

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

Programm: FFG – Industrienahe  
Dissertationen

Förderlinie: COMET- K2 Zentrum

Projekttyp: ADAMANT, 2020-2023,  
strategisch

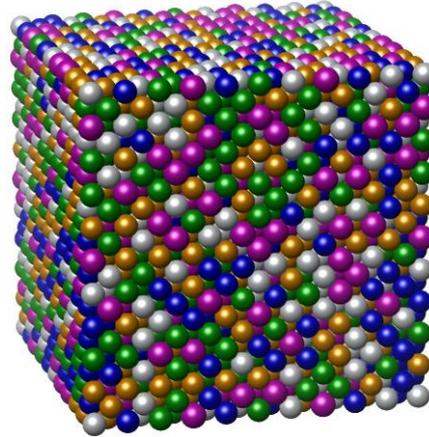


Illustration der atomaren Zusammensetzung der fcc FeMnNiCoCr-Legierung. Die verschiedenen Farben entsprechen den einzelnen Elementen: Fe (grau), Mn (lila), Ni (gold), Co (blau), Cr (grün). Bild: MCL

## VORHERSAGEMODELLIERUNG DER FESTIGKEIT VON HOCHENTROPIE-LEGIERUNGEN

COMPUTERGESTÜTZTES DESIGN VON LEGIERUNGEN KANN DIE KOSTEN FÜR DIE ENTWICKLUNG MODERNER MATERIALIEN SENKEN.

Hochentropie-Legierungen (HEA) sind eine Gruppe neuartiger metallischer Werkstoffe mit hervorragenden mechanischen und funktionellen Eigenschaften und großem Potenzial für künftige Anwendungen, insbesondere in der Luft- und Raumfahrt, im Energiesektor und im Werkzeugbau. HEAs sind Legierungen, die aus mehreren Legierungselementen mit gleichen oder relativ großen Anteilen von typischerweise fünf oder mehr Elementen bestehen. Diese Mischung von Legierungselementen auf atomarer Ebene sorgt für die hohe Festigkeit dieser Werkstoffklasse.

Die ökologischen und wirtschaftlichen Herausforderungen erfordern schnelle Entwicklungszyklen für verbesserte Werkstoffe. Gleichzeitig ist die Entwicklung neuer Legierungen ein schwieriges Unterfangen, da es eine große Anzahl möglicher

variabler Parameter gibt, wie zum Beispiel die chemische Zusammensetzung. Die Aufgabe kann erheblich vereinfacht werden, wenn man auf prädiktive Ab-Initio-Methoden zurückgreift, um diese Parameter mit den resultierenden Eigenschaften in Beziehung zu setzen. Die Anwendung solcher Methoden auf ungeordnete Legierungen ist jedoch nicht einfach und erfordert ein hohes Maß an Fachwissen.

Um die Anwendung modernster Simulationsmethoden zu erleichtern, hat das MCL einen Prototyp eines Software-Toolkits entwickelt, das komplexe Arbeitsabläufe zur Berechnung wichtiger Legierungseigenschaften implementiert. Die Mischkristallverfestigung stellt beispielsweise einen wesentlichen Beitrag zur Gesamtfestigkeit einer Metalllegierung dar und der Duktilitätsindex

## SUCCESS STORY

charakterisiert die Fähigkeit von Werkstoffen, sich zu verformen, ohne zu brechen.

Obwohl solche Berechnungen normalerweise mit einem extremen Rechenaufwand verbunden sind, verwenden wir kürzlich entwickelte Modelle, die sich ausschließlich auf Parameter stützen, die aus ab initio-Berechnungen gewonnen werden können, wodurch der Aufwand drastisch reduziert wird.

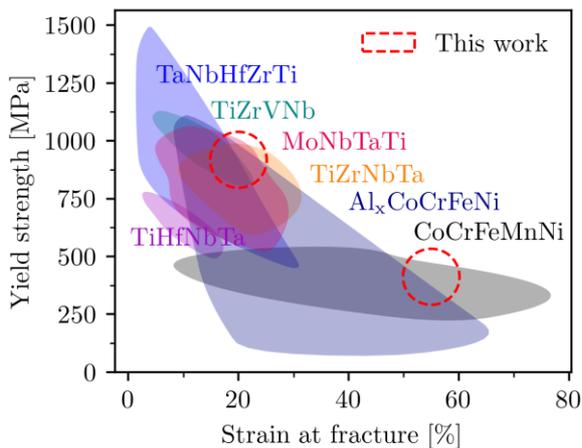


Abbildung 1: Ein Diagramm, das den Kompromiss zwischen Festigkeit und Duktilität (angegeben durch die maximale Verformung vor dem Bruch) für mehrere Legierungsklassen zeigt. Die roten Kreise zeigen ungefähr die in diesem Projekt betrachteten Legierungen. Bild: MCL

Das gesamte Rahmenwerk wurde sowohl an Eisengruppen- (FeMnCoNiCr) als auch an feuerfesten (MoNbTiTa) Mehrkomponenten-Legierungen ge-

testet. Außerdem wurden im Rahmen des Forschungsaufenthalts des Doktoranden Franco Moitzi direkte großmaßstäbliche Simulationen der Auswirkungen von Verunreinigungen auf die Duktilität von Eisen in den Einrichtungen des Oak Ridge National Laboratory, USA, durchgeführt. Die Ergebnisse zeigten eine sehr gute Übereinstimmung mit den verfügbaren experimentellen Daten für diese Legierungen, was die Zuverlässigkeit der zugrunde liegenden Methodik beweist.

### Wirkungen und Effekte

Die einzigartige Kombination von Simulationsmethoden, die in ein einziges Softwarepaket integriert sind, kann Werkstoffentwicklern ein Instrumentarium an die Hand geben, das es ihnen ermöglicht, einen großen Raum von Legierungszusammensetzungen zu erforschen und Legierungswerkstoffe zu finden, die gleichzeitig im Hinblick auf Festigkeit, Duktilität und andere Eigenschaften optimiert sind. In einem nächsten Schritt wird das MCL-ADAMANT-Toolkit mit einer benutzerfreundlichen Schnittstelle ausgestattet, um es zu einem Werkzeug zu machen, das die Kluft zwischen Experten für Legierungssimulationen und Materialwissenschaftlern überbrückt, die daran interessiert sind, ihre Konstruktionspraktiken durch den Einsatz von Vorhersagemodellen zu verbessern.

### Projektkoordination (Story)

Dr. Oleg Peil  
 Senior Scientist  
 Computational Materials Design  
 Materials Center Leoben Forschung GmbH  
 T +43 (0) 3842 45922-45

### IC-MPPE / COMET-Zentrum

**Materials Center Leoben Forschung GmbH**  
 Roseggerstrasse 12  
 8700 Leoben  
 T +43 (0) 3842 45922-0  
 mclburo@mcl.at  
 www.mcl.at

### Projektpartner

- keine

Das COMET-Zentrum IC-MPPE wird im Rahmen von COMET – Competence Centers for Excellent Technologies durch BMK, BMAW, und die Bundesländer Steiermark, Oberösterreich und Tirol gefördert. Das Programm COMET wird durch die FFG abgewickelt.