

ZWISCHENBERICHT/ENDBERICHT

FFG Projektnummer	865011	eCall Antragsnummer	13168923
Kurztitel	PL2N A	FörderungsnehmerIn	LKR
Bericht Nr.	2	Berichtszeitraum	01.03.2019- 29.02.2020
Bericht erstellt von	Simson (LKR), Kirschner, Eisenmenger (TUW IFP), Bernardi (TUW USTEM), Mayr-Schmölzer, Vonbun-Feldbauer (TUHH)		

Hinweise: Richtwert für den Umfang: 10-40 Seiten, als pdf im eCall hochladen!

1. Ziele und Ergebnisse

- Wurden die dem Förderungsvertrag zugrunde liegenden Ziele erreicht? Sind diese Ziele noch aktuell bzw. realistisch? (Achtung: Änderungen von Zielen erfordern eine Genehmigung durch die FFG)
- Vergleichen Sie die Ziele mit den erreichten Ergebnissen.
- Beschreiben Sie „Highlights“ und aufgetretene Probleme bei der Zielerreichung.

Im zweiten Projektjahr wurden die beiden wesentlichen methodischen Säulen des Projektes:

1. *Herstellung und Charakterisierung mehrerer Dünnschichtbibliotheken im Systems Al-Mg-Cu-Zn*
2. *kombinierte DFT- und CE-Simulation von ternären und quaternären Konfigurationen im genannten Systemen*

intensiv bearbeitet, und sehr gute Fortschritte erzielt werden.

Wie unten noch ausgeführt, konnten alle drei Ziele erreicht werden. **Das Projekt PL2N A liegt zum Zeitpunkt dieses 2. Zwischenberichtes (März 2020) im Zeitplan, alle Meilensteine konnten erreicht werden.** Meilenstein M2.1, „Übergabe des ersten Konfigurationssatzes von Task 2.1 an 2.2 / Start CE-Simulation“, wurde wie geplant erreicht. Der Meilenstein M3.2 „Erfolgreicher Abguss erster Bulk Proben“ wurde leicht verzögert mit 02/2020 erreicht. Die Verzögerung wurde bewusst in Kauf genommen, da dadurch eine abgestimmte Definition der Zielzusammensetzungen mit den Ergebnissen der DFT-CE-Simulation erreicht werden konnte.

LKR: Die Herstellung von Sputter Targets für die Bibliothekenerstellung wurde nach Bedarf des Partners TU Wien durchgeführt.

Der erste Konfigurationssatz an DFT-Simulationen der beiden Strukturvarianten C14 und C15 im System Al-Zn-Cu wurde wie geplant per 04/2019 an den für das Projekt bei TUHH angestellten Mitarbeiter, Dr. Wernfried Mayr-Schmölzer, übergeben.

Parallel lag der Fokus der thermodynamischen Modellerstellung auf der tiefgreifenden Recherche und Bewertung vorhandener binärer und ternärer Mischungs- und v.a.

Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

Konfigurationsenthalpiedaten. Zusätzlich wurde begonnen, die vorhandenen experimentellen Daten mit den Vorhersagen auf Basis kommerzieller thermodynamischer Simulationssoftware (ThermoCalc) durchzuführen. Nachdem erste Vergleiche unbefriedigende, weil durch die Datenbanken unzulänglich (i.e. unphysikalisch) abgebildete Zustände zeigten, wurde auf Basis neu verfügbarer Datenbanken (TCMG5, TCAL6) neuerliche Vergleichsrechnungen begonnen, welche in einzelnen Bereichen schon partielle Übereinstimmungen mit den XRD-Charakterisierungen des Partners TU Wien zeigen. Dies stellt eine potenzielle Verwendung als Enthalpiedatenbank in Aussicht, welche in der Folgeperiode weiter untersucht werden soll.

Mit 02/2020 wurden zudem die ersten Bulk-Proben abgegossen (s.u.) und werden in der Folgeperiode charakterisiert werden.

Der Projektfortschritt für die beiden Partner der TU Wien (IFP und USTEM) kann als planmäßig bezeichnet werden. Die etablierten Herstellungs- bzw. Charakterisierungsmethoden wurden auf die neuen Materialbibliotheken AlMgZn+Cu, AlCuMgZn+Al, AlCuMgZn+Zn und AlCuMgZn+Mg angewendet. Zusätzliche Methoden der Charakterisierung wie TEM Analysen und Härtemessungen wurden auf die vorherigen und aktuellen Proben angewendet. Es konnte ein komplexes Verhalten der Kristallphasen in Abhängigkeit der Zusammensetzung (Mischkristall, intermetallische Phase mit hohen Anteilen tertiärer Elemente, reine IM-Phasen) und eine nicht triviale Variation der Probenhärte gezeigt werden. Die Ergebnisse dieser Arbeiten werden im Juni 2020 bei der Thermec2020 in Wien, Österreich im Rahmen eines Vortrages und eines Posterbeitrages vorgestellt. Es kam zu keinen signifikanten Abweichungen vom Projektplan.

