



**Anpassung von Mikrosegmentierungsmodellen
durch Heißrissuntersuchungen an
erstarrendem Stahl**

Masterarbeit

eingereicht von

Michael BERNHARD

am Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie an der Montanuniversität Leoben
zur Erlangung des akademischen Grades

Diplomingenieur

in der Studienrichtung Eisen- und Stahlmetallurgie



Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen eines Projekts am COMET Kompetenzzentrum K1-MET unter Verwendung von Daten aus einem Projekt am COMET Kompetenzzentrum K2-MPPE in Zusammenarbeit mit den Unternehmenspartnern voestalpine Stahl GmbH und Primetals Technologies GmbH.

Der österreichischen Bundesregierung (insbesondere dem Bundesministerium für Verkehr, Innovation und Technologie und dem Bundesministerium für Wissenschaft, Forschung und Wirtschaft) vertreten durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft mbH (FFG), und den Ländern Steiermark und Tirol, vertreten durch die Steirische Wirtschaftsförderungsgesellschaft mbH (SFG) sowie die Standortagentur Tirol, wird für die Förderung im Rahmen des COMET Förderprogramms herzlich gedankt.



Kurzfassung

Die Erstarrung von Stählen führt zu Konzentrationsveränderungen auf mikroskopischer Ebene: Viele Begleit- und Legierungselemente lösen sich im flüssigen Stahl besser als im festen Stahl, was zu einem Konzentrationssprung an der Phasengrenze Fest/Flüssig führt. Dieses Phänomen wird als Mikroseigerung bezeichnet und wirkt prägend auf die Produktqualität, zum Beispiel die Ausbildung von Zentrumsseigerungen oder auch die Bildung von Heißrisseigerungen (HRS), im Stranggießprozess. Beim Stranggießen von Stahl wird die erstarrende Strangschale mechanischen Belastungen ausgesetzt. Die Verformung der Strangschale kann zur Ausbildung von ausgeprägten Seigerungen zwischen Korngrenzen führen, die als Heißrisseigerungen bezeichnet werden und sich in weiteren Prozessschritten bis an die Oberfläche ausbreiten können oder auch zu unerwünschten Härtegefügen im Fertigprodukt führen können. Je höher der Gehalt an seigernden Elementen, desto größer ist auch die Empfindlichkeit einer Legierung gegenüber der HRS-Bildung. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden DSC (Differential Scanning Calorimetry) Messergebnisse verwendet, um Stahllegierungen entsprechend ihres Kohlenstoffäquivalents einer Voreinteilung zu unterziehen und empirische Gleichungen zur Bestimmung der Liquidustemperatur zu evaluieren. Die analytische Lösung der Mikroseigerung mit der Gleichung von Ohnaka wird unter Verwendung von Verteilungskoeffizienten aus der Datenbank FSSTel2015 (FactSage) mit Ergebnissen von Heißzugversuchen korreliert, um über eine breite Palette von Stahlzusammensetzungen berechnete und aus dem Heißzugversuch abgeleitete Solidustemperaturen kritisch zu vergleichen. Dieses Vorgehen erlaubt eine Feineinstellung der Verteilungskoeffizienten. Auf Basis der FSSTel2015 Datenbank können auch die Gleichgewichtstemperaturen der Festphasenumwandlungen beschrieben und mit DSC-Messergebnissen hinterlegt werden. Unter Berücksichtigung der Legierungselemente und Phasenumwandlungstemperaturen

werden thermophysikalische Materialdaten berechnet, die zur numerischen Simulation der Erstarrung notwendig sind. Schließlich werden die gewonnenen Erkenntnisse für die Vorhersage der Bildung von HRS im Stranggießprozess eingesetzt: Die numerische Simulation des Erstarrungsvorgangs sowie die anschließende Dehnungsanalyse erfolgen in einer 1D-FV in-house Software. In die Dehnungsanalyse fließen eigene Versuchsergebnisse und neue Erkenntnisse aus parallel betriebenen Forschungsarbeiten ein. Die Vorstellung der Akkumulation von Dehnungen als Hauptursache der Bildung von HRS wird in einen on-line fähigen Heißrissbildungsindex implementiert. Für ausgewählte Gruppen von Stählen werden die HRS-Indizes mit kritischen Dehnungswerten abgeglichen und so eine Vorhersage über die Auswirkung von Gießparametern auf die HRS-Bildung in Brammen getroffen. Die erarbeitete Methodik wird eingesetzt um die numerischen Modelle in Zukunft auf weitere Stahlgruppen zu erweitern.

Abstract

Microsegregation is in general the consequence of the different dissolution of alloying elements and residual elements in liquid and in solid steel. The result is an enrichment of alloying elements between dendrites. This enrichment is the main reason for segregation at the macroscopic scale (center segregation) or the formation of hot tear segregations (commonly also termed internal cracks) and hence a decisive factor for product quality. The relatively thin strand formed in a continuous casting machine for steel is multiply deformed by bending, straightening or bulging. These deformations may result in the formation of hot tear segregations (HTS) along primary grain boundaries. During further processing, these kinds of defects may even lead to surface defects but more frequently to the formation of brittle phases after the rolling process. The higher the content of segregating elements the higher is the sensitivity towards the formation of HTS. Microsegregation modelling is thus the key for the understanding of HTS formation. Starting point for the present work is the critical review of liquidus formula by the comparison with results from DSC (Differential Thermal Analysis) for a wide range of steel compositions. A recently published formula could be slightly modified and improved. Microsegregation is modelled on basis of the analytical solution as proposed by Ohnaka. Equilibrium partition coefficients were determined from FactSage (FSStel2015). The calculated solidus temperature was compared with values determined from a hot tensile experiment for low carbon steel grades. The partition coefficients were again slightly adjusted. The generation of the thermophysical properties for the numerical solidification simulation demands the knowledge of phase transformation temperatures in the solid state. These values were also assessed on the basis of empirical equations and DSC measurement results. The findings were applied to calculate solidification in a continuous casting machine (1D-FV-model) and to analyse the strain in the mushy zone subsequently. The strain analysis is based on the results of parallel research work and own measurements. The basic idea of strain accumulation as main reason for HTS formation was transferred into an on-line capable HTS-

index. For selected steel grades the probability of HTS formation was predicted and the influence of operating parameters was quantified. The newly developed methodology will in future be used to extend the existing models to further steel grades.

Eidesstattliche Erklärung

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

Name des Verfassers

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	I
Abstract	III
Eidesstattliche Erklärung	V
Inhaltsverzeichnis	I
Akronyme	I
Abbildungsverzeichnis	II
Tabellenverzeichnis	VI
1 Einleitung	1
2 Literaturteil	3
2.1 Erstarrung von Stahl und Mikroseigerungsvorgänge.....	4
2.1.1 Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten und Lever-Rule	4
2.1.2 Einfluss von Legierungselementen auf den Erstarrungsweg im pseudobinären Fe-C-Diagramm	7
2.1.3 Empirische Gleichungen zur Berechnung der Liquidustemperatur legierter Stahlschmelzen	11
2.1.4 Einfluss von Erstarrungsbedingungen und chemischer Zusammensetzung auf den Sekundärdendritenarmabstand	15
2.1.5 Analytische Mikroseigerungsmodelle	20
2.1.6 Ausscheidung von Mangansulfid während der Erstarrung.....	27
2.1.7 Bedeutung der Mikroseigerung für das Stranggießen von Stahl	30
2.2 Mechanische Beanspruchung der Strangschale beim Stranggießen von Stahl...	35

3	1D-FV Erstarrungssoftware SolASys	39
3.1	Berechnung von Phasenumwandlungen und thermophysikalische Eigenschaften mit dem Modul SolAMat.....	40
3.1.1	Voreinteilung von Stählen auf Basis ihrer chemischen Zusammensetzung	41
3.1.2	Auswahl einer geeigneten Gleichung zur Berechnung der Liquidustemperatur	45
3.1.3	Mikroseigerungsmodell für die Erstarrung der Stahlgruppe I.....	48
3.1.4	Berechnung der Festkörper-Phasenumwandlungen.....	50
3.1.4.1	Beschreibung der δ/γ – Umwandlung	50
3.1.4.2	Beschreibung der Festkörper-Phasenumwandlungen im A_3 -Temperatur-bereich	51
3.1.5	Thermophysikalische Eigenschaften	57
3.1.5.1	Wärmekapazität.....	57
3.1.5.2	Dichte und Wärmeleitfähigkeit.....	59
3.1.5.3	Latente Wärme	59
3.1.5.4	Vergleich thermophysikalischer Materialdaten mit IDS Berechnungen	60
3.1.6	Bewertung des Mikroseigerungsmodells über DSC Messungen und SSCT-Versuche	61
3.2	Strangmechanik in SolAStrain	65
3.2.1	Biegen/Richten und Ausbauchen des Strangs	65
3.2.2	Thermische Ausdehnung durch Wiedererwärmung	66
3.2.3	Heißrissbildungsmodell und Formulierung eines „on-line fähigen“ Qualitätsindex ...	67
4	Berechnungen und Interpretation der Ergebnisse	70
4.1	Bestimmung der kritischen Dehnung aus dem SSCT-Versuch	70
4.2	Simulation einer Brammenstranggießanlage mit dem Prinzip akkumulierter Dehnungen	73
4.3	Ergebnisse eines on-line fähigen Heißrissindikators	75
5	Zusammenfassung und Ausblick	78
	Literaturverzeichnis	82
A	Empirische Liquidusformeln	A-1
A.1	Koeffizienten der Miettinen-Howe Gleichung.....	A-1
A.2	Koeffizienten und Argumente einiger Liquidusgleichungen	A-2
A.3	Überprüfung der Liquidusgleichungen mit DSC Messungen	A-3
B	Berechnung der δ/γ-Umwandlung	B-1
B.1	Regressionskoeffizienten der einzelnen Elemente	B-1
B.2	Ergebnisse der Regression.....	B-2

C	Berechnungs der γ/α-Umwandlung	C-1
C.1	Regressionskoeffizienten	C-1
C.2	Ergebnisse der Regression	C-2
C.3	Ausgewählte TTT Diagramme	C-3
C.4	Ausgewählte CCT Diagramme	C-5
D	Daten und Überprüfung der Wärmekapazität	D-1
D.1	Validierung mit FactSage (FSStel2015)	D-1
D.2	Koeffizienten zu Wärmekapazitätsberechnung nach FactSage (FSStel2015) in J/g/K.	D-2
D.2	Daten zur Berechnung des magnetischen Beitrags der Wärmekapazität aus FactSage (FSStel2015).	D-3
E	Daten und Simulationen SSCT Versuche	E-1
E.1	Chemische Zusammensetzung in wt%	E-2
E.2	Versuchsparameter	E-3
E.3	Berechnungsparameter	E-4
E.4	Ermittelte Solidustemperaturen	E-5
E.5	Metallographische Ergebnisse	E-6
E.6	Thermophysikalische Eigenschaften	E-7
E.7	Berechnete Phasenanteile	E-11
E.8	Simulationsergebnisse	E-15

Akronyme

DSC	Difference Scanning Calorimetry
FV	Finite Volumen
HR	Heißriss
HRS	Heißrissseigerung
HTSL	Hot Tear Segregation Length
NHTS	Number of Hot Tear Segregations
PDAS	Primärdendritenarmabstand
SDAS	Sekundärdendritenarmabstand
SSCT	Submerged Split Chil Tensile

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2-1: Schematische Darstellung der Gleichgewichtserstarrung einer binären Legierung nach [1]..... 5

Abbildung 2-2: Experimentell bestimmtes Fe-P System (links) und Einfluss von Kohlenstoff auf das Seigerungsverhalten von Phosphor (rechts) [3] 7

Abbildung 2-3: Fe-C-Gleichgewichtsdiagramm mit Kennzeichnung des kritischen, peritektischen Bereichs (a) und Einfluss von Legierungselementen auf das Fe-C-Diagramm (b) nach [17] 8

Abbildung 2-4: Thermisches Verhalten in der Kokille über den Kohlenstoffäquivalent (links) [19] und Zusammenhang zwischen TVK und Rissindex (rechts) [20] 9

Abbildung 2-5: Umrechnung der Liquiduslinie des Legierungselements in die Liquiduslinie des Bezugselements [23] 13

Abbildung 2-6: Abweichung zu experimentell ermittelten Ergebnissen bei Berechnung mit empirischen Gleichungen nach [30]..... 15

Abbildung 2-7: Reifung von Sekundärarmen während der Erstarrung [32] 16

Abbildung 2-8: Berechnung des Vergrößerungsparameters und SDAS in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehalts mit Informationen aus [32,36,37] 17

Abbildung 2-9: Erstarrendes Volumenelement nach Gulliver und Scheil [2].....21

Abbildung 2-10: Schematische Darstellung des Brody-Fleming Platenmodells nach [45] ...22

Abbildung 2-11: Rückdiffusion während der Erstarrung eines Volumenelements mit Länge L nach Brody-Flemings (links) und Abschneidung des Diffusionsprofils durch die physikalischen Grenzen des Modells (rechts) [47].....	25
Abbildung 2-12: Geometrische Modellierung von Dendriten: Plattenmodell (links) und gerichtete Dendriten (mitte und rechts).....	26
Abbildung 2-13: Berechnung der Anreicherung für Mangan (1,52wt% Mn) und Kohlenstoff (0,13wt% C) in Eisen mit unterschiedlichen Mikrosegierungsmodellen [48].....	27
Abbildung 2-14: Bedeutung des Mn/S Verhältnisses für die Einschlussbildung [51]	28
Abbildung 2-15: Einfluss des MSC Index auf die Warmumformbarkeit und die ZDT [52]	29
Abbildung 2-16: Mechanismen der Bildung von Makrosegierungen nach Ludwig [57].	30
Abbildung 2-17: Einfluss unterschiedlicher thermophysikalischer Materialdaten (1,2) und Solidustemperatur auf den Zeitpunkt der Durcherstarrung am Beispiel einer Brammenstranggießanlage [59]	31
Abbildung 2-18: Schematisches Darstellung der mechanischen Eigenschaften und charakteristischer Temperaturen in der Nähe des Schmelzpunktes [61] und Einfluss von Schwefel auf das kritische Temperaturintervall [62].....	32
Abbildung 2-19: Die drei Stufen der HRS Bildung nach [63] (links) und Mikro- bzw. Makrosegierung von Mangan sowie HRS in Brammen und SSCT Versuchskörpern in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehalts nach [64]	33
Abbildung 2-20: Entwicklung der Mikrostruktur in Abhängigkeit der Brammendicke nach [66]	34
Abbildung 2-21: Belastungsverhältnisse bei der Ausbauchung der Strangschale zwischen den Stützrollen	36
Abbildung 2-22: Belastungsverhältnisse und Lage der neutralen Faser beim Biegen (links) und Richten (rechts) des Strangs	37
Abbildung 2-23: Prinzip von Einpunktrichtsystem (links) und Mehrpunktrichtsystem (rechts) [67].....	37
Abbildung 2-24: Schematische Darstellung der Temperaturverläufe in einer Stranggießanlage an der Strangoberfläche und im Stranginneren	38
Abbildung 3-1: Flussdiagramm der Erstarrungssoftware SolASys	40
Abbildung 3-2: Übereinstimmung berechneter Ergebnisse mit DSC Messungen.....	42

Abbildung 3-3: Auswirkung der Optimierung auf die Übereinstimmung zwischen DSC Messungen und der Einteilung nach äquivalentem Kohlenstoffgehalt	43
Abbildung 3-4: Auswirkung des neuen Kohlenstoffäquivalents auf die TVK Glockenkurve .44	
Abbildung 3-5: Verbesserung der Ergebnisse durch Berücksichtigung eines „extended mismatch“ von $\pm 0,005\text{wt}\%$	45
Abbildung 3-6: Gleichgewichtsschaubilder Fe-Cu (links) und Fe-Al (rechts) aus FactSage (FSStel2015).....	47
Abbildung 3-7: Ergebnisse nach Optimierung der Howe-Miettinen Gleichung	48
Abbildung 3-8: Algorithmus für ein Mikroseigerungsmodell mit lokalen Verteilungskoeffizienten und temperaturabhängigen Diffusionskoeffizienten nach You [49].48	
Abbildung 3-9: Schematische Darstellung zur Berechnung der MnS-Ausscheidung in SolAMat	49
Abbildung 3-10: Zusammenfassung der Ergebnisse von FactSage (links) und von DSC Messungen (rechts) bei Gegenüberstellung mit SolAMat	51
Abbildung 3-11: Approximation der JMA-Gleichung nach Kirkaldy (links) und Fe-C Gleichgewichtsdiagramm mit Festphasen-Umwandlungstemperaturen (rechts).....	53
Abbildung 3-12: Vergleich diffusionskontrollierter Umwandlung von DSC Messungen und SolAMat am Beispiel von Fe-C-Si-(Mn) Systemen	54
Abbildung 3-13: Vergleich diffusionskontrollierter Umwandlung von DSC Messungen und SolAMat am Beispiel von Fe-C-Cr-Ni Systemen.....	55
Abbildung 3-14: Vergleich der Perlitstarttemperaturen und eutektoiden Zusammensetzung von SolAMat mit Literaturwerten und FactSage (FSStel2015) Berechnungen	55
Abbildung 3-15: Vergleich von Literaturwerten [84–86] und mit SolAMat und JMatPro.....	57
Abbildung 3-16: Schema zur Berechnung der Latenten Wärme aus FactSage (links) und Vergleich mit IDS bzw. Literaturwerten (rechts).....	60
Abbildung 3-17: Vergleich thermophysikalischer Eigenschaft von IDS und SolAMat für zwei Low Carbon Stähle.....	61
Abbildung 3-18: Schematischer Ablauf des SSCT Versuchs nach Arth [63]	62
Abbildung 3-19: Ablauf der metallographischen Auswertung von SSCT Versuchen nach [95]	62
Abbildung 3-20: Prinzip zu Ermittlung der Solidustemperatur aus dem SSCT Versuch	63

Abbildung 3-21: Gegenüberstellung der Gleichgewichtstemperaturen mit Ergebnissen aus FactSage (FSStel2015) und der allgemeinen Lever-Rule (links) sowie Berechnung für DSC Messungen mit Kohlenstoffäquivalent kleiner 0,09 wt%	64
Abbildung 3-22: Anpassung des Mikroseigerungsmodells über SSCT Versuche.....	65
Abbildung 3-23: Schematische Berechnung der thermischen Dehnung in SolIAStrain	67
Abbildung 3-24: Schematische Darstellung des Prinzips der akkumulierten Dehnung im Stranggießprozess	68
Abbildung 4-1: Bestimmung der kritischen Dehnung aus dem SSCT Versuch für die Stahlgruppe I.....	71
Abbildung 4-2: Untersuchung eines systematischen Einflusses von Legierungselementen auf die akkumulierte Dehnung.....	71
Abbildung 4-3: Berechnung der HTSL aus akkumulierter und kritischer Dehnung (links) und Verteilung gemessener HTSL einer Versuchsreihe (rechts)	72
Abbildung 4-4: Gegenüberstellung von gemessener und berechneter HRSL (links) und Abhängigkeit der berechneten HRSL von akkumulierter Dehnung und Dehnrate (rechts)....	73
Abbildung 4-5: Akkumulierte Dehnungen in einer Brammenstranggießanlage	74
Abbildung 4-6: Anwendung des Qualitätsindex auf den SSCT Versuch (oben) und Vergleich der Ergebnisse mit dem Prinzip der akkumulierten Dehnung (unten)	75
Abbildung 4-7: Berechnung der Dehnrate einer Stranggießanlage mit SolIAStrain.....	76
Abbildung 4-8: Anwendung des Heißrissindex zur Beurteilung des Einflussfaktoren auf die Heißrissbildung in einer Stranggießanlage	77

Tabellenverzeichnis

Tabelle 2-1: Verteilungskoeffizienten von Legierungselementen in δ -Ferrit	6
Tabelle 2-2: Verteilungskoeffizienten von Legierungselementen in Austenit	6
Tabelle 2-3: Koeffizienten für die Berechnung der Liquidustemperatur nach Schürmann et al. [23].....	14
Tabelle 2-4: Ausgewählte SDAS-Beziehung aus [2]	19
Tabelle 2-5: Diffusionskoeffizienten in Ferrit und Austenit [4], [12,46].....	24
Tabelle 2-6: Ausgewählte Koeffizienten für das MnS-Löslichkeitsprodukt aus [2]	29
Tabelle 3-1: Grenzgehalte an Legierungselementen für die Charakterisierung des Erstarrungswegs	41
Tabelle 3-2: Maximale Legierungsgehalte der DSC Messungen.....	41
Tabelle 3-3: Auswirkung der Optimierung auf die Koeffizienten im Kohlenstoffäquivalent....	43
Tabelle 3-4: Gültigkeitsbereich der neuen c_p -Formel	44
Tabelle 3-5: Berücksichtigte Elemente in den empirischen Gleichungen	45
Tabelle 3-6: Verteilungskoeffizienten des Mikroseigerungsmodells der Stahlgruppe I	49

1 Einleitung

Das kontinuierliche Vergießen von flüssigem Stahl ermöglicht eine kosteneffiziente Stahlproduktion unter Gewährleistung der erforderlichen Produktqualität. Während die Produktqualität des stranggegossenen Halbzeugs maßgeblich von den eingestellten Gießparametern (Sekundärkühlstrategie, Gießpulverauswahl, Gießgeschwindigkeit) abhängt, wird das Verhalten des Stahls beim Vergießen wesentlich vom Legierungskonzept beeinflusst.

Stähle erstarren unter technischen Bedingungen im Allgemeinen gerichtet-dendritisch, das heißt mit bevorzugter Wachstumsrichtung und entgegengesetzt zum Wärmestrom. In den interdendritischen Zwischenräumen kommt es bedingt durch die unterschiedliche Löslichkeit zwischen flüssiger und fester Phase zur Anreicherung von Legierungselementen. Dieses Phänomen wird als Mikroseigerung bezeichnet und wirkt prägend auf die Produktqualität, zum Beispiel auf die Ausbildung von Zentrumsseigerungen oder auch auf die Bildung von Heißrisseigerungen (HRS), im Stranggießprozess. Beim Stranggießen von Stahl wird die erstarrende Strangschale mechanischen Belastungen ausgesetzt. Die Verformung der Strangschale kann zur Ausbildung von ausgeprägten Seigerungen zwischen Korngrenzen führen, die als Heißrisseigerungen bezeichnet werden und sich in weiteren Prozessschritten bis an die Oberfläche ausbreiten können oder auch zu unerwünschten Härtegefügen im Fertigprodukt führen können.

Am Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie besteht die Möglichkeit, im Submerged Split Chill Tensile (SSCT) Versuch auf die Heißrissempfindlichkeit unterschiedlicher Stahlzusammensetzungen experimentell zu untersuchen. Das in-house 1D-FV Erstarrungsprogramm SolASys (Solidification Analysis System) erlaubt die Simulation des Erstarrungsverlaufs und

die Analyse auftretender Dehnungen in Stranggießanlagen sowie die Berechnung von Mikro-seigerungsvorgängen und thermophysikalischer Eigenschaften in Abhängigkeit der Stahlzusammensetzung. Zusätzlich bildet SolASys die Basis zur computergestützten Auswertung des SSCT Versuchs und stellt damit ein wertvolles Werkzeug zur Vorhersage der Heißrissbildung in Abhängigkeit von Stahlzusammensetzung, Anlagenkonfiguration und Gießparameter des Prozesses dar.

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Modifikation und Überprüfung einzelner Submodule von SolASys am Beispiel der Low Carbon Stähle und lässt sich in zwei wesentliche Aufgabengebiete unterteilen:

- Pre-Processor Modul „Mikro-seigerung und Materialdaten“ (SolAMat): Experimentell bestimmte Gleichgewichtsdaten von Phasenumwandlungen mittels DSC (Differential Scanning Calorimetry) Messung werden verwendet, um Stahllegierungen entsprechend ihres Kohlenstoffäquivalents einer Voreinteilung zu unterziehen und empirische Gleichungen zur Bestimmung der Liquidustemperatur zu evaluieren. Ein neues Mikro-seigerungsmodell erlaubt die Berücksichtigung zusätzlicher Elemente wie Aluminium, Chrom, Nickel, Molybdän und Kupfer zur Berechnung der Solidustemperatur. Das Modell wird über eine zuvor entwickelte Methodik über SSCT Versuche angepasst. Auf Basis der FSStel2015 Datenbank können auch die Gleichgewichtstemperaturen der Festphasenumwandlungen beschrieben und mit DSC-Messergebnissen hinterlegt werden. Unter Berücksichtigung der Legierungselemente und Phasenumwandlungstemperaturen werden thermophysikalische Materialdaten aufbereitet, die zur numerischen Simulation der Erstarrung notwendig sind.
- Post-Processor Modul „Strangmechanik“ (SolAStrain): Die getrennte Betrachtung von Innen- und Außenbogen des Strangs ist erforderlich, um die Verformung und auftretenden Dehnungen ordnungsgemäß zu beschreiben. Ergänzend zu den Biege-, Richt- und Bulgingbelastungen des Strangs wird die thermische Dehnung durch die Wiedererwärmung der Strangschale implementiert. Die Ermittlung des kritischen Dehnungswertes für die HRS-Bildung erfolgt aus dem SSCT Versuch. Die Vorstellung der Akkumulierung von Dehnungen als Hauptursache der Bildung von HRS wird in einen „on-line fähigen“ Heißrissbildungsindex implementiert. Für ausgewählte Gruppen von Stählen werden die HRS-Indizes mit kritischen Dehnungswerten abgeglichen und so eine Vorhersage über die Auswirkung von Gießparametern auf die HRS-Bildung in Brammen getroffen.

2 Literaturteil

Stähle erstarren unter technischen Bedingungen dendritisch. Nahe der Oberfläche erfolgt das Wachstum „gerichtet-dendritisch“, das heißt mit bevorzugter Wachstumsrichtung, entgegengesetzt zum Wärmestrom und unter Bildung von tannenbaumartigen Primärkristallen. Die Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichts bei der Erstarrung verlangt den vollständigen Diffusionsausgleich von Legierungselementen zwischen fester und flüssiger Phase. Diese Forderung kann aufgrund der kurzen Produktionszeiten beim Stranggießen von Stahl nicht erfüllt werden, daher kommt es zur Anreicherung von Legierungselementen in den interdendritischen Zwischenräumen, dieser Vorgang wird Mikroseigerung genannt.

Im Literaturteil werden ausgehend von der allgemeinen Betrachtung der Gleichgewichtserstarrung die wesentlichen Grundlagen der Mikroseigerung sowie deren mathematischen Beschreibung besprochen. Mikroseigerungsmodelle benötigen detaillierte Informationen über das vorliegende Mikrogefüge, die Diffusionsfähigkeit und thermodynamische Eigenschaften der Legierungselemente bei hohen Temperaturen. Dementsprechend sind diesen Einflussfaktoren eigene Kapitel gewidmet.

Abschließend wird im Literaturteil versucht, eine Brücke zwischen Mikroseigerungsvorgängen und einer damit verbundenen Fehlerbildung im Stranggießprozess zu schlagen:

- Niedrigschmelzende Filme (Seigerungen) an den Primärkorngrenzen führen zur Versprödung des Stahls im Hochtemperaturbereich und können bei gleichzeitiger Verformung der Strangschale zur Ausbildung von Heißrissen oder Heißrissseigerungen führen.
- Inhomogenitäten auf makroskopischer Ebene, die durch den Transport angereicherter Restschmelze innerhalb des Strangs entstehen, beeinträchtigen die Weiterverarbeitung und Qualität des Fertigprodukts.

2.1 Erstarrung von Stahl und Mikroseigerungsvorgänge

2.1.1 Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten und Lever-Rule

Bedingt durch die unterschiedliche Löslichkeit der Legierungselemente in Schmelze und fester Phase kommt es bei der Erstarrung von Stahl zu einem Konzentrationssprung an der Phasengrenzfläche, der durch den Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten $k = c_s/c_l$ definiert ist. Häufig werden Liquidus- und Soliduslinie als Geraden angesehen, der Verteilungskoeffizient bleibt dann über das gesamte Erstarrungsintervall konstant. Das Gleichgewicht verlangt den vollständigen Diffusionsgleich im Festen, diese Forderung ist bei sehr kleinen Erstarrungsintervallen und hoher Diffusionsfähigkeit des Legierungselements erfüllt. In diesem Fall können die aktuelle Konzentration in der Schmelze (c_l) sowie der entsprechende Festkörperanteil (f_s) zu jeder beliebigen Temperatur über die Lever-Rule [1] berechnet werden (**Gleichung 2-1, Gleichung 2-2**). Eine schematische Darstellung der Lever-Rule zeigt **Abbildung 2-1**.

$$c_l = \frac{c_0}{1 - f_s(1 - k)} \quad (2-1)$$

$$f_s = \frac{c_l - c_0}{c_l - c_s} = \frac{1}{1 - k} \left(\frac{T - T_l}{T - T_{l,0}} \right) \quad (2-2)$$

Hier entspricht T der aktuellen Temperaturen, $T_{l,0}$ der Liquidustemperatur des reinen Lösungsmittels, c_0 der Ausgangskonzentration und T_l der der aktuellen Liquidustemperatur.

In technischen Prozessen führt der unvollständige Diffusionsausgleich im Festen zu einer Anreicherung (Seigerung) der Legierungselemente in der Restschmelze. Die Erstarrung kann dann unter Verwendung analytischer Mikroseigerungsmodelle beschrieben werden (**Kapitel 2.1.5**).

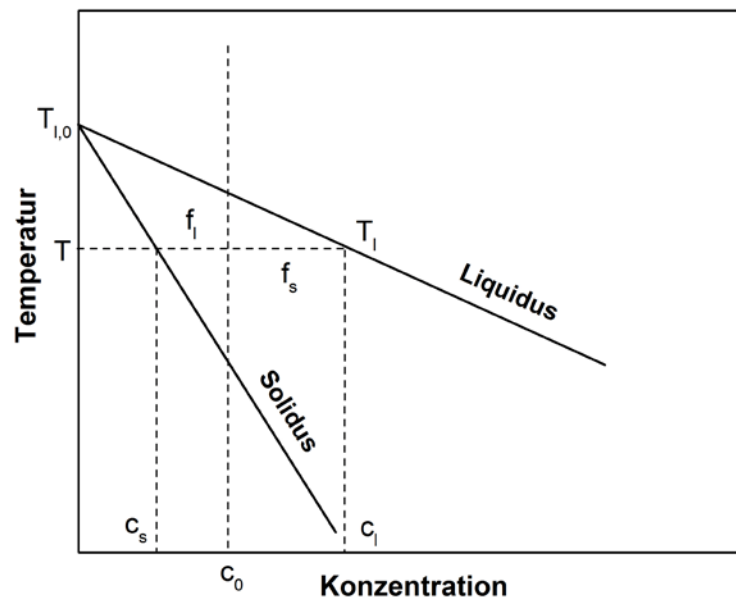


Abbildung 2-1: Schematische Darstellung der Gleichgewichtserstarrung einer binären Legierung nach [1]

Generell zeigen Legierungselemente mit niedrigen Verteilungskoeffizienten eine ausgeprägte Neigung zur Anreicherung in der Schmelze. In **Tabelle 2-1** sind publizierte Werte für die Verteilung ausgewählter Elemente zwischen Schmelze und δ -Ferrit zusammengestellt. Den niedrigsten Verteilungskoeffizient besitzt Schwefel mit Werten zwischen 0,02 – 0,05. In Abwesenheit von Mangan kann die starke Anreicherung des Schwefels nahe der Enderstarrung zu einer deutlichen Absenkung der Solidustemperatur führen. Weitere Elemente mit starker Seigerungstendenz sind Kohlenstoff und Phosphor. Während der Kohlenstoff aufgrund seiner hohen Diffusionsfähigkeit als interstitielles Atom einen besseren Konzentrationsausgleich erreichen kann, hindert die schlechte Beweglichkeit des Phosphors diesen. [2] In den meisten Stählen sind Mangangehalte von 1,5-2 wt% üblich. Während der Erstarrung reichert sich das Mangan in der Schmelze an und bildet bei Überschreitung des Löslichkeitsprodukts gemeinsam mit Schwefel Mangansulfid (MnS). Die Abbindung des Schwefels nahe der Enderstarrung ist eine wesentliche Aufgabe des Mangans und hat entscheidenden Einfluss auf die Produktqualität (**Kapitel 2.1.6**). Aluminium, Chrom, Nickel und Molybdän sind für ihre gute Mischbarkeit mit Eisen bekannt und stimmen in ihren Größenordnungen bei allen Autoren überein.

Tabelle 2-1: Verteilungskoeffizienten von Legierungselementen in δ -Ferrit

Autor	C	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu
Morita [3]	0,25	0,91	0,90	0,23	0,02	0,92	0,95	0,83	0,86	---
Ueshima [4–6]	0,19	0,77	0,76	0,23	0,05	---	---	---	---	---
Ghosh [7]	0,13	0,66	0,84	0,13	0,02	0,92	0,95	0,80	0,80	---
Battle [8,9]	0,20	0,83	0,90	0,13	0,02	0,92	0,95	0,83	---	---
Fischer [10]	0,11	0,77	0,73	0,16	0,05	---	0,94	0,75	---	0,70
Hansen [11]	0,14	0,91	0,12	0,28	0,11	---	1,00	0,55	---	0,59
Ghosh [6,12–15]	0,19	0,77	0,77	0,23	0,05	0,60	0,95	0,83	0,80	0,53

Aus **Tabelle 2-2** ist ersichtlich, dass die Verteilungskoeffizienten der Elemente bei Veränderung von ferritischer zu austenitischer Matrix entsprechend steigen oder sinken. Für ferritstabilisierende Elemente gilt $k_x^\delta > k_x^\gamma$ und für austenitstabilisierende Elemente $k_x^\delta < k_x^\gamma$. Die größte Differenz der Verteilungskoeffizienten ergibt sich bei Phosphor, wobei das Verhältnis von $k_p^\delta/k_p^\gamma \approx 2$ beträgt. [16]

Tabelle 2-2: Verteilungskoeffizienten von Legierungselementen in Austenit

Autor	C	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu
Morita [3]	0,35	0,50	0,95	0,08	0,05	---	0,87	0,95	0,60	---
Ueshima [4–6]	0,34	0,52	0,78	0,13	0,035	---	---	---	---	---
Ghosh [7]	0,36	0,50	0,95	0,06	0,02	---	0,85	0,95	0,60	---
Battle [8,9]	0,30	0,50	0,75	0,06	0,05	---	0,85	0,95	---	---
Ghosh [6,12–15]	0,34	0,52	0,79	0,13	0,035	0,60	0,86	0,95	0,59	0,88

Am Beispiel des experimentell ermittelten Fe-P-Systems (**Abbildung 2-2**, links) lässt sich erkennen, dass die Annahme linearer Liquidus- und Solidustemperaturen im Allgemeinen nicht gerechtfertigt ist. Der Verteilungskoeffizient des Phosphors weist eine signifikante Temperaturabhängigkeit auf, die nach Morita und Tanaka [16] mit der Beziehung $k_p^\delta = 0,715 - 3,2 \cdot 10^{-4}T$ beschrieben werden kann. Die Temperatur ist hier in Kelvin einzusetzen. Die Wechselwirkung der Legierungselemente untereinander führt ebenfalls zu einer Beeinflussung des Seigerungsverhaltens. An dieser Stelle ist vor allem der Kohlenstoff hervorzuheben, der mit steigender Konzentration den Seigerungsindex, darunter versteht

man das Verhältnis von maximal vorliegender Konzentration zur Ausgangskonzentration, des Phosphors signifikant erhöht (**Abbildung 2-2**, rechts). Die Wirkung des Kohlenstoffs kann in diesem Fall durch den Übergang von ferritischer zu austenitischer Matrix erklärt werden, welcher mit der peritektischen Reaktion einhergeht. [16]

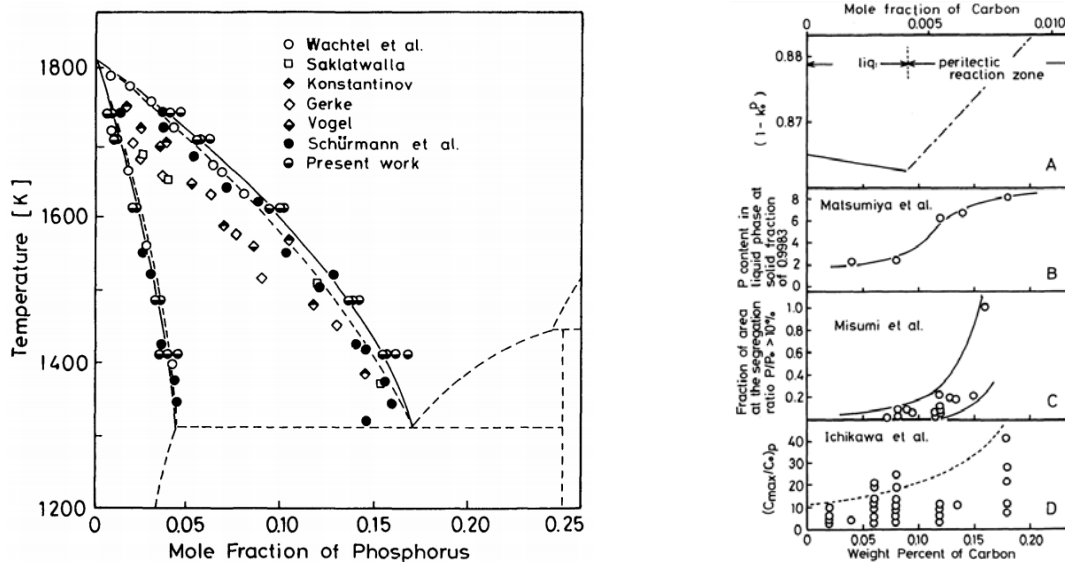


Abbildung 2-2: Experimentell bestimmtes Fe-P System (links) und Einfluss von Kohlenstoff auf das Seigerungsverhalten von Phosphor (rechts) [3]

2.1.2 Einfluss von Legierungselementen auf den Erstarrungsweg im pseudo-binären Fe-C-Diagramm

Beim Stranggießen von Stahl kommt der Anfangserstarrung in der Kokille hinsichtlich Produktqualität, Produktivität und Prozesszuverlässigkeit eine besondere Bedeutung zu. Im Fe-C-Diagramm können vier unterschiedliche Erstarrungswege von Stahl definiert werden (**Abbildung 2-3 (a)**) [17]:

- Typ I: Die Legierungslage befindet sich links des charakteristischen Punktes c_A , die Erstarrung erfolgt primär zu δ -Ferrit und die Umwandlung zu Austenit findet im Festen statt.
- Typ II: Stähle mit einer Zusammensetzung zwischen c_A und c_B werden hypo-peritektisch genannt und führen im Stranggießprozess häufig zu Problemen, da die Phasenumwandlung von δ -Ferrit zu Austenit mit der Enderstarrung zusammenfällt. Bedingt durch die höhere Dichte des Austenits kommt es zur Kontraktion der erstarrenden Strangschale und gleichzeitig zum Abheben der Strangoberfläche von der Kokille (Reduzierung der Wärmeabfuhr und Grobkornbildung). In weiterer Folge besteht bei diesen Stählen ein erhöhtes Risiko für tiefe Oszillationsmarken, starke Badspiegelschwankungen, ein unregelmäßiges

ßiges Schalenwachstum sowie eine hohe Riss- und Fehleranfälligkeit (Oberflächenrisse, Heißrisse). [18]

- Typ III: Stähle zwischen c_B und c_C werden hyper-peritektisch genannt. Die Umwandlung von δ -Ferrit zu Austenit ist vollständig abgeschlossen, bevor die Enderstarrung einsetzt.
- Typ IV: Stähle mit einer Zusammensetzung rechts von c_C erstarren primär austenitisch.

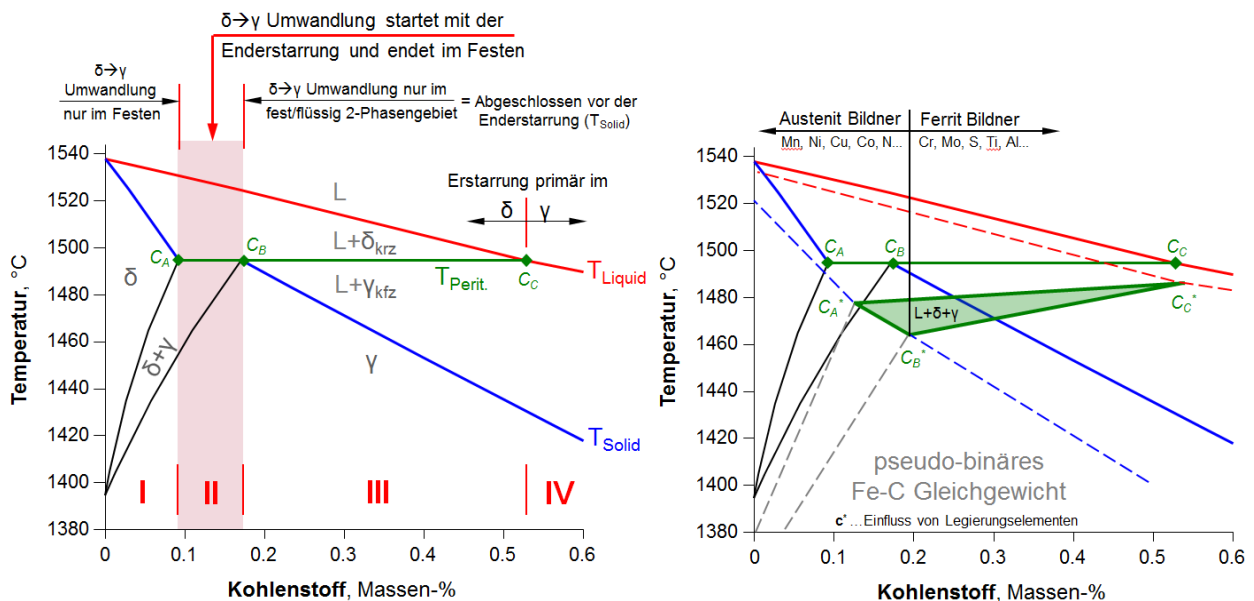


Abbildung 2-3: Fe-C-Gleichgewichtsdiagramm mit Kennzeichnung des kritischen, peritektischen Bereichs (a) und Einfluss von Legierungselementen auf das Fe-C-Diagramm (b) nach [17]

Da Stähle stets Multikomponentensysteme darstellen, ist der Einfluss der Legierungselemente auf den hyperperitektischen Bereich für die Industrie von besonderer Bedeutung (**Abbildung 2-3 (b)**). Zur Charakterisierung des Erstarrungsverhaltens in Abhängigkeit der Legierungselemente werden zwei Methoden exemplarisch dargestellt:

Der Kohlenstoffäquivalent c_P wird berechnet, wobei für c_A , c_B und c_C fixe Werte vorgegeben werden. Austenitbildner erhöhen c_P und ferritstabilisierende Elemente senken c_P . Xia et al. [19] veröffentlichten basierend auf Messergebnissen eines thermischen on-line Überwachungssystems der Kokille eine Formulierung für das Kohlenstoffäquivalent. In der instrumentierten Kokille wurden Temperaturschwankungen sowie integrale Wärmestromdichte gemessen und der Temperatur-Variations-Koeffizient (TVK) als charakteristische Kenngröße berechnet. Der TVK spiegelt die Temperaturfluktuationen ($T_{Stdabw.}$) relativ zum Temperaturmittelwert (T_{mittel}) in einem Zeitintervall von 120 Sekunden wider (**Gleichung 2-3**). [19]

$$TVK = \frac{T_{Stdabw.}}{T_{mittel}} \cdot 100\% \quad (2-3)$$

In Abhängigkeit des Kohlenstoffäquivalents ergibt sich ein typischer Verlauf des TVK. Stähle mit hypoperitekischer Zusammensetzung weisen ein ausgeprägtes Maximum des TVK auf, während die Wärmestromdichte minimal wird (**Abbildung 2-4, links**). Ein offensichtlicher Zusammenhang zwischen TVK und dem Auftreten von Oberflächenrissen kann in **Abbildung 2-4** (rechts) festgestellt werden: Bei Überschreitung eines kritischen TVK, hier mit dem Wert 1,4 definiert, kommt es zu einem deutlichen Anstieg der Rissanfälligkeit. Entsprechend dieser Vorgehensweise besitzen hypoperitekische Stähle c_p Werte zwischen 0,1 – 0,16 Gewichtsprozent (wt%). [17]

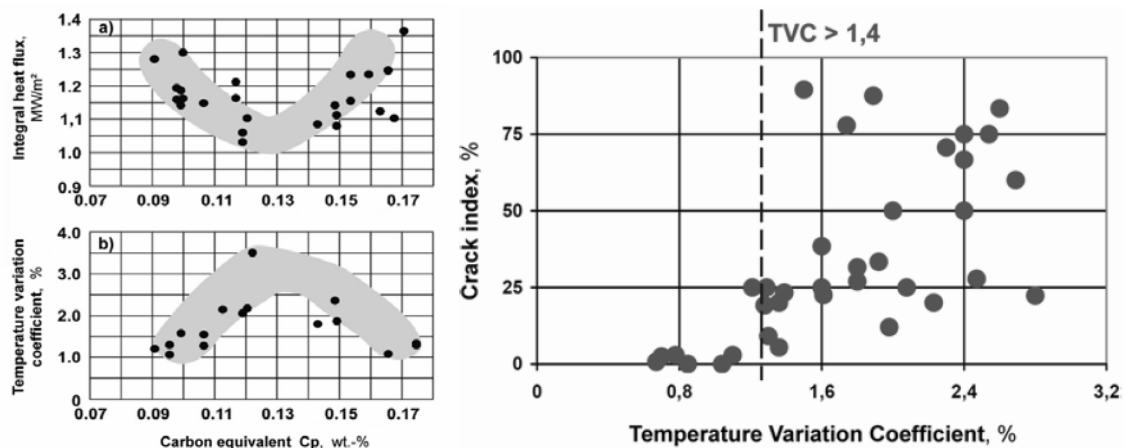


Abbildung 2-4: Thermisches Verhalten in der Kokille über den Kohlenstoffäquivalent (links) [19] und Zusammenhang zwischen TVK und Rissindex (rechts) [20]

Aus der Regression von kritischem TVK und chemischer Zusammensetzung konnte für den Kohlenstoffäquivalent **Gleichung 2-4** ermittelt werden (Konzentrationen in wt%).

$$c_p = C - 0,037Si + 0,02Mn + 0,0414P - 0,7S - 0,0254Cr + 0,023Ni - 0,0189Mo - 0,0276Ti + 0,7N \quad (2-4)$$

Diese Beziehung wurde von Presoly und Xia [17] durch Kombination aus thermischer Überwachung der Kokille und DSC (Difference Scanning Calorimetry) Messungen erweitert und optimiert (**Gleichung 2-5**). Korrekturen sind vor allem in der Gewichtung von Silizium, Chrom und Schwefel zu erkennen, ergänzend werden Aluminium und Kupfer berücksichtigt. Weiters konnten Verbesserungen für $c_A=0,09$ wt% bemerkt werden. Die vorgestellten c_p -Formeln sind nicht universell gültig, sondern nur innerhalb der Legierungsgrenzen der untersuchten Stähle. [17]

$$c_p = C - 0,005Si + 0,019Mn + 0,04P - 0,01S - 0,007Cr + 0,025Ni - 0,03Mo - 0,02Ti + 0,4N - 0,07Al + 0,1Cu \quad (2-5)$$

Der Einsatz des Kohlenstoffäquivalents zur Charakterisierung des Erstarrungsverhaltens neuentwickelter Stahlsorten, an dieser Stelle seien TRIP-Stähle mit Silizium- und Aluminiumgehalten von über 1 wt% erwähnt, scheiterte aufgrund der unterschiedlich starken Beeinflussung von c_A und c_B durch das spezielle Legierungskonzept. [21] Als alternative Möglichkeit zur Einteilung dieser Stähle kann der Einfluss der Legierungselemente auf c_A , c_B und c_C berechnet werden. Entsprechend des Kohlenstoffgehalts werden die Stähle relativ zu c_A^* , c_B^* und c_C^* gruppiert. Austenitstabilisierende Elemente verschieben c_A und c_B nach links, Ferritbildner nach rechts. Blazek et al. [21] führten thermodynamische Berechnungen des pseudo-binären Fe-C-Systems in ThermoCalc (Version M) durch, um c_A und c_B als Funktion von Aluminium, Chrom, Mangan, Molybdän Vanadium, Wolfram und Silizium zu berechnen. Mit den polynomialen Regressionen aus **Gleichung 2-6** und **Gleichung 2-7** konnte der hypoperitektische Bereich zu vergießender Stähle in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehalts festgelegt werden. Das kritische Kohlenstoffintervall wurde der gemessenen Wärmestromdichte aus einer instrumentierten Kokille gegenübergestellt und damit die Gültigkeit der c_A und c_B -Funktionen überprüft. [21] Eine ähnliche Methodik stellen Shepherd et al. [22] vor. Die thermodynamischen Berechnungen erfolgten hier in FactSage 6.2, als Prozesskenngröße wurde ähnlich zu Xia et al. [19] die Temperaturschwankung in der Kokille herangezogen.

$$c_A = 0,0896 + 0,0458Al - 0,0205Mn - 0,007Si + 0,0223Al^2 - 0,0239Ni + 0,0106Mo + 0,0134V - 0,0032Cr + 0,00059Cr^2 + 0,0197W \quad (2-6)$$

$$c_B = 0,1967 + 0,0036Al - 0,0316Mn - 0,0103Si + 0,1411Al^2 + 0,05Al \cdot Si - 0,0401Ni + 0,03255Mo - 0,0603V + 0,0024Cr + 0,00142Cr^2 - 0,00059Cr \cdot Ni + 0,0266W \quad (2-7)$$

Die Identifikation peritektischer Stähle nach Presoly und Xia bietet gegenüber dem Modell nach Blazek et al. bzw. Shepherd et al. zwei wesentliche Vorteile: Zunächst ist die mathematische Handhabung des Kohlenstoffäquivalents einfacher als die teils komplexen Polynome zur Berechnung von c_A^* und c_B^* . Weiters wird das Ergebnis thermodynamischer Berechnungen maßgeblich von der verwendeten Datenbank des Programms beeinflusst, während bei DSC-Messungen eine sichere Vorhersage über das Erstarrungsverhalten möglich ist. DSC-Messungen können dementsprechend zur Optimierung thermodynamischer Datenbanken verwendet werden. [17]

2.1.3 Empirische Gleichungen zur Berechnung der Liquidustemperatur legierter Stahlschmelzen

Die exakte Vorhersage der Liquidustemperatur von legierten Stahlschmelzen ist für das Stranggießen bezüglich Betriebssicherheit und Produktivität von außerordentlicher Bedeutung. Die Ausbildung der dünnen Schale hängt maßgeblich von der Überhitzung und der Kühlstrategie ab, hier kann eine ungünstige Kombination im schlimmsten Fall zum Durchbruch der Strangschale führen. In Mikroseigerungsmodellen wird eine geeignete Liquidusformel benötigt, um die aktuelle Temperatur der interdendritischen Schmelze, respektive die Solidustemperatur, zu berechnen. [23,24]

Alle Legierungselemente bis auf Aluminium senken die Liquidustemperatur des Reineisens in unterschiedlichem Ausmaß. Die Korrelation experimenteller Daten aus der thermischen Analyse mit Fe-C-X Gleichgewichtsschaubildern ist gerechtfertigt, da die Liquidustemperatur im Gegensatz zur Solidustemperatur von den Abkühlbedingungen unbeeinflusst bleibt. [2] Die mathematische Beschreibung der Liquiduslinie erfolgt im einfachsten Fall über eine lineare Gleichung mit unterschiedlicher Gewichtung der Legierungselemente (**Gleichung 2-8**). Mit steigendem Legierungsgehalt nimmt die Wechselwirkung der Elemente untereinander zu, dadurch wird die korrekte Berechnung der Liquidustemperatur komplexer. [23,24] Als Alternativen bieten sich in diesem Fall empirische Gleichungen höherer Ordnung bzw. Gleichungen mit Berücksichtigung von Wechselwirkungskoeffizienten an (**Gleichung 2-9, Gleichung 2-10**).

$$T_L = T_{\delta,\gamma}^0 + \sum_i W_{\delta,\gamma}^i (\text{wt}\%i) \quad (2-8)$$

$$T_L = T_{\delta,\gamma}^0 + \sum_i [W_{\delta,\gamma}^i (\text{wt}\%i) + V_{\delta,\gamma}^i (\text{wt}\%i)^2] \quad (2-9)$$

$$T_L = T_{\delta,\gamma}^0 + \sum_i [W_{\delta,\gamma}^i (\text{wt}\%i) + V_{\delta,\gamma}^i (\text{wt}\%i)^2] + \sum_{i,j} X_{\delta,\gamma}^{i,j} (\text{wt}\%i)(\text{wt}\%j) \quad (2-10)$$

Kawawa [25] veröffentlichte im Jahr 1973 einen Vorschlag zur Berechnung der Liquidustemperatur von Kohlenstoffstählen auf Basis thermischer Analysen und Fe-X Gleichgewichtsdigrammen. Mit der linearen Gleichung konnte für die untersuchten Stahlsorten eine Genauigkeit von ± 4 °C erreicht werden.

