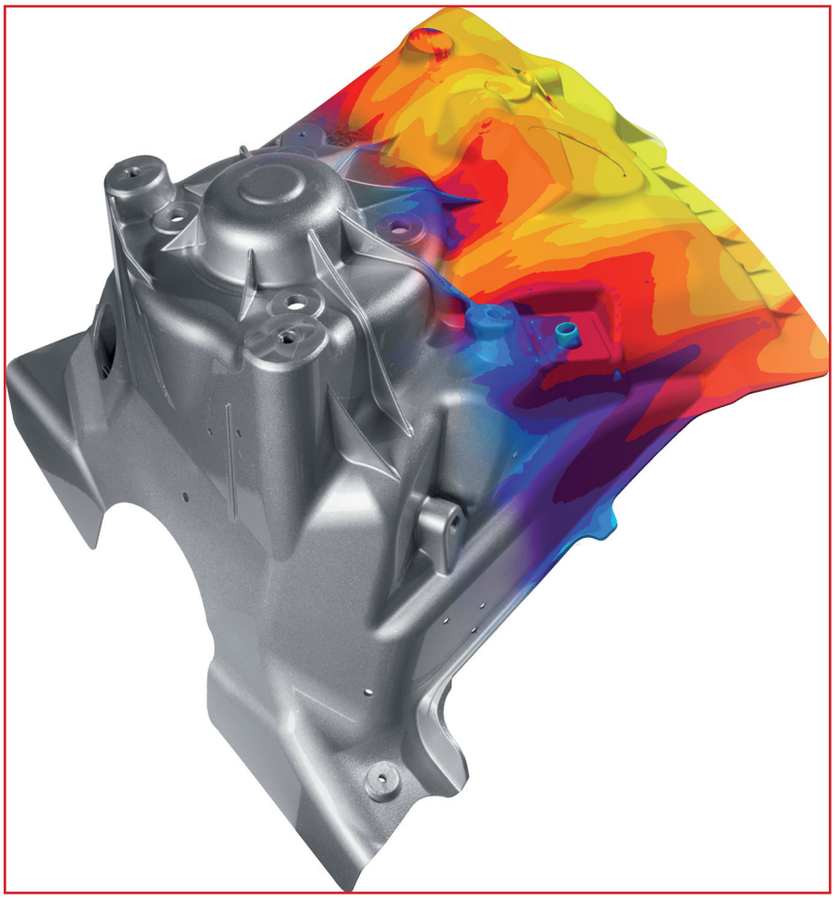
Produktorientierte Werkstoffentwicklung

Diekmann, U. (1)

Neue Werkstofflösungen treiben Innovationen, deshalb ist das Thema Werkstoff innerhalb der Produkt- und Prozessentwicklung von großer Bedeutung. So sind neue Produkte oft erst mit der erweiterten Leistungsfähigkeit neuer Werkstoffe möglich. Steigende Anforderungen an die Ressourceneffizienz erfordern zudem eine Steigerung von Material- und Energieeffizienz in der Produktion. Eine verbesserte Auslegung der Herstellprozesse von der Schmelze bis hin zur Umformung und Wärmebehandlung über FEM-Simulation kann hier einen Beitrag leisten. In beiden Fällen sind Werkstoffdaten erforderlich, die bezogen auf den Umfang in der Regel deutlich über die Inhalte von einfachen Datenblättern hinausgehen.

In der Vergangenheit stützte sich die Werkstoff- und Prozessentwicklung vielfach ausschließlich auf praktische Erfahrungen und wurde empirisch, teilweise mit hohem apparativem Aufwand vorangetrieben. Damit verknüpft waren lange Entwicklungszeiträume und hohe Kosten. Mit dem Beginn des Internetzeitalters haben sich durch die Einführung der digitalen Produktentwicklung die Zyklen zur Bereitstellung neuer Produkte radikal verkürzt. Mittlerweile hat dieser Trend auch bei den Werkstoffen Einzug gehalten – mit Werkstoffdatenbanken und Werkstoffsimulation können Entwicklungsaufwände reduziert werden. Dies kann bis hin zu einer produktorientierten Werkstoffentwicklung bzw. Werkstoffanpassung führen.



