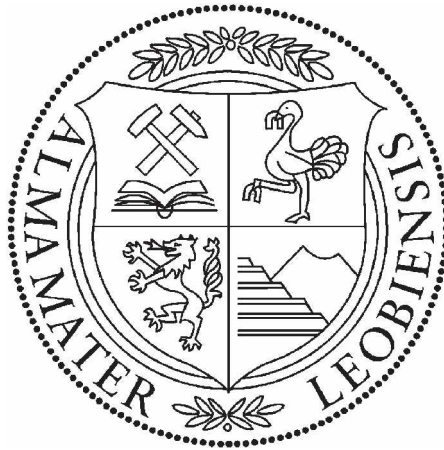


# Lehrstuhl für Umformtechnik

Department Product Engineering,  
Montanuniversität Leoben



## **DIPLOMARBEIT**

AUSSCHIEDUNGSKINETIK VON KARBIDEN IN EINEM  
WARMARBEITSSTAHL

**Johannes Zauner BSc**

Metallurgie 424

Juni 2009

**Betreuer**

Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Priv.-Doz. Christof Sommitsch

Dipl. Ing. Dr. techn. Bernhard Sonderegger

Dipl. Ing. Friedrich Krumphals

Dipl. Ing. Ivan Holzer

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Diplomarbeit selbstständig und ohne fremde Hilfe verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche erkenntlich gemacht habe.

Leoben, 13.06.2009

Johannes Zauner

# Danksagung

Zu allererst möchte ich Herrn Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Priv.-Doz. Christof Sommitsch, Vorstand des Instituts für Werkstoffkunde und Schweißtechnik für die Unterstützung und Beratung zweier Bakkalaureatsarbeiten und dieser Diplomarbeit danken.

Besonderer Dank gilt meinen zwei Hauptbetreuern Herrn Dipl. Ing. Friedrich Krumphals, der zu jeder Zeit Ratschläge und motivierende Worte parat hatte und Herrn Dipl. Ing. Ivan Holzer, der mir die Kunst des Simulierens mit MatCalc näher brachte. Vor allem in den letzten Stadien der Ausarbeitung dieser Arbeit unterstützten mich Herr Dipl. Ing. Friedrich Krumphals und Herr Dipl. Ing. Ivan Holzer mit Rat und Tat.

Weiters möchte ich mich recht herzlich bei den Mitarbeitern des Material Center Leoben Forschungs GmbH. (MCL) für die durchgeführten Wärmebehandlungen und bei Herrn Dipl. Ing. Dr. Stefan Mitsche vom Forschungsinstitut für Elektronenmikroskopie und Feinstrukturforschung (FELMI) für die schnelle Probenuntersuchung und -auswertung bedanken.

Ganz besonders möchte ich mich bei meinem verstorbenen Vater, der mein Interesse für ein Studium an der Montanuniversität Leoben weckte und mich bis zu seinem Tod mit seiner Lebenserfahrung und seinem Wissen unterstützte, bedanken. Auch gilt meiner Mutter der allerhöchste Dank für die jahrelange vortreffliche Verpflegung und den Beistand in schwierigen Zeiten. *Vielen, vielen Dank!*

# Kurzfassung

Für die Verarbeitung von metallischen Werkstoffen bei mittleren und hohen Temperaturen werden hauptsächlich Warmarbeitsstähle verwendet. Um die Lebensdauer dieser Werkzeuge vorhersagen zu können, ist es notwendig die Mikrostruktur und deren Veränderung während der Anwendung zu kennen, da die Materialeigenschaften stark von dem mikrostrukturellen Gefüge abhängig sind.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war die Untersuchung der Ausscheidungskinetik von Karbiden ausgehend von der chemischen Zusammensetzung des Warmarbeitsstahls X38Cr-MoV5-1 (Böhler W300) während einer bestimmten Wärmebehandlung. Mit Hilfe der Simulationssoftware MatCalc wurde die Art, die Verteilung und die Größe der Teilchen in der Mikrostruktur simuliert. Bei der experimentellen Untersuchung wurden die Stahlproben in einem Vakuumofen vergütet. Danach wurde die Mikrostruktur mittels Rasterelektronenmikroskop und EDX-Analyse nach Art und Verteilung der Karbidausscheidungen ausgewertet. Die Ergebnisse der Simulation und der experimentellen Auswertung wurden anschließend miteinander verglichen und diskutiert.



# Abstract

For the manufacturing of metallic materials at medium and elevated temperatures hot work tool steels are commonly used. To predict the lifetime of these tools it is necessary to characterize the microstructure and its change during the application because the material properties strongly depend on the microstructure.

The aim of the present work is the analysis of the precipitation kinetics of carbides with the chemical composition of the hot work tool steel X38CrMoV5-1 (Böhler W300) during a specific heat treatment. The character, distribution and dimension of the particles were simulated with the simulation software MatCalc. For the experimental study steel samples were heat treated in a vacuum furnace. Subsequently the microstructure of the samples was determined by a scanning electron microscope and EDX-analysis to analyse the character and distribution of carbide precipitations. The results of the simulations and of the experimental evaluation were compared and discussed.

# Inhaltsverzeichnis

Eidesstattliche Erklärung . . . . .	I
Danksagung . . . . .	II
Kurzfassung . . . . .	III
Abstract . . . . .	IV
Inhaltsverzeichnis . . . . .	V
<b>1 Einleitung und Zielsetzung . . . . .</b>	<b>1</b>
<b>2 Warmarbeitsstahl . . . . .</b>	<b>2</b>
2.1 Anforderungen an die Eigenschaften . . . . .	2
2.2 Legierungskonzepte . . . . .	7
2.3 Wärmebehandlung . . . . .	8
2.4 Theorie der Ausscheidungsbildung . . . . .	15
2.4.1 Homogene Keimbildung . . . . .	16
2.4.2 Heterogene Keimbildung . . . . .	20
2.4.3 Wachstumskinetik von Ausscheidungen . . . . .	22
2.4.4 Ostwald-Reifung . . . . .	24
2.4.5 Mechanismen der Ausscheidungshärtung . . . . .	25
2.4.6 Multipartikel Ausscheidungskinetik . . . . .	31
<b>3 Experimentelle Untersuchungen . . . . .</b>	<b>35</b>
3.1 Experimentelle Probenuntersuchung . . . . .	35
3.1.1 Wärmebehandlung . . . . .	35
3.1.2 Elektronenmikroskopische Untersuchung . . . . .	38
3.2 Simulationen mit MatCalc . . . . .	39
3.2.1 Definition der chemischen Zusammensetzung . . . . .	39
3.2.2 Berechnung eines Phasenmengendiagramms . . . . .	40
3.2.3 Berechnung eines Phasendiagramms . . . . .	42

3.2.4	Simulation der Ausscheidungskinetik . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Ergebnisse und Diskussion</b> . . . . .	<b>49</b>
4.1	Ergebnisse der Rasterelektronenmikroskopie und EDX-Analyse . . . . .	49
4.1.1	Ergebnisse der Probe 1 nach dem Härten . . . . .	49
4.1.2	Ergebnisse der Probe 4 . . . . .	53
4.2	Ergebnisse der Simulation mit MatCalc . . . . .	60
4.2.1	Phasendiagramm . . . . .	60
4.2.2	Phasenmengendiagramm . . . . .	61
4.2.3	Ausscheidungsverhalten . . . . .	62
4.3	Diskussion der Ergebnisse . . . . .	71
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b> . . . . .	<b>74</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b> . . . . .	<b>76</b>
	<b>Tabellenverzeichnis</b> . . . . .	<b>79</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b> . . . . .	<b>80</b>
<b>A</b>	<b>Beispielanhang</b> . . . . .	<b>82</b>
A.1	Skript der Ausscheidungskinetik mit $\lambda \approx 0,5$ . . . . .	82
A.2	Skript der Ausscheidungskinetik mit $\lambda \approx 3$ . . . . .	91
A.3	Skript der Ausscheidungskinetik mit $\lambda \approx 8$ . . . . .	101
A.4	Skript der Ausscheidungskinetik beim Auslagern . . . . .	111

# 1 Einleitung und Zielsetzung

Warmarbeitsstähle sind Stähle, die als Werkzeuge mit einer Dauertemperatur von über 200°C für das spanlose Umformen von Produkten aus Aluminium-, Zink-, Magnesium-, Kupfer- und Eisenlegierungen eingesetzt werden. Die Werkzeuge werden hauptsächlich beim Strangpressen, Druckguß, Schmieden mit Gesenken oder Hämmern und Schneiden verwendet [1–3].

Die Einsatzgebiete der Warmarbeitsstähle in der Warm- und Halbwarmumformung erfordern spezielle Eigenschaften wie eine hohe Anlassbeständigkeit, Warmfestigkeit, Warmhärte, Warmverschleißwiderstand, Warmzähigkeit und Temperaturwechselbeständigkeit. Damit diese Eigenschaften erreicht werden, werden Legierungselemente wie Chrom, Wolfram, Molybdän, Vanadium, Nickel, Kobalt und Mangan zulegiert. Zudem werden diese Werkstoffe einer bestimmten Wärmebehandlung unterzogen. Das im vergüteten Zustand vorliegende Gefüge eines Warmarbeitsstahls besteht zum Großteil aus angelassenem Martensit, in dem Sekundärhärteteilchen eingelagert sind, wodurch eine hohe Festigkeit erreicht wird [1, 4].

Da die Ausscheidungsprozesse stark von den Einflussfaktoren wie z.B. der Abkühlgeschwindigkeit, den Austenitisierungs- und Anlasstemperaturen abhängig sind, ist es von großer Bedeutung, diese gezielt zu steuern, um die Mikrostruktur zu optimieren. Durch die Weiter- bzw. Neuentwicklung von Softwarepaketen können die Vorgänge in einem Werkstoff während einer Wärmebehandlung beschrieben und in weiterer Folge vorhergesagt werden. In der vorliegenden Arbeit werden mit Hilfe des Softwareprogramms MatCalc thermodynamische Gleichgewichtsbetrachtungen und die Ausscheidungskinetik (Art, Verteilung und Größe der Teilchen) des Warmarbeitsstahls X38CrMoV5-1 berechnet. Die Ergebnisse der Simulationen werden mit den experimentellen Ergebnissen der Rasterelektronenmikroskopie und EDX-Analyse der vergüteten Proben des X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls verglichen und diskutiert.

## 2 Warmarbeitsstahl

Die Gruppe der Warmarbeitsstähle zählt zu jenen Stählen, die als Werkzeuge für das spanlose Umformen von Werkstoffen bei erhöhten Temperaturen eingesetzt werden wie z.B. beim Strangpressen, Druckguß, Schmieden mit Gesenken oder Hämmern und Schneiden. Sie dienen vornehmlich zur Formgebung von Produkten aus Aluminium-, Zink- und Magnesium-, aber auch aus Kupfer- und Eisenlegierungen bei Werkstücktemperaturen von ca. 400 bis 1200°C (Tab. 2.1). Auch die Kontaktzeiten von Millisekunden (Gesenk) bis Minuten (Strangpressen) zwischen Werkzeug und Werkstück beeinflussen die Werkzeuge. Je länger die Kontaktzeit andauert, desto geringer wird die Kühlzeit des Werkzeuges. Die Dauertemperatur der Werkzeuge beträgt während des Einsatzes über 200°C [1–3].

**Tabelle 2.1:** Anhaltswerte von Prozesstemperaturen bei der Verarbeitung. Die 1100°C bei Glas beschreibt die Erweichungstemperatur [5].

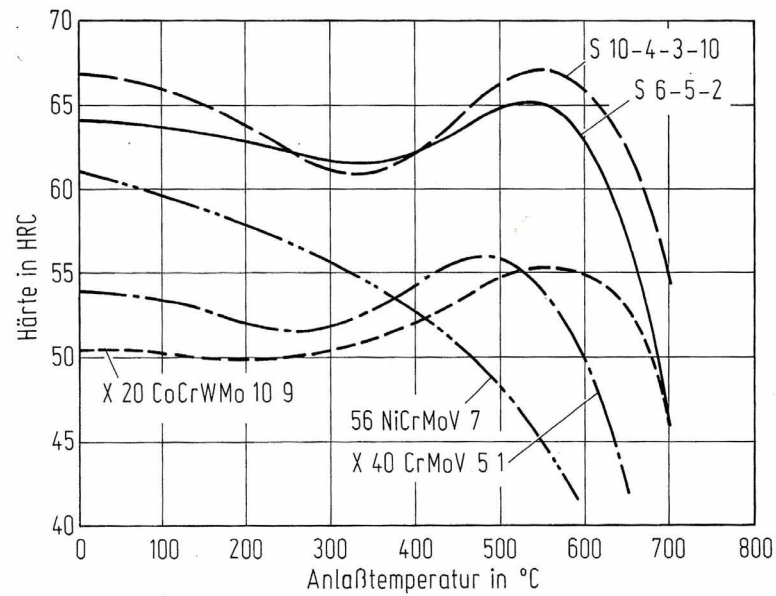
Werkstückstoff	Gießtemperatur [°C]	Umformtemperatur [°C]
Zn-Legierung	400	-
Mg-Legierung	600	-
Al-Legierung	700	500
Cu-Legierung	1000	800
Glas		1100
Stahl	-	1200

### 2.1 Anforderungen an die Eigenschaften

Wegen den oben genannten Anwendungen benötigen die Warmarbeitsstähle besondere Eigenschaften, die im folgenden besprochen werden:

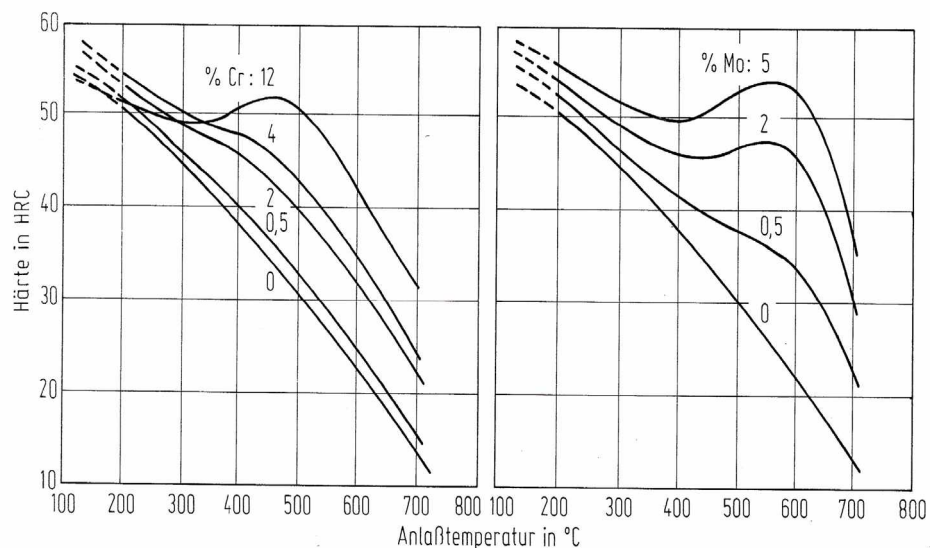
- **Hohe Anlassbeständigkeit:**

Bei Werkzeugen, die bei erhöhten Temperaturen arbeiten oder sich während des Einsatzes erwärmen, darf durch die Wärmeeinbringung kein Härteabfall eintreten. Neben der Anlasstemperatur muss auch die Dauer der Temperaturbeanspruchung berücksichtigt werden. Durch Legierungselemente wie Molybdän, Wolfram, Vanadin und Chrom, die den Martensitzerfall verzögern oder zur Ausscheidung von Sonderkarbiden führen, kann die Anlassbeständigkeit stark beeinflusst werden. Beim Anlassen zwischen 500 und 600°C führt die Ausscheidung von Sonderkarbiden zu einem Sekundärhärtemaximum. In Abbildung 2.1 werden die Anlasskurven mit dem Bereich der Sekundärhärte einiger Warmarbeits- und Schnellarbeitsstähle gezeigt [1, 4].

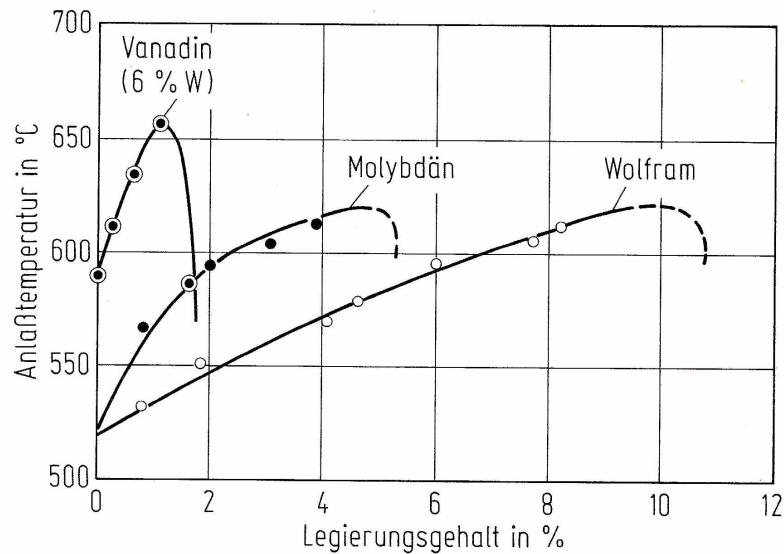


**Abbildung 2.1:** Anlaskkurven in Abhängigkeit von der Härte und Anlasstemperatur einiger Warmarbeits- und Schnellarbeitsstähle [4].

Der Vergleich zwischen dem Einfluss von Chrom und Molybdän zeigt, dass Chrom einen geringeren Einfluss auf die Sekundärhärte ausübt (Abb. 2.2). Die Wirkung auf die Anlaskbeständigkeit nimmt in der Reihenfolge von Wolfram, Molybdän und Vanadium zu (Abb 2.3) [4].



**Abbildung 2.2:** Einfluss von Chrom und Molybdän auf die Anlaskhärte von Stählen mit ca. 0,25%C [6].



**Abbildung 2.3:** Einfluss von Wolfram, Molybdän und Vanadin auf die Anlassbeständigkeit von Stählen mit ca. 0,3%C und 2,5%Cr [4].

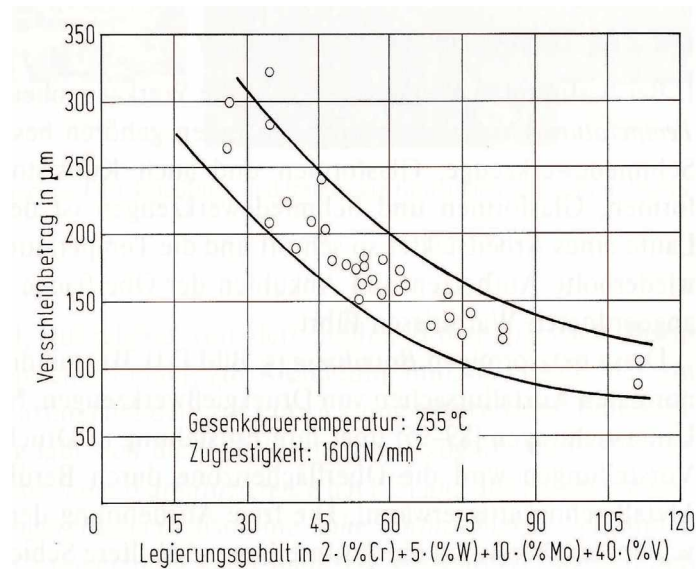
• **Hohe Warmfestigkeit, Warmhärte und Warmverschleißwiderstand:**

Das Zusammenwirken von verschiedenen Verschleißmechanismen (Abrasion, Adhäsion, Oberflächenzerrütung, tribochemische Reaktionen und Warmverschleiß) führt zu Werkzeugverschleiß. Die Warmhärte ist ein Maß für eine gute Formbeständigkeit und einen guten Verschleißwiderstand. Den Verschleißwiderstand kann man verbessern indem die Matrixhärte erhöht wird und Hartstoffe in der Stahlmatrix eingelagert werden. Jedoch führt eine Erhöhung der Härte auch zu einer Verringerung der Zähigkeit [4].

Auch durch Zulegieren von karbidbildenden Legierungselementen wie Chrom, Molybdän, Wolfram, Vanadin, Niob oder Titan können härtere Karbide als das Eisenkarbid (900HV) gebildet werden. Das Chromkarbid  $M_7C_3$  erreicht Härten bis zu 1500 HV, Molybdän-Wolfram-Karbid  $M_6C$  bis 1650 HV und die Vanadin-, Niob- und Titan-Karbide mehr als 2000 HV [4, 7].

Durch eine Erhöhung der Karbidmenge kann der Verschleißwiderstand ebenfalls verbessert werden. Die technisch mögliche Karbidmenge in konventionell hergestellten Stählen liegt bei ca. 25% Karbidanteil, da hier die Verformbarkeitsgrenze erreicht wird [4, 8].

Zusätzlich wird die Verschleißbeständigkeit von der Verteilung und der Form der Karbide beeinflusst. Liegen die Karbide zu weit auseinander und sind sie fein verteilt, dann nimmt die Verschleißbeständigkeit ab. In Abbildung 2.4 wird der Zusammenhang zwischen Legierungselementen und Warmhärte bzw. Verschleißwiderstand dargestellt [4].



**Abbildung 2.4:** Einfluss des Legierungsgehaltes auf den Verschleißwiderstand verschiedener Warmarbeitsstähle [9].

Es ist zu erkennen, dass die größte Wirkung auf den Verschleißwiderstand bei höheren Temperaturen vom Vanadin ausgeht. Dies wird durch den hohen Faktor für Vanadin in der Formel für den Legierungsgehalt angedeutet (Abbildung 2.4) [4].

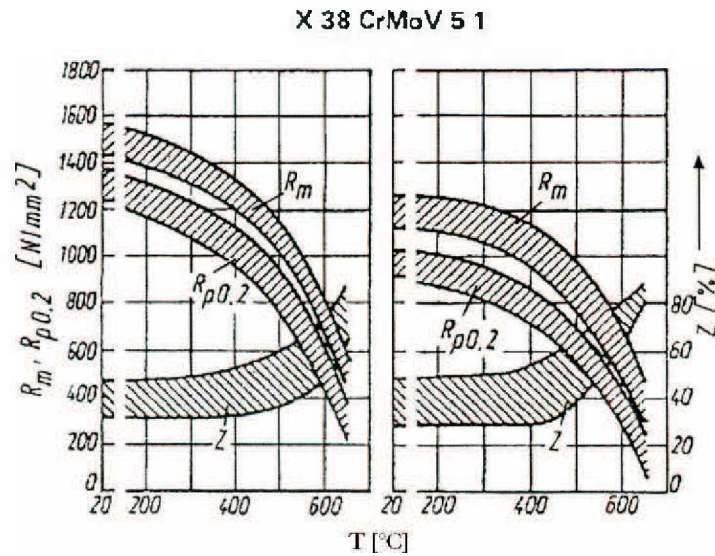
- **Hohe Warmzähigkeit:** Allgemein kann gesagt werden, dass mit zunehmendem Legierungsgehalt die Warmfestigkeit erhöht und die Zähigkeit verringert wird. Eine Verschlechterung der Zähigkeitseigenschaften kann auch während einer Wärmebehandlung (Abkühlen) durch das Entstehen von voreutektoiden Karbidausscheidungen, sowie durch eine vormartensitische Umwandlung (oberes Bainitgefüge), auftreten. Durch eine rasche Abkühlung von der Härtetemperatur im Temperaturbereich der voreutektoiden Karbidausscheidungen, können die Karbidausscheidungen an den Korngrenzen verringert oder vermieden werden [4].

Warmarbeitsstähle, die mit Wolfram und Molybdän legiert sind, neigen zu einer Warmversprödung in einem Bereich von 500 bis 600 °C. Aus diesem Grund werden in der Praxis die CrMo-Stähle verwendet, obwohl die W-haltigen Stähle eine höhere Anlassbeständigkeit und Warmfestigkeit aufweisen [1]. Allerdings hat die Anlassversprödung zwischen 500 und 600 °C bei den Warmarbeitsstählen wegen ihres Legierungsaufbaus nur eine geringe Bedeutung [4].

Auch durch ein homogenes Gefüge, das stark durch die Stahlherstellungsverfahren (z.B. Elektroschlack-Umschmelzverfahren, Druck-/Schutzgas-Elektroschlack-Umschmelzen, Vakuum-Lichtbogenofen) beeinflusst wird, werden die Zähigkeitseigenschaften entscheidend verbessert [4].

In Abb. 2.5 wird der Verlauf der Zugfestigkeit, der Streckgrenze und die Brucheinschnürung in Abhängigkeit von der Anlass temperatur dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass mit steigender Temperatur die Festigkeit abnimmt und die Zähigkeit ansteigt.





**Abbildung 2.5:** Abhängigkeit der Zugfestigkeit, Streckgrenze und Brucheinschnürung von der Anlasstemperatur für einen X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahl mit unterschiedlichen Anfangsfestigkeiten [10].

• **Temperaturwechselbeständigkeit:**

Bei Werkzeugen die z.B. für das Druckgießen, Schmieden, Glasformen und auch Kunststoffformen verwendet werden, treten an der Werkzeugoberfläche Temperaturwechsel auf, die so schroff und deren Temperaturdifferenz so groß sind, dass an der Oberfläche netzartige Brandrisse entstehen können.

Für eine bessere Brandrissbeständigkeit bzw. Temperaturwechselbeständigkeit sind folgende Einflüsse verantwortlich [1, 4]:

- Da die Bildung von Brandrissen immer mit Oxidationsvorgängen verbunden ist, sollten Chrom legierte Stähle verwendet werden, da diese die Zunder- bzw. Oxidationsbeständigkeit verbessern.
- Hohe Warmfließgrenze und Anlaßbeständigkeit führt zu einem besseren Ermüdungsverhalten.
- Hohe Wärmeleitfähigkeit, da diese den Temperaturgradienten verringert und sich ein geringerer Spannungsaufbau einstellt.
- Hoher Homogenitätsgrad führt zu einem besseren plastischen Verformungsvermögen und verhindert durch eine geringere Fehlerdichte eine frühzeitige Risseinleitung.

## 2.2 Legierungskonzepte

Für die Warmarbeitsstähle kann kaum eine Einteilung getroffen werden, da es eine sehr grosse Anzahl an Möglichkeiten gibt. In Abhängigkeit von der Temperaturbeanspruchung können warm- und hochfeste Vergütungsstähle mit oder ohne Sekundärhärte eingesetzt werden. Für sehr hohe Temperaturbeanspruchungen werden auch warmfeste und zunderbeständige austenitische Stähle und Nickelbasislegierungen eingesetzt, da diese Werkstoffe wegen ihrer dichteren Atompäckung weniger zu diffusionsabhängigem Kriechen neigen. Somit können die Warmarbeitsstähle (z.B. Tab. 2.2) nach ihrem Werkstoffverhalten in folgende Kategorien unterteilt werden [1]:

- **Schlagzähe Stähle:** Hierzu gehören die Ni-legierten CrMoV- Vergütungsstähle mit einem C-Gehalt von 0,5 bis 0,6%.
- **Warmzähe und verschleißfeste Stähle:** Dazu zählen CrMoV- oder WCrV-Vergütungsstähle mit Summenlegierungsgehalten bis zu 8% und einem C-Gehalt bei ca. 0,3 bis 0,4% und CoCrMo (W,V)-Vergütungsstähle mit über 8% Legierungsgehalten und C bis 0,5%.
- **Hochwarmfeste Stähle und Legierungen:** Hierbei handelt es sich um  $\gamma'$  aushärtende Stähle und Ni-Basislegierungen wie z.B. X6NiCrTi26-15 und NiCr20Co18Ti.

**Tabelle 2.2:** Typische Warmarbeitsstähle und Beispiele für deren Anwendung [1].

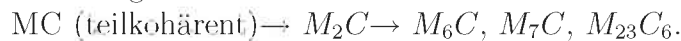
Gruppe	Stahltypen	Anwendungsbeispiele
Niedriglegierte Vergütungsstähle	56NiCrMoV7	Hammergesenke, Matrizenhalter und Pressstempel zum Strangpressen
Mittellegierte CrMoV- und WCrV-Stähle	X40CrMoV5-1, X32CrMoV3-3, X30WCrV9-3	Druckgieß- und Strangpresswerkzeuge für Leichtmetalle und auch Buntmetalle, Werkzeuge für Schmiedemaschinen
Hochlegierte CoCrMo (W,V)-Stähle	X20CoCrWMo10-9, X45CoCrWV5-5-5, X15CrCoMoV10-10-5	Druckgieß- und Strangpresswerkzeuge für Leichtmetalle und auch Buntmetalle, Werkzeuge für Schmiedemaschinen bei einer sehr hohen Temperaturbeanspruchung bis 700°C
Hochwarmfeste Stähle und Legierungen	X6NiCrTi26-15, X50NiCrWV13-13, NiCr19CoMo	Innenbuchsen für das Strangpressen von Kupfer und Cu-Legierungen (Billet-Temperatur > 750°C), Schmiedesättel für Freiformschmieden mit längeren Gebrauchszeiten

Die CrMoV-Gruppe hat die größte Bedeutung für die Warmarbeitsstähle. Sollten die CrMoV-Stähle bei höheren Temperaturen eine ungenügende Formbeständigkeit aufweisen, so werden WCrV-Stähle trotz ihrer geringeren Zähigkeit verwendet.

Mittels Wärmebehandlung und chemischer Zusammensetzung können die Gebrauchseigenschaften der Warmarbeitsstähle eingestellt werden. Die Wirkung der Hauptlegierungselemente wird im folgenden kurz beschrieben [1]:

**Chrom:** Erhöht die Härbarkeit, Zunderbeständigkeit, Verschleißwiderstand und führt bei höheren Gehalten zu einem Sekundärhärtemaximum. Ebenfalls erweitert es den umwandlungsträgen Bereich zwischen Perlit und Bainit (Warmbadhärtung).

**Wolfram, Molybdän und Vanadin:** Erhöhen die Warmfestigkeit, Anlassbeständigkeit und Verschleißwiderstand (V) durch Sonderkarbidausscheidung im Bereich des Sekundärhärtemaximums. Dabei treten mit steigender Anlasstemperatur folgende Ausscheidungen auf:



Durch W und Mo kommt es auch zu Anlasseffekten durch intermetallische Verbindungen (IMV), deren Ausscheidungszeitpunkt durch W zu höheren Temperaturen verschoben wird.

**Nickel:** Führt zu einer besseren Härbarkeit und erschwert die Weichglühbarkeit durch Absenken der  $A_1$ -Temperatur. Durch eine niedrigere Austenitisierungstemperatur kann ein feineres Härtegefüge eingestellt werden.

**Kobalt:** Verbessert die Wärmeleitfähigkeit, die Anlassbeständigkeit bis zu Temperaturen von 600°C und die Sekundärhärte durch Bildung von IMV bei gleichzeitiger Verringerung der Zähigkeit. Unter 5% hat es keinen Einfluss auf die Härbarkeit. Außerdem verzögert es die Karbidausscheidungen und führt zu einer feineren Verteilung.

**Silizium:** Erhöht die Zunderbeständigkeit, Härbarkeit, Seigerungsneigung und Festigkeit bei 5% CrMoV-Stählen bei Anlasstemperaturen von 200 bis 600°C und führt zu einem feinkörnigen Gefüge.

**Mangan:** Steigert die Härbarkeit, führt jedoch gleichzeitig zu einer Verringerung die Zähigkeit verringert. Durch die Kombination mit einem abgesenktem C-Gehalt kann dieser Effekt vermieden werden.

## 2.3 Wärmebehandlung

Üblicherweise wird bei der Wärmebehandlung von einem weichgeglühten Zustand, mit kugeligen Karbiden, die in einer ferritischen Matrix eingeformt sind, ausgegangen. Bei den Verbrauchern werden die Stähle im weichgeglühten Zustand bearbeitet und erst danach werden die endgültigen Eigenschaften durch eine Wärmebehandlung, dem Vergüten, eingestellt (Abb. 2.6) [1].

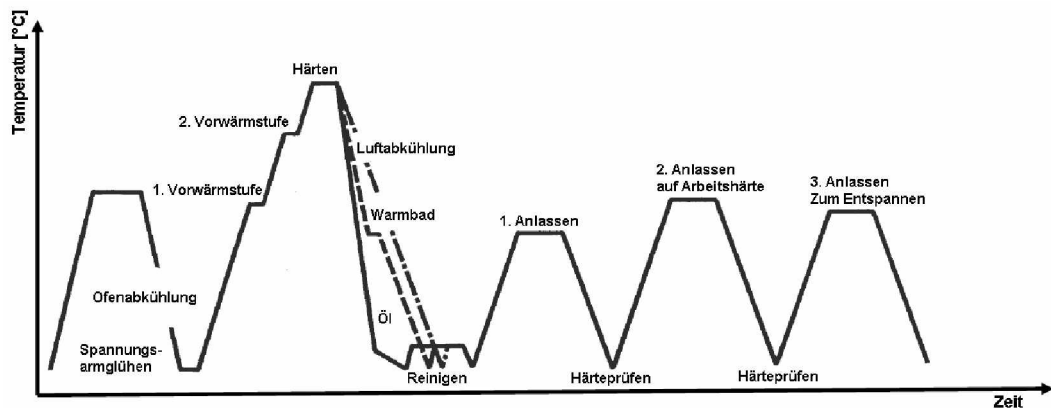


Abbildung 2.6: Wärmebehandlungsschema für den Warmarbeitsstahl Böhler W300 [2].

#### • Härten:

Für niedrig legierte Stähle sind Härtetemperaturen von 830 bis 900°C üblich. Hochlegierte Werkzeugstähle werden zwischen 1000 und 1080°C austenitisiert. Durch die Vorwärmstufen (Abb. 2.6) werden die thermischen Spannungen in den Querschnittübergängen und zwischen dem Rand und dem Kern des Werkstückes reduziert. Die Härtbarkeit wird besonders durch die Austenitisierungsbedingungen beeinflusst. Mit steigender Härtetemperatur wird die Härtbarkeit, die Anlassbeständigkeit erhöht, da es zu einer stärkeren Karbidlösung und somit zu einem umwandlungsträgeren Austenit kommt. Wegen der höheren Temperatur steigt jedoch die Gefahr der Grobkornbildung, die die Zähigkeit verringert. Generell wird bei Werkzeugen mit höheren Zähigkeitsanforderungen, komplizierten Formen und einer geringen Wanddicke niedrige und bei Dickwandigen hohe Härtetemperaturen verwendet [1].

Der Einsatz der verschiedenen Abschreckmittel wie Luft, Öl, Warmbad, Salzbad oder Stickstoff bei der Vakuumhärtung ist abhängig von der verwendeten Stahlsorte. Wird mit einer zu geringen Geschwindigkeit abgekühlt, so können sich voreutektoide Karbidausscheidungen oder Anteile an Bainit im Gefüge ausscheiden. Bei zu hohen Abkühlgeschwindigkeiten besteht die Gefahr von Verzug und Härtenspannungsrissen [1]. Abb. 2.7 zeigt ein Zeit-Temperatur-Umwandlungs Schaubild (ZTU) eines X38CrMoV5-1 Werkzeugstahls. In Abb. 2.8 wird das gehärtete Gefüge eines X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls gezeigt.

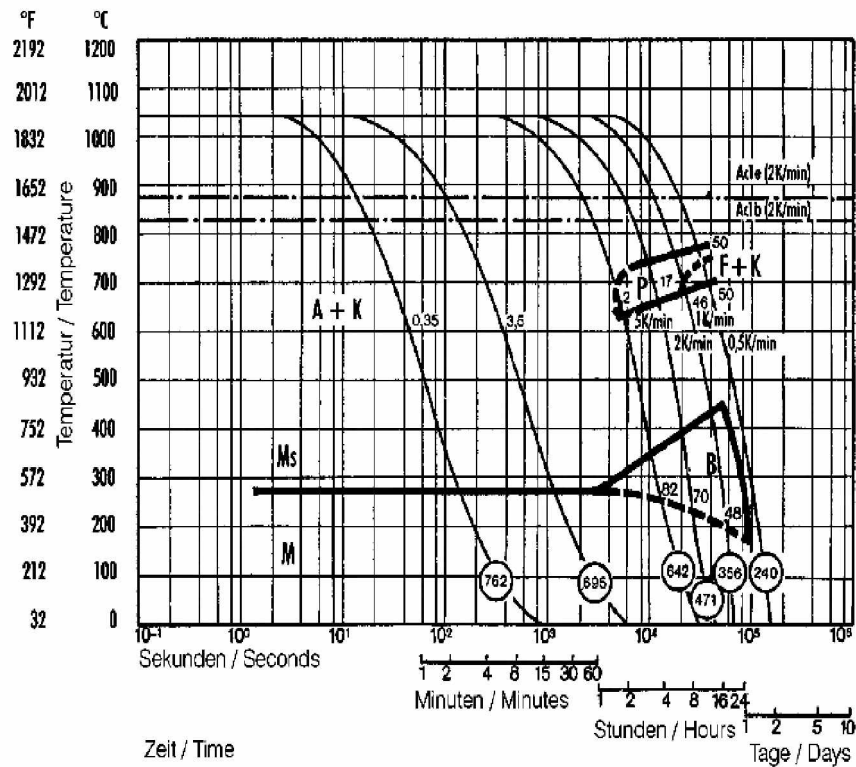


Abbildung 2.7: ZTU-Diagramm eines X38CrMov5-1 Warmarbeitsstahls [2].



