

Digitale Strategie zur Entwicklung von neuen, heißrisswiderstandsfähigen Al-Pulverlegierungen für SLM (Selektives Laserstrahlschmelzen) (DiStAl)

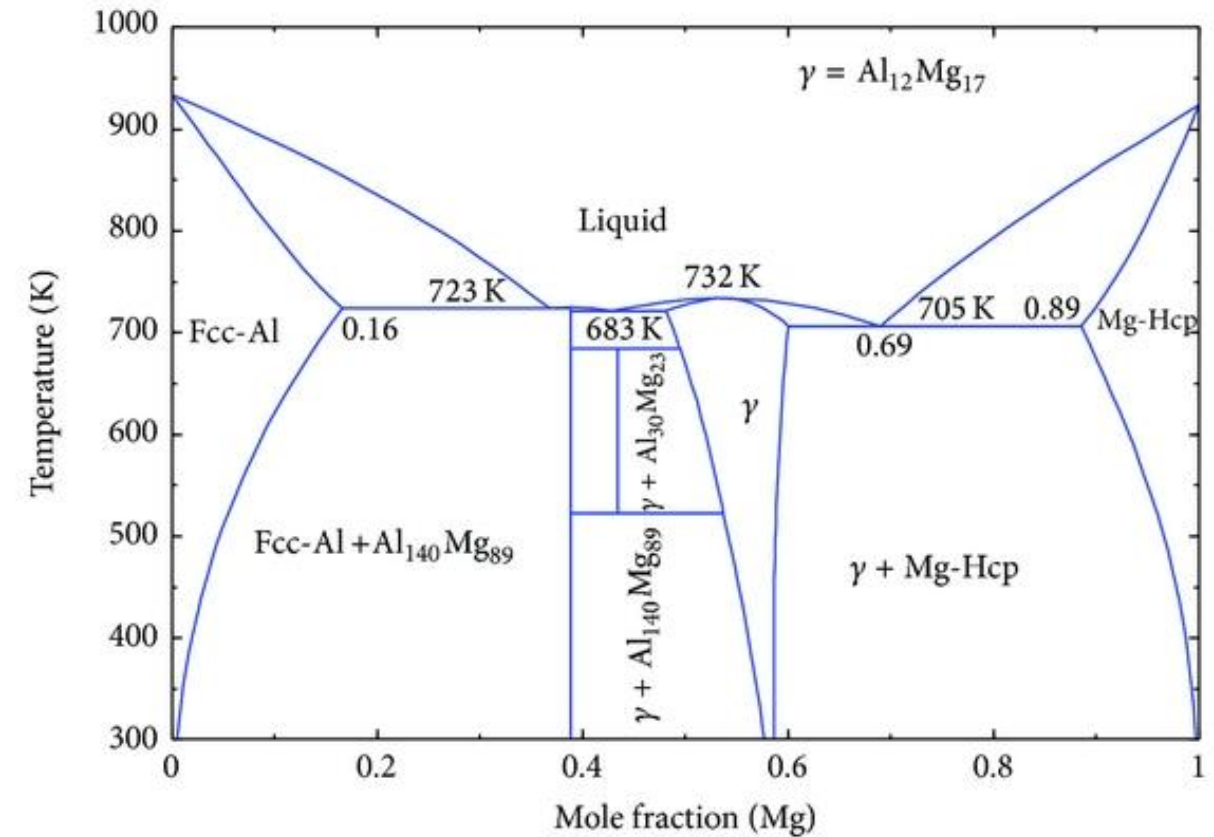
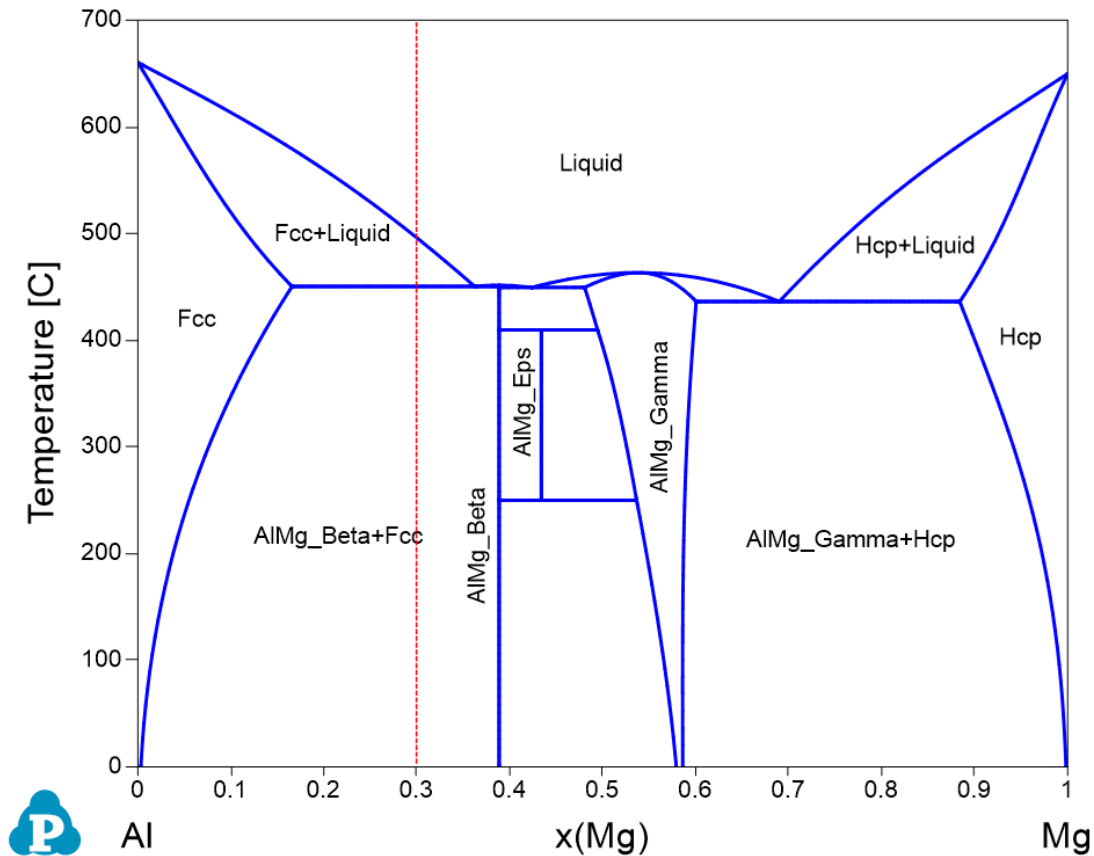
Teilvorhaben: Molekulardynamische Untersuchung des Heißrisswiderstands in Al-Pulverlegierungen unter Berücksichtigung von SLM-spezifischen Randbedingungen