Wolf [26] verfolgte hingegen einen quadratischen Ansatz des Regressionspolynoms. Die signifikante Absenkung der Liquidustemperatur durch Phosphor und Schwefel wird in dieser Gleichung nicht berücksichtigt. Die Gemeinsamkeit mit Kawawa besteht in der Annahme ei-

ner identen Steigung der Liquiduslinie von Ferrit und Austenit. Entsprechend dieser vereinfachten Vorstellung wird die Liquidustemperatur mit einem einheitlichen Ausdruck bestimmt.

Kagawa und Okamoto [27] beschränkten den quadratischen Ansatz auf die Wirkung des Kohlenstoffs. Im Rahmen thermodynamischer Berechnungen konnten getrennte Formulierungen für die Berechnung der Liquidustemperatur von Austenit und Ferrit erzielt werden. Als Entscheidungskriterium zwischen ferritischer und austenitischer Primärerstarrung dient die Lage des Kohlenstoffgehalts der Legierung relativ zum Punkt c_C . In Abhängigkeit der Legierungselemente wird die Verschiebung von c_C über **Gleichung 2-11** berechnet, wobei die Konzentrationen in Gewichtsprozent einzusetzen sind. Für $[C] < 0,51 + \Delta c_C$ wt% erfolgt die Berechnung der Liquidustemperatur über die Gleichung für Ferrit, für $0,51 + \Delta c_C < [C] < 1$ wt% über jene des Austenits.

$$\begin{aligned} \Delta c_C = & 0,33Si - 0,07Mn - 0,06P - 0,15S + 0,11Cr - 0,17Ni \\ & + 0,06Mo - 0,2Cu + 0,08Ti + 0,12W - 0,03Co \end{aligned} \quad (2-11)$$

Eine umfassende Analyse wurde von Howe [24] durchgeführt. Diese Analyse beinhaltete rund 90 Legierungen, die entsprechend ihrer Zusammensetzung in quasibinäre Systeme, niedriglegierte Stähle und hochlegierte Chrom-Nickel-Stähle unterteilt wurden. Die Daten für die Regression stammten aus eigenen Ergebnissen der thermischen Analyse und Jernkorn-torets [28] Untersuchungen. In Howes Gleichung werden Konzentrationsintervalle eines Legierungselements vorgegeben, innerhalb welcher dem Element eine bestimmte Gewichtung zugeteilt wird.

In **Anhang A** sind die Koeffizienten und Argumente der bisher vorgestellten Gleichung zusammengefasst. Kohlenstoff, Phosphor und Schwefel besitzen nicht nur niedrige Verteilungskoeffizienten, sondern führen auch zu einer signifikanten Absenkung der Liquidustemperatur bei bereits geringen Gehalten. Eine Streuung zwischen $(-7,6) - (-14,4)$ °C/wt% besteht bei den Silizium-Koeffizienten, die übrigen Elemente werden in allen Veröffentlichungen mit einer einheitlichen Gewichtung berücksichtigt.

Eine von Schürmann et al. [29] entwickelte Differenzenmethode soll die schmelzpunkterniedrigende Wirkung der Legierungselemente auf die äquivalente Wirkung eines entsprechenden Bezugselements umwerten. Aufgrund des thermodynamisch genau bekannten Fe-C Diagramms wird in der Arbeit von Schürmann und Stisovic [23] der Kohlenstoff als Bezugselement für Stahl gewählt. Aus dem Differenzenwert $\Delta X_i = a_i X_i + b_i X_i^2$ und der elementspezifischen Gleichung $\Delta X_i = X_B^i - X_i$ ergibt sich für den Einfluss eines Elements auf die äquivalente Gesamtkonzentration des Bezugselements $X_B^i = X_i + \Delta X_i = X_i (1 + a_i + b_i X_i)$ bzw. für alle Legierungselemente $X_B^{\Sigma} = X_B + \Sigma X_B^i$ (**Abbildung 2-5**).

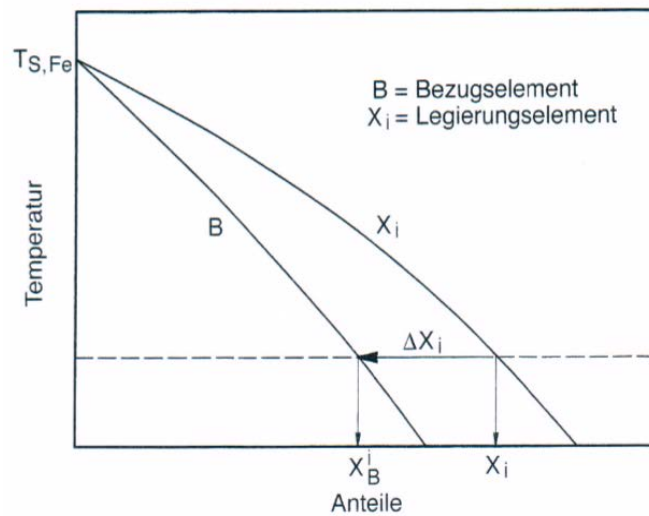


Abbildung 2-5: Umrechnung der Liquiduslinie des Legierungselements in die Liquiduslinie des Bezugslements [23]

Mit Umrechnung der Stoffmengenanteile auf Massengehalte ergeben sich zur Berechnung der Liquidustemperatur (in der Einheit °C) **Gleichung 2-12** für Ferrit und **Gleichung 2-13** für Austenit. Die thermodynamisch stabile Phase ist stets jene mit höherer Liquidustemperatur. Diese Definition bietet die Möglichkeit, durch eine Kohlenstoffvariation den Schnittpunkt der beiden Liquiduslinien zu ermitteln und damit den Punkt c_C zu charakterisieren.

$$T_{L,\delta/\alpha} = 1536 - 76,77 \left[\%C + \sum \left[\%X_i (1 + a_{\delta/\alpha}^i + b_{\delta/\alpha}^i X_i) \right] \right] - 6,89 \left[\%C + \sum \left[\%X_i (1 + a_{\delta/\alpha}^i + b_{\delta/\alpha}^i X_i) \right] \right]^2 \quad (2-12)$$

$$T_{L,\gamma} = 1536 - 58,74 \left[\%C + \sum \left[\%X_i (1 + a_{\gamma}^i + b_{\gamma}^i X_i) \right] \right] - 4,64 \left[\%C + \sum \left[\%X_i (1 + a_{\gamma}^i + b_{\gamma}^i X_i) \right] \right]^2 \quad (2-13)$$

Die Koeffizienten für die jeweilige Gleichung sind in **Tabelle 2-3** dargestellt, wie bei Wolf wird auf die Berücksichtigung von Phosphor und Schwefel verzichtet.

Tabelle 2-3: Koeffizienten für die Berechnung der Liquidustemperatur nach Schürmann et al. [23]

Element	$a_{\delta/\alpha}$	$b_{\delta/\alpha}$	a_{γ}	b_{γ}
<i>Si</i>	-0,8384	3,5440E-3	-0,6931	-0,0459
<i>Mn</i>	-0,9433	-2,6000E-4	-0,9323	-4,1584E-4
<i>Cr</i>	-0,9713	6,8400E-4	-0,9789	-4,2246E-4
<i>Ni</i>	-0,9485	4,0600E-4	-0,9147	-1,4619E-3
<i>Mo</i>	-0,9361	-6,3700E-4	-0,9365	1,0973E-3
<i>Cu</i>	-0,9576	-1,0140E-3	-0,4998	-0,3483
<i>Al</i>	-1,0011	-2,8154E-5	-0,9169	-0,3084

Miettinen und Howes Abhandlung [30] bildet die wohl umfangreichste Studie zur Beschreibung der Liquidustemperaturen von Stahl. Aus über 1000 thermodynamischen Berechnungen auf Basis der IDS (Interdendritic Solidification) Datenbank konnte eine analytische Regressionsformel für niedriglegierte und hochlegierte Stähle erstellt werden. Jedes Legierungselement besitzt in diesen Gleichungen einen Wechselwirkungskoeffizienten mit dem dominierenden Element. In niedriglegierten Stählen ist dieses Element der Kohlenstoff, in hochlegierten Stählen dominieren Chrom und Nickel. Der stark positive Wechselwirkungskoeffizient zwischen Titan und Stickstoff bei hochlegierten Stählen kann mit der Abbindung bei der Bildung von TiN oberhalb der Liquidustemperatur begründet werden. [30] Die Koeffizienten (Koeff) und Wechselwirkungskoeffizienten mit Kohlenstoff bzw. Chrom und Nickel (Koeff-C, Koeff-Cr, Koeff-Ni) sind in **Anhang A** zusammengefasst.

Sowohl die thermodynamischen Berechnungen mit der IDS Datenbank als auch die Regressionsgleichungen konnten mit über 700 gesammelten Literaturwerten überprüft und im Anschluss Ergebnissen der bereits vorgestellten, empirischen Liquidusformeln gegenübergestellt werden (**Abbildung 2-6**). Der gesamte Datensatz wurde in niedriglegierte und quasi niedriglegierte Stähle (0,03-1,2 wt% C; bis jeweils 5 wt% Cr, Ni und Mo), hochlegierte und quasi hochlegierte Stähle (9-30wt% Cr und bis 30wt% Ni) aufgeteilt. Quasi bedeutet in diesem Fall, dass diese Legierungen keine üblichen Stahlsorten, sondern experimentelle Fe-Multikomponentensysteme mit 2-5 Legierungselementen, darstellen. Howes und Wolfs Gleichung besitzen zwar allgemeine Gültigkeit, wurden für einen objektiven Vergleich allerdings nur zur Berechnung niedriglegierter Stähle herangezogen. In **Abbildung 2-6** ist ersichtlich, dass die Liquidustemperatur niedriglegierter Stahlsorten mit allen Gleichungen in ausreichender Genauigkeit berechnet werden kann. Die besten Resultate können für alle Gruppen

unter Verwendung der IDS Datenbank und der Regressionspolynome erzielt werden. Die Gleichung nach Schürmann und Stisovic (S-S) eignet sich für hochlegierte Stähle geringfügig besser als die Kagawa-Okamoto-Gleichung (K-O).

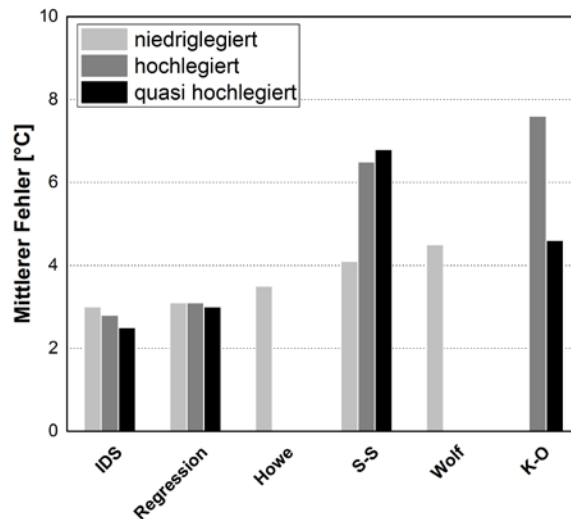


Abbildung 2-6: Abweichung zu experimentell ermittelten Ergebnissen bei Berechnung mit empirischen Gleichungen nach [30]

2.1.4 Einfluss von Erstarrungsbedingungen und chemischer Zusammensetzung auf den Sekundärdendritenarmabstand

Die mechanischen Eigenschaften, Mikroseigerungsvorgänge und Einschlussbildung werden maßgeblich vom vorliegenden Mikrogefüge beeinflusst. [31] Die Analyse des erstarrten Mikrogefüges ermöglicht es, Rückschlüsse auf die Erstarrungsbedingungen zu schließen. Theoretische Hintergründe zur Instabilität der Phasengrenze durch Legierungselemente werden ausführlich in [1,32] behandelt. Der Fokus dieses Kapitels liegt auf der Geometrie der dendritischen Struktur und den Reifungsprozessen der Dendritenarme während der Erstarrung.

Dendriten sind tannenartige Primärkristalle, deren Hauptstamm eine bevorzugte Wachstumsrichtung, entgegengesetzt zum Wärmestrom, besitzt. Eine dendritische Mikrostruktur wird durch den Primärdendritenarmabstand (PDAS, λ_1) und den Sekundärdendritenarmabstand (SDAS, λ_2) charakterisiert (**Abbildung 2-7**). Während der gemessene PDAS im erstarrten Mikrogefüge mit jenem bei der Erstarrung ident ist, können sich für den SDAS bedingt durch Reifungsprozesse erhebliche Unterschiede ergeben. Die Reifung ist ähnlich zur Ostwald-Reifung von Ausscheidungen: Das begünstigte Wachstum großer Sekundärarme führt zur

Auflösung kleiner Sekundär- sowie äußerst feiner Tertiärarme, die sich an der Dendritenspitze befinden. (**Abbildung 2-7**). [32,33] Mit dem Verhältnis λ_1/λ_2 kann die Permeabilität des Zweiphasengebiets abgeschätzt werden, dessen Kenntnis spielt beispielsweise für Strömungssimulationen in Stranggießanlagen eine wichtige Rolle. [34] Cicutti et al. [35] zeigten, dass beim Stranggießen $\lambda_1/\lambda_2=2,6$ entlang der Brammendicke annähernd konstant bleibt.

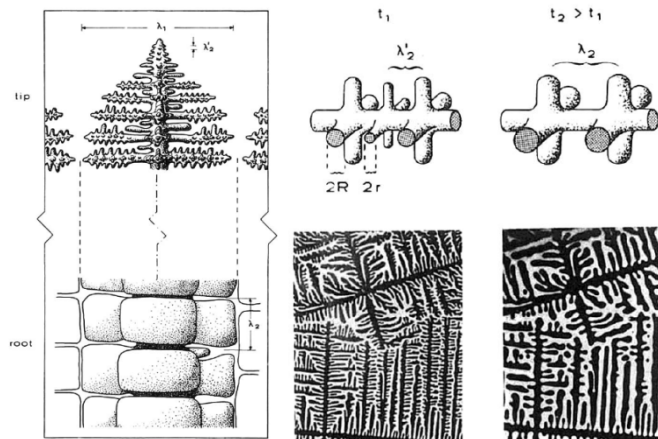


Abbildung 2-7: Reifung von Sekundärarmen während der Erstarrung [32]

Zur mathematischen Beschreibung der Reifungsvorgänge sind die Definitionen einiger Erstarrungskenngrößen notwendig. Die lokale Kühlrate \dot{T} (in K/s) ist das Produkt aus der Wachstumsgeschwindigkeit R (in mm/s) der Erstarrungsfront und dem Temperaturgradienten G (in K/mm) an der Phasengrenzfläche. Die Zeit, welche ein Dendrit im Zweiphasengebiet verbringt, wird als lokale Erstarrungszeit t_f (in s) bezeichnet. Diese ergibt sich aus **Gleichung 2-14**.

$$t_f = \frac{T_l - T_s}{\dot{T}} = \frac{T_l - T_s}{RG} \quad (2-14)$$

Der SDAS und die lokale Erstarrungszeit stehen über die fundamentale Beziehung nach Feurer und Wunderlin [36] in Verbindung (**Gleichung 2-15**).

$$\lambda_2 = 5,5(Mt_f)^{1/3} \quad (2-15)$$

Der Proportionalitätsfaktor M wird als Vergrößerungsparameter bezeichnet (**Gleichung 2-16**). Γ_{GT} ist der Gibbs-Thomson Koeffizient, m_l die Steigung der Liquiduslinie, c_l die Konzentration der Schmelze und D_l der Diffusionskoeffizient im Flüssigen.

$$M = \frac{\Gamma_{GT} D_l \ln\left(\frac{c_l}{c_0}\right)}{m_l(1-k)(c_0 - c_l)} = \frac{\Gamma_{GT} D_l \ln\left(\frac{1}{k}\right)}{m_l(1-k)(1-1/k)c_0} = K_M \frac{1}{c_0} \quad (2-16)$$

Berechnet man mit der Lever-Rule die maximale Konzentration der Schmelze ($c_i=c_0/k$) und fasst die oben erwähnten Größen in **Gleichung 2-16** als Konstante K_M zusammen, erkennt man, dass M indirekt proportional zur Ausgangskonzentration c_0 ist. Mit steigendem Legierungsgehalt würde der Vergrößerungsparameter und entsprechend **Gleichung 2-15** der SDAS im Allgemeinen abnehmen. Diese Vermutung soll im Folgenden für unterschiedliche Kohlenstoffgehalte mit der Vorgehensweise aus [37] und Werten für K_M aus [32] überprüft werden. **Gleichung 2-17** ermöglicht die Bestimmung von M unter Berücksichtigung der peritektischen Phasenumwandlung. Der Festkörperanteil ab dem die peritektische Phasenumwandlung einsetzt, kann unter der Annahme, dass die Umwandlung bei 0,6 wt% Kohlenstoff in der Schmelze stattfindet, ebenfalls mit Lever-Rule (**Gleichung 2-18**) berechnet werden. [32,37]

$$M = M^\delta f_s^{\delta/\gamma} + M^\gamma (1 - f_s^{\delta/\gamma}) \quad (2-17)$$

$$f_s^{\delta/\gamma} = \frac{0,6 - c_0}{0,6(1 - k^\delta)} \quad (2-18)$$

Das Ergebnis der Analyse zeigt **Abbildung 2-8**. Die Hemmung der SDAS Vergrößerung durch Kohlenstoff kann demnach bestätigt werden. Höhere Werte für K_M bedingen im Ferrit einen deutlich steileren Abfall des Vergrößerungsparameters als im Austenit. Die beschleunigte Abkühlung im Zweiphasengebiet führt zu einer vergleichsweise geringen Abnahme des SDAS, da der Proportionalitätsfaktor zwischen lokaler Erstarrungszeit und λ_2 über ein Wurzelgesetz begrenzt wird.

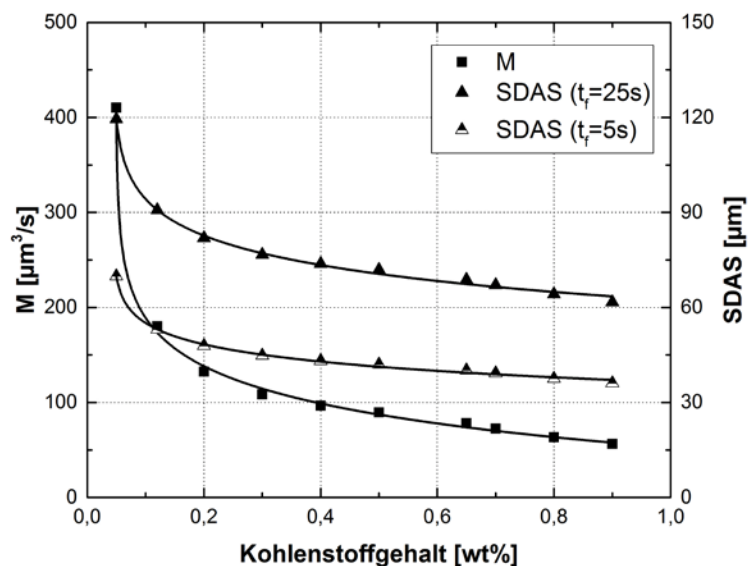


Abbildung 2-8: Berechnung des Vergrößerungsparameters und SDAS in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehalts mit Informationen aus [32,36,37]

Die Berechnung des Vergrößerungsparameters gestaltet sich in der Praxis äußerst komplex, daher wurden in der Vergangenheit zahlreiche empirische Gleichungen in der Form von **Gleichung 2-19** veröffentlicht. Sowohl der Koeffizient K als auch der Exponent n werden dabei oft als Funktionen der Legierungselemente vorgegeben und durch Korrelation zwischen metallographischen Untersuchungen und Ergebnissen von Erstarrungssimulationen bestimmt.

$$\lambda_2 = Kt_f^n = K\dot{T}^{-n} \quad (2-19)$$

In **Tabelle 2-4** sind ausgewählte SDAS Beziehungen zusammengefasst. Der Einfluss der Legierungselemente zeigt in beinahe allen Veröffentlichungen den gleichen Trend. Der Kohlenstoff senkt generell den SDAS und bestätigt damit die oben angeführte Analyse, eine Ausnahme bildet die Gleichung nach Cabrera-Marrero [38]. Diese Gleichung beschränkt sich auch nicht nur auf die Wirkung des Kohlenstoffs. Nach Cabrera-Marrero nimmt der SDAS bei geringen Aluminiumgehalten signifikant ab, diese Erkenntnis stimmt mit Untersuchungen von Hanel [39] überein. In der Auswahl einer geeigneten SDAS Beziehung für eigene Berechnungen muss darauf geachtet werden, dass diesen Gleichungen unterschiedliche Experimente und Mikroseigerungsmodelle zugrunde liegen und sich daher auch ein bestimmter Gültigkeitsbereich für die Abkühlbedingungen ergibt. [2]

Tabelle 2-4: Ausgewählte SDAS-Beziehung aus [2]

Autor	Ausdruck	C-Gehalt [wt%]
<i>El-Bealy,</i>	$\lambda_2 = 148\dot{T}^{-0,38}$	$0 \leq [C] \leq 0,53$
<i>Thomas [40]</i>	$\lambda_2 = (21,52764 - 9,4[C])t_f^{(0,4+0,08[C])}$	$0,53 \leq [C] \leq 1,5$
<i>Won,</i>	$\lambda_2 = (169,1 - 720,9[C])\dot{T}^{-0,4935}$	$0 < [C] \leq 0,15$
<i>Thomas [14]</i>	$\lambda_2 = 143,9\dot{T}^{0,3616} [C]^{(0,5501-1,996[C])}$	$0,15 < [C]$
<i>Cabrera- Marrero [38]</i>	$\lambda_2 = (70C + 50Si - 0,178Mn - 430Al + 0,755Ni - 3,42Cr)t_f^{1/3}$	$0,52 < [C]$
<i>Pierer, Bernhard [37]</i>	$\lambda_2 = (23,7 - 13,1[C]^{1/3})t_f^{1/3}$	$0,08 < [C] < 0,70$
<i>Guo, Zhu [41]</i>	$\lambda_2 = (166,38 - 567,07C - 85,39C^2)\dot{T}^{-0,49}$	$0 < [C] < 0,15$
	$\lambda_2 = (671,31C^2 - 627,8C + 232,23)\dot{T}^{-0,49} C^{(0,55-2C)}$	$0,15 \leq [C] \leq 0,53$
	$\lambda_2 = (27,93 - 11,19C)t_f^{(0,4+0,06C)}$	$0,53 < [C]$
<i>Suzuki [42]</i>	$\lambda_2 = 710\dot{T}^{-0,39}$	$[C] < 0,1$

2.1.5 Analytische Mikroseigerungsmodelle

Stähle erstarren im Allgemeinen dendritisch, das heißt, dass die Kristalle eine bevorzugte Wachstumsrichtung besitzen, die entgegengesetzt zum Wärmestrom orientiert ist. Im Falle eines unvollständigen Diffusionsausgleichs kommt es während der Erstarrung zur Anreicherung von Legierungselementen in den interdendritischen Zwischenräumen. Dieser Vorgang wird Mikroseigerung genannt und ist naturgegeben. Diese Art der Seigerung kann man im Rahmen eines Homogenisierungsprozesses (zum Beispiel Diffusionsglühen) ausgleichen. [2]

Die mathematische Beschreibung solcher Mikroseigerungsvorgänge lässt sich in zwei grundlegende Klassen unterteilen:

- Die Lever-Rule verlangt den vollständigen Konzentrationsausgleich (**Kapitel 2.1.1**), während im Modell nach Gulliver und Scheil die Diffusion im Festen vernachlässigt wird.
- Die kurzen Produktionszeiten in technischen Prozessen verwehren die Einstellung des Gleichgewichtszustandes. Interstitielle Atome wie Kohlenstoff oder Stickstoff weisen allerdings eine hohe Diffusionsfähigkeit auf und können einen bestimmten Konzentrationsausgleich erreichen. Basierend auf diesen Überlegungen entstanden Mikroseigerungsmodelle, die eine Rückdiffusion von Elementen aus der angereicherten Schmelze in die feste Phase erlauben. Das Ausmaß des Konzentrationsausgleichs wird von der Geometrie des Dendriten, der Diffusionsfähigkeit des jeweiligen Elements und der zur Verfügung stehenden Zeit während der Erstarrung definiert.

Da die Randbedingungen nach Gulliver und Scheil [43,44] die Voraussetzung für die Entwicklung aller weiteren Mikroseigerungsmodelle bildeten, sollen diese Annahmen zunächst besprochen werden:

- die Unterkühlung vor der Keimbildung ist vernachlässigbar,
- es findet kein Massenfluss in oder aus dem betrachteten Volumens statt,
- im Flüssigen findet ein vollständiger Diffusionsausgleich statt,
- an der Phasengrenzfläche Fest/Flüssig herrscht ein lokales Gleichgewicht, das durch den Gleichgewichtsverteilungskoeffizienten vorgegeben wird. Der Verteilungskoeffizient bleibt während des gesamten Erstarrungsvorgangs konstant.
- im Festen wird die Diffusion vernachlässigt.

In **Abbildung 2-9** sind die Überlegungen nach Gulliver und Scheil grafisch dargestellt. Schreitet die Erstarrungsfront um einen infinitesimalen Festkörperanteil df_s voran, kommt es

zur Anreicherung der Schmelze um den Betrag dC_L . Zur Erfüllung der Massenbilanz müssen die scharffierten Flächen gleichwertig sein. Durch Trennung der Variablen erhält man **Gleichung 2-20** als Lösung für die Konzentration in der Schmelze. Die Vernachlässigung der Diffusion im Festen führt zu Isokonzentrationslinien im Dendriten, die nach der Durcherstarrung erhalten bleiben.

$$C_L = C_0(1 - f_s)^{k-1} \quad (2-20)$$

Der Festkörperanteil wird mit **Gleichung 2-21** bestimmt.

$$f_s = 1 - \left(\frac{T - T_{l,0}}{T_l - T_{l,0}} \right)^{1/(k-1)} \quad (2-21)$$

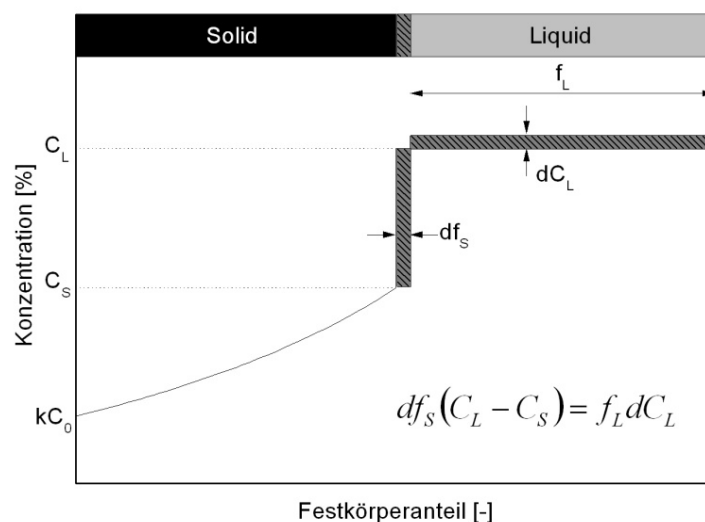


Abbildung 2-9: Erstarrendes Volumenelement nach Gulliver und Scheil [2]

Die Analyse von Rückdiffusionsvorgängen während der Erstarrung erfordert die geometrische Modellierung des erstarrenden Volumenelements und der Fest/Flüssig Phasengrenzfläche sowie einen Ausdruck für die Wachstumsrate. [45]

Brody und Flemings [45] teilen dem Dendriten eine plattenähnliche Form zu, die parallel und entgegengesetzt zum Wärmefluss orientiert ist (**Abbildung 2-10**). An der Position der Dendritenwurzel x_r ($r = \text{root}$) herrscht die Solidustemperatur, an der Dendritenspitze x_t ($t = \text{tip}$) die Liquidustemperatur. Im Bereich $x_r < x < x_t$ stehen die feste und flüssige Phase im Gleichgewicht. Die Konzentration an der Grenzfläche wird über $c_s^* = kc_l$ definiert. Ein Volumenelement mit der Länge L normal zum Wärmefluss beginnt bei Unterschreitung der Liquidustemperatur zu erstarren ($\lambda=0$). Die aktuelle Position der Phasengrenzfläche Fest/Flüssig wird mit λ_t festgelegt. Zum Zeitpunkt der Durcherstarrung befindet sich die Phasengrenzfläche bei $\lambda=L$, wobei L den Mittelpunkt zwischen zwei Dendriten darstellt.

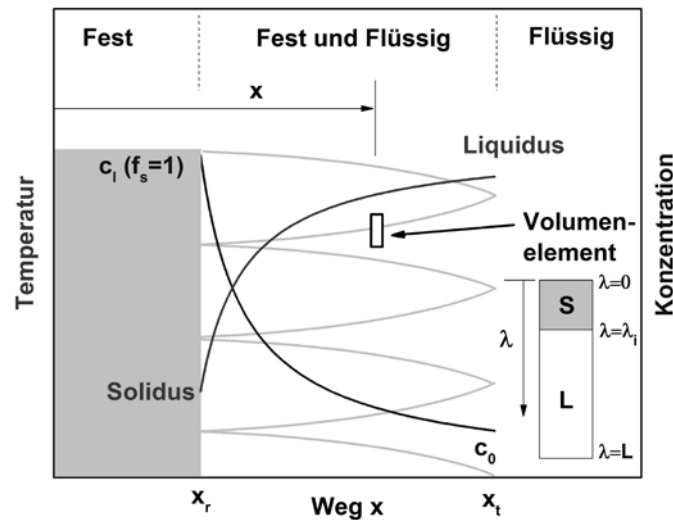


Abbildung 2-10: Schematische Darstellung des Brody-Fleming Plattenmodells nach [45]

Das Gulliver Scheil Modell wurde im 1D-Mikroseigerungsmodell von Brody und Flemings um folgende Annahmen erweitert [45]:

- Der Transport im Festen erfolgt über Volumendiffusion, der Diffusionskoeffizient ist eine Funktion von Temperatur und/oder Konzentration.
- Die Wachstumsrate $d\lambda_i/dt$ normal zum Wärmefluss, das heißt die Dickenzunahme der Dendritenplatten, ist eine kontinuierliche Funktion, die konstant ($d\lambda_i/dt=u$) oder parabolisch ($d\lambda_i/dt=w/(2t^{1/2})$) sein kann. u und w sind Konstante.
- Die Dichte von fester und flüssiger Phase sind ident, dementsprechend sind die Einflüsse der Volumenänderung für die Diffusion im Festen nicht von Bedeutung.

Aus der allgemeinen Massenbilanz (**Gleichung 2-22**) ergibt sich unter der Annahme, dass die Diffusion den Konzentrationsgradienten an der Phasengrenzfläche Fest/Flüssig nicht wesentlich beeinflusst (damit entsteht ein oberes Limit für die Diffusion im Festen) und ein parabolisches Wachstum vorliegt, **Gleichung 2-23** für c_l . [45] In **Gleichung 2-22** ist δ_s die Tiefe der Diffusionsschicht im Festen.

$$(c_l - c_s^*)df_s = (1 - f_s)dc_l + \frac{D_s}{L} \frac{dt}{d\lambda_i} dc_s^* = (1 - f_s)dc_l + \frac{1}{2} \frac{\delta_s}{L} dc_s^* \quad (2-22)$$

$$c_l = c_0 [1 - (1 - 2\alpha k)f_s]^{(k-1)/(1-2\alpha k)} \quad (2-23)$$

Mit **Gleichung 2-24** lässt sich der entsprechende Festkörperanteil berechnen.

$$f_s = \left(\frac{1}{1 - 2\alpha k} \right) \left[1 - \left(\frac{T_{l,0} - T}{T_{l,0} - T_l} \right)^{(1-2\alpha k)/(k-1)} \right] \quad (2-24)$$

Die Fourier-Zahl α in **Gleichung 2-25** stellt die dimensionslose Kennzahl zur Beschreibung des Stofftransports dar. Als charakteristische Länge L wird in Mikroseigerungsvorgängen im Allgemeinen $\lambda_2/2$ vorgegeben, für t die lokale Erstarrungszeit t_f . SDAS und lokale Erstarrungszeit stehen über die in **Kapitel 2.1.4** vorgestellten Beziehungen in Verbindung.

$$\alpha = \frac{D_s t}{L^2} = \frac{4D_s t_f}{\lambda_2^2} \quad (2-25)$$

Die Diffusion ist ein thermisch aktivierter Prozess, das heißt, dass dieser Vorgang nur bei ausreichend hoher Energie und entsprechend hoher Temperatur abläuft. Als Kenngröße für die Beweglichkeit eines Atoms in der Matrix wird der Diffusionskoeffizient D_s in Form eines Arrhenius-Ansatzes verwendet (**Gleichung 2-26**), wobei D_0 eine temperaturunabhängige Konstante und Q die Aktivierungsenergie in J/mol darstellen. Die Einheit der Temperatur ist Kelvin, jene der Gaskonstante J/molK.

$$D_s = D_0 e^{\left(\frac{-Q}{RT} \right)} \quad (2-26)$$

Der Diffusionskoeffizient kann unter den Legierungselementen um einige Größenordnungen variieren. Kohlenstoff ist als interstitiell gelöstes Atom besonders beweglich, während Chrom oder Nickel nur in geringem Ausmaß diffundieren können. Im kubisch raumzentrierten Gitter des Ferrits steht mehr Platz für die Bewegung der Atome zur Verfügung als im kubisch flächenzentrierten Austenit, dementsprechend höher ist auch die Diffusionsfähigkeit der Legierungselemente im Ferrit (**Tabelle 2-5**).

Tabelle 2-5: Diffusionskoeffizienten in Ferrit und Austenit [4], [12,46]

Element	$D^{\delta/\alpha}$ [cm ² /s]	D^{γ} [cm ² /s]
C	0,0127exp(-81379/RT)	0,0761exp(-134429/RT)
Si	8,0exp(-248948/RT)	0,30exp(-251218/RT)
Mn	0,76exp(-224430/RT)	0,055exp(-249128/RT)
P	2,9exp(-230120/RT)	0,01exp(-182666/RT)
S	4,56exp(-214639/RT)	2,4exp(-212232/RT)
Al	5,9exp(-241186/RT)	5,1exp(-245800/RT)
Cr	2,4exp(-239785/RT)	0,0012exp(-218991/RT)
Ni	1,6exp(-239994/RT)	0,34exp(-282378/RT)
Mo	3,47exp(-241375/RT)	0,068exp(-246856/RT)
Cu	2,6exp(-239994/RT)	0,7exp(-285976/RT)

Das Brody-Flemings Modell besitzt keine allgemeine Gültigkeit, da die Massenerhaltung nicht gewährleistet wird. Mit $\alpha \rightarrow 0$ (keine Rückdiffusion) erhält man zwar die Gulliver-Scheil-Beziehung, umgekehrt erhält man bereits mit $\alpha=0,5$ die Lever-Rule und nicht wie erwartet mit $\alpha \rightarrow \infty$. Daher sind **Gleichung 2-23** und **Gleichung 2-24** für höhere Fourier-Zahlen ungeeignet. Clyne und Kurz [47] konnten eine Verbesserung unter Einführung eines Korrekturterms erzielen. Die Vorgehensweise wird anhand **Abbildung 2-11** erläutert. Die Gültigkeit der Brody-Flemings Analyse bleibt nur erhalten wenn die Bedingung $\delta_s \ll L$ erfüllt ist, das heißt die Tiefe der Diffusionsschicht ist vernachlässigbar klein gegenüber der Dimension des Volumenelements. Ist diese Voraussetzung nicht gegeben, befindet sich ein Teil der in **Abbildung 2-11** (links) gekennzeichneten Fläche A_3 außerhalb der physikalischen Grenzen des Systems. In weiterer Folge entsteht durch das „Abschneiden“ des Diffusionsprofils Berechnungsfehler, welcher mit dem Ansatz aus **Abbildung 2-11** (rechts) abgeschätzt werden kann: A_T (**Gleichung 2-27**) entspricht hier der Fläche A_3 des linken Bildes. A_E (**Gleichung 2-28**) bildet die unberücksichtigte Fläche, die in erster Annäherung von der angegebenen Exponentialfunktion begrenzt wird. Die Integration des Verhältnisses A_E/A_T über die lokale Erstarrungszeit liefert unter der Annahme eines parabolischen Verhaltens, wie es für Dendriten üblich ist, den Fehler Σ (**Gleichung 2-29**). Je langsamer die Phasengrenzfläche fortschreitet bzw. je mehr Zeit zur Verfügung steht und je höher das Diffusionsvermögen des Elements, desto größer wird der Fehler.

$$A_T = \int_0^{\infty} c' dy = \frac{c'_0 \delta_s}{2} \quad (2-27)$$

$$A_E = \int_{y'}^{\infty} c' dy = \frac{c'_0 \delta_s}{2} \exp\left(-\frac{2y'}{\delta_s}\right) \quad (2-28)$$

$$\Sigma(\alpha) = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} \frac{A_E}{A_T} dt = \exp\left(-\frac{1}{2\alpha}\right) \quad (2-29)$$

Mit den Randbedingungen $\Omega(\alpha) \rightarrow \alpha$ für $\Sigma(\alpha)=0$ und $\Omega(\alpha) \rightarrow 0,5$ für $\Sigma(\alpha)=1$ erhält man für den Korrekturterm $\Omega(\alpha)$ **Gleichung 2-30**. Mit der Substitution von α in **Gleichung 2-23** und **Gleichung 2-24** durch $\Omega(\alpha)$ entgeht man dem Fehler bei höherer Fourier-Zahl. Das Problem der fehlenden Massenerhaltung bleibt zwar bestehen, dennoch ist als Clyne-Kurz Modell aufgrund seiner einfachen Handhabung weit verbreitet. [1]

$$\Omega(\alpha) = \alpha \left(1 - \exp\left(-\frac{1}{\alpha}\right) \right) - \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{1}{2\alpha}\right) \quad (2-30)$$

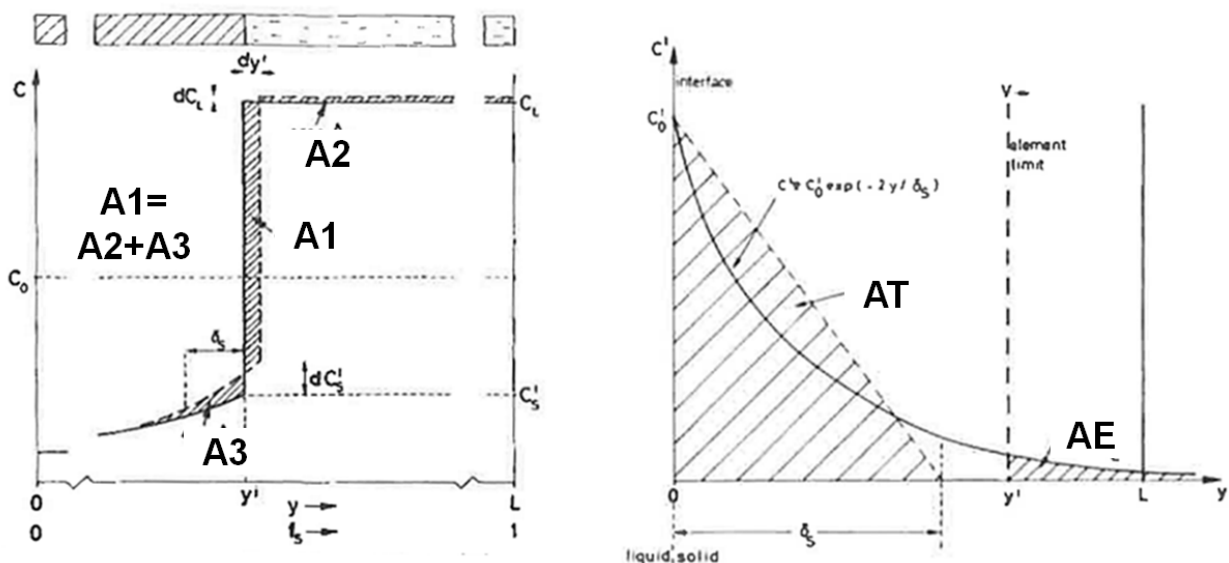


Abbildung 2-11: Rückdiffusion während der Erstarrung eines Volumenelements mit Länge L nach Brody-Flemings (links) und Abschneidung des Diffusionsprofils durch die physikalischen Grenzen des Modells (rechts) [47]

Ohnaka [48] erweiterte das Brody-Flemings Modell unter der Annahme einer quadratischen Verteilung $c_s = a + by + cy^2$ in der Transversalebene des Dendriten. Zur Vervollständigung des Modells werden platten- und dendritenförmige Erstarrungsgeometrien definiert. In die hexa-

gonale Form der gerichteten Dendriten wird hierzu ein Dreieck eingeschrieben (**Abbildung 2-12**).