Abbildung 2.8: Martensitisches Gefüge eines X38CrMov5-1 Warmarbeitsstahls nach dem Härten mit einem Abkühlparameter  $\lambda = 0,6$  [11].

- **Anlassen:**

Wird ein X38CrMoV5-1 Werkzeugstahl bei Temperaturen von 550 bis 600°C für ein bis zwei Stunden in zwei oder drei Stufen, je nach Legierung und gewünschten Eigenschaften, angelassen, so können sich Sonderkarbide vom Typ  $M_3C$ ,  $MC$ ,  $M_2C$ ,  $M_6C$ ,  $M_{23}C_6$ ,  $M_7C_3$ ,  $M_2N$  und  $MN$  ausscheiden [1].

In Abb. 2.9 wird eine Reihe möglicher Ausscheidungen, die in Werkzeugstählen auftreten können angeführt.

Ausscheidung			Matrix	
			krz	kfz
Fe-X			> 150°C	> 250°C
Fe <sub>2</sub> C	hex	ε-Karbid	+	-
Fe <sub>3</sub> C	orh	Zementit	+	-
Fe <sub>16</sub> N <sub>2</sub>	trz	α <sup>n</sup> -Nitrid	++	-
Fe <sub>4</sub> N	kfz	γ-Nitrid	+	++
M-X			> 450°C	> 600°C
MC	kfz	V, Nb, Ti	+	-
M <sub>3</sub> C	hex	Mo, V	+	-
M <sub>7</sub> C <sub>3</sub>	hex	Cr	-	-
M <sub>23</sub> C <sub>6</sub>	kfz	Cr	-	+
M <sub>6</sub> C	kfz	Mo, W	-	-
MN	kfz	Cr	+	-
MN	hex	Al	-	-
M <sub>3</sub> N	hex	Cr	-	-
M-M			> 450°C	> 700°C
NiAl	krz	B <sub>2</sub> -Phase	++	-
Ni <sub>3</sub> Al	kfz	γ'-Phase	-	++
Ni <sub>3</sub> Ti	hex	η-Phase	-	-
Fe <sub>7</sub> (Mo,W) <sub>6</sub>	rh	μ-Phase	-	-
Fe <sub>2</sub> (Mo,W)	hex	Laves-Phase	-	+
FeCr	tetr	σ-Phase	-	-
Fe <sub>36</sub> Cr <sub>12</sub> Mo <sub>10</sub>	krz	χ-Phase	-	-
(Fe, Ni) <sub>16</sub> Ti <sub>6</sub> Si <sub>7</sub>	kfz	G-Phase	+	-

**Abbildung 2.9:** Ausscheidungen beim Erwärmen abgeschreckter Gefüge. X steht für C, N und M für den Metallanteil. Fe-X und M-X sind Ausscheidungen mit interstitiellen Elementen (Karbid, Nitride) und M-M sind intermetallische Ausscheidungen. (-) inkohärent, (+) teilkohärent und (++) kohärent [5].

Die Diffusion von interstitiellen Atomen (X) verläuft um einiges schneller als die von Gitteratomen (M) und auch im Ferrit oder Martensit schneller als im Austenit. Somit ergeben sich grobe Anhaltstemperaturen für einen spürbaren Ausscheidungseffekt bei einer Halbedauer von ca. einer Stunde [5]. Im Folgenden werden einige Karbide näher beschrieben, wobei nur auf die wichtigsten Ausscheidungen in Werkzeugstählen eingegangen wird [12]:

**M<sub>3</sub>C:** Dieses Karbid ist vom Zementittyp ( $Fe_3C$ ) und besitzt ein orthorhombisches Gitter. M kann für Fe, Mn, Cr mit einer kleinen Menge W, Mo und V stehen.

**M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>:** Hierbei handelt es sich um ein Karbid mit einem kubisch-flächen zentrierten Gitter. Es tritt in hoch Cr-legierten- und in allen Schnellarbeitsstählen auf.  $Cr_{23}C_6$  ist der wichtigste Vertreter dieses Typs. Das Cr kann durch Fe ersetzt werden, um mit W und Mo Karbide zu bilden.

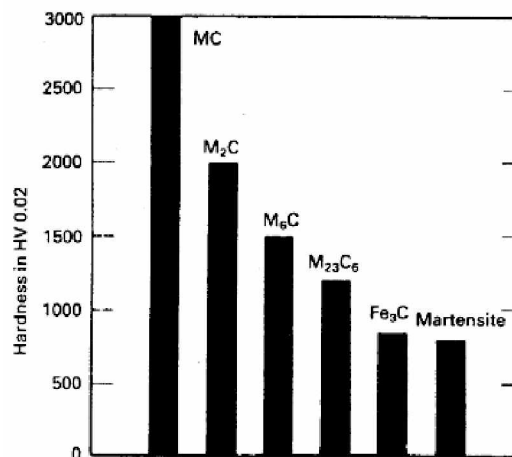
$M_7C_3$ : Hat ein hexagonales Gitter und kommt in Cr-legierten Stählen vor. Es ist hart und gegen Abrasion resistent.  $Cr_7C_3$  ist der wichtigste Vertreter dieses Karbids.

$M_6C$ : Ist ein W- oder Mo- reiches Karbid, das auch geringe Mengen an Cr, V und Co enthalten kann. Es ist ein kubisch-flächen zentriertes Karbid, extrem resistent gegen Abrasion und kommt hauptsächlich in Schnellarbeitsstählen vor.

$M_2C$ : Dieses hexagonale W- oder Mo-Karbid, das eine hohe Härte besitzt, ist vom  $W_2C$ -Typ und entsteht während des Anlassens.

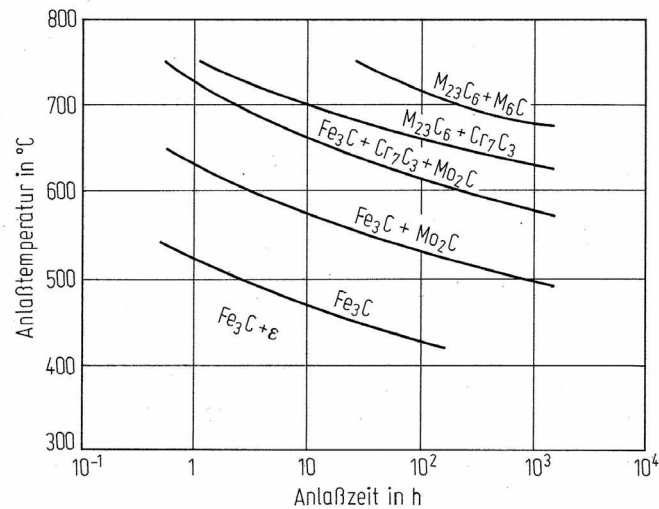
$MC$ : Ist hauptsächlich ein V-Karbid, das bis zu hohen Temperaturen stabil bleibt und somit einen großen Einfluss auf das Sekundärhärtemaximum ausübt.

Die verschiedenen Ausscheidungen haben unterschiedliche Härtewerte, die in Abb. 2.10 dargestellt sind.



**Abbildung 2.10:** Relative Härte von Karbiden, Zementit und Martensit in Werkzeugstählen [12].

Für die Vorhersage des Ausscheidungsverhaltens können experimentell bestimmte Ausscheidungsdiagramme verwendet werden. In Abb. 2.11 wird ein gemessenes Zeit-Temperatur-Ausscheidungs-Diagramm, in dem die Zeiten und Anlasstemperaturen für das Erscheinen und Verschwinden der verschiedenen Karbide zu erkennen sind, eines 10CrMo9-10 Stahls gezeigt [10].

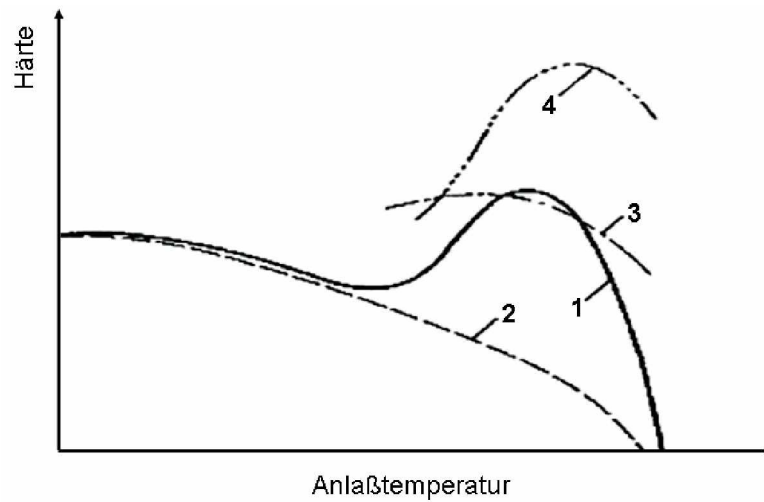


**Abbildung 2.11:** Gemessenes Zeit-Temperatur-Ausscheidungs-Diagramm eines 10CrMo9-10 Stahls [10].

In Abb. 2.12 werden die Vorgänge bei der Bildung des Sekundärhärtemaximums schematisch dargestellt. Beim Anlassen des gehärteten Zustandes kommt es am Anfang zu einem Härteabfall. Dies wird auf die Überführung des tetragonalen Martensits in kubischen Martensit zurück-geführt. Danach steigt die Härte wegen der Sonderkarbidaus-scheidung wieder an. Durch mehrmaliges Anlassen wird der Restaustenit, der bei hohen Härtetemperaturen auftritt, in Martensit umgewandelt und führt zu einem zusätzlichen Härteanstieg [13].

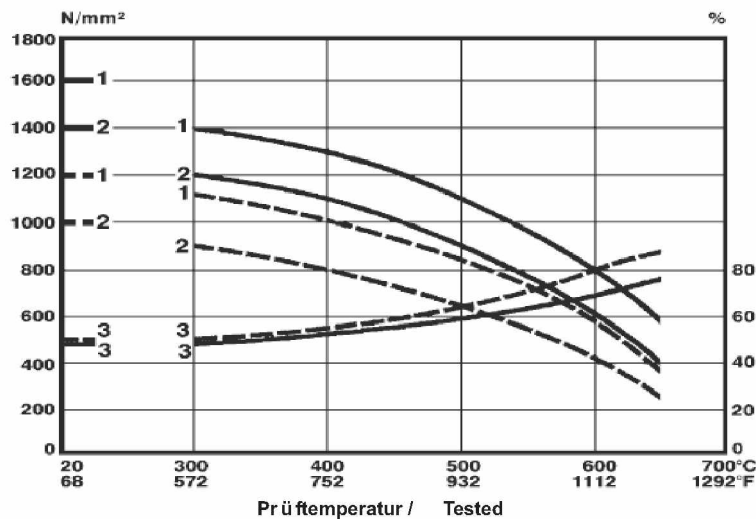
Neben der Festigkeitssteigerung durch kohärente oder teilkohärente Sekundärkarbide tritt noch eine Mischkristallhärtung durch Legierungselemente wie Silizium, Mangan und Kobalt, die keine Karbide bilden, auf. Jedoch können auch karbidbildende Elemente wie Wolfram, Chrom, Molybdän und Vanadium zur Mischkristallhärtung beitragen, sofern sie nicht in Ausscheidungen involviert sind. Mit steigender Anlasstemperatur verringert sich die Härte wegen der erhöhten Diffusion im Metallgitter und der besseren Beweglichkeit der Versetzungen. Nach dem Sekundärhärtemaximum fällt die Härte wieder ab, da bei höheren Temperaturen ein Vergrößerungsprozess einsetzt [13].





**Abbildung 2.12:** Vorgänge bei der Bildung des Sekundärhärtemaximums eines Warmarbeitsstahls. 1) Anlasskurve, 2) Entspannung des Martensits, 3) Ausscheidung von Sonderkarbiden, 4) Umwandlung von Restaustenit in Martensit [14].

Der Einfluss der Anlasstemperatur auf die Härte und Zähigkeit wird in Abbildung 2.13 gezeigt. Mit steigender Temperatur verringert sich die Härte, jedoch steigt die Streckgrenze und Brucheinschnürung an.



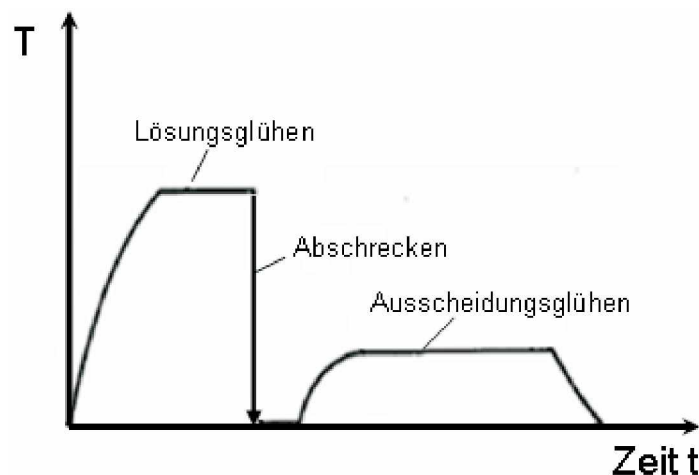
**Abbildung 2.13:** Einfluss der Anlasstemperatur auf die Zugfestigkeit (1), Streckgrenze  $R_{p0,2}$  (2) und der Brucheinschnürung (3) (gestrichelt= vergütet  $1200N/mm^2$ ), durchgehend= vergütet  $1600N/mm^2$  [2].

Um die benötigten Eigenschaften (Kap. 2.1) der Warmarbeitsstähle einstellen zu können, werden bestimmte Legierungselemente, die während einer Wärmebehandlung durch Aus-

scheidungsvorgänge Sonderkarbide bilden, verwendet. Im nachfolgenden Kapitel werden die Grundlagen der Ausscheidungsvorgänge näher beschrieben.

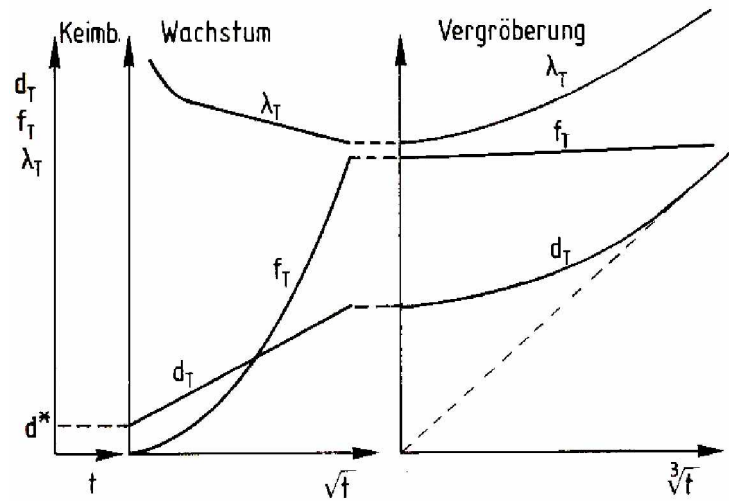
## 2.4 Theorie der Ausscheidungsbildung

In legierten Stählen können sich Phasen wie z.B. intermetallische Phasen,  $\sigma$ -Phase und Sonderkarbide, die sich bei hohen Temperaturen im Austenit aber auch bei niedrigen Temperaturen im Ferrit bilden, ausscheiden. Diese Ausscheidungsumwandlungen bzw. Aushärtungsumwandlungen finden in Legierungen statt, die in einem homogenen Mischkristallgebiet lösungsgeglüht werden und bei der Abkühlung in ein Mehrphasengebiet hineinlaufen. Durch die schnelle Abkühlung wird die Ausbildung eines Phasengleichgewichtes unterdrückt und schafft mit einem Mischkristall (MK), der an Legierungselementen übersättigt ist, eine treibende Kraft für gezielte Ausscheidung bei der nachfolgenden Aushärtungsglühung (Auslagern), Abb. 2.14. Beim Warmauslagern wird der übersättigte Mischkristall auf eine Temperatur unterhalb der Phasengrenzlinie  $\alpha - \alpha + \beta$  gebracht. Dies führt zu einer Bildung von feinen Ausscheidungen, da die Diffusionsprozesse wegen der nicht zu hohen Temperatur nur langsam ablaufen und die Diffusionswege kurz gehalten werden. Es bilden sich wegen der hohen Übersättigung des Mischkristalls viele Keime, die zu metastabilen oder stabilen Ausscheidungsphasen führen können [10, 15, 16].



**Abbildung 2.14:** Schematische Darstellung der Wärmebehandlung für die Ausscheidungsumwandlung [16].

Bei Ausscheidungsgefügen ist die Zahl, Größe, Form und Verteilung der Teilchen von großem Interesse. Die Ausscheidungsmorphologie kann sich während der Keimbildung oder der spinodalen Entmischung (spontane Entmischung) bilden und ändert sich während des Wachstums und der Vergrößerung der Teilchen [10, 17]. In Abb. 2.15 wird die Abhängigkeit des Ausscheidungsvolumenanteils  $f_T$ , -durchmessers  $d_T$  und -abstandes  $\lambda_T$  in den drei Stadien Keimbildung, Wachstum und Vergrößerung über die Zeit dargestellt.



**Abbildung 2.15:** Zeitlicher Verlauf der Teilchengröße, des -abstandes und des -volumenanteils bei der Keimbildung, dem Keimwachstum und der Vergrößerung [18].

In der Inkubationszeit bilden sich Keime der kritischen Grösse  $d^*$ , die danach nach dem  $\sqrt{t}$ -Gesetz wachsen. Im Bereich der Vergrößerung, Ostwald-Reifung, wachsen die Teilchen nach einem  $\sqrt[3]{t}$ -Gesetz [15].

### 2.4.1 Homogene Keimbildung

Die Änderung der gesamten freien Enthalpie  $\Delta G_{ges}$  ist die thermodynamische Triebkraft für die Ausscheidungsvorgänge. Damit sich Ausscheidungen bilden, muss die  $\Delta G_{ges}$  negativ werden. Für die Änderung der gesamten freien Enthalpie  $\Delta G_{ges}$  gilt allgemein:

$$\Delta G_{ges} = -\Delta G_{Vol} + \Delta G_{Grenz} + \Delta G_{Dehn} - \Delta G_{Def}. \quad (2.1)$$

- $\Delta G_{Vol}$  ist die freie Bildungsenthalpie (freie Volumenenthalpie) und muss negativ sein, da sie die entscheidende treibende Kraft für die Ausscheidungsbildung ist. Bei der Löslichkeitstemperatur  $T_l$  einer bestimmten Legierung ist  $\Delta G_{Vol} = 0$ . Dies bedeutet, dass der Mischkristall gesättigt ist. Wird die Temperatur gesenkt, so steigt die Übersättigung des Mischkristalls und  $\Delta G_{Vol}$  wird stärker negativ [15].

- $\Delta G_{Grenz}$  ist die freie Enthalpie der Phasengrenzfläche zwischen Matrix und Ausscheidung. Sie ist immer ein positiver Energieterm, deren Höhe immer von der chemischen Ähnlichkeit Teilchen-Matrix und der Gitterpassung an der Grenzfläche abhängig ist. Entscheidend für  $\Delta G_{Grenz}$  ist die Phasengrenzflächenenthalpie  $\Delta H_{Grenz}$ , die in der Reihenfolge kohärente, teilkohärente und inkohärente Phasengrenzfläche größer wird. Bei kohärenten Ausscheidungen gehen die Kristalle entlang der Phasengrenzfläche störungsfrei ineinander über und das Matrixgitter wird kontinuierlich in der Ausscheidung fortgesetzt. Die Phasen haben leicht unterschiedliche Gitterparameter, die zu leichten elastischen Ver-

zerrungen führen. Bei großen Gitterparameterunterschieden kann der Einbau von Stufenversetzungen zu einer Verringerung der Verzerrungen führen. Hierbei handelt es sich um eine teilkohärente Grenzfläche, bei der die meisten Gitterebenen in der Ausscheidung weitergehen. Sind zwei Phasen in ihrer Kristallstruktur sehr unterschiedlich, so erhält man eine inkohärente Grenzfläche. Die Energie einer kohärenten Grenzfläche ist im allgemeinen viel kleiner als bei einer Inkohärenten [15, 17].

- $\Delta G_{Dehn}$  ist die freie Gitterverzerrungsenthalpie. Bei Umwandlungen im Festkörper ändert sich das spezifische Volumen und daher kommt es durch Ausscheidungen zu Verzerrungen in der Matrix. Durch eingebaute Versetzungen in der Grenzfläche kann die Gitterverzerrungsenthalpie gesenkt werden. Die Passung wird durch eine kohärente, teilkohärente oder inkohärente Grenzfläche unterschiedlich beeinflusst und wird durch den Fehlpassungsparameter (Misfit-Parameter)  $\delta$  (Glg. 2.29) ausgedrückt. In Abbildung 2.16 wird der Aufbau der Phasengrenzfläche Teilchen/Matrix, Verzerrungsenthalpie und Phasengrenzflächenenthalpie in Abhängigkeit vom Misfit-Parameter gezeigt:

$$\delta = \frac{a_T - a_M}{\frac{1}{2}(a_M + a_T)} \approx \frac{\Delta a}{a_M} \cdot 100\%. \quad (2.2)$$

$a_M$  ist der Gitterabstand der Matrix in der betrachteten Ebene und  $a_T$  der Gitterabstand des Teilchens in der betrachteten Ebene.

Fehlpassungsparameter $ \delta $	Grenzflächentyp	Verzerrungsenthalpie	Phasengrenzflächenenthalpie
0	perfekt kohärent	0	
< ca. 5 %	kohärent (keine oder sehr wenige Fehlpassungsversetzungen)	$\Delta g_{Dehn} \sim \delta^2$	gering $\gamma_{Ph} < 200 \text{ mJ/m}^2$
5 % < $ \delta $ < 25 %	semikohärent (Einbau von Fehlpassungsversetzungen)	sehr gering	mittel $\gamma_{Ph} \approx 200 \dots 500 \text{ mJ/m}^2$
> ca. 25 % oder ungleiche Atombelegung in der kristallograph. Ebene	inkohärent	$\Delta g_{Dehn} \sim (\Delta V)^2$	hoch $\gamma_{Ph} \approx 500 \dots 1000 \text{ mJ/m}^2$

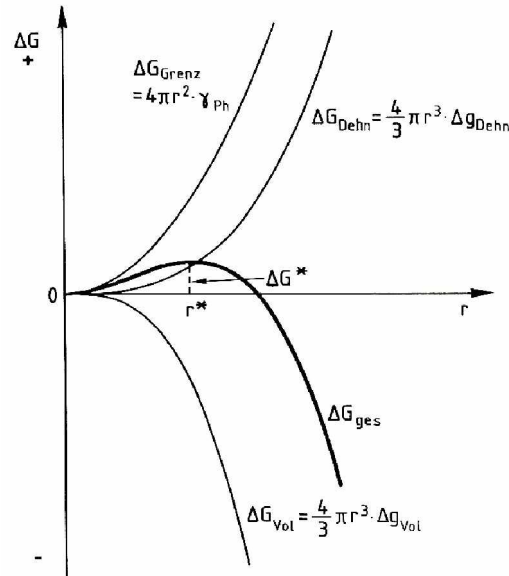
**Abbildung 2.16:** Aufbau der Phasengrenzfläche Teilchen/Matrix, Verzerrungsenthalpie und Phasengrenzflächenenthalpie in Abhängigkeit vom Misfit-Parameter [15].

$\Delta G_{Def}$ , die Einsparung freier Enthalpie bei der Keimbildung der Ausscheidungen an Gitterdefekten im Vergleich zu homogener Keimbildung, wird erst bei der heterogenen Keimbildung benötigt.

Der Verlauf von  $\Delta G_{ges}$ ,  $\Delta G_{Vol}$ ,  $\Delta G_{Grenz}$  und  $\Delta G_{Dehn}$  in Abhängigkeit vom Teilchenradius bei der Keimbildung kugelförmiger Ausscheidungen wird in Abb. 2.17 gezeigt. Für die Änderung der gesamten freien Enthalpie  $\Delta G_{ges}$  bei der homogenen Keimbildung in einem Festkörper ergibt sich [15]:

$$\Delta G_{ges} = \frac{4\pi r^3}{3} \cdot (\Delta g_{Vol} + \Delta g_{Dehn}) + 4\pi r^2 \cdot \gamma_{Ph}. \quad (2.3)$$

$\Delta g_{Vol}$  ist die spezifische freie Volumenenthalpie [ $J/m^3$ ] (auf Einheitsvolumen der Ausscheidungen bezogen),  $\Delta g_{Dehn}$  die spezifische freie Gitterverzerrungsenthalpie [ $J/m^3$ ] (auf Einheitsvolumen der Ausscheidungen bezogen) und  $\gamma_{Ph}$  die spezifische freie Phasengrenzfläche zwischen Teilchen und Matrix [ $J/m^2$ ] (auf Einheitsfläche bezogen).



**Abbildung 2.17:** Änderung der Anteile der freien Enthalpie mit dem Teilchenradius bei der Keimbildung kugelförmiger Ausscheidungen [15].

$\Delta G_{ges}$  verläuft am Anfang noch im positiven Bereich. Wegen der thermischen Fluktuation der Atome kommt es ab einem kritischen Keimradius  $r^*$  zur Bildung eines stabilen Keimes. Die Keimbildungsrate (Anzahl der gebildeten Keime pro Zeit)  $\dot{N}$  ergibt sich zu:

$$\dot{N} \sim \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{RT}\right). \quad (2.4)$$

Der kritische Keimbildungsradius  $r^*$  und die freie Aktivierungsenthalpie  $\Delta G^*$  sind mit der freien Volumenenthalpie  $\Delta G_{Vol}$  bzw.  $\Delta g_{Vol}$  verknüpft. Dies geht aus der ersten Ableitung von Glg. 2.3 hervor. Der kritische Keimradius ist durch das Maximum der  $\Delta G_{ges}$  Kurve gegeben. Aus

$$\frac{d(\Delta G_{ges})}{dr} = 0 \quad (2.5)$$

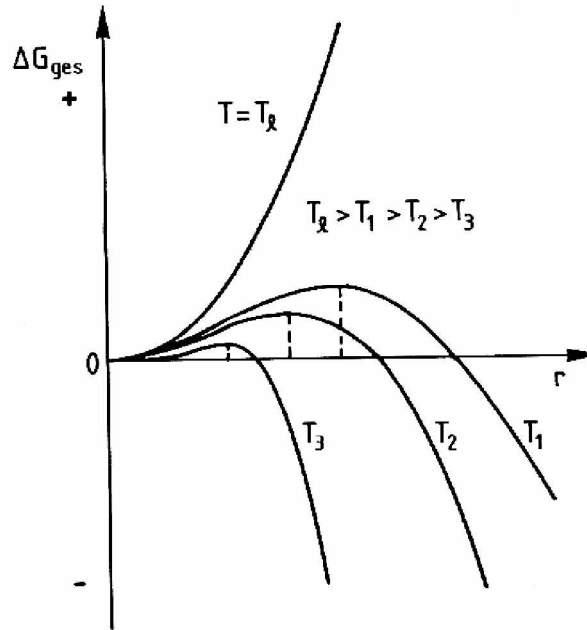
folgt:

$$r^* = \frac{2\gamma_{Ph}}{\Delta g_{Vol} + \Delta g_{Dehn}} \quad (2.6)$$

und

$$\Delta G^* = \frac{16\pi\gamma_{Ph}^3}{(\Delta g_{Vol} + \Delta g_{Dehn})^2}. \quad (2.7)$$

Mit sinkender Temperatur wird die freie Volumenenthalpie wegen der steigenden Übersättigung stärker negativ. Somit wird  $r^*$  und  $\Delta G^*$  kleiner, Abb. 2.18.



**Abbildung 2.18:** Änderung der gesamten freien Enthalpie mit dem Ausscheidungsradius in Abhängigkeit von der Temperatur.  $T_l$  ist die Löslichkeitstemperatur für eine bestimmte Konzentration [15].

Für die Keimbildung bei einer Phasenumwandlung ist immer eine Unterkühlung bzw. Übersättigung nötig. Mit höherer Temperaturdifferenz steigt die treibende Kraft für die Umwandlung. Die Keimbildungsrate ergibt sich zu:

$$\dot{N} \sim \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{RT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G_D}{RT}\right). \quad (2.8)$$

$\Delta G_D$  ist die freie Aktivierungsenthalpie der Diffusion. Nahe der Löslichkeitstemperatur ist die Keimbildungsrate sehr gering. Abb. 2.19 zeigt den Verlauf der Keimbildungsrate in Abhängigkeit von der Temperatur und der Zusammensetzung. Bei niedrigen Gehalten an gelösten Fremdatomen setzt die Keimbildung erst bei niedrigeren Temperaturen ein und  $\dot{N}$  ist geringer.

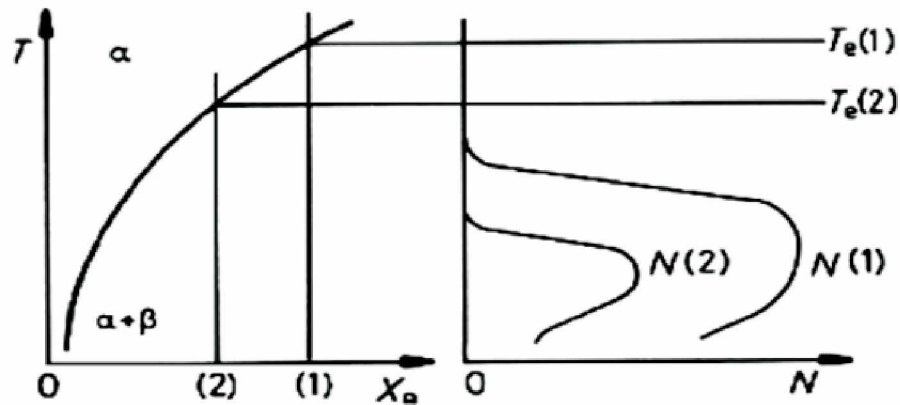


Abbildung 2.19: Keimbildungsrate in Abhängigkeit von der Temperatur und Zusammensetzung [19].

## 2.4.2 Heterogene Keimbildung

In übersättigten Mischkristallen findet die Keimbildung häufig heterogen an Gitterfehlstellen statt. In Abb. 2.20 sind die möglichen Keimstellen für die heterogene Ausscheidungskeimbildung dargestellt. Bei der heterogenen Keimbildung wird im Vergleich zur homogenen Keimbildung Energie eingespart, da an den Fehlstellen bereits eine Verzerrungs-, Grenzflächen-, oder Oberflächenenthalpie vorliegt. Somit ist die Keimbildungsrate für die heterogene Keimbildung bei gleicher Temperatur höher als für die homogene Keimbildung. Für die Änderung der gesamten freien Enthalpie gilt Glg. 2.1. Für  $\Delta G_{Def}$  gilt [15]:

$$\Delta G_{Def} = \Delta G_{het} - \Delta G_{hom} < 0. \quad (2.9)$$

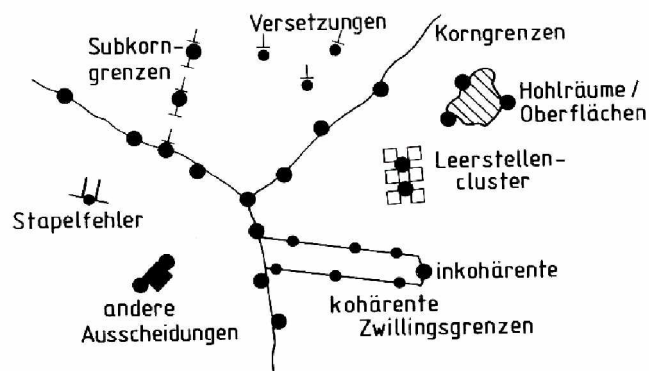
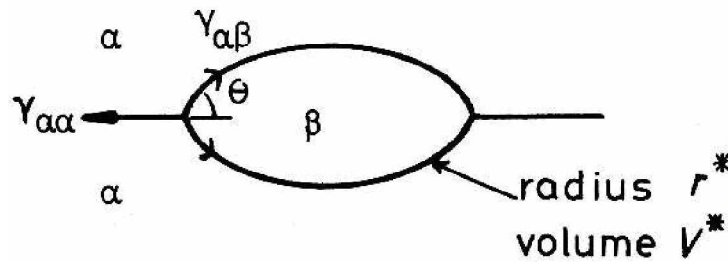


Abbildung 2.20: Gitterfehlstellen für die heterogene Ausscheidungskeimbildung [15].

An den Fehlstellen läuft die Diffusion schneller ab als im ungestörten Gitter und somit wird die Keimbildung und das Ausscheidungswachstum beschleunigt. Die wichtigsten Defekte für die Ausscheidungskeimbildung sind [19]:

• **Korngrenzen:** Die Keimbildung an Korngrenzen führt zu einer Einsparung an Grenzflächenenergie. Dies führt zu einer Erhöhung der Keimbildungsrate, da die Oberflächenenergie den  $\gamma_{Ph}$ -Term in Glg. 2.3 erniedrigt. Die energetisch günstigste Form für einen inkohärenten Korngrenzenkeim ist die Linsenform mit einem Benetzungswinkel  $\theta$  (Abb. 2.21).

$$\cos \theta = \gamma_{\alpha\alpha} / 2\gamma_{\alpha\beta}. \quad (2.10)$$



**Abbildung 2.21:** Linsenförmiger Keim (Grenzflächenenergie  $\gamma_{\alpha\beta}$ ) mit Krümmungsradius  $r^*$  an einer Korngrenze (Grenzflächenenergie  $\gamma_{\alpha\alpha}$ ) mit einem kritischen Volumen  $V^*$  [19].

Der kritische Radius ist unabhängig von der Korngrenze und ergibt sich zu:

$$r^* = \frac{2\gamma_{\alpha\beta}}{\Delta G_{Vol}}. \quad (2.11)$$

Für die heterogene Keimbildungsschwelle (Glg. 2.12) gilt:

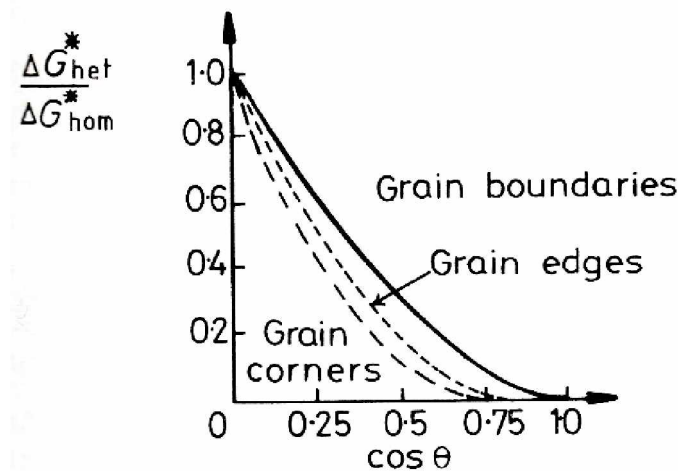
$$\frac{\Delta G_{het}^*}{\Delta G_{hom}^*} = \frac{\Delta V_{het}^*}{\Delta V_{hom}^*} = S(\theta) \quad (2.12)$$

Der Formfaktor  $S(\theta)$  ergibt sich aus Glg. 2.13:

$$S(\theta) = \frac{1}{2}(2 + \cos \theta)(1 - \cos \theta)^2 \quad (2.13)$$

Bei inkohärenten Ausscheidungen ist die Keimbildungsrate an (Großwinkel-) Korngrenzen größer als an allen übrigen Defekten, und daher hängen die Dichte und die Verteilung der Ausscheidungen stark von der Kornstruktur ab. Die Keimbildung tritt am leichtesten an Stellen auf, wo vier Körner zusammenstoßen (corner). Bei der Schnittkante von drei Körnern (edge) und an der Grenzfläche zweier Körner (boundary) erhöht sich die Aktivierungsenergie für die heterogene Keimbildung, Abb. 2.22.





