

Ivan Bleskov, Fritz Körmann, Tilmann Hickel  
Max-Planck-Institut für Eisenforschung

## Ziele 3. Phase

### Inhalt



- *Ab initio* Berechnung ausgewählter, experimentell beobachteter Schlüsselprobleme im Fe-Mn-Al-C System
- *Ab initio* Simulation ausgedehnter Defekte und der Temperaturabhängigkeit zugehöriger Parameter
- Simulation von Versetzungen
- Weiterentwicklung thermodynamischer Methoden
- Modellierung kinetischer Prozesse

### Methoden

- Temperaturabhängigkeit
- Spin Space Averaging (SSA) Methode mit SQS
- Erweiterung magnetischer Modelle auf Legierungen
- Konfigurationsentropie mit Cluster Expansion
- Versetzungen: Behandlung mit Lattice Green's functions
- Ankopplung an langreichweitiges elastisches Feld
- Zusammenarbeit mit Prof. D. Trinkle vereinbart
- Kinetik: Kinetisches Monte-Carlo mit bond-cutting Modell

### Input

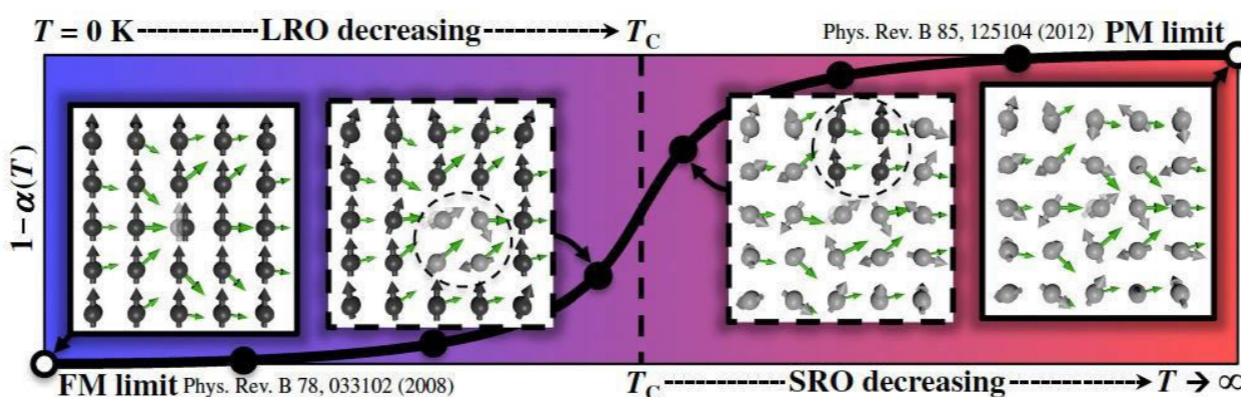
**Allg.:** Hinweise auf kritische und/oder exp. schwer zugängliche Effekte und Mechanismen, die ein Verständnis auf atomarer Skala erforderlich machen

→ **A1:** Struktur und lokale Chemie an  $\kappa$ - $\gamma$  Grenzfläche

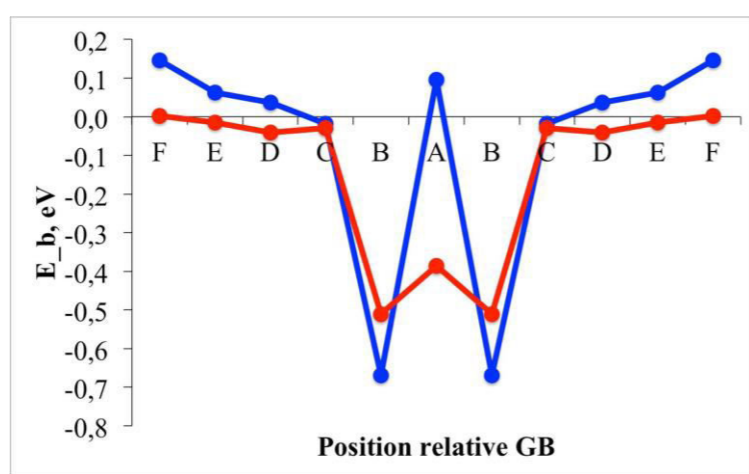
→ **A7:**  $\alpha$ - $\gamma$  Grenzfläche

