



Physikalisch basierte mehrskalige Simulation der additiv gefertigten Nickel-Legierung Inconel 718

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
von der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte
Dissertation

von

Tobias Maiwald-Immer

Tag der mündlichen Prüfung: 18.12.2018

Hauptreferent: Prof. Dr. Peter Gumbsch

Korreferent: Prof. Dr. Martin Heilmaier

Abstract

The strength of precipitations hardened materials like Inconel 718 is controlled by the chemistry, the manufacturing process, the microstructure and the heat treatment. This complex interaction requires a detailed analysis of process and material to assess and optimize the potential of strength for the whole material life cycle. Therefore, this dissertation develops an integrated physical based simulation chain, which links the alloying elements with the achievable material strength depending on temperature and time. Starting from the solidification process, the thermodynamics and thermokinetics of IN718 are calculated with MatCalc[©] based on the CALPHAD- Method. The yield strength is calculated by using the thermokinetic results. The dominating strengthening effects, solid solution hardening and precipitation hardening, are calculated from the phase chemistry and the interaction between dislocations and precipitations. The results are validated on an extensive published data set and own experiments, which are performed on additive manufactured and cast single crystalline material IN718. Starting from a process window analysis, the material is additively manufactured with different material properties. The achieved model accuracy is high and enables the prediction of the overaging process up to 50000 h. A sensitivity study points out the significance of different parameters and identifies the key parameters in material and process modelling.

key words: additive manufacturing, Inconel 718, precipitation kinetic, yield strength, material modelling, process modelling, nickel base alloy, microstructure, Integrated Computational Materials Engineering (ICME)

Zusammenfassung

Die Festigkeit ausscheidungsgehärteter Werkstoffe wie Inconel 718 wird durch die chemische Zusammensetzung, den Herstellprozess, die Mikrostruktur und die Wärmebehandlung bestimmt. Diese komplexen Abhängigkeiten erfordern eine detaillierte Prozess- und Materialanalyse, um das Festigkeitspotenzial im gesamten Materiallebenszyklus optimal ausnutzen zu können. Die vorliegende Arbeit entwickelt dafür eine integrierte, physikalisch basierte Simulationskette, welche in Abhängigkeit von Temperatur und Zeit die Kopplung der Legierungselemente mit der erreichbaren Materialfestigkeit ermöglicht. Ausgehend vom Erstarrungszustand werden die Thermodynamik und die Thermokinetik von IN718 basierend auf der CALPHAD-Methode mit Mat-Calc[®] berechnet. Die Streckgrenze wird anhand dieser thermokinetischen Daten berechnet. Die entscheidenden Festigkeitsbeiträge, Mischkristall- und Ausscheidungshärtung, werden auf Basis der Phasenchemie und der Interaktion zwischen Versetzungen und Ausscheidungen berechnet. Die Validierung der Ergebnisse erfolgt sowohl an umfangreichen Literaturdaten als auch an eigenen Experimenten an einkristallin gegossenen und additiv gefertigten IN718. Das additive Material wird ausgehend von einer Prozessfensteranalyse mit unterschiedlichen Materialeigenschaften hergestellt. Die erreichte hohe Modellgenauigkeit ermöglicht die Berechnung von Überalterungsprozessen von bis zu 50000 h. Eine Sensitivitätsanalyse zeigt abschließend die Signifikanz einzelner Modellparameter und identifiziert Schlüsselgrößen der Werkstoff- und Prozessmodellierung.

Schlagworte: Additive Fertigung, Inconel 718, Ausscheidungskinetik, Streckgrenze, Werkstoffsimulation, Prozesssimulation, Nickelbasislegierung, Mikrostruktur, Integrated Computational Materials Engineering (ICME)

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit mit dem Titel:

**“Physikalisch basierte mehrskalige Simulation der additiv gefertigten Nickel-Legierung
Inconel 718 “**

selbstständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe.

Dresden, 04.01.2019

Ort, Datum

gez. T. Maiwald-Immer

Unterzeichner

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner Industriepromotion in dem Unternehmen MTU Aero Engines AG.

Betreut wurde sie durch Herrn Professor Peter Gumbsch. Ihnen möchte ich an dieser Stelle meinen herzlichen Dank aussprechen. Sie haben mich mit Ihrer Diskussionsbereitschaft, Ihrer fachlichen Kritik und Ihren Anregungen stets noch weiter gefordert und die Arbeit in dem vorliegenden Rahmen ermöglicht.

Mein Dank gilt auch Herrn Professor Martin Heilmaier für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Zum Gelingen dieser Arbeit haben viele Abteilungen der MTU Aero Engines AG beigetragen. Ich möchte, stellvertretend für die gesamte Werkstoffabteilung, Herrn Dr. Eßlinger für die Möglichkeit und Unterstützung des Themas meinen Dank aussprechen. Weiterhin möchte ich mich ganz herzlich bei den Kollegen der Fertigung, im Besonderen Herr Ladewig, Herr Schlick, Herr Kuska und Herr Schlothauer, für die Unterstützung, Umsetzung und Diskussion der vielen Sonderwünsche in der additiven Fertigung bedanken. Ein großes Dankeschön geht auch an alle Kollegen der Probenfertigung und der Prüfabteilung für die schnelle, sehr gute Bearbeitung und Prüfung aller Proben. Für die Realisierung aller heißen Prozessschritte sei den Kollegen der Wärmebehandlungsabteilung besonders gedankt. In allen detailauflösenden Fragen geht ein großes Dankeschön an die Kollegen der Metallografie für die umfassende Unterstützung bei allen noch so aufwendigen Nachuntersuchungen.

Herzlich Bedanken möchte ich mich außerdem bei den Projektpartnern des Fraunhofer IWS Herr Helm und Frau Baiker sowie den Projektpartnern des Lehrstuhls WTM der Universität Erlangen Frau Prof. Körner, Herr Osmanlic und Herr Helmer für die sehr gute Zusammenarbeit und die gemeinsam erreichten tollen Entwicklungsergebnisse.

Ein großes Dankeschön geht auch an meine Teamkollegen Conni, Tim, Larissa, Michael und Markus für eure tatkräftige Unterstützung und die tolle, herzliche Atmosphäre auch fernab der Dissertationsthemen.

Ein herzliches Dankeschön geht an meinen langjährigen Zimmergenossen Michael Schober für seine Motivation und Unterstützung, die tollen Kaffeepausen und den Blick über den Tellerrand. Du hast mich in so manch ernüchternder Situation gerettet und zum Weitermachen motiviert!

Ein ganz besonderer Dank gilt Thomas Göhler und Andreas Fischersworing-Bunk. Ich danke euch für euer Engagement, eure Diskussion, Motivation und Initiierung der Simulationsthemen, ohne die diese Arbeit nicht zustande gekommen wäre. Es war mir eine Ehre, mit euch an diesen super spannenden Themen der Werkstoff- und Prozesssimulation zu arbeiten!

"Könnten wir gern machen, aber ich muss erst noch was für meine Dissertation machen" - Liebe Familie und liebe Freunde, ja, es tut mir Leid, dass ich euch die letzten Jahre immer wieder vertrösten musste. Mit der Abgabe der Arbeit ändert sich das jetzt aber wieder. Danke, dass ich trotzdem auf euch zählen konnte.

Meiner Freundin Tina möchte ich aus tiefstem Herzen für ihre fortwährende Unterstützung, das Durchstehen aller Hoch- und Tiefphasen sowie das geduldige Korrigieren der Dissertation danken!

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung und Zielsetzung	1
2 Grundlagen	4
2.1 Additiver Fertigungsprozess	4
2.2 Simulationsgestützte Analyse des SLM-Prozess	5
2.3 Der Werkstoff Inconel 718	8
2.3.1 Chemie und allgemeine Konstitution	8
2.3.2 Das Erstarrungs- und Segregationsverhalten	10
2.3.3 Das Ausscheidungsverhalten der γ' - und γ'' - Phase	12
2.3.4 Das Ausscheidungsverhalten der δ - Phase	15
2.3.5 Die quasi-statische Festigkeit von Inconel 718	16
2.4 Theoretische Streckgrenzbeiträge	17
2.4.1 Die intrinsische Festigkeit	17
2.4.2 Die Mischkristallhärtung	18
2.4.3 Die Feinkornhärtung	19
2.4.4 Die Ausscheidungshärtung	19
2.4.5 Die festigkeitssteigernden Effekte der γ' - Phase	22
2.4.6 Die festigkeitssteigernden Effekte der γ'' -Phase	23
3 Simulations- und Validierungskonzept	27
4 Simulationsmodell	29
4.1 Auswahl der Berechnungsmodelle der Eingangsgrößen	29
4.1.1 Gitterparameter der Phasen	29
4.1.2 Molare Phasenvolumen der Phasen	30
4.1.3 Fehlpassung und Gitterverzerrung der Ausscheidungen	31
4.1.4 Morphologie und Partikelabstand der Ausscheidungen	32
4.1.5 Versetzungslinienspannung in der γ - Phase	34
4.2 Werkstoffmodellierung	35
4.2.1 Thermodynamische Triebkraft und Multikomponentendiffusion	35
4.2.2 Ausscheidungsmodellierung	37
4.2.3 Modellierung der Segregation und Homogenisierung	42
4.3 Streckgrenzmodellierung	43
4.3.1 Addition einzelner Streckgrenzbeiträge	43

4.3.2	Berechnung der intrinsischen Festigkeit	44
4.3.3	Berechnung der Mischkristallhärtung	44
4.3.4	Berechnung der Feinkornhärtung	45
4.3.5	Addition einzelner Effekte der Ausscheidungshärtung	45
4.3.6	Berechnung der γ' - Ausscheidungshärtung	46
4.3.7	Berechnung der γ'' - Ausscheidungshärtung	48
4.3.8	Berechnung des Orowanefektes	52
4.4	Einfluss der kristallografischen Materialtextur	53
5	Ergebnisse	56
5.1	Vorgehen und Aufbau der Simulationskette	56
5.2	Definition der Eingangsgrößen der Simulationskette	58
5.2.1	Formfaktor der γ'' - Phase	58
5.2.2	T_{krit} Parameter für die γ' - und γ'' - Keimbildung	59
5.2.3	Gitterparameter der Phasen in IN718	60
5.2.4	Fehlpassung und Gitterverzerrung der Ausscheidungsphasen	62
5.2.5	Elastische Konstanten	64
5.2.6	Ausscheidungsabhängigkeit der Versetzungslinienspannung	65
5.2.7	Verwendete Werte für die Gitterenergien der γ' - und γ'' - Phase	66
5.2.8	Validierung von Datenbanken und Phasengleichgewicht für IN718	68
5.3	Charakterisierung des Versuchsmaterials	71
5.3.1	Herstellung und Wärmebehandlung des Gussmaterials	71
5.3.2	Herstellung und Wärmebehandlung des SLM-Materials	73
5.3.3	Orientierung der Einkristallzugproben	75
5.3.4	Textur der SLM-Zugproben	76
5.4	Erstarrungsverhalten und Homogenisierung von IN718	79
5.5	Phasenkinetiksimulation	85
5.5.1	Das Frühstadium der Ausscheidungsbildung	85
5.5.2	Die Phasenkinetik im SLM- Prozess	86
5.5.3	Die γ' - und γ'' - Phasenkinetik in IN718	87
5.6	Festigkeitssimulation	90
5.6.1	Die intrinsische Festigkeit für IN718	90
5.6.2	Die Mischkristallhärtung für IN718	91
5.6.3	Die Feinkornhärtung für IN718	92
5.6.4	Theoretische Härtungseffekte in der γ' - und γ'' - Phase	93
5.7	Kopplung von Phasenkinetik und Härtungseffekten	95
5.7.1	Analyse der Streckgrenzberechnung an Härtemessungen	95

5.7.2	Analyse der Streckgrenzberechnung an Zugversuchen	97
5.7.3	Sensitivitätsbewertung der Modelle	102
6	Diskussion der Ergebnisse	105
6.1	Die Modelle und deren Eingabegrößen	105
6.2	Die thermodynamische und -kinetische Datenbank	113
6.3	Die Validierungsdaten und Modellergebnisse	114
6.4	Die notwendige Genauigkeit der Schlüsselgrößen	116
6.5	Der Gültigkeitsbereich der Simulation	117
6.6	Die Gesamtbewertung des Simulationskettenansatzes	118
7	Zusammenfassung	119
A	Anhang	I
B	Anhang	VI
C	Anhang	XX
D	Anhang	XLIV
Patente und Veröffentlichungen		LVIII

Abbildungsverzeichnis

1.1	Mehrskalen Ansatz für Prozess- und Werkstoffsimulation	1
1.2	Mehrskalen Simulationskette SLM- Prozess	2
2.1	Schematische Darstellung SLM-Prozess	4
2.2	Modellskizze Schmelzpoolsimulation	6
2.3	Schmelzbadgeometrie Laserspuren	7
2.4	Prozessfensteranalyse für IN718-SLM	8
2.5	Dendritische Erstarrungsverhalten IN718	11
2.6	Schema Härtungseffekte der Grundfestigkeit	18
2.7	Regime der Ausscheidungshärtung	20
2.8	Mechanismen der Ausscheidungshärtung	21
2.9	Einheitszelle und Gleitebene der γ' -Phase	22
2.10	Einheitszelle und Gleitebene γ'' - Phase	24
3.1	Konzeptschema der Simulationskette	27
4.1	Morphologiebeschreibung γ' - Partikel	33
4.2	Morphologiebeschreibung γ'' - Partikel	34
4.3	Thermodynamische Triebkräfte zur Systementwicklung	36
4.4	Energieterme zur Keimbildung, Entwicklung der Elementcluster	39
4.5	Grenzflächenenergiemodell	40
4.6	Beschreibung des Ausscheidungswachstums	41
4.7	Scheil-Gulliver Methode	43
4.8	Versetzungsinteraktion mit γ'' - Partikeln	49
4.9	Richtungsabhängiges Verhalten des kfz- Gitters	53
5.1	Flussbild der Simulationskette	57
5.2	Formfaktor der γ'' - Phase	58
5.3	Ausscheidungsstart γ' - und γ'' - Phase	59
5.4	Berechnete γ - und γ' - Gitterparameter	61
5.5	Gitterparameter γ'' - Phase	62
5.6	γ' - Fehlpassung und Gitterverzerrung	63
5.7	γ'' - Fehlpassung und Gitterverzerrung	64
5.8	Versetzungslinienspannung als $f(R_s, f_j)$	65
5.9	γ_{GF} und γ_{APG} der IN718-Phasen	67

5.10	Mittlere Phasenchemie im Gleichgewicht	68
5.11	Berechnetes Phasengleichgewicht IN718, δ - und γ'' - Solvus	70
5.12	Analyse Diffusionsverhalten	71
5.13	Prozessfenster für IN718-SLM	74
5.14	Übersicht der SX- Materialtextur und Schmidfaktoren	76
5.15	Kornstruktur von IN718-SLM P1 und P2	77
5.16	ODF und IPF von IN718-SLM für P1-L und P2-L	78
5.17	Erstarrungsstruktur für IN718 im VT-v- Diagramm	80
5.18	Segregationsprofil und Erstarrungsabfolge für IN718	80
5.19	Segregationsgrad abhängiges Phasengleichgewicht	82
5.20	Diffusionsrechnung Seigerungsprofil IN718-SLM	83
5.21	Einfluss λ_D auf Seigerungsabbau in IN718	83
5.22	Spannungsarmglühung und Homogenisierung IN718-SLM	84
5.23	γ' - und γ'' - Frühstadium der Ausscheidung	85
5.24	Ausscheidungssimulation IN718-SX, -SLM	87
5.25	Ausscheidungssimulation IN718 zwischen 650 °C und 900 °C	89
5.26	Temperaturabhängige γ' - und γ'' - Vergröberungskonstante	90
5.27	Mischkristallfestigkeit IN718	91
5.28	Feinkornhärtung für IN718	92
5.29	Ausscheidungshärtung der γ' - und γ'' - Phase	93
5.30	Effekt der Modellerweiterung für die γ'' - Phase	94
5.31	Modellbewertung anhand von Härtekurven	95
5.32	Analyse von Härtemessungen im Bezug zu Atomsondenmessungen	96
5.33	σ_i bzw. τ_i für die IN718 Auslagerung bei 725 °C	97
5.34	$R_{p0,1}$ bei 680 °C und 750 °C, Gesamtabweichung $R_{p0,1}$ - Berechnung	98
5.35	Phasenkinetik und $R_{p0,1}$ zwischen 550 °C und 1000 °C für 1000 h	100
5.36	R_p für Überalterungsvorgang	101
5.37	R_p abh. vom Larson Miller Parameter	102
5.38	Analyse der Modellsensitivität	104
A.1	Datenfluss Schmelzpoolsimulation	I
A.2	Energieabsorption IN718	II
A.3	Defektdichte SLM- Material Studie 1	III
A.4	Defektdichte SLM- Material Studie 2	IV
A.5	Schliffbildvergleich dichtes und poröses Material	IV
A.6	Temperaturfeld SLM-Schichtaufbau	V

B.1	Probenmaterial IN718-Matrix-SX	VI
B.2	EDX-Analysen von IN718-Matrix-SX	VI
B.3	Probenmaterial IN718-SX	VII
B.4	Probenmaterial IN718-SLM	VII
B.5	Probenmaterial IN718-SLM	VIII
B.6	FEREM Ausscheidungsanalyse	IX
B.7	Wärmebehandlungszyklen Probenmaterial	XI
B.8	Zugversuchsanalyse IN718-SX	XII
B.9	EBSD- Aufnahme Längsschliff IN718-SX Zugprobe	XII
B.10	Orientierung der einzelnen SX-Probenstäbe	XIV
B.11	Texturanalyse SLM- Material P1	XV
B.12	Texturanalyse SLM- Material P2	XVI
B.13	Kornmorphologievergleich SLM- Material P1 und P2	XVII
B.14	Texturvergleich SLM- Material P1	XVIII
B.15	Texturvergleich SLM- Material P2	XIX
C.1	Elastische Konstanten in IN718	XX
C.2	TTT-Diagramm IN718	XXI
C.3	Zugkurve am einkristallinen IN718 Material	XLI
C.4	Zugkurve IN718-SLM	XLI
D.1	Phasenzusammensetzung Gleichgewicht	XLIV
D.2	Multikomponentendiffusion am Diffusionspaar Rene N5 - Rene N5	XLV
D.3	Seigerungsprofile der Elemente in IN718	XLVI
D.4	Diffusionsrechnung Seigerungsprofil IN718-SLM	XLVI
D.5	Diffusionsrechnung Seigerungsprofil IN718-SX	XLVI
D.6	Vergleich DTA- Signal Abschreckversuch IN718	XLVII
D.7	Grenzflächenenergie zur Keimbildung	XLVIII
D.8	Keimzusammensetzung in IN718Plus	XLVIII
D.9	Ausscheidungskinetik nach Slama et al.	L
D.10	Daten der Phasenkinetik IN718 bei 725 °C	LII
D.11	Korngrößenabhängige Phasentransformation γ'' - zu δ - Phase	LIII
D.12	Verformungsinduzierte Phasentransformation γ'' - zu δ - Phase	LIII
D.13	Ausscheidungszustand, τ_p^j und Härte für Auslagerung	LIV
D.14	τ_{HP} für IN718-SLM für P1 und P2	LV
D.15	Parametereinfluss auf die Auslagerungszeit für $R_{p,max}$	LVI
D.16	Parametereinfluss auf die Höhe der Streckgrenze	LVII

Tabellenverzeichnis

2.1	Chemische Zusammensetzungen IN718 und Phasen	9
2.2	Struktur, Morphologie und Stöchiometrie der IN718-Phasen	10
2.3	Mittlere Seigerungskoeffizienten IN718	11
2.4	Versetzungskonfigurationen in der γ'' - Phase	24
4.1	γ -, γ' - Basisgitterkonstante, Vegard- Koeffizienten, Gitterparameter	29
4.2	Gitterparameter, molare Phasenvolumen der Phasen in IN718	30
4.3	Mittlere Fehlpassung und Gitterverzerrung der Phasen in IN718	32
4.4	Härtungskonstanten Mischkristallhärtung	45
5.1	Legierungschemie des IN718 Probenmaterials	72
5.2	IN718-SLM Fertigungsparameter	75
5.3	Korngröße, Aspektverhältnis, Texturfaktor und <i>E</i> - Modul IN718-SLM	78
C.1	E-Modul, Atomradius und molare Masse der reinen Elemente	XX
C.2	Chemische Zusammensetzung Matrix IN718	XXII
C.3	Chemische Zusammensetzung γ' - Phase IN718	XXIII
C.4	Chemische Zusammensetzung γ'' - Phase IN718	XXIV
C.5	Chemische Zusammensetzung δ - Phase IN718	XXV
C.6	Chemische Zusammensetzung MC- Karbide IN718	XXVI
C.7	Chemische Zusammensetzung Laves- Phase IN718	XXVII
C.8	Gitterparameter für γ -, γ' - Phase	XXVIII
C.9	Gitterparameter für γ'' - Phase	XXIX
C.10	Gitterparameter für δ -, Laves- Phase und MC-Karbid	XXX
C.11	Nb- Gehalt abhängige γ' - Solvustemperatur	XXXI
C.12	Nb- Gehalt abhängige γ'' - Solvustemperatur	XXXII
C.13	Nb- Gehalt abhängige δ - Solvustemperatur	XXXIII
C.14	δ - Phasenanteil im thermodynamischen Gleichgewicht	XXXIV
C.15	γ'' -, γ' - Phasenanteil im thermodynamischen Gleichgewicht	XXXV
C.16	γ'' - und γ' - Partikelgröße für Auslagerung bei 650 °C bis 706 °C	XXXVI
C.17	γ'' - und γ' - Partikelgröße für Auslagerung bei 725 °C und 750 °C	XXXVII
C.18	γ'' - und γ' - Partikelgröße für Auslagerung bei 760 °C bis 900 °C	XXXVIII
C.19	Seigerungskoeffizienten	XXXIX
C.20	Streckgrenzdaten IN718-Matrix-SX	XLII
C.21	Streckgrenzdaten IN718-SX	XLII

Formelverzeichnis

Lateinische Symbole

Symbol	Einheit	Beschreibung
a_i^j	m	Gitterparameter Phase j in Gitterrichtung i
a_0^j	m	Basisgitterkonstante reinen Phase j
A_i	m^2	Korngrenzfläche
A_V	/	Aspektverhältnis
$A_{Schraube}$	/	Anteil Schraubenversetzung
A_{Stufe}	/	Anteil Stufenversetzung
b_{hkl}	m	Burgersvektor in der hkl- Ebenen
\vec{B}	/	Aufbaurichtung des SLM- Prozesses
c_i^j	at%	Elementkonzentration i in Phase j
\dot{c}_i^j	at% s^{-1}	Konzentrationsänderung
$c_{0,i}^{\gamma}$	at%	nominelle Zusammensetzung des Materials
$c_{k,i}$	at%	Elementkonzentration i in der k-ten Ausscheidung
d_{hkl}	m	Netzebenenabstand zwischen hkl- Ebenen
d_0	m	Prüfquerschnitt der Zugproben
D	$m^2 s^{-1}$	Diffusionskoeffizient im Feststoff
\mathbf{D}_{ij}^n	$m^2 s^{-1}$	Diffusionskoeffizientenmatrix
D_D	m	Durchmesser Guss- bzw. Probenrohling
D_P	m	Pulverkorndurchmesser
D_K	m	Korndurchmesser
D_Z	m	γ'' - Partikeldurchmesser
\vec{e}	/	Gleitebenennormale
E	GPa	E-Modul
E_{ij}^x	J	Bindungsenergie zwischen Atomen
f_j	vol%	Volumenanteil der Phase j
f_m^j	mol%	Molanteil der Phase j
F_c	N	Widerstandskraft der Ausscheidung gegen Versetzungsschneiden
F_a	m	maximale Feret
F_b	m	minimale Feret
G	$J mol^{-1}$	Gibbs'sche Systemenergie (freie Enthalpie)
G_{hkl}^j	N/mm^2	Schubmodul in hkl- Ebene der Phase j
ΔG_j	$J mol^{-1}$	Triebkraft zur Keimbildung einer Ausscheidung j
ΔG_{ges}	$J mol^{-1}$	gesamte freie Energie des Systems
ΔG_V	$J mol^{-1}$	thermodynamische Triebkraft

Symbol	Einheit	Beschreibung
ΔG_γ	J mol^{-1}	freie Energie der Phasengrenzfläche
ΔG_λ	J mol^{-1}	Verformungsenergie
ΔG_0	J mol^{-1}	thermodynamischen Triebkraft zur gesamten Systementwicklung
ΔG^*	J mol^{-1}	kritische Keimbildungsenergie
H	J mol^{-1}	Enthalpie
H_Z	m	γ'' - Partikelhöhe
ΔH	J mol^{-1}	Enthalpie der Lösung
J	/	Korrekturfaktor für das Versetzungsfrontverhalten
J_i	mol s^{-1}	Diffusionsstrom der Elemente
k_B	J K^{-1}	Boltzmann-Konstante
k_{HP}	$\text{N/mm}^2 \cdot \sqrt{m}$	werkstoffspezifische Hall-Petch-Konstante
$k_i^{s/l}$	/	Seigerungskoeffizient zwischen Fest- und Flüssigphase
$k_{j/\gamma}$	/	Verteilungskoeffizient der Elemente zw. Ausscheidungsphasen
$k_{ss,i}$	$\text{MPa at\%}^{-1/2}$	elementspezifische Härtungskonstante für τ_{HP}
k_v	$\text{nm/h}^{1/n}$	Vergröberungskonstante der Phasenkinetik
$k_{w/s}$		Parameter für Versetzungstyp nach [APKW14]
K	$\text{m}^{0.75} \text{K}^{0.5} \text{s}^{-0.25}$	Erstarrungskonstante für Berechnung λ_D
l_0	m	Prüflänge der Zugproben
L	m	Länge Guss- bzw. Probenrohling
L_{cc}	m	Partikelabstand zwischen Partikelzentren
L_s	m	Partikelabstand entlang Versetzungslinie für $\chi_c < 100^\circ$
L_{ss}	m	Partikelabstand zwischen Partikeloberflächen
L_w	m	Partikelabstand entlang Versetzungslinie für $\chi_c > 100^\circ$
$L_{Z,w/s}$	m	Partikelabstand entlang Versetzungslinie für χ_c
m_s	/	Schmidfaktor
\dot{m}_{ss}	$\text{m}^{-3} \text{s}^{-1}$	Keimbildungsrate
M	/	Texturfaktor
M_i	g mol^{-1}	molare Masse des Elementes i
M_k	$\text{mol mJ}^{-1} \text{s}^{-1}$	Mobilität der Grenzfläche
M_m	$\text{mol m}^2 \text{s}^{-1} \text{J}^{-1}$	Mobilität des Elementes im Feststoff
n	/	Exponent der Mischkristallhärtung
\vec{n}	/	Erstarrungsfrontnormale
n_G	m^{-2}	flächenbezogene Atomanzahl
n_S	/	Partikelanzahl je Einheitsfläche in der Gleitebene
n_v	/	Vergröberungsexponent der Phasenkinetik
n_V	/	Partikelanzahl im Einheitsvolumen
N_A	mol^{-1}	Avogadro-Konstante
N_i	/	Atomanzahl in der Einheitszelle des Kristallgitters
N_0	m^{-3}	Anzahl potentieller Keimbildungsorte
N_M	mol	Molzahl des Elementes i in der Matrix
p	/	Auslagerungsparameter für die γ'' - Varianten

Symbol	Einheit	Beschreibung
P	/	Larson Miller Parameter
P_L	W	Laserleistung
q	/	Exponent der geometrischen Summe der Ausscheidungshärtung
Q_{ges}	$J \text{ mol}^{-1}$	gesamte Energiedissipation
Q_1	$J \text{ mol}^{-1}$	Energiedissipation durch Grenzflächenbewegung
Q_2	$J \text{ mol}^{-1}$	Energiedissipation durch Diffusion in der Ausscheidung
Q_3	$J \text{ mol}^{-1}$	Energiedissipation durch Diffusion in der Matrix
r_i	m	innere Kernradius der Versetzung
r_k	m	Abstand über Grenzfläche für berücksichtigte Atombindungen
$r_{0,w/s}$	m	äußere Versetzungsradius abh. von χ_c
R	$J \text{ K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$	universelle Gaskonstante
R_K	m	sphärische Partikelradius
\dot{R}_K	$m \text{ s}^{-1}$	Wachstumsgeschwindigkeit Partikelradius
$R_{p0,1}$	MPa	0,1%ige Streckgrenze entspricht σ_{ges}
$R_{p0,2}$	MPa	0,2%ige Streckgrenze
R_S	m	sphärische γ' - Partikelgröße in der Gleitebene
R_Z	m	nicht-sphärische γ'' - Partikelgröße in der Gleitebene
R^*	m	kritischer Keimbildungsradius
S	$J \text{ mol}^{-1}$	Entropie
t	s	Zeit
Δt	s	Zeitschritt
t_{inku}	s	Inkubationszeit Keimbildung
T	K	Temperatur: T in K = T in $^{\circ}\text{C}$ + 273
T_{AS}	K	Ausscheidungsstarttemperatur
ΔT	K	Temperaturgradient
T_{krit}	K	kritische Phasentemperatur
T_L	K	Liquidustemperatur
T_S	K	Solidustemperatur
T_{Sol}^j	K	Solvustemperatur der Phase j
\dot{T}	K/s	Abkühlgeschwindigkeit
∇T	K/m	Temperaturgradient
\vec{u}	/	Gleitrichtung
v	m/s	Erstarrungsgeschwindigkeit
v_s	m/s	Scangeschwindigkeit
V_i^j	10^{-4} nm/at\%	Vegard-Koeffizienten des Elementes i in der Phase j
V_j	m^3	Volumen der Phase j
V_m^j	$\text{m}^3 \text{ mol}^{-1}$	molare Volumen der Phase j
w		Korrekturparameter für APG- Effekt mit $\chi_c < 100^{\circ}$
x	m	Wegstrecke
$z_{L,eff}$		effektiven Strukturparameter Atombindungen in Grenzfläche
$z_{s,eff}$		effektiven Strukturparameter gebrochener Bindungen in Grenzfläche
Z		Zeldovich Faktor

Griechische Symbole

Symbol	Einheit	Beschreibung
α	/	Korrekturfaktor zw. 0,1 und 1 für Versetzungsinteraktion
α_r	/	Korrekturfaktor der γ_{GF} einer gekrümmten Grenzfläche
β_c	/	Krümmungsparameter der Versetzung abh. von $\cos(\chi_c/2)$
$\beta_{T\text{krit}}$	/	Korrekturfaktor von γ_{GF} einer diffusen Grenzfläche
β^*		Clusterbildungsrate
γ		Matrixphase IN718
γ'		Ausscheidungsphase IN718
γ''		Ausscheidungsphase IN718
γ_{APG}^j	J/m ²	Antiphasengrenzenergie in der Phase j
$\gamma_{APG}^{[110]}$	J/m ²	APGE γ'' - Phase in $[1\bar{1}0]$ Gitterrichtung
$\gamma_{APG}^{[101]}$	J/m ²	APGE γ'' - Phase in $[10\bar{1}]$ & $[01\bar{1}]$ Gitterrichtung
γ_{SF}^j	J/m ²	Stapelfehlerenergie in der Phase j
γ_{GF}^j	J/m ²	Grenzflächenenergie in der Phase j
δ		Ausscheidungsphase IN718
δ_{KG}		Ausscheidungsphase an der Korngrenze in IN718
$\delta_{\gamma''}$		Ausscheidungsphase IN718 entstehend in γ'' - Phase
δ_i^j	%	lineare Fehlpassung (Misfit) der Phase j in Gitterrichtung i
δ_V^j	%	volumetrische Fehlpassung der Ausscheidungsphase j
ε_i^j	%	Gitterverzerrung der Matrix in Gitterrichtung i der Ausscheidung j
κ	/	Formfaktor aus Höhe und Durchmesser der γ'' - Partikel
λ_k	J	elastische Verzerrungsenergie
λ_D	m	Primärdendritenarmabstand
μ_j	J mol ⁻¹	thermodynamische Potential der Phase j
μ_{0i}	J mol ⁻¹	chemisches Potential der Elemente i in der Matrix
μ_{ki}	J mol ⁻¹	chemisches Potential der Elemente i in der k -ten Ausscheidung
ν	/	Querkontraktionszahl
ρ	kg/m ³	Dichte des Materials
ρ_{ges}	m/m ³	gesamte Versetzungsdichte: $\rho_{ges} = \rho_P + \rho_W$
ρ_P	m/m ³	Versetzungsdichte auf primären Gleitsystem
ρ_W	m/m ³	Dichte Waldversetzungen auf sekundärem Gleitsystem
σ_{HP}	N/mm ²	Spannungsbeitrag Feinkornhärtung
σ_{Int}	N/mm ²	intrinsische Spannungsbeitrag
$\sigma_{P,ges}$	N/mm ²	Spannungsbeitrag gesamte Ausscheidungshärtung aller Phasen
σ_{ges}	N/mm ²	Summe aller Spannungsbeiträge
σ_{SS}	N/mm ²	Spannungsbeitrag Mischkristallhärtung

Symbol	Einheit	Beschreibung
τ_0	N/mm ²	Peierls Nabarro Schubspannungsbeitrag von τ_{Int}
$\tau_{APG,w/s}^j$	N/mm ²	Anti-Phasengrenzeffekt der Phase j abh. von χ_c
$\tau_{APG,w/s}^{Duo}$	N/mm ²	APG γ'' - Phase für Versetzungspaar abh. von χ_c
$\tau_{APG,w/s}^{Quad}$	N/mm ²	APG γ'' - Phase für Versetzungsvierling abh. von χ_c
$\tau_{GF,w/s}^j$	N/mm ²	Grenzflächeneffekt der Phase j abh. von χ_c
τ_{HP}	N/mm ²	Feinkornhärtung
τ_{Int}	N/mm ²	intrinsischer Schubspannungsbeitrag
$\tau_{K,w/s}^j$	N/mm ²	Kohärenzeffekt der Phase j abh. von χ_c
τ_{ges}	N/mm ²	Summe aller Härtungsmechanismen (krit. Schubspannung)
$\tau_{ges,w/s}^j$	N/mm ²	gesamte Ausscheidungshärtung der Phase j abh. von χ_c
τ_{min}^j	N/mm ²	schwächster Härtungsmechanismus der Phase j aus $\tau_{ges,w}^j, \tau_{ges,s}^j, \tau_{Oro}^j$
τ_{Oro}^j	N/mm ²	Orowaneffekt der Phase j
$\tau_{P,ges}$	N/mm ²	gesamte Ausscheidungshärtung aller Phasen
$\tau_{S,w/s}^j$	N/mm ²	Schubmoduleffekt der Phase j abh. von χ_c
$\tau_{SF,w/s}^j$	N/mm ²	Stapelfehlereffekt der Phase j abh. von χ_c
τ_{SS}	N/mm ²	Mischkristallhärtung
τ_V	N/mm ²	athermischer Schubspannungsbeitrag von τ_{Int}
Φ	°	Winkel zw. Burgersvektor und Versetzungslinie
χ_c	°	Krümmungswinkel der Versetzung an Ausscheidungspartikeln
ψ_j	J	Bindungsenergie zwischen Atomen des Kristallgitters
ω_i	/	Korrekturparameter für $\tau_{S,w/s}^j$
$\Omega_{w/s}$	N/mm ²	Versetzungslinienspannung
ζ	°	Winkel zwischen Zugachse und Gleitrichtung
ξ	°	Winkel zwischen Zugachse und Gleitebenennormale
θ	°	Winkel

Abkürzungsverzeichnis

Abkürzung	Beschreibung
at%	Atomprozent
Abb.	Abbildung
Al	Aluminium
AMS	Aerospace Materials Specifications
APG	Anti-Phasen-Grenze
APGE	Anti-Phasen-Grenzenergie
ARAMIS	3D-Bewegungs- und -Verformungsmesssystem
C	Kohlenstoff
CALPHAD	Calculation of Phase Diagram
Cr	Chrom
CSF	komplexe Stapelfehler
D	Dendrit
DFT	Dichte-Funktional-Theorien
DSC	Differenzkalorimetrie, englisch: differential scanning calorimetry
DTA	Differenz-Thermo-Analyse
et al.	et alii
E-Modul	Elastizitätsmodul
EBSD	Elektronenrückstreubeugung, englisch: electron backscatter diffraction
EDX	Energiedispersive Röntgenspektroskopie
EMMC	European Material Modelling Concile
EN	Europäische Norm
EQ-Q	Ersatzquellenmodell
ESF	extrinsische Stapelfehler
Exp.	Experiment
Fe	Eisen
FEREM	Feldemissions-Raster-Elektronenmikroskop
FIB-SEM	Rasterelektronenmikroskope mit fokussiertem Ionenstrahl
Fkt.	Funktion
G-Modul	Schubmodul
GBB	Generalisiertes Modell gebrochener Bindungen
GF	Grenzfläche
Gl.	Gleichung
GS	Gleitsystem
hkl	Miller Indizes der kristallografischen Ebene und Richtung

Abkürzung	Beschreibung
iso	isotrop
ICME	Integrated Computational Materials Engineering
ICMEg	Integrated Computational Materials Engineering Genom
ID	Interdendrit
IPF	Inverse Polfigur
ISF	Intrinsische Stapelfehler
IWM	Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik in Freiburg
kfz	kubisch flächenzentriert, auch fcc: face centered cubic
krz	kubisch raumzentriert, auch bcc: body centered cubic
konst.	konstant
Kap.	Kapitel
Lit.	Literatur
LMP	Larson Miller Parameter
LWS	Lifshitz- Wagner- Slyozov Wachstumstheorie
max.	maximal
min.	minimal
Mo	Molybdän
MPS	Lehrstuhl für Material- und Prozesssimulation Universität Bayreuth
MW	Mittelwert
nm	Nanometer
Nb	Niob
Ni	Nickel
ODF	Orientierungsdichtefunktion
Ref.	Referenz
REM	Raster-Elektronenmikroskop
ROI	englisch: Region of Interest
S	Schmelze
SAED	Elektronen Diffraktometrie, englisch: selected area electron diffraction
SEBM	selektives Elektronenstrahlschmelzen
SF	Stapelfehler
SFE	Stapelfehlerenergie
SFFK	Modell von Svoboda- Fischer- Fratzl- Kozeschnik
Si	Silizium
SLM	selektive Laserstrahlschmelzen, englisch: selective laser melting
STDW	Standardabweichung
SWP	Schweißwurzelporosität

Abkürzung	Beschreibung
trz	tetragonal raumzentriert, auch bct: body centered tetragonal
Ta	Tantal
Tab.	Tabelle
TEM	Transmissions-Elektronenmikroskop
Ti	Titan
TTT	englisch: temperature time transformation
V	Vanadium
VD	Modell mit Verdampfungseffekt
VDMR	Modell mit Multireflexionseffekt
wt-%	Gewichtsprozent
WB	Wärmebehandlung
WL	Wärmeleitungsmodell
WTM	Institut der Werkstoffkunde und Technologie der Metalle der Friedrich-Alexander Universität Erlangen-Nürnberg

1. Einleitung und Zielsetzung

Das selektive Laserstrahlschmelzen (SLM) gehört zu den additiven Fertigungsverfahren, denen ein umfangreiches werkstoff- und bauteilspezifisches Fertigungspotenzial zugesprochen wird. Die Entwicklung dieses stark an Bedeutung gewinnenden Herstellverfahrens ist mit einer Vielzahl von Fragestellungen nach Prozessparameterfenstern, Parametersensitivitäten, Verzügen und Eigenspannungen, Wärmebehandlungen sowie prozessbezogener Werkstoff- und Bauteiloptimierungen konfrontiert. Entwicklungen und Optimierungen müssen dabei Wechselwirkungen und Einflussgrößen auf unterschiedlichen Größen- und Zeitskalen berücksichtigen, wodurch experimentelle Analysemethoden aufwendig, sehr umfangreich und damit kosten- und zeitintensiv sind.

Eine Möglichkeit zur Aufschlüsselung der Komplexität des SLM-Verfahrens stellt die Entwicklung von Simulationsmethoden im Bereich Prozess-, Verzugs- und Materialbeschreibung dar. Damit können die unterschiedlichsten Fragestellungen in einer virtuellen Umgebung effizient analysiert und optimiert werden. Ein großes Potenzial kann dabei physikalisch basierten mehrskalen Ansätzen zugesprochen werden, welche mit verschiedenen Methoden die einzelnen Aspekte der Werkstoff- und Prozessentwicklung auf unterschiedlichen Größen- und Zeitskalen betrachten. Diese Methodenkopplung ermöglicht sowohl die Beschreibung der gesamten thermomecha-

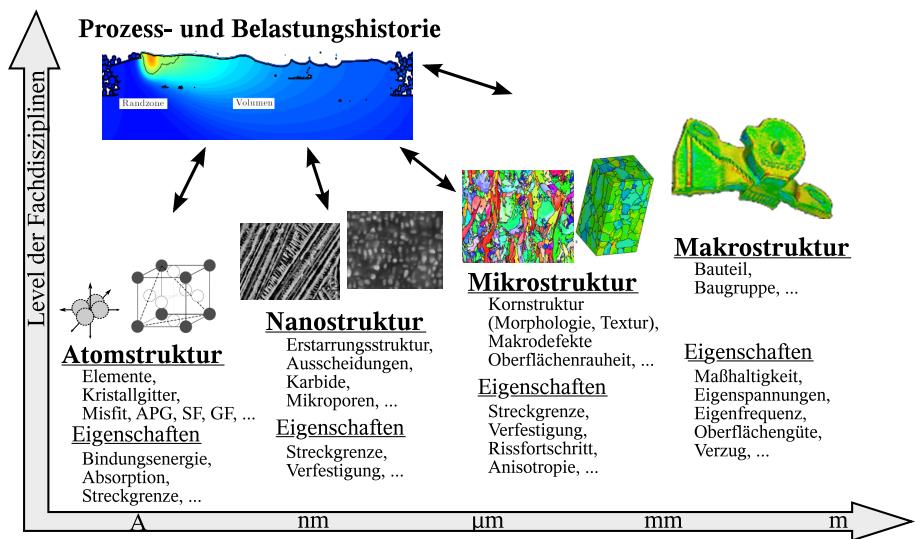


Abbildung 1.1: Mehrskalen Ansatz für Prozess- und Werkstoffsimulation nach [Ols00, CBD12]

nischen Prozesshistorie als auch die der erreichbaren Material- und Bauteileigenschaften und ist Gegenstand aktueller Forschungen [ACSM11, CLT⁺13, PCK⁺15, EMM16].

Eine mögliche Skalenaufteilung ist in Abbildung 1.1 schematisch dargestellt. Auf atomarer Ebene werden ausgehend von der lokalen Elementzusammensetzung und der Bindungsart zwischen den Elementen beispielsweise die charakteristische Kristallstruktur, Bindungsenergien im Gitter

und Gitterdefekte gesteuert. Auf Nanostrukturbene beeinflusst zum Beispiel die Temperaturlösung im Schweiß- oder Gussprozess die Erstarrungsstruktur und chemische Homogenität. Hieraus resultiert die Ausbildung und Verteilung von Erstarrungs- und Ausscheidungsphasen mit spezifischen Eigenschaften. Fortsetzend auf der Mikrostrukturbene ergeben sich Bereiche einer einheitlichen Ausrichtung von Kristallen zu einzelnen Körnern, welche durch die Prozess- und Belastungshistorie und die dadurch auf der Atom- und Nanostrukturbene hervorgerufenen Effekte gesteuert werden. Innerhalb eines Kornes können die Eigenschaften als nahezu homogen angenommen werden. Die Interaktionen innerhalb der Kornstruktur liefern die Eigenschaften auf der Mikrostrukturbene. Die Eigenschaften auf Makrostrukturbene resultieren aus der Homogenität der Mikrostruktur im Bauteil, welche durch die geometrischen Randbedingungen und die Prozess- und Belastungshistorie kontrolliert werden.

Zur Optimierung des SLM-Produktionsprozesses ist der Aufbau einer solchen physikalisch basierten, mehrskalen Simulationskette Gegenstand eines Entwicklungsprojektes bei der MTU Aero Engines AG. Das Konzept und erste Ergebnisse wurden in Konferenzbeiträgen und Patenten vorgestellt [MIGFB⁺13, MIGFB15, GHMI16, MIGFB16b, MIGFB16a]. Ziel des Projektes ist es, ausgehend von der Legierungschemie den Fertigungsprozess und die sich ergebenden Eigenschaften zu beschreiben und entsprechende Abhängigkeiten und Korrelationen abzuleiten. Der gewählte physikalisch basierte Ansatz soll darüber hinaus eine Optimierung der Fertigung und Materialeigenschaften sowie eine Übertragbarkeit auf andere Werkstoffe ermöglichen. Das Entwicklungsprojekt baut auf den Ergebnissen des europäisch geförderten Projektes "SimChain" mit den Kooperationspartnern Institut WTM der Universität Erlangen-Nürnberg, Fraunhofer IWM in Freiburg und Institut MPS der Universität Bayreuth auf [KHE16]. Diese Partner entwickeln einen Teil der Simulationskette für den Elektronenstrahl-Prozess, welcher bei der MTU Aero Engines AG auf den SLM- Prozess übertragen und ausgebaut wird. Im Rahmen des Ent-

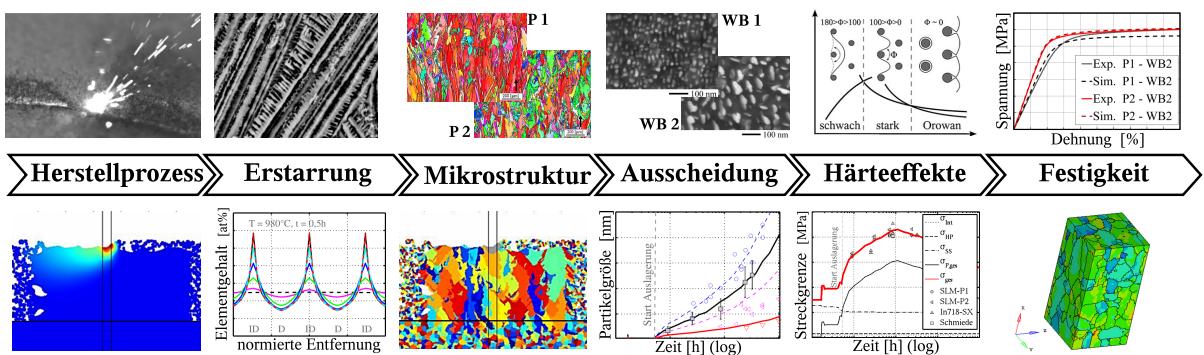


Abbildung 1.2: Physikalisch basierte mehrskalen Simulationskette für den SLM- Prozess

wicklungsprojektes werden bei der MTU Aero Engines AG für den additiv gefertigten Werkstoff IN718 sechs Simulationen miteinander gekoppelt. Diese simulieren den Strahlschmelzprozess, die Erstarrung, die Kornstruktur, die Ausscheidungen, die Härteeffekte und die mikrostruktur-

basierte Festigkeit. Damit wird die Möglichkeit geschaffen, ausgehend vom Herstellprozess auf die Materialeigenschaften zu schließen. (siehe Abb. 1.2).

Ziel der vorliegenden Dissertation ist die Entwicklung und Validierung eines Segmentes dieser Simulationskette. Durch eine Methodenkopplung werden ausgehend von der Legierungschemie und dem Erstarrungsverhalten die Ausscheidungsentwicklung und die resultierende Festigkeit unter Berücksichtigung der prozessspezifischen Mikrostruktur physikalisch basiert berechnet (Schritt zwei, vier und fünf nach Abb. 1.2). Eine grundlegende Analyse des Werkstoffes und der festigkeitssteigernden Mechanismen ermöglicht die Auswahl von geeigneten Modellen und die Implementierung von notwendigen werkstoff- und prozessspezifischen Erweiterungen. Die Validität der umgesetzten Modelle und gewählten Eingabegrößen wird anhand von Literaturdaten und gezielten experimentellen Untersuchungen nachgewiesen. Aus diesen Ergebnissen werden die Abbildungsgenauigkeit der einzelnen Methoden und der Methodenkopplung für werkstoffrelevante Temperaturen und Zeiten abgeleitet. In Kombination mit einer Sensitivitätsstudie erfolgen die Ermittlung des Gültigkeitsbereiches der Simulation sowie kritischer Parameter bzw. Schlüsselgrößen. Hierauf aufbauend werden Modellgrenzen und Unschärfen identifiziert und Anhaltspunkt über die Fehlerfortpflanzung entlang der Simulationskette gewonnen. Schlussendlich werden Aussagen über empfehlenswerte und notwendige Erweiterungen der Simulationen getroffen. Zusammenfassend lassen sich die folgenden Zielstellungen ableiten:

- Aufbau einer physikalisch basierten Simulationskette zur Vorhersage des Ausscheidungszustandes und der Streckgrenze von IN718,
- Bereitstellung von Daten zur Modellvalidierung,
- Kopplung der Simulationsmethoden zu einer Simulationskette zur Werkstoff- und Festigkeitsbeschreibung,
- Validierung der einzelnen Simulationsmethoden, deren Eingangsgrößen sowie der gekoppelten Simulationskette,
- Sensitivitätsanalyse der Modellparameter und Identifikation der Schlüsselgrößen sowie des Gültigkeitsbereiches der Simulation.

2. Grundlagen

2.1 Additiver Fertigungsprozess

Der SLM-Prozess (“selective laser melting”) ist ein laserbasiertes additives Fertigungsverfahren, bei dem ein Bauteil schichtweise durch die lokale Umschmelzung eines Pulverbettes aufgebaut wird. Das 3D-Konstruktionsmodell wird dafür in einzelne Schichtinformationen zerlegt und zusammen mit den lokal definierbaren Scanparametern an die Fertigungsmaschine übergeben. Ein Laser belichtet mit bis zu 400 W den schichtweise definierten Bauteilquerschnitt. Anschließend wird die Bauplattform abgesenkt und eine neue Pulverschicht für den nächsten Scanvorgang aufgetragen (s. Abb. 2.1a). Nach Abschluss des Aufbauprozesses ist ein Spannungsarmglühen notwendig, um die über den schichtweisen Schweiß-Prozess eingebrachten Eigenspannungen abzubauen [Kou03]. Anschließend wird das Bauteil von der Bodenplatte abgetrennt, final wär-

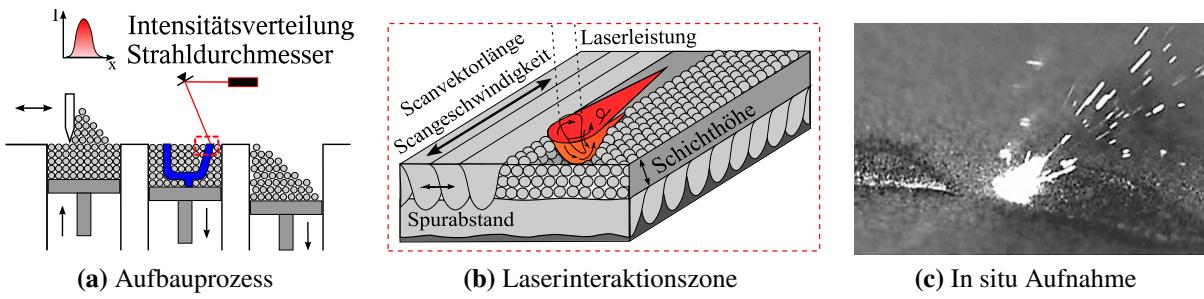


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des SLM-Prozesses: (a) schichtweiser Aufbauprozess, (b) Laserinteraktionszone, (c) In situ Aufnahme Scanprozess

mebehandelt und etwaige notwendige Oberflächennachbearbeitungen durchgeführt. Mit diesem Herstellungsverfahren lassen sich sehr komplexe und filigrane Bauteile nahezu endkonturnah fertigen.

Die Material- und Bauteilqualität des SLM-Prozesses wird im Wesentlichen auf drei Ebenen bestimmt: der Anlagenebene, der Bauteilebene und der Interaktionsebene zwischen Laser und Pulver. Die Einflüsse auf der Anlagenebene umfassen alle Geräte und Maschinen, deren Bedienung sowie sämtliche dem Bauprozess vor- und nachgelagerten Schritte. Von Bedeutung sind beispielsweise die Lagerung, Handhabung und Aufbereitung des Pulvers, die Wartung des Lasers und Schutzgassystems, die Maschinenreinigung und Einrichtung sowie das Trennen der Bauteile von der Bauplattform. Auf der Bauteilebene bestimmen beispielsweise die Bauteilanzahl, die Bauteilmorphologie und deren Orientierung auf der Bauplattform sowie die gewählte Supportstruktur wie sich der Bauprozess auf die Oberflächengüte, die Eigenspannungen und Verzüge auswirkt.

In der Interaktionsebene zwischen Laser und Pulverbett entsteht auf Mikrometerebene das charakteristische Material der additiven Fertigung. Auf dieser Ebene wird der Energieeintrag ins Material, die Dimension, die Dynamik und das Erstarrungsverhalten der Schmelze und damit die Anbindung an benachbarte Laserspuren und vorherige Schichten sowie die sich ausbildende Kornstruktur bestimmt. Die wichtigsten Größen sind dabei Laserleistung, Scangeschwindigkeit, Spurabstand, Scanvektorlänge und Pulverschichthöhe (siehe Abb. 2.1b). Die physikalischen Effekte in der Laserinteraktionszone sind der Grund für die hohe Prozessdynamik und zeigen sich im Prozessleuchten, der Schmauch- und Spritzerbildung und dem Pulverpartikelflug (siehe Abb. 2.1c) [LSF⁺16].

2.2 Simulationsgestützte Analyse des SLM-Prozess

Um die Materialeigenschaften in der additiven Fertigung zuverlässig kontrollieren zu können, ist es entscheidend, den Einfluss und die Interaktion der Fertigungsparameter in der Laserinteraktionszone detailliert zu kennen. Mit geeigneten Simulationen können die dafür notwendigen experimentellen Umfänge reduziert und weitere Bewertungsmöglichkeiten von Ergebnissen geschaffen werden. Eine solche virtuelle Prozessanalyse ist mit der physikalisch basierten 2D-Strahlschmelzsimulation, welche auf Basis der Lattice-Boltzmann-Methode vom Lehrstuhl WTM der Universität Erlangen-Nürnberg in Kooperation mit der MTU Aero Engines AG entwickelt wurde, möglich [Thi05, Att11, MIGFB⁺13, KSK14, MIGFB15]. Die Simulationsergebnisse stellen eine wichtige Grundlage für die vorliegende Dissertation dar. Zum einen bilden die Ergebnisse der Strahlschmelzsimulation die Interaktion der Fertigungsparameter und die resultierende Dichte des Materials ab, anhand derer die Prozessfensteranalyse für die Ermittlung der Fertigungsparameter für das Probenmaterial zielgerichteter erfolgen kann (siehe Kapitel 5.3.2). Zum anderen können durch die Anwendung der Simulation wichtige Eingabeparameter wie die Erstarrungsgeschwindigkeit, Temperaturgradient und Abkühlgeschwindigkeit für die Betrachtungen in dieser Dissertation berechnet werden (siehe Kapitel 5.4, 5.5.2 und Anhang A). Für die Simulation werden Materialeigenschaften wie Dichte, Wärmeleitfähigkeit und Schmelztemperatur, Pulverbettdaten wie Partikelverteilung und Schichthöhe sowie Scanparameter benötigt. Eine Übersicht zu allen Ein- und Ausgabedaten ist im Anhang A dargestellt. Im Folgenden wird sowohl auf die in der Simulation implementierten physikalischen Effekte als auch auf einzelne Aspekte der Modellvalidierung eingegangen. Eine Übersicht der implementierten physikalischen Effekte ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Neben der Thermo- und Fluiddynamik sind die material- und prozessspezifischen Berechnungen der Absorption, Verdampfung und Multireflexion entscheidend.

Die für den Strahlschmelzprozess zur Verfügung stehende Laserenergie wird aufgrund der ge-

ringen Eindringtiefe der Strahlung innerhalb nur weniger Nanometer an der Materialoberfläche eingekoppelt. Der materialspezifische Absorptionskoeffizient beschreibt in Abhängigkeit von Einstrahlwinkel, Laserwellenlänge und Temperatur den Anteil der absorbierten Laserenergie. Dieser liegt für IN718 zwischen 32 % und 45 % (siehe Anhang A). Die Absorption wird im Modell für jede Oberflächenzelle berechnet. Die Erwärmung des darunterliegenden Materials erfolgt nur über Wärmeleitung. Die Oberflächentemperatur steigt infolge der hohen Energie-

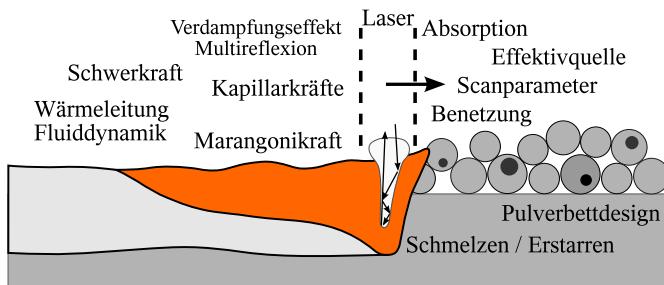


Abbildung 2.2: Modellskizze der Schmelzpoolsimulation nach [KAH11]

dichte des Lasers sehr schnell auf die Verdampfungstemperatur des Materials an. Mit Erreichen dieser Temperatur erhöht sich der Verdampfungsdruck an der Oberfläche bis auf das zehnfache des atmosphärischen Druckes und bildet eine Dampfkapillare. Durch Mehrfachreflexion in der Dampfkapillare steigt die berechnete absorbierte Energie um bis zu 30 % an [KSK14, Fab10]. Die Verdampfungseffekte, die hohe Schmelzbadtemperatur und das sich wiederholende Hinzukommen von neuen Pulverpartikeln ins Schmelzbad sorgen für eine sehr hohe Schmelzbad-dynamik, welche zu der ausgeprägten Schmauch- und Schmelzspritzerbildung führt. Der hohe Verdampfungsdruck und die Expansion des erwärmten Gases zwischen den Pulverpartikeln sorgen zusätzlich noch für das Aufwirbeln von Pulverpartikeln. Diese Effekte können bei ungünstiger Ausrichtung der Belichtungsstrategie zum Schutzgasstrom, zur Abschirmung des Lasers von der Oberfläche sowie zum Zusammenbruch von Energieeinkopplung und Dampfkapillare führen. Dies verursacht Defekte und Anbindungsfehler.

Die Grundlage der Modellvalidierung bilden Einzelspurexperimente, bei denen die Laserleistung zwischen 95 W und 345 W und die Scangeschwindigkeit zwischen 0,8 m/s und 1,6 m/s auf einer glatten IN718 Platte variiert werden. Die Ergebnisse aus Experiment und Strahlschmelzsimulation sind in Abbildung 2.3a dargestellt. Die Relevanz der schrittweise berücksichtigten Effekte kann aus deren schrittweise Implementierung in der Simulation abgeleitet werden. Der berechnete Absorptionskoeffizient und das reine Wärmeleitungsmodell (WL) sind nur für Streckenenergien bis 80 J/m ausreichend. Die Berücksichtigung des Verdampfungseffektes (VD) kann bis zu einer Streckenenergie von 175 J/m die Schmelzbadgeometrie abbilden. Für noch höhere Streckenenergien muss zusätzlich die Mehrfachreflexion (VDMR) in der Dampfkapillare berücksichtigt werden, welche aufgrund des 2D-Modells oberhalb von 300 J/m durch extreme Verdampfungseffekte auch an Abbildungsgrenzen stößt.

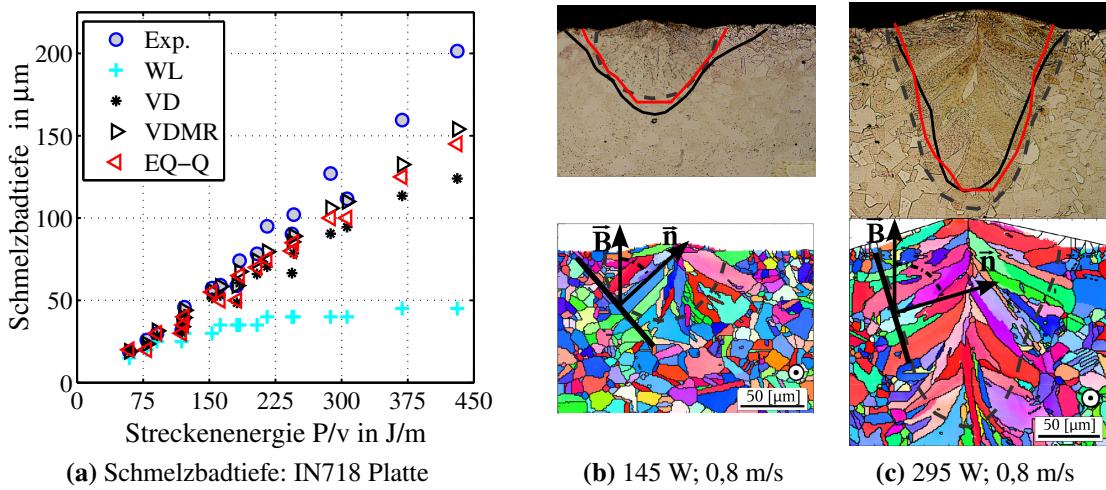


Abbildung 2.3: (a) Schmelzbadtiefe für IN718 auf glatter Platte aus: Experiment (Exp.) und Simulation mit Wärmeleitungs- (WL), Verdampfungs- (VD), Mehrfachreflexions- (VDMR) Wärmequellenmodell; (b) und (c) Schmelzbadgeometrie im Vergleich zur berechneten Kontur und Kornstruktur einer Einzelspur

Die Geometrie der einzelnen Laserspuren und deren ausreichende Überlappung zu Nachbarspuren sowie zu vorherigen Schichten legen nicht nur die Grundlage für eine defektfreie Fertigung sondern sind auch für die finale Kornstruktur im Bauteil von Bedeutung. In einer Schmelzspur wachsen die einzelnen Körner epitaktisch von der Erstarrungsfront in Richtung des maximalen Temperaturgradienten. Entscheidend für die Kornstruktur ist der Winkel zwischen Erstarrungsfrontnormalen (\vec{n}) und der Aufbaurichtung (\vec{B}), welcher mit steigender Streckenenergie zunimmt (siehe Abb. 2.3b und 2.3c). Die resultierende Kornstruktur des gesamten Bauteils wird in Kapitel 5.3.4 näher untersucht.

Das Prozessfenster für die Verarbeitung von IN718 wird durch eine gezielte Variation der Schlüsselparameter der Laserinteraktionszone (Laserleistung, Scangeschwindigkeit, Spurabstand und Pulverschichthöhe) identifiziert [MIGFB16a]. Die Defektdichte (Poren und Anbindungsfehler) wird für 28 unterschiedliche Parametersätze simulativ und experimentell in zwei Versuchsreihen ermittelt. In der Simulation werden die Scanstrategie, die Scanparameter und ein Pulverbett mit einer Packungsdichte von ca. 50 % prozessnah umgesetzt. Versuchsdetails zu den Experimenten und der Simulation sind im Anhang A dargestellt. Abbildung 2.4a zeigt für die erste Versuchsreihe, bei der jeder Parameter in zwei Stufen untersucht wird, den Vergleich zwischen gemessener und berechneter Defektdichte. Die Strahlschmelzsimulation kann sowohl den Absolutwert als auch die parameterspezifische Änderung (Anstieg) der Defektdichte für alle vier Schlüsselparameter abbilden. Der nichtlineare Zusammenhang zwischen Laserleistung, Scangeschwindigkeit und Defektdichte wird für Simulation und Experiment in der zweiten dreistufigen Versuchsreihe im Anhang A deutlich. Prozessfensterstudien von Meiner oder Helmer et al. dokumentieren gleiche Abhängigkeiten [Mei99, HCS14]. Die Variation der Scanparameter erzeugt außerdem

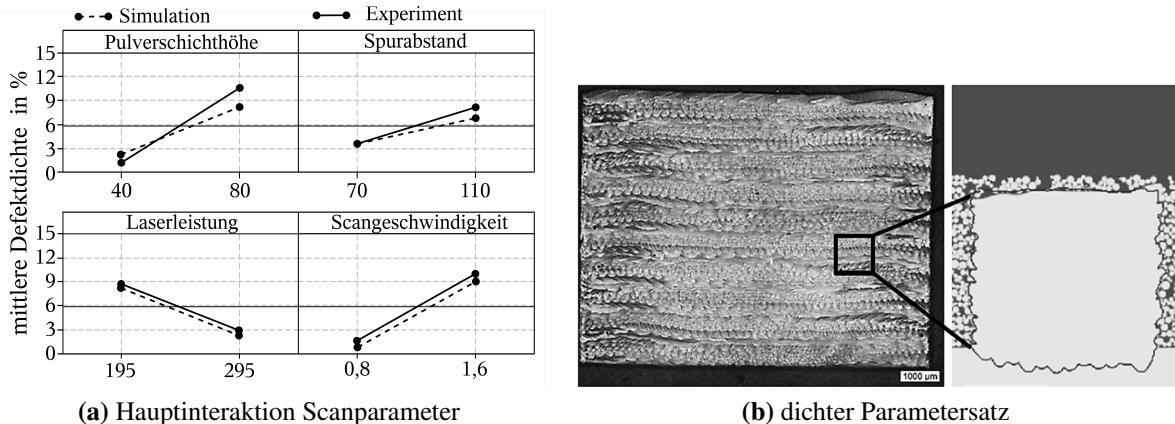


Abbildung 2.4: Einfluss der Scanparameter auf die Defektdichte im SLM- Material (a) aus Versuchen abgeleitete Hauptinteraktionsdiagramme, (b) Vergleich Schliffbild aus Experiment und Simulation (Details in Anhang A)

eine Veränderung der Gefügestruktur und des mechanischen Verhaltens, welche beispielsweise in den Referenz [PRCA14, CMWA14, MIGFB16a] und in Kapitel 5.3.4 gezeigt werden.

Über die Defektdichte hinaus ermöglicht die Simulation die Berechnung der Temperaturverteilung während des schichtweisen Aufbauprozesses. Eine Beispielrechnung ist im Anhang A ergänzt. Aus der Temperaturfeldsimulation leitet sich eine mittlere Erstarrungsgeschwindigkeit von 10^{-3} m/s und ein mittlerer Temperaturgradient von 10^7 K/m in einer Schmelzspur ab. Diese Daten sind für die Analyse des Erstarrungsverhaltens in Kapitel 5.4 von Bedeutung. Die mittlere Abkühlgeschwindigkeit zwischen 1100 °C und 600 °C liegt zwischen 10^5 K/s und 10^4 K/s. Ab der fünften bis sechsten Schicht beträgt die Materialtemperatur nicht mehr als 600 °C. Innerhalb dieser sechs Schichten fällt die Abkühlgeschwindigkeit nicht unter 10^4 K/s. Diese Werte sind für die Analyse der Ausscheidungskinetik während des SLM- Prozesses in Kapitel 5.5.2 von Relevanz.

2.3 Der Werkstoff Inconel 718

2.3.1 Chemie und allgemeine Konstitution

Inconel 718 (IN718) wurde Ende der 50’iger Jahre von der internationalen Nickel Gesellschaft als ausscheidungsgehärtete Ni- Basislegierung entwickelt und 1970 für den Einsatz in Flugzeugtriebwerken freigegeben. Aufgrund der guten Schweißbarkeit, der hohen Langzeitfestigkeit bei Temperaturen von bis zu 650 °C und der guten Korrosions- sowie Oxidationsbeständigkeit existieren vielfältige Anwendungen für diesen Werkstoff [Pin10, ACRC10, MSG96, GZ92]. Die Verarbeitungsanforderungen und die erreichbaren Eigenschaften werden über die Legierungschemie definiert, welche in Tabelle 2.1 inklusive der mittleren Chemie der wichtigsten Phasen

angegeben ist. Der hohe Cr- Gehalt sorgt für gute Oxidationsbeständigkeit. Cr und Mo liefern entscheidende Beiträge zur Mischkristallfestigkeit [GZ92, DLK11]. Die Elemente Al, Ti und Nb sind für die Bildung der Erstarrungs- und Ausscheidungsphasen verantwortlich. In der Fest-

Tabelle 2.1: Chemie IN718 nach Norm AMS5383E [AMS12], mittlere Phasenchemie (in wt%) und maximale Solvustemperatur der Phasen (Details im Anhang Tab. C.2 bis C.7, C.13 bis C.11)

	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	T_{Sol} in °C
IN718	52,50	18,4	19,00	5,10	3,00	0,95	0,50	
γ- Matrix	50,95	21,44	19,83	2,89	3,09	0,54	0,43	
γ'- Phase	71,79	2,05	0,63	13,31	1,32	6,87	4,01	≤900
γ''- Phase	61,13	1,43	1,75	29,57	2,32	3,60	0,18	≤950
δ- Phase	61,78	3,54	2,52	26,95	1,99	2,65	0,55	≤1050
Laves- Phase	40,50	11,84	12,19	28,16	5,87	1,16	0,26	
(Nb/Ti)C	≤1,4	≤0,6	≤1,3	(88/25)	≤1,3	(7,4/68)	0,0	

phasenumwandlung können sich die γ' -, die γ'' - und die δ - Ausscheidungsphase bilden. Die ersten beiden Phasen wirken festigkeitssteigernd. Die γ'' - Phase ist thermodynamisch metastabil und wandelt oberhalb von 650 °C sukzessiv in die thermodynamisch stabilere δ - Phase um. Diese Phasentransformation und die zunehmend schnellere Phasenvergrößerung oberhalb von 650 °C definieren die thermische Einsatzgrenze von IN718. Im Temperaturbereich von 850 °C bis 1050 °C lösen sich zuerst die γ' -, dann die γ'' - und schlussendlich die δ - Phase auf (siehe Tab. 2.1). Der Übergang zur schmelzflüssigen Phase findet zwischen der Solidus- (T_S) und Liquidustemperatur (T_L) mit ca. 1260 °C und 1357 °C statt [FRZ10]. Im dendritischen Erstarrungsprozess bildet sich infolge des ausgeprägten Segregationsverhaltens von Nb die (Ni)₂(Nb) Laves- Phase sowie Nb und Ti haltige MC- Karbide. Die Kristallstruktur, die Morphologie und die zugrundeliegende chemische Stöchiometrie der einzelnen Phasen sind in Tabelle 2.2 zusammengefasst.

Das Erstarrungs- und Ausscheidungsverhalten macht eine herstellprozessbezogene Wärmebehandlung notwendig. Das Gussmaterial kann oberhalb von 1060 °C homogenisiert und anschließend bei 954 °C lösungsgeglüht sowie zweistufig bei 720 °C und 620 °C für je 8 h ausgelagert werden [AMS12, CR89]. Das Schmiedematerial ist aufgrund der Prozessführung chemisch homogener, sodass nur ein Lösungsglühen bei 980 bis 1032 °C mit anschließender 2- stufiger Auslagerung durchgeführt wird [DD02, DDHR91, KAB⁺88, AMS12]. Im Auslagerungsvorgang wird der optimale γ' - und γ'' - Phasenanteil sowie die Ausscheidungsgröße für maximale Festigkeit eingestellt. Das träge Ausscheidungsverhalten und die langsame Festigkeitszunahme ermöglichen eine gute Schweißbarkeit und schaffen damit eine hohe Attraktivität des Werkstoffes für die generative Fertigung [DLK11]. Weitere komplexere Karbide (M₆C, M₂₃C₆, M₇C₃) sowie die α Cr- Phase und σ - Phase bilden sich erst unter Langzeiteinsatzbedingungen, sind teilweise abhängig vom Spannungszustand oder können über chemische Reinheit (min. Si- Gehalt)

Tabelle 2.2: Struktur, Morphologie und Stöchiometrie der Phasen in IN718 nach [PS05, MSG96]

Name	Struktur	Morphologie	Stöchiometrie
γ - Matrix	kfz - A1		Ni- Mischkristall
γ' - Phase	geordnet kfz - L1 ₂	sphärisch	Ni ₃ (Al,Ti)
γ'' - Phase	geordnet trz - D0 ₂₂	ellipsoide Scheibe	Ni ₃ (Nb,Ti)
δ - Phase	orthorombisch - D0 ₈	Platte	Ni ₃ (Nb,Ti)
MC- Karbid	kubisch - B1	inselförmig	(Nb/Ti)C
Laves- Phase	hexagonal - C14	globular	(Ni,Fe,Cr) ₂ (Nb,Ti)

und Prozessführung unterbunden werden [PS05, Rad89, BB88]. Daher wird auf diese Phasen nicht weiter eingegangen.

Die folgenden Kapitel beschreiben das Erstarrungsverhalten, die Ausscheidungskinetik und das letztendlich erreichbare Festigkeitsniveau des Werkstoffes.

2.3.2 Das Erstarrungs- und Segregationsverhalten

Im Erstarrungsprozess eines metallischen Werkstoffes bewegt sich die Phasengrenze zwischen festem und flüssigem Zustand in Richtung des höchsten Temperaturgradienten. Die Erstarrungsmorphologie wird dabei vom Temperaturgradienten (∇T) und der Erstarrungsgeschwindigkeit (v) kontrolliert. Mit zunehmendem Quotienten aus $\nabla T/v$ verändert sich die Morphologie von planar über zellular zu dendritisch bis hin zu globulitisch dendritisch, wobei die letzten beiden Strukturen meist in gieß- und schweißtechnischer Praxis vorliegen [Kou03]. Die Feinheit der Struktur nimmt mit steigendem Produkt aus $\nabla T \cdot v$ zu [KF98, Gol94, Kou03]. Der experimentell zugängliche primäre Dendritenarmabstand (λ_D) kann nach folgendem Ansatz berechnet werden [KF98]:

$$\lambda_D = K \cdot \nabla T^{-0,5} \cdot v^{-0,25}. \quad (2.1)$$

Die empirisch ermittelte Proportionalitätskonstante K wird zwischen $1444 \text{ } m^{0,75} K^{0,5} s^{-0,25}$ und $1515 \text{ } m^{0,75} K^{0,5} s^{-0,25}$ für Ni-Basis Superlegierungen angegeben und ist legierungsspezifisch vom Erstarrungsintervall und der Elementsegregation abhängig [Kru98, Gol94].

Die Segregation in Multikomponentenlegierungen resultiert aus einer unterschiedlichen Löslichkeit der Elemente in der festen und flüssigen Phase, welche durch den Seigerungskoeffizienten ($k_i^{s/l}$) beschrieben wird [TJRC53, KF98]. $k_i^{s/l}$ ist > 1 wenn sich das Element im zuerst erstarrenden Dendriten anreichert. Eine Anreicherung im Interdendriten wird durch < 1 deutlich. Die Koeffizienten für IN718 sind in Tabelle 2.3 zusammengefasst. Der Mischkristallhärter Mo und alle Ausscheidungsbildner reichern sich interdendritisch an. Aufgrund des hohen Gesamtanteils, dem geringsten Seigerungskoeffizienten mit einer hohen interdendritischen Anreicherung von bis zu 25 wt% und der Relevanz für alle Ausscheidungs- und Erstarrungsphasen

ist Nb das Schlüsselement der Legierung [CRJ⁺09, KCH⁺89, KDY⁺04, MSW⁺11, WDLZ07, WGZ⁺12]. Aus dieser Elementsegregation leitet sich das Erstarrungsverhalten von IN718 ab.

Tabelle 2.3: Mittlere Seigerungskoeffizienten der Elemente (Details im Anhang Tab. C.19)

	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al
mittlere $k_i^{s/l}$	1,08	1,04	1,03	0,52	0,77	0,73	0,7

Dies wird anhand der schematischen Abbildung 2.5 und dem pseudobinären Ni-Nb- Phasendiagramm beschrieben. Aus der Schmelze bildet sich zuerst eine Nb arme Matrix (2,6 wt%, ①). Die interdendritische Anreicherung mit Nb, Ti und C führt zur Bildung der MC- Karbide. Diese wird durch die zunehmende Kohlenstoffverarmung wieder gestoppt [Cie86]. Die interdendritische Zone reichert sich während der Abkühlung weiter mit Nb an und überschreitet deutlich die maximale Löslichkeit der Matrix von ca. 9,3 wt% (②). Dadurch wird der Erstarrungsprozess mit der eutektischen Matrix-Laves- Reaktion bei ca. 1190 °C beendet (③, ④) [KCH⁺89, CKHR89, Rad89, MMY⁺94]. Der beschriebene Prozess senkt die Anschmelztem-

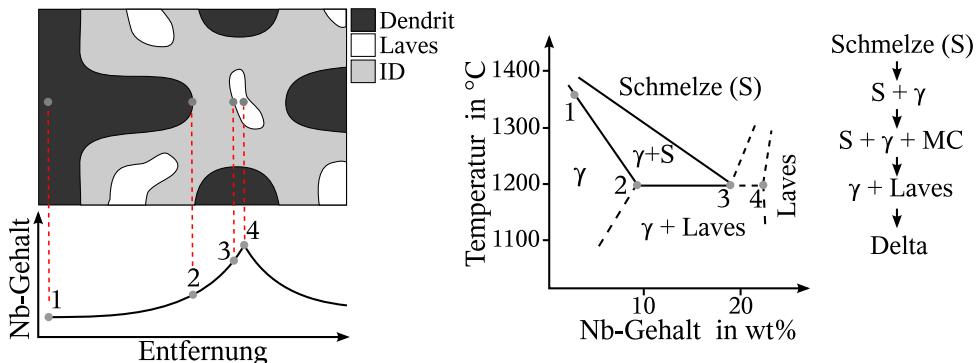


Abbildung 2.5: Schema des dendritischen Erstarrungsverhaltens anhand des Nb-Seigerungsverhaltens, dem pseudobinären Phasendiagramm und der resultierenden Erstarrungsabfolge nach [KCH⁺89]

peratur auf ca. 1190 °C ab und erweitert das Erstarrungsintervall im Vergleich zur chemisch homogenen Legierung von 97 K auf \approx 160 K. Nach Radavich et al. bilden sich bei weiterer langsamer Abkühlung in Abhängigkeit vom Nb- Gehalt die δ - Phase (> 6-8 wt%), die γ'' - Phase (> 4-6 wt%) und die γ' - Phase (< 4 wt%) [Rad89].

Die Ausprägungen der chemischen Inhomogenität und der spröden intermetallischen Laves- Phase sind von den Erstarrungsbedingungen abhängig und beeinflussen Festigkeit, Duktilität, Bruchzähigkeit und Kriecheigenschaften negativ [MSG96, SGR08, CRJ⁺09]. Die Segregation und der Laves- Anteil können durch höhere Erstarrungsgeschwindigkeiten reduziert jedoch nicht vollständig unterdrückt werden [Gor70, KF98, WDLZ07, SEV99, CRJ⁺09, NOL14, MSPK14, MSPK15]. Bei gleichzeitiger Erhöhung des Temperaturgradienten steigen Segregationsgrad und Laves- Anteil wieder an [NOL14]. Aufgrund dieser Zusammenhänge werden die Segregation

und Erstarrungsphasen auch in SLM gefertigten Materialen detektiert. Die rasche Abkühlung ($\nabla T \approx 10^7 \text{ K/m}$ und $v \approx 10^{-3} \text{ m/s}$) erzeugt eine sehr feine Erstarrungsstruktur ($\lambda_D \leq 1 \mu\text{m}$), wodurch die Prozesse auf einer sehr kleinen Größenskala stattfinden [Str15, AGM¹², JG14, SMS¹²]. Im Vergleich dazu erzeugt der auf dem Elektronenstrahl basierende generative Prozess (SEBM) aufgrund des geringeren Temperaturgradienten eine gröbere Erstarrungsstruktur ($\lambda_D \leq 20 \mu\text{m}$) [SMS¹²].

Für homogene Materialeigenschaften muss der Erstarrungszustand über ein gezieltes Homogenisierungsglühen beseitigt werden. Die dafür notwendige Temperatur und Zeit sind vom Dendritenarmabstand und der Größe sowie Phasenanteil der Laves- Phase abhängig [CRJ⁰⁹, Gor70]. Im einphasigen Temperaturbereich zwischen δ - Solvustemperatur und T_S ist der Segregationsabbau und Auflösung der Laves- Phase theoretisch möglich. Für Temperaturen unterhalb der δ - Solvustemperatur ist der Diffusionsausgleich deutlich langsamer und es wird eine Umlösung der Laves- in die δ - Phase beobachtet [Gor70, Str15]. Die Homogenisierbarkeit ist für das generativ gefertigte Material aufgrund der geringen Dendritenarmabstände und den kürzeren Diffusionswegen möglich [Str15]. Die Homogenisierbarkeit von Gussmaterial ist eingeschränkt möglich und erfordert sehr lange Zeiten bei sehr hohen Temperaturen, da λ_D und die Laves- Partikel sehr groß sind [Gor70]. Das thermokinetische Verhalten der γ' -, γ'' - und δ - Phase wird in den folgenden Kapiteln beschrieben.

2.3.3 Das Ausscheidungsverhalten der γ' - und γ'' - Phase

Die ausscheidungshärtende γ' - und γ'' - Phase liegen in geordneten Kristallstrukturen vor, welche der Raumgruppe und Symmetrie der ungeordneten A1- Matrixstruktur ähnlich sind [SMB88a, Got07, Ree06, NVL10]. Die Ausscheidungsbildner Nb, Ti und Al besetzen in der $L1_2$ γ' - Elementarzelle die Eckpositionen und in der $D0_{22}$ γ'' - Struktur neben den Eckpositionen noch die raumzentrierte Position (siehe Abb. 2.9a und 2.10a). Die Elemente mit kleineren Atomradien wie Ni, Fe und Cr sitzen auf den Flächendiagonalen (vgl. Tab. C.1).

Der Gitterparameter (a_i^j) der Phasen j ist abhängig von der Kristallstruktur, Phasenchemie und Wärmebehandlung. Für die γ - und γ' - Phase ist a_i^j isotrop (siehe Kap. 5.2.3). Der γ - und γ' - Gitterparameter kann über einen Modellansatz, welcher aus einer Vielzahl an Messdaten abgeleitet wurde, berechnet werden (siehe Kap. 4.1.1 und 5.2.3) [MOS85, Nas91, LXY^{97b}, Car00, Ree06, RTW09, DLNV11]. Für die γ'' - Phase muss zwischen der Grundfläche mit $a_{1-2}^{\gamma''} \approx 0,361 \text{ nm}$ und der Hochachse $a_3^{\gamma''} \approx 0,742 \text{ nm}$ unterschieden werden (siehe Kap. 5.2.3). Studien an binären und ternären Legierungen zeigen für die $D0_{22}$ - Struktur (Ni_3Nb , Ni_3V und Al_3Ti) eine starke Zusammensetzungsabhängigkeit [KMB⁰³, CML11, SMT04]. Messungen an einem vergleichbaren Legierungssystem (Ni-Cr-Fe-Nb) und am IN718 dokumentieren eine starke Abhängigkeit der Gitterkonstanten von der Auslagerungszeit und der γ'' - Partikelgröße

[KHIO96, KIO96, SC97, SSC97, SA00]. Ein Berechnungsmodell für den γ'' - Gitterparameter ist nicht vorhanden. Für die Simulation werden deshalb experimentelle Daten verwendet (siehe Kap. 5.2.3).

Aus den Gitterparametern leitet sich die volumetrische Fehlpassung (δ_V^j) und die lineare Fehlpassung (Misfit: δ_i^j) zwischen Matrix und Ausscheidung ab. Diese Fehlpassung verursacht eine Gitterverzerrung (ε_i^j). δ_i^j und ε_i^j sind wie der Gitterparameter wärmebehandlungsabhängig, für γ' isotrop und für γ'' anisotrop. In Richtung der γ'' - Scheibennormalen ist ε_i^j um ca. das 10-fache höher gegenüber γ' [Fan81, FDC82, OPD74a, WF94]. Senkrecht zur γ'' - Scheibennormalen ist ε_i^j vernachlässigbar gering [KW70, ZLZ⁺14]. Für die Keimbildung der Phasen ist δ_V^j relevant. Die geringe Fehlpassung (< 5 %) und die Strukturähnlichkeit der γ' und γ'' - Gitter zur Matrix ermöglichen die homogene Ausscheidung beider Phasen unter der Bildung einer niedrigenergetischen kohärenten Phasengrenze [SMB92, SSC97, SA00]. Für die Morphologie und den Festigkeitsbeitrag ist ε_i^j verantwortlich. Die sphärische γ' - Morphologie in IN718 resultiert aus der geringen isotropen Gitterverzerrung. Die elliptische scheibenförmige Erscheinung der γ'' - Phase wird durch die hohe anisotrope Gitterverzerrung kontrolliert [WKH⁺81, Kha89, FOK96, SMT04]. Das Aspektverhältnis (κ) zwischen Höhe und Durchmesser der Scheibenform fällt bis zu einem Durchmesser von ca. 50 nm auf 0,2 ab und ist für größere Partikel nahezu konstant [Fan81, HTFY95, SMB88a, SSC97, SA00, DNM⁺08, Aza04, ZLZ⁺14]. Diese Morphologie wird in 3D FIB-SEM Rekonstruktionen von Kulawik et al. bestätigt [KBK⁺15]. Konkrete Datensätze und die Berechnung werden in Kapitel 4.1.1, 4.1.3, 5.2.3 und 5.2.4 beschrieben.

Die Ausscheidung der γ' - und γ'' - Phase erfolgt für eine spannungsfreie Auslagerung bis ca. 850 °C homogen und kohärent in der Matrix [BBC89, SMB92, SSC97, Aza04]. Oberhalb von 850 °C wird vermehrt γ'' und oberhalb 900 °C ausschließlich γ'' dokumentiert [BBC89, SMB92, SSC97]. Hieraus leitet sich der γ' - Solvus mit < 900 °C und der γ'' - Solvus mit < 950 °C ab. Der erreichbare γ'' - Volumenanteil beträgt ca. 15 %. Der γ' - Anteil ist um den Faktor zwei bis drei geringer [OPD69, Fan81, Aza04].

Das Frühstadium der Ausscheidungen ist aufgrund der extrem kleinen Partikel schwer zu dokumentieren. Im wasserabgeschrecktem Zustand nach Lösungsglühung bei 1200 °C werden bei Fang beide Phasen mittels Röntgenbeugung identifiziert [Fan81]. Die Dokumentation mittels Elektronendiffraktometrie ist auflösungsbedingt nicht möglich. Für ölabgeschreckten und ausgelagerten (706 °C, 120 s) IN718 identifizieren Alam et al. keine Anzeichen in der Diffraktometrie für die γ' - und γ'' - Phase [ACRC10]. Die anschließend durchgeführte Atomsondenmessung zeigt jedoch die Bildung von Nb- reichen Clustern. Diese entsprechen dem Bildungsstadium der γ'' - Ausscheidungen. γ' relevante Ti- und Al- reiche Cluster sind weniger ausgeprägt. Aus den deutlich größeren Nb- Cluster wird geschlussfolgert, dass die Ausscheidung der γ'' - Phase zuerst erfolgt. Anhand von DTA- Versuchen ist eine Aussage über die Ausscheidungsreihenfolge

nicht möglich, da im Abkühlvorgang nur ein Peak zwischen 850 °C und 750 °C detektiert wird [NVL10]. Nach dem Aufheizen auf eine Auslagerungstemperatur zwischen 750 °C und 850 °C liegen beide Phasen aufgrund der hohen Ausscheidungskinetik vor [BBC89, Aza04, SSC97]. Oberhalb von 800 °C wird die höchste Wachstumsrate und eine abnehmende Partikelanzahl aufgrund der schnell einsetzenden Vergrößerung festgestellt. Schwer vermessbare Ausscheidungen werden bei 550 °C, 50 h, 600 °C, 24 h, 650 °C, 10 h, 680 °C, 4 h mittels Röntgenbeugung und Diffraktometrie im TEM festgestellt [SMB92, SSC97]. Das Ausscheidungsverhalten ist laut Cozar et al. zusätzlich vom (Ti+Al)/Nb Verhältnis abhängig, welches für $\text{IN718} < 0,8$ ist. Ist das Verhältnis $> 0,8$ dominiert γ' zunehmend die Phasenkinetik [CP73].