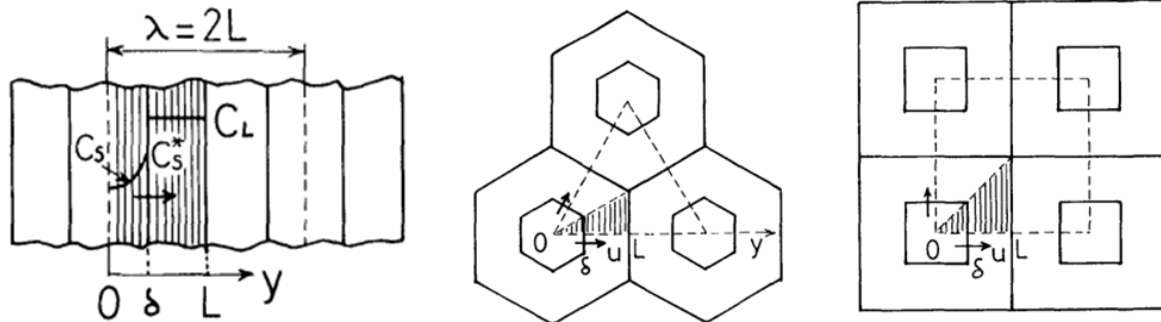


Abbildung 2-12: Geometrische Modellierung von Dendriten: Plattenmodell (links) und gerichtete Dendriten (mitte und rechts)

Mit den Anfangs- und Randbedingungen

- $t=0: c_s=kc_0, c_l=c_0, f_s=0$
- $y=0: \partial c_s/\partial y=0$
- $y=\delta$ (Phasengrenzfläche Fest/Flüssig): $c_s=c_s^*=kc_l$

kann die Massenbilanz gelöst werden und man erhält **Gleichung 2-31**.

$$\frac{dc_l}{c_l} = \frac{(1-k)df_s}{1 - \left(1 - \frac{\beta k}{1+\beta}\right)f_s} \quad (2-31)$$

Die Integration der Differentialgleichung liefert folgenden Ausdruck (**Gleichung 2-32**):

$$\frac{c_l}{c_0} = (1 - \Gamma f_s)^{(k-1)/\Gamma} \quad (2-32)$$

Zur Erhaltung der Masse muss im Falle temperaturabhängiger Diffusions- und Verteilungskoeffizienten **Gleichung 2-31** von f_s bis $f_s + \Delta f_s$ integriert werden, wobei die Diffusions- und Verteilungskoeffizienten während des Erstarrungsfortschritts Δf_s konstant bleiben. Das Ergebnis ist eine semi-integrierte Form nach **Gleichung 2-33**. [49]

$$\frac{c_{l2}}{c_{l1}} = \left(\frac{1 - \Gamma f_{s2}}{1 - \Gamma f_{s1}} \right)^{(k-1)/\Gamma} \quad (2-33)$$

Der Rückdiffusionsparameter Γ ist eine Funktion der Fourier-Zahl (**Gleichung 2-34**). Der Koeffizient ändert sich entsprechend der Erstarrungsgeometrie: Für das Plattenmodell gilt $n=2$,

für den gerichteten Dendriten $n=4$. Mit $\alpha \rightarrow 0$ erhält man für **Gleichung 2-32** die Scheil-Beziehung für $\alpha \rightarrow \infty$ die Lever-Rule.

$$\Gamma = 1 - \frac{k\beta}{1+\beta} = 1 - \frac{nk\alpha}{1+n\alpha} \quad (2-34)$$

In **Abbildung 2-13** sind Ergebnisse unterschiedlicher Mikroseigerungsmodelle für die Berechnung der Anreicherung von Mangan und Kohlenstoff in Eisen gegenübergestellt. Mangan besitzt mit $\alpha \sim 0,3$ eine niedrige Fourier-Zahl, daher liefert in diesem Fall auch das Brody-Flemings-Modell plausible Ergebnisse. Aufgrund der hohen Diffusionsfähigkeit des Kohlenstoffs steigt die Fourier-Zahl um den Faktor 10 auf $\alpha \sim 3$. Clyne-Kurz, Ohnaka (gekennzeichnet als Eq. 12) und die Lever-Rule sagen hier ähnliche Konzentrationen voraus, während Brody-Flemings in einem fatalen Fehler endet. [48]

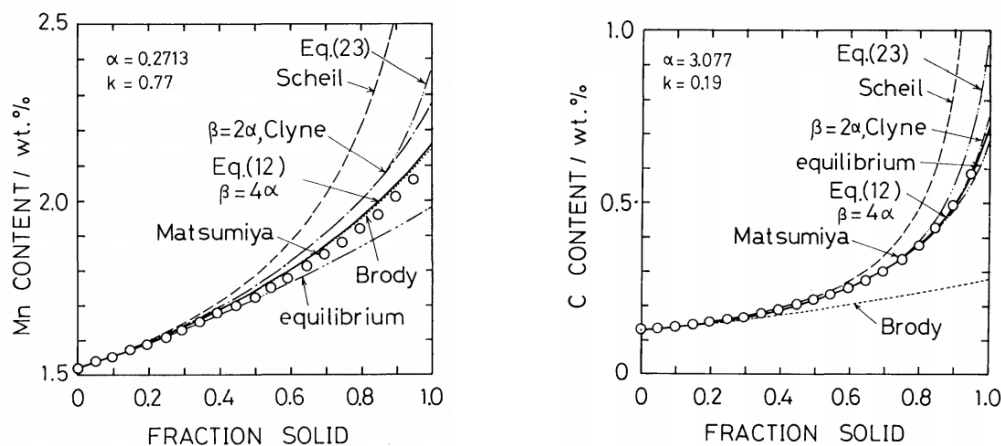


Abbildung 2-13: Berechnung der Anreicherung für Mangan (1,52wt% Mn) und Kohlenstoff (0,13wt% C) in Eisen mit unterschiedlichen Mikroseigerungsmodellen [48]

2.1.6 Ausscheidung von Mangansulfid während der Erstarrung

Die starke Anreicherung des Schwefels in der Schmelze kann in Verbindung mit entsprechenden Mangangehalten bei Überschreitung des Löslichkeitsprodukts zur Ausscheidung von Mangansulfid (MnS) in den interdendritischen Zwischenräumen führen. In Abwesenheit von Mangan würde sich stattdessen die eutektische Eisensulfidphase (FeS) bilden, welche in weiterer Folge als flüssiger Film an den Primärkorngrenzen vorliegt und eine Warmverprägung des Stahls verursacht. Daher wird die Duktilität im Hochtemperaturbereich oft mit dem Mn/S Verhältnis korreliert. **Abbildung 2-14** (rechts) zeigt, dass die Ausscheidung von MnS bei umso höherer Temperatur erfolgt, je höher das Mn/S Verhältnis ist. Das heißt die Differenz zwischen Liquidustemperatur T_l und der Ausscheidungstemperatur T sinkt. Ein

niedrigerer Mangangehalt im Stahl ermöglicht dagegen die kontinuierliche Anreicherung des Schwefels nahe der Enderstarrung. Die Konsequenzen sind höhere FeS Gehalte im Sulfid sowie eine deutliche Absenkung der Solidustemperatur. [50,51]

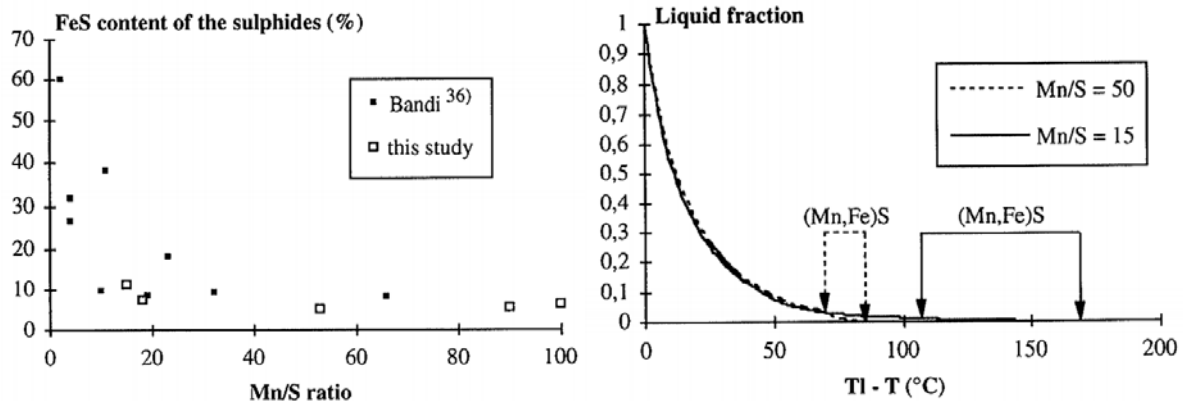


Abbildung 2-14: Bedeutung des Mn/S Verhältnisses für die Einschlussbildung [51]

Das Mn/S Verhältnis ist kein absoluter Wert, je nach Schwefelgehalt kann bei gleichbleibendem Verhältnis die Zusammensetzung des Sulfids unterschiedlich sein. [50] Alvarez de Toledo et al. [52] untersuchten den Einfluss von Mn/S auf die Warmduktilität von Stahl basierend auf Literaturwerten und Ergebnissen aus einem Walzwerk. Abhängig vom Schwefelgehalt formulierten die Autoren ein kritisches Mn/S Verhältnis $Mn/S_{kritisch} = 1,345S^{-0,7934}$, was bedeutet, dass mit steigendem Schwefelgehalt das kritische Mn/S Verhältnis sinkt. Dieser Zusammenhang widerspricht den Feststellungen aus **Abbildung 2-14**, bezieht man sich allerdings nur auf die Ausscheidung von MnS als notwendigen Prozess zur Verbesserung der Warmduktilität, wird tatsächlich weniger Mangan benötigt um das Löslichkeitsprodukt zu überschreiten, damit sinkt das kritische Mn/S Verhältnis. Der MSC Index in **Abbildung 2-15** ist definiert als $(Mn/S_{Stahl})/(Mn/S_{kritisch})$. MSC Werte größer 1 steigern die Duktilitätswerte, sowohl hinsichtlich der Heißrissbildung (ZST-ZDT), als auch bei niedrigeren Temperaturen. Die Zero Ductility Temperature (ZDT) und die Zero Strength Temperature (ZST) stellen charakteristische Temperaturen in Verbindung mit der Heißrissbildung dar und werden in **Kapitel 2.2** detailliert besprochen.

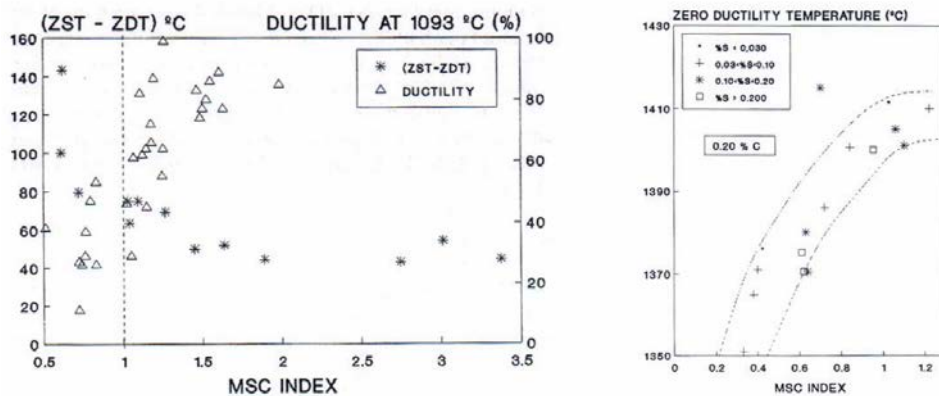


Abbildung 2-15: Einfluss des MSC Index auf die Warmumformbarkeit und die ZDT [52]

Die Ausscheidung von MnS wird entsprechend **Gleichung 2-35** durch das temperaturabhängige Löslichkeitsprodukt K_{MnS} beschrieben. Da mit niedrigeren Temperaturen die thermodynamische Triebkraft zunimmt, tritt die MnS-Bildung begünstigt bei niedrigen Erstarrungstemperaturen auf, dementsprechend findet man Mangansulfide häufig in Stählen mit höherem Kohlenstoffgehalt.

$$\log K_{\text{MnS}} = -\frac{A}{T} + B \quad (2-35)$$

Eine Auswahl entsprechender Werte für die Konstanten A und B sind in **Tabelle 2-6** zusammengefasst. Die Koeffizienten besitzen ähnliche Größenordnungen, dennoch können sich signifikante Unterschiede für die Seigerung in der Schmelze ergeben: Berechnet man das Löslichkeitsprodukt für 1450°C erhält man nach Choudhary $K_{\text{MnS}} = 1,1(\text{wt}\%)^2$ bzw. nach Xia $K_{\text{MnS}} = 0,356(\text{wt}\%)^2$, im ersten Fall kann sich dreimal mehr Schwefel bei gleichem Mangan Gehalt anreichern. Die Auswahl des Löslichkeitsprodukts hat, vor allem bei höheren Ausgangskonzentrationen an Schwefel und Mangan, daher entscheidenden Einfluss auf die berechnete Solidustemperatur.

Tabelle 2-6: Ausgewählte Koeffizienten für das MnS-Löslichkeitsprodukt aus [2]

Autor	A	B
Xia [53]	8750	4,63
Choudhary, Ghosh [12]	8817	5,16
Valdez, Wang [54]	8431	4,61
Ueshima, Isobe [55]	8625	4,74
Oikawa, Ohtani [56]	9200	5,30

2.1.7 Bedeutung der Mikroseigerung für das Stranggießen von Stahl

Mikroseigerungsvorgänge können die Produktqualität beim Stranggießen stark beeinträchtigen. Unterschiedliche Transportvorgänge der angereicherten Schmelze können zur Ausbildung von Inhomogenitäten auf makroskopischer Ebene führen. Bedingt durch den Erstarrungsverlauf finden sich diese Makroseigerungen vor allem im Zentrum des Strangs wieder. Die Mechanismen zur Bildung von Makroseigerungen können nach Ludwig et al. [57] wie folgt eingeteilt werden:

- Mechanismus A: Strömung von angereicherter oder verarmter Schmelze im Dendritennetzwerk,
- Mechanismus B: Transport von Kristallen bei gleichzeitigem An- oder Abtransport von Schmelze (Kristalle besitzen generell eine geringere Konzentration als die Schmelze),
- Mechanismus C: Die Aufweitung oder Kompression des Dendritennetzwerks führt zum An- oder Abtransport angereicherter Schmelze,
- Mechanismus D: Die Schrumpfung oder Ausdehnung durch Phasenumwandlungen führt zum An- oder Abtransport der Schmelze.

Im Stranggießprozess wird der Transport der Schmelze vor allem durch das Ausbauchen der Strangrolle zwischen den Stützrollen beeinflusst und ist ident mit Mechanismus C. [57] In **Abbildung 2-16** sind die Mechanismen schematisch dargestellt. Kristalle, die ein repräsentatives Volumenelement verlassen (B^+), eine Aufweitung des Dendritennetzwerks (C^+) und Schrumpfungen durch Phasenumwandlungen (D^+) erhöhen C_{mix} und begünstigen damit die Ausbildung von Zentrumsseigerungen.

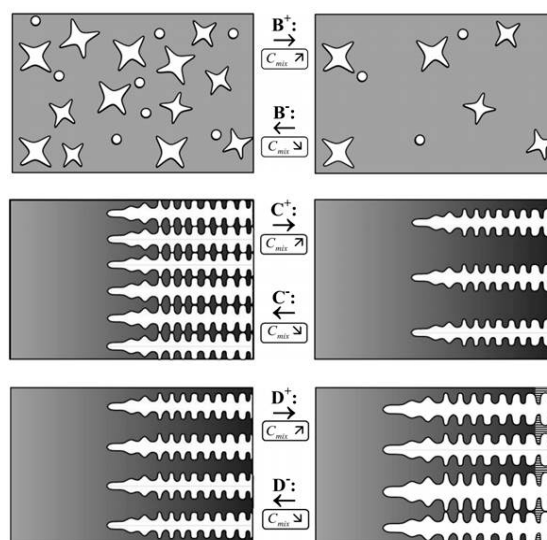


Abbildung 2-16: Mechanismen der Bildung von Makroseigerungen nach Ludwig [57].

Zur Verminderung der Makroseigerungen wird im Stranggießprozess eine Softreduction durchgeführt, bei welcher der Schalenkasten nahe der Durcherstarrung mechanisch oder thermisch zusammengedrückt wird. [58] Die Auslegung einer Softreduction erfolgt gewöhnlich über die numerische Simulation des Erstarrungsverlaufs unter Berücksichtigung der Sekundärkühlstrategie, dem Gießformat und der chemischen Zusammensetzung des Stahls. Mikroseeigerungsmodelle und thermophysikalische Eigenschaften werden zur Lösung der Wärmeleitungsgleichung benötigt und beeinflussen dementsprechend das Berechnungsergebnis der metallurgischen Länge. Geringe Abweichungen zur tatsächlichen Position der Sumpfspitze können dazu führen, dass der Einsatz einer Softreduction keine Verbesserung der Produktqualität erzielt oder die Qualität gar vermindert. In **Abbildung 2-17** ist die Auswirkung der Veränderung thermophysikalischer Eigenschaften auf die berechnete Position der Sumpfspitze dargestellt. Bereits geringfügige Modifikationen der Materialdaten verschieben die Solidusisotherme um einen halben Meter. In **Abbildung 2-17** bezieht sich der Index 1 auf die ursprünglichen Materialdaten, 2 auf die modifizierten Daten.

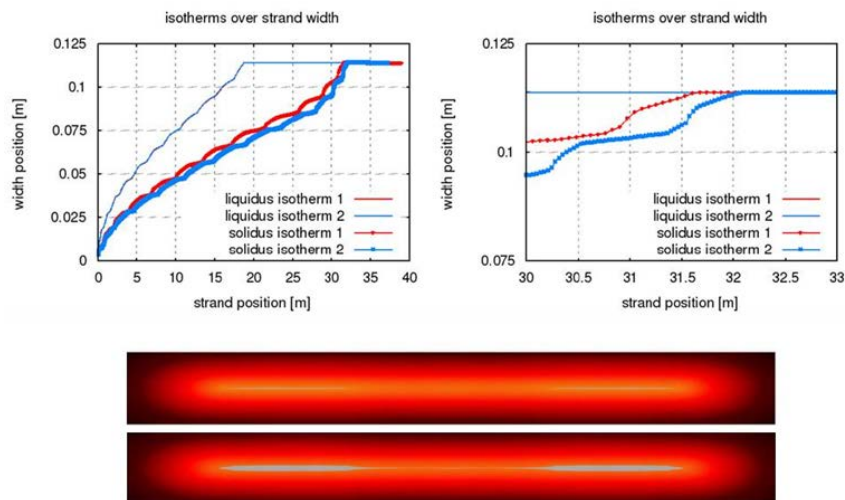


Abbildung 2-17: Einfluss unterschiedlicher thermophysikalischer Materialdaten (1,2) und Solidustemperatur auf den Zeitpunkt der Durcherstarrung am Beispiel einer Brammenstranggießanlage [59]

Ein wesentliches Qualitätsmerkmal des stranggegossenen Halbzeugs ist ein fehlerfreies Innenleben. Heißrisse (HR) und Heißrisseigerungen (HRS) können in weiteren Prozessschritten bis an die Oberfläche wachsen oder zu Härtegefügen im Fertigprodukt führen.

Abbildung 2-18 zeigt die „klassische“ Theorie der mechanischen Eigenschaften nahe der Solidustemperatur sowie charakteristische Temperaturen für die Heißrissebildung. Ab der Nullfestigkeitstemperatur ZST (Zero Strength Temperature), diese entspricht Festkörperanteilen zwischen $f_s=0,65-0,80$, kommt es zum Anstieg der Festigkeit der Dendriten. In diesem

Bereich liegen flüssige Filme in den dendritischen Zwischenräumen vor, einwirkende Zugspannungen können zur Bildung von Heißrisseigerungen führen. Die Schmelznachspeisungstemperatur LIT (Liquid Impenetrable Temperature) ist jene Temperatur, ab welcher die interdendritischen Räume nicht mehr mit Schmelze nachgespeist werden können. Die Nullzähigkeitstemperatur ZDT (Zero Ductility Temperature) befindet sich knapp oberhalb der Solidustemperatur und stellt den Übergang zwischen sprödem und duktilem Verhalten der Mikrostruktur dar.

Als kritisches Temperaturintervall ΔT_B (Brittle Temperature Range) wird die Differenz zwischen LIT und ZDT definiert, welche in gängigen Heißrissebildungskriterien die Berücksichtigung der chemischen Zusammensetzung zur Beurteilung der Rissempfindlichkeit darstellt. [58,60] Den Einfluss des Schwefels auf ΔT_B zeigt **Abbildung 2-18** (rechts). Die Anreicherung findet vor allem nahe der Enderstarrung statt, dementsprechend wird die ZDT stark abgesenkt, während sich ZST und LIT nur geringfügig ändern. Die Aufweitung des kritischen Temperaturintervalls bedingt eine höhere Heißrissempfindlichkeit mit steigendem Schwefelgehalt.

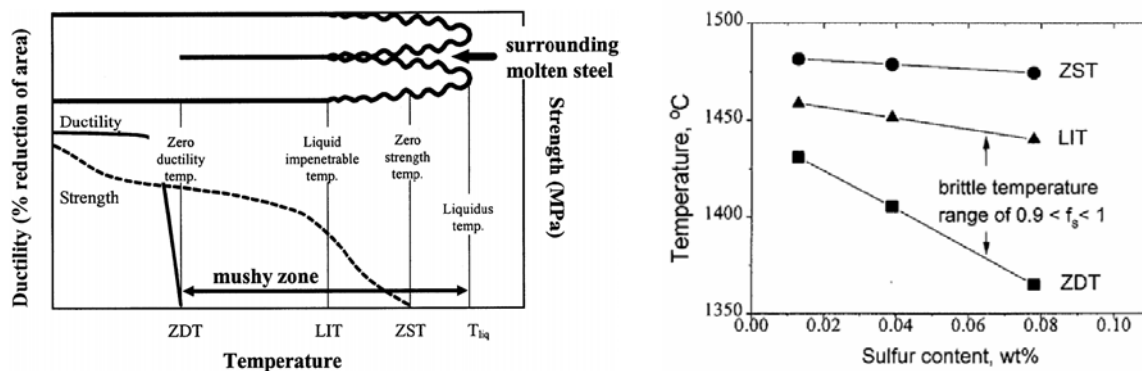


Abbildung 2-18: Schematische Darstellung der mechanischen Eigenschaften und charakteristischer Temperaturen in der Nähe des Schmelzpunktes [61] und Einfluss von Schwefel auf das kritische Temperaturintervall [62]

In der vorliegenden Arbeit wird die HRS Bildung als Seigerungsphänomen behandelt, diese Theorie setzt folgende Bedingungen voraus [63]:

- HRS entstehen nur im Zweiphasengebiet,
- Zugspannungen, die durch mechanische oder thermische Belastungen entstehen, werden normal zur Wachstumsrichtung aufgebracht,
- HRS befinden sich an der Primärkorngrenzen,
- HRS entstehen bei einem bestimmten Festkörperanteil und
- nur im Falle eines gerichteten Dendritenwachstums.

Aus den angeführten Bedingungen lässt sich ableiten, dass die Mikrosegrierung für die Beschreibung der HRS Bildung einen entscheidenden Beitrag leistet. In **Abbildung 2-19** (links) sind die drei Stufen der HR/HRS Bildung dargestellt [63]:

- Zwischen den Primärkorngrenzen befindet sich die angereicherte Restschmelze. Bei Beanspruchung mit einer Zugspannung normal zur Wachstumsrichtung erhöht sich der Rückdiffusionsweg der Elemente (**Kapitel 2.1.5**). Es kommt zur weiteren Anreicherung stark seigernder Elemente wie Schwefel, Phosphor oder Mangan. Die Lücke zwischen den Primärkorngrenzen kann von der Schmelze allerdings noch gefüllt werden, dementsprechend handelt es sich in Stufe 1 um ein Seigerungsphänomen, es liegen HRS vor.
- Mit zunehmender Zugspannung kommt es zur Bildung von Poren, da die Lücke von der Schmelze nicht mehr gefüllt werden kann (Typ II).
- In Typ III bilden sich Einschlüsse und Ausscheidungen (Mn, Nb). Die Poren können zusammenwachsen und einen „offenen HR“ bilden.

Ilie et al. [64] konnten die Heißrissbildung ebenfalls als Seigerungsphänomen identifizieren und den oben beschriebenen Mechanismus bestätigen (**Abbildung 2-19**, rechts). Die Zunahme des Kohlenstoffgehalts führt zur Aufweitung des Erstarrungsintervalls und damit zu einer stärkeren Anreicherung in den interdendritischen Zwischenräumen sowie auf makroskopischer Ebene. Sowohl im Labormaßstab (SSCT) als auch in Brammen konnte ein eindeutiger Zusammenhang zwischen der Anreicherung in HRS und den durch Mikrosegrierungsvorgänge bedingten Konzentrationsanstieg festgestellt werden.

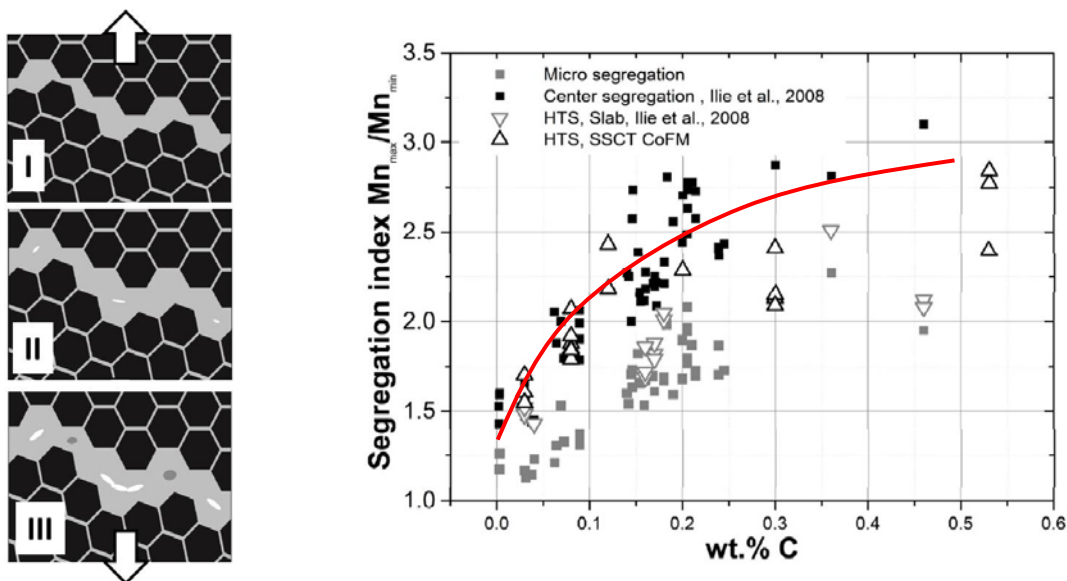


Abbildung 2-19: Die drei Stufen der HRS Bildung nach [63] (links) und Mikro- bzw. Makrosegrierung von Mangan sowie HRS in Brammen und SSCT Versuchskörpern in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehalts nach [64]

Vorhersagemodelle zur Heißrissbildung in Stranggießanlagen müssen vielen Anforderungen entsprechen und nach Bernhard [65] drei wesentliche Faktoren berücksichtigen: Die chemische Zusammensetzung des Stahls, den Einfluss der Mikrostruktur und die Prozessführung selbst.

Die chemische Zusammensetzung des Stahls beeinflusst die Mikroseigerungsvorgänge in den interdendritischen Zwischenräumen und an den Primärkorngrenzen. In einer einfachen Annahme erhöhen starkseigernde Elemente wie Phosphor und Schwefel die Rissempfindlichkeit. Mechanismen, die zur Abnahme solcher Elemente führen (Bildung von Mangansulfid), senken die Rissempfindlichkeit. [58]

Die oben angeführten Überlegungen von Arth et al. [63] gelten für gerichtete Erstarrung, wenn die Dendriten normal zur Wachstumsrichtung belastet werden. Weitgehend unempfindlich gegenüber der Rissbildung sind hingegen globulare Strukturen [58], wie sie im Gießprozess vor allem im Kern des Strangs auftreten. Weiters weist der zentrumsnahe Bereich des Strangs entsprechend **Abbildung 2-20** gröbere Primärkörner auf, dadurch konzentrieren sich die Belastungen auf weniger Korngrenzen und die lokale Dehnung steigt. Ein Heißrissbildungskriterium sollte daher stets mit einem Strukturmodell verknüpft sein. [65]

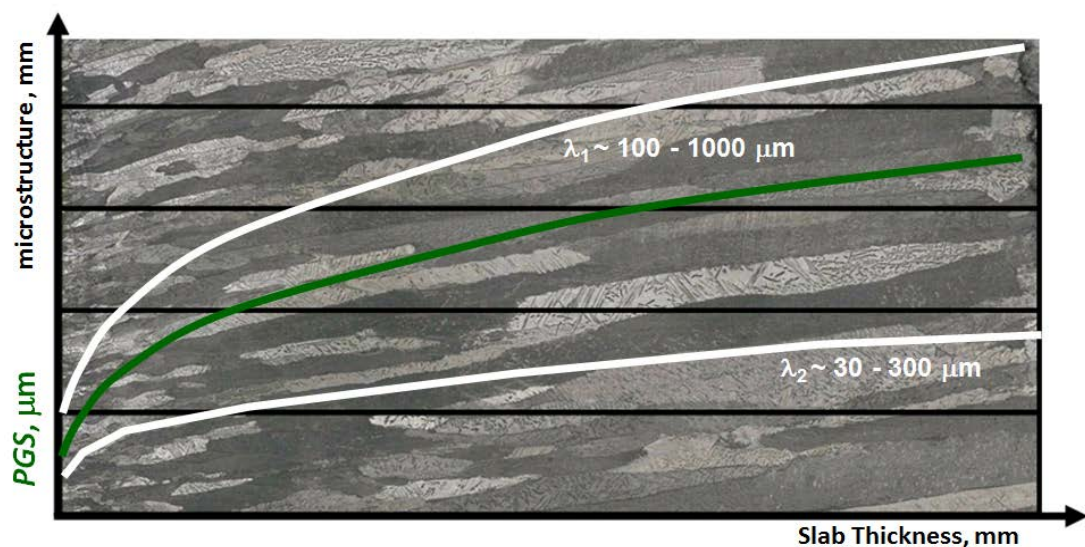


Abbildung 2-20: Entwicklung der Mikrostruktur in Abhängigkeit der Brammendicke nach [66]

Abschließend muss in einem prozessorientierten Heißrissbildungskriterium natürlich der Prozess selbst berücksichtigt werden. Der Zusammenhang von Anlagenkonfiguration (Rollenabstand, Biegeradius) sowie Gießparametern (Gießgeschwindigkeit, Kühlstrategie) und auftretenden Belastungen kann mit einer guten Strangmechanik ausreichend genau beschrieben werden. [65]

2.2 Mechanische Beanspruchung der Strangschale beim Stranggießen von Stahl

Beim Stranggießen können die auftretenden Belastungen bei Überschreitung eines kritischen Wertes zur Rissbildung in der erstarrenden Strangschale führen. Die Bestimmung dieser kritischen Werte ist für die Heißrissbildung beispielsweise im SSCT Versuch möglich (**Kapitel 4.1**). Die Position der Risse im stranggegossenen Halbzeug lässt auf den Schädigungszeitpunkt rückschließen. Das bedeutet, dass Risse, die sich nahe der Oberfläche befinden, bereits früh im Prozess entstanden. Im Folgenden sollen die wesentlichen Belastungsmechanismen, deren Modellierung und die auftretenden Rissarten besprochen werden. Die erste Beanspruchung erfährt die Schale bereits in der Kokille. Reibungskräfte und Kontraktion durch Phasenumwandlungen können in diesem Bereich schnell zur Rissinitiierung führen, besonders gefährdet sind hypoperitektische Stähle (**Kapitel 2.1.2**). Die Risse befinden sich hier nahe bzw. an der Oberfläche, bevorzugt unter Einziehungen oder im Kantenbereich.

Nach dem Verlassen der Kokille muss der Strang über die metallurgische Länge hinweg mit Rollen von beiden Seiten gestützt werden. Bedingt durch den steigenden ferrostatischen Druck mit zunehmendem Prozessfortschritt beginnt die Schale zwischen diesen Stützrollen auszubauchen. Die Dehnungsverhältnisse sind in

Abbildung 2-21 skizziert. Die neutrale Faser liegt in der Strangschale, wobei die höhere Festigkeit an der Oberfläche, bedingt durch die niedrigere Temperatur, die Position der neutralen Faser beeinflusst. Druckspannungen (ϵ_D) an der Erstarrungsfront, wie sie im Bereich zwischen den Stützrollen vorliegen, sind generell unbedeutend für die Rissbildung. Weitaus kritischer ist das Rückbiegen der Schale durch das folgende Rollenpaar, wo entsprechende Zugspannungen (ϵ_Z) an der Erstarrungsfront entstehen, die bei ausreichend hohen Beträgen Risse an der Ober- und Unterseite bilden. [67] Dieses Phänomen ist als Bulging bekannt und stellt vor allem beim Vergießen großer Formate wie Brammen ein ernstzunehmendes Problem dar. In der Vergangenheit sind zur Abschätzung der auftretenden Ausbauchung und Dehnung der Strangschale daher eine Vielzahl an Gleichungen empirischer Natur entwickelt worden. Als Einflussgrößen auf die Ausbauchung werden üblicherweise die Schalenstärke, der Rollenabstand, der ferrostatische Druck und die Gießgeschwindigkeit definiert. Die Beurteilung und Diskussion empirischer Bulgingformeln würde den Rahmen der vorliegenden Arbeit sprengen, eine ausführliche Diskussion kann in einer parallel verfassten Arbeit von Mayr [68] gefunden werden.

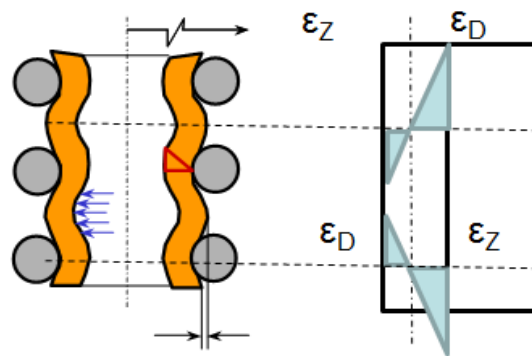


Abbildung 2-21: Belastungsverhältnisse bei der Ausbauchung der Strangschale zwischen den Stützrollen

Bei Fehlerbildungen in Stählen mit tendenziell geringer Rissempfindlichkeit kann oft der Anlagenzustand verantwortlich gemacht werden. Anlagenwartungen werden meist aus Produktivitätsgründen in unbedingt notwendigen Umfang durchgeführt. Die Deformation von Stützrollen in Längsrichtung durch die teilweise hohen Belastungen im Prozess kann zum sogenannten Rollenschlag führen. Die Symmetrieachse der Rolle liegt nicht mehr zum Zentrum, was sich beim Umlaufen in einem dauernden Biegen der Strangschale bemerkbar macht. [67] Die hervorgerufene Dehnung der Schale kann nach Barber und Perkins [69] mit **Gleichung 2-36** berechnet werden. δ_m entspricht dem Rollenversatz, S der Schalenstärke und l dem Rollenabstand. Häufig wird ein Rollenversatz erst erkannt, wenn die Rissbildung bereits erfolgt ist. Als vorbeugende Maßnahmen ergeben sich eine intensive Anlagenwartung oder die entsprechende Reihung von Stählen mit hohen Qualitätsanforderungen im Produktionsprogramm.

$$\varepsilon_m = \frac{300S\delta_m}{l^2} \quad (2-36)$$

Im Gegensatz zur Ausbauchung kommt es beim Biegen und Richten des Strangs nur in bestimmten Segmenten der Stranggießanlage zur Verformung der Schale. Beim Biegen wird der Strang aus der Vertikalen in die Kreisform überführt, Aufgabe des Richtsystems ist dessen Rückbiegen in die Horizontale. Lokal kommt es dabei zu hohen Rollenkräften und Beanspruchungen der Strangschale. Die neutrale Faser befindet sich in beiden Fällen in der Strangmitte (dies gilt streng genommen nicht für das Richten mit flüssigem Kern) [67], die Belastungen unterscheiden sich allerdings insofern, als dass beim Biegen die Zugspannung am Außenbogen auftritt, während sie beim Richten am Innenbogen vorliegt. Die erzeugten Risse können sowohl an der Oberfläche als auch im Inneren des Strangs liegen. Aufgrund der einseitig wirkenden Zugspannungen, findet man Biegerisse bevorzugt am Außenbogen, während Risse beim Richten am Innenbogen entstehen. Gegen Ende des Prozesses sedi-

mentieren die globularen Dendriten bei der annähernd horizontalen Führung des Strangs an der Unterseite und hemmen die Rissbildung am Außenbogen zusätzlich (**Kapitel 2.1.7**).

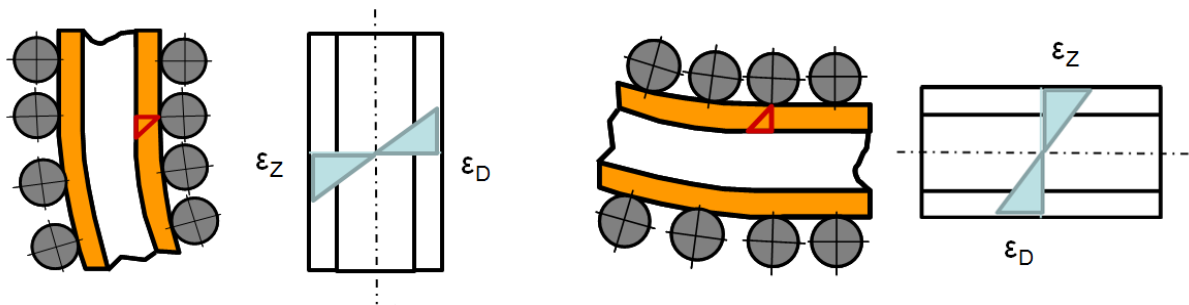


Abbildung 2-22: Belastungsverhältnisse und Lage der neutralen Faser beim Biegen (links) und Richten (rechts) des Strangs

Generell unterscheidet man zwischen Ein- und Mehrpunkttrichtsysteme, die sich in der Konstruktion der vordefinierten Kurve unterscheiden: Während beim Einpunkttrichtsystem (**Abbildung 2-23**, links) ein einzelner Kreisradius vorgegeben wird, sind Kurven eines Mehrpunkttrichtsystems (**Abbildung 2-23**, rechts) aus mehreren Radien zusammengesetzt und können als Hintereinanderschaltung mehrerer Einpunktssysteme gesehen werden. [67] Die Berechnung auftretender Dehnungen in einem Mehrpunkttrichtsystem ist nach Morita et al. [70] mit **Gleichung 2-37** möglich. Hier entspricht d der Strangdicke und R den einzelnen Biegeradien der Rollen.

$$\varepsilon_{B,S} = 100 \left(\frac{d}{2} - S \right) \left| \frac{1}{R_{n-1}} - \frac{1}{R_n} \right| \quad (2-37)$$

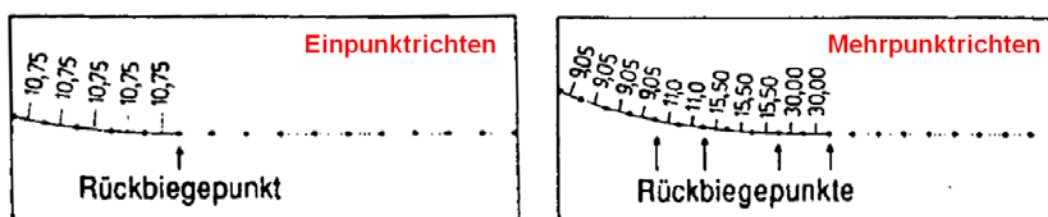


Abbildung 2-23: Prinzip von Einpunkttrichtsystem (links) und Mehrpunkttrichtsystem (rechts) [67]

Thermische Spannungen entstehen durch Temperaturdifferenzen innerhalb der Strangschale. Die Temperatur an der Strangoberfläche reagiert äußerst empfindlich auf die unterschiedlich starke Kühlung innerhalb der Sekundärkühlzone, während die Abkühlung im Stranginneren äußerst träge gegenüber äußeren Temperaturschwankungen ist. Kommt es an der Oberfläche allerdings zu Wiedererwärmungen (**Abbildung 2-24**, schraffierte Flächen), beispielsweise durch eine fehlende Kühlung, entsteht an der Erstarrungsfront im Stranginneren eine

Zugspannung. Die auftretende Dehnung ist direkt proportional zur Temperaturdifferenz, die an der Oberfläche vorliegt (**Gleichung 2-38**).

$$\varepsilon_{th} = \alpha_{th} \Delta T \quad (2-38)$$

Der Proportionalitätsfaktor α_{th} (in $1/K$) wird als Wärmeausdehnungskoeffizient bezeichnet. Die Temperaturabhängigkeit von α_{th} spielt im Stranggießprozess hinsichtlich der $\delta \rightarrow \gamma$ Umwandlung und der damit verbundenen Schrumpfung eine wesentliche Rolle. Eine mögliche Definition des Wärmeausdehnungskoeffizienten erfolgt über die temperaturabhängige Dichte nach Han [71] oder Mietinen [72] mit **Gleichung 2-39**, wobei ρ_{ref} und ρ die spezifische Dichte bei der Temperatur T_{ref} bzw. T sind.

$$\alpha_{th} = \frac{\left(\rho / \rho_{ref}\right)^{1/3} - 1}{T - T_{ref}} \quad (2-39)$$

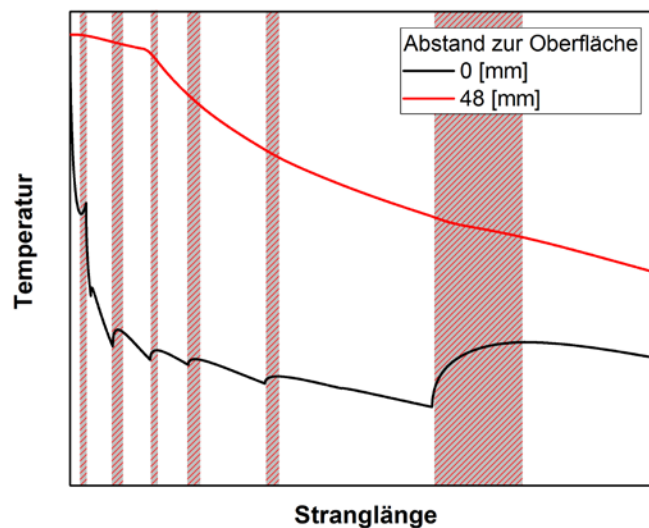


Abbildung 2-24: Schematische Darstellung der Temperaturverläufe in einer Stranggießanlage an der Strangoberfläche und im Stranginneren

3 1D-FV Erstarrungssoftware SolASys

Der schematische Aufbau der in-house 1D-FV (Finite Volumen) Erstarrungssoftware SolASys (Solidification Analysis Software) ist als Flussdiagramm in **Abbildung 3-1** dargestellt:

- Im „Modul Material Properties with Microsegregation“ (SolAMat) werden unter Berücksichtigung der Mikroseigerung und der diffusionskontrollierten Phasenumwandlungen jene thermophysikalischen Eigenschaften in Abhängigkeit der Stahlzusammensetzung berechnet, welche für die Erstarrungssimulation notwendig sind. Optional ist ein Import der Materialdaten aus dem Programm IDS (Interdendritic Solidification) möglich.
- In der „Setup Configuration“ kann ein zylindrisches oder kartesisches Koordinatensystem mit entsprechender Dimension und Anzahl an Knotenpunkten gewählt werden. In diesem Menü werden auch die Anfangsbedingungen (Überhitzung der Schmelze, Gießgeschwindigkeit) vorgegeben.
- Die notwendigen „Boundary Conditions“ Randbedingungen für die Simulation einer Stranggießanlage und den SSCT-Versuch werden als zeitabhängige Wärmestromdichte ($HF(t)$) oder Wärmeübergangskoeffizienten ($HTC(t)$) zur Verfügung gestellt. Der HF wird bevorzugt für die Berechnung des SSCT-Versuchs verwendet, der HTC eignet sich besonders für die Beschreibung der Sekundärkühlzone in einer Stranggießanlage. Die Erstarrungssimulation erfolgt mit dem Algorithmus von Swaminathan und Voller [73].
- Im Post Processing können Schalenwachstums- und Temperaturverläufe und Erstarrungskenngrößen exportiert werden. Zusätzlich kann die Auswertung des SSCT-Versuchs vorgenommen werden. Ein Submodul des Post Processings ist SolAStrain, in welchem die eigentliche Strangmechanik implementiert ist. In die Dehnungsanalyse können die Ausbauchung des Strangs, das Biegen und Richten, die thermische Dehnung durch Widererwärmung sowie der Rollenschlag individuell miteinbezogen werden.

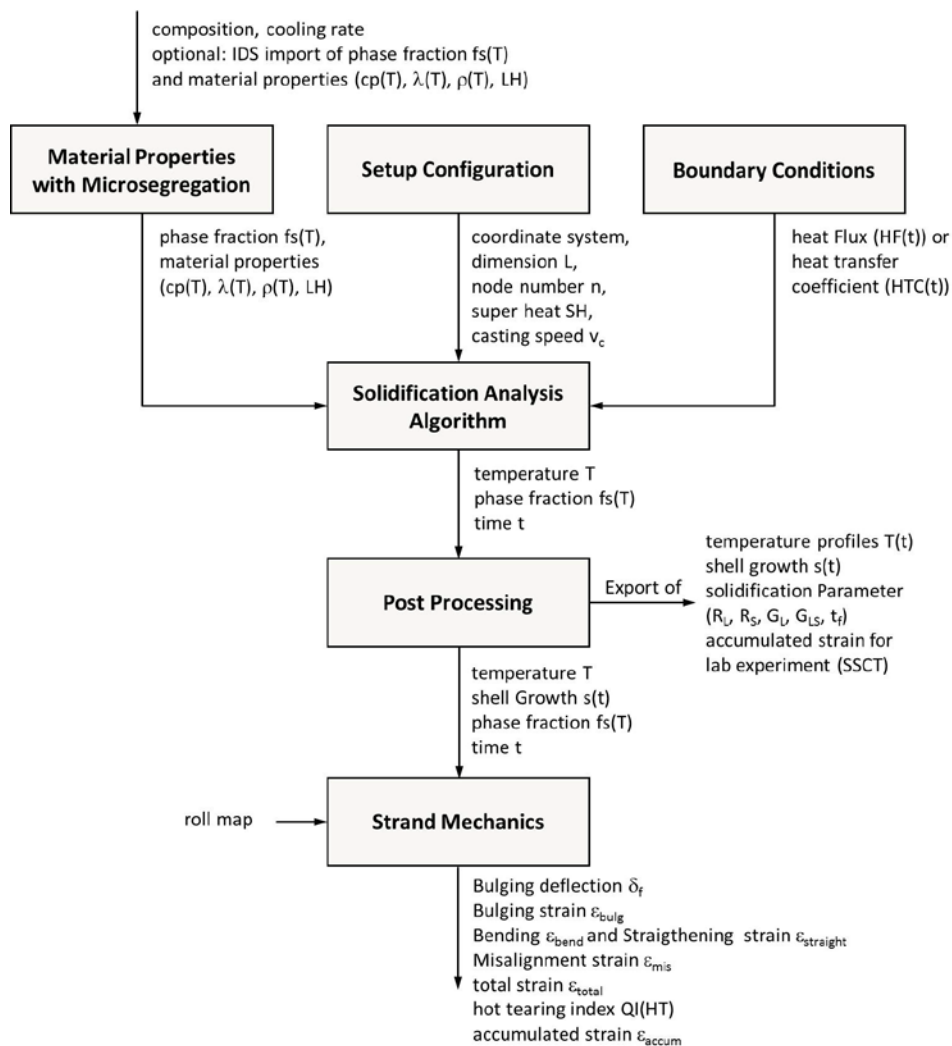


Abbildung 3-1: Flussdiagramm der Erstarrungssoftware SolASys

3.1 Berechnung von Phasenumwandlungen und thermophysikalische Eigenschaften mit dem Modul SolAMat

Im Modul SolAMat werden basierend auf über 300 DSC Messergebnissen und mehr als 1300 Berechnungen mit der FSStel2015 Datenbank in FactSage die Phasenumwandlungstemperaturen, die Wärmekapazität sowie die latente Wärme von Schmelze, Ferrit, Austenit und Perlit ermittelt. Die Arbeiten von Miettinen [72,74] dienen zur Berechnung der Dichte und Wärmeleitfähigkeit. In diesem Kapitel soll die Erstellung des ersten Submoduls von SolAMat am Beispiel der Stahlgruppe I ($c_P < 0,09$ wt%) vorgestellt werden, die Erweiterung von SolAMat auf die übrigen Kohlenstoffbereiche stellt ein Ziel der nahen Zukunft dar.

3.1.1 Voreinteilung von Stählen auf Basis ihrer chemischen Zusammensetzung

Im ersten Schritt wird in SolAMat entsprechend **Kapitel 2.1.2** eine Einteilung der vorliegenden Stahlzusammensetzung bezüglich des Erstarrungsverhaltens vorgenommen. Die Gleichungen nach Presoly [17], Blazek [21] sowie Shepherd [22] können hinsichtlich ihrer Eignung über DSC Messergebnisse beurteilt werden. Gegebenenfalls wird die ausgewählte Gleichung angepasst und der Gültigkeitsbereich (**Tabelle 3-1**) neu definiert.

