

# Optimierung von hochfesten Nickellegierungen

## Phasenstabilität in Nickelbasis-Superlegierungen

*M. Bäker, J. Rösler, Institut für Werkstoffe, Technische Universität Braunschweig*

### Kurzgefasst

- Untersuchung der Phasenstabilität und des Verhaltens von Ausscheidungen in Nickelbasis-Superlegierungen
- Berechnung des Einflusses hoher Konzentrationen von Legierungselementen auf die Phasenstabilität in Schmiedelegerungen
- Berechnung der Wechselwirkung zwischen Legierungselementen

Nickelbasis-Legierungen zeichnen sich durch ihre sehr gute Hochtemperaturfestigkeit aus und werden deswegen für höchstbelastete Anwendungen wie zum Beispiel Turbinenschaufeln oder auch -wellen eingesetzt. Um den Wirkungsgrad von Turbinen und damit die Energieeffizienz weiter zu steigern, ist es notwendig, die Hochtemperaturbeständigkeit dieser Legierungen zu erhöhen.

Nickelbasis-Legierungen erhalten ihr hohe Festigkeit durch ein Zusammenspiel verschiedener Ausscheidungen mit unterschiedlicher chemischer Zusammensetzung. Bei Gusslegierungen, wie sie für Turbinenschaufeln eingesetzt werden, ist die härtende Phase vor allem die kohärente  $\gamma'$ -Phase, die einen Volumenanteil von bis zu 70% ausmachen kann. Schmiedelegerungen, die für Turbinenwellen eingesetzt werden, haben typischerweise geringere Anteile der  $\gamma'$ -Phase. Dafür enthalten sie zusätzlich die  $\gamma''$ - und die  $\delta$ -Phase. Die  $\gamma''$ -Phase besitzt eine hohe Gitterfehlpassung zur Matrix und verfestigt den Werkstoff deshalb stark. Für den Schmiedeprozess ist auch die Ausscheidung der  $\delta$ -Phase von Bedeutung, da diese für eine feinkörnige Mikrostruktur sorgt.

Der Schmiedeprozess muss bei einer Temperatur stattfinden, bei der die  $\delta$ -Phase bereits ausgeschieden ist, damit die Korngröße gering bleibt, die verfestigenden Phasen jedoch nicht, da ansonsten die Festigkeit des Werkstoffs zu hoch ist und dieser nicht geschmiedet werden kann. Dadurch ergibt sich ein Schmiedetemperaturfenster, das zwischen der Solvus-Temperatur der  $\delta$ - und der der verfestigenden Phasen liegt. Zusätzlich ist noch die  $\eta$ -Phase relevant, da diese zur Bildung versprödet wirkender,

plattenförmiger Ausscheidungen neigt und in Konkurrenz zur  $\delta$ -Phase tritt. Die Bildung dieser Phase muss deshalb möglichst unterdrückt werden.

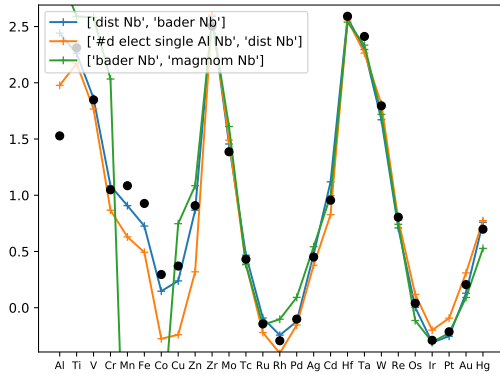
Für die Entwicklung verbesserter Nickelbasis-Legierungen ist es deshalb notwendig, das Verhalten der Phasen  $\gamma'$ ,  $\gamma''$ ,  $\delta$  und  $\eta$  genau zu verstehen und die Ausscheidung dieser Phasen so zu beeinflussen, dass sich hinreichend große Prozessfenster für Schmiedeprozesse einstellen lassen.

Das Institut für Werkstoffe der TU Braunschweig beschäftigt sich seit vielen Jahren mit der Optimierung von Nickelbasis-Legierungen [1–3]. Dabei wurde unter anderem auch eine verbesserte Nickelbasis-Schmiedelegerung entwickelt [4,5]. Um weitere Optimierungen der Legierung zu erzielen, können atomistische Simulationen mit der Methode der Dichtefunktional-Theorie verwendet werden, die den Einfluss von Legierungselementen auf die Phasenstabilität vorhersagen.

Bisher wurde im Projekt die Stabilität der  $\gamma''$ -,  $\delta$ - und  $\eta$ -Phasen untersucht [6–8]. Im vergangenen Jahr wurde die  $\gamma'$ -Phase in gleicher Weise untersucht. Es zeigten sich ähnliche Effekte wie bei den anderen Phasen, wobei insbesondere Elemente mit wenig  $d$ -Elektronen eine starke Tendenz haben, sich in der  $\gamma'$ -Phase zu lösen. Zusätzlich wurde auch die Wechselwirkung mit den Elementen Tantal und Titan in dieser Phase untersucht, da diese Elemente in kommerziellen Legierungen häufig eingesetzt werden. Der Einfluss dieser Elemente auf die Energien ist für Elemente, die Aluminium ersetzen, schwach, für Elemente, die Nickel ersetzen, etwas größer.