Das Wachstum der beiden Phasen kann grundlegend nach dem Ansatz von Lifshitz, Slyozov und Wagner mit Gleichung 2.2 beschrieben werden (Gleichung in der dargestellten Form nur gültig für ein vernachlässigbar kleines R_0) [LS61, Wag61, Fan81, FDC82, SMB92, DNM⁰⁸]. Die Triebkraft ist die Minimierung der Grenzflächen- und elastischen Verzerrungsenergie, welche zu einer Vergrößerung bzw. Ostwald- Reifung der Partikel führt.

$$\bar{R}_K - \bar{R}_0 = k_v \cdot t^{1/n_v} \quad (2.2)$$

\bar{R}_0 ist der mittlere Ausgangsradius und \bar{R}_K der mittlere Radius zur Zeit t . k_v ist die Vergrößerungskonstante, welche abhängig vom Diffusionskoeffizienten, der Temperatur und der Grenzflächenenergie ist [Fan81, FDC82, DNM⁰⁸]. n_v ist der Vergrößerungsexponent, welcher für grenzflächenkontrolliertes Wachstum ca. zwei und für diffusionskontrolliertes Wachstum ca. drei beträgt [Fan81]. Für nicht sphärische Partikel haben Nicholson et al. die Theorie erweitert [BN71]. Im fortschreitenden Auslagerungsprozess werden vereinzelt Sandwichstrukturen aus γ' und γ'' dokumentiert, deren Entstehungsprozess noch nicht vollständig verstanden ist [BM91, SMB92, MBB02, ACRC10, KBK¹⁵]. Als ein Erklärungsansatz wird das Zusammenwachsen der Partikel aufgrund geringer Teilchenabstände und überlagerter Diffusionsfeldern gesehen [DNS80]. Für Auslagerungstemperaturen von 700 °C bis 900 °C werden weiterhin an überalterten γ'' - Partikeln ab 100 nm Koaleszenzeffekte festgestellt, welche das Partikelwachstum zusätzlich beschleunigen [BB88, BBC89, HTFY95, SSC97, Fan81, Aza04]. Für sehr lange Auslagerungszeiten oberhalb 700 °C wird die thermodynamisch metastabile γ'' - Phase durch die δ - Phase ersetzt (siehe Kap. 2.3.4). Zusätzliche Verformung beschleunigt diese Phasentransformation signifikant [LXY^{97a}, LCX⁹⁹]. Eine Übersicht der publizierten Phasenkinetikdaten wird in einem TTT- Diagramm zusammen mit der δ - Phase in Abbildung C.2 dargestellt.

Erfolgt die Auslagerung von IN718 unter Zug- bzw. Druckspannung kann die Ausbildung einzelner γ'' - Orientierungsvarianten gesteuert werden [OPD74a, ZLZ¹⁴]. Ursächlich dafür ist die Wechselwirkung zwischen externem Spannungsfeld und der die Partikel umgebenden anisotropen Gitterverzerrung. Die Anwesenheit der unterschiedlichen Varianten hat wesentlichen

Einfluss auf die Streckgrenze [OPD74a, LCX⁺99, BBC89, MFC94].

2.3.4 Das Ausscheidungsverhalten der δ -Phase

Die δ -Phase ist die thermodynamisch stabile $\text{Ni}_3(\text{Nb},\text{Ti})$ Ausscheidung mit einer $\text{D}0_a$ Kristallstruktur. Die orthorhombische Einheitszelle besitzt in alle drei Raumrichtungen einen deutlich größeren Gitterparameter als die Matrix ($a_1^\delta = 0,5125 \text{ nm}$, $a_2^\delta = 0,4224 \text{ nm}$, $a_3^\delta = 0,4537 \text{ nm}$) (vgl. Anhang Tab. C.10), woraus eine hohe volumetrische Fehlpassung $\delta_V^\delta \approx 5\%$ resultiert. Aufgrund des unterschiedlichen Kristallstrukturtyps und der hohen Fehlpassung kann sich die Phase nur durch Kristallstrukturänderung und unter Bildung einer scharfen inkohärenten Grenzfläche bilden [SMB88b]. Dies bedingt eine heterogene Keimbildung der plattenförmigen Phase bevorzugt an Korn- und Zwillingsgrenzen [SMB88b, BBC89]. Die Ausscheidung im gestörten Gitterbereich der Korngrenze wird durch eine korngrenzenbezogene Nb-Segregation begünstigt [PDG⁺94, HFG75].

Oberhalb der γ'' -Solvustemperatur zwischen 900 °C und 950 °C ist die Phasenkinetik am schnellsten. Die δ -Phase kann nach wenigen Minuten beobachtet werden und wächst ausgehend von den Korngrenzen auf den Gleitsystemen der Matrix in das Korninnere [BC69, Cam86, SMB88b, BB88, BBC89, GZ92]. Das Ausscheidungsverhalten korreliert direkt mit der Korngröße, da die Korngrenzfläche die Anzahl der Keimbildungsorte bestimmt [BHC⁺04, Aza04]. Unterhalb der γ'' -Solvustemperatur wird die δ -Phasenkinetik signifikant trüger und die homogene Ausscheidung der metastabilen kohärenten γ'' -Phase dominiert. Verschiedene Autoren dokumentieren die Ausscheidung der δ -Phase an Korn- und inkohärenten Zwillingsgrenzen für folgende Auslagerungsstufen: 850 °C, ≤ 1 h; 800 °C, ≤ 2 h; 750 °C, ≤ 24 h; 700 °C, 100 h und 650 °C, 300 h [KW70, SMB88b, OBR91, Aza04, BHC⁺04]. Die δ -Phasenkinetik ist dabei sehr stark vom Lösungsglühgrad und dem Nb-Gehalt abhängig [BHC⁺04]. Der Nb-Gehalt beeinflusst den Gesamtphasenanteil und die Solvustemperatur, welche zwischen 960 °C bei 4,2 wt% und 1060 °C bei 6,0 wt% liegt (siehe Kap. 5.2.8). Mit der Phasenbildung entsteht ein ca. 100 nm breiter Saum um die δ -Phase, indem nur noch feine γ' -Partikel vorliegen [CP73, BB88, BBC89, BM91, GZ92]. Die γ'' -Partikel werden zugunsten der thermodynamisch stabileren Ni_3Nb -Phase aufgelöst.

Bei einer Langzeitauslagerung wird die Bildung der δ -Phase im Korn beobachtet. Einerseits wachsen δ -Nadeln von Korn- und Zwillingsgrenzen entlang der Gleitebenen ins Korn [KW70]. Andererseits ist eine Phasentransformation an Stapelfehlern in der γ'' -Phase sichtbar [KW70, SMB88b, SMB92, BB88, BBC89, RMWX02, GZ92]. Diese Stapelfehler werden vermehrt ab einer Größe von ca. 100 nm wahrgenommen und können sich aufgrund der geringen Stapelfehlerenergie und der hohen Gitterverzerrung in den γ'' -Partikeln selbst initiieren [SMB88b, SMB88a]. Die Stapelfolge der dichtest gepackten $\{112\}_{\gamma''}$ Ebene in der γ'' -Phase wird durch

die Stapelfehler von ABCDEFABCDEF... in ABCDEF**A**BCDEF... überführt [NHLV10]. Diese wenige Atomlagen dicke ABAB- Stapelfolge entspricht der D0_a δ - Phasen- Kristallstruktur, wodurch ein δ - Keim aus einer rein geometrischen Modifikation des γ'' - Gitters entsteht [KW70, SMB88b, NHLV10]. Die Initiierung von Stapelfehler und Phasentransformation wird durch plastische Deformation stark beschleunigt [LXY^{97a}, LCX⁹⁹]. Eine Übersicht der publizierten Phasenkinetikdaten wird in einem TTT- Diagramm in Abbildung C.2 dargestellt. Der über die Auslagerung ansteigende δ - Anteil hat einen negativen Einfluss auf Festigkeit, Bruchzähigkeit und Kriechfestigkeit [BB88, BBC89, GZ92, Aza04]. Ein positiver Effekt der δ - Phase ist die Verhinderung des Kornwachstums, sodass im Schmiedeprozess die Herstellung einer sehr feinen Korngröße möglich ist. Mit der Phasenauflösung oberhalb der δ - Solvustemperatur geht der korngrenzpendende Effekt sofort verloren [Aza04].

2.3.5 Die quasi-statische Festigkeit von Inconel 718

Die Streckgrenze von IN718 ist abhängig vom Herstellprozess und der durchgeführten Wärmebehandlung. Das Schmiede- und SLM- Material hat eine Streckgrenze > 1000 MPa, wohingegen für Gußmaterial der Wert darunter liegt [GZ92, Str15]. Der ausscheidungsunabhängige Streckgrenzanteil wird mit ca. 250-300 MPa angegeben [OPD74a, SMB88a]. Der zusätzliche Anteil durch Ausscheidungshärtung wird als Schubspannung mit ca. 250 MPa angegeben [CF83, OPD74a]. Dies entspricht bei einem Taylorfaktor von 3 einem Streckgrenzanteil von 750 MPa. Grundvoraussetzung für diese maximale Ausscheidungshärtung ist die chemische Homogenität und der optimale Ausscheidungszustand, woraus sich der Unterschied zwischen Guß- und Schmiedematerial erklärt. Der γ'' - Phase wird der wesentliche Härtungsbeitrag zugesprochen [OPD74a, CF83, SMB88a]. Als optimale Ausscheidungsgröße wird der γ'' - Durchmesser D_Z mit 20 nm bis 28 nm und der γ' - Radius R_K mit 6,5 nm bis 8 nm angegeben [CF89, OPD74a, SMB88a].

Der Wärmebehandlungseinfluss lässt sich anhand von Härtemessungen dokumentieren [SSC97, Aza04]. Im lösungsgeglühtem Zustand beträgt die Härte ca. 180 HV. Die Auslagerung bei Temperaturen ≤ 650 °C mit bis zu 100 h lässt die Härte auf 350 HV ansteigen. Die maximale Härte von ca. 466 HV wird bei unterschiedlichen Auslagerungszeiten im Temperaturbereich von > 650 °C bis ≤ 750 °C erreicht. Höhere Auslagerungstemperaturen verursachen einen schnellen Härteabfall, sodass die maximale Härte bei 800 °C nur noch 400 HV beträgt. Selbiges wird auch anhand von Zugversuchen deutlich [Fan81, FDC82, OPD74a, CF83, SSC97]. Diese zeigen, dass der Auslagerungs- und Überalterungsprozess einen Einfluss auf Verfestigungsverhalten und Bruchdehnung von IN718 haben [SMB88a].

Das Langzeitverhalten von IN718 zeigt bei Auslagerungs- bzw. Einsatztemperaturen < 600 °C keinen signifikanten Festigkeitsabfall der Streckgrenze [KT91, MPd00]. Bei 650 °C fällt die

Festigkeit nach den ersten 1000 h langsam ab [KT91, MPd00]. Bei 700 °C nehmen die Streckgrenze und Kerbschlagzähigkeit innerhalb der ersten 5000 h signifikant ab [MPd00]. Dieser Festigkeitsabfall ab 700 °C ist der Ausscheidungsvergrößerung, der Reduktion des γ'' - Phasenvolumenanteils und der Phasentransformation der γ'' - zur δ - Phase geschuldet. Daraus leitet sich die thermische Einsatzgrenze des Materials ab [KW70, SMB92, SSC97, MPd00, Aza04]. Die grundlegenden Festigkeitsbeiträge in einer ausscheidungsgehärteten Legierung werden im folgenden Kapitel beschrieben. Die publizierten Deformations- und Festigkeitsmechanismen der γ -, γ' - und γ'' - Phase im IN718 werden in den Kapiteln 2.4.5 bis 2.4.6 erläutert.

2.4 Theoretische Streckgrenzbeiträge

Die Träger der Verformung unter mechanischer Belastung eines Werkstoffes sind eindimensionale Gitterdefekte, sogenannte Versetzungen, auf definierten Gleitebenen im Kristallgitter. Für die Versetzungsbewegung ist eine Schubspannung auf der Gleitebene notwendig. Die maximal mögliche Hinderniswirkung gegen die Bewegung und Bildung von Versetzungen, also der Plastifizierung des Materials, stellt die kritische Schubspannung dar. Diese kann über den Textur- bzw. Schmidfaktor (M, m_S) in die makroskopisch messbare Streckgrenze umgerechnet werden (siehe Kap. 4.4). Die wesentlichen Anteile der Hinderniswirkung sind intrinsische Festigkeit, Mischkristallhärtung, Feinkornhärtung und Ausscheidungshärtung. Diese Härtungsmechanismen werden im Folgenden kurz beschrieben. Die Umsetzung in dem entwickelten Modell zur Berechnung der Streckgrenze von IN718 ist in Kapitel 4.3 dargestellt.

2.4.1 Die intrinsische Festigkeit

Die intrinsische Festigkeit (τ_{Int}) setzt sich aus einem thermisch aktivierbaren (τ_0) und athermischen (τ_V) Spannungsbeitrag zusammen, welche aus der Versetzungsbewegung im reinen Kristall resultieren. Im unverformten und unbelasteten Kristallgitter kann die initiale Versetzungsichte mit ca. 10^{10} m/m³ bis 10^{12} m/m³ abgeschätzt werden [Got07]. Die Versetzungen sind aufgrund der hervorgerufenen Gitterstörung von einem Spannungsfeld aus Zug- und Druckbereichen umgeben, wodurch Wechselwirkungskräfte zwischen Versetzungen und Fremdatomen hervorgerufen werden [Got07]. τ_0 ist zur Überwindung der Gitterreibung notwendig (vgl. Kap. 4.3.2, 5.6.1). Dieser Anteil ist in Metallen mit kfz-Kristallstruktur bei Raumtemperatur sehr gering [Som99, Got07]. τ_V entspricht ungefähr der gemessenen kritischen Schubspannung reiner Elemente und resultiert aus der Höhe der Versetzungsichte und der Versetzungswechselwirkung (vgl. Kap. 4.3.2, 5.6.1) [Got07]. Dabei wird zwischen der Wechselwirkung von primären Versetzungen (ρ_P), welche sich auf der gleichen oder parallelen Gleitebene befinden, und sekundären Versetzungen (Waldversetzungen, ρ_W), welche die Kristallebenen der Primären schnei-

den, unterschieden (vgl. Abb. 2.6a) [Got07, REH⁺10, LLA⁺10]. Zu Beginn des plastischen Fließens kann angenommen werden, dass die Versetzungsichte auf allen Gleitsystemen vergleichbar ist ($\rho_{ges} = \rho_P + \rho_W$) und die resultierende Schubspannung sich proportional zu $\sqrt{\rho_{ges}}$ verhält [SB99, Got07, LLA⁺10].

2.4.2 Die Mischkristallhärtung

Die Mischkristallhärtung (τ_{SS}) ist eine Methode der Streckgrenzenerhöhung durch das Zulegieren von löslichen Fremdatomen, wodurch die kritische Schubspannung zur Versetzungsbewegung steigt (siehe Abb. 2.6b). Es wird zwischen parelastischen, dielastischen und chemischen

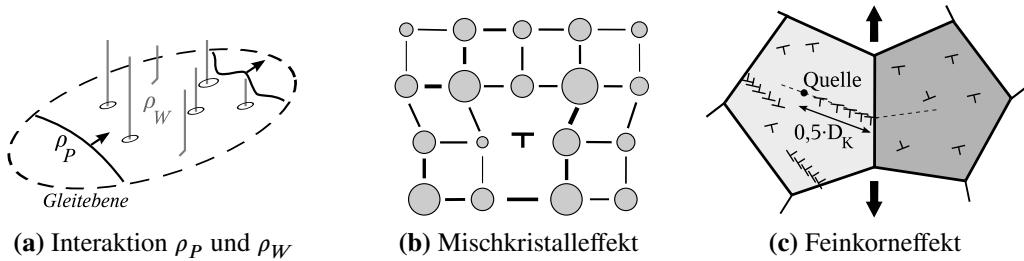


Abbildung 2.6: Schematische Wirkprinzipien der Härtungseffekte der Grundfestigkeit aus (a) Versetzungswechselwirkung, (b) Mischkristall- und (c) Feinkornhärtung

Effekten der Festigkeitssteigerung unterschieden.

Parelastische Wechselwirkungen (Gitterparametereffekt) werden durch unterschiedlich große Atomradien der Fremdatome hervorgerufen, welche Zug- oder Druckspannungen induzieren und somit Energiesenken oder -berge für die Versetzungen darstellen.

Dielastische Wechselwirkungen (Schubmoduleffekt) basieren auf einem unterschiedlichen Schubmodul von Fremdatom und Basiselement. Die Versetzungslinienenergie wird lokal reduziert oder erhöht. Dies hemmt die Versetzungsbewegung.

Bei dem chemischen Wechselwirkungsmechanismus (Suzukieffekt) wird lokal die notwendige Energie zur Bildung eines Stapelfehlers verändert. Fremdatome reduzieren in der Regel die Stapelfehlerenergie der Matrix, wodurch Stapelfehler entstehen können bzw. sich die Stapelfehlerbreite verändert.

Aus physikalischen Ansätzen zur Beschreibung der drei Effekte geht hervor, dass τ_{SS} proportional zur Wurzel der Elementkonzentration $\sqrt{c_i}$ steigt [Got07]. Für Multikomponentenlegierungen bieten sich aufgrund der hohen Komplexität der physikalischen Modelle einfache phänomenologische Ansätze an [GD77a, GD77b]. Die hierfür notwendigen Härtungskonstanten fassen die drei Effekte zusammen und werden experimentell an binären und ternären Legierungssystemen ermittelt (siehe Kap. 4.3.3).

2.4.3 Die Feinkornhärtung

In einem polikristallinen Material ist die Schubspannung in den einzelnen Körnern aufgrund deren Orientierung zur Belastungsrichtung unterschiedlich hoch. Die Versetzungsbewegung erfolgt zuerst in den Körnern, in denen die Gleitsysteme optimal zur Belastungsrichtung ausgerichtet sind (siehe Kap. 4.4). In der Versetzungsbewegung stellt die Korngrenze ein Hindernis dar, da das Gleitsystem im Nachbarkorn zum Ausgangssystem nicht kongruent ist. Dies erzeugt einen Versetzungsaufstau im Ausgangskorn (siehe Abb. 2.6c). Die Versetzungen stoßen sich aufgrund der sie umgebenden Spannungsfelder gegenseitig ab, wobei deren Abstand von der äußeren Spannung und den abstoßenden Kräften abhängt. Mit zunehmender Aufstaulänge steigen die abstoßenden Kräfte an, der Abstand der Versetzungen wird größer und die Entfernung zur Korngrenze nimmt zu. Die maximale Aufstaulänge ist auf den halben Korndurchmesser ($D_K/2$) begrenzt. Aus diesem Versetzungsaufstau leitet sich der phänomenologische Hall-Petch-Ansatz der Feinkornhärtung ab, welcher für viele Werkstoffe experimentell bestätigt ist (siehe Kap. 4.3.4) [Hal51, Pet53, SB99, Got07]. Der erzielte korngrößenabhängige Härtungseffekt τ_{HP} ist proportional zu $1/\sqrt{D_K}$ (siehe Kap. 5.6.3).

2.4.4 Die Ausscheidungshärtung

Ein effektives Mittel der Festigkeitssteigerung ist die Ausscheidungshärtung. Diese geht aus der Interaktion zwischen Ausscheidung und Versetzung hervor. Wirkt eine äußere Kraft auf das Material, wird die Versetzung zwischen den Ausscheidungen aufgrund deren Widerstandskraft gegen die Versetzungsbewegung gekrümmmt. Die maximale Widerstandskraft der Partikel (F_c) korreliert mit der Versetzungslinienspannung (Ω) und dem kritischen Krümmungswinkel der Versetzung (χ_c) beziehungsweise der kritischen Schubspannung (τ_{ges}) und dem Partikelabstand (L_{cc}) nach Gleichung 2.3 [Ard85, APKO⁺14]:

$$F_c = 2\Omega \cdot \cos(\chi_c/2) = \tau b L_{cc}. \quad (2.3)$$

b ist der Burgervektor der Versetzung. Die Ausscheidungshärtung wird anhand von χ_c in ein schwaches ($180^\circ - 100^\circ$) und starkes ($< 100^\circ$) Interaktionsregime zwischen Partikel und Versetzung unterteilt (siehe Abb. 2.7a) [KN71, Ard85, APKO⁺14]. Für $\chi_c \approx 0^\circ$ werden die Partikel nicht mehr geschnitten sondern über den Orowanmechanismus umgangen. Die notwendige Schneidspannung für das schwache Regime wird nach Gleichung 2.4 berechnet [KN71, Ard85, APKO⁺14].

$$\tau_{j,w} = \frac{2\Omega}{b L_{cc}} \left[\frac{F_c}{2\Omega} \right]^{3/2} \quad (2.4)$$

Für das starke Regime und den Orowanmechanismus reduziert sich der Ansatz auf [KN71, Ard85, APKO⁺14]:

$$\tau_{j,s} = \frac{J F_c}{b L_{cc}}. \quad (2.5)$$

Eine Herleitung der Ansätze ist in den Referenzen [KN71, Ard85, APKO⁺14] dargelegt. Der Härtungseffekt dieser drei Regime ist in Abhängigkeit vom Ausscheidungszustand unterschiedlich groß, wobei immer der Effekt mit dem geringsten Härtungsbeitrag aktiv ist. J ist ein Korrekturfaktor, welcher den Einfluss von zufällig angeordneten Partikeln auf die Versetzungslinienfront im jeweiligen Regime berücksichtigt. Die Widerstandskraft ist im schwachen Regime gering und die Versetzung bewegt sich nahezu eben durch das Partikelfeld ($J = 1$) (siehe Abb. 2.7b). Im starken Regime und für den Orowanmechanismus ist die Widerstandskraft hoch und die Versetzungsfront baucht in schwächeren Bereichen stark aus. Dieses veränderte Versetzungs-

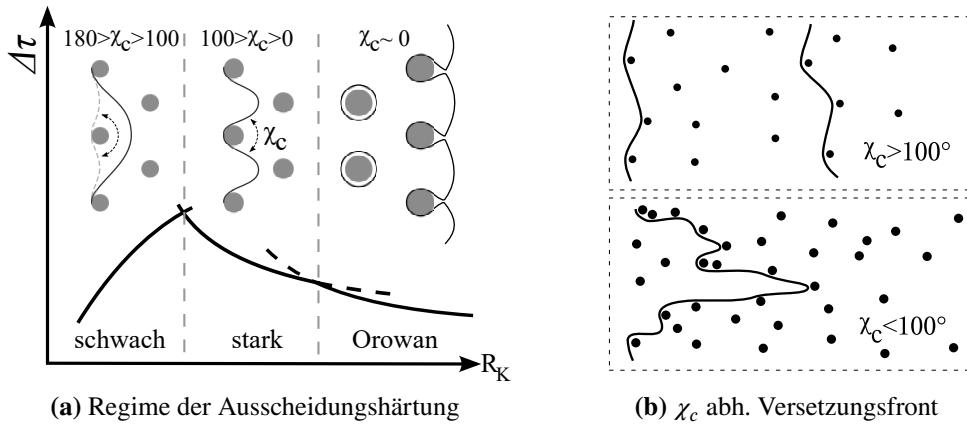


Abbildung 2.7: (a) Regime der Ausscheidungshärtung resultierend aus Interaktion zw. Partikel und Versetzung, (b) vereinfachte Versetzungsfront abh. von χ_c nach [FM66, Ard85]

verhalten haben Foreman und Makin in numerischen Studien untersucht und $J \approx 0,8$ abgeleitet. Vergleichbare Ergebnisse erzielen aktuelle Phasenfeldstudien [FM66, LWN15].

Die Widerstandskraft (F_c) der Ausscheidung gegen das Schneiden kann über drei Effekte beschrieben werden: Kohärenz-, Phasenchemie- und Schubmoduleffekt.

Der **Kohärenzeffekt** basiert auf der Interaktion von Spannungsfeldern, welche die Ausscheidung und Versetzung umgeben. Die Interaktionskraft ist vom Versetzungstyp (Stufe, Schraube), der Partikelgröße und dem Abstand der Versetzung vom Partikelzentrum abhängig [KN71, OPD74b, Got07, APKO⁺14, APKS⁺14]. Diese Abhängigkeit resultiert aus den unterschiedlichen Spannungsfeldern um eine Schrauben- bzw. Stufenversetzung sowie einer gewissen Reichweite der vom Partikel hervorgerufenen Gitterverzerrung. Die Widerstandskraft gegen die Versetzungsbewegung existiert ohne direkten Kontakt zwischen Ausscheidung und Versetzung und steigt mit abnehmendem Abstand zum Partikelzentrum. Die Maximalkraft wird für den jeweiligen Versetzungstyp in einem unterschiedlichen Abstand vom Partikelzentrum erreicht und ist

für die Stufenversetzung deutlich höher [OPD74b, APKS⁺14].

Der **Phasenchemieeffekt** resultiert aus der Umstrukturierung von Atombindungen und Stapelfolgen in der Ausscheidung und der Phasengrenzfläche durch das Eindringen von Versetzungen. Er wird in drei Effekte unterteilt.

Der *Antiphasengrenzeffekt* ist für geordnete Phasen mit Übergitterstruktur zur Matrix relevant. Dringt in solch eine geordnete Phase eine Versetzung ein, wird deren Kristallstruktur gestört und eine hochenergetische Anti-Phasen-Grenze (APG) erzeugt. In diesem Schneidvorgang muss eine Anti-Phasen-Grenz-Energie (γ_{APG}) aufgewendet werden, welche im Kristallgitter richtungsabhängig ist. Die Breite der APG stellt einen Gleichgewichtszustand aus den Wechselwirkungskräften zwischen Versetzungen, der Partikelgröße, dem Partikelabstand, der anliegenden Spannung auf dem Gleitsystem und der notwendigen γ_{APG} dar (siehe Abb. 2.8a).

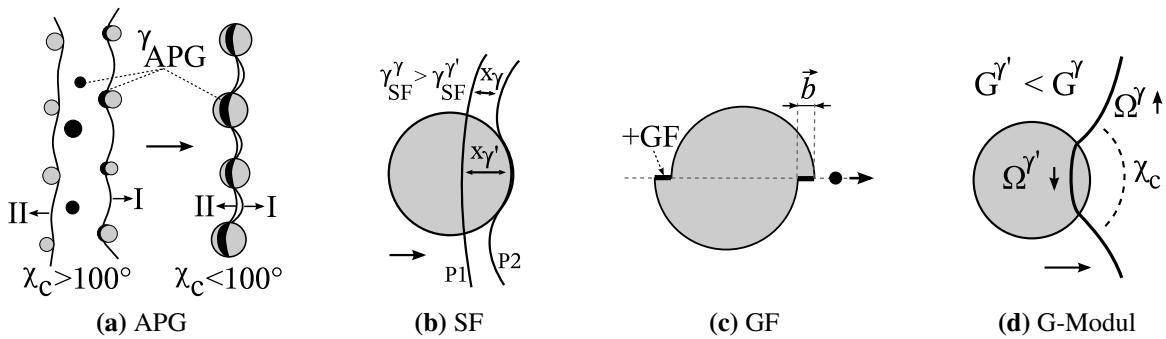


Abbildung 2.8: Mechanismen der Ausscheidungshärtung: (a) Antiphasengrenz- (APG), (b) Stapelfehler- (SF), (c) Grenzflächen- (GF), (d) G-Modul- Effekt nach [APKO⁺14]

Für das Wiederherstellen der geordneten Gitterstruktur, dem Schließen der APG, können je nach Gitterstruktur mehrere Versetzungen notwendig sein um die γ_{APG} wieder abzubauen (vgl. Kap. 2.4.5 und 2.4.6). Detailliertere Ausführungen sind bei Ardell oder Ahmadi et al. zu finden [Ard85, APKO⁺14].

Der *Stapelfehlereffekt* resultiert aus der möglichen Energieminimierung von Versetzungen durch Aufspaltung in Partialversetzungen. Diese Aufspaltung erzeugt einen Stapelfehler unter Aufwendung von Stapelfehlerenergie (SFE) (γ_{SF}^j), welche in der jeweiligen Phase unterschiedlich groß sein kann (siehe Abb. 2.8b). Die Aufspaltungsweite wird von der SFE in der Matrix und der Ausscheidungsphase kontrolliert. Die Widerstandskraft gegen die Versetzungsbewegung ergibt sich aus der Differenz der Stapelfehlerenergie, der unterschiedlichen Aufspaltungsweite in den Phasen und der dadurch erzeugten Reaktionskraft zwischen den Partialversetzungen [HK65, GH68].

Der *Grenzflächeneffekt* basiert auf der Zunahme der Grenzfläche zwischen Ausscheidung und Matrix. Schneidet eine Versetzung die Ausscheidung vergrößert sich die Grenzfläche um jeweils einen Translationsvektor b beim Ein- und Austritt. Die dafür notwendige Energie korreliert mit

der Grenzflächenenergie und resultiert in einer Widerstandskraft gegen die Versetzungsbewegung (siehe Abb. 2.8c) [Ard85].

Der **Schubmoduleffekt** ergibt sich aus unterschiedlichen elastischen Eigenschaften der Matrix- und der Ausscheidungsphase. In der Phase mit dem höheren Schubmodul ist eine höhere Schubspannung zur Bewegung der Versetzung aufgrund der höheren Versetzungslinienenergie notwendig (vgl. Kap. 4.1.5). Aus der Schubmoduldifferenz beider Phasen wird die Widerstandskraft gegen die Versetzungsbewegung abgeleitet (siehe Abb. 2.8d).

2.4.5 Die festigkeitssteigernden Effekte der γ' -Phase

Die $L1_2$ Struktur der geordneten γ' -Phase besitzt die gleiche dichtest gepackten $\{111\}$ Ebenen wie die γ -Phase mit einer Stapelfolge ABCABC... Für den Erhalt des Ordnungsgrades der γ' -Phase ist im Vergleich zur ungeordneten γ -Phase aber ein doppelt so großer Translationsvektor $a\langle 110 \rangle$ der Versetzung notwendig (siehe Abb. 2.9b). Diese sogenannte $a\langle 110 \rangle$ Superversetzung kann in zwei $a/2\langle 110 \rangle$ Superpartialversetzungen zerlegt werden. Folglich kann ein Versetzungspaar aus $a/2\langle 110 \rangle$ der γ -Matrix die γ' -Phase schneiden. Beim Eindringen der ersten Superpartialversetzung in die γ' -Phase wird eine Antiphasengrenze (APG) unter Aufwendung von Antiphasengrenzenergie (γ_{APG}^j) erzeugt, welche durch die zweite folgende Superpartialversetzung wieder geschlossen wird. Über diesen Mechanismus steuert die Ausscheidungsphase das Bewegungsverhalten von Versetzungspaaaren in der γ -Phase und erzeugt einen ausscheidungshärtenden Effekt. Die einzelnen Superpartialversetzungen können sich wie in der Matrix

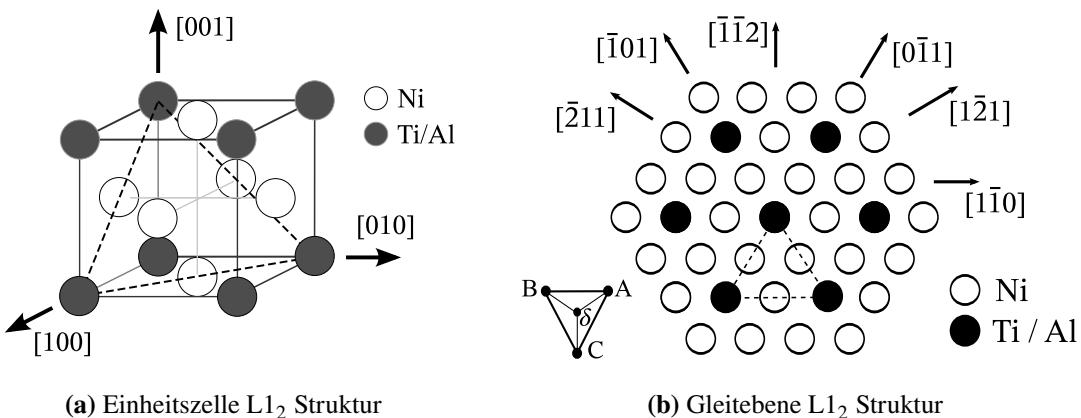


Abbildung 2.9: (a) Einheitszelle und (b) Gleitebene der $L1_2$ Struktur der γ' -Phase nach [Ree06]

in zwei Shockley-Partialversetzungen $a/6\langle 211 \rangle\{111\}$ unter Bildung eines komplexen Stapelfehlers (CSF) aufspalten. Diese Dissoziation stört ebenfalls die Ordnung nächster Nachbarn und sieht wie folgt aus [NN85, RS94, Ree06, WS14]:

$$a\langle 110 \rangle \rightarrow \frac{a}{6}\langle 211 \rangle + CSF + \frac{a}{6}\langle 121 \rangle + APG + \frac{a}{6}\langle 211 \rangle + CSF + \frac{a}{6}\langle 121 \rangle. \quad (2.6)$$

Weiterhin wird noch zwischen intrinsischem (ISF) und extrinsischem (ESF) Stapelfehler unterschieden, welche die Ordnung nächster Nachbarn nicht stören und die aufzubringende Stapelfehlerenergie (γ_{SF}^j) gering ist [RS94, Ree06].

Die notwendigen Energien zur Erzeugung von APG, CSF, ISF und ESF können näherungsweise aus Versetzungskonfigurationen im TEM [Vey92], mittels CALPHAD-Ansatz [CMW¹⁴], Dichte-Funktional-Theorien (DFT) [WS14] sowie über Ab initio Berechnungen [RS94] ermittelt werden. Typische Größenordnungen der Energien sind für die APG $0,15 - 0,25 \text{ J/m}^2$, für den CSF $0,2 - 0,25 \text{ J/m}^2$ und für den ISF sowie ESF $0,01 - 0,07 \text{ J/m}^2$ (siehe Kap. 5.2.7). Die weiteren Beiträge zur Ausscheidungshärtung (Grenzflächen-, Schubmodul- und Kohärenzeffekt) werden aufgrund ihres vergleichsweise geringen Einflusses kaum für diese Ausscheidungsphase in der Literatur diskutiert [Ard85, Ree06, APKW¹⁴]. Berechnungen von Ahmadi et al. zeigen am γ' gehärteten ATI 718Plus[®], dass der Kohärenzeffekt trotz des geringen Misfits noch einen geringen Einfluss hat [APKW¹⁴]. Der Grenzflächeneffekt mit einer berechneten Zusammensetzungs- und temperaturabhängigen Grenzflächenenergie von $0,16 \text{ J/m}^2$ sowie der Schubmoduleneffekt sind vernachlässigbar. Ab einem γ' -Partikeldurchmesser von 30 nm bis 40 nm wird der Übergang zum Orowanmechanismus im IN718 und ATI 718Plus[®] beobachtet [SMB88a, APKW¹⁴].

2.4.6 Die festigkeitssteigernden Effekte der γ'' -Phase

Die $D0_{22}$ Einheitszelle der geordneten γ'' -Phase ist eine Untergruppe der kfz-Gitterstruktur. Sie kann entlang der $<100>$ Würfelachsen aus zwei $L1_2$ Strukturen mit einer dazwischen liegenden APG zusammengesetzt werden (siehe Abb. 2.10a) [VE73]. Die dichtest gepackte Ebene ist die $\{111\}_\gamma$ Ebene, welche in Abbildung 2.10b dargestellt ist. (In dieser Arbeit erfolgt die Notation immer bezogen auf die γ -Phase.) Die Stapelsequenz der Phase setzt sich aus sechs $\{111\}$ Ebenen zu einer $ABCDEF A' B' C' \dots$ Stapelfolge zusammen. Aufgrund dieser geordneten Gitterstruktur bestehen in der $D0_{22}$ nicht die gleichen Rotationssymmetrien wie in der γ - und γ' -Gitterstruktur und einzelne kristallografische Richtungen müssen unterschieden werden.

In der $D0_{22}$ Gitterstruktur sind eine Vielzahl an theoretisch möglichen Burgersvektoren von Versetzungskonfigurationen möglich. Diese können die γ'' -Phase passieren, ohne eine APG oder einen SF zu erzeugen. Mögliche Konfigurationen sind nach Sundararaman et al. in Tabelle 2.4 im Bezug zur Abbildung 2.10 aufgelistet [SMB88a]. Konfigurationen aus 12 Versetzungen sind aufgrund der großen Anzahl an Burgersvektoren unwahrscheinlich und experimentell nicht nachgewiesen. Alle übrigen Konfigurationen sind für die $D0_{22}$ -Struktur dokumentiert.

Ein Versetzungsvierling mit dem Gesamtburgersvektor aus 4 BC bzw. 4 CA Versetzungen kann die γ'' -Phase schneiden. Hierbei erzeugt die erste BC bzw. CA Versetzung eine APG, welche erst nach dem Passieren von drei weiteren BC oder CA Versetzungen wieder geschlossen wird.

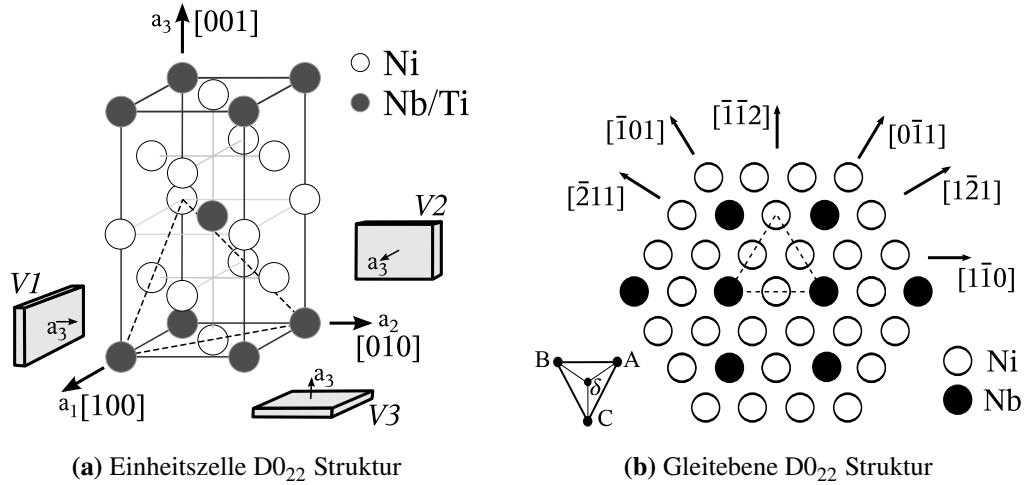


Abbildung 2.10: (a) Einheitszelle mit den drei Orientierungsvarianten (V1-V3) und (b) Gleitebene der D0₂₂ Struktur der γ'' -Phase nach [SMB88a]

Diese Konfiguration wurde von Moreen et al. in der Ni₃V-Phase festgestellt [MPT71]. Oblak et

Tabelle 2.4: theoretische Versetzungskonfigurationen und Aufspaltungen in der γ'' -Phase ohne Zurückbleiben von APG oder SF nach [SMB88a] (vgl. Abb. 2.10b)

Thompson Notation	Burgersvektor	mögl. Aufspaltung
2 AB	2 a/2 [110]	$AB \rightarrow A\delta + \delta B$
3 C δ	3 a/6 [112]	/
4 BC	4 a/2 [101]	$BC \rightarrow B\delta + \delta C$
4 AC	4 a/2 [011]	$CA \rightarrow C\delta + \delta A$
12 B δ ; 12 A δ	12 a/6 [211]; 12 a/2 [121]	/

al. konnte in IN718 die BC bzw. AC Vierlinge nur bei kurzen Auslagerungszeiten detektieren [OPD74a]. Für längere Auslagerungszeiten war die Identifikation der Vierlinge aufgrund der hohen Gitterverzerrung um die γ'' -Partikel nicht möglich.

Der kürzeste Translationsvektor in der γ'' -Phase ergibt sich für 3 C δ oder 2 AB Versetzungen. Beim Schneiden eines C δ Versetzungstripels erzeugen die ersten beiden C δ -Versetzung niedrigenergetische Stapelfehler, welche durch die letzte C δ -Versetzung abgebaut werden. Anhaltspunkte für diesen Verformungsmodus sind in der D0₂₂ Struktur der Ni₃V-Phase dokumentiert [RG70, KW70, VE78]. Für IN718 liegt kein expliziter Nachweis eines Versetzungstripels vor. Die γ - und γ' -Phase können ebenfalls von C δ -Versetzen in Form einer Shockley Partialversetzung geschnitten werden, deren Detektion aufgrund der geringen Aufspaltungsweite erschwert ist. Weiterhin werden zwei Mechanismen in IN718 mit der C δ -Versetzung verknüpft. Passiert die C δ -Versetzung jede {111} Ebene der γ'' -Partikel, entsteht ein mechanischer Zwilling [SMB88a]. Schneidet die C δ Versetzung die γ'' -Partikel auf jeder zweiten {111} Ebene, wird lokal die γ'' -Stapelfolge in die δ -Stapelfolge überführt. Letzterer Mechanismus wird in IN718 bei langen Auslagerungszeiten für die Bildung der δ -Phase im Korn verantwortlich ge-

macht [KW70, SMB88b, SMB88a, BBC89, LCX⁺99, NHLV10].

Versetzungspaare der AB- Konfiguration erzeugen in der γ'' - Phase eine APG, können sich ebenfalls in der γ - und γ' - Phase bewegen, und wurden in IN718 festgestellt [KW70, OPD74a, CF83, SMB88a].

Für diese vielfältigen theoretisch möglichen Partikel- Versetzungsinteraktionen ist ein weiterer Aspekt von Bedeutung: Aufgrund der möglichen Ausrichtungen entlang der Würfelachsen der γ - Einheitszelle und dem deutlich höheren Misfit entlang der Hochachse existieren drei mögliche Orientierungsvarianten der γ'' - Phase (V1 - V3 in Abb. 2.10a) [OPD74a]. Hieraus folgt, dass ein Versetzungspaar nur eine der drei Orientierungsvarianten in einer der drei möglichen Gleitrichtungen schneiden kann. In den beiden anderen Varianten ist in der gleichen Gleitrichtung ein Versetzungsvierling zum Herstellen der Kristallordnung notwendig, da der AB- Typ jetzt ein BC- bzw. AC- Typ ist. Lediglich Versetzungsvierlinge können in der entsprechenden Gleitrichtung alle drei räumlichen Varianten der γ'' - Partikel schneiden. Modellansätze zur Berechnung des APG- Effekts, welcher zwischen Versetzungspaar und -vierling und der Anwesenheit der γ'' - Orientierungsvarianten unterscheidet, wurden von Oblak et al. entwickelt [OPD74b].

Für die einzelnen Versetzungstypen AB, BC oder CA ergeben sich nach Sundararaman et al. unterschiedlich mögliche Aufspaltungen in Partialversetzungen (vgl. Tab. 2.4) [SMB88a]. Ein weiteres Aufspalten der AB- Versetzung erzeugt wie in der γ' - Phase zwischen den Segmenten $A\delta$ und δB einen hochenergetischen SF. Eine weitere Aufspaltung der BC- bzw. AC- Versetzung resultiert in einem niedrigenergetischen SF der $C\delta$ und einem hochenergetischen SF der δB bzw. δA . Die $C\delta$ kann die γ'' - Partikel aufgrund der geringen SFE passieren. Der δB - bzw. δA - Anteil wird an der Phasengrenzfläche aufgrund der höheren Energiebarriere festgehalten [SMB88a]. Das $C\delta$ - Segment und der dazugehörige SF konnten experimentell im TEM nachgewiesen werden [NHLV10]. Das in den beiden letzteren Partialversetzungen beteiligte $C\delta$ - Segment kann, wie schon für das $C\delta$ - Tripel beschrieben, auch die Zwillingsstruktur bzw. δ - Stapelfolge im γ'' - Partikel erzeugen.

Die Bestimmung der notwendigen Energien zur Erzeugung von APG und SF wird durch die Abhängigkeit von Kristallgitterrichtung und Phasenchemie erschwert. Dadurch sind kaum Daten für die Berechnung des Härtungsmechanismus verfügbar. Die für die Berechnung verwendeten publizierten Energien nach [OPD74a, SMB88a, FHV92, KVP92, RS94] sind in Kapitel 5.2.7 zusammengefasst.

Für die Berechnung des Kohärenzeffektes müssen die aufgrund des Gitterparameters hervorgerufene anisotrope Gitterverzerrung, die nicht sphärische Morphologie und die Abhängigkeit von den γ'' - Orientierungsvarianten berücksichtigt werden. Untersuchungen an der γ'' - Phase dokumentieren die Abhängigkeit der Gitterparameter und der Gitterverzerrung von der Ausscheidungsgröße [OPD74a, CF83, SMB92, SSC97]. Die größte Spreizung der Gitterverzerrung

wird von Sundararaman et al. ermittelt. Für kleine Partikel wird ein Wert von 1,12 % gemessen, welcher für deutlich größere Partikel auf 2,82 % ansteigt [SMB92]. Ein Modellansatz zur Berechnung des Kohärenzeffektes für nicht sphärische Ausscheidungen wurde von Oblak et al. entwickelt und für IN718 angewendet [OPD74b, OPD74a].

Die in der Literatur vorhandenen Modelle zur Beschreibung der Härtungsmechanismen eines Versetzungspaares, eines Versetzungsvierlings und des Kohärenzeffektes werden jeweils separat und ohne die Berücksichtigung des Grenzflächen- und Schubmoduleffektes angewendet und mit experimentellen Daten für IN718 verglichen [OPD74a, CF83, SMB92]. Die Untersuchungen sprechen dem Kohärenzeffekt oder dem APG- Effekt durch ein Versetzungspaar die maximale Ausscheidungshärtung zu. Eine Kopplung aller ausscheidungshärtenden Mechanismen unter Berücksichtigung der kristallografischen Effekte und der einzelnen γ'' - Orientierungsvarianten, welche zwischen schwacher und starker Partikel- Versetzungsinteraktion unterscheiden, ist nicht existent.

Ausgehend von den beschriebenen Werkstoff- und Festigkeitsgrundlagen werden folgende wesentliche Anforderungen an die zu entwickelnde Simulation deutlich. Die thermodynamische und thermokinetische Werkstoffsimulation muss das Zusammenspiel der entscheidenden drei Ausscheidungsphasen γ' -, γ'' - und δ -Phase im werkstoffrelevanten Temperatur und Zeitbereich des metastabilen Werkstoffsystems IN718 abbilden. Aufgrund der hohen Relevanz der Ausscheidungsphasen für die Festigkeit von IN718 wird von einer hohen Anforderung an die Abbildungsgenauigkeit ausgegangen. Die Festigkeitsberechnung selbst muss die Daten der Thermo-kinetikrechnung verarbeiten können, die einzelnen Härtungseffekte aufschlüsseln und geeignet zusammenfassen. Besonderes Augenmerk liegt auf der Ausscheidungshärtung. Eine gezielte Modellerweiterung soll beide Ausscheidungsphasen, alle Härtungsmechanismen und die phasenspezifische Partikel- Versetzungswirkungen berücksichtigen. Über die im Folgenden beschriebenen Methoden sollen die einzelnen Ausscheidungszustände und Streckgrenzbeiträge aufgeschlüsselt und besser analysierbar gemacht werden. Hierzu werden neben dem IN718-SLM Material auch ein einkristalliner ausscheidungsfreier IN718-Matrix Sonderabguss sowie ein einkristalliner IN718 Guss untersucht.

3. Simulations- und Validierungskonzept

Das Ziel der Arbeit ist eine durchgängige Beschreibung des Werkstoffes für den Herstellprozess ausgehend von der Legierungschemie bis hin zur Vorhersage der Streckgrenze. Hierzu zeigt Abbildung 3.1 eine vereinfachte schematische Skizze des geplanten Aufbaus der Simulationskette. Im ersten Schritt sind die Eingabe der Legierungschemie und der Temperaturbedingungen des Herstellverfahrens notwendig. Die Legierungschemie wird vom Materiallieferant angegeben. Die SLM-Schweißparameter zur Probenfertigung werden basierend auf den Ergebnissen der Strahlschmelzsimulation experimentell ermittelt. Die Simulation liefert darüber hinaus Temperaturfelddaten für die Analyse der Erstarrungsstrukturen und Phasenkinetik im SLM-Prozess. Für das vergleichend untersuchte Gussmaterial werden Messdaten vom Projektpartner bereit gestellt.

Die Werkstoffsimulation beschreibt basierend auf der Werkstoffchemie die Erstarrung, Thermodynamik und Thermokinetik im Material für den gesamten Temperatur-Zeit-Zyklus. Im Erstarrungsprozess wird die Elementsegregation und Phasenbildung basierend auf der Scheil-Gulliver-Methode abgeschätzt. Die dendritische Erstarrungsstruktur wird analytisch für die unterschiedlichen Fertigungsprozesse betrachtet. Ein möglicher Abbau der Segregation wird mittels 1D-Diffusionsrechnungen untersucht. Die Thermodynamik der temperatur- und chemieab-

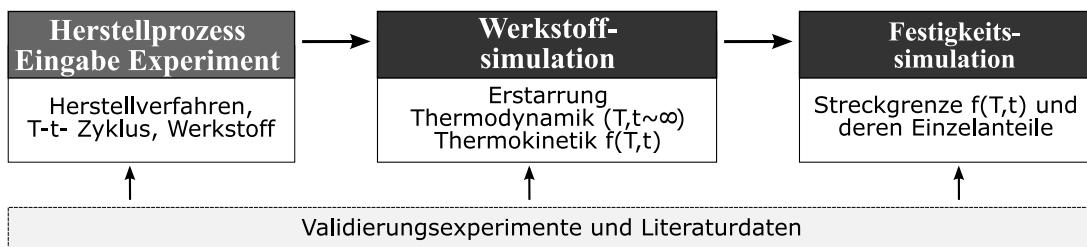


Abbildung 3.1: Konzeptschema der Simulationskette

hängigen Phasenstabilität und Phasenanteile sowie die Thermokinetik der temperatur- und zeit-abhängigen Ausscheidungshistorie werden mit der Software MatCalc[©] berechnet. Die Programmierung, die notwendigen Eingabegrößen und die verwendeten Datenbanken werden speziell für die untersuchte Legierung IN718 validiert.

Die Festigkeitssimulation beschreibt die Streckgrenze und deren zugrundeliegende Festigkeiteffekte für den durchlaufenen Temperatur-Zeit-Zyklus basierend auf den berechneten Daten der Thermokinetiksimulation. Die Thermokinetikergebnisse werden hierzu in ASCII-Dateien bereitgestellt. Die Modellgleichungen für die einzelnen Härtungseffekte werden speziell für die Legierung IN718 weiterentwickelt, miteinander gekoppelt und an die Ergebnisgrößen der Werkstoffsimulation angebunden. Grundlage bilden allgemein publizierte Modellansätze. Die programmiertechnische Umsetzung erfolgt in Matlab. Unter Berücksichtigung der Materialtextur,

welche experimentell ermittelt wird, wird aus der berechneten Schubspannung die theoretisch erreichbare Streckgrenze abgeleitet. Die direkte Kopplung beider Simulationen ermöglicht die Analyse der Abhängigkeiten, Sensitivitäten und Optimierungspotenzials entlang des Herstellprozesses.

Der detaillierte Aufbau der Simulationskette, die für jeden Schritt benötigten Ein- und Ausgaben sowie die Kopplung der einzelnen Schritte ist Ergebnis der Dissertation. In Kapitel 4 werden die verwendeten Modelle und Gleichungen beschrieben. In Kapitel 5 sind die mit den gewählten Simulationsansätzen erreichten Ergebnisse im Vergleich zu den Validierungsdaten dargestellt. Kapitel 6 enthält die Diskussion der Ergebnisse und Modelle.

Für die Modellvalidierung werden im Rahmen der Dissertation Proben aus zwei Gusslegierungen und additiv gefertigtem Material untersucht. Ziel ist es, die einzelnen Festigkeitseffekte im Zugversuch bei Raumtemperatur aufschlüsseln zu können. Das Gussmaterial wird von externen Partnern einkristallin hergestellt. Anhand der ausscheidungsfreien einkristallinen IN718-Matrix-Legierung (IN718-Matrix-SX) wird der Effekt der Mischkristallhärtung untersucht. Die Kombination aus Ausscheidungs- und Mischkristallhärtung wird anhand der einkristallinen Gussproben aus IN718 (IN718-SX) analysiert. Neben der Mischkristall- und Ausscheidungshärtung werden die Feinkornhärtung und der Textureinfluss am additiv gefertigten Material (IN718-SLM) untersucht. Hierbei wird die Textur gezielt über zwei Fertigungsparameter eingestellt. Die Ausscheidungshärtung wird an insgesamt acht unterschiedlichen Auslagerungsstufen anhand des IN718-SX und IN718-SLM bewertet. Hierzu wird die Wärmebehandlung ausgehend von der berechneten Zu- und Abnahme der γ'' -größenabhängigen Härtungseffekte durchgeführt und die gemessenen Partikelgrößen sowie Streckgrenzen mit den berechneten Ergebnissen verglichen. Die geringe Porosität des Versuchsmaterials wird anhand von ungeätzten Schliffen dokumentiert. Der Erstarrungszustand und der Effekt der Homogenisierung werden für alle drei Materialien anhand von geätzten Schliffen belegt. Der Ausscheidungszustand wird an fünf geätzten Schliffen im Feldemissions-REM dokumentiert. An allen Zugproben werden EBSD-Messungen im Rasterelektronenmikroskop zur Bestimmung der kristallografischen Orientierung bzw. Textur des Probenmaterials durchgeführt. Hierdurch ist eine probenspezifische Umrechnung zwischen der berechneten Schubspannung und der gemessenen Streckgrenze möglich.

Ergänzend zu den durchgeführten Experimenten werden eine Vielzahl an Literaturdaten zur Bewertung der Segregation, Phasenchemien, Gitterparameter, Gitterenergien, Ausscheidungszustände und wärmebehandlungsabhängigen Härte sowie Streckgrenze verwendet. Anhand dieser Daten werden die Datenbanken der Werkstoffsimulation und alle für die Simulationskette benötigten Eingangsgrößen sowie die temperatur- und zeitabhängige Phasenkinetik und Festigkeit in einem umfassenden Parameterraum bewertet.

4. Simulationsmodell

4.1 Auswahl der Berechnungsmodelle der Eingangsgrößen

4.1.1 Gitterparameter der Phasen

Der phasenspezifische Gitterparameter bestimmt das molare Volumen sowie die Fehlpassung und Gitterverzerrung zwischen Matrix und Ausscheidung, welche eine signifikante Bedeutung für die Phasenkinetik und Festigkeit haben. Da der Gitterparameter abhängig von der exakten Legierungsschemie und Wärmebehandlung ist wird ein Berechnungsmodell für die γ - und γ' -Phase eingeführt anhand dessen eine durchgängige Berechnung in der Simulationskette möglich ist. Die Berechnung des Gitterparameters a^j erfolgt nach der Vegard'schen Regel. Dieser Ansatz geht von einem konzentrationsabhängigen (c_i) additiven Anteil jedes Elementes i in der Phase j zur Basislänge der reinen Phase (a_0^j) aus [WK75]:

$$a^j = a_0^j + \sum_i V_i^j \cdot c_i^j. \quad (4.1)$$

Für die kristallstrukturspezifischen Basisgitterkonstante (a_0^j) und Vegard-Koeffizienten (V_i^j) werden in Tabelle 4.1 Werte aus unterschiedlichen Publikationen verglichen. Der Gitterparameter wird für eine aus Literaturdaten abgeleitete mittlere Phasenchemie (vgl. Tab. C.2, C.3) für die jeweiligen a_0^j und V_i^j berechnet. Die Ergebnisse sind für die einzelnen a_0^j und V_i^j vergleichbar und liegen innerhalb der von Mishima angegebenen Genauigkeitsgrenzen von $\pm 0,003$ nm [MOS85]. Die Ausscheidungsbildner Nb und Ti sowie der Mischkristallhärter Mo haben auf-

Tabelle 4.1: Basisgitterkonstante, Vegard- Koeffizienten, Gitterparameter der γ - und γ' - Phase

a_0^j [10^{-1} nm]	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	$a_{1=2=3}^j$ [nm]	Quelle
γ - Matrixphase								
3,524	1,28	1,03	6,99	4,79	4,21	1,76	0,36012	[MOS85]
3,517	1,20	1,07	6,58	5,00	4,18	1,76	0,35928	[Ree06]
3,5236	1,19	1,30	6,24	4,21	3,60	1,83	0,36016	[LXY+97b]
γ' - Ausscheidungsphase								
3,57	0,068	0,048	4,50	2,11	2,47	0,00	0,36332	[MOS85]
3,553	-0,03	-0,05	4,39	1,90	2,44	0,00	0,36145	[Nas91]

grund der hohen Vegard- Koeffizienten den größten Einfluss. Mit der Keimbildung geht der Nb und Ti- Gehalt aus der γ - in die γ' - bzw. γ'' - Phase über, woraus sich eine starke Abhängigkeit

vom Ausscheidungszustand ableitet lässt. In Kapitel 5.2.3 werden die Ergebnisse mit gemessenen Gitterparameter verglichen und ein Parametersatz ausgewählt.

Für den γ'' - Gitterparameter ist neben der Chemie noch eine sehr komplexe fehlpassungsabhängige Modellbeschreibung notwendig, weshalb in dieser Arbeit die Bewertung nur anhand von experimentellen Daten erfolgt. Aus den publizierten Messdaten wird eine Korrelation zwischen der γ'' - Partikelgröße und dem $a^{\gamma''}$ - Gitterparameter abgeleitet. Diese Funktion beschreibt abhängig von der Partikelgröße bzw. Wärmebehandlung die Veränderung von $a^{\gamma''}$ (siehe Kap. 5.2.3).

4.1.2 Molare Phasenvolumen der Phasen

Der Volumenanteil (f^j) der Phasen j wird in der Ausscheidungs- und Festigkeitssimulation für die Berechnung der volumetrischen Fehlpassung und Ausscheidungshärtung benötigt. Die CALPHAD- Datenbanken berechnen aber für jede Phase j den Molanteil (f_m^j), weshalb eine Abschätzung des Volumenanteils aus dem Molanteil wie folgt notwendig ist:

$$f^j = \frac{V_j}{V_{ges}} = f_m^j \cdot \frac{V_m^j}{V_{m,ges}}. \quad (4.2)$$

Das molare Volumen V_m^j der Phase j je Einheitszelle kann anhand der Gitterparameter, der Atomanzahl (N_i), der Konzentration c_i^j und der molaren Masse M_i des Elementes i mit der Avogadro-Konstanten N_A berechnet werden [Ret10]:

$$V_m^j = \frac{a_1^j \cdot a_2^j \cdot a_3^j \cdot \sum_i M_i c_i^j}{\sum_i \frac{N_i}{N_A} M_i}. \quad (4.3)$$

Tabelle 4.2 gibt für die mittlere Chemie (vgl. Tab. C.2 bis C.5) und die mittleren Gitterparameter der Phasen (vgl. Tab. C.8 bis C.10) das molare Volumen und das entsprechende Verhältnis zur Matrix an. Für die Matrix erfolgt die Berechnung im ausscheidungsfreien Zustand. Die molaren Massen sind im Anhang in Tabelle C.1 aufgelistet. Aufgrund der geringen Unterschiede zw-

Tabelle 4.2: Gitterparameter und abgeleitete molare Phasenvolumen der Phasen in IN718

Phase	N_i	\mathbf{a}_1	\mathbf{a}_3	\mathbf{a}_3	\mathbf{V}_m^j	Verhältnis zu γ
		[nm]			[$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$]	
γ	4	0,3607	0,3607	0,3607	$7,065 \cdot 10^{-6}$	1,00
γ'	4	0,3608	0,3608	0,3608	$7,071 \cdot 10^{-6}$	1,001
γ''	8	0,3616	0,3616	0,7412	$7,295 \cdot 10^{-6}$	1,033
δ	8	0,5122	0,4229	0,4542	$7,406 \cdot 10^{-6}$	1,048

schen den molaren Volumen der Phasen kann der berechnete Molanteil mit dem Volumenanteil

gleichgesetzt werden.

4.1.3 Fehlpassung und Gitterverzerrung der Ausscheidungen

Die Fehlpassung einer Ausscheidung zum Matrixkristallgitter unterteilt sich in die volumetrische Fehlpassung (δ_V^j) und die lineare (richtungsbezogene) Fehlpassung (Misfit, δ_i^j). δ_V^j wird benötigt, um die volumenbezogene Verformungsenergie der Keimbildung zu berechnen und leitet sich aus dem molaren Phasenvolumen der Matrix (V_m^γ) und Ausscheidung (V_m^j) ab:

$$\delta_V^j = \left| \frac{V_m^j - V_m^\gamma}{V_m^\gamma} \right|. \quad (4.4)$$

Der Misfit-Tensor (δ_i^j) beschreibt die Fehlpassung in den einzelnen Kristallgitterrichtungen, deren Diagonalelemente (δ_i^j) sich aus der Differenz der Gitterparameter zwischen Matrix (a_i^γ) und Ausscheidung (a_i^j) nach Gleichung 4.5 berechnen:

$$\delta_i^j = \frac{a_i^j - a_i^\gamma}{a_i^\gamma}. \quad (4.5)$$

Für die z- Achse der γ'' - Phase ist $a_3^{\gamma''}/2$ einzusetzen. Für die Misfitbestimmung der δ - Phase müssen die Matrixgitterparameter erst in Bezug zum δ - Phasen- Kristallsystem umgerechnet werden ($a_{1,new}^\gamma = a_1^\gamma \sqrt{2}$, $a_{2,new}^\gamma = 2 \cdot a_2^\gamma / \sqrt{3}$, $a_{3,new}^\gamma = ((8(a_2^\gamma)^2 - (a_{1,new}^\gamma)^2)/4)^{0.5}$ nach [Nia10]). Die für den Kohärenzeffekt relevante Gitterverzerrung (ε_i^j) berechnet sich aus den einzelnen Einträgen des Misfit-Tensors. Für die sphärische γ' - Ausscheidungen kann die Gitterverzerrung mit ν der Querkontraktion folgendermaßen berechnet werden [Esh57]:

$$\varepsilon_i^{\gamma'} = \frac{1}{3} \left(\frac{1+\nu}{1-\nu} \right) \cdot |\delta_i^{\gamma'}| \approx \frac{2}{3} \cdot |\delta_i^{\gamma'}|. \quad (4.6)$$

Für die nicht sphärischen γ'' - Ausscheidungen wird die tetragonale Gitterverzerrung für den maximalen Misfit in a_3 - Richtung mit dem Formfaktor κ wie folgt berechnet [AB63, SMB92]:

$$\varepsilon_i^{\gamma''} = \left[1 - \left(\frac{1-2\nu}{2(1-\nu)} \right) \frac{4}{3} \kappa \right] \cdot |\delta_i^{\gamma''}|. \quad (4.7)$$

Tabelle 4.3 fasst die mittlere volumetrische und lineare Fehlpassung sowie die mittlere Gitterverzerrung der Phasen zusammen. Die Berechnung der Fehlpassung und Gitterverzerrung in Abhängigkeit von der Ausscheidungskinetik mit entsprechendem Gitterparameter erfolgt für γ' und γ'' im Kapitel 5.2.4.

Tabelle 4.3: Mittlere Fehlpassung und Gitterverzerrung für γ' -, γ'' -, δ - Phase: δ_V^j für den ausscheidungsfreien γ - Zustand ($a^\gamma = 0,3607$ nm); δ_i^j und ε_i^j im ausgelagerten γ - Zustand ($a^\gamma = 0,3599$ nm) mit $\kappa = 0,3$; γ' -, γ'' -, δ - Gitterparameter nach Tab. 4.2

Phase	δ_V^j	δ_1^j	δ_2^j	δ_3^j	$\varepsilon_{1=2}^j$	ε_3^j
γ'	0,08	0,261	0,261	0,261	0,173	0,173
γ''	3,25	0,529	0,529	3,059	0,475	2,748
δ	4,82	0,645	1,623	2,808	/	/

4.1.4 Morphologie und Partikelabstand der Ausscheidungen

Die homogen verteilten, sphärischen Ausscheidungen der γ' - Phase und deren Radius und Volumenanteil können von der Ausscheidungssimulation und der zugrundeliegenden Modelltheorie beschrieben werden (siehe Kap. 4.2). In der Festigkeitsrechnung ist ein effektiver Partikelradius notwendig, welcher die mit der Versetzung interagierende Partikelgröße je nach Lage der Gleitebene zum Partikelzentrum berücksichtigt. In der Modelltheorie nach Ardell wird der mittlere planare Radius R_S der Ausscheidung aus einer geometrischen Projektion auf einer zur Gleitebene senkrecht stehenden Ebene abgeleitet (siehe Abb. 4.1a). R_S berechnet sich aus dem mittleren Radius R_K nach [Ard85, APKO⁺14]:

$$R_S = \frac{\pi}{4} \bar{R}_K. \quad (4.8)$$

Die Partikelanzahl je Einheitsfläche in der Gleitebene n_S berechnet sich nach Gleichung 4.9 aus dem Volumenanteil f_j der Phase j und R_S [Ard85]. Die Korrelation zwischen der Partikelanzahl im Einheitsvolumen n_V und n_S wird von Ahmadi et al. angegeben [APKO⁺14]:

$$n_S = \frac{3\pi f_j}{32R_S^2} = 2R_K \cdot n_V \quad (4.9)$$

Der Abstand zwischen punktförmigen Hindernissen in der Einheitsfläche eines quadratischen Gitters in der Gleitebene wird durch L_{cc} beschrieben (vgl. Abb. 4.1b und Gl. 4.10) [Ard85]. Im Falle finiter Ausscheidungen reduziert sich der Partikelabstand L_{cc} um $2R_S$ zum freien Abstand zwischen den Partikelloberflächen L_{ss} (vgl. Abb. 4.1b und Gl. 4.10) [Ard85, APKO⁺14]. Die beiden Längen L_{cc} und L_{ss} beschreiben in guter Näherung die mittleren geometrischen Abstände von homogen verteilten Ausscheidungen. Der Abstand zwischen Ausscheidungen entlang der Versetzungslinie $L_{w/s}$ ist vom vorherrschenden schwachen oder starken Schneidregime abhängig und unterscheidet sich von L_{ss} . Die Versetzungslinienlänge korreliert mit dem kritischen Krümmungswinkel χ_c der Versetzung. Mit steigender Hinderniswirkung wachsender Partikel nimmt χ_c und somit auch die Versetzungslinienlänge kontinuierlich ab. Die Abhängigkeit wird über den Parameter $\beta_c = \cos(\chi_c/2)$ beschrieben. Im schwachen Regime ist $L_w > L_{ss}$

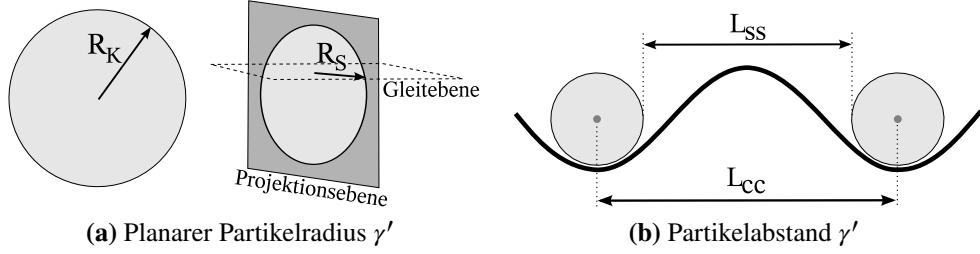


Abbildung 4.1: (a) Planarer Partikelradius nach [Ard85, APKO⁺14], (b) Partikelabstand der γ' -Phase

$(0 \leq \beta_c \leq 0,6)$. Im starken Regime ist $L_s \approx L_{ss}$ ($\beta_c > 0,6$). In dieser Arbeit werden in der Berechnung $\beta_c = \beta_w = 0,5$ für schwache Partikel und $\beta_c = \beta_s = 0,85$ für starke Partikel jeweils als konstant angenommen, sodass sich $L_{w/s}$ abh. von χ_c nach Gleichung 4.11 ergibt [Ard85, APKO⁺14]:

$$L_{cc} = n_s^{-1/2}, \quad L_{ss} = n_s^{-1/2} - 2R_s, \quad (4.10)$$

$$L_w = \beta_w^{-1/2} \cdot L_{ss}, \quad L_s = \beta_s^{-1/2} \cdot L_{ss}. \quad (4.11)$$

Die homogen verteilten nicht sphärischen Ausscheidungen der γ'' -Phase und deren Morphologie sowie Wachstumsverhalten können von der Ausscheidungssimulation mit MatCalc[®], ausgehend von sphärischen Partikeln R_K , nur über einen Formfaktor beschrieben werden (siehe Kap. 4.2). Aus diesem Grund ist der Ansatz der Dissertation die Morphologie der γ'' -Partikel durch eine zylindrische Geometrie mit dem Durchmesser D_Z , der Höhe H_Z und dem Formfaktor κ näherungsweise aus dem mittleren sphärischen Partikelradius \bar{R}_K zu bestimmen (vgl. Abb. 4.2a). Diese Ersatzmorphologie ermöglicht für die Kinetik- und Festigkeitsdaten einen Vergleich mit experimentellen Daten und ein Transfer zwischen beiden Modell. Die Umrechnung erfolgt auf Basis äquivalenter Volumen zwischen Kugel und Zylinder mit:

$$D_Z = \left(\frac{16}{3\kappa} \right)^{1/3} \cdot \bar{R}_K, \quad H_Z = \kappa \cdot D_Z. \quad (4.12)$$

Der Formfaktor κ wird aus Literaturdaten abgeleitet (siehe Kap. 5.2.1). Verantwortlich für diese elliptische Form ist die inhomogene Gitterverzerrung (siehe Kap. 5.2.4).

In der Festigkeitssimulation hat die Morphologie einen Einfluss auf die mit der Versetzung interagierenden Partikelgröße (vgl. Abb. 4.2b). Der mittlere gleitebenenbezogene Radius ergibt sich nach Oblak et al. [OPD74a]:

$$R_Z = \left(\frac{\sqrt{6}}{12} \cdot \kappa \cdot D_Z^2 \right)^{1/2}. \quad (4.13)$$

Die bei Ahmadi et al. vorgenommene Unterscheidung zwischen Schrauben- und Stufenversetzung, welche die gleitebenenbezogene Partikelgröße beeinflusst, wird vernachlässigt (für Details siehe Ref. [ASPK⁺14]). Diese Vereinfachung ist zulässig, da im relevanten Formfaktorintervall

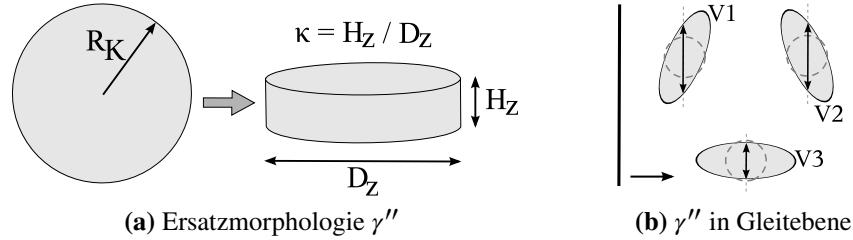


Abbildung 4.2: (a) Transfer des sphärischen R_K in Ersatzmorphologie anhand Formfaktor sowie (b) variantenabh. Partikeldimension in der Gleitebene der γ'' - Phase

zwischen 0,1 und 1 bei gleicher Interaktionswahrscheinlichkeit der beiden Versetzungstypen mit den Ausscheidungen die gewählte Approximation für R_Z nahezu identische Ergebnisse liefert. Die γ'' -Morphologie und deren räumliche Ausdehnung verändert ebenfalls den Partikelabstand und die resultierende Versetzungslinienlänge zwischen den Ausscheidungen (vgl. Abb. 4.2b). Der Formfaktor basierte Korrekturansatz für die Partikelabstände wird von Sonderegger et al. übernommen und berechnet sich folgendermaßen [SK12, ASPK⁺14]:

$$L_{Z,w/s} = \kappa^{1/6} \left(\frac{2 + \kappa^2}{3} \right)^{-1/4} \cdot L_{w/s}. \quad (4.14)$$

4.1.5 Versetzungslinienspannung in der γ -Phase

Eine entscheidende Inputgröße zur Berechnung der Ausscheidungshärtung ist die Versetzungslinienspannung (Ω), welche von der Orientierung der Versetzung im Kristall, dem Versetzungstyp, abhängig ist. Der Versetzungstyp ergibt sich aus dem Winkel Φ zwischen Burgersvektor ($b = \sqrt{a^2/2}$) und Versetzungslinie. Die Linienspannung kann nach Brown et al. für eine reine Stufenversetzung mit $\Phi = \pi/2$ und für eine reine Schraubenversetzung $\Phi = 0$ nach Gleichung 4.15 berechnet werden [KN71, DK59]. G_{111}^j ist der Schubmodul in der Gleitebene und ν die Querkontraktionszahl. Der innere Kernradius der Versetzung r_i wird zwischen b und $4b$ angegeben. Der äußere Versetzungsradius $r_{0,w/s}$ stellt die Distanz zum nächsten Hindernis dar.

$$\Omega(\Phi)_{w/s} = \frac{b^2 G_{111}^j}{4\pi} \cdot \left[\frac{1 + \nu - 3\sin^2\Phi}{1 - \nu} \right] \cdot \ln\left(\frac{r_{0,w/s}}{r_i}\right) \quad (4.15)$$

$$\Omega_{w/s} = A_{Stufe} \cdot \Omega(\pi/2)_{w/s} + A_{Schraube} \cdot \Omega(0)_{w/s} \quad (4.16)$$

Stufenversetzungen sind aufgrund einer um 1/4 geringeren Linienspannung deutlich flexibler, weshalb sie sich unter Spannung stärker krümmen und dadurch mit mehr Hindernissen interagieren. Anhand von Gleichung 4.16 ist eine Mittelung zwischen reinen Versetzungstypen über den Anteil A_i möglich.

In ausscheidungsgehärteten Werkstoffen verändert sich die Linienspannung mit der Auslagerungszeit aufgrund des sich ändernden Partikelabstandes und der zunehmenden Versetzungs krümmung an großen Partikeln. Letzterer Effekt kann für große Partikel nicht quantifiziert werden und ist für kleine Ausscheidungen aufgrund der nahezu geraden Versetzungsfront nicht relevant. Der Einfluss des sich ändernden Partikelabstandes über die Auslagerungszeit wird über den Parameter $r_{0,w/s}$ berücksichtigt. Basierend auf Überlegungen von Brown et al. bzw. Ardell wird für schwache Partikel der γ' -Phase $r_{0,w} = L_w$ und für schwache Partikel der γ'' -Phase $r_{0,w} = L_{Z,w}$ abgeleitet [KN71, Ard85]. Für starke Partikel wird $r_{0,s} = 2R_S$ für γ' und $r_{0,s} = 2R_Z$ für γ'' verwendet. Die ausscheidungsabhängige Berechnung von $\Omega(\Phi)$ ist in Kapitel 5.2.6 dargestellt.

4.2 Werkstoffmodellierung

4.2.1 Thermodynamische Triebkraft und Multikomponentendiffusion

Im Folgenden werden die grundlegenden Mechanismen der thermokinetischen Werkstoffmodellierung vorgestellt auf Basis derer eine Bewertung und Diskussion der Simulationsergebnisse und Modellgrenzen ermöglicht werden soll. Eine detaillierte Beschreibung ist bei Saunders et al. [SM98], Svoboda et al. [SFFK04], Kozeschnik et al. [KSF04] und Janssens et al. [JRK⁺07] dargelegt. Erste Anwendungen für Ni-Basis- Werkstoffe sind bei Rettig, Göhler und Maiwald-Immer zu finden [Ret10, MI11, Göh16]. Die thermodynamische und -kinetische Simulation erfolgt mit der Software MatCalc[®] und den Datenbankversionen mc-ni-s06.tdb und mc-ni-s03.ddb.

Die thermodynamische Modellierung basiert auf dem CALPHAD- Ansatz und leitet sich aus den Gesetzen der Löslichkeitsthermodynamik von Gibbs ab [Gib76]. Die Gibbs'sche Systemenergie G (freie Enthalpie) wird anhand der Zustandsvariablen Enthalpie H , Temperatur T und Entropie S mit der Gleichung 4.17 beschrieben. Das thermodynamische Gleichgewicht eines Systems ist durch die minimale Gibbs- Energie beschrieben.

$$G(p, T, c) = H(p, T, c) - T \cdot S(p, T, c) \quad (4.17)$$

In Multikomponentensystemen setzt sich die freie Phasenenthalpie aus dem Referenzzustand des reinen Elementes (G_{ref}^0), dem Beitrag der idealen Lösung (G_{mix}^{ideal}) und dem nicht-idealnen Anteil

(G_{mix}^{ex}) zusammen [Kat97]. G_{ref}^0 ist experimentell bestimmt [Din91]. G_{mix}^{ideal} berücksichtigt Energiebeiträge aus der zufälligen Elementpositionierung im Kristallgitter einer idealen Mischung. G_{mix}^{ex} beschreibt Interaktionskräfte zwischen Atomen einer nicht-idealnen Mischung [SM98]. Das Ergebnis dieser Beschreibung ist in der Datenbank (mc-ni-s06.tdb) hinterlegt.

Eine Änderung der Zustandsvariablen ($\Delta T, \Delta c; p$ meist konst.) ändert die Systemenergie und resultiert in einer thermodynamischen Triebkraft ΔG_0 zur Systementwicklung. Die Änderung der Systemenergie wird über das thermodynamische Potential μ nach Gleichung 4.18 beschrieben.

$$\mu_j = \frac{\delta G}{\delta(p, T, c)} \quad (4.18)$$

Im Falle der Ausscheidungsbildung ergibt sich aus dem Grad der Matrixübersättigung Δc_i ein konzentrationsabhängiger Potentialunterschied zwischen Matrix μ_γ und Ausscheidung μ_j (siehe Abb. 4.3). Die hieraus abgeleitete Triebkraft zur Keimbildung ΔG_j einer Ausscheidung entspricht dabei nicht der Triebkraft zur gesamten Systementwicklung ΔG_0 . Für die thermokineti-

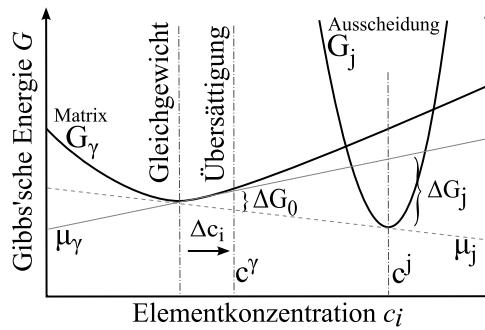


Abbildung 4.3: Schematische Darstellung der Gibbs'schen Energien im Zweistoffsysteem und Ableitung von ΔG_j und ΔG_0 zur Systementwicklung nach [JRK⁺07]

sche Simulation der untersuchten Referenzlegierung IN718 ist entscheidend, dass der temperaturabhängige Elementgehalt in den Phasen: $\gamma, \gamma', \gamma''$ und δ , also folglich das thermodynamische Potenzial der Phase, von der Datenbank korrekt beschrieben wird. Eine Überprüfung und Bewertung für die Legierung IN718 erfolgt im Rahmen der Datenbankvalidierung in Kapitel 5.2.8. Mit dem Atomtransport aus der Matrix in die sich bildenden Ausscheidungen reduzieren sich die Triebkräfte im System solange bis der Gleichgewichtszustand erreicht ist. Nach diesem Prinzip lassen sich komplexe Systeme mit der CALPHAD-Methode beschreiben.

Der für die Systementwicklung notwendige Atomtransport kann in der thermodynamischen Modellierung über das erste und zweite Fick'sche Gesetz auf Basis des Potentialgradientens $\delta\mu/\delta x$ und die Mobilität M_m der Atome beschrieben werden. Aus dem über eine Wegstrecke dx anliegenden Konzentrationsgradienten resultiert ein Gradient des chemischen Potentials $d\mu$, welcher die physikalische Ursache und Triebkraft der Diffusion darstellt. Das Potenzial kann mittels der thermodynamischen Datenbank (mc-ni-s06.tdb) berechnet werden. Die Mobilität M_m ist ein

Maß für den Widerstand gegen die Atombewegung und vergleichbar mit dem Diffusionskoeffizienten. Für ein binäres System wird der Diffusionsstrom \vec{J}_i mit der Mobilität M_m und dem Potentialgradienten $\delta\mu/\delta x$ über das erste Fick'sche Gesetz nach Andersen et al. beschrieben [AA92]:

$$\vec{J}_i = -c_i \cdot M_m \frac{\delta\mu}{\delta x} \quad (4.19)$$

Eine Erweiterung auf Multikomponentensysteme, welche die Elementinteraktion im Atomtransport mit berücksichtigt, ist bei Andersen et al. ergänzt [AA92]. Die Mobilität ist in der thermokinetischen Datenbank hinterlegt (mc-ni-s03.ddb) und basiert auf den Arbeiten von Campbell et al. [CBK02, CBH⁺05, CZH05, Cam08]. Die Validität der Datenbank für die Multikomponentenlegierung IN718 wird in Kapitel 5.2.8 überprüft und ist entscheidend für die Ausscheidungskinetik der γ' -, γ'' - und δ -Phase.

4.2.2 Ausscheidungsmodellierung

Die Ausscheidungen einer Phase entstehen beim Abschrecken einer Legierung aus dem homogenen Mischkristallgebiet in einen Temperaturbereich unterhalb des Phasensolvus. Der Ausscheidungsvorgang kann in drei Stadien aufgeteilt werden. *Die Keimbildung* ist der initialisierende stochastische Prozess, welcher durch thermische und chemische Fluktuation hervorgerufen wird. *Das Keimwachstum* ist ein deterministischer Vorgang, welcher durch chemische und/ oder mechanische Triebkräfte getrieben wird und zu einer kontrollierten Anlagerung von Atomen führt. *Die Vergrößerung* ist ein Vorgang, bei dem kleine Ausscheidungen zugunsten von Großen infolge des günstigeren Verhältnisses von Oberfläche zu Volumen aufgelöst werden.

Die zeitabhängigen Differentialgleichungen zur Beschreibung der drei Stadien werden in Mat-Calc[®] nach dem Kampmann-Wagner-Algorithmus gelöst [KW84]. Die Berechnung der Ausscheidungskinetik erfolgt nicht ortsaufgelöst sondern in statistisch verteilten Größenklassen mit dem Klassenradius R_K für jeden Zeitschritt Δt . Für jede einzelne Klasse werden die Stadien Keimbildung, Wachstum und Auflösung betrachtet. Weitere Details sind in Ref. [KW84, KSF04, JRK⁺07] beschrieben.

Die Keimbildung ist der initialisierende Schritt im Ausscheidungsprozess und wird in der klassischen Keimbildungstheorie als ein stochastischer Vorgang betrachtet. Die Keimbildungsrate \dot{m}_{ss} beschreibt die thermodynamische Wahrscheinlichkeit der Ausscheidungsbildung je Einheitsvolumen und Zeitinkrement in exponentieller Abhängigkeit von Temperatur und kritischer Keimbildungsenergie ΔG^* [SFFK04, KSF04]:

$$\dot{m}_{ss} = N_0 Z \beta^* \exp\left(\frac{-\Delta G^*}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{t_{inku}}{t}\right), \quad (4.20)$$

mit der Boltzmann-Konstante k_B , der Zeit t und der Inkubationszeit t_{inku} . Der Zeldovich Faktor Z berücksichtigt Effekte der Keimdestabilisation durch thermische Fluktuation ($k_B T$) und hat aufgrund seiner Größenordnung (1/40 bis 1/100) nur einen geringen Einfluss [Rus80, RSA⁺09]. Die Clusterbildungsrate β^* beschreibt die diffusionskontrollierte Anlagerungsfrequenz von Atomen an den Keim und ist von der Keimoberfläche und dem Potentialunterschied zwischen Matrix und Ausscheidung abhängig. N_0 definiert die potentiellen Keimbildungsorte der homogenen oder heterogenen Keimbildung. Für die sich homogen bildenden γ' -, γ'' - Phase in der Legierung IN718 stellt jedes Atom einen potentiellen Keimbildungsort dar ($N_0 \approx 10^{28} \text{ Atome} \cdot \text{m}^{-3}$). Bei der heterogenen Keimbildung der δ_{KG} - Phase in der Legierung IN718 ist dagegen die Anzahl der potentiellen Keimbildungsort deutlich reduziert und korreliert mit der Korngrenzfläche. Die kritische Keimbildungsenergie ΔG^* dominiert den Keimbildungsprozess und leitet sich aus der gesamten freien Energie ΔG_{ges} des Systems ab. ΔG_{ges} ist die Summe aus thermodynamischer Triebkraft ΔG_V , freier Energie der Phasengrenzfläche ΔG_γ und Verformungsenergie ΔG_λ [SFFK04]:

$$\Delta G_{ges} = \Delta G_V + \Delta G_\gamma + \Delta G_\lambda = \left(\sum_{i=1}^n N_{0i} \mu_{0i} + \sum_{k=1}^m \frac{4\pi}{3} R_K^3 \cdot \sum_{i=1}^n c_{k,i} \mu_{ki} \right) + \left(\sum_{k=1}^m 4\pi R_K^2 \gamma_{GF} S_k \right) + \left(\sum_{k=1}^m \frac{4\pi}{3} R_K^3 \lambda_k \right). \quad (4.21)$$

ΔG_V ist abhängig vom chemischen Potential der Elemente i in der Matrix μ_{0i} und der k -ten Ausscheidung μ_{ki} , dem Partikelradius R_K sowie der Molzahl des Elementes i in der Matrix N_{0i} . c_{ki} ist die Konzentration in der Ausscheidung. ΔG_γ ist abhängig von der für die Partikeloberfläche aufzuwendenden Grenzflächenenergie γ_{GF} . Der Morphologeeinfluss der nicht-sphärischen γ'' - und δ - Ausscheidungen wird in der Korrekturgröße S_k über den Formfaktor κ erfasst ($S_k = 0,7631\kappa^{1/3} + 0,3816\kappa^{-2/3}$). Für die γ'' - Phase ist eine detaillierte Analyse in Kapitel 5.2.1 notwendig. Für die δ - Phase kann ein konstanter Wert von 10 angenommen werden. ΔG_λ beschreibt die aufzuwendende elastische Verzerrungsenergie λ_k , welche sich aus der Volumenänderung aufgrund der Gitterfehlplassung (δ_V^j) zwischen Matrix und k -ter Ausscheidung ableitet. Bei vergleichbaren elastischen Konstanten und isotropen Materialverhalten ist $\lambda_k \approx 2 \frac{1+\nu}{1-\nu} G^y (\delta_V^j)^2$. Für die γ' - und γ'' - Phase sind die Beiträge sehr gering und die Phasen scheiden sich homogen aus (siehe Kap. 5.2.4). Wohingegen für die δ - Phase sehr hohe Werte erreicht werden, welche die Ursache für die heterogene und träge Keimbildung sind (siehe Kap. 5.2.4). Ein schematischer Verlauf der Energiebeiträge ist in Abbildung 4.4a dargestellt. Die erste Ableitung von ΔG_{ges} nach R_K ergibt den kritischen Keimradius R^* . Dieser eingesetzt in Gl. 4.21

liefert die kritische Keimbildungsenergie ΔG^* :

$$R^* = \frac{2\gamma_{GF}}{\Delta G_V - \Delta G_\lambda} \quad ; \quad \Delta G^* = \frac{16\pi\gamma_{GF}^3}{3(\Delta G_V - \Delta G_\lambda)^2}. \quad (4.22)$$

Hieraus geht hervor, dass neben ΔG_V auch γ_{GF} entscheidend für die Keimbildung ist. ΔG_λ gewinnt erst für hohe Fehlpassungen ($\delta_V^j > 5\%$) an Bedeutung. Die Bildung eines stabilen wachstumsfähigen Keims ist schematisch in Abbildung 4.4b dargestellt. Beim Abkühlen aus dem reinen Mischkristallbereich bilden sich aufgrund von stochastischen Elementverteilungen und Elementfluktuationen kleine Cluster, welche der Ausscheidungsphase ähneln. Infolge der Matrixübersättigung ist eine Triebkraft zur Ausscheidungsbildung vorhanden, welche nach t_{inku} zu einer stabilen Verteilung von Clustern führt. Diese Cluster erreichen eine überkritische Größe ($R_K > R^*$) und bilden wachstumsfähige Keime. Da die Aktivierungsschwelle ΔG^* überwunden wird, können die Keime unter Energiefreisetzung wachsen, obwohl ΔG_{ges} noch positiv ist. Für

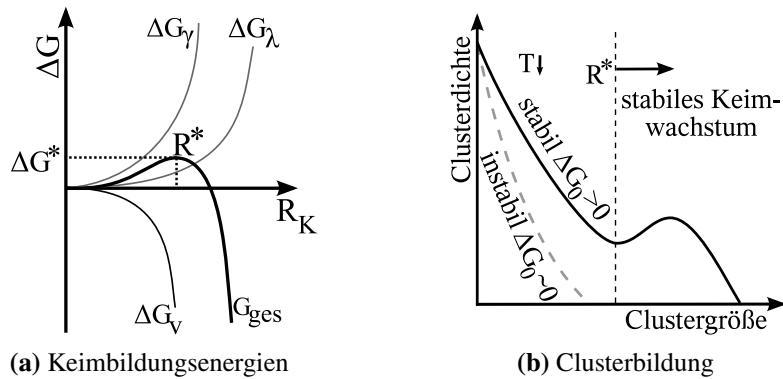


Abbildung 4.4: Schematischer Verlauf der (a) relevanten Energieterme der Keimbildung und (b) Clusterbildung mit und ohne ΔG_0 nach [JRK⁺07]

die Keimbildung kann ΔG_V auf Basis der Legierungschemie und der hinterlegten Datenbank berechnet werden. Die Berechnung der zweiten wichtigen Größe γ_{GF} wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

Das Grenzflächenenergiemodell in MatCalc[©] ermöglicht die physikalisch basierte Berechnung der Grenzflächenenergie in unterschiedlichen Kristallsystemen [KS09]. Nach dem Modellansatz von Bragg et al. sowie Becker basiert die Grenzflächenenergie (γ_{GF}) auf den Bindungsenergien E_{ij}^x zwischen Atomen entlang der Grenzfläche und berechnet sich aus der Energie neu gebildeter Bindungen zwischen den Phasen A und B reduziert um die Anzahl gebrochener Bindungen je Phase [BW34, Bec32]:

$$\gamma_{GF} = E_{AB}^{neu} - E_{AA}^{gebrochen} - E_{BB}^{gebrochen}. \quad (4.23)$$

Die Modellerweiterung von Turnbull korreliert die Summe aller Atombindungsenergien nächster Nachbarn mit der Enthalpie der Lösung ΔH [Tur55]. Dies ermöglicht die Beschreibung für

Multikomponentensysteme mit den CALPHAD-Datenbanken. Auf diesem Ansatz basiert das in MatCalc[©] implementierte Modell der “gebrochene Bindungen nächster Nachbarn” [KS09]. Für ein periodisches Volumenelement der Ausscheidung existieren über eine planare Grenzfläche A mit einer flächenbezogenen Atomanzahl n_G eine bestimmte Anzahl an Bindungen z_L und gebrochener Bindungen z_s je Atom (siehe Abb. 4.5a). Die effektiven Strukturparameter berücksichtigen zusätzlich die Bindungen $z_{L,eff}$ und die gebrochenen Bindungen $z_{s,eff}$ zu weiter entfernten Atomen im Radius r_k . Die Änderung der Enthalpie ΔH berechnet sich aus dem Übergang von Phase A in B als Funktion des Phasenanteils ($\Delta H = \delta H / \delta f$). Für γ_{GF} ergibt sich nach [JRK⁰⁷, KS09, SK10]:

$$\gamma_{GF} = \beta_{T_{krit}} \cdot \alpha_r \cdot \frac{n_G z_{s,eff}}{N_A z_{L,eff}} \cdot \Delta H, \quad (4.24)$$

mit der Avogadro-Konstanten N_A . Die Korrekturfunktion α_r berücksichtigt Effekte einer gekrümmten Oberfläche von realen Ausscheidungen in Abhängigkeit vom Partikelradius (vgl. Abb. 4.5b). Für die Keimbildung und bei hohen Temperaturen wird γ_{GF} überschätzt, da die An-

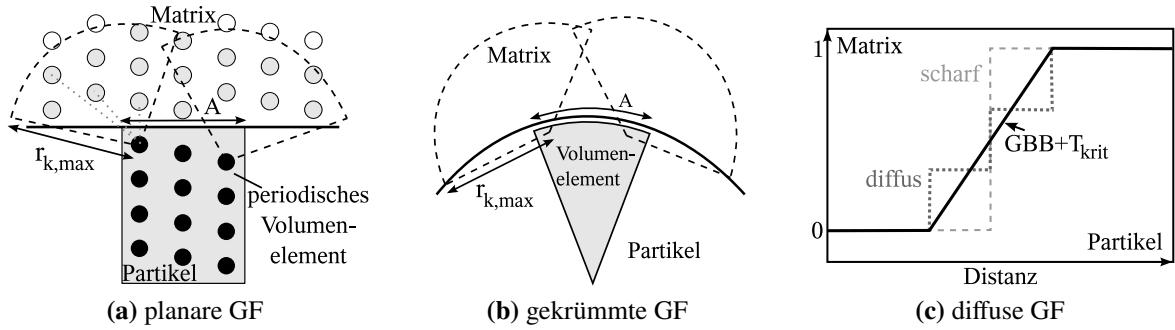


Abbildung 4.5: Grenzflächenenergiemodell: Berücksichtigung der gebrochenen Bindungen in einer (a) planaren, (b) gekrümmten und (c) diffusen Grenzfläche nach [JRK⁰⁷, KS09, SK10]

nahme einer scharfen Grenzfläche nicht zulässig ist. Die reduzierende Korrekturfunktion $\beta_{T_{krit}}$ berücksichtigt Effekte einer diffusen Grenzfläche (hervorgerufen durch entropische Beiträge und Ordnungsgradverluste) in einem erweiterten “generalisierten Modell gebrochener Bindungen” (GBB- Modell) (vgl. Abb. 4.5c). Dieses Modell benötigt die Eingabe einer kritischen Phasen-temperatur T_{krit} , welche der theoretisch möglichen Löslichkeitsenthalpie der Ausscheidung bei 0 K entspricht. T_{krit} steuert den temperaturabhängigen Startpunkt der Korrekturfunktion. Für die γ' - Phase werden Werte zwischen 2000 und 2500 K angegeben [SK10]. Für weiterführende Modellbeschreibungen sei auf Sonderegger et al. verwiesen [SK10]. Für γ' gehärtete Superlegierungen wird gezeigt, dass der Ordnungsgrad der Phase nicht bis T_{sol} bestehen bleibt und eine Grenzflächenenergiokorrektur für die Phasenkinetik notwendig ist [RBV98, MI11].

