

Berechnung von Zustandsdiagrammen ternärer metallischer Systeme aus thermodynamischen Mischungsgrößen binärer Systeme

Von

I. Ansara und E. Bonnier

Aus dem Laboratoire de Thermodynamique et Physico-chimie
métallurgiques — E.N.S.E.E.G. — Domaine Universitaire,
F-38 St. Martin d'Hères, France

Mit 6 Abbildungen

(Eingegangen am 20. April 1971)

*Calculation of Phase Diagrams of Ternary Metallic Systems
from Thermodynamic Data of Binary Mixtures*

Various methods of calculation of phase diagrams of multi-component metallic systems are discussed and compared with experimental data.

Verschiedene Berechnungsmethoden von Phasendiagrammen multikomponenter metallischer Systeme werden diskutiert und mit experimentellen Daten verglichen.

Die Bestimmung der Phasengrenzen metallischer Phasen mit mehreren Komponenten ist mit konventionellen Methoden (thermische Analyse, Mikroskopie, Radiokristallographie) schwierig, schon weil a priori keine Richtlinie zur Auswahl der Legierungszusammensetzungen verfügbar ist, die man zweckmäßigerweise einer Untersuchung unterwirft. Überdies muß für alle diese Methoden das Gleichgewicht zwischen den vorhandenen Phasen eingestellt sein. Das geht zwar bei flüssigen Phasen meist schnell, aber keineswegs auch bei festen Phasen, bei welchen die Einstellung des Gleichgewichts recht lange dauern kann. Die Bedeutung der kinetischen Faktoren, welche die Möglichkeit der Untersuchung von Phasendiagrammen begrenzen, macht sich um so mehr bemerkbar, je mehr Bestandteile die Systeme haben. Trotzdem hat die Kenntnis der Phasengrenzen und ihre Beeinflussung durch zusätzliche Komponenten für die Lösung metallurgischer Probleme hervorragendes Interesse.

Der nächstliegende Weg ist die Berechnung der Zusammensetzung der in einem Vielkomponenten-System im Gleichgewicht vorhandenen Phasen aus thermodynamischen Mischungsgrößen flüssiger und fester

Lösungen; diese sind allerdings nur für eine sehr begrenzte Zahl ternärer Systeme bekannt. Oft ist es vorteilhaft, sie aus den Mischungsgrößen der konstituierenden binären Systeme abzuschätzen, für welche Daten häufiger vorliegen.

In der vorliegenden Mitteilung behandeln wir thermodynamische Beziehungen, welche die Gleichgewichte zwischen Phasen eines Vielkomponenten-Systems ausdrücken, ferner auf Substitutionslösungen bezügliche Wechselwirkungsmodelle, die zur Bestimmung von Phasengleichgewichtsdiagrammen über den ganzen Konzentrationsbereich angewandt wurden.

Die Änderung der Freien Enthalpie ΔG eines Systems das φ miteinander im Gleichgewicht stehende Phase bildet, steht zu den Freien Enthalpien der einzelnen Phasen in folgender Beziehung:

$$\Delta G = \Delta G^{(\varphi)} + \sum_{j=1}^{j=\varphi-1} P_j (\Delta G^{(j)} - \Delta G^{(\varphi)}) \quad (1)$$

wobei P_j den Bruchteil der Phase j in einem Mol der ursprünglichen Legierung bedeutet. Es ist bekannt, daß die maximale Anzahl der Phasen, die in einem System aus m Bestandteilen im Gleichgewicht vorhanden sein können, $m + 1$ beträgt. Diese Beziehung setzt voraus, daß die Bezugszustände jeder Komponente in den verschiedenen Phasen dieselben sind. Wenn x_i den Molenbruch des Bestandteiles i im Ausgangssystem vorstellt und $x_i^{(j)}$ seinen Molenbruch in der Phase j , sind die Terme P_j mit den verschiedenen Molenbrüchen durch ein System von $(\varphi - 1)$ linearen Gleichungen verknüpft, das man in der Form

$$\|x_i - x_i^{(\varphi)}\| = \|x_i^{(j)} - x_i^{(\varphi)}\| \cdot \|P_j\| \quad (2)$$

schreiben kann, oder auch

$$\|P_j\| = \|x_i^{(j)} - x_i^{(\varphi)}\|^{-1} \cdot \|x_i - x_i^{(\varphi)}\| \quad (3)$$

Die Bestandteile i sind willkürlich gewählt.