Weiterhin wurde untersucht, in wie weit es möglich ist, Substitutionsenergien in den betrachteten Phasen aus den Eigenschaften der Elemente in einer Nickelmatrix vorherzusagen. Abb. 1 zeigt das Ergebnis für die Ersetzung von Ni in der  $\gamma''$ -Phase, wobei nur die Elemente Zr–Hg in den Fit einbezogen wurden. Es zeigt sich, dass sich die Substitutionsenergien unter Verwendung von zwei Parametern gut beschreiben lassen. Im kommenden Antragszeitraum sollen diese Untersuchungen fortgesetzt und auf die anderen Phasen erweitert werden.

Von besonderem Interesse ist die Frage, in wie weit hohe Konzentrationen von Legierungselementen wie Chrom und Cobalt die Energie andere Elemente und damit die Phasenstabilität beeinflussen. Berechnungen mit hohen Chromgehalten zeigen, dass Chrom eine starke Tendenz hat, Cobalt aus der Matrix zu verdrängen. Dies liegt nicht an einer direkten Wechselwirkung zwischen Cobalt und Chrom, sondern daran, dass ein hoher Chromge-



**Abbildung 1:** Fits der Energiedifferenz zwischen einem Element in der  $\gamma$ -Phase und der  $\gamma'$ -Phase für die Ersetzung von Ni mit unterschiedlichen Variablen, bester Fit in blau.

halt die magnetischen Momente in der Matrix stark reduziert und so den Energiegewinn durch magnetische Wechselwirkung zwischen Cobalt und Nickel deutlich reduziert. Auch andere Elemente können durch hohe Chromgehalte verdrängt werden; dies ist jedoch anscheinend eher auf elastische Wechselwirkungen zurückzuführen.

Die Untersuchungen mit hohem Gehalt an Cobalt wurden fortgesetzt. Dabei zeigte sich, dass Cobalt die Elemente Niob, Titan und Tantal aus der Matrix verdrängen kann. Dieser Effekt lässt sich direkt auf die nächste-Nachbar-Wechselwirkung zwischen Cobalt und dem jeweiligen Legierungselement zurückführen. Er beruht vor allem darauf, dass Bindungen zwischen Nickel und den jeweiligen Legierungselementen energetisch besonders günstig sind und dass die Zahl dieser Bindungen durch einen hohen Cobaltgehalt reduziert wird. Elastische Wechselwirkungen spielen hier keine Rolle, da Cobalt und Nickel nahezu identische Ionenradien besitzen. Im kommenden Antragszeitraum soll als weiteres Element noch Aluminium in diese Berechnungen einbezogen werden.

Zusätzlich wurden im vergangenen Jahr detaillierte Konvergenzanalysen durchgeführt, um die systematische Untersuchung der Wechselwirkung zwischen Atomen in der  $\gamma$ -Matrix vorzubereiten. Es wurde festgestellt, dass relativ große Zellen mit 108 Atomen verwendet werden sollten, um zuverlässige Ergebnisse zu erhalten. Um die Rechenzeit zu reduzieren, wurde ein Verfahren etabliert, bei dem zunächst mit einer geringen Zahl von Punkten im  $k$ -Raum gearbeitet wird, um die optimale Größe der Zelle zu bestimmen, und anschließend eine Rechnung mit höherer Genauigkeit durchgeführt wird.

Im kommenden Antragszeitraum sollen alle beschriebenen Untersuchungen abgeschlossen und

zur Veröffentlichung vorbereitet werden.

#### WWW

<https://www.tu-braunschweig.de/ifw/institut/mitarbeiter/privdozdr-mbaeker>

#### Weitere Informationen

- [1] Mukherji, Debashis ; Rösler, Joachim, *Zeitschrift für Metallkunde* 94 (2003), Nr. 5, S. 478–484. doi:10.3139/146.030478
- [2] Rösler, Joachim ; Götting, Martin ; Del Genovese, Dominique ; Böttger, Bernd ; Kopp, Reiner ; Wolske, Markus ; Schubert, Florian ; Penkalla, H-J ; Seliga, Tomas ; Thoma, Anderas u. a., *Wrought Ni-Base Superalloys for Steam Turbine Applications beyond 700° C. Advanced Engineering Materials* 5 (2003), Nr. 7, S. 469–483. doi:10.1002/adem.200310083
- [3] Kindrachuk, V ; Wanderka, N ; Banhart, J ; Mukherji, D ; Del Genovese, D ; Rösler, J, *Effect of rhenium addition on the microstructure of the superalloy Inconel 706. Acta Materialia* 56 (2008), Nr. 7, S. 1609–1618. doi: 10.1016/j.actamat.2007.12.010
- [4] Fedorova, Tatiana. *Entwicklung einer neuen Nickelbasis-Superlegierung auf Basis von Alloy 718*, Cuvillier, 2013
- [5] Fedorova, T ; Rösler, J ; Gehrman, B ; Klöwer, J, *8th International Symposium on Superalloy 718 and Derivatives* Wiley Online Library, S. 587–599 doi:10.1002/9781119016854.ch46
- [6] Bäker, Martin ; RÖSLER, Joachim ; HENTRICH, Tatiana ; ACKLAND, Graeme; *Influence of transition group elements on the stability of the  $\delta$ - and  $\eta$ -phase in nickelbase alloys* Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 26 (2018), S. 015005
- [7] Bäker, Martin ; Rösler, Joachim; *Effects of alloying on the interface energy of the  $\delta$ - and  $\eta$ -phase in nickelbase superalloys* Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 27 (2019), S. 015002
- [8] Bäker, Martin ; Rösler, Joachim; *Influence of transition group elements on the stability of the  $\gamma'$ -phase in nickelbase alloys* Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering (2020)