Die Entwicklung komplexer Legierungssysteme beschreibt temperatur- und zeitabhängig das Wachstum und die Vergrößerung der Ausscheidungen anhand von zwei möglichen Mecha-

nismen. Grenzflächenkontrolliertes Wachstum erfolgt durch den Umstrukturierungsprozess von Atomen entlang der Grenzfläche. Diffusionskontrolliertes Wachstum erfolgt durch den Transport von Elementen in der Matrix zur Ausscheidung. Letzterer Mechanismus ist in den meisten Fällen geschwindigkeitsbestimmenden und erfordert eine Beschreibung des Konzentrationsverlaufes zwischen Ausscheidung und Matrix. In MatCalc[®] wird der Übergang zwischen Matrix und Ausscheidung mit dem Modell von Svoboda et al. (SFFK-Modell) beschrieben [STF05]. In diesem Modell wird von einer homogenen Legierung mit zufällig verteilten, sphärischen Ausscheidungen ausgegangen, die von einer homogenen Matrix umgeben sind. Grundlage des Ansatzes ist die Berechnung der gesamten freien Energie des Systems ΔG_{ges} (Gl. 4.21) auf Basis mittlerer chemischer Zusammensetzungen der Matrix und Ausscheidung ohne die Konzentrationsprofile der Grenzfläche genau aufzulösen (“Mean-Field Ansatz“, siehe Abb. 4.6a).

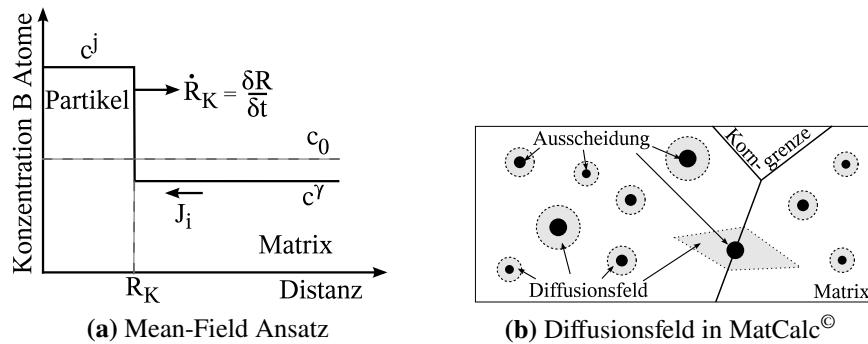


Abbildung 4.6: (a) Beschreibung des Ausscheidungswachstums nach dem Mean-Field Ansatz in MatCalc[®] anhand des Elementprofils der Phasengrenzfläche (b) Schema der Diffusionsfelder um stochastisch verteilter Partikel in MatCalc[®]

Die Entwicklung der Ausscheidungen wird anhand des thermodynamischen Extremalprinzips nach Onsager beschrieben [Ons31]. Diese Methode geht davon aus, dass sich das thermodynamische System entlang des “Pfades“ der maximalen Entropieproduktion in Richtung des Gleichgewichtszustandes entwickelt. Die gesamte Energiedissipation Q_{ges} wird dazu in drei Prozesse aufgeteilt: Dissipation durch Grenzflächenbewegung Q_1 , Dissipation durch Diffusion innerhalb der Ausscheidung Q_2 , Dissipation durch Diffusion in der Matrix Q_3 und nach Gleichung 4.25 berechnet [SFFK04]. Q_1 ist charakterisiert durch die Phasengrenzbewegung mit der Mobilität M_k . Triebkraft der Bewegung ist die Energieminimierung durch Reduktion des Volumen-Oberflächenverhältnisses. Der zweite Dissipationsterm stellt die Konzentrationsänderung $\dot{c}_{k,i}$ des Elements i in der Ausscheidung k dar. Der letzte Term approximiert die Diffusion in der Matrix unter der Annahme von sphärischen sich nicht überlagernden Diffusionsfeldern um statistisch verteilte Ausscheidungen mit einem radialsymmetrischen Diffusionsstrom. Die Größe

des Diffusionsfeldes wächst näherungsweise mit $x \approx \sqrt{Dt}$ (siehe Abb. 4.6b).

$$\begin{aligned} Q_{ges} = Q_1 + Q_2 + Q_3 &= \left(\sum_{k=1}^m \frac{4\pi R_k^2 \cdot \dot{R}_k^2}{M_k} K_k \right) + \left(\sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \frac{4\pi R T R_k^5 \dot{c}_{k,i}^2}{45 c_{k,i} D_{k,i}} I_k \right) \\ &+ \left(\sum_{k=1}^m \sum_{i=1}^n \frac{4\pi R T R_k^3}{c_i^\gamma D_{0,i}} \left(\dot{R}_k (c_{k,i} - c_i^\gamma) + \frac{R_k \dot{c}_{k,i}}{3} \right)^2 \cdot O_k \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Die chemische Zusammensetzung der Matrix ändert sich je Zeitschritt Δt durch den Transportprozess der Atome zum Partikel k . Die Wachstumsrate des Systems wird im fortschreitenden Wachstumsstadium durch weitere Diffusionswege und den Abbau der Matrixübersättigung reduziert. Die Korrekturgrößen K_k , I_k und O_k berücksichtigen Abweichungen im Falle morphologiebehafteter Partikel auf Basis des Formfaktors κ , welcher für die γ'' - und δ -Phase vorgegeben werden muss. Der Einfluss der Partikelmorphologie auf die gesamte Wachstumsrate ist stark vom definierten Formfaktor abhängig. Dieser beschleunigt das Wachstum im Falle von Scheiben für $\kappa < 1$ und reduziert im Falle von Nadeln für $\kappa > 1$ [KSF06]. Für die heterogene Keimbildung an Korngrenzen wird ein modifiziertes Diffusionsfeld über einen programmierten Korrekturfaktor berücksichtigt (siehe Abb. 4.6b). Dies führt aufgrund des geringeren “Elementeinzugsgebietes“ zu einer schnelleren Reduktion der Wachstumsrate und wird für die δ_{KG} -Phase in der Legierung IN718 benötigt. Die Systembeschreibung über ΔG_{ges} und Q_{ges} ist zu jedem Zeitpunkt nur von den unabhängigen Zustandsvariablen R_k , \dot{R}_k , $c_{k,i}$ und $\dot{c}_{k,i}$ abhängig. Die Systementwicklung kann anhand folgender Differentialgleichungen numerisch gelöst werden [SFFK04]:

$$\frac{\delta G_{ges}}{\delta R_k} = -\frac{1}{2} \frac{\delta Q_{ges}}{\delta \dot{R}_k} \quad ; \quad \frac{\delta G_{ges}}{\delta c_{k,i}} = -\frac{1}{2} \frac{\delta Q_{ges}}{\delta \dot{c}_{k,i}}. \quad (4.26)$$

4.2.3 Modellierung der Segregation und Homogenisierung

Die Scheil-Gulliver-Methode ist ein analytischer Ansatz zur Beschreibung der Elementsegregation im Erstarrungsprozess zwischen Dendrit und Interdendrit [Gul13, Sch42]. Die Gültigkeit des Modells ist unter folgenden Bedingungen gegeben. Es liegt ein lokales Gleichgewicht an der fest-flüssig Phasengrenze und eine homogene Zusammensetzung der Schmelze vor. Die Diffusion im Festmaterial und die Unterkühlung der Dendritenspitze ist vernachlässigbar. Unter diesen Annahmen berechnet sich das Konzentrationsprofil c_i^γ und der Phasenanteil f_γ der festen Phase mit einem elementspezifischen Seigerungskoeffizienten $k_i^{s/l}$ wie folgt [Sau97, DLK11]:

$$c_i^\gamma = k_i^{s/l} c_{0,i}^\gamma (1 - f_\gamma)^{k_i^{s/l} - 1} \quad ; \quad f_\gamma = 1 - \left(\frac{T_S - T}{T_S - T_L} \right)^{1/(k_i^{s/l} - 1)}, \quad (4.27)$$

mit der nominellen Zusammensetzung $c_{0,i}^\gamma$ des Materials. Die Koeffizienten $k_i^{s/l}$ werden nach Knorovsky et al. entweder aus dem Quotienten der dendritischen und nominellen Legierungschemie oder dem Quotienten der maximalen Löslichkeit in der Matrix und der interdendritischen Zusammensetzung bestimmt [KCH⁺89].

Der analytische Ansatz kann auch mit der CALPHAD-Methode kombiniert und in MatCalc[©] umgesetzt werden. Hierbei werden bei einer definierten Unterkühlung ΔT die Eigenschaften von Schmelze und Festphase in einer Gleichgewichtsberechnung bestimmt. Dieser Vorgang wird solange mit der jeweils neuen Schmelzzusammensetzung wiederholt, bis der definierte Anteil Restschmelze erreicht ist [Sau97] (siehe Abb. 4.7). Die aus Literaturdaten abgeleiteten Koeffizi-

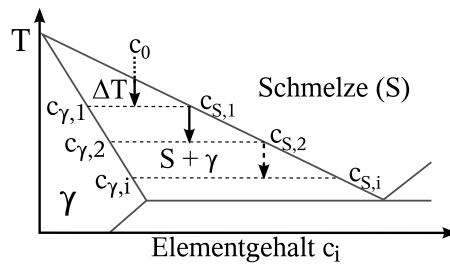


Abbildung 4.7: Schematisches Vorgehen nach der Scheil-Gulliver Methode

enten $k_i^{s/l}$ sind im Anhang in Tabelle C.19 zusammengefasst. Die Berechnungen für IN718 sind in Kapitel 5.4 dargelegt.

Die Homogenisierungsmodellierung baut auf den berechneten Segregationsprofilen der Elemente auf. Diese idealisierten Elementprofile werden in eine 1D Diffusionsrechnung mit periodischen Randbedingungen übertragen. Der hinterlegte Dendritenarmabstand λ_D wird nach Gleichung 2.1 in Abhängigkeit vom Herstellprozess ermittelt. Der Einfluss der Sekundärarme auf die Diffusionswege wird vernachlässigt. In der Diffusionsrechnung wird auf Homogenisierungstemperatur mit 6 K/min aufgeheizt und für die Haltezeit der Diffusionsausgleich berechnet. Die Ergebnisse sind für IN718-SLM und IN718-SX in Kapitel 5.4 dargestellt.

4.3 Streckgrenzmodellierung

4.3.1 Addition einzelner Streckgrenzbeiträge

Es wird angenommen, dass sich die Streckgrenze des Materials additiv aus den Beiträgen intrinsischer Festigkeit (τ_{Int}), Mischkristallhärtung (τ_{SS}), Feinkornhärtung (τ_{HP}) und Ausscheidungshärtung ($\tau_{P,ges}$) zusammensetzt [Ard85, SZL10, APKW⁺14]:

$$\tau_{ges} = \tau_{Int} + \tau_{SS} + \tau_{HP} + \tau_{P,ges} \quad (4.28)$$

Diese Festigkeitsbeiträge sind abhängig von der chemischen Zusammensetzung, dem Kristallgitter, den elastischen Konstanten, den Gitterenergien, der Materialtextur, dem Ausscheidungszustand und der Wechselwirkung zwischen Versetzungen und Ausscheidungen. Die verwendeten Modellgleichungen zur Beschreibung dieser Abhängigkeiten werden im Folgenden dargestellt. Alle Streckgrenzbeiträge werden als Schubspannungen berechnet, da die festigkeitssteigernden Beiträge physikalisch betrachtet auf gleitebenenbezogenen Mechanismen beruhen. Eine Umrechnung auf makroskopische Spannungen ist über den Texturfaktor M mit $\sigma_i = M \cdot \tau_i$ möglich (vgl. Kap. 4.4).

4.3.2 Berechnung der intrinsischen Festigkeit

Die intrinsische Festigkeit (τ_{Int}) setzt sich aus der notwendigen Schubspannung zur Versetzungsbewegung (τ_0) und der Versetzungswechselwirkung (τ_V) im Matrix Kristallgitter zusammen [Som99, Got07].:

$$\tau_{Int} = \left[\frac{2 \cdot G_{111}}{1 - \nu} \cdot \exp\left(\frac{-2\pi d_{111}}{(1 - \nu)b}\right) \right]_{\tau_0} + \left[\alpha b G_{111}^\gamma \sqrt{\rho_{ges}} \right]_{\tau_V}. \quad (4.29)$$

τ_0 ist vom Schubmodul der Gleitebene (G_{111}), dem Burgersvektor ($b = \sqrt{a^2/2}$) und dem Netzebenenabstand ($d_{111} = 0,5\sqrt{3a^2}$) des Gleitsystems abhängig. b und d_{111} werden aus dem wärmebehandlungsabhängig berechneten Gitterparameter der Matrix abgeleitet. ν ist die Querkontraktionszahl von IN718. Die geometrische Konstante α ist ein Maß für die Effizienz der Versetzungswechselwirkung und wird allgemein zwischen 0,1 und 1 angegeben [Som99, Got07]. Die Berechnung erfolgt mit einer Versetzungsichte von $\rho_{ges} = 10^{12} \text{ m/m}^3$ für den unverformten Kristall und $\alpha = 0,5$.

4.3.3 Berechnung der Mischkristallhärtung

Die Mischkristallhärtung (τ_{SS}) wird nach dem Summenpotenzansatz von Gypen et al. nach Formel (4.30) berechnet [GD77a]. Der Exponent n beträgt 1/2 und c_i^γ ist die Konzentration des Elementes i in at%. Die dafür erforderlichen elementspezifischen Härtungskonstanten $k_{ss,i}$ wurden von Mishima et al. an binären Legierungen (Ni-X) ermittelt (siehe Tab. 4.4) [MOS85].

$$\tau_{SS} = \frac{1}{M} \left[\sum_i k_{ss,i}^{1/n} c_i^\gamma \right]^n \quad (4.30)$$

Die Modellergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit Validierungsversuchen an binären und ternären Legierungen von Gypen et al. an kfz- und krz- Metallen sowie von Roth et al. an Ni-Legierungen [GD77b, RDT97]. Die Validierung für IN718 erfolgt in Kapitel 5.6.2.

Tabelle 4.4: Härtungskonstanten der Mischkristallhärtung nach [MOS85]

Element	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al
$k_{ss,i}$ [MPa at% $^{-1/2}$]	153	337	1183	1015	775	225

4.3.4 Berechnung der Feinkornhärtung

Die Feinkornhärtung (τ_{HP}) wird nach dem Hall-Petch Ansatz berechnet [Hal51, Pet53, Tho75]:

$$\tau_{HP} = k_{HP}^\tau \cdot D_K^{-1/2}. \quad (4.31)$$

D_K ist der effektive Korndurchmesser. Die schubspannungsbezogene Hall-Petch- Konstante ergibt sich aus dem Texturfaktor M mit $k_{HP}^\tau = k_{HP}^\sigma / M$ (siehe Kap. 4.4). Die werkstoffspezifische Hall-Petch- Konstante k_{HP}^σ wurde von Thompson für Ni-Basis Superlegierungen mit 0,158 MPa m $^{1/2}$ für Korngrößen von 1 μm bis 130 μm durch Anpassung der kleinsten quadratischen Abweichung an seine experimentellen Daten bestimmt [Tho75].

4.3.5 Addition einzelner Effekte der Ausscheidungshärtung

In der Berechnung der Ausscheidungshärtung werden folgende schneidende Mechanismen berücksichtigt: Kohärenzeffekt (τ_K^j), Anti-Phasengrenzeffekt (τ_{APG}^j), Stapelfehlereffekt (τ_{SF}^j), Grenzflächeneffekt (τ_{GF}^j) und Schubmoduleffekt (τ_S^j). Der nicht-schneidende Mechanismus ist der Orowanefekt (τ_{Oro}^j). Die Summe der einzelnen Festigkeitsbeiträge der Ausscheidungshärtung wird je Phase j nach dem Superpositionsansatz berechnet [APKW⁺14]. Hierzu werden jeweils alle Effekte der schwachen (w) bzw. der starken (s) Partikel-Versetzung-Wechselwirkung mit dem Exponenten $q = 1,8$ geometrisch aufsummiert [Ard85, APKW⁺14]:

$$\tau_{ges,w/s}^j = \left[\left(\tau_{K,w/s}^j \right)^q + \left(\tau_{APG,w/s}^j \right)^q + \left(\tau_{SF,w/s}^j \right)^q + \left(\tau_{GF,w/s}^j \right)^q + \left(\tau_{S,w/s}^j \right)^q \right]^{1/q}. \quad (4.32)$$

Der Gesamtbeitrag der beiden Phasen zur Ausscheidungshärtung berechnet sich aus der geometrischen Summe des schwächsten Härtungsmechanismus aus $\tau_{ges,w}^j$, $\tau_{ges,s}^j$ bzw. τ_{Oro}^j jeder Phase:

$$\tau_{P,ges} = \left[\left(\tau_{min}^{\gamma''} \right)^q + \left(\tau_{min}^{\gamma'} \right)^q \right]^{1/q}. \quad (4.33)$$

Für die Kombination von nur schwachen oder nur starken Wechselwirkungsregimen zwischen Partikel und Versetzung beträgt $q \approx 1,8$. Bei einer Kombination von schwachen und starken Mechanismen ist $q \approx 1,4$. Der Exponent wurde in numerischen Studien von Foreman und Makin

ermittelt und in Untersuchungen am Werkstoff IN718PLUS bestätigt [FM66, Ard85, APKO⁺14, APKW⁺14]. Die Modellgleichungen der schneidenden und nicht-schneidenden Mechanismen werden im Folgenden für γ' - und γ'' - Phase dargelegt.

4.3.6 Berechnung der γ' - Ausscheidungshärtung

Die Modellgleichungen basieren auf Arbeiten von Ahmadi et al., welche deren Validität am γ' - gehärteten ATI 718Plus[®] gezeigt haben [APKO⁺14, APKW⁺14]. Folgende Größen der Modellgleichungen werden in Abhängigkeit von der Thermokinetiksimulation nach den angegebenen Gleichungen berechnet: a^γ , $a^{\gamma'}$, b , $\varepsilon^{\gamma'}$, $\Omega_{w/s}$, R_S , $f_{\gamma'}$, L_w und L_s . $J = 1$ für das schwache und $J = 0,8$ für das starke Partikel-Versetzungsgesetz [Ard85, LWN15].

Der Kohärenzeffekt wird für die sphärische γ' - Phase mit dem erweiterten Ansatz von Brown et al. berechnet. Dieser Ansatz beinhaltet eine geometrische Mittelung für die Berechnung der Abstandsabhängigkeit einer mittleren Widerstandskraft der Ausscheidungen je Versetzungstyp [VE78, Ard85, GH66, KN71, APKS⁺14]. Für schwache Partikel ergibt sich der Schubspannungsbeitrag nach Gleichung 4.34 [APKW⁺14]. Die Versetzungstypen werden über den Parameter $k_w = 592/35$ für eine Stufe und $k_w = 9/5$ für eine Schraube mit dem jeweils entsprechenden $\Omega(\Phi)$ berücksichtigt [APKW⁺14]. Die Mittelung zwischen den Versetzungssanteilen erfolgt nach Gleichung 4.35.

$$\tau_{K,w}^{\gamma'} = \left[k_w \cdot \frac{b (4/\pi)^3 \varepsilon_{\gamma'}^3 G_{111}^3 R_S^3}{L_w^2 \Omega(\Phi)_w} \right]^{1/2} \quad (4.34)$$

$$\tau_{K,w}^{\gamma'} = A_{Stufe} \cdot \tau_{K,w}(\Omega(\pi/2)) + A_{Schraube} \cdot \tau_{K,w}(\Omega(0)) \quad (4.35)$$

Die Beschreibung für starke Partikel erfolgt über [APKW⁺14]:

$$\tau_{K,s}^{\gamma'} = k_s \cdot \frac{J}{L_s} \cdot \left[\frac{4 \varepsilon_{\gamma'} G_{111} R_S \Omega(\Phi)_s^3}{\pi b^3} \right]^{1/4}, \quad (4.36)$$

$$\tau_{K,s}^{\gamma'} = A_{Stufe} \cdot \tau_{K,s}(\Omega(\pi/2)) + A_{Schraube} \cdot \tau_{K,s}(\Omega(0)). \quad (4.37)$$

k_s beträgt bei entsprechender $\Omega(\Phi)$ 2,135 für eine Stufen- und 2 für eine Schraubenversetzung [APKW⁺14]. Der Schubmodul G_{111} der Matrix wird in Kapitel 5.2.5 angegeben.

Der Antiphasengrenzeffekt erfordert im Falle der geordneten γ' - Phase ein Versetzungspaar. Die Modellgleichung für schwache Partikel wird aus Beschreibungen von Ardell bzw. Ahmadi

et al. abgeleitet [Ard85, APKO⁺14]:

$$\tau_{APG,w}^{\gamma'} = \frac{\gamma_{APG}}{2b} \cdot \left[\left(\frac{4\gamma_{APG} R_S^3}{\Omega_w L_w^2} \right)^{1/2} - \left(\frac{32R_S^2}{3\pi L_w^2} \right) \right]. \quad (4.38)$$

Der hintere Klammerterm berücksichtigt näherungsweise das Schließen der APG durch die nachfolgende Versetzung und deren statistische Interaktion mit den geschnittenen Partikeln. Die Beschreibung der starken Partikel erfolgt nach Ahmadi et al. [APKO⁺14]:

$$\tau_{APG,s}^{\gamma'} = \frac{2wJ\Omega_s}{\pi b L_s} \cdot \left[\frac{\pi\gamma_{APG} R_S}{w\Omega_s} - 1 \right]^{1/2}. \quad (4.39)$$

γ_{APG} ist die APG- Energie der γ' - Phase und wird in Kapitel 5.2.7 angegeben. Der Korrekturfaktor w berücksichtigt unzureichend beschriebene Kräfte zwischen Versetzungen im Partikel, zurückbleibende Versetzungssegmente und andere Modellfehler. w wird zwischen 1 und 3 angegeben und wird in dieser Arbeit auf 1 gesetzt [Ard85, Ree06, APKO⁺14].

Der Stapelfehlereffekt wird für IN718 aufgrund der geringen SFE und der geringen Aufspaltungsweiten nach Gleichung 4.40 berechnet [APKO⁺14]:

$$\tau_{SF,w}^{\gamma'} = \frac{2\Omega_w}{bL_w} \cdot \left[\frac{R_S |\gamma_{SF}^{\gamma} - \gamma_{SF}^{\gamma'}|}{\Omega_w} \right]^{3/2}. \quad (4.40)$$

Der Ansatz geht davon aus, dass sich der Stapelfehler nicht über die Partikelgrenzen hinaus erstreckt. Für starke Partikel ergibt sich [APKO⁺14]:

$$\tau_{SF,s}^{\gamma'} = J \cdot \left[\frac{2R_S |\gamma_{SF}^{\gamma} - \gamma_{SF}^{\gamma'}|}{bL_s} \right]. \quad (4.41)$$

γ_{SF}^{γ} und $\gamma_{SF}^{\gamma'}$ sind die SFE der Matrix- und γ' - Phase und werden in Kapitel 5.2.7 angegeben.

Der Grenzflächenenergieeffekt hat infolge des geringen Zuwachses an Grenzfläche je Schneidvorgang ($2b$) nur einen geringen Festigkeitsbeitrag im IN718. Nach Gleichung 2.4 und 2.5 ergibt sich für schwache und starke Ausscheidungen die Schubspannung nach [APKO⁺14]:

$$\tau_{GF,w}^{\gamma'} = \frac{2\Omega_w}{bL_w} \cdot \left[\frac{b\gamma_{GF}}{\Omega_w} \right]^{3/2}, \quad (4.42)$$

$$\tau_{GF,s}^{\gamma'} = J \cdot \left[\frac{2\gamma_{GF}}{L_s} \right]. \quad (4.43)$$

γ_{GF} wird mit MatCalc[©] berechnet (siehe Kap. 5.2.7).

Der Schubmoduleffekt wird nach dem Modell von Nembach für schwache ($\tau_{S,w}$) und nach Ardell für starke ($\tau_{S,s}$) Partikel mit [Nem83, Ard85, KN71, APKO⁺14, APKW⁺14]:

$$\tau_{S,w}^{\gamma'} = \frac{2\Omega_w}{bL_w} \cdot \left[\frac{\omega_1 b^2 |G_{111}^{\gamma'} - G_{111}^{\gamma}|}{2\Omega_w} \right]^{3/2} \cdot \left[\frac{R_S}{b} \right]^{1.5\omega_2}, \quad (4.44)$$

$$\tau_{S,s}^{\gamma'} = J \cdot \left[\frac{\omega_1 b^2 |G_{111}^{\gamma'} - G_{111}^{\gamma}|}{bL_s} \right] \cdot \left[\frac{R_S}{b} \right]^{\omega_2} \quad (4.45)$$

berechnet. Der Schubmodul G_{111}^j der Phasen j wird in Kapitel 5.2.5 angegeben. Für ω_1 wird ein Wert zwischen 0,0175 und 0,0722 und ω_2 ein Wert mit $0,81 \pm 0,09$ angenommen [Nem83]. Im Modell wird $\omega_1 = 0,0449$ und $\omega_2 = 0,81$ verwendet.

4.3.7 Berechnung der γ'' - Ausscheidungshärtung

Das gesamtheitliche Modell zur Berechnung der γ'' - Ausscheidungshärtung berücksichtigt die Regime der schwachen und starken Partikel- Versetzungsinteraktion, die Eigenheiten der γ'' - Kristallografie, die Anwesenheit der Orientierungsvarianten und kombiniert alle Härtungsmechanismen. Die einzelnen existierenden Modellansätze von Oblak et al., Sundararaman et al. und Chaturvedi et al. werden an entsprechender Stelle implementiert und erweitert [OPD74b, OPD74a, SMB88a, CF83].

Folgende Größen der Modellgleichungen werden in Abhängigkeit von der Thermokinetiksimulation nach den angegebenen Gleichungen berechnet: a^{γ} , $a^{\gamma''}$, b , $\varepsilon_i^{\gamma''}$, $\Omega_{w/s}$, R_Z bzw. D_Z , $f_{\gamma''}$, $L_{Z,w}$ und $L_{Z,s}$. $J = 1$ für das schwache und $J = 0,8$ für das starke Partikel-Versetzungssregime [Ard85, LWN15].

Dem Kohärenzeffekt wird der größte Festigkeitsbeitrag zugesprochen [OPD74a, CF83]. Die Modellgleichungen von homogenen sphärischen Ausscheidungen können nicht für die γ'' - Phase übernommen werden [OPD74a]. Ursache dafür ist das inhomogene Verzerrungsfeld ($\varepsilon_3^{\gamma''} \gg \varepsilon_{1=2}^{\gamma''}$) um die Partikel und die Ausbildung von drei Orientierungsvarianten (V1-3) (siehe Abb. 4.8a) [OPD74b, OPD74a]. Die Anwesenheit der Varianten kann über den Eigenspannungszustand oder den externen Spannungszustand in der Wärmebehandlung gesteuert werden und muss für die Berechnung bekannt sein [OPD74a]. Die Widerstandskraft der Partikel ist vom Winkel zwischen Burgersvektor und der Hauptachse der Gitterverzerrung abhängig [OPD74b, APKS⁺14, ASPK⁺14]. Aufgrund dessen liefert jede Variante bei der Interaktion mit dem jeweiligen Versetzungstyp einen unterschiedlichen Festigkeitsbeitrag. Der Einfluss des Versetzungstyps und der Orientierungsvarianten ist bei Oblak et al. für nicht-sphärische Ausscheidungen diskutiert [OPD74b, OPD74a]. Die von Oblak abgeleitete Beschreibung berücksichtigt Schrauben- und Stufenversetzungen und deren Orientierung zur Hauptachse der Gitterverzer-

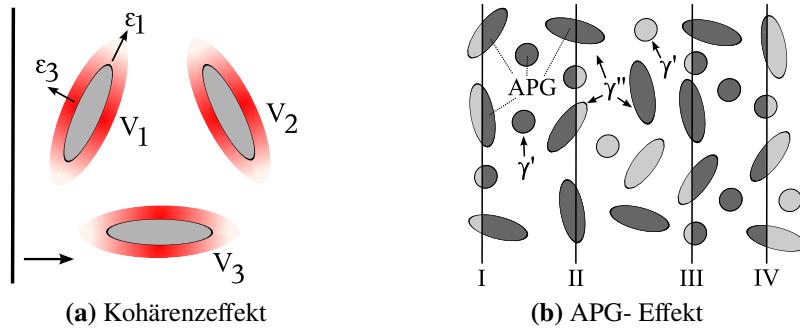


Abbildung 4.8: Schema der Versetzungswechselwirkung mit γ'' - Varianten (a) Kohärenzeffekt für inhomogene Gitterverzerrung ε_i und (b) APG- Effekt mit Ausbildung der APG für Versetzungs-paar und -vierling nach [OPD74a, ASPK⁺14]

rung. Die Widerstandskraft wird dabei aus der Interaktionsenergie zwischen dem Spannungsfeld einer geraden Versetzung und der Gitterverzerrung der Ausscheidung abgeleitet. Die gesamte abgeleitete mittlere Festigkeitssteigerung berechnet sich für schwache γ'' - Partikel nach [OPD74b, OPD74a]:

$$\tau_{K,w}^{\gamma''} = 1,7G_{111}|\varepsilon_3^{\gamma''}|^{3/2} \cdot \left[\frac{\kappa^2 D_Z f_{\gamma''}(1-p)}{4b} \right]^{1/2}. \quad (4.46)$$

Der Schubmodul G_{111} der Matrix wird in Kapitel 5.2.5 angegeben. $\varepsilon_3^{\gamma''}$ wird aufgrund der geringen Höhe vernachlässigt. Entscheidende Erweiterung des Modells ist die Beschreibung von κ und $\varepsilon_3^{\gamma''}$ in Abhängigkeit von der Wärmebehandlung bzw. der Partikelgröße. Der Parameter p berücksichtigt den Festigkeitseinfluss der Variantenanzahl [OPD74a]. Die maximale Festigkeit wird bei einer Auslagerung unter Zugspannungen erreicht. In diesem Zustand ist nur eine Orientierungsvariante anwesend und p ist 0. Im spannungsfrei ausgelagerten Werkstoff sind alle drei räumlichen Varianten anwesend. In diesem Fall wirken zwei Orientierungen festigkeitssteigernd, sodass $p = 1/3$ ist. Auslagerung unter Druckspannung liefert die geringste Festigkeit bei der zwei Varianten anwesend sind ($p = 0,5$).

Im Regime starker Partikel- Versetzungsinteraktion ist die Widerstandskraft so groß, dass die Krümmung der Versetzung nahezu $\chi_c \approx 0$ erreichen kann, ohne dass die Partikel die Gleitebene schneiden müssen. Für die Abstandsabhängigkeit zwischen Gleitebene und Partikelzentrum wird von Brown et al. ein relevantes Abstandsintervall definiert [KN71]. Die Integration über dieses Intervall ermöglicht Ardell die Berechnung der resultierenden Schubspannung [Ard85]. Hiervon ausgehend wird in dieser Arbeit die nicht-sphärischen Morphologie über Gleichung 4.13 und die einzelnen Orientierungsvarianten über p implementiert. Dies erlaubt näherungs-

weise die Berechnung der Schubspannung für die γ'' -Phase:

$$\tau_{K,s}^{\gamma''} = 1,2J \sqrt{f_{\gamma''}(1-p)} \cdot \left[\frac{\pi^3 \Omega_s^3 G_{111} \epsilon_3^{\gamma''}}{64b^3 R_z^3} \right]^{1/4}. \quad (4.47)$$

Der Antiphasengrenzeffekt beschreibt den Härtungseffekt eines Versetzungspaares in der Gleitrichtung $a/2$ $[\bar{1}10]$ und eines Versetzungsvierlings in den beiden anderen Gleitrichtungen (vgl. Abb. 4.8b). Die Berechnung erfolgt für kleine Partikel anhand der Modellgleichungen von Oblak et al. für ein Versetzungspaar nach Gleichung 4.48 und für einen Vierling nach Gleichung 4.49. Im Falle des Versetzungspaares unterscheidet Oblak et al. zwischen den drei Orientierungsvarianten. Es muss ergänzend berücksichtigt werden, dass ein Versetzungspaar nur in einer von drei möglichen Gleitebenen eine APG erzeugt. In den beiden anderen Gleitebenen wird von der Bildung eines SF durch die $C\delta$ -Partialversetzung ausgegangen. Dieser Effekt wird über einen in dieser Arbeit eingeführten Korrekturfaktor von $1/3$ vereinfacht berücksichtigt. Der gesamte Einfluss von Versetzungspaar und -vierling wird über die in der Arbeit eingeführte geometrischen Summe nach Gleichung 4.50 mit $q = 1,8$ für kleine Ausscheidungen berechnet [OPD74a, APKO⁺14].

$$\tau_{APG,w}^{Duo} = \frac{1}{3} \cdot \frac{\gamma_{APG}^{[\bar{1}10]}}{2b} \cdot \left[\left(\frac{4f_{\gamma''} R_z \gamma_{APG}^{[\bar{1}10]}}{\pi \Omega_w} \right)^{1/2} - p \cdot f_{\gamma''} \right] \quad (4.48)$$

$$\tau_{APG,w}^{Quad} = \frac{\gamma_{APG}^{[10\bar{1}]} }{4b} \cdot \left[\left(\frac{4f_{\gamma''} R_z \gamma_{APG}^{[10\bar{1}]} }{\pi \Omega_w} \right)^{1/2} - f_{\gamma''} \right] \quad (4.49)$$

$$\tau_{APG,w}^{\gamma''} = \left[\left(\tau_{APG,w}^{Duo} \right)^q + \left(\tau_{APG,w}^{Quad} \right)^q \right]^{1/q} \quad (4.50)$$

Die Berechnung für große Partikel erfolgt in Analogie zu kleinen Partikeln für ein Versetzungspaar nach Gl. 4.51 und einen Vierling nach Gl. 4.52 basierend auf den bei Ahmadi et al. publizierten Ansatz. Für die γ'' -Phase müssen der Partikelradius und -abstand durch die Formulierungen in den Gleichungen 4.13 und 4.14 ersetzt werden. Die Gesamthärtung ergibt sich über Gleichung 4.53.

$$\tau_{APG,s}^{Duo} = \frac{1}{3} \cdot \frac{2wJ\Omega_s}{\pi b L_{Z,s}} \cdot \left[\left(\frac{\pi R_z \gamma_{APG}^{[\bar{1}10]}}{w\Omega_s} \right) - p \right]^{1/2} \quad (4.51)$$

$$\tau_{APG,s}^{Quad} = \frac{2wJ\Omega_s}{2\pi b L_{Z,s}} \cdot \left[\left(\frac{\pi R_z \gamma_{APG}^{[10\bar{1}]} }{wL_{Z,s}} \right) - 1 \right]^{1/2} \quad (4.52)$$

$$\tau_{APG,s}^{\gamma''} = \left[\left(\tau_{APG,s}^{Duo} \right)^q + \left(\tau_{APG,s}^{Quad} \right)^q \right]^{1/q} \quad (4.53)$$

p ist 0, 1/3 oder 0,5 für die Anwesenheit der Orientierungsvarianten bei Auslagerung unter Zugspannung, ohne externen Spannungseinfluss oder Druckspannungen. In der Dissertation wird zwischen $\gamma_{APG}^{[110]}$ und $\gamma_{APG}^{[101]} = \gamma_{APG}^{[011]}$, den APG- Energie der jeweiligen kristallografischen Richtung, unterschieden. Entsprechende Werte werden in Kapitel 5.2.7 angegeben. Der Korrekturfaktor $w = 2$ berücksichtigt Modellbeschränkungen, welche aus der Beschreibung der APG-Größe in den Partikeln resultieren [Ard85, Ree06, APKO⁺14].

Der Stapelfehlereffekt wird entsprechend der γ' - Gleichungen beschrieben. Für die γ'' - Phase müssen der Partikelradius und -abstand durch die Formulierungen in den Gleichungen 4.13 und 4.14 ersetzt werden. Für kleine Ausscheidungen ergibt sich:

$$\tau_{SF,w}^{\gamma''} = \frac{2 \Omega_w}{bL_{Z,w}} \cdot \left[\frac{R_Z |\gamma_{SF}^{\gamma} - \gamma_{SF}^{\gamma''}|}{\Omega_w} \right]^{3/2}. \quad (4.54)$$

Für große Partikel ergibt sich $\tau_{SF,s}^{\gamma''}$:

$$\tau_{SF,s}^{\gamma''} = J \cdot \left[\frac{2R_Z |\gamma_{SF}^{\gamma} - \gamma_{SF}^{\gamma''}|}{bL_{Z,s}} \right]. \quad (4.55)$$

γ_{SF}^{γ} und $\gamma_{SF}^{\gamma''}$ sind die SFE der Matrix- und γ'' - Phase und werden in Kapitel 5.2.7 angegeben.

Der Grenzflächenenergieeffekt wird analog der γ' - Modellgleichungen berechnet. Der Partikelabstand ist für die γ'' - Phase durch die Formulierung in der Gleichung 4.14 zu beschreiben:

$$\tau_{GF,w}^{\gamma''} = \frac{2 \Omega_w}{bL_{Z,w}} \cdot \left[\frac{b \gamma_{GF}^{\gamma''}}{\Omega_w} \right]^{3/2} \quad (4.56)$$

$$\tau_{GF,s}^{\gamma''} = J \cdot \left[\frac{2 \gamma_{GF}^{\gamma''}}{L_{Z,s}} \right] \quad (4.57)$$

Die Grenzflächenenergie γ_{GF} wird in MatCalc[©] mit dem Grenzflächenenergiemodell berechnet (siehe Kap. 5.2.7).

Der Schubmoduleffekt wird analog der γ' - Modellgleichungen beschrieben. In den Gleichungen werden der Partikelradius und -abstand durch die Formulierungen in den Gleichungen 4.13

und 4.14 auf die γ'' - Phase angepasst:

$$\tau_{S,w}^{\gamma''} = \frac{2\Omega_w}{bL_{Z,w}} \cdot \left[\frac{\omega_1 b^2 |G_{111}^{\gamma''} - G_{111}^{\gamma}|}{2\Omega_w} \right]^{3/2} \cdot \left[\frac{R_Z}{b} \right]^{1,5\omega_2}, \quad (4.58)$$

$$\tau_{S,s}^{\gamma''} = J \cdot \left[\frac{\omega_1 b^2 |G_{111}^{\gamma''} - G_{111}^{\gamma}|}{bL_{Z,s}} \right] \cdot \left[\frac{R_Z}{b} \right]^{\omega_2}. \quad (4.59)$$

Der Schubmodul G_{111}^{γ} wird in Kapitel 5.2.5 angegeben. Für ω_1 und ω_2 wird nach Nembach 0,0449 und 0,81 verwendet [Nem83].

4.3.8 Berechnung des Orowaneffektes

Der nicht-schneidende Festigkeitsbeitrag der Ausscheidungshärtung für große Ausscheidungen wird über den Orowanmechanismus beschrieben. In diesem Regime kann die Versetzung die Partikel nicht mehr schneiden und krümmt sich an deren Oberfläche so stark, dass sie die Partikel unter Bildung eines Versetzungsringes umschließt, sich losreißt und weiter wandern kann. Mit der Widerstandskraft der Partikel ($F_m = 2\Omega_s \cos(\chi_c/2)$) und der Gleichung 2.5 ergibt sich die Orowan Schubspannung für sphärische Ausscheidungen [Ard85]:

$$\tau_{Oro}^{\gamma'} = J \cdot \left[\frac{2\Omega_s}{bL_s} \right]. \quad (4.60)$$

Ω_s und L_s werden nach Gleichung 4.16 und 4.11 aus den berechneten thermokinetischen Daten bestimmt.

Für nicht-sphärische Ausscheidungen ändert sich die Morphologie und der Abstand der Partikel in der Gleitebene, wodurch Gleichung 4.60 den Orowanmechanismus deutlich unterschätzt. Analysen von Kelly zeigen, dass scheibenförmige Ausscheidungen doppelt so effektiv sind und der Festigkeitsbeitrag mit Volumenanteil $f_{\gamma''}$ und Formfaktor κ steigt [Kel72]. Die Berechnung erfolgt anhand der von Kelly aufgestellten Gleichung mit [Kel72]:

$$C = \left[\left(\frac{f_{\gamma''}}{\kappa} \right)^{1/2} + \left(\frac{2}{\pi} - \frac{\pi\kappa}{2} \right) \cdot \left(\frac{f_{\gamma''}}{\kappa} \right) \right], \quad (4.61)$$

$$\tau_{Oro}^{\gamma''} = \frac{JbG_{111}}{2\pi\sqrt{1-\nu}} \cdot \left[\frac{C}{D_Z(1-0,5\pi\kappa C)} \right] \cdot \ln \left[\frac{\sqrt{2/3}D_Z}{r_i} \right]. \quad (4.62)$$

D_Z und b werden aus den Ergebnissen der Thermokinetiksimulation abgeleitet. $J = 0,8$, $\nu = 0,33$ und $r_i = 2b$. Der Schubmodul G_{111} wird in Kapitel 5.2.5 angegeben.

4.4 Einfluss der kristallografischen Materialtextur

Der Herstellungsprozess eines Werkstoffes definiert spezifische morphologische und kristallografische Texturen. Diese Texturen steuern die Richtungsabhängigkeit von Eigenschaften wie Steifigkeit, Streckgrenze oder Verfestigungsverhalten. Für den in dieser Arbeit angestrebten texturbereinigten Vergleich zwischen Experimenten an unterschiedlich texturierten Materialien und dem entwickelten Festigkeitsmodell muss die makroskopische Streckgrenze R_p in eine auf dem Gleitsystem für alle gleich wirkende kritische Schubspannung τ_{ges} umgerechnet werden. Diese Umrechnung erfolgt für jedes Gleitsystem nach dem Schmid'schen Schubspannungsgesetz:

$$\tau = \sigma \cdot \cos(\zeta) \cos(\xi) = \sigma \cdot m_s. \quad (4.63)$$

ζ und ξ beschreiben den Winkel zwischen Zugachse und Gleitrichtung (\vec{u}) bzw. Gleitebenennormalen (\vec{e}) (siehe Abb. 4.9a). Das Produkt $\cos(\zeta) \cos(\xi)$ ist der Schmid-Faktor m_s .

Die Ausrichtung des Kristallgitters zur äußeren Belastung steuert die Aktivierung und Interaktion einzelner Gleitsysteme, wobei das Gleitsystem mit dem höchsten Schmidfaktor zuerst aktiviert wird. m_s nimmt in Abhängigkeit von der Lage der Belastungsrichtung im Standardorientierungsdreieck unterschiedliche Werte an (siehe Abb. 4.9b). Dabei erfolgt die Verformung für die Eckorientierungen $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ und $\langle 111 \rangle$ theoretisch auf dem primären Gleitsystem [Got07]. Für alle abweichenden Orientierungen findet eine zunehmende Verfestigung auf

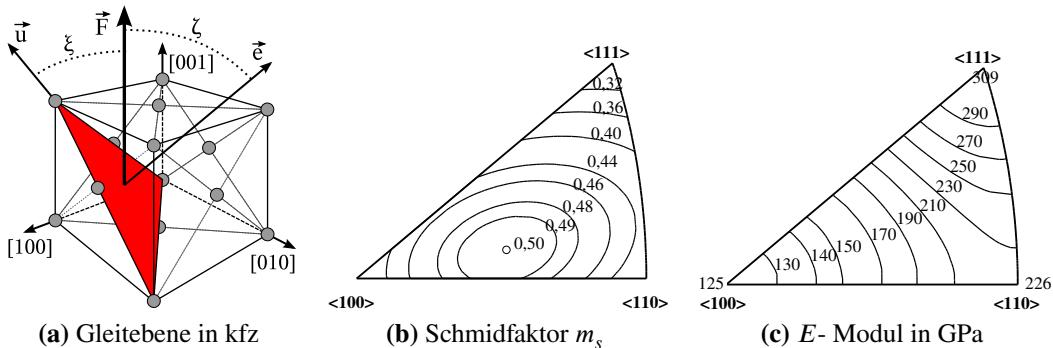


Abbildung 4.9: (a) verformungsrelevante Gleitebene in kfz- Gitter nach Schmid'schem Schubspannungsgesetz, Niveaulinien des (b) Schmidfaktors und (c) E- Moduls im Standarddreieck für kfz- Gitter nach [HSHB96, SKG01]

sekundären Gleitsystemen statt. Für den γ'' - gehärteten IN718 muss berücksichtigt werden, dass die Ausscheidungshärtung auf dem Gleitsystem von der Orientierung der Partikel zum Gleitsystem (Ausscheidungsvariante), der Versetzungsanzahl auf dem Gleitsystem, dem Versetzungstyp und der inhomogenen Gitterverzerrung abhängt. Diese Einflüsse können zur Aktivierung eines Gleitsystems mit geringerem Schmidfaktor führen, wenn auf diesem der ausscheidungshärtende Effekt geringer ist. Eine genaue Analyse dieser Effekte ist nur mit aufwendigen Messungen und

Berechnungsmodellen möglich, sodass nur eine Abschätzung in dieser Arbeit möglich ist. Aufgrund dieser Komplexität wird für das einkristalline Probenmaterial in Kapitel 5.3.3 die Lage im Standarddreieck angegeben. Anhand der Orientierung wird ein mittlerer Schmidfaktor für ein, drei und fünf aktive Gleitsysteme vergleichend bestimmt und ein probenspezifischer m_s abgeleitet.

Im polykristallinen Material ist aufgrund der individuellen Form und kristallografischen Ausrichtung die Verformung in jedem Korn verschieden. Die Verformungskompatibilität des Kornverbundes wird durch die Aktivierung unabhängiger Gleitsysteme sichergestellt. Dadurch wird das Verfestigungsverhalten und die Texturentwicklung gesteuert. Für die Bestimmung eines Texturfaktors $M = 1/\bar{m}_s$ existieren zwei etablierte Ansätze, welche die Ober- und Untergrenze für M abstecken. Taylor leitet seinen Texturfaktor für eine regellose Orientierungsverteilung (eine sogenannte graue Textur) aus fünf Gleitsystemen, deren Gesamtscherung minimal ist, mit $M = 3,06$ ab [Tay38]. In Anlehnung an die Einkristallverformung ist der Sachs-Faktor mit $M = 2,24$ der Mittelwert aus dem höchsten Schmidfaktor je Korn [Sac28]. Gegenüber diesen beiden Ansätzen zeigen kristallplastische Studien von Clausen et al., dass in kfz- Metallen im Mittel ca. 3,4 Gleitsysteme bis zum Erreichen der Streckgrenze aktiv sind und die Anzahl erst oberhalb von 0,2 % plastischer Dehnung zunimmt [CLL98]. Der von Clausen et al. abgeleitete Texturfaktor liegt mit 2,6 zwischen Taylor- und Sachs- Modell.

Im Rahmen dieser Arbeit werden keine kristallplastischen Rechnungen durchgeführt. Stattdessen werden in erster Näherung ein kornflächengewichteter Texturfaktor und E- Modul aus den gemessenen EBSD- Daten abgeleitet. Die Kristall- bzw. Kornorientierung wird über die drei Eulerwinkel der EBSD-Messung definiert. Unter Verwendung der Bunge Konvektion kann eine Orientierungsmatrix bestimmt und so die Orientierung jedes einzelnen Korns im Bezug zu beliebig anderen lokalen Kristallsystem ermittelt werden (bspw. im Bezug zur Belastungsrichtung) (siehe auch [FKA⁺14]). Aus den EBSD- Daten und der Belastungsrichtung werden so je Korn die möglichen Schmidfaktoren und der E- Modul abgeleitet. Der mittlere Texturfaktor M bzw. \bar{m}_s wird aus dem mittleren Schmidfaktor \bar{m}_s^i je Korn i nach Gleichung 4.64 abgeleitet:

$$\frac{1}{M} = \bar{m}_s = \sum_{i=1}^n \frac{A_i}{A_{ges}} \bar{m}_s^i = \sum_{i=1}^n \frac{A_i}{A_{ges}} \left(\sum_{j=1}^n m_{s,j}^i \right). \quad (4.64)$$

Die einzelnen Schmidfaktoren ergeben sich aus der gemessenen Kristallorientierung im Bezug zur Belastungsrichtung der Probe (Ergänzungen in Kap. B.5 und [FKA⁺14]). \bar{m}_s^i berechnet sich aus j Gleitsystemen je Korn i . In Anlehnung an die Ergebnisse von Clausen et al. entspricht j den drei am besten orientierten Gleitsystemen im Korn i . Vergleichend dazu wird \bar{m}_s für fünf Gleitsysteme angegebenen (siehe Kap. 5.3.4). A_i/A_{ges} ist der Quotient aus der jeweiligen Kornfläche zur Gesamtfläche.

Neben der Ausrichtung der Gleitebenen zur Belastungsrichtung haben die richtungsabhängigen elastischen Eigenschaften der kfz- Einheitszelle der Ni- Basislegierung einen Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften. Die Richtungsabhängigkeit ist über die Niveaulinien im Standarddreieck in Abbildung 4.9c dargestellt [HSHB96, SKG01]. Der mittlere E- Modul je Probe berechnet sich aus dem kornflächengewichteten E- Modul E^i je Korn i :

$$\bar{E} = \sum_{i=1}^n \frac{A_i}{A_{ges}} \cdot E^i. \quad (4.65)$$

E^i wird aus der gemessenen Orientierung, der Belastungsrichtung und den publizierten, richtungsabhängigen E- Moduldaten nach [HSHB96, SKG01] berechnet (vgl. Kap. B.5, [FKA⁺14]). Für die experimentellen Daten und die Berechnungen wird angenommen, dass die Orientierungsänderung des Kristalles bis zur Streckgrenze vernachlässigt werden kann und der probenspezifische Texturfaktor konstant bleibt. Für die Modelle der Mischkristall- und Feinkornhärtung ist zu beachten, dass die Modellkonstanten unter Annahme des Taylorfaktors ermittelt wurden. Aus diesem Grund wird in der Festigkeitsrechnung nur für diese beiden Ansätze der Taylorfaktor verwendet. Alle anderen Festigkeitsbeiträge werden mit $M = 2, 6$ oder dem materialspezifischen Texturfaktor berechnet.

5. Ergebnisse

5.1 Vorgehen und Aufbau der Simulationskette

Die in dieser Arbeit entwickelte Simulationskette verbindet den Herstellprozess mit den Werkstoff- und Festigkeitseigenschaften von IN718. Der durchlaufene Strukturplan ist in Abbildung 5.1 dargestellt und zeigt die notwendigen Eingaben und Ausgaben sowie die einzelnen Validierungsstufen der Methoden. Die Eingangsgrößen der Simulation werden in Kapitel 5.2 anhand von Literaturdaten bewertet bzw. aus Literaturdaten abgeleitet. Als Referenz für die Bestimmung von κ , a_i^j , δ_i^j , ε_i^j werden Auslagerungsversuche von Slama et al. verwendet, welche im Anhang D.5 näher beschrieben sind [SSC97, SA00].

Die Charakterisierung der Versuchsmaterialien IN718-Matrix-SX, IN718-SX und IN718-SLM wird in Kapitel 5.3 vorgenommen. Neben den simulationsgestützten Vorarbeiten zu den Fertigungsparametern und Temperaturfeldern des SLM- Prozesses in Kapitel 2.2, wird in Kapitel 5.3.2 experimentell ein sicheren Prozessfenster ermittelt und zwei Fertigungsparameter für das SLM- Material abgeleitet. Die Auswertung der kristallografischen und der morphologischen Textur erfolgt anhand von EBSD- Messungen in Kapitel 5.3.3 und 5.3.4 .

Die phänomenologischen Modelle zur Definition einer prozessspezifischen Homogenisierung von IN718-SLM und IN718-SX kombinieren Erstarrungsstrukturen, Segregationsprofile und Erstarrungsphasen mit einem temperatur- und zeitabhängigen Diffusionsausgleich. Die Ergebnisse und Validierungen für IN718-SLM und IN718-SX sind in Kapitel 5.4 dargestellt.

Die thermokinetische Beschreibung von IN718 erfolgt in MatCalc[©] und ist in Kapitel 5.5 beschrieben. Neben der programminternen Umsetzung sind die IN718 spezifische Beschreibung der Eingabegrößen für die Keimbildung (T_{krit}), die Morphologie (κ), das Partikelwachstum und die Phasentransformation wichtige Erweiterungen dieser Arbeit. Die schrittweise Validierung der Datenbanken und Simulationsergebnisse ermöglicht eine Bewertung der Resultate.

In der Festigkeitssimulation werden die Berechnung der Versetzungslienspannung, Gitterparameter, die Fehlpassung und Gitterverzerrung zwischen Matrix und Ausscheidungen sowie Gitterenergien für die Antiphasengrenze, Stapelfehler und Grenzfläche in Abhängigkeit von der Chemie und Wärmebehandlung für die γ -, γ' - und γ'' - Phasen implementiert. Der Modellausbau für die γ'' - Phase, die Kopplung von γ' - und γ'' - Phase sowie die Kopplung aller Härtungseffekte unter Berücksichtigung der morphologischen und kristallografischen Materialtextur sind entscheidende werkstoffspezifische Erweiterungen der Dissertation. Die Ergebnisse sind in Kapitel 5.6.1 bis 5.6.4 dargestellt.

Entscheidend für die Simulationskette ist die Kopplung der Berechnung von Phasenkinetik und Härtungseffekten und die dafür notwendige Morphologiebeschreibung der Partikel.

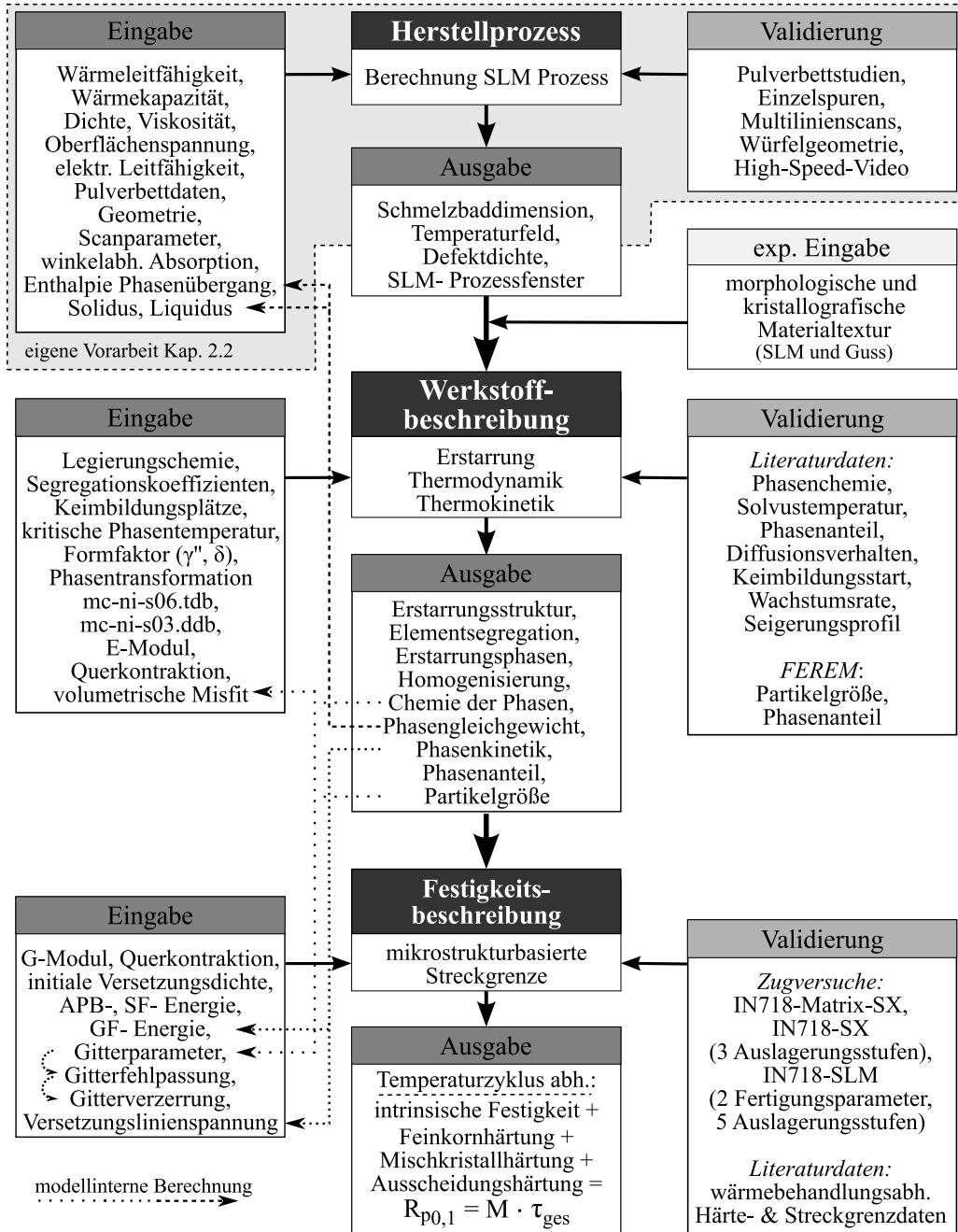


Abbildung 5.1: Flussbild der Simulationskette mit Ein- und Ausgabe sowie deren Validierung

Die Größen f_i , D_z , R_k , c_i^j , κ werden für den gesamten thermokinetischen Zyklus in MatCalc[©] berechnet und mittels ASCII-Dateien in das Festigkeitsmodell transferiert. Das Ergebnis dieser Methodenkopplung ist in Kapitel 5.7 beschrieben. Die Validierung erfolgt an publizierten Härtkurven (Kap. 5.7.1) und an publizierten sowie gemessenen Streckgrenzdaten (Kap. 5.7.2). Abschließend wird die Sensitivität der wichtigsten Modellergebnisse und -parameter in Kapitel 5.7.3 untersucht. Daraus lassen sich die Signifikanz und die Genauigkeitsanforderungen einzelner Parameter und Berechnungsergebnisse ableiten.

5.2 Definition der Eingangsgrößen der Simulationskette

5.2.1 Formfaktor der γ'' - Phase

Die verwendeten Modelle von Phasenkinetik- und Festigkeitssimulation erlauben keine örtliche bzw. morphologische Auflösung der Ausscheidungen. In den Modellen kann der beobachtete γ'' - Morphologieeinfluss nur durch einen durchmesserabhängigen Formfaktor $\kappa = H_z/D_z$ beschrieben werden. Der Formfaktor wird aus publizierten gemessenen Partikeldimensionen abgeleitet (vgl. Anhang C.8). Abbildung 5.2a dokumentiert den starken Abfall des Formfaktors κ der γ'' - Phase bis zu einem Partikeldurchmesser von ca. 50 nm mit einem anschließend konstanten Niveau zwischen 0,15 und 0,2 für größere Partikel. Mit Phasen-Feld Simulationen bestimmte Werte zeigen den gleichen Trend, sind jedoch etwas höher [ZLZ¹⁴]. Der Einfluss des Formfaktors in der Berechnung der Phasenkinetik wird exemplarisch für den Durchmesser der γ'' - Phase in Abbildung 5.2b gezeigt. Mit kleiner werdendem Formfaktor steigt die Wachstumsrate deutlich an. Vergleichsgrundlage für die Berechnung sind Auslagerungsversuche von Slama et al. (Details siehe Anhang D.5) [SSC97, SA00]. Der experimentell beobachtete, zunehmende Anstieg der Wachstumsrate kann nur durch die verwendete großenabhängige Funktion ($\kappa = f(D_z)$) in der Phasenkinetiksimulation abgebildet werden. Ursachen für diese großenab-

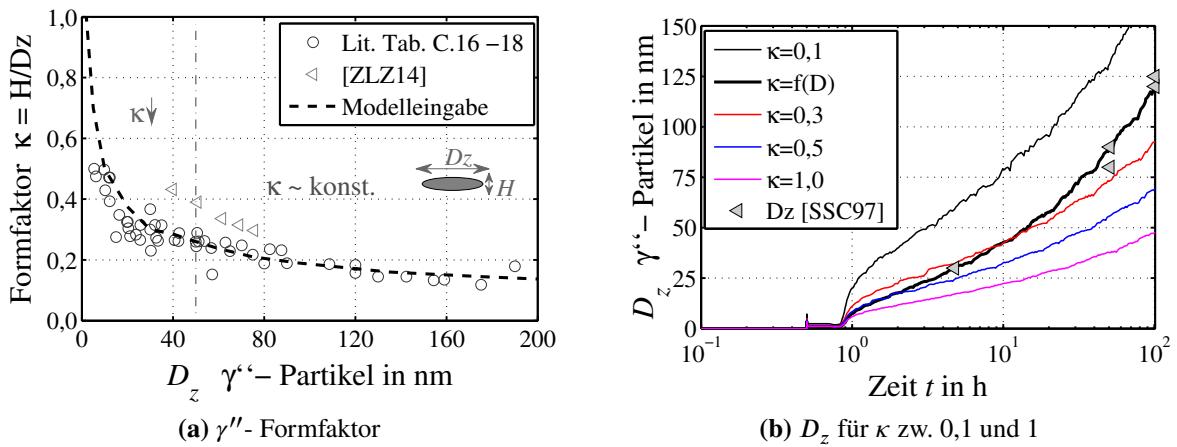


Abbildung 5.2: Formfaktor κ der γ'' - Phase: (a) Modelleingabe und Literaturdaten nach Tab. C.16 - C.18, (b) Auswirkung von κ auf die Berechnung vom γ'' - Durchmesser

hängige γ'' - Morphologie und dieses Wachstumsverhalten sind die im Folgenden dargelegten Größen wie Gitterparameter, Fehlpassung und Gitterverzerrung. Diese sind für die Berechnung der Keimbildung und Ausscheidungshärtung entscheidend.

5.2.2 T_{krit} Parameter für die γ' - und γ'' - Keimbildung

Die Keimbildung wird im Wesentlichen von der Höhe der Grenzflächenenergie und dem Grad der Matrixübersättigung kontrolliert. Letztere ergibt sich aus der Phasenchemie, dem Phasensolvus und der durch die Abkühlrate eingestellten Unterkühlung der Matrix. Für die Berechnung der Grenzflächenenergie muss in MatCalc[©] modellbedingt T_{krit} ermittelt werden (vgl. Gl.4.24). In dieser Arbeit wird T_{krit} anhand von publizierten DTA- Daten final definiert. In publizierten Experimenten wurden IN718 Proben mit einer Abkühlrate zwischen 5 K/min und 20 K/min von 1000 °C abgeschreckt [SSC97, NVL10, KHE16]. In der Berechnungen wird von 1000 °C abgeschreckt und T_{krit} zwischen 2000 K und 2800 K sowie die Abkühlraten zwischen 0,1 K/s und 1000 K/s variiert. Der “Onset“- Punkt des DTA- Signals entspricht der Ausscheidungsstarttemperatur T_{AS} und wird für das berechnete Signal ermittelt (vgl. Anhang Abb. D.6). Aus dem berechneten DTA- Signal wird T_{AS} in Abhängigkeit von T_{krit} und der Abkühlrate (\dot{T}) abgeleitet. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.3a dargestellt. T_{AS} sinkt mit steigendem T_{krit} und zunehmender Abkühlrate. Mit einem T_{krit} von 2500 K kann für versuchsnahen Abkühlraten die publizierte T_{AS} der γ' - und γ'' - Phase, welche zwischen 780 °C und 820 °C angegeben wird, gut abgebildet werden.

Die mit MatCalc[©] berechnete γ'' - Grenzflächenenergie im Keimbildungsstadium für $T_{krit} = 2500$ K beträgt 150 ± 7 mJ/m² und liegt in der Größenordnung publizierter Werte von 95 ± 10 mJ/m² für IN718 und 145 mJ/m² für die vergleichbare Ni_3Ta - Phase [DNM⁺08]. Die γ' -

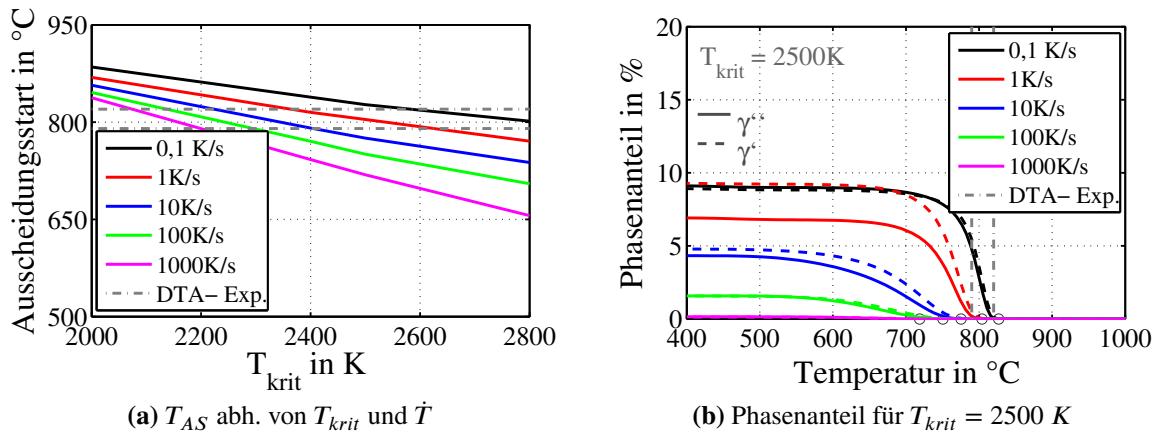


Abbildung 5.3: (a) berechnete T_{AS} in Abhängigkeit von T_{krit} und \dot{T} und (b) berechnete γ' - und γ'' - Phasenanteile für Abschreckvorgang von 1000 °C im Vergleich mit T_{AS} aus DTA- Versuchen (DTA-Exp.) nach [SSC97, NVL10, KHE16]

Grenzflächenenergie ist mit 128 ± 5 mJ/m² etwas niedriger. Das Ergebnis ist aufgrund der weniger komplexen γ' - Kristallstruktur plausibel. Das temperaturabhängige Berechnungsergebnis ist im Anhang D.4 ergänzt.

Für die jeweilige Abkühlrate ist der berechnete Phasenanteil beider Phasen identisch und sinkt

mit steigender Abkühlrate, wodurch das berechnete DTA- Signal immer schwächer wird (siehe Abb. 5.3b und Anhang Abb. D.6). Das oftmals publizierte Verhältnis von mindestens 2:1 stellt sich in diesen Fällen nicht ein (vgl. Kap. 5.5.3). Dies kann durch das träge Ausscheidungsverhalten der γ'' - Phase infolge des hohen volumetrischen Misfits und der Grenzflächenenergie begründet werden. Hieraus folgt, dass sich das Verhältnis der Phasenvolumenanteile über die Auslagerung einstellen muss. Dies wird in Kapitel 5.5.1 näher betrachtet.

5.2.3 Gitterparameter der Phasen in IN718

In Multikomponentenlegierungen werden die Gitterparameter einer Phase durch die Kristallstruktur, die Thermokinetik der Phasen und die lokale chemische Zusammensetzung des Materials, welche aus dem Herstellprozess und der Wärmebehandlung resultiert, gesteuert. In der Simulationskette wird der γ - und γ' - Gitterparameter in Abhängigkeit von der berechneten Phasenchemie über den gesamten Wärmebehandlungsprozess nach Gleichung 4.1 berechnet.

Im ersten Schritt wird die mittlere prozentuale Streuung der Gitterparameter a_i^j abhängig von den publizierten Vegard-Koeffizienten V_i^j und Basisgitterkonstanten a_0^j aus Tabelle 4.1 und eine mittlere gemessene bzw. simulierte Phasenchemie c_i^j nach Tabelle C.2 und C.3 bewertet. Die Streuung von a_i^j für die einzelnen V_i^j ist bei konstantem a_0^j für γ mit $< 0,08\%$ und für γ' mit $< 0,05\%$ gering. Die unterschiedlichen a_0^j haben den größten Einfluss mit einer a_i^j -Variation von $< 0,25\%$ für γ und $< 0,52\%$ für γ' . Der Unterschied, welcher sich aus gemessener und berechneter Phasenchemie für a_i^j ergibt, ist für $\gamma < 0,15\%$ und für $\gamma' < 0,3\%$.

Im zweiten Schritt wird der berechnete a_i^j mit publizierten Messdaten aus unterschiedlichen Wärmebehandlungsstufen verglichen. Die Messdaten sind im Anhang in Tabelle C.8 aufgelistet. In der thermokinetischen Berechnung wird von 1000 °C abgeschreckt und bei 750 °C ausgelagert. Im Vergleich zwischen Messdaten und Berechnung wird zwischen lösungsgeglühtem und ausgelagertem Zustand unterschieden. Die Abhängigkeit von der Auslagerungstemperatur wird für die Messdaten aufgrund der geringen Temperaturunterschiede vernachlässigt. Berechnungsdetails bezüglich der γ - und γ' - Phasenchemie sind im Anhang D.5 dargestellt. Die mit MatCalc[©] berechnete γ - Chemie stimmt im ausscheidungsfreien Zustand mit Literaturdaten überein. Im ausgelagerten Zustand ist im Vergleich mit Messdaten der berechnete Elementanteil von Nb um ca. 1 wt% und der von Ti um ca. 0,5 wt% in der γ - Phase zu gering. Die berechnete γ' - Chemie ist im ausgelagerten Zustand in Übereinstimmung mit Messdaten. Der niedrigere Fe- und Cr-Anteil ist vernachlässigbar. Basierend auf der simulierten Phasenchemie werden die γ - und γ' - Gitterparameter für die einzelnen V_i^j und a_0^j berechnet und in Abbildung 5.4 dargestellt. Der experimentell beobachtete Abfall des γ - Gitterparameters für die Auslagerung ist auf die Verarmung der Ausscheidungsbildner Nb, Ti und Al in der Matrix zurück zu führen und kann von der Berechnung abgebildet werden. Wird der γ - Gitterparameter mit den Vegard-Koeffizienten V_i^j

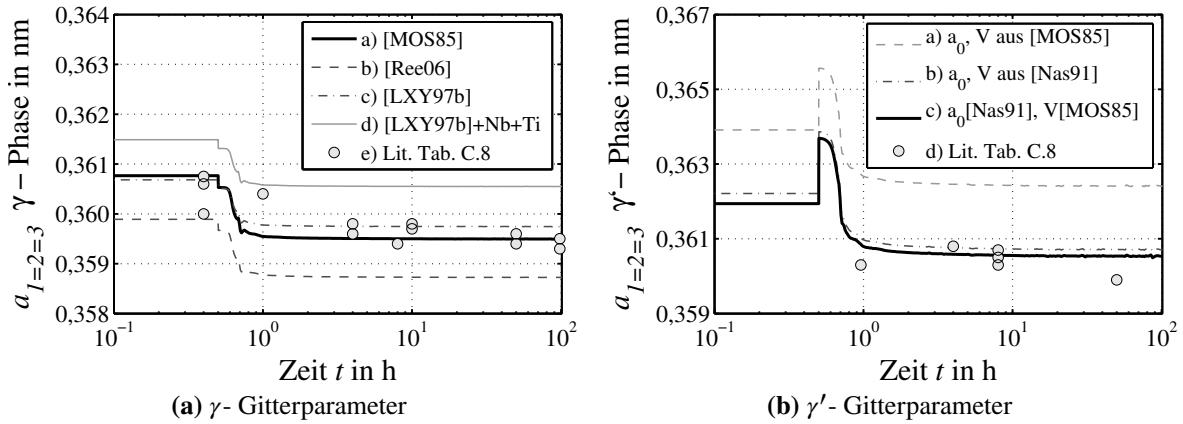


Abbildung 5.4: Berechnete a_i^j der γ - und γ' -Phase für verschiedene V_i^j , a_0^j nach Tabelle 4.1 für berechneten Auslagerungsversuch (Details in Anhang D.5), Literaturdaten in Tab. C.8

und der Basisgitterkonstante a_0^j von Mishima et al. nach Gleichung 4.1 gerechnet (vgl. Kurve a in Abb.5.4a) [MOS85], ist die Übereinstimmung mit Messdaten am besten. Für die Parameter von Liu et al. sind die Ergebnisse vergleichbar (Kurve c) [LXY⁺97b]. Für den Parametersatz von Reed et al. wird aufgrund des geringen $a_0^{\gamma'}$ der niedrigste Wert berechnet (Kurve b) [Ree06]. Wird der erhöht gemessene Nb- und Ti- Gehalt auf Basis der Parameter nach Liu et al. berücksichtigt, ergibt sich der maximale $a_i^{\gamma'}$ (Kurve d). Die gesamte Streubreite beläuft sich auf < 0,6 %.

Der gemessene γ' -Gitterparameter wird nur mit den Vegard-Koeffizienten V_i^j und der Basisgitterkonstante a_0^j aus Referenz [Nas91] gut abgebildet (Kurve b in Abb.5.4b). Aufgrund des erhöhten $a_0^{\gamma'}$ bei Mishima et al. werden die Messdaten überschätzt (Kurve a) [MOS85]. Mit dem geringeren $a_0^{\gamma'}$ stimmt das Ergebnis ebenfalls gut mit den Messdaten überein (Kurve c). Die Streubreite zwischen den Parametersätzen beläuft sich auf < 0,6 %. Wird der erhöht gemessene gegenüber dem berechneten Anteil an Nb, Ti und Al in der γ' -Phase berücksichtigt, liegen alle Parametersätze oberhalb der $a_i^{\gamma'}$ -Messdaten (vgl. Anhang Abb. D.9d). Der Ausschlag für $a_i^{\gamma'}$ während des Abschreck- und Aufheizvorganges (zwischen ca. 400 °C und 20 °C) ist auf eine modellbedingte Änderung der Phasenchemie infolge von Datenbankdefiziten zurückzuführen und wird vernachlässigt.

Die prozentual geringe Streubreite für a_i^j , welche aus V_i^j , a_0^j und c_i^j resultiert, beeinflusst die Höhe von δ_i^j und ε_i^j und wird im folgenden Kapitel dargestellt. In der Simulationskette werden $a_i^{\gamma'}$ und $a_i^{\gamma''}$ final mit dem einheitlichen Datensatz von Mishima für V_i^j und $a_0^{\gamma'} = 0,3524$ nm sowie $a_0^{\gamma''} = 0,3553$ nm berechnet.

Die γ'' -Gitterparameter können nur anhand von gemessenen Werten nach Slama et al. beschrieben werden [SSC97, SA00]. Aus den Messdaten wird eine, von der Partikelgröße abhängige, Funktion für $a_{1=2}^{\gamma''}$ und $a_3^{\gamma''}$ abgeleitet. Diese Funktion berechnet aus der simulierten γ'' -Partikelgröße der Phasenkinetik die Gitterparameter der γ'' -Phase. Der resultierende Verlauf ist in

Abbildung 5.5 dargestellt und kann den Trend der Messdaten für die Wärmebehandlung abbilden. Das Ergebnis zeigt einen leichten Anstieg für $a_3^{\gamma''}$ bis zu einer Partikelgröße von ca. 50 nm

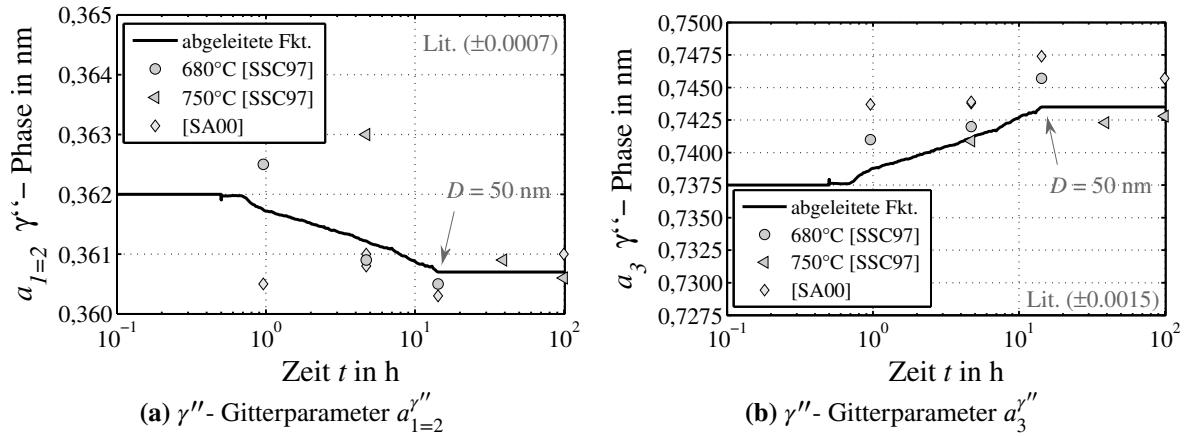


Abbildung 5.5: Abgeleiteter $a_i^{\gamma''}$ -Gitterparameterverlauf für berechneten Auslagerungsversuch (Details in Anhang D.5), γ'' -Messdaten in Tab. C.9

mit einem anschließend konstanten Niveau bis zu einer Größe von 120 nm nach 100 h. Der $a_{1=2}^{\gamma''}$ -Gitterparameter verhält sich dazu invers. Die Interpretation des Gitterparameterverlaufes erfolgt in Anlehnung an den Verlauf des Formfaktors, welcher ebenfalls ab einem Durchmesser von ca. 40 nm bis 60 nm konstant bleibt. Aufgrund der begrenzten Datenlage und einem fehlenden Gitterparametermodell stellt der γ'' -Gitterparameter $a_i^{\gamma''}$ eine kritische Größe in der Modellierung dar und muss im Kontext mit der abgeleiteten γ'' -Gitterverzerrung $\varepsilon_i^{\gamma''}$, der gesamten Ausscheidungshärtung der Phasen $\tau_{P,ges}$ und der gemessenen Festigkeit diskutiert werden.

5.2.4 Fehlpassung und Gitterverzerrung der Ausscheidungsphasen

Grundlage für die Analyse der Fehlpassung und Gitterverzerrung ist die berechnete Thermokinetik der Auslagerungsversuche nach Slama et al. (Details im Anhang D.5) [SSC97, SA00].

Die volumetrische Fehlpassung (δ_V^j) wird aus der berechneten Phasenchemie und Gitterparametern nach Gleichung 4.4 bestimmt. Die Ergebnisse für die komplette Wärmebehandlung sind in Abbildung 5.6a und 5.7a dargestellt. Da die volumetrische Fehlpassung nur für die Keimbildung von Bedeutung ist, wird in der Thermokinetiksimulation ein fester Wert von $\delta_V^{\gamma'} = 1,2\%$ und $\delta_V^{\gamma''} = 3,1\%$ hinterlegt. Für die δ -Phase wird ein Wert von $\delta_V^{\delta} = 4,9\%$ berechnet.

Die lineare Fehlpassung (δ_i^j) wird für den gesamten thermokinetischen Zyklus der Simulationskette auf Basis der berechneten Gitterparameter a_i^j nach Gleichung 4.5 berechnet. Als Vergleichsbasis wird eine aus gemessenen γ - und γ' -Gitterparametern berechnete Fehlpassung nach Gleichung 4.5 verwendet (a_i^{γ} und $a_i^{\gamma'}$ aus Abb. 5.4, Lit. Tab. C.8). Die Ergebnisse sind in

Abbildung 5.6a gegenüber gestellt. Die γ' - Fehlpassung $\delta_i^{\gamma'}$ ist für die gemessenen und berechneten Gitterparameter nahezu unabhängig von Auslagerungszeit bzw. Teilchengröße. Die aus den berechneten a_i^j abgeleitete Fehlpassung überschätzt die aus gemessenen a_i^j abgeleiteten Werte systematisch. Wird in der Berechnung von $\delta_i^{\gamma'}$ der minimal und maximal ermittelte Wert für a_i^j und $a_i^{\gamma'}$ aus Abbildung 5.4 berücksichtigt, variiert $\delta_i^{\gamma'}$ zwischen Werten $< 0,1\%$ und $> 1\%$. Die prozentuale Abweichung von $\delta_i^{\gamma'}$ wird gegenüber der geringen Streuung von $a_i^{\gamma'}$ signifikant größer, weshalb die Gitterparameter mit einer sehr hohen Genauigkeit bekannt sein müssen.

Die γ'' - Fehlpassung $\delta_i^{\gamma''}$ wird aus der berechneten γ'' - Partikelgröße, der großenabhangigen Funktion vom γ'' - Gitterparameter $a_i^{\gamma''}$ und dem berechneten γ - Gitterparameter nach Gleichung 4.5 bestimmt (siehe Abb. 5.7a). Die berechnete Fehlpassung steigt für die $a_3^{\gamma''}$ - Achse von ca. 2,3 % bei der Keimbildung auf 3,5 % im ausgelagerten Zustand an und fällt von 0,55 % auf 0,35 % für die $a_{(1=2)}^{\gamma''}$ - Achse im gleichen Intervall ab. Die aus gemessenen Gitterparametern abgeleitete

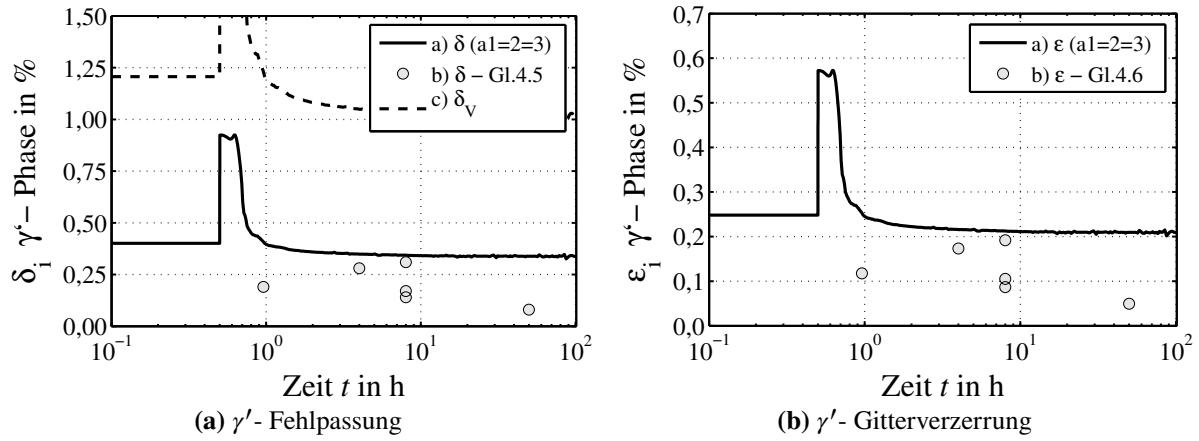


Abbildung 5.6: Fehlpassung $\delta_i^{\gamma'}$ und Gitterverzerrung $\varepsilon_i^{\gamma'}$ der γ' -Phase für berechneten Auslagerungsversuch (Details in Anhang D.5), Datenpunkte aus gemessenen Gitterparametern (vgl. Abb. 5.4) über Gl. 4.5 und 4.6 abgeleitet

Fehlpassung nach Gleichung 4.5 zeigt einen vergleichbaren Verlauf.

Die Gitterverzerrung (ε_i^j) wird für die γ' - Phase nach Gleichung 4.6 aus $\delta_i^{\gamma'}$ und für die γ'' - Phase nach Gleichung 4.6 aus $\delta_i^{\gamma''}$ und κ für den gesamten Wärmebehandlungszyklus berechnet. $\varepsilon_i^{\gamma'}$ verhält sich analog zur Fehlpassung $\delta_i^{\gamma'}$ und ist isotrop um die γ' - Teilchen in einer Höhe von ca. 0,2 % verteilt (siehe Abb. 5.6b). Die vergleichenden Datenpunkte werden aus gemessenen Gitterparametern aus Abbildung 5.4 nach Gleichung 4.6 abgeleitet und sind mit 0,1 % bis 0,2 % etwas niedriger als die berechneten Werte. Es ist ersichtlich, dass die Genauigkeit der berechneten Phasenchemie und der Gitterparameter entscheidend für die Berechnung der festigkeitsrelevanten Gitterverzerrung ist. Kleinste Abweichungen im Gitterparameter verursachen eine Schwankung von $\varepsilon_i^{\gamma'}$ um Faktor zwei bis drei.