Überlegene Produkte durch Nutzung einer produktorientierten Werkstoffentwicklung (Quelle: GF Automotive, www.gfau.com)

Werkstoffdaten im thermodynamischen Gleichgewicht

Bei metallischen Werkstoffen bestimmt das Gefüge die Werkstoffeigenschaften. Gefüge bestehen in der Regel aus mehreren Phasen, die jeweils unterschiedliche Zusammensetzung haben. Für binäre Legierungen können die Phasen und deren Zusammensetzung als Funktion von der Temperatur aus Phasendiagrammen abgelesen werden. Bei komplexeren Legierungen mit mehreren Legierungselementen ist dies nicht möglich, da Phasendiagramme mit mehr als drei Legierungselementen allgemein nicht zur Verfügung stehen. Demzufolge müssen für technisch relevante Werkstoffe Berechnungen zur Bestimmung der Phasengleichgewichte im n-dimensionalen Raum eingesetzt werden. Die CalPhaD-Methode (Calculation of Phase Diagrams [1]) ist die mittlerweile breit eingesetzte, wissenschaftliche Grundlage für Werkstoff-Simulationen: Es stehen eine Reihe kommerzieller Werkzeuge zur Verfügung, mit denen in Wissenschaft und industrieller Anwendungsentwicklung die Phasengleichgewichte für eine Vielzahl von metallischen Legierungssystemen mit guter Zuverlässigkeit berechnet werden können. Ein Ergebnis einer derartigen Berechnung zeigt beispielhaft Bild 1 für eine Aluminium-Legierung. Die Berechnung wurde mit dem Werkzeug JMatPro durchgeführt. Innerhalb weniger Sekunden können damit auch bei komplexen Legierungen die Phasenanteile, die Zusammensetzung der Phasen und die Temperaturen für die Phasenübergänge vorhergesagt werden. Damit steht dem Werkstoffentwickler ein Werkzeug zur Verfügung, mit dem die Wirkung der einzelnen Legierungselemente auf die Ausbildung der stabilen Phasen bestimmt werden kann.

Wenn Werkstoffeigenschaften von der Ausbildung der Phasen abhängen, dann ist es möglich die Ergebnisse aus der CalPhaD-Berechnung für die Bestimmung der Werkstoffeigenschaften zu nutzen. Die thermo-physikalischen Eigenschaften der Phasen hängen von der jeweiligen Zusammensetzung und der Temperatur ab. Unter Verwendung physikalischer Gesetze und

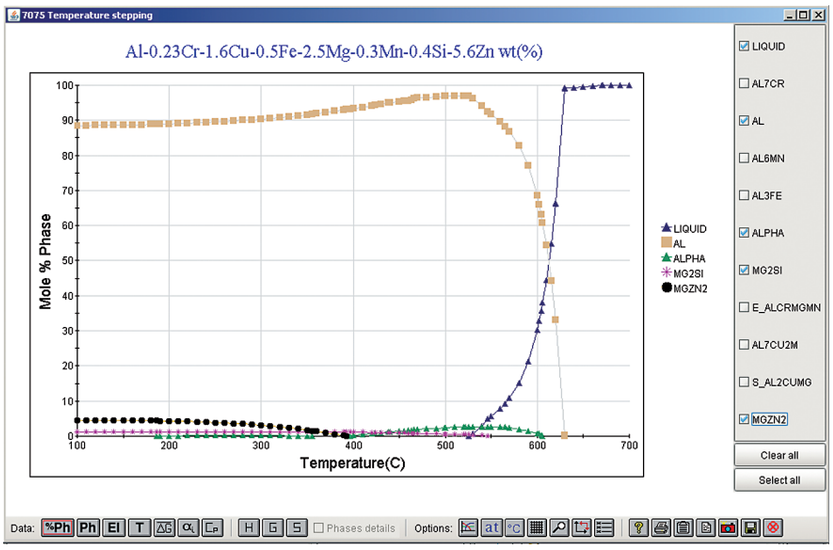


Bild 1: Berechnetes Phasengleichgewicht am Beispiel einer technischen Al-Legierung (7075) aus JMatPro

Stoff-Datenbanken, in der die Eigenschaften der Phasen als Funktion von Zusammensetzung und Temperatur erfasst sind, können die Werkstoffeigenschaften nach Anwendung von Mischungsregeln berechnet werden [6]. Bild 2 zeigt an einer Cu-Legierung die berechneten physikalischen Eigenschaften als Funktion der Temperatur am Beispiel des Elastizitätsmoduls.

