

Multiskalensimulationen von Metallen

Projektbeginn: 01.12.2009

Projektende: 30.11.2012

Zusammenfassung

Das Ziel dieses Projektes ist es, Methoden und Algorithmen zu entwickeln, um ein elastisch-plastisches Kontinuum, das mit Finiten Elementen (FE) und Versetzungsdynamik (DD, *Dislocation Dynamics*) modelliert wird, mit dem zugrunde liegenden atomistischen System, mit Hilfe von Molekulardynamik- (MD), Monte-Carlo (MC)-Simulationen, zu verknüpfen (siehe Abb.1). Hierbei wird ein vertikaler Ansatz (sequentielle Modellierung) verfolgt, im Gegensatz zu einer horizontalen Methode (simultane Modellierung), bei der verschiedene Längenskalen innerhalb eines Modells miteinander verknüpft werden. Die Kombination dieser Methoden ist relevant im Rahmen von hybriden, multiskaligen, kontinuums-atomistischen Simulationen von versetzungsverfestigten Werkstoffen wie Stählen oder Leichtmetallen, bei denen makroskopische mechanische Eigenschaften wie Risseinleitung und Rissausbreitungsenergien von der Größe der Ausscheidungen abhängig sind, da Wechselwirkungsenergien zwischen Versetzungen und Ausscheidungen in Metallen von der Größe der Ausscheidungen abhängen. Auf Grund der stark unterschiedlichen Längenskalen unterscheiden sich die Parameter, die

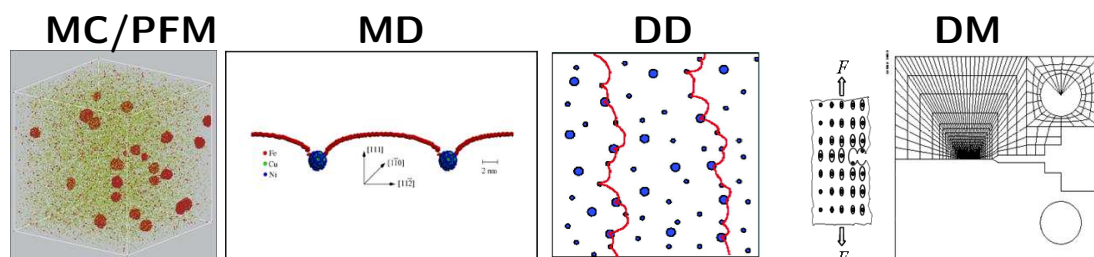


Abbildung 1: Simulation der Ausscheidungsbildung mittels Monte-Carlo (MC)- und Phasenfeldmethode (PFM); Wechselwirkungen zwischen Versetzungen und Teilchen werden durch Molekulardynamik- (MD) und Versetzungsdynamik-Methoden (DD) simuliert; Materialversagen wird im Rahmen von Schädigungsmechanik (DM, *Damage Mechanics*) simuliert. Die folgenden Kopplungsparameter werden in dieser sequentiellen Simulation abgeleitet werden: Teilchengrößenverteilungen (MC für kleine Teilchengrößen und PFM für größere), Grenzflächenenergien (MD) und Festigkeitsanstieg (DD, MD).

für das mechanische Verhalten der ausscheidungsverfestigten Metalle verantwortlich sind, für die atomare Ebene, für die mesoskopische Versetzungsebene sowie für die mikromechanischen Längenskala. Auf der Ebene der finiten Elemente sind die Parameter, die empfindlich auf Deformation und Bruch reagieren, typischerweise mit Spannungs-Dehnungs-Diagrammen ebenso wie mit makroskopischen Gleitbewegungs- und Bruchkräften verbunden, welche experimentell ermittelt werden. Auf dieser makroskopischen Ebene sind die Größenverteilungen der Ausscheidungen indirekt in der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurve enthalten. Auf der Versetzungsdynamik-Kontinuums-Ebene hingegen können Teilchen explizit für eine umfangreiche Anzahl an Größen berücksichtigt werden. Verteilungen von Teilchen und die Wechselwirkung von Versetzungen mit einem Teilchenfeld können realistische Gleitbewegungs- und Bruchkräfte von diesen Zusammensetzungen als Eingangsparameter für die makroskopisch benötigten Spannungs-Dehnungs-Kurven liefern. Versetzungsdynamik-Simulationen jedoch fehlt es oft an Wechselwirkungsenergien zwischen Versetzungen und Ausscheidungen. Die Untersuchung dieser Wechselwirkungsenergien erfordert eine kleinere oder, genauer gesagt, eine atomistische Längenskala, die z. B. über MD-Computer-Simulationen erfasst werden, bei denen Versetzungslinienenergien für geometrische Situationen abgeleitet werden können, die während der Wechselwirkung zwischen einer Versetzung und Ausscheidungen auftreten. Auf allen Längenskalen werden temperaturabhängige Werkstoffeigenschaften wie Spannungs-Dehnungs-Kurven, Versetzungslinienenergien und Vibrationen der Atome benötigt. Schließlich können die erforderlichen Größenverteilungen der Ausscheidungen, wie sie nach der Werkstoffherstellung oder auf Grund von Härtungs- oder Anlassprozessen vorliegen, von Monte-Carlo-Simulationen abgeleitet werden, bei denen Diffusionsprozesse verantwortlich für den Anstieg der Teilchengröße sind (Ostwaldreifung). Eine zweite Möglichkeit, um die Gesetze vor allem für größere Ausscheidungen abzuleiten, ist, Phasenfeldmethoden (PFM) anzuwenden, um den Teilchenvergrößerungsprozess zu simulieren. Eine physikalisch begründete Beschreibung des Wachstums der Ausscheidungen ist unbedingt erforderlich als Ausgangspunkt für die Simulation des Wachstumsprozesses nach der Keimbildung ebenso wie für das Ableiten der PFM Energie-Parameter wie z. B. Grenzflächenenergien oder Versetzungslinienenergien.

