

## **Multiskalensimulation zur Strukturoptimierung der Partikelverteilungen im Energiesystem Fe-Cu-Ni-Mn**

Projektbeginn: 01.06.2010

Projektende: 31.05.2012

### **Ziele**

Mit Kupfer, Nickel und Mangan legierte Stähle werden im Energie- und Kraftwerksbereich in großem Umfang als Werkstoff für Rohrleitungen und als Druckbehälter eingesetzt. Durch diese Legierungen wird eine verbesserte Härte und Zugfestigkeit bei höheren Temperaturen erreicht. Die Betriebstemperaturen in Kraftwerken liegen hierbei zwischen 300°C und maximal 450°C. Nach langzeitigem Betrieb wird eine Verfestigung und damit verbunden eine Zähigkeitsabnahme („Versprödung“) des Materials festgestellt.

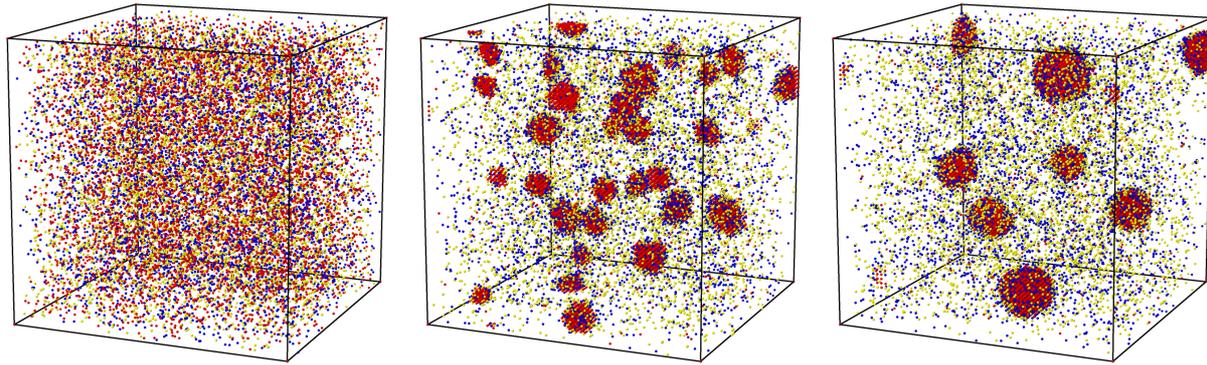
Das Ziel dieses Projektvorhabens besteht in einer realistischen numerischen Abbildung von Cu-reichen Ausscheidungen im Hinblick auf eine Strukturoptimierung der Partikelverteilungen im Energiesystem Fe-Cu-Ni-Mn. Die Bildung und das Wachstum der Partikel sollen mit atomistischen Monte-Carlo-Simulationen und für verschiedene relevante Temperaturen und Konzentrationen der Legierungselemente detailliert untersucht werden. Weiterhin werden Phasenfeldsimulationen vom Institut des Zuverlässigkeit von Bauteilen und Systemen (IZBS) der Universität Karlsruhe (TH) benutzt, um eine kontinuumsmechanische Darstellung der Vorgänge zu realisieren. Hiervon werden Ergebnisse zum Einfluss der Legierungselemente auf die Partikelbildung sowohl einzeln als auch in ihrer Zusammenwirkung erwartet. Die geplanten Simulationen liefern Aussagen über die zeitabhängige Radien- und Abstandsverteilungen der Partikel sowie über ihre jeweilige chemische Zusammensetzung. Die Simulationsergebnisse tragen dazu bei, die Werkstoffeigenschaften von kupfer-, nickel- und manganlegierten Stählen zukünftig zu verbessern.

### **Werkstoff**

Die Simulationen sollen jeweils für die Systeme Fe-Cu, Fe-Cu-Ni, Fe-Cu-Mn und Fe-Cu-Ni-Mn durchgeführt werden, um den Einfluss der Legierungselemente auf die Partikelbildung sowohl einzeln als auch in ihrer Zusammenwirkung untersuchen zu können. Die Temperatur soll hierbei jeweils konstant 360, 400 und 500 °C betragen, um die Simulationsergebnisse mit experimentellen Untersuchungen vergleichen zu können. Die Cu-Konzentration soll jeweils 0,65%, 1,00% und 1,50% betragen; die Ni-Konzentration 1,3% und die Mn-Konzentration 0,95%.

