

F-4

Fall-Beispiel einer skalenüberbrückenden Simulation bei Modellierung der Mikrochemie in Al-Knetlegierungen

Dr. Galyna Laptyeva

Research & Development, Hydro Aluminium, Bonn

Intermetallische Gussphasen, Dispersoide und die Konzentration der Legierungselemente in Lösung sind entscheidende Inputgrößen für die Simulation der Ver- und Entfestigungsvorgänge während der industriellen Fertigung von Aluminiumlegierungen.

Der Mikrochemie-Input für unser aktuelles statistisches Ver- und Entfestigungsmodell wird durch das ClaNG (Classical Nucleation and Growth) Modell generiert. ClaNG basiert auf der klassischen Theorie der Keimbildung und der Kinetik des Wachstums sowie der Reifung der Ausscheidungen und ist in der Lage, parallel ablaufende Mechanismen wie Auflösung, Bildung, Wachstum und Reifung der Ausscheidungen zu simulieren. Input-Daten für ClaNG beinhalten einige physikalische Größen, die nicht unmittelbar gemessen werden können; eine solche Größe ist die Grenzflächenenergie der Phasen.

Am Beispiel der Berechnung der Grenzflächenenergie mit der Ab-initio-Methode soll eine mögliche Anwendung der Simulation auf der atomistischen Ebene für das Generieren der nicht (oder nur mit großem Aufwand) messbaren physikalischen Inputgrößen für die statistischen Modelle gezeigt werden.