Tabelle 3-1: Grenzgehalte an Legierungselementen für die Charakterisierung des Erstarrungswegs

Autor	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu	Sn	Ti	Nb	N	V
Shepherd	1,5	2	0,19	0,07	2	0,5	0,5	1	1	1	0,44	0,5	0,1	1
Blazek	2	2,1	0,1	0,15	2	18,3	10,3	2,2	1,35	0,03	0,33	0,08		0,03
Presoly	Ziel der folgenden Analyse													

Die Maximalkonzentrationen (in wt%) der DSC Legierungen befinden sich in

Tabelle 3-2: Die Aufteilung in Gruppen erleichtert die Auswahl und Optimierung der Gleichungen. Ergänzend zu den angeführten Legierungen werden Fe-C-P(+Cr,Ni) Systeme und TWIP-Stähle untersucht. SolAMat soll zukünftig fähig sein, allen Stählen mit Zusammensetzung innerhalb der Gruppe „SolAMat“ entsprechende Materialdaten zur Verfügung zu stellen. Die Klasse der „Stahlsorten“ beinhaltet Legierungskonzepte von Stählen aus der Industrie.

Tabelle 3-2: Maximale Legierungsgehalte der DSC Messungen

	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu	Ti	Nb	N	V
Fe-C-Si	4,37	0,06	0,004	0,006	0,05	-	-	-	-	-	-	0,003	-
Fe-C-Mn	0,02	5,40	0,004	0,005	-	-	-	-	-	-	-	0,003	-
Fe-C-Si-Mn	4,1	4,1	0,019	0,009	0,02	-	-	-	-	-	-	0,005	-
Fe-C-Al	0,03	0,06	0,005	0,004	3,04	-	-	-	-	-	-	0,003	-
Fe-C-Al-Mn	0,54	4,1	0,009	0,004	3,3	-	-	-	0,2	-	0,02	0,005	-
SolAMat	0,99	2,24	0,08	0,21	0,95	9,1	2,1	1,45	0,71	0,038	0,054	0,01	0,30
Stahlsorten	0,52	2,22	0,08	0,02	0,1	2,4	1,22	1,02	0,71	0,173	0,054	0,009	0,11
Gesamt	4,37	26,8	0,158	0,3	4,63	23,91	11,6	4,93	0,24	0,13	1,86	0,52	1,87

Die Übereinstimmung der DSC Messungen mit berechneten Einteilungen zeigt **Abbildung 3-2**, die prozentuellen Angaben sind hier auf die Berechnungsergebnisse nach Presoly bezogen. Diese Gleichung erzielt die höchste Übereinstimmung, wobei Blazek ähnlich gute Ergebnisse für Stähle aus der industriellen Praxis sowie Zusammensetzungen von SolAMat erreicht. Etwas überraschend fällt die Einteilung für die Aluminium-Systeme aus: Blazeks Beziehung wurde speziell für höhere Silizium- und Aluminiumgehalte entwickelt, bei Berechnungen in Fe-C-Al und Fe-C-Al-Mn Systemen kommt es allerdings zu signifikanten Abweichungen. Eine mögliche Begründung ist die fehlerhafte Beschreibung der Aluminium Systeme in der damals verwendeten thermodynamischen Datenbank. Trotz eines ähnlichen Gültigkeitsbereichs zu Blazek, zeigt die Shepherd Gleichung tendenziell die größte Diskrepanz zu den Messwerten.

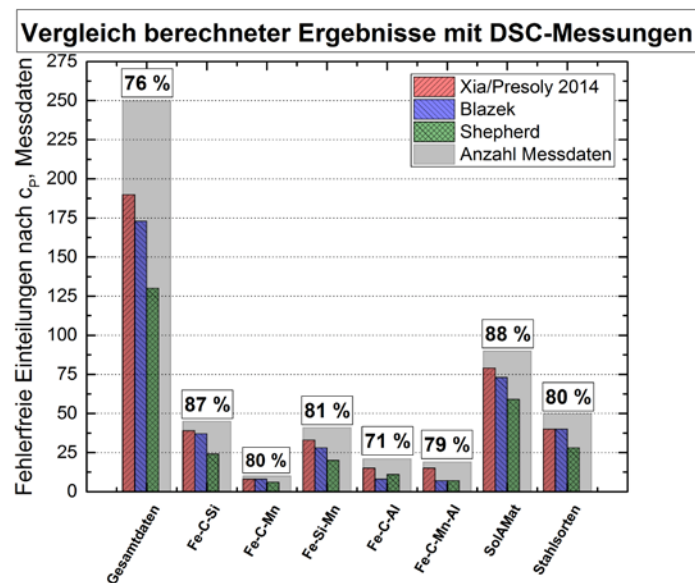


Abbildung 3-2: Übereinstimmung berechneter Ergebnisse mit DSC Messungen

Die hohe Übereinstimmung mit den Messergebnissen rechtfertigt die Auswahl der Gleichung von Presoly für eine weitere Optimierung. Da diese Beziehung bereits auf DSC Messungen basiert, kann mit einer geringfügigen Modifikation der Koeffizienten eine deutliche Verbesserung erzielt werden (**Tabelle 3-3**). Innerhalb der Fe-C-X Systeme werden die Koeffizienten für Silizium, Mangan und Aluminium angepasst. Die Gewichtung von Aluminium und Mangan verringert sich unwesentlich, der Koeffizient des Siliziums verdreifachte sich und liegt nun zwischen den Werten von Xia (-0,37) und Presoly (-0,005). Die Wechselwirkungskoeffizienten von Silizium und Mangan bzw. Aluminium und Mangan werden definiert, um den Erstarrungsweg in den entsprechenden Fe-C-X-Y besser zu beschreiben. Der Einfluss von Si*Mn scheint vernachlässigbar klein zu sein, wirkt sich allerdings besonders positiv im System Fe-C-Si-Mn aus. Die höhere Gewichtung von AlMn aus der Fe-C-Al-Mn Analyse verbessert

auch die Ergebnisse der TWIP-Stähle. Eine stark austenitstabilisierende Wirkung kann für Nickel gefunden werden. Bereits geringe Konzentration führen zu einer deutlichen Erhöhung des Kohlenstoffäquivalents, dementsprechend wird die Gewichtung des Nickels angepasst.

Tabelle 3-3: Auswirkung der Optimierung auf die Koeffizienten im Kohlenstoffäquivalent

	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu	Ti	N	SiMn	AlMn
Presoly/ Xia	-0,005	0,019	0,04	-0,1	-0,07	-0,007	0,025	-0,03	0,1	-0,02	0,4		
Bernhard/ Presoly	-0,016	0,016	0,04	-0,1	-0,065	-0,007	0,035	-0,03	0,1	-0,02	0,4	-0,001	0,01

Die Auswirkung der Optimierung ist vor allem in den Fe-C-X(-Y) Systemen ersichtlich: Die Übereinstimmung im Fe-C-Si und Fe-C-Al System steigt um 10%, für Fe-C-Mn besteht nun sogar eine vollkommene Übereinstimmung mit den DSC Messungen. Die getrennte Anpassung der Koeffizienten im jeweiligen Fe-C-X(-Y) System zeigt aber auch positive Auswirkung auf die Beschreibung des Erstarrungsverhaltens industrieller Stahlsorten und bestätigt damit diese Vorgehensweise. Insgesamt 15% des Gesamtdatensatzes können nicht richtig zugeordnet werden, zu diesen Stählen zählt der Großteil der TWIP-Stähle. Die Beschreibung der hohen Mangangehalte ist mit einem allgemeinen Kohlenstoffäquivalent erwartungsgemäß nicht möglich. Die Ergebnisse sind in **Abbildung 3-3** dargestellt (die prozentuellen Angaben beziehen sich auf die Gleichung nach Bernhard und Presoly).

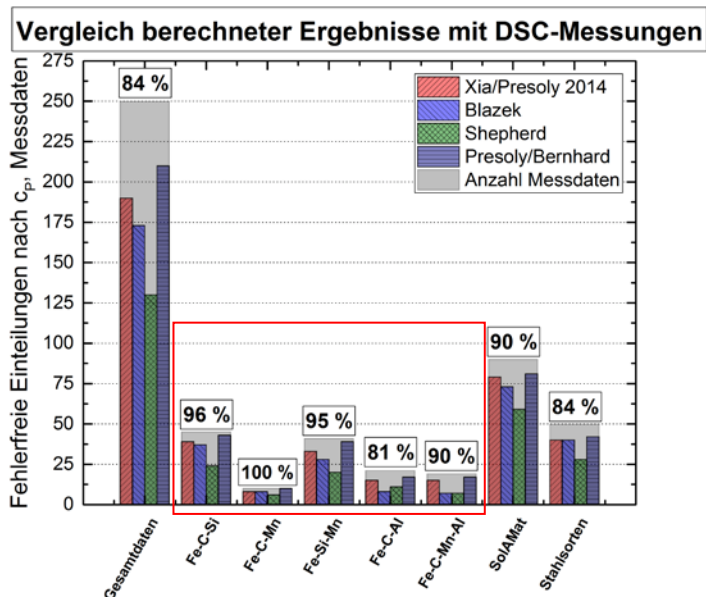


Abbildung 3-3: Auswirkung der Optimierung auf die Übereinstimmung zwischen DSC Messungen und der Einteilung nach äquivalentem Kohlenstoffgehalt

Entsprechend Presolys Erkenntnis [17] werden c_A mit 0,09 wt% und c_B mit 0,16 wt% definiert. Nahe dem Übergang von primär ferritischer zu primär austenitischer Erstarrung existieren nur wenige DSC Messergebnisse, der Wert für $c_C = 0,53$ wt% kann daher nicht experimentell überprüft werden. Ein elegantere Option stellt das „Einschneiden“ dieses Punktes mit den beiden Liquiduslinien dar (**Kapitel 2.1.3** und **Kapitel 3.1.2**). In **Abbildung 3-4** ist die Veränderung einer TVK Glockenkurve durch den neuen Kohlenstoffäquivalent dargestellt. Die TVK Werte verschieben sich im Zuge der Neuberechnung zu niedrigeren Kohlenstoffäquivalenten. Der Punkt c_A kennzeichnet den starken Anstieg des TVK Wertes und liegt nun bei 0,09 wt%. Ab einem Kohlenstoffäquivalent von 0,16 wt% wird die Temperaturverteilung in der Kokille wieder gleichmäßiger. Dieser Punkt entspricht c_B und ist ident mit Presolys Wert [17].

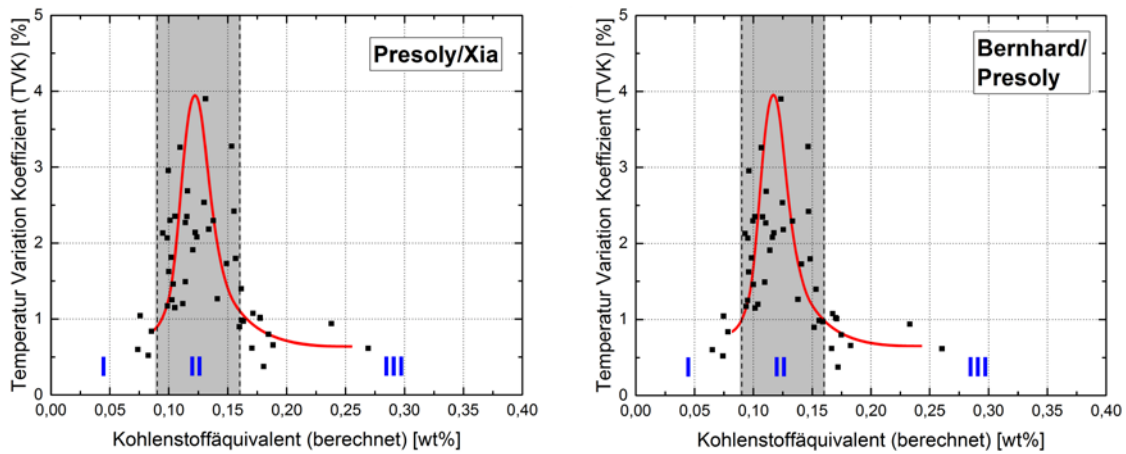


Abbildung 3-4: Auswirkung des neuen Kohlenstoffäquivalents auf die TVK Glockenkurve

Die neue c_P -Formel ist im Bereich der Konzentrationen von **Tabelle 3-4** gültig. Zusammensetzungen innerhalb dieser Grenzen können mit einer Erfolgsquote größer 90% dem tatsächlichen Erstarrungsweg zugeordnet werden.

Tabelle 3-4: Gültigkeitsbereich der neuen c_P -Formel

	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu	Ti	N
Bernhard/ Presoly	<1%	<2,5%	<0,05%	<0,02%	<1%	<2,5%	<1%	<1%	<0,2%	<0,04%	<100ppm

Rundungsfehler in der Berechnung von Legierungen, die nahe an einem charakteristischen Punkt liegen, können zur Fehlinterpretationen führen. Damit verliert man Informationen von ursprünglich richtig eingeordneten Stählen. Akzeptiert man eine geringfügige Abweichung zu einem der Punkte um $\pm 0,005$ wt% kann das Ergebnis nochmals verbessert werden. Diese

Art der Betrachtung ist in der Praxis allerdings schwer umzusetzen und soll an dieser Stelle nur den Nachteil einer Einteilung mit einem Wahr/Falsch Prinzip demonstrieren.

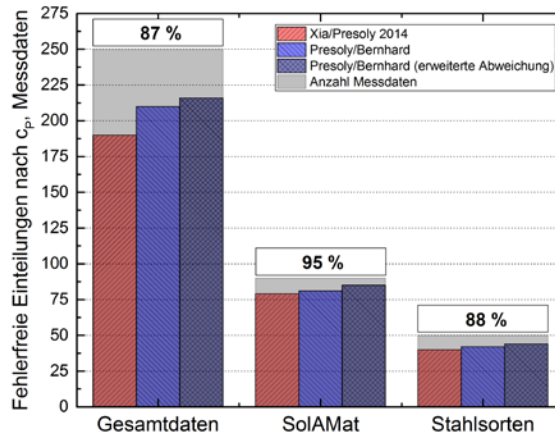


Abbildung 3-5: Verbesserung der Ergebnisse durch Berücksichtigung eines „extended mismatch“ von $\pm 0,005\text{wt}\%$

3.1.2 Auswahl einer geeigneten Gleichung zur Berechnung der Liquidustemperatur

Mit Mikroseigerungsmodellen ist es nur möglich, die Anreicherungen in Abhängigkeit des Festkörperanteils zu berechnen. Eine geeignete Liquidusformel ist notwendig, um die aktuelle Temperatur der interdendritischen Schmelze zu bestimmen. Zu diesem Zweck können erneut die DSC Messungen mit derselben Gruppierung wie in **Kapitel 3.1.1** verwendet werden, um die im Literaturteil vorgestellten Gleichungen zu evaluieren.

Eine Zusammenfassung der berücksichtigten Elemente in den empirischen Gleichungen aus dem Literaturteil zeigt **Tabelle 3-5** (K-O = Kagawa-Okamoto, S-S = Schürmann-Stisovic, H-M = Howe-Miettinen, (x) nur für hochlegierte Stähle).

Tabelle 3-5: Berücksichtigte Elemente in den empirischen Gleichungen

Autor	C	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu	Sn	Ti	Nb	N
<i>Kawawa</i>	x	x	x	x	x	x	x	x		x				
<i>Wolf</i>	x	x	x				x	x		x				
<i>K-O</i>	x	x	x	x	x		x	x	x	x		x		
<i>Howe</i>	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	X
<i>S-S</i>	x	x	x			x	x	x	x	x				
<i>H-M</i>	x	x	x	x	x		x	x	x			(x)	(x)	(x)

Die Ergebnisse der gesamten Analyse sind **Anhang A** zu entnehmen:

- Mit der Berechnung nach Kawawa [25] kann eine systematische Abweichung für Fe-C-Al und Fe-C-Al-Mn Legierungen festgestellt werden. Der negative Koeffizient des Aluminiums ($-3,6 \text{ °C/wt\%}$) bedingt eine zu niedrige Liquidustemperatur, diese Erkenntnis ist ein erster Hinweis auf eine Schmelzpunktserhöhung durch Aluminium. Die Kawawa-Gleichung führt bei bereits niedrigen Legierungsgehalten zu Fehlern von mehr als $\pm 10 \text{ °C}$ und eignet sich daher nicht zum Einsatz im Mikroseigerungsmodell.
- In der Analyse der Liquidusformel nach Wolf [26] bleiben TWIP-Stähle unberücksichtigt, da sonst ein objektiver Vergleich nicht möglich wäre. Die berechneten Liquidustemperaturen fallen selbst bei niedrigen Legierungsgehalten systematisch zu niedrig aus. Die Verwendung im Mikroseigerungsmodell ist aufgrund der fehlenden Berücksichtigung von Phosphor und Schwefel nicht möglich.
- Mit der Gleichung nach Kagawa und Okamoto [27] wird der Fehler reduziert, bei einem Kohlenstoffgehalt von 1 wt% stößt diese Gleichung allerdings an die Grenzen des Gültigkeitsbereichs. Die Beschreibung von TWIP-Stählen ist nicht möglich, da diese Tatsache kein Ausschlusskriterium zur Anwendung im Mikroseigerungsmodell darstellt, ist eine Implementierung grundsätzlich möglich.
- Die Howe-Formel [24] zeigt eine hohe Übereinstimmung mit den Messwerten, beinahe alle Fehler liegen im Bereich von $\pm 4 \text{ °C}$. Die bewusste Definition des Aluminium-Koeffizienten mit 0 °C/wt\% ist gegenüber der negativen Gewichtung von Kawawa [25] zu bevorzugen. Obwohl in der Gleichung Mangangehalte größer 12,5 wt% berücksichtigt werden, ist die Berechnung von TWIP-Stählen nicht möglich.
- Für Gesamtlegierungsgehalte kleiner 5 wt% zeigt die Schürmann-Stisovic sehr genaue Ergebnisse, ohne die Wirkung von Schwefel und Phosphor zu berücksichtigen. Ähnlich zu Wolf [26] ist die fehlende Gewichtung dieser beiden Elemente aber der Grund, die Gleichung nicht in Mikroseigerungsmodellen verwenden zu können.
- Die Gleichung von Miettinen und Howe [30] gewährleistet eine exakte Berechnung der Liquidustemperaturen. Aufgrund der geringen Fehleranfälligkeit bei hohen Konzentrationen, wie sie auch in interdendritischen Zwischenräumen entstehen, sowie der Möglichkeit, den Punkt c_C durch „Einschneiden“ von ferritischer und austenitischer Liquiduslinie zu bestimmen, eignet sich diese Gleichung besonders für das Mikroseigerungsmodell. Die Optimierung mit DSC Messungen verspricht eine zusätzliche Verbesserung der Howe-Miettinen Formel.

Den ersten Schritt der Optimierung bildet die ergänzende Implementierung von Aluminium und Kupfer in der Howe-Miettinen Gleichung. Die Koeffizienten für Kupfer sind in der Literatur weitgehend ident definiert, eine Überprüfung mit DSC Ergebnissen ist infolge fehlender Legierungen mit Kupfer nicht möglich. Für Kupfer wird deshalb in Ferrit ein Koeffizient von $-5^{\circ}\text{C}/\text{wt}\%$ und in Austenit von $-1,7^{\circ}\text{C}/\text{wt}\%$ entsprechend der Literatur [24–27] vorgegeben. Die unterschiedlichen Steigungen der Liquiduslinien im Fe-Cu System wird im Rahmen einer FactSage Berechnung mit der FSStel2015 Datenbank bestätigt. (**Abbildung 3-6** (links)). Die Wirkung von Aluminium kann aufgrund der zahlreichen DSC Messungen genauer untersucht werden. Da der negative Koeffizient in Kawawas Gleichung [25] eine zusätzliche Abweichung verursacht, wird zur ersten Abschätzung der Aluminiumgewichtung das Fe-Al Diagramm aus FactSage (FSStel2015) verwendet. (**Abbildung 3-6** (rechts)). In der eisenreichen Ecke des Systems erkennt man eine positive Steigung der Liquiduslinie bis ein Plateauwert bei 5 wt% Aluminium erreicht wird.

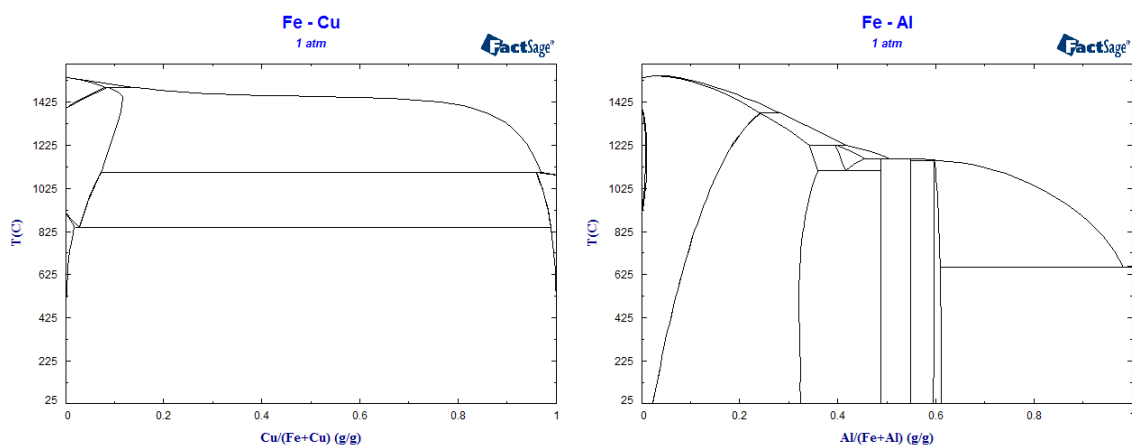


Abbildung 3-6: Gleichgewichtsschaubilder Fe-Cu (links) und Fe-Al (rechts) aus FactSage (FSStel2015)

Nach der Optimierung beschränken sich die fehlerhaften Liquidustemperatur auf ein Minimum. Es ist zielführend, die TWIP-Stähle getrennt zu betrachten, da dieses spezielle Legierungskonzept stark von den übrigen Zusammensetzungen abweicht. Der Koeffizient des Aluminiums nimmt einen positiven Wert von $2^{\circ}\text{C}/\text{wt}\%$ an und beweist dadurch dessen schmelzpunkterhöhende Wirkung. In TWIP-Stählen steigt die Gewichtung des Aluminiums auf $3,5^{\circ}\text{C}/\text{wt}\%$, da die hohen Mangangehalte zu einer stärkeren Krümmung des Fe-Al Systems führen. In der Liquidusformel für TWIP-Stähle werden zusätzlich Wechselwirkungskoeffizienten der wichtigsten Legierungselemente (Mangan, Aluminium und Silizium) berücksichtigt. Die Ergebnisse zeigt **Abbildung 3-7**.

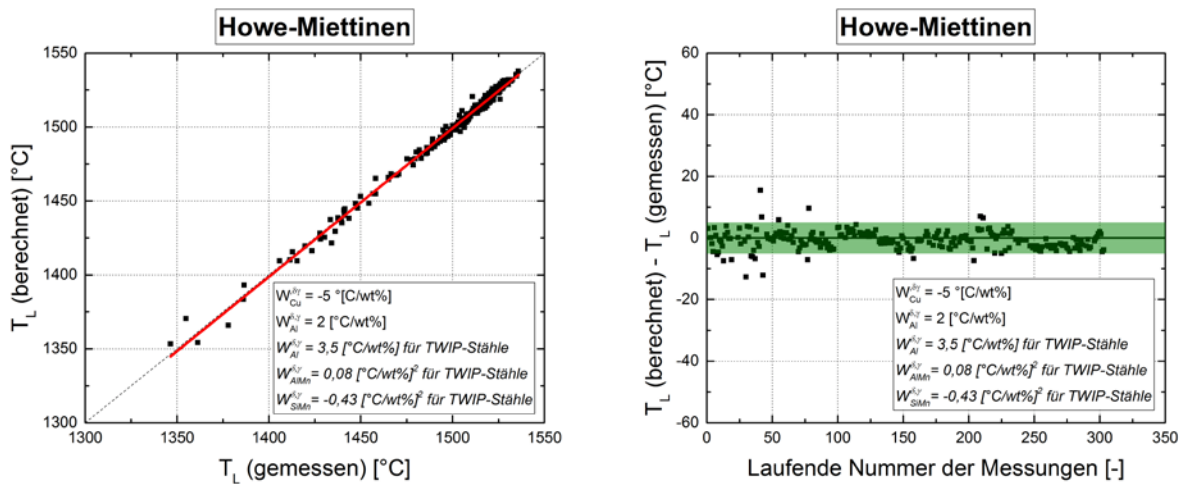


Abbildung 3-7: Ergebnisse nach Optimierung der Howe-Miettinen Gleichung

3.1.3 Mikroseigerungsmodell für die Erstarrung der Stahlgruppe I

Der Algorithmus des Mikroseigerungsmodells ähnelt jenem von You [49]: Mit Vorgabe einer lokalen Abkühlrate wird nicht nur global über das gesamte Erstarrungsintervall iteriert, sondern auch innerhalb des Erstarrungsfortschritts Δf_s . Konvergiert die Temperatur für den Festkörperanteil $f_s + \Delta f_s$, wird der mittlere Rückdiffusionsparameter $\Gamma = (\Gamma(f_s + \Delta f_s) + \Gamma(f_s)) / 2$ berechnet und innerhalb von Δf_s konstant gehalten (Abbildung 3-8).

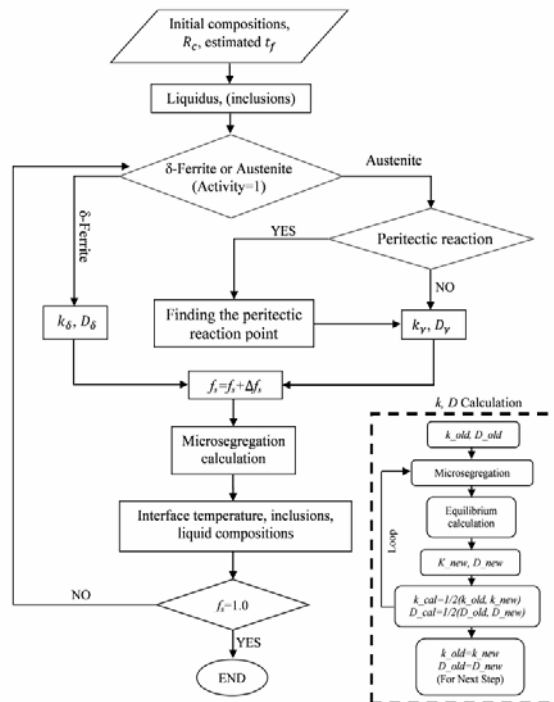


Abbildung 3-8: Algorithmus für ein Mikroseigerungsmodell mit lokalen Verteilungskoeffizienten und temperaturabhängigen Diffusionskoeffizienten nach You [49]

Die Verwendung temperaturabhängiger Diffusionskoeffizienten aus **Tabelle 2-5** erfordert die semi-integrierte Form des Ohnaka-Modells zur Modellierung der Mikroseigerung (**Kapitel 2.1.5**). Diese Gleichung ermöglicht eine zukünftige Erweiterung des Modells mit lokalen Verteilungskoeffizienten. Die SDAS-Beziehung nach Guo [41] berücksichtigt die unterschiedlichen Erstarrungswege im Fe-C Diagramm und bietet sich daher auch für die Erweiterung von SolAMat auf weitere Kohlenstoffbereiche an. Die Berechnung der Mikroseigerung mit einer lokalen Abkühlrate benötigt zur Iteration einen Startwert der Solidustemperatur, die erste Abschätzung ist mit der Gleichung nach Kagawa und Okamoto [27] möglich. Die aktuelle Liquidustemperatur der interdendritischen Schmelze wird mit der optimierten Liquidusformel aus **Kapitel 3.1.2** ermittelt. Die Verteilungskoeffizienten des Mikroseigerungsmodells sind in **Tabelle 3-6** zusammengefasst. Die Werte für Kohlenstoff, Silizium, Mangan, Phosphor und Schwefel stammen aus der Arbeit von Bernhard [2], die übrigen Verteilungskoeffizienten werden der Arbeit von Choudhary und Ghosh [6,12–15] entnommen.

Tabelle 3-6: Verteilungskoeffizienten des Mikroseigerungsmodells der Stahlgruppe I

	C	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu
k^δ	0,15	0,55	0,70	0,32	0,04	0,60	0,95	0,83	0,80	0,53

Zur Berechnung der MnS-Ausscheidung wird das Löslichkeitsprodukt nach Xia [53] verwendet, eine schematische Darstellung des Algorithmus zeigt **Abbildung 3-9**. Die Abbindung von Mangan und Schwefel findet bis zum Erreichen der entsprechenden Gleichgewichtskonzentration statt. Die Bildung von MnS folgt einer Geraden, die durch das Molmassenverhältnis der beiden Elemente charakterisiert ist. Ausgehend von $K_{\text{MnS}}(T_2)$ reichern sich Schwefel und Mangan erneut in der Schmelze an und es kommt wiederum die Ausscheidung bis $K_{\text{MnS}}(T_3)$. Dieser Vorgang wiederholt sich bis zur Durcherstarrung. [2]

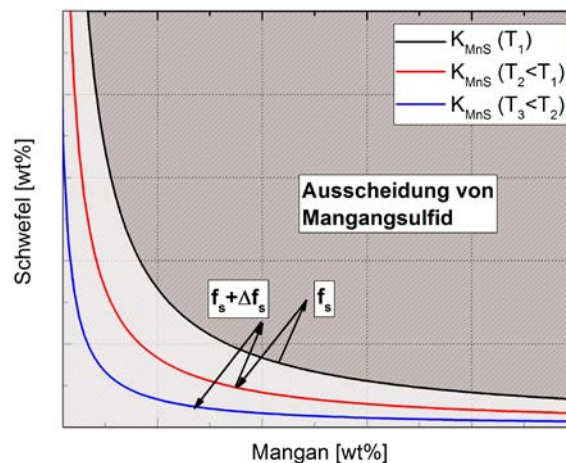


Abbildung 3-9: Schematische Darstellung zur Berechnung der MnS-Ausscheidung in SolAMat

3.1.4 Berechnung der Festkörper-Phasenumwandlungen

3.1.4.1 Beschreibung der δ/γ – Umwandlung

Der Einfluss von Legierungselementen auf Beginn ($T_{\text{aus+}}$) und Ende ($T_{\text{fer-}}$) der δ/γ -Phasenumwandlung wird in SolAMat mit einem Polynom 2. Ordnung (**Gleichung 3-1**) berücksichtigt. Die Ermittlung der (Wechselwirkungs-)Koeffizienten k , l und m konnte mit einer Kohlenstoffvariation in FactSage (FSStel2015) mit unterschiedlichem Gehalt des jeweiligen Elements erzielt werden, wobei der Regression mehr als 1300 Berechnungen hinterlegt sind. Die Konzentrationen sind in wt% einzusetzen und die Temperatur ergibt sich in °C. Die Ergebnisse befinden sich in **Anhang B**. Der Gültigkeitsbereich von **Gleichung 3-1** deckt zumindest jenen der c_p -Formel aus **Tabelle 3-4**.

$$T_{\text{aus+}, \text{fer-}} = 1394,74 + \sum_i \left(k_i^{a+, f-} c_i + l_i^{a+, f-} c_i^2 + m_i^{a+, f-} c_i c_C \right) \quad (3-1)$$

In **Abbildung 3-10** sind die Ergebnisse aus FactSage jenen von SolAMat gegenübergestellt. Sowohl Beginn- als auch Endtemperatur der δ/γ -Umwandlung können mit $\pm 8^\circ\text{C}$ ausreichend genau berechnet werden. Zur weiteren Validierung werden die Umwandlungstemperaturen von DSC Messungen berechnet. Die Auswahl der DSC Messdaten beschränkt sich auf Legierungen, für welche die Einteilung zwischen Messung und Berechnung übereinstimmt. Die einfache Modellierung einer Polynomfunktion führt generell zu befriedigenden Ergebnissen, unerwartet exakt fällt die Ermittlung der Umwandlungstemperatur von Fe-C-Si-Mn Legierungen in SolAMat aus: Obwohl FactSage Berechnungen für dieses System signifikant von den gemessenen Werten abweichen, erzielt SolAMat bei gleicher Datenbasis bessere Ergebnisse. Ein Grund liegt in der „getrennten“ Wirkung von Silizium und Mangan in SolAMat während in FactSage die Wechselwirkung im Fe-Si-Mn Gleichgewichtsdiagramm herangezogen wird. Im Falle einer fehlerhaften Datenbank kann es dadurch zu deutlichen Unterschieden kommen.

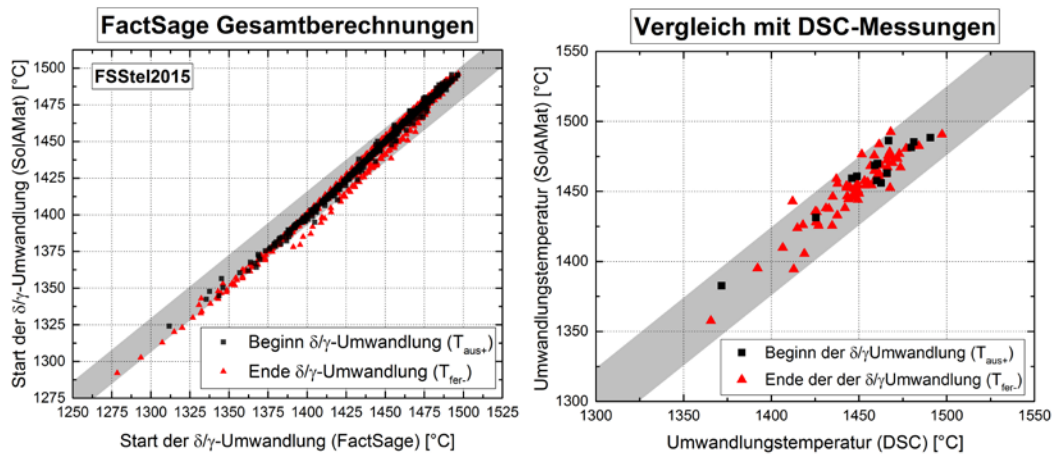


Abbildung 3-10: Zusammenfassung der Ergebnisse von FactSage (links) und von DSC Messungen (rechts) bei Gegenüberstellung mit SolAMat

3.1.4.2 Beschreibung der Festkörper-Phasenumwandlungen im A_3 -Temperaturbereich

Die Phasenumwandlungen im A_3 -Temperaturbereich werden maßgeblich von der vorliegenden Abkühlrate beeinflusst. Während im Gleichgewicht nur die Ferrit- und Perlitbildung stattfinden, kann der Austenit bei ausreichend hoher Abkühlgeschwindigkeit auch in Bainit oder Martensit umwandeln.

Im Stranggießprozess spielen aufgrund der relativ niedrigen Abkühlraten vor allem die Ferrit- und Perlitbildung eine wesentliche Rolle: Proeutektoiden Ferritfilme, die sich an den Austenitkorn Grenzen ausscheiden, werden häufig für die Versprödung des Stahls im 2. Duktilitätsminimum verantwortlich gemacht. Fällt die Umwandlung mit mechanischen Beanspruchungen wie dem Richten des Strangs zusammen, können die hohen lokalen Belastungen zur Rissbildung führen. [75] In SolAMat werden die Ferrit- und Perlitumwandlungstemperaturen benötigt, um die thermophysikalischen Eigenschaften ordnungsgemäß zu beschreiben. Beispielsweise sollten das Maximum der Wärmekapazität von Ferrit nahe dem Curie-Punkt oder die Änderung von Wärmeleitfähigkeit und Dichte mit dem Übergang zu ferritischer Matrix unbedingt berücksichtigt werden.

Phasenumwandlungstemperaturen werden in Abhängigkeit der Zeit in isothermen (TTT) oder kontinuierlichen (CCT) Schaubildern dargestellt. In der Praxis sind CCT vor allem für die Gefügeeinstellung im Rahmen einer Wärmebehandlung notwendig. Die experimentelle Ermittlung von TTT und CCT gestaltet sich in Dilatometern relativ einfach, die exakte Berechnung solcher Diagramme ist allerdings äußerst komplex. In der Vergangenheit leisteten vor allem Kirkaldy [76,77] und Bhadeshia [78] wegberaubende Arbeiten. Die Vorgehensweise von

Bhadeshia beruht auf thermodynamischen Berechnungen und ist dementsprechend komplexer als das Modell von Kirkaldy. Der semi-empirische Ansatz von Kirkaldy ermöglicht die Anpassung von Regressionsparametern durch eigene Versuchsergebnisse, wie es auch im kommerziellen Simulationsprogramm JMatPro umgesetzt wurde [79,80]. Es liegt daher nahe, dieses Modell in SolAMat zu implementieren und zukünftige Modifikationen über eigene Messungen vorzunehmen.

In einem ersten Schritt wird im Kirkaldy-Modell das isotherme Umwandelungsschaubild konstruiert. Die Zeit τ (**Gleichung 3-2**) entspricht jener Zeit, die bei konstanter Temperatur T benötigt wird, um einen bestimmten Anteil x der Phase umzuwandeln bzw. auszuscheiden. In dieser Gleichung ist N die ASTM Korngröße, D_{eff} ein effektiver Diffusionskoeffizient in Abhängigkeit der Legierungselemente (**Gleichung 3-3**), ΔT die Unterkühlung zur entsprechenden Gleichgewichtstemperatur (bei der Umwandlung von Austenit zu Ferrit die A_{e3} Temperatur) und q ein Exponent, der vom jeweiligen Diffusionsmechanismus abhängt. Es gilt $q=1$ für Volumendiffusion und $q=2$ für Korngrenzendiffusion. Das Volumenintegral ist eine Approximation der Johnson-Mehl-Avrami (JMA) Gleichung, welche die Gesamtkinetik einer diffusionskontrollierten Phasenumwandlung beschreibt. [81]

$$\tau(x, T) = \frac{1}{\beta 2^{(N-1)/2} D_{\text{eff}} \Delta T^q} \int_0^x \frac{dx}{x^{2(1-x)/3} (1-x)^{2x/3}} \quad (3-2)$$

$$R_{\text{eff}} \propto \frac{1}{D_{\text{eff}}} \propto e^{\left(\frac{Q_{\text{eff}}}{RT}\right)} \sum_{j=1}^m \alpha_j C_j \quad (3-3)$$

Die isotherme Umwandlungszeit für Ferrit (τ_F), Perlit (τ_P) und Bainit (τ_B) sind in den **Gleichungen 3-4 bis 3-9** zusammengefasst, wobei nur Kohlenstoff, Mangan, Chrom, Nickel und Molybdän berücksichtigt werden und eine starke Verzögerung der Umwandlung hervorrufen. Kirkaldy [76] konnte empirisch feststellen, dass der Exponent $q=3$ zu besseren Ergebnissen bei Perlit und Ferrit führt. Das Integral I entspricht dem Volumenintegral aus **Gleichung 3-2**. Im Fall des Bainits wurde das Integral modifiziert, um das Ende der Umwandlung besser zu prognostizieren. Beträgt der Koeffizient $A < 0$, wird I zur Berechnung verwendet, bei höheren Legierungsgehalten ($A > 0$) das angepasste Integral I' (**Abbildung 3-11**).

$$\tau_F = \frac{60\%Mn + 2\%Ni + 68\%Cr + 244\%Mo}{6 \cdot 2^{N/8} \Delta T^3 \exp(-23,500/RT)} I \quad (3-4)$$

$$\tau_P = \frac{1,8 + 5,4(\%Cr + \%Mo + 4\%Mo\%Ni)}{6 \cdot 2^{N/8} \Delta T^3 D_p} I \quad (3-5)$$

$$\frac{1}{D_p} = \frac{1}{\exp(-27500/RT)} + \frac{0,5\%Mo}{\exp(-37000/RT)} \quad (3-6)$$

$$\tau_B = \frac{(2,3 + 10\%C + 4\%Cr + 19\%Mo)10^{-4}}{6 \cdot 2^{N/8} \Delta T^2 \exp(-27500/RT)} I' \quad (3-7)$$

$$I' = \int_0^x \frac{e^{Ax^2}}{x^{2(1-x)/3} (1-x)^{2x/3}} dx \quad (3-8)$$

$$A = 1,9\%C + 2,5\%Mn + 0,9\%Ni + 1,7\%Cr + 4\%Mo - 2,6 \quad (3-9)$$

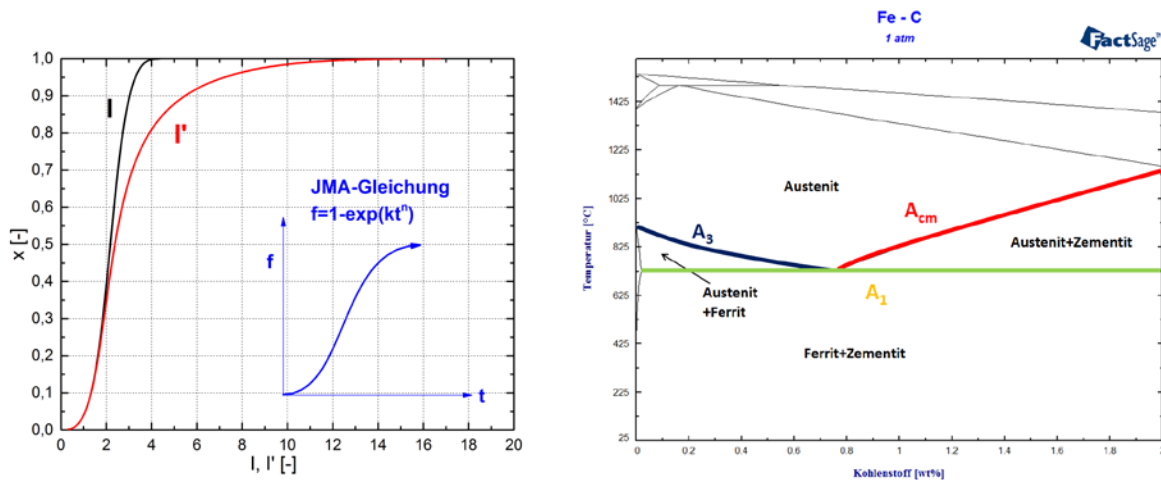


Abbildung 3-11: Approximation der JMA-Gleichung nach Kirkaldy (links) und Fe-C Gleichgewichtsdiagramm mit Festphasen-Umwandlungstemperaturen (rechts)

Das Kirkaldy-Modell erfordert als Eingangsparameter die Gleichgewichtstemperatur der jeweiligen Umwandlung. Als geeignete Methode zur Ermittlung von A_3 (Austenit→Ferrit) und A_{cm} (Austenit→Zementit) (**Abbildung 3-11**) empfiehlt sich erneut eine Kohlenstoffvariation in FactSage (FSStel2015), ähnlich zur Bestimmung der δ/γ -Temperaturen. Die Gleichgewichtstemperaturen können im Anschluss mit DSC Messungen validiert werden. Die $A_{3,0}$ entspricht jener des Reineisens (**Gleichung 3-10**), die Ausgangstemperatur des Zementits kann nicht einfach aus dem Gleichgewichtsschaubild abgelesen werden. $A_{cm,0}$ ergibt sich aus der Regression der A_{cm} Linie und stellt den Schnittpunkt mit der y-Achse dar. Die Temperatur von 404,69°C entspricht dem Wert einer FactSage Berechnung für 2 ppm Kohlenstoff (**Gleichung 3-11**).

$$A_3 = 911,42 + \sum_i (k_i c_i + l_i c_i^2 + m_i c_i^3 + n_i c_i c_c) \quad (3-10)$$

$$A_{cm} = 404,69 + \sum_i (k_i c_i + l_i c_i^2 + m_i c_i c_c) \quad (3-11)$$

Die Überprüfungen der A_3 Temperaturen mit DSC Messungen sind in **Abbildung 3-12** und **Abbildung 3-13** dargestellt, eine Analyse der A_{cm} Temperatur ist aufgrund der niedrigen Kohlenstoffgehalte in den DSC Messungen nicht möglich. Mit den Fe-C-Si-(Mn)- und Fe-Cr-Ni-Systemen können bis auf Molybdän alle relevanten Elemente in die Validierung miteinbezogen werden. Eine hohe Übereinstimmung mit den gemessenen Werten des Fe-C-Si-(Mn) Systems ist bis zu jeweils 2wt% Silizium und Mangan gewährleistet. In den Diagrammen ist zur Verdeutlichung des hervorragenden Ergebnisses auch die berechnete δ/γ -Umwandlung abgebildet.

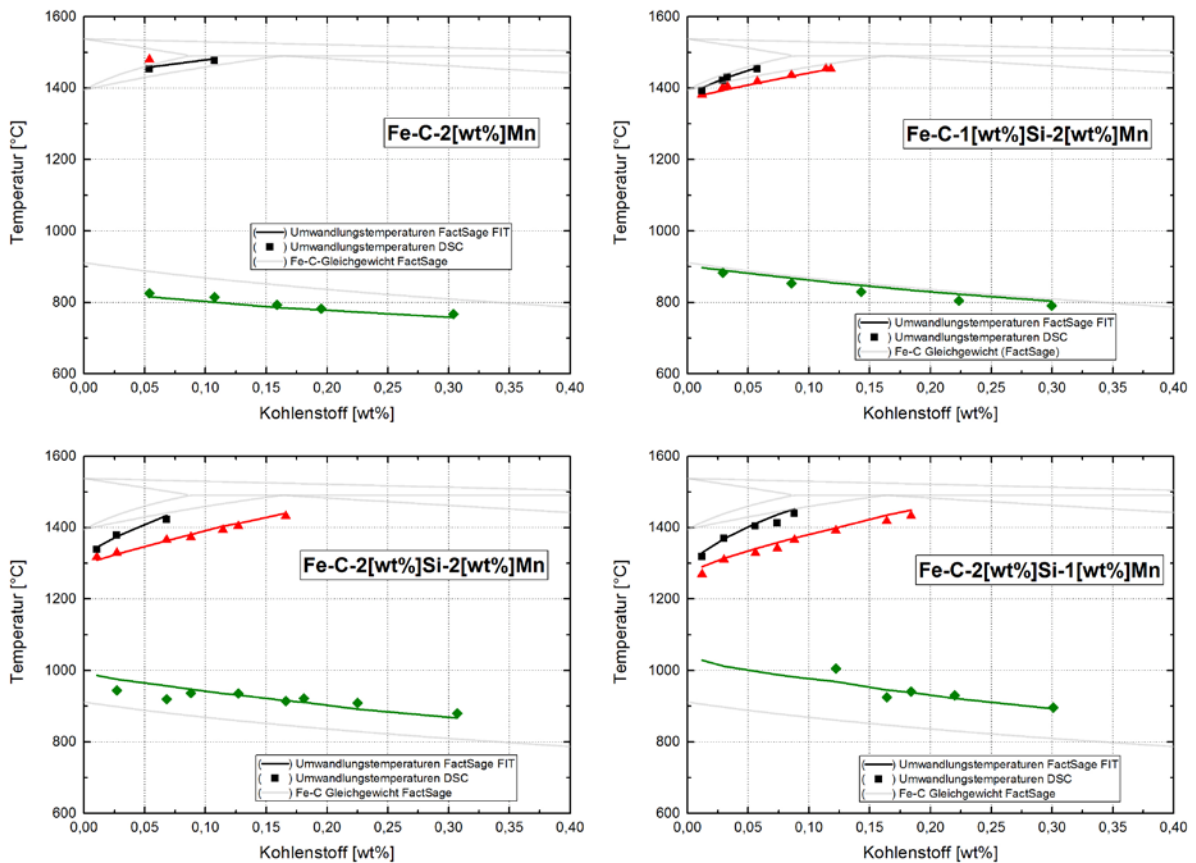


Abbildung 3-12: Vergleich diffusionskontrollierter Umwandlung von DSC Messungen und SolAMat am Beispiel von Fe-C-Si-(Mn) Systemen

Die Ternärsysteme der Fe-C-Cr-Ni Legierungen mit jeweils 2wt% Chrom bzw. Nickel können mit SolAMat exakt berechnet werden. Die zunehmende Abweichung bei Anwesenheit beider Elemente auf ± 10 °C ist ebenfalls vertretbar und stellt bei den hohen Gehalten ein mehr als zufriedenstellendes Ergebnis dar.