An der TU Hamburg wurden mit Projektstart am 1.4.2019 damit begonnen, die bewährte Methode der Cluster Entwicklung (CE) auf das quaternäre Mg-Zn-Cu-Al System anzuwenden. Zu Beginn wurde dieses auf ein pseudo-ternäres System vereinfacht, in dem eine stabile Mg-Submatrix angenommen wurde. Mittels eines großen Datensatzes an DFT-Rechnungen konnten sehr gute Näherungsmodelle mittels CE der C14 und C15 Laves Phasen sowie einer weiteren kubischen Phase erstellt werden. Es zeigte sich eine erhöhte Stabilität der kubischen Phase im Vergleich zu den Laves Phasen. Die Berechnung des Young'schen Elastizitätsmoduls in der Voight-Reuss-Hill-Näherung der stabilsten Strukturen mittels DFT wies auf eine erhöhte mechanische Stabilität der kubischen Phase hin. Darauf aufbauend wurde das Modell auf das quaternäre System erweitert, indem auch eine Änderung der Mg-Konzentration erlaubt wurde. Hier zeigte es sich, dass eine Änderung der Mg-Matrix zu einer großen Verringerung der Stabilität führte und dadurch die zu Beginn getroffene Annahme bestätigt wurde. Zusätzlich wurde begonnen, die bereits erstellten DFT-Rechnungen als Ausgangspunkt für die Erstellung von Paarpotentialen auf Basis von neuronalen Netzen zu erstellen.

Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

2. Arbeitspakete und Meilensteine

2.1 Übersichtstabellen

- Erläuterung:
Die Tabellen sind analog zum Förderungsansuchen aufgebaut
Basistermin: Termin laut Förderungsansuchen bzw. laut Vertrag gültigem Projektplan
Akt. Planung: Termin laut zum Zeitpunkt der Berichtslegung gültiger Planung.

Tabelle 1: Arbeitspakete

AP Nr.	Arbeitspaket Bezeichnung	Fertigstellungsgrad	Basistermin		Aktuell		Erreichte Ergebnisse / Abweichungen
			Anf.	Ende	Anf.	Ende	
1	Projektmanagement	66%	03/18	02/21	03/18	02/21	
2	Simulation	60%	03/18	02/21	03/18	02/21	Fortschritt lt. Plan
3	Experimentelle Legierungsherstellung	66%	05/18	02/21	05/18	02/21	Fortschritt lt. Plan
4	Charakterisierung	60%	10/18	02/21	06/18	02/21	Fortschritt lt. Plan;

Tabelle 2: Meilensteine

Meilenstein Nr.	Meilenstein Bezeichnung	Basistermin	Akt. Planung	Meilenstein erreicht am	Anmerkungen zu Abweichungen
1.1	KickOff-Sitzung	03/2018	05/2018	09.05.2018	Leichte Verzögerung aufgrund Terminkollisionen
1.2	Endbericht vorgelegt	02/2021	02/2021		
2.1	Übergabe des ersten Konfigurationssatzes von Task 2.1 an 2.2 / Start CE-Simulation	04/2019	04/2019	17.04.2019	Übergabe von DFT Ergebnissen von LKR an TUHH, TUHH startet CE
2.2	Abschließende Evaluierung der Korrelation zwischen Experiment und Simulation durchgeführt	02/2021	02/2021		
3.1	Erfolgreiche Herstellung von erster Dünnfilmbibliothek	12/2018	12/2018	12/2018	Prozedere zur Abscheidung von Dünnfilmbibliotheken vollständig etabliert
3.2	Erfolgreicher Abguss erster Bulk Proben	11/2019	11/2019	02/2020	Leichte Verzögerung, um mit CE-DFT-Simulation abgeglichen Kompositionsauslegung zu ermöglichen.
4.1	Validierung der Anwendbarkeit von TEM/FIB-Methoden auf lw-MPEAS	01/2019	01/2019	01/2019	

2.2 Beschreibung der im Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten

- Beschreiben Sie die im Berichtszeitraum durchgeführten Arbeiten, strukturiert nach den Arbeitspaketen.
- Konnten die Arbeitsschritte und –pakete gemäß Plan erarbeitet werden? Gab es wesentliche Abweichungen?
- Die Beschreibung beinhaltet ebenso eine allfällige Änderung der angewandten Methodik (Achtung: Änderungen an der Methodik und wesentliche Änderungen im Arbeitsplan erfordern eine Genehmigung durch die FFG!).