**Abbildung 2.22:** Aktivierungsenergie für verschiedene Arten von Korngrenzennukleation im Verhältnis zur homogenen Keimbildung in Abhängigkeit des Kosinus des Kontaktwinkels [20].

- Versetzungen:** Die Gitterverzerrung der Versetzungen kann die Keimbildung auf verschiedene Arten erleichtern. Ein Mechanismus basiert darauf, dass das Spannungsfeld einer Versetzung mit einer Ausscheidung wechselwirkt und sich die Verzerrungsenergie verringert. Nachdem sich Fremdatome in den elastisch verzerrten Bereichen um Versetzungen bevorzugt anlagern, kann es dort schon vor Beginn der Ausscheidung zu einer erhöhten Konzentration der Fremdatome kommen, was die Diffusionswege verkürzt und erneut die Keimbildung beschleunigt. Ein kohärenter Keim, dessen Volumen kleiner ist als das der Matrix, kann sich im Druckspannungsfeld oberhalb der Versetzung niederlassen. Ist das Volumen größer, so wird das Zugspannungsfeld unterhalb der Versetzung bevorzugt. Ein anderer Mechanismus basiert auf der Aufspaltung von Versetzungen. In kfz-Metallen kann sich eine Versetzung in sogenannte (Shockley-) Partialversetzungen aufspalten. Auf diese Weise wird ein Stapelfehler erzeugt. Durch die Änderung der Stapelfolge sind auf diese Weise vier Ebenen eines hdp-Kristalls entstanden. Diese können nun für Ausscheidungen, die hexagonal kristallisieren, als Keimbildungsstelle fungieren. Dadurch ist gleichzeitig ein Orientierungszusammenhang zwischen Ausscheidung und Matrix geschaffen worden, der eine gute Passung sowie eine niedrige Grenzflächenenergie bewirkt.

- Leerstellen:** Die Leerstellenkonzentration steigt exponentiell mit der Temperatur an. Wird eine Legierung von hoher Temperatur abgeschreckt, so verbleiben Leerstellen zwangsgelöst. Diese werden Überschussleerstellen genannt und können die Keimbildung erleichtern, indem sie die Diffusionsrate erhöhen oder die durch Passungsfehler verursachte Verzerrungsenergie erniedrigen. Als Leerstellencluster können sie die Ausscheidung initiieren.

### 2.4.3 Wachstumskinetik von Ausscheidungen

Nach der Bildung stabiler Keime im übersättigten Mischkristall beginnen diese zu wachsen, bis sich beide Phasen in ihrer Gleichgewichtskonzentration befinden. Das Ausschei-

ungswachstum ist ein diffusionsgesteuerter Mechanismus. Der aus einer binären Legierung AB ausgeschiedene Bruchteil an B ergibt sich zu [17, 21]:

$$X(t) \equiv \frac{(c_0 - \bar{c}_B)}{(c_0 - c'_B)} \quad (2.14)$$

Hier ist  $c_0$  die Ausgangskonzentration der Matrix B,  $c'_B$  die Konzentration im Gleichgewicht zwischen Matrix und Ausscheidung und  $\bar{c}_B$  die mittlere Konzentration der Matrix. Zur Vereinfachung wird eine kugelige Ausscheidung angenommen, ohne dabei die Verzerrungs- und Grenzflächenenergie zu berücksichtigen. Der Materiestrom durch die Grenzfläche der Ausscheidung ergibt eine zeitliche Änderung der Konzentration der B-Atome in der Matrix nach der Glg.:

$$\frac{4\pi R^3}{3} \frac{d\bar{c}_B}{dt} = j_B(r_0) \cdot 4\pi r_0^2, \quad (2.15)$$

wobei  $R$  den Einzugsbereich eines Teilchens und  $r_0(t)$  den Teilchenradius angibt. Die mittlere Konzentration der Matrix  $\bar{c}_B$  ändert sich mit der Zeit  $t$ , da ein Strom von B-Atomen  $j_B$  in die Ausscheidungen vom Radius  $r_0$  abfließt. Ändert sich das Konzentrationsprofil vor der Grenzfläche des Teilchens bei wachsendem Ausscheidungsradius  $r_0(t)$  mit der Zeit nicht, dann muss  $c_B(r)$  die zeitunabhängige Diffusionsgleichung 2.16 erfüllen.

$$c_B = c_0 - (c_0 - c'_B) \cdot \frac{r_0}{r} \quad (2.16)$$

Der Diffusionsstrom ergibt sich somit zu:

$$j_B(r_0) = -\tilde{D}_B \frac{\partial c_B}{\partial r} \Big|_{r_0} = -\tilde{D}_B \frac{c_0 - c'_B}{r_0} \quad (2.17)$$

Wird noch der Erhaltungssatz für die B-Atome berücksichtigt

$$\frac{4\pi R^3}{3} (c_0 - \bar{c}_B) = \frac{4\pi}{3} c_K r_0^3, \quad (2.18)$$

wobei  $c_K$  die B-Konzentration in der Ausscheidung ist, kann aus den Gln. 2.15 und 2.17  $r_0$  gekürzt werden zu:

$$\frac{d\bar{c}_B}{dt} = -(c_0 - \bar{c}_B)^{\frac{1}{3}} \left( \frac{c_0 - c'_B}{\tau^{\frac{3}{2}}} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (2.19)$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{3\tilde{D}_B (c_0 - c'_B)^{\frac{1}{3}}}{c_K^{\frac{1}{3}} R^2} \quad (2.20)$$

Mittels Integration erhält man das Wachstumsgesetz für kleine Zeiten ( $X < 0,2$ )

$$(c_0 - \bar{c}_B) = \left( \frac{2t}{3\tau} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot (c_0 - c'_B) \quad (2.21)$$

oder

$$X(t) = \left( \frac{2t}{3\tau} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (2.22)$$

Für lange Zeiten ( $X > 0,9$ ) gilt dieses Gesetz nicht mehr, da sich die Einzugsbereiche der gewachsenen Ausscheidungen überlappen und diese um die verbleibenden überschüssigen B-Atome konkurrieren. Nach C. Wert, C. Zener und F. Ham [17, 21] gilt:

$$X(t) = 1 - 2 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (2.23)$$

Die Zeitkonstante  $\tau$  ist gegeben durch die Diffusionskonstante:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{3D_B(c_0 - \hat{c}_B)^{\frac{1}{3}}}{c_K^{\frac{1}{3}}R^2} \quad (2.24)$$

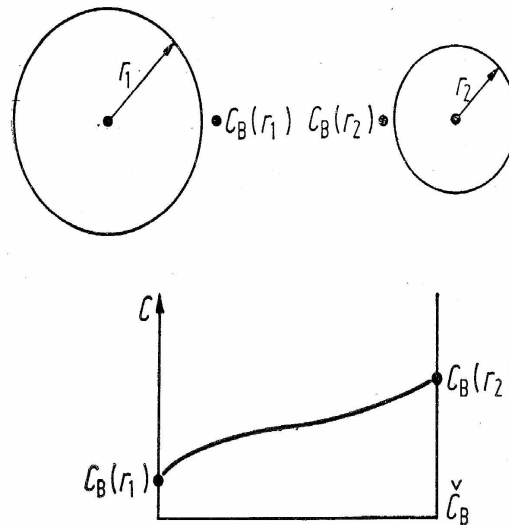
#### 2.4.4 Ostwald-Reifung

Während der Wärmebehandlung kann die optimale Art, Menge, Größe, Verteilung und Form der Ausscheidungen eingestellt werden. Am Ende des Keimwachstums hat sich die Gleichgewichtskonzentration eingestellt, jedoch lösen sich kleine Teilchen auf und große wachsen, da das Gefüge nicht im Gleichgewicht vorliegt. Durch die Teilchenvergrößerung, Ostwald-Reifung, wird die Gesamtgrenzflächenenergie vermindert, wenn die vielen feinen Ausscheidungen wenige grosse Teilchen bilden. Ob eine Ausscheidung wächst oder sich auflöst ist vom chemischen Potential abhängig, das bei kugelförmigen Teilchen durch die Krümmung der Oberfläche gegeben ist. Somit entsteht zwischen zwei Teilchen mit den Radien  $r_1$  und  $r_2$  eine chemische Potentialdifferenz  $\Delta\mu_P$  nach der Gibbs-Thomson Gleichung zu

$$\Delta\mu_P = 2\gamma_{\alpha\beta}\Omega\left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2}\right) = kT\frac{\Delta c_B}{\hat{c}_B}. \quad (2.25)$$

$\gamma_{\alpha\beta}$  ist die Grenzflächenenergie,  $\Omega$  das Atomvolumen,  $r_1$  und  $r_2$  die Teilchenradien und  $\hat{c}_B$  die Gleichgewichtskonzentration bei ebener Phasengrenzfläche. Daher entsteht aus der Potentialdifferenz ein Konzentrationsunterschied zwischen den Teilchen in der Matrix (Gleichung 2.26), der zu einem Diffusionsstrom vom kleinerem zum grösseren Teilchen führt (Abb. 2.23). In Folge dessen wachsen größere Teilchen, während sich die kleineren auflösen, solange bis  $c_B$  gleich  $\hat{c}_B$  ist [17, 21].

$$\Delta c_B = c_B(r_1) - c_B(r_2) \quad (2.26)$$



**Abbildung 2.23:** Schematischer Verlauf der Konzentration zwischen zwei Ausscheidungen mit unterschiedlichen Radien [17].

Das Gesetz für die Umlösung von Ausscheidungen wird von Lifshitz-Slyozov- Wagner wie folgt beschrieben

$$\bar{r}^3 - r_0^3 \approx \frac{D_B \bar{E}_{\alpha\beta} \check{c}_B \Omega^2}{kT} t \quad (2.27)$$

mit einem Anfangsradius der Teilchen  $r_0$ . In diesem Modell werden keine Verzerrungen berücksichtigt und die Teilchen als kugelförmig angenommen. Bei starken Verzerrungen, zum Beispiel in plattenförmigen Ausscheidungen, können diese das Teilchen gegen Ostwald- Reifung stabilisieren, jedoch bleibt der grundlegende Zusammenhang  $r \sim t^{\frac{1}{3}}$  erhalten [17, 21].

## 2.4.5 Mechanismen der Ausscheidungshärtung

Eine der wichtigsten Methoden zur Steigerung der Festigkeit von metallischen Werkstoffen ist die Ausscheidungshärtung. Die Ausscheidungen, deren Form, Art und Verteilung von der Wärmebehandlung abhängt, stellen Hindernisse für die Versetzungsbewegung dar. Inkohärente Ausscheidungen sind für Versetzungen unüberwindbar und können somit nur durch bestimmte Mechanismen der Versetzungsbewegung umgangen werden. Bei kohärenten und teilkohärenten Ausscheidungen setzen sich die kristallographischen Ebenen und Richtungen der Matrix in der Ausscheidung fort, d.h. Versetzungen können sich durch die Ausscheidungen hindurchbewegen (schneiden). Nachfolgend werden die Mechanismen des Härtens näher beschrieben:

- **Parelastische Wechselwirkung:**

Wird durch die unterschiedliche Atomgröße der Fremdatome der Ausscheidungen und der Matrixatome hervorgerufen. Das Verzerrungsfeld rund um die Ausscheidung tritt in

Wechselwirkung mit dem Spannungsfeld einer Stufenversetzung. Hierbei wirkt eine anziehende bzw. abstoßende Kraft zwischen dem Spannungsfeld größerer Fremdatome und dem Zugspannungsbereich bzw. Druckspannungsbereich der Versetzungen. Kleinere Atome hingegen wirken auf die Zugspannungsbereiche abstoßend und auf die Druckbereiche anziehend. Will sich die Versetzung nun weiterbewegen, so muss ein zusätzlicher Kraftaufwand erfolgen. Die rücktreibende Kraft auf die Versetzungen ergibt sich zu [15, 17, 21]:

$$F_{max}^p = G \cdot r \cdot b \cdot |\delta| \quad (2.28)$$

Somit steigt die parelastische Kraft  $F_{max}^p$  mit steigender Teilchengröße.  $G$  ist der Schubmodul,  $b$  der Burgersvektor und  $\delta$  der Misfit des Fremdatoms, der wie folgt definiert ist:

$$\delta = \frac{1}{c} \frac{a_L}{a_M}, \quad (2.29)$$

wobei  $c$  die Konzentration des Legierungselementes ist,  $a_L$  der Gitterparameter der Legierung und  $a_M$  des Reinmetalls. Zwischen Schraubenversetzungen und Ausscheidungen gibt es nur eine geringe Wechselwirkung, da deren elastische Verzerrung nur Scher- und keine Zug- und Druckspannungen enthält.

• **Diastische Wechselwirkung aufgrund lokaler Schubmoduländerung:**

Die Bindungskräfte im Gitter werden durch Fremdatome verändert, wodurch es zu einer Änderung des Schubmoduls kommt. Da die elastische Verzerrungsenthalpie einer Versetzung vom Schubmodul abhängig ist  $U_e \sim G$ , wird eine Versetzung von einem Fremdatom angezogen oder abgestoßen wenn ein geringerer oder höherer Schubmodul als in der Matrix herrscht. Auch hier ist ein erhöhter Kraftaufwand nötig, um die Versetzungen zu bewegen. Für die diastische Wechselwirkung gilt [15, 17, 21]:

$$F_{max}^d = G \cdot b^2 \cdot |\eta|, \quad (2.30)$$

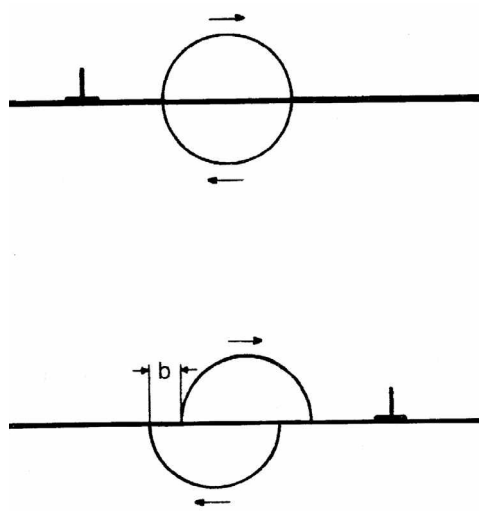
wobei  $\eta$  der Modulparameter (typische Werte:  $\eta \approx 0,5..1$ ) ist und wie folgt beschrieben wird

$$\eta = \frac{1}{c} \frac{G_L - G_M}{G_M}. \quad (2.31)$$

mit  $G_L$  als Schubmodul der Legierung und  $G_M$  als Schubmodul des Reinmetalls. Dieser Mechanismus tritt bei Stufen- und Schraubenversetzungen auf und aus diesem Grund hat er einen stärkeren Härteeffekt als der parelastische Mechanismus.

• **Chemische Härtung:**

Bewegt sich eine Versetzung durch eine Ausscheidung, dann wird diese geschnitten und es kommt zu einer Abscherung, die dem Burgersvektor entspricht, Abb. 2.24.



**Abbildung 2.24:** Schematische Darstellung einer Abscherung um den Burgersvektor  $b$  eines Teilchens durch eine Versetzung [17].

Durch diese Abscherung entsteht eine zusätzliche Phasengrenzfläche, die zu einer Erhöhung der Grenzflächenenergie führt. Diese zusätzliche Energie muss beim Schneiden eines Teilchens durch die angelegte Spannung aufgebracht werden. Somit ergibt sich für die abstoßende Kraft  $F^S$  auf die Versetzung Glg 2.32 [17]:

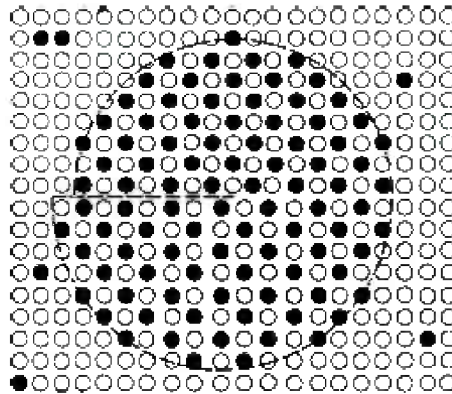
$$F^S = \gamma_p \cdot r. \quad (2.32)$$

$F^S$  ist abhängig von der Grenzflächenenergie  $\gamma_p$ , somit vom Umfang, und von einem Geometriefaktor  $r$ . Dieser Mechanismus trägt nur bei Ausscheidungen kleiner Größe entscheidend zur Festigkeitssteigerung bei.

• **Ordnungshärtung:**

Wird eine geordnete Ausscheidung durch eine Versetzung geschnitten, so wird beim Schneiden entlang der Gleitebene die Ordnung zerstört und eine Antiphasengrenze erzeugt (Abb. 2.25). Die Wechselwirkungskraft entspricht der Energie der Antiphasengrenze  $\gamma_{APB}$ , die aufgebracht werden muss [17]:

$$F^{APB} = \gamma_{APB} \cdot r. \quad (2.33)$$



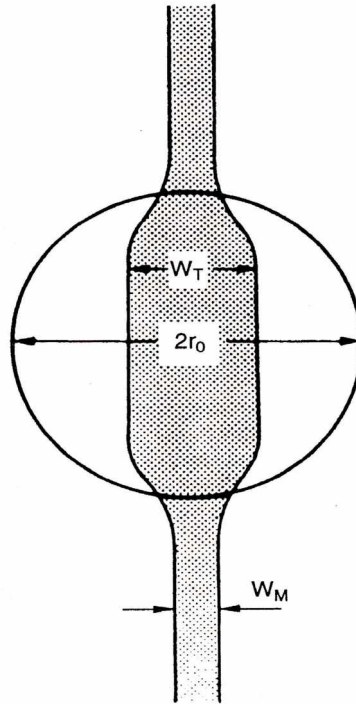
**Abbildung 2.25:** Entstehung einer Antiphasengrenze beim Schneiden eines geordneten Teilchens [21].

• **Stapelfehlerhärtung:**

Gibt es Unterschiede in der Stapelfehlerenergie zwischen der Matrix  $\gamma_{SF}^M$  und den Ausscheidungen  $\gamma_{SF}^T$ , so ist die Aufspaltungsweite der Versetzung in der Matrix verschieden von der Aufspaltungsweite in der Ausscheidung (Abb. 2.26). Bei  $\gamma_{SF}^T < \gamma_{SF}^M$  spaltet sich die Versetzung in der Ausscheidung weiter auf. Die Kraft, die nötig ist um die zusätzliche Aufspaltung wieder rückgängig zu machen, ergibt sich zu [17]:

$$F^{SF} = 2(\gamma_{SF}^T - \gamma_{SF}^M). \quad (2.34)$$

Die selbe Kraft wird beim umgekehrten Fall benötigt,  $\gamma_{SF}^T > \gamma_{SF}^M$ . Hierbei muss die Kraft aufgewendet werden, um die Versetzung in die Ausscheidung hineinzubewegen.



**Abbildung 2.26:** Änderung der Aufspaltungweite ( $W_M$ ) beim Durchgang durch eine Ausscheidung ( $W_T$ ) mit anderer Stapelfehlerenergie [21].

Alle angegebenen Kräfte, bis auf die Dielastische, nehmen proportional mit der Ausscheidungsgröße  $r$  zu. Die Gesamtkraft  $F_{max}$  aller Kräfte der Mechanismen ergibt sich mit der effektiven Grenzflächenenergie  $\tilde{\gamma}$  und dem Ausscheidungsradius  $r$  zu [17]:

$$F_{max} = \tilde{\gamma} \cdot r \quad (2.35)$$

Die zur Überwindung dieser Kraft notwendigen Fließspannung  $\Delta\tau_c$  erhält man aus

$$\Delta\tau_c \cdot b \cdot l_F = F_{max} \quad (2.36)$$

mit der Friedellänge  $l_F$

$$l_F = \sqrt[3]{\frac{6 \cdot E_V}{\Delta\tau_c \cdot c_F \cdot b}}, \quad (2.37)$$

wobei  $E_V$  die Versetzungsenergie ist,  $c_F$  die Zahl der Fremdatome pro Flächeneinheit in der Gleitebene. In Kombination mit Glg. 2.35 und der Flächendichte der Teilchen ( $f$ =Volumenanteil)

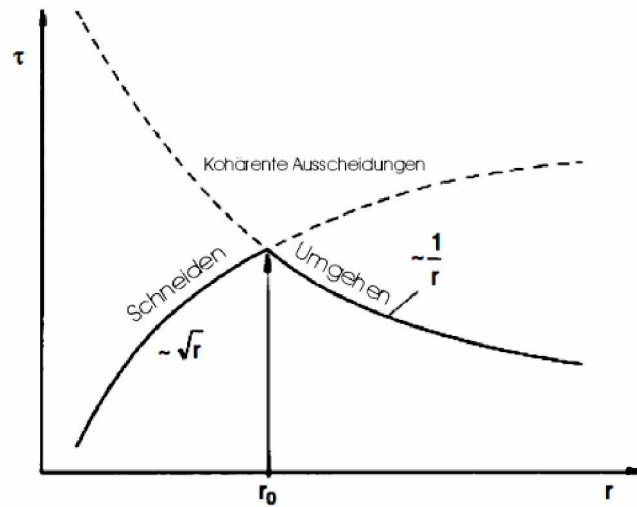
$$c_F = \frac{f}{r^2} \quad (2.38)$$

ergibt sich zu:

$$\Delta\tau_c \cdot b = \tilde{\gamma}^{\frac{3}{2}} \cdot \sqrt{f} \cdot \frac{\sqrt{r}}{\sqrt{6 \cdot E_V}} \quad (2.39)$$

Mit zunehmender Teilchengröße,  $\sqrt{r}$ , steigt die Schubspannung bis zu einem bestimmten Punkt an (Abb. 2.27).





**Abbildung 2.27:** Abhängigkeit der Schubspannung von der Teilchengröße. Schneiden erfolgt nur bei kohärenten Teilchen und nur bis zu einem gewissen Radius  $r_0$  [17].

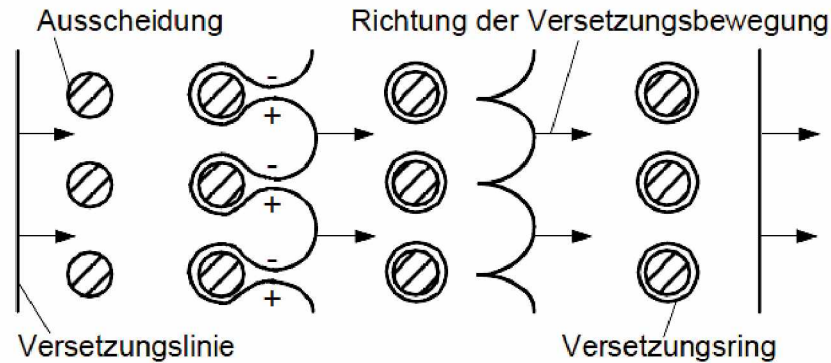
Ab einem Radius  $r_0$  (Glg. 2.41), bei dem eine maximale Festigkeit erreicht wird, kommt es zu einem Abfall der Schubspannung, die nicht grösser als die Orowan-Spannung (Glg. 2.40) werden kann.

$$\tau_{OR} \approx \frac{Gb\sqrt{f}}{r} \quad (2.40)$$

Somit erhält man aus Glg. 2.39 und 2.40 den Teilchenradius für die maximale Festigkeit:

$$r_0 = \frac{Gb^2}{\tilde{\gamma}} \sqrt[3]{3} \quad (2.41)$$

Da es für die Versetzungen schwieriger wird die Teilchen zu durchschneiden ist es nun einfacher die Teilchen zu umgehen. Dies wird als Orowan-Mechanismus (Abb. 2.28) bezeichnet. Dabei bewegt sich eine Versetzungslinie auf die Teilchen zu und beginnt sich zwischen den Ausscheidungen auszubeulen. Ab einem bestimmten Krümmungsradius vergrößert sich dieser ohne dass eine zusätzliche Spannungserhöhung notwendig ist. Hinter dem Teilchen berühren sich die antiparallelen Versetzungsteile und eine freie Versetzung kann sich von dem Teilchen ablösen. Durch diese Umgehung bildet sich somit ein zurückbleibender Versetzungsring, der eine zusätzliche rüctreibende Kraft auf die nachfolgenden Versetzungen ausübt.



**Abbildung 2.28:** Verschiedene Stadien des Orowan-Mechanismus. Bei der Umgehung der Ausscheidungen entsteht ein neuer Versetzungsring [22].

## 2.4.6 Multipartikel Ausscheidungskinetik

Die klassische analytische Ausscheidungskinetik behandelt nur das Wachstum eines Teilchens in den verschiedenen Phasen (Keimbildung, Wachstum und Vergrößerung). Bei der multipartikel Ausscheidungskinetik wird das Wachstum vieler Teilchen mittels numerischer Vorgehensweise berücksichtigt. Diese Anwendung verwendet üblicherweise die klassische Keimbildungstheorie (Kap. 2.4.1) und ein parabolisches Wachstumsgesetz [23–25].

### 2.4.6.1 Das numerische Kampmann-Wagner Modell

Hier wird ein binäres System betrachtet, in dem sich nach der klassischen Keimbildungstheorie Keime bilden, deren Wachstum dann mittels Wachstumsgesetz für einzelne Partikel beschrieben werden kann. Für die Beschreibung des Ausscheidungsverhaltens vieler Keime kamen Kampmann und Wagner zu folgender Lösung [26]:

- Es wird ein System mit einer Volumeneinheit betrachtet und die Zeit in diskrete Abschnitte  $\Delta t$  unterteilt,
- die Keimbildungsrate wird mit Glg. 2.45 für diesen Zeitabschnitt berechnet:

$$J = J_{ss} \exp\left(-\frac{\tau}{t}\right) = N_0 Z \beta \exp\left(-\frac{G^*}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\tau}{t}\right), \quad (2.42)$$

wobei  $N_0$  für die Gesamtanzahl an möglichen Keimplätzen,  $\tau$  für die Inkubationszeit stehen.  $Z$  (Zeldovich Faktor) und  $\beta^*$  berücksichtigen die thermische Vibration.

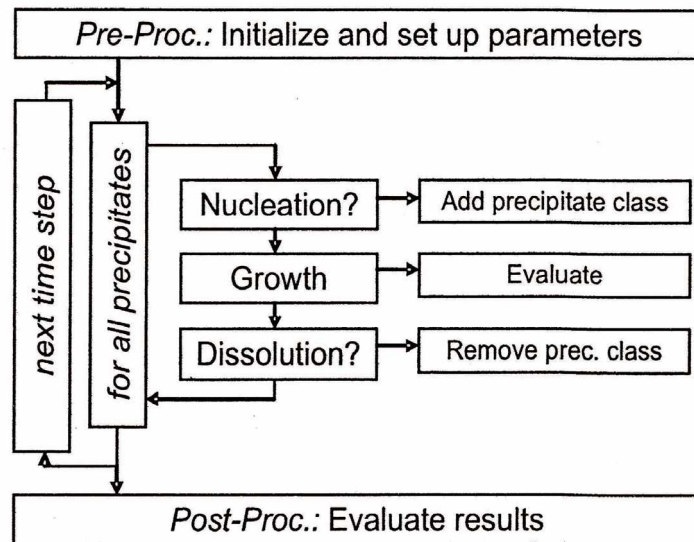
Wenn  $J > 0$ , dann

→ Bilde  $N_{m+1} = J(t)\Delta t$  Ausscheidungen. Sammle und übertrage alle neuen  $N_{m+1}$  Teilchen, die einen identischen Teilchenradius  $\rho_{m+1}$  und die gleiche chemische Zusammensetzung haben, in eine Teilchenklasse.  $m$  ist die Anzahl der einzelnen Teilchenklassen in der Matrix.

→ Jeder Teilchenklasse muss ein Radius  $\rho_{m+1}$ , der größer als der kritische Nukleationsradius  $r^*$  (2.6) ist, zugewiesen werden.

- Der Radius  $r_k$  wird für alle Teilchenklassen entsprechend  $\Delta r_k = \dot{r}_k \Delta t$  ( $k=1, \dots, m$ ) berechnet.
- Verringert sich der Radius  $r_k$  unter die definierte Grenze, so wird die Teilchenklasse aus der Matrix entfernt und um 1 reduziert.
- $m$  wird um 1 erhöht, wenn sich eine neue Teilchenklasse bildet.
- Die beschriebenen Schritte werden bis zur Endzeit wiederholt.

In Abb. 2.29 wird dieser Prozess schematisch dargestellt.



**Abbildung 2.29:** Schema der numerischen Integration der Gleichungen für Keimbildung und Wachstum entsprechend dem Kampmann-Wagner Modell [27].

#### 2.4.6.2 Das SFFK-Modell

Mit dem SFFK-Modell können Systeme mit unterschiedlicher Größe, chemischer Zusammensetzung und Phasentypen der Ausscheidungen berechnet werden. Die freie Energie eines kompletten Systems mit  $n$  Komponenten kann wie folgt beschrieben werden [25, 27–29]:

$$G = \sum_{i=1}^n N_{0i} \mu_{0i} + \sum_{k=1}^m \frac{4\pi r_k^3}{3} (\lambda_k + \sum_{i=1}^n c_{ki} \mu_{ki}) + \sum_{k=1}^m 4\pi r_k^2 \gamma_k, \quad (2.43)$$

wobei  $\theta$  für die Größen der Matrix,  $k$  für die Größen der Ausscheidungen,  $N$  für die Molanzahl der Komponenten  $i$  in der Matrix und  $\mu_{0i}$  für das dazugehörige chemische

Potential steht.  $r_k$  ist der Radius der Ausscheidungen,  $c_{ki}$  die mittlere chemische Zusammensetzung,  $\lambda_k$  die mechanische Energie,  $\mu_{ki}$  die Gibb'sche Energie der Komponente  $i$  der Teilchen und  $\gamma_k$  die spezifische Grenzflächenenergie der Phasengrenzfläche zwischen Ausscheidung und Matrix. In die Glg. 2.43 gehen nur Mittelwerte der chemischen Zusammensetzung der Matrix und Ausscheidungen ein.

Das SFFK-Model ist ein klassisches Näherungsverfahren ("*mean-field approach*"), da diese Formulierung keine Konzentrationsprofile berücksichtigt. Abb. 2.30 zeigt die näherungsweise mittleren Konzentrationen um ein einzelnes Teilchen sowie den Diffusionsfluss der Atome während der Wachstumsphase.

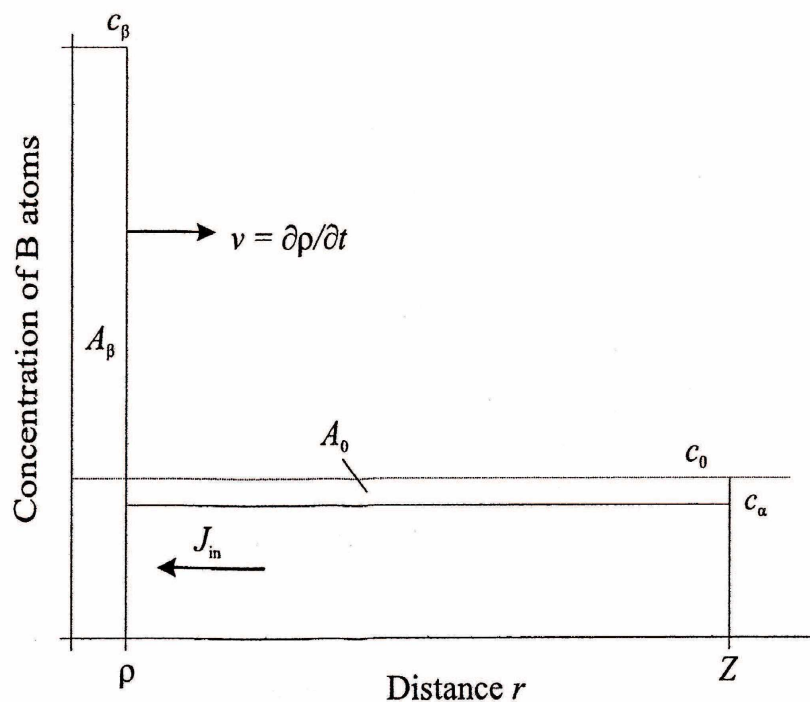


Abbildung 2.30: Mittelwert der Konzentration um ein einzelnes Teilchen [25].

Die einzelnen Terme der Glg. 2.43 können wie folgt beschrieben werden:

- Der erste Term beschreibt die Gibb'sche Energie der Matrix, indem die Molanzahl aller Komponenten  $N_{0i}$  mit dem entsprechenden chemischen Potential multipliziert wird.
- Der zweite Term beinhaltet die Summe der freien Energie aller Ausscheidungen  $m$ . Die mechanische freie Energie  $\lambda_k$  sowie die chemische freie Energie  $\sum_{i=1}^n$  werden mit dem Volumen der Teilchen multipliziert und über alle Partikel  $m$  aufsummiert.
- Durch den dritten Term werden die Grenzflächenenergien der Phasengrenzflächen zwischen den einzelnen Ausscheidungen und der Matrix berücksichtigt.

In Glg. 2.43 wird der aktuelle Zustand der totalen freien Energie des Gesamtsystems mit Hilfe der Zustandsparameter  $r_k$  und  $c_{ki}$  beschrieben. Weitere Parameter können mit dem Gesetz der Massenerhaltung für jede Komponente

$$N_i = N_{0i} + \sum_{k=1}^m \frac{4\pi r_k^3}{3} c_{ki} \quad (2.44)$$

und mit der globalen Massenerhaltung

$$\sum_{i=1}^n N_i = N \quad (2.45)$$

bestimmt werden [24, 25].

## 3 Experimentelle Untersuchungen

Die experimentelle Untersuchung des Warmarbeitsstahls X38CrMoV5-1 wurde einerseits durch die Simulation der Ausscheidungskinetik mit dem Programm MatCalc und andererseits durch die Gefügeuntersuchung mittels Rasterelektronenmikroskop und EDX-Analyse von wärmebehandelten Stahlproben durchgeführt. Tabelle 3.1 zeigt die chemische Zusammensetzung des X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls.

**Tabelle 3.1:** Chemische Zusammensetzung in % des Warmarbeitsstahls X38CrMoV5-1 (Böhler W300) [30].

C	Si	Mn	Cr	Mo	V	N	Fe
0,38	1,10	0,40	5,00	1,30	0,40	0,001	bal.

### 3.1 Experimentelle Probenuntersuchung

Für den Vergleich mit den numerischen Simulationen wurde eine mikrostrukturelle Auswertung des Ausscheidungsverhaltens durchgeführt.

#### 3.1.1 Wärmebehandlung

Vier Proben des Warmarbeitsstahls X38CrMoV5-1 wurden am Materials Center Leoben Forschungs GmbH. (MCL) wärmebehandelt. Die Proben wurden in einem horizontalen Einkammervakuumofen (SysThermS GmbH, VWC 446-15) mit konvektiver Erwärmung und Hochdruckgasabschreckung (bis max. 15 bar) inklusive integriertem Niederdruckaufkohl- und Carbonitriersystem (Abb. 3.1) gehärtet. In Abb. 3.2 wird der experimentelle Verlauf der Härtebehandlung gezeigt. Zuerst wurden die Proben auf eine Temperatur von 600°C erhitzt. Auf dieser Vorwärmstufe wurde die Temperatur für ca. 17 Minuten konstant gehalten, um eine Durchwärmung bis zum Kern zu erhalten, ehe sie auf 1020°C weiter erwärmt wurden. Nach dem Austenitisieren für 30 Minuten bei 1020°C wurden die Proben mit einem Sollabkühlungsparameter von  $\lambda_{Soll} \approx 0,5$  abgeschreckt. Dieser Parameter beschreibt die Abkühlungszeit von 800 auf 500°C in Sekunden  $\times 10^2$  (Glg. 3.1).

$$\lambda = \frac{t_{800} - t_{500}}{100}. \quad (3.1)$$

Somit bedeutet  $\lambda_{Soll} \approx 0,5$ , dass in 50 Sekunden von 800 auf 500°C (6°C pro Sekunde) abgekühlt wurde.



