

Calculs thermochimiques d'équilibres métaux liquide / sels / gaz lors du traitement d'alliages d'aluminium à l'aide du logiciel FactSage

Patrice Chartrand, Ph.D.

Professeur agrégé

CRCT - Centre de recherche en calcul thermochimique

Département de génie chimique



ÉCOLE
POLYTECHNIQUE
M O N T R É A L

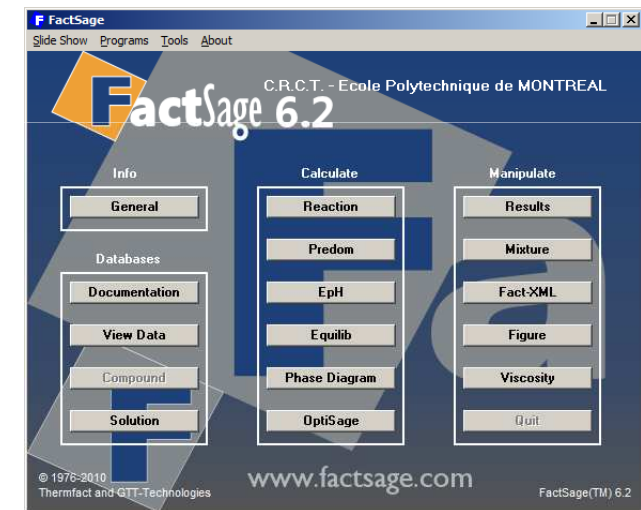
Journées annuelles de la SF2M 2011 – École des Mines de Nancy

Plan

- FactSage ?
- Problématique
- Calculs d'équilibres chimiques
- Modélisation thermodynamique:
 - Approche CALPHAD
- Études de cas

Qu'est-ce que FactSage ?

- **Logiciel expert thermochimique** pour l'étude des **réactions chimiques** et des **équilibres de phase**
- Développement conjoint (1999+):
 - École Polytechnique (Montréal, Canada);
 - GTT-Technologies (Aachen, Allemagne);
 - Début en 1977 à Poly; 1982 à GTT;
- Utilisé à travers le monde :
 - par plus de 250 compagnies :
 - Alcoa (ATC - Pittsburgh)
 - Rio Tinto Alcan (Arvida, Voreppe)
 - Hydro Aluminium (Porsgrunn, Årdal, Sundalsora, ...)
 - Constellium (Voreppe)
 - par plus de 250 universités



Utilité de FactSage

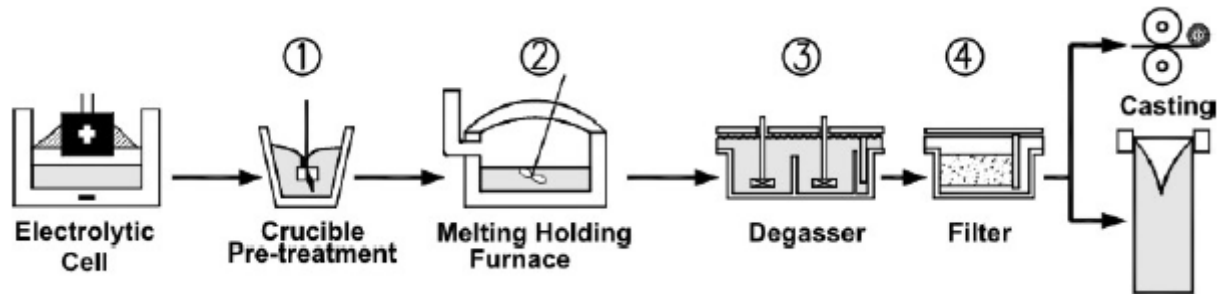
- Les problèmes industriels impliquant des réactions chimiques sont souvent très complexes;
- Pour les comprendre et les simuler, la **thermodynamique** et la **cinétique** sont toutes deux nécessaires:
 - *Méthodes expérimentales*
 - *Modélisation*
- **FactSage** est un outil de renommée mondiale dédié aux aspects de **modélisation thermodynamique**:
 - Il permet aussi d'introduire des notions très simples de **cinétique**.

Utilité de FactSage

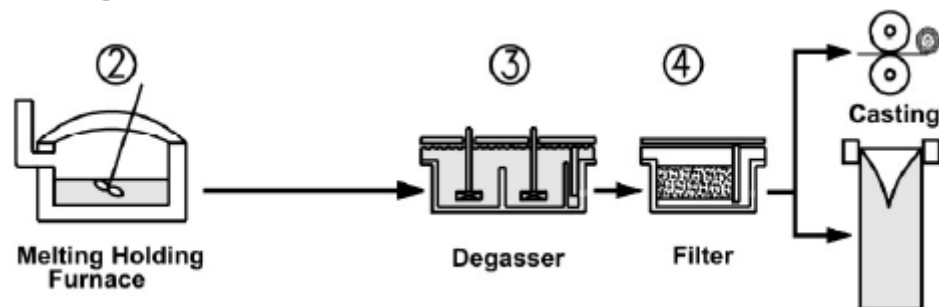
- Entre **2004 et 2011+**, des compagnies du domaine de l'aluminium ont financé avec le gouvernement canadien le projet de recherche « *Un laboratoire virtuel pour l'industrie de l'aluminium (VLAB)* »;
 - Alcan / Rio Tinto Alcan (Voreppe, Arvida, ...)
 - Alcoa (ATC-Pittsburgh, Usine Deschambeault, ...)
 - Constellium (Voreppe)
 - Hydro Aluminium (Porsgrunn, Ardal, Sunndalsora, Karmoy, ...)
 - Pechiney (Voreppe, ...)
- Des **modèles thermodynamiques** et **physico-chimiques** ont été développés pour la métallurgie primaire et secondaire de l'aluminium;
- Ces modèles sont intégrés dans **FactSage**, et dans **ChemApp.dll** pour les applications *in-house*.

Aluminium

- Filière du métal primaire:

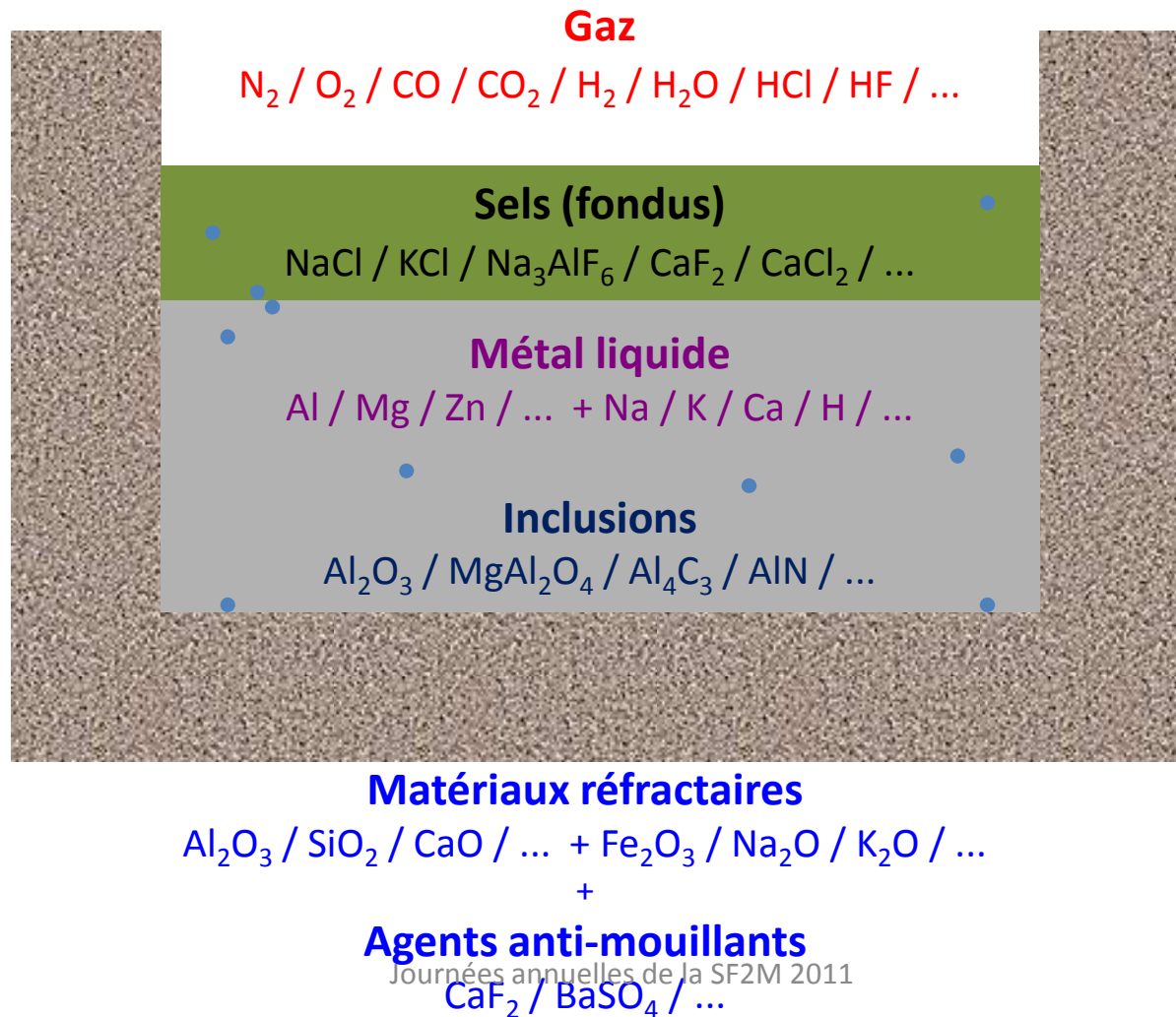


- Filière du recyclage:



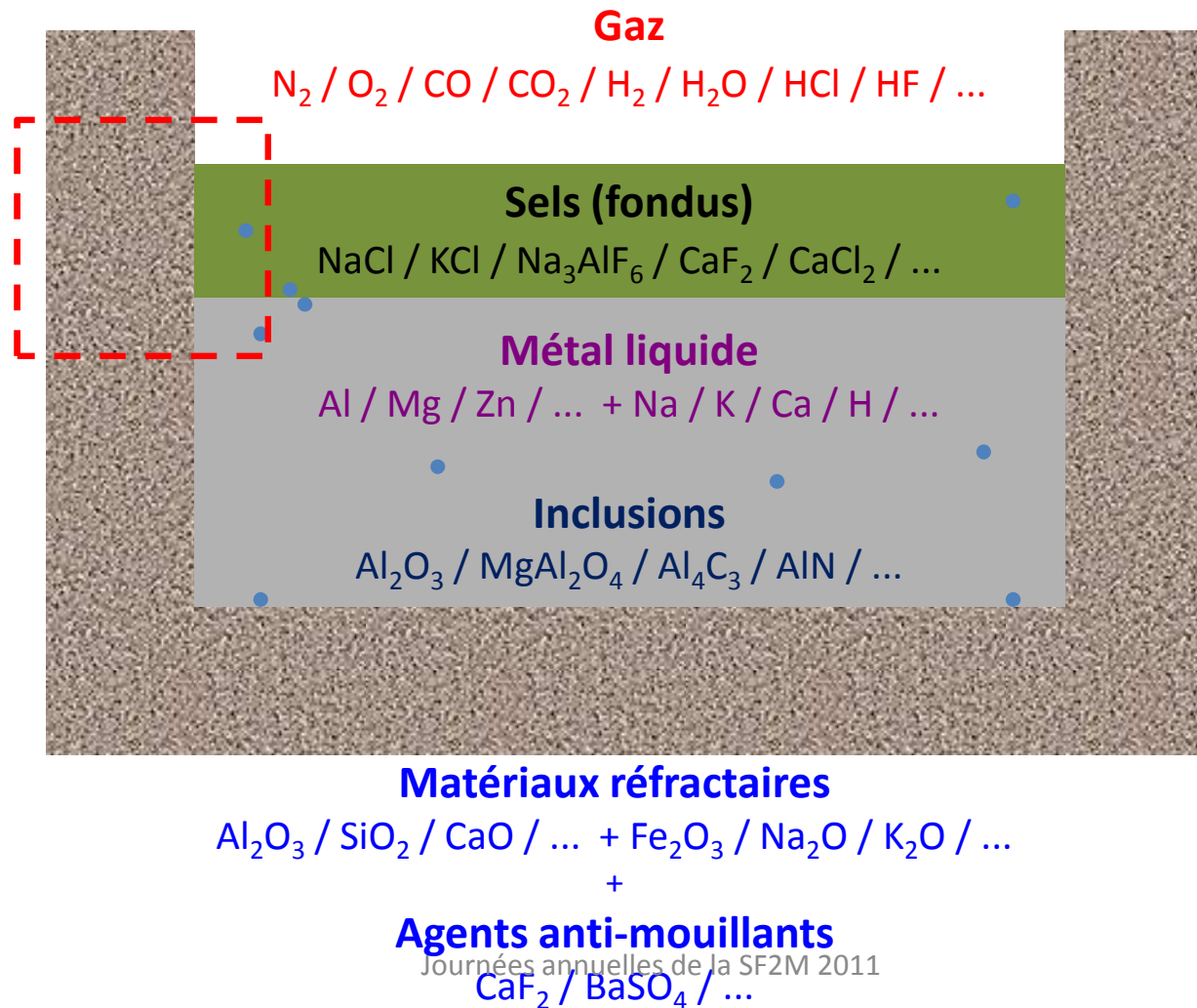
Four (prototype)

- Schéma



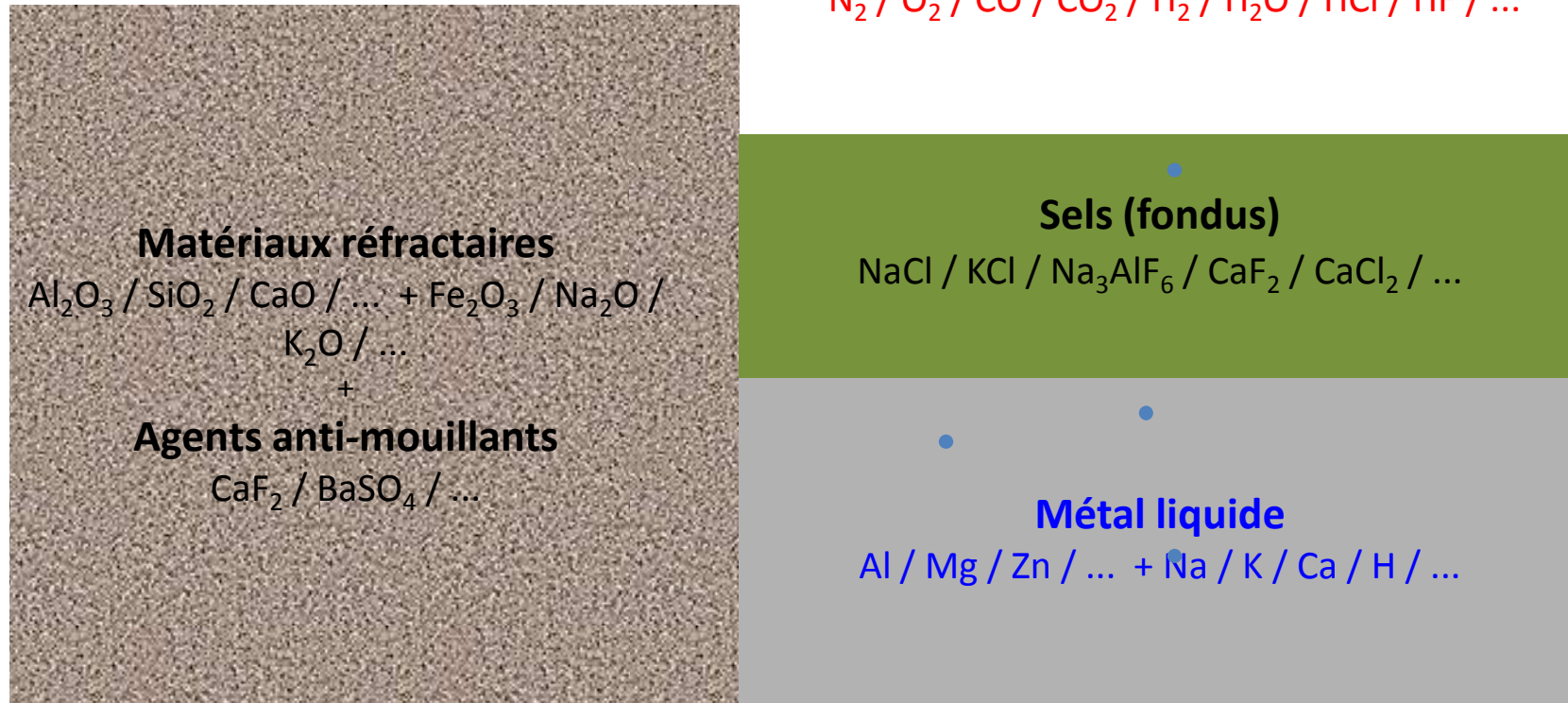
Four (prototype)

- Schéma



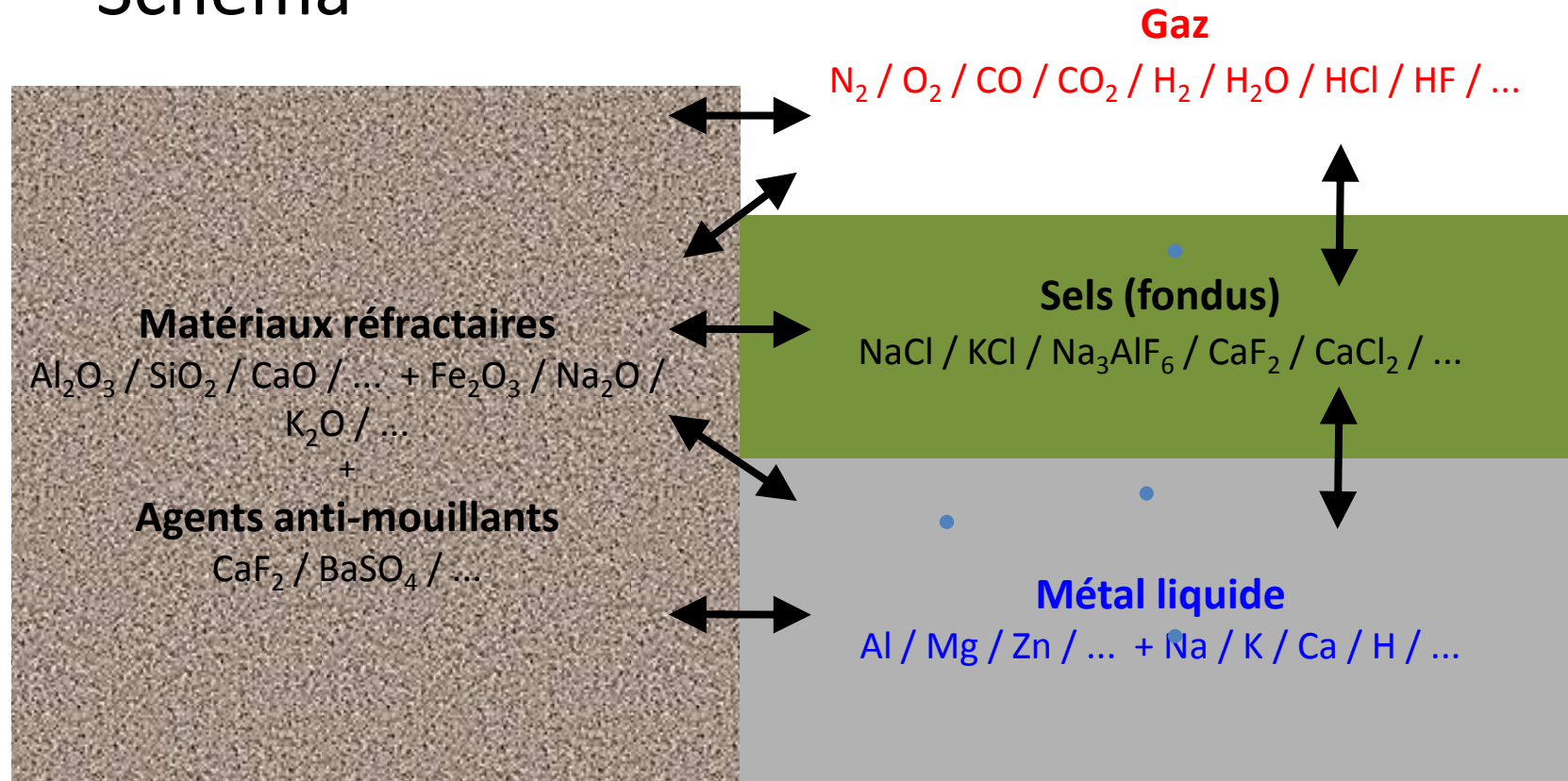
Four (prototype)

