

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

Ziele 3.Phase

Inhalt

- Auswirkungen von Legierungsbestandteilen (z.B Mn,Al) in Medium-Mn-Stählen II
- Ausscheidung von Nebenphasen (z.B κ -Karbide) II
- Untersuchung von Diffusionsmechanismen an kohärenten Phasengrenzen (Austenite/ κ -Karbid) III
- Wasserstoffversprödung in unterschiedlichen Phasen der Hoch-und Medium-Mn-Stähle

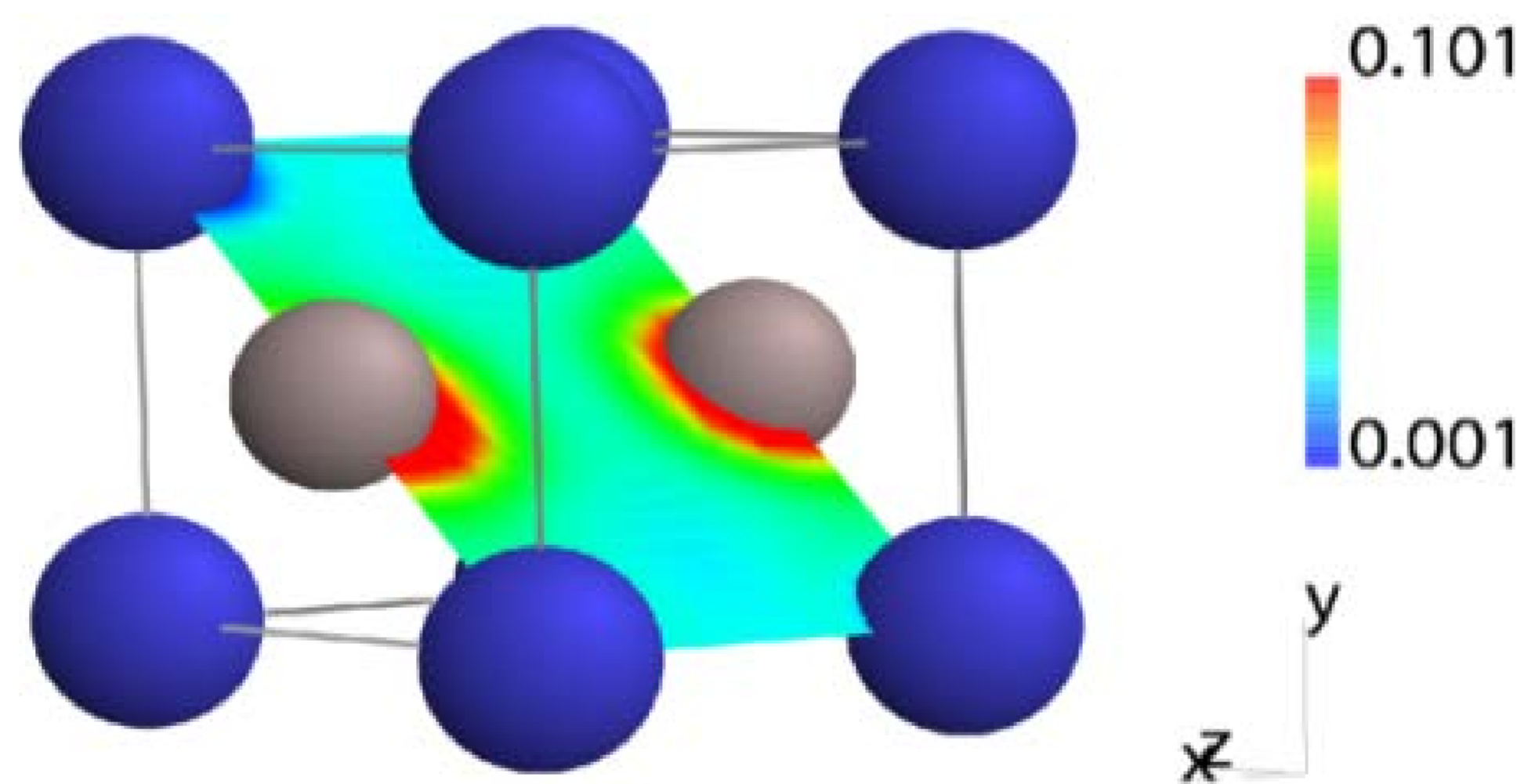
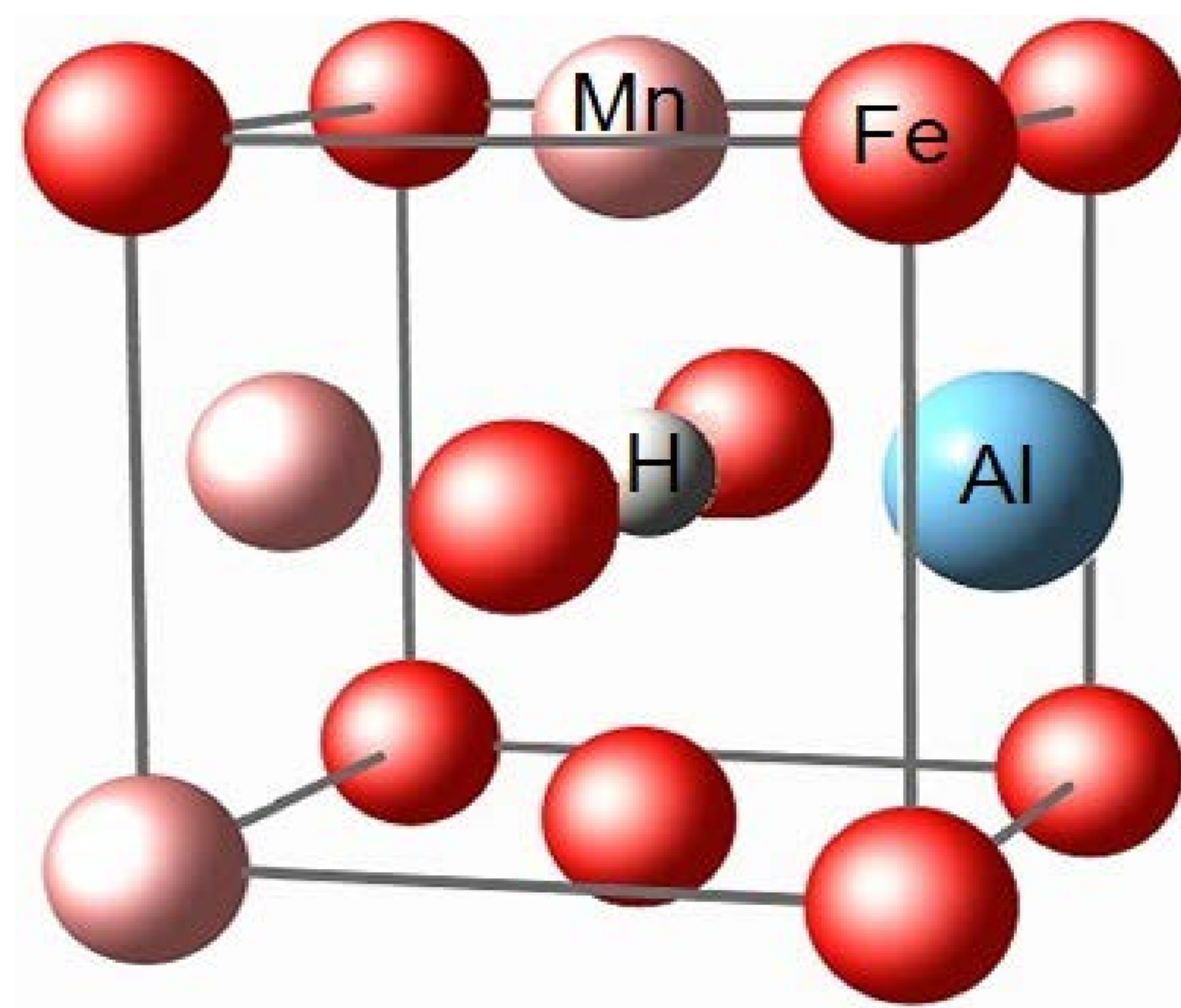
Methoden