Dennis Rapp, Meltem Sönmez, Peter Binkele

Institut für Materialprüfung, Werkstoffkunde und Festigkeitslehre (IMWF)
Universität Stuttgart



Gleichgewichts Al-Mg-Phasendiagramm bei “unendlich” langsamer Abkühlung



Molekulardynamik-Software: LAMMPS [1] S. Plimpton, J Comp Phys, 117, 1-19 (1995)

Visualierungs- und Analysesoftware: Ovito [2] A. Stukowski,
“Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool”,
Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 18 (2010), 015012.

Embedded-Atom-Method (EAM) Potential:

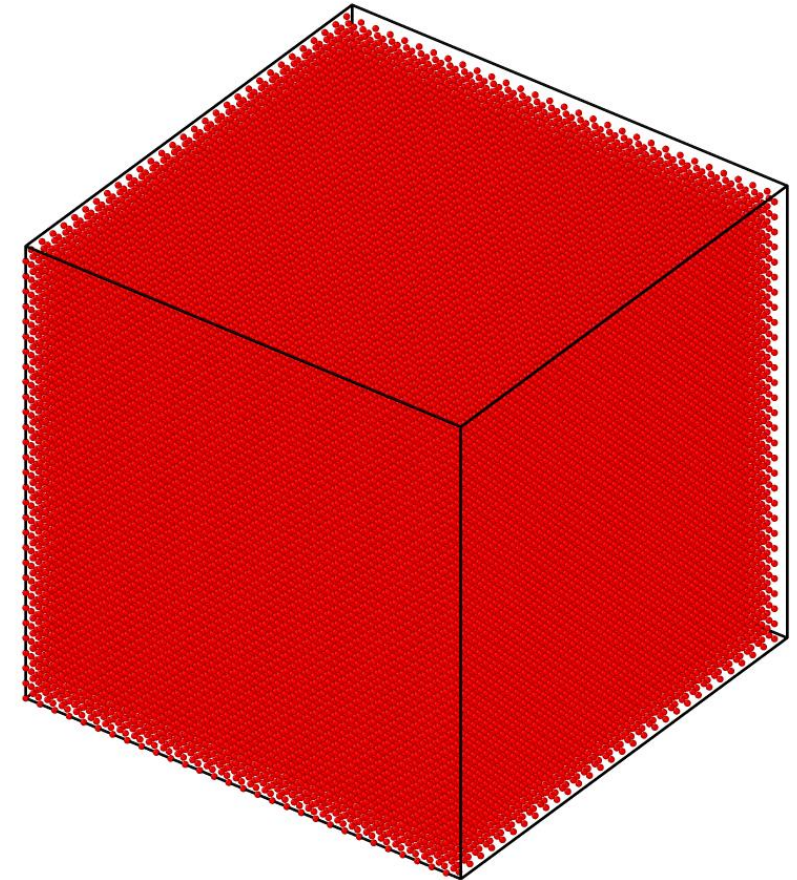
- **AlMg.liu.eam.alloy** [3] X.-Y. Liu, and J.B. Adams (1998), "Grain-boundary segregation in Al-10%Mg alloys at hot working temperatures", Acta Materialia, 46(10), 3467-3476.
- **Al-Mg.eam.fs** [4] M.I. Mendelev, M. Asta, M.J. Rahman, and J.J. Hoyt (2009), "Development of interatomic potentials appropriate for simulation of solid-liquid interface properties in Al-Mg alloys", Philosophical Magazine, 89(34-36), 3269-3285.

Modified-Embedded-Atom-Method (MEAM) Potential:

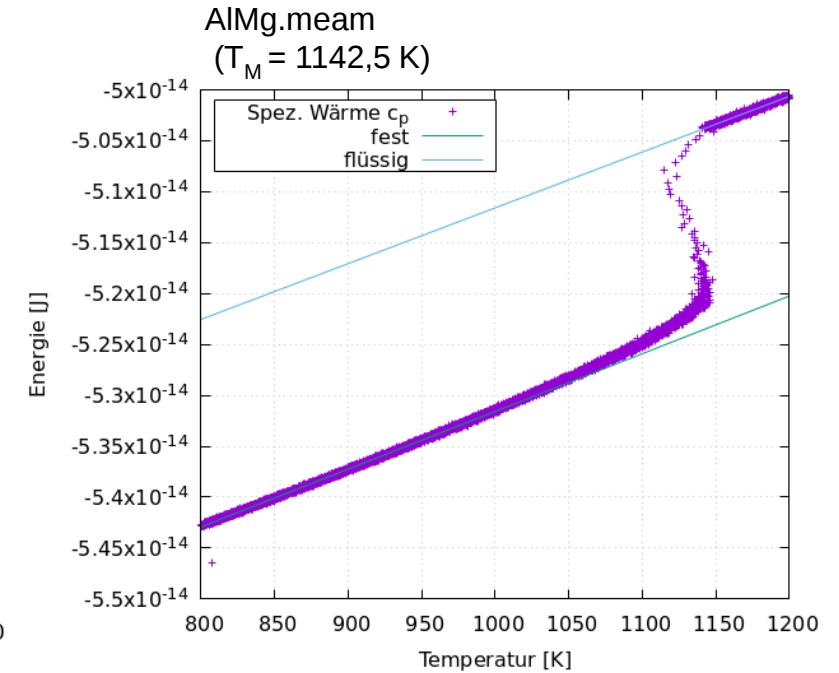
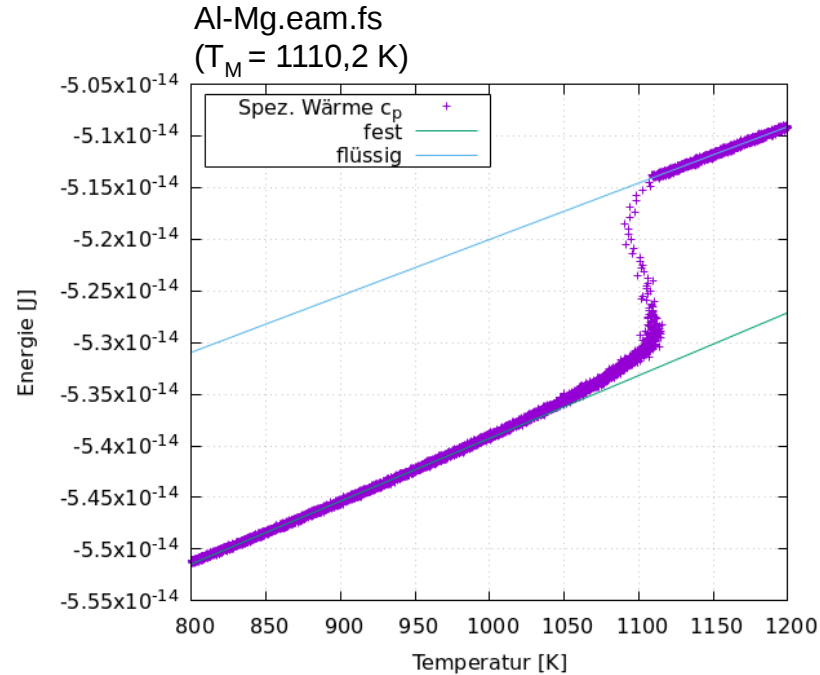
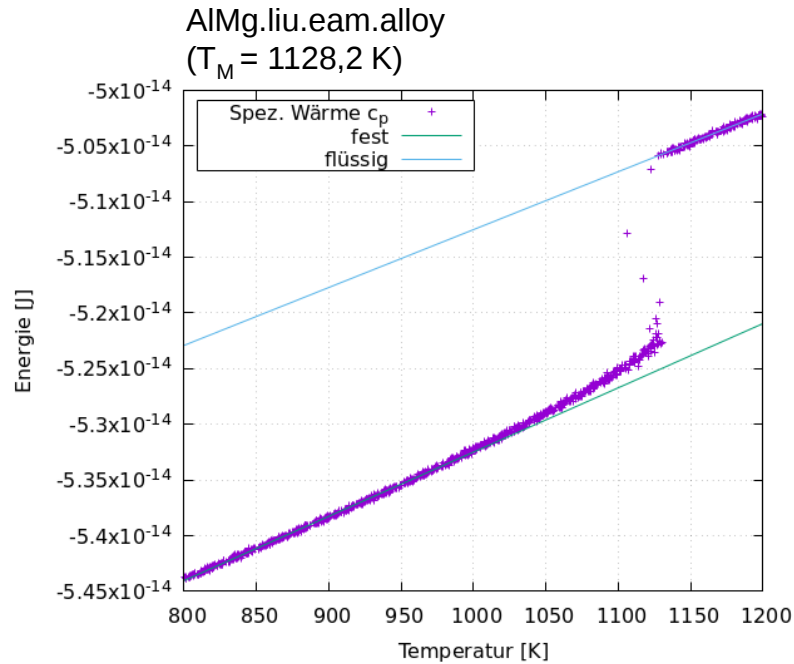
- **AlMg.meam** [5] Y.-M. Kim, N.J. Kim, and B.-J. Lee (2009), "Atomistic Modeling of pure Mg and Mg-Al systems", Calphad, 33(4), 650-657.

Simulationsdaten:

- Boxgröße: 30x30x30 Gitterkonstanten
- Gitterkonstante: 4,05 Å
- Orientierung: [1 0 0] [0 1 0] [0 0 1]
- Aufheizvorgang: von 800 K bis 1200 K
- Zeitschrittweite: 1 fs
- Zeitschritte: 1000000
- Gesamt simulierte Zeit: 1 ns
- Aufheizgeschwindigkeit: 400 K/ns



Fest-Flüssig-Phasenübergänge:



→ Dabei entspricht die isobare Wärmekapazität c_p den Steigungen der Geraden

Vergleich der Wärmekapazität c_p der verschiedenen Potentiale:

Potential	AlMg.liu.eam.alloy	Al-Mg.eam.fs	AlMg.meam
Wärmekapazität c_p im festen Zustand in J/gK	1,193	1,255	1,171
Wärmekapazität c_p im flüssigen Zustand in J/gK	1,075	1,128	1,132

→ Die spezifische Wärmekapazität von reinem Aluminium im festen Zustand beträgt 0,945 J/gK

[6] K., Stephan, K., Mayinger, F. (2013). Die kalorischen Zustandsgleichungen und die spezifischen Wärmekapazitäten.

