

### 3. Öka materialutvecklingstakten

För att kunna möta nya krav på material snabbare, behöver ett antal saker inom materialutveckling bli bättre. En av dem är våra materialmodeller – hur legeringssammansättningar och annan materialdesign påverkar egenskaperna. En annan är förståelsen för hur de olika stegen i processkedjan från råvara till handelsfärdig produkt påverkar de slutliga egenskaperna. Eftersom dagens tillverkningsmetoder bygger mycket på empiri behöver också teoretiska och experimentella modeller och metoder utvecklas och förbättras som ökar möjligheterna att förutsäga och styra processerna mot rätt egenskaper. Sverige är redan idag världsledande inom ovanstående områden. Genom att öka takten i utvecklingen av våra modeller – teoretiska såväl som experimentella – kan vi behålla försprånget och därmed förutsättningarna att leda utvecklingen även i framtiden. Men det räcker inte. För att kunna implementera den nya material- och processkunskapen i produktionen krävs förbättrad – ibland nyutvecklad – produktionsteknik. Det handlar om stora investeringar och risktaganden som behöver göras möjliga. För att kunna omsätta produkterna till erbjudanden krävs kunskaper om hur man bäst utnyttjar de nya materialens egenskaper i konstruktioner, och hur de olika stegen mellan materialtillverkning och konstruktion realiserar. Målet är att svensk metallindustri ska ha en globalt ledande förmåga att snabbt gå från en materialidé till fullskalig produktion av material med de rätta egenskaperna för att skapa en efterfrågad funktion.

Om man blickar bakåt är det lätt att se att långsiktiga satsningar av grundforskningskaraktär, men med tydliga mål, har varit viktiga för att behålla och stärka Sveriges ledande ställning inom utveckling av stål och andra metaller. För tre decennier sedan inleddes arbetet med ThermoCalc – en metod att via dator beräkna fasjämvikter i stål som funktion av legeringssammansättning. Idag används denna mjukvara i hela världen, och olika företag och nischer utvecklar egna, skyddade databaser för just "sina" sammansättningar. Allting tyder på att betydelsen av sådan forskning kommer att öka snarare än minska och detta arbete måste därför fortsätta och intensifieras. Internationellt sett har under senaste decenniet ett hierarkiskt betraktelsesätt vuxit fram. Det innebär att teori och experimentell karakterisering integreras över många längd- och tidskalor, alltifrån enskilda atomer upp till komponentnivå, från tider omfattande atomernas vibrationer till livslängden hos tekniska system. Då det gäller den teoretiska sidan har detta nya område kommit att benämnas "Integrated Computational Materials Engineering" (ICME). För validering av beräkningsresultat och mätning av viktiga data behövs dock experimentella studier på alla de ingående nivåerna i rum och tid. Svensk forskning har en stark och drivande position inom ICME med stöd av långsiktiga statliga och industri satsningar i samverkan som exempelvis på VINN Excellence Centre HERO-M (Hierarchic Engineering of Industrial Materials) vid KTH.

Redan 2004 demonstrerades i en rapport från amerikanska National Research Council att ICME är en mycket kraftfull metod för materialutveckling. Det påpekades i samma rapport att metodens fulla potential förblir outnyttjad så länge tillgängliga databaser är ofullständiga. Tyvärr har det systematiska uppbyggandet av databaser inte varit ett prioriterat område inom de fysiska vetenskaperna. Inom livsvetenskaperna har situationen varit helt annorlunda och i det största ingenjörprojektet någonsin kartlades den mänskliga arvsmassan, ett projekt som avslutades 2003 och resulterade i en gigantisk databas. Detta var bakgrunden till att USA:s president Barack Obama sommaren 2011, i ett tal om "Partnership for advanced manufacturing" lanserade "the materials genome initiative" (MGI) med det uttalade målet att korta ledtiden för från idé till praktiskt utnyttjande av nya material med 50 % eller mer.

En komplikation som inte får underskattas är att nuvarande termodynamiska databaser grundar sig på termodynamiska beskrivningar av de ingående grundämnena som publicerades för mer än 20 år sedan och baserar sig på då tillgänglig information som oftast var betydligt äldre. I vissa fall får man inte bara räkna med att informationen är mer än 50 år gammal utan även felaktig jämfört med senare data. Tyvärr är det inte så enkelt att justera sådan information eftersom man då även måste justera samtlig information där det aktuella grundämnet ingår. Det är därför ett lämpligt tillfälle att göra detta i samband med att en ny generation av termodynamiska databaser tas fram.

De ovan nämnda teoretiska metoderna måste åtföljas av en arsenal av experimentell instrumentering som är "state of the art". Exempelvis möjliggör atomsondstomografi kartläggning av den kemiska sammansättningen atom för atom, och olika typer av elektronmikroskopi för kartläggning av såväl lokal kemisk sammansättning som kristallstruktur.

Högenergiröntgen baserad på synkrotronstrålning har visat sig vara ett mycket kraftfullt verktyg och kommer att få en större tillgänglighet för svenskt vidkommande genom satsningarna MAXIV i Lund och PETRA III i Hamburg.

