

# Modellierung mechanischer Eigenschaften von Legierungen

## *Modeling Mechanical Properties of Alloys*

Bernhard Sonderegger

**Die Modellierung des mechanischen Verhaltens von Werkstoffen ist komplex und erfordert die Analyse der zugrunde liegenden Mechanismen. Die richtige Balance zwischen detaillierter Beschreibung aller physikalischen Phänomene, mathematischer Stabilität und Berechenbarkeit ist dabei oft die größte Herausforderung.**

Steinzeit, Bronzezeit, Eisenzeit. Stahl, Aluminium, Magnesium, Kunststoffe, Kohlefasern: Die technische Entwicklung der Menschheit ist eng verknüpft mit der Entwicklung von Werkstoffen. Metallische Werkstoffe besitzen noch immer viele Vorteile: Sie sind widerstandsfähig, lassen sich gut verformen, sind in großen Mengen herstellbar und relativ günstig. Für die industrielle Anwendung ist es oft wichtig, das mechanische Verhalten der Werkstoffe möglichst gut zu kennen. Zu beschreiben gibt es dabei viel: Festigkeit, Härte, Zähigkeit, Verhalten bei hohen und niedrigen Temperaturen. Schnelle Verformungen wie bei einem Fahrzeugcrash können von Interesse sein, ebenso wie langsame Verformungen wie bei einem Dampfdruckrohr nach zehn Jahren Dauereinsatz.

### **Mechanisches Verhalten**

Das mechanische Verhalten wird meist aufwendig durch eine Vielzahl von Experimenten bestimmt. Modelliert wird das Werkstoffverhalten dann durch vielparametrische analytische Funktionen, in denen Formänderungsraten mit mechanischen Spannungen, Temperaturen und der Vorgeschichte des Materials verknüpft werden. Der wissenschaftliche Erkenntnisgewinn bleibt dabei oft begrenzt. Die Verformung wird zwar korrekt beschrieben, die Gründe für das Verhalten bleiben aber unscharf. Auch sind Neuentwicklungen auf dieser Basis mühsam. Jede neue Legierung muss erst hergestellt, getestet, unter Umständen verworfen, modifiziert und neu getestet werden; ein Prozess, der viele Jahre in Anspruch nehmen kann. >

*Modeling the mechanical properties of materials is complex and requires the analysis of the underlying processes. There is often a delicate balance between considering all physical phenomena in detail and bearing in mind computational costs and numerical stability.*

*Stone Age, Bronze Age, Iron Age. Steel, aluminum, magnesium, plastics, carbon fiber: technical revolutions in history have often been strongly linked to new materials. Metals and alloys still offer many advantages: they are resistant to many environments, can be formed into various shapes, manufactured in large quantities and are relatively inexpensive. The mechanical behavior of the material is one of the key issues for industrial application; this includes strength, hardness, ductility, and properties at high and low temperatures. Fast deformation in car crashes can be of interest as well as slow deformation during the lifetime of a high-temperature steam pipe after 10 years.*

### **Mechanical behavior**

*The mechanical behavior is mostly recorded in a range of experimental setups. The results can then be interpolated by multi-parameter analytical expressions, where deformation rates are linked to mechanical stresses, temperatures and the previous history of the material. It is difficult to gain scientific insight with this strategy since the deformation of the material is described accurately but the reasons for the material properties remain unclear. In addition, the design of new materials requires extensive efforts, and each new alloy has to be produced, tested, eventually discarded, modified and tested again; a process which may take many years.*

*It is thus worthwhile from an economic point of view to distill general conclusions from material A and apply them to material B. This coincides with the scientific ambition for describing as many phenomena as possible with a small number of >*



Bernhard Sonderegger ist seit Frühjahr 2015 am Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik tätig und Inhaber der Professorenstelle des FoE „Advanced Materials Science“. Hauptthema seiner Arbeit ist das physikalische Verständnis der mechanischen Eigenschaften und des Verformungsverhaltens von metallischen Werkstoffen.

*Bernhard Sonderegger has worked at the Institute of Materials Science and Welding since Spring 2015 and holds the professorship in the FoE Advanced Materials Science. His research is focused on understanding mechanical properties and deformation of metals.*

Vom wirtschaftlichen Standpunkt ist es daher erstrebenswert, Erkenntnisse von Werkstoff A auf Werkstoff B zu übertragen. Dies deckt sich auch mit dem wissenschaftlichen Ziel, viele Phänomene durch wenige Grundprinzipien zu beschreiben. Hinzu kommt noch der Anspruch, Werkstoffverhalten mit physikalischen Grundlagen zu verknüpfen. Dazu ist es notwendig zu wissen, woher das mechanische Verhalten der Werkstoffe eigentlich stammt.