Für die γ'' -Phase muss die Größenabhängigkeit des Formfaktors und des Gitterparameters berücksichtigt werden. $\delta_i^{\gamma''}$ ist aufgrund der Kristallstruktur und richtungsabhängigen Fehlpassung anisotrop. Für die $a_3^{\gamma''}$ -Achse steigt der Wert von ca. 1,5 % auf 3,4 % für Ausscheidungsgrößen von 0 nm bis ca. 120 nm (siehe Abb. 5.7b). Für die $a_{(1=2)}^{\gamma''}$ -Achse fällt der Wert von ca. 0,47 % auf 0,3 %. Hieraus resultiert das tetragonale Verzerrungsfeld um die Ausscheidungen, bei dem die

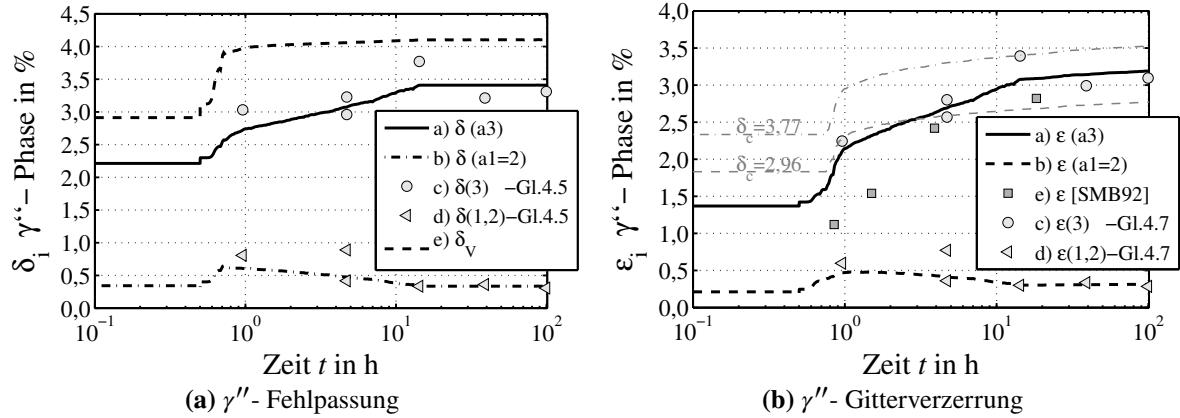


Abbildung 5.7: Fehlpassung δ_i^j und Gitterverzerrung ε_i^j der γ'' -Phase für berechneten Auslagerungsversuch (Details in Anhang D.5), Datenpunkte mit Formfaktor κ als $f(D_Z)$ und gemessenen Gitterparametern (vgl. Abb. 5.4) über Gl. 4.5 und 4.7 abgeleitet bzw. Messdaten nach [SMB92]

Spitzen der Partikel nahezu verzerrungsfrei sind. Dieses inhomogene Verzerrungsfeld steuert die Morphologieausbildung. Der Größenabhängige $\varepsilon_3^{\gamma''}$ -Verlauf kann das experimentell beobachtete Verhalten gut abbilden. Die aus gemessenen Gitterparametern bei Slama et al. abgeleitete Gitterverzerrung wird gut beschrieben [SSC97, SA00]. Die bei Sundararaman et al. gemessene Gitterverzerrung ist nur für sehr kurze Auslagerungszeiten geringer [SMB92]. Der bei Oblak et al. angegebene Wert von 2,8 % im ausgelagerten Zustand, stimmt mit dem berechneten Wert überein [OPD74a]. Werden die Größenabhängigen Gitterparameter nicht berücksichtigt und die Gitterverzerrung mit einer konstanten Fehlpassung berechnet, ist $\varepsilon^{\gamma''}$ lediglich vom Formfaktor κ abhängig. Die Abhängigkeit der Gitterverzerrung von der Teilchengröße bzw. Auslagerungszeit wird geringer. Beispielsweise sind in Abbildung 5.7b zwei Kurven für die minimale und maximale aus Messdaten ermittelte Fehlpassung dargestellt. Ohne die Berücksichtigung von κ ist $\varepsilon_i^{\gamma''}$ im gesamten Auslagerungsprozess konstant.

5.2.5 Elastische Konstanten

Der temperaturabhängige isotrope E-Modul und die Querkontraktionszahl ν der Legierung werden in der Thermokinetiksimulation für die Berechnung der Verformungsenergie ΔG_λ benötigt. Werte bei 20 °C sind $E = 200$ GPa und $\nu = 0,33$ [GZ92]. Die Temperaturabhängigkeit ist im Anhang in Abbildung C.1 dargestellt.

Für die Festigkeitsberechnung werden die temperaturabhängigen Schubmoduln der γ -, γ' - Phasen aus publizierten Daten von Einkristallabgüssen des CMSX4 abgeleitet [HSHB96, SKG01]. Die verwendeten Werte in der $<110>$ - Gleitrichtung betragen bei 20°C $G_{110}^\gamma = 66,5 \text{ GPa}$ und $G_{110}^{\gamma'} = 59 \text{ GPa}$. Die Temperaturabhängigkeit ist im Anhang in Abbildung C.1 dargestellt. Für die γ'' - Phase konnten keine Daten ermittelt werden. Es existieren Vergleichsdaten für die Ni_3V -Phase (ebenfalls DO_{22} -Struktur) mit einem gemessenen Schubmodul von 65 GPa [FHV92]. Der Einfluss der chemischen Unterschiede zwischen den Phasen kann nicht bewertet werden. Polykristallines Vanadium hat aber gegenüber Niob um ca. 20 % höhere elastische Eigenschaften. Als erste Näherung wird $G_{110}^{\gamma''} = 65 \text{ GPa}$ verwendet, wodurch der Schubmodul vermutlich überschätzt wird und eine Obergrenze darstellt.

5.2.6 Ausscheidungsabhängigkeit der Versetzungslienspannung

Für die Berechnung der Ausscheidungshärtung wird die Versetzungslienspannung $\Omega(\Phi)$ benötigt. $\Omega(\Phi)$ ist vom Partikelabstand der Ausscheidungen abhängig und ändert sich folglich während des Auslagerungsprozesses. Der Einfluss des Ausscheidungszustandes wird über $r_{0,w/s}$ in Gleichung 4.15 berücksichtigt (vgl. Kap. 4.1.5). Diese wärmebehandlungsabhängige Änderung der Versetzungslienspannung $\Omega(\Phi)$ und des in Gleichung 4.15 entscheidenden Faktors $\ln(r_{0,w}/r_i)$ wird in Abbildung 5.8 für einen berechneten isothermen Auslagerungsprozess bei 750°C gezeigt (Details siehe Anhang D.5). Beide Größen werden über den sich in der Wärmebehandlung ändernden γ'' - Durchmesser D_Z aufgetragen. Abbildung 5.8a veranschaulicht den

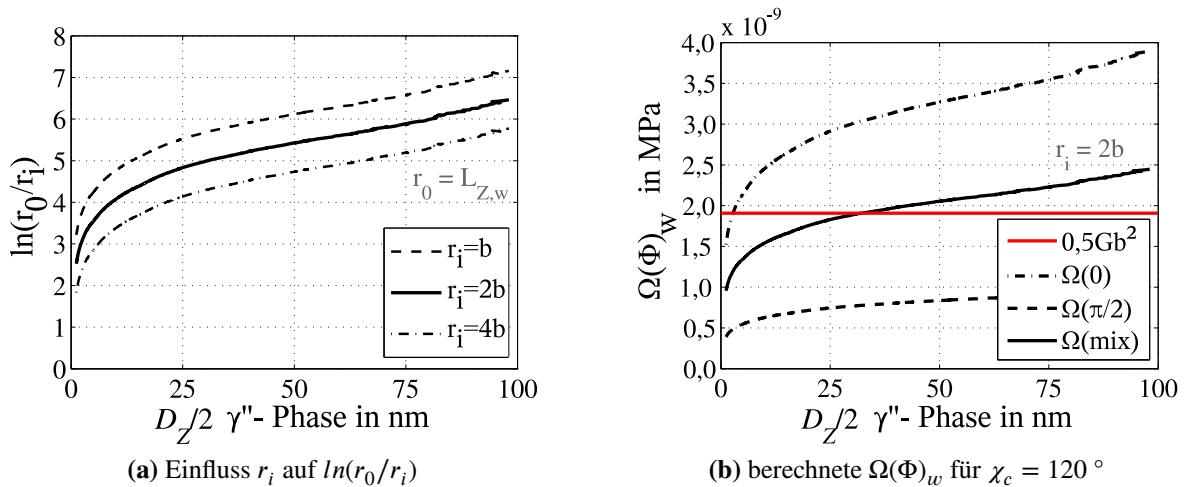


Abbildung 5.8: Wärmebehandlungsabhängige Änderung von (a) dem auslagerungsabhängigen Faktor $\ln(r_0/r_i)$ zur Berechnung von $\Omega(\Phi)$ mit variiertem Kernradius der Versetzung r_i und (b) der Linienspannung $\Omega(\Phi)$ einer Schrauben- und Stufenversetzung sowie deren Mittelwert gegenüber dem sonst konstant angenommenen Wert von $0,5Gb^2$ mit berechnetem äußeren Versetzungsradius r_0 bei einem Krümmungswinkel der Versetzung $\chi_c = 120^\circ$

Einfluss des angenommenen inneren Kernradius der Versetzung r_i auf den Faktor $\ln(r_{0,w}/r_i)$ für den aus dem berechneten Partikelabstand abgeleiteten äußeren Versetzungsradius $r_{0,w}$. Im Bereich der maximalen Ausscheidungshärtung ($D_Z = 20 - 40\text{nm}$) liegt der Wert zwischen 4,0 und 4,6. Dies ist in Übereinstimmung mit dem von Ardell publizierten Wert von ca. 4,0 [Ard85]. Abbildung 5.8b zeigt die Änderung der Versetzungslinienspannung während des Auslagerungsprozesses für die einzelnen Versetzungstypen für einen Krümmungswinkel der Versetzung χ_c von $\geq 120^\circ$. Diese Abhängigkeit wird über $r_{0,w}$ erreicht, welcher sich aus den berechneten $f_{\gamma''}$, D_Z , κ , $L_{Z,w}$ ableitet. Die Wahl des Anteils der Stufenversetzung A_{Stufe} bestimmt die Lage von $\Omega(\text{mix})$ zwischen $\Omega(0)$ und $\Omega(\pi/2)$. Für folgende Berechnungen werden $r_i = 2b$ und der Anteil der Stufenversetzungen auf 50 % ($A_{Stufe} = 0,5$) gesetzt.

5.2.7 Verwendete Werte für die Gitterenergien der γ' - und γ'' - Phase

Dieses Kapitel fasst die für die Simulation benötigten und gewählten Gitterenergien der γ' - und γ'' - Phase zusammen. Die Grenzflächenenergie wird mit MatCalc[©] berechnet für die Antiphaseengrenzenergie und Stapelfehler- Energie können nur Daten aus der Literatur abgeleitet werden.

Die Grenzflächenenergie- Energie (γ_{GF}) wird basierend auf dem Modell der gebrochenen Bindungen temperaturabhängig mit MatCalc[©] berechnet. Auf die berechnete Grenzflächenenergie im Keimbildungsstadium der γ' - und γ'' - Phase wird in Kapitel 5.5.1 näher eingegangen, da für die Ausscheidungsbildung die Korrekturfunktion β_T in Abhängigkeit von T_{krit} berücksichtigt werden muss.

Die berechnete γ_{GF}^j ist für beide Phasen zwischen 20 °C und 800 °C in Abbildung 5.9a dargestellt. Der prozentuale Abfall von γ_{GF} ist in diesem Temperaturbereich mit dem Abfall der elastischen Konstanten vergleichbar, wobei $\gamma_{GF}^{\gamma''}$ geringfügig höher ist. Modellanalysen von Kozeschnik et al. bescheinigen dem Modell allgemein eine Genauigkeit von ca. $\pm 20\%$ über einen sehr weiten Legierungsbereich für unterschiedliche Kristallsysteme [KS09, SK10]. Für die Festigkeitsberechnung ist γ_{GF} im ausgelagerten Zustand mit 0,2 J/m² und 0,22 J/m² für die γ' - und γ'' - Phase bei 20 °C relevant.

Die Antiphaseengrenz- Energie (γ_{APG}) wird für beide Phasen aus Literaturdaten abgeleitet. Für die γ' - Phase werden bei Crudden et al. in der {111}- Ebene eine Vielzahl an experimentell und simulativ ermittelte Werte zwischen 0,15 J/m² und 0,25 J/m² angegeben [CMW¹⁴]. Diese Daten und vergleichende *ab initio* Rechnungen verdeutlichen den Einfluss der Legierungselemente und zeigen bspw. für Nb, Ti und Ta einen erhöhenden Effekt. Bei Rosengaard et al. werden Werte zwischen 0,17 J/m² und 0,24 J/m² für die Ni₃Al- Phase angegeben [RS94]. Für die γ' - Phase in IN718 wird aus diesem Datenpool ein mittlerer Wert von $\gamma_{APG}^{\gamma'} = 0,2\text{ J/m}^2$ bei 20 °C

für die Festigkeitsberechnung abgeleitet. Die Abhängigkeit von der Temperatur kann nicht dargestellt werden.

Für die γ'' -Phase in IN718 sind kaum Daten verfügbar. Untersuchungen von Rosengaard et al. und Francois et al. dokumentieren eine starke Richtungs- und Temperaturabhängigkeit der APG-Energie in der DO_{22} am Beispiel der Ni_3V -Phase [RS94, FHV92]. Francois et al. ermittelt Werte bei $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ und $600\text{ }^{\circ}\text{C}$ von $0,1 \pm 0,02\text{ J/m}^2$ und $0,177 \pm 0,03\text{ J/m}^2$ für die Aufspaltung von Versetzungen im Gleitsystem $(111)[\bar{1}10]$ [FHV92]. Für die Aufspaltung von Versetzungen im Gleitsystem $(111)[10\bar{1}]$ sowie $(111)[01\bar{1}]$ werden Werte von $0,04 \pm 0,004\text{ J/m}^2$ bei $680\text{ }^{\circ}\text{C}$ angegeben [FHV92]. Die Berechnungen von Rosengaard et al. liefern vergleichbare Ergebnisse [RS94]. Khanta et al. dokumentiert einen Unterschied von ca. 30 % zwischen dem Gleitsystem $(111)[\bar{1}10]$ und dem Gleitsystem $(111)[10\bar{1}]$ sowie $(111)[01\bar{1}]$ in der DO_{22} Kristallstruktur [KVP92]. Lediglich Oblak et al. leitet aus Versetzungskonfigurationen eine APG-Energie von $0,296\text{ J/m}^2$ bei $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ für die γ'' -Phase in IN718 ab, ohne dabei zwischen Gleitsystemen zu unterscheiden [OPD74a]. Die Daten von Oblak et al., Francois et al. und die Abschätzung über den Abschlagfaktor von Khanta et al. sind in Abbildung 5.9b vergleichend dargestellt und bilden die Datengrundlage für die Berechnung. Die im Festigkeitsmodell verwendeten Werte bei $20\text{ }^{\circ}\text{C}$

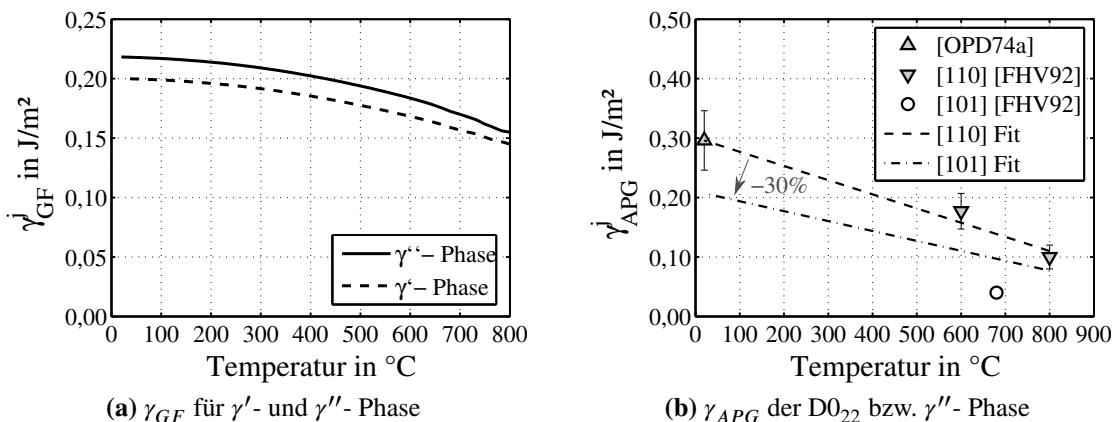


Abbildung 5.9: (a) berechnete γ_{GF} der γ' - und γ'' -Phase im ausgelagerten Zustand, (b) verwendete γ_{APG} der γ'' -Phase in der Festigkeitsberechnung nach [OPD74a, FHV92, KVP92]

sind für das Gleitsystem $(111)[\bar{1}10]$ $0,296\text{ J/m}^2$ und für die beiden Gleitsysteme $(111)[10\bar{1}]$ sowie $(111)[01\bar{1}]$ $0,2\text{ J/m}^2$. Die gezielte Unterscheidung wird im Festigkeitsmodell über Gleichung 4.48 und 4.49 bzw. 4.51 und 4.52 realisiert. Aufgrund der begrenzten Datenlage für die APG-Energie ist diese Größe zu diskutieren (siehe Kap. 6.1).

Die Stapelfehler-Energie (γ_{SF}) wird für γ , γ' und γ'' aus Literaturdaten abgeleitet. Für die Matrix wird von Sundararaman et al. ein Wert von $0,075\text{ J/m}^2$ und von Pineau ein Wert von $0,05\text{ J/m}^2$ angegeben [FP77, SMB88a]. Für die Berechnung wird $\gamma_{SF}^{\gamma''}$ mit $0,075\text{ J/m}^2$ verwendet. Für die γ' -Phase werden bei Reed Werte zwischen $0,01$ und $0,07\text{ J/m}^2$, bei Rosengaard et al.

Werte zwischen $0,04 \text{ J/m}^2$ und $0,06 \text{ J/m}^2$ angegeben [RS94, Ree06]. Für die Berechnung wird $\gamma_{SF}^{\gamma'}$ mit $0,05 \text{ J/m}^2$ verwendet.

Für die γ'' -Phase werden Werte zwischen $0,02$ und $0,03 \text{ J/m}^2$ aus dem Vergleich mit der Ni_3V -Phase abgeleitet [SMB88a, FHV92, RS94]. Für die Berechnung wird $\gamma_{SF}^{\gamma''}$ mit $0,025 \text{ J/m}^2$ angesetzt.

5.2.8 Validierung von Datenbanken und Phasengleichgewicht für IN718

Die beiden von MatCalc[©] bereitgestellten Datenbanken (*mc-ni-s06.tdb* und *mc-ni-s03.ddb*) bilden die Grundlage der Phasenkinetiksimulation, deren Bewertung ein wichtiger initialer Schritt der Modellierung ist. Die Validierung erfolgt anhand von Literaturdaten.

Die richtige Abbildung des thermodynamischen Gleichgewichtszustands bzgl. Temperaturabhängigkeit, Phasenanteil, Phasenchemie, T_L , T_S , T_{Sol} mit der *mc-ni-s06.tdb* ist die entscheidende Grundlage für die Berechnung der Keimbildungs- und Wachstumsprozesse. In der Validierung ist zu berücksichtigen, dass ein idealer, chemisch homogener Zustand der Simulation mit einem wärmebehandlungsabhängigen, teilweise seigerungsbehafteten, realen Werkstoffzustand verglichen wird. Die starke Wechselwirkung zwischen den drei Ausscheidungsphasen γ' , γ'' und δ und die Abhängigkeit dieser Phasen von den Elementen Nb, Ti und Al erschwert die Analyse.

Die Analyse der berechneten Phasenchemie zeigt im Vergleich zu gemessenen Werten, dass in der Simulation die Hauptelemente der Phasen und damit die wesentlichen Unterschiede zwischen den Phasen mit einer Abweichung von $\leq 10\%$ berechnet werden können. In Abbildung 5.10a ist der simulierte Elementanteil in der Phase über dem mittleren experimentell ermittelten Wert im ausgelagerten Zustand aufgetragen. Die Matrix besteht hauptsächlich aus Ni, Fe und Cr, die γ'' - und δ -Phase aus Ni, Nb und Ti und die γ' -Phase aus Ni und Al, Ti und Nb. Die

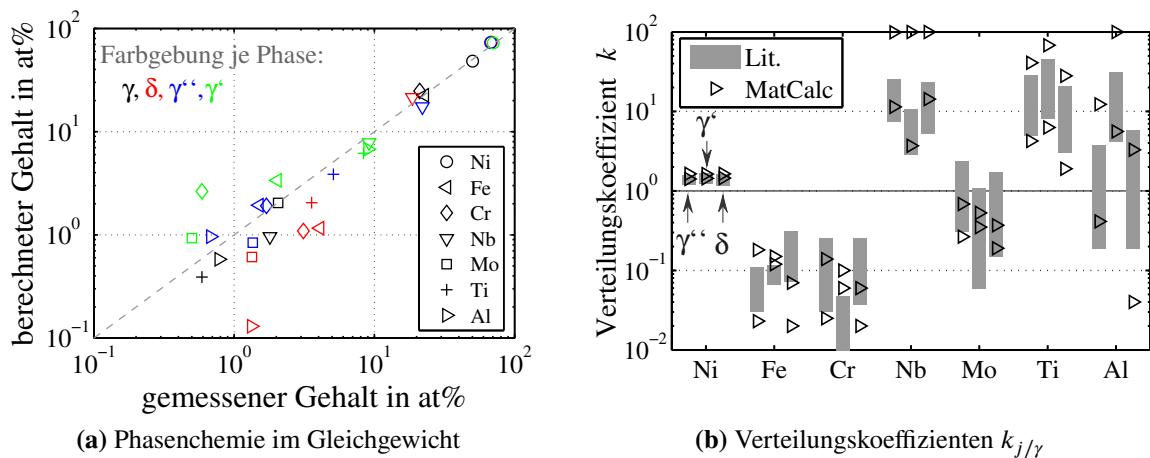


Abbildung 5.10: (a) mittlere berechnete Elementgehalt gegenüber gemessenem und (b) Verteilungskoeffizienten $k_{j/\gamma}$ der Elemente je Phase, berechnete Werte für $T \geq 400 \text{ }^{\circ}\text{C}$, Literaturdaten im Anhang C.4

übrigen Elemente mit einem geringen Anteil in der γ - und γ'' - Phase werden gut abgebildet. In der γ' - Phase wird der Anteile von Cr, Fe, Mo überschätzt. In der δ - Phase wird der Anteile von Cr, Fe, Mo unterschätzt. Die Defizite bezüglich der Karbide und Laves- Phase sind für die Phasenkinetik nicht relevant und ausreichend genau für die Analyse des Erstarrungsverhaltens. Die Rohdaten sind im Anhang C.4 aufgelistet. Eine temperaturabhängige Darstellung für die Phasen ist im Anhang in Abbildung D.1 ergänzt.

Eine weitere Möglichkeit die Chemie der Phasen zu analysieren und die Datenbank zu validieren stellt der Verteilungskoeffizient ($k_{j/\gamma}$) dar, welcher die Löslichkeit eines jeden Elementes in den Ausscheidungsphasen der Legierung beschreibt. Der Verteilungskoeffizient ist der Quotient aus dem Elementanteil in der Ausscheidung j und der γ - Matrix. Die Löslichkeit ist für $k_{j/\gamma} > 1$ in der Ausscheidung und für $k_{j/\gamma} < 1$ in der γ - Matrix größer. Für $k_{j/\gamma} = 1$ besteht eine vergleichbare Löslichkeit der Elemente in Ausscheidung und Matrix. Die Verteilungskoeffizienten ($k_{j/\gamma}$) für IN819 werden in Abbildung 5.10b für die drei Ausscheidungsphasen γ' , γ'' und δ dargestellt. Neben der phasenspezifischen Löslichkeit der Elemente wird auch die Streuung der experimentell bestimmten bzw. temperaturabhängig simulierten Daten deutlich. In dem für die Thermokinetik relevanten Temperaturbereich oberhalb von 400 °C kann die Simulation die Phasenchemie abbilden. Lediglich die Anteile der Ausscheidungsbildner (Nb, Ti, Al) sind in der Matrix sehr gering bzw. nicht vorhanden, woraus die sehr hohen Verteilungskoeffizienten $k_{j/\gamma}$ resultieren (Werte auf max. 100 begrenzt). Unterhalb von 400 °C zeigt die Datenbank Defizite gegenüber den Messwerten auf (vgl. Anhang Abb. D.1). In der γ -, γ' - und δ - Phase fallen die Nb-, Ti- und Al- Anteile ab. Der Mo- Anteil sinkt in der γ - Phase und steigt in der γ' - und δ - Phase stark an. In der Kinetikrechnung führt dies zu kleinen Fluktuationen von Chemie, Phasenanteil und Partikelradius sowie zur Bildung von sehr feinen Ausscheidungen. In der gekoppelten Festigkeitsberechnung beeinflusst diese Fluktuation auch die Berechnung der Gitterparameter und die Mischkristallhärtung. Diese Variationen begrenzen sich jedoch auf den Abschreckvorgang für $T < 400$ °C und sind für die berechneten, thermokinetischen Zyklen nicht entscheidend. Aus diesem Grund wird am Ende der Thermokinetikrechnung auf den Abschreckvorgang auf 20 °C für die Berechnung der festigkeitsrelevanten Größen verzichtet und der Wert bei Auslagerungstemperatur verwendet.

Der thermodynamische Gleichgewichtszustand für IN718 ist in Abbildung 5.11a dargestellt. Alle experimentellen Vergleichsdaten sind im Anhang in den Tabellen C.14 bis C.15 aufgelistet. Die berechnete Liquidus- und Solidustemperatur entsprechen mit 1350 °C und 1253 °C den experimentellen Daten nach [Cao05, FRZ10]. Der Solvus der δ - und γ' - Phase kann mit 1030 °C und 898 °C abgebildet werden. Selbiges gilt für die temperaturabhängigen δ - und γ' - Phasenanteile. Die metastabile γ'' - Phase kann nur durch die Unterdrückung der thermodynamisch stabileren δ - Phase im sogenannten metastabilen Gleichgewichtszustand berechnet werden. Im

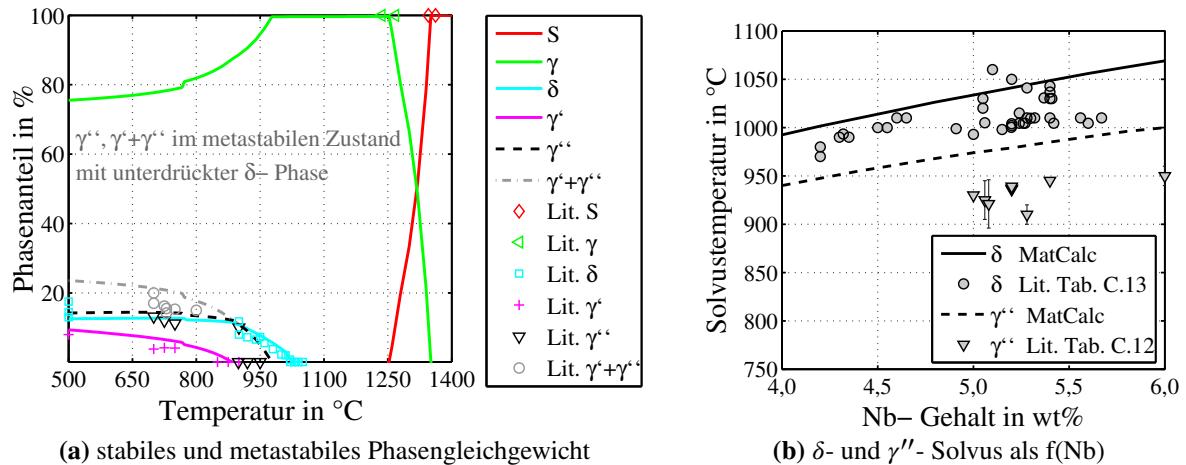


Abbildung 5.11: (a) stabiles und metastabiles Phasengleichgewicht von IN718 und (b) berechnete δ - und γ'' - Solvus im Gleichgewichtszustand abhängig vom Nb- Gehalt (Lit. in Tab. C.12 bis C.15)

dargestellten metastabilen Zustand ist der γ'' - Solvus mit 975 °C um ca. 25 bis 50 K höher als die experimentell angegebenen Werte. Der temperaturabhängige Phasenanteil ist in Übereinstimmung mit Messdaten. Das Verhältnis zwischen γ'' - und γ' - Phasenanteil liegt zwischen zwei und drei und entspricht den publizierten Werten. Die Summe beider liegt mit 24 % über der Obergrenze der in der Literatur mit bis zu 20 % angegebenen Werte.

Der Solvus der δ - und γ'' - Phase ist vom Nb- Gehalt der Legierung abhängig (siehe Abb. 5.11b) und nimmt mit steigendem Nb- Gehalt zu. Der Trend kann in der Simulation für beide Phasen wiedergegeben werden. Der berechnete δ - Solvus liegt ca. 25 K über dem mittleren experimentellen Wert. Die Bewertung des absoluten Wertes für die γ'' - Phase ist schwierig, da in der Literatur ein Streubereich zwischen 900 °C und 950 °C angegeben wird. Im Vergleich dazu ist der berechnete Solvus ca. 50 K höher. DTA- Analysen von Niang et al. zeigen allerdings erst oberhalb dieses angegebenen, metastabilen Solvus eine Phasenuflösung [NVL10]. Dies zeigt, dass zumindest die Auflösung der γ'' - Phase stark von der Phasenkinetik und den beiden anderen Ausscheidungsphasen abhängt. Eine abschließende Bewertung ist erst anhand der thermokinetischen Rechnungen möglich (siehe Kap. 5.7.2). Für den γ' - Solvus kann keine Abhängigkeit vom Nb- Gehalt festgestellt werden. Hingegen steigt der Solvus geringfügig mit zunehmenden Ti- und Al- Gehalten.

Die Mobilitätsdatenbank (*mc-ni-s03.ddb*) muss für die Beschreibung der Wachstumsprozesse die temperatur- und zeitabhängige Multikomponentendiffusion erfassen. Die korrekte Abbildung der temperaturabhängigen Diffusion wird exemplarisch für das Hauptelement Ni in Abbildung 5.12a nachgewiesen. Die Bewertung der Multikomponentendiffusion erfolgt an zwei unterschiedlichen Diffusionspaaren. In Abbildung 5.12b wird der berechnete Endzustand des Diffusionspaars LEK94 zu IN718 nach 2 h bei 1100 °C mit Literaturdaten verglichen. Die Ergebnisse für das Diffusionspaar Rene N4 zu Rene N5 bei 1293 °C für 10 h und 100 h sind im

Anhang in Abbildung D.2 ergänzt. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung, so dass davon ausgegangen werden kann, dass die Elementinteraktion im Diffusionsprozess abgebildet werden kann. Die Diffusionsdaten für die geordneten Strukturen ($L1_2$, DO_{22}) werden in MatCalc[©]

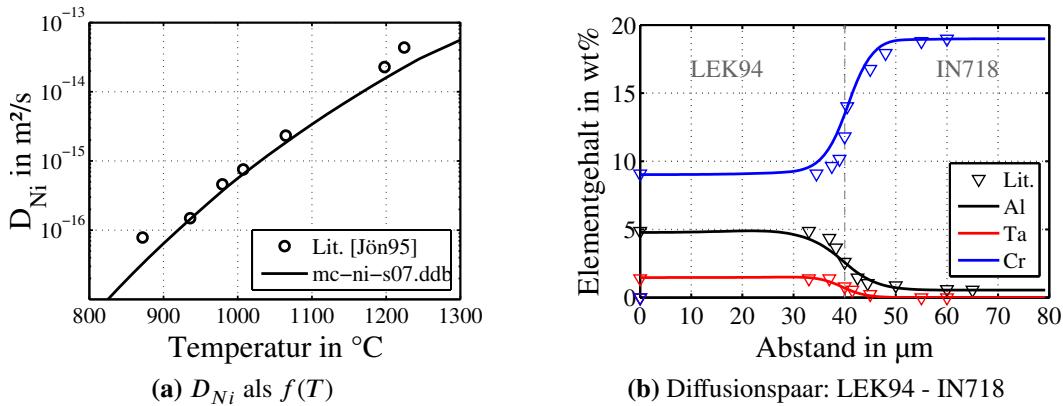


Abbildung 5.12: (a) Temperaturabhängigkeit der Diffusion für Ni (Daten aus [Jön95]) und (b) Multi-komponentendiffusion für Diffusionspaar LEK94 - IN718 nach 2 h bei 1100°C , Lit. aus [MTU05]

über einen Abschlagfaktor aus der Matrix abgeleitet. Analysen von Duan und Campbell in den geordneten A1- Strukturen bestätigen diese um die Hälfte reduzierte Diffusionsgeschwindigkeit [Cam06, Dua07].

Die in Atomsonden und TEM Analysen detektierten geringen Teilchenabstände führen im Wachstumsprozess der Ausscheidung zur Überlagerung und Interaktion der Diffusionsfelder [BM91, ACRC10]. Die dadurch hervorgerufene Interaktion der Diffusionsströme reduziert die Wachstumsrate. In MatCalc[©] existiert modellbedingt keine Überlagerung von Diffusionsfeldern, so dass das reduzierte Wachstum nur über einen zusätzlichen Korrekturfaktor der Matrixdiffusivität von 0,75 im Falle vorhandener Ausscheidungen berücksichtigt wird.

Der thermodynamische Gleichgewichtszustand und das Diffusionsverhalten können mit den beiden verwendeten Datenbanken für die Legierung IN718 dargestellt werden. Sie sind die Grundlage für die im Folgenden durchgeführten thermokinetischen Rechnungen.

5.3 Charakterisierung des Versuchsmaterials

5.3.1 Herstellung und Wärmebehandlung des Gussmaterials

Der IN718 γ - Mischkristall (IN718-Matrix-SX) wird als einkristalliner Sonderabguss der ausscheidungsfreien IN718 γ - Matrixzusammensetzung für eine gezielte Analyse der Mischkristallhärtung τ_{SS} und der dafür verwendeten Berechnungsmodelle hergestellt. Die Matrixchemie wird über Gleichgewichtsrechnungen in MatCalc[©] ermittelt und ist in Tabelle 5.1 angegeben. Die berechneten geringen Anteile an Nb, Ti und Al werden zur Sicherstellung des ausschei-

dungsfreien Zustandes vernachlässigt. Der berechnete Fest- Flüssigübergang des Gussmaterials liegt zwischen $T_S = 1350$ °C und $T_L = 1389$ °C. Der Sonderabguss wird an der Universität Bayreuth am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe in einer Vakuuminduktionsgießanlage aus 99,9%igen Reinelementen mit einer vorgegebenen $< 100 >$ Kristallorientierung in Probenlängsachse hergestellt. Die Schmelze wird bei ca. 1600 °C mit einem Temperaturgradienten von ca. 4 - 5 K/mm und einer Abzugsgeschwindigkeit von ca. 3 mm/min abgegossen. Das abgegossene Probenmaterial mit den Dimensionen $D_D = 11$ mm und $L = 130$ mm weist eine Porendichte < 1 % und einen Primärdendritenarmabstand von ca. 220 μm bis 270 μm auf (siehe Anhang Abb. B.1). Messungen der Elementverteilung zeigen, dass Ni, Fe dendritisch und Cr, Mo interdendritisch seigern (siehe Anhang Abb. B.2). Erstarrungsphasen werden metallografisch nicht detektiert. Für eine chemische Homogenisierung werden die Probenrohlinge in einer Diffusionsglühung schnell auf 1070 °C aufgeheizt, langsam weiter auf 1200 °C erwärmt, bei dieser Temperatur 25 h gehalten und langsam auf 20 °C abgekühlt. Die Temperaturführung inklusive Aufheiz- und Abkühlraten sind im Anhang B.3 dargestellt. Nach der Diffusionsglühung können im geätzten Schliff keine lokalen Unterschiede mehr detektiert werden. Die realisierte Orientierung der Probenstäbe wird mit EBSD- Messungen ermittelt (siehe Kap. 5.3.3). Die erreichte Mischkristallfestigkeit wird in Kapitel 5.6.2 mit den Modellergebnissen verglichen. Im Zugversuch werden alle Gussproben in Erstarrungsrichtung geprüft. Details zur mechanischen Prüfung und zu den Prüfdaten sind im Anhang C.10, C.11 und C.12 beschrieben.

Der Einkristallguss der Legierung IN718 (IN718-SX) wird speziell für die Analyse des zusätzlichen Effektes der Ausscheidungshärtung $\tau_{P,ges}$ zur Mischkristallhärtung τ_{SS} hergestellt. Korngrenzeffekte (τ_{HP}) sind für den Einkristall nicht relevant. Das Gussmaterial wird bei PCC Airfoils LCC. in Minerva, Ohio USA hergestellt. Die genauen Abgussbedingungen sind nicht bekannt. Die vorgegebene Kristallorientierung in Probenlängsachse ist die $< 100 >$ Richtung. Die vom Hersteller gemessene chemische Zusammensetzung wird in Tabelle 5.1 angegeben. Das Probenmaterial hat eine Porendichte von < 1 % und einen Dendritenarmabstand von ca.

Tabelle 5.1: Legierungschemie des IN718 Probenmaterials (Minorelemente vernachlässigt)

in wt%	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al
IN718-Matrix-SX							
Guss der Universität Bayreuth	46,65	24,00	26,50	0,00	2,15	0,00	0,00
Berechnung mit MatCalc [®]	46,60	23,86	26,20	0,17	2,11	0,08	0,68
IN718-SX							
Guss von PCC Airfoils LCC.	53,02	18,96	18,59	4,78	2,98	0,84	0,55
IN718-SLM							
Pulver von Oerlikon Metco AG	52,50	18,00	19,00	5,10	3,00	0,95	0,50

300 μm (siehe Anhang B.1.2). Der Gusszustand zeigt interdendritische Inseln der Laves- Phase ($\leq 50 \mu\text{m}$) und feine Karbide (C- Gehalt $< 0,05 \text{ wt\%}$). Die Reduktion von Seigerungen und Erstarrungsphasen sowie die gezielte Einstellung des Ausscheidungszustandes erfordern eine dreistufige Wärmebehandlung. Die Diffusionsglühung wird an den Gussrohlingen ($D_D = 19 \text{ mm}$, $L = 230 \text{ mm}$), die Homogenisierung und Auslagerung an den Probenrohlingen ($D_D = 8 \text{ mm}$, $L = 67 \text{ mm}$) durchgeführt. Die Parameter der Diffusionsglühung und Homogenisierung werden anhand der Ergebnisse in Kapitel 5.4 definiert. Die zweistufige Diffusionsglühung verhindert das Anschmelzen von interdendritischem Eutektikum und reduziert die Seigerungen. Es wird schnell auf 1070 °C aufgeheizt, langsam weiter auf 1150 °C erwärmt, bei dieser Temperatur 15 h gehalten, langsam weiter auf 1200 °C erwärmt, bei dieser Temperatur 25 h gehalten und langsam auf 20 °C abgekühlt. Die anschließende Homogenisierung erfolgt bei 1040 °C für 0,5 h mit einer abschließenden Wasserabschreckung. Dadurch wird für die folgende Auslagerung ein übersättigter Mischkristall eingestellt. Die Materialzustände vor und nach der Wärmebehandlung sind im Anhang B.3 gegenübergestellt. Die Gussseigerungen werden weitestgehend abgebaut. Über eine nachfolgende Auslagerung bei 725 °C mit drei unterschiedlichen Haltezeiten von 2 h (WB-SX-1), 8 h (WB-SX-2) und 32 h (WB-SX-3) wird der Ausscheidungszustand variiert. Die Temperatur und Haltezeiten werden aus den Berechnungsergebnissen der Phasenkinetik (vgl. Kap. 5.5.3) und Ausscheidungshärtung (vgl. Kap. 5.6.4) abgeleitet. Dadurch können die partikelgrößenabhängige Festigkeitszu- und abnahme gezielt untersucht werden. Messwerte und Details der Zyklen sind im Anhang in Abbildung B.7 zusammengestellt. Für die Berechnung der γ' - und γ'' - Ausscheidungskinetik des IN718-SX Materials sind die mittlere Abkühlrate der Wasserabschreckung mit -53 K/s und die Aufheizrate auf Auslagerungstemperatur mit 0,55 K/s entscheidend. Die Vermessung der Ausscheidungen und das entsprechende Vorgehen sind im Anhang B.2 beschrieben. Der Vergleich der gemessenen Partikelgrößen mit den Simulationsergebnissen folgt in Kapitel 5.5.3. Im Zugversuch werden alle Gussproben in Erstarrungsrichtung geprüft. Details zur mechanischen Prüfung und zu den Prüfdaten sind im Anhang C.10, C.11 und C.13 beschrieben. Die Ergebnisse zur Orientierungsanalyse werden in Kapitel 5.3.3 dargestellt. Die Prüfergebnisse der wärmebehandlungsabhängigen Festigkeit werden in Kapitel 5.7.2 mit den Berechnungsergebnissen verglichen.

5.3.2 Herstellung und Wärmebehandlung des SLM-Materials

Das additiv gefertigte Probenmaterial der Legierung IN718 (IN718-SLM) wird speziell für die Analyse der Ausscheidungshärtung $\tau_{P,ges}$, der Feinkornhärtung τ_{HP} und des Textureinflusses M hergestellt. Der schichtweise Aufbau aus sehr feinen Schweißbahnen ermöglicht die Herstellung eines chemisch sehr homogenen Werkstoffes. Dies ist für eine homogene Ausscheidungsbildung zur Analyse der Ausscheidungshärtung Voraussetzung. Die Analyse der Feinkornhärtung

tung und des Textureinflusses auf die Festigkeit sind aufgrund einer gezielten Veränderung der Gefügestruktur durch unterschiedliche SLM-Fertigungsparameter möglich (vgl. Kap. 2.2 und [PRCA14, CMWA14, MIGFB16a]). Die hierfür benötigten Fertigungsparameter werden durch eine Variation der Schlüsselparameter der Laserinteraktionszone (Laserleistung, Scangeschwindigkeit, Spurabstand und Pulverschichthöhe) ermittelt. Dazu werden 28 unterschiedliche Parametersätze in zwei vollfaktoriellen Versuchsreihen untersucht und die Defektdichte (Poren + Anbindungsfehler) an ungeätzten Schliffen ausgewertet. Weitere Versuchsdetails sind im Anhang A.3 beschrieben. Die Schweißparameter für die Fertigung des Probenmaterials werden aus den Ergebnissen für einen konstanten Absenkweg von $40 \mu\text{m}$ abgeleitet. Abbildung 5.13a zeigt die Bereiche unterschiedlicher Defektdichte bei einer Variation von Laserleistung, Scangeschwindigkeit und Spurabstand. Innerhalb des grün markierten Bereiches ist die Defektdichte $< 0,5\%$. Steigt die Energiedichte weiter an, besteht die Gefahr einer zunehmenden Schweißwurzelporosität (SWP - blauer Bereich). Sinkt die Energiedichte, nimmt die Defektdichte deutlich zu (gelbe und rote Bereiche). Das Probenmaterial zur Validierung der Ausscheidungs- und Festig-

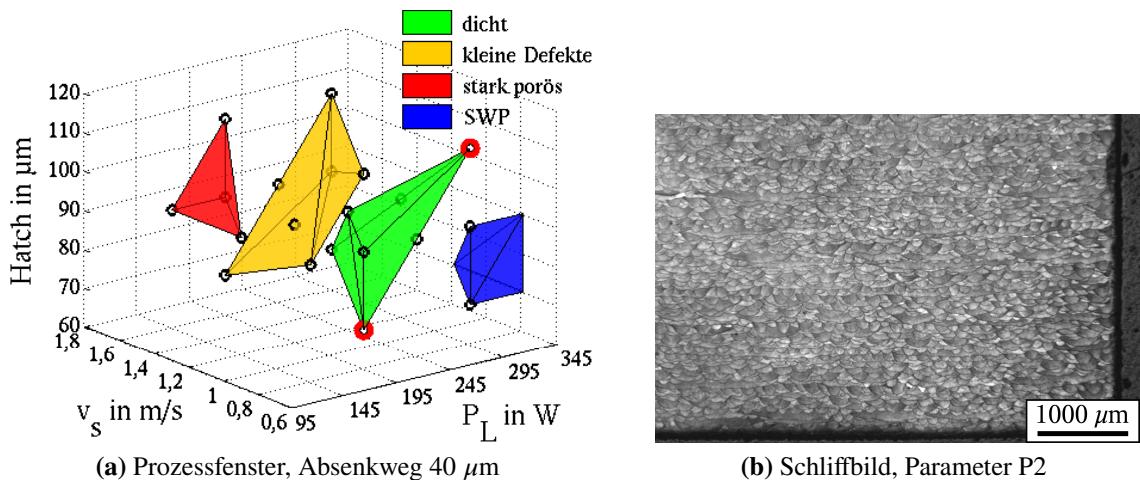


Abbildung 5.13: (a) ermitteltes Prozessfenster für IN718-SLM mit den beiden ausgewählten Fertigungsparametern (●), (b) geätztes Schliffbild für Parameter P2

keitssimulation wird mit zwei Parametersätzen an den Grenzen des grün dargestellten sicheren Prozessfensters hergestellt (siehe Abb. 5.13a). Die beide Parametersätze P1 und P2 sind in Tabelle 5.2 aufgelistet und ermöglichen eine nahezu defektfreie Fertigung. Die lichtmikroskopisch ermittelte Defektdichte ist für beide Fertigungsparameter $< 0,15\%$. Die feinen Schmelzkonturlinien des Schichtaufbaus sind nur im Zustand "wie gebaut" sichtbar (siehe Abb. 5.13b). Der ungeätzte Materialzustand lässt interdendritisches Eutektikum und Laves-Phase erkennen. Im geätzten Zustand kann die Dendritenstruktur mit einem mittleren Armabstand von ca. $0,6 \mu\text{m}$ vermessen werden. Eine Übersicht der Schliffbilder ist im Anhang B.1.3 zusammengefasst. Die Ergebnisse der Texturanalyse werden in Kapitel 5.3.4 dargestellt und bestätigen, dass in Abhängigkeit vom Schweißparameter die Gefügestruktur gezielt variiert werden kann. Für die Ferti-

gung wird ein sphärisches IN718 Pulver (*Amdry1718*) der Firma Oerlikon Metco AG mit einer mittleren Körnung von $D_p \approx 28 \mu\text{m}$ verwendet. Die chemische Zusammensetzung nach Herstellerangaben ist in Tabelle 5.1 aufgelistet. Die Probenrohlinge ($D_D = 8 \text{ mm}$, $L = 67 \text{ mm}$) werden stehend in Aufbaurichtung auf einer SLM- Anlage Typ M280 der Firma eos GmbH bei der MTU Aero Engines AG gefertigt. Die prozessbedingt notwendige Wärmebehandlung wird

Tabelle 5.2: IN718-SLM Fertigungsparameter P1 und P2 der beiden Gefügetypen

	Leistung	Scangeschwindigkeit	Absenkweg	Spurabstand
P1	195 W	0,8 m/s	40 μm	70 μm
P2	295 W	0,8 m/s	40 μm	110 μm

anhand der Ergebnisse aus den Kapiteln 5.4 und 5.5.3 definiert. Die Spannungsarmglühung der Probenrohlinge (980 °C für 1 h) muss auf der Bauplattform erfolgen und dient dem Abbau der aus dem Schweißprozess eingebrachten Eigenspannungen. Danach werden die Proben von der Bauplattform erodiert. Die anschließende Homogenisierung (1040 °C für 0,5 h) mit Raschabkühlung im Wasserbad löst alle Ausscheidungen auf und stellt einen übersättigten Mischkristall für die folgenden Auslagerungen wie beim IN718-SX Material ein. Um ein Kornwachstum zu unterbinden, erfolgt die Homogenisierung nur für eine kurze Haltezeit [Aza04]. Die für die Modellvalidierung benötigten unterschiedlichen Ausscheidungszustände werden über die folgenden fünf Auslagerungen eingestellt: 725 °C für 0,35 h (WB-SLM-1), 725 °C für 2,5 h (WB-SLM-2), 725 °C für 6,5 h (WB-SLM-3), 725 °C für 23,5 h (WB-SLM-4) und 750 °C für 47,5 h (WB-SLM-5). Die Vermessung der Ausscheidungen und das Temperaturprofil der Wärmebehandlung sind im Anhang B.2 und B.3 beschrieben. Für die Berechnung der γ' - und γ'' - Ausscheidungskinetik des IN718-SLM Materials ist die mittlere Abkühlrate der Wasserabschreckung mit -53 K/s und die Aufheizrate auf Auslagerungstemperatur mit 0,55 K/s entscheidend. Im Zugversuch werden alle SLM-Proben in Aufbaurichtung geprüft. Details zur mechanischen Prüfung und zu den Prüfdaten sind im Anhang C.10, C.11 und C.14 beschrieben. Ausscheidungskinetik und resultierende Streckgrenze werden in den Kapiteln 5.5.3 und 5.7.2 mit den Berechnungsergebnissen verglichen.

5.3.3 Orientierung der Einkristallzugproben

Die Orientierung des einkristallinen Versuchsmaterials in Zugrichtung zeigt eine große Streuung im stereografischen Standarddreieck (siehe Abb. 5.14a). Abweichungen von der definierten $<100>$ Richtung resultieren aus den nicht optimierten Gießparametern. Die Orientierung der einzelnen Probenstäbe sowie das experimentelle Vorgehen sind im Anhang B.5 und B.6 aufgeschlüsselt. Der mittlere Schmidfaktor \bar{m}_s für ein, drei bzw. fünf aktive Gleitsysteme wird in Abbildung 5.14b verglichen. Für Proben deren Orientierung nahe der $<100>$ oder $<110>$

Ecken des Standarddreiecks liegen, ist der Unterschied zwischen \bar{m}_s bei einem und fünf aktiven Gleitsystemen vernachlässigbar gering. Der resultierende Schubspannungsunterschied ist $< 7\%$ (vgl. Tab. C.20 und C.21). Mit zunehmender Entfernung wird der Unterschied für \bar{m}_s größer und der resultierende Schubspannungsunterschied steigt auf 12% – 20%. Aus der Unschärfe in der Bestimmung von \bar{m}_s für die Zugproben leitet sich der abgeleitete Streubereich von τ_{ges} ab. Dieser muss im Vergleich mit den Berechnungsergebnissen berücksichtigt oder orientierungspezifisch ausgewertet werden. Die im Anhang B.4 exemplarisch dargestellte Probenoberfläche

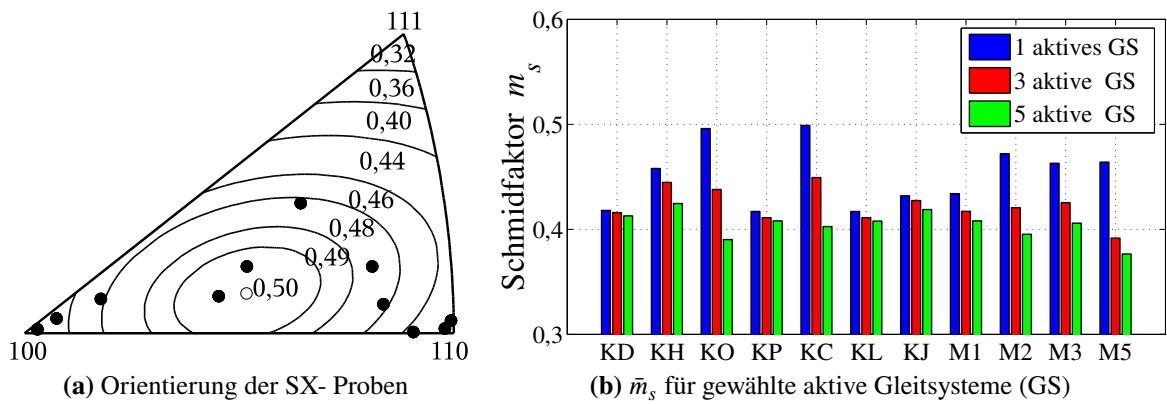


Abbildung 5.14: Korrelation zw. Orientierung der SX- Proben und m_s (a) Position im Standarddreieck und (b) Vergleich der mittleren m_s für ein bis fünf aktive Gleitsysteme von IN718-SX (KD-KJ) und IN718-Matrix-SX (M1-5)

und ARAMIS-Messung lassen die Aktivität von mehr als einem Gleitsystem vermuten. Eine systematische Auswertung ist im Rahmen der Arbeit nicht erfolgt. Als gewählte Näherung wird der mittlere Schmidfaktor aus drei aktiven Gleitsystemen verwendet, woraus sich \bar{m}_s zwischen 0,411 und 0,449 ergibt. Die Wahl des mittleren Schmidtfaktors berücksichtigt außerdem den Einfluss von potentiellen Fehlkörnern, welche durch Oberflächenätzung und EBSD- Messung nicht ganz ausgeschlossen werden können. Für die ausscheidungsfreien IN718-Matrix-SX Proben wird nur das am günstigsten orientierte Gleitsystem (1GS) für die Schubspannungsberechnung berücksichtigt.

5.3.4 Textur der SLM-Zugproben

Das SLM- Material zeigt eine parameterabhängige kristallografische und morphologische Textur. Die Unterschiede zwischen beiden Fertigungsparametern (P1, P2) resultieren aus den gewählten Spurabständen und Laserleistungen. Die mittels EBSD analysierte Textur beider Parameter ist für den Quer- und Längsschliff in Abbildung 5.15 dargestellt. Die Aufbaurichtung ist im Bild gekennzeichnet und entspricht der Zugrichtung. Die umfassenden Ergebnisse der Texturauswertung sowie das experimentelle Vorgehen sind im Anhang B.5 und B.7 zusammengefasst. Die Morphologieauswertung verdeutlicht, dass für beide Fertigungsparameter die Korn-

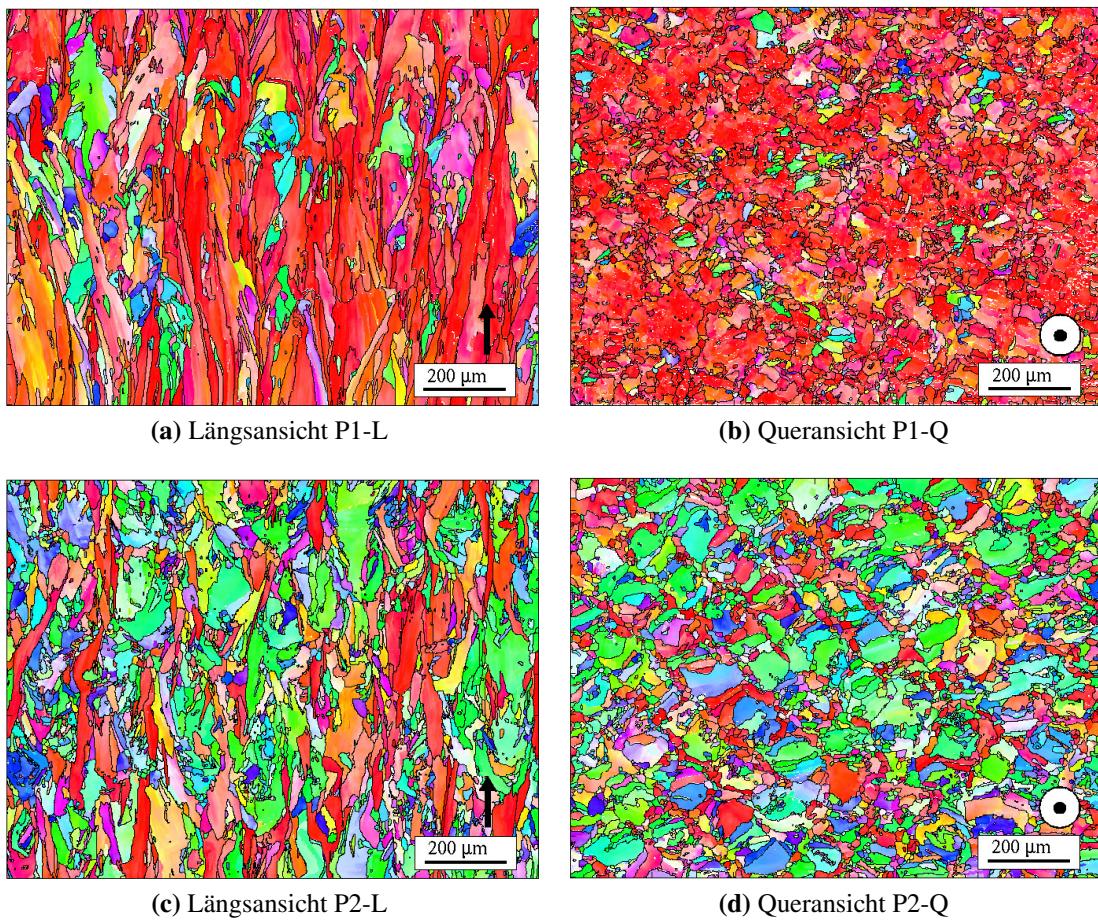


Abbildung 5.15: EBSD- Analyse der SLM- Kornstruktur für Fertigungsparameter P1 und P2 in den Schliffansichten längs in Aufbaurichtung (L) und quer dazu (Q)

form in Aufbaurichtung gestreckt und senkrecht dazu globulitisch ist (siehe Tab. 5.3). Der kornflächengewichtete maximale Feret (F_a) und das Aspektverhältnis (A_V) sind in Aufbaurichtung im Längsschliff für P1 mit $335 \mu\text{m}$ und 4,9 größer als für P2 mit $141 \mu\text{m}$ und 3,2. Quer zur Aufbaurichtung im Querschliff ist F_a für P1 mit $129 \mu\text{m}$ ebenfalls größer als für P2 mit $75 \mu\text{m}$ bei vergleichbaren A_V . Der maximale Feret (F_a) ist der maximale Abstand zweier paralleler Tangenten eines Korns. Die Orientierungsauswertung erfolgt anhand der Orientierungsdichtefunktion (ODF) in Form der Polfigur und der inversen Polfigur (IPF). Das Material IN718-SLM P1 zeigt eine scharfe kristallografische Textur mit einer stark ausgeprägten transversalen Anisotropie und einem Trend zur transversalen Orthotropie (siehe Abb. 5.16a). Schwerpunktmäßig zeigen die $<100>$ Kristallrichtungen in Aufbaurichtung bzw. Zugrichtung der Probe. Ursächlich dafür sind die geringe Schmelzbadtiefe und der folglich flache Winkel zwischen Erstarrungsfrontnormalen und Aufbaurichtung. Infolge des geringen Spurabstandes im generativen Aufbau führt dies zur Ausrichtung der bevorzugten $<100>$ Erstarrungsrichtung des Materials in Aufbaurichtung. Das Material IN718-SLM P2 zeigt eine weniger scharf ausgeprägte kristallografische Textur, die ebenfalls transversal orthotrop ist (siehe Abb. 5.16c). Der Schwerpunkt liegt eher

Tabelle 5.3: Feret F_a , Aspektverhältnis A_V , E -Modul und Texturfaktor M für 3 und 5 berücksichtigte Gleitsysteme für P1 und P2 in beiden Schlifflagen, alle Werte sind kornflächengewichtete Mittelwerte, vergleichend dazu der mittlere E -Modul der Zugversuche

Parameter	Schliff	\bar{F}_a in μm	\bar{A}_V	$\bar{M}(3)$	$\bar{M}(5)$	\bar{E} in GPa	\bar{E} (Exp.) in GPa
P1	quer	129	1,7	2,28	2,40	143	$161 \pm 4,5$
	längs	335	4,9	2,28	2,43	155	$161 \pm 4,5$
P2	quer	75	1,9	2,37	2,50	195	$209 \pm 7,6$
	längs	141	3,2	2,35	2,48	189	$209 \pm 7,6$

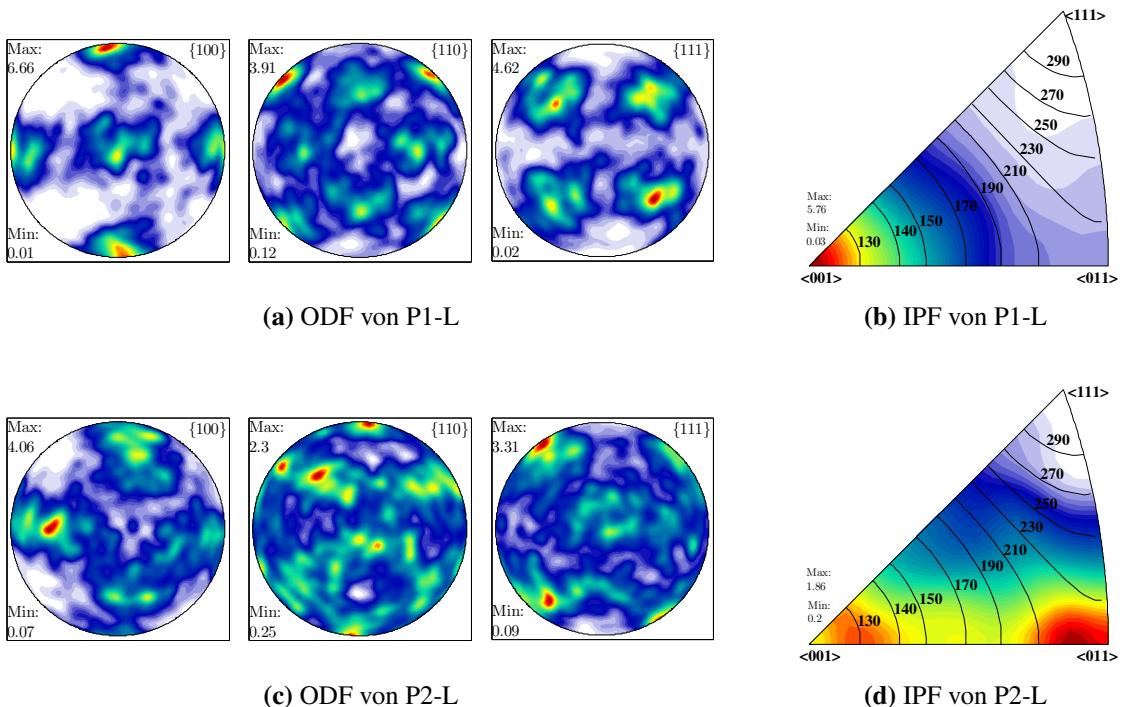


Abbildung 5.16: Aus EBSD- Messungen am Längsschliff von IN718-SLM abgeleitete ODF für (a) P1-L und (c) P2-L und IPF in Korrelation mit Isolinien des E-Moduls für (b) P1-L und (d) P2-L

in Richtung der $<110>$ -Kristallrichtungen bezogen auf die Aufbaurichtung bzw. Zugrichtung der Probe. Gründe dafür sind ein großer Winkel zwischen Erstarrungsfrontnormalen und Aufbaurichtung infolge der hohen Schmelzbadtiefe sowie des großen Spurabstandes. Die bevorzugte $<100>$ Erstarrungsrichtung wird dadurch aus der Aufbaurichtung gekippt, sodass in Aufbaurichtung die Vielfalt an Orientierungen deutlich zunimmt.

Die Korrelation zwischen gemessener, kristallografischer Textur und richtungsabhängigen E -Modul erlaubt die Ermittlung eines kornflächengewichteten, mittleren E -Moduls der Gefüge (siehe Abb. 5.16b und 5.16d). Der Mittelwert für P1 liegt zwischen 142 GPa und 155 GPa, welcher in guter Übereinstimmung mit dem experimentellen Wert von $161 \pm 4,5$ GPa ist. Für P2 wird ein Wert zwischen 189 GPa und 195 GPa ermittelt. Dieser ist geringfügig niedriger als der experimentell gemessene Wert von $209 \pm 7,6$ GPa. Zwischen beiden Gefügen lässt sich ein

deutlicher Steifigkeitsunterschied von ca. 20 % - 30 % in der Aufbaurichtung ableiten (siehe Tab. 5.3). Abweichungen zwischen gemessenem und abgeleiteten E-Modulwert können sowohl aus einer zu geringen EBSD-Messdatenstatistik als auch durch Ungenauigkeiten in der E-Modulbestimmung aus den Zugversuchen resultieren.

Die Auswertung der EBSD-Daten nach Gleichung 4.64 erlaubt die Ermittlung des kornflächen gewichteten Texturfaktors (siehe Anhang Abb. B.14 und B.15). Für beide Gefüge unterscheidet sich der Texturfaktor für drei und fünf aktive Gleitsysteme um $\leq 7\%$. Der Texturfaktorunterschied zwischen den Parametern P1 und P2 ist $\leq 5\%$ (siehe Tab. 5.3). Im Falle von drei aktiven Gleitsystemen ist $\bar{M} = 2,28$ für P1 und 2,35 für P2. Aufgrund der Unschärfe und vereinfachten Bestimmung des Texturfaktors ist eine Diskussion dieses Parameters in Kontext der Ergebnisse notwendig.

Der abgeleitete \bar{M} ermöglicht die Umrechnung der Prüfspannung in τ_{ges} für das SLM-Material und damit einen texturbereinigten Vergleich der Versuchs- und Simulationsergebnisse (siehe Anhang Tab. C.22). Die erreichbare Höhe von $\tau_{P,ges}$ wird über die Wärmebehandlung eingestellt. Die notwendige Homogenisierung wird in Kapitel 5.4 und die Phasenkinetik in Kapitel 5.5 beschrieben.

5.4 Erstarrungsverhalten und Homogenisierung von IN718

Die folgenden Betrachtungen dienen zur Abschätzung von Erstarrungsstruktur, Elementsegregation, Erstarrungsabfolge und Stabilität von Erstarrungsphasen. Basierend auf diesen Ergebnissen werden die notwendigen Wärmebehandlungsschritte zur Homogenisierung definiert.

Die Erstarrung in planarer, zellulärer, dendritischer und dendritisch-globulitischer Form wird von ∇T und v des jeweiligen Herstellprozesses gesteuert. Die Zonen der einzelnen Erstarrungsformen werden aus den Daten der Nickelbasis Legierung SRR99 und IN939 abgeleitet. Sie sind in Abbildung 5.17 dargestellt [SEV99]. Im Bereich der dendritischen Erstarrung wird der Dendritenarmabstand λ_D nach Gleichung 2.1 berechnet. Für die Abkühlbedingungen des SLM-Prozesses ergibt sich ein $\lambda_D = 0,6 \pm 0,3 \mu\text{m}$, welches durch Schliffbilder der feinen epitaktisch wachsenden Dendritenstruktur bestätigt wird (siehe Abb. 5.20a und B.5b). Im Vergleich mit publizierten Daten für den SEBM-Prozess, dessen ∇T um ca. Faktor 1000 geringer ist bei ähnlicher v , liefert Gleichung 2.1 auch ein plausibles Ergebnis mit $\lambda_D = 9 \pm 5 \mu\text{m}$ [SMS¹²]. Die deutlich langsameren Erstarrungsbedingungen für die IN718-Matrix-SX und IN718-SX Materialien erzeugen eine noch gröbere Dendritenstruktur mit $\lambda_D = 250 \pm 50 \mu\text{m}$, welche ebenfalls mit den gemessenen Werten vergleichbar ist (vgl. Kap. 5.3.1). Der ermittelte Dendritenarmabstand definiert die räumliche Ausdehnung der Segregation. Diese, sich einstellende, chemische Inhomogenität im Material ist für die Bildung der Phasen im Erstarrungsprozess verantwortlich.

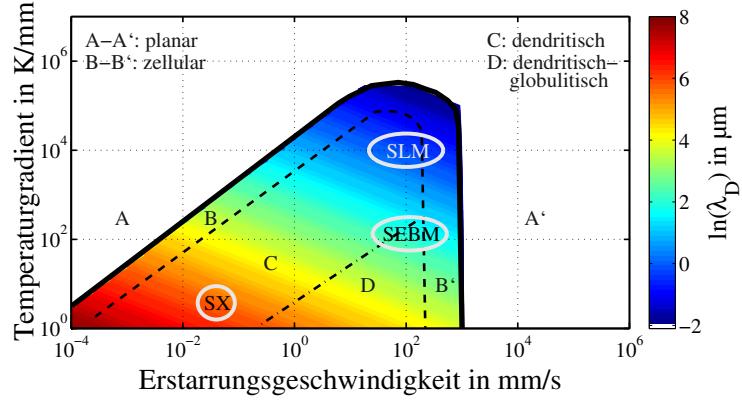


Abbildung 5.17: Erstarrungsstruktur für IN718 im VT-v-Diagramm, Zonen A bis D abgeleitet von SRR99 und IN939 aus [SEV99]

Die Segregation wird mit der Scheil- Gleichung 4.27 und dem MatCalc[®] Modell berechnet und mit publizierten Messdaten verglichen. Für die Vergleichbarkeit werden die Messdaten auf den jeweiligen Messweg zwischen dem Dendritenkern und der interdendritischen Zone normiert und die Modellergebnisse über den Festphasenanteil aufgetragen. Abbildung 5.18a stellt am Beispielelement Nb die Modellergebnisse den Messdaten gegenüber. Die übrigen Elemente sind im Anhang in Abbildung D.3 ergänzt. Publizierte Daten von Strößner und Parimi et al. zeigen für das SLM- Material, dass trotz Rascherstarrung auch eine starke Anreicherung von Nb mit ca. 10 wt% in der interdendritischen Zone gemessen werden kann [PRCA14, Str15]. Für den Gusszustand steigt die interdendritische Nb- Konzentrationen auf über 15 wt% an, wobei Werte > 20 wt% Messpunkten in bzw. nahe der Laves- Phase entsprechen [KCH⁸⁹, CRJ⁰⁹, PRCA14]. Die in der Literatur gemessene Elementverteilung kann mit dem Scheil- Modell und

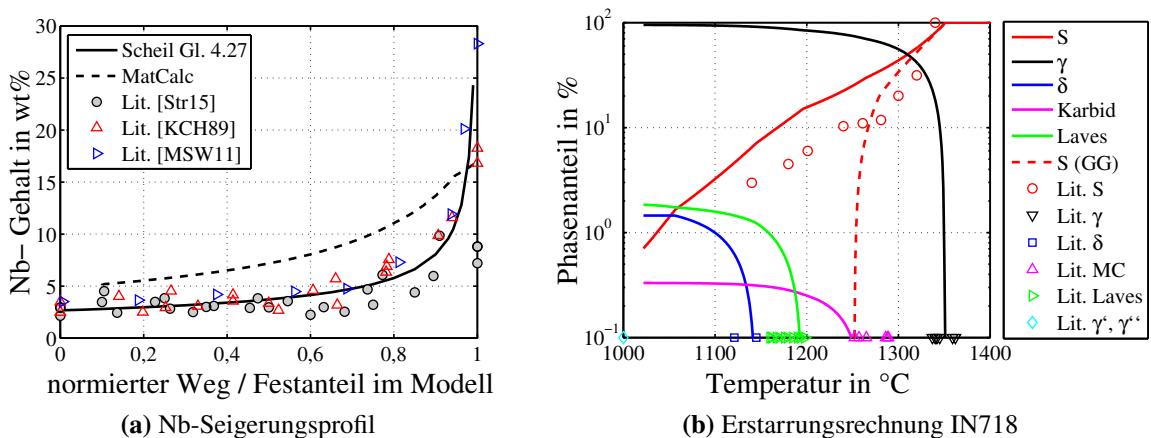


Abbildung 5.18: (a) Nb- Segregation zw. Dendrit und Interdendrit: normiert auf Messlänge im Experiment und γ - Festphasenanteil in der Simulation, (b) Erstarrungsabfolge IN718 berechnet mit MatCalc[®] gegenüber Literaturdaten nach [CWPT88, KCH⁸⁹, CKHR89, GZ92, MMY⁹⁴, KDY⁰⁴, Cao05, MSW¹¹, WGZ¹²]

den Seigerungskoeffizienten aus Tabelle C.19 abgebildet werden. Der mit MatCalc[®] berechnete

Verlauf kann den Trend darstellen, verzeichnet aber einen flacheren Verlauf bei einem insgesamt etwas höheren Niveau.

Die Kopplung der CALPHAD- Methode mit dem Scheil- Modell ermöglicht in MatCalc[®] die Berechnung eines idealisierten Erstarrungsprozesses, anhand dessen die Phasenbildung, die Phasenbildungstemperatur sowie der Anschmelzpunkt der erstarrten Legierung untersucht werden können. Das Berechnungsergebnis ist in Abbildung 5.18b dargestellt. Die Erstarrungsabfolge für IN718, die Bildungstemperatur der einzelnen Phasen sowie der abfallende Flüssigphasenanteil können von diesem einfachen Modell abgebildet werden. Der Absolutwert des Flüssigphasenanteils wird im Modell überschätzt. Der berechnete Laves- Phasenanteil wird im Vergleich mit dem "wie gebauten" Zustand des IN718-SLM Materials, für den ein Anteil von ca. 10 % bis 16 % ermittelt wird, unterschätzt (siehe Abb. 5.19b). Aufgrund der stufenweisen Iteration im Modell kann der Erstarrungsvorgang ab 3 % bis 5 % Restschmelze als beendet betrachtet werden. Hieraus ergibt sich eine Anschmelztemperatur zwischen 1100 °C und 1140 °C. Die Bildungstemperatur der Laves- und der δ - Phase werden vom Modell mit $T_{Sol}^{Laves} = 1190$ °C und $T_{Sol}^{\delta} = 1140$ °C erfasst. Die reale Anschmelztemperatur des Materials wird experimentell zwischen T_{Sol}^{Laves} und T_{Sol}^{δ} angegeben [KCH⁺89, CKHR89, Rad89]. Hieraus kann ein Erstarrungsintervall von 160 K bis maximal 210 K abgeleitet werden. Letzterer Wert entspricht einem berechneten Wert bei ca. 5 % Restschmelze. Gegenüber dem Gleichgewichtszustand wird deutlich, dass im erstarrten Zustand die Anschmelztemperatur des Materials deutlich niedriger ist. Dieser niedrigere Solidus wird in der Homogenisierungsglühung berücksichtigt, um etwaige interdendritische Anschmelzungen zu vermeiden.

Nie et al. und Manikandan et al. dokumentieren eine Abhängigkeit des Segregationsgrades und der Phasenbildung von ∇T und v im Erstarrungsprozess, welche von den verwendeten Modellen nicht abgebildet werden können [NOL14, MSPK14, MSPK15]. Der Einfluss eines unterschiedlich hohen interdendritischen Nb- Gehaltes auf den Phasenanteil und die Stabilität der Laves- Phase wird anhand von Gleichgewichtsrechnungen vereinfacht untersucht. Für vier chemische Zusammensetzungen, welche sich für einen Festphasenanteil zwischen 60 % und 95 % aus dem berechneten Scheilprofil nach Abbildung 5.18a ableiten, sind in Abbildung 5.19a der Flüssigphasen-, Laves- und δ - Anteil über der Temperatur dargestellt. Mit fallendem Nb- Gehalt sinken der Solvus und Phasenanteil der Laves- Phase. Der Solidus der Schmelze sowie der Solvus der δ - Phase hingegen steigen. Für $Nb \leq 5,5$ wt% ist die Laves- Phase thermodynamisch nicht mehr stabil. Weiterhin wird deutlich, dass die Bildung der δ - Phase die Laves- Phase thermodynamisch destabilisiert und diese sich ab einem Nb-Gehalt ≤ 10 wt% auflöst. Hieraus lässt sich ableiten, dass der über die Erstarrungsbedingungen eingestellte Segregationsgrad die Ausbildung der Phasen steuert.

Zielstellung der Homogenisierung ist eine Beseitigung der Einflüsse von Herstellprozess und

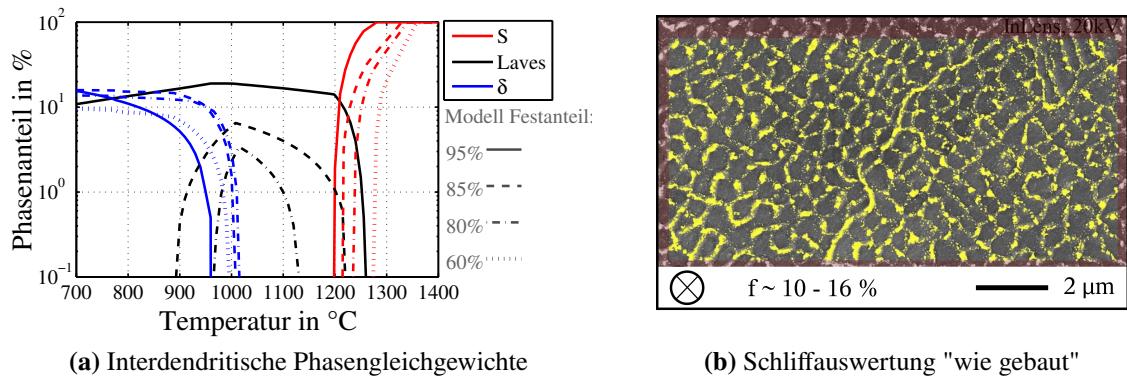


Abbildung 5.19: (a) Abhängigkeit des Phasengleichgewichtes vom Segregationsgrad, berechnet für die aus dem Scheil-Modell abgeleitete Chemie für einen Festanteil zwischen 60 % und 95 %, (b) Auswertung des Laves- Phasenanteils im Zustand “wie gebaut” (Originalbild aus Dissertation Strößner [Str15])

Erstarrungszustand für einen homogenen Ausscheidungszustand. Da Berechnungen mit Restsegregation eine nicht realisierte lokale Auflösung des Materials erfordern, ist eine hohe chemische Homogenität für das Kinetik- und Festigkeitsmodell Voraussetzung. Außerdem ermöglicht ein homogener Materialzustand eine valide experimentelle Vergleichbarkeit zwischen IN718-SX, IN718-SLM und den einzelnen Festigkeitsmechanismen. Die hierfür notwendigen Parameter Temperatur und Zeit werden aus 1D Diffusionsrechnungen abgeleitet. Es wird mit 6 K/min auf Homogenisierungs- bzw. Spannungsarmglühtemperatur aufgeheizt und der Diffusionsausgleich für die gewählte Haltezeit berechnet.

Die Diffusionsrechnungen für das SLM- Material zeigen bei einem Dendritenarmabstand von 0,68 μm , dass der Segregationsabbau schon während des Aufheizens zwischen 600 °C und 850 °C erfolgt. Dies ist aufgrund der kurzen Diffusionswege in der sehr feinen Dendritenstruktur möglich (vgl. Abb. 5.20a). Nach 0,5 h bei 980 °C kann von einem vollständigen Diffusionsausgleich ausgegangen werden. Die Ergebnisse für Nb sind in Abbildung 5.20b und für die übrigen Elemente im Anhang in Abbildung D.4 dargestellt. Die Schliffbilder vor und nach der Wärmebehandlung sind vergleichend im Anhang in Abbildung B.4 dargestellt. Die gewählte Temperatur und Zeit ergibt sich aus Besonderheiten des SLM- Materials, auf die am Ende des Kapitels noch eingegangen wird.

Das IN718-SX Gussmaterial weist im Gusszustand deutlich größere Dendritenarmabstände auf (siehe Anhang Abb. B.3). Der Einfluss des zunehmenden Dendritenarmabstandes auf die Homogenisierbarkeit im Vergleich zur SLM- Struktur ist in Abbildung 5.21a anhand des Elementes Nb gezeigt. Für $\lambda_D \geq 6,8 \mu\text{m}$ kann die Segregation bei 980 °C für 0,5 h nicht mehr abgebaut werden. Als Kenngröße der Restsegregation wird der Quotient aus maximalem und minimalem Nb- Gehalt zwischen Interdendrit (ID) und Dendrit (D) eingeführt (siehe Abb. 5.21b). Wie in Abbildung 5.21b erkennbar, werden selbst nach 10 h Glühzeit bei 980 °C die Seigerungen nur

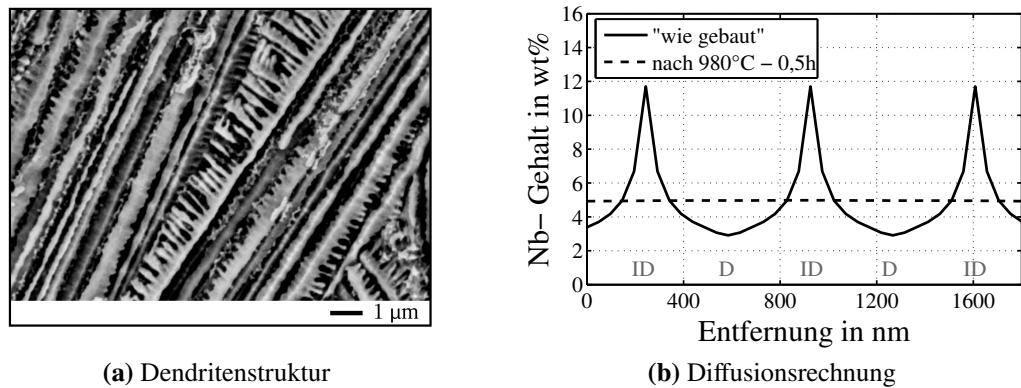


Abbildung 5.20: (a) gemessene Dendritenstruktur im Zustand "wie gebaut", (b) Diffusionsrechnung für IN718-SLM bei 980 °C für 0,5 h dargestellt für Nb mit (D) Dendrit und (ID) Interdendrit

für $\lambda_D < 20 \mu\text{m}$ abgebaut. Folglich kann für das Gussmaterial die Segregation nur durch eine modifizierte Wärmebehandlung abgebaut werden, welche an den Gussrohlingen zweistufig bei 1150 °C für 15 h und anschließend bei 1200 °C für 25 h erfolgt. Der erreichte Grad an Restsegregation ist im Vergleich zum SLM- Material in Abbildung 5.21b dargestellt. Die erste Stufe

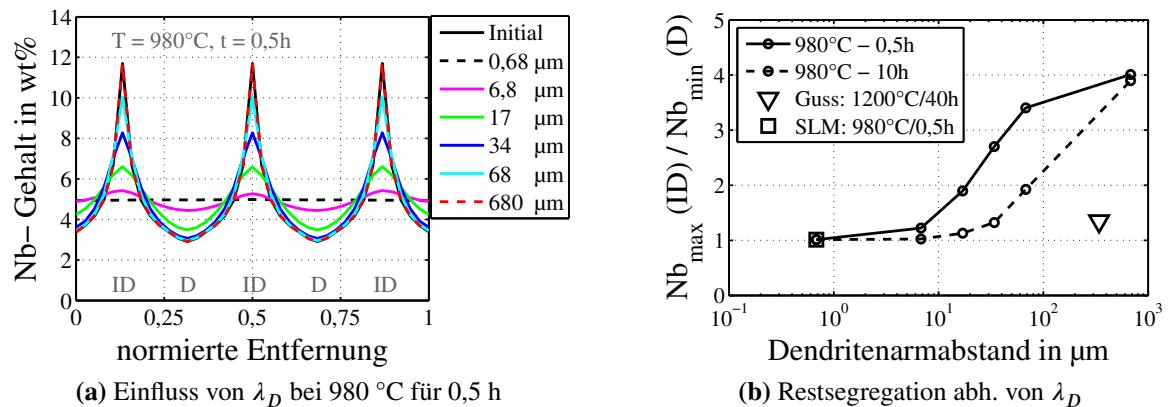


Abbildung 5.21: (a) Seigerungsabbau bei 980 °C für 0,5 h für λ_D von 0,68 μm bis 680 μm , (b) Einfluss von λ_D und Haltezeit auf die Restsegregation mit dem Vergleich zw. IN718-SLM und IN718-SX

vermeidet interdendritische Anschmelzungen und erhöht den Solidus durch einen Diffusionsausgleich. Anschließend kann die Prozesstemperatur auf 1200 °C für eine schnelle und maximale Homogenisierung angehoben werden. Das Ergebnis der Diffusionsrechnung mit einem mittleren Dendritenarmabstand von 350 μm ist im Anhang in Abbildung D.5 dargestellt und zeigt nach insgesamt 40 h einen guten Seigerungsabbau. Der Schliffbildvergleich des Gussmaterials vor und nach der Homogenisierung ist im Anhang in Abbildung B.3 ergänzt und bestätigt die Simulationsergebnisse.

Die Besonderheit für das SLM- Material resultiert aus dem Herstellprozess. Aufgrund der hohen Eigenspannungen, welche sich aus dem Schweißprozess ergeben, muss in einem ersten Schritt eine Spannungsarmglühung auf der Bauplattform erfolgen. Eine Glühung bei 950 °C für 1 h zeigt in Schliffbildern einen sehr hohen δ - Anteil in interdendritischen Bereichen im Korn und an der Korngrenze (siehe Abb. 5.22a). Dieser beträgt gemäß einer Gleichgewichtsrechnung ca. 8 % bis 10 %. Die Laves- Phase ist aufgelöst. Diese Phasenumwandlung tritt laut Strößner et al. mit reduziertem δ - Anteil auch schon bei einer Glühung von 800 °C für 0,25 h auf [Str15]. Ein

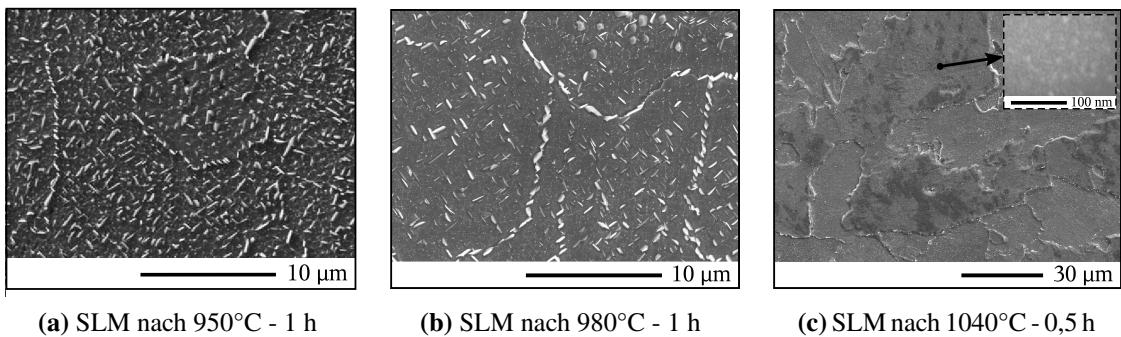


Abbildung 5.22: Spannungsarmglühung von IN718-SLM bei (a) 950 °C für 1h mit hohem δ - Anteil an der Korngrenze und im Korn, (b) nach 980 °C für 1h mit reduziertem δ - Anteil an der Korngrenze und im Korn, (c) ausscheidungsfrei nach Homogenisierung bei 1040 °C für 0,5h

hoher δ - Anteil im Korn ist für schlechte Kriech- und Kerbschlageigenschaften sowie beschleunigte Überalterung bei Einsatztemperaturen oberhalb von 600 °C verantwortlich (vgl. hierzu [MSG96, SGR08, CRJ⁺09, BB88, BBC89, GZ92, Aza04]). Außerdem wird der Ausscheidungsbildner Nb in der δ - Phase gebunden. Dem gegenüber steht der positive, korngrenzpendende Effekt der δ - Phase, welcher ein Kornwachstum infolge der hohen Eigenspannungen verhindert. Eine Reduktion des δ - Anteils ist durch das Anheben der Temperatur auf knapp unterhalb der δ - Solvustemperatur möglich, sodass der korngrenzpendende Effekt und die destabilisierende Wirkung auf die Laves- Phase erhalten bleiben. Der berechnete Gleichgewichtsanteil fällt bspw. bei 980 °C auf < 5 %. Die Reduktion des δ - Anteils kann im Schliffbild bestätigt werden (siehe Abb. 5.22b). Dieser komplexe Vorgang der Phasenumwandlung in Verbindung mit dem Segregations- und Eigenspannungsabbau kann von den Erstarrungsmodellen und dem Phasenkinetikmodell nicht abgebildet werden. Die Zustände können nur anhand der Schliffbilder bewertet werden. Die finale Wärmebehandlung wird aus den dargestellten Sachverhalten abgeleitet, und erfolgt bei 980 °C für 1 h. Die Glühzeit von 1 h soll die vollständige Probendurchwärmung und den Eigenspannungsabbau sicherstellen. Anschließend werden die Proben von der Bauplattform getrennt. Für einen idealen, vollständig ausscheidungsfreien Werkstoffzustand wird das Material in einem weiteren Schritt auf 1040 °C für 0,5 h erwärmt und anschließend im Wasserbad abgeschreckt (siehe Abb. 5.22c). Für diesen letzten Wärmebehandlungsschritt ist es wichtig im

Zuge des Spannungsarmglühens den δ - Anteil sowie die δ - Partikelgröße für eine schnelle Auflösung gering einzustellen. Grund dafür ist das rasch einsetzende Kornwachstum für Temperaturen oberhalb des δ - Solvus [Aza04], welches für das IN718-SLM Material vermieden werden soll. Der eingestellte Werkstoffzustand ist der Ausgangspunkt für die Phasenkinetikmodellierung des folgenden Auslagerungsprozesses in Kapitel 5.5.3.

Für eine Vergleichbarkeit mit dem SLM- Material werden aus den Gussrohlingen die kleineren Probenrohlinge gefertigt und anschließend die Glühung bei 1040 °C für 0,5 h mit Wasserabschreckung durchgeführt.