Für die praktische Werkstoff- und Prozessentwicklung sind die Berechnungen der Gleichgewichtseigenschaften der Werkstoffe ein guter Schritt in die richtige Richtung – für viele Anwendungen sind jedoch darüber hinaus gehende Daten erforderlich, beispielsweise für Erstarrungs- und Wärmebehandlungssimulation.

Erstarrungssimulation

FEM-Simulationen für die Erstarrung sind heute in vielen Gießereien ein Standard für die Optimierung von Gussteilen. Derartige Simulationen benötigen konsistente thermo-physikalische Daten für die jeweilige Legierung. Die Hersteller von FEM-Systemen liefern in der Regel nur wenige Datensätze, die für Optimierungen allgemein nicht ausreichen – berechnete Werkstoffdaten können diese Lücke schließen. Ausgehend vom sogenannten Scheil-Gulliver Ansatz, der das lokale Gleichgewicht an der Erstarrungsfront berechnet, und dem zuvor beschriebenen Vorgehen zur Berechnung der Werkstoffeigenschaften werden mit der Software JMatPro die notwendigen Werkstoffdaten für eine Vielzahl unterschiedlicher FEM-Systeme generiert. Bild 3 zeigt am Beispiel einer Berechnung mit Magmasoft die Ausbildung von Fehlern in einer gegossenen Motorkomponente aus einer Al-Legierung in Abhängigkeit unterschiedlicher Zusammensetzung [3].

Offensichtlich variieren innerhalb der erlaubten Spannbreite der Legierung die Eigenschaften derart, dass die Stabilität des Prozesses beeinflusst wird. Für den Praktiker ist dies keine neue Erkenntnis – für stabile Prozesse ist oft eine Eingrenzung von Analysenspannen erforderlich. Allerdings steht jetzt mit der Werkstoffsimulation ein Hilfsmittel zur Verfügung, mit dem der oft bestehende Zielkonflikt zwischen Kostenminimierung durch das Einsparen teurer Legierungselemente und der möglichen Auswirkung auf Ausschuss und Prozess-Sicherheit aufgelöst werden kann.

Berechnung der Festigkeit und Umformsimulation

Das gezielte Einbringen von Ausscheidungen und gleichzeitig die Unterdrückung unerwünschter Sprödphasen sind Ziele bei der Entwicklung von Nickel-Werkstoffen für höchste Anforderungen, z.B. im Turbinenbau. Mit der bekannten Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorow-Gleichung (JMAK-Gleichung) können in vielen Fällen die Kinetik der Phasenumwandlung und auch die Ausbildung der Partikelgrößen abgeschätzt werden [2]. Diese Informationen werden sowohl für die Optimierung der Legierungszusammensetzung als auch für die Wärmebehandlung genutzt. Ziel ist vielfach die Verbesserung der Festigkeitseigenschaften: Für die bekannten Verfestigungsmechanismen wie Mischkristall- und Korngrenzenverfestigung sowie auch für die Auswirkungen der Ausscheidungshärtung durch Gamma-´ und Gamma-´´ existieren Gesetzmäßigkeiten, die in der Werkstoffsimulation auch für komplexe technische Legierungen angewendet werden können. Bild 4 zeigt hierzu den Vergleich von experimentellen und berechneten Festigkeitswerten für eine Reihe technischer Superlegierungen.

Auch in der Umformtechnik, z.B. in Schmieden und Walzwerken, spielen FEM-Simulationen eine zunehmend wichtige Rolle für die Entwicklung. Neben

