

Modellierung der Gefügeänderung bei der thermomechanischen Behandlung der Alpha-Beta Titanlegierung Ti-6Al-4V

Dissertation

von

Dipl.-Ing. Alfred Krumphals

zur Erlangung des akademischen Grades
DOKTOR DER TECHNISCHEN WISSENSCHAFTEN

Durchgeführt im Rahmen des Projektes – Modellierung der Gefügeänderung bei der thermomechanischen Behandlung der Alpha-Beta Titanlegierung Ti-6Al-4V und deren Auswirkung auf die mechanischen Eigenschaften – in Kooperation mit Böhler Schmiedetechnik GmbH & Co KG und dem Institut für Werkstoffwissenschaft und Werkstofftechnologie an der TU-Wien, gefördert von der Christian Doppler Gesellschaft

am

Christian Doppler Labor für Werkstoffmodellierung und Simulation
Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik

Vorstand: Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Priv.-Doz. Christof Sommitsch
Fakultät für Maschinenbau

TECHNISCHE UNIVERSITÄT GRAZ

Kurzfassung

Modellierung der Gefügeänderung bei der thermomechanischen Behandlung der Alpha-Beta Titanlegierung Ti-6Al-4V

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Mikrostrukturmodellierung in der Titanlegierung Ti-6Al-4V während der thermomechanischen Behandlung. Das Hauptziel lag in der Modellierung metallphysikalischer Vorgänge, wie der Phasenumwandlung, der Rekristallisation und der Kornvergrößerung. Die Modellierung wurde hierbei entsprechend der Prozessführung und des Werkstoffs in zwei Bereiche, das Ein- und Zweiphasengebiet, aufgeteilt. Zur Vorhersage der Mikrostruktur wurden sowohl semi-empirische Modelle als auch ein eigens entwickelter zellulärer Automaten herangezogen. Die semi-empirischen Modelle wurden über User Routinen in das kommerzielle Finite Element Programm DEFORM™ integriert und mittels Vergleich mit einem realen Schmiedeprozess verifiziert. Der neu entwickelte zelluläre Automat konnte mittels Postprocessing mit der Finite Element Software gekoppelt werden. Dieser wurde zur Modellierung der Korngrößenentwicklung der primären Alpha Phase im Zweiphasengebiet für nicht-isotherme Fälle herangezogen.

Abstract

Microstructure modeling of the alpha/beta titanium alloy Ti-6Al-4V during thermo-mechanical treatment

This thesis deals with microstructure modeling in the titanium alloy Ti-6Al-4V during thermo-mechanical treatment. The main goal has been the modeling of microstructural mechanisms like phase transformation, recrystallization as well as grain growth. In order to model these phenomena over a wide range of temperatures a differentiation between one and two phase regimes has been taken into account. Semi-empirical models as well as cellular automata have been used to predict microstructure evolution. Semi-empirical models have been implemented into DEFORM™ using user subroutines and verified by real forging processes. Furthermore the cellular automata has been interlinked with the finite element Software to predict the evolution of alpha primary in the two phase field for non-isothermal treatments.

Danksagung

Diese Arbeit entstand in den Jahren 2009-2013 im Rahmen meiner wissenschaftlichen Tätigkeit am Christian Doppler Labor für Werkstoffmodellierung und Simulation, Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik an der Technischen Universität Graz.

Mein Dank gilt Herrn Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Christof Sommitsch, Vorstand des Institutes, für die ausgezeichnete Betreuung und die wissenschaftliche Unterstützung. Ebenfalls danken möchte ich Herrn Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Ernst Kozeschnik für die Begutachtung der Dissertation.

Auch bedanken möchte ich mich bei Frau Simone Kopeinik und Herrn Martin Schickbichler ohne die eine Bewältigung der umfangreichen Programmierarbeiten am zellularen Automaten nicht möglich gewesen wäre.

Mein besonderer Dank gilt auch den Kollegen am Institut für Werkstoffwissenschaft und Werkstofftechnologie an der Technischen Universität Wien für die Bereitstellung der notwendigen Mikrostrukturdaten zur Modellvalidierung.

Weiters sei auch allen Kollegen gedankt die durch ihre Diskussions- und Hilfsbereitschaft am Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. In diesem Rahmen sei auch Frau Claudia Ramskogler für den wertvollen Beitrag durch ihre Diplomarbeit gedankt.

Mein herzlicher Dank gilt auch den Mitarbeitern im Bereich Forschung und Entwicklung bei der Böhler Schmiedetechnik für die Unterstützung bei den FE-Simulationen und der Modellvalidierung.

Alfred Krumphals

Graz, Jänner 2013

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe.

Graz, am

.....

(Unterschrift)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Aufgabenstellung.....	2

Literatur

3	Eigenschaften und Verwendung von Titan und Titanlegierungen	3
3.1	Titan und Titanlegierungen.....	3
3.2	Ti-6Al-4V	4
4	Herstellungsprozess von Gesenkschmiedeteilen aus Ti-6Al-4V	5
4.1	Schmieden von Ti-6Al-4V.....	5
4.2	Einflussgrößen beim Schmieden von Titanlegierungen	6
4.2.1	Umformtemperatur	6
4.2.2	Temperaturverlauf.....	6
4.2.3	Umformgrad	6
4.2.4	Umformgeschwindigkeit	7
5	Mikrostruktur und Mikrostrukturentwicklung in Ti-6Al-4V	8
5.1	Alpha/Beta Phasenumwandlung.....	8
5.2	Kornvergrößerung	9
5.3	Rekristallisation	10
5.4	Einstellen von lamellarem Gefüge.....	11
5.5	Einstellen von globularem und bimodalem Gefüge.....	13
6	Mikrostrukturmodellierung	16
6.1	Kornvergrößerung	16
6.1.1	Analytische Modellierung von einphasigen Materialien.....	16
6.1.2	Analytische Modellierung von zweiphasigen Materialien	17
6.2	Statische Rekristallisation.....	18
6.3	Phasenumwandlung.....	19
6.3.1	Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov-Modell (JMAK)	19
6.3.2	Modellierung der sekundären Alphalamellendicke.....	21
6.4	Zelluläre Automaten-Modelle.....	26

Modellierung und Simulation

7	Vormaterial Ti-6Al-4V	28
8	Zellulärer Automat.....	29
8.1	Aufbau.....	29

8.2	Arbeitsweise.....	31
8.3	Setup im Einphasengebiet.....	34
8.4	Setup im Zweiphasengebiet	36
8.5	Phasenausgleich im Zweiphasengebiet.....	44
8.6	Beschreibung des Wachstumsexponenten bei Temperaturänderung.....	45
9	Mikrostrukturmodellierung im Betabereich von Ti-6Al-4V	49
9.1	Betakorngröße	49
9.1.1	Semiempirisches Vergrößerungsmodell	49
9.1.2	Zellulärer Automat.....	50
9.2	Statische Rekristallisation.....	53
9.2.1	Semiempirisches Rekristallisationsmodell.....	53
10	Mikrostrukturmodellierung im Alpha- und Betabereich	58
10.1	Korngröße der primären Alphaphase (Vergrößerung der primären Alphaphase)	58
10.1.1	Semiempirisches Vergrößerungsmodell	58
10.1.2	Zellulärer Automat.....	59
10.2	Phasenumwandlung (Alpha/Beta)	62
10.2.1	JMAK-Modell.....	62
10.3	Lamellendicke der sekundären Alphaphase	64
10.3.1	Diffusionsmodell.....	65
10.4	Spezialfälle.....	67
10.4.1	Aufheizsimulation	68
10.4.2	Phasenausgleich bei isothermer Wärmebehandlung.....	73
10.4.3	Nichtisotherme Wärmebehandlung	76
11	Einfluss der chemischen Zusammensetzung auf die Mikrostrukturmodelle.....	79
11.1	Betakorngröße	79
11.2	Primäre Alphaphase.....	82
11.3	Sekundäre Alphaphase	83
12	Schmiedesimulationen.....	86
12.1	Alpha/Beta-Gebiet.....	86
12.2	Beta-Gebiet.....	96
12.3	Einschränkungen	101
13	Zusammenfassung	103
14	Ausblick	105
15	Literaturverzeichnis.....	107

1 Einleitung

Titan und Titanlegierungen finden aufgrund ihrer besonderen Eigenschaften, wie geringer Dichte und hoher Festigkeit, Anwendung in Hightech-Bereichen wie in der Luft- bzw. Raumfahrt. Die mechanischen Eigenschaften dieser Materialien sind jedoch sehr von ihrer Mikrostruktur abhängig, welche während des Herstellungsprozesses gezielt eingestellt wird. Bei der Auslegung neuer Bauteile sind meist mehrere Verifikationsversuche notwendig, um den Einfluss der Prozessparameter auf die Mikrostruktur des Werkstoffs zu bestimmen. Diese kosten- und zeitintensiven Versuchsreihen sind zum Teil auch bei Verbesserungs- und Optimierungsmaßnahmen bestehender Prozesse notwendig.

Mittels kommerzieller FE-Programme (Finite Elemente) ist es heute bereits möglich komplette Prozesslinien, wie in diesem Fall die Herstellung von Gesenkschmiedeteilen aus Ti-6Al-4V, durchgehend zu simulieren. Das Ergebnis daraus ist eine Simulation eines realen Bauteils, welches über die gewünschte Endgeometrie verfügt, jedoch lässt sich über die Mikrostruktur und die daraus resultierenden mechanischen Eigenschaften meist nur schwer eine geeignete Aussage treffen.

An diesem Problem knüpft die Mikrostrukturmodellierung an. Zur Simulation der für die mechanischen Eigenschaften relevanten Mikrostrukturparameter, wie z.B. Korngröße und Phasenanteile, werden die mittels FE-Simulation berechneten Prozessgrößen wie Temperatur, Umformgrad und Umformrate herangezogen. Damit kann, mittels der Kopplung von FE-Simulation mit geeigneten Mikrostrukturmodellen, die Mikrostruktur in allen Bereichen des Bauteils berechnet und somit auf die mechanischen Eigenschaften geschlossen werden. Jedoch ist die Mikrostrukturmodellierung in zweiphasigen Werkstoffen wie Ti-6Al-4V komplex, weshalb meist bereits bestehende Mikrostrukturmodelle anderer Werkstoffe stark modifiziert bzw. neue Mikrostrukturmodelle entwickelt und validiert werden müssen.

2 Aufgabenstellung

Aus der in der Einleitung beschriebenen Problemstellung ergibt sich somit folgende Aufgabenstellung:

- Erläuterung der ablaufenden Mikrostrukturmechanismen im thermomechanischen Produktionsprozess (Phasenumwandlung, Kornvergrößerung und Rekristallisation)
- Entwicklung semi-empirischer Modelle zur Vorhersage der Mikrostrukturparameter im einphasigen Betagebiet (Beta Korngröße, Anteil rekristallisierter Betakörner)
- Entwicklung semi-empirischer Modelle zur Vorhersage der Mikrostrukturparameter im zweiphasigen Alpha plus Betagebiet (Korngröße und Phasenanteil der primären Alphaphase, Lamellendicke und Phasenanteil der sekundären Alphaphase)
- Erweiterung eines bestehenden zellulären Automaten („CA“ Cellular Automata) zur besseren Vorhersage der lokalen Korngrößenentwicklung im einphasigen Betabereich bzw. im zweiphasigen Alpha plus Betabereich
- Validierung der Mikrostrukturmodelle anhand experimenteller Ergebnisse
- Kopplung der semi-empirischen Mikrostrukturmodelle mit der finiten Elemente Software DEFORM™

3 Eigenschaften und Verwendung von Titan und Titanlegierungen

Dieses Kapitel gibt einen kurzen allgemeinen Überblick über Titan und Titanlegierungen. Dies dient vor allem dem besseren Verständnis der Eigenschaften des Materials und der dazugehörigen technischen Einsatzgebiete. Außerdem wird auf die in dieser Arbeit untersuchte Titanlegierung Ti-6Al-4V explizit eingegangen. Eine ausführliche Erläuterung über Eigenschaften und Einsatzgebiete von Titanlegierungen geben die Werke von Lütjering [1] und Peters [2].

3.1 Titan und Titanlegierungen

Titan und Titanlegierungen zeichnen sich primär durch ihre hohe spezifische Festigkeit und gute Korrosionsbeständigkeit aus. Aus diesem Grund werden diese häufig in der Luft- und Raumfahrt sowie in der Medizin eingesetzt. Ebenfalls vorteilhaft sind die spezifischen Festigkeiten bei höheren Temperaturen. Durch die hohe Affinität gegenüber Sauerstoff sind jedoch die maximalen Einsatztemperaturen stark begrenzt wenn das Material nicht durch entsprechende Maßnahmen wie z.B. Schutzschichten vor der Atmosphäre geschützt wird.

Titan tritt wie eine Reihe anderer Metalle in verschiedenen Gittermodifikationen auf. Die meisten Titanlegierungen sowie Reintitan liegen bei Raumtemperatur in der Modifikation der hexagonal dichtesten Kugelpackung (Alpha-Phase) vor (Abbildung 1, links). Bei höheren Temperaturen wandelt das Material hingegen in eine kubisch raumzentrierte Kristallstruktur (Beta-Phase) um (Abbildung 1, rechts). Die Umwandlungstemperatur beträgt bei Reintitan 882°C.

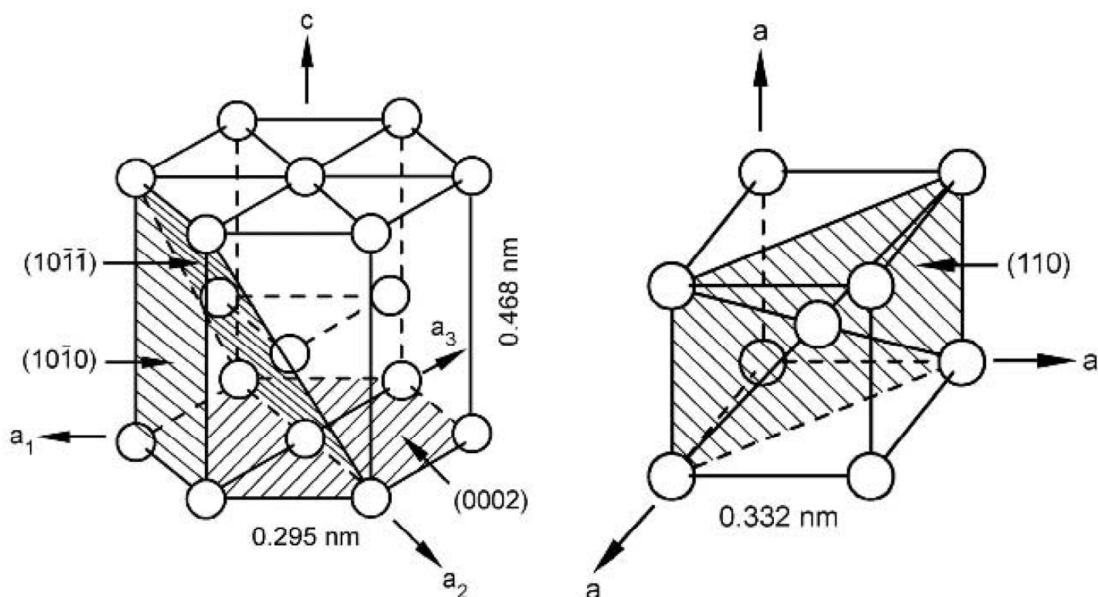


Abbildung 1: Kristallstrukturen in Titan und Titanlegierungen, links: hexagonal (Alpha-Phase), rechts: kubisch raumzentriert (Beta-Phase) [2].

Die allotrope Umwandlung dieser beiden Gittermodifikationen ist von großer Bedeutung und ermöglicht eine Vielfalt an Eigenschaften in Titan und Titanlegierungen.

3.2 Ti-6Al-4V

Bis heute wurden weit über 100 verschiedene Titanlegierungen entwickelt. Wirklich kommerziell durchgesetzten konnten sich jedoch nur einige Duzend. Grundsätzlich lassen sich diese in Alpha-, Alpha+Beta- und Beta-Legierungen einteilen. Die klassische Titanlegierung Ti-6Al-4V ist eine Alpha+Beta-Legierung. Auf sie entfällt über 50 Prozent der weltweiten Produktion. Der Grund hierfür liegt in der Ausgewogenheit ihrer Eigenschaften. Außerdem ist sie die mit Abstand am meisten erprobte und untersuchte Titanlegierung. Wie aus der Bezeichnung zu entnehmen ist, sind die Hauptlegierungselemente mit 6% Aluminium und 4% Vanadium (Gewichts-%) gegeben.

Je nach Herstellungsprozess lassen sich in diesem Material grundsätzlich drei Arten der Mikrostrukturausbildung unterscheiden. Je nachdem wie die beiden existierenden Phasen Alpha und Beta angeordnet sind, handelt es sich dabei um ein rein globulares oder lamellares Gefüge. Die dritte Art, ein bimodales Gefüge, ist eine Mischform aus den vorhin genannten Gefügearten. Eine ausführlichere Erläuterung über Mikrostruktur und Mikrostrukturentwicklung folgt in Kapitel 5.

Grundsätzlich ist das Anwendungsgebiet von Ti-6Al-4V breit gefächert. Dieses reicht vom Einsatz in der Medizintechnik über Anwendungen in der chemischen Industrie bis hin zur Luft- und Raumfahrt. Im Flugzeugbau werden häufig Gesenkschmiedeteile in Form von Turbinenscheiben oder kritisch beanspruchten Strukturteilen eingesetzt. Durch die gezielte Einstellung der Mikrostruktur während des Herstellungsprozesses können die daraus resultierenden mechanischen Eigenschaften optimal an die Anforderungen des Bauteils angepasst werden.

4 Herstellungsprozess von Gesenkschmiedeteilen aus Ti-6Al-4V

In diesem Kapitel wird kurz auf den Herstellungsprozess eines typischen Gesenkschmiedeteils aus Ti-6Al-4V eingegangen. Die wichtigen Prozessschritte beginnen beim Aufheizen des Vormaterials und enden beim Wärmebehandlungsprozess des zuvor geschmiedeten Bauteils. Des Weiteren werden auch jene Herstellungsparameter behandelt, welche während des Warmumformens den bedeutendsten Einfluss auf die Mikrostrukturentwicklung haben.

4.1 Schmieden von Ti-6Al-4V

Das Vormaterial bestehend aus feinem globularem (Alpha+Beta)-Gefüge wird in der Schmiede weiterverarbeitet. Dabei kann prinzipiell zwischen Alpha/Beta- und Beta-Schmieden unterschieden werden [1, 2, 3, 4, 5].

Beim Alpha/Beta-Schmieden wird der Werkstoff auf eine Temperatur zwischen 30°C und 100°C unter der Beta-Umwandlungstemperatur (Beta-Transus, 995°C bei Ti-6Al-4V) erwärmt. Die Temperatur wird so gewählt, dass durch die Energie, welche durch den Umformprozess eingebracht wird, die Beta-Transus-Temperatur nicht überschritten wird. Dasselbe gilt für die Parameter Umformgrad und Umformgeschwindigkeit. Darüber hinaus wird über diese der Prozess so gesteuert, dass die gewünschten Einstellungen am Gefüge erreicht werden. Nach dem Umformvorgang erfolgt die Abkühlung meist an Luft [2].

Erheblich sensibler auf die Umformbedingungen reagieren Titanlegierungen, welche im Beta-Bereich geschmiedet werden. Das Vormaterial wird dabei über die Beta-Transus-Temperatur erwärmt. Die Umformung muss dabei vor dem Beginn der Alpha/Beta-Umwandlung abgeschlossen werden. Beim Beta-Schmieden spielt besonders die Haltezeit auf Umformtemperatur vor dem Schmieden eine große Rolle. Bei höheren Temperaturen kommt es bei metallischen Werkstoffen meist zu Kornvergrößerungen und bei Titanlegierungen zu einer schädlichen Wasserstoffaufnahme. Um unerwünschte Gefügeausbildungen zu vermeiden, muss nach dem Beta-Schmieden kontrolliert abgekühlt werden. Je nach Bedarf kann die Abkühlung in Luft oder Wasser erfolgen [2].

Dem Schmieden wird meist eine Wärmebehandlung angeschlossen. Auch hier wird zwischen Lösungsglühungen im Beta- bzw. Alpha/Beta-Bereich unterschieden. Wird oberhalb von Beta-Transus gegläht, so entsteht ein Lamellen- oder Widmannstättengefüge. Bei Glühungen unterhalb von Beta-Transus bildet sich abhängig von den Umformparametern, ein globulares bzw. bimodales Gefüge aus. Dieses besteht aus globularer Alphaphase und einem lamellaren Umwandlungsgefüge. Deren Phasenanteile und Ausprägungen werden durch die Glühtemperatur sowie die Abkühlgeschwindigkeit nach dem Lösungsglühen gesteuert [2, 6, 7].

4.2 Einflussgrößen beim Schmieden von Titanlegierungen

Beim Schmiedeprozess gibt es einige Einflussgrößen denen besondere Beachtung geschenkt wird. Zu diesen Größen gehören Umformtemperatur, Temperaturverlauf, Umformgrad und Umformgeschwindigkeit. Diese werden im Folgenden getrennt behandelt.

4.2.1 Umformtemperatur

Die Umformtemperatur bestimmt maßgeblich die Materialeigenschaften während des Schmiedens. So werden durch eine Steigerung der Umformtemperatur die benötigten Fließspannungen für die plastische Umformung gesenkt. Außerdem können abhängig vom Schmiedeverfahren die Anteile und Ausprägung an Alpha- und Betaphase gesteuert werden [2, 8].

Anlagentechnisch wird die Umformtemperatur beim Schmieden besonders in der Randzone des Bauteils durch den Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Werkzeug und Schmiedeteil beeinflusst. Bei nicht-isotherm durchgeführten Schmiedeprozessen können so an der Randzone sehr hohe Temperaturgradienten entstehen, welche sich auf das Materialumformverhalten sowie die Gefügeentwicklung nahe der Bauteiloberfläche nachteilig auswirken können.

4.2.2 Temperaturverlauf

Die Aufheizrate und die Haltezeit auf Umformtemperatur bzw. die Abkühlgeschwindigkeit nach der Umformung beeinflussen größtenteils die Gefügeentwicklung und das Ausscheidungsverhalten. Geeignete Heizraten und Haltezeiten vor dem Schmieden haben den Zweck, ein gleichmäßiges Temperaturprofil im gesamten Bauteil einzustellen. Zu langes Halten auf Umformtemperatur ist jedoch zu vermeiden, da es dabei zu einer Gefügevergrößerung und Wasserstoffaufnahme kommt. Dies gilt besonders für das Betaschmieden.

Abhängig vom Kühlmedium (Luft, Wasser) beeinflussen verschiedene Abkühlgeschwindigkeiten die Zusammensetzung und Ausprägung des Gefüges. Rasches Abkühlen führt im Allgemeinen zu einem feineren Gefüge. Außerdem wird durch hohe Abkühlgeschwindigkeiten die Alpha/Beta-Phasenumwandlung zu tieferen Temperaturen verschoben [2, 8].

4.2.3 Umformgrad

Der Umformgrad beeinflusst die Kornform sowie die Ausbildung der Alphaphase. Damit kann beim Schmieden im Alpha/Beta-Phasenbereich der Anteil an globularer Alphaphase gesteuert werden. Neben der Abhängigkeit von anderen Parametern (z.B. Glühtemperatur

und Glühdauer bei der Wärmebehandlung, Schmiedetemperatur etc.) beginnt sich, bei lamellarem Ausgangsgefüge ab einem Umformgrad von ca. 0,7 durch das Einformen der Lamellenstruktur globulare Alpha-Phase zu bilden. Dieser Anteil steigt mit zunehmendem Umformgrad bis sich schlussendlich vollständig globulares Gefüge einstellt [8, 9].

4.2.4 Umformgeschwindigkeit

Neben dem Umformgrad ist auch die Umformgeschwindigkeit ein weiterer wichtiger Schmiedeparameter. Diese übt einen großen Einfluss auf das Umform- und Rekristallisationsverhalten des Werkstoffs aus. Mit zunehmender Umformgeschwindigkeit erhöht sich die Fließspannung. Besonders beim Schmieden im Alpha/Beta-Bereich muss darauf geachtet werden, dass durch die zusätzlich eingebrachte Wärmeenergie bei hohen Umformgeschwindigkeiten die Beta-Transus-Temperatur nicht überschritten wird [8, 10].

5 Mikrostruktur und Mikrostrukturentwicklung in Ti-6Al-4V

In diesem Kapitel wird kurz auf die verschiedenen Mikrostrukturen sowie deren Entwicklung in Ti-6Al-4V eingegangen. Wie bereits erwähnt, ist die Einstellung einer geeigneten Mikrostruktur wesentlich für die mechanischen Eigenschaften des Bauteils. Die einzelnen Gefügearten in Titanlegierungen werden durch unterschiedliche Größe, Form und Anordnung der beiden Phasen Alpha und Beta unterschieden. Mikrostrukturen in Ti-6Al-4V können, abhängig von verschiedenen Herstellparametern, lamellare, globulare und gemischte Gefüge aufweisen. Der genaue Einfluss von Prozessparametern auf die Mikrostrukturentwicklung bzw. deren Einbindung in die Mikrostrukturmodelle wird im nächsten Kapitel genauer erläutert.

5.1 Alpha/Beta Phasenumwandlung

Bei der Abkühlung aus dem Beta-Phasengebiet wandelt bei unterschreiten der Beta-Transus-Temperatur die kubisch raumzentrierte (krz) Betaphase kontinuierlich in die hexagonale (hex) Alphaphase um. Dieser Prozess ist diffusionsgesteuert. Daher wird die Kinetik dieser Umwandlung hauptsächlich von der Abkühlrate bestimmt [2, 6, 11, 12].

Abbildung 2 zeigt die Gleichgewichtswerte von Aluminium und Vanadium in den Phasen Alpha und Beta [11]. Während der Aluminiumgehalt in beiden Phasen nahezu ident ist, klafft die Differenz im Vanadiumgehalt mit sinkender Temperatur immer weiter auseinander. Des Weiteren ist die Diffusionsgeschwindigkeit von Aluminium in der Betaphase um einen Faktor von zwei bis drei höher [13, 14]. Demnach ist der dominierende Diffusionsmechanismus jener des Legierungselements Vanadium.

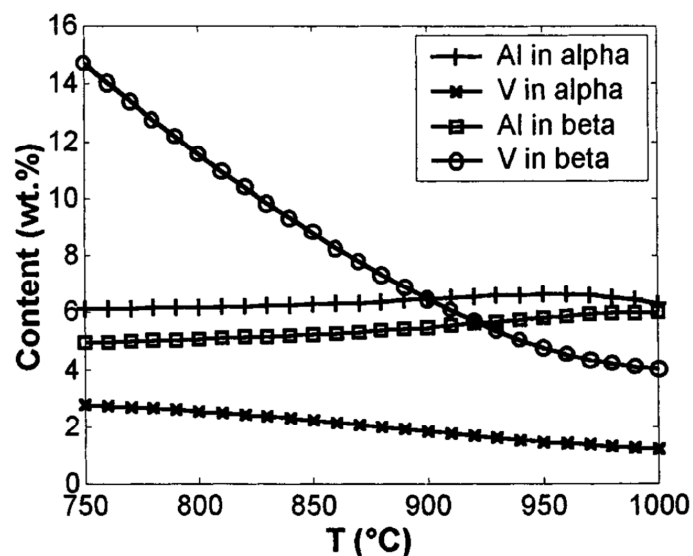


Abbildung 2: Gleichgewichtsanteile (Gewichtsprozent) der Legierungselemente Al und V in den Phasen Alpha und Beta in Abhängigkeit zur Temperatur [11]

Die vorhin genannten Fakten bestätigen die Modellvorstellungen in den Literaturstellen, wonach die Kinetik der Phasenumwandlung durch den Abtransport des Vanadiums weg von der Phasengrenzfläche durch die Betaphase gesteuert wird. Dies ist schematisch anhand des Konzentrationsprofils von Vanadium an der Phasengrenze zwischen Alpha und Beta in Abbildung 3 dargestellt [11].

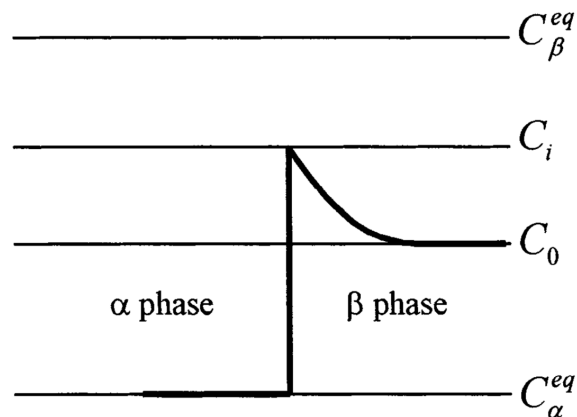


Abbildung 3: Konzentrationsprofil von Vanadium an der Alpha/Beta Phasengrenze [11]

5.2 Kornvergrößerung

Werden metallische Werkstoffe erhöhten Temperaturen ausgesetzt, kommt es meist zu einer Vergrößerung der Mikrostruktur. Geschuldet ist dieser Umstand dem physikalischen Prinzip der Minimierung von Grenzflächenenergie [15, 16, 17, 18]. Auch bei Titan und Titanlegierungen spielt dieser Mechanismus bei der Prozessgestaltung eine entscheidende Rolle. Während im Zweiphasengebiet der Einfluss der Mikrostrukturvergrößerung bei den meisten Herstellungsprozessen gering ausfällt, ist im Einphasengebiet die Kornvergrößerung erheblich stärker ausgeprägt. Der Grund hierfür liegt darin, dass sich in mehrphasigen Materialien die Phasen untereinander am Wachstum bzw. an der Vergrößerung behindern, da an Phasengrenzen eine zusätzliche Phasenumwandlung ablaufen muss [19].

Viele wissenschaftliche Arbeiten berichten von einer gleichmäßigen bzw. normalen Kornvergrößerung in Ti-6Al-4V [20, 21, 22]. Dies gilt sowohl für den Einphasen- als auch den Zweiphasenbereich. Diese Korngrößenentwicklung ist in metallischen Werkstoffen ein diffusionsgesteuerter Prozess und daher stark von der Temperatur abhängig. Zu beachten ist ebenfalls, dass Unterschiede in der Verformungstextur bei Materialien gleicher chemischer Zusammensetzung zu Unterschieden in der Vergrößerungskinetik führen können. Dieses Verhalten konnte z.B. im einphasigen Betabereich von Ti-6Al-4V festgestellt werden [23, 24, 25].

Die Kenntnis dieser Einflüsse ist wichtig für eine optimale Prozessauslegung, um die gewünschte Korngröße einstellen zu können.

5.3 Rekristallisation

Unter Rekristallisation in metallischen Werkstoffen wird im Allgemeinen die umformbedingte Neubildung der Korn- und Kristallstruktur verstanden. Als Triebkraft wirkt hierbei die Verringerung der Versetzungsdichte, welche durch vorangegangene Umformschritte erhöht wurde. Prinzipiell kann zwischen drei verschiedenen Arten von Rekristallisation unterschieden werden. Dazu gehören die dynamische, metadynamische und statische Rekristallisation. Bei der klassischen statischen Rekristallisation entstehen zu Beginn kleine Körner (Rekristallisationskeime), welche anschließend in die verformte Kornstruktur hineinwachsen bis ihre Grenzen zusammenstoßen. Bewegt sich also eine Korngrenze durch einen verformten Bereich mit hoher Versetzungsdichte, so hinterlässt diese schlussendlich ein Gebiet mit geringer Versetzungsdichte. Dies führt schließlich zu einer Verringerung der freien Enthalpie [26, 27].

Grundsätzlich werden die Arten der Rekristallisation dahingehend unterschieden, ob diese schon während oder erst nach der Verformung stattfinden. Während bei der dynamischen Rekristallisation Keimbildung und Wachstum simultan mit der Umformung ablaufen, starten diese bei der statischen Rekristallisation erst nach der Verformung. Eine Mischform ist dabei die metadynamische Rekristallisation. Bei dieser beginnt der Rekristallisationsprozess schon während der Umformung und läuft anschließend noch weiter. Die Unterscheidung der einzelnen Rekristallisationsarten spielt insofern eine wichtige Rolle, als diese zu unterschiedlichen finalen Kornstrukturen führen [15, 26, 27, 28].

Wie auch in anderen metallischen Werkstoffen sind in Ti-6Al-4V die ablaufenden Rekristallisationsmechanismen von den Prozessparametern abhängig. Einige Literaturstellen berichten von dynamischem Rekristallisationsverhalten bei typischen Umformparametern für Gesenkschmiedeteile im einphasigen Beta-Bereich [10, 29, 30]. Die Art der auftretenden Rekristallisation wird dabei meist aus aufgezeichneten Fließkurven oder mittels metallografischen Untersuchungen ermittelt. Bei letzteren ist die Manipulationszeit der Proben vom Ende der Verformung bis zum Abschrecken im Wasserbad von Bedeutung.

In den Literaturstellen [10, 29] fehlt die genaue Angabe der Manipulationszeit der Proben vom Ende der Verformung bis zum Abschrecken im Wasserbad. Bei der metallografischen Bestimmung des dynamischen Rekristallisationsverhaltens ist es jedoch wichtig, dass die Proben unverzüglich nach der Umformung abgeschreckt werden, um das Starten nachfolgender Rekristallisationsprozesse zu unterbinden. Bei der Verwendung handelsüblicher Prüfmaschinen kann die benötigte Zeit vom Ende der Umformung bis zur Abschreckung der Proben einige Sekunden dauern. Somit ist es nicht auszuschließen, dass bei der Ermittlung des Rekristallisationsverhaltens mittels metallografischen Schliffen statisch rekristallisierte Körner der dynamischen Rekristallisation zugeordnet werden.

Aus diesem Grund untersuchte Warchomicka et al. [31] umgeformte Proben, welche nach der Umformung in einem GleebleTM-System in situ abgeschreckt wurden. Dabei sind sehr kurze Abschreckzeiten realisierbar. Die metallografischen Untersuchungen zeigten eine verformte Kornstruktur ohne dynamisch rekristallisierte Körner. Jedoch bei Haltezeiten von nur 10 Sekunden nach der Umformung wies das Gefüge abhängig von den Umformparametern bereits einen statisch rekristallisierten Anteil von bis zu 20 Prozent auf. Dieser kann in anderen Untersuchungsmethoden fälschlicherweise als Ergebnis dynamischer Rekristallisation interpretiert werden.

Die Mechanismen der Rekristallisation führen bei einem ausreichend hohen Umformgrad und groben Ausgangskorn meist zu einer Kornfeinung. Dies kann auch bei der Auslegung von Fertigungsprozessen ausgenutzt werden. Dabei ist allerdings zu beachten, dass nach Abschluss der Rekristallisation erneut die Kornvergrößerung einsetzt.

5.4 Einstellen von lamellarem Gefüge

Rein lamellares Gefüge entsteht, wenn aus dem einphasigen Betaphasengebiet abgekühlt wird. Wird die Beta-Transustemperatur unterschritten, lagert sich zu Beginn an den Betakorngrenzen die neu gebildete Alphaphase in Form eines Saums an. Bei weiterer Abkühlung bilden sich anschließend die ersten Alphalamellen, welche radial in das Betakorn wachsen [32]. Abbildung 4 zeigt schematisch das Wachstum dieser Alphalamellen. Die Lamellendicke variiert hierbei stark mit der Abkühlgeschwindigkeit. Mit zunehmender Abkühlrate sinkt die durchschnittliche Alphalamellendicke und das Gefüge wird feiner [2, 10, 11, 33].

Ein weiterer wichtiger Gefügeparameter ist neben der Lamellendicke auch die Größe der Lamellenpakete. Diese sind vorwiegend von der Größe und Form der ursprünglichen Betakörner abhängig. Wird z.B. im einphasigen Betabereich lange geglüht, kann dies zu einem stark vergrößerten Betakorn führen was letzten Endes in großen Alpha-Lamellenkolonien resultiert. Grobe Strukturen im Gefüge sind insofern problematisch, da sie die mechanischen Eigenschaften meist negativ beeinflussen.

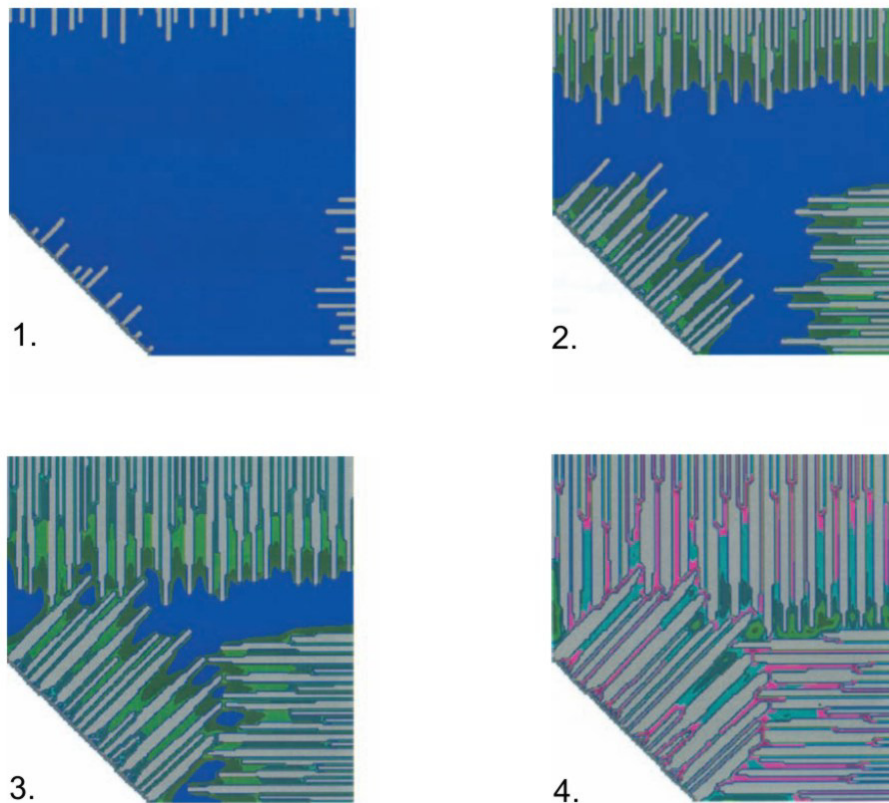


Abbildung 4: Schematische Darstellung des Alphalamellenwachstums in Ti-6Al-4V während des Abkühlvorganges [11]

In Abbildung 5 sind verschiedene lamellare Gefügeausbildungen bei unterschiedlichen Abkühlgeschwindigkeiten dargestellt. Teilbild a zeigt ein feines nadelförmiges martensitisches Umwandlungsgefüge, welches mittels hoher Kühlraten (Wasserabschreckung) aus dem Betagebiet eingestellt wurde. Wird das Material an Luft abgekühlt, so entsteht ein feines Lamellengefüge (Teilbild b). Mit zunehmender Abkühldauer wird das Lamellengefüge immer gröber. In Teilbild c ist ein nach langsamer Ofenabkühlung entstandenes grobes Gefüge aus Alphalamellen dargestellt [2, 34].

Wird ein lamellares Gefüge unterhalb von Beta-Transus ohne plastische Umformung gegläht, kommt es (abhängig von Temperatur, Glühdauer und Abkühlgeschwindigkeit) lediglich zu einer Vergrößerung der Lamellenstruktur und zu praktisch keiner Einformung (Globularisierung) der Alphalamellen. Ein globulares Gefüge entsteht nur, wenn das Material im Alpha/Beta-Phasenbereich ausreichend stark umgeformt wird [2, 8, 9, 34, 35].

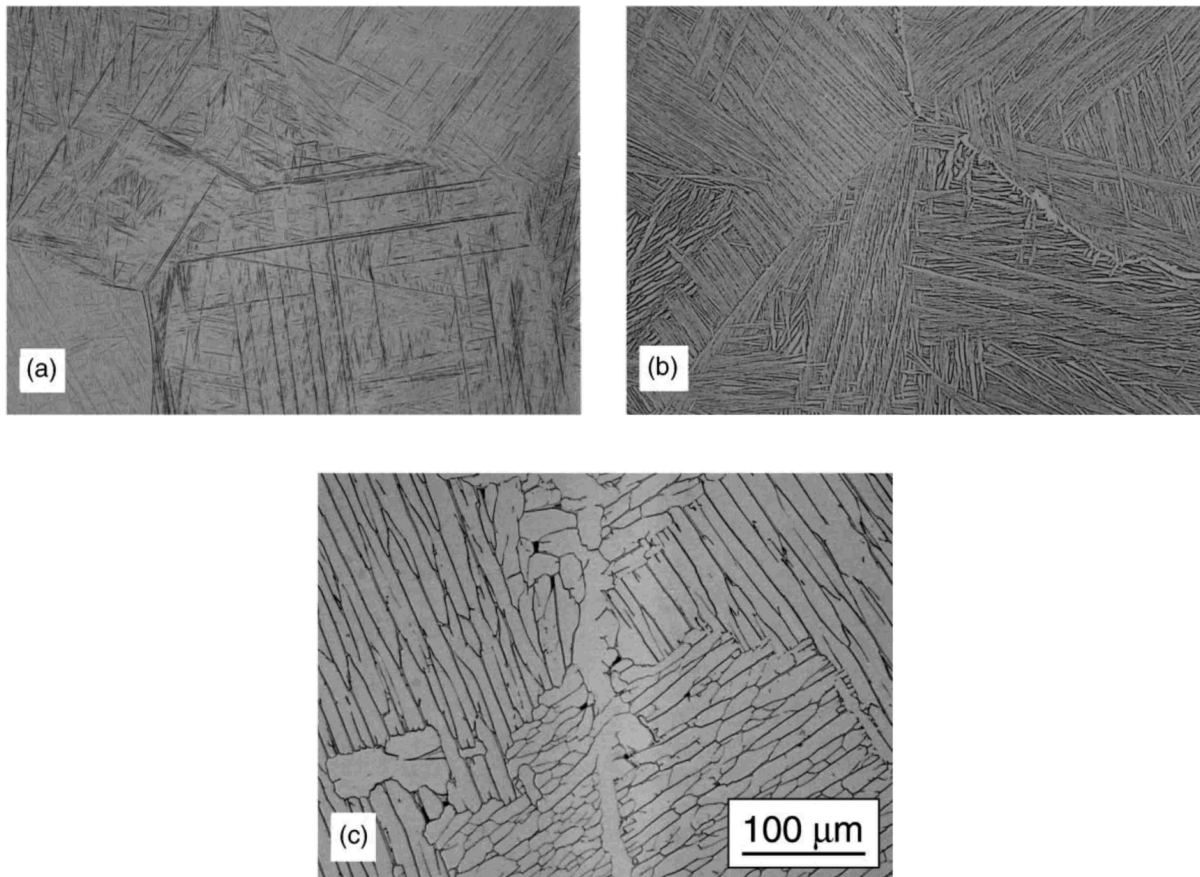


Abbildung 5: Lamellare Gefügeausbildungen bei unterschiedlichen Abkühlbedingungen: a) martensitisches Gefüge (Wasserabschreckung), b) feinlamellares Gefüge (Luftabkühlung), c) globlamellares Gefüge (Ofenabkühlung); gleicher Maßstab in allen Gefügebildern [34]

5.5 Einstellen von globularem und bimodalem Gefüge

Im Gegensatz zum rein lamellaren Gefüge ist es deutlich schwieriger eine vollständig globulare Mikrostruktur einzustellen (Abbildung 6). Prinzipiell gibt es hierzu zwei Möglichkeiten. Wird von einer lamellaren Ausgangsstruktur ausgegangen, kann diese bei ausreichend hoher Verformung aufgrund von Rekristallisationsvorgängen eingeformt werden. Diese Einformung ist dabei zum überwiegenden Anteil vom Umformgrad und der Temperaturführung im Zweiphasengebiet abhängig. Dieses Verhalten wurde bereits in vielen Literaturstellen untersucht [8, 9, 10, 36, 37].

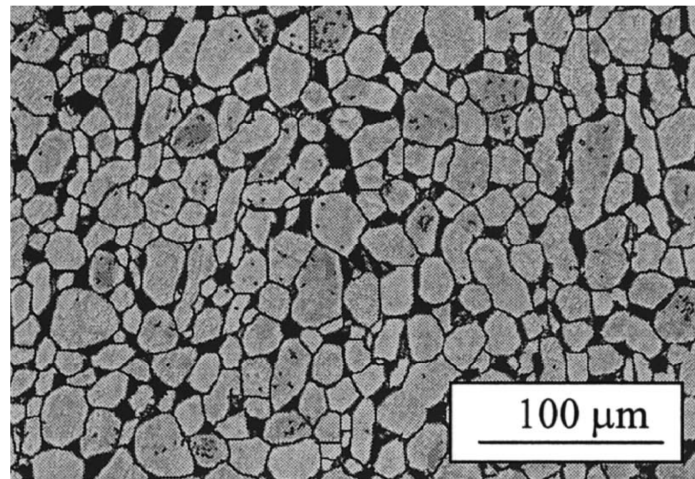


Abbildung 6: Globulares Gefüge von Ti-6Al-4V, globulare Alphaphase (hellgrau) [9]

In den meisten Fällen ist jedoch aufgrund des Herstellungsprozesses im Vormaterial bereits eine vollständig globulare Mikrostruktur vorhanden. Wird nun im Zweiphasengebiet auf Schmiedetemperatur aufgeheizt und wieder abgekühlt, bildet sich die neue Alphaphase in einer lamellenartigen Struktur aus. Die neu gebildete Mikrostruktur besteht somit aus übrig gebliebenen globularen primären Alphakörnern und neu gebildeten sekundären Alphalamellen. Solche Mikrostrukturen werden auch als bimodales Mischgefüge bezeichnet (Abbildung 7). Die einzige Möglichkeit, um unter diesen Umständen ohne zusätzliche Umformung ein vollständig globulares Gefüge einzustellen, besteht darin so langsam abzukühlen, dass sich die neu gebildete Alphaphase vollständig an den bereits vorhandenen globularen primären Alphakörnern anlagern kann.

