Prozesssimulation der Herstellung einsatzgehärteter pulvermetallurgischer Bauteile

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Ingenieurwissenschaften

an der Fakultät für Maschinenbau des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) genehmigte

Dissertation

von

Dipl.-Ing. Philipp Nußkern

aus Pforzheim

Tag der mündlichen Prüfung:	26.04.2013
Hauptreferent:	Prof. DrIng. habil. Volker Schulze
Korreferent:	Prof. DrIng. habil. Franz Hoffmann

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für angewandte Materialien (IAM) - Werkstoffkunde des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT).

Prof. Dr.-Ing. P. Elsner, Prof. Dr.-Ing. M. Heilmaier, Prof. Dr.-Ing. habil. V. Schulze und Prof. Dr. rer. nat. A. Wanner möchte ich für die Möglichkeit zur Durchführung dieser Arbeit danken.

Die Finanzierung des Projektes wie auch meiner Stelle erfolgte durch Mittel der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG). Dafür sei der DFG herzlich gedankt. Darüber hinaus möchte ich mich besonders beim externen Industriepartner Höganäs AB für die Bereitstellung von Pulver und Probenkörpern bedanken. Namentlich seien hier im Besonderen die Herren C. Szabo und U. Engström zu erwähnen, die durch ihre Anregungen, tatkräftige Unterstützung und ständige Diskussionsbereitschaft erheblich zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Zudem möchte ich mich noch bei der Stiftung Institut für Werkstofftechnik (IWT) für die thermochemische Wärmebehandlung bedanken.

Mein besonderer Dank gilt Prof Dr.-Ing. habil. V. Schulze für das in mich gesetzte Vertrauen, die Übernahme des Hauptreferats, die fachlichen Diskussionen und die zügige Durchsicht des Manuskripts. Herrn Dr.-Ing. J. Hoffmeister gebührt herzlicher Dank für die zahlreichen Anregungen und fachlichen Diskussionen, die die Ausarbeitung und das Projekt bereichert haben. Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. F. Hoffmann sei für die Übernahme des Korreferats ebenfalls herzlich gedankt.

Schließlich danke ich allen ehemaligen und aktuellen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern des Instituts, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Besonders erwähnenswert sind dabei die Techniker Herr R. Rössler und D. Mügge, die Metallographin Frau A. Ohl und die Herren W. Schäfer, T. Unger und W. Reich aus der mechanischen Werkstatt. Daneben möchte ich noch alle Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des Dachgeschoßes besonders herausheben, die mich währenddessen kollegial aber auch freundschaftlich in jeder erdenklichen Weise mit Rat und Tat unterstützt haben. Weiterhin danke ich all jenen Studierenden, die als wissenschaftliche Hilfskräfte sowie durch Studien- und Diplomarbeiten entscheidenden Anteil am Gelingen der Arbeit hatten.

Dem KHYS sei für die Finanzierung des Auslandaufenthaltes, der im Rahmen dieser Arbeit erfolgte, gedankt.

1	Einl	Einleitung		
2	Ken	ntnisstand	3	
	2.1	Pulvermetallurgie	3	
		2.1.1 Kompaktieren	3	
		2.1.2 Sintern	4	
		2.1.3 Nachbearbeitungsverfahren zur Verbesserung der Gebrauchs-		
		eigenschaften von pulvermetallurgischen Bauteilen	6	
	2.2	Einsatzhärten pulvermetallurgischer Bauteile	7	
		2.2.1 Gasaufkohlen	7	
		2.2.2 Abschrecken	11	
		2.2.2.1 Wärmeübergang beim Abschrecken	. 11	
		2.2.2.2 Phasenumwandlung beim Abschrecken	12	
		2.2.2.3 Eigenspannungsentwicklung beim Härten	18	
	2.3	Einsatzhärten oberflächenverdichteter gradiert poröser pulvermetallurgischer		
		Bauteile	19	
	2.4	Simulation des Einsatzhärtens mittels Finiter Elemente Methode	20	
	2.5	Anwendung der Simulation zur Abbildung von Wärmebehandlungsprozessen	24	
3	Wei	kstoff, Probenzustand und Probengeometrien	. 27	
	3.1	Werkstoff	27	
	3.2	Probengeometrien und -zustände für die Bestimmung von Eingabedaten	.27	
	3.3	Probengeometrie und -zustand des Demonstrators	30	
4	Ver	suchseinrichtungen, Versuchsdurchführung, und Charakterisierungs-		
	met	hoden	. 33	
	4.1	Versuchsdurchführungen zur Materialmodellierung	.33	
		4.1.1 Aufkohluntersuchungen zur Bestimmung effektiver Diffusions-		
		koeffizienten	.33	
		4.1.2 Abschreckdilatometeruntersuchungen zur Bestimmung des Zeit-		
		Temperatur-Umwandlungsverhaltens, der Umwandlungsdehnungen und		
		des thermischen Ausdehnungskoeffizienten	. 33	
		4.1.3 Untersuchungen am Deformationsdilatometer zur Bestimmung des		
		mechanischen Verhaltens	. 38	

		4.1.4 Untersuchungen am Deformationsdilatometer zur Bestimmung der	
		Umwandlungsplastizität	39
		4.1.5 Warmzugversuche zur Bestimmung des Elastizitätsmoduls	40
		4.1.6 Laser-Flash- und DSC-Messungen zur Bestimmung thermo-	
		physikalischer Kennwerte	41
	4.2	Versuchsdurchführung am Demonstrator	41
5	Nun	nerisches Konzept	46
	5.1	Aufkohlen	47
		5.1.1 Mathematische Modelle für das Aufkohlen	47
		5.1.2 Aufkohlmodell	48
	5.2	Abschrecken	50
		5.2.1 Mathematische Modelle für das Abschrecken	50
		5.2.1.1 Temperaturfeldberechnung	50
		5.2.1.2 Berechnung thermisch induzierter Phasenumwandlungen	51
		5.2.1.3 Berechnung der Dehnungsentwicklung	53
		5.2.2 Abschreckmodell	56
6	Eing	gabedaten für das numerische Konzept	58
	6.1	Eingabedaten aus der Literatur	58
		6.1.1 Stoffübergangskoeffizient	58
		6.1.2 Wärmeübergangskoeffizient	58
	6.2	Experimentell und simulativ bestimmte Eingabedaten	58
		6.2.1 Diffusionskinetik	58
		6.2.1.1 Experimentell und simulative Ergebnisse zur Bestimmung der	
		Diffusionskinetik	58
		6.2.1.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Material-	
		modellierung der Diffusionskinetik	64
		6.2.2 Umwandlungskinetik - Diffusionsgesteuertes Umwandlungsverhalten	69
		6.2.2.1 Experimentelle Ergebnisse	69
		6.2.2.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Material-	
		modellierung der diffusionsgesteuerten Umwandlungskinetik	71
		6.2.3 Umwandlungskinetik - Diffusionsloses Umwandlungsverhalten	77
		6.2.3.1 Experimentelle Ergebnisse	77
		6.2.3.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Material-	

		modellierung des Umwandlungsverhaltens	78
		6.2.4 Umwandlungsdehnungen	79
		6.2.4.1 Experimentelle Ergebnisse	79
		6.2.4.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Material-	
		modellierung des Umwandlungsverhaltens	
		6.2.5 Umwandlungsplastizität	
		6.2.5.1 Experimentelle Ergebnisse	
		6.2.5.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Material-	
		modellierung der Umwandlungsplastizitätskonstanten	85
		6.2.6 Mechanische Kennwerte	
		6.2.6.1 Experimentelle Ergebnisse	
		6.2.6.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Material-	
		modellierung des Umwandlungsverhaltens	
		6.2.7 Thermophysikalische Kennwerte	
		6.2.7.1 Experimentelle Ergebnisse	
		6.2.7.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Material-	
		modellierung der thermophysikalischen Kennwerte	
7	Erg	ebnisse und Diskussion	102
	7.1	Übertragung der Porositätstiefenverteilung	102
	7.2	Aufkohlen	103
		7.2.1 Ergebnisse der Aufkohlsimulation	103
		7.2.2 Diskussion der Ergebnisse der Aufkohlsimulation	104
	7.3	Abschrecken	109
		7.3.1 Ergebnisse der Abschrecksimulation	109
		7.3.2 Diskussion der Ergebnisse der Abschrecksimulation	110
	7.4	Diskussion der Prozesskette	116
8	Zus	ammenfassung	120
9	Lite	raturverzeichnis	122
10	Abb	ildungsverzeichnis	130
11	Tab	ellenverzeichnis	138

1 Einleitung

Die Pulvermetallurgie (PM), im einfachsten Fall bestehend aus den Prozessschritten Kompaktieren und Sintern, ermöglicht die endkonturnahe Fertigung komplexer Geometrien unter Vermeidung spanender Nachbearbeitung [1].

Der hohen Werkstoffausnutzung und Ökonomie steht der Nachteil der porösen Mikrostruktur der Bauteile gegenüber, die maßgeblich das Werkstoffverhalten bestimmt [1, 2]. Insbesondere die bei der Dimensionierung wichtigen mechanischen Werkstoffkennwerte erreichen nicht die Werte zerspanter schmelzmetallurgischer Bauteile. Pulvermetallurgisch erzeugte Bauteile werden daher meist in nur moderat beanspruchten Anwendungen eingesetzt. Das PM-Produktportfolio umfasst derzeit hauptsächlich Bauteile für Garten-, Freizeit- und Elektronik-geräte sowie Klima-, Türschließ- und Abgasanlagen von Automobilen [2].

Neuerdings gibt es zunehmend Bestrebungen, auch höher beanspruchte Bauteile mittels der pulvermetallurgischen Route herzustellen. Ein möglicher Ansatz für die Fertigung solcher eigenschaftsoptimierter Bauteile ist die Verknüpfung der pulvermetallurgischen Route mit einer anschließenden Wärmebehandlung. Derzeit werden bereits 2/3 aller PM-Bauteile wärmebehandelt [3]. Zumeist werden dabei aber keine thermochemischen Verfahren angewandt, da durch die vorliegende Bauteilporosität kein definiertes Kohlenstoffprofil eingestellt werden kann [4]. Sowohl der Randkohlenstoffgehalt als auch die Aufkohltiefe nehmen mit steigender Porosität zu. Bei überwiegend offener Porosität, insbesondere bei Dichten unter 7,2 g/cm³, kann Durchkohlung infolge der kapillarartigen Wirkung der Poren auftreten [3, 4]. Das Aufkohlen erfolgt dann nicht über das Werkstoffvolumen, sondern maßgeblich durch das Porenvolumen.

Um eine porositätsbedingte Durchkohlung von pulvermetallurgisch erzeugten Bauteilen beim Einsatzhärten zu vermeiden, kann der Wärmebehandlung eine mechanische Oberflächenbehandlung vorangestellt werden. Dabei wird die offene Porosität in eine oberflächenverdichtete, gradiert poröse Randschicht überführt. Ein Aufkohlen dieser oberflächennah verdichteten Bauteile erfolgt dann nahezu unbeeinflusst von der Porosität, was die Einstellung eines definierten Kohlenstoffprofils ermöglicht. In der hier vorliegenden Ausarbeitung wurde als Demonstratorgeometrie eine Flachprobe gewählt, was die Nutzung eines Festwalzprozesses als mechanische Oberflächenbehandlung ermöglicht. Eine mögliche Fertigungsfolge für hochbeanspruchbare PM-Bauteile kann dann Abbildung 1-1 entnommen werden.



Abbildung 1-1: Strategie zur thermochemischen Wärmebehandlung von PM-Bauteilen unter Nutzung eines Festwalzprozesses als mechanische Oberflächenbehandlung zur Vermeidung von Durchkohlungen.

Zur Analyse des Einsatzhärtens im Kontext obiger Fertigungsfolge wird ein Modell auf Basis des Finite Elemente Softwarepaketes ABAQUS/Standard erstellt, um den Prozess systematisch untersuchen und das Prozessverständnis nachhaltig verbessern zu können. Die gewonnenen Erfahrungen können anschließend auf das komplexe Realsystem übertragen und zur Optimierung von Prozessführung, Bauteilzustand und -verhalten genutzt werden.

Prozesskette:

2 Kenntnisstand

2.1 Pulvermetallurgie

Die Pulvermetallurgie, eine Begrifflichkeit für die Sintertechnik bei metallischen Werkstoffen, ermöglicht die Herstellung von Halbzeugen bzw. Formteilen mittels der Verfahrensschritte Kompaktieren und Sintern [1]. Bei ganzheitlicher Betrachtung kann der Pulvermetallurgie-Begriff um die Schritte Pulverherstellung und –aufbereitung sowie die oftmals durchgeführte Nachbehandlungen erweitert werden. Die Pulvermetallurgie ist dabei den urformenden Fertigungsverfahren gemäß der Einteilung aus DIN 8580 [5] zuzuordnen.

Großer Vorteil der Pulvermetallurgie ist die endkonturnahe Fertigung komplexgeformter Bauteile, was eine effiziente Fertigung ermöglicht. Materialabfälle und zusätzliche zeit-, energiesowie kostenaufwändige Fertigungsschritte werden weitestgehend oder ganz vermieden [1, 6]. Allerdings bietet dieses Verfahren nur bei hohen Stückzahlen Kostenvorteile, da Pulver und insbesondere die Presswerkzeuge erhebliche Investitionsmittel erfordern [1].

2.1.1 Kompaktieren

Die Formgebung des Pulvers, auch Kompaktieren genannt, hat das Ziel, Pulver in einen Formkörper, einen sogenannten Pulverpressling, zu überführen. Dabei wird eine homogene und gleichmäßige Verdichtung über den Querschnitt angestrebt. Für die Formgebung des Pulvers gibt es zahlreiche Verfahrensausprägungen, wie [1] entnommen werden kann. Eine der einfachsten stellt hierbei das Pressen in Matrizen dar, das wegen seiner Relevanz für die nachfolgende Arbeit weiter ausgeführt werden soll. Nach dem Füllen der Matrize und beginnendem Kompaktieren finden zunächst Dreh- und Umordnungsvorgänge statt, die eine erste Verdichtung zur Folge haben. Hierbei werden existierende Hohlräume aufgefüllt und Pulverbrücken, entstanden durch den Füllvorgang, aufgelöst. Zunehmende Presskräfte führen zu plastischen Verformungen der Oberfläche und damit zu einem zunehmenden Teilchenkontakt. Im Extremfall ist die Bildung von Pulveragglomeraten in Folge mechanischen Verhakens möglich. Gemäß [1] tritt aufgrund von Kaltverfestigung und Oberflächenkontakt eine Adhäsionswirkung auf. Ist das Verformungsvermögen eines Teilchens letztlich erschöpft, kann dieses im Laufe des Kompaktiervorganges zertrümmert werden.

2.1.2 Sintern

Die Wärmebehandlung des Pulverhaufwerkes, das sogenannte Sintern, verfolgt das Ziel den lose gebundenen Pulverpressling zu verdichten und gleichzeitig zu homogenisieren [7]. Das Sintern erfolgt zumeist unter Schutzatmosphäre, da durch die vorhandene große freie Oberfläche das Pulver sehr reaktionsfreudig ist. Die technische Sintertemperatur liegt bei einphasigen Pulvern bei 2/3 bis 4/5 der Schmelz- bzw. Solidustemperatur. Bei mehrphasigen Pulvern bestimmt hingegen der Schmelz- oder Soliduspunkt der niedrigstschmelzenden Phase die Sintertemperatur [7].

Die ablaufenden Vorgänge sind dabei auf die großen freien Energien des Pulverhaufwerks zurückzuführen, die als Triebkräfte wirken. Folglich ist der verdichtete Endzustand energetisch günstiger als das anfänglich lose gebundene Pulverhaufwerk [1]. Bei einphasigen, also homogenen Pulvern kann freie Energie durch Reduzierung der freien Oberfläche und dem Abbau von Gitterstörungen erfolgen. Im Falle heterogener Pulver erfolgt zusätzlich eine Homogenisierung. Zur Erklärung der einzelnen physikalischen Vorgänge gibt es diverse Sintermodelle [1, 7, 8], die mit steigender Teilchenanzahl zunehmend komplexer werden. Das einfachste Modell, das Zweiteilchenmodell [9], soll in dieser Ausarbeitung zur Darlegung der elementaren Grundprozesse, der Kontaktbildung und des Kontaktwachstums, genügen. Für weiterführende Informationen sei auf [8] verwiesen.



Abbildung 2-1: Zweiteilchenmodell zur Verdeutlichung der Vorgänge beim Sintern mit den Stadien Kontaktbildung, Sinterhalsbildung und Sinterhalswachstum.

Beim Zweiteilchenmodell (vgl. Abbildung 2-1) liegen zu Beginn zwei kugelförmige, unverformte Teilchen (Radius a₀) vor, die sich berühren. Die oben beschriebenen plastischen Verformungen der Teilchen während des Kompaktierens werden durch die Modellbetrachtung nicht berücksichtigt. Beide Teilchen haben die Tendenz, ihre Oberfläche zu verringern und letztlich eine Kugel zu bilden. Zunächst bildet sich hier ein fester Kontakt unter Minimierung der freien Oberfläche aus. Dieser Kontakthals führt zu Kapillardruck- im Konvexen und Kapillarzugspannungen im Konkaven. Mittels oberflächenenergetischer Betrachtungen (vgl. Kelvin-Thomson-Gleichung [7, 8]) ergibt sich im konkaven Bereich ein Leerstellenüberschuss und im Konvexen ein Leerstellenmangel [1, 9].

Der Materialtransport zwischen Quelle und Senke erfolgt mittels Diffusion, wobei hierbei Volumen- und Oberflächendiffusionsvorgänge zu unterscheiden sind (vgl. Abbildung 2-2). Für eine mathematische Beschreibung der Oberflächen- und Volumendiffusion sei auf die Ausarbeitung von Rockland [10] verwiesen. Sowohl durch Volumen- als auch durch Oberflächendiffusion wird der Teilchenkontakt ausgebaut, wobei allerdings nur erstere zu einer Schwindung führt. Mittels dieser Beschreibung der Elementarprozesse kann eine flächige Teilchenanordnung betrachtet werden. Durch das Pressen hat jedes Teilchen [7] fünf bis acht Nachbarteilchen, wobei die Kontakte zwischen den einzelnen Teilchen unterschiedlich ausgeprägt sind. Im Anfangsstadium kommt es wie oben beschrieben zur Ausbildung von Sinterhälsen. Aufgrund der Anisotropie des Kontaktwachstums können letztlich innere Spannungen auftreten. Die Folge sind plastische Deformationen der Kontaktbereiche, Trennung gebildeter Kontakte und vereinzelte lokale Teilchenbewegungen. Dadurch entstehen Verdichtungszentren und offene Porenkanäle zur Oberfläche. Mit weiterer Sinterdauer setzt Kornwachstum ein, was zur Schrumpfung der Poren wie auch zur Änderung der Porenmorphologie führt. Die Poren streben dabei letztlich eine runde Form an.



Abbildung 2-2: Diffusionsvorgänge im Sinterhals. Dabei werden Leerstellen durch \Box und Atome durch • symbolisiert. Die Diffusion von Atomen in den Bereich des Sinterhalses führt zu einer Annäherung der Zentren der zwei Teilchen und damit zu einer Schwindung um Δx .

Die durch die pulvermetallurgische Route erstellten Bauteile können nach DIN 30910 [11] gemäß der vorliegenden Porosität klassifiziert werden und weisen in der Regel Werte zwischen etwa 2 und 30 % auf. Hoch verdichtete Bauteile lassen sich dabei nur durch aufwändige

Verfahren, die einen hohen energetischen Aufwand erfordern, herstellen. Gänzlich porenfreie Werkstoffe sind nur durch Tränken bzw. Warmverdichten erzielbar [1].

2.1.3 Nachbearbeitungsverfahren zur Verbesserung der Gebrauchseigenschaften von pulvermetallurgischen Bauteilen

poröse Struktur pulvermetallurgischer Bauteile wirkt sich sowohl auf Die die thermophysikalischen, die thermischen als auch die mechanischen Gebrauchseigenschaften aus. Insbesondere die erzielbaren Festigkeiten bzw. Wechselfestigkeiten, die bei der Bauteilauslegung eine zentrale Rolle spielen, erreichen nicht die Werte schmelzmetallurgisch hergestellter Bauteile. Sowohl im Falle quasistatischer als auch zyklischer Beanspruchung kommt es zu Spannungskonzentrationen an Poren und Sinterhälsen [12], was bei geringen Beanspruchungen bereits zu lokalen inhomogenen plastischen Verformungen, Ermüdungsgleitbändern und damit letztlich zur Rissbildung führt. Um die Festigkeit bzw. Lebensdauer von Bauteilen zu verbessern, können mehrere Strategien verfolgt werden. Es können Legierungselemente zur Optimierung der Gebrauchseigenschaften verwendet werden [12, 13]. Dadurch sind bei gleicher Dichte höhere Festigkeiten und Härten sowie bessere Ermüdungseigenschaften bei zyklischer Beanspruchung erzielbar. Weitere Steigerungen sind die mechanische Oberflächenbehandlungen randnaher durch Bereiche. oftmals hochbeansprucht und versagenskritisch sind, möglich. Dabei wird oberflächennah nachverdichtet und darüber hinaus günstige Randschichtzustände erzeugt. Gängige Verfahren sind hierbei das Festwalzen und das Kugelstrahlen. Wesentliche Verfahrensparameter und deren Auswirkungen können [13] entnommen werden. Eine weitere, weit gängigere Möglichkeit ist die Wärmebehandlung von pulvermetallurgischen Bauteilen. Dabei werden hauptsächlich Festigkeits- und Härtesteigerungen durch Einstellung einer günstigen Mikrostruktur und geeigneter Eigenspannungszustände erreicht. Typische Verfahren sind hier das Sinterhärten, das induktive Randschichthärten und thermochemische Verfahren. Die Wärmebehandlungen können dabei der gleichen Anlagentechnik mit wie bei schmelzmetallurgisch erzeugten Bauteilen durchgeführt werden [4]. Allerdings ist zumeist eine Anpassung der Prozessparameter aufgrund von Porositätseffekten notwendig. Die Ausarbeitung fokussiert sich im Folgenden auf das thermochemische Verfahren Einsatzhärten. Für andere Verfahren sei auf die Übersichtswerke [2, 14] verwiesen.

2.2 Einsatzhärten pulvermetallurgischer Bauteile

Einsatzhärten, eine Wärmebehandlung, die zu den thermochemischen Diffusionsbehandlungen der Randschicht gehört, besteht gemäß DIN 17022 [15] aus den drei konsekutiven Teilschritten Erwärmen, Aufkohlen und Härten. Der Teilschritt Aufkohlen wird in der Literatur [16] teilweise auch unter den Begriffen Zementieren oder Einsetzen geführt. Zielsetzung des Verfahrens ist die Erzeugung harter und verschleißfester martensitischer Randschichten bei gleichzeitigem Erhalt des duktilen Kerns [16].

Die Prozessführung bei der Einsatzhärtewärmebehandlung umfasst ein Glühen für das Austenitisieren bzw. Aufkohlen und ein anschließendes Härten, das durch direktes Abschrecken oder über zusätzliche Zwischenwärmebehandlungsschritte erfolgen kann. Zumeist werden einsatzgehärtete Bauteile anschließend angelassen. (vgl. Abbildung 2-3)



Abbildung 2-3: Temperaturführung während des Einsatzhärtens. Verfahrensausprägung Direkthärten.

In der Literatur sind mehrere Verfahrensausprägungen bekannt. Nachfolgende Ausführungen beschränken sich auf das Gasaufkohlen sowie das Direkthärten in flüssigen Abschreckmedien. Für Vakuumaufkohlen sowie Einfachhärten, Härten nach isothermer Umwandlung und das Doppelhärten sei auf die Ausarbeitungen [17] und [18] verwiesen. Hinweise zur Anlagentechnik können [19] entnommen werden.

2.2.1 Gasaufkohlen

Unter Aufkohlen wird die Eindiffusion und Anreicherung der Randschicht mit Kohlenstoff in atomarer Form verstanden [20]. Dazu wird ein Bauteil mit einem geringen Kohlenstoffanteil, zumeist zwischen 0,1 und 0,3 Ma%, einem kohlenstoffhaltigen gasförmigen Medium

ausgesetzt, wobei teilweise auch feste und flüssige Spender eingesetzt werden. Dabei können nach [20] und [21] fünf physikalische und chemische Teilschritte unterschieden werden. Hierzu zählt die Reaktion zur Bildung des Transportmediums (Teilschritt I) sowie die Diffusion im Reaktionsmedium (Teilschritt II, vgl. Abbildung 2-4), bevor als Teilschritt III der eigentliche Stoffübergang, die Kohlenstoffabsorption, folgt (vgl. Abbildung 2-4). Nach dem Übergang vom Transportmedium in den Feststoff folgen Diffusionsvorgänge (Teilschritt IV, vgl Abbildung 2-4) und Reaktionen im Festkörper (Teilschritt V).



Abbildung 2-4: Ablaufende physikalische und chemische Vorgänge nach [20].

Aus werkstoffkundlicher Sicht sind insbesondere Teilschritt III und nachfolgende Prozesse von Interesse. Die Triebkraft für den Stoffübergang ist dabei auf Potentialunterschiede zwischen dem Kohlenstoffgehalt der Bauteiloberfläche und der Ofenatmosphäre zurückzuführen. Nachfolgend gelistete Reaktionsgleichungen beschreiben ablaufende Grenzflächenreaktionen [20, 21], wobei (C) der im Austenit gelöste Kohlenstoff darstellt. Dabei ist in Gleichung (2.1) die Boudouard-Reaktion, in Gleichung (2.2) die heterogene Wassergasreaktion und in Gleichung (2.3) die Methanreaktion dargestellt.

$$2CO = (C) + CO_2$$
 (2.1)

$$CO + H_2 = (C) + H_2O$$
 (2.2)

$$CH_4 = (C) + 2H_2$$
 (2.3)

Die gelisteten Grenzflächenreaktionen führen zunächst zu einer Aufkohlung, bis sich das chemische Gleichgewicht einstellt und die Umsetzung der Edukte stagniert. Durch die beigefügten Kohlenwasserstoffzusatzgase können die Produkte der Boudouard- und der heterogenen Wassergasreaktion abgebaut werden, so dass ein weiteres Aufkohlen ermöglicht wird. Diemar [22] spricht von einer Regeneration der Aufkohlungsatmosphäre.

Der wichtigste Parameter beim Gasaufkohlen stellt der Kohlenstoffpegel dar. Diese Prozessgröße, die in der Aufkohlungsatmosphäre eingestellt wird, sagt nach DIN EN 10052 welcher Kohlenstoffgehalt sich in dünnen Reineisenfolien [23] aus. bei der Aufkohlungstemperatur im Gleichgewicht einstellt. Üblicherweise wird das Gasaufkohlen zweistufig, mit zunächst hohem Kohlenstoffpegel der Größenordnung 0,9-1,3 Ma% und anschließend abgesenktem Kohlenstoffpegel mit 0,6-0,8 Ma%, ausgeführt. Diese zweistufige Prozessumsetzung erfolgt, um die Prozessdauer zu minimieren. Weiterer Vorteil der zweistufigen Prozessführung mit zunächst hohem Kohlenstoffpegel ist eine größere Aufkohlungstiefe und ein flacher verlaufender Gradient des Kohlenstoffprofils bei unveränderter Aufkohlungsdauer [22].

Pulvermetallurgische Bauteile lassen sich in der Regel mit derselben Anlagentechnik und Gasatmosphäre wie auch schmelzmetallurgische Bauteile aufkohlen [4]. Die entstehenden Kohlenstofftiefenprofile unterscheiden sich jedoch teilweise deutlich, wie die Arbeiten von [3, 4, 24, 25, 26, 27] zeigen (vgl. Abbildung 2-5).

Abbildung 2-5: Effekt der Porosität auf das Aufkohltiefenprofilen [3].

In allen Fällen wird für poröse Werkstoffe eine schnellere und deutlich tiefere Aufkohlung beobachtet. Gemäß den zitierten Arbeiten ist es sinnvoll, eine Klassifizierung in eine offene und geschlossene Porosität vorzunehmen. Bei vorliegenden geringen Dichten kann gemäß DIN 30912 [28], insbesondere bei Raumerfüllungen unter 85 % (6,6 g/cm³), von offener Porosität und einer vernetzten Porenstruktur ausgegangen werden. In diesem Falle sind bereits

bei relativ geringen Aufkohlungsdauern Durchkohlungen zu verzeichnen. Das Aufkohlen wird hierbei nicht mehr durch die Festkörperdiffusion bestimmt, sondern durch die Diffusion in der Gasphase des Porenvolumens [4], da das Diffusionsvermögen in gasförmigen Medien um mehrere Größenordnungen größer als in Festkörpern ist [24]. Der Beschaffenheit der Porenkanäle kommt dabei spezielle Bedeutung zu. Hierbei spielt nicht der Durchmesser eine entscheidende Rolle, sondern die spezifische Oberfläche an der Stoffübergangsreaktionen stattfinden können. Somit wird der Stoffübergang unter die makroskopische Oberfläche verlegt und die Reaktion an der geometrischen Grenzfläche verliert an Bedeutung. Solche Verhältnisse lassen sich durch gängige Modelle des Aufkohlens nicht beschreiben und sind besser über Festbettreaktionen zu modellieren [4]. Ein weiteres Phänomen offener Porosität zeigen die experimentellen Befunde von Kowalewski [29], die eine massive Überkohlung der Randschicht bei vorliegender offener Porosität ausweisen. Bei geschliffenen Proben gleicher Porosität sind keine Überkohlungen festzustellen [29]. Es ist daher davon auszugehen, dass in den Poren eine vollständig andere Atmosphärenzusammensetzung als in der Ofenatmosphäre herrscht und dies zu Überkohlungseffekten führt [24].

Bei Dichten über 85 % oder zugeschmierter bzw. zugedrückter Oberfläche ist die Gasdiffusion nicht mehr bestimmend und Grenzflächenreaktionen erfolgen an der makroskopisch geometrischen Oberfläche. Dennoch kann begünstigte Diffusion festgestellt werden. Der zunehmende Diffusionskoeffizient ist auf die Nutzung der freien Porenoberfläche [29, 30] für Diffusionsvorgänge zurückzuführen. Diffusionsprozesse über die Gasphase spielen dagegen eine untergeordnete Rolle, da mehrere Grenzflächenreaktionen auszuschließen sind [4].

Die Auswirkungen der Porosität auf den Diffusionskoeffizienten kann quantitativ der Arbeit von [24] entnommen werden. Dabei wird ein empirischer Zusammenhang zwischen Dichte ρ und Diffusionskoeffizient D auf Basis einer Potenzfunktion gemäß Gleichung (2.4) zur Modellierung der Ergebnisse gewählt. Die Faktoren A und b sind dabei angepasste Konstanten.

$$\mathbf{D} = \mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\rho}^{-\mathbf{b}} \tag{2.4}$$

2.2.2 Abschrecken

2.2.2.1 Wärmeübergang beim Abschrecken

Die Einstellung gewünschter Gebrauchseigenschaften beim Einsatzhärten von Bauteilen erfolgt durch das martensitische Härten [20]. Hierbei wird dem austenitisierten Bauteil durch ein beschleunigtes Abkühlen Wärme entzogen. Dabei untergliedert sich der Wärmeentzug in Wärmeübergang zwischen Bauteil und Abkühlmedium die Teilprozesse sowie Wärmetransport im Bauteil [21]. In dieser Ausarbeitung wird aufgrund der Relevanz insbesondere auf flüssige verdampfende Abschreckmedien mit einer Siedetemperatur unterhalb der Austenitisierungstemperatur eingegangen. Hierbei treten die Stadien Filmverdampfen, Blasensieden und Konvektion nacheinander auf [30] (vgl. Abbildung 2-6). Zunächst bildet sich beim Eintauchen des Bauteils ein Dampffilm aus. Dieses Phänomen wird in der Literatur als Filmverdampfen bezeichnet. Durch den thermisch isolierenden Dampffilm sind die abgeführte Wärmemenge und damit der Wärmeübergangskoeffizient verhältnismäßig gering. Sobald die Bauteiloberfläche die Leidenfrosttemperatur erreicht, bricht der Dampffilm zusammen und Blasensieden tritt auf. Durch die turbulente konvektive Strömung an der Bauteiloberfläche nimmt die Wärmeabfuhr deutlich zu, da die Oberfläche ständig mit kühlerem Abschreckmedium versorgt wird, was in Folge der vorherrschenden Temperaturen erneut verdampfen kann. Bei der sogenannten Burn-Out-Temperatur T_{Burn-Out} wird die maximale Wärmeabfuhr erreicht. Bei weiter sinkenden Temperaturen der Bauteiloberfläche ist ein Übergang zu Konvektionsprozessen zu verzeichnen. In Folge dessen sinkt der Wärmeübergangskoeffizient wieder deutlich ab.

Abbildung 2-6: Wärmestrom während der einzelnen Abkühlstadien [22].

Die poröse Mikrostruktur pulvermetallurgischer Werkstoffe beeinflusst sowohl die Wärmeleitfähigkeit als auch den Wärmeübergang [2, 14, 32]. Insbesondere für die Beschreibung der Phänomene des Wärmeübergangs ist eine Klassifizierung in offene und geschlossene Porosität sinnvoll. Geschlossen poröse Mikrostrukturen verhalten sich wie vollständig dichte Materialien. In diesen Fällen kommt der Oberflächenrauheit entscheidende Bedeutung zu. Für eine offenporöse, netzwerkartige Struktur stellt Warke [32] einen verbesserten Wärmeübergang und damit eine schnellere Abkühlung der Bauteiloberfläche im Vergleich zu einem vollständig verdichteten Werkstoff fest. Diese verbesserte Abkühlung kann einerseits damit erklärt werden, dass das Abschreckmedium in die Poren eindringen kann und damit eine vergrößerte Oberfläche für die Wärmeabfuhr zur Verfügung steht [2]. Andererseits beeinflusst die Oberflächenporosität die in flüssigen Medien ablaufenden Abschreckstadien, namentlich die Filmphase, die Siedephase und die Konvektionsphase [32]. Alle drei sind grundsätzlich auch bei pulvermetallurgischen Werkstoffen vorzufinden. Jedoch ist die Dampffilmphase in der Ausprägung deutlich reduziert, wie [32] in seinen experimentellen Untersuchungen feststellt. Grund hierfür sind die beim Eintauchen in das Abschreckmedium in der Porenstruktur vorliegende heiße Luft bzw. Gase, die sich durch das Abschrecken komprimieren. Die dadurch entstehende Sogwirkung lässt dann den das Bauteil zu Beginn umhüllenden Dampffilm lokal zusammenbrechen, was gleichbedeutend mit dem Übergang in die Siedephase ist. Das Blasensieden bei offenporösen Werkstoffen zeichnet sich grundsätzlich durch eine quantitativ größere Anzahl von Blasen aus [32], da Blasenbildung an Oberflächenfehlern wie beispielsweise Poren bevorzugt auftritt. Die dadurch auftretende turbulentere Strömung und so genannte Jets führen zu tendenziell höheren Abkühlraten an der Oberfläche. Für das Abkühlverhalten des gesamten Bauteils muss daneben auch noch die Wärmeleitfähigkeit des Bauteils in die Bewertung miteinfließen. Hierbei wirken sich Poren thermisch isolierend aus und reduzieren die Wärmeleitfähigkeit des gesamten Bauteils erheblich [2, 14].

2.2.2.2 Phasenumwandlung beim Abschrecken

In Folge der Temperaturabnahme verliert der für das Aufkohlen eingestellte Austenit an Stabilität, was zum Bestreben des Werkstoffes führt, über Phasenumwandlungen energetisch günstigere Zustände anzunehmen. Die Bildung einer neuen stabileren Phase erfolgt über Keimbildung und Wachstum. Keimbildung wird dabei generell in homogene und heterogene Keimbildung unterteilt. Aufgrund der technischen Relevanz [33] wird nachfolgend allerdings nur die heterogene Keimbildung behandelt. Keimbildung, d.h. die lokale Bildung einer neuen

Phase, erfolgt allerdings nicht im thermodynamischen Gleichgewicht, also sobald die Ausgangsphase und die sich bildende Phase gleiche freie Enthalpiewerte aufweisen, sondern erst bei einer gewissen Unterkühlung. Eine Unterkühlung hat zur Folge, dass eine Triebkraft in Größe der chemischen freien Enthalpie ΔG_{chem} zur Verfügung steht. Diese ist erforderlich, da für die Keimbildung neue Grenzfläche zur Ausgangsphase erzeugt werden muss und die Volumenänderungen in Folge der Phasenumwandlung durch lokale Verzerrungen des Gitters ausgeglichen werden müssen. Energetisch ist also die Änderung der Grenzflächenenthalpie ΔG_{renz} und die Änderung der Verzerrungsenthalpie $\Delta G_{Verzerrung}}$ durch die chemische freie Enthalpie ΔG_{chem} aufzubringen (vgl. Gleichung (2.5)). Wie die Auftragung der freien Enthalpie erst nach Überschreiten eines kritischen Keimradius r* festzustellen. In solch einem Fall ist der vorliegende Keim stabil und wachstumsfähig. Sind die Keime kleiner als der kritische Keimradius, kann das System unter Verringerung der freien Enthalpie diese wieder auflösen (vgl. Abbildung 2-7).

$$\Delta G_{tot} = \Delta G_{chem} + \Delta G_{Grenz} + \Delta G_{Verzerrung}$$
(2.5)

Abbildung 2-7: Visualisierung des kritischen Keimbildungsradius r^* und der kritischen freien Keimbildungsenthalpie ΔG_{krit} aus Betrachtungen der Oberflächenenergie und der chemischen Energie [33].

