

Nanostrukturierung von einer Milliarde Tonnen: Auf dem Weg zum atomaren Design neuer metallischer Legierungen

Nanostructuring of one billion tonnes: On the way to the atomic design of new metallic alloys

Raabe, Dierk

Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Düsseldorf

Korrespondierender Autor

E-Mail: d.raabe@mpie.de

Zusammenfassung

Metallische Werkstoffe bilden das Rückgrat moderner Industriegesellschaften, die ihre Wettbewerbsfähigkeit auf der Fertigung komplexer Produkte und Verfahren gründen. Die Grundlagenforschung an Metallen hat in den vergangenen Jahren eine Revolution erfahren, die darauf beruht, dass die Struktur und die Eigenschaften von Legierungen auf atomarer Ebene vorhergesagt und experimentell überprüft werden können. Diese Verfahren erlauben das auf den atomaren Bausteinen der Materie aufbauende Design neuer Werkstoffe.

Summary

Metallic materials are the backbone of modern industrial societies establishing their competitiveness in the production of complex products and processes. The basic research on metals has undergone a revolution in recent years, based on the fact that the structure and properties of alloys can be predicted and experimentally verified at the atomic level. These methods enable us to design new materials on the basis of their atomic structure.

Atomares Erkennen und Designen neuer metallischer Legierungen

Etwa 70% aller Innovationen sind mit Fortschritten in der Erforschung neuer Materialien verbunden. Insbesondere metallische Werkstoffe sind für moderne Industrieprodukte und entsprechende Fertigungsverfahren in den Bereichen Energie, Mobilität, Gesundheit, Sicherheit und industrielle Infrastruktur unverzichtbar. Die Erforschung, Herstellung, Weiterverarbeitung und Verwendung von metallischen Legierungen umfasst nahezu die Hälfte der in der EU erwirtschafteten Industrielleistung, mit einem finanziellen Umfang von etwa 3,5 Milliarden Euro pro Tag [vgl. [World Trade Organisation](http://www.wto.org) (<http://www.wto.org>), [Eurostat](http://epp.eurostat.ec.europa.eu) (<http://epp.eurostat.ec.europa.eu>)]. Alleine der Werkstoff Stahl mit seinen mehr als 2000 unterschiedlichen Legierungen wird weltweit in einer Menge von etwa 1,4 Milliarden Tonnen hergestellt und beispielsweise zu Maschinen, Autos, Gebäuden, Industrieanlagen und Kraftwerken weiterverarbeitet.

Die Erforschung dieser strategischen Materialklasse wurde in den vergangenen Jahren dadurch revolutioniert,

dass der innere Aufbau und die daraus resultierenden makroskopischen Eigenschaften zunehmend auf atomarer Ebene verstanden werden. Dabei stellen einerseits die Weiterentwicklung und Anwendung quantenmechanischer Simulationsverfahren, sowie andererseits die entsprechende experimentelle Überprüfung ineinander greifende Schlüsselfunktionen dar, die es erlauben, neue metallische Werkstoffe wissensbasiert und auf atomaren Prinzipien aufbauend zu erfinden.

Atomen bei der Arbeit zuschauen: Atomsonden-Tomographie

Während die theoretischen Verfahren – genauer gesagt die quantenmechanischen Vorhersagemethoden der Struktur metallischer Werkstoffe – in den letzten Jahresberichten angesprochen wurden, soll das Augenmerk hier auf die entsprechenden experimentellen Verfahren gerichtet werden.

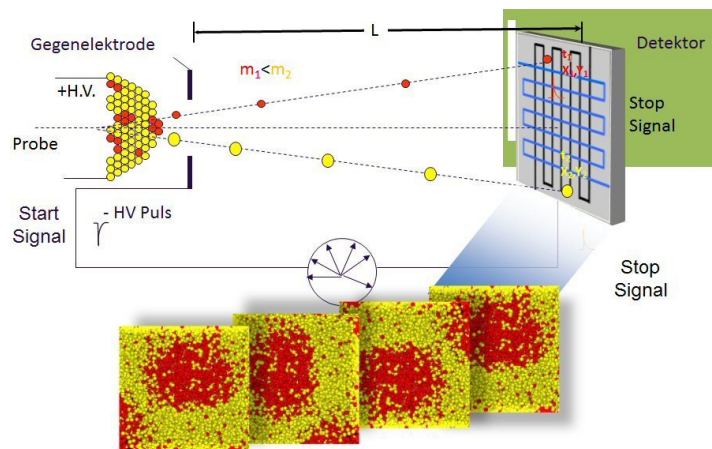


Abb. 1a: Prinzip der Atomsonden-Tomographie. Links im Bild, als Gegenelektrode geschaltet, ist die eigentliche Metallprobe. Bei jedem Spannungspuls ionisieren und evaporieren einzelne Atome, wie anhand der beiden Flugpfade (rote und gelbe Punkte) zu erkennen. Mithilfe der Flugdaueranalyse werden die verdampften Atome identifiziert und zu einer Sequenz von zweidimensionalen, aufeinander gestapelten Atomanordnungen tomographisch wieder zusammengesetzt [1, 2].

© Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

Speziell wird hier auf das neue Instrument der Atomsonden-Tomographie eingegangen: Dabei handelt es sich um eine Methode, bei der durch ultrakurze elektrische Spannungspulse oder – im Falle von nicht leitenden Materialien – durch Laserpulse einzelne Atome auf einer nur wenige Nanometer dünnen Metallspitze ionisiert und durch ein angelegtes Spannungsfeld zu einer Detektorplatte hin beschleunigt werden. Aus der Flugzeit zwischen dem Ablösen von der Metallspitze bis zum Auftreffen auf dem Detektor können die Ionen chemisch über ihr Masse-zu-Ladungs-Verhältnis identifiziert werden. Aus der Kenntnis der Verteilung des Magnetfeldes zwischen Probe und Detektor kann des Weiteren zurückberechnet werden, wo das jeweilige Atom vor seiner Ionisierung ursprünglich positioniert war [1, 2]. Je nach Experiment (Temperatur, Material, Feldverdampfungsbarriere der beteiligten Atomsorten, Nanostruktur) kann diese Positionierung mit nahezu atomarer Genauigkeit erfolgen. Damit steht der Forschung erstmalig eine Methode zur Verfügung, die es erlaubt, ein Material strukturell und gleichzeitig auch chemisch mit nahezu atomarer Auflösung zu analysieren (**Abb. 1a,b**).

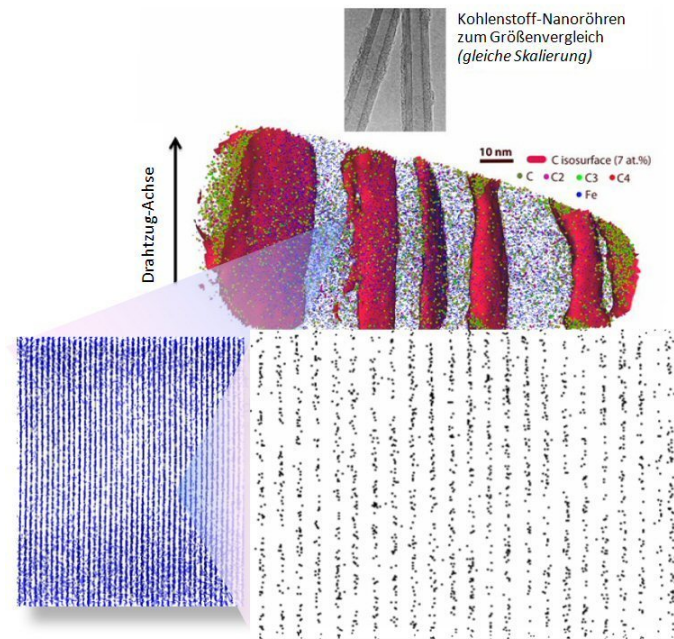


Abb. 1b: Als Anwendungsbeispiel der tomographischen Atomsonde zeigt die Abbildung die Analyse eines perlitischen Stahls mit einem Gehalt von 0,8 Gew.% Kohlenstoff. Die im Stahl rot markierten Bereiche sind Karbidphasen, wohingegen die bläulich eingefärbten Bereiche Eisenatome darstellen. Es ist zu beachten, dass die vergrößert darunter abgebildeten atomaren Strukturen der Atomsonden-Tomographie nicht genau an der hier schematisch gekennzeichneten Stelle entnommen wurden. Diese Materialien werden nach ausreichend hoher Drahtverformung unter anderem als Klavierdrähte, als Spannseile für Hängebrücken oder als Stahlcord in Autoreifen verwendet. Das Material weist eine feinere Nanostruktur auf als etwa Kohlenstoff-Nanoröhren (zum Vergleich ist oben in der Abbildung mit gleichem Maßstab ein solches Kohlenstoff-Material abgebildet). Das Ziel der auf atomarer Analytik gestützten Werkstoffentwicklung neuer Stähle besteht darin, Werkstoffe an die Grenzen der theoretischen Festigkeit zu führen. Allein das hier abgebildete Material weist bereits ein Vielfaches der Festigkeit beispielsweise von Spinnenseide auf [3].

© Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

Dabei können bei einem erfolgreichen Experiment bis zu 500 Millionen Atome untersucht werden. Dies bedeutet nicht nur einen entscheidenden Fortschritt in der unmittelbaren Beobachtung von Atomen, sondern eröffnet auch die Möglichkeit eines Vergleiches mit entsprechenden quantenmechanischen Vorhersagen der atomaren und chemischen Struktur. Durch die hohe Anzahl der in einem Experiment beobachtbaren Atome können zudem komplexe, heterogene Nanostrukturen erkennbar werden (Abb. 1b).

Energiewende mit neuen Legierungen für Kraftwerksturbinen

Die gesellschaftliche Diskussion über die Energiewende hat gezeigt, dass eine effizientere Nutzung der vorhandenen Energie von höchster Priorität ist. Dabei spielt insbesondere der sogenannte Wirkungsgrad von Wärmekraftmaschinen eine zentrale Rolle. Der Wirkungsgrad bestimmt, wie effizient die ins System hineingebrachte Energie (z. B. Gas, Kohle, Wind) in elektrische Energie umgewandelt werden kann. Dabei ist

die Effizienz umso höher, je heißer eine Turbine betrieben werden kann. Dies bedeutet, dass die effizientesten Turbinen solche sind, die mit metallischen Werkstoffen ausgestattet sind, welche möglichst hohe Temperaturen über lange Zeit und unter hohen mechanischen Belastungen aushalten können. Bei der Entwicklung der neuesten Turbinengeneration werden daher Werkstoffe, welche ursprünglich für Flugzeugturbinen entwickelt wurden, in vereinfachter Zusammensetzung auch auf stationäre Kraftwerksturbinen übertragen. Diese Materialien sind Nickelbasis-Legierungen mit Kobalt, Bor und Kohlenstoff (**Abb. 2**). Im Gegensatz zu den bisher in Kraftwerksturbinen verwendeten Eisen-Chrom-Stählen sind diese Nickelbasis-Legierungen für höhere Anwendungstemperaturen geeignet. Damit können Turbinen mit höheren Wirkungsgraden für Kraftwerke entwickelt werden.

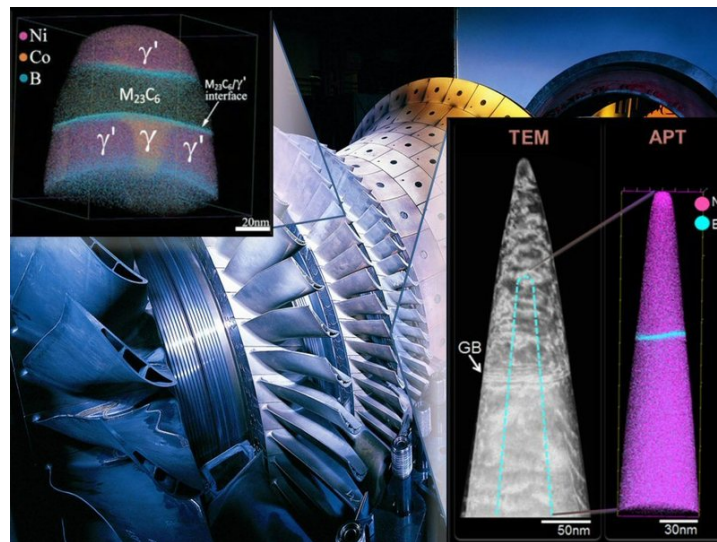


Abb. 2: Neue Generation von Nickelbasis-Legierungen für effizientere Hochtemperatur-Turbinen mit höheren Wirkungsgraden als bisherige Legierungen [4].

© Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

Die atomare Untersuchung dieser Materialien eröffnet den Zugang zu einem besseren Verständnis der bei den hohen Temperaturen und gewaltigen mechanischen Fliehkräften auftretenden langsamen Verformungserscheinungen, die auch als Kriechen bezeichnet werden. Die Ergebnisse der gegenwärtigen Untersuchungen dazu haben gezeigt, dass insbesondere die inneren Grenzflächen dieser vielkristallinen Werkstoffe eine Schwachstelle darstellen. Durch die Legierung mit Bor, welches sich durch Diffusion auf diesen inneren Grenzflächen ansammelt, werden die Grenzflächen stabilisiert und die Kriechverformung verringert.

--- Trenner ---

Design neuer Legierungen für effiziente Flugzeugturbinen

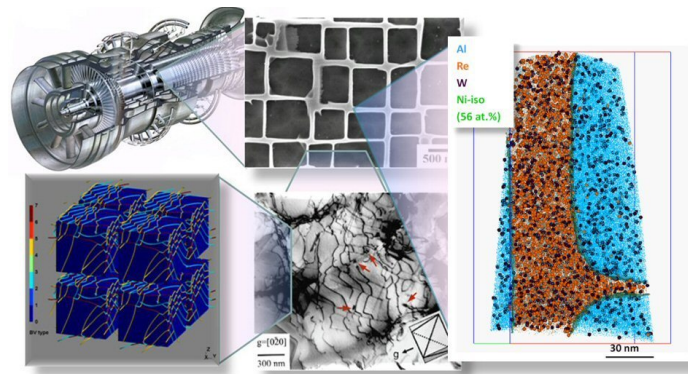


Abb. 3: Darstellung einiger Strukturkomponenten in Flugzeugturbinen. Die rechte Abbildung zeigt die Verteilung einzelner großer Atome (Rhenium, Wolfram) im Material.

© Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

Bei der Entwicklung neuer, sparsamer Flugzeugturbinen entstehen ähnliche Fragestellungen wie bei den Kraftwerksturbinen. Allerdings müssen solche Bauteile von Flugzeugkomponenten absolut schädigungstolerant ausgelegt werden. Darüber hinaus sind die entstehenden Kräfte und Temperaturen in Flugzeugturbinen deutlich extremer als bei Kraftwerksturbinen, welche eine wesentlich längere Laufzeit aber auch geringere thermische und mechanische Belastungen aufweisen. Zu diesem Zweck wurden für Flugzeugturbinen sogenannte Nickelbasis-Superlegierungen entwickelt, welche aus einer Nickel-reichen Matrix-Mischkristall-Legierung sowie darin eingebetteten, geordneten intermetallischen Phasen bestehen. Die Kriechverformung findet dann unter Last-Einwirkung insbesondere in den Zwischenräumen dieser intermetallischen Phasen statt. Um die Bewegung der für die Kriechverformung verantwortlichen Gitterdefekte, also der Versetzungen, in diesen Kanälen zu erschweren, werden möglichst große Atome wie Rhenium und Wolfram hinzulegiert, die in ihrer Umgebung Druckspannungen erzeugen (**Abb. 3**).

Literaturhinweise

[1] Raabe, D.; Choi, P. P.; Li, Y. J.; Kostka, A.; Sauvage, X.; Lecouturier, F.; Hono, K.; Kirchheim, R.; Pippan, R.; Embury, D.

Metallic composites processed via extreme deformation: Toward the limits of strength in bulk materials
MRS Bulletin 35, 982-991 (2010)

[2] Dmitrieva, O.; Ponge, D.; Inden, G.; Millán, J.; Choi, P.; Sietsma, J.; Raabe, D.

Chemical gradients across phase boundaries between martensite and austenite in steel studied by atom probe tomography and simulation
Acta Materialia 59, 364-374 (2011)

[3] Li, Y. J.; Choi, P.; Goto, S.; Borchers, C.; Raabe, D.; Kirchheim, R.

Evolution of strength and microstructure during annealing of heavily cold-drawn 6.3 GPa hypereutectoid pearlitic steel wire
Acta Materialia 60, 4005-4016 (2012)

[4] **Tytko, D.; Choi, P.; Klöwer, J.; Kostka, A.; Inden, G.; Raabe, D.**

Microstructural evolution of a Ni-based superalloy (617B) at 700°C studied by electron microscopy and atom probe tomography

Acta Materialia 60, 1731-1740 (2012)