### Mikrostruktur

Der Schlüssel zum Verständnis ist die Mikrostruktur. Darunter ist die Konfiguration zu verstehen, die den Werkstoff von einem Einkristall unterscheidet. Gelöste Fremdatome, Fehlstellen, Versetzungen, Korngrenzen, kleine zweite Phasen und Einschlüsse formen den Charakter des Werkstoffes. Zur plastischen Verformung kommt es erst bei Änderung der Mikrostruktur: Korngrenzen gleiten, Versetzun-

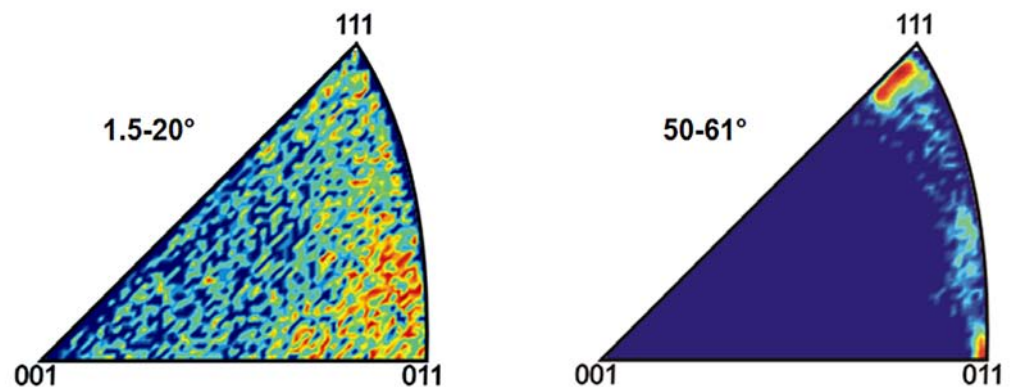
gen wandern und Atome diffundieren. *Additionally the models should be based on physics and enable quantitative predictions without the assessment of individual parameters for every single material. For this target it is necessary to understand the fundamental principles of the mechanical behavior of the investigated materials.*

### Microstructure

*The key to the mechanical properties lies in the microstructure: the difference between the real material and an idealized single crystal. Alloying elements in solid solution, vacancies, dislocations, grain and phase boundaries, precipitates and inclusions form the character of the material. Plastic deformation only occurs due to changes in the microstructure: grain boundaries slip, dislocations move and atoms diffuse. Plastic deformation can only be understood if the microstructure is known in detail, plus the effect of each microstructural element on the evolution of all other elements. This*

**Abbildung 1:**  
Analyse der Verteilung von  
Eigenvektoren von Korngrenzen-  
misorientierungen in einem  
martensitischen Stahl.

*Figure 1:*  
*Analysis of the eigenvector*  
*distribution of grain boundary*  
*misorientations in a martensitic*  
*steel.*



© TU Graz – Sonderegger

gen wandern und Atome diffundieren. Erst durch Kenntnis der Struktur inklusive aller Einschlüsse, Grenzflächen und Gitterbaufehler sowie deren Interaktionen lässt sich das Verhalten vollständig verstehen. Dabei stellen sich zwei Fragen: Wie manifestieren sich die Wechselwirkungen auf der Mikroskala im makroskopischen Verhalten und wie kommt es zur Ausbildung einer bestimmten Mikrostruktur? Können diese beiden Fragen physikalisch beantwortet werden, so kann auch das mechanische Verhalten eines Werkstoffes vorhergesagt werden. Das ist meist komplexer, als es klingt.