AP Projektmanagement (AP 1):

Das erste Jahresmeeting wurde am 07.06.2019 am Standort TU Wien unter Teilnahme aller Projektpartner durchgeführt. Darin wurden die weiteren Vorgehensweisen für das diesem Bericht zugrunde liegende Projektjahr skizziert. Im weiteren Projektverlauf wurden mehrere bilaterale Treffen zwischen TU Wien und LKR (3 physische Meetings am Standort TU Wien, mehrere Online-Abstimmungen), sowie zwischen LKR und TU Hamburg durchgeführt.

Das Projekt wurde hinsichtlich Kosten und Arbeitsfortschritt laufend überprüft und befindet sich im Plan.

AP Simulation (AP 2):

An der TU Hamburg (TUHH) wurden mit Projektstart begonnen, Modelle für die Vorhersage von Kristallstabilitäten auf Basis der bewährten Methode der Cluster Entwicklung (CE) zu entwickeln. Diese erlaubt die Vorhersage der Formationsenergie einer großen Anzahl an möglichen Anordnungen der Ionen und Stöchiometrien im Kristallgitter, ohne für jede Konfiguration eine vergleichsweise aufwändige DFT-Rechnung durchführen zu müssen.

Die Ergebnisse der Simulationen am ternären Mg-Zn-Cu System, die 2018 mittels Dichtefunktionaltheorie (DFT) am LKR durchgeführt wurden, wurden an der TUHH evaluiert. Des Weiteren wurde untersucht, ob in öffentlich zugänglichen Datenbanken für DFT-Rechnungen wie AFLOW oder NOMAD genug Daten für die Erstellung eines CE-Modells des zu untersuchenden multistöchiometrischen Systems vorhanden waren. Nachdem sich dies nicht bestätigen konnte, dienten nur die am LKR erstellten Datensätze als Startpunkt für die Erstellung eines Satzes an DFT-Trainingsdaten, mit denen ein Fit an ein CE-Modell des ternären Systems erstellt wurde. Die DFT-Daten werden nun laufend gemeinsam von LKR und TUHH erweitert.

Da die Modelle der Cluster Entwicklung auf einem Kristallgitter beruhen wurden als Startpunkt die C14 und C15 Laves Phasen als Basissymmetrien ausgewählt. Eine weitere Vereinfachung, um den Konfigurationsraum einzuschränken, bestand in der Annahme einer stabilen Magnesium Matrix in den jeweiligen Kristallstrukturen. Nach dem ersten Konsortialtreffen im Juni 2019 wurden

Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

aufgrund der Ergebnisse der von AP3 und AP4 durchgeführten Charakterisierungen die Simulationen auf ein zusätzliches kubisches Kristallgitter erweitert, welches im Vergleich zu den ursprünglichen C14 und C15 Modellen durch eine wesentlich höhere Zahl an möglichen Gitterplätzen (39 statt 12 und 6 bei C14 und C15) eine gesteigerte Komplexität aufweist. Des Weiteren wurden die Modelle auf das quaternäre Mg-Zn-Cu-Al System ausgedehnt. Die vorhandenen Programme zur Erstellung der CE-Modelle erwiesen sich als unzureichend diese massiv erhöhte Anzahl an Konfigurationen abzubilden, weshalb der gesamte Workflow auf ein anderes Softwarepaket (icet) umgestellt werden musste.

Unter der zu Beginn getroffenen Annahme einer stabilen Mg-Matrix konnte für alle drei (C14, C15 und kubischen) CE-Modelle ein sehr guter Fit mit einem mittleren quadratischen Fehler in Bezug auf die DFT-Trainingsdaten von unter 5meV pro Atom mit einer dreistelligen Anzahl an Fitparametern erreicht werden. Bei der Erweiterung des Modells auf variierende Mg-Konzentrationen und Besetzungen erhöhte sich der mittlere quadratische Fehler des Fits auf bis zu 30meV pro Atom bei bis zu 65000 Fitparametern. Die ursprüngliche Annahme der hohen Stabilität der Mg-Matrix konnte dennoch durch die CE-Modelle und nachträgliche DFT-Rechnungen bestätigt werden. Ebenso konnte die höhere Stabilität der kubischen Struktur, die durch AP3 und AP4 gefunden wurde, im Vergleich zu den Laves Phasen bestätigt werden. Des Weiteren wurde das Young'sche Elastizitätsmodul in der Voight-Reuss-Hill-Näherung mittels DFT Simulationen der stabilsten Strukturen berechnet. Die Ergebnisse zeigten eine wesentliche Steigerung der berechneten Steifigkeit der kubischen Phase im Vergleich zur C14 Laves Phase.

