

Sachbericht zum Verwendungsnachweis

Teil I: Kurzbericht

Verbundprojekt

Digitale Strategie zur Entwicklung von neuen, heißrissewiderstandsfähigen Al-Pulverlegierungen für SLM

Teilvorhaben

Molekulardynamische Untersuchung des Heißrissewiderstands in Al-Pulverlegierungen unter Berücksichtigung von SLM-spezifischen Randbedingungen

Akronym: DiStAl

Förderkennzeichen

13XP5115B

Laufzeit

01.02.2022 - 31.01.2024

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Zuwendungsempfänger

Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF)
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 32
70569 Stuttgart

Projektleiter

Prof. Dr.-Ing. Stefan Weihe

Teil I: Kurzbericht (max. 2 Seiten)

1. Ursprüngliche Aufgabenstellung sowie wissenschaftlicher und technischer Stand, an den angeknüpft wurde

Das Leichtbaupotenzial von Aluminiumlegierungen kann im Laser Powder Bed Fusion Prozess (PBF-LB/M) nicht vollständig ausgenutzt werden, da die Materialauswahl auf einige wenige Legierungen begrenzt ist welche nur ein geringes Produkt von Festigkeit und Bruchdehnung besitzen. Ein zentrales Hindernis dafür stellt der Heißrisswiderstand hochfester Aluminiumlegierungen dar, der die Verarbeitbarkeit weitestgehend auf die aktuell verwendeten eutektischen bzw. naheutektischen Legierungen AISi12 und AISi10Mg beschränkt. Heißrisse entstehen bei der Erstarrung während des Phasenübergangs von flüssig nach fest, genau zu dem Zeitpunkt, an dem die Schmelze keine Duktilität aufweist und durch die, bei der Abkühlung induzierten, Dehnung versagt. Dieser Zeitpunkt bzw. das Entstehen des Risses ist wiederum abhängig von der Werkstoffzusammensetzung und von den Abkühlbedingungen, die durch den Prozess vorgegeben werden. Einen Ansatz diese Wirkzusammenhänge nachvollziehen zu können, bietet die interdisziplinäre Entwicklung einer Ontologie sowie eine skalenübergreifende Simulationsmethodik.

Ziel des Projekts ist es, eine solche digitale Strategie zu entwickeln, die den Heißrisswiderstand von binären Al-Mg-Legierungen bewertbar macht. Im Kern steht dabei die Ausarbeitung einer umfassenden Ontologie, die die Wirkzusammenhänge des PBF-LB/M-Prozesses abbildet. Auf dieser Grundlage wird ein skalenübergreifender digitaler Simulationsworkflow erarbeitet, welcher in einen digitalen Zwilling der zu bewertenden Legierung resultiert und dessen Heißrisswiderstand bewertet. Anhand dieses Simulationsworkflows lässt sich die Anwendbarkeit von Legierungen, innerhalb des binären Al-Mg-Legierungssystems, für den PBF-LB/M-Prozess beurteilen. Perspektivisch soll die so entwickelte Methode auch auf komplexere Legierungssysteme und langfristig auch auf andere Werkstoffgruppen wie Nickel-Basis-Legierungen, Stähle und Titan übertragen werden.

Im Teilprojekt des IMWF werden Molekulardynamik (MD)-Simulationen zu zweiphasigen Zugversuchen, zu Versagen durch Kavitation und zum Dendritenwachstum durchgeführt, deren Ergebnisse, wie beispielsweise die zur Entstehung von Kavitationsporen erforderliche Spannung in Abhängigkeit der Mg-Konzentration, in die Aufstellung eines Kriteriums zur Heißrissentstehung einfließen können.

2. Ablauf des Vorhabens

Der Arbeitsablaufplan des Projektes DiStAl ist in Bild 1 dargestellt. Die darin definierten Zeitfenster wurden weitgehend eingehalten. Bezüglich des in der Gesamtvorhabenbeschreibung definierten Finanzierungsplans gab es keine Abweichungen.

Am IMWF wurden erfolgreich MD-Simulationen durchgeführt. Bei den Simulationsreihen zu den zweiphasigen Zugversuchen wurden hierbei die Geometrie der Grenzfläche (Zwei-Temperaturen-Modell / Entmischte Strukturen), die Randbedingungen (mit / ohne Querkontraktion), die Dehnraten, die thermodynamischen Ensembles und die interatomaren Al-Mg-Potentiale variiert.

Weiterhin wurden MD-Simulationsreihen zur Entstehung und zum Wachstum von Kavitationsporen für Al-Mg-Legierungen mit unterschiedlichen Mg-Konzentrationen durchgeführt.

Unterschiedliche MD-Simulationsstrategien zur Nachbildung des Dendritenwachstums wurden getestet. Die grundlegende Strategie bestand darin, die unterschiedlichen Schmelztemperaturen von reinem Al und einer Al-Mg-Legierung zu nutzen. Es zeigte sich, dass eine Kristallisation nur dann festgestellt werden konnte, wenn ein Temperaturgradient im System vorhanden war (Ein reiner Konzentrationsgradient reichte nicht aus).

Ein weiteres Ziel war es, die Simulationsmethoden der MPA (Phasenfeld-Simulationen und Finite-Elemente-Methode-Simulationen) und des IMWF (Molekulardynamik-Simulationen) zusammenzuführen. Aufgrund einer Neustrukturierung des Workflows konnte der ursprünglich geplante Testlauf und die Implementierung des Workflows noch nicht durchgeführt werden. Hierdurch resultiert eine Verschiebung im Zeitplan, wodurch der Workflow jedoch zweckmäßig und umsetzbar definiert ist.

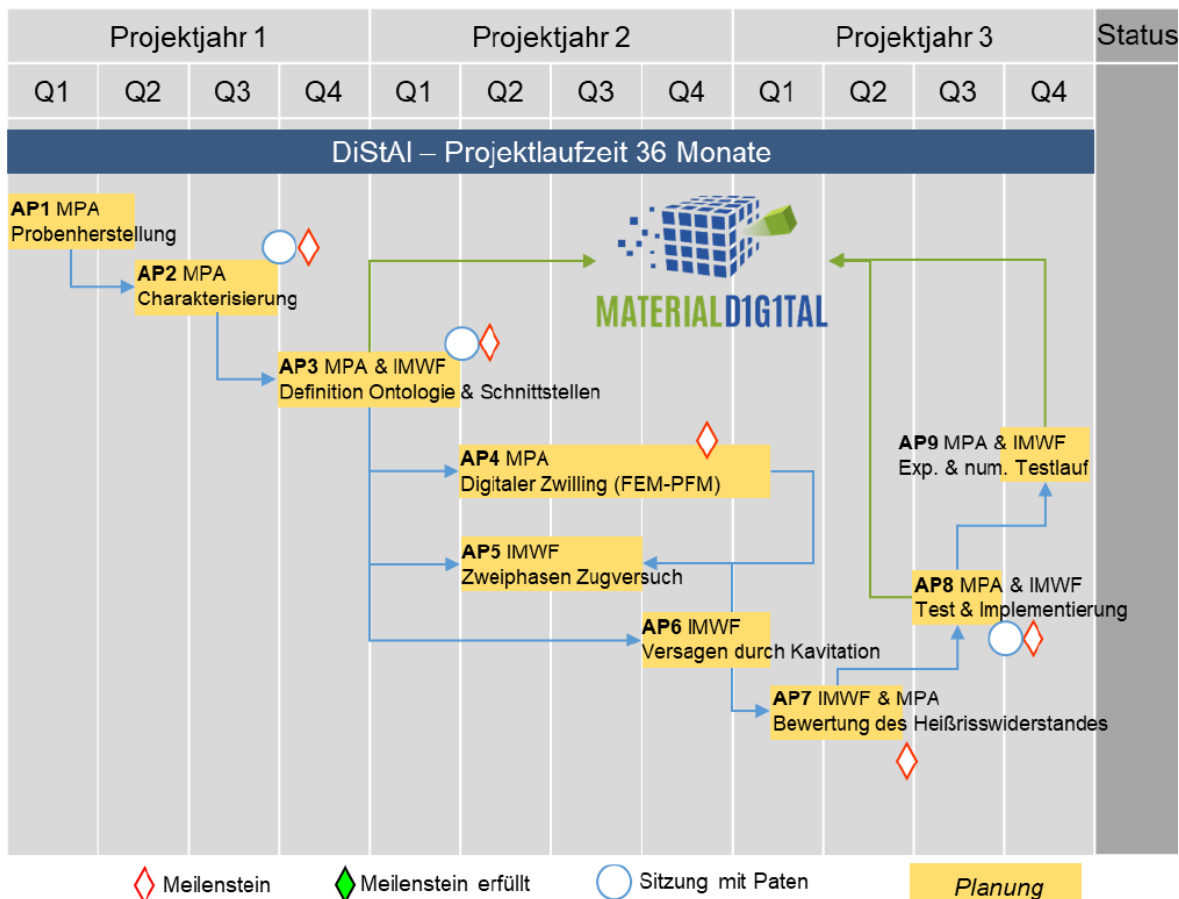


Bild 1: Arbeitsablaufplan des Forschungsprojekts DiStAI

3. Wesentliche Ergebnisse sowie ggfs. Zusammenarbeit mit anderen Forschungseinrichtungen

Die aus den MD-Simulationsreihen zu den zweiphasigen Zugversuchen erhaltenen Spannungs-Dehnungs-Kurven zeigen eine deutliche Dehnratenabhängigkeit: Je langsamer die Dehnrade ist, umso kleiner werden die Zugfestigkeit und die Bruchdehnung.

Bei den Simulationsreihen mit hydrostatischen Zugversuchen zur Porenbildung in flüssigen Al-Mg-Schmelzen wurde eine nur geringe Dehnratenabhängigkeit der Spannungs-Dehnungs-Kurven gefunden.

Der Einfluss der Magnesiumkonzentration auf die zur Entstehung einer Pore erforderliche Spannung wurde in weiteren MD-Simulationen untersucht. Mit steigender Mg-Konzentration nimmt die zur Entstehung einer Pore erforderliche Spannung stark ab (von 1127 MPa für reines Aluminium bis auf 188 MPa bei 34,5 at.% Magnesium). Hierbei ist zu beachten, dass es sich bei diesen Simulationen um eine Flüssigkeit ohne freie Oberflächen handelt. Dies entspricht dem Fall einer Schmelze, die vollständig von einem Festkörper umschlossen ist. Dies ist ein sehr wesentliches Ergebnis und kann in Finite-Elemente-Methode-Simulationen (auch in CFD- und Phasenfeld-Simulationen) als Kriterium für die Entstehung von Kavitationsporen und zur Bestimmung der Kavitationsporendichte verwendet werden: Wenn die Spannung an einem Ort (x,y,z) mit der lokalen Magnesium-Konzentration $c_{Mg}(x,y,z)$ die Grenzkurve übersteigt, entsteht eine Pore.

Es konnte gezeigt werden, dass das Dendritenwachstum, verbunden mit der Entstehung einer Erstarrungspore, in einem System aus Aluminium und Magnesium durch die Verwendung eines Temperaturgradienten mittels MD-Simulationen darstellbar ist. Diese Erkenntnisse bieten eine solide Grundlage für zukünftige Arbeiten und Forschungen in diesem Bereich.

Der Aufbau des Workflows wurde in Zusammenarbeit mit der MPA Universität Stuttgart durchgeführt. Hierbei übernahm das IMWF die Erstellung der molekulardynamischen Simulationsmodelle, Die weiteren für den Workflow benötigten Modelle (ThermoCalc, Finite-Elemente-Methode-Simulation, Phasenfeldsimulation sowie Auswertung mit Python) wurden von der MPA erstellt.

Sachbericht zum Verwendungsnachweis

Teil II: Eingehende Darstellung

Verbundprojekt

Digitale Strategie zur Entwicklung von neuen, heißrisswiderstandsfähigen AI-Pulverlegierungen für SLM

Teilvorhaben

Molekulardynamische Untersuchung des Heißrisswiderstands in AI-Pulverlegierungen unter Berücksichtigung von SLM-spezifischen Randbedingungen

Akronym: DiStAl

Förderkennzeichen

13XP5115B

Laufzeit

01.02.2022 - 31.01.2024

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Zuwendungsempfänger

Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF)
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 32
70569 Stuttgart

Projektleiter

Prof. Dr.-Ing. Stefan Weihe

Teil II: Eingehende Darstellung

1 Darstellung der Verwendung der Zuwendung sowie der erzielten Ergebnisse

Knappe Übersicht des Projekts

Das Ziel des Projekts DiStAl ist es, eine digitale Strategie zur Entwicklung neuer Aluminiumpulverlegierungen für laser- und pulverbettbasierter Additiver Fertigung (PBF-LB/M) zu erarbeiten. Die Herausforderung für die Entwicklung besteht dabei in der Vermeidung von Heißrissentstehung im Prozess.

Der Ablauf der Forschungs- und Entwicklungsarbeiten ist für das Verbundprojekt DiStAl mit Beteiligung der Materialprüfungsanstalt (MPA) Universität Stuttgart und des Instituts für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF) Universität Stuttgart entsprechend der Gesamtvorhabensbeschreibung (GVB) in die folgenden Hauptschritte gegliedert:

- AP1 Probenherstellung (MPA)
- AP2 Charakterisierung der gefertigten Proben (MPA)
- AP3 Definition der Ontologie und Schnittstellen zur Plattform und Modellen (MPA & IMWF)
- AP4 Digitaler Zwilling des Prozesses und Materials (MPA)
 - AP4.1 Kalibrieren & validieren des FEM-Modells (MPA)
 - AP4.2 Kalibrieren & validieren des Phasenfeld-Modells (MPA)
 - AP4.3 Untersuchung der Einflussfaktoren auf den Heißrisswiderstand (MPA)
- AP5 Molekulardynamiksimulation: Zweiphasiger Zugversuch (IMWF)
- AP6 Molekulardynamiksimulation: Versagen durch Kavitation (IMWF)
- AP7 Digitale Strategie: Bewertung des Heißrisswiderstandes (MPA & IMWF)
- AP8 Test und Implementierung des Workflows in die Plattform (MPA & IMWF)
- AP9 Testlauf und Validierung der digitalen Optimierungsstrategie (MPA)

Die digitale Strategie des Projektes zur Reduktion von Heißrissen setzt sich aus der Verwendung von unterschiedlichen Simulationsmethoden zusammen, die einzeln bzw. verknüpft zu einem Workflow den Heißrisswiderstand eines digitalen Zwillings von Prozess und Aluminiumpulverlegierung bewerten sollen.

Hierzu wurden am IMWF Molekulardynamik (MD)-Simulationen zu zweiphasigen Zugversuchen, zu Versagen durch Kavitation und zum Dendritenwachstum durchgeführt, deren Ergebnisse im Folgenden zusammengefasst werden. Die MD-Ergebnisse, wie z.B. die zur Entstehung von Kavitationsporen erforderliche Spannung, können in die Aufstellung eines Kriteriums zur Heißrissentstehung einfließen.

Die am IMWF durchgeführten Arbeiten entsprechen in den wesentlichen Punkten der im Antrag dargestellten Planung. Die Erreichung der gesetzten Meilensteine sind im Schlussbericht der MPA erläutert.

Die MD-Simulationen lieferten grundlegende Erkenntnisse bezüglich des Verhaltens an Fest-Flüssig-Grenzflächen, zum Dendritenwachstum und zur Poren- bzw. Rissbildung während des Erstarrungsprozesses von Al-Mg-Legierungen, jeweils auf atomare Skala.

Im Folgenden werden die erzielten Ergebnisse gemäß den Arbeitspaketen gegliedert dargestellt.

AP3: Definition der Ontologie und Schnittstellen

In diesem Arbeitspaket wurde in Zusammenarbeit mit der MPA Universität Stuttgart ein Konzept zur Kombination der Ergebnisse aller Skalen für die weitere Bearbeitung eines digitalen Zwillings erarbeitet. Auf Basis der Ergebnisse der vorherigen Arbeitspakete wird eine Ontologie entwickelt, um den Prozess, das Material und die Einflussfaktoren systematisch zu beschreiben. In einem Austausch mit der Plattform MaterialDigital wurden die Nutzung, die Zielgruppe und die Kompetenzfragen für die Ontologie diskutiert. Einige Beispiele der Kompetenzfragen sind nachfolgend aufgelistet:

- Wie ändert sich die Heißrissanfälligkeit mit der Variation eines bestimmten Prozessparameters?
- Wie beeinflussen die Prozessparameter und der Materialeinsatz die Mikrostruktur?
- Was sind die möglichen Ursachen für die Entstehung der Heißrisse?
- Was sind die material- oder prozessbezogenen Ansätze zur Vermeidung der Heißrisse?

Ein Simulationsworkflow hilft hierbei, skalenübergreifend die verschiedenen Simulationen zu kombinieren, um eine digitale Beschreibung der Heißrissentstehung zu ermöglichen. Die Schnittstelle zwischen verschiedenen Simulationen ist in Bild 1 dargestellt. Die Heißrisse werden nach dem RDG-Kriterium (M. Rappaz, J.-M. Drezet, and M. Gremaud 1999, [13]) beschrieben. Die Heißrisse können direkt aus dem Erstarrungspfad, der mit ThermoCalc modelliert wird, beschrieben werden (blauer Pfad). Eine weitere Beschreibung der Heißrisse erfolgt durch die Ermittlung der Abkühlrate R und des Temperaturgradienten G . Diese können aus einem Python-Skript, das mit der Finite-Elemente-Methode (FEM)-Simulation verknüpft ist, berechnet werden (grüner Pfad). Darüber hinaus können diese berechneten G und R als Input für die Phasenfeldsimulation zur Ermittlung der Dendritenarmabstände, der Morphologie der Dendriten und der Legierungskonzentration im Schmelzfilm verwendet werden. Diese Informationen, zusammen mit dem Gleichgewicht bzw. der Scheil-Simulation aus ThermoCalc, können Basisdaten für die Molekulardynamiksimulationen liefern, die anschließend mittels eines RDG die Heißrisse beschreiben kann (gelber Pfad).

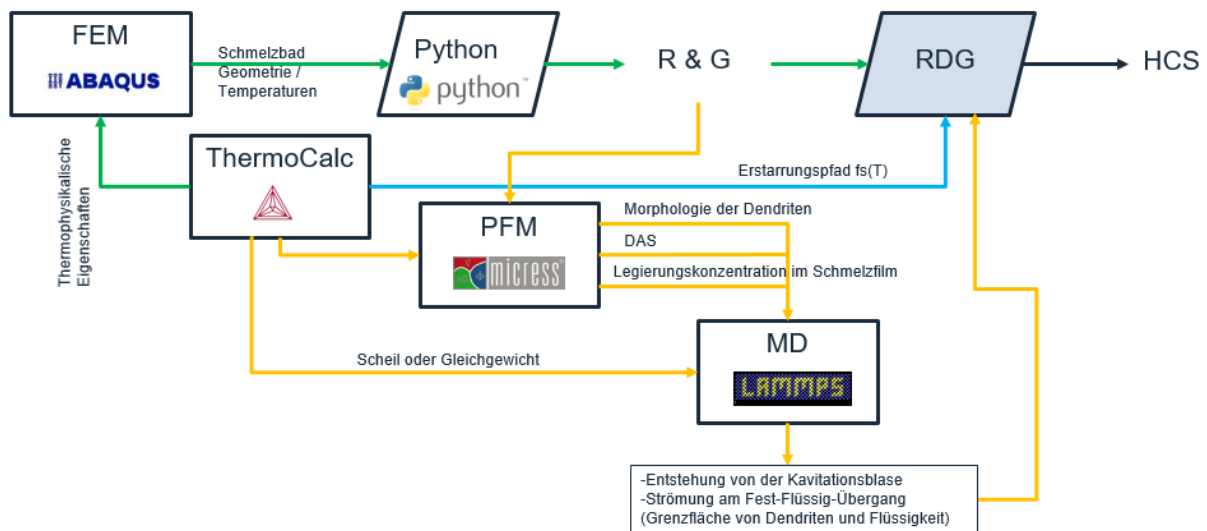


Bild 1: Übersicht der Schnittstellen zwischen den Simulationen

AP5: Molekulardynamiksimulation: Zweiphasige Zugversuche (IMWF)

Allgemeines zu MD

Für die Molekulardynamik-Simulationen wurde die Software LAMMPS [1] und die frei verfügbaren atomistischen Wechselwirkungspotentiale für Al-Mg (LAMMPS und National Institute of Standards and Technology (NIST) [2]-[5]) verwendet. Bei den interatomaren Potentialen handelt es sich um zwei Embedded-Atom-Method (EAM) Potentiale und ein Modified-Embedded-Atom-Method (MEAM) Potential:

Embedded-Atom-Method (EAM) Potentiale:

- AlMg.liu.eam.alloy [3] X.-Y. Liu, and J.B. Adams (1998), "Grain-boundary segregation in Al-10%Mg alloys at hot working temperatures", Acta Materialia, 46(10), 3467-3476.
- Al-Mg.eam.fs [4] M.I. Mendeleev, M. Asta, M.J. Rahman, and J.J. Hoyt (2009), "Development of interatomic potentials appropriate for simulation of solid-liquid interface properties in Al-Mg alloys", Philosophical Magazine, 89(34-36), 3269-3285.