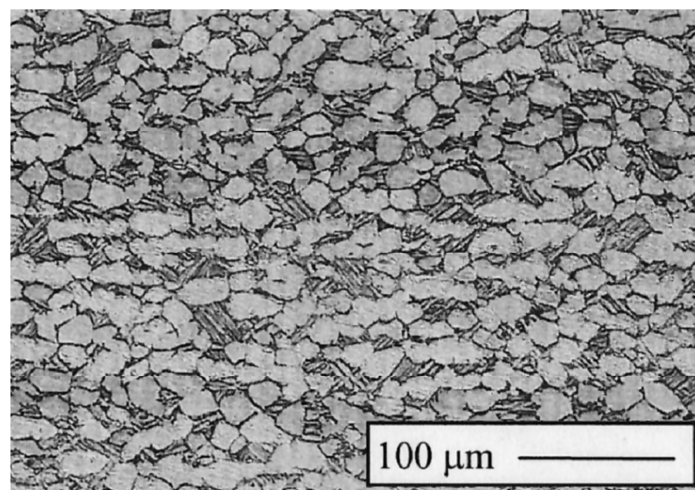


Abbildung 7: Bimodales Mischgefüge von Ti-6Al-4V; primäre globulare Alphakörner (hellgrau) und ehemalige Betakörner mit sekundärer lamellarer Alpha- plus Betaphase [37]

Wie bei den lamellaren Strukturen sind auch bei globularen und bimodalen Gefügen die mechanischen Eigenschaften von diversen Mikrostrukturparametern abhängig. Im Falle von

Ti-6Al-4V sind hierfür überwiegend die Größen bzw. Anteile der primären Alphakörner verantwortlich. Auch die Form der Körner sowie durch Umformung eingebrachte Texturen können das Materialverhalten unter Last maßgeblich beeinflussen [35].

6 Mikrostrukturmodellierung

Eine Beschreibung der bereits entwickelten Mikrostrukturmodelle sowie deren Grundlagen gibt dieses Kapitel. Hierbei wird besonders auf die wichtigen Bereiche der Kornvergrößerung, Rekristallisation und Phasenumwandlung eingegangen. Ebenfalls werden verschiedene Lösungsansätze zur Modellierung der Kornvergrößerung mittels zellulärer Automaten beschrieben.

6.1 Kornvergrößerung

Die Korngrenzenmobilität bzw. das daraus resultierende Kornwachstum basiert auf dem Prinzip der Minimierung von Grenzflächenenergie. Viele Ansätze beschreiben daher die Kinetik der Korngrenzen als Funktion der vorhandenen Oberflächenenergie. Die Korngrenzenmobilität ist daher abhängig von der Grenzflächenenergie und der Menge an vorhandenen Grenzflächen. Dies entspricht wiederum einem indirekt proportionalen Verhältnis zur Korngröße [20]. Im Zweiphasengebiet ist außerdem zu beachten, dass sich die beiden vorhandenen Phasen gegenseitig am Wachstum behindern. Der Grund hierfür liegt an lokalen Phasenumwandlungen, welche bei Bewegungen der Phasengrenzen zusätzlich ablaufen müssen.

6.1.1 Analytische Modellierung von einphasigen Materialien

Für die Modellierung des Kornwachstums von Ti-6Al-4V oberhalb der Beta-Transustemperatur können bereits bestehende Modelle, welche Wachstumsprozesse im Einphasengebiet beschreiben, angewendet werden [23, 38, 39, 40, 41]. Das Kornwachstum kann hierbei über die Gleichung 1

$$D^n - D_0^n = K t \exp\left(\frac{-Q_{GG}}{RT}\right) \quad \text{Gleichung 1}$$

formuliert werden. Tabelle 1 gibt eine Auflistung der verwendeten Parameter. D und D_0 sind die Korngröße nach der Zeit t bzw. die Ausgangskorngröße, n ist der Kornwachstumsexponent und K ist eine Konstante. Die Variablen Q_{GG} , R und T stehen für die Aktivierungsenergie für Kornwachstum, die molare Gaskonstante sowie die Temperatur.

Tabelle 1: Auflistung der verwendeten Variablen für das Kornvergrößerungsmodell

D	Korndurchmesser
D_0	Ausgangskorndurchmesser
n	Exponent für Kornwachstum
K	Konstante
T	Temperatur
Q_{GG}	Aktivierungsenergie für Kornwachstum
R	Molare Gaskonstante
t	Zeit

Bei dieser Art von analytischen Modellen ist zu beachten, dass einige Parameter materialspezifisch sind und entsprechend angepasst werden müssen. Bei diesem Modell sind die Werte für die Aktivierungsenergie für Kornwachstum Q_{GG} und den Wachstumsexponenten n zu bestimmen.

Die typischen Werte für n bewegen sich abhängig vom Material zwischen 2,0 und 5,0. Während reine Metalle nahe dem Schmelzpunkt meist Exponenten im Bereich von zwei aufweisen, liegen die Werte bei den meisten technischen Legierungen in der Nähe von drei und vier. Der Grund hierfür liegt an gelösten Legierungselementen (Korngrenzenseigerung) bzw. feinen Verunreinigungen, welche sich in den Korngrenzen ansammeln und dadurch deren Bewegung behindern (Zener pinning) [42, 43].

Der Wert für die Aktivierungsenergie für Kornwachstum Q_{GG} korreliert meist mit dem Wert für die Eigendiffusion [20]. Laut Zwicker bewegt sich dieser in Reintitan in Bereichen zwischen 145 und 315 kJ/mol [44]. Andere Autoren berichten von Werten um 150 kJ/mol [45, 46, 47]. Dies lässt vermuten, dass der passende Wert für Q_{GG} im Bereich zwischen 145 und 170 kJ/mol liegen dürfte.

6.1.2 Analytische Modellierung von zweiphasigen Materialien

Das im vorigen Abschnitt beschriebene analytische Modell lässt sich mit Einschränkungen auch auf zweiphasige Materialien anwenden. Das größte Problem hierbei besteht darin, dass die Modellparameter für alle Phasenanteile von 0 bis 100% mehr oder weniger genau validiert werden müssen. Einen guten Lösungsansatz hierzu liefern El-Khozondar et al. und Solomatov et al. in ihren Veröffentlichungen [48, 49]. Sie beschreiben mit ihren Modellen den Einfluss verschiedener Phasenanteile auf die Kornvergrößerung.

Jedoch lässt sich dieser Ansatz nur für isotherme Wärmebehandlungen gut anwenden. Bei schwankenden Temperaturen ändern sich ebenfalls die Phasenanteile der Legierung. Löst sich nun eine Phase durch Temperaturerhöhung teilweise auf, führt dies zu einer Schrumpfung der Körner, was im Modell nicht berücksichtigt werden kann.

6.2 Statische Rekristallisation

Die Dissertationen von Kleber [27], Sommitsch [50] und Stockinger [51] liefern bereits eine gute Informationsbasis für die Modellierung von Rekristallisationsvorgängen.

Die klassische statische Rekristallisation, wie sie in Lehrbüchern häufig dargestellt wird, beschreibt die Kornneubildung bei Temperaturen oberhalb dem 0,5-fachen der Schmelztemperatur nach vorangegangener Kaltverformung [15, 52, 53, 54]. Eine Klassifizierung nach Rekristallisationskeimbildung und Wachstum erfolgte in den späten 70er Jahren nach Jonas et al. und Sellars et al. in [55, 56]. Die heute übliche Einteilung beschränkt sich auf dynamische (DRX), metadynamische (MRX) und statische Rekristallisation (SRX). Wie in Abschnitt 5.3 beschrieben unterscheiden sich diese am Startzeitpunkt von Keimbildung und Wachstum.

In Gleichung 2 ist der Avrami-Ansatz zur Berechnung der Kinetik der statischen Rekristallisation gezeigt [57, 58]. Die Reaktionskinetik des Mechanismus wird hierbei durch die benötigte Zeit von 50% rekristallisiertem Anteil (Gleichung 3) beschrieben. Die verwendeten Variablen und Parameter sind in Tabelle 2 aufgelistet.

$$X_{(t)} = 1 - \exp\left[\ln(0.5)\left(\frac{t}{t_{0.5}}\right)\right] \quad \text{Gleichung 2}$$

$$t_{0.5} = a_1 \varphi^{a_2} \exp\left(\frac{Q_{SRX}}{RT}\right) \quad \text{Gleichung 3}$$

Tabelle 2: Auflistung der verwendeten Variablen und Parameter aus Gleichung 2 und Gleichung 3

$X_{(t)}$	statisch rekristallisierter Anteil
t	Zeit
$t_{0.5}$	benötigte Zeit für $X_{(t)} = 0,5$
φ	Umformgrad
R	molare Gaskonstante
T	Temperatur
Q_{SRX}	Aktivierungsenergie für statische Rekristallisation
α_1, α_2	Materialparameter

Bei der Warmumformung können neben der Rekristallisation auch Erholungsvorgänge einen entscheidenden Einfluss auf das Fließverhalten und die dabei entstehende Mikrostruktur haben. Abhängig vom Werkstoff beeinflusst dabei die Stapelfehlerenergie das Klettern und Quergleiten von Versetzungen [15]. Steigende Stapelfehlerenergien begünstigen die Versetzungsbewegung und daher auch die Erholung. Dies ist insofern von Bedeutung, da ein Teil der eingebrachten Umformenergie durch Erholung abgebaut wird und somit für die Rekristallisation nicht mehr zur Verfügung steht. Bei der Modellierung der statischen Rekristallisation im einphasigen Beta-Gebiet von Ti-6Al-4V muss deshalb zusätzlich der Einfluss der Umformrate berücksichtigt werden. In diesem Fall führen abnehmende

Umformgeschwindigkeiten zu langsameren Rekristallisationsgeschwindigkeiten, da mehr eingebrachte Umformenergie durch Erholung vernichtet wird [59].

Auch konnte ein kritischer Umformgrad ermittelt werden, welcher überschritten werden muss, damit es zu statischer Rekristallisation kommt. Dieser liegt bei Temperaturen von 1000 bis 1070°C zwischen 0,2 und 0,3 [31, 59].

6.3 Phasenumwandlung

In den nächsten beiden Abschnitten sind die analytischen Modellansätze zur Vorhersage des Alphaanteils bzw. der Alphalamellendicke bei der Alpha/Beta Phasenumwandlung beschrieben. Diese basieren auf der Modellierung der diffusionsgesteuerten Umwandlungsgeschwindigkeit bei der Beta/Alpha+Beta Phasenumwandlung.

6.3.1 Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov-Modell (JMAK)

Viele Phasenumwandlungen lassen sich mit dem Ansatz nach Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov (JMAK) beschreiben [60, 61, 62, 63, 64]. Die Modellierung der Phasenumwandlungskinetik erfolgt hierbei durch die Berechnung von umgewandelten Volumenanteilen je Zeit. Für isotherme Umwandlungen kann die Umwandlungskinetik in der allgemeinen Form mittels Gleichung 4

$$f = 1 - \exp\left(-k_j t^{n_j}\right) \quad \text{Gleichung 4}$$

dargestellt werden. Der Phasenanteil f , welcher mit der Zeit t variiert, ist außerdem von der Reaktionskonstanten k_j und dem Avrami-Index n_j abhängig. Letztere beschreiben wiederum die Mechanismen von Keimbildung und Wachstum. Durch Modifizierung dieses Modells lässt sich die Geschwindigkeit der Beta \rightarrow Alpha+Beta Phasenumwandlung in Ti-6Al-4V modellieren (Gleichung 5) [65]:

$$\frac{f_\alpha(t)}{f_\alpha^{\max}} = y = 1 - \exp\left(-k_j t^{n_j}\right) \quad \text{Gleichung 5}$$

Die Variable $f_\alpha(t)$ ist der Betrag an Alphaphase nach der Zeit t und wird durch den Wert f_α^{\max} dividiert, welcher den maximalen Gleichgewichtsanteil bei der jeweiligen Temperatur angibt. Daraus ergibt sich der Grad der Umwandlung y .

Das klassische JMAK Modell unterliegt auch einigen Einschränkungen. Zum einen wird die Keimbildung als homogen und die Keimbildungsrate als konstant angenommen. Zum anderen liegt das größte Problem jedoch darin, dass das Modell nur für isotherme

Umwandlungen herangezogen werden kann. Aus diesem Grund entwickelte Malinov et al. einen erweiterten JMAK-Ansatz mit dem es möglich ist, nicht-isotherme Phasenumwandlungen in Ti-6Al-4V zu berechnen [6]. Bei Abkühlvorgängen wird die Zeit-Temperatur Kurve in kleine isotherme Schritte unterteilt, wobei die JMAK-Modellparameter für jeden Schritt bekannt sind. Der Kühlvorgang im ersten Zeitschritt wird mittels Gleichung 6

$$f_1 = 1 - \exp\left(-k_{j1} \Delta t^{n_{j1}}\right) \quad \text{Gleichung 6}$$

beschrieben. Hierbei ist f_1 der umgewandelte Phasenanteil nach der Zeitspanne Δt im ersten Schritt, wobei k_{j1} und n_{j1} die JMAK Parameter bei der gemittelten Temperatur darstellen. Für die Berechnung des Phasenanteils für weitere Simulationsschritte ist nun die Einführung einer fiktiven Zeit erforderlich. Die fiktive Zeit für den Schritt 2 wird mit Gleichung 7 beschrieben.

$$t_2^* = n_{j2} \sqrt[n_{j2}]{\frac{\ln(1 - f_{j1})}{-k_{j2}}} \quad \text{Gleichung 7}$$

t_2^* gibt dabei jene Zeit an, welche benötigt wird, um unter den isothermen Bedingungen im zweiten Schritt bei entsprechender Temperatur und den JMAK Parametern k_{j2} und n_{j2} den Phasenanteil f_1 aus dem letzten Schritt umzuwandeln. Anschließend wird diese Zeit um die Zeitschrittweite Δt erhöht und der Phasenanteil f_2 nach Schritt 2 errechnet sich mittels Gleichung 8.

$$f_2 = 1 - \exp\left(-k_{j2} (t_2^* + \Delta t)^{n_{j2}}\right) \quad \text{Gleichung 8}$$

Angepasst auf jeden beliebigen Simulationsschritt i können Phasenanteil f_i und fiktive Zeit t_i^* mittels Gleichung 9

$$f_i = 1 - \exp\left(-k_{ji} (t_i^* + \Delta t)^{n_{ji}}\right) \quad \text{Gleichung 9}$$

und Gleichung 10

$$t_i^* = n_{ji} \sqrt[n_{ji}]{\frac{\ln(1 - f_{i-1})}{-k_{ji}}} \quad \text{Gleichung 10}$$

berechnet werden.

6.3.2 Modellierung der sekundären Alphalamellendicke

In Ti-6Al-4V bildet sich während der Phasenumwandlung die neu entstehende Alphaphase meist in einer lamellaren Struktur aus. Die Umwandlungskinetik wird hierbei durch die Diffusionsgeschwindigkeit von Vanadium an der Phasengrenze bestimmt. Beim Dickenwachstum von Alphaplatten (Lamellen) ist der Abtransport von Vanadium nur normal zur Plattenebene möglich (Abbildung 8). Im Gegensatz dazu passiert dieser an der Lamellenspitze in mehrere Richtungen. Da dadurch das Vanadium schneller abtransportiert werden kann, beschleunigt dies das Wachstum an dieser Stelle.

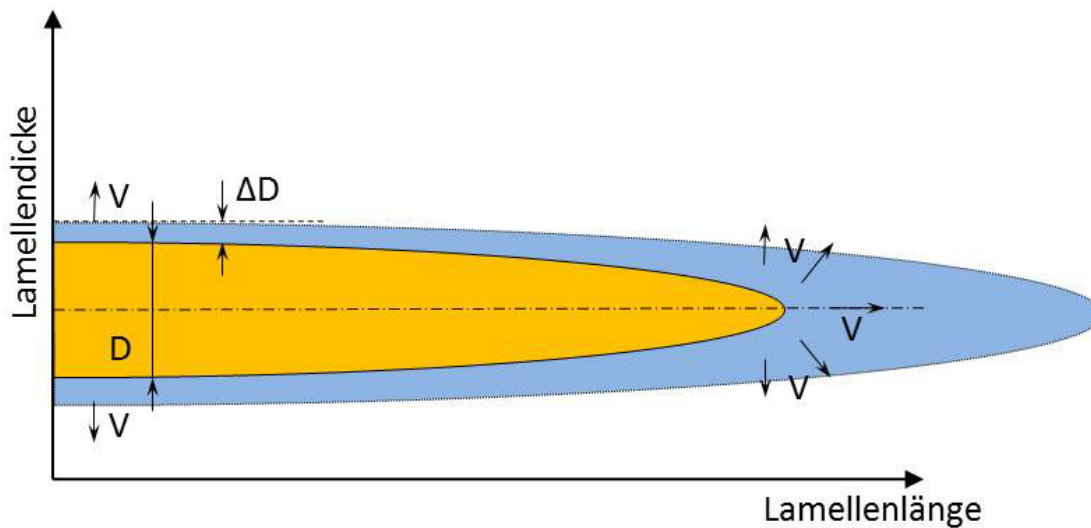


Abbildung 8: Schematische Darstellung des Lamellenwachstums, D Lamellendicke, ΔD Änderung der Lamellendicke, V Diffusionsrichtung des Vanadiums weg von der Grenzfläche

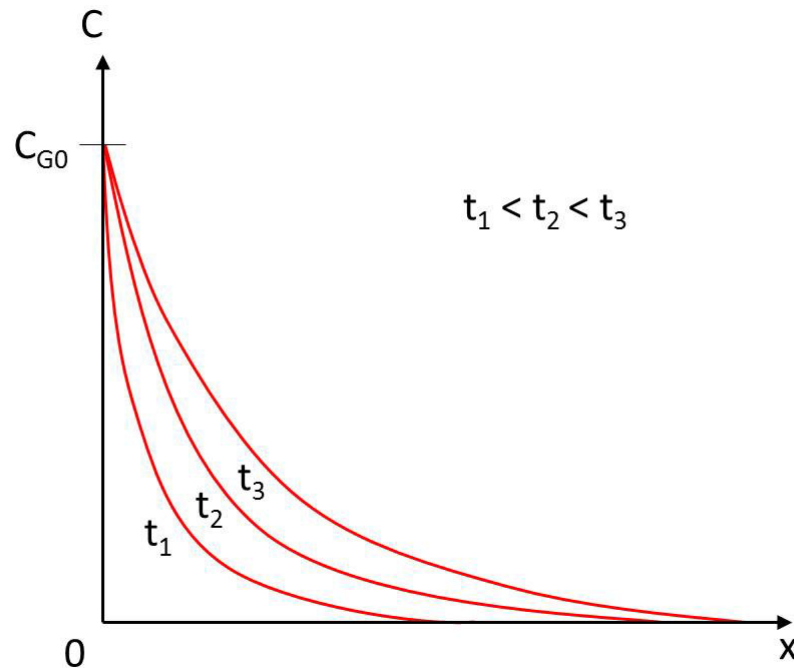
Für eine einfache Modellierung der Lamellendicke wird demnach nur das Wachstum in Dickenrichtung ΔD berücksichtigt, wobei das zusätzliche schnellere Wachstum in Längsrichtung vernachlässigt wird. Aus diesem Grund wird im Diffusionsmodell der eindimensionale Fall beim Dickenwachstum von Platten herangezogen.

Für die Berechnung der Mobilität der Phasengrenze ist es notwendig die Diffusion des Vanadiums an der Grenzfläche zu beschreiben, welche wiederum vom aktuellen Konzentrationsprofil abhängig ist. Der zeitabhängige Konzentrationsverlauf eines diffundierenden Elements an der Phasengrenze (Abbildung 9) lässt sich allgemein mittels Gleichung 11 beschreiben [66].

$$C_{(x,t)} = C_{G0} \operatorname{erfc} \left(\frac{x}{2\sqrt{D_V t}} \right) \quad \text{Gleichung 11}$$

Tabelle 3: Auflistung der in Gleichung 11 verwendeten Variablen

$C_{(x,t)}$	Konzentration abhängig von Position und Zeit
t	Zeit
C_{G0}	Konzentration des diffundierenden Elements an der Grenzfläche
x	Abstand von der Grenzfläche
D_V	Diffusionsrate

**Abbildung 9:** Konzentrationsprofile durch Diffusion zu den Zeiten $t_1 < t_2 < t_3$ in einem semi-infinityen Festkörper bei konstanter Oberflächenkonzentration C_{G0}

Die dabei verwendeten Parameter sind in Tabelle 3 aufgelistet. Die Konzentration an der Grenzfläche C_{G0} und die Diffusionsrate D_V sind werkstoffabhängig und im isothermen Fall konstant. Ändert sich jedoch C_{G0} aufgrund von Temperaturschwankungen, lässt sich dieser Ansatz nicht mehr anwenden. Der Grund hierfür liegt an der entstehenden Unstetigkeit durch die sprunghafte Änderung des Konzentrationswertes an der Grenzfläche (Abbildung 10).

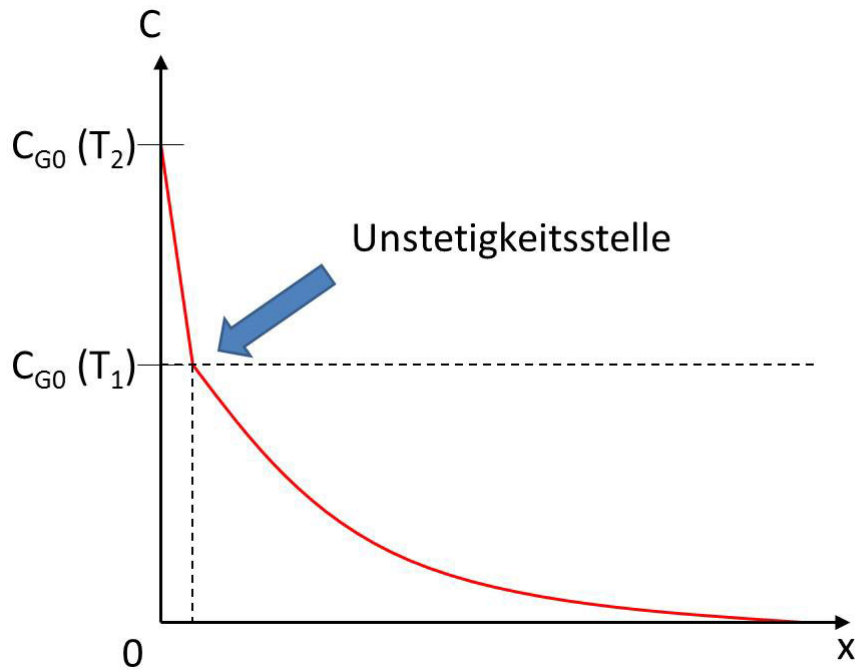


Abbildung 10: Unstetigkeitsstelle im Konzentrationsprofil bei variabler Oberflächenkonzentration bedingt durch eine Temperaturänderung

Ein Lösungsansatz zu diesem Problem besteht in der Unterteilung des Konzentrationsprofils in einzelne Konzentrationsbalken (Abbildung 11). Bei jedem Simulationsschritt erfolgt die Berechnung der Konzentration jedes Balkens anhand der Konzentrationswerte der Nachbarbalken. Dies ergibt sich aus der Summe des zu- und abfließenden Vanadiumstroms (Abbildung 12).

Für die Modellierung des Dickenwachstums der Alphalamellen in Ti-6Al-4V wird das Konzentrationsprofil in 10 Bereiche (Balken) unterteilt. Die Diffusionsbilanz im ersten Balken neben der Grenzfläche ergibt sich aus der V-Konzentration an der Grenzfläche C_β sowie aus der V-Konzentration im zweiten Balken. Beim 10. und Letzten sind es hingegen immer die Werte aus Balken Nummer 9 und dem V-Gehalt in der Legierung C_0 .

Für die Lösung des Diffusionsproblems zwischen den Balken wird das 2. Ficksche Gesetz herangezogen, welches generell im dreidimensionalen Fall mittels Gleichung 12 beschrieben werden kann [66]. Im speziellen Fall von Plattendickenwachstum handelt es sich um ein eindimensionales Problem, wodurch die Terme in y - und z -Richtung wegfallen. Durch Diskretisierung der Differentialgleichung in eine Differenzgleichung nach der Zeit t (Gleichung 13) ergibt sich Gleichung 14. Derselbe Schritt ist in Gleichung 15 gezeigt, wobei hier nach der Abhängigkeit in x -Richtung diskretisiert wird. Zusammengeführt in die Ausgangsgleichung (Gleichung 12) ergibt sich schlussendlich Gleichung 16, welche die Konzentrationsänderung in jedem Balken abhängig von Zeitschrittweite Δt und Balkenabstand x beschreibt.

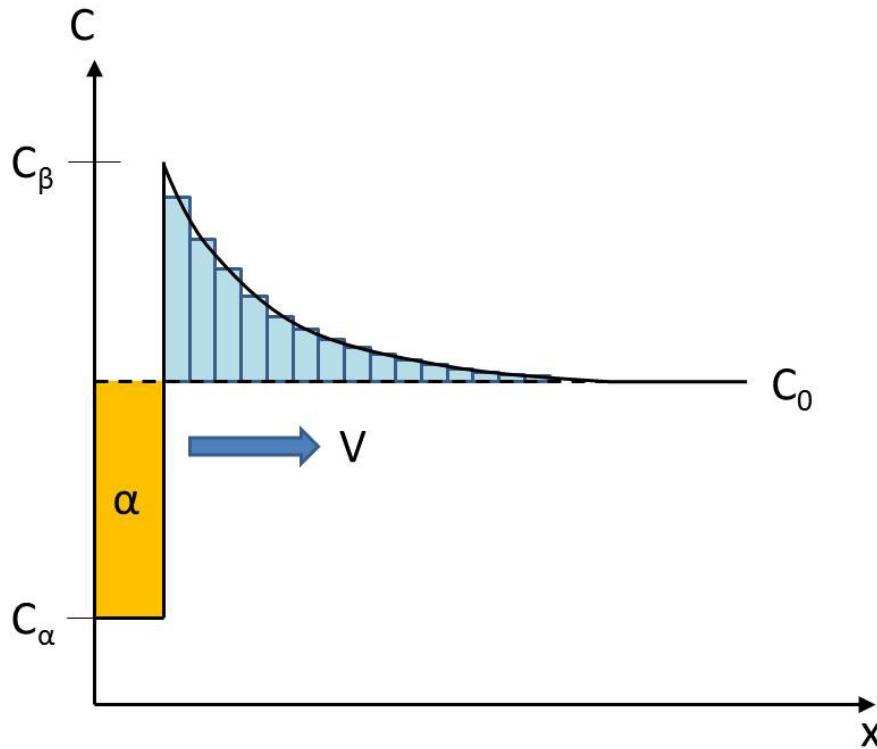


Abbildung 11: Vanadium Konzentrationsprofil an der Grenzfläche, Unterteilung des Konzentrationsverlaufs in einzelne Konzentrationsbalken. C_α V-Gleichgewicht in Alpha, C_β V-Gleichgewicht in Beta, V Diffusionsrichtung, C_0 V-Konzentration in der Legierung, α neu gebildete Alphaphase

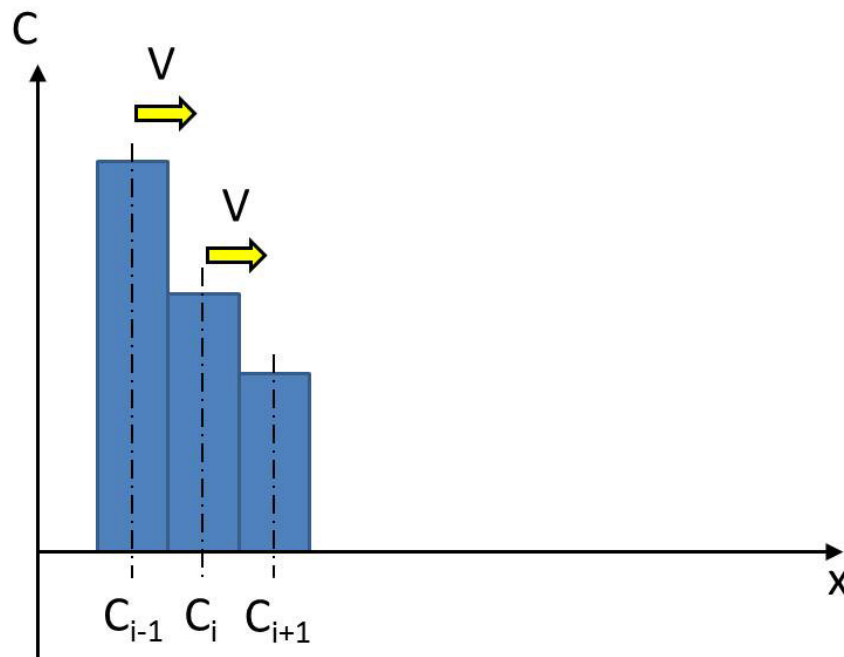


Abbildung 12: Diffusionsbilanz im Balken C_i , Vanadium Zufluss von C_{i-1} und Abfluss nach C_{i+1}

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_V \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad \text{Gleichung 12}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} \rightarrow \frac{\Delta C}{\Delta t} \quad \text{Gleichung 13}$$

$$C_{i_1} = C_{i_0} + \frac{\Delta C}{\Delta t} \cdot \Delta t \quad \text{Gleichung 14}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{\Delta \left(\frac{\Delta C}{\Delta x} \right)}{\Delta x} = \frac{C_{i-1} - 2C_i + C_{i+1}}{\Delta x^2} \quad \text{Gleichung 15}$$

$$C_{i,t+1} = C_{i,t} + \left[D_V \left(\frac{C_{i-1,t} - 2C_{i,t} + C_{i+1,t}}{\Delta x^2} \right) \right] \Delta t \quad \text{Gleichung 16}$$

Für die Modellierung des Diffusionsflusses an der Phasengrenzfläche, welcher für das Dickenwachstum verantwortlich ist, wird das 1. Ficksche Gesetz (Gleichung 17) herangezogen [66]. Der Massefluss J des diffundierenden Elements ist dabei jeweils von der Diffusionskonstante für Vanadium [13] D_V und dem Konzentrationsgradienten dC/dx abhängig. Der Abtransport von Vanadium direkt an der Grenzfläche J_{GF} ergibt sich somit aus Gleichung 18. Die Parameter C_β und C_{B1} stehen hierbei für die Vanadium-Konzentration an der Phasengrenze bzw. im ersten Konzentrationsbalken. Der Längenabstand beider Konzentrationswerte wird mit Δx (1 μm) definiert. Des Weiteren kann nun die Grenzflächenbewegung m für jeden Zeitschritt Δt mittels Gleichung 19 beschrieben werden, wobei C_α die V-Gleichgewichtskonzentration in der Alphaphase angibt.

$$J = -D_V \frac{\partial C}{\partial x} \quad \text{Gleichung 17}$$

$$J_{GF} = -D_V \left(\frac{C_\beta - C_{B1}}{\Delta x} \right) \quad \text{Gleichung 18}$$

$$m = \left(\frac{J_{GF}}{C_\beta - C_\alpha} \right) \Delta t \quad \text{Gleichung 19}$$

Nach der Bewegung der Phasengrenzfläche um den Abstand m wird das Koordinatensystem ebenfalls um diesen Betrag versetzt (Abbildung 13).

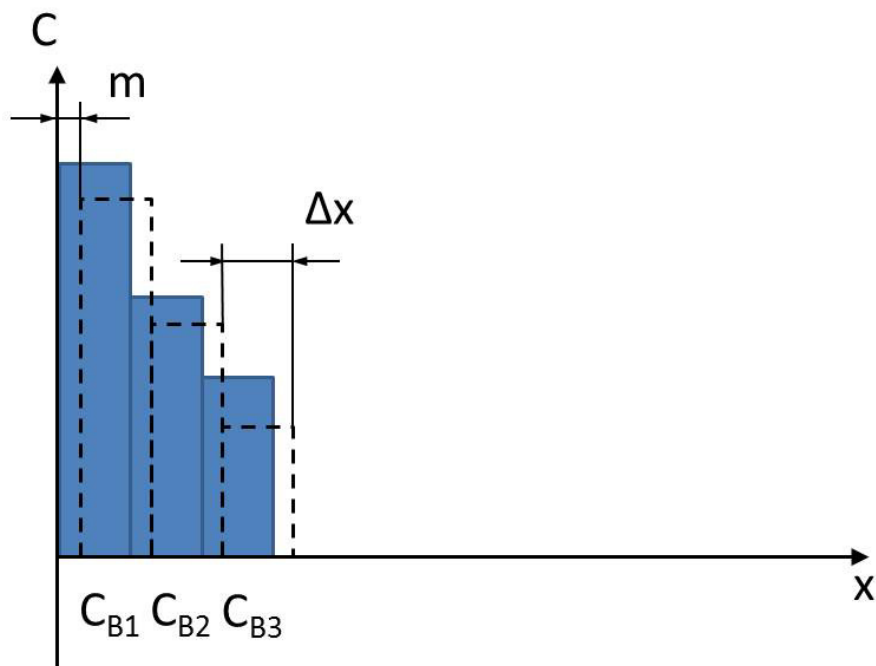


Abbildung 13: Versetzen des Koordinatensystems um den Betrag m und Neuberechnung der Konzentrationswerte in den Balken

Durch das Verschieben ändern sich auch die Werte der einzelnen Konzentrationsbalken. Die neuen gemittelten V-Konzentrationen werden mittels Gleichung 20 berechnet. Die Konzentrationswerte C_β an der Phasengrenze und C_0 in der Matrix bleiben durch diesen Schritt jedoch unverändert.

$$C_{B,i,neu} = C_{B,i}(\Delta x - m) + C_{B,i+1} m \quad \text{Gleichung 20}$$

Nach diesem Vorgang endet der aktuelle Simulationsschritt und die Konzentrationswerte der Balken dienen als Startwerte für den nächsten Schritt. Die Bewegung der Grenzfläche wird nach jedem Schritt aufsummiert und dies ergibt schlussendlich die modellierte Lamellendicke.

6.4 Zelluläre Automaten-Modelle

Einen guten Einstieg in das Thema zelluläre Automaten liefern die Bücher von Wolfram [67] und Mitchell [68]. Aus diesem Grund wird in diesem Abschnitt nur auf die wichtigsten Aspekte zu diesem Thema eingegangen.

Zelluläre Automaten sind Algorithmen, welche die räumliche und zeitliche Entwicklung komplexer Systeme beschreiben. Die einzelnen Zellen in einer definierten Matrix wechseln

dabei ihre Zustände abhängig von vorgegebenen Umwandlungsgesetzen. Diese Gesetze können wiederum auf probabilistischen oder deterministischen Ansätzen basieren. Die zellularen Automaten verwenden üblicherweise einen Zellenraum in 2D oder 3D, welcher gleichmäßig in quadratische bzw. kubische Zellen unterteilt ist. Jeder Zelle können außerdem verschiedene Zustände, wie z.B. Temperatur, Phasen- und Kornzugehörigkeit, zugeordnet werden. Unter Berücksichtigung dieses Zellenzustandes und der Nachbarschaft ist es den Zellen erlaubt ihre Eigenschaften gemäß den Umwandlungsgesetzen zu verändern [69, 70]. Damit ergibt sich eine fortschreitende Entwicklung des Systems mit jedem Simulationsschritt.

Die eigentliche Physik, welche die Geschwindigkeit der Systementwicklung steuert, ist in den Umwandlungsgesetzen des Algorithmus integriert. Bei den probabilistischen Ansätzen basiert dies auf Wahrscheinlichkeiten. Je geringer die Umwandlungswahrscheinlichkeit ausfällt, desto kleiner ist die Wahrscheinlichkeit, dass Zellen ihre Zustände ändern und desto langsamer läuft der Gesamtprozess ab. Somit lässt sich z.B. der Einfluss niedriger Temperaturen auf das Kornwachstum in metallischen Werkstoffen berücksichtigen. Da dieser Ansatz jedoch auf Wahrscheinlichkeiten basiert, ist eine exakte Reproduktion der Simulationsergebnisse nicht möglich. Es lässt sich somit nicht genau vorhersagen, wann welche Zelle ihren Status ändert. Aufgrund der enorm großen Anzahl an Simulationsschritten und Zellen im Zellenraum (bis zu 10^6) kann dieser Umstand aber vernachlässigt werden, da dies praktisch keinen Einfluss auf das Gesamtergebnis hat.

Im Gegensatz zu den probabilistischen Ansätzen ist bei den deterministischen Modellen die Umwandlung der Zellen exakt bestimmt. Dies führt auch bei mehreren Simulationsdurchläufen mit denselben Startparametern immer zu den genau gleichen Ergebnissen. Candic [71] entwickelte in seiner Dissertation deterministische und probabilistische Ansätze, welche die Kornvergrößerung in austenitischen Stählen beschreiben. Problematisch gestaltet sich beim deterministischen Modell die rechenintensive Ermittlung der benötigten Modellparameter, welche für einen Schritt 10 bis 100 mal mehr Zeit in Anspruch nimmt als beim vergleichbaren probabilistischen Modell. Diesem Mehrverbrauch an Simulationszeit kann wiederum nur mit einer deutlichen Verkleinerung der Simulationsmatrix entgegengewirkt werden.

Neben dem Modell nach Candic gibt es einige weitere Modelle zur Simulation von Kornvergrößerung mittels zellularen Automaten [72, 73, 74, 75]. Jedoch lassen sich diese meist nur für einphasige Werkstoffe anwenden. Um auch die Kornvergrößerung in zweiphasigen Materialien modellieren zu können, wurde basierend auf dem probabilistischen Modell nach Candic ein neuer Ansatz entwickelt. Die genaue Beschreibung des weiterentwickelten Modells folgt in Kapitel 8.

7 Vormaterial Ti-6Al-4V

Eine genaue Mikrostrukturauswertung der verwendeten Ti-6Al-4V Legierung wurde bereits in der Dissertation von Homporova [76] durchgeführt. Daher wird in diesem Abschnitt nur kurz auf das verwendete Vormaterial eingegangen. In Tabelle 4 ist die chemische Zusammensetzung der Legierung laut Hersteller aufgelistet. Die berechnete Beta-Transustemperatur des Materials liegt bei 996,8°C [78, 79]. Dieser Wert kann jedoch aufgrund der nicht ganz homogenen chemischen Verteilung der Legierungselemente zwischen Rand und Mitte des Vormaterialblocks variieren.

Tabelle 4: Chemische Zusammensetzung der verwendeten Ti-6Al-4V Legierung

Element	Al	V	C	Fe	N	O
Gewichts-%	6,45	4,33	0,03	0,18	0,006	0,18

Abbildung 14 zeigt das Gefüge des Vormaterials im Anlieferungszustand. Die Alphaphase liegt meist vollständig globular vor und ist dabei an den Korngrenzen von einem dünnen Saum Betaphase umschlossen. Geringe Anteile können auch in lamellarer Form auftreten. Die Phasenanteile an Alpha liegen hierbei je nach Charge bei ca. 90 Prozent.

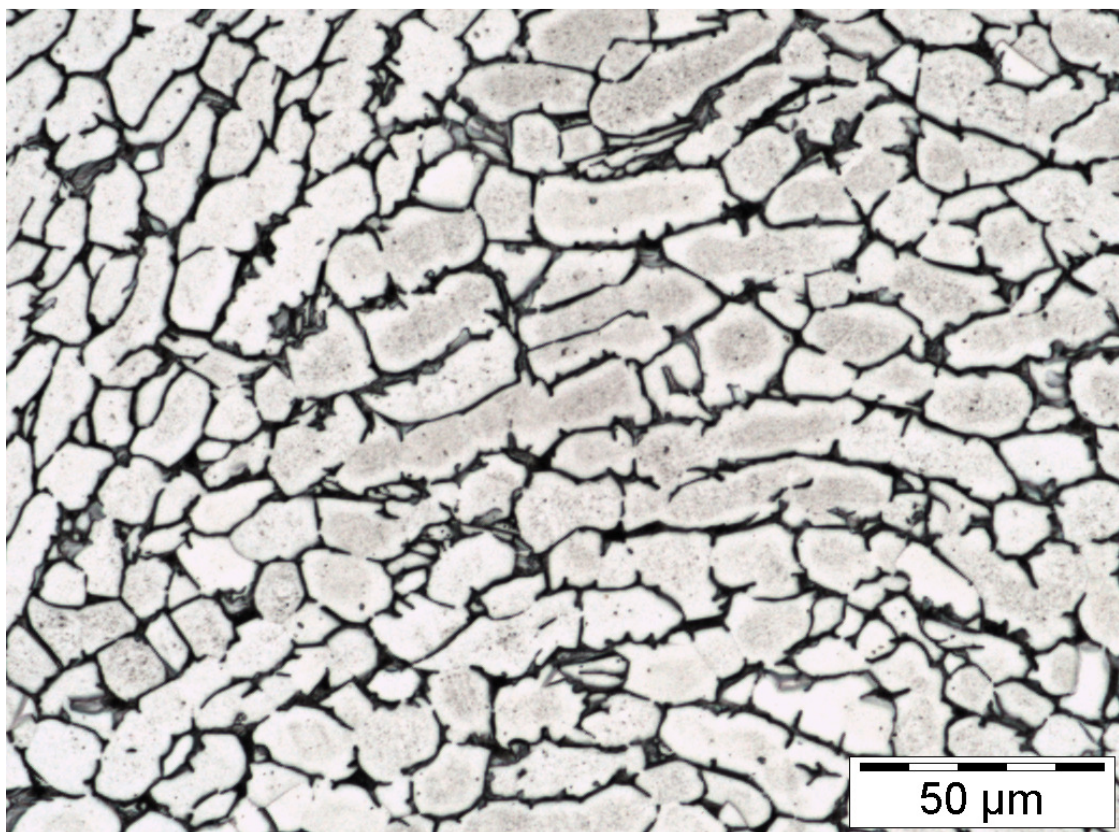


Abbildung 14: Mikrostruktur des Materials im Lieferzustand mit den Phasen Alpha (hellgrau) und Beta (dunkelgrau)

8 Zellulärer Automat

In diesem Kapitel wird der grundsätzliche Aufbau bzw. die Arbeitsweise des verwendeten CA-Modells beschrieben. Dies beinhaltet ebenfalls eine Erläuterung aller benötigten Inputdaten wie Ausgangsmikrostruktur und Materialparameter. Darüber hinaus ist dieses Modell als Basis für weitere Modellansätze in Richtung der Simulation von Rekristallisations- und Phasenumwandlungsvorgängen gedacht, welche in Folgeprojekten implementiert werden sollen. Aus diesem Grund liegt der Schwerpunkt dieser Arbeit auf der Modellierung der Kornvergrößerung.

8.1 Aufbau

Das CA-Modell basiert auf einem selbst entwickelten JAVA-Code, welcher ab der JAVA-Version 1.7 lauffähig ist und auf den Betriebssystemen Microsoft Windows 7 und openSUSE Version 12.0 (Linux) getestet wurde. Je nach Komplexität der Simulation steigen die Anforderungen an die Computerhardware. Für die Ausführung des Programms wird daher eine Workstation mit aktuellem Vierkernprozessor und mindestens 8 GB Arbeitsspeicher empfohlen (Stand: Jänner 2013).

Der CA besteht aus einer Matrix mit quadratischen Zellen. Jede Zelle verfügt dabei über einen Korn- bzw. Phasen-Status. Körner werden hierbei mit Zahlen und Phasen mit Buchstaben deklariert. D.h., alle Zellen mit gleichem Phasen- oder Kornstatus gehören demselben Korn bzw. derselben Phase an. Somit kann mittels Farbzueweisung jeder Zelle abhängig von Korn- bzw. Phasenzugehörigkeit eine Farbe zugeordnet werden, um damit die Mikrostruktur abzubilden. Zellen mit Nachbarn einer anderen Phase bzw. eines anderen Kornes gehören zu einer Phasen- bzw. Korngrenze. In nachfolgenden Beispiel (Abbildung 15) sind die einzelnen Phasen A und B gelb bzw. blau und Korn- bzw. Phasengrenzen schwarz dargestellt.

Der CA verwendet die Nachbarschaftsbeziehungen nach Moore, um festzustellen, ob sich eine Zelle an einer Korn oder Phasengrenze befindet und dadurch ein Statuswechsel der Zelle überhaupt möglich ist. Hierzu wird der Status der acht direkt anliegenden Nachbarzellen überprüft (Abbildung 16). In diesem speziellen Fall liegt die Zelle sowohl an einer Korngrenze als auch an einer Phasengrenze.

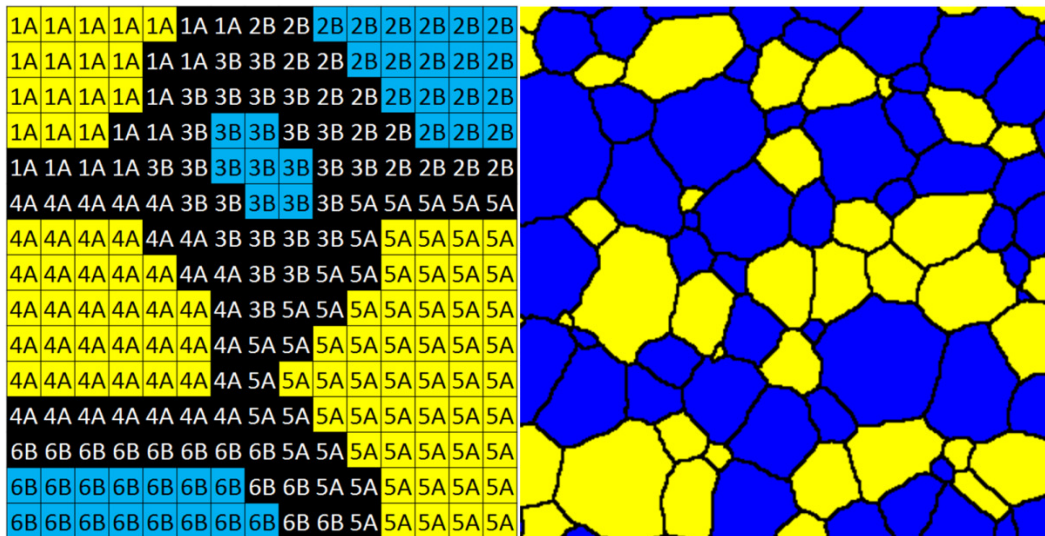


Abbildung 15: Unterschiedliche Einfärbung der Zellen in Abhängigkeit von Korn- bzw. Phasenzugehörigkeit zur Darstellung der Mikrostruktur (links: Detailbild mit Zellen und Phasenstatus; rechts: digitalisierte Mikrostruktur), Phase A (gelb), Phase B (blau), Phasen bzw. Korngrenzen (schwarz)



Abbildung 16: Nachbarschaftsregeln nach Moore; die aktuell ausgewählte Zelle 2B (in grau) befindet sich in Nachbarschaft mit den anderen Körnern 1B und 3A

Zur Simulation der eigentlichen Mikrostrukturentwicklung verwendet das Modell einen probabilistischen Ansatz zur Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeit P . Über diese wird bestimmt ob eine Zelle ihren Status ändern darf oder nicht. Damit wird die Bewegung von Phasen- bzw. Korngrenzen gesteuert.