So ist die Änderung der Freien Enthalpie ΔG des Systems gemäß Gl. (3) eine Funktion von $\varphi (m - 1)$ unabhängigen Variablen und sie hat ein Minimum, wenn alle Phasen im Gleichgewicht sind. Die Berechnung der Zusammensetzungen im Gleichgewicht bei gegebener Temperatur läuft also darauf hinaus, die Änderung der Freien Enthalpie in bezug auf jede der unabhängigen Variablen zu einem Minimum zu machen. Die Kenntnis der Mischungs-Enthalpien und -Entropien erlaubt darüber hinaus die Ableitung der zwischen x und T vorhandenen Relation und die Aufstellung des Phasengleichgewichtsdiagramms. Diese Berechnungsmethode hat *Gaye*¹ zur Bestimmung der Mischungslücke im ternären

¹ *H. Gaye* und *C. H. P. Lupis*, *Scripta Met.* **1970**, **4**, 685.

System Bi—Pb—Zn benutzt. Es ist dabei zu bemerken, daß zur Berechnung der Zusammensetzung der Phasen im Gleichgewicht eine etwas verschiedene Methode angewandt wurde: Lösung des Gleichungssystems, das die Gleichheit des chemischen Potentials μ aller Komponenten in jeder der Phasen ausdrückt, z. B. für den Bestandteil i :

$$\mu_i^{(1)} = \mu_i^{(2)} = \dots = \mu_i^{(\varphi)} \quad (4)$$

oder in Termen der Partiellen Freien Enthalpien

$$\Delta \bar{G}_i^{(1)} = \Delta \bar{G}_i^{(2)} + \Delta \bar{G}_i^{(1 \rightarrow 2)} = \dots = \Delta \bar{G}_i^{(\varphi)} + \Delta G_i^{(1 \rightarrow \varphi)} \quad (5)$$

Der Term $\Delta G_i^{(1 \rightarrow \varphi)}$ bedeutet die Änderung der Freien Enthalpie des Bestandteiles i für den Übergang $1 \rightarrow \varphi$.

Diese Gleichgewichtsbeziehungen wurden am häufigsten zur Berechnung von Phasendiagrammen binärer und ternärer Systeme verwendet; sie erweisen sich aber als umständlich, wenn das System mehr als drei Komponenten besitzt.

Im Falle eines Gleichgewichts zwischen einer flüssigen Lösung, die m Bestandteile enthält, mit dem festen Reinstoff oder mit einer intermetallischen binären Verbindung von definierter Zusammensetzung $i_\alpha j_\beta$ läßt sich die Gleichgewichtstemperatur, abgeleitet aus Gl. (4), in einer einfachen Form ausdrücken:

$$T = \frac{\Delta \bar{H}_i + L_i}{\Delta \bar{S}_i + L_i/T_i} \quad (6)$$

oder

$$T = \frac{X_i \Delta \bar{H}_i + (1 - X_i) \Delta \bar{H}_j - \Delta H_{i_\alpha j_\beta} + X_i L_i + (1 - X_i) L_j}{X_i \Delta \bar{S}_i + (1 - X_j) \Delta \bar{S}_j - \Delta S_{i_\alpha j_\beta} + X_i L_i/T_i + (1 - X_j) L_j/T_j} \quad (7)$$

$\Delta H_{i_\alpha j_\beta}$ bzw. $\Delta S_{i_\alpha j_\beta}$ sind die Änderungen der Bildungsenthalpie bzw. -entropie der definierten binären Verbindung, deren Molenbruch an i X_i beträgt, L_i bzw. T_i die Schmelzwärme bzw. die Schmelztemperatur des reinen Bestandteiles i .

Die oben angegebenen Beziehungen zeigen also, daß man zur Berechnung der Phasen-Gleichgewichtsdiagramme die Temperaturkoeffizienten der Freien Mischungsenthalpie sowie die Umwandlungsenthalpien der Reinstoffe für die verschiedenen Strukturen kennen muß. Wie schon gesagt, sind nur wenige Mischungsgrößen von Systemen aus vielen Bestandteilen bekannt. Deswegen sind Interpolationsbeziehungen, die man zur Berechnung dieser Größen aus den thermodynamischen Eigenschaften der binären Randsysteme benutzt, von großer Nützlichkeit bei der Abschätzung von Phasengleichgewichtsdiagrammen. Obgleich zahlreiche Wechselwirkungsmodelle zur Bestimmung von

Mischungsgrößen in Systemen mit vielen Bestandteilen existieren²⁻⁴, haben nur vier davon zur Berechnung von Diagrammen Anwendung gefunden; sie seien kurz beschrieben.

Modell der regulären Lösung

Bei dem Modell der regulären Lösung, das wir *Hildebrand*⁵ verdanken, ist jedes Atom von einer Schale von Nachbarn umgeben, deren Anzahl die Koordinationszahl z heißt. Die Zahl z ist unabhängig von der Natur des Zentralatoms, und auch die Zusammensetzung der Nachbarschale soll im Mittel dieselbe sein wie die der gesamten Lösung. Die Zahl der Paare ij ist also proportional dem Produkt $x_i x_j$, wobei x_i und x_j die Molbruchteile der Bestandteile i bzw. j in der Lösung sind. Die Änderung der Enthalpie ΔH ist gegeben durch

$$\Delta H = \sum_{i=1}^{i=m-1} \sum_{j=i+1}^{j=m} \lambda_{ij} x_i x_j, \quad (8)$$

wobei $\lambda_{ij} = z \mathcal{R} \left[\frac{1}{2} \varepsilon_{ii} + \frac{1}{2} \varepsilon_{jj} - \varepsilon_{ij} \right]$.