- Schéma



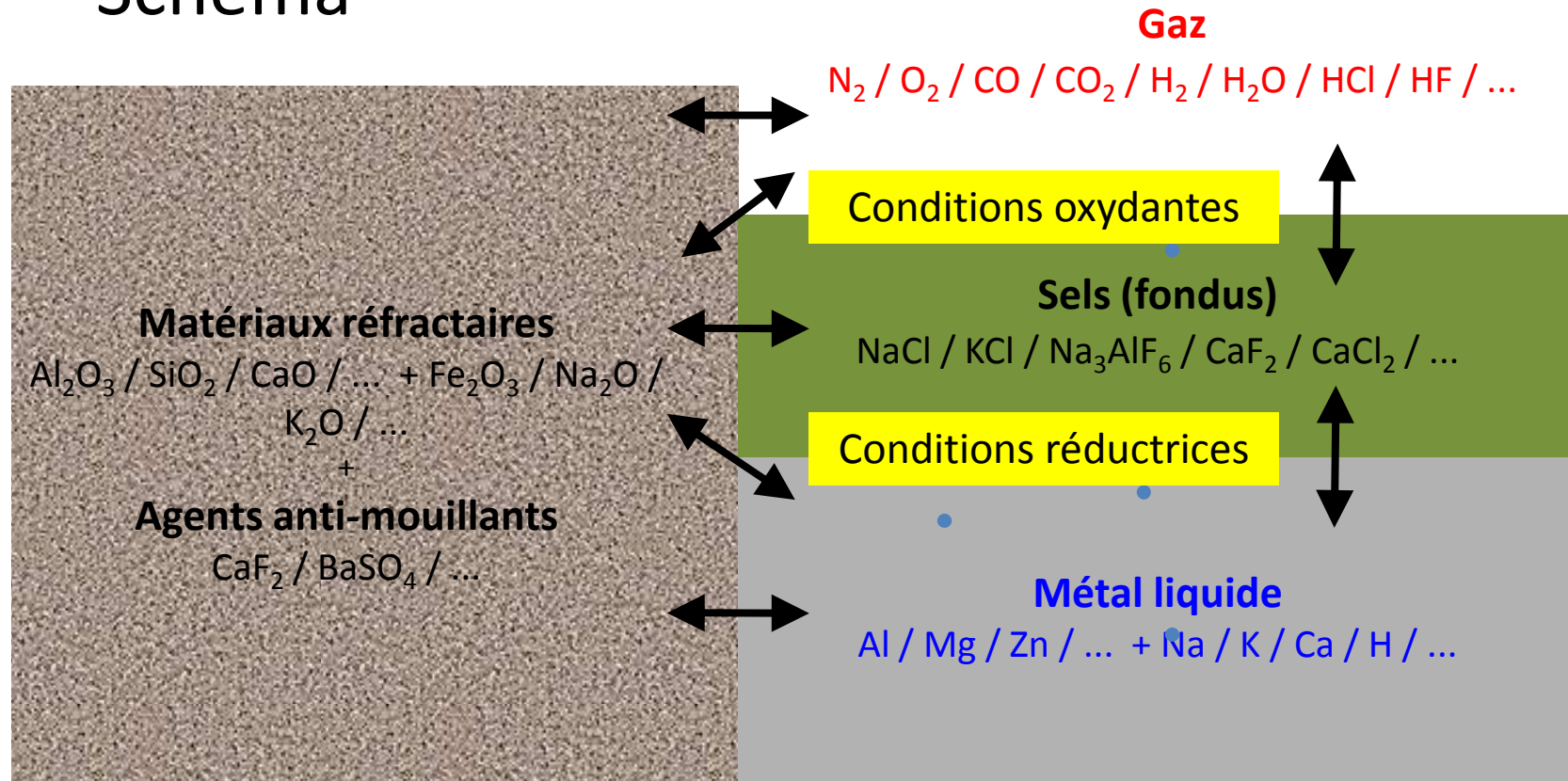
Four (prototype)

- Schéma



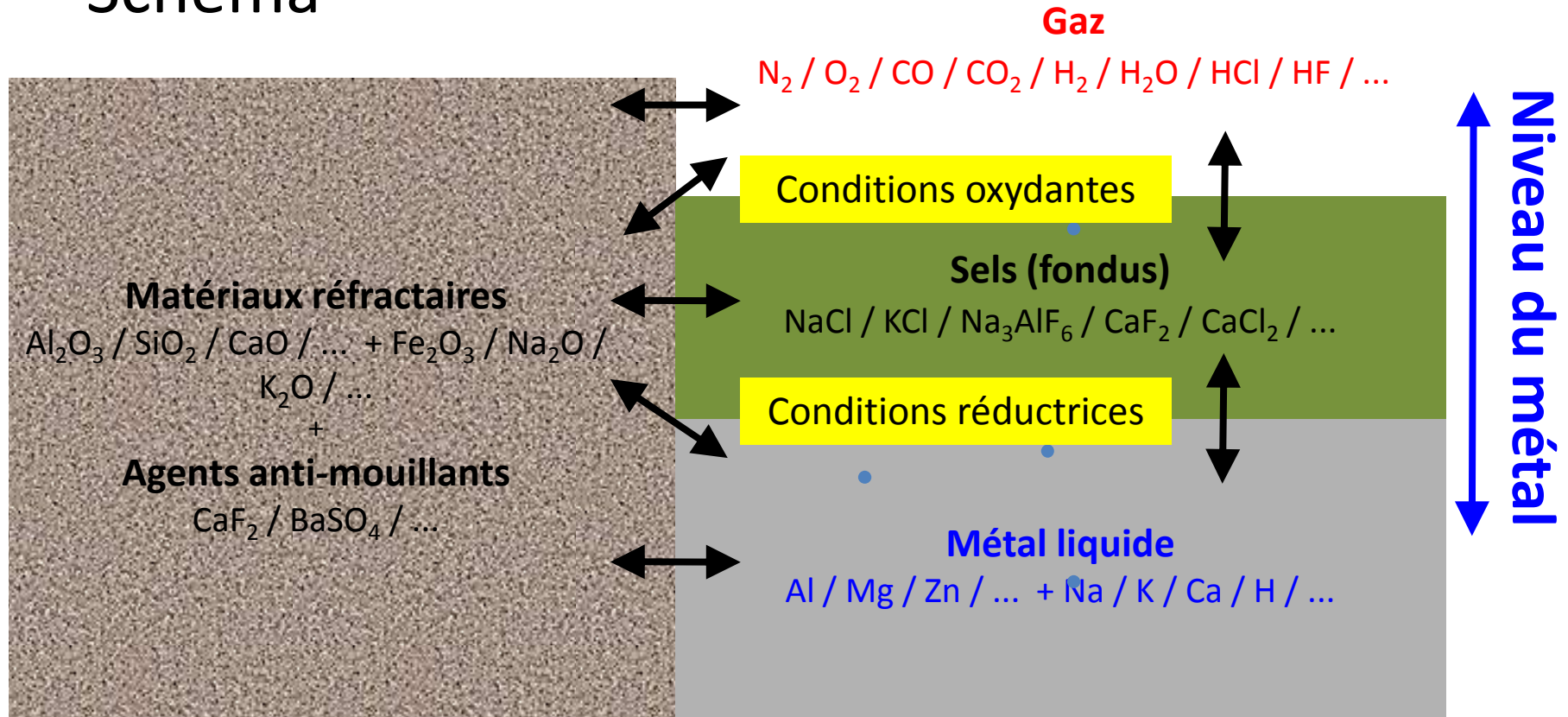
Four (prototype)

- Schéma



Four (prototype)

- Schéma



Calculs d'équilibres chimiques

- L'équilibre chimique peut être calculé à l'aide de **fonctions d'énergie de Gibbs**;
 - **En minimisant l'énergie de Gibbs globale du système:**

$$G_{system} = \sum_{phases} n_{phase} g_{phase}$$

$$g_{phase} = f(T, P, n_{Al}^{phase}, n_{Mg}^{phase}, n_{Na}^{phase}, n_{Cl}^{phase}, n_{O}^{phase}, \dots)$$

$$\min(G_{system})_{T, P, n_{Al}, n_{Mg}, n_{Na}, n_{Cl}, n_{O}, \dots}$$

- Propriétés thermodynamiques → dérivées de l'énergie de Gibbs:
 - $H, S, C_p, V, \mu_i, a_i, f.e.m., P_i,$ etc...
- Pour chaque phase (pure ou solution), une fonction de l'énergie de Gibbs ($T, P, n_{Al}, n_X, n_Y, \dots$) doit être déterminée.

Calculs d'équilibres chimiques

- La technique **CALPHAD** (*CAL*culat*ion of PHA*se *D*iagrams) est utilisée pour construire les fonctions d'énergie de Gibbs:
 - Technique rapide pour les systèmes multicomposants;
 - Technique utilisée par de nombreux laboratoires depuis le milieu des années 1970.
- Plusieurs logiciels ont été développés pour le calcul des équilibres de phase en utilisant la technique **CALPHAD**.
 - **FactSage** (Ecole Polytechnique Montreal + GTT-Technologies Germany)
 - ThermoCalc (KTH Stockholm)
 - Pandat (U. Wisconsin)
 - MTDData (NPL England)

Calculs d'équilibres chimiques

- La technique **CALPHAD** (*CAL*culat*ion* of *PH*ase *D*iagrams):
 - Pour chaque phase, une fonction de l'énergie de Gibbs doit être déterminée :
 - Choix du modèle d'énergie de Gibbs (fonction issue de la théorie);
 - Contribution enthalpique (intensité des liaisons, magnétisme, etc.);
 - Contribution entropique (configuration atomique ex. Boltzmann);
 - Des paramètres du modèle doivent être déterminés pour chaque constituant de la solution (*unaire*) et chaque interaction (*binaire*, *ternaire*).

Technique CALPHAD

Théorie

$$G = f(T, P, n_i, n_j, \dots, n_k)$$
$$G = H - TS$$
$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

Équilibre de phases, FEM,
Pressions partielles

Calorimétrie, DSC

$$H = \left(\frac{\partial \left(\frac{G}{T} \right)}{\partial \left(\frac{1}{T} \right)} \right)_{P, n_i, n_j, \dots, n_k}$$

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_{P, n_i, n_j, \dots, n_k}$$

$$\mu_i = \left(\frac{\partial G}{\partial n_i} \right)_{T, P, n_j, \dots, n_k}$$
$$\mu_i - \mu_i^o = RT \ln a_i = -nFE$$
$$a_i = \frac{P_i}{P^o}$$
$$\mu_i^\alpha = \mu_i^\beta, \mu_j^\alpha = \mu_j^\beta; \dots; \mu_k^\alpha = \mu_k^\beta$$

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{P, n_i, n_j, \dots, n_k}$$

« Prop. physiques »

$$V = \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_{T, n_i, n_j, \dots, n_k}$$

Construire une base thermodynamique

- Pour chaque phase, une fonction de l'énergie de Gibbs doit être déterminée :
 - Substances pures (ou un constituant d'une solution) :

$$G_T = H_T - TS_T$$

$$H_T = \boxed{\Delta H_{298.15K}} + \int_{298.15K}^T C_p dT$$

$$S_T = \boxed{S_{298.15K}} + \int_{298.15K}^T \frac{C_p}{T} dT$$

$$C_p = \boxed{a} + \boxed{bT} + \boxed{cT^{-2}} + \boxed{dT^2} + \dots$$

Paramètres sauvés dans la base de données

- Aussi:
 - Magnétisme
 - Pressure

Construire une base thermodynamique

- Pour chaque phase, une fonction de l'énergie de Gibbs doit être déterminée :

- **Solution** :

- G dépend de:
 - Température (et pression)
 - Composition
 - Structure cristalline
 - Ordre des atomes, à courte et longue distance


$$G_{T,X_i} = G_{T,X_i}^{mec} + G_{T,X_i}^{config} + G_{T,X_i}^{exces}$$

Construire une base thermodynamique

- Pour chaque phase, une fonction de l'énergie de Gibbs doit être déterminée :

- **Solution** :

- G dépend de:
 - Température (et pression)
 - Composition
 - Structure cristalline
 - Ordre des atomes, à courte et longue distance

$$G_{T,X_i} = G_{T,X_i}^{mec} + G_{T,X_i}^{config} + G_{T,X_i}^{exces}$$


Mélange “mécanique” des constituents de la solution

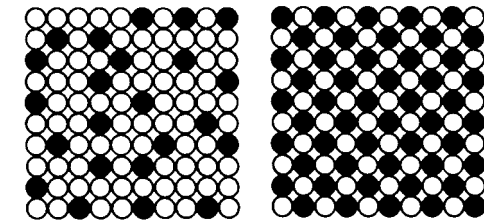
Construire une base thermodynamique

- Pour chaque phase, une fonction de l'énergie de Gibbs doit être déterminée :

– Solution :

- G dépend de:
 - Température (et pression)
 - Composition
 - Structure cristalline
 - Ordre des atomes, à courte et longue distance

$$G_{T,X_i} = G_{T,X_i}^{mec} + G_{T,X_i}^{config} + G_{T,X_i}^{exces}$$



**Contribution de la configuration atomique à l'entropie
(structure cristalline, ordonnancement, etc...)**

Construire une base thermodynamique

- Pour chaque phase, une fonction de l'énergie de Gibbs doit être déterminée :

- **Solution** :

- G dépend de:
 - Température (et pression)
 - Composition
 - Structure cristalline
 - Ordre des atomes, à courte et longue distance

$$G_{T,X_i} = G_{T,X_i}^{mec} + G_{T,X_i}^{config} + G_{T,X_i}^{exces}$$



**Changements dûs au mélange des constituants
(intensité des liaisons, modes vibrationnels, rotationnels, etc...)
= $f(T, x_i)$**

Construire une base thermodynamique

- Une fois le modèle d'énergie de Gibbs choisit pour une phase, il faut en déterminer les paramètres:
 - Avec un seul ensemble de paramètres (peu nombreux), il faut **simultanément** reproduire:
 - Les **propriétés thermodynamiques de la phase (homogènes)** :
 - Enthalpie vs T (C_p , fusion & transitions) et X_i (solution)
 - Potentiels chimiques, activités, *f.e.m.*
 - Masses volumiques
 - Les **équilibres de phase (hétérogènes)** :
 - Liquidus, solidus, solvus, eutectiques, monotectiques, etc..
 - L-V, S-V : pressions partielles, tensions de vapeurs
 - L-L : immiscibilités

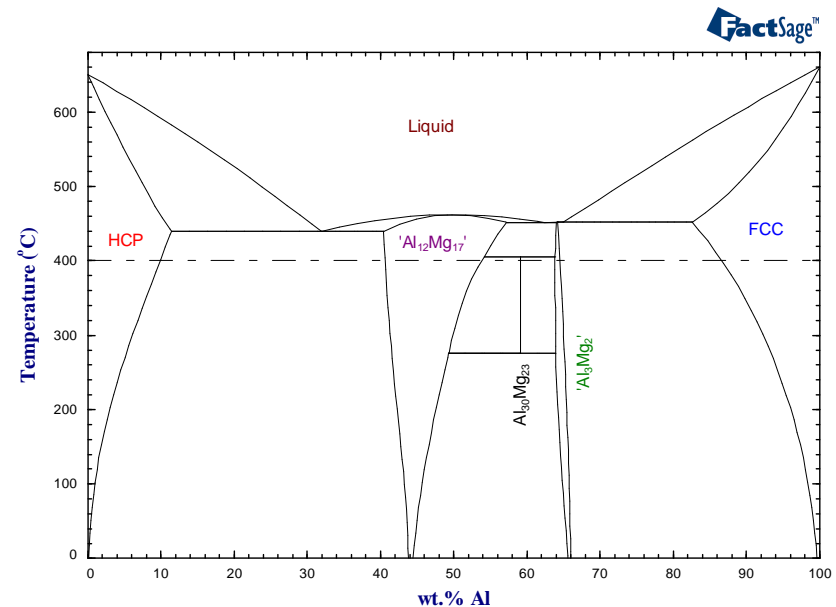
Ce processus est appelé “optimisation”

Construire une base thermodynamique

- Exemple : Al-Mg

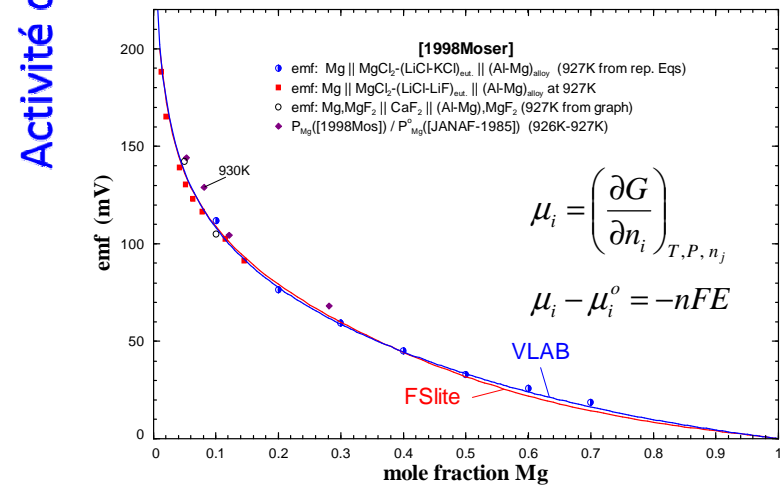
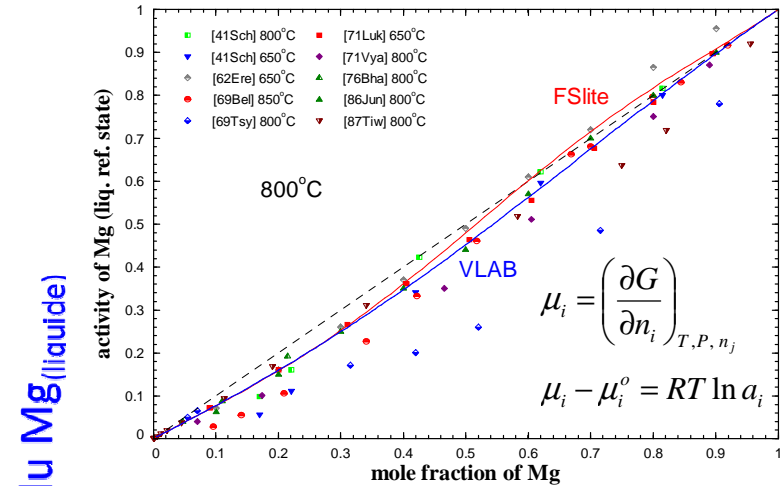
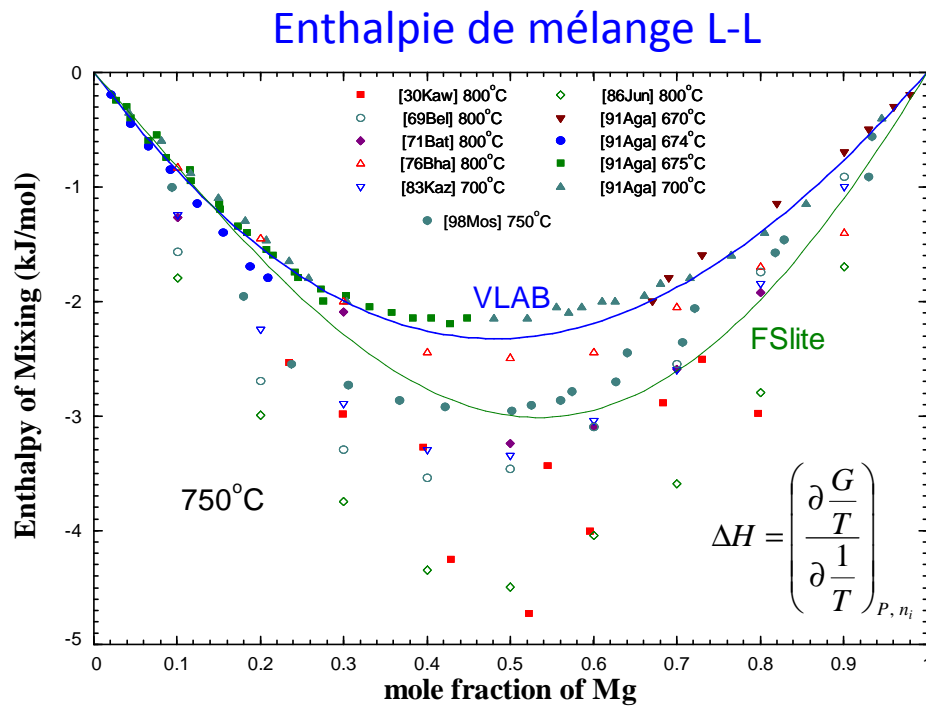
- Identification des phases stables:

- Gaz solution moléculaire (Al, Mg, Al₂, Mg₂)
 - Liquide solution atomique désordonnée
 - Mg – HCP solution atomique désordonnée
 - Al – FCC solution atomique désordonnée
 - Al₃₀Mg₂₃ substance pure
 - β-Al₃Mg₂ solution ordonnée
 - γ-Al₁₂Mg₁₇ solution ordonnée



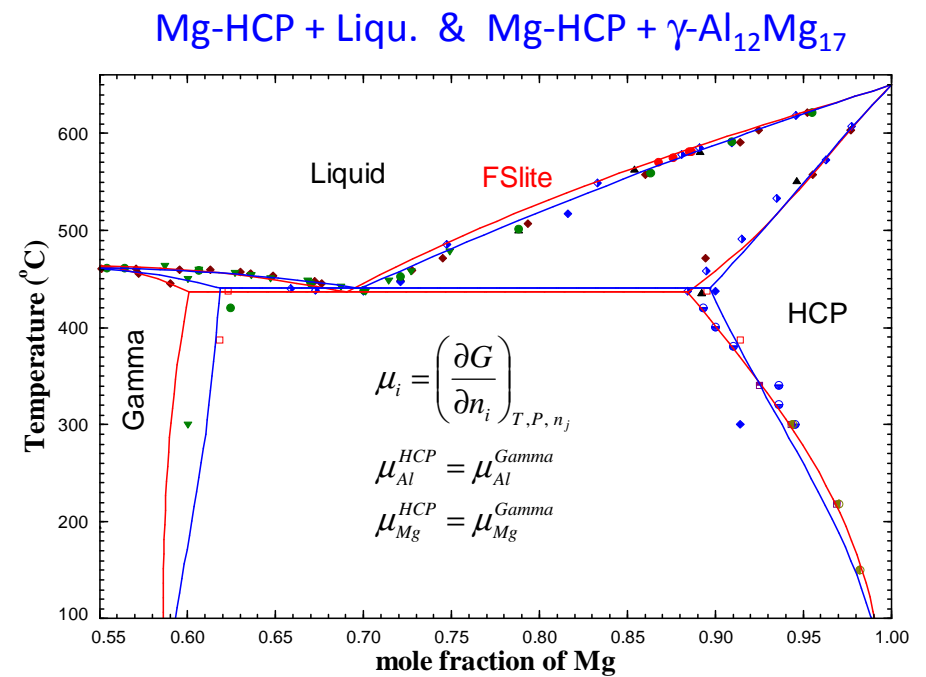
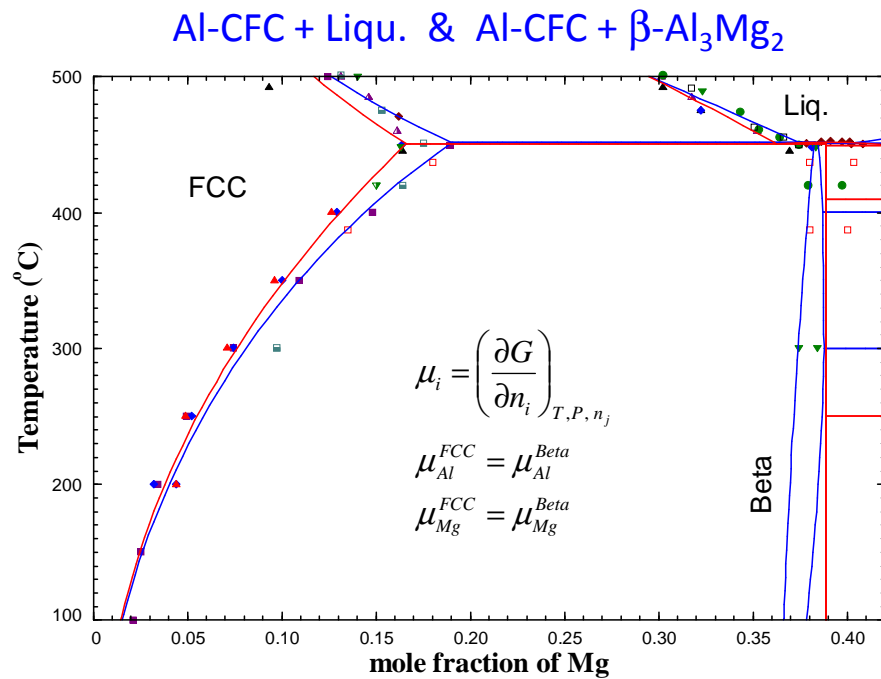
Construire une base thermodynamique

- Exemple: Al-Mg
 - Données du liquide



Construire une base thermodynamique

- Exemple: Al-Mg
 - Équilibres de phases

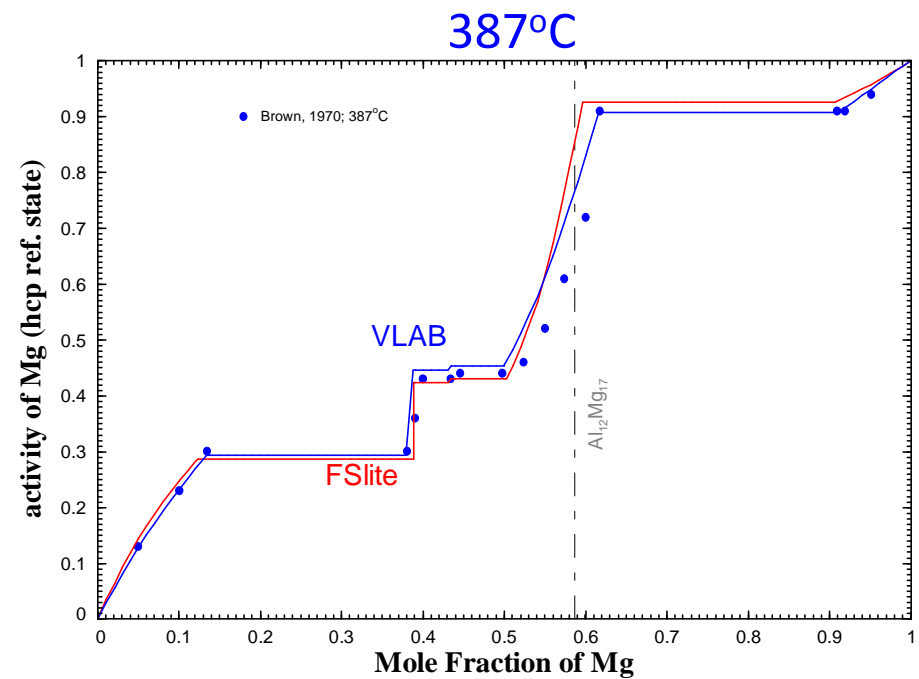
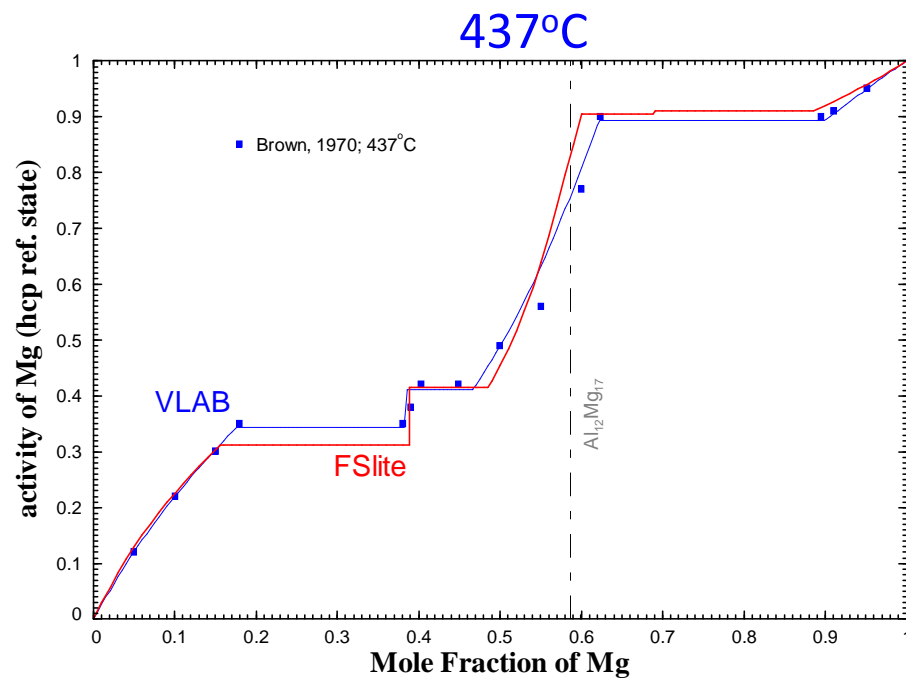


Construire une base thermodynamique

- Exemple: Al-Mg
 - Activité du $\text{Mg}_{(\text{hcp})}$

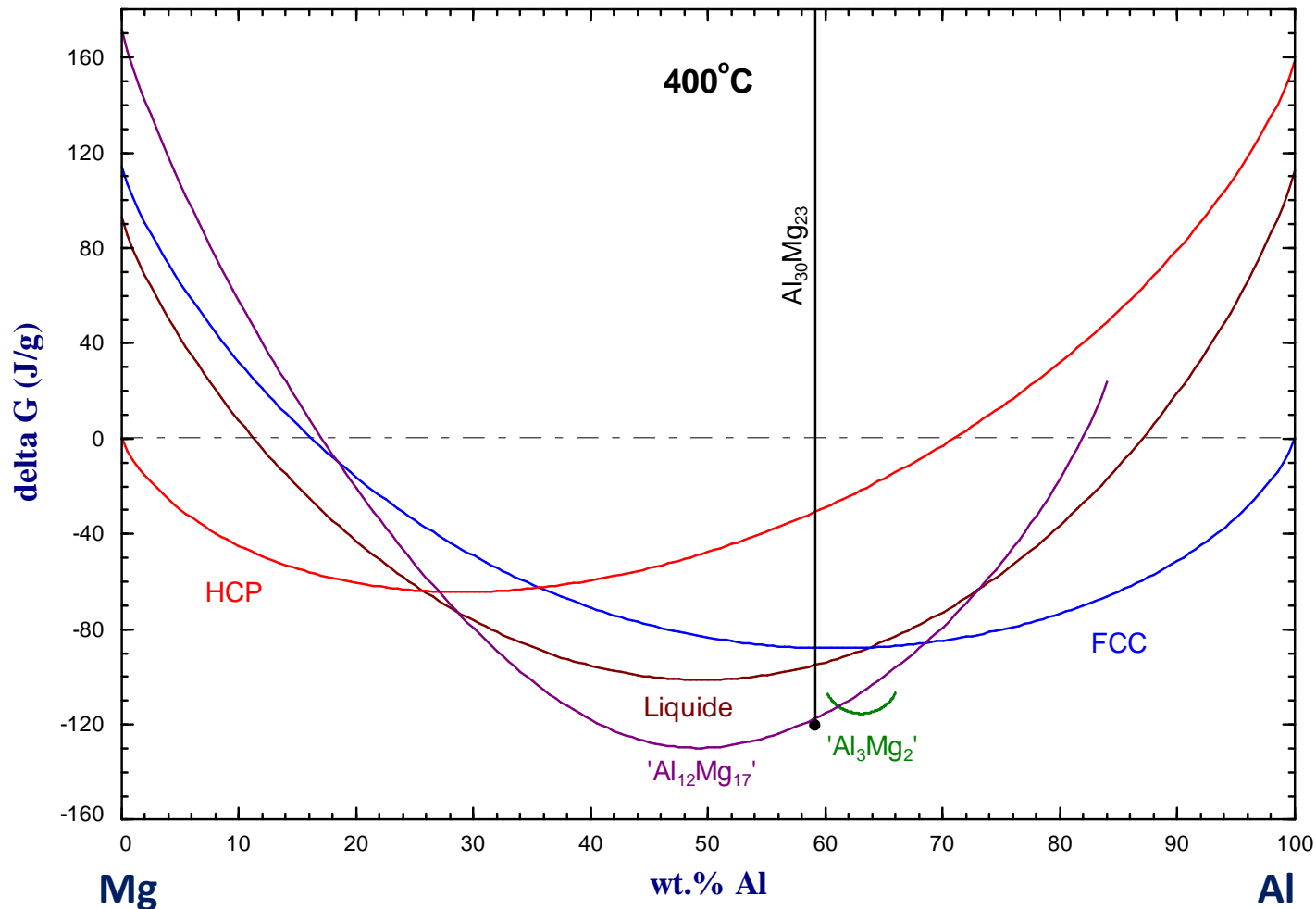
$$\mu_{\text{Mg}} = \left(\frac{\partial G}{\partial n_{\text{Mg}}} \right)_{T,P,n_{\text{Al}}}$$

$$\mu_{\text{Mg}} - \mu_{\text{Mg}}^o = RT \ln a_{\text{Mg}}$$



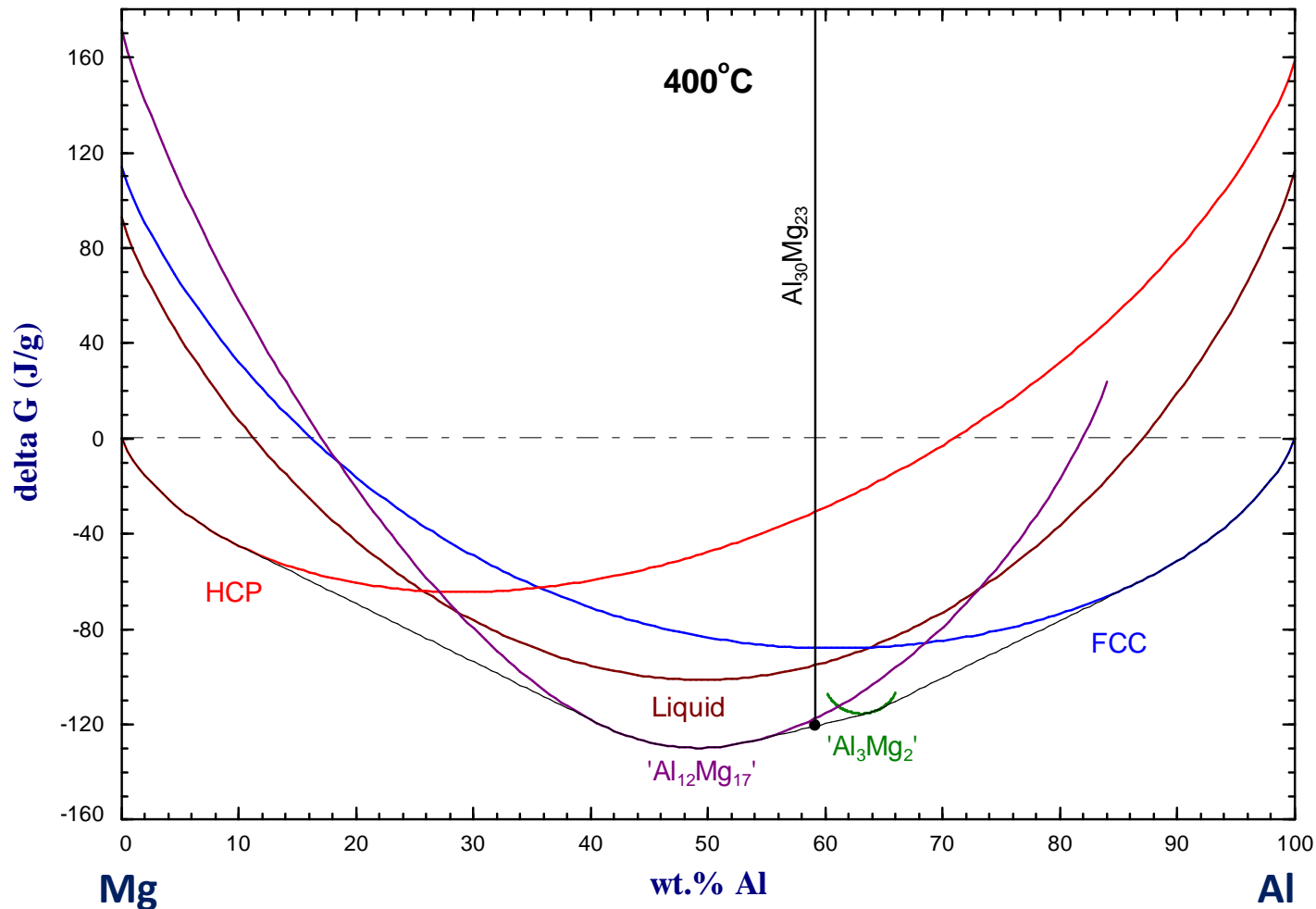
Construire une base thermodynamique

- Fonctions d'énergie de Gibbs @ 400°C

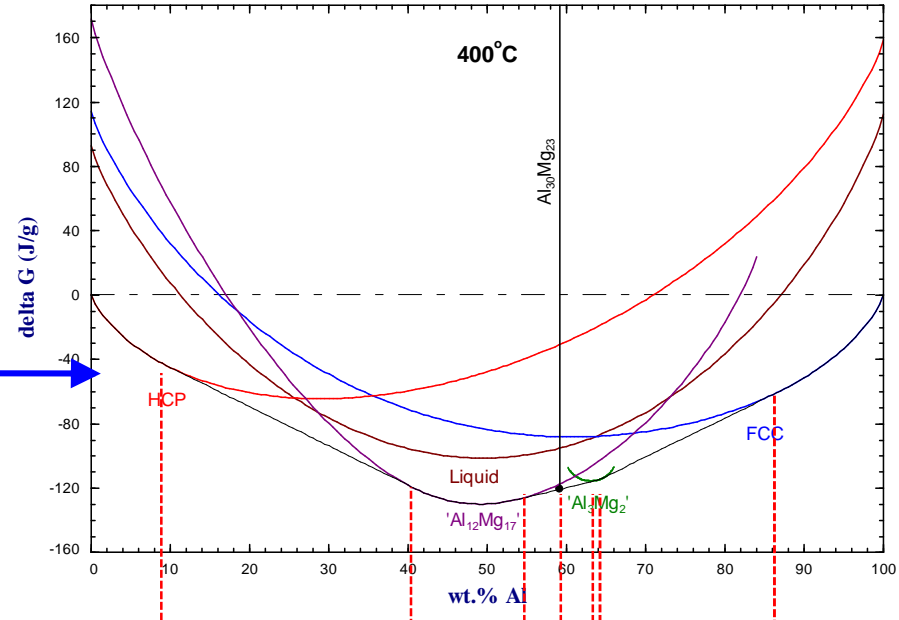


Construire une base thermodynamique

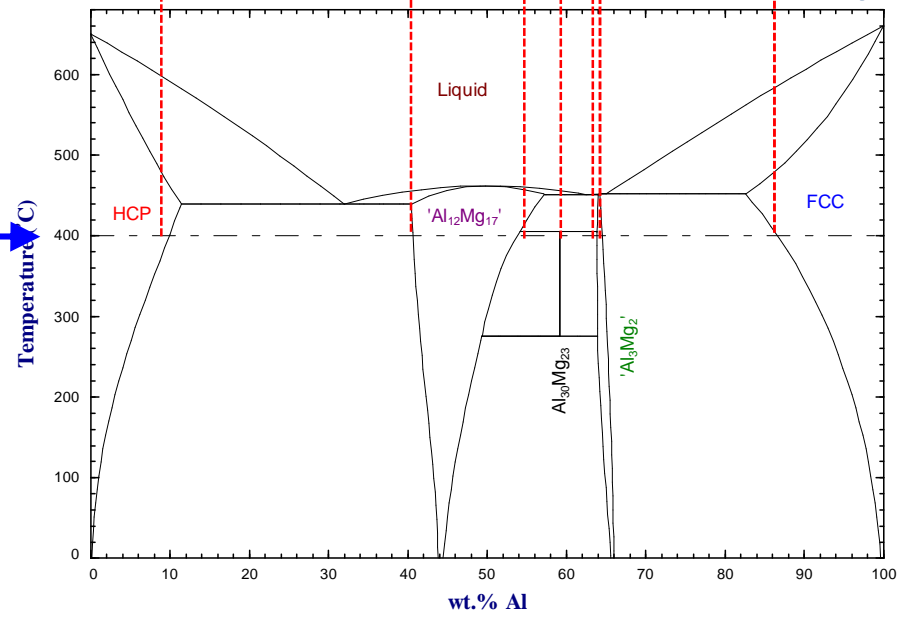
- **Minimum** d'énergie de Gibbs @ 400°C