8.2 Arbeitsweise

Wie alle Mikrostrukturmodelle benötigt auch der CA Inputdaten zur Gefügesimulation. Als Ausgangsmikrostruktur (Input) für den CA können sowohl virtuell erstellte, als auch im Mikroskop aufgenommene, reale Mikrostrukturbilder herangezogen werden. Ein Algorithmus weist hierbei jedem Bildpunkt abhängig von Farbe und Kontrast einen Phasen- und Kornstatus zu.

Zur Simulation der eigentlichen Änderung der Mikrostruktur werden die Übergangswahrscheinlichkeiten für Korn- und Phasengrenzen herangezogen. Im Zweiphasenbereich (Phase A und B) sind generell nur zwei Fälle möglich wie eine Zelle ihren Phasen- bzw. Kornstatus ändern kann. Entweder ändert sich nur der Kornstatus, z.B. an Korngrenzen oder es wechseln Korn- und Phasenstatus gemeinsam, wie es an Phasengrenzen der Fall ist. Eine Änderung des Phasenstatus alleine ist nicht möglich, da eine Zelle bei Phasenänderung auch den Kornstatus der Nachbarzelle übernehmen muss. Als erste Bedingung für einen Statuswechsel muss die Zelle einer Korn- bzw. Phasengrenze angehören. D.h., eine angrenzende Zelle (Moore Nachbarschaft) verfügt über einen anderen Korn- oder Phasenstatus.

Die an Korngrenzen zur Anwendung kommenden Wahrscheinlichkeiten $P_{(A/A)}$ und $P_{(B/B)}$ dienen der Beschreibung der Korngrenzmobilität. Ihr Wert variiert hierbei in Abhängigkeit von der Temperatur zwischen null und eins, wobei höhere Werte eine höhere Mobilität und damit auch eine schnellere Kornvergrößerung bedeuten.

An Phasengrenzen A/B ist bei Kornvergrößerung zusätzlich eine lokale Phasenumwandlung notwendig. Dieser Prozess ist meist diffusionsgesteuert, also von dem am langsamsten diffundierenden Element abhängig. Aufgrund dieser lokalen Phasenumwandlung ist die Mobilität von Phasengrenzen kleiner als die von Korngrenzen. Dies resultiert in kleineren Werten der Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{(A/B)}$ und $P_{(B/A)}$ an Phasengrenzen im Vergleich zu $P_{(A/A)}$ und $P_{(B/B)}$ an Korngrenzen.

Der grundsätzliche Ablauf eines Simulationsschritts ist in Abbildung 17 skizziert. Zu Beginn jedes Schritts werden die Temperatur und die entsprechenden Phasengleichgewichte eingelesen bzw. die Umwandlungswahrscheinlichkeiten berechnet. Anschließend wird eine zufällige Zelle ausgewählt. Befindet sich diese an keiner Grenze, d.h. alle acht Nachbarzellen (Moore Nachbarschaft) sind mit der ausgewählten Zelle ident, wird die nächste Zelle zufällig ausgewählt.

Ist dies nicht der Fall wird im nächsten Schritt als erstes der Status der Nachbarzellen 2, 4, 6, 8 und anschließend der Zellen 1, 3, 7, 9 überprüft (Abbildung 18). Sind bei einer Abfrage drei oder mehr Zellen ident und gehören einem andern Korn an, so wechselt die aktuelle Zelle mit der entsprechenden Übergangswahrscheinlichkeit P ihren Status auf den der Nachbarzellen des anderen Kornes. Muss die Zelle hierfür nur ihren Kornstatus ändern, werden dafür die Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{(A/A)}$ bzw. $P_{(B/B)}$ für die Beschreibung der Korngrenzmobilität herangezogen. Ist zusätzlich noch eine Änderung des Phasenstatus notwendig, kommen die Wahrscheinlichkeiten $P_{(A/B)}$ und $P_{(B/A)}$ für Phasengrenzen zum Einsatz. Dies gewährleistet ein globulares Wachstum der Mikrostruktur und führt automatisch zu einem Einformen langgestreckter Körner. Außerdem wird im Fall des Phasenwechsels

zusätzlich überprüft, ob sich das System anschließend noch innerhalb der Toleranz des Phasengleichgewichts befindet.

Lassen sich bei keiner der ersten Abfragen drei identischen Nachbarn ausmachen, so springt das Programm in die nächste Ebene. Grenzen an die betrachtete Zelle nur andere Körner mit der gleichen Phase jener Zelle an, so wird für ihren Wechsel $P_{(A/A)}$ bzw. $P_{(B/B)}$ herangezogen. Muss die Zelle anschließend ihren Status wechseln, wird für den neuen Status zufällig eine Nachbarzelle ausgewählt. Die Zelle wechselt somit abhängig von der Anzahl der Nachbarzellen anderer Körner. D.h., grenzen an die entsprechende Zelle des Korn 1 z.B. vier Zellen von Korn 2 und eine Zelle von Korn 3 an, so wird diese dann in 80 Prozent der Fälle zu Korn 2 und nur zu 20 Prozent zu Korn 3 wechseln. Die drei restlichen Nachbarzellen, welche ebenfalls zu Korn 1 gehören, bleiben dabei unberücksichtigt. Dasselbe gilt, wenn die Körner 2 und 3 einer anderen Phase angehören, nur werden dann die Wahrscheinlichkeiten $P_{(A/B)}$ bzw. $P_{(B/A)}$ herangezogen.

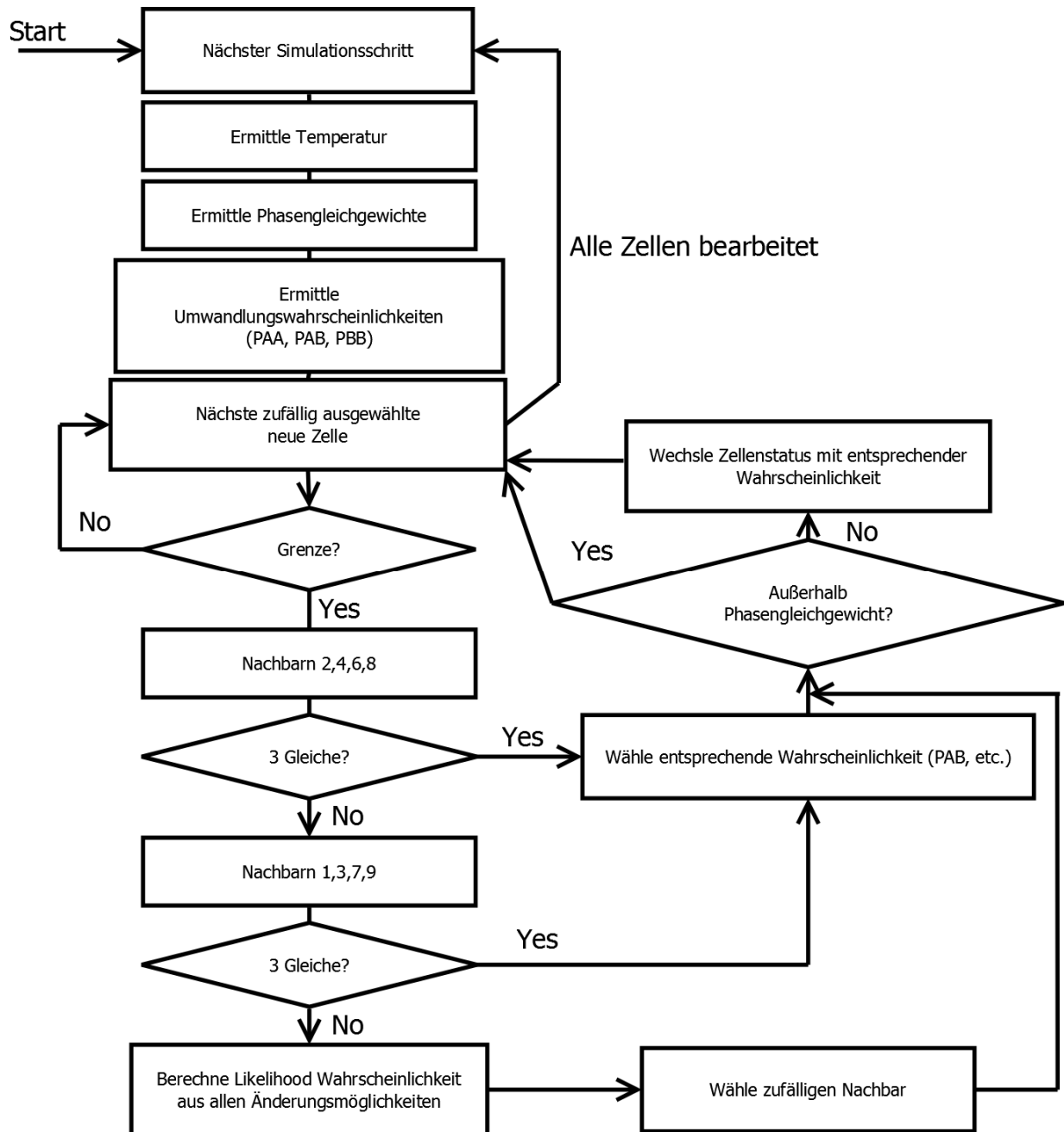


Abbildung 17: Ablaufschema aller Berechnungsschritte für eine Zelle in der Matrix

Hat nun ein Nachbarkorn dieselbe und das andere eine unterschiedliche Phase als die betrachtete Zelle, wie in Abbildung 16, so kommt die Likelihood Methode [77] zum Einsatz. Zu welchem Korn die Zelle wechselt, ist dabei von den Wahrscheinlichkeitswerten $P_{(A/A)}$ und $P_{(B/B)}$ bzw. $P_{(A/B)}$ und $P_{(B/A)}$ abhängig. Ob die entsprechende Zelle überhaupt wechselt ist hierbei durch die höhere Wahrscheinlichkeit bestimmt. Beträgt z.B. $P_{(A/A)} = 0,3$ und $P_{(A/B)} = 0,1$ kommt es in 30 % der Fälle zu einem Statuswechsel, wobei bei einem Wechsel mit 75 % Wahrscheinlichkeit das Korn mit gleicher Phase und mit 25 % Wahrscheinlichkeit das Korn mit anderer Phase ausgewählt wird. Kommen bei einem Wechsel wiederum mehrere Nachbarkörner gleicher bzw. unterschiedlicher Phasen in Frage, wird wie vorhin beschrieben ein Korn in Abhängigkeit von der Anzahl an direkten Nachbarn zufällig ausgewählt.

1	2	3
4		6
7	8	9

Abbildung 18: Nummerierung der direkten Nachbarn einer betrachteten Zelle

8.3 Setup im Einphasengebiet

Zur Simulation der Kornvergrößerung im Einphasengebiet ist es lediglich notwendig, in Abhängigkeit von der Temperatur und des Kornwachstumsexponenten des Werkstoffs, die Korngrenzmobilität über die Übergangswahrscheinlichkeit $P_{(B/B)}$ zu beschreiben (Gleichung 21). Die Zellen an Korngrenzen werden somit nur ihren Kornstatus verändern, da nur eine Phase existiert. Diese Änderung wird mit Hilfe des Temperaturterms $P_{(T)}$ (Gleichung 22) sowie des Terms $P_{(i)}$ (Gleichung 23), welcher die materialabhängigen Werte des Wachstumsexponenten berücksichtigt, beschrieben. Der Term $P_{(T)}$ kann dabei direkt aus dem analytischen Vergrößerungsmodell (Gleichung 1) übernommen werden. P_0 ist in diesem Fall eine Konstante, welche den Wert für $P_{(B/B)}$ bei der höchsten zu simulierenden Prozesstemperatur, also bei maximaler Wachstumsgeschwindigkeit, zwischen 0,5 und 1,0 einstellt. Somit ist gewährleistet, dass $P_{(B/B)}$ im gesamten Prozessfenster unter 1,0 bleibt, da Übergangswahrscheinlichkeiten größer 1,0 mathematisch nicht gültig sind.

$$P_{(B/B)} = P_0 \cdot P_{(T)} \cdot P_{(i)} \quad \text{Gleichung 21}$$

$$P_{(T)} = \exp\left(\frac{-Q_{GG}}{RT}\right) \quad \text{Gleichung 22}$$

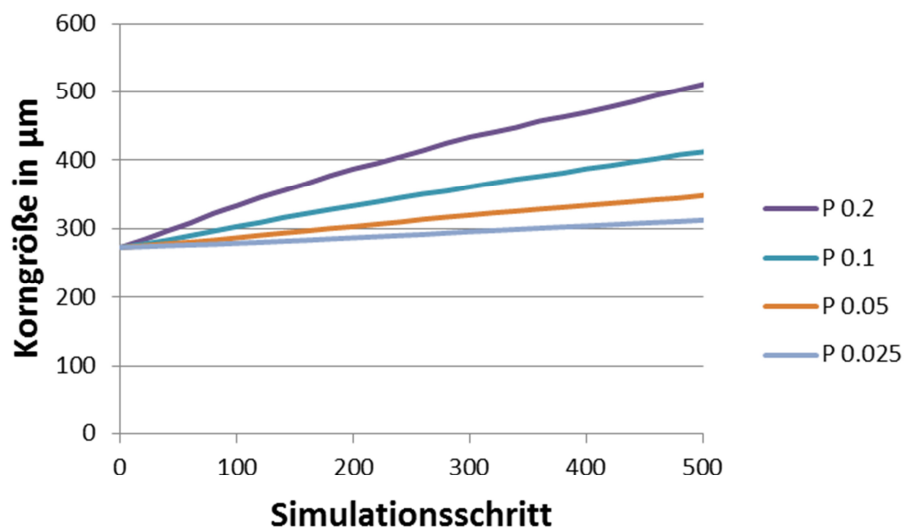
$$P_{(i)} = \frac{1}{\sqrt{i}} \quad \text{Gleichung 23}$$

Zur besseren Veranschaulichung sind die verwendeten Variablen und Parameter von Gleichung 21 bis Gleichung 23 in Tabelle 5 zusammengefasst.

Tabelle 5: Parameter für das CA Modell im einphasigen Bereich (Gleichung 21 bis Gleichung 23)

$P_{(B/B)}$	Übergangswahrscheinlichkeit
P_0	Konstante = 200000
$P_{(i)}$	Korrekturterm für Wachstumsexponenten
$P_{(T)}$	Temperaturterm
i	Simulationsschritt
R	Molare Gaskonstante
T	Temperatur in °K
Q_{GG}	Aktivierungsenergie für Kornwachstum = 150 kJ/mol

Wie bereits erwähnt wird die Kornvergrößerung im CA-Modell über die Übergangswahrscheinlichkeit gesteuert. Das Kornwachstum im Einphasengebiet skaliert somit direkt mit der Wahrscheinlichkeit P (Abbildung 19).

**Abbildung 19:** Einfluss der Wahrscheinlichkeit P auf die Korngrößenentwicklung

Eine schnellere Kornvergrößerung, wie z.B. bei Temperaturerhöhungen, wird also durch höher Wahrscheinlichkeitswerte erreicht (Abbildung 20).

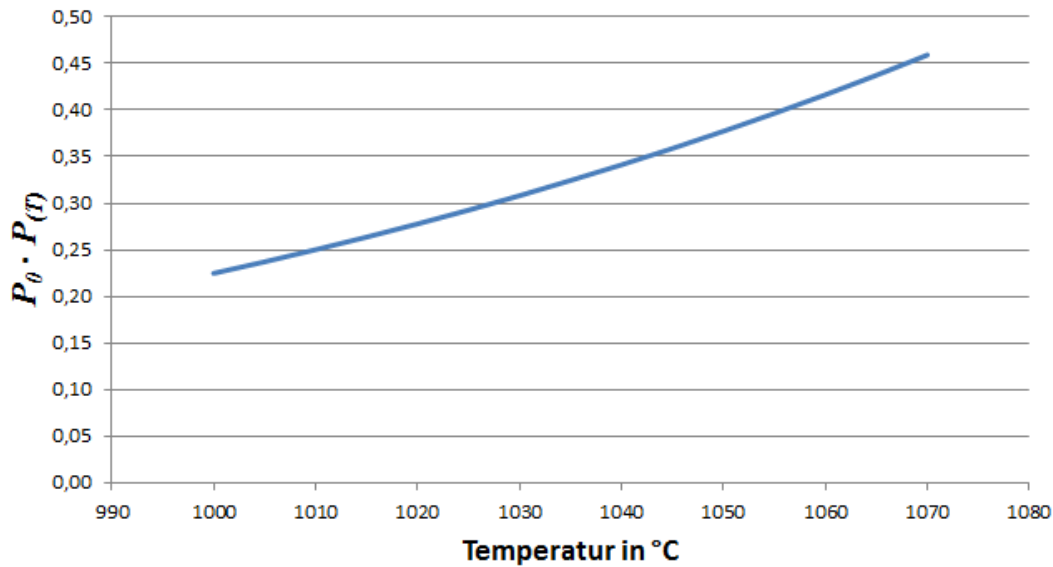


Abbildung 20: Einfluss der Temperatur auf die Übergangswahrscheinlichkeit im Temperaturbereich von 1000 bis 1070°C ($P_0 \cdot P(T)$)

Die Wahl der geeigneten Zellgröße und Zeitschrittweite erfolgte während der Validierung des Modells anhand experimenteller Daten zusammen mit den anderen Parametern P_0 und $P_{(i)}$. Die Parameter wurden schlussendlich mit 35 μm für die Zellgröße und 0,02 s für die Schrittweite festgelegt.

8.4 Setup im Zweiphasengebiet

Anders als im Einphasengebiet sind hier bei der Simulation der Kornvergrößerung im Zweiphasengebiet mehrere Übergangswahrscheinlichkeiten zu definieren, da Zellen sowohl ihren Kornstatus als auch ihren Phasenstatus verändern. Da die Übergangswahrscheinlichkeiten an Phasen- und Korngrenzen unterschiedliche Werte aufweisen, beeinflussen auch die Phasenanteile die Kornvergrößerung, weil sich damit der Betrag an Korn- und Phasengrenzflächen ändert. Die Simulation des Einflusses der Phasenanteile auf das Wachstumsverhalten einzelner Phasen mittels CA ist in Abbildung 21 bis Abbildung 24 dargestellt. Für die gezeigten Ergebnisse wurden die Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{(A/A)}$ und $P_{(B/B)}$ an Korngrenzen auf 0,5 bzw. $P_{(A/B)}$ und $P_{(B/A)}$ an Phasengrenzen auf 0,05 gesetzt, was zu einer zehnmal langsameren Kinetik von Phasengrenzen im Vergleich zu Korngrenzen führt.

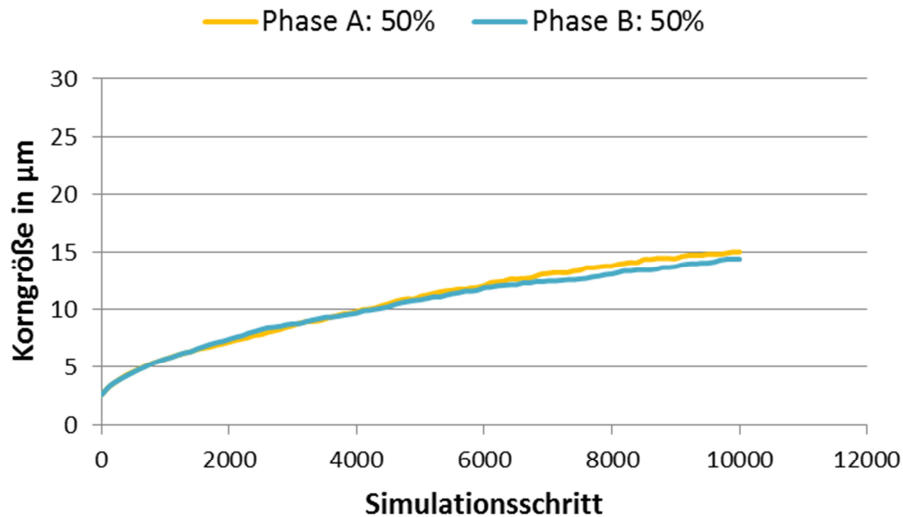


Abbildung 21: Durchschnittliche Korngröße der jeweiligen Phase bei gleichen Phasenanteilen in Abhängigkeit vom jeweiligen Simulationsschritt

Bei gleichen Phasenanteilen an Alpha und Beta vergrößern beide Phasen gleich schnell (Abbildung 21). Wird ein Phasenanteil erhöht, erfährt die dominierende Phase eine beschleunigte Vergrößerung, während die andere in ihrem Wachstum eingebremst wird (Abbildung 22). Dieser Effekt verstärkt sich, je weiter sich die entsprechenden Phasenanteile auseinander bewegen (Abbildung 23). Liegt eine Phase allein vor, dann erreicht die Geschwindigkeit der Kornvergrößerung ein Maximum (Abbildung 24). Der Grund hierfür liegt darin, dass z.B. bei steigendem Betagehalt die Alphakörner vermehrt von Körnern der anderen Phase umgeben sind, während die Betakörner mehr phasengleiche Nachbarn haben. Dadurch wird das Vergrößern der Alphaphase vorwiegend durch die langsamere Bewegung der Phasengrenze bestimmt. Hingegen verfügt dann die Betaphase über mehr Beta zu Beta Grenzflächen, wodurch deren Vergrößerung vermehrt von der schnelleren Bewegung der Korngrenzen gesteuert wird.

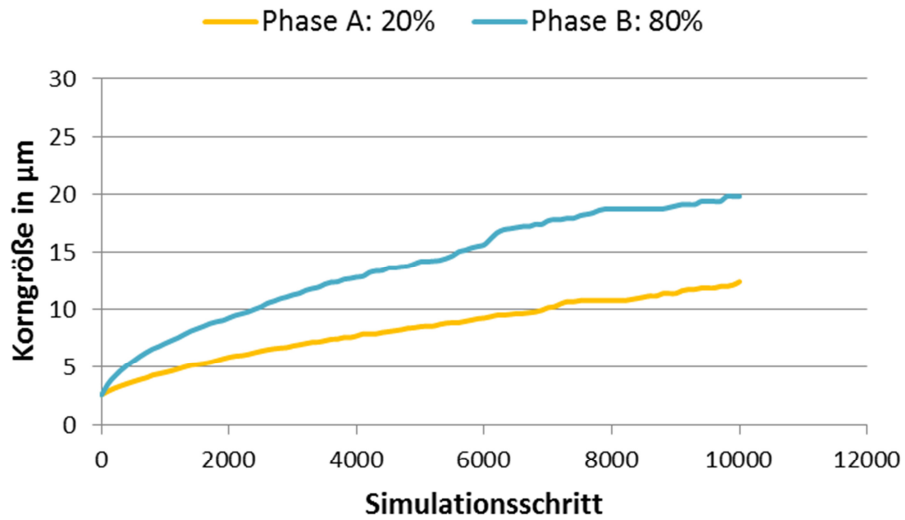


Abbildung 22: Durchschnittliche Korngröße der jeweiligen Phase bei 20% Phase A und 80% Phase B in Abhängigkeit vom jeweiligen Simulationsschritt

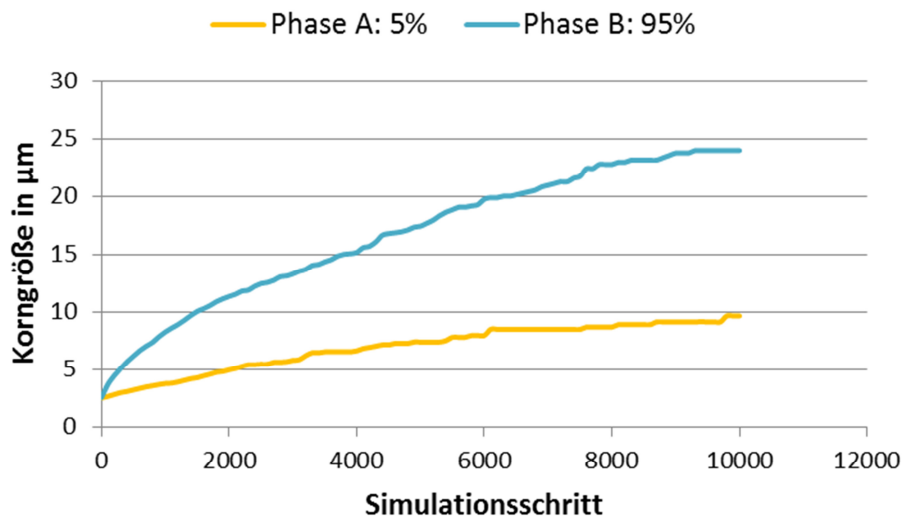


Abbildung 23: Durchschnittliche Korngröße der jeweiligen Phase bei 5% Phase A und 95% Phase B in Abhängigkeit vom jeweiligen Simulationsschritt

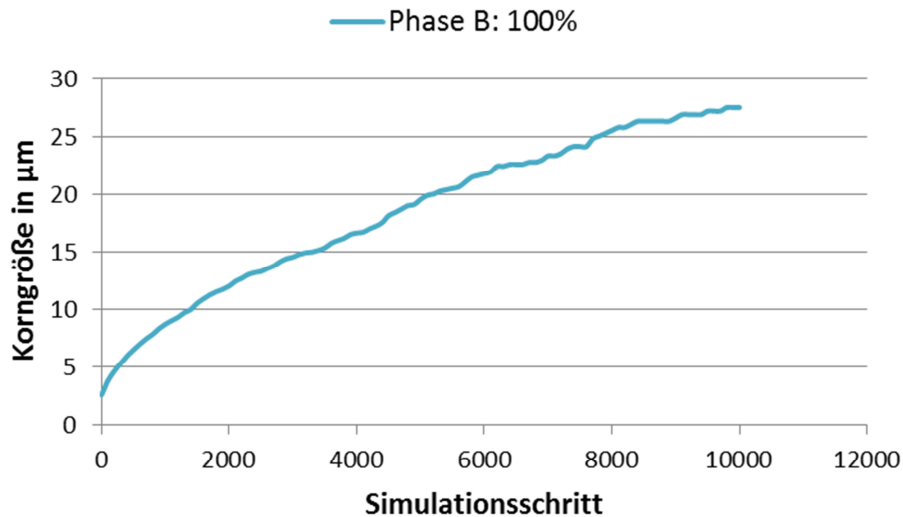


Abbildung 24: Durchschnittliche Korngröße der Phase B ohne gleichzeitig vorhandener Phase A in Abhängigkeit vom jeweiligen Simulationsschritt

Ein ähnliches Bild ergibt sich, wenn die simulierten Korngrößenverteilungen der einzelnen Phasen verglichen werden. Beide Phasen zeigen nach 2000 Simulationsschritten bei gleichem Phasenanteil normales Kornwachstum sowie ähnliche Korngrößenverteilungen (Abbildung 25).

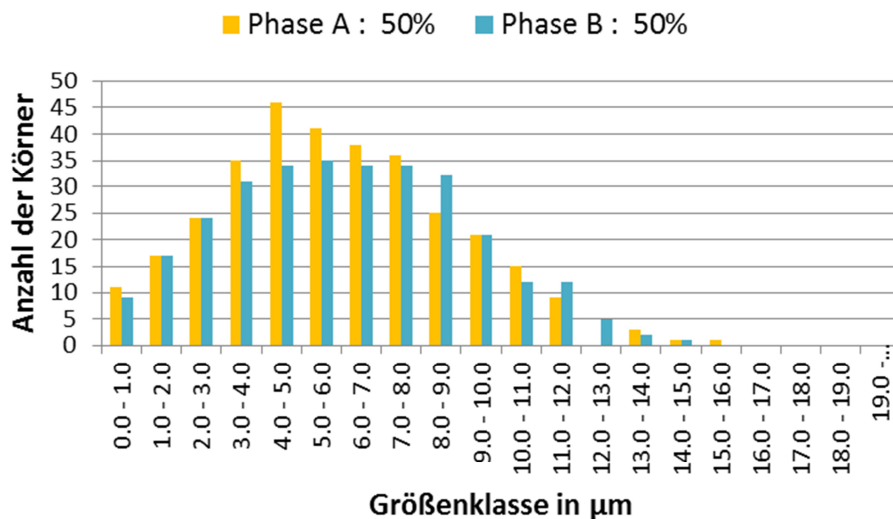


Abbildung 25: Korngrößenverteilung nach 2000 Simulationsschritten bei gleichen Anteilen beider Phasen

Bei einer Erhöhung des Betaanteils auf 80 Prozent (Abbildung 26) ist bereits ein deutlicher Unterschied in den Größenverteilungen auszumachen. Die Betaphase weist mehr Körner und eine breitere Verteilung im Gegensatz zur Alphaphase auf. Wird der Phasenanteil an

Beta auf 95 Prozent erhöht, wie in Abbildung 27 ersichtlich, wird der Unterschied in den Verteilungen noch deutlicher.

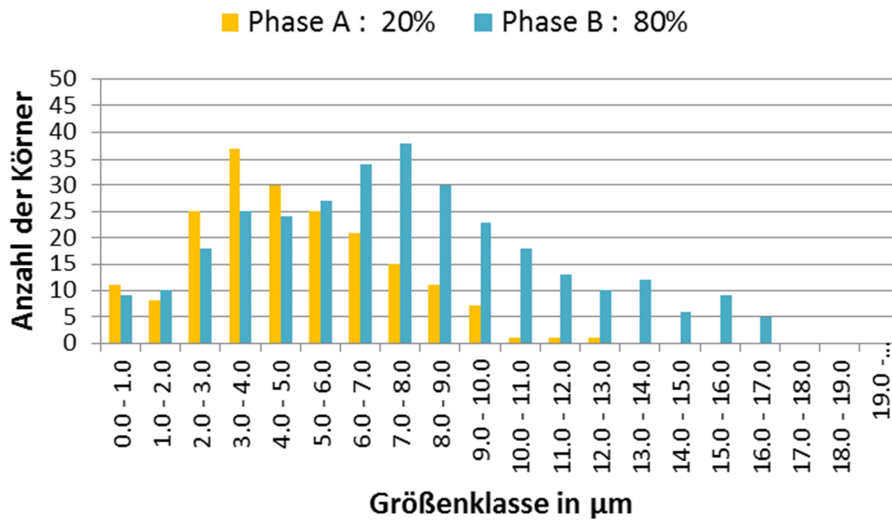


Abbildung 26: Korngrößenverteilung nach 2000 Simulationsschritten bei 20% Phase A und 80% Phase B

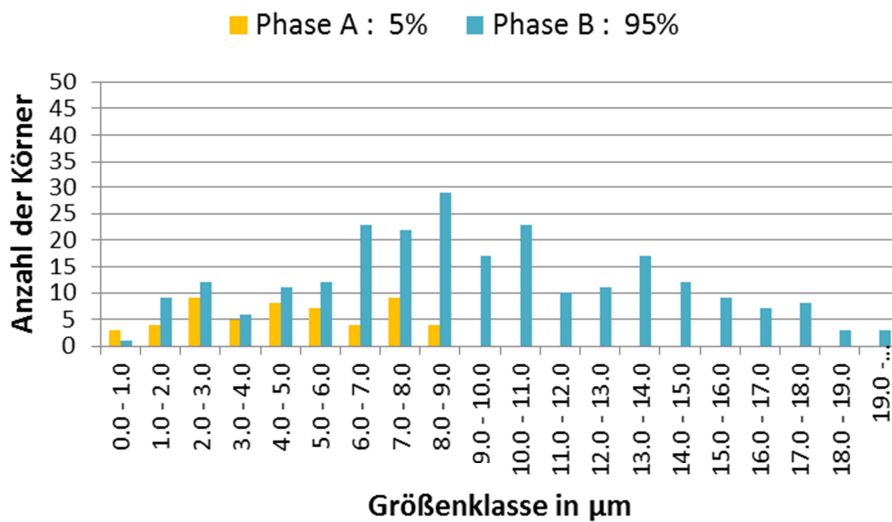


Abbildung 27: Korngrößenverteilung nach 2000 Simulationsschritten bei 5% Phase A und 95% Phase B

Die dargestellten Simulationsstudien verdeutlichen den Einfluss der Phasenanteile auf die Kornvergrößerung im zweiphasigen Bereich. Für eine Modellierung der Kornstruktur in Ti-6Al-4V ist es jedoch notwendig, die Werte der Übergangswahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit von Material- bzw. Prozessparametern zu beschreiben.

Eine Zusammenfassung aller verwendeten Parameter der folgenden Gleichungen ist in Tabelle 6 zusammengefasst. In Gleichung 24 sind die Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{(A/A)}$ und $P_{(B/B)}$ im Zweiphasenbereich definiert. P_0 ist eine Konstante und $P_{(i)}$ (Gleichung 26) beschreibt den Einfluss des materialabhängigen Wachstumsexponenten im Zweiphasenbereich. $P_{(T)}$ (Gleichung 22) berücksichtigt wie im einphasigen Bereich den Einfluss der Temperatur auf die Mobilität der Korngrenzen. Die Werte für $P_{(T)}$ wurden hierbei für die tieferen Temperaturen im Alpha/Beta Bereich aus den Daten des Einphasenmodells extrapoliert.

Wie im Literaturteil bereits erwähnt, ist in Ti-6Al-4V für die Bewegung der Phasengrenzen, welche mittels $P_{(A/B)}$ und $P_{(B/A)}$ modelliert wird (Gleichung 25), die Diffusion von Vanadium ausschlaggebend. Die Verknüpfung der Vanadiumdiffusion bei verschiedenen Temperaturen mit den Übergangswahrscheinlichkeiten ist in Gleichung 27 bis Gleichung 29 dargestellt.

Tabelle 6: Parameter für das CA Modell im zweiphasigen Bereich (Gleichung 24 bis Gleichung 29)

$P_{(A/A)}$	Übergangswahrscheinlichkeit an der Korngrenze (Alpha/Alpha)
$P_{(B/B)}$	Übergangswahrscheinlichkeit an der Korngrenze (Beta/Beta)
$P_{(A/B)}$	Übergangswahrscheinlichkeit an der Phasengrenze (Alpha wechselt zu Beta)
$P_{(B/A)}$	Übergangswahrscheinlichkeit an der Phasengrenze (Beta wechselt zu Alpha)
P_0	Konstante = 500000
P_1	Konstante = 0,5
$P_{(i)}$	Korrekturterm für Wachstumsexponenten
$P_{(T)}$	Temperaturterm
$P_{(Vdiff)}$	Term zur Beschreibung der Vanadiumdiffusion
i	Simulationsschritt
V_{diff}	Relative Diffusionsgeschwindigkeit
GVB	V-Konzentration im Gleichgewicht in Betaphase
GVA	V-Konzentration im Gleichgewicht in Alphaphase
D_V	V-Diffusionskoeffizient in Betaphase
T	Temperatur

$$P_{(A/A)} = P_{(B/B)} = P_0 \cdot P_{(T)} \cdot P_{(i)} \quad \text{Gleichung 24}$$

$$P_{(A/B)} = P_{(B/A)} = P_1 \cdot P_{(i)} \cdot P_{(Vdiff)} \quad \text{Gleichung 25}$$

$$P_{(i)} = \frac{1}{\sqrt[3]{i}} \quad \text{Gleichung 26}$$

$$V_{diff} = \frac{GVB - GVA}{D_V} \quad \text{Gleichung 27}$$

$$D_V = 77000 \cdot \exp\left(\frac{-17460}{T}\right) \quad \text{Gleichung 28}$$

$$P_{(V_{diff})} = \frac{V_{diff}(T = 1000^{\circ}C)}{V_{diff}}$$

Gleichung 29

Der Parameter V_{diff} (Gleichung 27) beschreibt dabei die relative Diffusionsgeschwindigkeit aus der Differenz der V-Konzentrationen, dividiert durch den Diffusionskoeffizienten D_V (Abbildung 28, Gleichung 28). Die dafür benötigten Gleichgewichtswerte der V-Konzentrationen in den Phasen Alpha GVA und Beta GVB wurden in Abhängigkeit der Temperatur mittels MatCalc [78] und JMatPro [79] ermittelt.

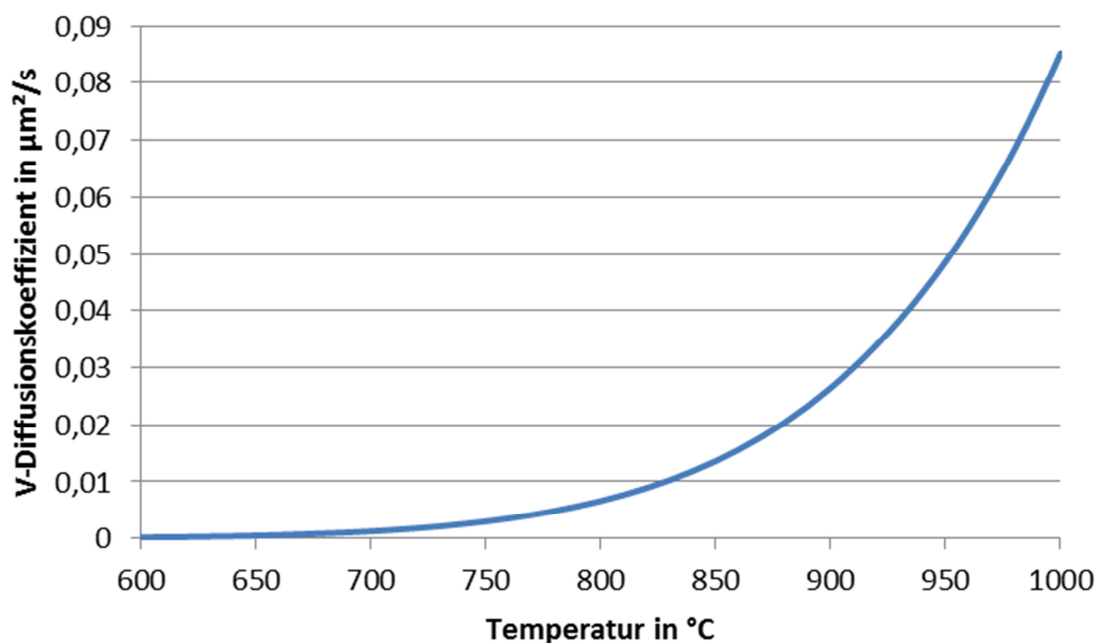


Abbildung 28: Diffusionskoeffizient von Vanadium in Beta (D_V) in Abhängigkeit der Temperatur [7, 13]

Wie aus Abbildung 28 und Abbildung 29 ersichtlich, ist bei hohen Temperaturen Differenz in den V-Konzentrationen gering und der Diffusionskoeffizient hoch bzw. bei niedrigen Temperaturen umgekehrt. Dementsprechend erhöht sich der Wert für V_{diff} bei fallenden Temperaturen. Der Quotient aus V_{diff} bei maximaler Temperatur (Beta-Transus = 1000°C) zu V_{diff} bei aktueller Temperatur ergibt dann $P_{(V_{diff})}$ (Gleichung 29).

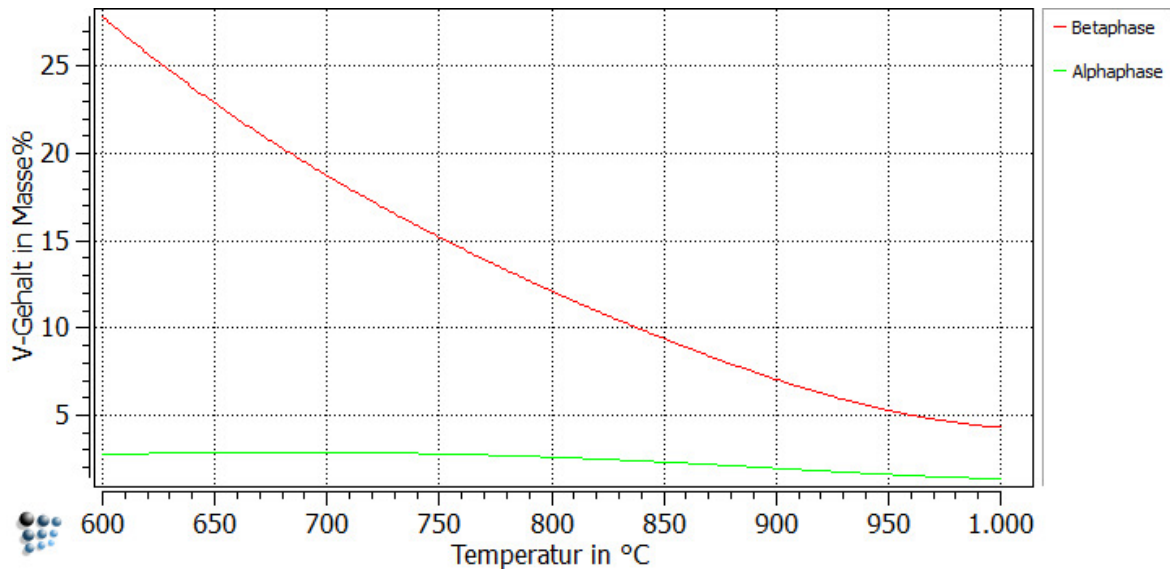


Abbildung 29: Gleichgewichtskonzentration von Vanadium in Alphaphase (grün) und Betaphase (rot) in Abhängigkeit der Temperatur [78, 79]

Dieser Wert bewegt sich entsprechend Abbildung 30 von 0,0 bis 1,0 und reduziert somit die Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{(A/B)}$ und $P_{(B/A)}$ bei fallenden Temperaturen entsprechend der Vanadiumdiffusion.

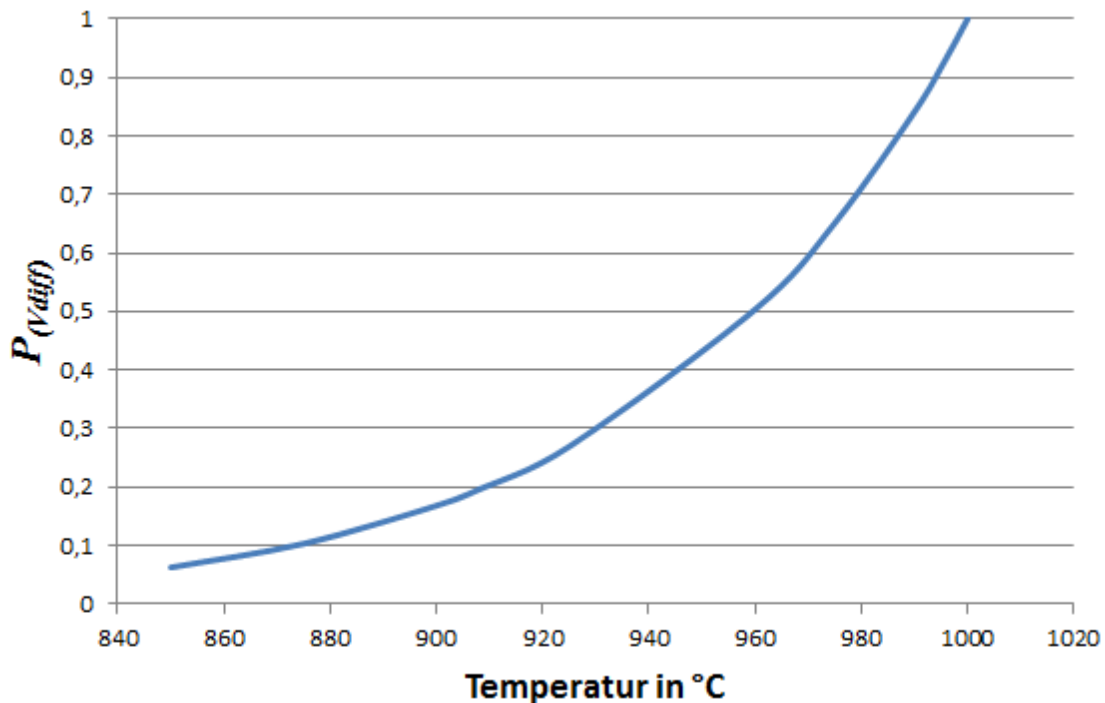


Abbildung 30: Einfluss der Temperatur auf den Faktor $P(v_{diff})$

Wie bereits erwähnt werden sowohl die Phasenumwandlung als auch die Kornvergrößerung im Zweiphasengebiet durch die Diffusion von Vanadium an der Phasengrenzfläche gesteuert. Die Triebkräfte sind jedoch unterschiedlich. Anders als bei der Phasenumwandlung, wo diese durch die Verringerung der Volumenenergie definiert ist, ist es bei der Kornvergrößerung die Minimierung der Grenzflächenenergie. Für die Alpha/Beta-Phasengrenze wird diese im Modell als konstant angenommen.

Die Bestimmung einer geeigneten Zellgröße und Zeitschrittweite erfolgte wie schon im Einphasengebiet zusammen mit der Validierung des CA Modells anhand von Versuchen und Literaturdaten [21, 76]. Im Zweiphasengebiet betragen deren Werte $0,34 \mu\text{m}$ für die Zellgröße und 2 s für die Schrittweite. Die großen Unterschiede dieser Werte im Vergleich zum Einphasengebiet sind durch die Anpassung des Modells auf die feinere Mikrostruktur und langsamere Wachstumskinetik begründet.

8.5 Phasenausgleich im Zweiphasengebiet

Um die Änderung der Phasenanteile bei Temperaturschwankungen zu berücksichtigen wurde zusätzlich ein Algorithmus für den Phasenausgleich implementiert. Die dafür notwendigen Phasengleichgewichte in Abhängigkeit von der Temperatur wurden mittels MatCalc [78] und JMatPro [79] ermittelt (Abbildung 31).