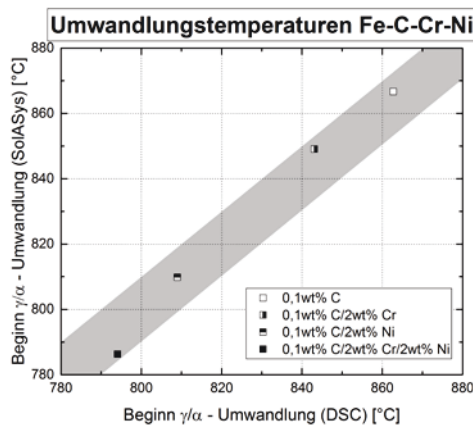


Abbildung 3-13: Vergleich diffusionskontrollierter Umwandlung von DSC Messungen und SolAMat am Beispiel von Fe-C-Cr-Ni Systemen

Der eutektoiden Punkt des pseudobinären Fe-C-System ergibt sich aus einer einfachen geometrischen Konstruktion: Als Schnittpunkt der A_3 - und A_{cm} -Linie lassen sich Temperatur und Konzentration in Abhängigkeit der Legierungselemente ablesen. Ein Vergleich der Perlitstarttemperaturen und eutektoiden Zusammensetzung von SolAMat mit Literaturwerten und FactSage (FSStel2015) Berechnungen ist in **Abbildung 3-14** dargestellt. Die A_1 Temperaturen stimmen gut überein, die eutektoiden Kohlenstoffkonzentration von SolAMat weist allerdings eine geringfügige, aber systematische Abweichung zu den FactSage Werten auf und liegt um 0,02wt% höher.

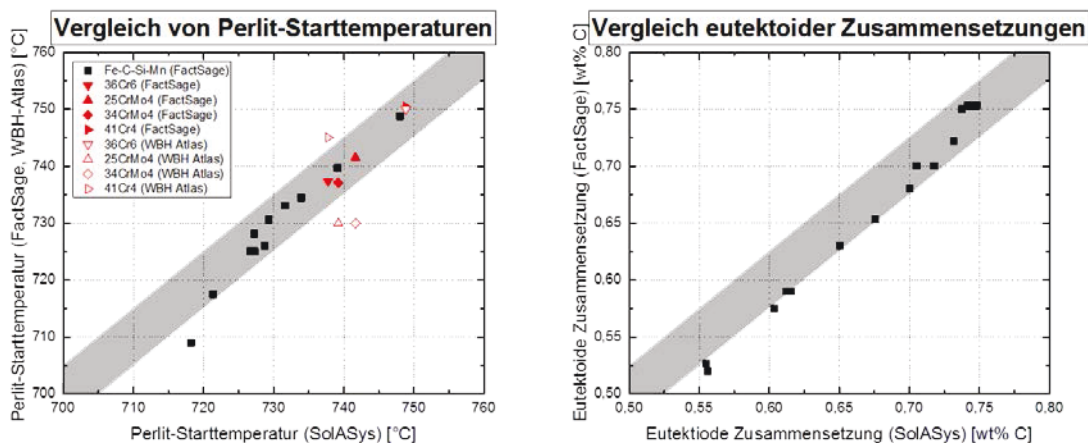


Abbildung 3-14: Vergleich der Perlitstarttemperaturen und eutektoiden Zusammensetzung von SolAMat mit Literaturwerten und FactSage (FSStel2015) Berechnungen

In einer ersten Annäherung werden in SolAMat nur die Umwandlungen von Austenit zu Ferrit bzw. zu Perlit berücksichtigt. Die Phasenanteile der beiden Gefügebestandteile nach vollständiger Umwandlung werden über das Hebelgesetz (**Gleichung 3-12**) berechnet. Hier ist

c_e die eutektoide Konzentration aus der geometrischen Konzentration und f_p bzw. f_α die Anteile von Perlit bzw. Ferrit. Bei Abkühlung unterhalb der A_{e3} scheidet sich zuerst Ferrit bis zum Phasenanteil f_α aus. Ab der Perlit-Starttemperatur wandelt der restliche Austenit bis zum Erreichen der Endtemperatur vollständig in Perlit um (f_p).

$$f_p = \frac{c_e - 0,02}{c_0 - 0,02} = 1 - f_\alpha \quad (3-12)$$

Zur Vervollständigung der Umwandlungsschaubilder wird die Bainit-Starttemperatur nach Kirkaldy und Venugopalan [77] (**Gleichung 3-13**) und die Martensit-Starttemperatur nach Steven und Haynes [82] berechnet (**Gleichung 3-14**).

$$TB_s(^{\circ}C) = 656 - 58\%C - 75\%Si - 35\%Mn - 34\%Cr - 15\%Ni - 41\%Mo \quad (3-13)$$

$$TM_s(^{\circ}C) = 561 - 474\%C - 33\%Mn - 17\%Cr - 17\%Ni - 21\%Mo \quad (3-14)$$

Die Scheil-Avrami-Regel erlaubt die Transformation eines TTT in ein CCT. Die Abkühlkurve wird als Treppenfunktion modelliert und die isothermen Umwandlungen τ_{IT} aus dem TTT aufsummiert. [81] **Gleichung 3-15** stellt den mathematischen Ausdruck der Summationsregel dar. [76]

$$\int_{T_{Ae3}}^{T_{CCT}} \frac{dt}{\tau_{IT}} = \int_{T_{Ae3}}^{T_{CCT}} \frac{dT}{\tau_{IT} \dot{T}} = 1 \quad (3-15)$$

Die Berechnung ausgewählter TTT und CCT Diagramme mit SolAMat sowie deren Vergleich mit dem Wärmebehandlungsatlas [83] befinden sich in **Anhang C**. Die Konstruktion der Schaubilder mit SolAMat führt zu geringeren Umwandlungszeiten, die Differenz beträgt bis zu 5 Sekunden. Bei niedrigen Abkühlraten von 1 K/s, wie es in Stranggießprozessen üblich ist, stimmen die Umwandlungstemperaturen und Phasenanteile von Ferrit und Perlit trotz der einfachen geometrischen Konstruktion annähernd überein: Beispielsweise betragen für den Stahl 36Cr6 in **Anhang C** die berechneten Phasenanteile für Ferrit 0,37 (gemessen 0,35) und für Perlit 0,63 (gemessen 0,65). Die guten Ergebnisse „rechtfertigen“ diese erste Annäherung in SolAMat.

Die CCT Transformation in SolAMat kann einigen Literaturwerten [84–86] (Dilatometermessungen) gegenübergestellt werden: In **Abbildung 3-15** (links) wird der Werkstoff mit 0,1wt% Kohlenstoff und 1,1wt% Mangan im umgeformten und geschweißten Zustand mit SolAMat gut charakterisiert. Höhere Kohlenstoff- (0,14wt%) und Mangangehalte (1,8wt%) senken die

Umwandlungstemperatur deutlich ab, tendenziell kommt es dadurch zu einer größeren Abweichung zwischen gemessenen und berechneten Werten. Die Wirkung von Mangan als starker Umwandlungsverzögerer ist auch in **Abbildung 3-15** (rechts) ersichtlich. In den Dilatometermessungen [84] vermindert eine Erhöhung des Mangangehalts um 2 wt% die Umwandlungstemperatur um 150°C. Die Berechnungen von SolAMat und JMatPro stimmen bis 1,5 wt% Mangan überein, die Dilatometermessungen weichen allerdings für alle Zusammensetzungen signifikant von den Berechnungen ab. Die Differenz von JMatPro [84] zu den Messwerten kann durch die Vorgabe einer kleineren Korngröße erklärt werden.

Abschließend muss festgehalten werden, dass die Berechnung diffusionskontrollierter Phasenumwandlung nicht den Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit darstellt. Die Implementierung des Kirkaldy-Modells und dessen Anpassung durch eigene Versuchsergebnisse soll die zukünftige Erweiterung von SolASys hinsichtlich weiterer stranggießrelevanter Module ermöglichen.

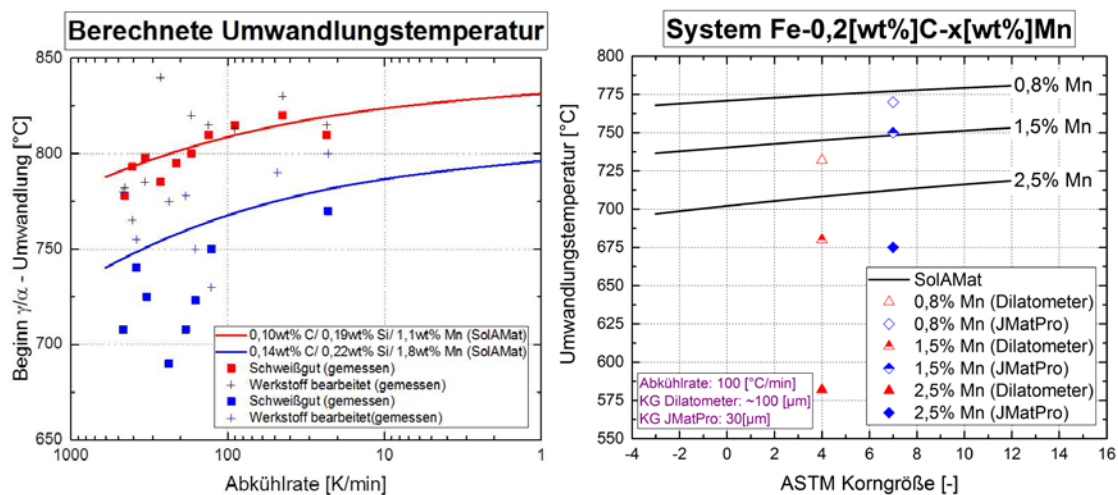


Abbildung 3-15: Vergleich von Literaturwerten [84–86] und mit SolAMat und JMatPro

3.1.5 Thermophysikalische Eigenschaften

3.1.5.1 Wärmekapazität

Die Wärmekapazität c_p des Legierungselements K wird in Abhängigkeit der Temperatur und den entsprechenden Koeffizienten C_i als Polynomfunktion dargestellt (**Gleichung 3-16**).

$$c_{p,K} = \sum_i C_i T^i + c_{p,magn} \quad (3-16)$$

Der zusätzliche, magnetische Beitrag $c_{p,magn}$ der Wärmekapazität einer Komponente ist vor allem für ferromagnetische Elemente wie Eisen (Ferrit) oder Nickel von Bedeutung. Dieser Beitrag kann mit den **Gleichungen 3-17** bis **Gleichung 3-20** berechnet werden. β ist das magnetische Moment pro Atom, $\tau=T/T^*$ (T^* ist die Curie-Temperatur für ferromagnetische Stoffe und die Neel-Temperatur für antiferromagnetische Stoffe) eine normalisierte Temperatur, p hängt von der Kristallstruktur des Elements ab. Der Koeffizient D ist eine Funktion von p . [87]

$$c_{p,magn} = R \ln(\beta + 1) c(\tau) \quad (3-17)$$

$$c(\tau) = \left[\frac{474}{497} \left(\frac{1}{p} - 1 \right) \left(2\tau^2 + \frac{2\tau^9}{3} + \frac{2\tau^{15}}{5} \right) \right] / D \quad \text{für } \tau \leq 1 \quad (3-18)$$

$$c(\tau) = \left[2\tau^{-5} + \frac{2\tau^{-15}}{3} + \frac{2\tau^{-25}}{5} \right] / D \quad \text{für } \tau > 1 \quad (3-19)$$

$$D = \frac{518}{1125} + \frac{11692}{15975} \left(\frac{1}{p} - 1 \right) \quad (3-20)$$

Die Wärmekapazität einer Phase ist abhängig von der Konzentration an Legierungselementen (**Gleichung 3-21**).

$$c_{p,a} = \sum_i c_{p,K_i} x_{K_i} \quad (3-21)$$

Gleichung 3-22 wird auch Neumann-Kopp Regel bezeichnet und stellt die gewichtete Summe der einzelnen Phasen dar.

$$c_p = \sum_i c_{p,i} x_i \quad (3-22)$$

Alle Koeffizienten und Parameter der **Gleichung 3-16** bis **Gleichung 3-20** werden FactSage (FSStel2015) entnommen und SolAMat übergeben (**Anhang D**). Zur Validierung der Wärmekapazitäten von SolAMat werden Berechnungen in FactSage durchgeführt. Da die Wärmekapazität im Zweiphasengebiet nicht definiert ist, kann die Überprüfung nur in den Einphasengebieten von Schmelze, Austenit und Ferrit erfolgen. Die Ergebnisse sind ebenfalls **Anhang D** zu entnehmen. Selbst im Fall hoher Konzentrationen der relevanten Legierungselemente kann die Wärmekapazität für alle Phasen ausreichend genau berechnet werden. Eine Abweichung ergibt sich bei sehr hohen Aluminium- oder Chromgehalten, diese Werte spielen für die weitere Entwicklung von SolAMat allerdings keine Rolle. Der Unterschied zwi-

schen SolAMat und FactSage im Erstarrungsgebiet entsteht durch die Mikroseigerungsbe-
rechnung und der damit verbundenen Absenkung der Solidustemperatur.

3.1.5.2 Dichte und Wärmeleitfähigkeit

Auf Basis der Arbeiten von Miettinen [74,88] werden die Dichte ρ und die Wärmeleitfähigkeit λ in SolAMat implementiert (**Gleichung 3-23** bis **Gleichung 3-26**), wobei der Index Φ der jeweiligen Phase (Schmelze, Ferrit, Austenit, Zementit) entspricht und eine gewichtete Summe der einzelnen Anteile darstellt. Der Koeffizient A_{mix} berücksichtigt den Einfluss der Konvektion auf die Wärmeleitfähigkeit, für Stranggießprozesse kann dieser mit einem Wert zwischen 4 und 6 vorgegeben werden [88], in SolAMat wird er aktuell mit 0 vorgegeben. Eine detaillierte Beschreibung der Koeffizienten und weiteren Größen in **Gleichung 3-23** bis **Gleichung 3-26** findet sich in Miettinens Veröffentlichungen [74,88].

$$\rho^\phi = \rho_{Fe}^\phi + \sum_i k_i^\phi C_i^\phi \quad (3-23)$$

$$\rho = \frac{1}{\sum \frac{f^\phi}{\rho^\phi}} \quad (3-24)$$

$$\lambda^\phi = \lambda_{Fe}^\phi + \sum_i k_i^\phi C_i^\phi \quad (3-25)$$

$$\lambda = (1 + A_{\text{mix}}) f^l \lambda^l + (1 - f^l) \lambda^s \quad (3-26)$$

3.1.5.3 Latente Wärme

In Reinstoffen ist die Latente Wärme jene Energiemenge, welche bei einem Phasenübergang erster Ordnung aufgenommen oder freigesetzt wird und entspricht in der zugehörigen Enthalpiekurve $H(T)$ dem Sprung bei der Schmelztemperatur. Aus der Enthalpiekurve eines Erstarrungsintervalls ist die Latente Wärme nicht sofort ersichtlich, sondern kann mit **Gleichung 3-27** berechnet werden. [88]

$$L = H_L - H_S - \int_{T_s}^{T_l} c_p(T) dT \quad (3-27)$$

Im Gegensatz zu IDS wird in FactSage die Latente Wärme eines Zweiphasengebiets nicht direkt ausgegeben. Zur einheitlichen Beschreibung der „enthalpieverwandten“ thermophysikalischen Eigenschaften auf Basis der FSStel2015 Datenbank wird deshalb in erster Näherung die Wärmekapazität als Polynom zweiten Grades zwischen $c_{p,s}$ und $c_{p,l}$ modelliert

(Abbildung 3-16). Mit der Integration des Polynoms sowie den Werten für H_I und H_S ergibt sich für die Darstellung der Latenten Wärme über den Kohlenstoffgehalt ein charakteristischer Verlauf: Im Ferrit besitzt die Latente Wärme im Punkt c_A ein Minimum. Zwischen c_A und c_B steigt der Wert mit zunehmendem Kohlenstoffgehalt wieder an und erreicht bei c_B ein Maximum. Ab diesem Punkt fällt die Latente Wärme erneut ab. Der Verlauf aus FactSage stimmt annähernd mit IDS 2.0 Berechnungen überein. Zusätzlich kann eine gute Korrelation mit Literaturwerten aus [89–92] gefunden werden, die zum Teil hohe Abweichung der Latenten Wärme zwischen dem Aufschmelzen und Erstarren erschwert allerdings einen objektiven Vergleich. Ein generell gültiger Wert des Eisen liegt bei 247 J/g [93] und liegt damit in der Größenordnung der Werte von SolAMat.

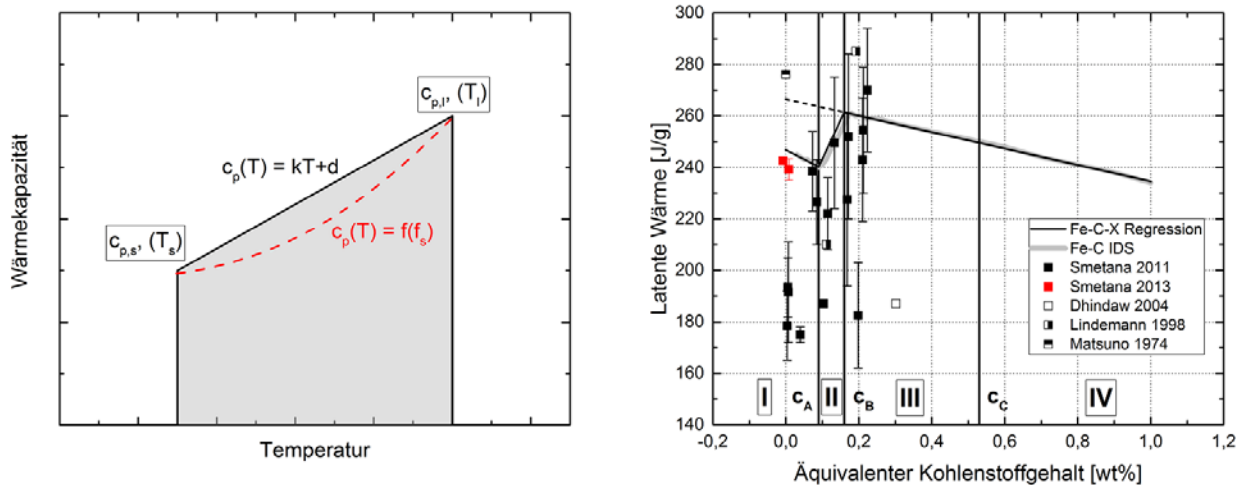


Abbildung 3-16: Schema zur Berechnung der Latenten Wärme aus FactSage (links) und Vergleich mit IDS bzw. Literaturwerten (rechts)

3.1.5.4 Vergleich thermophysikalischer Materialdaten mit IDS Berechnungen

Zur Validierung der berechneten Materialdaten von SolAMat findet eine Gegenüberstellung mit IDS 2.0 für die Stahlgruppe I statt (Abbildung 3-17). Die Abkühlraten betragen 10 K/s bei der Erstarrung und 0,1 K/s für die Austenitumwandlung, die Zusammensetzung der beiden Stähle (LC1 und LC2) ist bis auf den Chrom Gehalt ident:

- 0,03wt% C,
- 0,1wt% Si,
- 1wt% Mn,
- 50 ppm P und S,
- 0 wt% Cr (LC1) und 1 wt% Cr (LC2).

Die Wärmekapazität ist in beiden Programmen im Hochtemperaturbereich ($>900\text{ °C}$) ident. Der Unterschied nahe der Curie-Temperatur ergibt sich durch den generell höheren Perlitanteil in IDS, die Differenz steigt mit zunehmendem Chromgehalt. Der zu geringe Perlitanteil kann mit einfachen, geometrischen Konstruktionen in Verbindung gebracht werden. Ein ähnliches Ergebnis besteht bei der Berechnung der Dichte, hier kommt es durch die unterschiedlichen Phasenumwandlungstemperaturen ($\gamma \rightarrow \alpha$, Perlit) zu einer Abweichung von $1,5\text{ W/mK}$. Ein grundsätzlich verschiedener Verlauf besteht in der Wärmeleitfähigkeit. Die IDS 2.0 Version basiert auf anderen Messdaten, die Implementierung von Miettinens Veröffentlichungen [74,88] in SolAMat führt allerdings zu denselben Ergebnissen wie die Berechnung mit der IDS 16 Version (**Abbildung 3-17**, rechts unten). Weitere Gegenüberstellungen der Materialdaten können für alle SSCT Versuche (**Kapitel 3.1.6**) in **Anhang E** gefunden werden.

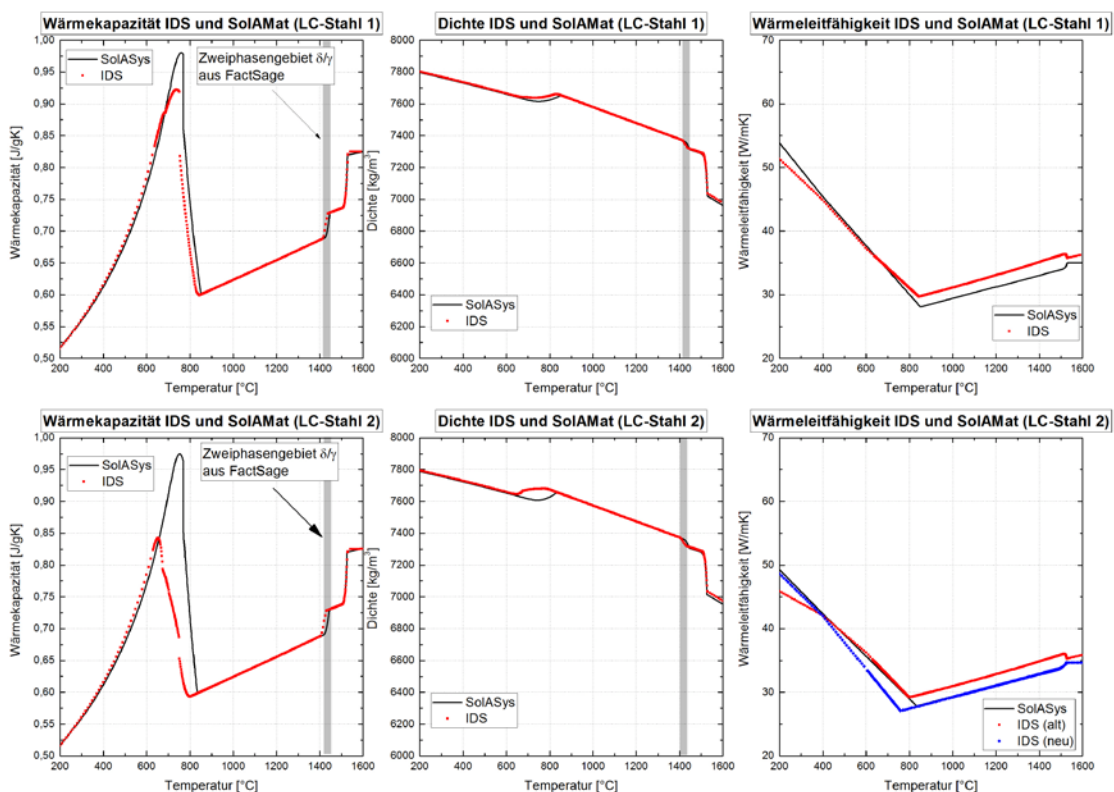


Abbildung 3-17: Vergleich thermophysikalischer Eigenschaft von IDS und SolAMat für zwei Low Carbon Stähle

3.1.6 Bewertung des Mikroseigerungsmodells über DSC Messungen und SSCT-Versuche

Im SSCT Versuch wird ein zylindrischer Probenkörper, bestehend aus Ober- und Unterteil, in die Schmelze getaucht. Nach einer bestimmten Zeit erfolgt an der erstarrenden Schale ein Zugversuch mit vorgegebener Dehnrates und Gesamtdehnung. Eine schematische Darstel-

lung des Versuchsablaufs zeigt **Abbildung 3-18**. Anschließend wird der Probenkörper aus der Schmelze gezogen und die Schale einer metallographischen Beurteilung unterzogen.

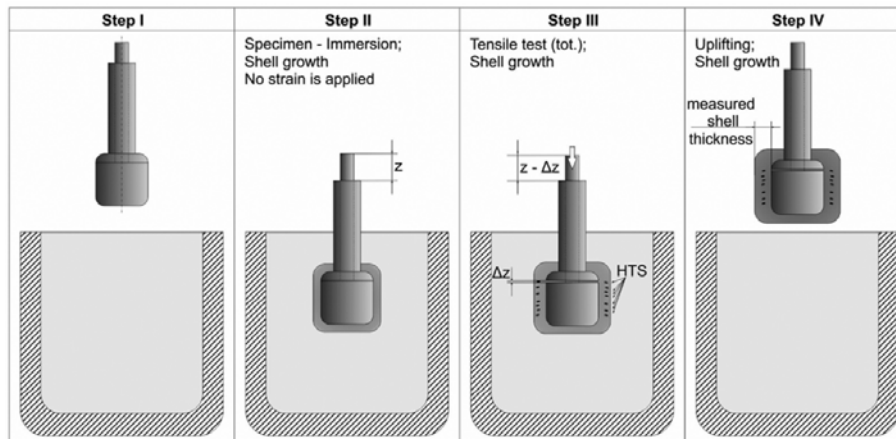


Abbildung 3-18: Schematischer Ablauf des SSCT Versuchs nach Arth [63]

Im Anschluss an den Versuch wird der Probenkörper von den irrelevanten Schalenteilen getrennt und in 16 Segmente geteilt. Acht der insgesamt 16 Teile werden in der Metallographie auf Lage, Anzahl und Länge der Heißrisse untersucht. Eine zusätzliche Messung der Schalenstärke ermöglicht die spätere Korrelation mit Simulationsergebnissen. Aus der gesamten Anzahl an identifizierten Heißrisseigerungen ergibt sich als Mittelwert die Number of Hot Tear Segregations (NHTS) je Schlibbild. Zusammen mit der mittleren Länge der Heißrisseigerungen (HTSL) bilden die NHTS die charakteristischen Kenngrößen des SSCT Versuchs. Der Abstand der Risse zur Oberfläche ist über die Probenhöhe normalverteilt und lässt auf das Schalenwachstum und die Abkühlbedingungen schließen. Die schematische Auswertung von SSCT Versuchen ist in **Abbildung 3-19** gezeigt. Für weitere Informationen sei auf die Arbeit von Pierer [94] verwiesen.

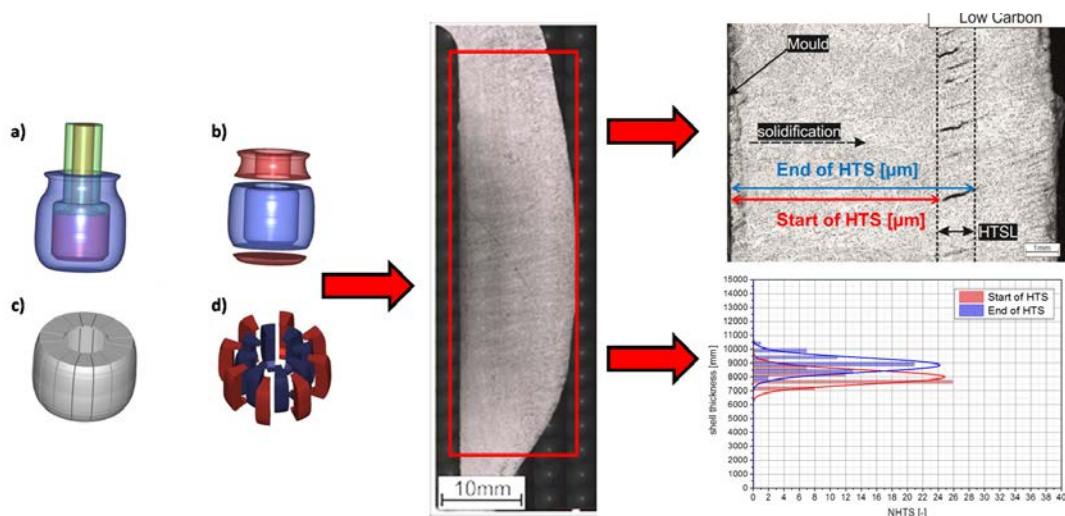


Abbildung 3-19: Ablauf der metallographischen Auswertung von SSCT Versuchen nach [95]

Im Rahmen einer Bachelorarbeit [2] konnte eine Methodik zur Bestimmung von Solidustemperaturen aus dem SSCT Versuch entwickelt werden, das Prinzip ist in **Abbildung 3-20** dargestellt. Entscheidende Berechnungsparameter des Schalenwachstums sind die Überhitzung der Schmelze sowie die Wärmestromdichte während des Versuchs. Das Simulationsergebnis wird mit der gemessenen Schalenstärke aus der Metallographie korreliert. Aus der metallographischen Untersuchung ergeben sich, bezogen auf den Abstand zur Probenoberfläche, zusätzlich Häufigkeitsmaxima für Rissanfang und –ende. Ordnet man diese Maxima jeweils dem Versuchsbeginn und –ende zu, erhält man zwei Wertepaare des Schalenwachstums. Da Heißrisse nahe der Solidustemperatur entstehen, müssen die beiden Wertepaare im Idealfall auf der Solidusisotherme liegen. Unterscheiden sich ermittelten Solidustemperaturen zu Versuchsbeginn und –ende, wird er Mittelwert inklusive Standardabweichung als Referenzwert herangezogen. Eine detaillierte Abhandlung der gesamten Methode und Einflussfaktoren auf die korrekte Auswertung kann [2] gefunden werden.

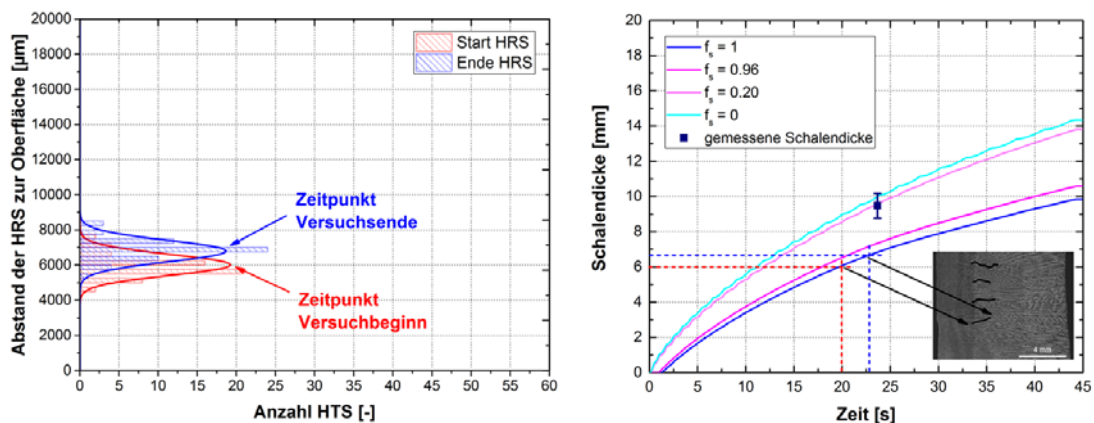


Abbildung 3-20: Prinzip zu Ermittlung der Solidustemperatur aus dem SSCT Versuch

Die chemischen Analysen, Versuchs- und Berechnungsparameter und Ergebnisse der metallographischen Analyse aller SSCT-Versuche befinden sich gemeinsam mit den berechneten Materialdaten, Phasenanteilen und Solidustemperaturen in **Anhang E**.

Die allgemeine Überprüfung des Algorithmus im Mikroseigerungsmodell erfolgt durch die Berechnung von Gleichgewichts-Solidustemperaturen, das heißt mit Vorgabe sehr hoher Fourier-Zahlen der einzelnen Elemente im Modell. Für die Zusammensetzungen der SSCT-Versuche werden die Ergebnisse der FactSage Berechnungen mit der FSStel2015 Datenbank sowie der allgemeinen Lever-Rule gegenübergestellt. Ergänzend können die Solidustemperaturen der DSC Messungen des Erstarrungstyps I zur Validierung verwendet werden. Die Auswahl der DSC Messdaten beschränkt sich auf Legierungen, für welche die Einteilung zwischen Messung und Berechnung übereinstimmt. Die berechneten Gleichgewichtstempere-

raturen der SSCT Versuche in **Abbildung 3-21** (links) zeigen eine hohe Übereinstimmung mit FactSage, aber auch mit der allgemeinen Lever-Rule. Wie erwartet kommt es bei sehr hohen Legierungsgehalten der DSC Messungen zu Abweichungen (**Abbildung 3-21**, rechts), besonders groß fällt dabei der Fehler für hochlegierte Siliziumsysteme aus. Mit Konzentrationen bis zu 4 wt% Silizium und spielen diese Systeme für die zukünftige Entwicklung von SolAMat allerdings keine entscheidende Rolle. Hohe Mangan- und Aluminiumkonzentrationen enden in geringfügigen Fehlern, dies bestätigt die Erhöhung der Liquidus- bzw. Solidustemperatur durch Aluminium.

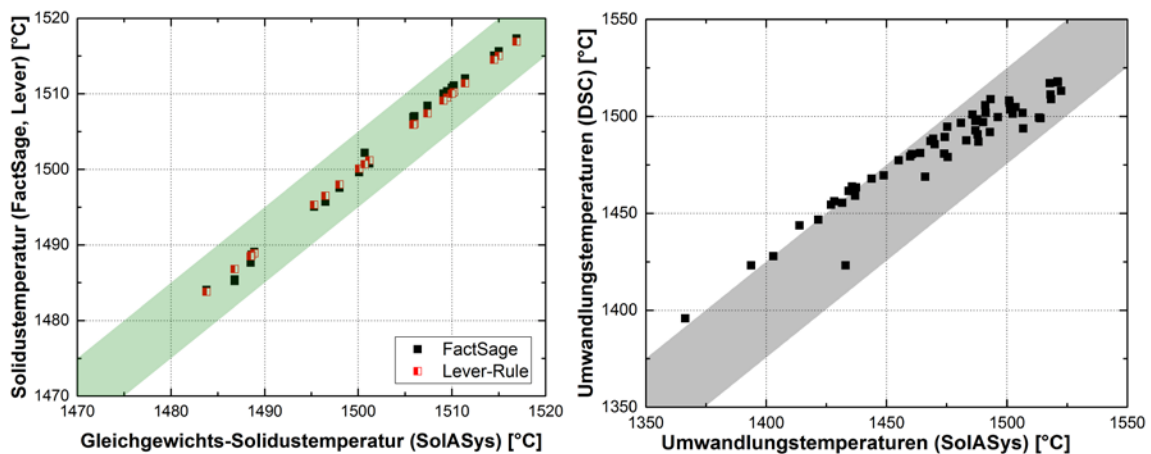


Abbildung 3-21: Gegenüberstellung der Gleichgewichtstemperaturen mit Ergebnissen aus FactSage (FSStel2015) und der allgemeinen Lever-Rule (links) sowie Berechnung für DSC Messungen mit Kohlenstoffäquivalent kleiner 0,09 wt%

In **Abbildung 3-22** befinden sich die Neuberechneten Solidustemperaturen gemeinsam mit den Ergebnissen des veralteten Mikrosegierungsmodells. Der orange Bereich markiert eine zu niedrig berechnete Solidustemperatur. Da Heißrisse allerdings etwas oberhalb der Solidustemperatur entstehen, ist im Rahmen der vorgestellten Methodik eine negative Abweichung zu den SSCT Solidustemperaturen ($T_s(\text{SolAMat}) - T_s(\text{SSCT})$) gegenüber einer positiven zu bevorzugen. Das neue Modell berechnet deutlich niedrigere Temperaturen als das ursprüngliche. Diese Tatsache ist zum einen auf die niedrigeren Verteilungskoeffizienten, die Berücksichtigung von mehreren Legierungselementen sowie auf die Verwendung der neuen Liquidusformel zurückzuführen. Die neu ermittelten Temperaturen liegen beinahe zur Gänze im „grünen Bereich“, der einer Abweichung von ± 5 °C entspricht.

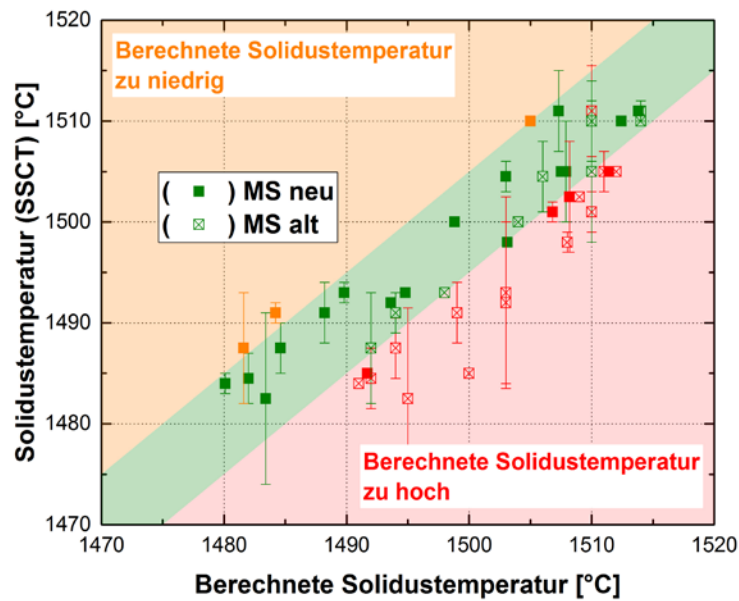


Abbildung 3-22: Anpassung des Mikroseigerungsmodells über SSCT Versuche

3.2 Strangmechanik in SolAStrain

Die Implementierung der Strangmechanik im Modul SolAStrain ist maßgeblich von den Überlegungen der **Kapitel 2.1.7** und **Kapitel 2.2** geprägt:

- die Sedimentation der globulitischen Dendriten im horizontalen Auslaufbereich der Stranggießanlage erfordert eine separate Betrachtung von Innen- und Außenbogen,
- in Richtung des Strangzentrums verdoppelt sich die Primärkorngröße, dementsprechend verringert sich die kritische Dehnung,
- Wiedererwärmungen durch fehlende Kühlung führen zu thermischen Dehnungen in der Strangschale.

3.2.1 Biegen/Richten und Ausbauchen des Strangs

Die Dehnung durch das Biegen und Richten des Strangs wird mit **Gleichung 2-37** nach Morita [70] berechnet. Eine parallel verfasste Arbeit von Mayr [68] beschäftigt sich mit der Beurteilung und Auswahl einer geeigneten Bulgingformel. In der aktuellen Version von SolAStrain wird die Formel nach Lamant et al. [96] zur Berechnung der Ausbauchung verwendet, eine Modifikation ist in Zukunft vorgesehen.

3.2.2 Thermische Ausdehnung durch Wiedererwärmung

Die Berechnung der thermischen Ausdehnung erfolgt nach Galles und Beckermann [97] (**Gleichung 3-28**).

$$\varepsilon_{th} = \alpha_{tot}(T - T_{coh}) \quad (3-28)$$

T_{coh} ist jene Temperatur, ab welcher der Stahl die Kohärenz erreicht und zu schrumpfen beginnt, diese entspricht üblicherweise der Solidustemperatur. Der totale thermische Ausdehnungskoeffizient α_{tot} wird über **Gleichung 3-29**, wobei ρ_s die Dichte der Festphase ist. [97]

$$\alpha_{tot} = \frac{1}{T - T_{coh}} \int_{T_{coh}}^T -\frac{1}{3\rho_s} \frac{d\rho_s}{dT} dT \quad (3-29)$$

Wie in **Kapitel 2.2** besprochen, wird die thermische Dehnung an der Erstarrungsfront durch die Temperaturdifferenz an der Oberfläche beeinflusst. In **Abbildung 3-23** ist die Berechnung der aktuellen Temperatur T für **Gleichung 3-29** schematisch dargestellt. Ein Stabelement des Gitters an der Oberfläche besitzt die mittlere Temperatur von zwei aufeinanderfolgenden Knotenpunkten n bzw. $n+1$. Eine Wiedererwärmung des Strangs würde nach **Gleichung 3-28** zu einer geringeren thermischen Belastung führen, dementsprechend wird in SolAStrain die Temperaturdifferenz ebenfalls auf zwei benachbarte Knotenpunkte bezogen. Ist die Temperaturänderung positiv ($T(n+1)-T(n)>0$), wird der Dehnungsbeitrag berücksichtigt, bei negativen Werten wird die Dehnung vernachlässigt, da sich entsprechend **Kapitel 2.2** Druckspannungen an der Erstarrungsfront bilden würden.

In SolAStrain werden alle auftretenden Dehnungen einem bestimmten Rollenpaar zugewiesen. Da sich der Vorgang der Wiedererwärmung entsprechend **Abbildung 3-23** über mehrere Meter in der Stranggießanlage erstrecken kann, müssen die positiven thermischen Dehnungsbeiträge auf den jeweiligen Rollenabstand d_{RA} aufgeteilt und innerhalb dieses Bereichs aufsummiert werden. Daraus ergibt sich der charakteristische Verlauf aus **Abbildung 3-23** (rechts). Die thermische Dehnung kann mit Werten von bis zu 0,085 % entsprechend zur Fehlerbildung im Produkt beitragen.

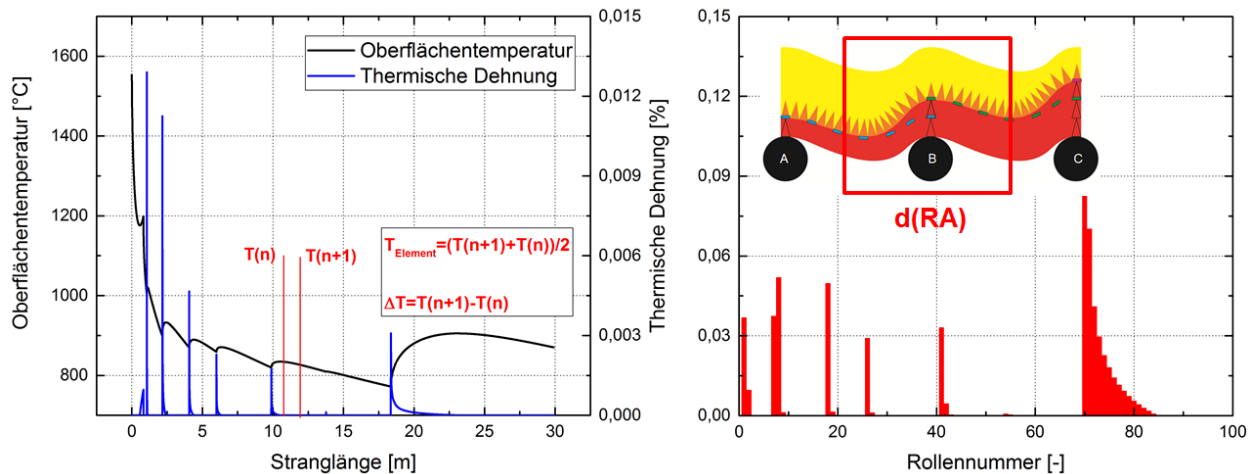


Abbildung 3-23: Schematische Berechnung der thermischen Dehnung in SolAstrain

3.2.3 Heißrissbildungsmodell und Formulierung eines „on-line fähigen“ Qualitätsindex

Im dehnungsbasierten Heißrissbildungskriterium werden alle Anforderung aus **Kapitel 2.1.7** berücksichtigt. In Anlehnung an das Prinzip der akkumulierten Dehnung wird nur ein Teil, der im Zweiphasengebiet auftretenden Gesamtdehnung zur Heißrissbildung beitragen. Der Temperaturbereich der „bevorzugten Dehnungsakkumulierung“ (=Index SA) ergibt sich zu $\Delta T_{SA} = T(f_s=f_{SA}) - T(f_s=1)$ und wird mit dem Mikroseigerungsmodell berechnet. Die Zeit t_A , welche das Zweiphasengebiet in ΔT_{SA} verbringt, ergibt sich durch die Division mit der lokalen Abkühlrate, die durch die Wachstumsgeschwindigkeit R_S und den Temperaturgradienten an der Phasengrenzfläche Fest/Flüssig G_{LS} definiert ist (**Gleichung 3-30**). Die akkumulierte Dehnung ist demnach jene Dehnung, die in Abhängigkeit der Dehnrate und der Zeit t_A im kritischen Bereich induziert werden kann (**Gleichung 3-31**). [94]

$$t_A = \frac{\Delta T_{SA}}{\dot{T}} = \frac{\Delta T_{SA}}{R_S G_{LS}} \quad (3-30)$$

$$\varepsilon_{acc} = \int_{t_A} \dot{\varepsilon} dt \quad (3-31)$$

Das Prinzip der akkumulierten Dehnung für den Stranggießprozess kann mit **Abbildung 3-24** erläutert werden. Ein erstarrendes Volumenelement passiert in Abhängigkeit der Gießgeschwindigkeit v_c innerhalb eines bestimmten Zeitraums t die Rollen A, B und C. Die Rollen sind jeweils um den Rollenabstand d_{RA} voneinander entfernt. Die Zeit, welches dieses Element von A nach B benötigt ergibt zu $t_{(A \rightarrow B)} = d_{RA}/v_c$, das gilt natürlich auch für B→C:

- Im Fall 1 ist die Zeit $t_{(A \rightarrow B)}$ kleiner als t_A aus **Gleichung 3-30**. Das Volumenelement ist bereits vor Erreichen der Rolle B durchgestarrt und befindet sich demnach nicht lange genug innerhalb des Bereichs von ΔT_{SA} , um den zusätzlichen Dehnungsbetrag von Rolle B zu akkumulieren.
- Im Fall 2 sind die Gießparameter der Stranggießanlage hinsichtlich der Heißrissbildung äußerst ungünstig gewählt. Die schnelle Gießgeschwindigkeit und geringe Sekundärkühlungsintensität vermindern die Dicke der Strangschale, dadurch erhöhen sich die Belastungen durch das Ausbauchen und Richten des Strangs. Gleichzeitig verlängert sich die Zeit im Bereich ΔT_{SA} , dementsprechend kann im Volumenelement sogar der Dehnungstrag der Rolle C akkumuliert werden.

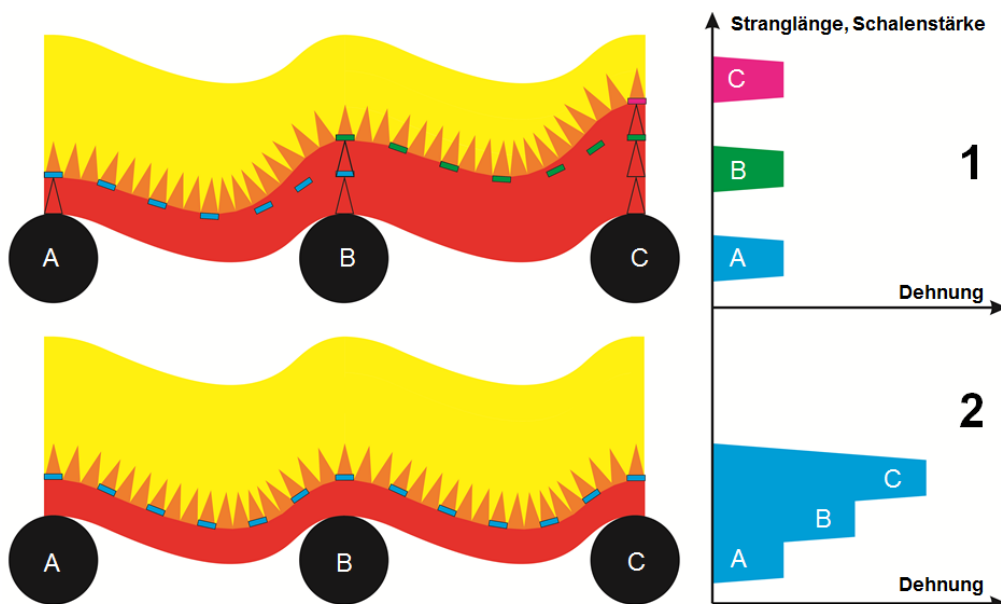


Abbildung 3-24: Schematische Darstellung des Prinzips der akkumulierten Dehnung im Stranggießprozess

Detaillierte Informationen zum Heißrissbildungskriterium und dem Prinzip der akkumulierten Dehnung können der Arbeit von Pierer [94] entnommen werden.