Ytterst är det dock materialegenskaperna som är av vikt och till modellerna för jämvikter och strukturutveckling måste därför fogas modeller för hur egenskaperna beror av materialstrukturen. Det är sällan utmaningen ligger i att utveckla en mekanisk egenskap, t.ex. hårdhet eller seghet, så långt som möjligt. Utmaningen ligger i regel i att kombinera egenskaper som inte gärna låter sig förenas, t.ex. hållfasthet och duktilitet, eller samtidig nötningsbeständighet och högt korrosionsmotstånd. Det finns dock exempel på enstaka egenskaper som är viktiga att vidareutveckla, t.ex. kryp motstånd vid höga temperaturer.

Dagens och morgondagens design av material bygger på användning av komplexa legeringssystem och mikrostrukturer, som uppnås genom en detaljstyrd processväg genom hela kedjan smältning – stelning – deformation – värmebehandling – kylning. Även processteg efter kylning, s.k. kalldeformation, påverkar mikrostrukturen och därmed egenskaperna, och behöver inkluderas för en komplett förståelse av hur materialegenskaper kan skapas.

Viktigt är att inte bara de rent materialtekniska förutsättningarna, utan även de randvillkor som ges av processutrustningen, tas med i beräkningarna. Det är bara i verklig utrustning som material faktiskt skapas, och bara med den kunskapen kan egenskaperna kontrolleras fullt ut. I det perspektivet blir det också möjligt att peka ut vilka modifieringar eller nyutvecklingar av produktionsutrustning som är önskvärda eller nödvändiga för att på bästa sätt nå de önskade egenskaperna.

Stora framsteg har uppnåtts genom finit elementmodellering (FEM) av deformationsprocesserna, som har gjort att processtyrningen har kunnat lyftas från den empiriska nivån till predikterbarhet. Slutsatserna kan till och med vara kontraintuitiva, d.v.s. leda till framgångsrika processvägar som inte hade kunnat förutsägas baserat på tidigare erfarenhet. Ett led i denna utveckling kräver en övergång från kontinuummodeller av material till ett betraktelsesätt som tar hänsyn till mikrostrukturkomponenter. I flerfasiga material sker deformation lokalt, vilket innebär att utveckling av dislokationsstrukturen kan se väldigt olika ut i olika strukturkomponenter. Dislokationsstrukturen styr materialets respons till efterföljande värmebehandlingsprocesser som är avsedda att åstadkomma återhämtning, rekristallisation, korntillväxt och fasomvandlingar och har därmed en helt avgörande betydelse för produktens slutegenskaper.

Ytterligare en övergripande aspekt av mikrostrukturdesign av nya metalliska material är möjligheten att prediktera och därmed undvika oönskade effekter. Utveckling av material med komplexa strukturer och högre hållfasthet ökar risken för sideeffekter såsom sprödhet, sprickkänslighet och svetsvårigheter. Detta kräver ett samlat angreppssätt som integrerar hela kunskapskedjan från ab initio beräkningar via mikrostruktur och deformationsbeteende till makroskopiska egenskaper.

För ett urgammalt material som gjutjärn, som kan beskrivas som en komposit av grafit i en stålmatrix, har en stark utveckling skett på senare tid. Efter att först ha modifierat grafiten för bättre seghet, har nu stålmatriken optimerats genom legering, värmebehandling och plastisk deformation. Detta har lett till gjutjärn med trefaldigad hållfasthet. I det fortsatta arbetet är modellering av mikrostrukturen och simulering av egenskaper för olika efterbehandlingar av avgörande betydelse.

Delområden för grundläggande forskningsinsatser för att stödja ICME:

- Metallgenomatik; kartläggning av metallegeringarnas "genom" – sammanställning av termodynamiska data genom en kombination av systematiskt arbete med legeringar och ab initio beräkningar från atomärt perspektiv
- Utveckling av metoder för högproduktiv utvärdering och sammanställning av databaser.
- Modeller för ytor och fasgränser och deras egenskaper.
- Modeller för koppling mikrostruktur – mekaniska egenskaper
- Modeller för materialegenskaper under belastning och i miljö.
- Experimentell kartläggning i tre dimensioner av strukturer – från makro till atomer (3 D)
- In-situ experimentell karakterisering av dynamiska förlopp (4 D)

En kraftfull satsning på att behålla och stärka svensk forskning position inom ICME och till detta kopplade experimentella metoder för generering av grundläggande indata och verifiering av resultat skapar en stark plattform för fortsatt utveckling av en svensk stål och metall- och gjuteriindustri baserad på globalt ledarskap inom valda nischprodukter.

För pulvermetallurgitekniken (PM) är det viktigt att ytterligare exploatera teknikens alla fördelar. Många komponenter och legeringar som p.g.a. sin komplexa form och sammansättning inte kan tillverkas på annat vis, kan med fördel tillverkas genom pulvermetallurgiska metoder. Genom PM kan produkter med mycket snäva toleranser tillverkas utan stort materialspill. Ett fortsatt utvecklingsarbete krävs, där egenskaperna för PM-tillverkat material görs än mer konsistenta och förutsägbara. Möjligheterna för PM-material att göra ännu mer nytta är stora.

De mätbara målen för området är:

- Två helt nya verktyg ska användas i produktutvecklingsarbetet.
- Utvecklingstiden för nya material, från beslut om projektstart till demonstration av egenskaper i fullskala, har minskat med genomsnitt 50 %.
- Nya produkters andel av företagets försäljning har ökat med genomsnitt 20 %.