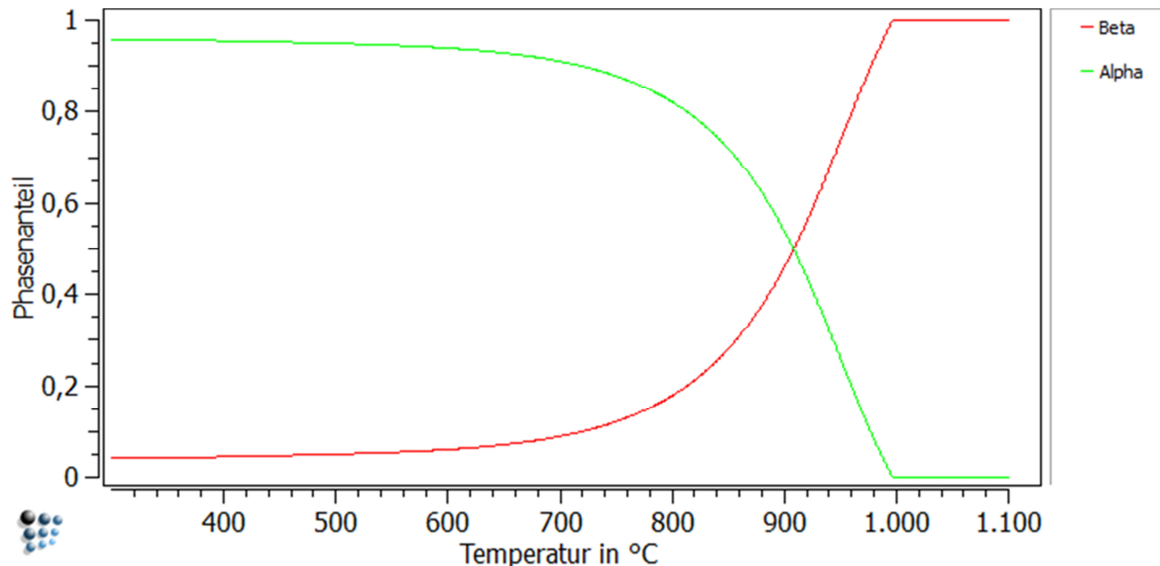


Abbildung 31: Gleichgewichtsanteile der Phasen Alpha und Beta in Abhängigkeit von der Temperatur [78, 79]

Bei jedem Simulationsschritt wird evaluiert, ob sich das System innerhalb einer definierten Toleranz im Phasengleichgewicht befindet. Ist dies nicht der Fall, greift das Programm in die Übergangswahrscheinlichkeiten $P_{(A/B)}$ und $P_{(B/A)}$ ein. Ist z.B. nach einer Temperaturerhöhung der Anteil an Alphaphase zu hoch, wird $P_{(B/A)}$ auf null gesetzt. Dies bewirkt, dass von nun an keine weiteren Zellen von Beta zu Alpha wechseln und somit nur mehr ein Wechsel von

Alpha zu Beta erlaubt ist. Dies wird solange fortgesetzt, bis das Phasengleichgewicht wieder erreicht ist.

Der Algorithmus ist damit in der Lage, die Phasenanteile immer an das entsprechende Gleichgewicht anzupassen. Dieses Modell ist damit für langsame Temperaturänderungen, bei denen sich das System immer in der Nähe des Gleichgewichts befindet, gut anwendbar. Die Geschwindigkeit von Phasenumwandlungen bei schnelleren Temperaturwechseln lässt sich jedoch nicht modellieren. Zum einen entsteht in Ti-6Al-4V bei schnellem Abkühlen eine lamellare Mikrostruktur, welche mit dem CA-Modell derzeit nicht dargestellt werden kann und zum anderen entsprechen auch die Vanadiumkonzentrationen in Alpha und Beta nicht mehr den Gleichgewichtswerten aus dem Modell. Eine Simulation beginnend aus dem einphasigen Betabereich ist derzeit ebenfalls nicht möglich, da noch kein Keimbildungsmodell implementiert ist.

Es ist jedoch möglich, den Einfluss wechselnder Phasenanteile auf die Korngröße zu beschreiben. Dies wird genutzt, um beim Aufheizen des Vormaterials von Raumtemperatur auf Schmiedetemperatur das Schrumpfen der Alphakörner durch die Reduzierung des Alphaanteils von 95 Prozent auf z.B. 30 Prozent zu modellieren.

8.6 Beschreibung des Wachstumsexponenten bei Temperaturänderung

Der Wachstumsexponent beschreibt bei der Modellierung der Kornvergrößerung je nach Material die Form bzw. Krümmung der Wachstumskurve. Im isothermen Fall ist sein Einfluss auf die Übergangswahrscheinlichkeit durch den Faktor $P_{(i)}$ definiert. Dieser reduziert dabei die Wahrscheinlichkeit mit jedem folgenden Simulationsschritt, welcher direkt proportional zur bereits abgelaufenen Zeit ist (Abbildung 32).

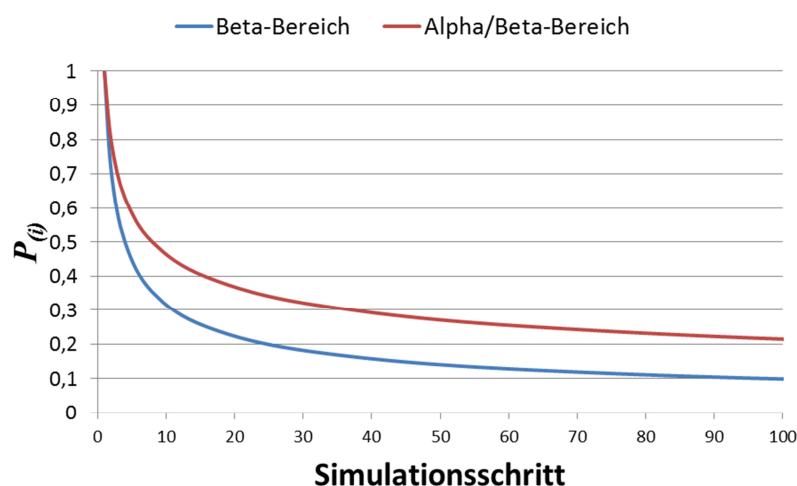


Abbildung 32: Verringerung des Faktors $P_{(i)}$ in Abhängigkeit zum jeweiligen Simulationsschritt, Beta-Bereich blau, Alpha/Beta-Bereich rot

Bei der kleinsten zu simulierenden Startkorngöße ($2,5 \mu\text{m}$ im Alpha/Beta Bereich bzw. $270 \mu\text{m}$ im Beta Bereich) ist $P_{(i)}$ laut Gleichung 23 und Gleichung 26 im ersten Schritt 1,0 und wird mit steigender Schrittnummer immer kleiner. Damit lässt sich die Kornvergrößerung entsprechend des Wachstumsexponenten des verwendeten Werkstoffs zu Beginn beschleunigen und mit fortschreitender Zeit entsprechend einbremsen.

Nach der Validierung des CA-Modells für isotherme Fälle lässt sich $P_{(i)}$ analytisch als Funktion des aktuellen Durchmessers und der Temperatur darstellen. Dies ist anhand eines Beispiels in Abbildung 33 dargestellt. Die grüne Kurve zeigt zum Vergleich den Wachstumsverlauf ohne Korrekturterm $P_{(i)}$. Die gestrichelten Linien beschreiben das Wachstumsverhalten im isothermen Fall für die Temperaturen T_1 , T_2 und T_3 ($T_1 < T_2 < T_3$). Damit ist für jeden Korndurchmesser D_B zu jeder Temperatur der entsprechende Wert i_B definiert. Erhöht sich im nächsten Zeitschritt T_1 auf T_2 , so wird i_B entsprechend der neuen Temperatur aktualisiert. Für die CA-Simulation im Zweiphasengebiet wird zur Berechnung von $P_{(i)}$ immer der Alphakorndurchmesser D_A herangezogen. Dies gilt sowohl für die Beschreibung der Übergangswahrscheinlichkeit $P_{(A/A)}$ (an Alpha/Alpha-Korngrenzen) als auch für $P_{(B/B)}$ (an Beta/Beta-Korngrenzen). Dies ist insofern nicht ganz korrekt, da für die Berechnung von $P_{(i)}$ für $P_{(B/B)}$ an Beta/Beta-Korngrenzen eigentlich der Betakorndurchmesser herangezogen werden müsste. Da die Betakorngöße im Zweiphasengebiet durch die Martensitbildung beim Abschrecken der Proben nicht ausgewertet werden konnte, wurde der Alphakorndurchmesser herangezogen. Aufgrund ähnlicher Phasenanteile und Korngrößen von Alpha und Beta, welche bei den meisten Schmiedetemperaturen in der Praxis vorherrschen, dürfte die entstehende Abweichung bei der Simulation in Bezug auf die Betakorngöße eher gering ausfallen.

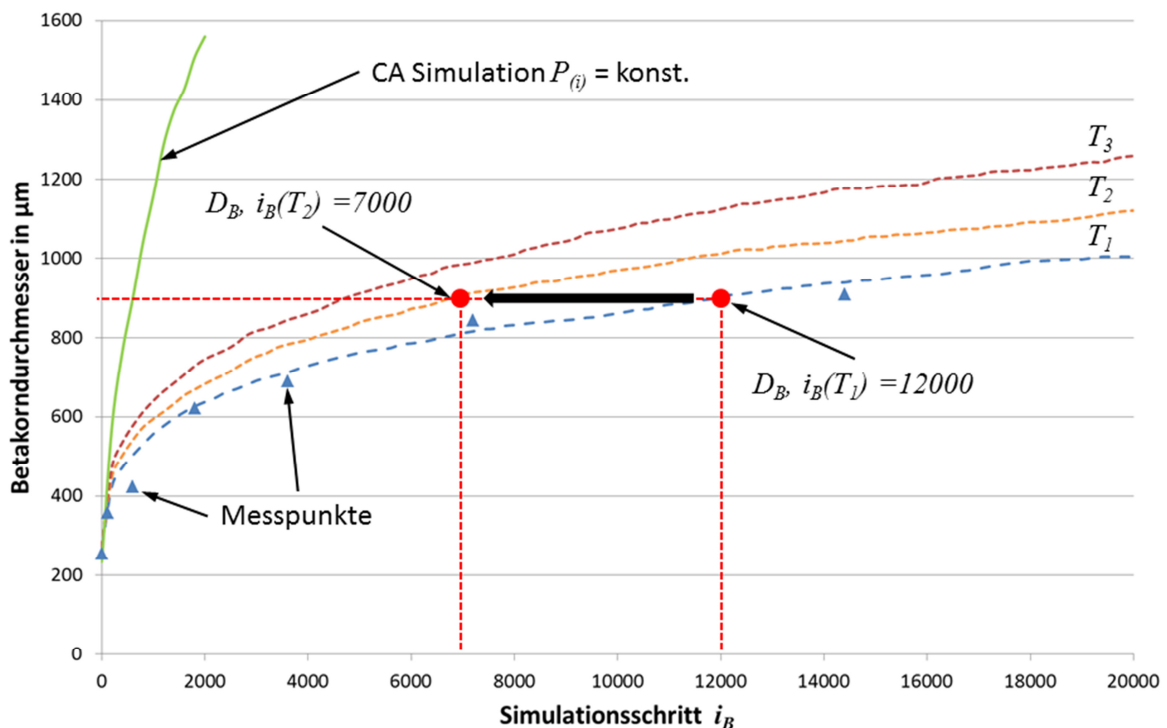


Abbildung 33: Vorgehensweise bei der Ermittlung von $P_{(iB)}$ bei Temperatursprüngen während der Simulation

Die Parameter i_B (Gleichung 30) und i_{AB} (Gleichung 32) entsprechen also jener Zeit, welche benötigt wird, um bei aktueller Temperatur im isothermen Fall die Mikrostruktur von der kleinsten validierten Startkorngröße zur aktuellen Korngröße vergrößern zu lassen. Die dazu benötigten aktuellen Korndurchmesser D_B bzw. D_A sowie die Temperatur T werden vor jedem Simulationsschritt automatisch berechnet und in die Gleichungen eingesetzt. Im Anschluss werden daraus die Wahrscheinlichkeitsparameter $P_{(iB)}$ (Gleichung 31) und $P_{(iAB)}$ (Gleichung 33) für den Ein- bzw. Zweiphasenbereich ermittelt.

$$i_B = \frac{D_B^{4,72} - 270^{4,72}}{5,34 \cdot 10^{22} \cdot 0,02 \cdot \exp\left(\frac{-320021}{8,314 \cdot T}\right)} \quad \text{Gleichung 30}$$

$$P_{(iB)} = \frac{1}{\sqrt{i_B}} \quad \text{Gleichung 31}$$

$$i_{AB} = \frac{D_A^{3,08} - 2,44^{3,08}}{4,38 \cdot 10^7 \cdot 2 \cdot \exp\left(\frac{-226372}{8,314 \cdot T}\right)} \quad \text{Gleichung 32}$$

$$P_{(iAB)} = \frac{1}{\sqrt[3]{i_{AB}}} \quad \text{Gleichung 33}$$

Zusammenfassend sind die verwendeten Parameter in Tabelle 7 aufgelistet.

Tabelle 7: Parameter zur Berechnung von $P_{(iB)}$ und $P_{(iAB)}$ (Gleichung 30 bis Gleichung 33)

$P_{(iB)}$	Korrekturfaktor im Beta-Bereich
$P_{(iAB)}$	Korrekturfaktor im Alpha/Beta-Bereich
i_B	Modellparameter zur Berücksichtigung unterschiedlicher Wachstums-exponenten (Beta-Bereich)
i_{AB}	Modellparameter zur Berücksichtigung unterschiedlicher Wachstums-exponenten (Alpha/Beta-Bereich)
T	Temperatur
D_A	Aktueller Alphakorndurchmesser
D_B	Aktueller Betakorndurchmesser

Abschließend soll die Bedeutung dieser Vorgehensweise für das CA- Modell erläutert werden. Die Vergrößerungsgeschwindigkeit, welche durch die Umwandlungswahrscheinlichkeiten gesteuert wird, ist in jedem Simulationsschritt von der Temperatur und der aktuellen Korngröße abhängig. Die Simulationszeit, welche im isothermen Fall für den Korrekturfaktor $P_{(i)}$ herangezogen wird, muss im nicht-isothermen Fall durch den aktuellen Korndurchmesser ersetzt werden, da dem CA-Model hierbei kein

globaler Zeitwert für die Berechnung von $P_{(i)}$ zur Verfügung steht. Dasselbe gilt, wenn bei isothermen Simulationen eine größere Startkorngröße gewählt wird. Aus diesem Grund wurde ausschließlich zum Zwecke der Validierung der Faktor $P_{(i)}$ in Abhängigkeit zum Simulationsschritt definiert. Für jene in den nachfolgenden Kapiteln gezeigten CA-Ergebnisse wurden für die Berechnung von $P_{(i)}$ wie beschrieben die aktuelle Temperatur T und die Korndurchmesser D_A bzw. D_B verwendet.

9 Mikrostrukturmodellierung im Betabereich von Ti-6Al-4V

In diesem Kapitel wird die Vorhersage der Korngrößenentwicklung und Rekristallisation im einphasigen Betabereich mittels geeigneter Modelle beschrieben, welche im Literaturteil bereits erläutert wurden. Die Modellierung von Korngrößen und Anteilen statisch rekristallisierten Gefüges erfolgt hierbei sowohl über semi-empirische bzw. physikalische Modelle als auch mithilfe eines eigens dafür entwickelten zellularen Automaten. Die zur Validierung benötigten Versuchsdaten für Rekristallisation und Kornvergrößerung im Betabereich stammen aus Untersuchungen am Institut für Werkstoffwissenschaft und Werkstofftechnologie an der Technischen Universität Wien [31, 76]. Die Auswertung von Korngröße und rekristallisiertem Gefügeanteil erfolgte für jeden Datenpunkt aus einem Gesichtsfeld, wobei die Körner einzeln ausgezählt und daraus Mittelwerte und Korngrößenverteilungen gebildet wurden.

9.1 Betakorngröße

Die Betakorngröße wird im einphasigen Betagebiet mit dem klassischen Kornvergrößerungsmodell als auch mittels CA modelliert. Eine Erläuterung zur Validierung dieser beiden Modelle folgt in den nächsten zwei Abschnitten.

9.1.1 Semiempirisches Vergrößerungsmodell

Das semiempirische Modell verwendet den klassischen Ansatz wie in Abschnitt 6.1.1 beschrieben. Eine Übersicht über die Werte der benötigten Modellparameter befindet sich in Tabelle 8. Für die Aktivierungsenergie Q_{GG} wurden die Daten aus der Literatur für die Eigendiffusion von Titan mit 150 kJ/mol herangezogen [45, 46, 47]. Der Kornwachstumsexponent n sowie die Wachstumskonstante K wurden mittels numerischer Regression ermittelt (R-Wert = 0,9656). Als Basis hierzu dienten experimentell ermittelte Korngrößendaten [76].

Tabelle 8: Modellparameter für semi-empirisches Kornwachstumsmodell der Betaphase im Betagebiet

Q_{GG}	Aktivierungsenergie für Kornvergrößerung = 150 kJ/mol
K	Wachstumskonstante = 6,8 E+16
n	Wachstumsexponent = 5,0

Abbildung 34 zeigt den Vergleich der Modellergebnisse mit den Versuchsdaten bis zu einer Versuchszeit von 20000 s. Die Temperatur zeigt zwischen 1030 und 1070°C einen deutlichen Einfluss auf das Vergrößerungsverhalten. Dieser finale Vergleich zeigt außerdem, dass das Modell für die Modellierung der Betakornvergrößerung gut anwendbar ist.

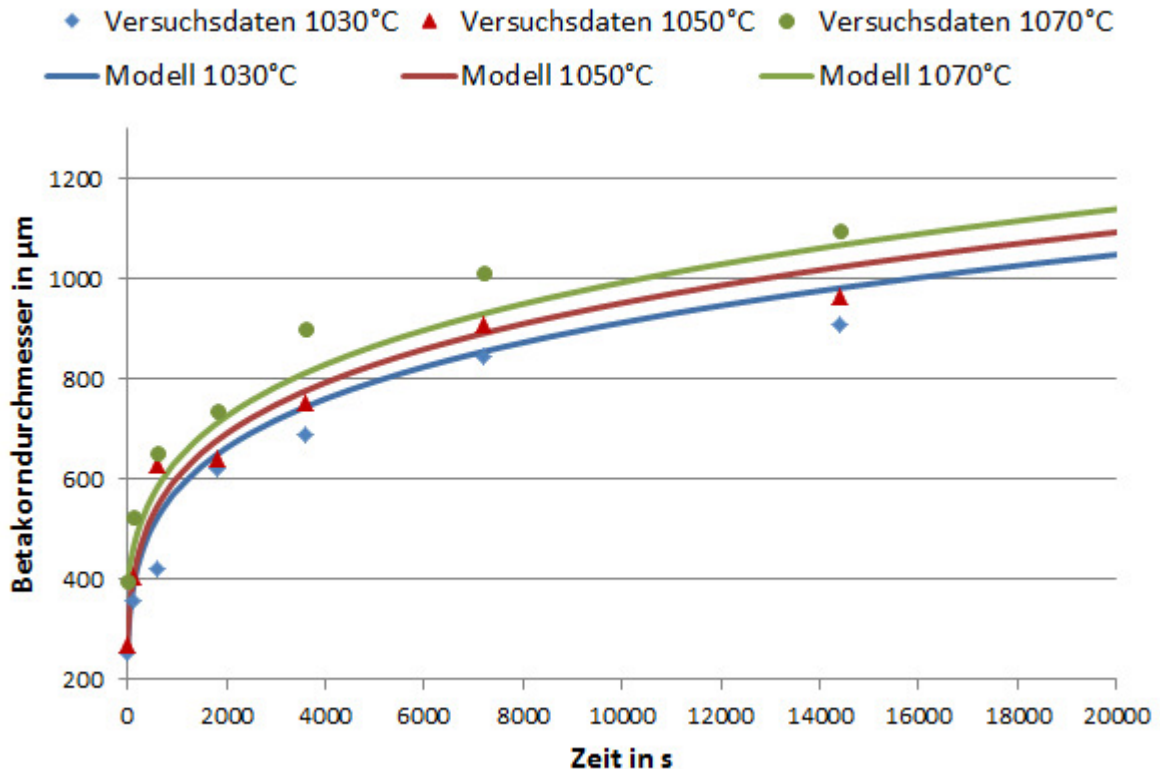


Abbildung 34: Betakorndurchmesser, Vergleich des semiempirischen Modells mit experimentellen Ergebnissen für 1030, 1050 und 1070°C; Versuchsdatenpunkte: 50 bis 100 ausgewertete Körner je Datenpunkt (arithmetischer Mittelwert)

In der Praxis liegen die Glühdauer und die Temperatur meist unter 2 Stunden (7200 s) bzw. 1050°C. Bei der eher unüblich hohen Schmiedetemperatur von 1070°C wird die Kornvergrößerung vom Modell leicht unterschätzt. Dies muss beachtet werden, sollten die Prozesstemperaturen 1050°C deutlich überschreiten.

9.1.2 Zellulärer Automat

Der Vergleich des CA-Modells mit Versuchsdaten ist in Abbildung 35 zu sehen. Die dazugehörigen Einstellungen wurden bereits in Kapitel 8.3 erläutert. Hierbei zeigt der CA eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen. Dies gilt ebenfalls für den Vergleich der Korngrößenverteilungen von Abbildung 36 bis Abbildung 41. Auffallend ist hierbei der Unterschied in den untersten Größenklassen. Der Grund hierfür liegt darin, dass kleine Betakörner besonders unter 100 µm Durchmesser mittels Lichtmikroskopie im metallografischen Schliff schwer zu vermessen sind und daher in der Auswertung nicht vorkommen.

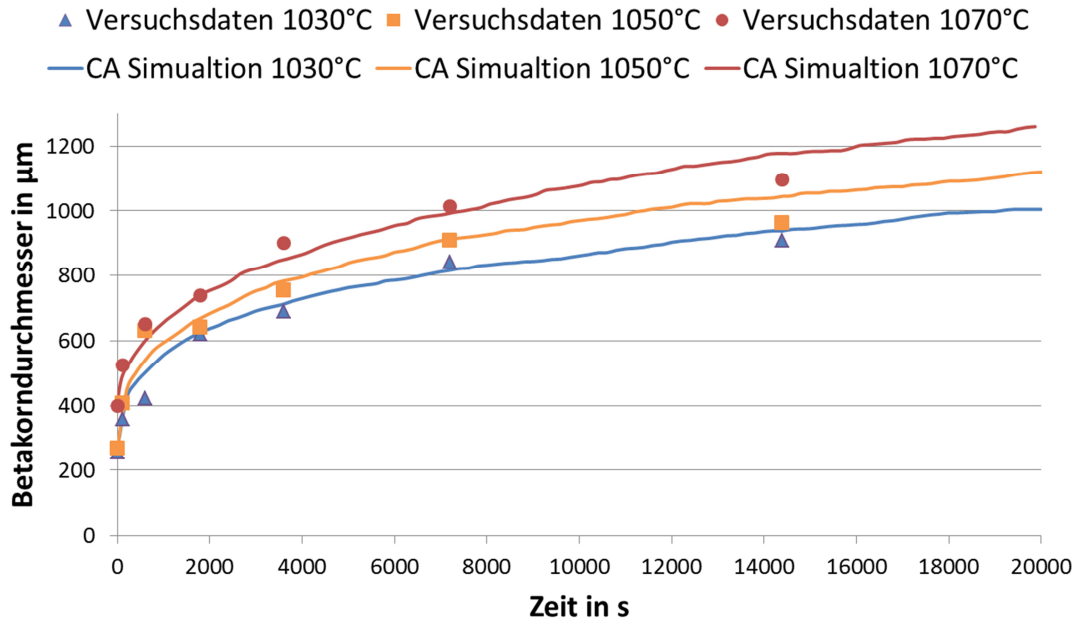


Abbildung 35: Betakorndurchmesser, Vergleich der CA-Daten mit experimentellen Ergebnissen für 1030, 1050 und 1070°C; Versuchsdatenpunkte: 50 bis 100 ausgewertete Körner je Datenpunkt (arithmetischer Mittelwert)

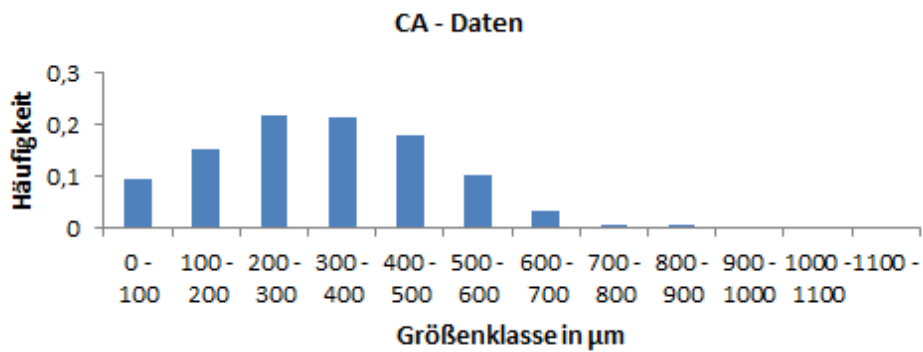


Abbildung 36: Korngrößenklassen, CA-Daten, 1050°C nach 120 s, ausgewertete Körner 2200

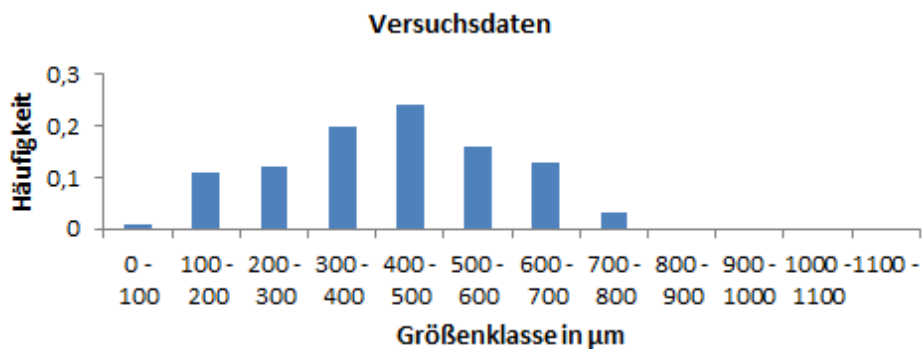


Abbildung 37: Korngrößenklassen, Versuchsdaten, 1050°C nach 120 s, ausgewertete Körner 100

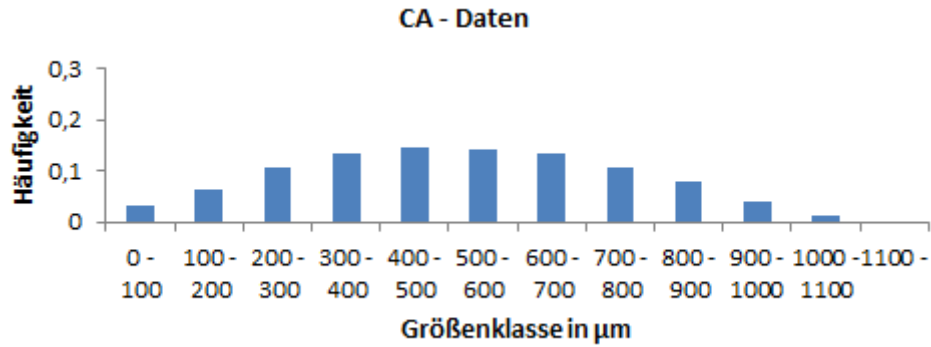


Abbildung 38: Korngrößenklassen, CA-Daten, 1050°C nach 600 s, ausgewertete Körner 967

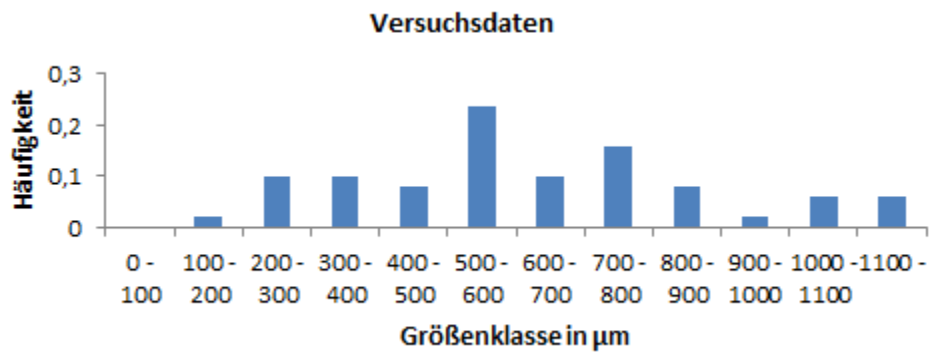


Abbildung 39: Korngrößenklassen, Versuchsdaten, 1050°C nach 600 s, ausgewertete Körner 51

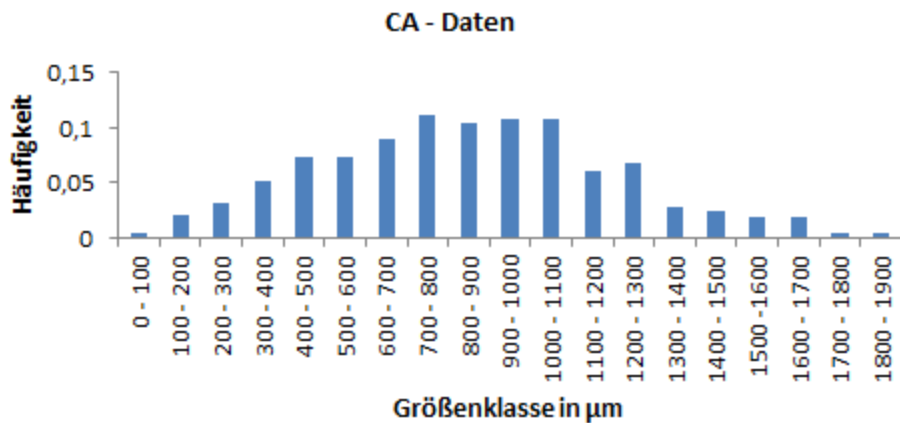


Abbildung 40: Korngrößenklassen, CA-Daten, 1050°C nach 7200 s, ausgewertete Körner 440

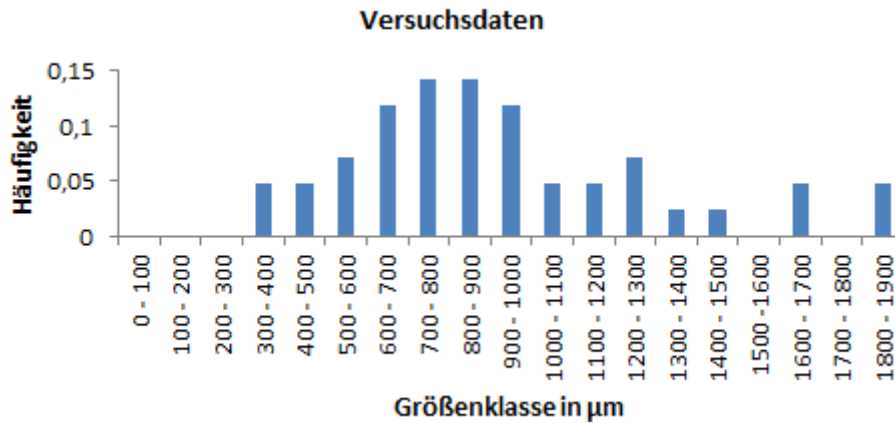


Abbildung 41: Korngrößenklassen, Versuchsdaten, 1050°C nach 7200 s, ausgewertete Körner 42

Auch das in den Experimenten bestätigte normale Kornwachstum konnte mittels CA simuliert werden. Unterschiede liegen hierbei lediglich in einem gleichmäßigeren Verlauf und weniger Ausreißer in den CA-Daten. Dies ist darin begründet, dass im CA-Modell für jedes Histogramm mehrere hundert bis tausend Körner ausgewertet werden. Die Anzahl der ausgemessenen Körner in den Schlibfbildern bewegt sich dagegen im Bereich zwischen 50 und 100 Körnern.

9.2 Statische Rekristallisation

In diesem Abschnitt wird das semiempirische Modell zur Modellierung der statischen Rekristallisation erläutert. Damit lässt sich das statische Rekristallisationsverhalten des Materials unter typischen Herstellparametern beim Gesenkschmieden vorhersagen.

9.2.1 Semiempirisches Rekristallisationsmodell

Wie bereits im Kapitel 6.2 beschrieben, sind bei der Modellierung der statischen Rekristallisation die drei Prozessparameter Umformgrad, Umformrate und Temperatur zu berücksichtigen. Eine Auflistung dieser und aller anderen verwendeten Variablen und Parameter findet sich in Tabelle 9. Die Aktivierungsenergie Q_{SRX} wurde mit 150 kJ/mol gewählt, welcher dem Wert für die Eigendiffusion von Titan in der Betaphase entspricht. Dieser wurde bereits im semiempirischen Modell für Kornvergrößerung verwendet.

Tabelle 9: Auflistung der Materialkonstanten und Variablen im verwendeten Rekristallisationsmodell

X_{SRX}	statisch rekristallisierter Anteil
t	Zeit
$t_{0,5}$	benötigte Zeit für $X_{SRX} = 0,5$
φ	Umformgrad
$\dot{\varphi}$	Umformrate
R	molare Gaskonstante
T	Temperatur
Q_{SRX}	Aktivierungsenergie für statische Rekristallisation = 150 kJ/mol
φ_{cr}	kritischer Umformgrad = 0,2
α_1	Materialparameter = 9,7 E+5
α_2	Materialparameter = -0,63
α_3	Materialparameter = -0,13

Das Modell wird hierbei mittels Gleichung 34 und Gleichung 35 beschrieben [59]. Die Validierung der Materialparameter α_1 , α_2 , α_3 sowie des kritischen Umformgrads φ_{cr} erfolgte anhand von experimentellen Ergebnissen. Die leichten Unterschiede in den Werten im Vergleich zu [59] ergeben sich durch die Ausweitung des betrachteten Temperaturbereichs. In verschiedenen Versuchsserien wurden die Inputparameter Umformgrad, Umformrate, Temperatur sowie die Haltezeit nach der Umformung variiert und dabei der statisch rekristallisierte Anteil ermittelt. Nach spätestens 600 s zeigt sich in allen Versuchen ein vollständig rekristallisiertes Gefüge.

$$X_{SRX} = 1 - \exp\left[\ln(0.5)\left(\frac{t}{t_{0.5}}\right)\right] \quad \text{Gleichung 34}$$

$$t_{0.5} = a_1 (\varphi - \varphi_{cr})^{a_2} \dot{\varphi}^{a_3} \exp\left(\frac{Q_{SRX}}{RT}\right) \quad \text{Gleichung 35}$$

Folgend wird der Vergleich zwischen dem Rekristallisationsmodell und den experimentellen Ergebnissen für verschiedene Parameterkonstellationen gezeigt. Zur Modellvalidierung wurde der rekristallisierte Anteil nach 0, 15, 60 und 600 s herangezogen.

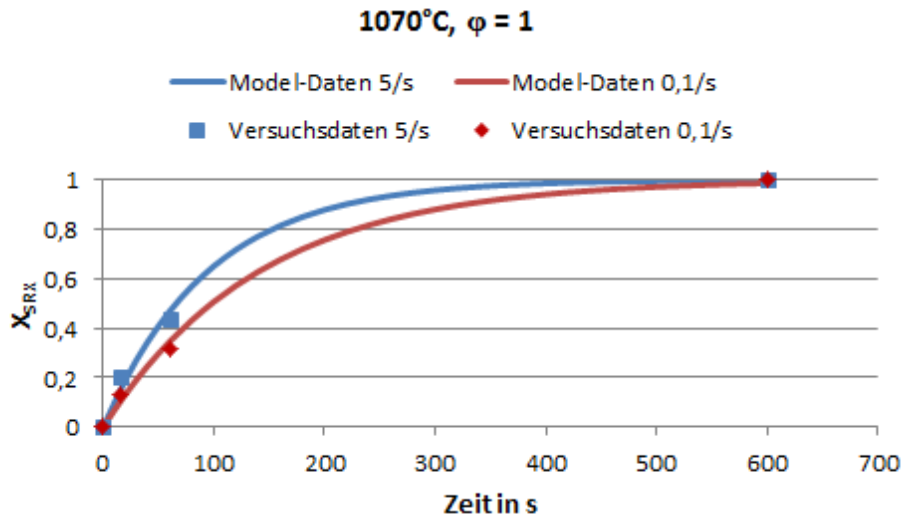


Abbildung 42: Anteil statisch rekristallisierter Körner, Vergleich von Versuchs- und Modelldaten, Temperatur = 1070°C, Umformgrad = 1,0; Umformgeschwindigkeit 5/s bzw. 0,1/s

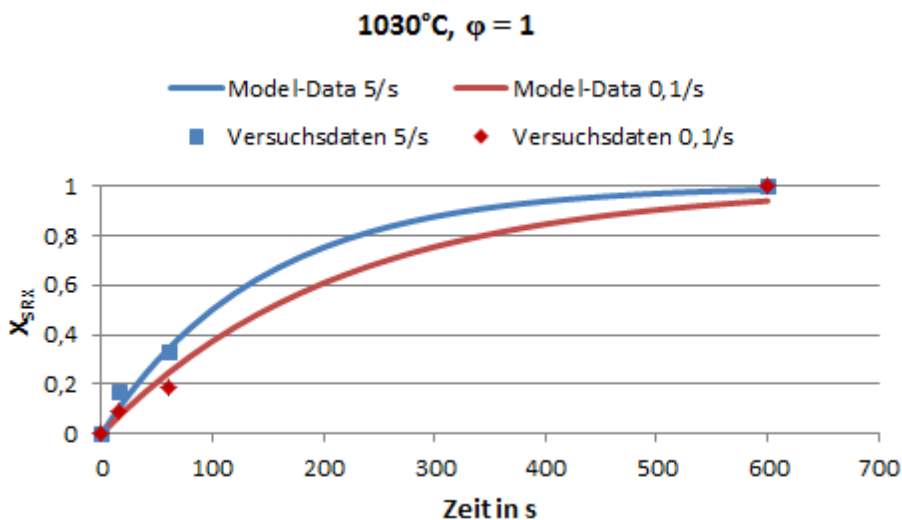


Abbildung 43: Anteil statisch rekristallisierter Körner, Vergleich von Versuchs- und Modelldaten, Temperatur = 1030°C, Umformgrad = 1,0; Umformgeschwindigkeit 5/s bzw. 0,1/s

Abbildung 42 zeigt den statischen Rekristallisationsfortschritt bei 1070°C, einem Umformgrad von 1,0 und Umformgeschwindigkeiten von 5/s und 0,1/s. Hierbei zeigen Modell und Experiment eine gute Übereinstimmung. Auffallend ist auch der Einfluss der Umformrate. Bei höheren Umformraten rekristallisiert das Material schneller. Dies ist darin begründet, dass bei langsamen Umformraten mehr Umformenergie durch Erholungsvorgänge abgebaut wird und dadurch dieser Anteil der Rekristallisation nicht mehr zur Verfügung steht. Ähnliches gilt auch für 1030°C wie in Abbildung 43 gezeigt wird. Die Rekristallisationskinetik ist hier, wie zu erwarten, aufgrund der niedrigeren Temperatur und den damit gekoppelten Diffusionsmechanismen insgesamt etwas langsamer.

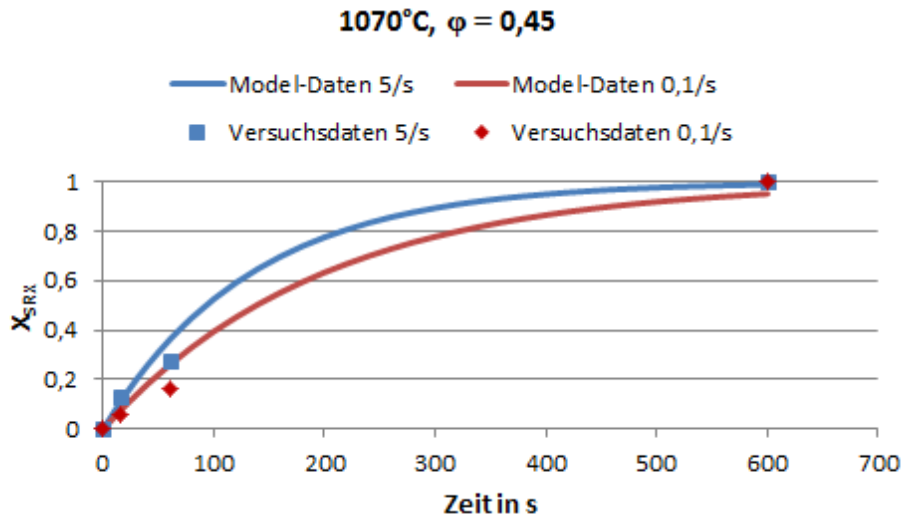


Abbildung 44: Anteil statisch rekristallisierter Körner, Vergleich von Versuchs- und Modelldaten, Temperatur = 1070°C, Umformgrad = 0,45; Umformgeschwindigkeit 5/s bzw. 0,1/s

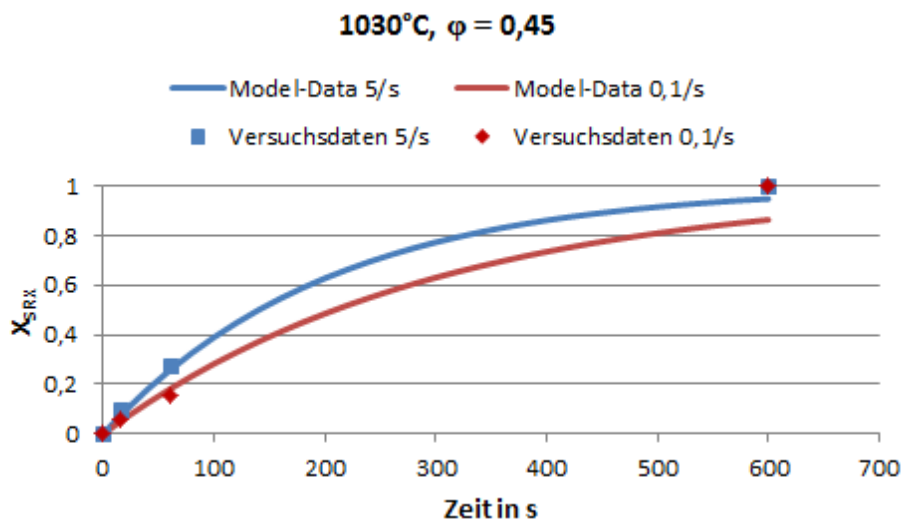


Abbildung 45: Anteil statisch rekristallisierter Körner, Vergleich von Versuchs- und Modelldaten, Temperatur = 1030°C, Umformgrad = 0,45; Umformgeschwindigkeit 5/s bzw. 0,1/s

Eine Reduzierung des Umformgrads führt ebenfalls zu einer Verlangsamung der Rekristallisationsgeschwindigkeit (Abbildung 44 und Abbildung 45). Besonders deutlich ist der Einfluss von Umformgrad und Umformrate in Abbildung 46 dargestellt. Die Zeit, welche benötigt wird, um 50 Prozent des Gefügeanteils zu rekristallisieren ($t_{0,5}$), ist indirekt proportional zu Umformgrad und Umformgeschwindigkeit. Wird jedoch der kritische Umformgrad von 0,2 unterschritten, kommt es zu keiner Rekristallisation. Weiter ist zu beachten, dass das Modell für Umformgeschwindigkeiten unter 0,1/s nicht validiert wurde, da solche in Standardschmiedeprozessen kaum Einfluss auf die Mikrostruktur haben.

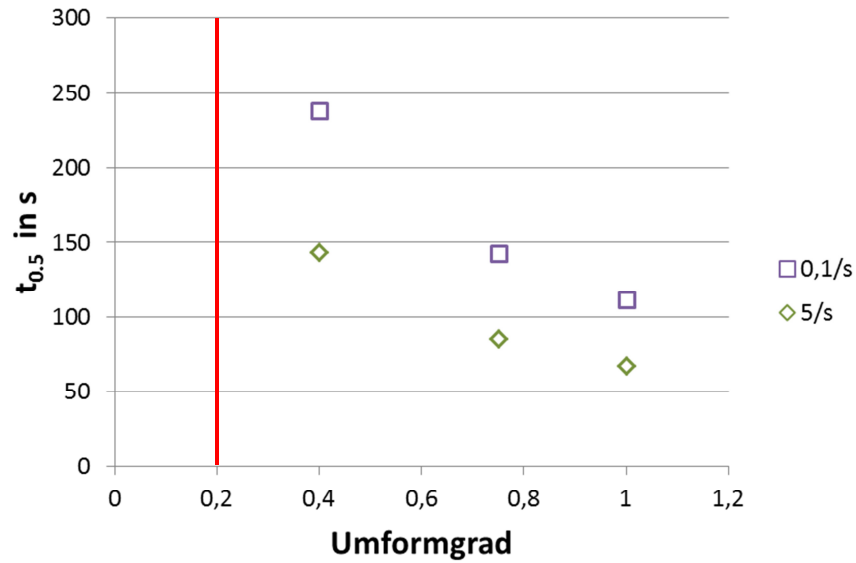


Abbildung 46: Zeit für 50 % statisch rekristallisierten Anteil bei 1070°C in Abhängigkeit von Umformgrad und Umformrate

Anschließend sei an dieser Stelle erwähnt, dass der gesamte statische Rekristallisationsprozess in allen gewählten Parametersätzen für Gesenkschmieden innerhalb von 600 s abläuft. Nach Abschluss setzt erneut die Kornvergrößerung ein. Da nach dem gewählten Modell die Rekristallisation nie 100 Prozent erreichen kann, wird für eine durchgehende Simulation des Prozesses eine Randbedingung herangezogen. Unterschreitet die Rekristallisationsgeschwindigkeit einen Grenzwert wird das Rekristallisationsmodell gestoppt und das Vergrößerungsmodell aktiviert. Weitere Erläuterungen hierzu folgen in den Kapiteln 12.2 und 12.3.