Modified-Embedded-Atom-Method (MEAM) Potential:

- AlMg.meam [5] Y.-M. Kim, N.J. Kim, and B.-J. Lee (2009), "Atomistic Modeling of pure Mg and Mg-Al systems", Calphad, 33(4), 650-657.

Zur Visualisierung und Analyse der Simulationsergebnisse wurde die Software OVITO [6] eingesetzt.

Bestimmung der Schmelztemperatur

Die Bestimmung der Schmelztemperatur erfolgte anhand einer Fest-Flüssig-Grenzfläche innerhalb der Simulationsbox (siehe Bild 2) gemäß folgender Vorgehensweise (Koexistenzmethode) [7]:

1. Konstruktion einer Fest-Flüssig-Grenzfläche in der Mitte der Simulationszelle am geschätzten Schmelzpunkt.
2. Das System wird über einen isenthalpischen Barostat nach Nosé-Hoover-Art (NPH) ins Gleichgewicht gebracht.
3. Die Systemtemperatur nähert sich der Schmelztemperatur an.
4. Bestimmung der Schmelztemperatur über mehrere Iterationen durch Anpassung der Schätztemperatur.

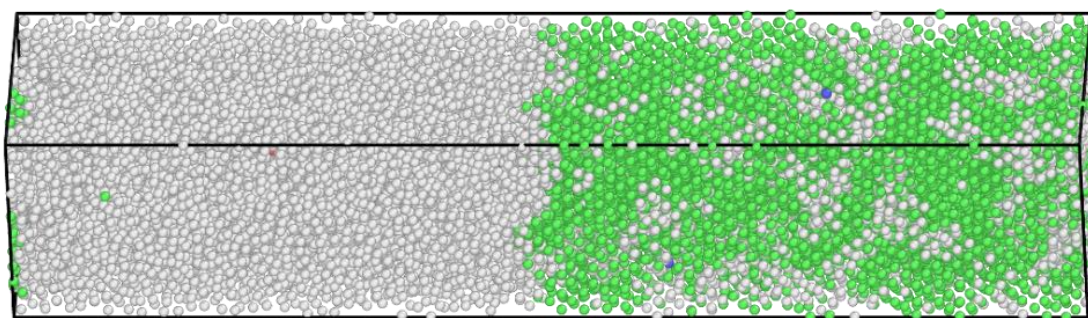


Bild 2: Die Simulationsbox mit den Abmessungen $10 \times 10 \times 50$ Gitterkonstanten ($a = 0.405$ nm) beinhaltet 20000 Al-Atome, die nach ihren Kristallstrukturen gekennzeichnet sind. Die kubisch-flächenzentrierten (FCC)-Strukturen (fest) wurden grün markiert, amorphe Strukturen (flüssig) sind grau gekennzeichnet. Für einige wenige Al-Atome wurden kubisch-raumzentrierte (BCC)-Strukturen detektiert, die blau markiert sind, bzw. hexagonale (HCP)-Strukturen, welche rot gekennzeichnet sind.

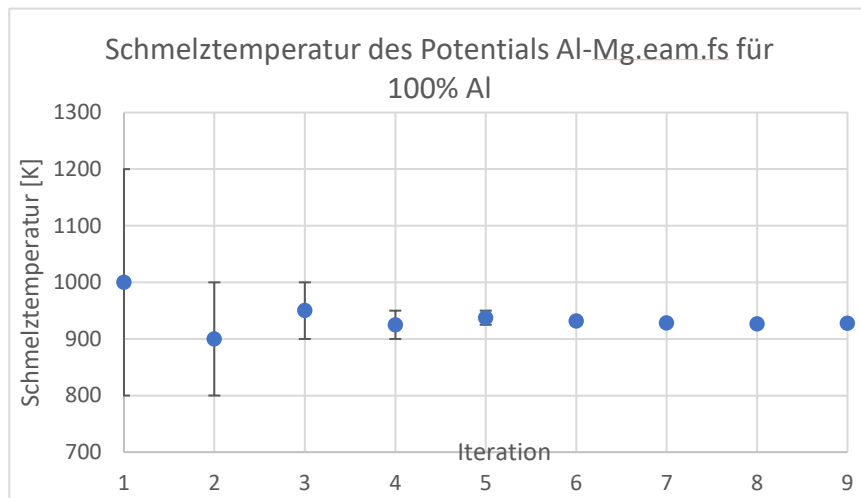


Bild 3: Bestimmung der Schmelztemperatur für reines Al über mehrere Iterationen. Für 100% Al wurde für das Potential Al-Mg.eam.fs eine Schmelztemperatur von $T_M = 927$ K bestimmt (in sehr guter Übereinstimmung mit der realen Schmelztemperatur von Al von 933 K).

Für reines Aluminium (eine Simulationsbox mit 100 at.% Al-Atomen) wurde für das Potential Al-Mg.eam.fs eine Schmelztemperatur von $T_M = 927$ K bestimmt, in sehr guter Übereinstimmung mit der realen Schmelztemperatur von Aluminium von 933 K.

Vergleich der Schmelztemperaturen mit interstitiellem bzw. substitutionellem Mg

Mit der oben beschriebenen Vorgehensweise wurden in zwei Simulationsreihen die Schmelztemperaturen von Al-Mg-Legierungen mit interstitiell bzw. mit substitutionell in das Kristallgitter eingebauten Mg-Atomen für unterschiedliche Mg-Konzentrationen ermittelt. Die Ergebnisse dieser Simulationen sind in Bild 4 dargestellt. Es ist bemerkenswert, dass bei beiden Anordnungen die Schmelztemperatur mit zunehmender Mg-Konzentration abnimmt. Ein weiteres wichtiges Resultat hierzu ist, dass die Schmelzkurve für die substitutionelle Anordnung bei jeder Mg-Konzentration immer oberhalb der Schmelzkurve für die interstitielle Anordnung bleibt. Dies ist auf die Gitterverspannung, welche durch die interstitiell platzierte Magnesiumatome verursacht wird, zurückzuführen. Für Mg-Konzentrationen oberhalb ca. 6,5 at.% wird der Kristall mit interstitiellem Mg instabil, was ebenfalls auf die Gitterverzerrungen zurückzuführen ist; der Kristall mit substitutionellem Mg hingegen bleibt stabil.

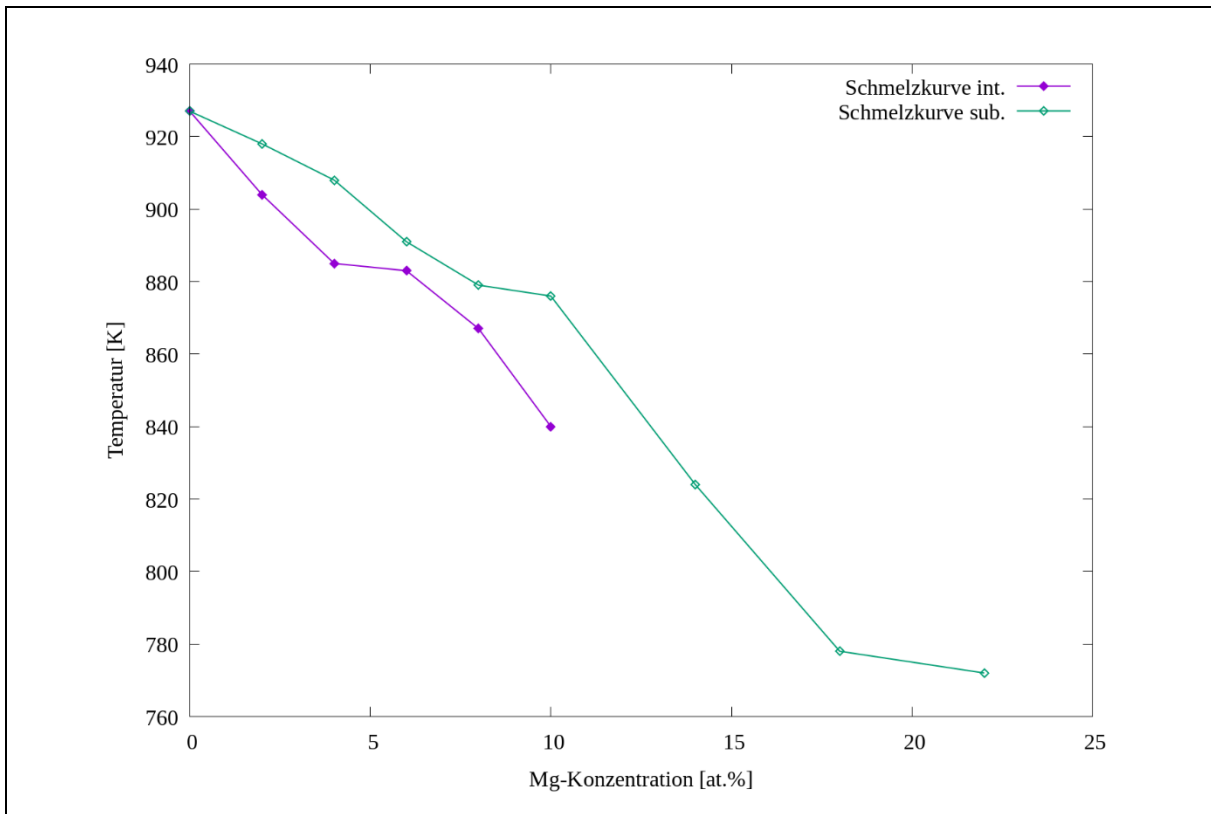


Bild 4: Vergleich der Schmelztemperaturen mit interstitiellem bzw. substitutionellem Magnesium. Mit zunehmender Mg-Konzentration sinkt die Schmelztemperatur ab. Die Schmelzkurve für die substitutionelle Anordnung liegt bei jeder Mg-Konzentration oberhalb der Schmelzkurve für die interstitielle Anordnung.

Aufheizvorgang und spezifische Wärmekapazität c_p von reinem Aluminium

Bei den folgenden Bildern handelt es sich um Schnappschüsse der MD-Simulationsbox bei einem Aufheizvorgang von reinem Aluminium.

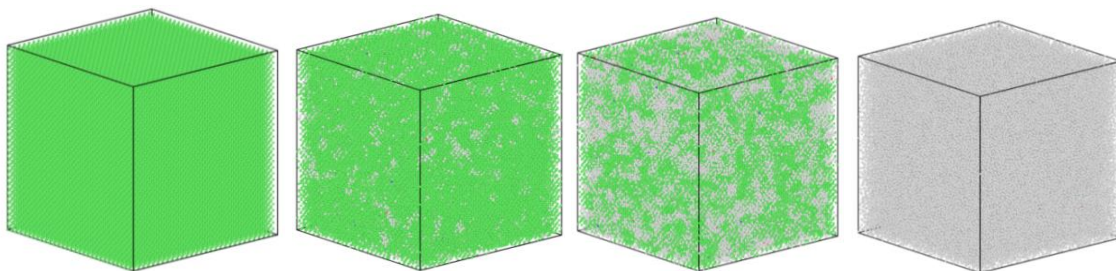


Bild 5a

Bild 5b

Bild 5c

Bild 5d

Bild 5a repräsentiert die Simulationsbox im Anfangszustand. Die Simulationsbox ist nach Kristallstrukturen gekennzeichnet und somit liegt ein perfektes Einkristall vor. Die FCC-Strukturen wurden grün markiert. In den darauffolgenden Bildern 5b bis 5d ist die Phasenumwandlung von fest zu flüssig zu sehen. Wie man in Bild 5b schon erkennen kann, treten mit der Zeit einzelne amorphe Strukturen in der Simulationsbox auf. Dabei sind die amorphen Strukturen grau gekennzeichnet. Mit der Zeit nimmt die Anzahl der amorphen Strukturen immer mehr zu, sodass die Anzahl der kristallinen Strukturen immer mehr abnimmt. Bei Bild 5c handelt es sich um den Zustand genau vor dem Umklappen des FCC-Kristallgitters in die amorphe Struktur. Wie man hier erkennen kann, haben sich die amorphen Bereiche im Vergleich zu den vorherigen Bildern

deutlich vergrößert. In Bild 5d besteht nun die Simulationsbox gänzlich aus amorphen Strukturen. Somit hat dann ein Phasenübergang stattgefunden.

Zusammenfassend lässt sich hieraus schließen, dass es während des Aufheizvorgangs zu einer Phasenumwandlung kommt und somit die Schmelztemperatur und die spezifische Wärmekapazität von reinem Aluminium bestimmt werden können. Anfangs handelt es sich um festes Aluminium mit FCC-Kristallstrukturen, das dann mit der Erhöhung der Temperatur in einen flüssigen Zustand übergeht. Dabei wird der flüssige Zustand durch amorphe Strukturen in der Simulationsbox verdeutlicht. Durch Verwendung unterschiedlicher Potentiale kann die Schmelztemperatur von reinem Aluminium leicht variieren. In den folgenden Schaubildern wird der Phasenübergang von fest zu flüssig bei den drei interatomaren Al-Mg-Potentiale dargestellt.

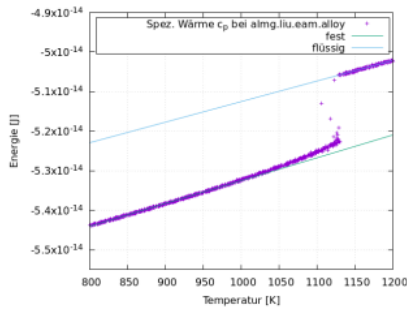


Bild 6a: Phasenübergang mit AIMg.liu.eam.alloy-Potential

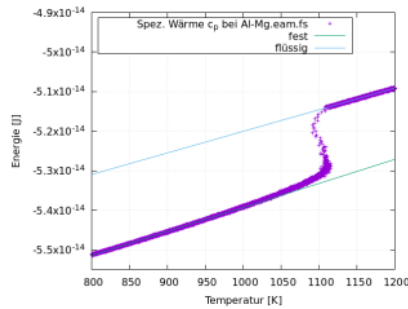


Bild 6b: Phasenübergang mit Al-Mg.eam.fs-Potential

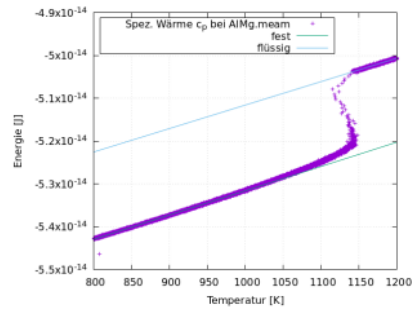


Bild 6c: Phasenübergang mit AIMg.meam-Potential

Bild 6a beschreibt den Phasenübergang von reinem Aluminium bei einem Aufheizvorgang unter Verwendung des AIMg.liu.eam.alloy-Potentiale. Bild 6b beschreibt den Phasenübergang von reinem Aluminium unter Verwendung des Al-Mg.eam.fs-Potentiale und Bild 6c den Phasenübergang unter Verwendung des AIMg.meam-Potentiale. Es ist deutlich zu erkennen, dass bei allen drei Potentiale ein Phasenübergang stattfindet. Der einzige Unterschied zwischen den Simulationen mit den unterschiedlichen Potentiale besteht darin, dass die Schmelztemperaturen von reinem Aluminium voneinander abweichen. Dabei ergeben sich folgenden Schmelztemperaturen:

| Interatomares Potential | Schmelztemperatur T_m [K] |
|-------------------------|-----------------------------|
| AIMg.liu.eam.alloy | 1128,2 |
| Al-Mg.eam.fs | 1110,2 |
| AIMg.meam | 1142,5 |

Tabelle 1: Schmelztemperaturen von reinem Aluminium bei dem Aufheizvorgang für die drei Potentiale

Wie in Tabelle 1 erkennbar, sorgt das AIMg.meam-Potential für die höchste Schmelztemperatur von reinem Aluminium und das Al-Mg.eam.fs-Potential für die niedrigste Schmelztemperatur. Dabei weichen die aus den Simulationen sich ergebenden Schmelztemperaturen um ca. 200 K von dem Literaturwert $T_m = 660 \text{ °C} = 933,15 \text{ K}$ [8] ab. Dies ist auf die **sehr hohe Aufheizgeschwindigkeit**, die in diesen Simulationen verwendet wurde, zurückzuführen. In den obigen Schaubildern, die die Fest-Flüssig-Phasenübergänge beschreiben, wurden zwei Geraden in die Kurven eingezeichnet. Die Geraden haben eine wichtige Bedeutung für die Wärmekapazitäten. Denn die isobare Wärmekapazität c_p entspricht dabei den Steigungen der Geraden. Es handelt sich hierbei um die isobare Wärmekapazität, da während der Versuchsreihe die Simulationsbox mit einem NpT-Ensemble equilibriert wurde, wodurch der Druck während der

Simulation konstant gehalten wird. Da es bei diesen Simulationen zu einem Fest-Flüssig-Übergang kam, ergibt sich eine Wärmekapazität sowohl im festen Zustand, als auch im flüssigen Zustand.

Somit ergeben sich folgende isobare Wärmekapazitäten bei der Phasenumwandlung für reines Aluminium mit den drei unterschiedlichen Potentialen:

| Potential | AlMg.liu.eam.alloy | Al-Mg.eam.fs | AlMg.meam |
|---|--------------------|--------------|-----------|
| Wärmekapazität c_p im festen Zustand in $\frac{J}{gK}$ | 1,193 | 1,255 | 1,171 |
| Wärmekapazität c_p im flüssigen Zustand in $\frac{J}{gK}$ | 1,075 | 1,128 | 1,132 |

Tabelle 2: Isobare Wärmekapazitäten in unterschiedlichen Zuständen (fest bzw. flüssig)

Wenn die isobaren Wärmekapazitäten in Tabelle 2 miteinander verglichen werden, fällt auf, dass in der festen Phase das AlMg.meam-Potential die niedrigste Wärmekapazität aufweist. In diesem Zustand hat das Al-Mg.eam.fs-Potential den höchsten Wert. Nichtsdestotrotz gibt es nur eine geringe Abweichung der Wärmekapazitäten bei den verschiedenen Potentialen. Auch hier lassen sich die Simulationsergebnisse mit den spezifischen Wärmekapazitäten c_p im festen und flüssigen Zustand von reinem Aluminium vergleichen. Aus der Literatur ergibt sich für spezifische Wärmekapazität von reinem Aluminium im festen Zustand zu $c_p = 0,945 \frac{J}{gK}$ [9]. Wenn nun die Werte aus den Simulationen für die spezifische Wärmekapazität mit der spezifischen Wärmekapazität für festes Aluminium miteinander verglichen werden, wird deutlich, dass die Werte ziemlich nah beieinander liegen. Die Abweichungen lassen sich dadurch erklären, dass in den Simulationen ein perfekter, defektfreier Einkristall verwendet wurde, im Gegensatz zu den experimentell untersuchten, i.A. nicht defektfreien Kristallen aus reinem Al. Im Falle der isobaren Wärmekapazität im flüssigen Zustand weist das AlMg.liu.eam.alloy-Potential die geringste und das Al-Mg.eam.fs-Potential die höchste Wärmekapazität auf. Jedoch gibt es auch hier nur geringe Abweichungen der Wärmekapazitäten bei den vorliegenden Potentialen. Des Weiteren ergibt sich aus der Literatur für die spezifische Wärmekapazität von reinem Aluminium im flüssigen Zustand $c_p = 1,127 \frac{J}{gK}$ [10]. Folglich handelt es sich bei den Simulationsergebnissen der Wärmekapazitäten von reinem Aluminium im flüssigen Zustand um realistische Werte, da es zwischen den Werten im Hinblick auf den Literaturwert eine nur minimale Abweichung gibt.