Al-Mg:
Courbe du minimum
d'énergie de Gibbs @
400°C



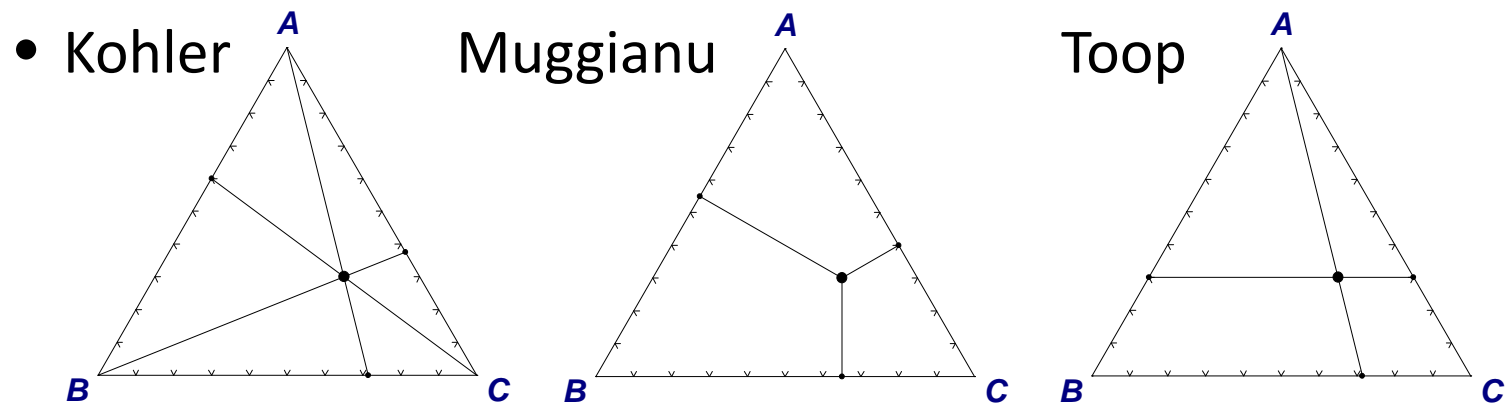
Al-Mg:
Équilibre de phase
calculé @ 400°C



Construire une base thermodynamique

- **Systeme ternaire (pour 1 phase)**

- Il faut **estimer l'énergie de Gibbs** d'une phase **dans le ternaire** à partir des propriétés des sous-systèmes à 1- et 2-composants;
- Des **techniques d'interpolation** sont utilisées:

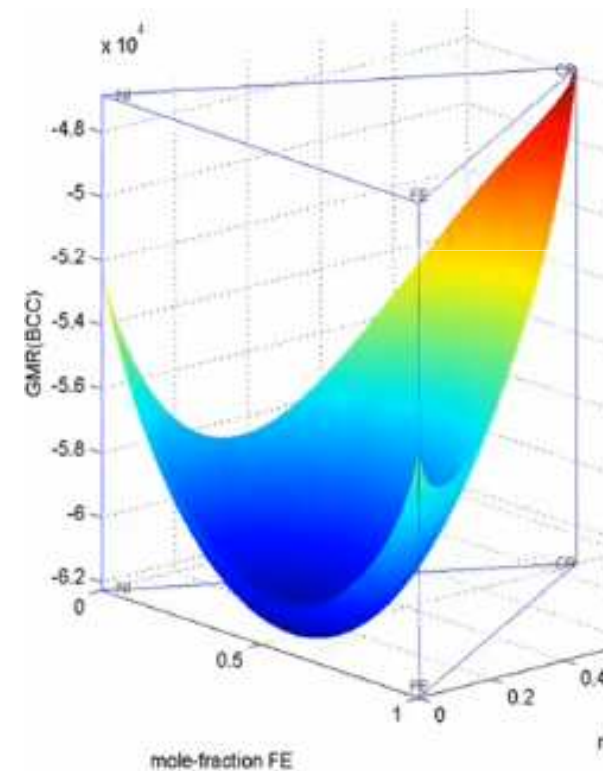
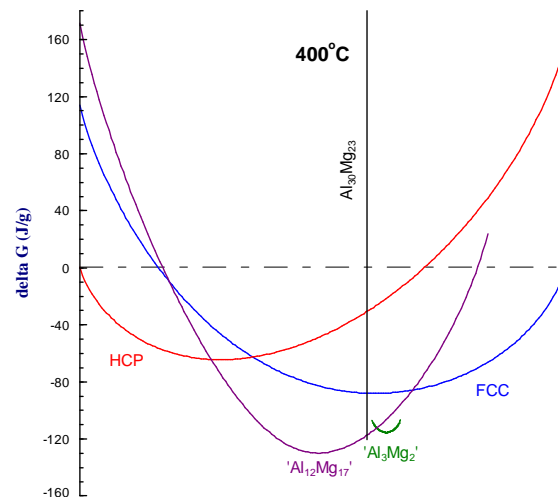


- Valides pour les systèmes d'ordre supérieur (4-, 5-, ...components) **mais ne prévoient pas l'existence de nouvelles phases.**

Construire une base thermodynamique

- **Systemes multicomposants (hétérogènes)**

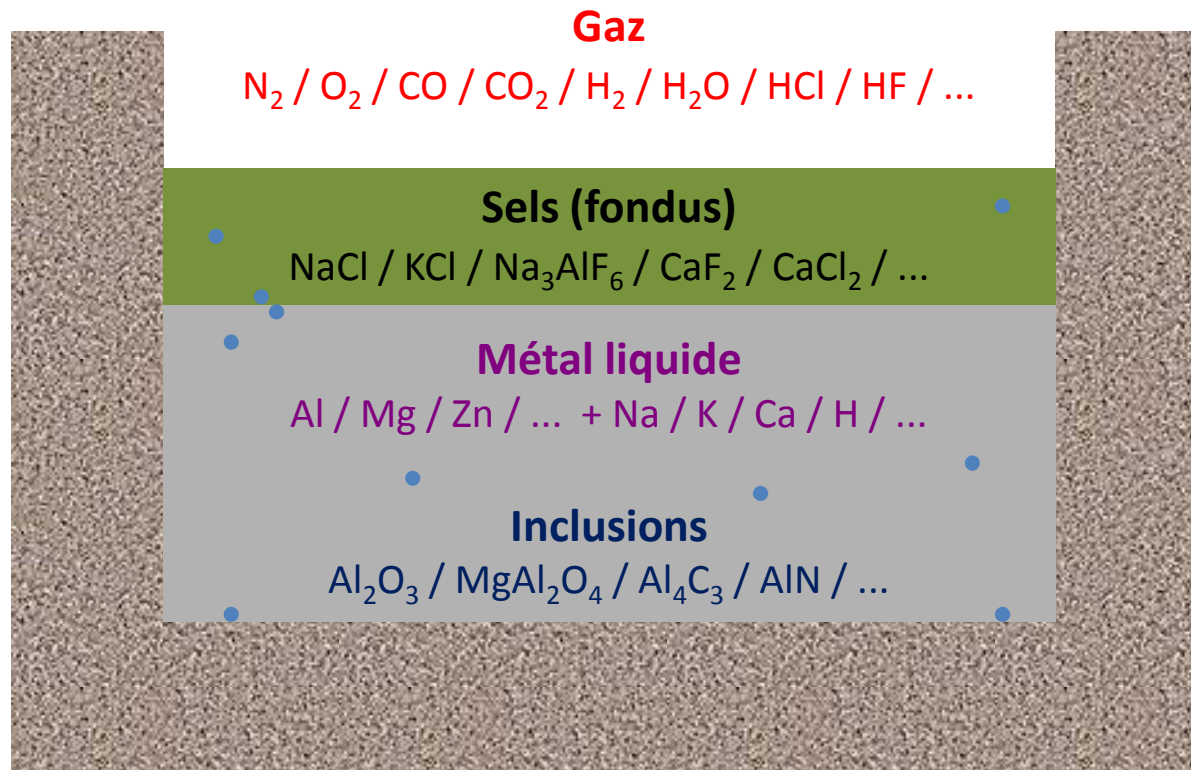
- Les courbes d'énergie de Gibbs deviennent des **surfaces d'énergie de Gibbs**.



- L'équilibre chimique \rightarrow min G.

Modèles thermodynamiques

- **Gaz** / métal liquide / sels fondus / oxydes



Matériaux réfractaires

Al₂O₃ / SiO₂ / CaO / ... + Fe₂O₃ / Na₂O / K₂O / ...
+

Agents anti-mouillants

CaF₂ / BaSO₄ / ...

Modèles thermodynamiques (VLAB)

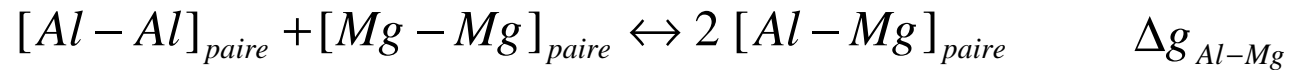
- **Métal liquide:**

- Un modèle a été obtenu pour les éléments d'alliage majeurs
 - Mg, Si, Zn
 - Cu
- Pour les éléments d'alliage mineurs
 - Mn
 - Li
 - Ti, Zr, Cr
 - Sr, Ba, Sc
 - Terres rares
 - As, Sb, Pb, Bi, Sn, Ag
- Pour les impuretés
 - Fe, Ni
 - Na, K, Ca, Be
 - C, H, B, P

Modèles thermodynamiques

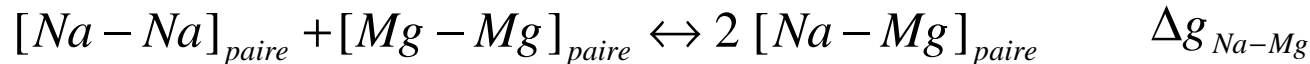
- **Métal liquide:**

- Modèle quasichimique modifié (approx. des paires):



...

...



...

...

- Bilans de matière : coordination atomes / paires

$$Z_{Al} n_{Al} = 2n_{Al-Al} + n_{Al-Mg} + n_{Al-Na} + n_{Al-Ca} + \dots$$

Paramètres du modèle $Z_{Mg} n_{Mg} = 2n_{Mg-Mg} + n_{Al-Mg} + n_{Mg-Na} + n_{Mg-Ca} + \dots$

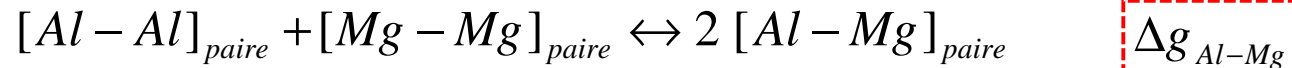
$$Z_{Na} n_{Na} = 2n_{Na-Na} + n_{Al-Na} + n_{Mg-Na} + n_{Na-Ca} + \dots$$

$$Z_{Ca} n_{Ca} = 2n_{Ca-Ca} + n_{Al-Ca} + n_{Mg-Ca} + n_{Na-Ca} + \dots$$

Modèles thermodynamiques

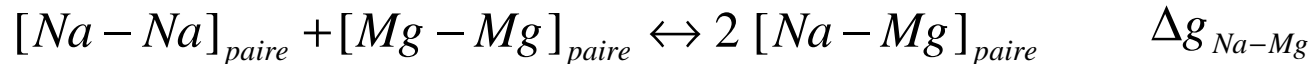
- **Métal liquide:**

- Modèle quasichimique modifié (approx. des paires):



...

...



...

...

$$G^{Liquide} = n_{Al} g_{Al}^{o,Liqu.} + n_{Mg} g_{Mg}^{o,Liqu.} + n_{Na} g_{Na}^{o,Liqu.} + n_{Ca} g_{Ca}^{o,Liqu.} + \dots$$

$$-T\Delta S_{config}^{Liqu.} \quad \text{Paramètres du modèle}$$

$$g_{Al}^{o,Liqu.} = h_{Al}^{o,Liqu.} - T s_{Al}^{o,Liqu.} + \frac{1}{2} n_{Al-Mg} \Delta g_{Al-Mg} + \frac{1}{2} n_{Al-Na} \Delta g_{Al-Na} + \frac{1}{2} n_{Al-Ca} \Delta g_{Al-Ca} + \dots$$

$$+ \frac{1}{2} n_{Mg-Na} \Delta g_{Mg-Na} + \frac{1}{2} n_{Mg-Ca} \Delta g_{Mg-Ca} + \frac{1}{2} n_{Na-Ca} \Delta g_{Na-Ca} + \dots$$

Paramètres du modèle

Modèles thermodynamiques

- **Métal liquide:**

- Modèle quasichimique modifié (approx. des paires):

$$\Delta S_{config}^{Liqu.} = -R \left(n_{Al} \ln x_{Al} + n_{Mg} \ln x_{Mg} + n_{Na} \ln x_{Na} + \dots \right)_{\text{atomes}}$$

$$- R \left(n_{Al-Al} \ln \frac{x_{Al-Al}}{y_{Al}^2} + n_{Mg-Mg} \ln \frac{x_{Mg-Mg}}{y_{Mg}^2} + n_{Na-Na} \ln \frac{x_{Na-Na}}{y_{Na}^2} + \dots \right)_{\text{paires unaires}}$$

$$- R \left(n_{Al-Mg} \ln \frac{x_{Al-Mg}}{2y_{Al}y_{Mg}} + n_{Al-Na} \ln \frac{x_{Al-Na}}{2y_{Al}y_{Na}} + n_{Mg-Na} \ln \frac{x_{Mg-Na}}{2y_{Mg}y_{Na}} + \dots \right)_{\text{paires binaires}}$$

Aucun paramètre

- Moles de paires à l'équilibre (n_{i-j}) \rightarrow min **G** at T, P, n_i

Modèles thermodynamiques (VLAB)

- Sels fondus:

- Un modèle a été obtenu pour:

LiCl – NaCl – KCl - MgCl₂ - CaCl₂ - AlCl₃ – LiF – NaF – KF - MgF₂ - CaF₂ - AlF₃

Auquels s'ajoutent les oxydes, sulfures et sulfates correspondants:

Li, Na, K, Mg, Ca, Al // F, Cl, O, S, SO₄

- D'autres combinaisons d'ions sont disponibles pour:
 - Hydroxydes
 - Carbonates
 - Sr et Ba
 - Plusieurs métaux de transitions

Modèles thermodynamiques

- **Sels fondus:**

- Modèle quasichimique modifié (approx. des quadruplets):

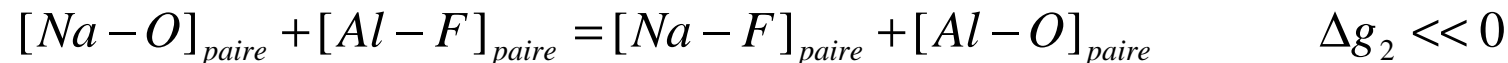
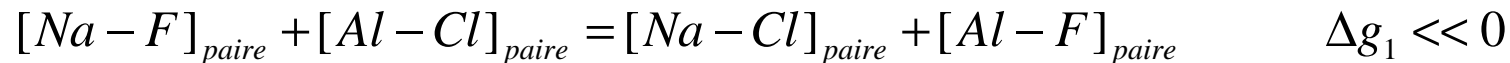
- Cations (**Na⁺, K⁺, Al³⁺, Mg²⁺, ...**) et anions (**Cl⁻, F⁻, O²⁻, OH⁻, ...**)

- Fortes déviations au mélange aléatoires

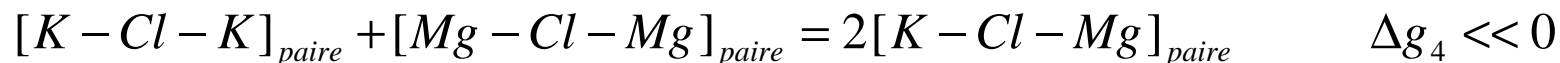
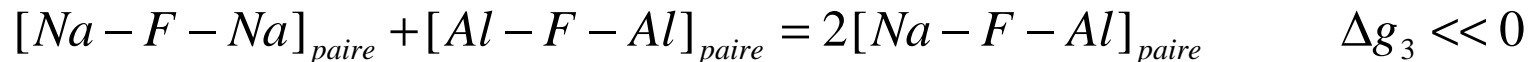
- Ordre 1^{er} voisins : effet coulomb, effet de taille
- Ordre 2^e voisins : polarisation → Al³⁺

- Le modèle évalue simultanément l'ordonnement 1^{er} et 2^e voisins:

- **1^{er} voisins**



- **2^e voisins**

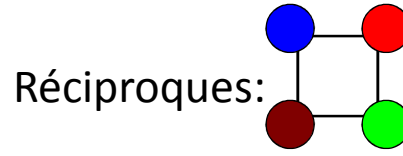
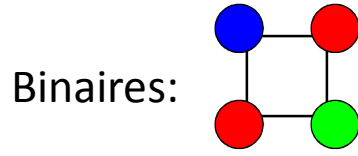
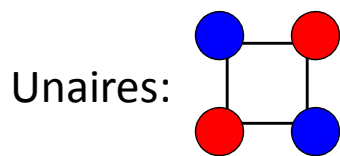


Modèles thermodynamiques

- **Sels fondus:**

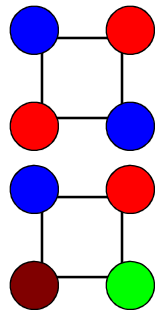
- Modèle quasichimique modifié (approx. des quadruplets):

- **Quadruplets:**

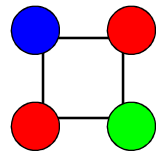


- Ions: Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Al^{3+} , ... // Cl^- , F^- , OH^- , SO_4^{2-} , O^{2-} , ...