10 Mikrostrukturmodellierung im Alpha- und Betabereich

In diesem Abschnitt folgt eine Beschreibung der Mikrostrukturmodelle für das zweiphasige Alpha- und Betagebiet. Hierbei geht es primär um das Vergrößerungsverhalten der Phasen sowie die Mikrostrukturentwicklung während Aufheiz- und Abkühlvorgängen. Wie im einphasigen Betabereich wurden auch im Zweiphasenbereich zur Modellvalidierung die Mikrostrukturauswertungen an der Technischen Universität Wien durchgeführt [76]. Die Auswertungen für Korngröße und Anteil der primären Alphaphase erfolgten auch hier für jeden Datenpunkt aus einem Gesichtsfeld.

10.1 Korngröße der primären Alphaphase (Vergrößerung der primären Alphaphase)

Eine Modellierung der primären Alphaphase ist wichtig, da sowohl ihre Größe als auch ihr Anteil die mechanischen Eigenschaften maßgeblich beeinflusst. Im Folgenden werden sowohl der semiempirische Lösungsansatz als auch die Modellierung mittels zellularen Automaten beschrieben.

10.1.1 Semiempirisches Vergrößerungsmodell

Das semiempirische Vergrößerungsmodell, welches bereits zur Vorhersage des Kornwachstums im einphasigen Betagebiet verwendet wurde (Kapitel 9.1.1), kann auch für die Modellierung der primären Alphakorngröße herangezogen werden. Das Modell wurde dabei nach den Daten von Hamilton et al. [21] validiert. Die Werte für die Aktivierungsenergie Q_{AB} , die Konstante K_{AB} und den Wachstumsexponenten n_{AB} sind in Tabelle 10 zusammengefasst.

Tabelle 10: Modellparameter für das semi-empirische Kornwachstumsmodell der Alphaphase im Alpha+Beta-Gebiet

Q_{AB}	Aktivierungsenergie für Kornvergrößerung = 226 kJ/mol
K_{AB}	Wachstumskonstante = 4,4 E+7
n_{AB}	Wachstumsexponent = 3,0

Der Vergleich des durchschnittlichen primären Alphakorndurchmessers in Abbildung 47 zeigt eine gute Übereinstimmung der Modelldaten mit den experimentellen Ergebnissen. Jedoch ist mit diesem Modell nur eine Vorhersage der Kornvergrößerung bei isothermen Glühprozessen zulässig. Dies ist darin begründet, dass bei Temperaturschwankungen im Zweiphasengebiet zusätzlich Phasenumwandlungen ablaufen müssen. Bei einem Temperaturanstieg würde demnach die Verkleinerung der Alphakörner, bedingt durch die teilweise Auflösung der Alphaphase, nicht berücksichtigt werden.

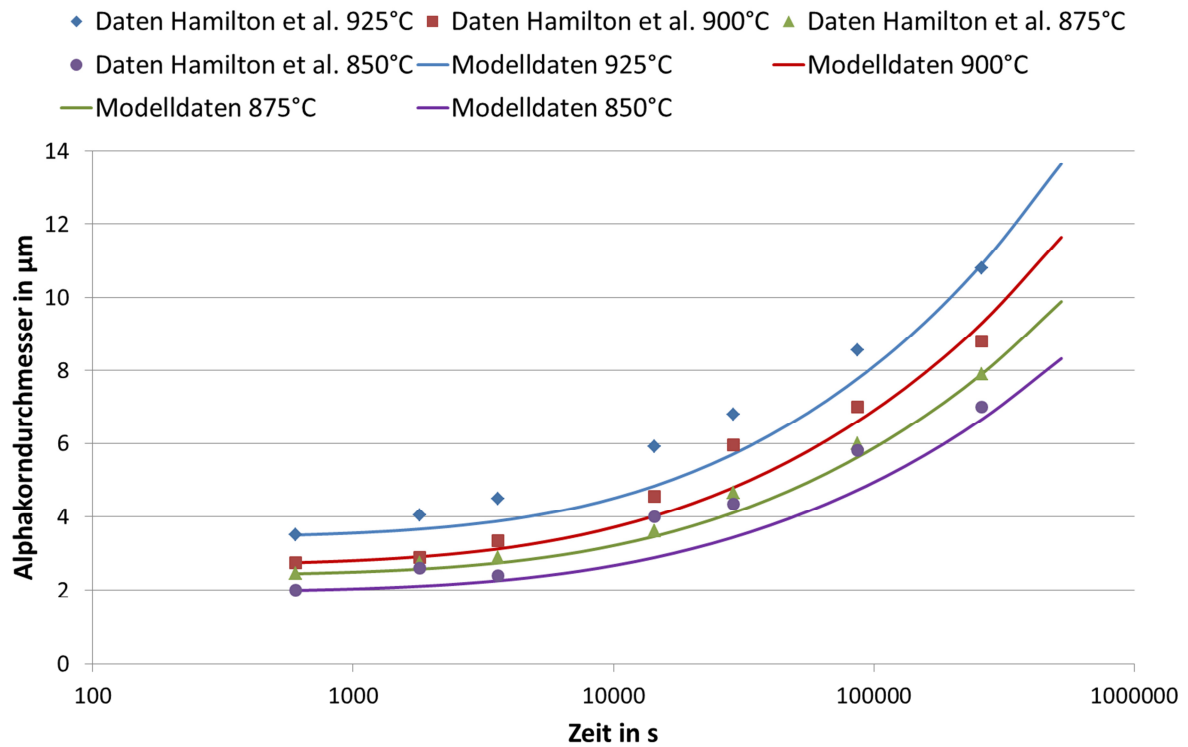


Abbildung 47: Vergleich des semiempirischen Vergrößerungsmodells mit den experimentellen Daten aus [21]

10.1.2 Zellulärer Automat

Der Vergleich des CA-Modells mit den Literaturdaten nach Hamilton et al. [21] für isotherme Wärmebehandlungen wird in diesem Abschnitt gezeigt. Als Modellinput werden die in Kapitel 8.4 beschriebenen Einstellungen herangezogen. Abbildung 48 zeigt eine gute Übereinstimmung des durchschnittlichen Korndurchmessers bei 850, 875, 900 und 925°C. Bei 900 und 925°C ist zu Beginn die simulierte Kornvergrößerung etwas langsamer als in den Versuchen. Die strichlierten Linien sind dabei eine Extrapolation der Modelldaten auf höhere Temperaturen von 950 und 970°C. Im Vergleich zum Einphasengebiet zeigt sich hier deutlich die wesentlich langsamere Vergrößerungsgeschwindigkeit der Mikrostruktur. Bei üblichen Schmiedetemperaturen um die 925°C wird eine Glühzeit von über 8 Stunden benötigt, um dem Alphakorndurchmesser von ca. 3,5 auf 7 µm vergrößern zu lassen.

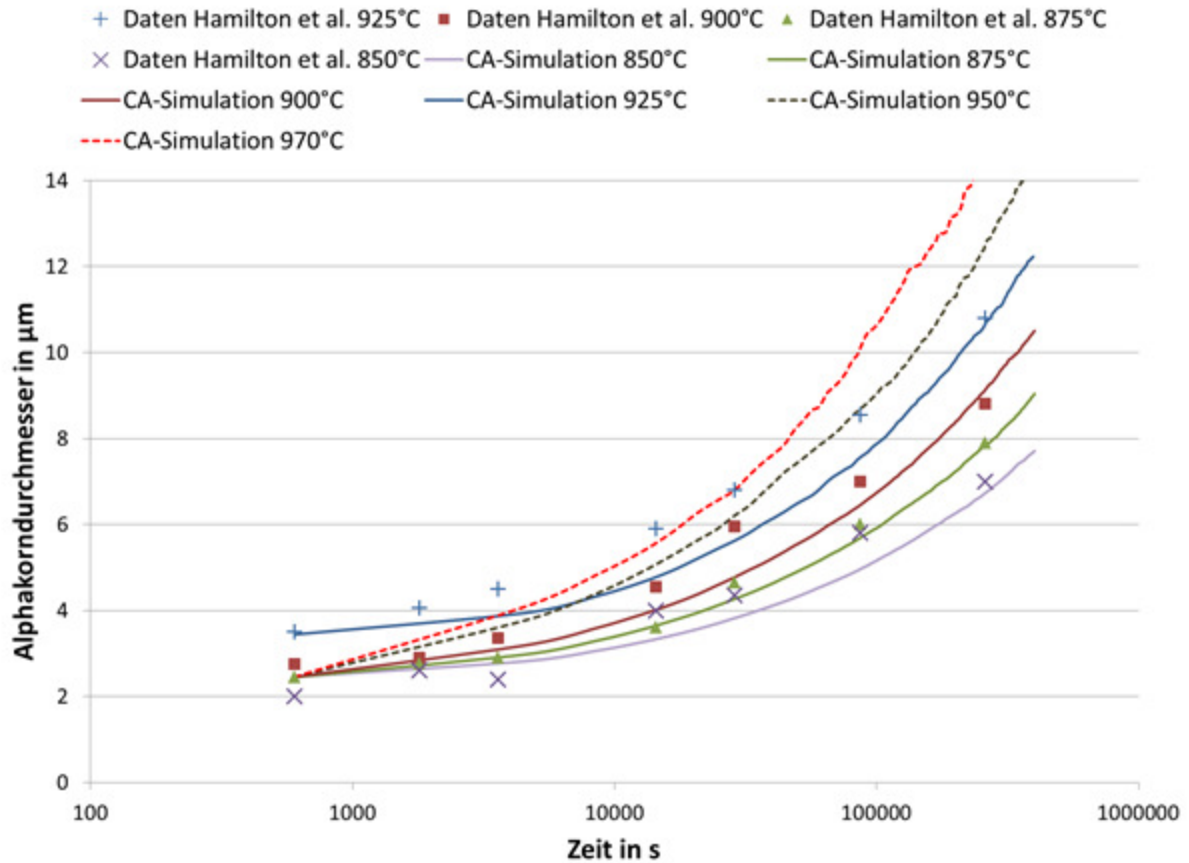


Abbildung 48: Alphakornvergrößerung beim isothermen Glühen bei 850, 875, 900 und 925°C; CA-Daten bei 950 und 970°C sind extrapoliert

Das Vormaterial für Gesenkschmiedeteile hat im Anlieferungszustand eine primäre Alphakorngröße zwischen 8 und 10 μm . Aus diesem Grund konnte bei eigens durchgeführten Versuchen bei 930 und 950°C für praxisnahe Glühzeiten bis zu 4 Stunden keine relevante Kornvergrößerung ausgemacht werden. Einzig bei unrealistisch hohen Schmiedetemperaturen von 970°C lässt sich eine solche nachweisen.

Abbildung 49 zeigt den Vergleich der Entwicklung des primären Alphakorndurchmessers bei 970°C und bis zu einer Glühzeit von 4 Stunden. Hierbei liegt das CA-Modell leicht unter den gemessenen Werten.

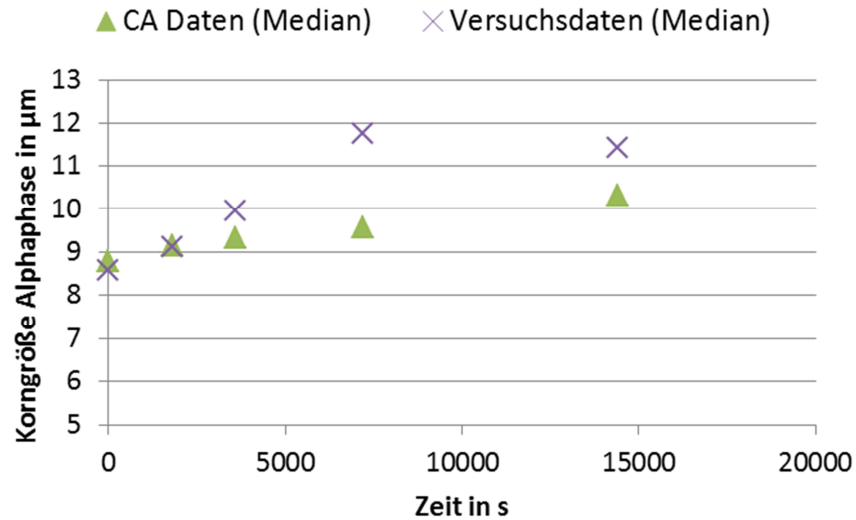


Abbildung 49: Vergleich des primären Alphakorndurchmessers; CA-Daten und Versuchsergebnissen bei 970°C; Median gewichtet nach der Kornfläche

Ein ähnliches Bild ist beim Vergleich der Korngrößenverteilungen in Abbildung 50 und Abbildung 51 zu erkennen. Beide Verteilungen zeigen ein normales Kornwachstum, wobei die Vergrößerung auch hier im CA-Modell etwas langsamer abläuft als im Versuch.

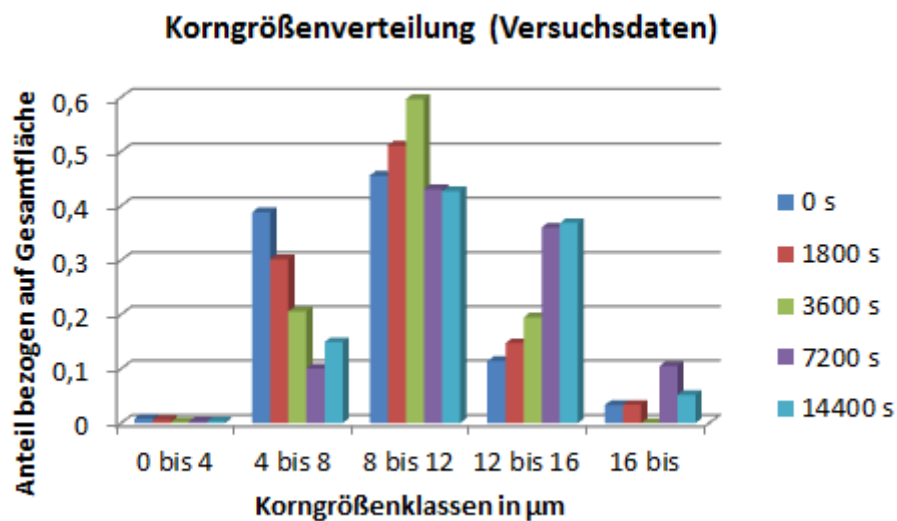


Abbildung 50: Korngrößenverteilung der primären Alphaphase laut Versuchsdaten bei 970°C nach 0, 1800, 3600, 7200 und 14400 s

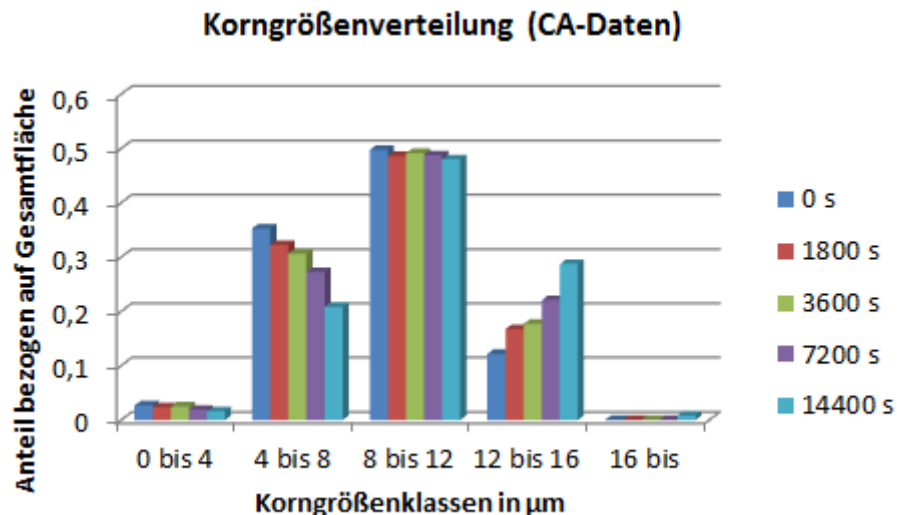


Abbildung 51: Korngrößenverteilung der primären Alphaphase laut CA-Modell bei 970°C nach 0, 1800, 3600, 7200 und 14400 s

Die hier gezeigten Ergebnisse bestätigen somit die Annahme, dass die Vergrößerungsgeschwindigkeit von der Diffusion von Vanadium an der Alpha/Beta-Phasengrenze abhängig ist. Außerdem sei an dieser Stelle die spezielle Auswertungsmethode für den Vergleich CA-Modell mit Versuchsdaten bei 970°C erwähnt. Die mittels Lichtmikroskopie ausgewerteten Körner konnten nur bis zu einer minimalen Größe von 4 μm erfasst werden. Mittels CA-Modell lassen sich hingegen alle Körner berücksichtigen. Da die Mindestgröße der modellierten Körner einer Zelle im CA entspricht, ist erstere somit mit der Zellengröße festgelegt. Der kleinstmögliche Korndurchmesser entspricht in diesem Fall also einem Durchmesser von 0,34 μm . Die Berücksichtigung dieser kleinen Körner führt demnach zu einer Diskrepanz im Vergleich mit den Versuchsdaten, wenn Verteilungen oder Durchschnittswerte auf der Anzahl der Körner basieren. Aus diesem Grund wurden bei der Auswertung die Körner nach ihrem flächenmäßigen Anteil gewichtet. Somit fallen die von der großen Anzahl her vielen kleinen Körner nur wenig ins Gewicht, da sie einen flächenmäßig geringen Anteil aufweisen.

10.2 Phasenumwandlung (Alpha/Beta)

Im anschließenden Abschnitt wird die Validierung des Modells für die diffusionsgesteuerte Beta/Alpha Phasenumwandlung gezeigt. Dieses Modell dient vor allem der Vorhersage des totalen Phasenanteils an Alpha bei verschiedenen Kühlraten aus dem Betagebiet.

10.2.1 JMAK-Modell

Wie schon im Literaturteil erwähnt lässt sich das herkömmliche JMAK-Modell nur auf isotherme Phasenumwandlungen anwenden. Aus diesem Grund wurde das Modell so

modifiziert, dass auch Phasenumwandlungen während Abkühlvorgängen beschrieben werden können. Dies geschieht mit der Einführung der zusätzlichen Variablen t_i . Um einen bestimmten Anteil an Alphaphase f umzuwandeln, wird bei einer bestimmten Temperatur und den daraus resultierenden Modellparametern eine gewisse Zeit t benötigt. Für die Zeit t plus der Zeitschrittweite dt ergibt sich somit der neue Phasenanteil aus Startanteil $f_{(i-1)}$ und neu gebildeten Anteil df im aktuellen Simulationsschritt. Mit jedem Zeitschritt ändern sich jedoch die Temperatur und damit auch gewisse Modellparameter. Für den vorhin gerechneten Startanteil ist unter den neuen Bedingungen im nächsten Simulationsschritt eine andere Startzeit t erforderlich. t_i beschreibt im aktuellen Schritt somit immer jene Zeit, welche für die Phasenumwandlung benötigt würde, um von null auf den Startanteil umzuwandeln. Der Wert für t_i wird demnach für die aktuelle Temperatur bei jedem Schritt erneut berechnet. Mit dieser Vorgehensweise lässt sich die Phasenumwandlung während der Abkühlung modellieren, indem die Temperaturkurve in viele kleine isotherme Zwischenschritte zerlegt wird.

Das modifizierte JMAK-Modell ist in Gleichung 36 bis Gleichung 38 beschrieben. Die verwendeten und validierten Parameter sind in Tabelle 11 aufgelistet. Die Werte für die JMAK-Parameter k_j und n_j wurden mit 1,13 bzw. 0,015 bestimmt. Die benötigten temperaturabhängigen Gleichgewichtsanteile an Alphaphase wurden mit MatCalc [78] und JMatPro [79] berechnet.

$$t_i = \left(\frac{\ln(HCP - f_{(i-1)})}{-k_j} \right)^{\frac{1}{n_j}} \quad \text{Gleichung 36}$$

$$df = \left(\frac{dt (k_j n_j (t_i + dt))^{n_j - 1}}{\exp k_j ((t_i + dt)^{n_j})} \right) HCP \quad \text{Gleichung 37}$$

$$f_i = f_{(i-1)} + df \quad \text{Gleichung 38}$$

Tabelle 11: Auflistung der Materialkonstanten und Variablen im verwendeten JMAK-Modell

t_i	Virtuell benötigte Zeit für $f_{(i-1)}$
dt	Zeitschrittweite
HCP	Gleichgewichtsanteil an Alphaphase aus MatCalc (temperaturabhängig)
f_i	Anteil an Alphaphase zum Zeitschritt i
$f_{(i-1)}$	Anteil an Alphaphase zum Zeitschritt $i-1$
df	Änderung des Phasenanteils
k_j	Reaktionskonstante = 1,13
n_j	Reaktionsexponent = 0,015

Abbildung 52 zeigt den Vergleich des modifizierten JMAK-Modells mit den Literaturdaten nach Katzarov et al. [11]. Bei fortgeschrittener Phasenumwandlung zeigt das Modell ab Alphaanteilen von 0,3 eine gute Übereinstimmung mit den Daten aus der Literatur. Lediglich zu Beginn der Phasenumwandlung sind die Abweichungen höher. Die Literaturdaten sind in

diesem Fall stets niedriger als die JMAK Ergebnisse. Dies dürfte auf eine verzögerte, nicht homogene Keimbildung zurückzuführen sein, welche mit diesem Modell nicht zu beschreiben ist.

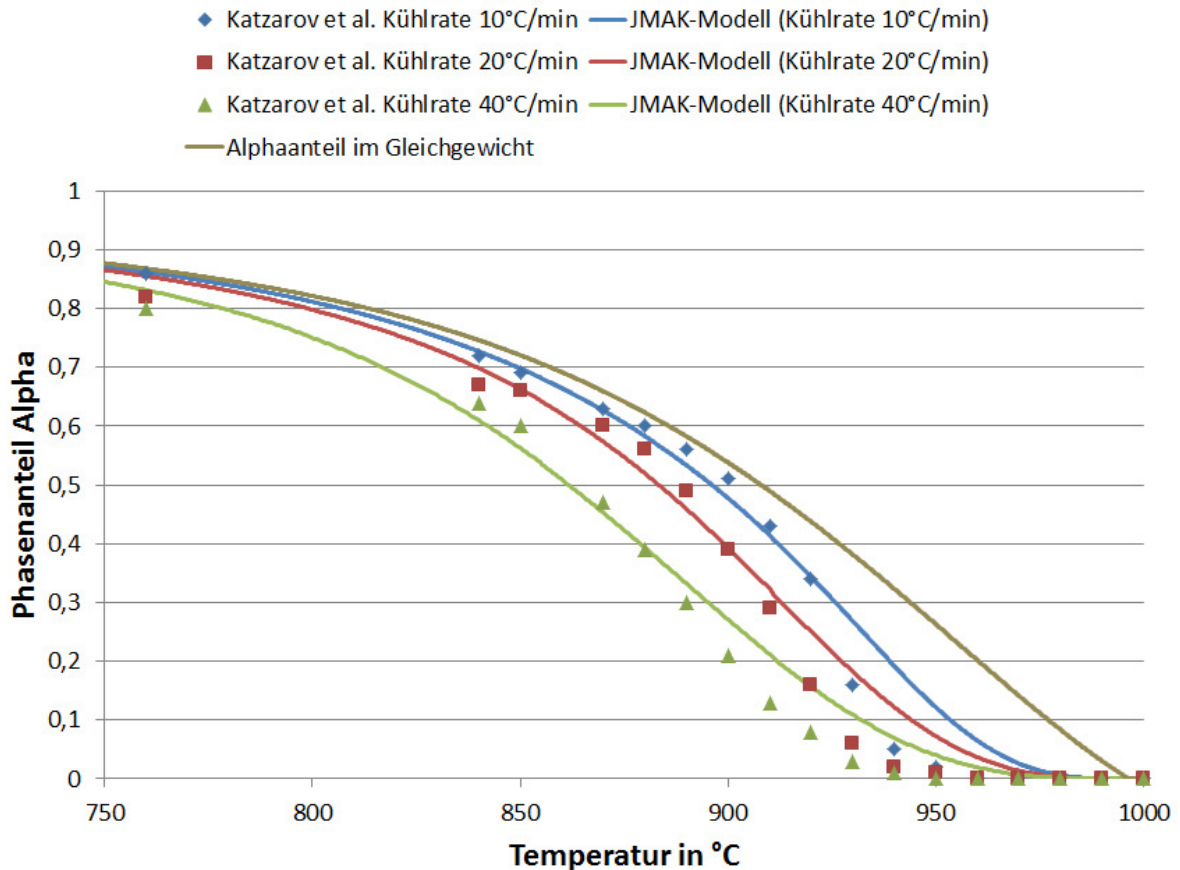


Abbildung 52: Entwicklung des Alpha-Phasenanteils bei verschiedenen Kühlraten; Vergleich des modifizierten JMAK-Modells mit Katzarov et al. [11]

Auffallend ist ebenfalls, dass sich wie erwartet mit steigender Abkühlgeschwindigkeit die Phasenumwandlung zu tieferen Temperaturen verschiebt. Für Kühlraten über 40°C/min ist das Modell jedoch nicht mehr gültig, da ab dieser Grenze vermehrt diffusionslose Martensitbildung einsetzt.

10.3 Lamellendicke der sekundären Alphaphase

Die Beschreibung des Modells zur Modellierung der mittleren sekundären Alphalamellendicken erfolgte bereits in Abschnitt 6.3.2. Im folgenden Kapitel ist die Validierung des Modells sowohl mit Versuchs- als auch Literaturdaten gezeigt. Hierbei wird speziell auf den Einfluss verschiedener Abkühlraten und Starttemperaturen eingegangen.

10.3.1 Diffusionsmodell

Abbildung 53 zeigt den Vergleich der Lamellendicke von Modell- mit Versuchsdaten. Der Werkstoff wurde hierbei ausgehend von 20 auf 930°C erhitzt und mit Kühlraten von 18, 30 und 42°C/min abgeschreckt. Bei Kühlraten von 18 und 30°C/min ist eine gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen Werten und den Modelldaten erkennbar. Die Lamellendicke sinkt aufgrund der geringeren Diffusionszeit bei schnellerer Abkühlung. Bei Abkühlraten über 40°C/min wird ein Vergleich kritisch, da zum Teil schon diffusionslose Martensitbildung erfolgen kann. Außerdem sind die dabei entstehenden Lamellen so fein, dass diese nur schwer auszuwerten sind.

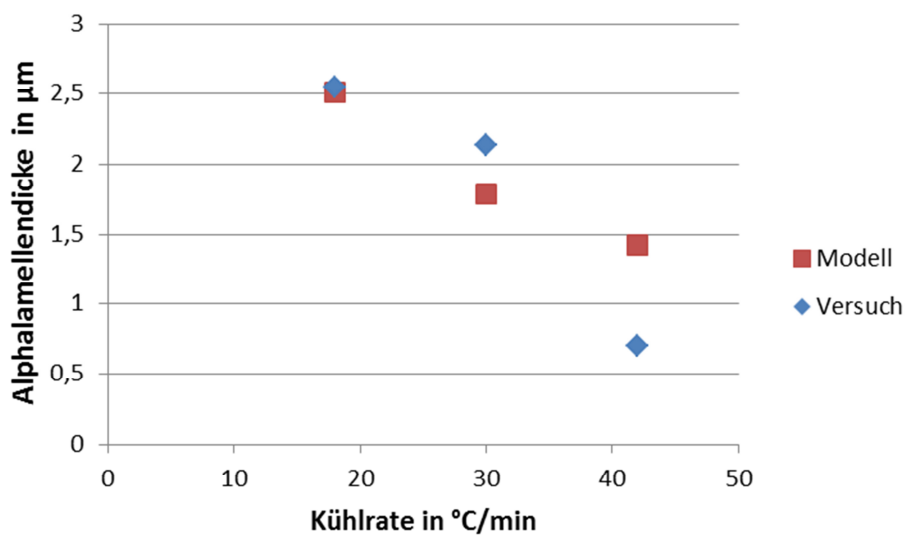


Abbildung 53: Modellierung der Alphalamellendicke; Vergleich des Modells mit gemessenen Werten; Abkühlung von 930°C auf Raumtemperatur; Kühlraten: 18, 30 und 42°C/min; Versuchsdaten: Median aus ca. 100 ausgewerteten Lamellen je Datenpunkt

Eine ähnliche Übereinstimmung ergibt sich beim Vergleich des Modells mit Daten aus der Literatur nach Katzarov et al. [11] (Abbildung 54). Hierbei wurde aus dem Betagebiet bei Kühlraten von 5, 10, 20 und 40 °C/min auf Raumtemperatur abgekühlt. Bei Abkühlgeschwindigkeiten von 5 und 40°C/min zeigen Modell- und Versuchsdaten geringe Abweichungen, während bei Kühlraten von 10 und 20°C/min eine zu hohe Lamellendicke vorhergesagt wird.

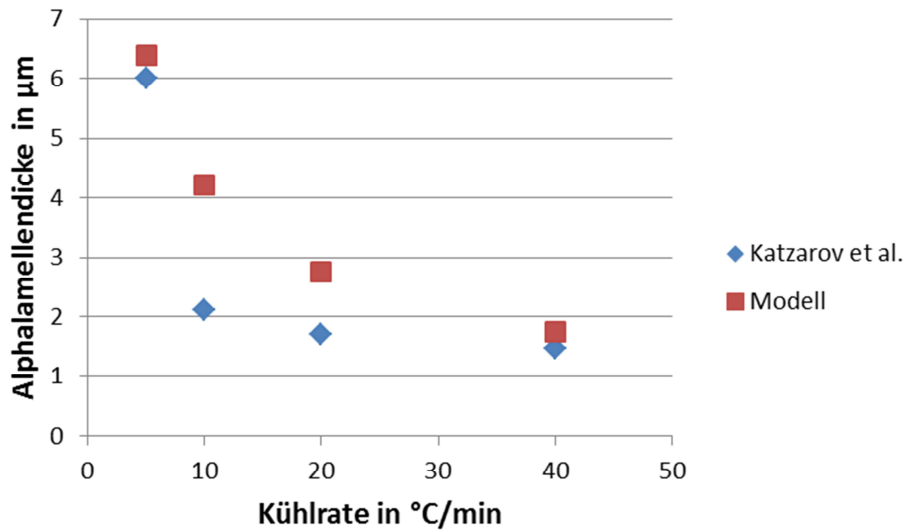


Abbildung 54: Modellierung der Alphalamellendicke; Vergleich des Modells mit Daten aus Katzarov et al. [11]; Abkühlung von Beta-Transus (ca. 1000°C) auf Raumtemperatur; Kühlraten 5, 10, 20 und $40^{\circ}\text{C}/\text{min}$

Die Entwicklung der berechneten Alphalamellendicke im Temperaturbereich zwischen 1000 und 600°C ist in Abbildung 55 gezeigt. Der Abkühlvorgang startet in diesem Fall über der Beta-Transus-Temperatur. Interessant ist hierbei, dass das Dickenwachstum der Alphalamellen und die Phasenumwandlung hauptsächlich zwischen 1000 und 800°C ablaufen.

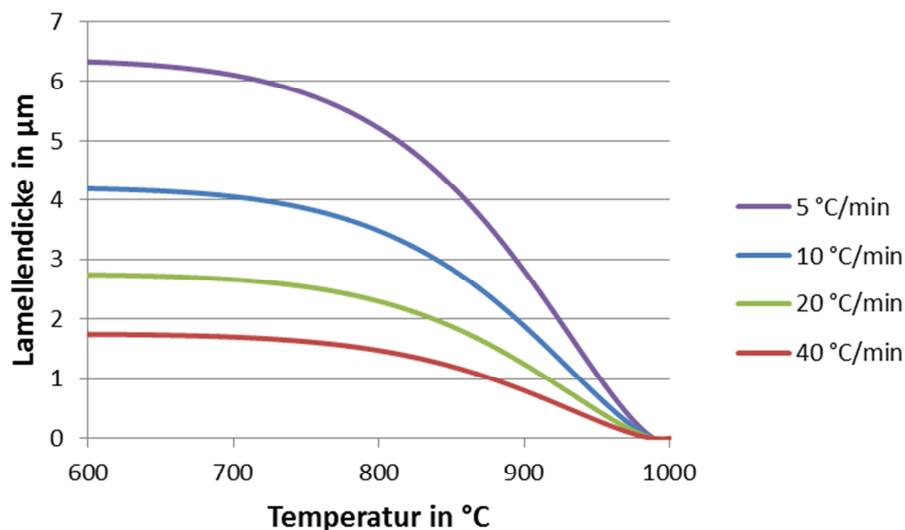


Abbildung 55: Entwicklung der Alphalamellendicke (Modelldaten) bei verschiedenen Abkühlraten im Temperaturbereich von 1000 bis 600°C

In Abbildung 56 ist die Abhängigkeit der Lamellendicke von Kühlrate und Starttemperatur dargestellt. Die Alphalamellendicke steigt hierbei mit niedrigeren Kühlraten und höheren Starttemperaturen. Dies ist durch die längeren Diffusionszeiten und schnelleren Diffusionsraten bei höheren Temperaturen begründet.

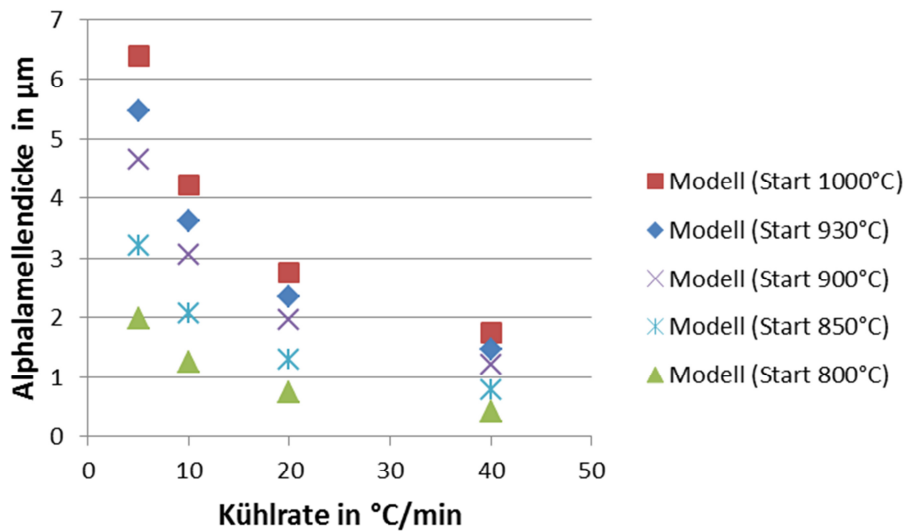


Abbildung 56: Einfluss der Peaktemperatur und Kühlrate auf die Lamellendicke der sekundären Alphaphase

Die Einschränkungen bei diesem Modell ergeben sich hauptsächlich dadurch, dass die gegenseitige Beeinflussung von wachsenden Alphalamellen nicht berücksichtigt werden kann. Wachsen die Lamellen bei fortgeschrittener Phasenumwandlung zunehmend zusammen, behindern sich diese untereinander am weiteren Wachstum. Dies ist darin begründet, dass sich das Vanadium in den Lamellenzwischenräumen anreichert und nicht schnell genug abtransportiert werden kann. Damit verändern sich auch die lokalen Vanadium-Konzentrationen und Gleichgewichtswerte. Dies führt dazu, dass das Modell gegen Ende des Wachstumsprozesses bzw. der Phasenumwandlung ein zu schnelles Dickenwachstum vorhersagen dürfte. Dies gilt besonders für hohe lamellare Alphaanteile wie sie meist unter 900°C vorliegen. Wird hingegen aus dem zweiphasigen Alpha+Beta-Gebiet abgekühlt, hat die bereits vorhandene primäre Alphaphase nur wenig Einfluss, da diese das Lamellenwachstum innerhalb der Betakörner nicht beeinflusst.

10.4 Spezialfälle

Da das CA-Modell nicht nur für isotherme Wärmebehandlungen entwickelt wurde, werden in diesem Abschnitt auch spezielle Simulationen präsentiert, welche mit dem Programm ebenfalls möglich sind. Vorwiegend handelt es sich hierbei um die Beschreibung des Einflusses variierender Phasenanteile auf die Korngrößen. Dies ist besonders bei der Simulation von nicht-isothermen Glühprozessen von Bedeutung.

10.4.1 Aufheizsimulation

Bei der Aufheizsimulation des Vormaterials auf Schmiedetemperatur geht es hauptsächlich um die Beschreibung der Alpha- und Betakorngrößenentwicklung. Durch das teilweise Auflösen der primären globularen Alphaphase werden die Alphakörner schrumpfen und die Betakörner entsprechend wachsen. Aufgrund der kurzen Aufheizzeit hat die parallel ablaufende Kornvergrößerung in den Simulationen so gut wie keinen Einfluss auf die Ergebnisse. Zur Simulation der Korngrößenentwicklung während des Aufheizens wurde als erstes die Mikrostruktur des Vormaterials in den CA eingelesen (Abbildung 57). Dazu wurde die Bilddatei entsprechend Abbildung 58 nachbearbeitet. Abbildung 59 zeigt schlussendlich die eingelesene Mikrostruktur nach der Virtualisierung.

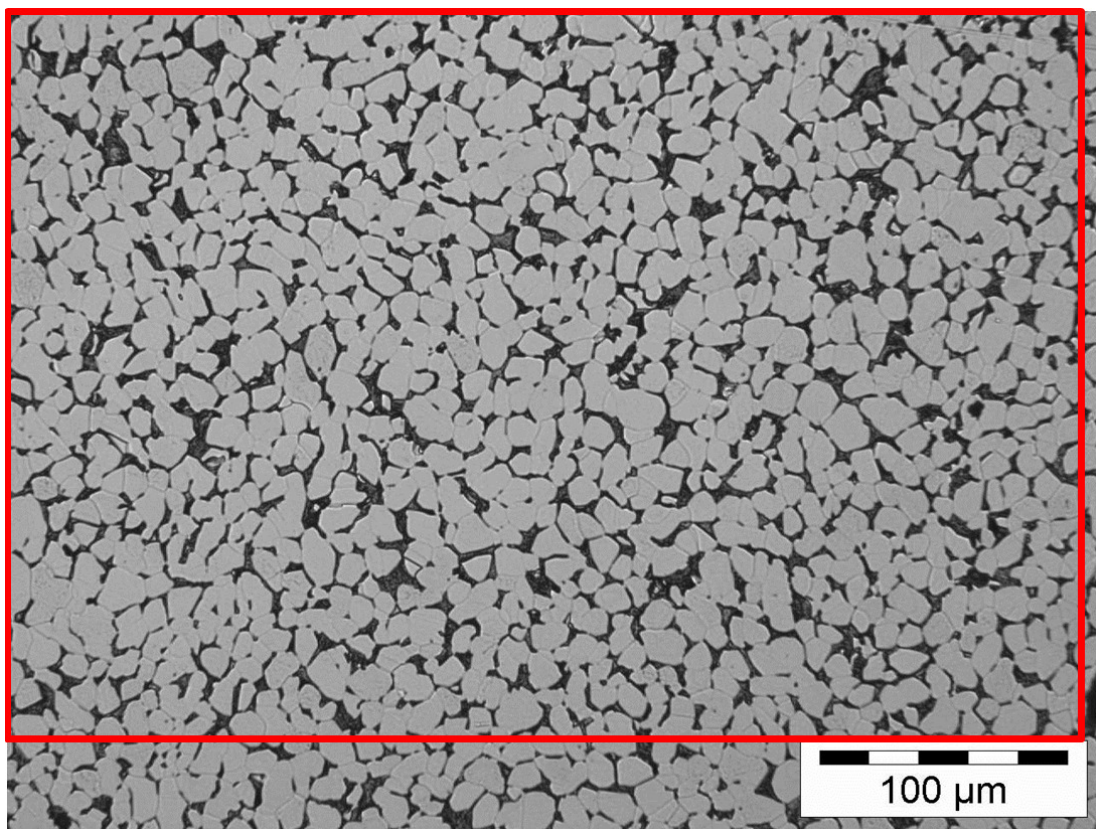


Abbildung 57: Gefüge des Vormaterials im Anlieferungszustand; primäre Alphaphase hellgrau, Betaphase schwarz; digitalisierter Bereich ist rot markiert

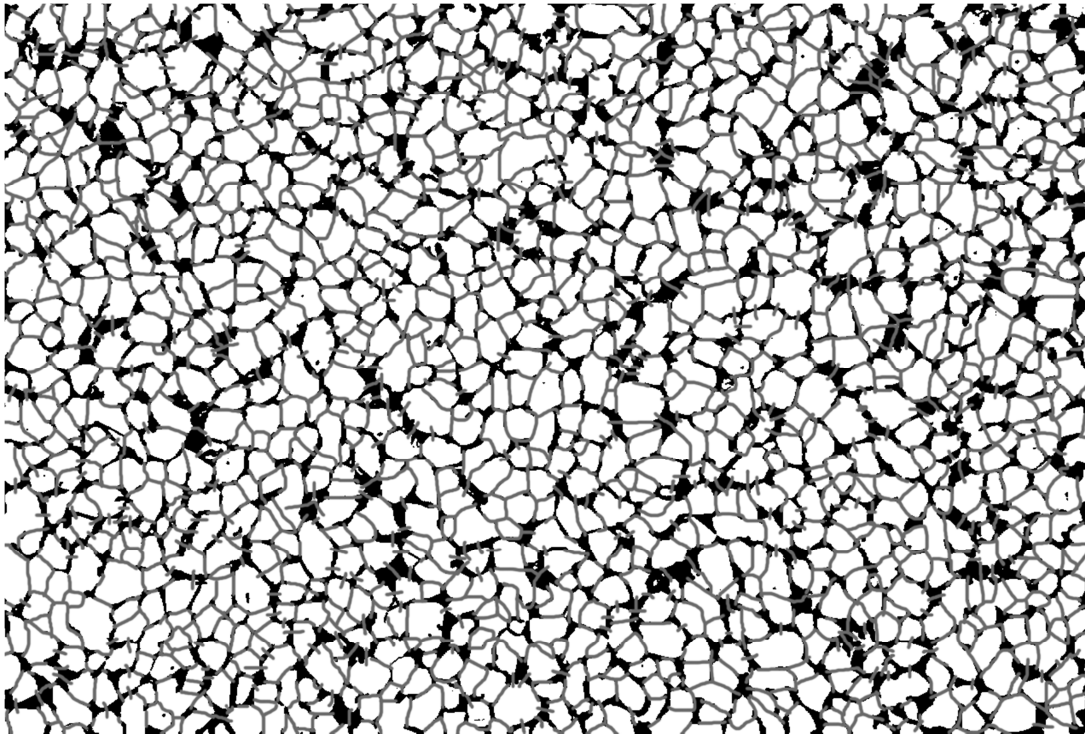


Abbildung 58: Nachbearbeitetes Image; Alphaphase in weiß bzw. Betaphase in schwarz kontrastiert; Korngrenzen grau nachgezeichnet

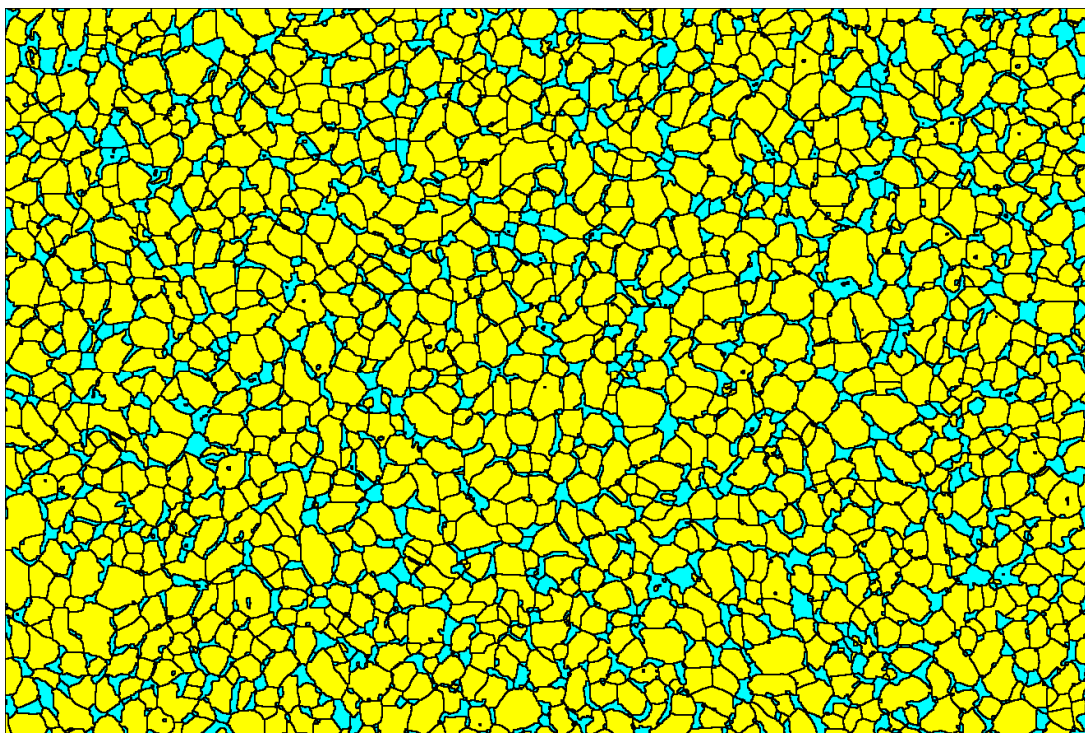


Abbildung 59: Digitalisierte Mikrostruktur des Vormaterials; primäre Alphaphase gelb; Betaphase cyan

Die Entwicklung der Kornstruktur während des Aufheizens ist von Abbildung 60 bis Abbildung 63 dargestellt. Ein Vergleich der metallographischen Schliffe mit den simulierten Mikrostrukturbildern zeigt bei 930 und 970°C eine gute Übereinstimmung sowohl in den Alphakorngrößen als auch bei den Phasenanteilen. Die Betakorngröße lässt sich hingegen in den Schliffen nicht bzw. nur schwer vermessen. Der Grund hierfür liegt in der Martensitbildung, welche durch das Abschrecken der Probe nach der Wärmebehandlung verursacht wird.

