

# Modellierung und Simulation zur Qualitätsverbesserung und Effizienzsteigerung

Seit einigen Jahren kooperiert die AMAG mit dem Institut für Werkstoffwissenschaft und -technologie der TU Wien unter der Leitung von Prof. Ernst Kozeschnik, um die Software MatCalc und eingebundene Datenbanken als geeignetes Modellierungstool den Legierungen und Prozessen der AMAG anzupassen.

Vor dem Computerzeitalter beruhte die Entwicklung von Legierungen auf empirischen Korrelationen von chemischer Zusammensetzung, den vorgenommenen Prozessschritten und den sich daraus ergebenden Produkteigenschaften. Das Verständnis des Verhaltens von Polykristallen in Verbindung mit der Mikrostruktur, der Ausscheidungssequenz und dem Verformungsmechanismus unter Zuhilfenahme von theoretischen Modellen wird zunehmend wichtiger zur Optimierung und Entwicklung der Werkstoffe der Zukunft. Rechnerische Methoden, basierend auf physikalischen Gesetzen, können kosten- und zeitsparend zur Beurteilung von Prozessparametern eingesetzt werden. AMAG arbeitet dabei bevorzugt mit MatCalc, einem thermo-kinetischen Softwarepaket, das unter anderem die Vorhersage von Ausscheidungsvorgängen ermöglicht [1-3].

Ausscheidungen entstehen, wenn ein homogener Mischkristall durch Abschrecken im homogenen, aber übersättigten Zustand verbleibt, obwohl er laut dem spezifischen Gleichgewichtsphasendiagramm im zweiphasigen Zustand vorliegen sollte. Doch nicht nur an Legierungselementen liegt eine Übersättigung vor, sondern auch an freien Gitterplätzen im Kristallgitter. Diese Leerstellen sind thermodynamisch

notwendig, da sie für den Stofftransport in realen Systemen unabdingbar sind. Dabei besteht für jede Temperatur eine bestimmte Gleichgewichtskonzentration, die mit steigender Temperatur zunimmt. Durch den Abschreckprozess werden Überschussleerstellen (sogenannte Abschreckleerstellen) im System „eingefroren“ und erhöhen die Diffusion, wodurch sich der übersättigte Mischkristall in metastabile Phasen separieren kann. Abhängig von Temperatur und Zeit wandeln sich metastabile Phasen in stabile Phasen und somit in den Gleichgewichtszustand um.

Der Einfluss der Abschreckleerstellen wurde nun erstmals mit einem entsprechenden theoretischen Modell in MatCalc implementiert und ermöglicht die realitätsnahe Beschreibung der kohärenten ersten metastabilen Ausscheidungen [4]. Diese Ausscheidungen verursachen im umgebenden Aluminium-Gitter Kohärenzspannungen, die eine freie Versetzungsbewegung erschweren und somit bereits zu einem Anstieg der Festigkeit führen. Aushärtbare Aluminiumlegierungen bilden nach dem Abschreckprozess sehr fein verteilte, kleine, kohärente Ausscheidungen bei Raumtemperaturauslagerung und bei erhöhten Auslagerungstemperaturen eher weniger, größere, semi- oder inkohärente Teilchen. Allein durch gezielte Wärmebehandlungen

ist es bei bestimmten Legierungen möglich, Eigenschaftsänderungen des Werkstoffes herbeizuführen.

Die klassische T6-Wärmebehandlung, der einfachste Fall des Aushärtens, besteht aus den Prozessschritten Lösungsglühen - Abschrecken - Warmauslagern. Ausgehend von einer gegebenen Legierungszusammensetzung ermöglicht MatCalc Prognosen zur Optimierung der Wärmebehandlung für bestimmte geforderte Eigenschaftsprofile. Nachfolgend wird die Wärmebehandlung für Ausscheidungshärten, bestehend aus den in Abbildung 1 dargestellten Prozessschritten Lösungsglühen, Abschrecken, Zwischenwärmen und Warmauslagern sowie die Entwicklung der Streckgrenze einer AA6016 Legierung mittels Simulation gezeigt.