- Ont une énergie de Gibbs:



→ **NaCl pure**



→ du binaire **NaCl-AlCl₃** ($\Delta g_{\text{Na-Cl-Al}}$)

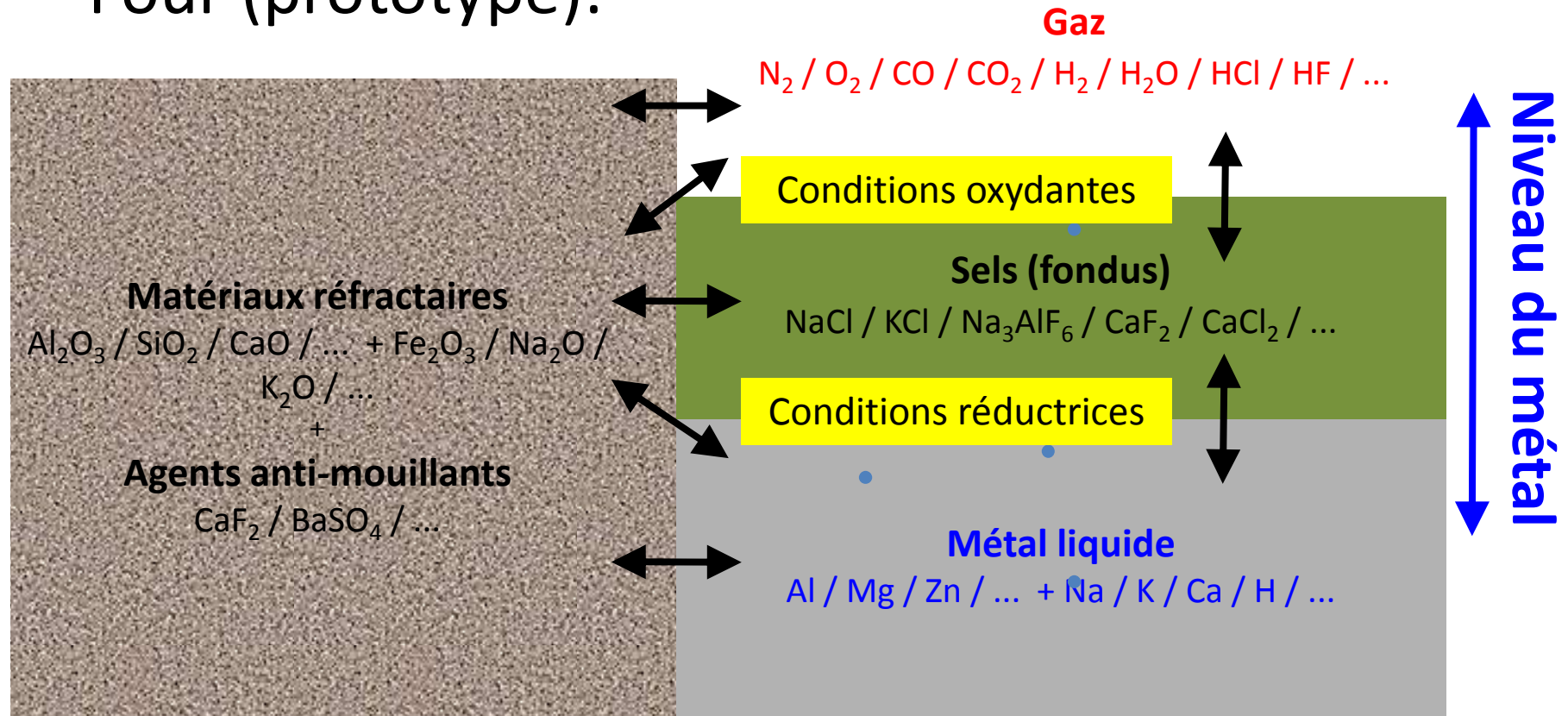
→ du système réciproque **NaCl-AlCl₃-NaF-AlF₃**

- Se mélangent aléatoirement, contraints par un bilan de matière

- Composition à l'équilibre des quadruplets → min **G** at T, P, n_i

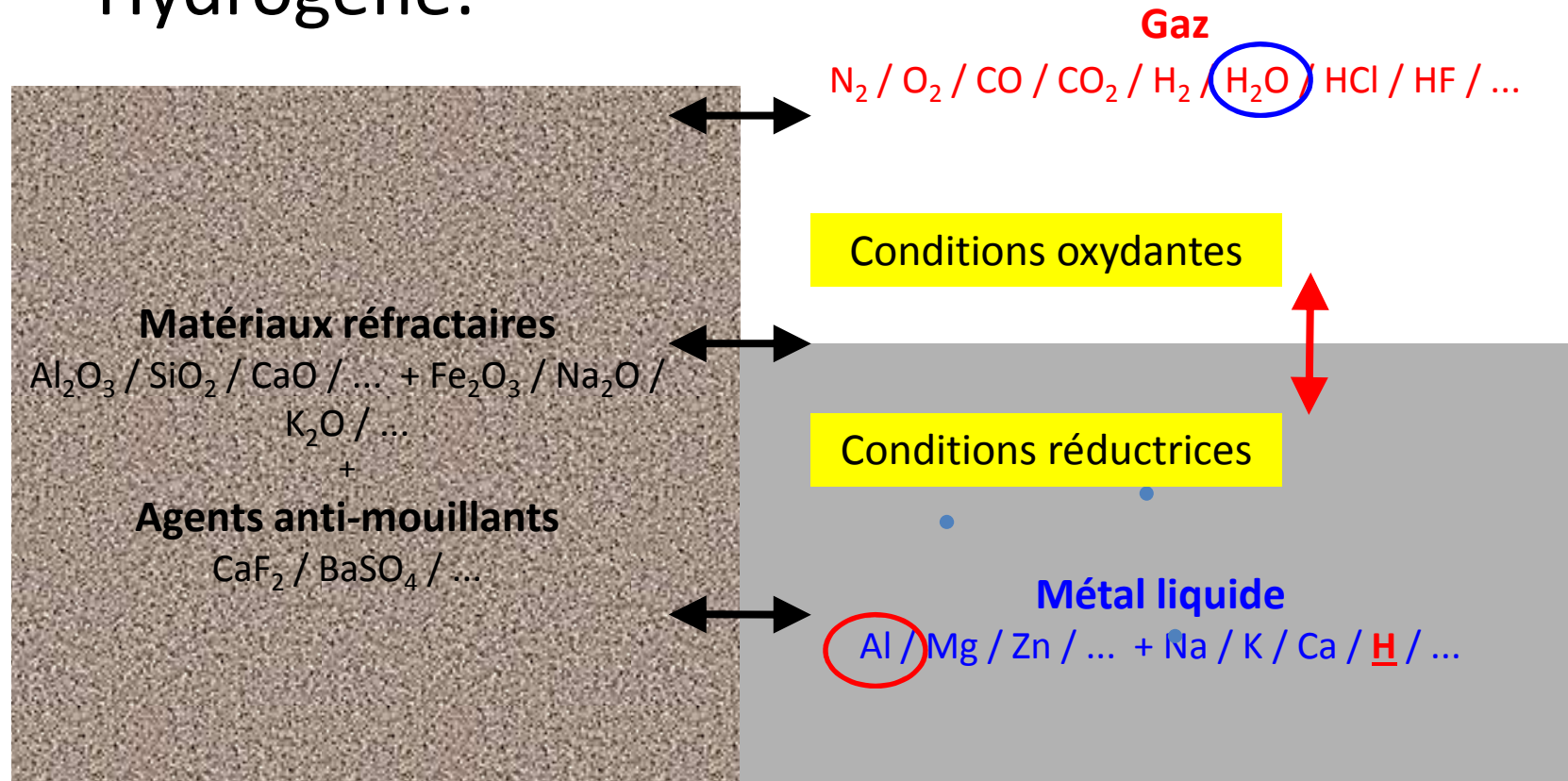
Études de cas

- Four (prototype):



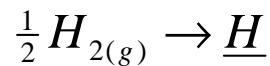
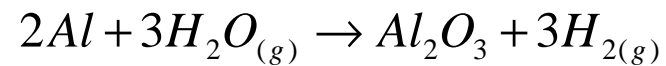
Études de cas

- Hydrogène:

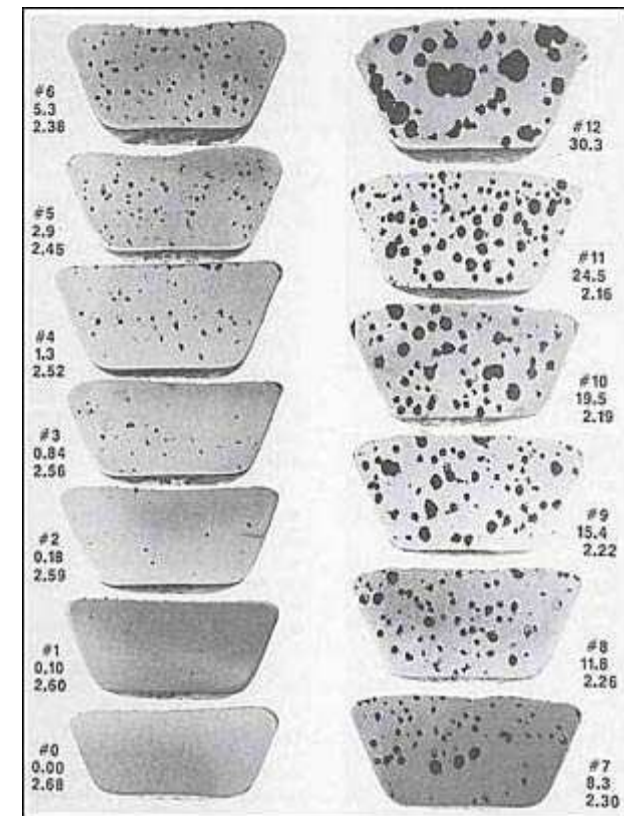
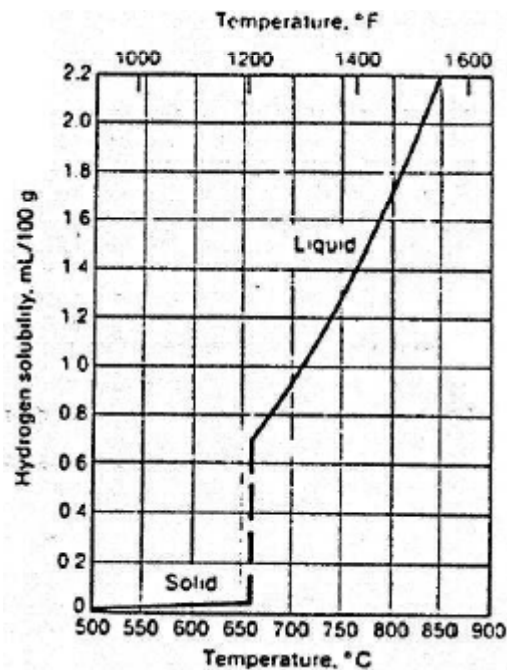


Hydrogène

- Les alliages d'aluminium liquides sont sensibles à la **prise en hydrogène** qui résulte en une **hausse de la porosité** lors de la **solidification**:



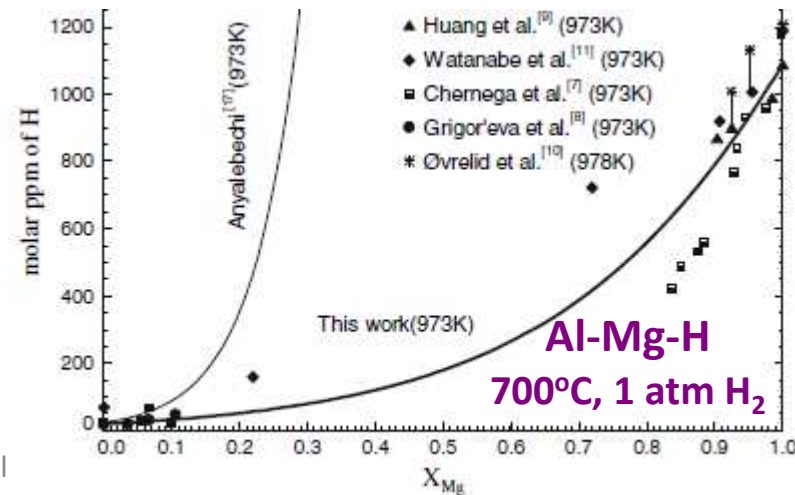
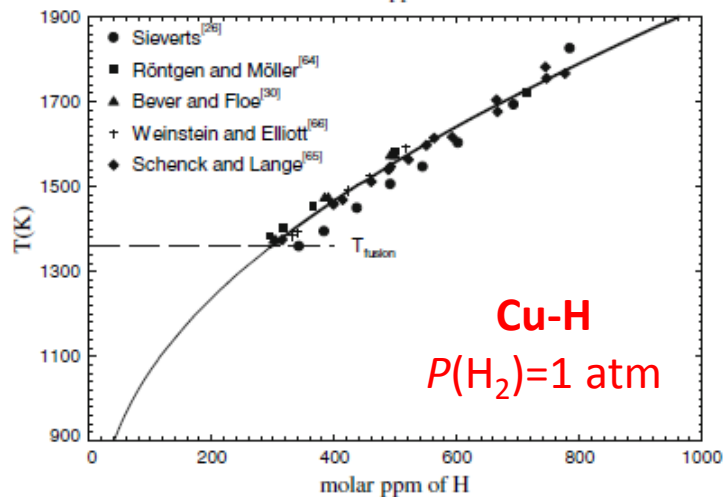
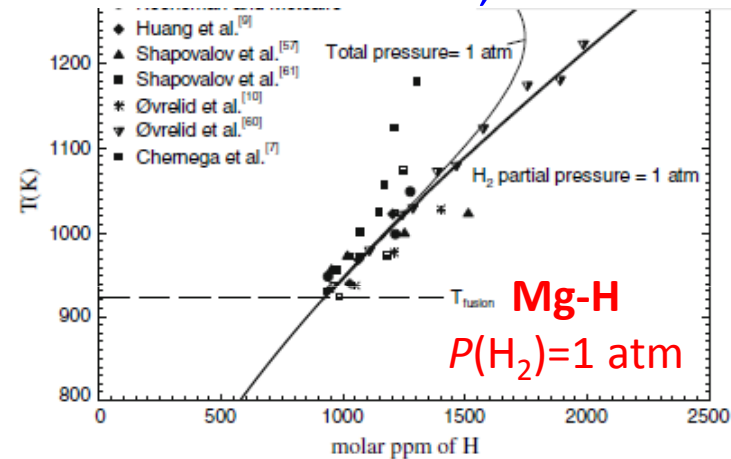
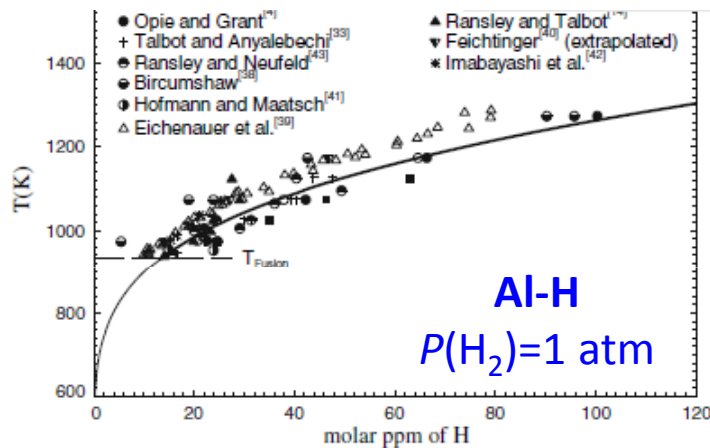
$$K_{eq} = \frac{x_H^{m\acute{e}tal} \gamma_H^o}{P_{H_2}^{\frac{1}{2}}}$$



Hydrogène

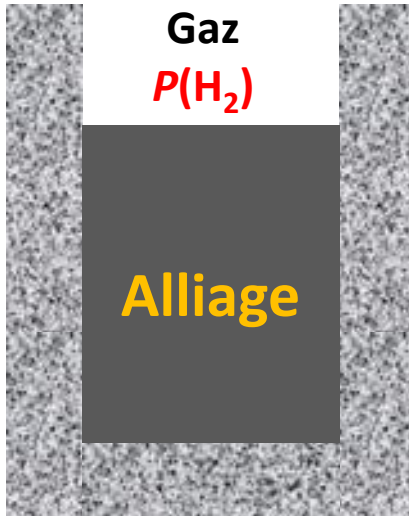
- Une modélisation complète des systèmes **Al-H**, **X-H** et **Al-X-H** a été publiée:

– **J.-P. Harvey & P. Chartrand**, *Metall. and Mater. Trans. A*, 2010.

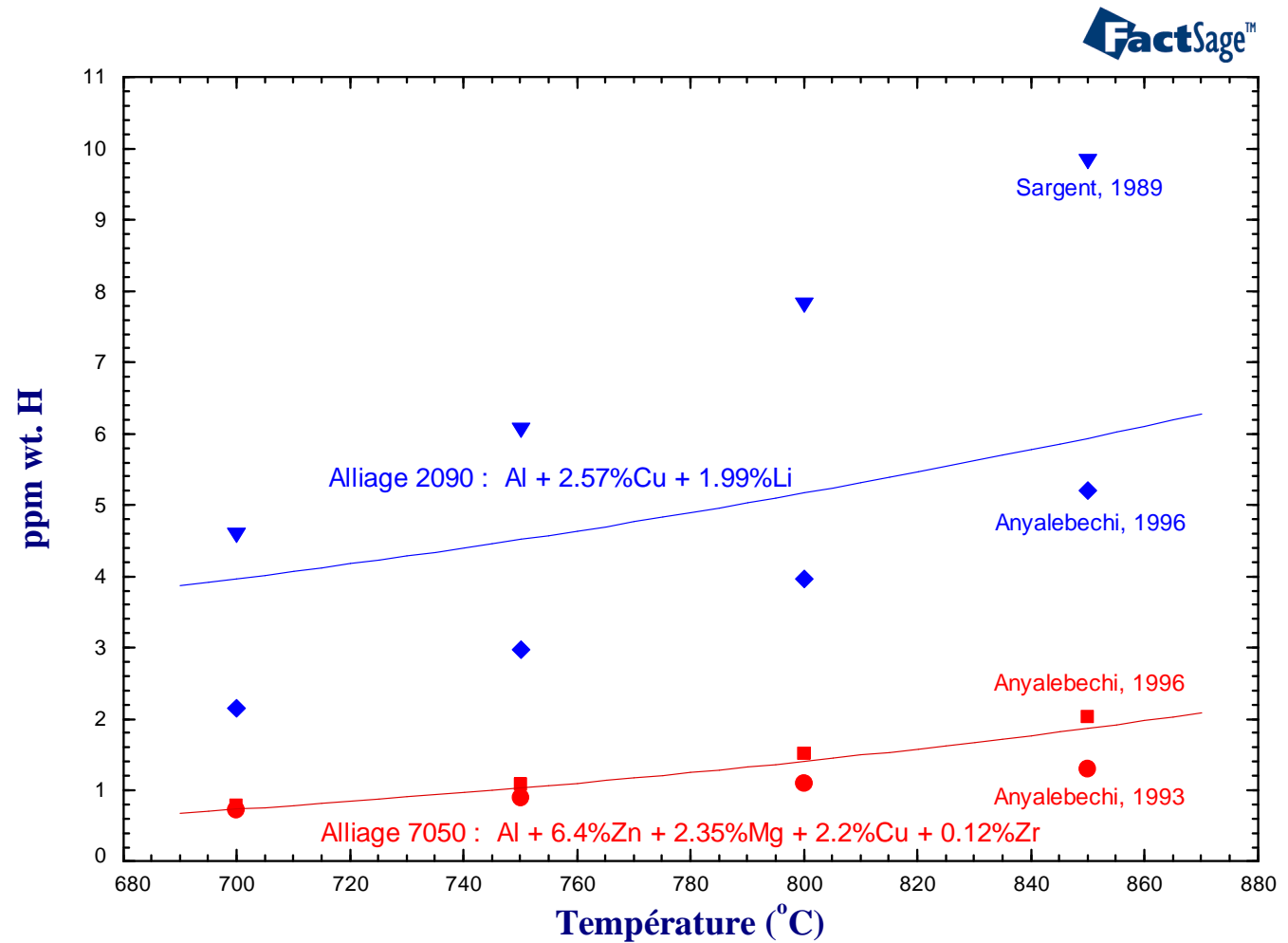


Hydrogène

- Prédiction de la solubilité de H pour **7050** et **2090** ($P(H_2) = 1 \text{ atm}$).