Grundsätzlich ist zwischen diffusionsgesteuerter und diffusionsloser Phasenumwandlung zu unterscheiden. Zu den rein diffusionsgesteuerten Phasenumwandlungen zählen die Austenit-Ferrit- und die Austenit-Perlit-Umwandlungen. Demgegenüber ist die Austenit-Martensit-Umwandlung als gänzlich diffusionslos zu betrachten. Sowohl Diffusions- als auch Scherumwandlungsprozesse treten bei der Austenit-Bainit-Umwandlung auf.

Austenit-Ferrit-Umwandlung:

Bei der Austenit-Ferrit-Umwandlung erfolgt die Keimbildung an der Korngrenze. Grundsätzlich kann nach Porter [34] sowohl eine inkohärente als auch teilkohärente Orientierungsbeziehung vorliegen. Das Wachstum der Keime ist grenzflächenkontrolliert. Die kubisch-flächenzentrierte Struktur des Austenits ändert sich dabei in eine kubischraumzentrierte Struktur des Ferrits. Mit zunehmender Unterkühlung ist die Bildung von plattenförmigem Ferrit, sogenanntem Widmanstätten-Ferrit, zu verzeichnen, was tendenziell eher zu teilkohärenter Ferritbildung führt.

Austenit-Perlit-Umwandlung:

Die Keimbildung bei der Austenit–Perlit-Umwandlung erfolgt an den Austenitkorngrenzen bzw. Austenit-Ferritkorngrenzen [34]. Dabei entsteht zunächst, je nach chemischer Zusammensetzung, ein Ferrit- oder Zementitkeim. Für die weiteren Ausführungen wird davon ausgegangen, dass sich zuerst ein Zementitkeim bilden kann. Dieser Keim weist zum benachbarten Austenitkorn γ_1 eine Orientierungsbeziehung auf, um die aufzuwendende Oberflächenenergie zu minimieren (vgl. Abbildung 2-8).

Abbildung 2-8: Visualisierung der Keimbildung und des Wachstums von Perlit (in Anlehnung an [34]).

Dadurch entsteht eine teilkohärente Phasengrenze mit hoher Packungsdichte [33], die Diffusionsprozesse erschwert und unwahrscheinlich erscheinen lässt. Diffusionsprozesse laufen daher eher über die folglich inkohärenten Phasengrenzen zum zweiten Austenitkorn γ_2 ab, da hier eine relativ niedrige Packungsdichte vorliegt. Da für die Zementitkeimbildung eine lokale Anreicherung mit Kohlenstoff erforderlich ist, sind Bereiche um den Zementitkeim vergleichsweise kohlenstoffarm, was zu einer Bildung von Ferrit an der Austenitkorngrenze in direkter Nachbarschaft des Zementitkeims führt. Auch hier kann wieder von einer teilkohärenten Phasengrenzfläche zum benachbarten Austenit γ_1 ausgegangen werden. Insgesamt entsteht so eine lamellare Keimstruktur an der Austenitkorngrenze. Das Wachstum der Keime erfolgt gekoppelt mit konstanter Geschwindigkeit [34] in das Austenitkorn γ_2 , das keine Orientierungsbeziehung zu den Keimen aufweist. Geschwindigkeitsbestimmend ist dabei die Diffusion des Kohlenstoffs im Austenit an die Spitze der Zementitlamelle. Gemäß Porter [34] kann die Wachstumsgeschwindigkeit v_{Perlit} durch Gleichung (2.6) angegeben werden, wobei k eine Konstante, D^y_c der Diffusionskoeffizient von Kohlenstoff im Austenit und Δ T die Unterkühlung ist.

$$\mathbf{v}_{\text{Perlit}} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{D}_{c}^{\gamma} \cdot \left(\Delta \mathbf{T}^{2}\right) \tag{2.6}$$

Die Diffusion basiert hierbei sowohl auf Volumendiffusionsprozessen im Austenit als auch auf Diffusionsvorgängen entlang der Grenzflächen. Letztgenannte ermöglichen eine schnellere Phasenumwandlung.

Austenit-Bainit-Umwandlung:

Bei größeren Abkühlgeschwindigkeiten bildet sich ein bainitisches Gefüge mit ferritischzementitischer Mikrostruktur aus. Der Zementit ist hierbei, je nach Bildungstemperatur, im Inneren oder auf der Korngrenze des nadelförmigen bzw. plattenförmigen Ferrits eingelagert. Hauptunterschied zur perlitischen Umwandlung ist hierbei, dass eine Orientierungsbeziehung zwischen dem Ferrit, dem Zementit sowie dem Austenitkorn besteht. Die Keimbildung des Ferrits erfolgt an der Korngrenze zum Austenit. Ausgehend von diesen Keimbildungsstellen wachsen die Ferritnadeln bzw. -platten in das Austenitkorn, mit dem eine Orientierungsbeziehung besteht. Die Bildung des nadel- bzw. plattenförmigen Ferrits erfolgt über Scherumwandlungsprozesse. Für das Ablaufen dieser Scherumwandlungen sind zunächst Diffusionsprozesse an der Umwandlungsfront notwendig. Hierbei diffundiert Kohlenstoff von der Umwandlungsfront in das Austenitkorn bzw. in den bereits gebildeten Ferrit, so dass die Austenitbereiche in unmittelbarer Nähe der Umwandlungsfront an Kohlenstoff verarmen und somit weitere Scherumwandlungsprozesse ermöglicht werden. Einerseits reichert sich dadurch der Austenit mit Kohlenstoff an, so dass sich bei einer ausreichenden Kohlenstoffkonzentration Zementit bilden kann und andererseits entstehen Ausscheidungen in den Nadeln bzw. Platten des gebildeten Ferrits (vgl. Abbildung 2-9). Die Wachstumsgeschwindigkeit des Bainits wird somit durch die ablaufenden Diffusionsvorgänge bestimmt.

Abbildung 2-9: Visualisierung der Keimbildung und des Wachstums von Bainit (in Anlehnung an [34]).

Austenit-Martensit-Umwandlung:

Bei hinreichend schneller Abkühlung sind großflächige Diffusionsprozesse nicht mehr möglich, was eine ferritisch-perlitische oder bainitische Phasenumwandlung ausschließt. Durch vorliegende hohe Triebkräfte in Folge hoher Unterkühlung erfolgt eine martensitische Reaktion. Dabei klappt die kubisch-flächenzentrierte Raumstruktur in ein kubischraumzentriertes Gitter um, wobei der Kohlenstoff im Gitter zwangsgelöst verbleibt. Es entsteht eine tetragonal verzerrte Raumstruktur [16]. Der Vorgang kann mit der sogenannten Bain'schen Konstruktion, wie in [33, 34] beschrieben, veranschaulicht werden. Ausgangspunkt der Umwandlung stellt dabei ein Martensitkeim dar. Das Wachstum der Keime und damit die Phasenumwandlung verlaufen annähernd mit Schallgeschwindigkeit [33].

Der sich bildende Martensitanteil ist temperaturabhängig. Im Falle der martensitischen Reaktion ist hierbei die aufzuwendende Energie für Anpassungsverformungen dominant. Dementsprechend kann Martensitbildung nur dann einsetzen, wenn ausreichend Energie für

Anpassungsverformungen zur Verfügung steht. Diese freie Enthalpie resultiert aus einer Unterkühlung, die der Martensitstarttemperatur M_s entspricht. Ist die zur Verfügung stehende Triebkraft erschöpft, kann sich kein neuer Martensit bilden. Für einen zunehmenden Martensitanteil ist dann eine weitere Abkühlung erforderlich, weitere was Anpassungsverformungen ermöglicht. Die Temperatur, bei der der gesamte Martensit wird als Martensitfinish-Temperatur M_f bezeichnet. umgewandelt ist. Ist die Martensitumwandlung unvollständig, verbleibt hochdeformierter Austenit, sogenannter Restaustenit, im Gefüge. Insbesondere bei Kohlenstoffgehalten über 0,5 Ma% muss unter die Raumtemperatur abgekühlt werden, um die Martensitfinish-Temperatur zu erzielen. Daher liegt für einsatzgehärtete Bauteile in der randnah gehärteten Schicht üblicherweise Restaustenit vor.

Gefüge beim Einsatzhärten:

Aufgrund der hohen Kohlenstoffgehalte und Abkühlgeschwindigkeiten im Randbereich einsatzgehärteter Bauteile ist hier die Bildung von einer martensitischen Randschicht zu beobachten, wohingegen duktileres Gefüge im Kern ein durch geringere Abkühlgeschwindigkeiten und Kohlenstoffgehalte angestrebt wird. Der Zusammenhang zwischen Abkühlgeschwindigkeit und ablaufender Phasenumwandlung kann dabei den so genannten Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubildern (ZTU-Diagramme) entnommen werden. Dabei ist allerdings zu beachten, dass diese von der chemischen Zusammensetzung abhängig sind und daher für jede Tiefe ein eigenes ZTU-Diagramm Gültigkeit besitzt. Im Falle pulvermetallurgischer Werkstoffe muss zudem der Effekt der Porosität auf das ZTU-Diagramm berücksichtigt werden. Dazu liefern [4, 30, 32, 35, 36] experimentelle Befunde aus den Betrachtungen isothermer diffusionsgesteuerter Umwandlungsversuche. Dabei sind verkürzte Inkubationszeiten sowie Umwandlungsendzeiten zu verzeichnen [35, 36]. Dies kann nicht auf die geringere thermodynamische Stabilität von porösen Werkstoffen, die eine erhöhte Oberflächenenergie aufweisen, zurückgeführt werden [30]. Stattdessen geht Warke [32] davon aus, dass Keimbildung an den Poren sowie eine zunehmende Mobilität der Atome entlang der Porenoberfläche diese experimentellen Befunde bewirken. Daneben können auftretende Umwandlungsdehnungen durch das Porenvolumen aufgenommen werden, was auch Phasenumwandlungen bei geringeren Triebkräften ermöglicht [36].

2.2.2.3 Eigenspannungsentwicklung beim Härten

Neben der martensitischen Randschicht und dem duktilen Kern sorgen insbesondere die Eigenspannungszustände nach dem Abschrecken für die guten Gebrauchseigenschaften. Eigenspannungen sind dabei gemäß Definition DIN EN 15305 [37] zurückbleibende Spannungen in einem temperaturgradientenfreien Bauteil, ohne dass äußere Kräfte und Momente wirken [21]. Dabei können Eigenspannungen erster bis dritter Ordnung unterschieden Nachfolgende werden [37]. Ausführungen beziehen sich auf Makroeigenspannungen. Diese Eigenspannungen erster Ordnung im einsatzgehärteten Bauteil sind die Folge lokaler inhomogener plastischer Verformungen in Folge von überlagerten thermischen und umwandlungsbedingten Dehnungen. Veranschaulicht werden können die sich bildenden Spannungen durch das Rand-Kernmodell [21]. Dabei wird davon ausgegangen, dass die thermischen Dehnungen auf entstehende Temperaturgradienten beim Abschrecken zurückzuführen sind. Zunächst, durch den direkten Kontakt zwischen Randschicht und Abschreckmedium, ist im Rand eine schnellere Temperaturabnahme als im Bauteilkern zu verzeichnen. Die Folge dieses stärkeren Schrumpfungsbestrebens sind Zugspannungen im Bauteilrand und Druckspannungen im Kern. Wird die Warmfließgrenze überschritten, kommt es lokal zu Plastifizierungen. Mit Überschreiten der maximalen Temperaturdifferenz zwischen Rand und Kern, kühlt das Bauteilinnere schneller ab, was zu einem Abbau der vorliegenden Spannungen führt. Durch die plastischen Dehnungen im Rand und die plastischen Stauchungen im Kern bilden sich Druckeigenspannungen im Rand und abstützende Zugeigenspannungen im Kern.

werden Diesen rein thermischen in metallischen Werkstoffen Spannungen Umwandlungsspannungen durch Volumenänderungen in Folge der Austenitumwandlung überlagert. Dabei kann festgehalten werden, dass die martensitische Reaktion die vorliegenden Spannungen stets zu negativeren Werten verschiebt. Entscheidend für den letztlichen Eigenspannungszustand ist dabei die Abfolge der Umwandlungen [21]. Bei einer ungewünschten Durchhärtung, wenn beispielsweise eine Durchkohlung in Folge von offener Porosität auftritt, wandelt der Rand vor dem Kern um. Dabei kommt es durch die martensitische Reaktion der Oberfläche ausgehend von thermischen Zugspannungen in der Randschicht und thermischen Druckspannungen im Kern zu einem Vorzeichenwechsel. Der Volumensprung bei der Austenit-Martensit-Umwandlung ist also zunächst mit dem Aufbau von Druckspannungen im Rand und Zugspannungen im Kern verbunden. Da auch der Kern durch einen hohen Kohlenstoffgehalt in Folge der Durchkohlung die kritische Abkühlgeschwindigkeit erreicht, ist auch im Kern mit einer martensitischen Umwandlung zu rechnen. Dementsprechend kann der Volumensprung unter der Dehnungsbehinderung des bereits umgewandelten Randes zu einem erneuten Vorzeichenwechsel führen. Die Folge ist ein unerwünschter Zugeigenspannungszustand in der Randschicht (vgl. Abbildung 2-10 links) [21].

Beim Einsatzhärten wird eine ferritisch-perlitische oder bainitische Umwandlung des Kernes vor der martensitischen Umwandlung der Randschicht angestrebt. Ausgehend von den thermischen Spannungen mit vorliegendem Zugspannungen im Rand und Druckspannungen im Bauteilkern werden bei einem zunächst ferritisch-perlitisch oder bainitisch umwandelnden Kern die Umwandlungsspannungen durch Plastifizierungen in Folge der niedrigen Warmstreckgrenze bei hohen Temperaturen begrenzt. Sowohl die nachfolgende martensitische Umwandlung des Randes bei Erreichen der M_s-Temperatur als auch das Schrumpfen des Kernes führt zu Dehnungen, die den vorliegenden Zugspannungen des Randes entgegenwirken. Dadurch kann ein Vorzeichenwechsel erfolgen, was letztlich zu Druckeigenspannungen Rand Zugeigenspannungen Kern führt im und im (vgl. Abbildung 2-10 rechts).

Abbildung 2-10: Eigenspannungsentwicklung für das Einsatzhärten: (links) Rand- vor Kernumwandlung sowie (rechts) Kern- vor Randumwandlung [21].

2.3 Einsatzhärten oberflächenverdichteter gradiert poröser pulvermetallurgischer Bauteile

Zur Vermeidung von Durchkohlungseffekten und ungünstiger Bauteilzustände wie Zugeigenspannungen an der Bauteiloberfläche, kann die offenporöse Oberfläche in eine geschlossene, gradiert poröse Randschicht überführt werden. Untersuchungen von Merkel [13] zeigen, dass hierbei oberflächennah isolierte Poren ohne Netzwerkcharakter vorliegen. Die Aufkohlrate nimmt, wie beispielsweise Prucher und Gallo [4, 24] feststellen, bei höheren Dichten generell ab. Der Aufkohlvorgang ist dann nicht von Gasdiffusionsprozessen in Porenkanälen, sondern durch den Stoffübergang an der verdichteten Oberfläche sowie durch Diffusionsprozesse im Festkörper bestimmt. Als Konsequenz lässt sich daraus schließen, dass bei vorliegenden isolierten Poren nicht von erneuten Stoffübergängen unterhalb der makroskopischen Oberfläche auszugehen ist [4].

2.4 Simulation des Einsatzhärtens mittels Finiter Elemente Methode

Bei der numerischen Beschreibung von Wärmebehandlungsprozessen sind komplexe Wechselwirkungen zwischen den Phasen, der Temperatur, den Dehnungen und der chemischen Zusammensetzung, wie in [38-40] gezeigt, zu implementieren, um die Eigenspannungs-, Temperatur- und Mikrostrukturentwicklung beschreiben zu können (vgl. Abbildung 2-11).

Abbildung 2-11: Wechselwirkung zwischen der Temperatur, dem Kohlenstoffgehalt, der Phasenverteilung und dem mechanischen Verhalten beim Einsatzhärten.

Beispielsweise können durch eine inhomogene Temperaturverteilung thermische Spannungen entstehen, die durch Überschreiten der Warmstreckgrenze lokale Plastifizierungen verursachen. Durch das Abschrecken und die damit einhergehende Temperaturabnahme kommt es je nach vorliegender Abkühlgeschwindigkeit lokal zur Bildung von Ferrit/Perlit, Bainit oder Martensit. Diese Änderungen der Mikrostruktur bedingen Volumenänderungen, die zu elastischen wie auch lokal plastischen Verformungen führen und damit den Dehnungsbzw. Spannungszustand direkt beeinflussen. Andererseits hat der vorliegende Spannungszustand wiederum Einfluss auf das Umwandlungsverhalten. Hierbei ist neben spannungsinduzierten Umwandlungsvorgängen die Umwandlungsplastizität zu nennen [38] (vgl. Abbildung 2-11).

Trotz einer Vielzahl von Studien und Veröffentlichungen sind kommerzielle Softwarepakete nur eingeschränkt in der Lage, thermochemische Wärmebehandlungen ohne benutzerdefinierte Erweiterungen zu beschreiben. Die relevanten Differentialgleichungen, wie das Fick'sche Gesetz zur Beschreibung der Diffusion oder die Fourier-Gleichung zur Beschreibung von Temperaturfeldern, sind zwar implementiert, aber Kinetikmodelle zur Beschreibung des Stoffüberganges oder der Phasenumwandlungen fehlen häufig, wie den Dokumentationen der Softwarepakete zu entnehmen ist.

Die zur numerischen Beschreibung des Aufkohlens erforderlichen Stoffübergangsmodelle können einer Auflistung von Sundelöf [41] entnommen werden. Üblicherweise berücksichtigen diese Modelle lediglich den Stoffübergang an sich. An- und Abtransportprozesse sowie Grenzflächenreaktionen werden materialwissenschaftlich vernachlässigt.

Eine Möglichkeit zur Beschreibung des Stoffüberganges bei vorliegender Methan-Wasserstoffatmosphäre stellt das in [42] vorgestellte Kinetikmodell nach Grabke dar (vgl. Gleichung (2.7)).

$$j_{c} = k_{1} \cdot \frac{p_{CH_{4}}}{p_{H_{2}}^{0,5}} - k_{2} \cdot a_{c} \cdot p_{H_{2}}^{1,5}$$
(2.7)

Dieses Ratengesetz erlaubt die Berechnung des molaren Stoffstromes j_c über die Grenzfläche und berücksichtigt sowohl Aufkohlungs- wie auch Entkohlungsvorgänge. Basis des Kinetikmodells sind die Kohlenstoffaktivität a_c, also der Dampfdruck des Kohlenstoffs im Austenit bezogen auf den Dampfdruck in reinem Kohlenstoff, k₁ der Ratenkoeffizient für das Aufkohlen, k₂ der Ratenkoeffizient für die Entkohlung und die Partialdrücke von Methan p_{H_2} und Wasserstoff p_{CH_4} . In [41] wird das Modell kritisch diskutiert und insbesondere die Beschränkung auf eine Methan-Wasserstoffatmosphäre sowie die vereinfachte Beschreibung der Grenzflächenreaktion bemängelt.

Ein weiteres Modell, basierend auf Versuchsdaten für eine Kohlenstoffmonoxidatmosphäre, liefert [43, 44]. Auch hier berechnet sich der molare Massenstrom j_c durch die Partialdrücke

der Gase p_i , die Kohlenstoffaktivität im Feststoff a_c , die Ratenkoeffizienten k_i und die Gleichgewichtskohlenstoffaktivität a_c^{eq} . Für die Boudouard-Reaktion gibt [43] Gleichung (2.8) an.

$$j_{c} = \frac{k_{1} \cdot p_{CO}^{2}}{k_{2} \cdot p_{CO} \cdot a_{c}^{eq} + k_{3} \cdot p_{CO} + k_{4} \cdot a_{c}^{eq} \cdot a_{c}} \cdot (a_{c}^{eq} - a_{c})$$
(2.8)

Ist die heterogene Wasserstoffreaktion maßgebend so ist Gleichung (2.9) anzuwenden.

$$j_{c} = \frac{k_{1} \cdot p_{CO}^{2} + k_{2} \cdot p_{CO} \cdot p_{H_{2}}}{k_{3} \cdot p_{CO} + k_{4} \cdot p_{H_{2}} + k_{5} \cdot a_{c}}$$
(2.9)

Aussagen zu den einzelnen ablaufenden Teilreaktionen sind den Gleichungen (2.8) und (2.9) allerdings nicht zu entnehmen.

Oftmals wird der Stoffübergang über eine empirische Stoffübergangsfunktion beschrieben, auch technologischer Ansatz genannt (vgl. Gleichung 2.10) [21, 45–48].

$$\mathbf{j}_{c} = \alpha \cdot (\mathbf{a}_{p} - \mathbf{a}) \tag{2.10}$$

Dabei ist j_c der molare Stoffstrom, α der Stoffübergangskoeffizient, a_p das vorliegende Kohlenstoffpotential in der Gasatmosphäre und a das Kohlenstoffpotential im Feststoff. Sowohl das vorliegende Kohlenstoffpotential im Gas a_p als auch der Stoffübergangskoeffizient α können aus Partialdrücken berechnet werden. Hierzu sei auf die Beschreibung von Stickels [47] verwiesen. Nachteil dieser Vorgehensweise - insbesondere bei pulvermetallurgischen Bauteilen - ist, dass der Stoffübergangskoeffizient experimentell bestimmt ist und für die Atmosphäre gilt, jedoch nicht für die tatsächliche Zusammensetzung der Atmosphäre in der offenen Porosität.

Das Härten und die dabei ablaufenden Phasenumwandlungen werden üblicherweise durch eine Kombination von Modellen für diffusionsgesteuerte und diffusionslose Phasenumwandlungen beschrieben.

Die mathematische Beschreibung nach der Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorow-Gleichung findet im Falle der diffusionsgesteuerten Phasenumwandlung am häufigsten Anwendung [48-51] (vgl. Gleichung (2.11)).

$$\mathbf{w}_{i} = 1 - \exp(-\mathbf{b} \cdot \mathbf{t}^{n}) \tag{2.11}$$

Bei diesem Modell wird der gebildete Phasenanteil w_i mittels des Koeffizienten für Keimbildung und Wachstum b sowie des Transformationsmechanismusexponenten n und der Zeit t berechnet. Gültigkeit besitzt das Modell allerdings nur im isothermen Falle. Basis können dann isotherme Zeit-Temperatur-Umwandlungs-Diagramme sein. Um mit diesem Modell die kontinuierliche Abkühlung beschreiben zu können, wird die kontinuierliche Abkühlung durch isotherme Stufen approximiert [52-55].

Eine weitere Möglichkeit zur Beschreibung von diffusionsgesteuerten Phasenumwandlungen, die allerdings nur selten Verwendung findet, liefert Leblond [56]. Die mathematische Formulierung ist mit einem Ratengesetz vergleichbar und wird in der Literatur auch teilweise unter diesem Begriff geführt (vgl. Gleichung (2.12)).

$$\dot{w} = \frac{w_{eq}(T) - w}{\tau(T)}$$
(2.12)

Dabei ist τ die charakteristische Zeit für die Reaktion bei der Temperatur T, w_{eq} der Gleichgewichtsphasenanteil bei der Temperatur T und w der bereits gebildete Anteil.

Für diffusionslose Phasenumwandlungen werden zumeist die Modelle nach Koistinen und Marburger [57] bzw. Yu [58] verwendet. Das gängigste dieser beiden Modelle für die martensitische Härtung ist hierbei der Ansatz nach Koistinen und Marburger, der von einem linearen Verhältnis zwischen Martensitanteil und Temperaturänderung ausgeht. In integrierter Form ist der Koistinen-Marburger-Ansatz in Gleichung (2.13) dargestellt. Der gebildete Martensitgehalt w_M berechnet sich hierbei aus dem maximal möglichen Gehalt w_M^{max}, der Konstanten k und der Temperaturdifferenz aus Martensitstarttemperatur M_s sowie der vorliegenden Temperatur T (vgl. Gleichung (2.13)).

$$w_{M} = w_{M}^{max} \cdot [1 - exp(-k \cdot (M_{s} - T))]$$
 (2.13)

Die Konstante k stellt in diesem Zusammenhang die martensitische Umwandlungsrate dar und ist gemäß [59] von der chemischen Zusammensetzung, insbesondere vom Kohlenstoffgehalt, abhängig, jedoch von der Temperatur unabhängig. In den meisten Fällen wird k zu 0,011 [59] gewählt.

Die Martensitstarttemperatur kann über Gleichung (2.14) [21] abgeschätzt werden und trägt dabei der chemischen Zusammensetzung, insbesondere den Gehalten an Kohlenstoff C, Mangan Mn, Chrom Cr, Nickel Ni und Molybdän Mo Rechnung.

$$M_{*} = 561 - 474 \cdot \%C - 33 \cdot \%Mn - 17 \cdot \%Cr - 17 \cdot \%Ni - 21 \cdot \%Mo$$
(2.14)

Eine weitere Möglichkeit zur Berechnung des Martensitgehaltes w_M stellt das bereits erwähnte Modell nach Yu [58] dar. Dieses kann Gleichung (2.15) entnommen werden, wobei w_M^{max} der maximal mögliche Martensitgehalt, M_s die Martensitstarttemperatur und M_f die Martensitfinishtemperatur ist. Der Exponent p wird dabei je nach Literaturquelle zu 2 bzw. 2,5 gewählt. Schröder [60] wählt p beispielsweise zu 2.

$$w_{M} = w_{M}^{max} \cdot \left[1 - \left(\frac{T - M_{f}}{M_{s} - M_{f}} \right)^{p} \right]$$
(2.15)

2.5 Anwendung der Simulation zur Abbildung von Wärmebehandlungsprozessen

Erste simulative Arbeiten [61-63] zur Beschreibung thermochemischer Wärmebehandlungsprozesse für porenfreie Werkstoffe haben sich zunächst auf den Teilprozessschritt Abschrecken konzentriert. Das Kohlenstoffprofil wurde hierbei nicht simulativ vorhergesagt. Herausforderung dieser Arbeiten war die Berechnung lokaler Werkstoffeigenschaften in Abhängigkeit des vorliegenden Kohlenstoffgehaltes und der Temperatur.

Ausgehend von diesen ersten Schritten wurden die Simulationen zunehmend um die thermochemische Modellierung des Aufkohlens erweitert [64-66]. Dabei hat sich gezeigt, dass das Aufkohlprofil nur sinnvoll mit temperatur- und insbesondere kohlenstoffabhängigen Diffusionskoeffizienten beschrieben werden kann. Die Abbildung oberflächennaher Gradienten erfordert dabei randnah eine feine Vernetzung. Für das Abschrecken sind letztlich alle komplexen thermischen, mechanischen und metallurgischen Wechselwirkungen, wie in [39, 40] beschrieben, zu berücksichtigen.

In den Forschungsarbeiten von Besserdich [67] hat sich gezeigt, dass eine sinnvolle Vorhersage der Eigenspannungsentwicklung nur durch Berücksichtigung der umwandlungsplastischen Verformungen, die bei Umwandlungen im spannungsbehafteten Werkstoffvolumen auftreten, erfolgen kann. Ohne umwandlungsplastische Dehnungsanteile können vorliegende Eigenspannungszustände lediglich qualitativ abgebildet werden, wie Besserdich [67] anhand von Tangentialeigenspannungen von wassergehärteten Zylindern aus 42CrMo4 zeigen konnte. Daneben ist für die Vorhersagegüte der Simulation der Wärmeübergang zwischen Bauteil und Abschreckmedium entscheidend. In [68-71] sind hierzu sowohl experimentelle wie auch numerische Ergebnisse für gasförmige und flüssige Medien beschrieben. Eine Modellierung für flüssige Abschreckmedien unter Berücksichtigung des Leidenfrostphänomens kann der Arbeit von Majorek [72] entnommen werden. Hierbei werden temperatur- und ortsabhängige Wärmeübergangskoeffizienten aus Temperatur-Zeitverläufen Bauteil und videotechnischer Analyse am der Oberflächenbenetzung ermittelt. Die Ergebnisse belegen, dass durch eine temperatur- und ortsabhängige Beschreibung des Wärmeübergangskoeffizienten die Vorhersagequalität von Axialeigenspannungen wasserabgeschreckter 42CrMo4-Zylindern verbessert werden kann.

Untersuchungen [73-75] zeigen, dass die Fertigungsabfolge einen signifikanten Einfluss auf den Verzug hat. Die vorliegenden Eigenspannungen können beim Erwärmen die Warmstreckgrenze überschreiten, so dass lokal plastische Verformungen auftreten, die Formund Maßänderungen nach sich ziehen. Mit der gängigen Strategie, die numerische Beschreibung des Einsatzhärtens mit einem idealisierten eigenspannungsfreien vollständig austenitisierten Zustand zu beginnen, kann dieser Verzug nicht vorhergesagt werden. Es ist daher sinnvoll, das Erwärmen wie auch die gesamten Fertigungskette einzubeziehen, wenn die Verzugsbestimmung im Mittelpunkt steht. Hat die numerische Beschreibung das Ziel, lediglich die Mikrostruktur und Eigenspannungsentwicklung vorherzusagen, kann auf die Beschreibung des Erwärmens verzichtet werden.

Durch die Simulation komplexer Bauteile wie auch die Beschreibung ganzer Prozessketten, nehmen sowohl die Datenmenge als auch die Rechenzeiten stark zu. Daher gibt es zunehmend Bestrebungen, den Rechenaufwand zu vereinfachen. In [38] werden Methoden und Strategien für das Einsatzhärten komplex geformter Bauteile, namentlich Abstraktion und Submodelling, vorgestellt und bewertet. Ersteres beruht hierbei auf der Vereinfachung von Geometrien und wurde hinsichtlich der Auswirkungen auf die Kohlenstoffverteilung, die Eigenspannungs- und Verzugsentwicklung untersucht. Für die Kohlenstoffverteilung konnten gute Ergebnisse erzielt werden, wohingegen die Eigenspannungs- und Verzugsentwicklung durch Geometrieänderungen beeinflusst werden. Die Abstraktion ist daher nur bis zu einem gewissen Grade zu empfehlen. Das Submodelling, also das lokale Freischneiden von Bauteilbereichen, konnte demgegenüber überzeugen. Der Aufwand für die Umsetzung dieser Strategie ist allerdings deutlich höher.

Hinsichtlich der numerischen Beschreibung des Einsatzhärtens bei pulvermetallurgischen Bauteilen gibt es derzeit kaum Literatur. Sundelöf [41] beschränkt sich lediglich auf den Aufkohlungsvorgang. Das vorgestellte Aufkohlmodel wird allerdings aufgrund fehlender experimenteller Daten nicht ausreichend verifiziert. In seiner Ausarbeitung wird die Vorgehensweise verfolgt, dass mittels Bildanalyse der poröse Werkstoff in ein binarisiertes Bild überführt wird, welches zur Geometrieerzeugung genutzt wird. Mittels dieser Geometrie erfolgt dann die Simulation des Aufkohlungsvorganges. Mit Hinblick auf Datenmenge und Rechenzeit ist dieses Konzept allerdings kritisch zu sehen. Erfolgsversprechender scheinen erste Schritte und Ergebnisse zu sein, die auf einem homogenisierten Modell ohne modellierte Porosität beruhen [41]. Eine Gegenüberstellung mit experimentellen Daten erfolgt allerdings nicht.

3 Werkstoff, Probenzustand und Probengeometrien

3.1 Werkstoff

Basiswerkstoff für alle durchgeführten Untersuchungen ist das kommerziell erhältliche, vorlegierte, wasserverdüste Pulver Astaloy 85 Mo (Firma Höganäs AB, Schweden). Dieses an sich nahezu kohlenstofffreie eisenbasierte Pulver wurde durch Beimischung von Graphit modifiziert. Durch diese Vorgehensweise wurden drei Pulvermischungen mit 0,25, 0,5 bzw. 0,8 Ma% Kohlenstoff erstellt (vgl. chemische Analyse in Tabelle 3-1), die die Grundlage für diese Arbeit darstellen.

Die erstgenannte Pulvermischung mit 0,25 Ma% Kohlenstoff dient einerseits der Bestimmung von Eingabedaten für die numerische Berechnung und andererseits stellt diese Pulvermischung den Basiswerkstoff zur experimentellen Durchführung der Prozesskette aus Abbildung 1-1 dar. Alle weiteren Pulvermischungen dienen ausschließlich der Bestimmung von Eingabedaten für die Simulation.

Tabelle 3-1: Chemische Zusammensetzung des modifizierten Basiswerkstoffes Astaloy 85 Mo gemäß Spektralanalyse.

Fe [Ma%]	C [Ma%]	Mo [Ma%]	Mn [Ma%]	Cr [Ma%]	Ni [Ma%]	Cu [Ma%]
	0,246					
Basis	0,517	0,866	0,128	0,038	0,031	0,026
	0,776					

3.2 Probengeometrien und –zustände für die Bestimmung von Eingabedaten

Ausgangsgeometrie für einen Großteil der Versuche zur Bestimmung von Eingabedaten waren gesinterte zylindrische Rohlinge mit einem Durchmesser von 12,7 mm und einer Länge von 10 mm (vgl. Abbildung 3-1). Diese wurden über die pulvermetallurgische Herstellroute, bestehend aus den Prozessschritten Kompaktieren und Sintern, aus allen drei Pulvermischungen hergestellt. Das Kompaktieren erfolgte mittels eines uniaxialen Pressvorganges. Zur Einstellung verschiedener Dichtestufen wurden die Presskräfte variiert. Das Sintern wurde in einer stickstoffbasierten Atmosphäre bei 1120 °C für 20 min durchgeführt. Aufstickungseffekte werden im Weiteren vernachlässigt. Es ergaben sich Rohlinge der Dichten 6,8 und 7,2 g/cm³ mit Kohlenstoffgehalten von jeweils 0,25, 0,5 bzw.

0,8 Ma%. Porenfreie Rohlinge mit den Kohlenstoffgehalten von 0,25, 0,5 bzw. 0,8 Ma%, die eine Dichte von 7,8 g/cm³ aufweisen, wurden durch eine zusätzliche Schmiedebehandlung gefertigt. Die Herstellung der Rohlinge erfolgte in allen Fällen beim Industriepartner Höganäs AB.

Abbildung 3-1: Geometrie der zylindrischen Rohlinge nach dem Sintern.

Für Aufkohluntersuchungen zur Bestimmung effektiver Diffusionskoeffizienten wurden Rohlinge (vgl. Abbildung 3-1) der Dichtestufen 6,8, 7,2 und 7,8 g/cm³ mit einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0,25$ Ma% verwendet. Um Einflüsse offener Porosität beim Aufkohlungsprozess ausschließen zu können, wurden die Stirnflächen der zylindrischen Rohlinge um 0,1 mm abgeschliffen.

Das Umwandlungsverhalten, der Wärmeausdehnungskoeffizient und die Umwandlungsdehnungen wurden mit dünnwandigen zylindrischen Hohlproben mit einem Außendurchmesser von 4 mm, einer Bohrung mit einem Durchmesser von 3,6 mm und einer Länge von 10 mm (vgl. Abbildung 3-2) ermittelt.

Abbildung 3-2: Zylindrische Hohlprobengeometrie (Proben für die Dilatometeruntersuchungen).
Zur Herstellung der Probengeometrie für das Abschreckdilatometer wurden die Rohlinge aus Abbildung 3-1 zerspant. Es wurden Abschreckdilatometerproben der Dichten 6,8, 7,2 bzw. 7,8 g/cm³ mit Kohlenstoffgehalten von 0,25, 0,5 bzw. 0,8 Ma% gefertigt. Auf eine geringfügige Verdichtung durch geringe Zerspankräfte wurde geachtet. CT-Analysen belegen, dass die poröse Mikrostruktur auch nach dem Zerspanen weitgehend erhalten bleibt (vgl. Abbildung 3-3).



Abbildung 3-3: CT-Analyse an einer zylindrischen Hohlprobengeometrie nach der Zerspanung.

Die mechanischen Eigenschaften des Werkstoffes wurden an zylindrischen Proben für das Verformungsdilatometer mit einem Durchmesser von 4 mm und einer Länge von 8 mm bestimmt (vgl. Abbildung 3-4). Die Herstellung der zylindrischen Proben für die Deformationsexperimente erfolgte über Zerspanung der Rohlinge aus Abbildung 3-1. Es wurden Rohlinge der Dichten 6,8 bzw. 7,2 g/cm³ mit Kohlenstoffgehalten von 0,25, 0,5 bzw. 0,8 Ma% bearbeitet. Gemäß den durchgeführten CT-Analysen blieb auch hierbei die poröse Mikrostruktur weitgehend erhalten.



Abbildung 3-4: Zylindrische Probengeometrie (Proben für die Deformationsexperimente).

