

Stahl ab initio

Im Sonderforschungsbereich 761 „Stahl ab initio – Quantenmechanisch geführtes Design neuer Eisenbasis-Werkstoffe“ arbeiten Naturwissenschaftler und Ingenieure vom Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf und der RWTH Aachen zusammen an der Entwicklung neuer Werkstoffe. Dies geschieht unter anderem auf Basis von ab initio Ansätzen, also unter Nutzung von lediglich auf Naturkonstanten aufbauenden numerischen Modellen, sowie weiteren mesoskopischen Modellierungsansätzen. Damit sollen ein neuer Weg zur schnellen und zielgerichteten Entwicklung einer neuen Gruppe von Strukturwerkstoffen aufgezeigt und gleichzeitig ab initio Ansätze für ingenieurwissenschaftliche Fragestellungen in der Werkstofftechnik eingesetzt und weiterentwickelt werden.

Auswahl des Legierungssystems Fe-Mn-C

Ziel ist es, das Legierungssystem Fe-Mn-C im Hinblick auf seine Eignung zur Entwicklung neuer Strukturwerkstoffe zu untersuchen. Dabei ist das System Fe-Mn-C vor allem für Anwendungen von Interesse, die eine Kombination von hoher Festigkeit einerseits und guter Kaltumformbarkeit, hohem Verschleißschutz oder guten Tieftemperatureigenschaften andererseits erfordern. Es wurde gewählt, da die Eigenschaften dieses Legierungssystems im Wesentlichen durch die chemische Zusammensetzung beeinflusst werden, so dass die Werkstoffe für eine thermodynamische Modellierung besonders geeignet erscheinen. Das Werkstoffverhalten mit seiner außergewöhnlich attraktiven Kombination von hoher Festigkeit bei gleichzeitig guter Umformbarkeit kann bei diesen Stählen auf unterschiedliche Verformungsmechanismen zurückgeführt werden. Abhängig von der Stapelfehlerenergie treten die Verformungsmechanismen homogenes oder inhomogenes Versetzungsgleiten, mechanische induzierte Martensitbildung – TRIP-Effekt