6/7/2011

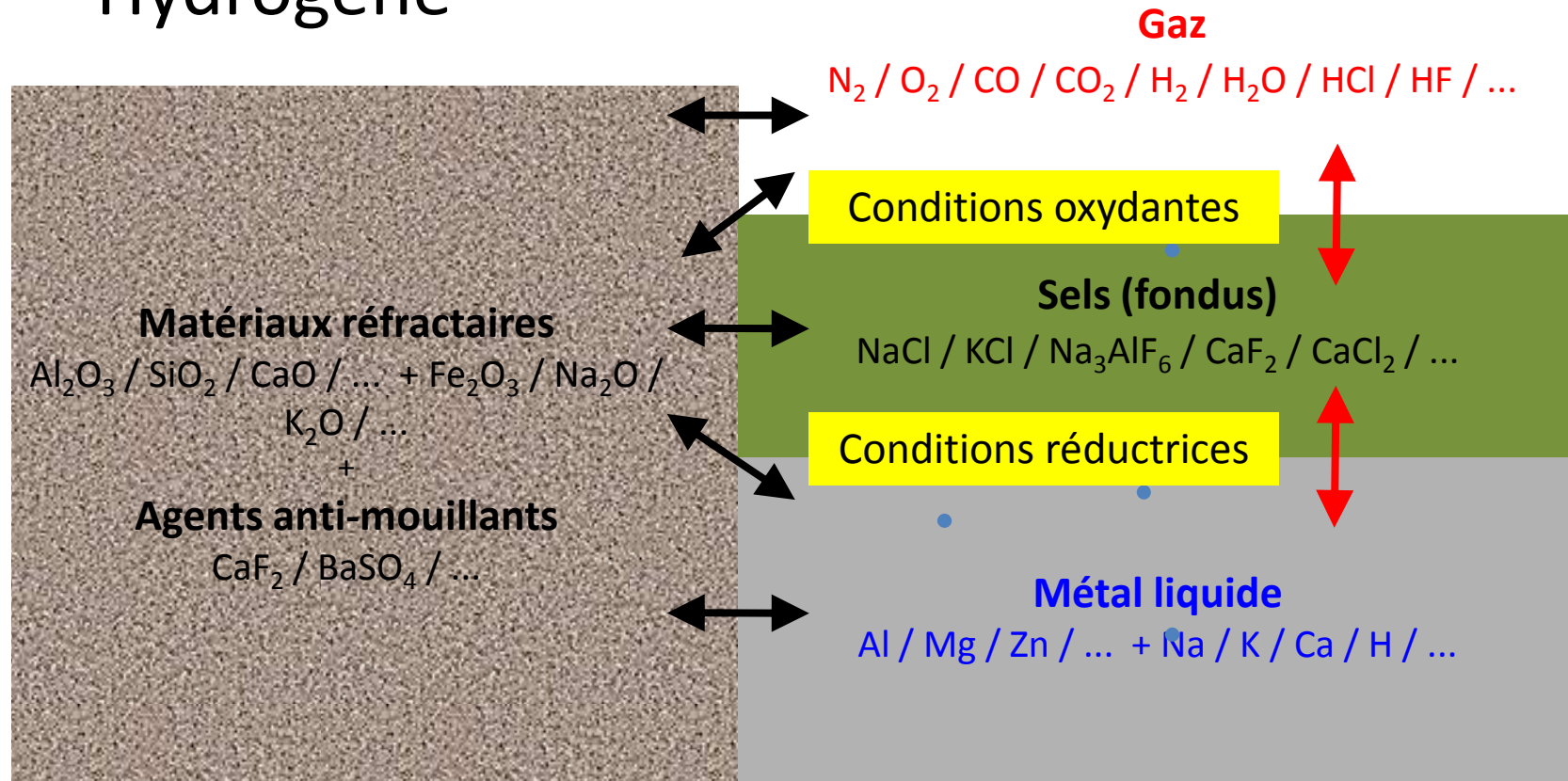


Journées annuelles de la SF2M 2011

44

Études de cas

- Hydrogène



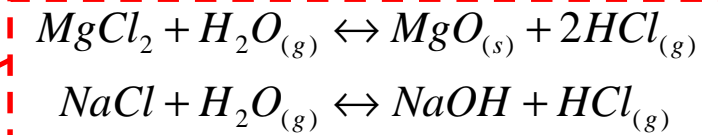
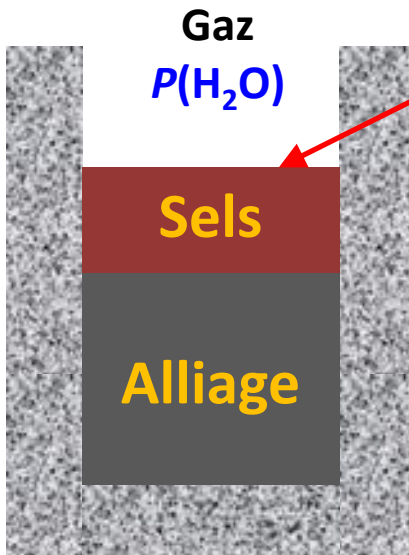
Hydrogène

- Échanges **métal liquide** / **sels fondus** / **gaz**

- Compositions initiales

- Métal liquide: Al + 5% Mg
- Sels fondus: NaCl-KCl équimolaire + 2% MgCl₂
- Gaz: air + 50% humidité relative @ 25°C

Conditions oxydantes



98 g NaKCl₂ + 2 g MgCl₂ + 0.983 mol (N₂)_{0.79}(O₂)_{0.21} + 0.017 mol H₂O
=

1.0013 mol Ideal Gas
(0.77551 N₂
+ 0.20610 O₂
+ 1.5723E-02 H₂O
+ 2.4937E-03 HCl

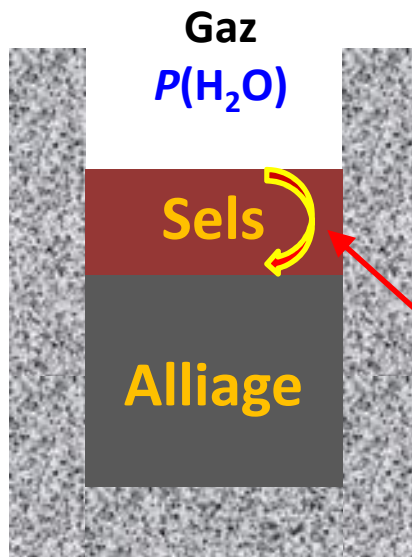


+ 99.869 grams Molten Salts
(0.49341 NaCl
+ 0.49339 KCl
+ 1.3184E-02 MgCl₂
+ 4.4426E-06 NaOH
+ 4.4424E-06 KOH

+ 0.0531 gram MgO periclase (INCLUSIONS)

Hydrogène

- Échanges **métal liquide** / **sels fondus** / **gaz**
 - Compositions initiales
 - Métal liquide: Al + 5% Mg
 - Sels fondus: NaCl-KCl équimolaire + 2% MgCl₂
 - Gaz: air + 50% humidité relative @ 25°C



98 g NaKCl₂ + 2 g MgCl₂ + 0.983 mol (N₂)_{0.79}(O₂)_{0.21} + 0.017 mol H₂O
=

1.0013 mol Ideal Gas

(0.77551 N₂
+ 0.20610 O₂
+ 1.5723E-02 H₂O
+ 2.4937E-03 HCl



+ **99.869 grams Molten Salts**

(0.49341 NaCl
+ 0.49339 KCl
+ 1.3184E-02 MgCl₂
+ 4.4426E-06 NaOH
+ 4.4424E-06 KOH

Le sel fondu est "extrait"
du calcul dans un courant
(flux) qui est ensuite réagit
avec le métal liquide

+ **0.0531 gram MgO periclase (INCLUSIONS)**

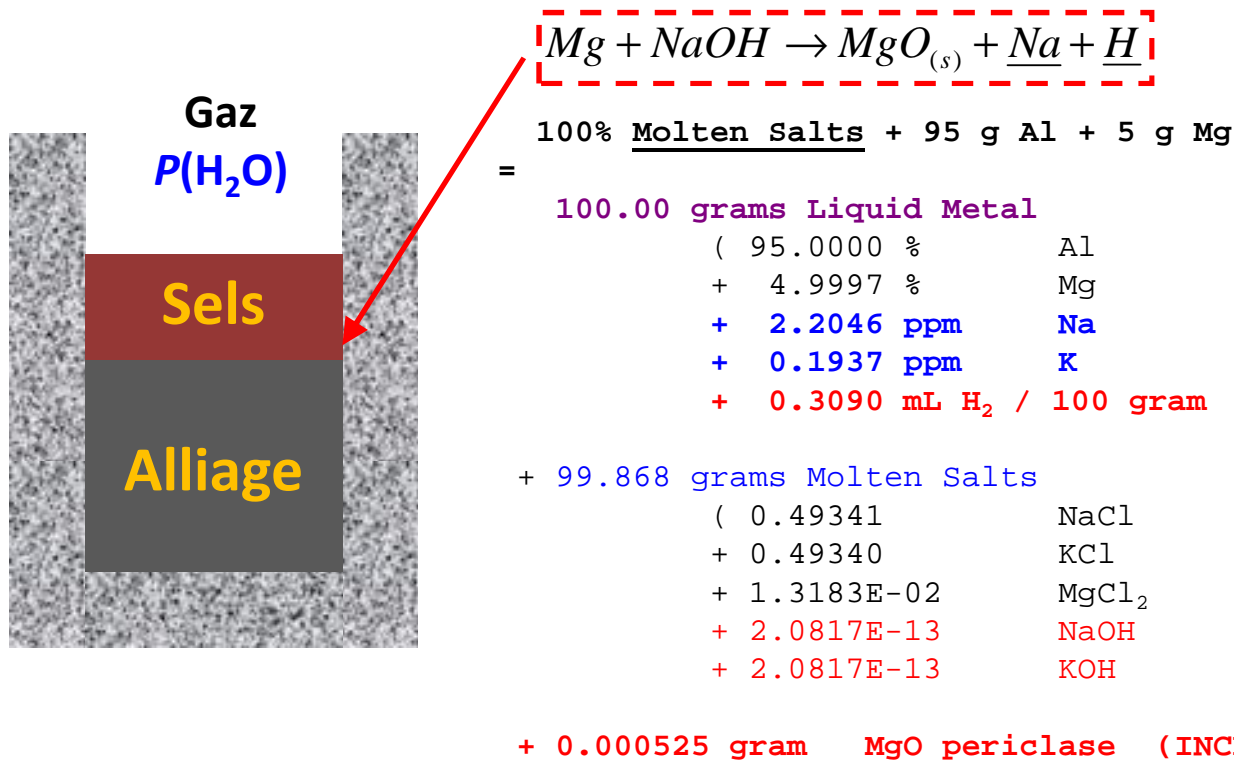
Hydrogène

- Échanges **métal liquide** / **sels fondus** / **gaz**

- Compositions initiales

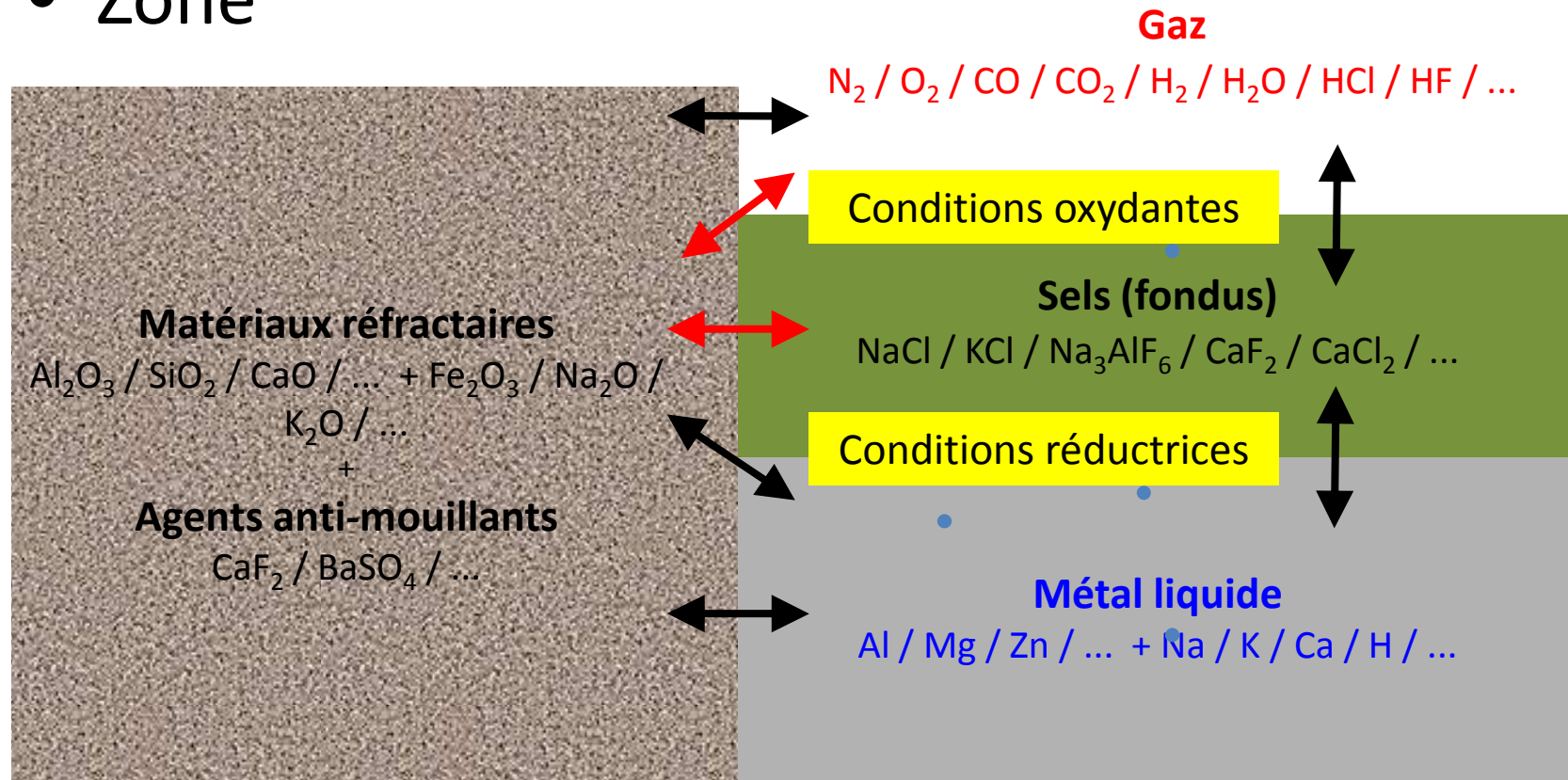
- Métal liquide: Al + 5% Mg
- Sels fondus: NaCl-KCl équimolaire + 2% MgCl₂
- Gaz: air + 50% humidité relative @ 25°C

Conditions réductrices



Réactions sels / réfractaires / gaz

- Zone

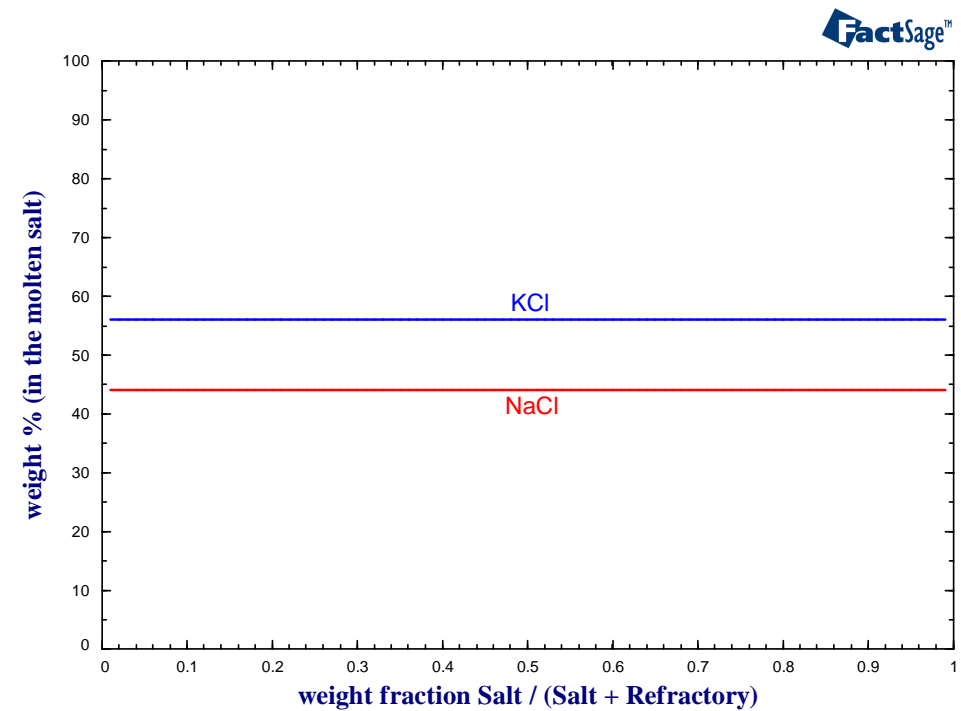
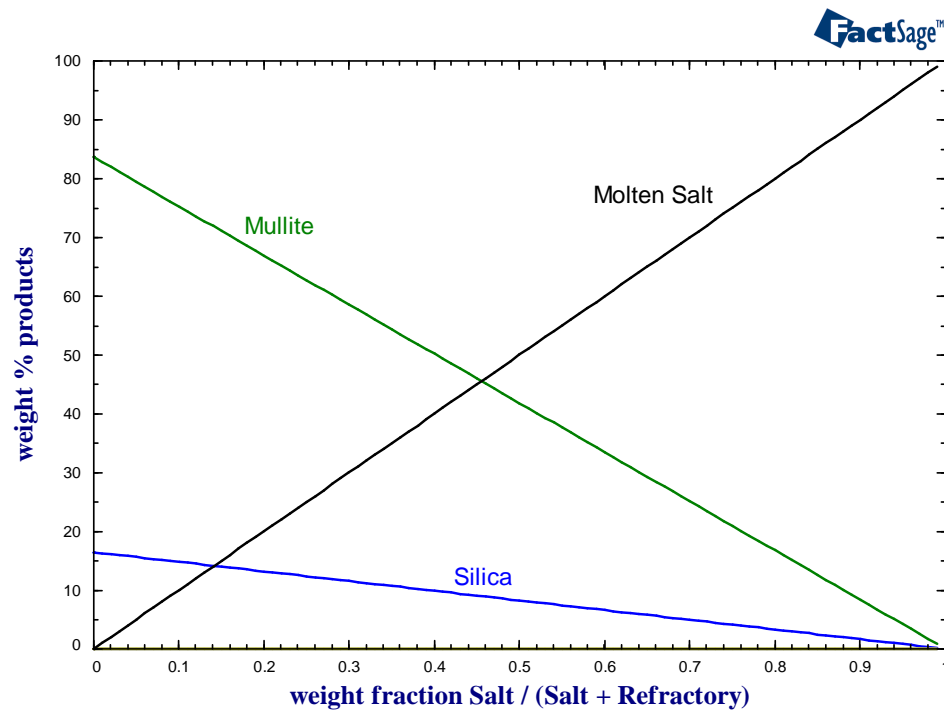