Abbildung 3.1: Einkammervakuumofen der Firma SysTherms.

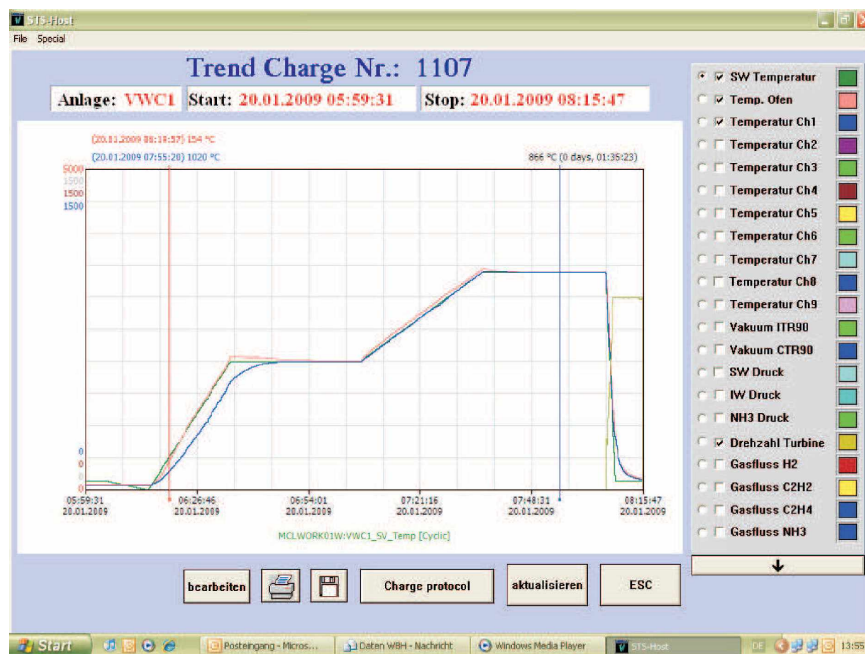


Abbildung 3.2: Experimenteller Verlauf der Härtebehandlung.

Für die Anlassbehandlung der Proben wie in Tab. 3.2 beschrieben, wurde ein Umluft-Kammerofen der Firma ThermConcept (KM 70/08/A) verwendet (Abb. 3.3).



**Abbildung 3.3:** Anlassofen der Firma ThermConcept.

Die Proben 1-4 wurden bei unterschiedlichen Zeiten aus dem Anlassofen entnommen. In Tab. 3.2 werden alle Proben mit der entsprechenden Wärmebehandlung und in Abb. 3.4 die Positionen der Probenentnahme und die schematische Wärmebehandlung gezeigt.

**Tabelle 3.2:** Wärmebehandlung der experimentellen Untersuchung.

Probe	Härtetemp. [°C]30min.	1.Anlassen [°C]60min.	2.Anlassen [°C]120min.	3.Anlassen [°C]120min.	4.Anlassen [°C]120min.
1	1020				
2	1020	550			
3	1020	550	595		
4	1020	550	595	605	610



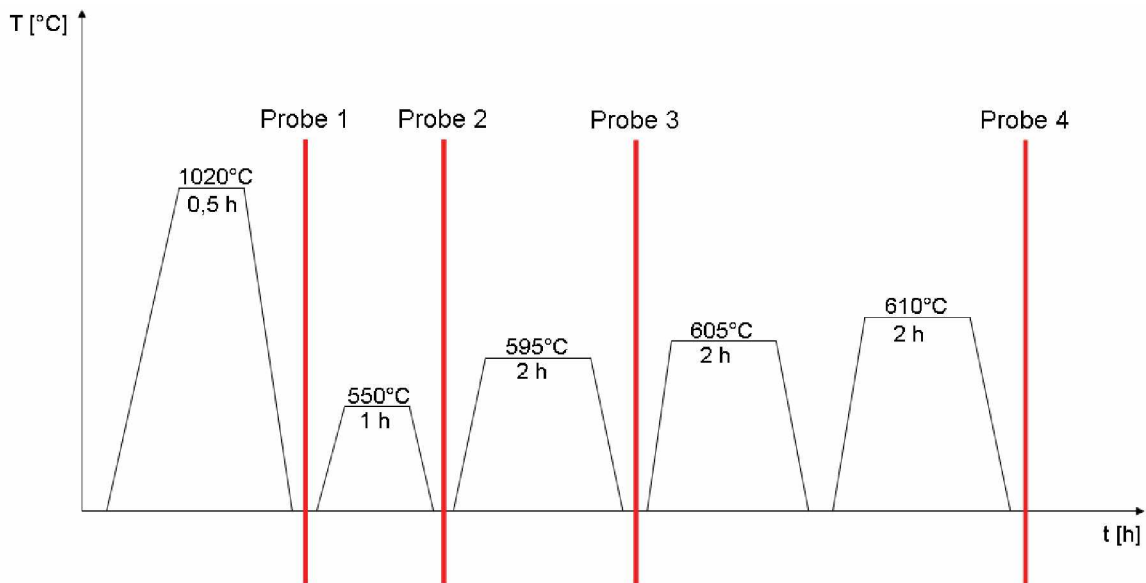


Abbildung 3.4: Schematischer Verlauf der Wärmebehandlung.

Bereits während der Wärmebehandlung wurde die Härte der Proben durch einen Mitarbeiter des MCL bestimmt, um die gewünschten Härtewerte nach den einzelnen Wärmebehandlungsschritten zu erhalten. Da die Probe 4 nach dem dritten Anlassen (46 HRC) nicht der Zielhärte von 44 HRC entsprach, wurde sie ein viertes mal bei  $610^{\circ}\text{C}$  angelassen. In Tab. 3.3 werden die Härtewerte der unterschiedlich wärmebehandelten Proben gezeigt. Es ist zu erkennen, dass sich die Härte mit zunehmenden Anlassenstufen durch den Martensitzerfall verringert.

Tabelle 3.3: Härtewerte der Proben.

Probe 1[HRC]	Probe 2[HRC]	Probe 3[HRC]	Probe 4[HRC]
58	55	49	44

### 3.1.2 Elektronenmikroskopische Untersuchung

Die mikrostrukturelle Untersuchung des X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls wurde am "Institut für Elektronenmikroskopie und Feinstrukturforschung" (FELMI) in Graz durchgeführt. Die Mikrostruktur der Proben wurde mittels Rasterelektronenmikroskop (REM) (Zeiss Ultra 55) untersucht. Hierbei wird die Probenoberfläche mit einem feingebündelten Elektronenstrahl, der durch eine Elektronenquelle, die aus einer auf hohe Temperaturen geheizten Kathode (Wolfram-Draht) und Bündelungselektrode (Wehnelt-Elektrode) besteht, erzeugt wird, abgerastert. Die Wechselwirkungen der Elektronen mit dem Objekt erzeugen eine Abbildung der gewünschten Oberfläche [31, 32].

Für die Ermittlung der lokalen Probenzusammensetzung bzw. der Ausscheidungen wurde

im REM ein sogenanntes "Energiedispersive Röntgenspektrometer" (EDX-S) eingesetzt. Diese Spektrometer müssen das von der Probe abgegebene Röntgenspektrum zerlegen, d.h. es ist der Zusammenhang zwischen der Energie der Röntgenlinien und ihrer Intensität zu bestimmen [32].

## 3.2 Simulationen mit MatCalc

Mit Hilfe des Softwareprogramms *MatCalc<sup>TM</sup>* (Version 5.30.1053 vom 2009-02-13) wurde die Ausscheidungskinetik der an den Proben durchgeführten Wärmebehandlung (Abb. 3.4), ein Phasenmengendiagramm und ein Phasendiagramm des Warmarbeitsstahls X38CrMoV5-1 berechnet. *MatCalc<sup>TM</sup>* wird hauptsächlich für Berechnungen der Ausscheidungskinetik verwendet. Die Ausscheidungskinetik basiert auf dem *SFFK-Modell* (Kap. 2.4.6) für Simulationen der Keimbildung und Wachstum von kugel- und zylinderförmigen Ausscheidungen in einer Mehrkomponentenumgebung [27–29].

Aus Gründen der Einfachheit wurden die Simulationen der Ausscheidungskinetik mit Hilfe von "*Scripts*" (siehe Anhang A) durchgeführt. Diese "*Scripts*" beinhalten alle notwendigen Daten der Wärmebehandlung (siehe unten) für die Berechnung. Für die Darstellung des Einflusses der Abkühlrate wird mit drei verschiedenen Abkühlparametern  $\lambda_{sol} = 0, 5/3/8$  simuliert. Da die Diffusion mit geringer werdender Temperatur abnimmt und somit ab der Martensit-Start-Temperatur vernachlässigbar ist, wird die Abkühlung immer bis zur Martensit-Start-Temperatur berechnet, die bei einem X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahl ca. 290°C beträgt (Abb. 2.7) [2]. Die Simulation der Ausscheidungskinetik wird für die Probe 4 in Abb. 3.4 durchgeführt. Dem Härten folgen vier Anlassstufen mit 550°C (1 Stunde), 595°C (2 Stunden), 605°C (2 Stunden) und 610°C (2 Stunden). Für einen weiteren Vergleich wurde eine Auslagerung bei 590°C für 1000 Stunden nach dem vierten Anlassen simuliert. Nachfolgend werden die, für die Berechnungen grundlegenden Arbeitsschritte bei den Simulationen erklärt. Die Ergebnisse der Simulationen werden im Kap. 4 diskutiert.

### 3.2.1 Definition der chemischen Zusammensetzung

Die Einstellung der chemischen Zusammensetzung und der auftretenden Phasen wird für alle Simulationen (Phasenmengendiagramm, Phasendiagramm, Ausscheidungsverhalten) gleich durchgeführt. In der Menüleiste unter dem Menüpunkt "*Global*" wird das Dialogfeld "*Database*" ausgewählt, um die thermodynamische Datenbank des Werkstoffes (*mc\_steel.tdb*) auszuwählen. Nach dem Hochladen der Datenbank werden die benötigten chemischen Elemente und Phasen markiert (blau unterlegt) und mittels "*Read*"-Taste eingelesen, siehe Abb. 3.5. Die Zusammensetzung kann unter dem Menüpunkt "*Global*" und weiters im Dialogfeld "*Composition*" definiert werden. Dies zeigt Abb. 3.6.

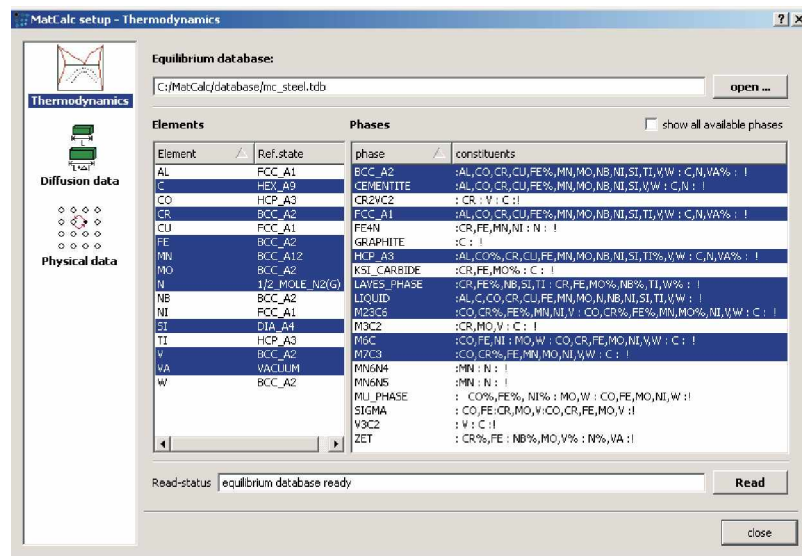


Abbildung 3.5: Dialogfenster der thermodynamischen Datenbank und Auswahl der benötigten chemischen Elemente und Phasen.

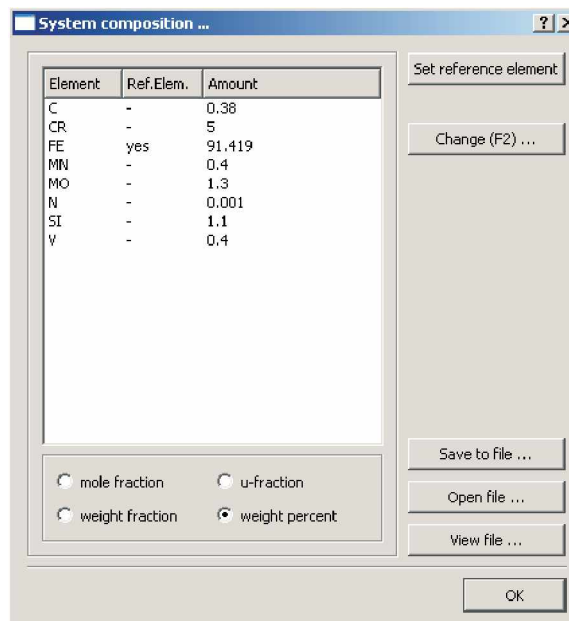


Abbildung 3.6: Dialogfenster der chemischen Zusammensetzung.

### 3.2.2 Berechnung eines Phasenmengendiagramms

Phasenmengendiagramme beschreiben den Verlauf der thermodynamisch stabilen Phasen in Abhängigkeit der Temperatur.

Nach der Definition der chemischen Zusammensetzung unter dem Menüpunkt *"Calc-Equilibrium"* wird ein Gleichgewicht bei 700°C berechnet (Abb. 3.7).

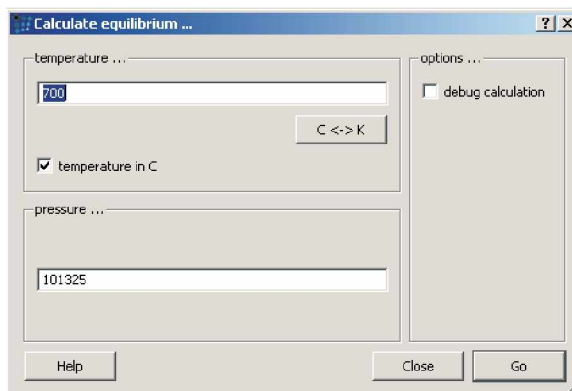


Abbildung 3.7: Dialogfenster für die Berechnung eines Gleichgewichtes bei 700°C.

Im Anschluss an die Gleichgewichtsberechnung wird im Menüpunkt *"Calc-Stepped calculation"* gewählt. Es öffnet sich das Dialogfenster *Stepped equilibrium*, das in Abb. 3.8 dargestellt ist. Nach dem Wählen der Abhängigkeit, hier Temperatur, in der *"Type"-Box* wird in der *"Range"-Box* die Start- (400°C), Stoptemperatur (1600°C) und der Temperaturintervall mit 25°C eingestellt. Die Temperatur wird in Celsius angegeben (*"Options-Box"*). Die *"vary"-* und *"Boundary conditions"-Box* wird für die Berechnung eines Temperaturintervalls nicht benötigt.

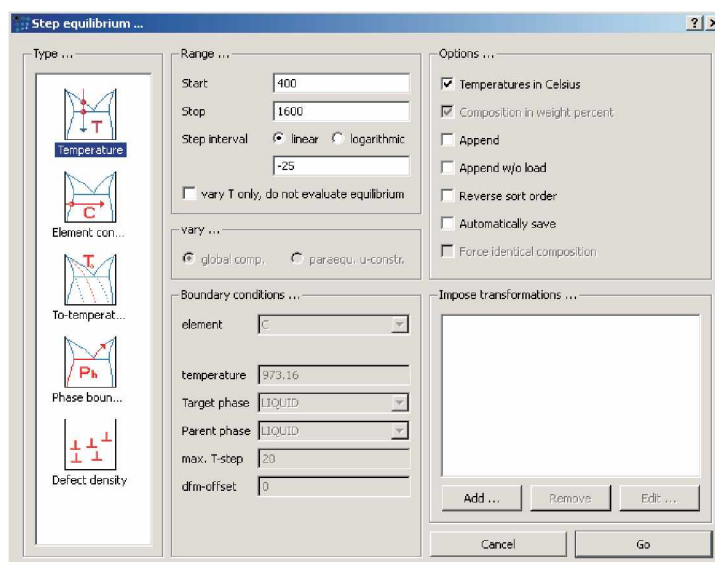


Abbildung 3.8: Dialogfenster des Step equilibrium, in dem die Start-, Stoptemperatur und das Temperaturintervall eingestellt wird.

Für die Darstellung des Ergebnisses muss ein neues Dialogfenster erzeugt werden. Unter dem Menüpunkt "View" und "Create new window" erhält man das Dialogfenster (Abb. 3.9), in dem "Plot:XY-data" ausgewählt wird. Anschließend öffnet sich ein leerer "plot" mit einer x- und y- Achse. Die gesamten Phasenanteile werden in diesem Fenster in Abhängigkeit von der Temperatur dargestellt (Kap. 4).

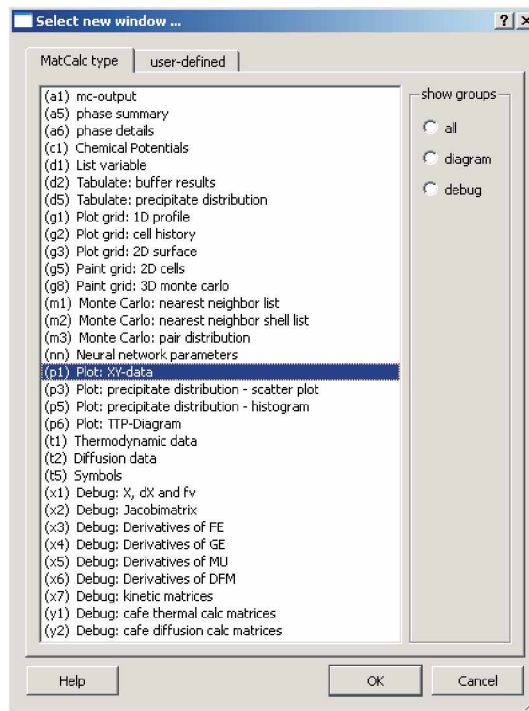


Abbildung 3.9: Dialogfenster für die Auswahl eines geeigneten Ausgabetyps für die Ergebnisse.

### 3.2.3 Berechnung eines Phasendiagramms

Um ein Phasendiagramm zu berechnen, muss eine Anzahl an Phasengrenzen gefunden werden. Die Vorgehensweise bei der Berechnung des Phasendiagramms wird anhand der Berechnung der Phasengrenzfläche des  $\delta$ -Ferrits (*BCC\_A2*) beschrieben. Das Phasengebiet des  $\delta$ -Ferrits (*BCC\_A2*) erhält man indem als erstes ein Gleichgewicht (equilibrium) bei 1500°C berechnet wird (Menüpunkt "Calc-Equilibrium"). Danach wählt man den Menüpunkt "Calc-Search phase boundary" und definiert "BCC\_A2" als "target phase" (Abb. 3.10).

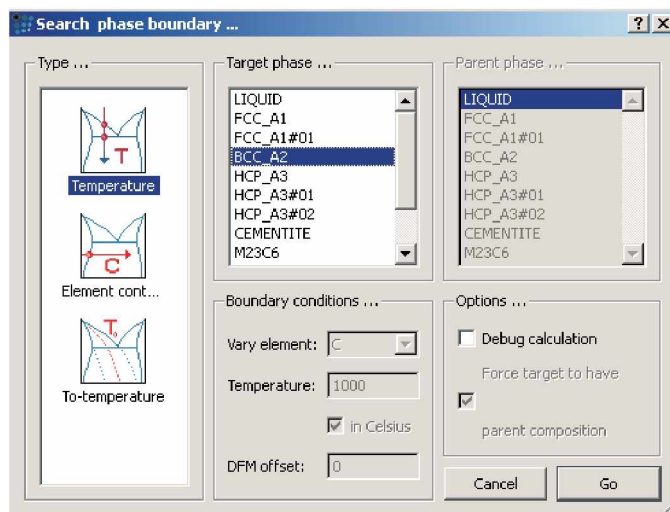


Abbildung 3.10: Einstellungen für die Berechnung eines Punktes auf einer Phasengrenzfläche.

Nachdem ein Punkt auf der Phasengrenzlinie ermittelt wurde, öffnet man den Menüpunkt *Calc-Stepped calculation*, siehe Abb. 3.11 und wählt *Phase boundary*, um den Bereich des Kohlenstoffgehalts (0-0,6 Gew.%), in dem die Berechnung erfolgt, einzustellen. Mittels *Go*-Taste wird die Simulation gestartet und die Phasengrenzlinie berechnet.

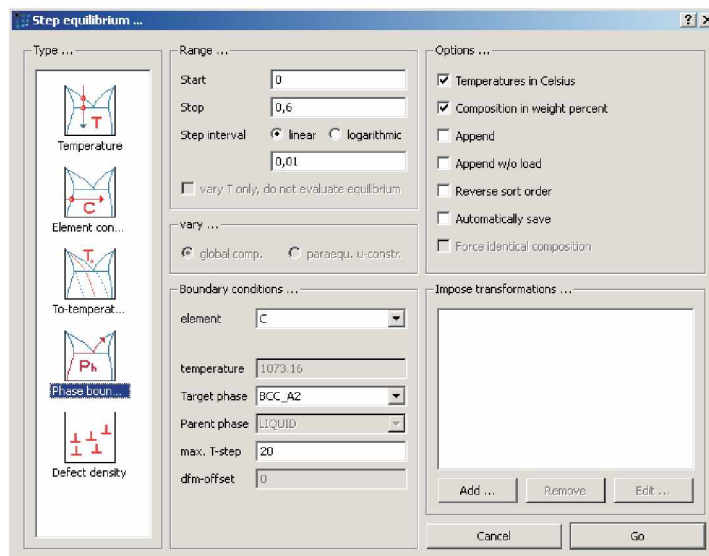


Abbildung 3.11: Einstellungen für die Berechnung einer Phasengrenzfläche.

Für die Darstellung der berechneten Phasengrenzlinie wird wiederum ein *Plot* verwendet. Die Darstellung der Phasengrenzlinien erfolgt durch die Übermittlung mittels *drag and drop* der  $T\%C$ -Variable in den *Plot* (Abb. 3.12). Vor jeder weiteren Berechnung muss die  $T\%C$ -Variable der vorangegangenen Berechnung durch *Duplicate and lock se-*

ries" gesperrt werden. Für die restlichen Phasengrenzl意思en wird der selbe Ablauf der Berechnung durchgeführt, wie für das  $\delta$ -Ferrit. Auch kann durch unterschiedliche Werte von "Step intervall" und "max. T-step" die Simulation beeinflusst werden.

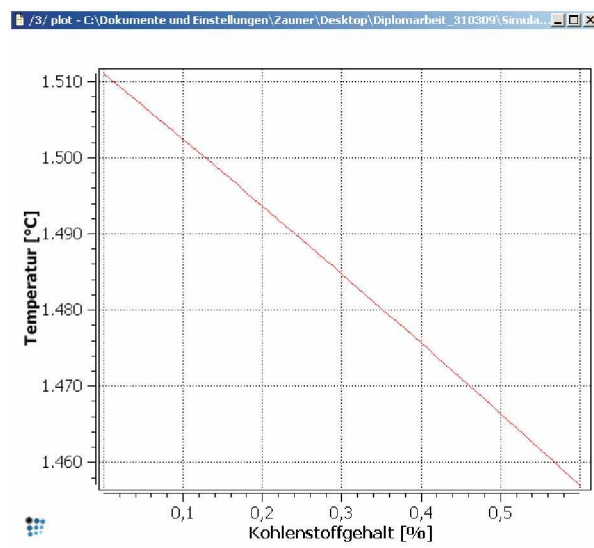


Abbildung 3.12: Darstellung einer Phasengrenzlinie im Ausgabefenster.

### 3.2.4 Simulation der Ausscheidungskinetik

Hierbei muss neben der thermodynamischen Datenbank noch eine Diffusionsdatenbank (mc\_sample\_fe.ddb) hinzugefügt werden (Abb. 3.13). Dies geschieht über den Menüpunkt "Global-Databases".

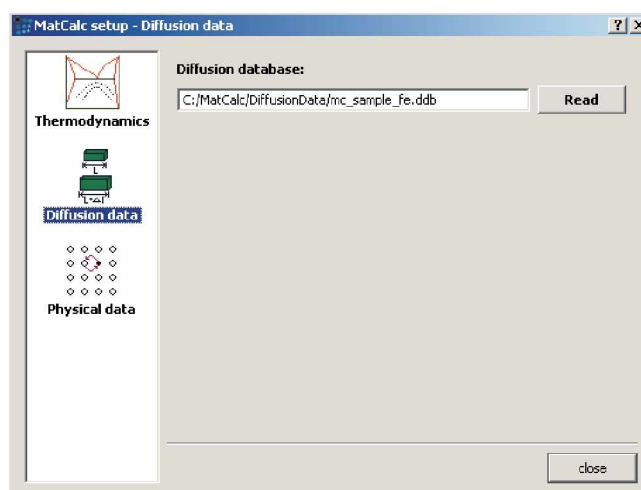


Abbildung 3.13: Hochladen der Diffusionsdatenbank.

Um Ausscheidungen bilden zu können muss unter *"Global-Phase status"* eine Phase z.B.  $M_{23}C_6$  und anschließend mit *"Create"* ausgewählt werden (Abb. 3.14). Es öffnet sich ein Dialogfeld *"Create new phase"* (Abb. 3.15), in dem das Feld *"precipitate(\_Pnn)"* markiert werden muss. Mit *"Ok"* wird die Auswahl bestätigt und es bildet sich die Ausscheidung  $M_{23}C_6-p0$ .

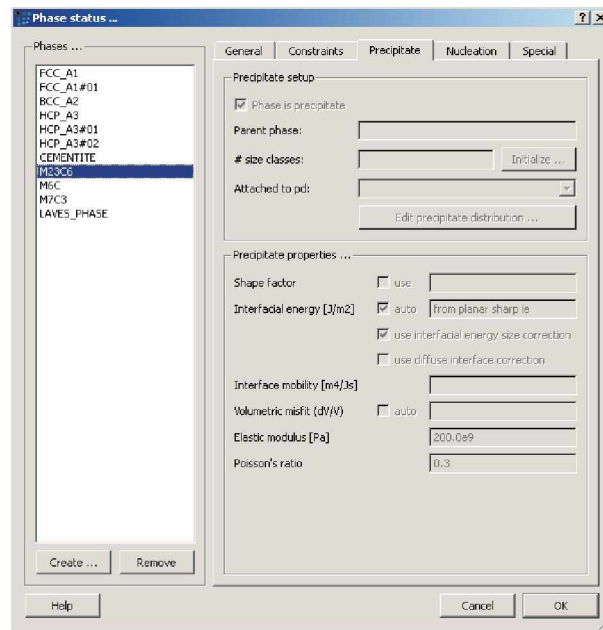


Abbildung 3.14: Einstellungen für Bildung einer Ausscheidung.



Abbildung 3.15: Bestätigung der Einstellungen für Bildung einer Ausscheidung.

Über den Menüpunkt *"Global-Phase status"* werden die verschiedenen Phasen der Ausscheidungen (z.B.  $M_{23}C_6-p0$ ) bestimmt (Abb. 3.16). Im *"Precipitate setup"*-Feld wird die Anzahl der Teilchenklasse unter *"# size classes"* (für alle Simulationen 100) eingestellt und unter *"Attached to pd"* wird die Ausscheidung dem Ferrit zugeordnet.



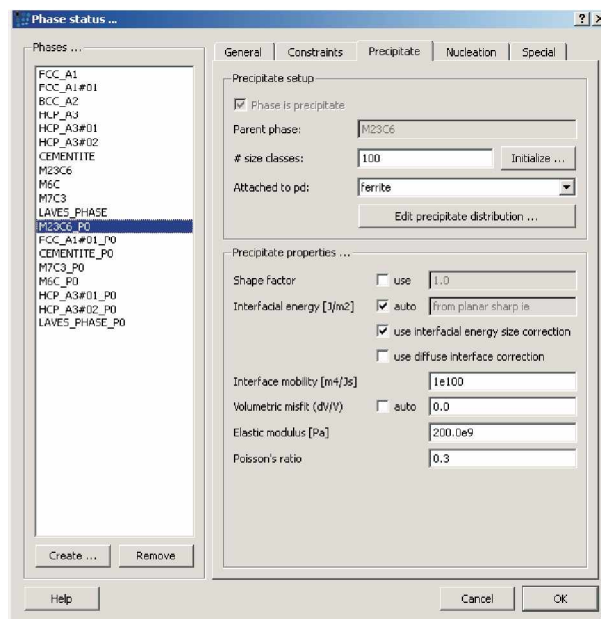


Abbildung 3.16: Einstellungen der Ausscheidungen.

Die Generierung und Zuordnung der Ausscheidungen an die Matrix wird über den Befehl "New" im Menü "Global-Precipitation domains" eingestellt. Im Feld "Precipitation domain" erhält die Matrix den Namen "austenite" bzw. "ferrite", welchen im Feld "Matrix phase" die Phasen "FCC\_A1" bzw. "BCC\_A2", in welchen sich die Ausscheidungen ausbilden, zugewiesen werden (Abb. 3.17 bzw. 3.18).

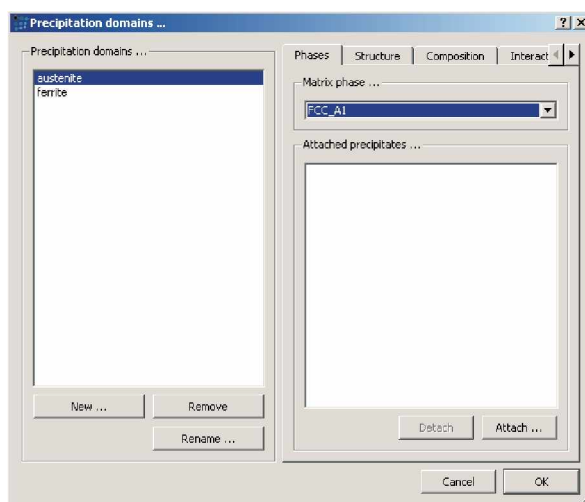


Abbildung 3.17: Generierung und Zuordnung der Ausscheidungen an die Matrix.

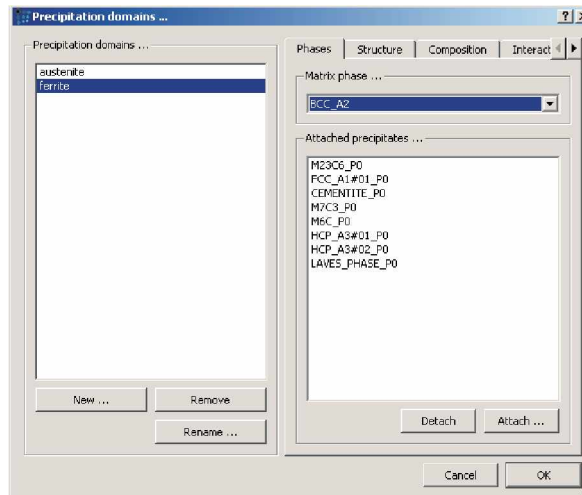


Abbildung 3.18: Generierung und Zuordnung der Ausscheidungen an die Matrix.

Unter "Global-Heat treatments-Edit" werden die Keimplätze eingestellt. Im Austenit werden nur Korngrenzen als Keimstellen definiert (Abb. 3.19). Hierbei wird z.B. für die Ausscheidung  $M_{23}C_6$ -p0 der Ausdruck "set-precipitation-parameter  $m_{23}c_6$ -p0 ns ge" verwendet, wobei "ns ge" für "(n)ucleation (s)ite (g)rainboundary (e)dge" steht.

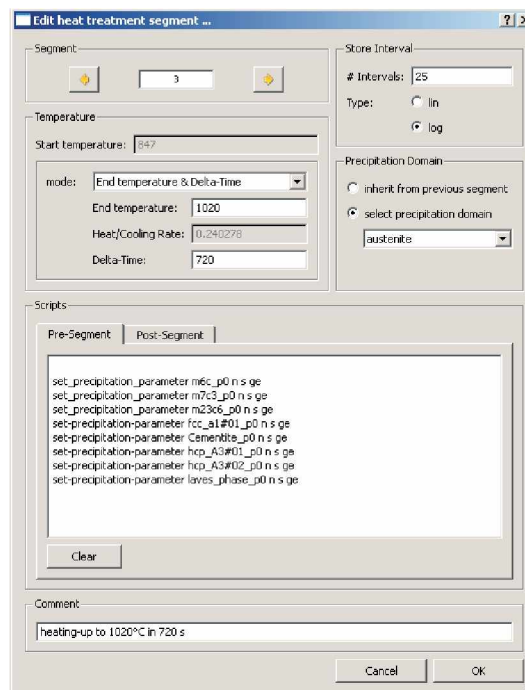


Abbildung 3.19: Einstellungen der Keimstellen für Austenit.

Für den Ferrit bzw. Martensit werden die Keimstellen der Ausscheidungen wie in Abb. 3.20 eingestellt. Für *FCC\_A1#01\_PO* und *CEMENTITE\_PO* (z.B. "set-precipitation-parameter *FCC\_A1#01\_PO ns gsd*") werden Korngrenzen [(g)rain boundary], Subkorngrenzen [(s)ub-grain boundary] und Versetzungen [(d)islocation] als Keimstellen ausgewählt. Den anderen Ausscheidungen werden Korngrenzen und Subkorngrenzen (z.B. "set-precipitation-parameter *FCC\_A1#01\_PO ns gs*") zugewiesen.

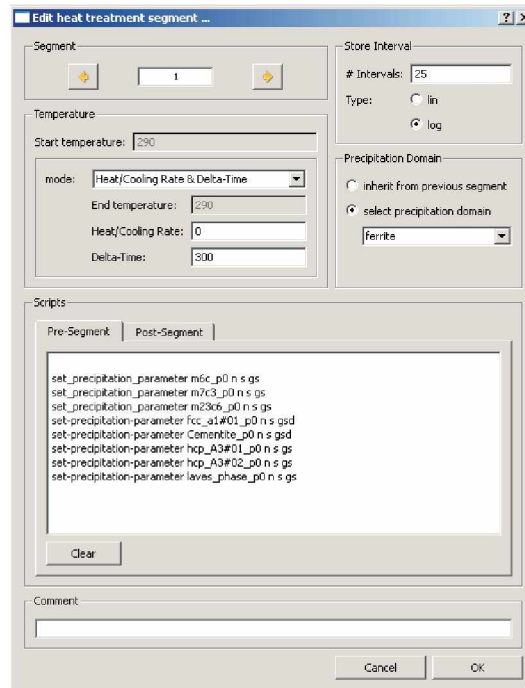


Abbildung 3.20: Einstellung der Keimstellen für Ferrit.

## 4 Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Simulationen mit *MatCalc<sup>TM</sup>* und der experimentellen Untersuchungen beschrieben und anschließend miteinander verglichen und diskutiert.