Für die thermophysikalischen Untersuchungen zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit bzw. der Wärmekapazität wurden zylindrische Flachproben mit einem Durchmesser von 12,7 mm (Wärmeleitfähigkeit) bzw. 5 mm (Wärmekapazität) und einer Höhe von 1 mm verwendet. Die Probenherstellung erfolgte pulvermetallurgisch. Gesintert wurde 20 min lang in einer stickstoffbasierten Atmosphäre bei 1120 °C. Jede Probengeometrie lag in den Kohlenstoffvariationen 0,25, 0,5 bzw. 0,8 Ma% und den Dichtestufen 6,8 und 7,8 g/cm³ vor. Für Warmzugversuche wurden Probengeometrien gemäß DIN 2740 [76], wie in Abbildung 3-5 dargestellt, verwendet. Diese Proben wurden direkt über die pulvermetallurgische Route ausgehend von Astaloy 85 Mo-Pulver mit einem Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma% hergestellt. Das Sintern erfolgte ebenfalls wie bei den zylindrischen Rohlingen für 20 min in einer stickstoffbasierten Atmosphäre bei 1120 °C. Aufstickungseffekte werden im Weiteren vernachlässigt. Im Endzustand lag eine Dichte von 7,2 g/cm³ vor.



Abbildung 3-5: Zugprobengeometrie (DIN 2740) zur Durchführung von Warmzugversuchen.

3.3 Probengeometrie und –zustand des Demonstrators

Als Demonstratorbauteil zur Durchführung der in Abbildung 1-1 dargestellten Prozesskette wurde die taillierte Flachprobengeometrie aus Abbildung 3-6 verwendet.

Die taillierte Flachprobe wurde pulvermetallurgisch aus Astaloy 85 Mo-Pulver mit einem Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma% beim Industriepartner Höganäs AB hergestellt. Das Sintern erfolgte bei Temperaturen von 1120 °C für 20 min in einer stickstoffbasierten Atmosphäre. Damit ergibt sich ein Lieferzustand mit einer Dichte von 7,2 g/cm³, was einer mittleren

Porosität von 7,5 % entspricht. Dies konnte ebenfalls mit quantitativer Bildanalyse [77] nachgewiesen werden.



Abbildung 3-6: Gewähltes Demonstratorbauteil: taillierte Flachprobe gemäß ISO 3928.

Der randnah verdichtete gradiert poröse Oberflächenzustand, der Ausgangszustand für das in dieser Arbeit betrachtete Einsatzhärten ist, wurde mittels einer Festwalzbehandlung am Institut für angewandte Materialien (IAM) - Werkstoffkunde eingestellt. Dazu wurde der Demonstrator in eine Matrize eingebettet (vgl. (1) in Abbildung 3-7) und der taillierte Bereich mäanderförmig mit einem hydrostatisch gelagerten Werkzeug des Typs Ecoroll HG 6 (vgl. (2) Abbildung 3-7), welches auf einer Hartstoffkugel mit einem Durchmesser von 6 mm (vgl. (3) Abbildung 3-7) basiert, bearbeitet. Die Bewegungsrichtung wie auch der Vorschub des Werkzeugs werden von einer CNC-gesteuerten Fräsmaschine (vgl. (4) in Abbildung 3-7) vorgegeben. Im hier vorliegenden Fall wurde die mechanische Oberflächenbehandlung mit einem Vorschub von 1000 mm/min und einem Festwalzdruck von 180 bar durchgeführt. Der Bahnabstand wurde zu 0,04 mm gewählt. Die gewählten Parameter sind das Ergebnis von Parameterstudien (vgl. [13] und [77]).



Abbildung 3-7: Links: Festwalzen in mäanderförmigen Bahnen. Rechts: Festwalzwerkzeug vom Typ Ecoroll HG 6 [77].



Abbildung 3-8: Porositätstiefenprofil der taillierten Flachprobe nach einem Festwalzprozess mit einem Festwalzdruck von 180bar. Auswertung erfolgte mittels Bildanalyse.

Damit ergibt sich der in Abbildung 3-8 dargestellte gradiert poröse Randschichtzustand. Der für das Festwalzen typische Porositätstiefenverlauf zeichnet sich durch ein Minimum unterhalb der Oberfläche aufgrund der Hertz'schen Pressung aus. In diesem Bereich kann von einer weitestgehend porenfreien Werkstoffstruktur ausgegangen werden. Eine Verdichtung kann bis in eine Tiefe von 750 µm festgestellt werden.

4 Versuchseinrichtungen, Versuchsdurchführung, und Charakterisierungsmethoden

4.1 Versuchsdurchführungen zur Materialmodellierung

4.1.1 Aufkohluntersuchungen zur Bestimmung effektiver Diffusionskoeffizienten

Das Aufkohlen zur Bestimmung effektiver Diffusionskoeffizienten wurde im halbautomatischen Glockenofen vom Typ SOLO 202 am IWT Bremen durchgeführt. Die Prozessatmosphäre wurde durch Stickstoff/Methanol mit Propanzugabe erzeugt. Die Aufkohlatmosphäre setzte sich aus 20 % CO, 40 % H₂ sowie 40 % N₂ zusammen. Prozessparameter für die Bestimmung effektiver Diffusionskoeffizienten waren ein konstanter Kohlenstoffpegel von 1 Ma%, eine Aufkohlungstemperatur von 940 °C und eine Aufkohlungszeit von 4 h. Aufkohlungsuntersuchungen wurden an zylindrischen Proben der Dichten 6,8, 7,2 und 7,8 g/cm³ durchgeführt. Alle eingesetzten Proben hatten anfänglich einen Grundkohlenstoffgehalt von 0,25 Ma%. Das Aufkohlen erfolgte einseitig über die geschliffene Stirnseite der zylindrischen Rohlinge. Alle anderen Seiten wurden mit der Härteschutzpaste Vacucoat 0095 (Firma Nüssle GmbH, Nagold) abgedeckt.

Ausgewertet wurden die Versuche per optischer Emissionsspektrometrie (OES). Eingesetzt wurde hierbei ein Spektrometer vom Typ ARL 3460. Kohlenstofftiefenprofile konnten durch abwechselnden Materialabtrag per Schleifen sowie OES-Messungen erzeugt werden.

4.1.2 Abschreckdilatometeruntersuchungen zur Bestimmung des Zeit-Temperatur-Umwandlungsverhaltens, der Umwandlungsdehnungen und des thermischen Ausdehnungskoeffizienten

Abschreckdilatometeruntersuchungen erfolgten mit einem Dilatometer des Typs Bähr DIL 805 A/D (Firma Bähr-Thermoanalyse GmbH, Hüllhorst). Der Aufheizvorgang erfolgte in allen Fällen induktiv (Induktor: vgl. (1) Abbildung 4-1) unter Vakuumatmosphäre. Abgeschreckt wurde mittels Heliumgas. Der Aufheiz- und Abschreckvorgang wurde über ein mittig an die Proben angeschweißtes Thermoelement des Typs S (vgl. (2) Abbildung 4-1) geregelt. Als Auflösungsvermögen wird für die Temperaturmessung 0,5 °C durch den Hersteller [78] angegeben. Die Messung der Längenänderung erfolgt über einen induktiven Wegaufnehmer, der über Schubstangen (vgl. (3) Abbildung 4-1) mit der Probe verbunden ist. Die maximale Auflösung beträgt 0,05 µm [78].



Abbildung 4-1: Vakuumkammer des Abschreckdilatomters DIL 805 A/D.

Abschreckdilatometeruntersuchungen wurden an Proben (vgl. Abbildung 3-2) aller 3 Kohlenstoffstufen (0,25, 0,5 und 0,8 Ma%) und Dichten (6,8, 7,2 und 7,8 g/cm³) durchgeführt.

Zu unterscheiden sind im Weiteren isotherme und kontinuierliche Dilatometerversuche. Ziel der isothermen Abschreckdilatometeruntersuchungen stellt die Ermittlung des isothermen Zeit-Temperatur-Umwandlungsverhaltens in Form von ZTU-Diagrammen dar. Die Versuchsdurchführung umfasst dabei das induktive Erwärmen der Probe innerhalb 1 min auf 940 °C, das Halten dieser Temperatur für 3 min und ein anschließendes Abschrecken mit einer Abschreckrate von 400 K/s auf die jeweilige Zieltemperatur (vgl. Abbildung 4-2). Der Zieltemperaturbereich lag zwischen 625 und 725 °C für die Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung und 400 bis 575 °C für die Bainit-Umwandlung. Im Bereich zwischen 575 und 625 °C wurden keine Versuche durchgeführt, da der hohe Molybdängehalt hier zu einem umwandlungsträgen Bereich führt. Die Haltezeit bei Zieltemperatur wurde solange gewählt, bis keine Längenänderung mehr zu verzeichnen war. Anschließend wurde auf Raumtemperatur abgeschreckt.

Für die Auswertung wurde lediglich die gemessene Dehnung ab Erreichen der isothermen Umwandlungstemperatur betrachtet. Zu Beginn wurden die betrachteten Dehnungen zu Null gesetzt, so dass die Daten lediglich die Änderungen in Folge der Phasenumwandlungen wiedergeben. Gemäß SEP 1680 [79] erfolgt der Beginn der Zeitzählung für die Bestimmung charakteristischer Umwandlungszeiten bereits mit Beginn der Abschreckung der austenitisierten Probe. Nach dieser Datenvorbereitung lässt sich der Phasenanteil w(t) zum beliebigen Zeitpunkt t aus dem Verhältnis von tatsächlicher Dehnung $\epsilon(t)$ zu totaler Dehnung ϵ_{total} (vgl. Abbildung 4-2) berechnen (vgl. Gleichung (4.1)).

$$w(t) = \frac{\varepsilon(t)}{\varepsilon_{\text{total}}}$$
(4.1)

Annahme bei Anwendung dieser Auswertungsmethodik ist, dass die totale Dehnung gleichbedeutend mit einer vollständigen Phasenumwandlung ist. Gemäß SEP 1680 wurde ein Phasenanteil von w = 1 % als Inkubationszeit und ein Phasenanteil von w = 99 % als Transformationsendzeit definiert.



Abbildung 4-2: isotherme Versuchsführung zur Bestimmung des isothermen Umwandlungsverhaltens. Auswertung dargestellt am Beispiel der Austenit-Bainit-Umwandlung für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von 0,8 Ma% und einer Dichte von 7,8 g/cm³.

Neben den isothermen Versuchen wurden auch kontinuierliche Dilatometerversuche durchgeführt. Dadurch war die gefügeabhängige Bestimmung des thermischen Ausdehnungskoeffizienten, die Ermittlung der Umwandlungsdehnungen in Folge thermisch induzierter Phasenumwandlungen und die Aufnahme des kontinuierlichen Zeit-Temperatur-Umwandlungsverhaltens möglich. Für die kontinuierlichen Dilatometerversuche wurden Proben innerhalb 1 min auf 940 °C induktiv erwärmt, die Temperatur für 3 min gehalten und im Anschluss mit konstanter Abschreckrate auf Raumtemperatur abgeschreckt. Durch eine Kombination von Heliumgasabschreckung und induktivem Gegenheizen sind Abschreckraten zwischen 0,25 K/s und 25 K/s möglich.

Die messtechnisch erfasste Längenänderung in Folge der Temperaturänderungen kann für die Bestimmung thermischer Ausdehnungskoeffizienten herangezogen werden. Dazu wird das gemessene Signal in hinreichendem Abstand von Phasenumwandlungen durch eine lineare Regression beschrieben. Die Steigung der ermittelten Regressionsgeraden entspricht dann dem über der Temperatur gemittelten thermischen Ausdehnungskoeffizienten. In Abbildung 4-3 ist beispielhaft die Bestimmung des thermischen Ausdehnungskoeffizienten für Austenit dargestellt.



Abbildung 4-3: Bestimmung des thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Beispiel für die Bestimmung des über der Temperatur gemittelten thermischen Ausdehnungskoeffizienten für Austenit.

Für die Bestimmung kontinuierlicher Zeit-Temperatur-Umwandlungsdiagramme ist sowohl der Umwandlungsbeginn als auch das Umwandlungsende festzustellen. Für eine eindeutige Identifikation dieser Kennwerte wurde die gemessene Längenänderung nach der Zeit differenziert. Damit ergibt sich ein Kurvenverlauf wie in Abbildung 4-4 dargestellt. Nach anfänglich konstanter Längenänderungsrate in Folge thermischer Ausdehnung ist bei auftretender Phasenumwandlung ein Peak der Längenänderungsrate festzustellen. Der Beginn der Phasenumwandlung ist dabei definiert als der Zeitpunkt, ab dem die Längenänderungsrate ansteigt. Das Phasenumwandlungsende ist folglich dann erreicht, wenn die Längenänderungsrate wieder einen konstanten Wert annimmt.

Für die Ermittlung von Umwandlungsdehnungen in Folge thermisch induzierter Phasenumwandlungen muss zunächst ein Referenzgefügezustand festgelegt werden. In dieser Ausarbeitung wird hierzu zweckmäßigerweise der austenitische Zustand verwendet, um damit Umwandlungsdehnungen ausgehend von der kubisch-flächenzentrierten Struktur beschreiben zu können. Für die Ermittlung der Umwandlungsdehnung wird zunächst die Dehnung der austenitisierten Probe durch eine Regressionsgerade angenähert und bis Raumtemperatur extrapoliert (vgl. Abbildung 4-5).



Abbildung 4-4: Bestimmung der Umwandlungsdehnung schematisch am Beispiel der Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung.



Abbildung 4-5: Bestimmung der Umwandlungsdehnung schematisch am Beispiel der Umwandlung von Austenit in Ferrit/Perlit für Astaloy 85 Mo.

In einem weiteren Schritt wird eine zweite Regressionsgerade für die thermisch bedingte Dehnung eines ferritisch-perlitischen, bainitischen oder martensitischen Probenzustands bestimmt und diese ebenfalls bis Raumtemperatur verlängert. Die Differenz der vorliegenden Dehnungen bei Raumtemperatur ergeben die Umwandlungsdehnungen ε^{tr} korrigiert um den thermischen Anteil. In Abbildung 4-5 ist beispielhaft die Bestimmung der Umwandlungsdehnung vom austenitischen in den ferritisch-perlitischen Zustand bezogen auf die Referenztemperatur, hier Raumtemperatur T_{RT} , dargestellt.

4.1.3 Untersuchungen am Deformationsdilatometer zur Bestimmung des mechanischen Verhaltens

Zur Aufnahme des mechanischen Verhaltens wurde ein Dilatometer des Typs Bähr DIL 805 A/D (Firma Bähr-Thermoanalyse GmbH, Hüllhorst) verwendet. Dazu wurde eine zusätzliche Belastungseinheit an das Dilatometer gekoppelt und Kräfte über Belastungsstempel auf die Probe geleitet. Die minimale Kraft, die aufgebracht werden kann, ist 200 N. Maximal sind Prüfkräfte von 12 kN möglich. Letztere Beschränkung ergibt sich aus der maximalen Beanspruchbarkeit des Al₂O₃-Stempelmaterials. Der Aufheizvorgang erfolgt wie bei der Abschreckdilatometrie über Induktion unter Vakuumatmosphäre. Das nachfolgende Abschrecken wurde mit Heliumgas durchgeführt. Geregelt werden beide Vorgänge durch ein mittig an die Probe angeschweißtes Thermoelement des Typs S. Die auftretenden Längenänderungen werden über einen induktiven Wegaufnehmer messtechnisch erfasst.

Die mechanischen Kennwerte Streckgrenze und Elastizitätsmodul wurden an Proben für das Verformungsdilatometer mit den Dichten 6,8, 7,2 und 7,8 g/cm³ sowie für alle drei Kohlenstoffstufen 0,25, 0,5 und 0,8 Ma% bestimmt. Dazu wurden die Proben induktiv auf 940 °C in 1 min aufgeheizt und auf dieser Temperatur für 3 min gehalten. Im Falle eines zu prüfenden Austenits wurde nachfolgend der Druckversuch eingeleitet. Bei martensitischer, bainitischer und ferritisch-perlitischer Mikrostruktur wurde über einen Abschreckvorgang das entsprechende Gefüge eingestellt und erst im Anschluss die mechanische Prüfung begonnen. Nach vollständiger Phasenumwandlung wurden die Proben hydraulisch mit Druckkräften beansprucht. Die Versuchsführung mit einer weggesteuerte wurde Verformungsgeschwindigkeit von 0,015 mm/s durchgeführt. Der Versuch erfolgte bis zum Erreichen einer definierten Verformung von 2 mm bzw. bis das Beanspruchungsmaximum der Al₂O₃-Druckstempel von $F_{max} = 12$ kN erreicht wurde. Die Messgrößen wurden in ein Spannungs-Dehnungs-Diagramm überführt.

Der Elastizitätsmodul stellt sich als Steigung des linearen elastischen dann Verformungsbereichs dar und konnte mittels einer linearen Anpassung bestimmt werden. Zu beachten ist, dass der so ermittelte E-Modul durch die Maschinensteifigkeit verfälscht ist. Daher Warmzugversuche durchgeführt, wurden um den temperaturabhängigen Elastizitätsmodul exakt bestimmen und die Dehnung korrigieren zu können (vgl. Kapitel 4.1.5).

4.1.4 Untersuchungen am Deformationsdilatometer zur Bestimmung der Umwandlungsplastizität

Die Umwandlungsplastizitätskonstante wurde ebenfalls mittels Untersuchungen am Deformationsdilatometer bestimmt. Hierzu wurden Proben für das Verformungsdilatometer mit der Dichte 7,8 g/cm² und Kohlenstoffgehalten von 0,25, 0,5 oder 0,8 Ma% in einer Minute auf 940 °C aufgeheizt und für 3 min auf dieser Temperatur gehalten. Während der letzten Minute der Temperaturausgleichszeit wurden per hydraulischer Deformationseinheit Kräfte von -200 N, -400 N bzw. -600 N auf die Probe aufgebracht und anschließend auf Raumtemperatur mit 25 K/s abgeschreckt. Ein Aufbringen der Druckkraft während des Abschreckens war aufgrund der hohen Abschreckrate nicht möglich. Die spannungsfreien Referenzversuche wurden nach gleichem Schema, allerdings ohne Nutzung der Belastungseinheit, durchgeführt.

Zwischen dem spannungsfreien Referenzversuch und dem spannungsbehafteten Versuch kann eine umwandlungsplastische Längenänderung Δl^{tp} festgestellt werden (vgl. Gleichung (4.2).

$$\Delta l^{tp} = \Delta l_{\sigma \neq 0} - \Delta l_{\sigma = 0} \tag{4.2}$$

Diese kann durch Bezug auf die Ausgangslänge in die umwandlungsplastische Dehnung ϵ^{tp} umgerechnet werden (vgl. Gleichung (4.3).

$$\varepsilon^{\rm tp} = \frac{\Delta l^{\rm tp}}{l_0} \tag{4.3}$$

Durch Berechnung der umwandlungsplastischen Dehnung kann das entsprechende $\varepsilon^{tp}(\sigma)$ -Diagramm erstellt werden, welches einen linearen Anstieg der umwandlungsplastischen Dehnung für geringe Spannungen ausweist. Die Steigung im Bereich geringer Spannungen ist als umwandlungsplastische Konstante K definiert. Für jede angelegte Spannung σ gilt daher die mathematische Beziehung aus Gleichung (4.4).

$$K = \frac{\varepsilon^{tp}}{\sigma}$$
(4.4)

4.1.5 Warmzugversuche zur Bestimmung des Elastizitätsmoduls

Abgebrochene Warmzugversuche wurden an einer Zwick 100 kN Universalprüfmaschine durchgeführt. Die Messung der Längenänderung erfolgte über einen Ansetzdehnungsaufnehmer (vgl. (1), Abbildung 4-6) nach Störrle [80]. Temperaturen über der Raumtemperatur wurden über einen Strahlungsofen (vgl. (2), Abbildung 4-6) mit einer maximalen Leistung von 2000 W erzielt. Die Regelung erfolgte mittels eines an die Oberfläche angeschweißten Thermoelements des Typs S (vgl. (3), Abbildung 4-6). Um einen Wärmestrom über das Maschinengestänge (vgl. (4), Abbildung 4-6) zu vermeiden, wurden die Fassungen über Düsenheizbänder CK DHB 20 (Firma Mickenhagen GmbH, Lüdenscheid) zusätzlich beheizt.

Für die Bestimmung des Elastizitätsmoduls (E-Modul) wurden abgebrochene Warmzugversuche an Proben (vgl. (5), Abbildung 4-6) mit einer Dichte von 7,2 g/cm³ und einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0.25$ Ma% bei den Temperaturen 100, 200, 250, 350, 400, 550 und 600 °C durchgeführt. Dazu wurde die Probe auf Prüftemperatur erwärmt und für 3 min ein Temperaturausgleich ermöglicht, bevor der Zugversuch gestartet wurde. Messtechnisch wurde dabei der Kraft-Längenänderungsverlauf aufgenommen, der in ein Spannungs-Dehnungs-Diagramm umgerechnet wurde. Der Elastizitätsmodul stellt sich dann als Steigung des linearen elastischen Verformungsbereichs dar und konnte mittels einer linearen Anpassung bestimmt werden.



Abbildung 4-6: 100 kN Universalprüfmaschine Zwick mit Spiegelofen und Dehnungsaufnehmer zur Durchführung von Warmzugversuchen zur Bestimmung des Elastizitätsmoduls.

Eine Gegenüberstellung des ermittelten E-Moduls aus Warmzugversuchen mit Werten aus Deformationsdilatometerversuchen bei gleicher Probenvariante (7,2 g/cm³ und $c_c = 0,25$ Ma%) und Prüftemperatur führt zur Bestimmung der Maschinensteifigkeit in Abhängigkeit der Temperatur. Damit können die gemessenen Dehnungen aus der Deformationsdilatometrie korrigiert werden.

4.1.6 Laser-Flash- und DSC-Messungen zur Bestimmung thermophysikalischer Kennwerte

Laser-Flash Messungen zur Bestimmung der Temperaturleitfähigkeit wurden gemäß ASTM E 1461 [81] durchgeführt. Die spezifische Wärme wurde mittels DSC-Analysen nach DIN EN ISO 11357-1 [82] bestimmt. Für die Bestimmung beider physikalischer Kennwerte wurden porenfreie ferritisch-perlitische Proben in allen drei Kohlenstoffstufen verwendet. Die Wärmeleitfähigkeit wurde aus dem Produkt von Temperaturleitfähigkeit, spezifischer

Wärme und Dichte berechnet. Die Dichtebestimmung erfolgte mittels dem Standardverfahren nach Archimedes, der Auftriebsmethode [83, 84].

4.2 Versuchsdurchführung am Demonstrator

Das Einsatzhärten der taillierten Flachprobe wurde mittels des Einsatzhärteofens SOLO 202 durchgeführt. Da nur die Ober- und Unterseite der taillierten Flachprobe mechanisch oberflächenbehandelt wurden und somit die Seiten- und Einspannungsflächen unbehandelt sind, wurden diese mit der Härteschutzpaste Vacucoat 0095 vor dem Einsatzhärten behandelt und somit vor einer Aufkohlung geschützt.

Wie bei den Versuchen zur Bestimmung des Diffusionskoeffizienten erfolgt die Aufkohlung in einer Stickstoff-Methanol-Atmosphäre mit Propananreicherung. Damit erfolgte das Aufkohlen auch hier in einer Prozessatmosphäre aus 20 % CO, 40 % H₂ sowie 40 % N₂. Jedoch wurde der Aufkohlprozess zweistufig bei 940 °C durchgeführt. In der ersten Phase des Aufkohlprozesses wurde die Flachprobe 300 s lang einem Kohlenstoffpegel von 1 Ma% ausgesetzt (vgl. Abbildung 4-7). In der anschließenden zweiten Phase wurde der Kohlenstoffpegel auf 0,8 Ma% abgesenkt. Dieser Kohlenstoffpegel lag 3300 s lang im Ofen vor. Die Prozessgesamtzeit für das Aufkohlen kann mit etwa 2 h angegeben werden. Die anschließende Härtung erfolgte in einem Ölbad mit dem Mehrbereichsmineralöl Durixol W72 (Firma Burgdorf GmbH, Stuttgart). Das verwendete Ölbad besitzt ein Volumen von 1,2 m³ und erlaubt eine maximale Badtemperatur von 100 °C. Für die Versuche wurde eine Badtemperatur von 60 °C verwendet.



Abbildung 4-7: Eingestelltes Kohlenstoffpotential in der Ofenatmosphäre beim Einsatzhärten.

Für die Auswertung der lokalen Verdichtung nach der mechanischen Randschichtbehandlung und für die Aufnahme des Gefügezustands nach dem Einsatzhärten wurden lichtmikroskopische Untersuchungen an Querschliffen durchgeführt. Die Aufbereitung der Schliffoberfläche ist dabei aufwändiger als bei porenfreien Werkstoffen [85]. Insbesondere für die Porositätsanalysen ist es entscheidend, vorliegende Poren weder durch die Präparation "zuzudrücken" noch "zuzuschmieren". Daher wurden in dieser Arbeit die Schliffe infiltriert [77]. Dazu muss zunächst einmal die Porosität freigelegt werden, was gemäß der Schleif- und Polierabfolge nach Tabelle 4-1 erfolgte. Im Anschluss an ein abschließendes Reinigen in Isopropanol im Ultraschallbad wurden die Poren mit Kunstharz unter Vakuum infiltriert und erneut präpariert (vgl. Tabelle 4-2).

Die Bildanalyse zur Bestimmung des Dichtegradienten erfolgte mittels der Phasenanalysefunktion des kommerziellen Softwarepaketes Olympus analySIS pro. Die notwendigen Schliffaufnahmen wurden bei 200-facher Vergrößerung mit einem Mikroskop des Typs Olympus DP71 aufgenommen. An jeder Auswerteposition wurden vier sich überlappende Bilder in Tiefenrichtung erstellt. Zur Anfertigung eines Porositätstiefenverlaufs wurden die Aufnahmen per MIA Bildausrichtungsfunktion der Software Stream Enterprise zusammengesetzt und mit einem Messraster der Rasterhöhe 50 um belegt. Für jedes Rasterelement wurde eine "Phasenanalyse" zur Bestimmung der lokal vorliegenden Porosität durchgeführt (vgl. Abbildung 4-8). Der Schwellenwert für die Porositätsanalyse wurde automatisch durch die verwendete Analysesoftware analySIS pro bestimmt. Die dargestellten Ergebnisse stellen Mittelwerte der einzelnen Messungen dar.

	Unterlage	Körnung	Druck [N]	Geschwindigkeit [U/min]	Zeit [min]
Schleifen	SiC – Papier	P180	20	200	Bis plan
		P320			2
		P600			2
Polieren	sehr hartes perforiertes Chemiefaser- tuch	9 µm	20	150	5
	mittelhartes Kunstseiden- tuch	6 µm	30	150	8

Tabelle 4-1: Probenpräparation: Freilegung der Poren.

Tabelle 4-2: Probenpräparation: Schleifen und Polieren nach der Infiltration der Poren.

	Unterlage	Körnung	Kraft	Geschwindigkeit	Zeit
			[N]	[U/min]	[min]
Schleifen	SiC – Papier	P1000	20	200	Bis plan
Polieren	sehr hartes, perforiertes Chemiefaser- tuch	9 µm	20	150	7
	mittelhartes Kunstseiden-	6 µm	20	150	7
	tuch	3 µm	30	150	5
	kurzgeflocktes, weiches Synthetiktuch	1 µm	30	150	4
	weiches	0,25	30	150	2
	Synthetiktuch	OPS0,05 µm	30	150	1
	Dest. H ₂ O		30	150	0,33

Zur Verifikation der Vorgehensweise, der Schwellenwertbestimmung und der Probenpräparation wurden Voruntersuchungen durchgeführt. Die automatische Schwellenwertbestimmung wurde überprüft, indem ein Mikrohärteeindruck in die Probe eingebracht wurde und per Messoptik als auch per Bildanalyse ausgewertet wurde. Die Abweichung der Ergebnisse lag bei etwa 1 %. Zur Verifikation der Präparation wurden Dichtemessungen an porösen Proben homogener Dichteverteilung sowohl mittels Bildanalyse als auch mit dem Standardverfahren nach Archimedes, der Auftriebsmethode, [83, 84] vorgenommen. Sowohl die Bildanalyse als auch die Dichtebestimmung nach Archimedes ergaben vergleichbare Werte mit 7,28 bzw. 7,16 g/cm³.



Abbildung 4-8: Beispielhafte Darstellung für die "Phasenanalyse" und das verwendete Messraster. Hier: Astaloy 85 Mo mit einer Dichte von 7,2 g/cm³. Vergrößerung 200-fach.

Um den Gefügezustand nach der Einsatzhärtebehandlung aufnehmen zu können, wurden die erzeugten Schliffe über eine Doppelätztechnik mit Nital und alkoholischer Pikrinsäure $C_6H_3N_3O_7$, auch als Pikral bekannt, angeätzt.

Für die Bestimmung des lokal vorliegenden Kohlenstoffgehaltes wurde ein Spektrometer vom Typ ARL 3460 zur Durchführung optischer Emissionsspektrometrie (OES) gemäß DIN 51009 [86] eingesetzt. Durch eine Kombination der OES-Technik mit einem abtragenden Schleifverfahren können Kohlenstofftiefenprofile bestimmt werden.

Der oberflächennahe Eigenspannungszustand wurde mittels röntgenographischer Eigenspannungsanalyse charakterisiert. Die Beugungsexperimente wurden an einem Röntgendiffraktometer in ψ -Konfiguration mit CrK_{α}-Strahlung durchgeführt. Aufgenommen wurden die {211}- α -Fe Beugungslinien, die mittels einer Pearson VII Funktion angefittet wurden. Die Eigenspannungswerte wurden per sin² ψ -Methode unter Nutzung der elastischen Konstanten E^{211} = 219911 MPa und v^{211} = 0,28 analysiert. Für die Aufnahme von Tiefenverläufen wurde abwechselnd gemessen und die Oberfläche elektrochemisch abgetragen. Eigenspannungsumlagerungen wurden nicht korrigiert.

Die röntgenographische Restaustenitbestimmung wurde mittels eines Röntgendiffraktometers, das nach dem Bragg-Brentano-Fokussierungsprinzip arbeitet, durchgeführt. Die Messung erfolgt mit Zr gefilterter MoK_{α}-Strahlung. Der Restaustenitgehalt berechnet sich nach Gleichung (4.5) über die Flächenhäufigkeit H_i der reflektierenden Gitterebenen, I_{ki} die Intensität der Linie i der Phase k und R_{ki} der Faktor der Linie. Ausgewertet wird nach dem 6 Linienverfahren.

$$R_{A} = \frac{100 \text{vol}\%}{1 + \frac{\left(\sum_{i} H_{i} I_{\alpha i} / R_{\alpha i}\right) / \sum_{i} H_{i}}{\left(\sum_{i} H_{i} I_{\gamma i} / R_{\gamma i}\right) / \sum_{i} H_{i}}}$$
(4.5)

5 Numerisches Konzept

des Einsatzhärtens erfordert Die numerische Beschreibung die Abbildung der Prozessteilschritte Aufheizen, Aufkohlen und Abschrecken. Damit ergibt sich die thermochemisch-mechanisch Notwendigkeit einer gekoppelten Simulation unter Berücksichtigung der komplexen Wechselwirkungen zwischen Temperatur, chemischer Zusammensetzung, Gefüge-, Porositäts-, Spannungsund Dehnungsverteilung (vgl. Abbildung 5-1). [38-40]



Abbildung 5-1: Wechselwirkungen bei einer thermochemischen Wärmebehandlung.

Da solch ein thermochemisch-mechanischer Lösungsalgorithmus für das verwendete Finte-Elemente (FE) Softwarepaket ABAQUS nicht zur Verfügung steht, sind mehrere voneinander getrennte konsekutive Simulationen durchzuführen. Theoretisch ergeben sich also drei verkettete Simulationen: eine thermomechanische Aufheizsimulation gefolgt von einer thermochemischen Aufkohlsimulation sowie einer abschließenden thermomechanischen Beschreibung des Abschreckens. Dieser Dekompositionsansatz bei der Modellbildung ist möglich, da davon ausgegangen werden kann, dass einerseits alle vorliegenden Eigenspannungen der vorherigen mechanischen Oberflächenbehandlung durch das Aufheizen abgebaut sind und andererseits Veränderungen im Kohlenstoffprofil während des Abschreckens ausgeschlossen werden können. Da unter diesen Voraussetzungen aber die Auswirkungen des Aufheizens auf den letztlich vorliegenden Bauteilzustand vernachlässigbar sind und in dieser Arbeit der Fokus nicht auf der Verzugsausbildung liegt, wird auf die Beschreibung des Aufheizens gänzlich verzichtet.

Sowohl beim verbleibenden Aufkohlen als auch beim Abschrecken wird die poröse Mikrostruktur nicht modelliert. Diese Homogenisierung stellt eine Notwendigkeit bei der numerischen Beschreibung des Einsatzhärtens poröser Strukturen dar, da die Porengröße für gewöhnlich mehrere Größenordnungen kleiner als die Bauteilgeometrie ist. Vorteilhaft wirkt sich diese Strategie bei der Vernetzung aus. Da keine Notwendigkeit besteht, Bereiche um die Poren fein aufzulösen, können die Elementzahl, die Modellgröße sowie die Rechenzeit deutlich reduziert werden. Um trotzdem Effekte der Porosität berücksichtigen zu können, wird die lokal vorliegende Porosität als Statusvariable für die numerische Beschreibung hinterlegt und effektive Materialparameter intern berechnet.

Damit stellt sich das Simulationskonzept wie in Abbildung 5-2 gezeigt dar. Austauschgrößen sind die Porositäts-, Kohlenstoff-, Phasen- und Temperaturverteilung.



Abbildung 5-2: Simulationskonzept für das Einsatzhärten bestehend aus zwei konsekutiven Teilsimulationen. Das Aufheizen wird vernachlässigt.

5.1 Aufkohlen

5.1.1 Mathematische Modelle für das Aufkohlen

Um das Aufkohlen numerisch beschreiben zu können, müssen Modelle für den Stoffübergang und den Stofftransport implementiert werden. In dieser Ausarbeitung wird die Kohlenstoffabstraktion an der Oberfläche mittels eines technologischen Ansatzes [21, 45-48] modelliert:

$$\dot{\mathbf{m}} = \boldsymbol{\beta} \cdot (\mathbf{C}_{\mathbf{n}} - \mathbf{C}), \tag{5.1}$$

wobei m der Massenstrom pro Flächeneinheit ist, berechnet aus dem Produkt aus Stoffübergangskoeffizient β und der Konzentrationsdifferenz des Oberflächenkohlenstoffgehaltes C und des Kohlenstoffpegels C_p. Dieser für porenfreie Werkstoffe häufig verwendete Ansatz kann auch hier Anwendung finden, da durch die vorherige mechanische Oberflächenbehandlung eine vollständig verdichtete Oberfläche Vorliegt. Das Modell wird mittels der ABAQUS eigenen Erweiterung DSFLUX in die Simulation integriert. Ein Aufruf erfolgt nur für Oberflächenelemente.

Der Stofftransport von der Oberfläche ins Bauteil kann mittels des 2. Fick'schen Gesetzes beschrieben werden. Das 2. Fick'sche Gesetz, das bereits standardmäßig in ABAQUS implementiert ist, kann Gleichung (5.2) entnommen werden, wobei $\partial C/\partial t$ die Derivation der Kohlenstoffkonzentration, D der Diffusionskoeffizient und $\partial C/\partial x$ der lokale Konzentrationsgradient ist.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$
(5.2)

Bei Anwendung eines vereinfachten homogenisierten Modells sind effektive Transporteigenschaften zu berücksichtigen. Daher ist der Diffusionskoeffizient D durch den experimentell bestimmten effektiven Diffusionskoeffizienten D_{eff} (vgl. Gleichung (5.3)) zu ersetzen. Das 2. Fick'sche Gesetz ändert sich dadurch zu:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{eff}(x) \frac{\partial C}{\partial x} \right)$$
(5.3)

Für eine numerische Beschreibung sind daher nur der effektive Diffusionskoeffizient und der Stoffübergangskoeffizient als Eingabeparameter zu hinterlegen.

5.1.2 Aufkohlmodell

Die Aufkohlsimulation erfolgt an einem symmetrischen 3D-Halbmodell der taillierten Flachprobe (vgl. Abbildung 5-3). Auf eine Simulation der gesamten Flachprobe wurde verzichtet, um die Rechenzeit und die Datenmenge möglichst gering zu halten. Für die Vernetzung wurden insbesondere die Oberflächen im Bereich der Taillierung, die für die Auswertung von besonderer Bedeutung ist, fein aufgelöst. Dazu wurden mittels der ABAQUS Funktion "Bias Edge" Elemente in z-Richtung verzerrt. Über das ganze Geometriemodell wurde ein Verzerrungsverhältnis von 3 zwischen Kern- und Oberflächenelementen vorgegeben, was bedeutet, dass die Elemente an der Oberfläche nur noch 1/3 der Größe des Kernes aufweisen. Zusätzlich wurden mittels dieser Vorgehensweise auch Elemente der Einspannfläche in x-Richtung verzerrt. Der Übergang der Einspannfläche zur Taillierung weist eine feinere Vernetzung als das freie Ende auf. In diesem Fall sind die Elemente am freien Ende 5-fach so groß wie im Übergangsbereich zur Taillierung. Insgesamt umfasste das Netz 27837 Hexaeder Elemente (vgl. Abbildung 5-3).