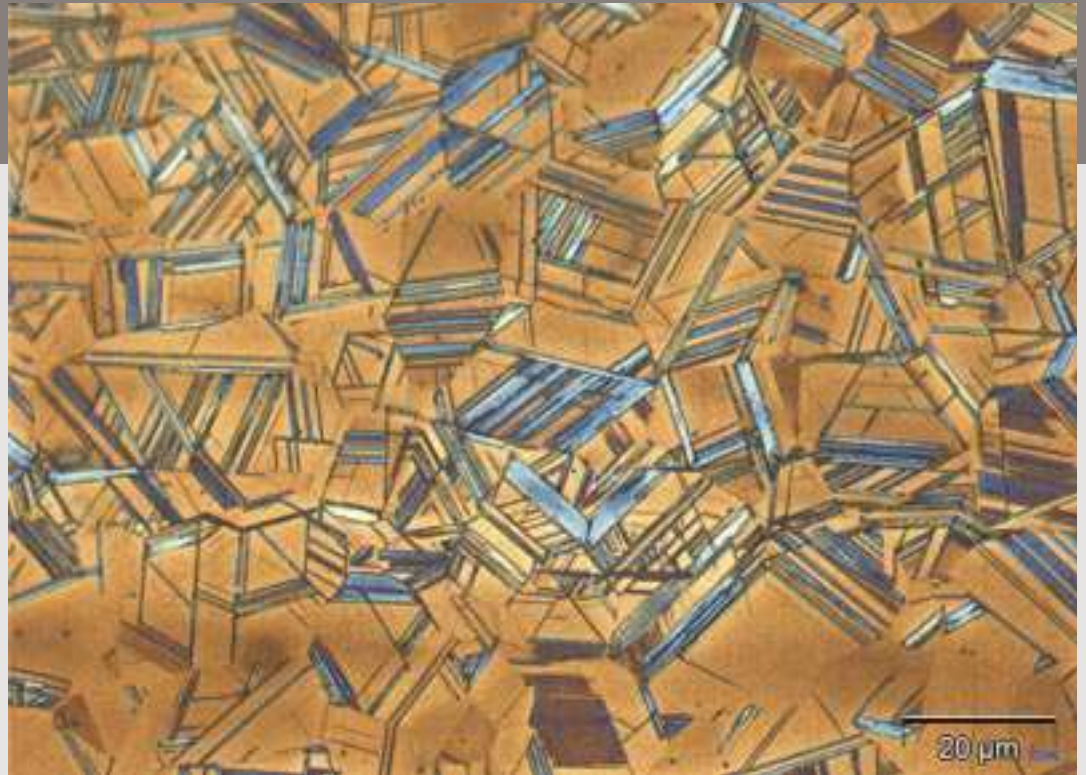


Bild 1: Gefüge eines hochmanganhaltigen Stahles. Braun erscheint das austenitische Grundgefüge, hellblau die durch Verformung aufgetretenen Martensitlamellen (TRIP-Effekt).

(transformation induced plasticity) – mechanisch induzierte Zwillingsbildung – TWIP-Effekt (twinning induced plasticity) – im Material auf.

Bei der Gefügebildung ist es deshalb besonders wichtig, die Phasenstabilität des Austenits zu kennen, was im Wesentlichen über die Ermittlung der Stapelfehlerenergie erfolgt.

Ein Stapelfehler ist ein zweidimensionaler Gitterfehler, der sich in einer kubischflächenzentrierten Struktur dadurch darstellt, dass die regelmäßige Reihenfolge der dichtest gepackten Ebenen unterbrochen wird. Man kann sich dies anschaulich so vorstellen, dass eine eingeschobene Versetzung in zwei Partialversetzungen aufgespalten wird und sich diese Partialversetzungen in einem definierten Abstand zueinander anordnen. Zwischen Ihnen wird ein Stapelfehler aufgespannt, in dem die normale Reihenfolge der dichtest gepackten Ebenen der kubisch-flächenzentrierten

Kristallstruktur nicht mehr gegeben ist. Mit dieser Anomalie in der Reihenfolge verbunden ist als Werkstoffkenngröße eine charakteristische Energie: die Stapelfehlerenergie. Da sowohl die Zwillingsbildung als auch die Martensitbildung mittels Partialversetzungen interpretiert werden können, ist das Vorhandensein und die Aufspaltungswerte von Partialversetzungen und damit letztendlich die Stapelfehlerenergie ein Parameter, der die verschiedenen Verformungsmechanismen in kubisch-flächenzentrierten Werkstoffen steuert. Die Stapelfehlerenergie hat für die Modellierung eine verbindende Funktion, da sie einerseits für theoretische Chemiker und Physiker als Kenngröße mittels ab initio Ansätzen berechenbar ist, andererseits für Werkstoffingenieure einen Materialparameter darstellt, der die Auswahl verschiedener Verformungsmechanismen und damit die Beeinflussung der mechanischen Eigenschaften ermöglicht.

Methodischer Ansatz

Im Sonderforschungsbereich werden unterschiedliche Modellierungsansätze verfolgt. Dabei wird keine durchgehende Prozesssimulation vorgenom-

men und auch nicht für alle untersuchten Phänomene eine alle Skalen übergreifende Werkstoffmodellierung angestrebt. Vielmehr sollen die wichtigsten thermodynamischen, kinetischen und mikromechanischen Effekte in den Grundlagen erkenntnisorientiert auf der jeweils für das Phänomen wichtigen Größenskala behandelt werden. Die Phänomene werden dann skalenübergreifend mittels „Scale hopping“ betrachtet; darunter wird beispielsweise verstanden, das auf der atomistischen Ebene erhaltene quantenmechanische Informationen unmittelbar in mikrostrukturellen oder makroskopischen Modellen eingesetzt werden.

