

## Diffusion

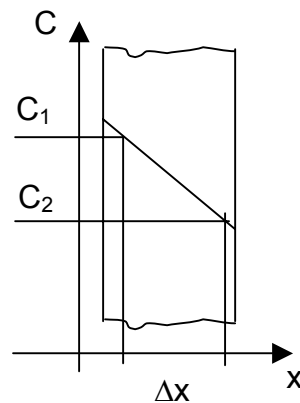
---

Durch die Wand eines zylindrischen Stahlbehälters fließt ein stationärer Diffusionsstrom (Dichte  $j$ ) von Kohlenstoff. Im Abstand  $\Delta x$  liegen die Konzentrationen  $C_1$  und  $C_2$  vor.

Gegeben:

Durchmesser des Behälters	$D =$	2	m
Wandstärke des Behälters	$d =$	8	mm
Diffusionsstromdichte	$j =$	$2.1 \cdot 10^{-9}$	kg/(m <sup>2</sup> ·s)
Konstante	$D_0 =$	$3.39 \cdot 10^{-4}$	m <sup>2</sup> /s
Aktivierungsenergie	$Q =$	133	kJ/mol
Gaskonstante	$R =$	8.314	J/(mol·K)
	$\Delta x =$	5	mm
	$C_1 =$	1.3	kg/m <sup>3</sup>
	$C_2 =$	0.9	kg/m <sup>3</sup>

- Wie gross ist die Diffusionskonstante?
- Wie gross ist die herrschende Temperatur?



## Gleichgewicht und Unterkühlung

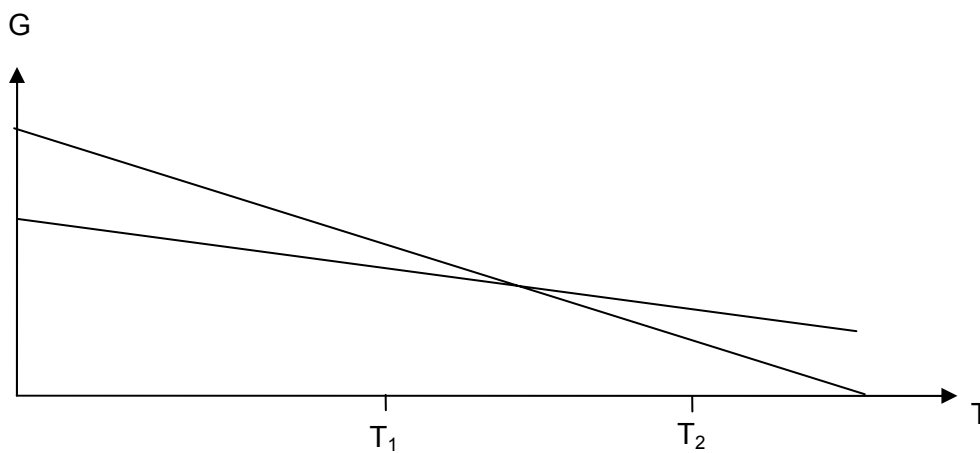
**5 Punkte**

Gegeben sind die idealisierten Graphen „freie Enthalpie“-„Temperatur“ von zwei verschiedenen Aggregatzuständen eines reinen Stoffes sowie zwei Gleichgewichtstemperaturen  $T_1$  und  $T_2$ .

- Fügen Sie den fehlenden dritten Graphen ein und beschriften Sie alle drei.
- Was bedeuten  $T_1$  und  $T_2$ ?
- Berechnen Sie genähert die Differenz der betreffenden freien Enthalpien bei einer Unterkühlung  $\Delta T$  unter  $T_1$ . Was kann man bezüglich stabiler Phase daraus schließen?

Gegeben

Schmelztemperatur	$T_{S-Fk}$	933	K
Schmelzentropie	$\Delta S_{S-Fk}$	12.11	J/molK
Unterkühlung	$\Delta T =$	50	K



**Aufkohlen****8 Punkte**

Ein Stahl wird in einer CO-haltigen Atmosphäre aufgekocht. Die anfängliche C-Konzentration  $c_0$  im Stahl beträgt 0.2 %, die Konzentration in der Oberfläche des Stahles während des Aufkohlvorganges ( $C_a$ ) ist 1.0 %. Die Aufkohlungstemperatur beträgt 925°C.

Die aufgekohlte Schicht soll in einer Tiefe von 1.0 mm eine C-Konzentration von 0.4 % aufweisen.