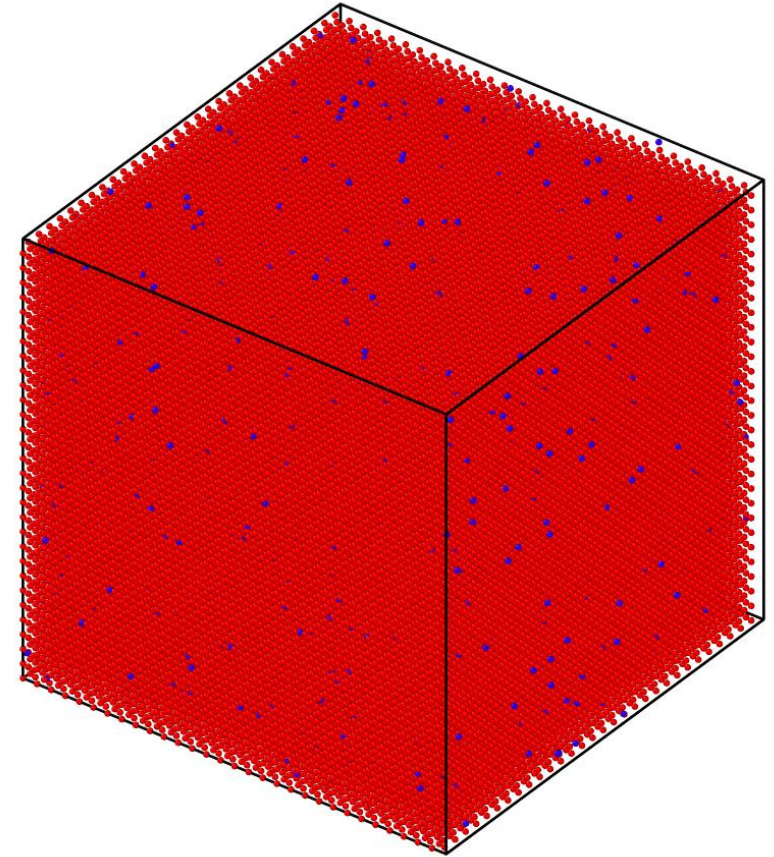
In: Thermodynamik. Springer-Lehrbuch. Springer Vieweg, Berlin, Heidelberg.

→ Die spezifische Wärmekapazität von reinem Aluminium im flüssigen Zustand beträgt 1,127 J/gK

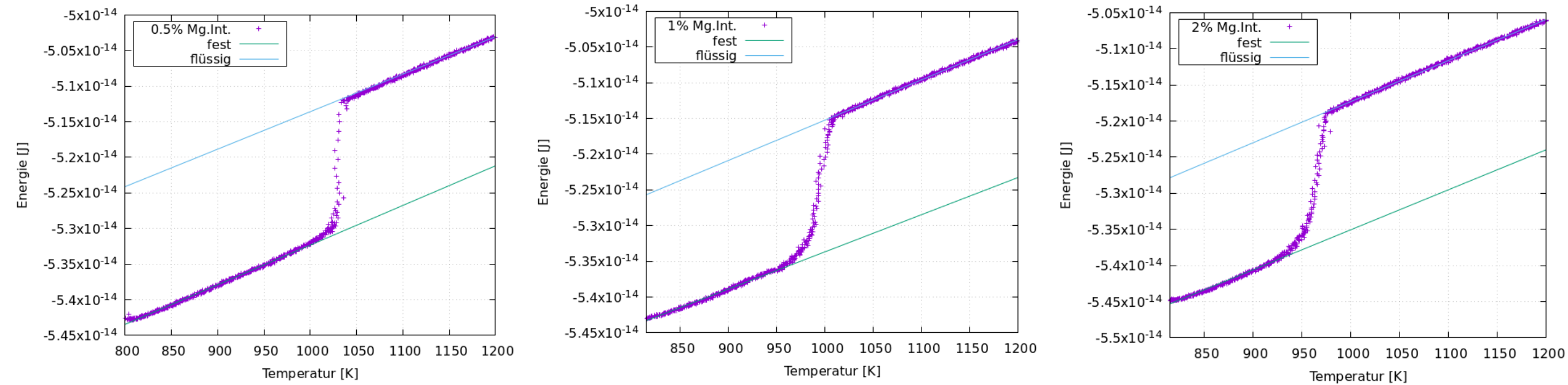
[7] Leitner, M., Leitner, T., Schmon, A. et al. Thermophysical Properties of Liquid Aluminum. Metall Mater Trans A 48, 3036–3045 (2017).

Simulationsdaten:

- Boxgröße: 30x30x30 Gitterkonstanten
- Gitterkonstante: 4,05 Å
- Orientierung: [1 0 0] [0 1 0] [0 0 1]
- Aufheizvorgang 01: von 800 K bis 1200 K
- Aufheizvorgang 02: von 600 K bis 1000 K
- Zeitschrittweite: 1 fs
- Zeitschritte: 1000000
- Gesamt simulierte Zeit: 1 ns
- Aufheizgeschwindigkeit: 400 K/ns
- Interstitielles Magnesium mit unterschiedlichen Konzentrationen hinzugefügt
- Simulationen wurden mit dem AlMg.liu.eam.alloy Potential durchgeführt