Eine Besonderheit ist, dass in mehreren Teilprojekten ab initio Methoden zum Einsatz kommen. Darunter versteht man, dass basierend auf der Elektronenkonfiguration die Bindungsverhältnisse von Molekülen und Kristallstrukturen vorhergesagt werden können. Grundlage hierfür ist die Schrödinger-Gleichung, die in ihrer allgemeinen Form bereits 1926 aufgestellt wurde. Mit der Einführung von vereinfachenden Annahmen zur gegenseitigen Beeinflussung von Elektronen in

Neue Methoden zur Entwicklung von Strukturwerkstoffen

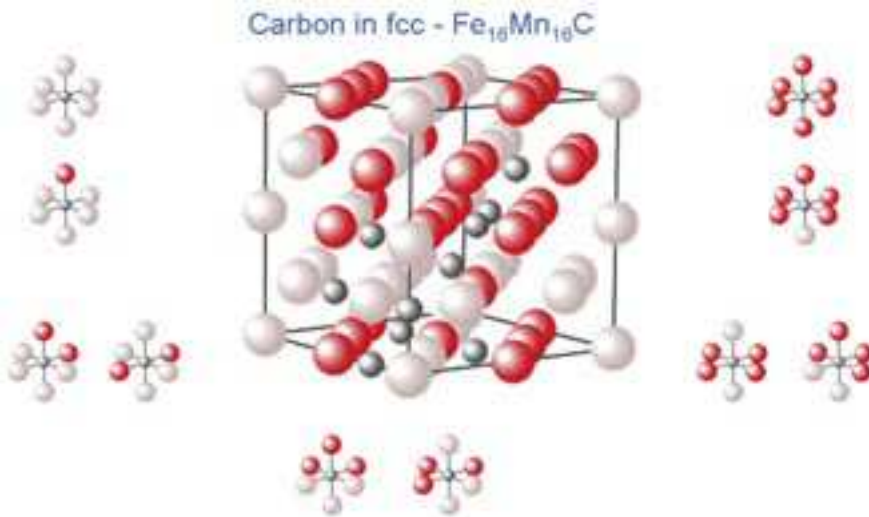
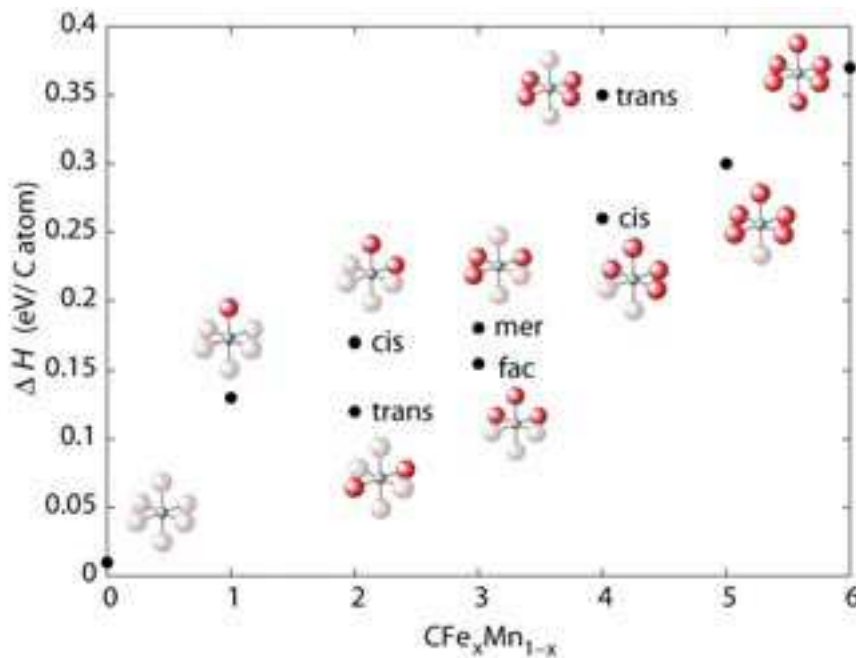