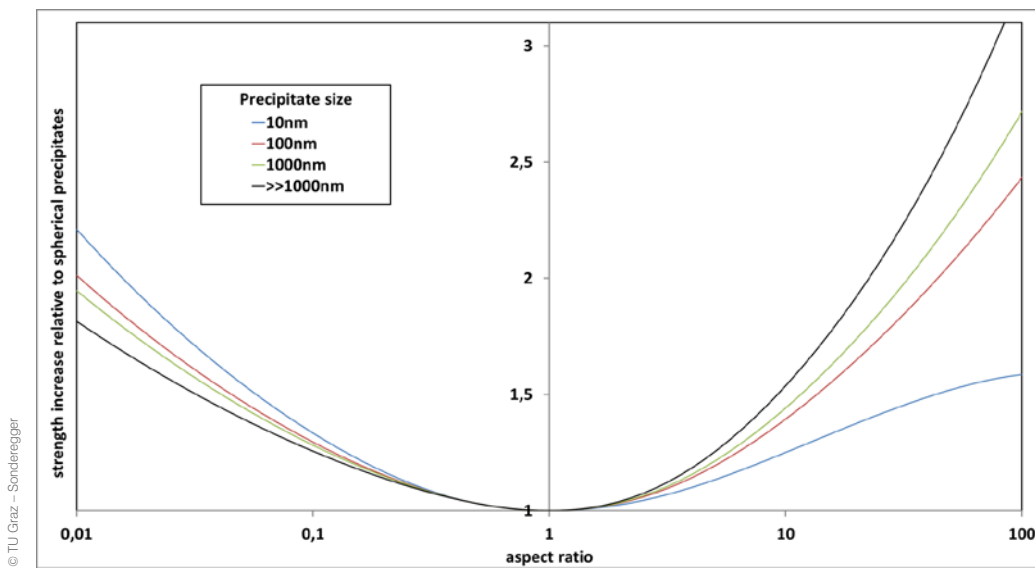
### Nukleation von zweiten Phasen

Als Beispiel mag hier die Bildung von Ausscheidungen, kleinen zweiten Phasen in Festkörpern, dienen. Diese Objekte in einer typischen Größe von Nano- bis Mikrometern steigern die Festigkeit und die Härte, verbessern die Langzeitstabilität bei

*raises two questions: how do the microstructural interactions affect macroscopic mechanical properties and how does the microstructure evolve in the first place? As soon as these questions can be answered on a physical basis, then the mechanical behavior of a material can be predicted. This task is more complex than it appears.*

### Nucleation of precipitates

*Take as an example the formation of precipitates. These objects in the scale from nano- to micrometers increase yield strength and effect hardness, improve long-term stability at high temperatures and can be formed in a wide variety of industrial alloys. High-temperature steels, aluminum or nickel-base alloys owe their properties to nitrides, carbides or intermetallic phases. It is important to produce the right quantity and quality of precipitates with respect to size, number density, type and position within the*



**Abbildung 2:**  
Einfluss der Form von inkohärenten Ausscheidungen auf deren festigkeitssteigernde Wirkung.

*Figure 2:*  
Impact of precipitate shape on strength increase (incoherent particles).

hohen Temperaturen und ermöglichen eine Vielzahl von neuen technischen Legierungen. Warmfeste Stähle, viele Aluminium- und Nickelbasislegierungen verdanken ihre Eigenschaften Karbiden, Nitriden oder intermetallischen Ausscheidungen. Entscheidend ist die richtige Dosis: Größe, Stückzahl, Typ und Platz innerhalb der Mikrostruktur. Erreicht wird dies durch eine fein abgestimmte chemische Zusammensetzung und gezielte Wärmeführung im Herstellungsprozess.

Der Bildungsprozess dieser Ausscheidungen beginnt bei stochastischen Bewegungen von Legierungsatomen und deren Agglomeration zu Clustern. Einfache Sonderfälle können mit Monte-Carlo-Simulationen beschrieben werden. Leider ist das kleinste repräsentative Volumen in einem technischen Werkstoff typischerweise ein Korn mit circa  $10^{10}$ – $10^{18}$  Atomen, durchsetzt von Gitterbaufehlern und von komplexer Zusammensetzung. Als Mittel der Wahl bleiben Statistik und Thermodynamik.

Diese Kombination findet sich in der klassischen Nukleationstheorie (CNT). Diffusionsraten, Gibbs-Energien und Grenzflächen sind hier die prägenden Begriffe. Oft stößt CNT jedoch an ihre Grenzen: gerade bei sehr kleinen Objekten, dem eigentlichen Anwendungsgebiet: So ändern sich zum Beispiel spezifische Energien von Phasengrenzflächen bei starker Krümmung. Der Weg bis zur Materialentwicklung per Modellierung und Simulation ist also gespickt mit vielen einzelnen physikalischen Aufgabenstellungen und jede Lösung ist ein kleiner Schritt. ■

*microstructure. This is achieved by carefully balanced chemical composition and sophisticated heat treatments. The formation process of the precipitates starts by stochastic movements of alloying atoms and their agglomeration to clusters. In a few simple cases, this formation can be simulated by Monte-Carlo methods. Unfortunately, the smallest representative volume in a technical alloy is typically a grain with  $10^{10}$ – $10^{18}$  atoms, containing an inhomogeneous distribution of lattice defects and with complex composition. In this case, statistical and thermodynamic approaches are more appropriate.*

*This combination can be found in Classical Nucleation Theory (CNT). Gibbs energies, diffusion rates and interfaces are the key words here. But even well-established physical concepts such as CNT have to be improved. As it turns out, some input parameters, such as specific phase boundary energies, depend on the curvature of the boundary and thus the size of the nucleus. Each solution to such a problem gives more insight into the underlying processes in the material and is thus a small step towards designing materials by modeling and simulation. ■*