ADAMANT

Ab initio Design of Alloy Materials: A Software Toolkit

Programm / Ausschreibung	FORPA, Forschungspartnerschaften NATS/Ö-Fonds, FORPA OEF2019	**Status**	abgeschlossen
Projektstart	01.02.2020	**Projektende**	30.06.2023
Zeitraum	2020 - 2023	**Projektlaufzeit**	41 Monate
Keywords	Alloy modelling, computational materials design, materials strength		

Projektbeschreibung

Der ständig wachsende Bedarf an verbesserter Energieeffizienz und Nachhaltigkeit dängt die Materialforschung zur Beschäftigung mit immer komplexeren Legierungen. Von besonderem Interesse sind derzeit sogenannte „Multi-principal element alloys“ (MPEAs), inklusive Hochentropie-Legierungen, bei denen ein ad-hoc Design extrem teuer und zeitaufwändig wäre und deshalb praktisch kaum durchführbar ist. In diesem Zusammenhang kann ein integrierter Zugang bahnbrechend sein, der Experimente mit einer neuen Art der physikalischen Modellierung kombiniert, bei der die Effizienz und Genauigkeit der Rechenmethoden gut ausbalanciert sind.
Ziel dieses Projektes ist die Erstellung eines Software-Tools, das auf der Verwendung mehrerer Methoden für computerunterstütztes Materialdesign beruht und die Entdeckung neuer Materialien viel effizienter macht. Das Projekt zielt insbesondere auf die Entwicklung von Werkstoffen mit hoher Zugfestigkeit ab. Für konventionelle Ab-initio Berechnungen stellt die Zugfestigkeit eine enorme Herausforderung dar, weil sie die Modellierung der Wechselwirkung von Versetzungen mit verschiedenen Lösungselementen erfordert, was Berechnungen extrem schwierig und teuer macht.
Um dieses Problem zu beheben, verwenden wir eine Klasse alternativer Methoden, die speziell für die Behandlung von Mischkristallen entwickelt wurden. Zum einen kombinieren wir maschinelles Lernen mit einer genäherten, aber sehr effizienten Ab-Initio Methode, um vielversprechende Zusammensetzungen schnell zu finden. In unserem Fall suchen wir nach Zusammensetzungen, welche die Mischkristallverfestigung maximieren. Zum anderen entwickeln wir eine fortgeschrittene Methode für die genaue Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Lösungslementen und Versetzungen, wie sie in Mehrkomponenten-Legierungen auftritt.
Die entwickelten Methoden werden auf eisenbasierte Hochentropie-Legierungen angewendet, wobei wir folgende Ergebnisse erwarten: 1) Ein detailliertes Verständnis der Wechselwirkung zwischen gelösten Elementen und Versetzungen, 2) einen theoretischen Rahmen für die Vorhersage der Auswirkung des Magnetismus auf die Temperaturabhängigkeit der Fließspannung, die für die Festigkeit maßgeblich ist, 3) die Validierung der Annahmen, die den phänomenologischen Modellen zur Mischkristallverfestigung zugrunde liegen.
Die hier entwickelten Methoden und Abläufe werden zusammen mit anderen Tools des MCL verwendet, um den Prototyp eines Software-Tools zu erstellen, das die Workflows zur Charakterisierung und Vorhersage komplexer Materialeigenschaften, wie der Festigkeit, standardisiert und vereinheitlicht. Dieses Software-Tool wird klar über den Stand

der Technik im Bereich des Ab-initio-basierten Materialdesigns hinausgehen und die Kosten für physikalische Modellierung um mindestens einen Faktor 5 verringern.

Projektpartner

- Materials Center Leoben Forschung GmbH