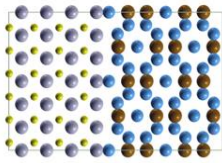
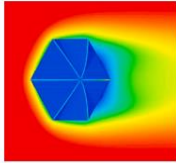

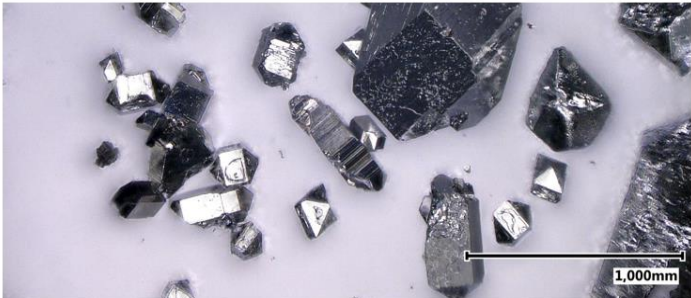


**IC-MPPE / Integrated Computational Materials Process and Product Engineering**

Programm: COMET – Competence Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET-Zentrum (K2)

Projekttyp: GalvaSMART, 2017-2021, multi-firm

Atomic scale DFT modelling	material growth model	CFD process model		
				
nm	$\mu\text{m}$	mm	m	Length scale
				

# INTEGRIERTE MATERIAL- UND PROZESS-SIMULATION VON ZINKBADPHÄNOMENEN BEIM FEUERVERZINKEN

## MULTI-SKALEN MATERIAL- UND PROZESSSIMULATION VON UNERWÜNSCHTER PARTIKELNENTSTEHUNG IM ZINKBAD UND AUF DEN BADEINBAUTEN

Korrosion verursacht jährliche Kosten von bis zu 3,4% des globalen Bruttoinlandsprodukts (BIP). Ein entsprechender Korrosionsschutz reduziert ökonomische Kosten und schützt gleichzeitig die Umwelt. Aus diesem Grund sind viele Stahlprodukte mittels Zinkbeschichtungen gegen Korrosion geschützt. Ein wichtiges Beispiel dafür sind Stahlbänder, die für die Außenhaut von Automobilen verwendet werden.

Die kontinuierliche Beschichtung von Stahlbändern in Feuerverzinkungsbädern ist die weltweit am häufigsten verwendete Technologie zum Korrosionsschutz von Stahlbändern. Obwohl diese Technologie weit verbreitet und schon lange im Einsatz ist, gibt es für den Feuerverzinkungsprozess immer wieder neue Anforderungen hinsichtlich Beschichtungsqualität

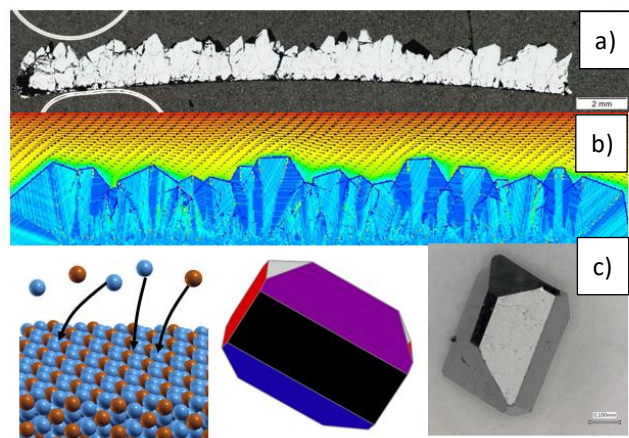


Fig. 1: Vergleich zwischen der realen und der virtuellen Welt: (a) Reale Schlackepartikel, gewachsen auf einer Zinkbadrolle, (b) Simulation mehrerer Schlackepartikel, (c) atomistische Modellierung zur Bestimmung der bevorzugten Form und Vergleich mit realen Schlackepartikeln, die in der Schmelze gewachsen sind.

## SUCCESS STORY

und Oberflächenbeschaffenheit. Eine besondere Herausforderung sind unerwünschte chemische Reaktionen im Zinkbad und am Badequipment, die intermetallische Schlackepartikel bilden (siehe Fig.1). Diese Partikel können Oberflächendefekte auf dem Stahlband erzeugen und damit zu Qualitätseinbußen führen und teure Wartungszyklen in der Produktionsanlage notwendig machen.