→ **C1:** Atompositionen an Zwillings-, Korn- und Phasengrenzen

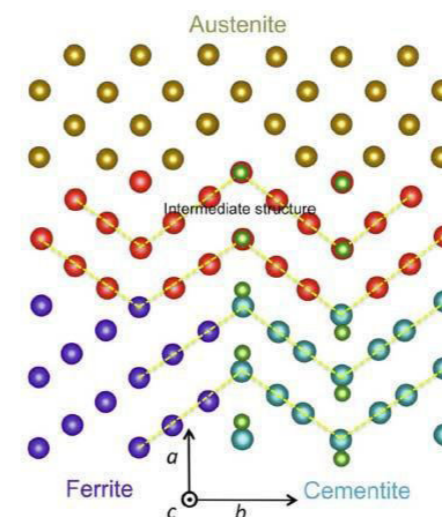
→ **C6:** Rolle von Mn bei der Korngrenzversprödung im Ferrit



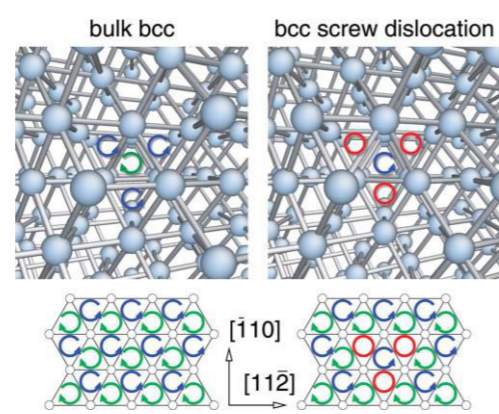
Kürzlich entwickelte Methode zur Kopplung der magnetischen Energie an explizite DFT-Berechnungen von atomaren Kräften



Energetik von Mn nahe einer  $\Sigma 5$  (013) Korngrenze in bcc Fe mit (rot) und ohne (blau) Relaxationseffekte



Neues Konzept zur Behandlung der Ferrit-Austenit-Grenzfläche



Lattice Green's Function Ansatz für Versetzungsschlüsselgrößen

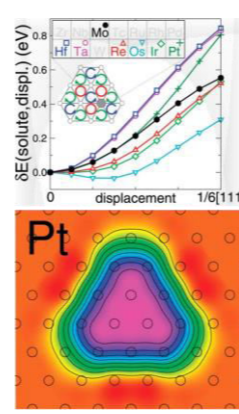
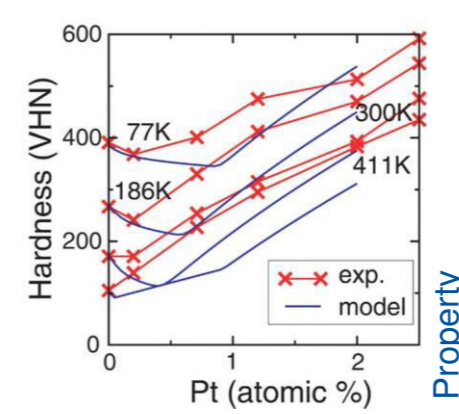


Figure from <http://dtrinkle.matse.illinois.edu>



### Output

### Ziele/Impact

- Gewinnung eines *ab initio* Verständnisses der Thermodynamik und Kinetik grenzflächendominierter Prozesse. Insb.:
  - Phasenstabilität in der Nähe von Korngrenzen
  - Phasenstabilitäten an den Phasengrenzen, die für die Ausbildung der Mikrostruktur entscheidend sind
- Weiterentwicklung thermodynamischer Methoden
- Explizite Simulation von Versetzungen und ggf. deren Aufspaltung

### Arbeitspakete

- Thermodynamische Beschreibung von Bulk-Phasen: Phasenübergänge, Legierungen, Vakanz,  $\kappa$ -Karbide
- Stapelfehler und Versetzungen: Barrieren; atomare Struktur von Versetzungskernen; Peierls Barriere
- Korngrenzen: Mn-induzierte Ferrit-Versprödung
- Phasengrenzen: Phasenstabilität nahe  $\alpha/\gamma$  Grenzfläche; Segregation an Grenzen; Misfit-Versetzungen