



Metallurgie im 21. Jahrhundert: Quantenmechanisch geführtes Werkstoffdesign

Die Abteilungen von Prof. Neugebauer (Computergestütztes Materialdesign) und Prof. Raabe (Mikrostrukturphysik und Umformtechnik) haben eine neue Generation von Simulationsmethoden für die Werkstoffentwicklung eingeführt. Die Innovation des Ansatzes beruht auf der Verbindung von Quantenmechanik, Kontinuumstheorie und Experiment für metallurgisches Materialdesign.

Einführung in die Multiskalensimulationen

Werkstoffe sind seit jeher vor allem durch empirische Verfahren entwickelt worden. In der Regel folgten Neuentwicklungen und Verbesserungen dabei einerseits empirischen Beobachtungen hinsichtlich der Wirkung bestimmter Legierungszusätze bezüglich der Festigkeit, Härte oder Leitfähigkeit, andererseits empirischen thermodynamischen und kinetischen Zusammenhängen bezüglich Stabilität und Darstellbarkeit.

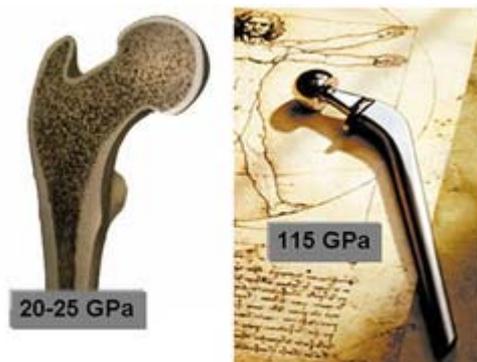
Während der letzten 15 Jahre gewannen Computersimulationen eine zunehmende Rolle um einzelne Aspekte eines neuen Werkstoffs gezielt vorherzusagen [1-4]. Auf der atomaren Skala sind dies beispielsweise die Verfahren der Molekulardynamik und der Monte-Carlo-Methode, auf der mikroskopischen Skala zum Beispiel die Phasenfeldmethode sowie zelluläre Automaten und auf der Makroskala statistische analytische Modelle des gemittelten Materialverhaltens (konstitutive Materialgesetze) in Verbindung mit FEM-Verfahren (FEM: Finite-Elemente-Methode).

Eine wesentlich realistischere Beschreibung von Werkstoffen versprechen Multiskalensimulationen, welche zusätzlich darauf abzielen, selektiv Informationen zwischen Simulationsverfahren auf jeweils benachbarten Größen- und Ortsskalen untereinander zu verknüpfen. Aufgrund der Zeit- und Größenunterschiede zwischen der atomaren und makroskopischen Skala ist es allerdings nicht möglich, einen Werkstoff durchgehend über alle Skalen zu modellieren. Jörg Neugebauer und Dierk Raabe haben daher am Max-Planck-Institut für Eisenforschung alternative Methoden zur skalenüberbrückenden Werkstoffsimulation entwickelt. Die Vorgehensweise besteht darin, quantenmechanische Ergebnisse aus *ab initio* Simulationen unmittelbar auf der makroskopischen Ebene über geeignete Verfahren der Kontinuumstheorie einzubinden [1, 5].

In der Folge wird an einem Beispiel aufgezeigt, welche Möglichkeiten der neue Ansatz eröffnet. Der wirtschaftliche Nutzen solcher Simulationen zeigt sich dabei zunächst in der Reduzierung des experimentellen Aufwands bei der Bestimmung von Kennwerten für empirische Simulationen. Experimente zur Kennwertbestimmung sowie zur direkten Material- oder Bauteilprüfung sind sehr kostenintensiv. Insbesondere *ab initio* Methoden mit ihrer hohen Voraussagegenauigkeit haben ein hohes Potenzial gerade auch in einer anwendungsorientierten Umgebung.

Eine weitere mögliche Kostenreduktion liegt auch in der Materialsynthese. So können bisher noch nicht synthetisierte Werkstoffe mithilfe der neuen Simulationsverfahren zunächst auf dem Computer auf ihre Strukturen und Eigenschaften hin überprüft werden, sodass sich die experimentelle Synthese entsprechender Materialsysteme von vornherein auf wenige Materialkombinationen begrenzen lässt. Weitere Vorteile liegen darin, dass die spätere Nutzung von Werkstoffen sich schon auf dem Computer simulieren lässt. Neben diesen rein wirtschaftlichen Aspekten eröffnen solche Simulationsverfahren auch beträchtliche technisch-wissenschaftliche Wettbewerbsvorteile für ein Unternehmen, indem Produkte grundsätzlich nicht mehr graduell oder empirisch sondern wissenschaftlich entwickelt und in ihren Strukturen, Eigenschaften und Synthesemethoden beschrieben werden. Dieser Paradigmenwechsel hat positive Auswirkungen auf die Produktentwicklungszeiten, auf die Qualität und auf die Genauigkeit der Produktcharakterisierung.

Ein neues Biomaterial für Implantate als Beispiel für quantenmechanisch geführtes Werkstoffdesign

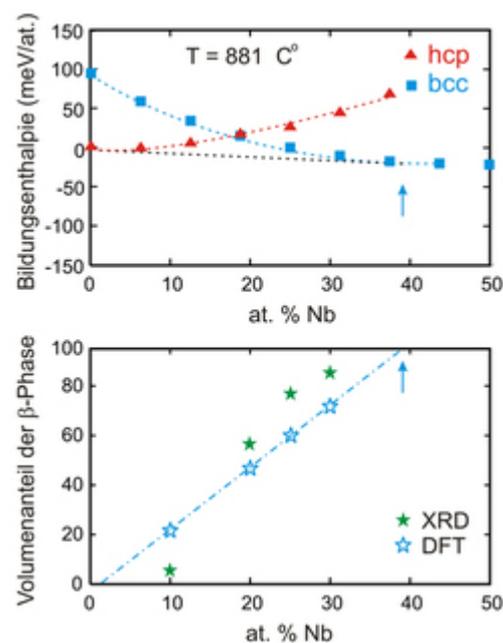


Jährlich werden weltweit mehr als eine Million Hüftprothesen eingesetzt.

© MPI für Eisenforschung GmbH, Düsseldorf

Im Folgenden wird die neue Simulationstechnik am Beispiel eines Biowerkstoffes für Implantatanwendungen dargestellt [1-4]. Als Ausgangsbasis dient Titan. Es ist bioverträglich, gut zu bearbeiten und besitzt eine hohe Härte, sodass es heute als Standardmaterial in der Medizintechnik dient. Allein im Hüftbereich werden jährlich weltweit mehr als eine Million Prothesen eingesetzt (**Abb. 1**). Trotz seiner positiven Eigenschaften besteht beim Einsatz von Titan ein bisher ungelöstes Problem: Während Knochen eine elastische Steifigkeit von 20-25 GPa besitzt, bewegen sich die entsprechenden Steifigkeiten der Titanimplantate im Bereich von 100 bis 110 GPa. Diese Diskrepanz im mechanischen Verhalten zwischen Knochen und Prothese führt zum Effekt der mechanischen Abschirmung. Dies bedeutet, dass die im betroffenen Körperteil übertragene Kraft nicht mehr vom Knochen, sondern vom Implantat getragen wird. Da der Knochen seine Struktur und seine mechanische Leistungsfähigkeit in Abhängigkeit der anliegenden Spannungen verändert, führt seine künstliche Entlastung im Lauf der Zeit bei Gegenwart eines Implantats zu seiner Schwächung (Entmineralisierung, Rückbildung von Proteinen). In der Folge führt das zur Knochenschädigung, Implantatlockerung und Entzündungen. Diese Effekte ziehen in der Regel einen Austausch der Prothese nach 5-12 Jahren mit sich.

Vor diesem Hintergrund hat sich das Max-Planck-Institut für Eisenforschung der Aufgabe gestellt, mithilfe der neuen Simulationsstrategien und experimenteller Überprüfung der Vorhersagen neue Titan-Legierungen herzustellen, die eine dem Knochen ähnliche Steifigkeit haben als bisherige Materialien und gleichzeitig über eine hervorragende Bioverträglichkeit, Festigkeit und Härte verfügen.



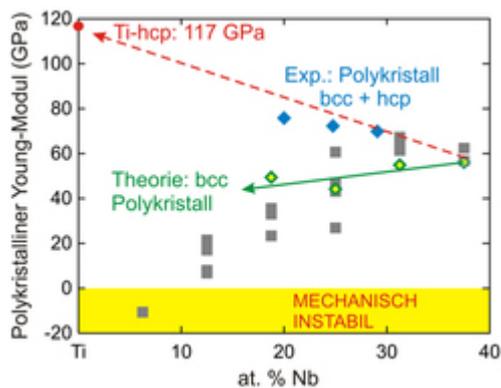
Bildungsenergien für binäre Titan-Niob-Legierungen als Funktion der Zusammensetzung. Die roten Symbole bezeichnen die hexagonale Gitterstruktur (hcp) und die blauen Symbole die kubisch-raumzentrierte Gitterstruktur (bcc). Die untere Abbildung zeigt die sehr gute Übereinstimmung der experimentell ermittelten Phasenanteile mit der Theorie (XRD: Röntgenbeugung; DFT: Dichtefunktionaltheorie).

© MPI für Eisenforschung GmbH, Düsseldorf

Ein erster Erfolg der quantenmechanischen Rechnungen war es, dass sie einen innovativen und metallurgisch nicht intuitiven Weg aufzeigten, um die Steifigkeit des Titans zu reduzieren. Der Ausgangspunkt der Überlegungen war, Kristallstrukturen

des Titans zu identifizieren, die eine reduzierte Steifigkeit haben. Da Titan bei Raumtemperatur nur in der hexagonalen Kristallstruktur vorkommt, ließ sich diese Fragestellung nicht experimentell beantworten. Mittels quantenmechanischer Rechnungen gelang es zu zeigen, dass die kubisch-raumzentrierte Kristallstruktur instabil gegenüber bestimmten Verzerrungen ist. Formal kann man dies so ausdrücken, dass Titan in dieser Kristallstruktur negative elastische Konstanten und damit eine verschwindende Steifigkeit aufweist. Durch geeignete Legierungsbildung sollte es damit möglich sein, die bei Raumtemperatur instabile kubische Phase zu stabilisieren und damit die Steifigkeit dieser Phase über einen weiten Bereich einzustellen.

Zu diesem Zweck wurden Legierungen aus Titan mit verschiedenen kubisch-raumzentrierten Metallen untersucht. Im ersten Schritt wurde die Stabilität verschiedener Legierungen mit *ab initio* Verfahren untersucht. Mittels dieses Screenings gelang es, eine optimale Materialkombination zu identifizieren. Angeleitet durch diese theoretische Vorauswahl wurden aussichtsreiche Kandidaten wie Titan-Niob- und Titan-Molybdän-Legierungen hergestellt und experimentell hinsichtlich der *ab initio* Vorhersagen überprüft (**Abb. 2**).

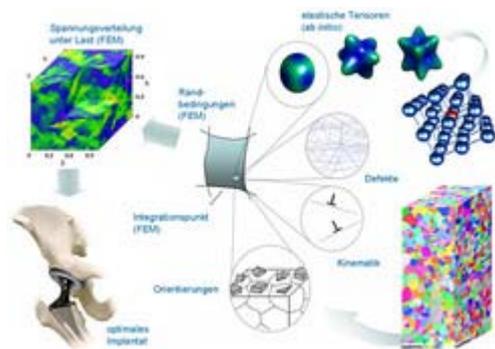


Überprüfung der mittels *ab initio* Vorhersagen ermittelten elastischen Eigenschaften von Titan-Niob-Legierungen (rote Linie) und deren experimentelle Überprüfung (blaue Symbole).

© MPI für Eisenforschung GmbH, Düsseldorf

Die Leistungsfähigkeit dieses Zugangs zeigte sich u.a. in der Genauigkeit, mit der der für Implantate relevante kubische Anteil als Funktion der Legierungszusammensetzung auf der Basis quantenmechanischer Rechnungen vorhergesagt wurde (**Abb. 2**). Sowohl die quantenmechanischen Rechnungen als auch die Experimente zeigen, dass mit zunehmendem Gehalt an Niob beziehungsweise Molybdän im Titan die kubisch-raumzentrierte Struktur des Materials bei Raumtemperatur stabilisiert wird.

Der zweite Schritt bestand darin, durch *ab initio* Rechnungen die elastischen Eigenschaften der neuen Materialien zu berechnen. Die beeindruckende Vorhersagegenauigkeit, die sich mit diesem Ansatz erzielen lässt, ist in **Abbildung 3** am Beispiel der Titan-Niob-Legierungen gezeigt. Die Übereinstimmung zwischen Theorie (rot gestrichelte Linie) und Experiment (blaue Symbole) geht weit über die Möglichkeiten hinaus, die konventionelle Ansätze erzielen könnten.



Darstellung zum Vorgehen bei der Einbindung der elektronentheoretischen Ergebnisse in makroskopische Finite-Elemente-Rechnungen unter Berücksichtigung der elastischen Kristall-Anisotropie sowie der Orientierungsverteilung der Kristalle.

© MPI für Eisenforschung GmbH, Düsseldorf

Der dritte Schritt beinhaltet die Einbindung der elektronentheoretischen Ergebnisse in makroskopische FEM-Rechnungen (**Abb. 4**). Die Weitergabe der elastischen Konstanten an die Finite-Elemente-Simulationen ist wichtig, da sie zwei relevante Informationen beinhalten: dies sind erstens die allgemeine elastische Steifigkeit des Materials sowie zweitens die elastische Anisotropie. Der Begriff der elastischen Anisotropie beschreibt die Richtungsabhängigkeit der elastischen Eigenschaften des

Materials. Um beide Eigenschaftsgruppen, also die plastische und elastische Richtungsabhängigkeit der neuen Werkstoffe mit entsprechender physikalischer Detailtiefe in makroskopischen Finite-Elemente-Simulationen für das letztliche Produktdesign nutzen zu können, wurde auch hier eine neue Methode, und zwar die kristallmechanischen FEM zur Beschreibung der mechanischen Materialbelastung verwendet. Die hier erläuterte Vorgehensweise hat gegenüber einem herkömmlichen Ti-Implantatwerkstoff mit einer sehr hohen Steifigkeit von etwa 115 GPa zu einer neuen Legierung geführt (Ti-35wt.%Nb-7wt.%Zr-5wt.%Ta) die eine Steifigkeit von nur noch 59,9 GPa aufweist.

Originalveröffentlichungen

D. Raabe, B. Sander, M. Friák, D. Ma, J. Neugebauer:

Theory-guided bottom-up design of beta-titanium alloys as biomaterials based on first principles calculations: theory and experiments.

Acta Materialia **55**, 4475-4487 (2007).

M. Friák, B. Sander, D. Raabe, J. Neugebauer:

Theory-guided design of Ti-based binaries for human implants.

Journal of Physics – Condensed Matter **20**, 064221 (2008).

B. Sander, D. Raabe:

Texture inhomogeneity in a Ti-Nb-based beta-titanium alloy after warm rolling and recrystallization.

Materials Science and Engineering A **479**, 236-247 (2008).

D. Ma, M. Friák, J. Neugebauer, D. Raabe, F. Roters:

Multiscale simulation of polycrystal mechanics of textured β -Ti alloys using ab initio and crystal-based finite element methods.

physica status solidi b **245**, 2642-2648 (2008).

W. A. Counts, M. Friák, D. Raabe, J. Neugebauer:

Using ab initio calculations in designing bcc Mg-Li alloys for ultra light-weight applications.

Acta Materialia **57**, 69-76 (2009).

Adresse: <http://www.mpg.de/387596/forschungsSchwerpunkt>

© Max-Planck-Gesellschaft, München, © 2003-2012

Alle Rechte vorbehalten

Vervielfältigung nur mit Genehmigung