Die Formulierung eines on-line fähigen Qualitätsindex (QI_{HT}) zur Beschreibung der Heißrissbildungsgefahr in einer Stranggießanlage beruht auf denselben Überlegungen (**Gleichung 3-32**):

- ΔT_{SA} wird von einem Mikroseigerungsmodell berechnet,
- R_S und G_{LS} werden bereits routinemäßig online bestimmt und können der Erstarrungssimulation für alle Bereiche in der Stranggießanlage entnommen werden,

- die Dehnrate wird maßgeblich von der Anlagenkonfiguration bestimmt (Rollenteppich, Gießgeschwindigkeit, ...) und
- die kritische Dehnung kann experimentell aus dem SSCT Versuch gewonnen werden. In Richtung Strangzentrum halbiert sich die kritische Dehnung aufgrund der größeren Primärkörner nach [66], dadurch wird abschließend der Mikrostruktureinfluss berücksichtigt.

Ist der Qualitätsindex kleiner 1, geht man von einer geringen Gefahr der Heißrissbildung im Strang aus. Steigt beispielweise die Dehnrate infolge schnellerer Gießgeschwindigkeit an, kann die Rissinitiierung nicht mehr mit Sicherheit ausgeschlossen werden.

$$QI_{HT} = \frac{\frac{\Delta T_{SA}}{R_S G_{LS}} \dot{\epsilon}}{\epsilon_{crit}} < 1 \quad (3-32)$$

4 Berechnungen und Interpretation der Ergebnisse

Im folgenden Kapitel wird die kritische Dehnung von Stählen der Gruppe I aus dem Gesamtdatensatz an SSCT Versuchen ermittelt. Gemeinsam mit den neuen Modulen SolAMat und SolAStrain wird dieser Wert verwendet, um die auftretenden Dehnungen in einer Brammenstranggießanlage mit dem Prinzip der akkumulierten Dehnung zu analysieren. Hierzu soll ergänzend der Einfluss unterschiedlicher Stahlzusammensetzungen und Kühlstrategien untersucht werden. Abschließend wird die Heißrissbildungsgefahr in derselben Brammenstranggießanlage unter identen Randbedingungen mit dem Qualitätsindex prognostiziert und den Ergebnissen der akkumulierten Dehnung gegenübergestellt.

4.1 Bestimmung der kritischen Dehnung aus dem SSCT-Versuch

Zur Bestimmung der kritischen Dehnung aus dem SSCT werden die identifizierten Heißrisse und Heißrisseigerungen (NHTS, **Kapitel 3.1.6**) in einem „Ampelsystem“ über die akkumulierte Dehnung dargestellt. Im grünen Bereich von **Abbildung 4-1** werden nur Vorstufen der Heißrisse (=Heißrisseigerungen) gefunden. Im Übergangssektor (orange) steigt die NHTS, zusammenwachsende Poren können offene Heißrisse erzeugen, dieser Vorgang bildet allerdings noch die Ausnahme. Mit zunehmender akkumulierter Dehnung liegen im roten Gebiet offene Heißrisse vor. Im Fall der Low Carbon Stähle ($c_p < 0,09$ wt%, **Abbildung 4-1**) kommt es bei einer akkumulierten Dehnung 0,6 % zu einer signifikanten Zunahme der NHTS. Dieser Wert kann daher als kritische Dehnung innerhalb der Stahlgruppe I identifiziert werden.

Ein Vergleich mit höherkohligen Stählen zeigt, dass die Rissanzahl dennoch gering ausfällt. Die NHTS von Low Carbon Stählen muss in Relation zu den NHTS in höherkohligen Stählen stehen, daher kann ein allgemein gültiger Wert erst im Anschluss einer Betrachtung der Ampelsysteme der übrigen Stahlgruppen definiert werden.

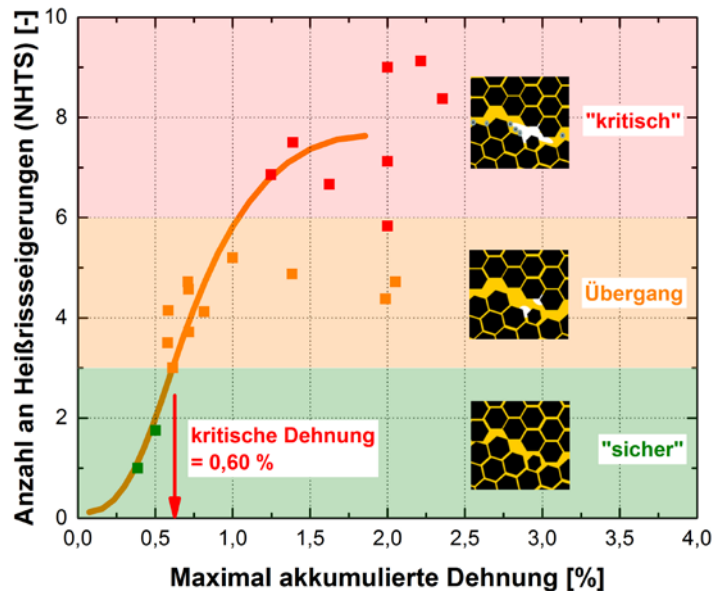


Abbildung 4-1: Bestimmung der kritischen Dehnung aus dem SSCT Versuch für die Stahlgruppe I

Die Definition einer kritischen Dehnung für die gesamte Stahlgruppe I ist nur dann gerechtfertigt, wenn der systematische Einfluss eines Legierungselements auf das Ergebnis ausgeschlossen werden kann. Die Überprüfung dieser Forderung ist in **Abbildung 4-2** dargestellt. Es ist ersichtlich, dass die NHTS in Abhängigkeit stark seigernder Elemente, wie Kohlenstoff, Phosphor oder Schwefel, ohne bestimmte Verteilung in der Gesamtkurve liegen. Die einheitliche Betrachtung der Low Carbon Stähle hinsichtlich ihrer Heißrissbildungstendenz ist daher gerechtfertigt.

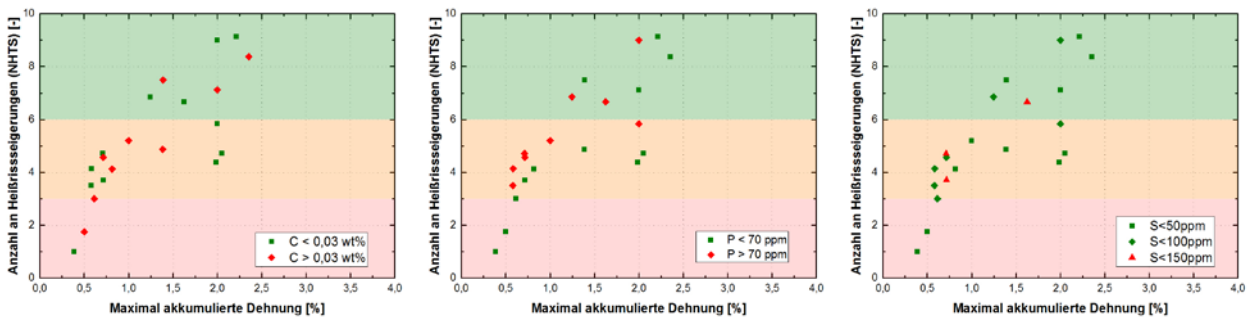


Abbildung 4-2: Untersuchung eines systematischen Einflusses von Legierungselementen auf die akkumulierte Dehnung

Pierer [94] definiert den Bereich der bevorzugten Dehnungsakkumulierung ΔT_{SA} mit Festkörperanteilen zwischen $f_{SA} = 0,96$ und $f_S = 1$. Die Gültigkeit dieser Werte für das neue Mikroerigerungsmodell kann mit dem Prinzip aus **Abbildung 4-3** überprüft werden. Aus den Schnittpunkten der akkumulierten Dehnung und kritischen Dehnung ergibt sich die berechnete Heißrislänge. Dabei gilt: Je größer der Bereich ΔT_{SA} , desto länger sind die Heißrisse. Der berechnete Wert kann für jede Versuchsserie dem Ergebnis aus der metallographischen Untersuchung (**Abbildung 4-3**, rechts) gegenübergestellt werden.

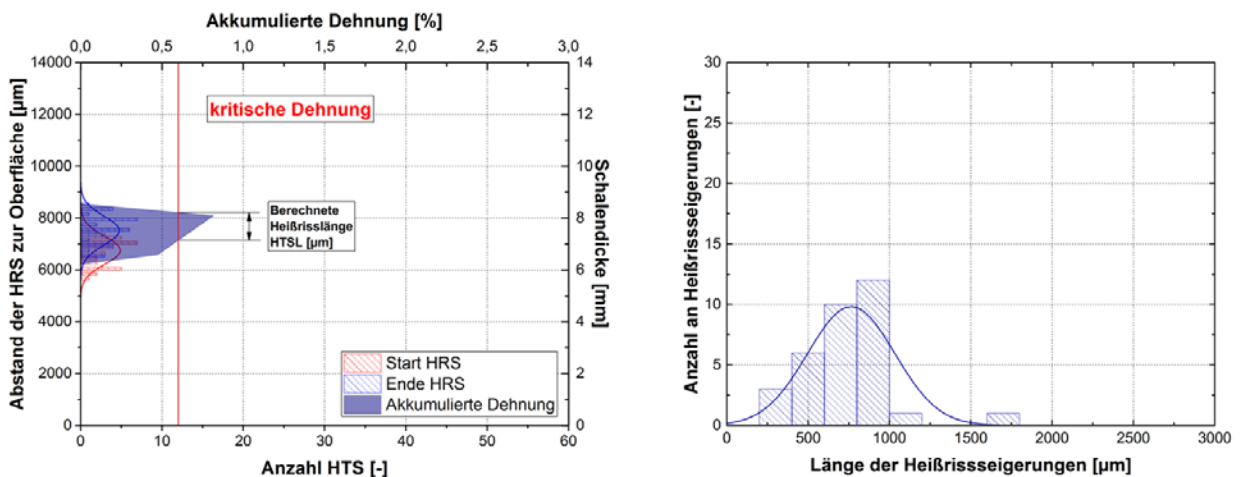


Abbildung 4-3: Berechnung der HTSL aus akkumulierter und kritischer Dehnung (links) und Verteilung gemessener HTSL einer Versuchsreihe (rechts)

In **Abbildung 4-4** (links) sind die Ergebnisse für die Heißrislänge zusammengefasst. Weder eine systematische Abweichung zwischen gemessenen und berechneten Werten noch ein Zusammenhang derselben ist erkennbar, demnach kann auf eine Anpassung von ΔT_{SA} verzichtet werden. Die teils hohen Standardabweichungen der Messwerte erschweren allerdings eine objektive Beurteilung. **Abbildung 4-4** (rechts) zeigt die Abhängigkeit der berechneten Heißrislänge von Dehnrate und akkumulierter Dehnung:

- Mit zunehmender Dehnrate kann im Zweiphasengebiet mehr Dehnung akkumuliert werden,
- da die dazu notwendige Zeit allerdings sinkt, nimmt auch die Länge der Heißrisse ab.

Dieses Ergebnis bestätigt die Vorgehensweise zur „Berechnung“ von auftretenden Heißrislängen, demnach kann dieses Prinzip auch bei der zukünftigen Auswertung höherkohligter Stähle angewendet werden.

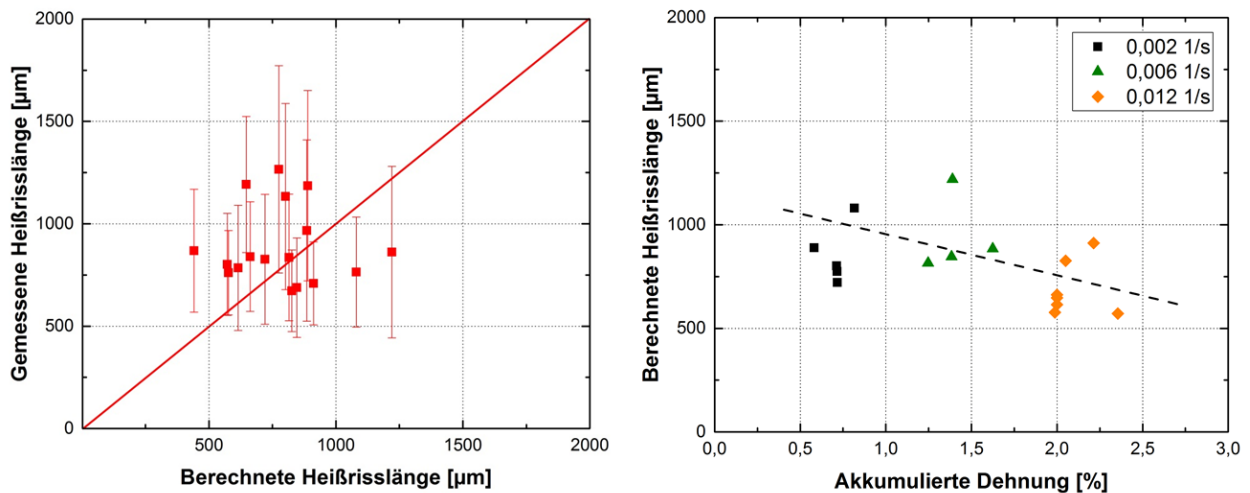


Abbildung 4-4: Gegenüberstellung von gemessener und berechneter HRSL (links) und Abhängigkeit der berechneten HRSL von akkumulierter Dehnung und Dehnrates (rechts)

4.2 Simulation einer Brammenstranggießanlage mit dem Prinzip akkumulierter Dehnungen

Im Rahmen dieses Kapitels wird der Einfluss der Kühlstrategie und unterschiedlicher Stahlzusammensetzungen auf die auftretenden Dehnungen in einer Stranggießanlage mit SolASt-rain (**Kapitel 3.2**) untersucht. Die thermischen Randbedingungen und die Anlagenkonfigurationen werden der Veröffentlichung von Arth [63] entnommen, der kritische Dehnungswert aus **Kapitel 4.1** halbiert sich von der Strangoberfläche bis zum Strangzentrum durch die Vergrößerung der Primärkörner nach [63].

Ausgewählte Ergebnisse sind in **Abbildung 4-5** dargestellt:

- Die Veränderung der Kühlstrategie übt den größten Einfluss auf die Dehnungsakkumulation aus. Das Kühlprogramm „Hardcooling“ entspricht einer intensiven Kühlung des Strangs. Mit dieser Strategie kann sich im Gegensatz zum „Softcooling“ eine dickere Schale ausbilden, die hinsichtlich Belastungen (Ausbauchung, Richten) des Strangs weitaus weniger empfindlich ist. Die schnellere Abkühlung vermindert zusätzlich die Akkumulation mehrerer Rollenbeiträge, da dem Zweiphasengebiet weniger Zeit in ΔT_{SA} zur Verfügung steht.
- Eine Erhöhung des Phosphorgehalts von 50 ppm auf 250 ppm zeigt nur geringfügige Änderungen in der Dehnungsanalyse, lediglich drei Rollenbeiträge werden zusätzlich aufsummiert. Dieses Ergebnis ist etwas unerwartet, da Phosphor generell als kritisches

Element der Heißrissbildung gilt. Ein möglicher Grund besteht im geringen Einfluss des Phosphors auf das schmale Erstarrungsintervall von Low Carbon Stählen.

- Die Berechnung für unterschiedliche Schwefelgehalte zeigt auf den ersten Blick eine ungewöhnliche Tendenz. Während der Schwefelgehalt von 50 ppm für die Heißrissbildung unbedeutend ist, verdoppelt sich die akkumulierte Dehnung bei 100 ppm. Es wäre zu erwarten, dass die Heißrissempfindlichkeit mit weiterer Erhöhung der Schwefelkonzentration steigt. Das ist allerdings nicht der Fall: Ab 200 ppm wird das Löslichkeitsprodukt des Mangansulfids überschritten. Die MnS Bildung erfolgt bei einem Festkörperanteil von $f_s = 0,97$. Die Ausscheidung wirkt sich nahe der Enderstarrung besonders positiv auf die Dehnungsakkumulierung aus und das Risiko der Heißrissbildung sinkt. Das Ergebnis stimmt damit mit den Beobachtungen von Alvarez de Toledo et al. [52] überein.

In keinem der berechneten Fälle wird der kritische Wert der Dehnung erreicht, unter Standard-Gießbedingungen darf das auch nicht der Fall sein. An dieser Stelle ist zu erwähnen, dass der Anlagenzustand, beispielsweise ein Versatz der Stützrollen, zu lokalen Dehnungsspitzen führen kann. Die Qualität des Strangs kann dann, entgegen der Prognose, stark beeinträchtigt werden. [2]

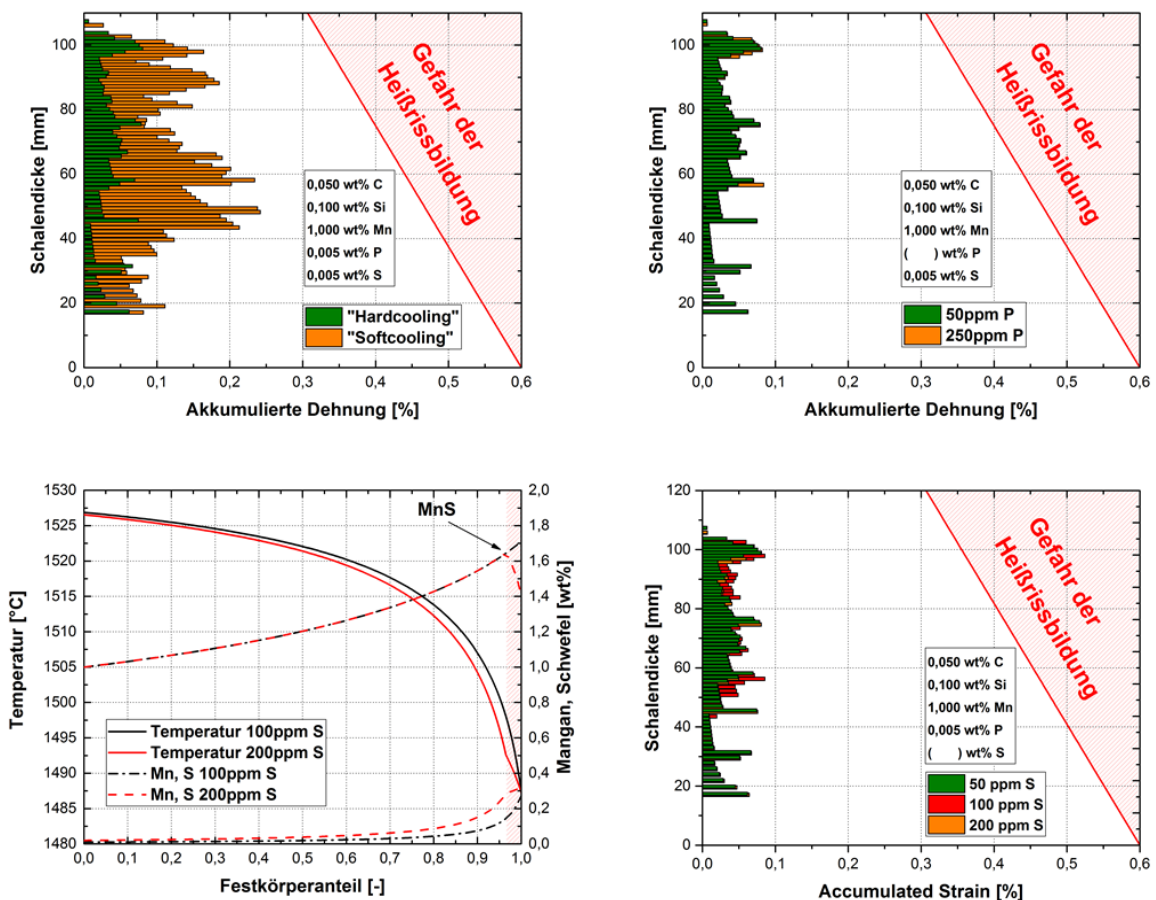


Abbildung 4-5: Akkumulierte Dehnungen in einer Brammenstranggießanlage

4.3 Ergebnisse eines on-line fähigen Heißrissindikators

Die erste Validierung des Heißrissindex erfolgt über dessen Berechnung für den SSCT Versuch mit dem kritischen Dehnungswert aus **Kapitel 4.1**. Entsprechend **Gleichung 3-32** wird zusätzlich die Dehnrate benötigt, diese ist ein Versuchsparameter und als solcher vorgegeben. Abschließend werden aus den Simulationsergebnissen die Wachstumsgeschwindigkeit der Solidusisotherme (R_S) und der Temperaturgradient an der Phasengrenzfläche Fest/Flüssig (G_{LS}), jeweils für Versuchsbeginn und Versuchsende, entnommen. Mit zunehmender Versuchszeit sinkt die lokale Abkühlrate und das Schalenwachstum wird flacher und der Qualitätsindex am Ende des Versuchs verschiebt sich zu deutlich höheren Werten (**Abbildung 4-6**). Die Korrelation zeigt, dass ein eindeutiger Zusammenhang zwischen Qualitätsindex und der akkumulierten Dehnung besteht, der Index reagiert allerdings sensibler auf die Anzahl an Heißrissen. Eine bessere Approximation der akkumulierten Dehnung besteht nach **Abbildung 4-6** zum Zeitpunkt des Versuchsbeginns.

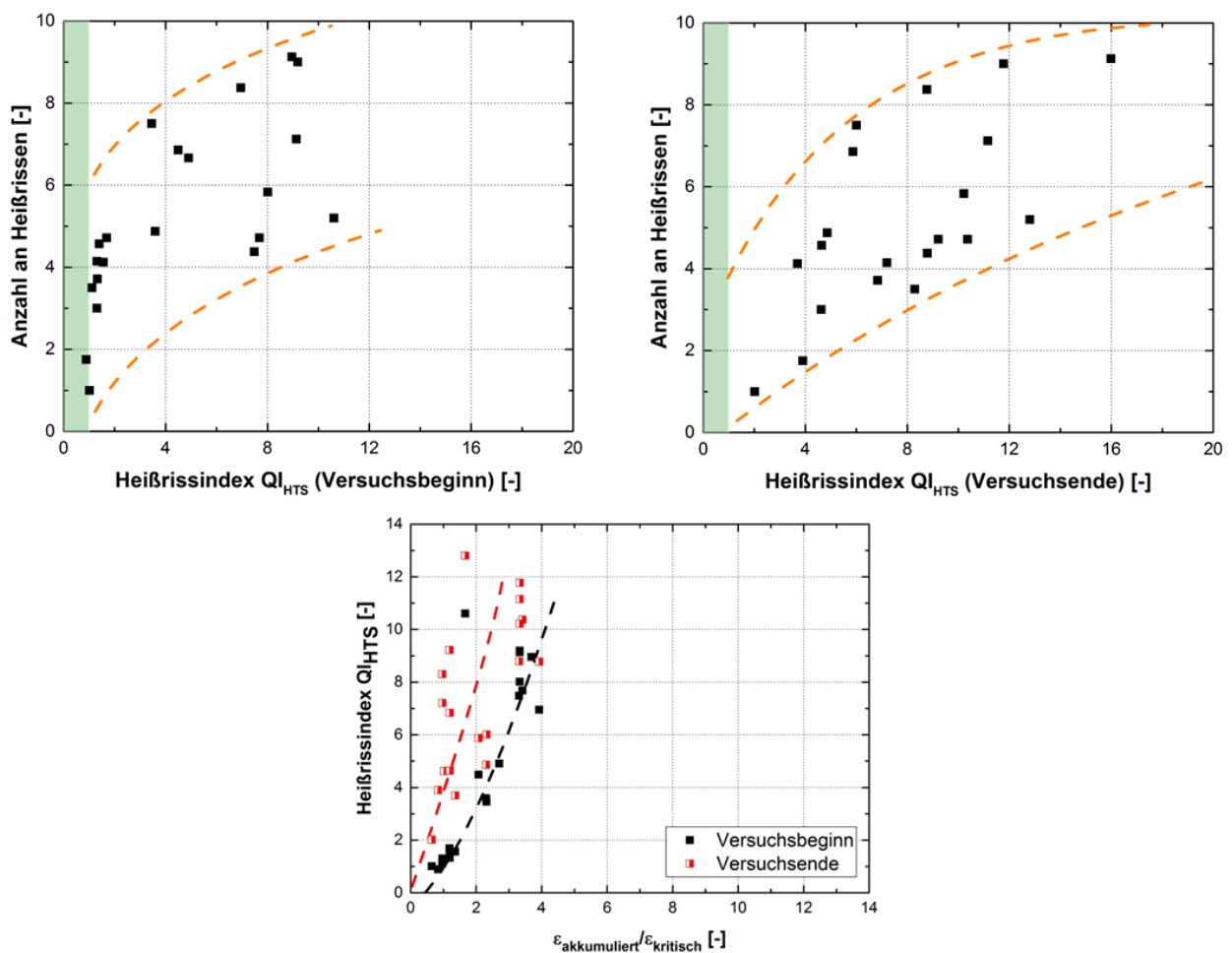


Abbildung 4-6: Anwendung des Qualitätsindex auf den SSCT Versuch (oben) und Vergleich der Ergebnisse mit dem Prinzip der akkumulierten Dehnung (unten)

Zur Berechnung des Heißrissindex einer Stranggießanlage ist im Gegensatz zum SSCT Versuch die Dehnrates a priori nicht bekannt. Die Vorgehensweise zur Entwicklung eines Ausdrucks für die Dehnrates ist **Abbildung 4-7** schematisch dargestellt: In SolASys wird die auftretende Dehnung $\varepsilon_A - \varepsilon_C$ immer dem jeweiligen Rollenpaar mit der Ausdehnung d_{RA} zugeordnet. Unter Berücksichtigung der Gießgeschwindigkeit v_C kann die Dehnrates für Rolle B vereinfacht über **Gleichung 4-1** berechnet werden.

$$\dot{\varepsilon}_B = \frac{\varepsilon_B}{d_{RA}} v_C \quad (4-1)$$

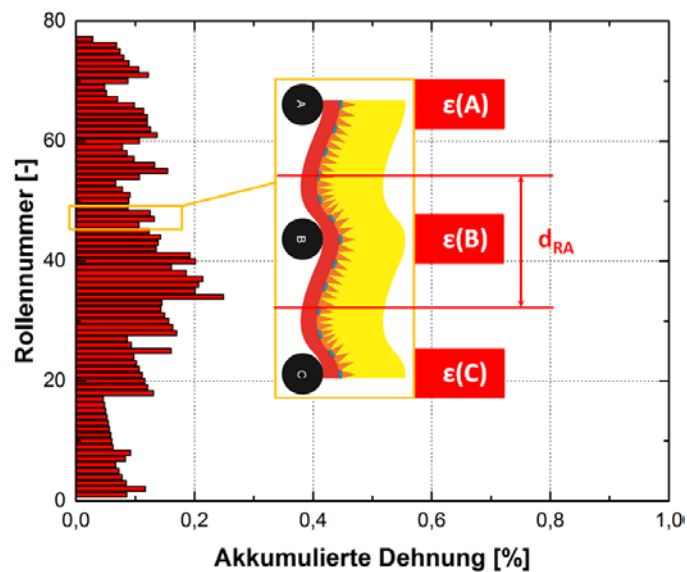


Abbildung 4-7: Berechnung der Dehnrates einer Stranggießanlage mit SolAStrain

Abschließend wird der Heißrissindikator zur Dehnungsanalyse derselben Brammenstranggießanlage [63] aus **Kapitel 4.2** angewendet. Es ist ersichtlich, dass im Fall einer „Softcooling“ – Strategie die Werte des Qualitätsindex nahe am gefährdeten Bereich liegen, bei einer Erhöhung des Schwefelgehalts von 50 ppm auf 100 ppm wird der kritische Wert von 1 sogar überschritten. Der geringe Einfluss des Phosphors sowie die Wirkung der MnS-Auscheidung auf die Heißrissempfindlichkeit bleiben erhalten (**Kapitel 4.2**). In allen Szenarien fällt die Beurteilung der Heißrissgefahr mit dem Qualitätsindex deutlich sensibler aus, als jene mit dem Prinzip der akkumulierten Dehnung (**Abbildung 4-5**).

Der Rissindex wird zukünftig auf alle weiteren SSCT Versuche und Stahlgruppen angewendet und abschließend mit Industrieerfahrungen überprüft, um in weiterer Folge eine objektive Beurteilung dieser Methode zu ermöglichen.

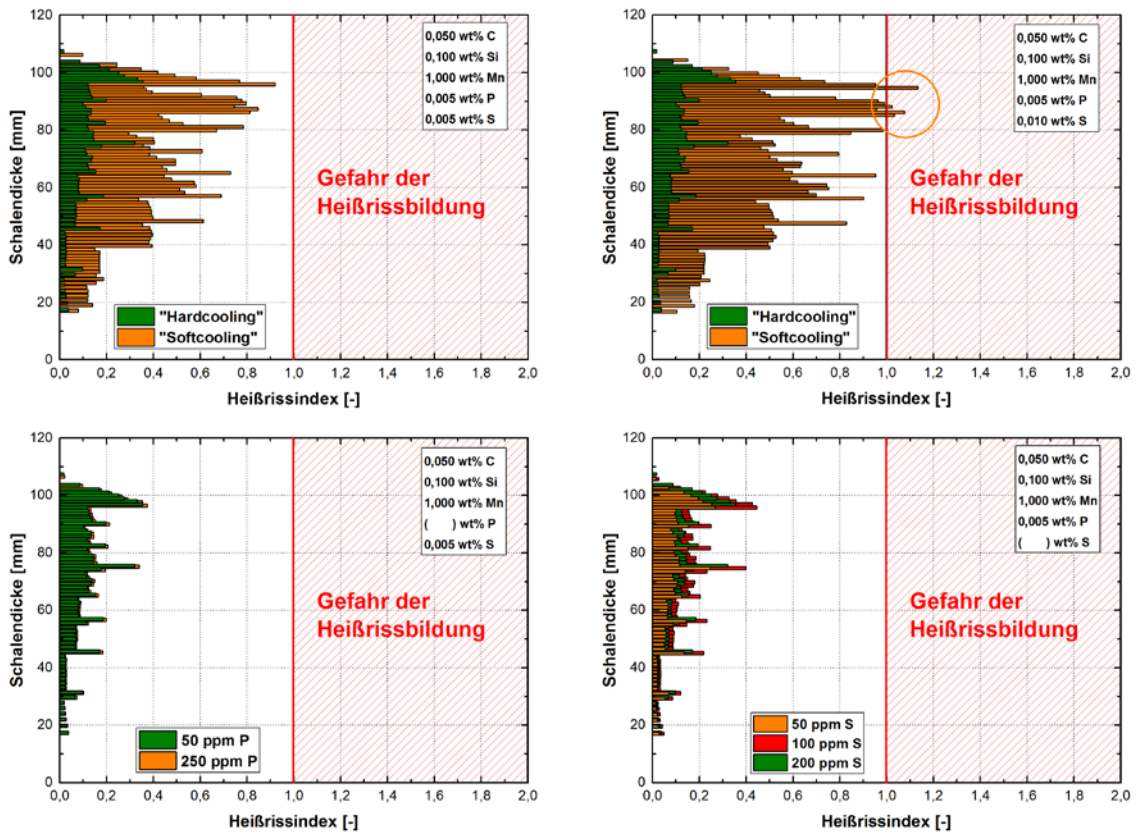


Abbildung 4-8: Anwendung des Heißrissindex zur Beurteilung des Einflussfaktoren auf die Heißrissbildung in einer Stranggießanlage

5 Zusammenfassung und Ausblick

Beim Stranggießen von Stahl wird die erstarrende Strangschale mechanischen Belastungen ausgesetzt. Die Verformung der Strangschale kann zur Ausbildung von ausgeprägten Seigerungen zwischen den Korngrenzen führen, die als Heißrisseigerungen bezeichnet werden und sich in weiteren Prozessschritten bis an die Oberfläche ausbreiten können, oder auch zu unerwünschten Härtegefügen im Fertigprodukt führen können. Am Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie besteht die Möglichkeit, im Submerged Split Chill Tensile (SSCT) Versuch auf die Heißrissempfindlichkeit unterschiedlicher Stahlzusammensetzungen zu schließen. Das in-house 1D-FV Erstarrungsprogramm SolASys bildet die Basis zur computergestützten Auswertung des SSCT Versuchs. Die Software erlaubt in einem erweiterten Modul die Simulation des Erstarrungsverlaufs und die Analyse auftretender Dehnungen in Stranggießanlagen. SolASys stellt damit ein wertvolles Werkzeug zur Vorhersage der Heißrisbildung in Abhängigkeit der Anlagenkonfiguration und Gießparameter des Prozesses dar.

Im ersten Teil der vorliegenden Arbeit wurde das Pre-Processor Modul „Mikroseigerung und Materialdaten“ (SolAMat) am Beispiel der Low Carbon Stähle neu gestaltet und erlaubt nun die Berücksichtigung zusätzlicher Elemente wie Aluminium, Chrom, Nickel, Molybdän und Kupfer.

- Basierend auf über 300 bestimmten Gleichgewichtsdaten von Phasenumwandlungen mittels Difference Scanning Calorimetry (DSC) Messungen konnte die c_p -Formel von Presoly [17] optimiert werden: Die Gewichtung von Aluminium (von -0,07 zu -0,065) und Mangan (von 0,019 zu 0,016) ändert sich nur geringfügig. Der Silizium-Koeffizient verdreifacht sich von -0,005 auf -0,016. Die stark austenitstabilisierende Wirkung von Nickel wird in der Erhöhung des entsprechenden Koeffizienten von 0,025 auf 0,035 berücksichtigt. Die ergänzenden Wechselwirkungskoeffizienten $Si \cdot Mn = -0,001$ und $Al \cdot Mn = 0,01$

beeinflussen das Ergebnis erst ab höheren Aluminium- (> 1 wt%) und Siliziumgehalten (> 3 wt%). Die Auswirkung der Optimierung ist vor allem in den Fe-C-X(-Y) Systemen ersichtlich, die Übereinstimmung im Fe-C-Si und Fe-C-Al System steigt um 10%, für Fe-C-Mn besteht nun sogar eine vollkommene Übereinstimmung mit den DSC Messungen. Insgesamt können rund 85 % des Gesamtdatensatzes ordnungsgemäß eingeteilt werden. Der Gültigkeitsbereich der optimierten c_P -Formel ist in **Tabelle 3-4** definiert.

- Die 300 DSC Messergebnisse wurden verwendet, um eine geeignete Gleichung zur Berechnung der Liquidustemperatur für das Mikroseigerungsmodell auszuwählen. Eine Beurteilung von sechs empirischen Formeln aus der Literatur zeigt, dass für ein exaktes Ergebnis die getrennte Betrachtung von Ferrit- und Austenitliquiduslinie notwendig ist. Die Gleichungen nach Howe und Miettinin [30] weisen die geringste Abweichung zu den Messergebnissen auf und werden einer weiteren Verbesserung über die DSC Messungen unterzogen. Im Rahmen der Optimierung kann eine schmelzpunkterhöhende Wirkung von Aluminium festgestellt werden, diese Erkenntnis wird über FactSage(FSStel2015) Berechnungen bestätigt. Der angepasste Koeffizient beträgt +2 °C/wt% Mit der optimierten Gleichung wird eine durchschnittliche Abweichung weniger ± 3 °C erreicht.
- Aus über 1300 thermodynamischen Berechnungen mit FactSage (FSStel2015) wurden Regressionspolynome zur Berechnung der δ/γ -Umwandlung erstellt, die den Einfluss von Legierungselementen berücksichtigen. Die Ergebnisse aus FactSage werden jenen von SolAMat gegenübergestellt. Sowohl Beginn- als auch Endtemperatur der δ/γ -Umwandlung können mit ± 8 °C ausreichend genau berechnet werden. Zur weiteren Validierung werden die Umwandlungstemperaturen der DSC Messungen mit SolAMat berechnet. Die einfache Modellierung einer Polynomfunktion führt auch hier zu befriedigenden Ergebnissen von durchschnittlich ± 9 °C. Der Gültigkeitsbereich der Regressionspolynome erstreckt sich zumindest über jenen der c_P -Formel aus **Tabelle 3-4**.
- Zur Beschreibung der kühlratenabhängigen Festkörper-PhasenUmwandlung von Austenit zu Ferrit, Perlit bzw. Bainit wurde das Modell von Kirkaldy [76] adaptiert. Die erforderlichen Gleichgewichtstemperaturen werden, wie die δ/γ -Umwandlung, mit Regressionspolynomen von FactSage (FSStel2015) Berechnungen ermittelt, wobei die A_3 (Austenit→Ferrit) ebenfalls mit DSC Messungen überprüft werden. Eine hohe Übereinstimmung mit den gemessenen Werten des Fe-C-Si-(Mn) Systems ist bis zu jeweils 2wt% Silizium und Mangan gewährleistet. Die Ternärsysteme der Fe-C-Cr-Ni Legierungen mit jeweils 2wt% Chrom bzw. Nickel können mit SolAMat exakt berechnet werden. Die zunehmende Abweichung bei Anwesenheit beider Elemente auf ± 10 °C ist ebenfalls vertretbar und

stellt bei den hohen Gehalten ein mehr als zufriedenstellendes Ergebnis dar. Die niedrigen Kohlenstoffgehalte der DSC Messungen schließen eine experimentelle Überprüfung der A_{cm} (Austenit→Zementit) aus. Aus einer einfachen geometrischen Konstruktion, dem Schnitt der A_3 -Linie mit der A_{cm} -Temperatur, wird die Perlitstarttemperatur (A_1) berechnet. Die Phasenanteile von Ferrit und Perlit nach vollständiger Umwandlung sowie die entsprechenden Umwandlungstemperaturen stimmen für niedrige Kühlrate (bis 1 K/s) mit Messwerten aus dem Wärmebehandlungsatlas [83] überein.

- Unter Berücksichtigung der Legierungselemente und Phasenumwandlungstemperaturen werden thermophysikalische Materialdaten aufbereitet, die zur numerischen Simulation der Erstarrung notwendig sind. Während die Wärmekapazität und Latente Wärme auf Basis der FSSStel2015 Datenbank berechnet werden, dienen Miettinens Arbeiten [72,74,88] zur Beschreibung der Dichte und Wärmeleitfähigkeit. SolAMat und IDS 2.0 zeigen, bis auf die Phasenumwandlungstemperaturen, idente Ergebnisse für die Wärmekapazität, Dichte und latente Wärme. Bei der Berechnung der Wärmeleitfähigkeit ergibt sich ein Abweichung von -1,5 W/mK in Relation zu IDS 2.0. Die IDS 2.0 Version basiert auf anderen Messdaten, die Implementierung von Miettinens Veröffentlichungen [74,88] in SolAMat führt allerdings zu denselben Ergebnissen wie die Berechnung mit der IDS 16 Version.
- Der Algorithmus des Mikroseigerungsmodells wurde mit ausgewählten FactSage (FSSStel2015) Berechnungen und DSC Messungen der Gleichgewichtssolidustemperatur überprüft. Für die Gegenüberstellung mit den FactSage Berechnungen ergibt sich eine exakte Übereinstimmung, während bei den DSC Messungen erwartungsgemäß für hohe Siliziumgehalte (bis 4 wt%) eine signifikante Abweichung von -20 °C entsteht. Diese Konzentrationen spielen für die weitere Entwicklung von SolAMat allerdings keine Rolle. Abschließend wird das Mikroseigerungsmodell mit einer zuvor entwickelten Methode über SSCT Versuche an Low Carbon Stählen angepasst. Ein Vergleich mit dem „veralteten“ Mikroseigerungsmodell zeigt, dass die neu berechneten Solidustemperaturen deutlich niedriger ausfallen. Diese Tatsache ist zum einen auf die niedrigeren Verteilungskoeffizienten, die Berücksichtigung von mehreren Legierungselementen sowie auf die Verwendung der neuen Liquidusformel zurückzuführen. Die neu ermittelten Temperaturen liegen beinahe zur Gänze im „grünen Bereich“ von **Abbildung 3-22**, der einer Abweichung von ± 5 °C entspricht.

Der zweite Teil der Arbeit beschäftigt sich mit der Modifikation des Post-Processor Moduls „Strangmechanik“ (SolAStrain):

- Im ersten Schritt werden Innen- und Außenbogen bei der Dehnungsanalyse getrennt betrachtet. Diese Vorgehensweise ermöglicht die Berücksichtigung der entgegengesetzten Belastungsfälle beim Biegen und Richten des Strangs. Die entsprechenden Dehnungen werden mit der Formel nach Morita [70] ermittelt.
- Eine parallel verfasste Arbeit von Mayr [68] beschäftigt sich mit der Beurteilung und Auswahl einer geeigneten Bulgingformel. In der aktuellen Version von SolAStrain wird die Formel nach Lamant et al. [96] zur Berechnung der Ausbauchung verwendet, eine Modifikation ist in Zukunft vorgesehen.
- In einem einfachen Ansatz werden thermische Dehnungen mit dem Prinzip eines temperaturabhängigen Wärmeausdehnungskoeffizienten berechnet. Die so ermittelten Dehnungen können, je nach Kühlstrategie, bis zu 0,1 % betragen und damit entscheidend zur Heißrissbildung beitragen.
- Im Fall der Low Carbon Stähle kommt es im SSCT Versuch ab einer akkumulierten Dehnung von 0,6 % zu einer signifikanten Zunahme der metallographisch gemessenen Heißrissanzahl (NHTS). Dieser Wert kann daher als kritische Dehnung innerhalb der Stahlgruppe I identifiziert werden. Ein Vergleich mit höherkohligen Stählen zeigt, dass die Rissanzahl dennoch gering ausfällt. Die NHTS von Low Carbon Stählen muss in Relation zu den NHTS in höherkohligen Stählen stehen, daher kann ein allgemein gültiger Wert erst im Anschluss einer Betrachtung der übrigen Stahlgruppen definiert werden. In **Abbildung 4-2** ist ersichtlich, dass die NHTS in Abhängigkeit stark seigernder Elemente, wie Kohlenstoff, Phosphor oder Schwefel, ohne bestimmte Verteilung in der Gesamtkurve liegen. Die einheitliche Betrachtung der Low Carbon Stähle hinsichtlich ihrer Heißrissbildungstendenz ist daher gerechtfertigt.
- Die abschließende Dehnungsanalyse einer Brammenstranggießanlage zeigt, dass in allen Szenarien (Veränderung der Kühlstrategie, unterschiedliche Stahlzusammensetzung) die Beurteilung der Heißrissgefahr mit dem neu entwickelten Qualitätsindex deutlich sensibler ausfällt, als jene mit dem Prinzip der akkumulierten Dehnung.

Mit der Zusammenführung von über 300 DSC Messungen, rund 30 SSCT Versuchen, 1300 thermodynamischen Berechnungen in FactSage (FSStel2015) sowie Literaturwerten konnte der gültige Konzentrationsbereich in SolASys ausgedehnt werden. Die erarbeitete Vorgehensweise erlaubt gemeinsam mit der modifizierten Strangmechanik eine abgesicherte Berechnung von Low Carbon Stählen hinsichtlich der Materialdaten und Heißrissempfindlichkeit und wird in Zukunft eingesetzt, um die numerischen Modelle auf weitere Stahlgruppen zu erweitern.

Literaturverzeichnis

- [1] Dantzig, J.A. und M. Rappaz, Solidification, EPFL Press, Lausanne, 2009.
- [2] Bernhard, M., Bewertung und Anpassung eines analytischen Mikroseigerungsmodells über SSCT Versuche an Ultra Low Carbon und Low Carbon Stählen, Bachelorarbeit, Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie, Montanuniversität Leoben, 2015.
- [3] Morita, Z.-I. und T. Tanaka, Thermodynamics of Solute Distributions between Solid and Liquid Phases in Iron-Base Ternary Alloys, ISIJ International 23 (1983), 10, 824–833.
- [4] Ueshima, Y., S. Mizoguchi, T. Matsumiya und H. Kajioka, Analysis of Solute Distribution in Dendrites of Carbon Steel with δ/γ Transformation during Solidification, Metallurgical Transactions B 17 (1986), 4, 845–859.
- [5] Lyman, T., H.E. Boyer, W.J. Carnes und M.W. Chevalier, Metals Handbook, 8. Auflage, Metals Park, Ohio, USA, 1973.
- [6] ISIJ (Ed.), Tekko-Binran (Handbook for Steel) Volume 1, Maruzen, Tokyo, 1981.
- [7] Ghosh, A., Segregation in Cast Products, Sadhana 26 (2001), 1-2, 5–24.
- [8] Battle, T.P. und R.D. Pehlke, Equilibrium Partition Coefficients in Iron-Based Alloys, Metallurgical and Materials Transactions B 20 (1989), 2, 149–160.
- [9] C.R. Tyler (Ed.), Electric Furnace Steelmaking, Iron and Steel Society, Pennsylvania, USA, 1984.

- [10] Fischer, W.A. und H. Frye, Das Zonenschmelzen von weichmagnetischen Stählen und sein Einfluß auf den Verlauf der Konzentration und die Ausbildung des Makrogefüges in Stäben bis 60 mm Durchmesser, VS Verlag für Sozialwissenschaften, Wiesbaden, 1969.
- [11] Hansen, M. und K. Anderko, Constitution of Binary Alloys, McGraw-Hill, New York, 1958.
- [12] Choudhary, S.K. und A. Ghosh, Mathematical Model for Prediction of Composition of Inclusions Formed during Solidification of Liquid Steel, ISIJ International 49 (2009), 12, 1819–1827.
- [13] Yamada W., T. Matsumiya, A. Ito (Eds.), Proceedings of the 6th International Iron and Steel Congress, The Iron and Steel Institute of Japan, Tokyo, 1990, 618.
- [14] Won, Y.-M. und B.G. Thomas, Simple Model of Microsegregation during Solidification of Steels, Metallurgical and Materials Transactions A 32 (2001), 7, 1755–1767.
- [15] Suzuki, M., R. Yamaguchi, K. Murakami und M. Nakada, Inclusion Particle Growth during Solidification of Stainless Steel, ISIJ International 41 (2001), 3, 247–256.
- [16] Morita, Z.-I. und T. Tanaka, Equilibrium Distribution Coefficient of Phosphorus in Iron Alloys, ISIJ International 26 (1986), 2, 114–120.
- [17] Presoly, P., G. Xia, P. Reisinger und C. Bernhard, Continuous Casting of Hypoperitectic Steels: Mould Thermal Monitoring and DSC-analysis, Berg- und Hüttenmännische Monatshefte 159 (2014), 11, 430–437.
- [18] Xia, G., C. Bernhard, S. Illie und C. Fürst, Why are some Peritectic Steels Susceptible to Surface Cracking Formation for Continuously-cast slab, 6th European Conference on Continuous Casting, Riccione, Italy, 2008.
- [19] Xia, G., H.P. Narzt, C. Fürst, K. Mörwald, J. Moertl, P. Reisinger und L. Lindemberger, Investigation of Mould Thermal Behaviour by Means of Mould Instrumentation, Ironmaking and Steelmaking 31 (2013), 5, 364–370.
- [20] Xia, G., Kokillenmetallurgie des konventionellen Brammenstranggießens von Stahl, Habilitationsschrift, Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie, Montanuniversität Leoben, 2011.
- [21] Blazek, K.E., O. Lanzi, P.L. Gano und D.L. Kellogg, Calculation of the Peritectic Range for Steel Alloys, AISTech, Indianapolis, USA, 2007.