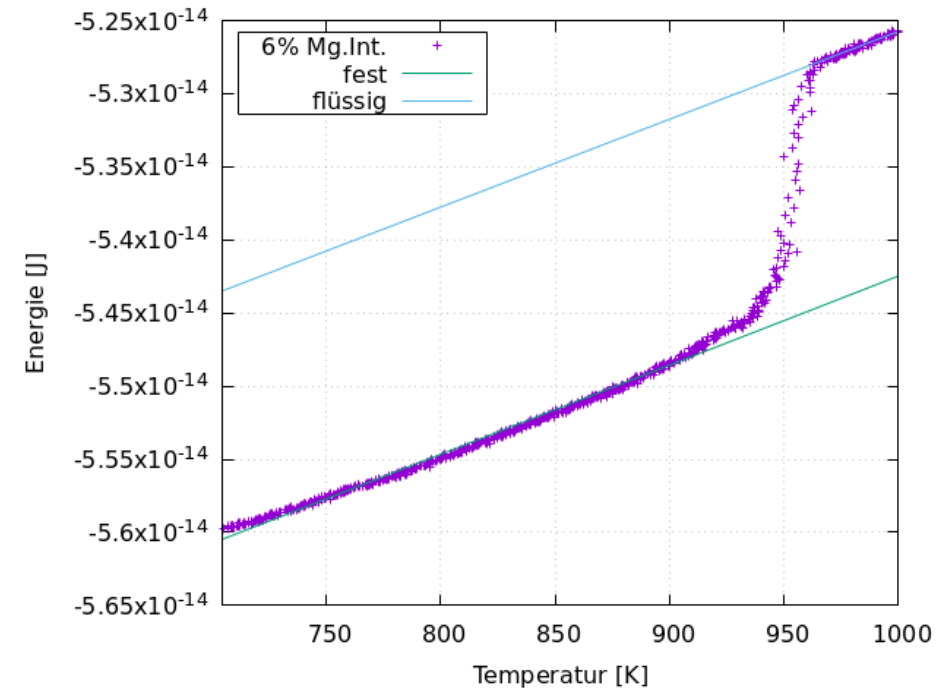
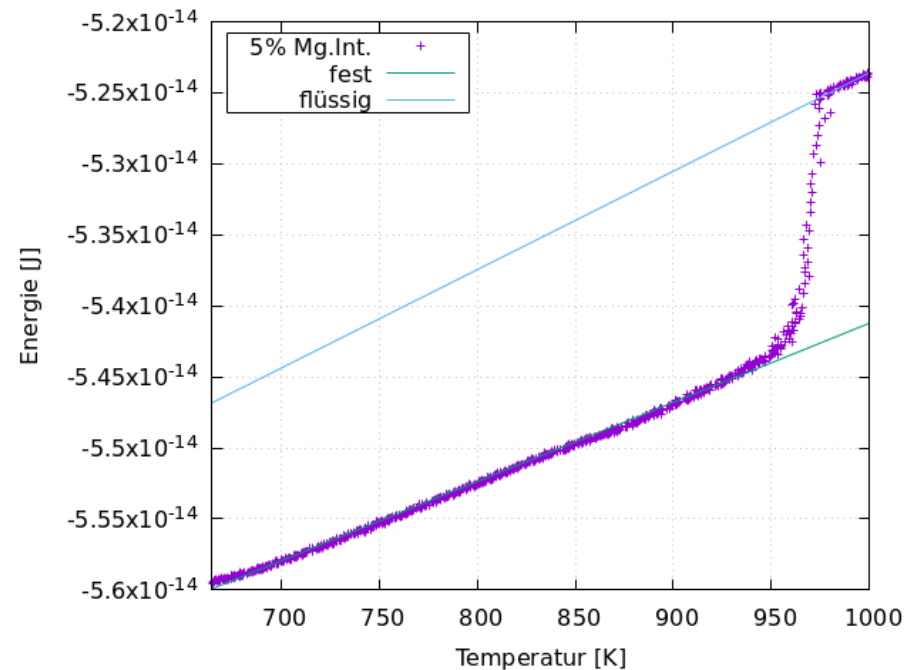


MD-Ergebnisse:



Fest-Flüssig-Phasenübergang für unterschiedliche interstitielle Mg Konzentrationen

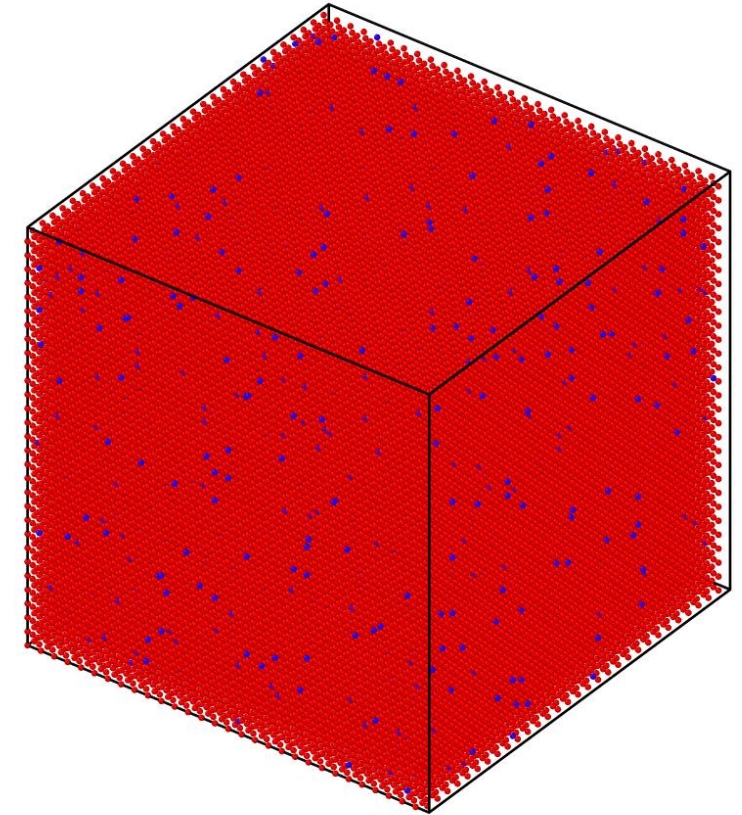
MD-Ergebnisse:



Fest-Flüssig-Phasenübergang für unterschiedliche interstitielle Mg Konzentrationen

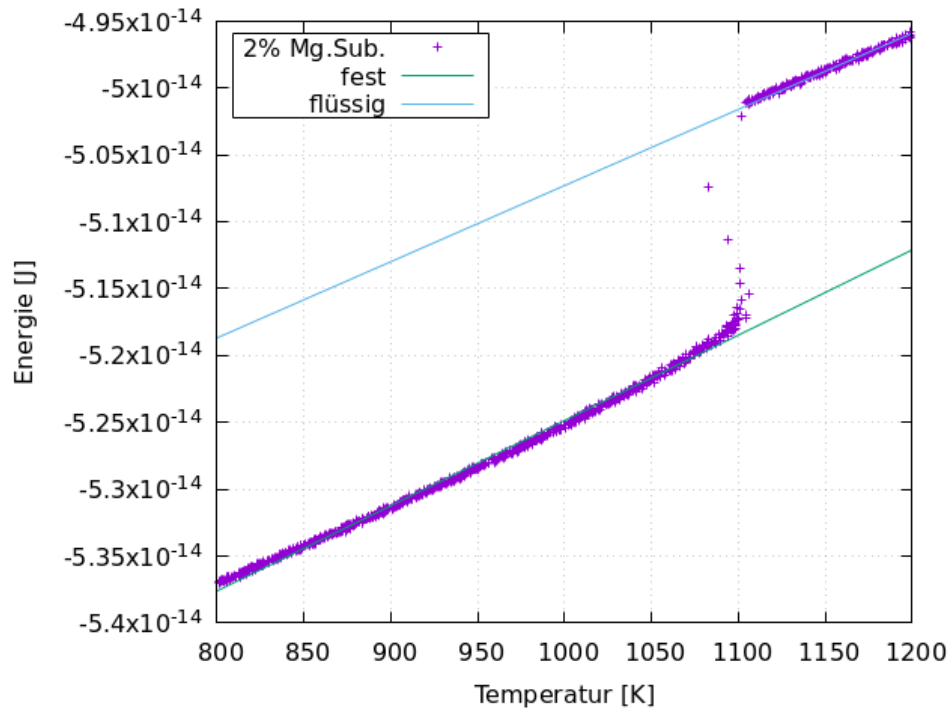
Simulationsdaten:

- Boxgröße: 30x30x30 Gitterkonstanten
- Gitterkonstante: 4,05 Å
- Orientierung: [1 0 0] [0 1 0] [0 0 1]
- Aufheizvorgang 01: von 800 K bis 1200 K
- Aufheizvorgang 02: von 600 K bis 1000 K
- Zeitschrittweite: 1 fs
- Zeitschritte: 1000000
- Gesamt simulierte Zeit : 1 ns
- Aufheizgeschwindigkeit: 400 K/ns
- Substitutionelles Magnesium mit unterschiedlichen Konzentrationen hinzugefügt
- Simulationen wurden mit dem AlMg.liu.eam.alloy Potential durchgeführt

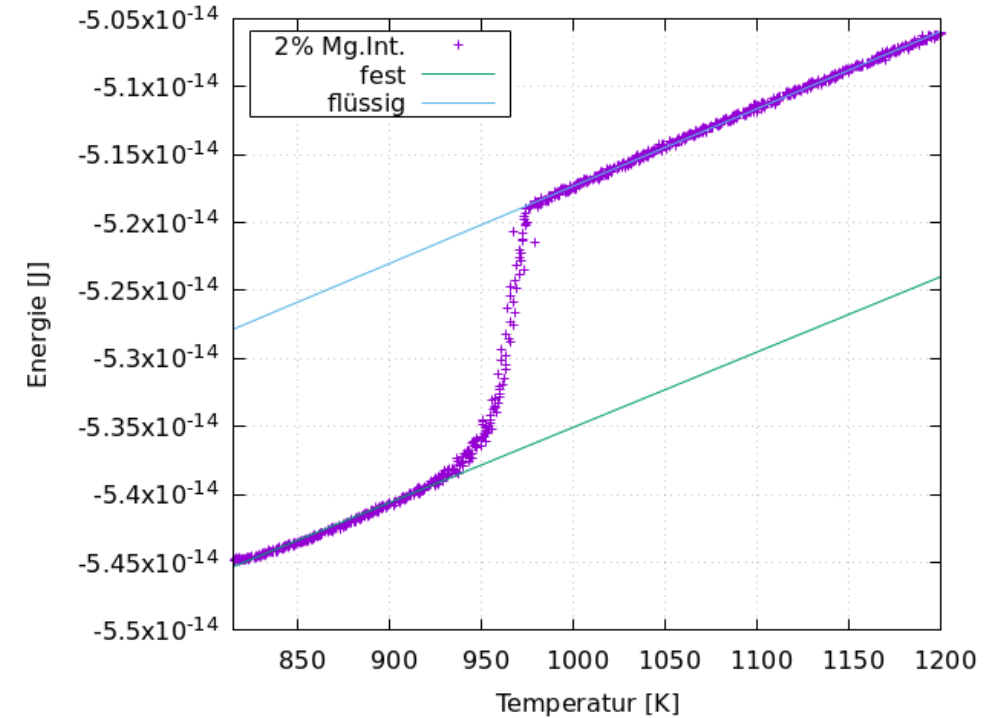


Vergleich von substitutionellen und interstitiellen Magnesium:

$T_m = 1104,01$

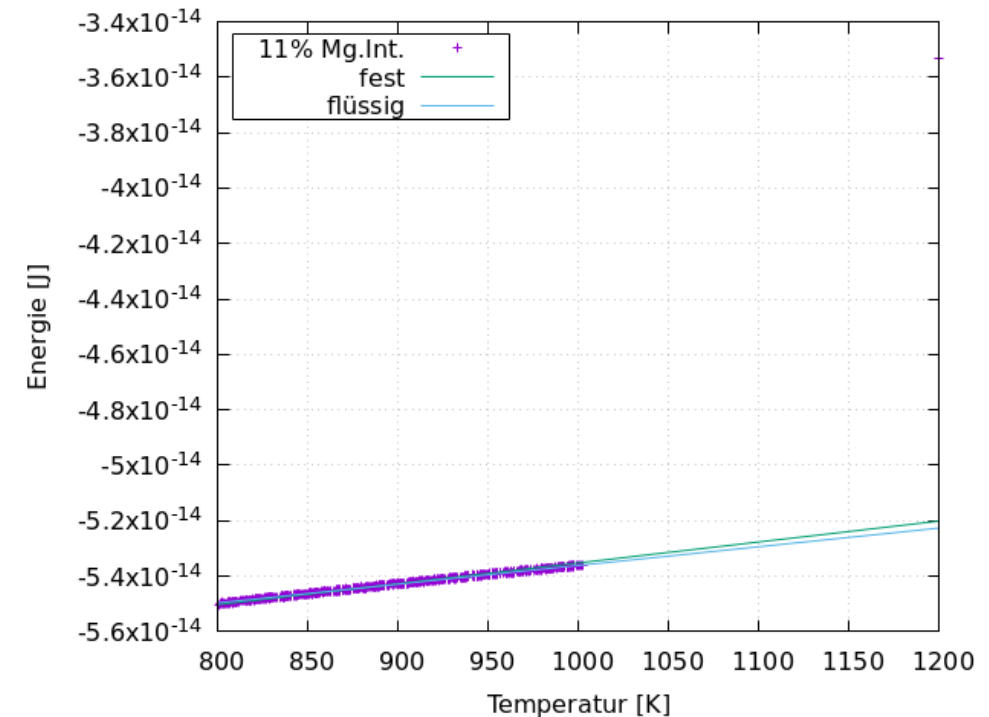
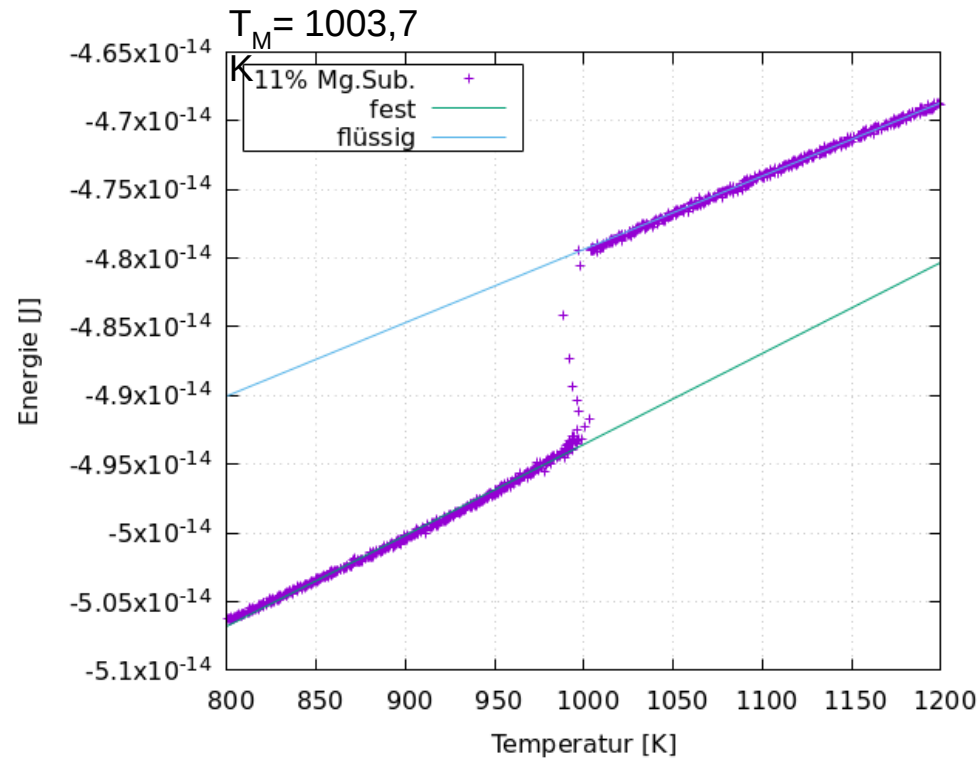


$T_m = 973,8$ K



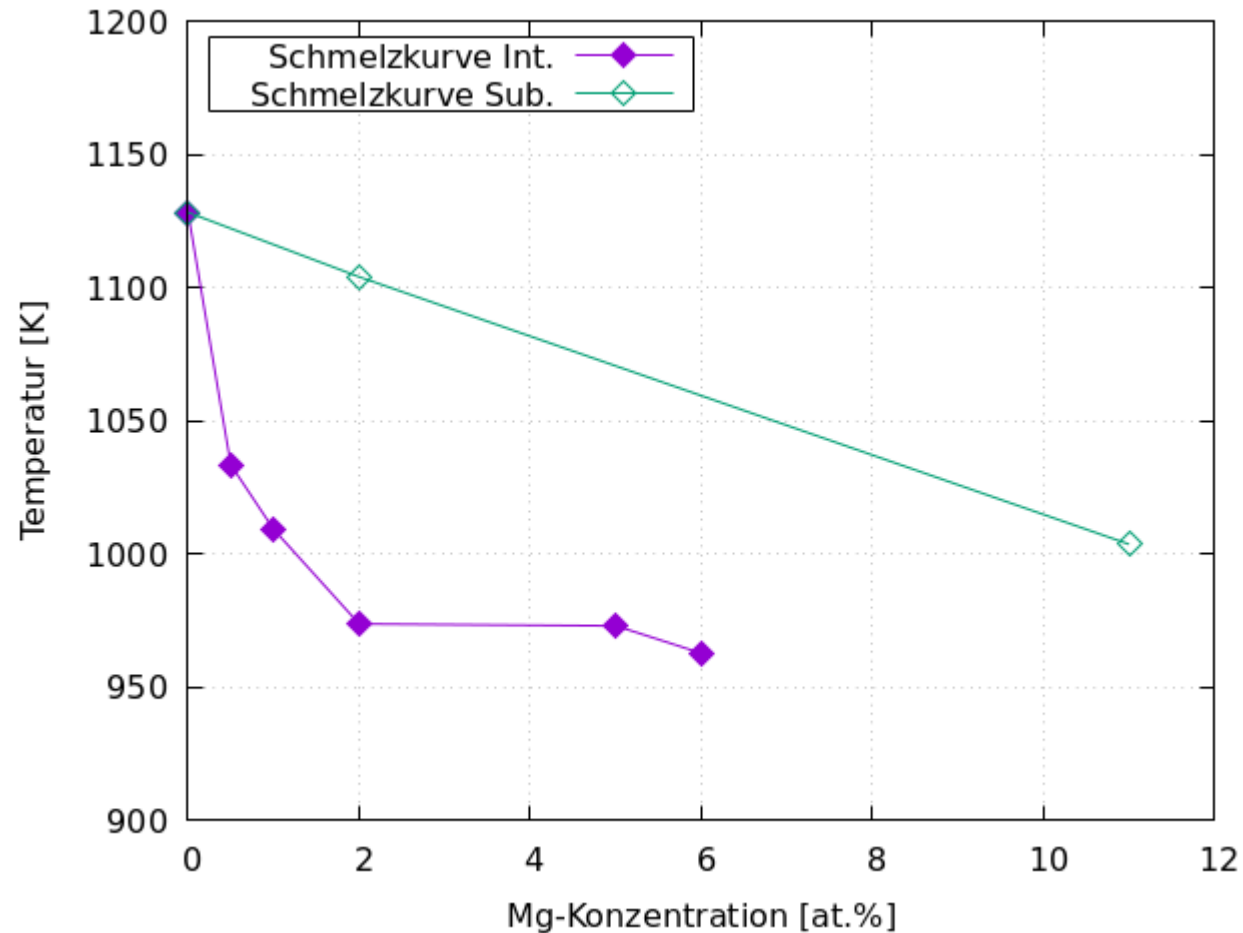
→ Die Schmelztemperatur ist um 130 K verschoben