- DFT-Gesamtenergierechnungen (Pseudopotentiale und besser)
- Analyse thermischer Eigenschaften durch Molekulardynamische Simulationen (MD)
- COHP-basierte Bindungsanalyse mittels Linear Muffin Tin Orbitals (LMTO)
- Bindungsanalyse aus projiziertem PW-Basissatz: LOBSTER (Local-Orbital Basis Suite Towards Electronic-Structure Reconstruction) **neu !!**

Input

- Strukturdatenbanken: Kristallographische Parameter der Legierungen → **A5/C1**
- Quantenchemie: Pseudopotentiale, Allelektronenverfahren, Basissätze, Dichtefunktionale
- Gruppenexpertise: Spezielle Auswahl der relevanten Systeme

Erweiterung des Phasensystems
 Um die Elemente Al und H



Bindungsanalyse anhand Elektronendichteverteilung in AlMn2

Output

- Nahordnungen im Fe–Mn–Al–C-System → **C2**
- Lokale Abhängigkeit der Karbidbildung → **A3**
- Modellierung kohärenter Phasengrenzen => Struktur- und thermodynamische Daten → **C3**
- Wasserstoffversprödung im Ferrit Karbid und an kohärenten Phasengrenzen → **A2/A9**

Ziele/Impact

- Fundierte Analyse des strukturellen Zusammenhangs, sowie der chem.-physikal. Eigenschaften im Fe–Mn–Al–C-System → **TP C1/C4**
- Quantitative Beschreibung von der chem. Bindungssituationen in unterschiedlichen Phasen in hoch- und mittel-Mn-Stählen
- Optimierte Strukturmodelle für Haupt- und Nebenphasen inklusive der resultierenden Phasengrenzen → **TP A2/C2**
- Sammlung an makroskop.-thermochemischen Größen unter Einschluss von Substitutionseffekten und Defektstrukturen → **TP A3/A9**

Arbeitspakete

- AP1:** Modellierung Fe–Mn–Al–C
 - 1.1 Ordnung und thermodynamische Daten Austenite
 - 1.2 Faktoren der κ -Karbidbildung
- AP2:** κ -Karbide
 - 2.1 Nah-/Fernordnung und Thermodynamik
 - 2.2 κ -Karbide und Austenite im Gleichgewicht
- AP3:** Wasserstoffmanagement
 - 3.1 Wasserstoff in Fe–Mn–Al–C
 - 3.2 κ -Karbide als Wasserstofffänger
 - 3.3 kohärente Phasengrenze κ -Karbid/Austenite