λ_{ij} ist der Wechselwirkungsparameter in der binären Lösung $i-j$. Da die Zusammensetzung der Nachbarschalen von der Natur des Zentralatoms nicht beeinflusst wird, gibt es keinen Ordnungseffekt, und die Mischungsentropie ist ideal.

*Meijering*⁶ hat dieses Modell benutzt, um den isothermen Schnitt des Systems Cu—Ni—Cr bei 1203 K zu berechnen, der mit dem experimentell gefundenen Diagramm in sehr befriedigender Weise übereinstimmt (Abb. 1 a, 1 b). *Kaufman*⁷ hat ferner die isothermen Schnitte der Systeme Mo—W—Os, Zr—Ta—W, Re—W—Ta und Re—Hr—Mo im

² J. J. van Laar, Z. Physik. Chem. **83**, 599 (1913).

³ G. Scatchard und W. J. Hamer, J. Amer. Chem. Soc. **57**, 1805 (1935).

⁴ A. Krupkowski, Bull. Acad. Pol. Sci. et Lett. **A 1951**, 15; E. Bonnier und R. Caboz, C. r. hebdomad. Sé. Acad. Sci. **250**, 527 (1960); C. H. P. Lupis, Ph.D. Thesis, Mass. Inst. Technol., Boston, 1965; C. H. P. Lupis und J. F. Elliott, Acta Met. **15**, 265 (1967); J. C. Mathieu, F. Durand und E. Bonnier, J. Chim. Physique **11—12**, 1289 (1965); J. C. Mathieu, F. Durand und E. Bonnier, J. Chim. Phys. **11—12**, 1297 (1965); B. Brion, J. C. Mathieu, P. Hieter und P. Desre, J. Chim. Phys. **66**, 1238 (1969); G. W. Toop, Trans. MS. AIME, **233**, 850 (1965); G. W. Wilson, J. Amer. Chem. Soc. **86**, 127 (1964); C. Colinet, D.E.S., Fac. des Sci., Univ. Grenoble, 1967.

⁵ J. H. Hildebrand, J. Amer. Chem. Soc. **51**, 66 (1929).

⁶ J. L. Meijering, Acta Met. **5**, 527 (1957); J. L. Meijering, G. W. Rathewai, M. G. van der Steeg und P. B. Braun, J. Inst. Met. **56**, 84, 118 (1955).

⁷ L. Kaufman und H. Bernstein, Computer Calculation of Phase Diagrams. Academic Press. 1970.

Temperaturbereich zwischen 1800 und 3000 K bestimmt. Das Diagramm Ge—Bi—Si ist von *Hurle*⁸ abgeschätzt worden.

