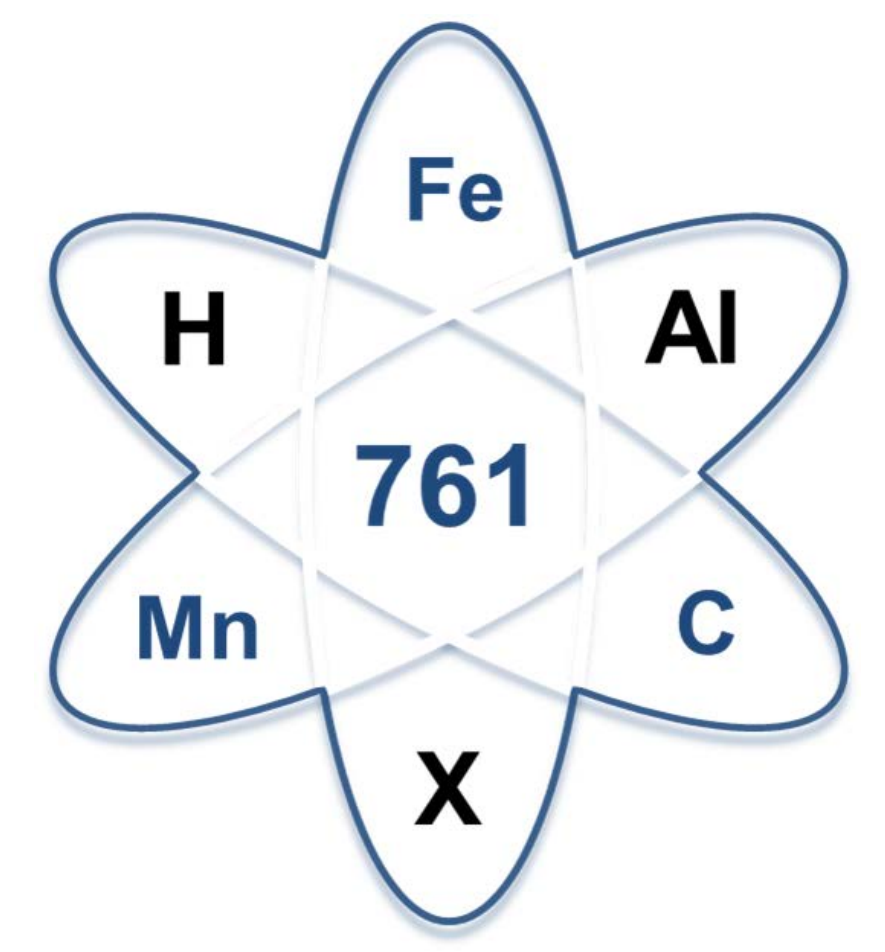


# A1 *Ab initio* Quantenchemie



Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Richard Dronskowski  
Institut für Anorganische Chemie

## Ergebnisse 2.Phase

### Motivation

- Entwicklung atomistischer Strukturmodelle für binäre, ternäre und quaternäre Phasen des Systems Fe–Mn–Al–C
- Ziel ist grundlegendes Verständnis der Struktur-Eigenschaftsbeziehungen
- Die Vorgehensweise soll halbquantitative Voraussagen ermöglichen und auf vielversprechende neue Materialien hindeuten
- Dabei werden Bulkphasen (Ferrit, Martensit, Austenit) sowie Ausscheidungen (z.B.  $\kappa$ -Karbide) untersucht

### Methoden

- Dichtefunktionaltheoretische-Gesamtenergierechnungen (Pseudopotentiale und besser)
- Umrechnung in makroskopische Enthalpien (Phasengrenzen, Stapelfehler, etc.)
- COHP-basierende Bindungsanalysen
- teilweise Molekulardynamiksimulationen
- hochgradig korrelierte Modellrechnungen für ausgewählte Modellsysteme (wellenfunktionenbasiert, jenseits DFT)

## Ergebnisse

- Phasendiagramm Fe–Mn als Basis aller Rechnungen im TP
- Aluminium als wichtiges neues Element (Nahordnung)
- Wechselwirkungen zwischen Al und C in Fe/Mn-Matrix
- Rolle des Wasserstoffs im System Fe–Mn–H
- Wasserstofffänger in Stählen (insbesondere  $\kappa$ -Karbide)

*Al–Al-Wechselwirkungen in Abhängigkeit des Abstands in antiferromagnetischem fcc-Fe<sub>106</sub>Al<sub>2</sub> (links). Al-Atome aus unterschiedlichen magnetischen Schichten (schwarz) zeigen generell schwächere Abstoßung als aus Schichten gleichen Spins (grau). Rechts: Die Analyse der C–Al<sub>x</sub>-Bindung (x = 1, 2) in fcc-Fe<sub>106</sub>Al<sub>2</sub>C offenbart wesentlich stärkere abstoßende Kräfte.*

*Links: Lösungsenthalpie von Wasserstoff in FeMn als Funktion der Anzahl koordinierender Mn-Atome (a); aufgetragen gegen die Voronoi-Volumina der Oktaeder ergibt sich ein ähnlicher Verlauf (b). Mit steigender Anzahl der Mn-Nachbarn fällt die Kern-Kern-Abstoßung nahezu linear ab (c). Folglich zeigt sich dieser Effekt auch als Funktion der Voronoi-Volumina (d). Rechts: COHP-Bindungsanalyse (Crystal Orbital Hamilton Population) zum Verständnis der Bevorzugung von Mn-reichen Oktaedern für Wasserstoff. Während die suspekte M–H-Bindung keine Erklärung liefert, sind die energetischen Unterschiede in den veränderten M–M-Bindungen begründet.*

## Impact

- Kooperation mit TP A3: Gleichgewichtsstrukturen/Enthalpien für Phasendiagramme
- Kooperation mit TP A9: Erklärung der Lösungsenthalpie von Wasserstoff in Fe–Mn

Referenz zu eigenen Veröffentlichungen :

- ▶ D. Djurovic, B. Hallstedt, J. von Appen, R. Dronskowski: Thermodynamic assessment of the Fe-Mn-C system, *Calphad* **35** (2011) 479– 491.
- ▶ J. von Appen, R. Dronskowski, A. Chakrabarty, T. Hickel, R. Spatschek, J. Neugebauer, Impact of Mn on the solution enthalpy of hydrogen in austenitic Fe-Mn alloys: a first-principles study, *J. Comput. Chem.*, in Druck.