5.5 Phasenkinetiksimulation

5.5.1 Das Frühstadium der Ausscheidungsbildung

Das Frühstadium der Ausscheidungen im Auslagerungsvorgang wird anhand von publizierten Atomsondenmessungen von Alam et al. bewertet [ACRC10]. Die experimentelle Versuchsdurchführung mit einer Ölabschreckung von 1050 °C und anschließender Auslagerung bei 706 °C wird in die Simulation mit einer Abkühlrate von 25 K/s übernommen. Im Experiment werden die Ausscheidungen über einen definierten, phasenspezifischen Grenzwert der Elementkonzentration ausgewertet. Abbildung 5.23 vergleicht die Simulation mit den publizierten Daten. Experimentell werden nach dem Abschrecken und dem Erreichen der Auslagerungstemperatur kleine Elementcluster festgestellt, welche sich während des Aufheizvorganges weiter mit Nb, Ti und Al angereichert haben. Im abgeschreckten Zustand entsprechen diese gemessenen Elementcluster, deren Größe nicht quantifiziert ist, einem simulierten γ' -, γ'' - Phasenanteil von $\leq 4\%$ und einer simulierten γ' -, γ'' - Partikelgröße von $\leq 1,5$ nm. Die gemessene Zunahme der Elementcluster

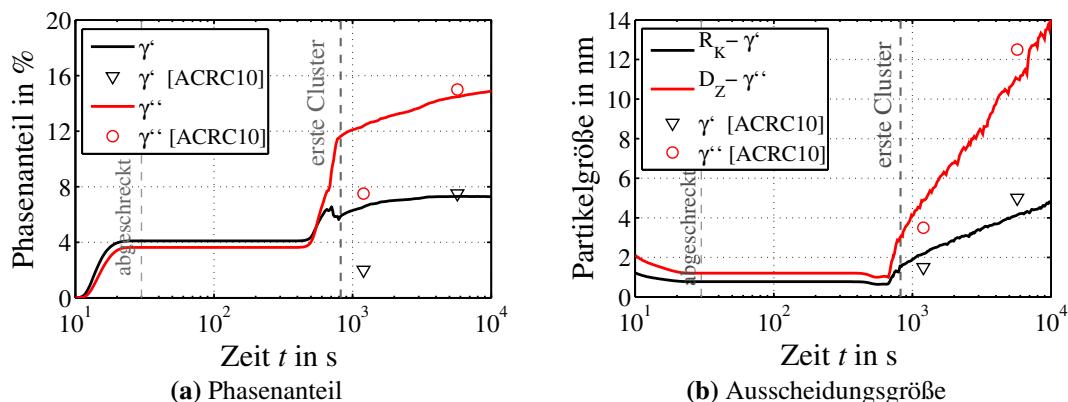


Abbildung 5.23: Frühstadium der γ' - und γ'' - Phasenkinetik für Öl- Abschreckung von 1050 °C und Auslagerung bei 706 °C im Vergleich zu Atomsondenmessungen nach [ACRC10]

im Aufheizvorgang wird durch den ansteigenden Trend des simulierten Phasenanteils und der

simulierten Partikelgröße erfasst. Während des Aufheizvorganges führt die starke Übersättigung der Matrix zu einer fortwährenden Keimbildung und damit zu einem starken Anstieg des Phasenanteils in der Simulation, sodass nach 500 s bei 706 °C der berechnete Phasenanteil stark (um ca. 40 %) und die Teilchengröße geringfügig (um ca. 15 %) überschätzt wird. Mit dem Aufheizvorgang stellt sich schnell, wie schon in den DTA- Analysen angedeutet, das erwartete Phasenanteilsverhältnis von $\geq 2 : 1$ in der Simulation ein. Die Abweichungen im Frühstadium können sowohl aus dem Modell als auch aus dem Experiment resultieren. In der Simulation kann der Zustand infolge eines zu hoch berechneten Ausscheidungsdruckes überschätzt werden. Im Experiment wird der Ausscheidungszustand auf Basis einer konstanten Phasenchemie ausgewertet, sodass unter Umständen eine Unterschätzung der Keimbildung vorliegt. Dies wird anhand von Analysen am Werkstoff IN718Plus deutlich, welche im Frühstadium eine Abweichung der γ' -Keimzusammensetzung von der Gleichgewichtsstöchiometrie zeigen (vgl. Abb.D.8) [ZRS⁺10]. Gilt selbiges für die Phasen im IN718, unterschätzt die erfolgte Auswertung der Atomsondenmessung den Phasenanteil und die Teilchengröße. Es kann davon ausgegangen werden, dass sich die Ungenauigkeit auf ein Zeitfenster von ca. 1800 s bei 706 °C beschränkt. Für den Zustand nach 5000 s bei 706 °C stimmen Experiment und Simulation hinsichtlich Phasenanteil und Partikelgröße überein.

Simulationsstudien an diesem Beispiel zeigen weiterhin, dass für ein unterschiedlich hohes T_{krit} der Phasen die Übereinstimmung mit den Experimenten abnimmt. Aus diesem Grund wird für alle weiteren Kinetikrechnungen $T_{krit} = 2500$ K für γ' und γ'' verwendet.

5.5.2 Die Phasenkinetik im SLM- Prozess

Die berechneten Temperaturzyklen im SLM- Prozess zeigen konstant hohe Aufheiz- und Abkühlraten ($>> 10^3$ K/s) über mehrere Schichten (vgl. Abb. A.6). Die für die Phasenkinetik relevante Erwärmung auf Temperaturen oberhalb 650 °C ist nur für Bruchteile von Sekunden vorhanden, wobei der Temperatureinfluss auf eine Reichweite von ca. drei bis fünf Schichthöhen beschränkt ist. Im Vergleich mit den berechneten DTA- Analysen, welche für die Abschreckung von 1050 °C mit 1000 K/s Partikelgrößen < 1 nm und einen Phasenanteil < 1 % zeigen, erfolgt die Abkühlung im SLM- Prozess schneller. Weiterhin lassen sich bei diesen raschen Temperaturzyklen Diffusionswege von < 1 nm über $x \approx \sqrt{\bar{D} \cdot t}$ abschätzen. Folglich kann davon ausgegangen werden, dass im Zustand wie gebaut (wenn überhaupt) nur feinste γ' - und γ'' - Elementcluster mit verschwindend geringem Volumenanteil vorliegen. Das Material ist δ - Phasen frei. Dieser Zustand wird in der Dissertation von Strößner anhand von TEM- Untersuchungen bestätigt [Str15].

Die Phasenkinetik im weiteren Auslagerungsvorgang wird in dem folgenden Kapitel beschrieben.

5.5.3 Die γ' - und γ'' - Phasenkinetik in IN718

Die γ' - und γ'' - Phasenkinetik von IN718-SLM und IN718-SX wird für die Wasserabschreitung von 1040 °C mit der anschließenden Auslagerung bei 725 °C einheitlich berechnet. Dies ist aufgrund identischer Temperaturführung und des ausscheidungsfreien und nahezu chemisch homogenen Ausgangszustandes beider Materialien zulässig. Die Berechnung erfolgt für die in Tabelle 2.1 angegebene Chemie und die gemessenen Aufheiz- und Abkühlraten (siehe Anhang B.3). Für die Bewertung der Simulationsergebnisse werden neben den eigenen gemessenen FEREM- Daten (Exp. 725 °C) auch Literaturdaten aus vergleichbaren Versuchen bei 700 °C und 750 °C herangezogen. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.24 dargestellt. Im abgeschrägten Zustand ist die berechnete Partikelgröße $\leq 1,1$ nm und der gesamte Ausscheidungspasenanteil ≤ 5 %. Mit Erreichen der Auslagerungstemperatur von 725 °C ist die Partikelgröße ≤ 2 nm und nimmt kontinuierlich mit der Haltezeit zu, sodass für das Festigkeitsmodell eine definierte Partikelgröße ausgehend von sehr kleinen Teilchen eingestellt werden kann. Nach 0,35 h beträgt

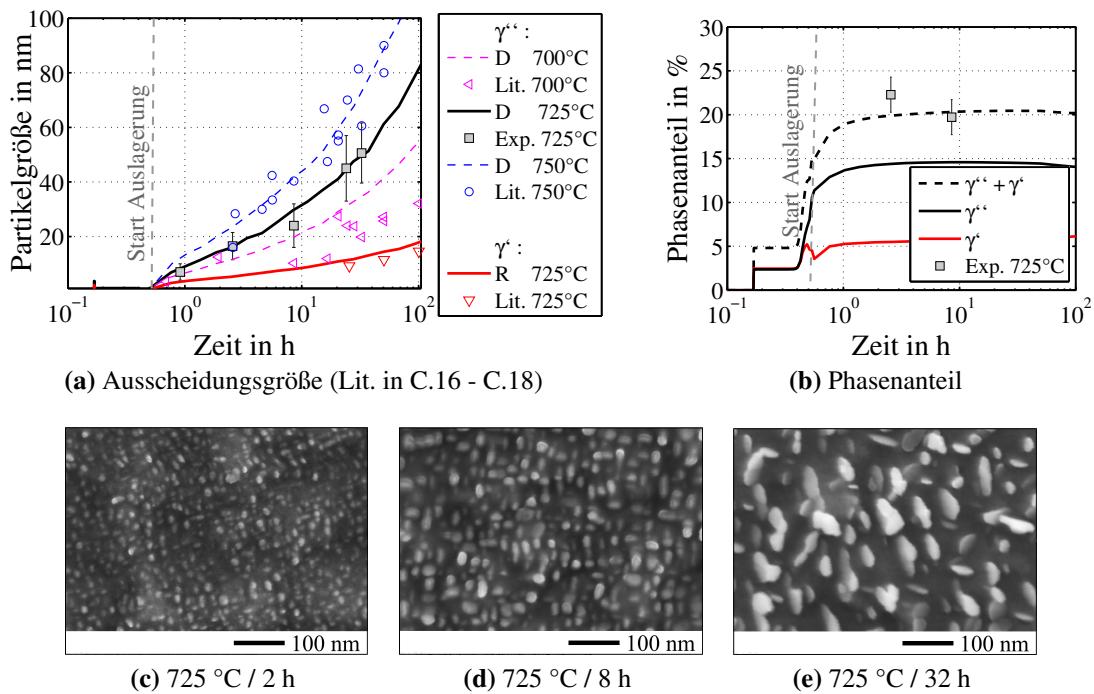


Abbildung 5.24: Ausscheidungssimulation IN718-SX, -SLM für die Auslagerung bei 725 °C mit (a) Partikelgröße, (b) Phasenanteil und (c) bis (e) FEREM- Aufnahmen der Partikel, vergleichende Literaturdaten für D_Z , R_K bei 700 °C, 750 °C in Tab. C.16 - C.18

$D_z = 8$ nm und $R_k = 3,4$ nm. Nach der maximal untersuchten Auslagerungszeit von 32 h beträgt $D_z = 50$ nm und $R_k = 13,5$ nm. Die Abweichung zu den näherungsweise bestimmten FEREM- Daten ist < 15 %. Die Plausibilität der FEREM- Daten lässt sich anhand von Literaturdaten bei 700 °C und 750 °C bestätigen, da die FEREM- Ergebnisse zwischen den publizierten Streubändern liegen. Die FEREM- Aufnahmen des Ausscheidungszustandes für 2 h, 8 h und

32 h bei 725 °C sind in Abbildung 5.24c bis 5.24e dargestellt.

Die Ergebnisse der Phasenkinetik aus Experiment und Simulation werden anhand der jeweils bestimmten Vergrößerungskonstante k_v und dem jeweils bestimmten Vergrößerungsexponenten n_v basierend auf Gleichung 2.2 miteinander verglichen. Die Auswertung erfolgt für die γ' -Phase anhand des mittleren Radius R_K und für die γ'' -Phase anhand des Partikeldurchmessers D_Z . Aus dem eigenen Auslagerungsversuch lässt sich für γ'' ein Vergrößerungsexponent von 2,33 bestimmen, woraus sich ein Übergang zu grenzflächenkontrolliertem Wachstum ableiten lässt. In der Simulation wird n_v mit 2,26 ermittelt. Für γ' ergibt sich n_v aus den Experiment mit 3,2, welches einem diffusionskontrollierten Wachstum entspricht. In der Simulation ergibt sich n_v mit 3,4. Als γ'' -Vergrößerungskonstante bei 725 °C wird aus dem Experiment $k_v = 11,2$ und in der Simulation $k_v = 12,5$ abgeleitet. Die γ' -Vergrößerungskonstante ist bei 725 °C im Experiment $k_v = 3,4$ und in der Simulation $k_v = 4,1$. Die Abweichung zwischen gemessenem und berechnetem k_v ist < 18 % und für $n_v < 6$ %. Das phasenspezifische Wachstum der γ' - und γ'' -Partikel wird damit von der Simulation bei 725 °C mit hoher Genauigkeit abgebildet.

Der berechnete Gesamtphasenanteil steigt während des Aufheizvorganges sehr schnell an und erreicht nach 0,5 h ca. 92 % vom maximalen Gesamtanteil von 20,44 vol%, welcher ab ca. 10 h erreicht wird. Die FEREM Messwerte nach 2 h und 8 h, welche zwischen 22,3 % und 19,7 % liegen, werden mit einer Abweichung von < 15 % abgebildet. Ätzeffekte und Detektionsfehler werden pauschal über eine Streuung von ± 2 % berücksichtigt. Aus der Berechnung ergibt sich ein Volumenanteilsverhältnis zwischen γ'' und γ' von ca. 2,5.

Alle weiteren Ergebnisse der Thermokinetikrechnung, welche ins Festigkeitsmodell zur Berechnung der Streckgrenze transferiert werden, sind im Anhang D.6 dargestellt. Die Phasenzusammensetzung kann in der Simulation berechnet werden. Für die Matrix kann der Unterschied zwischen ausscheidungsfreiem und ausscheidungsbehaftetem Zustand dargestellt werden. Lediglich für Nb und Ti werden die publizierten Messwerte im ausscheidungsbehafteten Zustand unterschätzt. Für die γ' - und γ'' -Phase wird eine Unstetigkeit in der berechneten Phasenchemie zum Zeitpunkt der Keimbildung für die Elemente Fe, Cr, Mo, Al festgestellt. Die genaue Ursache kann nicht benannt werden und wird auf Datenbankdefizite zurück geführt. Der Effekt wirkt sich nur kurzzeitig auf die Keimbildungsrate und den Partikelradius aus und beschränkt sich auf den Abschreckvorgang aus dem lösungsgeglühten Zustand.

Die Phasenkinetiksimulation im Temperaturbereich zwischen 550 °C und 1000 °C wird anhand von einem umfangreichen Literaturdatensatz mit Auslagerungszeiten von bis zu 1000 h bewertet. In den Publikationen werden IN718 Proben von ≥ 970 °C mit Öl oder Wasser abgeschreckt und anschließend bei entsprechender Temperatur ausgelagert. Die Simulation wird mit der in Tabelle 2.1 definierten Chemie und einer Abkühlung von 1000 °C mit 50 K/s und anschließender Auslagerung durchgeführt. Die Simulationsergebnisse und die experimentellen

Daten sind in Abbildung 5.25 dargestellt. In der Analyse der γ'' - Partikelgröße zwischen 750 °C und 800 °C zeigt sich, dass die berechneten Werte innerhalb des experimentellen Streubandes liegen. Zwischen 650 °C und 700 °C liegen die simulierten Werte am oberen Ende des jeweiligen Durchmesserstreibandes. Für Temperaturen > 800 °C bzw. $D_Z > 200$ nm werden die gemessenen Durchmesser unterschätzt. Das beschleunigte γ'' - Partikelwachstum resultiert aus der experimentell beobachteten Partikelkoaleszenz, welche von der Simulation nicht abgebildet wird. Die gemessenen γ' - Räden werden zwischen 650 °C und 750 °C geringfügig vom Modell

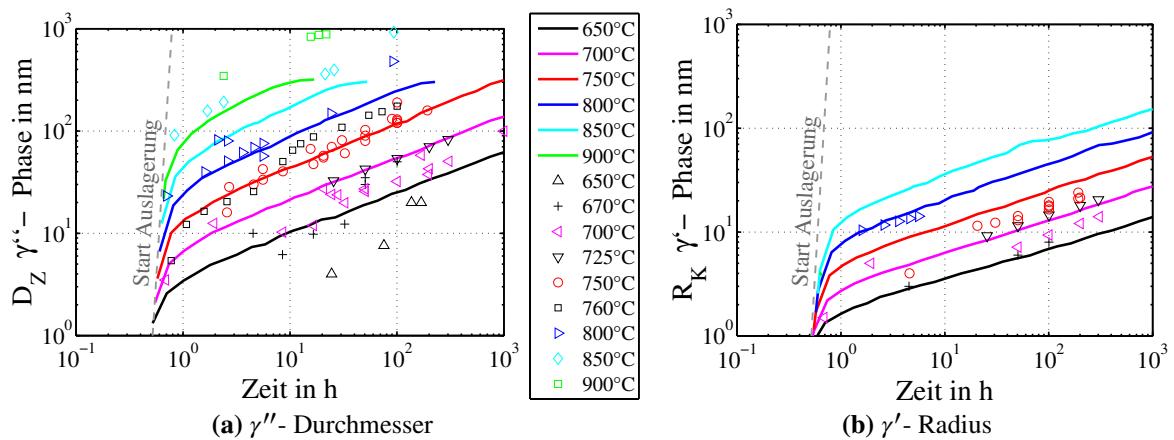


Abbildung 5.25: Ausscheidungssimulation IN718 zwischen 650 °C und 900 °C nach Wasserabschreckung von 1000 °C mit (a) γ'' - und (b) γ' - Partikelgröße; Literaturdaten (Symbole) sind in Tabellen C.16 bis C.18 angegeben; Chemie und Wärmebehandlung sind in Publikationen vergleichbar: ca. 5 wt% Nb und rasche Abkühlung von ≥ 970 °C

überschätzt. Bei 800 °C liegt eine gute Übereinstimmung vor. Ein kritischer Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Daten ist für beide Phasen aufgrund der nicht angegebenen Fehlerbalken in den publizierten Daten schwierig und zu diskutieren.

Die Ergebnisse der Thermokinetik werden erneut anhand der jeweils bestimmten Vergrößerungskonstante k_v und dem jeweils bestimmten Vergrößerungsexponenten n_v basierend auf Gleichung 2.2 miteinander verglichen. Die Auswertung erfolgt für die γ' - Phase anhand des mittleren Radius R_K und für die γ'' - Phase anhand des Partikeldurchmessers D_Z . Aus den Experimenten lässt sich für γ'' ein Vergrößerungsexponent von $2,37 \pm 0,3$ ableiten. In der Simulation wird n_v mit $2,45 \pm 0,09$ bestimmt. Für γ' ergibt sich n_v aus den Experimenten mit $3,34 \pm 0,9$. In der Simulation wird n_v mit $3,39 \pm 0,19$ ermittelt.

Die Temperaturabhängigkeit der Vergrößerungskonstante k_v wird für beide Phasen von der Simulation erfasst und ist in Abbildung 5.26 dargestellt. k_v ist im Wesentlichen von Temperatur, Grenzflächenenergie und Diffusionsgeschwindigkeit abhängig [DNM⁺08]. Die Abweichung zwischen simulierten und experimentellen Werten ist dabei zwischen 725 °C und 800 °C mit $< 15\%$ am geringsten. Für niedrigere Temperaturen sind die experimentellen Werte für beide Phasen geringer. Für Temperaturen oberhalb von 800 °C wird k_v für γ'' unterschätzt.

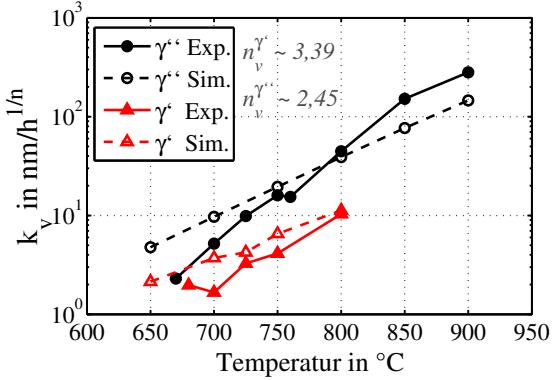


Abbildung 5.26: Temperaturabhängige γ' - und γ'' - Vergrößerungskonstante k_v , abgeleitet aus den Phasenkinetikdaten in Abbildung 5.25

Die Bildung der inkohärenten δ -Phase ist im IN718 von der Korngröße, der γ'' -Partikelgröße und dem Umformgrad abhängig. Die Korngröße definiert die Anzahl potenzieller Keimbildungsorte. Im Vergleich mit Daten von Azadian und Beaubois et al. wird der Unterschied zwischen 50 μm und 300 μm erfasst (siehe Anhang Abb. D.11) [Aza04, BHC⁺04]. Die γ'' -Partikelgröße und der Umformgrad sind für die Phasentransformation von γ'' - in δ -Phase verantwortlich. Die Überalterung des Werkstoffes und die damit einhergehenden Entfestigung wird durch diese Prozesse entscheidend beschleunigt. Ursache dafür ist die experimentell beobachtete Bildung der δ -Phase in den Stapelfehlern der γ'' -Partikel. Im Modell wird dieser Effekt über den phänomenologischen Ansatz der Partikeltransformation in MatCalc[®] implementiert. Das Modell wird anhand von Daten von Kirman et al., Azadian und Lee et al. umformgradabhängig (bzw. ρ_{ges}) kalibriert [KW70, LXY⁺97a, LCX⁺99, Aza04]. Im unverformten Zustand wird die Transformation ab einem γ'' -Durchmesser von 150 nm initiiert. D_Z nimmt mit steigendem Umformgrad ab, wodurch die Transformation beschleunigt wird. Das Ergebnis der Kalibrierung ist im Anhang in Abbildung D.12 dargestellt und entspricht den experimentellen Beobachtungen. Der Einfluss auf die Streckgrenzentwicklung wird in Kapitel 5.7.2 deutlich.

In den folgenden Kapiteln werden die Ergebnisse der Thermokinetikrechnung mit dem Festigkeitsmodell zur Berechnung der Streckgrenze von IN718 gekoppelt.

5.6 Festigkeitssimulation

5.6.1 Die intrinsische Festigkeit für IN718

Die Peierls-Nabarro-Spannung (τ_0) beträgt 1,8 MPa für den bei Raumtemperatur hinterlegten Schubmodul und einen mittleren Gitterparameter von $a_i^\gamma \approx 0,36$ nm. Für höhere Temperaturen ist $\tau_0 = 0$. Mit $\rho_{ges} = 10^{12}$ m/m³ und $\alpha = 0,5$ ergeben sich für den athermischen Schubspannungsbeitrag $\tau_V = 7,5$ MPa. Die intrinsische Festigkeit τ_{Int} beträgt in Summe 9,3 MPa. Mit

einem Texturfaktor von $M = 2,6$ ist die makroskopische Spannung $\sigma_{Int} = 24,2$ MPa. Diese stimmt mit der von Thompson ermittelten Größe von 21,8 MPa in reinem Ni überein [Tho75].

5.6.2 Die Mischkristallhärtung für IN718

Die Mischkristallhärtung ist von der chemischen Zusammensetzung der Matrix abhängig und wird mit Gleichung 4.30 berechnet. Im ersten Schritt erfolgt die Modellbewertung am korngrenz- und ausscheidungsfreien IN718-Matrix-SX. In diesem Fall hängt die Streckgrenze nur von der intrinsischen Festigkeit τ_{Int} , der Mischkristallhärtung τ_{SS} und der kristallografischen Orientierung der Probe ab. Der Orientierungseinfluss wird über den probenspezifischen Schmidfaktor m_s berücksichtigt (siehe Tab. C.20). Die aus dem Zugversuch abgeleitete Schubspannung τ_{ges} beträgt $70,8 \pm 1,7$ MPa (siehe Anhang Abb. C.3a und Tab. C.20). Der berechnete Wert wird für c_i nach Tabelle 5.1 mit 75,6 MPa bestimmt (siehe Abb. 5.27a). Die Abweichung zum Experiment ist $< 7\%$. Die gemessene Temperaturabhängigkeit kann nicht erfasst werden, da die Koeffizienten $k_{ss,i}$ nur für Raumtemperatur bekannt sind.

Im zweiten Schritt wird τ_{SS} allgemein für die γ -Phase in IN718 mit der in MatCalc[®] simulierten und der in der Literatur angegebenen Chemie in Tabelle C.2 ($T \leq 760$ °C) berechnet. Gegenüber dem IN718-Matrix-SX enthält die γ -Phase in IN718 einen gewissen Nb-, Ti- und Al- Gehalt, welcher zu einem Anstieg von τ_{SS} führt. Dabei liegt τ_{SS} für die gemessene γ -Chemie mit 94 MPa um ca. 12 % höher als der Wert für die berechnete Zusammensetzung. Ursache für die Differenz sind der zu gering berechnete Nb- und Ti- Gehalt in der γ -Phase (vgl. Abb. D.9c). Ergänzend dazu gibt Sundararaman et al. eine Streckgrenze von 280 MPa für einen von

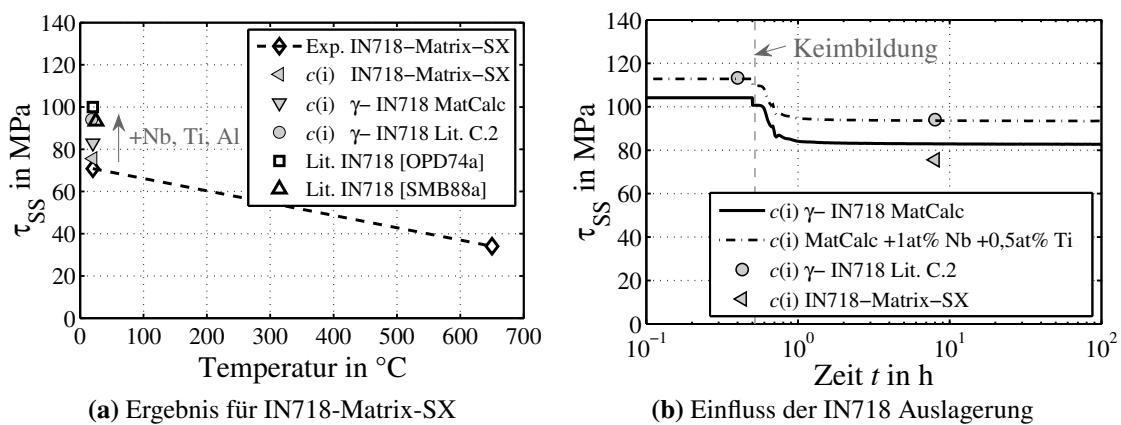


Abbildung 5.27: (a) τ_{SS} für die Chemie des IN718-Matrix-SX und der γ -Phase im ausgelagerten IN718 (b) Entwicklung von τ_{SS} entlang der Wärmebehandlung von Kap. 5.5.3 mit Raschabkühlung und Auslagerung bei 725 °C

1000 °C wasserabgeschreckten Zustand des IN718 an [SMB88a]. Mit $M = 3$ für eine graue Gefügetextur ergibt sich daraus eine kritische Schubspannung von 93 MPa, welche dem vom

Modell berechneten Wert entspricht. Oblak et al. schätzt τ_{SS} mit 100 MPa für selbigen Zustand ab [OPD74a].

Für IN718 ändert sich während der Wärmebehandlung die Matrixchemie zwischen dem lösungsgeglühten und ausgelagerten Zustand und folglich auch τ_{SS} . Der Härtungsbeitrag der Ausscheidungsbildner Nb, Ti und Al in der Matrix reduziert sich mit der Bildung der γ' - und γ'' - Phase. Die Kopplung der Phasenkinetik mit Gleichung 4.30 zeigt in Abbildung 5.27b die Entwicklung von τ_{SS} zwischen lösungsgeglühtem und ausgelagertem Zustand ($1050\text{ }^{\circ}\text{C} \rightarrow 725\text{ }^{\circ}\text{C}$). Mit der Keimbildung fällt τ_{SS} von 104 MPa auf 82,8 MPa für die berechnete Matrixchemie ab. Im Vergleich dazu ist der berechnete Wert für den Nb und Ti freien IN718-Matrix-SX um 8 % niedriger. Wird τ_{SS} für die gemessene Matrixchemie nach Tabelle C.2 einmal für $T \leq 760\text{ }^{\circ}\text{C}$ und einmal für $T > 950\text{ }^{\circ}\text{C}$ berechnet ist die τ_{SS} um 12 % höher. Dieser Unterschied resultiert aus den unterschätzten Nb- und Ti- Gehalten in der Phasenkinetik (+1 at% Nb, +0,5 at% Ti).

Das Modell kann den Einfluss der einzelnen Legierungselemente und die Abhängigkeit vom Auslagerungszustand darstellen. Defizite der thermodynamischen Datenbank bewirken eine 12%ige Abweichung in der Berechnung von τ_{SS} , welche im ausgelagerten Zustand zwischen 83 MPa und 95 MPa liegt.

5.6.3 Die Feinkornhärtung für IN718

Der Einfluss der Feinkornhärtung τ_{HP} für IN718 wird rechnerisch gezeigt. Für einen ausscheidungsfreien Zustand werden τ_{Int} , τ_{SS} berechnet. Für die Abschätzung des Korngrößeneinflusses wird in der Hall- Petch Gleichung die Korngröße D_K zwischen $1\text{ }\mu\text{m}$ und $1000\text{ }\mu\text{m}$ variiert. Das Ergebnis ist für einen Taylorfaktor $M = 3$ in Abbildung 5.28a dargestellt. Die Analyse

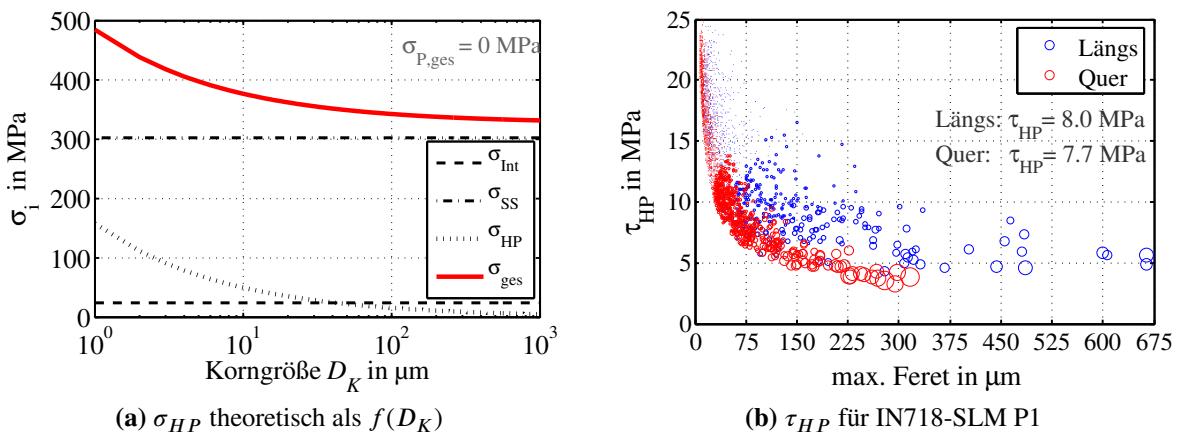


Abbildung 5.28: (a) korngrößenabhängige Grundfestigkeit IN718 für die ausscheidungsfreie Matrix ($\sigma_{P,ges} = 0$) mit $M = 3$, (b) kornflächengemittelte τ_{HP} von IN718-SLM P1 (Kreisfläche korreliert mit gemessener Korngröße)

zeigt, dass erst unterhalb von $D_K = 50\text{ }\mu\text{m}$ eine Feinkornhärtung einsetzt und mit kleinerem

D_K steigt. Für $D_K = 10 \mu\text{m}$ wird ein Härtungseffekt von $\sigma_{HP} = 45 \text{ MPa}$ erreicht. Ab einer Korngröße von $2-3 \mu\text{m}$ beträgt $\sigma_{HP} = 100 \text{ MPa}$. Für die Berechnung von τ_{HP} des IN718-SLM Materials wird für D_K der minimalen Feret ($F_b = F_a/A_V$) aus den EBSD-Messungen abgeleitet. Es wird angenommen, dass F_b näherungsweise der Lauflänge der Versetzung zwischen den Korgrenzen der in Aufbaurichtung gestreckten Körner entspricht. Abbildung 5.28b zeigt für jedes Korn der EBSD- Messung exemplarisch für den Fertigungsparameter P1 die kornflächenbezogene Darstellung von τ_{HP} über F_a . Das Ergebnis für P2 ist in Abbildung D.14 ergänzt. Die kornflächengewichtete, mittlere Feinkornhärtung τ_{HP} beträgt für P1 ca. 8 MPa und für P2 aufgrund der kleineren Korngröße ca. 9,5 MPa. Die Abweichung zwischen dem ausgewerteten Längs- und Querschliff ist vernachlässigbar gering.

5.6.4 Theoretische Härtungseffekte in der γ' - und γ'' - Phase

Die Ergebnisse der für IN718 erweiterten Modellgleichungen der Ausscheidungshärtung sind in Abbildung 5.29 für die γ' - und γ'' - Phase zusammengefasst. Die Daten werden für eine simulierte Auslagerung bei 725°C (f_i , R_K , D_Z) dargestellt.

Der Härtungsbeitrag der γ' - Phase ergibt sich aus dem dominierenden APG- Effekt und zu einem geringeren Anteil aus dem Kohärenzeffekt (siehe Abb. 5.29a). Für $\tau_{APG}^{\gamma'}$ liegt der Übergang zwischen schwachem und starkem Regime bei $R_K = 13,5 \text{ nm}$ mit 84 MPa und für $\tau_K^{\gamma'}$ bei $R_K = 31 \text{ nm}$ mit 56 MPa. Der Anteil der Härtungseffekte $\tau_{SF}^{\gamma'}, \tau_{GF}^{\gamma'}, \tau_S^{\gamma'}$ ist vernachlässigbar gering. Der Gesamthärtungsbeitrag der γ' - Phase mit einer maximalen Schubspannung von

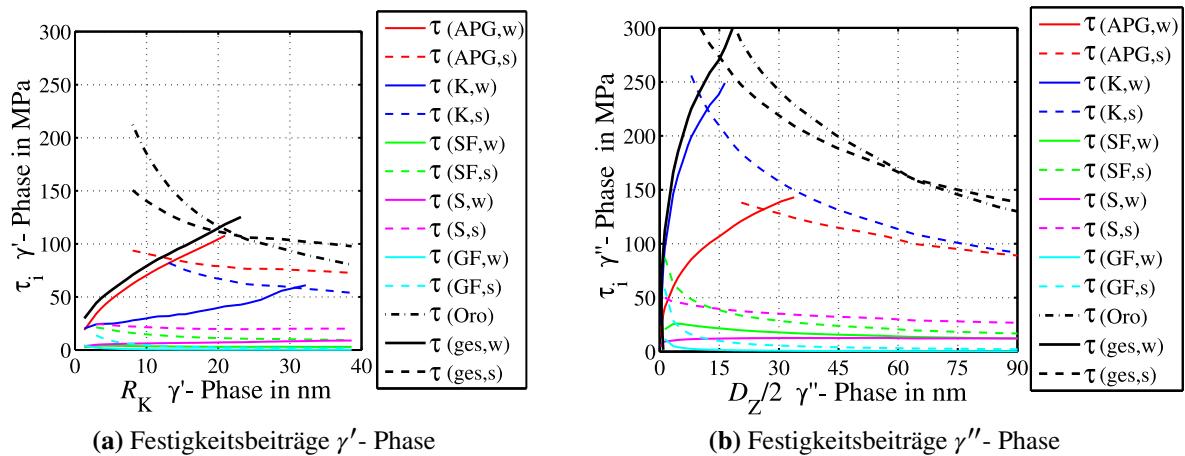


Abbildung 5.29: Härtungseffekte der γ' - und γ'' - Phase berechnet auf Basis der Phasenkinetikdaten in Anhang Kap. D.6

110 MPa bei $R_K = 19 \text{ nm}$ und $f_{\gamma'} \approx 5\%$ stellt den Übergang vom schwachen zum starken Schneidregime dar. Dies ist vergleichbar mit dem bei Ahmadi et al. publizierten Wert von 17 nm

[APKW⁺14]. Der Übergang vom Schneid- zum Orowanregime liegt bei $R_K = 25$ nm. Dies ist mit $R_K \geq 20$ nm nach Sundararaman et al. vergleichbar, welcher zunehmend Orowanringe um γ'' - Partikel dieser Größe detektiert [SMB88a].

Der Härtungsbeitrag der γ'' - Phase setzt sich aus dem dominierenden Kohärenzeffekt und zu einem geringeren Anteil aus dem APG- Effekt zusammen (siehe Abb. 5.29b). Für $\tau_K^{\gamma''}$ liegt der Übergang zwischen schwachem und starkem Regime bei $D_Z/2 = 11$ nm mit einem maximalen Härtungsbeitrag von 225 MPa. $\tau_{APG}^{\gamma''}$ ist die Summe aus Versetzungspaar und -vierling mit einem maximalen Härtungsbeitrag von 130 MPa bei $D_Z/2 = 26$ nm. Die übrigen drei Effekte $\tau_{SF}^{\gamma''}$, $\tau_{GF}^{\gamma''}$, $\tau_S^{\gamma''}$ sind mit dem gewählten Setup im Vergleich dazu vernachlässigbar gering. Für diese Effekte wird kein Übergang vom schwachen zum starken Partikel-Versetzungsrégime beobachtet. Aus den Einzeleffekten ergibt sich die Gesamthärtungskurve der γ'' - Phase mit einem maximalen Härtungsbeitrag von 273 MPa bei $D_Z/2 = 15$ nm. Publikationen geben für den maximalen Härtungsbeitrag einen vergleichbaren Wert mit $D_Z/2 = 10$ nm bis 13,5 nm an [CF83, CF87, CF89, SMB88a]. Der berechnete Übergang vom Schneid- zum Orowanregime liegt bei $D_Z/2 = 65$ nm.

Die Auswirkungen der Modellerweiterung für die γ'' - Phase sind im Vergleich zu den Modellen in der Literatur in Abbildung 5.30 dargestellt [OPD74a, Ard85]. Der berechnete Kohärenzeffekt unter Berücksichtigung der größenabhängigen $\varepsilon_i^{\gamma''}$ zeigt einen flacheren Anstieg gegenüber dem Verlauf mit einem konstanten $\varepsilon_i^{\gamma''}$ nach Oblak et al. ($\tau(K,w)$ [OPD74a]). Der Ansatz für sphärische Ausscheidungen nach Ardell ($\tau(K,w)$ [Ard85]) ist für die γ'' - Phase mit deren inhomogener Gitterverzerrung nicht zulässig und liefert komplett falsche Ergebnisse. Die Erweiterungen für

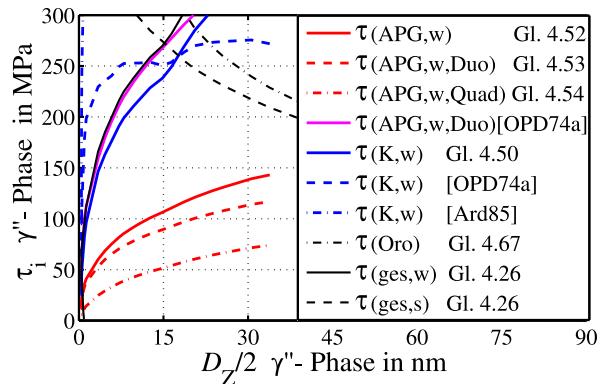


Abbildung 5.30: Vergleich der Modelle von [OPD74a, Ard85] mit den Modellerweiterung für die γ'' - Phase dieser Arbeit auf Basis der Phasenkinetikdaten in Anhang Kap. D.6

die Beschreibung des APG- Effektes in der γ'' - Phase reduzieren den berechneten Härtungsbeitrag, sodass $\tau_K^{\gamma''}$ für die γ'' - Phase dominiert. $\tau_{APG}^{\gamma''}$ nach Oblak et al. ($\tau(APG,w,Duo)[OPD74a]$) berücksichtigt nur Versetzungspaares und liegt auf dem Niveau des Kohärenzeffektes ohne auf Details der Schneidmechanismen in der Kristallografie der γ'' - Phase und die Versetzungsvier-

linge einzugehen. Der gesamte Härtungsbeitrag der γ'' -Phase sowie der gesamte Anteil aus γ' - und γ'' -Phasen liegen ohne die Modellerweiterung um den Faktor 1,5 bis 2 höher und nehmen für kurze Auslagerungszeiten deutlich schneller zu. Die folgenden Kapitel zeigen die qualitativen und quantitativen Modellergebnisse aus der Kopplung der Thermokinetik- und Festigkeitsimulation im Vergleich mit experimentellen Daten am Ein- und Polykristall. Diese Ergebnisse bestätigen die getätigten Modellerweiterungen und deren Relevanz für IN718.

5.7 Kopplung von Phasenkinetik und Härtungseffekten

5.7.1 Analyse der Streckgrenzberechnung an Härtemessungen

Die wärmebehandlungsabhängige Festigkeit des Materials wird durch die Kopplung des Phasenkinetik- und Streckgrenzmodells nur korrekt berechnet, wenn alle Details hinsichtlich Partikelgröße, Ausscheidungswachstum, Phasenanteil, Partikelabstand, Werkstoffparameter sowie Härtungsmechanismen und deren Partikel- Versetzungsinteraktionen richtig beschrieben sind. Der erste Bewertungsschritt der Modellkopplung erfolgt an publizierten Härtekurven, bei denen das Material lösungsgeglüht, rasch abgekühlt und anschließend für bis zu 100 h ausgelagert wird. Die maximale Härte von 495 HV wird bei 680 °C nach 51 h erreicht. Mit steigender Auslagerungstemperatur verkürzt sich die Auslagerungszeit, sodass bei 750 °C die maximale Härte von 465 HV schon nach 4,5 h gemessen wird. In der Simulation erfolgt die Abkühlung mit 50 K/s von 1050 °C und anschließender Auslagerung zwischen 675 °C und 750 °C für 100 h. Die berechnete Schubspannung ist im Vergleich mit den publizierten Härtekurven in Abbildung 5.31a dargestellt. Analog der Härtemessungen zeigt die Berechnung schon während des Aufheizvor-

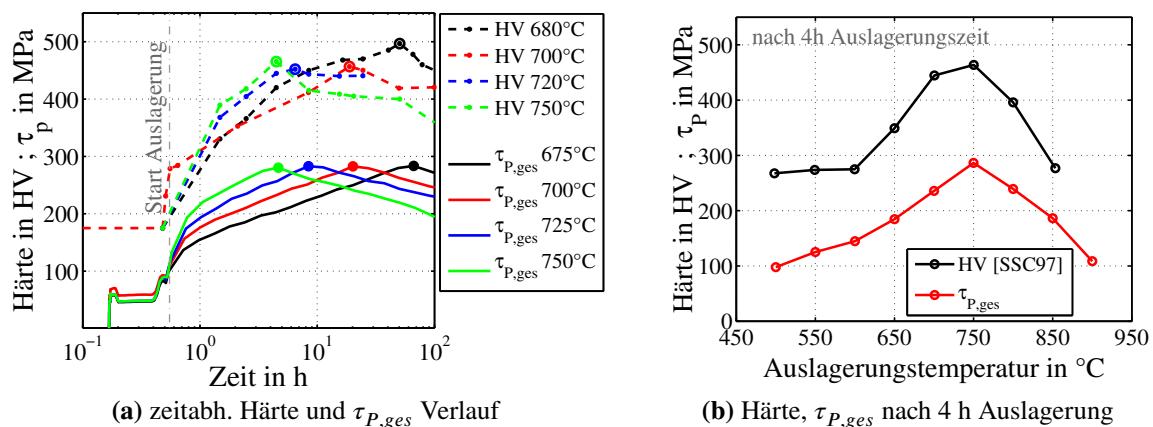


Abbildung 5.31: Vergleich der berechneten $\tau_{P,ges}$ mit den über (a) Zeit und (b) Auslagerungstemperatur aufgetragenen Härtemessungen von [Aza04, SSC97]

ganges auf Auslagerungstemperatur einen starken Anstieg der Festigkeit. In der Simulation wird

bei 675 °C nach 66 h das Maximum von $\tau_{P,ges} = 283$ MPa erreicht. Bei 750 °C liefert die Berechnung schon nach 4,6 h die maximale Ausscheidungshärtung von 279 MPa. Die Übereinstimmung der Verläufe und die temperatur- und zeitabhängige Lage der maximalen Festigkeit bestätigen die erfolgreiche Modellkopplung. Die Abweichung der Lage der maximalen Festigkeit liegt zwischen 5 % und 25 %, ohne dass die exakten Versuchsbedingungen bekannt sind. Ergänzende Berechnungsergebnisse für R_K , D_Z , f_j und $\tau_{P,ges}$ sind im Anhang in Abbildung D.13 ergänzt. Die Modellierung zeigt, dass der Volumenanteil sehr schnell auf den maximalen Wert ansteigt und das Erreichen des Festigkeitsmaximums nur von der Wachstumsgeschwindigkeit der Ausscheidungen abhängt. Mit steigender Auslagerungstemperatur steigt auch die Wachstumsgeschwindigkeit und folglich wird die optimale Ausscheidungsgröße schneller erreicht. Die Ergebnisse in Abbildung D.13 zeigen außerdem, dass für eine einstufige Auslagerung die maximale Festigkeit nur mit dem optimalen γ'' - Durchmesser korreliert. Das Festigkeitspotential der γ' -Phase wird nicht ausgeschöpft, da vor dem Erreichen des optimalen γ' -Radius die Entfestigung aufgrund γ'' -Vergrößerung einsetzt. Abbildung 5.31b vergleicht Härtemessungen von Slama et al. mit dem berechneten $\tau_{P,ges}$ in Abhängigkeit von der Auslagerungstemperatur für eine konstante Auslagerungszeit von 4 h [SSC97]. Die Temperaturabhängigkeit wird von der Simulation korrekt beschrieben. Härte und $\tau_{P,ges}$ steigen mit zunehmender Temperatur an und erreichen ein Maximum bei 750 °C mit 463 HV bzw. 283 MPa. Für höhere Auslagerungstemperaturen fallen die Kurven innerhalb der 4 h wieder stark ab.

Die für die Validierung der Phasenkinetik genutzten Atomsondenmessungen von Alam et al. liefern ebenfalls Härtewerte (siehe Abb. 5.32) [ACRC10]. Diese bei 706 °C ausgelagerten Proben erreichen nach ca. 7,5 h die maximale Härte. Im Vergleich dazu wird in der Härtekurve bei 700 °C in Abbildung 5.31a das Härtemaximum erst nach 19 h erreicht. Wesentlicher Unterschied

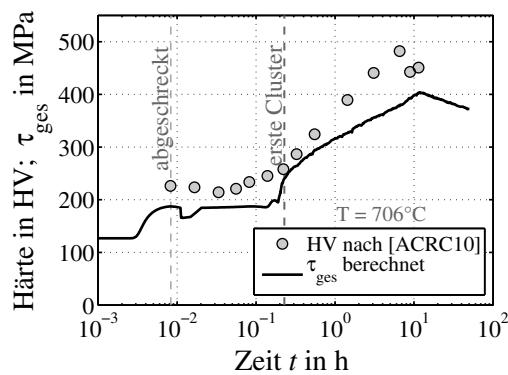


Abbildung 5.32: Bewertung der berechneten τ_{ges} anhand der Härtemessungen von Alam et al. im Rahmen seiner Atomsondenmessungen [ACRC10], f_j , R_K und D_Z in Abb. 5.23

zwischen den beiden Versuchen ist die leicht modifizierte Chemie der Legierung mit einem etwas höheren Nb- Gehalt bei Alam et al. (+0,4 wt%). In einer erneuten Berechnung wird in der Simulation bei gleicher Wärmebehandlung die Chemie entsprechend angepasst. Die rechneri-

sche Auslagerungszeit bis zum Festigkeitsmaximum verkürzt sich von 19 h auf 11,5 h für den höheren Nb- Gehalt (siehe Abb. 5.32). Der Vergleich dieser Ergebnisse zeigt den hohen Einfluss von Nb auf die Ausscheidungskinetik. Die Abweichung von 4 h Auslagerungszeit zwischen dem Modell und der Härtemessung von Alam et al. kann über einen etwas geringere Partikelgrößer in der Kinetik erklärt werden (vgl. Abb. 5.23).

5.7.2 Analyse der Streckgrenzberechnung an Zugversuchen

Grundlage für die Berechnung der Streckgrenze sind die in Kapitel 5.5.3 berechneten thermokinetischen Daten.

Die experimentell am IN718-SLM und IN718-SX gemessene Streckgrenze ($R_{p0,1}$) wird im ersten Schritt mit der berechneten Schubspannung, welche einheitlich mit $M = 2,6$ in eine Zugspannung umgerechnet wird, verglichen. Die Zugversuche zeigen einen Anstieg der Streckgrenze von 822 ± 16 MPa nach 0,35 h Auslagerungszeit (IN718-SLM) auf das Festigkeitsmaximum von 1073 ± 45 MPa nach 8 h Auslagerungszeit (IN718-SX) (siehe Abb. 5.33a). Für das

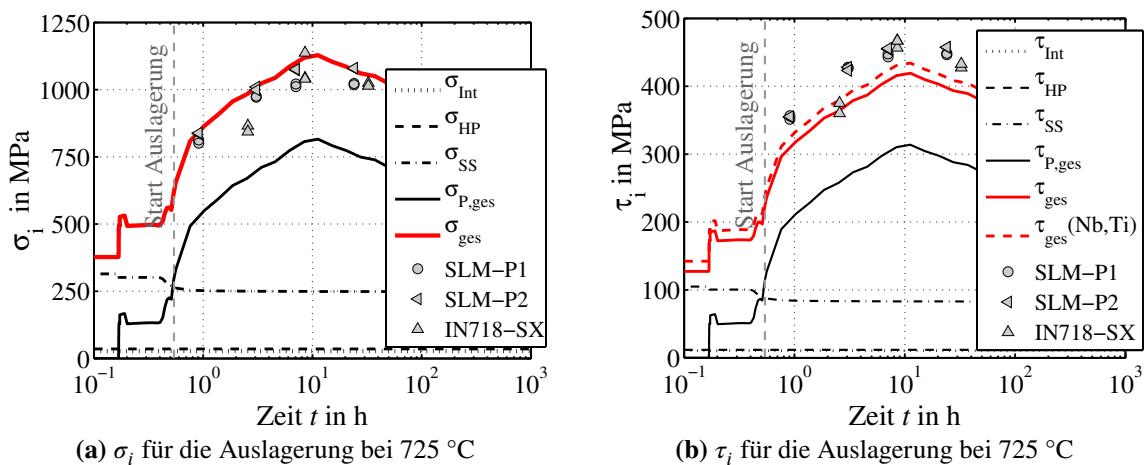


Abbildung 5.33: (a) Vergleich zwischen gemessener und berechneter $R_{p0,1}$ für die Auslagerung bei 725 °C, Modell mit $M = 2,6$ umgerechnet; (b) texturbereinigter Vergleich der gemessenen und berechneten τ_{ges} , Messwerte mit probenspezifischen M bzw. m_s umgerechnet

SLM- Material ergibt sich ein Festigkeitsplateau zwischen 6,5 h und 23,5 h mit einem $R_{p0,1}$ von 1048 ± 30 MPa. $R_{p0,1}$ beträgt für den Fertigungsparameter P1 1018 ± 5 MPa und ist für P2 mit 1077 ± 3 MPa etwas höher. Die längere Auslagerung des SX- Materials von 32 h führt zu einem Festigkeitsabfall auf 1019 ± 6 MPa. Die Streuung der Zugversuchsergebnisse fällt aufgrund der hohen Materialhomogenität und der minimalen Defektdichte sehr gering aus. Die berechnete σ_{ges} kann den zeitabhängigen Verlauf der Messdaten abbilden und zeigt, dass nach Erreichen der Auslagerungstemperatur der Beitrag von $\tau_{p,ges}$ den Großteil der Festigkeit ausmacht (siehe Abb. 5.33a). Die berechnete σ_{ges} beträgt nach 0,35 h 830 MPa und steigt auf ein Maximum von

1128 MPa nach 10,5 h Auslagerungszeit. Für längere Zeiten fällt σ_{ges} wieder ab, beträgt nach 32 h noch 1055 MPa und nach 100 h nur noch 980 MPa. Mit dem einheitlichen $M = 2,6$ liegen die Berechnungsergebnisse an der Obergrenze der Zugversuchsdaten.

Für einen texturbereinigten Vergleich zwischen Messdaten und Simulation wird im zweiten Schritt die gemessene $R_{p0,1}$ mit dem probenspezifischen Schmidtfaktor m_s bzw. Texturfaktor M für IN718-SX, IN718-SLM-P1 und -P2 in die auf dem Gleitsystem wirkende Schubspannung umgerechnet. Hierdurch ist eine texturbereinigte Bewertung der Härtungseffekte anhand von τ_{ges} möglich. Aus der Streckgrenze ergibt sich eine Schubspannung zwischen $354 \pm 2,3$ MPa bei 0,35 h (IN718-SLM) und maximal 464 ± 6 MPa bei 8 h (IN718-SX) Auslagerungszeit (siehe Abb. 5.33b, vgl. Tab. C.21, C.22). Die berechneten Werte bilden den gemessenen zeitabhängigen Verlauf ab und liegen mit einer Abweichung von $< 15\%$ unterhalb der experimentellen Daten. Der entsprechende Ausscheidungszustand ist in Abbildung 5.24 dokumentiert. Die Festigkeitsanteile τ_{SS} und $\tau_{P,ges}$ liefern den dominierenden Festigkeitsbeitrag, wobei $\tau_{P,ges}$ im Zuge der Auslagerung bis zu dreimal so hoch wird. Der Einfluss von τ_{Int} und τ_{HP} ist vernachlässigbar.

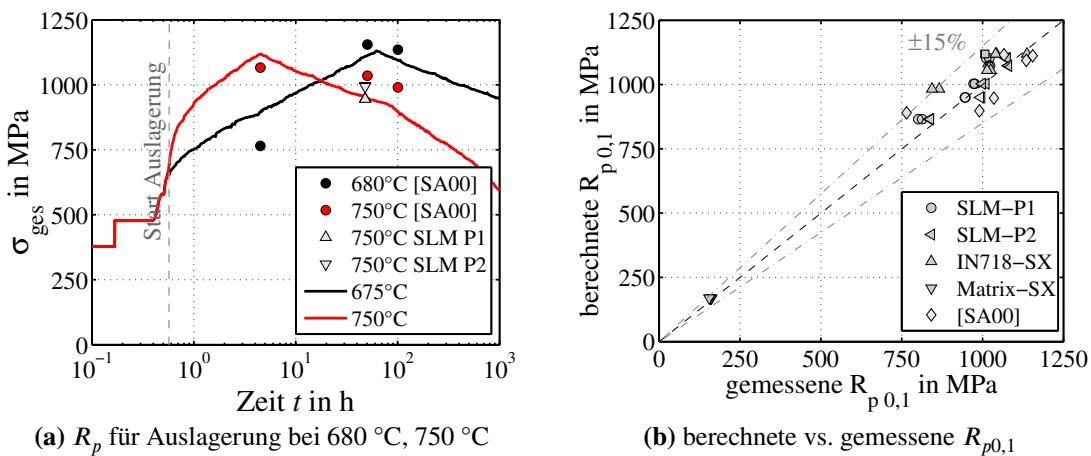


Abbildung 5.34: (a) Vergleich zwischen gemessener und berechneter $R_{p0,1}$ für die Auslagerung bei 680 °C und 750 °C; (b) Gesamtabweichung zwischen allen berechneten und gemessenen $R_{p0,1}$ -Werten, Modell mit $M = 2,6$ umgerechnet

Werden die Defizite in der Berechnung der Matrixchemie und der daraus folgend berechnete τ_{SS} berücksichtigt, reduziert sich die Abweichung um ca. 15 MPa zu τ_{ges} (Nb,Ti). Der verwendete Texturfaktor hat ebenfalls Einfluss auf die Abweichung, welche sich für den maximal ermittelten m_s bzw. M weiter reduziert (vgl. Tab. C.22). Der berechnete Maximalwert für τ_{ges} liegt zwischen 415 MPa und 425 MPa nach 10,5 h Auslagerungszeit. Eine systematische Analyse der Einflussgrößen auf die Ergebnisgenauigkeit erfolgt im Rahmen der Sensitivitätsstudie in Kapitel 5.7.3.

Die Entwicklung der Streckgrenze bei 680 °C und 750 °C wird anhand von publizierten Daten von Slama et al. und den Versuchen am SLM- Material bei 750 °C bewertet [SA00]. Die

Simulation kann für die Temperaturen den Streckgrenzverlauf, die Lage und Höhe des Festigkeitsmaximums wiedergeben (siehe Abb. 5.34a). Die Abweichungen können u.a. aus fehlenden Daten bezüglich der exakten Chemie, Wärmebehandlung und Textur bei Slama et al. resultieren [SA00]. Für das SLM- Material ist die Abweichung nach 50 h $< 6\%$.

Der Vergleich zwischen allen gemessenen und berechneten Streckgrenzdaten ist in Abbildung 5.34b dargestellt. Die sich insgesamt ergebende Abweichung zwischen Experiment und Simulation ist $< \pm 15\%$.

Ausgehend von dieser Modellgenauigkeit werden Phasenkinetik und Streckgrenze von IN718 für eine einstufige Auslagerung zwischen 550 °C und 1000 °C für bis zu 1000 h nach einer Raschabkühlung von 1000 °C berechnet. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.35 zusammengefasst und zeigen die Entwicklung der Streckgrenze in Abhängigkeit vom Ausscheidungszustand in diesem Temperatur- und Zeitfenster. Der Startpunkt der Auslagerung sowie der Bereich mit einer resultierenden Streckgrenze > 1000 MPa sind über Konturlinien markiert. Die Phasenkinetik zeigt die Interaktion der drei Ausscheidungsphasen und deren Auswirkungen auf Phasenanteil und Partikelgröße. Während des Aufheizens auf Auslagerungstemperatur bildet sich schnell ein hoher γ'' - und γ' - Phasenanteil mit einem Verhältnis von mindestens 2:1. Für Temperaturen unterhalb von 700 °C sind beide Ausscheidungsphasen stabil, der Phasenanteil nähert sich dem thermodynamischen Gleichgewichtszustand an und die Wachstumsgeschwindigkeit der Partikel ist gering. Die δ - Phase ist nur an der Korngrenze (δ_{KG}) mit maximal 3 vol% nach 100 h vorhanden.

Für Temperaturen oberhalb von 700 °C löst sich die γ'' - Phase zugunsten der thermodynamisch stabileren δ - Phase auf. Diese Umlösung erfolgt durch den δ - Anteil an der Korngrenze, welcher über die Auslagerung langsam zunimmt, sowie die stetige Phasentransformation von γ'' zu δ , welche ab einer definierten γ'' - Partikelgröße ($D_Z \geq 150$ nm) nach langen Auslagerungszeiten einsetzt. Die Kinetik der Phasenumlösung beschleunigt sich mit steigender Auslagerungstemperatur. Die berechneten Bereiche der δ - Phase (δ_{ges} , δ_{KG} , $\delta_{\gamma''}$) stimmen mit publizierten TTT-Diagrammen überein (vgl. Abb. 5.35e, 5.35f, 5.35g, C.2). Mit der Auflösung der γ'' - Phase steigt der γ' - Phasenanteil aufgrund der frei werdenden Ti-, Al- und teilweise Nb- Gehalte auf Maximalwerte von 10 % an. Der γ' - Solvus liegt zwischen 890 °C und 900 °C. Der Solvus der γ'' - Phase ist temperatur- und zeitabhängig und liegt für kurze Auslagerungszeiten bei maximal 950 °C (der Stufeneffekt resultiert aus den Berechnungsschritten von 25 K). Der δ - Solvus liegt in diesem Prozessfenster bei 1000 °C. Im Vergleich zu den im Gleichgewichtszustand berechneten Phasensolvi wird deutlich, dass sowohl der γ'' - Solvus als auch der δ - Solvus in der Kinetik geringer sind. Der in der Kinetik berechnete Phasensolvus stimmt bei einem Nb- Gehalt von 5,1 wt% mit dem publizierten Solvus in Abbildung 5.11b überein. Selbiges ist für die übrigen Nb- Konzentrationen zu erwarten.

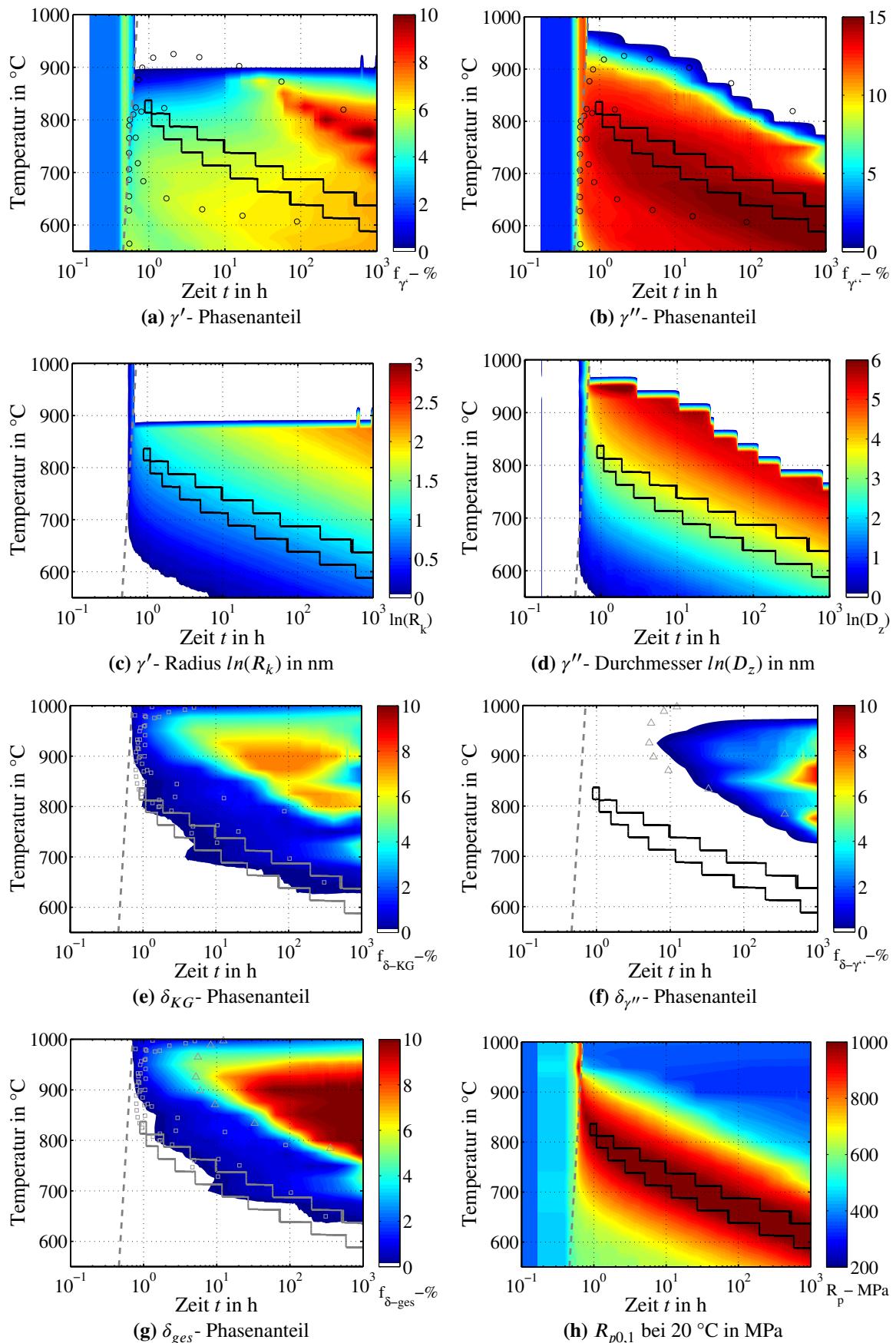


Abbildung 5.35: Berechnete Phasenkinetik und $R_{p0,1}$ für einstufige Auslagerung nach Wasserabschreckung von 1000 °C, Hüllkontur markiert $R_{p0,1} > 1000$ MPa bei 20 °C, (--) Auslagerungstemperatur erreicht, übrigen Symbole nach TTT-Diagramm in Abb. C.2

Die temperatur- und zeitabhängige Phasenkinetik steuert die erreichbare Streckgrenze des Materials. Eine Streckgrenze > 1000 MPa wird zwischen 600 °C nach 800 h und maximal 825 °C nach $0,8$ h erreicht. Das Zeitfenster im Auslagerungsprozess, in dem $R_{p0,1} > 1000$ MPa ist, wird mit steigender Temperatur immer kleiner. Der Abfall der Festigkeit geht mit der Vergrößerung und Auflösung der γ'' -Phase einher. Innerhalb der berechneten Zeiten fällt die Festigkeit oberhalb von 800 °C wieder auf das Niveau der Mischkristallfestigkeit ab.

Die Aussagefähigkeit der Simulation für Langzeitauslagerungen mit $t \leq 50.000$ h wird an publizierten Daten für Temperaturen zwischen 600 °C und 800 °C untersucht. In der Berechnung wird der Langzeitauslagerung zunächst eine Standardauslagerung bei 720 °C, 8 h und 620 °C, 8 h vorgelagert. Da für die experimentellen Daten keinerlei Texturinformationen bekannt sind, wird bezogen auf den Zustand nach Standardauslagerung die relative Streckgrenze mit der Simulation verglichen (siehe Abb. 5.36a). Die Analyse zeigt, dass der Trend der Streckgrenzentwick-

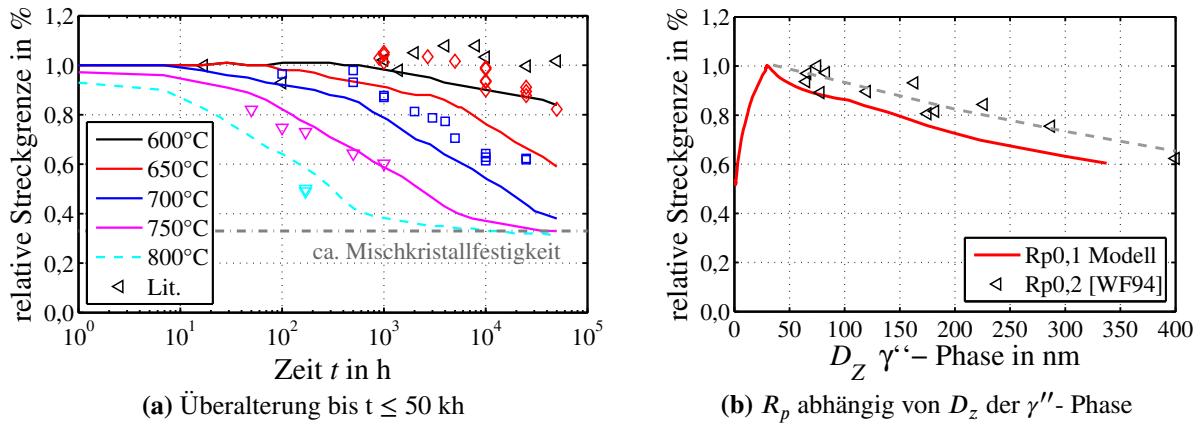


Abbildung 5.36: (a) relative R_p für den Überalterungsvorgang nach Standardauslagerung für $t \leq 50.000$ h bei 600 °C bis 800 °C, Literaturdaten nach [BB88, KT91, RK92, MPd00, MTU05]; (b) Abhängigkeit R_p vom γ'' - Durchmesser, Daten nach [WF94]

lung auch für lange Auslagerungszeiten von der Simulationskette abgebildet wird. Für 700 °C bis 800 °C ist die Abweichung zwischen Simulation und Experiment $< 15\%$. Für $T < 700$ °C erfolgt die berechnete Entfestigung schneller. Die Abweichung ist $< 25\%$. Dies kann auf die höher berechnete Wachstumskinetik infolge einer zu hohen Vergrößerungskonstante k_v in diesem Temperaturbereich zurückgeführt werden. Ursache dafür können Abweichungen im verwendeten Formfaktor, der Diffusionsgeschwindigkeit oder Grenzflächenenergie in der Kinetiksimulation sein. Für 600 °C und 650 °C zeigt die Simulation im Überalterungsprozess ebenfalls den experimentell beobachteten Effekt der geringen Festigkeitszunahme nach der Standardauslagerung, allerdings bei kürzeren Zeiten. Aus den Berechnungen ergibt sich weiterhin die Abhängigkeit der Streckgrenze vom γ'' -Durchmesser (siehe Abb. 5.36b). Der Vergleich mit den von Wlodek et al. publizierten Daten zeigt, dass die Korrelation zwischen Streckgrenze und γ'' -Partikelgröße von der Simulation erfasst wird.

Die Auftragung der publizierten und berechneten Überalterungsdaten über den Larson-Miller Parameter ermöglicht einen temperatur- und zeitbereinigten Vergleich der Streckgrenzanalyse. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.37 dargestellt und werden aus den Daten in Abbildung 5.36a abgeleitet. Die Simulation ermöglicht im Überalterungsprozess über den gesamten Temperatur-

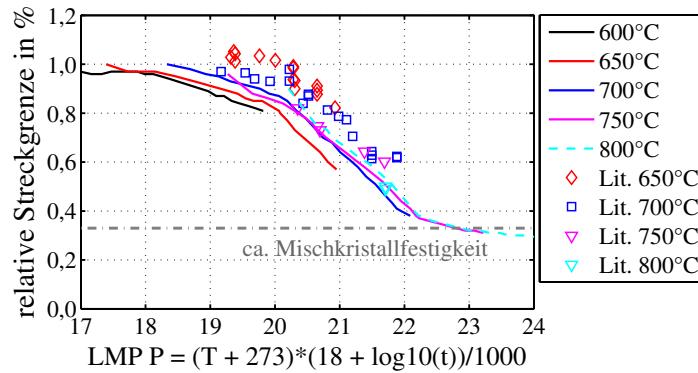


Abbildung 5.37: relative Streckgrenze über Larson Miller Parameter (LMP) nach Standardauslagerung für $t \leq 50$ kh bei 600 °C bis 800 °C, Literaturdaten nach [BB88, KT91, RK92, MPd00, MTU05]

und Zeitbereich eine konservative Berechnung der Festigkeitsentwicklung mit einer maximalen Abweichung $\leq 20\%$.

5.7.3 Sensitivitätsbewertung der Modelle

Die Ergebnisse der Simulationskette basieren auf den in dieser Arbeit entwickelten und gekoppelten Modellen sowie dem definierten Parametersetup, welche das Werkstoff- und Festigkeitsverhalten mit einer insgesamt erreichten Abweichung $\leq 20\%$ beschreiben. Über die schrittweise Validierung wird allerdings eine gewisse Streuung und Ungenauigkeit deutlich, welche aus den gewählten Datenbanken, Parametern, Modellen, Experimenten und der Texturinterpretation resultieren. Die Bewertung dieser Einflüsse und der daraus resultierenden Modellsensitivität erfolgt anhand einer systematischen Variation der Parameter für die festigkeitsdominierende γ'' -Phase. Folgende Parameter werden berücksichtigt: γ'' - Phasenanteil $f_{\gamma''}$, γ'' - Partikeldurchmesser D_Z , γ'' - Formfaktor κ , γ'' - Grenzflächenenergie $\gamma_{GF}^{\gamma''}$, Matrixschubmodul G_{γ} , γ'' - Schubmodul $G_{\gamma''}$, Texturfaktor M , γ'' - Gitterverzerrung $\epsilon_3^{\gamma''}$, Anteil an Stufenversetzungen A_{Stufe} , γ'' - Antiphasengrenzenergie $\gamma_{APG}^{\gamma''}$ und γ'' - Stapelfehlerenergie $\gamma_{SF}^{\gamma''}$. Der Phasenanteil $f_{\gamma''}$, der Partikeldurchmesser D_Z , der Formfaktor κ und die Grenzflächenenergie $\gamma_{GF}^{\gamma''}$ sind Ergebnisgrößen der Phasenkinetik. Der Schubmodul der Matrix G_{γ} und γ'' - Phase $G_{\gamma''}$, der Texturfaktor M , die Gitterverzerrung $\epsilon_3^{\gamma''}$, der Anteil an Stufenversetzungen A_{Stufe} , die Antiphasengrenzenergie $\gamma_{APG}^{\gamma''}$ und Stapelfehlerenergie $\gamma_{SF}^{\gamma''}$ werden aus Literaturquellen, Annahmen und eigenen Messdaten für das Festigkeitsmodell abgeleitet. Diese 11 Parameter werden im Festigkeitsmodell für eine Auslagerung bei 725 °C zweistufig um $\pm 10\%$ variiert. Die auszuwertenden Zielgrößen sind

die Höhe der Streckgrenze $R_{p,max}$ und der Zeitpunkt des Erreichens des Festigkeitsmaximums t_{max} . Der sich hieraus ergebende vollfaktorielle Versuchsplan mit 2^{11} Kombinationen wird mit der Statistiksoftware Minitab[©] erstellt. In der Auswertung mit Minitab[©] werden die Parameter und Zielgrößen anhand einer Regressionsanalyse miteinander unter der Annahme eines linearen Zusammenhangs korreliert. Aus dem von Minitab[©] ermittelten Polynom können primäre und sekundäre Wechselwirkungen in sogenannten Hauptinteraktionsdiagrammen dargestellt werden. Nimmt sowohl der Parameter als auch die Zielgröße zu liegt ein positiver Effekt vor. Der Einfluss des Parameters ist umso signifikanter je steiler der Anstieg der Zielgröße ist. Der Gesamtumfang der Sensitivitätsstudie ist im Anhang in den Abbildungen D.15 und D.16 zusammengefasst. Diese Hauptinteraktionsdiagramme zeigen, dass von den 11 untersuchten Parametern lediglich fünf bei einer Variation von $\pm 10\%$ ausschlaggebend die Zielgrößen beeinflussen. Diese fünf Parameter sind in Abbildung 5.38 dargestellt.

Auf die Auslagerungszeit t_{max} haben im Wesentlichen der Partikeldurchmesser D_Z und der Gitterverzerrung $\varepsilon_3^{\gamma''}$ einen Einfluss. Für D_Z ist die korrekte Berechnung der Keimbildung und des Partikelwachstums auf Basis der verwendeten thermodynamischen- und kinetischen Datenbank, welche die Phasenchemie und -stabilität (vgl. Abb.5.10, 5.11) sowie die temperaturabhängigen Transportvorgänge im Material (vgl. Abb.5.12) beschreiben, Voraussetzung. Ausgehend vom thermodynamischen Potenzial (vgl. Gl.4.18) muss die Grenzflächenenergie (vgl. Gl.4.24, Abb.5.9a) und Keimbildung (vgl. Gl.4.20, Abb.5.23) sowie die Systementwicklung mit dem eingeführten Formfaktor (vgl. Gl.4.26, Abb.5.2) für die Legierung IN718 korrekt in der Kinetiksimulation beschrieben sein. Für den Übertrag des Partikeldurchmessers in das Festigkeitsmodell ist die richtige Beschreibung der Gleitebenenbezogenen Partikelgröße (vgl. Gl.4.12, 4.13), der berücksichtigte Formfaktor der Ausscheidung (vgl. Abb.5.2) und die aus den gemessenen Gitterparametern (vgl. Abb.5.5) berechnete Gitterverzerrung $\varepsilon_3^{\gamma''}$ (vgl. Gl.4.7, Abb.5.7) entscheidend. Der Phasenanteil $f_{\gamma''}$ zeigt nur einen geringen und der Schubmodul G_{γ} sowie Texturfaktor M gar keinen Einfluss auf die Auslagerungszeit t_{max} . Die Höhe der Streckgrenze $R_{p,max}$ hingegen wird stark durch den Phasenanteil $f_{\gamma''}$, Matrixschubmodul G_{γ} , Texturfaktor M sowie der Gitterverzerrung $\varepsilon_3^{\gamma''}$ beeinflusst. In der Phasenkinetik muss die Höhe des Phasenanteils von der thermodynamischen Datenbank (vgl. Abb.5.11) korrekt beschrieben werden. Im Festigkeitsmodell beeinflussen der Phasenanteil $f_{\gamma''}$ und die Gitterverzerrung $\varepsilon_3^{\gamma''}$ die Höhe der ausscheidungshärtenden Effekte (vgl. Gl.4.46 bis 4.53 und 4.62). Der Matrixschubmodul ist neben den Modellgleichungen für die Ausscheidungshärtung (vgl. Kap.4.3.6, 4.3.7, 4.3.8, Abb.5.29) auch für die Berechnung der Versetzungslinienenergie (vgl. Gl.4.15, Abb.5.8) relevant. Der Texturfaktor M bzw. Schmidfaktor m_s erlaubt im Abschluss die Umrechnung der berechneten Schubspannung auf den aktiven Gleitebenen in die makroskopisch gemessene Streckgrenze des Zugversuches (vgl. Gl.4.64). Der Partikeldurchmesser D_Z hat gar keinen Effekt auf die Höhe der Streckgrenze.

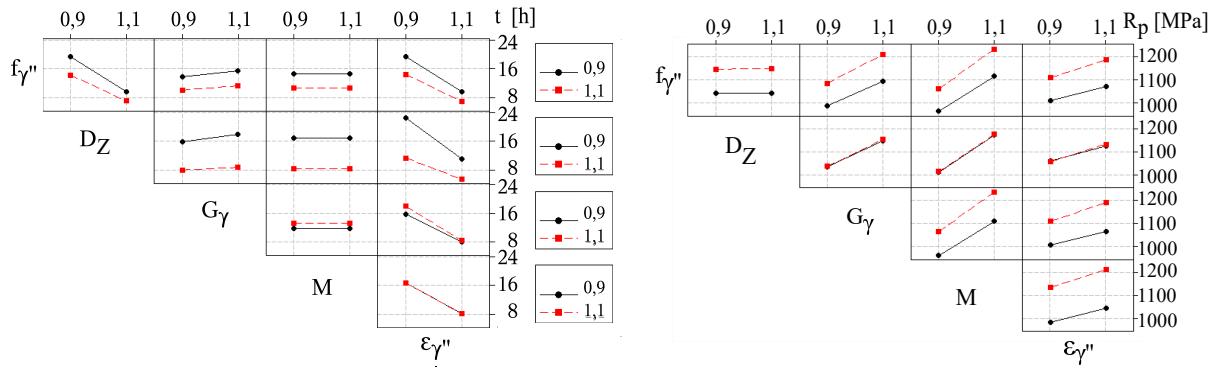


Abbildung 5.38: Analyse der Modellsensitivität für die fünf ausschlaggebenden Modellparameter, welche (a) die notwendige Auslagerungszeit bis zum Erreichen von $R_{p,max}$ und (b) die Höhe von $R_{p,max}$ steuern

Die Studie zeigt, dass infolge einer Parameterstreuung dieser fünf Größen von $\pm 10\%$ die Auslagerungszeit zwischen ca. 8 h und 24 h und die Höhe der Streckgrenze zwischen ca. 1000 MPa und 1200 MPa im Extremfall variieren kann. Folglich sind die Anforderungen an die Genauigkeit der Eingangsdaten und der berechneten Zwischen- und Endergebnisse entlang der Simulationskette sehr hoch. Für eine exakte Berechnung der Werkstoffeigenschaften wird angenommen, dass Eingangsdaten und Modellergebnisse eine Genauigkeit von $< 10\%$ erreichen müssen. Weiterhin wird deutlich, dass ausgehend von der chemischen Zusammensetzung der Phasen alle Effekte voneinander abhängen beziehungsweise aufeinander aufbauen und für die finale Werkstoffeigenschaften und folglich für die Werkstoffmodellierung relevant sind. Die aus den Grundlagen abgeleiteten werkstoffspezifischen Anforderungen, die umgesetzten Modelle und das erreichte Ergebnis bestätigen das konzeptionelle Vorgehen der Dissertation. Verbleibende Unschärfen aus Experiment und Simulation sowie Möglichkeiten zur Verbesserung der Modellgenauigkeit werden im folgenden Kapitel diskutiert.

6. Diskussion der Ergebnisse

Das Ergebnis der Dissertation ist eine physikalisch basierte Simulationskette zur Beschreibung des Erstarrungs- und des Ausscheidungszustandes sowie der Streckgrenze von IN718. Die Modellkopplung beschreibt den vierphasigen, metastabilen Werkstoff in den relevanten Temperatur- und Zeitbereichen. Entscheidend für die erfolgreiche Simulation sind die Modellkopplungen, die korrekte Beschreibung der γ'' -Phase und die dafür notwendigen Modellerweiterungen gegenüber bisher verfügbaren Ansätzen. Die Validierung der berechneten und definierten Eingabeparameter sowie die Ergebnisse der einzelnen und gekoppelten Methoden erfolgt an publizierten Daten und eigenen Experimenten an IN718-Matrix-SX, IN718-SX und IN718-SLM. Im Rahmen der Validierung und der Sensitivitätsstudie können die hohe Genauigkeit, der Gültigkeitsbereich und die Schlüsselgrößen der Simulation identifiziert werden. Im Folgenden werden verwendete Modelle, Eingabegrößen, Datenbanken, Validierungsdaten, Schlüsselgrößen und der Gültigkeitsbereich vor dem Hintergrund der erreichten Ergebnisse diskutiert und auf Schwachstellen sowie Entwicklungspotenzial eingegangen.

6.1 Die Modelle und deren Eingabegrößen

In der Diskussion der Modelle und Eingabeparametern wird zwischen dem phänomenologischen und dem physikalischen Ansatz unterschieden. Die phänomenologische Beschreibung der Erstarrung und Homogenisierung über die Scheilmethode, die Berechnung der Primärarmabstände und die Diffusionsrechnung stellen eine Vereinfachung realer Prozesse dar. Anhand dieser Methoden können Wärmebehandlungsschritte unter Berücksichtigung des Diffusionsausgleiches und der Randbedingungen wie Phasensolvus sowie Kornvergröberung abgeschätzt werden.

Die Randbedingungen für die Kornvergröberung werden aus der Arbeit von Azadian abgeleitet [Aza04]. Für die Spannungsarmglühung von IN718-SLM ist experimentell gezeigt, dass sich die δ -Phase im Aufheizprozess bildet [Str15]. Aus diesem Grund wird davon ausgegangen, dass Rekristallisationsvorgänge bei der gewählten Temperatur von 980 °C weitestgehend unterbunden werden. Aufgrund der zweistufigen Glühung bei 980 °C und anschließend bei 1040 °C wird auf Basis von Publikationen von einem vollständigen Eigenspannungsabbau ausgegangen [HSW⁺08, LLY⁺11, APPP16].

Für die Scheilmethode werden Segregationskoeffizienten aus Messdaten von gegossenem IN718 verwendet. Studien von Nie et al. und Manikandan et al. zeigen allerdings Einflüsse von ∇T und v auf die Ausprägung der Segregation, welche durch diese temperaturfeld- insensitiven Koeffizienten nicht abgebildet werden können [NOL14, MSPK14, MSPK15]. Für eine verfahrensunabhängige Beschreibung muss der Temperaturfeldeinfluss berücksichtigt werden, welcher bspw.

über die Phasenfeldmethode zugänglich ist. Im Vergleich mit TEM- Daten für IN718-SLM wird deutlich, dass die Abweichung trotz der Defizite für das entscheidende Element Nb gering und eine Trendvorhersage möglich ist [Str15]. Dies ist in Übereinstimmung mit den Ergebnissen vieler Autoren, welche die Scheil-Gulliver-Methode für die Abschätzung der Elementverteilung für u.a. IN718 als brauchbar identifiziert haben [KCH⁺89, KDY⁺04, MSW⁺11, SA86].

In der Diffusionsrechnung ist die Vernachlässigung von ausgeprägten Sekundärarmen der Dendriten nur bedingt zulässig [Ret10]. Für große λ_D wird daher eine Erweiterung auf ein synthetisches 2D- Feld empfohlen. Der Fehler für die feine Struktur des SLM-Materials wird aufgrund der schwach ausgeprägten Sekundärarme als gering eingestuft. Der komplexe Vorgang der Phasenumwandlung in Verbindung mit dem Segregations- und Eigenspannungsabbau im SLM- Material stellt eine Lücke in der Simulationskette dar, welche nur durch experimentelle Untersuchungen geschlossen werden konnte. In diesem Fall sind bspw. aufwendige Phasenfeld-simulationen notwendig.

In den physikalisch basierten Ansätzen der Phasenkinetik- und Streckgrenzberechnung werden die wichtigsten physikalischen Effekte wie u.a. die Nukleation, die Energie der Phasen und Grenzflächen, das Ausscheidungswachstum sowie die Interaktion von Versetzungen mit Legierungselementen und Ausscheidungen beschrieben. Dies ermöglicht eine mechanismenbasierte Werkstoffbeschreibung. Die Komplexität der physikalischen Prozesse erfordert jedoch eine modellhafte Abstraktion der Mechanismen und Vorgänge.

Die Ausscheidungsmodellierung erlaubt keine räumliche Auflösung. Die Partikel werden als Kugeln betrachtet, deren Diffusionsfelder sich nicht überlagern. Das Wachstumsverhalten von morphologiekontrollierten Ausscheidungen kann nur über den Formfaktor erfasst werden. Weiterhin wird von einem idealisierten, chemisch homogenen Volumen von 1 m³ ausgegangen. All dies entspricht nicht den realen Bedingungen im Werkstoff. In der vorliegenden Arbeit wird die Diskrepanz zwischen realem Werkstoff und Modell über die prozessspezifische Homogenisierung, welche einen chemisch homogenen, ausscheidungsfreien Werkstoff im lösungsgeglühten Zustand anstrebt, minimiert. Im Rahmen dieser Simulationskette ist eine Erweiterung um den Segregationseinfluss heute noch nicht möglich.

Die Größen des Nukleationsmodells sind schwer bis gar nicht quantifizierbar. Eine indirekte Bestätigung der Modellgültigkeit und der gewählten Parameter geht aus dem Vergleich zwischen berechneter Partikelanzahl und deren Entwicklung mit Messdaten am ATI 718Plus[®] bei Ahmadi et al. hervor [APKW⁺14].

Das Grenzflächenenergiemodell benötigt die Eingabe von T_{krit} , wodurch Effekte einer diffusen Grenzfläche und einer von der Stöchiometrie abweichenden Chemie berücksichtigt werden [SK10]. Die Existenz und Relevanz der diffusen Grenzfläche, welche einem temperaturabhängigen Ordnungsgradverlust der geordneten Kristallstruktur der Ausscheidung entspricht, kann

für die γ' - Phase und deren Phasenkinetik in Nickelbasis- Superlegierungen gezeigt werden [RBV98, MI11]. An der Legierung ATI 718Plus[®] ist messtechnisch nachgewiesen, dass zum Zeitpunkt der Clusterbildung die Chemie nicht der Stöchiometrie entspricht sondern sich erst über die Auslagerung einstellt [ZRS⁺10]. Für IN718 dokumentiert Alam et al. auch eine zunehmende Anreicherung von Elementen im Keimbildungsstadium [ACRC10]. Aufgrund dieser schwer zu beziffernden Sachverhalte ist die Kalibrierung von T_{krit} an DSC- bzw. DTA- Versuchen zielführend. Für IN718 kann die γ' - und γ'' - Keimbildung weder über DSC- Versuche noch über metallografische Schritte sauber getrennt werden [NVL10, SSC97, SA00, SMB88b, SMB88a, SMB92]. Mit dem gewählten T_{krit} kann das experimentell ermittelte DTA- Signal abgebildet werden, eine fundierte Bewertung der Ausscheidungsreihenfolge ist damit jedoch in der Simulation nicht möglich. Die abgeleitete Unterkühlung zur Keimbildung aus Messung und Modell beträgt im IN718 ca. 100 K. Dieses Ergebnis ist im Vergleich zu den ca. 50 K Unterkühlung bei hoch γ' - haltigen Nickelbasis Superlegierungen, bei denen der chemische Ausscheidungsdruck deutlich höher ist, plausibel [GHS98, MI11]. Die korrekte Ausscheidungsstarttemperatur ist für das anschließende Ausscheidungswachstum entscheidend. Anhand der Variationsstudie kann T_{krit} auf Werte zwischen 2400 K und 2600 K eingeschränkt werden. Ein niedriges T_{krit} führt dabei zu einer früheren Keimbildung und zu größeren Partikeln in der Phasenkinetik. Dies ist für die γ' - Phase in Nickelbasis Superlegierungen dokumentiert [MI11, Göh16]. Im Vergleich mit Atomsondenmessungen im Frühstadium der Phasenbildung wird eine Übereinstimmung der Partikelgröße für ein einheitliches T_{krit} von 2500 K erreicht [ACRC10]. Die berechnete Grenzflächenenergie beider Phasen liegt in der Größenordnung von publizierten Werten [DNM⁺08]. Allgemein wird für das Modell bei Kozeschnik et al. gezeigt, dass für unterschiedliche Phasen und Kristallsysteme γ_{GF} auf ca. $\pm 20\%$ genau berechnet wird [KS09, SK10].

Für das Ausscheidungswachstum müssen die Diffusion im Partikel, die Interaktion von Diffusionsfeldern und der Morphologieeinfluss definiert werden. In MatCalc[®] ist nur die Diffusionsdatenbank der Matrix hinterlegt. Die Diffusionsgeschwindigkeit in der geordneten Kristallstruktur der γ' - und γ'' - Partikel kann nur über einen Korrekturfaktor der Matrixeigenschaften angepasst werden. Diffusionsexperimente von Campbell et al. haben für Ni ein Verhältnis von 0,5 zwischen der Diffusionsgeschwindigkeit in der Matrix und in der Ausscheidung aufgezeigt [Cam08]. Dieser Korrekturfaktor wird für die γ' - Phase in Nickelbasis Superlegierungen bestätigt und für die γ'' - Phase aufgrund ähnlicher Chemie und Gitterstruktur angenommen [MI11, Göh16]. Die Interaktion der Diffusionsfelder von Ausscheidungen wird durch die Reduktion der Matrixdiffusion um den Faktor 0,75 berücksichtigt. Die Notwendigkeit wird aus den über Atomsonden- und TEM- Messungen dokumentierten, sehr geringen Partikelabständen abgeleitet [BM91, SMB92, MBB02, ACRC10]. Bei Temperaturen zwischen 600 °C und 800 °C sind die Diffusionswege ausreichend lang, sodass von einer Interaktion der Diffusionsfelder ausgegangen werden muss.