- [22] Shepherd, R.E., I. Knopp und H.-G. Brass, The Effect of Alloying Elements on the Peritectic Range in Low Alloyed Cast Steel, 5th International Congress of Congress on the Science and Technology of Steelmaking, Dresden, 2012.
- [23] Schürmann, E. und T. Stisovic, Berechnung der Liquidustemperatur aus der chemischen Analyse legierter Stahlschmelzen, Stahl und Eisen 118 (1998), 11, 97–102.
- [24] Howe, A., Estimation of Liquidus Temperatures for Steels, Ironmaking and Steelmaking 15 (1988), 3, 134–142.
- [25] Kawawa, T., Estimation of Liquidustemperature of Steel, Report of 6th Meeting on Solidification of Steel, No. 6-III-9, 1973.
- [26] Wolf, M., in Concast Metallurgical Seminar, Zürich, 1982.
- [27] Kagawa, A. und T. Okamoto, Influence of Alloying Elements on Temperature and Composition for Peritectic Reaction in Plain Carbon Steels, Materials Science and Technology 2 (1986), 10, 997–1008.
- [28] A Guide to the Solidification of Steels, Jernkontoret, Stockholm, 1977.
- [29] Schürmann, E., M. Djurdjevic und L. Nedeljkovic, Calculation of Liquidus Temperatures of Low and High Alloyed Iron Base Melts from their Chemical Composition by Means of Equivalence Factors, steel research 68 (1997), 3, 101–106.
- [30] Miettinen, J. und A.A. Howe, Estimation of Liquidus Temperatures for Steels using Thermodynamic Approach, Ironmaking and Steelmaking 27 (2000), 3, 212–227.
- [31] Shah, N.A. und J.J. Moore, Effect of Thermal Conditions and Alloying Constituents (Ni, Cr) on Macroseggregation in Continuously Cast High-Carbon (0.8 Pct), Low-Alloy Steel, Metallurgical Transactions B 20 (1989), 6, 893–910.
- [32] Kurz, W. und D.J. Fisher, Fundamentals of Solidification, Trans Tech Publications, Uetikon-Zuerich, Switzerland, 1998.
- [33] Flemings, M.C., Coarsening in Solidification Processing, Materials Transaction 46 (2005), 5, 895–900.
- [34] Poirier, D.R., Permeability for Flow of Interdendritic Liquid in Columnar-Dendritic Alloys, Metallurgical Transactions B 18 (1987), 1, 245–255.
- [35] Cicutti, C. und R. Boeri, On the Relationship between Primary and Secondary Dendrite Arm Spacing in Continuous Casting Products, Scripta Materialia 45 (2001), 12, 1455–1460.

- [36] Feurer, U. und R. Wunderlin, Influence of the Composition and Solidification Conditions on Dendrite Morphology of Binary Aluminium Alloys, Fachbericht der Deutschen Gesellschaft für Metallkunde 38 (1978), 21.
- [37] Pierer, R. und C. Bernhard, On the Influence of Carbon on Secondary Dendrite Arm Spacing in Steel, Journal of Materials Science 43 (2008), 21, 6938–6943.
- [38] Cabrera-Marrero, J.M., V. Carreño-Galindo, R.D. Morales und F. Chávez-Alcalá, Macro-Micro Modeling of the Dendritic Microstructure of Steel Billets Processed by Continuous Casting, ISIJ International 38 (1998), 8, 812–821.
- [39] Hanel, M., Bestimmung von Sekundärdendritenarmständen für Stähle mit unterschiedlichen Kohlenstoffgehalten, Bachelorarbeit, Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie, Montanuniversität Leoben, 2011.
- [40] El-Bealy, M. und B.G. Thomas, Prediction of Dendrite Arm Spacing for Low Alloy Steel Casting Processes, Metallurgical and Materials Transactions B 27 (1996), 4, 689–693.
- [41] Guo, W. und M.-Y. Zhu, Characteristic Parameters for Dendritic Microstructure of Solidification During Slab Continuous Casting, Journal of Iron and Steel Research 16 (2009), 1, 17–21.
- [42] Suzuki, A., T. Suzuki, Y. Nagaoka und Y. Iwata, On Secondary Dendrite Arm Spacing in Commercial Carbon Steels with Different Carbon Content, Journal of the Japan Institute of Metals and Material 32 (1968), 12, 1301–1305.
- [43] Gulliver, G.M., Metallic Alloys, Griffin, London, 1922.
- [44] Scheil, E., Bemerkungen zur Schichtkristallbildung, Zeitschrift für Metallkunde 34 (1942), 70–72.
- [45] Brody, H.D. und M.C. Flemings, Solute Redistribution in Dendritic Solidification, Transactions of the Metallurgical Society of AIME 236 (1966), 615–623.
- [46] Oikawa, H., Lattice Diffusion in Iron - A Review,, Tetsu-to-Hagane (1982), P1489-P1497.
- [47] Clyne, T.W. und W. Kurz, Solute Redistribution during Solidification with Rapid Solid State Diffusion, Metallurgical Transactions A 12 (1981), 6, 965–971.
- [48] Ohnaka, I., Mathematical Analysis of Solute Redistribution during Solidification with Diffusion in Solid Phase, Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan 26 (1986), 12, 1045–1051.

- [49] You, D., C. Bernhard, G. Wieser und S. Michelic, Microsegregation Model with Local Equilibrium Partition Coefficients During Solidification of Steels, *steel research international* 87 (2016), 7, 840–849.
- [50] Schwerdtfeger, K., Rissanfälligkeit von Stählen beim Stranggiessen und Warmumformen, *Stahleisen*, Düsseldorf, 1994.
- [51] Wintz, M., M. Bobadilla, J. Lehmann und H. Gaye, Experimental Study and Modeling of the Precipitation of Non-metallic Inclusions during Solidification of Steel, *ISIJ International* 35 (1995), 6, 715–722.
- [52] Alvarez de Toledo, G., O. Campo und E. Lainez, Influence of Sulfur and Mn/S Ratio on the Hot Ductility of Steels During Continuous Casting, *steel research* 64 (1993), 6, 292–299.
- [53] Xia, G., Untersuchungen über das mechanische Verhalten von erstarrendem Stahl unter stranggußähnlichen Bedingungen, Dissertation, Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie, Montanuniversität Leoben, 1992.
- [54] Valdez, M.E., Y. Wang und S. Sridhar, In-Situ Observation of the Formation of MnS during Solidification of High Sulphur Steels, *steel research international* 75 (2004), 4, 247–256.
- [55] Ueshima, Y., K. Isobe, S. Mizoguchi, H. Maede und H. Kajjoka, Analysis of the Rate of Crystallization and Precipitation of MnS in a Resulphurized Free-Cutting Steel, *Tetsu-to-Hagane* 74 (1988), 3, 465–472.
- [56] Oikawa, K., H. Ohtani, K. Ishida und T. Nishizawa, The Control of the Morphology of MnS Inclusions in Steel during Solidification, *ISIJ International* 35 (1995), 4, 402–408.
- [57] Ludwig, A., M. Wu und A. Kharicha, On Macrosegregation, *Metallurgical and Materials Transactions A* 46 (2015), 11, 4854–4867.
- [58] Pierer, R. und C. Bernhard, Gängige Heißrissbildungskriterien und experimentelle Validierung, *Berg- und Hüttenmännische Monatshefte* 149 (2004), 95–101.
- [59] Hahn, S. und Schaden T., Dynaphase: Online Calculation of Thermodynamic Properties during Continuous Casting, 8th European Continuous Casting Conference, Graz, Austria, 2014.
- [60] Santillana, B., R. Boom, D. Eskin, H. Mizukami, M. Hanao und M. Kawamoto, High-Temperature Mechanical Behavior and Fracture Analysis of a Low-Carbon

- Steel Related to Cracking, Metallurgical and Materials Transactions A 43 (2012), 13, 5048–5057.
- [61] Won, Y.M., T.-J. Yeo, D.J. Seol und K.H. Oh, A New Criterion for Internal Crack Formation in Continuously Cast Steels, Metallurgical and Materials Transactions B 31 (2000), 4, 779–794.
- [62] Kim, K.-h., T.-J. Yeo, K.H. Oh und D.N. Lee, Effect of Carbon and Sulfur in Continuously Cast Strand on Longitudinal Surface Cracks, ISIJ International 36 (1996), 3, 284–289.
- [63] Arth, G., C. Bernhard, S. Illie, T. Schaden und R. Pierer, Experimental und Numerical Investigations on Hot Tearing during Continuous Casting of Steel, Berg- und Hüttenmännische Monatshefte 160 (2015), 3, 103–108.
- [64] Illie, S., Reiter, J., H. Presslinger, J. Fluch und C. Bernhard, Characterization of Hot Tear Segregations in Continuous Casting of Slabs, 6th European Casting Conference, Riccione, Italy, 2008.
- [65] Bernhard, C., Anforderungen an prozessorientierte Heißrissbildungsmodelle, Berg- und Hüttenmännische Monatshefte 149 (2004), 3, 90–95.
- [66] Hadler, M., Charakterisierung der Erstarrungsstruktur von Stranggussbrammen, Masterarbeit, Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie, Montanuniversität Leoben, 2010.
- [67] Schwerdtfeger, K. und A. Diener, Metallurgie des Stranggießens, Stahleisen, Düsseldorf, 1992.
- [68] Mayr, P., Bewertung von empirischen Bulging-Formeln zur Berechnung auftretender Dehnungen in der Strangschale beim Stranggießprozess, Bachelorarbeit, Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie, Montanuniversität Leoben, 2016.
- [69] Barber, B. und A. Perkins, Strand Deformation in Continuous Casting, Ironmaking and Steelmaking 16 (1989), 6, 406–411.
- [70] Morita, Y., H. Kawashima und M. Nakamura, Strain Analysis on Internal Cracks in Continuously Cast Steel Slabs, The Sumitomo Search (1985), 30, 19–30.
- [71] Han, H.N., J.-E. Lee, T.-J. Yeo, Y.M. Won, K.-h. Kim, K.H. Oh und J.-K. Yoon, A Finite Element Model for 2-Dimensional Slice of Cast Strand, ISIJ International 39 (1999), 5, 445–454.

- [72] Miettinen, J., Calculation of Solidification-Related Thermophysical Properties for Steels, *Metallurgical and Materials Transactions B* 28 (1997), 2, 281–297.
- [73] Swaminathan, C.R. und V.R. Voller, A General Enthalpy Method for Modeling Solidification Processes, *Metallurgical Transactions B* 23 (1992), 5, 651–664.
- [74] Miettinen, J., Thermodynamic-Kinetic Simulation of Solidification and Phase Transformations in Steels, Helsinki University of Technology Publications in Materials Science and Metallurgy, Espoo 1999.
- [75] Mintz, B., S. Yue und J.J. Jonas, Hot Ductility of Steels and Its Relationship to the Problem of Transverse Cracking During Continuous Casting, *International Materials Reviews (USA)* 36 (1991), 5, 187–217.
- [76] Kirkaldy, J.S., Diffusion-controlled Phase Transformations in Steels: Theorie and Application, *Scandinavian Journal of Metallurgy* 20 (1991), 50–61.
- [77] A.R. Marder, J.J. Goldstein (Eds.), Phase Transformations in Ferrous Alloys, AIME, Warrendale, Pennsylvania, 1984.
- [78] Bhadeshia, H. K. D. H., Thermodynamic Analysis of Isothermal Transformation Diagrams, *Metal Science* 16 (1982), 159–165.
- [79] Saunders, N., Z. Guo, Li X., A.P. Miodownik und J.P. Schille, The Calculation of TTT and CCT Diagrams for General Steels, Internal report, Sente Software Ltd., U.K., 2004.
- [80] Diekmann, U., Calculation of Steel Data using JMatPro, Comat, Plzen, Czech Republic, 2012.
- [81] Buchmayr, B., Werkstoff- und Produktionstechnik mit Mathcad: Modellierung und Simulation in Anwendungsbeispielen, Springer, Berlin, 2002.
- [82] Steven, W. und A.G. Haynes, The Temperature of Formation of Martensite and Bainite in Low-Alloy Steels, *Journal of Iron and Steel Institute* 183 (1956), 349.
- [83] Wever, F., A. Rose, H. Hougardy und Orlich, J. Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Atlas zur Wärmebehandlung der Stähle, Verlag Stahleisen, Düsseldorf, Duetschland, 1954-1958.
- [84] Fuchs, N., In-situ Beobachtung von Austenitkornwachstum und Phasenumwandlungen in Stählen mittels Hochtemperatur-Laser-Scanning-Konfokal-Mikroskopie, Masterarbeit, Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie, Montanuniversität Leoben, 2016.

- [85] Pereloma, E. und D.V. Edmonds, Phase transformations in steels, Woodhead Publishing Limited, Cambridge, UK, 2012.
- [86] Strangwood, M., The Prediction and Assessment of Weldmetal Microstructures, PhD Thesis, 1987.
- [87] Dinsdale, A.T., SGTE Data for Pure Elements, Calphad 15 (1991), 4, 317–425.
- [88] Miettinen, J., Calculation of Thermophysical Properties of Carbon and Low Alloyed Steels for Modeling of Solidification Processes, Metallurgical and Materials Transactions B 25 (1997), 12, 909–916.
- [89] Smetana, B., M. Zaludova, S. Zla, J. Dobrovska, I. Krejci, L. Valek, R. Pachlopnik und A. Stvrtnova, Study of Latent Heats of Fe Based Metallic Alloys, Metal 2013, Brno, Czech Republik, 2013.
- [90] Smetana, B., M. Zaludova, Zla, S., Dobrovska, J., V. Matejka, J. Dobrovska und K. Gryc, Latent Heats of Phase Transitions of Fe-C Based Metallic Alloys in High Temperature Region, Metal 2011, Brno, Czech Republik, 2011.
- [91] Dhindaw, B., T. Antonsson, J. Tinoco und H. Fredriksson, Characterization of the Peritectic Reaction in Medium-AlloySteel through Microsegregation and Heat-of-TransformationStudies, Metallurgical and Materials Transactions A 35 (2004), 2869–2879.
- [92] Lindemann, A., J. Al-Karawi und J. Schmidt, Thermal Analytical Study of Steels at High Temperature Including the Range of Melting, Thermochemica Acta 310 (1998), 133-140.
- [93] Smrha, L., Solidification and Crystallization of Steel Ingots, SNTL, Prag, 1983.
- [94] Pierer, R., Formulation of a New Hot Tearing Criterion for the Continuous Casting Process, Dissertation, Lehrstuhl für Eisen- und Stahlmetallurgie, Montanuniversität Leoben, 2007.
- [95] Lederhaas B., Metallographische Auswertung von SSCT-Proben, interner Bericht, Leoben, 2012.
- [96] Lamant, J.Y., M. Larrecq, Z. Smarzynski, J.L. Hensgen, C. Rossard, J.D. Weber und J.C. Dhuyvetter, Study of the Bulging of Continuously Cast Slabs, Technical Steel Research Report EUR 8963/111 EN, Luxemburg, 1982.

-
- [97] Galles, D. und C. Beckermann, Measurement and Simulation of Distortion of a Steel Bracket Casting, 66th SFSA Technical and Operating Conference, Chicago, Illinois, 2012.

A Empirische Liquidusformeln

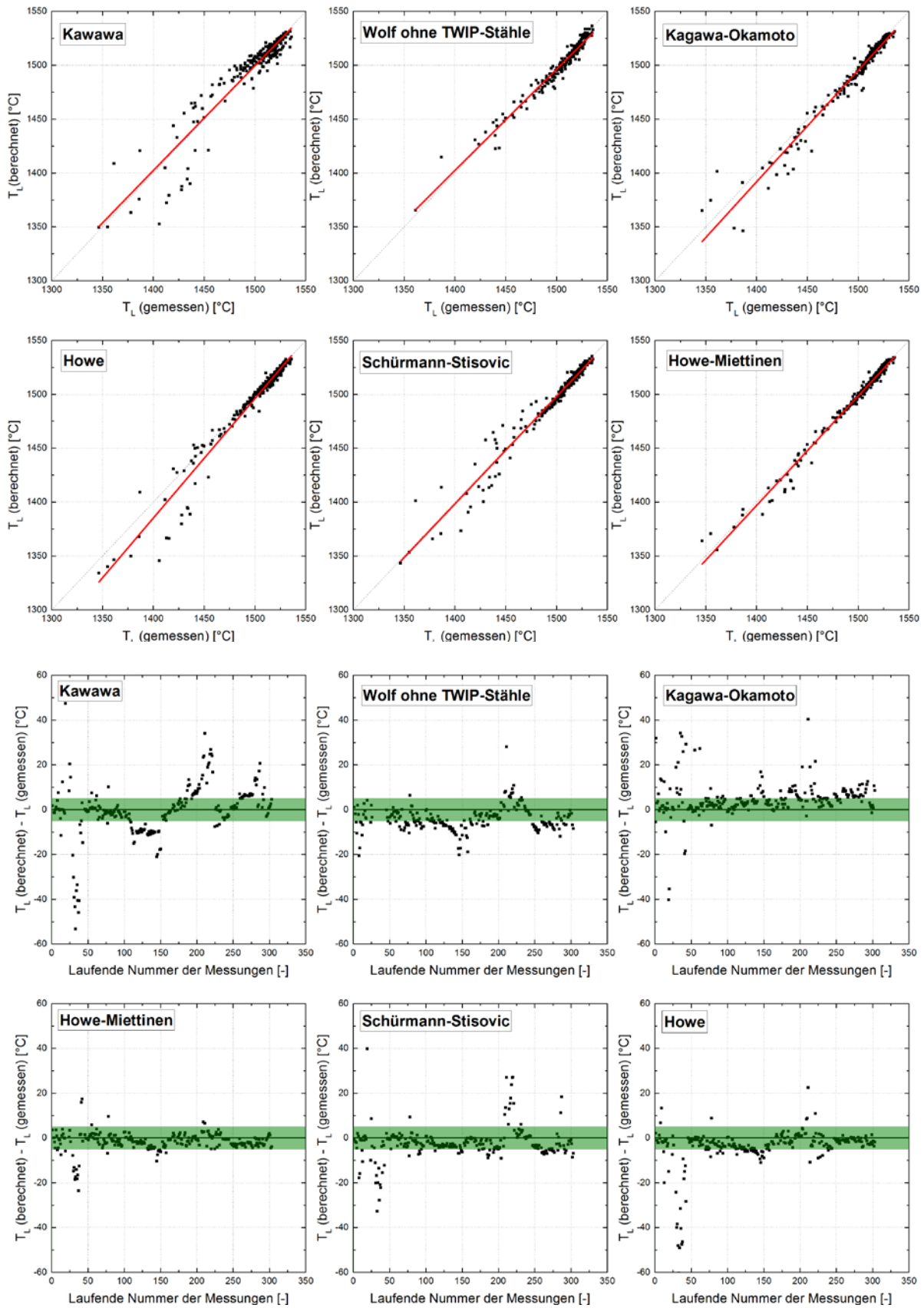
A.1 Koeffizienten der Miettinen-Howe Gleichung

	niedriglegiert δ		niedriglegiert γ		hochlegiert δ			hochlegiert γ		
T_L^0	1538		1528		1538			1528		
	Koeff	Koeff-C	Koeff	Koeff-C	Koeff	Koeff-Cr	Koeff-Ni	Koeff	Koeff-Cr	Koeff-Ni
C	-76,24	-10,354	-60,09	-6,1399	-76,28	-1,3991	-0,0837	-62,62	0,5175	-0,206
Si	-11,66	-4,3512	-11,49	-5,6055	-9,43	-0,2128	0,2391	-8,29	-0,4646	0,1755
Mn	-5,62	-0,2230	-4,26	0,4530	-7,55	0,1779	0,01	-4,22	-0,0143	-0,0377
P	-24,78	-12,941	-30,92	-5,3497						
S	-32,81	-17,723	-33,19	-10,09						
Cr	-1,95	-0,0033	-2,47	1,3303	-1,56	-0,0205	0,0095	-2,59	-0,034	0,0546
Mo	-2,2	-0,8451	-4,36	0,0701	-2,87	0,044	-0,0205	-6,26	0,0494	0,0244
Ni	-3,58	-0,8364	-1,97	-0,5886	-4,29		-0,0428	-1,69		-0,0175
Ti					-18,55	0,0538	0,3514	-16,91	-0,0907	0,1422
Nb					-12	0,0789	0,1771	-10,17	-0,0225	0,0781
N					-42,64	-1,2721	-1,0988	-21,6	0,1153	-0,2366
Cr ³					2E-3			4E-4		
Ni ³					7E-4			-4E-4		
TiN					283,96			155		

A.2 Koeffizienten und Argumente einiger Liquidusgleichungen

	Kawawa	Wolf	Kagawa		Howe
	δ/γ	δ/γ	δ	γ	δ/γ
T_L^0	1536	1537,4	1534	1491	1537
C	-78C	-100C +22,41C ²	-48,24C -63,04C ²	-36,33C +61,9C ²	C < 0,471: -87C 0,471 < C < 1: -70C-8 1 < C: -76C-2
Si	-7,6Si	-13,55Si +0,64Si ²	-14,4Si	-17,1Si	Si < 1: -9Si Si > 1: -Si ² - 9 Si + 1
Mn	-4,9Mn	-5,82Mn -0,3Mn ²	-4,9Mn	-3,3Mn	-5Mn
P	-34,4P		-31,8P	-27,1P	-34P
S	-38S		-37,1S	-30,4S	-40S
Cr	-1,3Cr	-1,59Cr +0,007Cr ²	-1,04Cr	-2,6Cr	-0,473Cr-0,208Cr ² + 0,0123Cr ³ -0,00018Cr ⁴
Mo		-3Mo	-2,6Mo	-3,3Mo	-2,5Mo
Ni	-3,1	-4,18Ni- 0,01Ni ²	-4,7Ni	-1,6Ni	Ni < 4,4: -5Ni 4,4 < Ni: -1,92Ni-13,54
Al	-3,6				0
Cu	-4,7	-4,2Cu	-5,3Cu	-1,7Cu	-5Cu
Sn					-8Sn
Ti			-10,2Ti		-15Ti
Nb					-9Nb
N					-72N

A.3 Überprüfung der Liquidusgleichungen mit DSC Messungen

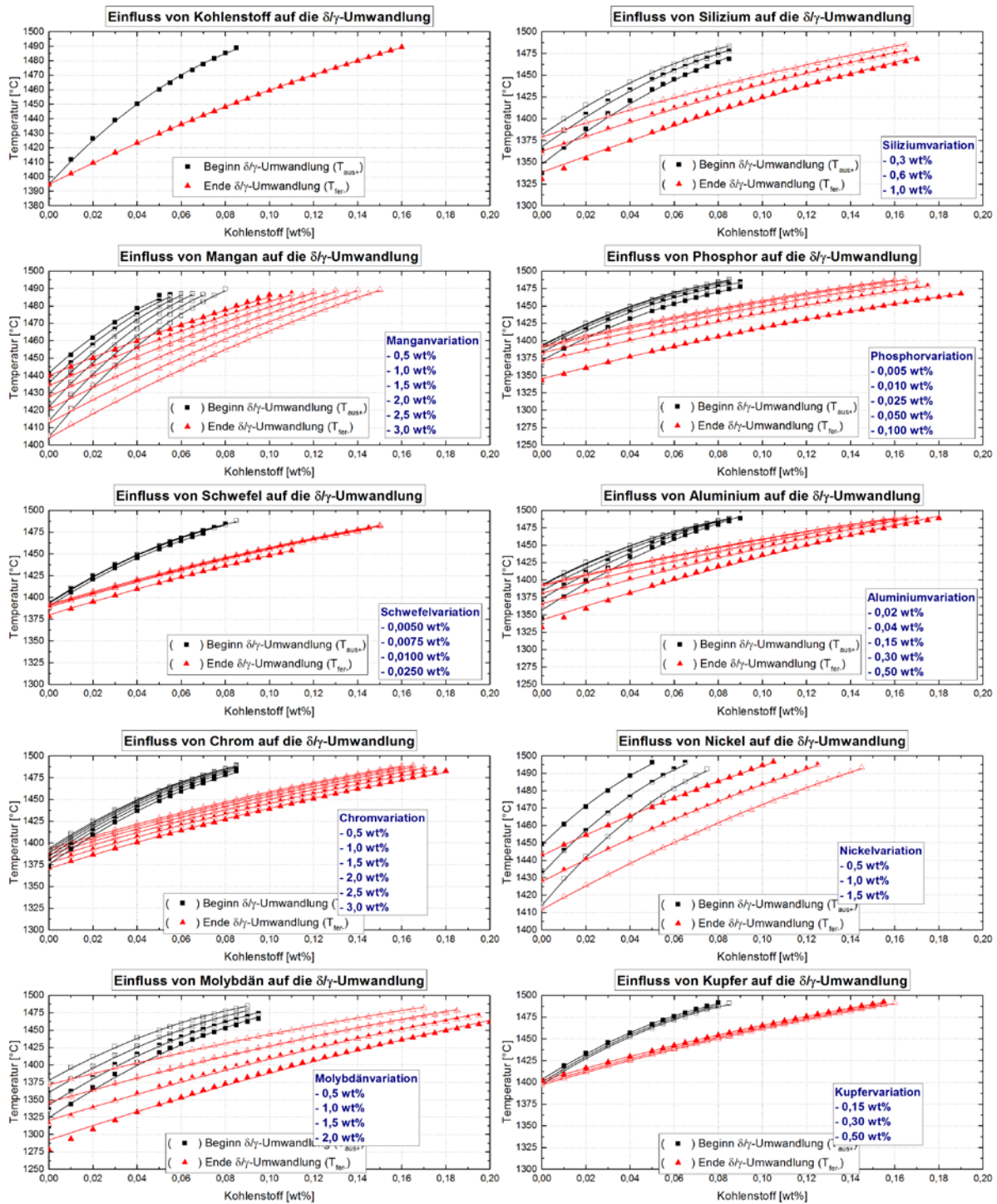


B Berechnung der δ/γ -Umwandlung

B.1 Regressionskoeffizienten der einzelnen Elemente

	C	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu
k^+	1639,47	-42,37	20,68	-220,20	-170,41	-66,55	-1,99	40,37	-33,32	18,30
l^+	-6408,18	-4,53	-1,70	-100,94	-1129,04	-19,33	-1,47	-2,82	-0,99	-2,32
m^+	1639,47	-42,37	20,68	-220,20	-170,41	-66,55	-1,99	40,37	-33,32	18,30
k^-	748,12	-49,3	19,37	-478,24	-582,16	-84,88	-2,56	34,86	-45,07	14,90
l^-	-992,28	-6,99	-1,45	-180,68	-583,80	-37,73	-1,80	-1,88	-3,13	-0,79
m^-		199,89	-65,59	855,11	1445,15	515,84	13,87	-90,75	155,06	-27,23

B.2 Ergebnisse der Regression

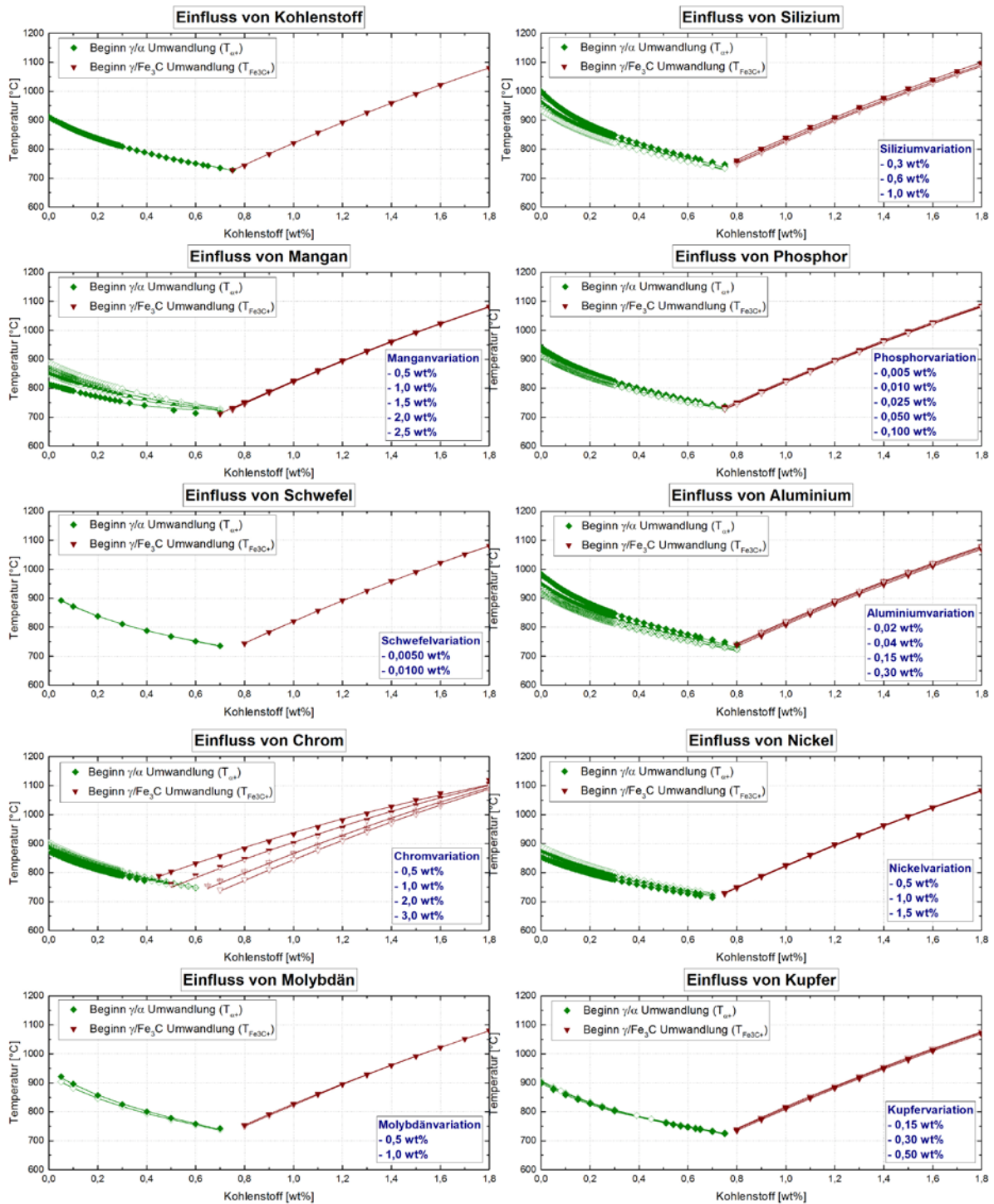


C Berechnung der γ/α -Umwandlung

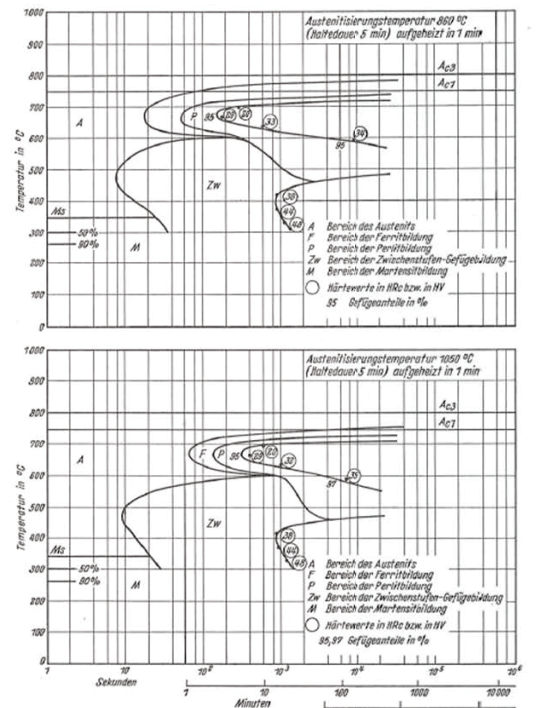
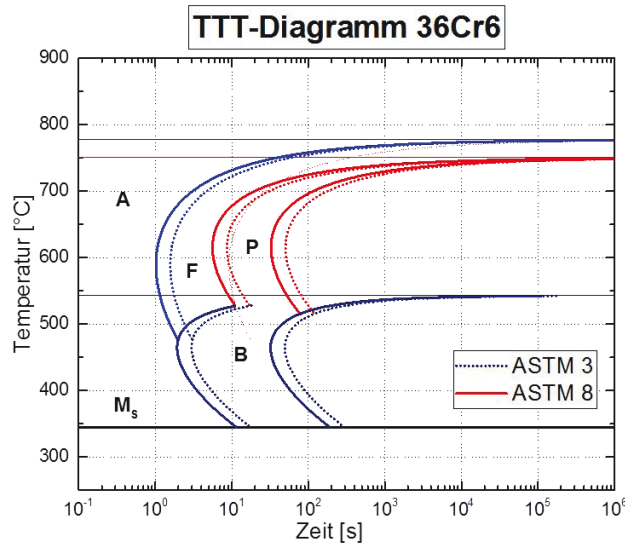
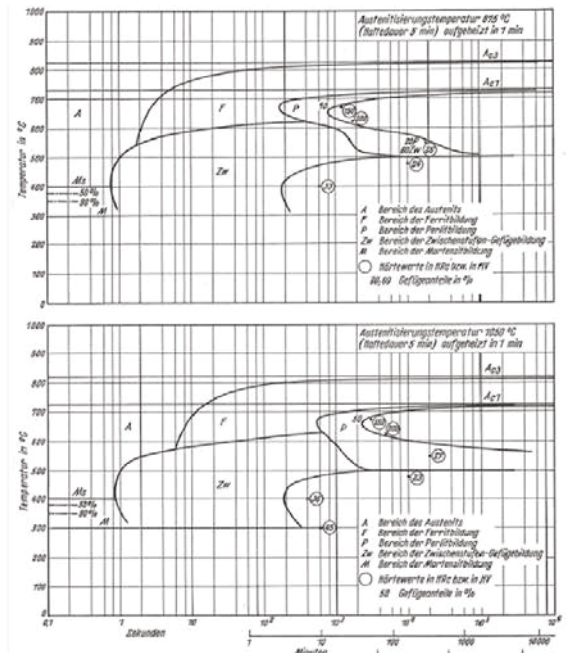
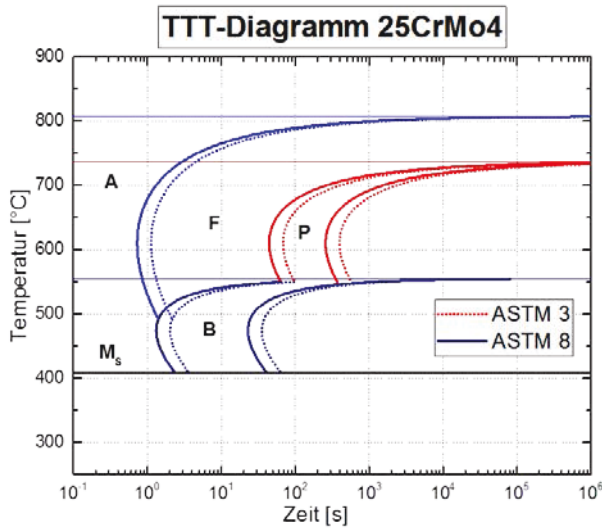
C.1 Regressionskoeffizienten

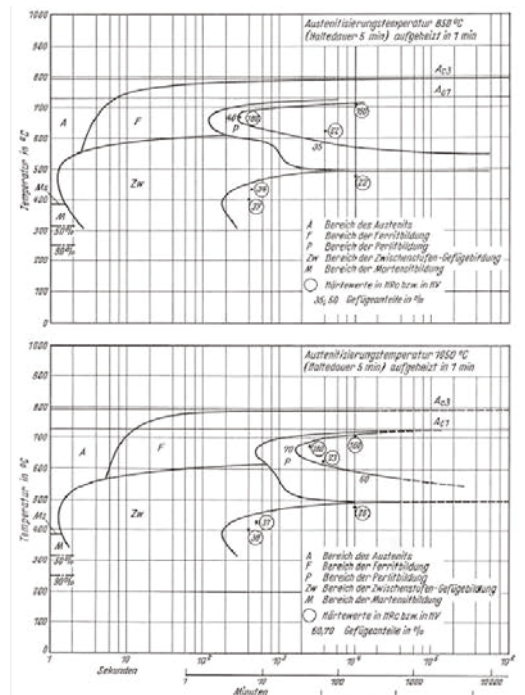
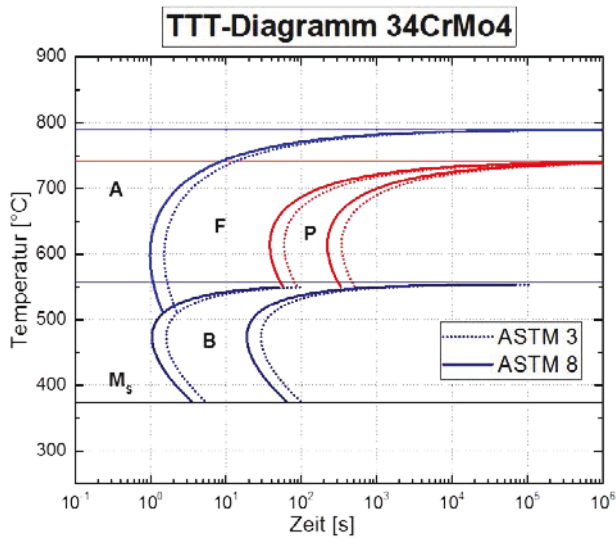
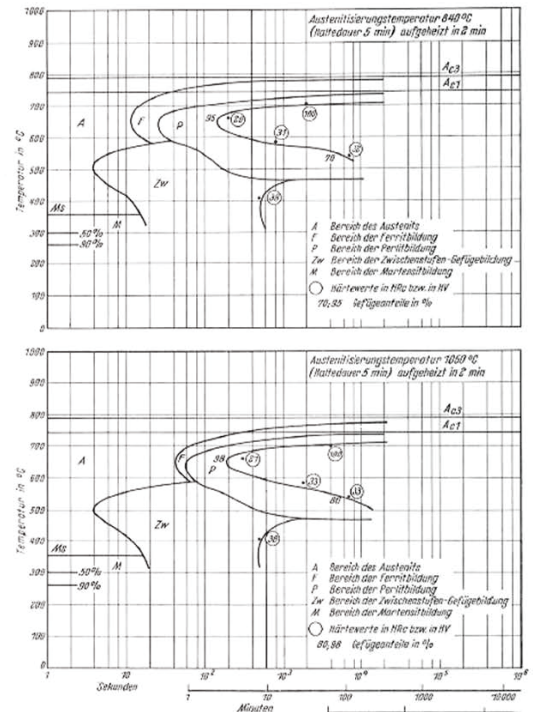
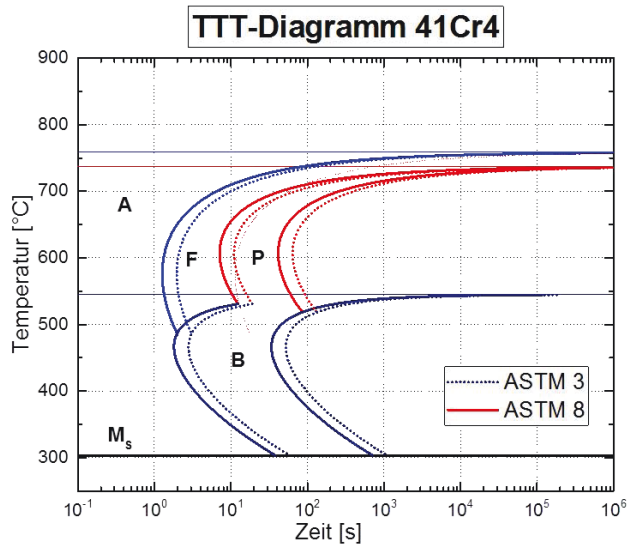
	C	Si	Mn	Cr	Ni	Mo
k^{A3}	-463,45	63,75	-41,16	-15	-37,86	26,23
l^{A3}	484,58	1,17	1,70	0,95	2,77	7,67
m^{A3}	-261,04	2,63	0,06	-0,06	-0,36	-4,05
n^{A3}		-77,20	42,77	20,57	34,92	-37,56
k^{Acm}	466,75	16,07	3,22	87,71	2,33	16,26
l^{Acm}	-50,74	0,71	0,05	-3,04	0,54	-0,12
m^{Acm}		1,30	-1,43	-39,57	-0,26	-9,7

C.2 Ergebnisse der Regression

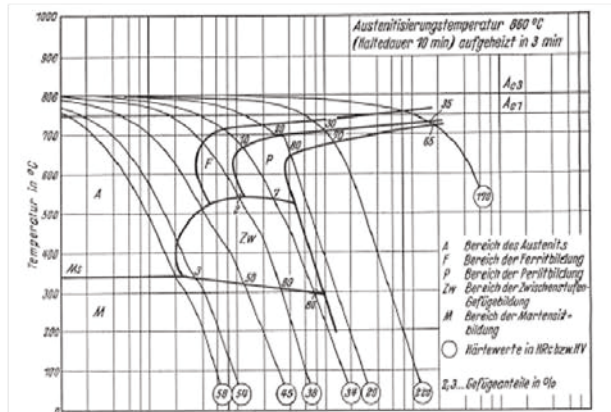
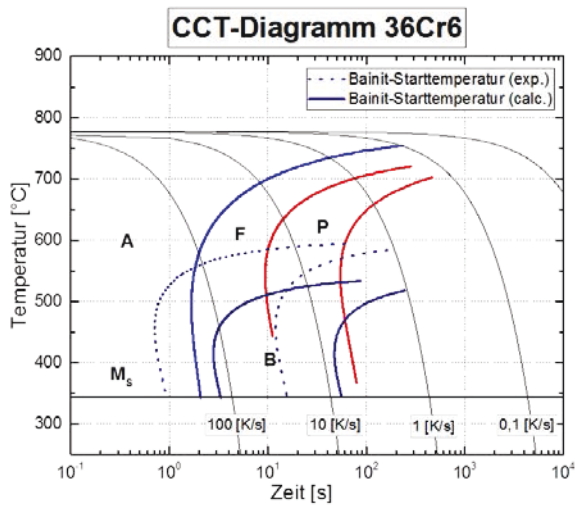
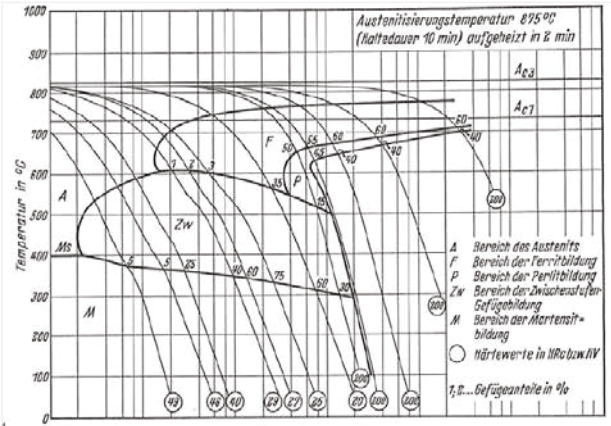
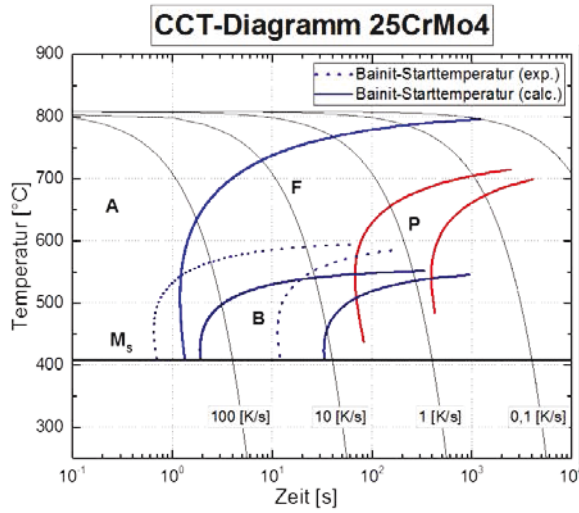


C.3 Ausgewählte TTT Diagramm



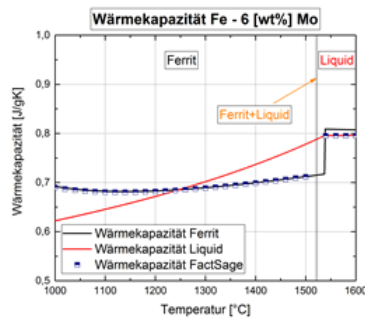
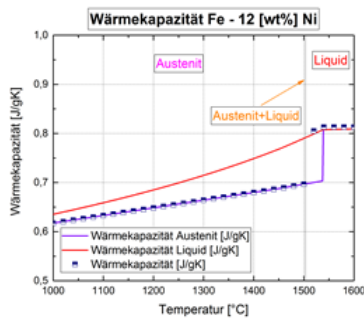
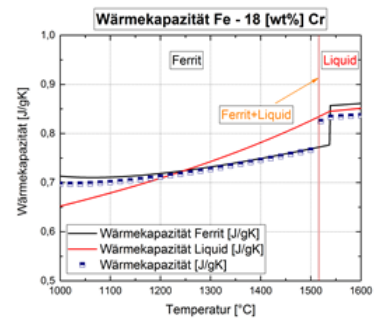
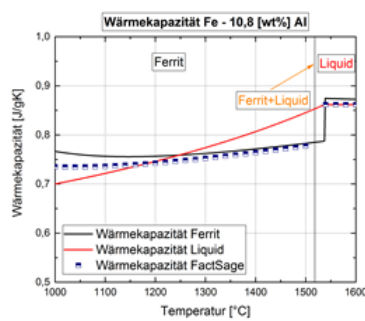
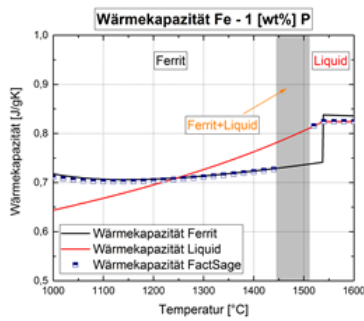
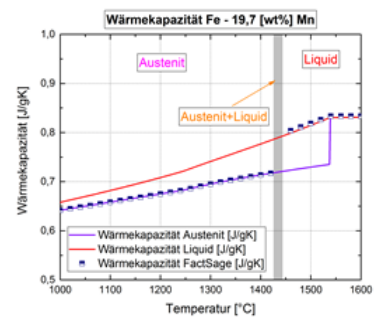
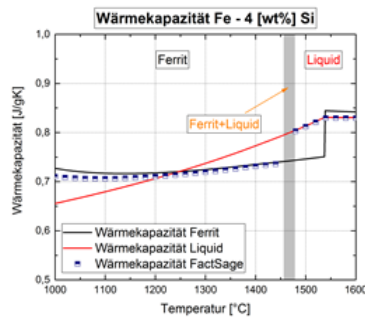
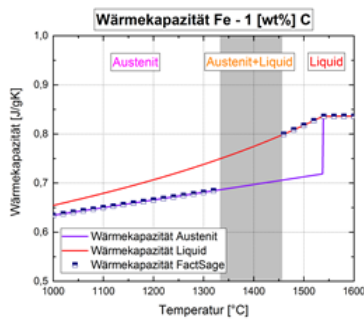


C.4 Ausgewählte CCT Diagramme



D Daten und Überprüfung der Wärmekapazität

D.1 Validierung mit FactSage (FSStel2015)



D.2 Koeffizienten zu Wärmekapazitätsberechnung nach FactSage (FSStel2015) in J/gK