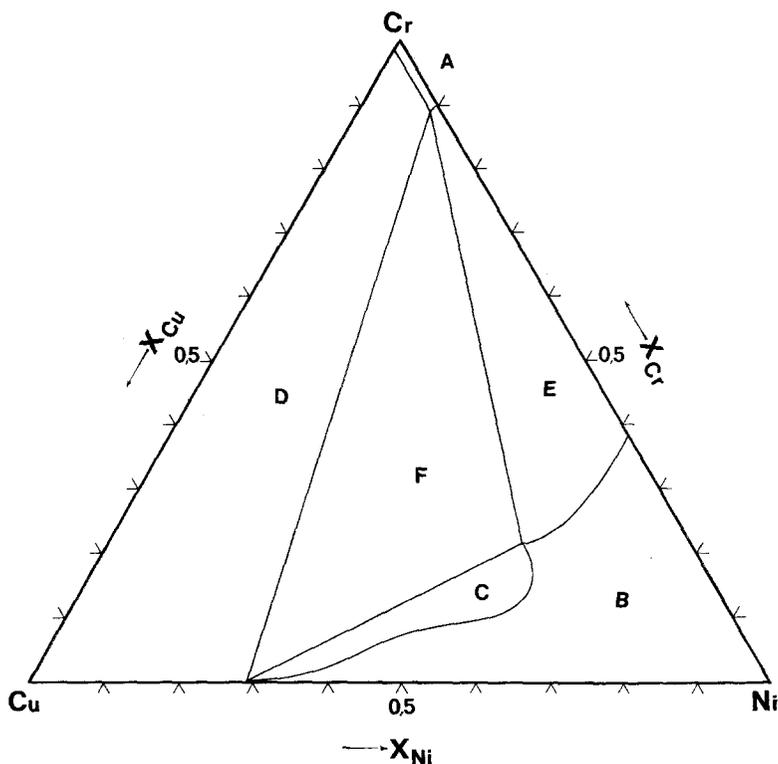


Abb. 1. a) Experimentelles Phasendiagramm des Systems Ni—Cr—Cu bei 930° C⁸. A: homogene kubisch-raumzentrierte Lösung. B: homogene kubisch flächenzentrierte Lösung; C: zweiphasig kubisch-flächenzentrierter Bereich; D: zweiphasiger Bereich, kubisch raumzentriert + kubisch flächenzentriert (Cu-reich); E: zweiphasiger Bereich, kubisch raumzentriert und kubisch flächenzentriert (Ni-reich); F: dreiphasiger Bereich, kubisch raumzentriert und 2mal kubisch flächenzentriert (reproduz. aus⁶)

Quasi-chemisches Modell

Das quasichemische Modell von *Guggenheim*⁹ behält identische Koordinationszahlen für alle Atome bei, berücksichtigt aber die Nahordnung, welche durch die konkurrierende Wechselwirkung verschiedener Nachbaratome auf ein zentrales Atom entsteht; diese Nahordnung

⁸ D. T. J. Hurle und E. R. Pike, *J. Mat. Sci.* 399 (1966).

⁹ E. A. Guggenheim, *Mixtures*. Oxford: Clarendon Press. 1952.

wird ausgedrückt durch Gl. (9), welche n_{ij} liefert, die Zahl der Paare ij im chemischen Gleichgewicht mit den Paaren ii und jj

$$n_{ij}^2 = (n_i - \sum_{k=1}^{k=m} \delta_{ij} n_{ik}) (n_j - \sum_{l=1}^{l=m} \delta_{ij} n_{il}) \exp(-2 \lambda_{ij}/z k T) \quad (9)$$

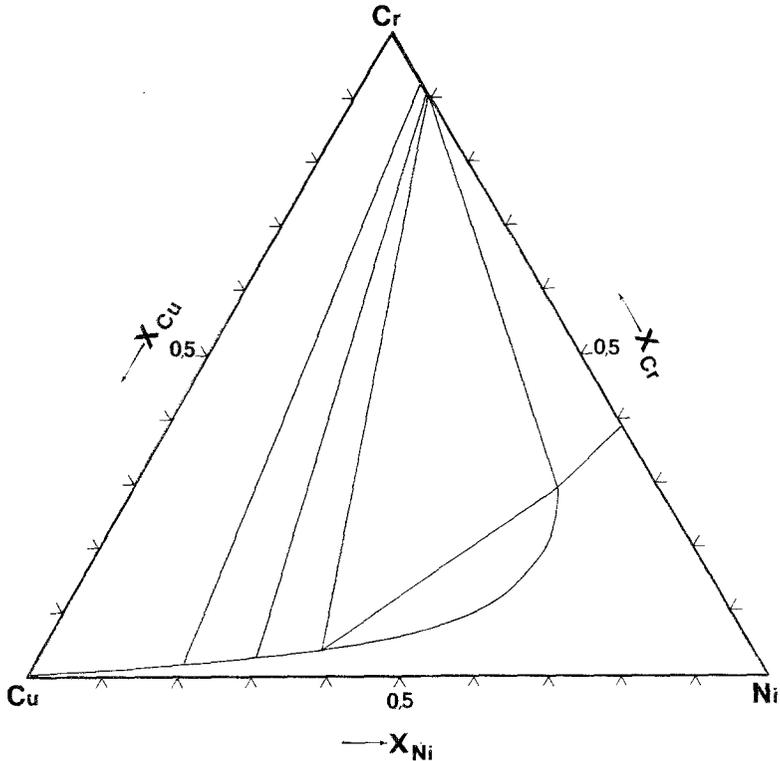


Abb. 1. b) Isothermer Schnitt des Systems Ni—Cr—Cu. berechnet⁶, (reproduz. aus⁶)

wobei δ_{ij} , der *Kroneckerindex*, den Wert 1 oder 0 annimmt, je nachdem, ob i gleich oder ungleich j .

Die Änderung der freien Überschußenthalpie der Mischung folgt aus Gl. (10):

$$\Delta G^{xs} = \sum_{i=1}^{i=m} (RT z/2) x_i \ln [(n_i - n \sum_{k=1}^{k=m-1} \delta_{ij} n_{ik}) / n x_i^2]. \quad (10)$$

Die Änderung der Mischungsenthalpie ergibt sich aus Gl. (11):

$$\Delta H = \sum_{i=1}^{i=m-1} \sum_{j=i+1}^{j=m} \lambda_{ij} (n_{ij}/n) \quad \text{mit} \quad n = \sum_i n_i \quad (11)$$

Der Parameter λ_{ij} ist derselbe wie in Gl. (8) und wird aus den experimentell bestimmten Werten aller binären Randsysteme abgeleitet. Die verschiedenen Werte von n_{ij} werden durch Lösung des Systems von C_m^2 -Gleichungen, die durch (9) definiert sind, erhalten.