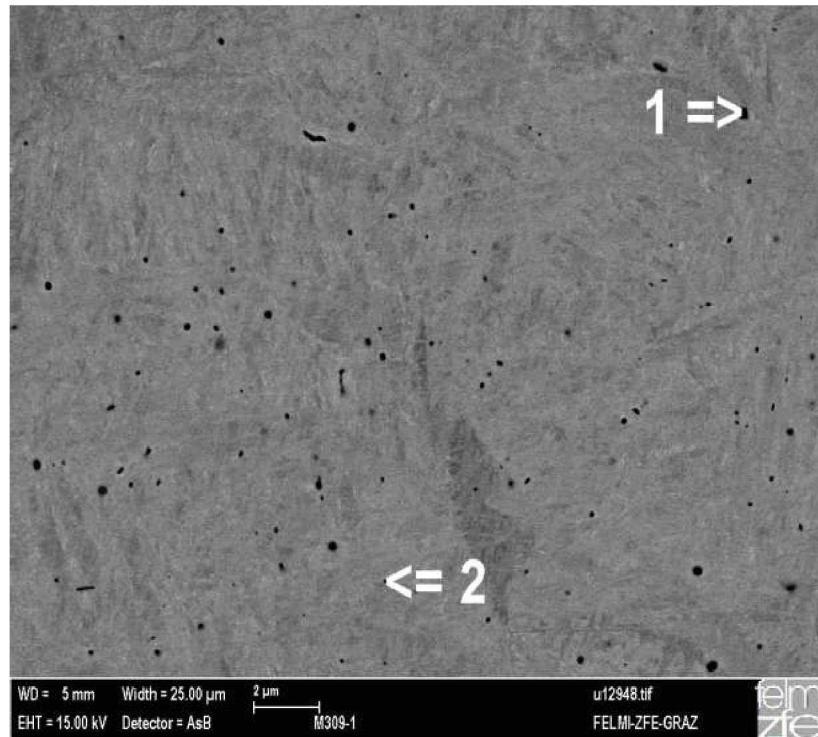
### 4.1 Ergebnisse der Rasterelektronenmikroskopie und EDX-Analyse

Am "Institut für Elektronenmikroskopie und Feinstrukturforschung" (FELMI) in Graz wurden die Proben 1 und 4 (Abb. 3.4) mittels Rasterelektronenmikroskop und EDX untersucht, da sich in Probe 4 aufgrund des längsten Anlassvorgangs die größten Sekundärausscheidungen einstellten. Die Probe 1 wurde gewählt, um einen Vergleich zwischen dem Härtegefüge und dem Anlassgefüge der Probe 4 zu erlangen und in weiterer Folge die Entwicklung des Gefüges während der Wärmebehandlung zu sehen. Die Proben 2 und 3 werden erst in nachfolgenden Arbeiten untersucht, da in dieser Arbeit die experimentellen Ergebnisse des Ausscheidungsverhalten der Probe 4 mit den Simulationsergebnissen verglichen werden soll.

#### 4.1.1 Ergebnisse der Probe 1 nach dem Härten

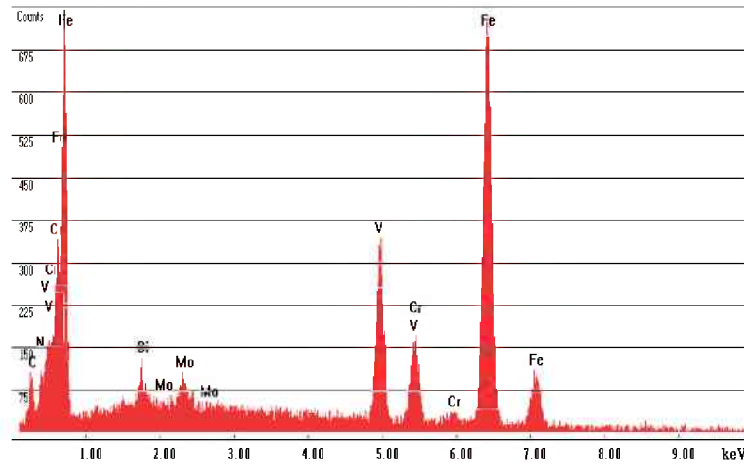
Probe 1 zeigt den Zustand nach dem Abschrecken von 1020°C mit  $\lambda \approx 0,5$ . Nachfolgend werden die aufgenommenen REM-Bilder und die Analysen der detektierten Ausscheidungen dargestellt.

Abb. 4.1 zeigt die REM-Aufnahme einiger Ausscheidungen (Primärausscheidungen). Die Ausscheidungen, die mittels EDX analysiert wurden, wurden mit der Nummer 1 und 2 markiert. Ausscheidung 1 bzw. 2 haben ca. eine Größe von 400 nm bzw. 20 nm.



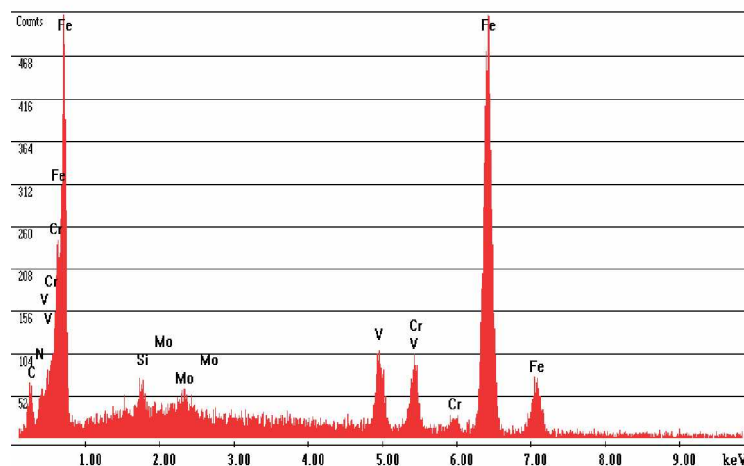
**Abbildung 4.1:** REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 1 nach dem Härten.

Die Analyse der ersten Ausscheidung (1) wird in Abb. 4.2 dargestellt. Vor allem nahe dem linken *Eisenpeak* kommt es zu Überlagerungen von mehreren *Peaks* (Chrom, Vanadium, Stickstoff). Aufgrund des großen *Vanadiumpeaks* in der Mitte handelt es sich hier um ein Vanadiumkarbid oder -nitrid (VC oder VN). Wegen der sehr geringen Größe der Ausscheidungen wird bei der EDX-Untersuchung ein gewisser Anteil der Matrix mitanalysiert. Dies zeigt sich z.B. anhand der *Silizium- und Molybdänpeaks*.



**Abbildung 4.2:** EDX-Analyse der ersten Ausscheidung der Probe 1 nach dem Härten.

Die Analyse der zweiten Ausscheidung (2) in Abb. 4.3 hat beinahe die selbe Erscheinung wie die vorherige Analyse. Ebenfalls handelt es sich um ein Vanadiumkarbid oder -nitrid. Da die zweite Ausscheidung kleiner als die Erste ist, stellt sich ein niedrigerer *Vanadiumpeak* ein.



**Abbildung 4.3:** EDX-Analyse der zweiten Ausscheidung der Probe 1 nach dem Härten.

Eine andere untersuchte Stelle der Probe 1 wird in Abb. 4.4 gezeigt. An dieser Stelle werden 2 Ausscheidungen (3 und 4) und ein Bereich der Matrix (5) untersucht. Die Größe der Ausscheidungen beträgt ca. 200 nm für die Erste (3) und 70 nm für die Zweite (4).

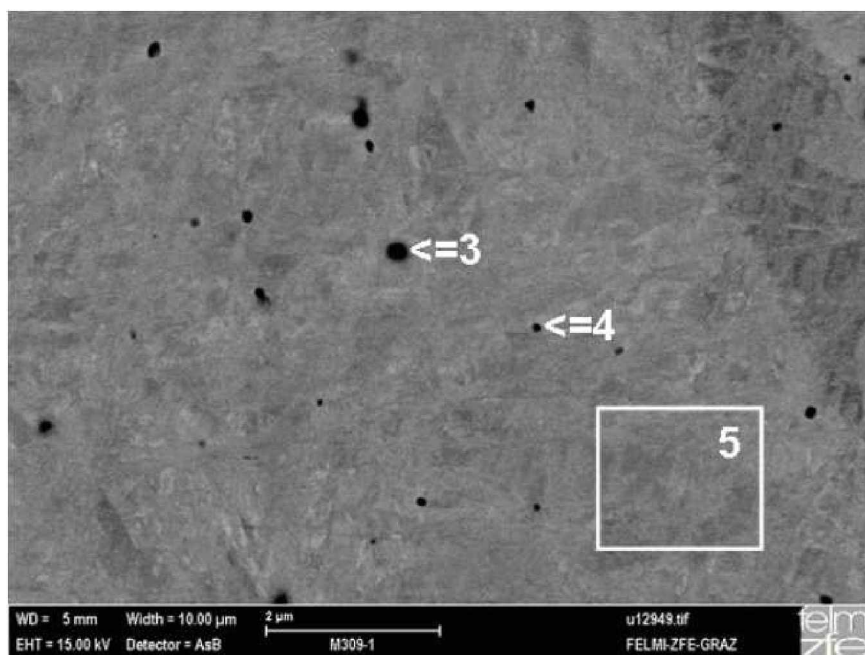


Abbildung 4.4: REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 1 nach dem Härten.

Die Analyse der dritten Ausscheidung (3) zeigt einen kleinen *Vanadiumpeak*. Hierbei wird es sich wieder um ein Vanadiumkarbid/-nitrid oder ein Eisenkarbid handeln.

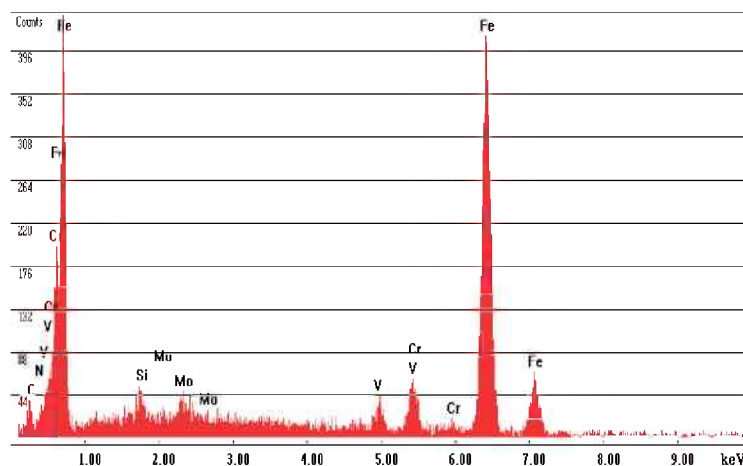


Abbildung 4.5: EDX-Analyse der dritten Ausscheidung der Probe 1 nach dem Härten.

Die vierte Ausscheidung zeigt einen deutlichen *Vanadiumpeak*, der auf ein Vanadiumkarbid oder -nitrid schließen lässt (Abb. 4.6). In Abb. 4.7 wird die Analyse der Matrix (Bereich 5) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass sich die Matrix aus Eisen-, Molybdän-, Chrom- und Vanadiummischkarbiden zusammensetzt.

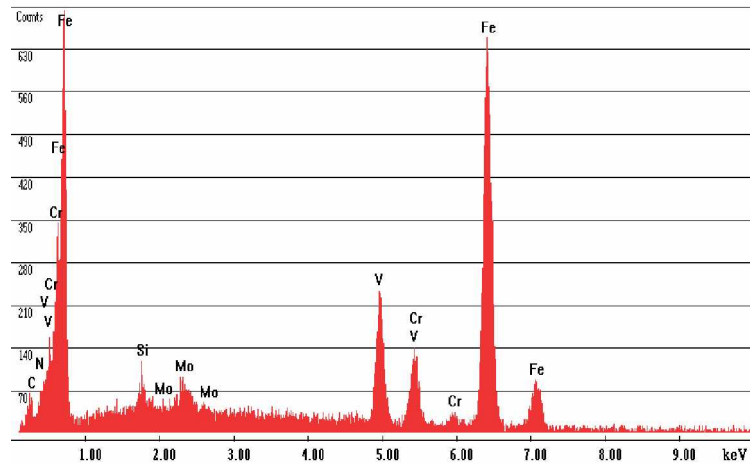


Abbildung 4.6: EDX-Analyse der vierten Ausscheidung der Probe 1 nach dem Härten.

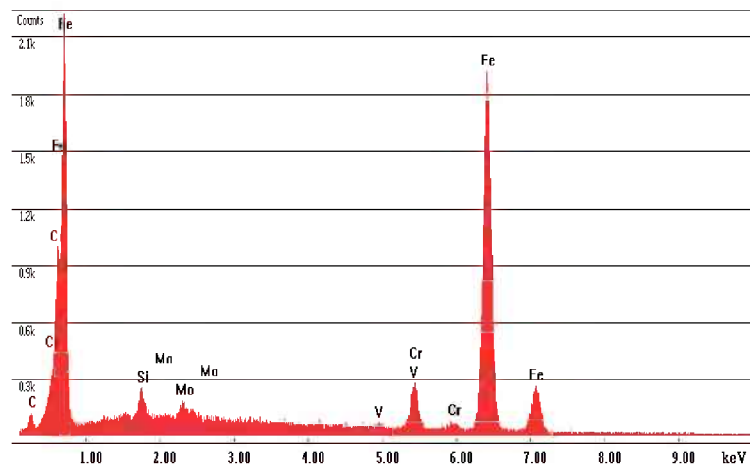


Abbildung 4.7: EDX-Analyse des Bereichs 5 der Probe 1 nach dem Härten.

Alle untersuchten Ausscheidungen der Probe 1 zeigten eine ähnliche Analyse, die auf Vanadiumkarbide oder -nitride schließen lässt.

#### 4.1.2 Ergebnisse der Probe 4

Die Probe 4 des X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls wurde viermal angelassen bevor sie untersucht wurde. Da die erste Untersuchung der Probe 4 eine Ätzstruktur aufwies, wurde die Probe 4 ein weiteres Mal poliert, um die Ätzstruktur zu entfernen. Nachfolgend werden die im REM aufgenommenen Ausscheidungen und deren EDX-Analysen für die erste und



zweite Untersuchungsreihe dargestellt und diskutiert.

• **Untersuchungsreihe 1:**

In Abb. 4.8 sind drei Ausscheidungen zu erkennen. Ausscheidung 1 hat eine Größe von ca. 100 bis 200 nm, Ausscheidung 2 ca. 200 nm und Ausscheidung 3 ca. 600 nm.

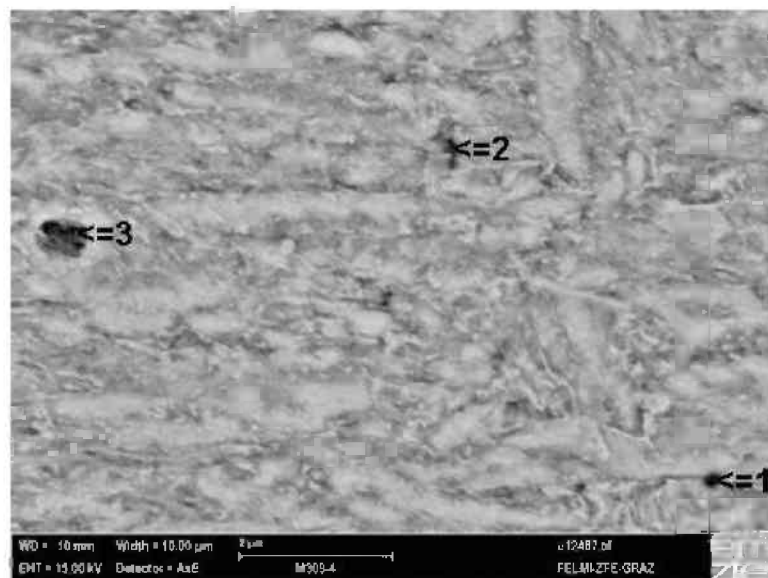


Abbildung 4.8: REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 4.

Die Analyse (Abb. 4.9) der ersten Ausscheidung (1) zeigt die verschiedenen detektierten Elemente in diesem Bereich. Der *Vanadiumpeak* lässt auf ein Vanadiumkarbid oder -nitrid schließen. Die Ausscheidung könnte ebenfalls ein Molybdän-Chrom-Mischkarbid sein. Die helleren Stellen im Bild deuten auf Molybdänkarbide (MoC) hin.

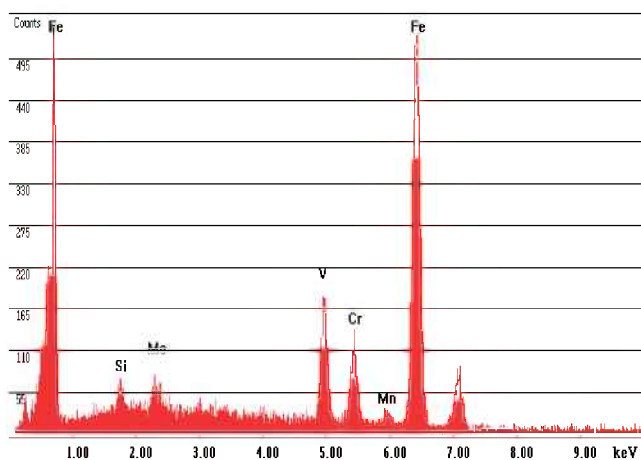


Abbildung 4.9: EDX-Analyse der ersten Ausscheidung der Probe 4.

Die zweite Ausscheidung (2) hat eine ähnliche Zusammensetzung wie Ausscheidung eins (Abb. 4.9). Nur sind die *Vanadium- und Chrompeaks* geringer und es wurde kein Molybdän detektiert. Auch diese Ausscheidung wird ein Vanadiumkarbid oder -nitrid sein.

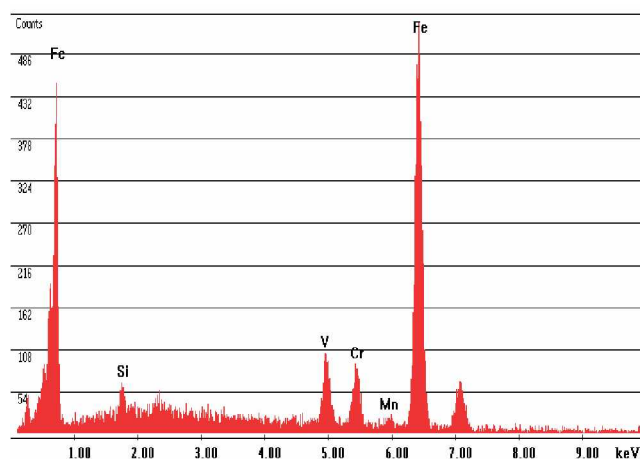


Abbildung 4.10: EDX-Analyse der zweiten Ausscheidung der Probe 4.

Der Bereich der dritten Ausscheidung kann nicht eindeutig identifiziert werden (Abb. 4.11). Hierbei kann es sich um ein Chromkarbid ( $Cr_{23}C_6$  bzw.  $Cr_7C_3$ ) oder Eisenkarbid ( $Fe_3C$ ) handeln.

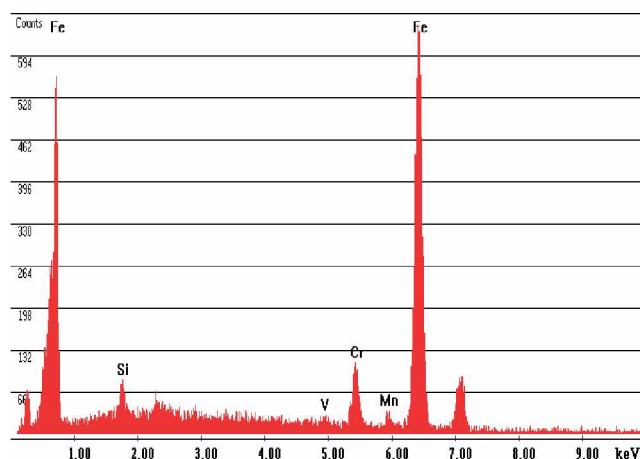


Abbildung 4.11: EDX-Analyse der dritten Ausscheidung der Probe 4.

Abb. 4.12 zeigt einen weiteren Bereich der Probe 4, in dem Ausscheidungen untersucht wurden. Mit ca.  $2 \mu\text{m}$  ist die Ausscheidung 4 um einiges größer als die Ausscheidungen 5 und 6 (beide ca.  $0,5\text{-}0,6 \mu\text{m}$ ).

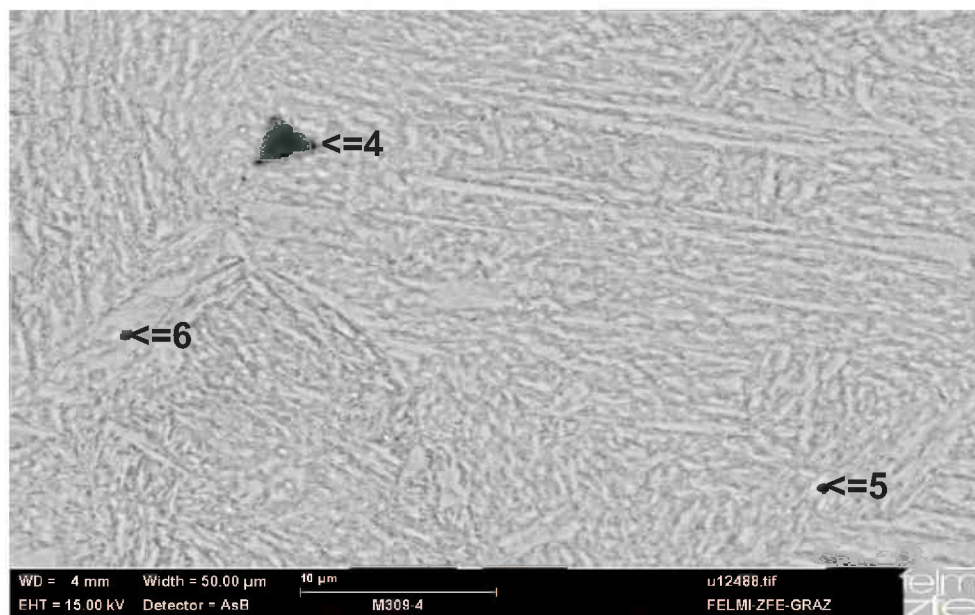


Abbildung 4.12: REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 4.

In Abb. 4.13 wird die Analyse der Ausscheidung 4 dargestellt. Es ist zu sehen, dass besonders drei *Peaks* dominieren, nämlich der *Vanadium-*, *Titan-* und *Nitridpeak*, wobei der *Nitridpeak* mit einem *Titanpeak* überlagert. Aus diesen Gründen kann die Ausscheidung 4 ein Titankarbid/-nitrid, Vanadiumkarbid/-nitrid, Chromkarbid/-nitrid oder auch eine Mischung aus Vanadium-Titan-Karbid/Nitrid sein.

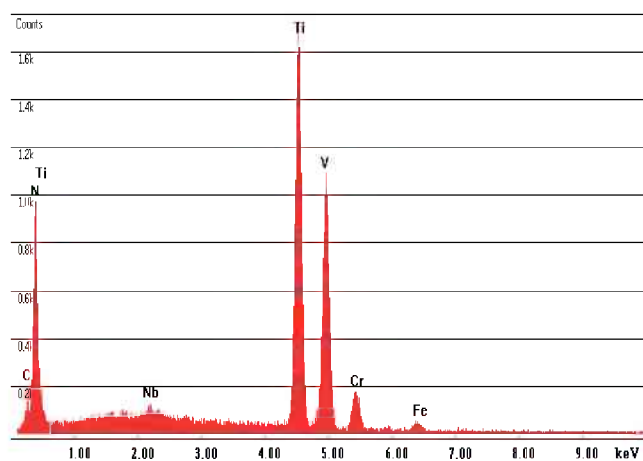


Abbildung 4.13: EDX-Analyse der vierten Ausscheidung der Probe 4.

Die Ausscheidungen 5 und 6 zeigen beinahe die gleichen Analysen (Abb. 4.14 und 4.15). Allerdings zeigt Ausscheidung 5 keinen *Vanadiumpeak*. Hierbei wird es sich um ein Chrom-

oder Eisenkarbid handeln. Die Analyse der Ausscheidung 6 zeigt noch einen geringen *Vanadiumpeak*, wodurch auf ein Chrom-, Vanadium- oder Eisenkarbid geschlossen werden kann.

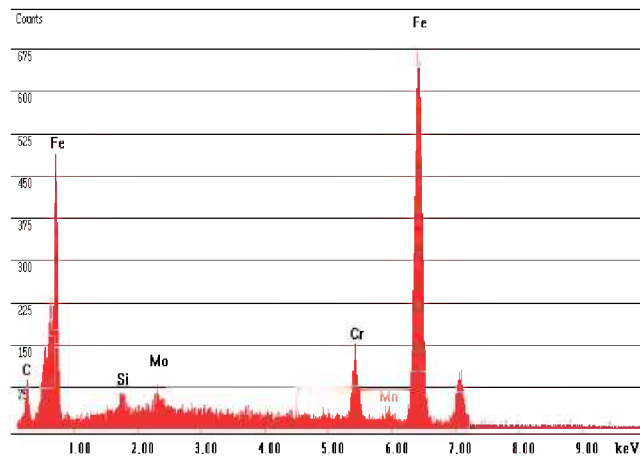


Abbildung 4.14: EDX-Analyse der fünften Ausscheidung der Probe 4.

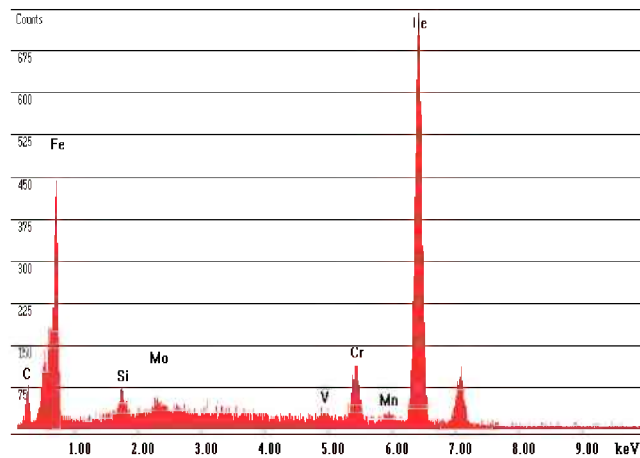
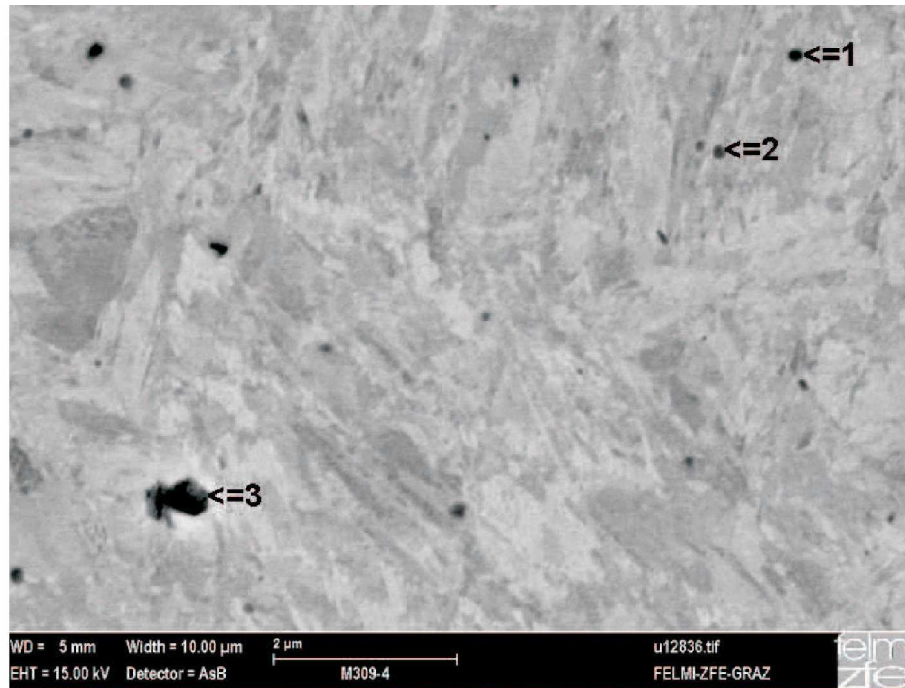


Abbildung 4.15: EDX-Analyse der sechsten Ausscheidung der Probe 4.

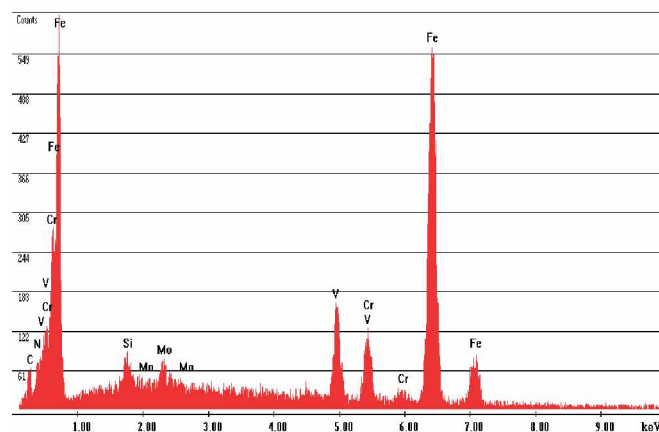
#### • Untersuchungsreihe 2:

Nach dem die Probe 4 nochmals poliert und untersucht wurde, sind in Abb. 4.16 Ausscheidungen mit einer Größe von 150 bis 500 nm zu sehen. Es ist zu erkennen, dass durch den Poliervorgang die Ätzstruktur beseitigt wurde. In diesem Bereich wurden drei Ausscheidungen mittels EDX analysiert.



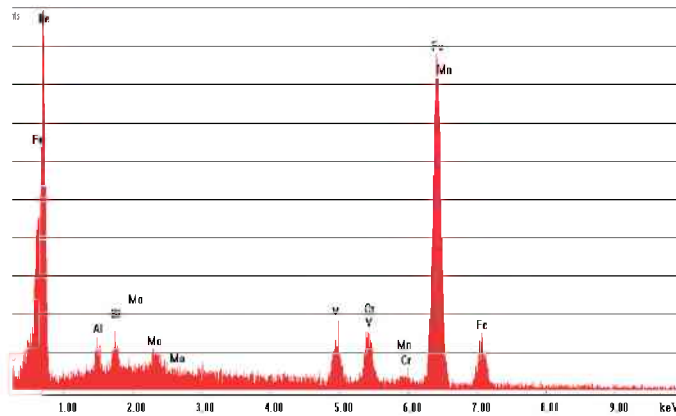
**Abbildung 4.16:** REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 4 nach einem weiteren Poliervorgang.

Bei der ersten Ausscheidung (1) handelt es sich um ein Vanadiumkarbid oder -nitrid. Dies wird wieder durch den *Vanadiumpeak* in der Mitte und den überlagerten *Vanadium- und Nitridpeaks* am linken Rand gezeigt (Abb. 4.17).



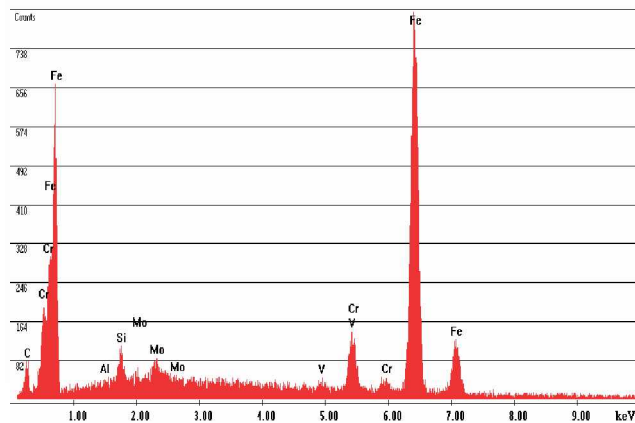
**Abbildung 4.17:** EDX-Analyse der ersten Ausscheidung der Probe 4 nach einem weiteren Poliervorgang.

Die Analyse der zweiten Ausscheidung (2) lässt aufgrund des *Vanadiumpeaks* und des nicht vorhandenen *Nitridpeaks* auf ein Vanadiumkarbid schließen (Abb. 4.18). Die Detektion des Aluminiums (*Aluminiumpeak*) kann auf Rückstände des Poliervorgangs zurück zu führen sein.



**Abbildung 4.18:** EDX-Analyse der zweiten Ausscheidung der Probe 4 nach einem weiteren Poliervorgang.

Bei der dritten Ausscheidung kann wegen des geringen *Vanadiumpeaks* nicht genau definiert werden, ob es sich um ein Vanadium- oder Eisenkarbid handelt (Abb. 4.19).



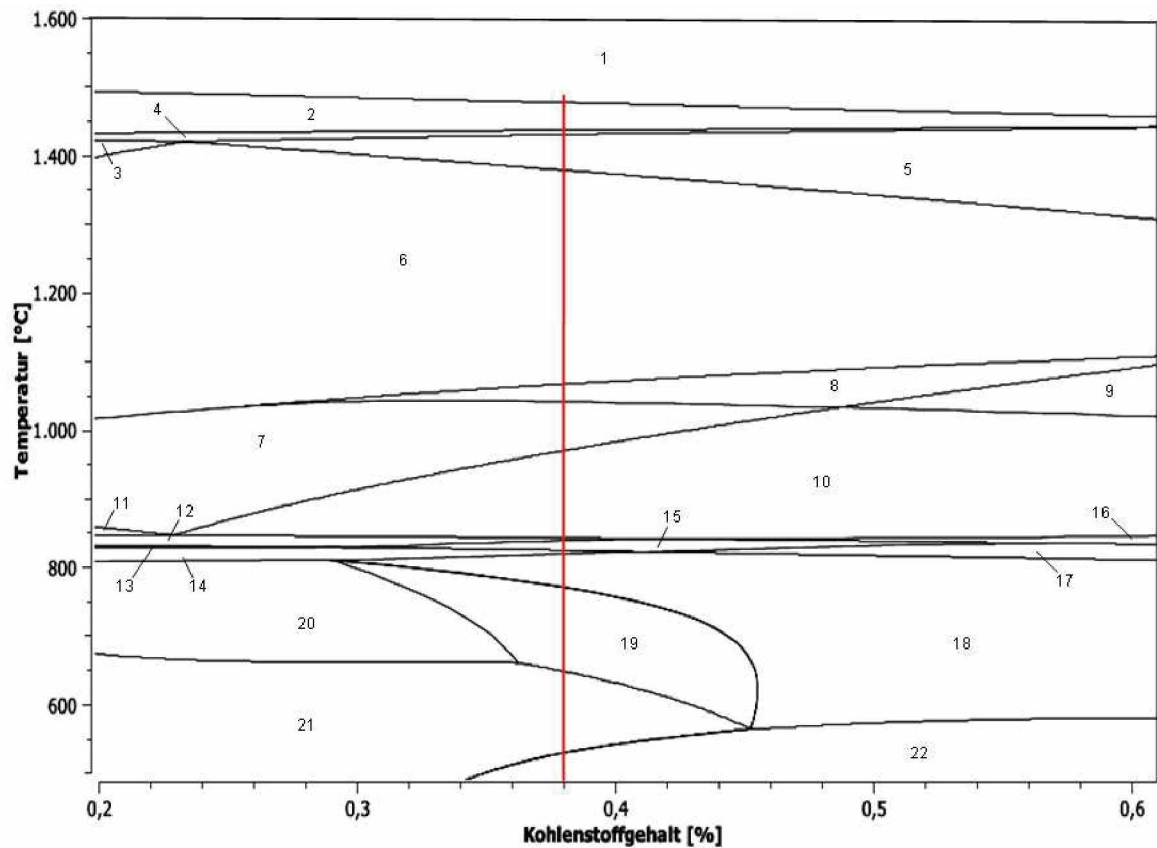
**Abbildung 4.19:** EDX-Analyse der dritten Ausscheidung der Probe 4 nach einem weiteren Poliervorgang.

## 4.2 Ergebnisse der Simulation mit MatCalc

Mit Hilfe des Simulationsprogrammes MatCalc wurde ein Phasendiagramm, ein Phasenmengendiagramm und das Ausscheidungsverhalten des X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls berechnet. Nachfolgend werden die Simulationsergebnisse diskutiert.

### 4.2.1 Phasendiagramm

Durch die Berechnung eines Phasendiagramms können die Phasengleichgewichte in Abhängigkeit von der Temperatur und des Kohlenstoffgehaltes dargestellt werden (Abb. 4.20). Aufgrund dieser Berechnung kann beobachtet werden, bei welchen Temperaturen sich welche Phasen bei einem Kohlenstoffgehalt von 0,38% (Warmarbeitsstahl X38CrMoV5-1) bilden. Die Phasen werden in Tab. 4.1 aufgelistet.



**Abbildung 4.20:** Berechnetes Phasendiagramm des X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehalts. Der nominelle Kohlenstoffgehalt beträgt 0,38% (senkrechte Linie).