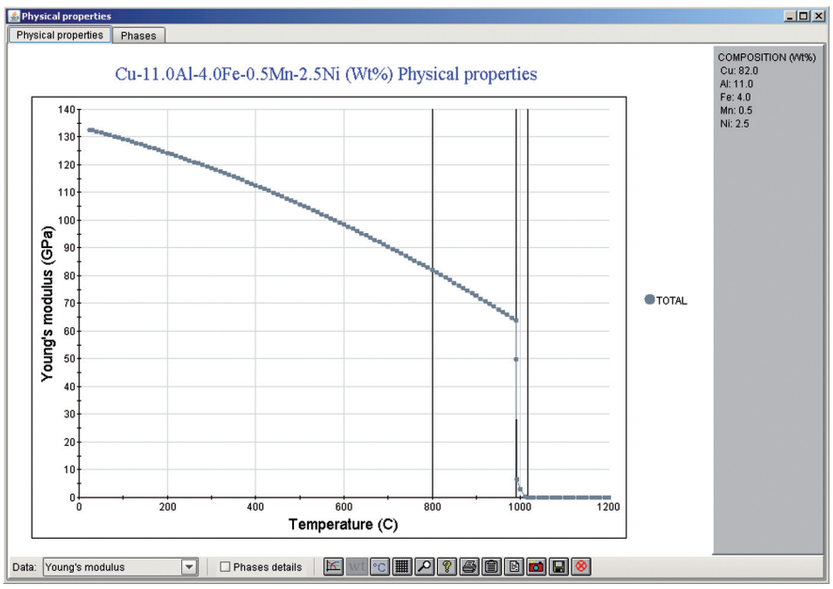


Bild 2: Berechnete Thermo-Physikalische Eigenschaften für eine Kupferlegierung am Beispiel des Elastizitätsmoduls

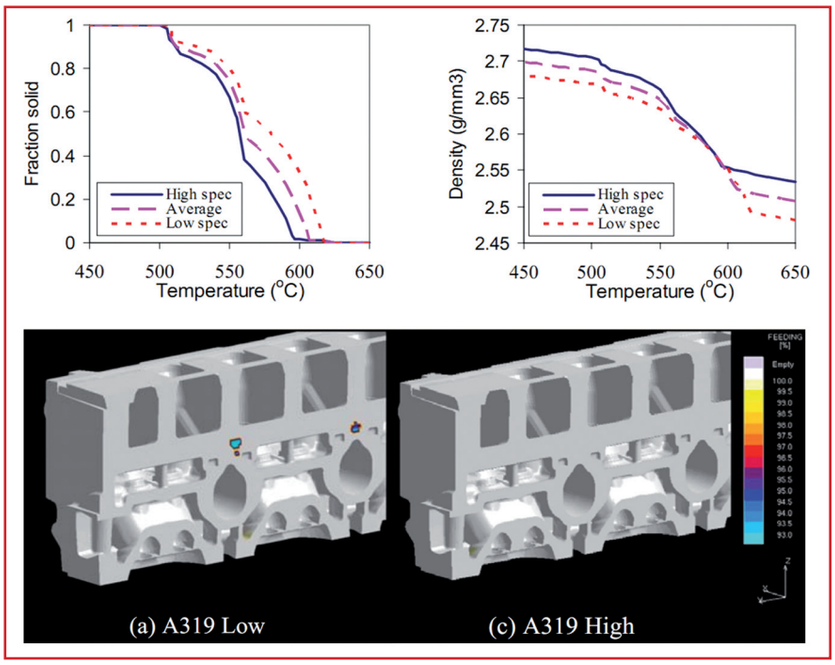


Bild 3: Oben: Einfluss von Analysenschwankungen auf berechnete thermophysikalische Eigenschaften einer A319-Aluminium-Legierung. Unten: Auswirkung der Analysenschwankung auf die möglichen Gießfehler (Feeding-Simulation in Magmasoft).

den bereits beschriebenen thermo-physikalischen Eigenschaften spielen Fließkurven eine herausragende Rolle in der Umformsimulation. Fließkurven stellen den Zusammenhang zwischen Fließspannung, Umformgrad, Umformgeschwindigkeit und Temperatur dar – die experimentelle Ermittlung dieser Daten für unterschiedliche Werkstoff-Varianten ist kosten- und zeitintensiv. In Ergänzung zu den oben beschriebenen Berechnungen der Festigkeit können mit einem vereinfachten Modell auch Fließkurven berechnet werden: Wesentlicher Mechanismus zur Berechnung der Fließkurven ist die Unterscheidung zwischen Versetzungsgleiten für verfestigende und Versetzungsklettern für entfestigende Fließkurven sowie Mischungen daraus [4]. Die Praxiserfahrungen mit den berechneten Werkstoffdaten für die Umformsimulation haben dazu geführt, dass auf diesem Gebiet führende FEM-Simulationssysteme, wie z.B. Forge [7], Simufact, Deform und Qform mittlerweile Schnittstellen für die automatisierte Übernahme der benötigten Daten aus der Werkstoffsimulation anbieten.