Molekulardynamische zweiphasige Zugversuche

Es wurden Molekulardynamiksimulationen zu zweiphasigen Zugversuchen durchgeführt, bei denen die Geometrie der Grenzfläche (Zwei-Temperaturen-Modell / Entmischte Strukturen), die Randbedingungen (mit / ohne Querkontraktion), die Dehnraten, die thermodynamischen Ensembles (NVE, NVT, NpT, NVH) und die interatomaren Al-Mg-Potentiale variiert wurden. Im Folgenden werden einige Ergebnisse vorgestellt:

Simulation: Zugversuch mit dem Zwei-Temperaturen-Modell unter Verwendung des NVT-Ensembles bei verschiedenen Dehnraten (mit Querkontraktion)

Diese Simulationsreihe wurde zunächst mit dem Al-Mg.eam.fs-Potential durchgeführt. Dabei wurde eine Simulationsbox, bestehend aus 95% Aluminiumatomen und 5% Magnesiumatomen und einer Boxgröße von $60 \times 30 \times 30$ Gitterkonstanten mechanisch belastet, indem es in x-Richtung mit drei unterschiedlichen Dehnraten gezogen wurde. Dabei wurden zwei verschiedene Equilibrierungsschritte während der Simulation ausgeführt. Im ersten Equilibrierungsschritt wird der linke Bereich der Simulationsbox mit einem NVT-Ensemble von 1400 K auf 1150 K abgekühlt. Währenddessen wird der rechte Bereich der Simulationsbox mit einem NpT-Ensemble von 500 K auf 900 K aufgeheizt. Nach 10000 Zeitschritten endet die erste Equilibrierung. Im zweiten Equilibrierungsschritt werden die Temperaturen in beiden Bereichen der Box mit denselben Ensembles für 40000 Zeitschritte konstant gehalten. Die Deformierung erfolgt links mit einem NVT-Ensemble, nachdem es von 1150 K auf 900 K abgekühlt wurde. Zu Beginn des Zugversuchs (der Deformation) beträgt die Temperatur sowohl im linken als auch im rechten Bereich der Simulationsbox genau 900 K. Dabei wird die Temperatur im rechten Bereich der Simulationsbox mit einem NpT-Ensemble konstant gehalten und es wird eine Querkontraktion in y- und z-Richtung miteingebunden. Aufgrund der erlaubten Querkontraktion fluktuieren die Spannungen in den Lateralrichtungen (y- und z-Richtung) um den Wert Null.

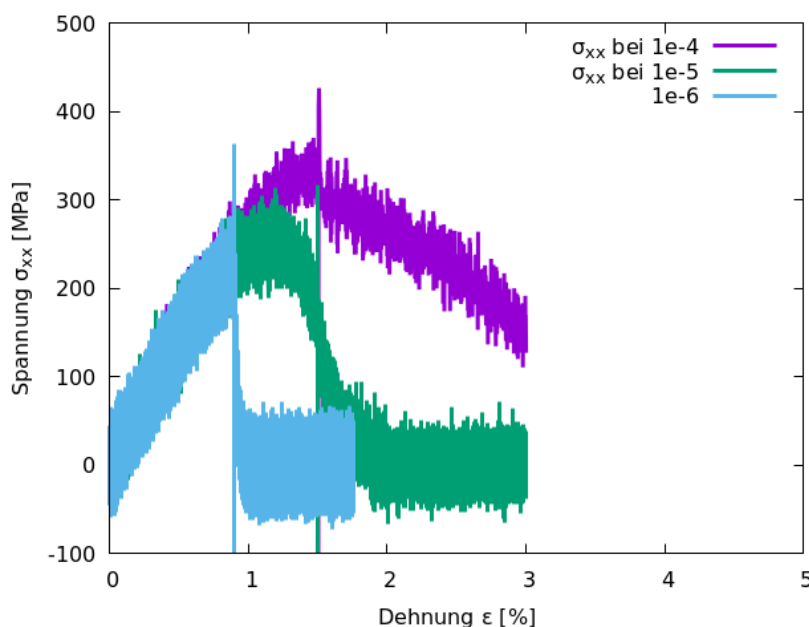


Bild 7: Spannungs-Dehnungs-Verläufe in Zugrichtung (x-Richtung) bei unterschiedlichen Dehnraten

In Bild 7 ist das Spannungs-Dehnungs-Diagramm in Zugrichtung zu sehen. Es ist deutlich zu erkennen, dass die höchsten Spannungen in der Simulation mit der höchsten Dehnraten zu sehen sind. Somit lässt sich sagen, dass je langsamer die Dehnraten sind, desto geringere Spannungen entstehen in der Simulationsbox während der Simulation. Bild 7 veranschaulicht die Spannungs-Dehnungs-Diagramme der drei Simulationen (die senkrechten Linien markieren jeweils

Fortsetzungen der Simulation). Hier ist bei allen Verläufen ein Spannungsmaximum erkennbar. Nach dem Erreichen des Spannungsmaximums ist in allen drei Verläufen ein Spannungsabfall zu erkennen. Dieser Kurvenverlauf ist typisch für das Spannungs-Dehnungs-Diagramm eines Zugversuchs. In Bild 8 wird die Bewegung der Fest-Flüssig-Grenzfläche veranschaulicht. Denn zu Beginn der Simulation ist die Simulationsbox im linken Bereich in einem amorphen Zustand und im rechten Bereich in einem kristallinen Zustand. Wie man anhand den Snapshots sehen kann, nimmt mit der Zeit die Anzahl der FCC-Strukturen ab. Am Ende sind in der Simulationsbox ausschließlich amorphe Strukturen vorhanden.

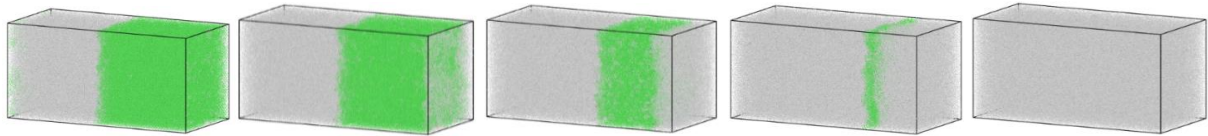


Bild 8: Snapshots der Simulationsbox (Dehnrate $1 \cdot 10^{-6}$ 1/ps) während der Simulation zu verschiedenen Simulationszeiten

Die Simulationen zeigen, dass diese Probe (bei der „langsamsten“ hier vorgestellten Dehnrate von $1 \cdot 10^{-6}$ 1/ps = $1 \cdot 10^{-6}$ 1/s) eine **Zugfestigkeit von ca. 225 MPa** aufweist; dieser hohe Zahlenwert verwundert nicht, da in der Simulation **keine freien Oberflächen** vorhanden sind. Weitere Simulationen unter Verwendung von NVE, NpT und NpH-Ensembles bestätigten die in Tabelle 3 dargestellten Ergebnisse:

| Dehnrate [1/ps] | Dehnrate [1/s] | Zugfestigkeit [MPa] |
|-------------------|-------------------|---------------------|
| $1 \cdot 10^{-4}$ | $1 \cdot 10^{+8}$ | 330 |
| $1 \cdot 10^{-5}$ | $1 \cdot 10^{+7}$ | 240 |
| $1 \cdot 10^{-6}$ | $1 \cdot 10^{+6}$ | 225 |

Tabelle 3: Zugfestigkeit der Probe in Abhängigkeit der Dehnrate

Simulation: Zugversuch mit „Entmischten Strukturen“ unter Verwendung des NVT-Ensembles bei der Dehnrates $2 \cdot 10^{-6} \text{ 1/ps} = 2 \cdot 10^{+6} \text{ 1/s}$ (mit Querkontraktion)

Auch diese Simulationsreihe wurde mit dem Al-Mg.eam.fs-Potential durchgeführt. Nun besteht die Simulationsbox aus einer zweiphasigen Legierung. Bei der ersten Phase der Legierung handelt es sich um reines Aluminium und sie besitzt einen Anteil von 50 at.% der gesamten Legierung. Bei der restlichen Hälfte der Legierung handelt es sich um die zweite Phase, die wiederum aus 78 at.% Aluminium und 22 at.% gelöstes Magnesium besteht. Somit ergibt sich eine sogenannte „Entmischte Struktur“, siehe Bild 9.

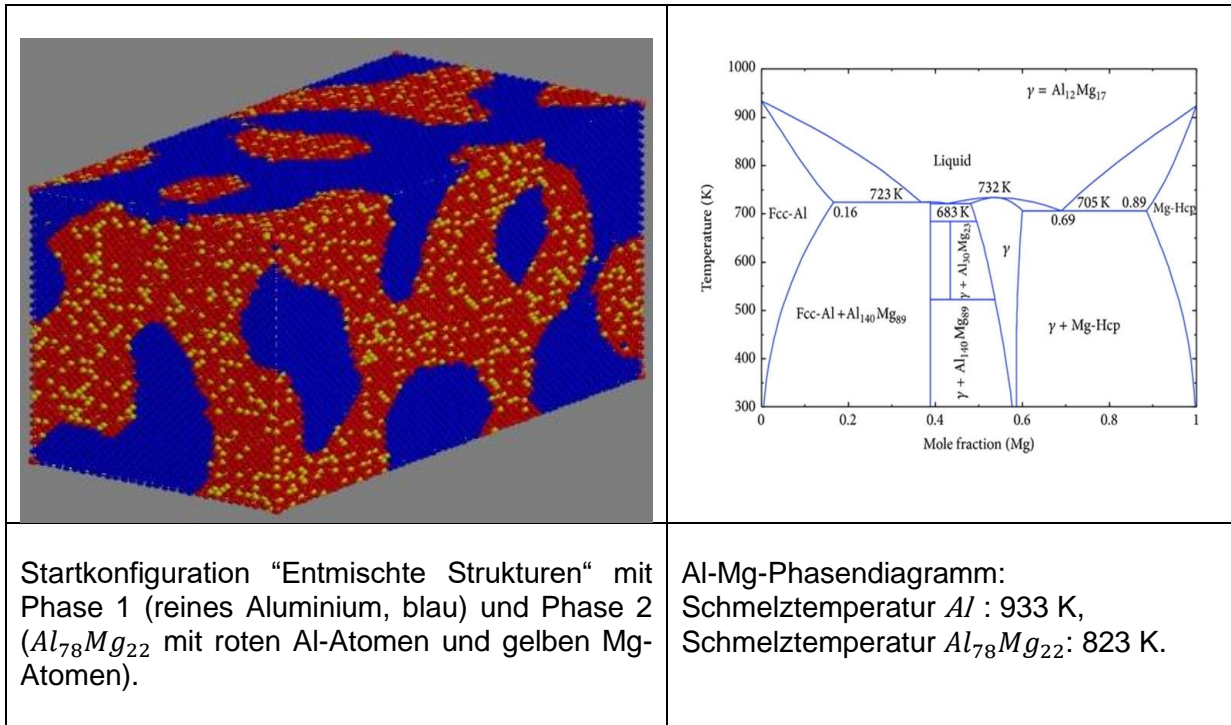


Bild 9: Startkonfiguration „Entmischte Strukturen“ und das Al-Mg-Phasendiagramm

Für Temperaturen zwischen 823 K und 933 K ist reines Al fest und $Al_{78}Mg_{22}$ flüssig. Dies kann für die Erzeugung von Fest-Flüssig-Grenzflächen genutzt werden. Somit wird die Simulationsbox, bestehend aus einer entmischten Struktur und einer Boxgröße von $60 \times 30 \times 30$ Gitterkonstanten mechanisch belastet indem es mit einer Dehnrates von $2 \cdot 10^{-6} \text{ 1/ps} = 2 \cdot 10^{+6} \text{ 1/s}$ in x-Richtung gezogen wurde. Dabei wurde die Versuchsreihe für fünf unterschiedliche Temperaturen durchgeführt. Anders als den vorherigen Simulationen findet während dieser Simulation nur ein Equilibrierungsschritt statt. Dafür wird einfach die Temperatur im gesamten Bereich der Simulationsbox konstant gehalten. Im Zugversuch (Deformation) wird dann eine Querkontraktion in y- und z-Richtung mithilfe eines NpT-Ensembles miteingebunden. Die folgenden Bilder werden die Simulationsergebnisse in Bezug auf verschiedene Größen veranschaulichen.

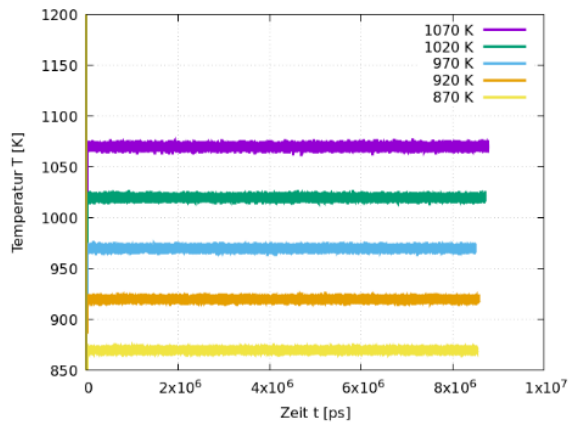


Bild 10: Temperatur in Abhängigkeit der Zeit

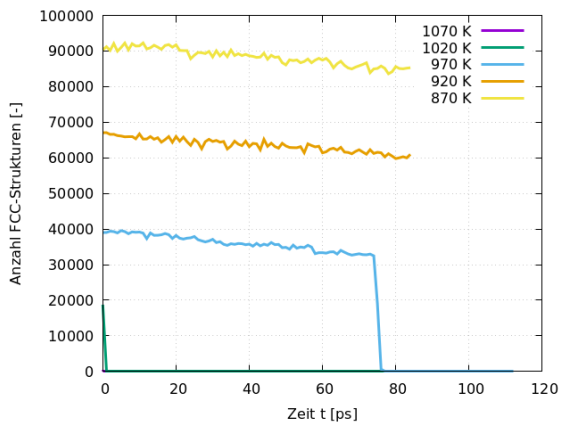


Bild 11: Anzahl der FCC-Strukturen in Abhängigkeit von t

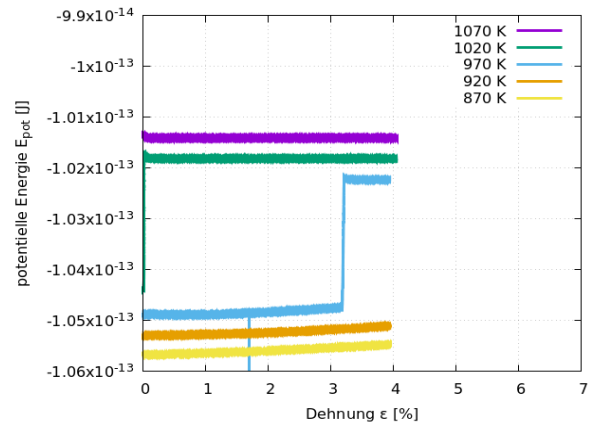


Bild 12: Potentielle Energie in Abhängigkeit der Dehnung

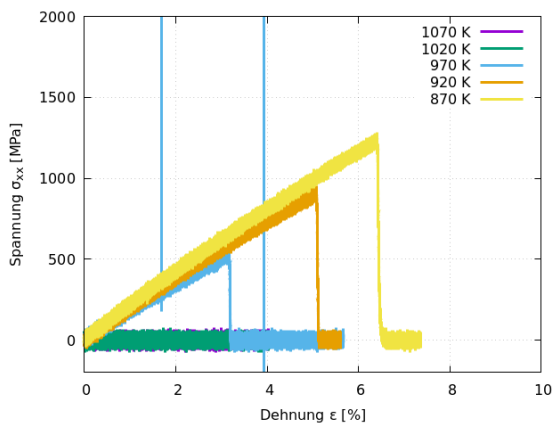


Bild 13: Spannungs-Dehnungs-Diagramme bei allen Temperaturen

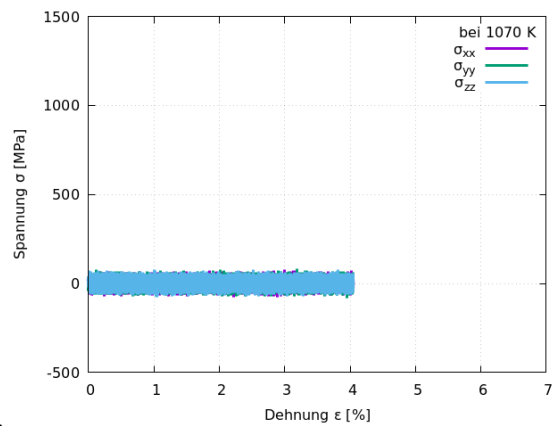


Bild 14: Spannungs-Dehnungs-Diagramm bei 1070 K

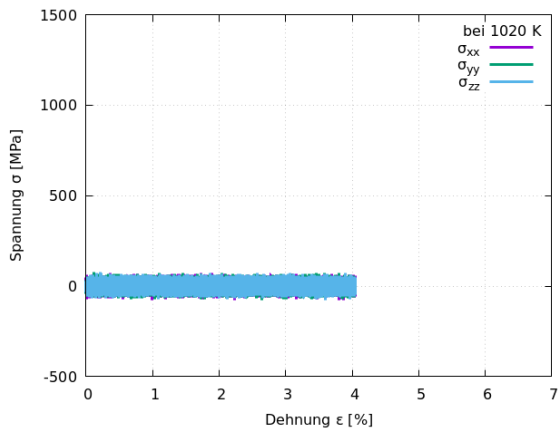


Bild 15: Spannungs-Dehnungs-Diagramm bei 1020 K

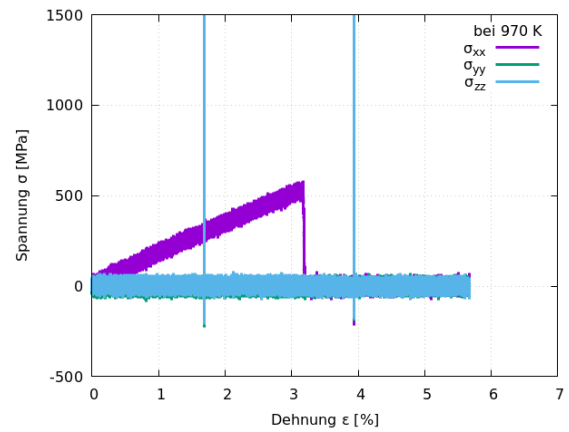


Bild 16: Spannungs-Dehnungs-Diagramm bei 970 K

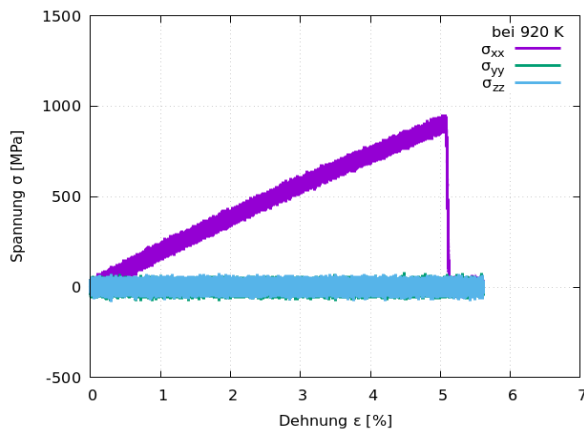


Bild 17: Spannungs-Dehnungs-Diagramm bei 920 K

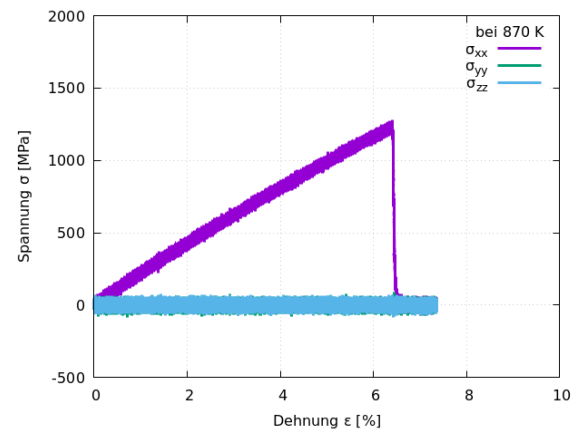


Bild 18: Spannungs-Dehnungs-Diagramm bei 870 K

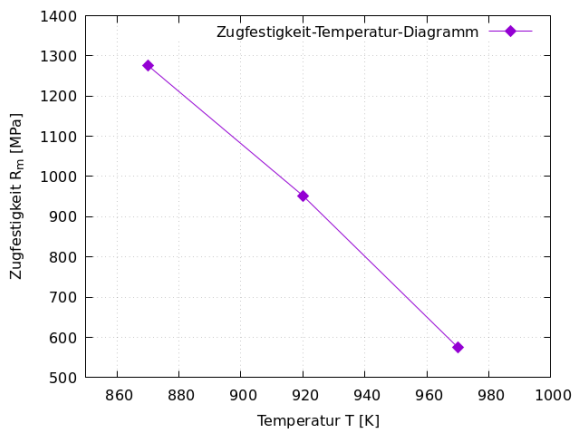


Bild 19: Zugfestigkeit in Abhängigkeit der Temperatur

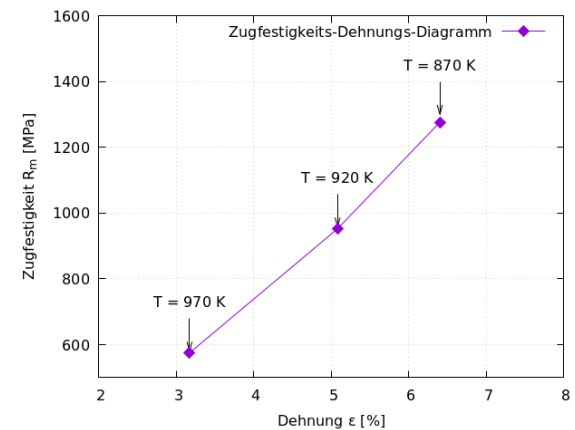


Bild 10: Zugfestigkeit über der Bruchdehnung für drei Temperaturen

In Bild 10 sind die Temperaturverläufe in Abhängigkeit der Zeit abgebildet. In den Simulationsverläufen treten nur minimale Temperaturschwankungen auf, die Temperaturen bleiben jeweils nahe ihrem Sollwert.

