

---

## Thermodynamische Computer-Berechnungen in der Werkstoffwissenschaft

H.J. SEIFERT

Technische Universität Bergakademie Freiberg, Freiberg, Germany,  
[seifert@ww.tu-freiberg.de](mailto:seifert@ww.tu-freiberg.de)

Die Berechnungsmethoden der *computergestützten Werkstoffthermodynamik* können effizient genutzt werden, um komplexe Reaktionen in multikomponentigen multiphasigen Systemen vorherzusagen. Besonders die CALPHAD-Methode (CALculation of PHase Diagrams) hat sich für anwendungsorientierte Simulationen von heterogenen Werkstoffreaktionen und Prozessabläufen bewährt. Die zunehmende Verfügbarkeit von umfassenden thermodynamischen Datenbanken und fortschrittlicher Software hat dies möglich gemacht. Auch die Entwicklung der thermodynamischen Modelle für Lösungsphasen wurde während der vergangenen 25 Jahre intensiv vorangetrieben. Auf dieser Grundlage können die Phasengleichgewichte und Phasendiagramme realer Systeme zuverlässig berechnet werden. Die thermodynamische Modellierung erfordert die Verwendung experimenteller thermodynamischer und kristallographischer Daten für binäre und ternäre Subsysteme. Kalorimetrisch gemessene Enthalpien und Wärmekapazitäten sowie chemische Potentialdaten aus EMK- und Knudsen-Effusions-Messungen sind eine wichtige Grundlage für die Beschreibung der Systemphasen. Diese Daten und die experimentellen Informationen zu den Phasendiagrammen werden verwendet, um die Parameter der analytischen Modellbeschreibungen für die Gibbs-Energie-Funktionen anzupassen (Thermodynamische Optimierung). Für die detaillierte Analyse der Werkstoffreaktionen und der korrelierten thermischen Effekte werden die verschiedenen Typen von Phasendiagrammen und thermodynamischen Funktionen berechnet. Chemische Potentialdiagramme geben Aufschluss über Phasenstabilitäten unter spezifischen physikalisch-chemischen Sinterbedingungen. Zudem werden berechnete Phasenmengendiagramme verwendet, um chemische Reaktionen und Phasenstabilitäten auch quantitativ zu analysieren. Die Ergebnisse sind die Basis, um Prozessbedingungen für die Entwicklung optimierter Werkstoffgefüge zu schaffen. Die beschriebene Methode wird am Beispiel von Leichtmetalllegierungen und technischen Keramiken illustriert.