**Tabelle 4.1:** Phasen des berechneten Phasendiagramms.

Phasenbereichsnummer	Phasen
1	S
2	$\delta$ +S
3	$\delta$ + $\gamma$
4	$\delta$ + $\gamma$ +S
5	$\gamma$ +S
6	$\gamma$
7	$\gamma$ +Cr <sub>2</sub> N+MC
8	$\gamma$ +MC
9	$\gamma$ +MC+M <sub>7</sub> C <sub>3</sub>
10	$\gamma$ +M <sub>7</sub> C <sub>3</sub> +MC+Cr <sub>2</sub> N
11	$\alpha$ + $\gamma$ +Cr <sub>2</sub> N+MC
12	$\alpha$ + $\gamma$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>7</sub> C <sub>3</sub>
13	$\alpha$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>7</sub> C <sub>3</sub>
14	$\alpha$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>23</sub> C <sub>6</sub> +M <sub>7</sub> C <sub>3</sub>
15	$\alpha$ + $\gamma$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>23</sub> C <sub>6</sub> +M <sub>7</sub> C <sub>3</sub>
16	$\gamma$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>23</sub> C <sub>6</sub> +M <sub>7</sub> C <sub>3</sub>
17	$\alpha$ + $\gamma$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>23</sub> C <sub>6</sub> +M <sub>2</sub> C
18	$\alpha$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>23</sub> C <sub>6</sub> +M <sub>2</sub> C
19	$\alpha$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>23</sub> C <sub>6</sub> +M <sub>7</sub> C <sub>3</sub> +M <sub>2</sub> C
20	$\alpha$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>7</sub> C <sub>3</sub> +M <sub>23</sub> C <sub>6</sub>
21	$\alpha$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>7</sub> C <sub>3</sub> +M <sub>23</sub> C <sub>6</sub> +Laves
22	$\alpha$ +Cr <sub>2</sub> N+MC+M <sub>23</sub> C <sub>6</sub> +M <sub>7</sub> C <sub>3</sub> +M <sub>2</sub> C+Laves

## 4.2.2 Phasenmengendiagramm

Für die Darstellung der auftretenden Phasen und deren Anteile in Abhängigkeit von der Temperatur in einem X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahl mit der Zusammensetzung laut Tab. 3.1 wurde ein Phasenmengendiagramm, das in Abb. 4.21 dargestellt ist, berechnet.

Es ist zu erkennen, dass die *flüssige Phase (Liquidus)* bis knapp 1380°C vorhanden ist. Der *Ferrit* ist in einem kleinen Bereich zwischen 1430°C und 1477°C und bei niedrigeren Temperaturen beginnt er sich ab ca. 842°C (*A<sub>3</sub>*-Temperatur) auszuscheiden. Ab 825 °C hat der Ferrit einen stabilen Verlauf. Der *Austenit* beginnt sich bei ca. 1437°C zu bilden und bleibt bis ca. 842°C stabil ehe er sich bei 825°C auflöst (*A<sub>1</sub>*-Temperatur). Zwischen 1041°C und 819°C bildet sich *Mo<sub>2</sub>C*. *M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>* ist bei höheren Temperaturen zwischen 970°C und 770°C und bei niedrigeren ab ca. 529°C stabil. Der Anteil des *M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>* steigt ab 837°C stark an und bleibt ab ca. 770°C konstant. Ab 530°C verringert sich der Anteil des *M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>* wieder. Ab ca. 1067°C scheidet sich eine MX-Phase aus. Der Anteil der MX-Phase steigt bis ca. 970°C. Nach einem Abfall des MX bis 842°C erhöht sich der Anteil wieder und bleibt bis zu tieferen Temperaturen nahezu konstant. Die *Laves phase* ist ab ca. 635°C vorhanden.



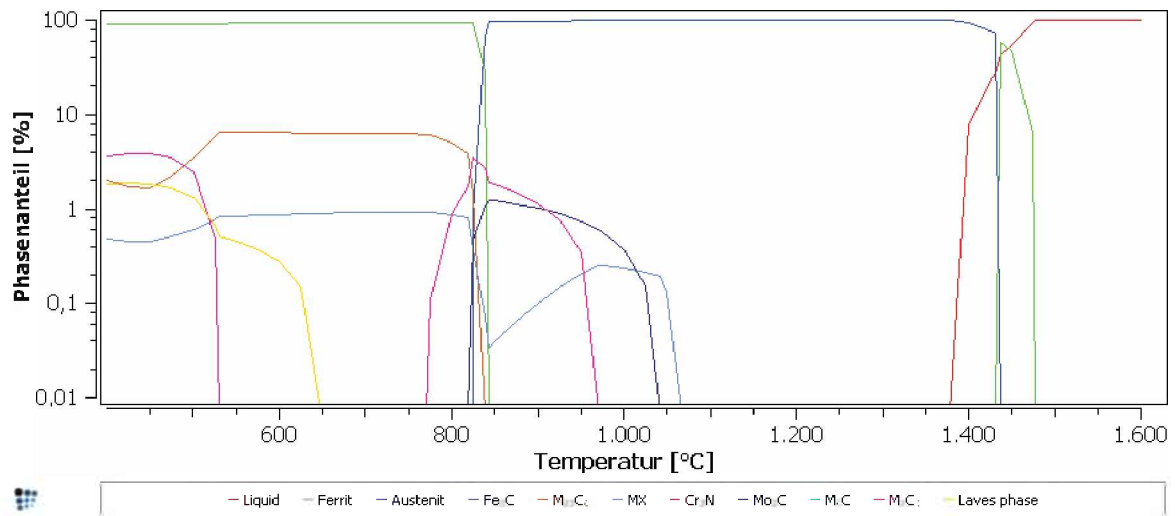


Abbildung 4.21: Phasenmengendiagramm des X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls.

### 4.2.3 Ausscheidungsverhalten

Da es vier Anlanssschritte benötigte um die Zielhärte von 44 HRC zu erlangen, mussten auch die Simulationen darauf abgestimmt werden (Abb. 4.22).

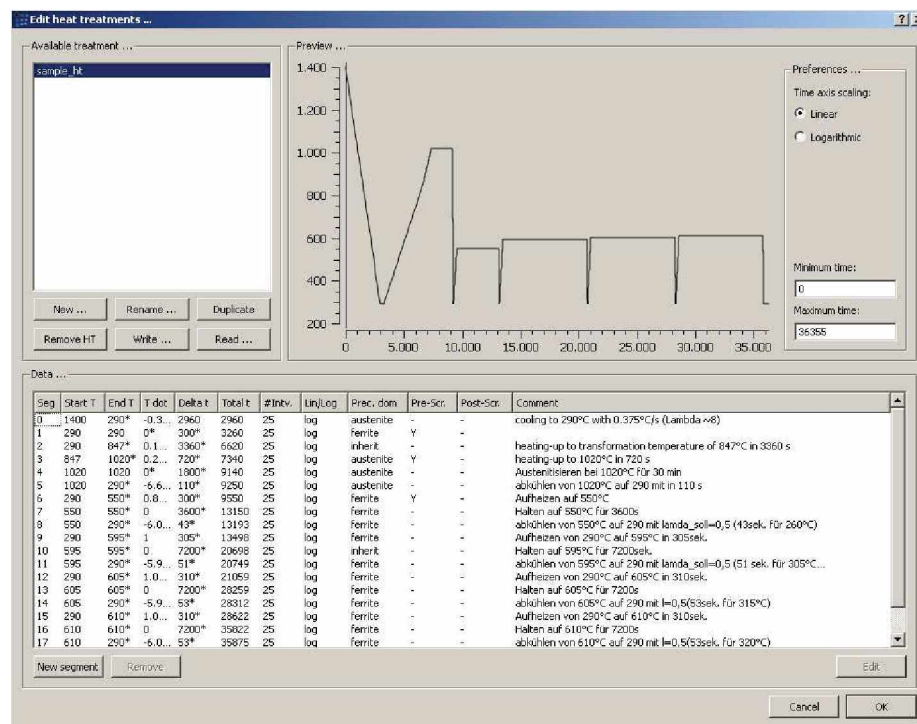


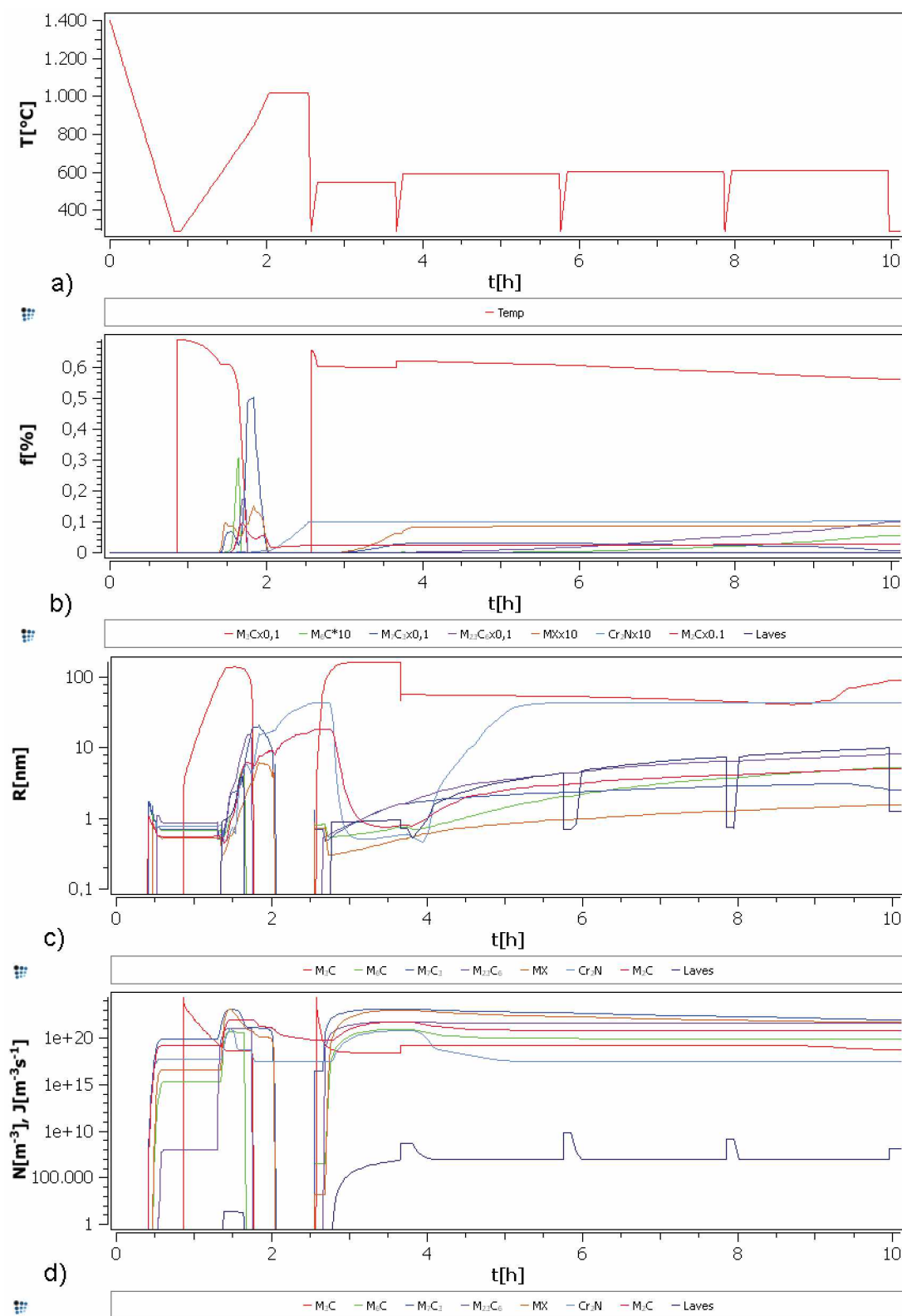
Abbildung 4.22: Verlauf der Wärmebehandlung bei der Ausscheidungskinetiksimulation.

Nachfolgend werden die Ergebnisse der Simulationen mit unterschiedlichen Abkühlparametern  $\lambda = 0,5/3/8$  und einer Simulation mit zusätzlicher Auslagerung beschrieben und diskutiert.

• **Simulation der Ausscheidungskinetik mit  $\lambda \approx 0,5$ :**

In Abb. 4.23 werden die Ergebnisse der Simulation mit einem Abkühlparameter  $\lambda \approx 0,5$  dargestellt. Der Wärmeverlauf wie das Abkühlen nach dem Erstarren von  $1400^\circ\text{C}$ , Härten bei  $1020^\circ\text{C}$ , Anlassen bei  $550^\circ\text{C}$  (1 Stunde),  $595^\circ\text{C}$  (2 Stunden),  $605^\circ\text{C}$  (2 Stunden) und  $610^\circ\text{C}$  (2 Stunden) wird in Abb. 4.23a gezeigt.

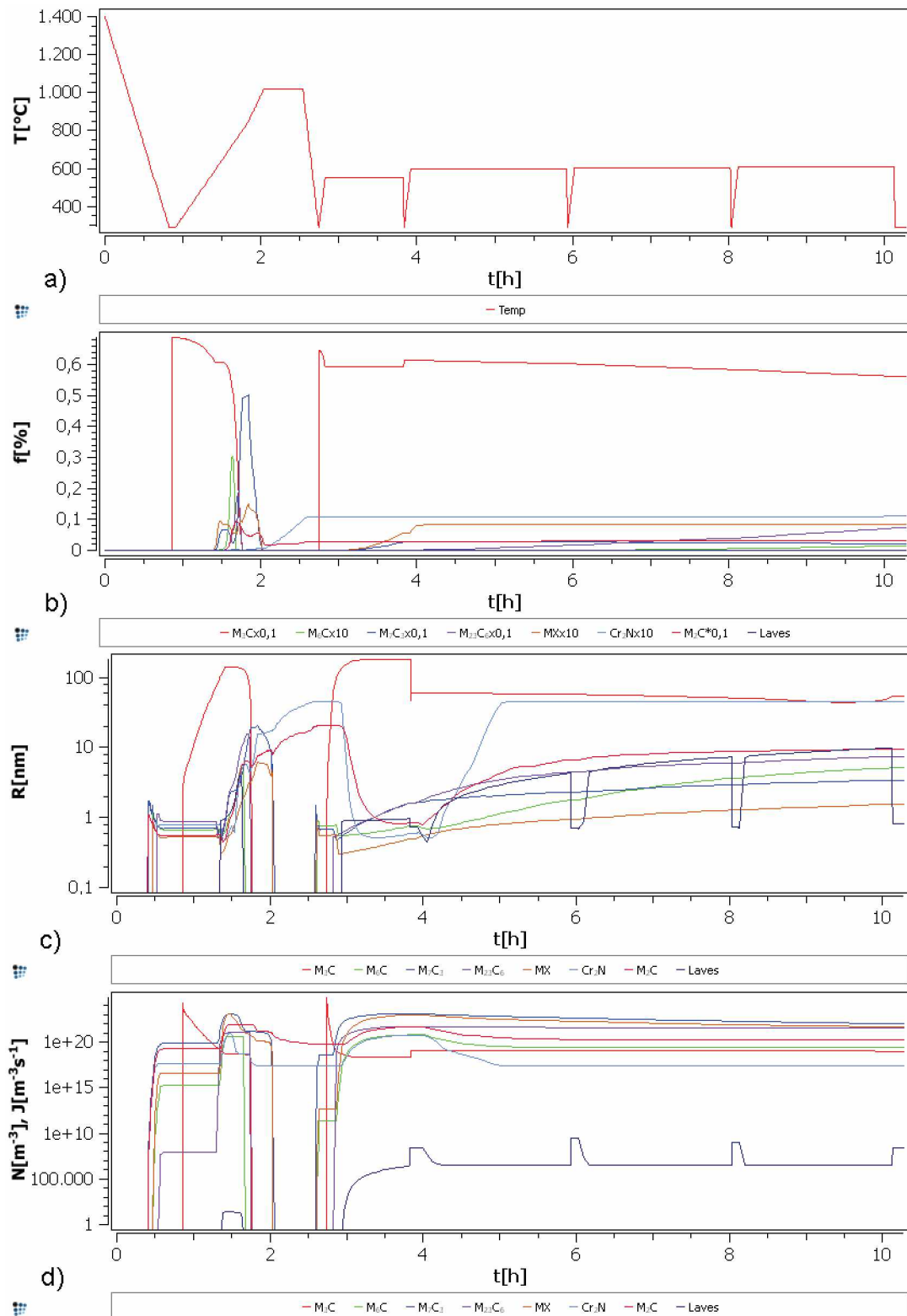
Der Phasenanteil der Ausscheidungen ( $M_3C$ ,  $M_6C$ ,  $M_7C_3$ ,  $M_{23}C_6$ , MX,  $Cr_2N$ ,  $M_2C$  und Laves) wird in Abb. 4.23b gezeigt. Während des Austenitisierens bei  $1020^\circ\text{C}$  lösen sich bis auf  $Cr_2N$  und  $M_2C$  alle Ausscheidungen auf. Beim Abschreckvorgang scheidet sich  $M_3C$  aus, dessen Anteil bis zum Ende der Wärmebehandlung leicht abnimmt. Der Anteil der  $M_7C_3$  Ausscheidung nimmt während des Aufheizens auf die Austenitisierungstemperatur von  $1020^\circ\text{C}$  stark zu und nimmt ab ca.  $850^\circ\text{C}$  wieder ab. Beim ersten Anlassen steigt der  $M_7C_3$  Phasenanteil leicht an und verringert sich im Laufe der Wärmebehandlung gering.  $M_{23}C_6$  und  $M_6C$  steigt während des Anlassens konstant an. Die Phasenanteile der  $Cr_2N$ - und  $M_2C$  Ausscheidungen bleiben während des Anlassens unverändert. Den größten Phasenanteil nach der Wärmebehandlung haben  $Fe_3C$ ,  $M_2C$ ,  $M_{23}C_6$  und  $M_7C_3$ . Die Radien der  $M_6C$  (ca. 5 nm),  $M_7C_3$  (ca. 2,5 nm),  $M_{23}C_6$  (ca. 8 nm), MX (ca. 1,5 nm) und  $M_2C$  (ca. 5 nm) Ausscheidungen vergrößern sich nur leicht bis zum Ende der Wärmebehandlung (Abb. 4.23c). Der Radius des  $M_3C$  (ca. 90 nm) steigt während des Aufheizens in der ersten Anlassstufe sehr stark an und verringert sich dann sprunghaft während des Abkühlvorgangs nach dem ersten Anlassen. Danach bleibt der Radius nahezu konstant. Erst im letzten Drittel der vierten Anlassstufe beginnt er zu vergrößern. Der Radius des  $Cr_2N$  (ca. 42 nm) fällt während der ersten Anlassstufe stark ab und steigt in der Zweiten bis auf seinen endgültigen Radius wieder an. Die Anzahl der sich ausscheidenden Teilchen stellt sich während der ersten Anlassstufe ein und ändert sich bis zum Schluss kaum mehr (Abb. 4.23d).



**Abbildung 4.23:** Simulation der Auscheidungskinetik mit  $\lambda \approx 0,5$ . a) Wärmeverlauf b) Phasenanteil c) Radien der Teilchen d) Teilchenanzahl pro Volumen. Für eine bessere Übersicht werden die Phasenanteile der  $M_3C$ ,  $M_2C$ ,  $M_{23}C_6$  und  $M_7C_3$  Ausscheidung mit 0,1 und MX,  $M_6C$  und  $Cr_2C$  mit 10 multipliziert.

**• Simulation der Ausscheidungskinetik mit  $\lambda \approx 3$ :**

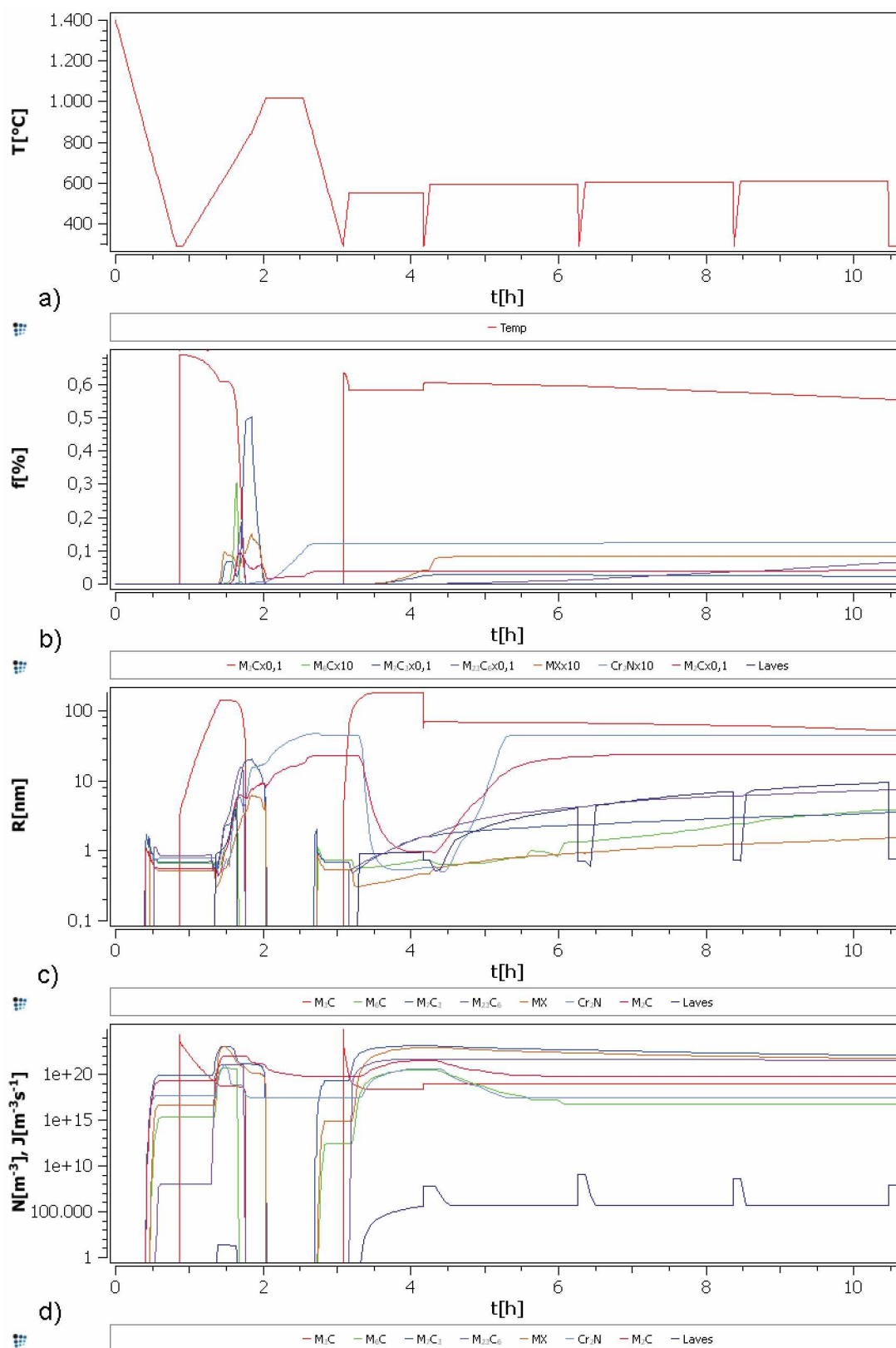
Bei der Simulation mit dem Abkühlparameter  $\lambda = 3$  (Abb. 4.24) stellen sich bis auf  $M_6C$  beinahe die gleichen Phasenanteile wie bei  $\lambda = 0,5$  ein (Abb. 4.24b).  $M_6C$  scheidet sich bei  $\lambda = 0,5$  nach ca. drei Stunden und bei dieser Simulation mit  $\lambda = 3$  erst nach ca. fünf Stunden aus. Der Radius von  $M_3C$  vergrößert in der letzten Anlassstufe nur noch sehr gering im Vergleich zu vorher (ca. 54 nm), siehe Abb. 4.24c. Jedoch hat sich der Radius des  $M_2C$  fast verdoppelt (ca. 9,6 nm). Die Verläufe der Teilchenanzahl pro Volumen haben den selben Verlauf wie bei der Simulation mit  $\lambda \approx 0,5$  (Abb. 4.24d).



**Abbildung 4.24:** Simulation der Ausscheidungskinetik mit  $\lambda = 3$ . a) Wärmeverlauf b) Phasenanteil c) Radien der Teilchen d) Teilchenanzahl pro Volumen. Für eine bessere Übersicht werden die Phasenanteile der  $M_3C$ ,  $M_2C$ ,  $M_{23}C_6$  und  $M_7C_3$  Ausscheidungen mit 0,1 und MX,  $M_6C$  und  $Cr_2C$  mit 10 multipliziert.

- **Simulation der Ausscheidungskinetik mit  $\lambda \approx 8$ :**

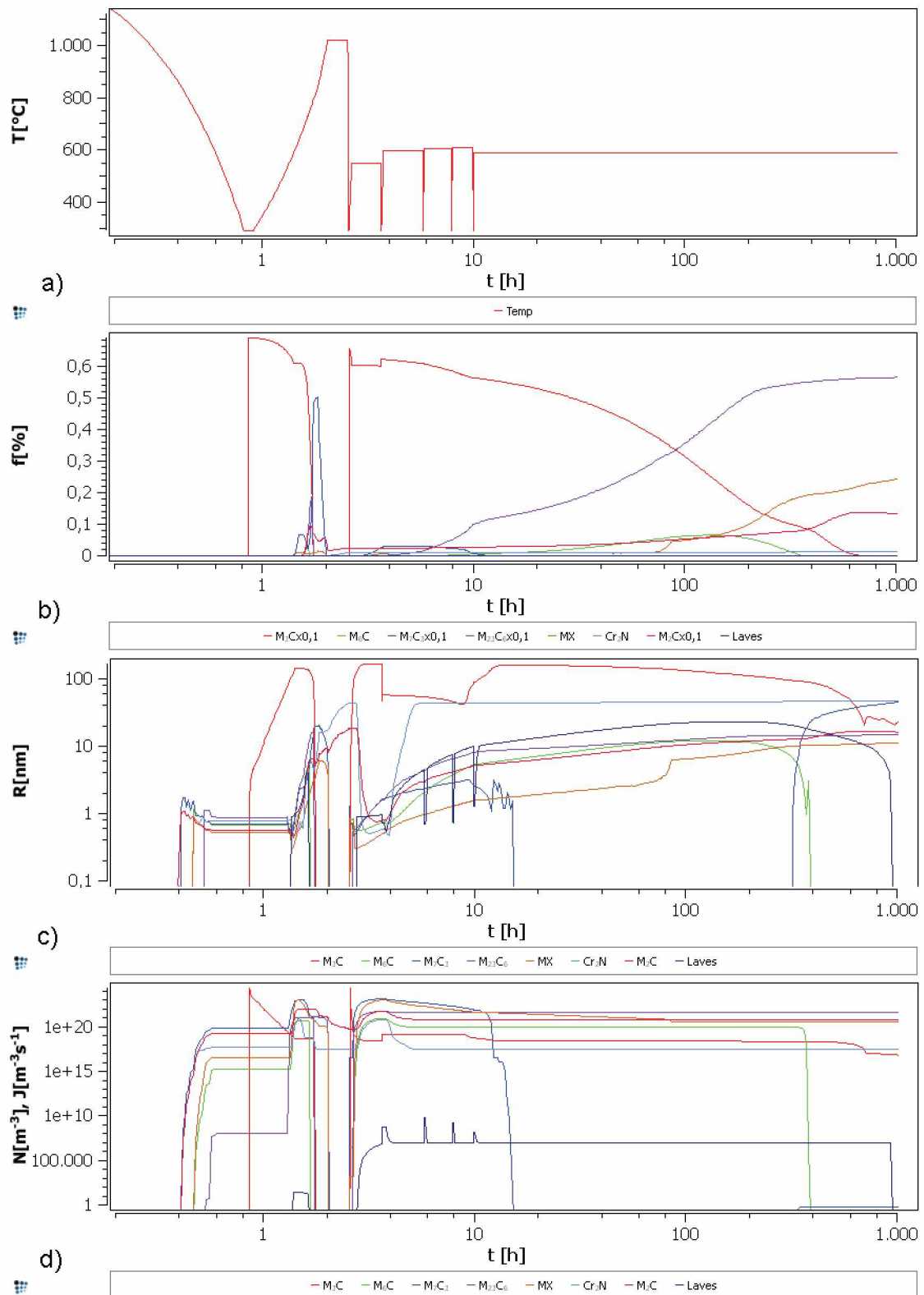
Bei einem Abkühlparameter von  $\lambda = 8$  ist in Abb. 4.25a eine längere Abkühldauer zu erkennen. Die Phasenanteile haben beinahe den gleichen Verlauf wie bei den anderen zwei Simulationen zuvor (Abb. 4.25b).  $M_6C$  scheidet sich nun während des Anlassens nicht mehr aus. Auch kommt es zu keiner Vergrößerung, wie vorher beobachtet, des  $M_3C$  (53 nm) am Ende der Wärmebehandlung (Abb. 4.25c). Der Radius des  $M_2C$  vergrößert sich deutlich auf ca. 24 nm im Vergleich zu den vorherigen Simulationen mit ca. 5 nm bei  $\lambda = 0,5$  und 9,6 nm bei  $\lambda = 3$ .



**Abbildung 4.25:** Simulation der Ausscheidungskinetik mit  $\lambda = 8$ . a) Wärmeverlauf b) Phasenanteil c) Radien der Teilchen d) Teilchenanzahl pro Volumen. Für eine bessere Übersicht werden die Phasenanteile der  $M_3C$ ,  $M_2C$ ,  $M_{23}C_6$  und  $M_7C_3$  Ausscheidungen mit 0,1 und MX,  $M_6C$  und  $Cr_2C$  mit 10 multipliziert.

• **Simulation der Ausscheidungskinetik mit  $\lambda \approx 0,5$  und zusätzlichem Auslagern bei  $590^\circ\text{C}$ :** Bei der Verarbeitung von Werkstoffen (Strangpressen, Gesenkschmieden) treten im Warmarbeitsstahl kurzfristig zyklische Temperaturschwankungen bis  $600^\circ\text{C}$  auf. Diese Simulation berechnet den Einfluss dieser Temperaturschwankungen auf das Ausscheidungsverhalten während des Betriebes für einen X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahl. Für die Beschreibung der zyklischen Temperaturschwankungen wurde die mittlere Temperatur von  $590^\circ\text{C}$  gewählt. Nach dem vierten Anlassen wird nochmals auf eine Temperatur von  $590^\circ\text{C}$  erwärmt und anschließend für 1000 Stunden gehalten (Abb. 4.26a). Während des Auslagerns löst sich der Anteil des  $M_3C$  beinahe auf und der des  $M_{23}C_6$  steigt stark an (Abb. 4.26b). Die MX- und  $M_2C$ -Anteile steigen ebenfalls mit der Dauer des Auslagerns an, während sich  $M_7C_3$  auflöst und zu einem späteren Zeitpunkt wieder ausscheidet.  $M_6C$  erreicht bei ca. 130 Stunden seinen maximalen Anteil und löst sich danach wieder auf. Der Radius des  $M_3C$  steigt zu Beginn des Auslagerns stark an und verringert sich danach wieder (Abb. 4.26c). Es ist zu erkennen, dass die anderen Radien leicht steigen oder konstant bleiben.





**Abbildung 4.26:** Simulation der Ausscheidungskinetik beim Auslagern in logarithmischer Darstellung. a) Wärmeverlauf b) Phasenanteil c) Radien der Teilchen d) Teilchenanzahl pro Volumen. Für eine bessere Übersicht wird der Phasenanteil der  $M_3C$ ,  $M_2C$ ,  $M_{23}C_6$  und  $M_7C_3$  Ausscheidungen mit 0,1 multipliziert.

### 4.3 Diskussion der Ergebnisse

Im folgenden werden die experimentellen Untersuchungen mit den Ergebnissen der Simulationen mit *MatCalc<sup>TM</sup>* verglichen und diskutiert.

Die detektierten Ausscheidungen der Probe 1 und 4, bei denen es sich vorwiegend um Primärausscheidungen handelt, wurden mittels REM und EDX-Analyse untersucht. Laut EDX-Analyse handelt es sich bei den Ausscheidungen der Probe 1, die nach dem Härten entnommen wurde, entweder um Vanadiumkarbide oder -nitride mit einer Größe von 20 nm bis 400 nm (Kap. 4.1.1).

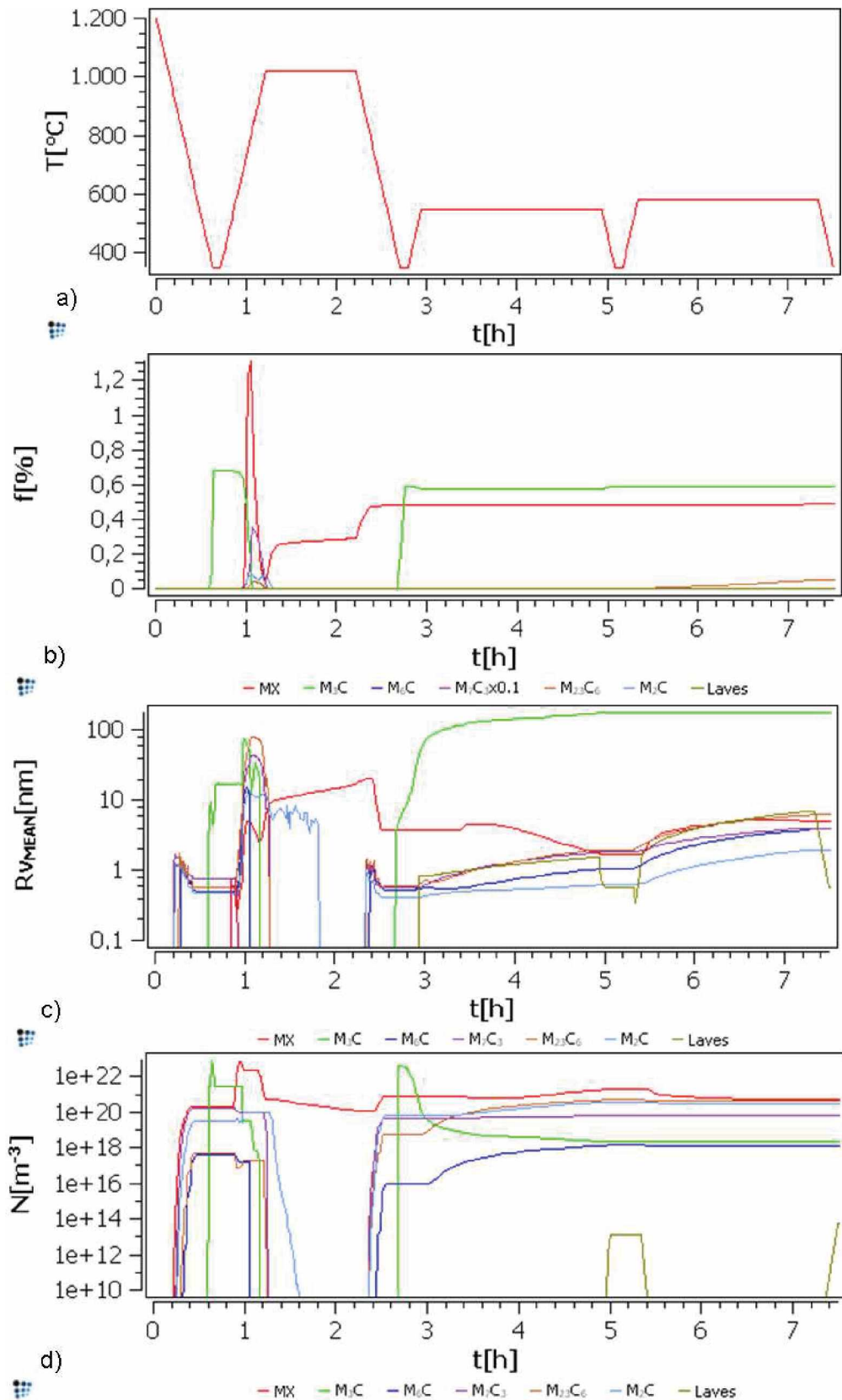
Da bei der ersten Untersuchung der Probe 4 eine Ätzstruktur zu erkennen war, wurde die Probe 4 ein weiteres Mal poliert und untersucht.

Bei der ersten Untersuchungsreihe der Probe 4 wurden Ausscheidungen mit einer Größe von ca. 100 bis 600 nm detektiert (Abb. 4.8). Diese Ausscheidungen können aufgrund der EDX-Analysen wie z.B. in Abb. 4.9 und 4.10 als Vanadiumkarbid/ -nitrid oder ein Molybdänkarbid bestimmt werden. In der Analyse in Abb. 4.11 handelt es sich um ein Eisen- oder Chromkarbid. Ein anderes Ergebnis ergab die Analyse der Ausscheidung 4 der Probe 4 (Abb. 4.12). In Abb. 4.13 sind die zwei großen *Titan- und Vanadiumpeaks* und der überlagerte *Titan- und Nitridpeak* zu sehen, die auf ein Titankarbid/-nitrid, Vanadiumkarbid/-nitrid, Chromkarbid/-nitrid oder einer Mischung aus Vanadium-Titan-Karbid/-Nitrid schließen lässt.