Bild 11 zeigt die Anzahl der FCC-Strukturen in Abhängigkeit der Zeit. Hier wird die Abhängigkeit zwischen der Temperatur und der Anzahl der kristallinen Strukturen deutlich. Denn je höher die Temperatur in der Simulationsbox wird, desto weniger FCC-Strukturen befinden sich in der Simulationsbox. Somit lässt sich sagen, dass sich die Phasenumwandlung mit abnehmender Temperatur zeitlich nach hinten verschiebt. Wenn man die höchste und die niedrigste Temperatur

miteinander vergleicht, fällt auf, dass sich bei der Simulation mit 1070 K schon bereits am Anfang eine Flüssigkeit befindet. Wohingegen die meisten kristallinen Strukturen bei der Simulation mit einer Temperatur von 870 K zu sehen sind.

Bild 12 veranschaulicht die potentielle Energie in Abhängigkeit der Dehnung. Hier wird deutlich, dass die potentiellen Energien überwiegend konstant bleiben. Die höchsten potentiellen Energien lassen sich bei den höheren Temperaturen feststellen. Die niedrigeren Temperaturen weisen geringere potentielle Energien auf. Außerdem lässt sich in der blauen Kurve für $T = 970$ K die Phasenumwandlung widerspiegeln. Denn ab einer Dehnung von ca. 3,2 % ergibt sich ein Sprung der potentiellen Energie nach oben, ab dann bleibt die potentielle Energie konstant. Somit bleiben die potentiellen Energien bei Flüssigkeiten weitgehend konstant.

Bild 13 veranschaulicht die Spannungs-Dehnungs-Diagramme in x-Richtung (=Zugrichtung) bei unterschiedlichen Temperaturen. Auffallend ist, dass es bei den Simulationen mit 1070 K und 1020 K zu keinen Spannungen in x-Richtung kommt. Der Grund dafür ist, dass sich bereits am Anfang der Simulationen Flüssigkeiten in den Simulationsboxen befinden und somit die Spannungen bei einem Zugversuch an einer Flüssigkeit nahe Null bleiben. Bei den restlichen Spannungs-Dehnungs-Diagrammen handelt es sich um übliche Spannungs-Dehnungs-Diagramme für einen Zugversuch eines Festkörpers. Jedoch wird hier deutlich, dass die Maximalspannung (=Zugfestigkeit) in der Simulationsbox mit abnehmender Temperatur steigt, die Bruchdehnung ebenfalls.

Die Bilder 14 bis 18 zeigen die Spannungs-Dehnungs-Verläufe der Normalspannungen (in jede Raumrichtung) der Simulationsbox. Bei den hohen Temperaturen ergeben sich keine Spannungen, da bei diesen Simulationen Flüssigkeiten vorhanden sind. Bei den Simulationen mit 970 K und 920 K entstehen nur Spannungen in x-Richtung. Da bei diesen Simulationen eine Querkontraktion in lateraler Richtung eingebunden worden sind, ergeben sich folglich auch keine Spannungen in y- und z-Richtungen.

Bild 19 repräsentiert die Zugfestigkeit in Abhängigkeit der Temperatur. Hier wird deutlich, dass die Zugfestigkeit der Probe mit steigender Temperatur abnimmt. Das Bild 20 zeigt nun die Zugfestigkeit über der Bruchdehnung für drei Temperaturen. Mit zunehmender Temperatur nimmt sowohl die Zugfestigkeit als auch die Bruchdehnung ab.

Simulation: Zugversuch mit „Entmischten Strukturen“ unter Verwendung des NVT-Ensembles bei der Dehnrage $2 \cdot 10^{-5}$ 1/ps = $2 \cdot 10^{+7}$ 1/s (mit Querkontraktion)

Hierbei wurde die Simulationsbox mit einer Dehnrage von $2 \cdot 10^{-5}$ 1/ps = $2 \cdot 10^{+7}$ 1/s in x-Richtung gezogen. Dabei wurde diese Versuchsreihe für einen erweiterten Temperaturbereich (von Raumtemperatur bis oberhalb der Schmelztemperatur) für zehn unterschiedliche Temperaturen durchgeführt. Die Temperatur wird jeweils im gesamten Bereich der Simulationsbox konstant gehalten. In diesen Zugversuchen wird dann eine Querkontraktion in y- und z-Richtung mithilfe eines NpT-Ensembles miteingebunden, wodurch sich folglich keine Spannungen in lateraler Richtung in der Simulationsbox ergeben. Die folgenden Bilder veranschaulichen die Simulationsergebnisse in Bezug auf unterschiedliche Parameter.

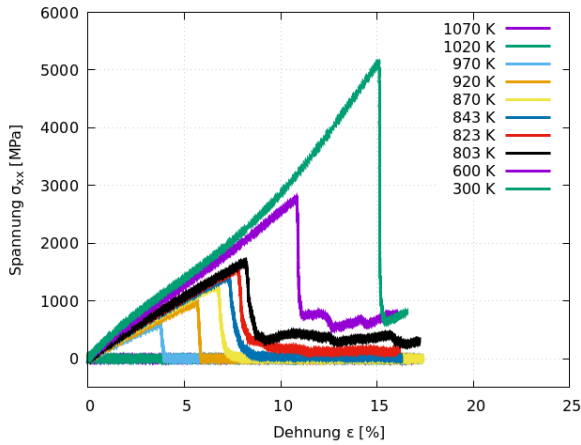


Bild 21: Spannungs-Dehnungs-Diagramme für alle zehn Temperaturen

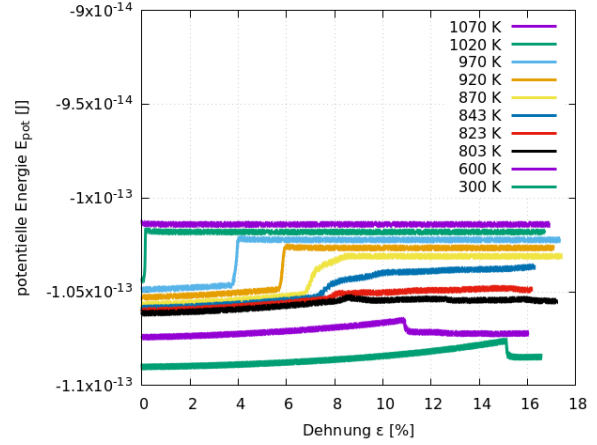


Bild 22: Potentielle Energie in Abhängigkeit der Dehnung

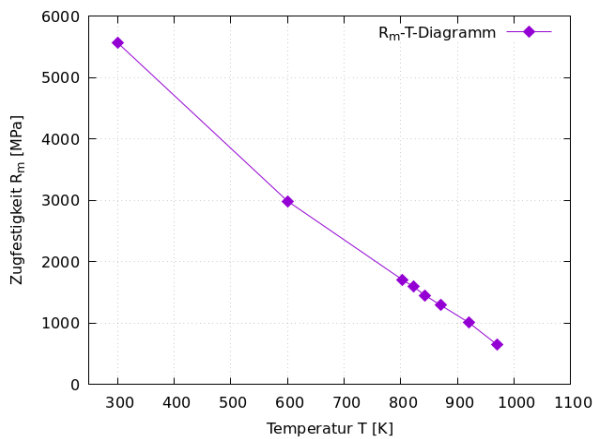


Bild 23: Zugfestigkeit in Abhängigkeit der Temperatur

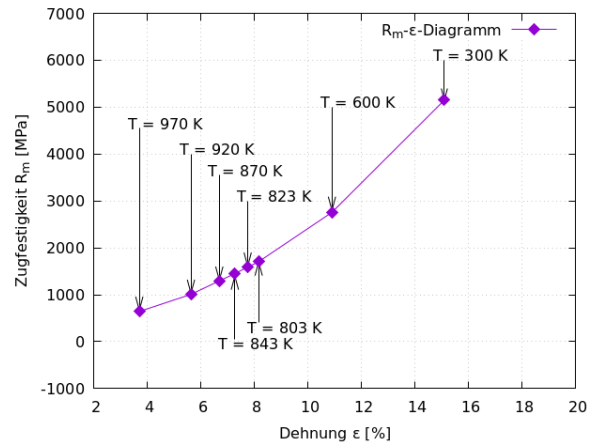


Bild 24: Zugfestigkeit über der Bruchdehnung für acht Temperaturen

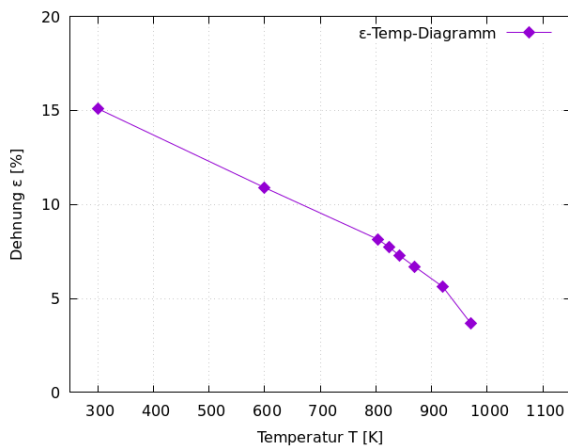


Bild 25: Bruchdehnung in Abhängigkeit der Temperatur

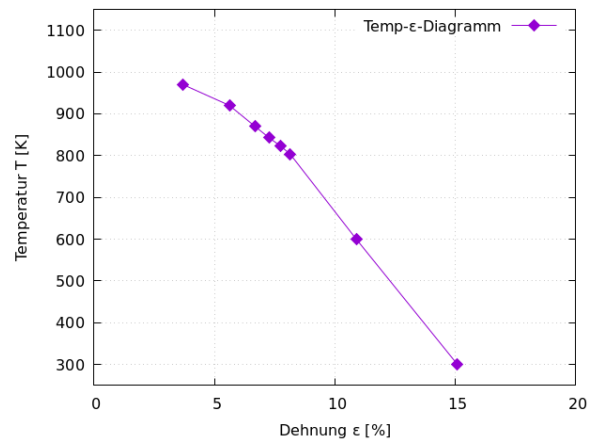


Bild 26: Temperatur in Abhängigkeit der Bruchdehnung

Aus Bild 21 lässt sich in der Simulationsreihe eine starke Temperaturabhängigkeit der erhaltenen Spannungs-Dehnungs-Kurven ablesen. Mit sinkender Temperatur kommt es zu höheren Spannungen in x-Richtung (der Belastungsrichtung), die Zugfestigkeit und die Bruchdehnung steigen an. Bei den Temperaturen $T=1070\text{ K}$ und $T=1020\text{ K}$ ergeben sich keine Spannungen in x-Richtung der Simulationsbox. Der Grund dafür ist, dass sich bei diesen hohen Temperaturen

schon bereits am Anfang der Simulation überall eine Flüssigkeit befindet. Daher ist es sinnvoll, diese Simulationsreihe für Temperaturen kleiner als 1020 K durchzuführen.

Bild 22 veranschaulicht die potentielle Energie in Abhängigkeit der Dehnung. Hier fällt auf, dass es bei den zwei höchsten Temperaturen zu keiner Änderung der potentiellen Energie kommt, die potentielle Energie bleibt über die gesamte Simulationszeit konstant. Bei den Simulationen für Temperaturen zwischen 970 K und 823 K ist hingegen einen Anstieg der potentiellen Energie, eine Stufe, gut zu erkennen. Um den Verlauf der potentiellen Energie besser nachvollziehen zu können, wurde der Zustand der Simulationsbox jeder Simulation auf Ovito näher analysiert. Bei den beiden höchsten Temperaturen war die Simulationsbox bereits von Anfang an in einem amorphen, flüssigen Zustand und es findet kein Phasenübergang Flüssig-Fest statt. Dies ist der Grund dafür, dass sich keine Spannung in x-Richtung der Simulationsbox ergeben und dass die potentiellen Energien einen konstanten Verlauf zeigen. Bei den Simulationen mit 970 K bis 823 K kommt es zu einem Fest-Flüssig-Phasenübergang, sodass in der Simulationsbox zwei Phasen existieren (reines Al: kristalliner Zustand, fest; $Al_{78}Mg_{22}$: amorpher Zustand, flüssig). Aus diesem Grund kommt es zu einer Stufe im Verlauf der potentiellen Energien. Bei den Simulationen für Temperaturen kleiner 823 K finden keine Phasenübergänge statt. Jedoch sind nun in den Simulationsboxen FCC-Strukturen zu erkennen, die gesamte Simulationsbox befindet sich in kristallinem Zustand.

Bild 23 repräsentiert die Zugfestigkeit in Abhängigkeit der Temperatur. Hier wird deutlich, dass die Zugfestigkeit der Probe mit steigender Temperatur abnimmt. Das Bild 24 zeigt nun die Zugfestigkeit über der Bruchdehnung für die untersuchten Temperaturen. Mit zunehmender Temperatur nimmt sowohl die Zugfestigkeit als auch die Bruchdehnung ab.

Die Bilder 25 und 26 zeigen die Temperaturabhängigkeit der Bruchdehnung. Mit zunehmender Temperatur nimmt die Bruchdehnung ab.

AP6: Molekulardynamiksimulation: Versagen durch Kavitation

Es wurden Simulationen zur Entstehung und zum Wachstum von Kavitationsporen für reines Aluminium und für Aluminium-Magnesium-Legierungen durchgeführt.

Im Rahmen von Simulationsreihen zum hydrostatischen Zug wurden an reinem Aluminium und AlMg-Legierungen sowohl im flüssigen als auch im festen Zustand interessante Erkenntnisse gewonnen. Beim hydrostatischen Ziehen an flüssigem Aluminium und der flüssigen AlMg-Schmelze entstand jeweils eine einzelne Pore, während bei festem Aluminium und der festen AlMg-Legierung jeweils mehrere Poren entstanden. Unabhängig von der Dehnrage wurde bei allen hydrostatischen Zugversuchen eine bestimmte kritische Spannung und Dehnung festgestellt, bei der Poren entstehen. Die kritische Spannung war bei den Simulationsreihen mit Magnesiumzusatz niedriger.

Auch Untersuchungen zur Porenbildung durch Erstarrungsvorgänge wurden durchgeführt. Bei hohen Abkühlraten konnte bei reinem Aluminium gleichzeitige Kristallisation und Porenbildung beobachtet werden. Bei der Aluminium-Magnesium-Legierung war jedoch eine geänderte Temperaturführung notwendig, um eine erfolgreiche Kristallisation zu ermöglichen. Bei diesem Prozess entstanden Poren und Stapelfehler.

Reines flüssiges Aluminium: Hydrostatisches Ziehen

Hierzu wurde eine kubische Simulationsbox unter Zugbelastung in alle drei Raumrichtungen gesetzt, es handelt sich also um einen Zugversuch mit hydrostatischer Zugbelastung. Die Temperatur in dieser Simulation liegt mit $T = 1150$ K ungefähr 123 K oberhalb der Schmelztemperatur, es handelt sich hier um reines, flüssiges Aluminium. Bild 27 zeigt Schnappschüsse aus dieser Simulation, bei welchen jeweils die Oberfläche der Pore detektiert

und farblich in hellgrau markiert wurde. Es ist zu erkennen, dass sich in Bild b) eine Pore gebildet hat, die sich im weiteren Verlauf der Simulation (mit zunehmender Zugbelastung) vergrößert.

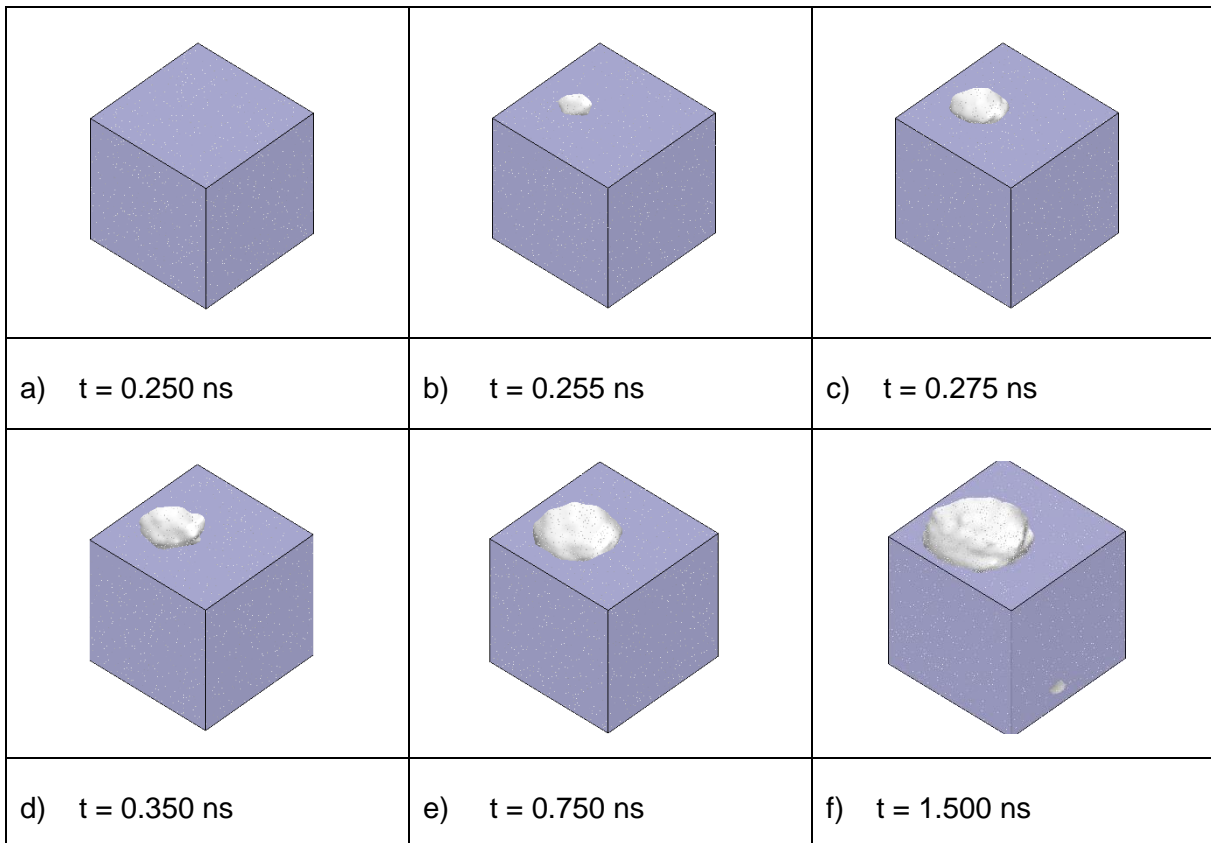


Bild 27 a)-f): Hydrostatischer Zugversuch an reinem, flüssigen Al. Nach 0,255 ns (Bild b)) hat sich eine Pore gebildet, die sich im weiteren Verlauf der Simulation (mit zunehmender Zugbelastung) vergrößert. Abmessungen der Simulationsbox: 30x30x30 Gitterkonstanten, 108000 Atome, NVT-Ensemble.

