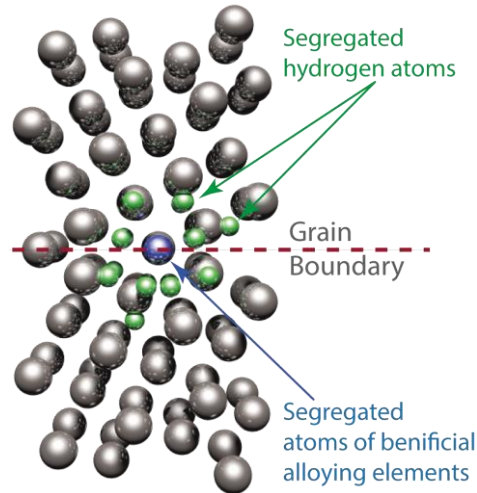


SUCCESS STORY
**IC-MPPE / Integrated
Computational Materials
Process and Product
Engineering**

 Programm: COMET – Competence
Centers for Excellent Technologies

Förderlinie: COMET-Zentrum (K2)

 Projekt: High strength hydrogen
resistant alloys – Part I


COMPUTERGESTÜTZTES DESIGN VON WASSERSTOFF- BESTÄNDIGEN MATERIALIEN

ATOMISTISCHE MODELLIERUNG ANGEWANDT AUF DAS DESIGN VON MATERIALIEN FÜR DIE ZUKUNFT

Wasserstoff ist einer der wichtigsten Energieträger der Zukunft, da er ohne CO₂-Emissionen hergestellt und umgewandelt werden kann.

Leider sind viele hochfeste Werkstoffe, die für die Herstellung einer effizienten Infrastruktur für Transport und Speicherung von Wasserstoff in Frage kommen, anfällig auf Wasserstoffversprödung. Dies gilt auch für Nickelbasis-Superlegierungen, die typischerweise für extrem beanspruchte Komponenten wie Verschraubungen verwendet werden. Unter Wasserstoffeinwirkung neigen einige Materialqualitäten zur Korngrenzenversprödung.

Korngrenzen (KG) sind spezifische mikrostrukturelle Einheiten von Werkstoffen, bei denen die lokale chemische Zusammensetzung im Vergleich zur gemittelten chemischen Zusammensetzung sehr unterschiedlich sein kann. Dies ist auf die Tendenz einiger Elemente zurückzuführen, in diesem atomar

weniger dicht gepackten Bereich zu segregieren, der die Korngrenze zwischen Körnern unterschiedlicher kristallographischer Orientierung bildet. Einige der segregierenden Elemente, wie z.B. Wasserstoff, verringern die Kohäsion zwischen den Körnern, während andere die Kohäsion und damit die gesamten mechanischen Eigenschaften verbessern.

Wasserstoffversprödung wird für eine Reihe von katastrophalen Ausfällen in verschiedenen Industriezweigen verantwortlich gemacht, u.a. im Bauwesen und in der Erdölindustrie, und hat in mehr als 100 Jahren Forschung viel Aufmerksamkeit auf sich gezogen. Direkte quantitative Untersuchungen dieses Phänomens sind jedoch erst seit kurzem möglich, nachdem moderne experimentelle und computer-gestützte Techniken entwickelt wurden, die eine Materialbeschreibung auf der atomaren Skala, der Skala eines Wasserstoffatoms, ermöglichen. Die

SUCCESS STORY

atomistische Modellierung mittels Dichtefunktionaltheorie (DFT)-Berechnungen bietet eine einzigartige Möglichkeit, die Intensität der Entmischung und die daraus resultierende Bindungsstärke von Korngrenzen zu bestimmen. Abb. 1 zeigt die Ergebnisse einer DFT-Hochdurchsatzberechnungsstudie für alle technisch relevanten chemischen Elemente (84!) in Ni. Basierend auf diesen Ergebnissen können die Legierungselemente entsprechend ihrer Wirkung auf die Kohäsionsfestigkeit von Korngrenzen klassifiziert werden, d.h. ob sie die Wasserstoffversprödung reduzieren (grüner Bereich), sie erhöhen (roter Bereich) oder ob sie neutral sind (gelber Bereich).