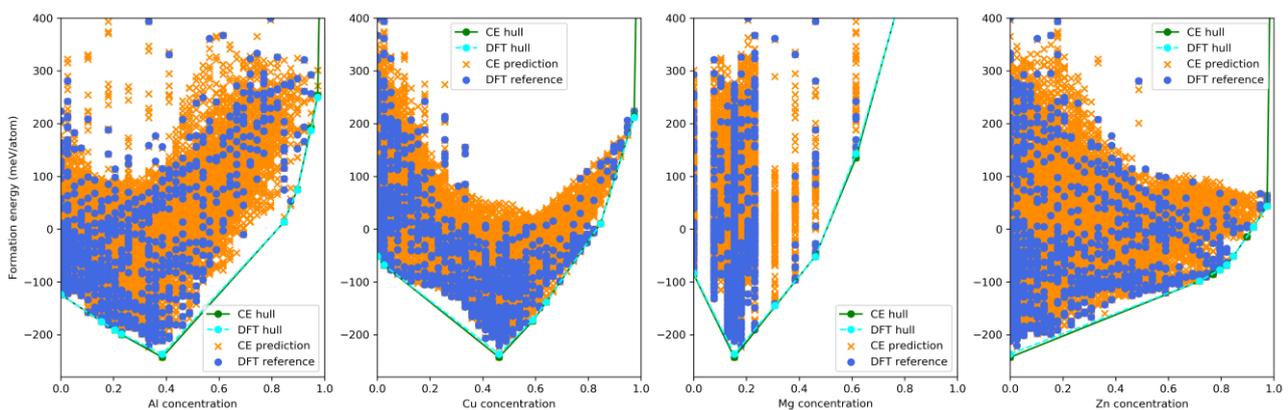


Abbildung 1 Exemplarische Darstellung der Formationsenergien des Mg-Zn-Cu-Al Systems im kubischen Gitter, projiziert auf die Achse der Konzentrationsänderung je eines der Elemente. Das Modell wurde aus 936 DFT Simulationen (blau) generiert und ermöglicht die Vorhersage der Stabilität von 17442 weiteren Strukturen (orange). Die einhüllenden Kurven (türkis und dunkelgrün) ermöglichen die Vorhersage der stabilsten Konfiguration des Systems bei der entsprechenden Konzentration eines Elements. Deutlich sichtbar ist das Minimum der Formationsenergie bei der $Mg_2Cu_6Al_5$ Struktur.

Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

Parallel zu den erwähnten Arbeiten wurde die Möglichkeit evaluiert, die vorhandenen DFT-Rechnungen als Trainingsdaten für ein auf computergestütztem Lernen basierendes Potential anzuwenden. Diese Potentiale sind nicht wie die CE-Modelle auf ein spezifisches Kristallgitter beschränkt und können auch mit Simulationssoftware wie LAMMPS, die auf klassischen Atompotentialen basieren, verwendet werden. Dadurch werden physikalische Größen wie thermische Eigenschaften zugänglich, für die DFT-Simulationen zu aufwändig sind. Erste vielversprechende Versuche zeigten eine hohe Qualität des Fits an die vorhandenen DFT-Daten mit mittleren quadratischen Fehlern der Formationsenergie in der Größenordnung von 5 meV pro Atom des quaternären Systems.

Die Arbeiten an der thermodynamischen Beschreibung von Leichtmetall-HEAs war in der Berichtsperiode geprägt von der vergleichenden Analyse der verfügbaren Materialdaten aus den Sputter-Bibliotheken mit:

- a) in der Literatur verfügbaren, ständig gescreenten binären und teilweise ternären Enthalpiedaten und Bewertung über das vorhandene semi-empirische Modell
- b) mit durch kommerzielle thermodynamische CALPHAD-Software (ThermoCalc) basierend auf neu verfügbaren Datenbanken.

Mit Verfügbarkeit der oben beschriebenen CE-Datenbanken werden nun intensive Vergleiche aller drei Kriterien“bibliotheken“ untereinander und mit den experimentellen Ergebnissen weitergeführt.

AP Experimentelle Legierungsherstellung (AP 3):

Die im Zwischenbericht 1 etablierten Methoden zur Probenherstellung bzw. Probennachbehandlung wurden genutzt, um ausgehend von den Ergebnissen der ersten Proben aus den $\text{AlCu}_2\text{MgZn}_2$ und AlMgZn_2 Serien weiterführende Materialbibliotheken zu produzieren und eingehend zu analysieren. Hierbei wurde die Stöchiometrie ausgehend von einer Mischung der 4 Komponenten Al, Cu, Mg und Zn jeweils in die Richtung der 4 Reinmaterialien verschoben. Die Konzentration des quaternären Startpunktes wurde hierbei ausgehend von den Messungen aus den ersten Linearbibliotheken ($\text{AlCu}_2\text{MgZn}_2$ und AlMgZn_2) an einem Punkt gewählt, an dem sich sowohl Materialeigenschaften wie Härte massiv änderten, aber auch kristallographische Änderungen der Mikrostruktur und Anzahl der intermetallischen Phasen maximal waren. Somit ergeben sich zum gegenwärtigen Projektzeitpunkt 7 Linearbibliotheken im quaternären System Al-Mg-Zn-Cu. Alle angefertigten Proben wurden mittels elektronen- und röntgentechnischen Analyseverfahren charakterisiert.

Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

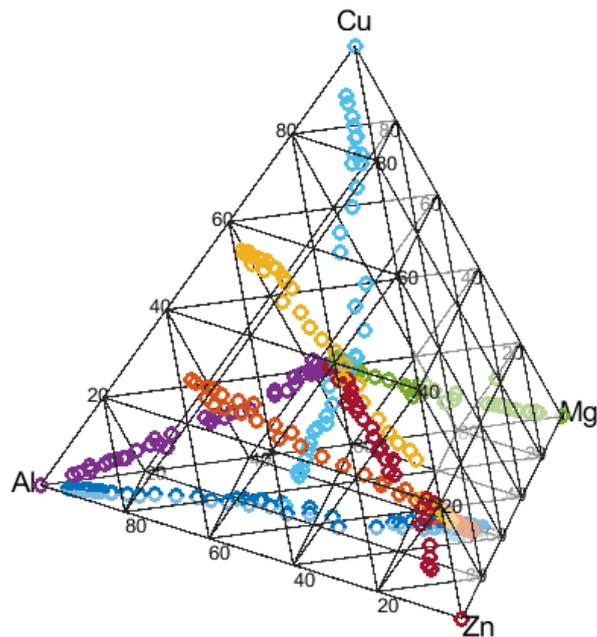


Abbildung 2 Übersicht der Zusammensetzung der hergestellten Probenserien. Die unterschiedlichen Farben spiegeln verschiedene Serien wieder, die Achsen geben die at% der jeweiligen Elemente in den Proben an

Als mögliches Tool zur Auswahl von zukünftigen Materialkombinationen wurde ein Computerprogramm entwickelt, das auf Grundlage von Materialeigenschaften (Mischungs- und intermetallische Bindungsenthalpien, Schmelzpunkte, Valenzelektronenkonzentration, Atomradien) und relativen Konzentrationen berechnet, welche Materialkombinationen bestimmte Kriterien zur Bildung einer Solid Solution aus der Literatur erfüllen. Dieses Programm soll zukünftig verwendet werden, um die aus den experimentell hergestellten Bibliotheken gezogenen Schlüsse mit den in der Literatur etablierten Kriterien abzugleichen und die Materialauswahl für künftige Bibliotheken zu unterstützen.

Zum Ende der vorliegenden Berichtsperiode wurden 2 Bulk-Proben abgegossen und werden im unmittelbaren weiteren Projektverlauf charakterisiert werden. Die Auswahl der Stöchiometrien erfolgte nach o.g. Kriterien:

- **Mg₁₂Zn₁₁Al₁₃Cu₆₄**: Die XRD-Analyse des isostöchiometrischen Sputterbereichs zeigt einen rel. breiten single phase-Bereich einer kubischen Phase an, siehe auch Abbildung 3 a) und b). Auch die CE-Simulation sieht hier die stabilste kubische Konfiguration
- **Mg₁₉Zn₃₁Al₂₁Cu₂₉**: In der Linearbibliothek AlCu₂MgZn₂ wurde hier ein metallurgisch widersprüchliches Verhalten beobachtet. Einerseits ist im XRD eine maximale Anzahl detektierter Phasen innerhalb der Reihe, einhergehend mit einem massiven Härteanstieg erkennbar. Andererseits ist die Schlifffmorphologie globular „glatt“, während in den übrigen Stöchiometrien

Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

ausgeprägte Schwindungsrisse als Indiz einer intermetallischen Phasenumwandlungskontraktion vorliegen (Abbildung 4).

Um in weiterer Folge die im Projektplan vorgesehenen Versuche mit Sekundärmaterial (Schrotte, synthetische Verunreinigungsfraktionen) anzubahnen, wurden am LKR einige Versuchskampagnen mit semi-industriellen Gießverfahren, allen voran einem modifizierten Niederdruckgussverfahren, durchgeführt, um insbesondere im Hinblick auf die volatilen und sicherheitskritischen Elemente Mg und Zn eine stabile Prozessbasis zur Verfügung zu haben.