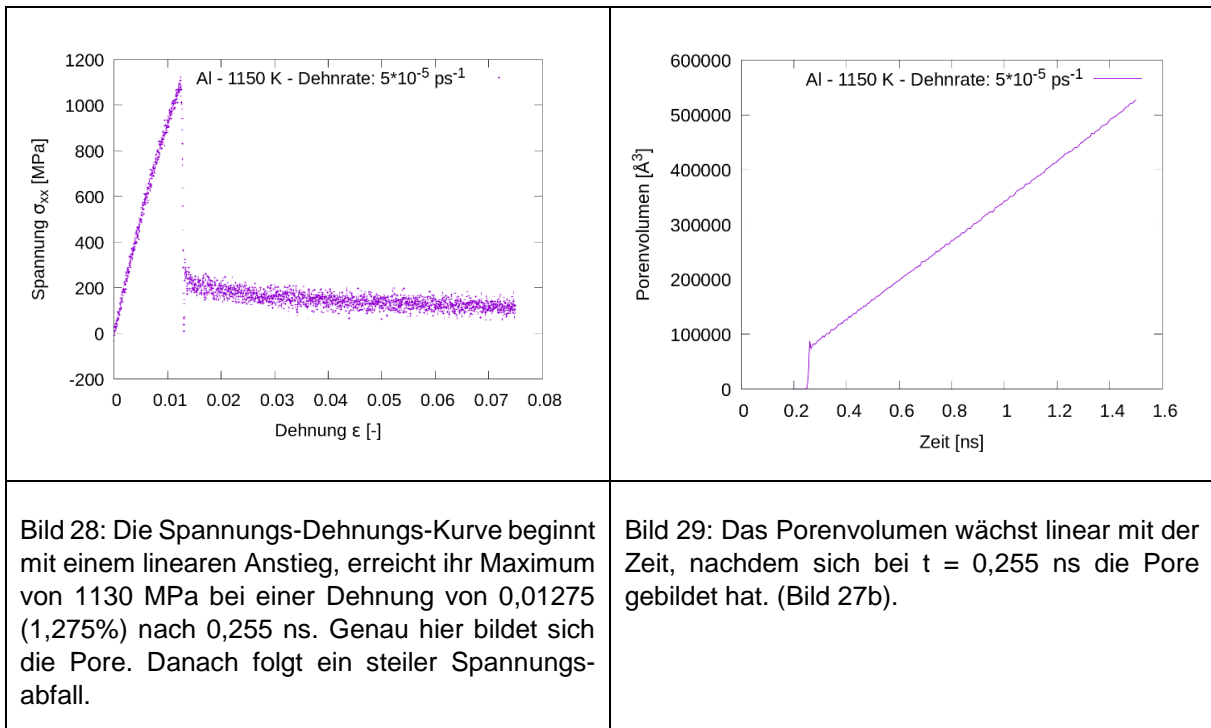


Bild 28 zeigt die zugehörige Spannungs-Dehnungs-Kurve. Die Kurve beginnt mit einem linearen Anstieg, erreicht ihr Maximum von 1130 MPa bei einer Dehnung von 0,01275 (1,275%) nach

0,255 ns. Genau hier bildet sich die Pore. Danach folgt ein steiler Spannungsabfall. Bild 29 zeigt, dass das Porenvolumen linear mit der Zeit wächst, nachdem sich bei $t = 0,255$ ns die Pore gebildet hat.

Weiterhin wurden drei Simulationen mit unterschiedlichen Dehnraten durchgeführt und gezeigt, dass die erhaltenen Spannungs-Dehnungs-Kurven für reines Al nur sehr schwach abhängig von der Dehnrates sind, siehe Bild 30a. Alle drei Kurven liegen nahezu identisch übereinander.

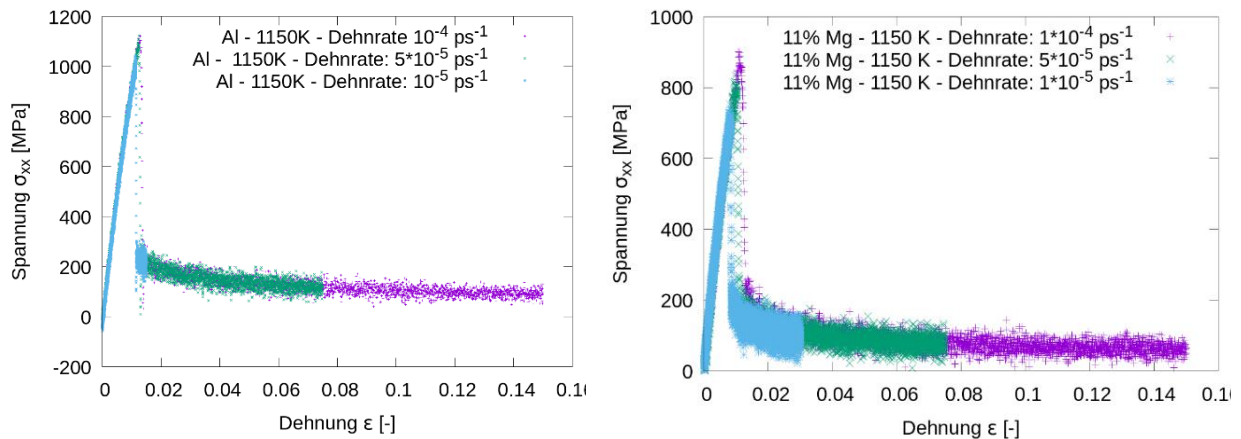


Bild 30a: Die Spannungs-Dehnungs-Kurven für **reines, flüssiges Aluminium** sind nur **sehr schwach abhängig** von der Dehnrates. Alle drei Kurven liegen nahezu identisch übereinander (Das Spannungsmaximum befindet sich bei **1130 MPa**).

Bild 30b: Die Spannungs-Dehnungs-Kurven für eine **Aluminium-Magnesium Schmelze mit 11 at.% Mg** sind ebenfalls **schwach abhängig** von der Dehnrates (Das Spannungsmaximum befindet sich nun bei ca. **820 MPa**)

Bild 30b zeigt die entsprechenden drei Spannungs-Dehnungs-Kurven für eine flüssige **Aluminium-Magnesium Schmelze mit 11 at.% Mg**-Anteil. In Übereinstimmung mit der Simulationsreihe für reines Aluminium wurden Dehnrates von $1 \cdot 10^{-4}$ 1/ps ($=1 \cdot 10^8$ 1/s), $5 \cdot 10^{-5}$ 1/ps ($=5 \cdot 10^7$ 1/s) und $1 \cdot 10^{-5}$ 1/ps ($=1 \cdot 10^7$ 1/s) verwendet. Anfangs zeigen alle drei Kurven nahezu übereinstimmende Verläufe, nur schwach abhängig von der Dehnrates. Mit abnehmender Dehnrates sinkt auch die kritische Spannung leicht, bleibt aber sehr ähnlich. Diese schwache Dehnratesabhängigkeit weist starke Ähnlichkeiten mit dem Materialverhalten beim Zugversuch mit reinem flüssigem Aluminium auf. Bei einer Dehnung von 0,82% wird eine Höchstspannung von etwa 820 MPa erreicht und es bildet sich eine einzelne Pore. Nach der Bildung dieser Pore verzeichnen die Kurven einen deutlichen Spannungsabfall.

Diese Ergebnisse zeigen, dass die Entstehung und das Wachstum von Poren in flüssigem Aluminium-Magnesium-Schmelzen unter Zugbelastung gut simuliert werden können. Die Bildung der Pore erfolgt bei einer bestimmten Spannung und Dehnung, und das Wachstum der Pore korreliert mit der Zugbelastung. Zudem zeigt sich, dass das Spannungs-Dehnungs-Verhalten nur schwach abhängig von den von uns verwendeten Dehnrates ist.

Al-Mg-Schmelze mit 22 % Magnesiumzusatz: Hydrostatisches Ziehen

In dieser Simulation wurde die Porenbildung einer Aluminium-Magnesium-Schmelze mit 22 at.% Magnesiumzusatz untersucht. Dabei stand auch in dieser Simulation die Simulationsbox unter einer anwachsenden hydrostatischen Zugbelastung in allen drei Raumrichtungen. Während der Simulation wurden regelmäßig Schnappschüsse erstellt, welche in Bild 31 zu sehen sind. Hierbei wird die Porenentstehung und deren Wachstum veranschaulicht.

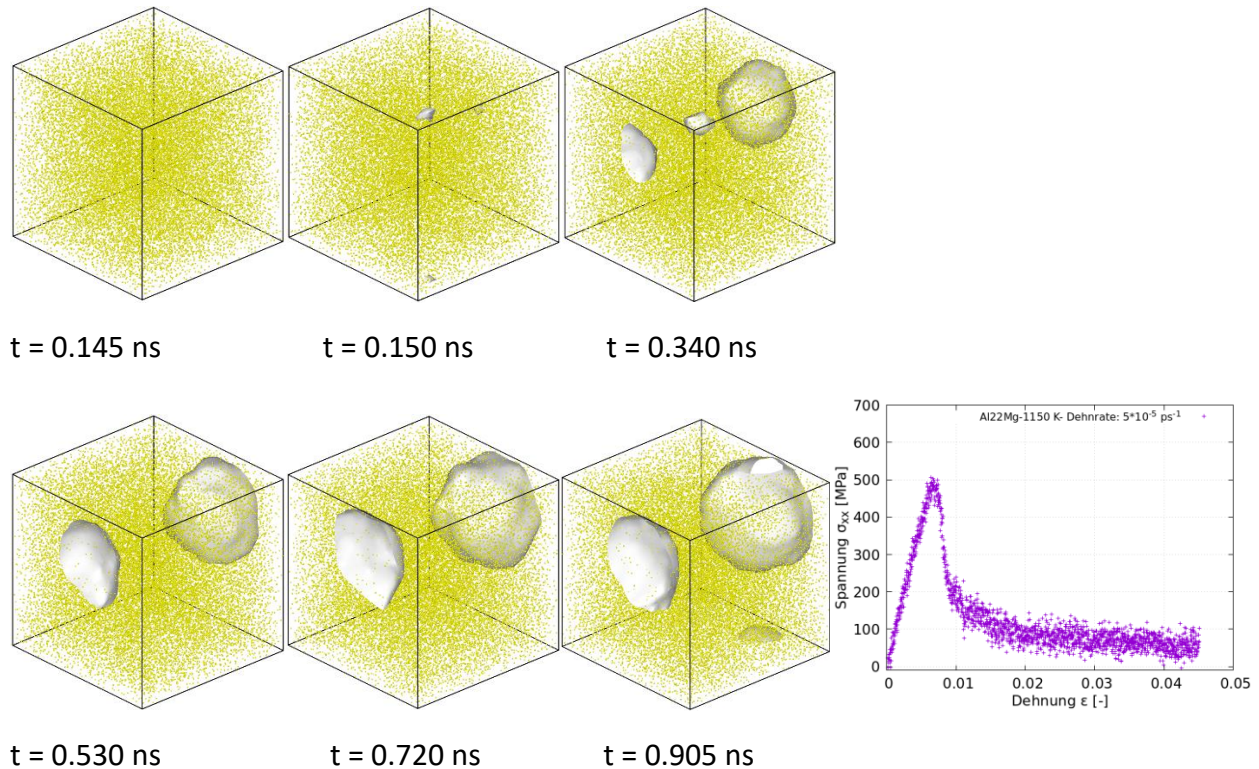
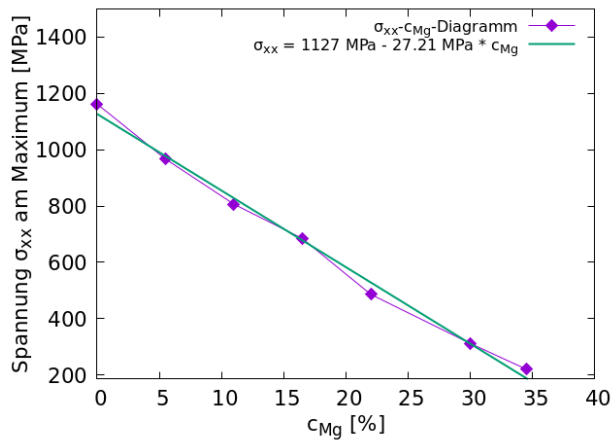


Bild 31: Darstellung der Simulationsbox nur mit Mg-Atomen (gelb), um die Poren besser zu veranschaulichen (Al-Atome sind transparent dargestellt) und die dazugehörige Spannungs-Dehnungs-Kurve.

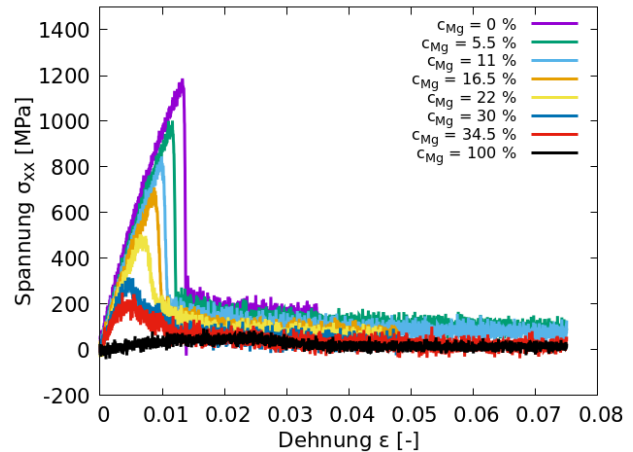
Auch aus diesen Schnappschüssen lässt sich die Porenentstehung und deren Wachstum sehr gut erkennen. Hierbei entsteht die Pore nach 0,150 ns und wird immer mit der Zeit größer. Die Maximalspannung beträgt 500 MPa zum Zeitpunkt der Porenentstehung. Die Bildung und das Wachstum der entstandenen Pore führen zu einem steilen Spannungsabfall.

Al-Mg-Schmelzen: Hydrostatisches Ziehen, Kavitationsspannung

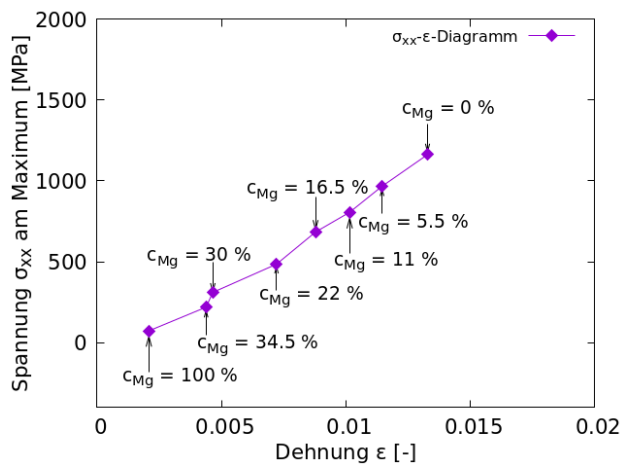
Die beiden in den vorherigen Abschnitten vorgestellten Simulationen gehören zu einer Simulationsreihe, bei welcher der Einfluss der Magnesiumkonzentration auf die zur Entstehung einer Pore erforderliche Spannung untersucht wurde. Die Magnesiumkonzentration wurde hierbei zwischen 0 und 34,5 at. % variiert. Das Ergebnis ist Bild 32a dargestellt, wobei das Maximum der jeweiligen Spannungs-Dehnungs-Kurve (Bild 32b), welches dem Zeitpunkt der Porenentstehung entspricht, über der jeweiligen Magnesiumkonzentration aufgetragen ist: Mit steigender Mg-Konzentration nimmt die zur Entstehung einer Pore erforderliche Spannung stark ab (in linearer Näherung von 1127 MPa für reines Aluminium bis auf 188 MPa bei 34,5 at.% Magnesium). Hierbei ist zu beachten, dass es sich bei diesen Simulationen um **eine Flüssigkeit ohne freie Oberflächen** handelt. Dies entspricht dem Fall einer Schmelze, die vollständig von einem Festkörper umschlossen ist.



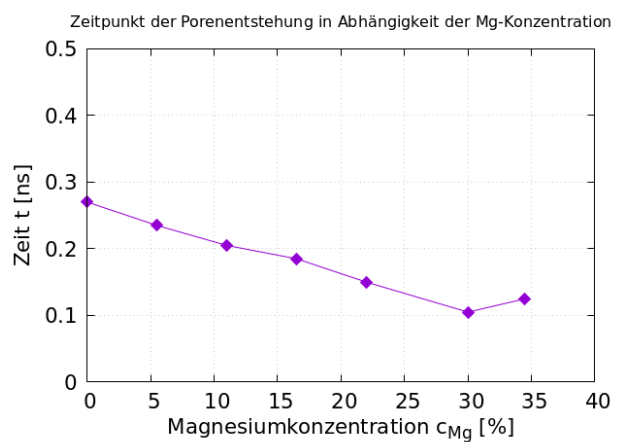
32a)



32b)



32c)



32d)

Bild 32a): Mit steigender Mg-Konzentration nimmt die zur Entstehung einer Pore erforderliche Spannung stark ab (in linearer Näherung von 1127 MPa für reines Aluminium bis auf 188 MPa bei 34,5 at.% Magnesium), b): Die dazugehörigen Spannungs-Dehnungs-Kurven, c): Positionen der Maxima der Spannungs-Dehnungs-Kurven von 32b), d): Zeitdauer bis zur Entstehung der Pore in Abhängigkeit der Mg-Konzentration.

Dies ist ein sehr wesentliches Ergebnis und kann in Finite-Elemente-Methode-Simulationen (auch in CFD- und Phasenfeld-Simulationen) als Kriterium für die Entstehung von Kavitationsporen und zur Bestimmung der Kavitationsporendichte verwendet werden: Wenn die Spannung an einem Ort (x,y,z) mit der lokalen Magnesium-Konzentration $c_{Mg}(x,y,z)$ die Grenzkurve in Bild 32a übersteigt, entsteht eine Kavitationspore.

Molekulardynamik: Möglichkeiten der Dendritenwachstumssimulation

Verschiedene Simulationsstrategien zur Nachbildung des Dendritenwachstums wurden getestet, die als Ausgangspunkt für zukünftige Forschungen dienen können. Die grundlegende Strategie bestand darin, die unterschiedlichen Schmelztemperaturen von reinem Aluminium und einer Aluminium-Magnesium-Legierung zu nutzen. Es zeigte sich, dass eine Kristallisation nur dann festgestellt werden konnte, wenn ein **Temperaturgradient** im System vorhanden war (Ein reiner Konzentrationsgradient reichte nicht aus).

Ein System mit den Abmessungen $60 \times 50 \times 30$ Gitterkonstanten ($a = 0,405$ nm), was etwa $24 \times 20 \times 12$ nm entspricht und 360000 Atome umfasst, wurde ausgewählt. Das System mit periodischen Randbedingungen setzte sich aus drei Dendritenarmen und einem Stamm

zusammen. Die Dendriten, aus 100% Aluminium bestehend, wurden durch ein NVT Ensemble auf 650 Kelvin gehalten und dienten als Kristallisationskeime. Das restliche System bestand aus einer AlMg-Schmelze mit 11 at.% Magnesium, die durch ein NVT Ensemble von 1150 K auf 650 K in 3 ns abgekühlt wurde.

Der Anfangszustand des Systems ist in Bild 33 abgebildet. Die Aluminiumatome des reinen Aluminiumbereichs sind in Rot, die Aluminiumatome der AlMg-Schmelze in Gelb und die Magnesiumatome in Blau dargestellt. Der Dendritenstamm und die Dendritenarme sind deutlich in Rot erkennbar.

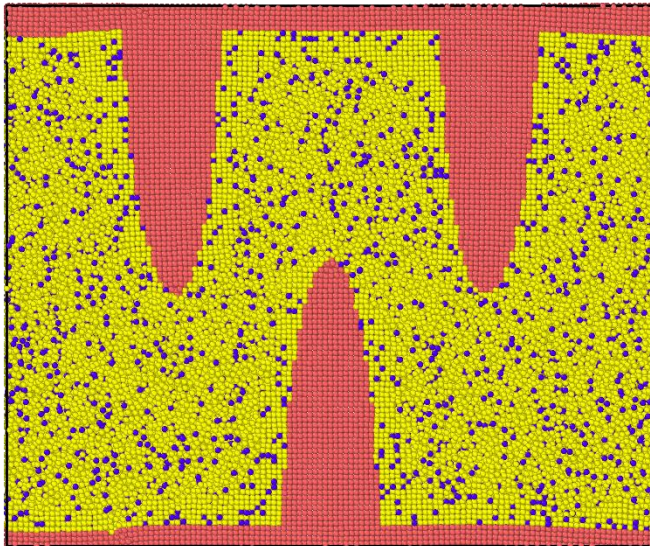


Bild 33: Anfangszustand der Dendritenwachstumssimulation. Die Aluminiumatome der Dendriten sind rot dargestellt, während die Magnesiumatome der AlMg-Schmelze in Blau und die Aluminiumatome der AlMg-Schmelze in Gelb hervorgehoben sind.