Abbildung 5-3: Geometriemodell für die Einsatzhärtesimulation in ABAQUS. Vernetzung mit 27837 Hex-Elemente mittels der Biase-Funktion (Verzerrungsfunktion).

Für die numerische Berechnung wurden mechanische, thermische und metallurgische Randbedingungen vorgegeben. Die Symmetrie an der Schnittfläche wurde mechanisch durch eine Fixierung in x-Richtung sowie eingeschränkte Rotationsmöglichkeiten um die y- bzw. z-Achse realisiert. Zusätzlich wurde am Punkt L eine feste Lagerung eingeführt. Für die Aufkohlsimulation wurde von einer vollständigen Austenitisierung und einer homogenen Temperaturverteilung von $T_{Aufkohlen} = 940$ °C ausgegangen.

Zunächst, vor der Simulation des Aufkohlprozesses, wurden die Ergebnisse vorheriger Prozessschritte übertragen. Im Falle der hier vorliegenden Ausarbeitung wurde die Porositätsverteilung mittels einer benutzerdefinierten Erweiterung auf das Modell aufgeprägt. Für den Aufkohlprozess selbst erfolgte der Stoffübergang über die Unter- bzw. Oberseite (vgl. rote Deckflächen in Abbildung 5-4) der taillierten Flachproben. Die Prozessparameter, also die Aufkohldauer und der vorgegebene Kohlenstoffpegel, können dem Kapitel 4.2 Versuchsführung entnommen werden.



Abbildung 5-4: Chemische Randbedingung: Stoffübertragung über rot gekennzeichnete obere und untere Deckfläche. Visualisierung der festen Einspannung im Punkt L.

5.2 Abschrecken

5.2.1 Mathematische Modelle für das Abschrecken

5.2.1.1 Temperaturfeldberechnung

Elementare Bausteine einer jeden Wärmebehandlungssimulation sind die Beschreibung des Wärmeübergangs zwischen Bauteil und Umgebungsmedium sowie die Berechnung des sich daraus ergebenden Temperaturfelds. In der hier vorliegenden Arbeit wird der Wärmeübergang durch Gleichung (5.4) beschrieben, bei der sich der Wärmestrom aus dem Produkt des Wärmeübergangskoeffizienten WüK und der Differenz zwischen Oberflächentemperatur des Abschreckmediums Bauteils Τs und Temperatur des $T_{\rm U}$ berechnet. Der Wärmeübergangskoeffizient wird als konstant angenommen. Die Temperatur-, Porositäts-, und Ortsabhängigkeit des Wärmeübergangskoeffizienten wird vernachlässigt.

$$\dot{\mathbf{Q}} = \mathbf{W}\ddot{\mathbf{u}}\mathbf{K} \cdot (\mathbf{T}_{\mathbf{U}} - \mathbf{T}_{\mathbf{S}}) \tag{5.4}$$

Der so berechnete Wärmestrom Q führt in der numerischen Beschreibung zu einer äußeren Wärmesenke, die Auswirkungen auf das Temperaturfeld und dessen Berechnung hat. Die entstehende Temperaturverteilung wird in ABAQUS über die hinterlegte Wärmeleitungsglei-

chung nach Fourier berechnet (vgl. Gleichung (5.5)). Neben dem Wärmestrom gehen hierbei die Materialparameter Wärmeleitfähigkeit λ , Dichte ρ und spezifische Wärmekapazität c_p ein.

$$\lambda \Delta \mathbf{T} + \mathbf{Q} = \mathbf{c}_{p} \cdot \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{T}$$
(5.5)

5.2.1.2 Berechnung thermisch induzierter Phasenumwandlungen

Bedingt durch die berechnete Temperaturabnahme können temperaturinduzierte Phasenumwandlungen im Bauteil auftreten. Dabei sind generell diffusionsgesteuerte und diffusionslose Phasenumwandlungen zu unterscheiden. Diese auftretenden Phasenumwandlungen können standardmäßig nicht von ABAQUS bzw. ABAQUS-eigenen Erweiterungen berücksichtigt werden, sind aber für eine realitätsnahe numerische Beschreibung sowie für die Vorhersage von Randschichtzuständen unumgänglich. Daher müssen Modelle zur Beschreibung von Phasenumwandlungen in die Simulation über benutzerdefinierte Erweiterungen integriert werden. Für die diffusionsgesteuerten Phasenumwandlungen wurden, wie in der Literatur üblich, ein Johnson-Mehl-Avrami-Ansatz [48-51] (vgl. Gleichung (5.6)) benutzt, wobei wi der gebildete Phasenanteil, b der Koeffizient für Keimbildung und Wachstum und n der Transformationsmechanismusexponent ist. Basis für dieses Modell sind isotherme Zeit-Temperatur-Umwandlungs-Diagramme.

$$w_i = 1 - \exp(-b \cdot t^n)$$
(5.6)

Um mit diesem isothermen Modell eine kontinuierliche Abkühlung beschreiben zu können, wird der Abschreckvorgang durch isotherme Stufen approximiert [52, 53, 87] (vgl. Abbildung 5-5). Entscheidend hierbei ist, dass die Umwandlung nur für hinreichend kleine Zeitschritte isotherm betrachtet werden kann, ohne dass zu große Abweichungen zwischen Modell und realem Werkstoffsystem entstehen. Zudem erfordert die Vorgehensweise eine Berücksichtigung der bereits gebildeten Phasenanteile bei Übergang zu einer folgenden isothermen Stufe (vgl. Übergang P_{f-1} zu P_f in Abbildung 5-5). Diese können durch die Berechnung einer fiktiven Umwandlungszeit berücksichtigt werden. Im Beispiel von Abbildung 5-5 ist beim Übergang von P_{f-1} zu P_f die Umwandlungszeit von t_{f-1} zu τ_{f-1} zu reduzieren, um bei der geringeren Umwandlungstemperatur Tf anfänglich äquivalente

(5.8)

Phasenanteile der Berechnung vorgeben zu können. Die fiktive Umwandlungszeit t* berechnet sich folglich gemäß Gleichung (5.7) [87].

$$t^* = \tau_{f-1} + \Delta t_f \tag{5.7}$$

Hierbei ist τ_{f-1} die Zeit für die adäquate Gefügemenge bei T_f und Δt_f die tatsächliche Länge der Haltezeit bei der Temperatur T_f . Damit ist der Johnson-Mehl-Avrami-Ansatz aus Gleichung (5.6) zu Gleichung (5.8) zu modifizieren.

 $w_i = 1 - \exp\left(-b \cdot t^{*n}\right)$



Abbildung 5-5: Anwendung des Johnson-Mehl-Avrami-Ansatzes zur Beschreibung einer Phasenumwandlung bei kontinuierlicher Abkühlung [87].

Bei hinreichend hohen Abkühlraten sind diffusionsgesteuerte Umwandlungen nicht mehr möglich und martensitische Härtung tritt auf. Ein Modell stellt hierbei der Koistinen-Marburger-Ansatz dar [57]. Hierbei wird der gebildete Martensitgehalt w_M abhängig von der Temperatur mittels des maximal möglichen Martensitgehaltes w_M^{max} , dem Werkstoffparameter k und der Martensitstarttemperatur M_S gebildet (vgl. Gleichung (5.9)).

$$w_{M} = w_{M}^{max} [1 - exp(-k \cdot (M_{s} - T))]$$
(5.9)

In der hier vorliegenden Simulation wurde der Koeffizient k zu $0,01 \text{ K}^{-1}$ gewählt. Dies ist gemäß [59] ein zweckmäßiger Wert für eisenbasierte Werkstoffe mit einem Kohlenstoffgehalt unter 1,1 Ma%.

5.2.1.3 Berechnung der Dehnungsentwicklung

Für die Vorhersage der Spannungsentwicklung wird der Dehnungstensor berechnet. Dieser setzt sich aus elastischen ε^{el} , plastischen ε^{pl} , thermischen ε^{th} und umwandlungsbedingten Dehnungen zusammen, wobei letzterer Anteil sich in die Umwandlungsdehnung ε^{tr} und die umwandlungsplastische Dehnung ε^{tp} aufspalten lässt (vgl. Gleichung (5.10)).

$$\varepsilon_{\text{ges}} = \varepsilon^{\text{el}} + \varepsilon^{\text{pl}} + \varepsilon^{\text{th}} + \varepsilon^{\text{tr}} + \varepsilon^{\text{tp}}$$
(5.10)

$$d\varepsilon_{\text{ges}} = d\varepsilon^{\text{el}} + d\varepsilon^{\text{pl}} + d\varepsilon^{\text{th}} + d\varepsilon^{\text{tr}} + d\varepsilon^{\text{tp}}$$
(5.11)

Die elastischen und plastischen Dehnungsanteile werden durch ABAQUS intern berechnet. Da die Berechnung von Phasenumwandlungen nicht standardmäßig berücksichtigt werden, müssen die thermischen und umwandlungsbedingten Dehnungsanteile in benutzerdefinierten Erweiterungen ermittelt werden. Hierzu steht in ABAQUS die Subroutine UEXPAN zur Verfügung. In dieser wird die inkrementelle Änderung der Dehnungsanteile in Abhängigkeit der Phase bzw. Phasenumwandlung berechnet und an den FE-Code zur Berechnung der Dehnung nach Gleichung (5.11) zurückgegeben (vgl. Gleichung (5.12)).

$$d\varepsilon_{th+tr+tp} = d\varepsilon^{th} + d\varepsilon^{tr} + d\varepsilon^{tp}$$
(5.12)

Die thermische Dehnung ist dabei gemäß Gleichung (5.13) für einen einphasigen Werkstoff bei Annahme einer isotropen Dehnung durch die Temperaturdifferenz ΔT und den thermischen Ausdehnungskoeffizient α bestimmt.

$$\varepsilon^{\rm th} = \alpha \cdot \Delta T \tag{5.13}$$

Als Referenztemperatur für die Berechnung der Temperaturdifferenz wird, wie bereits in Kapitel 4.1.2 erwähnt, in dieser Ausarbeitung die Raumtemperatur verwendet.

Für mehrphasige Werkstoffe müssen die thermischen Dehnungsanteile einer jeden Phase berechnet werden. Eine lineare Zusammenführung kann mittels phasenanteiliger Gewichtung und Addition der einzelnen Anteile vollzogen werden (vgl. Gleichung (5.14)).

$$\varepsilon_{\text{ges}}^{\text{th}} = \sum_{i=\text{Phase}} w_i \cdot \varepsilon_i^{\text{th}} = \sum_{i=\text{Phase}} w_i \cdot \alpha_i \cdot \Delta T$$
(5.14)

Da die Erweiterung UEXPAN für jedes Zeitinkrement aufgerufen wird, muss die inkrementelle Änderung der thermischen Dehnung berechnet werden. Das totale Differential von Gleichung (5.14) ergibt Gleichung (5.15).

$$d\epsilon_{ges}^{th} = \sum_{i=Phase} \left[\alpha_i \cdot \Delta T \cdot dw_i + w_i \cdot \Delta T \cdot d\alpha_i + w_i \cdot \alpha_i \cdot \Delta T \right]$$
(5.15)

Ist der Ausdehnungskoeffizient α_i für jede Phase konstant und zum Beispiel nicht abhängig von der Porosität bzw. vom Kohlenstoffgehalt, kann Gleichung (5.15) weiter vereinfacht werden zu:

$$d\varepsilon_{ges}^{th} = \sum_{i=Phase} [\alpha_i \cdot \Delta T \cdot dw_i + w_i \cdot \alpha_i \cdot \Delta T].$$
(5.16)

Die umwandlungsbedingten Dehnungen, die eine Folge geänderter Gitterstrukturen sind, können für polykristalline Werkstoffe als isotrop betrachtet werden. Die einzelnen Umwandlungsdehnungen setzen sich dabei additiv zur Gesamtumwandlungsdehnung zusammen. Mathematisch ergibt sich eine Beschreibung nach Gleichung (5.17).

$$\varepsilon_{\text{ges}}^{\text{tr}} = \sum_{i=\text{Phase}} w_i \cdot \varepsilon_i^{\text{tr}}$$
(5.17)

Für die inkrementelle Änderung ist das totale Differential zu bilden (vgl. Gleichung 5.18).

$$d\varepsilon_{ges}^{tr} = \sum_{i=Phase} \varepsilon_i^{tr} \cdot dw_i$$
(5.18)

Die umwandlungsplastischen Dehnungen, die ein Maß für die Dehnungsänderung bei Phasenumwandlungen unter Last sind, lassen sich nach Mitter [88] durch Gleichung (5.19) darstellen, wobei ε_{ij}^{tp} der umwandlungsplastische Dehnungstensor und s_{ij} der derivatorische Spannungstensor (vgl. Gleichung (5.20)) ist.

$$\varepsilon_{ij}^{tp} = \frac{3}{2} \mathbf{K} \cdot \mathbf{s}_{ij} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{w})$$
(5.19)

Die Funktion f(w) stellt dabei den Umwandlungsfortschritt dar und kann folglich Werte zwischen 0 und 1 annehmen. Ein Ansatz zur Berechnung [89] kann nach Gleichung (5.21) erfolgen.

$$s_{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_x - \sigma_m & \tau_{xy} & \tau_{xy} \\ \tau_{xy} & \sigma_y - \sigma_m & \tau_{xy} \\ \tau_{xz} & \tau_{yz} & \sigma_z - \sigma_m \end{pmatrix}$$
(5.20)

$$f(w) = w \cdot (2 - w) \tag{5.21}$$

Für die Berechnung der inkrementellen Änderung ist die Bildung des totalen Differentials von Gleichung (5.19) notwendig. Es ergibt sich:

$$d\varepsilon_{ij}^{tp} = \frac{\partial \varepsilon_{ij}^{tp}}{\partial w} dw = 3 \cdot K \cdot (1 - w) \cdot s_{ij} dw_{i}.$$
(5.22)

Umwandlungsplastische Dehnungen treten bei allen Phasenumwandlungen des Austenits zu Niedertemperaturphasen auf. Daher kann Gleichung (5.22) zu Gleichung (5.23) umgeschrieben werden, was einer additiven Überlagerung der einzelnen Dehnungsanteile entspricht.

$$d\varepsilon_{ij}^{tp} = \sum_{i=Phase} \left[3 \cdot K \cdot (1-w) \cdot s_{ij} \cdot dw_i \right]$$
(5.23)

Für die numerische Beschreibung des Abschreckens ist folglich die Wärmeleitfähigkeit λ , die spezifische Wärmekapazität c_p und die Dichte p bereitzustellen. Um Phasenumwandlungen während des Abschreckens beschreiben zu können, sind im Falle diffusionsgesteuerter Umwandlungen die Parameter b und n für die Austenit-Ferrit/Perlit- bzw. Austenit-Bainit-Umwandlung, die aus isothermen ZTU-Daten bestimmbar sind, zu hinterlegen. Für die diffusionslose Umwandlung ist die Martensitstarttemperatur M_S als Eingabegröße Zur Beschreibung sind vorzugeben. der Dehnungsentwicklung thermische Ausdehnungskoeffizienten α, die Umwandlungsplastizitätskonstanten Κ, die Umwandlungsdehnungen ε^{tr} sowie Fließkurven vorzugeben.

5.2.2 Abschreckmodell

Das Geometriemodell für die Abschrecksimulation entspricht dem Aufkohlmodell und ist in Abbildung 5-6 grafisch dargestellt. Um die bei der numerischen Berechnung des Abschreckens zu erwartenden großen Gradienten insbesondere bei der Gefügeentwicklung abbilden zu können wurde das Netz in der Taillierung feiner ausgeführt. Dabei wurde in z-Richtung die Knotenanzahl um den Faktor 2,5 erhöht.



Abbildung 5-6: Änderungen der Vernetzung: feinere Vernetzung in z-Richtung.

Die mechanischen und metallurgischen Randbedingungen sind der Beschreibung des Aufkohlmodells aus Kapitel 5.1.2 zu entnehmen. Neben der Porositätsverteilung wird für die Abschrecksimulation auch die Kohlenstoffverteilung aus der Aufkohlungsberechnung auf das Modell übertragen. Die Abkühlung erfolgt über alle Oberflächen mit Ausnahme der Symmetrieebene (vgl. Abbildung 5-7). Vorgegeben wurde ein konstanter Wärmeübergangskoeffizient und eine konstante Temperatur des Ölbades von $T_{Ol} = 20^{\circ}C$.



Abbildung 5-7: Thermische Randbedingung: Wärmeübertragung über rot gekennzeichnete Oberflächen. Visualisierung der festen Einspannung im Punkt L.

6 Eingabedaten für das numerische Konzept

6.1 Eingabedaten aus der Literatur

6.1.1 Stoffübergangskoeffizient

Bei der numerischen Beschreibung des Aufkohlens des Einsatzhärtens wird üblicherweise und vereinfachend ein konstanter Stoffübergangskoeffizient β der Größenordnung 1·10⁻⁵ bis $3,5.10^{-5}$ cm/s [90-92] wird vernachlässigt, vorgegeben. Dabei dass der Stoffübergangskoeffizient mit steigender Aufkohlungsdauer tendenziell abnimmt, da mit zunehmender Prozessdauer nicht mehr der Stoffübergang die Aufkohlkinetik bestimmt, sondern die ablaufenden Diffusionsvorgänge. Wissenschaftlich noch nicht eindeutig geklärt ist die Auswirkung der Aufkohlungstemperatur. Rimmer [91] und Wünning [93] geben keine Auswirkungen auf den Stoffübergangskoeffizienten an, wohingegen die Studien von Munts und Moiseev [92, 94] einen signifikanten Einfluss ausweisen. In dieser Ausarbeitung wird ein Stoffübergangskoeffizient von $\beta = 2 \cdot 10^{-4} \text{ cm/s}$ verwendet [21, 94, 95], da dieser in Kombination mit der technologischen Beschreibung des Stoffüberganges in einer Vielzahl von Vorgängerarbeiten [22, 38] zu guten Vorhersagen geführt hat.

6.1.2 Wärmeübergangskoeffizient

In der hier vorliegenden Ausarbeitung wird vereinfachend ein konstanter mittlerer Wärmeübergangskoeffizient WüK für die numerische Beschreibung des Wärmeübergangs beim Abschrecken vorgegeben. Hierbei wurde ein für die Ölbadabschreckung typischer Wert von 600 W/(m²·K) verwendet [96]. Effekte der Temperatur, der Porosität und der Geometrie wurden nicht berücksichtigt. Experimentelle Befunde, wie sich diese Parameter auswirken, können Arbeiten von Diemar und Warke [22, 32] entnommen werden.

6.2 Experimentell und simulativ bestimmte Eingabedaten

6.2.1 Diffusionskinetik

6.2.1.1 Experimentell und simulative Ergebnisse zur Bestimmung der Diffusionskinetik

Zur Vorhersage von Aufkohlprofilen in gradiert porösen Randschichtzuständen mittels des beschriebenen numerischen Konzepts muss der Diffusionskoeffizient für die interstitielle Atombewegung von Kohlenstoff in Astaloy 85 Mo sowohl für den porenfreien Werkstoffzustand als auch in Abhängigkeit der Porosität bestimmt werden.

Zur Bestimmung Diffusionskoeffizienten Kohlenstoff des von bei 940 °C Volumendiffusionsvorgängen in porenfreiem Astaloy 85 Mo bei wurden Aufkohlversuche an pulvermetallurgisch hergestellten, geschmiedeten, zylindrischen Proben $(\rho = 7.8 \text{ g/cm}^3)$ durchgeführt. Die Ergebnisse können Abbildung 6-1 entnommen werden. In den vollständig verdichteten Proben (7,8 g/cm³) stellt sich ein typisches Kohlenstoffprofil mit abfallendem Kohlenstoffgehalt über dem Oberflächenabstand ein. Kennwerte sind ein Randkohlenstoffgehalt von $c_{c, Rand} = 0.86 \text{ Ma\%}$ und eine maximale Eindringtiefe des Kohlenstoffs von etwa 1,5 mm.



Abbildung 6-1: Kohlenstofftiefenverteilung in geschliffenen Astaloy 85 Mo Rohlingen der homogenen Dichte $\rho = 7,8$ g/cm³ nach einer 4-stündigen Aufkohlbehandlung bei 940 °C und einem Kohlenstoffpegel von 1 Ma%.

Die Bestimmung des Diffusionskoeffizienten aus den experimentellen Befunden von Abbildung 6-1 erfolgte simulativ. Dazu wurde numerisch ein Kohlenstoffprofil erzeugt und über Variation des Diffusionskoeffizienten an die experimentellen Befunde angepasst (vgl. Abbildung 6-2). Die Simulation basierte hierbei auf einem technologischen Ansatz (vgl. Gleichung (6.1)), bei dem ß der Stoffübergangskoeffizient, c_{Oberfläche} der Kohlenstoffgehalt der Probenoberfläche und c_p der Kohlenstoffpegel ist.

$$\dot{\mathbf{m}} = \beta \cdot (\mathbf{c}_{\mathbf{P}} - \mathbf{c}_{\mathbf{Oberfläche}}) \tag{6.1}$$

Der Stoffübergangskoeffizient wurde zu $\beta = 2 \cdot 10^{-3}$ mm/s und der Kohlenstoffpegel gemäß dem Experiment zu c_p = 1 Ma% gewählt. Die Eindiffusion von Kohlenstoff wurde lediglich einseitig erlaubt. Das Diffusionsverhalten im Werkstoff wurde durch das 2. Fick'sche Gesetz vorgegeben. Es ergibt sich ein Diffusionskoeffizient von 2,0·10⁻⁵ mm²/s (vgl. Abbildung 6-2).



Abbildung 6-2: Anpassung der Simulation an das experimentell ermittelte Aufkohlprofil für den porenfreien Werkstoffzustand von Astaloy 85 Mo. Aufkohlbedingungen: $c_p = 1$ Ma%, T = 940 °C und 4 Stunden Aufkohldauer.

Um den Einfluss zunehmender Porosität bzw. unterschiedlicher Porenmorphologien auf die Volumendiffusion studieren zu können, wurde ein einfaches 2D-Modell, wie in Abbildung 6-3 veranschaulicht, genutzt.



Abbildung 6-3: Modell zur Bestimmung der Auswirkungen von Poren auf Volumendiffusionsprozesse.

Betrachtet wurden runde bzw. elliptische Poren mit Vorzugsrichtung quer bzw. entlang der Diffusionsrichtung. Diffusionsprozesse können dabei nur über das Werkstoffvolumen erfolgen. Linksseitig wird dem Modell ein fester Kohlenstoffgehalt c_0 als Randbedingung vorgegeben. Rechtsseitig ist eine Stoffübergangsbedingung (vgl. Gleichung (6.2)) mit einem Stoffübergangskoeffizient β und einer Umgebungskohlenstoffkonzentration c_1 definiert. Der Kohlenstoffgehalt für die rechte Modelloberfläche geht über die Variable c in Gleichung (6.2) ein.

$$\dot{\mathbf{m}} = \boldsymbol{\beta} \cdot (\mathbf{c} - \mathbf{c}_1) \tag{6.2}$$

Der gemittelte Stoffstrom \overline{m} über die rechte Seitenfläche lässt sich dann gemäß des Integrals aus Gleichung (6.3) berechnen. Dabei ist L₀ die Breite des 2-D Modells und S die Integrationsvariable.

$$\overline{\dot{m}} = \frac{1}{L_0} \int_{0}^{L_0} \beta \cdot (c - c_1) dS$$
(6.3)

Mittels des gemittelten Stoffstromes kann der effektive Diffusionskoeffizient über Gleichung (6.4) berechnet werden, wobei L_1 die Länge des 2D-Modells und c der gemittelte Kohlenstoffgehalt an der rechten Grenzfläche ist.

$$D_{\text{eff}} = \frac{\overline{\dot{m}}}{(c - c_0)} L_1 \tag{6.4}$$

effektive Diffusionskoeffizient Wird der so berechnete auf den porenfreien Diffusionskoeffizienten bezogen, sind Aussagen zur Auswirkung der Porosität und Porenmorphologie auf die Volumendiffusion möglich. Die Ergebnisse können Abbildung 6-4 entnommen werden. Dabei zeigt sich, wie mit zunehmender Porosität der effektive Diffusionskoeffizient abnimmt. Daneben wirkt sich auch die Morphologie der Poren aus. Elliptische Poren mit Vorzugsrichtung in Diffusionsrichtung bewirken die geringste Abnahme, wohingegen elliptische Poren mit Vorzugsrichtung quer zur Diffusionsrichtung den größten Abfall des effektiven Diffusionskoeffizienten verursachen.



Abbildung 6-4: Effektiver Diffusionskoeffizient bei dominanter Volumendiffusion in Abhängigkeit der Porenmorphologie.

Die auf diese Weise simulativ ermittelten effektiven Diffusionskoeffizienten vernachlässigen allerdings, dass neben Volumendiffusionsprozessen auch Oberflächendiffusionsprozesse in porösen Werkstoffen ablaufen können. Diese werden insbesondere bei einem Porennetzwerk dominant. Um die Auswirkungen der Oberflächendiffusion quantifizieren zu können, wurden Aufkohluntersuchungen an Proben mit einem Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma% und einem deutlich ausgeprägten Porennetzwerk und damit großem Angebot an freier Porenoberfläche (Dichten 6,8 und 7,2 g/cm³) durchgeführt. Die Untersuchungen erfolgten analog zu den Aufkohlexperimenten für den porenfreien Werkstoffzustand (7,8 g/cm³). Die Ergebnisse sind in Abbildung 6-5 dargestellt und werden mit dem Aufkohlungsprofil aus Abbildung 6-1 dass verglichen. Dabei zeigt sich, mit zunehmender Porosität sowohl der Randkohlenstoffgehalt als auch die Eindringtiefe zunimmt, wohingegen der Gradient abnimmt. Für den porenfreien Werkstoff ergibt sich ein Randkohlenstoffgehalt von $c_{c, Rand} = 0.86$ Ma%, der sich bei einer Dichte von 7,2 g/cm³ auf $c_{c, Rand} = 0.94$ Ma% bzw. bei einer Dichte von 6,8 g/cm³ auf c_{c. Rand} = 1,01 Ma% steigert. Insbesondere bei 6,8 g/cm³ kann von einer Durchkohlung ausgegangen werden, da kaum ein Gradient im Kohlenstoffprofil festzustellen ist.



Abbildung 6-5: Kohlenstofftiefenverteilungen in geschliffenen Astaloy 85 Mo Zylinderproben der homogenen Dichten $\rho = 6,8,7,2$ und 7,8 g/cm³ nach einem 4-stündigen Aufkohlprozess bei 940 °C und einem Kohlenstoffpegel von 1 Ma%.

Der je nach Porosität wirkende effektive Diffusionskoeffizient kann simulativ aus diesen Aufkohlexperimenten (vgl. Abbildung 6-5) bestimmt werden. Dazu wurde analog zur Vorgehensweise für den porenfreien Werkstoffzustand simulativ ein Kohlenstoffprofil erzeugt und über Variation des Diffusionskoeffizienten an die experimentellen Befunde angepasst (vgl. Abbildung 6-2). Die Simulation basierte hierbei auf einem modifizierten technologischen Ansatz (vgl. Gleichung (6.5)), bei dem ß der Stoffübergangskoeffizient, c_{Übergang} der Kohlenstoffgehalt in der Tiefe, in der kein Effekt der Schleifbehandlung mehr vorliegt, und c_p der Kohlenstoffpegel ist. c_{Übergang} wurde dabei unter die Oberfläche gelegt, da hier ein gradientenfreies Werkstoffvolumen vorliegt.

$$\mathbf{m} = \beta \cdot (\mathbf{c}_{\mathrm{P}} - \mathbf{c}_{\mathrm{Ühergang}}) \tag{6.5}$$

Der Stoffübergangskoeffizient wurde zu $\beta = 2 \cdot 10^{-4}$ cm/s [21] und der Kohlenstoffpegel gemäß dem Experiment zu c_p = 1 Ma% gewählt. Die Eindiffusion von Kohlenstoff wurde lediglich einseitig erlaubt. Das Diffusionsverhalten im Werkstoff wurde durch das 2. Fick'sche Gesetz vorgegeben.

Eine Auftragung der so bestimmten effektiven Diffusionskoeffizienten über der Dichte kann Abbildung 6-6 entnommen werden. Der porenfreie Diffusionskoeffizient D_0 entspricht dabei 2,0·10⁻⁵ mm²/s. Mit wachsender Porosität ist ein zunehmender effektiver Diffusionskoeffizient, $D_{eff, 7,2 \text{ g/cm}^3} = 9,1 \cdot 10^{-5} \text{ mm}^2\text{/s bzw.}$ $D_{eff, 6,8 \text{ g/cm}^3} = 5,1 1 \cdot 10^{-4} \text{ mm}^2\text{/s}$, zu verzeichnen. Dieser Anstieg ist auf dominierende Oberflächendiffusionsprozesse zurückzuführen.



Abbildung 6-6: Effektiver Diffusionskoeffizient bei dominanter Oberflächendiffusion.

6.2.1.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Materialmodellierung der Diffusionskinetik

Der für den porenfreien Werkstoffzustand numerisch bestimmte Diffusionskoeffizient von $D_{porenfrei} = 2,0\cdot10^{-5}$ mm²/s kann mit Werten der Literatur auf Plausibilität überprüft werden. Spur [21] gibt für eine Temperatur von 930 °C einen Diffusionskoeffizient von 1,47·10⁻⁵ mm²/s bei einem Kohlenstoffgehalt von 0,1 Ma% und 2,63·10⁻⁵ mm²/s bei einem Kohlenstoffgehalt von 0,5 Ma% als Diffusivität für Kohlenstoffatome im Austenit an. Beide Werte sind vergleichbar zu dem hier bestimmten Diffusionskoeffizienten für den porenfreien Werkstoffzustand. Auch der häufig verwendete Approximationsansatz nach Smith [98] zur Abschätzung des Diffusionskoeffizienten liefert vergleichbare Ergebnisse, wobei T die Temperatur in Kelvin und c_c der Kohlenstoffgehalt in Massenprozent ist (vgl. Gleichung (6.6)).

$$D_{\text{porenfrei}} = 0.68 \frac{\text{cm}^2}{\text{s}} \cdot \exp\left(-\frac{18900 \text{ K}^{-1}}{\text{T}} + \left(\frac{4300 \text{ Ma}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}}{\text{T}} - 2.63 \text{ Ma}^{-1}\right) c_c^{-1.5}\right)$$
(6.6)

Es ergeben sich je nach vorgegebener Kohlenstoffkonzentration Werte zwischen $1 \cdot 10^{-5}$ und $3 \cdot 10^{-5}$ mm²/s bei Temperaturen von 940 °C, was ebenfalls, gut zu dem bestimmten Wert von D_{porenfrei} = 2,0 \cdot 10^{-5} mm²/s passt.
Thermodynamisch lässt sich der Diffusionskoeffizient direkt aus der Sprungenthalpie Q über einen Arrhenius Ansatz unter Einbezug der Temperatur T, einer Materialkonstanten D_0 und der universalen Gaskonstante R berechnen (vgl. Gleichung (6.7)).

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}_0 \exp\left(-\frac{\mathbf{Q}}{\mathbf{R} \cdot \mathbf{T}}\right) \tag{6.7}$$

Mit einer Materialkonstanten für Austenit von $D_0 = 7,38 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2/\text{s}$ [33], der Versuchstemperatur T = 940 °C respektive 1213,15 K und der Gaskonstanten ergibt sich eine Sprungenthalpie von 106 kJ/mol für den porenfreien Werkstoff (7,8 g/cm³). [33] gibt eine Bandbreite für die Sprungenthalpie in kubisch-flächenzentrierten Metallen von 100-300 kJ/mol an. Der Vergleich der bestimmten Sprungenthalpie mit Literaturwerten ergibt somit eine gute Übereinstimmung und ermöglicht indirekt eine Verifikation der gesamten Vorgehensweise.

Wird bei zunehmender Porosität weiter von Volumendiffusion ausgegangen, kann ein abnehmender Diffusionskoeffizient gemäß Abbildung 6-4 festgestellt werden. Diese Abnahme in der Diffusivität kann auf eine Reduktion des für Diffusionsvorgänge verfügbaren Querschnittes zurückgeführt werden. Durch die lokale Behinderung von Diffusionsvorgängen reduziert sich der Stoffstrom über den Querschnitt. Wird nun eine Homogenisierung durchgeführt, ergeben sich durch den verringerten Stoffstrom deutlich geringere Diffusionskoeffizienten. Eine besondere Bedeutung kommt in diesem Zusammenhang der Porenmorphologie zu. Im weiteren Verlauf werden elliptische Poren mit Orientierung in bzw. quer zur Diffusionsrichtung als Extremformen der Morphologie betrachtet. Elliptische Poren mit Ausrichtung entlang der Diffusionsrichtung reduzieren den Querschnitt deutlich weniger stark als elliptische Poren mit Vorzugsrichtung quer zur Diffusionsrichtung. Wird die thermodynamische Betrachtung aus (Gleichung (6.7)) herangezogen, so ergibt sich aus einem sinkenden Diffusionskoeffizienten eine scheinbar zunehmende Sprungenthalpie, da alle anderen Größen konstant bleiben (vgl. Abbildung 6-7). Im Falle einer Dichte von 7,2 g/cm³ berechnet sich die scheinbare Sprungenthalpie zu 108 kJ/mol für elliptische Poren mit Vorzugsrichtung quer zur Diffusionsrichtung. Für eine Dichte von 6,8 g/cm³ sind hingegen für diese Porenausrichtung bereits 110 kJ/mol aufzubringen. Für elliptische Poren mit Vorzugsrichtung in Diffusionsrichtung sind bei einer vorliegenden Dichte von 7,2 g/cm³ 107 kJ/mol und bei 6,8 g/cm3 108 kJ/mol notwendig. Der Einfluss der Dichte auf die scheinbare Sprungenthalpie Q_{Volumendiffusion. Dichte} zeigt sich in Abbildung 6-7 und kann über eine lineare Anpassung mit den Parametern $Q_0 = 106 \text{ kJ/mol}$, der Sprungenthalpie für den porenfreien Werkstoff, und $\Delta Q_{Volumendiffusion} = -3,95 \text{ kJ/mol} \cdot \text{cm}^3/\text{g}$, der Änderung der Sprungenthalpie für elliptischen Poren mit Vorzugsrichtung quer zur Diffusionsrichtung in Abhängigkeit der Dichte, beschrieben werden (vgl. Gleichung (6.8)). Bei elliptischen Poren entlang der Diffusionsrichtung ist für $\Delta Q_{Volumendiffusion}$ ein Wert von -1,71 kJ/mol·cm³/g zu verwenden.

$$Q_{\text{Volumendiffusion, Dichte}} = (\rho - 7.8[g/cm^3]) \cdot \Delta Q_{\text{Volumendiffusion}} + Q_0$$
(6.8)

Dies erscheint zunächst widersprüchlich, da die Diffusion über das Werkstoffvolumen per Volumendiffusion erfolgt und die Porosität keinen Einfluss auf die Sprungenthalpie haben sollte. Wird allerdings davon ausgegangen, dass es sich hierbei um ein eindimensionales Stoffübertragungsproblem handelt und Triebkräfte für die Diffusion von der Quelle in das Material vorliegen, so bezieht sich sowohl der Diffusionskoeffizient als auch die Sprungenthalpie auf die interstitielle Atombewegung in Richtung des Konzentrationsgefälles. Da Poren aufgrund der Verringerung des Querschnittes die Diffusion in das Material behindern, müssen in einem porösen Werkstoff zusätzliche Diffusionsprozesse um die Poren erfolgen. Diese zusätzlichen Diffusionsvorgänge erfordern ebenfalls Sprungenthalpien. Im homogenisierten, also porenfreien Werkstoff ergibt sich damit eine scheinbare Zunahme der Sprungenthalpie, da auch diese Diffusionsvorgänge bei einer homogenisierten Betrachtung berücksichtigt werden müssen.

Für die effektiven Diffusionskoeffizienten bei Volumendiffusion $D_{eff, Volumendiffusion}$ ergibt sich somit auf Basis von Gleichung (6.7) sowie des in Gleichung (6.8) beschriebenen Zusammenhangs zwischen Sprungenthalpie und Dichte die mathematische Beschreibung aus Gleichung (6.9).

$$D_{\text{eff, Volumendiffusion}} = D_0 \cdot \exp\left(\frac{-((\rho - 7,8[g/cm^3]) \cdot \Delta Q_{\text{Volumendiffusion}} + Q_0)}{R \cdot T}\right)$$
(6.9)

Relevant werden diese Betrachtungen insbesondere, wenn keine Porennetzwerke sondern einzelne isolierte Poren vorliegen und somit wenig freie Porenoberfläche in Diffusionsrichtung zur Verfügung steht. In diesem Falle ist von dominierender Volumendiffusion auszugehen und Gleichung (6.9) gilt.



Abbildung 6-7: Scheinbare Sprungenthalpie für die interstitielle Atombewegung im Falle von Volumendiffusion bei vorliegender Porosität.