*Stringfellow*¹⁰ hat dieses Modell benutzt, um die isothermen Schnitte der Systeme In—Ga—As, In—As—Sb, Ge—Si—Sn und Ge—Si—Pb bei Temperaturen zwischen 1100 und 1300 K zu berechnen. Die Übereinstimmung mit den experimentellen Werten ist ausgezeichnet.

Die statistischen Modelle, verbunden mit Hypothesen betreffs der Wechselwirkungsenergien der Atome, haben ihre Nützlichkeit zur Beschreibung der Konfiguration der Lösungen und damit bei der Bestimmung der thermodynamischen Mischungsgrößen erwiesen. Trotzdem wendete man die oben beschriebenen Modelle nur bei einer beschränkten Zahl von Systemen an. Sie bedingen eine Symmetrie der thermodynamischen Funktionen hinsichtlich der Zusammensetzung, die man im allgemeinen experimentell nicht bestätigt findet. Ferner ist zu bemerken, daß diese Modelle nur einen einzigen Parameter benötigen, um die thermodynamischen Eigenschaften als Funktion des Molenbruches für jedes binäre Randsystem darzustellen.

Polynomische Beziehungen

Auch empirische analytische Beziehungen¹¹ wurden verwendet zur Interpolation thermodynamischer Mischungsgrößen in ternären Systemen oder Systemen aus m Komponenten. Eine Überschußgröße X^{xs} läßt sich in der allgemeinen Form schreiben:

$$X^{xs} = \sum_1^m x_i \sum_1^m x_j a_{ij} + \sum_1^m x_i \sum_1^m x_j \sum_1^m x_k a_{ijk} + \dots \quad (12)$$

Die Terme a_{ij} , $a_{ijk} \dots$ sind Konstanten, wobei einerseits $a_{ijk} = a_{jik} = a_{kij}$, andererseits $a_{iii} = a_{jjj} = 0$ gilt.

In dieser Relation sind Koeffizienten enthalten, die nicht aus der bloßen Kenntnis der binären Randsysteme abgeleitet werden können, und deshalb wurden sie hauptsächlich verwendet, um experimentelle Daten in den ternären Systemen in analytischer Form darzustellen. *Fiorani* hat so seine experimentellen Daten der Systeme Cd—Bi—Zn, Pb—Sn—Zn und Cd—Pb—Zn¹² wiedergegeben, was ihm überdies ermöglichte, die Mischungslücken im flüssigen Zustand zu berechnen.

¹⁰ G. B. Stringfellow und P. E. Greene, J. Phys. Chem. Solids **30**, 1779 (1969); G. B. Stringfellow und P. E. Greene, J. Electrochem. Soc., Solid State Sci. **117**, 1075 (1970).

¹¹ K. Wohl, Trans. Amer. Inst. Chem. Engng. **42**, 215 (1946).

¹² M. Fiorani und L. Oleari, Ric. Sci. **29**, 2349, 2372 (1959).

Kohlersche Beziehung

Kohler¹³ hat vorgeschlagen, die Freie Überschußenthalpie eines homogenen ternären Systems auszudrücken durch die Beziehung:

$$\Delta G^{xs} = (x_A + x_B)^2 (\Delta G_{AB}^{xs})_{x_A/x_B} + (x_A + x_C)^2 (\Delta G_{AC}^{xs})_{x_A/x_C} + (x_B + x_C)^2 (\Delta G_{BC}^{xs})_{x_B/x_C} \quad (13)$$