In Bild 34 sind Schnappschüsse der Simulation festgehalten, die durch den Einsatz von Polyhedral Template Matching farblich illustriert wurden. Die grüne Färbung repräsentiert die FCC-Atome, während die amorphen Atome grau eingefärbt sind. Der Prozess der Kristallisation und die Ausbreitung der Erstarrungsfront sind deutlich erkennbar und nehmen ihren Ursprung in den Dendriten.

Die Momentaufnahme in Bild 34 b) zeigt bei $t=0,25$ ns die Verschmelzung der drei Dendriten. Dieser Vorgang markiert den Ausgangspunkt für die nachfolgenden Phasen der Simulation.

Im weiteren Verlauf der Simulation, genauer bei $t=0,625$ ns, zeigt Bild 34 c) einem leichten Fortschritt der Kristallisation. Hier ist auch die vollständige Verschmelzung der Dendriten erkennbar.

Bild 34 d) bei $t=0,965$ ns dokumentiert einen weiteren entscheidenden Entwicklungsschritt: die Entstehung einer einzelnen Pore. Dieses Ereignis ist bedeutsam, da die Porenbildung in den vorangegangenen Simulationen häufig parallel zum Start der Kristallisation auftrat. Der minimale Fortschritt der Kristallisation seit dem letzten Schnappschuss könnte dabei den Beginn einer intensiveren Kristallisationsphase signalisieren.

Diese Annahme bestätigt sich in Bild 34 e) bei $t=2,000$ ns. Hier sind eine fortschreitende Kristallisation und das anhaltende Porenwachstum deutlich zu erkennen. Letztlich zeigt Bild 34 f) bei $t=3,000$ ns, dass die Kristallisation fast vollständig abgeschlossen ist und die Pore weiterhin an Größe zugenommen hat.

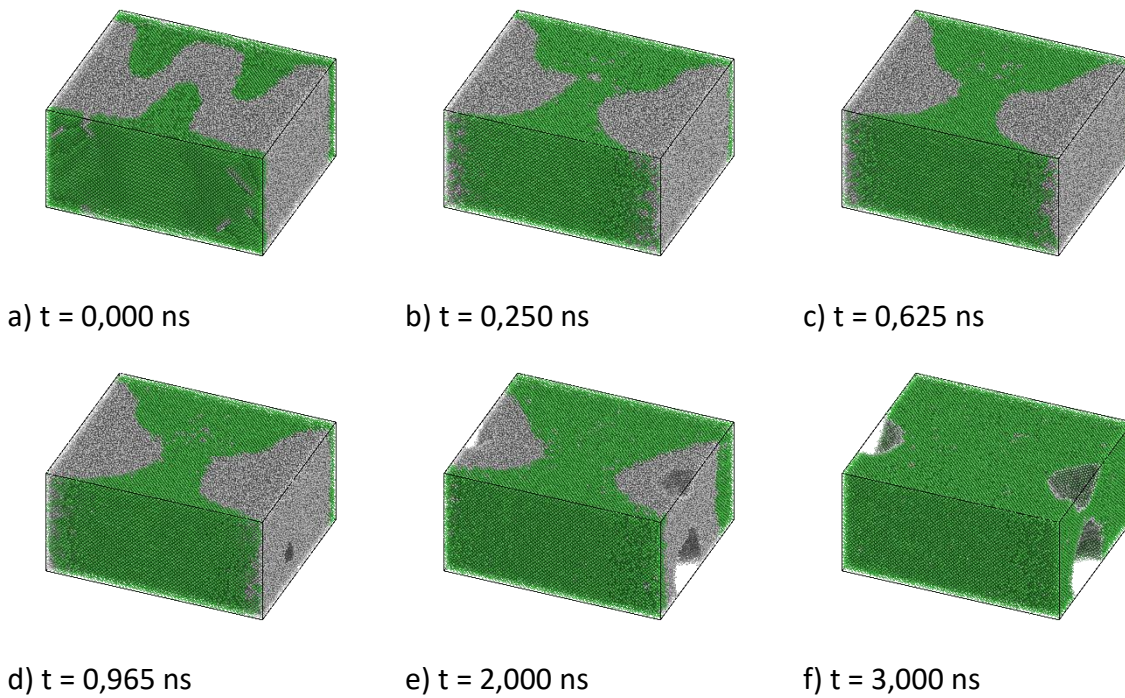


Bild 34 a) - f): Simulationsbox zu verschiedenen Simulationszeitpunkten, farblich gekennzeichnet durch Polyhedral Template Matching in Ovito: grün für FCC, grau für amorph.

In Bild 35 wird der Anteil der FCC-Atome im Verlauf der Zeit dargestellt. Es ist erkennbar, dass zu Beginn der Simulation bereits 42% der Simulationsbox kristallin waren. Dieser Anteil steigt innerhalb der ersten 0,25 ns auf 52% und bleibt dann bis 0,965 ns nahezu konstant. Ab 0,965 ns startet der Kristallisationsprozess erneut und nimmt aufgrund der wachsenden Oberfläche der Dendriten und der sinkenden Temperatur des Systems stetig an Geschwindigkeit zu, bis der Kristallisationsvorgang nach 2,5 ns nahezu abgeschlossen ist und 96% des Systems kristallisiert sind. Bei 0,965 ns, also dem Start des Kristallisationsprozesses, ist in Bild 34 d) auch die Entstehung der Pore sichtbar.

| | | |
|---|---|---|
| <p>Dendritenwachstum</p> | <p>Dendritenwachstum</p> | <p>Dendritenwachstum</p> |
| <p>Bild 35: Darstellung des FCC-Atomanteils im Verlauf der Zeit. Initial 42% kristallin, erhöht sich dieser auf 96% nach 2,5 ns, wobei die verstärkte Kristallisation bei 0,965 ns beginnt.</p> | <p>Bild 36: Zeitliche Entwicklung des Porenvolumens von der initialen Bildung bei 0,965 ns bis zum Erreichen eines Volumens von 350 nm³ bei 2,5 Nanosekunden (ns).</p> | <p>Bild 37: Zeitabhängige Spannungsentwicklung. Ein Maximum von 490 MPa ist bei 0,965 ns erkennbar, gefolgt von einem starken Abfall bis 2,5 ns und anschließendem Wiederanstieg aufgrund weiterer Abkühlung.</p> |

Bild 36 zeigt das Porenvolumen im Verlauf der Zeit. Bei 0,965 ns wird die Bildung einer ersten Pore sichtbar, was mit den Schnappschüssen in Bild 34 übereinstimmt. Das Porenvolumen wächst nahezu linear bis zu einem Volumen von 350 nm³ bei 2,5 ns.

Bild 37 stellt die Entwicklung der Spannung über die Zeit dar. Die Spannung nimmt nahezu linear zu, bis sie bei 0,965 ns ein Maximum von 490 MPa erreicht und dann stark abfällt. Genau zu diesem Zeitpunkt beobachteten wir in den vorherigen Abbildungen den Beginn des Porenwachstums und den Start des Kristallisationsprozesses. Nach diesem Spannungseinbruch fällt die Spannung bis zu einem Zeitpunkt von 2,5 ns, was mit dem Abschluss des Kristallisationsprozesses zusammenfällt. Nach Beendigung der Kristallisation steigt die Spannung wieder an, bedingt durch den anhaltenden Abkühlvorgang.

Es konnte gezeigt werden, dass das Dendritenwachstum in einem System aus Aluminium und Magnesium durch die Verwendung eines Temperaturgradienten darstellbar ist. Diese Erkenntnisse bieten eine solide Grundlage für zukünftige Arbeiten und Forschungen in diesem Bereich. Die Einführung eines Temperaturgradienten ermöglichte es, die Dynamik der Dendritenbildung und des Wachstums in einer AlMg-Schmelze besser zu verstehen. Die Möglichkeit, diesen Prozess zu simulieren und zu visualisieren, kann wertvolle Einblicke in die Mechanismen der Dendritenbildung und des Phasenübergangs geben.

AP7: Bewertung des Heißrisswiderstandes

Die digitale Strategie des Projektes zur Reduktion von Heißrissen setzt sich aus der Verwendung von unterschiedlichen Simulationsmethoden zusammen, die einzeln bzw. verknüpft zu einem Workflow den Heißrisswiderstand eines digitalen Zwillings von Prozess und Aluminiumpulverlegierung bewerten soll.

Im Verlauf des Projekts zeigte sich, dass eine sequentielle Verknüpfung der einzelnen Simulationsmethoden aufgrund ihrer sehr unterschiedlichen Längen- und Zeitskalen eine bessere, sinnvoll realisierbare Möglichkeit ist, um diese multiskalige Simulationsmethodik für Erkenntnisse zur Entstehung/Vermeidung von Heißrissen anwenden zu können. Die sequentielle Vorgehensweise basiert darauf, dass Simulationsergebnisse und Übergabeparameter von einer kurzen Längen- bzw. Zeitskala an die nächste Simulationsmethode (mit einer längeren Längen- bzw. Zeitskala) weitergegeben werden. Die Schwierigkeit hierbei besteht in der Identifikation dieser Parameter, ihrer Bereitstellung und der Weitergabe an die nächst höherskalige Simulationsmethode.

Ein Beispiel hierzu wird im Folgenden vorgestellt: Eine MD-Simulationsreihe lieferte die zur Entstehung einer Pore erforderliche Spannung (Kavitationsspannung) in Abhängigkeit der Mg-Konzentration. Sie kann durch eine Geradengleichung angenähert werden, siehe Bild 32a:

$$\sigma_{\text{Kav}}(c_{\text{Mg}}) = 1127 \text{ MPa} - 27,21 \text{ MPa} \cdot c_{\text{Mg}}, \quad 0\% < c_{\text{Mg}} < 34,5 \text{ at.}\%$$

Hierbei ist $\sigma_{\text{Kav}}(c_{\text{Mg}})$ die Kavitationsspannung und c_{Mg} die Magnesiumkonzentration in at.%. Dies ist ein sehr wesentliches Ergebnis und kann in Finite-Elemente-Methode-Simulationen (auch in CFD- und Phasenfeld-Simulationen) als Kriterium für die Entstehung von Kavitationsporen und zur Bestimmung der Kavitationsporendichte verwendet werden: Wenn die lokale Spannung an einem Ort (x,y,z) mit der lokalen Magnesium-Konzentration $c_{\text{Mg}}(x,y,z)$ die Grenzkurve in Bild 32a übersteigt (bzw. oberhalb der o.g. Geraden liegt), entsteht eine Kavitationspore.

Anmerkung: Bei Molekulardynamik-Simulationen liegt die typische Längenskala im Bereich von ca. 50 Nanometern (Länge der Simulationsbox), die Zeitskala im Bereich von 10 Nanosekunden (insgesamt simulierte Zeit, die Zeitschrittweite im Bereich einer Femtosekunde). Die Phasenfeldsimulationen und Finite-Elemente-Methode-Simulationen der Projektpartner an der MPA weisen eine Längenskala im Mikro- bis Millimeterbereich und eine Zeitskala im

Millisekundenbereich auf. Hiermit sind die Längen- und Zeitskalen des Phasenfeldmodells deutlich zu groß, um sie in der MD Simulation direkt übernehmen zu können.

AP8+9: Test und Implementierung, Experimenteller und numerischer Testlauf

Die einzelnen Simulationspakete wurden in den jeweiligen Arbeitspaketen (AP4, AP5 und AP6) getestet und mit den experimentellen Daten überprüft. (Siehe auch Zwischenbericht 2022 der MPA [14] und Zwischenbericht 2023 des IMWF [15]).

Der Workflow zur simulativen Bewertung des Heißrisswiderstandes konnte aufgrund von zunächst deutlich unterschätzten Rechenzeiten nicht in der in AP 3 definierten Form implementiert werden. Während der Bearbeitung stellte sich heraus, dass die Längenskalen der ermittelten Dendritenarmabstände aus dem Phasenfeldmodell zu groß sind, um deren Längenskalen in der MD Simulation in einer für die Anwendung realistischen Rechenzeit abbilden zu können. Gleichermäßen ergeben sich Probleme bei der Zeitskala. Hier sind in der Phasenfeldsimulation Veränderungen im Mikro- bzw. Millisekunden Bereich festzustellen. In der MD-Simulation können jedoch nur Veränderungen im Nanosekunden-Bereich simuliert werden, da hier die Rechenzeiten ebenfalls unpraktikabel ausfallen. Dadurch wäre der Workflow in der in Arbeitspaket 3 geplanten Form für alle weiteren Anwender nicht anwendbar. Eine genauere Erläuterung dieser Problematik ist im Zwischenbericht 2023 des IMWF [15] zu lesen. Die in Arbeitspaket 8 und 9 durzuführenden Tests und die Implementierung des Workflows konnte somit nicht in der ursprünglich geplanten Form durchgeführt werden, da hierfür der einheitliche Workflow fehlt.

Um die erläuterten Problematiken des in Arbeitspaket 3 geplanten Workflow zu umgehen, könnte ein alternatives Vorgehen durchgeführt werden. Dieses ist schematisch im angepassten Workflow in Bild 38 dargestellt. Abweichend zum originalen Workflow werden die einzelnen Simulationen sequenziell durchgeführt und deren Ergebnisse zum nächsten Programm übergeben. Ebenfalls sind die Ergebnisse der MD Simulationen zur Entstehung von Kavitationsporen zu bestimmen und werden anschließend in einer Simulation des fest-flüssig-Übergangs in FEM eingebunden. Mit diesem Vorgehen ist es über sequenzielle Methoden möglich, die kavitationsbedingte Rissbildung im Erstarrungsvorgang zu simulieren und darüber die kritischen Spannungen und die Kavitationsporendichte zu bestimmen, die zur Entstehung von Heißrissen führen können. Diese kritischen Spannungen und die Kavitationsporendichte sind für die Definition des RDG Kriteriums zwingend nötig. Dieser alternative Lösungsweg ist in Bild 38 dargestellt.

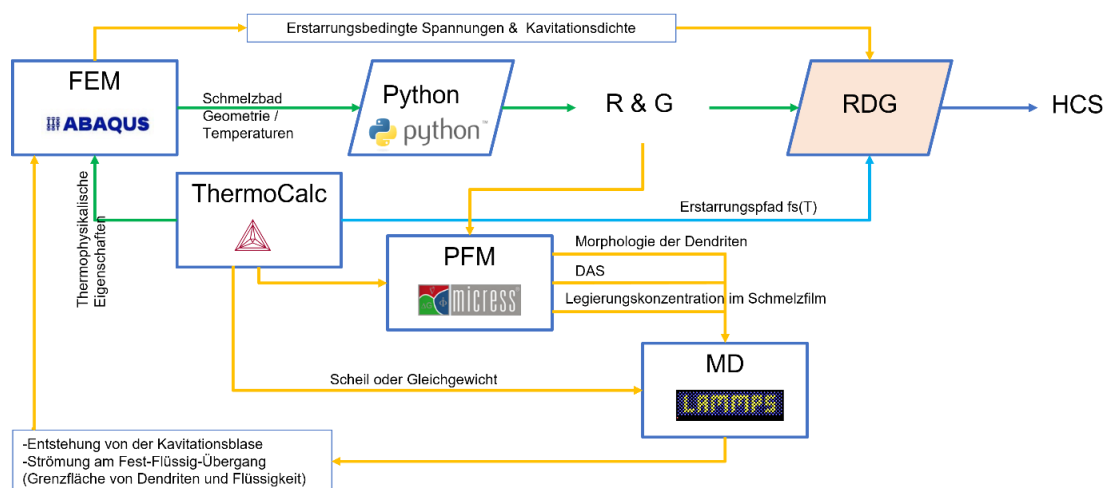


Bild 38: Graphische Darstellung einer möglichen alternativen Vorgehensweise

Der dazu gehörige simulative Aufwand ist innerhalb des Zeitrahmens dieses Projektes jedoch nicht mehr möglich gewesen. Dieses Vorgehen stellt jedoch einen Lösungsweg dar, der in Zukunft weiterentwickelt werden kann, um die Heißrissensibilität des Werkstoffs anwenderfreundlich bestimmbar zu machen.

Literaturverzeichnis

- [1] A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, S. J. Plimpton, LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, *Comp Phys Comm*, 271 (2022) 10817. <https://www.lammps.org>
- [2] <https://www.ctcms.nist.gov/potentials/>
- [3] X.-Y. Liu, J.B. Adams, Grain-boundary segregation in Al-10%Mg alloys at hot working temperatures, *Acta Materialia*, 46(10), 3467-3476, 1998. (AlMg.liu.eam.alloy)
- [4] M.I. Mendeleev, M. Asta, M.J. Rahman, J.J. Hoyt, Development of interatomic potentials appropriate for simulation of solid-liquid interface properties in Al-Mg alloys, *Philosophical Magazine*, 89(34-36), 3269-3285, 2009. (Al-Mg.eam.fs)
- [5] Y.-M. Kim, N.J. Kim, B.-J. Lee, Atomistic Modeling of pure Mg and Mg-Al systems, *Calphad*, 33(4), 650-657, 2009. (Al-Mg-MEAM)
- [6] A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 18, 015012, 2010. <https://www.ovito.org>
- [7] YangChun Zou, ShiKai Xiang, ChengDa Dai, Investigation on the efficiency and accuracy of methods for calculating melting temperature by molecular dynamics simulation, *Computational Materials Science*, 171, 109156, 2020.
- [8] R. Bürgel, H.-J. Maier, T. Niendorf: *Handbuch Hochtemperatur-Werkstofftechnik : Grundlagen, Werkstoffbeanspruchungen, Hochtemperaturlegierungen und -beschichtungen*. 5., überarb. und erw. Aufl. Berlin, Springer Vieweg, 2015 .
- [9] K. Stephan, F. Mayinger (Hrsg.): *Die kalorischen Zustandsgleichungen und die spezifischen Wärmekapazitäten*. Berlin, Heidelberg, Springer Vieweg, 2013
- [10] M. Leitner, T. Leitner, A. Schmon, K. Aziz, G. Pottlacher: *Thermophysical Properties of Liquid Aluminum*. URL <https://link.springer.com/article/10.1007/s11661-017-4053-6>
- [11] M. Lutz, Molekulardynamische Untersuchung der thermischen und fluiddynamischen Einflüsse auf den Erstarrungsprozess von AlMg-Legierungen für die additive Fertigung, Master-Arbeit, Betreuer: Dr.-Ing. Peter Binkele, Dennis-Michael Rapp (M. Sc.), Prüfer: Prof. Dr.-Ing. Stefan Weihe, Prof. Dr.-Ing. Michael Seidenfuß, Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF), Universität Stuttgart, pp. 1-99, (2023).
- [12] M. Sönmez, Untersuchung der Heißrissinitiierung an der Erstarrungsfront in additiv gefertigten Al-Mg-Legierungen mittels Molekulardynamik, Bachelor-Arbeit, Betreuer: Dr.-Ing. Peter Binkele, Dennis-Michael Rapp (M. Sc.), Prüfer: Prof. Dr. rer. nat. Siegfried Schmauder, Prof. Dr.-Ing. Michael Seidenfuß, Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF), Universität Stuttgart, pp. 1-85, (2022).
- [13] M. Rappaz, J.-M. Drezet, M. Gremaud (1999): A New Hot-Tearing Criterion. In: *METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A*, S. 449–455.
- [14] DiStal-Zwischenberichte 2022/2023, MPA, Universität Stuttgart, Förderkennzeichen 13XP5115A.
- [15] DiStal-Zwischenberichte 2022/2023, IMWF, Universität Stuttgart, Förderkennzeichen 13XP5115B.
- [16] Y. Shibuta, *Molecular Dynamics of Solidification*, ISIJ International, 64(7), 1107-1124, 2014.

2 Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Entsprechend dem zahlenmäßigen Nachweis kann festgestellt werden, dass die Projektkosten leicht über den geplanten Kosten liegen (101,71% anstelle 100,00%). Die wesentlichen Abweichungen ergeben sich aus den im Folgenden aufgelisteten Positionen:

Personalkosten: Mehrkosten in vertretbarem Rahmen in Höhe von 3,19% ergaben sich bei den Personalkosten

Materialkosten: Es sind keine Materialkosten angefallen.

Fremdleistungen: Es sind keine Kosten für Fremdleistungen angefallen.

Reisekosten: Bei den Reisekosten sind nur 10,00% der geplanten Aufwendungen angefallen.

Vorhabensspezifische Afa: Keine.

Sonstige unmittelbare Vorhabenkosten: Keine.