Vergleich von substitutionellen und interstitiellen Magnesium:

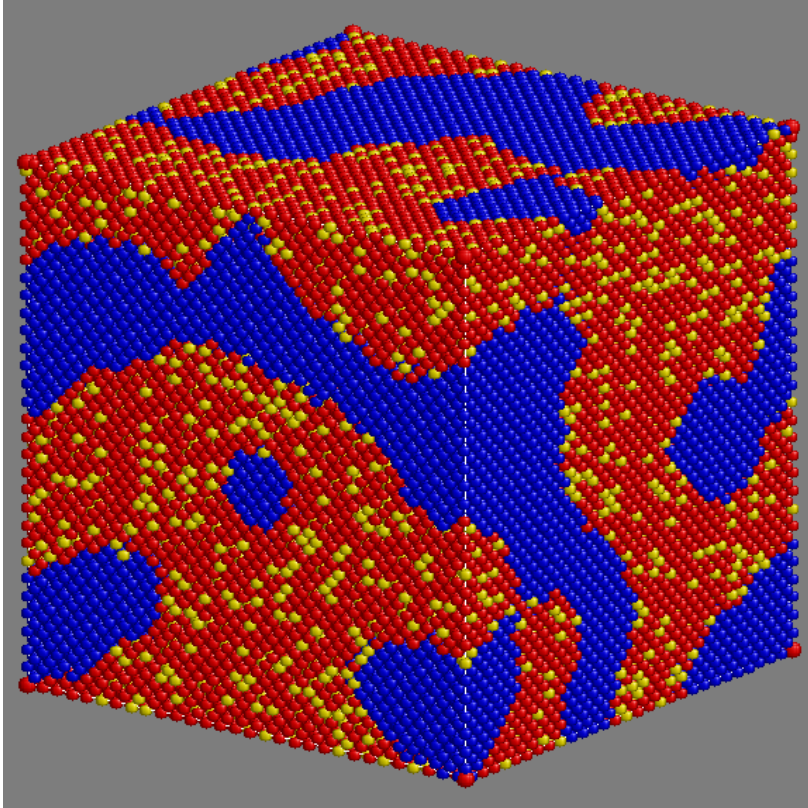


→ Bei interstitiellem Magnesium findet kein Phasenübergang statt

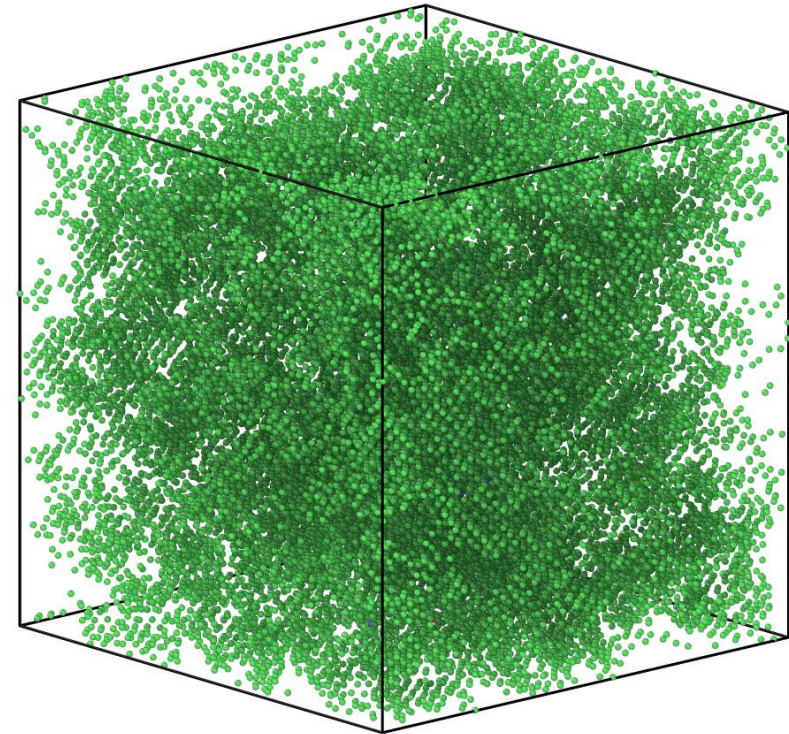
Vergleich der Schmelztemperaturen im interstitiellen und substitutionellen Zustand:



Modellierung einer Schmelzfront:



Künstliche Entmischung Al/Al₂₂Mg aus Al₁₁Mg



voranschreitendes Schmelzen unter Eindiffusion von Mg in die zuvor reine Al-Phase.(grün: feste Phase)

Molekulardynamik: Reines Aluminium

- Aluminium wurde mit 3 verschiedenen Potentials über eine vorgegebene Zeit aufgeheizt
- Bei allen drei Potentials war ein Phasenübergang von fest zu flüssig zu sehen
- Die Wärmekapazitäten wurden miteinander verglichen:
→ Werte für die Wärmekapazität liegen nah beieinander

Molekulardynamik: Aluminium-Magnesium-Legierung

- Gitterbox mit größtenteils Aluminium wurde mit verschiedenen interstitiellen Mg-Anteile ergänzt
- Wurde mit `AlMg.liu.eam.alloy`-Potential über eine vorgegebene Zeit aufgeheizt
- Schmelztemperaturen wurden miteinander verglichen:
→ mit zunehmender Magnesiumkonzentration sinkt die Schmelztemperatur

Molekulardynamik: Aluminium-Magnesium-Legierung

- Gitterbox mit größtenteils Aluminium wurde mit verschiedenen substitutionellen Mg-Anteilen ergänzt
- Wurde mit `AlMg.liu.eam.alloy`-Potential über eine vorgegebene Zeit aufgeheizt
→ auch bei hohen Magnesiumkonzentrationen kommt es zu einem Phasenübergang
- Erste Modellierung einer Schmelzfront