Réactions sels / réfractaires / gaz

- Réfractaires: 60% Al_2O_3 + 40% SiO_2
- Sels: NaCl-KCl équimolaire
- Gaz: $P(\text{H}_2\text{O})$ très basse

850°C

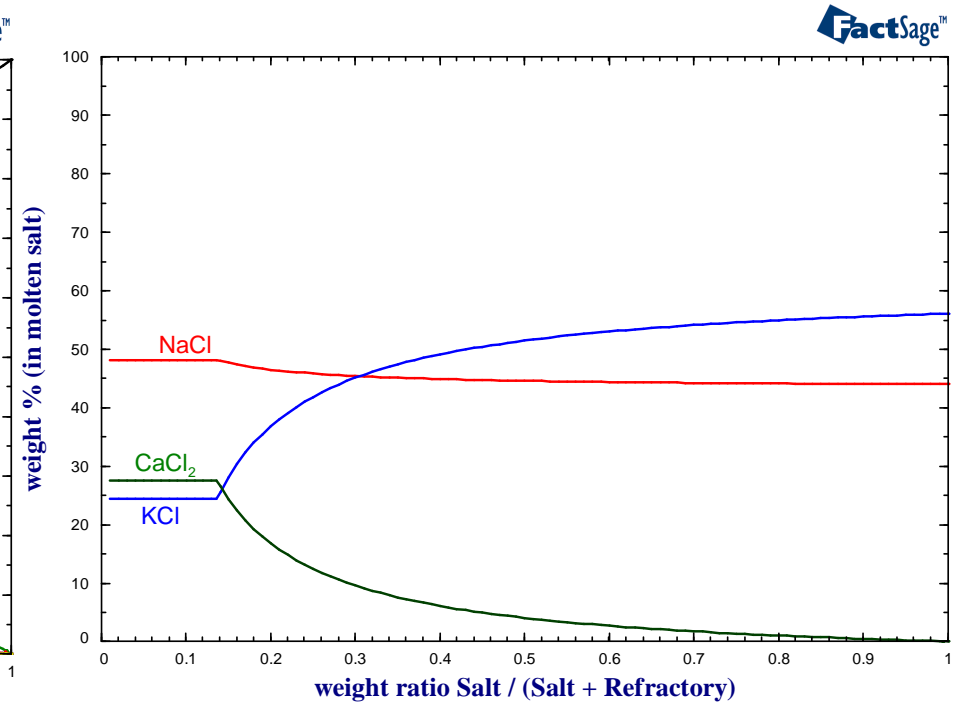
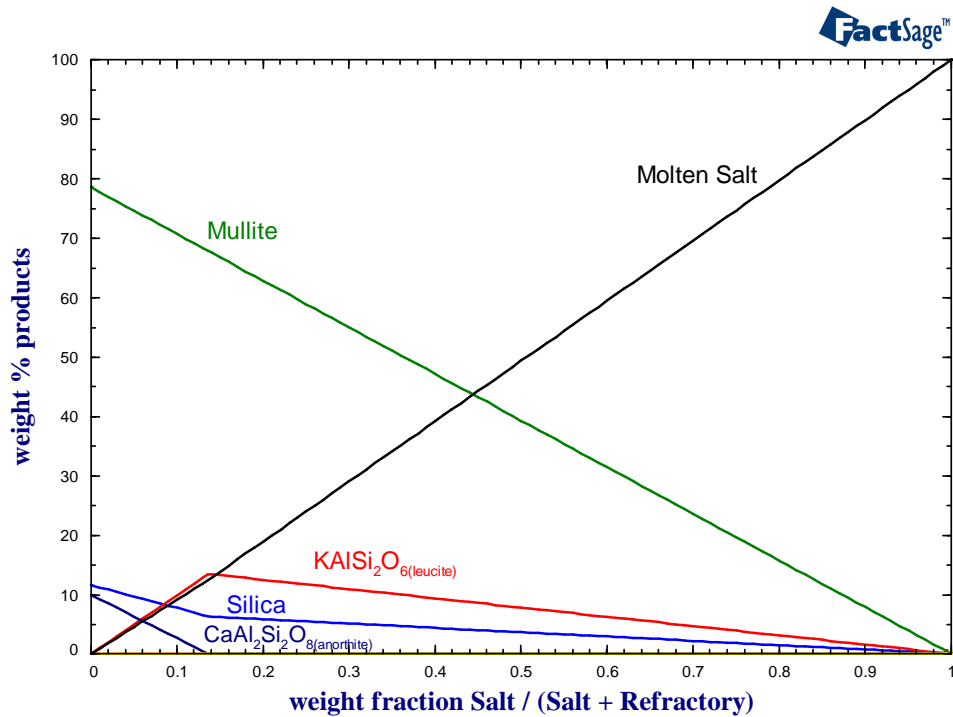
Pas de réaction



Réactions sels / réfractaires / gaz

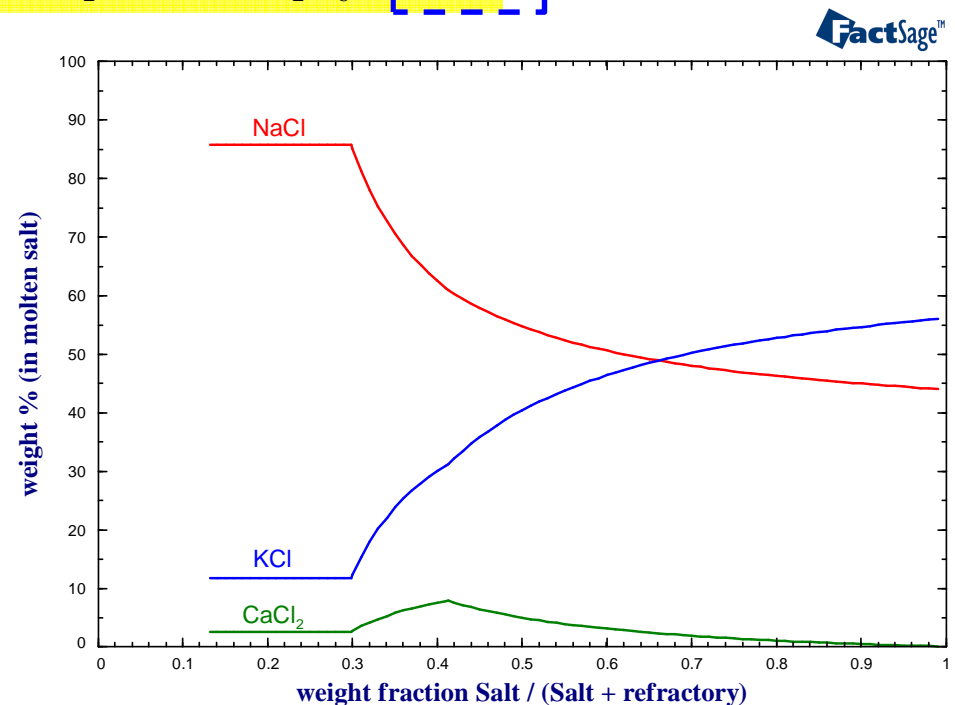
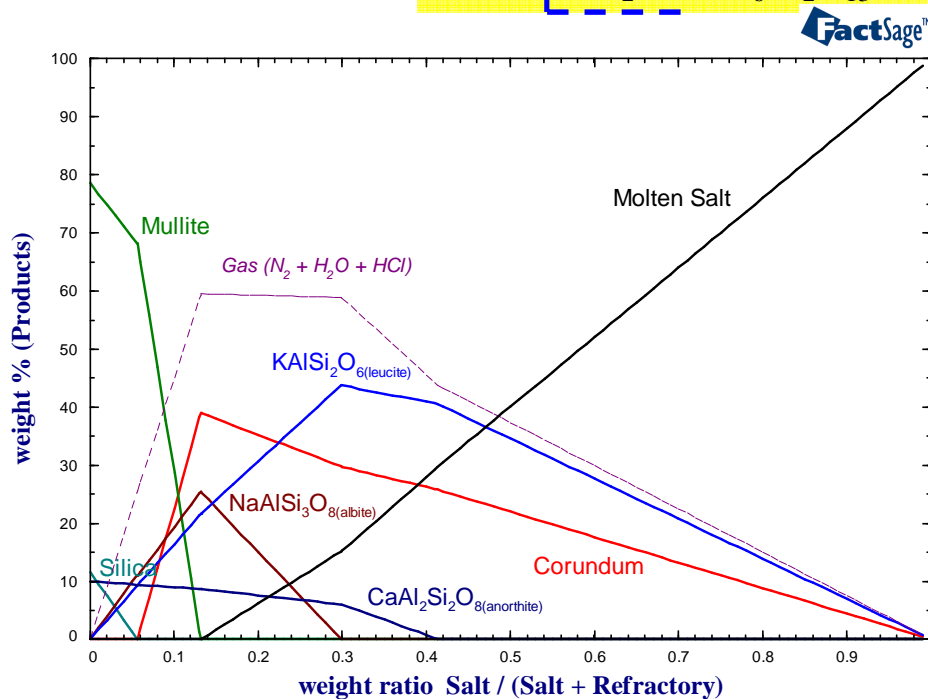
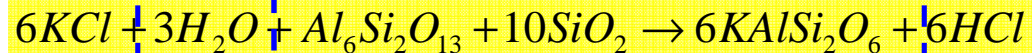
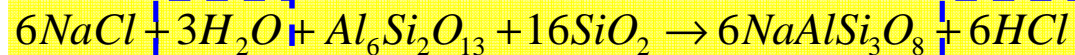
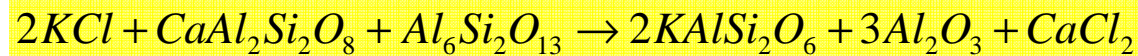
- Réfractaires: 60% Al_2O_3 + 38% SiO_2 + 2% CaO
- Sels: NaCl-KCl équimolaire
- Gaz: $P(\text{H}_2\text{O})$ très basse

850°C



Réactions sels / réfractaires / gaz

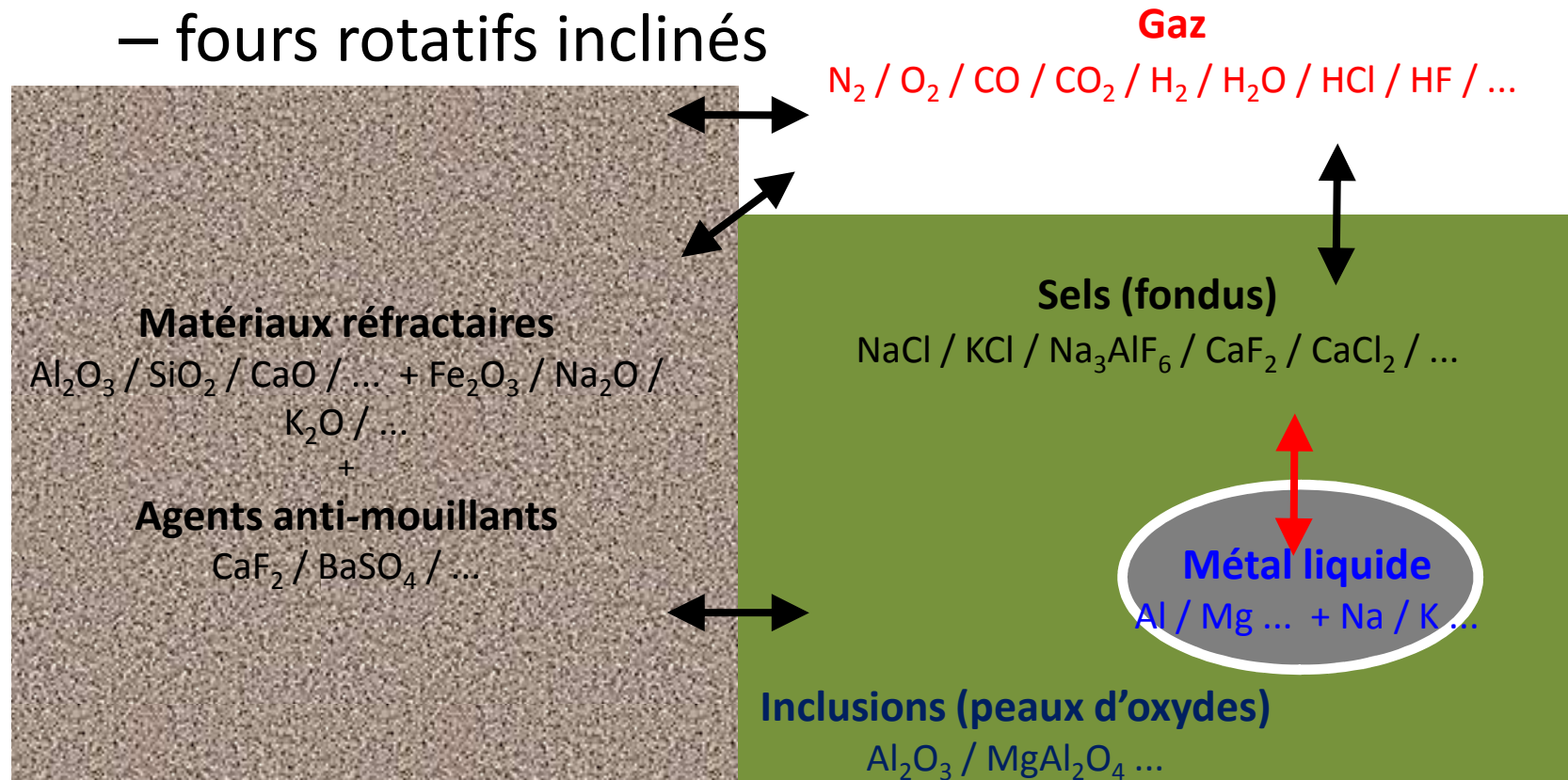
- Réfractaires: 60% Al₂O₃ + 38% SiO₂ + 2% CaO 850°C
- Sels: NaCl-KCl équimolaire
- Gaz: $P(\text{H}_2\text{O}) = 0.18 \text{ atm}$ (gaz de combustion)



Réactions sels / métal / inclusions

- **Recyclage**

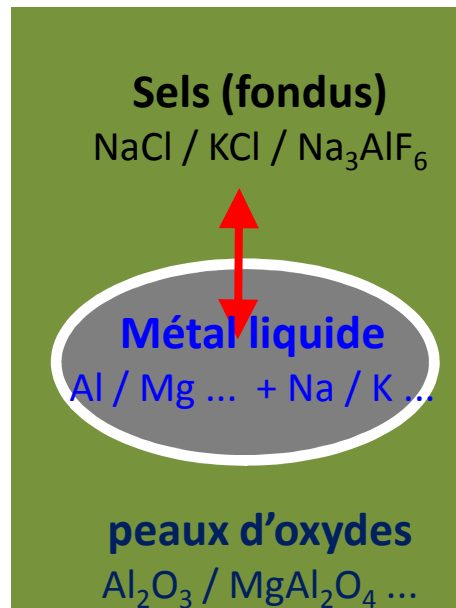
– fours rotatifs inclinés



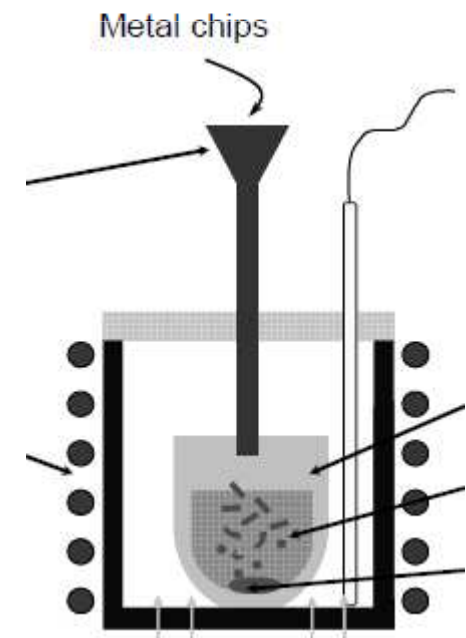
Réactions sels / métal / inclusions

- **Recyclage**

- S. Besson, A. Pichat, E. Xolin, P. Chartrand, B. Friedrich, 2011
- Expériences de coalescence de copeaux de **AA3104** 720-800°C



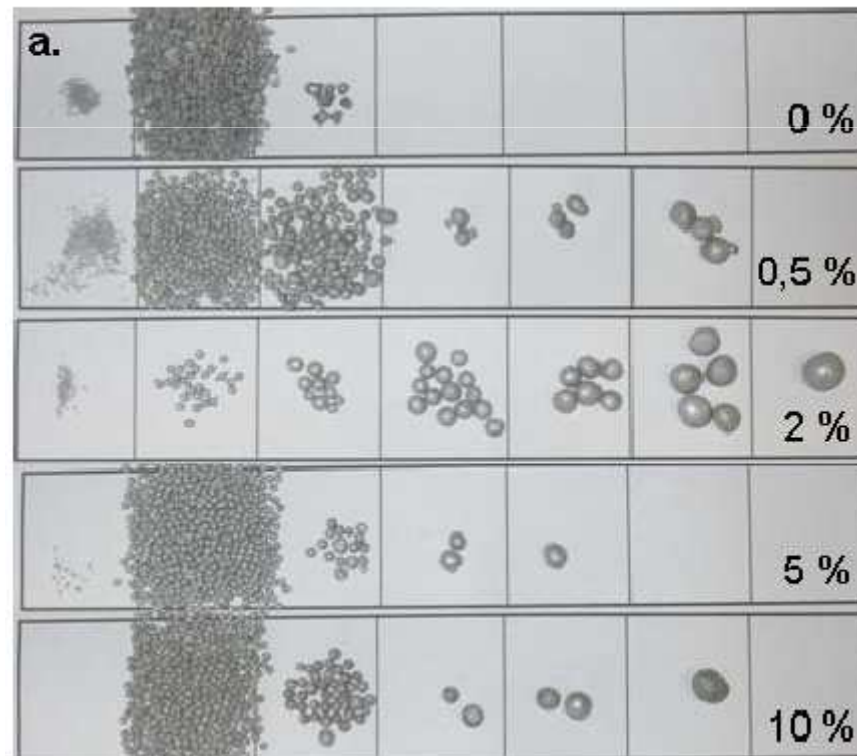
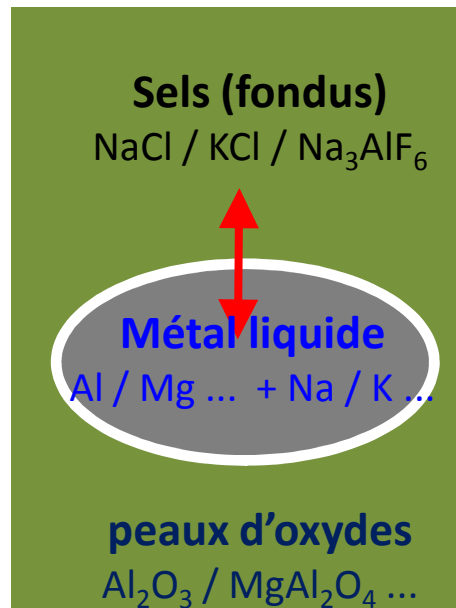
- 37.5 g de sels
 - NaCl-KCl équimolaire
 - 0-10% Na_3AlF_6
- 12.5 g de métal (copeaux)
 - 1.20 % Mg
 - 0.2 g de peaux d'oxydes