### **Vorgehensweise**

Die Hauptideen dieser Simulationsmethode bestehen in einer physikalisch fundierten Beschreibung der Platzwechselforgänge einer Leerstelle mit den nächst benachbarten Gitteratomen. Diese thermisch aktivierten diffusionsellen Prozesse können durch einen direkten Monte-Carlo Algorithmus genau simuliert werden. Ein verbesserter Monte-Carlo-Ansatz mit auf ab-initio Berechnungen basierenden Energiedaten soll verwendet werden. Dazu sollen die Aktivierungsenergien für Migration und die Schwingungsfrequenzen unter Verwendung von verfügbaren experimentellen Diffusionsdaten und neusten Ab-initio-Ergebnissen berechnet werden.



(a)  $T=500^{\circ}\text{C}$ ,  $t=0$ ,  $\bar{R}=0$       (b)  $t=8,8$  Stunden,  $\bar{R}=1\text{ nm}$       (c)  $t=79$  Stunden,  $\bar{R}=1,57\text{ nm}$

Schnappschüsse aus einer Monte-Carlo-Simulation für das System Fe-Cu-Ni-Mn- (Cu 1.5 wt% - Ni 1.3 wt% - Mn 0.95 wt%) . (a) Aus den anfänglich statisch zufällig auf das Kristallgitter verteilten Cu-(rot), Ni-(gelb), und Mn-(blau) Atomen bilden sich Ausscheidungen. Fe-Atome sind transparent dargestellt. (b) Nach 8,8 Stunden haben sich Ausscheidungen mit dem mittleren Radius  $R=1$  nm gebildet. Im weiteren Verlauf der Simulation wachsen großen Ausscheidungen auf Kosten der kleinen (die sogenannte Ostwald Reifung). (c) Nach 79 Stunden ist der mittlere Radius auf  $R=1,57$  nm angestiegen.

Im System Fe-Cu soll ein Einblick in die Abhängigkeit der Partikelform von der Partikelgröße gewonnen werden. Für die Systeme Fe-Cu-Ni, Fe-Cu-Mn, Fe-Cu-Ni-Mn soll der Einfluss der Legierungselemente Ni bzw. Mn auf die Partikelform und ihre chemische Zusammensetzung untersucht werden. Die Grenzflächenenergien zwischen Partikel und der umgebenden Matrix sollen für die verschiedenen Systeme berechnet werden. Dies geschieht mit Hilfe des Simulationspaketes VASP (Vienna ab-initio simulation package), welches quantenmechanische ab-initio Berechnungen auf basis der Dichte-Funktional-Theorie (DTF) ermöglicht. Die Grenzflächeenergien gehen direkt als Eingabeparameter in die an der IZBS in Karlsruhe geplanten Simulationen ein.

Die klassische Theorie des Partikelwachstums ist unterteilt in die drei Bereiche: Keimbildung, Wachstums und Ostwald-Reifung (Vergrößerung der großen Partikel auf Kosten der kleinen). Mit Hilfe atomistischer MC-Simulationen sollen die zeitliche Entwicklung des mittleren Partikelradius, der Partikelradienverteilungen und die Partikelabstandsverteilungen jeweils für die verschiedenen Systeme dargestellt werden. Die aus der Simulation erhaltenen Radienverteilungen und die Vergrößerungsraten der Partikel sollen mit der kontinuumsmechanischen Theorie von Lifshitz, Slyozov und Wagner (LSW) verglichen werden.

Im Rahmen der laufenden Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer Institut für Zerstörungsfreie Prüfverfahren (IZFP) in Saarbrücken werden die aus der Monte-Carlo- und der Phasenfeldsimulation entstandenen Ergebnisse mit entsprechenden Experimenten verglichen. Um einen realistischen Einblick auf die Dynamik der Gitterstruktur zu gewinnen, werden die Relaxationen der atomaren Bindungen und die (In-) Kohärenz der Cu bzw Cu-Ni-Ausscheidungen in Abhängigkeit der Partikelgröße mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen untersucht.

## Partner

Dieses Projekt wird gemeinsam mit dem Institut für Zuverlässigkeit von Bauteilen und Systemen (IZBS) der Universität Karlsruhe (TH) durchgeführt.

## **Danksagung**

Die Untersuchungen werden von der Deutschen Forschungsgemeinschaft unter Schm 746/101-1 gefördert. Für die finanzielle Unterstützung sei gedankt.

## **Ansprechpartner**

Dr.-Ing. Peter Binkele  
Tel.: +49 / 711 685-62595  
E-mail: peter.binkele@imwf.uni-stuttgart.de

Dr. rer. nat. Alejandro Mora  
Tel.: +49 / 711 685-62701  
E-mail: alejandro.mora@imwf.uni-stuttgart.de