Es gibt zahlreiche Annäherungen, um dieses Problem zu lösen, wie z. B. direkte Kopplungsprozesse innerhalb eines Algorithmus (horizontale oder auch simultane Kopplung) - mit der Schwierigkeit, dass stark auseinandergehende Längen- und Zeitskalen miteinander verbunden werden müssen. Ein vielversprechender Vorschlag, der in der jüngsten Vergangenheit unterbreitet wurde, deckt auf jeder Längenskala das relevante Problem mit der passenden Methode ab und überbrückt die Lücken durch Parametertransfer (hierarchische oder sequen-

tielle Modellierung). In der Vergangenheit wurden vorbereitende Arbeiten geleistet, indem Längen- und Zeitskalen direkt (horizontal) überbrückt worden sind und zwar innerhalb einer gekoppelten Finiten-Elemente-Atomistik-Methode (FEAt) als Teil des Problems oder durch hierarchische Simulationen mit mehreren benötigten Simulationswerkzeugen. Zuerst müssen die verfügbaren direkten Kopplungsprozesse sorgfältig auf die Möglichkeit einer geeigneten Modifikation untersucht werden, um diese Methoden weiter zu entwickeln. Als eine praktisch relevante Anwendung eines solchen Ansatzes soll in dieser Arbeit die Ausscheidungsverfestigung von Stahl oder einer Aluminium-Legierung angegangen und mit Experimenten verglichen werden. Parametrische Studien werden einen Überblick über die Möglichkeiten zur Verfügung stellen, wie Werkstoffe weiterentwickelt werden können. In unserer eigenen Gruppe wurden Erfahrungen in Kontinuums- und atomistischen Simulationen mit FE-, MD-, MC- und PF-Methoden und der Schädigungsmechanik (DM, *Damage Mechanics*) gesammelt. Für die FE und MD Simulationen werden wir eng mit SimTech-Forschern und mit Gruppen im SimTech Exzellenzcluster zusammenarbeiten, die viel Erfahrung mit kontinuums- und atomistischen Methoden haben und die sich auch mit direkten Kopplungsansätzen beschäftigen. Ziel der Kopplung zwischen Versetzungsdynamik (DD) und Rissausbreitungssimulationen unter Zuhilfenahme der Schädigungsmechanik ist es, den Festigkeitsanstieg für realistische Verteilungen von Ausscheidungsgrößen und -anordnungen sowie für Teilchendichten abzuleiten, die aus Monte-Carlo (MC)-Simulationen bzw. Phasenfeldmethoden (PFM) gewonnen werden. Versetzungsdynamik basiert auf realistischen Simulationsparametern von MD-Ergebnissen für die komplexe Wechselwirkung zwischen einer Versetzung und einer Kupfer-Ausscheidung. Die Wechselwirkung zwischen einer Versetzung und einem Teilchen kann mit MD als eine Funktion der Teilchengröße simuliert werden. Der Festigkeitsanstieg wird für realistische Teilchengrößenverteilungen abgeleitet werden. Das wird nützlich sein, um den makroskopischen Verfestigungseffekt auf Grund der Kupfer-Ausscheidungen abzuschätzen und folglich auch, um das Versagensverhalten des Werkstoffes abzuleiten, indem die Schädigungsmechanik (DM) im Rahmen der Finite Elemente-Methode (FEM) eingesetzt wird.

Danksagung

Wir danken der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die Förderung dieses Projekts im Rahmen des Exzellenzclusters Simulation Technology (EXC 310/1) an der Universität Stuttgart.

www.simtech.uni-stuttgart.de

Ansprechpartner

Dipl.-Phys. David Molnar
Institut für Materialprüfung,
Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF)
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 32
70569 Stuttgart

E-mail: david.molnar@imwf.uni-stuttgart.de
Tel.: +49 (0)711 685 63929