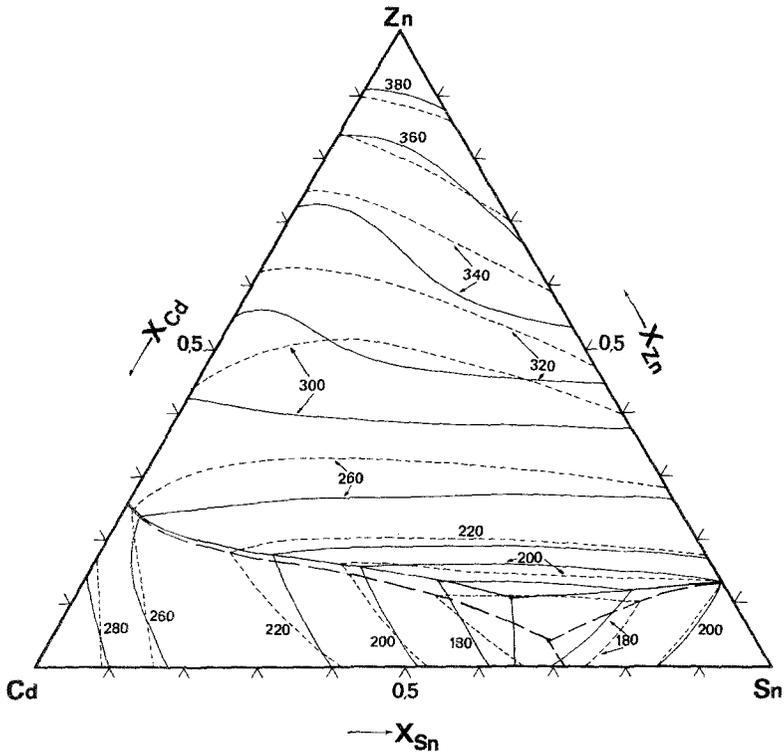


Abb. 2. Liquidus des Systems Cd—Sn—Zn, exper.¹⁴ - - - - -, ber.¹⁵ ——— (Temp. in °C)

in der G_{AB}^{xs} , G_{AC}^{xs} und G_{BC}^{xs} Änderungen der Freien Überschußenthalpien binärer Randsysteme sind, genommen für die Werte x_A/x_B , x_A/x_C und x_B/x_C , also entlang der quasibinären Schnitte. Diese Gleichung wurde

¹³ F. Kohler, Mh. Chem. **91**, 738 (1960).

¹⁴ R. Lorenz und D. Plumbridge, Z. Anorg. Allgem. Chem. **83**, 228 (1913).

¹⁵ I. Ansara, P. Desre und E. Bonnier, C. r. hebdomad. Sé. Acad. Sci. **270**, 1098 (1970).

auch von *Olson*¹⁶ vorgeschlagen und von *Kehiaian*¹⁷ erweitert auf Systeme aus m Bestandteilen. In diesem Falle erhält G^{xs} die Form:

$$\Delta G^{xs} = \sum_{i=1}^{i=m-1} \sum_{j=i+1}^{j=m} (x_i + x_j)^2 (\Delta G_{ij}^{xs}) x_i/x_j \quad (14)$$

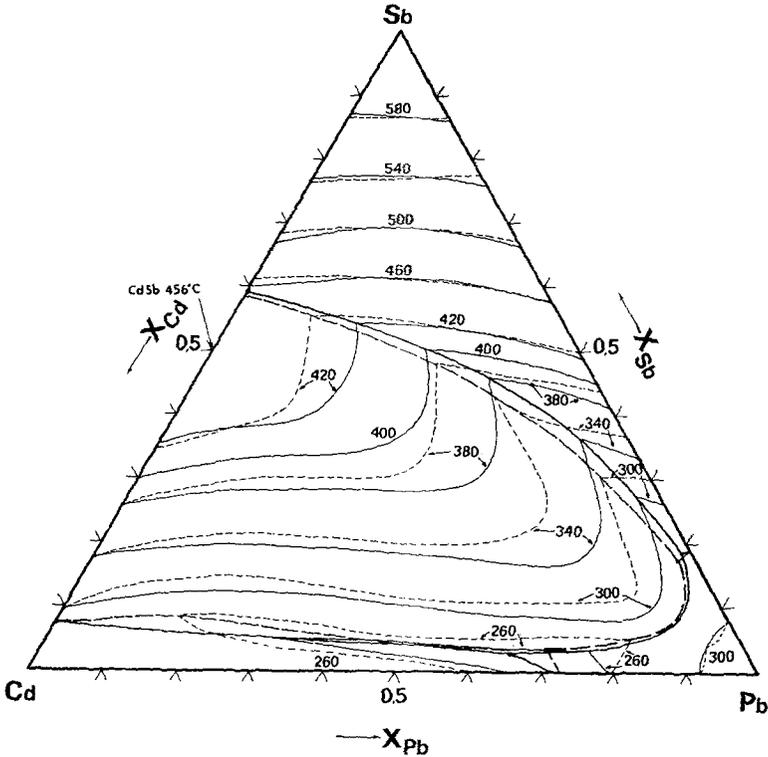


Abb. 3. Liquidus des Systems Cd—Pb—Sb, exper.¹⁸ - - - - ber. ——— (Temp. in °C)

Die Änderung der zusätzlichen partiellen freien Enthalpie einer der Komponenten k ist gegeben durch die Beziehung:

$$\Delta \bar{G}_k^{xs} = \sum_{i=1}^{i=m} (x_i + x_k) (\Delta G_{ik}^{xs} + \Delta \bar{G}_{k(ik)}^{xs}) x_k/x_i - \sum_{i=1}^{i=n-1} \sum_{j=i+1}^{j=m} (x_i + x_j)^2 (\Delta G_{ij}^{xs}) x_i/x_j. \quad (15)$$

¹⁶ N. J. Olson und G. W. Toop, Trans. MS. AIME **236**, 590 (1966).