- Wieviele Stunden dauert der Prozess?  
(Interpolation der Tabellenwerte ist verlangt)

Angaben:

$R = 8.314 \text{ J/molK}$

Für Diffusion von C in Austenit:

$D_0 = 2.2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

$Q = 146 \text{ kJ/mol}$

$\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}$	$\text{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}\right)$
$y$	$\text{erf}(y)$
0	0
0,10	0,1125
0,20	0,2227
0,30	0,3286
0,40	0,4284
0,50	0,5205
0,60	0,6039
0,70	0,6778
0,80	0,7421
	0,75
0,90	0,7970
1,00	0,8427
1,50	0,9661
2,00	0,9953

## Erstarrung

**10 Punkte**

---

Eine Aluminiumschmelze mit 5% Cu wird einmal ohne und einmal mit Zugabe von Keimbildungspartikeln abgekühlt und zur Erstarrung gebracht.

Welchen Einfluss hat die Massnahme

- a) auf die Korngrösse?
- b) auf die Abkühlungskurve, die im Gleichgewichtsfall Knickpunkte aufweist?
- c) Wie nennt man die Keimbildung im einen und anderen Fall?
- d) Erklären Sie den Einfluss der Partikel.

Gewisse Turbinenschaufeln werden als Einkristalle aus Ni - Basislegierungen hergestellt.

- e) Beschreiben Sie den Herstellprozess.
- f) Wann ist ein feinkörniges Gefüge erwünscht und wann ein grobkörniges und warum?

## Diffusion

Durch die Wand eines zylindrischen Stahlbehälters fliesst ein stationärer Diffusionsstrom (Dichte  $j$ ) von Kohlenstoff. Im Abstand  $\Delta x$  liegen die Konzentrationen  $C_1$  und  $C_2$  vor.

Gegeben:

Durchmesser des Behälters	$D_B =$	2	m
Wandstärke des Behälters	$d =$	8	mm
Diffusionsstromdichte	$j =$	$2.1 \cdot 10^{-9}$	kg/(m <sup>2</sup> ·s)
Konstante	$D_0 =$	$3.39 \cdot 10^{-4}$	m <sup>2</sup> /s
Aktivierungsenergie	$Q =$	133	kJ/mol
Gaskonstante	$R =$	8.314	J/(mol·K)
	$\Delta x =$	5	mm
	$C_1 =$	1.3	kg/m <sup>3</sup>
	$C_2 =$	0.9	kg/m <sup>3</sup>

- Wie gross ist der Diffusionskoeffizient?
- Wie gross ist die herrschende Temperatur?

Lösung:

- Der Behälterdurchmesser ist gross gegenüber der Wandstärke, Behandlung als ebenes Problem.

Das erste Fick'sche Gesetz gibt den stationären Diffusionsstrom als Funktion von Konzentrationsgefälle und Diffusionskoeffizient  $D$  an:

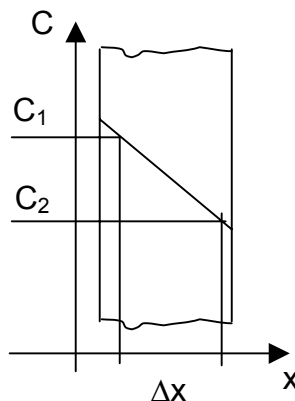
$$j = -D \frac{\Delta C}{\Delta x}, \text{ auflösen nach } D:$$

$$D = -j \frac{\Delta x}{\Delta C} = -2.1 \cdot 10^{-9} \frac{\text{kg}}{\text{m}^2 \cdot \text{s}} \frac{0.005 \text{ m}}{0.9 - 1.3 \text{ kg/m}^3} = 2.6 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2/\text{s}$$

Die Arrheniusfunktion  $D = D_0 \cdot \exp(-Q/RT)$

gibt den Zusammenhang zwischen Diffusionskoeffizient und absoluter Temperatur. Aufgelöst nach  $T$ :

$$T = -\frac{Q}{R} \cdot \frac{1}{\ln \frac{D}{D_0}} = -\frac{133000 \text{ J/mol}}{8.314 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}} \cdot \frac{1}{\ln \frac{2.6 \cdot 10^{-11}}{3.39 \cdot 10^{-4}}} = 976 \text{ K}$$