Bild 2: Ab initio Berechnung der Bindungsenthalpie der unterschiedlichen Fe-Mn-C-Konfigurationen.



der Dichtefunktionaltheorie können nun auch Viel-Elektronensysteme wie beispielsweise Festkörper behandelt werden, weil die erforderliche Rechenleistung zur Lösung der Schrödinger-Gleichung deutlich sinkt. Die ab initio Modellierung wird beispielsweise dort genutzt, wo es um das grundlegende Verständnis der Wirkung von Fremdatomen

in einer Matrix geht, also zum Beispiel der Rolle von Legierungselementen oder der Wechselwirkung von interstitiellen und substitutionellen Atomen.

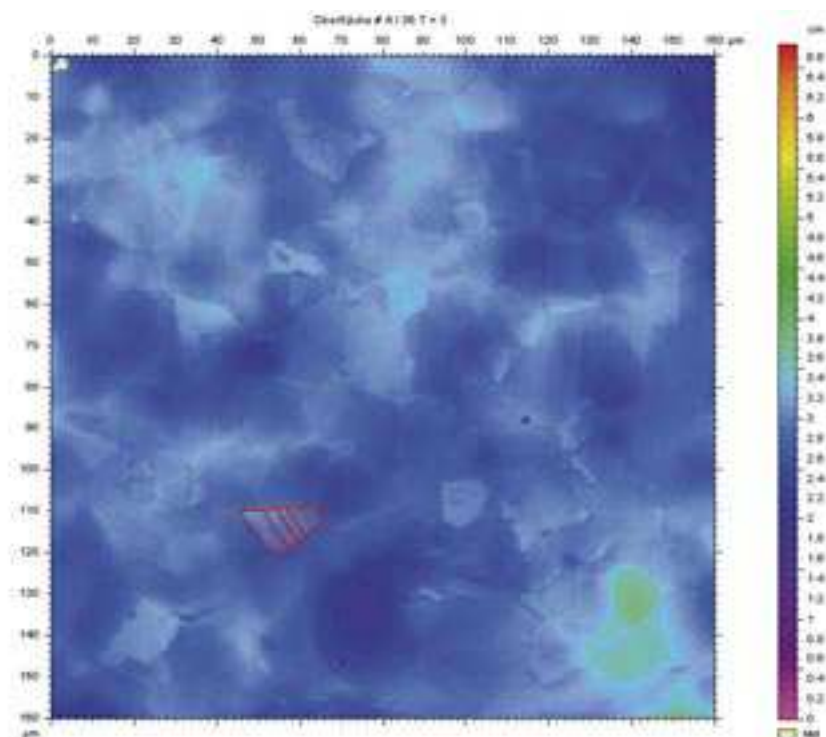
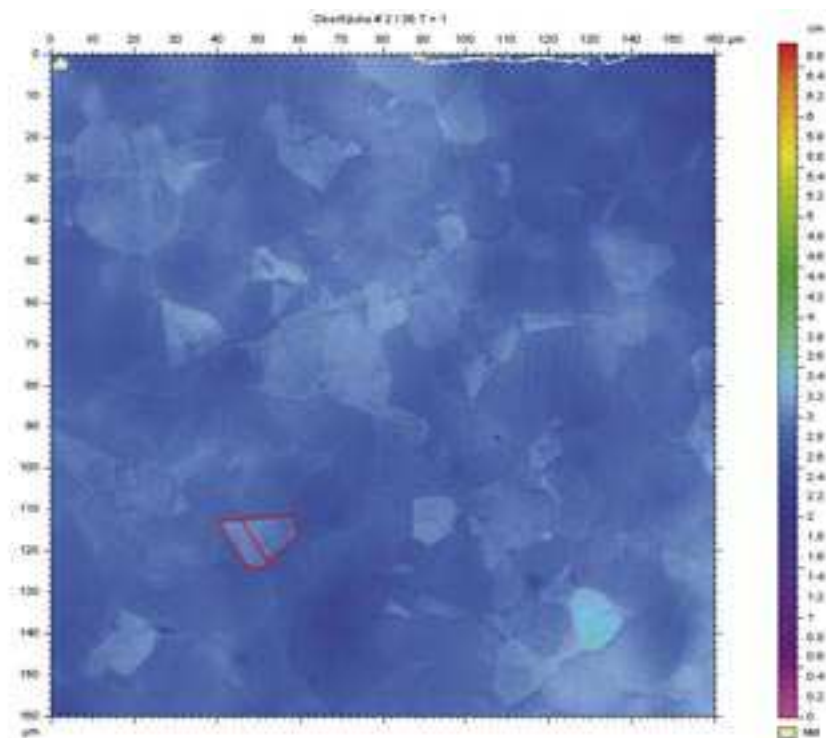
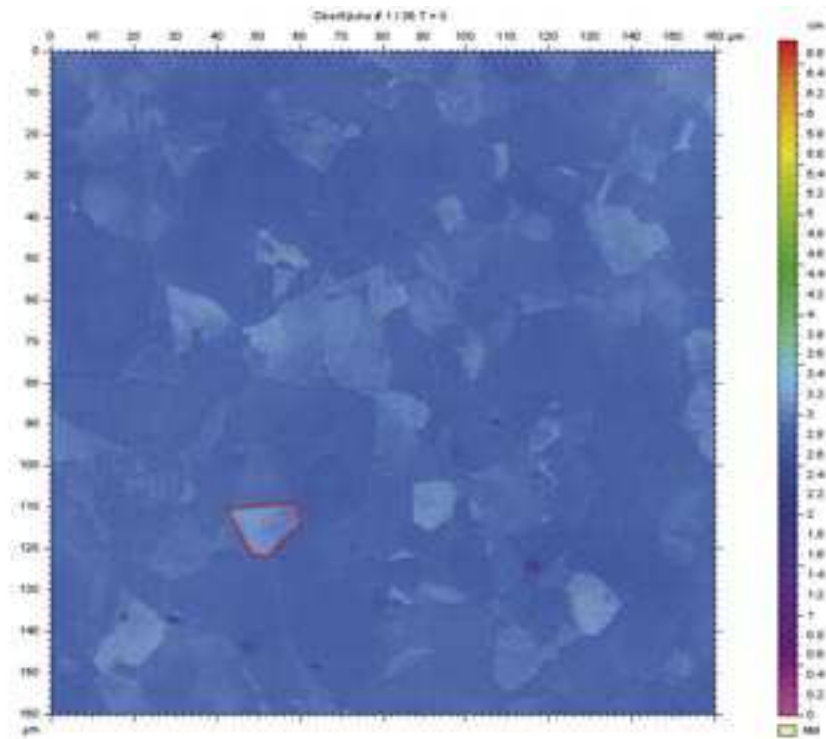
Parallel zu den theoretischen Ansätzen werden experimentelle Arbeiten durchgeführt. Hier liegen die Herausforderungen einerseits in der Technologieentwicklung zur Herstellung der

hoch legierten Werkstoffe; andererseits werden neue Untersuchungsmethoden für gezielte wissenschaftliche Fragestellungen entwickelt. Weiterhin dienen umfangreiche experimentelle Untersuchungen sowohl zur Charakterisierung des Werkstoffverhaltens als auch zur Evaluierung der numerischen Modellierung.