3 Notwendigkeit/ Angemessenheit der geleisteten Projektarbeiten

Die geleisteten Projektarbeiten des IMWF waren in ihrem gesamten Umfang notwendig für die Erfüllung der angestrebten Ziele. Die Notwendigkeit und Angemessenheit der am IMWF durchgeführten umfangreichen Molekulardynamik-Simulationen begründet sich durch die hierdurch erzielten Erkenntnisse des mechanischen Verhaltens an Fest-Flüssig-Grenzflächen und zur Poren- bzw. Rissbildung während des Erstarrungsprozesses von Al-Mg-Legierungen, jeweils auf atomarer Skala. Die Methoden und Ergebnisse werden für weitere (zukünftige) Forschungsarbeiten zur Thematik „Entwicklung von neuen, heißrissewiderstandsfähigen Pulverlegierungen für den Laser Powder Bed Fusion Prozess (PBF-LB/M)“ genutzt. Aufgrund der gewerblich nicht vertretbaren Risiken bis zur Anwendbarkeit der entwickelten Methodik war das Forschungsvorhaben nicht im wirtschaftlichen Rahmen darstellbar und daher ausschließlich durch eine Förderunterstützung durchführbar.

4 Voraussichtlicher Nutzen und Fortschreibung des Verwertungsplans

Die Ergebnisse der am IMWF entstandenen Arbeiten werden für weitere künftige Forschungsarbeiten zur Thematik „Entwicklung von neuen, heißrissewiderstandsfähigen Pulverlegierungen für PBF-LB/M“ genutzt. Neben Aluminiumlegierungen sind hierbei insbesondere Titan- bzw. Nickelbasis-Pulverlegierungen von Interesse.

Weiterhin werden die Methoden und die Ergebnisse des Projekts in der Lehre und für die Ausbildung der Studenten genutzt. Im Rahmen des Vorhabens sind zusätzlich zwei sehr gute studentische Abschlussarbeiten entstanden, die in Abschnitt 6 aufgelistet sind: In der Bachelorarbeit von Frau Sönmez wurden Aufheißvorgänge, Fest-Flüssig-Grenzflächen und Nanozugversuche mit unterschiedlichen Dehnraten für Al-Mg-Legierungen mithilfe von Molekulardynamik-Simulationen untersucht. Die in der Masterarbeit von Herrn Lutz durchgeführten molekulardynamischen Untersuchungen lieferten grundlegende Erkenntnisse zur Poren- bzw. Rissbildung während des Erstarrungsprozesses von Al-Mg-Legierungen.

Durch die am IMWF durchgeführten Arbeiten ist es gelungen, die Eigenschaften der zu untersuchenden Al-Mg-Legierungen mit Hilfe von MD-Simulationen zu modellieren und ein differenziertes Verständnis zum Verhalten an Fest-Flüssig-Grenzflächen, zum Dendritenwachstum und zur Poren- bzw. Rissbildung während des Erstarrungsprozesses zu erreichen. Hiermit wurde der Stand der Forschung zu dieser Thematik erheblich vorangetrieben. In künftigen Projekten kann im Anschluss auf die Ergebnisse von DiStAl zurück gegriffen werden um weitere wichtige Metallpulverlegierungen (Titan, Nickelbasis etc.) auf ihren Heißrissewiderstand zu untersuchen. Hierfür können die in diesem Projekt erfolgreich entwickelten Molekulardynamik-Input-Skripte direkt weitergenutzt werden.

5 Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Neue Veröffentlichungen zu Molekulardynamiksimulationen zu Fest-Flüssig-Grenzflächen in Metallen werden am IMWF kontinuierlich beobachtet. Über den Verlauf der Projektdurchführung waren hierzu Fortschritte festzustellen, beispielsweise wurden von Shibuta [16] im Jahr 2024 Molekulardynamiksimulationen zur Erstarrung in Eisen und Coarse-Grained-MD-Simulationen zur Dendritenbildung in Nickel veröffentlicht.

Zu den in DiStAl erreichten Ergebnissen der zweiphasigen Nanozugversuche und zur Poren- bzw. Rissbildung während des Erstarrungsprozesses von Al-Mg-Legierungen sind bei anderen Stellen keine Fortschritte bekannt.

6 Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen des Ergebnisses

Studentische Abschlussarbeiten:

Meltem Sönmez: Untersuchung der Heißrissinitiierung an der Erstarrungsfront in additiv gefertigten Al-Mg-Legierungen mittels Molekulardynamik, Bachelor-Arbeit, Betreuer: Dr.-Ing. Peter Binkele, Dennis-Michael Rapp (M. Sc.), Prüfer: Prof. Dr. rer. nat. Siegfried Schmauder, Prof. Dr.-Ing. Michael Seidenfuß, Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF), Universität Stuttgart, pp. 1-85, (2022).

Mischa Lutz, Molekulardynamische Untersuchung der thermischen und fluidodynamischen Einflüsse auf den Erstarrungsprozess von AlMg-Legierungen für die additive Fertigung, Master-Arbeit, Betreuer: Dr.-Ing. Peter Binkele, Dennis-Michael Rapp (M. Sc.), Prüfer: Prof. Dr.-Ing. Stefan Weihe, Prof. Dr.-Ing. Michael Seidenfuß, Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF), Universität Stuttgart, pp. 1-99, (2023).

Veröffentlichungen:

Peter Binkele, Dennis Rapp, Meltem Sönmez, Mischa Lutz, Wolfgang Verestek, (2023, 18.-19. September), „DiStAl“ - Digitale Strategie zur Entwicklung von neuen, heißrisswiderstandsfähigen Al-Pulverlegierungen für SLM, Teilvorhaben: Molekulardynamische Untersuchung des Heißrisswiderstands in Al-Pulverlegierungen unter Berücksichtigung von SLM-spezifischen Randbedingungen. Posterpräsentation, Plattform MaterialDigital Vollversammlung in Karlsruhe.

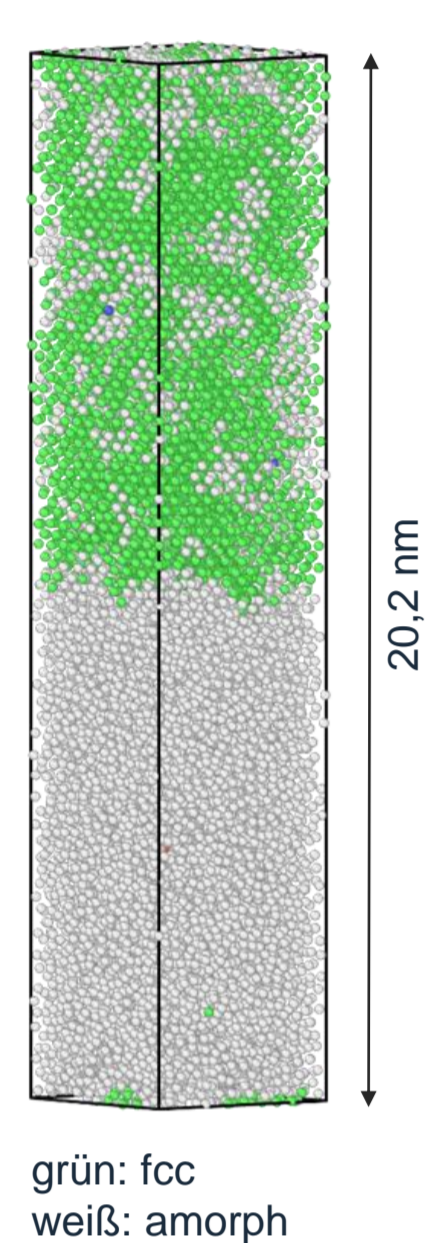
Weitere Veröffentlichungen sind geplant.

„DiStAl“ - Digitale Strategie zur Entwicklung von neuen, heißbrisswiderstandsfähigen Al-Pulverlegierungen für SLM

Teilvorhaben: Molekulardynamische Untersuchung des Heißbrisswiderstands in Al-Pulverlegierungen unter Berücksichtigung von SLM-spezifischen Randbedingungen

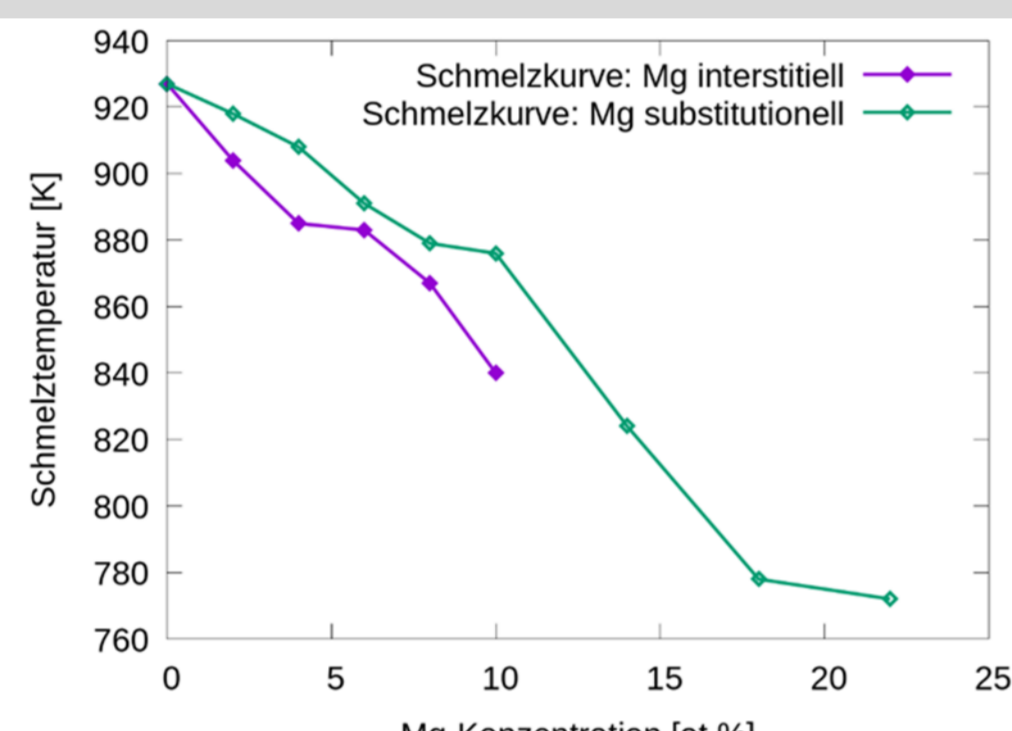
Peter Binkele, Dennis Rapp, Meltem Sönmez, Mischa Lutz, Wolfgang Verestek
 Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF), Universität Stuttgart, Deutschland

Molekulardynamik: Schmelztemperatur Al-Mg-Legierung

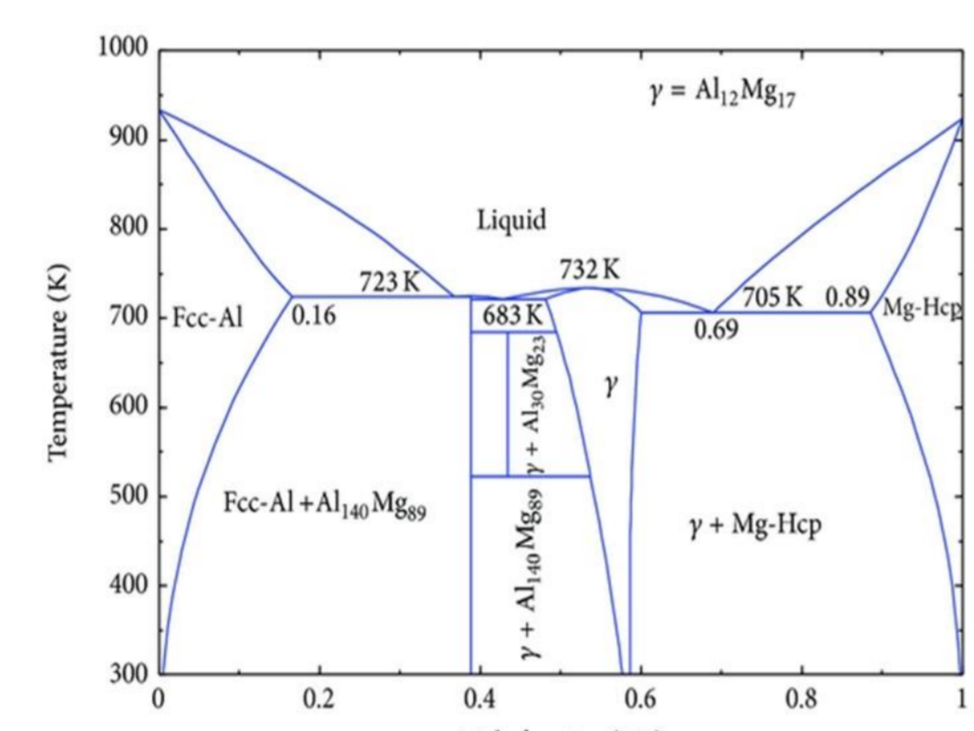
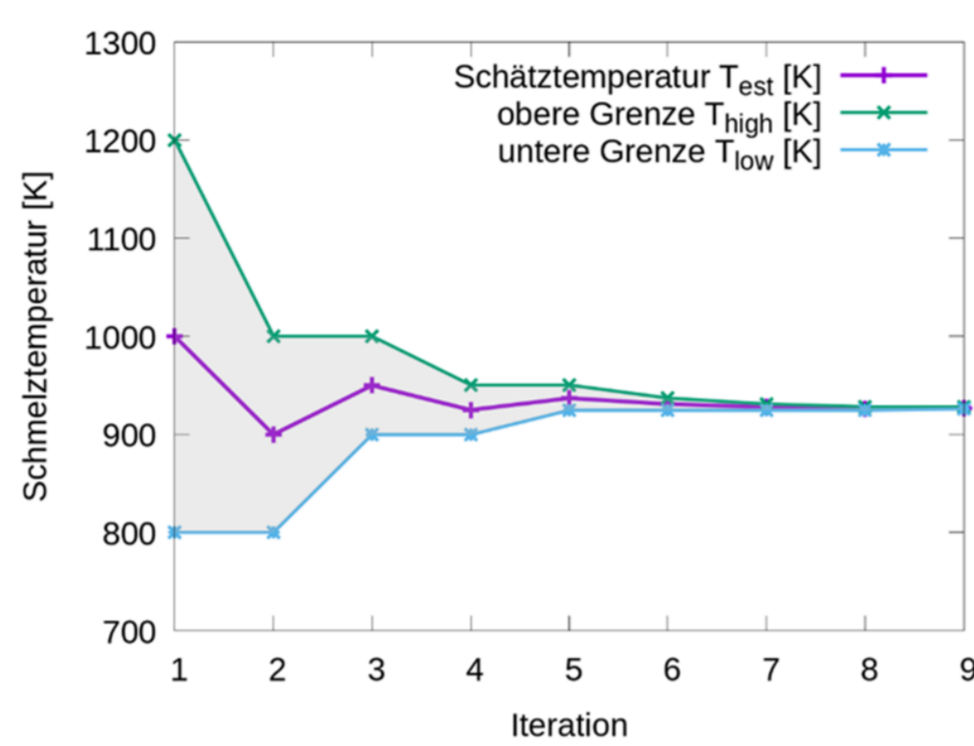


Für 100% Al:
 Simulation: $T_M = 927$ K
 Real: $T_M = 933$ K

Vergleich der Schmelztemperaturen mit interstitiellem bzw. substitutionellem Mg:



Mit zunehmender Mg-Konzentration nimmt die Schmelztemperatur ab.



[4] M. Mezbahul-Islam, A.O. Mostafa, M. Medraj, Journal of Materials (2014), 1–33.

Molekulardynamik-Software: LAMMPS [1] S. Plimpton, J. Comp. Phys., 117 (1995) 1-19.

Embedded-Atom-Method (EAM) Potential: Al-Mg.eam.fs

[2] M.I. Mendeleev, M. Asta, M.J. Rahman, and J.J. Hoyt, Development of interatomic potentials appropriate for simulation of solid-liquid interface properties in Al-Mg alloys, Philosophical Magazine, 89(34-36), (2009) 3269-3285.

Visualisierungs- und Analysesoftware: Ovito

[3] A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO the open Visualization Tool, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010) 015012.

Bestimmung der Schmelztemperatur durch Fest-Flüssig-Grenzfläche, Koexistenzmethode, Vorgehen:

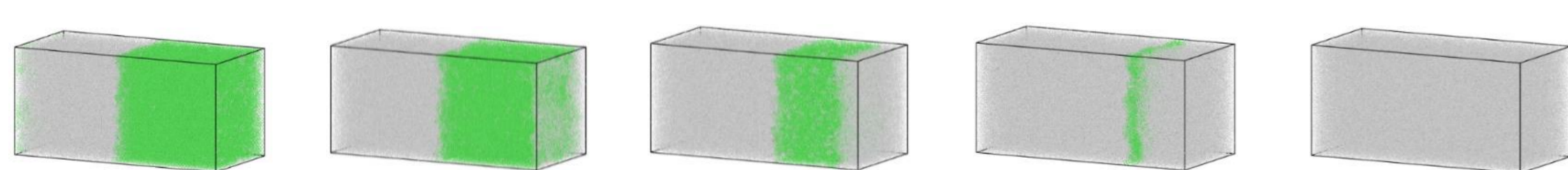
1. Konstruktion einer Fest-Flüssig-Grenzfläche in der Mitte der Simulationszelle am geschätzten Schmelzpunkt
2. Das System über einen isenthalpischen Barostat nach Nosé-Hoover-Art (NPH) ins Gleichgewicht bringen
3. Systemtemperatur nähert sich Schmelztemperatur an
4. Bestimmung der Schmelztemperatur über mehrere Iterationen durch Anpassung der Schätztemperatur.

Molekulardynamik: Zweiphasige Zugversuche

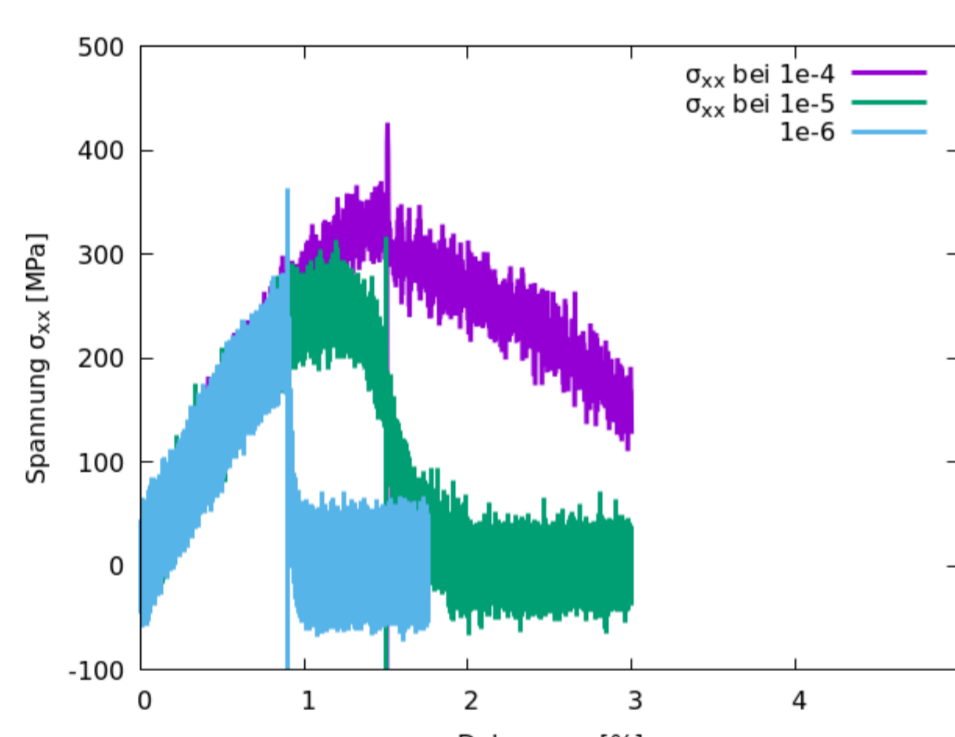
Variation der

- Geometrie der Grenzfläche (Zwei-Temp.-Modell / Entmischte Strukturen)
- Randbedingungen (mit / ohne Querkontraktion)
- Dehnraten
- Ensembles (NVE, NVT, NpT, NVH)

Zwei-Temperaturen-Modell



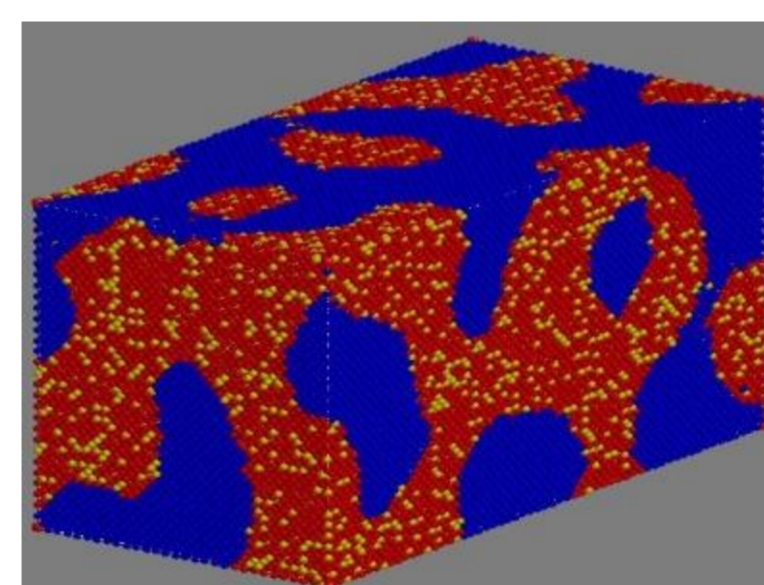
Snapshots bei Dehnrate $1 \cdot 10^{-6} \text{ ps}^{-1} = 1 \cdot 10^{+6} \text{ s}^{-1}$



| Dehnrate [1/ps] | Dehnrate [1/s] | Zugfestigkeit [MPa] |
|-------------------|-------------------|---------------------|
| $1 \cdot 10^{-4}$ | $1 \cdot 10^{-6}$ | 330 |
| $1 \cdot 10^{-5}$ | $1 \cdot 10^{-7}$ | 240 |
| $1 \cdot 10^{-6}$ | $1 \cdot 10^{-8}$ | 225 |

Simulationsbox: $60 \times 30 \times 30$ Gitterkonstanten, $a=0,405$ nm, 95% Al-Atome, 5% Mg-Atome, Querkontraktion ist erlaubt, $T = 900$ K zu Beginn des Zugversuchs.

