

# Simulation der Reifung von $\gamma''$ -Ausscheidungen in der Legierung IN718

Von der Fakultät für Ingenieurwissenschaften  
der Universität Bayreuth  
zur Erlangung der Würde  
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)  
genehmigte Dissertation

von

M. Sc. Felix Schleifer

aus

Bamberg

Erstgutachter: Prof. Dr.-Ing. Uwe Glatzel

Zweitgutachter: Prof. Dr. Ingo Steinbach

Tag der mündlichen Prüfung: 19. Juli 2021

Lehrstuhl Metallische Werkstoffe

Universität Bayreuth

2021

# Inhaltsverzeichnis

1	Motivation .....	1
2	Grundlagen und Definitionen.....	3
2.1	Die Mikrostruktur der Legierung IN718 .....	3
2.2	Plattenförmige $\gamma''$ -Ausscheidungen .....	4
2.2.1	Die kohärente Grenzfläche.....	6
2.2.2	Beschreibung der Form von $\gamma''$ -Ausscheidungen.....	9
2.3	Gleichgewichtsform und Anordnung von Ausscheidungen .....	13
2.4	$\gamma''$ -Mikrostrukturvergrößerung durch Ostwaldreifung .....	16
3	Materialwissenschaftliche Modellbildung .....	19
3.1	Phasenfeldmethode .....	19
3.1.1	Sharp Phase-Field Formulierung.....	19
3.1.2	Volumenbeiträge zum Phasenfeldmodell.....	24
3.1.3	Entwicklungsgleichungen .....	26
3.1.4	Konfiguration einer Simulation in 2D und 3D.....	28
3.2	Ostwaldreifung mit nicht-sphärischen Ausscheidungen .....	31
3.2.1	Lifshitz-Slyosov-Wagner-Theorie der Ausscheidungsreifung.....	31
3.2.2	Modellerweiterung um variable Ausscheidungsform .....	33
3.3	Methoden zur Bestimmung des Dehnungsfelds einer Ausscheidung.....	34
3.3.1	Effektive Energiedichte elliptischer Ausscheidungen.....	34
3.3.2	Relaxationsfunktion für tetragonal anisotrope Elastizität .....	35
4	Temperaturabhängige Materialparameter .....	36
4.1	Thermodynamische und kinetische Größen .....	36
4.2	Elastische Materialdaten.....	40
4.3	Gitterfehlpassung.....	44
4.4	Grenzflächenenergiedichte .....	45
5	Ergebnisse der Simulationsstudien.....	50
5.1	Elastischer Gleichgewichtszustand.....	50
5.1.1	Elastisches Feld einer $\gamma''$ -Ausscheidung.....	50
5.1.2	Gleichgewichtsform einer $\gamma''$ -Ausscheidung.....	52
5.1.3	Periodische Anordnung von $\gamma''$ -Ausscheidungen.....	62
5.2	Simulation der $\gamma''$ -Ausscheidungsreifung .....	67

5.2.1	Einfluss der Gitterfehlpassung und der Grenzflächenenergie.....	69
5.2.2	Mikrostruktur während der Reifung.....	73
5.2.3	Quantitative Beschreibung der $\gamma''$ -Reifungskinetik.....	75
6	Diskussion der materialwissenschaftlichen Erkenntnisse.....	78
6.1	Simulation der $\gamma''$ -Mikrostrukturentwicklung mit dem Phasenfeldmodell.....	78
6.2	Die $\gamma''$ -Mikrostruktur in der Legierung IN718 .....	79
6.2.1	Einflussfaktoren auf die Form der $\gamma''$ -Ausscheidungen.....	79
6.2.2	Experimentell beobachtete Aspektverhältnisse.....	81
6.2.3	Die $\gamma/\gamma''$ -Grenzflächenenergiedichte .....	83
6.2.4	Die $\gamma''$ -Ausscheidungsform in der Ebene .....	86
6.3	Reifung von $\gamma''$ -Ausscheidungen in IN718.....	88
6.3.1	Die temperaturabhängige $\gamma''$ -Reifungskinetik in Simulation und Experiment...	89
6.3.2	Koaleszenz von $\gamma''$ -Ausscheidungen .....	93
6.3.3	Ausscheidungsanordnung während der Reifung.....	94
7	Zusammenfassung.....	96
8	Summary .....	98
9	Literaturverzeichnis.....	100
10	Nomenklatur.....	116
10.1	Formelzeichen .....	116
10.2	Abkürzungen .....	119
	Lebenslauf.....	121
	Danksagung.....	122

## 1 Motivation

Im Zuge der Energiewende wird in Deutschland ein immer größerer Teil der Energie aus erneuerbaren Quellen gewonnen. Neben der Gewinnung von Strom aus Windkraftanlagen und Photovoltaik nehmen auch Kraftwerke mit konventionellen, stationären Gasturbinen einen wichtigen Platz in Stromnetz ein. Die starken Schwankungen der von erneuerbaren Energiequellen in das Netz eingespeisten Leistung müssen durch flexibel an- und abfahrbare Kraftwerke mittlerer Leistungsklasse abgefangen werden. Solche dezentral aufgestellten Aggregate gewährleisten die Stabilität der Energieversorgung. In diesem Zuge benennt das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) die „Entwicklung und Verbesserung von Materialien zur Ausrichtung des Betriebs fossiler Kraftwerke auf die Herausforderungen der Energiewende“ als ein strategisches Ziel der Materialforschung [1]. Im Jahr 2019 wurde vom BMWi Forschungsprojekte im Bereich konventioneller thermischer Kraftwerke mit 28,3 Mio. € gefördert. Im Bereich „Materialforschung für die Energiewende“ wurden 89 Projekte mit insgesamt 10,3 Mio. € gefördert [2].

Neben der Nutzung im Bereich der Energieversorgung spielen Gasturbinen weiterhin eine entscheidende Rolle im Bereich Mobilität. Vor der Coronapandemie sagten Prognosen eine Verdopplung des globalen Luftverkehrsaufkommens in den nächsten 20 Jahren voraus [3]. Hierdurch ergeben sich konkrete Anforderungen an Antriebstechnologien um die Belastung von Mensch und Umwelt so weit wie möglich zu reduzieren. Der europäische Luftfahrtforschungsbeirat ACARE geht davon aus, dass mindestens 75% der Einsparungen des CO<sub>2</sub>- und NO<sub>x</sub>-Ausstoßes durch technische Veränderungen an Triebwerk und Zelle der Flugzeuge geschehen muss [3].

Sowohl die stationären Gasturbinen zur Stromgewinnung, als auch die Triebwerke der Luftfahrtindustrie sind effiziente Wärme-Kraft-Maschinen. Der Wirkungsgrad dieser Maschinen steigt direkt mit der Turbineneintrittstemperatur, woraus sich immer höhere Anforderungen an die Temperaturbeständigkeit der Komponenten im Heißgastrakt der Turbine ergeben. Die stärksten Belastungen treten in den rotierenden Teilen der Hochdruckturbinenstufe, den Schaufeln und Schaufelrädern, auf. Die Hochtemperaturzugfestigkeit und Kriechbeständigkeit der verwendeten Werkstoffe müssen den steigenden Anforderungen angepasst werden. Aktuell sind die am stärksten thermo-mechanisch belasteten Bauteile aus Nickelbasis-Superlegierungen gefertigt. Sie weisen eine einzigartige Kombination aus Kriecheigenschaften, Korrosionsbeständigkeit und Duktilität auf. Zusätzlich zu den mechanischen Eigenschaften spielt in der Luftfahrtindustrie auch das Gewicht der Komponenten eine kritische Rolle. Durch moderne additive Fertigungsverfahren kann bis zu 25% der Masse einzelner Komponenten eingespart werden [4].

Moderne Werkstoffentwicklung ist zu einem großen Anteil von den Fortschritten im Bereich des „Integrated Computational Materials Engineering“ getrieben. Aufwändige Trial-and-Error Methoden in der Forschung und Entwicklung können durch Multiskalensimulationen reduziert werden. Eine umfassende Simulationskette bietet die Möglichkeit den gesamten Zusammenhang zwischen Prozessbedingungen, Mikrostruktur und Materialeigenschaften abzubilden [5]. Die zugrundeliegenden Modelle spielen auch im Zuge der „Industrie 4.0“ eine

entscheidende Rolle, als Datenschnittstelle und als Teil eines „Digitalen Zwillings“. Es sind Modelle nötig, die temperatur- und zeitabhängig die physikalischen Prozesse abbilden, die zur Mikrostrukturbildung führen. Besonders die extremen Bedingungen während der additiven Fertigung von Bauteilen mit komplexen Geometrien stellen die Modellbildung vor Herausforderungen [4].

Die überlegenen mechanischen Eigenschaften der Nickelbasislegierungen bei hohen Temperaturen lassen sich auf ihr spezifisches Gefüge mit einem hohen Anteil an intermetallischen Phasen zurückführen. Diese Mikrostruktur der sogenannten Superlegierungen stellt sich bei der Prozessierung des Werkstoffes, vor allem bei der Wärmebehandlung, ein. Anders als beim Einsatz bei Raumtemperatur ist bei Temperaturen nahe dem Schmelzpunkt das Gefüge im Material im ständigen Wandel. Die Vergrößerung der Mikrostruktur beim Einsatz unter hoher thermo-mechanischer Last limitiert die Lebensdauer aller mechanisch belasteter Komponenten im Heißgasbereich der Turbinen. Zum erfolgreichen Einsatz von Nickelbasislegierungen in den Turbinen der Zukunft ist das grundlegende Verständnis der Mechanismen der Mikrostrukturentwicklung entscheidend.

Die Legierung 718 ist seit ihrer Entwicklung in den 1960er Jahren die mit Abstand am meisten eingesetzte Nickelbasislegierung für Hochtemperaturanwendungen [6]. Beim Hersteller Pratt & Whitney machte die Legierung in den 1990er Jahren teilweise über 40% der verarbeiteten Superlegierungen aus [7]. Der Grund für den Erfolg der Legierung sind ihre hervorragende Verarbeitbarkeit durch Gießen und Schmieden und der günstige Preis der Legierungskomponenten [6]. Die sehr gute Schweißbarkeit und die dadurch begründete sehr gute Eignung für additive Fertigungsverfahren machen die Legierung auch heute noch zu einem viel genutzten Werkstoff [8]. Die große industrielle Relevanz der Legierung und ihrer Derivate zeigt sich auch in der seit 1991 alle vier Jahre stattfindenden Konferenz „The Superalloy 718 & Derivatives“. Die Legierung ist bei Temperaturen bis zu 650°C einsetzbar, was sie etwa als Werkstoffe für Turbinenscheiben qualifiziert. Die Vorhersage und Verlängerung der Lebensdauer dieser Legierung und der von ihr abgeleiteten Derivate ist eines der zentralen Ziele für die Weiterentwicklung polykristalliner Nickelbasis-Superlegierungen [9].

Ziel dieser Arbeit ist ein physikalisches Modell auf Grundlage der Phasefeldmethode zu entwickeln, welches die Mikrostrukturentwicklung während der Ausscheidungsreifung quantitativ beschreibt. Dazu sollen anisotrope elastische Effekte durch die Gitterfehlpassung der tetragonalen  $\gamma''$ -Ausscheidungsphase, sowie die anisotrope Grenzflächenenergiedichte betrachtet werden und deren Einfluss auf die temperatur- und zeitabhängige Gefügevergrößerung quantifiziert und erklärt werden. Die systematische Untersuchung der Faktoren, welche die Mikrostrukturbildung beeinflussen, soll konsistent zeitabhängige Zusammenhänge zwischen der Thermodynamik der Phasen und der Mikromechanik im Material aufzeigen. Durch den Vergleich mit experimentellen Daten werden wichtige Zusammenhänge für die computergestützte Entwicklung von modernen, schmiedbaren Nickellegierungen, sowie für die Auslegung von thermo-mechanisch belasteten Komponenten im industriellen Kontext ermittelt.

## 2 Grundlagen und Definitionen

### 2.1 Die Mikrostruktur der Legierung IN718

Inconel® alloy 718 (IN718) ist der Produktname einer Nb-haltigen aushärtbaren Ni-Fe-Legierung der Special Metals Corporation [10]. Diese Legierung zeichnet sich durch Festigkeit und Kriechbeständigkeit bei Temperaturen bis zu 650°C, also oberhalb der Einsatztemperaturen der Stähle, aus. Die Legierung ist schmiedbar, schweißbar und kann pulvermetallurgisch verarbeitet werden. Die Legierung ist Ausgangspunkt für die Entwicklung vieler polykristalliner Knet- und Gusslegierungen für Hochtemperaturanwendungen. Die Zusammensetzung der Legierung nach den Spezifikationen des Herstellers ist in Tabelle 1 gegeben. Neben den angegebenen Legierungselementen können in IN718 noch maximal 0,08% C, 0,35% Mn und Si, 0,015% P und S, 0,006% B und 0,3% Cu (in Gew.%) enthalten sein.

*Tabelle 1: Nominelle Zusammensetzung Nb-haltiger Legierungen in Gew.%.*

Legierung	Ni	Nb	Cr	Fe	Mo	Al	Ti	Co
IN718 [10]	50-55	4,8-5,5	17-21	bal.	2,8-3,3	0,2-0,8	0,7-1,2	< 1,0
IN718M [11]	58	5,0	18	bal.	3,0	–	–	–

Abhängig von den Herstellungsbedingungen, insbesondere der Wärmebehandlung, bilden sich im Gefüge der Legierung verschiedene Phasen. Die austenitische, kubisch-flächenzentrierte  $\gamma$  Matrix ist ein ungeordneter Mischkristall und besteht hauptsächlich aus den Legierungselementen Ni, Fe und Cr. Der hohe Anteil an Cr bewirkt gute Korrosionseigenschaften. Der hohe Anteil an Fe ist aus der Entwicklung der Legierung aus hochlegierten Stählen begründet und führt zu vergleichsweise niedrigen Rohmaterialkosten. Mo und Co wirken in der Matrix als Mischkristallhärter.

Es bilden sich außerdem dispers verteilte Ausscheidungen der  $L1_2$  geordneten  $\gamma'$ -Phase mit der nominellen Zusammensetzung  $Ni_3(Al, Ti)$ . Diese Phase ist in den meisten Nickelbasis-Superlegierungen zur Festigungssteigerung in großen Anteilen vorhanden. In IN718 tritt diese Phase mit einem geringen Volumenanteil von unter 5% auf und bildet kugelförmige Ausscheidungen [12]. Weiter werden plattenförmige  $\gamma''$ -Ausscheidungen mit der stöchiometrischen Zusammensetzung  $Ni_3Nb$  beobachtet. Es handelt sich dabei um eine metastabile, geordnete Phase mit tetragonal-raumzentrierter Kristallstruktur. Diese Phase trägt maßgeblich zu den guten mechanischen Eigenschaften der Legierung bei [13]. Die orthorhombische  $\delta$ -Phase mit der Zusammensetzung  $Ni_3Nb$  ist die stabile Form der  $\gamma''$ -Phase, welche sich bei der Erstarrung als primäre  $\delta$ -Phase an den Korngrenzen bildet. Diese Ausscheidungen sind deutlich größer als die  $\gamma'$ - und  $\gamma''$ -Ausscheidungen und hemmen das Kornwachstum nach der Umformung. Sekundäre  $\delta$ -Phase bildet sich aus den  $\gamma''$ -Ausscheidungen in den Körnern nach langer Auslagerung bei hoher Temperatur (mehrere tausend Stunden bei 650°C). Die Legierungselemente Al und Ti spielt eine wichtige Rolle bei

der Stabilisierung von  $\gamma''$ , wohingegen Mo die  $\delta$ -Phase stabilisiert [14]. Al, Ti und Fe besetzen Nb-Positionen im Gitter. Mo und Cr besetzen bevorzugt Ni-Gitterpositionen [15]. Anders als die primären  $\delta$ -Ausscheidungen sind die sekundären  $\delta$ -Ausscheidungen für die mechanischen Eigenschaften der Legierung abträglich. Die Lebensdauer von Bauteilen aus IN718 hängt signifikant von der Umwandlung von  $\gamma''$  in  $\delta$  ab. Es bilden sich außerdem Karbide, Nitride und Laves-Phasen, die ebenfalls erst nach mehreren hundert Stunden ausscheiden [16].

Für die verschiedenen Formgebungsverfahren existiert eine große Anzahl an Wärmebehandlungsstrategien. Die klassische Wärmebehandlung nach dem Kaltwalzen besteht aus einer Glühung bei 960°C für eine Stunde und dann Abkühlung an Luft. Anschließend folgt eine zweistufige Auslagerung bei 718°C und 625°C für je 8 h. Dazwischen wird mit 50°C h<sup>-1</sup> im Ofen abgekühlt [17]. Andere Wärmebehandlungskonzepte beinhalten Auslagerung bei 760°C und anschließend bei 650°C. Die Ausscheidungsmikrostruktur in den Körnern stellt sich hauptsächlich beim Abkühlen nach dem Glühen und während der ersten Auslagerungsstufe ein.

Zur Untersuchung der  $\gamma''$ -Ausscheidungen wurde eine  $\gamma'$ -freie Variante von IN718 entwickelt, benannt mit IN718M(odified) [11]. Die Zusammensetzung ist in Tabelle 1 ebenfalls gegeben. Die Zusammensetzung ohne die  $\gamma'$ -Bildner Al und Ti ist so gewählt, dass sowohl die Matrix als auch die  $\gamma''$ -Ausscheidungen eine ähnliche Zusammensetzung haben, wie in IN718. Wenn die Legierung IN718M im Bridgman-Verfahren einkristallin abgegossen wird, stellt sich eine reine Matrix/ $\gamma''$ -Mikrostruktur ohne primäre  $\delta$ -Phase ein. Da Nb sehr stark seigert, ist ein Auflösen der dendritischen Struktur in der einkristallin ergossenen IN718M Proben notwendig. Eine Homogenisierung bei 1150°C für 24 h mit anschließender Abschreckung in Wasser ist nötig, um eine ausreichend homogene Mikrostruktur zu erhalten [18].

Die Entwicklung neuer Derivate von IN718 zielt ab auf  $\gamma'/\gamma''$ -Koausscheidung [12, 19–21]. Dabei bilden sich relativ große kubische  $\gamma'$ -Ausscheidungen, die an ihren sechs Flächen von  $\gamma''$ -Ausscheidungen gesäumt sind. Dadurch wird die Vergrößerung der beteiligten Phasen deutlich verlangsamt. Andere Autoren berichten von einer Mikrostruktur mit einer anderen Anordnung der  $\gamma'$ - und  $\gamma''$ -Ausscheidungen, die zu verbesserten mechanischen Eigenschaften führt [22, 23].

## 2.2 Plattenförmige $\gamma''$ -Ausscheidungen

Die geordnete intermetallische  $\gamma''$ -Phase hat die stöchiometrische Formel Ni<sub>3</sub>Nb und bildet eine tetragonal-raumzentrierte Struktur (trz). Die Struktur der metastabilen Phase ist nach der Strukturbericht Nomenklatur die D0<sub>22</sub> Struktur mit der Raumgruppe I4/mmm. Die Einheitszelle lässt sich beschreiben als zwei kubisch-flächenzentrierte (kfz) Ni Einheitszellen, mit Nb Atomen an Gitterpositionen auf den Ecken und im Zentrum. Die  $\gamma''$ -Phase ist in der Matrixphase fein verteilt eingebettet. Der ungeordnete  $\gamma$  Mischkristall hat eine kubisch-flächenzentrierte (kfz) Kristallstruktur mit stochastisch besetzten Gitterplätzen und der Raumgruppe Fm $\bar{3}$ m. In der Ni-reichen Matrix reichern sich hauptsächlich die Legierungselemente Cr, Fe und Mo an. Geordnete intermetallische Phasen besitzen nur eine geringe Löslichkeit für andere Elemente. Zur Ausscheidungshärtung der Legierung IN718

trägt hauptsächlich die  $\gamma''$ -Phase bei [13]. Der Verfestigungsmechanismus ist hierbei die Scherung der Ausscheidungen durch gleitende Versetzungspaare und durch Orowan-Beugung [24–26].  $D0_{22}$  geordnete Ausscheidungen werden ebenfalls in anderen Nickelbasislegierungen wie IN625 [27], Legierungen komplexer Zusammensetzung [28] und in Legierungen der Systeme Ni-V-Si [29, 30] und Fe-Ni-Ta [31] beobachtet.

Abbildung 1 zeigt die Einheitszellen der Matrixphase und der  $\gamma''$ -Phase. Für die kubische Matrix kann ein Gitterparameter  $a_{Matrix}$  als Kantenlänge der Einheitszelle definiert werden. Im Falle der tetragonalen Ausscheidungsphase können zwei unterscheidbare Gitterparameter  $a_{\gamma''}$  und  $c_{\gamma''}$  in den Richtungen der orthogonalen Einheitsvektoren  $\vec{a}, \vec{b}$  ( $a_{\gamma''}$ ) und  $\vec{c}$  ( $c_{\gamma''}$ ) definiert werden. Der Einheitsvektor  $\vec{c}$  gibt die Orientierung der tetragonalen Einheitszelle an und wird als tetragonale Achse bezeichnet.

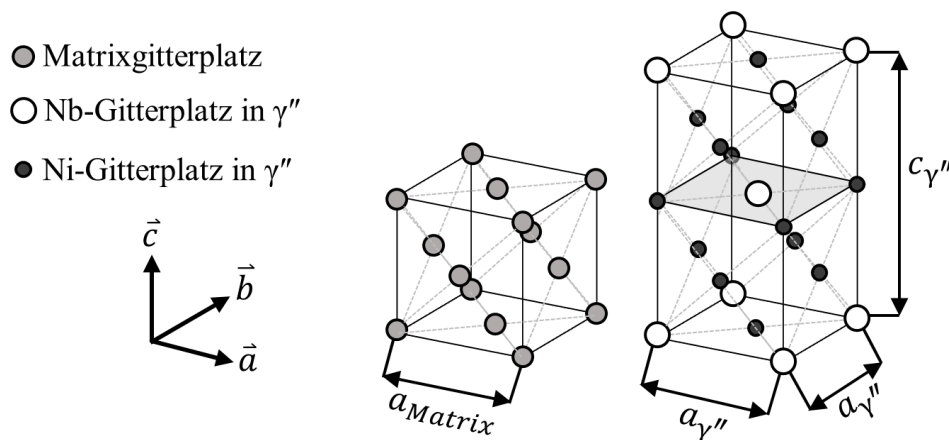


Abbildung 1: Einheitszellen der kubisch-flächenzentrierten Matrix und der tetragonal-raumzentrierten  $\gamma''$ -Ausscheidung ( $D0_{22}$  Struktur) mit den Gitterparametern  $a_{Matrix}$ ,  $a_{\gamma''}$  und  $c_{\gamma''}$ .

Abbildung 2 zeigt Aufnahmen von  $\gamma''$ -Ausscheidungen in der Legierung IN718M aus dem Transmissionselektronenmikroskop (TEM) nach 2 h, 6 h und 10 h Auslagerung bei 760°C [32]. Die Aufnahmen stammen von Yuch-Yu Lin und sind am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth entstanden. Die ausgeprägte Plattenform der hell dargestellten Ausscheidungen ist sehr gut zu erkennen, genau wie die Vergrößerung, die Zunahme der Größe der Ausscheidungen mit der Zeit. Die Ausscheidungen erscheinen mit zunehmender Auslagerungsdauer länglicher.



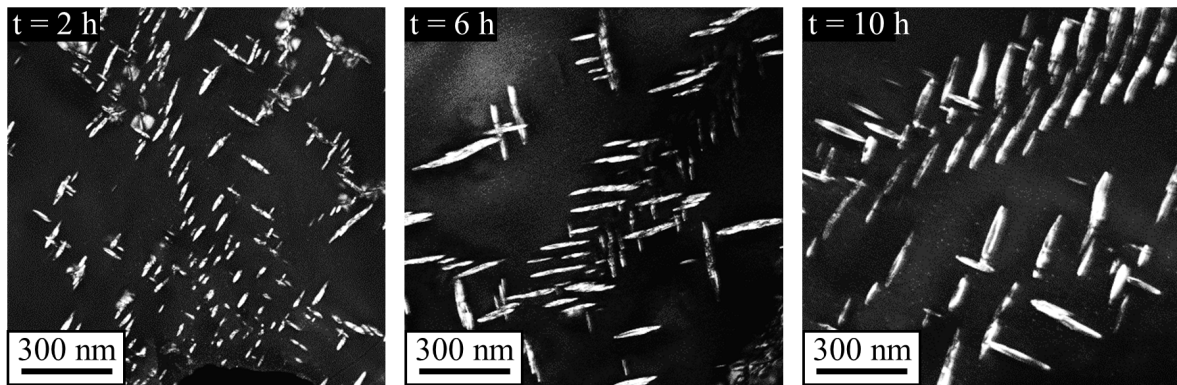


Abbildung 2: Plattenförmige  $\gamma''$ -Ausscheidungen in TEM Aufnahmen nach 2 h, 6 h und 10 h Auslagerung bei 760°C [32].

## 2.2.1 Die kohärente Grenzfläche

Die Phasengrenzfläche zwischen der kfz Mischkristallmatrix und der  $\gamma''$ -Ausscheidungsphase ist gekennzeichnet durch einen Übergang von kubischer zu tetragonaler Kristallsymmetrie. Im kubischen Kristallsystem sind die  $\langle 100 \rangle$ -Richtungen bzw. die  $\{100\}$ -Ebenen nicht unterscheidbar. Im tetragonalen Kristallsystem existiert hingegen die  $\vec{c}$ -Richtung, die diese Symmetrie bricht.

Abbildung 3 zeigt schematisch eine elliptische  $\gamma''$ -Ausscheidung, die kohärent in der Matrixphase eingebettet ist. Kohärenz bedeutet, dass die kristallographischen Ebenen kontinuierlich durch die Phasengrenzfläche hindurch verlaufen. Der Verlauf kristallographischer Ebenen ist in der Grafik schematisch durch ein Gitter dargestellt. Innerhalb der Ausscheidung ist das Gitter relativ zur Matrix gedehnt. Die Dehnung ist in  $\vec{c}$ -Richtung größer als in  $\vec{a}$ -Richtung und bewirkt eine Verzerrung des Kristallgitters in und um die Ausscheidung herum. Der Abstand der Gitterebenen ist etwa um den Faktor  $5 \cdot 10^6$ , die Eigendehnung der Ausscheidung ist etwa um den Faktor 20 übertrieben dargestellt.

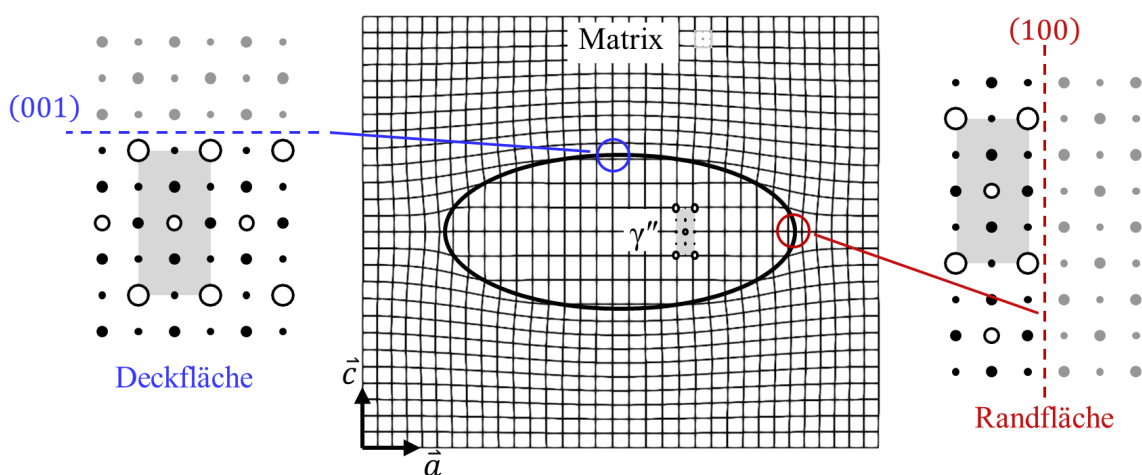


Abbildung 3: Ellipsenförmige Ausscheidung mit Gitterdehnung durch anisotrope Fehlpassung. Die Fehlpassung ist um den Faktor 20 überhöht und die Größe der Einheitszellen um den Faktor  $5 \cdot 10^6$ . Die Kristallstrukturen der (001) Deckfläche und der (100) Randfläche der Ausscheidung sind ebenfalls dargestellt.

### Die anisotrope Gitterfehlpassung

Der relative Unterschied zwischen dem Abstand der Gitterebenen der Phasen wird als Gitterfehlpassung bezeichnet. Sie ist definiert als der relative Unterschied der Gitterkonstante zweier Phasen, die eine kohärente Grenzfläche bilden. Die richtungsabhängige Gitterfehlpassung  $\delta_{hkl}$  ist definiert als

$$\delta_{hkl} = 2 \frac{a_{\text{Ausscheidung},hkl} - a_{\text{Matrix},hkl}}{a_{\text{Ausscheidung},hkl} + a_{\text{Matrix},hkl}} \quad (1)$$

mit  $a_{\text{Ausscheidung}}$  und  $a_{\text{Matrix}}$  den Gitterparametern der jeweiligen Phasen [33] und den Miller'schen Indizes  $h, k, l$ . Wie in Abbildung 3 angedeutet, ist die Gitterfehlpassung im System  $\gamma/\gamma''$  richtungsabhängig. Die Gitterfehlpassungen führen zu Kohärenzspannungen in den Ausscheidungen und in der umgebenden Matrix. Um die Anisotropie der Gitterfehlpassung zu verdeutlichen sind in Abbildung 3 zwei exemplarische Konfigurationen der Grenzfläche dargestellt. Es handelt sich um eine (001) Grenzfläche normal zur  $\vec{c}$ -Richtung, welche die Deckfläche der Ausscheidung bildet und eine (100) Grenzfläche normal zur  $\vec{a}$ -Richtung, die die Randfläche bildet. Diese Anisotropie der Gitterfehlpassung ist der Grund für die beobachtete Plattenform der Ausscheidungen [31].

Die Kohärenz der Matrix/ $\gamma''$ -Grenzfläche ist der Grund für das Ausscheiden der metastabilen  $\gamma''$ -Phase vor der stabilen  $\delta$ -Phase. Die kohärente Grenzflächenenergiedichte ist um etwa eine Zehnerpotenz niedriger als die der inkohärenten  $\delta$ -Phase, wodurch die Nukleationsrate von  $\gamma''$  deutlich erhöht ist [34]. Kleine  $\gamma''$ -Ausscheidungen sind aufgrund der niedrigeren Grenzflächenenergiedichte, trotz der auftretenden Kohärenzspannung, energetisch günstiger als inkohärent ausgeschiedene  $\delta$ -Phase. Mit zunehmender Ausscheidungsgröße tritt Kohärenzverlust der  $\gamma''$ -Ausscheidungen auf. In die kohärente Grenzfläche werden äquidistante, geometrisch notwendige Versetzungen eingebaut, die die Kohärenzspannungen verringern, jedoch zu einer Erhöhung der Gesamtenergie der Grenzfläche beitragen [34, 35]. Der Durchmesser der Ausscheidungen, ab dem sich solche teilkohärenten Grenzflächen bilden wurde durch Phasenfeldsimulationen bestimmt und liegt bei etwa 80 nm [36]. Experimentell werden teilkohärente Ausscheidungen ab Durchmessern von 100 nm beobachtet [17]. Bei weiterem Wachstum der teilkohärenten  $\gamma''$ -Ausscheidungen entsteht ein Versetzungsnetzwerk in der Grenzfläche, aus dem sich dann die inkohärente Matrix/ $\delta$ -Grenzfläche bildet, wenn sich die vergrößerten  $\gamma''$ -Ausscheidungen zu  $\delta$ -Phase umwandeln. Die Umwandlung findet statt über Stapelfehler in den dichtest gepackten (112)-Ebenen [13]. Im Einkristall beobachtet man dementsprechend die folgende Ausscheidungsreihenfolge der  $\text{Ni}_3\text{Nb}$ -Phasen aus dem Mischkristall (MK):

Übersättigter  $\gamma$  MK  $\rightarrow$  kohärentes  $\gamma''$   $\rightarrow$  teilkohärentes  $\gamma''$   $\rightarrow$  sekundäres  $\delta$  [27].

Die Umwandlung der metastabilen  $\gamma''$ -Phase in die stabile  $\delta$ -Phase ergibt sich durch das Wachstum der  $\gamma''$ -Ausscheidungen. Zur Vorhersage der temperaturabhängigen Lebensdauer der Legierung IN718 ist folglich Verständnis über die physikalischen Zusammenhänge, die die Kinetik der  $\gamma''$ -Vergrößerung bestimmen, von großer technischer Relevanz.

### Orientierungsvarianten der $\gamma''$ -Ausscheidungen

Abbildung 4 a zeigt die Matrix/ $\gamma''$ -Mikrostruktur in einer rasterelektronenmikroskopischen Aufnahme (SEM) die am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth im Zuge der Arbeit von Yueh-Yu Lin entstanden ist. Es handelt sich um eine im Bridgman-Verfahren einkristallin abgegossene Probe der Legierung IN718M. Die Probe wurde nach der Homogenisierung für 10 h bei 760°C ausgelagert. Die Wärmbehandlung ist so gewählt, dass nur die  $\gamma''$ -Phase ausscheidet und sich keine  $\delta$ -Phase bildet [18]. Die Matrix ist dunkel und die plattenförmigen  $\gamma''$ -Ausscheidungen erscheinen heller. Durch die Ätzung werden auch Ausscheidungen, die hinter der Betrachtungsebene liegen sichtbar.

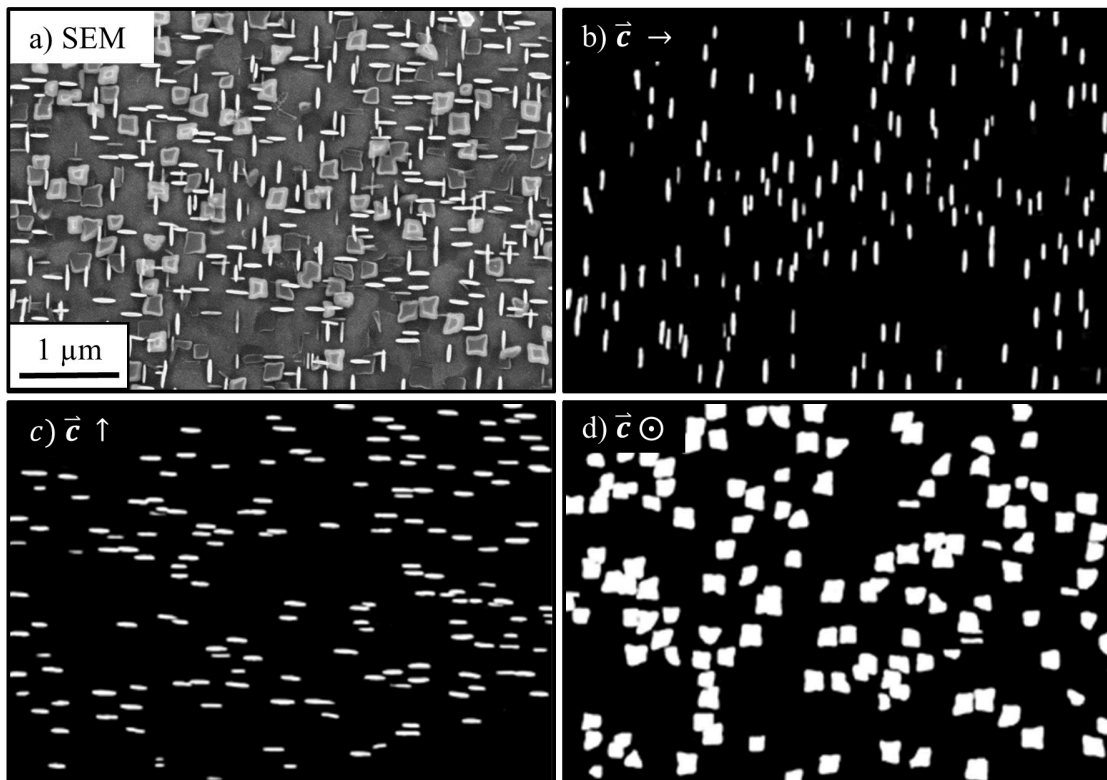


Abbildung 4: a) Mikrostrukturaufnahme des Gefüges in einkristallinem IN718M nach Homogenisierung und Auslagerung für 10 h bei 760°C von Yueh-Yu Lin, Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth. Die drei Orientierungsvarianten sind in b) - d) einzeln binarisiert dargestellt [32].

Die Ausscheidungen erscheinen plattenförmig mit den Plattennormalen parallel zu den  $\langle 001 \rangle$ -Richtungen der Matrix. Es sind drei Orientierungsvarianten der Ausscheidungen erkennbar [37]. Die Orientierungsbeziehung zwischen Matrixphase und den Ausscheidungen lautet

$$\langle 100 \rangle_{\gamma} \parallel \langle 100 \rangle_{\gamma''} \quad (2)$$

In Abbildung 4 b - d sind außerdem für jede der Orientierungsvarianten der  $\gamma''$ -Phase eine binarisierte Darstellung der Mikrostruktur gezeigt. Die Ausscheidungen sind weiß dargestellt und die Matrix ist schwarz. Liegt die tetragonale Achse  $\vec{c}$  in der Bildebene, sind die Ausscheidungen langgezogene Ellipsen. Für die Orientierungsvariante bei der  $\vec{c}$  aus der

Bildebene ragt erscheinen die Ausscheidungen viereckig mit gleichen Seitenlängen, sowie stellenweise konkaven Anteilen und abgerundeten Ecken. Nach der Standardwärmebehandlung kommen die Orientierungsvarianten näherungsweise zu gleichen Anteilen vor. Durch Auslagerung bei erhöhter Temperatur und unter einachsiger Last kann eine Variantenselektion erzielt werden [38, 39]. Dabei lösen sich zwei der drei Orientierungsvarianten zugunsten der Dritten auf. Die Ausscheidungen dieser Variante wachsen diffusiv an. Dieser Vorgang der richtungsabhängigen Vergrößerung ist analog zur Floßbildung, die in Nickelbasis-Superlegierungen mit hohem  $\gamma'$ -Volumenanteil beobachtet wird. Auslagerung unter einachsiger Last erhöht außerdem die Nukleationsrate, wodurch die mittlere Ausscheidungsgröße zunächst gesenkt wird [40]. Durch die Variantenselektion und die Nukleationsrate ist eine gezielte Einstellung der mechanischen Eigenschaften der Legierung möglich [41, 42].

### 2.2.2 Beschreibung der Form von $\gamma''$ -Ausscheidungen

In diesem Abschnitt soll die allgemeine Form einer  $\gamma''$ -Ausscheidung beschrieben werden. Die Ausscheidungen sind plattenförmig, das heißt ihre Ausdehnung ist in einer Richtung deutlich kleiner, als in den anderen beiden. Die 3D Form der Ausscheidungen wird durch drei dimensionslose Kennzahlen beschrieben, welche jeweils aus 2D Schnitten durch die Ausscheidungen hergeleitet werden.

Die in der Literatur verbreitetste Methode der Quantifizierung der Form plattenförmiger Ausscheidungen ist die Angabe des Aspektverhältnis. Diese Kennzahl entspricht dem Verhältnis von Durchmesser zur Dicke einer Platte. Eine inverse Definition des Aspektverhältnis ist ebenfalls in der Literatur zu finden. Um Unterschiede durch eine inverse Definition zu verhindern, wird in dieser Arbeit das Aspektverhältnis stets logarithmisch aufgetragen. Unabhängig vom Aspektverhältnis können sich plattenförmige Ausscheidungen auch durch ihre Rundheit unterscheiden. Im Zuge dieser Arbeit wird dabei die Ausscheidungsform in der Plattenebene (normal zu  $\vec{c}$ ) von der Form eines Plattenquerschnittes (normal zu  $\vec{a}$  oder normal zu  $\vec{b}$ ) unterscheiden. Es werden hier die Begriffe der „Form in der Ebene“ und der „Plattenform“ eingeführt, welche in dieser Arbeit so verwendet werden. Ein Beispiel für die Plattenform sind die in der binarisierten Mikrostrukturaufnahme in Abbildung 4 b und c dargestellten Ausscheidungen. Aus diesen Aufnahmen kann das Aspektverhältnis der Ausscheidungen ausgewertet werden. Die Ausscheidungsformen in der Ebene sind in Abbildung 4 d gezeigt.

#### Bestimmung des Aspektverhältnis einer Ausscheidung

Abbildung 5 zeigt schematisch die Form von  $\gamma''$ -Ausscheidungen in der Plattenebene (a) und im Plattenquerschnitt (b). Die Dicke der Ausscheidungen  $2r$  entspricht der maximalen Ausdehnung der Ausscheidung in  $\vec{c}$ -Richtung und die Ausscheidungsgröße  $R$  ist definiert als die halbe Ausdehnung der Ausscheidung in  $\vec{a}$ -Richtung. Das Aspektverhältnis  $A$  ergibt sich dann als

$$A = \frac{R}{r} \quad (3)$$

Die Formen in der Ebene in Abbildung 5 a variieren in ihrer Rundheit, jedoch nicht in ihrem Aspektverhältnis. Das gilt aufgrund der Kristallsymmetrie ebenfalls für idealisierte Ausscheidungen mit tetragonaler Symmetrie, wie die  $\gamma''$ -Phase. Ausscheidungen mit  $R > 50$  nm zeigen teilweise konkave Formen (siehe Abbildung 4 d). In den Querschnitten in Abbildung 5 b sieht man ein mit der Ausscheidungsgröße steigendes Aspektverhältnis der elliptischen Plattenform. Das Aspektverhältnis von  $\gamma''$ -Ausscheidungen ist durch die Auswertung von Mikrostrukturaufnahmen experimentell gut zugänglich. Die der Ausscheidungsformen in der Ebene sind ebenfalls in den Mikrostrukturaufnahmen in Abbildung 4 d zu entnehmen. Ebenfalls in Abbildung 5 b dargestellt ist die Größenabhängigkeit des Aspektverhältnis, welches experimentell beobachtet wird (siehe Abbildung 2). Durch die Anisotropie der Fehlpassung ist das Wachstum in Richtung des größeren Gitterfehlpassung gehemmt gegenüber den anderen Richtungen, wodurch das Aspektverhältnis mit dem Wachstum der Ausscheidung zunimmt.

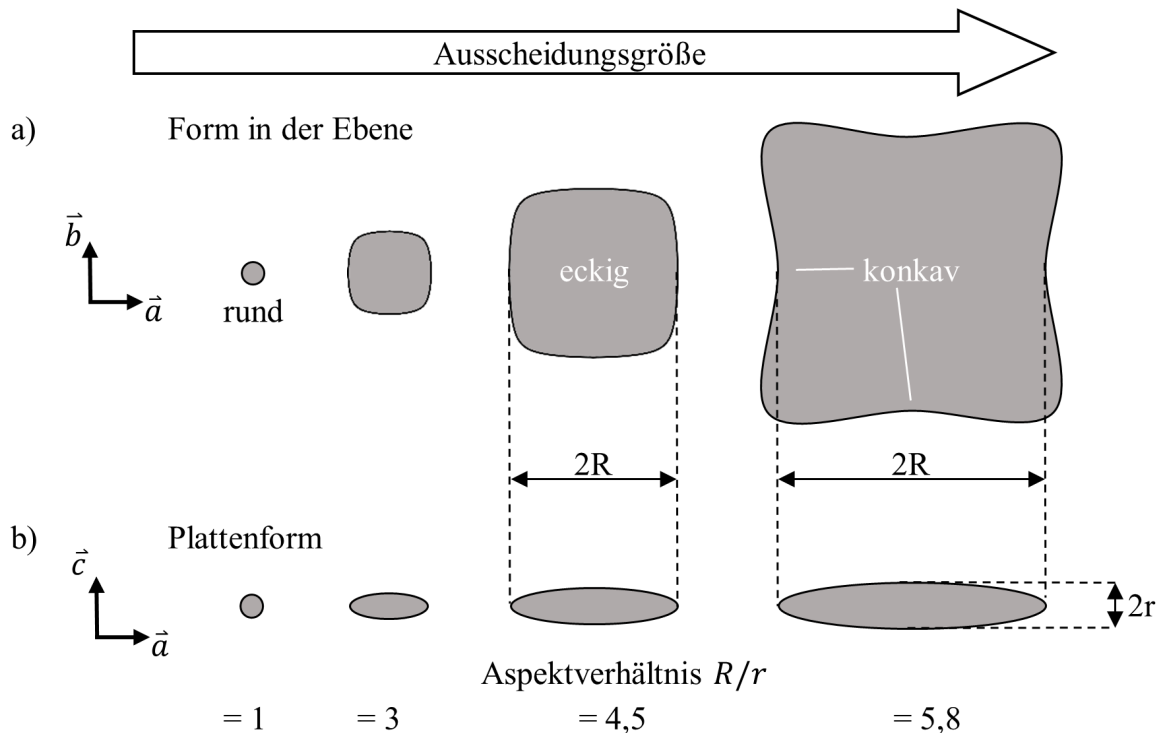


Abbildung 5: a) Schematische Schnitte durch  $\gamma''$ -Ausscheidungen mit variierender Form in der Plattenebene b) Plattenform mit größenabhängigem Aspektverhältnis. Die Ausscheidungsgröße  $R$  ist die halbe Ausdehnung der Ausscheidung in  $\vec{a}$ -Richtung.

Die Form der Ausscheidungen kann durch ein abgeplattetes Rotationsellipsoid angenähert werden [31]. Dabei handelt es sich um einen Körper, welcher durch Rotation einer Ellipse um deren kleine Halbachse entsteht. Die Form in der Ebene wird also als kreisförmig angenommen. Das Rotationsellipsoid wird in kartesischen Koordinaten durch die folgende Gleichung beschrieben:

$$\frac{x^2 + y^2}{R^2} + \frac{z^2}{r^2} \leq 1, \quad (4)$$

$$x^2 + y^2 + A^2 z^2 \leq R^2,$$

Dabei entsprechen  $R$  bzw.  $r$  dem Hauptradius bzw. dem kleinen Radius und  $A$  dem Aspektverhältnis der Ellipse. Volumen  $V_0$  und Oberfläche  $S_0$  eines solchen Rotationsellipsoids ergeben sich damit zu

$$V_0 = \frac{4\pi}{3} R^2 r = \frac{4\pi}{3A} R^3. \quad (5)$$

$$S_0 = 2\pi R \left( R + \frac{r^2}{\sqrt{R^2 - r^2}} \sinh^{-1} \left( \frac{\sqrt{R^2 - r^2}}{r} \right) \right) \quad (6)$$

$$= 2\pi R^2 \left( 1 + \frac{\sinh^{-1}(\sqrt{A^2 - 1})}{A\sqrt{A^2 - 1}} \right).$$

Um die Größe einer Ausscheidung unabhängig von ihrer Form zu beschreiben, kann die dritte Wurzel aus dem Volumen der Ausscheidung verwendet werden. Eine ähnliche Größe stellt der Vergleichsradius  $\hat{R}$  dar, dem Radius einer Kugel die das gleiche Volumen  $V$  hat, wie die Ausscheidung. Es ergibt sich damit der Zusammenhang

$$\hat{R} = \sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi}} \approx 0,62 \sqrt[3]{V}. \quad (7)$$

Unter der Annahme einer rotationselliptischen Form der Ausscheidung kann man den Vergleichsradius aus dem Hauptradius  $R$  und dem Aspektverhältnis  $A$  der Ausscheidung berechnen über

$$\hat{R} = \frac{R}{\sqrt[3]{A}}. \quad (8)$$

Abbildung 6 zeigt eine experimentell beobachtete Ausscheidung aus Abbildung 2 mit einem Aspektverhältnis von 3. Die Längen  $R$  und  $r$  sind jeweils entlang der Gitterrichtungen  $\vec{a}$  bzw.  $\vec{c}$  definiert.

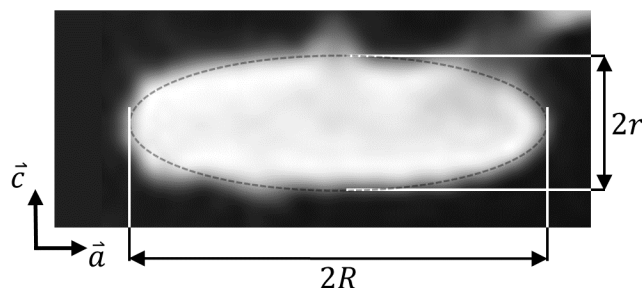


Abbildung 6: Schematische Darstellung der Auswertung einer experimentell beobachteten Ausscheidung aus einer TEM Aufnahme (siehe Abbildung 4) mit den Längen  $R$  und  $r$ . Das Aspektverhältnis  $A = R/r$  ist 3.

### Die Ausscheidungsform aus den Momenten

Zur Bestimmung der Form beliebig orientierter Ausscheidungen kann die Methode der invarianten Momente genutzt werden [43, 44]. Die zentralen Momente  $\mu_{ij}$  einer Ausscheidung sind für einen 2D Schnitt durch die Ausscheidung ist wie folgt definiert

$$\mu_{ij} = \iint_F x^i y^j \varphi(\vec{x}) dF, \quad (9)$$

wobei  $\vec{x} = (x, y)^T$  der Ortsvektor mit Ursprung im Schwerpunkt der Ausscheidung ist.  $\varphi(\vec{r})$  ist eine Verteilungsfunktion, die die Geometrie der Ausscheidung angibt. Sie ist 1 im Inneren der Ausscheidung und 0 außerhalb der Ausscheidung. Die Ordnung der Momente ergibt sich als Summe aus  $i$  und  $j$ . Das Moment der 0-ten Ordnung  $\mu_{00}$  entspricht der Fläche der Ausscheidung. Liegt der Ursprung des Koordinatensystems im Schwerpunkt der Fläche, verschwinden die zentralen Momente erster Ordnung, so dass  $\mu_{01} = \mu_{10} = 0$ .

Es lassen sich die folgenden Invarianten der 2D Momente definieren

$$\lambda_1 := \frac{2\mu_{00}^2}{\mu_{20} + \mu_{02}}, \quad (10)$$

$$\lambda_2 := \frac{\mu_{00}^4}{\mu_{20} \cdot \mu_{02} - \mu_{11}^2}. \quad (11)$$

Die Invarianten  $\lambda_1$  und  $\lambda_2$  sind unter Rotation und Skalierung invariant.  $\lambda_2$  ist auch unter Streckung, also Änderung des Aspektverhältnis, konstant.  $\lambda_2$  ist ein allgemeines Maß für die Ausscheidungsform, insbesondere für die Eckigkeit, bzw. die Konvexität der Form [45]. Für Ellipsen gilt  $\lambda_2 = (4\pi)^2 \approx 158$  und für Rechtecke gilt  $\lambda_2 = 144$ . Es gilt  $\lambda_2 \geq \lambda_1^2$ . Aus den Invarianten der Momente lässt sich das Aspektverhältnis  $A$  bestimmen durch

$$A = \frac{\sqrt{\lambda_2} + \sqrt{\lambda_2 - \lambda_1^2}}{\lambda_1}, \quad (12)$$

gültig im Bereich  $144 \leq \lambda_2 \leq 158$  für zweizählig drehsymmetrische Formen. Um die Abweichung einer Form von einer Ellipse zu beschreiben, wird die verallgemeinerte Rundheit  $\theta$  eingeführt, welche 100% ist für Ellipsen und etwa 33% für Rechtecke. Sie berechnet sich durch Normierung von  $\lambda_2$  als [32]

$$\theta = \left( \frac{\lambda_2}{(4\pi)^2} \right)^{12}. \quad (13)$$

Werte kleiner 33% treten auf wenn konkave Bereiche in der Form auftreten oder wenn keine zweizählige Drehsymmetrie auftritt.

Abbildung 7 a zeigt exemplarische Formen im zweidimensionalen Raum in welchem die Plattenform unabhängig von der Ausscheidungsgröße beschrieben werden kann. Um die 3D Form von  $\gamma''$ -Ausscheidungen zu beschreiben, wird die Rundheit  $\theta_A$  von Schnitten durch die Ebene normal zu  $\vec{a}$  als Maß für die Plattenform und die Rundheit  $\theta_C$  von Schnitten durch die Ebene normal zu  $\vec{c}$  als Maß für die Ausscheidungsform in der Ebene ermittelt. Abbildung 7 b

zeigt Schnitte durch eine plattenförmige Ausscheidung. Der Querschnitt ist blau und der Schnitt durch die Plattenebene in Rot dargestellt.

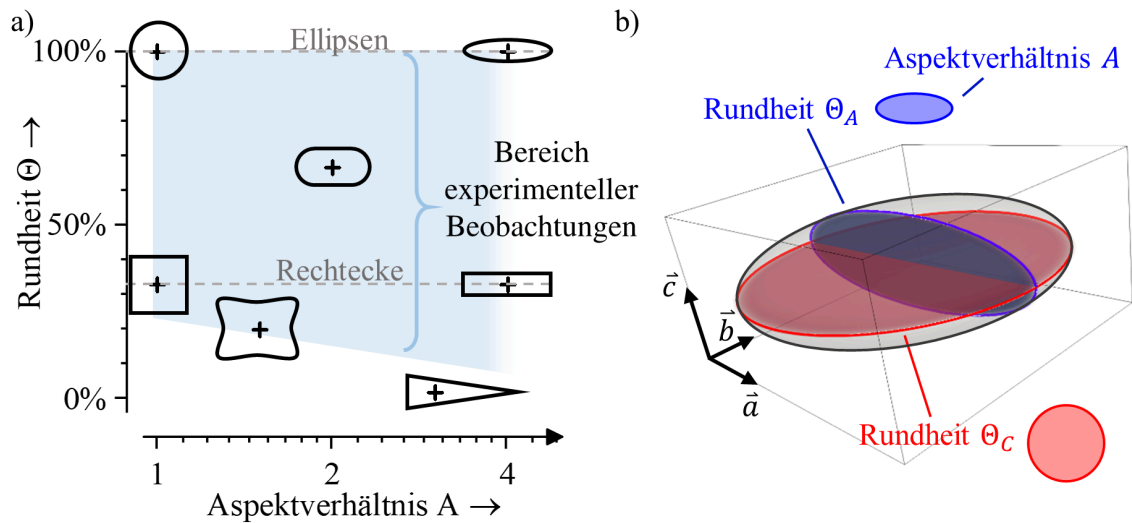


Abbildung 7: a) Phasenraum der Ausscheidungsform aus Aspektverhältnis  $A$  und Rundheit  $\Theta$  mit beispielhaften Formen. Der Bereich in dem experimentelle Beobachtungen zur  $\gamma''$ -Form liegen ist blau dargestellt b) Rotationselliptische Ausscheidung mit Querschnitt (blau) und Schnitt durch die Plattenebene (rot).

Aus einer binarisierten Mikrostrukturaufnahme, wie in Abbildung 4 gezeigt, oder aus einem Schnitt durch eine Simulationsdomäne können durch die Auswertung der Momente automatisiert die Fläche, die Schwerpunktskoordinaten, die Rundheit und das Aspektverhältnis aller Ausscheidungen bestimmt werden. Der Ausscheidungsgröße  $R$  ergibt sich aus den Momenten im Querschnitt als

$$R = \sqrt{\frac{A_\lambda \mu_{00}}{\pi}}. \quad (14)$$

Damit wird die Form einer jeden Ausscheidung beschrieben durch die Größen  $A$ ,  $\Theta_A$  und  $\Theta_C$ . Die Größe einer Ausscheidung wird beschrieben durch ihren Hauptradius  $R$ , der im Folgenden nur noch als Radius bezeichnet wird.

### 2.3 Gleichgewichtsform und Anordnung von Ausscheidungen

Die ersten Untersuchungen zur Form von kohärenten Ausscheidungen wurden durchgeführt unter der Annahme einer einzelnen Ausscheidung in unendlich ausgedehnter Matrixphase [46–51]. Die Form von kohärenten Ausscheidungen spielt eine entscheidende Rolle für die mechanischen Eigenschaften von Legierungen. Dies liegt zum einen an den höheren möglichen Phasenanteilen von würfelförmigen Ausscheidungen im Vergleich zu Kugeln [52], an der Beeinflussung der Reifungskinetik [53] und an den unterschiedlichen Interaktionen mit den Versetzungen [54]. Mit der Bestimmung der Ausscheidungsform geht auch immer die Bestimmung der Orientierung relativ zum Kristallgitter einher [55].

Für Ausscheidungen mit ausgeprägter, tetragonal anisotroper Gitterfehlpassung werden die platten- und stabförmige Ausscheidungsmorphologie beobachtet. Ist die Gitterfehlpassung in



Richtung der tetragonalen Achse die betragsmäßig größere, so bilden sich plattenförmige Ausscheidungen. Ist diese Gitterfehlpassung die betragsmäßig kleinere, so bilden sich stäbchenförmige Ausscheidungen [55]. Haben die Gitterfehlpassungen dasselbe Vorzeichen, so sind die Ausscheidungen entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Richtungen orientiert. Im Falle unterschiedlicher Vorzeichen, wie bei der  $D0_{22}$ -Phase im System Ni-V bilden sich komplexere Mikrostrukturen [30, 56].

Die zentrale Annahme bei der Bestimmung der Gleichgewichtsform einer Ausscheidung ist, dass diese Form die Summe aller Energiebeiträge im System minimiert [57]. Zur Vereinfachung wird dabei die chemische Energie nicht explizit betrachtet, sondern implizit durch Erhaltung des Phasenanteils berücksichtigt. Damit ergibt sich, dass die Gleichgewichtsform die Summe aus elastischer Energie und Grenzflächenenergie minimiert für eine Ausscheidung definierten Volumens [48]. Die Form einer Ausscheidung ist unabhängig von den Beträgen der Energiebeiträge, sondern ergibt sich lediglich aus deren Verhältnis. Eine grobe Abschätzung der Größenordnung der elastischen Energiedichte ergibt sich aus

$$e_{el} \approx \frac{1}{2} \delta^2 G, \quad (15)$$

wobei  $G$  der Schubmodul ist. Die Wahl von  $G$  als elastische Konstante ist beliebig, da in dieser Betrachtung keine Aussagen über Anisotropie oder Inhomogenität der elastischen Konstanten einfließen und die anderen elastischen Konstanten ebenfalls in der selben Größenordnung liegen.

