

Designte Oberflächen und funktionale Beschichtungen

Hauchdünne maßgeschneiderte Schichten für hochbelastete Produkte und Komponenten

Das Anforderungsprofil an Hochleistungswerkstoffe erfordert zunehmend eine anwendungsorientierte Optimierung. Derart „maßgeschneiderte Werkstoffe“ zeichnen sich vor allem dadurch aus, dass nicht die Eigenschaften oder die chemische Zusammensetzung des Werkstoffes, sondern die geplante Hochleistungsanwendung von Anfang an den Wertschöpfungsprozess bestimmt. Vor allem bei Werkzeugen ist es offensichtlich, dass deren Oberflächen einer besonderen Beanspruchung ausgesetzt sind. Hier kommt es zu einer Kombination aus mechanischem, thermischem und chemischem Angriff, wodurch die Lebensdauer und Einsetzbarkeit von Werkzeugen, aber auch deren Bauteilen (etwa in Automobil- und Flugzeugindustrie), sehr stark beeinträchtigt wird. Die Oberfläche eines bestimmten Werkstoffes durch mechanische, thermische und chemische Methoden (z.B. Kugelstrahlen, Randschichthärten, Einsatzhärten) zu optimieren, ist

oft zu wenig. Die Beschichtungstechnik, allen voran die physikalische Dampfphasenabscheidung (siehe Schemabild), bietet hier die Möglichkeit, die Oberfläche verschiedenster Werkzeuge und Bauteile mit sehr dünnen (ca. 3-10 μm) aber extrem widerstandsfähigen Hochleistungswerkstoffen zu schützen.

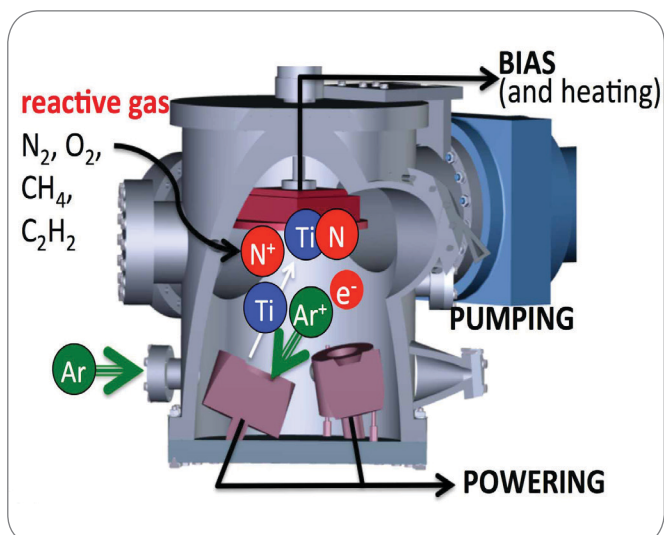
Zielsetzung

Die intelligente Beschichtung von Werkstoffen mit Materialien aus mehreren Komponenten steht im Fokus der Forschung. Materialien dieser Art erlauben es, dem gestiegenen Bedarf an maßgeschneiderten Funktionen von Beschichtungen besser als bisher gerecht zu werden.

Beschichtungen schützen Werkstoffe und geben ihnen zusätzliche, verbesserte Eigenschaften. Materialien aus zwei Elementen, wie binäre Nitride, Karbide oder Boride bestimmter Metalle, sind für diesen Zweck gut erforscht. Sie konnten lange Zeit die Anforderungen der Industrie gut erfüllen. Neue Anwendungen bei Hochleistungswerkstoffen erfordern jedoch neue Kombinationen von Eigenschaften. Mehr Möglichkeiten dafür bieten Materialien, die aus mehr als zwei Komponenten bestehen – sogenannte ternäre, quarternäre und multinäre Nitride, Karbide oder Boride. Doch mit der Anzahl an Komponenten in diesen Schichten steigt auch deren Komplexität. Der weitere Nutzen dieser Schichten erfordert daher ein wissensbasiertes Designkonzept und ein umfassendes Verständnis für die Technik des Beschichtungsprozesses. Dieser Aufgabe stellen sich Prof. Paul Mayrhofer und sein Forschungsteam an der TU Wien.

Lösungsansätze

Ein wichtiger Teil dieser Forschung befasst sich mit dem „Computer Aided Design“ von Schichtmaterialien, das eine präzise Vorausberechnung von bestimmten Materialeigenschaften und -verhalten erlaubt. Dabei werden insbesondere moderne Methoden der sogenannten Dichtefunktionaltheorie und der Kontinuumsmechanik verwendet. Zum Einsatz kommt hier vorwiegend der in Wien entwickelte Code im Vienna Ab Initio