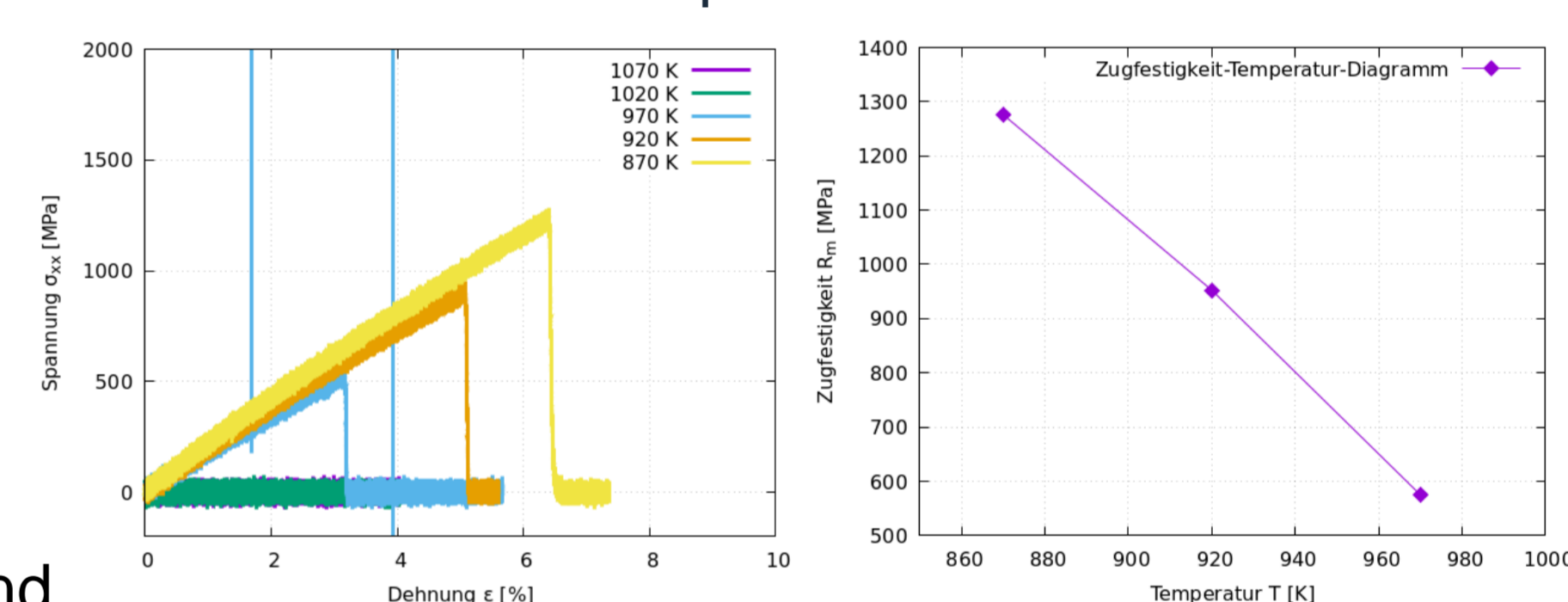
„Entmischte Strukturen“



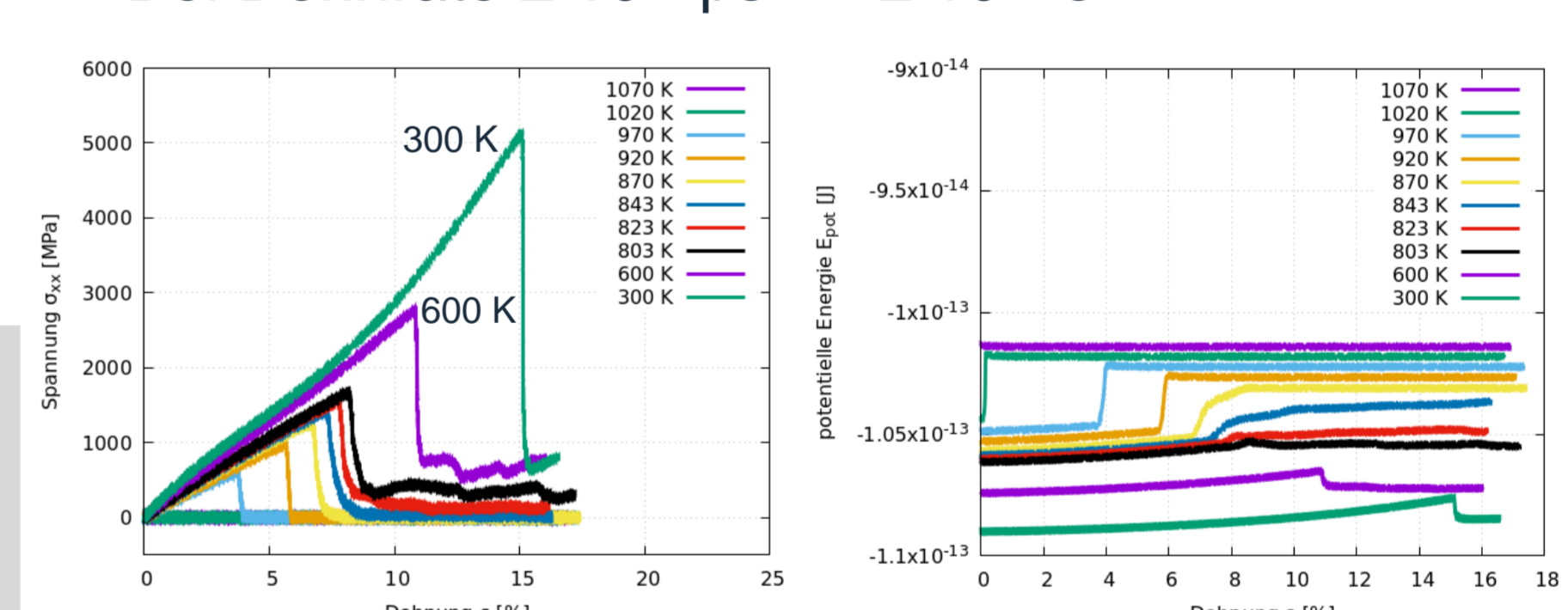
Startkonfiguration mit Phase 1 (Al_{100} , blau) und Phase 2 ($Al_{78}Mg_{22}$ mit roten Al-Atomen und gelben Mg-Atomen).
 $T_M(Al_{100}) = 927$ K
 $T_M(Al_{78}Mg_{22}) = 780$ K

Mit abnehmender Temperatur nehmen Zugfestigkeit und Bruchdehnung zu.

Bei Dehnrate $2 \cdot 10^{-6} \text{ ps}^{-1} = 2 \cdot 10^{+6} \text{ s}^{-1}$



Bei Dehnrate $2 \cdot 10^{-5} \text{ ps}^{-1} = 2 \cdot 10^{+7} \text{ s}^{-1}$



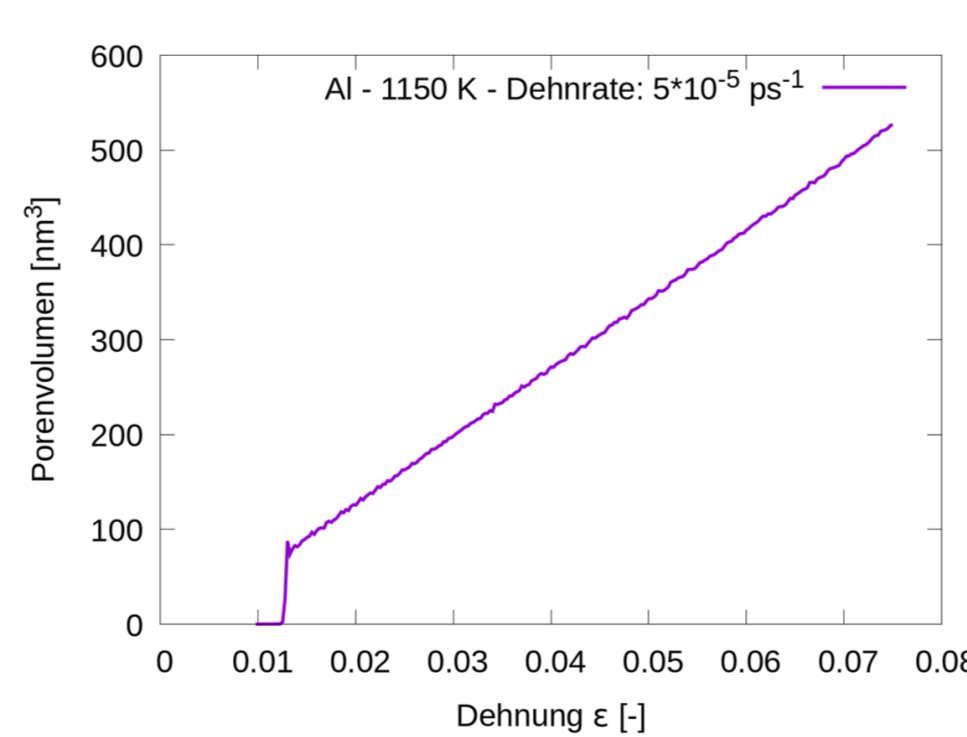
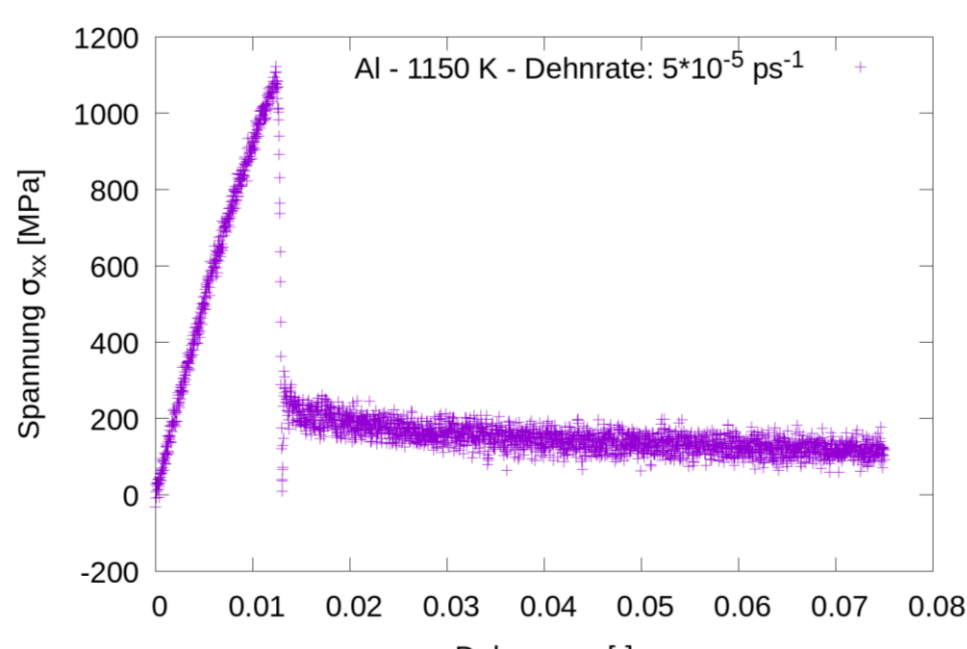
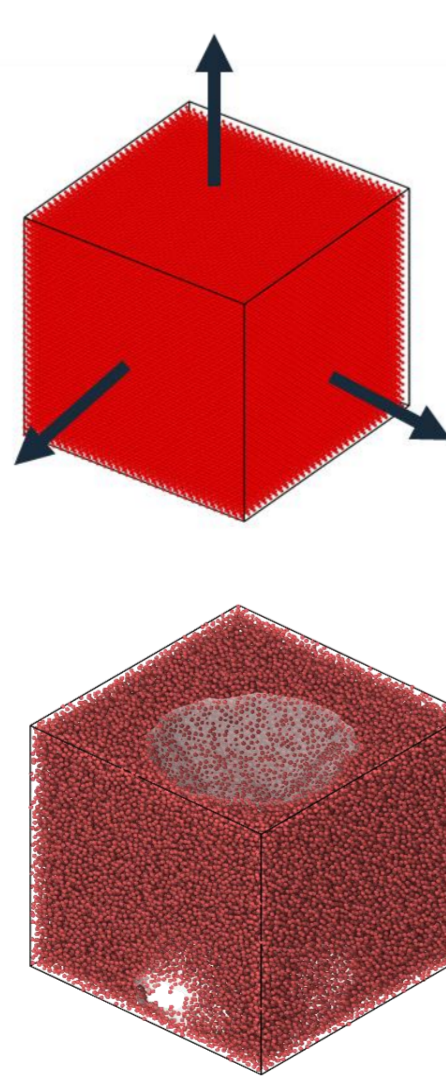
Molekulardynamik: Bildung von Poren / Blasen

Hydrostatischer Zugversuch

Für flüssiges Al:

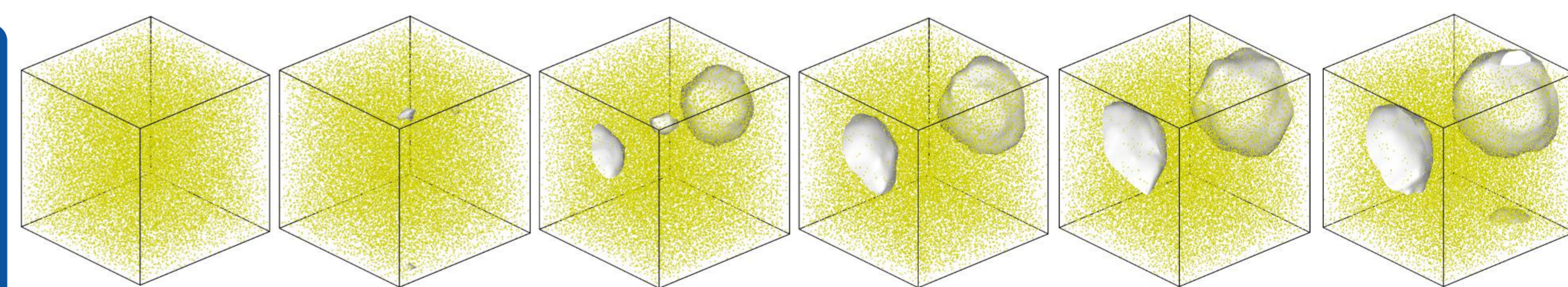
Simulationsdaten:

- Boxgröße: $30 \times 30 \times 30$ Gitterkonstanten
- Randbedingungen: periodisch
- Temperatur: 1150 K
- Zeitschrittweite: 1 fs
- Zeitschritte: 1500000
- Gesamt simulierte Zeit: 1,5 ns
- Dehnraten: $5 \cdot 10^{-5} \text{ 1/ps} = 5 \cdot 10^7 \text{ 1/s}$



→ Spannungsabfall und Porenbildung bei 1,28% Dehnung.
 → Porenvolumen wächst linear mit der Zeit bzw. Dehnung.

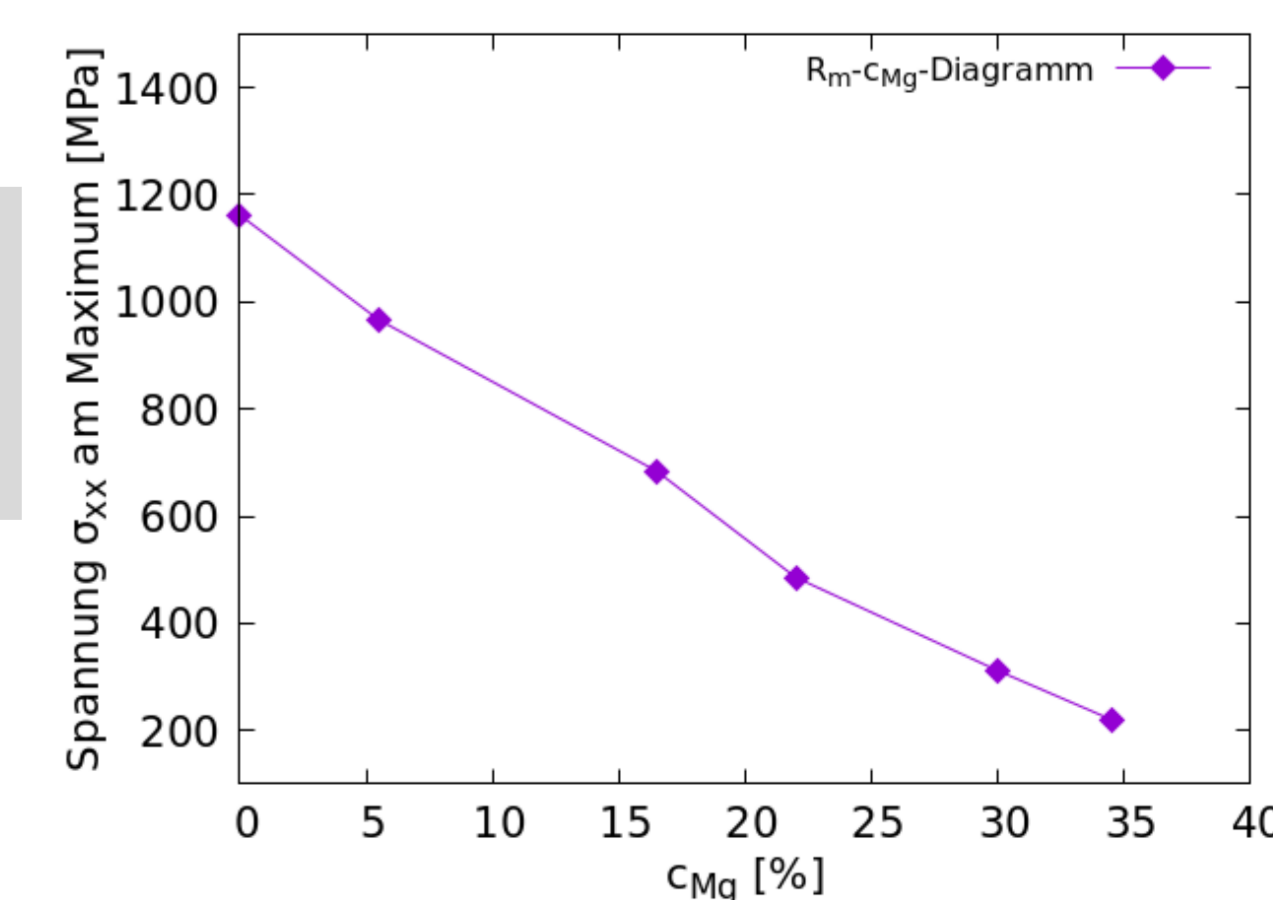
Variation der Mg-Konzentration



Snapshots: Al-Mg-Schmelze mit 22% Magnesiumzusatz
 Al: transparent, Mg: gelb.

Mit steigender Mg-Konzentration nimmt die zur Bildung einer Pore erforderliche Spannung stark ab.

Kann als orts- und konzentrationsabhängiges Kriterium für Blasenentstehung verwendet werden.



Ein Verbundprojekt von:

