

COMPUTERUNTERSTÜTZTE THERMOCHEMIE

Bei der Herstellung und beim Einsatz von Feuerfestmaterialien laufen komplexe chemische Reaktionen ab. Diese beeinflussen stark die Materialeigenschaften, insbesondere die Korrosionsbeständigkeit und die Festigkeit des Werkstoffes.

Thermochemische Berechnungen mit der Computer-Software FactSage[®] ermöglichen die Voraussage von Gleichgewichtszuständen unter vorgegebenen Einsatzbedingungen. Damit können Aussagen zu möglichen Reaktionsabläufen auch in experimentell schwer zugänglichen Stoffsystemen und in Systemen mit komplexer Zusammensetzung getroffen werden.

Ausgangspunkt der Berechnungen ist die Festlegung der verschiedenen Parameter: Art und Menge der Komponenten, z.B. der Gasatmosphäre (in Partialdrücken) sowie der Temperatur. Durch Variation eines oder mehrerer Parameter können Tendenzen bezüglich der Stabilität einzelner Phasen sowie die Temperatur-, Druck und Konzentrations-Grenzen für den jeweils dominierenden Reaktionsmechanismus vorhergesagt werden.

Die computergestützte Thermochemie ist somit ein wertvolles Werkzeug zur Festlegung von Herstellungsbedingungen, bei der Prognose einsatzbedingter Gefügeveränderungen sowie in der Schadensanalyse.

Beispiel 1:

Das Diagramm in **Bild 1** zeigt die Phasenanteile sowie Art und Menge der gasförmigen Komponenten, die sich in Abhängigkeit von der Temperatur in einem typischen Al-haltigen MgO-C-Stein einstellen. Metallisches Aluminium ist in Gegenwart von Kohlenstoff nicht stabil, so dass bereits bei niedrigen Temperaturen Aluminiumcarbid (Al_4C_3) entsteht. Bei etwa 1250°C zersetzt sich diese Phase und es entsteht MgO- Al_2O_3 -Spinell.

Bei einem Gesamtdruck von 0,1 bar ist ab 1550°C mit der Zersetzung von MgO unter Entstehung von Mg-Dampf und CO-Gas zu rechnen. Die berechneten Ergebnisse stimmen gut mit der betrieblichen Praxis überein.

Beispiel 2:

Im Diagramm in **Bild 2** ist die Stabilität von Al_2O_3 und MgO gegenüber CaO/SiO₂ (C:S-Verhältnis = 1,5) dargestellt. Es zeigt sich, dass Al_2O_3 im Vergleich zu MgO eine höhere Sättigungslöslichkeit und damit eine geringere Stabilität gegenüber CaO/SiO₂ aufweist.

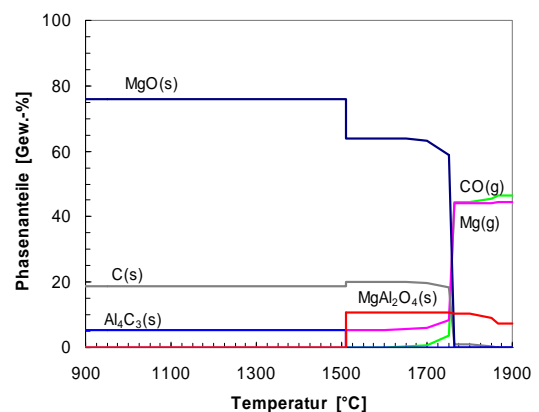


Bild 1: Phasengleichgewicht in einem typischen, Al-haltigen MgO-C-Stein.

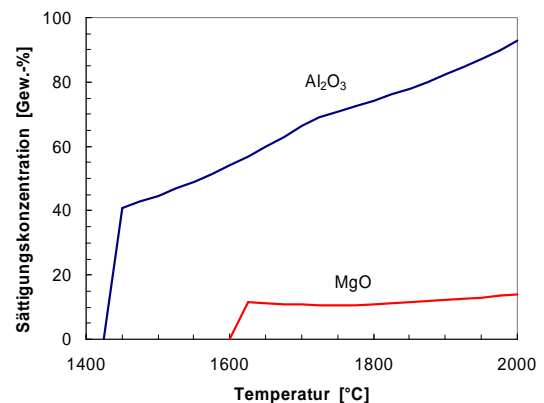


Bild 2: Stabilität von Al_2O_3 und MgO gegenüber CaO-SiO₂-Schlacke (C/S = 1,5).