# Gleichgewicht und Unterkühlung

**5 Punkte**

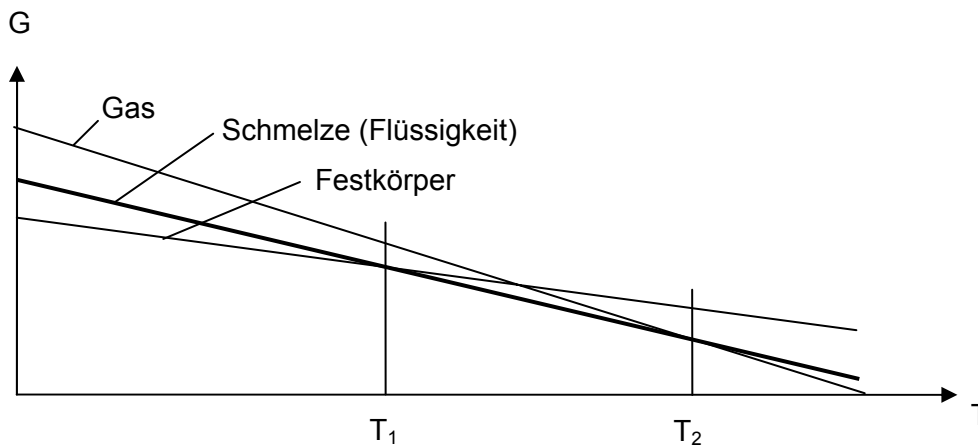
Gegeben sind die idealisierten Graphen „freie Enthalpie“-„Temperatur“ von zwei verschiedenen Aggregatzuständen eines reinen Stoffes sowie zwei Gleichgewichtstemperaturen  $T_1$  und  $T_2$ .

- a) Fügen Sie den fehlenden dritten Graphen ein und beschriften Sie alle drei.
- b) Was bedeuten  $T_1$  und  $T_2$ ?
- c) Berechnen Sie genähert die Differenz der betreffenden freien Enthalpien bei einer Unterkühlung  $\Delta T$  unter  $T_1$ . Was kann man bezüglich stabiler Phase daraus schließen?

Gegeben

Schmelztemperatur	$T_{S-Fk}$	933	K
Schmelzentropie	$\Delta S_{S-Fk}$	12.11	J/molK
Unterkühlung	$\Delta T =$	50	K

Lösung a)



Gerade {0.5}<sub>0.5</sub>  
Namen {1.5}<sub>2</sub>

b)  $T_1$  ist die Schmelztemperatur,  $T_2$  ist die Verdampfungstemperatur.

2x 0.25 {0.5}<sub>2.5</sub>

c) Aus  $G = H - TS$  folgt für den Gleichgewichtszustand mit  $\Delta G = 0$ :

$$\Delta H_{S-Fk} = T_{S-Fk} \cdot \Delta S_{S-Fk} = 933K \cdot 12.11J / molK = 11300J / mol$$

Formel {0.5}<sub>3</sub> Wert {0.5}<sub>3.5</sub>

Für Unterkühlung:

$$\underline{\underline{\Delta G_{S-Fk}}} = \Delta H_{S-Fk} \cdot \frac{T_{SG} - T}{T_{SG}} = 11300J / mol \cdot \frac{50K}{933K} = \underline{\underline{606J / mol}}$$

Formel {0.5}<sub>4</sub> Wert {0.5}<sub>4.5</sub>

Die Schmelze hat die höhere freie Enthalpie als der Festkörper, folglich ist der Festkörper stabil.

Folgerung {0.5}<sub>5</sub>

# Aufkohlen

# 8 Punkte

Ein Stahl wird in einer CO-haltigen Atmosphäre aufgekocht. Die anfängliche C-Konzentration  $c_0$  im Stahl beträgt 0.2 %, die Konzentration in der Oberfläche des Stahles während des Aufkohlvorganges ( $C_a$ ) ist 1.0 %. Die Aufkohlungstemperatur beträgt 925°C.

Die aufgekohlte Schicht soll in einer Tiefe von 1.0 mm eine C-Konzentration von 0.4 % aufweisen.