Die Höhe des Faktors wird aus dem Vergleich der Partikelgröße für alle Daten zwischen 600 °C und 800 °C Auslagerungstemperatur abgeleitet.

Das Wachstum der sphärischen γ' - Partikel kann mit der vorgestellten Systemkonfiguration beschrieben werden. Für die γ'' - Phase ist die Berücksichtigung des Formfaktors entscheidend. Die physikalischen Hintergründe sind der richtungsabhängige Gitterparameter und die resultierende Gitterverzerrung, wodurch eine Anlagerung von Atomen in einer Kristallrichtung bevorzugt wird. Diese Sachverhalte werden u.a. in Untersuchungen von Devaux et al. und Phasenfeldrechnungen von Zhou et al. deutlich [DNM⁺08, ZLZ⁺14]. In den Simulationsstudien in Kapitel 5.2.1 wird gezeigt, dass durch die großenabhängige Beschreibung des Formfaktors das morphologiekontrollierte Wachstum der Partikel korrekt beschrieben wird. Der Formfaktor als Funktion der γ'' - Partikelgröße wird aus einem großen Datenpool gemessener Partikeldimensionen abgeleitet. Eine abgeleitete Funktion an der Unter- bzw. Obergrenze der Messdaten führt dabei zu größeren bzw. kleineren Partikeln, woraus sich eine Ungenauigkeit der Partikelgröße von ca. 10 % ergibt. Der γ'' - Formfaktor ist auch über Phasenfeldsimulationen zugänglich, auch wenn erste Ergebnisse an einem vereinfachten Werkstoffsystem oberhalb der Messdaten liegen [ZLZ⁺14]. Die inkohärente Gitterverzerrung und deren Einfluss auf die Wachstumskinetik sowie die Ausbildung der einzelnen Orientierungsvarianten bei einer spannungsüberlagerten Auslagerung kann von diesem Phasenfeldmodell abgebildet werden [ZLZ⁺14]. Diese Effekte können mit MatCalc[©] nicht untersucht werden.

Die berechnete Streckgrenze ergibt sich aus der Summe der einzelnen Festigkeitsbeiträge τ_{Int} , τ_{HP} , τ_{SS} und $\tau_{P,ges}$. Die Festigkeitsbeiträge beider Ausscheidungsphasen sowie die Härtungsbeiträge der einzelnen Regime je Phase werden über die geometrische Summe schlussendlich zu $\tau_{P,ges}$ zusammengefasst. Diese geometrische Summe und deren Exponenten wird aus publizierten Experimenten und numerischen Studien abgeschätzt und ist bei Ardell u.a. umfassend diskutiert [FM66, Ard85, APKO⁺14, APKW⁺14]. Diese Arbeit übernimmt sowohl die in der Literatur empfohlene Vorgehensweise als auch die Exponenten. Letztere sind mit einer schwer bewertbaren Unschärfe belegt. Eine Plausibilisierung erfolgt durch die schrittweise Validierung der Modelle und der Höhe sowie dem Verlauf der jeweiligen Festigkeitsbeiträge.

Die einzelnen Streckgrenzbeiträge werden basierend auf den validierten Ergebnissen der Phasenkinetiksimulation unter Berücksichtigung der Materialtextur berechnet. Die Grundfestigkeit aus τ_{Int} , τ_{HP} und τ_{SS} wird auf Basis von Ersatzmodellen ermittelt, deren Gültigkeit u.a. Gypen et al. und Thompson bestätigen [GD77a, GD77b, Tho75].

Für den IN718 ist die erweiterte Beschreibung von $\tau_{P,ges}$ basierend auf der Partikelgröße, dem Partikelabstand, der Versetzungslienenergie und deren möglichen Wechselwirkungsmechanismen mit beiden Ausscheidungen entscheidend.

Die Partikelgröße und der Phasenanteil in der Ausscheidungssimulation müssen in eine festig-

keitsrelevante, mittlere Partikelgröße und einen Partikelabstand in der Gleitebene übertragen werden. Die Relevanz dieser gleitebenenbezogenen Betrachtung geht aus theoretischen Überlegungen bei Ardell und Brown hervor, deren Modellunterschiede sich auf < 5 % belaufen [KN71, Ard85]. Die gleitebenenbezogene Berechnung wird indirekt aus dem Vergleich zwischen gemessener Partikelgröße und berechneten Festigkeitseffekten bei Ahmadi et al. bestätigt [APKW⁺14]. Für die γ'' -Phase ist die auf den Formfaktor κ basierende, volumenkonstante Überführung der sphärischen Morphologie der Phasenkinetik in die γ'' -Ersatzmorphologie entscheidend. Hierdurch kann die gleitebenenbezogene Beschreibung von Partikelgröße und -abstand nach Oblak et al. und Sonderegger et al. in den Gleichungen der Ausscheidungshärtung umgesetzt werden [OPD74a, SK12]. Der Partikelabstand in der Gleitebene, welcher sich aus dem berechneten Phasenanteil und der Partikelgröße ableitet, wird für beide Phasen in die Versetzungslänge überführt. Die Versetzungslänge zwischen den Oberflächen der Partikel und die Widerstandskraft der Partikel gegen die Versetzungsbewegung sind die Schlüsselgrößen der Ausscheidungshärtung. Die Versetzungsliniellänge berücksichtigt neben der Partikelanzahl in der Gleitebene auch einen mittleren, kritischen Krümmungswinkel der Versetzung ($\beta_{w/s}$) im jeweiligen Schneidregime. Dieses Vorgehen ermöglicht damit in der Berechnung der ausscheidungshärtenden Effekte nicht nur die Berücksichtigung der Schlüsselgrößen der Ausscheidungskinetik, sondern auch das Verhalten der Versetzungen in Abhängigkeit vom Ausscheidungszustand. Die Berechnung erfolgt für eine mittlere Partikelgröße je Phase.

Die dynamische Entwicklung der Versetzungslinienspannung in Abhängigkeit von Versetzungstyp, -krümmung und -liniellänge kann nur für letztere durch die Kopplung an die Phasenkinetik realisiert werden. Diese Kopplung zeigt eine deutliche Veränderung gegenüber dem statischen Wert von $0,5Gb^2$ (vgl. Abb. 5.8b). Die Versetzungskrümmung ist für kleine Ausscheidungen aufgrund einer nahezu geradlinigen Versetzungsfront, welche bei Oblak et al. dokumentiert ist, nicht relevant [OPD74a]. Für große Partikel wird davon ausgegangen, dass sich der Energiebeitrag durch die Versetzungskrümmung aufgrund der unterschiedlichen Versetzungstypen im Mittel aufhebt. Für den Versetzungstyp wird ein gleicher Schrauben- und Stufenanteil angenommen. Für die charakteristische Größe $\ln(r_{0,w}/r_i)$ (vgl. Gl. 4.16) ergibt sich für $\Omega(\Phi)_{w/s}$, welche an die Ausscheidungskinetik gekoppelt ist, ein mit Ardell vergleichbare Werte von ≈ 4 im Festigkeitsmaximum [Ard85]. Gegenüber Dieter et al. ist der berechnete Wert um ca. 25 % niedriger [Die86]. Eine genaue Quantifizierung der Absolutwerte ist aufgrund der dynamischen Entwicklungen und Modellannahmen schwierig.

Der Schubmodul in der Gleitebene ist aufgrund der in der Gleitebene stattfindenden Verformung für die Berechnung der Ausscheidungshärtung eine entscheidende Größe. Der verwendete Wert G_{111}^γ in Gleitrichtung ist gegenüber den Berechnungen von Ardell, Oblak et al., Ahmadi et al., welche den isotropen Wert annehmen, um 20 % geringer [OPD74a, Ard85, APKW⁺14]. Im Fal-

le des höheren Schubmoduls jeder Phase steigt $\tau_{P,ges}$ entsprechend.

Für jeden Härtungsmechanismus von $\tau_{P,ges}$ wird die zu überwindende Energiebarriere aus der Wechselwirkung zwischen Versetzung und Partikel separat für jede Phase modellhaft beschrieben. Diese Modelle sind in der Fachliteratur schwerpunktmäßig für sphärische Partikel umfassend untersucht und diskutiert. Wichtige Referenzen für diese Arbeit sind [KN71, Kel72, OPD74b, OPD74a, Ard85, SMB88a, APKO⁺14, APKS⁺14, ASPK⁺14, SK12]. Die Modelle für die sphärische γ' -Phase werden bei Ahmadi et al. im ATI 718Plus[®] bestätigt und in dieser Arbeit umgesetzt [APKW⁺14]. Für die festigkeitsdominierende γ'' -Phase ist die Berücksichtigung der möglichen Interaktionen mit Versetzungen eine wichtige Erweiterung, auf die im Folgenden näher eingegangen wird.

Mit dem erweiterten Modell des Kohärenzeffektes kann die Zu- und Abnahme des γ'' -Härtungs effektes für das schwache und starke Härtungsregime in Abhängigkeit von der Morphologie, den Orientierungsvarianten, dem Versetzungstyp und der Gitterverzerrung beschrieben werden.

Eine entscheidende und zugleich kritische Erweiterung ist die verwendete Gitterverzerrung der γ'' -Phase. $\varepsilon_3^{\gamma''}$ ergibt sich aus der abgeleiteten Funktion des Formfaktors und der Gitterparameter, welche in Abhängigkeit von der Partikelgröße nach den Messdaten von Slama et al. hinterlegt werden [SSC97, SA00]. Aufgrund der Streuung der Gitterparameterdaten und die Begrenzung auf eine Quelle sollten diese Daten nochmals experimentell verifiziert werden. Eine Änderung der Gitterparameter in Abhängigkeit von der chemischen Zusammensetzung, der Partikelgröße bzw. der Wärmebehandlung ist für die D0₂₂-Gitterstruktur vielfach an unterschiedlichen Phasen nachgewiesen [KHO96, KIO96, CML11, SMT04, KMB⁺03]. Oblak et al. publiziert für den IN718 eine Zunahme der Gitterverzerrung über die Auslagerungszeit [OPD74a]. Weiterhin wird bei Sundararaman et al. die Abhängigkeit der $\varepsilon_3^{\gamma''}$ von D_Z messtechnisch erfasst und zeigt eine gute Übereinstimmung mit den in dieser Arbeit berechneten Werten [SMB92]. Lediglich für kurze Auslagerungszeiten von < 2 h sind die Messdaten um ca. 35 % geringer. Vor diesem Hintergrund ist der berechnete $\varepsilon_3^{\gamma''}$ -Verlauf plausibel. Eine bessere Bewertung und Beschreibung dieser Schlüsselgröße kann durch hochauflösende Messdaten oder Modelle, welche die Abhängigkeit zwischen Phasenchemie, Wärmebehandlung, Gitterparameter und Gitterverzer rung beschreiben, erreicht werden.

Im schwachen Härtungsregime zeigt die Berücksichtigung des $\varepsilon_3^{\gamma''}$ -Verlaufes gegenüber Daten von Oblak et al. und Chaturvedi et al. für kleine Partikel eine deutliche Absenkung des Härtungseffektes [OPD74a, CF83]. Dadurch können die Versuche an IN718-SX und IN718-SLM für 0,35 h und 2,5 h Auslagerungszeit korrekt beschrieben werden (vgl. Abb. 5.30). Der Ansatz für sphärische Ausscheidungen bzw. für ein konstantes $\varepsilon_3^{\gamma''}$ überschätzt das Verhalten deutlich. Im Härtungsspeak des Effektes wird ein vergleichbares Niveau mit den Ergebnissen von Oblak et al. erreicht [OPD74a].

Im starken Regime wird das Modell von Ardell um die Morphologie, die Orientierungsvarianten und die Funktion für $\varepsilon_3^{\gamma''}$ erweitert [Ard85]. Die Schwachstelle der Modellgleichung ist die fehlende Aufschlüsselung des Festigkeitsbeitrages der einzelnen Versetzungstypen. Der Festigkeitsabfall für die großen γ'' - Partikel in den Experimenten mit 23,5 h und 50 h Auslagerungszeit sowie die Daten der Überalterung kann gut abgebildet werden. Auch die zeitliche Lage des insgesamt berechneten Härtungspeaks stimmt mit den experimentellen Daten und den publizierten Werten überein [CF83, CF89, SMB88a]. Folglich liefert der Ansatz plausible Ergebnisse. Für eine weiter verbesserte Beschreibung der physikalischen Effekte ist eine saubere Aufschlüsselung der Versetzungstypen zusätzlich notwendig.

Für das untersuchte Material erfolgt die Auslagerung spannungsfrei, sodass alle Orientierungsvarianten vorhanden sind und $p = 1/3$ beträgt. In dieser Simulationskette ist p eine nutzerdefinierte Größe, da in der Phasenkinetik nicht zwischen den Orientierungsvarianten in Abhängigkeit vom Spannungszustand unterschieden werden kann. Sind Spannungen im Auslagerungsvorgang relevant, muss p abgeschätzt oder die Phasenkinetik mit bspw. der Phasenfeldmethode nach Zhou et al. berechnet werden [ZLZ⁺14]. Dieser Effekt ist für eigenspannungsbehaftete Bauteile im Auslagerungsvorgang relevant und kann eine bauteilzonenabhängige Festigkeit erzeugen.

Die Beschreibung des APG- Effektes anhand der erweiterten Modellgleichungen berücksichtigt die richtungsabhängige Gitterenergie und die theoretisch mögliche sowie experimentell beobachtete Versetzungsanzahl und -bewegung auf den aktivierbaren Gleitebenen der $D0_{22}$ - Gitterstruktur. Hierzu werden dokumentierte Versetzungskonfigurationen und Gitterenergien für die Ni_3Nb - und Ni_3V - Phase als Grundlage verwendet [OPD74a, SMB88a, FHV92, KVP92, RS94, NHLV10]. Gegenüber bisherigen Ansätzen [OPD74a, CF83, SMB88a] zeigt das Resultat der verwendeten Gleichungen eine deutliche Reduktion des APG- Härtungseffektes (vgl. Abb. 5.30). Hieraus ergibt sich die für die $D0_{22}$ - Struktur der γ'' - Phase erwartete Dominanz des Kohärenzeffektes. Ohne die Erweiterungen liegt der APG- Effekt nur eines Versetzungspaares auf dem Niveau des Kohärenzeffektes, wodurch der gesamte berechnete Festigkeitsbeitrag die Messdaten um mindestens das 1,5 fache überschätzt. Für einen fundierten Nachweis und eine entsprechend exaktere Modellbeschreibung sind hochauflösende Experimente und bspw. atomistische Simulationen notwendig. Die komplexe Interaktion von Versetzungen und Partialversetzungen mit den drei Orientierungsvarianten auf den drei unterschiedlichen Gleitrichtungen bleiben Gegenstand weiterer Forschung. Die im Modell in Abhängigkeit von den Gleitrichtungen hinterlegte $\gamma_{APG}^{\gamma''}$ stellt eine Näherung dar. Der bei Oblak et al. ermittelte Wert ist eine Obergrenze, da der Härtungseinfluss der γ' - Phase und die Richtungsabhängigkeit in der $D0_{22}$ - Struktur in der Herleitung nicht berücksichtigt werden. Aufgrund der zugrundeliegenden Wärmebehandlung bei Oblak et al. ist der Festigkeitsbeitrag der γ' - Phase und der daraus hervorgerufene Fehler für $\gamma_{APG}^{\gamma''}$ gering [OPD74a]. Der Fehler aus der fehlenden Aufschlüsselung zwischen Gleitebenen

kann nicht beziffert werden. Im Bezug zu den Daten und der angegebenen Streuung bei Francois et al. und Rosengaard et al. ist $\gamma_{APG}^{[10]}$ bei 20 °C mit $0,296 \pm 0,05 \text{ J/m}^2$ ein erster Anhaltswert [OPD74a, FHV92, RS94]. Der gewählte Wert in den beiden anderen Gleitrichtungen ist eine Annahme auf Basis des bei Khanta et al. abgeleiteten Abschlagswertes von 30 % [KVP92]. Die hieraus abgeleitete Fitfunktion zeigt bei 680 °C einen ca. doppelt so hohen Wert wie bei Francois et al. [FHV92, KVP92]. Eine Bewertung ist aufgrund fehlender Daten nicht möglich. Die Richtungsabhängigkeit und ein etwas höherer Wert im Vergleich zur γ' -Phase ist basierend auf der $D0_{22}$ -Kristallstruktur plausibel.

Die Festigkeitsbeiträge von τ_{SF}^j , τ_{GF}^j und τ_S^j sind für beide Phasen vernachlässigbar gering. Die γ' -, γ'' -Schubmoduln, γ_{GF}^j und γ_{SF}^j liegen in der Größenordnung von Literaturdaten (vgl. Kap. 5.2.7). Eine exakte Validierung ist aufgrund der Dominanz des Kohärenz- und Antiphasengrenzeffektes für IN718 nicht möglich [Ard85, APKO⁺14]. Für die Diskussion der Modelle wird auf die Literatur verwiesen [Nem83, Ard85, APKO⁺14].

Die Beschreibung des Orowanefektes nach Kelly et al. berücksichtigt, dass nicht-sphärische Partikel mit mehreren Gleitebenen interagieren, wodurch der Festigkeitsbeitrag erhöht wird [Kel72]. Der berechnete Übergang zwischen starkem Schneidregime und Orowanefekt liegt bei $D_Z/2 = 65 \text{ nm}$. Da Sundararaman et al. in seinen Studien keine Orowanringe um γ'' -Partikel mit $D_Z/2 \leq 60 \text{ nm}$ identifiziert, scheint der Wert plausibel [SMB88a]. Wird der Ansatz nach Kelly nicht berücksichtigt, liegt die Orowanfunktion deutlich tiefer und der Übergang vom Schneiden zum Orowanefekt liegt bei $D_Z/2 < 30 \text{ nm}$.

Der von Sundararaman et al. publizierte Härtungseffekt der mechanischen Zwillingsbildung wird in dieser Arbeit nicht untersucht, da keine weiteren Referenzen und die benötigte Zwillingsenergie vorliegen. Der Effekt tritt laut Sundararaman et al. erst für große γ'' -Partikel im überalterten IN718 auf.

Die makroskopische Streckgrenze wird mittels M bzw. m_s aus τ_{ges} abgeleitet. Die Einkristallproben verdeutlichen, dass sich je nach Lage im Standarddreieck eine Streuung von bis zu 20 % aus der Berücksichtigung von einer unterschiedlichen Anzahl an Gleitsystemen ergeben kann (siehe Kap. 6.3). Dies gilt auch für jedes einzelne Korn im Polykristall. Der Vergleich zwischen Talyorfaktor, Sachsfaktor, dem Wert bei Clausen et al. und die Verteilung der gemessenen Orientierung in der inversen Polfigur zeigen, dass M bzw. m_s spezifisch für den Herstellprozess des Materials ermittelt werden muss. Die verwendete Mittelung für drei bzw. fünf Gleitsysteme im IN718-SX und IN718-SLM ist aufgrund der komplexen Versetzungswechselwirkung mit Ausscheidungen in mehreren Gleitsystemen plausibel, stellt jedoch nur eine Näherung dar. Die kornflächengewichtete Mittelung für einen effektiven Texturfaktor im Polykristall ist ebenfalls nur eine Näherung, welche aber die Möglichkeit bietet unterschiedliche Texturen auf Basis von EBSD- Messungen zu vergleichen und M abzuleiten. Der er-

mittelte M stellt im Vergleich von gemessener Streckgrenze und abgeleiteter Schubspannung die Untergrenze dar (vgl. Abb. 5.33). Der Fehler wird auf $< 10\%$ geschätzt. Weiterhin setzt sich im Polykristall die makroskopische Streckgrenze aus der Verformung von Körnern mit geringem Texturfaktor, welche sich schon deutlich unterhalb von 0,2 % plastischer Dehnung verformen, und Körnern mit höherem Texturfaktor zusammen. Dies erschwert zusätzlich eine fundierte Bestimmung von M und kann nur über kristallplastische Simulationen, welche die exakte Materialtextur berücksichtigen, aufgeschlüsselt werden. Eine Vielzahl an Publikationen nehmen Werte für M an, ohne detaillierte Angaben zum Werkstoffzustand zu machen [OPD74a, Tho75, GD77a, GD77b, CF83, Ard85, MOS85, RDT97, APKW[†]14]. Ein kaum bewertbarer Fehler entsteht, wenn in diesen Fällen die Modellentwicklung nicht am isotropen chemisch homogenen Schmiedematerial erfolgt ist. Durch die schrittweise Modellvalidierung über IN718-Matrix-SX, IN718-SX und IN718-SLM kann die Anwendbarkeit der Modelle für einen chemisch homogenen Werkstoff unter Berücksichtigung der entsprechenden Textur bestätigt werden.

6.2 Die thermodynamische und -kinetische Datenbank

Die thermodynamische und die thermokinetische Datenbank bilden die Grundlage der gesamten Simulationskette. In der Validierung der Datenbanken werden c_i^j , f_i , R_K , T_L , T_S , T_{Sol}^j und die Multikomponentendiffusion anhand von Literaturdaten bewertet. Für den Großteil der Parameter ist die Abweichung zwischen Simulation und Experiment kleiner als 20 %. Die erhaltene Abweichung entspricht dabei mitunter der Größenordnung der experimentellen Schwankungsbreite für bspw. c_i^j , f_i , R_K . Die Abweichung für T_L , T_S , T_{Sol}^j ist $< 10\%$. Entscheidend für die thermokinetische Werkstoffbeschreibung ist die korrekte Berechnung der Phasenzusammensetzungen. Für die Hauptelemente der Phasen wird eine Abweichung $\leq 15\%$ erreicht, welche für die übrigen Elemente mitunter deutlich höher ist. Mit dieser Datenbankqualität können die Thermodynamik und Thermokinetik von IN718 berechnet werden. Vor dem Hintergrund der mehrskalen Simulationskette wird die Notwendigkeit einer noch genaueren Beschreibung von bspw. geringen Elementanteilen in den Phasen deutlich, welche für die Berechnung von a_i^j , δ_i^j , ε_i^j und τ_{SS} entscheidend sind. Für eine solche Präzisierung der Datenbanken sind weiterführende, hochauflösende Experimente unter definierten Bedingungen wie bei Miller et al. oder valide atomistische Simulationen notwendig [MBB02].

6.3 Die Validierungsdaten und Modellergebnisse

Die Modellvalidierung an experimentellen Daten erfolgt ausgehend von der Datenbankanalyse bis hin zur voll gekoppelten Streckgrenzberechnung. In der Bewertung der Datenbankqualität wird am Beispiel der Chemie deutlich, dass oftmals keine Angaben bezüglich Materialhomogenität, Wärmebehandlung und genauem Messpunkt (mittig zw. Partikeln, am Partikelrand oder im Partikelzentrum) sowie Messfehler vorhanden sind. Die Streuung zwischen unterschiedlichen Quellen erschwert ebenfalls den Vergleich (siehe Tab. C.2 bis C.5). Eine exakte Bewertung ist damit nur eingeschränkt möglich.

Die Partikelgröße und der Phasenanteil werden anhand von FEREM-, TEM- und Atomsondenmessungen validiert. Experimentell müssen dafür die Morphologie und die Phase des Partikels genau bestimmt werden. Dies ist besonders im Frühstadium kompliziert. Für die korrekte γ'' -Partikelgröße müssen die drei Orientierungsvarianten berücksichtigt werden. In den Publikationen werden entweder die Halbachse oder der Durchmesser für die γ'' - Ellipse angegeben, was nicht immer 100%ig nachvollziehbar ist. Fehlerbalken werden ebenfalls selten angegeben. In der Simulation wird D_Z als Vereinfachung der elliptischen γ'' - Partikel ausgewertet. Diese Fakten beeinflussen und erschweren den Vergleich und die Abweichungsbewertung zwischen Experiment und Simulation. Die geringsten Abweichungen von < 15 % zwischen Simulation und Messung liegen für die hochwertigen Datensätze aus TEM- Untersuchungen von Slama et al. und Atomsondenmessungen von Alam et al. bei Auslagerungstemperaturen zwischen 680 °C und 750 °C vor [SSC97, SA00, ACRC10]. Die eigenen FEREM Daten sind als Anhaltspunkte zu bewerten, welche sich gut in den restlichen Datenpool einfügen. Bezuglich des Phasenanteils wird ein Verhältnis von 2:1 bis 3:1 mit einem Gesamtanteil von 20 vol% bis 25 vol% angegeben. Dies wird von der Simulation abgebildet. Im Vergleich zu Atomsondenmessungen wird im Frühstadium (706 °C, 8 min) eine Abweichung festgestellt, welche nicht eindeutig dem Modell und/oder Experiment zugeschrieben werden kann. Nach 1 h sind die Ergebnisse identisch. Ein zur Simulation vergleichbarer, schneller Anstieg des γ' - und γ'' - Phasenanteils wird in Phasenfeldrechnungen bei 790 °C dargestellt [ZLZ¹⁴]. Deutlich ältere Quellen zeigen bei 700 °C einen langsameren Anstieg des Phasenanteils und stehen im Widerspruch zu Atomsondenmessungen von Alam et al. und der Simulation [Fan81, FDC82, CF83, ACRC10]. In diesem Fall wird ein vergleichbar schneller Anstieg des Phasenanteils erst bei 750 °C verzeichnet. Diese Abweichung kann auf die verwendete Messmethode zurück geführt werden, bei der der γ'' - Phasenanteil aus der Matrix herausgeätzt und gewogen wird.

In der Festigkeitsberechnung sind die Werte für τ_{Int} und τ_{HP} nicht quantifizierbar. In Summe ist ihr berechneter Beitrag an τ_{ges} mit < 5 % vernachlässigbar. Zum Beispiel verdeutlicht der geringe Unterschied zwischen τ_{ges} für IN718-SLM und IN718-SX, dass τ_{HP} nicht relevant ist

und nur für sehr kleine Korngrößen zu berücksichtigen ist. Der Anteil von τ_{SS} am maximalen τ_{ges} ist mit ca. 25 % festigkeitsrelevant. Für den ausscheidungsfreien IN718-Matrix-SX ist die Modellabweichung von 5 MPa für τ_{SS} gering und beinhaltet Ungenauigkeiten in den Härtungskonstanten, den Orientierungsmessungen und der Bestimmung von m_s . Die Berechnungen für IN718-SX und IN718-SLM verdeutlichen den Einfluss der Ausscheidungsbildung und der Elemente Nb, Mo und Ti, welche den größten Mischkristallhärtungseffekt haben. Abweichungen in der Berechnung bzw. Messung der γ -Chemie resultieren in einer Streuung von ca. 20 MPa. τ_{SS} kann im ausgelagerten Zustand zwischen 80 MPa und 100 MPa angegeben werden, was in guter Übereinstimmung zu publizierten Werten ist [OPD74a, SMB88a].

Der Anteil von $\tau_{P,ges}$ ist bei optimaler Auslagerung mit ca. 75 % festigkeitsdominierend. Im Gegensatz zu IN718-Matrix-SX ist für IN718-SX also neben τ_{SS} und m_s zusätzlich der Effekt der Ausscheidungshärtung relevant. Die ausscheidungshängige Zu- und Abnahme von $\tau_{P,ges}$ ist für die drei Auslagerungszeiten in Simulation und Experiment identisch. In der Auswertung von R_p und τ_{ges} wird weiterhin die Relevanz der kristallografischen Orientierung deutlich. Die prozentuale Abweichung für τ_{ges} liegt zwischen 3 % und 22 % abhängig von der zugeordneten Orientierung der Probe im Standarddreieck und der berücksichtigten Anzahl von einem, drei und fünf aktiven Gleitsystem für die Bestimmung des Schmidfaktors. Aufgrund der Gussqualität der IN718-SX Proben ist eine weitere Eingrenzung nicht möglich. An dieser Stelle sind weiterführende Gleitlinienanalyse an den Probenoberflächen und Schliffanalysen des Prüfquerschnittes notwendig, welche im Rahmen der Arbeit nicht mehr erfolgten. Infolge der Unschärfe in der Orientierungsbestimmung erfolgt die Auswertung für drei aktive Gleitsysteme als mittlere Näherungslösung und liefert ein maximales τ_{ges} von 464 MPa nach 8 h bei 725 °C für das IN718-SX Material. Für das polykristalline IN718-SLM Material erzeugt die Unterscheidung zwischen drei und fünf aktiven Gleitsystemen in der Bestimmung von M eine Variation von τ_{ges} um ca. 5 %. τ_{ges} ist mit 456 MPa bei 725 °C nach 6,5 h bzw. 23,5 h für drei aktive Gleitsysteme vergleichbar mit dem maximalen τ_{ges} für IN718-SX. Die Texturanalyse des IN718-SLM Materials zeigt weiterhin, dass ein Taylorfaktor von 3,06 der Textur des SLM- Materials nicht entspricht. Mit $M = 3,06$ fällt τ_{ges} auf 350 MPa und liegt ca. 100 MPa unterhalb der IN718-SX Ergebnisse. Im Vergleich zu älteren Berechnungsergebnissen von Oblak et al. und Chaturvedi et al. wird $\tau_{P,ges}$ um ca. 70 MPa höher berechnet [OPD74a, CF83]. Diese Publikationen schätzen τ_{SS} mit 100 MPa ab und berechnen $\tau_{P,ges}$ mit maximal 250 MPa. Dabei wird nur ein Härtungseffekt für γ' und γ'' berücksichtigt und sowohl die Partikelgröße als auch der Phasenanteil aus Experimenten abgeleitet. Über Materialhomogenität und Textur sind keine Angaben verfügbar. Die Ergebnisse zeigen, dass neben τ_{SS} und $\tau_{P,ges}$ die Texturinterpretation in Form der Schmid- bzw. Texturfaktoren m_s bzw. M eine Schlüsselgröße zur korrekten Festigkeitsanalyse ist. Weiterhin wird deutlich, dass für die Validierung und die Simulationsfähigkeit von mehrskalen Simu-

lationsketten experimentelle Daten oftmals nicht ausreichend dokumentiert sind. Wichtige Informationen über Chemie, exakte Wärmebehandlungsschritte oder Materialtextur fehlen. Auch ist die experimentelle Zugänglichkeit von wichtigen Daten, wie bspw. Partikelgröße und Phasenanteil im Frühstadium, mit hohem Aufwand verbunden. Gerade dieses Frühstadium ist für die korrekte Beschreibung der anschließenden Wachstumskinetik der Ausscheidungen entscheidend.

6.4 Die notwendige Genauigkeit der Schlüsselgrößen

Im Rahmen der Modellvalidierung hat sich eine gewisse Unschärfe für einzelne Simulationsparametern herausgestellt. Die Schlüsselgrößen zur Prozess- und Werkstoffsimulation werden aus den Ergebnissen der Sensitivitätsstudie aus Kapitel 5.7.3 abgeleitet, welche an der festigkeitsdominierenden γ'' -Phase in IN718 durchgeführt wurde. Bei einer Variationsbreite von $\pm 10\%$ haben die fünf Parameter $f_{\gamma''}, D_Z, G_{\gamma}, M, \epsilon_3^{\gamma''}$ einen deutlichen Einfluss auf die Streckgrenzhöhe und die notwendige Auslagerungszeit. Kritische Parameter wie die APG-Energie sind aufgrund des vergleichsweise geringeren Festigkeitsbeitrages gegenüber dem Kohärenzeffekt weniger relevant. Im Maximum der γ'' -Härtung bedeuten diese $\pm 10\%$ Variation eine mögliche Streuung für den γ'' -Phasenanteil $f_{\gamma''}$ von $15 \pm 1,5$ vol%, für den γ'' -Partikeldurchmesser D_Z von 30 ± 3 nm, für den Matrix-Schubmodul G_{γ} von $66 \pm 6,6$ GPa, für den Texturfaktor M von $2,28 \pm 0,23$ (für IN718-SLM-P1) und für die γ'' -Gitterverzerrung $\epsilon_3^{\gamma''}$ von $2,8 \pm 0,28\%$.

Eine Eingrenzung der Schwankungsbreite ist für $f_{\gamma''}$ und D_Z nicht möglich. Anhand der Phasenkinetikvalidierung wird im Vergleich mit den Daten von Alam et al. (Atomsonde) und Slama et al. (TEM) deutlich, dass die Abweichung zwischen Modell und Messung in der Größenordnung von 10 % liegt [SSC97, SA00, ACRC10]. Diese Abweichung entspricht vermutlich auch der Größenordnung der Messungenauigkeit. Eine genaue Quantifizierung ist aufgrund fehlender Fehlerbalken nicht möglich. FEREM-Daten sind nicht ausreichend genau. Die Sensitivität von D_Z im Härtemaximum erklärt sich aus dem steilen Anstieg bzw. Abfall der Härtungsfunktion. Der γ -Schubmodul wird aus dem gemessenen E-Modul und der Querkontraktionszahl abgeleitet. Der verwendete E_{100} beträgt nach Hermann et al. für die γ -Phase des CMSX4 125 GPa [HSHB96]. Für den gleichen Werkstoff wird bei Siebörger et al. E_{100} mit 134 GPa gemessen [SKG01]. Dies entspricht einer Variationsbreite von 7 % und erschwert eine Eingrenzung ebenfalls. Weiterhin liegt eine Abweichung der γ -Chemie gegenüber dem IN718 vor.

In der vorgestellten Texturauswertung ergibt sich für den Texturfaktor M eine Abweichung von 5 % aus der unterschiedlichen Anzahl berücksichtigter Gleitsysteme. Die gewählte kornflächen gewichtete Summe entspricht einer groben Näherung, deren Unschärfe nicht quantifiziert werden kann. Eine Verbesserung in der Beschreibung von M ist mit kristallplastischen Rechnungen

möglich und wird für eine korrekte Materialbeschreibung empfohlen.

Für die Berechnung von ε_i^j wird im Falle der γ' -Phase deutlich, dass schon geringe Schwankungen der Phasenchemie einen großen Einfluss ($> 10\%$) auf $\delta_i^{\gamma'}$ und $\varepsilon_i^{\gamma'}$ haben. Hieraus lassen sich hohe Genauigkeitsanforderungen für a_i^j , δ_i^j und ε_i^j ableiten, welche ebenfalls für die γ'' -Phase gelten. Ein Modell für die γ'' -Phase würde die aktuell vorhandene Lücke in der Simulationskette schließen und eine bessere Bewertung dieser Schlüsselgröße ermöglichen.

In der Phasenkinetikrechnung kann gezeigt werden, dass der γ'' -Formfaktor als $f(D_Z)$ entscheidend für die korrekte Modellierung ist. Wird diese Funktion verwendet, wirkt sich eine Schwankung um $\pm 10\%$ nicht signifikant auf das Ergebnis aus.

Trotz der hohen Genauigkeitsanforderungen an die identifizierten Schlüsselparameter, können mit dem gewählten bzw. berechneten Parametersatz die Phasenkinetik und die Festigkeit des Materials mit einer hohen Genauigkeit beschrieben werden. Es wird davon ausgegangen, dass sich Abweichungen entlang der Simulationskette nicht zwangsläufig zu einem maximalen Fehler addieren, sondern sich vielmehr ausgleichen (z.B. ein zu hoher $f_{\gamma''}$ durch einen kleineren D_Z oder G_{γ}).

6.5 Der Gültigkeitsbereich der Simulation

Der Gültigkeitsbereich der Simulation wird aus den Modellgrenzen und den Ergebnissen der Validierung abgeleitet. Das analysierbare Elementspektrum der Legierung wird anhand des Schlüssellements Nb abgeleitet. Der δ - und γ'' -Solvus sowie der Anstieg und Abfall des Phasenanteils können innerhalb der Grenzen zwischen 4 wt% und 6 wt% Nb in der Legierung dargestellt werden. Selbiges gilt für die Phasenkinetik. In der vorliegenden Arbeit ist ein Nachweis für 5 wt% und 5,4 wt% Nb erbracht. In der Phasenkinetik kann der Temperaturbereich zwischen 700 °C und 800 °C für $t > 1000$ h in guter Übereinstimmung mit den Experimenten untersucht werden. k_v und n_v entsprechen den experimentell ermittelten Werten. Für Temperaturen < 700 °C bzw. > 800 °C ist die Kinetik schneller bzw. langsamer als die experimentellen Beobachtungen. Solide Trendvorhersagen sind aber möglich. Für technische Anwendungen sind diese Temperaturfenster von geringerem Interesse, da die Kinetik vernachlässigbar träge ist (< 700 °C) bzw. nahe dem Bereich der Lösungsglühung des Materials liegt (> 800 °C). Der Vertrauensbereich der Kinetiksimulation wird für $D_Z > 200$ nm aufgrund fehlender Partikelkoaleszenz verlassen. Der Vertrauensbereich der Festigkeitsberechnung ist mit dem der Phasenkinetik aufgrund der direkten Kopplung identisch. Die Ausscheidungshärtungsmodelle sind weiterhin auf einen maximalen Phasenanteil von ca. 30 % begrenzt. Oberhalb dieses Wertes sind die Modellannahmen nicht mehr valide. Aktuell kann die Streckgrenze nur für Raumtemperatur berechnet werden, obwohl die Phasenkinetik vollständig temperatur- und zeitabhängig beschrieben wird. Ursache

dafür ist die teilweise unbekannte Temperaturabhängigkeit wichtiger Eingangsparameter wie bspw. Gitterenergien, Atomabstände und resultierende Gitterverzerrungen. Werden diese Daten ergänzt, sind Berechnungen bis $0,5 \cdot T_S$ denkbar. Oberhalb dieser Temperatur sind die Modellannahmen aufgrund der thermischen Aktivierung der Versetzungsbewegung nicht mehr gültig.

6.6 Die Gesamtbewertung des Simulationskettenansatzes

Die entwickelte Simulationskette kann trotz der Vielzahl an Parametern und Modellvereinfachungen die grundlegenden werkstoffphysikalischen Effekte von IN718 beschreiben. Dies wird durch die schrittweise Validierung von Datenbanken, Phasenkinetik und Festigkeitsbeiträgen an eigenen und publizierten Messdaten gezeigt. Eine vergleichbare Kopplung der Phasenkinetik- und Streckgrenzberechnung wird auch bei Ahmadi et al. am γ' - gehärteten Werkstoff ATI718Plus[®] erfolgreich demonstriert [APKW⁺14]. Für eine vollständige Durchgängigkeit der Simulationskette wird empfohlen, die vorliegende Arbeit um mindestens zwei Methoden zu ergänzen. Wichtige Eingangsparameter, wie die chemie- und temperaturabhängigen Gitterparameter und Gitterenergien sowie der Steifigkeitstensor, können mit atomistischen Modellen für die einzelnen Phasen berechnet werden. Dies zeigen bspw. Arbeiten von Rosengaard et al. und Khanta et al. [RS94, KVP92]. Die Vielzahl an Legierungselementen stellt hierfür allerdings noch eine Herausforderung dar. Eine Erweiterung um kristallplastische Rechnungen ermöglicht weiterhin die korrekte Berücksichtigung der Materialtextur und damit eine fundierte Umrechnung der berechneten Härtungseffekte (τ_{ges}) in die makroskopische Streckgrenze. Vorteilhaft an dieser Kopplung ist, dass dieser entscheidende Inputparameter (τ_{ges}) von kristallplastischen Modellen dadurch abhängig vom thermokinetischen Materialzyklus im Auslagerungs- und Überalterungsprozess beschrieben werden kann. Die Festigkeitseigenschaften, wie bspw. die Fließkurve, können damit in einem virtuellen Labor in allen Belastungsrichtungen bestimmt werden [BSB⁺15, Bai16]. Weiterhin kann über Modelle auf kleineren Größenskalen mittels Atomistik, Molekulardynamik und Phasenfeld ein noch tieferes Verständnis der Mechanismen erreicht werden. Diese Modelle ermöglichen eine genauere Beschreibung bspw. der Clusterbildung, der Keimbildung und der Interaktion zwischen Partikel und Versetzung. Anhand dieser Ergebnisse können die Modellgleichungen und -parameter dieser Arbeit optimiert werden. So bestätigen bspw. aktuelle Phasenfeldstudien die γ'' - Morphologie oder den Korrekturfaktor $J = 0,8$ für nicht sphärische Partikel im Schneidregime ($\chi_c < 100^\circ$) [ZLZ⁺14, LWN15]. Die entwickelten Simulationsmethoden sind grundlegend auch anwendbar für chemisch inhomogenes Material, wie es bspw. für Gussmaterial der Fall ist. In diesem Fall müssen die Restsegregationen aufgelöst und die Phasenkinetik und Festigkeit in jedem Gitterpunkt berechnet werden. Die Ableitung einer makroskopischen Festigkeit ergibt sich schlussendlich aus einer geeigneten Mittelung über alle Gitterpunkte.

7. Zusammenfassung

Das Ergebnis der Dissertation ist eine physikalisch basierte Simulationskette zur Berechnung der Phasenkinetik und Streckgrenze von IN718. Ausgehend von der Analyse des Erstarrungszustandes ist eine Bewertung und Optimierung der Materialhomogenität in Abhängigkeit vom Herstellprozess möglich. Die Modellkopplung aus Phasenkinetik und Härtungseffekten verknüpft die Legierungschemie mit den Ausscheidungsphasen und der erreichbaren Streckgrenze in Abhängigkeit von Temperatur und Zeit. Die Validität der Eingabeparameter und der Ergebnisse der einzelnen und gekoppelten Modelle wird an einem umfangreichen Literaturdatensatz und an eigenen Experimenten am einkristallin gegossenen und additiv gefertigten IN718 nachgewiesen. Eine abschließende Sensitivitätsstudie zeigt die Signifikanz einzelner Modellparameter, woraus die Schlüsselgrößen der Modellierung abgeleitet werden.

Ausgehend von einer phänomenologischen Erstarrungsbeschreibung werden Erstarrungsstruktur, Elementsegregation und Phasenbildung aus der schmelzflüssigen Phase betrachtet. Eine daraus abgeleitete Diffusionsrechnung ermöglicht die Definition der Homogenisierungsglühung in Abhängigkeit vom Herstellprozess bzw. für die zwei untersuchten Materialzustände. Für den IN718-SX sind aufgrund der groben Dendritenstruktur Temperaturen oberhalb von 1100 °C für mehr als 25 h notwendig. Für den IN718-SLM wird die Homogenität schon während der Spannungsarmglühung oberhalb von 900 °C erreicht. Der Segregationsabbau ist für die anschließenden Phasenkinetik- und Festigkeitssimulation sowie ein vergleichbares Festigkeitspotenzial beider Herstellrouten entscheidend.

Die entwickelte CALPHAD basierte thermodynamische und -kinetische Simulation berechnet für die Zusammensetzung von IN718 die Chemie der γ -, γ' -, γ'' - und δ - Phase, die Keimbildung, das Partikelwachstum sowie Phasenanteile der Ausscheidungen für definierte Temperaturzyklen. Die simulierte γ' - und γ'' - Phasenkinetik wird für das Frühstadium der Phasen und den folgenden Auslagerungsprozess zwischen 500 °C und 1000 °C untersucht. Das diffusions- (γ') und grenzflächenkontrollierte (γ'') Wachstumsverhalten wird anhand der LWS- Theorie an eigenen FEREM- Daten sowie publizierten TEM-, REM- und Atomsondenmessungen validiert. Die geringste Abweichung (< 15 %) zwischen gemessenem und berechnetem Ausscheidungszustand wird im werkstoffrelevanten Temperaturbereich zwischen 700 °C und 800 °C erreicht. Die Überalterungsvorgänge im IN718 werden dank der phänomenologisch berücksichtigten Phasentransformation von der γ'' - zur δ - Phase auch für sehr lange Betriebszeiten gut abgebildet.

Die entwickelte Streckgrenzberechnung berücksichtigt sowohl die Beiträge der intrinsischen Festigkeit als auch die Feinkorn-, Mischkristall- und Ausscheidungshärtung. Die letzteren zwei liefern die entscheidenden Festigkeitsbeiträge für IN718 und werden auf Basis der berechneten Phasenchemie und der γ' - und γ'' - Ausscheidungsgrößen sowie Phasenanteile berechnet.

Der Festigkeitsbeitrag der Ausscheidungshärtung ist mit ca. 75 % festigkeitsdominierend. Er berechnet sich aus den möglichen Interaktionen zwischen Versetzung und Ausscheidung. Den relevanten Beitrag liefern der Antiphasengrenzeffekt für die γ' - Phase und der Kohärenzeffekt für die γ'' - Phase. Für den festigkeitsdominierenden Beitrag der γ'' - Phase sind die Berücksichtigung der Partikelmorphologie, der Gitterverzerrung in Abhängigkeit von der Auslagerung und die möglichen schneidenden Versetzungsbewegungen in der $D0_{22}$ - Gitterstruktur entscheidend. Diese Phasenspezifika sind Gegenstand der in dieser Arbeit umgesetzten Modellerweiterungen gegenüber den klassischen Modellgleichungen der Ausscheidungshärtung. Diese Erweiterungen und die Kopplung an die Phasenkinetik realisieren die geringe Abweichung ($\leq 15\%$) zwischen gemessener und berechneter Festigkeit.

Die abschließend durchgeführte Sensitivitätsstudie ermittelt fünf Schlüsselgrößen: D_Z , $f_{\gamma''}$, $\epsilon_{\gamma''}$, G_{γ} und M für die Prozess- und Werkstoffsimulation. Diese Parameter müssen mit einer Abweichung $\leq 10\%$ für die Modellierung bekannt sein. Für die Festigkeit sind die über den Herstellprozess und die Wärmebehandlung eingestellte Partikelgröße, der Phasenanteil und die Materialtextur entscheidend.

Die im Rahmen der Dissertation entwickelte Simulationskette kann erfolgreich wichtige Fragestellungen der Werkstoff- und Prozessentwicklung, auch über den SLM- Fertigungsprozess hinaus, mit hoher Genauigkeit abbilden. Die entwickelten Methoden ermöglichen für IN718 bspw. die Bewertung des Festigkeitseinflusses von lokaler Variation der Chemie in Halbzeugen, Spezifikationsabweichung von Chemie und/oder Wärmebehandlung oder die Legierungsoptimierung für neue Herstellverfahren. Für Reparaturverfahren von Bauteilen oder neuen Herstellverfahren ist eine Optimierung der Wärmebehandlung möglich. Weiterhin ist eine Bewertung der Überalterung und Entfestigung des Materials im individuellen Produktlebenszyklus darstellbar. Im Kontext mit der übergeordneten Simulationskette nach Abbildung 1.2 wird durch die entwickelten Methoden die Chemie und Wärmebehandlung von IN718 für das SLM-Verfahren optimiert. Weiterhin wird τ_{ges} als wichtige Eingabegröße der kristallplastischen Festigkeitssimulation berechnet. In Kombination mit der gemessenen oder berechneten Kornstruktur können die Materialeigenschaften von IN718-SLM im Bauteilvolumen, der Randzone sowie in schwer prüfbaren Bauteilzonen wie Wandstärkenübergängen, stark verjüngenden Geometrien und dünnwandigen Bereichen, bewertet werden. In diesen Zonen ist der Randeinfluss auf die Kornstruktur groß und die Scanvektorlänge und Schmelzbadgeometrie weichen u.a. vom Volumenstandard ab. Resultierend aus der Diskussion der erzielten Ergebnisse werden weitere Ansätze zur Modellweiterentwicklung und Methodenkopplung abgeleitet, wodurch die Modellgüte und Vorhersagegenauigkeit weiter gesteigert werden kann. Die Ergebnisse der Dissertation bestätigen das hohe Potenzial von mehrskalen Simulationsketten als ein effizienter und wichtiger Befähiger für die Entwicklung von Werkstoffen, Herstellprozessen und Technologien der Zukunft.

Literaturverzeichnis

- [AA92] ANDERSSON, J.O. ; AGREN, J.: Models for numerical treatment of multicomponent diffusion in simple phases. In: *Journal of Applied Physics* 72 (1992), S. 1350–1355
- [AB63] ASHBY, M.F. ; BROWN, L.M.: Diffraction contrast from spherically symmetrical coherency strains. In: *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* 8 (1963), Nr. 91, S. 1083–1103
- [ACRC10] ALAM, T. ; CHATURVEDI, M. ; RINGER, S.P. ; CAIRNEY, J.M.: Precipitation and clustering in the early stages of ageing in Inconel 718. In: *Material Science and Engineering A* 527 (2010), Nr. 29, S. 7770–7774
- [ACSM11] ALLISON, J. ; COLLINS, P. ; SPANOS, G. ; MINERALS, M.M.S. T.: *Proceedings of the 1st World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME)*. John Wiley & Sons, 2011 <https://books.google.de/books?id=LjheuLlQI0IC>. – ISBN 9781118147719
- [AGM⁺12] AMATO, K.N. ; GAYTAN, S.M. ; MURR, L.E. ; MARTINEZ, E. ; SHINDO, P.W. ; HERNANDEZ, J. ; COLLINS, S. ; MEDINA, F.: Microstructures and mechanical behavior of Inconel 718 fabricated by selective laser melting. In: *Acta Materialia* 60 (2012), Nr. 5, S. 2229–2239
- [Agr82a] AGREN, J.: Diffusion in phases with several components and sublattices. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 43 (1982), Nr. 5, S. 421–430
- [Agr82b] AGREN, J.: Numerical treatment of diffusional reactions in multicomponent alloys. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 43 (1982), Nr. 4, S. 385–391
- [AMS12] Norm SAE AMS5383E Oktober 2012. *Nickel Alloy, Corrosion and Heat-Resistant, Investment Castings, 52.5Ni - 19Cr - 3.0Mo - 5.1Cb(Nb) - 0.90Ti - 0.60Al - 18Fe, Vacuum Melted Homogenization and Solution Heat Treated*
- [APKO⁺14] AHMADI, M.R. ; POVODEN-KARADENIZ, E. ; OEKSUEZ, K.I. ; FALAHATI, A. ; KOZESCHNIK, E.: A model for precipitation strengthening in multi-particle systems. In: *Computational Materials Science* 91 (2014), S. 173–186
- [APKS⁺14] AHMADI, M.R. ; POVODEN-KARADENIZ, E. ; SONDEREGGER, B. ; OEKSUEZ, K.I. ; FALAHATI, A. ; KOZESCHNIK, E.: A model for coherency strengthening of large precipitates. In: *Scripta Materialia* 84-85 (2014), S. 47–50

- [APKW⁺14] AHMADI, M.R. ; POVODEN-KARADENIZ, E. ; WHITMORE, L. ; STOCKINGER, M. ; FALAHATI, A. ; KOZESCHNIK, E.: Yield strength prediction in Ni-base alloy 718Plus based on thermo-kinetic precipitation simulation. In: *Material Science & Engineering A* 608 (2014), S. 114–122
- [APPP16] ABA-PEREÀ, P.E. ; PIRLING, T. ; PREUSS, M.: In-situ residual stress analysis during annealing treatments using neutron diffraction in combination with a novel furnace design. In: *Materials & Design* 110 (2016), S. 925 – 931
- [Ard85] ARDELL, A.J.: Precipitation Hardening. In: *Metallurgical Transactions A* 16 (1985), Nr. 12, S. 2131–2165
- [ARES14] ANDERSSON, J. ; RAZA, S. ; ELIASSON, A. ; SURREDDI, K.B.: Solidification of Alloy 718, ATI 718Plus[®] and Waspaloy. In: OTT, E.A. (Hrsg.): *Proceedings of the 8th International Symposium on Superalloy 718 and Derivatives (TMS)*. John Wiley & Sons, 2014. – ISBN 9781119016854, S. 145–156
- [ASPK⁺14] AHMADI, M.R. ; SONDEREGGER, B. ; POVODEN-KARADENIZ, E. ; FALAHATI, A. ; KOZESCHNIK, E.: Precipitate strengthening of non-spherical precipitates extended in <100> or {100} direction in fcc crystals. In: *Materials Science & Engineering A* 590 (2014), S. 262–266
- [Att11] ATTAR, E.: *Simulation of Electron Beam Melting Process*, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Diss., 2011. – Download: <https://dnb.info/1013101472/34>
- [Aza04] AZADIAN, S.: *Aspects of Precipitation in the Alloy Inconel 718*, Lulea Tekniska Universitet of Technology, Lulea Schweden, Diss., 2004
- [Bai16] BAIKER, M.: *Mikrostruktursimulationen zur Ermittlung von Materialeigenschaften für Blechwerkstoffe und Anwendung in der Umformsimulation*, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Fraunhofer IWM Forschungsberichte Band 11, Hrsg.: Fraunhofer IWM, Freiburg/Brsg., ISBN 9783839610893, Diss., 2016
- [BB88] BROOKS, J.W. ; BRIDGES, P.J.: Metallurgical stability of Inconel alloy 718. In: DUHL, D.N. (Hrsg.): *Superalloys 1988: proceedings of the Sixth International Symposium on Superalloys*. Metallurgical Society (U.S.), 1988. – ISBN 9780873390767, S. 33–42
- [BBC89] BURGER, J.L. ; BIEDERMAN, R.R. ; COUTS, W.H.: The effects of starting condition on the aging response of AS- forged alloy 718. In: LORIA, E.A. (Hrsg.):

- Superalloy 718: metallurgy and applications : proceedings of the International Symposium on the Metallurgy and Applications of Superalloy 718.* TMS, 1989. – ISBN 9780873390972, S. 207–217
- [BC69] BOESCH, W.J. ; CANADA, H.B.: Precipitation Reactions and Stability of NiCb in Inconel Alloy 718. In: *Journals Metals* 21 (1969), Nr. 10, S. 34–38
- [Bec32] BECKER, R.: Die Keimbildung bei der Ausscheidung in metallischen Mischkristallen. In: *Annalen der Physik* 424 (1932), Nr. 1, S. 128–140
- [BHC⁺04] BEAUBOIS, V. ; HUEZ, J. ; COSTE, S. ; BRUCHELLE, O. ; LACAZE, J.: Short term precipitation kinetics of delta phase in strain free Inconel 718 alloy. In: *Materials Science and Technology* 20 (2004), Nr. 8, S. 1019–1026
- [BM91] BURKE, M.G. ; MILLER, M.K.: Precipitation in Alloy 718: A Combined AEM and APFIM Investigation. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718, 625 & Various Derivatives.* TMS, 1991. – ISBN 978–0873391733, S. 337–350
- [BN71] BOYD, J.D. ; NICHOLSON, R.B.: The coarsening behaviour of Θ'' and Θ' precipitates in two Al-Cu alloys. In: *Acta Metallurgica* 19 (1971), Nr. 12, S. 1379–1391
- [BSB⁺15] BAIKER, M. ; SILBERMANN, K. ; BUTZ, A. ; HELM, D. ; NEUGEBAUER, R.: *Viruelle Kennwertermittlung für die Umformsimulation von Feinblechen : Ergebnisse eines Vorhabens der industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF) gefördert über die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen e.V. (AIF) aus Mitteln des Bundesministerium für Wirtschaft und Energie.* 1. Europäische Forschungsgesellschaft für Blechverarbeitung e.V. (EFB), Hannover, 2015. – ISBN 9783867764490
- [BW34] BRAGG, W.L. ; WILLIAMS, E.J.: The effect of thermal agitation an atomic arrangement in alloys. In: *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 145 (1934), Nr. 855, S. 699–730
- [Cam86] CAMUS, G.: *Traitements thermomécaniques de l'alliage NC19FeNb (Inconel 718) pour différentes applications sur turbomachines industrielles et aéronautiques'.* Toulouse, Institut National Polytechnique de Toulouse, Diss., 1986
- [Cam06] CAMPBELL, C.E.: Assessment of Diffusion Mobilities in the γ' ($L12-Ni_3Al$) and B2 (NiAl) Structures. In: *Acta Materialia* 56 (2006), S. 4277–4290
- [Cam08] CAMPBELL, C.E.: Assessment of the diffusion mobilities in the γ' and B2 phases in the Ni-Al-Cr system. In: *Acta Materialia* 56 (2008), S. 4277–4290

- [Cao05] CAO, W.-D.: Solidification and solid state phase transformation of ALLVAC 718Plus® Alloy. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718, 625 & Various Derivatives*. TMS, 2005. – ISBN 9780873396028, S. 165–177
- [Car00] CARON, P.: High γ' Solvus New Generation Nickel-Based Superalloys for Single Crystal Turbine Blade Applications. In: POLLOCK, T.M. (Hrsg.): *Superalloys 2000: proceedings of the Ninth International Symposium on Superalloys*. TMS, 2000. – ISBN 9780873394772, S. 737–746
- [CBD12] COWLES, B. ; BACKMAN, D. ; DUTTON, R.: Verification and validation of IC-ME methods and models for aerospace applications. In: *Integrating Materials and Manufacturing Innovation* (2012), 6, Nr. 1. <https://doi.org/10.1186/2193-9772-1-2>
- [CBH⁺05] CAMPBELL, C.E. ; BOETTINGER, W.J. ; HANSEN, W.J. ; MEREWETHER, P. ; MUELLER, B.A.: *Examination Of Multicomponent Diffusion Between Two Ni-Base Superalloys*. in P.E.A. Turchi and A. Gonis and K. Rajan and A. Meike: Complex Inorganic Solids. Boston, MA : Springer US, 2005. – 241–249 S.
- [CBK02] CAMPBELL, C.E. ; BOETTINGER, W.J. ; KATTNER, U.R.: Development of a diffusion mobility database for Ni-base superalloys. In: *Acta Materialia* 50 (2002), Nr. 4, S. 775–792
- [CF83] CHATURVEDI, M.C. ; FANG, Y.H.: Strengthening mechanisms in Inconel 718 superalloy. In: *Metal Science* 17 (1983), Nr. 3, S. 145–149
- [CF87] CHATURVEDI, M.C. ; FANG, Y.H.: Effect of particle size on the creep rate of superalloy Inconel 718. In: *Materials Science and engineering* 89 (1987), S. L7–L10
- [CF89] CHATURVEDI, M.C. ; FANG, Y.H.: Creep Deformation of Alloy 718. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718: metallurgy and applications : proceedings of the International Symposium on the Metallurgy and Applications of Superalloy 718*. TMS, 1989. – ISBN 9780873390972, S. 489–498
- [Cie86] CIESLAK, M.J.: unpublished research, Sandia National Laboratories, Albuquerque nach [KCH+89]. (1986)
- [CK67] COPLEY, S.M. ; KEAR, B.H.: Temperature and orientation dependence of the flow stress in off-stoichiometric Ni sub 3 Al/gamma' phase/(Strength characteristics of single crystals of nickel aluminide/gamma phase/, discussing temperature and

- orientation dependence of work hardening. In: *Trans. TMS-AIME* 239 (1967), S. 984–992
- [CKHR89] CIESLAK, M.J. ; KNOROVSKY, G.A. ; HEADLEY, T.J. ; ROMIG, A.D.: Microstructural Characterization of Cast 718. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718: metallurgy and applications : proceedings of the International Symposium on the Metallurgy and Applications of Superalloy 718*. TMS, 1989. – ISBN 9780873390972, S. 59–68
- [CLCB02] CADEL, E. ; LEMARCHAND, D. ; CHAMBRELAND, S. ; BLAVETTE, D.: Atom probe tomography investigation of the microstructure of superalloys IN718. In: *Acta Mater.* 50 (2002), S. 957–966
- [CLL98] CLAUSEN, B. ; LORENTZEN, T. ; LEFFERS, T.: Self-consistent modelling of the plastic deformation of FCC polycrystals and its implications for diffraction measurements of internal stress. In: *Acta Materialia* 46 (1998), Nr. 9, S. 3087–3098
- [CLT⁺13] CAMPBELL, C. (Hrsg.) ; LI, M. (Hrsg.) ; THORNTON, K. (Hrsg.) ; HOLM, E. (Hrsg.) ; GUMBSCH, P. (Hrsg.): *Proceedings of the 2nd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME)*. John Wiley & Sons, New York (NY), 2013. – ISBN 9781118766897
- [CML11] CONNETABLE, D. ; MATHON, M. ; LACAZE, J.: First principle energies of binary and ternary phases of the Fe-Nb-Ni-Cr system. In: *Calphad* 35 (2011), Nr. 4, S. 588–593
- [CMW⁺14] CRUDDEN, D.J. ; MOTTURA, A. ; WARNKEN, N. ; RAEISINIA, B. ; REED, R.C.: Modelling of the influence of alloy composition on flow stress in high-strength nickel-based superalloys. In: *Acta Material Inc.* 75 (2014), S. 356–370
- [CMWA14] CARTER, L.N. ; MARTIN, C. ; WITHERS, P. J. ; ATTALLAH, M. M.: The influence of the laser scan strategy on grain structure and cracking behaviour in {SLM} powder-bed fabricated nickel superalloy. In: *Journal of Alloys and Compounds* 615 (2014), S. 338 – 347
- [Cos03] COSTE, S.: *Determination des lois de volutions microstructurale de l'alliage 718 lors du matricage*. Toulouse, Institut National Polytechnique de Toulouse, Diss., 2003
- [CP73] COZAR, R. ; PINEAU, A.: Morphology of γ' and γ'' Precipitates and Thermal Stability of Inconel 718 Type Alloys. In: *Metallurgical Transactions* 4 (1973), Nr. 1, S. 47–59

- [CR89] CARLSON, R.G. ; RADAVICH, J.F.: Microstructural Characterization of Cast 718. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718: metallurgy and applications : proceedings of the International Symposium on the Metallurgy and Applications of Superalloy 718*. TMS, 1989. – ISBN 9780873390972, S. 79–95
- [CRJ⁺09] CAO, X. ; RIVAX, B. ; JAHAZI, M. ; CUDDY, J. ; BIRUR, A.: Effect of pre- and post-weld heat treatment on metallurgical and tensile properties of Inconel 718 alloy butt joints welded using 4 kw NdYAG laser. In: *Journal of Materials Science* 44 (2009), Nr. 17, S. 4557–4571
- [CWPT88] COLLIER, J.P. ; WONG, S.H. ; PHILLIPS, J.C. ; TIEN, J.K.: The Effect of Varying Al, Ti and Nb Content on the Phase Stability of INCONEL 718. In: *Metallurgical Transactions A* 19 (1988), Nr. 7, S. 1657–1666
- [CZH05] CAMPBELL, C.E. ; ZHAO, J.C. ; HENRY, M.F.: Examination of Ni-base superalloy diffusion couples containing multiphase regions. In: *Materials Science and Engineering A* 407 (2005), Nr. 1, S. 135–146
- [DBB94] DESVALLÉES, Y. ; BOUZIDI, M. ; BOIS, F.: Delta phase in Inconel 718: mechanical properties and forging requirements. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloys 718, 625, 706 and Various Derivatives*. TMS, 1994. – ISBN 0873392353, S. 281–291
- [DD02] DONACHIE, M.J. ; DONACHIE, S.J.: *Superalloys: A Technical Guide*. 2. ASM International, 2002. – ISBN 9780871707499
- [DDHR91] DEANTONIO, D.A. ; DUHL, D. ; HOWSON, T. ; ROTHMAN, M.F.: Heat Treating of Superalloys. In: *ASM International* 4 (1991), S. 793–814
- [Del07] DELEUME, J.: *Facteurs metallurgiques et mecaniques controlant l'amorçage de defauts de corrosion sous contrainte dans l'alliage 718 en milieu primaire des reacteurs a eau sous pression*. Toulouse, L'Institute National Polytechnique De Toulouse, Diss., 2007
- [Die86] DIETER, G.E.: *Mechanical Metallurgy*. 3. McGraw-Hill Professional, 1986. – ISBN 9780070168930
- [Din91] DINSDALE, A.T.: SGTE data for pure elements. In: *CALPHAD* 15 (1991), Nr. 4, S. 317–425
- [DK59] DEWIT, G. ; KOEHLER, J.S.: Interaction of Dislocations with an Applied Stress in Anisotropic Crystals. In: *Phys. Rev.* 116 (1959), S. 1113–1120

- [DLK11] DUPONT, J.N. ; LIPPOLD, J.C. ; KISER, S.D.: *Welding metallurgy and weldability of nickel-base alloys*. John Wiley & Sons, Inc., 2011. – ISBN 9781118210031
- [DLNV11] DEHMAS, M. ; LACAZE, J. ; NIANG, A. ; VIGUIER, B.: TEM Study of High-Temperature Precipitation of Delta Phase in Inconel 718 Alloy. In: *Materials Science and Engineering* 2011 (2011), S. 1–9. – Article ID 940634
- [DNM⁺08] DEVAUX, A. ; NAZÉ, L. ; MOLINS, R. ; PINEAU, A. ; ORGANISTA, A. ; GUÉDOU, J.Y. ; UGINET, J.F. ; HÉRITIER, P.: Gamma double prime precipitation kinetic in Alloy 718. In: *Material Science and Engineering* 486 (2008), Nr. 1, S. 117–122
- [DNS80] DAVIES, C.K.L. ; NASH, P. ; STEVENS, R.N.: The effect of volume fraction of precipitate on oswald ripening. In: *Acta Metallurgica* 28 (1980), Nr. 2, S. 179–189
- [Dua07] DUAN, J.: Atomistic simulation of diffusion mechanisms in off-stoichiometric Al-rich Ni_3Al . In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 19 (2007), Nr. 8, S. 1–9
- [EMM16] EMMC, European Materials Modelling C.: *European Materials Modelling Council (EMMC)*. <https://emmc.info/>. Version: 2016. – link to an upcoming modelling community in europe, eingesehen am: 25.08.2016
- [Esh57] ESHELBY, J.D.: The Determination of the Elastic Field of an Ellipsoidal Inclusion, and Related Problems. In: *The Royal Society* 241 (1957), Nr. 1226, S. 376–396
- [Fab10] FABBRO, R.: Melt pool and keyhole behaviour analysis for deep penetration laser welding. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 43 (2010), Nr. 44, S. 445–501
- [Fan81] FANG, Y.H.: *The coarsening behaviour of γ'' and γ' particles in Inconel 718*, University of Manitoba, Manitoba Kanada, Diss., 1981
- [FDC82] FANG, Ya H. ; DEB, P. ; CHATURVEDI, M.C.: Coarsening behaviour of γ'' - and γ' - particles in Inconel alloy 718. In: *Metal Science* 16 (1982), Nr. 12, S. 555–562
- [FHV92] FRANCOIS, A. ; HUG, G. ; VEYSSIERE, P.: The fine structure of dislocations in Ni_3V . In: *Philosophical Magazine A* 66 (1992), Nr. 2, S. 269–288
- [FK13] FÖLL, Helmut ; KIEL, Universität: *Einführung in die Materialwissenschaft I, Onlineskript der Universität Kiel*. http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/mw1_ge/kap_7/illistr/t7_1_2.html. Version: 2013. – Internetseite eingesehen am: 22.03.2013

- [FKA⁺14] FRIED, M. ; KRECHEL, C. ; AFFELDT, E.E. ; ECKERT, B. ; KIMMIG, S. ; RETZE, U. ; HÖPPEL, H.W. ; GÖKEN, M.: Fatigue crack initiation in nickel-based superalloys studied by microstructure-based FE modeling and scanning electron microscopy. In: GUEDOU, J.Y. (Hrsg.): *EUROSUPERALLOYS 2014, 2nd European Symposium on Superalloys and their Applications*. EDP Sciences, MATEC Web of Conferences Volume 14, 2014. – ISBN 9781634393232, S. 279
- [FM66] FOREMAN, A.J.E. ; MAKIN, M.J.: Dislocation movement through random arrays of obstacles. In: *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* 14 (1966), Nr. 131, S. 911–924
- [FOK96] FUJII, T. ; ONAKA, S. ; KATO, M.: Shape-dependent strain energy of an inhomogeneous coherent inclusion with general tetragonal misfit strains. In: *Scripta Materialia* 34 (1996), Nr. 10, S. 1529–1535
- [FP77] FOURNIER, D. ; PINEAU, A.: Low cycle fatigue behavior of Inconel 718 at 298 K and 823 K. In: *Metallurgical Transactions A* 8 (1977), Nr. 7, S. 1095–1105
- [FRZ10] FRANK, R.B. ; ROBERTS, C.G. ; ZHANG, J.: Effect of Nickel Content on Delta Solvus Temperature and Mechanical Properties of Alloy 718. In: OTT, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718 and Derivatives*. John Wiley & Sons, 2010. – ISBN 9781118495223, S. 725–736
- [GD77a] GYPEN, L.A. ; DERUYTTERE, A.: Multi-component solid solution hardening. Part 1: Proposed model. In: *Journal of Materials Science* 12 (1977), Nr. 5, S. 1028–1033
- [GD77b] GYPEN, L.A. ; DERUYTTERE, A.: Multi-component solid solution hardening. Part 2: Agreement with experimental results. In: *Journal of Materials Science* 12 (1977), Nr. 5, S. 1034–1038
- [GH66] GEROLD, V. ; HABERKORN, H.: On the Critical Resolved Shear Stress of Solid Solutions Containing Coherent Precipitates. In: *Phys. Status Solidi (b)* 16 (1966), Nr. 2, S. 675–684
- [GH68] GEROLD, V. ; HARTMANN, K.: Theoretical and experimental investigations on stacking fault strengthening. In: *Trans. Japan Inst. Metals* 9 (suppl.) (1968), S. 509–513
- [GHMI16] GÖHLER, T. ; HESS, T. ; MAIWALD-IMMER, T.: *Belichtung bei generativer Fertigung*. Patent von MTU Aero Engines AG, 02.03.2016. <https://google.com/patents/EP2886226A3?cl=ko>. Version: 2016. – Pub. No. EP2886226 A3

- [GHS98] GROSDIDIER, T. ; HAZOTTE, A. ; SIMON, A.: Precipitation and dissolution processes in γ/γ' single crystal nickel-based superalloys. In: *Materials Science and Engineering: A* 256 (1998), Nr. 1, S. 183–196
- [Gib76] GIBBS, J.W.: *On the equilibrium of heterogeneous substances*. Vol. 1. Thermodynamics, 1876. – 85–92 S. – New York: Dover Publ., 1961
- [Gol94] GOLDSCHMIDT, D.: Einkristalline Gasturbinenschaufeln aus Nickelbasis-Legierungen, Teil I: Herstellung und Gefüge. In: *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik* 25 (1994), Nr. 8, S. 311–320
- [Gor70] GORDINE, J.: Welding of Inconel 718. In: *Welding Research Supplement* 49 (1970), Nr. 11, S. 531–537
- [Got07] GOTTSSTEIN, G.: *Physikalische Grundlagen der Materialkunde*. 3. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. – ISBN 9783540711049
- [Gul13] GULLIVER, G.H.: The quantitative effect of rapid cooling upon the constitution of binary alloys. In: *Journal of the Institute of Metals* 9 (1913), Nr. 1, S. 120–157
- [GZ92] GHONEM, H. ; ZHENG, D.: Mechanisms and Modelling of Environment-dependent Fatigue Crack Growth in a Nickel Based Superalloy. In: *Mechanics of Solids Laboratory, Department of Mechanical Engineering, University of Rhode Island Kingston* (1992), S. 252
- [Göh16] GÖHLER, T.: *Designkriterien für rheniumreduzierte Nickelbasis-Einkristalllegierungen: Identifikation und rechnergestützte Umsetzung*. Erlangen, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Diss., 2016. – urn:nbn:de:bvb:29-opus4-73606
- [Hal51] HALL, E.O.: The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results. In: *Proceedings of the Physical Society. Section B*. 64 (1951), Nr. 9, S. 747–753
- [HCS14] HELMER, H.E. ; C.KÖRNER ; SINGER, R.F.: Additive manufacturing of nickel-based superalloy Inconel 718 by selective electron beam melting: Processing window and microstructure. In: *Journal of Materials Research* 29 (2014), 09, S. 1987–1996
- [HFG75] HOUVION, J.P. ; FRANTZ, C. ; GANTOIS, M.: Cellular transformation mechanism of metastable Ni₃Nb and Ni₃Ti precipitates in several nickel alloys. In: *Memoires scientifiques de la Revue de metallurgie* 72 (1975), S. 159–170

- [HFY94] HE, J. ; FUKUYAMA, S. ; YOKOGAWA, K.: γ'' Precipitate in Inconel 718. In: *Journal of Materials Science and Technology* 10 (1994), S. 293–303
- [HK65] HIRSCH, P.B. ; KELLY, A.: Stacking-fault strengthening. In: *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics* 12 (1965), Nr. 119, S. 881–900
- [Hop15] HOPPE, Andy: *www.periodensystem.info, ein Projekt von Andy Hoppe, Periodensystem der Elemente.* <http://www.periodensystem.info/periodensystem/>. Version: 2015. – Internetseite für alle IN718 Legierungs-elemente eingesehen am: 22.02.2015
- [HSHB96] HERMANN, W. ; SOCKEL, H.G. ; HAN, J. ; BERTRAM, A.: Elastic properties and determination of elastic constants of nickel-base superalloys by a free-free beam technique. In: KISSINGER, R.D. (Hrsg.): *Superalloys 1996: proceedings of the Eighth International Symposium on Superalloys*. TMS, 1996. – ISBN 9780873393522, S. 229–238
- [HSW⁺08] HOFFMEISTER, J. ; SCHULZE, V. ; WANNER, A. ; HESSERT, R. ; KOENIG, G.: Thermal Relaxation of Residual Stresses induced by Shot Peening in IN718. In: *Proceedings of the 10th International Conference on Shot Peening, Tokyo Japan, September 15th - 18th, 2008. Ed.: K. Toshia*. International Conference on Shot Peening (ISCSP), Tokyo, 2008, S. 157–162
- [HTFY95] HE, J. ; TANG, X.Y. ; FUKUYAMA, S. ; YOKOGAWA, K.: Boundary in γ'' precipitates in Inconel 718 nickel-base superalloy. In: *Acta Metallurgica et Materialia* 43 (1995), Nr. 12, S. 4403–4409
- [JG14] JIA, Q. ; GU, D.: Selective laser melting additive manufacturing of Inconel 718 superalloy parts: Densification, microstructure and properties. In: *Journal of Alloys and Compounds* 585 (2014), S. 713–721
- [Jön95] JÖNSSON, B.: Assessment of the mobilities of Cr, Fe and Ni in fcc Cr-Fe-Ni alloys. In: *Zeitschrift fuer Metallkunde/Materials Research and Advanced Techniques* 86 (1995), S. 686–692
- [JRK⁺07] JANSSENS, K.G.F. ; RAABE, D. ; KOZESCHNIK, E. ; MIODOWNIK, M.A. ; NESTLER, B.: *Computational Materials Engineering: An Introduction to Microstructure Evolution*. 1. Elsevier Academic Press, 2007. – 179–217 S. – ISBN 9780123694683

- [KAB⁺88] KOUL, A.K. ; AU, P. ; BELLINGER, N. ; THAMBURAJ, R. ; WALLACE, W. ; IM-MARIGEON, J.P.: Development of a Damage Tolerant Microstructure for Inconel 718 Turbine Disc Materials. In: DUHL, D.N. (Hrsg.): *Superalloys 1988: proceedings of the Sixth International Symposium on Superalloys*. Metallurgical Society (U.S.), 1988. – ISBN 9780873390767, S. 3–12
- [KAH11] KÖRNER, C. ; ATTAR, E. ; HEINL, P.: Mesoscopic simulation of selective beam melting processes. In: *Journal of Materials Processing Technology* 211 (2011), Nr. 6, S. 978–987
- [Kat97] KATTNER, U.R.: The thermodynamic modeling of multicomponent phase equilibria. In: *JOM* 49 (1997), Nr. 12, S. 14–19
- [KBK⁺15] KULAWIK, K. ; BUFFAT, P.A. ; KRUK, A. ; WUSATOWSKA-SARNEK, A.M. ; CZYRSKA-FILEMONOWICZ, A.: Imaging and characterization of γ' and γ'' nanoparticles in Inconel 718 by EDX elemental mapping and FIB-SEM tomography. In: *Materials Characterization* 100 (2015), S. 74–80
- [KCH⁺89] KNOROVSKY, G.A. ; CIESLAK, M.J. ; HEADLEY, T.J. ; ROMIG, A.D. ; HAMMETTER, W.F.: Inconel 718: A Solidification Diagram. In: *Metallurgical Transactions A* 20 (1989), Nr. 10, S. 2149–2158
- [KDY⁺04] KANG, S.H. ; DEGUCHI, Y. ; YAMAMOTO, K. ; OGI, K. ; SHIRAI, M.: Solidification Process and Behavior of Alloying Elements in Ni-Based superalloy Inconel 718. In: *Materials Transactions* 45 (2004), Nr. 8, S. 2728–2733
- [Kel72] KELLY, P.M.: The effect of particle shape on dispersion hardening. In: *Scripta Metallurgica* 6 (1972), Nr. 8, S. 647–656
- [KF98] KURZ, W. ; FISHER, D.J.: *Fundamentals of Solidification*. 4. Trans. Tech. Publications Ltd., 1998. – ISBN 9780878498048
- [Kha89] KHACHATURYAN, A.G.: Strain controlled morphologies in the two-phase state. In: STOCKS, G.M. (Hrsg.): *Alloy Phase Stability*. Springer Netherlands, 1989, S. 529–555
- [KHE16] KOERNER, C. ; HELM, D. ; EMMERICH, H.: *Development of physically based simulation chain for microstructure evolution and resulting mechanical properties focused on additive manufacturing processes*. http://cordis.europa.eu/project/rcn/111099_de.html. Version: 2016. – Clean Sky gefördertes Projekt Themennummer: JTI-CS-2012-2-SAGE-04-019, Project ID: 326020,

Projektname: SimChain, beteiligte Institute: FAU Erlangen-Nürnberg WTM und Fraunhofer Freiburg IWM und Universität Bayreuth MPS

- [KHIO96] KUSABIRAKI, K. ; HAYAKAWA, I. ; IKEUCHI, S. ; OOKA, T.: Lattice Constants of γ and γ'' Phases and γ''/γ Lattice Mismatches in a Ni-15Cr-8Fe-6Nb Alloy. In: *ISIJ International* 36 (1996), Nr. 1, S. 310–316
- [KIO96] KUSABIRAKI, K. ; IKEUCHI, S. ; OOKA, T.: Morphology and Lattice Constants of γ'' Precipitates in a Ni-18Cr-16Fe-5Nb-3Mo Alloy. In: *Materials Transactions* 37 (1996), S. 1050–1055
- [KMB⁺03] KARPETS, M.V. ; MILMAN, Y.V. ; BARABASH, O.M. ; KORZHOVA, N.P. ; SENKOV, O.N. ; MIRACLE, D.B. ; LEGKAYA, T.N. ; VOSKOBOYNIK, I.V.: The influence of Zr alloying on the structure and properties of Al_3Ti . In: *Intermetallics* 11 (2003), Nr. 3, S. 241–249
- [KN71] KELLY, A. ; NICHOLSON, R.B.: *Strengthening Methods in Crystals*. Halstead Press Division, Wiley, 1971. – ISBN 9780470468005
- [KO74] KEAR, B. ; OBLAK, J.: Deformation Modes γ' Precipitation Hardened Nickel-Base Alloys. In: *Journal de Physique Colloques* 35 (1974), Nr. C7, S. 35–45
- [Kou03] KOU, S.: *Welding Metallurgy*. 2. A John Wiley & Sons, Inc., 2003. – ISBN 9780471434917
- [Kru98] KRUG, P.: *Einfluss einer Flüssigmetallkühlung auf die Mikrostruktur gerichtet erstarrter Superlegierungen*, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Diss., 1998
- [KS09] KOZESCHNIK, E. ; SONDEREGGER, B.: Generalized Nearest-Neighbour Broken-Bond Analysis of Randomly Oriented Coherent Interfaces in Multicomponent Fcc and Bcc Structures. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 40 (2009), Nr. 3, S. 499–510
- [KSF04] KOZESCHNIK, E. ; SVOBODA, J. ; FISCHER, P. Fratzl F.: Modelling of kinetics in multi-component multi-phase systems with spherical precipitates II: Numerical solution and application. In: *Materials Science and Engineering: A* 385 (2004), Nr. 1, S. 157–165
- [KSF06] KOZESCHNIK, E. ; SVOBODA, J. ; FISCHER, F.D.: Shape factors in modeling of precipitation. In: *Materials Science and Engineering A* 441 (2006), Nr. 1, S. 68–72

- [KSK14] KLASSEN, A. ; SCHAROWSKY, T. ; KÖRNER, C.: Evaporation model for beam based additive manufacturing using free surface lattice Boltzmann methods. In: *Journal of Physics D: Applied Physics* 47 (2014), 06, Nr. 27, S. 275–303
- [KT91] KORTH, G.E. ; TRYBUS, C.L.: Tensile Properties and Microstructure of Alloy 718 thermally Aged to 50000 h. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718, 625 & Various Derivatives*. TMS, 1991. – ISBN 9780873391733, S. 437–446
- [KVP92] KHANTA, M. ; VITEK, V. ; POPE, D.P.: An atomistic study of dislocations and their mobility in a model $D0_{22}$ alloy. In: *Materials Science and Engineering A* 152 (1992), Nr. 1, S. 89–94
- [KW70] KIRMAN, I. ; WARRINGTON, D.H.: The Precipitation of Ni_3Nb Phases in a Ni-Fe-Cr-Nb Alloy. In: *Metallurgical Transactions* 1 (1970), Nr. 10, S. 2667–2675
- [KW84] KAMPMANN, R. ; WAGNER, R.: Kinetics of precipitation in metastable binary alloys-theory and applications to Cu-1.9 at In: HAASEN, P. (Hrsg.): *Decomposition of Alloys: The Early Stages 1st Edition*. Acta-Scripta Metallurgic, 1984, S. 91–103
- [LCX⁺99] LIU, W.C. ; CHEN, Z. ; XIAO, F. ; WANG, S. ; YAO, M.: Strain-induced Precipitation of γ'' Phase and the γ'' to δ Transformation in Inconel 718. In: *Zeitschrift fuer Metallkunde* 90 (1999), S. 147–152
- [LLA⁺10] LEE, M.G. ; LIM, H. ; ADAMS, B.L. ; HIRTH, J.P. ; WAGONER, R.H.: A dislocation density-based single crystal constitutive equation. In: *International Journal of Plasticity* 26 (2010), Nr. 7, S. 925–938
- [LLY⁺11] LIU, F. ; LIN, X. ; YANG, G. ; SONG, M. ; CHEN, J. ; HUANG, W.: Microstructure and residual stress of laser rapid formed Inconel 718 nickel-base superalloy. In: *Optics & Laser Technology* 43 (2011), Nr. 1, S. 208–213
- [LS61] LIFSHITZ, I.M. ; SLYOZOV, V.V.: The Kinetics of precipitation from Supersaturated Solid Solutions. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 19 (1961), Nr. 1, S. 35–50
- [LSF⁺16] LADEWIG, A. ; SCHLICK, G. ; FISSER, M. ; SCHULZE, V. ; GLATZEL, U.: Influence of the shielding gas flow on the removal of process by-products in the selective laser melting process. In: *Additive Manufacturing* 10 (2016), S. 1–9
- [LWN15] LIU, H. ; WANG, Y. ; NIE, J.F.: Phase Field Simulation of Orowan strengthening by coherent Precipitate Plates in a Mg-Nd Alloy. In: POOLE, W. (Hrsg.):

- Proceedings of the 3rd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME).* Colorado Springs, Collorado : Springer International Publishing, 2015. – ISBN 9783319486123, S. 63–71
- [LXY⁺97a] LIU, W.C. ; XIAO, F.R. ; YAO, M. ; CHEN, Z.L. ; JIANG, Z.Q. ; WANG, S.G.: The influence of cold rolling on the precipitation of delta phase in Inconel 718 alloy. In: *Scripta Materialia* 37 (1997), Nr. 1, S. 53–57
- [LXY⁺97b] LIU, W.C. ; XIAO, F.R. ; YAO, M. ; CHEN, Z.L. ; JIANG, Z.Q. ; WANG, S.G.: Relationship between the lattice constant of γ phase and the content of δ phase, γ'' and γ' phases in Inconel 718. In: *Scripta Materialia* 37 (1997), S. 59–64
- [MBB02] MILLER, M.K. ; BABU, S.S. ; BURKE, M.G.: Comparison of the phase compositions in Alloy 718 measured by atom probe tomography and predicted by thermodynamic calculations. In: *Materials Science and Engineering A* 327 (2002), Nr. 1, S. 84–88
- [MCCK98] MCKAMEY, C.G. ; CARMICHAEL, C.A. ; CAO, W.D. ; KENNEDY, R.L.: Creep Properties of Phosphorus+Boron-Modified Alloy 718. In: *Scripta Mater.* 38 (1998), S. 485–491
- [Mei99] MEINER, W.: *Direktes selektives Lasersintern einkomponentiger metallischer Werkstoffe*. Aachen, Shaker Verlag, RWTH Aachen Universität, Diss., 1999. <http://publications.rwth-aachen.de/record/55755>. – 125 S
- [MFC94] M.P.SOLIGNAC ; FOUCAULT, M. ; CLOUE, J.M.: Effects of cold working in microstructural and mechanical properties and SCC behavior of alloy 718. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloys 718, 625, 706 and Various Derivatives*. TMS, 1994. – ISBN 0873392353, S. 751–761
- [MI11] MAIWALD-IMMER, T.: *Computergestützte Untersuchung der Ausscheidungskinetik in Nickelbasis-Legierungen*. Freiberg, TU Bergakademie Freiberg, Diplomarbeit, 2011
- [MIGFB⁺13] MAIWALD-IMMER, T. ; GÖHLER, T. ; FISCHERSWORRING-BUNK, A. ; OSMANLIC, F. ; KÖRNER, C. ; BAUEREISS, A.: Application of ICME Methods for the Development of rapid Manufacturing Technologies. Version: 2013. https://doi.org/10.1007/978-3-319-48194-4_12. In: AL., C. C. (Hrsg.): *Proceedings of the 2nd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME)*. Salt Lake City, Utah : Springer International Publishing, 2013. – ISBN 9783319481944, 75-80

- [MIGFB15] MAIWALD-IMMER, T. ; GÖHLER, T. ; FISCHERSWORRING-BUNK, A.: From Melt Pool to Strength Application of ICME Methods for the Development of Rapid Manufacturing Technologies. Version: 2015. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9781119139508.ch26>. In: POOLE, W. (Hrsg.): *Proceedings of the 3rd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2015)*. Colorado Springs, Collorado : Wiley-Blackwell, 2015. – ISBN 9783319486123, 215-220
- [MIGFB16a] MAIWALD-IMMER, T. ; GÖHLER, T. ; FISCHERSWORRING-BUNK, A.: *From melt pool to strength - Capabilities and limitations of ICME methods in case of AM*. <http://congress.cimne.com/icme2016/admin/files/filepaper/p106.pdf>. Version: 2016. – Vortrag gehalten auf dem *2nd International Workshop on Software Solutions for Integrated Computational Materials Engineering (icmeg)*, 12-15 April 2016, Barcelona, Spanien, PDF eingesehen am: 25.05.2016
- [MIGFB16b] MAIWALD-IMMER, T. ; GÖHLER, T. ; FISCHERSWORRING-BUNK, A.: *Simulationsverfahren zur Entwicklung eines Herstellungsverfahrens*. Patent von MTU Aero Engines AG, 02.06.2016. <https://patentscope.wipo.int/search/en/detail.jsf?docId=W02016082810&tab=PCTBIBLIO&maxRec=1000>. Version: 2016. – Pub. No. WO2016082810A1
- [MMY⁺94] MURATA, Y. ; MORINAGA, M. ; YUKAWA, N. ; OGAWA, H. ; KATO, M.: Solidification Structures of Inconel 718 with Microalloying Elements. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloys 718, 625, 706 and Various Derivatives*. TMS, 1994. – ISBN 0873392353, S. 81–88
- [MOS85] MISHIMA, Y. ; OCHIAI, S. ; SUZUKI, T.: Lattice Parameters of $\text{Ni}(\gamma)$, $\text{Ni}_3\text{Al}(\gamma')$ and $\text{Ni}_3\text{Ga}(\gamma)$ Solid Solutions with Additions of Transition and B-subgroup Elements. In: *Acta Metallurgica* 33 (1985), S. 1161–1169
- [MPd00] MANNAN, S. ; PATEL, S. ; DEBARBADILLO, J.: Long term thermal stability of Inconel alloys 718, 706, 909, and Waspaloy at 593 °C and 704 °C. In: POLLOCK, T.M. (Hrsg.): *Superalloys 2000: proceedings of the Ninth International Symposium on Superalloys*. TMS, 2000. – ISBN 9780873394772, S. 449–458
- [MPT71] MOREEN, H.A. ; POLONIS, D.H. ; TAGGART, R.: Superdislocations in Ni_3V . In: *Journal of Applied Physics* 42 (1971), S. 2151–2152

