

# Komplexe Diffusionsprozesse in Metallen

Experimentelle Analyse und mathematische Simulation  
der Randentkohlung und Gasaufkohlung,  
inneren Oxidation und Sauerstoffsegregation  
an Metall-Oxid-Phasengrenzen

Priv.-Doz. Dr. Jürgen Gegner

Mit 324 Bildern und 10 Tabellen

# Inhaltsverzeichnis

---

<b>Vorwort</b>	<b>v</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Diffusionsforschung – aus Tradition ein Glanzlicht der Materialwissenschaft in Deutschland	3
1.2 Kurzübersicht	5
<b>2 Modellierung mikroskopischer Objektverteilungen</b>	<b>8</b>
2.1 Bildanalyse und einfache Modellverteilungen	8
2.1.1 Digitale Bildverarbeitung	9
2.1.2 Bestimmung der Eingabedaten	10
2.1.3 Diffusionslängenanalyse	14
2.1.4 1D-Modell bei richtungsabhängiger Objektverteilung	17
2.2 Gefüge-Deskriptoren	20
2.3 Stereologische Analyse	24
2.3.1 Korrektur der Teilchengröße bei Schnittbildern	25
2.3.2 Computereperiment und Korrektur der Teilchenabstände	27
2.4 Stochastische Optimierung und Generierung von Modellverteilungen	29
2.4.1 Zielfunktion der räumlichen Punktanordnung	30
2.4.2 Lösung mittels Monte-Carlo-Verfahren	34
2.4.2.1 Konstruktionsheuristik	34
2.4.2.2 Verbesserungsheuristik	36
2.4.3 Zuordnung der Objektgrößen	38
2.5 Anwendungspotenzial in der Materialwissenschaft und Werkstofftechnik	39
2.6 Anwendungsbeispiele	42
<b>3 Berechnung von Diffusionsprozessen</b>	<b>51</b>
3.1 Grundlagen und Diffusionsgleichungen	52
3.2 Analytische Lösungen und Anwendung auf das System Fe-C	54
3.2.1 Gleichmäßige Anfangskonzentrationsverteilung	57
3.2.1.1 Unendlicher Halbraum	57

3.2.1.2	Endliche Systeme	79
3.2.2	Beliebiges Anfangskonzentrationsprofil	82
3.3	Numerische Methoden	90
3.3.1	Kurzübersicht und kommerzielles Finite-Elemente-Programmsystem	90
3.3.2	Ebenes 1D-Modell mit Berücksichtigung der Bauteilkrümmung	93
3.3.3	Vergleich mit analytischen Lösungen im System Fe-C	96

## **4 Rindentkohlung und Gasaufkohlung von niedriglegierten Stählen** **99**

4.1	Grundlagen, Literaturübersicht und Stand der Technik	99
4.1.1	Fertigungsbedingte Eigenspannungen	102
4.1.2	Austenitisieren und Härten	104
4.1.2.1	Schutzgastechnik	108
4.1.2.2	Carbidauflösung	110
4.1.2.3	Beziehung zwischen Härte und Kohlenstoffkonzentration	113
4.1.3	Aufkohlen für das Einsatzhärten	115
4.1.3.1	Zweistufiges Normaldruck-Gasaufkohlen	120
4.1.3.2	Gasatmosphären und Aufkohlungsreaktionen	126
4.1.3.3	Ableitung des Newtonschen Reaktionsgesetzes	131
4.1.3.4	Kohlenstoffpegel und Legierungsfaktor	135
4.1.3.5	Vorhersage von Aufkohlungsprofilen	138
4.1.3.6	Härteverfahren	141
4.1.3.7	Sonderverfahren	144
4.1.4	Rindentkohlung als unerwünschte Nebenwirkung der Wärmebehandlung	150
4.1.4.1	Klassifizierung möglicher Randschichtfehler	152
4.1.4.2	Verzunderung	154
4.1.4.3	Randoxidation	159
4.1.4.4	Rindentkohlung	164
4.1.4.5	Entkohlung durch Deckschichten	168
4.2	Realistische Werkstoff- und Prozessmodellierung	173
4.2.1	Zieldefinition und Prozessschritte	176
4.2.2	Elemente des Modells	177
4.2.2.1	Gasphasenreaktionen und Kohlenstoff-Grenzflächenübergang	177
4.2.2.2	Kohlenstoffdiffusion im Stahl	178
4.2.2.3	Austenit-Ferrit-Phasenumwandlung	179
4.2.2.4	Auflösung und Ausfällung von Carbiden	182
4.2.2.5	Wirkung der Deckschicht	183
4.2.3	Anwendung auf Vorgänge der Rindentkohlung und Gasaufkohlung	186
4.3	Neues Messverfahren für den Diffusionskoeffizienten von Kohlenstoff in Stählen	187
4.3.1	Motivation	187
4.3.2	Übersicht etablierter Messverfahren	194
4.3.3	Versuchsdurchführung der isothermen Pulverpack-Entkohlung	195
4.3.4	Mathematische Auswertung der Kohlenstoff-Tiefenverläufe	198
4.3.4.1	Modifizierte Matano-Profilanalyse	198