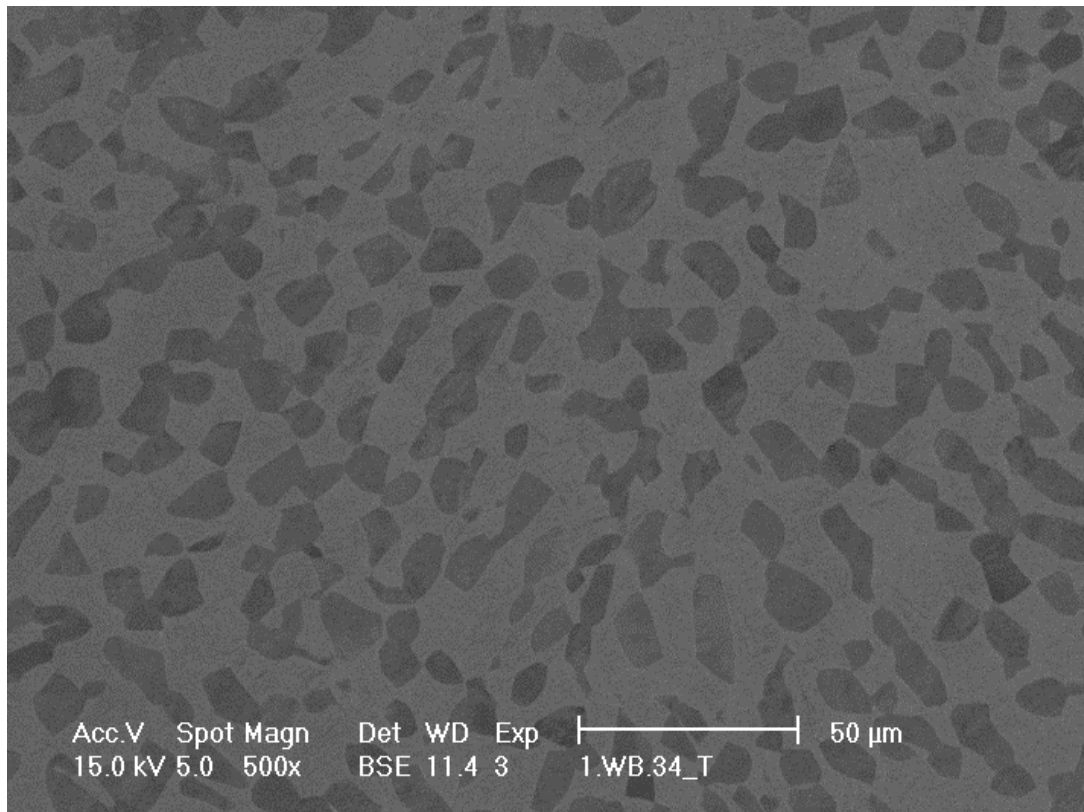


Abbildung 60: Gefüge nach Aufheizversuch bei 930°C; primäre Alphaphase dunkelgrau; Betaphase hellgrau

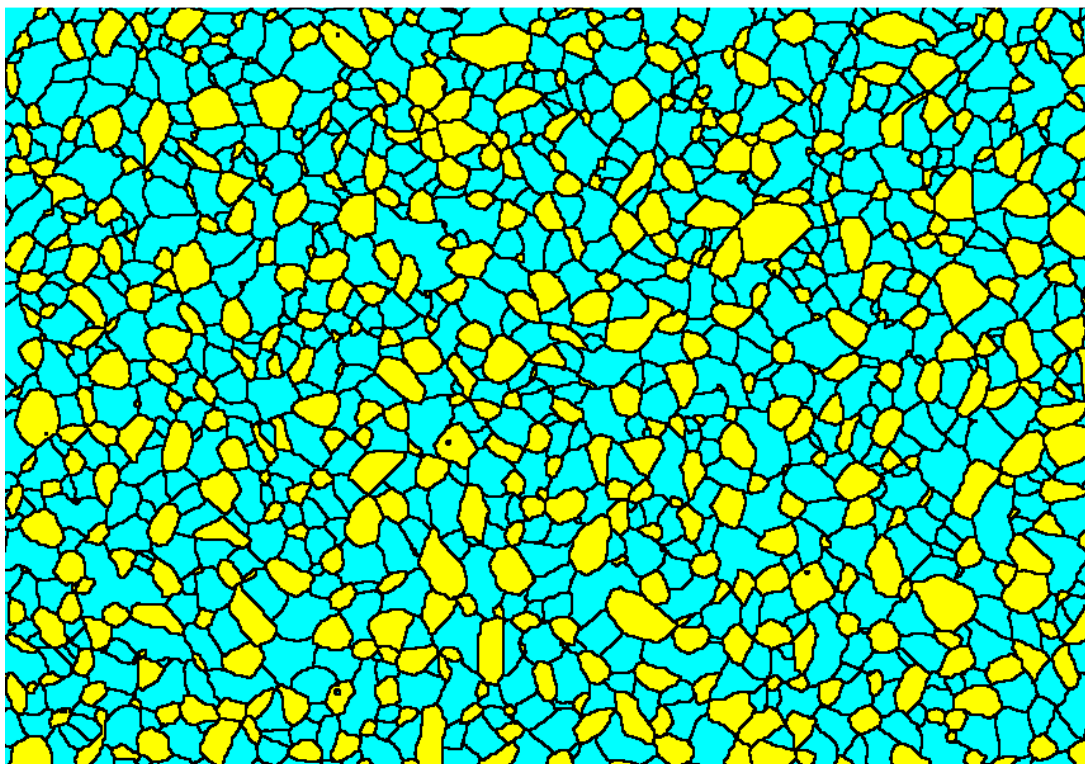


Abbildung 61: Gefüge nach Aufheizvorgang bei 930°C simuliert mittels CA; primäre Alphaphase gelb; Betaphase cyan

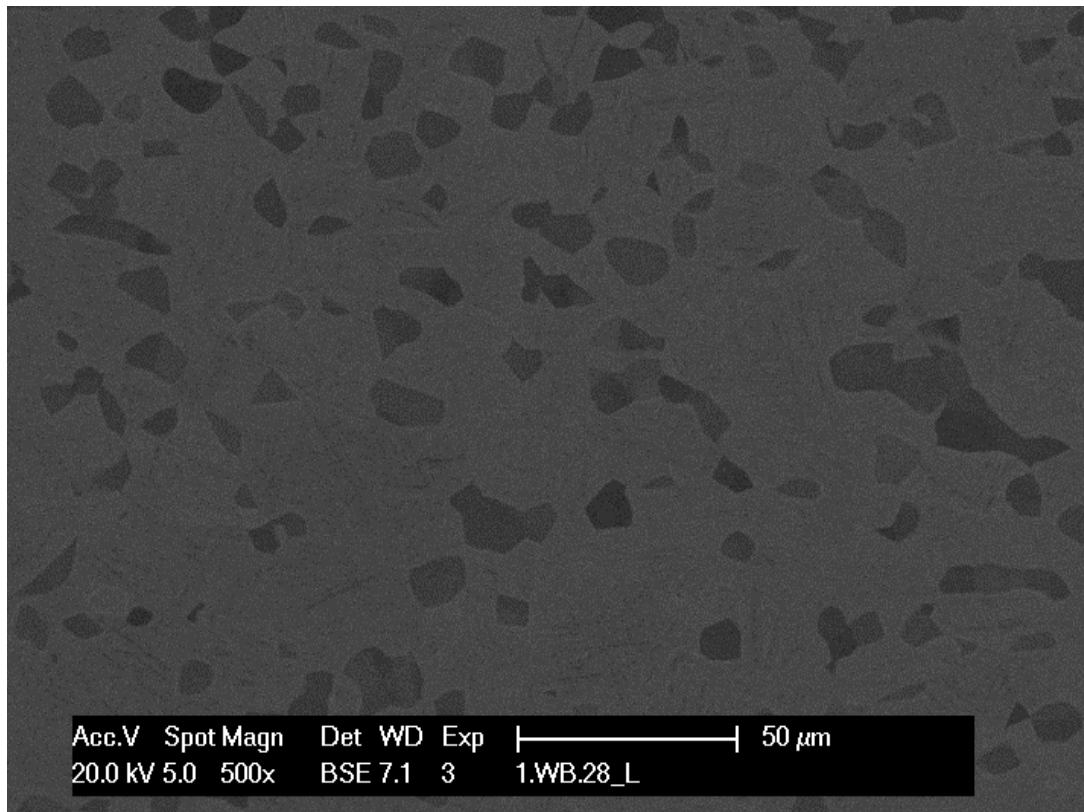


Abbildung 62: Gefüge nach Aufheizversuch bei 970°C; primäre Alphaphase dunkelgrau; Betaphase hellgrau

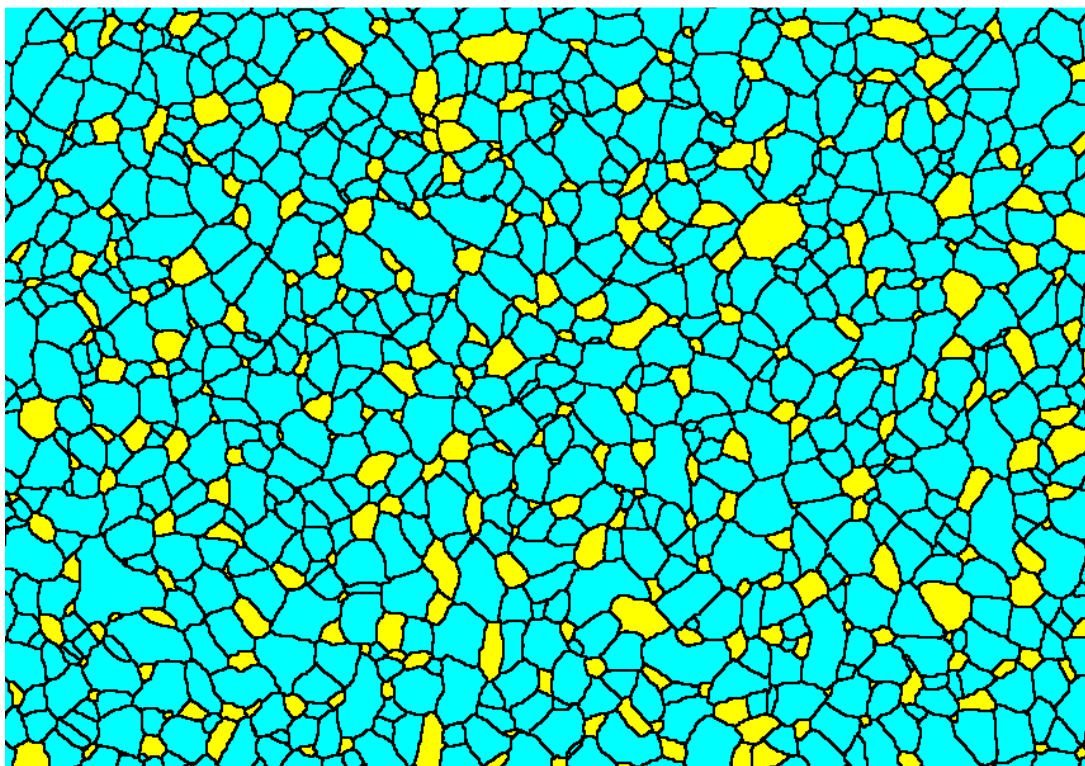


Abbildung 63: Gefüge nach Aufheizvorgang bei 970°C simuliert mittels CA; primäre Alphaphase gelb; Betaphase cyan

Die Entwicklung der gemittelten Alpha- und Betakorngröße während des Aufheizens ist in Abbildung 64 gezeigt. Der Temperaturbereich bewegt sich hierbei zwischen 800 und 970°C. Die Vergleiche der mittleren Alphakorngröße zeigen hierbei eine gute Korrelation zwischen den Aufheizversuchen und der CA-Simulation. Die CA-Daten der Entwicklung der Betakorngröße sind ebenfalls dargestellt. Wie erwartet vergrößert sich diese mit fortschreitender Auflösung der Alphaphase. Aufgrund der vorhin bereits erläuterten Probleme bei der metallographischen Auswertung ist ein Vergleich der Betakorngröße mit den Versuchsdaten jedoch nicht möglich.

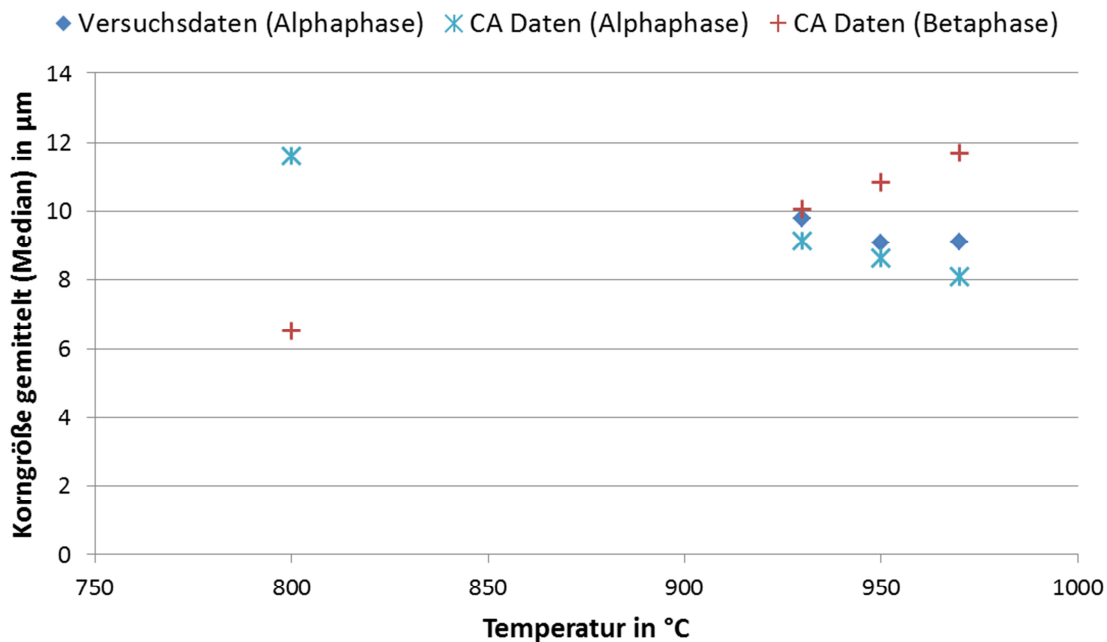


Abbildung 64: Korngrößenentwicklung der Phasen Alpha und Beta während des Aufheizens

Der primäre Alphaanteil des eingelesenen Vormaterials entspricht in dieser Simulation ca. 80%. Da sich beim Aufheizen immer zuerst die lamellare sekundäre Alphaphase innerhalb der Betakörner auflöst, würde dieser Anteil ohne lamellare Alphaanteile einem Gleichgewicht bei 800°C entsprechen. Dies bedeutet, dass sich in diesem Fall erst ab 800°C die primäre Alphaphase aufzulösen beginnt, da zuerst immer die feinen lamellaren Alphastrukturen verschwinden. Deshalb ist eine Verringerung in der Korngröße der primären Alphaphase erst dann zu beobachten wenn sich auch ihr Phasenanteil verkleinert. Aus diesem Grund entsprechen die Korndurchmesser bei 800°C jenen des Vormaterials bei Raumtemperatur.

10.4.2 Phasenausgleich bei isothermer Wärmebehandlung

Bei dieser Simulation wird die Entwicklung der Alphakorngröße gezeigt, wenn sich die Phasenanteile zu Beginn der isothermen Glühphase noch nicht im Gleichgewicht befinden. Es kommt dann zu einer Überlagerung von Kornvergrößerung und Auflösungsvorgängen.

In Abbildung 65 ist die Entwicklung des Alpha Phasenanteils bei 930 und 950°C dargestellt. Zu Beginn befindet sich dieser noch nicht im Gleichgewicht was daran zu erkennen ist, dass sich erst ca. 2000 s nach Erreichen der Glühtemperatur ein konstanter Wert einstellt. Die punktierten Linien zeigen hingegen die simulierte Entwicklung des Alphaanteils mittels CA. Während der Phasenausgleich bei 950°C schnell genug abläuft, um eine gute Übereinstimmung mit den Versuchen zu gewährleisten ist dieser bei 930°C zu langsam. Der Grund hierfür liegt an den geringeren Übergangswahrscheinlichkeiten bei 930°C.

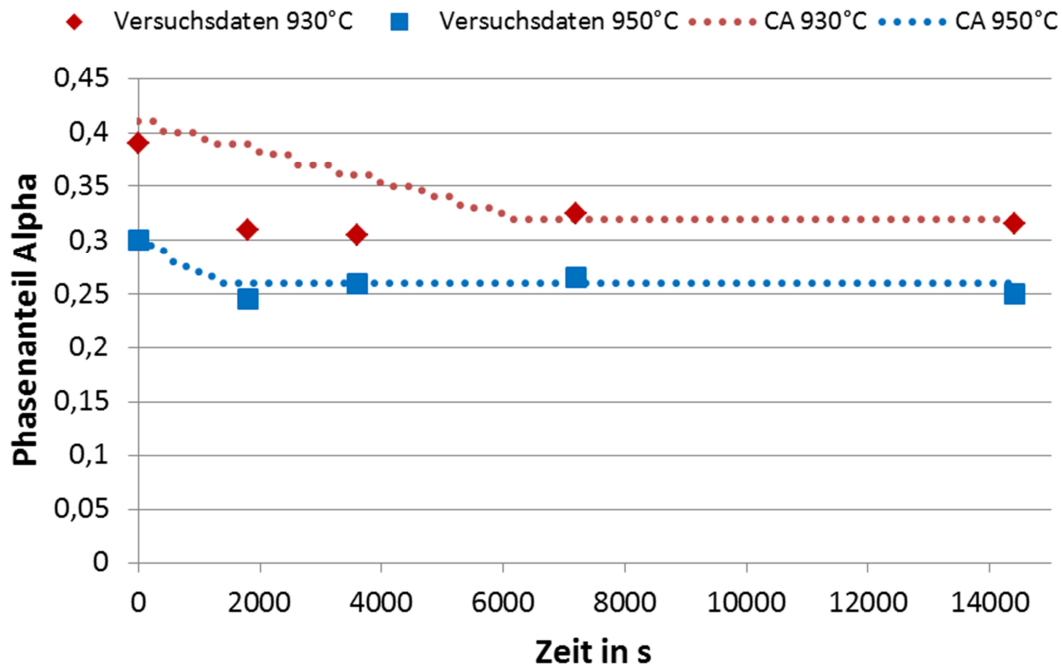


Abbildung 65: Entwicklung des Anteils an Alpha während der isothermen Behandlung bei 930°C und 950°C plus Simulation der Änderung des Phasenanteils mittels CA

Die Überlagerung der Phasenumwandlungs- und Vergrößerungsprozesse ist in Abbildung 66 und Abbildung 67 dargestellt. Wie erwartet dominiert bei 930°C der Effekt der Phasenumwandlung das Geschehen, was sowohl in der CA-Simulation als auch in den Versuchen zu einer Verringerung der Alphakorngröße führt. Bei 950°C halten sich beide Mechanismen mehr oder weniger die Waage was sich in einer geringeren Veränderung der Alphakorngröße widerspiegelt.

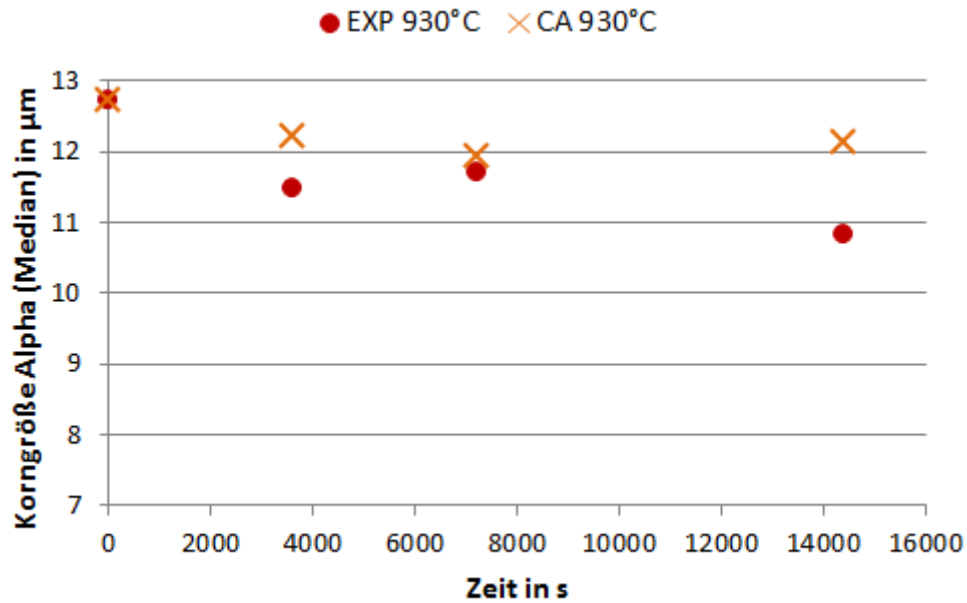


Abbildung 66: Entwicklung der Alphakorngröße; Überlagerung von Kornvergrößerung und Ausgleich auf das Phasengleichgewicht bei 930°C

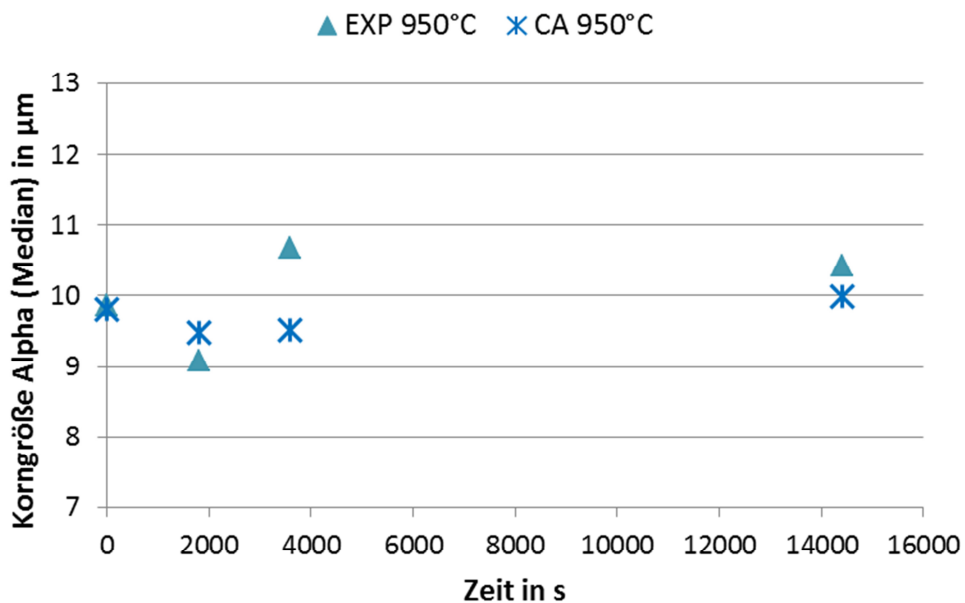


Abbildung 67: Entwicklung der Alphakorngröße; Überlagerung von Kornvergrößerung und Ausgleich auf das Phasengleichgewicht bei 950°C

Abschließend sei angemerkt, dass das CA-Modell wie bereits in Kapitel 8.5 erwähnt nicht dazu entwickelt wurde, um Phasenumwandlungen zu simulieren. Da bei 930°C der Phasenausgleich zu langsam abläuft, wäre es notwendig diesen separat zu simulieren und anschließend das Modell mit entsprechender Korngröße und Phasenanteil für die Simulation der Kornvergrößerung weiter laufen zu lassen.

10.4.3 Nichtisotherme Wärmebehandlung

Als letzter Spezialfall ist die CA-Simulation von zwei Temperaturzyklen während einer nicht-isothermen Wärmebehandlung gezeigt. Der Temperaturverlauf wurde hierbei entsprechend Abbildung 68 eingelesen.

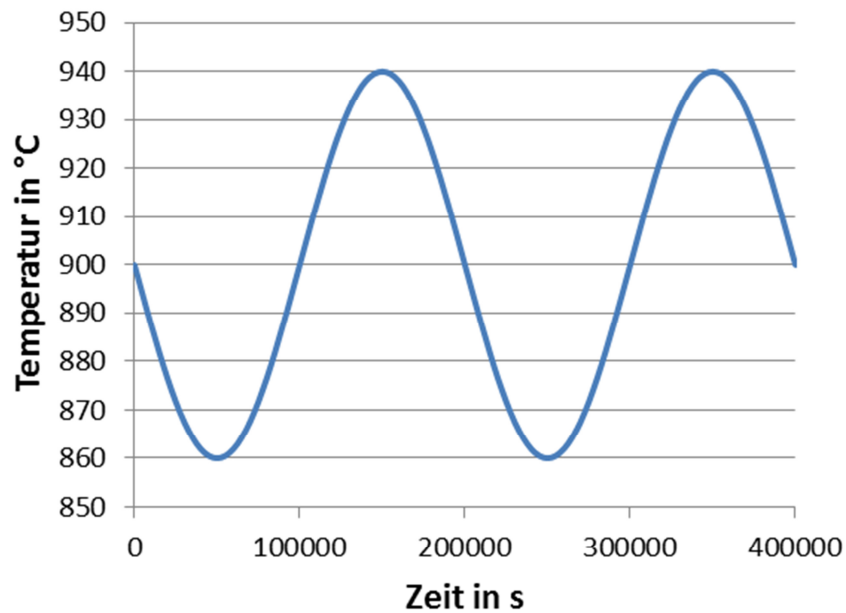


Abbildung 68: Temperatur-Zeit Verlauf der zwei durchgeführten Temperaturzyklen in der CA-Simulation

Die Einstellung des Alphaphasenanteils während der Simulation wird dabei vom CA-Modell automatisch vorgenommen und bewegt sich dabei immer in der Nähe des Gleichgewichtswertes (Abbildung 69). Aufgrund der extrem langsamen Temperaturänderung hat der CA in diesem Fall immer ausreichend Zeit seinen Phasenanteil an das Gleichgewicht anzupassen.

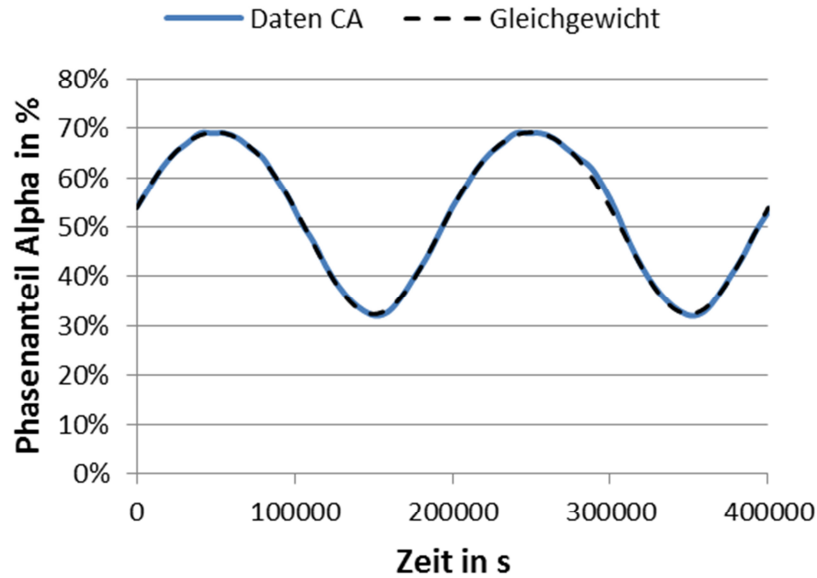


Abbildung 69: Änderung des Alpha Phasenanteils während der Temperaturzyklen (CA-Simulation), Vergleich der CA-Daten mit dem Phasengleichgewichtswert

Die finale Entwicklung der Alpha- und Betakorngröße ist in Abbildung 70 dargestellt. Zu Beginn dominiert bei der relativ kleinen Startkorngröße beider Phasen die Kornvergrößerung. Doch nach kurzer Zeit macht sich ein Einfluss der Phasenumwandlung bemerkbar, welcher die Kornvergrößerung der sich auflösenden Phase verzögert, während die andere Phase in ihrem Kornwachstum zusätzlich beschleunigt wird. Bei größeren Korndurchmessern nimmt der Einfluss der Phasenumwandlung überhand, da die Kornvergrößerung immer langsamer abläuft. Dies führt dann schlussendlich zu einem Abfall des Korndurchmessers der sich auflösenden Phase.

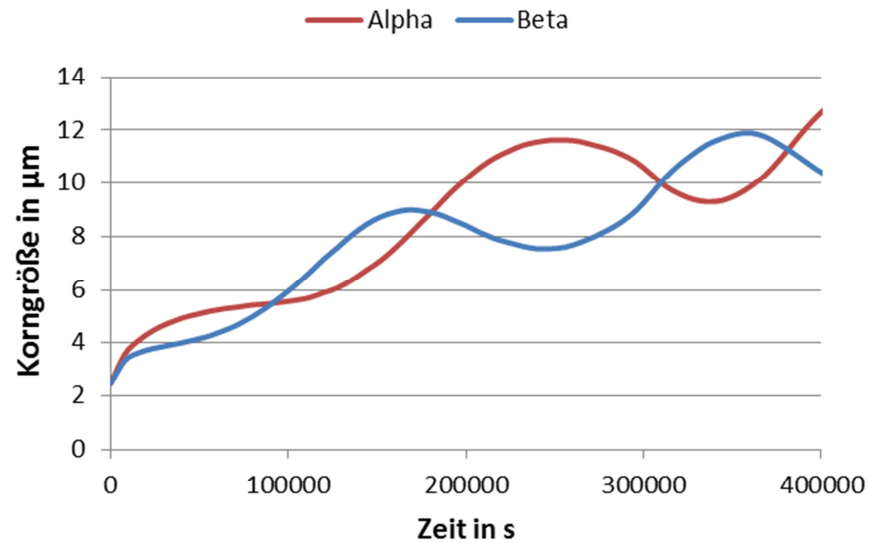


Abbildung 70: Entwicklung der Korngröße von Alpha und Beta bei Überlagerung von Kornvergrößerung und Phasenumwandlung während Temperaturschwankungen

Solche Temperaturschwankungen wie sie für diese Simulation angenommen wurden sollten jedoch keinesfalls in praktischen Herstellungsprozessen vorkommen. Dieses theoretische Beispiel soll demnach nur aufzeigen, wie sich die Korngrößenentwicklung verhält, wenn die beiden Mechanismen der Kornvergrößerung und Phasenumwandlung durch Temperaturschwankungen überlagert werden.

11 Einfluss der chemischen Zusammensetzung auf die Mikrostrukturmodelle

In den vorangegangenen Kapiteln 9 und 10 wurden unter anderem die Ergebnisse der Mikrostrukturmodelle mit Versuchsdaten verglichen. Die Versuchslegierung hatte hierbei immer dieselbe chemische Zusammensetzung. Da sich in der Praxis die chemische Zusammensetzung des Vormaterials innerhalb bestimmter Grenzen verändern kann, wird in diesem Kapitel auf den Einfluss deren Variation auf die Mikrostrukturmodelle und deren Inputparameter eingegangen.

11.1 Betakorngröße

Die Vergrößerung der Betaphase im einphasigen Betabereich startet bei Überschreiten der Beta-Transus-Temperatur. Durch Unterschiede in der chemischen Zusammensetzung kann diese aber höher oder tiefer ausfallen als beim Referenzmaterial. Dementsprechend startet die Kornvergrößerung schon bei niedrigerer oder erst bei höherer Temperatur. Dies ist insofern von Bedeutung, als für das Vergrößerungsmodell im Betagebiet als Startbedingung das Überschreiten der Beta-Transus-Temperatur herangezogen wird.

In Tabelle 12 sind daher neben der chemischen Zusammensetzung die entsprechenden Beta-Transus-Temperaturen des Vormaterials bzw. der oberen und unteren Toleranzgrenze angegeben.

Tabelle 12: Chemische Zusammensetzung des Vormaterials plus unterer und oberer Grenze von Beta-Transus bei Variation von Al und V innerhalb der erlaubten Toleranzgrenze; alle Angaben in Gewichts-%

	Beta-Transus	Al	V	C	Fe	N	O
Untere Grenze	974,22°C	5,5	4,5	0,03	0,18	0,006	0,18
Vor-material	996,81°C	6,45	4,33	0,03	0,18	0,006	0,18
Obere Grenze	1016,92°C	6,75	3,5	0,03	0,18	0,006	0,18

Die Beta-Transus-Temperatur sowie die Heizrate haben einen Einfluss auf die Startkorngröße, welche sich zu Beginn der jeweiligen isothermen Glühphase bei der jeweiligen Schmiedetemperatur einstellt.

Für das Referenzmaterial ist die Entwicklung der Betakorngröße während des Aufheizens für verschiedene Heizraten in Abbildung 71 dargestellt. Die angenommene Betakorngröße entspricht hierbei bei Überschreiten der Beta-Transus-Temperatur 250 µm. Schon hier zeigt sich, dass höhere Heizraten zu kleineren Betakorndurchmessern bei Erreichen der Schmiedetemperatur (z.B. 1070°C) führen.

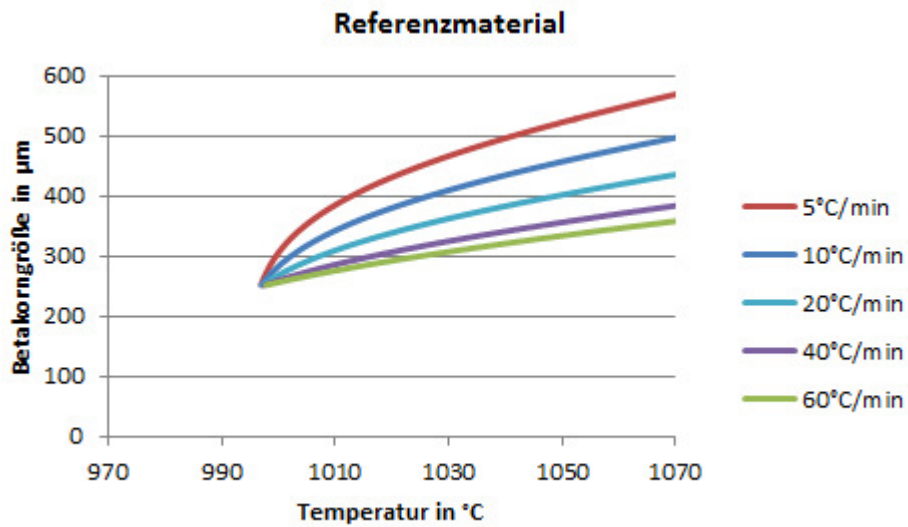


Abbildung 71: Entwicklung der Betakorngröße bei verschiedenen Aufheizraten auf Umformtemperatur im Referenzmaterial (996,81°C Beta-Transus)

Ein ähnliches Bild ergibt sich beim Vergleich mit der oberen bzw. unteren Grenze für die Beta-Transus-Temperatur. Im Vergleich zum Referenzmaterial führen niedrigere Beta-Transus-Temperaturen zu höheren Korndurchmessern, da die Kornvergrößerung früher startet (Abbildung 72). Bei der oberen Grenze bzw. bei höheren Transus-Temperaturen ist es dagegen genau umgekehrt (Abbildung 73).

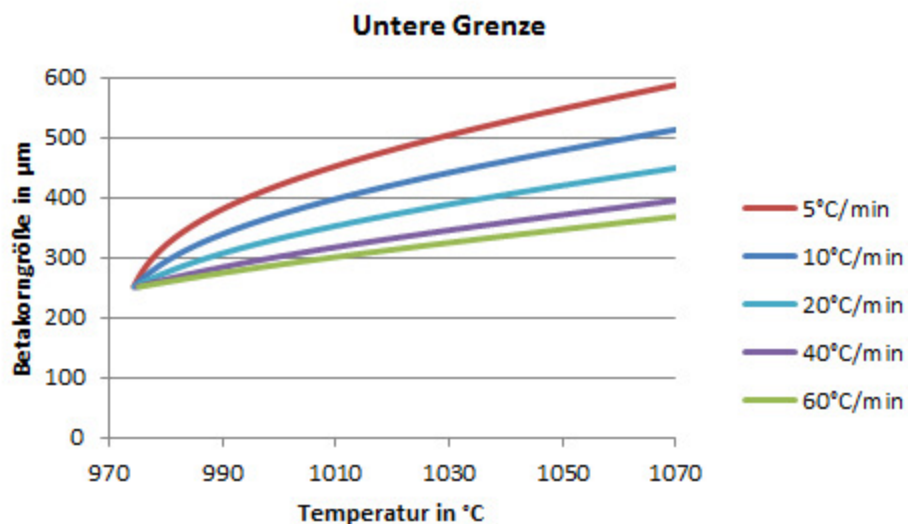


Abbildung 72: Entwicklung der Betakorngröße bei verschiedenen Aufheizraten auf Umformtemperatur im Falle der niedrigsten möglichen Beta-Transus-Temperatur (974,22°C)

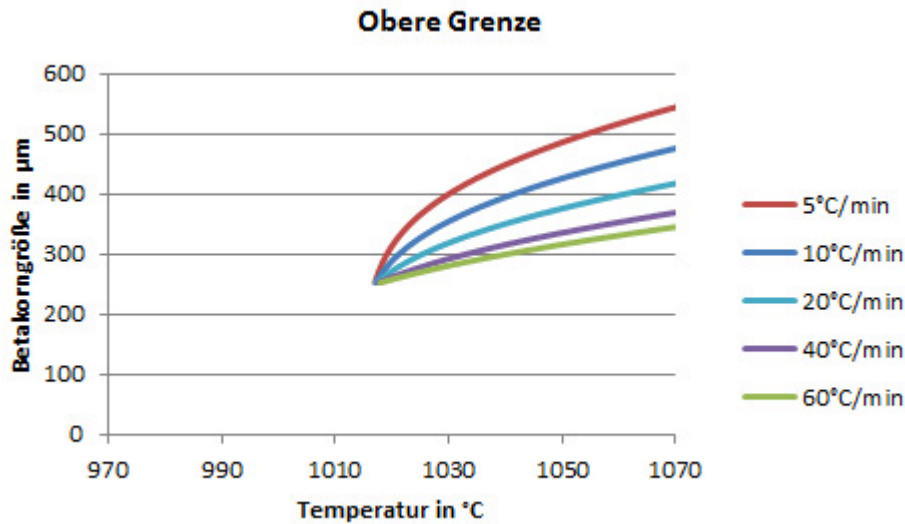


Abbildung 73: Entwicklung der Betakorngröße bei verschiedenen Aufheizraten auf Umformtemperatur im Falle der höchst möglichen Beta-Transus-Temperatur (1016,92°C)

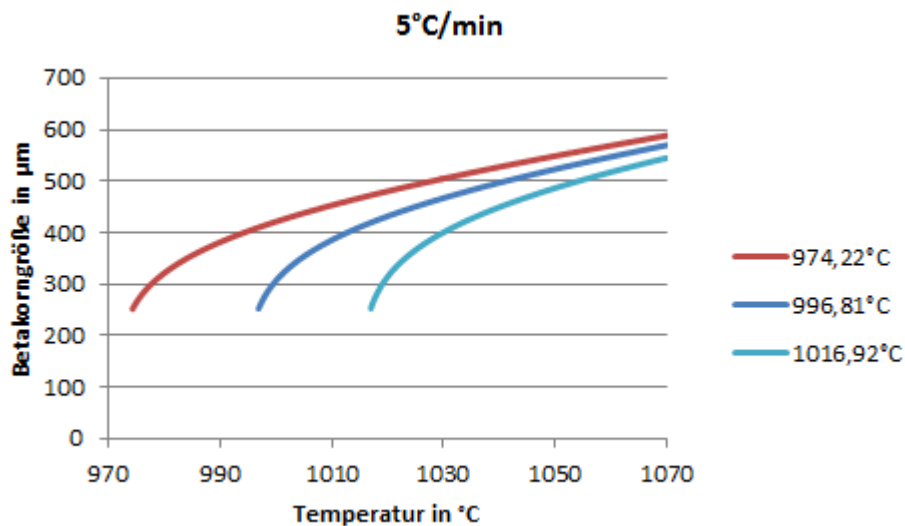


Abbildung 74: Entwicklung der Betakorngröße; direkter Vergleich der unterschiedlichen Beta-Transus-Temperaturen; Aufheizrate 5°C/min

Um die Korngröße möglichst gering zu halten und den Einfluss der Variation der chemischen Zusammensetzung zu minimieren sollten beim Aufheizen möglichst hohe Heizraten gewählt werden. Jedoch ist dies im Inneren großer Bauteile nicht immer möglich. Sind die Aufheizraten gering, wird der Einfluss verschiedener Beta-Transus-Temperaturen ebenfalls kleiner, da die Kinetik der Kornvergrößerung mit höheren Korngrößen langsamer wird. Jedoch führt dies immer zu einer unerwünschten groben Kornstruktur (Abbildung 74). In diesen Simulationen wurde auch angenommen, dass bei Überschreiten der Beta-Transus-Temperatur sofort die Beta-Kornvergrößerung einsetzt. Dies ist insofern nicht ganz korrekt, da sich besonders bei hohen Heizraten die Alphaphase erst bei höheren Temperaturen

auflöst und dadurch die Kornvergrößerung noch weiter behindert. Dadurch dürfte die wahre Korngröße beim Aufheizen etwas unter den Modellvorhersagen liegen.

11.2 Primäre Alphaphase

Da sich Veränderungen in der chemischen Zusammensetzung nicht nur auf die Beta-Transus-Temperatur sondern auch auf die Gleichgewichte der Phasenanteile im Alpha/Beta-Bereich auswirken, führt dies somit auch zu Änderungen des Gehalts der primären Alphaphase. Wie in Abschnitt 10.4.1 beschrieben variieren dann ebenfalls die Korndurchmesser in der Aufheizsimulation, da entsprechend mehr oder weniger Alphaphase in Beta umwandelt.

Tabelle 13: Auflistung der Beta-Transus-Temperaturen mit entsprechender chemischer Zusammensetzung (Referenzmaterial rot markiert)

Beta-Transus	974,22°C	976,99°C	994,03°C	996,81°C	1003,03°C	1010,69°C	1016,92°C
Al	5,5	5,5	6,45	6,45	6,75	6,45	6,75
V	4,5	4,33	4,5	4,33	4,33	3,5	3,5
C	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,03
Fe	0,18	0,18	0,18	0,18	0,18	0,18	0,18
N	0,006	0,006	0,006	0,006	0,006	0,006	0,006
O	0,18	0,18	0,18	0,18	0,18	0,18	0,18

In Tabelle 13 sind die untersuchten chemischen Zusammensetzungen mit den mittels MatCalc [78] und JMatPro [79] berechneten Beta-Transus-Temperaturen aufgelistet. Dazu sind in Abbildung 75 die Gleichgewichtswerte der Alphaphase für ein typisches Schmiedefenster im Zweiphasenbereich zwischen 900 und 950°C dargestellt.

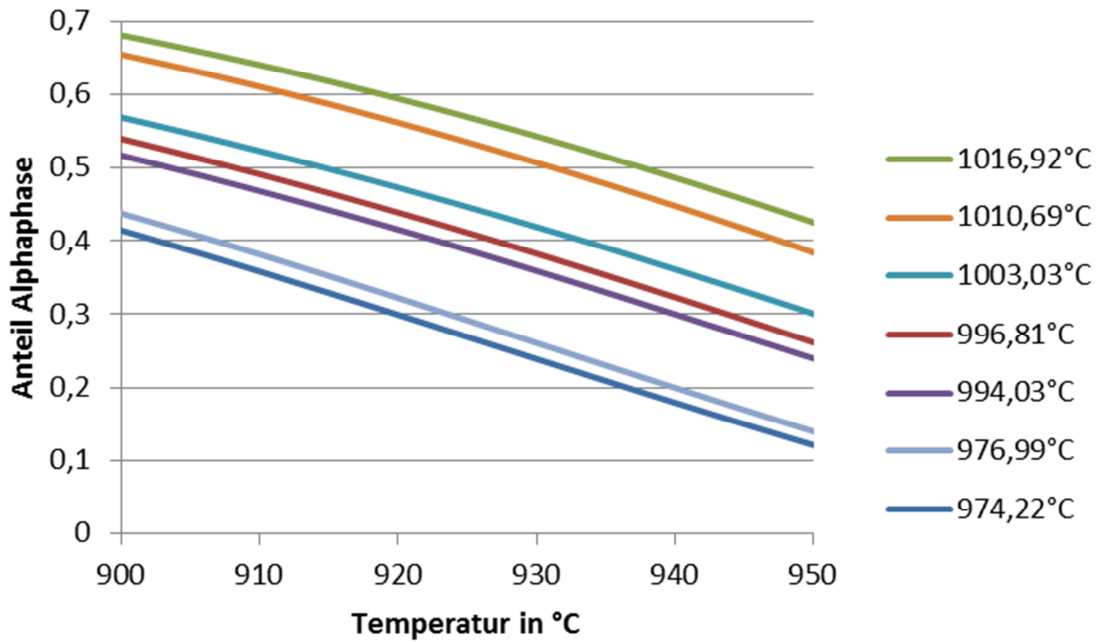


Abbildung 75: Einfluss der Beta-Transus-Temperatur auf das Phasengleichgewicht von Alpha im Schmiedefenster zwischen 900 und 950°C [78, 79]

Variiert die Beta-Transus-Temperatur nur leicht (+5°C) hält sich der Fehler meist in Grenzen und es ist somit keine Anpassung des Modells an die neue chemische Zusammensetzung notwendig. Darüber hinaus sollte jedoch beachtet werden, dass aufgrund der erlaubten Toleranzen in der chemischen Zusammensetzung viel größere Abweichungen beim Phasenanteil möglich sein können. In diesen Fällen weichen die Inputparameter der Mikrostrukturmodelle sehr stark von den realen Werten ab und müssen dementsprechend an die neuen Werte angepasst werden.