- [MSG96] MURALIDHARAN, B.G. ; SHANKAR, V. ; GILL, T.P.S.: *Weldability of Inconel 718 - A Review*. 1. Indira Gandhi Centre for Atomic Research, Kalpakkam (India), 1996. – Contract Number: DE98618824/XAB; IGC-175
- [MSPK14] MANIKANDAN, S.G.K. ; SIVAKUMAR, D. ; PRASAD, R.K. ; KAMARAJ, M.: Effect of weld cooling rate on Laves phase formation in Inconel 718 fusion zone. In: *Journal of Materials Processing Technology* 214 (2014), Nr. 2, S. 358–364
- [MSPK15] MANIKANDAN, S.G.K. ; SIVAKUMAR, D. ; PRASAD, R.K. ; KAMARAJ, M.: Laves phase in alloy 718 fusion zone - microscopic and calorimetric studies. In: *Mat. Characterization* 100 (2015), S. 192–206
- [MSW⁺11] MIAO, Z. ; SHAN, A. ; WANG, W. ; LU, J. ; XU, W. ; SONG, H.: Solidification process of conventional superalloy by confocal scanning laser microscope. In: *Trans. Nonferrous Met. soc. China* 21 (2011), Nr. 2, S. 236–242
- [MTU05] MTU: MTU Aero Engines GmbH. (2005). – bisher nicht veröffentlichte interne Projektdaten
- [Nas91] NASH, P.: *Phase Diagrams of Binary Nickel Alloys*. ASM International, Materials Park (OH), 1991. – ISBN 9780871703651
- [Nem83] NEMBACH, E.: Precipitation hardening caused by a difference in shear modulus between particle and matrix. In: *Physica Status Solidi (A)* 78 (1983), Nr. 2, S. 571–581
- [NHLV10] NIANG, A. ; HUEZ, J. ; LACAZE, J. ; VIGUIER, B.: Characterizing Precipitation Defects in Nickel based 718 Alloy. In: *Material Science Forum* 636-637 (2010), S. 517–522
- [Nia10] NIANG, A.: *Contribution a l'étude de la précipitation des phases inter métalliques dans l'alliage 718*, Institut National Polytechnique de Toulouse, Toulouse, Diss., 2010
- [NN85] NEMBACH, E. ; NEITE, G.: Precipitation Hardening of Superalloys by ordered γ' -Particles. In: *Progress in Material Science* 29 (1985), Nr. 3, S. 177–319
- [NOL14] NIE, P. ; OJO, O.A. ; LI, Z.: Numerical modeling of microstructure evolution during laser additive manufacturing of nickel-based superalloy. In: *Acta Materialia* 77 (2014), S. 85–95

- [NVL10] NIANG, A. ; VIGUIER, B. ; LACAZE, J.: Some features of anisothermal solid-state transformations in alloy 718. In: *Materials Characterization* 61 (2010), Nr. 5, S. 525–534
- [NYPL03] NA, Y. S. ; YEOM, J. T. ; PARK, N. K. ; LEE, J. Y.: Simulation of microstructures for alloy 718 blade forging using 3D FEM simulator. In: *Journal of Materials Processing Technology* 141 (2003), Nr. 3, S. 337–342
- [OBR91] ORADEI-BASILE, A. ; RADAVICH, J.F.: A current T-T-T diagram for wrought alloy 718. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718, 625 & Various Derivatives*. TMS, 1991. – ISBN 978–0873391733, S. 325–335
- [Ols00] OLSON, G.B.: Pathways of Discovery, Designing a New Material World. In: *Science* 288 (2000), Nr. 5468, 993-998. <http://science.sciencemag.org/content/288/5468/993>
- [Ons31] ONSAGER, L.: Reciprocal Relations in Irreversible Processes I & II. In: *Phys. Rev.* I: 37, II: 38 (1931), Nr. I: 4, II: 12, S. I: 405–426, II: 2265–2279
- [OPD69] OBLAK, J.M. ; PAULONIS, D.F. ; DUVALL, D.S.: Precipitation in Nickel-Base Alloy 718. In: *ASM (Amer. Soc. Metals), Trans. Quart.* 62 (1969), S. 611–622
- [OPD74a] OBLAK, J.M. ; PAULONIS, D.F. ; DUVALL, D.S.: Coherency Strengthening in Ni Base Alloys Hardened by DO_{22} γ'' Precipitates. In: *Metall. Trans.* 5 (1974), Nr. 1, S. 143–153
- [OPD74b] OBLAK, J.M. ; PAULONIS, D.F. ; DUVALL, D.S.: An Estimate of the Strengthening Arising from Coherent, Tetragonally-distorted Particles. In: *Materials Science and Engineering* 13 (1974), S. 51–56
- [PCK⁺15] POOLE, W. ; CHRISTENSEN, S. ; KALIDINDI, S. ; LUO, A. ; MADISON, J. ; RAA-BE, D. ; SUN, X.: *Proceedings of the 3rd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME)*. John Wiley & Sons, 2015 <https://books.google.de/books?id=siJECQAAQBAJ>. – ISBN 9781119139515
- [PDG⁺94] PANG, J.X. ; DWYER, D.J. ; GAO, M. ; VALERIO, P. ; WEI, R.P.: Surface enrichment and grain boundary segregation of niobium in Inconel 718 single- and polycrystals. In: *Scripta Metallurgica et Materialia* 31 (1994), Nr. 3, S. 345–350
- [Pet53] PETCH, N.J.: The cleavage strength of polycrystals. In: *Journal of the Iron and Steel Institute* 174 (1953), S. 25–28

- [Pin10] PINEAU, A.: *Alloy 718 and other derivatives based on γ'' precipitation.* Präsentation, Chalmers Schweden. <http://matperso.mines-paristech.fr/Donnees/data02/264-Inco-718-CHALMERS-Sweden-May-2010.pdf>. Version: 2010. – eingesehen am: 10.02.2013
- [Pla16] PLANSEE, SE: *Werkstoffe: Kennwerte der hochschmelzenden Metalle.* <https://www.plansee.com/de/werkstoffe/niob.html>. Version: 2016. – Internetseite eingesehen am: 22.06.2016
- [PRCA14] PARIMI, L.L. ; RAVI, G. A. ; CLARK, D. ; ATTALLAH, M. M.: Microstructural and texture development in direct laser fabricated IN718. In: *Materials Characterization* 89 (2014), S. 102 – 111
- [PS05] PATEL, S.J. ; SMITH, G.D.: The role of Niobium in wrought superalloys. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Proceedings of the Sixth International Symposium on Superalloys 718, 625, 706 and Derivatives.* TMS, 2005. – ISBN 9780873396028, S. 135–154
- [Raa98] RAABE, D.: *Computational materials science: the simulation of materials microstructures and properties.* 1. Wiley-VCH, 1998. – ISBN 9783527295418
- [Rad89] RADAVICH, J.F.: The physical metallurgy of cast and wrought alloy 718. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718: metallurgy and applications : proceedings of the International Symposium on the Metallurgy and Applications of Superalloy 718.* TMS, 1989. – ISBN 9780873390972, S. 229–240
- [RBV98] ROYER, A. ; BASTIE, P. ; VERON, M.: In situ study of the coarsening of nickel based single crystal γ' precipitate: evolution of the volume fraction and of the lattice parameter mismatch. In: *Acta Materialia* 46 (1998), S. 5357–5368
- [RDT97] ROTH, H.A. ; DAVIS, C.L. ; THOMSON, R.C.: Modeling solid solution strengthening in nickel alloys. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 28 (1997), 6, Nr. 6, S. 1329–1335
- [Ree06] REED, R.C.: *The Superalloys: Fundamentals and Applications.* Cambridge University Press, 2006. – ISBN 9781139458634
- [REH⁺10] ROTERS, F. ; EISENLOHR, P. ; HANTCHERLI, L. ; TJAHJANTO, D.D. ; BIELER, T.R. ; RAABE, D.: Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. In: *Acta Materialia* 58 (2010), Nr. 4, S. 1152–1211

- [Ret10] RETTIG, R.: *Mathematische Modellierung der Ausscheidung von Sprödphasen in komplexen rutheniumhaltigen Nickelbasis-Superlegierungen*. Erlangen, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), Diss., 2010. – urn:nbn:de:bvb:29-opus-19984
- [RG70] ROYER, A. ; GANTOIS, M.: Mecanismes de deformation plastique dans un alliage nickel chrome niobium durci par precipitation à 700°C. In: *Scripta Metallurgica* 4 (1970), Nr. 8, S. 651–655
- [RK92] RADAVIDCH, J.F. ; KORTH, G.E.: High Temperature Degradation of Alloy 718 after Longtime Exposures. In: ANTOLOVICH, S.D. (Hrsg.): *Superalloys, 1992: Proceedings of the Seventh International Symposium on Superalloys*. TMS, 1992. – ISBN 9780608038254, S. 497–505
- [RMWX02] RONGBIN, L. ; MEI, Y. ; WENCHANG, L. ; XIANCHANG, H.: Effects of Cold Rolling on Precipitates in Inconel 718 Alloy. In: *Journal of Materials Engineering and Performance* 11 (2002), Nr. 5, S. 504–508
- [RS94] ROSENGAARD, N.M. ; SKRIVER, H.L.: Ab initio study of antiphase boundaries and stacking faults in $L1_2$ and DO_{22} compounds. In: *The American Physical Society* 50 (1994), S. 4848–4858
- [RSA⁺09] RADIS, R. ; SCHAFER, M. ; ALBU, M. ; KOTHLEITNER, G. ; PÖLT, P. ; KOZESCHNIK, E.: Multimodal size distributions of γ' precipitates during continuous cooling of UDIMET 720 Li. In: *Acta Materialia* 57 (2009), Nr. 19, S. 5739–5747
- [RTW09] REED, R.C. ; TAO, T. ; WARNKEN, N.: Alloys-By-Design: Application to nickel-based single crystal superalloys. In: *Acta Materialia* 57 (2009), Nr. 19, S. 5898–5913
- [Rus80] RUSSELL, K.C.: Nucleation in solids: The induction and steady state effects. In: *Advances in Colloid and Interface Science* 13 (1980), Nr. 3, S. 205–318
- [SA86] SARREAL, J.A. ; ABBASCHIAN, G.J.: The Effect of Solidification Rate on Microsegregation. In: *Metallurgical Transaction A* 17 (1986), Nr. 11, S. 2063–2073
- [SA00] SLAMA, C. ; ABDELLAOUI, M.: Structural characterization of the aged Inconel 718. In: *Journal of Alloys and Compounds* 306 (2000), S. 277–284
- [Sac28] SACHS, G.: Zur Ableitung einer Fliessbedingung. In: *Mitteilungen der deutschen Materialprüfungsanstalten: Sonderheft IX: Arbeiten aus dem Kaiser Wilhelm-*

- Institut für Metallforschung und dem staatlichen Materialprüfungamt zu Berlin-Dahlem.* Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1928. – ISBN 9783642920455, S. 94–97
- [Sau97] SAUNDERS, N.: Applicability of the equilibrium and Scheil Model to Solidification in Multi-Component alloys. In: BEECH, J. (Hrsg.): *Proceedings of the 4th Decennial Int. Conf. on Solidification Processing, Sheffield*. University of Sheffield, Department of Engineering Materials, 1997. – ISBN 0952250721, S. 362–366
- [SB99] SMALLMAN, R.E. ; BISHOP, R.J.: *Modern Physical Metallurgy and Materials Engineering (Sixth Edition)*. 6. Oxford : Butterworth-Heinemann, 1999. – 1–319 S. – ISBN 9780750645645
- [SC97] SLAMA, C. ; CIZERON, G.: Etude du comportement structural de l'alliage NC 19 Fe Nb (Inconel 718). In: *Journal de Physique III* 7 (1997), S. 665–688
- [Sch42] SCHEIL, E.: Bemerkungen zur Schichtkristallbildung. In: *Zeitschrift für Metallkunde* 34 (1942), S. 70–72
- [SEV99] SAHM, P.R. ; EGRY, I. ; VOLKMANN, T.: *Schmelze, Erstarrung, Grenzflächen: Eine Einführung in die Physik und Technologie flüssiger und fester Metalle*. 1. Springer-Verlag GmbH, 1999. – ISBN 9783540415664
- [SFFK04] SVOBODA, J. ; FISCHER, F.D. ; FRATZL, P. ; KOZESCHNIK, E.: Modelling of kinetics in multicomponent multiphase systems with spherical precipitates I.-Theory. In: *Materials Science and Engineering: A* 385 (2004), Nr. 1, S. 166–174
- [SGR08] SIVAPRASAD, K. ; GANESH, S. ; RAMAN, S.: Influence of Weld Cooling Rate on Microstructure and Mechanical Properties of Alloy 718 Weldments. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 39 (2008), Nr. 9, S. 2115–2127
- [SHKS11] SONDEREGGER, B. ; HOLZER, I. ; KOZESCHNIK, E. ; SOMMITSCH, C.: Particle distance distributions and their effect on precipitation strengthening. In: *Computer Methods in Materials Science* 11 (2011), Nr. 1, S. 148–153
- [SK10] SONDEREGGER, B. ; KOZESCHNIK, E.: Interfacial Energy of Diffuse Phase Boundaries in the Generalized Broken-Bond Approach. In: *Metallurgical and Materials Transactions A* 41 (2010), Nr. 12, S. 3263–3269
- [SK12] SONDEREGGER, B. ; KOZESCHNIK, E.: Particle strengthening in fcc crystals with prolate and oblate precipitates. In: *Scripta Materialia* 66 (2012), Nr. 1, S. 52–55

- [SKBH01] STOCKINGER, M. ; KOZESCHNIK, E. ; BUCHMAYR, B. ; HORVATH, W.: Modelling of delta-phase dissolution during preheating of Inconel 718 turbine disks. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloy 718, 625 & Various Derivatives*. TMS, 2001. – ISBN 9780873395106, S. 141–148
- [SKG01] SIEBÖRGER, D. ; KNAKE, H. ; GLATZEL, U.: Temperature dependence of the elastic moduli of the nickel-base superalloy CMSX-4 and its isolated phases. In: *Materials Science and Engineering A* 298 (2001), Nr. 1, S. 26–33
- [SM98] SAUNDERS, N. ; MIODOWNIK, A.: *CALPHAD (Calculation of Phase Diagrams): A Comprehensive Guide*. 1. Elsevier Science Ltd., 1998. – ISBN 9780080421292
- [SMB88a] SUNDARARAMAN, M. ; MUKHOPADHYAY, P. ; BANERJEE, S.: Deformation behaviour of γ'' strengthened Inconel 718. In: *Acta Metallurgica* 36 (1988), Nr. 4, S. 847–864
- [SMB88b] SUNDARARAMAN, M. ; MUKHOPADHYAY, P. ; BANERJEE, S.: Precipitation of the δ - Ni_3Nb Phase in Two Nickel Base Superalloys. In: *Metal. Transactions A* 19 (1988), Nr. 3, S. 453–465
- [SMB92] SUNDARARAMAN, M. ; MUKHOPADHYAY, P. ; BANERJEE, S.: Some Aspects of the Precipitation of Metastable Intermetallic Phases in Inconel 718. In: *Metallurgical Transactions A* 23 (1992), Nr. 7, S. 2015–2028
- [SMS⁺12] STRONDL, A. ; MILENKOVIC, S. ; SCHNEIDER, A. ; KLEMENT, U. ; FROMMEYER, G.: Effect of Processing on Microstructure and Physical Properties of Three Nickel-Based Superalloys with Different Hardening Mechanisms. In: *Advanced Engineering Materials* 14 (2012), Nr. 7, S. 427–437
- [SMT04] SUZUKI, A. ; MATSUO, T. ; TAKEYAMA, M.: Microstructure control of Ni base alloys with high volume fraction of $D0_{22}$ compound. In: GREEN, K.A. (Hrsg.): *Superalloys 2004: proceedings of the Tenth International Symposium on Superalloys*. TMS, 2004. – ISBN 9780873395762, S. 115–124
- [Som99] SOMMITSCH, C.: *Theorie und Modell der mikrostrukturellen Entwicklung von Nickel-Basis-Legierungen während des Warmwalzens - Die virtuelle Walzstraße*. Graz, Institut für Werkstoffkunde, Schweißtechnik und spanlose Formgebungsverfahren, TU Graz, Diss., 1999
- [SSC97] SLAMA, C. ; SERVANT, C. ; CIZERON, G.: Ageing of the Inconel 718 alloy between 500 and 750 °C. In: *Journal of Materials Research* 12 (1997), Nr. 9, S. 2298–2316

- [SSH87] SIMS, C.T. ; STOLOFF, N.S. ; HAGEL, W.C.: *Superalloys II: High-Temperature Materials for Aerospace and Industrial Power*. 2. John Wiley & Sons Inc, 1987. – ISBN 9780471011477
- [STF05] SVOBODA, J. ; TUREK, I. ; FISCHER, F.D.: Application of the thermodynamic extremal principle to modeling of thermodynamic processes in material sciences. In: *Philosophical Magazine* 85 (2005), Nr. 31, S. 3699–3707
- [Str15] STRÖSSNER, J.: *Mechanische und mikrostrukturelle Charakterisierung der Nickelbasis Superlegierung IN718 - hergestellt mittels selektiven Laserstrahlschmelzen*, Universität Bayreuth, Diss., 2015. – Shaker Verlag GmbH, Aachen, Aufl. 1
- [SZL10] SCHNITZER, R. ; ZINNER, S. ; LEITNER, H.: Modeling of the yield strength of a stainless maraging steel. In: *Scripta Materialia* 62 (2010), Nr. 5, S. 286–289
- [Tay38] TAYLOR, G.I.: Plastic strain in metals. In: *Journal of the Institute of Metals* 62 (1938), S. 307–324
- [TER14] TERRA, UNI: *Atomradien reiner Legierungselemente, UNI TERRA - Kindler & Gleich GbR Germany, Berlin*. http://www.uniterra.de/rutherford/tab_atr2.htm. Version: 2014. – Internetseite für alle IN718 Legierungselemente eingesehen am: 22.05.2014
- [TG83] THOMPSON, R.G. ; GENCULU, S.: Microstructural evolution in the HAZ of Inconel 718 and correlation with the hot ductility test. In: *Welding Journal, Research Supplement* 62 (1983), S. 337–345
- [Thi05] THIES, M.: *Lattice Boltzmann Modeling with free Surface Applied to Formation of Metal Foams*. Erlangen, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Diss., 2005. – urn:nbn:de:bvb:29-opus-2572
- [Tho75] THOMPSON, A.W.: Yielding in nickel as a function of grain or cell size. In: *Acta Metallurgica* 23 (1975), Nr. 11, S. 1337–1342
- [TJRC53] TILLER, W.A. ; JACKSON, K.A. ; RUTTER, J.W. ; CHALMERS, B.: The Redistribution of Solute Atoms During the Solidification of Metals. In: *Acta Metallurgica* 1 (1953), Nr. 4, S. 428 – 437
- [TMS15] TMS, The Minerals Metals & Materials S.: *Modeling Across Scales: A Roadmapping Study for Connecting Materials Models and Simulations Across Length*

- and Time Scales.* TMS, 2015. – 93 S. www.tms.org/multiscalestudy. – ISBN 9780692376065
- [Tur55] TURNBULL, D.: Impurities and Imperfections. In: *Acta Metallurgica* 55 (1955), Nr. 3, S. 121–144
- [VE73] VANDERSCHAEVE, G. ; ESCAIG, B.: A plastic deformation mode for long-period ordered alloys. In: *Physica status solidi a* 20 (1973), Nr. 1, S. 309–319
- [VE78] VANDERSCHAEVE, G. ; ESCAIG, B.: Dissociation of $1/2 <112>$ perfect dislocations and nature of slip dislocations in ordered Ni_3V . In: *J. Physique Lett.* 39 (1978), S. 74–77
- [Vey92] VEYSSIERE, P.: Properties of Surface Defects in Intermetallics. In: LIU, C. T. (Hrsg.): *Ordered Intermetallics — Physical Metallurgy and Mechanical Behaviour*. Springer Netherlands, 1992, S. 165–175
- [Vin85] VINCENT, R.: Precipitation around welds in the nickel-base superalloy, Inconel 718. In: *Acta Metallurgica* 33 (1985), Nr. 7, S. 1205–1216
- [Wag61] WAGNER, C.: Theorie zur Alterung von Niederschlägen durch Umlösen (Ostwald-Reifung). In: *Zeitschrift für Elektrochemie, Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie* 65 (1961), S. 581–591
- [WDLZ07] WANG, L. ; DONG, J. ; LIU, L. ; ZHANG, M.: Microstructure and fractal characteristics of the solid-liquid interface forming during directional solidification of Inconel 718. In: *Directory of Open Access Journals* 4 (2007), Nr. 3, S. 182–185
- [WF94] WLODEK, S.T. ; FIELD, R.D.: The effects of long time exposure on Alloy-718. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloys 718, 625, 706 and Various Derivatives*. TMS, 1994. – ISBN 0873392353, S. 659–670
- [WGZ⁺12] WANG, L. ; GONG, H. ; ZHAO, H. ; DONG, J. ; ZHANG, M.: Phase transformation and liquid density redistribution during solidification of Ni-based superalloy Inconel 718. In: *Research & Development China Foundry* 9 (2012), Nr. 3, S. 263–268
- [WK75] WATANABE, R. ; KUNO, T.: Alloy Design of Nickel-Base Precipitation Hardened Superalloys. In: *Tetsu-to-Hagane* 61 (1975), Nr. 9, S. 2274–2294
- [WKH⁺81] WEN, S.H. ; KOSTLAN, E. ; HONG, M. ; KHACHATURIAN, A.G. ; MORRIS, J.W.: The preferred habit of a tetragonal inclusion in a cubix matrix. In: *Acta Metallurgica* 29 (1981), Nr. 7, S. 1247–1254

- [WS14] WANG, J. ; SEHITOGLU, H.: Dislocation slip and twinning in Ni-based $L1_2$ type alloys. In: *Intermetallics* 52 (2014), S. 20–31
- [WZC⁺08] WU, K. ; ZHANG, F. ; CHEN, S. ; WEISHENG, C. ; CHANG, Y.A.: A Modeling Tool for the Precipitation Simulations of Superalloys during Heat Treatments. In: REED, R.C. (Hrsg.): *Superalloys 2008: proceedings of the Eleventh International Symposium on Superalloys*. TMS, 2008. – ISBN 9780873397285, S. 933–939
- [XCC05] XIAO, L. ; CHEN, D.L. ; CHATURVEDI, M.C.: Shearing of γ'' precipitates and formation of planar slip bands in Inconel 718 during cyclic deformation. In: *Scripta Materialia* 52 (2005), Nr. 7, S. 603–607
- [YCMd97] YANG, L. ; CHANG, K.-M. ; MANNAN, S. ; DEBARBADILLO, J.: A new DTA approach for verifying precipitate solvus in Inconel alloy 718. In: LORIA, E.A. (Hrsg.): *Superalloys 718, 625, 706 and various derivatives*. TMS, 1997. – ISBN 9780873393768, S. 353–365
- [YZL08] YAN, B.C. ; ZHANG, J. ; LOU, L.H.: Effect of boron additions on the microstructure and transverse properties of a directionally solidified superalloy. In: *Materials Science and Engineering: A* 474 (2008), Nr. 1, S. 39–47
- [ZLZ⁺14] ZHOU, N. ; Lv, D.C. ; ZHANG, H.L. ; MCALLISTER, D. ; ZHANG, F. ; MILLS, M.J. ; WANG, Y.: Computer simulation of phase transformation and plastic deformation in IN718 superalloy: Microstructural evolution during precipitation. In: *Acta Materialia* 65 (2014), S. 270–286
- [ZRS⁺10] ZICKLER, G.A. ; RADIS, R. ; SCHNITZER, R. ; KOZESCHNIK, E. ; STOCKINGER, M. ; LEITNER, H.: The Precipitation Behavior of Superalloy ATI Allvac 718Plus. In: *Advanced Engineering Materials* 12 (2010), Nr. 3, S. 176–183

A. Vorarbeiten zum SLM-Prozess

A.1 Datenfluss der Schmelzpoolsimulation

Die Abbildung A.1 listet die notwendigen Eingabeparameter, intern berechneten Größen und Ausgabeparameter der 2D-Strahlschmelzsimulation auf.

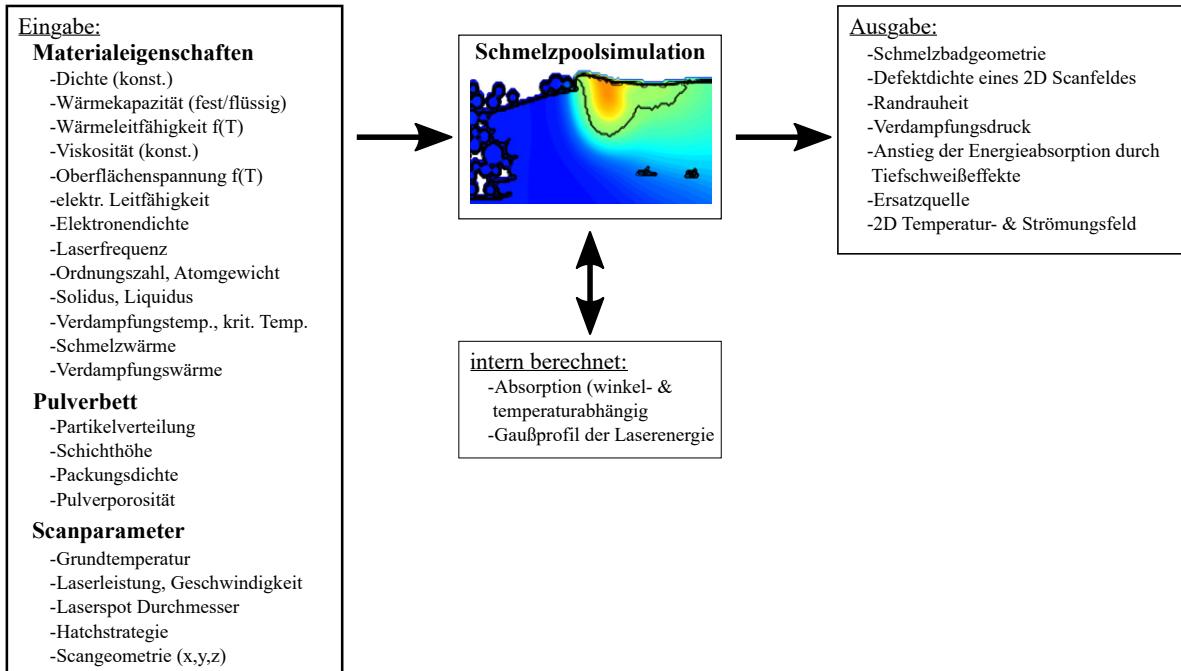


Abbildung A.1: Datenfluss in der Schmelzpoolsimulation mit Eingabedaten und intern berechneten Größen sowie Berechnungsergebnissen

A.2 Ansatz der Absorptionsberechnung

Der Absorptionskoeffizient wird für jede Oberflächenzelle unter dem Laserstrahl über das Snelliussche Brechungsgesetz in Abhängigkeit von der Oberflächenkrümmung und Oberflächentemperatur berechnet. Für die Berechnung müssen die Leitungselektronendichte, die Wellenlänge der Laserstrahlung und der temperaturabhängige spezifische elektrische Widerstand bekannt sein. Mit diesen Größen können die Plasma-, die Elektronenstoß- und die Laserfrequenz ermittelt werden. Mit diesen Parametern werden der Real- und der Imaginärteil der Dielektrizitätszahl berechnet. Hiermit lassen sich der Real- und Imaginärteil des Brechungsindex bestimmen, woraus sich die Absorptionskoeffizienten von senkrecht und parallel polarisiertem Licht ergeben. Unter Verwendung der Fresnel'schen Formel kann der Absorptionskoeffizient abhängig von Einfallswinkel und Temperatur für die Metalloberfläche berechnet werden. Für den verwendeten

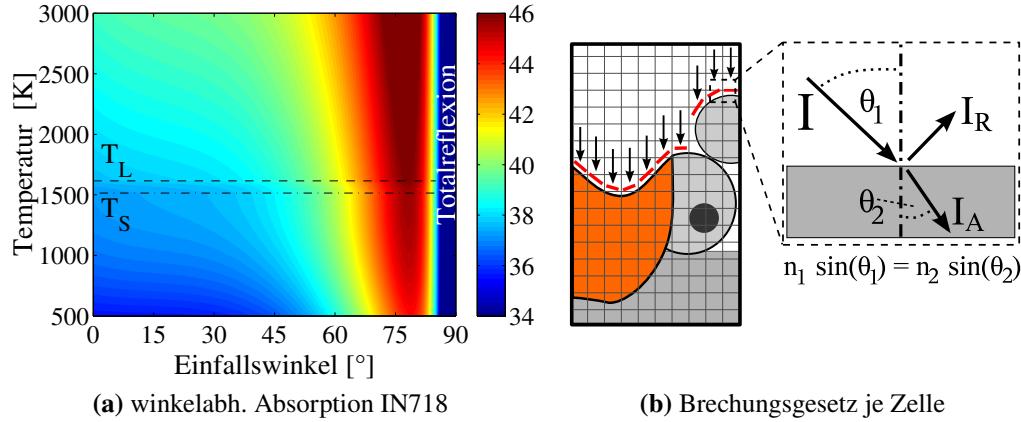


Abbildung A.2: (a) winkel- und temperaturabh. berechnete Energieabsorption IN718 und (b) schematische Darstellung der Implementierung in der Schmelzpoolsimulation

zirkular polarisierten Laser wird die Absorption aus der geometrischen Summe aus dem senkrecht und parallel polarisierten Anteil berechnet. Die Formeln sind in Referenz [MIGFB⁺13] beschrieben. Das Ergebnis für IN718 ist in Abbildung A.2 dargestellt.

A.3 Variationsstudie der SLM- Parameter

In der ersten Parameterstudie des SLM-Prozesses wird die Leistung in vier Stufen zwischen 145 W und 295 W und die Scangeschwindigkeit in drei Stufen zwischen 0,8 m/s und 1,6 m/s variiert. Der Spurabstand ist mit 90 μm und die Schichthöhe mit 40 μm konstant. Die Defektdichte wird in Querschliffen aufgebauter Würfel an drei Stellen ermittelt (ROI mit 1 mm^2 Fläche). Die Auswertung erfolgt für die Messung und Simulation anhand der Interaktions- und der Hauptinteraktionsdiagramme in Abbildung A.3. Die Auswertung erfolgt in Minitab. Im Experiment zeigt sich bei 195 W ein instabiler Übergang zwischen porösem und dichtem Material sowie eine nichtlineare Abhängigkeit der Defektdichte von Leistung und Scangeschwindigkeit. Die Defektdichte ist dabei für 245 W und 295 W sehr gering. In der Simulation wird die erwartete Nichtlinearität für Leistung und Scangeschwindigkeit gut abgebildet. Es zeigt sich aber im Gegensatz zum Experiment ein kontinuierlicher Übergang bei 195 W. Die mittlere Defektdichte ist in der Simulation im Vergleich zum Experiment niedriger.

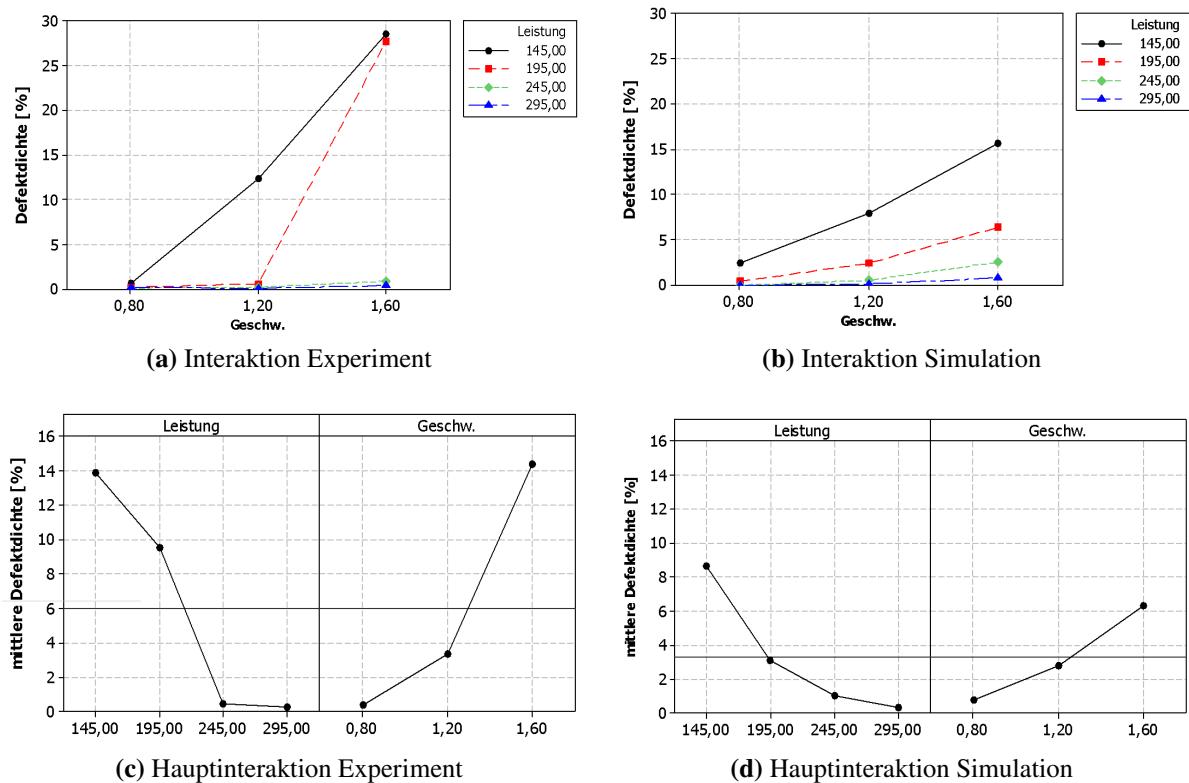
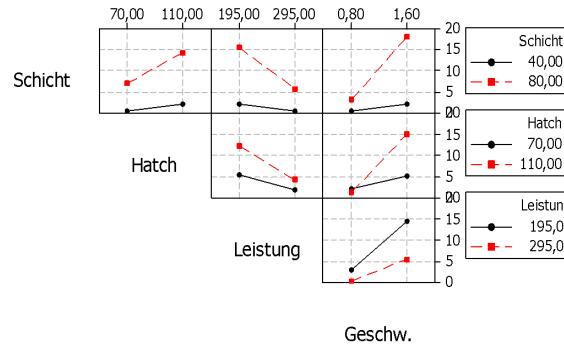


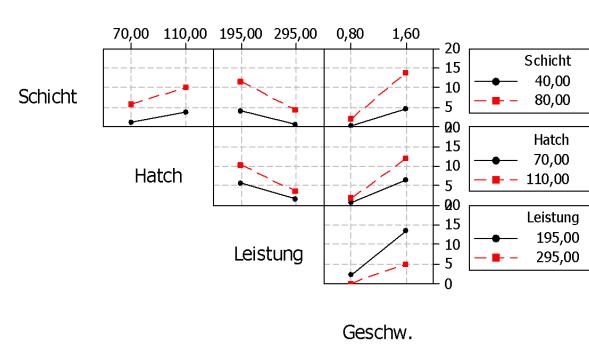
Abbildung A.3: Defektdichte SLM- Material Parameterstudie 1

In der zweiten Parameterstudie werden die Parameter der Laserprozesszone in einem zweistufigen voll faktoriellen statistischen Versuchsplan untersucht. Die Leistung beträgt 195 W und 295 W, die Scangeschwindigkeit 0,8 m/s und 1,6 m/s, der Hatchabstand 70 μm und 110 μm und die Pulverschichthöhe 40 μm und 80 μm . Die Defektdichte wird in Querschliffen aufgebauter Würfel an drei Stellen ermittelt (ROI mit 1 mm^2 Fläche). Die Auswertung für die Messung und Simulation ist in den Interaktions- und Hauptinteraktionsdiagrammen in Abbildung A.4 dargestellt. Die Auswertung erfolgt in Minitab. Aufgrund des Designs des Versuchsplanes kann nur eine lineare Abhängigkeit für alle vier Parameter dargestellt werden. Es wird gezeigt, dass alle vier Größen einen deutlichen Einfluss auf die Defektdichte haben. Der Hatchabstand hat von allen den geringsten Effekt. Alle Abhängigkeiten werden von der Simulation gut erfasst. Vereinzelt sind die berechnete Defektdichte und der Anstieg in den Interaktionsdiagrammen geringfügig niedriger als im Experiment.

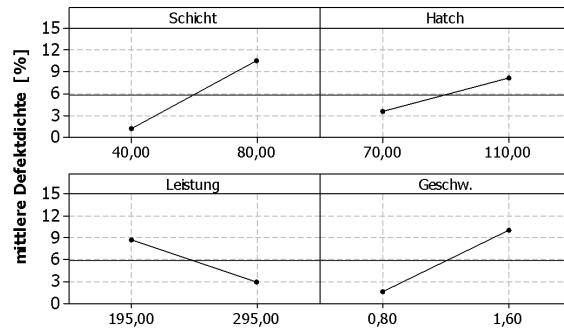
Eine Zielwertsuche nach minimaler Defektdichte für jegliche Parameterkombinationen liefert mit den experimentellen und simulierten Daten ein vergleichbares Ergebnis. Das experimentell ermittelte sichere Prozessfenster kann folglich auch mit der entwickelten Simulation ermittelt werden.



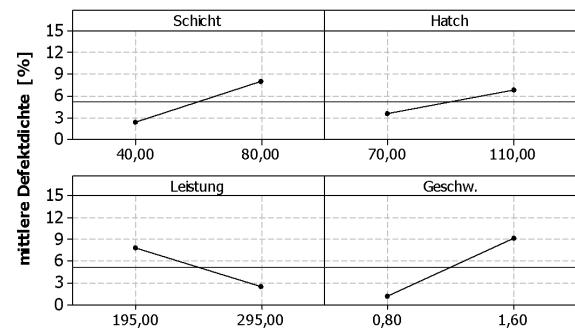
(a) Interaktion Experiment



(b) Interaktion Simulation



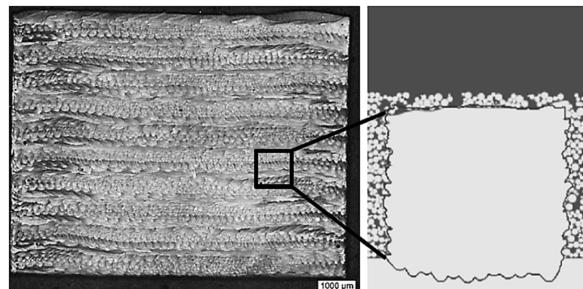
(c) Hauptinteraktion Experiment



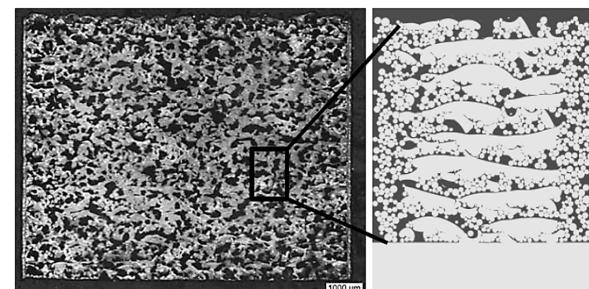
(d) Hauptinteraktion Simulation

Abbildung A.4: Defektdichte SLM- Material Parameterstudie 2 mit zweistufigen voll faktoriellem statistischen Versuchsplan

Abbildung A.5 zeigt den Vergleich zwischen einem Längsschliff eines aufgebauten Würfels und einem simulierten Ausschnitt für einen dichten und einen porösen Parametersatz.



(a) dichter Parametersatz

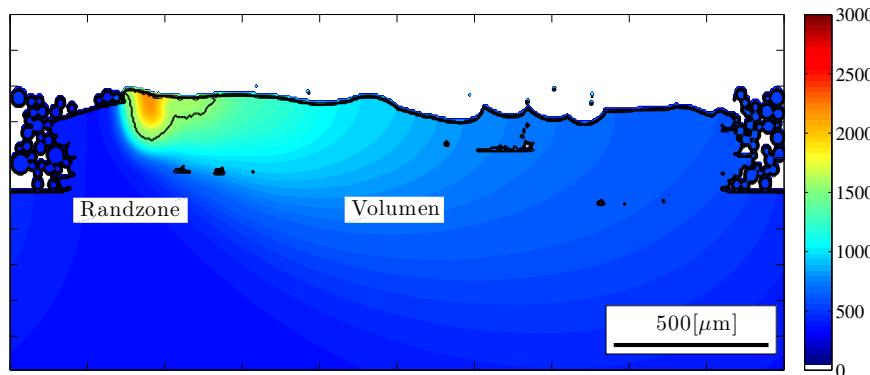


(b) poröser Parametersatz

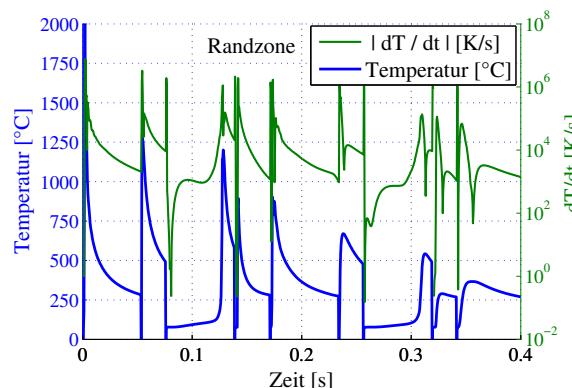
Abbildung A.5: Vergleich zw. einem (a) dichten und (b) porösem Parametersatz aus Experiment und Simulation

A.4 Berechnetes Temperaturfeld des SLM- Prozesses

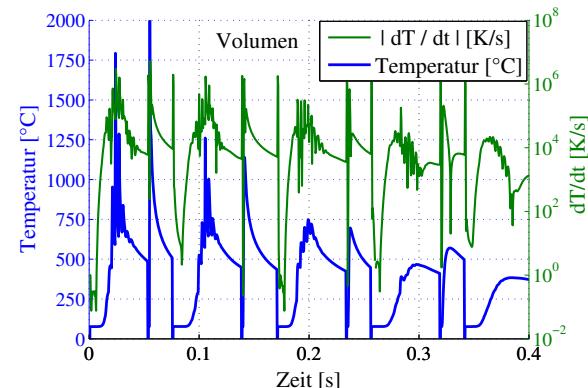
Das Temperaturprofil wird für eine vereinfachte und etwas verkleinerte zylindrische Geometrie berechnet. In der Simulation dreht die Scanrichtung je Schicht um 90° , sodass die Berechnung einmal quer und einmal längs zur Simulationsebene erfolgt. Der Scanprozess startet am linken Rand. Der Startpunkt alterniert aller zwei Schichten zwischen rechts und links. Das Temperaturfeld wird während des Beschichtungsvorganges wieder auf Vorheiztemperatur gesetzt. Das Ergebnis nach neun Schichten ist in Abbildung A.6a für die zylindrische Geometrie veranschaulicht. Für einen Messpunkt in der Randzone und einem im Volumen sind der Temperaturverlauf und die Abkühlgeschwindigkeit in den Diagrammen A.6b und A.6c dargestellt. In der zylindrischen Geometrie sind die Scanvektoren und folglich die Widerkehrzeiten in der Randzone gegenüber dem Volumen deutlich kürzer. Hierdurch ist die Restwärme des Materials höher und es entsteht ein asymmetrisches Schmelzbad in Richtung der vorherigen Spur.



(a) berechnetes Temperaturfeld (2D)



(b) Temperaturmesspunkt Randzone



(c) Temperaturmesspunkt Volumen

Abbildung A.6: Berechnetes Temperaturfeld des SLM-Schichtaufbaus mit zylindrischer Geometrie, aufgrund kürzerer Scanvektoren in der Randzone ist die Materialrestwärme höher, das Schmelzbad größer und asymmetrisch mit entsprechender Auswirkung auf den Temperaturverlauf

B. Charakterisierung des Probenmaterials

B.1 Metallografische Auswertung

B.1.1 Probenmaterial IN718-Matrix-SX

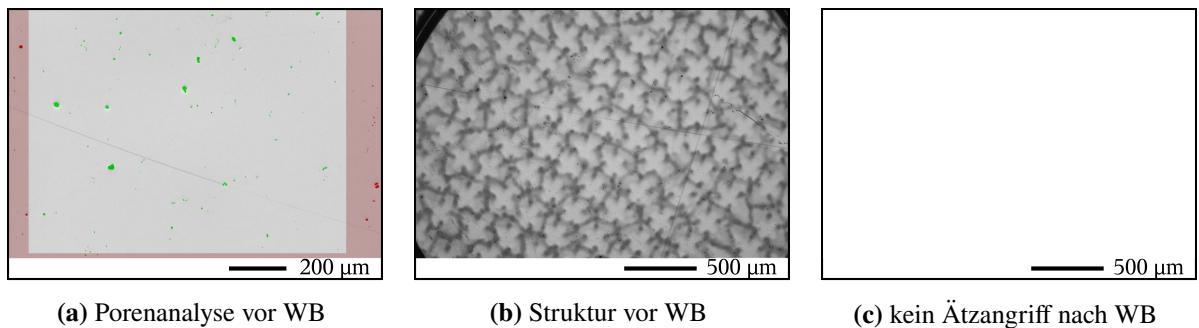


Abbildung B.1: Probenmaterial IN718-Matrix-SX vor und nach der Wärmebehandlung (WB): (a) Porosität $\leq 0,5 \%$, (b) Dendritenstruktur vor der Wärmebehandlung, (c) Materialstruktur nach der Wärmebehandlung

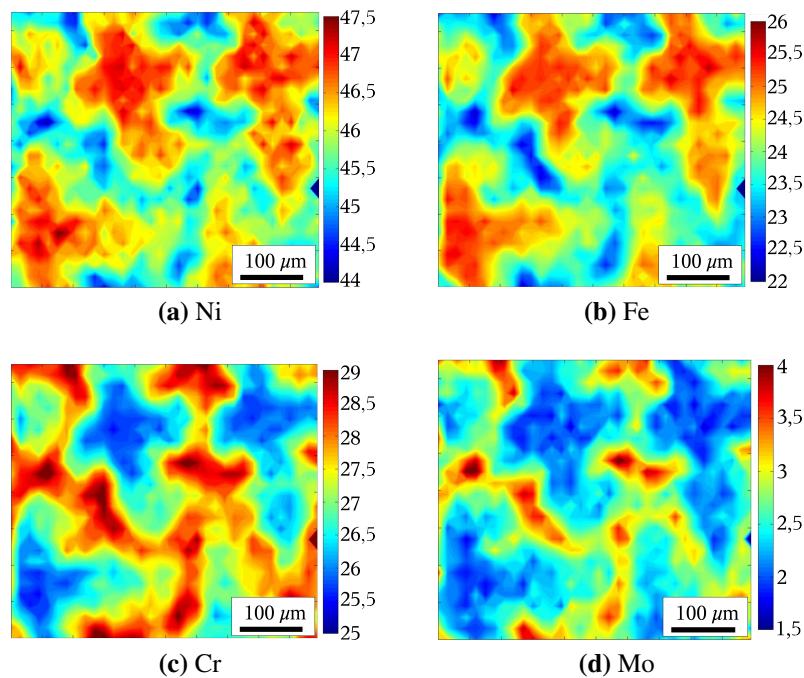


Abbildung B.2: EDX-Analysen von IN718-Matrix-SX im REM für die vier Legierungselemente vor der Diffusionsglühung, Angabe in wt%

B.1.2 Probenmaterial IN718-SX

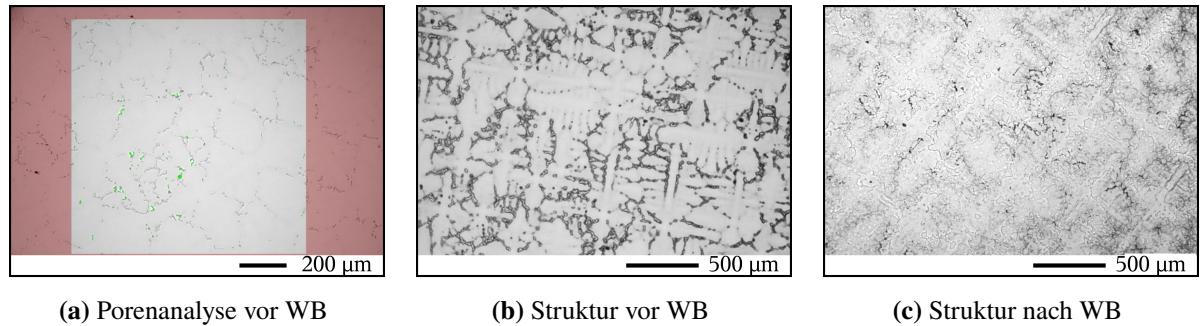


Abbildung B.3: Probenmaterial IN718-SX vor und nach der Wärmebehandlung (WB): (a) Porosität $\leq 0,5\%$, (b) Erstarrungsstruktur vor der Diffusionsglühung, (c) Materialstruktur nach der Diffusionsglühung

B.1.3 Probenmaterial IN718-SLM

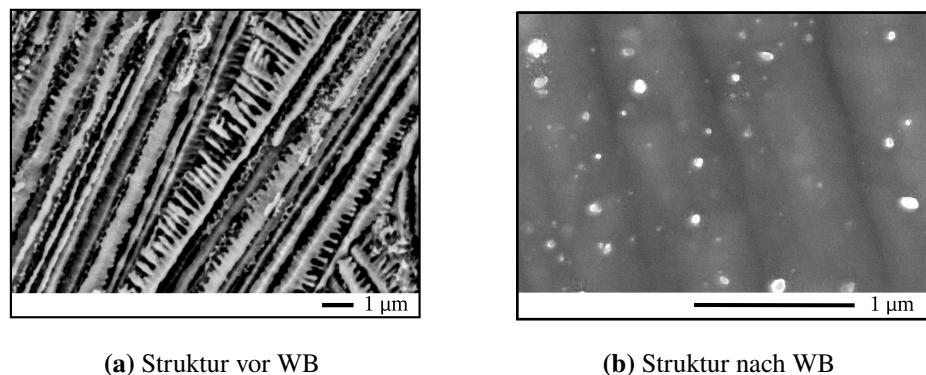


Abbildung B.4: Probenmaterial IN718-SLM vor und nach der Wärmebehandlung bei 950 °C für 0,5 h (WB): (a) Erstarrungsstruktur vor der Spannungsarmglühung, (b) Materialstruktur nach der Spannungsarmglühung

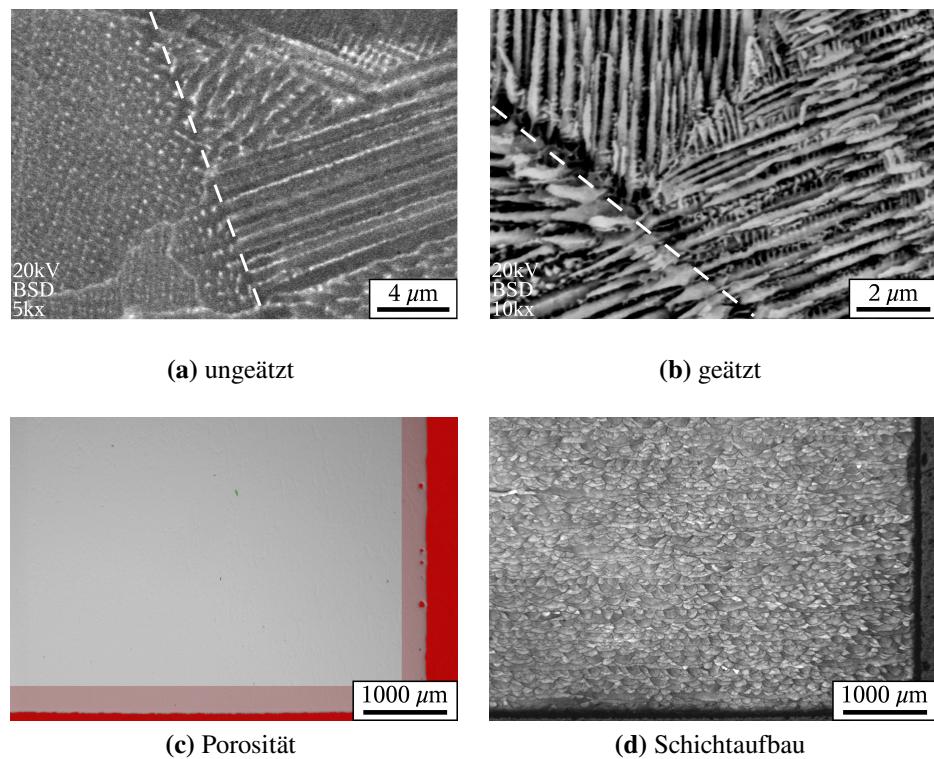


Abbildung B.5: Probenmaterial IN718-SLM im Zustand “wie gebaut“ (ohne Wärmebehandlung, am Beispiel des Fertigungsparameters P2, P1 ist vergleichbar): (a) ungeätzte Dendritenstruktur (weißer interdendritischer Bereich = Eutektikum/Laves- Phase) und (b) geätzte Dendritenstruktur mit markierter Schmelzbadkontur, (c) Porositätsanalyse und (d) Schmelzkonturlinien des Schichtaufbaus im elektrolytisch geätzten Zustand

B.2 Analyse des Ausscheidungszustandes

Die Dokumentation des Ausscheidungszustandes erfolgt im Feldemissions-Raster-Elektronen-Mikroskop (FEREM) zur Kontrolle der Auslagerungsversuche und qualitativen Modellvalidierung. Hierfür sind die Proben leitend eingebettet, mehrstufig nass geschliffen und poliert. Die Tauchätzung erfolgt bei Raumtemperatur in der IN718-Ätzlösung (75 ml Ethanol (96 %ig), 25 ml Salzsäure (32 %ig), 2,5 ml Wasserstoffperoxid). Für das Material IN718-SX werden drei Auslagerungszustände (725 °C für 2 h, 8 h, 32 h) dokumentiert. Für das Material IN718-SLM werden die Zustände nach der Homogenisierung (1040 °C, 0,5 h), nach der Kurzzeitauslagerung (725 °C, 0,35 h) und nach der Langzeitauslagerung (725 °C, 23,5 h) untersucht. Der gesamte Ausscheidungsphasenanteil und der maximale Partikeldurchmesser der elliptischen Partikel werden rein quantitativ für alle Proben ermittelt. Die Partikelgröße wird an mehreren Stellen im Schliff an mindestens 30 Partikeln je Auslagerungsstufe ausgewertet. Ein Beispiel der automatischen Identifikation von Phasenanteil und maximalem Partikeldurchmesser sowie der manuellen Teilchengrößenvermessung sind in Abbildung B.6 dargestellt. Die Vermessung der γ'' -Höhe und der γ' -Durchmesser sowie eine exakte Phasenidentifikation sind auflösungs- bzw. methodenbedingt nicht möglich. Der gesamte Phasenanteil und der γ'' -Durchmesser stellen aufgrund von Ätzeffekten und der räumlichen Ausrichtung der Phasen nur eine Näherung dar. Für umfassend verlässliche Daten sind eine genaue kristallografische Schliffausrichtung, eine teilweise höhere Auflösung und eine exakte Phasenidentifikation notwendig, welche im Rahmen dieser Arbeit nicht möglich waren. Aus diesem Grund sind die ermittelten Daten im Kontext mit Literaturdaten zu analysieren und zu diskutieren. Die Probenpräparation wurde von der Fachabteilung der MTU Aero Engines AG durchgeführt. Die FEREM Bilder wurden am Institut für Werkstoffkunde und Werkstoffmechanik der TU München und der Siemens AG erstellt. Die Datenauswertung und Analyse erfolgte eigenständig.

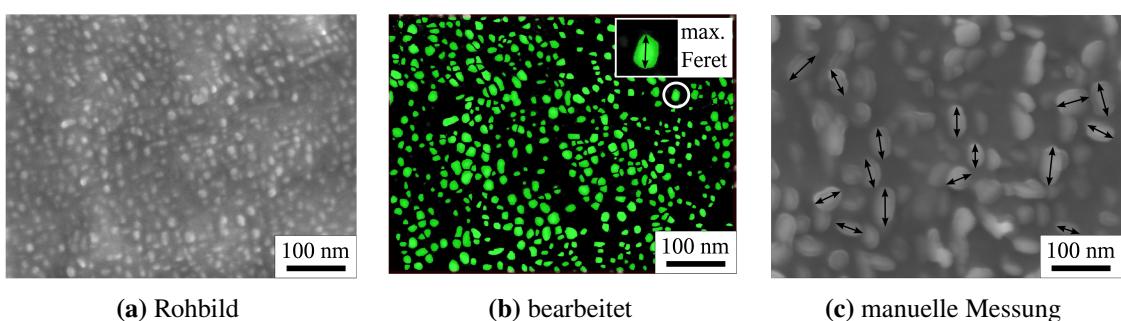


Abbildung B.6: Ausscheidungsanalyse der FEREM- Bilder, (a) Rohbild und (b) bearbeitetes Bild der automatischen Partikelanalyse mit Kennzeichnung max. Feret für WB-SX-1, (c) manuelle Partikelvermessung für WB-SX-3

B.3 Messung der Temperatur und Abkühlraten

Die Diffusions- (IN718-Matrix-SX, IN718-SX) und Spannungsarmglühungen (IN718-SLM) werden in einem Vakuumofen durchgeführt. Die Homogenisierungsglühung und Auslagerung für IN718-SX und IN718-SLM erfolgen in einem Luftumwälzofen. Die Regelgenauigkeit des Vakuumofens beträgt nach Kalibrierprotokoll ± 8 K, die des Luftumwälzofens ± 15 K. Die Wasserabschreckung nach der Homogenisierung (IN718-SX, IN718-SLM) wird in einem 75 l Behälter bei einer Wassertemperatur von 20 °C durchgeführt. Die Aufheiz- und Abkühlraten der Temperaturzyklen werden mit einem NiCr-Ni- Mantel-Thermoelement Typ K gemessen. Für die Spannungsarmglühung des SLM- Materials wird das Thermoelement an der Unterseite der Bodenplatte befestigt. Alle Wärmebehandlungen wurden von der Fachabteilung der MTU Aero Engines AG durchgeführt.

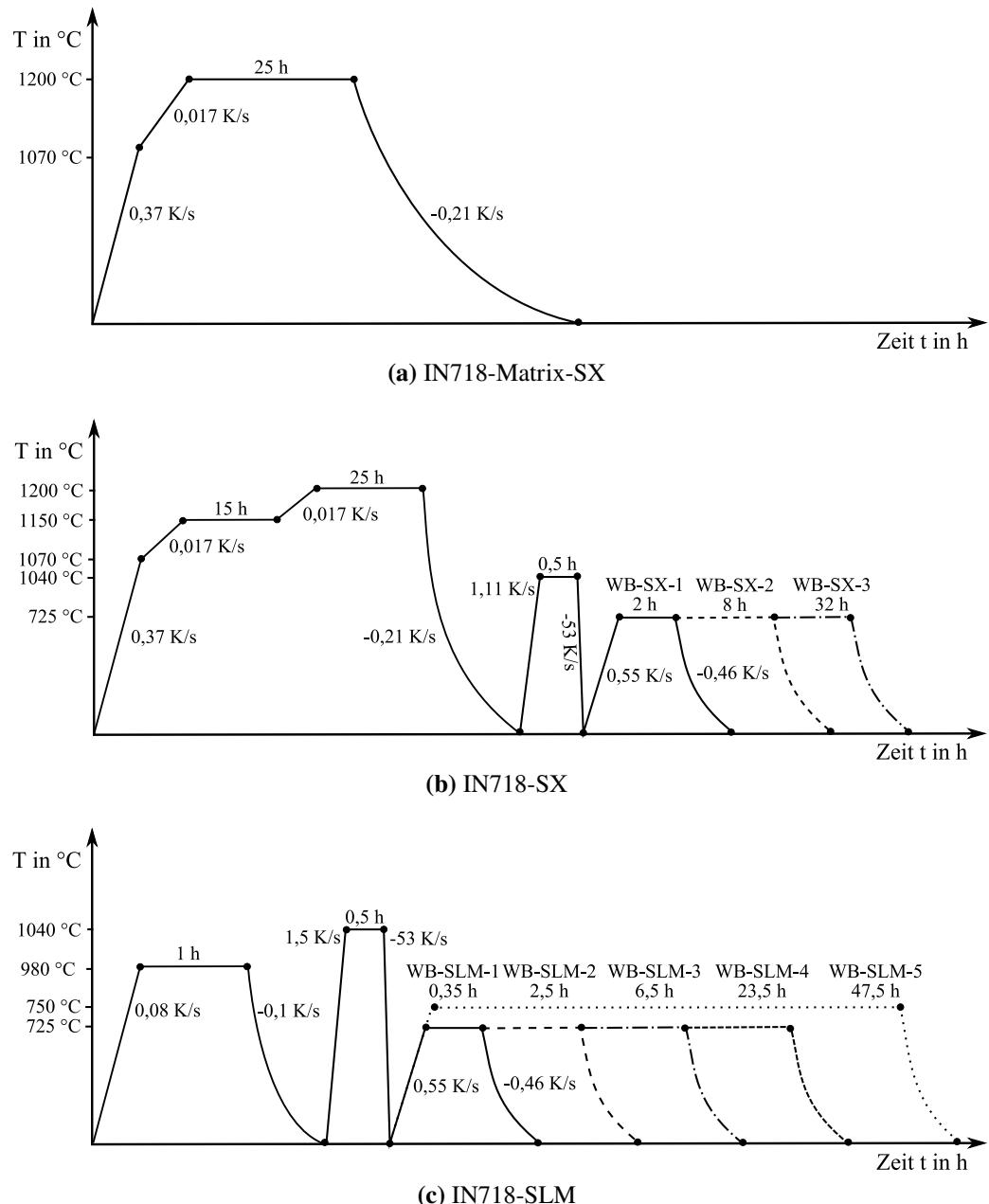


Abbildung B.7: Schema der durchgeföhrten Wärmebehandlungszyklen für (a) IN718-Matrix-SX, (b) IN718-SX und (c) IN718-SLM mit angegebener Haltezeit und Temperatur sowie mittleren gemessenen Aufheiz- bzw. Abkühlraten

B.4 Verformung IN718-SX-Zugprobe

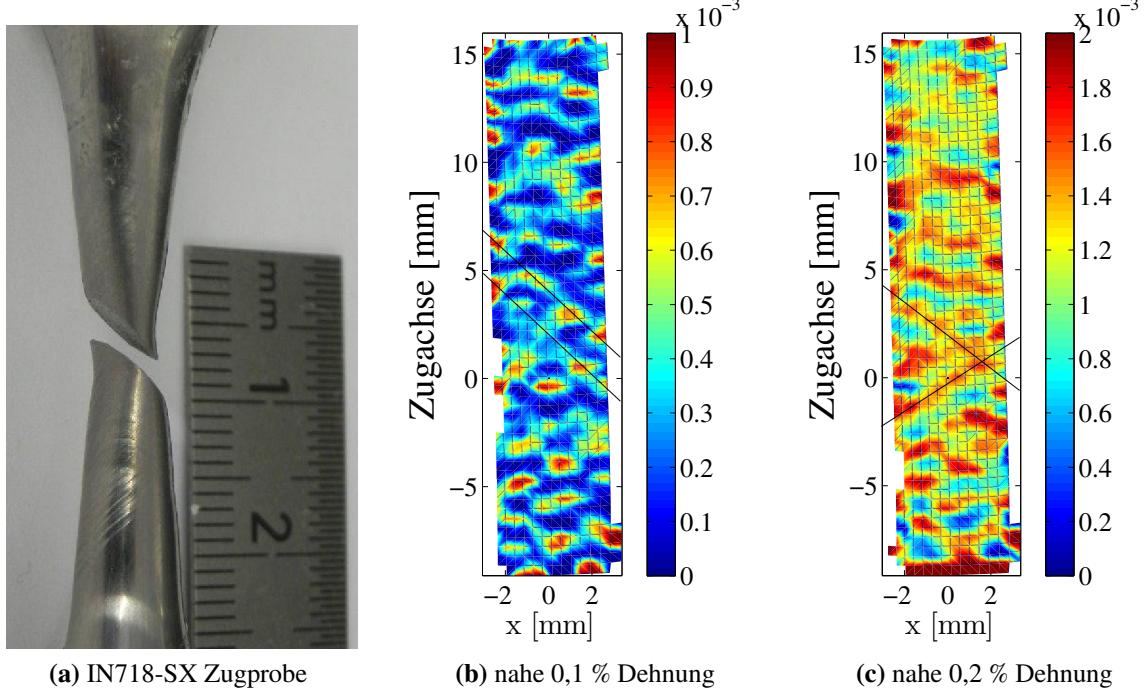


Abbildung B.8: Zugversuchsanalyse IN718-SX: (a) auf Gleitebene versagte Zugprobe mit Gleitlinien auf der Oberfläche, mittels ARAMIS- Technik aufgenommene Oberflächendehnung für Zeitpunkt (b) kurz vor 0,1 % Dehnung und (c) kurz vor 0,2 % Dehnung, Proben zeigen Verformung auf Gleitbändern (exemplarisch mit Linien markiert)

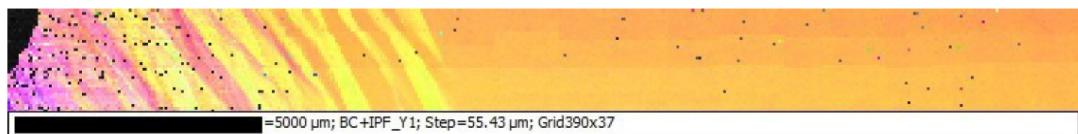


Abbildung B.9: EBSD- Aufnahme an einem Längsschliff einer IN718-SX Zugprobe, im Gewindegange ist das Material unverformt, in Richtung Bruchstelle nimmt die Verformung bzw. Abgleitung kontinuierlich zu (Einfärbung nach inverser Polfigur in Zugrichtung)

B.5 Vorgehen bei der Orientierungs- und Texturanalyse

Für das einkristalline Material (IN718-Matrix-SX, IN718-SX) wird eine Fehlkornanalyse durch Sichtprüfung der chemische geätzten Oberfläche durchgeführt. Fehlkornbehaftete Probenstäbe werden aussortiert bzw. die Proben aus fehlkornfreien Bereichen gefertigt. Die kristallografische Orientierung des IN718-Matrix-SX und IN718-SX Materials wird im Gewindegang der Probe über EBSD- Punktmessungen bestimmt. Die kristallografische und morphologische Textur des IN718-SLM Materials wird anhand von EBSD- Flächenaufnahmen mit einer Rasterschrittweite von $1 \mu\text{m}$ an Schliffen längs und quer zur Aufbaurichtung ermittelt. Für die EBSD- Messungen werden die Proben leitend eingebettet, mehrstufig nass geschliffen und anschließend poliert. Die Rekonstruktion der EBSD- Rohdaten erfolgt mit einem selbst entwickelten Code für die Matlab[®] Toolbox MTEX[®] (Version 3.5.0). Für die Kornstrukturauswertung wird ein Grenzwinkel von 10° als Korngrenzwinkel definiert, welcher aus einer Grenzwinkelanalyse zwischen 2° und 20° abgeleitet wird (vgl. Abb. B.11 und B.12). Ab 10° werden keine signifikanten Veränderungen der Kornstruktur festgestellt. Aus den Orientierungsdaten werden ein mittlerer Schmidt faktor bzw. Texturfaktor und ein mittlerer E-Modul der jeweiligen Probe abgeleitet (siehe Kap. 4.4). Die dafür entwickelten Auswerteroutinen in Matlab[®] sind Erweiterungen von existierenden MTU Aero Engines AG internen Routinen nach [FKA⁺14]. Die Analyseergebnisse sind in Kapitel 5.3.3 und 5.3.4 zusammengefasst. Probenpräparation und Rohdatenermittlung wurden von der Fachabteilung der MTU Aero Engines AG durchgeführt. Die Datenaufbereitung und deren Interpretation erfolgte eigenständig.

B.6 Orientierungsanalyse des SX-Materials

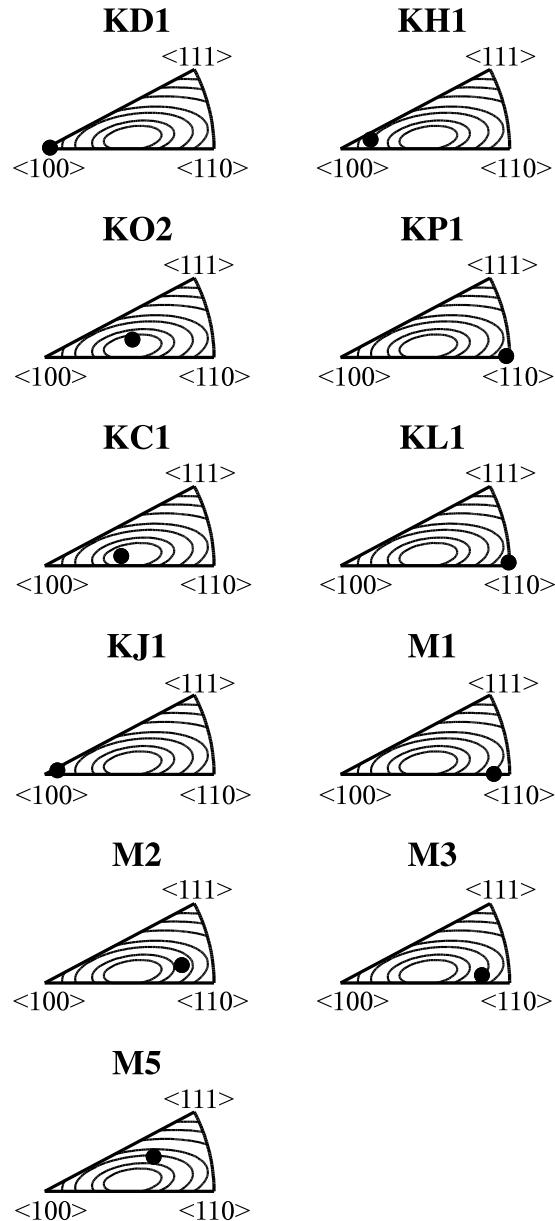


Abbildung B.10: Orientierung der einzelnen SX-Probenstäbe im Standarddreieck, IN718-SX für KD1 bis KJ1 und IN718-Matrix-SX für M1 bis M5, Konturlinien entsprechen den m_s Niveaulinien, Zugversuchsdaten in Tabelle C.20 und C.21, Zugkurven in Abbildung C.3

B.7 Kornstruktur des SLM-Materials

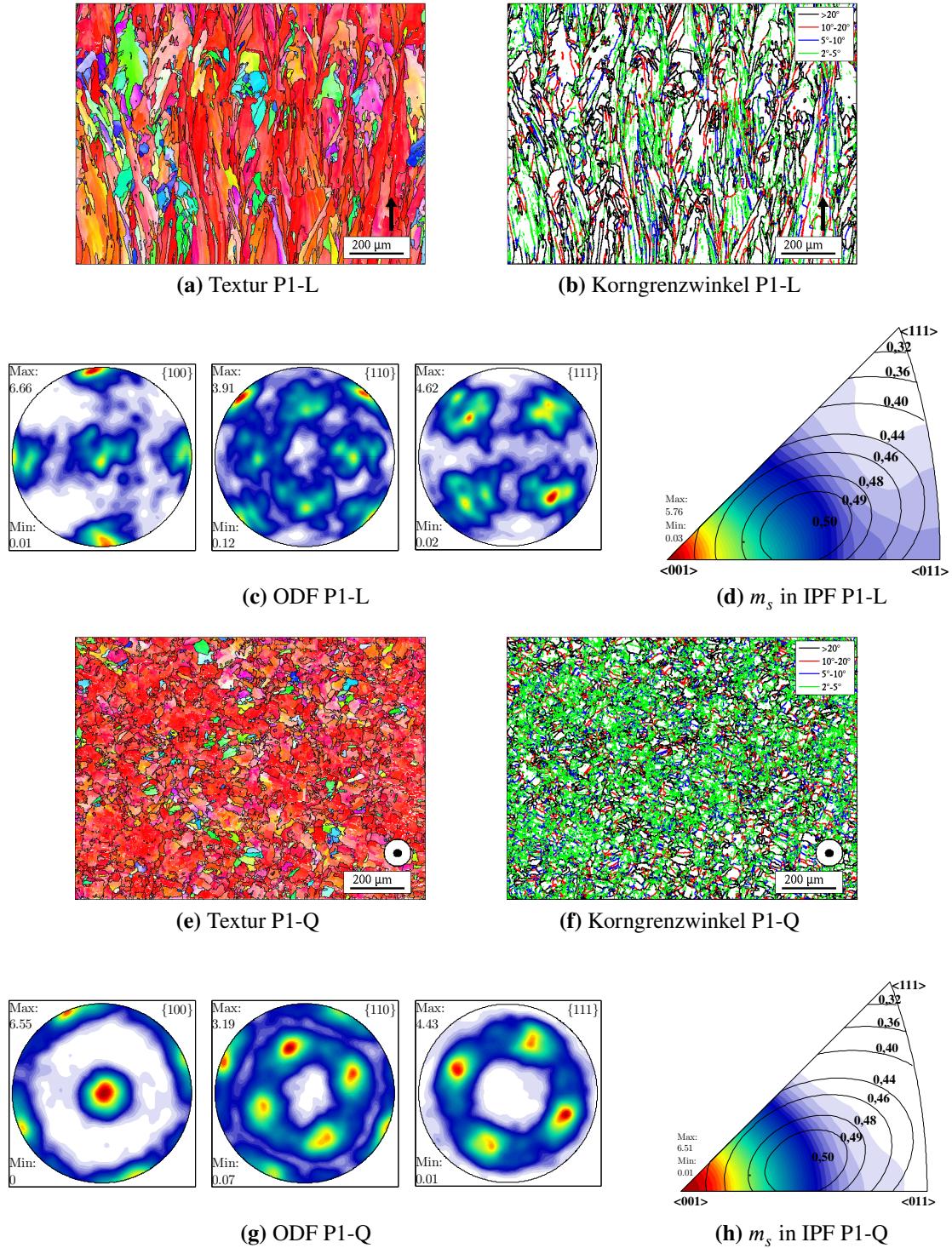


Abbildung B.11: Texturanalyse des SLM- Materials mit Fertigungsparameter P1 im Längs- (-L) und Querschliff (-Q) nach der Wärmebehandlung

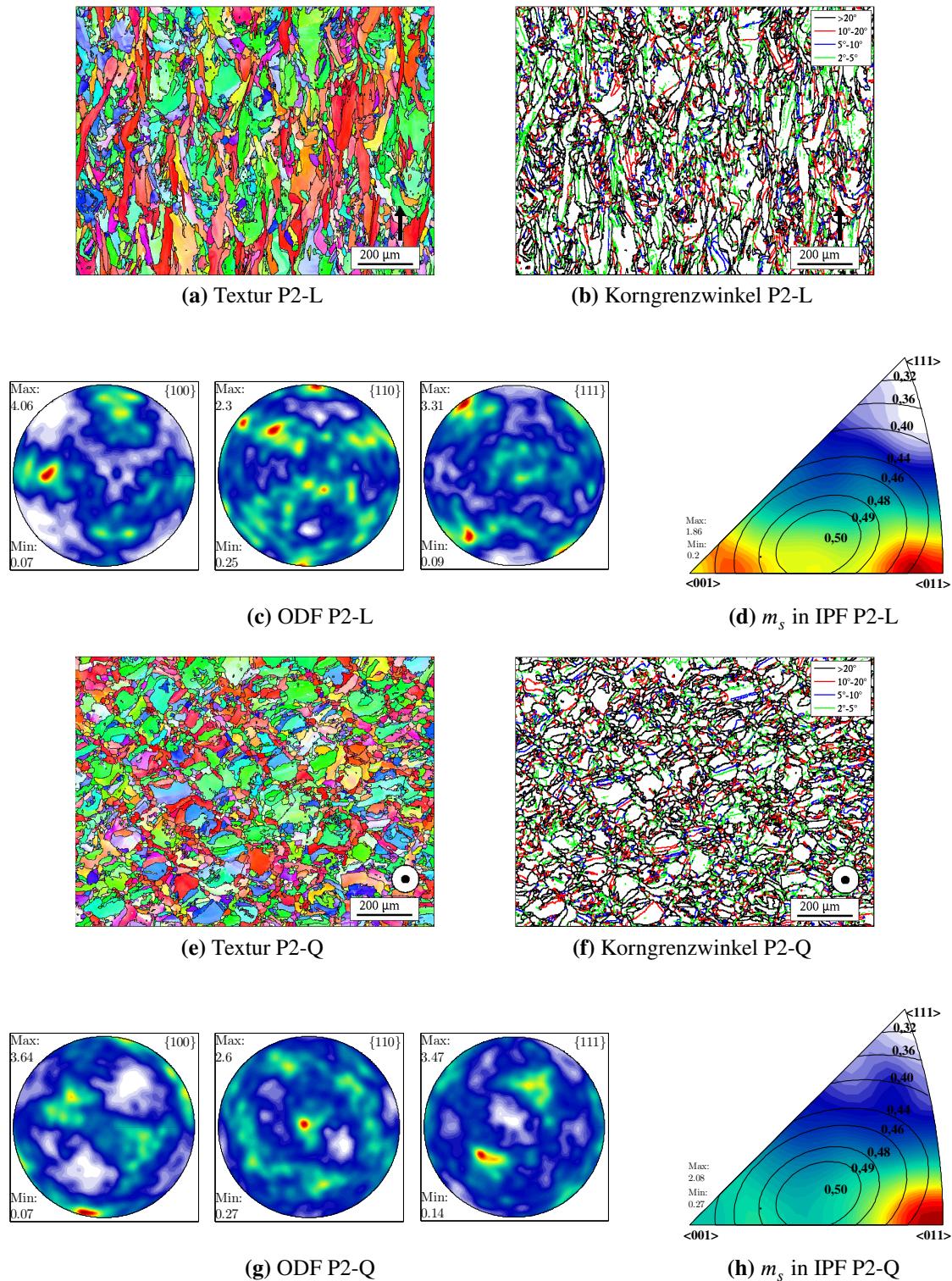


Abbildung B.12: Texturanalyse des SLM- Materials mit Fertigungsparameter P2 im Längs- (-L) und Querschliff (-Q) nach der Wärmebehandlung

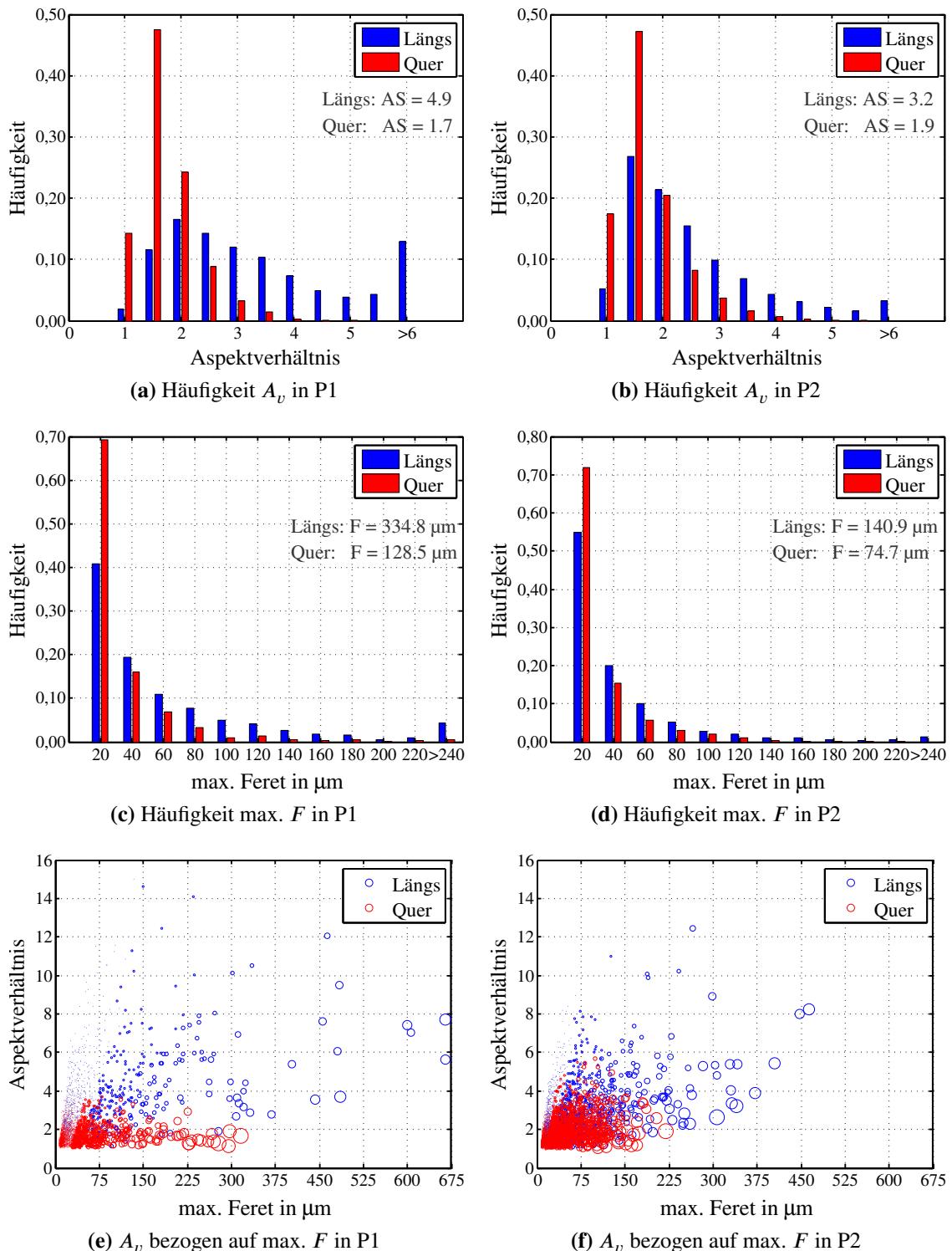


Abbildung B.13: Kornmorphologievergleich hinsichtlich Aspektverhältnis (A_v) und maximalem Feret (max. F) für das SLM- Material P1 und P2 im Quer- und Längsschliff nach der Wärmebehandlung, Symbolgröße der Streudiagramme korreliert mit Kornfläche

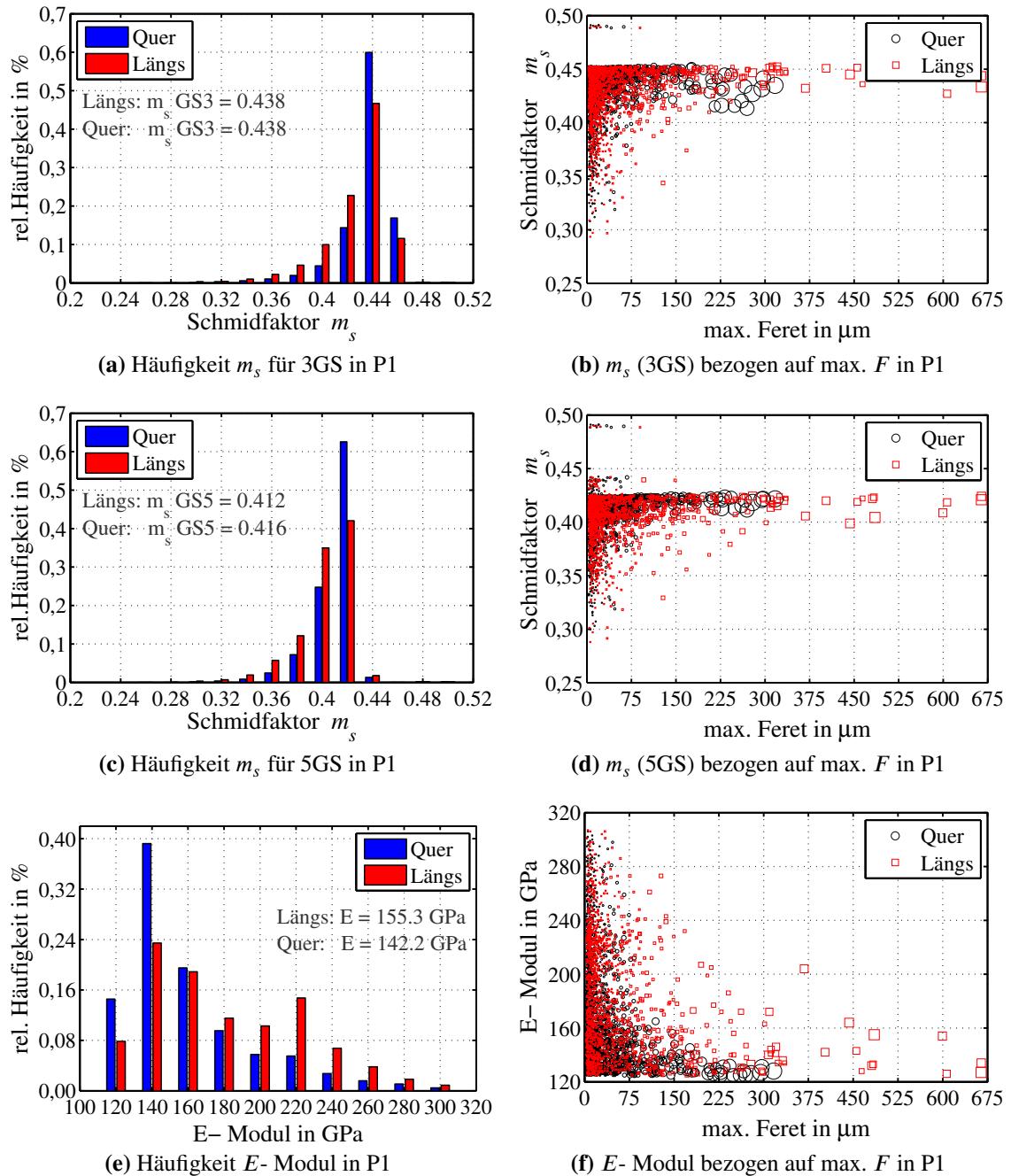


Abbildung B.14: Vergleich für m_s bei 3 und 5 aktiven Gleitsystemen und dem abgeleiteten E -Modul des SLM- Materials P1 im Quer- und Längsschliff nach der Wärmebehandlung, Symbolgröße der Streudiagramme korreliert mit Kornfläche

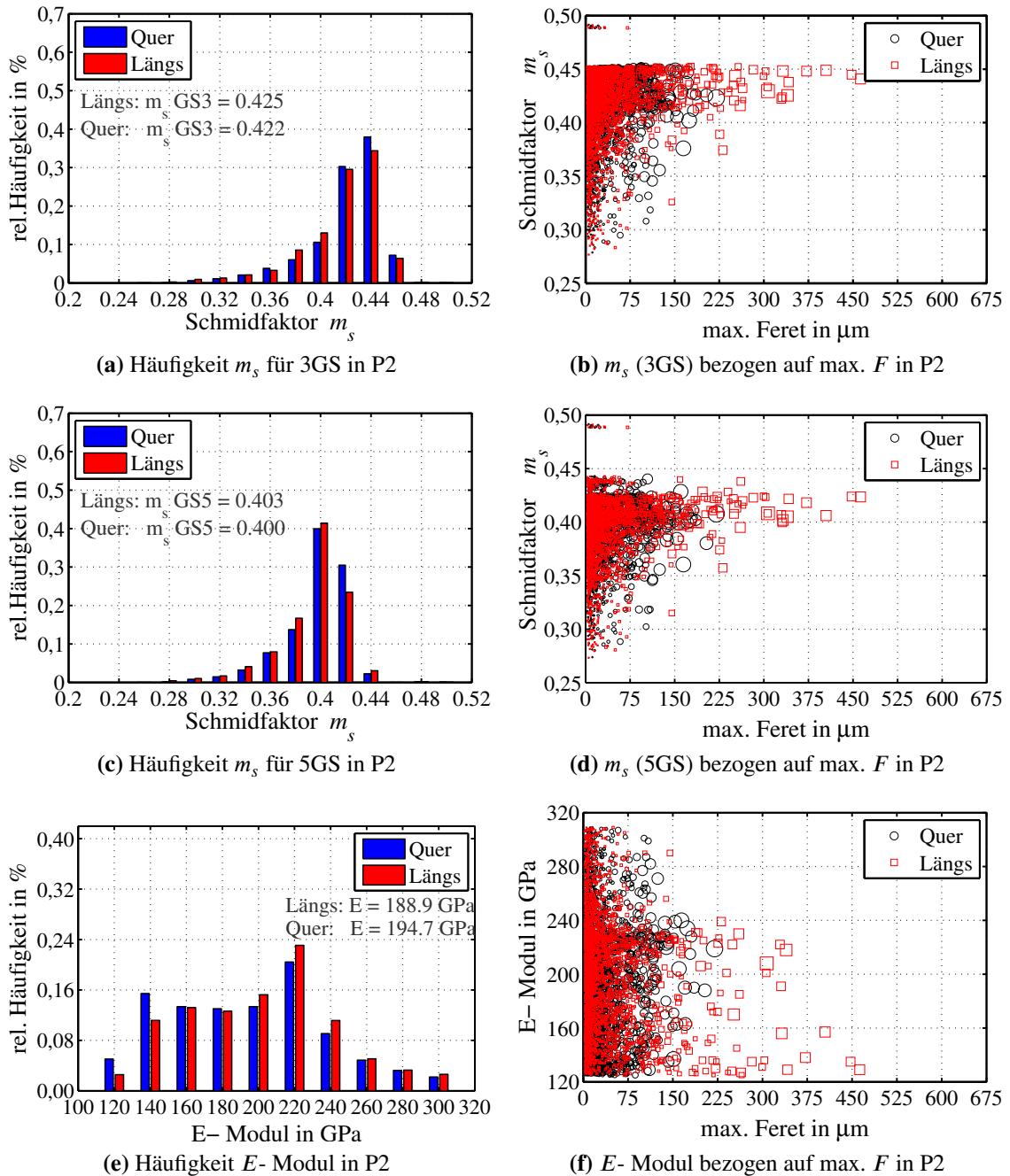


Abbildung B.15: Vergleich für m_s bei 3 und 5 aktiven Gleitsystemen und dem abgeleiteten E -Modul des SLM- Materials P2 im Quer- und Längsschliff nach Wärmebehandlung, Symbolgröße der Streudiagramme korreliert mit Korngröße

