



Computergestützte Simulation der Mikrostrukturentwicklung

Computational Microstructure Evolution

Die mechanisch-technologischen Eigenschaften eines modernen Werkstoffes hängen zu einem großen Teil von seiner inneren Struktur, seiner Mikrostruktur ab. Von besonderer Bedeutung sind hierbei die Anordnung der einzelnen Körner innerhalb der poly-kristallinen Struktur, die Anzahl und Position von Gitterbaufehlern, wie z.B. Versetzungen, aber auch die Anordnung der einzelnen sekundären Phasen eines mehr-phasigen Werkstoffes.

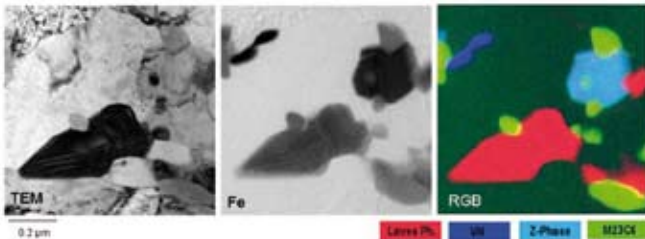


Abb. 1: Mikrostruktur eines 9-12% Cr Stahls (energie-gefilterte Transmissionselektronen-Mikroskopie, FELMI TU Graz). Subkornstruktur mit verschiedenen Ausscheidungen, welche die Mikrostruktur über lange Zeit und bei hohen Belastungen stabilisieren.

Abb. 1 zeigt ein typisches Beispiel für eine komplexe Mikrostruktur eines 9-12% Chrom-Stahls, wie er in hochbelasteten Komponenten von thermischen Kraftwerken Anwendungen findet. Werkstoffe dieser Art sind nicht nur korrosionsbeständig gegen wässrige Medien, sie ertragen Spannungen von bis zu 100 MPa bei Temperaturen um die 600°C und Einsatzzeiten über 100.000 Stunden. Zur Illustration: Diese Werkstoff-Belastung tritt auf, wenn man einen Draht mit einem Querschnitt von 1 mm² (entspricht dem Verbindungskabel zwischen MP3-Player und Ohrhörer) mit einem Gewicht von 10 kg (1 Jahr altes Kind) beaufschlagt und bei dieser Temperatur (rot-glühend!) für mehr als 11 Jahre hält.

Wie schon angedeutet, kommt den Ausscheidungen die wesentliche Aufgabe der Stabilisierung der Mikrostruktur zu, um zu verhindern, dass der Werkstoff nach langer Zeit seine herausragenden Festigkeitseigenschaften verliert. Nun sind die Ausscheidungs-Populationen bei den hohen Temperaturen nicht statisch, sondern sie verändern permanent ihre Größenverteilung und Anzahl. Große Ausscheidungen wachsen auf Kosten kleinerer. Einzelne Phasen können von thermodynamisch stabileren aufgelöst werden. Um diese Werkstoffe hinsichtlich ihrer Eigenschaften zu optimieren ist es notwendig, die Entwicklung der Ausscheidungen vorhersagen zu können. Auf diesem Wissen aufbauend, kann im nächsten Schritt die Entwicklung der Mikrostruktur vorhergesagt werden. Beide Arbeitsgebiete sind derzeit in der wissenschaftlichen Gemeinde von höchster Aktualität, da sie sowohl grundlagenorientiert und von hohem wissenschaftlichem Anspruch sind, als auch in der praktischen, industriellen Anwendung von höchster Bedeutung.

Nachdem ich mein Studium der technischen Physik an der TU Graz beendet hatte, begann ich am damaligen Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik mein Doktoratsstudium. Schon damals mit der Optimierung von Werkstoffeigenschaften befasst, begann ich bald mit der Entwicklung von Computermodellen zur Vorhersage der Mikro-

strukturentwicklung. Nach einem einjährigen Forschungsaufenthalt in den USA zurück an der TU Graz war ich, neben der Fortsetzung der Modellierungstätigkeit, mit Werkstoffcharakterisierung und -analyse vor allem mit elektronenmikroskopischen Methoden beschäftigt. Die Anwendung meiner Forschungstätigkeit auf dem Gebiet der Schweißtechnik brachte mir im Frühjahr 2005 den renommierten ‚Professor Koichi Masubuchi Award‘ der amerikanischen Schweißgesellschaft AWS (mehr als 50.000 Mitglieder) ein.

Mein derzeitiger Arbeitsschwerpunkt ist wieder eindeutig die Mikrostrukturmodellierung, wo in unserer Arbeitsgruppe am IWS gemeinsam mit Fachkollegen aus Leoben und der tschechischen Republik an der Weiterentwicklung der Modelle für Ausscheidungskinetik und lokale Mikrostrukturentwicklung gearbeitet wird. Abb. 2 zeigt einen Snapshot der hierfür an unserem Institut entwickelten Software ‚MatCalc‘. Höhepunkt meiner persönlichen Karriere war die Habilitation im Fach ‚Werkstoffwissenschaften‘ im Oktober 2005.

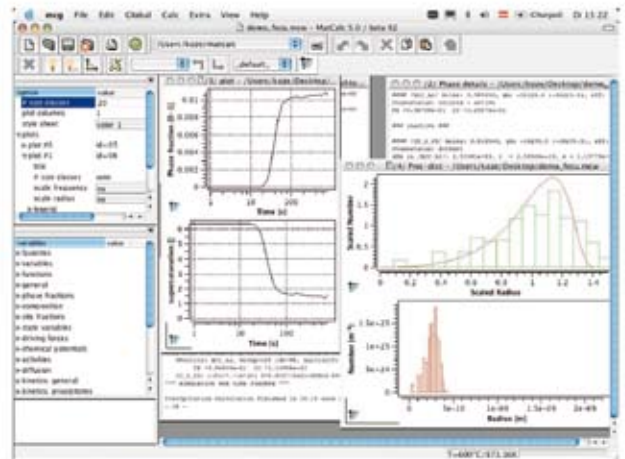


Abb. 2: Snapshot des an der TU Graz entwickelten Software Pakets ‚MatCalc‘.

Computational Microstructure Evolution

The mechanical properties of materials are mainly determined by their microstructure, i.e. their poly-crystalline character and the density and distribution of lattice defects and precipitates. The ability to predict these quantities is an important key to optimizing advanced materials. Computational microstructure evolution is a working area of high relevance for industry as well as an area of challenge from a scientific point of view. In the past decade, computer software has been developed that allows simulation of the evolution of precipitates on a thermodynamic and kinetic basis. Application to problems in materials of technical relevance and complexity has been demonstrated in numerous recent publications. Focus of further research will be the simulation of the local microstructure evolution using techniques such as finite elements, cellular automata and kinetic Monte Carlo.