Die dimensionslose Kennzahl  $Q$  stellt das Verhältnis der Energiebeiträge aus der Grenzfläche und der elastischen Energie durch die Gitterfehlpassung da und ist definiert als

$$Q = \frac{e_{el}V}{\Gamma S} = \frac{\delta^2 G}{\Gamma} \hat{R}, \quad (16)$$

mit  $V$  und  $S$  dem Volumen und der Oberfläche einer Ausscheidung,  $G$  dem Schubmodul,  $\Gamma$  der Grenzflächenenergiedichte und  $\hat{R}$  der Größenskala der Ausscheidung, welche sich aus dem Quotienten von Volumen und Oberfläche ergibt [49, 51, 58].  $Q$  ist dabei eine grobe Abschätzung der Energiebeiträge, welche keine Aussagen über Anisotropie im System und über phasenabhängige Inhomogenitäten enthält. Elastische Wechselwirkungen benachbarter Ausscheidungen sind ebenfalls nicht berücksichtigt. All diese Faktoren beeinflussen die Ausscheidungsform bei nominell gleichem  $Q$ . Andererseits zeigt sich in der Kennzahl der Trend, dass eine nominelle Verringerung des Schubmoduls den gleichen Effekt auf die Ausscheidungsform hat, wie eine Erhöhung der Grenzflächenenergie, wenn alle anderen Parameter konstant bleiben.

Die Größe  $Q$  zeigt durch  $Q \propto \hat{R}$  die Größenabhängigkeit der Ausscheidungsform auf. Das Verhältnis von elastischer Volumenenergie im System zur Grenzflächenenergie steigt mit zunehmender Ausscheidungsgröße an. Die Form kleiner Ausscheidungen ist stärker von der Grenzflächenenergie beeinflusst, als die Form großer Ausscheidungen. Geht  $Q$  bei isotropem  $\Gamma$  gegen 0, so ist die Gleichgewichtsform nur noch durch die Grenzflächenenergie beeinflusst.

Es bildet sich eine kugelförmige Ausscheidung, wenn  $\Gamma$  isotrop ist. Aus der experimentell beobachteten Form können durch Anpassung von Modellen der Gleichgewichtsform kritische Materialparameter, wie Gitterfehlpassung [59] und Grenzflächenenergie [45, 60, 61] oder Diffusionskoeffizienten [62], bestimmt werden.

Abbildung 8 zeigt die Rundheit  $\theta$  von Ausscheidungen mit isotroper Gitterfehlpassung in Abhängigkeit von  $Q$ , wie sie von Markus Holzinger am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth in 2D Simulationen für  $\gamma'$ -Ausscheidungen in Nickelbasis-Superlegierungen ermittelt wurde [45]. Die charakteristische eckige Form ergibt sich aus der Anisotropie der elastischen Eigenschaften der Phasen [63]. Der Vergleichsradius  $\hat{R}$  der Ausscheidung ist in diesem Fall der Durchmesser eines Kreises mit gleicher Fläche. Für  $Q > 4$  nimmt die Rundheit signifikant ab. Aufgrund der verwendeten Methode mit einer diffusen Grenzfläche erreicht  $\theta$  nie ganz 100% [45].

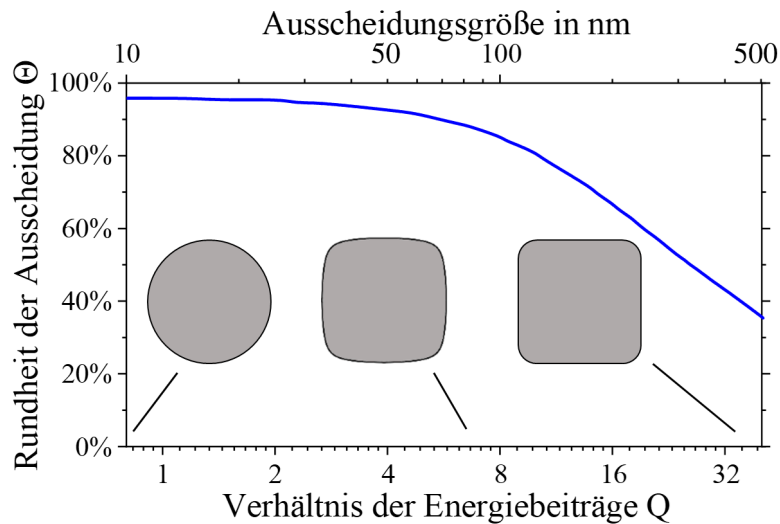


Abbildung 8: Rundheit  $\theta$  von 2D  $\gamma'$ -Ausscheidungen mit isotroper Gitterfehlpassung und anisotropen elastischen Konstanten in Abhängigkeit von der Kennzahl  $Q$  [45].

Ein weiterer Effekt, der in der Literatur beschrieben wird, ist die Instabilität der  $\gamma'$ -Würfelform für  $Q > 4$ , die zu einer Symmetriebrechung führt [50, 51, 64]. Unter Verwendung der Randintegralmethode wurde gezeigt, dass eine elastisch steifere Ausscheidung die vierzählig drehsymmetrische Form der Ausscheidungen stabilisiert [65], genauso wie eine zunehmende Anisotropie der elastischen Konstanten [66]. Für Ausscheidungen mit tetragonal anisotroper Gitterfehlpassung sind elastisch induzierte Symmetriebrechungen ebenfalls beschrieben, wenn die  $\langle 111 \rangle$ -Richtungen elastisch weich sind [67].

Elastische Wechselwirkungen zwischen fehlpassenden Ausscheidungen treten bei hohen Volumenanteilen der dispersen Phase auf. Im System  $\gamma/\gamma'$  wird beobachtet, dass ein zunehmender Phasenanteil zu einer noch stärker ausgeprägten eckigen Würfelform von  $\gamma'$  Ausscheidungen führt [68]. Mit analytischen Methoden kann gezeigt werden, dass sich runde fehlpassende Ausscheidungen in einer kubischen Matrixphase in einer regelmäßigen kubischen Überstruktur anordnen [69]. Die Anordnung geschieht durch selektives Auflösen ungünstig angeordneter Ausscheidungen und durch Bewegung der Ausscheidungen mittels Diffusion [70]. Die experimentell beobachteten Abweichungen von der regelmäßigen

Anordnung treten auf, wenn zusätzlich phasenabhängige elastische Eigenschaften betrachtet werden [71]. Inhomogenität der elastischen Eigenschaften hat außerdem Einfluss auf die Mikrostrukturänderung während der Auslagerung unter einachsiger Last [72, 73]. Des Weiteren können elastische Effekte auf Grund von Versetzungen die Ausscheidungsform beeinflussen [74]. Im Falle der tetragonalen  $\gamma''$ -Ausscheidungen bewirkt der Einbau von Versetzungen in die Phasengrenzfläche ein verringertes Aspektverhältnis der Ausscheidungen [36].

### 2.4 $\gamma''$ -Mikrostrukturvergrößerung durch Ostwaldreifung

Die Vergrößerung der Mikrostruktur sei hier definiert als die zeitliche Zunahme der mittleren Ausscheidungsgröße  $\langle R \rangle$ . Diese ist definiert als Mittelwert über die Größen  $R_i$  aller  $n$  Ausscheidungen

$$\langle R \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n R_i. \quad (17)$$

Die Zunahme der Größe einer einzelnen Ausscheidung wird als Wachstum bezeichnet. Betrachtet wird hier ein zweiphasiges System im unendlich ausgedehnten Einkristall.

#### Mechanismen der Vergrößerung

Die Vergrößerung einer Mikrostruktur bei isothermer Auslagerung beruht auf verschiedenen Ursachen. Nach Lösungsglügen und Abkühlung, befindet sich die Legierung in einem einphasigen, übersättigten Zustand. Durch homogene Nukleation bilden sich Keime, die durch Diffusion der gelösten Legierungselemente aus der Matrix wachsen, bis sich der temperaturabhängige Gleichgewichtsanteil der Ausscheidungsphase einstellt. Die Mikrostruktur vergrößert sich also durch Abscheiden von Legierungselementen aus der übersättigten Matrix an den Keimen. Dieses Wachstum aus der übersättigten Matrixphase geht mit einem Anstieg des Volumenanteils einher [75]. Diffusives Wachstum kann zu Zusammenwachsen zweier benachbarter Ausscheidungen unter Bildung einer Antiphasengrenze führen. Eine solche Koaleszenz hat eine Unstetigkeit im zeitlichen Verlauf der mittleren Ausscheidungsgröße im System zur Folge.

Man beobachtet in dispersen Systemen auch einen zeitlichen Anstieg der mittleren Größe von Partikeln dispers verteilter Phase bei näherungsweise konstantem Phasenanteil, die Ostwaldreifung [76]. Die Triebkraft dazu ist der Abbau von Phasengrenzfläche und damit von Grenzflächenenergie. Eine solche Vergrößerung findet ohne Änderung des Volumenanteils der Ausscheidungen statt [77]. Modelle zur  $\gamma''$ -Mikrostrukturentwicklung in Nb-haltigen Nickelbasislegierungen, die sowohl Wachstum aus dem übersättigten Mischkristall und die Ostwaldreifung beinhalten basieren auf der Beschreibung der Mikrostruktur in einzelnen Klassen von Ausscheidungsgrößen [78].

Abbildung 9 zeigt schematisch die Mechanismen der Mikrostrukturentwicklung während der isothermen Auslagerung, ausgehend von einem übersättigten Mischkristall (MK) nach dem Lösungsglügen. Die Übersättigung ist blau dargestellt. Es ist jeweils schematisch die

Mikrostrukturentwicklung, die zeitliche Änderung des Volumenanteils, der Partikelzahl und der mittleren Ausscheidungsgröße gegeben. Die Nukleation und das Wachstum der Keime aus dem übersättigten MK führen zur Einstellung des Gleichgewichtsvolumenanteiles (a). Die Ostwaldreifung führt zu einer Mikrostrukturvergrößerung ohne, dass sich der Volumenanteil ändert (b). Die Koaleszenz zweier Ausscheidungen kann zur Bildung einer Antiphasengrenze (APB) führen und tritt während des Wachstums zweier benachbarter Ausscheidungen auf (c). Die Mechanismen a - c führen zu Zunahme der mittleren Ausscheidungsgröße und damit zu Mikrostrukturvergrößerung.

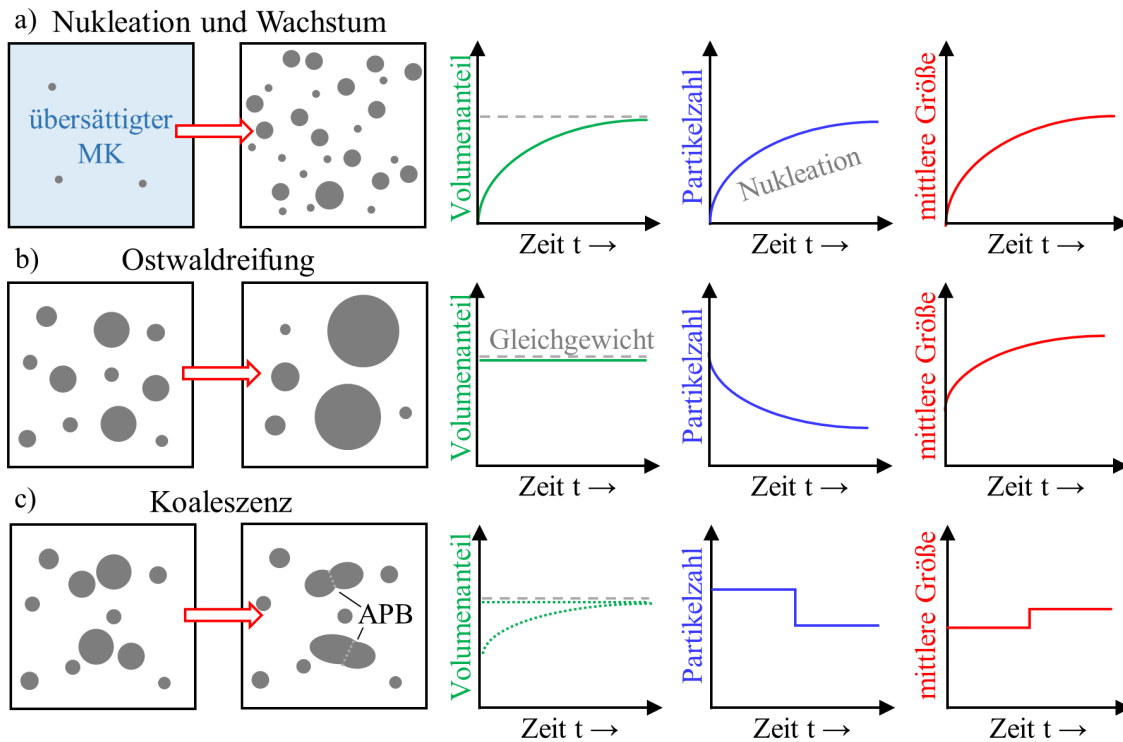


Abbildung 9: Mechanismen der Mikrostrukturentwicklung während isothermer Auslagerung. a) Nukleation von Ausscheidungen und Wachstum aus dem übersättigten Mischkristall (MK) durch Abscheidung von Legierungselementen b) Ostwaldreifung und c) Koaleszenz unter Bildung einer Antiphasengrenze (APB). Die zeitliche Entwicklung der Mikrostruktur, des Volumenanteils, der Partikelzahl und der mittleren Ausscheidungsgröße ist jeweils gegeben.

In der Realität finden die in der Abbildung dargestellten Prozesse simultan statt. Während einzelne Ausscheidungen aus der übersättigten Matrix wachsen bilden sich noch weitere Keime. Außerdem tritt bereits Wachstum durch Ostwaldreifung und Koaleszenz auf. Bei nicht-isothermer Auslagerung findet unter Umständen noch Auflösen von Ausscheidungen und die Nukleation sekundärer Ausscheidungen statt.

### Kinetik der Ostwaldreifung

Damit während der Reifung ein diffusiver Stofftransport zwischen den Ausscheidungen stattfinden kann, muss eine gewisse Löslichkeit der dispersen Phase bzw. ihrer

Legierungselemente in der Matrix gegeben sein. An einer gekrümmten Grenzfläche tritt der Gibbs-Thomson Effekt auf. Als Konsequenz der Grenzflächenenergie ist in der Matrix um die gekrümmte Grenzfläche das chemische Potential  $\mu$  der dispersen Phase erhöht. Im Fall einer isotropen Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_0$  gilt der proportionale Zusammenhang

$$\Delta\mu \propto \kappa \cdot \Gamma_0 \quad (18)$$

Der Effekt gewinnt an Stärke mit steigender Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma$  und steigender Krümmung der Grenzfläche  $\kappa$ . Es stellt sich damit ein Diffusionsstrom von stärker gekrümmten Grenzflächen zu weniger gekrümmten ein. Für kugelförmige Ausscheidungen ist die Krümmung invers proportional zum Radius der Kugel  $\kappa = r^{-1}$ . Ausscheidungen mit kleinem Radius lösen sich auf während Ausscheidungen mit großem Radius wachsen.

Die mittlere Größe von Ausscheidungen  $\langle R \rangle$  lässt sich während der Reifung beschrieben durch einen Ansatz [79, 80]

$$\langle R(t) \rangle^N - \langle R(t=0) \rangle^N = Kt, \quad (19)$$

wobei  $N$  der Reifungsexponent und  $K$  der Reifungskoeffizient ist mit der Einheit  $\text{m}^N \text{s}^{-1}$ . Ein Reifungskoeffizient von 2 beschreibt Reifung die ausschließlich limitiert ist durch Diffusion durch die Phasengrenzfläche, wie man es in Legierungen mit extrem hohem Anteil disperser Phase beobachtet [81]. In Nickelbasislegierungen mit hohem Anteil an  $\gamma'$ -Phase wird ein Reifungsexponent  $N \approx 2,3$  beobachtet, welcher sich bei Betrachtung der Kohärenzspannung ergibt [82]. Elastische Wechselwirkungen in Legierungen mit hohem Volumenanteil an kohärent ausgeschiedener  $\gamma'$ -Phase zeigen Reifungsverhalten mit zeitlich abnehmendem  $N$  [83]. Kohärenzspannungen und die daraus erwachsende Würfelform von  $\gamma'$ -Ausscheidungen allein haben keinen Einfluss auf den Reifungsexponenten [51]. Im Gegensatz dazu gilt  $N = 3$  im Fall von Reifung, deren Kinetik ausschließlich durch Volumendiffusion durch die Matrix bestimmt wird. Das ist etwa der Fall bei niedrigen Phasenanteilen. Die Temperaturabhängigkeit der Reifungskinetik wird durch die Aktivierungsenergie der Reifung  $Q_K$  beschrieben [61, 78, 84]. Der Reifungskoeffizient hängt von der Temperatur ab durch die Beziehung

$$K(T) \propto \frac{e^{\left(-\frac{Q_K}{k_B T}\right)}}{T}, \quad (20)$$

wobei  $k_B \approx 8,314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$  die universelle Gaskonstante ist [85].

### 3 Materialwissenschaftliche Modellbildung

#### 3.1 Phasenfeldmethode

Zur Beschreibung von Phasenumwandlungen in der Materialwissenschaft hat sich die Phasenfeldmethode bewährt [86, 87]. Die Methode wird vielfach angewandt um die  $\gamma/\gamma'$ -Mikrostrukturentwicklung [88–93] und die  $\gamma/\gamma''$ -Mikrostrukturentwicklung [36, 39, 94] in Nickelbasislegierungen zu beschreiben. Die Variationsformulierung macht die Phasenfeldmethode zu einem nützlichen Werkzeug zu Bestimmung der Form [58, 67, 95–98] und Anordnung [71, 99] von Ausscheidungen. Die Phasenfeldmethode beruht auf einer impliziten Beschreibung der Phasengrenzen durch ein Feld  $\varphi(\vec{x}) \in \{0,1\}$ . Dabei ist  $\varphi$  als ein Ordnungsparameter zu verstehen, der zwischen der ungeordneten  $\gamma$  Matrix ( $\varphi = 0$ ) und der geordneten  $\gamma''$ -Phase ( $\varphi = 1$ ) unterscheidet. Die Phasengrenze ist diffus, das heißt es gibt im Kontinuum einen stetigen Übergang zwischen den Phasen. Phasenfeldwerte zwischen 0 und 1, bzw. ein Gradient des Phasenfeldes zeigen eine Phasengrenze an. Die Länge über die diese diffuse Grenzfläche verschmiert ist wird als Grenzflächenbreite, bzw. als Phasenfeldbreite bezeichnet.

Die phänomenologische Beschreibung der energetischen Beiträge zur Mikrostrukturbildung basiert auf dem großkanonischen Potential  $\Omega$ , welches ein Integral über eine lokale großkanonische Potentialdichte  $\omega(\vec{x})$  ist [100–102]. In jedem Punkt im System wird damit eine Energiedichte bestimmt. Die Zustandsvariablen der energetischen Beiträge sind das Phasenfeld  $\varphi$  mit dem Gradienten  $\partial_I \varphi$  ( $I = x, y, z$ ), das lokale chemische Potential  $\mu_n$  von Legierungselement  $n$  und das elastische Verschiebungsfeld  $u$  mit den Einträgen  $u_I$ . Die Beiträge zur lokalen Energetik sind ein Grenzflächenbeitrag  $\omega_{int}(\varphi, \partial_I \varphi)$ , ein chemischer Beitrag aus der lokalen Elementverteilung bzw. den chemischen Potentialen  $\omega_{ch}(\mu_n)$  und ein Beitrag aus der elastischen Dehnung des Kristallgitters  $\omega_{el}(\vec{u})$ . Die letzteren beiden Beiträge sind phasenabhängige Volumenbeiträge und damit vom Phasenfeld abhängig.

##### 3.1.1 Sharp Phase-Field Formulierung

Das Phasenfeldmodell ist ein Kontinuumsmodell und auch mathematisch kontinuierlich formuliert. Die numerische Diskretisierung muss so gewählt werden, dass die diffuse Grenzfläche durch genügend numerische Stützstellen aufgelöst wird um Artefakte zu vermeiden. Zu den Artefakten gehört eine künstliche Anisotropie der Grenzfläche und eine künstliche Reibung der Grenzfläche am numerischen Gitter. Die künstliche Reibung führt im Extremfall zu einem vollständigen Anhaften der Grenzfläche an das numerische Gitter, ein Effekt der in der Literatur unter dem Begriff Pinning bekannt ist. Ursache der künstlichen Gitterreibung ist die Variation der Grenzflächenenergie abhängig von der Grenzflächenposition relativ zum numerischen Gitter. Ist der diffuse Übergang der Grenzfläche numerisch zu grob aufgelöst, so ergeben sich ausgeprägte Oszillationen in der totalen Grenzflächenenergie als Funktion der Grenzflächenposition. Die Bewegung der diskreten Grenzfläche über das effektiv periodische Potential des numerischen Gitters ist mit künstlichem Energieverlust und einer verminderten Mobilität der Grenzfläche verbunden.

Übersteigt die Amplitude der Oszillationen die Stärke der anderen Triebkräfte, so ist keine Bewegung der Grenzfläche mehr möglich und es kommt zum Pinning [103]. Für klassische Phasenfeldmodelle ist eine Phasenfeldbreite von 5 – 8 numerischen Stützstellen nötig [104].

Eine Möglichkeit diese Limitierung der numerischen Diskretisierung zu umgehen ist das Sharp Phase-Field Modell (SPFM). Das SPFM basiert auf einer explizit diskreten Beschreibung der Grenzfläche, die so gewählt wird, dass entlang ausgewählter Richtungen des numerischen Gitters die translatorische Invarianz der Grenzflächenenergie erhalten bleibt. Das bedeutet, dass die Grenzflächenbreite und -energie nicht von der Position der Grenzfläche abhängen, also weder die künstliche Gitterreibung noch das Pinning auftritt. Im Folgenden werden die Richtungen im numerischen Gitter in Miller'schen Indizes angegeben. Da das numerische Gitter ein kubisch primitives Gitter ist, dessen Basis mit der der kubischen Matrixphase übereinstimmt, wird nicht explizit zwischen den Richtungen des numerischen Gitters und den kristallographischen Richtungen der Phasen unterschieden [105].

### Diskretes Phasenfeldprofil und Potential

Abbildung 10 zeigt das zur Beschreibung der diffusen 1D Grenzfläche genutzte diskrete Tangens-Hyperbolicus Profil nach dem Ansatz [105]

$$\varphi_i = \frac{1}{2} \left( \tanh \left( 2 \frac{i\Delta x + x_0}{\xi} \right) + 1 \right). \quad (21)$$

Dabei ist der Index  $i$  ein Zähler über die numerischen Gitterpositionen,  $\Delta x$  der physikalische Gitterabstand der Diskretisierung,  $x_0$  die Position der Grenzfläche zwischen zwei numerischen Gitterpunkten und  $\xi$  die Phasenfeldbreite in numerischen Gitterpunkten. Die Grenzflächenposition ist definiert als der Punkt (in höheren Dimensionen die Isolinie bzw. Isofläche) an dem  $\varphi = 1/2$ .

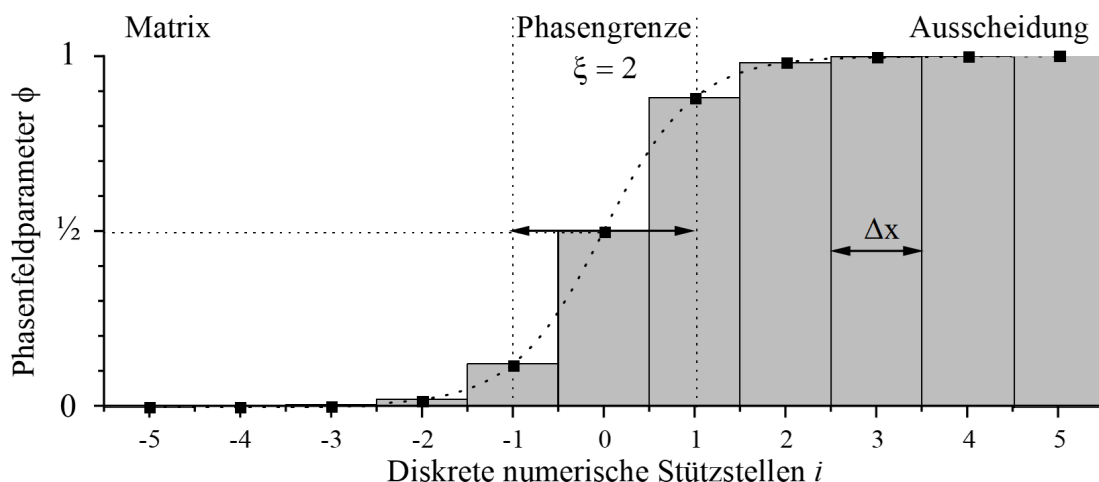


Abbildung 10: Diskretes 1D Phasenfeldprofil nach Gleichung (21). Die Breite der Phasengrenze beträgt zwei numerische Gitterlängen  $\xi = 2$ . Das kontinuierliche Phasenfeldprofil ist gestrichelt dargestellt.

Das diskrete großkanonische Potential sei definiert als die Summe über alle numerischen Stützstellen mit den kartesischen Koordinaten  $\vec{x}_i$

$$\Omega = \Delta x^3 \sum_i \omega_{int}(\vec{x}_i) + \omega_{bulk}(\vec{x}_i), \quad (22)$$

wobei  $\omega_{bulk} = \omega_{el} + \omega_{ch}$  die Summe aller Volumenbeiträge zur Potentialdichte ist [105]. Der Beitrag durch die anisotrope Grenzfläche ist wie folgt definiert:

$$\omega_{int} = f_i(\vec{n})g(\varphi_i). \quad (23)$$

Dabei ist  $f_i$  eine Funktion, welche die tetragonale Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte abbildet,  $g$  bezeichnet den isotropen Anteil des Grenzflächenbeitrags und  $\varphi_i = \varphi(\vec{x}_i)$  ist der lokale Phasenfeldparameter.

Der isotrope Grenzflächenbeitrag  $g$  besteht aus zwei Termen. Der erste weist dem quadrierten Betrag des Gradienten des Phasenfelds einen Energiebetrag zu und bewirkt damit eine Aufweitung der Phasengrenze. Der zweite Term ist ein Doppelmuldenpotential  $p$  mit Minima bei 0 und 1. Dadurch werden Grenzflächen energetisch bestraft und die Grenzflächenbreite geht gegen 0. Um eine konstante, definierte Grenzfläche zu erhalten werden beide Terme passend gewichtet. Es ergibt sich für den Grenzflächenbeitrag

$$g(\varphi_i) = \frac{\Gamma_0}{\Gamma_{ref}(\Delta x)^2} \left( \frac{1}{2} |\vec{\nabla}|^2 \varphi_i + p(\varphi_i) \right), \quad (24)$$

wobei  $\Gamma_0$  die physikalische isotrope Grenzflächenenergiedichte ist und  $\Gamma_{ref}$  eine Referenzgrenzflächenenergiedichte, welche sich durch die Definition des Potentials und des Gradiententerms ergibt. Im Sharp Phase-Field Modell werden beide Terme so gewählt, das Grenzflächenenergie möglichst unabhängig von  $x_0$  ist, also translatorische Invarianz herrscht [105].

### **Translatorische Invarianz**

Als Richtung der translatorischen Invarianz werden die  $\langle 100 \rangle$ -Richtungen ausgewählt, damit die Grenzflächenposition entlang dieser Richtungen, und damit auch das Aspektverhältnis einer Ausscheidung, präzise bestimmt werden kann. Im Falle eines kubisch primitiven numerischen Gitters ergibt sich das folgende Potential

$$p(\varphi_i) = \frac{1}{4} \left\{ \frac{q^2 - 1}{q^2} \cdot \ln(1 - q^2(2\varphi_i - 1)^2) - (2\varphi_i - 1)^2 \right\}, \quad (25)$$

wobei  $q = \tanh(2\Delta x/\xi)$  an das numerische Gitter koppelt [105] und  $\varphi_i = \varphi(\vec{x}_i)$  der lokale Phasenfeldparameter ist. Das Potential ist in Abbildung 11 für unterschiedliche Grenzflächenbreiten  $\xi$  dargestellt.



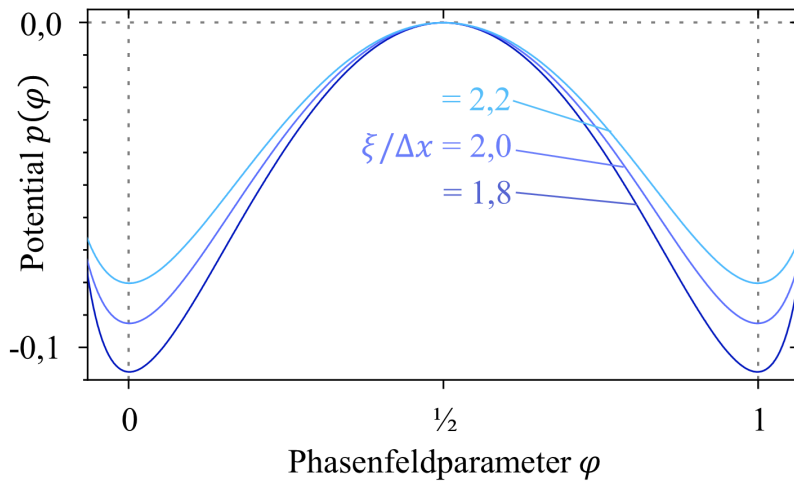


Abbildung 11: Doppelmuldenpotential nach Gleichung (25) für verschiedene Grenzflächenbreiten.

Um aus dem translatorisch invarianten 1D Modell eine 3D Formulierung zu erhalten wird ein diskreter Gradientenoperator  $|\tilde{\nabla}|^2$  eingeführt. Dieser betrachtet neben den direkt benachbarten numerischen Stützstellen auch die übernächsten und drittnächsten Nachbarn einer numerischen Stützstelle. Diese Nachbarschaftsbeziehungen, also benachbarte Gitterpositionen mit demselben Abstand zur Referenzstützstelle, werden als Schalen bezeichnet. Durch eine geschickte Gewichtung der Schalen im Gradientenoperator kann die künstliche Anisotropie und die Effekte der verlorenen translatorischen Invarianz minimiert werden. Der Operator ist definiert als

$$|\tilde{\nabla}|^2 \varphi_i = \sum_{j=1}^3 \rho_j \frac{\psi_j}{3d_j^2} \sum_{k=1}^{\psi_j} (\varphi(\vec{x}_i + \vec{r}_{jk}) - \varphi_i)^2, \quad (26)$$

wobei der Index  $j$  die Nachbarschaftsschale angibt (1., 2. und 3. Nachbarn),  $\rho_j$  der Gewichtungsfaktor der Schale  $j$ ,  $\psi_j$  die Koordinationszahl dieser Schale und  $d_j$  der Abstand der Nachbarn zur Stützstelle ist [105]. Der Index  $k$  ist ein Zähler über die  $\psi_j$  Nachbarn innerhalb einer Schale und  $\vec{r}_{jk}$  ist der Richtungsvektor zum  $k$ -ten Nachbar in der  $j$ -ten Schale. Für die Gewichtungsfaktoren gilt  $\sum \rho_j = 1$ . Sie werden durch eine nichtlineare Optimierung bestimmt, bei der die Grenzflächenenergie in zwei Richtungsscharen ungleich der Richtung der translatorischen Invarianz mit der Grenzflächenenergie der Richtung der translatorischen Invarianz gleichgesetzt wird. Die Gewichtungsfaktoren sind abhängig von der Grenzflächenbreite. In Tabelle 2 sind Faktoren gegeben, welche die Anisotropie in  $\langle 110 \rangle$  und  $\langle 111 \rangle$ -Richtung minimieren zusammen mit der Referenzgrenzflächenenergie  $\Gamma_{ref}$ . In dieser Arbeit wird stets eine Grenzflächenbreite von 2 verwendet.

Tabelle 2: Gewichtungskoeffizienten  $\rho_j$  und Referenzgrenzflächenenergiedichten  $\Gamma_{ref}$  für das Sharp Phase-Field Modell für verschiedene Breiten der Phasengrenze  $\xi$ .

Phasenfeldbreite $\xi$ in $\Delta x$	$\rho_1$	$\rho_2$	$\Gamma_{ref}$
4	0,4190	0,1307	0,1613
3	0,4038	0,1447	0,2099
2	0,4130	0,1539	0,2945
3/2	0,4129	0,1703	0,3606
1	0,4308	0,1870	0,4426
2/3	0,4530	0,1930	0,4875

### **Anisotropie der Grenzflächenenergie**

Die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma$  einer kohärenten fest/fest-Phasengrenze ist abhängig von der Orientierung der Grenzfläche  $\vec{n}$  [34]. In Abschnitt 2.2.1 wurde dargelegt, dass sich die Grenzflächen normal zur  $\vec{c}$ -Richtung und die Grenzflächen normal zu den Richtungen  $\vec{a}$  und  $\vec{b}$  in ihrer Struktur und sich so auch in ihrer Grenzflächenenergiedichte unterscheiden. Um diese Richtungsabhängigkeit von  $\Gamma$  zu berücksichtigen wurde in Gleichung (21) die diskrete Anisotropiefunktion  $f_i(\vec{n})$  eingeführt. Sie moduliert die Grenzflächenenergiedichte in Abhängigkeit der lokalen Grenzflächenorientierung  $\vec{n}$ . Die Orientierung sei dargestellt durch den Winkel  $\theta$  zwischen der Grenzflächennormalen  $\vec{n}$  und der tetragonalen Richtung  $\vec{c}$ . Als Profilkfunktion der Grenzflächenenergiedichte wird der folgende Ansatz gewählt

$$f(\theta) = 1 - \left(1 - \frac{\Gamma_C}{\Gamma_A}\right) \cdot (\cos \theta)^2. \quad (27)$$

Dabei wird die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_C$  einer Deckfläche mit Normale parallel zu  $\vec{c}$  um den Faktor  $(1 - \Gamma_C/\Gamma_A)$  gegenüber der Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A$  bei  $\theta = \pi/2$  moduliert. Für alle anderen möglichen Orientierungen existiert eine stetig differenzierbare interpolierte Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma(\theta) = \Gamma_0 f(\theta)$ , wobei  $\Gamma_0$  die isotrope Grenzflächenenergiedichte ist. Abbildung 12 zeigt die resultierende orientierungsabhängige Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma(\theta)$  für verschiedene Verhältnisse  $\Gamma_A/\Gamma_C$  in Polardarstellung.  $\Gamma(\theta)$  wird in diesem Modell als zylindersymmetrisch um die  $\vec{c}$  Achse angenommen.

Die diskrete Darstellung der Anisotropiefunktion  $f_i$  ist gegeben durch

$$f_i = 1 - \left(1 - \frac{\Gamma_C}{\Gamma_A}\right) \cdot \left( \frac{(\tilde{\partial}_z \varphi_i)^2}{(\tilde{\partial}_x \varphi_i)^2 + (\tilde{\partial}_y \varphi_i)^2 + (\tilde{\partial}_z \varphi_i)^2} \right), \quad (28)$$

wobei  $\tilde{\partial}_j$  mit  $J = x, y, z$  die diskrete Ableitung nach der  $J$ -ten Raumrichtung bezeichnet. Die Gradiententerme erstrecken sich nur über die benachbarten numerischen Stützstellen in den  $\langle 100 \rangle$ -Richtungen ( $\vec{x}_i \pm \vec{r}_j$ ) und sind definiert als

$$(\tilde{\partial}_J \varphi_i)^2 = \frac{1}{2} \left( (\varphi(\vec{x}_i + \vec{r}_j) - \varphi_i)^2 + (\varphi(\vec{x}_i - \vec{r}_j) - \varphi_i)^2 \right). \quad (29)$$

Die Anisotropiefunktion ist so gewählt, dass ihre Ableitung nach  $\varphi$  entlang der Richtungen der translatorischen Invarianz verschwinden, so dass diese weiterhin gewahrt wird und das

diskrete Potential in Gleichung (25) weiterhin die Gleichgewichtsbedingung für die Profilkurve in Gleichung (21) erfüllt.

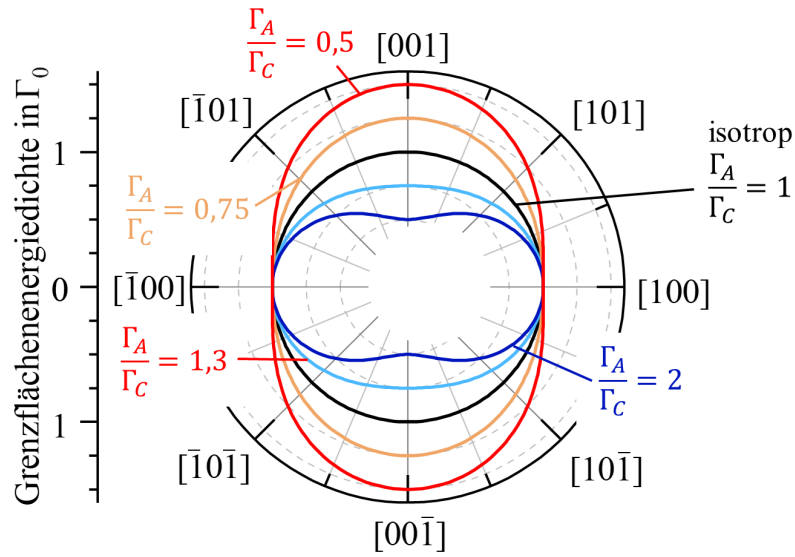


Abbildung 12: Orientierungsabhängige Grenzflächenenergiedichte für verschieden starke Anisotropien  $\Gamma_A/\Gamma_C$ .

### 3.1.2 Volumenbeiträge zum Phasenfeldmodell

Im großkanonischen Potential in Gleichung (22) wird eine lokale Potentialdichte  $\omega_{bulk}(x_i)$  eingeführt, welches die Volumenbeiträge zur energetischen Beschreibung des Phasenfeldmodells beschreibt. Die Potentialdichte ist durch die Ortsabhängigkeit implizit an das Phasenfeld gekoppelt. Die Volumenbeiträge teilen sich auf als

$$\omega_{bulk}(x_i) = \omega_{el}(\varphi, \vec{u}) + \omega_{ch}(\varphi, \mu_n). \quad (30)$$

Um phasenabhängige Volumenbeiträge zur lokalen Energiedichte zu berücksichtigen muss eine Interpolationsfunktion  $h(\varphi)$  definiert werden, welche den Wert 1 in der jeweiligen Phase hat und 0 in der anderen Phase. Um eine Verschiebung der energetischen Minima von 0 und 1 zu verhindern muss die Ableitung der Interpolationsfunktion nach dem Phasenfeld für 0 und 1 verschwinden. Die einfachste Wahl ist ein Polynom dritten Grades

$$h(\varphi) = 3\varphi^2 - 2\varphi^3. \quad (31)$$

Durch die Wahl dieses Interpolationspolynoms ist die translatorische Invarianz weiterhin erhalten [105]. Die Beschreibung der Volumenbeiträge basiert hauptsächlich auf den Arbeiten von Mushongera et al. [82] und Fleck et al. [106].

### Elastische Energiedichte

Durch die Gitterfehlpasung zwischen den Phasen ergibt sich ein Verschiebungsfeld  $\vec{u}$  mit den Einträgen  $u_I$ . Die Indizes  $I, J, K, L = x, y, z$  stehen hier für die Raumrichtungen. Das Dehnungsfeld  $\varepsilon$  bestimmt sich aus dem Verschiebungsfeld durch

$$\varepsilon_{IJ} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_I}{\partial x_J} + \frac{\partial u_J}{\partial x_I} \right). \quad (32)$$

Die elastische Energiedichte ergibt sich aus dem lokalen Dehnungsfeld  $\varepsilon$  als

$$\omega_{el} = \frac{1}{2} (\varepsilon_{IJ} - \bar{\varepsilon}_{0,IJ}) \bar{C}_{IJKL} (\varepsilon_{KL} - \bar{\varepsilon}_{0,KL}), \quad (33)$$

wobei  $\bar{\varepsilon}_0$  die Gitterfehlpassung ist, die als phasenabhängiger Eigendehnungstensor in das Modell eingeht und  $\bar{C}_{IJKL}$  der phasenabhängige Elastizitätstensor. Die phasenabhängigen Größen werden interpoliert durch

$$\begin{aligned} \bar{C}_{IJ}(\varphi) &= h(\varphi) C_{IJ}^{\gamma} + (1 - h(\varphi)) C_{IJ}^{\gamma''} \\ \bar{\varepsilon}_{0,IJ}(\varphi) &= h(\varphi) \varepsilon_{0,IJ}. \end{aligned} \quad (34)$$

Das Spannungsfeld  $\sigma$  wird bestimmt als

$$\sigma_{IJ} = \bar{C}_{IJKL} (\varepsilon_{KL} - \bar{\varepsilon}_{0,KL}). \quad (35)$$

### Chemische Triebkraft

Die chemische Triebkraft im Phasenfeldmodell beschreibt die Kopplung der Phasenumwandlung an die lokalen Konzentrationen der  $n$  Legierungselemente. Über die Thermodynamik der Phasen ist eine Beschreibung diffusionslimitierter fest/fest Umwandlung möglich. Die hier dargestellte Methode die lokale Thermodynamik der Phasen zu beschreiben funktioniert auf Basis einer quadratischen Näherung an die Minima der Gibb'schen Freien Energie [106].

Der chemische Anteil zur großkanonischen Potentialdichte ist gegeben durch die lokale Interpolation

$$\omega_{ch}(\varphi, \mu_n) = h(\varphi) \omega_{ch}^{\gamma''}(\mu_n) + h(1 - \varphi) \omega_{ch}^{\gamma}(\mu_n), \quad (36)$$

wobei  $\omega_{ch}^{\alpha}$  die Beiträge der jeweiligen Phasen sind und  $\mu_n$  die chemischen Potentiale der Legierungselemente. Die Gibb'sche Freie Energiedichte der Phasen  $g_{ch}^{\alpha}$  wird beschrieben durch

$$g_{ch}^{\alpha} = \frac{1}{2} (c_n - X_n^{\alpha})^2 \chi_n^{\alpha} + Y^{\alpha}, \quad (37)$$

wobei  $c_n$  die lokale Konzentration des Legierungselements  $n$  ist und  $\chi_n^{\alpha}$  der thermodynamische Faktor. Die Koordinaten des Scheitelpunktes der Parabel sind  $X_n^{\alpha}$  und  $Y^{\alpha}$  und die Öffnungsweite wird beschrieben durch  $\chi_n^{\alpha}$  [82]. Diese Parameter sind temperaturabhängig und können aus CalPhaD-Datenbanken entsprechend bestimmt werden [106].

Die natürlichen Variablen der großkanonischen Potentialdichte  $\omega$  sind, neben der Temperatur  $T$ , die chemischen Potentiale der Legierungselemente  $\mu_n$ . Diese sind definiert als die partiellen Ableitungen der Gibb'schen Freien Energie nach den Konzentrationen  $c_n$  als

$$\mu_n = \frac{\partial g_{ch}^\alpha}{\partial c_n} = \chi_n^\alpha (c_n - X_n^\alpha). \quad (38)$$

Daraus ergibt sich die großkanonische Potentialdichte durch eine Legendretransformation aus der Gibb'schen Freien Energie zu

$$\omega_{ch}^\alpha(\mu_n) = g_{ch}^\alpha - \mu_n c_n. \quad (39)$$

Die lokalen Konzentrationen können dann aus den chemischen Potentialen berechnet werden mittels

$$c_n = (\chi_n^\alpha)^{-1} \mu_n + X_n^\alpha, \quad (40)$$

wobei der inverse thermodynamische Faktor als eine verallgemeinerte Löslichkeit verstanden werden kann [100]. In metallischen Werkstoffen bei atmosphärischem Druck kann die Gibb'sche Freie Energie der Freien Energie gleichgesetzt werden [106].

Die chemische Triebkraft im Phasenfeldmodell bewirkt, dass der Phasenanteil im betrachteten System immer gegen den Gleichgewichtsphasenanteil strebt. Dadurch können temperaturabhängig das Ausscheiden und Auflösen von Phasen betrachtet werden. Bei konstanter Temperatur und Gleichgewichtsphasenanteil bewirkt die chemische Triebkraft eine implizite Phasenerhaltung. Um die Mikrostrukturbildung im chemischen Gleichgewicht zu beschreiben ist eine explizite Betrachtung der lokalen Chemie nicht nötig. Lediglich die Phasenanteile müssen durch eine weitere Triebkraft  $\omega_{ch}^*(t)$  künstlich erhalten werden. Diese ersetzt in Gleichung (30) den chemischen Anteil der großkanonischen Potentialdichte im Volumen. Die Funktionsweise dieser Triebkraft ist, dass sie homogen im gesamten System wirkt und von der Größenordnung so gewählt wird, dass sie alle anderen Triebkräfte exakt ausgleicht. Sie ist definiert als Summe über die lokalen Triebkräfte  $\delta\omega/\delta\varphi$  als

$$\omega_{ch}^*(t) = \sum_i \frac{\delta\omega(x_i)}{\delta\varphi} \frac{1}{h'(\varphi_i)}, \quad (41)$$

wobei  $h'(\varphi) = 6(\varphi - \varphi^2)$  die Ableitung der Interpolationsfunktion aus Gleichung (31) nach dem Phasenfeldparameter  $\varphi$  ist.

### 3.1.3 Entwicklungsgleichungen

Die zeitliche Entwicklung einer Zustandsgröße wird durch ein thermodynamisch konsistentes Set aus gekoppelten partiellen Differentialgleichungen bestimmt. Diese leiten sich aus der Variationsableitung des großkanonischen Potentials nach der Zustandsgröße ab. Es ergibt sich eine lokale Triebkraft, die sich wieder in eine Triebkraft aus der Grenzfläche, der lokalen Elementverteilung und aus der Gitterdehnung aufteilt. Das Zusammenspiel der Triebkräfte bestimmt die Mikrostrukturentwicklung. Um aus der großkanonischen Zustandssumme in Gleichung (25) die Gleichungen für die Entwicklung der Zustandsgrößen herzuleiten, werden die Variationsableitungen des Potentials nach den Zustandsgrößen ermittelt.

Die zeitliche Entwicklung des Phasenfeldes ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= -\frac{2M}{3\Gamma\xi} \frac{\delta\Omega}{\delta\varphi} = \\ &= -\frac{2M}{3\Gamma\xi} \left\{ \frac{\Gamma}{\Gamma_0} \left( f \left( \frac{\partial p}{\partial \varphi} + 2\tilde{\nabla}^2 \varphi_i \right) + \frac{\partial f}{\partial \varphi} g \right) + \frac{\partial \omega_{bulk}(x_i)}{\partial h(\varphi)} h'(\varphi_i) \right\} \end{aligned} \quad (42)$$

wobei der kinetische Koeffizient  $M$  die Dimension eines Diffusionskoeffizienten hat und  $\tilde{\nabla}^2 \varphi_i$  der diskrete Laplace-Operator ist. Dieser ist, analog zum Gradiententerm in Gleichung (26), definiert als [105]

$$\tilde{\nabla}^2 \varphi_i = \sum_{j=1}^3 \rho_j \frac{\psi_j}{3d_j^2} \sum_{k=1}^3 (\varphi(\vec{x}_i + \vec{r}_{jk}) - \varphi_i). \quad (43)$$

Die zeitliche Entwicklung der chemischen Potentiale kann ebenfalls thermodynamisch konsistent aus dem großkanonischen Potential abgeleitet werden, so dass die Konzentrationen erhalten werden durch [32]

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\delta\Omega}{\delta\mu_n} \right) = \nabla(M_n \nabla \mu_n), \quad (44)$$

wobei  $M_n$  die Mobilität von Legierungselement  $n$  ist, die sich aus den Diffusionskoeffizienten und aus dem thermodynamischen Faktor ableitet. Die Entwicklungsgleichungen sind in den Arbeiten von Mushongera et al. [82] und Fleck et al. [106] explizit gegeben.

Ebenfalls mit einer Variationsableitung kann die Bedingung für die elastische Verschiebung hergeleitet werden. Die elastische Relaxation wird als viel schneller angenommen, als die diffusiven Prozesse im System. Deshalb ergibt sich die folgende Entwicklung für das Verschiebungsfeld zu jedem Zeitpunkt

$$\frac{\delta\Omega}{\delta u_I} = \frac{\partial}{\partial x_I} \frac{\partial \omega_{el}}{\partial \varepsilon_{IJ}} = \frac{\partial \sigma_{IJ}}{\partial x_I} = 0. \quad (45)$$

Die Entwicklungsgleichungen werden auf einem Finite-Differenzen-Gitter gelöst. Das Gitter ist kubisch primitiv und hat eine feste Größe von  $m_x \times m_y \times m_z$  numerischen Stützstellen. Die zeitliche Entwicklung des Phasenfeldes und der chemischen Potentiale werden durch das explizite Eulerverfahren gelöst. Dabei ist die Zeitschrittweite  $\Delta t$  gekoppelt an die minimale Diffusionsgeschwindigkeit  $D_{min}$  im System durch

$$\Delta t = 0,01 \cdot \frac{D_{min}}{(\Delta x)^2}. \quad (46)$$

Das Verschiebungsfeld wird in jedem Zeitschritt durch eine Jakobi-Relaxation gelöst. Die Zeitschrittweite der Relaxation ist 0,1 und das Abbruchkriterium ist eine maximale Änderung der mittleren Verschiebung von  $10^{-4} \Delta x$ .

### 3.1.4 Konfiguration einer Simulation in 2D und 3D

Das physikalische System, dessen zeitliche Entwicklung durch das Phasenfeldmodell numerisch beschrieben werden soll, wird definiert durch die Entwicklungsgleichungen (43), (44) und (45), die phasenabhängigen Parameter des Sharp Phase-Field Modells, sowie Rand- und Startbedingungen des simulierten Systems. Die Menge dieser Größen ergibt zusammen die Konfiguration einer Simulation. Da die Simulationsdomänen immer Kantenlängen unter 1000 nm haben, wird angenommen, dass die Kristallstruktur nicht durch Korngrenzen unterbrochen wird.

#### Randbedingungen

Die betrachteten Simulationsdomänen sind quaderförmig und haben die physikalischen Kantenlängen  $L_x \times L_y \times L_z$ . Die betrachteten Systeme sind dabei als kleinste Einheitszelle einer periodischen Anordnung von Systemen zu verstehen. Die physikalische Größe der Simulationsdomäne ergibt sich aus der Zahl der Stützstellen und der numerischen Gitterweite  $\Delta x$  als  $L_I = m_I \cdot \Delta x$ . Die Randbedingungen werden auf einer weiteren Lage numerischer Stützstellen, den Rändern, definiert. Die tetragonale Achse der  $\gamma''$ -Phase ist stets parallel zur  $z$ -Richtung der Simulationsdomäne orientiert. In jeder Raumrichtung  $I = x, y, z$  existiert jeweils ein negativer „linker“ Rand  $I = 0$  und ein positiver „rechter“ Rand  $I = L_I$  mit dem Normalenvektor  $n_I$ . An den Rändern jedes Feldes gelten definierte Randbedingungen. Einer Zustandsgröße  $U$  wird an diesen Rändern ein definierter Wert  $U_R$  (Dirichlet Randbedingung) oder eine definierte Ortsableitungen  $\partial U_R / \partial n_I$  (Neumann Randbedingung) zugewiesen. Darüber hinaus sind periodische Randbedingungen möglich  $U(0) = U(L_I)$ .

Eine Besonderheit stellen die Randbedingungen für das Feld der Verschiebungen normal zum Rand  $u_n$  dar. Periodische Randbedingungen oder Dirichlet Randbedingungen  $u_n = 0$  bewirken eine Volumenkonstanz der Simulationsdomäne. Wenn eine Phase mit einer Eigendehnung durch Gitterfehlpassung in das System eingebracht wird ändert sich jedoch zwangsläufig das Volumen des Systems. Eine erzwungene Konstanz des Volumens wirkt in diesem Fall als künstliche externe Volumendehnung und führt dem System unphysikalische elastische Energie zu. Zur exakten Bestimmung der elastischen Energie des Systems ist das nicht zulässig. Eine dehnungsfreie Neumann Randbedingung,  $\partial u_n / \partial n_I = 0$ , führt hingegen zu einem inhomogenen Verschiebungsfeld normal zum Rand. Dadurch ist der Rand nicht mehr flach und die Periodizität der Simulationsdomäne ist nicht mehr gegeben.

Es ist also eine weitere Art der Randbedingung erforderlich, die eine homogene Verschiebung des Randes zulässt, um keine externe Dehnung zu erzeugen. Diese darf gleichzeitig die Periodizität der Simulationsdomäne nicht stören. Es handelt sich also um eine Dirichlet Randbedingung mit einem zunächst unbekanntem  $U_R \neq 0$ . Die Simulationsdomäne kann damit ihr Volumen ändern ohne ihre Quaderform zu verlieren. Eine solche Randbedingung wird ebenfalls genutzt, um die Kohärenzspannung in Nickelbasis-Superlegierungen zu bestimmen [33, 107–110] und um Gleichgewichtsformen von  $\gamma'$ -Ausscheidungen bei realistischem Phasenanteil zu bestimmen [68]. Die Randbedingung ist so implementiert, dass während jedem Zeitschritt der iterativen Lösung von Gleichung (45) die Verschiebungen am

Rand gemittelt werden und dem Rand diese homogene Verschiebung  $u_n = \bar{u}_n$  zugewiesen wird. Die anderen Verschiebungen im Rand erhalten scherdehnungsfreie Neumann Randbedingungen  $\partial u_J / \partial n_I = 0$  ( $J \neq I$ ). Um das System statisch bestimmt zu lassen, erhält der gegenüberliegende Rand die Randbedingung  $u_n = 0$ .

### **Periodizität der Simulationsdomänen**

Um den Rechenaufwand zu reduzieren, werden Spiegelsymmetrien des Systems ausgenutzt. Zur Betrachtung einzelner Ausscheidungen in einer quaderförmigen Simulationsdomäne ist es auf Grund der tetragonalen Symmetrie ausreichend, ein Achtel (in 2D ein Viertel) der Ausscheidung zu beschreiben. Der Schwerpunkt der Ausscheidung liegt dann im Ursprung des Koordinatensystems und die negativen Ränder sind die Spiegelebenen des Systems. In diesem Falle sind an allen Rändern die Ableitungen der Zustandsgrößen  $\varphi$  und  $\mu_n$  gleich 0 und die Verschiebungen wie oben dargestellt. Auch wenn in diesem Fall Periodizität nicht explizit implementiert ist, ergeben die Randbedingungen in diesem Fall eine periodische Überstruktur der Simulationsdomäne. Eine solche Konfiguration wird im Folgenden als Spiegelperiodizität bezeichnet.

Abbildung 13 zeigt je eine 2D und eine 3D Konfiguration in einem periodischen und einem spiegelperiodischen System. Es ist jeweils die rechteckige bzw. quaderförmige Simulationsdomäne mit dem Seitenverhältnis  $L_x/L_y$  und deren Ränder dargestellt. Außerdem sind die Symmetrieebenen, welche ausgenutzt werden dargestellt. Ebenfalls dargestellt ist die durch die Periodizität implizierte Überstruktur. Periodische Randbedingungen quaderförmiger Gebiete führen zu einer rechteckigen bzw. orthorhombischen Fernordnung mit den Gitterparametern  $L_I$ . Die 2D Systeme entsprechen einer in  $y$ -Richtung unendlich ausgedehnten Domäne in welchen die Ausscheidungen unendlich ausgedehnten Stäben mit elliptischem Querschnitt sind. Dazu wird  $L_y = 0$  gesetzt und die Randbedingungen in  $y$ -Richtung als periodische Randbedingungen angenommen. Daraus ergibt sich ein ebener Dehnungszustand mit  $\varepsilon_{yI} = \varepsilon_{Iy} = 0$  für  $I = x, y, z$ .

In einem spiegelperiodischen System kann darüber hinaus auch eine sechseckige bzw. rechteckig-zentrierte periodische Anordnung der Simulationsdomänen implementiert werden [111]. Dazu werden an einem positiven Rand antisymmetrische Randbedingungen implementiert. Diese können als Randbedingungen symmetrisch zur Schnittgeraden zwischen einem Rand und einer dazu senkrecht liegenden Mittelebene des Quaders verstanden werden. In zwei Dimensionen reduziert sich die Symmetrie zu einer Punktsymmetrie relativ zu einem Mittelpunkt eines Randes, so dass für das Feld  $U$  an einem beliebigen Punkt  $x_I$  im Rand gilt:  $U(x_I) = U(L_I - x_I)$ . Antisymmetrische Randbedingungen an mehr als einem Rand führen zu nicht definierten Fernordnungen und sind daher nicht erlaubt.