Im Gegensatz dazu kann bei vorliegenden Porennetzwerken mit freier Porenoberfläche in Diffusionsrichtung eine Zunahme des effektiven Diffusionskoeffizienten festgestellt werden (vgl. Abbildung 6-6), da im Falle von Porennetzwerken Diffusion entlang der freien Porenoberfläche möglich wird. Mit zunehmendem Angebot an freier Oberfläche dominiert dieser Diffusionsmechanismus. Die notwendige Sprungenthalpie Qoberflächendiffusion für die Änderung lokaler Bindungszustände stellt sich hierbei geringer als bei Diffusionsvorgängen im ungestörten Volumen dar. Gemäß [33] gilt hierbei die Faustregel, dass für Diffusion entlang der freien Oberfläche Viertel der Sprungenthalpie nur ein von Volumendiffusionsvorgängen aufgebracht werden Qvolumendiffusion muss (vgl. Gleichung (6.10)).

$$4 \cdot Q_{\text{Oberflächendiffusion}} \approx Q_{\text{Volumendiffusion}}$$
 (6.10)

Da sich der Diffusionskoeffizient D direkt aus der Sprungenthalpie für Sprungvorgänge Q über einen Arrhenius Ansatz berechnet [33], unterscheidet sich der Diffusionskoeffizient für Oberflächendiffusion $D_{Oberflächendiffusion}$ vom Diffusionskoeffizient für Volumendiffusion $D_{Volumendiffusion}$ durch den exponentiellen Zusammenhang um mehrere Größenordnungen (vgl. Gleichung (6.7)). Anhaltswerte können Standardwerken der Werkstoffkunde, wie [16, 34], entnommen werden.

Es zeigt sich deutlich, wie die Mobilität der Interstitionsatome mit einem zunehmenden Angebot an freier Porenoberfläche, also abnehmender Dichte, ansteigt. Mittels des Arrheniusansatzes aus Gleichung (6.7) lasst sich damit auf die scheinbare Sprungenthalpie zurückrechnen (vgl. Abbildung 6-8). Im Falle einer Dichte von 7,2 g/cm³ reduziert sich die scheinbare Sprungenthalpie auf 90,7 kJ/mol bzw. für eine Dichte von 6,8 g/cm³ auf 73,3 kJ/mol. Der Einfluss der Dichte auf die scheinbare Sprungenthalpie $Q_{Oberflächendiffusion, Dichte}$ zeigt sich in Abbildung 6-8 und kann über eine lineare Anpassung mit den Parametern $\Delta Q_{Oberflächendiffusion} = 32,1 \text{ kJ/mol} \cdot \text{cm}^3/\text{g}}$ und $Q_0 = 106 \text{ kJ/mol}$ beschrieben werden (vgl. Gleichung (6.11)).

$$Q_{\text{Oberflächendiffusion, Dichte}} = (\rho - 7,8[g/cm^3]) \cdot \Delta Q_{\text{Oberflächendiffusion}} + Q_0$$
(6.11)

Die Berechnung des effektiven Diffusionskoeffizienten $D_{eff, Oberflächendiffusion}$ kann auf Basis von Gleichung (6.7) sowie des in Gleichung (6.11) beschriebenen Zusammenhangs zwischen scheinbarer Sprungenthalpie und Dichte erfolgen (vgl. Gleichung (6.12)).

$$D_{\text{eff, Oberflächendiffusion}} = D_0 \cdot \exp\left(\frac{-((\rho - 7,8[g/cm^3]) \cdot \Delta Q_{\text{Oberflächendiffusion}} + Q_0)}{R \cdot T}\right)$$
(6.12)



Abbildung 6-8: Scheinbare Sprungenthalpie für die interstitielle Atombewegung im Falle von Oberflächendiffusion bei vorliegender Porosität.

Im Falle der hier vorliegenden gradiert porösen Randschicht kann direkt an der Oberfläche von Volumendiffusion ausgegangen werden, da dieser Bereich durch die mechanische Oberflächenbehandlung nahezu vollständig verdichtet ist. Mit zunehmendem Oberflächenabstand ist ein Anstieg der Porosität zu verzeichnen. Hierbei ist allerdings zunächst von einzelnen Poren auszugehen. Da das Festwalzen überwiegend zu einer elliptischen Porenmorphologie mit Vorzugsrichtung quer zur Diffusionsrichtung führt, ist der überwiegende Anteil der Porenoberfläche nicht in Diffusionsrichtung orientiert. Das heißt, dass Diffusionsvorgänge in das Bauteil kaum über die freien Oberflächen der Poren erfolgen können und damit der Aufkohlprozess weiterhin von Volumendiffusionsvorgängen dominiert wird. Erst beim Übergang zur Grundporosität kann von einem Porennetzwerk ausgegangen werden, was dazu führt, dass Oberflächendiffusionsvorgänge dominieren. Daher wird für die Simulation zur Berechnung des effektiven Diffusionskoeffizienten Gleichung (6.13) benutzt, wobei x_0 durch die Tiefenwirkung des Festwalzvorganges definiert wird.

$$D_{eff}(x) = \begin{cases} D_0 \cdot \exp\left(\frac{-((\rho - 7,8[g/cm^3]) \cdot \Delta Q_{Volumendiffusion} + Q_0)}{R \cdot T}\right) & x < x_0 \\ D_0 \cdot \exp\left(\frac{-((\rho - 7,8[g/cm^3]) \cdot \Delta Q_{Oberflächendiffusion} + Q_0)}{R \cdot T}\right) & x > x_0 \end{cases}$$
(6.13)

6.2.2 Umwandlungskinetik - Diffusionsgesteuertes Umwandlungsverhalten

6.2.2.1 Experimentelle Ergebnisse

Da in dieser Arbeit die numerisches Beschreibung von diffusionsgesteuerten Phasenumwandlungen auf dem Ansatz von Johnson, Mehl und Avrami [48-51] basiert, sind der Transformationsmechanismusexponent n und der Parameter für Wachstum und Keimbildung b zu bestimmen. Beide können aus isothermen ZTU-Schaubildern bestimmt werden. Die experimentellen Befunde der isothermen Phasenumwandlungen sind für die Dichten 6,8, 7,2 und 7,8 g/cm³ sowie für die drei Kohlenstoffgehalte 0,25, 0,5 und 0,8 Ma% in den Abbildungen 6-9, 6-10 und 6-11 dargestellt. Für einen Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma% konnte lediglich ein Teildiagramm erstellt werden, da der Beginn der Bainitreaktion messtechnisch nicht auflösbar ist.

In allen Diagrammen sind bevorzugte Umwandlungsbereiche feststellbar, die zur typischen "nasenförmigen" Ausprägung des Umwandlungsbeginns und -endes führen. Für die Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung bzw. Austenit-Bainit-Umwandlung liegt dieser Bereich bei Temperaturen um 700 bzw. 500 °C. Zunehmender Kohlenstoffgehalt führt in allen Fällen zu längeren Inkubations- und Umwandlungsendzeiten. Beispielsweise verlängert sich die Inkubationszeit der Bainitbildung von knapp 1 s im Falle von einer Dichte von 6,8 g/cm³ bei 0,5 Ma% Kohlenstoff zu 3,6 s bei gleicher Dichte und 0,8 Ma% Kohlenstoff (vgl. hierzu Abbildung 6-10 und 6-11). Zudem kann eine leichte Änderung der Krümmung der Umwandlungsnase festgestellt werden.



Abbildung 6-9: Fragment eines isothermen ZTU-Schaubilds für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0.25$ Ma% für eine Dichte von 6,8 g/cm³ und 7,8 g/cm³.



Abbildung 6-10: Isothermes ZTU-Schaubild für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0.5 \text{ Ma\%}$ für eine Dichte von 6,8, 7,2 und 7,8 g/cm³.

Der Vergleich des Umwandlungsverhaltens poröser Proben mit dem des porenfreien Werkstoffes zeigt eine Verschiebung zu kürzeren Inkubations- und Gesamtumwandlungszeiten. Im Falle von einem Kohlenstoffgehalt von 0,5 Ma% beginnt die Bainit-Umwandlung im porenfreien Werkstoff (7,8 g/cm³) nach 2,4 s. Bei einer Porosität von etwa 12 %, also einer Dichte von 6,8 g/cm³, beginnt die Austenit-Bainit-Umwandlung bereits nach ungefähr 1 s (vgl. hierzu Abbildung 6-10).

Der Vergleich von Abbildung 6-10 und Abbildung 6-11 zeigt, dass die Lagen der Umwandlungskurven hinsichtlich minimaler Umwandlungsstartzeiten unabhängig vom Kohlenstoffgehalt und der Dichte sind, so dass in allen Fällen die kürzesten Inkubations- und Gesamtumwandlungszeiten bei Temperaturen von 500 (Bainit-Umwandlung) bzw. 700 °C (Ferrit-Perlit-Umwandlung) zu verzeichnen sind.



Abbildung 6-11: Isothermes ZTU-Schaubild für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0.8 \text{ Ma\%}$ für eine Dichte von 6,8, 7,2 und 7,8 g/cm³.

6.2.2.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Materialmodellierung der diffusionsgesteuerten Umwandlungskinetik

Auftretende Phasenumwandlungen in den Abbildungen 6-9, 6-10 und 6-11 sind auf Änderungen der Zustandsgröße Temperatur zurückzuführen [99]. Dabei verliert die kubischflächenzentrierte (kfz) Struktur des Austenits an Stabilität und wandelt ferritisch-perlitisch, perlitisch oder bainitisch um. Triebkraft für die Umwandlung stellt dabei die Abnahme der freien Enthalpie dar [33]. Die Bildung neuer Phasen erfolgt in allen Fällen über Keime. Für diese muss neue Grenzfläche gebildet und das Gitter verzerrt werden, was der Triebkraft der Phasenumwandlung entgegenwirkt. Daher sind nur Keime ab einer kritischen Größe, was gleichbedeutend mit einem günstigen Oberflächen-Volumen-Verhältnis ist, wachstumsfähig.

Die festgestellte bevorzugte Umwandlung bei mittleren Temperaturen, oben auch mit "nasenförmiger" Ausprägung der Inkubations- und Umwandlungsendzeit beschrieben, ist eine direkte Konsequenz aus dem Produkt von Keimzahl und dem jeweiligen Diffusionsvermögen. Bei hohen Temperaturen liegen zwar gute Diffusionsbedingungen vor, aber durch die geringe Unterkühlung sind nur geringe Triebkräfte für die Phasenumwandlung wirksam. Keimbildung ist nur in geringem Maße möglich. Bei hoher Unterkühlung stehen zwar Triebkräfte in ausreichendem Maße für die Keimbildung zur Verfügung, allerdings ist das Diffusionsvermögen dann eingeschränkt. Aus diesem Grunde liegt bei mittleren Temperaturen ein ideales Verhältnis von Keimzahl und Diffusionsvermögen vor, so dass sich kürzeste Inkubations- und Umwandlungsendzeiten ergeben.

Legierungselemente wirken sich sowohl auf den Keimbildungsprozess als auch auf die notwendigen Diffusionsvorgänge aus. Ein zunehmender Kohlenstoffgehalt bewirkt eine verzögerte Umwandlung, obwohl der Diffusionskoeffizient durch die sinkende Aktivierungsenthalpie [100] zunimmt und damit thermisch bedingte Sprungvorgänge einfacher möglich sind. Zu berücksichtigen ist jedoch eine deutlich größere Anzahl von erforderlichen Diffusionsvorgängen. Zusätzlich bewirkt der Kohlenstoff eine Stabilisierung des Austenits zu tieferen Temperaturen, was zu geringeren Triebkräften in kohlenstoffreichen Werkstoffen im unterkühlten Austenit führt. Zusammenfassend lässt sich daher auf eine verzögerte Umwandlung schließen. Je nach Verhältnis von Diffusionskoeffizient und Keimzahl ist auch eine Verschiebung der Umwandlungsnase entlang der Temperaturachse denkbar, was sich so allerdings nicht in den experimentellen Befunden widerspiegelt. Jedoch sei in diesem Zusammenhang darauf verwiesen, dass die Prüftemperaturen mit einer 50 °C Spreizung zur Auflösung solcher Phänomene zu grob gewählt wurden. Als Indiz, dass oben durchgeführte Überlegung aber durchaus Berechtigung hat, kann allerdings die geänderte Krümmung der Umwandlungsnasen dienen. die auf eine Verschiebung der Umwandlungsnasen in Temperaturrichtung schließen lässt.

Eine beschleunigte Phasenumwandlung kann bei vorliegender poröser Mikrostruktur beobachtet werden. Dabei kann aber nicht von geänderten Triebkräften [30] ausgegangen werden. Die freien Porenoberflächen und das defektreiche Mikrovolumen um die Pore führt zu einer erhöhten Mobilität der Atome, was letztendlich zu bevorzugter Keimbildung an Porenoberflächen und Keimwachstum führt. Auftretende Umwandlungsdehnungen können zudem durch das Porenvolumen aufgenommen werden [30]. Daher werden kürzere Inkubations- und Transformationsendzeiten für poröse Proben festgestellt.

Bei Annahme einer diffusionsgesteuerten Umwandlungskinetik kann üblicherweise die Modellierung mittels des Johnson-Mehl-Avrami-Ansatzes (vgl. Gleichung (6.14)) erfolgen.

$$w_{\text{Phase}} = 1 - \exp(-b \cdot t^n) \tag{6.14}$$

Die Avrami-Gleichung (6.14) beschreibt dabei den zeitlichen Verlauf der Phasenbildung w_{Phase} über den Transformationsmechanismusexponent n und den Parameter b für Keimbildung und Wachstum.

Unter der Bedingung, dass sich der Keimbildungsmechanismus nicht ändert [101], kann der Transformationsmechanismusexponent n für den Umwandlungsvorgang als konstant angesehen werden. Da gemäß den Abbildungen 6-10 und 6-11 die bainitische Phasenumwandlung relativ rasch beginnt und die ferritisch-perlitische Phasenumwandlung erst nach Inkubationszeiten von mehreren Minuten bzw. Stunden einsetzt, ist die bainitische Phasenumwandlung bei der Wärmebehandlung zumeist dominierend und von besonderer Relevanz für die simulative Beschreibung. Aus diesem Grunde wird nachfolgend die bainitische Phasenumwandlung modelliert und auf ein Modell der Ferrit-Perlit-Umwandlung verzichtet.

Im Falle der Austenit-Bainit-Umwandlung wurden zunächst alle Versuche frei, ohne Restriktionen durch den Johnson-Mehl-Avrami-Ansatz, angefittet. Dabei ergibt sich für den Parameter b eine Variation um mehrere Größenordnungen, wohingegen sich der Wert für n verändert. Daher marginal kann von einem konstanten nur Transformationsmechanismusexponenten ausgegangen werden. Als Mittelwert aller bestimmten Exponenten ergibt sich n = 2,4. Dieser Zahlenwert ist gemäß [101] gleichbedeutend mit 2-dimensionalem, plattenförmigem Wachstum der Bainitnadeln. Als Konsequenz muss der Parameter b von der Temperatur, dem Kohlenstoffgehalt und der Porosität abhängig sein. Folglich ist ein porositäts-, temperatur- und kohlenstoffabhängiges Kinetikmodell für den Parameter b zu entwickeln.

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Ansatz für b, basierend auf der Beschreibung der Wachstumsgeschwindigkeit G und der Keimbildungsgeschwindigkeit n_{Keim} , entwickelt [102] (vgl. Gleichung (6.15)).

$$b \sim n_{Keim} \cdot G$$
 (6.15)

Dieser Ansatz für den Geschwindigkeitskoeffizienten b ist als mechanismengetriebenes aber nicht physikalisch mechanismenbeschreibendes Modell anzusehen. Der Koeffizient ist daher ein Maß für die je nach Temperatur maximal mögliche Umwandlungsgeschwindigkeit, die sich einstellen kann. b ermöglicht so das Abbilden der begünstigten Umwandlung bei mittleren Temperaturen. Die Änderung der Umwandlungsgeschwindigkeit mit der Zeit ist bereits durch den Johnson-Mehl-Avrami-Ansatz abgedeckt.

Die Keimbildungsrate n_{Keim} , also die entstehende Anzahl kritischer Keime pro Zeiteinheit in der Ausgangsphase, setzt sich aus einem thermodynamischen und kinetischen Anteil [102] zusammen. Nach Sahm [99] kann für reine Metalle und metallische Legierungen der kinetische Anteil, der die Abnahme des Diffusionsvermögens mit fallender Temperatur berücksichtigt, vernachlässigt werden. Folglich ist der thermodynamische Anteil bestimmend und die Keimbildungsrate kann durch Gleichung (6.16) vereinfachend dargestellt werden.

$$\dot{n}_{\text{Keim}} \sim \exp\left[-\frac{\Delta G^*}{R \cdot T}\right]$$
 (6.16)

Dabei ist ΔG^* die Gibb'sche Energie für die kritische Keimbildung, R die Gaskonstante und T die Temperatur. Da mit steigender Unterkühlung die Triebkraft zunimmt und damit die Keimbildungsrate stark ansteigt [99], kann ΔG^* vereinfacht durch Gleichung (6.17) beschrieben werden. Dabei ist ΔT die Unterkühlung.

$$\Delta G^* = \frac{\text{const.}}{\Delta T^2} \tag{6.17}$$

Durch Vernachlässigung des kinetischen Anteils können An- und Ablagerungsprozesse von Atomen nicht berücksichtigt werden. Soll eine Berücksichtigung des Materialflusses erfolgen, ist die Becker und Döring Theorie anzuwenden.

Die Wachstumsgeschwindigkeit der Keime ist durch Diffusionsprozesse bestimmt und kann daher wie in Kapitel 6.2.1.2 mittels eines Arrhenius-Ausdruckes beschrieben werden (vgl. Gleichung (6.18)) [102].

$$\dot{G} \sim \exp\left[-\frac{Q_s}{R \cdot T}\right]$$
 (6.18)

Dabei ist Q_S die Enthalpie für Selbstdiffusion von Eisen, R die Gaskonstante und T die Temperatur. Aus Gleichung (6.15), (6.16), (6.17) und (6.18) folgt damit die temperaturabhängige Proportionalität aus Gleichung (6.19). Für b ergibt sich dann unter Einführung der Parameter D_{Bainit} , E_{Bainit} und F_{Bainit} Gleichung (6.20), wobei D_{Bainit} der Proportionalitätskonstanten, E_{Bainit} der Konstanten const und F_{Bainit} der Enthalpie für Selbstdiffusion Q_S von Eisen entspricht.

b ~
$$\exp\left[-\frac{\frac{\operatorname{const}}{\Delta T^{2}} + Q_{s}}{R \cdot T}\right]$$
 (6.19)

$$b(T, c_{c}, \rho) = D_{\text{Bainit}} \exp\left[-\frac{\frac{E_{\text{Bainit}}}{\Delta T^{2}} + F_{\text{Bainit}}}{R \cdot T}\right]$$
(6.20)

Da bei bainitischer Phasenumwandlung die Porosität und der Kohlenstoffgehalt die Lage der einzelnen "nasenförmigen" Kurven der isothermen ZTU-Diagramme beeinflusst, ist D_{Bainit} (vgl. Gleichung (6.20)) gemäß Gleichung (6.21) anzusetzen (vgl. Tabelle 6-1)).

$$D_{\text{Bainit}}(\rho, c_{c}) = (d_{1} + d_{2} \cdot \rho) + (c_{c} - 0.5 \cdot \text{Ma\%}) \cdot (d_{3} + d_{4} \cdot \rho)$$
(6.21)

Tabelle 6-1: Parameter für die Modellierung von D_{Bainit} in Gleichung (6.20).

Umwandlung	$D_{\text{Bainit}}(\rho, c_c)$
Austenit 🌩	$d_1 = 1,03 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-2,4}$
Bainit	$d_2 = -1.29 \cdot 10^{13} \text{ cm}^3 / (g \cdot s^{2,4})$
	$d_3 = -3.13 \cdot 10^{14} \text{ Ma\%} \cdot \text{s}^{-2.4}$
	$d_4 = 3.97 \cdot 10^{14} \text{ cm}^3 / (\text{Ma\%} \cdot \text{g} \cdot \text{s}^{2,4})$

Neben der Lage von Umwandlungsbeginn und –ende beeinflusst der Kohlenstoffgehalt aber auch die Nasenform der bainitischen ZTU-Kurven, was durch die Kohlenstoffabhängigkeit der Parameter E_{Bainit} und F_{Bainit} berücksichtigt wird (vgl. Gleichungen (6.22) und (6.23) sowie Tabelle 6-2).

$$E_{\text{Bainit}}(c_{c}) = e + f \cdot c_{c}$$
(6.22)

$$F_{\text{Bainit}}(c_c) = g + h \cdot c_c \tag{6.23}$$

Tabelle 6-2: Parameter für die Modellierung von E_{Bainit} in Gleichung (6.22) und F_{Bainit} in Gleichung (6.23) für die Austenit-Bainit-Umwandlung.

Umwand- lung	E _{Bainit} (c _c)	$F_{Bainit}(c_c)$
Austenit ➡	$e = 1,67 \cdot 10^{8} \text{ J}^{1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{2}$	$g = 1,96 \cdot 10^{5} \text{ J}^{1} \cdot \text{mol}^{-1}$
Bainit	f = 6,67 \cdot 10^{7} \text{ J}^{1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{2} \cdot \text{Ma}%^{-1}	h = 2,00 \cdot 10^{4} \text{ J}^{1} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot Ma\%^{-1}



Abbildung 6-12: Gegenüberstellung von modellierten und experimentellen Befunden für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0,5$ Ma% und den Dichten 6,8 g/cm³ und 7,8 g/cm³ (links) bzw. 7,2 g/cm³ und 7,8 g/cm³. Die Aufteilung erfolgte aus Gründen der Übersichtlichkeit.



Abbildung 6-13: Gegenüberstellung von modellierten und experimentellen Befunden für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0,8$ Ma% und den Dichten 6,8 g/cm³ und 7,8 g/cm³ (links) bzw. 7,2 g/cm³ und 7,8 g/cm³. Die Aufteilung erfolgte aus Gründen der Übersichtlichkeit.

Die Ergebnisse des entwickelten Modells sind den experimentellen Befunden in den Abbildungen 6-12 und 6-13 gegenübergestellt. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Experimenten und dem entwickelten Modell.

6.2.3 Umwandlungskinetik - Diffusionsloses Umwandlungsverhalten

6.2.3.1 Experimentelle Ergebnisse

Für die numerische Beschreibung der diffusionslosen Phasenumwandlung mittels des Koistinen-Marburger-Ansatzes [57] ist die Martensitstarttemperatur M_s erforderlich, die per kontinuierlicher Abschreckdilatometrie bestimmt werden kann. Die Ergebnisse fasst Abbildung 6-14 zusammen. Im Falle des verdichteten Astaloy 85 Mo-Pulvers mit 0,5 Ma% Kohlenstoff liegt eine Martensitstarttemperatur von etwa 350 °C vor. Mit zunehmendem Kohlenstoffgehalt nimmt diese ab: bei 0,8 Ma% Kohlenstoffgehalt auf etwa 330 °C. Für einen Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma% konnte keine reine martensitische Umwandlung realisiert werden, so dass die in Abbildung 6-14 dargestellten Martensitstarttemperaturen Versuchen entstammen, die zunächst eine Bainitbildung aufweisen. Ein Einfluss der Porosität konnte messtechnisch nicht erfasst werden. Die gemessenen M_s-Temperaturen liegen alle im Bereich des verdichteten Werkstoffes.



Abbildung 6-14: Martensitstarttemperatur in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehaltes und der Dichte.

6.2.3.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Materialmodellierung des Umwandlungsverhaltens

Bei hohen Abschreckraten sind diffusionsgesteuerte Phasenumwandlungen nicht mehr möglich. Ein Übergang in eine energetisch stabilere Struktur erfolgt dann durch Scherumklappvorgänge. Diese können allerdings erst ablaufen, wenn eine ausreichend hohe Unterkühlung und damit Triebkräfte vorliegen, die auch die notwendigen Anpassungsdeformationen wie auch Grenzflächenbildungen ermöglichen [33]. Dabei kann aber davon ausgegangen werden, dass die Energie für Anpassungsverformungen sehr viel größer als die notwendige Energie für die Bildung der Grenzflächen ist. Die Triebkraft kann nach [33] durch Gleichung (6.24) berechnet werden, wobei T₀ die Temperatur ist, bei der der Austenit und die Martensitphase die gleiche freie Enthalpie aufweisen und M_s die Martensitstarttemperatur ist.

$$\Delta G_{\text{chem}} = \Delta H_{\text{chem}} \cdot \frac{(T_0 - M_s)}{T_0}$$
(6.24)

Der Zähler aus Gleichung (6.24) stellt somit die Unterkühlung dar. Da Gleichung (6.24) keine Zeitabhängigkeit aufweist, ist der gebildete Martensitgehalt nur von der Unterkühlung, nicht jedoch von der Haltedauer der Temperatur abhängig.

Ein zunehmender Anteil an interstitiell gelösten Fremdatomen, wie in diesem Falle Kohlenstoff, führt zu einer Abnahme der Martensitstarttemperatur, da die Einlagerung der Fremdatome eine Stabilisierung des Austenits zur Folge hat. In Bezug auf Gleichung (6.24) bewirkt dieses Zulegieren von Fremdatomen eine Abnahme von T₀. Die Konsequenz ist, dass vergleichbare Triebkräfte erst bei tieferen Temperaturen zur Verfügung stehen und die Martensitstarttemperatur mit zunehmendem Kohlenstoffgehalt sinkt (vgl. Abbildung 6-14) [33]. Effekte der Porosität auf die M_s-Temperatur können in ähnlicher Weise aus Gleichung (6.24)

abgeleitet werden. Die für die Martensitbildung notwendigen Anpassungsverformungen und die dafür notwendige aufzubringende Verformungsenergie ΔH_{def} stellt sich im porösen Fall geringer dar, da Umwandlungsdehnungen durch das Porenvolumen aufgenommen werden können [30, 32]. Damit ist die aufzubringende Triebkraft geringer, was Martensitbildung bereits bei geringeren Unterkühlungen ermöglicht. Experimentell ist dieser Anstieg in [30] dokumentiert.

In dieser Ausarbeitung war die theoretisch zunehmende M_s-Temperatur für den porösen Werkstoff nicht experimentell erfassbar. Es ist hierbei zu bemerken, dass bei der gewählten Prüftechnik eine isolierte Betrachtung des Effekts der Porosität nicht möglich ist, da immer Einflüsse aus thermischer Leitfähigkeit und Porosität gemeinsam erfasst werden. Da im Realfall bei Abschreckvorgängen die Porosität neben der Martensitbildung auch immer die Wärmeleitfähigkeit beeinflusst, kann daher auf eine weitere Trennung der Einflüsse verzichtet werden.

Aufgrund des dominanten Einflusses des Kohlenstoffgehaltes und einer fehlenden experimentellen Datenbasis für die Porositätseffekte wurde die Martensitstarttemperatur nur in Abhängigkeit des Kohlenstoffs mittels eines linearen Ansatzes modelliert (vgl. Gleichung (6.25)).

$$M_s = M_{s,0} - \Delta M_s \cdot c_c \tag{6.25}$$

Dabei ist $M_{s,0}$ die Martensitstarttemperatur von kohlenstofffreiem Astaloy 85 Mo und ΔM_s ein Parameter, der die Abnahme der Martensitarttemperatur in Folge eines zunehmenden Kohlenstoffgehaltes beschreibt. Beide Parameter wurden per Least–Square Schätzer bestimmt. Die Parameter können Tabelle 6-3 entnommen werden. Eine Gegenüberstellung des Modells mit dem Experiment ist in Abbildung 6-14 dargestellt.

Tabelle 6-3: Parameter $M_{s,0}$ und ΔM_s (vgl. Gleichung (6.25)) für die Modellierung der diffusionslosen Umwandlung in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehaltes c_c .

Umwandlung	M _{s,0}	ΔM_s
	701,03 [K]	134,61 [K/Ma%]
Austenit ➡ Martensit	bzw.	bzw.
	427,88 [°C]	[°C/Ma%]

6.2.4 Umwandlungsdehnungen

6.2.4.1 Experimentelle Ergebnisse

Auftretende Umwandlungsdehnungen können aus den experimentellen Befunden der Dilatometerversuche ermittelt werden. Die festgestellten Umwandlungsdehnungen für die Austenit-Ferrit/Perlit-Reaktion können Abbildung 6-15 entnommen werden. Dabei treten stets positive Umwandlungsdehnungen auf. Durch zunehmenden Kohlenstoffgehalt reduzieren sich die Umwandlungsdehnungen teilweise erheblich. Für Dichten von 6,8 bzw. 7,2 g/cm³ konnten vergleichbare Umwandlungsdehnungen ermittelt werden. Beim porenfreien Werkstoff sind allerdings geringere Umwandlungsdehnungen zu messen. Ähnlich verhält es sich für die bei der Austenit-Bainit-Umwandlung auftretenden Umwandlungsdehnungen (vgl. Abbildung 6-16).



Abbildung 6-15: Umwandlungsdehnungen für die Austenit in Ferrit-Perlit Umwandlung für Astaloy 85 Mo für verschiedene Kohlenstoffgehalte und Dichtestufen.



Abbildung 6-16: Umwandlungsdehnungen für die Austenit in Bainit Umwandlung für Astaloy 85 Mo für verschiedene Kohlenstoffgehalte und Dichtestufen.

Demgegenüber sind deutlich größere Umwandlungsdehnungen bei der Austenit-Martensit-Umwandlung festzustellen. Allerdings ist hier die Datenbasis geringer, da im Falle von 0,25 Ma% Kohlenstoff keine reine Martensitbildung mit verwendeter Versuchstechnik zu realisieren ist. Für Kohlenstoffgehalte über 0,5 Ma% liegt hingegen keine vollständige Phasenumwandlung vor, da die Martensitfinishtemperatur unter der Raumtemperatur liegt, was Auswertungen mittels der beschriebenen Vorgehensweise unmöglich macht. Daher wird hier lediglich die Umwandlungsdehnung für einen Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0,5$ Ma% in Abhängigkeit der Dichte vorgestellt (vgl. Abbildung 6-17). Mit zunehmender Dichte sind hierbei steigende Umwandlungsdehnungen festzustellen.



Abbildung 6-17: Umwandlungsdehnungen für die Austenit in Martensit Umwandlung bei einem Kohlenstoffgehalt von 0,5 Ma% für verschiedene Dichtestufen.

6.2.4.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Materialmodellierung des Umwandlungsverhaltens

Die auftretenden positiven Umwandlungsdehnungen bei der Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung werden durch den Übergang einer dichtest gepackten kubischflächenzentrierten (kfz) Struktur in ein kubisch-raumzentriertes (krz) Gitter verursacht. Mit zunehmendem Kohlenstoffgehalt nimmt die Verzerrung der kubisch-flächenzentrierten austenitischen Ausgangsphase zu [33, 100]. Dadurch ist die Volumenänderung mit steigendem Kohlenstoffgehalt beim Übergang des Austenits in die ferritisch-perlitische Phase geringer. Dies ist in guter Übereinstimmung mit Literaturwerten nach Sjöström [103]. Demgegenüber hat die Porosität bei der diffusionsgesteuerten Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung kaum Auswirkung auf die Umwandlungsdehnungen. Die Anderungen liegen hierbei in Größenordnung der Messungenauigkeit. Es kann davon ausgegangen werden, dass die geometrische Struktur der Poren bei der diffusionsgesteuerten Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung erhalten bleibt (vgl. Abbildung 6-18). Allerdings sind auch Literaturquellen zu finden, die einen Einfluss ausweisen [32]. Für die vollständig verdichteten Proben sind tendenziell geringere Umwandlungsdehnungen festzustellen. Dies ist wohl auf den Eigenspannungsabbau während des Erwärmens zurückzuführen, da die vollständig porenfreien Proben über den zusätzlichen Prozessschritt Schmieden hergestellt wurden. Aus diesem Grunde wurden diese Messwerte nicht als Eingabedaten für die Simulation verwendet. Bei den Eingabedaten wurde kein Einfluss der Porosität auf die Umwandlungsdehnungen vorgesehen.



Abbildung 6-18: Gegenüberstellung der Längenänderung bei der Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung für verschiedene Dichten und einen Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma%.

Die Umwandlungsdehnungen für die Austenit-Bainit-Umwandlung sind betragsmäßig vergleichbar mit den Umwandlungsdehnungen für die Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung. Kohlenstoffgehalt und Porosität wirken sich wie bei der Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung aus.

Im Falle der Austenit-Martensit-Umwandlung ist durch den Übergang des dichtest gepackten Gitters in eine tetragonal-raumzentrierte Struktur mit den größten Umwandlungsdehnungen zu rechnen. Dabei nehmen die notwendigen Anpassungsverformungen mit steigendem Kohlenstoffgehalt zu, was letztlich zu steigenden Umwandlungsdehnungen führt [103]. Anders als im Falle der Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung ist bei einer Scherumwandlung ein deutlicher Einfluss der Porosität festzustellen. Ausgehend vom porenfreien Werkstoff ist eine abnehmende Umwandlungsdehnung mit zunehmender Porosität messtechnisch zu erfassen. Die Porosität nimmt also Dehnungen, verursacht durch die Martensitbildung, auf [30]. Für die Simulationen wurden in allen Fällen tabellarisch Werte hinterlegt. Soll dennoch eine Modellierung erfolgen, bieten sich lineare Funktionen in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehaltes cc gemäß Gleichung (6.26) für die Umwandlungsdehnungen bei der Austenit-Ferrit/Perlitbzw. Austenit-Bainit-Umwandlung Dabei an. die ist ε_{tr.0} Umwandlungsdehnung des kohlenstofffreien Werkstoffes und $\Delta \varepsilon_{tr}$ ein Parameter zur Quantifizierung des Kohlenstoffeffektes.

$$\varepsilon_{\rm tr} = \varepsilon_{\rm tr,0} + \Delta \varepsilon_{\rm tr} \cdot c_{\rm c} \tag{6.26}$$



Abbildung 6-19: Gegenüberstellung modellierter und experimentell gemessener Umwandlungsdehnungen für die Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung.



Abbildung 6-20: Gegenüberstellung modellierter und experimentell gemessener Umwandlungsdehnungen für die Austenit-Bainit-Umwandlung.

Für die Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung ergeben sich die Parameter $\varepsilon_{tr,0} = 9,9\cdot10^{-3}$ und $\Delta\varepsilon_{tr} = -2,29\cdot10^{-3}$ Ma%⁻¹. Dagegen gelten bei der Austenit-Bainit-Umwandlung die Parameter $\varepsilon_{tr,0} = 1,07\cdot10^{-2}$ und $\Delta\varepsilon_{tr} = -3,35\cdot10^{-3}$ Ma%⁻¹. Eine Gegenüberstellung zeigt Abbildung 6-19 bzw. 6-20.

Für die Austenit-Martensit-Umwandlung werden die Umwandlungsdehnungen nur in Abhängigkeit der Dichte tabellarisch vorgegeben (vgl. Abbildung 6-21). Aufgrund unzureichender Daten kann die Kohlenstoffabhängigkeit hier nicht berücksichtigt werden.

Soll auch hier das Verhalten durch ein Modell vorgegeben werden, ist ein linearer Ansatz in Abhängigkeit der Dichte (vgl. Gleichung (6.27)) vorzugeben. Dabei ist $\varepsilon_{tr, \text{ poros}}$ die fiktive Umwandlungsdehnung für eine Werkstoffstruktur niedrigster Dichte und $\Delta \varepsilon_{tr, \text{ Dichte}}$ ein Parameter, der den Effekt einer zunehmenden Dichte Rechnung trägt. Die in Gleichung (6.27) verwendeten Parameter lassen sich zu $\varepsilon_{tr, \text{ poros}} = 1,14\cdot10^{-3}$ und $\Delta \varepsilon_{tr, \text{ Dichte}} = 2,26\cdot10^{-3}$ cm³/g bestimmen.

$$\varepsilon_{\rm tr} = \varepsilon_{\rm tr.\,porös} + \Delta \varepsilon_{\rm tr.\,Dichte} \cdot (\rho - 7,8[g/cm^3])$$
(6.27)



Abbildung 6-21: Gegenüberstellung der modellierten und experimentell ermittelten Umwandlungsdehnungen für die Austenit-Martensit-Umwandlung für einen Kohlenstoffgehalt von 0,5 Ma%.

6.2.5 Umwandlungsplastizität

6.2.5.1 Experimentelle Ergebnisse

Die umwandlungsplastische (UP-) Dehnung für die Austenit-Martensit-Umwandlung von Astaloy 85 Mo wurde mittels Deformationsdilatometrie bestimmt. Die für die numerische Beschreibung notwendige umwandlungsplastische Konstante kann gemäß den Ausführungen in Kapitel 4 bestimmt werden. Das Ergebnis zeigt Abbildung 6-22.

Mit zunehmendem Kohlenstoffgehalt kann zunächst eine Abnahme der UP-Konstanten verzeichnet werden, bevor im Falle eines Kohlenstoffgehaltes von 0,8 Ma% wieder höhere UP-Konstanten bestimmt werden können.



Abbildung 6-22: Umwandlungsplastische Konstante für die Austenit-Martensit-Umwandlung.

