

Sämtliche Untersuchungen in unserem Haus werden von Experten durchgeführt. Die Mitarbeiter sind Spezialisten aus den Bereichen Physik, Chemie und Mineralogie sowie Werkstoffprüfung und -technologie.

**weitere Prüfverfahren:**

- Gaskorrosionstests für reduzierende Medien
- Drehtrommeltest
- Gaspermeabilität
- Induktionsschmelzanlagen
- Keil-Spalt-Prüfverfahren
- Quantitativer Oxidationstest
- Reibverschleiß
- Strahlverschleiß
- Wärmeleitfähigkeit

**[www.difk.de](http://www.difk.de)**

Wir sind das zentrale Institut mit mehr als 50 Jahren Erfahrung auf allen Geieten der Feuerfest-Technologie. Wir fühlen uns absolut der Neutralität verpflichtet und sind damit Partner aller im Bereich der Feuerfest-Technologie arbeitende Unternehmen.

**Kontakt:**

Rheinstr. 58  
56203 Höhr-Grenzhausen

Tel.: +49 2624 9433200

Fax: +49 2624 9433205

Mail: [info@difk.de](mailto:info@difk.de)

**[www.difk.de](http://www.difk.de)**

# Computer- unterstützte Thermochemie

**[www.difk.de](http://www.difk.de)**

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.

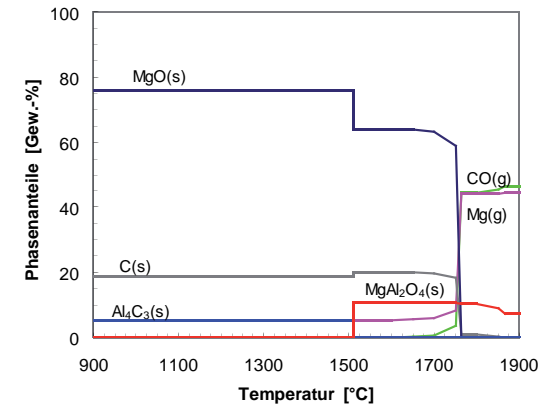
### Beispiel 1:

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  $1250^\circ C$  zersetzt sich diese Phase und es entsteht MgO- $Al_2O_3$ -Spinell. Bei einem Gesamtdruck von 0,1 bar ist ab  $1550^\circ C$  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.

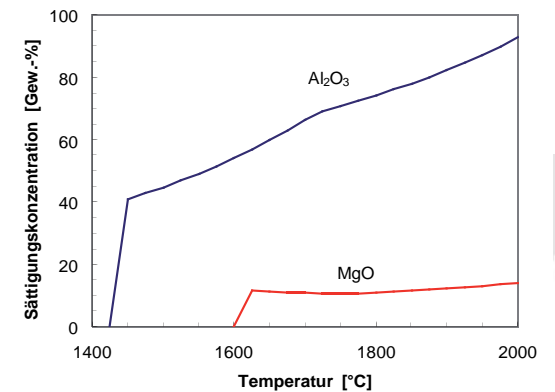
### Beispiel 2:

Im Diagramm in Bild 2 ist die Stabilität von  $Al_2O_3$  und MgO gegenüber CaO/SiO<sub>2</sub> (C:S-Verhältnis = 1,5) dargestellt. Es zeigt sich, dass  $Al_2O_3$  im Vergleich zu MgO eine höhere Sättigungslöslich-

keit und damit eine geringere Stabilität gegenüber CaO/SiO<sub>2</sub> aufweist.



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



**Bild 2:** Stabilität von  $Al_2O_3$  und MgO gegenüber CaO-SiO<sub>2</sub>-Schlacke (C/S = 1,5).