Schema eines PVD Prozesses

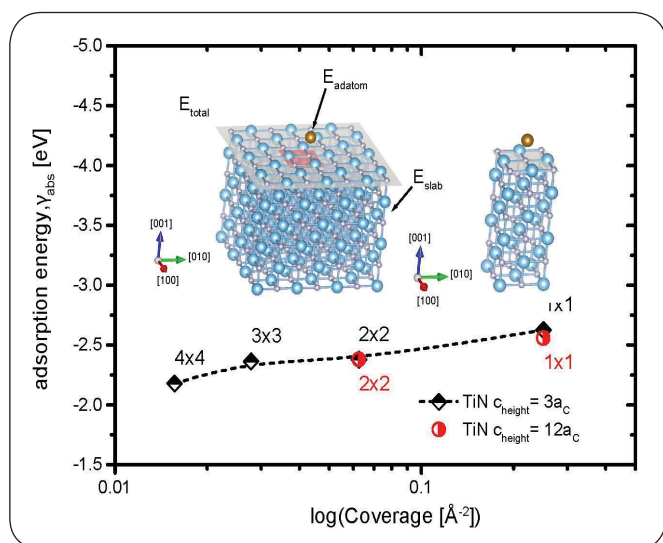
Simulation Package (VASP). Die computerunterstützte Werkstoffentwicklung befasst sich zum einen mit grundlegenden Eigenschaften der Materialien, wie der Berechnung von Bindungslängen und der Bindungsenergie, und zum anderen mit dem Verformungsverhalten der Schichten.

Desweiteren wird an der experimentellen Entwicklung der Schichten und der Beschichtungsprozesse geforscht. Dabei stehen aber nicht nur die verschiedenen Materialien im Fokus der Aufmerksamkeit sondern auch spezielle Schichtarchitekturen – wie z. B. die Kombination verschiedener Lagen oder Phasen und chemische oder strukturelle Gradienten.

In beiden Bereichen – Design und Entwicklung – fließen auch Daten aus der Erforschung von Veränderungen der Schichten ein, die durch thermische, chemische oder mechanische Einwirkungen erfolgen können.

Ergebnisse

Ein Beispiel für „Computer Aided Design“ von Schichtmaterialien ist deren Adsorptionsverhalten für verschiedenen Materialien. Durch die Berechnung von Adsorptionsenergien kann die Auswahl von Schichtsystemen für bestimmte Anwendungen erleichtert werden. In dem Diagramm unten wird der Zusammenhang der Größe der Superzellen und der Adsorptionsenergie dargestellt. Derartige Berechnungen sind für eine Optimierung der Simulationszeiten notwendig und stellen den ersten Schritt für weitere Berechnungen dar. Mit Hilfe der computergestützten Werkstoffwissenschaft ist es möglich, die experimentellen Forschungsstrategien ideal auszulegen.

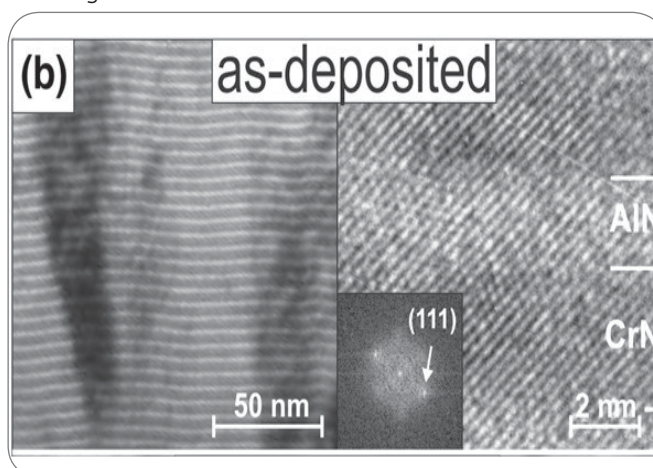


DFT Studie der Adsorptionsenergie

Materialversagen ist oft die Ursache für Betriebsstillstände bzw. Ausfälle und entsteht häufig durch die Initiierung

von Rissen im Material. Das kann zwar selten verhindert werden, aber es ist möglich, das Ausbreiten der Risse durch gezielt designte Prozesse zu stoppen.

Gelungen ist dies etwa in einem TU Wien-Projekt, eine phasenumwandlungsinduzierte Volumenänderung von AlN verwendet wird um das Risswachstum in einer Hartstoffschicht zu hemmen oder sogar zu stoppen. Hierzu ist es notwendig AlN Schichten in sehr dünnen Lagen (3 nm) herzustellen. Dies ist nur durch ein Multilagendesign (siehe Bild unten) möglich. Diese Schichten weisen außerdem noch den „Superlattice Effekt“ auf, wodurch die Härte als auch die Zähigkeit der Schichten verbessert werden kann. In der unten gezeigten hochauflösenden Transmissionselektronenmikroskopie Aufnahme sind sehr gut die unterschiedlichen AlN und CrN Nanolagen erkennbar.



Querschnitt durch eine CrN/AlN Multilagenschicht

Nutzen für Sie

Insgesamt läutet die Forschung hier eine neue Ära für das zielgerichtete Design, die bedarfsgerechte Entwicklung und das Testen neuer Materialien und Beschichtungen ein.

Für Hersteller, die Produkte (Schichten, Targetmaterialien, Beschichtungsprozesse) optimieren wollen, bietet die Kombination aus computerunterstützter und experimenteller Werkstoff- bzw. Schichtentwicklung der TU Wien eine erhebliche Zeit- und Kosteneffizienz.

Ansprechpartner:

Univ.Prof. Dr. Paul Mayrhofer
 Institut für Werkstoffwissenschaft und
 Werkstofftechnologie
 +43 1 58801 30811
 paul.mayrhofer@tuwien.ac.at
 www.tuwien.ac.at
 hardcoatings.tuwien.ac.at