6.2.5.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Materialmodellierung der Umwandlungsplastizitätskonstanten

Ähnliche Verläufe wie in Abbildung 6-22 dargestellt können auch den Ausarbeitungen von Trapp und Besserdich [38, 67] entnommen werden. Die zunächst abnehmende umwandlungsplastische Konstante ist dabei auf eine zunehmende Mischkristallverfestigung zurückzuführen. Die Folge sind kleine umwandlungsplastische Längenänderungen und damit eine geringere umwandlungsplastische Konstante. Bei zunehmendem Kohlenstoffgehalt entwickelt sich morphologisch Plattenmartensit, der sich bei Einwirkung einer äußeren anisotropen Last in eine Vorzugsrichtung ausbildet. In der Literatur wird dies als Magee-Effekt beschrieben [67].

Eine Modellierung der UP-Konstanten K in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehaltes kann mittels eines Polynoms zweiten Grades erfolgen (vgl. Gleichung (6.28)). Dabei ist K₀ die Umwandlungsplastizität des kohlenstofffreien Werkstoffs und die Parameter ΔK_1 sowie ΔK_2 geben die Änderung der UP-Konstanten in Folge eines zunehmen Kohlenstoffgehaltes an.

$$\mathbf{K}(\mathbf{c}_{c}) = \Delta \mathbf{K}_{2} \cdot \mathbf{c}_{c}^{2} + \Delta \mathbf{K}_{1} \cdot \mathbf{c}_{c} + \mathbf{K}_{0}$$
(6.28)

Die Parameter K₀, Δ K₁ und Δ K₂ wurden mittels eines Least-Square Schätzers zu K₀ = 46,37 [10⁻⁵mm²/N], Δ K₁ = -91,06 [10⁻⁵mm²/(Ma%·N)] und Δ K₂ = 81,95 [10⁻⁵ mm²/(Ma%²·N)] bestimmt.

6.2.6 Mechanische Kennwerte

6.2.6.1 Experimentelle Ergebnisse

Der Elastizitätsmodul (E-Modul) von Astaloy 85 Mo für einen Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma% kann in Abhängigkeit von Dichte und Temperatur Abbildung 6-23 entnommen werden. Sowohl mit zunehmender Porosität als auch mit steigender Temperatur nimmt der E-Modul ab. Wie Abbildung 6-23 zeigt, verläuft der Abfall des Elastizitätsmoduls mit zunehmender Temperatur für die Dichten 6,8 und 7,2 g/cm³ identisch, so dass der Abfall mathematisch mit der gleichen Steigung beschrieben werden kann. Für das verdichtete Material ist hingegen eine schwächere Abnahme des Elastizitätsmoduls mit zunehmender Temperatur festzustellen.



Abbildung 6-23: Experimentelle Befunde für den Elastizitätsmodul in Abhängigkeit von Dichte und Temperatur für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma%.

Die experimentell ermittelten Streckgrenzen entstammen Untersuchungen am Deformationsdilatometer und können in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehaltes, der Temperatur und der vorliegenden Mikrostruktur den Abbildungen 6-24 und 6-25 entnommen werden. Die Streckgrenze steigt dabei ausgehend vom ferritisch-perlitischen über den bainitischen zum martensitischen Werkstoffzustand bei vergleichbaren Prüftemperaturen und Dichten an. Für eine austenitische Mikrostruktur ist die Streckgrenze generell niedriger, allerdings liegen die realisierbaren Prüftemperaturen auch deutlich höher. Mit zunehmender Temperatur ist generell eine Abnahme der Streckgrenze zu verzeichnen. Die gewählten maximalen Temperaturen entsprechen der Stabilität der jeweiligen Phase. Ein wachsender Porenanteil ist gleichbedeutend mit einer Abnahme der Streckgrenze. Für den vollständig verdichteten Zustand konnten aufgrund von mangelndem Probenmaterial keine Versuche durchgeführt werden.



Abbildung 6-24: Experimentelle Befunde für die elastische Streckgrenze in Abhängigkeit der Dichte und der Temperatur für eine ferritsich-perlitische (links) bzw. bainitsche (rechts) Mikrostruktur für Astaloy 85 Mo.



Abbildung 6-25: Experimentelle Befunde für die elastische Streckgrenze in Abhängigkeit der Dichte und der Temperatur für eine martensitische (links) bzw. austenitische (rechts) Mikrostruktur für Astaloy 85 Mo.

6.2.6.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Materialmodellierung des Umwandlungsverhaltens

Das elastische Verhalten ist ein Maß für die Bindungsverhältnisse [104]. Die Abnahme des E-Moduls mit zunehmender Temperatur ist auf einen flacher werdenden Verlauf der Kraft-Abstandskurve zurückzuführen. Die Abnahme verläuft dabei linear mit steigender Temperatur [105]. Dies ist Abbildung 6-23 zu entnehmen. Allerdings ist bei genauerer Betrachtung zu bemerken, dass die Steigung für die porösen Werkstoffzustände und den porenfreien Werkstoff unterschiedlich sind. Der Grund für diese Diskrepanz im Werkstoffverhalten ist möglicherweise auf die Probenherstellung zurückzuführen. Die porösen Werkstoffzustände werden ausschließlich über die pulvermetallurgische Route hergestellt. Die vollständig verdichteten Proben werden zusätzlich geschmiedet.

Sowohl Phasenübergänge als auch der Anteil der gelösten Fremdatome ändern den Elastizitätsmodul nicht messbar. Eine Erklärung hierfür liefert Courtney und Gottstein [104, 105]. Der Elastizitätsmodul ist definiert als die zweite Ableitung des interatomaren Potentials bei Gleichgewichtsabstand. Der Gleichgewichtsabstand ändert sich zwar bei Phasenumwandlungen und durch einen zunehmenden Fremdatomanteil wie Gottstein [105] zeigt, aber lediglich in sehr geringem Maße. Damit sind signifikante Änderungen des Elastizitätsmoduls ausgeschlossen.

Demgegenüber beeinflusst die Porosität den Elastizitätsmodul deutlich. Durch die lokale Spannungskonzentration an den Poren treten bei gleicher elastischer Beanspruchung größere elastische Dehnungen auf als in einem porenfreien Werkstoff. Damit verläuft die Hooke'sche Gerade mit zunehmender Porosität flacher. Häufig werden poröse Mikrostrukturen auch als Werkstoffverbund angesehen. Eine Abschätzung des Porositätseffektes kann dann über die Werkstoffverbundmodelle nach Reuss und Voigt als Ober- bzw. Untergrenze erfolgen. Eine genauere Modellierung ist aber durch Ansätze von German und Dalgic [14, 106] möglich, die auch im Weiteren Verwendung finden. Am häufigsten wird ein Potenzgesetz zur Beschreibung der Dichteabhängigkeit des **E-Moduls** verwendet E_{Dichte, RT} (vgl. Gleichung (6.29)) [14], wobei E_{0, RT} der Elastizitätsmodul einer porenfreien Probe bei Raumtemperatur und Y eine Materialkonstante in Abhängigkeit der Porenmorphologie ist.

$$E_{\text{Dichte,RT}} = E_{0,RT} \cdot \rho^{Y} \tag{6.29}$$

Y wird dabei hauptsächlich durch die pulvermetallurgische Route bestimmt. Mit zunehmender Porenverrundung verringert sich Y, wohingegen unregelmäßige Porenverteilungen zu einem steigenden Y führen. Für eine nähere Bestimmung von Y führt Dalgic [106] den Sinterparameter P_s auf Basis der Sinterzeit t_{Sinter} in Stunden und der Sintertemperatur T_{Sinter} in Kelvin ein (vgl. Gleichung (6.30)).

$$P_{s} = T_{Sinter} \cdot (20 + \log t_{Sinter})$$
(6.30)

Mit den verwendeten Sinterparametern (vgl. Kapitel 3) lässt sich ein Wert von 27189 K für P_s berechnen. Damit ergibt sich aus der tabellarischen Auflistung von [106] als grobe Abschätzung ein Y = 3,6 für wasserverdüstes Pulver. Für den hier vorliegenden Fall ist aber eine Verwendung eines geringeren Y zweckmäßiger. Eine Anpassung lieferte ein Y = 2,8 als optimalen Wert und ist damit ein Indiz für eine stärkere Porenverrundung durch die spanende Oberflächenbehandlung. Der Elastizitätsmodul einer porenfreien Probe bei Raumtemperatur wurde experimentell zu $E_{0,RT} = 210,24$ GPa bestimmt und dient als Grundlage für die Modellierung. Eine Beschreibung des Abfalls des E-Moduls mit abnehmender relativer Dichte, also dem Verhältnis zwischen tatsächlicher Dichte und Dichte des porenfreien Zustands bei Raumtemperatur, zeigt Abbildung 6-26.



Abbildung 6-26: Gegenüberstellung der modellierten und experimentellen Elastizitätsmoduln für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma% und einer ferritischperlitischen Mikrostruktur für unterschiedliche Porositäten. Modell nach [14] mit Y=2,8.

Da in der numerischen Beschreibung insbesondere die Temperaturabhängigkeit des Elastizitätsmoduls von entscheidender Bedeutung ist, muss die Modellierung nach German [14] noch hinsichtlich des Temperatureinflusses ergänzt werden. Da die experimentellen Befunde auf einen linearen Zusammenhang hinweisen, kann nachfolgender Ansatz aus Gleichung (6.31) genutzt werden. Dabei ist T die Temperatur, $\Delta E_{\text{Temperatur}}$ ein Fitparameter zur Beschreibung des Temperatureinflusses und $E_{\text{Dichte, RT}}$ der Elastizitätsmodul für eine bestimmte Dichte bei Raumtemperatur, berechnet nach Gleichung (6.29).

$$E_{eff}(\rho, T) = E_{Dichte, RT} + \Delta E_{Temperatur} \cdot T$$
(6.31)

wurde Der Parameter $\Delta E_{Temperatur}$ mittels eines Least-Square Schätzers zu $\Delta E_{\text{Temperatur}} = -0,126 \,[^{\circ}\text{C}^{-1}]$ bestimmt. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Modell für die porösen Werkstoffzustände. Für den verdichteten Zustand ist eine Abweichung zu verzeichnen (vgl. Abbildung 6-27). Da sich das Verhalten der porösen Zustände untereinander nicht unterscheidet und eine Änderung des Verhaltens mit weiterer Dichtezunahme nicht anzunehmen ist, wurde der für die porösen Zustände erfasste Temperatureffekt auch auf den verdichteten Zustand übertragen. Eine Beeinflussung der Ergebnisse durch die zusätzliche Schmiedebehandlung ist daher nicht auszuschließen (vgl. Abbildung 6-27).



Abbildung 6-27: Gegenüberstellung von modellierten und experimentell ermittelten Elastizitätsmoduln für verschiedene Dichten und verschiedene Temperaturen.

Der Anstieg der Streckgrenze mit steigendem Kohlenstoffgehalt ist auf eine zunehmende Mischkristallverfestigung zurückzuführen. Die bei geringerer Spannung einsetzende plastische Verformung bei poröser Mikrostruktur kann der inhomogenen plastischen Verformung während quasistatischer Beanspruchung zugeschrieben werden. Hierbei wirken die Poren als Spannungskonzentratoren, die gleichzeitig den tragenden Querschnitt reduzieren. Insbesondere die Porenmorphologie hat einen Einfluss auf die Streckgrenze. Eine Modellierung kann mit Zusammenhängen aus der Literatur erfolgen. Gemäß Salak [107] kann für Sintereisen die Streckgrenze in Abhängigkeit der Dichte mit einem exponentiellen Ansatz nach Gleichung (6.32) verwendet werden. Hierbei ist $R_{eS, 0\%, RT}$ die Streckgrenze von porenfreiem Astaloy 85 Mo bei Raumtemperatur und f die vorliegende Porosität. n ist abhängig vom vorliegenden Pulver, der Kompaktiermethode und den Sinterbedingungen.

$$R_{eS, Porosität, RT} = R_{eS,0\%, RT} \cdot exp(-n \cdot f)$$
(6.32)

Mittels Gleichung (6.33) kann Gleichung (6.32) dichteabhängig beschrieben werden. Es ergibt sich der mathematische Zusammenhang aus Gleichung (6.34)

$$\mathbf{f} = \left(1 - \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)\right) \tag{6.33}$$

$$R_{eS, Dichte, RT} = R_{eS, 7, 8g/cm^{3}, RT} \cdot exp\left(-n \cdot \left(1 - \left(\frac{\rho}{\rho_{0}}\right)\right)\right)$$
(6.34)

Mit einem Parameter n = 0,043 konnte die Dichteabhängigkeit für alle Mikrostrukturen beschrieben werden. n ist dabei [107] zu entnehmen. Eine Gegenüberstellung von modellierten und experimentellen Daten ist in den Abbildungen 6-28 und 6-29 dargestellt. Die Modellierung erfolgte ausgehend von $R_{eS, 7,2g/cm^3, RT}$ was als $R_{eS, 7,8g/cm^3, RT}$ in Gleichung (6.34) Verwendung findet. Mittels dieser Vorgehensweise kann die Streckgrenze des porenfreien Werkstoffs extrapoliert werden.



Abbildung 6-28: Modellierte und experimentelle elastische Streckgrenze in Abhängigkeit der Porosität für eine ferritsich-perlitische (links) bzw. bainitische (rechts) Mikrostruktur.



Abbildung 6-29: Modellierte und experimentelle elastische Streckgrenze in Abhängigkeit der Porosität für eine martensitische (links) bzw. austenitische (rechts) Mikrostruktur.

Ein Modell für die Temperaturabhängigkeit von $R_{es, Dichte, RT}$ ähnlich zu Gleichung (6.31) konnte nicht aufgestellt werden (vgl. Abbildung 6-30). Ein linearer Ansatz mit einer porositätsunabhängigen Steigung gemäß Gleichung (6.31) kann die Entwicklung der Streckgrenze mit der Temperatur nicht hinreichend genau abbilden. Auf eine porositäts-, kohlenstoff- und mikrostrukturabhängig modellierte Steigung wurde auf Grund der Komplexität des Modells verzichtet. Die Materialkennwerte wurden daher tabellarisch in ABAQUS hinterlegt, da hier standardmäßig die hinterlegten Datenpunkte linear interpoliert werden.



Abbildung 6-30: Abhängigkeit der Streckgrenze von der Temperatur. Eine porositätsunabhängige lineare Modellierung erscheint nicht möglich.

6.2.7 Thermophysikalische Kennwerte

6.2.7.1 Experimentelle Ergebnisse

Die Ergebnisse für die gefügeabhängigen thermischen Ausdehnungskoeffizienten von Astaloy 85 Mo sind Abbildung 6-31 zu entnehmen.



Abbildung 6-31: Thermischer Ausdehnungskoeffizient in Abhängigkeit des Gefüges, der Dichte und des Kohlenstoffgehaltes. Ermittlung über Abschreckdilatometrie.

Der thermische Ausdehnungskoeffizient ist dabei praktisch unabhängig von der jeweiligen Porosität und dem vorliegenden Kohlenstoffgehalt. Entscheidend ist lediglich die Mikrostruktur, wobei allerdings zwischen dem ferritisch-perlitischen bzw. bainitischen Zustand kaum Unterschiede feststellbar sind (vgl. Abbildung 6-31). Messungen an einer rein martensitischen Mikrostruktur konnten lediglich für einen Kohlenstoffgehalt von 0,5 Ma% durchgeführt werden. Bei geringerer oder höherer Kohlenstoffkonzentration konnte kein vollständig martensitischer Zustand eingestellt werden.

Die spezifische Wärmekapazität ist in Abbildung 6-32 dargestellt. Ausgehend von der Raumtemperatur ist ein allmählicher Anstieg zu verzeichnen. Während des Phasenübergangs ist ein Maximum der spezifischen Wärme zu detektieren. Nach der Phasenumwandlung sinkt die spezifische Wärme wieder ab. Ein erhöhter Kohlenstoffgehalt erweitert den Bereich der maximalen spezifischen Wärme zu höheren Temperaturen. Der messbare Maximalwert reduziert sich dabei. Vor und nach der Phasenumwandlung ergeben sich keine Unterschiede. Auf Versuche zur Abhängigkeit der spezifischen Wärmekapazität von der Porosität konnte verzichtet werden, da [108] ausweist, dass die Einflüsse der Porosität in Größenordnung der Messungenauigkeiten liegen und daher vernachlässigt werden können.



Abbildung 6-32: Spezifische Wärmekapazität in Abhängigkeit der Temperatur und des Kohlenstoffgehaltes. Ermittlung über DSC-Analyse.

Die Wärmeleitfähigkeit ist in Abbildung 6-33 in Abhängigkeit der Versuchstemperatur und des Kohlenstoffgehaltes dargestellt. Dabei ist eine Abnahme der Wärmeleitfähigkeit mit zunehmender Versuchstemperatur für eine ferritisch-perlitische Mikrostruktur festzustellen. Für den Austenit kann kein nennenswerter Temperatureinfluss messtechnisch erfasst werden. Gemäß Eckstein [97] verhalten sich bainitische und martensitische Mikrostrukturen vergleichbar zum geprüften ferritisch-perlitischen Gefüge. Signifikante Einflüsse des Kohlenstoffgehaltes konnten nicht nachgewiesen werden.



Abbildung 6-33: Wärmeleitfähigkeit für vollständig verdichteten ($\rho = 7,8 \text{ g/cm}^3$) Proben aus Astaloy 85 Mo in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehaltes. Berechnung über Temperaturleitfähigkeit und spezifische Wärmekapazität.

Der Einfluss der Porosität ist in einer Vielzahl von Veröffentlichungen beschrieben [2, 108] und es existieren zahlreiche Modelle zur Beschreibung der Effekte der Porosität. Auf Versuche mit unterschiedlichen Mikrostrukturen und Porositäten konnte daher verzichtet werden. Grundlage für alle Modelle ist die Wärmeleitfähigkeit des porenfreien Werkstoffes. Ausgehend von den Messdaten aus Abbildung 6-33 wurde daher das arithmetische Mittel für jede Temperatur berechnet. Das Ergebnis kann Abbildung 6-34 entnommen werden.



Abbildung 6-34: Arithmetisches Mittel der Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit der Temperatur.

6.2.7.2 Diskussion der experimentellen Befunde und Materialmodellierung der thermophysikalischen Kennwerte

Das Phänomen der thermischen Ausdehnung ist auf die unsymmetrische Ausbildung der Energiemulde des interatomaren Potentials zurückzuführen. Diese asymmetrische Form entsteht, da das Potential für sich annähernde Atome stärker ansteigt als für Atome, die sich voneinander wegbewegen. Die Folge ist, dass bei Energiezufuhr, wie hier Wärmezufuhr, größere Auslenkungen auf der atomabgewandten Seite zu verzeichnen sind. Der mittlere Atomabstand verschiebt sich daher zu größeren Auslenkungen und verbleibt nicht in der Ruhelage von T = 0 K [105].

Auf den thermischen Ausdehnungskoeffizienten wirken sich die Porosität und der Kohlenstoffgehalt nicht messbar aus. Bestätigt werden diese Ergebnisse durch Danninger [108], der in seiner Ausarbeitung ebenfalls keine Einflüsse der Porosität auf den Wärmeausdehnungskoeffizient feststellen kann. Vielmehr wird angemerkt, dass die poröse Struktur stabil bleibt und sich die Poren ebenfalls bei zunehmender Temperatur ausdehnen. Für zunehmende Kohlenstoffgehalte kann von einer Aufweitung des Gitters ausgegangen werden [100]. Durch den chemisch bedingten vergrößerten Gleichgewichtsatomabstand gibt Diemar [22] zunehmende thermische Ausdehnungskoeffizienten an. Allerdings sind die Änderungen auch bei hohen Kohlenstoffgehalten nicht signifikant.

Da die experimentellen Befunde weder Auswirkungen des Kohlenstoffs noch der Porosität ausweisen, werden in der Simulation konstante thermische Ausdehnungskoeffizienten von $\alpha_{\text{ferritisch-perlitisch}} = 1,55 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, $\alpha_{\text{martensitisch}} = 6,75 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ und $\alpha_{\text{austenitisch}} = 2,3 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ vorgegeben. Für $\alpha_{\text{bainitisch}}$ wurde der Wert des ferritisch-perlitischen Gefüges verwendet.

Die spezifische Wärme kann für hohe Temperaturen temperaturunabhängig angenommen werden [105], was auch die experimentellen Ergebnisse zeigen. Für tiefe Temperaturen ist ein linearer Anstieg mit der Temperatur zu erwarten. Die zunehmende Breite des Maximums ist auf einen zunehmenden Perlitanteil in Folge Änderungen des Kohlenstoffgehaltes zurückzuführen. Die chemische Zusammensetzung hat vor und nach der Phasenumwandlung kaum einen Einfluss auf die spezifische Wärme, wie auch [108] zeigt. Auswirkungen der porösen Mikrostruktur auf die spezifische Wärme für mit Molybdän vorlegierte pulvermetallurgische Stähle können gemäß den Ergebnissen von [108] ausgeschlossen werden. Für die Simulation wurde daher die spezifische Wärmekapazität in Abhängigkeit der Temperatur und des Kohlenstoffgehaltes tabellarisch vorgegeben.

Die Wärmeleitung in Metallen erfolgt überwiegend über freie Elektronen. Die Elektronen transportieren dabei die Energie über Stoßprozesse mit Atomen. Daher hängt die Wärmeleitfähigkeit maßgeblich von der Elektronengeschwindigkeit und der mittleren freien Weglänge, also der Distanz zwischen zwei Stößen, ab [105]. Die Elektronengeschwindigkeit ist dabei temperaturunabhängig. Demgegenüber nimmt die mittlere freie Weglänge mit abnehmender Temperatur zu, was in Kombination mit einer geringeren spezifischen Wärme der Elektronen bei niedrigen Temperaturen zu einem Maximum der Wärmeleitfähigkeit führt. Diesen Sachverhalt zeigen auch die experimentellen Befunde.

Für den Einfluss von Fremdatomen gilt gemäß [105], dass sich die mittlere freie Weglänge reduziert und somit die Wärmeleitfähigkeit sinkt. Diese theoretische Überlegung kann bei Vergleich der Wärmeleitfähigkeit einer Legierung und eines Reinstoffes bewiesen werden [105]. In den durchgeführten Versuchen mit Astaloy 85 Mo konnten diese Effekte nicht messtechnisch werden. Es ist anzunehmen. dass die erfasst Änderung der Kohlenstoffkonzentration für eine messbare Änderung der Wärmeleitfähigkeit zu geringfügig ist. Auch in der Ausarbeitung von [22] wurde kein Kohlenstoffeinfluss berücksichtigt.

Für die Simulation wurde für eine porenfreie austenitische Mikrostruktur eine temperaturunabhängige Wärmeleitfähigkeit von $\lambda_{0, T} = 0,24$ W/(cm·K) vorgegeben. Für ein porenfreies ferritisch-perlitisches, bainitisches und martensitisches Gefüge wurde die Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{0, T}$ in Abhängigkeit der Temperatur über den mathematischen Zusammenhang aus Gleichung (6.35) modelliert (vgl. Abbildung 6.35).

$$\lambda_{0T} = \lambda_{RT} + \Delta \lambda_1 \cdot T + \Delta \lambda_2 \cdot T^2$$
(6.35)

Dabei ist λ_{RT} die Wärmeleitfähigkeit bei Raumtemperatur und $\Delta\lambda_1$ sowie $\Delta\lambda_2$ Parameter zur Beschreibung der Änderung der Wärmeleitfähigkeit in Folge eines Temperaturanstieges. Die Parameter wurden über ein Least-Square Schätzer bestimmt. Es ergibt sich $\lambda_{RT} = 0,54 \text{ W/(cm}\cdot\text{K}), \Delta\lambda_1 = -5,27 \cdot 10^{-5} \text{ W/(cm}\cdot\text{K}^2)$ sowie $\Delta\lambda_2 = -6,22 \cdot 10^{-7} \text{ W/(cm}\cdot\text{K}^3)$. Im Falle einer porösen Mikrostruktur erfolgt die Wärmeleitung nur über das Werkstoffvolumen [2]. Die Poren stellen Isolatoren dar und verringern den für die Wärmeleitung nutzbaren Querschnitt erheblich. Durch ein Porennetzwerk nimmt zudem die so genannte Tortusität, also die Gewundenheit der Wärmetransportwege, zu. All das

verringert die Wärmeleitfähigkeit deutlich.



Abbildung 6-35: Einfluss der Temperatur auf die Wärmeleitfähigkeit. Gegenüberstellung von modellierten und experimentellen Befunden für den porenfreien Werkstoffzustand.

Ein Modell für den Einfluss der Porosität auf die Wärmeleitfähigkeit kann der Literatur [2] entnommen werden (vgl. Gleichung (6.36)), wobei $\lambda_{0, T}$ die Wärmeleitfähigkeit des porenfreien Werkstoffes bei einer Temperatur T (vgl. Gleichung (6.35)) und f die Porosität ist.

$$\lambda_{\text{eff T}} = \lambda_{0 \text{ T}} \cdot (1 - 2 \cdot \mathbf{f}) \tag{6.36}$$

Das Modell lässt sich mittels Gleichung (6.37) zu Gleichung (6.38) umschreiben, so dass eine dichteabhängige Beschreibung vorliegt. Dabei ist ρ_0 die Dichte des porenfreien Werkstoffs und ρ die jeweilig vorliegende Rohdichte.

$$f = \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right) \tag{6.37}$$

$$\lambda_{\rm eff,T} = \lambda_{0,T} \cdot \left(1 - 2 \cdot \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0} \right) \right)$$
(6.38)

Durch Anwendung des Modells aus Gleichung (6.38) kann die effektive Wärmeleitfähigkeit für eine poröse austenitische Mikrostruktur berechnet werden. Für eine Dichte von 6,8 bzw. 7,2 g/cm³ ergibt sich eine effektive Wärmeleitfähigkeit von 0,18 bzw. 0,20 W/(cm·K). Im Falle einer ferritsich-perlitischen, bainitschen und martensitischen Mikrostruktur muss zusätzlich der Temperatureinfluss, wie durch Gleichung (6.35) ausgedrückt, berücksichtigt werden. Es ergeben sich effektive Wärmeleitfähigkeiten wie in Abbildung 6-36 dargestellt.



Abbildung 6-36: Einfluss der Porosität auf die Wärmeleitfähigkeit unter Nutzung der porenfreien Wärmeleitfähigkeit aus Abbildung 6-35 und des Modells von [32].

Allerdings ist zu bemerken, dass dieses Modell lediglich den Einfluss der Porosität bzw. der Dichte beschreibt. Morphologieeffekte bleiben gänzlich unberücksichtigt. Um diesen Einfluss abschätzen zu können, wurden Simulationen durchgeführt. Basis für diese Simulationen war dabei die Annahme, dass Wärmeleitung nur über das Werkstoffvolumen nicht aber über das Porenvolumen erfolgt [2].

Die Simulation beruht dabei auf einem halbunendlichen 2D-Modell mit modellierter poröser Struktur in runder, eckiger sowie elliptischer Ausführung, dessen linkes Ende mit einer Wärmequelle mit $T_{Rand} = T_0$ verknüpft wurde (vgl. Abbildung 6-37).



Abbildung 6-37: Halbunendliches 2D-Modell zur Bestimmung der effektiven Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit von Porosität und Porenmorphologie.

Für das rechte Ende ist ein Wärmeübergang zu einer Wärmesenke implementiert. Die mathematische Beschreibung des Wärmeübergangs kann dabei Gleichung (6.39) entnommen werden. Hierbei wird der gemittelte Wärmefluss $\dot{Q}_{gemittelt}$ über den Quotient aus dem Integral des Produktes aus Wärmeübergangskoeffizient α und Temperaturdifferenz und der Seitenlänge L₀ berechnet. Dabei ist die Temperatur T₁ die Temperatur der Wärmesenke und T die lokale Temperatur an der rechten Grenzfläche.

$$\dot{Q}_{\text{gemittelt}} = \frac{1}{L_0} \int_0^{L_0} \alpha \cdot (T - T_1) dS$$
(6.39)

Die vorliegende mittlere Temperatur $T_{gemittelt, rechts}$ am rechten Ende kann durch Integration berechnet werden (vgl. Gleichung (6.40)).

$$T_{\text{gemittelt, rechts}} = \frac{1}{L_0} \int_0^{L_0} T dS$$
(6.40)

Wird dieses poröse Modell durch eine 1-dimensionale porenfreie Struktur ersetzt, so kann die effektive Wärmeleitfähigkeit über den bekannten mittleren Wärmefluss über die rechte Grenzfläche und die gemittelte Temperatur $T_{gemittelt, rechts}$ an der rechten Grenzfläche berechnet werden (vgl. Gleichung (6.41)).

$$\lambda_{\text{eff}} \frac{(T_0 - T_{\text{gemittelt, rechts}})}{L_1} = \dot{Q}_{\text{gemittelt}}$$
(6.41)

Für die effektive Wärmeleitfähigkeit in Abhängigkeit der Dichte und der Porenmorphologie ergibt sich simulativ der in Abbildung 6-38 dargestellte Zusammenhang.

Ausgehend vom porenfreien Werkstoff mit einer Dichte von 7,8 g/cm³ nimmt die Wärmeleitfähigkeit mit zunehmender Porosität zunächst linear und anschließend exponentiell ab. Einige wenige runde Poren haben kaum Einfluss, wohingegen Porennetzwerke mit eher elliptischer Form mit Vorzugsrichtung quer zur Wärmeleitungsrichtung die Wärmeleitfähigkeit stark reduzieren.



Abbildung 6-38: Einfluss der Dichte und der Porenmorphologie auf die Wärmeleitfähigkeit. Befunde aus halbunendlichem 2D-Modell aus Abbildung 6-37.

Mathematisch können die simulativen Befunde mittels eines exponentiellen Zusammenhangs modelliert werden. $\lambda_{0,T}$ in Gleichung (6.42) ist die Wärmeleitfähigkeit des verdichteten Werkstoffes bei einer entsprechenden Temperatur. Der Faktor B ist dabei abhängig von der vorliegenden Porenmorphologie. Bei runden Poren wird B zu -2,1, bei elliptischer Poren mit Vorzugsrichtung quer zur Wärmeleitung ist B = -3,1 und bei einer Vorzugsrichtung entlang der Richtung der Wärmeleitung ist B = -1,95.

$$\lambda_{\rm eff,T} = \lambda_{0,T} \cdot \exp\left[\mathbf{B} \cdot \left(1 - \frac{\rho}{\rho_0}\right)\right] \tag{6.42}$$
Eine Gegenüberstellung des Modells der Literatur und des hier per numerischer Berechnung entwickelten Modells zeigt Abbildung 6-39. Hierbei ergibt sich eine gute Übereinstimmung bis zu einer Dichte von 7,0 g/cm³ was einer Porosität von etwa 10 % entspricht. Für geringere Dichten bzw. höhere Porositäten gibt das hier entwickelte Modell besser den Zusammenhang der experimentellen Befunde wieder. Da sich diese Ausarbeitung aber auf Dichten von minimal 6,8 g/cm³ beschränkt, sollten beide Modelle eine hinreichend gute Beschreibung des Effekts der Porosität erlauben. Allerdings kann das neu bestimmte Modell zusätzlich den Einfluss der Morphologie berücksichtigen. Dies erscheint notwendig vor dem Hintergrund der mechanischen Oberflächenbehandlung. Oberflächennah wird das Werkstoffvolumen verdichtet und stellt sich daher nahezu porenfrei dar (vgl. Abbildung 3-8 bis 250 µm). Mit zunehmendem Oberflächenabstand steigt die Porosität allerdings weiterhin an (vgl. Abbildung 3-8 von 500 bis 750 µm). In diesem Fall ist davon auszugehen, dass sich durch die mechanische Oberflächenbehandlung eine Vorzugsmorphologie der Poren einstellt. Es sind elliptische Poren mit Vorzugsrichtung parallel zur Oberfläche zu erwarten. Gemäß Abbildung 6-38 hätte dies Einfluss auf die Wärmeleitfähigkeit, speziell wenn eine Dichte kleiner als 7,0 g/cm³ bzw. eine Porosität von über 10 % vorliegt.



Abbildung 6-39: Vergleich des hier beschriebenen Modells für die Abhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit von der Dichte im Falle einer runden Porenmorphologie und dem von [2] veröffentlichten Modell.

(7.1)

7 **Ergebnisse und Diskussion**

7.1 Übertragung der Porositätstiefenverteilung

Gemäß Kapitel 3.3 liegt nach der Festwalzbehandlung in der Taillierung der Flachprobe ein Verdichtungszustand, wie in Abbildung 3-8 dargestellt, vor. Alle übrigen Oberflächen wie auch der Bauteilkern weisen dagegen unverändert eine Porosität von 7,5 % auf und sind damit unbeeinflusst von der mechanischen Oberflächenbehandlung.

Für das weitere simulative Vorgehen müssen diese unterschiedlichen lokalen Verdichtungszustände auf das Modell übertragen werden. Dazu wurde dem Bauteil, mit Ausnahme dem Bereich der Taillierung, ein konstanter Porositätswert von 7,5 % vorgegeben (vgl. Abbildung 7-1 rechts). Für die Übertragung des gradiert porösen Randschichtzustandes in der Taillierung wurde eine Boltzmann-Funktion gemäß Gleichung (7.1) verwendet, die an das experimentelle Porositätstiefenprofil der Taillierung angepasst wurde (vgl. Abbildung 7-1 links).



Abbildung 7-1: Links: Experimentell ermitteltes Porositätstiefenprofil nach dem Festwalzen der taillierten Flachprobe und entsprechende mathematische Beschreibung durch eine Boltzmann-Funktion im Vergleich zur resultierenden Porositätsverteilung nach dem Aufprägen. Rechts: Übertragene Porositätstiefenverteilung.

Dadurch ergeben sich für die Parameter A₁, A₂, x₀ und dx die Werte A₁ = 0,12 %, A₂ = 100 %, $x_0 = 474,23 \mu m$ und dx = 84,94 μm .

Eine Gegenüberstellung der aufgeprägten Porositätstiefenverteilung mit der Boltzmann-Funktion und dem experimentell ermittelten Porositätsprofil ist in Abbildung 7-1 links gegeben. Der Vergleich zeigt, dass die experimentellen Befunde ohne große Abweichungen auf das Modell übertragen werden können und somit im Weiteren das Einsatzhärten an randschichtverdichteten gradiert porösen Werkstoffzuständen untersucht werden kann. Zur Anwendung der Modelle aus Kapitel 6 wird die Porositätsverteilung mittels des Zusammenhangs aus Gleichung (7.2) in eine Dichteverteilung umgerechnet. Die Umrechnung erfolgt in der benutzerdefinierten Erweiterung. Der Parameter f ist hierbei die Porosität und ρ_0 die Rohdichte.

$$\rho = \rho_0 \cdot (1 - f) \tag{7.2}$$

7.2 Aufkohlen

7.2.1 Ergebnisse der Aufkohlsimulation

Das simulativ bestimmte Aufkohlprofil für den randschichtverdichteten gradiert porösen Taillierungsbereich nach einem zweistufigen Gasaufkohlprozess unter Vorgabe des Kohlenstoffpegels aus Abbildung 4-7 ist in Abbildung 7-2 dargestellt.



Abbildung 7-2: Simulativ ermitteltes Aufkohlprofil für den gradiert porösen Werkstoffzustand aus Abbildung 7-1. Ergebnis gilt für eine Aufkohltemperatur von 940 °C bei einem zweistündigen zweistufigen Aufkohlprozess. Kohlenstoffpegel im 1.-Stadium: 1 Ma %. Kohlenstoffpegel im 2.-Stadium: 0,8 Ma%.

Die Simulationsergebnisse basieren dabei auf einer zweigeteilten Beschreibung des effektiven Diffusionskoeffizienten wie in Kapitel 6.2.1.2 beschrieben. Für die verdichtete Taillierungsoberfläche Simulation sagt die einen Randkohlenstoffgehalt von c_{Rand, Taillierung} = 0,72 Ma% voraus. Mit zunehmendem Oberflächenabstand ist eine Abnahme des Kohlenstoffgehaltes zu verzeichnen bis in einer Tiefe von etwa 1 mm der Grundkohlenstoffgehalt des Ausgangspulvers, also c_{Pulver} = 0,25 Ma%, erreicht wird. Somit ergibt sich ein definiertes Kohlenstoffprofil, bei dem sich die Aufkohlung überwiegend auf den verdichteten Randschichtbereich beschränkt.

Daneben zeigt Abbildung 7-2, dass Entkohlungsvorgänge, die bei zweistufigen Aufkohlprozessen häufig nach dem ersten Stadium oberflächennah stattfinden, bei dem gewählten Parametersatz nicht auftreten. Erkennbar ist dies anhand des streng monoton fallenden Kohlenstoffprofils in Oberflächennähe.

7.2.2 Diskussion der Ergebnisse der Aufkohlsimulation

Das in Abbildung 7-2 simulativ ermittelte Kohlenstofftiefenprofil ist eine direkte Folge des Diffusionsmodells. Oberflächennah bis in eine Tiefe von 750 µm wird von dominierenden Volumendiffusionsprozessen und damit effektiven Diffusionskoeffizienten. die Abbildung 6-4 entnommen werden können, ausgegangen. Dadurch ergibt sich ein steiler Abfall des Kohlenstoffprofils in Oberflächennähe. Im unverdichteten Bauteilkern überwiegen dagegen Oberflächendiffusionsprozesse, was eine Beschreibung des effektiven Diffusionskoeffizienten nach Abbildung 6-6 erfordert. Durch die Zunahme des effektiven Diffusionskoeffizienten in Folge von Oberflächendiffusionsvorgängen reduziert sich der Gradient erheblich, was zu einer langsamen asymptotischen Annäherung an den Grundkohlenstoffgehalt führt.