AP Charakterisierung (AP 4):

Die in AP 3 produzierten Proben wurden mittels elektronenmikroskopischer Verfahren (Sekundärelektronen, Rückstreuelektronen) untersucht. Energiedispersive Spektroskopie (EDS) wurde herangezogen, um die atomare Schichtzusammensetzung zu kontrollieren. Für die Messung und Charakterisierung der vorhandenen Phasen wurden Röntgenbeugungsexperimente am Röntgenkompetenzzentrum der TU Wien durchgeführt. Der Vergleich der verschiedenen Zusammensetzungen und Materialkombinationen des Systems AlCuMgZn + (Al, Cu, Mg, Zn) ermöglichte einen Einblick in die treibenden Parameter für Phasenbildung, kristallografische Ordnung und Einfluss auf die Mikrostruktur. Die Analyse der Auswirkung von einer Zunahme der Legierungselemente ausgehend von Reinmetallen zeigte inwiefern sich die einzelnen Metalle auf die Eigenschaften der Legierung auswirken. Hierbei konnte im Fall der AlMgZn + Cu Serie eine Single Phase Legierung bei einer Wärmenachbehandlungstemperatur von 350 °C bis zu relativ hohem Anteil an Legierungsatomen (Cu ~60 at%) gefunden werden.

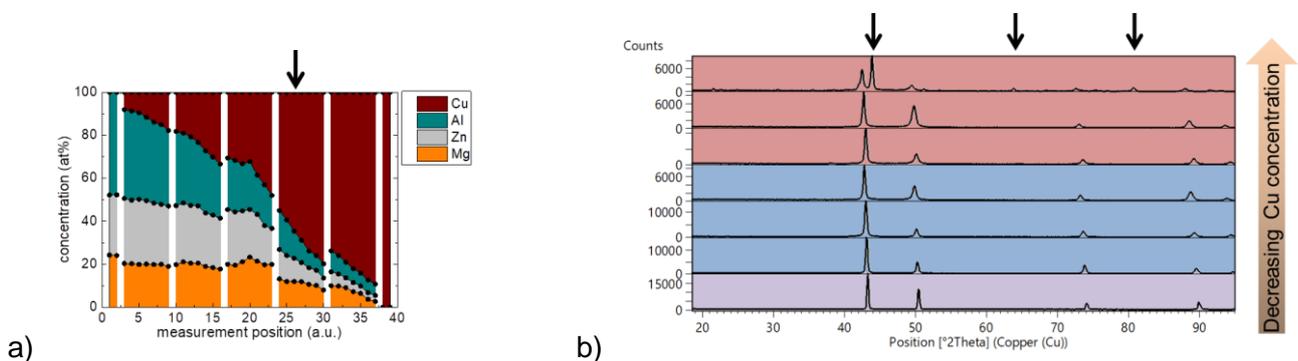


Abbildung 3a) Übersicht der Zusammensetzungen der Probenreihe AlMgZn + Cu. Der Pfeil gibt die Grenze des Konzentrationsbereichs an, in der die Ausbildung von Cu-fremden Kristallphasen beginnt (links: Vielzahl von IM-Phasen, rechts: single Cu-Phase). b) XRD-Messungen an den rechten 3 Proben aus a) (ab „measurement position 24“). Die Pfeile indizieren die Peaks der neu auftretenden intermetallischen Phasen.

Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

Die Messung mittels röntgendiffraktometrischer Methoden konnte einen Aufschluss auf die Entartung der Kristallsysteme in Zusammenhang mit den chemischen Zusammensetzungen geben. An allen Proben wurden Härtemessungen durchgeführt, die mit den Ergebnissen der XRD Untersuchungen abgeglichen wurden. Dadurch konnte der Auswirkung der Entartung der vorherrschenden Kristallsysteme auf die mechanische Eigenschaft der Härte nachgegangen werden. Ausgewählte Proben wurden mittels TEM Analyse untersucht, um die Ausbildung von Clustern sichtbar zu machen.