¹⁷ H. Kehiaian, Bull. Acad. Pol. Sci. **14**, 153 (1966).

¹⁸ E. Abel, O. Redlich und L. Adler, Z. Anorg. Allgem. Chem. **174**, 269 (1928).

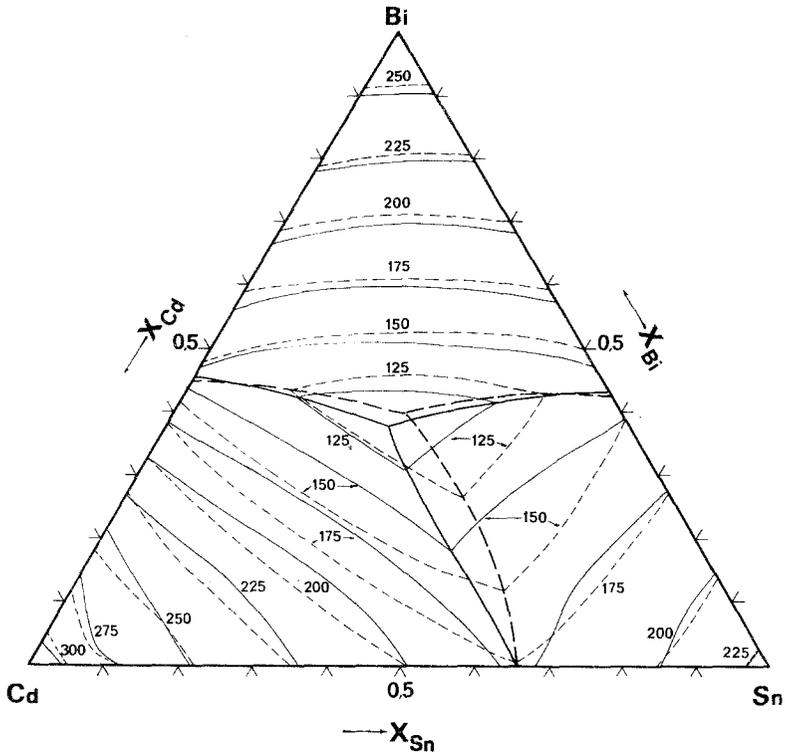


Abb. 4. Liquidus des Systems Cd—Bi—Sn, exper.¹⁹ - - - -, ber. - - - -
(Temp. in °C)

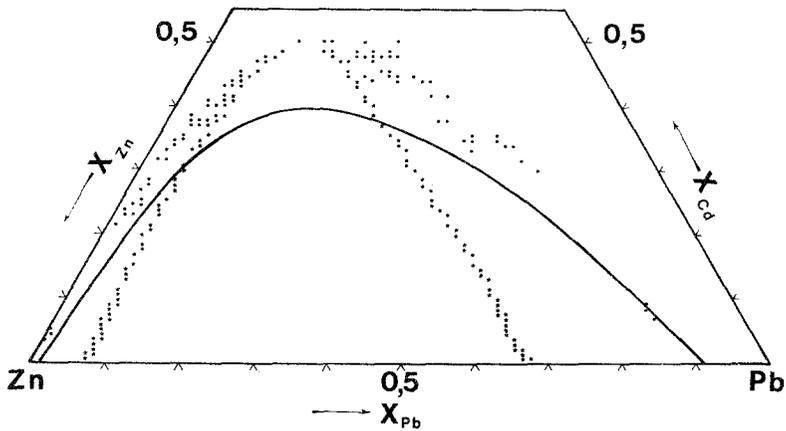


Abb. 5. Isothermer Schnitt des Systems Cd—Pb—Zn, exper.¹² ———, ber.²⁰, Grenze des zweiphasigen Bereiches ** Spinodalkurve

¹⁹ H. J. Bray, F. D. Bell und S. J. Harris, *J. Inst. Met.* **90**, 24 (1961 bis 1962).

Die Änderungen der Mischungs-Enthalpie und der zusätzlichen Mischungs-Entropie können als Funktion der entsprechenden Größen der binären Systeme ausgedrückt werden durch eine zu den Gl. (13) oder (14) analoge Gleichung.