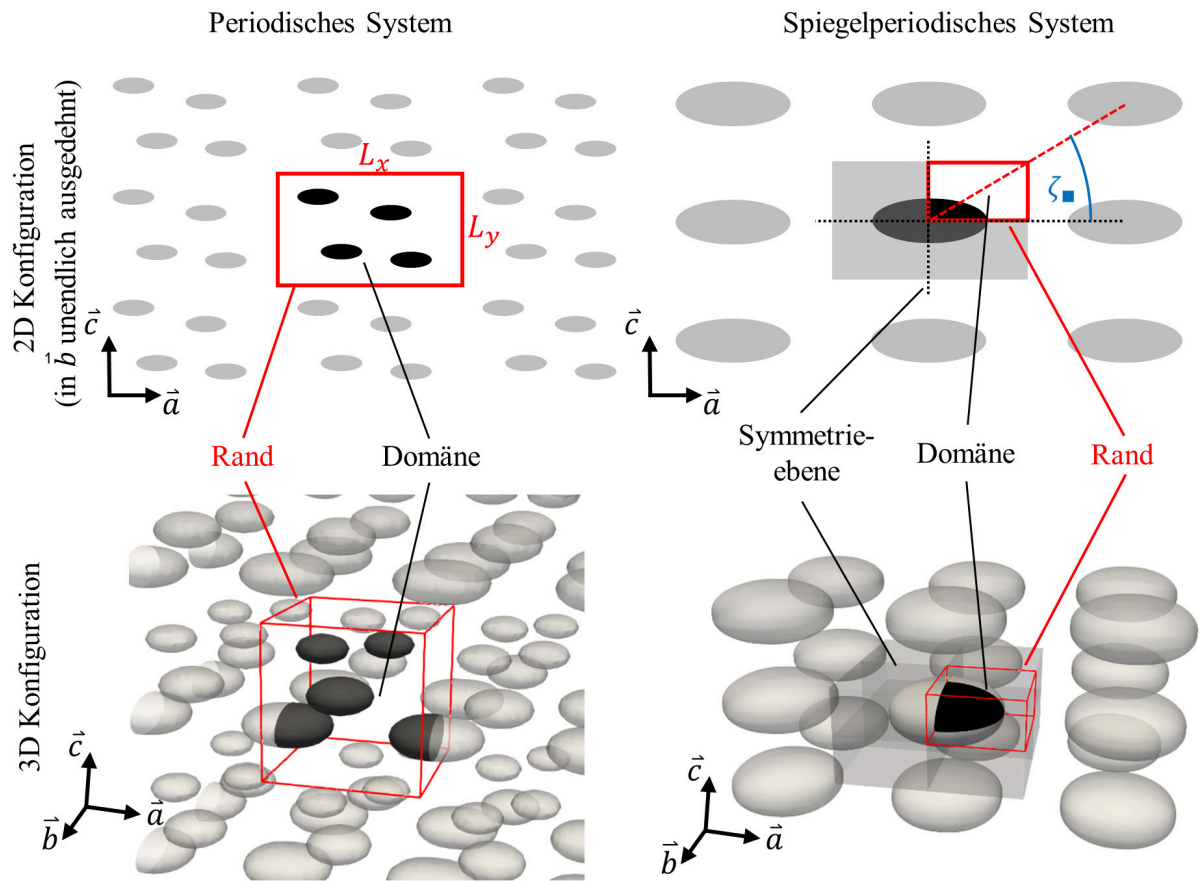


Abbildung 13: 2D (oben) und 3D (unten) Konfiguration je eines periodischen und spiegelperiodischen Systems mit der Simulationsdomäne, den Rändern und Symmetrieebenen. Die durch die Periodizität implizierte Fernordnung ist durch Transparenz dargestellt. Die 2D Konfiguration entspricht einer aus der Ebene heraus unendlich ausgedehnten Simulationsdomäne mit ebenem Dehnungszustand.

Abbildung 14 zeigt zwei sechseckige Fernordnungen einer 2D Simulationsdomäne. Zur Beschreibung der Überstruktur wird der Winkel  $\zeta$  zwischen der Verbindung des Koordinatenursprungs mit dessen Bildpunkt und der  $x$ -Achse verwendet. Im Fall der rechteckigen Anordnung sei der Winkel  $\zeta_{\blacksquare}$  definiert als Winkel zwischen der Diagonalen der Domäne und der  $x$ -Achse. Um in der sechseckigen Anordnung Winkel größer oder kleiner  $\zeta_{\blacksquare}$  darzustellen sind jeweils Punktsymmetrien am oberen bzw. rechten Rand nötig. Allgemein ist der Winkel  $\zeta$  einer spiegelperiodischen Überstruktur bei gleichen Kantenlängen der Simulationsdomäne definiert als

$$\zeta = \begin{cases} \tan^{-1}(2L_y/L_x) & \text{für sechseckige Anordnungen } \zeta > \zeta_{\blacksquare} \\ \tan^{-1}(L_y/L_x) & \text{für rechteckige Anordnungen } \zeta = \zeta_{\blacksquare} \\ \tan^{-1}(L_y/2L_x) & \text{für sechseckige Anordnungen } \zeta < \zeta_{\blacksquare} \end{cases} \quad (47)$$

Durch diese Definition der Randbedingungen und durch die Wahl der Kantenlängen der Simulationsdomäne sind alle 2D Bravais-Gitter als Überstruktur darstellbar mit Ausnahme eines allgemeinen schiefwinkligen Gitters, welches in der dem System inhärenten tetragonalen Symmetrie nicht enthalten ist.

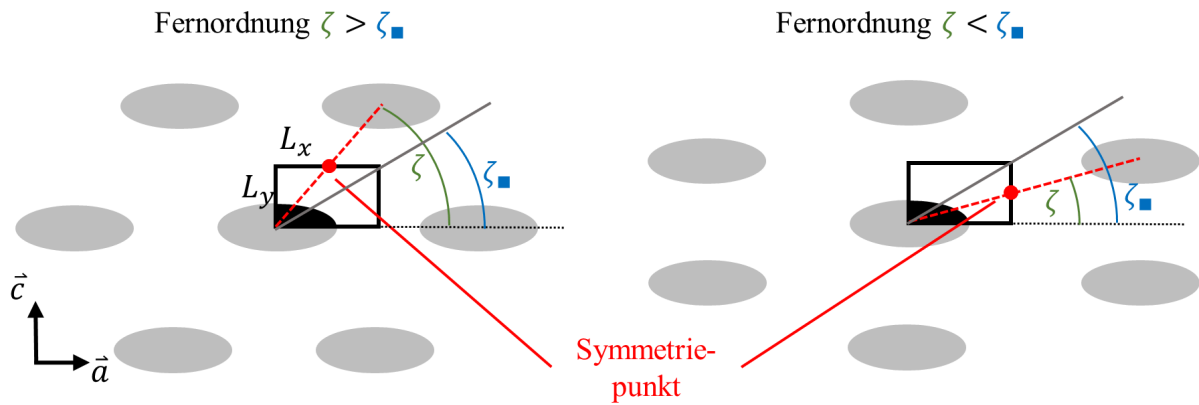


Abbildung 14: Sechseckige Fernordnung spiegelperiodischer Simulationsdomänen für  $\zeta > \zeta_{\blacksquare}$  und  $\zeta < \zeta_{\blacksquare}$ .

### Anfangsbedingungen

Neben den Randbedingungen müssen auch die Anfangsbedingungen der Felder definiert werden. Das Phasenfeld zum Zeitpunkt  $t = 0$  gibt an, welche Mikrostruktur und welcher Phasenanteil in das System eingebracht werden. Die Anfangsbedingungen des Verschiebungsfeldes sind direkt an das initiale Phasenfeld geknüpft und ergeben sich aus den Eigendehnungen der  $\gamma''$ -Phase. Für die Reifungssimulationen werden die chemischen Potentialfelder so initialisiert, dass sich nach Gleichung (40) die Gleichgewichtskonzentrationen der Phasen einstellen. Durch die lokale Krümmung der Grenzfläche und die Grenzflächenenergiedichte stellt sich wegen des Gibbs-Thomson Effekts zu Beginn der Simulation eine Elementverteilung ein, welche vom thermodynamischen Gleichgewicht des Systems abweicht und zur Ostwaldreifung führt.

## 3.2 Ostwaldreifung mit nicht-sphärischen Ausscheidungen

Ostwaldreifung tritt auf, wegen des Gibbs-Thomson Effektes. Gekrümmte Grenzflächen führen zu einem lokal erhöhten chemischen Potential (siehe Gleichung (18) auf Seite 18), wodurch sich ein Diffusionsstrom von weniger stark gekrümmten Grenzflächen zu stärker gekrümmten einstellt. Neben der Krümmung der Grenzfläche spielt auch die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma$  eine wichtige Rolle in der Beschreibung der Reifungskinetik.

### 3.2.1 Lifshitz-Slyosov-Wagner-Theorie der Ausscheidungsreifung

Nach der Lifshitz-Slyosov-Wagner-Theorie (LSW-Theorie) ändert sich der mittlere Radius  $\langle R \rangle$  kugelförmiger Ausscheidungen während der Reifung nach Gleichung (19) mit einem Reifungsexponenten  $N = 3$ . Der Reifungskoeffizient ist  $K$  [76, 112].

Abbildung 15 zeigt den zeitlichen Verlauf der mittleren Ausscheidungsgröße während der Reifung nach der LSW-Theorie für verschiedene initiale Ausscheidungsgrößen  $\langle R(t = 0) \rangle$  und für verschiedene Reifungskoeffizienten  $K$  (siehe Gleichung (19) auf Seite 18). Mit steigender Reifungsdauer verschwindet der Einfluss der ursprünglichen Ausscheidungsgröße [85]. Der Reifungskoeffizient hingegen hat einen deutlich höheren Einfluss auf die Größenentwicklung als die ursprüngliche Ausscheidungsgröße. Die LSW-Theorie lässt auch

Rückschlüsse auf die Verteilung der Ausscheidungsgrößen zu. Diese Verteilung ist selbstähnlich, das heißt, wenn die Verteilung auf die mittlere Größe normiert wird, stellt sich mit der Zeit eine konstante Verteilung ein. Im Allgemeinen ist die Verteilung nicht symmetrisch zu  $\langle R \rangle$  sondern linksschief [79]. Die LSW-Theorie sagt, trotz ihrer Einfachheit, die zeitliche Änderung der Ausscheidungsgröße während einer Auslagerung sehr gut voraus. Die Vorhersage der Verteilung der Ausscheidungsgrößen ist, anders als die Vorhersage der mittleren Ausscheidungsgröße, experimentell selten zutreffend [79].

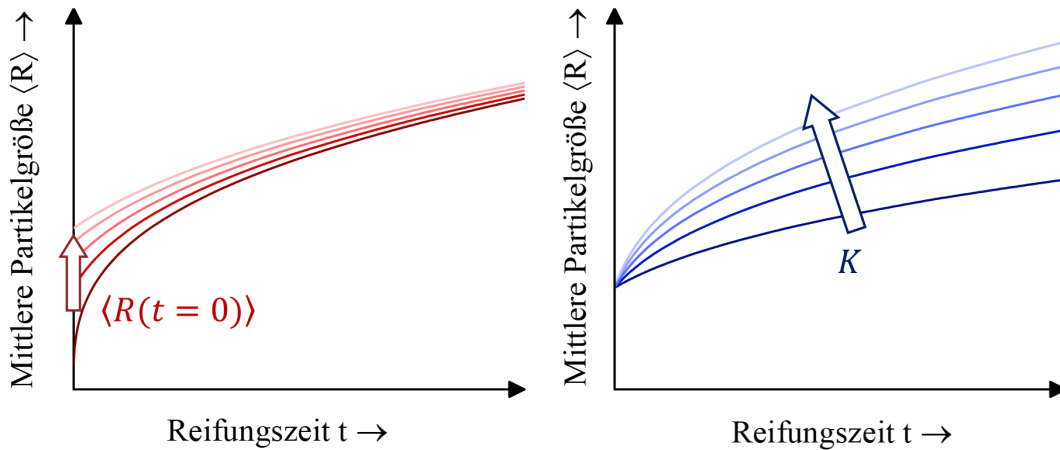


Abbildung 15: Abhängigkeit der mittleren Ausscheidungsgröße  $\langle R \rangle$  nach der LSW-Theorie von a) dem initialen mittleren Radius  $\langle R(t=0) \rangle$  und b) dem Reifungskoeffizienten  $K$ .

Der Reifungskoeffizient  $K$  hängt von verschiedenen Beiträgen ab

$$K = K_S \cdot K_V \cdot K_{LSW}, \quad (48)$$

wobei  $K_{LSW}$  der Reifungskoeffizient aus der ursprünglichen LSW-Theorie ist [57].  $K_V$  ist ein Korrekturfaktor für reelle Volumenanteile der dispersen Phase [79, 113] und  $K_S$  ein Korrekturfaktor für nichtkugelförmige Ausscheidungen [53]. Im Fall disperser geordneter Phasen in einer Mischkristallmatrix kann die Reifungskinetik durch die Diffusion der ausscheidungsbildenden Legierungselemente beschrieben werden. Für kugelförmige Ausscheidungen mit verschwindendem Phasenanteil ohne elastische Interaktion mit der Matrix ergibt sich der Reifungskoeffizient zu [76, 112]

$$K_{LSW} = \frac{4}{9} \frac{c_n^\gamma D_n V_M \Gamma}{k_B T}, \quad (49)$$

wobei  $c_n^\gamma$  die Gleichgewichtskonzentration und  $D_n$  der Diffusionskoeffizient des Elements  $n$  in der Matrixphase ist.  $V_M$  ist das molare Volumen der Ausscheidungsphase und  $\Gamma$  die Phasengrenzflächenenergiedichte. Hier sind zwei Anmerkungen nötig: die Gleichgewichtskonzentration  $c_n^\gamma$  ist als Stoffmengenanteil (mol/mol) einzusetzen und das molare Volumen ist definiert als Volumen pro Mol Atome und nicht pro Mol stöchiometrische Einheiten [80]. Der Effekt finiter  $\gamma''$ -Volumenanteile  $V_{\gamma''}$  kann analytisch nicht ermittelt werden. Es existieren verschiedene numerische Ansätze die Reifungskinetik aus der LSW-Theorie dahingehend zu korrigieren. Für geordnete Ausscheidungen in Nickelbasislegierungen wird ein Ansatz verwendet, der durch

$$K_V = 2,22 + 24,9 V_{\gamma''} , \quad (50)$$

angenähert werden kann [61, 114]. Bei einem realistischen  $\gamma''$ -Volumenanteil von 12% ergibt sich ein Korrekturfaktor  $K_V = 5,21$ .

Die grundlegenden Betrachtungen zur Reifungskinetik fußen bisher auf konstanter Krümmung der Grenzfläche, also der Annahme kugelförmiger Ausscheidungen. Durch nicht kugelförmige Ausscheidungsformen entsteht eine lokal unterschiedliche Krümmung der Grenzfläche, welche die Reifungskinetik mitbestimmt. Der geometrische Faktor  $K_S$  gibt an, wie der Reifungskoeffizient einer so geformten Ausscheidung von dem der Kugel abweicht. Für würfelförmige Ausscheidungen wurde der Faktor 8 ermittelt [53]. Für scheibenförmige Ausscheidungen wird ebenfalls ein beschleunigender Effekt beschrieben [115], welcher mit zunehmendem Aspektverhältnis steigt. Das ergibt sich aus dem stark gekrümmten Rand, welcher mehr und stärker gekrümmte Fläche bietet als eine Kugel mit demselben Volumen. Für plattenförmige Ausscheidungen ergibt sich ein linearer Zusammenhang zwischen  $K_S$  und dem Aspektverhältnis der Scheibe mit dem Proportionalitätsfaktor  $2/\pi$  [116], so dass

$$K_S = \frac{2A}{\pi}. \quad (51)$$

In diesem Fall ist die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A$  an der gekrümmten Randfläche ausschlaggebend für die Reifungskinetik [116].

### 3.2.2 Modellerweiterung um variable Ausscheidungsform

Im vorhergehenden Abschnitt wird die LSW-Theorie der Ausscheidungsreifung mit reellem Phasenanteil und nichtkugelförmigen Ausscheidungen beschrieben. Diese Betrachtung beinhaltet jedoch nicht die Abhängigkeit der Ausscheidungsform von der Ausscheidungsgröße. Es wird vielmehr angenommen, dass alle Ausscheidungen dieselbe Form haben. Wir wissen jedoch, dass das Aspektverhältnis der Ausscheidungen mit zunehmender Ausscheidungsgröße zunimmt, da die elastische Energie die Form der Ausscheidung dann zunehmend dominiert. Man erwartet also, dass im Laufe der Reifung der Reifungskoeffizient zunimmt und nicht, wie in der LSW-Theorie angenommen, konstant bleibt. Im System Ti-Al-N wurde gezeigt, dass mit einem Modell, welches variable Ausscheidungsformen berücksichtigt, die Mikrostrukturentwicklung korrekt beschrieben wird [117]. Eine ähnliche Beschreibung existiert auch für die größenabhängige Form von  $\gamma''$ -Ausscheidungen in der Legierung IN625 [78]. In dieser Arbeit wird ein Modell basierend auf der LSW-Theorie eingeführt, das auf inkrementellen Zeitschritten basiert, innerhalb derer die Ausscheidungsform als konstant angesehen wird. In jedem Zeitschritt dieses modifizierten LSW Modells (mLSW) wird die LSW-Theorie der Ausscheidungsreifung angewandt.

Zur Beschreibung der Ausscheidungsgröße wird der mittlere Vergleichsradius  $\hat{R}$  verwendet, der in Gleichung (8) auf Seite 11 definiert wurde. Dieser ist definiert als der Radius einer kugelförmigen Ausscheidung mit gleichem Volumen wie die Ausscheidung. Der mittlere Vergleichsradius  $\langle \hat{R} \rangle$  errechnet sich durch die modifizierte LSW-Theorie, welche im Folgenden als mLSW Modell bezeichnet wird. Der größenabhängige Reifungskoeffizient

$K(\hat{R})$  zum Zeitpunkt  $\tau$  ergibt sich durch die Gleichungen (48) bis (51). Es ergibt sich eine mittlere Ausscheidungsgröße  $\langle \hat{R}_\tau \rangle$  zum inkrementellen Zeitpunkt  $\tau$  als

$$\langle \hat{R}_\tau \rangle = \sqrt[3]{K(\langle \hat{R}_{\tau-1} \rangle) \cdot \Delta t + \langle \hat{R}_{\tau-1}^3 \rangle}, \quad (52)$$

wobei  $\Delta t$  der Zeitschrittweite entspricht. Die Zeitschrittweite wird gewählt als  $\Delta t = 10$  s. Da das mittlere Volumen der Ausscheidungen durch die Wahl von  $\hat{R}$  nicht mehr vom Aspektverhältnis abhängt, ist Massenerhaltung gewährleistet. Die experimentell beobachtete Größe  $\langle R(t) \rangle$  lässt sich dann ableiten aus Gleichung (23) als

$$\langle R(\tau) \rangle = \hat{R}_\tau A_\tau^{\frac{2}{3}}. \quad (53)$$

### 3.3 Methoden zur Bestimmung des Dehnungsfeldes einer Ausscheidung

Zur analytischen Beschreibung des elastischen Dehnungsfeldes in einer und um eine kohärente Ausscheidung herum muss das sogenannte Einschlussproblem (auch Eshelby's Problem) gelöst werden [118, 119]. Die Ausscheidung wird dabei als ein elastischer Einschluss und eine elastische Inhomogenität beschrieben [119]. Zur Beschreibung von Dehnung durch die Gitterfehlpassung wird die Ausscheidungsphase mit einer spannungsfreien Eigendehnung  $\varepsilon_0$  beaufschlagt. Das elastische, spannungsbehaftete Dehnungsfeld ( $\varepsilon - \varepsilon_0$ ) wird so bestimmt, dass die Kompatibilitätsbedingungen erfüllt sind. Den Formalismus um dieses Feld zu bestimmen nennt man Eshelby's Zyklus.

Unabhängig von der Gitterfehlpassung ist eine Ausscheidung auch eine elastische Inhomogenität. Die elastischen Eigenschaften der beteiligten Phasen unterscheiden sich und führen damit zu einem inhomogenen Spannungsfeld. Man beobachtet einem Steifigkeitskontrast bzw. einem Kontrast der Anisotropie der Phasen.

#### 3.3.1 Effektive Energiedichte elliptischer Ausscheidungen

Für rotationselliptische Ausscheidungen mit anisotroper Eigendehnung kann gezeigt werden, dass das Dehnungsfeld in der Ausscheidung konstant ist, wenn isotrope Elastizität angenommen wird [118]. In diesem Fall ist die Gleichgewichtsform der Ausscheidung ebenfalls ein Rotationsellipsoid. Die elastische Energiedichte  $e_{el}$  in der Ausscheidung ist dann

$$e_{el}(A) = \frac{G}{1-2\nu} [\beta_1(A)\varepsilon_1^2 + \beta_2(A)\varepsilon_1 + \beta_3(A)\varepsilon_1\varepsilon_2], \quad (54)$$

wobei die Parameter  $\beta_i(A)$  vom Aspektverhältnis abhängen. Die Parameter können numerisch aus Oberflächenintegralen über die Rotationellipsoiden bestimmt werden und sind in der Literatur tabelliert [119]. In der vorliegenden Arbeit werden die Parameter angenähert durch einen gebrochen rationalen Ansatz

$$\beta_i(A) = \frac{\beta_{Ai} + A\beta_{Bi}}{1 + A\beta_{Ci} + A^2\beta_{Di}}. \quad (55)$$

Die Parameter  $\beta_{Ii}$  sind in Tabelle 3 gegeben.

*Tabelle 3: Parameter  $\beta_{Ii}$  zur Bestimmung der elastischen Energiedichte nach Eshelby in Gleichung (54) und (55).*

$\beta_{Ii}$	$\beta_{1i}$	$\beta_{2i}$	$\beta_{3i}$
$\beta_{Ai}$	0,42411	0,37347	0,82529
$\beta_{Bi}$	0,80319	0,43158	-0,06081
$\beta_{Ci}$	0,54045	0,79572	1,62062
$\beta_{Di}$	-0,00008	0,31216	-0,12442

Bei gegebenem Hauptradius  $R$  der Ellipse kann das Aspektverhältnis  $A$  bestimmt werden, welches die Summe aus elastischer Energie und Grenzflächenenergie minimiert [31] mittels

$$\frac{\partial}{\partial A} (e_{el} V_0 + \Gamma S_0) \equiv 0. \quad (56)$$

Das Volumen  $V_0$  und die Oberfläche  $S_0$  einem abgeflachten Rotationsellipsoid sind Gleichung (5) und Gleichung (6) auf Seite 11 gegeben.

### 3.3.2 Relaxationsfunktion für tetragonal anisotrope Elastizität

Für das Problem der elastisch fehlpassenden Ausscheidung mit einem beliebig anisotropen Elastizitätstensor und Eigendehnungstensor existieren analytische Lösungen für Geometrien und Anordnungen, die im Fourierraum darstellbar sind. Die Ausscheidungen sind dabei punktförmig und regelmäßig verteilt oder sind in mindestens einer Raumrichtung hinreichend klein. Für solche Geometrien ergibt sich ein konstantes Dehnungsfeld in der Ausscheidung [120], so dass der Dehnungszustand ausschließlich von den elastischen Eigenschaften der Ausscheidung abhängt.

Die elastische Energiedichte einer Ausscheidung kann durch eine orientierungsabhängige elastische Relaxationsfunktion  $B(\vec{n})$  beschrieben werden. Dabei quantifiziert die Funktion elastisch harte und weiche Richtungen und weist diesen eine Energiedichte über die Eigendehnung zu [46, 71, 121]. Diese Energiedichte berechnet sich als

$$\begin{aligned} B(\vec{n}) &= C_{IJKL} \varepsilon_{IJ}^0 \varepsilon_{KL}^0 - n_I \sigma_{IJ}^0 G_{JK}(\vec{n}) \sigma_{KL}^0 n_L \\ \sigma_{IJ}^0 &= C_{IJKL} \varepsilon_{KL}^0 \\ G_{JK}(\vec{n})^{-1} &= C_{IJKL} n_I n_L, \end{aligned} \quad (57)$$

wobei  $n_I$  die Einträge des Normalenvektors  $\vec{n}$  sind und  $G_{JK}(\vec{n})$  der Green'sche Tensor. Physikalisch betrachtet entspricht diese charakteristische Relaxationsfunktion der Energiedichte in einer flächigen Ausscheidung mit unendlicher Ausdehnung und verschwindender Dicke mit Flächennormale  $\vec{n}$ . Minima dieser Funktion zeigen energetisch günstige Grenzflächenorientierungen auf. Mit dieser Methode wurde gezeigt, dass die (001)-Ebene die Habitusebene kohärenter tetragonaler Ausscheidungen mit  $0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_3$  ist [120, 122].

### 4 Temperaturabhängige Materialparameter

Für eine beliebige, temperaturabhängige Größe  $U(T)$  wird, mit Ausnahme der Diffusionskoeffizienten, eine polynomielle Temperaturabhängigkeit angenommen

$$U(T) = \sum_{i=0}^P U_i T^i, \quad (58)$$

wobei  $P$  der Grad des Polynoms ist und die Parameter  $U_i$  durch nichtlineare Anpassung an die vorliegenden Daten gewonnen werden. Zu jedem  $U_i$  kann auch eine Ungenauigkeit  $\delta U_i \ll U_i$  angegeben werden. Durch Fehlerfortpflanzung ergibt sich für einen beliebigen Funktionswert  $u(U_j)$  die Ungenauigkeit  $\delta u$  durch

$$\delta u(U_j) = \sum_j \left| \frac{\partial u}{\partial U_j} \delta U_j \right|. \quad (59)$$

Die in dieser Arbeit präsentierten Anpassungen wurden mittels Levenberg-Marquardt-Algorithmus zur Minimierung der Fehlerquadratrate in der Software Origin 2019b durchgeführt. Die Ungenauigkeiten ergeben sich aus der Streuung der Datenpunkte und den in der Literatur angegebenen Ungenauigkeiten der Daten. Als Kriterium für die Güte der Anpassung wird das Bestimmtheitsmaß genutzt, dass sich aus den Fehlerquadraten im Levenberg-Marquardt-Algorithmus ergibt.

#### 4.1 Thermodynamische und kinetische Größen

Thermodynamische und thermokinetische Daten sind nötig zur quantitativen Beschreibung der Reifungskinetik, wie in den Abschnitten 3.1.2 und 3.2 dargestellt. Die Daten zur Beschreibung der Thermodynamik der Phasen stammen aus CalPhaD-Datenbanken. Die Software Thermo-Calc wurde zusammen mit der Datenbank TCNi8 zur Bestimmung der thermodynamischen Größen genutzt. Die Software DICTRA wurde mit der Datenbank MobNi4 genutzt um die kinetischen Daten zu bestimmen [123]. Die Referenzzusammensetzung der Legierung IN718, die zur Bestimmung der thermodynamischen und kinetischen Daten benutzt wurde, ist in Tabelle 4 gegeben.

*Tabelle 4: Referenzzusammensetzung von IN718 für die CalPhaD Methode.*

Anteil	Ni	Nb	Cr	Fe	Mo	Co	Al	Ti
Gew.%	52.9 (bal.)	5,4	18	18	3,0	0,3	0,5	0,9
At.%	52.3 (bal.)	3,4	21	19	1,8	0,3	1,1	1,1

Der Temperaturbereich der Berechnung erstreckt sich von 530°C bis 930°C, der Bereich, in dem die Auslagerungs- und die Einsatztemperatur der Legierung liegen. Zur Bestimmung der Eigenschaften der  $\gamma''$ -Phase wurde die stabile  $\delta$ -Phase unterdrückt und lediglich die Matrixphase,  $\gamma'$  und  $\gamma''$  in die Berechnung mit einbezogen.

**Volumenanteil und molares Volumen der Phasen**

Abbildung 16 a zeigt den berechneten  $\gamma''$ -Volumenanteil der Legierung IN718. Dazu verglichen werden experimentell beobachtete Volumenanteile nach der Standardwärmebehandlung [124, 125]. Die experimentellen Daten liegen im Mittel etwas unter der CalPhaD-Vorhersage. Das liegt daran, dass während der Standardwärmebehandlung etwa 2-3 Vol.%  $\delta$ -Phase an den Korngrenzen ausscheiden. Als theoretisch maximaler Phasenanteil von  $\gamma''$  in IN718 wird 21 Vol.% angegeben [124].

Abbildung 16 b zeigt das berechnete molare Volumen  $V_M^\alpha$  der Phasen, welches für die Bestimmung der Reifungskinetik nach Gleichung (49) auf Seite 32 benötigt wird. Das molare Volumen der zweiphasigen Legierung berechnet sich aus den Phasenanteilen über ein Hebelgesetz. Aus der Änderung des molaren Volumens der zweiphasigen Legierung lässt sich im betrachteten Temperaturbereich eine Wärmeausdehnung von etwa  $14 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  bestimmen, welche sehr gut mit experimentell ermittelten Werten übereinstimmt [10].

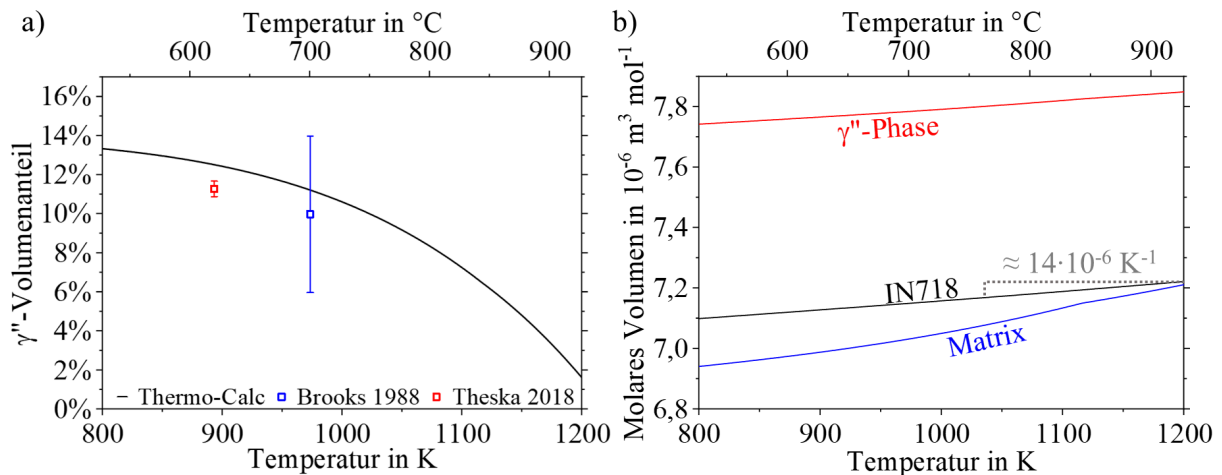


Abbildung 16: a) Temperaturabhängiger Volumenanteil der  $\gamma''$ -Phase in IN718 bestimmt mit Thermo-Calc. Zum Vergleich sind experimentell ermittelte Volumenanteile gegeben [124, 125]. b) Molares Volumen der Phasen und der zweiphasigen Legierung, ebenfalls mit Thermo-Calc bestimmt.

**Zusammensetzung der Phasen**

Abbildung 17 a zeigt die Gleichgewichtszusammensetzung der Matrixphase und Abbildung 17 b der  $\gamma''$ -Phase in IN718 berechnet mit Thermo-Calc. Die Elemente Cr und Fe sind neben Ni die Hauptbestandteile der Mischkristallmatrix. Der Gehalt an Nb in der  $\gamma''$ -Phase entspricht näherungsweise der Stöchiometrie von  $\text{Ni}_3\text{Nb}$ . Mit zunehmender Temperatur steigen die Löslichkeit von Nb in der Matrix und die Löslichkeit von Ti, Fe und Cr in der Ausscheidungsphase. Zum Vergleich sind experimentell ermittelte Elementverteilungen gegeben [126–128]. Experimentell wird derselbe Trend der Elementverteilung beobachtet. Vor allem beim Gehalt von Nb in der Matrix, welcher für die Reifungskinetik relevant ist, gibt es deutliche quantitative Unterschiede zwischen CalPhaD-Vorhersage und experimentellen Beobachtungen. Das kann auf Ungenauigkeiten in der CalPhaD-Datenbank begründet sein. Außerdem muss eine Messung der lokalen Zusammensetzung nicht zwangsläufig den



## Temperaturabhängige Materialparameter

Gleichgewichtszustand widerspiegeln, da sich durch den Gibbs-Thomson Effekt Nb in der Matrix um kleine Ausscheidungen herum anreichert.

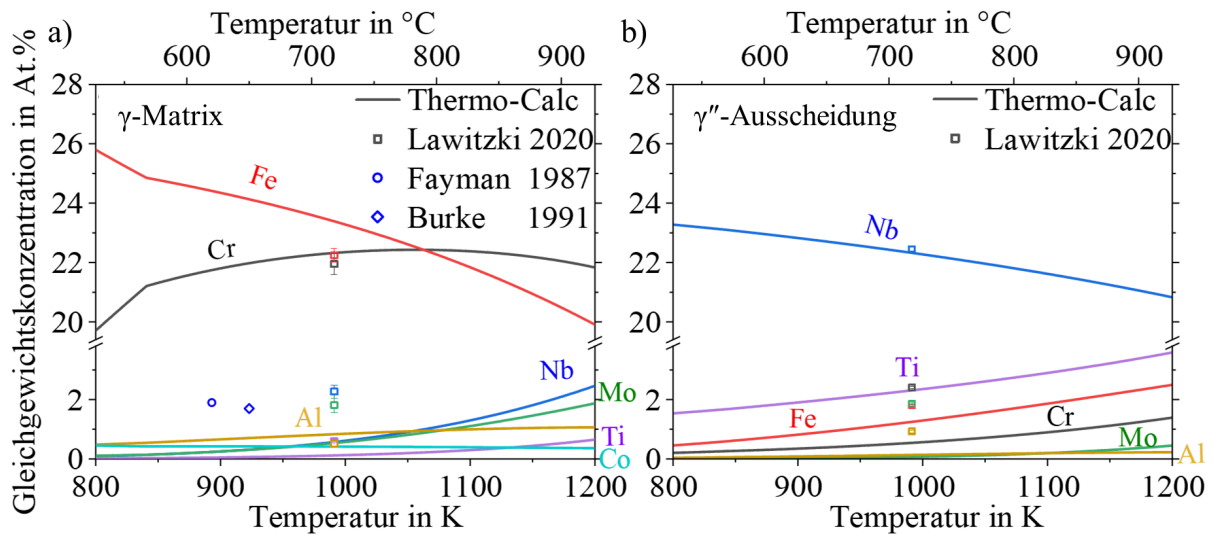


Abbildung 17: Gleichgewichtszusammensetzung a) der Matrixphase und b) der Ausscheidungsphase von IN718 in At.% bestimmt mit Thermo-Calc. Zum Vergleich sind experimentell ermittelte Phasenzusammensetzungen gegeben [126–128].

## Diffusionskoeffizienten

Die Diffusionskoeffizienten  $D_n$  der Legierungselemente  $n$  in der Mischkristallmatrix sind die relevanten Größen zur quantitativen Beschreibung der Ausscheidungskinetik. Ihre Temperaturabhängigkeit ist gegeben durch die Arrheniusbeziehung

$$D(T) = D_0 e^{\left(-\frac{Q_D}{k_B T}\right)}, \quad (60)$$

wobei  $D_0$  der Vorfaktor,  $Q_D$  die Aktivierungsenergie der Diffusion und  $k_B \approx 8,314 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$  die universelle Gaskonstante ist.

Der effektive Diffusionskoeffizient  $\tilde{D}$  ist ein Maß um den Einfluss langsam diffundierender Elemente auf diffusionslimitierte Vorgänge zu beschreiben. Für eine Legierung mit  $n$  Komponenten bestimmt sie sich über ein Hebelgesetz aus den Konzentrationen  $c_n$  der Elemente und deren Diffusionskoeffizienten  $D_n$  [85]

$$\tilde{D} = \sum_n D_n \cdot c_n. \quad (61)$$

Abbildung 18 a zeigt die Diffusionskoeffizienten der Legierungselemente in IN718 in der Arrheniusauftragung. Die Steigung entspricht dabei den Aktivierungsenergien der Diffusion. Zu erkennen ist, dass die Ausscheidungsbildenden Elemente Ti, Al und Nb um etwa eine Größenordnung schneller diffundieren, als die anderen Elemente. Der effektive Diffusionskoeffizient der Legierung IN718 liegt im Bereich der langsam diffundierenden Elemente. Abbildung 18 b zeigt experimentell ermittelte Diffusionskoeffizienten von Nb in kfz Nickel und in IN718 [129–131]. Die beschriebenen Werte liegen in einem Bereich von

etwa drei Größenordnungen. Die DICTRA-Vorhersage liegt am niedrigsten. Die Diffusionskoeffizienten von Nb in reinem Ni liegen um mindestens eine Größenordnung höher als die beobachteten Diffusionskoeffizienten in der Legierung IN718 [131]. Die ermittelten Diffusionsdaten sind in Tabelle 5 gegeben.

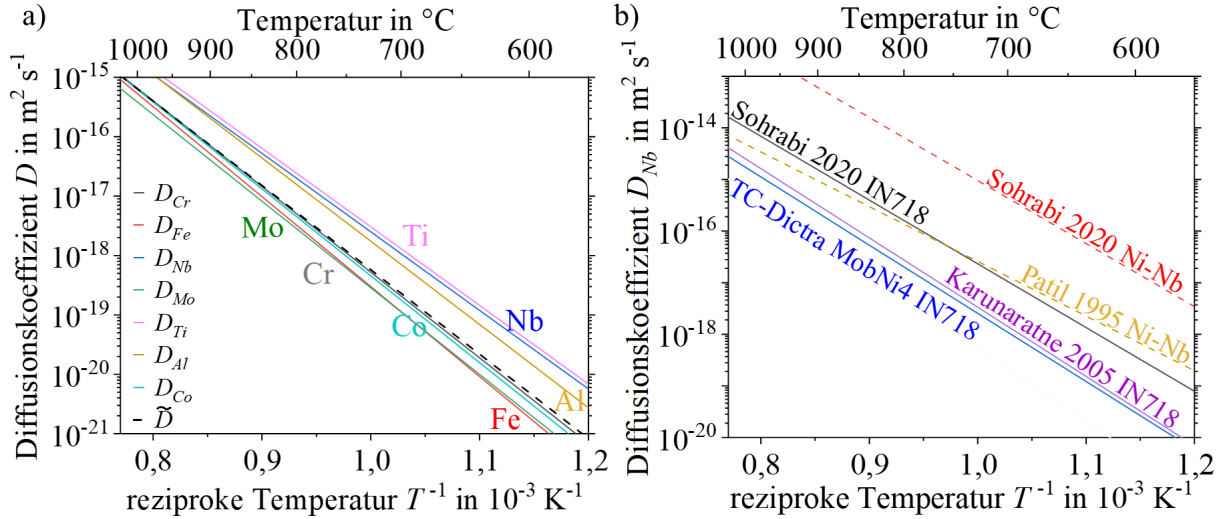


Abbildung 18: a) Temperaturabhängige Diffusionskoeffizienten der Legierungselemente in IN718 nach DICTRA Datenbank MobNi4 mit effektivem Diffusionskoeffizienten der Legierung b) Diffusionskoeffizienten von Nb in kfz Nickel [129, 131] und in IN718 [130, 131].

Tabelle 5: Diffusionskoeffizienten der Legierungselemente in IN718 und effektiver Diffusionskoeffizient der Legierung IN718.

	$D_o$ in $10^{-6} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$	$Q_D$ in $\text{kJ mol}^{-1}$	$D$ bei $725^{\circ}\text{C}$ in $10^{-20} \text{m}^2 \text{s}^{-1}$	Quelle
Nb in IN718	43 $\pm$ 18	248 $\pm$ 5	450	TCNi8, [130, 131]
Cr in IN718	142	276	49,0	MobNi4
Fe in IN718	424	290	28,0	MobNi4
Mo in IN718	111	279	26,8	MobNi4
Ti in IN718	52	253	286	MobNi4
Al in IN718	184	268	163	MobNi4
Co in IN718	195	280	42,5	MobNi4
$\bar{D}$ von IN718	93 $\pm$ 29	272 $\pm$ 49	53,9	Gleichung (61)

Die Mobilität der Phasengrenze  $M$ , als Parameter für die Kinetik der Phasenumwandlung im Phasenfeldmodell in Gleichung (42), wird so gewählt, dass sie immer größer ist, als der größte Diffusionskoeffizient eines Legierungselements im System [77]. Damit ist die Kinetik der Phasenumwandlung rein diffusionslimitiert.

### 4.2 Elastische Materialdaten

Der Elastizitätstensor  $\mathbf{C}$  mit den Einträgen  $C_{IJ} = C_{JI}$  in der reduzierten Voigt-Schreibweise ist

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & & & \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & & & \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & & & \\ & & & C_{44} & & \\ & & & & C_{55} & \\ & & & & & C_{66} \end{pmatrix}. \quad (62)$$

Nulleinträge sind nicht dargestellt. Für verschiedene Kristallsymmetrien ergeben sich jeweils Zusammenhänge der Konstanten. Diese sind für isotrope Materialien (Polykristalle), kubische Kristalle (Matrix oder einkristalliner und homogener Werkstoff) und tetragonale Kristalle (D0<sub>22</sub>) in Tabelle 6 zusammengefasst.

Tabelle 6: Symmetriebeziehungen im Elastizitätstensor.

Symmetrie	Beziehungen			Unabh. Konstanten
isotrop	$C_{11} = C_{22} = C_{33} = 2C_{44} + C_{12}$	$C_{12} = C_{13} = C_{23}$	$C_{44} = C_{55} = C_{66}$	2
kubisch	$C_{11} = C_{22} = C_{33}$	$C_{12} = C_{13} = C_{23}$	$C_{44} = C_{55} = C_{66}$	3
tetragonal	$C_{11} = C_{22}$	$C_{13} = C_{23}$	$C_{44} = C_{55}$	6

Im isotropen Fall bestimmt man den Elastizitätsmodul  $E$ , Schubmodul  $G$  und die Querkontraktionszahl  $\nu$  aus dem Elastizitätstensor wie folgt:

$$G = C_{44} \quad (63)$$

$$\nu = \frac{C_{12}}{2(C_{12} + C_{44})} \quad (64)$$

$$E = 2G(1 + \nu). \quad (65)$$

Haben alle Phasen dieselben elastischen Konstanten  $C_{IJ}^\gamma = C_{IJ}^{\gamma''}$  so spricht man von elastischer Homogenität. Der Elastizitätstensor eines inhomogenen mehrphasigen Systems  $\mathbf{C}^M$  bestehend aus  $\alpha$  verschiedenen Phasen kann beschrieben werden durch die Mischungsregel [132]

$$C_{IJ}^M = \sum_{\alpha} C_{IJ}^{\alpha} V_{\alpha}, \quad (66)$$

wobei  $C^{\alpha}$  der Elastizitätstensor und  $V_{\alpha}$  der Volumenanteil der Phase  $\alpha$  ist. Um die drei Orientierungsvarianten der  $\gamma''$ -Phase zu berücksichtigen kann Gleichung (66) angepasst werden, so dass sich als homogenisierter, kubisch symmetrischer Elastizitätstensor der  $\gamma''$ -Phase  $\bar{C}^{\gamma''}$  ergibt

$$\begin{aligned}
 \bar{C}_{11}^{\gamma''} &= \frac{1}{3} (2C_{11}^{\gamma''} + C_{33}^{\gamma''}) \\
 \bar{C}_{12}^{\gamma''} &= \frac{1}{3} (C_{12}^{\gamma''} + 2C_{13}^{\gamma''}) \\
 \bar{C}_{44}^{\gamma''} &= \frac{1}{3} (2C_{44}^{\gamma''} + C_{66}^{\gamma''})
 \end{aligned}
 \tag{67}$$

Sind nun die elastischen Konstanten von  $(\alpha - 1)$  Phasen bekannt, genau wie deren Volumenanteile und die elastischen Konstanten des Verbundes, dann können die elastischen Konstanten der verbleibenden Komponente mit der Mischungsregel bestimmt werden.

Abbildung 19 a zeigt berechnete temperaturabhängigen elastischen Konstanten der  $\gamma''$ -Phase [133–135] zusammen mit einer linearen Anpassung. Die dargestellten Studien bestimmen die elastischen Konstanten der  $\gamma''$ -Phase mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT). Dabei wird die Elektronenstruktur verschiedener regelmäßiger Atomanordnungen bestimmt. Aus Konfigurationen unterschiedlicher Dehnung kann dann der energetische Unterschied der Konfigurationen und letztendlich der Elastizitätstensor bestimmt werden. Eine direkte experimentelle Bestimmung der elastischen Konstanten von  $\gamma''$  ist nicht ohne weiteres möglich, da es sich um eine metastabile Phase handelt. Die Herstellung einer einphasigen  $\gamma''$ -Probe ist nicht möglich.

Abbildung 19 b zeigt Resonanz-Ultraschall-Spektroskopie (RUS) Messungen der elastischen Konstanten eines IN718 Einkristalls (SX) zusammen mit einer gepunkteten Ausgleichsgerade. Die hier dargestellten RUS Messungen sind im Zuge der Arbeit von Fabian Krieg am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth entstanden. Die Daten werden in dieser Arbeit für die Betrachtung elastisch homogener, kubisch anisotroper Systeme verwendet. Durch die Mischungsregel aus Gleichung (66) zusammen mit dem Phasenanteil aus den CalPhaD-Rechnungen und den, über die drei Orientierungsvarianten nach Gleichung (67) gemittelten, elastischen Konstanten der Ausscheidungsphase können die elastischen Konstanten der verbleibenden Matrixphase berechnet werden. Diese weichen bis auf  $C_{11}$  nicht signifikant von denen des mehrphasigen Systems ab. Bei hohen Temperaturen gleichen sich die elastischen Konstanten an, was am abnehmenden Phasenanteil von  $\gamma''$  liegt. Es sei hier noch erwähnt, dass diese Betrachtung impliziert, dass sich die Zusammensetzung von  $\gamma''$  nicht mit der Temperatur ändert, die der Matrix allerdings schon. Das ist im betrachteten Temperaturbereich nur eingeschränkt zutreffend (siehe Abbildung 17 auf Seite 38).

Abbildung 19 c zeigt Resonanz-Ultraschall-Spektroskopie (RUS) Messungen der elastischen Module von geschmiedetem, polykristallinem IN718 zusammen mit einer Ausgleichsgeraden. Ebenfalls gegeben ist die Querkontraktionszahl  $\nu$ , welche mit steigender Temperatur zunimmt. Diese elastischen Kennwerte werden für Modellbetrachtungen unter der Annahme isotroper Elastizität, wie die Eshelby Lösung des Einschlussproblems, verwendet. Zum Vergleich sind elastische Kennwerte aus dem Datenblatt der Legierung gegeben [10]. Elastizitäts- und Schubmodul stimmen gut überein, die Angaben zur Querkontraktionszahl im Datenblatt streuen stark, und genügen nicht dem Zusammenhang aus Gleichung (65).

## Temperaturabhängige Materialparameter

Deswegen wird angenommen, dass die RUS Messungen der Module korrekt sind und die daraus bestimmten Querkontraktionszahlen zuverlässiger, als die Angaben im Datenblatt.

Abbildung 19 d zeigt die Zener-Anisotropie  $Z$  für die einzelnen Phasen und die mehrphasige Legierung.  $Z$  ist definiert für kubische Kristalle als [132]

$$Z = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}. \quad (68)$$

Die Anisotropie der Matrix nimmt mit der Temperatur zu, wie für andere Ni-reiche Mischkristalle ebenfalls beobachtet [106]. Für die  $\gamma''$ -Phase sind drei Variationen der Anisotropie gegeben. Alle sind weniger ausgeprägt, als die Anisotropie der Matrixphase. Sie zeigen auch eine schwächere und negative Temperaturabhängigkeit.

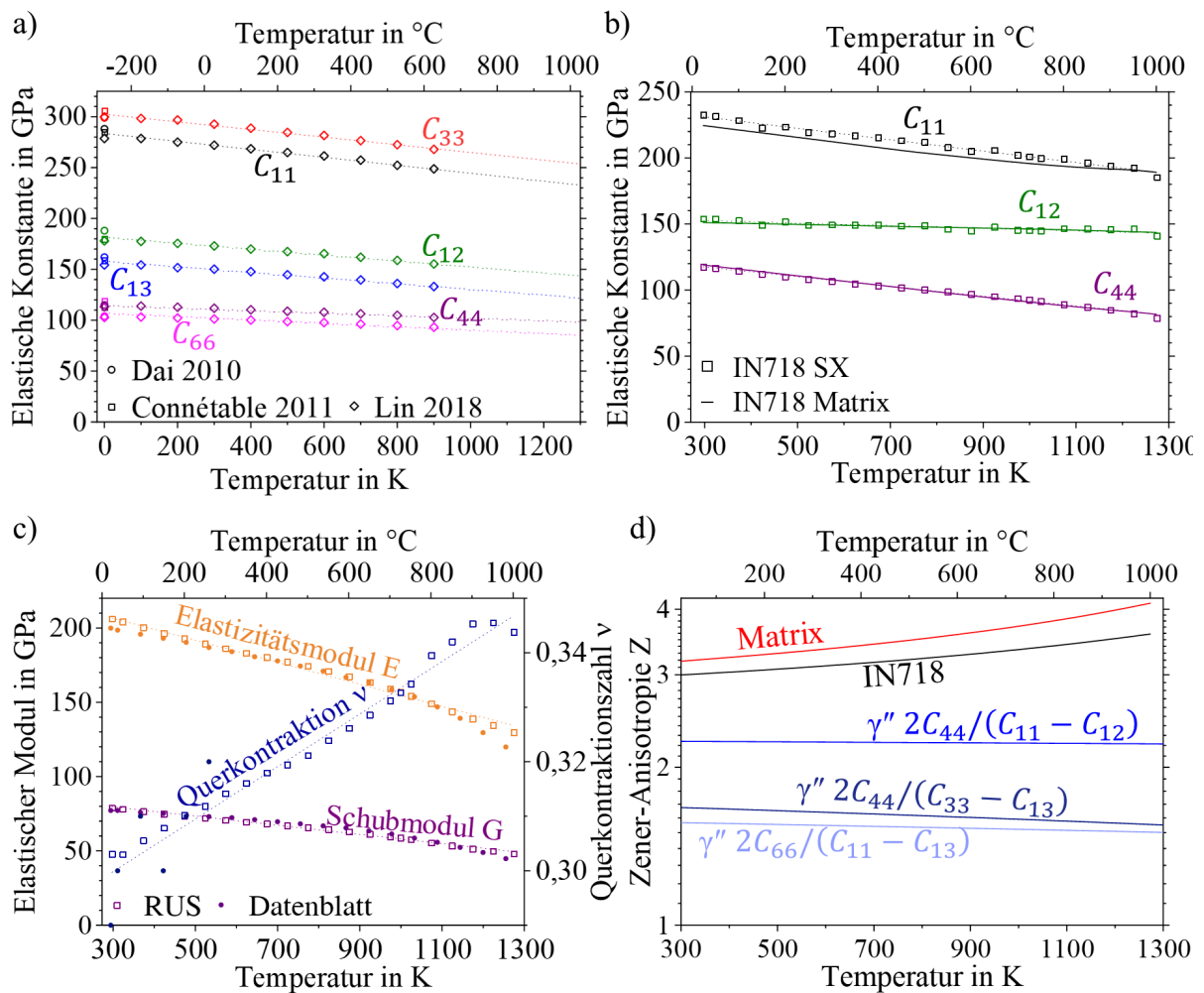


Abbildung 19: a) Elastische Konstanten von  $\gamma''$  aus DFT Simulationen [133–135] b) Elastische Konstanten einer einkristallinen IN718 Probe aus RUS Messungen und Abschätzung der elastischen Eigenschaften der Matrix c) Elastische Kenngrößen von isotropem IN718 aus RUS Messungen und dem Datenblatt [10]. d) Elastische Anisotropie der Phasen und der Legierung.

Abbildung 20 zeigt den richtungsabhängigen Elastizitätsmodul der Phasen bei 725°C. Die Anisotropie der elastischen Eigenschaften und der phasenabhängige Kontrast dieser Anisotropie ist deutlich erkennbar. Für beide Phasen ist die  $\bar{a}$ -Richtung die elastisch weichste Richtung und die  $\langle 111 \rangle$ -Richtungen sind die elastisch härtesten Richtungen. Vor allem in den  $\langle 001 \rangle$ -Richtungen zeigt sich auch ein ausgeprägter Steifigkeitskontrast zwischen den Phasen. Der Elastizitätsmodul der  $\gamma''$ -Phase in  $\bar{c}$ -Richtung ist um 25% höher als in  $\bar{a}$ -Richtung.

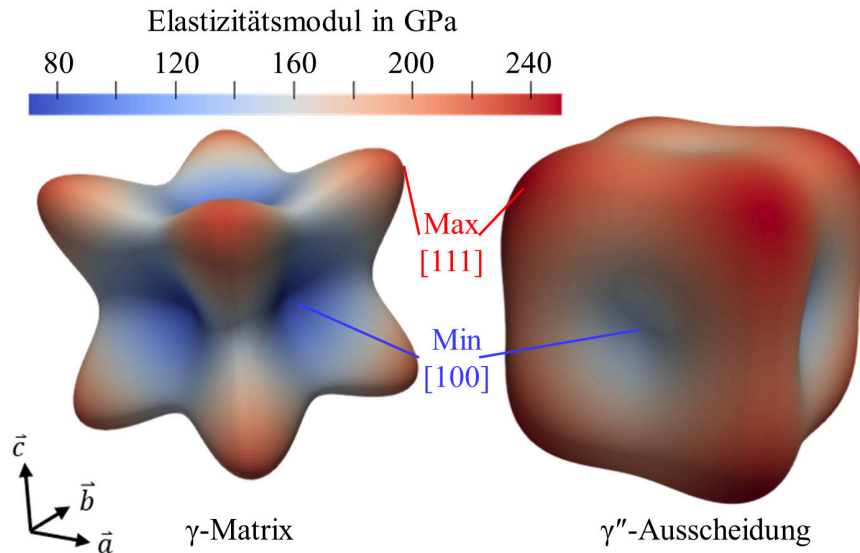


Abbildung 20: Richtungsabhängiger Elastizitätsmodul der Phasen bei 725°C. Die Anisotropie ist bei der Matrixphase deutlich ausgeprägter.

Die temperaturabhängigen elastischen Konstanten und Kennwerte sind in Tabelle 7 gegeben. Um den Einfluss der elastischen Konstanten auf die Mikrostrukturentwicklung zu untersuchen, werden vier verschiedene Konfigurationen der elastischen Konstanten definiert. Um ausschließlich den Einfluss der anisotropen Gitterfehlpassung zu untersuchen, werden die homogenen und isotropen elastische Eigenschaften von IN718, wie in Abbildung 19 c dargestellt, gewählt. Um den Einfluss der Anisotropie zu untersuchen wird der homogene, kubisch anisotrope Elastizitätstensor von IN718 aus Abbildung 19 b verwendet. Zur vollständigen Beschreibung der Mikroelastizität werden die phasenabhängigen elastischen Konstanten aus Abbildung 19 a und b verwendet. Zur Beschreibung des isotropen Steifigkeitskontrastes zwischen den Phasen wird eine weitere Konfiguration definiert, bei der sich die Phasen durch ihr Schubmodul  $G_{\gamma''} = 1,3 G_{\gamma}$ , aber nicht durch ihre Querkontraktion unterscheiden („Phasenabhängig isotrop“ in Tabelle 7). Die Schubmodule werden so gewählt, dass das experimentell ermittelte Schubmodul der zweiphasigen Legierung nach der Mischungsregel aus Gleichung (66) erhalten bleibt.

## Temperaturabhängige Materialparameter

Tabelle 7: Temperaturabhängige elastische Konstanten und Kennwerte der Phasen mit der linearen Änderung pro 1000 K für die verschiedenen Konfigurationen.

	Parameter	T = 0 K	Änderung pro 1000 K	T = 725°C	Quelle
$\gamma''$ -Aus- scheidung	$C_{11}$ in GPa	284 ± 1,01	-38,2 ± 2,08	245 ± 3,1	[22–24]
	$C_{33}$ in GPa	303 ± 0,92	-36,7 ± 1,88	266 ± 2,8	
	$C_{12}$ in GPa	182 ± 1,10	-28,6 ± 2,26	153 ± 3,4	
	$C_{13}$ in GPa	158 ± 0,84	-27,1 ± 1,72	131 ± 2,6	
	$C_{44}$ in GPa	115 ± 0,39	-11,9 ± 0,80	103 ± 1,2	
	$C_{66}$ in GPa	107 ± 1,92	-16,2 ± 3,94	91 ± 5,9	
$\gamma$ -Matrix	$C_{11}$ in GPa	234 ± 0,81	-37,2 ± 0,96	197 ± 1,8	Gl. (66) & (67)
	$C_{12}$ in GPa	156 ± 0,87	-9,3 ± 1,03	146 ± 1,9	
	$C_{44}$ in GPa	129 ± 0,56	-36,8 ± 0,67	92 ± 1,2	
IN718 SX kubisch	$C_{11}$ in GPa	244 ± 0,89	-43,1 ± 1,06	201 ± 2,0	RUS
	$C_{12}$ in GPa	156 ± 0,87	-9,3 ± 1,03	146 ± 1,9	
	$C_{44}$ in GPa	129 ± 0,56	-36,8 ± 0,67	92 ± 1,2	
IN718 isotrop	$E$ in GPa	229 ± 0,47	-74,1 ± 1,68	155 ± 2,2	RUS
	$G$ in GPa	89 ± 1,39	-30,9 ± 0,58	58 ± 2,0	
	$\nu$	0,285 ± 0,002	+0,048 ± 0,002	0,333 ± 0,004	
Phasenabh. isotrop	$G_\gamma$ in GPa			56 ± 1,9	Gl. (66)
	$G_{\gamma''}$ in GPa			73 ± 2,5	

### 4.3 Gitterfehlpassung

Die Gitterfehlpassung  $\delta$  ergibt sich aus dem relativen Unterschied der Gitterparameter zweier Phasen. Im Fall einer kohärenten Phasengrenzfläche ergeben sich daraus Kohärenzspannungen, da eine Dehnung der Kristallgitter nötig ist, um ein kohärentes Gitter zu beizubehalten. Zur Beschreibung der Mikroelastizität im Phasenfeldmodell eignet sich zur Definition der Fehlpassung, der spannungsfreie Transformationsvektor, bzw. der Eigendehnungsvektor  $\vec{\epsilon}_0$  der Matrix, der die Gitterkonstante der dispersen Phase auf die der Matrix bezieht. Dieser ist in Voigt-Darstellung, im Falle einer kohärenten  $\gamma''$ -Ausscheidung gegeben als  $\vec{\epsilon}_0 = (\epsilon_1, \epsilon_1, \epsilon_3, 0, 0, 0)$  mit

$$\begin{aligned}\epsilon_1 &= \frac{a_{\gamma''} - a_{Matrix}}{a_{Matrix}} \\ \epsilon_3 &= \frac{c_{\gamma''} - 2a_{Matrix}}{2a_{Matrix}}.\end{aligned}\tag{69}$$

Abbildung 21 zeigt experimentelle Daten zur temperaturabhängigen Gitterfehlpassung in IN718 [17, 128, 136, 137]. Die Gitterfehlpassung wurde in-situ gemessen. Es handelt sich daher um die verspannte Fehlpassung [138]. Messungen der Gitterkonstante von  $\gamma''$  ist aufgrund der Metastabilität der Phase nicht möglich. Die Daten wurden durch Röntgendiffraktometrie [17] und Neutronenstreuung [128, 136, 137] ermittelt.