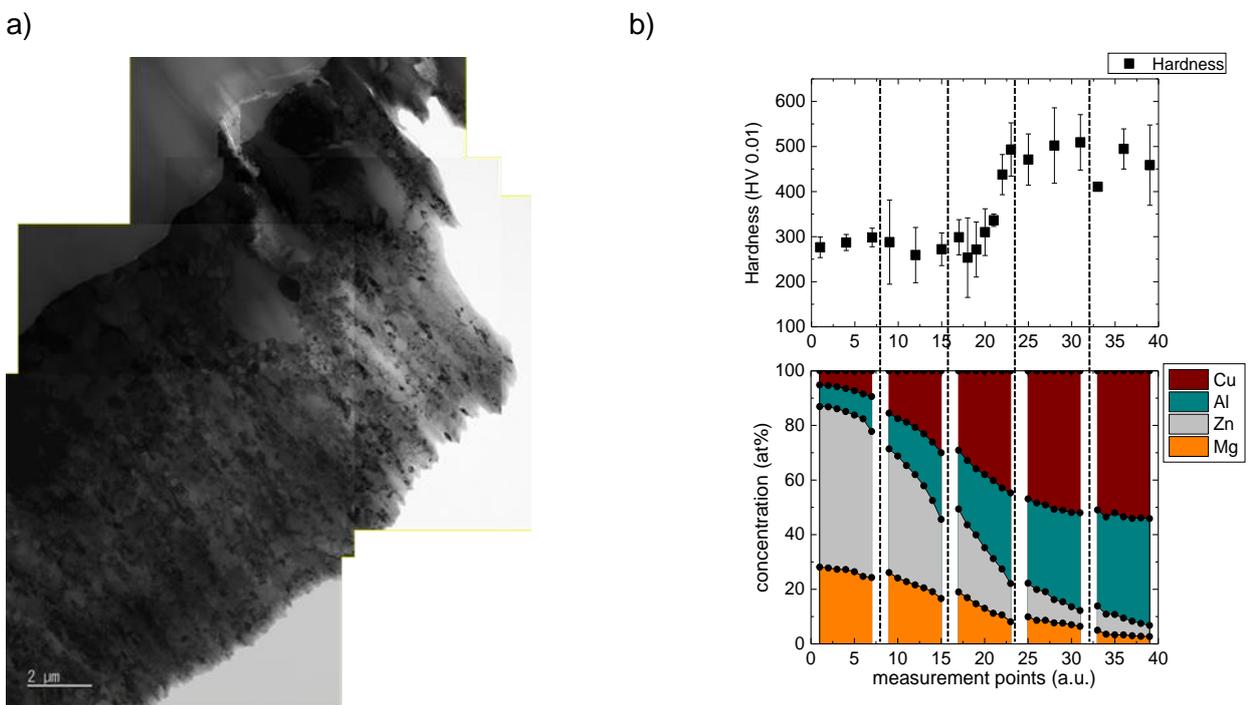


Abbildung 4 a) Zusammengesetzte TEM Aufnahme einer Probe der Serie AlCu₂MgZn₂ sowie b) Härteverhalten der Proben der gleichen Serie.

Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

Änderungen im weiteren Projektverlauf

- Gibt es Veränderungen? Welche Auswirkungen haben diese? Wie muss die Planung adaptiert werden?

Bis dato sind keine Abweichung vom Projektplan aufgetreten und auch nicht avisiert.

Zum Berichtszeitpunkt sind keine Änderungen des Projektverlaufs geplant oder zu erwarten.

Die Vorarbeiten zur Herstellung von Dünnschichtbibliotheken konnte erfolgreich abgeschlossen werden, sowie in weiterer Folge eine Vielzahl an stöchiometrischen Bibliothekspfaden im System Al-Mg-Zn-Cu erfolgreich hergestellt und charakterisiert werden.

Die DFT- und CE-Simulation wurde in einem breiten stöchiometrischen Feld angelehnt an die ersten Bibliotheken erstellt und eine breite Datenbasis geschaffen, welche eine wenigstens partielle Übereinstimmung mit den experimentellen Daten indizieren und in der Folgeperiode intensiv verglichen werden.

Der Abgleich mit simplifizierten thermodynamischen Modellen, bzw. ergänzend kommerzieller thermodynamischer Berechnungsdatenbanken wurde und wird intensiv durchgeführt.

3. Projektteam und Kooperation

- Gibt es wesentliche Veränderungen im Projektteam (interne Schlüsselmitarbeiter und Drittleister)?
- Bei Konsortialprojekten: Beschreiben Sie die Zusammenarbeit im Konsortium.
- Gehen Sie auf Änderungen in der Arbeitsaufteilung ein. Gibt es Auswirkungen auf die Kosten- / Finanzierungsstruktur und die Zielsetzung?

Das Projektteam des LKR blieb im Berichtszeitraum unverändert. Mit 01.04.2019 wurde die im Projektantrag definierte Stelle des wissenschaftlichen Mitarbeiters an der TUHH mit Herrn Wernfried Mayr-Schmölzer besetzt. Wesentliche Änderungen im Projektteam sind seitens der TU Wien nicht aufgetreten.

Die Zusammenarbeit mit dem Konsortium, ist reibungslos und fachlich intensiv, was beim derzeitigen Stand des Projektes eine sehr wichtige Rolle spielt. Da der Projektleiter LKR sowohl experimentell als auch simulativ die Schnittstelle des Projektes repräsentiert, konnte eine intensive und koordinierte Kommunikation sowohl der experimentellen als auch simulativen Arbeiten sichergestellt werden. Im Berichtszeitraum wurden mehrere physische technische Abstimmungen am Standort der TU Wien abgehalten, wo sowohl die experimentellen Ergebnisse abgehandelt wurden als auch per Jänner 2020, ein erster Abgleich der simulativen Arbeiten mit den Dünnschichtbibliotheken im System Al-Mg-Zn-Cu, einschließlich der Umsetzung von Bulk-Proben.