Um diese Phänomene besser zu verstehen und praktikable Lösungen für die Industrie zu entwickeln, wurde ein Multiskalen Material- und Prozessmodell für das Zinkbad und die Entstehung von Schlackepartikeln entwickelt. Ein wichtiger Aspekt der Analyse ist die thermochemische Strömungssimulation des Zinkbadprozesses. Diese enthält ein virtuelles Zinkbadmodell, in dem reale Prozessparameter aus dem Betrieb in Strömungs-, Temperatur- und Konzentrationsfelder übersetzt werden. Diese Information ist mit eigens entwickelten Thermodynamik und Reaktionskinetikmodellen gekoppelt, um die aktuellen, lokalen Zustände im Zinkbad für den Betreiber sichtbar zu machen (siehe Fig. 2).

Dieses virtuelle Zinkbad Prozessmodell ist mit einem mikroskaligen Kristallwachstumsmodell gekoppelt, in welchem der Stoffaustausch zwischen dem flüssigen Zink und der Kristalloberfläche berechnet wird und das facettierte Wachstum der Kristalle simuliert werden kann. Um die benötigten Modellparameter zu bestimmen wurden Density Functional Theory (DFT)

Modelle entwickelt, mit welchen die Oberflächenenergien und die Partikelform auf atomarer Ebene ermittelt werden können (siehe Fig. 1).

### Wirkung und Effekte

Die Ergebnisse dieses Multiskalen Material- und Prozessmodells erlauben es, für die Industriepartnern optimierte Prozesszustände abzuleiten, um die Wartungskosten zu reduzieren und die Produktqualität weiter zu erhöhen. Dies führt direkt zu Umsatzsteigerungen für die Industriepartner, weil Premiumqualität um bis zu 25% teurer verkauft werden kann, im Vergleich zu defektbehafteten Oberflächen. Aktuelle Schätzungen erwarten eine jährliche Gewinnspanne von über 100 Millionen Dollar weltweit.

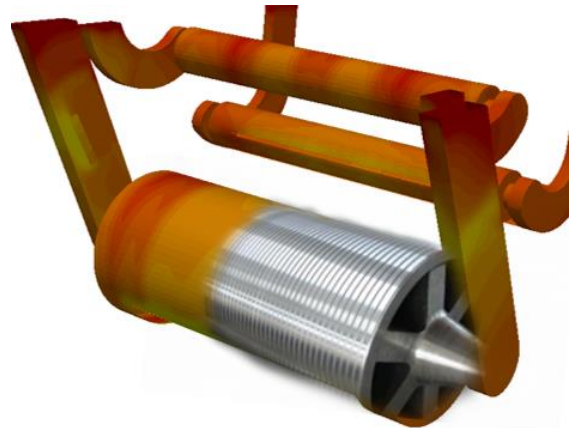


Fig. 2: Bildmontage von realen und Simulationsbildern des Badequipments: Aufwachsrate der Schlackepartikel auf der Badrolle berechnet mit dem virtuellen Prozessmodell unter realen Betriebsbedingungen. Rot kennzeichnete Bereiche weisen hohe und gelbe Bereiche niedrige Wachstumsraten auf.

### Projektkoordination (Story)

Dr. Georg Reiss  
 Key Researcher  
 Department Simulation  
 T +43 (0) 3842 45922-44  
 georg.reiss@mcl.at

### Materials Center Leoben Forschung GmbH

**Koordinator: COMET K2 Center IC-MPPE**  
 Roseggerstrasse 12  
 8700 Leoben  
 T +43 (0) 3842 45922-0  
 mclburo@mcl.at / www.mcl.at

### Projektpartner

- Voestalpine Stahl Linz, Austria
- International Zinc Association, USA
- Montanuniversität Leoben, Chair of Thermoprocess Technology, Austria
- Montanuniversität Leoben, Chair of Simulation and Modelling of Metallurgical Processes, Austria

This success story was provided by the consortium leader/centre management and by the mentioned project partners for the purpose of being published on the FFG website. Further information on COMET: [www.ffg.at/comet](http://www.ffg.at/comet)