Das experimentell ermittelte Kohlenstoffprofil für den gradiert porösen Taillierungsbereich nach einem zweistufigen Gasaufkohlprozess unter Vorgabe des Kohlenstoffpegels aus Abbildung 4-7 ist in Abbildung 7-3 dem berechneten Kohlenstoffprofil der Taillierung gegenübergestellt. Für das Experiment ergibt sich ein Kohlenstoffgehalt an der Oberfläche von $c_{Rand, Exp} = 0,78$ Ma% und eine maximale Eindringtiefe des Kohlenstoffs von etwa 1 mm. Damit liegt auch experimentell ein definiertes Kohlenstoffprofil, das sich auf den verdichteten Bereich beschränkt, vor.

Bei Vergleich der berechneten und experimentellen Daten zeigt sich eine gute Vorhersage des Kohlenstoffprofils durch die Simulation und die gewählten Ansätze. Die maximale Eindringtiefe des Kohlenstoffs wird stimmig vorhergesagt. Der Randkohlenstoffgehalt wird geringfügig unterschätzt. In der Simulation ergibt sich ein Wert von 0,72 Ma%, im Experiment sind jedoch 0.78 Ma% messtechnisch feststellbar. Im Bereich zwischen 250 µm und 750 µm überschätzt die Simulation die experimentell ermittelten Kohlenstoffwerte leicht, was eine Unterschätzung des Gradienten zur Folge hat. Es ist daher anzunehmen, dass die in diesem Bereich vorgegebenen effektiven Diffusionskoeffizienten zu groß gewählt sind. Dies würde auch die zu geringen Oberflächenwerte der Simulation erklären, da in diesem Falle der zu groß berechnete Stoffstrom unterhalb der Oberfläche der Randschicht übermäßig Kohlenstoff entzieht. Einerseits muss in diesem Zusammenhang berücksichtigt werden, dass die genutzten effektiven Diffusionskoeffizienten Ergebnisse einer idealisierten simulativen Betrachtung sind, da solch definiert angeordnete elliptische Poren im realen Werkstoff in der Regel nicht vorzufinden sind. Andererseits wird der Effekt eines zunehmenden Kohlenstoffgehaltes auf die Diffusivität in der durchgeführten Simulation nicht berücksichtigt. Wie in [33] beschrieben wird, nimmt durch zunehmend interstitiell gelöste Kohlenstoffatome die Gitterverzerrung zu, was eine Abnahme der Sprungenthalpie für Kohlenstoffdiffusionsprozesse Folge hat und damit zu wachsenden zur Diffusionskoeffizienten führt. Je nach vorliegendem Kohlenstoffgehalt kann sich der Diffusionskoeffizient um den Faktor 3-4 ändern (vgl. Approximationsansatz zur Abschätzung des Diffusionskoeffizienten nach Smith [98] in Kapitel 6.2.1).



Abbildung 7-3: Gegenüberstellung des simulativ berechneten Kohlenstoffprofils mit der experimentell ermittelten Kohlenstoffverteilung. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.

Die vorliegende Porosität wirkt sich dagegen gemäß Abbildung 6-4 im Falle von Volumendiffusion nur prozentual und damit minimal aus. Für eine Porosität von 7,5 % ergibt sich eine Reduktion des Diffusionskoeffizienten um etwa 20 %. Daher ist der effektive Diffusionskoeffizient bei vorherrschender Volumendiffusion in gradiert porösen Randschichten primär vom Kohlenstoffgehalt abhängig und nur sekundär von der Porosität. Im hier vorliegenden Fall wurde die Berechnung ohne den Kohlenstoffeffekt durchgeführt, was letztlich bedeutet, dass mit einem gemittelten Diffusionskoeffizienten gerechnet wurde, der strenggenommen nur für mittlere Kohlenstoffgehalte gilt. Somit ist der vorgegebene Wert für geringe Kohlenstoffgehalte zu groß. Wird von der Abschätzung nach Smith (vgl. Gleichung (6.6)) ausgegangen, dann lassen sich die Auswirkungen des Kohlenstoffgehaltes auf den Diffusionskoeffizienten mit einem Faktor von 4 quantifizieren, was bedeutet, dass der in der Simulation verwendete effektive Diffusionskoeffizient $D_{eff} = 0.8 \cdot D_{porenfrei}$ für niedrige Kohlenstoffgehalte nochmals zu halbieren ist. Wird mittels dieser Abschätzung eine erneute simulative Betrachtung durchgeführt so ergeben sich die in Abbildung 7-4 dargestellten Ergebnisse. Die Abweichungen zwischen Experiment und Simulation lassen sich deutlich reduzieren.



Abbildung 7-4: Gegenüberstellung der experimentell ermittelten Kohlenstoffverteilung mit den simulativ berechneten Kohlenstoffprofilen mit bzw. ohne Einbezug des Kohlenstoffeffektes auf die Diffusivität. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.

Ein Nachweis für die Stimmigkeit des gewählten kombinierten Diffusionskonzeptes mit Volumendiffusion in der gradiert porösen Randschicht und Oberflächendiffusion im porösen Kernbereich liefert Abbildung 7-5. Hierbei sind die numerisch berechneten Kohlenstoffprofile für reine Volumendiffusion (D_{eff} gemäß Abbildung 6-4) bzw. reine Oberflächendiffusion (D_{eff} gemäß Abbildung 6-6) denen eines porenfreien Werkstoffs (D_{porenfrei} = $2 \cdot 10^{-5}$ mm²/s) und den experimentellen Befunden gegenübergestellt.

Abbildung 7-5 zeigt, dass oberflächennah nur marginale Unterschiede zu verzeichnen sind, da hier der Werkstoff nahezu porenfrei ist und damit in allen drei Simulationen mit nahezu ähnlichen Diffusionskoeffizienten gerechnet wird. Ab einer Tiefe von etwa 500 µm ist eine Abweichung zwischen den Ansätzen deutlich zu erkennen, da in diesem Bereich die Porosität von 3 % (Tiefe 500 µm) auf 7,5 % (Tiefe von 750 µm) zunimmt. Es handelt sich also um die Randschichtzone, in der noch ein Einfluss der Oberflächenverdichtung zu verzeichnen ist, aber Poren nicht mehr gänzlich geschlossen werden können. Im Falle von ablaufender Oberflächendiffusion steht in diesem Werkstoffbereich ein immer größer werdendes Angebot an thermodynamisch günstigeren Diffusionspfaden über die freie Porenoberfläche zur Verfügung.



Abbildung 7-5: Gegenüberstellung numerisch berechneter Kohlenstoffprofile für reine Volumendiffusion (D_{eff} gemäß Abbildung 6-4) bzw. reine Oberflächendiffusion (D_{eff} gemäß Abbildung 6-6) mit denen eines porenfreien Werkstoffs ($D_{porenfrei} = 2 \cdot 10^{-5}$ mm²/s) und den experimentellen Befunden. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.

Da für Oberflächendiffusionsvorgänge der effektive Diffusionskoeffizient zunimmt, verläuft das so erzeugte Kohlenstoffprofil über der Kohlenstoffverteilung, die mit einem konstanten Diffusionskoeffizienten gültig für einen porenfreien Werkstoffzustand berechnet wurde. Aus der Abweichung ergibt sich, dass Oberflächendiffusionsvorgänge als dominierender Diffusionsprozess auszuschließen sind und folglich kein Porennetzwerk vorliegen kann.

Einzelne runde bzw. tendenziell eher elliptische Poren mit Vorzugsrichtung quer zur Diffusionsrichtung begünstigen den Diffusionsvorgang durch ihre Ausrichtung weniger stark, da verhältnismäßig wenig Porenoberfläche in Diffusionsrichtung zur Verfügung steht. In diesem Falle wird die Reduktion des Diffusionsquerschnittes durch die Poren entscheidend. Dadurch ist eine Abnahme des effektiven Diffusionskoeffizienten im Vergleich zum Diffusionskoeffizienten für den porenfreien Werkstoffzustand zu verzeichnen. Da das experimentelle Profil unterhalb der fiktiven Kohlenstoffverteilung, die mit dem Diffusionskoeffizienten für den porenfreien Werkstoff berechnet wurde, liegt, gelingt mit Volumendiffusion und Berücksichtigung des abnehmenden Diffusionsquerschnittes die beste Beschreibung des experimentellen Befundes. Aufgrund der nur prozentualen Abnahme liegen die Kohlenstoffverteilungen für den fiktiv porenfreien Werkstoff wie für Volumendiffusion relativ nahe beieinander.

Es kann also festgehalten werden, dass in gradiert porösen Randschichten nach einer Festwalzbehandlung Volumendiffusion dominiert, da kaum freie Porenoberfläche in Diffusionsrichtung zur Verfügung steht. Da sich gleichzeitig der Diffusionsquerschnitt, also die Querschnittsfläche für Diffusionsprozesse, verringert, reduziert sich makroskopisch der effektive Diffusionskoeffizient gegenüber dem Diffusionskoeffizienten im porenfreien Werkstoff. Mit zunehmendem Oberflächenabstand nehmen die Effekte der mechanischen Oberflächenbehandlung ab, so dass ab einer Tiefe von 750 µm wieder von einem Porennetzwerk auszugehen ist (vgl. Abbildung 7-1). Folglich kann dort vermehrt Oberflächendiffusion stattfinden, was zu deutlich größeren Diffusionskoeffizienten als im porenfreien Werkstoff führt. Es ist davon auszugehen, dass dieses Konzept zur Beschreibung der Diffusion auch bei anderen mechanischen Oberflächenbehandlungen, die gradiert poröse PM-Randschichtzustände ergeben, angewendet werden kann. Noch allgemeiner folgt aus diesen Ergebnissen und Ausführungen, dass eine Beschreibung von Diffusionsprozessen in porösen Werkstoffzuständen nicht allein auf Basis eines Porositätswertes erfolgen kann. Die vorliegende Morphologie ist ebenfalls ausschlaggebend.

7.3 Abschrecken

7.3.1 Ergebnisse der Abschrecksimulation

Die numerischen Ergebnisse der Härtesimulation sind in Abbildung 7-6 dargestellt. Es bildet sich ein martensitisches Randgefüge auf bainitischem Kern aus. Die martensitische Randschicht reicht dabei bis in eine Tiefe von etwa 0,48 mm. An der Oberfläche liegt nach der martensitischen Härtung ein Restaustenitgehalt von 3,13 Ma% vor.



Abbildung 7-6: Gefügeverteilung nach dem Einsatzhärten in der taillierten Flachprobe. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.

Die Eigenspannungsverteilung im Bauteil nach dem Abschrecken kann Abbildung 7-7 entnommen werden. Für die martensitische Randschicht sagt die Simulation Druckeigenspannungen voraus, die sich an Zugeigenspannungen des Kernbereiches abstützen. Der Vorzeichenwechsel korreliert gemäß den simulativen Ergebnissen mit dem Wechsel in der Mikrostruktur. Maximale Druckeigenspannungen von etwa $\sigma^{ES}_{max} = -611$ MPa werden vorhergesagt (vgl. Abbildung 7-7). An der Oberflächen liegen Eigenspannungen der Größe $\sigma^{ES}_{0} = -567$ MPa vor.



Abbildung 7-7: Eigenspannungstiefenprofil nach dem Einsatzhärten in der taillierten Flachprobe. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.

7.3.2 Diskussion der Ergebnisse der Abschrecksimulation

Die oben berechnete Mikrostrukturentwicklung ist eine direkte Folge des beim Aufkohlen eingestellten Kohlenstofftiefenprofils und der beim Festwalzen erzeugten gradiert porösen Randschicht. Dabei gilt, dass für jede Tiefe in Abhängigkeit vom dort vorliegenden Kohlenstoffgehalt und lokalen Verdichtungszustand ein eigenes Zeit-Temperatur-Umwandlungsdiagramm Gültigkeit besitzt. Je geringer der Kohlenstoffgehalt und je höher der lokale Porengehalt, desto reaktiver ist die austenitische Mikrostruktur bei Unterkühlung. Dieses zunehmende Umwandlungsbestreben in Folge der porösen Mikrostruktur ist einerseits auf die Nutzung der Poren als Keimbildungsstellen und andererseits auf die Nutzung der Porenoberfläche für Diffusionsprozesse zurückzuführen. Wird davon ausgegangen, dass die Keimbildung bei vorhandener Porosität immer an der Porenoberfläche erfolgt, so können Diffusionsprozesse stets über die Porenoberfläche um den Keim erfolgen. Damit existiert immer eine günstig orientierte Porenoberfläche, die für Diffusionsprozesse genutzt werden kann. Da bei einer Phasenumwandlung kein gerichteter Materialtransport über große Strecken wie beim Aufkohlen erfolgen muss, spielt die vorliegende Morphologie, also ob eine vernetzte Porosität oder einzelne Poren vorliegen, keine Rolle. Folglich ist Oberflächendiffusion stets dominant und es ist anders als bei gerichteten weitreichenden Diffusionsprozessen nicht von dominierender Volumendiffusion für geringe Porositäten auszugehen. Damit gelten im Falle von Diffusionsprozessen bei Phasenumwandlungen die effektiven Diffusionskoeffizienten gemäß Abbildung 6-6. Der andere wichtige Faktor für die Umwandlung ist der Kohlenstoffgehalt. Ein zunehmender Kohlenstoffgehalt führt zu einer Stabilisierung des Austenits, weshalb die notwendigen Triebkräfte erst bei tieferen Temperaturen erreicht werden. Vergleicht man die Wirkungsweise von Kohlenstoff und Porosität, so zeigt sich, dass der Kohlenstoff das Umwandlungsverhalten stärker beeinflusst. Folglich ist das Verhältnis zwischen Kohlenstoffgehalt, Porosität und Abschreckrate entscheidend für Phasenumwandlungsprozesse. Aufgrund des hohen Molybdängehaltes des Versuchswerkstoffes sind Kohlenstoffdiffusionsprozesse im Austenit erheblich behindert, so dass notwendige Umordnungsprozesse sowie großflächige Entmischungen und weitreichende Diffusionsprozesse in der experimentellen Praxis nicht auftreten können. Daher können ferritisch-perlitische Reaktionen von vorneherein ausgeschlossen werden, und es ist von Bainitbildung auszugehen.

Erste bainitische Phasenumwandlungen erfolgen in Werkstoffbereichen, die hohe Abschreckraten, geringe Kohlenstoffgehalte und einen hohen Porenanteil aufweisen. Die schnellste Temperaturabnahme ist dabei im Bereich des kleinsten Querschnittes der Taillierung an den Kanten zu verzeichnen (vgl. Abbildung 7-8 links). Der Kohlenstoffgehalt (vgl. Abbildung 7-8 rechts) und die Dichte nehmen ausgehend von der Oberfläche ab. Im Falle des hier vorliegenden Demonstrators ergibt sich somit ein optimales Verhältnis von Kohlenstoffgehalt, Porosität und Abschreckrate in Kantennähe an den nicht aufgekohlten Seitenflächen des kleinsten Querschnittes direkt unterhalb der gradiert porösen Randschicht (vgl. Markierung "S" in Abbildung 7-9).

Mit zunehmender Zeit nimmt die Temperatur der Werkstoffbereiche, die die neugebildete Bainitphase umgibt, ebenfalls ab, so dass auch hier die notwendigen Triebkräfte für Phasenumwandlungen zur Verfügung stehen. Simulativ ist dabei zu beobachten, wie sich eine bainitische Phasenumwandlungsfront in Richtung Bauteilkern bzw. entlang der Seitenflächen in Längsrichtung ausbreitet. Durch die aufkohlungsbedingte chemische Austenitstabilisierung der Randschicht sind oberflächennah keine Umwandlungen zu verzeichnen. Erst nach vollzogener Kernumwandlung und bei deutlich reduzierten Temperaturen sind in der aufgekohlten Randschicht die Triebkräfte für eine Phasenumwandlung vorhanden. Eine diffusionskontrollierte Umwandlung ist dann allerdings aufgrund fehlenden Diffusionsvermögens nicht mehr möglich, so dass martensitische Scherumwandlungen erfolgen. Auch hier beginnt zunächst die Phasenumwandlung ausgehend von den Seitenflächen (vgl. Markierung S in Abbildung 7-9) unterhalb der Oberfläche, da hier durch geringe Kohlenstoffgehalte schneller die Martensitstarttemperatur erzielt wird.



Abbildung 7-8: *Gegenüberstellung der anfänglichen Temperaturentwicklung nach t* = 0,25 *s und der Kohlenstoffverteilung. Identifikation der Werkstoffbereiche, die zuerst umwandeln.*

Die Umwandlungsfront breitet sich mit weiterem Wärmeentzug in Richtung Oberfläche aus. Da die Randschicht Kohlenstoffkonzentrationen über 0,5 Ma% aufweist, kann keine vollständige Gefügeumwandlung beobachtet werden, so dass Restaustenit in den Randbereichen vorliegt. Die Porosität beeinflusst die martensitische Umwandlung in der hier vorliegenden Simulation nicht, da im Modell kein Einfluss der Porosität auf die Martensitstarttemperatur hinterlegt ist und auch keine Umwandlungsdehnungen durch das Porenvolumen aufgenommen werden können, was eine martensitische Reaktion auch bei geringeren Triebkräften ermöglichen würde.

Die Ergebnisse der experimentellen Härtung sind in Abbildung 7-10 links dargestellt. Nach einer Nital-Pikral Doppelätzung kann ein hauptsächlich martensitisch dominiertes Randschichtgefüge und ein bainitischer Kern festgestellt werden. Die martensitisch gehärtete Randzone erstreckt sich dabei etwa 0,5 mm ausgehend von der Oberfläche in das Bauteil, wobei allerdings eine exakte Abgrenzung aufgrund des fließenden Übergangs von martensitischem zu bainitischem Gefüge schwierig ist. An der Oberfläche konnte ein Restaustenitgehalt von 4 Ma% röntgenographisch ermittelt werden.



Abbildung 7-9: Darstellung der Werkstoffbereiche, die die ersten Phasenumwandlungsprozesse beim Abschrecken durchlaufen. Gezeigt ist die bainitische Phasenumwandlung.

Ein Vergleich mit der simulativ vorhergesagten Mikrostruktur ergibt generell eine gute Übereinstimmung, allerdings unterschätzt die Simulation die martensitische Härtung der Randschicht leicht (vgl. Abbildung 7-10 rechts). Statt 0,5 mm werden in der Simulation 0,48 mm vorhergesagt. Ein möglicher Grund für diese Abweichung ist, dass Umwandlungsdehnungen im realen Werkstoff vom Porenvolumen aufgenommen werden können und sich daher die erforderlichen Anpassungsverformungen des Systems reduzieren, was eine Martensitbildung auch bei geringeren Triebkräften, also in größeren Tiefen, ermöglicht [30]. Diese Hypothese erscheint plausibel, da gemäß Mittemeijer [33] ein erheblicher Anteil der Triebkraft für Anpassungsverformungsvorgänge aufgebracht werden muss.



Abbildung 7-10: Querschliff durch die Flachprobe nach dem Einsatzhärten. Nital-Pikral Doppelätzung sowie Gegenüberstellung von simulativen und experimentellen Befunden.

Die zeitliche Entwicklung des Spannungszustandes ist in Abbildung 7-11 für einen Oberflächenknoten der Taillierung dargestellt und ist eine direkte Folge der sich einstellenden Temperaturgradienten wie auch der Abfolge der auftretenden Phasenumwandlungen. Nachvollzogen werden kann der dargestellte Spannungsverlauf mit dem gängigen Rand-Kern-Modell aus [21].

Mit Beginn der Abkühlung bilden sich im Rand Längszugspannungen (I) und im Kern Längsdruckspannungen aus. Diese Wärmespannungen sind die direkte Folge auftretender Temperaturdifferenzen. Die Temperatur der Oberfläche nimmt durch den direkten Kontakt mit dem Abschreckmedium schneller ab als der Kern und weist damit ein stärkeres Bestreben zur Schrumpfung auf. Dieser Schrumpfung der Oberfläche wirkt der Bauteilkern entgegen, so dass in der Oberfläche die bereits erwähnten Längszugspannungen entstehen (I). Die thermischen Spannungen sind dabei umso größer, je höher die Warmstreckgrenze und je geringer die Wärmeleitfähigkeit ist. Auf beide Kennwerte wirkt sich die Porosität aus. Da sich nach und nach auch thermische Spannungen in den dickeren Zuglängsspannungen an der Oberfläche im hier betrachteten geringsten Querschnitt (II).

Nach ungefähr 4 s ist das Bauteil soweit abgekühlt, dass im Kernbereich Triebkräfte für erste Phasenumwandlungsprozesse zur Verfügung stehen. Umwandlungen in der Randschicht sind durch die hohen Kohlenstoffgehalte noch nicht möglich. Die Bainitbildung im Kern bewirkt eine Volumenzunahme, die von den austenitischen Randbereichen der Probe behindert wird. Folglich nehmen die Druckspannungen durch die behinderte Ausdehnung des Kernbereiches für den Kern wie auch die Längszugspannungen im Rand (vgl. Teilbereich III des Spannungsverlaufes aus Abbildung 7-11) zu. Durch die Überlagerung der thermisch- und umwandlungsbedingten Spannungen können lokal Plastifizierungen auftreten, was zunächst eine Reduktion der Längszugspannungen bewirkt. Da die Temperaturdifferenz zwischen Rand und Kern weiter zunimmt und die Warmstreckgrenze mit sinkender Temperatur ebenfalls ansteigt, kann im weiteren Verlauf eine leichte Zunahme der Zugspannungen beobachtet werden (Teilbereich IV).

Erreicht die Temperatur in der Randschicht die Martensitstarttemperatur, so setzt die martensitische Reaktion ein. Durch den hohen Randkohlenstoffgehalt beginnt die martensitische Reaktion zunächst unterhalb der Oberfläche (Teilbereich V). Der so auftretende Volumensprung wird durch den bereits umgewandelten Kernwerkstoff behindert, so dass ein Vorzeichenwechsel in der Spannungsentwicklung zu verzeichnen ist. Der Randbereich steht ab diesem Zeitpunkt unter Druckspannungen, der Kernbereich des Bauteils

unter Zugspannungen. Im weiteren Verlauf der Spannungsentwicklung (Teilbereich VI) ist eine Zunahme der Drucklängsspannung im betrachteten Oberflächenelement erkennbar, die auf die dort zeitlich zuletzt stattfindende martensitische Umwandlung zurückzuführen ist. Der Volumensprung dieser martensitischen Umwandlung wird von bereits umgewandelten Werkstoffbereichen behindert, so dass die bereits existierenden Druckspannungen weiter ausgebaut werden. In Folge lokaler Plastifizierungen bleiben diese Spannungen auch nach Temperaturausgleich existent, so dass letztlich Druckeigenspannungen im Rand und Zugeigenspannungen im Kernwerkstoff vorliegen.



Abbildung 7-11: Zeitliche Entwicklung der Spannungsentwicklung für ein Oberflächenelement in Längsrichtung.

Das messtechnisch erfasste Eigenspannungstiefenprofil ist in Abbildung 7-12 dargestellt. Es zeichnet sich durch ein Druckeigenspannungsmaximum der Höhe σ^{ES} = -478 MPa aus. An der Oberfläche liegen lediglich Druckeigenspannungen von ungefähr -200 MPa vor. Dieser Abfall zur Oberfläche wird in der Literatur einerseits auf den sich in der Randschicht bildenden Restaustenitgehalt zurückgeführt als auch auf eindiffundierenden Sauerstoff, der lokal mit sauerstoffaffinen Elementen Oxide bildet, die die Härtbarkeit verringern [109]. Ein Nulldurchgang konnte nicht festgestellt werden. Dies ist auf Umlagerungseffekte beim Abtragen zurückzuführen. Da sowohl die Unter- als auch die Oberseite festgewalzt und einsatzgehärtet werden, stehen beide letztlich unter Druckeigenspannungen. Durch elektrochemisches einseitiges Abtragen wird das mechanische Momentengleichgewicht aufgehoben und es kommt zu einer Verformung und damit zu Umlagerungseffekten.

Ein Vergleich zwischen Simulation und Experiment zeigt, dass in beiden Fällen der grundsätzliche Verlauf, mit Druckeigenspannungen im Rand und Zugeigenspannungen im Kernwerkstoff, wiedergegeben wird. Die im Rande vorliegenden Durckeigenspannungen werden überschätzt. Insbesondere der Oberflächenwert der aufgrund innerer Oxidation stark gegenüber den anderen Eigenspannungswerten des Randbereiches abfällt, kann durch die Simulation nicht beschrieben werden, da die geänderte chemische Zusammensetzung nach der inneren Oxidbildung in der Simulation nicht berücksichtigt wird. Der Nulldurchgang kann aufgrund von Umlagerungseffekten, die bei der experimentellen Ermittlung von Eigenspannungen in Folge eines einseitigen elektrochemischen Abtragens auftreten, nicht für eine Verifikation der Simulation genutzt werden. Dennoch scheint der Nulldurchgang der Simulation die Korrelation Mikrostrukturentwicklung plausibel durch mit der (vgl. Abbildung 7-12).



Abbildung 7-12: Gegenüberstellung der experimentellen und simulativen Eigenspannungsverteilung in Längsrichtung. Experimentelle Ergebnisse sind unkorrigiert. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.

7.4 Diskussion der Prozesskette

Die in dieser Arbeit angestrebte definierte Einstellung eines Kohlenstofftiefenprofils und damit gezielte Randschichthärtung konnte gemäß den in Kapitel 7.2 und 7.3 vorgestellten Ergebnissen umgesetzt werden. Diese erfolgreiche thermochemische Behandlung von PM-Bauteilen ist hauptsächlich auf die vorherige mechanische Oberflächenbehandlung und damit auf die Oberflächenverdichtung zurückzuführen. Abbildungen 7-13, 7-14, 7-15 zeigen den Einfluss des Festwalzens auf die Ergebnisse. Hierfür wurden die Simulationen zusätzlich an

der mechanisch nicht behandelten und daher porösen Einspannfläche ausgewertet. Für die Diffusionsvorgänge im Bereich der Einspannfläche wurde von dominanter Oberflächendiffusion ausgegangen. Für das Aufkohlen ergibt sich an der Einspannfläche c_{Rand, Einspannfläche} = 0,63 Ma% ein deutlich geringerer Randkohlenstoffgehalt, als sich bei verdichteter Oberfläche $c_{Rand, Taillierung} = 0,72$ Ma% einstellen würde. Die Aufkohlungstiefe dagegen nimmt deutlich zu. An der Einspannfläche wird der Grundkohlenstoffgehalt erst in einer Tiefe von 2,25 mm, also fast der halben Bauteilbreite, wieder erreicht. Im Vergleich hierzu stellen sich deutlich größere Gradienten im Kohlenstoffprofil der mechanisch behandelten Taillierung ein und der Grundkohlenstoffgehalt ist bereits in einer Tiefe von ungefähr 1 mm messbar.



Abbildung 7-13: Simulativ ermitteltes Aufkohlprofil für den porösen bzw. gradiert porösen Werkstoffzustand aus Abbildung 7-1. Ergebnis gilt für eine Aufkohltemperatur von 940 °C für 2 h bei einem Kohlenstoffpegel von 1 Ma% im 1. Stadium und 0,8 Ma% im 2. Stadium.

Für das nachfolgende Härten sind die Ergebnisse in Abbildung 7-14 dargestellt. Auch hier zeigt sich eine deutlich tieferreichende martensitische Härtung. Für die Einspannfläche weist die Simulation eine martensitisch dominierte Randschicht bis in eine Tiefe von 0,81 mm aus. Im Vergleich hierzu erstreckt sich die martensitische Härtung im Bereich der Taillierung nur bis 0,48 mm in das Bauteil. Durch die höheren Randkohlenstoffgehalte in der Taillierung ist in diesen Werkstoffbereichen auch mit einem höheren Restaustenitgehalt zu rechnen. Im Bereich der Taillierung liegen randnah 3,1 Ma% vor. Dagegen wird für den Einspannbereich ein Restaustenitgehalt von 2,8 Ma% vorausgesagt.



Abbildung 7-14: Simulativ ermittelte Gefügeverteilung für den porösen bzw. gradiert porösen Werkstoffzustand.

Folglich sind auch Änderungen beim Eigenspannungszustand festzustellen (vgl. Abbildung 7-15). Durch den geringeren Kohlenstoffgehalt liegt ein geringerer Restaustenitanteil in der Einspannfläche vor.



Abbildung 7-15: Simulativ ermittelte Eigenspannungsverteilung für den porösen bzw. gradiert porösen Werkstoffzustand. Auswertung in allen Fällen an der nicht taillierten Seitenfläche, so dass keine Geometrieeffekte berücksichtigt werden müssen.

Die Simulation sagt daher für die Einspannfläche maximale Druckeigenspannungen an der Oberfläche von $\sigma_{max, Einspannfläche} = -532$ MPa voraus, die damit betragsmäßig kleiner als in der Taillierung mit $\sigma_{max, Taillierung} = -611$ MPa sind. An der Oberfläche ergibt sich für Werkstoffbereiche, die vor der thermochemischen Behandlung einer mechanischen Oberflächenbehandlung unterzogen wurden, ein Wert von $\sigma_{0, Taillierung} = -567$ MPa. Das Werkstoffvolumen, das unter Druckeigenspannungen steht, ist dagegen im Bereich der Einspannfläche größer. Der Nulldurchgang ist hier nach etwa 0,9 mm festzustellen. In der Taillierung ist dagegen der Nulldurchgang bereits nach 0,6 mm zu verzeichnen.

Damit lässt sich also festhalten, dass mittels des gewählten Ansatzes der mechanischen Oberflächenbehandlung vor dem Einsatzhärten der Kohlenstoff definierter in die Randschicht eingebracht werden kann und die Randschicht gezielt härtbar ist bei gleichzeitigem Erhalt des duktilen Kernes. Dies deutet auf vorteilhaftere Bauteileigenschaften durch die mechanische Oberflächenbehandlung hin.

8 Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war die numerische Beschreibung des Einsatzhärtens von pulvermetallurgischen randschichtverdichteten gradiert porösen Bauteilen zur Vorhersage des Kohlenstoffprofils, der Gefügeverteilung und des Eigenspannungszustands.

Das gewählte numerische Konzept sieht dabei zwei konsekutive Simulationen für die Einzelprozesse Aufkohlen und Härten basierend auf dem kommerziellen FE-Softwarepaket ABAQUS vor. Beide Simulationen wurden verkettet miteinander durchgeführt, um die Ergebnisse aus der vorangegangenen Rechnung berücksichtigen zu können. Die numerische Berechnung erfolgte an vereinfachten porenfreien und damit homogenisierten Strukturen. Zur Berücksichtigung der Porosität wurden effektive Materialeigenschaften benutzt. Die des Aufkohlens basierte auf numerische Beschreibung einer Beschreibung des Stoffüberganges mittels eines technologischen Ansatzes. Der Stofftransport im Werkstoffvolumen wurde mittels des 2. Fick'schen Gesetzes unter Nutzung effektiver Diffusionskoeffizienten beschrieben Die Temperaturfeldberechnung bei der Abschrecksimulation beruht auf der in ABAQUS standardmäßig implementierten Wärmeleitungsgleichung nach Fourier unter Berücksichtigung des Wärmeübergangs über die Bauteiloberflächen. Auftretende thermisch induzierte Phasenumwandlungen und deren Effekte auf das Temperaturfeld sowie den vorliegenden Spannungszustand werden in benutzerdefinierten Erweiterungen berechnet. Dabei muss zwischen diffusionsgesteuerten und diffusionslosen Phasenumwandlungen unterschieden werden. Diffusionsgesteuerte Phasenumwandlungen werden mittels eines Johnson-Mehl-Avrami-Ansatzes beschrieben. Dagegen erfolgt die Berechnung diffusionsloser Umwandlungsvorgänge mit einem Modell nach Koistinen-Marburger.

Zur Durchführung des beschriebenen numerischen Konzepts wurden Materialkennwerte für Astaloy 85 Mo bestimmt und mittels dieser experimentellen Befunde ein Materialmodell erstellt. Das Aufkohlverhalten wurde sowohl mittels Aufkohlversuchen als auch -simulationen erfasst und daraus effektive Diffusionskoeffizienten berechnet. Im Falle eines Porennetzwerkes mit großem Angebot an freier Oberfläche in Diffusionsrichtung kann von dominierender Oberflächendiffusion ausgegangen werden, was zu zunehmenden effektiven Diffusionskoeffizienten mit wachsender Porosität führt. Bei einzeln vorliegenden elliptischen Poren dominiert weitestgehend Volumendiffusion. Damit kommt dem verfügbaren Diffusionsquerschnitt entscheidende Bedeutung zu, was wiederum einen abnehmenden effektiven Diffusionskoeffizienten bei zunehmender Porosität bedingt. Für die numerische Beschreibung ist oberflächennah von Volumendiffusion und für die nicht mechanisch verdichteten Kernbereiche von Oberflächendiffusion auszugehen. Für die Modellierung des diffusionsgesteuerten Umwandlungsverhaltens mittels des Johnson-Mehl-Avrami-Ansatzes wurden isotherme Umwandlungsversuche durchgeführt. Dabei konnte eine bevorzugte Phasenumwandlung bei mittlerer Unterkühlung sowie längere Inkubationszeiten für zunehmenden Kohlenstoffgehalt und abnehmende Porosität festgestellt werden. Um diese experimentellen Befunde numerisch beschreiben zu können. wurde der Transformationsmechanismusexponent konstant gewählt und der Parameter zur Beschreibung von Keimbildung und -wachstum temperatur-, kohlenstoff- und porositätsabhängig ausgeführt. Bezüglich des mechanischen Verhaltens wurden temperatur-, kohlenstoff- und porositätsabhängig Versuche für unterschiedliche Mikrostrukturen durchgeführt mit der Zielsetzung das Fließverhalten zu bestimmen. Ergänzend wurden thermophysikalische Kennwerte experimentell ermittelt.

Die numerischen Untersuchungen des Aufkohlens zeigen, dass eine Durchkohlung durch vorherige mechanische Oberflächenverdichtung vermieden und ein definiertes Kohlenstoffprofil erzeugt werden kann. Das erzeugte Kohlenstoffprofil kann mittels eines technologischen Ansatzes Abbildung des Stoffüberganges und effektiver zur Diffusionskoeffizienten für Flachproben vorhergesagt werden. Bei Berücksichtigung des Kohlenstoffeffektes auf den effektiven Diffusionskoeffizienten lassen sich verbesserte Ergebnisse erzielen. Insbesondere in Oberflächennähe kann der Effekt des Kohlenstoffs nicht vernachlässigt werden.

Für das Abschrecken ergibt sich mit dem beschriebenen Kohlenstoffprofil eine martensitische Randschicht, die in ein bainitisches Grundgefüge übergeht. Die martensitische Randschicht ist in Folge dessen verbunden mit der Ausbildung von Druckeigenspannungen, die sich an Zugeigenspannungen im Bauteilinneren abstützen. Der Vorzeichenwechsel der Eigenspannungen korreliert mit dem Übergang der martensitisch dominierten Randschicht in das bainitische Kerngefüge. Die Gefügeentwicklung kann durch das erstellte Materialmodell und die gewählten Ansätze nach Johnson-Mehl-Avrami und Koistinen-Marburger gut wiedergegeben werden. Die entstehenden Eigenspannungen werden leicht überschätzt.

Zentrales Ergebnis der Arbeit ist damit einerseits die Durchführbarkeit einer Einsatzhärtung an pulvermetallurgischen oberflächenverdichteten gradiert porösen Bauteilen und andererseits die Anwendbarkeit des entwickelten Simulationstools für die Prozess- und Bauteilauslegung.

9 Literaturverzeichnis

- Schatt W., Wieters K. P., Kieback, B.: Pulvermetallurgie: Technologien und Werkstoffe, 2. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2007.
- [2] Totten G.: Steel Heat Treatment Metallurgy and Technology, CRC Press, Boca Raton 2007.
- [3] Altena H., Danninger H.: Wärmebehandlung von Sinterstahl-Präzisionsteilen: II. Prozess- und Anlagetechnik, BHM, 150.Jg., 5 (2005), S. 170.
- [4] Prucher T.: Carburizing of Iron Based P/M Components, 20th ASM Heat Treating Society Conference Proceedings, (2000), S. 994.
- [5] Norm: DIN 8580, Fertigungsverfahren Begriffe, Einteilung, Beuth-Verlag, Berlin, 2003.
- [6] Angelo P.C., Subramanian R.: Powder Metallurgy: Science, Technology and Applications, Second Printing, PHI Learning Private Limited, 2009.
- [7] Schatt W.: Sintervorgänge-Grundlagen, VDI Verlag, Düsseldorf, 1992.
- [8] Geguzin J.E.: Physik des Sinterns, VEB Deutscher Verlag f
 ür Grundstoffindustrie, 1967.
- [9] Frenkel J.J.: J. Physics, USSR, 9 (1945) 5, S. 385.
- [10] Rockland, J.G.R.: Z. Metallkde, 58 (1967) 476, S 564.
- [11] Norm: DIN 30910- Teil 3: Wärmebehandlung von Sinterteilen, Beuth Verlag, Berlin, 1990.
- [12] Biallas G.: Zyklisches Verformungsverhalten und Mikrostruktur von Sintereisen und ausgewählten Sinterstählen, VDI Fortschritt Berichte Reihe 5, VDI Verlag, Düsseldorf, 1997
- [13] Merkel J.: Untersuchungen zum Einfluss von Kugelstrahl- und Festwalzbehandlungen auf den Randschichtzustand und die Schwingfestigkeit von Sintereisenwerkstoffen, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 2009.
- [14] German R.M.: Powder metallurgy of iron and steel, Wiley Interscience Publication, New York, 1998.
- [15] Norm: DIN 17022 Teil 3: Verfahren der Wärmebehandlung Einsatzhärten, Beuth Verlag, Berlin, 1989.
- [16] Bargel H. J., Schulze G.: Werkstoffkunde, Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2005.
- [17] Herring D.H.: Vacuum Carburizing of P/M Steals, Industrial Heating, 1987, S. 30.