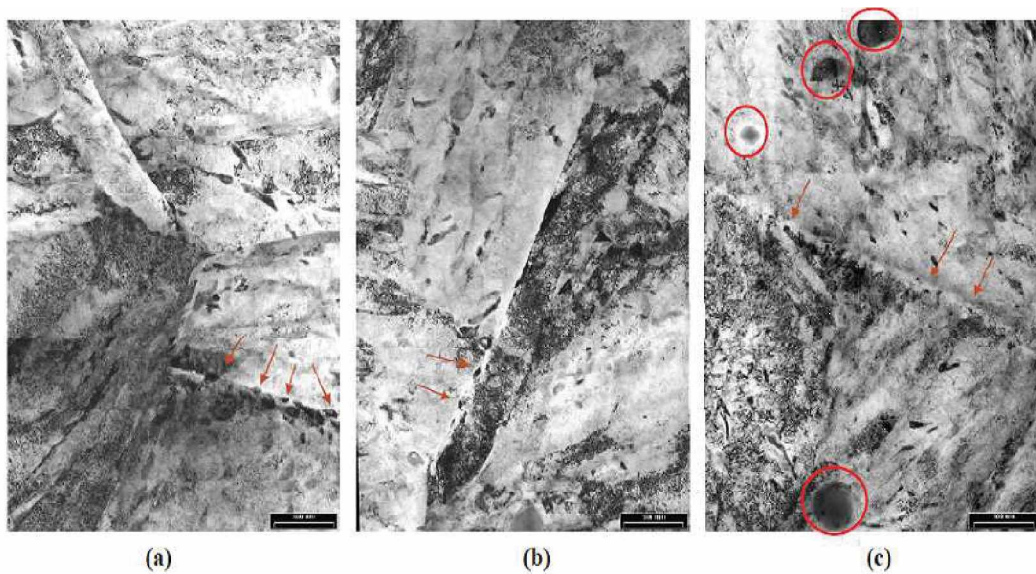
Die zweite Untersuchungsreihe der Probe 4 ergab eine Größe von ca. 160 bis 500 nm für die untersuchten Ausscheidungen, die durch die Analyse als Vanadiumkarbide oder -nitride beschrieben werden. Die Ergebnisse der beiden Untersuchungsreihen der Probe 4 führten zu den selben Ergebnissen. Die Radien der Ausscheidungen beider Untersuchungen liegen ca. zwischen 100 nm und 600 nm und bei den detektierten Ausscheidungen handelt es sich um Vanadiumkarbide/-nitride, Chromkarbide/-nitride oder auch um Eisenkarbide.

Da die feinen Sekundärausscheidungen durch die EDX-Analyse nicht genau bestimmt werden konnten, müssen für eine genaue Validation zwischen den Simulationen und den experimentellen Ergebnissen weitere Untersuchungen durchgeführt werden.

An dieser Stelle wird auf die Arbeit von Krumphals et al. [33] verwiesen, bei der die Wärmebehandlung eines X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls (Böhler W400) zu einer Zielhärte von 48 bis 50 HRC führte. Die Proben des W400 wurden für eine Stunde bei 1020°C austenitisiert und anschließend gehärtet. Darauf folgten zwei Anlassstufen mit 550°C und 580°C für jeweils 2 Stunden. Der schematische Temperaturverlauf wird in den Ergebnissen der MatCalc Simulationen in Abb. 4.27a gezeigt. Mittels Transmissions-Elektronen-Mikroskop (TEM) wurden die Stahlproben auf Sekundärausscheidungen untersucht und anschließend mit den Ergebnissen der durchgeführten MatCalc Simulationen, die in Abb. 4.27 dargestellt werden, verglichen. Der Vergleich der Simulationsergebnisse mit den experimentellen Ergebnissen (Abb. 4.28) in Krumphals et al. ergab, dass die Größe des  $Fe_3C$  ( $75 \pm 20$  nm) mit dem Radius des  $Fe_3C$  (100 nm) der Simulation (Abb. 4.27c) gut übereinstimmte.



**Abbildung 4.27:** Simulation der Ausscheidungskinetik des W400. a) Temperaturverlauf b) Phasenanteil c) Radien der Teilchen d) Teilchenanzahl pro Volumen. Für eine bessere Übersicht wird der Phasenanteil der  $M_7C_3$  Ausscheidung mit 0,1 multipliziert [33].



**Abbildung 4.28:** TEM-Aufnahmen des W400. Ausscheidungen wie  $Fe_3C$ , VC an den Korngrenzen (rote Pfeile), große Primärkarbide (rote Kreise) und eine hohe Versetzungsdichte [33].

Da der W400 nur einen anderen Siliziumgehalt ( $Si \sim 0,2$ ) als der W300 ( $Si \sim 1,10$ ) besitzt, werden die Ergebnisse dieser Arbeit mit den Ergebnissen der Arbeit von Krumphals et al. verglichen.

In der vorliegenden Arbeit wurde bei der Simulation des Ausscheidungsverhalten bei einem Abkühlparameter von  $\lambda \approx 0,5$  ein Radius des  $Fe_3C$  von ca. 90 nm simuliert (Abb. 4.23). Bei den Simulationen mit  $\lambda = 3$  bzw. 8 (Abb. 4.24 bzw. 4.25) wurden Radien von 54 nm bzw. 53 nm ermittelt. Die Ergebnisse der Simulationen dieser Arbeit passen somit relativ gut zu den experimentellen Ergebnissen von Krumphals et al..

Für eine genauere Validation zwischen den Simulationen und den Stahlproben des X38Cr-MoV5-1 Warmarbeitsstahl (W300) müssen weitere experimentelle Versuche durchgeführt werden. Allerdings ist eine REM-EDX-Analyse bei dieser Stahlorte und Wärmebehandlung keine geeignete Untersuchungsmethode. In zukünftigen Arbeiten könnte eine Untersuchung mittels Transmissions-Elektronen-Mikroskops (TEM) zu detaillierteren Ergebnis führen, da mittels TEM sehr kleine Teilchen detektiert werden können.

## 5 Zusammenfassung

Warmarbeitsstähle zählen zu jenen Stählen, die als Werkzeuge für das spanlose Umformen von Werkstoffen wie Aluminium-, Zink-, Magnesium-, Kupfer- und Eisenlegierungen bei erhöhten Temperaturen eingesetzt werden. Verwendet werden sie beim Strangpressen, Druckguss, Schmieden mit Gesenken oder Hämmern und Schneiden.

Für diese Anwendungen werden besondere Anforderungen an die Anlassbeständigkeit, Warmfestigkeit, Warmhärte, Warmverschleißwiderstand, Warmzähigkeit und Temperaturwechselbeständigkeit gestellt. Durch Zulegieren einiger Legierungselemente wie Chrom, Molybdän, Mangan und Vanadin können die benötigten Eigenschaften mittels einer bestimmten Wärmebehandlung eingestellt werden. Während des Härtens wird ein martensitisches Gefüge eingestellt und im nachfolgenden Anlassen scheiden sich Sonderkarbide vom Typ  $MC$ ,  $M_2C$ ,  $M_6C$ ,  $M_{23}C_6$  und  $M_7C_3$  aus und können so zu einem Sekundärhärtemaximum führen.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war die Untersuchung der Ausscheidungskinetik von Karbiden ausgehend von der chemischen Zusammensetzung des Warmarbeitsstahls X38CrMoV5-1 (W300) während einer bestimmten Wärmebehandlung. Es sollten die Ergebnisse der vergüteten Stahlprobe 4 (Abb. 3.4), die mit einer REM-EDX-Analyse untersucht wurde, mit den Ergebnissen der Ausscheidungssimulation, die mit der Software *MatCalc*<sup>TM</sup> durchgeführt wurde, abgeglichen und verifiziert werden.

Die Ergebnisse der experimentellen Untersuchung mittels REM-EDX-Analyse zeigten vorwiegend Primärausscheidungen von einer Größe zwischen 100 nm bis 600 nm. Bei den untersuchten Ausscheidungen handelt es sich um Vanadiumkarbide/-nitride, Chromkarbide/-nitride oder auch um Eisenkarbide.

Die Simulationsergebnisse der vorliegenden Arbeit wurden ebenfalls mit den Ergebnissen der Arbeit von Krumphals et al. verglichen. In der Arbeit von Krumphals et al. wurde ein X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahl (W400) bei 1020°C (1 Stunde) gehärtet und anschließend bei 550°C und 580°C (jeweils 2 Stunden) angelassen. Der Vergleich der experimentellen Ergebnisse mit den Simulationen in Krumphals et al. ergaben, dass die Größe des  $Fe_3C$  ( $75 \pm 20$  nm) mit dem Radius des  $Fe_3C$  (100 nm) der Ausscheidungssimulation (Abb. 4.27c) übereinstimmte.

Die Ergebnisse der Simulation des Ausscheidungsverhaltens bei einem Abkühlparameter von  $\lambda \approx 0,5$  ergaben in der vorliegenden Arbeit einen Radius des  $Fe_3C$  von ca. 90 nm (Abb. 4.23c) und bei den Simulationen mit  $\lambda = 3$  bzw. 8 wurden Radien von 54 bzw. 53 nm (Abb. 4.24c und 4.25c) berechnet. Somit kann gesagt werden, dass die Ergebnisse der Simulationen dieser Arbeit sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmen.

Für eine genauere Validation zwischen den Simulationen und den experimentellen Ergebnissen des Warmarbeitsstahls X38CrMoV5 – 1 (W300) müssen weitere experimentelle Untersuchungen durchgeführt werden. Eine Untersuchung mittels Transmissions-

---

Elektronen-Mikroskop (TEM) wäre vorteilhaft, da diese Methode sehr kleine Teilchen analysieren kann.

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Anlasskurven in Abhängigkeit von der Härte und Anlasstemperatur einiger Warmarbeits- und Schnellarbeitsstähle . . . . .	3
2.2	Einfluss von Chrom und Molybdän auf die Anlasshärte von Stählen mit ca. 0,25%C . . . . .	3
2.3	Einfluss von Wolfram, Molybdän und Vanadin auf die Anlassbeständigkeit von Stählen mit ca. 0,3%C und 2,5%Cr . . . . .	4
2.4	Einfluss des Legierungsgehaltes auf den Verschleißwiderstand verschiedener Warmarbeitsstähle . . . . .	5
2.5	Abhängigkeit der Zugfestigkeit, Streckgrenze und Brucheinschnürung von der Anlasstemperatur für einen X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahl . . . . .	6
2.6	Wärmebehandlungsschema für den Warmarbeitsstahl Böhler W300 . . . . .	9
2.7	ZTU-Diagramm eines X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls . . . . .	10
2.8	Martensitisches Gefüge eines X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls nach dem Härten . . . . .	10
2.9	Ausscheidungen beim Erwärmen abgeschreckter Gefüge . . . . .	11
2.10	Relative Härte von Karbiden, Zementit und Martensit in Werkzeugstählen . . . . .	12
2.11	Gemessenes Zeit-Temperatur-Ausscheidungs-Diagramm . . . . .	13
2.12	Vorgänge bei der Bildung des Sekundärhärtemaximums eines Warmarbeitsstahls . . . . .	14
2.13	Einfluss der Anlasstemperatur . . . . .	14
2.14	Schematische Darstellung der Wärmebehandlung für die Ausscheidungs- umwandlung . . . . .	15
2.15	Zeitlicher Verlauf der Teilchengröße, des -abstandes und des -volumenanteils . . . . .	16
2.16	Aufbau der Phasengrenzfläche Teilchen/Matrix in Abhängigkeit vom Misfit- Parameter . . . . .	17
2.17	Änderung der Anteile der freien Enthalpie mit dem Teilchenradius . . . . .	18
2.18	Änderung der gesamten freien Enthalpie mit dem Ausscheidungsradius . . . . .	19
2.19	Keimbildungsrate in Abhängigkeit von der Temperatur und Zusammenset- zung . . . . .	20
2.20	Gitterfehlstellen für die heterogene Ausscheidungskeimbildung . . . . .	20
2.21	Linsenförmiger Keim mit Krümmungsradius $r^*$ an einer Korngrenze . . . . .	21
2.22	Aktivierungsenergie für verschiedene Arten von Korngrenzennukleation . . . . .	22

---

2.23	Schematischer Verlauf der Konzentration zwischen zwei Ausscheidungen mit unterschiedlichen Radien . . . . .	25
2.24	Schematische Darstellung einer Abscherung um den Burgersvektor $b$ eines Teilchens durch eine Versetzung . . . . .	27
2.25	Entstehung einer Antiphasengrenze beim Schneiden eines geordneten Teilchens . . . . .	28
2.26	Änderung der Aufspaltungweite beim Durchgang durch eine Ausscheidung mit anderer Stapelfehlerenergie . . . . .	29
2.27	Abhängigkeit der Schubspannung von der Teilchengrösse . . . . .	30
2.28	Verschiedene Stadien des Orowan-Mechanismus . . . . .	31
2.29	Kampmann-Wagner Modell . . . . .	32
2.30	Mittelwert der Konzentration um ein einzelnes Teilchen . . . . .	33
3.1	Einkammervakuumofen der Firma SysTherms . . . . .	36
3.2	Experimenteller Verlauf der Härtebehandlung . . . . .	36
3.3	Anlassofen der Firma ThermConcept . . . . .	37
3.4	Schematischer Verlauf der Wärmebehandlung . . . . .	38
3.5	Dialogfenster thermodynamische Datenbank . . . . .	40
3.6	Dialogfenster der chemischen Zusammensetzung . . . . .	40
3.7	Dialogfenster für die Berechnung eines Gleichgewichtes bei 700°C . . . . .	41
3.8	Dialogfenster des Step equilibrium . . . . .	41
3.9	Dialogfenster für die Auswahl eines geeigneten Ausgabetyps . . . . .	42
3.10	Einstellungen für die Berechnung eines Punktes auf einer Phasengrenzfläche . . . . .	43
3.11	Einstellungen für die Berechnung einer Phasengrenzfläche . . . . .	43
3.12	Darstellung einer Phasengrenzlinie im Ausgabefenster . . . . .	44
3.13	Hochladen der Diffusionsdatenbank . . . . .	44
3.14	Einstellungen für Bildung einer Ausscheidung . . . . .	45
3.15	Bestätigung der Einstellungen für Bildung einer Ausscheidung . . . . .	45
3.16	Einstellungen der Ausscheidungen . . . . .	46
3.17	Dialogfenster "Precipitation domain" . . . . .	46
3.18	Dialogfenster "Phase status" . . . . .	47
3.19	Einstellungen der Keimstellen für Austenit . . . . .	47
3.20	Einstellung der Keimstellen für Ferrit . . . . .	48



---

4.1	REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 1 nach dem Härten . . . . .	50
4.2	EDX-Analyse der ersten Ausscheidung der Probe 1 nach dem Härten . . .	51
4.3	EDX-Analyse der zweiten Ausscheidung der Probe 1 nach dem Härten . .	51
4.4	REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 1 nach dem Härten . . . . .	52
4.5	EDX-Analyse der dritten Ausscheidung der Probe 1 nach dem Härten . . .	52
4.6	EDX-Analyse der vierten Ausscheidung der Probe 1 nach dem Härten . . .	53
4.7	EDX-Analyse des Bereichs 5 der Probe 1 nach dem Härten . . . . .	53
4.8	REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 4 . . . . .	54
4.9	EDX-Analyse der ersten Ausscheidung der Probe 4 . . . . .	54
4.10	EDX-Analyse der zweiten Ausscheidung der Probe 4 . . . . .	55
4.11	EDX-Analyse der dritten Ausscheidung der Probe 4 . . . . .	55
4.12	REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 4 . . . . .	56
4.13	EDX-Analyse der vierten Ausscheidung der Probe 4 . . . . .	56
4.14	EDX-Analyse der fünften Ausscheidung der Probe 4 . . . . .	57
4.15	EDX-Analyse der sechsten Ausscheidung der Probe 4 . . . . .	57
4.16	REM-Bild einiger Ausscheidungen der Probe 4 nach einem weiteren Polier- vorgang . . . . .	58
4.17	EDX-Analyse der ersten Ausscheidung der Probe 4 nach einem weiteren Poliervorgang . . . . .	58
4.18	EDX-Analyse der zweiten Ausscheidung der Probe 4 nach einem weiteren Poliervorgang . . . . .	59
4.19	EDX-Analyse der dritten Ausscheidung der Probe 4 nach einem weiteren Poliervorgang . . . . .	59
4.20	Berechnetes Phasendiagramm des X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls . . . . .	60
4.21	Phasenmengendiagramm des X38CrMoV5-1 Warmarbeitsstahls . . . . .	62
4.22	Verlauf der Wärmebehandlung . . . . .	62
4.23	Simulation der Ausscheidungskinetik mit $\lambda \approx 0,5$ . . . . .	64
4.24	Simulation der Ausscheidungskinetik mit $\lambda = 3$ . . . . .	66
4.25	Simulation der Ausscheidungskinetik mit $\lambda = 8$ . . . . .	68
4.26	Simulation der Ausscheidungskinetik beim Auslagern . . . . .	70
4.27	Simulation der Ausscheidungskinetik des W400 . . . . .	72
4.28	TEM-Aufnahmen des W400 . . . . .	73

# Tabellenverzeichnis

2.1	Anhaltswerte von Prozesstemperaturen bei der Verarbeitung . . . . .	2
2.2	Typische Warmarbeitsstähle und Beispiele für deren Anwendung . . . . .	7
3.1	Chemische Zusammensetzung in % des Warmarbeitsstahls X38CrMoV5-1 .	35
3.2	Wärmebehandlung der experimentellen Untersuchung . . . . .	37
3.3	Härtewerte der Proben . . . . .	38
4.1	Phasen des berechneten Phasendiagramms . . . . .	61

# Literaturverzeichnis

- [1] J. Mayerhofer: “Skriptum Werkstoffkunde der Stähle-Part: Hochlegierte Stähle”, WS1997/98.
- [2] Böhler Werkstoffdatenblatt X38CrMoV5-1: Böhler Werksbezeichnung: W300.
- [3] Uddeholm: Broschüre Lieferprogramm Warmarbeitsstähle.
- [4] W. Jäniche und Autorenkollektiv: *Werkstoffkunde Stahl Bd.2 Anwendungen*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo, 1985.
- [5] H. Berns und W. Theisen: *Eisenwerkstoffe-Stahl und Gusseisen*, 3 Aufl., Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [6] E. C. Bain und H. W. Paxton: *Alloying Elements in Steel*, Bd. 2, American Society of Metals, Metals Park, Ohio, 1966.
- [7] R. D. Koester und D. P.: “Hot hardness of selected borides, oxides, and carbides to 1900°C”, *Journal of the American Ceramic Society* **55**:290–296, 1967.
- [8] H. Berns: *in: Werkstoffkunde der gebräuchlichen Stähle, Teil 2*, Verein. Deutscher Eisenhüttenleute, Düsseldorf, 1977.
- [9] H. Voss, E. Wetter und F. Netthöfel: “Verschleißverhalten von vergütbaren Gesenkstählen”, *Archiv Eisenhüttenwesen* **38**:379–386, 1967.
- [10] W. Jäniche und Autorenkollektiv: *Werkstoffkunde Stahl Bd.1 Grundlagen*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo, 1985.
- [11] S. Mayer, C. Scheu, H. Leitner, H. Clemens und I. Siller: “Influence of the cooling rate on the mechanical properties of a hot-work tool steel”, *BHM* **152**(5), 2007.
- [12] W. Krieger, C. Bernhard und J. Korp: “Skriptum Herstellungswege ausgewählter Produktgruppen”, WS2007/08.
- [13] P. Gümpel, H.-W. Hellmonds und M. Hoock: “Karbidausscheidungen in dem Warmarbeitsstahl X38CrMoV5-1”, *Thyssen EdelstahlTechnische Berichte* **11**(2):143–149, 1985.
- [14] H. Hiebler: “Skriptum Prozeßketten ausgewählter Produktgruppen”, WS2000/01.
- [15] R. Bürgel: *Handbuch Hochtemperatur-Werkstofftechnik*, Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, 1998.
- [16] H. Cerjak: “Skriptum Werkstoffkunde Laborübung”, SS2007. IWS TU Graz.
- [17] G. Gottstein: *Physikalische Grundlagen der Materialkunde*, Bd. 2, Springer-Verlag, 2001.

- [18] E. Hornbogen: *in: W. Dahl, Grundlagen des Festigkeits- und Bruchverhaltens*, Verlag Stahleisen, Düsseldorf.
- [19] D. A. Porter und K. E. Easterling: *Phase Transformations in Metals and Alloys*, Bd. 2, Chapman & Hall, 1992.
- [20] J. W. Cahn: “The kinetics of grain boundary nucleated reactions”, *Acta Metallurgica* **4**:449–459, 1956.
- [21] P. Haasen: *Physikalische Metallkunde*, Bd. 3, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1994.
- [22] W. Bergmann: *Werkstofftechnik Teil 1: Grundlagen. 2. durchgesehene Auflage*, Carl Hanser Verlag, München Wien, 1968.
- [23] C. Zener: “Theory of growth of spherical precipitates from solid solution”, *J. Appl. Phys.* **20**:950–953, 1949.
- [24] R. Radis: *Untersuchung der Ausscheidungskinetik und der Teilchenverteilung in der Nickelbasis-Superlegierung UDIMET 720 Li*, Diplomarbeit, TUGraz, 2007.
- [25] E. Kozeschnik: “Thermodynamic and kinetic simulations with MatCalc”, 2008.
- [26] R. Kampmann und R. Wagner: “Kinetics of precipitation in metastable binary alloys-theory and applications”, *Acta Scripta Metall. series-Decomposition of alloys: the early stages* S. 91–103, 1984.
- [27] E. Kozeschnik, J. Svoboda, P. Fratzl und F. D. Fischer: “Modelling of kinetics in multi-component multi-phase systems with spherical precipitates II: Numerical solution and application”, *Mater. Sci. Eng. A* **385**(1-2):157–165, 2004.
- [28] J. Svoboda, F. D. Fischer, P. Fratzl und E. Kozeschnik: “Modelling of kinetics in multi-component multi-phase systems with spherical precipitates I: Theory”, *Mater. Sci. Eng. A* **385**(1-2):166–174, 2004.
- [29] E. Kozeschnik, J. Svoboda und F. D. Fischer: “Modified evolution equations for the precipitation kinetics of complex phases in multi-component systems”, *CALPHAD* **28**(4):379–382, 2005.
- [30] “Böhler Edelstahl-Handbuch”, 2006.
- [31] <http://de.wikipedia.org/wiki/Rasterelektronenmikroskop>.
- [32] <http://www.felmi-zfe.tugraz.at/>.
- [33] F. Krumphals, T. Wlanis, C. Sommitsch, I. Holzer, B. Sonderegger und V. Wieser: “Modelling of microstructure evolution in hot work tool steels during service”, *Proceedings of 16th Komplastech Conference, Computer Methods in Materials Science* **9**(2):228–233, 2009.

# A Beispielanhang

Im folgenden werden die für die Simulation der Ausscheidungskinetik verwendeten "Scripts" aufgelistet.

## A.1 Skript der Ausscheidungskinetik mit $\lambda \approx 0,5$

```
$Application
$*****
$new workspace
$*****
new_workspace
set_workspace_info Simulation der Wärmebehandlung von W300 (Probe B15)
set_workspace_info +
set_workspace_info + Ausgewählte Elemente:
set_workspace_info + Fe C Si Cr Mo Mn V
set_workspace_info +
set_workspace_info + Matrix phases: Ferrite(BCC_A2) , Austenite(FCC_A1)
set_workspace_info + Precipitate phases: MX (NbC, VN) , M6C , M7C3 , M23C6 ,
HCP_A3
set_workspace_info + M3C(Cementite) and Laves phase
set_workspace_info +
set_workspace_info + Wärmebehandlung
set_workspace_info + Casting von 1400°C
set_workspace_info + Austenitisieren bei 1020°C für 30 Minuten
set_workspace_info + Abkühlen auf Martensit-Start-Temperatur mit Lambda=0,5
set_workspace_info + 1.Anlassen bei 550°C für 1 Stunde
set_workspace_info + 2.Anlassen bei 595°C für 2 Stunden
set_workspace_info + 3.Anlassen bei 605°C für 2 Stunden
set_workspace_info + 4.Anlassen bei 610°C für 2 Stunden
$*****
$DATENBANK
$*****
open_thermodyn_database mc_steel.tdb
$*****
$AUSGEWÄHLTE ELEMENTE; CHEMISCHE ZUSAMMENSETZUNG
$*****
select_elements C Cr Fe Mn Mo Si V N
select_phase fcc_a1 bcc_a2 hcp_a3 cementite laves_phase M23C6 M7C3 M23C6 M6C
set_reference_element fe
read_thermodyn_database
enter_composition wp c=0,38 Cr=5,00 Mn=0,40 Mo=1,30 Si=1,10 V=0,40 N=0,001
```

```

$*****
$VARIABLEN
$*****
set-variable-value npc 100 $ number of particle classes
$*****
$DATENBANK DIFFUSION
$*****
read_mobility_database mc_sample_fe.ddb
$*****
$GLEICHGEWICHTSBERRECHNUNG
$*****
set_temperature_celsius 1100
set_automatic_startvalues
calc_equilibrium
$*****
PRECIPITATION
$*****
$-----
$PRECIPITATION DOMAIN
$-----
create_precipitation_domain austenite $Austenite as. parti. domain
set_precipitation_parameter austenite x fcc_a1 $matrix phase of domain austenite
set_precipitation_parameter austenite d 1e12 $dislocation density
set_precipitation_parameter austenite g 100e-6 $grain diameter
create_precipitation_domain ferrite
set_precipitation_parameter ferrite x bcc_a2 $matrix phase of domain austenite
set_precipitation_parameter ferrite d 1e14 $dislocation density
set_precipitation_parameter ferrite g 100e-6 1 $grain diameter
set_precipitation_parameter ferrite s 0,1e-6 100 $subgrain diameter
$-----
$PRECIPITATION PHASE M23C6
$-----
create_new_phase m23c6 p $ precipitation phase m23c6
set_precipitation_parameter m23c6_p0 d austenite $ domain austenite
set_precipitation_parameter m23c6_p0 c npc $ number of particle classes
set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s ge $ nucleation site=grain boundary
$-----
$PRECIPITATION PHASE MX
$-----
create_new_phase FCC_A1#01 p $ precipitate phase MX
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 d austenite
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 c npc
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M3C

```

```

$-----
create_new_phase cementite p $ precipitate phase cementite
set_precipitation_parameter cementite_p0 d austenite
set_precipitation_parameter cementite_p0 c npc
set_precipitation_parameter cementite_p0 n c p $ nucleus comp: para-equilibrium
set_precipitation_parameter cementite_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M7C3
$-----
create_new_phase m7c3 p $ precipitate phase M7C3
set_precipitation_parameter m7c3_p0 d austenite
set_precipitation_parameter m7c3_p0 c npc
set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M6C
$-----
create_new_phase m6c p $ precipitate phase M6C
set_precipitation_parameter m6c_p0 d austenite
set_precipitation_parameter m6c_p0 c npc
set_precipitation_parameter m6c_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE Cr2N
$-----
create_new_phase hcp_A3#01 p $ precipitate phase Cr2N
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 d austenite
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 c npc
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M2C
$-----
create_new_phase hcp_A3#02 p $ precipitate phase M2C
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 d austenite
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 c npc
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE LAVES PHASE
$-----
create_new_phase laves_phase p $ precipitate phase Laves phase
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 d austenite
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 c npc
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s ge
$*****
$Wärmebehandlung
$*****
create_heat_treatment sample_ht

```

```

$*****
$CASTING
$*****
$ append segment no.1(0) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 0 c cooling after casting from 1400°C to Ms $Ms-temp.=290°C
edit-ht-segment sample_ht 0 d n austenite $ define precipitation domain for first ht seg-
ment
edit-ht-segment sample_ht 0 s 1400 $ define segment start temperature
edit-ht-segment sample_ht 0 c cooling to 290°C with 0.375°C/s (Lambda 8) edit-ht-
segment sample_ht 0 1 290 -0,375
$-----
$Halten auf Temperatur von 290°C für 300 Sekunden
$-----
$ append segment no.2(1) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 1 d n ferrite
edit-ht-segment sample_ht 1 2 0 300 $ definition of second ht segment: Tdot+delta.t(2)→
end temperature: 280°C (Tdot=0 → T=const.); end time: 300s
$attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter fcc_a1#01_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter Cementite_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s gs
$*****
$Austenitisieren
$*****
$-----
$Transformationtemperatur
$-----
$ append segment no.3(2) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 2 c heating-up to transformation temperature of 825°C in 3360s
edit-ht-segment sample_ht 2 3 825 3360
$-----
$ Aufheizen
$-----
$ append segment no.4(3) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 3 c heating-up to 1020°C in 720 s
edit-ht-segment sample_ht 3 d n austenite

```



```

edit_ht_segment sample_ht 3 3 1020 720 $attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter fcc_a1#01_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter Cementite_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s ge
$-----
$AUSTENITISIEREN
$-----
$ append segment no.5(4) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 4 c $Austenitisieren bei 1020°C für 30 min
edit_ht_segment sample_ht 4 d n austenite $segment
edit_ht_segment sample_ht 4 c Austenitisieren bei 1020°C für 30 min
edit_ht_segment sample_ht 4 2 0 1800
$*****
$Härten
$*****
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.6(5) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 5 c abkühlen von 1020°C bis auf 290°C in 110 s $Lambda=0,5
edit_ht_segment sample_ht 5 d n austenite $segment
edit_ht_segment sample_ht 5 c abkühlen von 1020°C auf 290 mit in 110 s
edit_ht_segment sample_ht 5 3 290 110
$*****
$Anlassen 1
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.7(6) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 6 c Aufheizen auf 550°C
edit_ht_segment sample_ht 6 d n ferrite
edit_ht_segment sample_ht 6 c Aufheizen auf 550°C
edit_ht_segment sample_ht 6 3 550 300 $attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s gs

```

```
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter fcc_a1#01_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter Cementite_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#01_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#02_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter laves_phase_p0 n s gs
$-----
$Halten auf Temperatur von 550°C für 1 Stunde
$-----
$append segment no.8(7) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 7 c Halten auf 550°C für 3600s
edit_ht_segment sample_ht 7 3 550 3600
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.9(8) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 8 c abkühlen von 550°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 8 c abkühlen von 550°C auf 290 mit lambda_soll=0,5 (43sek.
für 260°C)
edit_ht_segment sample_ht 8 3 290 43
$*****
$Anlassen 2
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.10(9) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 9 c Aufheizen auf 595°C
edit_ht_segment sample_ht 9 d n ferrite
edit_ht_segment sample_ht 9 c Aufheizen von 290°C auf 595°C in 305sek.
edit_ht_segment sample_ht 9 3 595 305
$-----
$Halten auf Temperatur von 595°C für 2 Stunden
$-----
$append segment no.11(10) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 10 c Halten auf 595°C für 7200sek.
edit_ht_segment sample_ht 10 3 595 7200
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.12(11) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
```

```
edit_ht_segment sample_ht 11 c abkühlen von 595°C
edit_ht_segment sample_ht 11 c abkühlen von 595°C auf 290 mit lambda_soll=0,5 (51 sek.
für 305°C )
edit_ht_segment sample_ht 11 3 290 51
$*****
$Anlassen 3
$*****
$_____
$AUFHEIZEN
$_____
$append segment no.13(12) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 12 c Aufheizen auf 605°C von 290
edit_ht_segment sample_ht 12 c Aufheizen von 290°C auf 605°C in 310sek.
edit_ht_segment sample_ht 12 3 605 310
$_____
$Halten auf Temperatur von 605°C für 2 Stunden
$_____
$append segment no.14(13) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 13 c Halten auf 605°C für 7200s
edit_ht_segment sample_ht 13 3 605 7200
$_____
$ABKÜHLEN AUF Ms-Temperatur
$_____
$ append segment no.15(14) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 14 c abkühlen von 605°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 14 c abkühlen von 605°C auf 290 mit lambda=0,5(53sek. für
315°C)
edit_ht_segment sample_ht 14 3 290 53
$*****
$Anlassen 4
$*****
$_____
$AUFHEIZEN
$_____
$append segment no.16(15) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 15 c Aufheizen auf 610°C von 290
edit_ht_segment sample_ht 15 c Aufheizen von 290°C auf 610°C in 310sek.
edit_ht_segment sample_ht 15 3 610 310
$_____
$Halten auf Temperatur von 610°C für 2 Stunden
$_____
```

```

$append segment no.17(16) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 16 c Halten auf 610°C für 7200s
edit_ht_segment sample_ht 16 3 610 7200
$-----
$ABKÜHLEN AUF Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.18(17) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 17 c abkühlen von 610°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 17 c abkühlen von 610°C auf 290 mit lambda= 0,5(53sek. für
320°C)
edit_ht_segment sample_ht 17 3 290 53
$-----
$Halten auf Ms-Temperatur
$-----
$append segment no.19(18) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 18 c Halten auf 290°C für 500s
edit_ht_segment sample_ht 18 d y
edit_ht_segment sample_ht 18 3 290 500
$*****
$OUTPUT WINDOW
$*****
new-gui-window p1 set-gui-window-property . X stepvalue/3600 $ default x-axis variable
(time)
$-----
$TEMPERATUR
$-----
set-plot-option . s n b t$c
set-plot-option . s m -1 t$c Temp
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 t T[°C]
set-plot-option . l b
$-----
$PHASE FRACTIONS
$-----
create-new-plot x . $ Phase fractions
set-plot-option . s n b f$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 f$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b f$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 f$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b f$M7C3_p0

```

```

set-plot-option . s m -1 f$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b f$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 f$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b f$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 f$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b f$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 f$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b f$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 f$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b f$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 f$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 f 100
set-plot-option . a y 1 t f[%]
set-plot-option . l b
$-----
$MEAN RADIUS
$-----
create-new-plot x . $ Mean Radii set-plot-option . s n b r_mean$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b r_mean$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b r_mean$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b r_mean$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b r_mean$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 f 1e9
set-plot-option . a y 1 t R[nm]
set-plot-option . a y 1 y log
set-plot-option . a y 1 s 0,1..
set-plot-option . l b
$-----

```

\$NUMBER OF PARTICLES

```

$-----
create-new-plot x . $ Number of Particles
set-plot-option . s n b num_part$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b num_part$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b num_part$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b num_part$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b num_part$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 t N[m<sup>-3</sup>], J[m<sup>-3</sup>s<sup>-1</sup>]
set-plot-option . a y 1 y log
set-plot-option . a y 1 s 1..
set-plot-option . l b
move_gui_window . 20 20 800 1000
update_gui_window .
$*****
$Simulation
$*****
set_simulation_parameter e 1e24
set_simulation_parameter t h sample_ht 10
set_simulation_parameter s r
start-precipitate-simulation

```

## A.2 Skript der Ausscheidungskinetik mit $\lambda \approx 3$

```

$Application
$*****
$new workspace
$*****
new_workspace
set_workspace_info Simulation der Wärmebehandlung von W300 (Probe B15)

```

```

set_workspace_info +
set_workspace_info + Ausgewählte Elemente:
set_workspace_info + Fe C Si Cr Mo Mn V
set_workspace_info +
set_workspace_info + Matrix phases: Ferrite(BCC_A2) , Austenite(FCC_A1)
set_workspace_info + Precipitate phases: MX (NbC, VN) , M6C , M7C3 , M23C6 ,
HCP_A3
set_workspace_info + M3C(Cementite) and Laves phase
set_workspace_info +
set_workspace_info + Wärmebehandlung
set_workspace_info + Casting von 1400°C
set_workspace_info + Austenitisieren bei 1020°C für 30 Minuten
set_workspace_info + Abkühlen auf Martensit-Start-Temperatur mit Lambda=3
set_workspace_info + 1.Anlassen bei 550°C für 1 Stunde
set_workspace_info + 2.Anlassen bei 595°C für 2 Stunden
set_workspace_info + 3.Anlassen bei 605°C für 2 Stunden
set_workspace_info + 4.Anlassen bei 610°C für 2 Stunden
$*****
$DATENBANK
$*****
open_thermodyn_database mc_steel.tdb
$*****
$AUSGEWÄHLTE ELEMENTE; CHEMISCHE ZUSAMMENSETZUNG
$*****
select_elements C Cr Fe Mn Mo Si V N
select_phase fcc_a1 bcc_a2 hcp_a3 cementite laves_phase M23C6 M7C3 M23C6 M6C
set_reference_element fe
read_thermodyn_database
enter_composition wp c=0,38 Cr=5,00 Mn=0,40 Mo=1,30 Si=1,10 V=0,40 N=0,001
$*****
$VARIABLEN
$*****
set-variable-value npc 100 $ number of particle classes
$*****
$DATENBANK DIFFUSION
$*****
read_mobility_database mc_sample.fe.ddb
$*****
$GLEICHGEWICHTSBERRECHNUNG
$*****
set_temperature_celsius 1100
set_automatic_startvalues
calc_equilibrium
$*****
PRECIPITATION