11.3 Sekundäre Alphaphase

Für die Modellierung der Alphalamellendicke werden unter anderem die Gleichgewichtswerte von Vanadium in der Alpha- und Betaphase benötigt, weil diese die Grundlage für die Berechnung der Vanadiumdiffusion bilden. Da diese Gleichgewichtswerte auch von Variationen in der chemischen Zusammensetzung beeinflusst werden, ist in diesem Abschnitt deren Änderung in Abhängigkeit von der Legierungszusammensetzung aufgezeigt. Zum Vergleich werden hierbei wieder das Referenzmaterial mit einer Beta-Transus-Temperatur von 996,81 bzw. die obere und untere Toleranzgrenze mit 974,22 und 1016,92°C herangezogen. Die chemische Zusammensetzung dieser Legierungen wurde bereits in Tabelle 12 dargestellt.

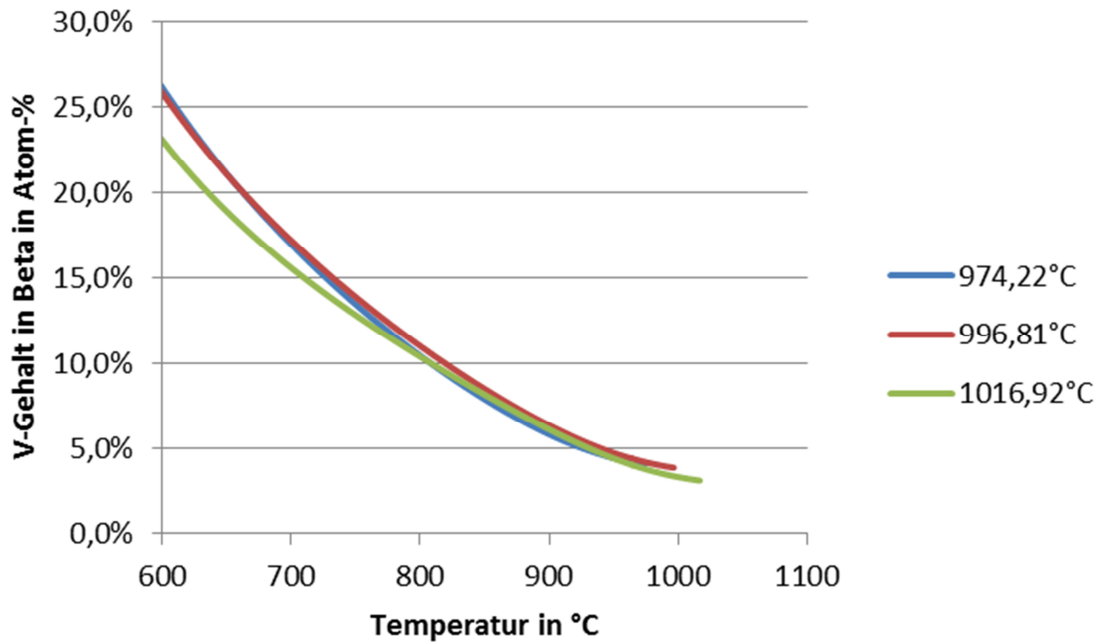


Abbildung 76: Gleichgewicht von Vanadium in der Betaphase in Abhängigkeit zur Temperatur für drei Legierungszusammensetzungen mit entsprechenden Beta-Transus-Temperaturen

Wie in Abbildung 76 und Abbildung 77 zu sehen ist, variieren die V-Gleichgewichte im für die Phasenumwandlung wichtigen Temperaturbereich zwischen ca. 800 und 1000°C nur wenig. Damit sollte dieser Einfluss auf das Mikrostrukturmodell entsprechend gering ausfallen, wenn der Abkühlvorgang im Alpha/Beta-Bereich startet.

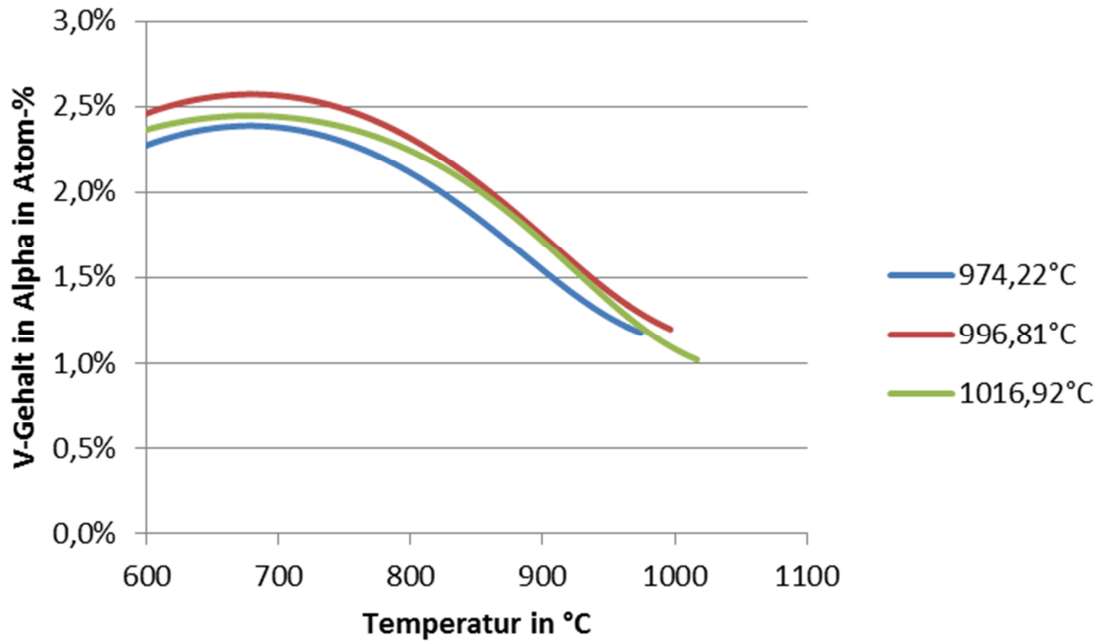


Abbildung 77: Gleichgewicht von Vanadium in der Alphaphase in Abhängigkeit zur Temperatur für drei Legierungszusammensetzungen mit entsprechenden Beta-Transus-Temperaturen

Wird jedoch aus dem einphasigen Betagebiet abgekühlt, beginnt das Lamellenwachstum bei unterschreiten der jeweiligen Beta-Transus-Temperatur entsprechend früher oder später. In Kapitel 10.3.1 wurde bereits der Einfluss verschiedener Peak-Temperaturen und Abkühlraten auf die Lamellendicke aufgezeigt. Demnach sollten auch in diesem Fall die Abweichungen meist nur im einstelligen Prozentbereich liegen.

12 Schmiedesimulationen

In diesem Kapitel werden den Ergebnissen der Mikrostrukturmodelle Versuchsauswertungen realer Schmiedeprozesse gegenübergestellt. Hierzu wurde ein kompletter Schmiedeprozess vom Aufheizen über die Verformung bis hin zur nachfolgenden Wärmebehandlung simuliert. Die Implementierung der semiempirischen Modelle in den FEM-Code erfolgte mittels Fortran-User-routinen. Die für die Simulation benötigten Material- und Prozessparameter wie z.B. Fließkurven, Reibkoeffizienten sowie Wärmeübergangszahlen wurden aus einer vorhandenen Datenbank des Firmenpartners entnommen. Für die CA-Simulation dienten die simulierten Zeit-Temperatur-Verläufe ausgewählter Bereiche als Input.

12.1 Alpha/Beta-Gebiet

Für die Simulationen im Zwei- und Einphasenbereich wurde ein sogenanntes „V-Shape“ Teil herangezogen. Hierbei wird aus einem zylindrischen Vormaterial in einem oder mehreren Umformschritten ein rechter Winkel geschmiedet (Abbildung 78). In der hier gezeigten Simulation werden neben dem Schmiedevorgang mit anschließender Wärmebehandlung auch das Aufheizen des Vormaterials sowie Manipulationsvorgänge zwischen Ofen und Schmiedepresse berücksichtigt. Der genaue Ablauf des simulierten Schmiedeprozesses ist in Tabelle 14 angeführt.

Tabelle 14: Auflistung der simulierten Prozessschritte beim Schmieden im Alpha/Beta-Bereich

1.	Aufheizen des Vormaterials auf 930°C
2.	Halten auf 930°C
3.	Erster Umformschritt bei 930°C
4.	Rückwärmen auf 930°C
5.	Zweiter und letzter Umformschritt bei 930°C
6.	Luftabkühlung auf Raumtemperatur
7.	Aufheizen auf 970°C
8.	Wärmebehandlung bei 970°C
9.	Luftabkühlung auf Raumtemperatur

Im Zweiphasengebiet erfolgt der Umformprozess zweistufig, wobei zwischen den Umformschritten das Schmiedeteil auf 930°C rückgewärmt wird. Das Abkühlen auf Raumtemperatur nach dem zweiten und letzten Umformschritt sowie nach der Wärmebehandlung erfolgt beide Male an Luft.

Abbildung 78 und Abbildung 79 zeigen den geometrischen Vergleich der Simulation mit dem Realteil. Da die Simulation in 2D durchgeführt wurde, entspricht diese dem Querschnitt des Bauteils in der Mitte der Längsachse. In Abbildung 80 ist die Verteilung des finalen Umformgrades über den Bauteilquerschnitt dargestellt. Für die nachfolgende CA-Simulation der Korngröße wurden zwei Punkte mit jeweils niedrigem (Punkt 1) und hohem (Punkt 2) Umformgrad ausgewählt.

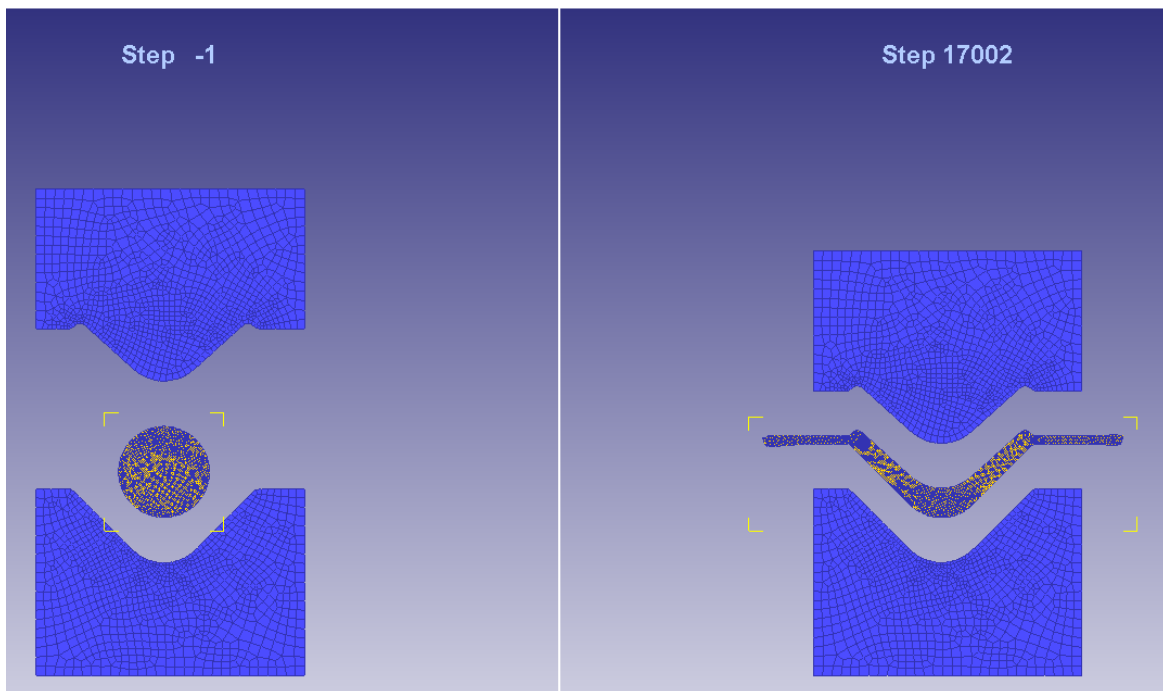


Abbildung 78: DEFORM™ Schmiedesimulation eines V-Shape-Teils; Gesenke mit Vormaterial links; Gesenke mit Fertigteil rechts; Schmieden im Zweiphasengebiet



Abbildung 79: Geschmiedetes Fertigteil direkt nach der Umformung

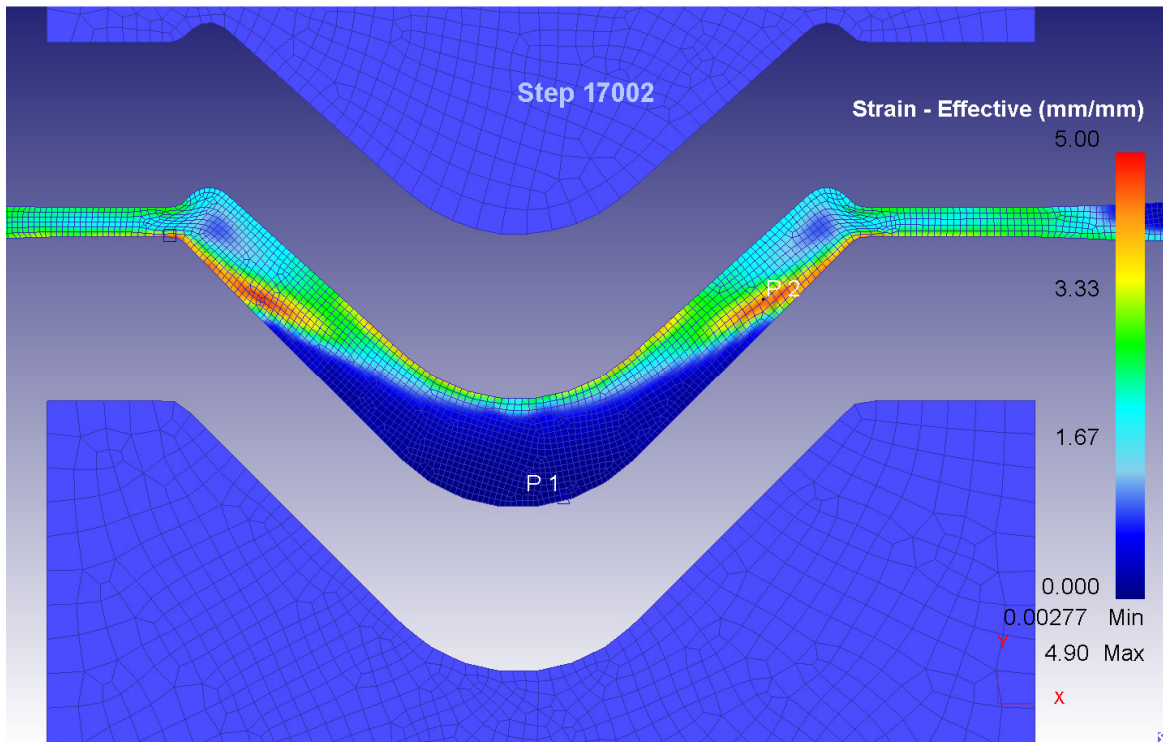


Abbildung 80: Umformgradverteilung im fertigen Schmiedeteil (Punkt 1: 0,016; Punkt 2: 4,440)

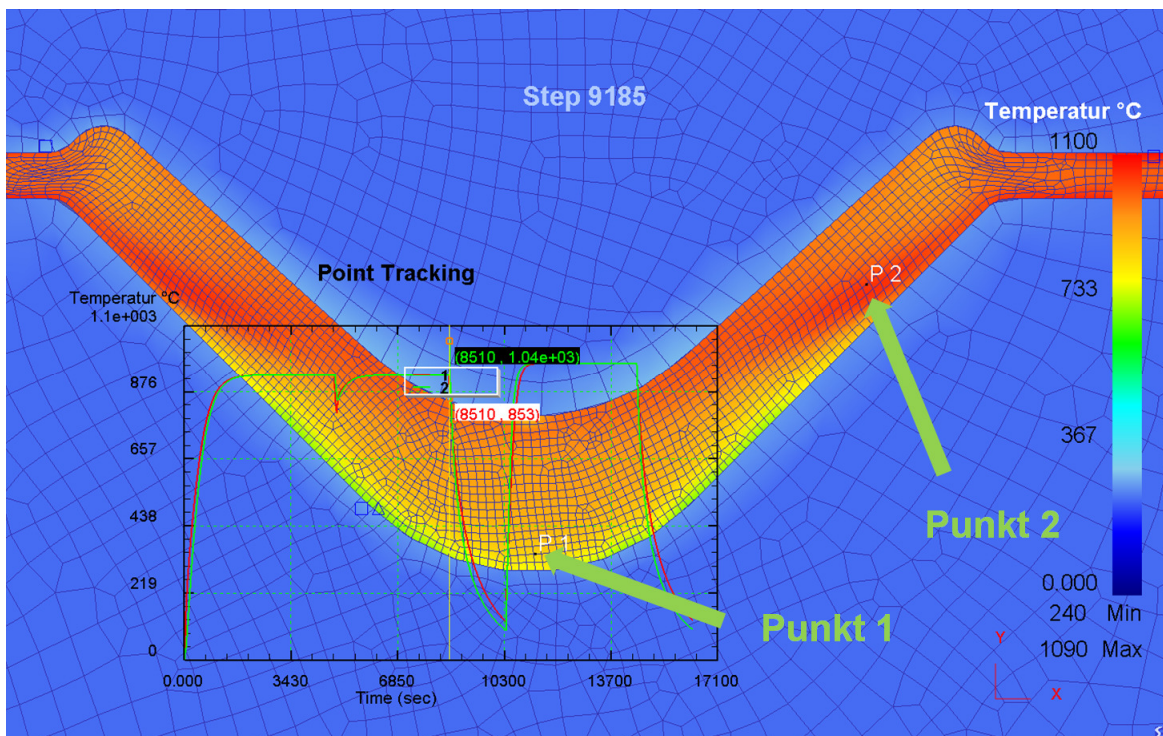


Abbildung 81: Point-Tracking: Aufzeichnung der Zeit-Temperaturkurven in den Punkten 1 und 2 über den gesamten Schmiedeprozess

Die Zeit-Temperatur-Kurve wurde mittels Point-Tracking für jeden der zwei Punkte aus den FEM-Daten extrahiert und in das CA-Modell eingegeben (Abbildung 81). Abbildung 82 zeigt hierbei die Unterschiede in den Temperaturverläufen auf. Diese fallen entsprechend gering aus, wobei es in Punkt 2 aufgrund der hohen Umformung im zweiten Umformschritt zu einer umformbedingten Temperaturerhöhung kommt. Diese reicht immerhin kurz über die Beta-Transus-Temperatur hinaus. Darüber hinaus sind die Abkühlgeschwindigkeiten nach der Umformung bzw. Wärmebehandlung aufgrund der Position in Punkt 1 etwas langsamer als in Punkt 2.

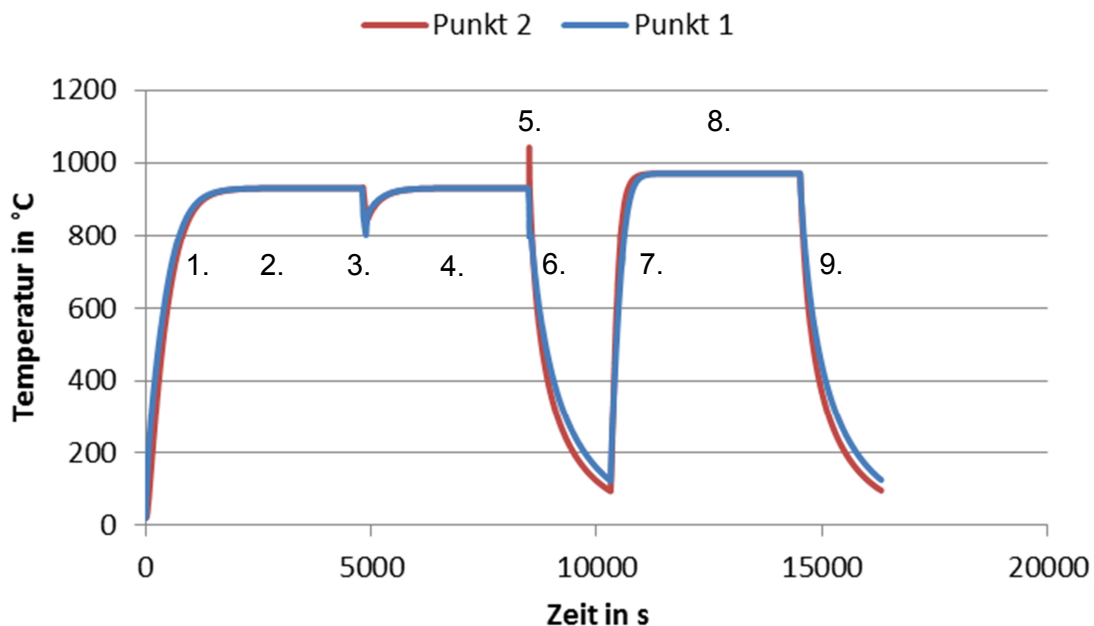


Abbildung 82: Aus DEFORM exportierte Temperatur-Zeitkurven für die Punkte 1 und 2 dienen als Input für die CA-Simulation; Prozessschritte 1 bis 9

Abbildung 83 zeigt den simulierten Anteil an Alpha primär im Vergleich zum jeweiligen Phasengleichgewicht. Da das CA-Modell die Phasenanteile während des raschen Aufheizens nicht schnell genug ausgleichen kann, wurde das Aufheizen separat simuliert und daraus die Mikrostruktur mit entsprechenden Phasenanteilen und Korngrößen als Startgefüge bei 930°C herangezogen. Ein schneller Abfall in der Temperatur führt hierbei wie erwartet zu keiner Änderung am Anteil der primären Alphaphase, da sich die neu Entstehende in Form von Lamellen ausbildet und beim Wiederaufheizen als erste wieder auflöst. Erst bei der Wärmebehandlung, wo bis auf 970°C erwärmt wird, beginnt sich zusätzlich primäres Alpha aufzulösen.

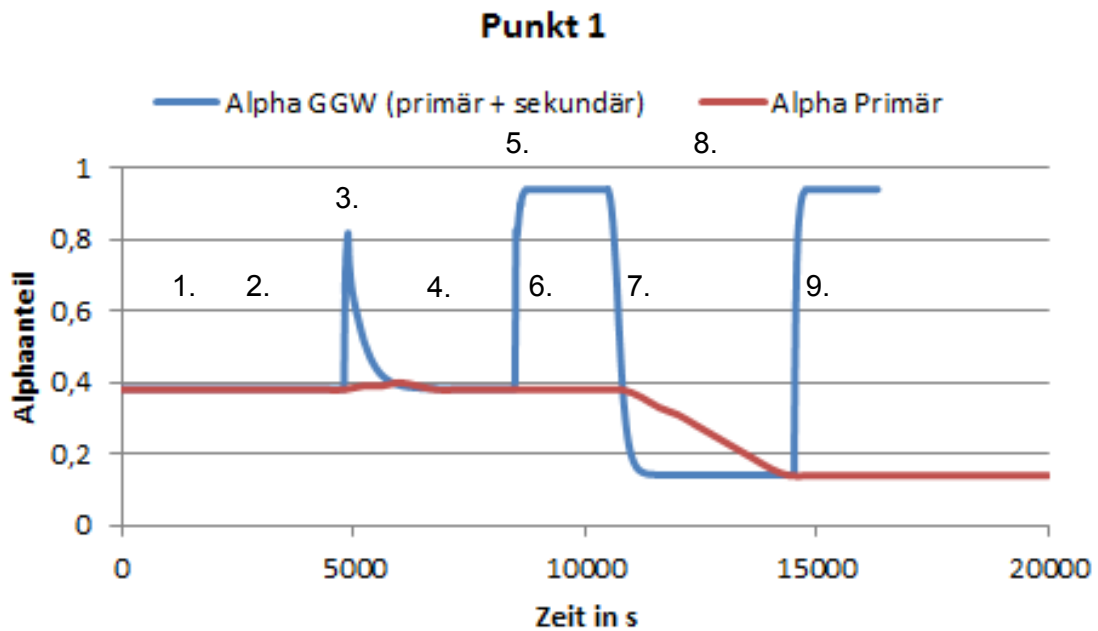


Abbildung 83: Vergleich des simulierten primären Alphaanteils mittels CA (rot) in Punkt 1 mit dem jeweiligen Phasengleichgewichtswert (blau)

Für die Entwicklung der Korngröße der beiden Phasen Alpha und Beta konnte laut Abbildung 84 bis zu Beginn der Wärmebehandlung (7.) eine langsame Vergrößerung ausgemacht werden. Erst beim Aufheizen auf 970°C sinkt der Anteil an primärer Alphaphase und damit auch ihre Korngröße während die Betakörner entsprechend wachsen. Während und nach dem Abkühlvorgang (9) ist aufgrund der niedrigen Temperatur keine Veränderung in den Korngrößen mehr festzustellen.

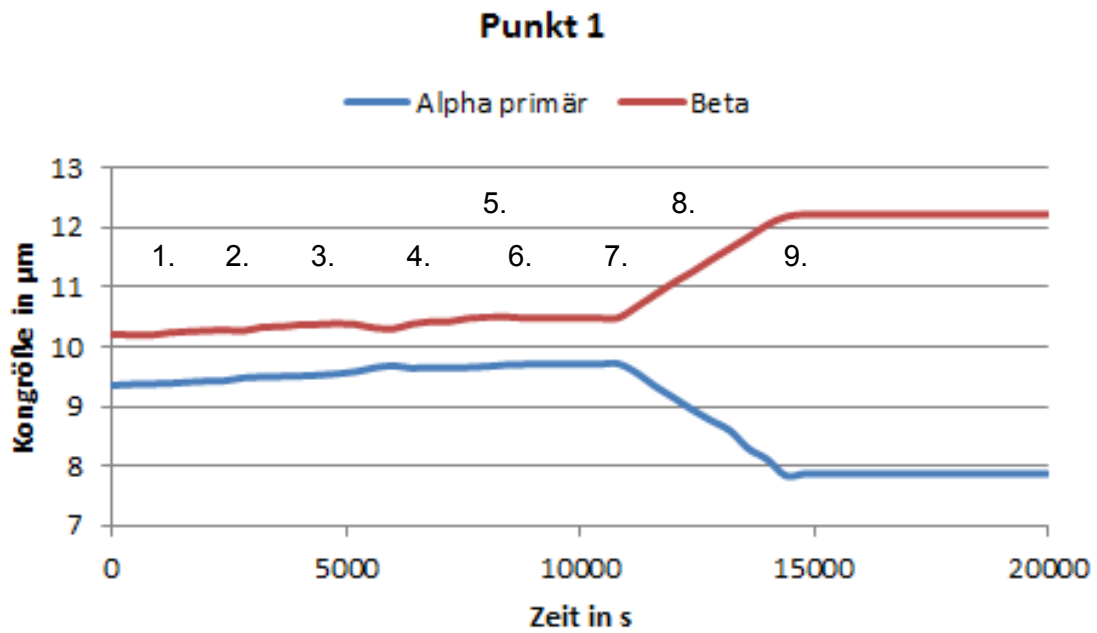


Abbildung 84: Entwicklung der Alpha- und Betakorngröße während des Schmiedeprozesses in Punkt 1; CA-Simulation

Die Mikrostrukturentwicklung in Punkt 2 in Bezug auf Phasenanteile und Korngrößen verläuft ähnlich wie in Punkt 1 (Abbildung 85 und Abbildung 86). Die kurzzeitige Erhöhung der Temperatur über Beta-Transus zeigt in der CA-Simulation keinen Einfluss auf das Gefüge, da die Zeit für Auflösungs Vorgänge nicht ausreicht.

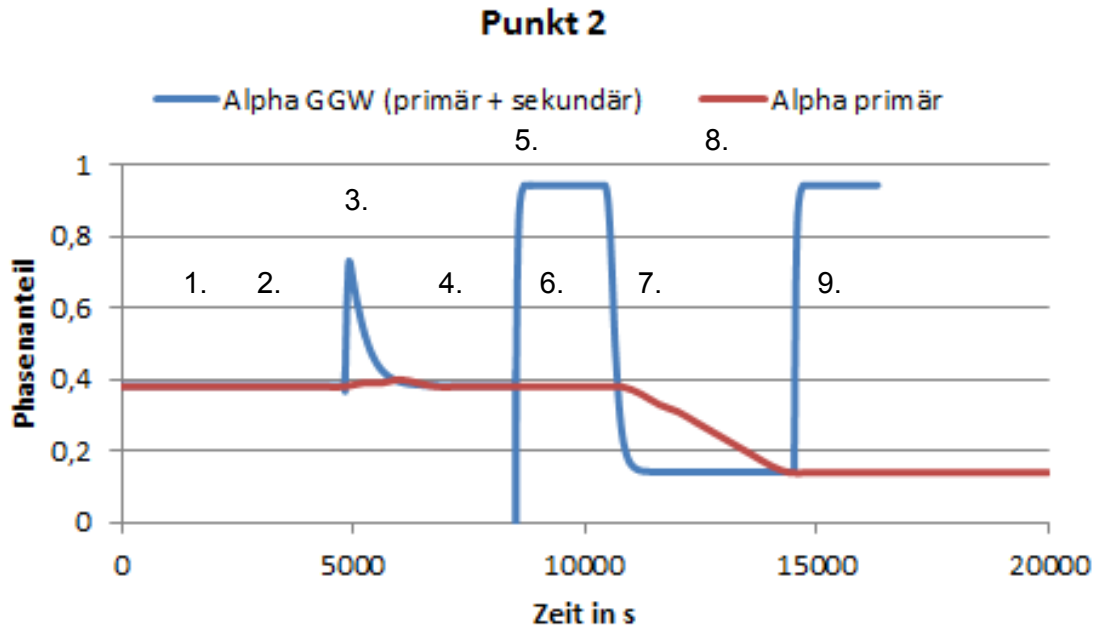


Abbildung 85: Vergleich des simulierten primären Alphaanteils mittels CA in Punkt 2 mit dem jeweiligen Phasengleichgewichtswert

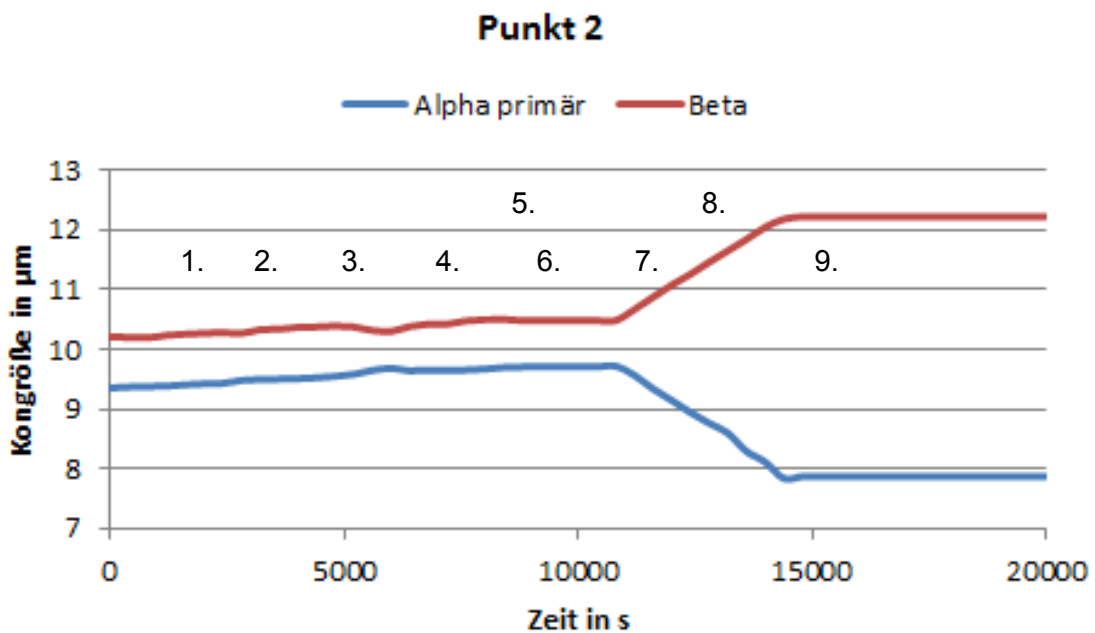


Abbildung 86: Entwicklung der Alpha- und Betakorngröße während des Schmiedeprozesses in Punkt 2, CA-Simulation

Unterschiede ergeben sich jedoch in der modellierten Alphalamellendicke. Aufgrund der schnelleren Abkühlgeschwindigkeit in Punkt 2 nach der Wärmebehandlung bilden sich dort dünnere Lamellen aus (Abbildung 87 und Abbildung 88).

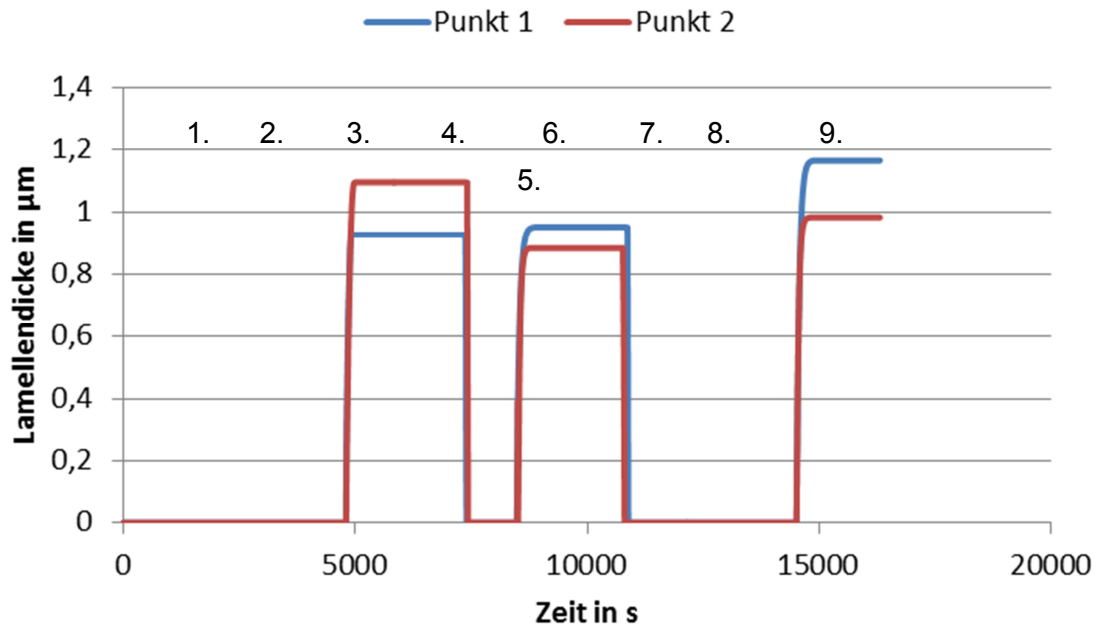


Abbildung 87: Simulierte Entwicklung der Alphalamellendicke in den Punkten 1 und 2 während des Umformprozesses

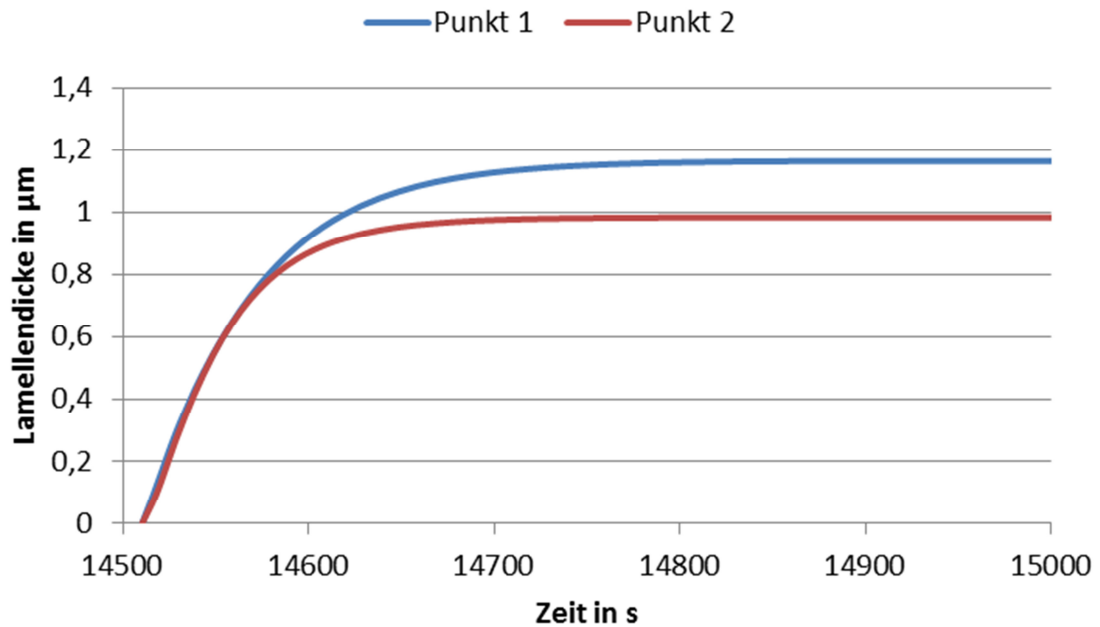


Abbildung 88: Entwicklung der Alphalamellendicke beim Abkühlvorgang nach der Wärmebehandlung (9.)

Ein Vergleich der Simulation mit den Versuchsdaten in Tabelle 15 zeigt für Punkt 2 eine gute Übereinstimmung, wobei in den Versuchen eine etwas geringere Lamellendicke gemessen wurde. An dieser Stelle sei jedoch angemerkt, dass die Abkühlgeschwindigkeit die kritische Marke von 40°C/min übersteigt. Aufgrund der hohen Kühlrate läuft die Phasenumwandlung nicht mehr vollständig diffusionsgesteuert ab, sondern es kommt zu einer teilweise diffusionslosen martensitischen Umwandlung. Aus diesem Grund bewegt sich das Modell hierbei an der Grenze zum Gültigkeitsbereich. Jedoch sind im Inneren großer Bauteile die Kühlraten meist viel geringer. Somit lässt sich dieses Modell zur Vorhersage der Alphalamellendicke in diesen Bereichen besser anwenden.

Tabelle 15: Vergleich der modellierten Mikrostrukturparameter mit realen Schmiedeversuchen in Punkt 2

	Alpha primär	Alphalamellendicke
Simulation (FEM, CA)	7,87 µm	0,98 µm
Schmiedeversuche	8,68 µm	0,79 µm

Ebenfalls ausgemessen wurden im Realversuch die Koloniegrößen (Länge der Alphalamellenpakete) der entstehenden Alphalamellen in den Betakörnern (Abbildung 89), welche ebenfalls einen Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften haben. Diese wurden dann der simulierten Betakorngröße gegenübergestellt.

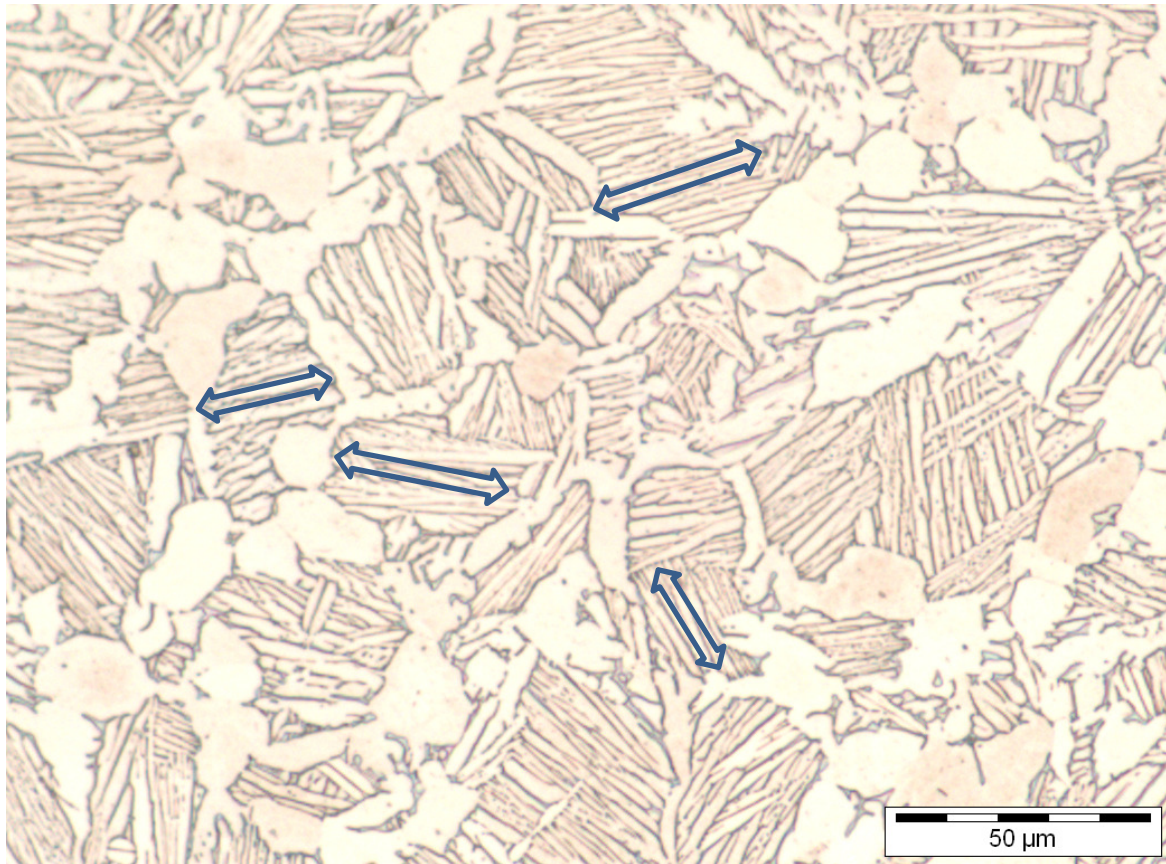


Abbildung 89: Auswertung der Koloniegröße (Länge der Lamellenpakete) innerhalb ehemaliger Betakörner; Mikrostrukturbild aufgenommen in einer anderen Versuchsreihe (Ofenabkühlung)

Wird die simulierte Betakorngröße von $12,21 \mu\text{m}$ der Koloniegröße von $17,45 \mu\text{m}$ gegenübergestellt, ergibt sich eine deutliche Abweichung. Der Grund hierfür liegt darin, dass sich Lamellenpakete in kleinen Betakörnern nicht oder nur schlecht auswerten lassen. Deswegen wurden bei der Gefügeauswertung nur die gut sichtbaren Lamellenkolonien ausgewertet, welche sich in den größeren ehemaligen Betakörnern befinden. Da die simulierte Betakorngröße von $12,21 \mu\text{m}$ einen Mittelwert darstellt, sind aufgrund der Korngrößenverteilung durchaus Betakörner in der Größenordnung von $20 \mu\text{m}$ Durchmesser vorhanden (Abbildung 90). In diesen ist dann die Entstehung entsprechend größerer Lamellenkolonien möglich. An dieser Stelle sei angemerkt, dass die Lamellenpakete nicht über die Betakorn Grenzen hinauswachsen. Deshalb ist die Koloniegröße stets kleiner als die vorhandene Betakorngröße.

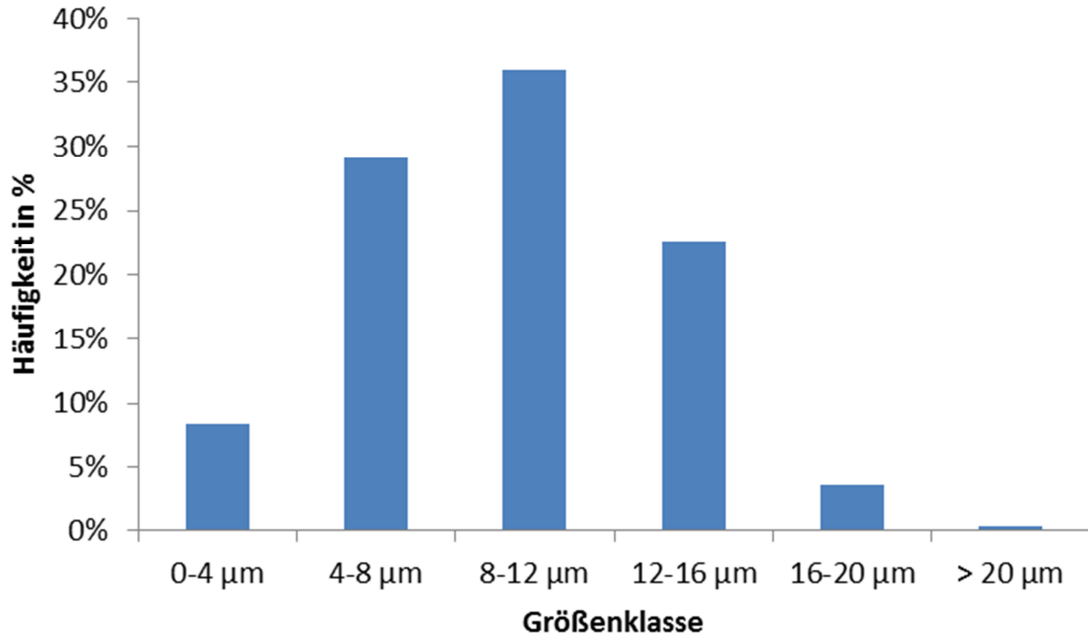


Abbildung 90: Finale Korngrößenverteilung der Betaphase nach der Wärmebehandlung

12.2 Beta-Gebiet

Für die Simulation im einphasigen Betagebiet über der Beta-Transus-Temperatur wurde dasselbe Schmiedeteil wie schon im Zweiphasengebiet simuliert. Aufgrund der höheren Temperatur ist es jedoch möglich das Teil in einem Umformschritt zu fertigen. Die entsprechenden Prozessschritte der Simulation vom Aufheizen bis zum Abkühlen sind in Tabelle 16 aufgelistet.

Tabelle 16: Auflistung der Prozessschritte beim Schmieden im Beta-Bereich

1.	Aufheizen des Vormaterials auf 1030°C
2.	Halten auf 1030°C
3.	Schmieden bei 1030°C
4.	Luftabkühlung auf Raumtemperatur

In Abbildung 91 ist die Temperaturverteilung des Schmiedeteils und der Werkzeuge vor und kurz nach der Umformung dargestellt. Weiters sind die für das Point-Tracking gewählten Positionen in Abhängigkeit der Umformgradverteilung in Abbildung 92 gezeigt. Die gewählten Punkte liegen hierbei in Bereichen hoher bzw. niedriger Umformgrade.