Ab initio Berechnungen mit Superzellen

Auf atomarer Skala werden lokale Ordnungsphänomene untersucht, die experimentell nicht zugänglich sind, wie zum Beispiel die kohlenstoffinduzierte Nahordnung von Fe- und Mn-Atomen. Nachdem gezeigt werden konnte, dass in binären Fe-Mn-Legierungen die Verteilung der Metallatome auf die Plätze des Gitters statistisch verteilt erfolgt, wird in einem Rechnerexperiment eine Fe-Mn-Superzelle aus 16 Eisen- und 16 Manganformen aufgebaut. Diese Superzelle beinhaltet alle denkbaren Typen von Oktaederlücken mit unterschiedlicher Anordnung der Eisen- und Manganatome. Ein einzelnes Kohlenstoffatom wird nacheinander in die zehn möglichen unterschiedlich koordinierten Oktaederlücken eines kubisch-flächenzentrierten Fe/Mn-Gitters eingelagert und jeweils die theoretische Reaktionsenthalpie berechnet. In einer Auftragung der Enthalpiedifferenzen gegen die Zahl der direkten Eisennachbarn (rote Atome) zeigt sich, dass umso mehr Energie aufgebracht werden muss, je eisenreicher das Oktaeder um den Kohlenstoff ist, siehe Bild 2. Die größte Reaktionswärme wird demnach frei, wenn das C-Atom von einem reinen Mn6-Oktaeder, das in einer statistischen Verteilung jedoch äußerst selten vorkommt, umgeben ist. Diese Rechnung wurde für 0 Kelvin durchgeführt; es wird angenommen, dass der Enthalpieunterschied von etwa 35 kJ in dieser Größenordnung vom Entropieverlust bis zur Schmelztemperatur nicht ausgeglichen werden kann, so dass eine Nahordnung von Kohlenstoff und Mangan auch bei den technisch interessanten Temperaturen wahrscheinlich ist.

Bild 3: Konfokalmikroskopisch ermittelte Oberflächentopographie eines zwillingsbildenden hochmanganhaltigen Stahles in drei Stadien der Umformung im Zugversuch. Oben: unverformt, mitte, 2 Prozent Dehnung, unten: 6 Prozent Dehnung. Das in Rot hervorgehobene austenitische Korn zeigt mit zunehmender Dehnung parallele Strukturen, welche als Gleitstufen oder Zwillinge interpretiert werden können.



Experimentelle Ermittlung mechanischer Eigenschaften

Die Zusammenhänge der auf verschiedenen Skalen berechneten Einflussgrößen mit den erwarteten Verformungsmechanismen werden in einem nächsten Schritt experimentell überprüft. Dazu werden verschiedene Korngrößen im Gefüge eingestellt sowie unterschiedliche Prüftemperaturen und Dehngeschwindigkeiten im Zugversuch ausgewählt. Für Gefügeuntersuchungen werden lichtoptische Methoden wie die konfokale Mikroskopie (siehe Bild 3) und TEM-Techniken genutzt. Wo diese Methoden an ihre Grenzen stoßen, werden unterstützend EBSD- und XRD-Techniken eingesetzt, um die Martensit- oder Zwillingsbildung genau differenzieren zu können. Das Ziel ist, über das Verständnis der Grundlagen der Zwillings- und Martensitbildung und deren Kontrolle eine möglichst genaue Vorhersage der Verformungsmechanismen anhand von chemischer Zusammensetzung, Korngröße und Umformparametern zu treffen.

22

Autoren:

Dr.rer.nat. Jörg von Appen ist Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Anorganische Chemie. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Bleck ist Inhaber des Lehrstuhls und Leiter des Instituts für Eisenhüttenkunde. Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Richard Dronskowski hat den Lehrstuhl für Festkörper- und Quantenmechanik inne. Dr. Alireza Saeed-Akbari, MSc. und Dipl.-Ing. Sascha Hoffmann sind Wissenschaftliche Mitarbeiter am Institut für Eisenhüttenkunde.