	Kristall- struktur	T _{min} [K]	T _{max} [K]	T ⁰ *10 ⁻¹	T ¹ *10 ⁻⁵	T ⁻² *10 ³	T ² *10 ⁻¹⁰	T ³ *10 ⁻¹¹	T ⁶ *10 ⁻²¹	T ³ *10 ⁸	T ⁴ *10 ¹⁰	T ¹⁰ *10 ³¹
Fe	bcc_a2	298	1811	4,2106366	15,749002	-2,7704718	63,311201					
		1811	1812	8,2370848								
	fcc_a1	298	1811	4,4165637	13,456961	-2,7704718	63,311201					
		1811	1812	8,2370848								
	liquid	298	1811	4,2106366	15,749020	-2,7704718	63,311201		2,7640167			
		1811	6000	8,2370848								
C	graphite	298	6000	20,231960	7,8646540	-426,71951				1,3203227	-1,198931	
Fe₃C	cementite	298	9999	6,6833751								
Si	diamond_a4	298	1687	8,1293739	13,622004	-12,580655	7,5882573					
		1687	3600	9,6832885								1,3470727
Mn	fcc_a1	298	1519	4,4627908	21,842787	-2,5337633						
		1519	2000	8,7371147								-63,266976
P	white_p	298	317	57,605531	-1877,1243	-105,42439	201504,75					
		317	1000	9,2767324	-11,078209	-11,168550	442,22591					
		1000	3000	8,4994519								
S	fc_orthoromb.	298	368	3,4327148	165,47014							-14509,901
		368	1300	5,5954589	67,956495	-2,4893186						-2624,4653
Al	fcc_a1	298	700	9,0310632	13,970011	-5,4920515	1951,6990					
		700	933	14,300308	-137,36787	-5,4920515	12818,158					
		933	2900	11,766635								
Cr	bcc_a2	298	2180	5,1750035	-7,2865080	-5,3561709	1704,6009					
Ni	fcc_a1	298	1728	3,7646482	16,494870							
		1728	3000	7,3432447								
Mo	bcc_a2	298	2896	2,4556211	7,1767320	-1,3716549	-354,07441	1,6372697				
Cu	fcc_a1	298	1358	3,7944783	8,3619425	-1,6516539	-122,01209					
		1358	3200	4,9381550								

D.3 Daten zur Berechnung des magnetischen Beitrags der Wärmekapazität aus FactSage (FSStel2015)

	Fe(α)	Fe(γ)	Mn	Cr	Ni
T* [K]	1043	67	540	311,5	633
β [-]	2,22	2,22	0,62	0,008	0,52
ρ [-]	0,40	0,28	0,28	0,40	0,28

E Daten und Simulationen SSCT Versuche

E.1 Chemische Zusammensetzung in wt%

Versuch	C	Si	Mn	P	S	Al	Cr	Ni	Mo	Cu	C _p
CSRL2	0,030	0,359	1,610	0,006	0,004	0,046	0,166	0,020	0,019	0,023	0,049
CSRL3	0,030	0,322	1,540	0,006	0,004	0,094	0,161	0,020	0,019	0,021	0,046
CSRM2	0,030	0,329	1,600	0,006	0,004	0,076	0,175	0,168	0,019	0,162	0,067
CSRP1	0,030	0,321	1,540	0,006	0,000	0,026	0,180	0,036	0,012	0,033	0,051
CSRP2	0,030	0,361	1,540	0,006	0,000	0,014	0,178	0,043	0,013	0,038	0,052
PJ01	0,060	0,260	1,270	0,004	0,005						0,076
PJ02	0,050	0,290	1,280	0,004	0,005						0,066
PJ03	0,050	0,300	1,290	0,004	0,005						0,066
CSRI1	0,048	0,330	1,650	0,007	0,004	0,200	0,004	0,011	0,200		0,053
CSRI2	0,050	0,316	1,560	0,006	0,004	0,200	0,004	0,009	0,190		0,054
CSRS1	0,050	0,356	1,600	0,006	0,000	0,017	0,188	0,020	0,015	0,035	0,071
PAL03	0,039	0,042	0,267	0,002	0,005						0,043
PAL04	0,037	0,051	0,291	0,002	0,008						0,041
PAL05	0,033	0,054	0,284	0,002	0,012						0,037
PAQ02	0,025	0,014	0,083	0,011	0,009						0,026
PAQ03	0,021	0,014	0,126	0,012	0,009						0,023
PAQ05	0,024	0,014	0,168	0,010	0,013						0,027
PAQ06	0,023	0,014	0,179	0,011	0,010						0,026
PAS02	0,050	0,031	0,162	0,010	0,008						0,052
PAT02	0,035	0,016	0,125	0,010	0,009						0,037
PAT03	0,033	0,017	0,211	0,009	0,013						0,036
PAT05	0,034	0,016	0,177	0,009	0,008						0,037
PAT06	0,031	0,016	0,194	0,009	0,010						0,034

E.2 Versuchsparameter

Versuch	Besch.	T _Ü	t ₀	ε'	ε	t _{ges}	SO	SM	SU
	[mm]	[°C]	[s]	[1/s]	[%]	[s]	[mm]	[mm]	[mm]
CSRL2	0,4	24,6	18	0,012	3	24,50	11,38	10,62	10,81
CSRL3	0,4	27,6	18	0,012	4	25,33	11,16	11,46	11,24
CSRM2	0,4	29,5	18	0,012	2	23,67	11,77	10,14	10,31
CSRP1	0,4	26,9	18	0,003	3	32,00	13,30	12,20	12,65
CSRP2	0,4	23,4	18	0,002	2	32,00	13,40	13,01	12,61
PJ01	0,4	33,4	16	0,006	2	23,33	9,87	9,64	10,61
PJ02	0,4	26,0	16	0,006	3	25,00	10,60	10,18	11,09
PJ03	0,4	26,2	16	0,012	3	22,50	10,76	9,86	10,17
CSRI1	0,4	24,4	18	0,012	1	22,83	11,05	10,29	11,28
CSRI2	0,4	27,8	18	0,012	2	23,67	10,14	8,74	9,55
CSRS1	0,4	27,1	18	0,003	3	32,00	12,00	11,00	12,00
PAL03	0,0	39,0	18	0,002	2	32,00	12,06	14,59	13,05
PAL04	0,0	39,0	18	0,002	2	32,00	12,52	15,36	12,05
PAL05	0,0	39,0	18	0,002	2	32,00	12,17	12,73	12,33
PAQ02	0,0	37,0	18	0,002	2	32,00	12,23	15,11	13,78
PAQ03	0,0	42,0	18	0,002	2	32,00	11,06	14,83	12,02
PAQ05	0,0	43,0	18	0,002	2	32,00	11,66	14,95	12,26
PAQ06	0,0	33,0	18	0,002	2	32,00	11,71	14,64	13,48
PAS02	0,0	35,0	18	0,002	2	32,00	12,83	15,21	12,85
PAT02	0,0	40,0	18	0,006	2	25,33	12,03	13,08	11,13
PAT03	0,0	54,0	18	0,006	2	25,33	10,18	11,36	11,03
PAT05	0,0	34,0	18	0,012	2	23,67	9,09	11,62	10,30
PAT06	0,0	39,0	18	0,012	2	23,67	11,19	13,42	10,40

E.3 Berechnungsparameter

Versuch	T'	T _Ü	ΔSH	HF	S	S (VB)	Zeit (VB)	S (VE)	Zeit (VE)
	[K/s]	[°C]	[°C]			[mm]	[mm]	[mm]	[mm]
CSRL2		20	-4,6	MIN	MEAN	7,16	20	7,81	22,50
CSRL3		30	2,4	MAX	MEAN	6,87	20	7,58	23,33
CSRM2		25	-4,5	MIN	MEAN	6,8	20	7,57	21,67
CSRP1		25	-1,9	MIN	MEAN	8	20	8,86	30,00
CSRP2		25	1,6	MAX	MEAN	8,4	20	9,47	30,00
PJ01		30	-3,4	MIN	MEAN	5,75	18	6,34	21,33
PJ02		30	4,0	MIN	MEAN	6,2	18	7,02	23,00
PJ03		25	-1,2	MIN	MEAN	6,25	18	7,04	20,50
CSRI1		25	0,6	MAX	MEAN	7,15	20	8,00	20,83
CSRI2		35	7,2	MIN	MEAN	5,93	20	6,72	21,67
CSRS1		35	7,9	MIN	MEAN	6,76	20	7,52	30,00
PAL03	10	35	-4,0	72Prozent	SO	8,17	20	9,00	30,00
PAL04		35	-4,0	75Prozent	SO	9,1	20	10,10	30,00
PAL05		35	-4,0	72Prozent	SO	7,5	20	8,40	30,00
PAQ02		40	3,0	75Prozent	SO	8,26	20	9,50	30,00
PAQ03		50	8,0	72Prozent	SO	7,6	20	8,60	30,00
PAQ05		45	2,0	75Prozent	SO	7,4	20	8,57	30,00
PAQ06		35	2,0	72Prozent	SO	7,7	20	8,90	30,00
PAS02		35	0,0	75Prozent	SO	8,2	20	9,50	30,00
PAT02		45	5,0	MIN	SO	8,7	20	9,65	23,33
PAT03		55	1,0	75Percent	SO	6,8	20	7,76	23,33
PAT05		40	6,0	0.675MAX	SU	7,1	20	8,30	21,67
PAT06		40	1,0	0.755MAX	SO	8,4	20	9,30	21,67

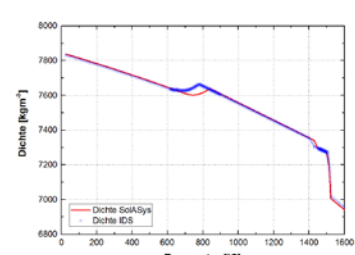
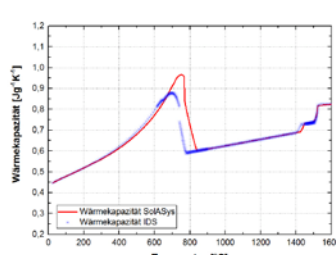
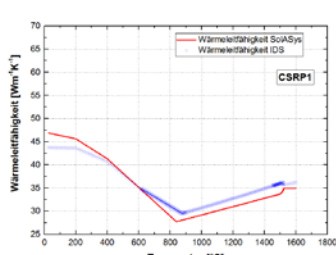
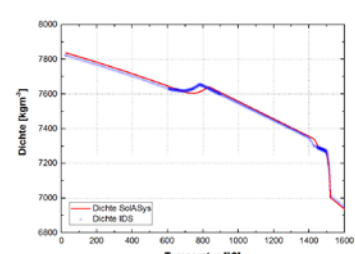
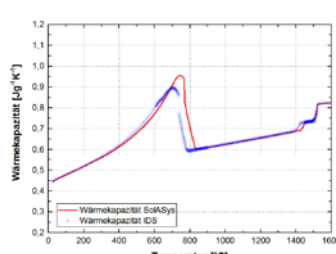
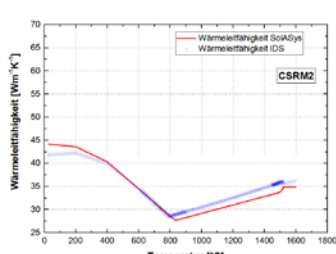
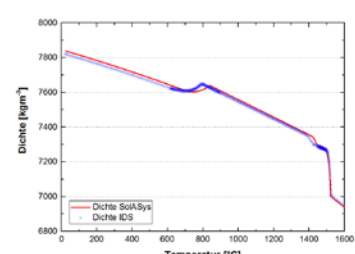
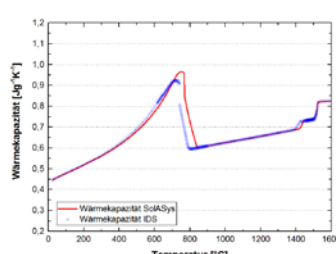
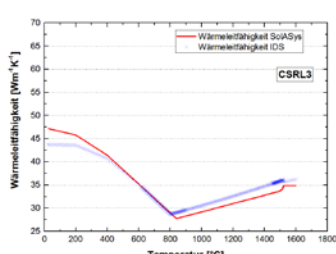
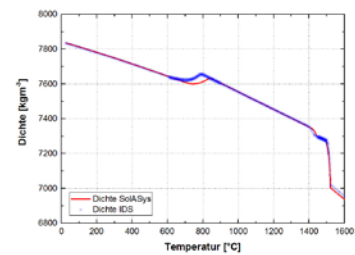
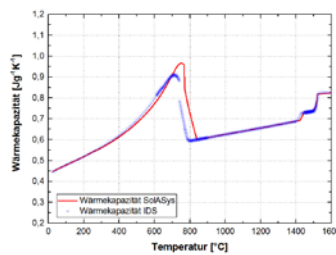
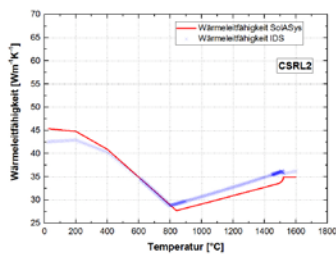
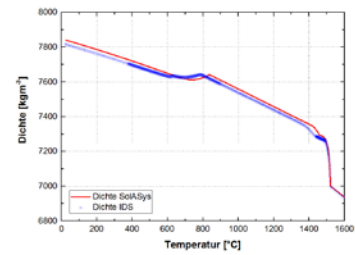
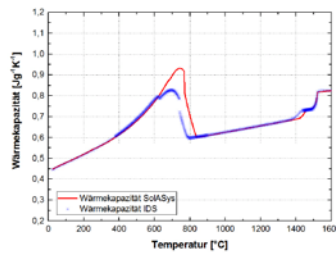
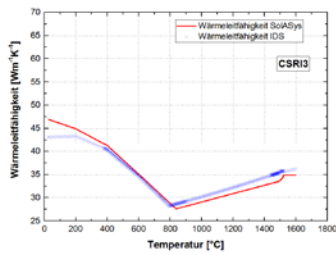
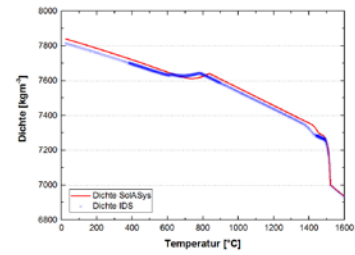
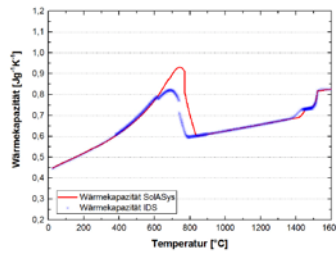
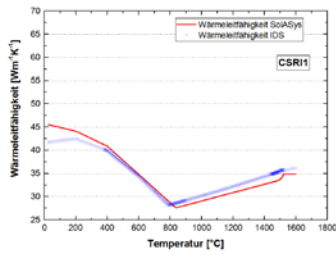
E.4 Ermittelte Solidustemperaturen

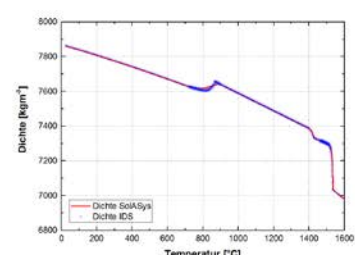
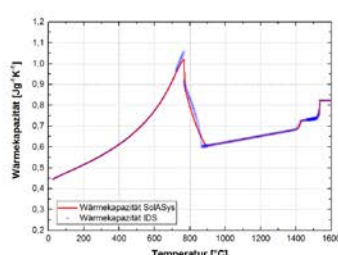
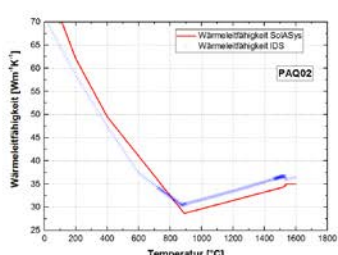
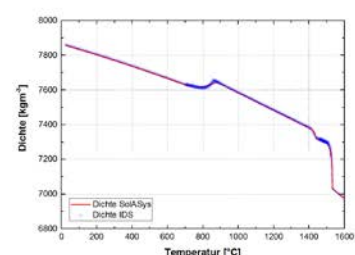
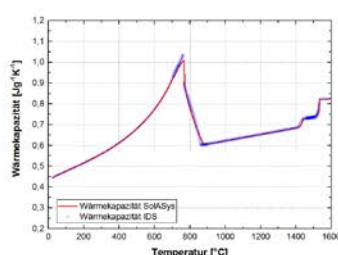
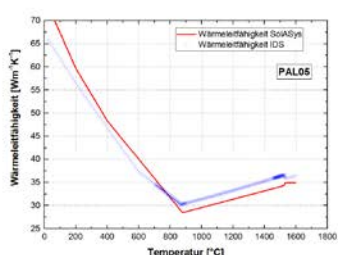
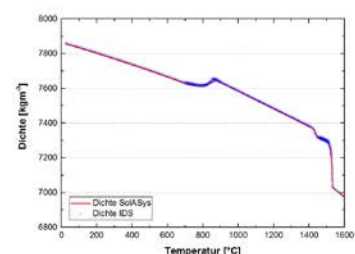
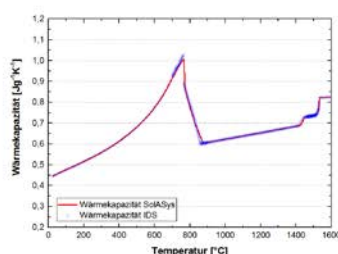
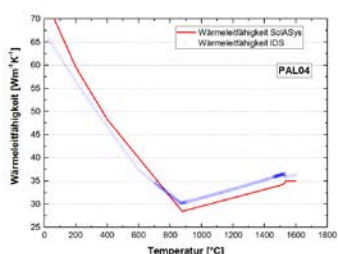
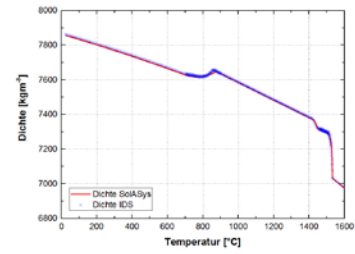
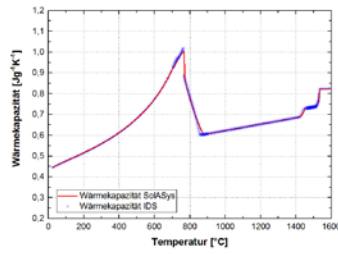
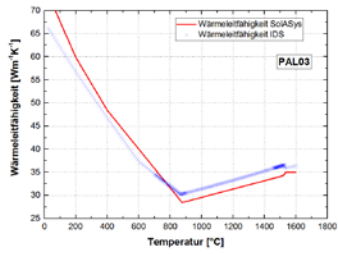
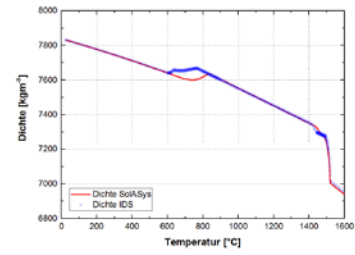
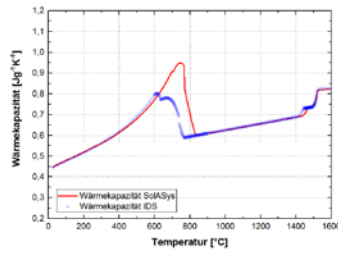
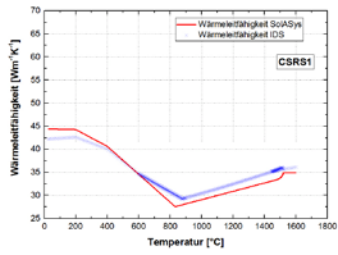
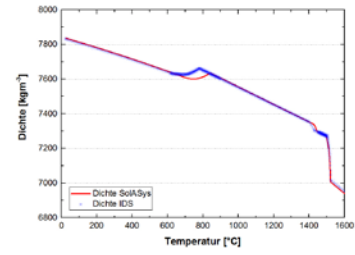
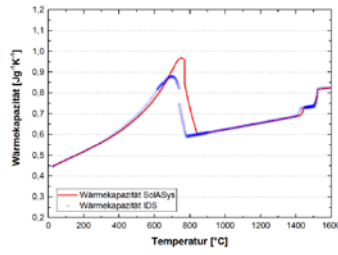
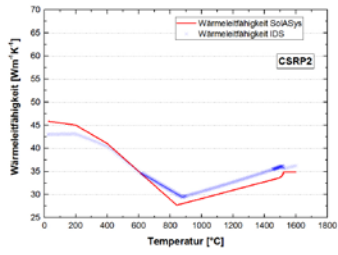
Versuch	T _s (VB) [°C]	T _s (VE) [°C]	T _s (SSCT) [°C]	T _s (FactSage) [°C]	T _s (Lever) [°C]	T _s (SolASys,G) [°C]	T _s (SolASys) [°C]
CSRL2	1494	1492	1493,00	1496	1497	1497	1490
CSRL3	1485	1485	1485,00	1498	1498	1498	1492
CSRM2	1488	1494	1491,00	1495	1495	1495	1488
CSRP1		1493	1493,00	1501	1501	1501	1495
CSRP2		1492	1492,00	1500	1500	1500	1494
PJ01	1485	1483	1484,00	1484	1484	1484	1480
PJ02	1490	1485	1487,50	1489	1489	1489	1485
PJ03	1490	1492	1491,00	1489	1489	1489	1484
CSRI1	1482	1493	1487,50	1485	1487	1487	1482
CSRI2	1482	1487	1484,50	1485	1487	1487	1482
CSRS1	1491	1474	1482,50	1488	1489	1489	1483
PAL03		1505	1505,00	1510	1510	1510	1508
PAL04		1510	1510,00	1508	1507	1507	1505
PAL05		1498	1498,00	1507	1506	1506	1503
PAQ02		1510	1510,00	1516	1515	1515	1512
PAQ03		1511	1511,00	1517	1517	1517	1514
PAQ05	1508	1497	1502,50	1512	1511	1511	1508
PAQ06		1505	1505,00	1515	1515	1515	1511
PAS027		1500	1500,00	1502	1501	1501	1499
PAT02	1502	1500	1501,00	1510	1509	1509	1507
PAT03	1503	1506	1504,50	1507	1506	1506	1503
PAT05	1510	1500	1505,00	1511	1510	1510	1508
PAT06	1507	1515	1511,00	1511	1510	1510	1507

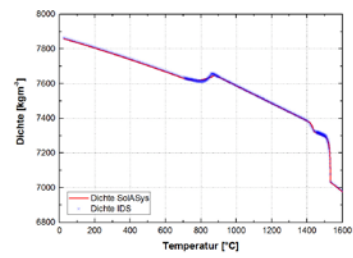
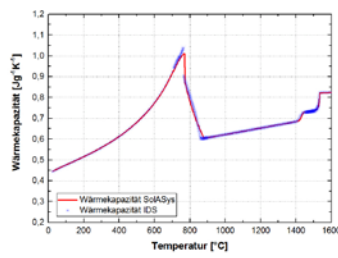
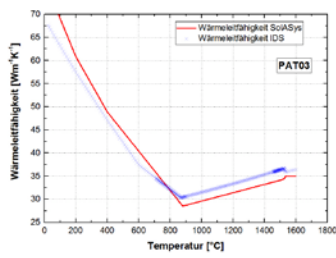
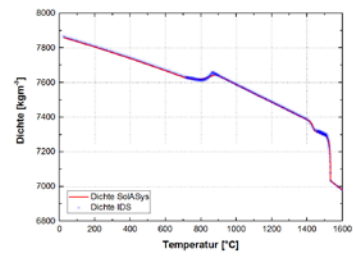
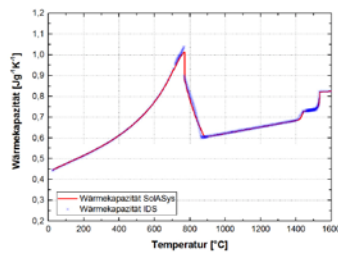
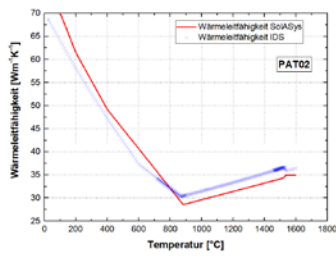
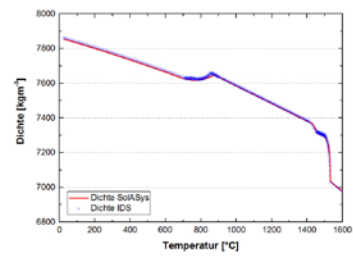
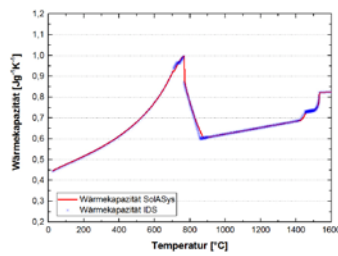
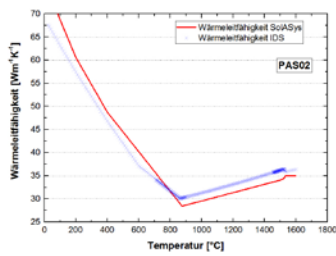
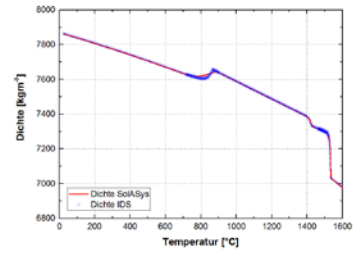
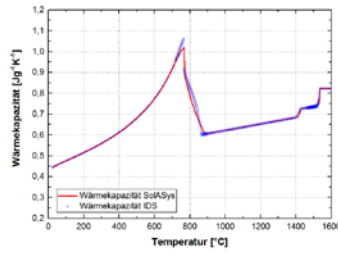
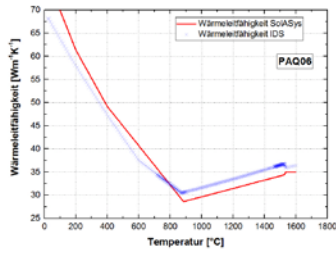
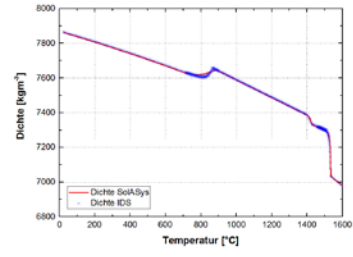
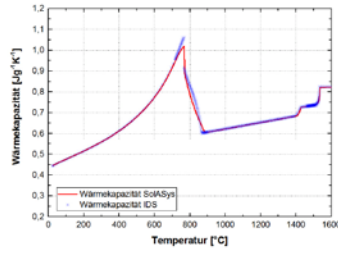
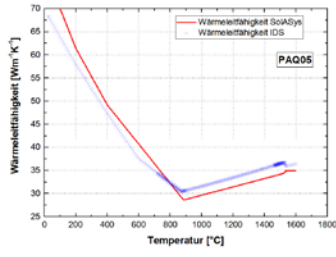
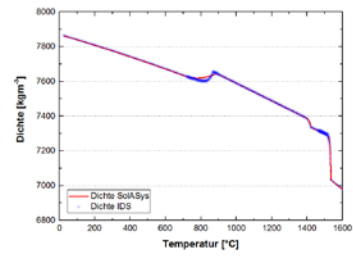
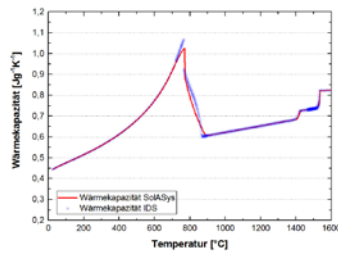
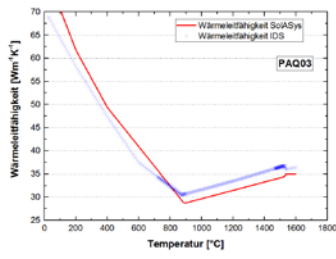
E.5 Metallographische Ergebnisse

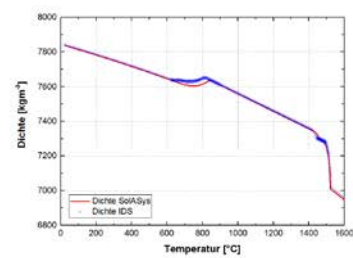
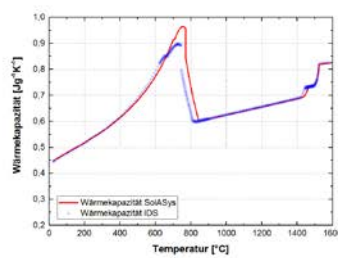
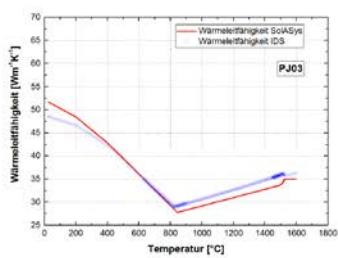
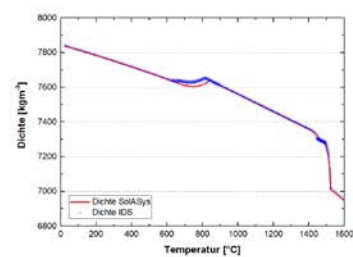
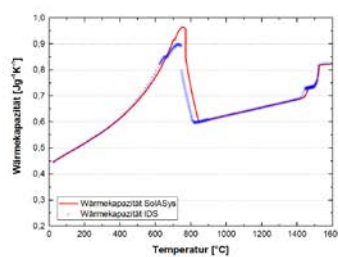
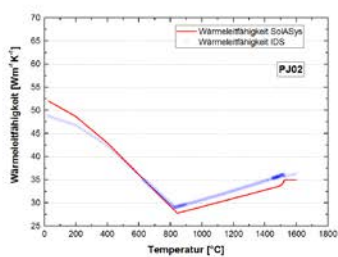
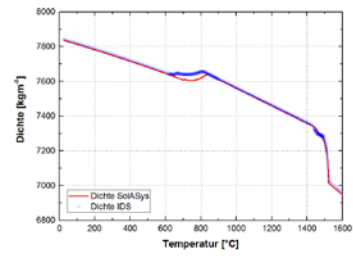
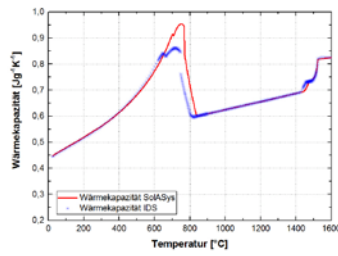
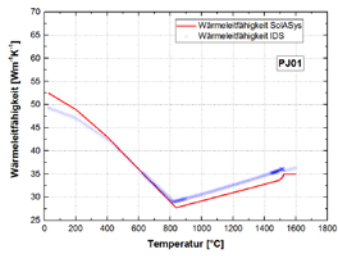
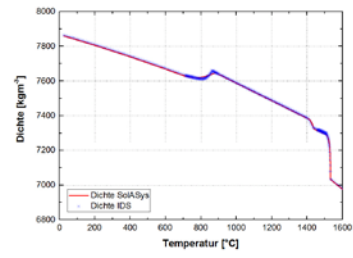
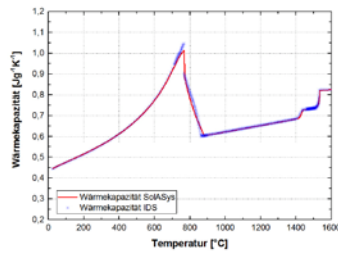
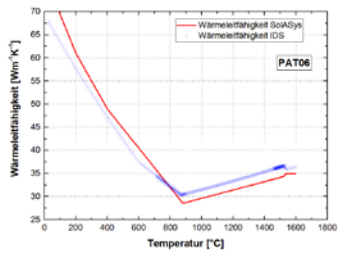
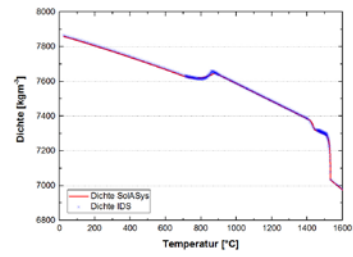
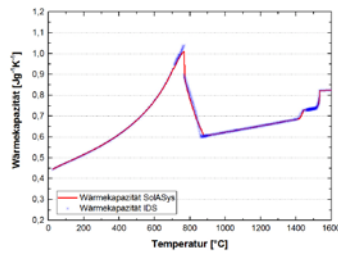
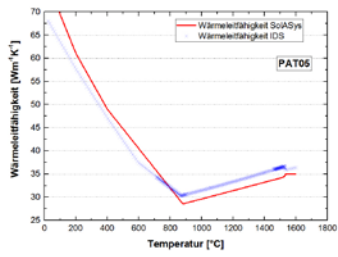
Versuch	NHTS	ϵ_{akk}	HTSL (calc)	HTSL (meas)	HTSL (Stdabw. meas)
	[-]	[%]	[μm]	[μm]	[μm]
CSRL2	5	2	826	673	199
CSRL3	9	2	912	709	202
CSRM2	4	2	577	761	206
CSRP1	7			865	266
CSRP2	1	0		1080	495
PJ01	5	1	846	688	243
PJ02	8	1	1220	862	419
PJ03	8	2	572	802	249
CSRI1	5	1	441	868	300
CSRI2	7	2	615	785	306
CSRS1	4	1	1080	765	268
PAL03	2	1		829	246
PAL04	3	1		1004	316
PAL05	4	1	721	826	317
PAQ02	4	1		1277	499
PAQ03	6			1015	423
PAQ05	5	1	802	1133	455
PAQ06	4	1	889	1186	465
PAS02	5	1	775	1266	506
PAT02	7	1	815	836	309
PAT03	7	2	885	967	442
PAT05	6	2	647	1192	332
PAT06	9	2	662	840	268

E.6 Thermophysikalische Eigenschaften

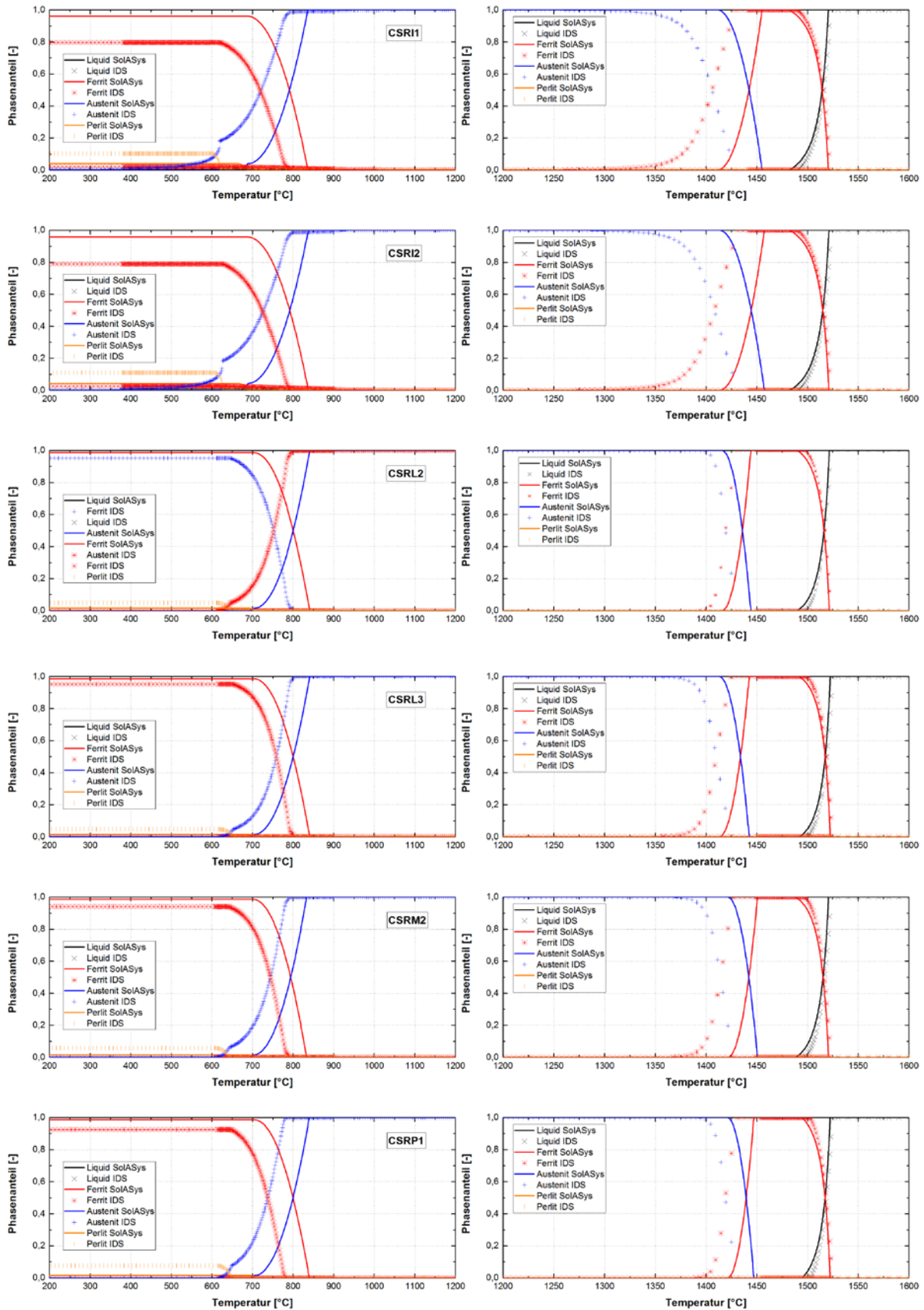


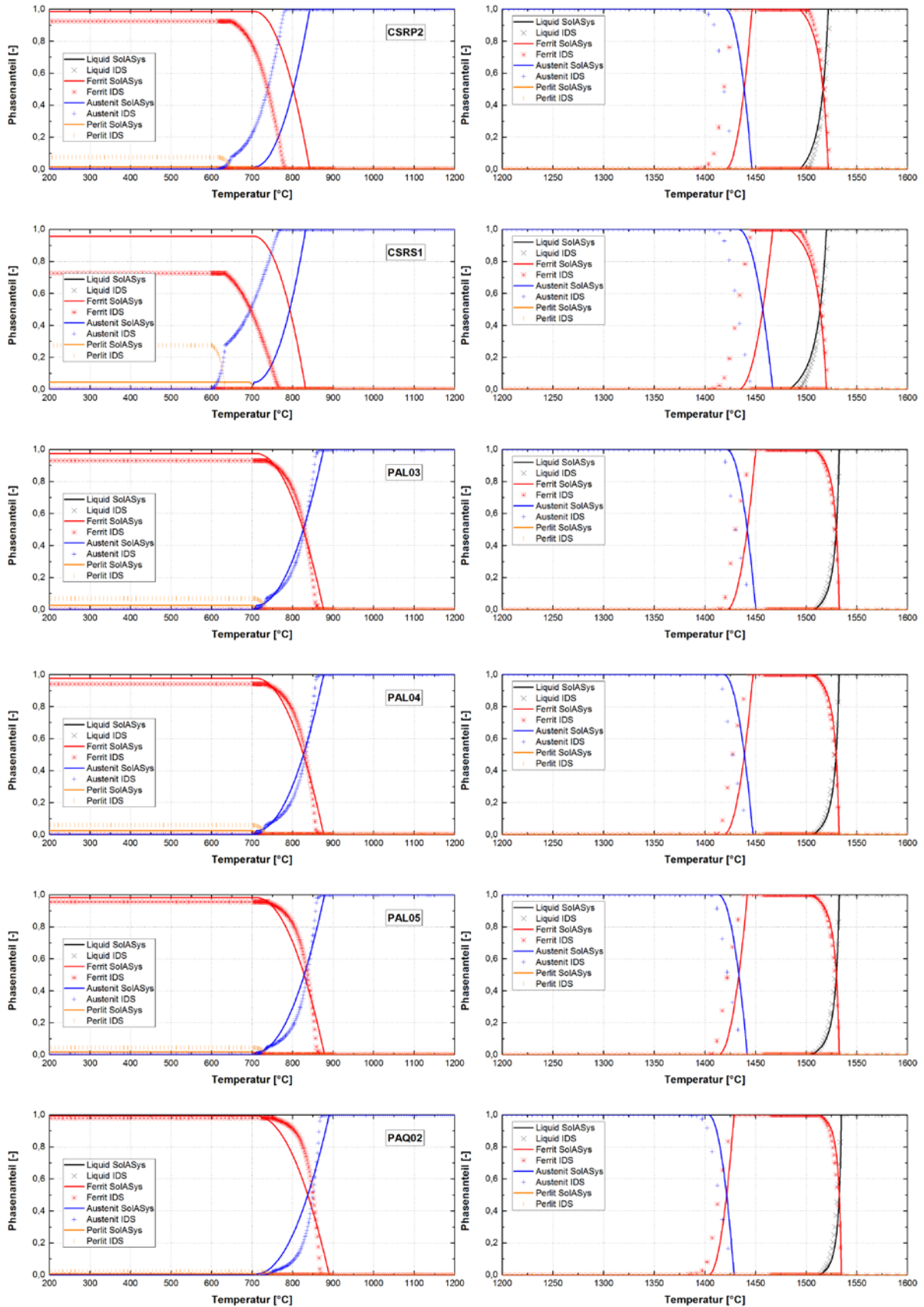


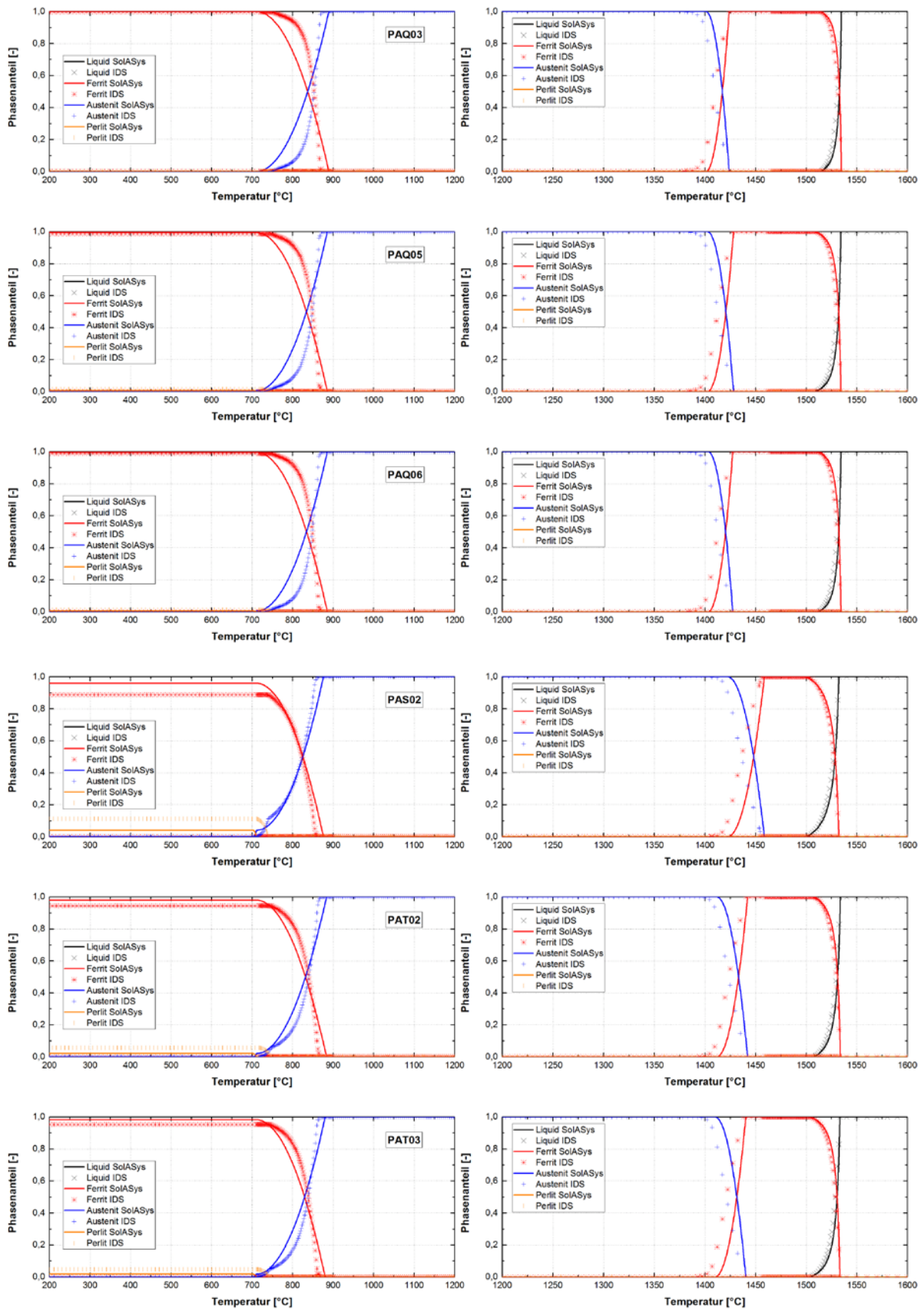


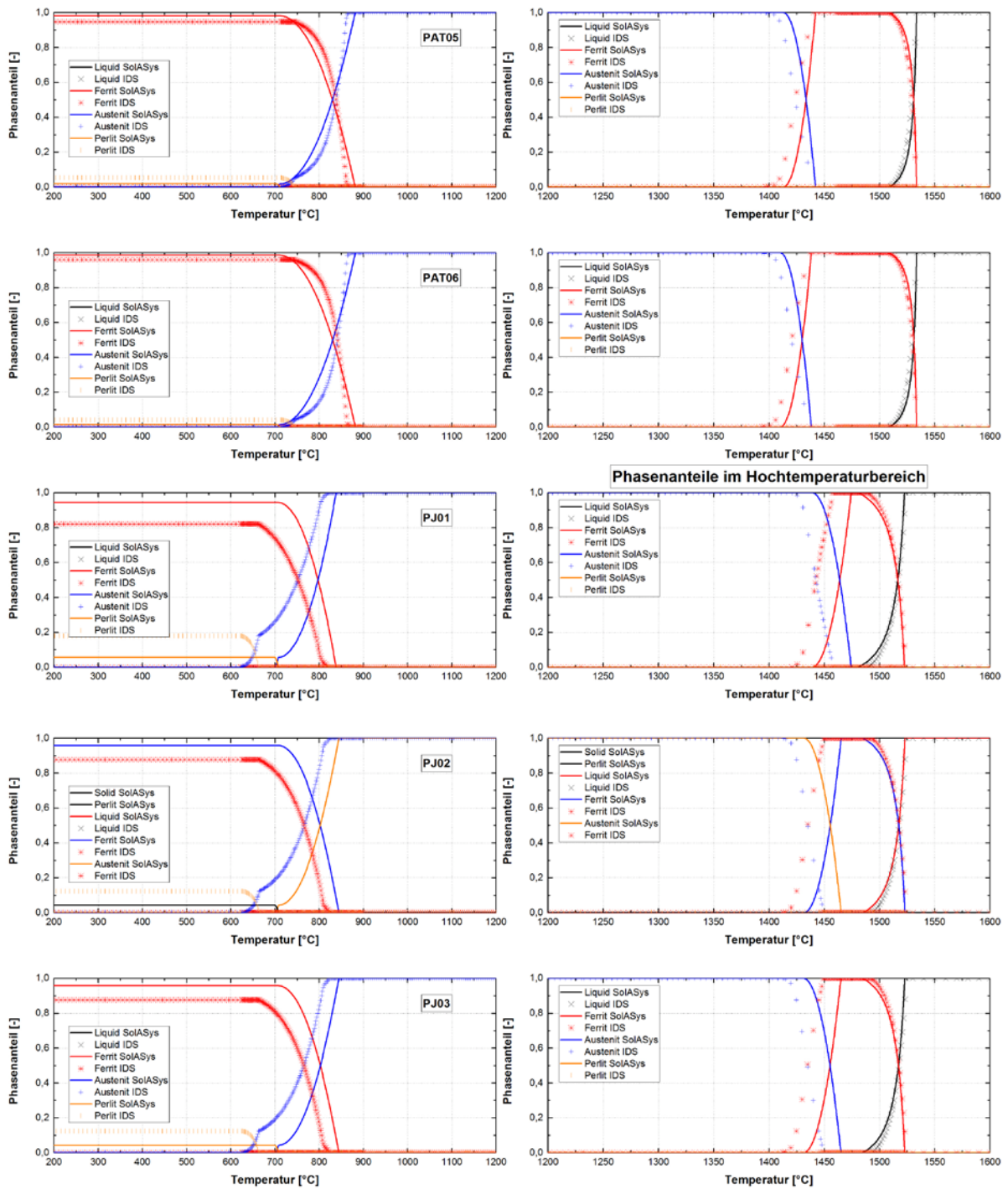


E.7 Berechnete Phasenanteile









E.8 Simulationsergebnisse