Die *Kohler*-Gleichung hat unter den beschriebenen Modellen den großen Vorteil, daß sie experimentelle Größen der binären Randsysteme

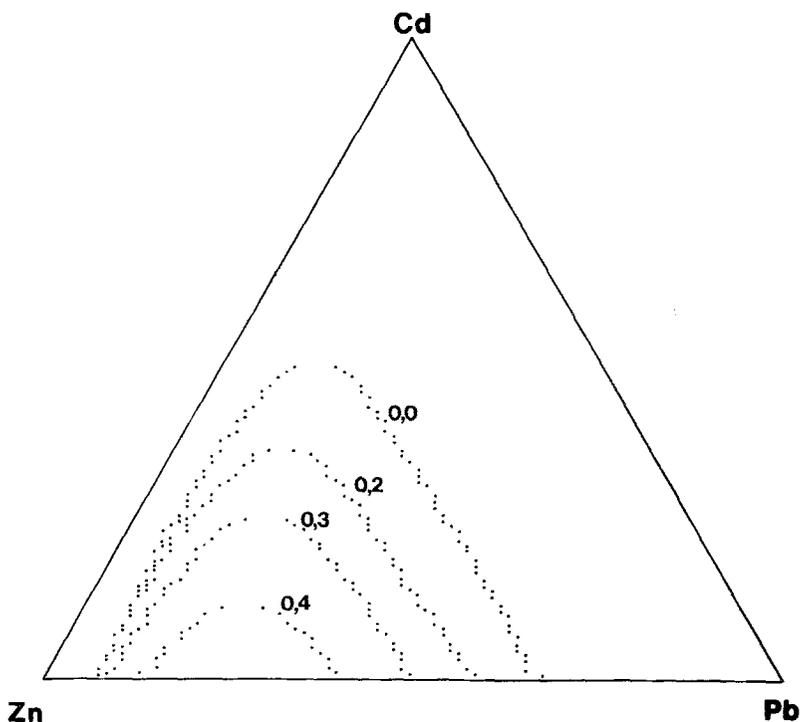


Abb. 6. Schnitte der Spinodalfläche im System Cd—Sn—Zn—Pb bei 500° C für $x_{\text{Sn}} = 0,0, 0,2, 0,3, 0,4$

benutzt, und nicht fiktive Werte, die durch eine analytische Approximationsbeziehung gegeben sind.

Die Beziehungen (6) und (7) wurden zur Berechnung der Schmelzdiagramme in den ternären Systemen Cd—Sn—Zn, Cd—Pb—Sb¹⁶ und Cd—Pb—Bi verwendet (Abb. 2, 3, 4). Es ist auch die experimentell gefundene Kurve eingezeichnet, die Übereinstimmung ist besonders befriedigend.

Die Mischungslücken der Systeme Cd—Pb—Zn, Sn—Pb—Zn, Al—Pb—Sn²⁰, Ag—Pb—Sn²¹ wurden mittels der Beziehung (8) bestimmt,

²⁰ I. Ansara, P. Desre und E. Bonnier, J. Chim. Phys. **66**, 297 (1969).

²¹ N. J. Olson und G. W. Toop, Trans. MS. AIME **245**, 905 (1969).

ein Beispiel dafür zeigt Abb. 5. Der Verlauf ergibt sich fast automatisch und die so erhaltene Kurve ist in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Befunden von Fiorani¹². Auf der Abb. ist auch die Spinodalkurve eingezeichnet. Diese ist gegeben durch die Bedingung:

$$|G_{ij}| = 0 \text{ für } i, j = 1, 2, \dots, m = 1,$$

wobei $G_{ij} = \partial G / \partial x_i \partial x_j$.

Die Resultate der Gl. (10) ergeben sich durch numerische Berechnung, wobei die Zusammensetzung, welche für die Spinodalkurve charakteristisch ist, durch den Übergang der Determinante G_{ij} von einem positiven in einen negativen Wert gekennzeichnet ist.

Abb. 6 zeigt Abschnitte der für 500° berechneten Spinodalfläche für das quaternäre flüssige System Cd—Pb—Sn—Zn für verschiedene Werte von x_{Sn} (0,0, 0,2, 0,3, 0,4). Die verwendete Darstellung entspricht einem Tetraeder, dessen Spitze Sn im Unendlichen liegt. Unterhalb $x_{\text{Sn}} = 0,4$ ist die flüssige Lösung homogen.

Die dargelegten Ergebnisse zeigen, daß in erster Näherung die Abschätzung von Phasendiagrammen auf Grund von Modellen, welche auf den thermodynamischen Eigenschaften der binären Randsysteme basieren, zu einer befriedigenden Wiedergabe der experimentellen Ergebnisse führt. Während zahlreiche Mischungsdaten für flüssige Lösungen vorliegen, ist dies bei festen Phasen nicht so. Die komplette experimentelle Untersuchung eines binären Systems, die sich auf die Aufstellung der Gleichgewichtsphasendiagramme einerseits, auf die Bestimmung der thermodynamischen Eigenschaften andererseits erstreckt, ist also wünschenswert. Sie ist Voraussetzung für die Möglichkeit, sowohl die Modelle als auch die Mischungsdaten systematisch für eine Vorausberechnung der Phasengrenzen zu verwerten.