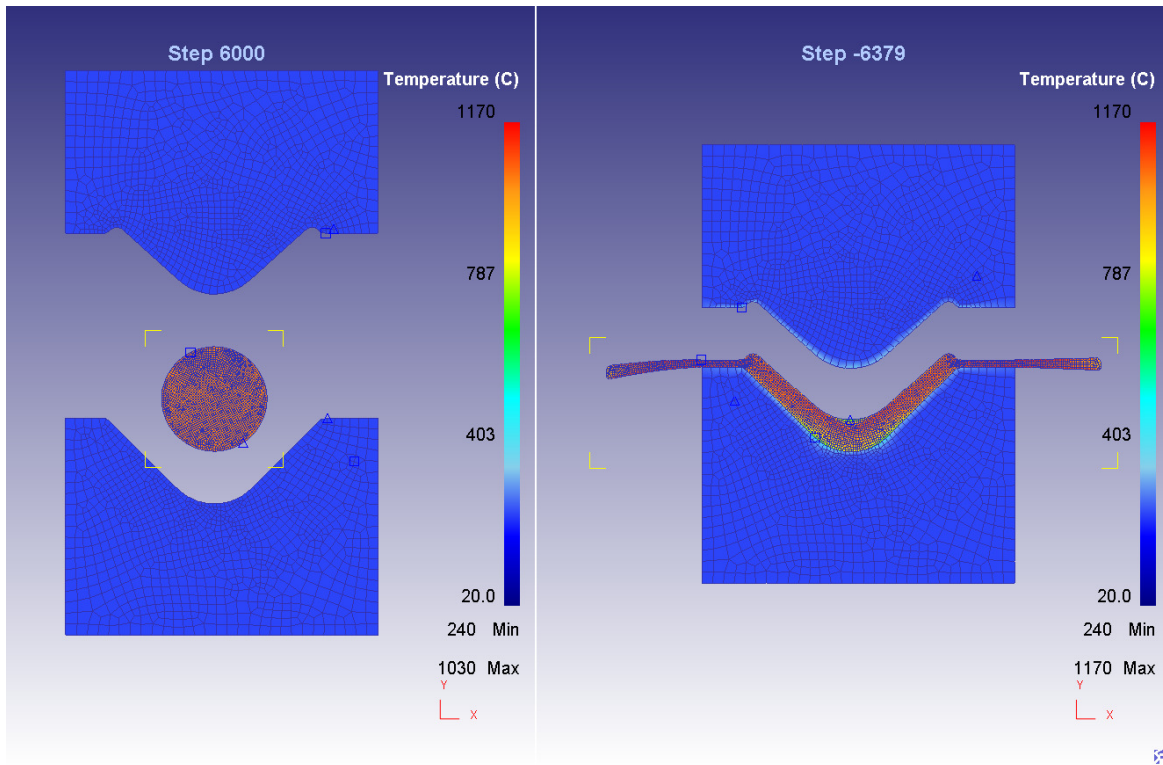


Abbildung 91: DEFORM™ Schmiedesimulation eines V-Shape-Teils; Gesenke mit Vormaterial links; Gesenke mit Fertigteil rechts; Schmieden im Einphasengebiet

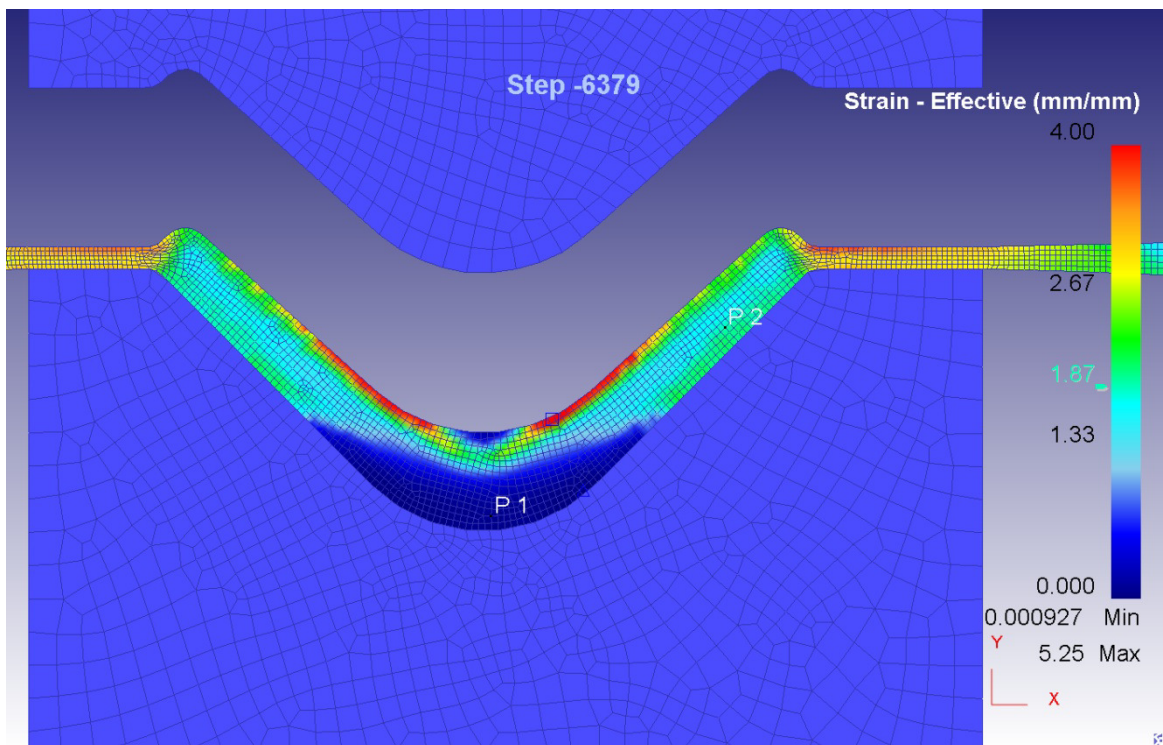


Abbildung 92: Umformgradverteilung im fertigen Schmiedeteil (Punkt 1: 0,068; Punkt 2: 1,880)

Die entsprechenden Zeit-Temperaturverläufe der Punkte 1 und 2 sind in Abbildung 93 veranschaulicht. Aufgrund der Umformung ist hierbei in Punkt 2 ein kleiner Temperaturanstieg während des Schmiedevorganges zu beobachten.

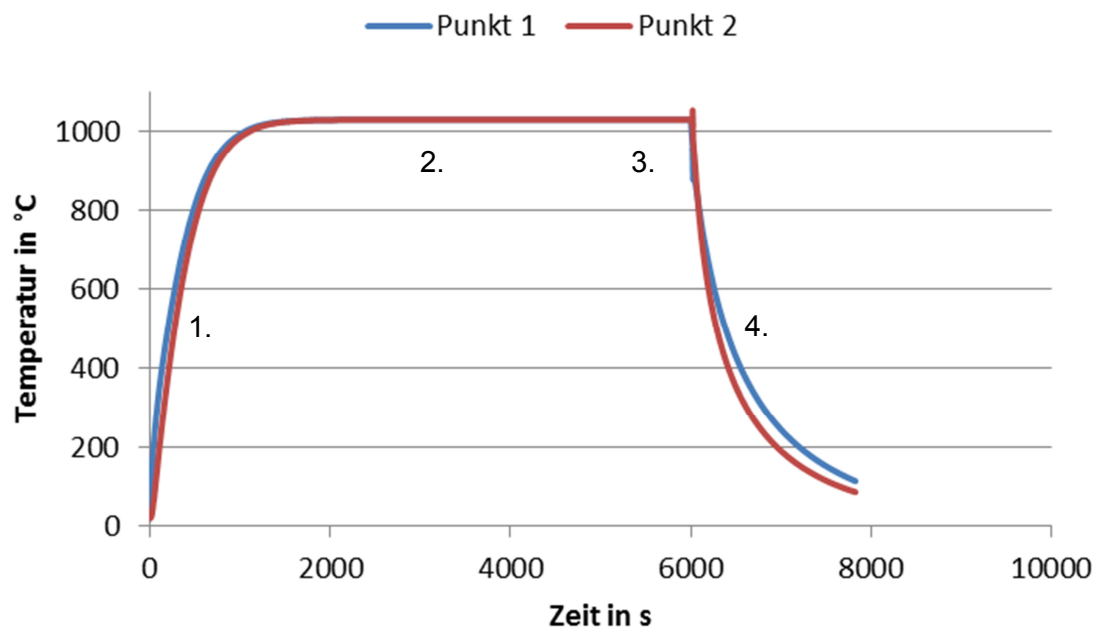


Abbildung 93: Aus DEFORM exportierte Temperatur-Zeitkurven für die Punkte 1 und 2; Prozessschritte 1 bis 4

Die simulierte Korngrößenentwicklung (Abbildung 94) ist in beiden Punkten aufgrund der sehr ähnlichen Temperatur-Zeit-Verläufe nahezu gleich. Das Modell rechnet mit einer Anfangskorngröße von 250 μm und startet erst bei Überschreiten der Beta-Transus-Temperatur mit der Kornvergrößerung. Diese stoppt nach dem Schmiedevorgang während der Abkühlung an Luft.

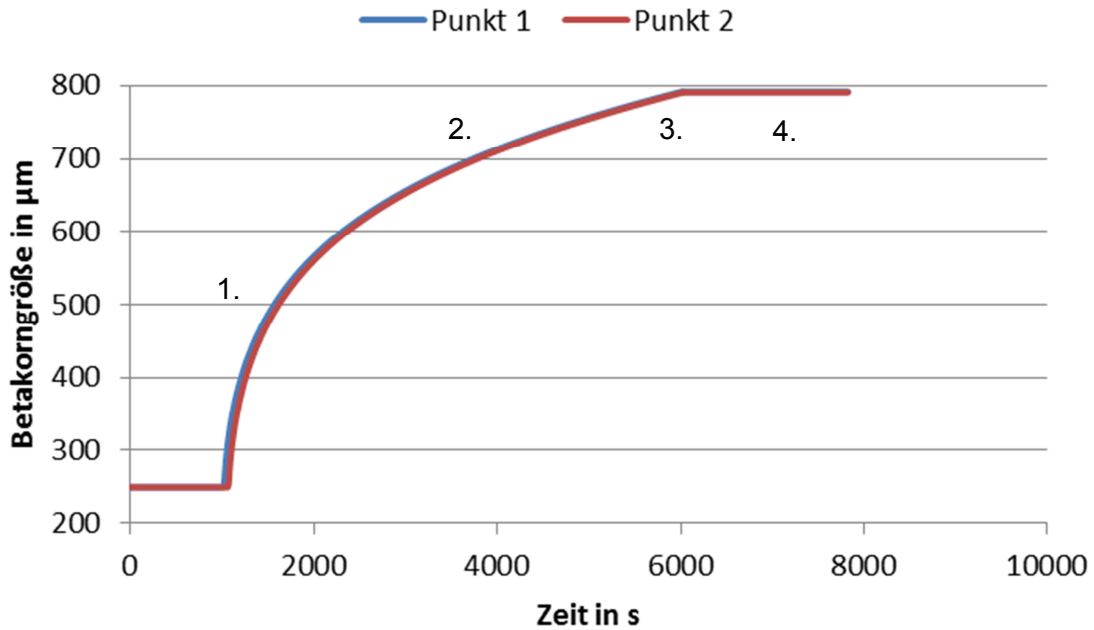


Abbildung 94: Entwicklung der Betakorngröße in den Punkten 1 und 2 während des Prozessverlaufs

Für die ablaufenden Rekristallisationsvorgänge (Abbildung 95) bleibt hingegen zwischen Ende der Umformung und Unterschreiten der Beta-Transus-Temperatur nur wenig Zeit. Während in Punkt 1 aufgrund ungenügender Umformung keine Rekristallisation stattfindet, erreicht diese in Punkt 2 nur Anteile von ca. 3 Prozent. Für höhere Anteile rekristallisierter Körner wäre nach der Umformung eine längere Haltezeit über der Beta-Transus-Temperatur notwendig. Dies kann im Inneren großer Schmiedeteile durchaus der Fall sein.

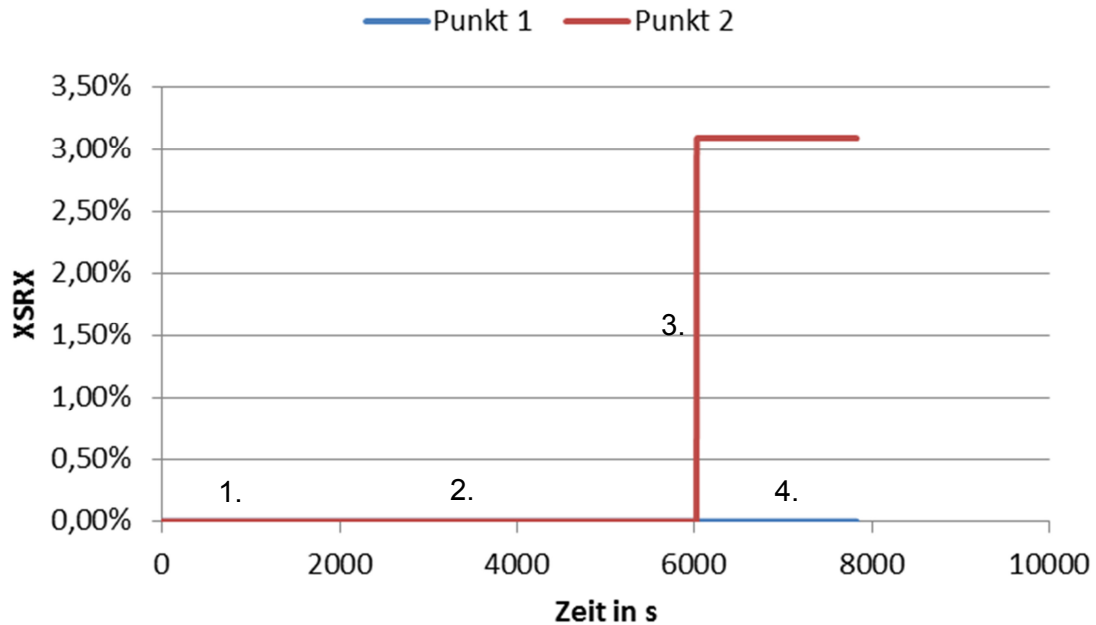


Abbildung 95: Entwicklung des statisch rekristallisierten Anteils in den Punkten 1 und 2 während des Prozessverlaufs

Die Entwicklung der finalen Alphalamellendicken während des Abkühlvorganges nach der Umformung ist in Abbildung 96 gezeigt. Je nach Abkühlrate ergeben sich unterschiedliche Werte im Bereich um 1 μm in den Punkten 1 und 2. Wie im vorigen Abschnitt bereits erwähnt, bewegt sich auch hier das Modell bereits an der Grenze des Gültigkeitsbereichs. Laut der Temperaturkurve beträgt die Abkühlzeit zwischen 1030°C und 600°C nur knapp 5 Minuten. Das bedeutet, dass in jenem Temperaturbereich wo die eigentliche Phasenumwandlung stattfindet, Kühlraten von ca. 100°K/min vorherrschen. Die Phasenumwandlung läuft dann nicht mehr diffusionsgesteuert ab, sondern es kommt zu einer diffusionslosen martensitischen Umwandlung, was zu einer Bildung von Martensitnadeln im Gefüge führt. Wie bereits erwähnt treten im Inneren von großen und massiven Schmiedeteilen langsamere Kühlraten auf, sodass das Mikrostrukturmodell dann akkurate Ergebnisse liefert.

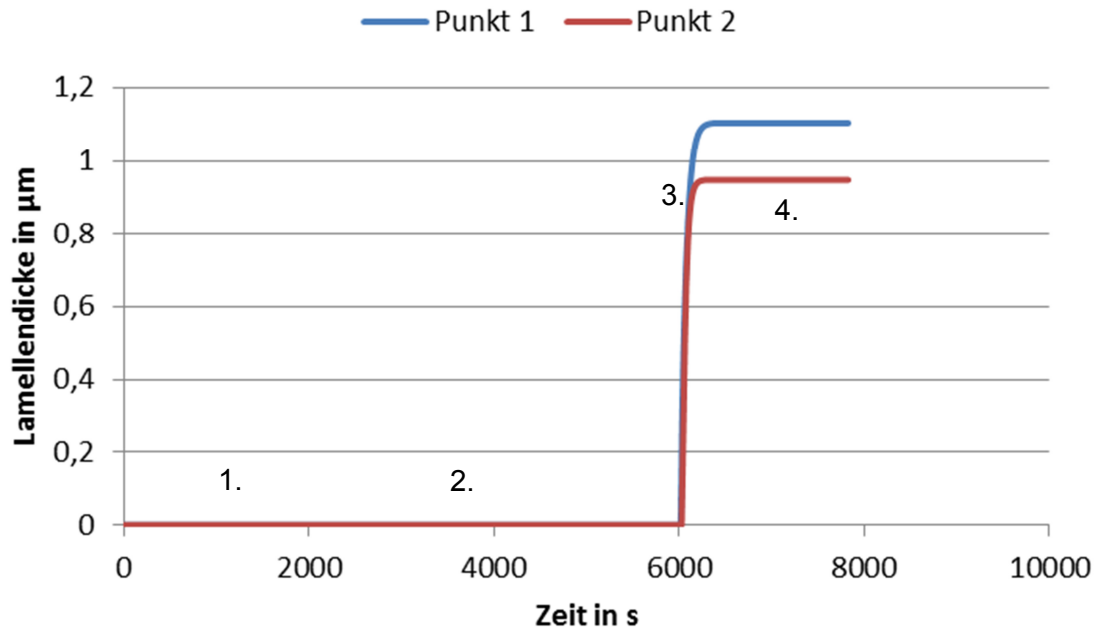


Abbildung 96: Entwicklung der Alpha-Lamellendicke in den Punkten 1 und 2 während des Prozessverlaufs

12.3 Einschränkungen

Die gezeigten Simulationen in den letzten zwei Kapiteln unterliegen einigen Annahmen und Einschränkungen. In der CA-Simulation im Zweiphasenbereich kann die Verformung des Gefüges nicht simuliert werden. Für Elemente mit wenig Umformgrad stellt dies für die Modellierung der primären Alphaphase kein Problem dar, da hierbei die Verformung über die Betaphase erfolgt. Mit steigenden Umformgraden wird jedoch auch die Alphaphase mehr und mehr verformt was zu einer Streckung der Alphakörner führt. Um dies in der Simulation zu berücksichtigen kann die verformte Mikrostruktur nach dem Schmiedevorgang erneut eingelesen werden. Mit dieser neuen Startmikrostruktur können dann anschließende Wärmebehandlungsschritte simuliert werden.

Es ist aber zu beachten, dass der Einfluss der Versetzungsdichte auf die Mobilität von Korn- und Phasengrenzen im Modell nicht implementiert ist, was bei der Simulation von umgeformten Mikrostrukturen zu entsprechenden Abweichungen in der Vergrößerungsgeschwindigkeit führen kann.

Ein weiteres Problem in der Simulation ist, dass die in Ti-6Al-4V auftretenden lamellaren Strukturen nicht modelliert werden können. Die Prozessführung muss jedoch so gewählt werden, dass während des isothermen Haltens auf Wärmebehandlungstemperatur keine lamellaren Strukturen vorhanden sind. Sonst würden vereinzelte grobe Lamellen entstehen, welche die Materialeigenschaften negativ beeinflussen. Aus diesem Grund ist während des Produktionsprozesses meist nur eine globulare Mikrostruktur aus Alpha- und Betakörnern vorhanden. Die lamellaren Alphastrukturen, welche sich kurz zwischen den Schmiede- und Wärmebehandlungszyklen bilden, lösen sich beim Wiederaufheizen vollständig auf und

beeinflussen somit nicht die finale Mikrostruktur. Die Mikrostruktur wird dann in Form von globularen Alpha- und Betakörnern dargestellt. Es ist dabei jedoch zu beachten, dass sich beim letzten Abkühlvorgang innerhalb der Betakörner die vorhin erwähnten Alphalamellenkolonien bilden, welche im CA-Modell nicht modelliert werden.

Der Phasenausgleichsalgorithmus ist ebenfalls Einschränkungen unterworfen. Bei der Simulation realer Produktionsprozesse ist immer darauf zu achten, dass dem Algorithmus genügend Zeit zum Ausgleich der Phasenanteile auf das jeweilige Gleichgewicht zur Verfügung steht. Aus diesem Grund müssen Aufheizvorgänge von Raumtemperatur auf Schmiedetemperatur meist separat modelliert werden, da hierbei in relativ kurzer Zeit ein großer Anteil an Alpha in Beta umwandelt. Wie schon in Kapitel 8.5 erwähnt wurde dieser Algorithmus nicht für die Modellierung der Phasenumwandlungskinetik konzipiert.

Die Simulation von Abkühlvorgängen in Ti-6Al-4V mittels CA hat im Gegensatz zum Aufheizen eine weitere Einschränkung. Beim Aufheizen ist das Resultat unabhängig von der Heizrate immer eine globulare Mikrostruktur. Dies ist beim Abkühlen nur bei sehr langsamen Kühlraten der Fall, da sich dabei die neu entstehende Alphaphase an den bereits vorhandenen primären Alphakörnern anlagert. Wird schneller abgekühlt bilden sich Alphalamellen, was dazu führt, dass das Wachstum der primären Alphaphase stoppt. Das CA-Modell würde aber dennoch ein Wachstum der primären Alphakörner beschreiben bis das Phasengleichgewicht erreicht ist. Dies wäre dann ein Problem wenn nach der Umformung bei einer niedrigeren Temperatur geglüht wird. Dieser Fall ist jedoch in der Praxis unbedingt zu vermeiden. Die kurzen Zeiten, wo zwischen den Schmiede- und Wärmebehandlungszyklen niedrige Temperaturen vorherrschen, können ebenfalls unberücksichtigt bleiben, da die diffusionsgesteuerten Prozesse in diesem Fall viel zu träge sind, um die Phasenanteile maßgebend zu verändern. Ein Grund hierfür sind auch die im CA-Modell temperaturabhängigen Übergangswahrscheinlichkeiten, welche mit fallenden Temperaturen ebenfalls niedrigere Werte annehmen. Die Geschwindigkeit des Phasenausgleichs ist somit an die Übergangswahrscheinlichkeiten gekoppelt.

Bei der Simulation im einphasigen Betagebiet mussten ebenfalls wichtige Annahmen getroffen werden. Im Modell startet die Betakornvergrößerung unmittelbar nach dem Überschreiten der Beta-Transus-Temperatur. Dies ist insofern nicht ganz korrekt, da sich vorher die gesamte Alphaphase auflösen muss, was aufgrund der diffusionsgesteuerten Prozesse erst kurze Zeit später passiert. Demnach beginnt im Modell die Mikrostruktur geringfügig früher zu vergrößern als im Realprozess. Im Gegensatz dazu werden die Vergrößerungs- und Rekristallisationsmodelle beim Unterschreiten der Beta-Transus-Temperatur infolge des Abkühlvorganges gestoppt, was ebenfalls nicht ganz korrekt ist, da hierzu erst das Starten der Beta => Alpha Phasenumwandlung zwingend erforderlich ist.

Wird nach der Umformung länger auf Temperatur gehalten, startet nach dem Rekristallisationsvorgang erneut die Kornvergrößerung. Da die Rekristallisation jedoch laut Modell nie 100 Prozent erreicht wurde als Abbruchkriterium die Rekristallisationskinetik herangezogen. D.h., unterschreitet diese den aus den Versuchsergebnissen abgeleiteten Wert von $1,75 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ (neu gebildeter Rekristallisationsanteil pro Sekunde), stoppt der Algorithmus die Rekristallisation und fährt mit der Kornvergrößerung fort. Dabei wird jedoch vorher ein neuer gemittelter Startkorndurchmesser aus dem Anteil und Durchmesser der rekristallisierten und nicht rekristallisierten Körner berechnet.

13 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde die Mikrostrukturmodellierung der Titanlegierung Ti-6Al-4V während des thermomechanischen Herstellungsprozesses behandelt. Die Modellierung der Mikrostrukturentwicklung erfolgte hierbei mittels semi-empirischer Modelle bzw. zellulärer Automaten (CA). Der Schwerpunkt lag in der Beschreibung der Gefügeentwicklung im Ein- und Zweiphasengebiet von Ti-6Al-4V, da sich je nach Temperatur- und Prozessführung die Anteile und Ausprägung der einzelnen Phasen gezielt verändern lassen. Ein weiteres Hauptziel war die Kopplung der Mikrostrukturmodelle mit der Finite Elemente Software DEFORMTM, um eine möglichst durchgehende Simulation der Gefügeentwicklung über den gesamten Gesenkschmiedeprozess zu ermöglichen.

Die semiempirische Modellierung von Rekristallisation, Kornvergrößerung und Phasenumwandlung baut auf bekannten Modellansätzen aus der Literatur auf. Ein Vorteil dieser Ansätze liegt in der einfachen Implementierung in die FE-Software. Außerdem werden durch diese die benötigten Rechenzeiten nur unwesentlich verlängert. Neben den bereits bekannten Modellen über Phasenumwandlung, Rekristallisation und Kornvergrößerung wurde ein neues Modell entwickelt, welches die Entwicklung der Alphalamellendicke während des Abkühlvorganges beschreibt. Als kontrollierender Mechanismus wird hierbei die temperaturabhängige Diffusion des Vanadiums an der Phasengrenze herangezogen.

Eine wesentliche Neuerung ist die Weiterentwicklung eines bereits bestehenden CA-Modells zur Simulation der zweiphasigen Kornvergrößerung in Ti-6Al-4V. Durch die Implementierung eines Phasenausgleichsalgorithmus ist es nun auch möglich, nichtisotherme Glühbehandlungen im Zweiphasenbereich zu simulieren. Bisher war dies auch mit analytischen Modellen nicht möglich, da damit der Einfluss variierender Phasenanteile auf die Korngröße nicht beschrieben werden konnte. Der große Vorteil des CA-Modells besteht darin, dass sich auch reale Mikrostrukturen einlesen lassen und damit als Startmikrostruktur für die Simulation herangezogen werden können. Es ist auch möglich, die für das Modell benötigten Inputparameter, wie Phasengleichgewichte und Vanadiumkonzentrationen in Alpha und Beta, an die chemische Zusammensetzung der entsprechenden Charge anzupassen.

Nach der Validierung anhand experimenteller Ergebnisse konnte gezeigt werden, dass sich die implementierten semiempirischen Modellansätze in den meisten Fällen eignen, um die Vorgänge wie Phasenumwandlung, statische Rekristallisation und Kornvergrößerung zu beschreiben. Auch das CA-Modell, welches speziell zur Simulation der Gefügeentwicklung im Zweiphasenbereich konzipiert wurde, zeigt eine gute Übereinstimmung zu Literaturdaten und experimentellen Ergebnissen. Hierbei wurde außerdem die Annahme bestätigt, dass das Vergrößerungsverhalten im Zweiphasengebiet, sowie das Alphalamellenwachstum, maßgeblich von der Diffusion des Vanadiums an der Phasengrenze beeinflusst wird. Eine Kopplung des CA-Modells mit der FE-Software als „Postprocessing“ ist ebenfalls möglich, da die Zeit-Temperaturkurven einzelner Elemente der FE-Simulation in den CA eingelesen werden können. Dies erlaubt wiederum eine genauere Beschreibung der Mikrostrukturentwicklung im Zweiphasenbereich mittels CA im Gegensatz zu den direkt implementierten semiempirischen Mikrostrukturmodellen. Der eingebaute Phasenausgleichsalgorithmus, welcher die Simulation nichtisothermer Wärmebehandlungen ermöglicht, unterliegt hierbei jedoch einigen Einschränkungen, da damit die Phasenumwandlungskinetik nicht beschrieben werden kann. Dies führt dazu, dass bei

schnellen Temperaturänderungen der Algorithmus nicht in der Lage ist die großen Veränderungen in den Phasenanteilen schnell genug auszugleichen. Aus diesem Grund sind vor allem Aufheizvorgänge getrennt zu simulieren, wodurch dem Algorithmus mehr Zeit für den Ausgleich der Phasenanteile zur Verfügung gestellt werden kann. Zur finalen Validierung der Mikrostrukturmodelle wurde ein realer Schmiedeversuch vom Aufheizen des Vormaterials bis hin zu nachfolgenden Wärmebehandlung des Schmiedeteils nachsimuliert. Die berechneten Mikrostrukturparameter zeigten beim Vergleich mit den Mikrostrukturauswertungen aus dem Schmiedeteil eine gute Übereinstimmung.

14 Ausblick

Mit den entwickelten semi-empirischen Mikrostrukturmodellen sowie mithilfe des CA konnten wesentliche Aspekte und Mechanismen der Mikrostrukturentwicklung während der thermomechanischen Behandlung von Ti-6Al-4V beschrieben werden. Jedoch ergaben sich daraus ebenso viele neue Herausforderungen in Bezug auf die Modellierung weiterer Mechanismen, welche in Zukunft von Bedeutung sein könnten. Auf diese soll hier kurz eingegangen werden.

CA-Modellierung

In naher Zukunft sind die vorrangigen Aufgabengebiete im Bereich der CA-Modellierung die Implementierung neuer Algorithmen, welche es ermöglichen, Vorgänge wie Phasenumwandlung und Rekristallisation für komplexe Legierungen realitätsnah zu modellieren. Anders als bei der reinen Kornvergrößerung ist dabei eine genaue Beschreibung sowohl der Keimbildungsvorgänge als auch der Wachstumskinetik essentiell. Auch die Kopplung dieser Algorithmen untereinander ist von großer Bedeutung, da die verschiedenen metallphysikalischen Mechanismen parallel ablaufen und sich somit beeinflussen können. Da Rekristallisationsvorgänge meist mit einer vorangegangenen Verformung einhergehen, ist es außerdem sehr empfehlenswert einen Algorithmus zu entwickeln, welcher die Mikrostruktur abhängig vom jeweiligen Umformgrad automatisch mitverformt.

Versuche

Zur Verbesserung der Modellansätze ergeben sich auf experimenteller Seite einige zukünftige Aufgaben. Besonders im Zweiphasenbereich wäre es von großem Vorteil, die Verformung sowie die Entwicklung der umgeformten Mikrostruktur direkt im CA-Modell beschreiben zu können. Dies gilt ebenfalls für den Einfluss des Umformgrades auf die Kinetik nachfolgender Vergrößerungsprozesse. Dazu sind weitere Untersuchungen über die Einflussnahme von Umformparametern auf die Form der Alpha- und Betakörner erforderlich. Darüber hinaus sollten auch zusätzliche Versuche durchgeführt werden, um die Entwicklung dieser Umformtexturen bei nachfolgenden Wärmebehandlungen zu bestimmen.

CA-Simulation

Die komplexen Mikrostruktursimulationen werden erst durch die entsprechende Leistungsfähigkeit moderner Computersysteme ermöglicht. Da im Gegensatz zu früher die Entwicklung neuer Prozessoren in Richtung von mehr Rechenkernen bzw. Cluster-Computing geht, ist es wichtig, auch die Software entsprechend auf Mehrkernprozessoren zu optimieren [80, 81, 82, 83]. Dies ist besonders für zukünftige Mikrostruktursimulationen in 3D interessant, da hierbei anders als in 2D eine um den Faktor 100 bis 1000 größere Anzahl an Zellen benötigt wird, um die entsprechende Mikrostruktur abbilden zu können. Dies wirkt sich wiederum sehr stark auf die benötigte Simulationszeit aus. Während aktuell die meisten

Programme aufgrund schlechter oder fehlender Parallelisierung der Rechenaufgaben kaum mehr als vier Prozessorkerne gleichzeitig auslasten können, sind bei modernen Rechenzentren oft mehrere hundert Rechenkerne verfügbar. Bei entsprechender Optimierung des CA-Modells auf entsprechend viele Rechenkerne ließe sich somit auch bei sehr komplexen Algorithmen enorm viel Rechenzeit einsparen [83, 84].

15 Literaturverzeichnis

- [1] G. Lütjering und J.C. Williams: Titanium, Springer, Berlin, 2007.
- [2] M. Peters und C. Leyens: Titan und Titanlegierungen, WILEY-VCH, Köln, 2002.
- [3] M.J. Donachie: Titanium A Technical Guide, Second Edition, ASM, USA, 2000.
- [4] Y.V.R.K. Prasad und S. Sasidhara: A Compendium of Processing Maps, ASM, USA, 1997.
- [5] T.G. Byrer, S.L. Semiatin und D.C. Vollmer: Forging Handbook, ASM, USA, 1985.
- [6] S. Malinov, Z. Guo, W. Sha und A. Wilson: Differential scanning calorimetry study and computer modeling of $\beta \Rightarrow \alpha$ phase transformation in a Ti-6Al-4V alloy, Metallurgical and Materials Transactions A (2001), 32A, 879-887.
- [7] S.L. Semiatin, S.L. Knisley, P.N. Fagin, F. Zhang und D.R. Barker: Microstructure evolution during alpha-beta heat treatment of Ti-6Al-4V, Metallurgical and Materials Transactions A (2003), 34A, 2377-2386.
- [8] S.L. Semiatin, V. Seetharaman und I. Weiss: Flow behavior and globularization kinetics during hot working of Ti-6Al-4V with a colony alpha microstructure, Materials Science and Engineering A (1999), 263, 257-271.
- [9] N. Stefansson, S.L. Semiatin und D. Eylon: The kinetics of static globularization of Ti-6Al-4V, Metallurgical and Materials Transactions A (2002), 33A, 3527-3534.
- [10] Z.X. Guo, R. Ding und A. Wilson: Microstructural evolution of a Ti-6Al-4V alloy during thermomechanical processing, Materials Science and Engineering A (2002), 327, 233-245.
- [11] I. Katzarov, S. Malinov und W. Sha: Finite element modeling of the morphology of β to α phase transformation in Ti-6Al-4V Alloy, Metallurgical and Materials Transactions A (2002), 33A, 1027-1040.
- [12] S. Malinov und W. Sha: Modeling thermodynamics, kinetics, and phase transformation morphology while heat treating titanium alloys, JOM (2005), 57, 42-45.
- [13] S.L. Semiatin et al.: Diffusion Coefficients for Modeling the Heat Treatment of Ti-6Al-4V, Metallurgical and Materials Transactions A (2004), 35A, 3015-3018.
- [14] S.L. Semiatin, B.C. Kirby und G.A. Salishchev: Coarsening Behavior of an Alpha-Beta Titanium Alloy, Metallurgical and Materials Transactions A (2004), 35A, 2809-2819.
- [15] G. Gottstein: Physikalische Grundlagen der Materialkunde, Springer, Berlin, 2001.
- [16] P. Feltham: Grain growth in metals, Acta Metallurgica (1957), 5, 97-105.
- [17] D. Fan und L.Q. Chen: Diffusion-controlled grain growth in two-phase solids, Acta Materialia (1996), 45, 3297-3310.
- [18] E. Hornbogen und H. Warlimont: Metallkunde, Springer, Berlin, 2001.

- [19] S. Ankem: Grain growth in multiphase alloys, *Materials Science Forum* (1992), 94-96, 159-168.
- [20] S.L. Semiatin, J.C. Soper und I.M. Sukonnik: Short-time beta grain growth kinetics for a conventional titanium alloy, *Acta Materialia* (1996), 44, 1979-1986.
- [21] C.H. Johnson, S.K. Richter, C.H. Hamilton und J.J. Hoyt: Static grain growth in a microduplex Ti-6Al-4V alloy, *Acta Materialia* (1999), 47, 23-29.
- [22] F.J. Gil und J.A. Planell: Behaviour of normal grain growth kinetics in single phase titanium and titanium alloys, *Materials Science and Engineering A* (2000), 283, 17-24.
- [23] O.M. Ivasishin, S.V. Shevchenko und S.L. Semiatin: Effect of crystallographic texture on the isothermal beta grain-growth kinetics of Ti-6Al-4V, *Materials Science and Engineering* (2002), A332, 343-350.
- [24] S.L. Semiatin, P.N. Fagin, M.G. Glavicic, I.M. Sukonnik und O.M. Ivasishin: Influence on texture on beta grain growth during continuous annealing of Ti-6Al-4V, *Materials Science and Engineering A* (2001), 299, 225-234.
- [25] O.M. Ivasishin, S.L. Semiatin, P.E. Markovsky, S.V. Shevchenko und S.V. Ulshin: Grain growth and texture evolution in Ti-6Al-4V during beta annealing under continuous heating conditions, *Materials Science and Engineering A* (2002), 337, 88-96.
- [26] F.J. Humphreys und M. Hatherly: *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*, Elsevier, Oxford, 2004.
- [27] S. Kleber: *Physikalische Simulation eigenschaftsbestimmender Vorgänge beim thermomechanischen Walzen*, Dissertation, techn. Universität Graz, Graz, 1998.
- [28] B. Derby und M.F. Ashby: On dynamic recrystallization, *Scripta Metallurgica* (1987), 21, 879-884.
- [29] R. Ding und Z.X. Guo: Microstructural evolution of a Ti-6Al-4V alloy during β -phase processing: experimental and simulative investigations, *Materials Science and Engineering A* (2004), 365, 172-179.
- [30] T. Seshacharyulu, S.C. Medeiros, W.G. Frazier und Y.V.R.K. Prasad: Hot working of commercial Ti-6Al-4V with an equiaxed α - β microstructure: materials modeling considerations, *Materials Science and Engineering A* (2000), 284, 184-194.
- [31] F. Warchomika, C. Poletti und M. Stockinger: Microstructural Characterization of Hot Deformed Ti-6Al-4V, *Proceedings of the 12th World Conference on Titanium* (2011), Volume I, Peking, 729-732.
- [32] B. Appolaire, L. Hericher und E. Aeby-Gautier: Modelling of phase transformation kinetics in Ti alloys – Isothermal treatments, *Acta Materialia* (2005), 53, 3001-3011.
- [33] I. Weiss; F.H. Froes, D. Eylon und G.E. Welsch: Modification of alpha morphology in Ti-6Al-4V by thermomechanical processing, *Metallurgical Transactions A* (1986), 17A, 1935-1947.

- [34] S.L. Semiatin und T.R. Bieler: The effect of alpha platelet thickness on plastic flow during hot working of Ti-6Al-4V with a transformed microstructure, *Acta Materialia* (2001), 49, 3565-3573.
- [35] K. Nakase, I. Inagaki, N. Ariyasu und H. Tsubakino: The variation of microstructure by α - β forging and its effect on the strength and ductility in Ti-6Al-4V alloy, *Zeitschrift für Metallkunde* (2005), 96, 1413-1419.
- [36] E.B. Shell und S.L. Semiatin: Effect of initial microstructure on plastic flow and dynamic globularization during hot working of Ti-6Al-4V, *Metallurgical and Materials Transactions A* (1999), 30A, 3219-3229.
- [37] N. Stefansson und S.L. Semiatin: Mechanisms of globularization of Ti-6Al-4V during static heat treatment, *Metallurgical and Materials Transactions A* (2003), 34A, 691-698.
- [38] M. Hillert: On the theory of normal and abnormal grain growth, *Acta Metallurgica* (1965), 13, 227-238.
- [39] G.W. Greenwood: The growth of dispersed precipitates in solutions, *Acta Metallurgica* (1956), 4, 243-248.
- [40] P.G. Shewmon: *Transformation in Metals*, McGraw-Hill, New York, 1969.
- [41] D.A. Porter und K.E. Easterling: *Phase Transformation in Metals and Alloys*, Van Nostrand Reinhold, Wokingham, 1988.
- [42] M.A. Miodownik: Zener Pinning, in *Encyclopedia of Materials: Science and Technology* (Second Edition), 2001, 9855-9859.
- [43] Y. Bréchet und M. Militzer: A note on grain size dependent pinning, *Scripta Materialia* (2005), 52, 1299-1303.
- [44] U. Zwicker: *Titan und Titanlegierungen*, Springer, Berlin, 1974.
- [45] D. Dymont, Herausgeber: H. Kimura und O. Izumi. *Proc. Conference on Titanium. Japan*, 1980. 519-528.
- [46] J.F. Murdock, T.S. Lundy, und E.E. Stansbury: Diffusion of Ti44 and V48 in titanium, *Acta Metallurgica* (1964), 12, 1033-1039.
- [47] N.E. Walsoe de Reça, und C.M. Libanati: Self-diffusion in β -titanium and β -hafnium, *Acta Metallurgica* (1968), 16, 1297-1305.
- [48] R. El-Khozondar, H. El-Khozondar, G. Gottstein und A. Rollet: Microstructural Simulation of Grain Growth in Two-phase Polycrystalline Materials, *Egypt. J. Solids* (2006), 29, 35-47.
- [49] V.S. Solomatov, R. El-Khozondar und V. Tikare: Grain size in the lower mantle: constraints from numerical modeling of grain growth in two-phase systems, *Physics of the Earth and Planetary Interiors* (2002), 129, 265-282.
- [50] C. Sommitsch: *Theorie und Modell der mikrostrukturellen Entwicklung von Nickel-Basis-Legierungen während des Warmwalzens – Die virtuelle Walzstraße*, Dissertation, techn. Universität Graz, Graz, 1999.

- [51] M. Stockinger: Mikrostrukturelle Simulation des Gesenkschmiedens von Nickelbasis-Legierungen, Dissertation, techn. Universität Graz, Graz, 2003.
- [52] F. Vollertsen und S. Vogler, Werkstoffeigenschaften und Mikrostruktur, Carl Hanser, München, 1989.
- [53] J.D. Verhoeven: Fundamentals of Physical Metallurgy, John Wiley & Sons, Inc., New York, 1975.
- [54] J.E. Burke und D. Turnbull: Recrystallisation and grain growth, Progress in Metal Physics (1952), 3, 275-292.
- [55] R.W. Cahn und P. Haasen: Physical Metallurgy, Elsevier, Amsterdam, 1983.
- [56] C.M. Sellars und J.A. Whiteman: Recrystallization and grain growth in hot rolling, Metal Science (1979), 2, 187-194.
- [57] D. Huang, W.T. Wu, D. Lambert und S.L. Semiatin: Computer Simulation of Microstructure Evolution During Hot Forging of Waspaloy and Nickel Alloy 718, Proc. Microstructure Modeling and Prediction During Thermomechanical Processing (2001), New Orleans, 137-146.
- [58] C.M. Sellars: The Physical Metallurgy of Hot Working, Proc. Hot Working and Forming Processes (1979), Sheffield, 3-15.
- [59] A. Krumphals, M. Stockinger, F. Warchomicka und Ch. Sommitsch: Evolution of Beta Grain Size During Beta Phase Processing of Ti-6Al-4V, Proceedings of the 12th World Conference on Titanium (2011), Volume I, Peking, 493-496.
- [60] M. Avrami: Kinetics of phase change. I: General theory, The Journal of Chemical Physics (1939), 7, 1103-1112.
- [61] M. Avrami: Kinetics of phase change. II: Transformation-time relations for random distribution of nuclei, The Journal of Chemical Physics (1940), 8, 212-224.
- [62] M. Avrami: Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. III, The Journal of Chemical Physics (1941), 9, 177-184.
- [63] E. Woldt: The relationship between isothermal and non-isothermal description of Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov kinetics, Journal of Physics and Chemistry of Solids (1992), 53, 521-527.
- [64] C.W. Price: Use of Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami kinetics in recrystallization of metals and crystallization of metallic glasses, Acta Metallurgica et Materialia (1990), 38, 727-738.
- [65] W. Sha und S. Malinov: Titanium alloys: modelling of microstructure, properties and applications; Woodhead Publishing, Cambridge, 2009.
- [66] M.E. Glicksman: Diffusion in solids, John Wiley & Sons, New York, 2000.
- [67] S. Wolfram: A New Kind of Science, Wolfram Media Inc., Champaign, USA, 2002.
- [68] M. Mitchell: Complexity: A Guided Tour, Oxford University Press, New York, 2009.

- [69] J. Koc und V. Paidar: Modelling of the effect of tripple junctions on grain boundary migration by a cellular automaton, *Journal de Physique IV* (2001), 11, 585-592.
- [70] M. Rappaz and C. Gandin: Probabilistic modelling of microstructure formation in solidification processes, *Acta Materialia* (1993), 41, 345-360.
- [71] M. Candic: Grain structure design of hot formed and annealed multi phase alloys, Dissertation, Montanuniversität Leoben, Leoben, 2010.
- [72] Y. Liu, T. Baudin und R. Penelle: Simulation of normal grain growth by cellular automaton, *Scripta Metallurgica* (1996), 34, 1679-1683.
- [73] K.G.F. Janssens: An introductory review of cellular automata modeling of moving grain boundaries in polycrystalline materials, *Mathematics and Computers in Simulation* (2010), 80, 1361–1381.
- [74] S. Raghavan und Satyam S. Sahay: Modeling the grain growth kinetics by cellular automaton, *Materials Science and Engineering A* (2007), 445–446, 203–209.
- [75] Y. Hea, H. Ding, L. Liu und K. Shin: Computer simulation of 2D grain growth using a cellular automata model based on the lowest energy principle, *Materials Science and Engineering A* (2006), 429, 236–246.
- [76] P. Homporova: Thermal history of alpha morphology in titanium alloy Ti-6Al-4V, Dissertation, techn. Universität Wien, Wien, 2011.
- [77] U. Krengel: Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik, Friedrich Vieweg & Sohn, Braunschweig/Wiesbaden, 1988.
- [78] MatCalc, Version 5.42, Technische Universität Wien, <http://matcalc.tuwien.ac.at> (September 2012).
- [79] JMatPro, Modul: Titanium alloys, Sente Software Ltd., Version 6.0, <http://www.sentsoftware.co.uk> (September 2012).
- [80] P. Schnabel: Computertechnik-Fibel, 3. Auflage, Books on Demand, Ludwigsburg, 2012.
- [81] U. Brinkschulte und T. Ungerer: Mikrocontroller und Mikroprozessoren, 3. Auflage, Springer, Heidelberg, 2010.
- [82] K. Wüst: Mikroprozessortechnik, 2. Auflage, Vieweg, Wiesbaden, 2006.
- [83] T. Rauber und G. Rürger: Multicore: Parallele Programmierung, Springer, Berlin, 2008.
- [84] H. Bauke und S. Mertens: Cluster Computing, Springer, Berlin, 2006.