Zusammenfassung und Ausblick

Die Berechnung von Werkstoffdaten ist heute für viele metallische Legierungen möglich – allerdings mit unterschiedlich ausgeprägter Breite und unterschiedlichem Reifegrad. In vielen Bereichen hat die Werkstoffsimulation bereits einen Einzug in die industrielle Praxis gehalten. Sie liefert einen Beitrag zur Effizienzsteigerung bei der Entwicklung und Optimierung von metallischen Werkstoffen und Verarbeitungsprozessen. Die Anzahl aufwändiger experimenteller Untersuchungen kann deutlich reduziert werden. Deshalb wird die produktorientierte Entwicklung von Werkstoffen vor allem dort möglich, wo leicht Einfluss auf die chemische Zusammensetzung genommen werden kann, z.B. in Gießereien und bei Produzenten von Halbzeugen. Wegen der engen Verknüpfung zwischen Werkstoff und Verarbeitungsprozessen sowie durch den zunehmenden Einsatz der FEM-Simulation mit erforderlichen, sogenannten Materialkarten bietet die Werkstoffsimulation auch auf diesem Gebiet eine effiziente Lösung für steigende Anforderungen.

Literatur

[1] N. Saunders, A.P. Miodownik, CALPHAD – Calculation of Phase Diagrams, Pergamon Materials Series vol.1, ed. R.W. Cahn (Oxford: Elsevier Science,1998).
[2] N. Saunders, M. Fahrmann, C.J. SMALL: The application of CALPHAD calculations to Ni-based superalloys. ROLLS ROYCE PLC-REPORT-PNR, 2000
[3] Z. Guo, N. Saunders, E. Hepp and J.P. Schillé, Modelling of material properties - A viable solution to the lack of material data in casting simulation, in: 5th Int. Conf. on Solidification Processing, 23-25 July, 2007, Sheffield, U.K.
[4] Z. Guo, N. Saunders, J.P. Schillé, A.P. Miodownik: Modelling High Temperature Flow Stress Curves of Titanium Alloys. Chongping (2008) MRS Conference
[5] U. Diekmann: Calculation of Steel Data using JMATPRO. Lecture, Comat, 2012. Plzen, CZ
[6] Z. Guo, R. Turner, A.D. Da Silva, N. Saunders, F. Schroeder, P.R. Cetlin, J.P. Schillé, Introduction of Materials Modelling into Processing Simulation, Materials Science Forum Vol. 762 (2013) pp 266-276
[7] A. Tewes, R. Rech, N. Müller, P. Wolf: The Open Die Forging Shop of the Future: Three Years of Experience with the Virtual Production Planning at Buderus Edelstahl, Lecture, IFM 2014, Tokyo

(1) Uwe Diekmann, Metatech GmbH

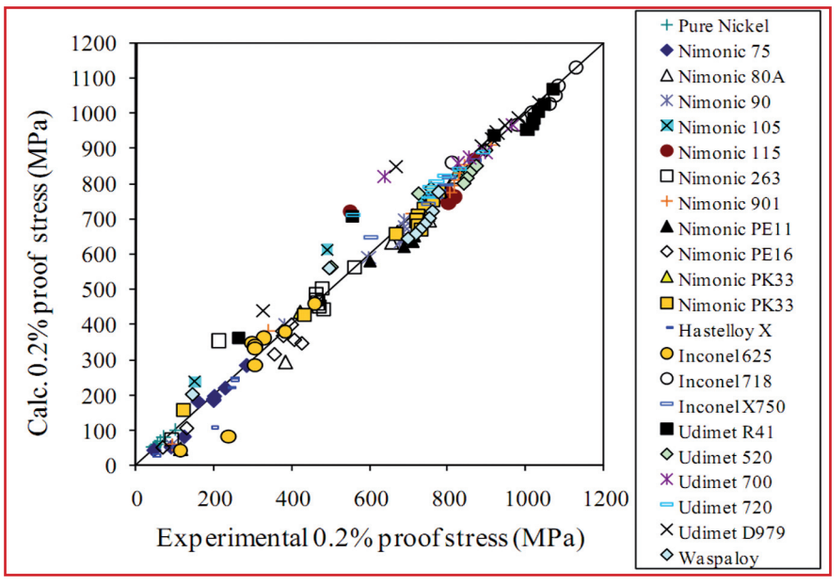


Bild 4: Vergleich zwischen berechneter $R_{p\,0,2}$ Dehngrenze aus JMatPro und gemessenen Werten für unterschiedliche technische Nickel-Superlegierungen im Temperaturbereich zwischen Raumtemperatur und 1.000 °C.