4. nur Endbericht: Wirtschaftliche und wissenschaftliche Verwertung

- Beschreiben Sie die bisherigen Verwertungs- und / bzw. Weiterverbreitungsaktivitäten. Ist eine Verwertung möglich?
- Listen Sie Publikationen, Dissertationen, Diplomarbeiten sowie etwaige Patentmeldungen, die aus dem Projekt entstanden sind, auf.
- Welche weiterführenden F&E-Aktivitäten sind geplant

Leermeldung, da Zwischenbericht.

5. Erläuterungen zu den Kosten

- Die Abrechnung ist als eigene Datei im Excel-Format hochzuladen. Die Verwendung der im eCall zur Verfügung gestellten Vorlage ist verpflichtend. Beachten Sie den Kostenleitfaden: www.ffg.at/kostenleitfaden bzw. Ausschreibungsdokumente
- Abweichungen vom Kostenplan sind an dieser Stelle zu beschreiben und zu begründen.
- Ist mit Änderungen am Kostenplan bis zum Projektende zu rechnen? Wenn ja, erläutern Sie diese. (Achtung: Größere Änderungen sind genehmigungspflichtig) (www.ffg.at/Kostenumschichtungen)

LKR: die Projektkosten entsprechen dem Projektfortschritt und sind im Plan. Mit Änderungen im Kostenplan wird nicht gerechnet.

Seitens der TU Wien (Partner USTEM und IFP) sind bis dato noch keine drastischen Änderungen der Kostenstruktur aufgetreten. Es hat sich allerdings, wie bereits im 1. Zwischenbericht erwähnt, eine intensive Zusammenarbeit mit dem Röntgenzentrum der TU Wien (XRC) ergeben, welche sich noch im beantragten Kostenrahmen bewegt.

Im Berichtszeitraum (03. 2019-02. 2020) ergibt die Abrechnung des XRC Kosten von ca. EUR 13 700.- für die bisherige Projektlaufzeit, sodass eine Überschreitung der Kosten für Röntgenanalytik wahrscheinlich ist. Allerdings stehen dem, wie gesagt, die beantragten Kosten für die Positionen 2.12 und 2.13 (Messkarte, Messrechner), EUR 5 000.— gegenüber. Weiters wurden die beantragten Materialkosten für Verbrauchsmaterialien und Teile für Vakuumanlagen von insgesamt EUR 20 000 (Positionen 2.14, 2.15) erst zu ca. 50% ausgeschöpft, und es ist zu erwarten, dass diese auch aufgrund der problemlosen Performance aller experimentellen Einrichtungen nicht vollständig genutzt werden. Eine neutrale Kostenumschichtung hin zu Röntgenanalytische Dienstleistungen wird daher von den Partnern laufend beobachtet und ggf. adressiert. Die Umschichtung wird jedoch nach gegenwärtigem Stand unterhalb der 10%-Gesamtkostengrenze verbleiben.

Mit 01.04.2019 wurde die beantragte Stelle des wissenschaftlichen Mitarbeiters an der TUHH mit Herrn Wernfried Mayr-Schmölzer besetzt. In Absprache mit der FFG werden Dienstreisekosten

Energieforschungsprogramm - 4. Ausschreibung

Klima- und Energiefonds des Bundes – Abwicklung durch die Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft FFG

aus dem ersten Förderjahr, die aus formalen Gründen nicht abgerechnet werden konnte, im zweiten Jahr neuerlich eingereicht. Insgesamt entsprechen die Projektkosten der TUHH dem Projektfortschritt und sind im Plan.

Innerhalb des Konsortiums wurde die Vorgangsweise beim Kick Off Meeting, beim Konsortialtreffen sowie in Telefonkonferenzen abgestimmt. Für die Abstimmung im AP Simulation fand darüber hinaus ein weitere AP interne Meetings statt. Außerdem findet ein regelmäßiger Austausch über e-mail und Telefon statt.

Für den weiteren Projektverlauf wird eine plangemäße Abarbeitung erwartet.

6. Projektspezifische Sonderbedingungen und Auflagen

- Gehen Sie auf projektspezifische Sonderbedingungen und Auflagen (laut §6 des Förderungsvertrags) ein, sofern diese im Förderungs- bzw. Werkvertrag vereinbart wurden.

Leermeldung. Alle Auflagen wurden bereits vor Projektstart erfüllt und an FFG kommuniziert.

7. Meldungspflichtige Ereignisse

Gibt es besondere Ereignisse rund um das geförderte Projekt, die der FFG mitzuteilen sind z.B.

- Änderungen der rechtlichen und wirtschaftlichen Einflussmöglichkeiten beim Förderungsnehmer
- Insolvenzverfahren
- Ereignissen, die die Durchführung der geförderten Leistung verzögern oder unmöglich machen
- Weitere Förderungen für dieses Projekt

Alle Partner: keine meldepflichtigen Ereignisse