4.3.4.2	Erweiterte numerische Profilanalyse und Automatisierung	200
4.3.5	Anwendungspotenzial in der Schadensanalytik und Härtereitechnik	204
4.4	Experimentelle Methoden	205
4.4.1	Röntgenografische Spannungsmessung	205
4.4.2	Metallografie mit Mikroskopie	211
4.4.3	Härteprüfung	213
4.4.4	Chemische Stückanalyse	216
4.5	Entwicklung einer neuen Messtechnik für Kohlenstoff-Tiefenverläufe	218
4.5.1	Übersicht und Bewertung etablierter Messverfahren	218
4.5.2	Grundlagen der Sekundärionenmassenspektrometrie	220
4.5.3	Instrumentierung, Messprinzip und Analysebedingungen	223
4.5.4	Zuverlässigkeit und Messgenauigkeit	227
4.5.5	Anwendungspotenzial in der Werkstoff- und Härtereitechnik	230
4.5.6	Modifizierte Messtechnik	231
4.6	Versuchsdurchführung, Probenpräparation und chemische Analyse des Ausgangsmaterials	232
4.6.1	Randentkohlung von Wälzlagerstahl 100Cr6	232
4.6.1.1	Isotherme Pulverpack-Entkohlung	232
4.6.1.2	Simulation von Austenitisierungsfehlern	233
4.6.2	Gasaufkohlung von Einsatzstahl 17NiCrMo14	235
4.6.2.1	Industrieller Zweistufen-Normaldruckprozess	235
4.6.2.2	Folienmethode	237
4.7	Experimentelle Ergebnisse und Diskussion	238
4.7.1	Anwendungsbeispiel der Kohlenstoffprofil-Messung in der Schadensanalytik	239
4.7.2	Bestimmung des Diffusionskoeffizienten von Kohlenstoff in der Austenitphase von Wälzlagerstahl 100Cr6	241
4.7.2.1	Gefügecharakterisierung und Härteprofile	242
4.7.2.2	Entkohlungsprofile und mathematische Analyse	246
4.7.2.3	Literaturvergleich und Interpolationsformel	252
4.7.3	Kohlenstoff-Tiefenverläufe und Randschichteigenschaften bei der Entkohlung von Wälzlagerstahl 100Cr6 in oxidierender Atmosphäre zur Simulation von Austenitisierungsfehlern	255
4.7.3.1	Offene Glühung an Luft	256
4.7.3.2	Wärmebehandlung in gezielt kontaminiertem Schutzgas	263
4.7.4	Normaldruck-Gasaufkohlung von Einsatzstahl 17NiCrMo14	267
4.7.4.1	Messung des C-Pegels und der Kohlenstoffübergangszahl	268
4.7.4.2	Aufkohlungsprofil und Randschichteigenschaften	270
4.7.5	Diskussion	276
4.8	Mathematische Prozesssimulation und Diskussion	281
4.8.1	Profilanalyse der Gasentkohlungsversuche	281
4.8.1.1	Offene Glühung an Luft	283
4.8.1.2	Wärmebehandlung in gezielt kontaminiertem Schutzgas	288
4.8.2	Computermodell der Randentkohlung mit Carbidauflösung	293
4.8.2.1	Mathematische Modellierung	294
4.8.2.2	Homogene Carbidgeverteilung	296
4.8.2.3	Inhomogene Carbidgeverteilung	300
4.8.2.4	Analyse des isothermen Pulverpack-Entkohlungsversuchs	302
4.8.3	Simulation von Aufkohlungsprozessen	304