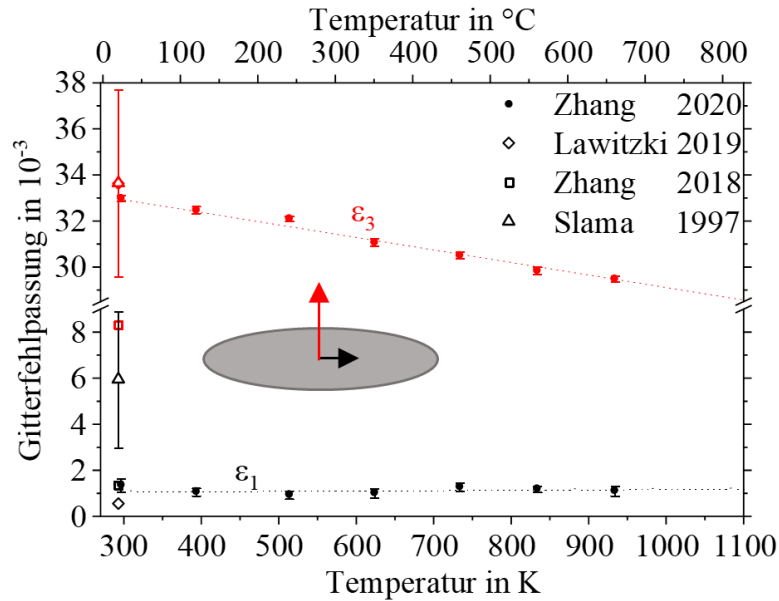


Abbildung 21: Experimentell ermittelte temperaturabhängige Gitterfehlpassung der  $\gamma''$ -Phase in einer IN718 Mischkristallmatrix aus verschiedenen Quellen [17, 128, 136, 137].

Die betragsmäßig größere Gitterfehlpassung  $\varepsilon_3$  liegt bei Raumtemperatur etwa im Bereich von  $33 \cdot 10^{-3}$  und weist eine ausgeprägte, negative Temperaturabhängigkeit auf. Die kleinere Gitterfehlpassung  $\varepsilon_1$  liegt deutlich niedriger, im Bereich unter  $2 \cdot 10^{-3}$  und weist eine weniger ausgeprägte Temperaturabhängigkeit auf. Die gemessenen Gitterfehlpassungen streuen relativ stark. Die gemessenen Werte von  $\varepsilon_3$  liegen dabei näher aneinander als die der kleineren Fehlpassung  $\varepsilon_1$ . Das Verhältnis der Fehlpassungen  $\varepsilon_3/\varepsilon_1$  liegt, abhängig von den betrachteten Daten, im Bereich von 6 – 60. Die in dieser Arbeit angenommenen Werte der Fehlpassung entstammen einer linearen Anpassung an die Daten von Zhang et al. [136]. Zur Bestimmung der Ungenauigkeit werden die anderen Literaturdaten in eine mittlere quadratische Abweichung miteinbezogen. Die interpolierten Daten sind in Tabelle 8 gegeben.

Tabelle 8: Temperaturabhängige Gitterfehlpassung der  $\gamma''$ -Phase.

	Eigendehnung in $10^{-3}$ bei 0 K		Änderung in $10^{-3}$ pro 1000 K		Eigendehnung in $10^{-3}$ bei 725°C		Quelle
$\varepsilon_1$	1,06	$\pm 0,17$	+0,15	$\pm 0,25$	1,21	$\pm 0,41$	[17, 128, 136, 137]
$\varepsilon_3$	34,5	$\pm 0,54$	-5,44	$\pm 0,95$	29,1	$\pm 1,50$	

#### 4.4 Grenzflächenenergiedichte

Die Phasengrenzflächenenergiedichte ist eine fundamentale Größe in der Beschreibung von Phasenumwandlungen. Sie hat die Einheit einer Energie pro Fläche und ist im Allgemeinen orientierungs- und temperaturabhängig. Sie ist außerdem abhängig von der lokalen Zusammensetzung der beteiligten Phasen sowie deren Kristallstruktur. Im Allgemeinen gilt,



dass die Grenzflächenenergiedichte einer kohärenten Grenzfläche um den Faktor 3 bis 30 niedriger ist, als die einer inkohärenten Grenzfläche [34, 39, 139].

### Isotrope Grenzflächenenergie

Die Grenzflächenenergiedichte ist experimentell nicht ohne Weiteres zugänglich. Experimentelle Methoden zur Bestimmung der Energiedichte einer kohärenten Grenzfläche zwischen einer intermetallischen Phase und einem Mischkristall umfassen u. A. die Messung der Wärmeentwicklung während der Ostwaldreifung [140], die Anpassung von Modellen der Reifungskinetik [61, 141–143] und Nukleation [144, 145], sowie dem Vergleich der Musterbildung in der Mikrostruktur [31, 45, 61]. Die kohärente Phasengrenzflächenenergie ist eine Größe, die sich rein aus dem lokalen Bruch der Translationssymmetrie eines Kristalles und der Thermodynamik der Phasen ergibt [34]. Sie ist im in Abschnitt 3.1 beschriebenen Modell, unabhängig von der Gitterfehlpassung, welche durch Grenzflächen zusätzliche elastische Energie in das System einbringt.

Abbildung 22 zeigt Literaturwerte der temperaturabhängigen Grenzflächenenergiedichte einer Matrix/ $\gamma''$ -Phasengrenzfläche. Eine negative Temperaturabhängigkeit ist zu erkennen, wie es allgemein für die kohärente Grenzflächenenergiedichte gilt [34]. Die Werte bei 0 K entstammen DFT Simulationen der Grenzfläche, wobei in einem Fall zwei verschiedene Grenzflächenorientierungen betrachtet wurden [40, 139]. Die anderen Werte entstammen der Anpassung von Modellen der Reifungs- bzw. Ausscheidungskinetik an experimentelle Daten [61, 94, 145] oder durch den Vergleich der Ausscheidungsform mit experimentellen Mikrostrukturdaten [31, 61]. Die gestrichelte Linie in Abbildung 22 spiegelt die qualitativ erwartete, negative Temperaturabhängigkeit der Grenzflächenenergiedichte wieder [34]. Zusammen mit den Diffusionskoeffizienten der Legierungselemente ist die Grenzflächenenergiedichte unter den Materialparametern mit der größten Ungenauigkeit belegt. Da die Werte im relevanten Temperaturbereich zwischen 650°C und 760°C sehr stark streuen, wird im Zuge dieser Arbeit für diesen Temperaturbereich zunächst eine konstante Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma = 100 \text{ mJ m}^{-2}$  angenommen.

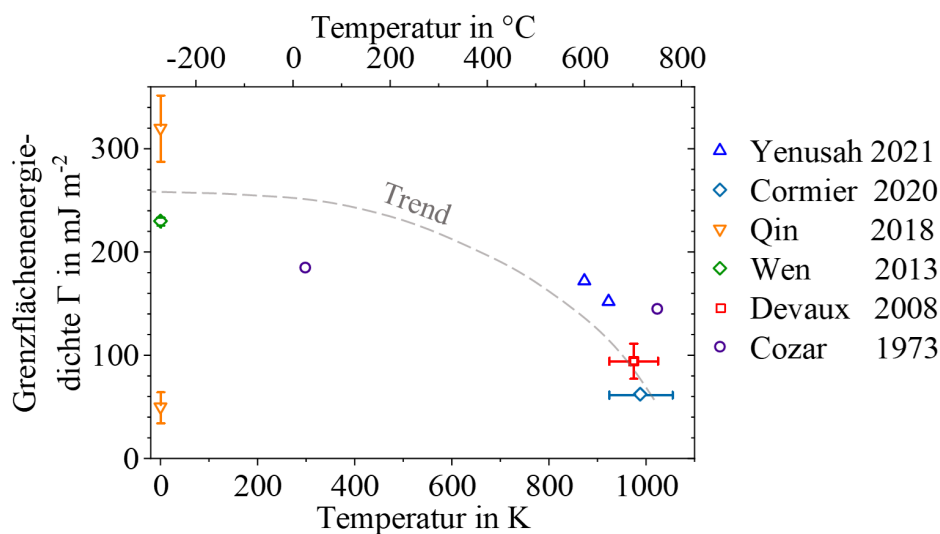


Abbildung 22: Ermittelte Grenzflächenenergiedichte kohärenter Matrix/ $\gamma''$ -Phasengrenzflächen [31, 40, 61, 94, 139, 145].

### Anisotropie der Grenzflächenenergie

Abbildung 23 zeigt eine schematische rotationselliptische Ausscheidung mit orientierungsabhängiger Grenzflächenenergie nach Gleichung (27). Flächen mit einem Orientierungswinkel  $\theta$  nahe 0 bzw.  $\pi$  sind blau dargestellt und solche mit  $\theta$  ungefähr  $\pm \pi/2$  sind rot dargestellt. Die Grenzflächenenergiedichte der roten Randfläche sei  $\Gamma_A$  und die Grenzflächenenergiedichte der blauen Deckflächen sei  $\Gamma_C$ . Zu beiden unterscheidbaren Orientierungen ist die lokale Kristallstruktur der Grenzfläche gegeben. In der ungeordneten Mischkristallphase, der Matrix, sind alle Gitterpositionen äquivalent. Jede Gitterposition ist mit der gleichen Wahrscheinlichkeit von einem bestimmten Legierungselement besetzt. Die Wahrscheinlichkeit, dass eine Gitterposition im Mischkristall mit einem bestimmten Element besetzt ist entspricht der molaren Konzentration des Legierungselements in der Matrixphase. Nimmt man an, dass die geordnete  $\gamma''$ -Ausscheidungsphase stöchiometrisch auftritt, so ergeben sich in dieser Phase je mit Ni und mit Nb besetzte Gitterpositionen. Die Elemente, für die die  $\gamma''$ -Phase eine gewisse Löslichkeit besitzt, besetzen auch spezifisch entweder die Ni oder die Nb Positionen, sodass die Unterscheidbarkeit der Gitterpositionen weiterhin gegeben ist. Es ergeben sich dementsprechend die drei Spezies, die eine Gitterposition im System Matrix/ $\gamma''$  besetzen können: „Ni“, „Nb“, „MK“. MK steht dabei für eine statistisch besetzte Position im Mischkristall. In Abbildung 23 sind die Gitterpositionen MK grau dargestellt, Weiß sind Nb und Schwarz Ni Positionen. Kleinere Punkte deuten Gitterpositionen an, die eine halbe Gitterebene tiefer liegen.

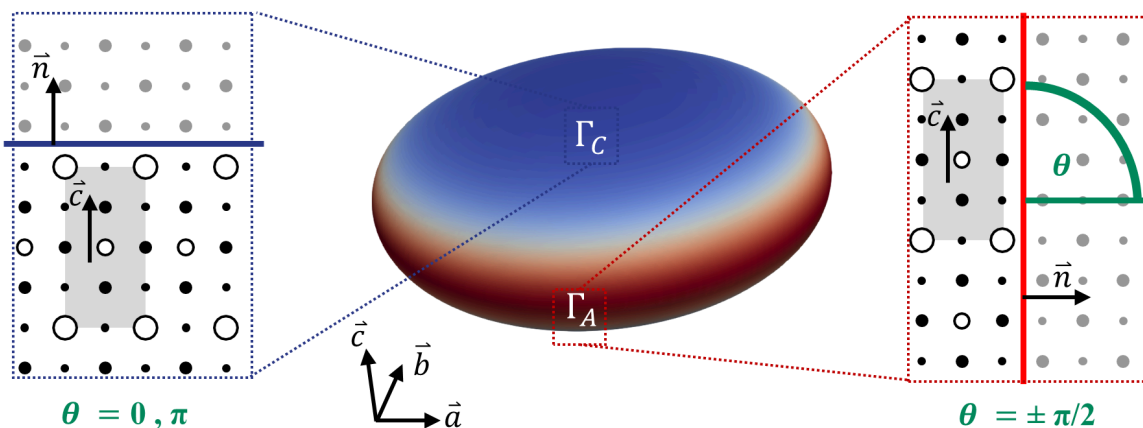


Abbildung 23: Exemplarische  $\gamma''$ -Ausscheidung mit der orientierungsabhängigen Grenzflächenenergiedichte der Deckfläche  $\Gamma_C$  (blau) und der Randfläche  $\Gamma_A$  (rot). Die Kristallstruktur der Grenzfläche sind für beide Konfigurationen ebenfalls dargestellt.

Die Orientierungsabhängigkeit der Grenzflächenenergiedichte ergibt sich aus der unterschiedlichen lokalen Struktur verschieden orientierter Grenzfläche und kann in erster Näherung qualitativ durch „gebrochene Bindungen“ abgeschätzt werden. Eine gebrochene Bindung an einer Gitterposition entspricht im Falle einer kohärenten Grenzfläche einer benachbarten Gitterposition, welche durch ein anderes Legierungselement besetzt ist, als das im Volumen der Fall ist [146–148]. Genauere Abschätzungen berücksichtigen noch weitere Nachbarschaftsschalen, um quantitative Abschätzungen zu ermöglichen [149]. Zur Abschätzung der Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte im System  $\gamma/\gamma''$  sollen hier die

Nachbarschaftsbeziehungen in den Grenzflächen verglichen werden. Jede Gitterposition hat zwölf nächste  $\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} 0 \rangle$  Nachbarn. Als Referenz wird die  $\gamma''$ -Phase angenommen, die im Volumen zwei unterscheidbare Ni Positionen, mit je 4 Nb und 8 Ni Nachbarn und eine Nb Position mit 12 Ni Nachbarn besitzt. Es ergeben sich im Mittel pro Gitterposition 6 Ni-Nb Bindungen und 6 Ni-Ni Bindungen, da eine der Ni Gitterpositionen doppelt so oft vorkommt, wie die anderen. Es treten keine benachbarten Nb-Nb Bindungen auf.

Im Fall der Deckfläche existieren zwei unterscheidbare Gitterpositionen an der Grenzfläche in der  $\gamma''$ -Phase. Die Nb Positionen haben jeweils 8 Ni Nachbarn und 4 MK, die Ni Positionen jeweils 4 Nb Nachbarn, 4 MK und 4 Ni. Im Mittel ergibt das 0,5 Ni-Ni und 1,5 Ni-Nb Bindungen in der Grenzfläche pro Gitterposition in der Grenzfläche. Im Fall einer Grenzfläche normal zur Gitterrichtung  $\vec{a}$  ergeben sich drei unterscheidbare Grenzflächenpositionen in der Ausscheidung. Die Nb Positionen haben 8 Ni und 4 MK Nachbarn. Eine Gitterposition Ni hat 2 Nb, 6 Ni und 4 MK Nachbarn und zwei andere Ni Positionen je hat 3 Nb, 5 Ni und 4 MK Nachbarn. Damit ergeben sich je eine Ni-Nb Bindung und eine Ni-Ni Bindung in der Grenzfläche. Das ist ein Hinweis, dass sich die Energiedichten dieser beiden Grenzflächenorientierungen signifikant unterscheiden. DFT Simulationen bei 0 K zeigen ebenfalls, dass eine deutliche Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte existiert [40].

Eine erste Abschätzung der Größenordnung der Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte ergibt sich aus dem Vergleich mit dem System Al-Sc. DFT Simulationen zur Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte von  $\text{Al}_3\text{Sc}$  Ausscheidungen zeigen, dass sich die Grenzflächenenergiedichten von Orientierungen mit einem Verhältnis der Bindungen in der Grenzfläche  $\text{Al-Sc}/\text{Al-Al} = 1$  zu denen mit einem Verhältnis von 3 um den Faktor  $0,73 \pm 0,02$  unterscheiden ( $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,37$ ) [150, 151]. Die Verhältnisse Ni-Nb/Ni-Ni in  $\gamma/\gamma''$ -Grenzflächen unterscheiden sich zwischen den Orientierungen normal zu  $\vec{a}$  bzw.  $\vec{c}$  ebenfalls um den Faktor 1 zu 3. Das ist ein erster Hinweis darauf, dass  $\Gamma_A/\Gamma_C > 1$  und dass sich der Unterschied zwischen den Grenzflächenenergiedichten im Bereich einiger 10% bewegt.

In Abbildung 24 sind drei verschiedene Konfigurationen der Grenzflächenenergiedichte dargestellt, die zur systematischen Untersuchung des Einflusses der Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte dienen sollen. Referenz ist jeweils eine Konfiguration mit isotroper Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_0$  (a). Die zwei Konfigurationen mit anisotroper Grenzflächenenergiedichte sind die beiden Grenzfälle in denen je die Energiedichte  $\Gamma_A$  bzw.  $\Gamma_C$  der isotropen Referenzenergiedichte  $\Gamma_0$  entsprechen. Ausgehend vom isotropen Fall und der Anisotropiestärke  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,5$  bedeutet das, dass um die Konfiguration (b) in Abbildung 24 zu erhalten die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_C$  verringert wird. Anders herum wird im Fall (c) die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A$  erhöht. Die integrale Grenzflächenenergie einer beliebigen Ausscheidung ist also im Fall (b) mit verringertem  $\Gamma_C$  am niedrigsten, im isotropen Fall (a) mittelhoch und in der Konfiguration (c) mit erhöhtem  $\Gamma_A$  am höchsten. Konfigurationen mit einer integral definierten konstanten Grenzflächenenergien sind für beliebige Ausscheidungsformen nicht möglich, weswegen die hier beschriebenen Grenzfälle nötig sind. Die anisotropen Profile nach Gleichung (27) unterscheiden sich, für ein konstantes  $\Gamma_A/\Gamma_C$ , lediglich durch den Betrag der Grenzflächenenergiedichte.

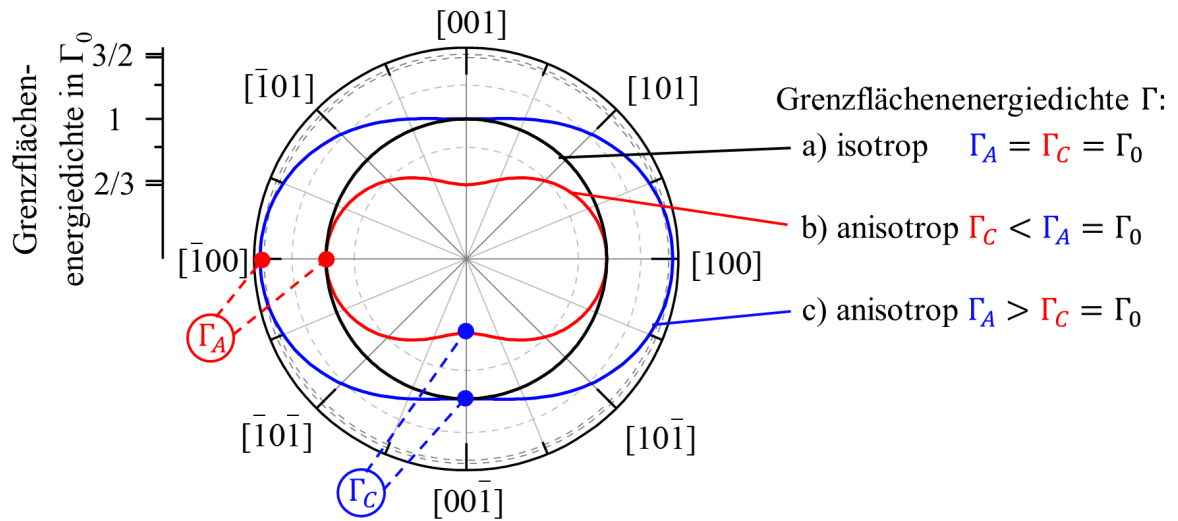


Abbildung 24: Unterscheidbare Grenzfälle der a) isotropen b) bzw. c) anisotropen Grenzflächenenergiedichte mit  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,5$ .

# 5 Ergebnisse der Simulationsstudien

## 5.1 Elastischer Gleichgewichtszustand

Der erste Teil der Betrachtungen zur  $\gamma''$ -Strukturbildung beschäftigt sich mit dem Zustand mechanischen Gleichgewichtes. Dabei wird angenommen, dass die Form einzelner Ausscheidungen so vorliegt, dass die Summe aus Grenzflächenenergie und elastischer Energie durch die Kohärenzspannungen minimal ist. Die Minimierung geschieht bei konstantem Phasenanteil und für Ausscheidungen mit definierten Volumen. Durch Variation des Volumens einer Ausscheidung kann die Abhängigkeit der Ausscheidungsform von  $Q$  und damit von der Größenabhängigkeit der Ausscheidungsform untersucht werden. Es wird eine Temperatur von  $725^\circ\text{C}$  und eine Grenzflächenenergiedichte von  $100 \text{ mJ m}^{-2}$  angenommen. Die Temperaturabhängigkeit der Ergebnisse wird in Abschnitt 6 diskutiert.

### 5.1.1 Elastisches Feld einer $\gamma''$ -Ausscheidung

Die Gitterfehlpassung beeinflusst das elastische Feld innerhalb und außerhalb einer kohärenten Ausscheidung. Betrachtet man eine isolierte Ausscheidung in unendlicher Matrix, so geht die Dehnung in der Matrix mit zunehmendem Abstand zur Ausscheidung gegen 0.

#### Orientierungsabhängige Relaxationsfunktion

Abbildung 25 a zeigt die orientierungsabhängige elastische Relaxationsfunktion  $B(\vec{n})$ , welche in Abschnitt 3.3.2 eingeführt wurde. Es handelt sich dabei um die elastische Energiedichte einer unendlich ausgedehnten und unendlich dünnen plattenförmigen Ausscheidung mit der Normalen  $\vec{n}$ . Nimmt man anisotrope Gitterfehlpassung und tetragonale elastische Konstanten an, ergibt sich in der 3D Polardarstellung ein Körper mit tetragonaler Symmetrie. Die Relaxationsfunktion ist ein analytischer Ansatz, um abzuschätzen, wie stark Orientierungen einer kohärenten Grenzfläche zur elastischen Energie im System beitragen.

Deutlich erkennbar ist das ausgeprägte Minimum der Relaxationsfunktion in  $\pm \vec{c}$ -Richtung im (010)-Schnitt in Abbildung 25 b. Das Minimum erklärt, warum die Normale der plattenförmigen  $\gamma''$ -Ausscheidungen mit der tetragonalen Achse  $\vec{c}$  der tetragonalen Phase zusammenfällt [122]. Beim Blick auf die  $\vec{c}$ -Richtung in Abbildung 25 c zeigt sich eine vierzählig drehsymmetrische Anisotropie. Die Richtungen  $[\pm 1 1 0]$  und  $[1 \pm 1 0]$  zeigen die höchste Energiedichte. Es gibt also keine Rotationsinvarianz um die  $\vec{c}$ -Richtung. Die Anisotropie bei Drehung um die  $\vec{c}$ -Achse ist jedoch deutlich weniger ausgeprägt als die Anisotropie bei Drehung um die anderen Kristallachsen.

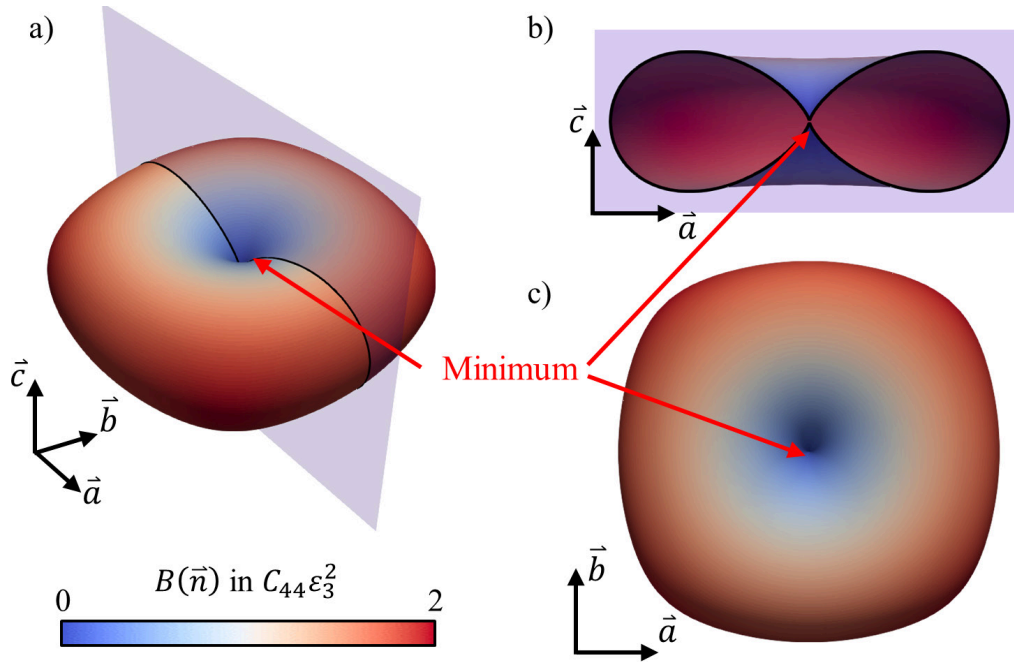


Abbildung 25: a) Elastische Relaxationsfunktion  $B(\vec{n})$  als Vielfache der elastischen Energieskala  $C_{44}\varepsilon_3^2$  in 3D Polardarstellung. b) (010) Schnitt durch die 3D Polardarstellung c) Blick auf die  $\vec{c}$ -Richtung.

### Spannungsfeld um eine Ausscheidung

Abbildung 26 zeigt das elastische Feld einer elliptische  $\gamma''$ -Ausscheidung. Die elastischen Eigenschaften sind hier vollständig anisotrop und phasenabhängig gewählt (siehe Tabelle 7). Die Ausscheidung hat ein Aspektverhältnis von 4,5 bei einem Hauptradius von 45 nm. Im 2D System hat die Ausscheidung einen Flächenanteil von etwa 2%. Neben den Einträgen des Spannungstensor sind auch die elastische Energiedichte und die „von Mises“ Vergleichsspannung  $\sigma_{vM}$  in Abbildung 26 dargestellt. Die Vergleichsspannung errechnet sich im ebenen Dehnungszustand ( $x \parallel \vec{a}, z \parallel \vec{c}$ ) als

$$\sigma_{vM} = \sqrt{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{zz}^2 + \sigma_{xx}\sigma_{zz} + 3\sigma_{xz}^2}. \quad (70)$$

Die Vergleichsspannung entspricht der einachsigen Spannung, welche zu einer vergleichbaren Gestaltänderung führt. In den Farbskalen der Abbildung 26 sind die minimal und maximal auftretenden Werte gekennzeichnet.

Die elastische Energiedichte in der Ausscheidung ist näherungsweise konstant. Das deckt sich mit den analytischen Betrachtungen [31, 118]. Die elastische Energiedichte in der Matrix nimmt in  $\vec{a}$ -Richtung sehr schnell ab. In  $\vec{c}$ -Richtung geht die elastische Energiedichte nach weniger als zwei mal der Ausscheidungsdicke gegen 0. Am Punkt der stärksten Krümmung, der Randfläche der Ausscheidung, ist das stark lokalisierte Maximum der elastischen Energie erreicht (siehe Markierung 1). Diese Beobachtung deckt sich ebenfalls mit der Vorhersage durch die Relaxationsfunktion aus Abbildung 25. Die Vergleichsspannung hat ebenfalls ihr Maximum am Rand der Ellipse. Die Vergleichsspannung fällt langsamer ab (siehe Markierung 2) und sie geht im Inneren der Ausscheidung gegen 0, da sich dort ein hydrostatischer Druckspannungszustand einstellt. In der Matrix treten Zugspannungen auf.

Die Maxima der Zugspannungen befinden sich wieder an den Rändern der Ellipse. Die Schubspannung  $\sigma_{xz}$  hat ihr betragsmäßiges Maximum in der Matrix an den  $\{110\}$  orientierten Grenzflächen (siehe Markierung 3). Es ist ebenfalls eine integrale Gesamtenergie  $\Omega$  bezogen auf eine virtuelle Dicke der 2D Domäne von 1 m gegeben. Der Wert von  $19 \cdot 10^{-9}$  J entspricht einer mittleren normierten Energiedichte von etwa  $0,057 C_{44} \varepsilon_3^2$ .

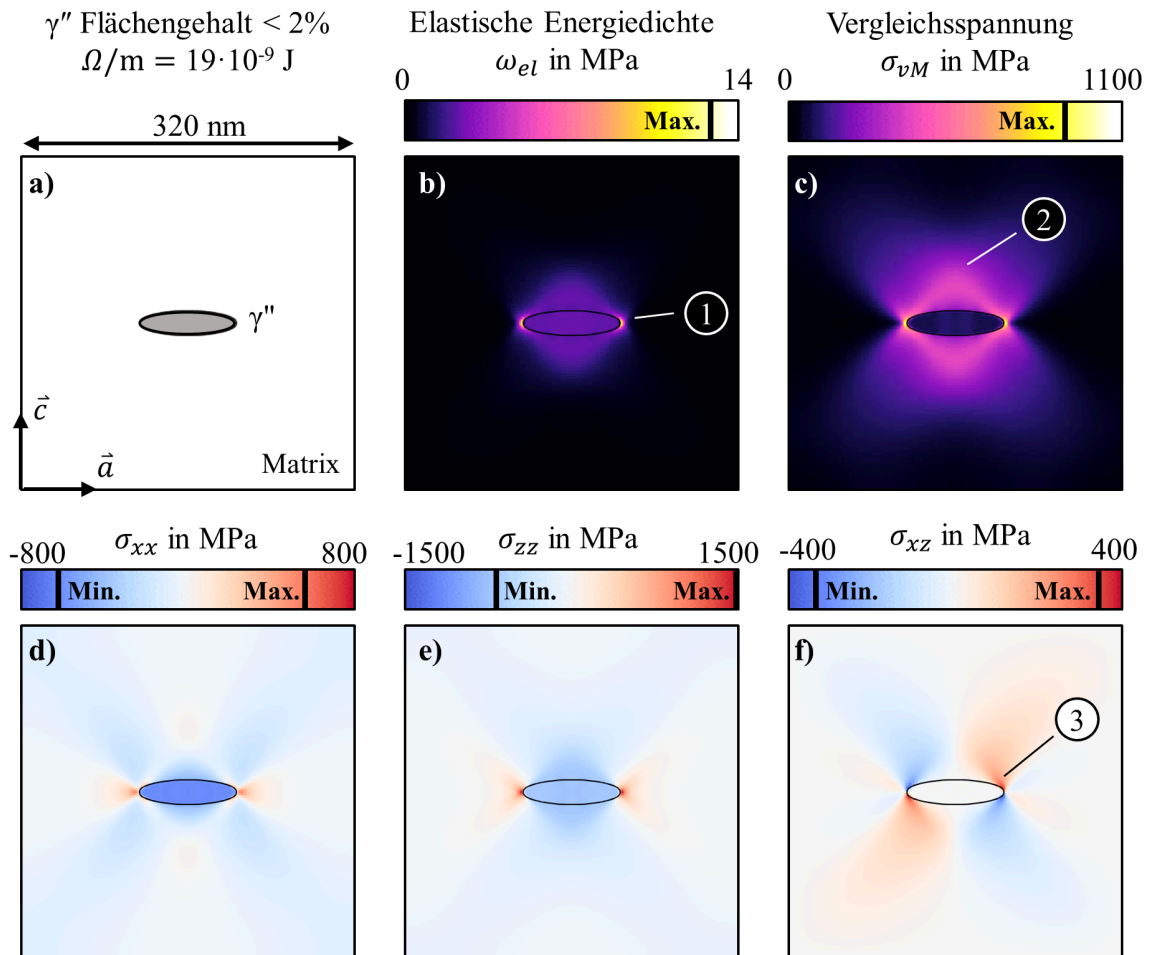


Abbildung 26: a)  $\gamma''$ -Ausscheidung im elastisch anisotropen Fall mit b) elastischer Energiedichte c) Vergleichsspannung und d) - f) Einträgen des Spannungstensors.

Im dargestellten Fall sind die Spannungen lokal sehr hoch. Im Vergleich zu kohärenten  $\gamma'$ -Ausscheidungen in Nickelbasis-Superlegierungen übersteigen sie diese um bis zu einem Faktor 4 [33]. Die Spannungsspitzen sind jedoch stark lokalisiert und für Ausscheidungen in der hier dargestellten Größe wird beobachtet, dass bereits ein Kohärenzverlust eingetreten ist [36]. Das heißt die lokalen Kohärenzspannungen werden durch Versetzungsnetzwerke abgebaut. Dieser Effekt ist in der hier dargestellten Betrachtung nicht enthalten, weshalb die Spannungsspitzen hier tendenziell überschätzt werden.

### 5.1.2 Gleichgewichtsform einer $\gamma''$ -Ausscheidung

Zur Bestimmung der Gleichgewichtsform einer Ausscheidung wird ein spiegelperiodisches System, wie in Abschnitt 3.1.4 beschrieben, initialisiert. Durch die Formulierung der Entwicklungsgleichung als Variationsableitung strebt die Phasengrenzfläche in dem System

iterativ gegen eine Form minimaler Energie, die Gleichgewichtsform. Zur exakten Bestimmung des Aspektverhältnis aus dem diskreten Phasenfeld  $\varphi(x_i)$  ist es nötig, das 1D Phasenfeldprofil entlang der kartesischen Koordinatenachsen unter Zuhilfenahme der tanh-Phasenfeldprofilfunktion aus Gleichung (21) auf Seite 20 zu interpolieren. So kann die exakte Position der Phasengrenze  $X(\varphi = 1/2)$  gefunden werden. Die Interpolation erfolgt so, dass entlang einer Richtung, zwei numerische Stützstellen gewählt werden, welche in direkter Nachbarschaft zur Phasengrenze liegen. Die Stützstelle  $X^+$  ist dabei die Stützstelle für die gilt  $\varphi(X^+) > 1/2$  und  $X^-$  ist die Stützstelle für die gilt  $\varphi(X^-) < 1/2$ . Mit den zwei Stützstellen können dann Breite  $\xi$  und Position  $X$  der Grenzfläche berechnet werden. Die exakte Position der Phasengrenze berechnet sich als

$$X = X^+ - \frac{\tanh^{-1}(1 - 2\varphi(X^+))}{\tanh^{-1}(1 - 2\varphi(X^-)) - \tanh^{-1}(1 - 2\varphi(X^+))}. \quad (71)$$

Die lokale Grenzflächenbreite in Richtung der kartesischen Koordinatenachsen ergibt sich zu

$$\xi = \frac{2}{|\tanh^{-1}(1 - 2\varphi(X^+)) - \tanh^{-1}(1 - 2\varphi(X^-))|}. \quad (72)$$

Durch diese Interpolation wird die Ausdehnung der Ausscheidung entlang der kartesischen Koordinatenachsen der Simulationsdomäne bestimmt und daraus das Aspektverhältnis berechnet.

Abbildung 27 zeigt eine exemplarische 2D Simulationsdomäne aus  $20 \times 12$  numerischen Gitterpunkten und dem Phasenfeld einer elliptischen Ausscheidung. Die Isolinie ist gestrichelt dargestellt. Die diskreten Phasenfeldprofile entlang der beiden kartesischen Koordinatenachsen sind ebenfalls gegeben. Die tanh-Interpolation nach Gleichung (71) zeigt an, an welchen Stellen jeweils der Schnittpunkt der Koordinatenachse mit der Isolinie  $\varphi = 1/2$  liegt.

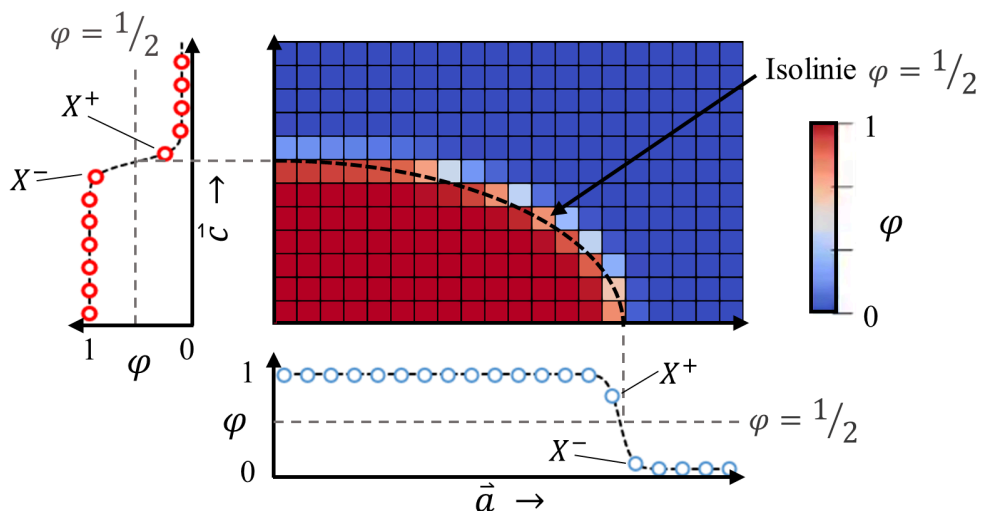


Abbildung 27: Simulationsdomäne aus  $20 \times 12$  Gitterpunkten mit den Phasenfeldprofilen entlang der Koordinatenachsen und der Isolinie  $\varphi = 1/2$ .

Die Form der Ausscheidungen ist in jedem Fall die Isofläche bzw. Isolinie des Phasenfelds mit einem Phasenfeldwert von  $\varphi = 1/2$ . Diese wird in der Software Paraview 5.9.0 [152]



durch die „Contour“ Funktion aus dem Phasenfeld bestimmt. Die Rundheit  $\theta$  eines 2D Schnittes durch die Ausscheidung kann aus dem Phasenfeld direkt numerisch bestimmt werden, indem man das Phasenfeld als Verteilungsfunktion für die Berechnung der Momente nach Gleichung (9) auf Seite 12 nutzt. Die Genauigkeit dieser Methode nimmt ab, wenn die Ausscheidung durch wenige numerische Stützstellen aufgelöst ist und die Phasenfeldbreite groß ist [45]. Alternativ kann die Rundheit aus der von Isolinien eingeschlossenen Fläche bestimmt. Hierbei nimmt man eine scharfe Grenzfläche an, was die Genauigkeit erhöht.

Abbildung 28 a zeigt den zeitlichen Verlauf der Gesamtenergie aus zwei Phasenfeldsimulationen. Ausgangspunkt ist je eine kreisförmige und eine quadratische Form. Die Gesamtenergie konvergiert jeweils gegen die Energie des Gleichgewichtszustandes  $E_{\min}$ . Die Änderung pro Zeitschritt in Abbildung 28 b fällt exponentiell ab. Das Abbruchkriterium ist als maximale relative Änderung der Gesamtenergie pro Zeitschritt von  $10^{-4}$  definiert. Das Aspektverhältnis (c) steigt auf den Wert von 3,9 und die Rundheit der Ausscheidungen (d) gleicht sich von 100% bzw. 33% einem Gleichgewichtswert von etwa 95% an. Durch die diffuse Grenzfläche bleiben die invarianten Momente unter der theoretischen Erwartung [45].

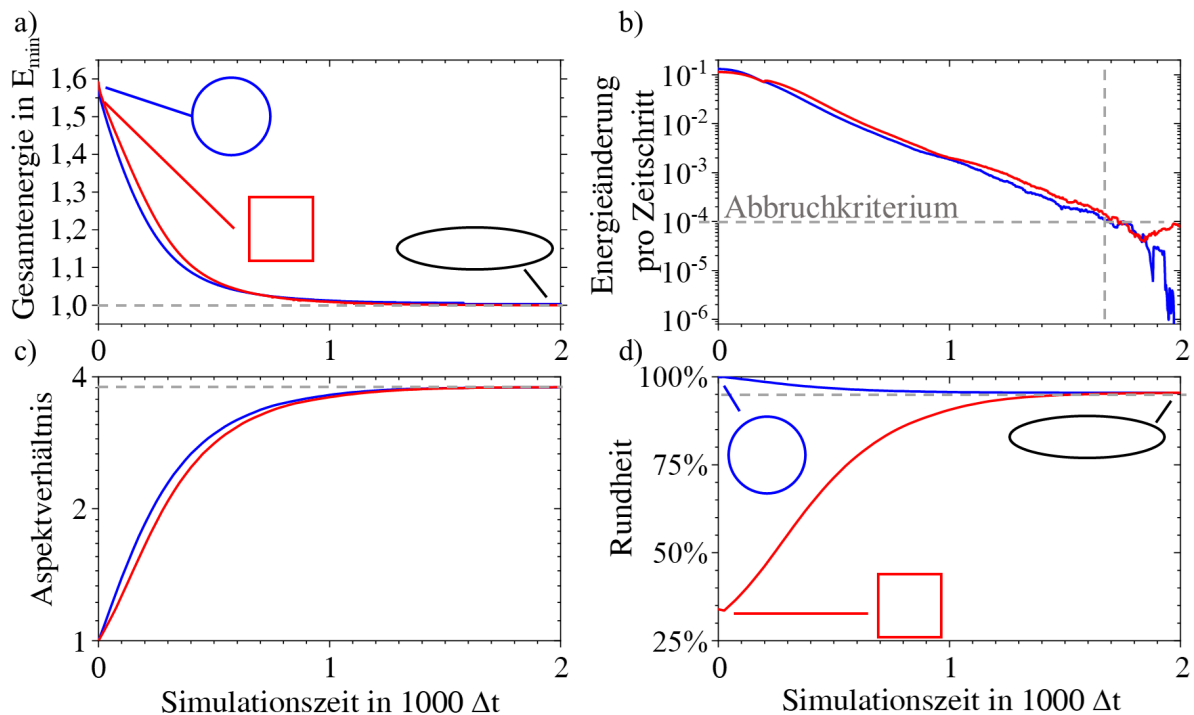


Abbildung 28: a) Konvergenz der Gesamtenergie einer Ausscheidung während der Berechnung der Gleichgewichtsform mit dem Phasenfeldmodell ausgehend von einem Kreis (blau) und einem Quadrat (rot) normiert auf das Energieminimum  $E_{\min}$ . b) Relative Änderung der Energie pro Zeitschritt mit Abbruchkriterium c) und d) 2D Formänderung während der Berechnung quantifiziert durch Aspektverhältnis und Rundheit.

**Formbildung durch anisotrope Gitterfehlpassung**

Zur Bestimmung der Gleichgewichtsform der  $\gamma''$ -Ausscheidungen mit dem Phasenfeldmodell wird ein zweidimensionales System aus  $100 \times 100$  numerischen Stützstellen mit einer kreisförmigen Ausscheidung mit einem Radius von 15 Gitterpunkten initialisiert. Das entspricht einem Flächenanteil von etwa 2%. Außerdem wird zum Vergleich ein 3D System aus  $100 \times 100 \times 100$  Stützstellen mit einer kugelförmigen Ausscheidung mit einem Radius von 15 Stützstellen verwendet. Die elastischen Konstanten sind isotrop und homogen angenommen damit die Ergebnisse mit dem Modell von Cozar & Pineau aus Gleichung (56) verifiziert werden können. Das Verhältnis der Energiebeiträge sei hier definiert als

$$Q_A = \frac{\varepsilon_3^2 C_{44}^{\gamma''} \hat{R}}{\Gamma_C} \tag{73}$$

Um verschiedene  $Q_A$  zu realisieren wird lediglich die Längenskalierung  $\Delta x$  variiert.

Abbildung 29 zeigt die durch das 2D bzw. 3D Phasenfeldmodell ermittelten Aspektverhältnisse der Gleichgewichtsformen im Vergleich zum analytischen Modell von Cozar & Pineau für verschiedene Ausscheidungsgrößen [31]. Ausscheidungen werden in diesem Modell als Rotationsellipsoide ( $\theta_a = \theta_c = 1$ ) angenommen, deren Aspektverhältnis die Summe aus Grenzflächenenergie und elastischer Energie minimiert. Die Gitterfehlpassung ist anisotrop. Aufgrund der isotropen Grenzflächenenergiedichte geht das Aspektverhältnis für kleine Ausscheidungsgrößen gegen 1. Mit steigender Ausscheidungsgröße wächst das Aspektverhältnis in diesem Modell gegen unendlich.

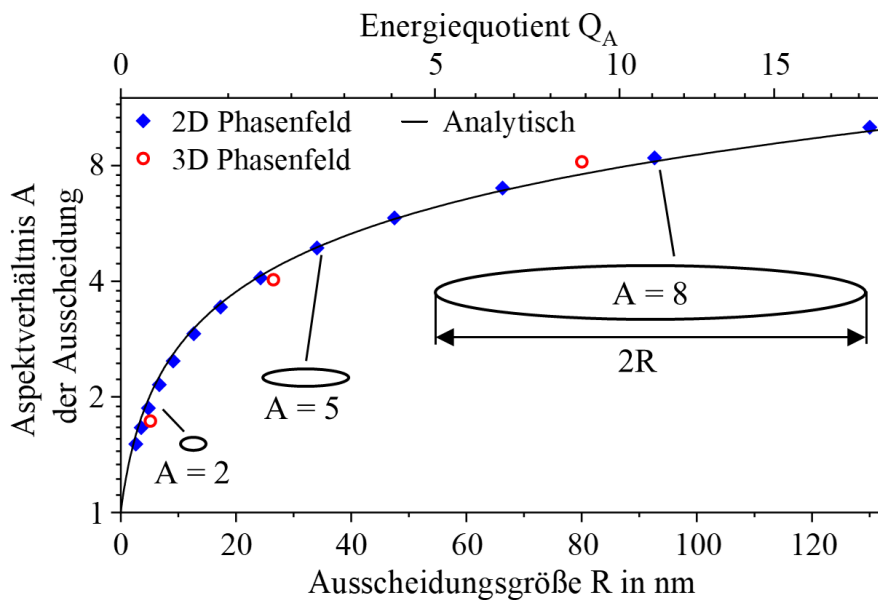


Abbildung 29: Größenabhängiges Aspektverhältnis von  $\gamma''$ -Ausscheidungen aus dem Phasenfeldmodell im Vergleich zum analytischen Modell von Cozar & Pineau.

Die Ausscheidungen im 2D Phasenfeldmodell sind elliptisch, wie auch vom Modell von Cozar & Pineau vorhergesagt. Im 3D Phasenfeldmodell sind die Ausscheidungen rotationselliptisch. Die Aspektverhältnisse im Phasenfeldmodell weichen um maximal 4% vom Modell von Cozar & Pineau ab, was deutlich unterhalb der Genauigkeit der

## Ergebnisse der Simulationsstudien

zugrundeliegenden Materialdaten liegt. Das Phasenfeldmodell liefert dementsprechend exakte Aspektverhältnisse von 3D Ausscheidungen. Im 2D Phasenfeldmodell muss die Grenzflächenenergiedichte um den Faktor  $2/3$  reduziert werden um vergleichbare Ergebnisse zu erhalten. Das Aspektverhältnis steigt mit zunehmender Ausscheidungsgröße langsamer an.

Abbildung 30 a zeigt Aspektverhältnisse ermittelt mit dem Modell von Cozar & Pineau und dem 2D Phasenfeldmodell für variierende Anisotropiestärken  $\varepsilon_3/\varepsilon_1$ . Die Annahme war bisher, dass  $\varepsilon_3/\varepsilon_1 \approx 24$  wie in Abschnitt 4.3 dargestellt. Um die Anisotropie der Gitterfehlpassung zu variieren wird  $\varepsilon_3$  konstant gehalten und  $\varepsilon_1$  angepasst. Der Energiequotient  $Q_A$  bleibt gleich, da dieser die Anisotropie der Gitterfehlpassung nicht berücksichtigt. Es zeigt sich, dass für eine kleine Anisotropie der Gitterfehlpassung,  $\varepsilon_3/\varepsilon_1 \leq 6$ , das Aspektverhältnis abnimmt.

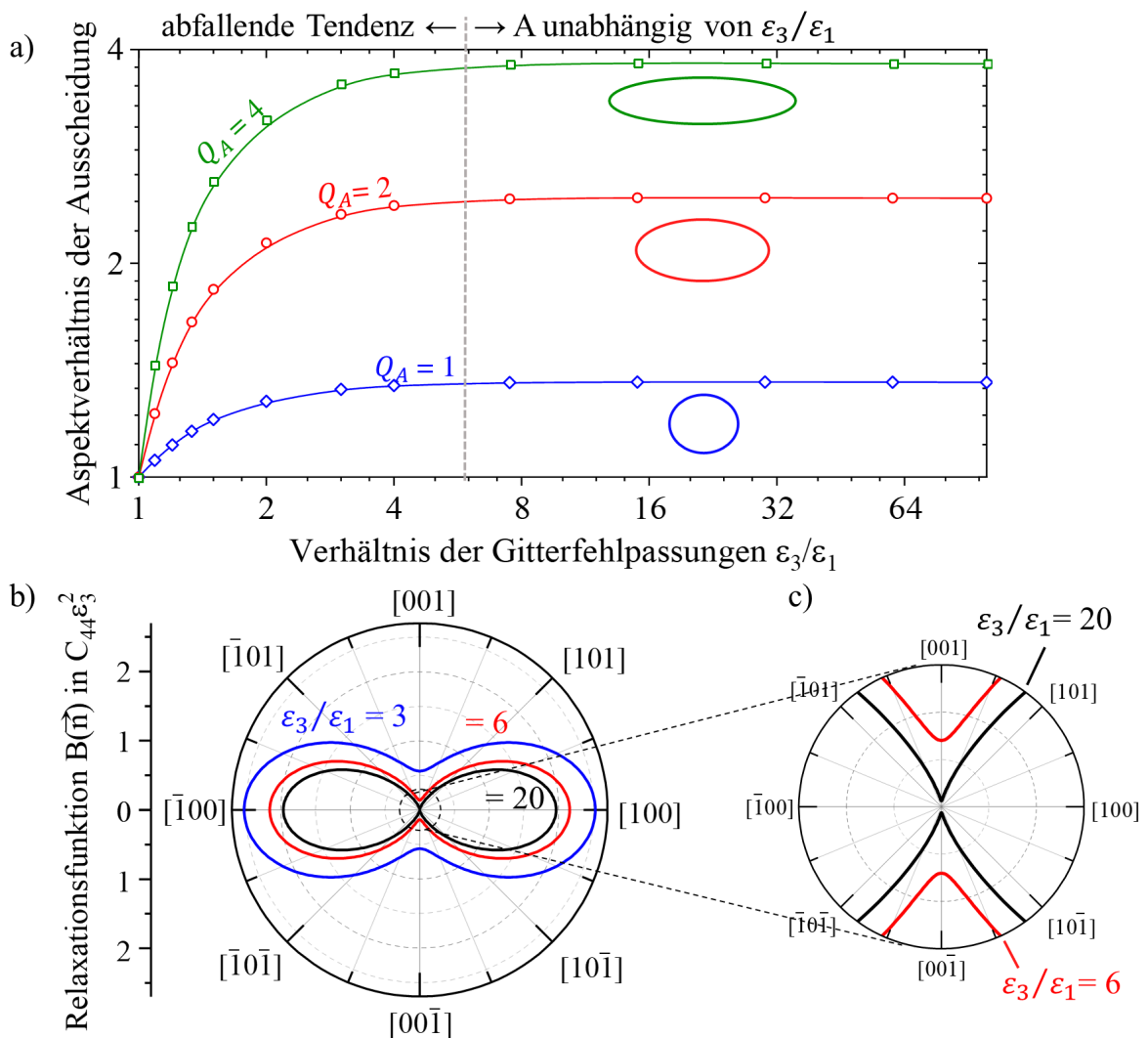


Abbildung 30: a) Aspektverhältnis von Ausscheidungen in Abhängigkeit der Anisotropie der Gitterfehlpassung  $\varepsilon_3/\varepsilon_1$ . b) Richtungsabhängige Relaxationsfunktion für drei verschiedene  $\varepsilon_3/\varepsilon_1$ . Die Minima sind in c) vergrößert dargestellt.

Im Grenzfall  $\varepsilon_3 = \varepsilon_1$  ist das Aspektverhältnis 1 und die Gleichgewichtsform ist eine Kugel, da die elastischen Konstanten isotrop sind. Für eine ausreichend große Anisotropie  $\varepsilon_3/\varepsilon_1 > 6$  erreicht das Aspektverhältnis ein Plateau. Ein weiteres Absenken von  $\varepsilon_1$  führt zu keiner weiteren Zunahme des Aspektverhältnis. Hierin liegt auch die Definition von  $Q_A$  in Gleichung (73) begründet, welche nur die Größere der beiden Gitterfehlpassungen enthält. Zur Erklärung dieses Sachverhalts lässt sich die elastische Relaxationsfunktion  $B(\vec{n})$  heranziehen. Abbildung 30 b zeigt die Relaxationsfunktion für Orientierungen in der  $\vec{a}/\vec{c}$ -Ebene, also Schnitte durch die 3D Darstellung in Abbildung 25 auf Seite 51. Es ist das ausgeprägte Minimum für Grenzflächen normal zur tetragonalen Richtung  $\vec{c}$  und ein Maximum normal zu  $\vec{a}$  zu sehen. Das Verhältnis der Energiedichten  $B(\vec{a})/B(\vec{c})$  zwischen der  $\vec{a}$  und  $\vec{c}$ -Richtung nimmt mit steigender Anisotropie der Gitterfehlpassung zu. Das Minimum ist immer größer 0, wie in der Vergrößerung in Abbildung 30 c deutlich zu sehen ist. Für die kleinste dargestellte Anisotropie  $\varepsilon_3/\varepsilon_1 = 3$  ist  $B(\vec{a})/B(\vec{c}) \approx 5$  und für eine im Sinne von Abbildung 30 a starke Anisotropie  $\varepsilon_3/\varepsilon_1 = 20$  wird  $B(\vec{a})/B(\vec{c}) \approx 100$ .

Eine kompakte Ausscheidung mit einer geschlossenen Oberfläche minimiert die elastische Energie durch die Gitterfehlpassung so, dass die energetisch günstigen Grenzflächenorientierungen normal zu  $\vec{c}$  einen hohen Anteil an der gesamten Grenzfläche haben, während Orientierungen normal zu  $\vec{a}$ , die zu viel elastischer Energie im System führen, wenig Anteil an der Oberfläche der Ausscheidung haben [153]. Dadurch stellt sich für  $\Gamma \rightarrow 0$  ein Aspektverhältnis der Ausscheidung ein, das in der Größenordnung von  $B(\vec{a})/B(\vec{c})$  liegt. Geht man nun dazu über, dass die Ausscheidungsform die Summe aus elastischer Energie und Grenzflächenenergie minimiert, kommt das Verhältnis zwischen diesen beiden energetischen Beiträgen ins Spiel. Liegt die Grenzflächenenergie im Bereich des Maximums der orientierungsabhängigen elastischen Energie  $B(\vec{a})$ , dann wird der energetische Beitrag der Grenzfläche mit minimaler elastischer Energie normal zu  $\vec{c}$  hauptsächlich durch die Grenzflächenenergiedichte bestimmt. Dieser Effekt nimmt zu, wenn  $B(\vec{a})/B(\vec{c})$  groß ist. Es ergibt sich der Zusammenhang

$$A \propto \frac{\Gamma_A + e_{el}(\vec{a}) \cdot R}{\Gamma_C + e_{el}(\vec{c}) \cdot R}, \quad (74)$$

der die Bildung des Aspektverhältnisses aus dem Verhältnis der Summe aus elastischer Energie und Grenzflächenenergie der Orientierungen normal zu  $\vec{a}$  und  $\vec{c}$  beschreibt. Dabei ist  $\Gamma_A$  die Grenzflächenenergiedichte der Randfläche der Ausscheidung,  $\Gamma_C$  die der Deckfläche und  $e_{el}(\vec{n})$  die elastische Energiedichte, die eine Grenzfläche mit Orientierung  $\vec{n}$  im System bewirkt. Dieser Energiebeitrag ist a priori unbekannt, kann aber durch die elastische Relaxationsfunktion  $B(\vec{n})$  abgeschätzt werden. Wird also  $B(\vec{a})/B(\vec{c})$  mit steigendem Verhältnis der Gitterfehlpassungen größer (siehe Abbildung 30 b und c), dann sinkt der Einfluss der kleineren Gitterfehlpassung  $\varepsilon_1$  auf das Aspektverhältnis der Ausscheidung, bis der Betrag von  $\varepsilon_1$  keine Rolle mehr spielt.

Die Ergebnisse vom Modell von Cozar & Pineau und dem Phasenfeldmodell zeigen, dass allein die tetragonale Anisotropie der Gitterfehlpassung zwischen der kubischen Matrix und

## Ergebnisse der Simulationsstudien

der tetragonalen Ausscheidung die Bildung der Plattenform der Ausscheidungen erklärt, ohne das weitere Anisotropien berücksichtigt werden müssen. Mit Anpassung der Grenzflächenenergie dichte lässt sich das größenabhängige Aspektverhältnis erklären. Für ausreichend große Anisotropie  $\varepsilon_3/\varepsilon_1 > 6$  ist das Aspektverhältnis unabhängig von der kleineren Gitterfehlpassung. Die Ungenauigkeiten der experimentell ermittelten Fehlpassungen (siehe Tabelle 8 auf Seite 45) fallen dementsprechend wenig ins Gewicht.