- [18] Poor R.: Vacuum carburizing of FLN 2-4405 powdered metal material, Advances in powder metallurgy & particulate materials, 2 (2004), S. 23.
- [19] Totten G. E.: Steel Heat Treatment- Equipment and Process Design, Second Edition, CRC Press, Boca Racon, 2006.
- [20] Liedtke D.: Merkblatt 452 Einsatzhärten, Stahl-Informations-Zentrum, Düsseldorf, 2012.
- [21] Spur G., Stöferle T.: Handbuch der Fertigungstechnik, Bd. 2 Wärmebehandeln, Hanser Verlag, München, 1987.
- [22] Diemar A.: Simulation des Einsatzhärtens und Abschätzung der Dauerfestigkeit einsatzgehärteter Bauteile, Dissertation, Bauhaus Universität Weimar, 2007.
- [23] Norm: DIN EN 10052, Begriffe der Wärmebehandlung von Eisenwerkstoffen, Beuth-Verlag, Berlin, 1994.
- [24] Gallo A., Elia A., Cimabellini S.: The apparent diffusion coefficient of carbon in sintered iron during the gas carburizing process, powder metallurgy International, 16 (1984) 4, S. 177.
- [25] Widanka K.: Effect of interconnected porosity on carbon diffusion depth in vacuum carburising process of iron compacts, Powder Metallurgy, 53 (2010) 4, S. 318.
- [26] Krave T. J.: Carburization as a Function of Density and Carbon Potential Advances in Powder Metallurgy and Particulate Materials, MPIF, Princeton, 6 (1997), S. 3.
- [27] Rosso M., Scavino G., Lesprance G., Hong, B. D., Rege A. D., Miele P., Krave T. J.: Carbon and Nitrogen Diffusion in Ni, Mo, Mn alloyed P/M Steels Subjected to Gaseous and Plasma Case-hardening Treatments in Powder Metallurgy and Particulate Materials, MPIF, Princeton, 6 (1997), S. 12.
- [28] Norm: DIN 30912: Sintermetalle; Sint-Richtlinien, Beuth Verlag, Berlin, 1990.
- [29] Kowaleski J, Kucharski K.: Vacuum carburizing system for powder metal parts and components, Industrial Heating, 5 (2007), S. 61.
- [30] Pustovoit V. N., Churyukin Y. N., Blinovski V. A.: Criteria for the effect of porosity on phase transformations in sintered steels, Izvestiya Akademli nauk SSSR Metally, 2 (1991), S. 90.
- [31] Baehr H.D., Stephan K.: Wärme- und Stoffübertragung, 4.Auflage, Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2004.
- [32] Warke V.: Predicting the Response of Powder Metallurgy Steel Components to Heat Treatment, Dissertation, Worcester Polytechnic Institute, 2008.

- [33] Mittemeijer E.: Fundamentals of Materials Science, Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2010.
- [34] Porter D.A., Easterling K.E.: Phase Transformation in Metals and Alloys, Second Edition, CRC Press, Boca Raton, 2004.
- [35] Ermakov S. S., Maksarova I. Y.: Kinetic characteristics of the diffusional transformation of supercooled austenite in PM Steels, Poroshkovaya Metallurgiya, 5 (1983) 257, S. 66.
- [36] Guerevich Y. G., Rakhmanov V. I., Panshin I. F.: Transformation of supercooled austenite in sintered steels during continous cooling, Porshk. Metall, 10 (1979), S. 86.
- [37] Norm: DIN EN 15305: Zerstörungsfreie Prüfung Röntgendiffraktometrisches Prüfverfahren zur Ermittlung der Eigenspannungen, Beuth-Verlag, Berlin, 2008.
- [38] Trapp N.: Methoden und Strategien zur Simulation der Wärmebehandlung komplexer Bauteile aus 20MnCr5, Institut f
 ür Werkstoffkunde I, Universit
 ät Karlsruhe (TH), Dissertation, 2010.
- [39] Rohde J., Jeppsson A.: Literature review of heat treatment simulations with respect to phase transformation, residual stresses and distortion. In: Scandinavian Journal of Metallurgy, 29 (2000), S. 47.
- [40] Inoue T., Arimoto K.: Development and Implementation of CAE System "HEARTSfor Heat Treatment Simulation Based on Metallo-Thermo-Mechanics. In: Journal of Materials Engineering and Performance, 6 (1997), S. 51.
- [41] Sundelöf E.: Modelling of Reactive Gas Transport, Licentiate Thesis, Institutionen för numerisk analys och datalogi, Kungl Tekniska Högskolan, Stockholm, 2003.
- [42] Grabke H. J.: Kinetics of gas-solid reactions, Material Science Forum, 154 (1994), S. 59.
- [43] Madsac M., Hiron T.: Kinetik der Oberflächenreaktion, Scripta Metallurgica, 16 (1982), S.1013.
- [44] Sproge L., Ågren J.: Experimental and theoretical studies of gas consumption in the gas carburizing process. Journal of Heat Treating, 6 (1988) 1, S. 9.
- [45] Collin R., Gunnarson S., Thulin D.: Influence of reaction rate on gas carburizing of steel, Journal of The Iron and Steel Institute, (1972), S. 777.
- [46] Collin R., Gunnarson S., Thulin. D.: A mathematical model for predicting carbon concentration profiles in gas-carburized steel. Journal of The Iron and Steel Institute, (1972), S. 785.

- [47] Stickels C.A: Analytical models for the gas carburizing process. Metallurgical transactions B, 20 (1989), S. 535.
- [48] Avrami M.: Kinetics of Phase Change, J. Chem. Physics, 7 (1939), S. 1103.
- [49] Avrami M.: Kinetics of Phase Change, J. Chem. Physics, 8 (1940), S. 212.
- [50] Avrami M.: Kinetics of Phase Change, J. Chem. Physics, 9 (1941), S. 2177.
- [51] Johnson W. A., Mehl R. F.: Reaction Kinetics in Processes of Nucleation and Growth, Trans. AIME, 135 (1939), S. 416.
- [52] Denis S., Sjöström S., Simon A.: Coupled temperature, stress, phase transformation calculation model – numerical illustration of the internal stress evolution during cooling of a eutectoid carbon steel cylinder, Metall. Trans A. 18A (1987), S. 1203.
- [53] Ehlers M., Müller H., Löhe D.: Verzugs-, Spannungs-, und Eigenspannungsausbildung beim Tauchkühlen abgesetzter Stahlzylinder – Simulation und Experiment, In: Deutsche Forschungsgemeinschaft "Eigenspannungen und Verzug durch Wärmeentwicklung", Forschungsbericht, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, (1999), S. 70.
- [54] Kübler R., Zhang S., Müller H., Löhe D.: Development of Stresses and Residual Stresses of AISI 52100 Rings using different Quenching Conditions – Simulation and Experiments, In: Proceedings of the international Manufacturing Conference in China, Hongkong, 2000.
- [55] Kübler R.: Numerische und experimentelle Untersuchungen zum Einfluß des Wärmeübergangs beim Hochdruckgasabschrecken in Düsenfeldern auf die Spannungs-, Eigenspannungs- und Verzugsausbildung von rotationssymmetrischen Proben aus 100Cr6, Dissertation, Universität Karlsruhe, 2002.
- [56] Leblond J.B., Devaux J.: A new kinetic model for anisothermal metallurgical trans formations in steel including effect of austenite grain size, Acta metal, Vol. 32 (1984) 1, S 137.
- [57] Koistinen D.P., Marburger R.E.: A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steel, Acta Metall., 7 (1959), S. 59.
- [58] Yu H.J.: Berechnung von Abkuehlungs-, Umwandlungs-, Schweiss- sowie Verformungseigenspannungen mit Hilfe der Methoder der Finiten Elemente, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 1977.
- [59] Gür C.H., Jiansheng P.: Handbook of Thermal Process Modeling of Steels, CRC Press Taylor Francis, Boca Raton, 2009

[60]	Schröder R.: Untersuchung zur Spannungs- und Eigenspannungsausbildung beim Ab-
	schrecken von Stahlzylindern, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1985.
[61]	Oda S., Miyachika K., Fujio H.: Residual stress calculation of case hardened and thin-
	rimmed spur gears with various standard pressure angles, In: ICRS3, Elsevier Applied
	Science, London, (1992), S. 1248.
[62]	Anderson C., Goldman P., Rangaswamy P., Petrus G., Ferguson B.L., Lathrop J., Nik-
	kel D.: Development of a carburizing and quenching simulation tool, Proceedings 2nd

- Int. Conf. Quenching and Control of Distortion, ASM International, (1996), S. 377.
 [63] Hoferer M., Müller H., Macherauch E.: Einfluss des Kohlenstoffprofils bei Eisenwerkstoffen auf die Spannungs- und Eigenspannungsausbildung beim Härten. HTM
- werkstoffen auf die Spannungs- und Eigenspannungsausbildung beim Härten, HTM 51 (1996), S. 80.
- [64] Bergheau J. M., Boitout F., Toynet V., Denis S., Simon A.: Finite element simulation of coupled carbon diffu-sion, metallurgical transformation and heat transfer with applications in the automobile industry, Proceedings 3nd Int. Conf. Quenching and Control of Distortion, ASM International, (1999), S. 145.
- [65] Franz C., Lübben T., Lütjens J., Streicher F., Trapp N., Vogel M.: Computer Aided Simulation of Heat Treatment, Teil 3: Simulation der Einsatzhärtung komplexer Bauteilgeometrien durch Abstraktion, HTM 61 (2006) 1, S. 19.
- [66] Trapp N., Fiderer M., Lütjens J., Ehlers M., Schulze V.: Simulation of case-hardening of complex components by use of a construction kit, In: Proceedings of the 1st Int. Conf. On Distortion Engineering, (2005), S. 289.
- [67] Besserdich G.: Untersuchungen zur Eigenspannungs- und Verzugsausbildung beim Abschrecken von Zylindern aus den Stählen 42 CrMo4 und Ck45 unter Berücksichtigung der Umwandlungsplastizität, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1993.
- [68] Lübben T., Hoffmann F., Mayr P., Wildau M.: Simulation der Ölabschreckung unter Berücksichtigung der Streuung des Wärmeübergangs, HTM 53 (1998) 4, S. 288.
- [69] Tensi H.M., Stich A., Spies H.-J., Spengerl A.: Grundlagen des Abschreckens durch Tauchkühlen, HTM 50 (1995) 4, S. 254.
- [70] Tensi H. M., Künzel T., Stitzelberger P.: Benetzungskinetik als wichtige Kenngröße für die Härtung beim Tauchkühlen, HTM 42 (1987) 3, S. 125.
- [71] Tensi H. M., Lainer K.: Einfluss gekrümmter Oberflächen auf den Wärmeübergang beim Tauchkühlen, HTM 54 (1999) 1, S. 53.

- [72] Majorek A., Scholtes B., Müller H., Macherauch E.: Influence of heat transfer on the development of residual stresses in quenched steel cylinders, Steel Research 65 (1994)
 4, S 146.
- [73] Lübben T., Hoffmann F., Mayr P.: Maß- und Formänderung infolge Wärmebehandlung – eine Systembetrachtung, In: Tagungsband Massänderung und Deformation bei Wärmebehandlungen, ATTT-AWT-Tagung Belfort, (1997), S. 1.
- [74] Volkmuth J., Hengerer F.: Einfluß des Ausgangsmaterials auf den Verzug bei der Wärmebehandlung von Massenteilen, HTM 44 (1989) 2, S. 89.
- [75] Volkmuth J.: Eigenspannungen und Verzug. HTM 51 (1996) 3, S. 145.
- [76] Norm DIN 2740: Sintermetalle, ausgenommen Hartmetalle Zugprobestäbe, Beuth-Verlag, Berlin, 2009.
- [77] Schäfers P.: Auswirkung des Festwalzens auf die Randschicht poröser Werkstoffe, Studienarbeit, Karlsruher Institut f
 ür Technologie, 2011.
- [78] http://www.baehr-thermo.com/de/produkte/html/frame_produkte.html am 28.08.2012
- [79] Stahlinstitut VDEh und Wirtschaftsvereinigung Stahl im Stahl-Zentrum SEP 1680: Aufstellung von Zeit-Temperatur-Umwandlungsschaubildern f
 ür Eisenlegierungen, 1990, S 1.
- [80] Störrle A.: Konstruktion eines Hochtemperatur-Dehnungsaufnehmers unter Berücksichtigung der Anforderungen des iwk1, Studienarbeit, Karlsruher Institut f
 ür Technologie, 2010.
- [81] Norm ASTM E 1461: Standard Test Method for Thermal Diffusivity by the Flash Method, ASTM International, 2011.
- [82] Norm DIN 51007: Thermische Analyse (TA); Differenzthermoanalyse (DTA); Grundlagen, Beuth-Verlag, 1994.
- [83] Norm DIN EN 993-1: Prüfverfahren für dichte geformte feuerfeste Erzeugnisse: Teil
 1: Bestimmung der Rohdichte, offenen Porosität und Gesamtporosität, Beuth Verlag, Berlin, 1995.
- [84] Norm DIN ISO 2738: Bestimmung der Dichte, des Tränkstoffgehaltes und der offenen Porosität, Beuth Verlag, Berlin, 2000.
- [85] Peters R., Lindlohr S., Zafari A., Beiss P., Broeckmann C.: Präparation und bildanalytische Bestimmung von Dichtegradienten an Sinterformteilen auf Eisenbasis, Sonderbände der Praktischen Metallographie, 41 (2009), S. 57.
- [86] Norm DIN 51009: Optische Atomspektralanalyse Allgemeine Grundlagen und Begriffe, Beuth Verlag, Berlin, 2001.

- [87] Yu H. J., Wolfstieg U., Macherrauch E.: Berechnung von Eigenspannungen mit Hilfe eines speziellen Finite-Elemente Programmes. In: Archiv Eisenhüttenwesen, 49 (1978), S 499.
- [88] Mitter W.: Umwandlungsplastizität und ihre Berücksichtigung bei der Berechnung von Eigenspannungen, Bd. 7 von materialkundlich-technische Reihe, Geb. Bornträger Verlag, Berlin, Stuttgart, 1975.
- [89] Denis S., Simon A., Beck, G.: Analysis of the Thermomechanical Behaviour of Steel during Martensitic Quenching and Calculation of internal Stresses. In: Eigenspannungen, Entstehung - Messung - Bewertung, DGM Vortragsband, (1983), S. 211.
- [90] Stolar P., Prenosil B.: Kinetics of Transfer of Carbon from Carburizing and Carbonitriding Atmospheres, Metallic Materials, 22 (1984) 5, S. 348.
- [91] Rimmer K., Schwarz-Bergkampf E., Wunning J.: Surface Reaction Rate in Gas Carburizing, HTM 30 (1975), S. 152.
- [92] Munts V.A., Baskatov A.P.: Rate of Carburizing of Steel, Metal Science and Heat Treatment, 22 (1980), S. 358.
- [93] Wünning J.: Advances in Gas Carburizing Technique, HTM 23 (1968), S.101.
- [94] Moiseev B.A., Brunzel Y.M., Shvartsman L.A.: Kinetics of Carburizing in an endothermal Atmosphere, Metal Science and Heat Treatment, 21 (1979), S. 437.
- [95] Hofferer M.B.: Einfluss des Kohlenstoffprofils, des Grundwerkstoffs und des Abschreckmediums auf die Spannungs- und Eigenspannungsausbildung beim Einsatz härten verschiedener Eisenbasiswerkstoffe, Institut für Werkstoffkunde I, Universität Karlsruhe (TH), Dissertation, 1997.
- [96] Norm DIN 17022 Teil 3: Wärmebehandlung von Eisenwerkstoffen, Verfahren zur Wärmebehandlung, Einsatzhärten, Beuth Verlag, Berlin, 1989.
- [97] Eckstein H. J.: Technologie der Wärmebehandlung von Stahl. VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 2. Auflage, Leipzig, 1987.
- [98] Smith R.P.: The diffusion of carbon in iron by the steady state method. Acta Metall., 1 (1953), S. 578.
- [99] Sahm P.R, Egry I., Volkmann T.: Schmelze, Erstarrung, Grenzflächen, Vieweg Teubner Verlag, 1999.
- [100] Wells C., Batz W., Mehl R.F.: Trans AIME, 188 (1950), S. 553.
- [101] Christian J. W.: The Theory of Transformations in Metals and Alloys, in: an Advanced Textbook in Physical Metallurgy, Pergamon Press, Oxford, 1965.

- [102] Shackelford J. F.: Werkstofftechnologie f
 ür Ingenieure, Pearson Studium, Oxford, 2005.
- [103] Sjöström S: The calculation of quench stresses in steel, Linköping University, Dissertation, 1982.
- [104] Courtney T.H.: Mechanical Behaviour of Materials, Waveland Press, Second Edition, 2005.
- [105] Gottstein G.: Physikalische Grundlage der Materialkunde, Springer Heidelberg Berlin, 2007.
- [106] Dalgic M.: Zusammenhang zwischen der Porenmorphologie und der Schwingfestigkeit von Sinterstahl und Sintereisen, Rheinisch Westfälische Technische Hochschule Aachen, Dissertation, 2009.
- [107] Salak A., Miskovic V.: The dependence of mechanical properties of Sintered iron compacts upon porosity, powder metallurgy international, 6 (1974), S. 128.
- [108] Danninger H., Gierl C.: Thermal expansion and thermal conductivity of sintered steels, http://www.mpif.org/apmimembers/metallography%20contest/2010/0034danninger.pdf vom 03.08.2012.
- [109] Hoferer M.: Einfluss des Kohlenstoffprofils, des Grundwerkstoffs und des Abschreckmechanismus auf die Spannungs- und Eigenspannungsausbildung beim Einsatzhärten verschiedener Eisenbasiswerkstoffes, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 1997

10 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1:	Strategie zur thermochemischen Wärmebehandlung von PM-Bauteilen unter Nutzung eines Festwalzprozesses als mechanische Oberflächen-
	behandlung zur Vermeidung von Durchkohlungen.
Abbildung 2-1:	Zweiteilchenmodell zur Verdeutlichung der Vorgänge beim Sintern mit
	den Stadien Kontaktbildung, Sinterhalsbildung und Sinterhalswachs-
	tum.
Abbildung 2-2:	Diffusionsvorgänge im Sinterhals. Dabei werden Leerstellen durch
	und Atome durch • symbolisiert. Die Diffusion von Atomen in den Be-
	reich des Sinterhalses führt zu einer Annäherung der Zentren der zwei
	Teilchen und damit zu einer Schwindung um Δx .
Abbildung 2-3:	Temperaturführung während des Einsatzhärtens. Verfahrensausprägung
	Direkthärten.
Abbildung 2-4:	Ablaufende physikalischen und chemische Vorgänge nach [20].
Abbildung 2-5:	Gegenüberstellung von Aufkohltiefenprofilen in porenfreien und gra-
	diert porösen Werkstoffen [3].
Abbildung 2-6:	Wärmestrom während der einzelnen Abkühlstadien [22].
Abbildung 2-7:	Visualisierung des kritischen Keimbildungsradius r* und der kritischen
	freien Keimbildungsenthalpie aus Betrachtungen der Oberflächenener-
	gie und der chemischen Energie [33].
Abbildung 2-8:	Visualisierung der Keimbildung und des Wachstums von Perlit
	(in Anlehnung an [34]).
Abbildung 2-9:	Visualisierung der Keimbildung und des Wachstums von Bainit
	(in Anlehnung an [34]).
Abbildung 2-10:	Eigenspannungsentwicklung bei einer martensitischen Randschichthär-
	tung (links) und bei einer Durchhärtung (rechts), die beispielsweise in
	Folge einer ungewollten Durchkohlung auftreten kann.
Abbildung 2-11:	Wechselwirkung zwischen der Temperatur, dem Kohlenstoffgehalt, der
	Phasenverteilung und dem mechanischen Verhalten beim Einsatzhärten.
Abbildung 3-1:	Geometrie der zylindrischen Rohlinge nach dem Sintern.

Abbildung 3-2:	Zylindrische Hohlprobengeometrie (Proben für die Dilatometeruntersu-
	chungen).
Abbildung 3-3:	CT-Analyse an einer zylindrischen Hohlprobengeometrie nach der
	Zerspanung.
Abbildung 3-4:	Zylindrische Probengeometrie (Proben für die Deformationsexperimen-
	te).
Abbildung 3-5:	Zugprobengeometrie (DIN 2740) zur Durchführung von Warmzugver- suchen.
Abbildung 3-6:	Gewähltes Demonstratorbauteil: taillierte Flachprobe.
Abbildung 3-7:	Links: Festwalzen in mäanderförmigen Bahnen. Rechts: Festwalzwerk-
	zeug vom Typ Ecoroll HG 6 [77].
Abbildung 3-8:	Porositätstiefenprofil der taillierten Flachprobe nach einem Festwalz-
	prozess mit einem Festwalzdruck von 180bar. Auswertung erfolgte mit-
	tels Bildanalyse.
Abbildung 4-1:	Vakuumkammer des Abschreckdilatomters DIL 805 A/D.
Abbildung 4-2:	isotherme Versuchsführung zur Bestimmung des isothermen Umwand-
	lungsverhaltens. Auswertung dargestellt am Beispiel der Austenit-
	Bainit-Umwandlung für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt
	von 0,8 Ma% und einer Dichte von 7,8 g/cm ³ .
Abbildung 4-3:	Bestimmung des thermischen Ausdehnungskoeffizienten. Beispiel für
	die Bestimmung des über der Temperatur gemittelten thermischen Aus-
	dehnungskoeffizienten für Austenit.
Abbildung 4-4:	Bestimmung der Umwandlungsdehnung schematisch am Beispiel der
	Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung.
Abbildung 4-5:	Bestimmung der Umwandlungsdehnung schematisch am Beispiel der
	Umwandlung von Austenit in Ferrit/Perlit für Astaloy 85 Mo.
Abbildung 4-6:	100 kN-Universalprüfmaschine Zwick mit Spiegelofen und Dehnungs-
	aufnehmer zur Durchführung von Warmzugversuchen zur Bestimmung
	des Elastizitätsmoduls.
Abbildung 4-7:	Eingestelltes Kohlenstoffpotential in der Ofenatmosphäre beim
	Einsatzhärten.
Abbildung 4-8:	Beispielhafte Darstellung für die "Phasenanalyse" und das verwendete
	Messraster. Hier: Astaloy 85 Mo mit einer Dichte von 7,2 g/cm ³ . Ver-
	größerung 200-fach.

Abbildung 5-1:	Wechselwirkungen bei einer thermochemischen Wärmebehandlung.
Abbildung 5-2:	Simulationskonzept für das Einsatzhärten bestehend aus zwei konseku-
	tiven Teilsimulationen. Das Aufheizen wird vernachlässigt.
Abbildung 5-3:	Geometriemodell für die Einsatzhärtesimulation in ABAQUS. Vernet-
	zung mit 27837 Hex-Elemente mittels der Biase-Funktion (Verzer-
	rungsfunktion).
Abbildung 5-4:	Chemische Randbedingung: Stoffübertragung über rot gekennzeichnete
	obere und untere Deckfläche. Visualisierung der festen Einspannung im
	Punkt L.
Abbildung 5-5:	Anwendung des Johnson-Mehl-Avrami-Ansatzes zur Beschreibung
	einer Phasenumwandlung bei kontinuierlicher Abkühlung [87].
Abbildung 5-6:	Änderungen der Vernetzung: feinere Vernetzung in z-Richtung.
Abbildung 5-7:	Thermische Randbedingung: Wärmeübertragung über rot gekennzeich-
	nete Oberflächen. Visualisierung der festen Einspannung im Punkt L.
Abbildung 6-1:	Kohlenstofftiefenverteilung in geschliffenen Astaloy 85 Mo-Rohlingen
	der homogenen Dichte $\rho = 7,8$ g/cm ³ und einem Grundkohlenstoffge-

- halt von 0,25 Ma% nach 4-stündigem Aufkohlen bei 940 °C mit einem Kohlenstoffpegel von 1 Ma%.
- Abbildung 6-2: Anpassung der Simulation an das experimentell ermittelte Aufkohlprofil für den porenfreien Werkstoffzustand von Astaloy 85 Mo. Aufkohlbedingungen: $c_p = 1$ Ma%, T = 940 °C und 4 Stunden Aufkohldauer.
- Abbildung 6-3: Modell zur Bestimmung der Auswirkungen von Poren auf Volumendiffusionsprozesse.
- Abbildung 6-4:Effektiver Diffusionskoeffizient bei dominanter Volumendiffusion in
Abhängigkeit der Porenmorphologie.
- Abbildung 6-5: Kohlenstofftiefenverteilungen in geschliffenen Astaloy 85 Mo-Zylinderproben der homogenen Dichten $\rho = 6,8, 7,2$ und 7,8 g/cm³ nach einem 4-stündigen Aufkohlprozess bei 940 °C und einem Kohlenstoffpegel von 1 Ma%.
- Abbildung 6-6: Effektiver Diffusionskoeffizient bei dominanter Oberflächendiffusion.
- Abbildung 6-7:Scheinbare Sprungenthalpie für die interstitielle Atombewegung im
Falle von Volumendiffusion bei vorliegender Porosität.
- Abbildung 6-8:Scheinbare Sprungenthalpie für die interstitielle Atombewegung im
Falle von Oberflächendiffusion bei vorliegender Porosität.

Abbildung 6-9:	Fragment eines isothermen ZTU-Schaubilds für Astaloy 85 Mo mit
	einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0,25 \text{ Ma\%}$ für eine Dichte von
	6,8 g/cm ³ und 7,8 g/cm ³ .
Abbildung 6-10:	Isothermes ZTU-Schaubild für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoff-
	gehalt von $cc = 0.5$ Ma% für eine Dichte von 6.8 g/cm ³ und 7.8 g/cm ³ .
Abbildung 6-11:	Isothermes ZTU-Schaubild für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoff-
	gehalt von $c_c = 0.8$ Ma% für eine Dichte von 6.8 g/cm ³ und 7.8 g/cm ³ .
Abbildung 6-12:	Gegenüberstellung von modellierten und experimentellen Befunden für
	Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0,5$ Ma% und den
	Dichten 6,8 g/cm ³ und 7,8 g/cm ³ .
Abbildung 6-13:	Gegenüberstellung von modellierten und experimentellen Befunden für
	Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von $c_c = 0.8$ Ma% und den
	Dichten 6,8 g/cm ³ und 7,8 g/cm ³ .
Abbildung 6-14:	Martensitstarttemperatur in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehaltes und
	der Dichte.
Abbildung 6-15:	Umwandlungsdehnungen für die Austenit in Ferrit-Perlit-Umwandlung
	für Astaloy 85 Mo für verschiedene Kohlenstoffgehalte und Dichtestu-
	fen.
Abbildung 6-16:	Umwandlungsdehnungen für die Austenit in Bainit Umwandlung für
	Astaloy 85 Mo für verschiedene Kohlenstoffgehalte und Dichtestufen.
Abbildung 6-17:	Umwandlungsdehnungen für die Austenit in Martensit Umwandlung
	bei einem Kohlenstoffgehalt von 0,5 Ma% für verschiedene Dichtestu-
	fen. Bestimmung erfolgte aus Dilatometerexperimenten.
Abbildung 6-18:	Gegenüberstellung der Längenänderung bei der Austenit-Ferrit/Perlit-
	Umwandlung für verschiedene Dichten und einen Kohlenstoffgehalt
	von 0,25 Ma%.
Abbildung 6-19:	Gegenüberstellung modellierter und experimentell gemessener Um-
	wandlungsdehnungen für die Austenit-Ferrit/Perlit-Umwandlung.
Abbildung 6-20:	Gegenüberstellung modellierter und experimentell gemessener Um-
	wandlungsdehnungen für die Austenit-Bainit-Umwandlung.
Abbildung 6-21:	Gegenüberstellung der modellierten und experimentell ermittelten
	Umwandlungsdehnungen für die Austenit-Martensit-Umwandlung für
	einen Kohlenstoffgehalt von 0,5 Ma%.

Abbildung 6-22:	Umwandlungsplastische Konstante für die Austenit-Martensit-
	Umwandlung.
Abbildung 6-23:	Experimentelle Befunde für den Elastizitätsmodul in Abhängigkeit von
	Dichte und Temperatur für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt
	von 0,25 Ma%.
Abbildung 6-24:	Experimentelle Befunde für die elastische Streckgrenze in Abhängig-
	keit der Dichte und der Temperatur für eine ferritsich-perlitische (links)
	bzw. bainitsche (rechts) Mikrostruktur für Astaloy 85 Mo.
Abbildung 6-25:	Experimentelle Befunde für die elastische Streckgrenze in Abhängig-
	keit der Dichte und der Temperatur für eine martensitische (links) bzw.
	austenitische (rechts) Mikrostruktur für Astaloy 85 Mo.
Abbildung 6-26:	Gegenüberstellung der modellierten und experimentellen Elastizitäts-
	moduln für Astaloy 85 Mo mit einem Kohlenstoffgehalt von 0,25 Ma%
	und einer ferritisch-perlitischen Mikrostruktur für unterschiedliche Po-
	rositäten. Modell nach [14] mit einem Y=2,8.
Abbildung 6-27:	Gegenüberstellung von modellierten und experimentell ermittelten
	Elastizitätsmoduln für verschiedene Dichten und verschiedene Tempe-
	raturen.
Abbildung 6-28:	Modellierte und experimentelle elastische Streckgrenze in Abhängig-
	keit der Porosität für eine ferritsich-perlitische (links) bzw. bainitische
	(rechts) Mikrostruktur.
Abbildung 6-29:	Modellierte und experimentelle elastische Streckgrenze in Abhängig-
	keit der Porosität für eine martensitische (links) bzw. austenitische
	(rechts) Mikrostruktur.
Abbildung 6-30:	Gegenüberstellung von modellierten und experimentell ermittelten
	Streckgrenzen für den verdichteten Zustand in Abhängigkeit der Prüf-
	temperatur.
Abbildung 6-31:	Thermischer Ausdehnungskoeffizient in Abhängigkeit des Gefüges, der
	Dichte und des Kohlenstoffgehaltes. Ermittlung über Abschreckdilato-
	metrie.
Abbildung 6-32:	Spezifische Wärmekapazität in Abhängigkeit der Temperatur und des
	Kohlenstoffgehaltes. Ermittlung über DSC-Analyse.

Abbildung 6-33:	Wärmeleitfähigkeit für vollständig verdichteten ($\rho = 7,8$ g/cm ³) Asta-
	loy 85 Mo in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehaltes. Berechnung über
	Temperaturleitfähigkeit und spezifische Wärmekapazität.
Abbildung 6-34:	Arithmetisches Mittel der Wärmeleitfähigkeit in Abh. der Temperatur.
Abbildung 6-35:	Einfluss der Temperatur auf die Wärmeleitfähigkeit. Gegenüberstellung
	von modellierten und experimentellen Befunden für den porenfreien
	Werkstoffzustand. unter Nutzung der porenfreien Wärmeleitfähigkeit
	aus Abbildung 6-34 und des Modells von [32].
Abbildung 6-36:	Einfluss der Porosität auf die Wärmeleitfähigkeit unter Nutzung der
	porenfreien Wärmeleitfähigkeit aus Abbildung 6-35 und des Modells
	von [32].
Abbildung 6-37:	Halbunendliches 2D-Modell zur Bestimmung der effektiven Wärme-
	leitfähigkeit in Abhängigkeit von Porosität und Porenmorphologie.
Abbildung 6-38:	Einfluss der Dichte und der Porenmorphologie auf die Wärmeleitfähig-
	keit. Befunde aus halbunendlichem 2D-Modell aus Abbildung 6-37.
Abbildung 6-39:	Vergleich des hier beschriebenen Modells für die Abhängigkeit der
	Wärmeleitfähigkeit von der Porosität im Falle einer runden Porenmor-
	phologie und dem von [2] veröffentlichten Modell.
Abbildung 7-1:	Links: Experimentell ermitteltes Porositätstiefenprofil nach dem Fest-
	walzen der taillierten Flachprobe und entsprechende mathematische Be-
	schreibung durch eine Boltzmann-Funktion im Vergleich zur resultie-
	renden Porositätsverteilung nach dem Aufprägen. Rechts: Übertragene
	Porositätstiefenverteilung.
Abbildung 7-2:	Simulativ ermitteltes Aufkohlprofil für den gradiert porösen Werkstoff-
	zustand aus Abbildung 7-1. Ergebnis gilt für eine Aufkohltemperatur
	von 940 °C bei einem zweistündigen zweistufigen Aufkohlprozess.
	Kohlenstoffpegel im Boost-Stadium: 1 Ma%. Kohlenstoffpegel im Dif-
	fusions-Stadium: 0,8 Ma%.
Abbildung 7-3:	Gegenüberstellung des simulativ berechneten Kohlenstoffprofils mit
	der experimentell ermittelten Kohlenstoffverteilung. Auswertung je-
	weils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoff-
	zustand.
Abbildung 7-4:	Gegenüberstellung der experimentell ermittelten Kohlenstoffverteilung

mit den simulativ berechneten Kohlenstoffprofilen mit bzw. ohne Ein-

bezug des Kohlenstoffeffektes auf die Diffusivität. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand. Abbildung 7-5: Gegenüberstellung numerisch berechneter Kohlenstoffprofile für reine Volumendiffusion (D_{eff} gemäß Abbildung 6-4) bzw. reine Oberflächendiffusion (D_{eff} gemäß Abbildung 6-6) mit denen eines porenfreien Werkstoffs (D_{porenfrei} = $2 \cdot 10^{-5}$ mm²/s) und den experimentellen Befunden. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.

- Abbildung 7-6: Gefügeverteilung nach dem Einsatzhärten in der taillierten Flachprobe. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.
- Abbildung 7-7: Eigenspannungstiefenprofil nach dem Einsatzhärten in der taillierten Flachprobe. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.
- Abbildung 7-8: Gegenüberstellung der anfänglichen Temperaturentwicklung nach t = 0,25 s und der Kohlenstoffverteilung. Identifikation der Werkstoffbereiche, die zuerst umwandeln.
- Abbildung 7-9: Darstellung der Werkstoffbereiche, die die ersten Phasenumwandlungsprozesse beim Abschrecken durchlaufen. Gezeigt ist die bainitische Phasenumwandlung.
- Abbildung 7-10: Querschliff durch die Flachprobe nach dem Einsatzhärten. Nital-Pikral Doppelätzung sowie Gegenüberstellung von simulativen und experimentellen Befunden.
- Abbildung 7-11: Zeitliche Entwicklung der Spannungsentwicklung für ein Oberflächenelement in Längsrichtung.
- Abbildung 7-12: Gegenüberstellung der experimentellen und simulativen Eigenspannungsverteilung in Längsrichtung. Experimentelle Ergebnisse unkorrigiert. Auswertung jeweils in der Taillierung bei vorliegendem gradiert porösen Werkstoffzustand.
- Abbildung 7-13: Simulativ ermitteltes Aufkohlprofil für den porösen bzw. gradiert porösen Werkstoffzustand aus Abbildung 7-1. Ergebnis gilt für eine Aufkohltemperatur von 940 °C für 2 Stunden bei einem Kohlenstoffpegel von 1 Ma% im ersten Stadium und bei 0,8 Ma% im zweiten Stadium.
- Abbildung 7-14: Simulativ ermittelte Gefügeverteilung für den porösen bzw. gradiert porösen Werkstoffzustand.
- Abbildung 7-15: Simulativ ermittelte Eigenspannungsverteilung für den porösen bzw. gradiert porösen Werkstoffzustand. Auswertung in allen Fällen an der nicht taillierten Seitenfläche, so dass keine Geometrieeffekte berücksichtigt werden müssen.

11 Tabellenverzeichnis

Tabelle 3-1:	Chemische Zusammensetzung des modifizierten Basiswerkstoffes Asta-
	loy 85 Mo gemäß Spektralanalyse.
Tabelle 4-1:	Probenpräparation: Freilegung der Poren.
Tabelle 4-2:	Probenpräparation: Schleifen und Polieren nach der Infiltration der Po-
	ren.
Tabelle 6-1:	Parameter für die Modellierung von D_{Bainit} in Gleichung (6.14).
Tabelle 6-2:	Parameter für die Modellierung von E_{Bainit} in Gleichung (6.15) und
	F _{Bainit} in Gleichung (6.16) für die Austenit-Bainitumwandlung.
Tabelle 6-3:	Parameter $M_{s,0}$ und ΔM_s (6.18) für die Modellierung der diffusionslosen
	Umwandlung in Abhängigkeit des Kohlenstoffgehaltes c _{c.}