- Wieviele Stunden dauert der Prozess?  
(Interpolation der Tabellenwerte ist verlangt)

Angaben:

$R = 8.314 \text{ J/molK}$

Für Diffusion von C in Austenit:

$D_0 = 2.2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

$Q = 146 \text{ kJ/mol}$

Lösung: (SU06-1112)

Lösung des zweiten Fickschen Gesetzes für lineare Diffusion (unendlicher Halbraum)

Hilfsvariable:  $y = \frac{x}{2 \cdot \sqrt{Dt}}$

$$\frac{c_a - c(x,t)}{c_a - c_0} = \text{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{Dt}}\right) = \text{erf}(y)$$

$$\frac{c_a - c(x,t)}{c_a - c_0} = \frac{1.0 - 0.4}{1.0 - 0.2} = 0.75 \quad \text{Formel \{1\}_1 \quad \text{Wert \{1\}_2}$$

$\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}$	$\text{erf}\left(\frac{x}{2 \cdot \sqrt{D \cdot t}}\right)$
y	erf(y)
0	0
0,10	0,1125
0,20	0,2227
0,30	0,3286
0,40	0,4284
0,50	0,5205
0,60	0,6039
0,70	0,6778
0,80	0,7421
	0,75
0,90	0,7970
1,00	0,8427
1,50	0,9661
2,00	0,9953

Fehlerfunktion erf(y) → y aus Tabelle auswerten durch Interpolation:

$$\text{erf}(y) = 0.750 \Rightarrow y = \text{erf}^{-1}(0.750) = 0.8 + (0.90 - 0.80) \cdot \frac{0.750 - 0.7421}{0.7970 - 0.7421} = 0.814$$

Formel {1}\_3 Wert {1}\_4

$$D = D_0 \exp\left\{\frac{-Q}{RT}\right\} = 2.2 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s} \exp\left\{\frac{-146000 \text{ J/mol}}{8.314 \text{ J/mol K} (925 + 273) \text{ K}}\right\} = 9.47 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}$$

Formel {1}\_5 Wert {1}\_6

$$y = \frac{x}{2 \cdot \sqrt{Dt}} \Rightarrow t = \frac{x^2}{4 \cdot y^2 \cdot D} = \frac{(0.001 \text{ m})^2}{4 \cdot 0.814^2 \cdot 9.47 \cdot 10^{-12} \text{ m}^2/\text{s}} = 3.98 \cdot 10^4 \text{ s} = 11.1 \text{ h}$$

Formel {1}\_7 Wert {1}\_8

**Erstarrung****10 Punkte**

Eine Aluminiumschmelze mit 5% Cu wird einmal ohne und einmal mit Zugabe von Keimbildungspartikeln abgekühlt und zur Erstarrung gebracht.

Welchen Einfluss hat die Massnahme

- auf die Korngrösse?
- auf die Abkühlungskurve, die im Gleichgewichtsfall Knickpunkte aufweist?
- Wie nennt man die Keimbildung im einen und anderen Fall?
- Erklären Sie den Einfluss der Partikel.

Gewisse Turbinenschaufeln werden als Einkristalle aus Ni - Basislegierungen hergestellt.

- Beschreiben Sie den Herstellprozess.
- Wann ist ein feinkörniges Gefüge erwünscht und wann ein grobkörniges und warum?

**Lösung**

a) Keimbildungspartikel (Kornfeiner) ergeben ein feineres Korn. {1}<sub>1</sub>

b) Ohne Keimbildungspartikel tritt eine grössere Unterkühlung auf, ev. mit Wiederanstieg der Temperatur, nachdem die Keimbildung stattgefunden hat. {1}<sub>2</sub>  
Mit Kornfeiner ergibt sich eine gleichmässige Temperaturabnahme, da die Kristallisation früher startet. {1}<sub>3</sub>

c) Ohne Keimbildungspartikel: Homogene Keimbildung. {1}<sub>4</sub>  
mit Keimbildungspartikeln: Heterogene Keimbildung {1}<sub>5</sub>

d) Die Keimbildung erfordert wegen der verkleinerten Grenzfläche und der damit verringerten Grenzflächenenergie weniger Atome für den kritischen Keim, die notwendige Unterkühlung für eine grosse Keimzahl ist geringer. {1}<sub>6</sub>

e) Herstellprozess Einkristall: Die Gussform wird auf der einen Seite erhitzt, auf der anderen Seite abgekühlt, dadurch entsteht eine gerichtete Erstarrung. Durch einen schraubenlinienförmigen Kristallselektor wird erreicht, dass im Nutzteil des Gussstückes nur ein einziger Kristall wächst. {2}<sub>8</sub>

f) Feinkörnige Gefüge sind vorteilhaft bei normalen (niedrigen) Temperaturen, weil Korngrenzen die Versetzungsbewegung behindern, d.h. die Streckgrenze wird erhöht. {1}<sub>9</sub>  
Bei hohen Temperaturen entsteht Korngrenzengleiten (ein Kriechmechanismus), weshalb sich korngrenzenarme oder -freie Werkstoffe weniger stark verformen. {1}<sub>10</sub>