

Auszug aus dem Jahresbericht 2018  
 Zur aktuellen Website: [www.ist.fraunhofer.de](http://www.ist.fraunhofer.de)

# THERMODYNAMISCHE MODELLIERUNG VON WERKSTOFF-LEGIERUNGEN MIT DER CALPHAD-METHODE

Die computergestützte Simulation ist heutzutage ein wichtiger Bestandteil der Forschungs- und Entwicklungsarbeit. Dies gilt zunehmend auch für die Materialwissenschaften. Mit der CALPHAD-Methode (CALculation of PHase Diagrams), die auf der Kalkulation von Phasengleichgewichtszuständen und thermodynamischen Eigenschaften in einem definierten System beruht, können Materialeigenschaften berechnet werden. Dieses ermöglicht es z. B. Legierungen auf deren Eignung für bestimmte Verfahren und Anwendungen, die Entwicklung eines besseren Verständnisses über Vorgänge im Material, und eine gezielte Optimierung von Legierungszusammensetzungen und Schichtsystemen.

## Elektronenstrahlbehandlung von $Ti_{(1-x)}Al_xN$ -Schichten auf Vergütungsstahl

Am Fraunhofer IST wurde die Simulationssoftware Thermo-Calc bei der Elektronenstrahlbehandlung (EBH) von  $Ti_{(1-x)}Al_xN$ -Schichten auf Vergütungsstahl eingesetzt und dabei interessante Erkenntnisse über Materialeigenschaften gewonnen. Vor der Elektronenstrahlbehandlung ist an den Focused Ion Beam (FIB)-Präparaten eine periodisch morphologische Schichtstruktur zu erkennen, die durch die Substratrotation im Beschichtungsprozess verursacht wird. Im Verlauf der EBH löst sich diese Struktur des Sublayers auf und eine Matrixstruktur mit globularen Einschlüssen bildet sich (vgl. Abbildung 1). Die Vorgänge, die zu dem Phänomen führen, lassen sich mit Hilfe einer chemischen Analyse und der Simulation mittels Thermo-Calc erklären.

## Die Analyse

Phasen- und Zustandsdiagramme für die verschiedenen Bereiche im Material, die zunächst mit der Software Thermo-Calc

erstellt wurden, zeigen, dass sich das Gefüge der Verbindungsschicht und des Sublayers stark unterscheiden. Die  $TiAlN$ -Schicht besteht weitgehend aus kubisch flächenzentriertem Mischkristall und Aluminiumnitrid, während sich im Sublayer hauptsächlich ein hexagonal dichtest gepackter Mischkristall und eine  $Ti_2N$ -Phase bilden. Die Variation der Elementkonzentrationen um die gemessenen Werte ergibt, dass bei bestimmten chemischen Zusammensetzungen ab rund 1000 °C eine flüssige Aluminiumphase auftritt (vgl. nebenstehendes Diagramm oben). Tatsächlich können durch Einwirkung des Elektronenstrahls lokale Temperaturen von deutlich über 1000 °C erreicht werden, sodass es in den entsprechenden Bereichen zur Ausscheidung von Aluminium kommt, das anschließend wieder erstarrt. Darüber hinaus wurden weitere Materialeigenschaften wie die Solidustemperatur und die Dichte in Abhängigkeit der chemischen Zusammensetzung berechnet. Danach erreicht der Verlauf der Solidustemperatur zwischen 35 und 45at% Stickstoff einen Tiefpunkt (vgl. nebenstehendes Diagramm unten) und entspricht dort etwa der Ausscheidungstemperatur des flüssigen Aluminiums.

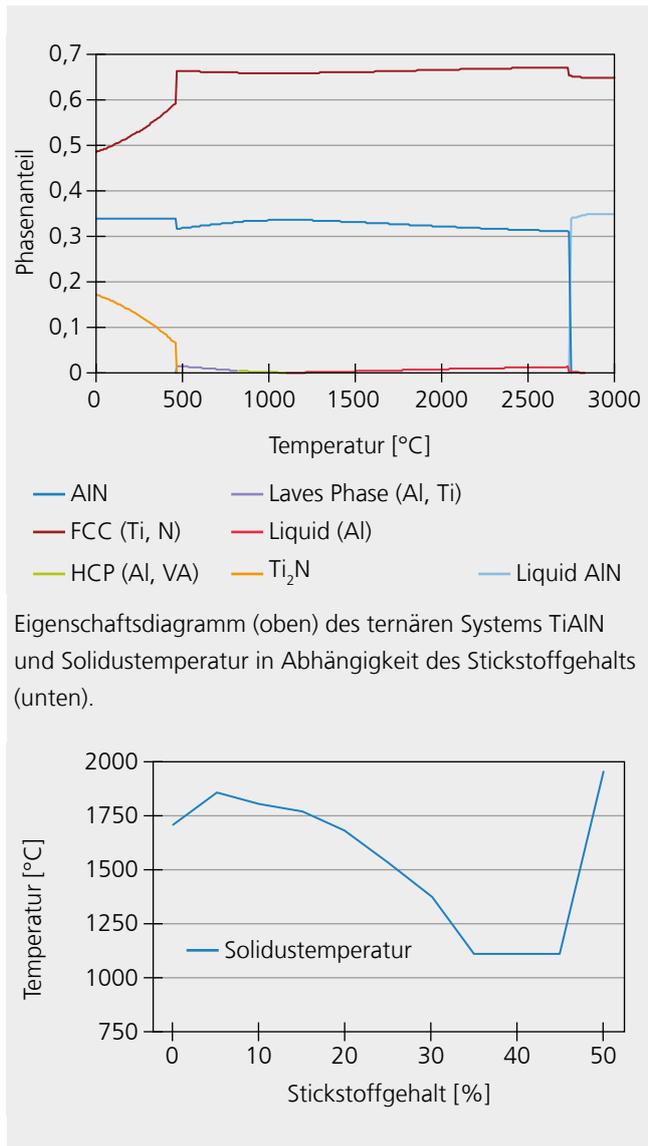
1 FIB-Präparat der TiAlN-Schicht vor (links) und nach (rechts) der Elektronenstrahlbehandlung.

## Die Ergebnisse

Die Modellierung der Vorgänge während der EBH von TiAlN-Schichten mittels Thermo-Calc liefert eine plausible Erklärung für die beobachteten Strukturänderungen. Sie legt nahe, dass lokal kleine Volumina durch den Elektronenstrahl auf Temperaturen oberhalb der Solidustemperatur erhitzt werden, sodass flüssiges Aluminium ausgeschieden wird, erstarrt und im Querschliff als globulare Ausscheidungen mit geringerer Dichte zurückbleibt.

## Ausblick

Die CALPHAD-Methode wird in weiteren Projekten zur Unterstützung eingesetzt. Dabei rückt die Simulation von Diffusionsvorgänge in komplexen Werkstoffen mit Hilfe der Zusatzsoftware DICTRA zunehmend in den Fokus.



## KONTAKT

Julian Vogtmann, M.Sc.  
Telefon +49 531 2155-657  
julian.vogtmann@ist-extern.fraunhofer.de