C. Rohdaten zur Modellvalidierung

C.1 E-Modul, Atomradius und molare Masse der Elemente

Tabelle C.1: E-Modul, Atomradius und molare Masse der reinen Elemente in IN718

	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	Quelle
E-Modul in GPa	214	196	289	104	350	116	70	[Pla16, FK13]
Atomradius in pm	124,6	124,1	124,9	142,9	136,2	144,8	143,1	[TER14]
molare Masse in g/mol	58,7	55,9	52,0	92,9	95,9	47,9	27,0	[Hop15]

C.2 Literaturdaten elastischer Konstanten IN718

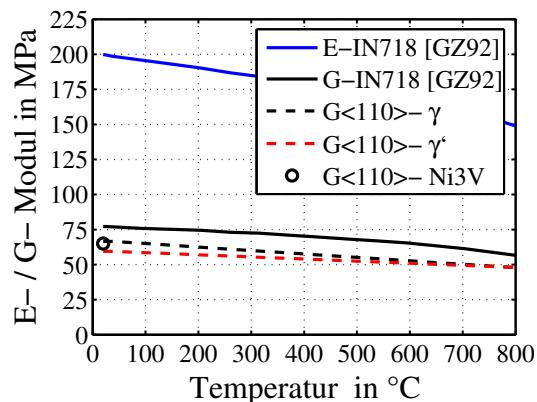


Abbildung C.1: Temperaturabhängige isotrope und gleitebenenbezogene E-Modul und G-Modul für IN718 und relevante Phasen nach [FHV92, GZ92, HSHB96, SKG01]

C.3 Literaturdaten TTT-Diagramm IN718

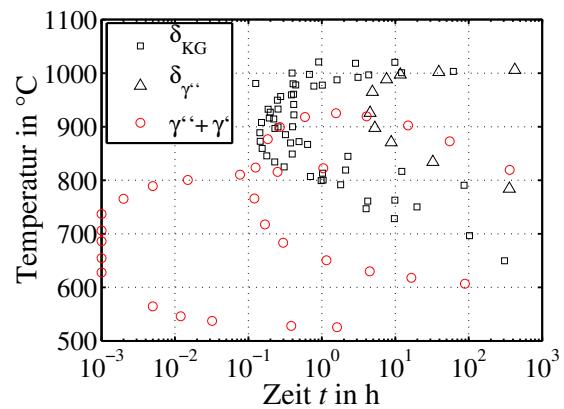


Abbildung C.2: TTT- Diagramm IN718, Literaturdaten nach [BB88, BHC⁺04, Aza04, NVL10]

C.4 Chemie der Phasen

Tabelle C.2: Chemische Zusammensetzung der IN718 Matrix in at%, gemessene Literaturangaben mit abgeleiteten Mittelwert und abgeleiteter Standardabweichung für alle Messdaten; berechnete Gleichgewichtswerte mit MatCalc[®] (mc-ni-s06.tdb), Mittelwerte und Standardabweichung für alle Daten ≥ 400 °C; Werte kleiner 0,01 nicht angegeben

T in °C	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	Quelle
Literaturdaten								
718	46,21	25,54	23,48	1,59	2,13	0,47	0,58	[MBB02]
621	43,79	26,92	25,25	0,99	2,50	0,21	0,34	[MBB02]
	49,82	19,98	16,40	2,56	1,27	0,92		[TG83]
	53,88	19,66	20,56	1,60	1,55	0,84	1,91	[KCH ⁺ 89]
	51,82	19,43	23,21	2,17	1,45	0,85	1,06	[MSW ⁺ 11]
	55,19	20,03	20,84	1,57	1,64	0,73		[CKHR89]
760	48,56	23,80	22,00	1,97	2,41	0,52	0,74	[BM91]
760	52,06	23,10	18,70	1,99	2,83	0,59	0,73	[BM91]
650	50,39	23,30	21,70	1,69	2,14	0,34	0,44	[BM91]
650	52,09	25,50	17,40	1,69	2,32	0,50	0,50	[BM91]
870	54,85	20,60	15,70	3,71	2,67	1,21	1,26	[BM91]
982	54,16	20,10	16,10	4,57	2,43	1,40	1,24	[BM91]
MW ≤ 760 °C	50,22	22,82	21,05	1,80	2,06	0,59	0,78	
STDW	3,79	2,92	2,63	0,47	0,47	0,24	0,54	
MatCalc [®]								
1060	52,3	19,1	21,3	3,15	1,85	1,0	1,08	
940	50,30	20,76	23,19	1,44	1,96	0,86	1,16	
720	46,90	23,8	26,0	0,16	2,1	0,09	0,59	
620	46,30	24,2	26,5	0,05	2,14	0,02	0,04	
400	45,50	24,8	27,1	0,0	2,14	0,0	0,05	
20	42,0	27,4	29,8	0,0	0,32	0,0	0,0	
MW	48,3	21,5	24,8	0,96	2,04	0,39	0,58	
STDW	2,6	2,2	2,2	1,22	0,11	0,44	0,48	

Tabelle C.3: Chemische Zusammensetzung der γ' -Phase IN718 in at%, gemessene Literaturangaben mit abgeleiteten Mittelwert und abgeleiteter Standardabweichung für alle Messdaten; berechnete Gleichgewichtswerte mit MatCalc[®], Mittelwerte und Standardabweichung für alle Daten ≥ 400 °C (mc-ni-s06.tdb)

T in °C	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	Quelle
Literaturdaten								
718	72,97	2,00	0,79	7,22	0,53	7,38	9,11	[MBB02]
621	70,98	2,24	0,83	7,54	1,38	8,24	8,79	[MBB02]
760	69,26	2,15	0,50	10,20	0,49	9,40	8,00	[BM91]
760	68,69	1,81	0,21	10,40	0,18	7,91	10,80	[BM91]
650	70,55	2,10	0,86	10,30	0,34	7,76	8,09	[BM91]
650	70,58	1,79	0,41	8,31	0,20	8,51	10,20	[BM91]
MW	70,52	2,03	0,59	9,17	0,50	8,37	9,00	
STDW	0,99	0,10	0,15	1,34	0,41	0,83	0,47	
MatCalc [®]								
940	69,1	4,5	4,29	10,97	1,14	6,06	3,74	
720	72,3	3,16	2,43	7,91	0,77	6,8	6,47	
620	74,1	2,9	2,1	7,12	0,76	6,42	7,46	
400	72,2	2,9	1,74	5,32	1,04	5,38	9,36	
20	74,8	3,49	0,21	5,46	8,03	2,03	6,03	
MW	72,43	3,37	2,64	7,83	0,93	6,17	6,76	
STDW	2,06	0,66	0,98	2,04	0,17	0,52	2,03	

Tabelle C.4: Chemische Zusammensetzung der γ'' - Phase IN718 in at%, gemessene Literaturangaben mit abgeleitetem Mittelwert und abgeleiteter Standardabweichung für alle Messdaten; berechnete Gleichgewichtswerte mit MatCalc[©], Mittelwerte und Standardabweichung für alle Daten ≥ 400 °C (mc-ni-s06.tdb)

T in °C	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	Quelle
Literaturdaten								
718	68,42	2,11	2,16	20,07	1,30	5,59	0,35	[MBB02]
621	68,90	1,73	1,93	19,27	3,00	4,73	0,44	[MBB02]
	68,00	2,00	4,00	19,00	1,00	4,50	0,50	[Vin85]
760	66,87	0,86	0,76	25,10	1,05	4,92	0,44	[BM91]
760	65,33	1,25	0,84	24,50	0,91	5,99	1,18	[BM91]
650	65,89	1,91	1,53	23,10	0,89	5,41	1,27	[BM91]
650	68,98	0,73	0,71	23,00	1,36	4,65	0,57	[BM91]
MW	67,48	1,51	1,70	22,00	1,36	5,11	0,68	
STDW	0,37	0,16	0,93	0,45	0,88	0,47	0,06	
MatCalc [©]								
940	71,2	3,77	3,24	16,37	0,57	3,66	1,14	
720	72,9	1,99	2,08	17,05	0,64	4,09	1,12	
620	73,6	1,43	1,61	17,64	0,79	3,88	1,08	
400	74,4	0,57	0,69	18,68	1,34	3,80	0,48	
20	74,9	0,00	0,01	18,38	0,72	5,89	0,00	
MW	73,0	1,94	1,91	17,44	0,84	3,86	0,96	
STDW	1,18	1,17	0,92	0,85	0,30	0,16	0,28	

Tabelle C.5: Chemische Zusammensetzung der δ -Phase IN718 in at%, gemessene Literaturangaben mit abgeleiteten Mittelwert und abgeleiteter Standardabweichung für alle Messdaten; berechnete Gleichgewichtswerte mit MatCalc[®], Mittelwerte und Standardabweichung für alle Daten ≥ 400 °C (mc-ni-s06.tdb); Werte kleiner 0,01 nicht angegeben

T in °C	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	Quelle
Literaturdaten								
	67,50	1,90	4,30	21,40		3,25	1,60	[Aza04]
	66,83	2,70	2,49	23,17	0,42	4,40		[Aza04]
	69,50	5,50	3,50	13,50	2,00	4,00	2,00	[BM91]
	64,90	5,30	3,40	20,40	2,20	3,00	0,80	[PS05]
	68,91	5,96	4,11	13,79	1,44	3,93	1,86	[Cao05]
	72,14	3,18	0,95	19,91	0,65	2,81	0,37	[FRZ10]
MW	68,30	4,09	3,12	18,69	1,34	3,57	1,33	
STDW	1,85	1,60	1,23	3,98	0,63	0,57	0,65	
MatCalc [®]								
1060	71,98	1,76	1,84	22,09	0,96	1,15	0,23	
940	72,80	1,52	1,47	20,91	0,73	2,33	0,23	
720	73,90	1,17	0,94	20,57	0,47	2,8	0,12	
620	74,30	0,9	0,74	21,21	0,42	2,35	0,07	
400	74,80	0,47	0,44	21,15	0,49	1,64	0,0	
20	74,90	0,00	0,24	17,00	7,14	0,63	0,0	
MW	73,56	1,16	1,09	21,39	0,61	2,05	0,13	
STDW	1,03	0,45	0,5	0,63	0,20	0,58	0,09	

Tabelle C.6: Chemische Zusammensetzung der MC- Karbide IN718 in at% (ohne C- Angabe), gemessene Literaturangaben mit abgeleiteten Mittelwert und abgeleiteter Standardabweichung für alle Messdaten; berechnete Gleichgewichtswerte mit MatCalc[©] bei 1020 °C (mc-ni-s06.tdb); MatCalc[©] unterscheidet TiC und NbC nicht, daher die Abweichung für Ti und Nb; Werte kleiner 0,01 nicht angegeben

T in °C	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	Quelle
Literaturdaten								
NbC		0,90	1,90	84,00	0,50	7,00	0,10	[PS05]
TiC				14,60		80,00	0,10	[BM91]
NbC	4,00	1,00	6,00	84,00	3,00	13,18		[Vin85]
TiC	2,00	0,50	3,00	19,75	1,00	75,75		[Vin85]
NbC	5,00	0,94	0,87	74,10	1,26	9,48	7,51	[TG83]
TiC	1,00	0,86	0,45	6,39	0,05	85,96	5,00	[TG83]
NbC	1,00	1,83	2,78	79,18	3,02	13,18		[Cao05]
TiC	1,00	0,82	0,77	20,17	0,42	75,75		[Cao05]
NbC				86,22		13,78		[MSW ⁺ 11]
NbC	2,69	0,98	1,38	78,69		16,23	0,04	[KDY ⁺ 04]
MW- NbC	2,34	0,97	2,12	81,03	1,08	13,17		
MW- TiC				15,44		79,15		
MatCalc [©]								
1020 °C			0,18	27,09	0,04	24,36		

Tabelle C.7: Chemische Zusammensetzung der Laves- Phase IN718 in at%, gemessene Literaturangaben mit abgeleitetem Mittelwert und abgeleiteter Standardabweichung für alle Messdaten; berechnete Gleichgewichtswerte mit MatCalc[©], Mittelwerte und Standardabweichung für alle Daten ≥ 400 °C (mc-ni-s06.tdb); Werte kleiner 0,01 nicht angegeben

T in °C	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	Quelle
Literaturdaten								
	40,00	15,00	15,30	18,80	10,20	0,60	0,10	[BM91]
	44,00	12,00	15,50	29,00	4,00	2,50	0,10	[Vin85]
	38,50	11,50	13,50	26,00	2,00	1,50	0,10	[Vin85]
	49,18	13,03	15,68	15,13	3,21	1,44	2,33	[KCH ⁺ 89]
	47,50	14,53	10,63	14,00	2,13	2,50		[TG83]
	43,76	15,25	16,75	18,40	3,90	1,21	0,72	[Cao05]
	33,69	19,06	17,29	19,58	9,31	0,29	0,76	[FRZ10]
	43,81	13,27	17,41	19,84	3,59	1,66	0,41	[KDY ⁺ 04]
	38,92	15,73	18,09	19,74	4,76	1,33	1,44	[MSW ⁺ 11]
	50,12	13,34	16,43	15,42	3,08	1,61		[CKHR89]
	51,79	10,37	11,39	20,25	3,94	1,77	0,48	[ARES14]
MW	43,75	13,81	15,27	19,74	3,99	1,58	0,79	
STDW	5,47	2,35	2,45	4,47	1,95	0,60	0,75	
MatCalc [©]								
1020	34,40	18,05	14,17	24,18	9,23			
720	32,85	18,85	14,00	19,25	14,33			
20	20,57	41,60	25,07		12,81			
MW	33,63	18,45	14,09	21,75	11,78			
STDW	0,78	0,40	0,09	2,47	2,55			

C.5 Gitterparameter der Phasen

Tabelle C.8: Gitterparameter für γ - und γ' - Phase in IN718

Zustand nach	Gitterparameter in nm	Quelle
γ - Gitterparameter		
	0,3598	[Del07]
	0,3601	[CP73]
	0,3594	[CP73]
900 °C	0,3616	[SMB88b]
990 °C/wa	0,3600	[SSC97, SA00]
680 °C/4 h	0,3596	[SSC97, SA00]
680 °C/50 h	0,3594	[SSC97, SA00]
680 °C/98 h	0,3593	[SSC97, SA00]
750 °C/4 h	0,3598	[SSC97, SA00]
750 °C/10 h	0,3596	[SSC97, SA00]
750 °C/98 h	0,3595	[SSC97, SA00]
960 °C/1 h	0,3604	[DLMV11]
960 °C/10 h	0,3598	[DLMV11]
920 °C/10 h	0,3597	[DLMV11]
1050 °C/wa	0,3606	[Fan81]
720 °C/8h + 620 °C/8h	0,3594	[LCX ⁺ 99]
1040°C	0,36075	[LXY ⁺ 97b]
γ' - Gitterparameter		
	0,3603	[Del07]
	0,3607	[CP73]
	0,3605	[CP73]
680 °C/4 h	0,3603	[SSC97, SA00]
750 °C/4 h	0,3608	[SSC97, SA00]
750 °C/50 h	0,3599	[SSC97, SA00]
	0,3620	[SMB88b]
	0,3622	[Fan81]

Tabelle C.9: Gitterparameter für γ'' - Phase in IN718

Zustand nach	Gitterparameter in nm	Quelle
$a_1 = a_2$ - Gitterparameter		
	0,3624	[CP73]
	0,3626	[CP73]
	0,3624	[Fan81]
	0,3624	[SMB88b]
680 °C/4 h	0,3625	[SSC97]
680 °C/50 h	0,3609	[SSC97]
680 °C/98 h	0,3605	[SSC97]
750 °C/4 h	0,3630	[SSC97]
750 °C/50 h	0,3609	[SSC97]
750 °C/98 h	0,3606	[SSC97]
680 °C/4 h	0,3605	[SA00]
680 °C/50 h	0,3608	[SA00]
680 °C/98 h	0,3603	[SA00]
750 °C/4 h	0,3610	[SA00]
750 °C/50 h	0,3631	[SA00]
750 °C/98 h	0,3610	[SA00]
	0,3599	[SC97]
a_3 - Gitterparameter		
	0,7406	[CP73]
	0,7416	[CP73]
	0,7406	[Fan81]
	0,7406	[SMB88b]
680 °C/4 h	0,7410	[SSC97]
680 °C/50 h	0,7420	[SSC97]
680 °C/98 h	0,7457	[SSC97]
750 °C/4 h	0,7409	[SSC97]
750 °C/50 h	0,7423	[SSC97]
750 °C/98 h	0,7428	[SSC97]
680 °C/4 h	0,7437	[SA00]
680 °C/50 h	0,7438	[SA00]
680 °C/98 h	0,7474	[SA00]
750 °C/4 h	0,7439	[SA00]
750 °C/50 h	0,7391	[SA00]
750 °C/98 h	0,7457	[SA00]
	0,7355	[SC97]

Tabelle C.10: Gitterparameter für δ -, Laves- Phase und MC-Karbid in IN718

Zustand nach	Gitterparameter in nm	Quelle
a_1^δ - Gitterparameter		
	0,5141	[Del07]
	0,5076	[SSC97]
900 °C/114 h	0,5141	[SMB88b]
	0,5141	[Nia10]
	0,5110	[KW70]
900 °C/10 h	0,5114	[Nia10]
a_2^δ - Gitterparameter		
	0,4231	[Del07]
	0,4203	[SSC97]
900 °C/114 h	0,4231	[SMB88b]
	0,4231	[Nia10]
	0,4250	[KW70]
900 °C/10 h	0,4220	[Nia10]
a_3^δ - Gitterparameter		
	0,4556	[Del07]
	0,4524	[SSC97]
900 °C/114 h	0,4534	[SMB88b]
	0,4534	[Nia10]
	0,4560	[KW70]
900 °C/10 h	0,4510	[Nia10]
Laves- Gitterparameter		
	0,4670	[KCH ⁺ 89]
MC- Gitterparameter		
	0,4430	[KCH ⁺ 89]
(TiC)	0,4330	[SC97]
(NbC)	0,4470	[SC97]

C.6 Solvustemperatur der Phasen

Tabelle C.11: Nb- Gehalt abhängige γ' - Solvustemperatur, allgemeiner Konsens der Literatur ist ein etwas geringerer Solvus als der γ'' - Solvus, MatCalc[©] für Gleichgewicht (mc-ni-s06.tdb)

Nb- Gehalt in wt%	γ' - Solvus in °C	Quelle
Literaturdaten		
5,06	863 ± 12 K ($> 850, \leq 875$)	[Aza04]
$> 5,28$	900	[SMB92]
MatCalc [©]		
4,0	900	
5,0	899	
6,0	897	

Tabelle C.12: Nb- Gehalt abhängige γ'' - Solvustemperatur, der γ'' - Solvus ist schwer mess- und trennbar vom γ' - Solvus; hier wird deshalb ein Mittelwert angegeben, welcher sich aus dem Streubereich der Literaturdaten ergibt; aus Daten von [FRZ10] wurde nachträglich der Onset- Punkt des DTA- Signales ausgewertet; Berechnung mit MatCalc[©] für metastabilen Gleichgewichtszustand (unterdrückte δ - Phase) (mc-ni-s06.tdb)

Nb- Gehalt in wt%	γ'' - Solvus in °C	Quelle
Literaturdaten		
5,06	925 \pm 20 K ($> 900, < 950$)	[Aza04]
5,08	921 \pm 25 K ($> 894, \leq 948$)	[YCMd97]
5,28	910 \pm 10 K ($> 900, \leq 920$)	[NVL10]
5,0	930	[FRZ10]
5,17	936	[FRZ10]
5,18	937	[FRZ10]
5,18	939	[FRZ10]
5,4	945	[FRZ10]
6,0	≤ 950	[SMB88b]
MatCalc [©]		
4,0	940	
4,4	955	
4,8	968	
5,0	974	
5,2	979	
5,4	985	
5,8	996	
6,0	1000	

Tabelle C.13: Nb- Gehalt abhängige δ - Solvustemperatur, Gleichgewicht in MatCalc[©] (mc-ni-s06.tdb)

Nb- Gehalt in wt%	δ - Solvus in °C	Quelle
Literaturdaten		
4,2	970, 980	[Cos03]
4,3	990	[Cos03]
4,5	1000	[Cos03]
4,6	1010	[Cos03]
4,65	1010	[Cos03]
5,05	1025	[Cos03]
5,1	1060	[Cos03]
5,2	1050	[Cos03]
5,28	1041	[Cos03]
5,4	1043	[Cos03]
5,32	1010	[HTFY95]
5,15	998	[SSC97]
5,2	1000	[Cam86]
5,29	1010	[DBB94]
5,37	1031	[SKBH01]
5,4	1037	[NYPL03]
5,06	1005	[Aza04]
5,41	1030	[Aza04]
5,0	993	[FRZ10]
5,17	1002	[FRZ10]
5,18	1004	[FRZ10]
5,4	1010	[FRZ10]
4,32	993	[CWPT88]
4,91	999	[CWPT88]
5,26	1004	[CWPT88]
5,28	1010	[CWPT88]
5,42	1004	[CWPT88]
5,56	1010	[CWPT88]
5,67	1010	[CWPT88]
5,24	1015	[BC69] in [BHC ⁺ 04]
5,40	1030	[BC69] in [BHC ⁺ 04]
MatCalc [©]		
4,0	988,5	
4,4	1005,8	
4,8	1022,3	
5,0	1029,7	
5,2	1037,1	
5,4	1044,6	
5,6	1052,0	
6,0	1065,0	

C.7 Temperaturabhängige Phasenanteile in IN718

Tabelle C.14: Verwendete Daten für Bewertung des δ - Phasenanteils im thermodynamischen Gleichgewicht

Temperatur in °C	Phasenanteil in %	Quelle
δ - Phase		
1021	0	[NVL10]
900	8	[NVL10]
20	13	[NVL10]
1050	0	[WZC ⁺ 08]
1040	0	[WZC ⁺ 08]
1030	0	[WZC ⁺ 08]
1010	2	[WZC ⁺ 08]
950	7,3	[WZC ⁺ 08]
900	11,8	[WZC ⁺ 08]
1030	0	[BHC ⁺ 04]
1020	0,8	[BHC ⁺ 04]
1000	2,3	[BHC ⁺ 04]
980	3,8	[BHC ⁺ 04]
960	5,5	[BHC ⁺ 04]
940	6,6	[BHC ⁺ 04]
920	7,2	[BHC ⁺ 04]
20	14,5	[Aza04]
20	17,5	[Aza04]

Tabelle C.15: Verwendete Daten für Bewertung des γ'' - und γ' - Phasenanteils, Berechnung mit MatCalc[©] für metastabilen Gleichgewichtszustand (unterdrückte δ - Phase) (mc-ni-s06.tdb)

Temperatur in °C	Phasenanteil f_j in %	Quelle
γ'' - Phase		
950	0	[Aza04]
900	10	[Aza04]
920	0	[NVL10]
899	0	[Rad89]
750	11,2	[Fan81]
725	12	[Fan81]
700	13,2	[Fan81]
γ' - Phase		
900	0	[NVL10]
875	0	[Aza04]
850	0	[Aza04]
899	0	[Rad89]
750	4,09	[Fan81]
725	4,19	[Fan81]
700	3,82	[Fan81]
20	8	[Aza04]
$\gamma' + \gamma''$ - Phase		
800	15	[Aza04]
700	20	[Aza04]
750	15,3	[Fan81]
725	16,2	[Fan81]
700	17	[Fan81]
730	15,5	[KBK ⁺ 15]
730	14,2	[KBK ⁺ 15]

C.8 Partikelgröße für Auslagerungsversuche

Tabelle C.16: Partikelgröße γ'' - und γ' - Phase für Auslagerung bei 650 °C bis 706 °C aus Publikationen ermittelt, alle Versuche wurden mit Raschabkühlung (Wasser/Öl) von mind. 970 °C bei Nb- Gehalt zw. 4,94 wt% bis 6 wt% durchgeführt

Temperatur in °C	Zeit in h	$D_{\gamma''}$ in nm	$H_{\gamma''}$ in nm	κ	$R_{\gamma'}$ in nm	Quelle
650	24	4				[SMB92]
	75	7,6				[SMB92]
	136	20				[SMB92]
	168	20				[SMB92]
670	8	6,2	2,9	0,48		[DNM ⁺ 08]
	16	9,8	4,9	0,50		[DNM ⁺ 08]
	32	12,3	5,8	0,47		[DNM ⁺ 08]
680	4	10			3	[SA00]
	50	30	11	0,37	6	[SA00]
	50	35	11	0,31	6	[SA00]
	100	50	13	0,26	8	[SA00]
700	20	27,4				[SMB92]
	24	24				[SMB92]
	168	58				[SMB92]
700	8	10,2	4,4	0,43		[DNM ⁺ 08]
	16	11,9	5,6	0,47		[DNM ⁺ 08]
	32	19,8	6,5	0,33		[DNM ⁺ 08]
700	28	23,8				[Aza04]
	50	27,2				[Aza04]
	197	37,6				[Aza04]
	1000	99,6				[Aza04]
700	50	25,7	8,1	0,32	7,2	[Fan81]
	100	32	10,1	0,32	9,4	[Fan81]
	200	42,7	12,3	0,28	12,1	[Fan81]
	306	50,6	14,6	0,29	14,1	[Fan81]
706	0,138	3,5			1,5	[ACRC10]
	1,38	12,5			5	[ACRC10]

Tabelle C.17: Partikelgröße γ'' - und γ' - Phase für Auslagerung bei 725 °C und 750 °C aus Publikationen ermittelt, alle Versuche wurden mit Raschabkühlung (Wasser/Öl) von mind. 970 °C bei Nb- Gehalt zw. 4,94 wt% bis 6 wt% durchgeführt

Temperatur in °C	Zeit in h	$D_{\gamma''}$ in nm	$H_{\gamma''}$ in nm	κ	$R_{\gamma'}$ in nm	Quelle
725	25	32,6	8,9	0,27	9,2	[Fan81]
	50	42,4	11,1	0,26	11,5	[Fan81]
	100	53,8	14,1	0,26	14,6	[Fan81]
	200	70,2	17,4	0,24	18	[Fan81]
	300	82,5	19,4	0,23	20,5	[Fan81]
750	8	20,2	6,6	0,33		[DNM ⁺ 08]
	16	23,7	6,7	0,28		[DNM ⁺ 08]
	32	30,3	7	0,23		[DNM ⁺ 08]
750	2	16	4,4	0,28		[SMB92]
	20	57,2	8,7	0,15	11,2	[SMB92]
	24	70			18	[SMB92]
	100	120	18,8	0,16	19,5	[SMB92]
	100	130	18,8	0,15	21	[SMB92]
	192	159	21,5	0,14	24	[SMB92]
750	4	30	9	0,30	4	[SA00]
	50	80	15	0,19	13	[SA00]
	50	90	17	0,19	13	[SA00]
	100	120	22	0,18	16,5	[SA00]
	100	190	34	0,18	16,5	[SA00]
750	2	28,4				[Aza04]
	5	33,4				[Aza04]
	20	55				[Aza04]
	90	131,5				[Aza04]
750	5	42,4	5,9	0,28		[Fan81]
	15	66,8	8,8	0,26		[Fan81]
	30	81,4	10,8	0,27	12,3	[Fan81]
	50	102,6	13,4	0,26	14,3	[Fan81]
	100	126	16,2	0,26	17,6	[Fan81]
	200				21,5	[Fan81]

Tabelle C.18: Partikelgröße γ'' - und γ' - Phase für Auslagerung bei 760 °C bis 900 °C aus Publikationen ermittelt, alle Versuche wurden mit Raschabkühlung (Wasser/Öl) von mind. 970 °C bei Nb- Gehalt zw. 4,94 wt% bis 6 wt% durchgeführt

Temperatur in °C	Zeit in h	$D_{\gamma''}$ in nm	$H_{\gamma''}$ in nm	κ	$R_{\gamma'}$ in nm	Quelle
760	0,2	5,4	2,7	0,50		[HFY94]
	0,5	12,2	4,8	0,39		[HFY94]
	1,0	16,4	5,7	0,35		[HFY94]
	2,0	20,4	6,2	0,30		[HFY94]
	4,0	25,6	6,8	0,27		[HFY94]
	8,0	50,2	12,3	0,25		[HFY94]
	10,0	65,0	14,9	0,23		[HFY94]
	12,0	75,0	16,3	0,22		[HFY94]
	16,0	87,6	20,3	0,23		[HFY94]
	30,0	108,6	20,2	0,19		[HFY94]
	54,0	142,4	20,7	0,15		[HFY94]
	72,0	154,4	20,5	0,13		[HFY94]
	100,0	175,2	20,7	0,12		[HFY94]
	790	56,8	13,6	0,24		[OPD74a]
	1,0	39,9	17,2	0,43		[ZLZ ⁺ 14]
	2,0	50,7	19,7	0,39		[ZLZ ⁺ 14]
	3,0	61,5	20,7	0,34		[ZLZ ⁺ 14]
	4,0	69,0	21,7	0,32		[ZLZ ⁺ 14]
	5,0	75,5	22,4	0,29		[ZLZ ⁺ 14]
800	0,1	23,2				[Aza04]
	1,5	82,0				[Aza04]
	23,6	148,5				[Aza04]
	91,2	480,3				[Aza04]
816	2,0	80,0				[BBC89]
850	0,2	91,0				[Aza04]
	1,1	157,2				[Aza04]
	1,8	191,9				[Aza04]
	20,7	360,9				[Aza04]
	25,3	295,6				[Aza04]
	92,8	926,6				[Aza04]
900	1,7	345,7				[Aza04]
	14,9	835,2				[Aza04]
	17,9	869,9				[Aza04]
	21,2	881,6				[Aza04]

C.9 Seigerungskoeffizienten der Elemente

Tabelle C.19 listet die aus publizierten Messdaten der Chemie abgeleiteten Seigerungskoeffizienten der Legierung IN718 auf. Im Vergleich dazu werden Seigerungskoeffizienten angegeben, welche mit MatCalc[©] ermittelt wurden. Für alle Berechnungen mit der Scheil- Gleichung 4.27 werden in dieser Arbeit die aus Literaturdaten abgeleiteten Mittelwerte (MW) je Element verwendet.

Tabelle C.19: Seigerungskoeffizienten der Elemente in IN718 bestimmt aus gemessener Chemie der angegebenen Quellen; Quotient des Dendriten k_i^D aus Chemie Dendritenkern und nomineller Zusammensetzung sowie Quotient des Interdendriten k_i^{ID} aus max. Matrixlöslichkeit und interdendritischem Eutektikum nach [KCH⁺89]; MatCalc[©] Koeffizienten aus berechneter Chemie der Matrix zu nomineller Zusammensetzung nach Tab. 2.1 (mc-ni-s06.tdb); Konzentrationsangabe in at%

	Ni	Fe	Cr	Nb	Mo	Ti	Al	Quelle
Literaturdaten								
Dendrit	53,88	19,66	20,57	1,60	1,55	0,84	1,97	[KCH ⁺ 89]
nominell	53,31	18,84	20,32	3,28	1,89	1,15	1,21	[KCH ⁺ 89]
k_i^D	1,01	1,04	1,01	0,49	0,82	0,73	1,63	[KCH ⁺ 89]
max. Matrix	59,08	13,63	16,24	5,95	2,11	2,11	0,88	[KCH ⁺ 89]
Eutektikum	51,36	12,96	15,96	12,83	2,67	2,61	1,62	[KCH ⁺ 89]
k_i^{ID}	1,15	1,05	1,02	0,46	0,79	0,81	0,54	[KCH ⁺ 89]
Dendrit	55,19	20,03	20,84	1,57	1,64	0,73		[CKHR89]
nominell	53,31	18,84	20,32	3,28	1,89	1,15	1,21	[CKHR89]
k_i^D	1,04	1,06	1,03	0,48	0,87	0,63		[CKHR89]
max. Matrix	59,69	13,75	16,61	6,19	1,75	2,00		[CKHR89]
Eutektikum	52,43	12,92	16,07	13,02	2,90	2,64		[CKHR89]
k_i^{ID}	1,14	1,06	1,03	0,48	0,60	0,76		[CKHR89]
Dendrit	51,82	19,73	23,21	2,17	1,45	0,85	1,06	[MSW ⁺ 11]
nominell	51,96	19,13	21,67	3,04	1,85	1,15	1,20	[MSW ⁺ 11]
k_i^D	1,00	1,03	1,07	0,71	0,78	0,74	0,88	[MSW ⁺ 11]
Dendrit	55,38	18,29	21,31	1,79	1,67	0,64	0,91	[ARES14]
nominell	53,61	18,64	20,46	3,13	1,85	1,14	1,07	[ARES14]
k_i^D	1,03	0,98	1,04	0,57	0,90	0,56	0,85	[ARES14]
MW- Dendrit	1,02	1,03	1,04	0,56	0,84	0,67	0,87	
MW- Interdendrit	1,15	1,06	1,03	0,47	0,70	0,79	0,54	
MW	1,08	1,04	1,03	0,52	0,77	0,73	0,70	
MatCalc [©]								
k_i^D 1300 °C	0,98	1,15	1,01	0,44	1,03	0,51	1,03	
k_i^D 1200 °C	0,99	1,08	1,02	0,59	1,05	0,64	1,02	
MW	0,99	1,12	1,02	0,52	1,04	0,58	1,03	

C.10 Prüfbedingungen der Zugversuche

Die Zugproben aus dem Gussmaterial werden in Erstarrungsrichtung bzw. Abzugrichtung und die gedruckten Proben in Aufbaurichtung gefertigt. Alle Zugproben werden mit einer geschliffenen Oberfläche (Rauheit $< 2 \mu\text{m}$) hergestellt. Der Prüfquerschnitt beträgt $d_0 = 6 \text{ mm}$, die Prüflänge $l_0 = 30 \text{ mm}$. Die Versuche werden an einer Klasse 1 Prüfmaschine durchgeführt (Kraftgenauigkeit 1 %, Verlängerung $< 1 \text{ %}$, $\Delta T \leq 3 \text{ K}$, Schrägzug $< 7 \text{ %}$). Die Zugprüfung erfolgte bei 20°C und 650°C dehnungskontrolliert nach Norm EN2002-1 mit $0,5 \text{ %/min}$ bis $0,5 \text{ %}$ plastischer Dehnung und anschließend mit 5 %/min bis zum Bruch. Die Streckgrenze wird bei $0,1 \text{ %}$ und $0,2 \text{ %}$ plastischer Dehnung aus den Kraft- Weg- Kurven bestimmt. An einzelnen SX-Proben werden die Oberflächendehnungen mittels ARAMIS- Technik aufgenommen, welche die homogene Verformung der Einkristalle auf Gleitbändern bis weit über die Streckgrenze bestätigen (vgl. Abb. B.8). Das Abgleiten auf Gleitbändern ist ebenfalls anhand von Gleitlinien an der Probenoberfläche sichtbar. Die Orientierungsänderung der Einkristalle kann anhand von EBSD-Aufnahmen im Prüfbereich festgestellt werden (siehe Abb. B.9). Der Gewindebereich verbleibt unverformt. Die Probenfertigung und Prüfung wurde von den entsprechenden Fachabteilungen der MTU Aero Engines AG vorgenommen. Projektbedingt erfolgte die Prüfung einer geringen Probenanzahl am Fraunhofer IWM in Freiburg. Die Versuchsdurchführung erfolgte nach den gleichen definierten Standards und liefert vergleichbare Ergebnisse ohne auffällige Abweichungen. Für alle drei Materialien werden im Anhang in Kapitel C.11 exemplarische Zugkurven dargestellt. Die Probennummer, die zugehörige Wärmebehandlung, $R_{p0,1}$, der Texturfaktor und die entsprechende kritische Schubspannung sind im Anhang in Kapitel C.12, C.13 und C.14 für alle drei Materialien zusammengefasst. Die Versuchsergebnisse werden in Kapitel 5.7.2 beschrieben und mit den Berechnungsergebnissen verglichen.

C.11 Gemessene Zugkurven des Probenmaterials

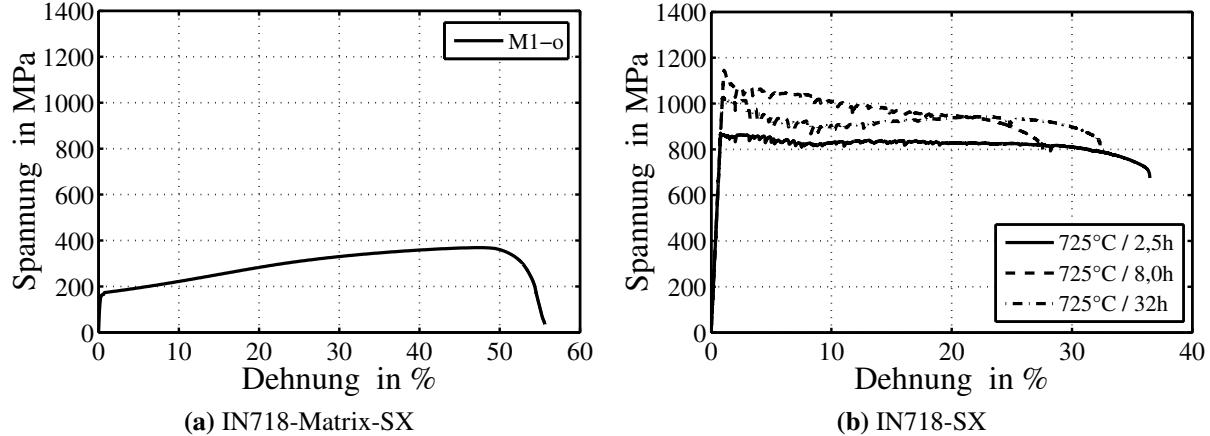


Abbildung C.3: Gemessene Zugkurven am einkristallinen Material: (a) IN718-Matrix-SX, (b) IN718-SX für die 3 Auslagerungsstufen; die Prüfrichtung entspricht der Erstarrungsrichtung im Gießprozess

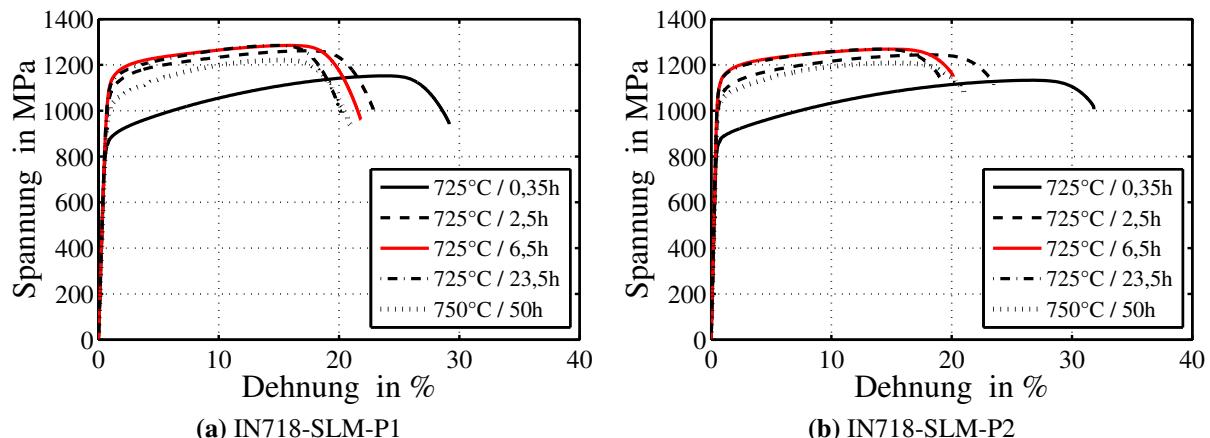


Abbildung C.4: Gemessene Zugkurven am IN718-SLM für die 5 Auslagerungsstufen: (a) Fertigungsparameter P1 und (b) Fertigungsparameter P2; geprüft werden nur stehend in Aufbaurichtung gefertigte Proben

C.12 Streckgrenzdaten IN718-Matrix-SX

Tabelle C.20: Streckgrenzdaten der einzelnen Zugproben IN718-Matrix-SX für berücksichtigte Anzahl aktiver Gleitsysteme 1, 3 und 5; $R_{p0,1}$ und τ_i in MPa; die Prüfrichtung entspricht der Erstarrungsrichtung im Gießprozess

ID	T- Prüfung	$R_{p0,1}$	m_s (1)	\bar{m}_s (3)	\bar{m}_s (5)	τ_1 (1)	τ_2 (3)	τ_3 (5)
M1-o	20 °C	162	0,434	0,417	0,408	70,31	67,56	66,10
M1-u	20 °C	159	0,434	0,417	0,408	69,00	66,30	64,87
M2	20 °C	155	0,472	0,421	0,395	73,16	65,26	61,23
M3-o	650 °C	71	0,463	0,425	0,406	32,78	30,18	28,83
M3-u	650 °C	74	0,463	0,425	0,406	34,26	31,45	30,04
M5	650 °C	76	0,464	0,392	0,376	35,26	29,00	28,58

C.13 Streckgrenzdaten IN718-SX

Tabelle C.21: Streckgrenzdaten der einzelnen Zugproben IN718-SX bei entsprechender Wärmebehandlung (WB) für berücksichtigte Anzahl aktiver Gleitsysteme 1, 3 und 5, Prüftemperatur 20 °C; $R_{p0,1}$ und τ_i in MPa; die Prüfrichtung entspricht der Erstarrungsrichtung im Gießprozess

ID	WB	$R_{p0,1}$	m_s (1)	\bar{m}_s (3)	\bar{m}_s (5)	τ_1 (1)	τ_2 (3)	τ_3 (5)
KD-1	WB1	865	0,418	0,416	0,413	361,57	359,84	357,25
KH-1	WB1	844	0,458	0,445	0,425	386,55	375,58	358,70
KO-2	WB2	1043	0,496	0,438	0,390	517,33	456,80	406,77
KP-1	WB2	1137	0,417	0,411	0,408	474,13	467,31	463,90
KC-1	WB2	1040	0,499	0,449	0,403	518,96	466,96	419,12
KL-1	WB3	1025	0,417	0,411	0,408	427,00	421,28	418,20
KJ-1	WB3	1014	0,432	0,427	0,419	438,05	432,98	424,87

C.14 Streckgrenzdaten IN718-SLM

Tabelle C.22: Streckgrenzdaten der einzelnen Zugproben IN718-SLM beider Fertigungsparameter P1 und P2 bei entsprechender Wärmebehandlung (WB), τ_{ges} abgeleitet für gefügespezifischen Texturfaktor M bei 3 und 5 aktiven Gleitsystemen, Prüftemperatur 20 °C; $R_{p0,1}$ und τ_i in MPa; geprüft werden nur stehend in Aufbaurichtung gefertigte Proben

ID	WB	$R_{p0,1}$	M (3)	M (5)	τ_{ges} (3)	τ_{ges} (5)
Fertigungsparameter P1						
P1-1a	SLM3	813	2,28	2,4	356,6	338,8
P1-1b	SLM3	801	2,28	2,4	351,3	333,8
P1-2a	SLM4	972	2,28	2,4	426,3	405
P1-2b	SLM4	976	2,28	2,4	428,1	406,7
P1-3a	SLM5	1021	2,28	2,4	447,8	425,4
P1-3b	SLM5	1011	2,28	2,4	443,4	421,3
P1-4a	SLM6	1023	2,28	2,4	448,7	426,3
P1-4b	SLM6	1018	2,28	2,4	446,5	424,2
P1-5a	SLM7	947	2,28	2,4	415,4	398,6
P1-5b	SLM7	945	2,28	2,4	414,5	393,8
Fertigungsparameter P2						
P2-1a	SLM3	836	2,36	2,48	354,2	337,1
P2-1b	SLM3	839	2,36	2,48	355,5	338,3
P2-2a	SLM4	1010	2,36	2,48	427,9	407,3
P2-2b	SLM4	999	2,36	2,48	423,3	402,8
P2-3a	SLM5	1073	2,36	2,48	454,7	432,7
P2-3b	SLM5	1076	2,36	2,48	455,9	433,9
P2-4a	SLM6	1079	2,36	2,48	457,2	435,1
P2-4b	SLM6	1080	2,36	2,48	457,6	435,5
P2-5a	SLM7	997	2,36	2,48	422,5	402,0
P2-5b	SLM7	993	2,36	2,48	420,8	400,4

D. Ergänzende Berechnungsergebnisse

D.1 Phasenzusammensetzung im Gleichgewichtszustand

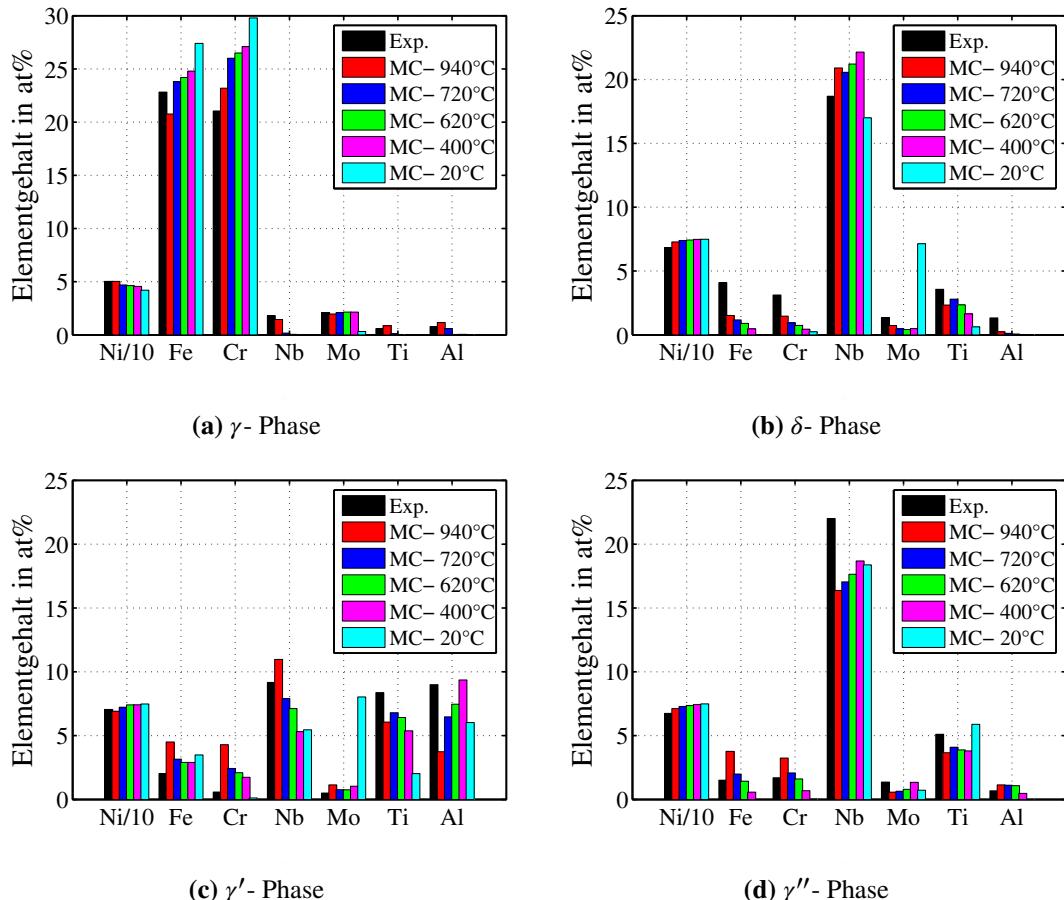


Abbildung D.1: Vergleich der Phasenzusammensetzung im Gleichgewichtszustand zwischen mittlerer experimentell bestimmter Chemie (für $T \geq 400$ °C nach Tab. C.2, C.5, C.3, C.4) und der MatCalc[©] Rechnung (γ'' - Phasenchemie für metastabilen Zustand) mit mc-ni-s06.tdb

D.2 Analyse Diffusionsdatenbank

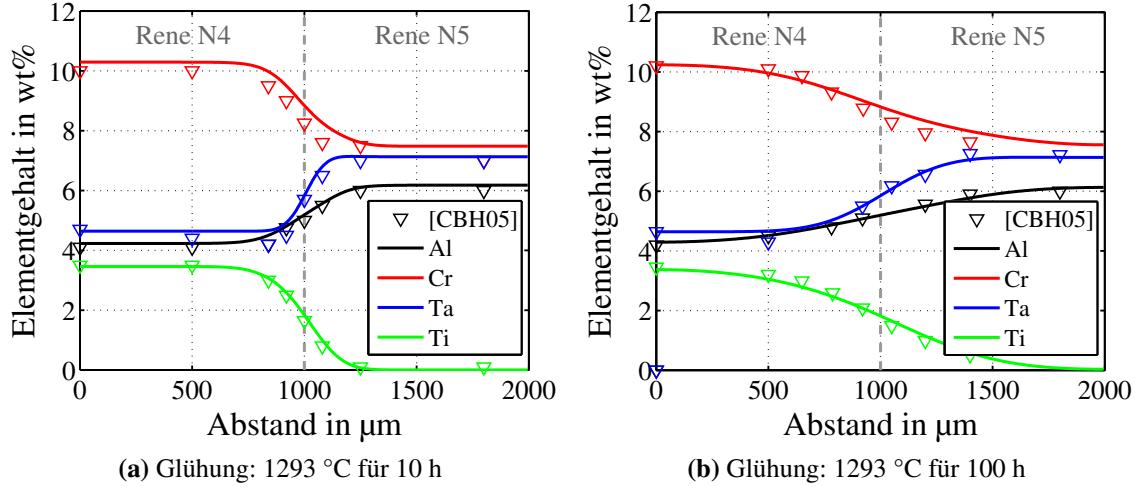


Abbildung D.2: Analyse der Multikomponentendiffusion am Diffusionspaar Rene N4 - Rene N5 bei 1293 °C für (a) 10 h und (b) 100 h, Berechnungsdatenbanken: mc-ni-s06.tdb, mc-ni-s07.ddb, Daten aus Referenz [CBH⁺05]

D.3 Analyse Segregation und Homogenisierung IN718

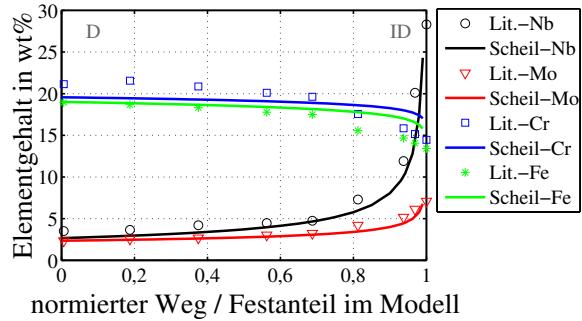


Abbildung D.3: Seigerungsprofile der Elemente in IN718: Vergleich zwischen Messdaten und der Scheil-Gleichung 4.27, Literaturdaten aus [MSW⁺11]

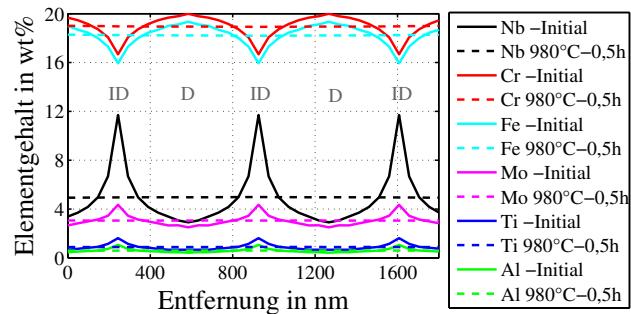


Abbildung D.4: Diffusionsrechnung bei 980 °C für 0,5 h für den definierten Dendritenarmabstand und die definierten Seigerungsprofile der Elemente für das IN718-SLM Material

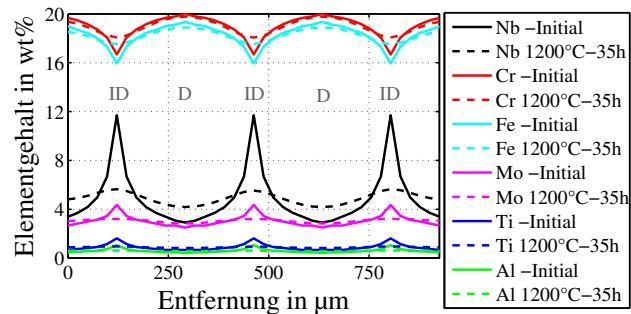


Abbildung D.5: Diffusionsrechnung bei 1200 °C für 35 h für den definierten Dendritenarmabstand und die definierten Seigerungsprofile der Elemente für das IN718-SX Material, Einfluss der Sekundärarme wird vernachlässigt

D.4 Analyse Ausscheidungsstart

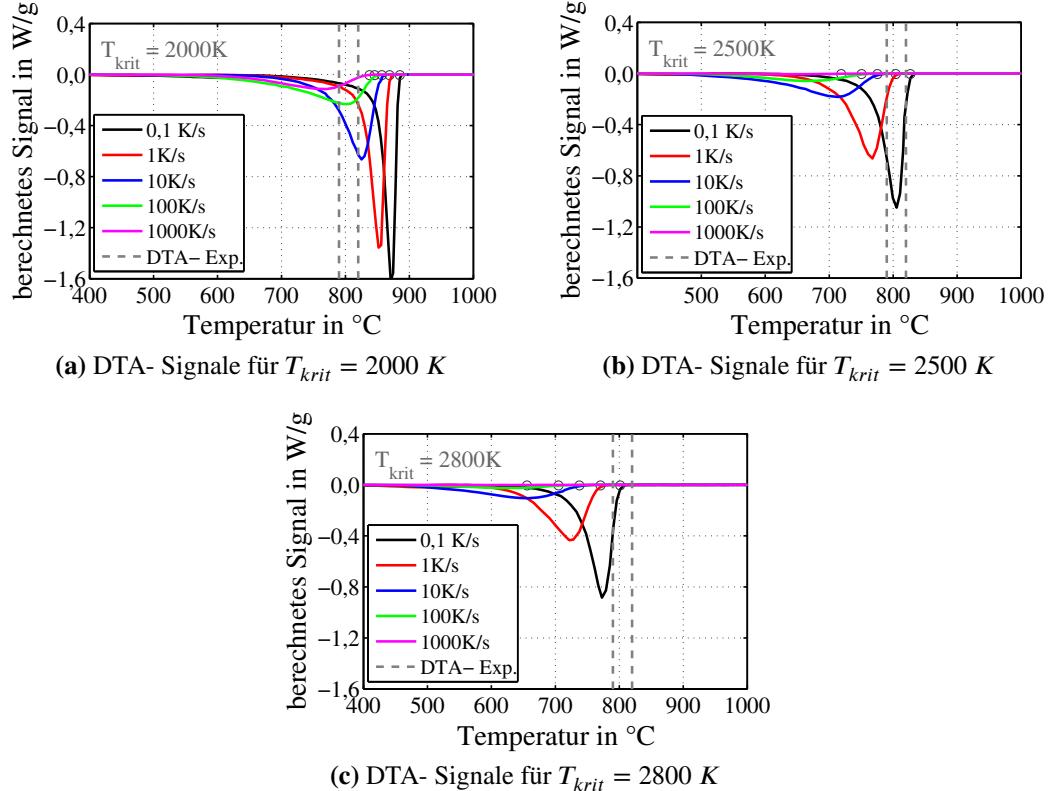


Abbildung D.6: Analyse der berechneten DTA- Signale für T_{krit} zwischen 2000 K und 2800 K und Abkühlraten zwischen 0,1 K/s und 1000 K/s bei einer Starttemperatur von 1000 °C im Vergleich zu den publizierten Temperaturbereichen von gemessenen DTA- bzw. DSC- Signalen [SSC97, NVL10, KHE16]

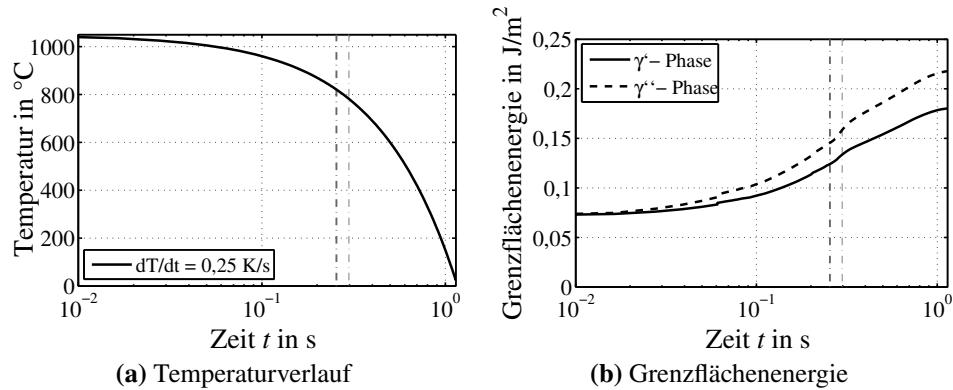


Abbildung D.7: Berechnete Grenzflächenenergie zur Keimbildung für $T_{krit} = 2500$ K mit einer Abkühlrate von 0,25 K/s bei einer Starttemperatur von 1050°C, -. Linie markiert den Ausscheidungsstartpunkt

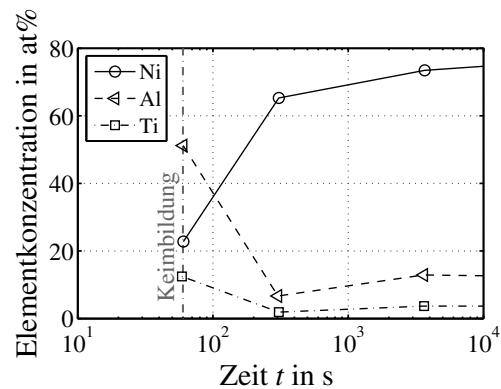


Abbildung D.8: Gemessene γ' -Keimzusammensetzung in ATI 718Plus® im Frühstadium der Ausscheidungsbildung nach Zickler et al. [ZRS⁺10]

D.5 γ' - und γ'' - Phasenkinetik bei 750 °C nach [SSC97, SA00]

Als Referenz für die Bewertung der berechneten Eingangsgrößen der Simulation (κ , D_z , a_i^j , δ_i^j , ε_i^j) in Kapitel 5.2 dienen Ergebnisse der Auslagerungsversuche von Slama et al. [SSC97, SA00]. Diese Versuche erfolgen bei 680 °C und 750 °C Auslagerung für maximal 100 h nach Wasserabschreckung von 990 °C. Messtechnisch erfasst sind die Partikelgröße und Gitterparameter der Phasen nach unterschiedlichen Zeiten bei angegebener Chemie und Wärmebehandlungsparametern. Abbildung D.9 zeigt die Berechnungsergebnisse der Phasenkinetik für die Auslagerung bei 750 °C. Die berechnete Partikelgröße ist in guter Übereinstimmung mit den Messdaten (siehe Abb. D.9g). Für eine einheitliche Darstellung der Ergebnisse in Kapitel 5.2 wird die Kinetik immer bei 750 °C berechnet. Alle von Slama et al. ermittelten Daten bei 680 °C Auslagerungstemperatur und der entsprechenden Auslagerungszeit werden für den Vergleich anhand der Simulation auf Auslagerungszeiten bei 750 °C partikelgrößenbezogen übertragen. Eine etwaige Temperaturabhängigkeit der einzelnen Messdaten wird dabei vernachlässigt. Die berechnete γ -, γ' - und γ'' - Phasenchemie wird im lösungsgeglühten und ausgelagerten Zustand mit Messdaten aus den Tabellen C.2, C.3 und C.4 verglichen. Im ausgelagerten Zustand wird der Wert bei 8 h, der Standardzeit der ersten Auslagerungsstufe, verwendet.

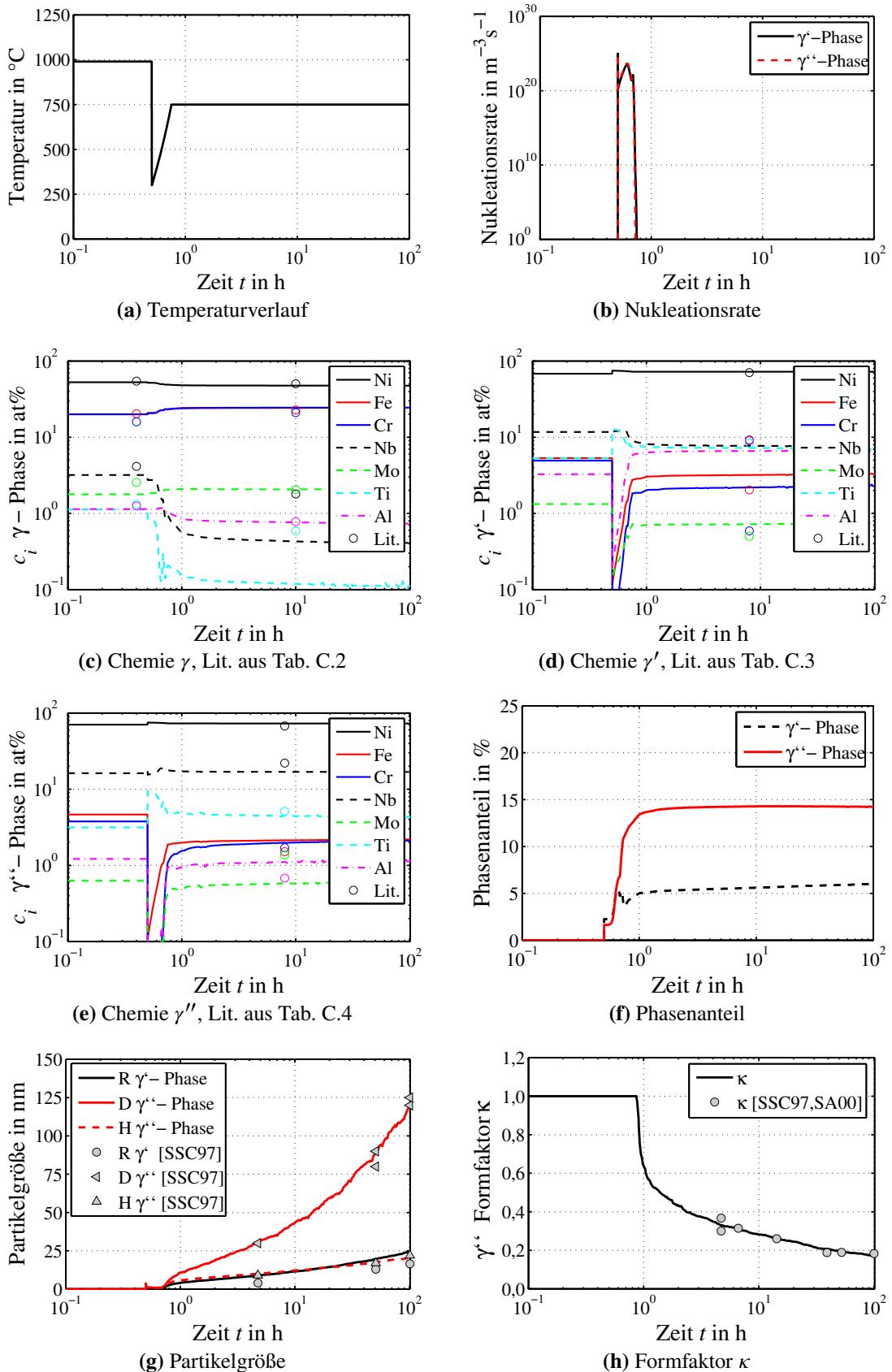


Abbildung D.9: Berechnete Ausscheidungskinetik nach Experimenten von [SSC97] bei 750 °C als Berechnungsgrundlage für die Bestimmung von Gitterparameter, Fehlpassung und Gitterverzerrung

D.6 γ' - und γ'' - Phasenkinetik bei 725 °C

Abbildung D.10 zeigt die Berechnungsergebnisse der Phasenkinetik für die Auslagerung bei 725 °C nach Wasserabschreckung von 1040 °C. Die berechnete γ -, γ' - und γ'' - Phasenchemie wird im lösungsgeglühten und ausgelagerten Zustand mit Messdaten aus Tabelle C.2, C.3 und C.4 verglichen. Im ausgelagerten Zustand wird der Wert bei 8 h, der Standardzeit der ersten Auslagerungsstufe, verwendet. Diese Berechnungsdaten werden ins Festigkeitsmodell zur Berechnung der Streckgrenze transferiert.

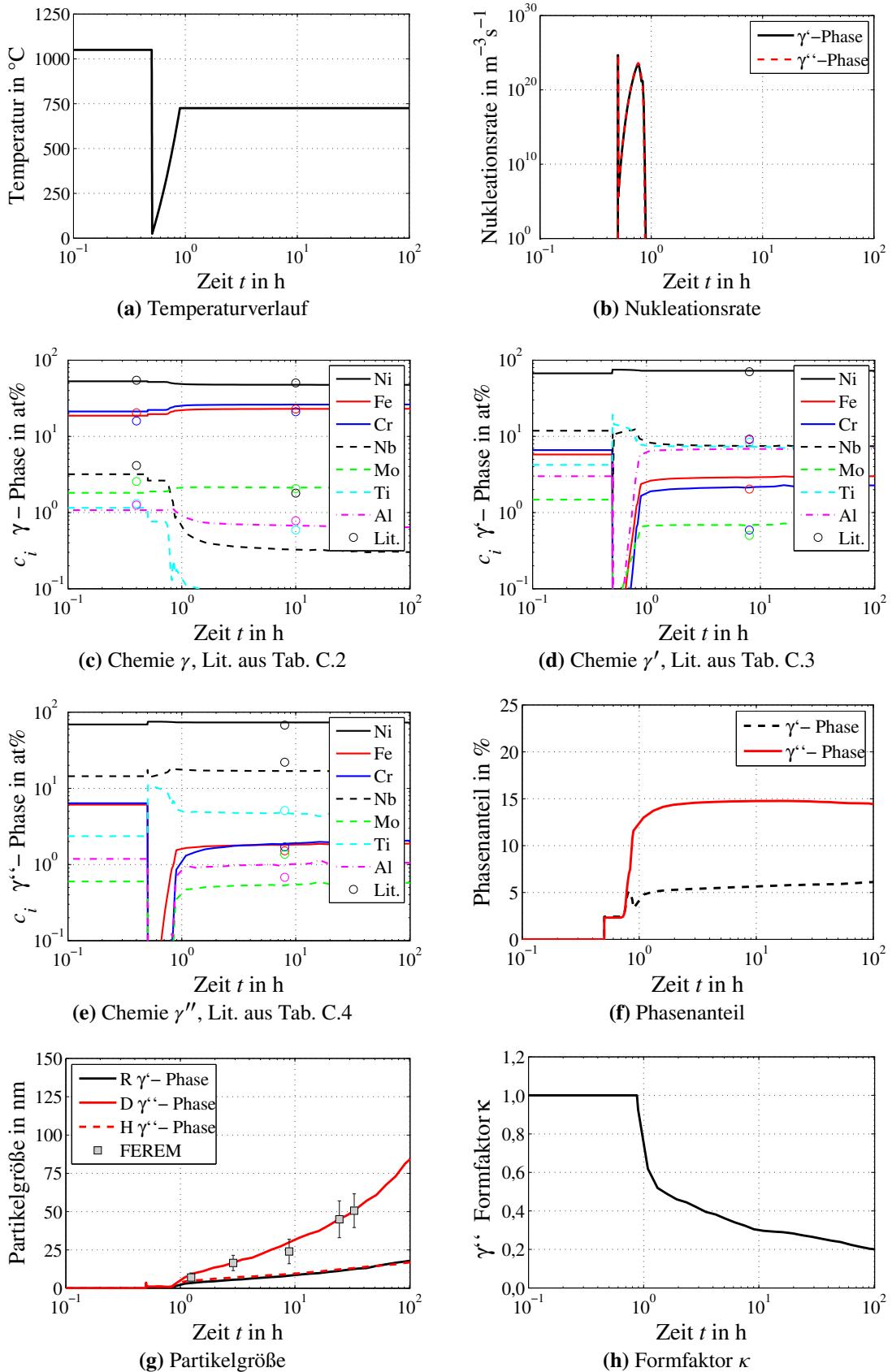


Abbildung D.10: Berechnete Daten der Phasenkinetik bei 725 °C

D.7 Phasentransformation γ'' - zu δ - Phase in IN718

Abbildung D.11 zeigt die δ - Phasenkinetik in Abhängigkeit von der Korngröße des Materials in Anlehnung an die experimentellen Studien von Azadian und Beaubois et al. [Aza04, BHC⁰⁴]. Da die Korngröße die Anzahl potenzieller Keimbildungsorte der δ - Phase steuert, ist die Kinetik sowohl in Simulation als auch im Experiment für das Material mit kleinerer Korngröße schneller.

Abbildung D.12 zeigt das Ergebnis der Kalibrierung des Phasentransformationsmodells in Abhängigkeit vom Umformgrad (bzw. ρ_{ges}) anhand der experimentellen Daten von Liu et al. [LXY^{97a}, LCX⁹⁹]. Im unverformten Zustand setzt die Phasentransformation ab einem γ'' - Durchmesser von 150 nm ein. D_Z nimmt mit steigendem Umformgrad ab, wodurch eine Beschleunigung der Transformation erreicht bzw. abstrahiert wird. Hierdurch ist es möglich die experimentell beobachtete Phasenkinetik und Phasentransformation zwischen γ'' - und δ - Phase abhängig vom Umformgrad phänomenologisch gut zu beschreiben.

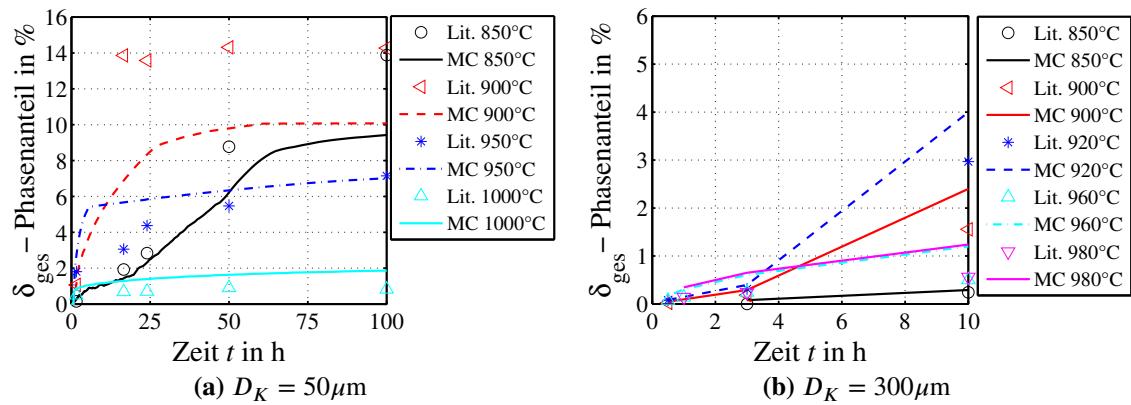


Abbildung D.11: Korngrößenabhängige Phasentransformation γ'' - zu δ -Phase in verformungsfreien IN718, Korngöße D_K mit $50\mu\text{m}$ und $300\mu\text{m}$, Literaturdaten nach [Aza04, BHC⁰⁴]

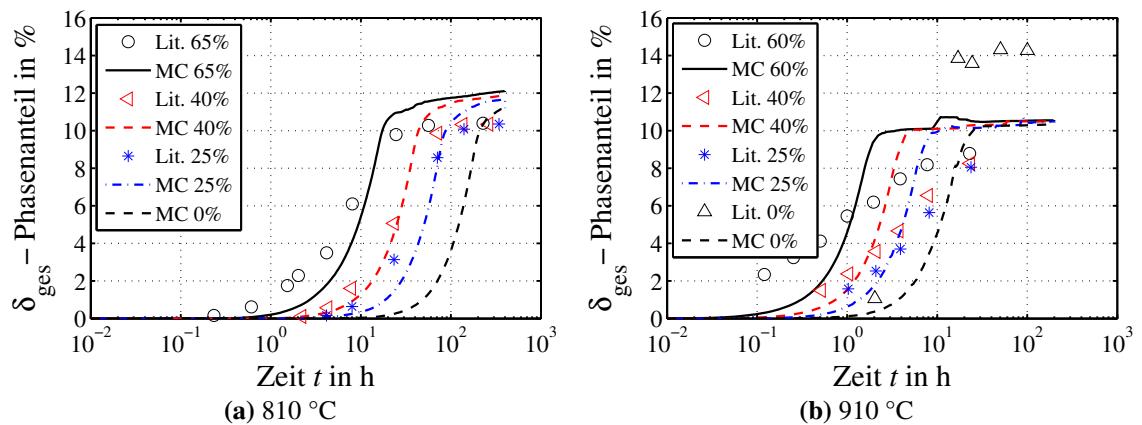


Abbildung D.12: Verformungsinduzierte Phasentransformation γ'' - zu δ -Phase in IN718 bei $810\text{ }^{\circ}\text{C}$ und $910\text{ }^{\circ}\text{C}$ Auslagerungstemperatur, Literaturdaten nach [LXY^{97a}, LCX⁹⁹]

D.8 Ausscheidungskinetik entsprechend Härtemessungen

In Abbildung D.13 sind ergänzend zum Vergleich zwischen gemessenen Härtekurven und berechneter $\tau_{P,ges}$ die Berechnungsergebnisse für D_z , R_k , $f_{\gamma'}$, $f_{\gamma''}$ und den Härtungsbeitrag $\tau_P^{\gamma'}$, $\tau_P^{\gamma''}$ der einzelnen Phasen dargestellt. Die zum maximalen $\tau_{P,ges}$ gehörigen D_z , R_k , $f_{\gamma'}$, $f_{\gamma''}$ sowie $\tau_P^{\gamma'}$ und $\tau_P^{\gamma''}$ sind über farbige Symbole markiert. Abbildung D.13b korreliert Lage und Betrag des maximalen $\tau_P^{\gamma'}$ und $\tau_P^{\gamma''}$ mit der entsprechenden Partikelgröße D_z und R_k bei vorliegendem Phasenvolumenanteil.

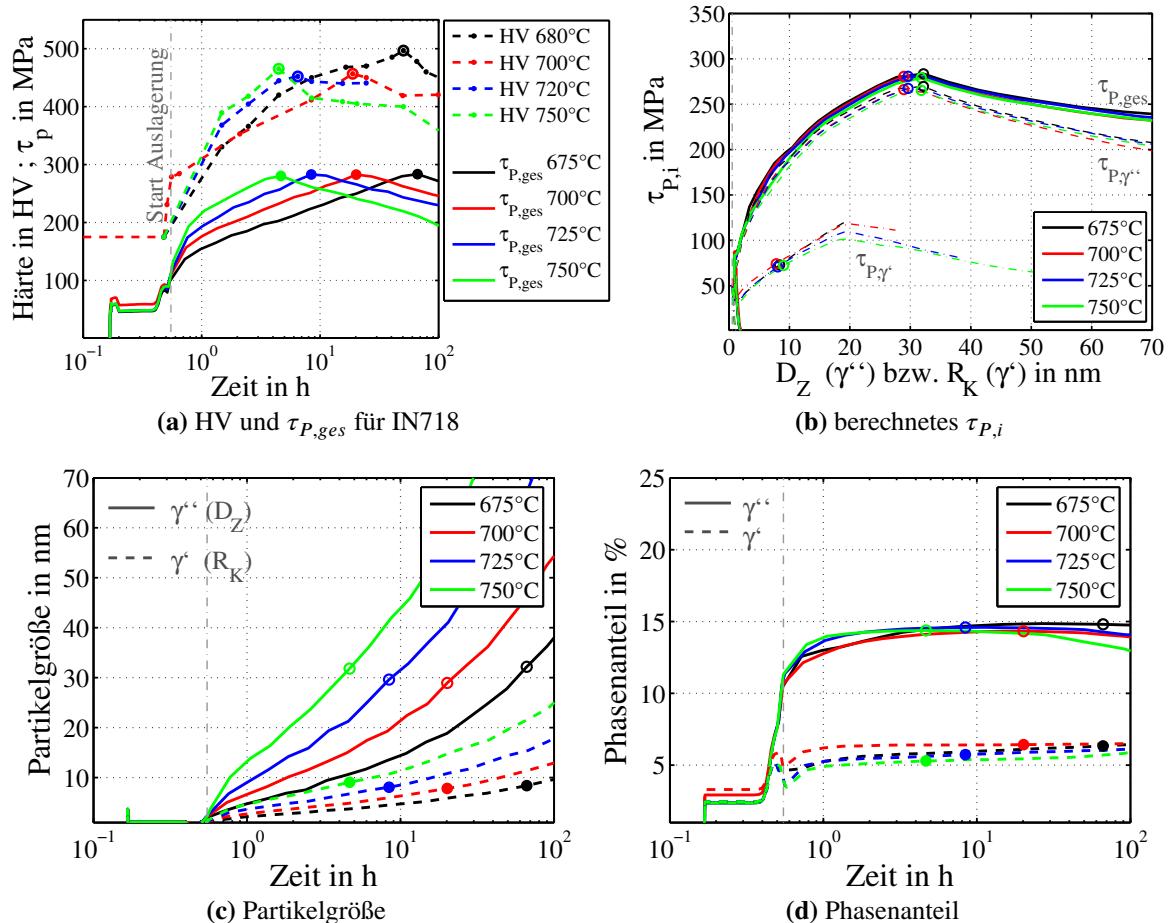


Abbildung D.13: Berechneter Ausscheidungszustand und τ_P^j entsprechend der Härtemessungen von [Aza04, SSC97] für die einstufige Auslagerung nach Lösungsglühen

D.9 Feinkornhärtung des SLM- Materials

Abbildung D.14 zeigt vergleichend die Feinkornhärtung für IN718-SLM P1 und IN718-SLM P2 für die aus EBSD- Daten abgeleitete Korngröße. Für die Berechnung der Feinkornhärtung wird für das SLM- Material der minimale Feret ($F_b = F_a/A_V$) als D_K verwendet. Dargestellt ist τ_{HP} über F_a für jedes Korn. Der Mittelwert wird kornflächengewichtet bestimmt.

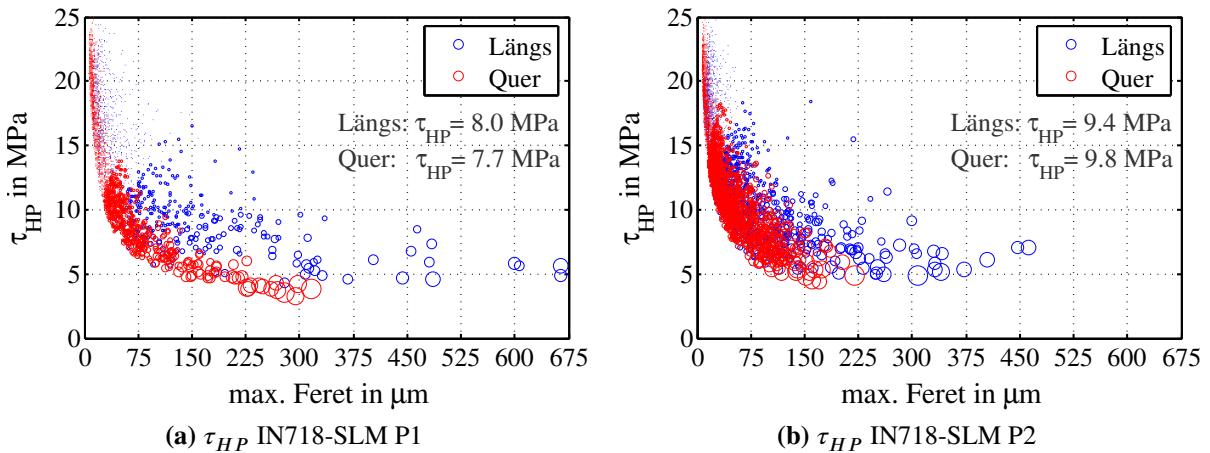


Abbildung D.14: Korngrößenbezogene Feinkornhärtung τ_{HP} für IN718-SLM (a) P1 und (b) P2

D.10 Daten der Sensitivitätsbewertung

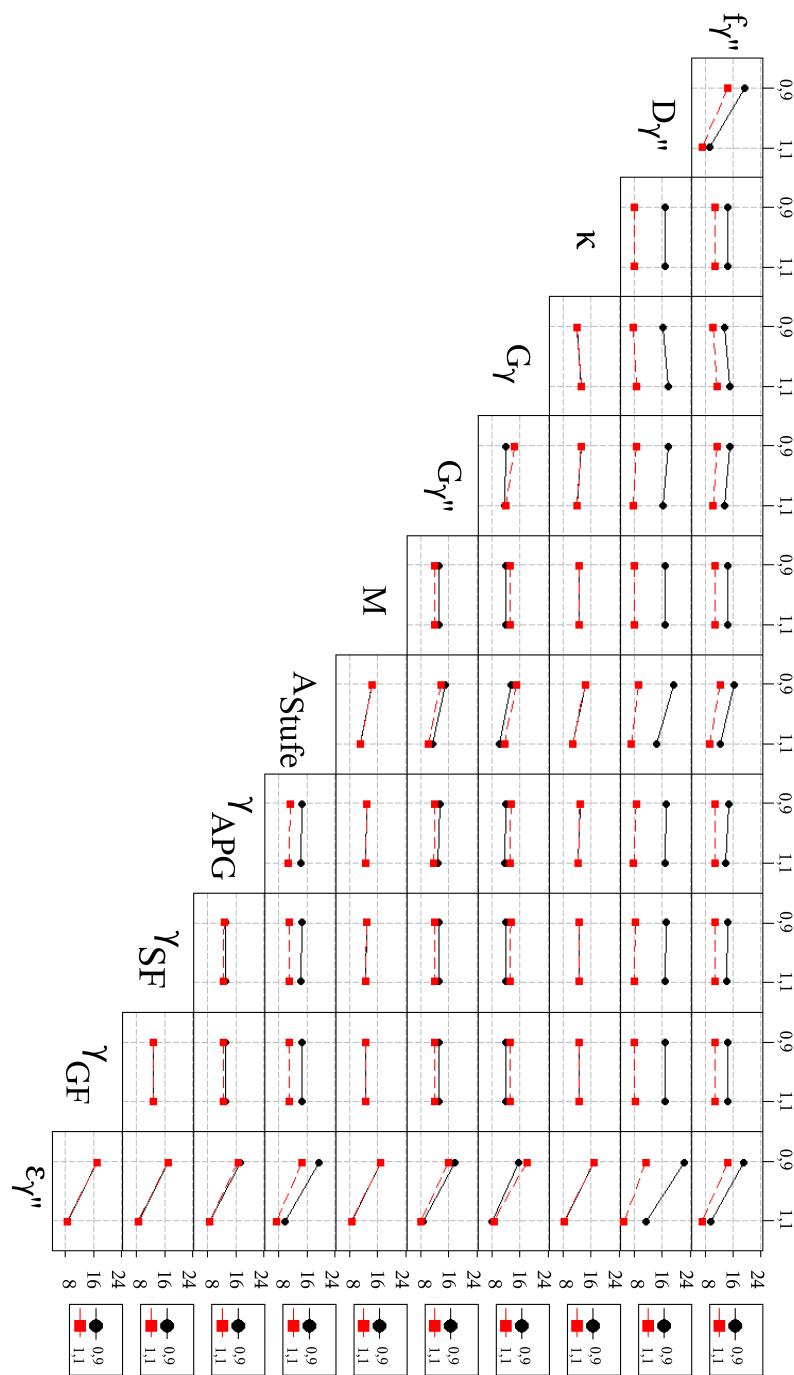


Abbildung D.15: Interaktionsdiagramm: Parametereinfluss auf die Auslagerungszeit bis $R_{p,max}$

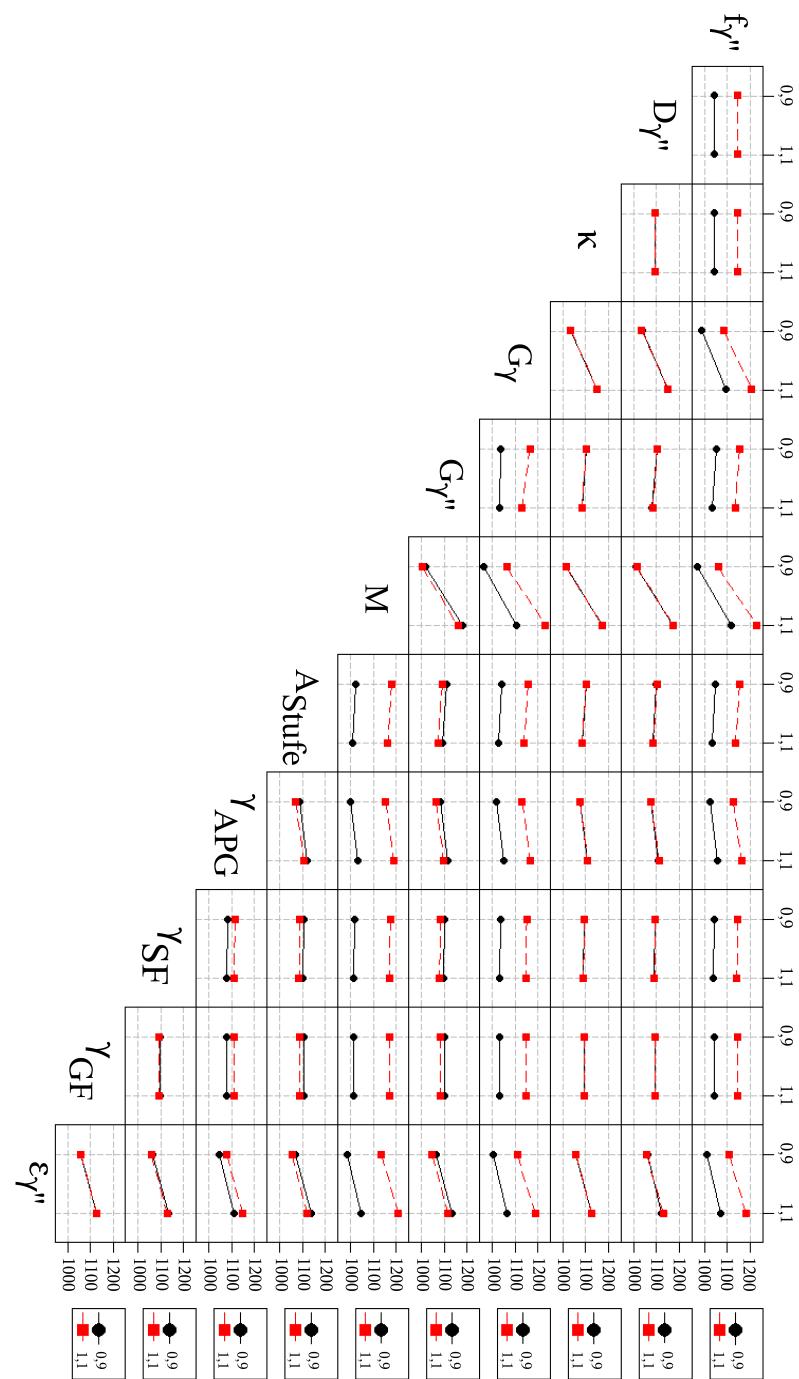


Abbildung D.16: Interaktionsdiagramm: Parametereinfluss auf die Höhe der Streckgrenze

Patente und Veröffentlichungen

Patente:

Titel: Simulationsverfahren zur Entwicklung eines Herstellungsverfahrens

Autor: T. Maiwald-Immer, T. Göhler, A. Fischersworrung-Bunk

Veröffentlichungsnummer: WO2016082810 A1

Veröffentlichungsdatum: 02.06.2016

URL-Link: <https://www.google.com/patents/WO2016082810A1?cl=und>

Titel: Belichtung bei generativer Fertigung

Autor: T. Göhler, T. Hess, T. Maiwald-Immer

Veröffentlichungsnummer: EP2886226 A3

Veröffentlichungsdatum: 02.03.2016

URL-Link: <https://google.com/patents/EP2886226A3?cl=ko>

Veröffentlichungen:

MAIWALD-IMMER, T.; GÖHLER, T.; FISCHERSWORRING-BUNK, A.; OSMANLIC, F.; KÖRNER, C.; BAUEREISS, A.: Application of ICME Methods for the Development of rapid Manufacturing Technologies. Version: 2013. https://doi.org/10.1007/978-3-319-48194-4_12. In: AL., C. C. (Hrsg.): *Proceedings of the 2nd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME)*. Salt Lake City, Utah: Springer International Publishing, 2013. ISBN 9783319481944, S. 75 bis 80

MAIWALD-IMMER, T.; GÖHLER, T.; FISCHERSWORRING-BUNK, A.: From Melt Pool to Strength Application of ICME Methods for the Development of Rapid Manufacturing Technologies. Version: 2015. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/9781119139508.ch26>. In: POOLE, W. (Hrsg.): *Proceedings of the 3rd World Congress on Integrated Computational Materials Engineering (ICME 2015)*. Colorado Springs, Colorado: Wiley-Blackwell, 2015. ISBN 9783319486123, S. 215 bis 220

MAIWALD-IMMER, T.; GÖHLER, T.; FISCHERSWORRING-BUNK, A.: From melt pool to strength - Capabilities and limitations of ICME methods in case of AM. <http://congress.cimne.com/icme2016/admin/files/filepaper/p106.pdf>. Version: 2016. Vortrag gehalten auf dem *2nd International Workshop on Software Solutions for Integrated Computational Materials Engineering*, 12. bis 15. April 2016, Barcelona, Spanien, PDF eingesehen am: 25.05.2016