Der erste Schritt ist das Lösungsglühen. Dabei gehen Mg und Si im Aluminiummischkristall in Lösung. Im realen Prozess wird die Aluminiumlegierung mit 0,4g ew.% Mg und 1,0 gew.% Si bis zur Temperatur des Aluminiummischkristalls erwärmt und dort gehalten. Diese Schritte sind in der Simulation bei gleicher chemischer Zusammensetzung der Legierung nicht notwendig, da die Eingabe der Starttemperatur für den Abschreckprozess ausreicht, um die Gleichgewichtssituation des Mischkristalls mit den gelösten Legierungselementen zu berechnen (Ausgangssituation der Simulation). Würde nun die Legierung nach dem Lösungsglühen sehr langsam abgekühlt werden, so würde sich gemäß Phasendiagramm die Mg<sub>2</sub>Si Phase ausscheiden. Ein solches Gefüge würde schlechtere mechanische Eigenschaften aufweisen, als dies durch ausreichend schnelle Abkühlung

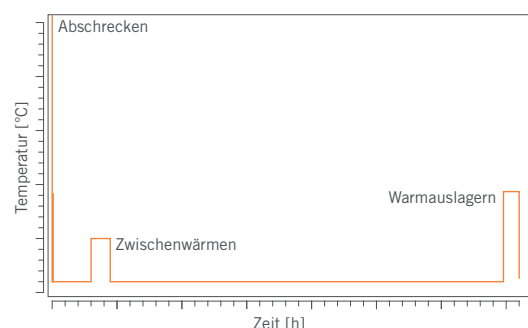


Abbildung 1: Temperaturprofil - Ausscheidungshärten

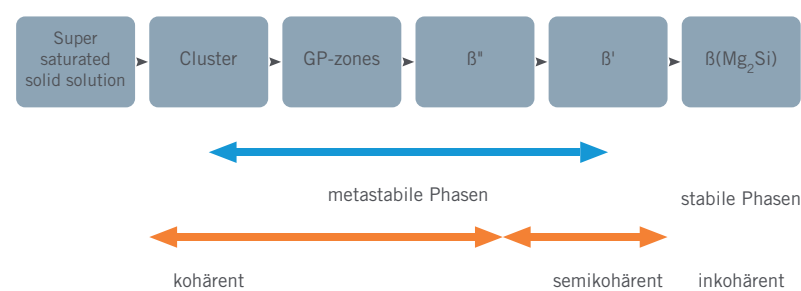


Abbildung 2: Ausscheidungssequenz Al-Mg-Si Legierung

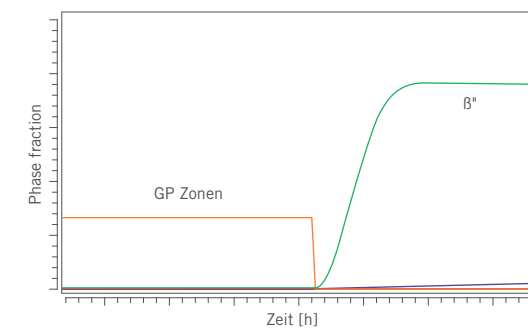


Abbildung 3: Phasenfraktion während Wärmebehandlung - Aushärten

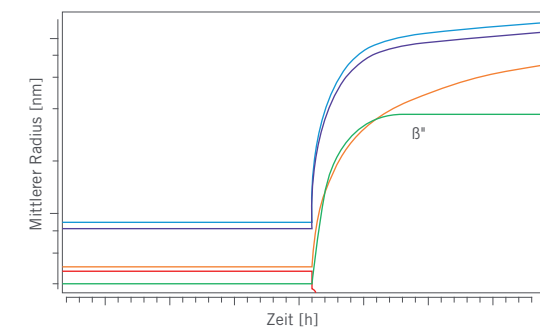


Abbildung 4: mittlere Teilchen-radien der Ausscheidungen

lung und die dadurch bedingte Bildung von metastabilen, feinst verteilten und sehr kleinen (ø wenige Nanometer) Mg-Si Co-Cluster und GP-Zonen der Fall ist. Die generell akzeptierte Ausscheidungssequenz für Al-Mg-Si Legierungen lautet: (Abb. 2)

Die Bildung der Cluster und der GP-Zonen erfolgt bereits bei Raumtemperatur. Im Temperaturgebiet von ca. 100 - 220°C tritt die beta\* Phase auf. Diese nadelförmigen Mg<sub>5</sub>Si<sub>6</sub> Ausscheidungen verursachen durch ihre größere Ausdehnung und die damit verbundene größere Gitterverzerrung den größten Härtesteigerungseffekt. Eine weitere Auslagerungsbehandlung führt zur Bildung der teilkohärenten, metastabilen stäbchenförmigen beta' Phase. Letztendlich bildet sich die Gleichgewichtsphase beta mit der Zusammensetzung Mg<sub>2</sub>Si. Diese inkohärente Phase trägt nur mehr wenig zur Festigkeit der Al-Mg-Si Legierungen bei.

Während der Zwischenwärmstufe werden die Co-Cluster wieder gelöst und dadurch erfolgt auch eine Stabilisierung der beta\* Phase. In Abbildung 3 ist der Phasenanteil ersichtlich. Deutlich erkennbar sind die Auflösung der GP-Zonen und der rasche Anstieg des Phasenanteils der beta\* Phase.

Die mittleren Teilchenradien sind in Abb. 4 dargestellt. Die Abbildung zeigt, dass spätere semi- und inkohärente Ausscheidungen ebenfalls während der Warmauslagerung zusammen mit der beta\* Phase wachsen, jedoch sind die Teilchendichten um Größenordnungen geringer als die der beta\* Phase. Somit kann der größte Anteil der Festigkeitssteigerung eindeutig der beta\* Phase zugerechnet werden.

### Vorhersage der Streckgrenze

Die in MatCalc implementierten Festigkeitsmodelle ermöglichen auf Basis der

Teilchenanzahlen und mittleren Radien der individuellen Ausscheidungen die Modellierung der Entwicklung der Streckgrenze (Rp<sub>0,2</sub>) unter gegebenen Temperatur/Zeit - Bedingungen [5]. (Abb. 5)

Die Gesamtverfestigung sigma<sub>total</sub> wird durch folgenden additiven Zusammenhang ermittelt:

$$\sigma_{total} = \sigma_i + \sigma_{ss} + \sigma_p$$

- sigma<sub>i</sub> - intrinsische Festigkeit Aluminium
- sigma<sub>ss</sub> - Mischkristallverfestigung
- sigma<sub>p</sub> - Ausscheidungshärtung

Somit ist es möglich, ausgehend von der chemischen Legierungszusammensetzung, die Auswirkung geänderter Herstellungsparameter auf die statistische Festigkeit vorherzusagen. ■

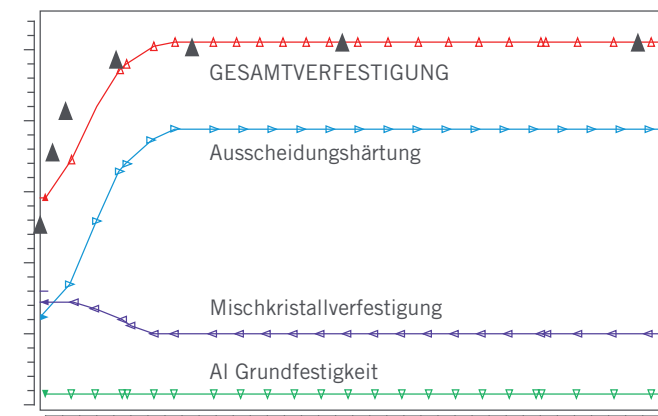


Abbildung 5: Entwicklung der Streckgrenze (Simulation + Experiment)

LITERATURVERZEICHNIS  
 [1] Svoboda J., Fischer F.D., Fratzl P., Kozeschnik E.; Mater. Sci. Eng. A 385 (1-2) (2004) 166  
 [2] Kozeschnik E., Svoboda J., Fischer F.D.; Calphad, 28 (2005) 379  
 [3] Kozeschnik E., Svoboda J., Fratzl P., Fischer F.D.; Mater. Sci. Eng. A 385 (1-2) (2004) 157  
 [4] Fischer F.D., Svoboda J., Appel F. and Kozeschnik E., Acta Mater, 59 (2011) 3463  
 [5] Lang P., Falahati A., Povoden-Karadeniz E., Ahmadi M.R., Warczok P., Kozeschnik E., Proceedings of the 12th International Conference on Aluminium Alloys (2010) 1443



Die Anwendung von thermodynamischen Simulationen gewinnt zusehends an Bedeutung. Die Kombination von langjährigen, empirischen Erfahrungen aus Forschung und Produktion mit den Möglichkeiten der quantitativen Vorhersage mittels Simulation erschließt verbesserte Möglichkeiten zur Feinabstimmung von chemischen Zusammensetzungen und opti-

mierten Prozessparametern für weitere Produktverbesserungen in der AMAG. Gleichzeitig können diese Optimierungen auch zur Steigerung der Energieeffizienz durch Vermeidung von unnötigen Prozesszeiten beitragen.

Univ.-Prof. Dr. Ernst Kozeschnik  
 wissenschaftlich-technologischer  
 Beirat der AMAG