### Einfluss von elastischer Anisotropie und Inhomogenität

Abbildung 31 a zeigt die Aspektverhältnisse von Ausscheidungen unter Einbeziehung von Anisotropie und Inhomogenität der elastischen Konstanten im Vergleich zu den Ergebnissen mit isotroper und homogener Elastizität. Durch die Anisotropie der Elastizität (kubische Matrix, tetragonale Ausscheidung) existieren elastisch härtere und weichere Richtungen, was sich auch in der elastischen Energiedichte widerspiegelt. Im Fall inhomogener Elastizität sind die elastischen Konstanten phasenabhängig. Das Simulationssetup entspricht dem 2D Phasenfeldmodell aus Abbildung 29.

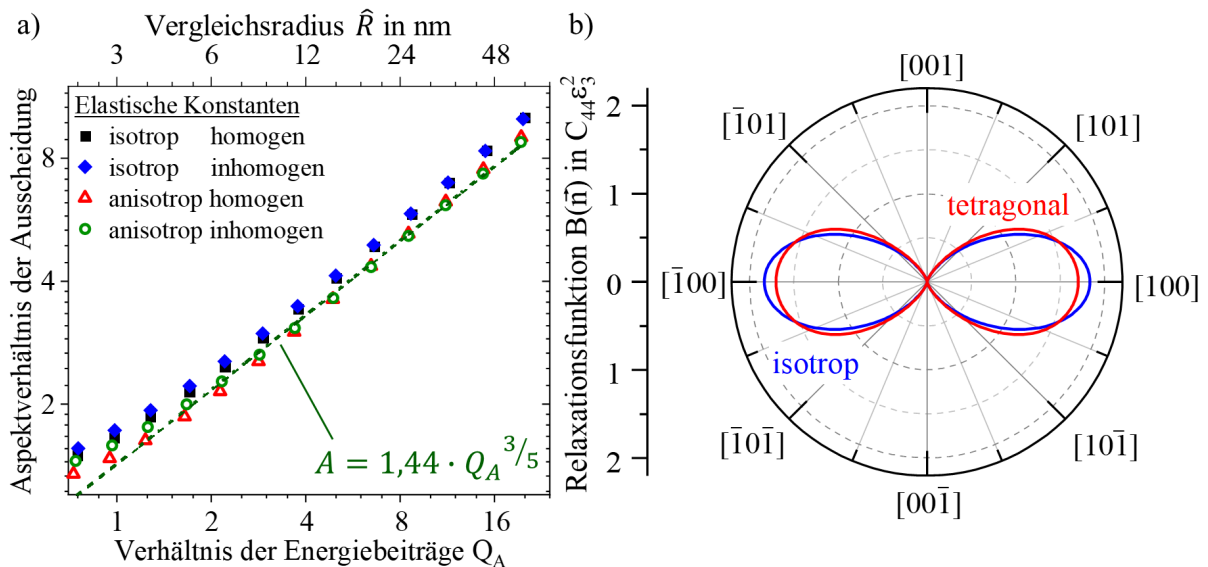


Abbildung 31: a) Aspektverhältnisse als Funktion von  $Q_A$  für verschiedene Konfigurationen der elastischen Materialeigenschaften. b) Orientierungsabhängige elastische Relaxationsfunktion für isotrope und tetragonale elastische Konstanten.

Es zeigt sich, dass die berechneten Aspektverhältnisse nahe beieinander liegen. Die Anisotropie der elastischen Konstanten bewirkt leicht verringerte Aspektverhältnisse der Ausscheidungen. Die Phasenabhängigkeit der elastischen Konstanten bewirkt hingegen leicht erhöhte Aspektverhältnisse im Bereich kleinerer  $Q_A$ , also dem Bereich, in dem die Ausscheidungsform stärker von der Grenzfläche geprägt wird. Die Rundheit  $\theta_A$  als Maß der Abweichung der 2D Form von der Ellipse liegt in jedem Fall im Bereich von 94 – 96%, also im Bereich der Ellipsen. Es fällt kein signifikanter Trend für verschiedene Konfigurationen der elastischen Konstanten auf. Empirisch kann aus den simulierten Ausscheidungsformen für anisotrope und inhomogene elastische Konstanten ein Ansatz für das Aspektverhältnis durch die Potenzfunktion

$$A = 1,44 \cdot Q_A^{3/5} \quad (75)$$

abgeleitet werden, welcher den Zusammenhang im Bereich  $2 < Q_A < 20$  gut annähert (Bestimmtheitsmaß über 99%).

Eine Erklärung, weshalb die Anisotropie des Elastizitätstensors zu einer Stauchung der Ausscheidungsform führt bietet wieder die Relaxationsfunktion  $B(\vec{n})$ . Abbildung 31 b zeigt die orientierungsabhängige Relaxationsfunktion für isotrope und tetragonale elastische Konstanten der Ausscheidungsphase. Da die elastischen Konstanten der Matrix nicht in die Relaxationsfunktion eingehen, sind die Konfigurationen mit inhomogener Elastizität nicht dargestellt. Das Maximum im Fall tetragonaler Anisotropie ist rund 10% niedriger als im isotropen Fall. Für schräge Orientierungen ist im Fall der anisotropen Elastizität die Relaxationsfunktion gegenüber isotroper Elastizität erhöht. Eine höheres Aspektverhältnis der Ausscheidungsform bewirkt mehr Grenzfläche mit Orientierung nahe dem Maximum von  $B(\vec{n})$  und weniger schräge Orientierungen. Dementsprechend existiert ein Trend zu niedrigeren Aspektverhältnissen für die betrachtete Anisotropie der elastischen Konstanten.

### Anisotropie der Grenzflächenenergie

Nimmt man an, dass die Gitterfehlpassung verschwindet, also der elastische Beitrag zum Energiepotential gegen 0 geht, wird die Gleichgewichtsform einer Ausscheidung ausschließlich durch die Minimierung der Grenzflächenenergie bestimmt. Im Fall isotroper Grenzflächenenergiedichte ist die Form immer eine Kugel. Im Fall anisotroper Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma(\theta)$  kann die Gleichgewichtsform durch die Wulffsche Konstruktion ermittelt werden [57]. Die Grundannahme der Wulffschen Konstruktion ist, dass sich die Form aus den Tangenten an die Profilfunktion  $f(\theta)$  bestimmen lässt [153]. Im 2D Fall kann diese Konstruktion in parametrischer Darstellung wie folgt angewendet werden

$$\begin{aligned} x(\theta) &= f(\theta) \sin \theta + (\partial_\theta f(\theta)) \cos \theta \\ y(\theta) &= f(\theta) \cos \theta - (\partial_\theta f(\theta)) \sin \theta \end{aligned} \quad (76)$$

wobei  $\partial_\theta f$  die partielle Ableitung der Anisotropiefunktion nach dem Winkel  $\theta$  ist. Ist die so bestimmte parametrische Darstellung der Gleichgewichtsform differenzierbar ergibt sich die Form aus dem Bereich  $0 \leq \theta \leq 2\pi$ . Hat die Form Singularitäten bzw. Ecken, dann ergibt sich die Form aus  $\theta_o \leq \theta \leq 2\pi - \theta_o$ . Der Grenzwinkel  $\theta_o \neq 0, \pi/2$  berechnet sich als Winkel für den gilt  $x(\theta_o) = 0$  oder  $y(\theta_o) = 0$ . Existiert ein solcher Winkel nicht, so ist die Form glatt. Ein solcher Winkel existiert, bzw. Singularitäten treten auf, wenn

$$f(\theta) + \partial_\theta^2 f(\theta) \leq 0, \quad (77)$$

wobei  $\partial_\theta^2 f$  die zweite partielle Ableitung der Anisotropiefunktion nach dem Winkel  $\theta$  ist. Im Falle der Anisotropiefunktion aus Gleichung (27) treten nach Gleichung (77) keine Singularitäten auf, wenn  $1/2 \leq \Gamma_A/\Gamma_C \leq 2$ , also wenn sich die maximale und minimale Grenzflächenenergiedichte um nicht mehr als den Faktor zwei unterscheiden. In diesem Fall entspricht das Aspektverhältnis der Gleichgewichtsform dem Verhältnis der Grenzflächenenergiedichten der Randfläche zur Deckfläche  $A = \Gamma_A/\Gamma_C$ .

Abbildung 32 zeigt die Gleichgewichtsform der Ausscheidungen, ermittelt durch die Wulffsche Konstruktion im Phasenraum aus Rundheit  $\Theta$  und Aspektverhältnis  $A$  für verschiedene Verhältnisse  $\Gamma_A/\Gamma_C$ . Die Rundheit wurde bestimmt durch numerische Integration aus der parametrischen Darstellung. Es zeigt sich, dass die Rundheit mit zunehmender Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte sinkt und das Aspektverhältnis steigt. Die Rundheit der Form  $\Theta$  weicht im Bereich bis  $A = 2$  um etwa 3% von der Ellipse ab. Mit Auftreten der Ecken ab  $A > 2$  sinkt die Rundheit signifikant.

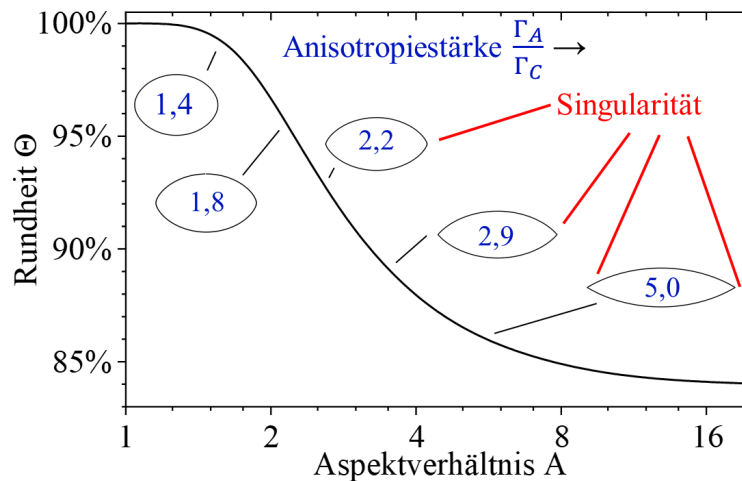


Abbildung 32: 2D Form von Ausscheidungen mit anisotroper Grenzflächenenergiedichte nach der Wulffschen Konstruktion im Phasenraum aus Aspektverhältnis  $A$  und Rundheit  $\Theta$  für verschiedene Verhältnisse  $\Gamma_A/\Gamma_C$  in blau.

Abbildung 33 zeigt Ausscheidungsformen, die mit dem 2D Phasenfeldmodell ermittelt wurden unter der Annahme verschwindender Gitterfehlpassung bei Anisotropiestärken von  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,25$  und  $1,50$ . Die Simulationsdomäne hat eine Größe von  $100 \times 100$  mit einer anfänglichen kreisförmigen Ausscheidung mit einem Radius von 60 Gitterpunkten. Die analytische Vorhersage der Form durch die Wulffsche Konstruktion aus Gleichung (76) ist ebenfalls dargestellt. Der Flächeninhalt beider Formen ist auf 1 normiert. Das Phasenfeldmodell stellt für beide Anisotropiestärken die Ausscheidungsform korrekt dar. Das Aspektverhältnis weicht um maximal 5% von der analytischen Lösung ab.

Abbildung 34 a zeigt das Aspektverhältnis der Gleichgewichtsform von  $\gamma''$ -Ausscheidungen in Abhängigkeit des Verhältnisses der Energiebeiträge  $Q_A$  für isotrope und anisotrope Grenzflächenenergiedichte mit  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,4$ . Die elastischen Konstanten sind isotrop und homogen angenommen. Das Simulationssetup entspricht dem aus Abbildung 31 a auf Seite 58. Es zeigt sich, dass im Falle einer verringerten Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_C$  auf der Deckfläche der Ausscheidung das Aspektverhältnis deutlich zunimmt (siehe Markierung 1). Die Anisotropie von Gitterfehlpassung und Grenzflächenenergiedichte bewirken zusammen eine deutliche Streckung der Ausscheidung. Im zweiten Grenzfall wird die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A$  entlang der Randfläche der Ausscheidung verringert (siehe Abbildung 24 auf Seite 49). Das führt bei kleinem  $Q_A$ , also im Fall von durch die Grenzflächenenergie dominierter Formbildung, zu einer ebenfalls starken Streckung der

Ausscheidungsform (siehe Markierung 2). Mit steigendem  $Q_A$  gleicht sich das Aspektverhältnis dem des isotropen Falls an (siehe Markierung 3).

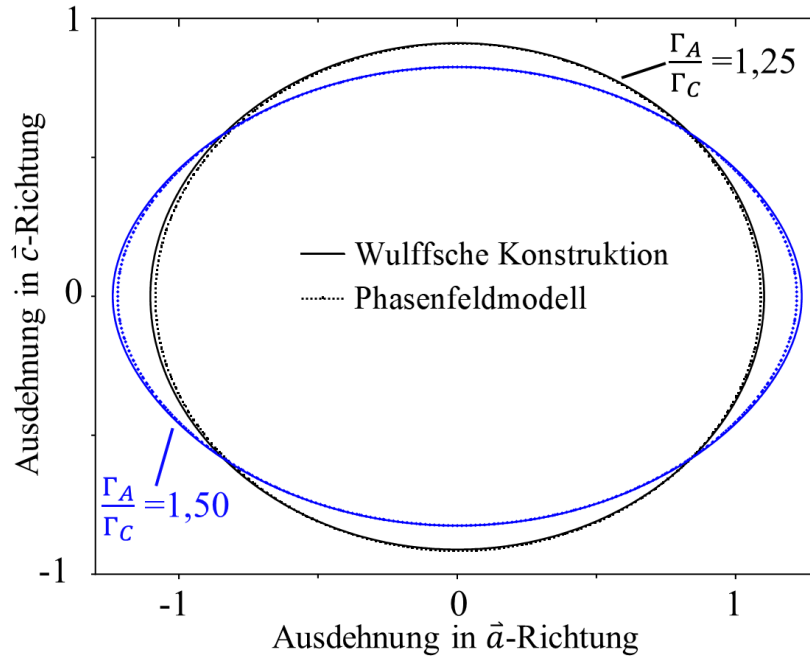


Abbildung 33: Durch die anisotrope Grenzfläche bewirkte Ausscheidungsform aus dem Phasenfeldmodell und aus der Wulffschen Konstruktion für  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,25$  und  $1,5$ .

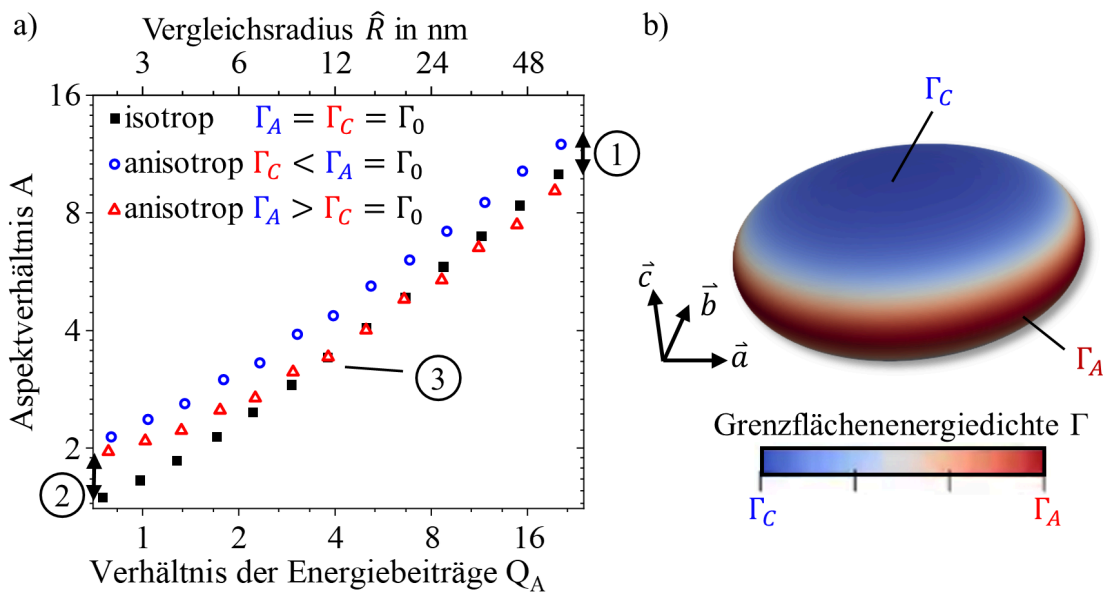


Abbildung 34: a) Aspektverhältnisse als Funktion von  $Q_A$  für verschiedene Konfigurationen der anisotropen Grenzflächenenergie mit  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,4$ . b) Exemplarische Ausscheidung mit orientierungsabhängiger Grenzflächenenergie und  $A = 3$ .

Abbildung 34 b zeigt exemplarisch eine  $\gamma''$ -Ausscheidung mit  $A = 3$  zusammen mit der lokalen orientierungsabhängigen Grenzflächenenergie. Die Deckfläche nimmt mit zunehmendem Aspektverhältnis einen größeren Anteil der Grenzfläche der Ausscheidung ein. Für  $Q \rightarrow 0$ , bzw. für kleine Ausscheidungen, ist die Form der Ausscheidung in diesem Modell



nur noch durch die Grenzflächenenergie bestimmt und das Aspektverhältnis strebt unabhängig vom Betrag der Grenzflächenenergiedichte gegen  $\Gamma_A/\Gamma_C$ . Mit steigender Ausscheidungsgröße, bzw. steigendem  $Q$  wird die Form stärker vom Verhältnis aus Grenzflächenenergie und elastischer Energie geprägt. Im Fall anisotroper Grenzflächenenergiedichte mit erhöhtem  $\Gamma_C$  ist ab einem  $Q$  von 4 bzw. ab  $A = 3,4$  das Aspektverhältnis gleich dem Aspektverhältnis im Fall isotroper Grenzflächenenergiedichte. Das lässt dadurch sich erklären, dass die wenig gekrümmte Deckfläche mit  $\theta \approx 0$  bzw.  $\Gamma \approx \Gamma_C$  deutlich mehr Flächenanteil an der Grenzfläche einer plattenförmigen Ausscheidung hat, als die stark gekrümmte Randfläche. Die Form einer  $\gamma''$ -Ausscheidung ist also für ausreichend große Ausscheidungen ( $R > 17$  nm für  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,4$ ) hauptsächlich von der Energiedichte der (001) orientierten Deckfläche abhängig. Kleinere Ausscheidungen werden durch die Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte zusätzlich gestreckt.

### 5.1.3 Periodische Anordnung von $\gamma''$ -Ausscheidungen

Die bisherigen Untersuchungen geschahen unter der Annahme, dass der  $\gamma''$ -Volumenanteil gering ist und dass dadurch keine elastischen Wechselwirkungen zwischen den Ausscheidungen auftreten. Zur Beschreibung von größeren Phasenanteilen wird das Verhältnis von Ausscheidungsgröße zur Simulationsdomäne angepasst. Durch die periodischen Randbedingungen, die in Abschnitt 3.1.4 eingeführt wurden, ergibt sich mit endlichem Volumenanteil der Matrix eine spezifische Anordnung bzw. Überstruktur der Ausscheidungen. Der Winkel  $\zeta$  in dem die Ausscheidungen zueinander angeordnet sind kann durch das Seitenverhältnis der Simulationsdomäne und die Wahl der Randbedingungen eingestellt werden (siehe Abbildung 13 auf Seite 30).

#### Elastische Wechselwirkung

Abbildung 35 zeigt das Spannungsfeld zwischen Ausscheidungen in einer regelmäßigen rechteckigen Überstruktur mit einem Winkel von  $\zeta = 45^\circ$  zwischen den schrägen nächsten Nachbarn. Abgesehen von dem Flächenanteil von 10% und der rechteckigen Überstruktur sind die Bedingungen, unter denen das Spannungsfeld berechnet wurde genau gleich mit denen, die in Abbildung 26 auf Seite 52 verwendet wurden. Die schwarzen Balken in den Skalen zeigen ebenfalls Maximal- und Minimalwerte an. Die elastische Energiedichte und die Vergleichsspannung zeigen ähnliche qualitative Verläufe wie im Fall ohne elastische Wechselwirkungen. Die Maximalwerte beider Felder sind erhöht gegenüber dem Fall mit kleinerem Phasenanteil. Die elastische Energiedichte fällt nur im Bereich zwischen den gekrümmten Rändern der Ausscheidung auf 0 (siehe Markierung 1 in Abbildung 35 b). Zwischen den Deckflächen der Ausscheidungen fällt die Vergleichsspannung auf etwa ein Drittel ihres Maximums (siehe Markierung 2 in Abbildung 35 c). Sieht man sich die Einträge des Spannungstensors an, fallen ebenfalls die erhöhten Beträge der Maxima und Minima auf. Vor allem fällt auf, dass die Matrix überall unter mechanischer Spannung steht. Die Schubspannungen fallen zwischen den Ausscheidungen immer auf 0 ab (siehe Markierung 3 in Abbildung 35 f). Es ist eine integrale Gesamtenergie der Domäne von  $95 \cdot 10^{-9}$  J gegeben, welche einer mittleren normierten Energiedichte von etwa  $0,28 C_{44} \epsilon_3^2$  entspricht. Dieser Wert,

bezogen auf die vier Ausscheidungen in der Domäne, ist höher als das Vierfache der Energiedichte der Konfiguration mit einer einzelnen Ausscheidung aus Abbildung 26 auf Seite 52 ( $19 \cdot 10^{-9}$  J). Der höhere Phasengehalt und die ausgeprägte elastische Wechselwirkung zwischen den Ausscheidungen bewirkt zusätzliche elastische Energie im System.

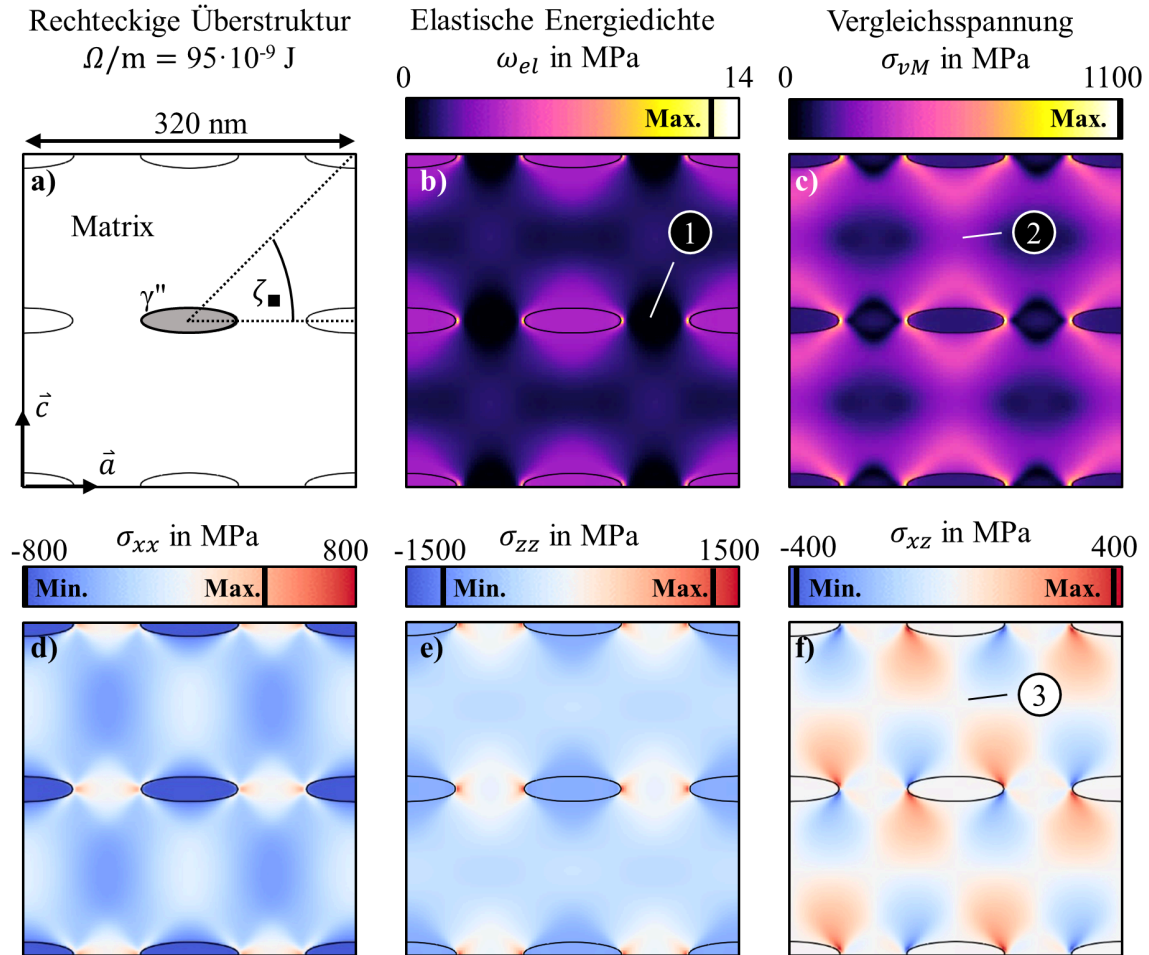


Abbildung 35: a)  $\gamma''$ -Ausscheidungen mit Flächenanteil von 10% in rechteckiger Überstruktur ( $\zeta = 45^\circ$ ) mit b) elastischer Energiedichte c) Vergleichsspannung und d) - f) Einträgen des Spannungstensors.

Abbildung 36 zeigt das Spannungsfeld zwischen elastisch wechselwirkenden Ausscheidungen in sechseckiger Anordnung mit einem Winkel  $\zeta = 60^\circ$  (Definition in Abbildung 14 auf Seite 31). Die elastische Energiedichte zeigt in diesem Fall einen Maximalwert von 14 MPa. In der rechteckigen Anordnung in Abbildung 35 b liegt das Maximum bei 13 MPa. Die Gesamtenergie der sechseckigen Anordnung beträgt etwa  $87 \cdot 10^{-9}$  J, was etwa  $0,26 C_{44} \varepsilon_3^2$  entspricht. Sie ist um 8% niedriger als in der rechteckigen Anordnung, da die Energiedichte in großen Teilen der Matrix auf einem niedrigen Niveau liegt (siehe Markierung 1 in Abbildung 36 b). Die Einsparung an elastischer Energie im System liegt darin begründet, dass die Deckflächen der Ausscheidungen, die Flächen normal zur größten Gitterfehlpassung  $\varepsilon_3$ , einander nicht direkt gegenüber liegen. Es zeigen sich Stellen in der Matrix, an denen die Vergleichsspannung auf einem niedrigen Niveau liegt (siehe Markierung 2 in Abbildung 36 c). Anders als in der rechteckigen Anordnung fällt in der sechseckigen Anordnung die Schubspannung zwischen zwei Ausscheidungen nicht zwangsläufig auf 0.

## Ergebnisse der Simulationsstudien

Entlang der Richtung  $\vec{c}$  ändert sich das Vorzeichen der Schubspannungen nicht (siehe Markierung 3 in Abbildung 36 f). Unabhängig von Phasenanteil und Ausscheidungsanordnung verbleiben die Maxima der Eigenspannungen jedoch nahe der stark gekrümmten Randfläche der Platten.

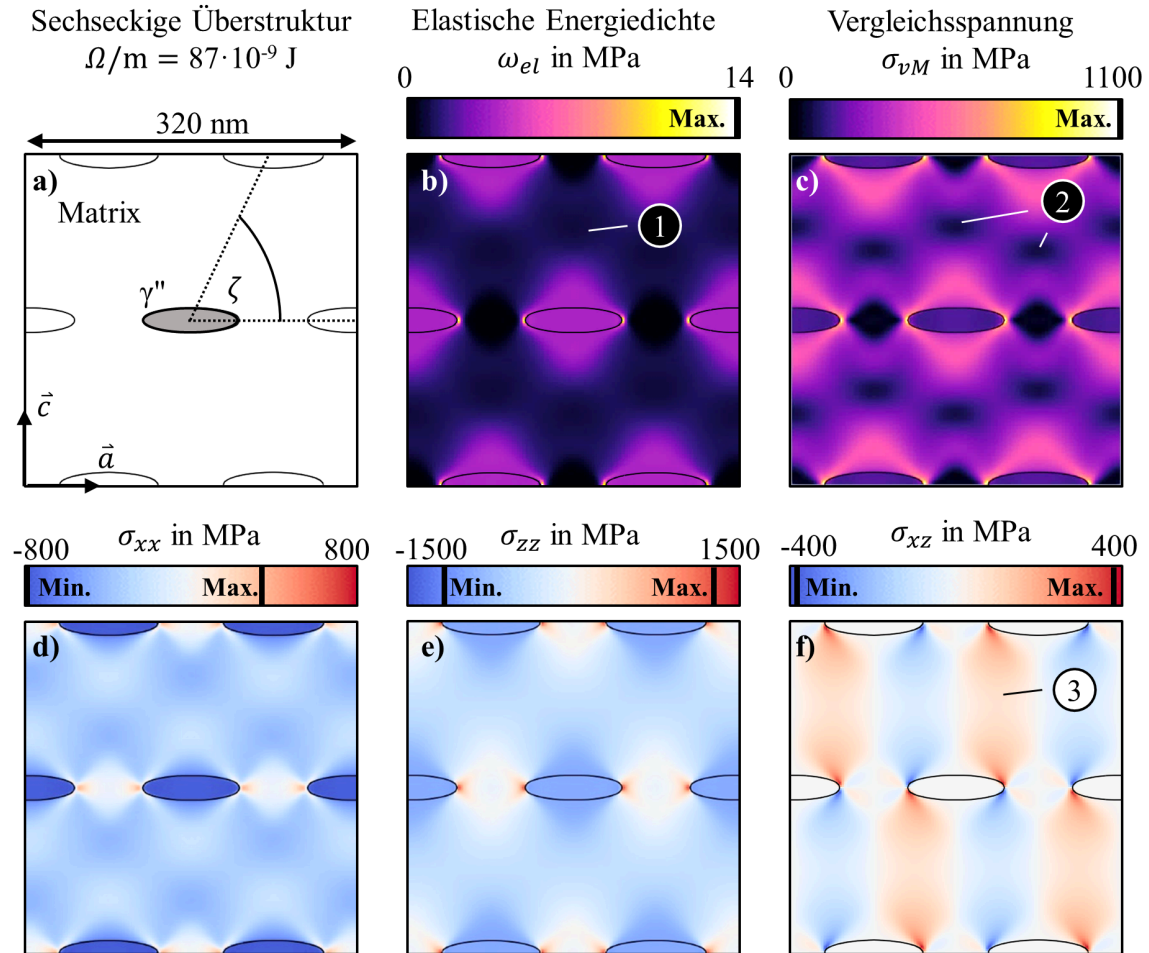


Abbildung 36: a)  $\gamma''$ -Ausscheidungen mit Flächenanteil von 10% in sechseckiger Überstruktur ( $\zeta = 60^\circ$ ) mit b) elastischer Energiedichte c) Vergleichsspannung und d) - f) Einträgen des Spannungstensors.

Abbildung 37 a zeigt das Aspektverhältnis von  $\gamma''$ -Ausscheidungen in Abhängigkeit des Phasenanteils. Zur Variation des Phasenanteils wurde die Größe der Simulationsdomäne relativ zur Größe der Ausscheidung variiert. Die Ausscheidung wird initialisiert als Ellipse mit einem Aspektverhältnis von 3 und einem Hauptradius von 100 numerischen Stützstellen. Die Grenzflächenenergiedichte wird als isotrop angenommen und die elastischen Konstanten als anisotrop und inhomogen mit einem Verhältnis der Energiebeiträge  $Q_A = 2$ . Anisotrope Elastizität ist nötig um elastische Wechselwirkungen zwischen Einschlüssen mit Eigendehnung zu beobachten [119]. Die Überstruktur ist rechteckig mit  $\zeta = 21^\circ$ . Aus den Abständen der Ausscheidungszentren  $2L_x$  bzw.  $2L_z$ , sowie aus der Ausscheidungsgröße  $R$  und dem Aspektverhältnis  $A$  der Ausscheidung kann der  $\gamma''$ -Volumenanteil abgeschätzt werden. Nimmt man eine Rotationsellipse im Zentrum einer Simulationsdomäne der Größe

$L_x \times L_x \times L_z$  an, deren Querschnitt durch den Mittelpunkt die Simulationsdomäne ist, ergibt sich die Abschätzung des zugehörigen Volumenanteils

$$V_{\gamma''} \approx \frac{\pi R^3}{6A L_x^2 L_z}. \quad (78)$$

Der angegebene Volumenanteil entspricht damit dem Volumenanteil, bei dem Ausscheidungen den gleichen Abstand zueinander haben, wie im 2D Modell.

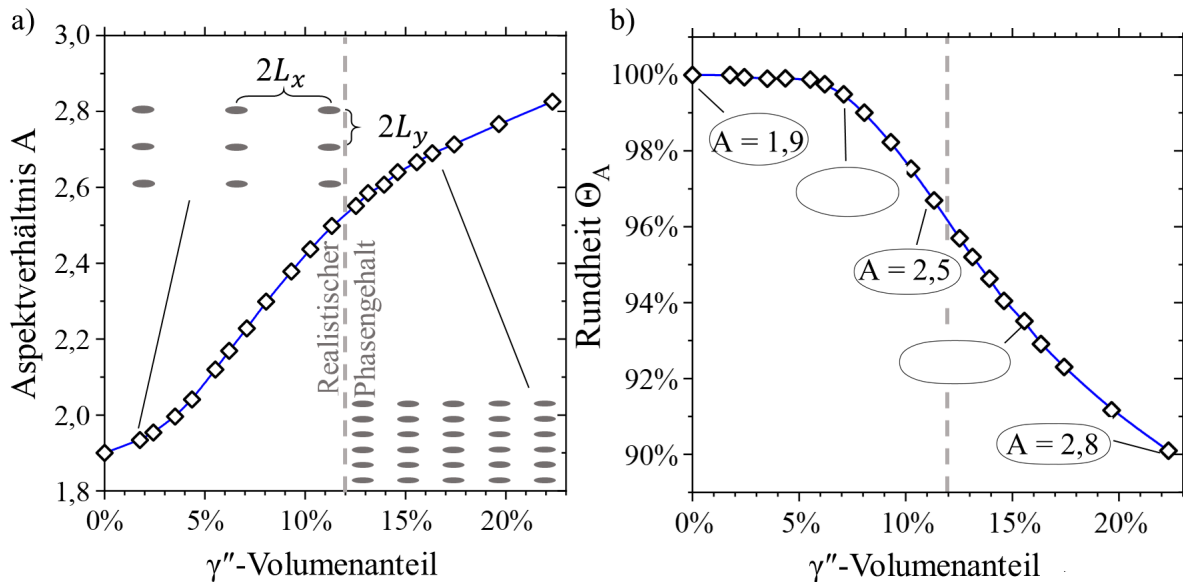


Abbildung 37: a) Aspektverhältnis und b) Rundheit der Gleichgewichtsform in Abhängigkeit vom  $\gamma''$ -Volumenanteil mit simulierten Ausscheidungsformen.

Es zeigt sich, dass mit zunehmendem Volumenanteil die elastische Interaktion zwischen den Ausscheidungen zu einem steigenden Aspektverhältnis führt. Die Ausscheidungen werden gestreckt, wenn sie sich näherkommen. Die Ausscheidungen werden um 50% gestreckt von 1,9 bei 0 Vol.% zu 2,8 bei einem Volumengehalt von 23%. Bei einem realistischen Phasenanteil von 12% steigt das Aspektverhältnis um 34% von 1,9 auf 2,5.

Abbildung 37 b zeigt die Rundheit  $\Theta_A$  der Ausscheidungsform in Abhängigkeit des Volumenanteils. Außerdem sind die simulierten Ausscheidungsformen dargestellt. Ab einem Volumenanteil von 6% sinkt die Rundheit stark, die Ausscheidungsform weicht also deutlich von der elliptischen Form ab. Ab einem Volumenanteil von 10% zeigt sich die Tendenz zur Bildung einer stärker facettierten Form mit deutlich ausgeprägten Deckflächen. Anders als in den Betrachtungen in Abschnitt 5.1.2 zur Anisotropie der elastischen Konstanten und Grenzflächenenergiedichte bewirkt die elastische Interaktion zwischen den Ausscheidungen eine deutliche Abweichung von der elliptischen Form. Diese Ergebnisse decken sich mit Ergebnissen zu  $\gamma'$ -Ausscheidungen, die ebenfalls stärker ausgeprägte Facetten zeigen bei höherem Volumenanteil [68].

### Ausscheidungsanordnung

Abbildung 38 zeigt die skalierte mittlere Gesamtenergiedichte von 2D Simulationsdomänen. Die Gesamtenergiedichte errechnet sich aus der Summe der Grenzflächenenergie und der gesamten elastischen Energie in der Simulationsdomäne normiert auf deren Größe. Die Konfiguration der Simulation entspricht dem der in Abbildung 37 dargestellten Ergebnisse mit 12%  $\gamma''$ -Gehalt. Das Seitenverhältnis der Simulationsdomäne wurde jedoch variiert um nach Gleichung (47) auf Seite 30 verschiedene Anordnungswinkel  $\zeta$  bei konstanter Fläche darzustellen. Außerdem werden die rechteckige und die sechseckige Anordnung verglichen. Der größere Winkelbereich der sechseckigen Anordnung ergibt sich aus den zwei verschiedenen Möglichkeiten die Randbedingungen zu implementieren (siehe Abbildung 14 auf Seite 31).

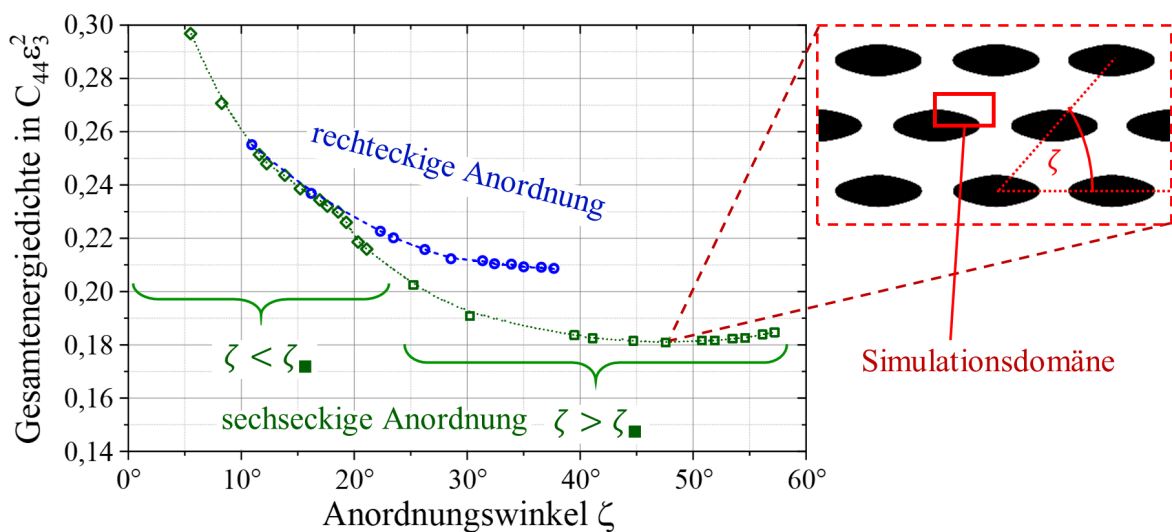


Abbildung 38: Gesamtenergiedichte rechteckiger und sechseckiger Ausscheidungsanordnungen mit verschiedenen Anordnungswinkel  $\zeta$ . Die energetisch günstigste sechseckige Anordnung bei einem Winkel  $\zeta = 47^\circ$  ist gesondert dargestellt.

Für die sechseckige und für die rechteckige Anordnung der Ausscheidungen ergibt sich zu Winkeln kleiner  $40^\circ$  hin ein steiler Anstieg der Gesamtenergie. Die spiegelperiodischen, rechteckigen Anordnungen zeigen ein Energieminimum bei einem Winkel von  $38^\circ$ , dem größten darstellbaren Winkel. Die sechseckigen Anordnungen sind ab einem Anordnungswinkel von  $20^\circ$  energetisch deutlich günstiger als die rechteckigen Anordnungen. Es ergibt sich ein Zustand minimaler Energie bei  $47^\circ$  und sechseckiger Anordnung. Diese Ausscheidungsanordnung minimaler Energie ist in Abbildung 38 ebenfalls dargestellt. Das diese sechseckige Anordnung energetisch deutlich günstiger ist, als eine rechteckige Anordnung lässt sich durch die Beobachtungen in Abbildung 35 und Abbildung 36 erklären. Ausscheidungen, die in Richtung der größten Fehlpassung nahe beieinander liegen, wie in einer rechteckigen Anordnung, führen zu hohen Spannungen in der Matrix (siehe Abbildung 35 c auf Seite 63). Die sechseckige Anordnung minimaler Energie minimiert diese Wechselwirkung und ist daher unter den untersuchten Anordnungen die energetisch günstigste Anordnung.

Abbildung 39 zeigt die Ausscheidungsform in rechteckiger (Rundheit  $\theta = 94\%$ ) und sechseckiger Anordnung (Rundheit  $\theta = 91\%$ ) bei einem Phasenanteil von 12% und minimaler Energiedichte (siehe Abbildung 38) normiert auf eine Fläche von 1. Die leichte Facettierung der Form bei sechseckiger Anordnung ist erkenntlich dadurch, dass der Umriss der sechseckigen Form den der Form aus rechteckiger Anordnung pro Sektor zweimal schneidet. Zwischen diesen Schnittpunkten zeigt sich eine verringerte Krümmung, ähnlich zu den in Abbildung 37 dargestellten Ausscheidungsformen bei rechteckiger Anordnung. Diese facettierten Bereiche bilden sich im Fall sechseckiger Anordnung nicht normal zur  $\vec{c}$ -Richtung, sondern normal zur Verbindungslinie zwischen den Ausscheidungsschwerpunkten.

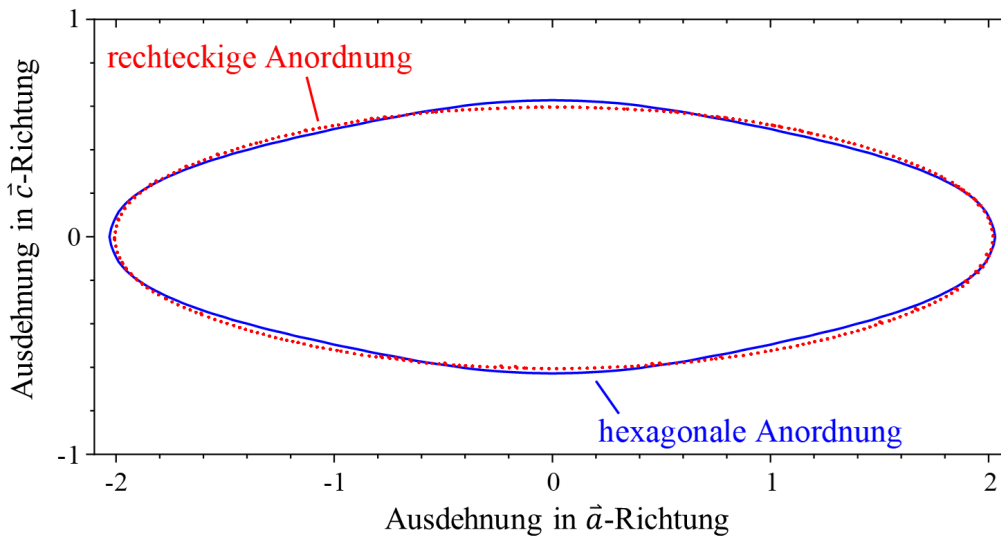


Abbildung 39: Ausscheidungsformen in rechteckiger und sechseckiger Anordnung bei einem Phasenanteil von 12% und einer energetisch günstigen Anordnung (siehe Abbildung 38).

Die Ergebnisse zeigen, dass eine schräge Anordnung der Ausscheidungen mit einem Winkel im Bereich von  $40^\circ - 55^\circ$  in einer Mikrostruktur aus einer einzelnen  $\gamma''$ -Orientierungsvariante energetisch bevorzugt ist. Die Ausscheidungen beeinflussen sich gegenseitig elastisch, was zu Abweichungen von der elliptischen Form führt. Es bilden sich Facetten in der Ausscheidungsform. Ähnliche elastische Wechselwirkungen zwischen Ausscheidungen wurden für andere Systeme nachgewiesen. Dabei erfahren entfernte Ausscheidungen eine Anziehung und nahe Ausscheidungen eine Abstoßung [98, 154–156]. Das führt letztendlich zu einem stabilen Gleichgewichtsabstand zwischen den Ausscheidungen.

## 5.2 Simulation der $\gamma''$ -Ausscheidungsreifung

Zur qualitativen Beschreibung der Einflüsse auf die Reifungskinetik im Phasenfeldmodell wird eine 2D Simulationsdomäne aus  $512 \times 512$  numerischen Stützstellen verwendet. In der Simulationsdomäne werden 500 elliptische Ausscheidungen initialisiert, mit einem Aspektverhältnis, das in etwa dem der Gleichgewichtsform entspricht. Die Größe der Ausscheidungen wird zufällig variiert um  $\pm 10\%$ . Das chemische Potentialfeld von Nb wird

so initialisiert, dass in Matrix und Ausscheidungen die jeweilige Gleichgewichtskonzentration von Nb vorliegt.

Es werden sechs Konfigurationen unterschieden, die in den Reifungssimulationen betrachtet werden. Dazu wird jeweils der Einfluss anisotroper Grenzflächenenergiedichte ( $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,4$ ) nach den in Abbildung 24 auf Seite 49 dargestellten Fällen variiert. Zur Beschreibung des Einflusses der Gitterfehlpassung auf die Reifungskinetik werden jeweils Fälle ohne Gitterfehlpassung, also ohne elastischen Anteil am Phasenfeldmodell, verglichen mit Fällen mit anisotroper homogener Elastizität.

Abbildung 40 zeigt die Reifung mit isotroper Grenzflächenenergiedichte und ohne Einfluss der Gitterfehlpassung zu vier Zeitpunkten bei 725°C. In der oberen Reihe ist das Phasenfeld dargestellt mit der runden Ausscheidungen in schwarz ( $\varphi \geq 1/2$ ) und der Matrix in Weiß ( $\varphi < 1/2$ ). In der unteren Reihe ist das chemische Potentialfeld des Elementes Nb dargestellt. Zum Zeitpunkt  $t = 0$  ist das chemische Potentialfeld homogen. Nach Start der Simulation steigt das chemische Potential um die Ausscheidungsgrenzflächen herum durch den Gibbs-Thomson Effekt, welcher implizit in der Phasenfeldformulierung enthalten ist, an. Diese kurze Einstellungsphase macht sich durch einen leichten Rückgang des Volumenanteils und der mittleren Ausscheidungsgröße bemerkbar. Da dieser Vorgang durch die Konfiguration der Simulation bedingt ist, und nicht physikalisch, wird dieser Ablauf zur Bestimmung der Reifungskinetik vernachlässigt.

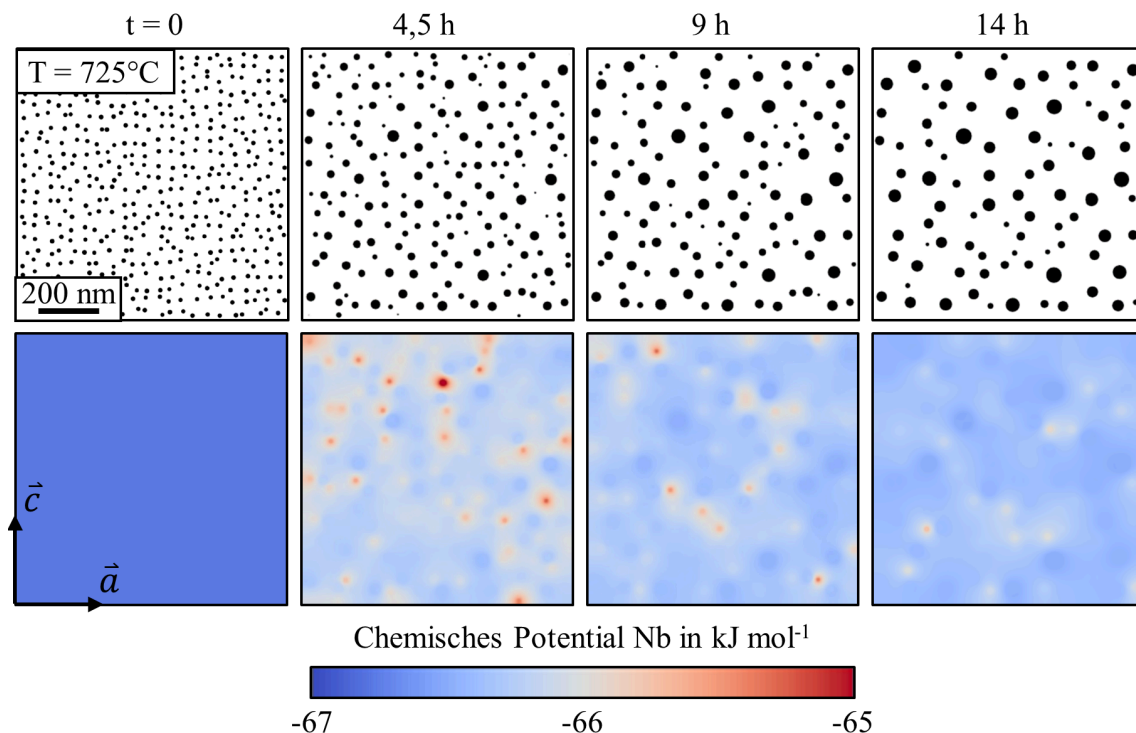


Abbildung 40: Das Phasenfeld (oben) und das chemische Potentialfeld von Nb (unten) während der Reifung bei 725°C mit isotroper Grenzflächenenergiedichte ohne Einfluss der Gitterfehlpassung.

In Abbildung 40 ist zu sehen, dass das chemische Potentialfeld stellenweise scharfe Peaks zeigt an Stellen, an denen durch das Auflösen einer Ausscheidung viel Nb in der Matrix gelöst ist. Die Inhomogenität, die im chemischen Potentialfeld entsteht führt zu einer Diffusion von stark gekrümmten Grenzflächen zu weniger stark gekrümmten Flächen, wodurch sich kleine Ausscheidungen zugunsten großer Ausscheidungen auflösen. Neben der lokalen Krümmung ist die Grenzflächenenergiedichte der zweite treibende Faktor der Ausscheidungsreifung. Aus dem Phasenfeld können die Größe und die Form der einzelnen Ausscheidungen bestimmt werden. Dazu werden zu jeder Ausscheidung der Flächeninhalt und die invarianten Momente bestimmt (siehe Abschnitt 2.2.2). Aus den Momenten und dem Flächeninhalt können dann der Vergleichsradius  $\hat{R}$ , die Rundheit  $\theta$  und das Aspektverhältnis  $A$  bestimmt werden. Aus den Daten der einzelnen Ausscheidungen wird dann der mittlere Vergleichsradius  $\langle \hat{R} \rangle$  bestimmt. Der Reifungskoeffizient  $K_{\hat{R}}$  wird bestimmt durch lineare Anpassung an die kubischen mittleren Ausscheidungsgrößen über der Zeit.

### 5.2.1 Einfluss der Gitterfehlpassung und der Grenzflächenenergie

Abbildung 41 zeigt das Phasenfeld zu drei Zeitpunkten während der Reifungssimulation bei 725°C für den Fall ohne Berücksichtigung der Gitterfehlpassung mit anisotroper Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,4$  (a) und für zwei Fälle mit Berücksichtigung der Gitterfehlpassung (b und c). In allen Fällen zeigt sich eine Vergrößerung der Mikrostruktur über die Zeit. Im Falle der anisotropen Grenzflächenenergiedichte und ohne elastischen Beitrag durch die Gitterfehlpassung weisen die Ausscheidungen eine Plattenform auf mit einem Aspektverhältnis, das etwas niedriger ist, als das zu erwartende Verhältnis (siehe Abschnitt 5.1.2). Die Ausscheidungsform ist nicht größenabhängig. Unter Berücksichtigung der Gitterfehlpassung zeigt sich eine Mikrostruktur mit stärker plattenförmigen Ausscheidungen. Die Ausscheidungen zeigen die typische Größenabhängigkeit der Ausscheidungsform mit höheren Aspektverhältnissen bei größeren Ausscheidungen (siehe Abbildung 29 auf Seite 55). In Abbildung 41 c weisen die Ausscheidungen gegenüber dem Fall isotroper Grenzflächenenergiedichte nochmals erhöhte Aspektverhältnisse auf, da die Grenzflächenenergie der Deckfläche reduziert wird (siehe Abbildung 34 auf Seite 61).



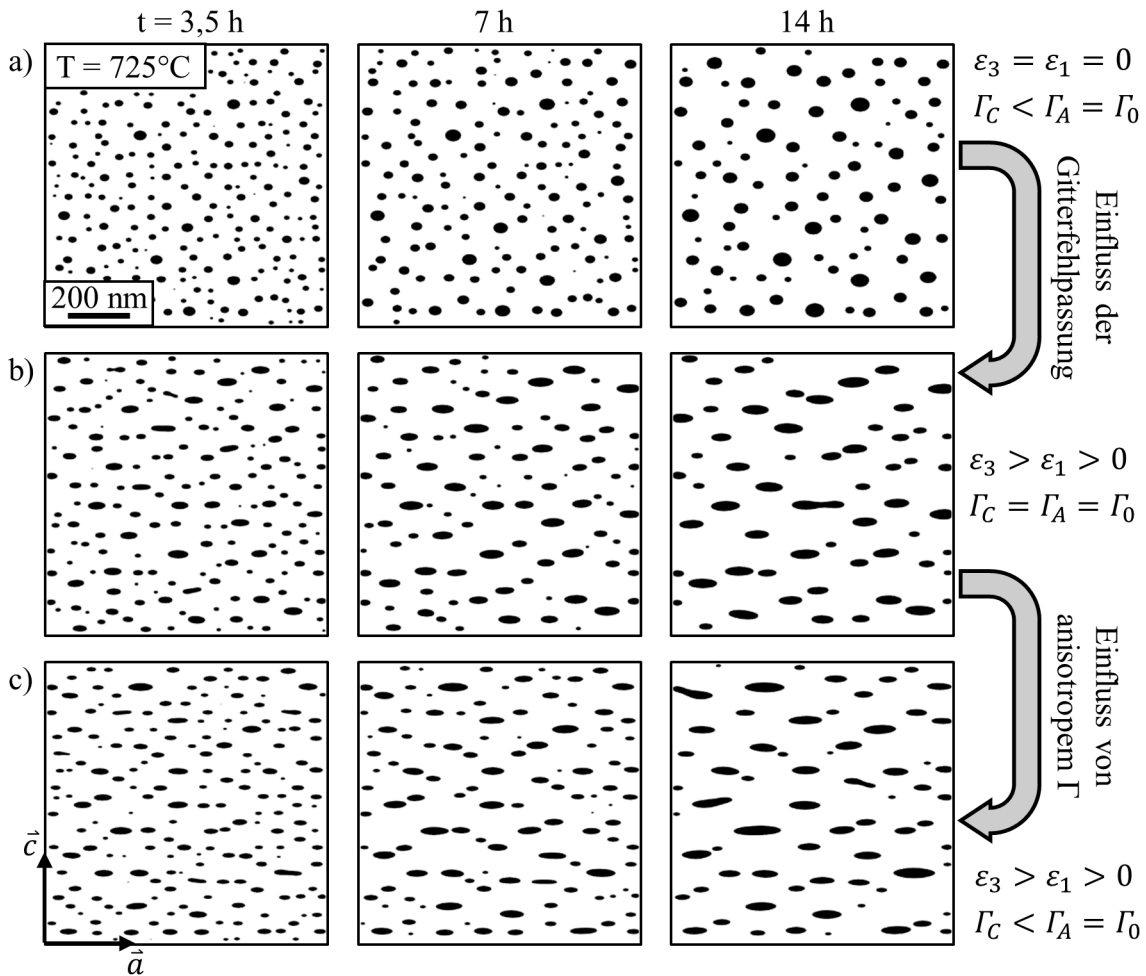


Abbildung 41: Simulierte Mikrostruktur während der Reifung bei 725°C unter Berücksichtigung von anisotroper Grenzflächenenergie in a) und c) und der Gitterfehlpassung b) und c) zu drei Zeitpunkten in einem System mit 500 initialen Ausscheidungen.

Abbildung 42 zeigt den Verlauf des mittleren Vergleichsradius  $\langle \hat{R} \rangle$  der Ausscheidungen über der simulierten Reifungsdauer. Die Ausscheidungsgröße ist kubisch über der Zeit dargestellt. Ein linearer Zuwachs der Ausscheidungsgröße deutet in dieser Darstellung auf Reifungsverhalten mit einem Exponenten von  $N = 3$  hin (siehe Gleichung (19) auf Seite 18), die Steigung entspricht dem Reifungskoeffizienten. Die Wahl des Vergleichsradius  $\hat{R}$ , wie in Abschnitt 2.2.2 dargestellt, dient dazu, die Reifungsgeschwindigkeit unabhängig von der Ausscheidungsform zu charakterisieren. In Abbildung 42 a sind die Reifungssimulationen ohne Berücksichtigung der Gitterfehlpassung dargestellt. Die Verläufe der Kurven sind zu Beginn linear und streuen nach 6 h etwas stärker, was auf die sinkende Anzahl an Ausscheidungen zurückzuführen ist. Die Kurven unterscheiden sich durch die Konfiguration der Grenzflächenenergie nach Abbildung 24 auf Seite 49. Die Kurven mit isotroper Grenzflächenenergie  $\Gamma_C = \Gamma_A = \Gamma_0$  und mit reduzierter Grenzflächenenergie der Deckfläche  $\Gamma_C < \Gamma_A = \Gamma_0$  zeigen einen sehr ähnlichen Verlauf. Die Kurve mit erhöhter Grenzflächenenergie der Randfläche  $\Gamma_A > \Gamma_C = \Gamma_0$  zeigt eine deutlich beschleunigte Reifungskinetik (siehe Markierung 1).