4.8.3.1	Profilvorhersage für die industrielle Praxis	305
4.8.3.2	Analyse von Diffusionsdaten	315
4.8.3.3	Profilanalyse des Gasaufkohlungsversuchs	319
4.8.4	Weiteres Optimierungspotenzial	326
4.9	Integrale Prozessoptimierung des industriellen Einsatzhärtens niedriglegierter Stähle	328

## **5 Innere Oxidation und Sauerstoffsegregation an Metall/Oxid-Phasengrenzen 329**

5.1	Grundlagen, Literaturübersicht und Stand der Forschung	329
5.1.1	Innere Oxidation	329
5.1.1.1	Ableitung und Diskussion der Wagner-Theorie	332
5.1.1.2	Charakterisierung der Oxidteilchen	341
5.1.1.3	Innere Oxidfilme und Übergang zu äußerer Oxidation	345
5.1.2	Sauerstoffsegregation an Metall-Oxid-Phasengrenzen	347
5.1.2.1	Kirchheim-Modell	348
5.1.2.2	Segregationsgleichgewichte	353
5.1.2.3	Segregationskinetik	359
5.2	Innere Oxidation	363
5.2.1	Messmethode der Permeationskonstante von Sauerstoff im Grundmetall	363
5.2.2	Entkohlungsgesteuerte innere Oxidation von Wälzlagerstahl 100Cr6 am Zersetzungsdruk von Wüstit	369
5.2.2.1	Versuchsdurchführung und Probenpräparation	370
5.2.2.2	Untersuchungsverfahren	370
5.2.2.3	Versuchsergebnisse	371
5.2.2.4	Diskussion	383
5.2.3	Computermodell der inneren Oxidation	384
5.2.3.1	Motivation und Zieldefinition	385
5.2.3.2	Modellbildung	385
5.2.3.3	Verifizierung	389
5.2.3.4	Erweiterte Prozesssimulation	392
5.2.3.5	Neues Messverfahren für Sauerstoffdiffusionskoeffizienten	397
5.2.3.6	Diskussion und weiteres Potenzial	402
5.3	Sauerstoffsegregation an Metall-Oxid-Phasengrenzen	404
5.3.1	Untersuchungsmethoden in der Übersicht	404
5.3.2	Nanochemischer Nachweis der Sauerstoffsegregation im System Ag-MgO	407
5.3.2.1	Volumetrische Isothermenmessung	408
5.3.2.2	Versuchsdurchführung, Probenpräparation und chemische Analyse des Ausgangsmaterials	412
5.3.2.3	Untersuchungsverfahren	414
5.3.2.4	Elektronenenergieverlustspektroskopie in Ionisationskantennähe	414
5.3.2.5	Ergebnisse	416
5.3.2.6	Diskussion	421
5.3.3	Kinetik-Modell der Sauerstoffsegregation für Systeme Pd-Oxid	423

5.3.3.1	Diffusionsgesteuerter Reaktionsablauf	424
5.3.3.2	Eingabedaten und Modellbildung	428
5.3.3.3	Ergebnisse und Vergleich mit dem Experiment	430
5.3.3.4	Diskussion und weiteres Potenzial	435
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>437</b>
6.1	Mikroskopische Objektverteilungen	438
6.2	Randentkohlung und Gasaufkohlung niedriglegierter Stähle	438
6.2.1	Randentkohlung	439
6.2.2	Gasaufkohlung	441
6.3	Innere Oxidation	442
6.4	Sauerstoffsegregation an Metall-Oxid-Phasengrenzen	444
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>446</b>
	<b>Sachregister</b>	<b>474</b>
	<b>Glossar: Abkürzungen und Bezeichnungen</b>	<b>481</b>
	<b>Der Autor</b>	<b>494</b>