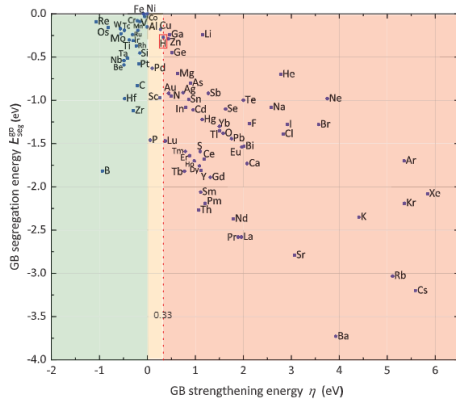


Abb. 1: Berechnete Energie für die Verstärkung von Korngrenzen durch Legierungselemente in Ni.

Die Implementierung dieser Daten in die vom Materials Center Leoben (MCL) entwickelte thermodynamische Modellierungssoftware SEGROcalc ermöglicht die Auslegung geeigneter Mikrolegierungskonzepte einschließlich optimierter Wärmebehand-

lungen. Die Validierung der Modelle und Berechnungswerkzeuge wurde mit Testlegierungen durchgeführt. Die vorhergesagte Entmischung wurde mit Hilfe von Atomsonden - Untersuchungen validiert und die Erhöhung der Korngrenzenfestigkeit in Mikrobiegebalken-Tests nachgewiesen (siehe Abb. 2).

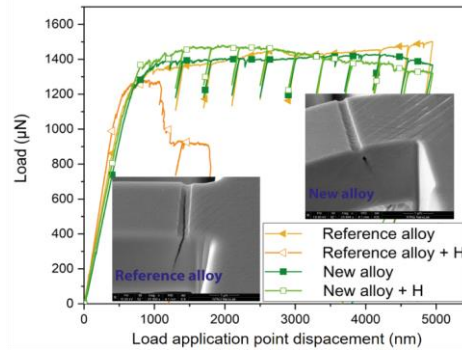


Abb. 2: Erhöhte Zähigkeit der neu entwickelten Legierung im wasserstoffbeladenen Zustand und ohne Wasserstoff, ermittelt an gekerbten Mikrobiegebalken - Proben.

Wirkungen und Effekte

Zur Verifizierung des Designkonzepts wurde eine computergestützt entwickelte Nickelbasis Superlegierung in einem größeren Maßstab hergestellt und unter Wasserstoffeinwirkung getestet. In Zugversuchen wurde eine Verbesserung der Bruchdehnung um den Faktor 5 erreicht.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der rechnerische Legierungsentwicklungsansatz den Materialdesignprozess um den Faktor 2 beschleunigt hat und zu radikal neuen Lösungen für das Design und die Entwicklung neuer Legierungen geführt hat.

Projektkoordination (Story)

Vsevolod Razumovskiy, Dr.
 Senior Researcher
 Bereich Simulation
 +43 3842 45922 - 69
 vsevolod.razumovskiy@mcl.at

Projektpartner

- voestalpine Böhler Edelstahl GmbH, Österreich
- Equinor ASA, Norwegen
- Erich Schmid Institut für Materialwissenschaften, Österreichische Akademie der Wissenschaften

Materials Center Leoben Forschung GmbH

Koordinator COMET K2 Zentrum IC-MPPE
 Roseggerstrasse 12
 8700 Leoben
 T +43 (0) 3842 45922-0
 mclburo@mcl.at / www.mcl.at

- Montanuniversität Leoben, Österreich
- Norwegian University of Science and Technology, Norwegen

Diese Success Story wurde von der Zentrumsleitung und den genannten Partnern zur Veröffentlichung auf der FFG Website freigegeben. Weitere Informationen zu COMET: www.ffg.at/comet