Abbildung 42 b zeigt die Ergebnisse der Reifungssimulationen unter Berücksichtigung der anisotropen Gitterfehlpassung. Die Berücksichtigung elastischer Energie im System führt zu einer deutlich erhöhten Reifungsgeschwindigkeit. Anders als ohne Gitterfehlpassung, führt in diesem Fall die Reifung mit isotroper Grenzflächenenergiedichte zur schnellsten Reifung. Der Fall  $\Gamma_C < \Gamma_A = \Gamma_0$  mit der minimalen integralen Grenzflächenenergie weist die geringste Geschwindigkeit auf. Der Fall  $\Gamma_A > \Gamma_C = \Gamma_0$  mit maximaler integraler Grenzflächenenergie weist eine mittlere Reifungskinetik auf. Die höheren Reifungskoeffizienten unter Berücksichtigung der Gitterfehlpassung lassen sich einerseits durch die stark erhöhten Aspektverhältnisse und die dadurch erhöhte Krümmung der Grenzfläche am Rand der Ausscheidung erklären, welche durch den Formfaktor  $K_S$  auch in die Reifungskinetik der LSW-Theorie eingehen. Dieser Effekt wird im mLSW Modell aus Abschnitt 3.2.2 berücksichtigt und kann ungefähr durch eine Verdopplung der Reifungsgeschwindigkeit quantifiziert werden (siehe Markierung 2 in Abbildung 43 b). Die weitere Zunahme der Reifungsgeschwindigkeit (siehe Markierung 3 in Abbildung 43 b), die im Phasenfeldmodell beobachtet wird, geht auf den elastischen Energiebeitrag  $\omega_{el}$  durch die Gitterfehlpassung zurück, der im mLSW Modell nicht berücksichtigt wird. Dieser Effekt tritt auf, wenn die Ausscheidungsformen niedrige Symmetrie aufweisen [49]. In Abbildung 43 b sind die Reifungskoeffizienten aus LSW und mLSW als gestrichelte Linien dargestellt.

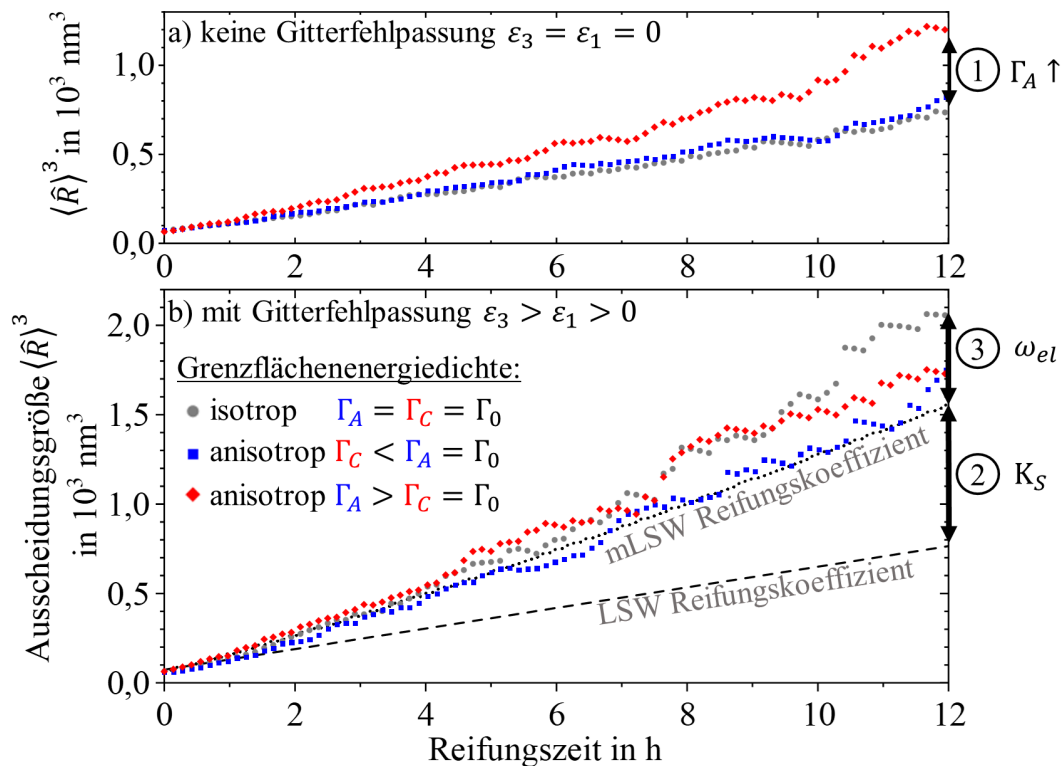


Abbildung 42: Reifungskurven aus den Phasenfeldsimulationen a) ohne und b) mit Berücksichtigung der Gitterfehlpassung bei 725°C. Es werden die drei Konfigurationen der Grenzflächenenergiedichte aus Abbildung 24 auf Seite 49 verglichen. Außerdem sind die Reifungskoeffizienten aus LSW-Theorie und dem mLSW Modell dargestellt.

## Ergebnisse der Simulationsstudien

In Tabelle 9 sind Reifungskoeffizienten  $K_{\hat{R}}$  gegeben, die durch lineare Anpassung mit festem Achsenabschnitt  $\langle \hat{R}(t = 0) \rangle$  aus der Steigung der Kurven in Abbildung 42 bestimmt wurden. Der Achsenabschnitt ergibt sich aus der Anfangskonfiguration der Simulationsdomäne. Außerdem sind die Reifungskoeffizienten gegeben, die durch die LSW-Theorie und das mLSW Modell bestimmt wurden (siehe Abschnitt 3.2). Wird die Gitterfehlpassung vernachlässigt, stimmen die Reifungskoeffizienten von LSW Modell und Phasenfeldmodell gut überein. Lediglich im Fall anisotroper Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A = \Gamma_0 > \Gamma_C$  tritt eine Steigerung des Reifungskoeffizienten um 64% im Vergleich zum isotropen Fall auf (siehe Markierung 1 in Abbildung 42 a). Das ist auf die Form der Ausscheidungen zurückzuführen, die eine lokal stärkere Krümmung der Randflächen aufweisen (siehe Abbildung 41 b und c), an welcher die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A$  darüber hinaus ebenfalls erhöht ist.

*Tabelle 9: Reifungskoeffizienten  $K_{\hat{R}}$  aus Phasenfeldsimulationen in  $10^{-30} m^3 s^{-1}$ . Außerdem sind Vorhersagen durch LSW-Theorie und mLSW Modell gegeben.*

Grenzflächenenergiedichte	keine Gitterfehlpassung $\varepsilon_3 = \varepsilon_1 = 0$	Gitterfehlpassung $\varepsilon_3 > \varepsilon_1 > 0$
isotrop $\Gamma_C = \Gamma_A = \Gamma_0$	$14,9 \pm 0,07$	$42,5 \pm 0,52$
anisotrop $\Gamma_C < \Gamma_A = \Gamma_0$	$15,8 \pm 0,10$	$34,9 \pm 0,32$
anisotrop $\Gamma_A > \Gamma_C = \Gamma_0$	$24,5 \pm 0,29$	$39,2 \pm 0,24$
Analytische Modelle	16,1 (LSW)	33,7 (mLSW)

Die höheren Reifungskoeffizienten unter Berücksichtigung der Gitterfehlpassung lassen sich einerseits durch die stark erhöhten Aspektverhältnisse bzw. die erhöhte Krümmung der Ausscheidungen erklären. Dieser Effekt wird im mLSW Modell berücksichtigt und kann ungefähr durch eine Verdopplung des Reifungskoeffizienten quantifiziert werden (siehe Markierung 2 in Abbildung 42 b). In Abbildung 42 b sind die Reifungskoeffizienten aus LSW und mLSW ebenfalls gestrichelt dargestellt. Die weitere Zunahme der Reifungsgeschwindigkeit, die im Phasenfeldmodell beobachtet wird (siehe Markierung 3 in Abbildung 42 b), geht dann auf Beiträge durch die elastische Energie zurück, die im mLSW Modell nicht berücksichtigt werden. Dieser Effekt tritt auf, wenn die Ausscheidungsformen niedrige Symmetrie aufweisen [51].

Im Fall mit reduzierter Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_C$  auf der Deckfläche steigt das Aspektverhältnis, wie in Abbildung 34 auf Seite 61 gezeigt, wodurch auch die Reifungsgeschwindigkeit steigt. Im Fall mit erhöhtem  $\Gamma_A$  steigt das Aspektverhältnis im Vergleich zur Konfiguration mit isotroper Grenzflächenenergiedichte nicht signifikant (siehe Abbildung 34 Seite 61), dafür ist die Grenzflächenenergiedichte an der gekrümmten Randfläche erhöht, was ebenfalls die Reifungsgeschwindigkeit erhöht [116]. So erklärt sich, warum sich im elastisch beeinflussten Fall ein weniger ausgeprägter Unterschied zwischen den Konfigurationen der anisotropen Grenzflächenenergiedichte ergibt, als im Fall ohne Fehlpassung. Außerdem ist dargestellt, dass die Grenzflächenenergiedichten  $\Gamma_A$  und  $\Gamma_C$  jeweils unterschiedliche Auswirkungen haben. So beeinflusst  $\Gamma_A$  an der stark gekrümmten Randfläche die Reifung und

$\Gamma_C$  auf der Deckfläche die Ausscheidungsform signifikant. Die Ausscheidungsform beeinflusst wiederum auch die Reifungsgeschwindigkeit.

### 5.2.2 Mikrostruktur während der Reifung

Abbildung 43 a zeigt das mittlere Aspektverhältnis der Ausscheidungen über der Reifungsdauer für alle sechs Konfigurationen. Für die Konfigurationen ohne Betrachtung der Kohärenzspannungen durch die Gitterfehlpassung bleibt das Aspektverhältnis über der gesamten Reifungsdauer konstant bei 1 bzw.  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,4$ . Unter Berücksichtigung der Gitterfehlpassung steigt das mittlere Aspektverhältnis mit der Reifungszeit an. Die Konfiguration mit reduzierter Grenzflächenenergie  $\Gamma_C$  zeigt die höchsten Aspektverhältnisse, wie durch die Betrachtungen der Gleichgewichtsform in Abbildung 34 auf Seite 61 erklärt. Dass die Ausscheidungen der Konfiguration mit erhöhtem  $\Gamma_A$  höhere Aspektverhältnisse aufweisen, als im Falle isotroper Grenzflächenenergie, kann durch die höheren Ausscheidungsgrößen auf Grund der schnelleren Reifungskinetik bei erhöhter Grenzflächenenergie  $\Gamma_A$  erklärt werden.

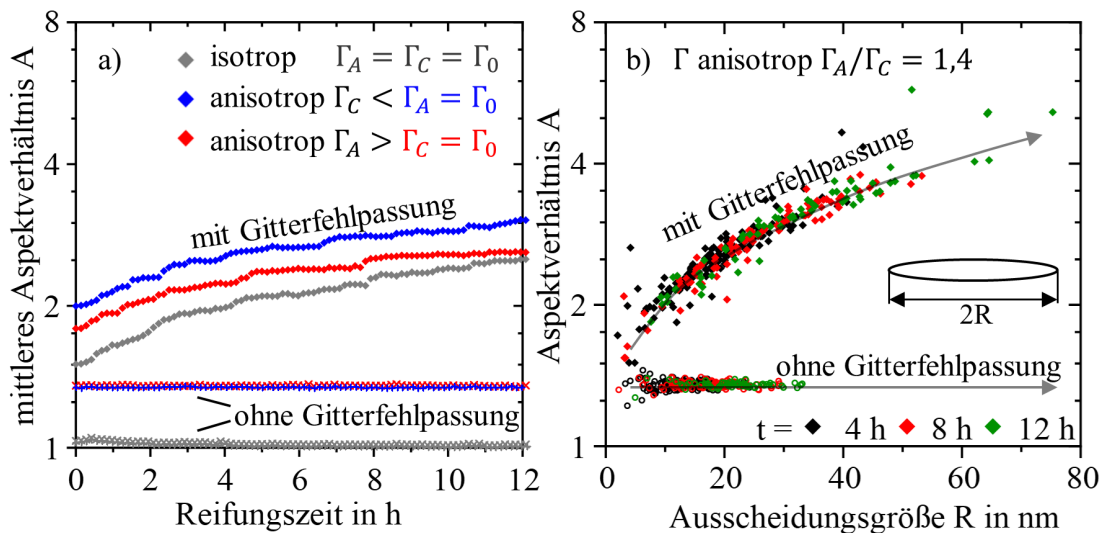


Abbildung 43: Aspektverhältnisse der Ausscheidungen während der Reifungssimulationen bei 725°C. a) Mittleres Aspektverhältnis über der Zeit für die Konfigurationen aus Abbildung 24 auf Seite 49 b) Größenabhängigkeit des Aspektverhältnis für  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,4$  mit und ohne Berücksichtigung der Gitterfehlpassung.

Abbildung 43 b zeigt die Aspektverhältnisse der einzelnen Ausscheidungen nach 4 h (schwarz), 8 h (rot) und 12 h (grün) simulierter Reifungszeit bei 725°C. Es wird jeweils der Fall  $\Gamma_A > \Gamma_C = \Gamma_0$  mit und ohne Berücksichtigung der Gitterfehlpassung betrachtet. Unter Berücksichtigung der Gitterfehlpassung sind die Aspektverhältnisse abhängig von der Ausscheidungsgröße und von der Grenzflächenenergie. In jedem Fall steigen die Ausscheidungsgrößen mit der Zeit. Betrachtet man die Reifung mit Gitterfehlpassung, steigen die Ausscheidungsgrößen schneller und es ist eine deutliche Abhängigkeit der Aspektverhältnisse von der Ausscheidungsgröße zu sehen, wie in Abbildung 29 auf Seite 55 beschrieben. Ohne Berücksichtigung der Gitterfehlpassung beobachtet man ein langsames

## Ergebnisse der Simulationsstudien

Wachstum und keine Änderung des Aspektverhältnis. Außerdem streuen die Aspektverhältnisse weniger, da die Ausscheidungsform nur durch die Grenzfläche und nicht durch elastische Wechselwirkungen beeinflusst ist.

Abbildung 44 zeigt die Verteilung der Ausscheidungsgrößen zu drei Zeitpunkten während der Reifungssimulationen, die in Abbildung 43 b dargestellt sind. Die Klassenbreiten sind so gewählt, dass immer mindestens fünf Ausscheidungen in eine Klasse fallen. Die LSW-Theorie sagt vorher, dass die Verteilungen der Ausscheidungsgröße gleich sind, wenn die Ausscheidungsgrößen auf die mittlere Ausscheidungsgröße  $\langle R \rangle$  normiert werden. Diese theoretisch erwartete Verteilung nach der LSW-Theorie ist asymmetrisch und fällt auf der Flanke zu höheren Werten stärker ab. Abbildung 44 a zeigt die Verteilungen aus dem Phasenfeldmodell für den Fall, dass keine Kohärenzspannungen auftreten. Die Verteilungen sind symmetrischer als die der LSW Vorhersage, was für die meisten realen Systeme beobachtet wird [79, 157]. Ausscheidungen im Größenbereich  $> 1,5 \langle R \rangle$  treten häufiger auf, als von der LSW-Theorie vorhergesagt, was sich durch das Zusammenwachsen von Ausscheidungen erklären lässt [27, 158]. Diese experimentell beobachteten Koaleszenzeffekte sind in der LSW-Theorie nicht berücksichtigt.

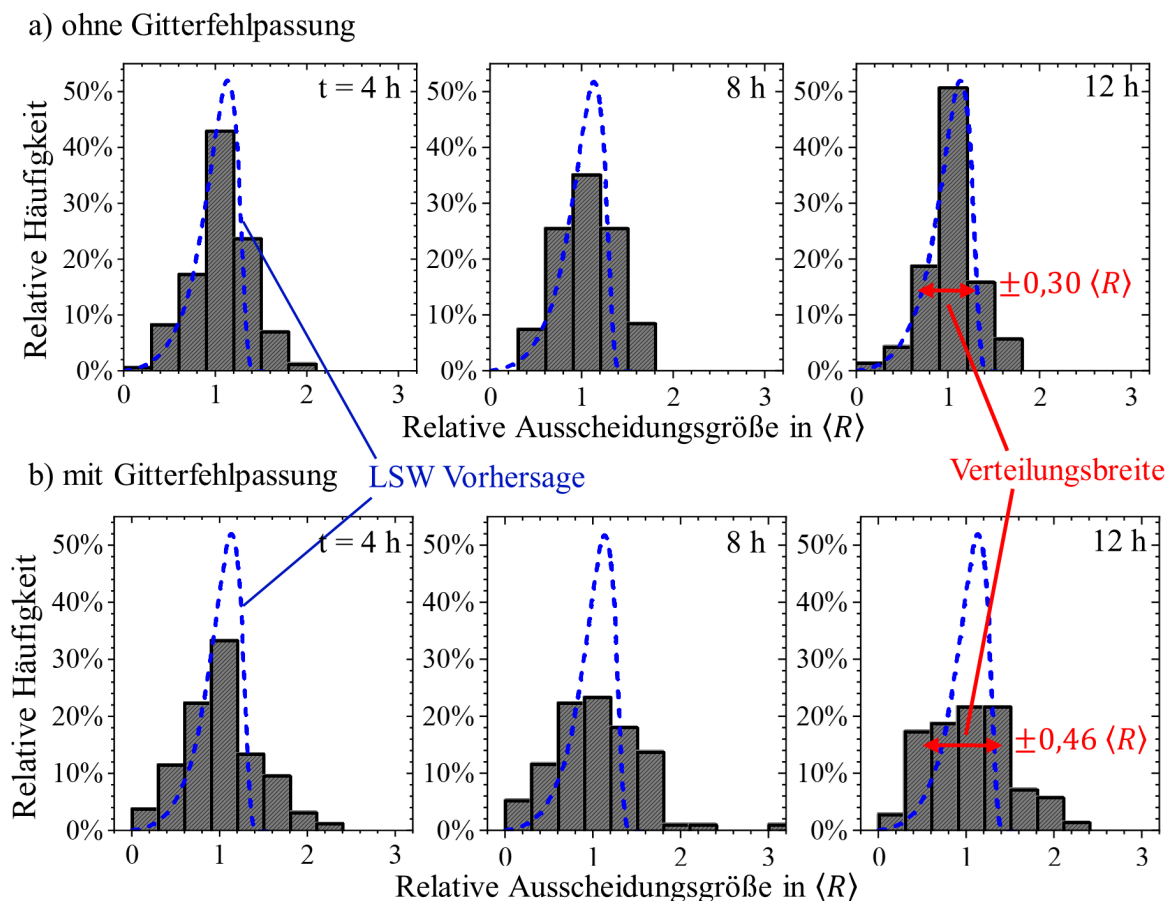


Abbildung 44: Verteilung der Ausscheidungsgrößen während der Reifung bei 725°C a) ohne Berücksichtigung der Gitterfehlpassung und b) mit Gitterfehlpassung. Die Vorhersage der Verteilung aus der LSW-Theorie und die Breite der Verteilung ist ebenfalls dargestellt.

Abbildung 44 b zeigt die Verteilung der Ausscheidungsgrößen aus dem Phasenfeldmodell unter Berücksichtigung von Kohärenzspannungen, die sich durch die Gitterfehlpassung ergeben. Die Verteilungen sind breiter als ohne die Berücksichtigung der Gitterfehlpassung. Es treten Ausscheidungen größer als  $1,5 \langle R \rangle$  auf. Die Maxima der Verteilungen sind weniger stark ausgeprägt. Die Standardabweichung, als Maß der Verteilungsbreite, beträgt ohne Gitterfehlpassung  $0,30 \langle R \rangle$  und mit Berücksichtigung der Gitterfehlpassung  $0,46 \langle R \rangle$ .

### 5.2.3 Quantitative Beschreibung der $\gamma''$ -Reifungskinetik

Zur vollständigen Beschreibung der Reifung von  $\gamma''$ -Ausscheidungen in der Legierung IN718 wird ein 3D Phasenfeldmodell verwendet. Die Simulationsdomäne besteht aus  $128^3$  numerischen Stützstellen, die einer physikalischen Kantenlänge von 250 nm entsprechen. Es werden 400 Ausscheidungen zufällig verteilt initialisiert mit  $V = 3000 \text{ nm}^3$  und  $A = 4$ . Die elastischen Eigenschaften sind anisotrop und inhomogen und die Grenzflächenenergiedichte ist ebenfalls anisotrop gewählt mit  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,4$  und  $\Gamma_C = 100 \text{ mJ m}^{-2}$ . Für die Diffusivität des  $\gamma''$ -Bildners Nb wird der effektive Diffusionskoeffizient  $\tilde{D}$  nach Gleichung (61) auf Seite 38 verwendet und den Einfluss weiterer Legierungselemente zu berücksichtigen. Die Randbedingungen sind in alle drei Raumrichtungen periodisch, wie in Abbildung 13 a auf Seite 30 dargestellt.

Abbildung 45 zeigt die 3D Mikrostruktur zu vier Zeitpunkten während einer 3D Reifungssimulation im Phasenfeldmodell bei  $725^\circ\text{C}$ . Es wird die zeitabhängige mittlere Ausscheidungsgröße  $\langle \hat{R} \rangle$  aus dem mittleren Volumen der Ausscheidungen und deren Aspektverhältnis bestimmt und daraus der Reifungskoeffizient  $K$  berechnet.

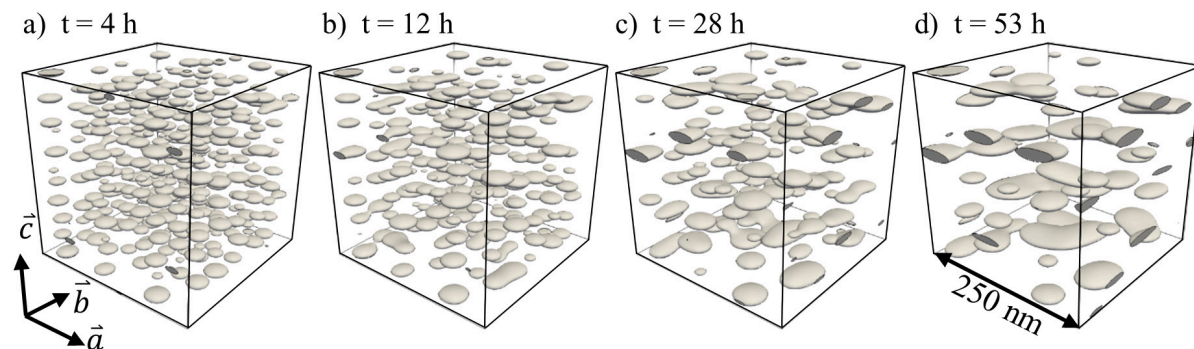


Abbildung 45: Simulierte 3D Mikrostruktur im Phasenfeldmodell während der Reifung bei  $725^\circ\text{C}$  zu vier Zeitpunkten a) - d).

Die Reifungskinetik von  $\gamma''$ -Ausscheidungen kann ebenfalls durch die LSW-Theorie und das modifizierte LSW Modell (mLSW), wie in Abschnitt 3.2 dargestellt, beschrieben werden. Die notwendigen thermodynamischen und kinetischen Parameter wurden in Abschnitt 4.1 dargestellt. Als Diffusionskoeffizient wird ebenfalls  $\tilde{D}$  nach Gleichung (61) auf Seite 38 verwendet. Die Ausscheidungsform kann auf verschiedene Arten berücksichtigt werden. Einmal kann der Einfluss der Ausscheidungsform gänzlich vernachlässigt werden, indem die LSW-Theorie für kugelförmige Ausscheidungen angewandt. Dazu wird der Korrekturfaktor für die Ausscheidungsform  $K_S = 1$  gesetzt (siehe Gleichung (51) auf Seite 27). Die

## Ergebnisse der Simulationsstudien

Ausscheidungsform kann außerdem als elliptisch mit konstantem Aspektverhältnis  $A = 2,8$  angenommen werden [61]. Im mLSW Modell werden die Aspektverhältnisse, im Gegensatz zur LSW-Theorie, nicht als konstant, sondern als abhängig von der mittleren Ausscheidungsgröße und damit implizit zeitabhängig betrachtet. Bei der Kopplung der Reifungskinetik im mLSW Modell geht die Grenzflächenenergiedichte als Parameter sowohl explizit in die Reifungskinetik als  $\Gamma_A$  ein, als auch implizit als  $\Gamma_C$  durch die Form der Ausscheidungen.  $\Gamma_C$  muss also, um eine konsistente Beschreibung der Reifung zu erhalten, so angepasst werden, dass die Aspektverhältnisse den experimentellen Daten entsprechen.

Abbildung 46 zeigt die kubische mittlere Ausscheidungsgröße  $\langle R \rangle$  über der Reifungsdauer für  $\gamma''$ -Ausscheidungen bei  $725^\circ\text{C}$  für verschiedene Implementierungen der LSW-Theorie und des mLSW Modells. Außerdem sind die Ergebnisse der 3D Phasenfeldstudie aus Abbildung 45 dargestellt. Der Reifungskoeffizient der 3D Phasenfeldstudie wurde aus den Daten zwischen 15 h und 53 h ermittelt. Vorher ist der Verlauf noch nicht linear, was sich durch das Einstellen des Gibbs-Thomson Effektes in der Simulation erklären lässt. Es sind zwei Reifungskurven des LSW Modells unter der Annahme kugelförmiger Ausscheidungen, also  $K_S = 1$ , und plattenförmiger Ausscheidungen mit  $A = 2,8$  gezeigt. In beiden Fällen ist der Reifungskoeffizient konstant, was sich in einem linearen Verlauf von  $\langle R \rangle^3$  über der Zeit äußert. Nimmt man kugelförmige Ausscheidungen an, so wird die Reifungskinetik gegenüber dem Phasenfeldmodell um den Faktor 15 unterschätzt, bei ansonsten gleichen thermodynamischen Materialparametern. Die Annahme der Kugelform der Ausscheidungen in der LSW-Theorie unterschätzt die Reifungskinetik im Vergleich zur Annahme konstanter Plattenform um den Faktor 5 (siehe Markierung 1).

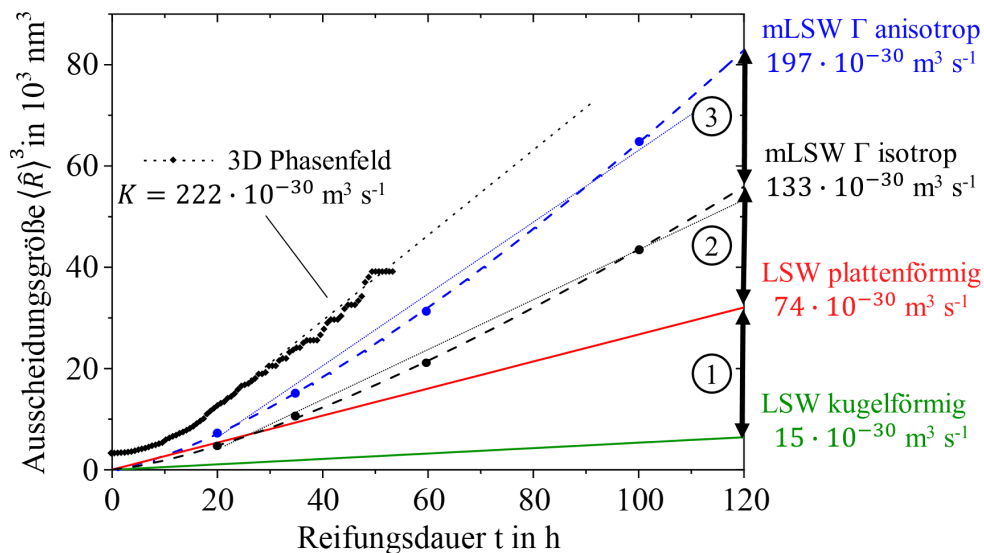


Abbildung 46: Ergebnisse der Reifungssimulationen bei  $725^\circ\text{C}$  mit dem 3D Phasenfeldmodell, der LSW-Theorie und dem mLSW Modell zusammen mit linearen Anpassungen (dünne Linien) und den daraus bestimmten Reifungskoeffizienten. Die Ausscheidungsform wird in LSW und mLSW durch vier verschiedene Ansätze berücksichtigt.

Die Abbildung zeigt außerdem zwei Kurven, die mit dem mLSW Modell ermittelt wurden, welches das mittlere Aspektverhältnis aus der Anpassung an die experimentellen Aspektverhältnisse nach Gleichung (81) auf Seite 83 berücksichtigt. Die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A$ , die in die Reifungskinetik explizit eingeht wird um den Faktor 1,4 erhöht, um den Vergleich zur Reifungskinetik im 3D Phasenfeldmodell zu erreichen. Die Steigung dieser Kurven nimmt mit der Zeit zu, ein Effekt des mit der Ausscheidungsgröße zunehmenden Aspektverhältnis. Im mLSW Modell ergibt sich ein Reifungsexponent  $N = 2,3$ , welcher durch die größenabhängige Form der Ausscheidungen erklärt werden kann. In den Ergebnissen des 3D Phasenfeldmodells ist ein Trend mit  $N < 3$  ebenfalls erkennbar, jedoch weniger deutlich ausgeprägt. Die Ausscheidungsgröße steigt im mLSW Modell spätestens nach 30 h deutlich schneller als nach der LSW-Theorie mit konstantem  $K$  (siehe Markierung 2).

Aus den Ergebnissen der Reifungssimulation mit dem mLSW Modell wurden zum Vergleich mit der LSW-Theorie ebenfalls Reifungskoeffizienten bestimmt. Ähnlich dem experimentellen Vorgehen werden Datenpunkte nach 20, 35, 60 und 100 h zur Anpassung verwendet. Die Ergebnisse des mLSW Modells mit anisotroper Grenzflächenenergiedichte bilden die Kinetik des Phasenfeldmodells am besten ab, da die erhöhte Grenzflächenenergiedichte zu einer nochmals erhöhten Reifungsgeschwindigkeit führt (siehe Markierung 3). Die Reifungskoeffizienten aus der Phasenfeldsimulation und aus dem mLSW Modell mit anisotroper Grenzflächenenergiedichte sind in etwa gleich.



### 6 Diskussion der materialwissenschaftlichen Erkenntnisse

#### 6.1 Simulation der $\gamma''$ -Mikrostrukturentwicklung mit dem Phasenfeldmodell

In Abschnitt 3.1 wird das Phasenfeldmodell, welches zur Beschreibung der  $\gamma''$ -Mikrostrukturentwicklung in der Legierung IN718 verwendet wird vorgestellt. Durch die diskrete Sharp Phase-Field Formulierung ist zur Darstellung einer Phasengrenzfläche nur eine einzelne numerische Stützstelle nötig. Das ist ein Vorteil von einem Faktor 4 – 5 im Vergleich zur konventionellen Formulierung und ermöglicht damit die Darstellung von bis zu  $5^3 = 125$ -fach größeren physikalischen Volumina mit derselben Diskretisierung und Rechenzeit. Die Sharp Phase-Field Formulierung zeigt darüber hinaus sehr günstige Eigenschaften, wenn es um die Simulation sehr großer thermodynamischer Triebkräfte bei der Phasenumwandlung geht [103]. Diese Eigenschaften des Sharp Phase-Field machen die Simulationsstudien in 3D mit über 400 simulierten Ausscheidungen möglich, wie sie benötigt werden um die Entwicklung der mittleren Ausscheidungsgröße während der Ausscheidungsreifung in einer Phasenfeldstudie nachzuvollziehen. Zusammen mit der Methode der invarianten Momente zu Auswertung der Mikrostruktur, kann die Reifungskinetik effizient untersucht werden.

Die hier genutzte Formulierung des chemischen Beitrags zur lokalen Potentialdichte beschreibt erfolgreich die Mikrostrukturentwicklung in Nickelbasis-Superlegierungen während nicht-isothermer, mehrstufiger Auslagerungswärmebehandlung [77]. Zusammen mit einer Beschreibung der Nukleation sekundärer  $\gamma''$ -Ausscheidungen ist auch eine vollständige Beschreibung der nicht-isothermen Mikrostrukturentwicklung möglich [94]. Der elastische Beitrag zur Energiedichte aufgrund der Gitterfehlpassung wird korrekt bestimmt, da die Ergebnisse der analytischen Theorie nach Eshelby korrekt widergegeben werden. Durch die speziellen spiegelperiodischen Randbedingungen werden die Spannungen in der Matrix und die elastische Energie auch bei realistischem Phasenanteil korrekt bestimmt. Die Implementierung des an das Phasenfeld gekoppelten elastischen Einschlussproblems lässt beliebige Anisotropien der elastischen Konstanten zu. Steifigkeitskontraste werden durch die phasenabhängige Beschreibung des Elastizitätstensors dargestellt.

Eine Limitierung der verwendeten Methode ist, dass sich lokale Inhomogenitäten der Verteilung von Legierungselementen innerhalb einer Phase nicht in den lokalen elastischen Eigenschaften, bzw. der lokalen Eigendehnung widerspiegeln. Die Gitterfehlpassung ist abhängig von der lokalen Zusammensetzung, weswegen gerade schwere, hochschmelzende Legierungselemente wie Mo die Gitterkonstanten stark beeinflussen können [159–161]. Im binären System Al-Li wurde beobachtet, dass eine chemomechanische Kopplung der elastischen Konstanten an das lokale Konzentrationsfeld die experimentell in diesem System beobachtete inverse Reifung erklärt [162, 163]. Die experimentell beobachtete  $\gamma''$ -Mikrostrukturentwicklung in der Legierung IN718 wird jedoch auch ohne eine Betrachtung dieser Effekte korrekt erklärt.

Die Formulierung der anisotropen Grenzflächenenergiedichte basiert auf der Annahme, dass zwei unterscheidbare Grenzflächenenergiedichten an den Deck- bzw. Randflächen der Ausscheidungen ( $\Gamma_C$  bzw.  $\Gamma_A$ ) für die Mikrostrukturbildung relevant sind. Dabei werden weitere Anisotropien, etwa für  $\{110\}$  oder  $\{111\}$  orientierte Grenzflächen vernachlässigt. Für kohärente Grenzflächen zwischen kfz Phasen sind diese Anisotropien bekannt und können quantifiziert werden. Die Unterschiede liegen im Bereich unter 10% [148]. Die in dieser Arbeit verwendete Interpolationsfunktion für Energiedichten von nicht  $\{100\}$  orientierten Grenzflächen ist relativ simpel und bewahrt die translatorische Invarianz der Sharp Phase-Field Formulierung effektiv. Ähnliche Formulierungen finden Verwendung in der Beschreibung von teilkohärenten tetragonalen Ausscheidungen [36, 164–166]. Nicht berücksichtigt wird eine Anisotropie der Mobilität der Grenzfläche. Im Falle von tetragonalen  $\theta'$ -Ausscheidungen in Aluminiumlegierungen wird diese Anisotropie mit einem Faktor von über 100 abgeschätzt, um die experimentell beobachtete Mikrostruktur reproduzieren zu können [164, 165]. Für die  $\gamma''$ -Mikrostruktur sind Anpassungen der richtungsabhängigen Mobilität der Grenzfläche nicht nötig, da die experimentell beobachtete Mikrostruktur, insbesondere das Aspektverhältnis der Ausscheidungen, quantitativ durch das Phasenfeldmodell mit isotroper Mobilität ausreichend genau beschrieben wird.

In der realen Mikrostruktur kommen Orientierungs- und Translationsvarianten der  $\gamma''$ -Phase vor, so dass Ausscheidungen unterschiedlicher Varianten beim Zusammenwachsen Antiphasengrenzen bilden. Dadurch wird das Zusammenwachsen gehemmt [39]. Um diesen Sachverhalt im Modell nachzubilden ist ein Multiphasenfeldmodell nötig. Für die drei Orientierungsvarianten und die je fünf Translationsvarianten der  $\gamma''$ -Phase in der kfz Matrix sind zusammen 15 Phasenfelder nötig, denen die Ausscheidungen zu Beginn der Simulation zufällig zugewiesen werden. Als Grenzflächenenergiedichte zwischen zwei  $\gamma''$ -Ausscheidungen würden dann die jeweiligen Antiphasengrenzenergien gewählt werden. Die Ausscheidungsanordnung [99], der lokalen Spannungszustand [39] und chemomechanische Effekte während der Ausscheidungsreifung können mit einem Multiphasenfeldmodell vollständig beschrieben werden. Eine entsprechende Sharp Phase-Field Formulierung existiert bereits [167]. Es ist nicht bekannt, dass die Ausscheidungsanordnung und die Orientierungsvarianten für die Reifungskinetik eine Rolle spielen. Für die Gleichgewichtsform ohne elastische Interaktionen sind die anderen Orientierungsvarianten ebenfalls nicht ausschlaggebend.

## 6.2 Die $\gamma''$ -Mikrostruktur in der Legierung IN718

### 6.2.1 Einflussfaktoren auf die Form der $\gamma''$ -Ausscheidungen

Um die elastische Triebkraft zur Bildung der Form von  $\gamma''$ -Ausscheidungen zu beschreiben wird die dimensionslose Kennzahl  $Q$  betrachtet, welche in Gleichung (16) auf Seite 14 eingeführt wurde. Sie repräsentiert das Verhältnis aus dem elastischen Energiebeitrag durch Kohärenzspannungen zur Grenzflächenenergie. Da  $Q$  mit der Ausscheidungsgröße steigt, ist die Ausscheidungsform größenabhängig. Die Ergebnisse in Abschnitt 5.1.2 zeigen, dass für das Aspektverhältnis der Ausscheidungen lediglich die betragsmäßig größte Gitterfehlpassung

$\varepsilon_3$  eine Rolle spielt, wenn die Anisotropie der Gitterfehlpassung stark genug ist ( $\varepsilon_3/\varepsilon_1 > 6$ ). Außerdem spielt die Grenzflächenenergie der Deckfläche der Ausscheidung die dominante Rolle in der Formbildung, besonders, wenn die Ausscheidung groß ist ( $R > 17$  nm). Die Form der Ausscheidung ist also hauptsächlich durch das Verhältnis  $Q_A$  bestimmt, in welches die betragsmäßig größere Gitterfehlpassung  $\varepsilon_3$  und die Grenzflächenenergiedichte der Deckfläche  $\Gamma_C$  eingeht (siehe Gleichung (73) auf Seite 55). Die dimensionslose Kennzahl beschreibt das Verhältnis zwischen der elastischen Energie und der Grenzflächenenergie in der Ebene normal zu  $\vec{a}$ . Steigt dieses Verhältnis, so nimmt auch das Aspektverhältnis der Ausscheidung zu. Die Anisotropie der elastischen Konstanten und der Grenzflächenenergiedichte, sowie die elastische Inhomogenität und Wechselwirkung zwischen den Ausscheidungen haben ebenfalls einen Einfluss auf das Aspektverhältnis, welcher in der dimensionslosen Kennzahl nicht berücksichtigt ist. Die elastische Wechselwirkung zwischen den Ausscheidungen führt außerdem zu Abweichungen von der elliptischen Ausscheidungsform ( $\theta_A < 100\%$ ).

Die Temperaturabhängigkeit von  $Q_A$  lässt sich abschätzen durch die temperaturabhängigen Materialparameter, die in Abschnitt 4 gegeben werden. Im relevanten Temperaturbereich  $650^\circ\text{C} - 760^\circ\text{C}$  nimmt die Gitterfehlpassung  $\varepsilon_3$  von  $31,0 \cdot 10^{-3}$  auf  $30,4 \cdot 10^{-3}$  um 1,9% ab und  $C_{44}$  von 107 GPa auf 106 GPa um 1,2% ab. Die elastische Energie im System nimmt damit nach Gleichung (15) von Seite 14 im betrachteten Temperaturbereich um 5,0% ab. Die Ungenauigkeit der elastischen Energie, die sich durch Fehlerfortpflanzung aus der Streuung der Materialparameter ergibt liegt im Bereich von  $\pm 6,9\%$ . Es ist zu erwarten, dass die  $\gamma/\gamma''$ -Grenzflächenenergiedichte im Bereich nahe der  $\gamma''$ -Solvustemperatur eine ausgeprägte negative Temperaturabhängigkeit aufweist [34], wie auch in Abbildung 22 auf Seite 46 angedeutet ist. Daher ist anzunehmen, dass für eine Ausscheidung bei konstantem Volumen,  $Q_A$  mit steigender Temperatur steigt, also der Einfluss der Gitterfehlpassung auf die Ausscheidungsform zunimmt.

Abbildung 47 a zeigt schematisch, welche Auswirkungen die in dieser Arbeit untersuchten Faktoren auf die Plattenform der Ausscheidungen haben. Ausgangspunkt ist dabei die elliptische Form, wie sie im analytischen Modell vorhergesagt wird. Ausgehend von dieser Modellannahme steigt das Aspektverhältnis, wenn  $Q_A$  steigt (siehe Abbildung 29 auf Seite 55), also bei niedrigerer Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_C$ , höherer Gitterfehlpassung  $\varepsilon_3$ , elastisch härterem Material ( $E, G \uparrow$ ) und einem Wachstum der Ausscheidung ( $R, \hat{R} \uparrow$ ). Gleichzeitig führt die elastische Anisotropie zu leicht gestauchten Ausscheidungen (siehe Abbildung 31 auf Seite 58). Ist das Verhältnis der Gitterfehlpassungen  $\varepsilon_3/\varepsilon_1$  ausreichend klein ( $< 6$ ), so strebt die Ausscheidung bei isotroper Grenzflächenenergiedichte zur Kugelform (siehe Abbildung 30 auf Seite 56). Eine anisotrope Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A/\Gamma_C > 1$  führt zu einem höheren Aspektverhältnis und zu einer Abweichung von der Ellipsenform durch sinkende Rundheit  $\theta_A$  (siehe Abbildung 34 auf Seite 61). Elastische Interaktion benachbarter Ausscheidungen bei realistischen  $\gamma''$ -Volumenanteilen und in energetisch günstigen Anordnungen führen zu einer Streckung der Ausscheidungsform und zu sinkender Rundheit der Ausscheidung (siehe Abbildung 37 auf Seite 65). Der Einfluss der Gitterfehlpassung auf die Form und damit auf das Aspektverhältnis einer  $\gamma''$ -Ausscheidung steigt mit der Temperatur. Abbildung 47 b zeigt die Einflüsse auf  $A$  und  $\theta_A$  tabellarisch,

wobei  $\uparrow\uparrow$  für starken positiven Einfluss,  $\uparrow$  für positiven Einfluss,  $\bullet$  für keinen Einfluss und  $\downarrow$  für negativen Einfluss steht.

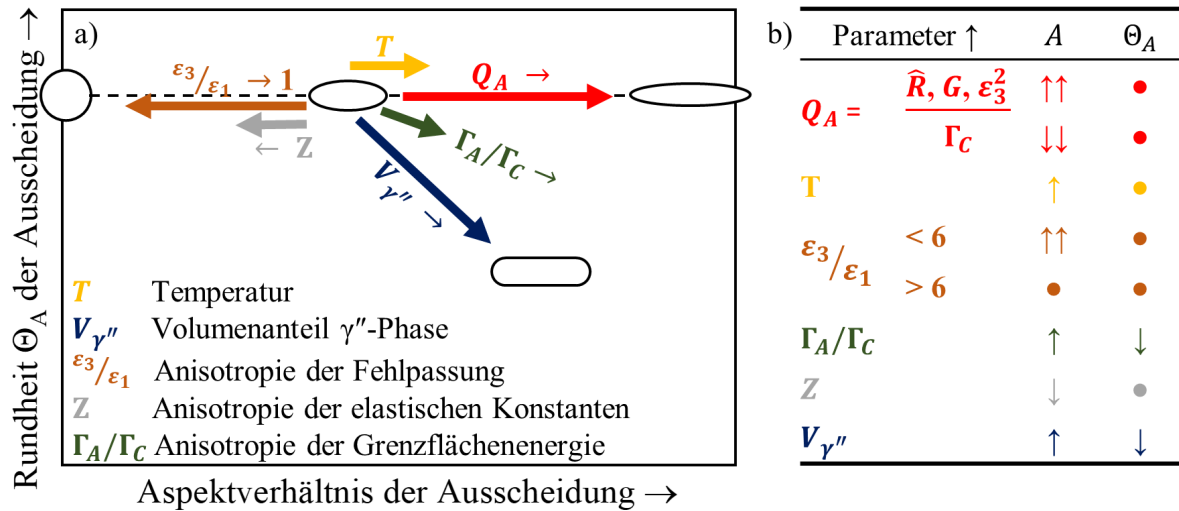


Abbildung 47: Durch die Simulationsstudien in Abschnitt 5.1.2 und 5.1.3 ermittelter qualitativer Einfluss verschiedener Parameter auf die  $\gamma''$ -Ausscheidungsform a) im  $\Theta/A$  Raum und b) Tabellarisch mit  $\uparrow\uparrow$  starker Einfluss,  $\uparrow$  Einfluss,  $\bullet$  kein Einfluss,  $\downarrow$  negativer Einfluss.

Die Ergebnisse dieser Arbeit sind auf andere Legierungssysteme mit  $\gamma''$ -Ausscheidungen, wie die Legierung IN625 [27], Legierungen komplexer Zusammensetzung [28] und Legierungen in den Systemen Ni-V-Si [29, 30] und Fe-Ni-Ta [31] übertragbar. Eine plattenförmige Morphologie dispers verteilter Ausscheidungen wird ebenfalls für die  $\theta'$ -Phase im System Al-Cu [168] und auch in Yttrium-stabilisierter ZrO<sub>2</sub> Keramik beobachtet [60]. Diese Systeme zeichnen sich durch den kohärenten Phasenübergang von kubischer auf tetragonale Symmetrie aus. Die Formbildung ist in diesen Fällen ebenfalls elastisch induziert, weswegen die hier dargestellten Ergebnisse auf diese Materialsysteme ebenfalls übertragbar sind.

### 6.2.2 Experimentell beobachtete Aspektverhältnisse

Abbildung 48 zeigt experimentell ermittelte Aspektverhältnisse von  $\gamma''$ -Ausscheidungen aus verschiedenen Quellen. Die Ausscheidungsgrößen wurden einerseits aus Transmissionselektronenmikrostrukturaufnahmen (TEM) ausgemessen [17, 61, 84, 169] und andererseits durch Anpassung an Daten von Kleinwinkelneutronenbeugungsexperimenten ermittelt [128]. Die Daten vom Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth (MW) stammen aus TEM Aufnahmen von Yueh-Yu Lin nach 2 h, 6 h und 10 h Auslagerung bei 760°C [32], wie in Abbildung 2 auf Seite 5. Zwei exemplarische Ausscheidungen aus den TEM Aufnahmen sind in Abbildung 48 ebenfalls dargestellt. Die Literaturdaten spiegeln das Aspektverhältnis der Ausscheidungen nach Auslagerung bei Temperaturen zwischen 650°C und 760°C wieder. Teilweise sind gemittelte Daten gegeben und teilweise werden die Formen für einzelne Ausscheidungen angegeben. Eine Zuordnung einzelner Werte aus der Literatur zu Temperaturen ist nicht immer möglich. Die experimentellen Daten zeigen die

Größenabhängigkeit des Aspektverhältnis, welches durch die Betrachtung der Kennzahl zum Verhältnis der Energiebeiträge  $Q$  in Gleichung (16) auf Seite 14 postuliert wurde.

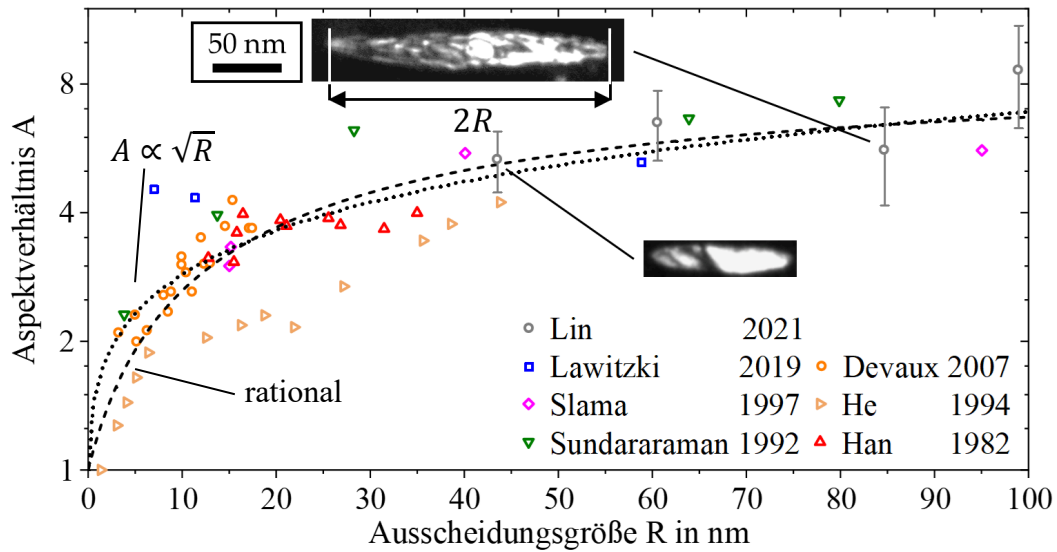


Abbildung 48: Größenabhängige Aspektverhältnisse experimentell beobachteter  $\gamma''$ -Ausscheidungen [17, 61, 84, 128, 169] mit ausgewählten TEM Aufnahmen des Lehrstuhls Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth [32]. Phänomenologische Ansätze zur Beschreibung der Größenabhängigkeit des Aspektverhältnis nach den Gleichungen (80) ( $A \propto \sqrt{R}$ ) und (81) (rational) sind ebenfalls dargestellt.

Die experimentell ermittelten Aspektverhältnisse spiegeln nur bedingt die Gleichgewichtsform der Ausscheidungen wieder, wie die große Streuung bei großen Ausscheidungsgrößen zeigt. In einer realen Mikrostruktur tritt Koaleszenz von Ausscheidungen auf, die zu deutlichen Abweichungen von der idealisierten Form führt. Außerdem weicht die Form sehr kleiner Ausscheidungen während ihres Wachstums deutlich von der Gleichgewichtsform ab [101]. Durch die drei Orientierungsvarianten gibt es weitere elastische Wechselwirkungen unter denen Ausscheidungen ihre Form annehmen. Außerdem streuen bereits die ermittelten Aspektverhältnis stark durch Kanteneffekte im Mikroskop, durch die Auflösung der Aufnahmen und durch die nötige Binarisierung der Mikrostrukturaufnahmen. Es wird angenommen, dass die experimentellen Aspektverhältnisse im Mittel die Gleichgewichtsform repräsentieren. Die Betrachtung der temperaturabhängigen Materialparameter ergibt, dass im Temperaturbereich  $650^\circ\text{C} - 760^\circ\text{C}$  keine signifikante Änderung der elastischen Energie stattfindet, welche über die Streuung der Materialdaten hinaus geht. Deswegen wird angenommen, dass im betrachteten Temperaturbereich das Verhältnis aus elastischer Energie und Grenzflächenenergie konstant ist.

Die Beziehung zwischen der Ausscheidungsgröße  $R$  und dem Aspektverhältnis  $A$  ist stetig steigend. Der Verlauf der Kurve flacht mit zunehmender Ausscheidungsgröße ab. Um den Verlauf der Größenabhängigkeit des Aspektverhältnis zu beschreiben werden zwei Funktionen verwendet. Die erste Funktion basiert auf der empirischen Beobachtung, dass die Aspektverhältnisse der simulierten Gleichgewichtsformen in Abbildung 31 auf Seite 58 für  $Q_A > 2$  dem Zusammenhang  $A \propto Q_A^{3/5}$  gehorchen. Daraus ergibt sich  $A \propto \hat{R}^{3/5}$ . Unter der

Annahme rotationselliptischer Ausscheidungen ist  $\hat{R} = RA^{-1/3}$  (siehe Gleichung (8) auf Seite 11). Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} A^{5/3} &\propto \hat{R} \\ A^{5/3} &\propto A^{-1/3} \cdot R \\ A^2 &\propto R \\ A &\propto \sqrt{R}. \end{aligned} \tag{79}$$

Aus diesem Zusammenhang wird ein empirischer Ansatz

$$A(R) \approx A(0) + b \cdot \sqrt{R \cdot \text{nm}^{-1}} \tag{80}$$

abgeleitet, wobei  $A(0)$  dem Aspektverhältnis im Grenzflächendominierten Fall  $R \rightarrow 0$  entspricht und  $b$  ein dimensionsloser Parameter ist. Für eine isotrope Grenzflächenenergiedichte ist  $A(0) = 1$  und im Fall anisotroper Grenzflächenenergiedichte ist  $A(0) = \Gamma_A/\Gamma_C$ . Bei der Anpassung an die experimentellen Daten aus Abbildung 48 mit  $A(0) = 1$  ergibt sich  $b = 0,591 \pm 0,022$ . Das Bestimmtheitsmaß, als Kriterium der Güte der Anpassung, beträgt für diese Anpassung 73%.

Ein anderer Ansatz basiert auf der Annahme aus Gleichung (74) auf Seite 57, dass sich das Aspektverhältnis der Ausscheidung aus dem Verhältnis der Energiedichten der Deckfläche und der Randfläche einer Ausscheidung, also der Summe aus Grenzflächenenergiedichte und elastischer Energie bestimmen lässt. Die Beiträge aus der elastischen Energie können qualitativ ähnlich der Relaxationsfunktion aus Abschnitt 3.3.2 verstanden werden. Es ergibt sich dann ein gebrochen rationaler Zusammenhang für das Aspektverhältnis

$$A(R) \approx \frac{A(0) + c (R \cdot \text{nm}^{-1})}{1 + d (R \cdot \text{nm}^{-1})} \tag{81}$$

mit den dimensionslosen Parametern  $c$  und  $d$ . Dieser Ansatz konvergiert für  $R \rightarrow \infty$  gegen  $c/d$ . Aus den experimentellen Daten ergibt sich im Fall isotroper Grenzflächenenergiedichte  $A(0) = 1$ ,  $c = 0,231 \pm 0,031$  und  $d = 0,026 \pm 0,006$  mit einer Anpassungsgüte von 71%. Die beiden Ansätze aus den Gleichungen (80) und (81) beschreiben die experimentellen Daten damit ähnlich gut. Die angepassten Kurven sind ebenfalls in Abbildung 48 dargestellt.

### 6.2.3 Die $\gamma/\gamma''$ -Grenzflächenenergiedichte

Zur Präsentation der Ergebnisse in Abschnitt 5 wurde für die isotrope Grenzflächenenergiedichte ein Wert von  $100 \text{ mJ m}^{-2}$  verwendet. Der Wert basiert auf einer Anpassung an das Aspektverhältnis von  $\gamma''$ -Ausscheidungen mit dem Modell von Cozar & Pineau und an die LSW-Theorie zur Beschreibung der Kinetik der Ausscheidungsreifung [61]. Hierbei ist jedoch anzumerken, dass das Modell von Cozar & Pineau und die LSW-Theorie viele Annahmen bezüglich der Mikrostruktur treffen, welche zu einer deutlichen Ungenauigkeit der Vorhersage der Grenzflächenenergiedichte führen. Das Modell von Cozar & Pineau bestimmt die Gleichgewichtsform einer  $\gamma''$ -Ausscheidung anhand homogener, isotroper elastischer Konstanten für einen verschwindend geringen Phasenanteil. Sowohl die Wahl eines anisotropen und phasenabhängigen Elastizitätstensors, als auch die Berücksichtigung von elastischen Interaktionen zwischen den Ausscheidungen bei einem

realistischen  $\gamma''$ -Volumenanteil von 12%, bewirken, wie in Abbildung 47 auf Seite 81 zusammengefasst, signifikante Abweichungen von der Vorhersage des analytischen Modells von Cozar & Pineau. Eine Anpassung der Gleichgewichtsformen aus dem Phasenfeldmodell an die experimentellen Daten liefert eine genauere Vorhersage der Grenzflächenenergie. In der Beschreibung des Reifungskoeffizienten für die LSW-Theorie ist der realistische Phasenanteil und die Plattenform der Ausscheidungen zwar enthalten, nicht jedoch die Größenabhängigkeit der Ausscheidungsform. Der Anteil der elastischen Energie an der Beschreibung der Reifungskinetik ist nur implizit durch die Ausscheidungsform berücksichtigt. Außerdem wurde in der Originalstudie eine fehlerhafte Definition des molaren Volumens verwendet [61], wodurch die Reifungskoeffizienten um einen Faktor 4 überschätzt wurden [80].

Im Folgenden sollen die Erkenntnisse aus den Ergebnissen in Abschnitt 5 zusammen mit den bereits diskutierten experimentellen Daten genutzt werden, um eine genauere Abschätzung der Grenzflächenenergiedichte im Temperaturbereich von 650°C – 760°C zu erhalten.

### **Die Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte**

Die Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte wird durch das Verhältnis der Energiedichten  $\Gamma_A/\Gamma_C$  definiert. Unter der Annahme, dass das Aspektverhältnis  $A(0)$  der rein grenzflächen-dominierten Form ( $R \rightarrow 0$ ), welche sich im Falle verschwindender elastischer Beiträge zur Formgebung ergibt, gleich  $\Gamma_A/\Gamma_C$  ist kann das Verhältnis aus dem  $A$ -Achsenabschnitt einer Funktion für das größenabhängige Aspektverhältnis  $A(R)$  abgeleitet werden. Damit lässt sich ein oberes Limit der Anisotropiestärke aus den experimentell beobachteten Ausscheidungsformen ableiten. Mit Ausnahme einer Veröffentlichung [170], werden nur experimentelle Aspektverhältnisse größer 1,9 beobachtet. Das ist ein Hinweis, dass  $\Gamma_A/\Gamma_C < 1,9$ . In den beiden phänomenologischen Ansätzen für das größenabhängige Aspektverhältnis aus den Gleichungen (80) und (81) auf Seite 83 ist der Achsenabschnitt explizit als Parameter enthalten.

