

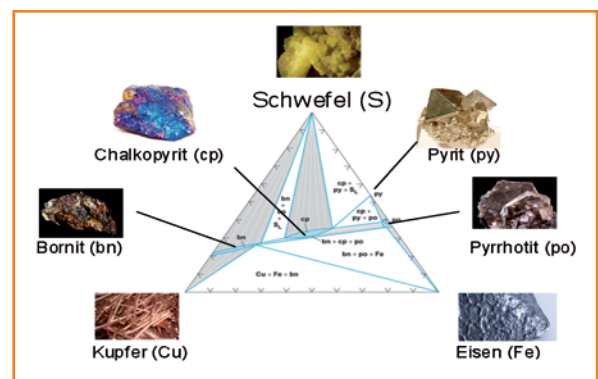


## BePhaSys

### Entwicklung eines Verfahrens zur Berechnung von thermochemischen Gleichgewichten

Chemische Prozesse sind die Basis allen Lebens. Sie sind zugleich die Grundlage vieler technischer Verfahren und dabei entstehender Produkte. Die optimale Beherrschung der chemischen Reaktionsabläufe im Labor - etwa für neue Legierungen und Funktionsschichten aller Art - ist die Voraussetzung für industrielle Verfahren, die Ressourcen effizient nutzen. Alle in der Natur ablaufenden chemischen Vorgänge streben einen Gleichgewichtszustand an, in dem keine weiteren Reaktionen mehr stattfinden. Mithilfe thermochemischer Methoden lassen sich Vorhersagen treffen über mögliche Reaktionen zwischen Stoffen in einem chemischen System und den dabei entstehenden Produkten (fest, flüssig, gasförmig oder auch Mischungen solcher Phasen). Die rechnergestützte Thermochemie beschäftigt sich mit der Entwicklung von Datenbanken und Programmen zur Simulation solcher Gleichgewichte zwischen einer Vielzahl von chemischen Komponenten in unterschiedlichen Phasen („multikomponentige Vielphasensysteme“), beispielsweise für die Erstellung von Phasendiagrammen.

Für Systeme mit wenigen Komponenten ist eine Beschreibung der Vorgänge mit relativ geringem Rechneraufwand möglich. Bei der Beschreibung von praxisrelevanten Vielphasensystemen mit zahlreichen Komponenten stoßen die bisher existierenden mathematischen Werkzeuge jedoch sehr schnell an ihre Grenzen. Innerhalb des Projektes BePhaSys werden daher mathematische Verknüpfungen und Software für die Berechnung der beschriebenen thermochemischen Basisaufgaben entwickelt. Die neuen Verfahren sollen in der Lage sein, Phasengleichgewichte in beliebigen Systemen ohne Einschränkung der Komponenten- und Phasenzahl deutlich schneller als bisher zu berechnen. Auch



Phasendiagramm

komplexe Sonderfälle sollen erstmals zuverlässig abgebildet werden. Die gegenüber dem Stand der Technik angestrebten deutlich robusteren und schnelleren Berechnungen können für viele Anwendungsbereiche eingesetzt werden. Nutzer dieser Entwicklungen sind Unternehmen und Forschungseinrichtungen, die neue, zukunfts-trächtige Prozesse und Werkstoffe erforschen. Das Anwenderspektrum reicht von der Stahl- und Aluminiumindustrie bis hin zur Elektronik und Energietechnik, wobei Aspekte nachhaltiger, ressourcen- und umweltschonender Prozesse eine wichtige Rolle spielen.

#### Kontakt:

GTT Gesellschaft für Technische Thermochemie  
und -physik mbH, Herzogenrath  
Prof. Dr. Klaus Hack  
Tel.: 02407 / 59533,  
E-Mail: KH@gtt-technologies.de

#### Partner:

Fraunhofer-Institut für Algorithmen und  
Wissenschaftliches Rechnen (SCAI), Sankt Augustin