

**IC-MPPE**  
**Integrated Computational**  
**Materials Process and Product**  
**Engineering.**

Programm: FFG Produktion der Zukunft

Förderlinie: COMET- K2 Zentrum

Projekt: PREHY, 10/2022-12/2025, single-firm



Wasserstofftanks und Fahrzeuge, Bild: KI-generiert von MCL

## NEUER WERKSTOFF: HÖHERE FESTIGKEIT UND WASSERSTOFFBESTÄNDIGKEIT

DIGITALE WERKSTOFFENTWICKLUNG KOMBINIERT ATOMISTISCHE SIMULATIONEN, MASCHINELLES LERNEN UND KI UND SENKT SO ENTWICKLUNGSZEIT UND MATERIALKOSTEN.

Der Übergang zu CO<sub>2</sub>-neutraler Energie erfordert Wasserstoff als Energiespeicher. Für dessen sichere Nutzung müssen Werkstoffe gleichzeitig hohe Festigkeit und Duktilität bis hin zu tiefen Temperaturen von 20 K (-253.15°C) aufweisen. Langzeitbetrieb führt jedoch oft zu Wasserstoffversprödung, deren Anfälligkeit mit steigender Festigkeit zunimmt.

Im Projekt wurde ein digital unterstützter Legierungsentwicklungsansatz genutzt, der Dichtefunktionaltheorie, Thermodynamik, maschinelles Lernen und KI vereint, um Designprinzipien wie Stapelfehlerenergie, Gitterfehlpassung und Wasserstoff-Trapping gezielt zu bewerten. Damit konnten gleich zwei

vielversprechende neue Werkstoffe, ein austenitischer Stahl und eine Nickelbasislegierung, für wasserstoffbeständigere ausscheidungsgehärtete Legierungen identifiziert werden. Der durchgängig digitale Workflow ersetzt kostenintensive Trial-and-Error Experimente und verkürzt die Entwicklungszeit erheblich.

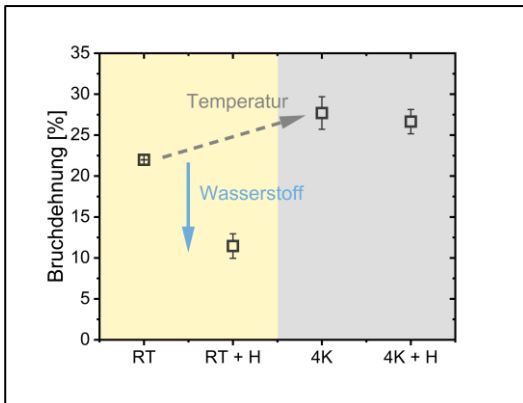
So konnten im Rahmen des Projekts wurde gemeinsam mit der *voestalpine BÖHLER Edelstahl GmbH und Co KG* und der *Montanuniversität Leoben* gleich zwei neue Werkstoffe, ein austenitischer Stahl und eine Nickel-Basis-Legierung mit höherer Festigkeit und verbesserter Wasserstoffbeständigkeit entwickelt und patentiert werden. Experimentelle Versuche bei 4 K und Raumtemperatur bestätigten die

## SUCCESS STORY

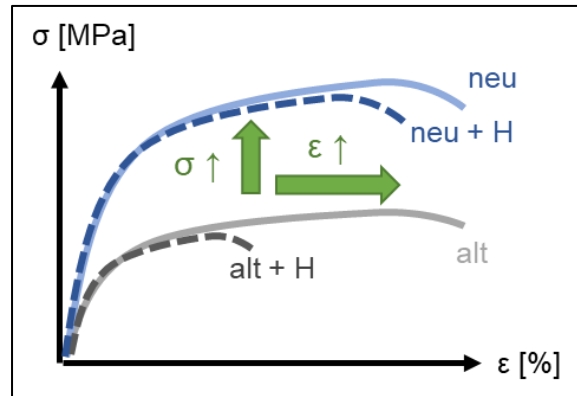
hohe Widerstandsfähigkeit gegen Wasserstoffversprödung.

### Wirkungen und Effekte

Die neu entwickelten Werkstoffe steigern Zuverlässigkeit und Sicherheit in Wasserstoffsystemen, ermöglichen leichtere und kompaktere Bauteile und sparen damit Gewicht, Kosten und Rohmaterialverbrauch im Vergleich zu konventionellen Werkstoffen, und leistet einen substantziellen Beitrag zur Energiewende. Gleichzeitig zeigt der entwickelte digitale Ansatz, wie datengetriebene Materialforschung Innovation und Wirtschaftlichkeit nachhaltig verbinden kann.



Einfluss von Wasserstoff und der Temperaturreduktion von Raumtemperatur (RT) auf 4 K (-269°C) auf die Bruchdehnung eines austenitischen Stahls, Copyright MCL



Festigkeits- und Duktilitätssteigerung des alten und neuen Werkstoffes dargestellt in einem schematischen Spannungs-Dehnungs-Diagramm, Copyright MCL

Die patentierten Werkstoffe werden bereits für Pilotanwendungen in Wasserstofftanks und Kryosystemen vorgesehen. Durch schnellere Entwicklungszyklen und reduzierte Materialkosten verbessert die digitale Materialdesignmethode die Wettbewerbsfähigkeit europäischer Wasserstofftechnologien langfristig und unterstützt die strategische Unabhängigkeit von kritischen Rohstoffen.

### Projektkoordination (Story)

Dr. Vsevolod Razumovskiy  
 Head of the Christian Doppler Laboratory  
 Key Scientist Computational Materials Design  
 Materials Center Leoben Forschung GmbH  
 T +43 (0) 3842 45922-532  
 vsevolod.razumovskiy@mcl.at

### IC-MPPE / COMET-Zentrum

**Materials Center Leoben Forschung GmbH**  
 Vordernberger Straße 12  
 8700 Leoben  
 T +43 (0) 3842 45922-0  
[mclburo@mcl.at](mailto:mclburo@mcl.at)  
[www.mcl.at](http://www.mcl.at)

### Projektpartner

- Montanuniversität Leoben, Österreich
- voestalpine BÖHLER Edelstahl GmbH & Co KG, Österreich

Das COMET-Zentrum IC-MPPE wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMIMI, BMWET und die Bundesländer Steiermark, Oberösterreich und Tirol gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt ([www.ffg.at/comet](http://www.ffg.at/comet)).

**SUCCESS STORY**



 **Bundesministerium  
Innovation, Mobilität  
und Infrastruktur**

 **Bundesministerium  
Wirtschaft, Energie  
und Tourismus**

Österreichische  
Forschungsförderungsgesellschaft mbH  
Sensengasse 1, A-1090 Wien  
T +43 (0) 5 77 55 - 0  
office@ffg.at  
www.ffg.at