Abbildung 49 zeigt die experimentell ermittelten Aspektverhältnisse aus Abbildung 48 auf Seite 82 zusammen mit den phänomenologischen Ansätzen zur Beschreibung der Größenabhängigkeit der Aspektverhältnisse aus Gleichung (80) und (81) auf Seite 83 unter Annahme anisotroper Grenzflächenenergie, also mit Achsenabschnitt  $A(0) \neq 1$ . Für das Modell in Gleichung (80) mit  $A \propto \sqrt{R}$  ergibt sich  $A(0) = 1,404 \pm 0,078$  mit  $b = 0,516 \pm 0,023$ . Die Güte der Anpassung beträgt 72%. Für den gebrochen rationalen Ansatz aus Gleichung (81) ergibt sich  $A(0) = 1,624 \pm 0,45$  mit  $c = 0,157 \pm 0,041$  und  $d = 0,013 \pm 0,006$ . Die Güte der Anpassung beträgt ebenfalls 72%. Die Anpassungen mit variablem Achsenabschnitt beschreiben  $A(R)$  also nicht signifikant besser als unter der Annahme  $A(0) = 1$ , es ergeben sich jedoch Hinweise auf die Stärke der Anisotropie  $\Gamma_A/\Gamma_C$ .

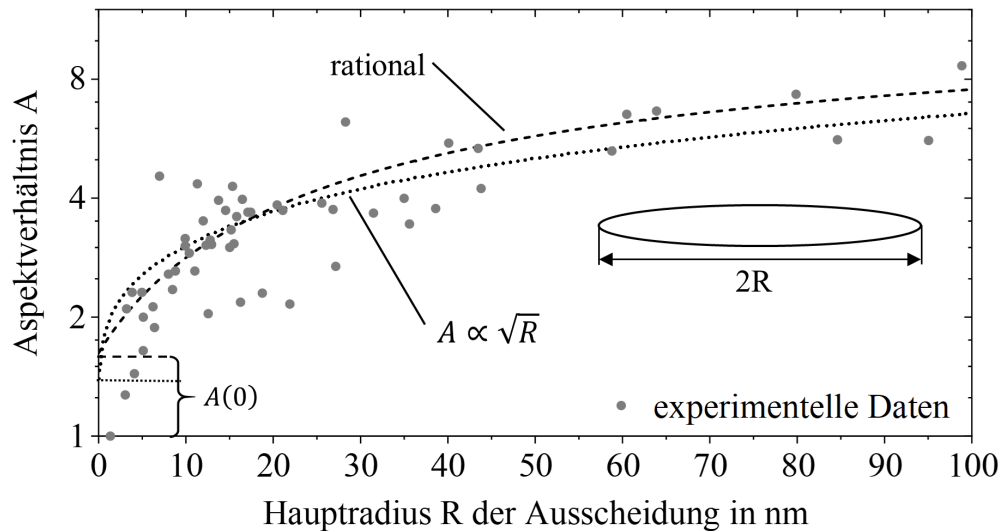


Abbildung 49: Abschätzung der Anisotropiestärke der Grenzflächenenergiedichte anhand vom Achsenabschnitt  $A(0)$  von Anpassungen an die experimentellen Daten aus Abbildung 48.

Ein weiterer Hinweis auf die Stärke der Anisotropie ergibt sich aus dem Vergleich der  $\theta'$ -Phase im System Al-Cu, die ebenfalls tetragonal geordnet ist. Diese Phase scheidet ebenfalls kohärent bzw. teilkohärent in einer Mischkristallmatrix aus [168]. Die Ausscheidungen sind ebenfalls plattenförmig, weisen aber höhere Aspektverhältnisse auf als  $\gamma''$  in IN718 [168]. Die Deckfläche der  $\theta'$ -Ausscheidungen wird als kohärent mit einer niedrigen Grenzflächenenergiedichte angenommen und die Randfläche als teilkohärent mit hoher Grenzflächenenergie. Ein Verhältnis der Grenzflächenenergiedichten von mindestens 2 ist nötig, um in Phasenfeldmodellen die experimentell beobachtete  $\theta'$ -Mikrostruktur zu erhalten [164, 165]. Diese Anisotropie ist teilweise durch das Versetzungsnetzwerk, welches sich in die teilkohärente Grenzfläche einbettet, zu erklären.

Aus den Betrachtungen zu den gebrochenen Bindungen von Matrix/ $\gamma''$ -Grenzflächen normal zu den Gitterrichtungen  $\vec{a}$  und  $\vec{c}$  in Abschnitt 4.4 und dem Vergleich zu anderen Materialsystemen mit bekannter Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte kann abgeschätzt werden, dass eine signifikante Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte im System  $\gamma/\gamma''$  vorliegt. Die Anpassung der beiden Ansätze aus Gleichung (80) und (81), die auf Erkenntnissen über die Formbildung von  $\gamma''$ -Ausscheidungen beruhen, zeigt ebenfalls dass eine Anisotropie der  $\gamma/\gamma''$ -Grenzflächenenergiedichte im Bereich  $1,2 < \Gamma_A/\Gamma_C < 1,6$  liegt.

### **Bestimmung der Grenzflächenenergiedichte aus dem Phasenfeldmodell**

Abbildung 50 zeigt Aspektverhältnisse aus einer 3D Phasenfeldstudie der  $\gamma''$ -Gleichgewichtsform zusammen mit den experimentellen Daten. Die Simulationsdomäne hat eine Größe von  $50 \times 50 \times 17$  numerischen Stützstellen mit einem realistischen  $\gamma''$ -Volumenanteil von 12%. Die elastischen Eigenschaften sind anisotrop und inhomogen und die Grenzflächenenergiedichte ist ebenfalls anisotrop gewählt mit  $\Gamma_A/\Gamma_C = 1,4$ . Drei exemplarische Ausscheidungsformen, wie sie im Phasenfeldmodell ermittelt wurden sind ebenfalls mit den Kanten der Simulationsdomäne dargestellt. Die Grenzflächenenergiedichte



$\Gamma_C$ , die nötig ist um die Übereinstimmung mit den experimentellen Daten zu erhalten beträgt  $240 \pm 33 \text{ mJ m}^{-2}$ . Damit ist  $\Gamma_A = 340 \pm 46 \text{ mJ m}^{-2}$ .

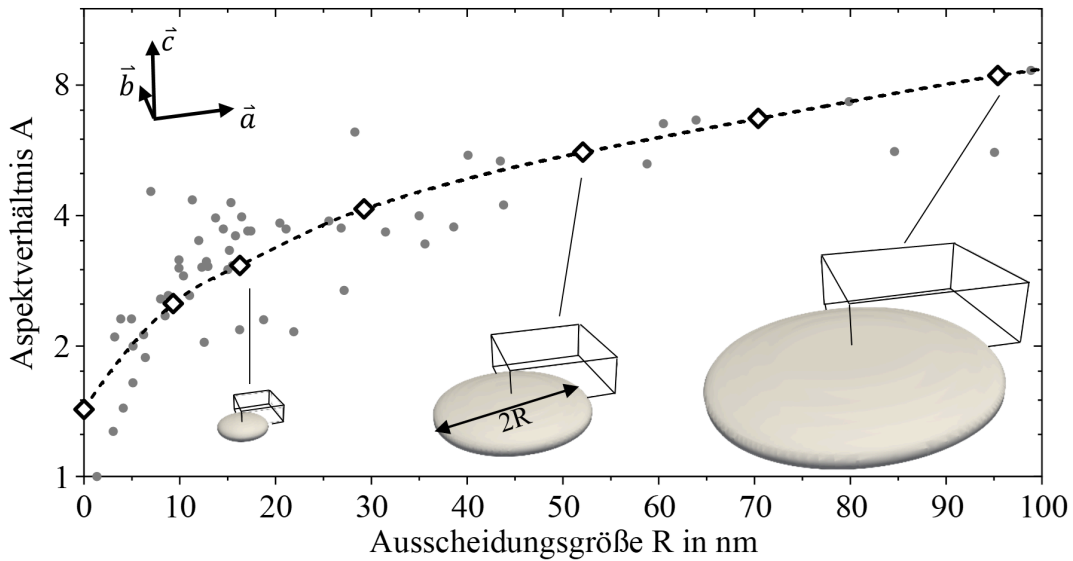


Abbildung 50: Quantitative Ausscheidungsformen aus einer 3D Phasenfeldsimulation mit den experimentellen Daten aus Abbildung 48 auf Seite 82.

### 6.2.4 Die $\gamma''$ -Ausscheidungsform in der Ebene

Die Anisotropie des Elastizitätstensors schlägt sich nicht nur im Aspektverhältnis einer Ausscheidung nieder, sondern auch in ihrer Form in der Ebene (Definition siehe Abbildung 5 auf Seite 10). Die experimentell beobachteten Formen in der Ebene sind ausgeprägt eckig (siehe Abbildung 4 auf Seite 8). Im Fall isotroper elastischer Konstanten mit anisotroper Gitterfehlpassung ergibt sich Rotationsinvarianz der elastischen Energiedichte um die  $\vec{c}$  Achse. Im Fall von tetragonaler Anisotropie ergibt sich eine vierzählige Drehsymmetrie der elastischen Energie um die  $\vec{c}$  Achse und damit auch der Gleichgewichtsform zugunsten eckigerer Ausscheidungen, getrieben durch die kleinere Gitterfehlpassung  $\varepsilon_1$  und die elastisch weichen  $\langle 001 \rangle$ -Richtungen. Das Verhältnis von elastischer Energie zu Grenzflächenenergie in der Ebene normal zu  $\vec{c}$  lässt sich, im Kontrast zu  $Q_A$  aus Gleichung (73) auf Seite 55, durch die folgende Definition der Kennzahl  $Q$  quantifizieren

$$Q_C = \frac{C_{44}'' \varepsilon_1^2}{\Gamma_A} \hat{R}. \quad (82)$$

Neben der elastischen Energie geht hier ebenfalls die Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A$  am Rand der Ausscheidung ein. Im System  $\gamma/\gamma'$  wurde in 2D Simulationen gezeigt, dass Abweichungen von einer runden Form ab  $Q > 4$  auftreten, wenn die Ausscheidungsphase eine elastische Anisotropie  $Z = 2$  aufweist [45], wie es für die  $\gamma''$ -Phase in Abbildung 19 d gezeigt ist. Aus den experimentell ermittelten Gitterfehlpassungen lässt sich abschätzen, dass

$$Q_C \approx \left(\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_3}\right)^2 Q_A \approx \frac{Q_A}{500}. \quad (83)$$

Abweichungen von der kreisförmigen, grenzflächendominierten Form in der Plattenebene werden also erst bei 500-fach größeren Ausscheidungen erwartet, als die Ausbildung der elongierten Plattenform. Bei 725°C wäre eine Ausscheidungsgröße  $R$  von 4000 nm nötig. Die metastabile  $\gamma''$ -Phase wächst nicht zu derart großen Ausscheidungen, da sie sich vorher in die stabile  $\delta$ -Phase umwandelt [13, 27]. Die Gitterfehlpassung  $\varepsilon_1$  in der Plattenebene und die daraus resultierenden Kohärenzspannungen alleine erklären also nicht die experimentell beobachtete, nichtrunde Form der Ausscheidungen in der Ebene. Selbst, wenn man annimmt, dass die Gitterfehlpassung  $\varepsilon_1$  um den Faktor 6 erhöht würde, wäre noch eine Ausscheidungsgröße von 100 nm nötig um beobachtbare Abweichungen von der Kreisform zu erreichen. Für  $Q_C$  ist, wie für  $Q_A$ , ebenfalls eine positive Temperaturabhängigkeit zu erwarten, da  $\varepsilon_1$  im Vergleich zu  $\varepsilon_3$  keine negative Temperaturabhängigkeit aufweist.

Abbildung 51 a zeigt die simulierte  $\gamma''$ -Gleichgewichtsform mit einer regelmäßigen Überstruktur in einer 3D Phasenfeldstudie bei einem  $\gamma''$ -Volumenanteil von 12%. Die Simulationsdomäne hat eine Größe von  $46 \times 46 \times 27$  numerischen Stützstellen. Die physikalische Größe der Simulationsdomäne wurde bei konstantem Phasenanteil variiert um die Größenabhängigkeit der Formbildung zu untersuchen. Abbildung 51 b zeigt die Plattenform simulierter  $\gamma''$ -Ausscheidungen und Abbildung 51 c deren größenabhängige Ausscheidungsform in der Ebene. Die Plattenform zeigt die Zunahme des Aspektverhältnis mit zunehmender Ausscheidungsgröße. Die Form in der Ebene zeigt eine zunehmende Abweichung von der Kreisform bis zu einer Rundheit von 67%. Bei der größten untersuchten Ausscheidung zeigt die Form in der Ebene konkave Anteile, wie sie auch experimentell beobachtet werden.

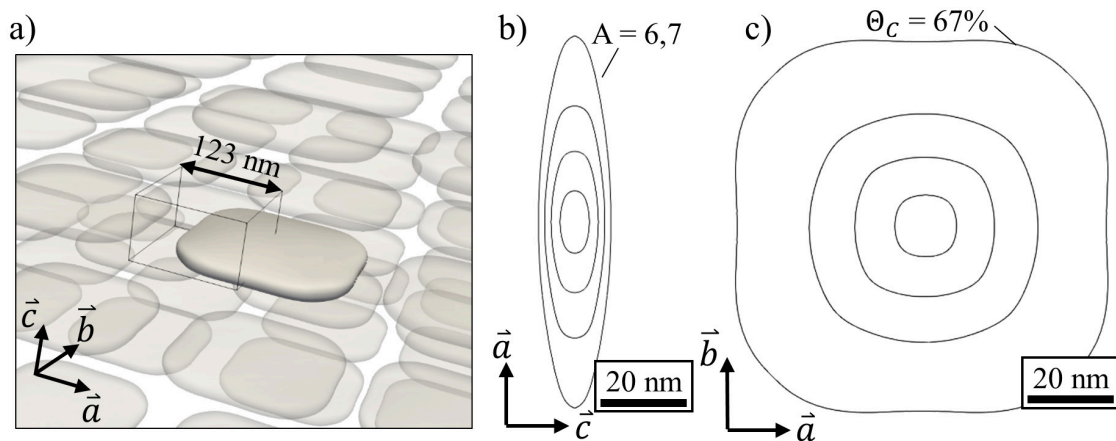


Abbildung 51: a) Periodische rechteckige Anordnung von  $\gamma''$ -Ausscheidungen bei 12% Volumenanteil aus 3D Berechnungen b) Plattenformen und c) Ausscheidungsformen in der Ebene bei verschiedenen Ausscheidungsgrößen.

Abbildung 52 zeigt die Rundheit  $\theta_C$  der Ausscheidungsform in der Ebene der in Abbildung 51 gezeigten  $\gamma''$ -Ausscheidungen, die sich durch die elastische Interaktion zwischen benachbarten Ausscheidungen einstellt, zusammen mit experimentell ermittelten Rundheiten vom Lehrstuhl

Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth [32]. Exemplarisch sind simulierte und experimentell beobachtete Ausscheidungsformen dargestellt. Die elastischen Wechselwirkungen bewirken im Phasenfeldmodell eine abnehmende Rundheit  $\theta_C$  von  $\gamma''$ -Ausscheidungen. Die experimentellen Daten nach 6 h bzw. 10 h Auslagerung bei 760°C weisen bei einer ähnlichen Ausscheidungsgröße deutlich eckigere Formen auf mit einer mittleren Rundheit von 50% bzw. 30%.

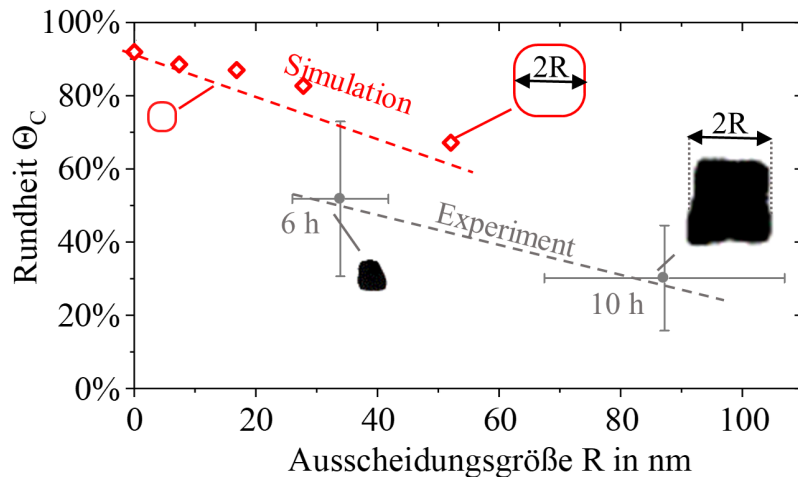


Abbildung 52: Größenabhängige Rundheit  $\theta_C$  der  $\gamma''$ -Ausscheidungsform in der Ebene aus 3D Phasenfeldsimulationen und im Experiment nach 6 h bzw. 10 h Auslagerung bei 760°C [32].

Die Existenz der eckigen Ausscheidungsform in der Ebene, wie sie experimentell beobachtet wird, kann nicht allein durch die Anisotropie der elastischen Konstanten und durch die Gitterfehlpassung erklärt werden. Die Betrachtung von elastischen Wechselwirkungen zwischen benachbarten Ausscheidungen, wie im 3D Phasenfeldmodell bei einem  $\gamma''$ -Volumenanteil von 12%, ist nötig um den Verlust der Rundheit mit steigender Ausscheidungsgröße zu erklären.

### 6.3 Reifung von $\gamma''$ -Ausscheidungen in IN718

Die Ausscheidungsform hat einen starken Einfluss auf die Reifungskinetik, da bei der Abweichung von der Kugelform lokal höhere Krümmungen der Phasengrenzfläche auftreten. Die stark erhöhte Krümmung entlang der Randfläche der Ausscheidung wirkt beschleunigend [115]. Der Einfluss auf die Reifungskinetik steigt dabei linear mit zunehmendem Aspektverhältnis  $K \propto A$  [116]. Die wenig gekrümmte Deckfläche der Ausscheidungen hat einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Reifungskinetik. Der Reifungskoeffizient wird maßgeblich von der Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma_A$  an der stark gekrümmten Randfläche beeinflusst (siehe Abbildung 42 auf Seite 71). Anders als in der LSW-Theorie angenommen ist die Ausscheidungsform zeitlich nicht konstant, sondern durch ihre Größenabhängigkeit implizit zeitabhängig. Da mit zunehmender Ausscheidungsgröße das Aspektverhältnis steigt, nimmt auch der Reifungskoeffizient mit der Zeit zu. Das ist im mLSW Modell als größenabhängiges Aspektverhältnis berücksichtigt.

Die Grenzflächenenergiedichte spielt eine besondere Rolle bei der Beschreibung der Reifungskinetik, da sie in zwei Richtungen wirkt. Auf der einen Seite bewirkt eine hohe Grenzflächenenergiedichte eine Zunahme der Reifungsgeschwindigkeit. Auf der anderen Seite bewirkt die Grenzflächenenergie ein niedrigeres Aspektverhältnis der Ausscheidungen und damit eine Reduktion der Krümmung der Grenzfläche und somit eine Verlangsamung der Reifungsgeschwindigkeit. Der Reifungskoeffizient hängt von der Grenzflächenenergiedichte ab durch  $K \propto A(\Gamma) \cdot \Gamma$ . Der Zusammenhang zwischen dem dimensionslosen Verhältnis der Energiebeiträge  $Q$  und dem Aspektverhältnis ist  $A \propto Q_A^{3/5}$ , wie aus den Simulationsdaten hervorgeht (siehe Abbildung 31 auf Seite 58), womit sich  $A \propto \Gamma^{-3/5}$  ergibt. Für die Reifung von plattenförmigen  $\gamma''$ -Ausscheidungen ergibt sich insgesamt ein Zusammenhang zwischen der Grenzflächenenergiedichte  $\Gamma$  und dem Reifungskoeffizienten  $K \propto \Gamma^{2/5}$ . Die Grenzflächenenergiedichte beeinflusst die Reifungskinetik von  $\gamma''$ -Ausscheidungen also weniger stark, als im Fall der Reifung kugelförmiger Ausscheidungen, in welchem die Grenzflächenenergiedichte linear in den Reifungsexponenten eingeht.

### 6.3.1 Die temperaturabhängige $\gamma''$ -Reifungskinetik in Simulation und Experiment

Abbildung 53 zeigt die experimentelle Verteilung der  $\gamma''$ -Ausscheidungsgrößen in IN718M nach 6 h und 10 h Auslagerung bei 760°C. Die Verteilungen sind leicht asymmetrisch, wie von der LSW-Theorie vorhergesagt. Die Klassenbreiten sind so gewählt, wie in Abbildung 44 auf Seite 74. Die Standardabweichung, als Maß der Verteilungsbreite, beträgt 0,43  $\langle R \rangle$  bzw. 0,33  $\langle R \rangle$  und liegt damit unter der Breite von 0,46  $\langle R \rangle$ , die in den 2D Phasenfeldsimulationen vorhergesagt wurde (siehe Abbildung 44 b auf Seite 74).

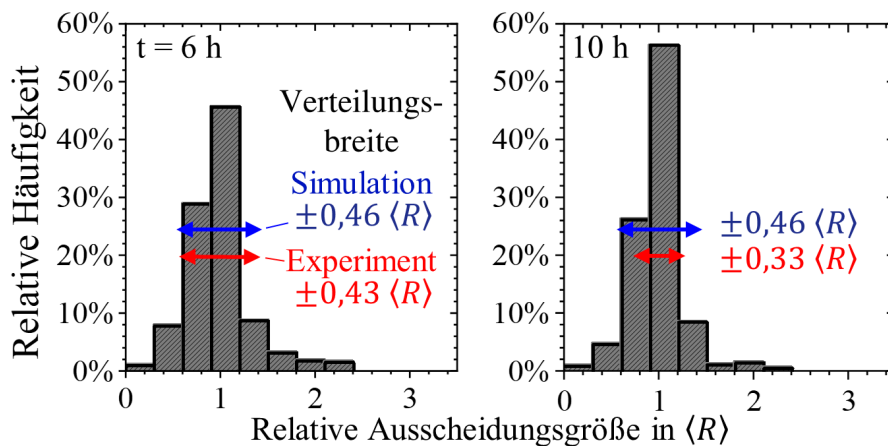


Abbildung 53: Experimentelle Verteilung der Ausscheidungsgrößen nach 6 h bzw. 10 h Auslagerung von IN718M bei 760°C. Die Verteilungsbreiten von Experiment und Simulation (Abbildung 44 b auf Seite 74) sind zum Vergleich dargestellt.

Abbildung 54 zeigt experimentell ermittelte  $\gamma''$ -Reifungskoeffizienten in den Legierungen IN718 [17, 61, 84, 169–172] und IN718M [11] im Temperaturbereich von 650°C – 760°C in Arrheniusauftragung. Der Nb Gehalt der untersuchten Proben liegt im Bereich 4,9 – 5,3 Gew.%, mit Ausnahme von der Arbeit von Sundararaman et al., mit einem Nb Gehalt von 6 Gew.%. Es sind experimentelle Daten der Legierung IN718M gezeigt, die am Lehrstuhl

Metallische Werkstoffe (MW) der Universität Bayreuth von Yueh-Yu Lin ermittelt wurden [173]. Die Ausscheidungsgrößen wurden aus TEM Aufnahmen nach unterschiedlichen Zeiten bei isothermer Auslagerung bestimmt. Es zeigt sich, wie erwartet, ein exponentieller Anstieg der Reifungsgeschwindigkeit mit der Temperatur. Die Reifungskoeffizienten streuen stark mit Unterschieden von mehr als zwei Größenordnungen, vor allem bei hohen Temperaturen. Die Abweichung der Reifungsgeschwindigkeit vom linearen Trend in der Arrheniusauftragung bei hohen Temperaturen ist auf die Größenabhängigkeit der Aspektverhältnisse zurück zu führen, auf Unterschiede in der Nukleationskinetik und eine höhere Koaleszenzrate [158]. Die Aktivierungsenergie der Reifung  $Q_K$  kann aus der Steigung von  $\ln(KT)$  über  $1/T$  bestimmt werden [61, 85]. Diese beträgt für die vorliegenden Daten  $483 \pm 96 \text{ kJ mol}^{-1}$  mit einem Bestimmtheitsmaß von 57% und liegt damit deutlich über der Aktivierungsenergie der Diffusion von Nb in IN718 von  $248 \pm 5 \text{ kJ mol}^{-1}$  [130, 131] und der Aktivierungsenergie des effektiven Diffusionskoeffizienten der Legierung von  $272 \pm 49 \text{ kJ mol}^{-1}$  (siehe Tabelle 5 auf Seite 39). Die Aktivierungsenergie der Ergebnisse vom Lehrstuhl Metallische Werkstoffe liegt bei  $508 \pm 23 \text{ kJ mol}^{-1}$  mit einem Bestimmtheitsmaß von  $> 99\%$ . Die Reifungskinetik der  $\gamma''$ -Ausscheidungen in IN718 weicht damit deutlich vom Verhalten nach der LSW-Theorie ab, die vorhersagt, dass die Aktivierungsenergie der Reifung im Bereich der Aktivierungsenergie der Diffusion liegt [84]. Die hier bestimmte Aktivierungsenergie der Reifung stimmt mit den Ergebnissen einer anderen Studie überein, die ebenfalls eine signifikant erhöhte Aktivierungsenergie der  $\gamma''$ -Reifung, vor allem bei Temperaturen über  $700^\circ\text{C}$  berichtet [158].

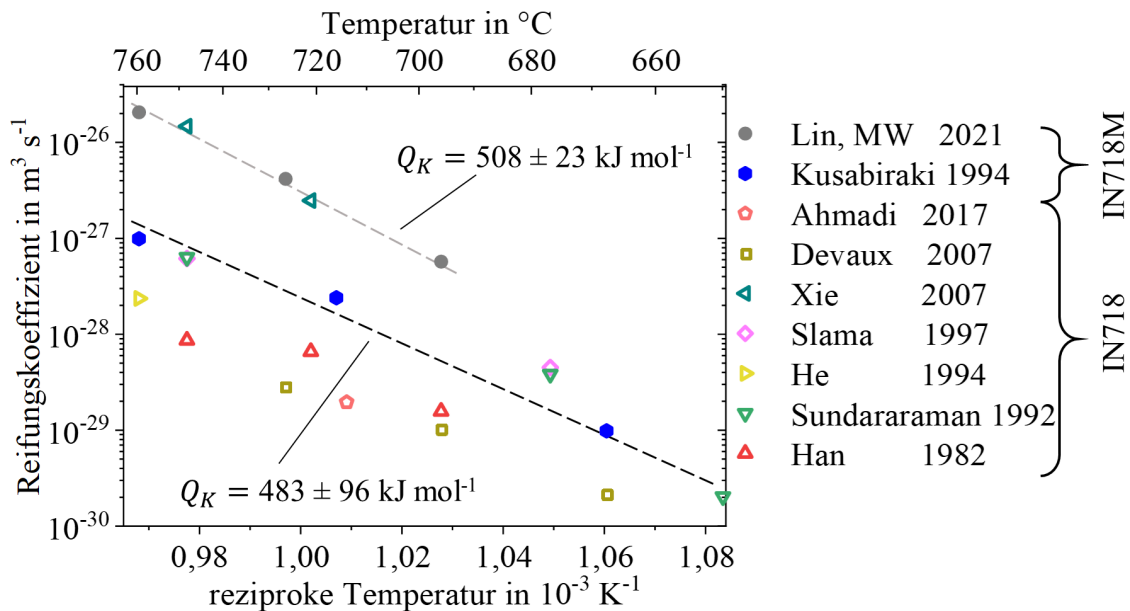


Abbildung 54: Experimentell ermittelte Reifungskoeffizienten  $K$  [11, 17, 61, 84, 169-173] mit Ausgleichsgeraden und Aktivierungsenergie der Reifung  $Q_K$ .

Abbildung 55 zeigt die experimentell ermittelten temperaturabhängigen  $\gamma''$ -Reifungskoeffizienten aus Abbildung 54 zusammen mit den berechneten Reifungskoeffizienten aus dem mLSW Modell mit anisotroper Grenzflächenenergiedichte und aus der LSW-Theorie für plattenförmige Ausscheidungen mit einem konstanten

Aspektverhältnis von 2,8 (siehe Abbildung 46 auf Seite 76). Die Bestimmung der Reifungskoeffizienten ist in Abschnitt 5.2.3 dargestellt. Die Grenzflächenenergiedichte in der LSW-Theorie und im mLSW Modell ist  $\Gamma_A = 340 \text{ mJ m}^{-2}$  in Konsistenz mit den Ergebnissen zur Gleichgewichtsform. Das größenabhängige Aspektverhältnis, welches das mLSW Modell von der LSW-Theorie unterscheidet, ist durch die Anpassung von Gleichung (81) an die experimentellen Aspektverhältnisse berücksichtigt. Die Anisotropie der Grenzflächenenergiedichte ist im mLSW Modell implizit dadurch enthalten, dass die Aspektverhältnisse der Ausscheidungen so gewählt sind, dass sie der Form von Ausscheidungen mit  $\Gamma_C = 240 \text{ mJ m}^{-2}$  entsprechen (siehe Abbildung 50 auf Seite 86). Zur Beschreibung der Diffusion im System wird der effektive Diffusionskoeffizient  $\tilde{D}$  der Legierung verwendet, welcher den Einfluss langsam diffundierender Elemente berücksichtigt (siehe Tabelle 5 auf Seite 39). Die Ungenauigkeit der simulierten Reifungskoeffizienten liegt jeweils bei etwa einem Faktor von zehn, was sich aus der Streuung der Diffusionskoeffizienten ergibt (siehe Abbildung 18 b auf Seite 39).

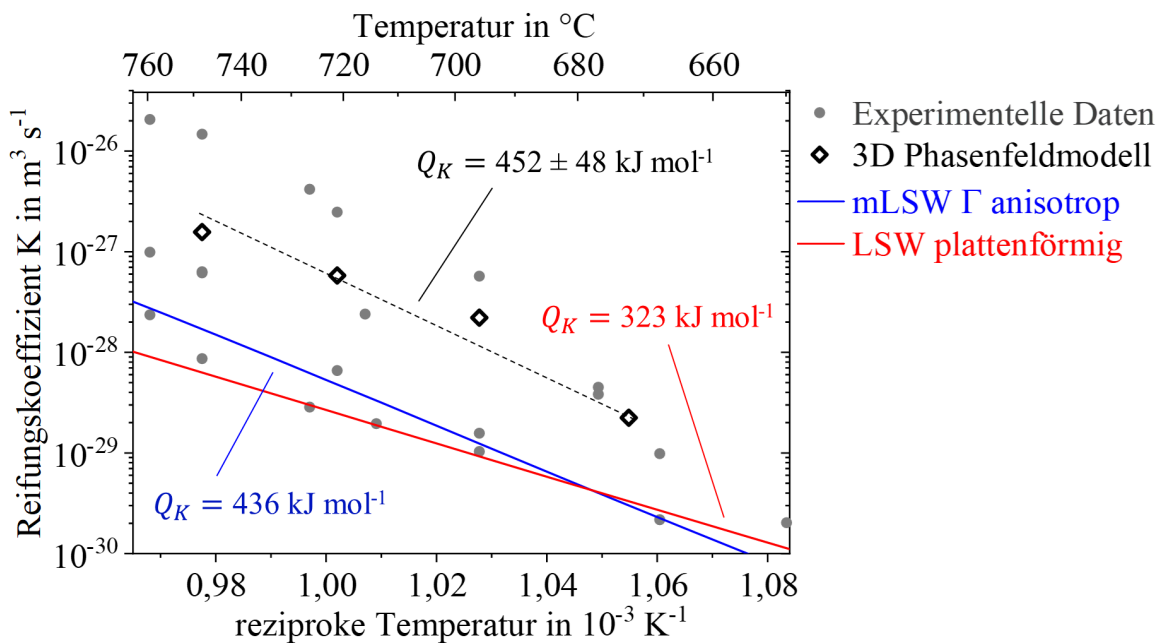


Abbildung 55: Reifungskoeffizienten ermittelt durch das 3D Phasenfeldmodell (schwarz), die LSW-Theorie (rot) und durch das mLSW Modell (blau) im Vergleich zu den experimentellen Daten aus Abbildung 54 (graue Punkte).

In Abbildung 55 sind außerdem Reifungskoeffizienten aus vier 3D Phasenfeldstudien gezeigt. Die Konfiguration der Simulationsdomäne entspricht der in Abbildung 45 auf Seite 75 dargestellten Konfiguration mit einer Kantenlänge der würfelförmigen Domäne von 650 nm. Die Grenzflächenenergiedichte ist ebenfalls anisotrop gewählt mit  $\Gamma_A = 340 \text{ mJ m}^{-2}$  und  $\Gamma_C = 240 \text{ mJ m}^{-2}$ . Die elastischen Konstanten sind anisotrop, phasen- und temperaturabhängig. Die thermodynamischen Daten sind ebenfalls phasen- und temperaturabhängig. Als Diffusionskoeffizient wird  $\tilde{D}$  angenommen. Die Simulationen wurden solange durchgeführt bis noch 40 Ausscheidungen in der Domäne waren. Nach unserem Kenntnisstand ist diese Beschreibung der  $\gamma''$ -Reifung in einem 3D Sharp Phase-Field Modell mit tetragonaler

Anisotropie des elastischen Tensors und mit anisotroper Grenzflächenenergiedichte weltweit erstmalig.

Die LSW-Theorie und das mLSW Modell liefern Reifungskoeffizienten, die im unteren Bereich der experimentellen Daten liegen. Die LSW-Theorie unter Annahme eines konstanten Aspektverhältnis der plattenförmigen Ausscheidungen liefert bei Temperaturen über 670°C niedrigere Reifungskoeffizienten, als das mLSW Modell. Die Temperaturabhängigkeit der Reifungskinetik wird über die Aktivierungsenergie  $Q_K$  der Reifung beschrieben. Für das mLSW Modell ergibt sich eine Aktivierungsenergie von 436 kJ mol<sup>-1</sup>, die dem experimentell beobachteten Wert von 483 kJ mol<sup>-1</sup> gut entspricht. Die LSW-Theorie liefert eine signifikant schlechtere Vorhersage von 323 kJ mol<sup>-1</sup>, die im Bereich der Aktivierungsenergie der Diffusion der Legierungselemente liegt. Die Reifungskoeffizienten aus dem Phasenfeldmodell liegen um etwa einen Faktor von 5 höher, als die des mLSW Modells. Aus den 3D Phasenfeldsimulationen lässt sich eine Aktivierungsenergie von  $452 \pm 48$  kJ mol<sup>-1</sup> bestimmen, welche ähnlich dem mLSW Modell ebenfalls sehr gut im Bereich der experimentellen Vorhersage liegt. Auch die Aktivierungsenergie von  $508 \pm 22$  kJ mol<sup>-1</sup> aus den Daten vom Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth kann damit nachvollzogen werden.

Es zeigt sich, dass zur Beschreibung der temperaturabhängigen Reifungskinetik der Einfluss der größenabhängigen Ausscheidungsgeometrie berücksichtigt werden muss. Die Materialparameter, die in der LSW-Theorie berücksichtigt werden, reichen nicht aus, um die Temperaturabhängigkeit der Reifungskinetik zu erklären. Neben der Formänderung führt die elastische Energie im System, die im mLSW Modell nicht explizit enthalten ist, ebenfalls zu Abweichungen von der klassischen Reifungskinetik. Das wird deutlich in Abbildung 42 auf Seite 71 und beim Vergleich von Reifungskoeffizienten aus Phasenfeldsimulationen und aus dem mLSW Modell in Abbildung 55. Zur vollständigen quantitativen Beschreibung der Ausscheidungsreifung ist das 3D Phasenfeldmodell am besten geeignet.

Aus der Anpassung der 3D Phasenfeldsimulationen, welche Kohärenzspannungen durch die anisotropen und phasenabhängigen elastischen Konstanten und die anisotrope Gitterfehlpassung berücksichtigt, kann die Energiedichte der  $\gamma/\gamma''$ -Grenzfläche bestimmt werden. Eine Grenzflächenenergiedichte von  $240 \pm 33$  mJ m<sup>-2</sup> liefert im Temperaturbereich zwischen 650°C – 760°C konsistente Vorhersagen zur Ausscheidungsmorphologie, der Reifungskinetik und deren Temperaturabhängigkeit, die mit den jeweiligen experimentellen Daten übereinstimmen. Dieser Wert der Grenzflächenenergiedichte entspricht etwa der kohärenten Grenzflächenenergiedichte für tetragonale  $\theta'$ -Ausscheidungen im System Al-Cu bei der selben homologen Temperatur von etwa 0,6 [165, 174, 175]. Die CalPhaD Datenbank mc\_ni\_v2.011 sagt für  $\gamma''$ -Ausscheidungen in IN718 eine Grenzflächenenergiedichte von 220 mJ m<sup>-2</sup> voraus [149, 172]. Es existiert eine Reihe von Hinweisen, dass die Grenzflächenenergiedichte von Grenzflächen, welche um 90° zur tetragonalen Richtung verkippt sind um den Faktor 1,2 bis 1,6 höher ist als die der Deckfläche.

### 6.3.2 Koaleszenz von $\gamma''$ -Ausscheidungen

Abbildung 56 a zeigt eine simulierte 2D Mikrostruktur aus einer Reifungssimulation mit dem Phasenfeldmodell. Neben der bereits diskutierten schrägen Anordnung der Ausscheidungen fallen ebenfalls Ausscheidungen auf, die deutlich von der elliptischen Ausscheidungsform abweichen und lokale konkave Stellen aufweisen. Diese Ausscheidungsformen entstehen während der Reifung durch Koaleszenz zweier Ausscheidungen [27]. Wächst eine Ausscheidung, die in  $\vec{a}$ -Richtung nahe an einer zweiten Ausscheidung liegt, dann kommt es vor, dass die benachbarten Ausscheidungen zusammenwachsen und eine gemeinsame Grenzfläche bilden. Dieser Vergrößerungsmechanismus grenzt sich klar von der Reifung ab, bei welcher sich eine Ausscheidung auflöst ohne mit der wachsenden Ausscheidung eine gemeinsame Grenzfläche zu bilden (siehe Abbildung 9 auf Seite 17). Dieses Zusammenwachsen von Ausscheidungen führt, anders als die Reifung, zeitweise zu den beobachteten konkaven Ausscheidungsformen und der Ausbildung einer Antiphasengrenze, wenn unterschiedliche Translationsvarianten der Phase aufeinander treffen. Abbildung 56 b zeigt einen Ausschnitt aus einer IN718M Mikrostrukturaufnahme aus dem Rasterelektronenmikroskop (SEM) von Yueh-Yu Lin am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth, in welcher man vergleichbare Ausscheidungsformen beobachtet [32]. Einzelne Ausscheidungen sind stark elongiert oder weisen Knicke wie in der Simulation auf. Die Koaleszenz der  $\gamma''$ -Ausscheidungen beeinflusst die Reifungskinetik im Phasenfeldmodell, da der Effekt des Zusammenwachsens mit in die Reifungskinetik einfließt und zu der beobachteten, von der LSW-Theorie abweichenden, Ausscheidungsgrößenverteilung führt [158].

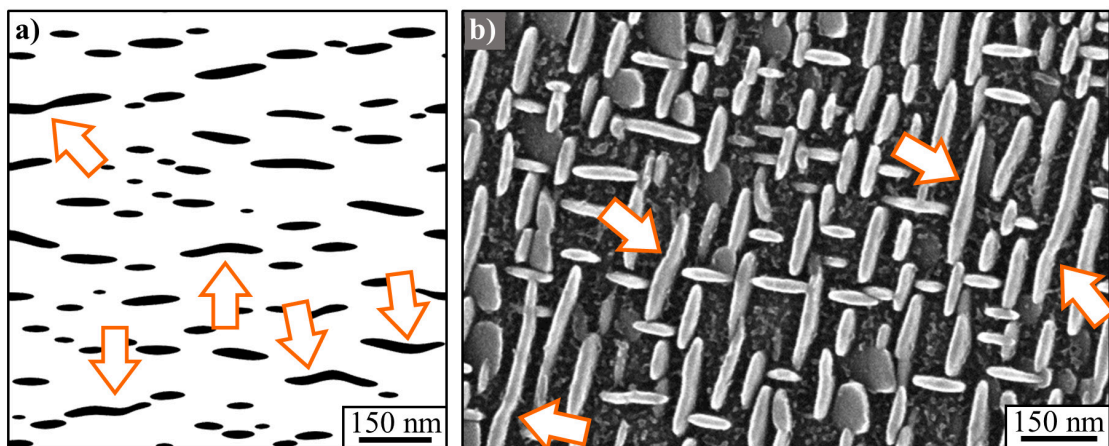


Abbildung 56: Ausscheidungsform durch Koaleszenz von Ausscheidungen a) im Phasenfeldmodell und b) in SEM Aufnahmen der Legierung IN718M. Bereiche in denen Ausscheidungen zusammengewachsen sind und wo konkave Stellen auftreten sind durch Pfeile gekennzeichnet.

Abbildung 56 legt ebenfalls nahe, dass die Koaleszenzrate im Phasenfeldmodell überschätzt wird. Der  $\gamma''$ -Flächenanteil liegt in der experimentellen Mikrostruktur signifikant höher und der Bildausschnitt ist größer gewählt. Trotzdem sind die koagulierten Ausscheidungen zahlenmäßig weniger und die Abweichung von der Gleichgewichtsform ist weniger stark ausgeprägt. Eine Überschätzung der Koaleszenzrate zwischen den Ausscheidungen führt zu



einer Überschätzung der Reifungskinetik. Eine Ursache hierfür ist Breite der Grenzfläche im Phasenfeldmodell, die größer ist als in der Realität.

### 6.3.3 Ausscheidungsanordnung während der Reifung

Abbildung 57 a - c zeigt die simulierte 2D  $\gamma''$ -Mikrostruktur nach 5 bzw. 15 h Reifung bei 725°C im Vergleich zum Ausgangszustand. Das Simulationssetup entspricht dem aus Abbildung 41 auf Seite 70. Der Einfluss von Gitterfehlpassung und anisotroper Grenzflächenenergiedichte wird berücksichtigt. Die zunächst hauptsächlich entlang der kartesischen Hauptachsen der Simulationsdomäne angeordneten Ausscheidungen reifen zu einer Mikrostruktur mit Ausscheidungen, die auf schrägen Linien angeordnet sind. In der Abbildung wird der Winkel der Anordnungen von  $35 \pm 7^\circ$  zur  $\vec{a}$ -Richtung durch blaue Linien angedeutet.

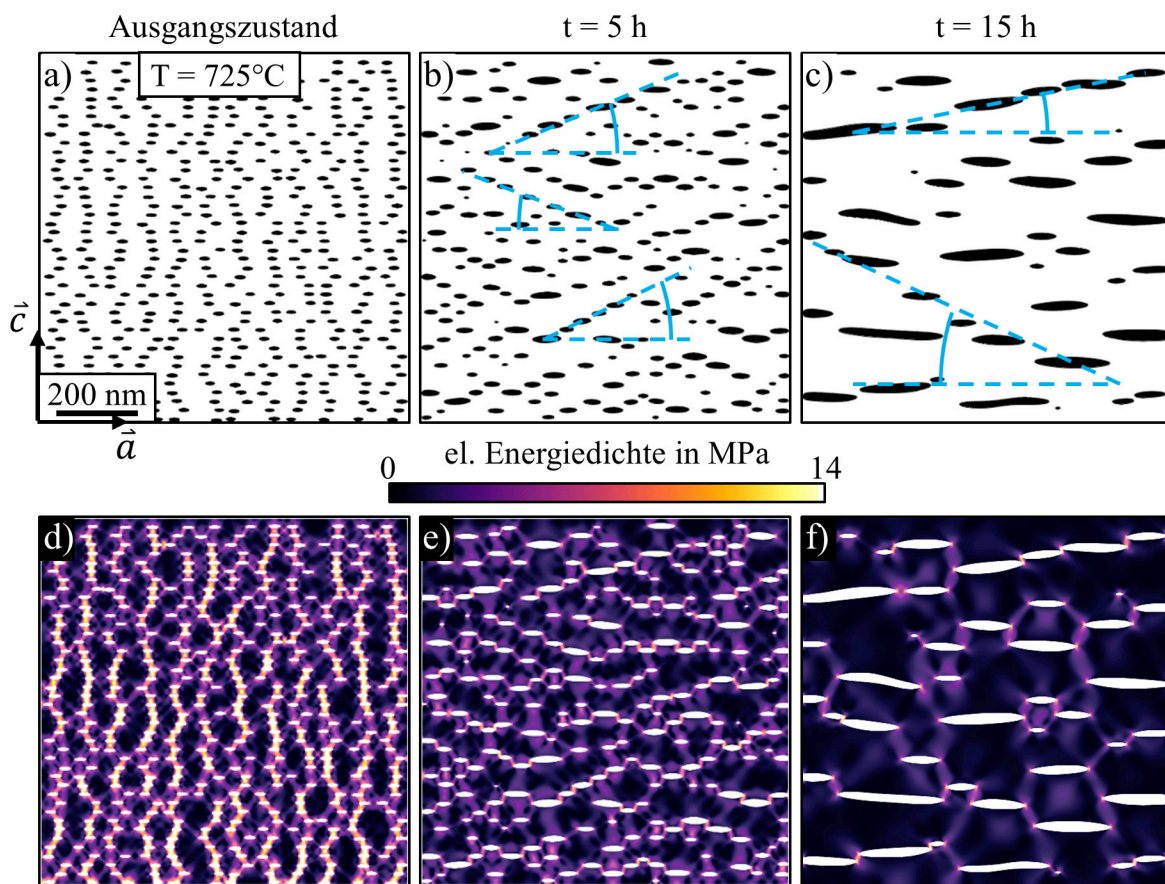


Abbildung 57: a) Simulierte  $\gamma''$ -Mikrostruktur vor und b), c) während der Reifung bei 725°C zu mit schräg angeordneten Ausscheidungen. d) - e) Elastische Energiedichte in der Matrix.

Abbildung 57 d - e zeigt außerdem die Verteilung der elastischen Energiedichte in der Matrix. Im Ausgangszustand bewirken die ungünstig zueinander orientierten Ausscheidungen stellenweise hohe elastische Energiedichten, die während der Reifung abgebaut werden. Elastisch ungünstig orientierte Ausscheidungen lösen sich während der Reifung bevorzugt auf. Die Verteilung der elastischen Energiedichte durch die Gitterfehlpassung der Ausscheidungen spiegelt die Ergebnisse aus Abbildung 35 und Abbildung 36 wieder (Seiten 63 und 64), die zeigen, dass schräge Anordnungen der Ausscheidungen energetisch günstiger sind.

Abbildung 58 zeigt parallel angeordnete  $\gamma''$ -Ausscheidungen einer Orientierungsvariante. Abbildung 58 a zeigt einen Schnitt durch eine 3D Simulationsdomäne nach einer Reifungssimulation bei 725°C (siehe Abbildung 45 auf Seite 75). In die Darstellung gehen Ausscheidungen, die unterhalb der Betrachtungsebene liegen durch transparente Darstellung bis in eine Tiefe von 100 nm ein. Abbildung 58 b und c zeigen TEM Aufnahmen aus Proben, die unter einachsiger Last ausgelagert wurden, um eine Variantenselektion durchzuführen [38, 41]. Abbildung 58 d zeigt eine SEM Aufnahme von  $\gamma''$ -Ausscheidungen, die von Yueh-Yu Lin am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth entstand [18].

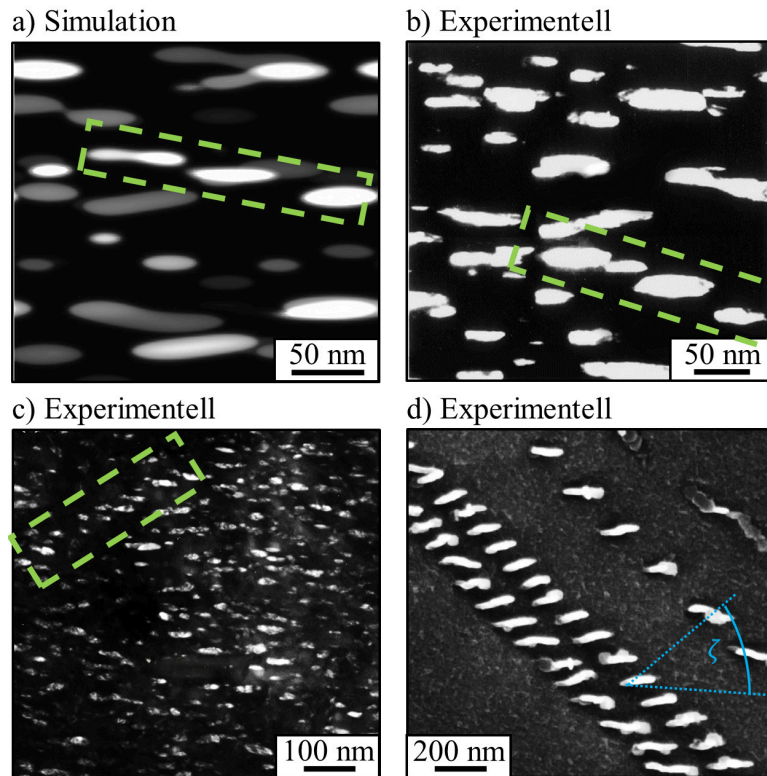


Abbildung 58: Schräge Anordnung von  $\gamma''$ -Ausscheidungen einer einzelnen Orientierungsvariante aus a) einem Schnitt mit Tiefeninformation durch eine 3D Phasenfelddomäne b) TEM Aufnahmen von von Gao et al. [38] und c) von Zhang et al. [41] und d) SEM Aufnahme von Yueh-Yu Lin, Lehrstuhl Metallische Werkstoffe der Universität Bayreuth [18].

Die Ausscheidungen sind entlang einer Versetzung auf einer  $\langle 111 \rangle$ -Ebene ausgeschieden. Aus den Betrachtungen zur Gleichgewichtsanzordnung der  $\gamma''$ -Ausscheidungen in einer regelmäßigen Überstruktur in Abbildung 38 auf Seite 66 ergibt sich, dass die energetisch günstigste Anordnung von parallel orientierten Ausscheidungen eine sechseckige Überstruktur ist. In den Phasenfeldsimulationen der Reifung in Abbildung 57 zeigt sich ebenfalls eine Anordnung der Ausscheidungen in schrägen Anordnungen. Ungünstig angeordnete Ausscheidungen lösen sich während der Reifung bevorzugt auf. In den experimentellen Mikrostrukturaufnahmen aus Abbildung 58 sind jeweils Stellen durch grüne Umrandungen markiert, an denen Anordnungen zu sehen sind, wie sie durch die Simulationsergebnisse vorhergesagt werden. Die experimentell beobachteten Ausscheidungen sind in Winkeln von 20° bis 45° angeordnet.

### 7 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Simulation der Mikrostrukturvergrößerung in der Nickellegierung IN718. Diese industriell relevante Hochtemperaturlegierung wird in Gasturbinen eingesetzt, wo sie Temperaturen bis zu 650°C ausgesetzt wird. Ihre vorteilhaften mechanischen Eigenschaften erhält die Legierung zu einem großen Teil durch die Ausscheidung der tetragonalen intermetallischen  $\gamma''$ -Phase. Die Phase tritt in Form von kohärenten, plattenförmigen Ausscheidungen auf, die in einer Ni-reichen Mischkristallmatrix eingebettet sind. Während der Auslagerung bei hohen Temperaturen lösen sich durch Ostwaldreifung kleine Ausscheidungen auf und große Ausscheidungen wachsen an, was sich letztlich auf die Lebensdauer der Legierung auswirkt. Dieser Mechanismus der Mikrostrukturvergrößerung wurde in dieser Arbeit in Simulationsstudien quantitativ untersucht und die Ergebnisse mit experimentellen Daten aus der Literatur und aus der Arbeit von Yueh-Yu Lin am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe [18, 32, 173] validiert.

#### **Die Sharp Phase-Field Methode (SPFM)**

Zur physikalischen Beschreibung der Mikrostrukturentwicklung wird ein 3D Phasenfeldmodell basierend auf einer phänomenologischen Energiedichte verwendet. Die Verwendung der neuartigen Sharp Phase-Field Methode (SPFM) für translationsinvariante Grenzflächen vermindert den Rechenaufwand um mehr als zwei Größenordnungen. Erstmals wird hier eine SPFM Formulierung für eine orientierungsabhängige Grenzflächenenergiedichte vorgestellt. Es werden außerdem spezifische Randbedingungen eingeführt, welche die Beschreibung von periodischen Überstrukturen bei hohen  $\gamma''$ -Volumengehalten ermöglicht.

Neben der Grenzflächenenergie geht auch die elastische Energie durch die Gitterfehlpassung zwischen Ausscheidung und Matrix in das Modell ein. Die Gitterfehlpassung der  $\gamma''$ -Phase ist stark anisotrop. In tetragonaler Richtung ist die Fehlpassung um etwa einen Faktor 25 größer als in den beiden anderen Gitterrichtungen. Der phasenabhängige Elastizitätstensor ist ebenfalls anisotrop, um eine genaue Beschreibung des Spannungszustandes im Gefüge zu erhalten. Die Zeitabhängigkeit der Phasenumwandlung wird durch die Diffusion der Legierungselemente beschrieben. Die temperaturabhängigen Daten zur Beschreibung der Gefügevergrößerung stammen aus verschiedenen Quellen. Die Auswirkung der Streuungen dieser Daten wird diskutiert.

Neben dem Phasenfeldmodell werden weitere analytische Modelle angewandt, um die Ergebnisse zu erklären.

#### **Die Form und Anordnung der Ausscheidungen**

Die Form einer  $\gamma''$ -Ausscheidung wird durch ihre Rundheit und durch das Aspektverhältnis zwischen Durchmesser und Dicke der Platte beschrieben. Die Gleichgewichtsform einer Ausscheidung minimiert die Summe aus elastischer Energie und Grenzflächenenergie und ist abhängig von der Größe der Ausscheidung. Mit wachsender Ausscheidungsgröße wird die Form zunehmend elastisch dominiert und ihr Aspektverhältnis steigt. Kleine Ausscheidungen

sind durch den Einfluss der Grenzflächenenergie dominiert und daher leicht gestaucht und runder. Die Plattenform geht hauptsächlich auf die Anisotropie der Gitterfehlpassung zurück. Anisotropie der elastischen Konstanten und der Grenzflächenenergiedichte haben einen deutlich geringeren Einfluss. Ab einem Verhältnis der richtungsabhängigen Gitterfehlpassungen  $\varepsilon_3/\varepsilon_1 = 6$  führt eine weitere Erhöhung des Verhältnisses zu keiner weiteren Erhöhung des Aspektverhältnis einer Ausscheidung.

Bei einem realistischen  $\gamma''$ -Volumenanteil von 12% spielen elastische Wechselwirkungen zwischen den Ausscheidungen eine entscheidende Rolle in der Mikrostrukturbildung, sowohl im Hinblick auf die Ausscheidungsanordnung als auch auf die Ausscheidungsform. Es konnte gezeigt werden, dass das Aspektverhältnis der Ausscheidungen mit zunehmendem Phasenanteil steigt, und, dass gleichzeitig die Rundheit der Ausscheidungsformen abnimmt. Die experimentell beobachtete eckige Form der Ausscheidungen lässt sich unter Berücksichtigung der Wechselwirkung zwischen den Ausscheidungen beschreiben. Es wurde außerdem erstmalig gezeigt, dass eine schräge Anordnung der Ausscheidungen zueinander, wie sie experimentell beobachtet wird, die energetisch günstigste regelmäßige Anordnung von  $\gamma''$ -Ausscheidungen ist.

### **Das Reifungsverhalten der $\gamma''$ -Phase**

Erstmals werden 3D Phasenfeldsimulationen der  $\gamma''$ -Reifung bei verschiedenen Temperaturen vorgestellt, unter Berücksichtigung von phasenabhängiger, tetragonaler Elastizität und anisotroper Grenzflächenenergiedichte. Die Reifungskinetik der plattenförmigen Ausscheidungen hängt stark von deren größenabhängiger Form ab. Die ausgeprägte Krümmung der Grenzfläche entlang des Randes der Ausscheidungen führt zu einer beschleunigten Reifungskinetik. Zur temperaturabhängigen Beschreibung des Reifungskoeffizienten ist es notwendig, die implizite Zeitabhängigkeit der Ausscheidungsform während der Reifung zu berücksichtigen. Das Wachstum der Ausscheidungen während der Reifung führt zu größeren Aspektverhältnissen der Ausscheidungen und damit zu einem kontinuierlich steigenden Reifungskoeffizienten. Hierdurch ergibt sich ein Exponent der Reifung von 2,3. Nur unter Berücksichtigung dieses Effektes kann die experimentell beobachtete Temperaturabhängigkeit der  $\gamma''$ -Reifung mit einer Aktivierungsenergie von  $508 \pm 23 \text{ kJ mol}^{-1}$  reproduziert werden.

Die Phasengrenzflächenenergie zwischen Matrix und  $\gamma''$ -Phase wirkt sich in zweierlei Hinsicht auf die Mikrostrukturbildung aus. Wenn die Grenzflächenenergie steigt, nimmt das Aspektverhältnis der Ausscheidungen, und damit auch die Reifungsgeschwindigkeit, ab. Andererseits hängt die Reifungskinetik auch vom Abbau der Grenzflächenenergie ab. Durch konsistente Anpassung der Grenzflächenenergiedichte an die experimentell beobachteten Ausscheidungsformen und an die Reifungskinetik ergibt sich eine Grenzflächenenergiedichte von  $240 \pm 33 \text{ mJ m}^{-2}$  auf der Deckfläche der plattenförmigen Ausscheidungen. Im Zuge dieser Arbeit wurde abgeschätzt, dass die Grenzflächenenergiedichte der Randfläche einer  $\gamma''$ -Ausscheidung bis zu 40% höher liegt als die der Deckfläche. Es ergibt sich damit eine Grenzflächenenergiedichte der Randfläche von  $340 \text{ mJ m}^{-2}$ .