Réactions sels / métal / inclusions

- **Recyclage**

- S. Besson, A. Pichat, E. Xolin, P. Chartrand, B. Friedrich, 2011
- Expériences de coalescence de copeaux de **AA3104** 720-800°C



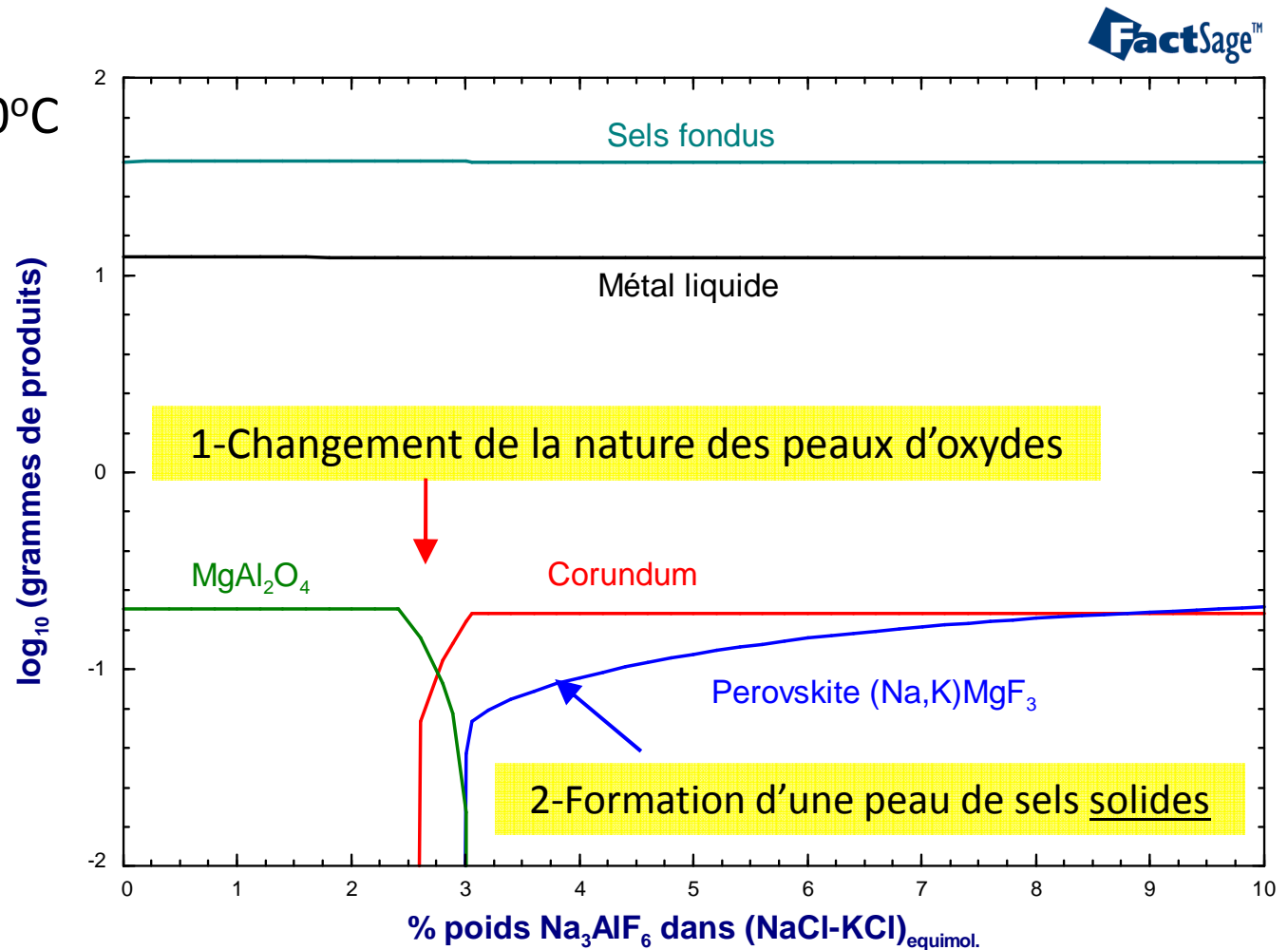
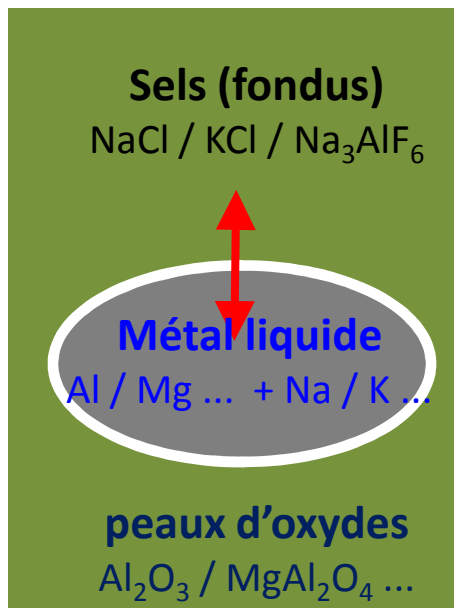
Distribution des copeaux coalescés vs % Na₃AlF₆

Meilleure efficacité de 0.5-2% Na₃AlF₆

Réactions sels / métal / inclusions

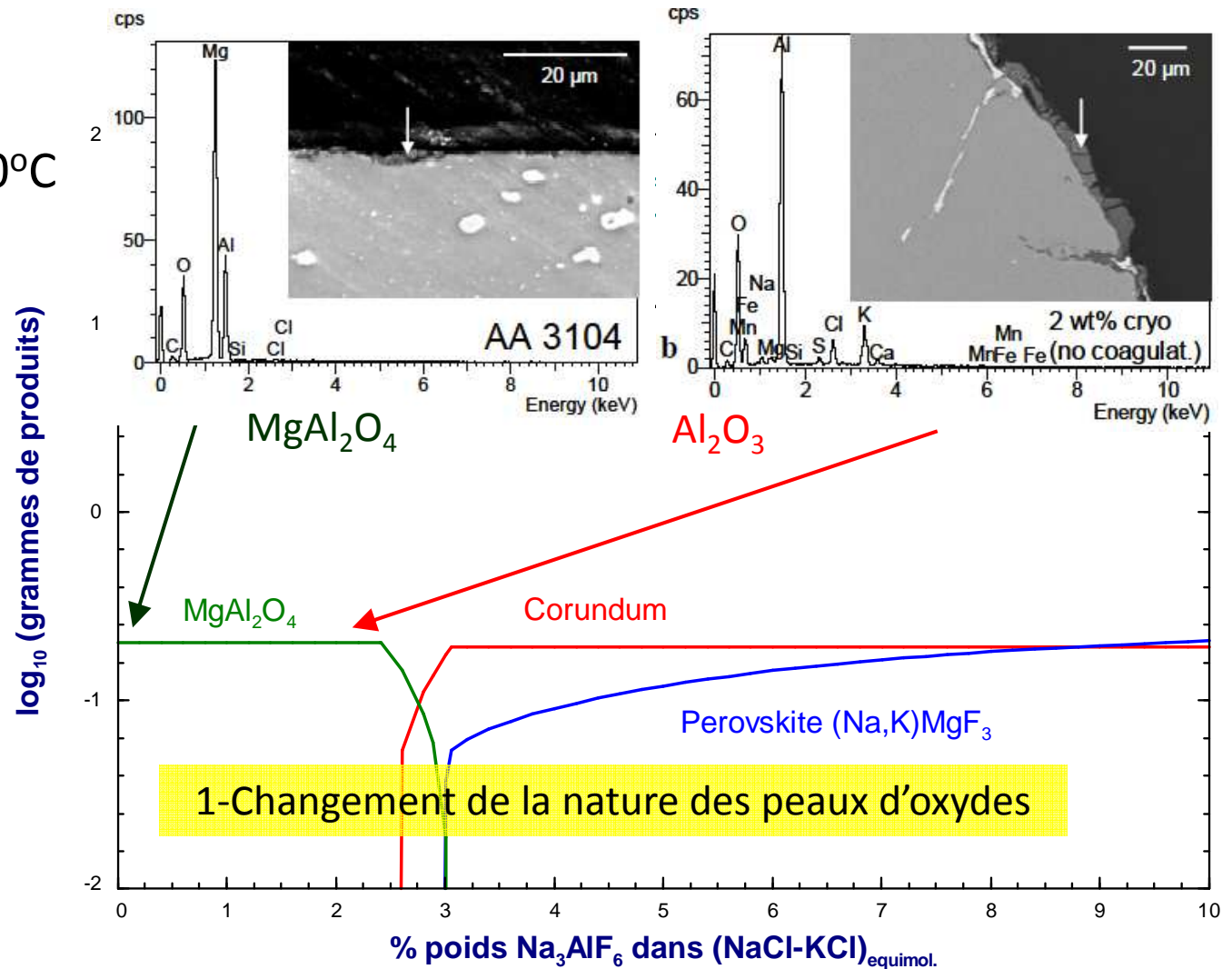
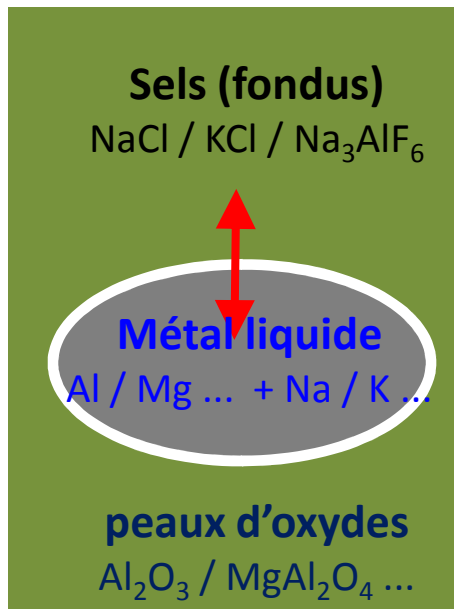
- **Recyclage**

- Calculs 720°C



Réactions sels / métal / inclusions

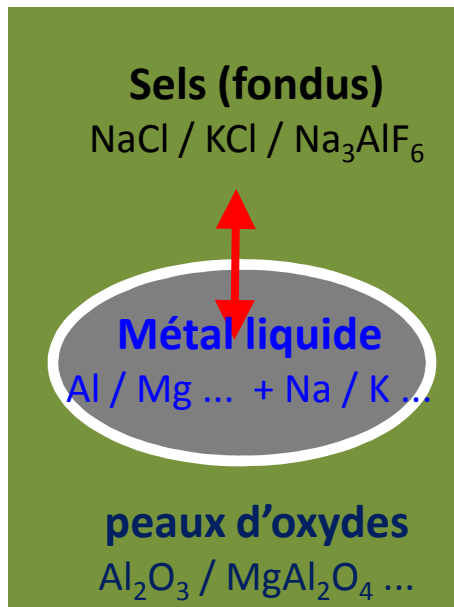
- **Recyclage**
 - Calculs 720°C



Réactions sels / métal / inclusions

- Recyclage

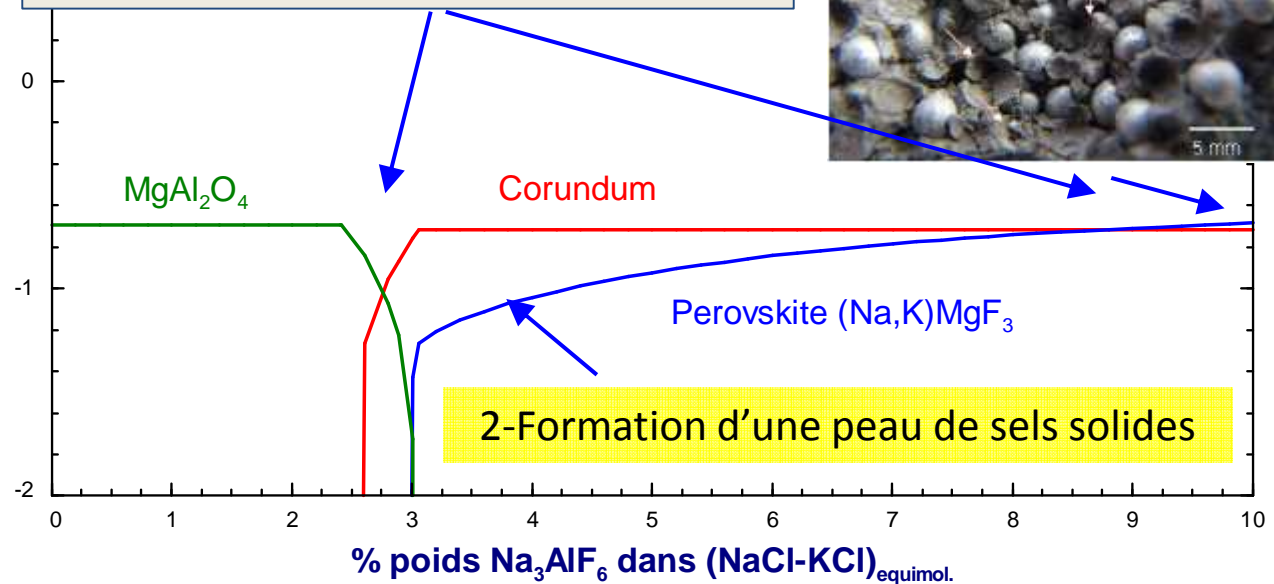
- Calculs 720°C



KMgF₃ and **Na_{0.85}K_{0.15}MgF₃** ont été observés par **XRD** sur les peaux des billes pour **2-10 % Na₃AlF₆** (S. Besson et al., 2011)



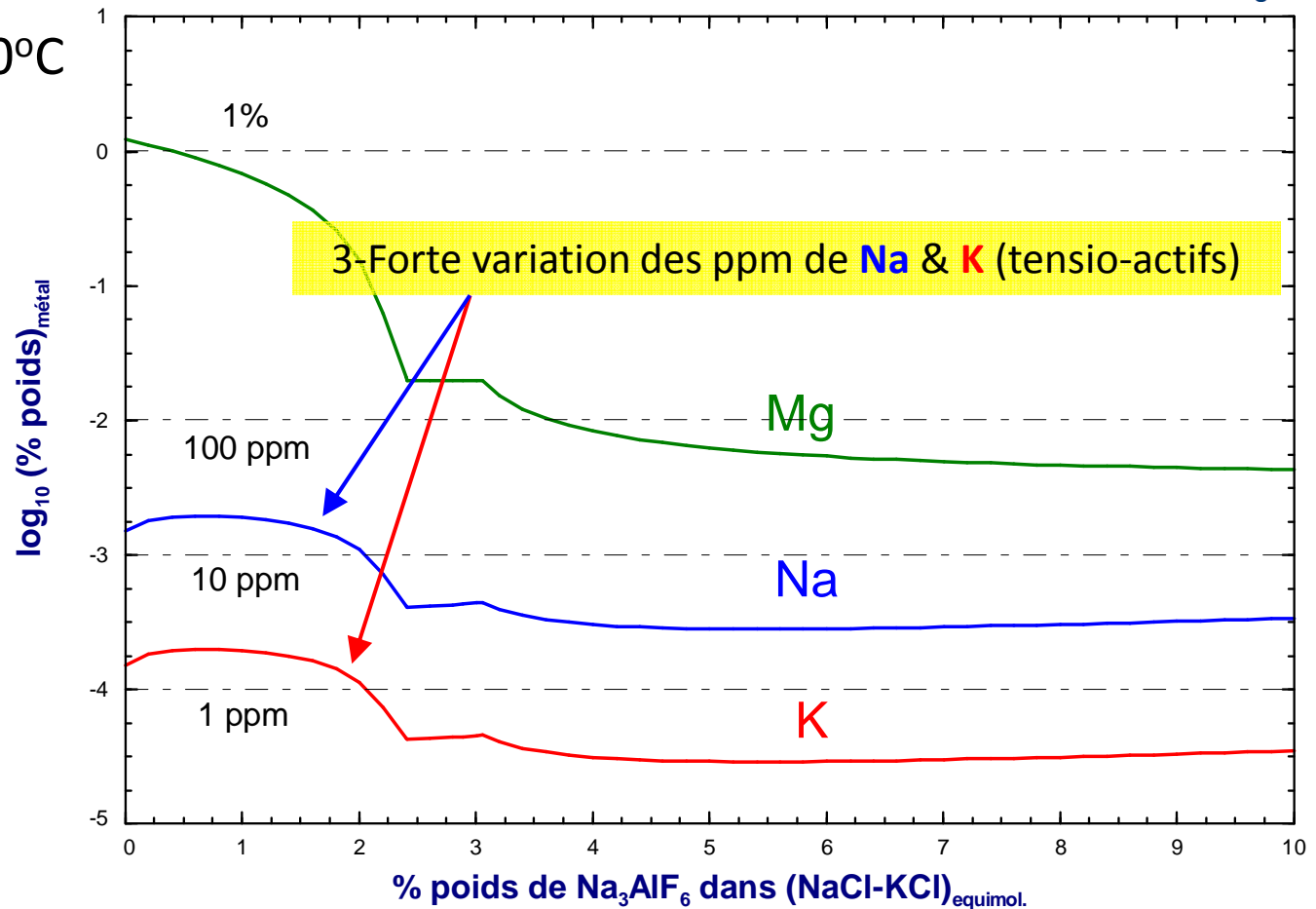
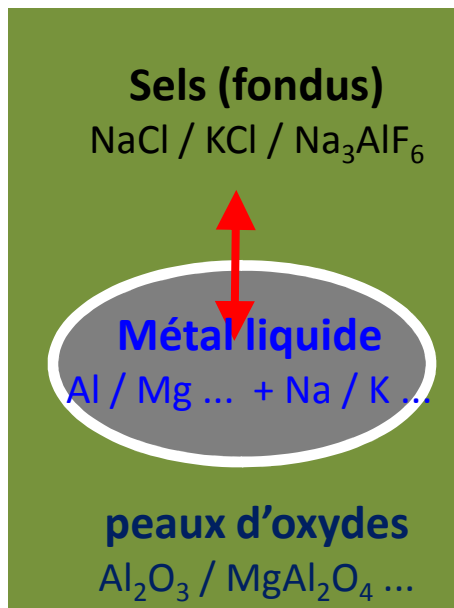
log₁₀ (grammes de produits)



Réactions sels / métal / inclusions

- Recyclage

– Calculs 720°C



Calculs d'équilibres chimiques avec FactSage

- FactSage est un **outil intéressant** pour la **planification** et **l'analyse d'expériences** impliquant des notions de thermodynamiques chimiques.
- Le problème doit être formulé de façon à limiter l'impact des aspects cinétiques, ce qui n'est pas toujours possible.
- Les calculs faits par FactSage sont limités par la **qualité des modèles** et **l'étendue des bases de données**: le projet **VLAB** est dédié à améliorer les modèles et les bases.
- FactSage est déjà l'outil de calculs thermodynamiques **multi-composants** et **multi-phasiques le plus puissant** disponible pour le traitement de **l'aluminium** liquide et de ses alliages.

Calculs d'équilibres chimiques avec FactSage

- Une interface de type « *Librairie dynamiquement liée* » (DLL) est disponible (**ChemApp.DLL**) qui permet de lier FactSage et ses bases de données à une application informatique « maison »:
 - CFD
 - Éléments finis
 - Logiciel de contrôle
 - etc...