```

```

$*****
$-----
$PRECIPITATION DOMAIN
$-----
create_precipitation_domain austenite $Austenite as. parti. domain
set_precipitation_parameter austenite x fcc_a1 $matrix phase of domain austenite
set_precipitation_parameter austenite d 1e12 $dislocation density
set_precipitation_parameter austenite g 100e-6 $grain diameter
create_precipitation_domain ferrite
set_precipitation_parameter ferrite x bcc_a2 $matrix phase of domain austenite
set_precipitation_parameter ferrite d 1e14 $dislocation density
set_precipitation_parameter ferrite g 100e-6 1 $grain diameter
set_precipitation_parameter ferrite s 0,1e-6 100 $subgrain diameter
$-----
$PRECIPITATION PHASE M23C6
$-----
create_new_phase m23c6 p $ precipitation phase m23c6
set_precipitation_parameter m23c6_p0 d austenite $ domain austenite
set_precipitation_parameter m23c6_p0 c npc $ number of particle classes
set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s ge $ nucleation site=grain boundary
$-----
$PRECIPITATION PHASE MX
$-----
create_new_phase FCC_A1#01 p $ precipitate phase MX
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 d austenite
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 c npc
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M3C
$-----
create_new_phase cementite p $ precipitate phase cementite
set_precipitation_parameter cementite_p0 d austenite
set_precipitation_parameter cementite_p0 c npc
set_precipitation_parameter cementite_p0 n c p $ nucleus comp: para-equilibrium
set_precipitation_parameter cementite_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M7C3
$-----
create_new_phase m7c3 p $ precipitate phase M7C3
set_precipitation_parameter m7c3_p0 d austenite
set_precipitation_parameter m7c3_p0 c npc
set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M6C
$-----

```



```

create_new_phase m6c p $ precipitate phase M6C
set_precipitation_parameter m6c_p0 d austenite
set_precipitation_parameter m6c_p0 c npc
set_precipitation_parameter m6c_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE Cr2N
$-----
create_new_phase hcp_A3#01 p $ precipitate phase Cr2N
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 d austenite
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 c npc
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M2C
$-----
create_new_phase hcp_A3#02 p $ precipitate phase M2C
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 d austenite
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 c npc
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE LAVES PHASE
$-----
create_new_phase laves_phase p $ precipitate phase Laves phase
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 d austenite
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 c npc
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s ge
$*****
$Wärmebehandlung
$*****
create_heat_treatment sample_ht
$*****
$CASTING
$*****
$ append segment no.1(0) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 0 c cooling after casting from 1400°C to Ms $Ms-temp.=290°C
edit-ht-segment sample_ht 0 d n austenite $ define precipitation domain for first ht seg-
ment
edit-ht-segment sample_ht 0 s 1400 $ define segment start temperature
edit-ht-segment sample_ht 0 c cooling to 290°C with 0.375°C/s (Lambda 8) edit-ht-
segment sample_ht 0 1 290 -0,375
$-----
$Halten auf Temperatur von 290°C für 300 Sekunden
$-----
$ append segment no.2(1) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht

```

```

edit-ht-segment sample_ht 1 d n ferrite
edit-ht-segment sample_ht 1 2 0 300 $ definition of second ht segment: Tdot+delta.t(2)→
end temperature: 280°C (Tdot=0 → T=const.); end time: 300s
$attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter fcc_a1#01_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter Cementite_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s gs
$*****
$Austenitisieren
$*****
$-----
$Transformationtemperatur
$-----
$ append segment no.3(2) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 2 c heating-up to transformation temperature of 825°C in 3360s
edit-ht-segment sample_ht 2 3 825 3360
$-----
$ Aufheizen
$-----
$ append segment no.4(3) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 3 c heating-up to 1020°C in 720 s
edit-ht-segment sample_ht 3 d n austenite
edit-ht-segment sample_ht 3 3 1020 720 $attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter fcc_a1#01_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter Cementite_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s ge
$-----
$AUSTENITISIEREN
$-----
$ append segment no.5(4) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 4 c $Austenitisieren bei 1020°C für 30 min
edit_ht_segment sample_ht 4 d n austenite $segment

```

```

edit_ht_segment sample_ht 4 c Austenitisieren bei 1020°C für 30 min
edit_ht_segment sample_ht 4 2 0 1800
$*****
$Härten
$*****
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.6(5) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 5 c abkühlen von 1020°C bis auf 290°C in 730 s $Lambda=3
edit_ht_segment sample_ht 5 d n austenite
edit_ht_segment sample_ht 5 c abkühlen von 1020°C auf 290 mit in 730 s
edit_ht_segment sample_ht 5 3 290 730
$*****
$Anlassen 1
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.7(6) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 6 c Aufheizen auf 550°C
edit_ht_segment sample_ht 6 d n ferrite
edit_ht_segment sample_ht 6 c Aufheizen auf 550°C
edit_ht_segment sample_ht 6 3 550 300 $attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter fcc_a1#01_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter Cementite_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#01_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#02_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter laves_phase_p0 n s gs
$-----
$Halten auf Temperatur von 550°C für 1 Stunde
$-----
$append segment no.8(7) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 7 c Halten auf 550°C für 3600s
edit_ht_segment sample_ht 7 3 550 3600
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.9(8) to heat treatment schedule

```

```

append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 8 c abkühlen von 550°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 8 c abkühlen von 550°C auf 290 mit lambda_soll=0,5 (43sek.
für 260°C)
edit_ht_segment sample_ht 8 3 290 43
$*****
$Anlassen 2
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.10(9) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 9 c Aufheizen auf 595°C
edit_ht_segment sample_ht 9 c Aufheizen von 290°C auf 595°C in 305sek.
edit_ht_segment sample_ht 9 3 595 305
$-----
$Halten auf Temperatur von 595°C für 2 Stunden
$-----
$append segment no.11(10) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 10 c Halten auf 595°C für 7200sek.
edit_ht_segment sample_ht 10 3 595 7200
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.12(11) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 11 c abkühlen von 595°C
edit_ht_segment sample_ht 11 c abkühlen von 595°C auf 290 mit lambda_soll=0,5 (51 sek.
für 305°C )
edit_ht_segment sample_ht 11 3 290 51
$*****
$Anlassen 3
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.13(12) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 12 c Aufheizen auf 605°C von 290
edit_ht_segment sample_ht 12 c Aufheizen von 290°C auf 605°C in 310sek.
edit_ht_segment sample_ht 12 3 605 310
$-----
$Halten auf Temperatur von 605°C für 2 Stunden

```

```
$-----
$append segment no.14(13) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 13 c Halten auf 605°C für 7200s
edit_ht_segment sample_ht 13 3 605 7200
$-----
$ABKÜHLEN AUF Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.15(14) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 14 c abkühlen von 605°C bis auf 290 $segment
edit_ht_segment sample_ht 14 c abkühlen von 605°C auf 290 mit lambda=0,5(53sek. für
315°C)
edit_ht_segment sample_ht 14 3 290 53
$*****
$Anlassen 4
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.16(15) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 15 c Aufheizen auf 610°C von 290
edit_ht_segment sample_ht 15 c Aufheizen von 290°C auf 610°C in 310sek.
edit_ht_segment sample_ht 15 3 610 310
$-----
$Halten auf Temperatur von 610°C für 2 Stunden
$-----
$append segment no.17(16) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 16 c Halten auf 610°C für 7200s
edit_ht_segment sample_ht 16 3 610 7200
$-----
$ABKÜHLEN AUF Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.18(17) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 17 c abkühlen von 610°C bis auf 290 $segment
edit_ht_segment sample_ht 17 c abkühlen von 610°C auf 290 mit lambda= 0,5(53sek. für
320°C)
edit_ht_segment sample_ht 17 3 290 53
$-----
$Halten auf Ms-Temperatur
$-----
$append segment no.19(18) to heat treatment schedule
```

```

append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 18 c Halten auf 290°C für 500s
edit_ht_segment sample_ht 18 d y
edit_ht_segment sample_ht 18 3 290 500
$*****
$OUTPUT WINDOW
$*****
new-gui-window p1 set-gui-window-property . X stepvalue/3600 $ default x-axis variable
(time)
$-----
$TEMPERATUR
$-----
set-plot-option . s n b t$c
set-plot-option . s m -1 t$c Temp
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 t T[°C]
set-plot-option . l b
$-----
$PHASE FRACTIONS
$-----
create-new-plot x . $ Phase fractions
set-plot-option . s n b f$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 f$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b f$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 f$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b f$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 f$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b f$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 f$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b f$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 f$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b f$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 f$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b f$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 f$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b f$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 f$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 f 100
set-plot-option . a y 1 t f[%]
set-plot-option . l b

```

---

\$

**\$MEAN RADIUS**

---

\$

```

create-new-plot x . $ Mean Radii set-plot-option . s n b r_mean$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b r_mean$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b r_mean$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b r_mean$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b r_mean$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 f 1e9
set-plot-option . a y 1 t R[nm]
set-plot-option . a y 1 y log
set-plot-option . a y 1 s 0,1..
set-plot-option . l b

```

---

\$

**\$NUMBER OF PARTICLES**

---

\$

```

create-new-plot x . $ Number of Particles
set-plot-option . s n b num_part$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b num_part$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b num_part$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b num_part$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b num_part$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C

```

```

set-plot-option . s n b num_part$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 t N[m<sup>-3</sup>], J[m<sup>-3</sup>s<sup>-1</sup>]
set-plot-option . a y 1 y log
set-plot-option . a y 1 s 1..
set-plot-option . l b
move_gui_window . 20 20 800 1000
update_gui_window .
$*****
$Simulation
$*****
set_simulation_parameter e 1e24
set_simulation_parameter t h sample_ht 10
set_simulation_parameter s r
start-precipitate-simulation

```

### A.3 Skript der Ausscheidungskinetik mit $\lambda \approx 8$

```

$Application
$*****
$new workspace
$*****
new_workspace
set_workspace_info Simulation der Wärmebehandlung von W300 (Probe B15)
set_workspace_info +
set_workspace_info + Ausgewählte Elemente:
set_workspace_info + Fe C Si Cr Mo Mn V
set_workspace_info +
set_workspace_info + Matrix phases: Ferrite(BCC_A2) , Austenite(FCC_A1)
set_workspace_info + Precipitate phases: MX (NbC, VN) , M6C , M7C3 , M23C6 ,
HCP_A3
set_workspace_info + M3C(Cementite) and Laves phase
set_workspace_info +
set_workspace_info + Wärmebehandlung
set_workspace_info + Casting von 1400°C
set_workspace_info + Austenitisieren bei 1020°C für 30 Minuten
set_workspace_info + Abkühlen auf Martensit-Start-Temperatur mit Lambda=8
set_workspace_info + 1.Anlassen bei 550°C für 1 Stunde
set_workspace_info + 2.Anlassen bei 595°C für 2 Stunden
set_workspace_info + 3.Anlassen bei 605°C für 2 Stunden
set_workspace_info + 4.Anlassen bei 610°C für 2 Stunden

```



```

$*****
$DATENBANK
$*****
open_thermodyn_database mc_steel.tdb
$*****
$AUSGEWÄHLTE ELEMENTE; CHEMISCHE ZUSAMMENSETZUNG
$*****
select_elements C Cr Fe Mn Mo Si V N
select_phase fcc_a1 bcc_a2 hcp_a3 cementite laves_phase M23C6 M7C3 M23C6 M6C
set_reference_element fe
read_thermodyn_database
enter_composition wp c=0,38 Cr=5,00 Mn=0,40 Mo=1,30 Si=1,10 V=0,40 N=0,001
$*****
$VARIABLEN
$*****
set-variable-value npc 100 $ number of particle classes
$*****
$DATENBANK DIFFUSION
$*****
read_mobility_database mc_sample_fe.ddb
$*****
$GLEICHGEWICHTSBERRECHNUNG
$*****
set_temperature_celsius 1100
set_automatic_startvalues
calc_equilibrium
$*****
PRECIPITATION
$*****
$ _____
$PRECIPITATION DOMAIN
$ _____
create_precipitation_domain austenite $Austenite as. parti. domain
set_precipitation_parameter austenite x fcc_a1 $matrix phase of domain austenite
set_precipitation_parameter austenite d 1e12 $dislocation density
set_precipitation_parameter austenite g 100e-6 $grain diameter
create_precipitation_domain ferrite
set_precipitation_parameter ferrite x bcc_a2 $matrix phase of domain austenite
set_precipitation_parameter ferrite d 1e14 $dislocation density
set_precipitation_parameter ferrite g 100e-6 1 $grain diameter
set_precipitation_parameter ferrite s 0,1e-6 100 $subgrain diameter
$ _____
$PRECIPITATION PHASE M23C6
$ _____
create_new_phase m23c6 p $ precipitation phase m23c6

```

```
set_precipitation_parameter m23c6_p0 d austenite $ domain austenite
set_precipitation_parameter m23c6_p0 c npc $ number of particle classes
set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s ge $ nucleation site=grain boundary
$-----
$PRECIPITATION PHASE MX
$-----
create_new_phase FCC_A1#01 p $ precipitate phase MX
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 d austenite
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 c npc
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M3C
$-----
create_new_phase cementite p $ precipitate phase cementite
set_precipitation_parameter cementite_p0 d austenite
set_precipitation_parameter cementite_p0 c npc
set_precipitation_parameter cementite_p0 n c p $ nucleus comp: para-equilibrium
set_precipitation_parameter cementite_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M7C3
$-----
create_new_phase m7c3 p $ precipitate phase M7C3
set_precipitation_parameter m7c3_p0 d austenite
set_precipitation_parameter m7c3_p0 c npc
set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M6C
$-----
create_new_phase m6c p $ precipitate phase M6C
set_precipitation_parameter m6c_p0 d austenite
set_precipitation_parameter m6c_p0 c npc
set_precipitation_parameter m6c_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE Cr2N
$-----
create_new_phase hcp_A3#01 p $ precipitate phase Cr2N
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 d austenite
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 c npc
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M2C
$-----
create_new_phase hcp_A3#02 p $ precipitate phase M2C
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 d austenite
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 c npc
```

```

set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE LAVES PHASE
$-----
create_new_phase laves_phase p $ precipitate phase Laves phase
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 d austenite
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 c npc
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s ge
$*****
$Wärmebehandlung
$*****
create_heat_treatment sample_ht
$*****
$CASTING
$*****
$ append segment no.1(0) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 0 c cooling after casting from 1400°C to Ms $Ms-temp.=290°C
edit-ht-segment sample_ht 0 d n austenite $ define precipitation domain for first ht segment
edit-ht-segment sample_ht 0 s 1400 $ define segment start temperature
edit-ht-segment sample_ht 0 c cooling to 290°C with 0.375°C/s (Lambda 8) edit-ht-segment sample_ht 0 1 290 -0,375
$-----
$Halten auf Temperatur von 290°C für 300 Sekunden
$-----
$ append segment no.2(1) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 1 d n ferrite
edit-ht-segment sample_ht 1 2 0 300 $ definition of second ht segment: Tdot+delta_t(2)→
end temperature: 280°C (Tdot=0 → T=const.); end time: 300s
$attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter fcc_a1#01_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter Cementite_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s gs
$*****
$Austenitisieren
$*****
$-----
$Transformationstemperatur

```

```

$-----
$ append segment no.3(2) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 2 c heating-up to transformation temperature of 825°C in 3360s
edit-ht-segment sample_ht 2 3 825 3360
$-----
$ Aufheizen
$-----
$ append segment no.4(3) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 3 c heating-up to 1020°C in 720 s
edit-ht-segment sample_ht 3 d n austenite
edit-ht-segment sample_ht 3 3 1020 720 $attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set-precipitation-parameter m6c_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set-precipitation-parameter m7c3_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set-precipitation-parameter m23c6_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set-precipitation-parameter fcc_a1#01_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set-precipitation-parameter Cementite_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#01_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#02_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set-precipitation-parameter laves_phase_p0 n s ge
$-----
$AUSTENITISIEREN
$-----
$ append segment no.5(4) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 4 c $Austenitisieren bei 1020°C für 30 min
edit_ht_segment sample_ht 4 d n austenite $segment
edit_ht_segment sample_ht 4 c Austenitisieren bei 1020°C für 30 min
edit_ht_segment sample_ht 4 2 0 1800
$*****
$Härten
$*****
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.6(5) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 5 c abkühlen von 1020°C bis auf 290°C in 1947 s $Lambda=8
edit_ht_segment sample_ht 5 d n austenite $segment
edit_ht_segment sample_ht 5 c abkühlen von 1020°C auf 290 mit in 1947 s
edit_ht_segment sample_ht 5 3 290 1947
$*****
$Anlassen 1
$*****

```

```

$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.7(6) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 6 c Aufheizen auf 550°C
edit_ht_segment sample_ht 6 d n ferrite
edit_ht_segment sample_ht 6 c Aufheizen auf 550°C
edit_ht_segment sample_ht 6 3 550 300 $attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter m6c_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter m7c3_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter m23c6_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter fcc_a1#01_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter Cementite_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#01_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#02_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter laves_phase_p0 n s gs
$-----
$Halten auf Temperatur von 550°C für 1 Stunde
$-----
$append segment no.8(7) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 7 c Halten auf 550°C für 3600s
edit_ht_segment sample_ht 7 3 550 3600
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.9(8) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 8 c abkühlen von 550°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 8 c abkühlen von 550°C auf 290 mit lamda_soll=0,5 (43sek. für
260°C)
edit_ht_segment sample_ht 8 3 290 43
$*****
$Anlassen 2
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.10(9) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 9 c Aufheizen auf 595°C
edit_ht_segment sample_ht 9 c Aufheizen von 290°C auf 595°C in 305sek.
edit_ht_segment sample_ht 9 3 595 305
$-----

```

```

$Halten auf Temperatur von 595°C für 2 Stunden
$-----
$append segment no.11(10) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 10 c Halten auf 595°C für 7200sek.
edit_ht_segment sample_ht 10 3 595 7200
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.12(11) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 11 c abkühlen von 595°C
edit_ht_segment sample_ht 11 c abkühlen von 595°C auf 290 mit lambda_soll=0,5 (51 sek.
für 305°C )
edit_ht_segment sample_ht 11 3 290 51
$*****
$Anlassen 3
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.13(12) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 12 c Aufheizen auf 605°C von 290
edit_ht_segment sample_ht 12 d n ferrite
edit_ht_segment sample_ht 12 c Aufheizen von 290°C auf 605°C in 310sek.
edit_ht_segment sample_ht 12 3 605 310
$-----
$Halten auf Temperatur von 605°C für 2 Stunden
$-----
$append segment no.14(13) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 13 c Halten auf 605°C für 7200s
edit_ht_segment sample_ht 13 3 605 7200
$-----
$ABKÜHLEN AUF Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.15(14) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 14 c abkühlen von 605°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 14 c abkühlen von 605°C auf 290 mit lambda=0,5(53sek. für
315°C)
edit_ht_segment sample_ht 14 3 290 53
$*****
$Anlassen 4

```

```

$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.16(15) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 15 c Aufheizen auf 610°C von 290
edit_ht_segment sample_ht 15 c Aufheizen von 290°C auf 610°C in 310sek.
edit_ht_segment sample_ht 15 3 610 310
$-----
$Halten auf Temperatur von 610°C für 2 Stunden
$-----
$append segment no.17(16) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 16 c Halten auf 610°C für 7200s
edit_ht_segment sample_ht 16 3 610 7200
$-----
$ABKÜHLEN AUF Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.18(17) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 17 c abkühlen von 610°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 17 c abkühlen von 610°C auf 290 mit lambda= 0,5(53sek. für
320°C)
edit_ht_segment sample_ht 17 3 290 53
$-----
$Halten auf Ms-Temperatur
$-----
$append segment no.19(18) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 18 c Halten auf 290°C für 500s
edit_ht_segment sample_ht 18 d y
edit_ht_segment sample_ht 18 3 290 500
$*****
$OUTPUT WINDOW
$*****
new-gui-window p1 set-gui-window-property . X stepvalue/3600 $ default x-axis variable
(time)
$-----
$TEMPERATUR
$-----
set-plot-option . s n b t$c
set-plot-option . s m -1 t$c Temp
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin

```

```

set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 t T[°C]
set-plot-option . l b
$-----
$PHASE FRACTIONS
$-----
create-new-plot x . $ Phase fractions
set-plot-option . s n b f$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 f$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b f$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 f$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b f$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 f$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b f$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 f$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b f$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 f$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b f$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 f$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b f$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 f$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b f$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 f$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 f 100
set-plot-option . a y 1 t f[%]
set-plot-option . l b
$-----
$MEAN RADIUS
$-----
create-new-plot x . $ Mean Radii set-plot-option . s n b r_mean$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b r_mean$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b r_mean$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b r_mean$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b r_mean$hcp_a3#02_p0

```



```

set-plot-option . s m -1 r_mean$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 f 1e9
set-plot-option . a y 1 t R[nm]
set-plot-option . a y 1 y log
set-plot-option . a y 1 s 0,1..
set-plot-option . l b
$-----
$NUMBER OF PARTICLES
$-----
create-new-plot x . $ Number of Particles
set-plot-option . s n b num_part$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b num_part$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b num_part$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 t N[m<sup>-3</sup>], J[m<sup>-3</sup>s<sup>-1</sup>]
set-plot-option . a y 1 y log
set-plot-option . a y 1 s 1..
set-plot-option . l b
move_gui_window . 20 20 800 1000
update_gui_window .
$*****
$Simulation
$*****
set_simulation_parameter e 1e24
set_simulation_parameter t h sample_ht 10

```

```
set_simulation_parameter s r
start-precipitate-simulation
```

## A.4 Skript der Ausscheidungskinetik beim Auslagern

```
$Application
$*****
$new workspace
$*****
new_workspace
set_workspace_info Simulation der Wärmebehandlung von W300 (Probe B15)
set_workspace_info +
set_workspace_info + Ausgewählte Elemente:
set_workspace_info + Fe C Si Cr Mo Mn V
set_workspace_info +
set_workspace_info + Matrix phases: Ferrite(BCC_A2) , Austenite(FCC_A1)
set_workspace_info + Precipitate phases: MX (NbC, VN) , M6C , M7C3 , M23C6 ,
HCP_A3
set_workspace_info + M3C(Cementite) and Laves phase
set_workspace_info +
set_workspace_info + Wärmebehandlung
set_workspace_info + Casting von 1400°C
set_workspace_info + Austenitisieren bei 1020°C für 30 Minuten
set_workspace_info + Abkühlen auf Martensit-Start-Temperatur mit Lambda=0,5
set_workspace_info + 1.Anlassen bei 550°C für 1 Stunde
set_workspace_info + 2.Anlassen bei 595°C für 2 Stunden
set_workspace_info + 3.Anlassen bei 605°C für 2 Stunden
set_workspace_info + 4.Anlassen bei 610°C für 2 Stunden
set_workspace_info + Auslagern 590°C für 1000 Stunden
$*****
$DATENBANK
$*****
open_thermodyn_database mc_steel.tdb
$*****
$AUSGEWÄHLTE ELEMENTE; CHEMISCHE ZUSAMMENSETZUNG
$*****
select_elements C Cr Fe Mn Mo Si V N
select_phase fcc_a1 bcc_a2 hcp_a3 cementite laves_phase M23C6 M7C3 M23C6 M6C
set_reference_element fe
read_thermodyn_database
enter_composition wp c=0,38 Cr=5,00 Mn=0,40 Mo=1,30 Si=1,10 V=0,40 N=0,001
$*****
$VARIABLEN
$*****
```

```

set-variable-value npc 100 $ number of particle classes
$*****
$DATENBANK DIFFUSION
$*****
read_mobility_database mc_sample_fe.ddb
$*****
$GLEICHGEWICHTSBERRECHNUNG
$*****
set_temperature_celsius 1100
set_automatic_startvalues
calc_equilibrium
$*****
PRECIPITATION
$*****
$-----
$PRECIPITATION DOMAIN
$-----
create_precipitation_domain austenite $Austenite as. parti. domain
set_precipitation_parameter austenite x fcc_a1 $matrix phase of domain austenite
set_precipitation_parameter austenite d 1e12 $dislocation density
set_precipitation_parameter austenite g 100e-6 $grain diameter
set_precipitation_parameter austenite s 10e-6 $subgrain diameter
create_precipitation_domain ferrite
set_precipitation_parameter ferrite x bcc_a2 $matrix phase of domain austenite
set_precipitation_parameter ferrite d 1e14 $dislocation density
set_precipitation_parameter ferrite g 100e-6 1 $grain diameter
set_precipitation_parameter ferrite s 0,1e-6 100 $subgrain diameter
$-----
$PRECIPITATION PHASE M23C6
$-----
create_new_phase m23c6 p $ precipitation phase m23c6
set_precipitation_parameter m23c6_p0 d austenite $ domain austenite
set_precipitation_parameter m23c6_p0 c npc $ number of particle classes
set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s ge $ nucleation site=grain boundary
$-----
$PRECIPITATION PHASE MX
$-----
create_new_phase FCC_A1#01 p $ precipitate phase MX
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 d austenite
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 c npc
set_precipitation_parameter FCC_A1#01_P0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M3C
$-----
create_new_phase cementite p $ precipitate phase cementite

```

```

set_precipitation_parameter cementite_p0 d austenite
set_precipitation_parameter cementite_p0 c npc
set_precipitation_parameter cementite_p0 n c p $ nucleus comp: para-equilibrium
set_precipitation_parameter cementite_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M7C3
$-----
create_new_phase m7c3 p $ precipitate phase M7C3
set_precipitation_parameter m7c3_p0 d austenite
set_precipitation_parameter m7c3_p0 c npc
set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M6C
$-----
create_new_phase m6c p $ precipitate phase M6C
set_precipitation_parameter m6c_p0 d austenite
set_precipitation_parameter m6c_p0 c npc
set_precipitation_parameter m6c_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE Cr2N
$-----
create_new_phase hcp_A3#01 p $ precipitate phase Cr2N
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 d austenite
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 c npc
set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE M2C
$-----
create_new_phase hcp_A3#02 p $ precipitate phase M2C
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 d austenite
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 c npc
set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s ge
$-----
$PRECIPITATION PHASE LAVES PHASE
$-----
create_new_phase laves_phase p $ precipitate phase Laves phase
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 d austenite
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 c npc
set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s ge
$*****
$Wärmebehandlung
$*****
create_heat_treatment sample_ht
$*****
$CASTING

```

```

$*****
$ append segment no.1(0) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 0 c cooling after casting from 1400°C to Ms $Ms-temp.=290°C
edit-ht-segment sample_ht 0 d n austenite $ define precipitation domain for first ht seg-
ment
edit-ht-segment sample_ht 0 s 1400 $ define segment start temperature
edit-ht-segment sample_ht 0 c cooling to 290°C with 0.375°C/s (Lambda 8) edit-ht-
segment sample_ht 0 1 290 -0,375
$-----
$Halten auf Temperatur von 290°C für 300 Sekunden
$-----
$ append segment no.2(1) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 1 d n ferrite
edit-ht-segment sample_ht 1 2 0 300 $ definition of second ht segment: Tdot+delta.t(2)→
end temperature: 280°C (Tdot=0 → T=const.); end time: 300s
$attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter fcc_a1#01_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter Cementite_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 1 r + set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s gs
$*****
$Austenitisieren
$*****
$-----
$Transformationtemperatur
$-----
$ append segment no.3(2) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 2 c heating-up to transformation temperature of 825°C in 3360s
edit-ht-segment sample_ht 2 3 825 3360
$-----
$ Aufheizen
$-----
$ append segment no.4(3) to heat treatment schedule
append-ht-segment sample_ht
edit-ht-segment sample_ht 3 c heating-up to 1020°C in 720 s
edit-ht-segment sample_ht 3 d n austenite
edit-ht-segment sample_ht 3 3 1020 720 $attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s ge

```

```

edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter fcc_a1#01_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter Cementite_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#01_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter hcp_A3#02_p0 n s ge
edit_ht_segment sample_ht 3 r + set_precipitation_parameter laves_phase_p0 n s ge
$ _____
$AUSTENITISIEREN
$ _____
$ append segment no.5(4) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 4 c $Austenitisieren bei 1020°C für 30 min
edit_ht_segment sample_ht 4 d n austenite $segment
edit_ht_segment sample_ht 4 c Austenitisieren bei 1020°C für 30 min
edit_ht_segment sample_ht 4 2 0 1800
$*****
$Härten
$*****
$ _____
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$ _____
$ append segment no.6(5) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 5 c abkühlen von 1020°C bis auf 290°C in 110 s $Lambda=0,5
edit_ht_segment sample_ht 5 d n austenite $segment
edit_ht_segment sample_ht 5 c abkühlen von 1020°C auf 290 mit in 110 s
edit_ht_segment sample_ht 5 3 290 110
$*****
$Anlassen 1
$*****
$ _____
$AUFHEIZEN
$ _____
$append segment no.7(6) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 6 c Aufheizen auf 550°C
edit_ht_segment sample_ht 6 d n ferrite
edit_ht_segment sample_ht 6 c Aufheizen auf 550°C
edit_ht_segment sample_ht 6 3 550 300 $attach a pre-segment script to change nucleation
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter m6c_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter m7c3_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter m23c6_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter fcc_a1#01_p0 n s gsd
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set_precipitation_parameter Cementite_p0 n s gsd

```

```

edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#01_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter hcp_A3#02_p0 n s gs
edit_ht_segment sample_ht 6 r + set-precipitation-parameter laves_phase_p0 n s gs
$-----
$Halten auf Temperatur von 550°C für 1 Stunde
$-----
$append segment no.8(7) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 7 c Halten auf 550°C für 3600s
edit_ht_segment sample_ht 7 3 550 3600
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.9(8) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 8 c abkühlen von 550°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 8 c abkühlen von 550°C auf 290 mit lamda_soll=0,5 (43sek. für
260°C)
edit_ht_segment sample_ht 8 3 290 43
$*****
$Anlassen 2
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.10(9) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 9 c Aufheizen auf 595°C
edit_ht_segment sample_ht 9 c Aufheizen von 290°C auf 595°C in 305sek.
edit_ht_segment sample_ht 9 3 595 305
$-----
$Halten auf Temperatur von 595°C für 2 Stunden
$-----
$append segment no.11(10) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 10 c Halten auf 595°C für 7200sek.
edit_ht_segment sample_ht 10 3 595 7200
$-----
$ABKÜHLEN auf Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.12(11) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 11 c abkühlen von 595°C
edit_ht_segment sample_ht 11 c abkühlen von 595°C auf 290 mit lambda_soll=0,5 (51 sek.
für 305°C )

```

```
edit_ht_segment sample_ht 11 3 290 51
$*****
$Anlassen 3
$*****
$_____
$AUFHEIZEN
$_____
$append segment no.13(12) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 12 c Aufheizen auf 605°C von 290
edit_ht_segment sample_ht 12 c Aufheizen von 290°C auf 605°C in 310sek.
edit_ht_segment sample_ht 12 3 605 310
$_____
$Halten auf Temperatur von 605°C für 2 Stunden
$_____
$append segment no.14(13) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 13 c Halten auf 605°C für 7200s
edit_ht_segment sample_ht 13 3 605 7200
$_____
$ABKÜHLEN AUF Ms-Temperatur
$_____
$ append segment no.15(14) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 14 c abkühlen von 605°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 14 c abkühlen von 605°C auf 290 mit lambda=0,5(53sek. für
315°C)
edit_ht_segment sample_ht 14 3 290 53
$*****
$Anlassen 4
$*****
$_____
$AUFHEIZEN
$_____
$append segment no.16(15) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 15 c Aufheizen auf 610°C von 290
edit_ht_segment sample_ht 15 c Aufheizen von 290°C auf 610°C in 310sek.
edit_ht_segment sample_ht 15 3 610 310
$_____
$Halten auf Temperatur von 610°C für 2 Stunden
$_____
$append segment no.17(16) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 16 c Halten auf 610°C für 7200s
```



```

edit_ht_segment sample_ht 16 d n ferrite
edit_ht_segment sample_ht 16 3 610 7200
$-----
$ABKÜHLEN AUF Ms-Temperatur
$-----
$ append segment no.18(17) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 17 c abkühlen von 610°C bis auf 290
edit_ht_segment sample_ht 17 c abkühlen von 610°C auf 290 mit lambda= 0,5(53sek. für
320°C)
edit_ht_segment sample_ht 17 3 290 53
$*****
$Auslagern bei 590°C für 1000 Stunden
$*****
$-----
$AUFHEIZEN
$-----
$append segment no.19(18) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 18 c Aufheizen auf 590°C
edit_ht_segment sample_ht 18 c Aufheizen von 290°C auf 590°C in 300sek.
edit_ht_segment sample_ht 18 3 590 300
$-----
$Halten bei 590°C für 1000 Stunden
$-----
$append segment no.20(19) to heat treatment schedule
append_ht_segment sample_ht
edit_ht_segment sample_ht 19 c Halten auf 590°C für 3600000sek.
edit_ht_segment sample_ht 19 3 590 3600000
$*****
$OUTPUT WINDOW
$*****
new-gui-window p1 set-gui-window-property . X stepvalue/3600 $ default x-axis variable
(time)
$-----
$TEMPERATUR
$-----
set-plot-option . s n b t$c
set-plot-option . s m -1 t$c Temp
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 t T[°C]
set-plot-option . l b
$-----

```

**\$PHASE FRACTIONS**


---

```

create-new-plot x . $ Phase fractions
set-plot-option . s n b f$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 f$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b f$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 f$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b f$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 f$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b f$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 f$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b f$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 f$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b f$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 f$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b f$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 f$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b f$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 f$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 f 100
set-plot-option . a y 1 t f[%]
set-plot-option . l b

```

---

**\$MEAN RADIUS**


---

```

create-new-plot x . $ Mean Radii set-plot-option . s n b r_mean$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b r_mean$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b r_mean$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b r_mean$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b r_mean$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b r_mean$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 r_mean$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]

```

```

set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 f 1e9
set-plot-option . a y 1 t R[nm]
set-plot-option . a y 1 y log
set-plot-option . a y 1 s 0,1..
set-plot-option . l b
$-----
$NUMBER OF PARTICLES
$-----
create-new-plot x . $ Number of Particles
set-plot-option . s n b num_part$Cementite_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$Cementite_p0 M<sub>3</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$M6C_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M6C_p0 M<sub>6</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$M7C3_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M7C3_p0 M<sub>7</sub>C<sub>3</sub>
set-plot-option . s n b num_part$M23C6_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$M23C6_p0 M<sub>23</sub>C<sub>6</sub>
set-plot-option . s n b num_part$fcc_a1#01_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$fcc_a1#01_p0 MX
set-plot-option . s n b num_part$hcp_a3#01_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$hcp_a3#01_p0 Cr<sub>2</sub>N
set-plot-option . s n b num_part$hcp_a3#02_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$hcp_a3#02_p0 M<sub>2</sub>C
set-plot-option . s n b num_part$laves_phase_p0
set-plot-option . s m -1 num_part$laves_phase_p0 Laves
set-plot-option . a x 1 t t[h]
set-plot-option . a x 1 y lin
set-plot-option . a x 1 s auto
set-plot-option . a y 1 t N[m<sup>-3</sup>], J[m<sup>-3</sup>s<sup>-1</sup>]
set-plot-option . a y 1 y log
set-plot-option . a y 1 s 1..
set-plot-option . l b
move_gui_window . 20 20 800 1000
update_gui_window .
$*****
$Simulation
$*****
set_simulation_parameter e 1e24
set_simulation_parameter t h sample_ht 10
set_simulation_parameter s r
start-precipitate-simulation

```