### 8 Summary

The present work deals with the simulation of microstructure coarsening in the nickel alloy IN718. This industrially relevant high-temperature alloy is used in gas turbines, where it is subjected to temperatures up to 650°C. The alloy obtains its advantageous mechanical properties to a large extent from the precipitation of the tetragonal intermetallic  $\gamma''$  phase. The phase occurs as coherent, plate-shaped precipitates embedded in a Ni rich solid solution matrix. During aging at high temperatures, Ostwald ripening causes small precipitates to dissolve and large precipitates to grow, ultimately affecting the alloy's lifetime. This mechanism of microstructure coarsening was quantitatively investigated in simulation studies in this work and the results were validated with experimental data from the literature and from the work of Yueh-Yu Lin at Metals and Alloys, University of Bayreuth [18, 32, 173].

#### **The Sharp Phase-Field Method (SPFM)**

A 3D phase-field model based on a phenomenological energy density is used to physically describe the microstructure evolution. The use of the novel Sharp Phase-Field Method (SPFM) for translation-invariant interfaces reduces the computational effort by more than two orders of magnitude. For the first time, an SPFM formulation for an orientation-dependent interfacial energy density is presented here. Specific boundary conditions are also introduced, which allow for the description of periodic superstructures at high  $\gamma''$  volume contents.

In addition to the interfacial energy, the elastic energy due to the lattice misfit between the precipitate and the matrix is considered in the model. The lattice misfit of the  $\gamma''$  phase is strongly anisotropic. In the tetragonal direction, the misfit is about a factor of 25 larger than in the other two lattice directions. The phase-dependent tensor of elasticity is also anisotropic to provide an accurate description of the stress state in the microstructure. The time dependence of the phase transformation is described by the diffusion of the alloying elements. The temperature-dependent data describing the microstructure coarsening comes from various sources. The effect of the scattering of the data is discussed.

In addition to the phase field model, other analytical models are applied to explain the results.

#### **The shape and arrangement of the precipitates**

The shape of a  $\gamma''$  precipitate is described by its roundness and by the aspect ratio between the diameter and thickness of the plate. The equilibrium shape of a precipitate minimizes the sum of elastic energy and interfacial energy and depends on the size of the precipitate. As the precipitate size increases, the shape becomes more elastically dominated, and its aspect ratio increases. Small precipitates are dominated by the influence of interfacial energy. Therefore they tend to be more compressed and rounded. The plate shape is mainly due to the anisotropy of the lattice misfit. Anisotropy of elastic constants and interfacial energy density have

significantly less influence. Above a ratio between the anisotropic lattice misfit  $\varepsilon_3/\varepsilon_1 = 6$ , a further increase in the ratio no longer leads to higher aspect ratios of the precipitates.

At a realistic  $\gamma''$  volume fraction of 12%, elastic interactions between precipitates play a crucial role in microstructure formation, both in terms of precipitate arrangement and precipitate shape. It was shown that the aspect ratio of the precipitates increases with the  $\gamma''$  volume fraction and that the roundness of the precipitate shapes decreases at the same time. The experimentally observed edgy shape of the precipitates can be described by considering the interaction between the precipitates. It was also shown that an oblique arrangement of the precipitates is the energetically most favorable regular arrangement of  $\gamma''$  precipitates, as experimentally observed.

### **The ripening behavior of the $\gamma''$ phase**

For the first time, 3D phase field simulations of  $\gamma''$  ripening at different temperatures are presented, that take into account phase-dependent tetragonal elasticity and anisotropic interfacial energy density. The ripening kinetics of the plate-shaped precipitates are strongly connected to their size-dependent shape. The pronounced curvature of the interface along the edge of the precipitates leads to accelerated ripening kinetics. For the temperature-dependent description of the ripening coefficient, it is necessary to consider the implicit time dependence of the precipitate shape during ripening. The growth of the precipitates during ripening leads to larger aspect ratios of the precipitates, thus to a continuously increasing ripening coefficient. This results in an exponent of ripening of 2.3. Only by taking this effect into account, the experimentally observed temperature dependence of  $\gamma''$  ripening with an activation energy of  $508 \pm 23 \text{ kJ mol}^{-1}$  can be reproduced.

The interfacial energy between matrix and  $\gamma''$  phase affects the microstructure formation in two ways. When the interfacial energy increases, the aspect ratio of the precipitates decreases and so does the ripening kinetics. On the other hand, the ripening kinetics also depend on the dissipation of interfacial energy. Consistently fitting the interfacial energy density to the experimentally observed precipitate shapes and to the ripening kinetics yields an interfacial energy density of  $240 \pm 33 \text{ mJ m}^{-2}$  on the top surface of the plate-shaped precipitates. In the course of this work, it was estimated that the interfacial energy density of the circumferential surface of a  $\gamma''$  precipitate is up to 40% higher than that of the top surface. This results in an interfacial energy density of the circumferential surface of  $340 \text{ mJ m}^{-2}$ .

### 9 Literaturverzeichnis

- [1] Bundesministerium für Wirtschaft und Energie; *7. Energieforschungsprogramm der Bundesregierung – Innovationen für die Energiewende*, (2018) verfügbar unter: [bmwi.de/Redaktion/DE/Publikationen/Energie/7-energieforschungsprogramm-der-bundesregierung.pdf](https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Publikationen/Energie/7-energieforschungsprogramm-der-bundesregierung.pdf); Zugriff am 22.02.2021.
- [2] Bundesministerium für Wirtschaft und Energie; *Bundesbericht Energieforschung 2020 – Forschungsförderung für die Energiewende*, (2020) verfügbar unter: [bmwi.de/Redaktion/DE/Publikationen/Energie/bundesbericht-energieforschung-2020.pdf](https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Publikationen/Energie/bundesbericht-energieforschung-2020.pdf); Zugriff am 22.02.2021.
- [3] Die Bundesregierung; *Die Luftfahrtstrategie der Bundesregierung*, (2014) verfügbar unter: [bmwi.de/Redaktion/DE/Publikationen/Technologie/luftfahrtstrategie-der-bundesregierung.pdf](https://www.bmwi.de/Redaktion/DE/Publikationen/Technologie/luftfahrtstrategie-der-bundesregierung.pdf); Zugriff am 22.02.2021.
- [4] Pollock T.M.; *Alloy design for aircraft engines*; *Nature Materials* 15 (2016), 809-815.
- [5] Murty B.S., Yeh J.W., Ranganathan S., Bhattacharjee P.P.; *Alloy design in the 21st century: ICME, materials genome, and artificial intelligence strategies: High-Entropy Alloys*. Elsevier, (2019) 81-101.
- [6] R.E. Schafrik, D.D. Ward, and J.R. Groh; *Application of Alloy 718 in GE Aircraft Engines: Past, Present and Next Five Years: Superalloys 718, 625, 706 and Various Derivatives* (2001).
- [7] D.F. Paulonis, and J.J. Schirra; *Alloy 718 at Pratt & Whitney – Historical Perspective and Future Challenges: Superalloys 718, 625, 706 and Various Derivatives* (2001).
- [8] Trosch T., Strößner J., Völkl R., Glatzel U.; *Microstructure and mechanical properties of selective laser melted Inconel 718 compared to forging and casting*; *Materials Letters* 164, (2016) 428-431.
- [9] Hardy M.C., Detrois M., McDevitt E.T., Argyrakis C., Saraf V., Jablonski P.D., Hawk J.A., Buckingham R.C., Kitaguchi H.S., Tin S.; *Solving Recent Challenges for Wrought Ni-Base Superalloys*; *Metallurgical and Materials Transactions A* 51, (2020) 2626-2650.
- [10] Special Metals Corporation; *Inconel Alloy 718*, (2007) verfügbar unter: [specialmetals.com/assets/smc/documents/inconel\\_alloy\\_718.pdf](https://www.specialmetals.com/assets/smc/documents/inconel_alloy_718.pdf); Zugriff am 22.02.2021.

- [11] Kusabiraki K., Hayakawa I., Ikeuchi S., Ooka T.; *Morphology of  $\gamma''$  precipitates in Ni-18Cr-16Fe-5Nb-3Mo Alloy*; Iron and Steel, (1994) 348-352.
- [12] Cozar R., Pineau A.; *Morphology of  $\gamma'$  and  $\gamma''$  precipitates and thermal stability of Inconel 718 type alloys*; Metallurgical Transactions 4, (1973) 47-59.
- [13] Kirman I., Warrington D.H.; *The Precipitation of  $Ni_3Nb$  Phases in a Ni-Fe-Cr-Nb Alloy*; Metallurgical Transactions 1, (1970) 2667-2675.
- [14] Bäker M., Rösler J.; *Influence of transition group elements on the stability of the  $\gamma''$ -phase in nickelbase alloys*; Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, (2020).
- [15] Kulo N., He S., Ecker W., Pippan R., Antretter T., Razumovskiy V.I.; *Thermodynamic and mechanical stability of  $Ni_3X$ -type intermetallic compounds*; Intermetallics 114, (2019) 106604.
- [16] Paulonis D.F., Oblak J.M., Duvall D.S.; *Precipitation in Nickel-base Alloy 718*; Amer. Soc. Metals, Trans. Quart. 62, (1969) 611-622.
- [17] Slama C., Servant C., Cizeron G.; *Aging of the Inconel 718 alloy between 500 and 750 °C*; Journal of Materials Research 12, (1997) 2298-2316.
- [18] Lin Y.-Y., Schleifer F., Fleck M., Glatzel U.; *On the interaction between  $\gamma''$  precipitates and dislocation microstructures in Nb containing single crystal nickel-base alloys*; Materials Characterization 165, (2020) 110389.
- [19] Detor A.J., DiDomizio R., Sharghi-Moshtaghin R., Zhou N., Shi R., Wang Y., McAllister D.P., Mills M.J.; *Enabling Large Superalloy Parts Using Compact Coprecipitation of  $\gamma'$  and  $\gamma''$* ; Metallurgical and Materials Transactions A 49, (2018) 708-717.
- [20] Shi R., McAllister D.P., Zhou N., Detor A.J., DiDomizio R., Mills M.J., Wang Y.; *Growth behavior of  $\gamma'/\gamma''$  coprecipitates in Ni-Base superalloys*; Acta Materialia 164, (2019) 220-236.
- [21] Phillips P.J., McAllister D., Gao Y., Lv D., Williams R.E., Peterson B., Wang Y., Mills M.J.; *Nano  $\gamma'/\gamma''$  composite precipitates in Alloy 718*; Applied Physics Letters 100, (2012) 1-4.



- [22] Mignanelli P.M., Jones N.G., Pickering E.J., Messé O.M., Rae C.M., Hardy M.C., Stone H.J.; *Gamma-gamma prime-gamma double prime dual-superlattice superalloys*; Scripta Materialia 136, (2017) 136-140.
- [23] Mignanelli P.M., Jones N.G., Hardy M.C., Stone H.J.; *On the Time-Temperature-Transformation Behavior of a New Dual-Superlattice Nickel-Based Superalloy*; Metallurgical and Materials Transactions A 49, (2018) 699-707.
- [24] Chaturvedi M.C., Han Y.-F.; *Strengthening mechanism in Inconel 718 superalloy*; Metal Science 17, (1983) 145-149.
- [25] Lv D.C., McAllister D., Mills M.J., Wang Y.; *Deformation mechanisms of D0<sub>22</sub> ordered intermetallic phase in superalloys*; Acta Materialia 118, (2016) 350-361.
- [26] Oblak J.M., Paulonis D.F., Duvall D.S.; *Coherency Strengthening in Ni Base Alloys Hardened by D0<sub>22</sub>  $\gamma''$  Precipitates*; Metall. Trans. 5, (1974) 143.
- [27] Suave L.M., Cormier J., Villechaise P., Soula A., Hervier Z., Bertheau D., Laigo J.; *Microstructural Evolutions During Thermal Aging of Alloy 625: Impact of Temperature and Forming Process*; Metallurgical and Materials Transactions A 45, (2014) 2963-2982.
- [28] Han B., Wei J., He F., Da Chen, Wang Z., Hu A., Zhou W., Kai J.; *Elemental Phase Partitioning in the  $\gamma$ - $\gamma''$  Ni<sub>2</sub>CoFeCrNb<sub>0.15</sub> High Entropy Alloy*; Entropy 20, (2018) 910.
- [29] Kozakai T., Aoki C., Moritani T., Doi M.; *Precipitation of Gamma-Prime and Gamma-Double Prime Coherent Phases in Three-Phase Ni-V-Si Alloys*; Materials Science Forum 539-543, (2007) 3036-3041.
- [30] Suzuki A., Kojima H., Matsuo T., Takeyama M.; *Alloying effect on stability of multi-variant structure of Ni<sub>3</sub>V at elevated temperatures*; Intermetallics 12, (2004) 969-975.
- [31] Cozar R., Pineau A.; *Influence of coherency strains on precipitate shape in a FeNiTa alloy*; Scripta Metallurgica 7, (1973) 851-854.
- [32] Lin Y.-Y., Schleifer F., Holzinger M., Ta N., Skrotzki B., Darvishi Kamachali R., Glatzel U., Fleck M.; *Quantitative Shape-Classification of Misfitting Precipitates during Cubic to Tetragonal Transformations: Phase-Field Simulations and Experiments*; Materials (Basel, Switzerland) 14, (2021) 1373.

- [33] Glatzel U., Feller-Kniepmeier M.; *Calculations of internal stresses in the  $\gamma/\gamma'$  microstructure of a nickel-base superalloy with high volume fraction of  $\gamma'$ -phase*; Scripta Metallurgica 23, (1989) 1839-1844.
- [34] Kaptay G.; *A coherent set of model equations for various surface and interface energies in systems with liquid and solid metals and alloys*; Advances in colloid and interface science 283 (2020), p. 102212.
- [35] Carroll L.J., Feng Q., Pollock T.M.; *Interfacial Dislocation Networks and Creep in Directional Coarsened Ru-Containing Nickel-Base Single-Crystal Superalloys*; Metallurgical and Materials Transactions A 39, (2008) 1290-1307.
- [36] Ji Y., Lou Y., Qu M., Rowatt J.D., Zhang F., Simpson T.W., Chen L.-Q.; *Predicting Coherency Loss of  $\gamma''$  Precipitates in IN718 Superalloy*; Metallurgical and Materials Transaction A 47, (2016) 3235.
- [37] Slama C., Abdellaoui M.; *Structural characterization of the aged Inconel 718*; Alloys and Compounds 306, (2000) 277-284.
- [38] Gao M., Chen S., Gary Harlow D., Wei R.P.; *Preferential coarsening of  $\gamma''$  precipitates in INCONEL 718 during creep*; Metallurgical and Materials Transactions A 27, (1996) 3391-3398.
- [39] 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*; Acta Materialia 65, (2014) 270.
- [40] Qin H., Bi Z., Yu H., Feng G., Du J., Zhang J.; *Influence of stress on  $\gamma''$  precipitation behavior in Inconel 718 during aging*; Journal of Alloys and Compounds 740, (2018) 997-1006.
- [41] Zhang R.Y., Qin H.L., Bi Z.N., Li J., Paul S., Lee T.L., Nenchev B., Zhang J., Kabra S., Kelleher J.F., Dong H.B.; *Using Variant Selection to Facilitate Accurate Fitting of  $\gamma''$  Peaks in Neutron Diffraction*; Metallurgical and Materials Transactions A 50, (2019) 5421-5432.
- [42] Zhang H., Li C., Guo Q., Ma Z., Li H., Liu Y.; *Improving creep resistance of nickel-based superalloy Inconel 718 by tailoring gamma double prime variants*; Scripta Materialia 164, (2019) 66-70.

- [43] Hu M.-K.; *Visual pattern recognition by moment invariants*; IEEE Transactions on Information Theory 8, (1962) 179-187.
- [44] MacSleyne J.P., Simmons J.P., Graef M. de; *On the use of 2-D moment invariants for the automated classification of particle shapes*; Acta Materialia 56, (2008) 427-437.
- [45] Holzinger M., Schleifer F., Glatzel U., Fleck M.; *Phase-field modeling of  $\gamma'$ -precipitate shapes in nickel-base superalloys and their classification by moment invariants*; European Physical Journal B 92, (2019).
- [46] Khachaturyan, AG; *Some questions concerning the theory of phase transformations in solids*; Soviet Phys. Solid State 8, (1967) 2163-2168.
- [47] Johnson W.C., Cahn J.W.; *Elastically Induced Shape Bifurcations*; Acta Metallurgica 32, (1984) 1925-1933.
- [48] Voorhees P.W., McFadden G.B., Johnson W.C.; *On the morphological development of second-phase particles in elastically-stressed solids*; Acta Metallurgica et Materialia 40, (1992) 2979-2992.
- [49] Thompson M.E., Su C.S., Voorhees P.W.; *The equilibrium shape of a misfitting precipitate*; Acta Metallurgica et Materialia 42, (1994) 2107-2122.
- [50] Thompson M.E., Voorhees P.W.; *Equilibrium particle morphologies in elastically stressed coherent solids*; Acta Materialia 47, (1999) 983-996.
- [51] Li X., Thornton K., Nie Q., Voorhees P.W., Lowengrub J.S.; *Two- and three-dimensional equilibrium morphology of a misfitting particle and the Gibbs-Thomson effect*; Acta Materialia 52, (2004) 5829-5843.
- [52] van Sluytman J.S., Pollock T.M.; *Optimal precipitate shapes in nickel-base  $\gamma$ - $\gamma'$  alloys*; Acta Materialia 60, (2012) 1771-1783.
- [53] Ardell A.J., R. B. Nicholson; *The coarsening of  $\gamma'$  in Ni-Al Alloys*; J. Phys. Chem. Solids 27, (1966) 1793-1804.
- [54] Argon, A.; *Strengthening Mechanisms in Crystal Plasticity*. Oxford University Press, (2007).
- [55] Tordjman A., Wasserblat A., Shneck R.Z.; *Revisit of the shape and orientation of precipitates with tetragonal transformation strains that minimise the elastic energy*; Philosophical Magazine 100, (2020) 927-954.

- [56] A. Suzuki, T. Matsuo, and M. Takeyama; *Microstructure Control of Ni Base Alloys with High Volume Fraction of D0<sub>22</sub> Compound*. Green, K.A.; Pollock, T.M.; Harada, H. Howson, T. *et al.* (Hrsg.): *Superalloys 2004*, 115-124.
- [57] Sahm, P.R.; Egry, I.; Volkmann, T. (Hrsg.); *Schmelze, Erstarrung, Grenzflächen – Eine Einführung in die Physik und Technologie flüssiger und fester Metalle*. Springer, Berlin, (2001).
- [58] Wang Y., Chen L.-Q., Khachaturyan A.G.; *Shape evolution of a precipitate during strain-induced coarsening: A computer simulation*; *Scripta Metallurgica et Materialia* 25, (1991) 1387-1392.
- [59] Tsukada Y., Takeno S., Karasuyama M., Fukuoka H., Shiga M., Koyama T.; *Estimation of material parameters based on precipitate shape: efficient identification of low-error region with Gaussian process modeling*; *Scientific reports* 9 (2019), 15794.
- [60] Lanteri V., Mitchell T.E., Heuer A.H.; *Morphology of tetragonal precipitates in partially stabilized ZrO<sub>2</sub>*; *Journal of the American Ceramic Society* 69, (1986) 564-569.
- [61] 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*; *Materials Science and Engineering: A* 486, (2008) 117-122.
- [62] Zhang J., Poulsen S.O., Gibbs J.W., Voorhees P.W., Poulsen H.F.; *Determining material parameters using phase-field simulations and experiments*; *Acta Materialia* 129, (2017) 229-238.
- [63] Khachaturyan, AG, Semenovskaya S.V., Morris Jr J.W.; *Theoretical analysis of strain-induced shape changes in cubic precipitates during coarsening*; *Acta Metallurgica* 36, (1988) 1563-1572.
- [64] McCormack M., Khachaturyan, AG, Morris Jr J.W.; *A two-dimensional analysis of the evolution of coherent precipitates in elastic media*; *Acta Metallurgica et Materialia* 40, (1992) 325-336.
- [65] Schmidt I., Gross D.; *The equilibrium shape of an elastically inhomogeneous inclusion*; *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 45, (1997) 1521-1549.
- [66] Kolling S., Mueller R., Gross D.; *The influence of elastic constants on the shape of an inclusion*; *International Journal of Solids and Structures* 40, (2003) 4399-4416.

- [67] Bhadak B., Sankarasubramanian R., Choudhury A.; *Phase-Field Modeling of Equilibrium Precipitate Shapes Under the Influence of Coherency Stresses*; Metallurgical and Materials Transactions A 49, (2018) 5705-5726.
- [68] Mueller R., S. Eckert, Gross D.; *3D equilibrium shapes of periodically arranged anisotropic precipitates with elastic misfit*; Archives of Mechanics 52, (2000) 663-683.
- [69] Khachaturyan, AG, Airapetyan V.M.; *Spatially periodic distributions of new phase inclusions caused by elastic distortions*; Physica status solidi (a) 26, (1974) 61-70.
- [70] Wang, Chen, Khachaturyan; *Particle translational motion and reverse coarsening phenomena in multiparticle systems induced by a long-range elastic interaction*; Physical review. B, Condensed matter 46 (1992), 11194-11197.
- [71] Degeiter M., Le Bouar Y., Appolaire B., Perrut M., Finel A.; *Instabilities in the periodic arrangement of elastically interacting precipitates in nickel-base superalloys*; Acta Materialia 187, (2020) 41-50.
- [72] Zhou N., Shen C., Mills M.J., Wang Y.; *Contributions from elastic inhomogeneity and from plasticity to  $\gamma'$  rafting in single-crystal Ni–Al*; Acta Materialia 56, (2008) 6156-6173.
- [73] Boussinot G., Le Bouar Y., Finel A.; *Phase-field simulations with inhomogeneous elasticity: Comparison with an atomic-scale method and application to superalloys*; Acta Materialia 58, (2010) 4170-4181.
- [74] Shi R., Ma N., Wang Y.; *Predicting equilibrium shape of precipitates as function of coherency state*; Acta Materialia 60, (2012) 4172-4184.
- [75] Abbaschian, R.; Abbaschian, L.; Reed-Hill, R.E.; *Physical metallurgy principles*. Cengage Learning, Stamford, (2010).
- [76] Wagner C.; *"Theorie der Alterung von Niederschlägen durch Umlösen (Ostwald-Reifung)"*; Zeitschrift für Elektrochemie 65, (1961) 581.
- [77] Schleifer F., Fleck M., Holzinger M., Lin Y.-Y., Glatzel U.; *Phase-Field Modeling of  $\gamma'$  and  $\gamma''$  Precipitate Size Evolution During Heat Treatment of Ni-Based Superalloys*. Tin, S.; Hardy, M.; Clews, J. et al. (Hrsg.): Superalloys 2020, 500-508.
- [78] Moore I.J., Burke M.G., Palmiere E.J.; *Modelling the nucleation, growth and coarsening kinetics of  $D0_{22}$  precipitates in the Ni-base Alloy 625*; Acta Materialia 119, (2016) 157-166.

- [79] Voorhees P.W.; *The Theory of Ostwald Ripening*; Journal of Statistical Physics 38, (1985) 231.
- [80] Calderon H.A., Voorhees P.W., Murray J.L., Kostorz G.; *Ostwald ripening in concentrated alloys*; Acta Metallurgica et Materialia 42, (1994) 991-1000.
- [81] Ardell A.J., Ozolins V.; *Trans-interface diffusion-controlled coarsening*; Nature Mater 4, (2005) 309.
- [82] Mushongera L.T., Fleck M., Kundin J., Querfurth F., Emmerich H.; *Phase-field study of anisotropic  $\gamma'$ -coarsening kinetics in Ni-base superalloys with varying Re and Ru contents*; Advanced Engineering Materials 17, (2015) 1149.
- [83] Doi M.; *Coarsening Behaviour of Coherent Precipitates in Elastically Constrained Systems – With Particular Emphasis on Gamma-Prime Precipitates in Nickel-base Alloys*; Materials Transactions, (1992) 637-649.
- [84] Han Y.-F., Deb P., Chaturvedi M.C.; *Coarsening behaviour of  $\gamma''$ - and  $\gamma'$ -particles in Inconel alloy 718*; Metal Science 16, (1982) 555-562.
- [85] Bürgel, R.; Jürgen Maier, H.; Niendorf, T.; *Handbuch Hochtemperatur-Werkstofftechnik*. Vieweg+Teubner, (2011).
- [86] Steinbach I.; *Phase-field models in materials science*; Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 17, (2009) 73001.
- [87] Steinbach I.; *Phase-Field Model for Microstructure Evolution at the Mesoscopic Scale*; Annual Review of Materials Research 43, (2013) 89.
- [88] Wang Y., Banerjee D., Su C.C., Khachaturyan, AG; *Field kinetic model and computer simulation of precipitation of L12 ordered intermetallics from fcc solid solution*; Acta Materialia 46, (1998) 2983-3001.
- [89] Zhu J.Z., Wang T., Ardell A.J., Zhou S.H., Liu Z.K., Chen L.Q.; *Three-dimensional phase-field simulations of coarsening kinetics of  $\gamma'$  particles in binary Ni-Al alloys*; Acta Materialia 52, (2004) 2837-2845.
- [90] Gaubert A., Le Bouar Y., Finel A.; *Coupling phase field and viscoplasticity to study rafting in Ni-based superalloys*; Philosophical Magazine 90, (2010) 375.
- [91] Mushongera L.T., Fleck M., Kundin J., Wang Y., Emmerich H.; *Effect of Re on directional  $\gamma'$ -coarsening in commercial single crystal Ni-base superalloys: A phase field study*; Acta Materialia 93, (2015) 60-72.

- [92] Pang Y., Li Y.S., Wu X., Liu W., Hou Z.; *Phase-field simulation of diffusion-controlled coarsening kinetics of  $\gamma'$  phase in Ni-Al alloy*; International Journal of Materials Research 106, (2015) 108-113.
- [93] Bhaskar M.S.; *Quantitative phase field modelling of precipitate coarsening in Ni-Al-Mo alloys*; Computational Materials Science 146, (2018) 102-111.
- [94] Yenusah C.O., Ji Y., Liu Y., Stone T.W., Horstemeyer M.F., Chen L.-Q., Chen L.; *Three-dimensional Phase-field simulation of  $\gamma''$  precipitation kinetics in Inconel 625 during heat treatment*; Computational Materials Science 187, (2021) 110123.
- [95] Wang Y., Chen L.-Q., Khachaturyan, AG; *Kinetics of strain-induced morphological transformation in cubic alloys with a miscibility gap*; Acta Metallurgica et Materialia 41, (1993) 279-296.
- [96] Leo P.H., Lowengrub J.S., Jou H.-J.; *A diffuse interface model for microstructural evolution in elastically stressed solids*; Acta Materialia 46, (1998) 2113-2130.
- [97] Cottura M., Le Bouar Y., Appolaire B., Finel A.; *Rôle of elastic inhomogeneity in the development of cuboidal microstructures in Ni-based superalloys*; Acta Materialia 94, (2015) 15-25.
- [98] Jokisaari A.M., Naghavi S.S., Wolverton C., Voorhees P.W., Heinonen O.G.; *Predicting the morphologies of  $\gamma'$  precipitates in cobalt-based superalloys*; Acta Materialia 141, (2017) 273-284.
- [99] Bhadak B., Singh R.K., Choudhury A.; *Equilibrium Multi-precipitate Configurations*; Metallurgical and Materials Transactions A 51, (2020) 5414-5431.
- [100] Plapp M.; *Unified derivation of phase-field models for alloy solidification from a grand-potential functional*; Physical Review E 84, (2011) 31601.
- [101] Bhadak B., Jogi T., Bhattacharya S., Choudhury A.; *Formation of solid-state dendrites under the influence of coherency stresses: A diffuse interface approach*; preprint <http://arxiv.org/pdf/2101.09964v1>, (2021).
- [102] Aagesen L.K., Gao Y., Schwen D., Ahmed K.; *Grand-potential-based phase-field model for multiple phases, grains, and chemical components*; Physical review. E 98 (2018), p. 23309.
- [103] Fleck M., Schleifer F., Glatzel U.; *Frictionless motion of marginally resolved diffuse interfaces in phase-field modeling*; preprint <http://arxiv.org/abs/1910.05180>, (2019).

- [104] Darvishi Kamachali R., Schwarze C., Lin M., Diehl M., Shanthraj P., Prahl U., Steinbach I., Raabe D.; *Numerical Benchmark of Phase-Field Simulations with Elastic Strains: Precipitation in the Presence of Chemo-Mechanical Coupling*; Computational Materials Science 155, (2018) 541-553.
- [105] Finel A., Le Bouar Y., Dabas B., Appolaire B., Yamada Y., Mohri T.; *Sharp Phase Field Method*; Physical Review Letters 121, (2018) 25501.
- [106] Fleck M., Schleifer F., Holzinger M., Glatzel U.; *Phase-Field Modeling of Precipitation Growth and Ripening During Industrial Heat Treatments in Ni-Base Superalloys*; Metallurgical and Materials Transactions A 49, (2018) 4146-4157.
- [107] Probst-Hein M., Dlouhy A., Eggeler G.; *Interface dislocations in superalloy single crystals*; Acta Materialia 47, (1999) 2497-2510.
- [108] Preußner J., Rudnik Y., Völkl R., Glatzel U.; *Finite-element modelling of anisotropic single-crystal superalloy creep deformation based*; Zeitschrift für Metallkunde 96, (2005) 595-601.
- [109] Müller L., Glatzel U., Feller-Kniepmeier M.; *Calculation of the internal stresses and strains in the microstructure of a single crystal nickel-base superalloy during creep*; Acta Metallurgica et Materialia 41, (1993) 3401-3411.
- [110] Pollock T.M., Argon A.S.; *Intermediate Temperature Creep Deformation in CMSX-3 Single Crystals*. Duhl, D.N.; Maurer, G.; Antolovich, S. *et al.* (Hrsg.): Superalloys 1988, 285-294.
- [111] Gurevich S., Karma A., Plapp M., Trivedi R.; *Phase-field study of three-dimensional steady-state growth shapes in directional solidification*; Physical Reviews E 81, (2010) 11603.
- [112] Lifshitz I.M., Slyosov V.V.; *The kinetics of precipitation from supersaturated solid solutions*; J. Phys. Chem. Sol. 19, (1961) 35.
- [113] Ardell A.J.; *The effect of volume fraction on particle coarsening: theoretical considerations*; Acta Metallurgica 20, (1972) 61-71.
- [114] Ai C., Zhao X., Zhou J., Zhang H., Liu L., Pei Y., Li S., Gong S.; *Application of a modified Ostwald ripening theory in coarsening of  $\gamma'$  phases in Ni based single crystal superalloys*; Journal of Alloys and Compounds 632, (2015) 558-562.



- [115] Kozeschnik E., Svoboda J., Fischer F.D.; *Shape factors in modeling of precipitation*; Materials Science and Engineering A 441, (2006) 68-72.
- [116] Boyd J.D., Nicholson R.B.; *The coarsening behaviour of  $\theta''$  and  $\theta'$  precipitates in two Al-Cu alloys*; Acta Metallurgica 19, (1971) 1379.
- [117] Svoboda J., Fischer F.D., Mayrhofer P.H.; *A model for evolution of shape changing precipitates in multicomponent systems*; Acta Materialia 56, (2008) 4896-4904.
- [118] Eshelby J.D.; *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion and related problems*; Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences 241, (1957) 376-396.
- [119] Toshio Mura; *Micromechanics of Defects in Solids*. Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht, (1987).
- [120] Kostlan E., Morris J.W.; *The Preferred Habit of a Coherent Thin-Plate Inclusion in an Anisotropic Elastic Solid*; Acta Metallurgica 35, (1987).
- [121] Morris J.W.; *The Khachaturyan theory of elastic inclusions: Recollections and results*; Philosophical Magazine 90, (2010) 3-35.
- [122] Wen S.H., Kostlan E., Hong M., Khachaturyan, AG, Morris Jr J.W.; *The preferred habit of a tetragonal inclusion in a cubix matrix*; Acta Metallurgica 29, (1981) 1247-1254.
- [123] Andersson J.O., Helander T., Höglund L., Shi P., Sundman B.; *Thermo-Calc & DICTRA, computational tools for materials science*; Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry 26, (2002) 273-312.
- [124] Brooks J.W., Bridges P.J.; *Metallurgical stability of INCONEL alloy 718*. Duhl, D.N.; Maurer, G.; Antolovich, S. *et al.* (Hrsg.): Superalloys 1988, 33-42.
- [125] Theska F., Stanojevic A., Oberwinkler B., Ringer S.P., Primig S.; *On conventional versus direct ageing of Alloy 718*; Acta Materialia 156, (2018) 116-124.
- [126] Fayman Y.C.; *Microstructural Characterization and Elemental Partitioning in a Direct-aged Superalloy (DA 718)*; Materials Science and Engineering A 92, (1987) 159-171.
- [127] M. G. Burke and M. K. Miller; *Precipitation in Alloy 718: A Combined AEM and APFIM Investigation*; Superalloys 718, 625 and Various Derivatives, (1991).

- [128] Lawitzki R., Hassan S., Karge L., Wagner J., Wang D., Kobylinski J. von, Krempaszky C., Hofmann M., Gilles R., Schmitz G.; *Differentiation of  $\gamma'$ - and  $\gamma''$ - precipitates in Inconel 718 by a complementary study with small-angle neutron scattering and analytical microscopy*; Acta Materialia 163, (2019) 28-39.
- [129] Patil R.V., Kale G.B.; *Chemical diffusion of niobium in nickel*; Journal of Nuclear Materials, (1996) 57-60.
- [130] Karunaratne M., Reed R.C.; *Interdiffusion of Niobium and Molybdenum in Nickel between 900 -1300 °C*; Defect and Diffusion Forum 237-240, (2005) 420-425.
- [131] Sohrabi M.J., Mirzadeh H.; *Revisiting the Diffusion of Niobium in an As-Cast Nickel-Based Superalloy During Annealing at Elevated Temperatures*; Metals and Materials International 26, (2020) 326-332.
- [132] Zener, C.; *Elasticity and Anelasticity of Metals*. University of Chicago press, (1948).
- [133] Connétable D., Mathon M., Lacaze J.; *First principle energies of binary and ternary phases of the Fe-Nb-Ni-Cr system*; Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry 35, (2011) 588-593.
- [134] Dai S., Liu W.; *First-principles study on the structural, mechanical and electronic properties of  $\delta$  and  $\gamma''$  phases in Inconel 718*; Computational Materials Science 49, (2010) 414-418.
- [135] Lin Y.C., Jiang X.-Y., Luo S.-C., He D.-G.; *Study on the structural transition and thermal properties of  $Ni_3Nb-D0_{22}$  phase: First-principles calculation*; Materials & Design 139, (2018) 16-24.
- [136] Zhang R.Y., Qin H.L., Bi Z.N., Li J., Paul S., Lee T.L., Zhang S.Y., Zhang J., Dong H.B.; *Temperature-Dependent Misfit Stress in Gamma Double Prime Strengthened Ni-Base Superalloys*; Metallurgical and Materials Transactions A 51, (2020) 1860-1873.
- [137] Zhang R.Y., Bi Z.N., Qin H.L., Zhang J., Fortes A.D., Dong H.B.; *Constrained Lattice Misfit Measurement in Bulk Inconel 718 Using High Resolution Neutron Diffraction* 439-448.
- [138] Völkl R., Glatzel U., Feller-Kniepmeier M.; *Measurement of the Unconstrained Misfit in the Nickel-Base Superalloy CMSX-4 with CBED*; Scripta Materialia 38, (1998) 893-900.

- [139] Wen Z., Zhao Y., Hou H., Wang N., Fu L., Han P.; *A first-principles study on interfacial properties of Ni(001)/Ni<sub>3</sub>Nb(001)*; Transactions of Nonferrous Metals Society of China 24, (2014) 1500-1505.
- [140] Boyd J.D., Nicholson R.B.; *A Calorimetric Determination of Precipitate Interfacial Energies in Two Al-Cu Alloys*; Acta Metallurgica, (1971).
- [141] Ardell A.J., Ozolins V.; *Trans-interface diffusion-controlled coarsening*; Nature Materials 4, (2005) 309-316.
- [142] Ardell A.J.; *Interfacial free energies and solute diffusivities from data on Ostwald ripening*; Interface Science 3, (1995) 119-125.
- [143] Meher S., Carroll M.C., Pollock T.M., Carroll L.J.; *Designing nickel base alloys for microstructural stability through low  $\gamma$ - $\gamma'$  interfacial energy and lattice misfit*; Materials & Design 140, (2018) 249-256.
- [144] Robson J.D.; *Modelling the evolution of particle size distribution during nucleation, growth and coarsening*; Materials Science and Technology 20, (2004) 441-448.
- [145] Cormier J., Gadaud P., Czaplicki M., Zhang R.Y., Dong H.B., Smith T.M., Zhang F., Tiley J.S., Semiatin S.L.; *In-Situ Determination of Precipitation Kinetics During Heat Treatment of Superalloy 718*; Metallurgical and Materials Transactions A, (2020).
- [146] Bragg W.L., Williams E.J.; *The effect of thermal agitation on atomic arrangement in alloys*; Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character 145, (1934) 699-730.
- [147] Becker R.; *Die Keimbildung bei der Ausscheidung in metallischen Mischkristallen*; Annalen der Physik 424, (1938) 128-140.
- [148] Lee Y.W., Aaronson H.I.; *Anisotropy of coherent interphase boundary energy*; Acta Metallurgica 28, (1980) 539-548.
- [149] Sonderegger B., Kozeschnik E.; *Generalized Nearest-Neighbor Broken-Bond Analysis of Randomly Oriented Coherent Interfaces in Multicomponent Fcc and Bcc Structures*; Metallurgical and Materials Transactions A 40, (2009) 499.
- [150] Gupta A., Kulitcki V., Kavakbasi B.T., Buranova Y., Neugebauer J., Wilde G., Hickel T., Divinski S.V.; *Precipitate-induced nonlinearities of diffusion along grain boundaries in Al-based alloys*; Physical Review Materials 2, (2018) 1-16.

- [151] Gupta, A.; *Ab initio based study of precipitate formation in advanced structural Al-based alloys – Dissertation*; Ruhr Universität Bochum, (2019).
- [152] Ayachit, U.; Geveci, B.; *The ParaView guide – Updated for ParaView version 4.3*. Kitware, Los Alamos, (2015).
- [153] Burton W.K., Cabrera N., Frank F.C.; *The growth of crystals and the equilibrium structure of their surfaces*; Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 243, (1951) 299-358.
- [154] Su C.H., Voorhees P.W.; *The Dynamics of Precipitate Evolution in Elastically Stressed Solids - I. Inverse Coarsening*; Acta Metallurgica 44, (1996) 2001-2016.
- [155] Su C.H., Voorhees P.W.; *The Dynamics of Precipitate Evolution in Elastically Stressed Solids - II. Particle Alignment*; Acta Metallurgica 44, (1996) 1987-1999.
- [156] Goerler J.V., Lopez-Galilea I., Roncery M.L., Shchyglo O., Theisen W., Steinbach I.; *Topological phase inversion after long-term thermal exposure of nickel-base superalloys: Experiment and phase-field simulation*; Acta Materialia 124, (2017) 151-158.
- [157] Svoboda J., Fischer F.D.; *Generalization of the Lifshitz–Slyozov–Wagner coarsening theory to non-dilute multi-component systems*; Acta Materialia 79, (2014) 304-314.
- [158] Moore I.J., Burke M.G., Nuhfer N.T., Palmiere E.J.; *Evaluation of classical precipitation descriptions for  $\gamma''$  ( $Ni_3Nb-D0_{22}$ ) in Ni-base superalloys*; Journal of Materials Science 52 (2017), 8665-8680.
- [159] Völkl R., Glatzel U., Feller-Kniepmeier M.; *Measurement of the lattice misfit in the single crystal nickel based superalloys CMSX-4, SRR99 and SC16 by convergent beam electron diffraction*; Acta Materialia 46, (1998) 4395-4404.
- [160] Neumeier S., Pyczak F., Göken M.; *The temperature dependent lattice misfit of rhenium and ruthenium containing nickel-base superalloys – Experiment and modelling*; Materials & Design 198, (2021) 109362.
- [161] Goodfellow A.J., Owen L.R., Christofidou K.A., Kelleher J., Hardy M.C., Stone H.J.; *The Effect of Temperature and Mo Content on the Lattice Misfit of Model Ni-Based Superalloys*; Metals 9, (2019) 700.

- [162] Darvishi Kamachali R., Schwarze C.; *Inverse Ripening and Rearrangement of Precipitates under Chemomechanical Coupling*; Computational Materials Science 130, (2017) 292-296.
- [163] Park J., Kamachali R.D., Kim S.-D., Kim S.-H., Oh C.-S., Schwarze C., Steinbach I.; *First Evidence for Mechanism of Inverse Ripening from In-situ TEM and Phase-Field Study of  $\delta'$  Precipitation in an Al-Li Alloy*; Scientific reports 9 (2019), p. 3981.
- [164] Vaithyanathan V., Wolverton C., Chen L.Q.; *Multiscale modeling of precipitate microstructure evolution*; Physical Review Letters 88, (2002) 125503.
- [165] Vaithyanathan V., Wolverton C., Chen L.Q.; *Multiscale modeling of  $\beta'$  precipitation in Al-Cu binary alloys*; Acta Materialia 52, (2004) 2973-2987.
- [166] Ta N., Bilal M.U., Häusler I., Saxena A., Lin Y.-Y., Schleifer F., Fleck M., Glatzel U., Skrotzki B., Darvishi Kamachali R.; *Simulation of the  $\theta'$  Precipitation Process with Interfacial Anisotropy Effects in Al-Cu Alloys*; Materials (Basel, Switzerland) 14, (2021) 1280.
- [167] Dimokrati A., Le Bouar Y., Benyoucef M., Finel A.; *S-PFM model for ideal grain growth*; Acta Materialia 201, (2020) 147-157.
- [168] Da Costa Teixeira J., Cram D.G., Bourgeois L., Bastow T.J., Hill A.J., Hutchinson C.R.; *On the strengthening response of aluminum alloys containing shear-resistant plate-shaped precipitates*; Acta Materialia 56, (2008) 6109-6122.
- [169] Sundararaman M., Mukhopadhyay P., Banerjee S.; *Some aspects of the precipitation of metastable intermetallic phases in INCONEL 718*; Metallurgical Transactions 23 A, (1992) 2015-2028.
- [170] He J., Fukuyama S., Yokogawa K.;  *$\gamma''$  Precipitate in Inconel 718*; J. Mater. Sci. Technol. 10, (1994).
- [171] Xie X.S., Dong J.X., Zhang M.C.; *Research and Development of Inconel 718 Type Superalloy*; Materials Science Forum 539-543, (2007) 262-269.
- [172] Ahmadi M.R., Rath M., Povoden-Karadeniz E., Primig S., Wojcik T., Danninger A., Stockinger M., Kozeschnik E.; *Modeling of precipitation strengthening in Inconel 718 including non-spherical  $\gamma''$  precipitates*; Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 25, (2017) 55005.

- [173] Lin, Y.-Y.; *Ausscheidungs- und Vergrößerungsverhalten der metastabilen  $\gamma'$ -Phase in niobhaltigen Nickelbasislegierungen – Dissertation*; Universität Bayreuth, (2021).
- [174] Ji Y., Ghaffari B., Li M., Chen L.-Q.; *Phase-field modeling of  $\theta'$  precipitation kinetics in 319 aluminum alloys*; Computational Materials Science 151, (2018) 84-94.
- [175] Liu H., Papadimitriou I., Lin F.X., LLorca J.; *Precipitation during high temperature aging of Al–Cu alloys: A multiscale analysis based on first principles calculations*; Acta Materialia 167, (2019) 121-135.

## 10 Nomenklatur

### 10.1 Formelzeichen

Dimension gegeben als **M** Masse, **L** Länge, **T** Zeit, **Θ** Temperatur

Formelzeichen	Dimension	Beschreibung
$\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$		Orthogonale Gitterrichtungen im kfz Gitter
$a_\alpha$	L	Gitterkonstanten der Phase $\alpha$ in $\vec{a}$ -Richtung
$A$		Aspektverhältnis einer Ausscheidung $R/r$
$A(0)$		Aspektverhältnis im grenzflächendominierten Fall
$b, c, d$		Parameter für phänomenologische Anpassung
$B$	$M L^{-1} T^{-2}$	Elastische Relaxationsfunktion
$c_{\gamma''}$	L	Gitterkonstante von $\gamma''$ in $\vec{c}$ -Richtung
$c_n$		Lokale Konzentration von Element $n$
$c_n^\alpha$		Gleichgewichtskonzentration von $n$ in Phase $\alpha$
$C_{IJ}^\alpha$	$M L^{-1} T^{-2}$	Komponente $IJ$ des Elastizitätstensors von Phase $\alpha$ in Voigt Notation
$d_j$		Entfernung zum $j$ -ten Nachbarn normiert auf $\Delta x$
$D_{min}$	$L^2 T^{-1}$	Niedrigster Diffusionskoeffizient im System
$D_n$	$L^2 T^{-1}$	Diffusionskoeffizient von Element $n$
$D_{0,n}$	$L^2 T^{-1}$	Vorfaktor des Diffusionskoeffizienten von Element $n$
$\tilde{D}$	$L^2 T^{-1}$	Effektiver Diffusionskoeffizient einer Legierung
$e_{el}$	$M L^{-1} T^{-2}$	Elastische Energiedichte
$E$	$M L^{-1} T^{-2}$	Elastizitätsmodul
$E_{min}$	$M L^2 T^{-2}$	Energie des Gleichgewichtszustandes
$f(\varphi), f(\theta)$		Anisotropiefunktion der Grenzflächenenergie
$g(\varphi)$		Potential der isotropen Grenzfläche
$g_\alpha$	$M L^{-1} T^{-2}$	Gibb'sche Freie Energiedichte der Phase $\alpha$
$G_\alpha$	$M L^{-1} T^{-2}$	Schubmodul der Phase $\alpha$
$G_{IJ}$	$M L^{-1} T^{-2}$	Green'scher Tensor der Elastizität

Formelzeichen	Dimension	Beschreibung
$h, k, l$		Beliebiger Miller'scher Index
$h(\varphi)$		Interpolationsfunktion für Volumenbeiträge zu $\Omega$
$i$		Zähler über numerische Gitterpunkte
$i, j$		Beliebige Indizes
$I, J, K, L$		Indizes für räuml. Dimensionen $x_{I(J,K,L)} \in [x, y, z]$
$k_B$	$M L^2 T^{-2} \Theta^{-1}$	Universelle Gaskonstante $\approx 8,314 \text{ kJ mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$
$K$	$L^N T^{-1}$	Reifungskoeffizient
$K_{LSW}$	$L^3 T^{-1}$	Reifungskoeffizient nach der LSW-Theorie
$K_S$		Formfaktor für Reifungskoeffizient
$K_V$		Volumenanteilsfaktor für Reifungskoeffizient
$L_I$	L	Kantenlänge der Simulationsdomäne in $I$ -Richtung
$m_I$		Anzahl numerischer Stützstellen in $I$ -Richtung
$M$	$L^2 T^{-1}$	Phasenfeldmobilität
$n$		Index für Legierungselemente (Nb, Al, Cr, ...)
$\vec{n}$		Orientierung der Grenzfläche
$N$		Reifungsexponent
$p(\varphi)$		Doppelmuldenpotential
$P$		Grad eines Polynoms
$q$		Kopplungsparameter für das SPFM
$Q_n$	$M L^2 T^{-2}$	Aktivierungsenergie der Diffusion des Elements n
$Q, Q_A, Q_C$		Kennzahl zum Einfluss der elastischen Energie
$Q_K$	$M L^2 T^{-2}$	Aktivierungsenergie der Reifung
$r$	L	Kleiner Radius der Ellipse, halbe Dicke einer Ausscheidung
$\vec{r}_{jk}$	L	Ortsvektor zum k-ten Nachbarn in der j-ten Schale
$\vec{r}_j$	L	Ortsvektor zum nächsten Nachbarn in J-Richtung
$R$	L	Ausscheidungsgröße, Radius der Ausscheidung, Hauptradius einer Ellipse



## Nomenklatur

Formelzeichen	Dimension	Beschreibung
$\hat{R}$	L	Vergleichsradius der Kugel gleichen Volumens
$\langle \hat{R} \rangle, \langle R \rangle$	L	Mittlerer Radius $\hat{R}$ bzw. $R$
$S_0$	$L^2$	Oberfläche eins Rotationsellipsoids
$t$	T	Zeit
$T$	$\Theta$	Temperatur
$\vec{u}$	L	Verschiebungsvektor
$U$	$[U]$	Beliebige temperaturabhängige Größe
$U_i$	$[U] \Theta^{-i}$	$i$ -ter Parameter des Polynomansatzes von $U(T)$
$V$	$L^3$	Volumen
$V_\alpha$		Volumenanteil der Phase $\alpha$
$V_0$	$L^3$	Volumen eins Rotationsellipsoids
$V_M^\alpha$	$L^3$	Molares Volumen der Phase $\alpha$
$\vec{x}$	L	Ortsvektor
$x, y, z$		Orthogonale Koordinatenrichtung
$X_n^\alpha$		Parameter der Gibb'schen Freien Energie von $n$ in $\alpha$
$Y^\alpha$	$M L^2 T^{-2}$	Parameter der Gibb'schen Freien Energie von $\alpha$
$Z$		Zener-Anisotropie $2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$
$\alpha$		Phasenindex ( $\gamma, \gamma', \gamma''$ )
$\beta_i (\beta_{Ii})$		Parameter für Eshelby Lösung des elastischen Einschlussproblems (Parameter der Näherung)
$\Gamma (\Gamma_a, \Gamma_c, \Gamma_0)$	$M T^{-2}$	Grenzflächenenergiedichte (normal zu $\vec{a}, \vec{c}$ , isotrop)
$\Gamma_{ref}$	$M T^{-2}$	Referenzgrenzflächenenergie für das SPM
$\delta$		Gitterfehlpassung
$\delta U$	$[U]$	Ungenauigkeit einer beliebigen Größe $U$
$\Delta t$	T	Numerischer Zeitschritt
$\Delta x$	L	Numerischer Gitterabstand
$\varepsilon$		Dehnungstensor

Formelzeichen	Dimension	Beschreibung
$\varepsilon^0$		Eigendehnungstensor
$\varepsilon_1, \varepsilon_3$		Gitterfehlpassung/Eigendehnungen der $\gamma''$ -Phase
$\zeta, \zeta_{\blacksquare}$		Winkel einer punktsymmetrischen Anordnung
$\theta$		Winkel zwischen $\vec{n}$ und $\vec{c}$
$\Theta (\Theta_A, \Theta_C)$		Rundheit (normal zu $\vec{a}$ bzw. $\vec{c}$ )
$\kappa$	$L^{-1}$	Krümmung der Grenzfläche
$\lambda_1, \lambda_2$		Invariante der Momente zweiter Ordnung
$\mu_{ij}$	$L^{(2+i+j)}$	Zentrales 2D Moment der Ordnung $(i + j)$
$\mu_n^\alpha$	$M L^2 T^{-2}$	Chemisches Potential von Element $n$ in Phase $\alpha$
$\nu$		Querkontraktionszahl
$\xi$		Phasenfeldbreite in $\Delta x$
$\rho_j$		Gewichtungskoeffizient der $j$ -ten Schale
$\sigma$	$M L^{-1} T^{-2}$	Mechanischer Spannungstensor mit den Einträgen $\sigma_{IJ}$
$\sigma_{vM}$	$M L^{-1} T^{-2}$	von Mises Vergleichsspannung
$\varphi$		Phasenfeldparameter
$\chi_n^\alpha$	$M L^2 T^{-2}$	Thermodynamischer Faktor von $n$ in Phase $\alpha$
$\psi_j$		Koordinationszahl der $j$ -ten Schale
$\omega (\omega_{int}, \omega_{ch}, \omega_{el})$	$M L^{-1} T^{-2}$	Großkanonische Potentialdichte/Triebkraft (Grenzfläche, chemisch, elastisch)
$\Omega$	$M L^2 T^{-2}$	Großkanonisches Potential

## 10.2 Abkürzungen

Abkürzung	Beschreibung
APB	Antiphasengrenze (Anti Phase Boundary)
At.%	Atomprozent
BMWi	Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
CalPhaD	Berechnung von Phasendiagrammen (Calculation of PhaseDiagrams)

## Nomenklatur

---

Abkürzung	Beschreibung
DFT	Dichtefunktionaltheorie
Gew.%	Gewichtsprozent
IN625	Inconel <b>625</b> , Alloy 625, In625
IN718	Inconel <b>718</b> , Alloy 718, In718
IN718M	Modifizierte, $\gamma'$ -freie Legierung basierend auf <b>IN718</b>
kfz	Kubisch-flächenzentriert
LSW-Theorie	Lifshitz-Sloyzov-Wagner Theorie
MK	Mischkristall
mLSW Modell	Modifiziertes <b>LSW</b> Modell
MW	(Lehrstuhl) <b>M</b> etallische <b>W</b> erkstoffe
NO <sub>x</sub>	Stickoxide
RUS	<b>R</b> esonanz- <b>U</b> ltraschall- <b>S</b> pektroskopie
SEM	Rasterelektronenmikroskop ( <b>S</b> canning <b>E</b> lectron <b>M</b> icroscope)
SPFM	Sharp <b>P</b> hase- <b>F</b> ield <b>M</b> odell
TEM	<b>T</b> ransmissionselektronen <b>m</b> ikroskop
$\gamma$	Matrixphase, kfz Mischkristall
$\gamma'$	Kubisch-flächenzentrierte geordnete Phase L1 <sub>2</sub>
$\gamma''$	Tetragonal-raumzentrierte geordnete Phase D0 <sub>22</sub>
$\delta$	Orthorhombische Phase
$\theta'$	Tetragonale Phase im System Al-Cu

---

**Lebenslauf**Persönliche Daten

Name: Felix Schleifer  
Anschritt: Badstraße 41, 95444 Bayreuth  
Geburtsdatum: 07.11.1992  
Geburtsort: Bamberg  
Familienstand: ledig

Schulbildung

09/1999 – 07/2003 Rupprecht Grundschule Bamberg  
09/2003 – 07/2011 Dientzenhofer Gymnasium Bamberg,  
Abschluss: Allgemeine Hochschulreife

Studium

10/2011 – 03/2015 Studium Materialwissenschaft und Werkstofftechnik an der  
Universität Bayreuth, Abschluss: Bachelor of Science  
10/2014 – 08/2017 Studium Materialwissenschaft und Werkstofftechnik an der  
Universität Bayreuth, Abschluss: Master of Science

Berufliche Tätigkeit

08/2012 – 09/2012 Forschungspraktikum am Max-Planck-Institut für  
Eisenforschung, Düsseldorf  
06/2015 – 09/2015 Forschungspraktikum im Laboratory for Advanced  
Computational Engineering an der Universität Maribor,  
Slowenien  
Seit 11/2017 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl Metallische  
Werkstoffe, Universität Bayreuth  
01/2020 – 03/2020 Forschungsaufenthalt bei A. Finel am Laboratoire d'Etude des  
Microstructures am ONERA in Châtillon, Frankreich

### Danksagung

Ich möchte mich an dieser Stelle bei meinen aktuellen und ehemaligen KollegInnen für die konstruktive Zusammenarbeit, das gute Arbeitsklima und die Unterstützung bei meiner Promotion am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe bedanken.

Mein besonderer Dank gilt...

...Herrn Prof. Dr.-Ing. Uwe Glatzel für die Möglichkeit diese Arbeit am Lehrstuhl Metallische Werkstoffe anzufertigen. Vielen herzlichen Dank für Ihre stets offene Tür, die vielen wichtigen Denkanstöße und fachlichen Diskussionen.

...Herrn Prof. Dr. Ingo Steinbach als Koordinator des „SPP 1713 Chemomechanics“, im Zuge dessen diese Arbeit entstand, für die Übernahme des Zweitgutachtens zu meiner Arbeit.

...Herrn PD Dr. Michael Fleck für die direkte fachliche Betreuung meiner Arbeit, die Unterstützung bei der detaillierten Ausarbeitung von Vorträgen und Veröffentlichungen und die unzähligen ergiebigen Diskussionen während unserer überaus gelungenen Zusammenarbeit im Simulationsteam.

...meinem Simulationskollegen Markus für die vielen Diskussionen über gewagte Ideen, PC Probleme und unsere Arbeit. Darüber hinaus danke ich dir auch für das viele hilfreiche Feedback zur Ausarbeitung dieser Dissertation.

...meinen Bürokollegen Florian, Christian, Hans und Robert für die angenehme Atmosphäre, den Zusammenhalt und die vielen Gespräche und in der Ludwig-Thoma-Straße und im TAO Gebäude.

...Yueh-Yu und Fabian für die vielen experimentellen Daten, die die Diskussion der Simulationsergebnisse sehr bereichert haben.

...Beate für die viele Unterstützung bei allen organisatorischen Belangen und die vielen netten Gespräche.

...meinen KollegInnen Marius, Daniel, Jan, Selina, Sebastian, Stephan, Mike und Petra für die schöne Zeit und die lustigen Momente am Lehrstuhl, in der Mensa, auf Konferenzen, auf Mallorca und nach Feierabend.

Un grand merci aussi à Alphonse Finel de l'ONERA à Châtillon près de Paris, dont le groupe de recherche m'a permis d'être invité pendant trois mois. Un grand merci au personnel du «LEM» qui m'a accueilli si gentiment et merci à mon collègue de bureau Antoine Ruffini.

Ich möchte mich auch bei meiner Sandra und bei meinen vielen FreundInnen für die Ermutigung und Ablenkung gerade in der letzten Zeit bedanken. Nicht zuletzt bin ich meinen Eltern sehr dankbar, die mich auf meinem gesamten Lebensweg so wundervoll unterstützt haben.