play an important role. Besides, the influence clearly differs according to selected alloy. The distribution coefficient and the segregation index, the relation of maximum to the minimum concentration, are used as quantification numbers. These numbers are than finally compared for the different alloying systems.

The flow has also big influence on the solidification structure. On account of the volume differences between the solid crystal and the liquid phase a flow whose consideration plays an important role concerning the segregation and the morphology originates in the course of the solidification process necessarily. It appears that in particular the flow turned away side (shadow side) finds out a big growth disadvantage by the strong enrichments. The symmetry of the system is thereby broken. In particular systems with narrow

solidification intervals show an especially strong influence on the current, because here by the enrichments on the shadow side it comes to a drop down of solidus and liquidus temperatures and as a consequence the driving force of solidification is minimised and the solidification process stops. In this work a model is developed, which is able to simulate the quaternary system iron - manganese - carbon - aluminium with different crystal orientations under an influence of the convection and to examine the segregation behaviour of the alloy elements during the solidification. For it the single binary and ternary subsystems are looked first and at the end the entire quaternary system is examined. The phase-field method has developed to a very powerful method for the simulation of solidification processes on a mesoscopic scale. The coupling with the Navier-Stokes equations makes it possible to see the influence of convection on the microstructure development.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Stand der Wissenschaft und Technik	7
3	Theorie	19
3.1	Atomarer Aufbau von Festkörpern	19
3.2	Kristallgitter	22
3.2.1	Kubisch flächenzentrierte Kristallstruktur (fcc)	23
3.2.2	Kubisch raumzentrierte Kristallstruktur (bcc)	24
3.2.3	Flüssige Phase	26
3.3	Freie molare Enthalpie	27
3.4	Phasenübergänge	32
3.5	Phasendiagramm	35
3.6	Keimbildung	37
3.7	Diffusion	41
3.8	Erstarrung	43
3.9	Gießverfahren	48
3.10	Gefüge	48
3.11	Seigerung	50
3.12	Mikroseigerungsmodelle	52
3.13	Gefügevergrößerung	58
4	Phasenfeld Modellierung	59
4.1	Allgemeine Beschreibung	59

4.2	Reinstoff	61
4.3	Phasendiagrammbasierte Modelle	62
4.4	Modelle auf Basis der freien Energie	64
4.4.1	Operator Splitting	65
4.4.2	Selbstkopplung	66
4.4.3	Konzentrationskopplung	69
4.4.4	Orientierungskopplung	71
4.4.5	Strömungskopplung	72
4.4.6	Vollständiges binäres Modell	74
4.4.7	Vollständiges Multikomponentenmodell	76
4.5	Erstarrungsbedingungen	77
4.6	Numerik	78
5	Phasenfeld Untersuchungen ohne Strömung	81
5.1	Binäre Systeme	83
5.2	Ternäre Systeme	119
5.3	Quarternäres System	158
6	Phasenfeld Untersuchungen mit Strömung	173
6.1	Binäre Systeme	173
6.2	Ternäre Systeme	187
6.3	Quarternäres System	207
7	Diskussion	217
8	Schlussfolgerungen	265
9	Ausblick	267
10	Zusammenfassung	271
	Literaturverzeichnis	273
	Anhang	A.1