

# 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 des Einflusses von Legierungselementen auf die Gitterfehlpassung und die thermische Ausdehnung

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 ihre 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 standen Wechselwirkungseffekte zwischen Legierungselementen in der  $\gamma$ -Matrix im Vordergrund. Da dabei auch Konfigurationen mit hohem Chrom-Gehalt von Interesse sind, wurde auch der Einfluss magnetischer Effekte untersucht. Es zeigte sich, dass bei hohen Chromgehalten eine korrekte Initialisierung der magnetischen Momente erforderlich ist, um Konvergenz zu erzielen: Chromatome auf übernächsten-Nachbar-Plätzen tendieren dazu, ihre Momente entgegengesetzt auszurichten. Enthält die Matrix zusätzlich Cobalt, dann überwiegt allerdings die antiferromagnetische Wechselwirkung mit den Cobalt-Atomen. Es zeigt sich, dass Chrom die Energie von Cobalt deutlich erhöht und deshalb möglicherweise Cobaltatome in andere Phasen verdrängen kann.

Untersuchungen mit hohem Gehalt an Cobalt wurden durchgeführt, um zu prüfen, ob Cobalt Niob aus der  $\gamma$ -Matrix verdrängen und so Niob-haltige Phasen stabilisieren kann. Generell ist eine Positionierung von Niob und Cobalt auf nächsten-Nachbar-Plätzen energetisch ungünstig. Die Energie einer Matrix mit Cobalt und Niob lässt sich dabei anscheinend zumindest näherungsweise durch diesen Effekt vorhersagen, eventuell ist die verdrängende Wirkung bei hoher Cobalt-Konzentration auch verstärkt. Bei hinreichend hoher Cobalt-Konzentration kann deshalb ein deutlicher Verdrängungseffekt erwartet werden.

Weiterhin wurde damit begonnen, die Wechselwirkung zwischen Atomen in der  $\gamma$ -Matrix systematisch in Abhängigkeit von der Zahl der  $d$ -Elektronen zu

untersuchen. Es zeigte sich hierbei jedoch, dass die bisher verwendeten Superzellen mit 32 Atomen hierfür nicht geeignet sind, da elastische Verzerrungseffekte im Gitter insbesondere bei Atomen mit großem Radius (wie Zirkonium oder Niob) sehr stark sind. Deshalb sollen im Antragszeitraum größere Zellen mit 108 Atomen für diese Berechnungen verwendet werden.

Im kommenden Antragszeitraum sollen diese Untersuchungen abgeschlossen werden. Darüber hinaus wird bisher nicht betrachtete  $\gamma'$ -Phase analog zu den bisherigen Untersuchungen analysiert werden. Bei dieser Phase kommt es in Superlegierungen häufig zur Ersetzung von Al durch Ta oder Ti. Es soll deshalb auch untersucht werden, welchen Einfluss diese Elemente auf die Energie der  $\gamma'$ -Phase haben und wie sie in der  $\gamma'$ -Phase mit dort gelösten Legierungselementen wechselwirken.

#### WWW

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

#### 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 ; Gehrmann, 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)