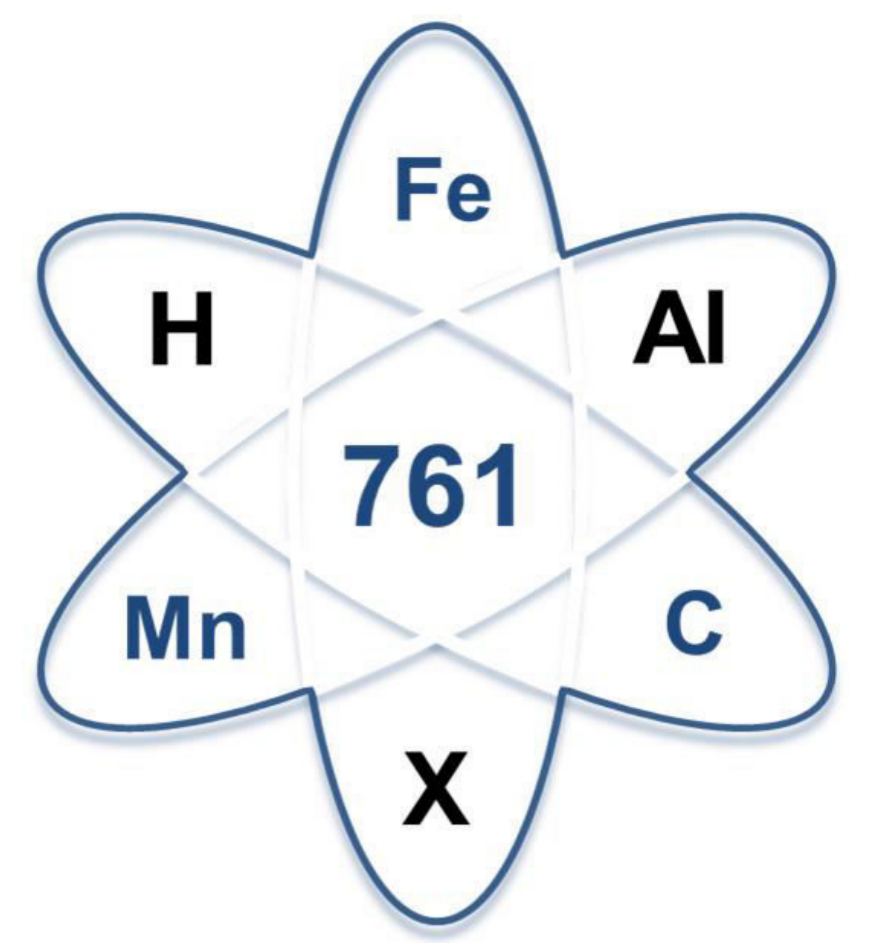


# A9 Ab initio Wasserstoffversprödung

Ab initio basierte Mesoskalensimulation der Wasserstoffversprödung



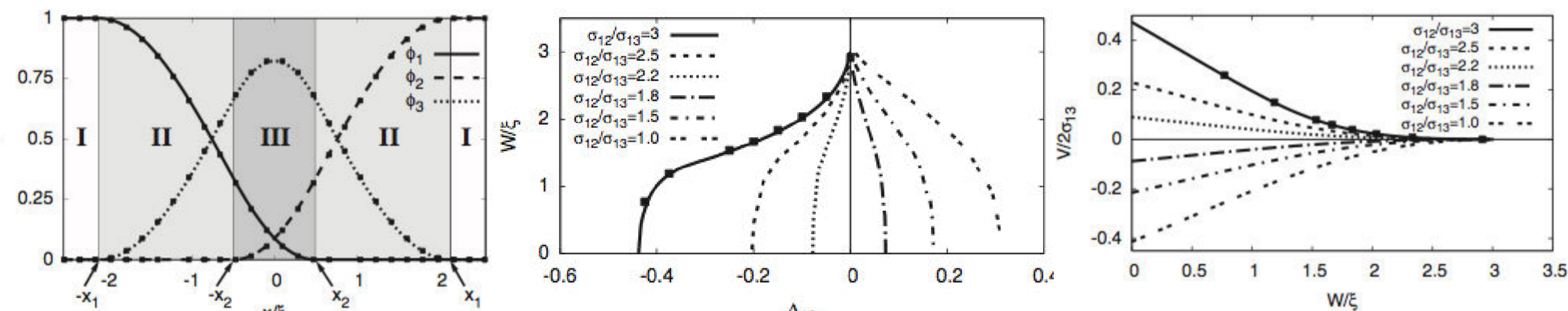
Dr. R. Spatschek, Prof. J. Neugebauer  
Max-Planck-Institut für Eisenforschung

## Ergebnisse 2.Phase

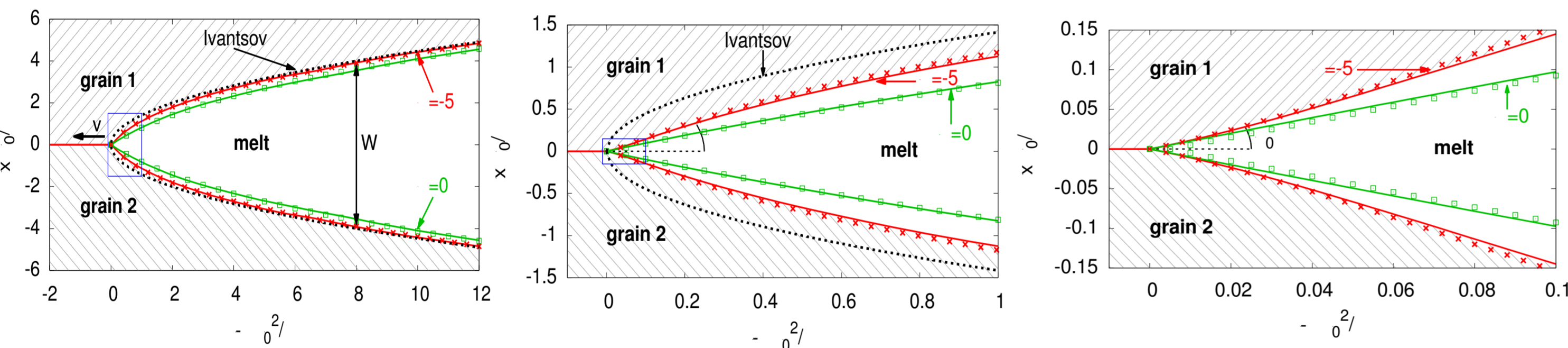
### Korngrenzenschmelzen

Hochtemperaturversprödung → B1

- Bei der Flüssigmetallversprödung findet Materialversagen durch Aufschmelzen entlang von Korngrenzen statt.
- Wir untersuchen den Einfluss von Premelting-Effekten auf die Thermodynamik und die Kinetik dieses nanoskaligen Schmelzens.



In einem Phasenfeldmodell wird das Premelting durch den Überlapp von Fest-flüssig-Grenzflächen hervorgerufen. Im Modell von Steinbach und Pezzolla findet der Premelting-Übergang an der klassischen Schwelle  $\sigma_{gb} = 2\sigma_{sl}$  statt.



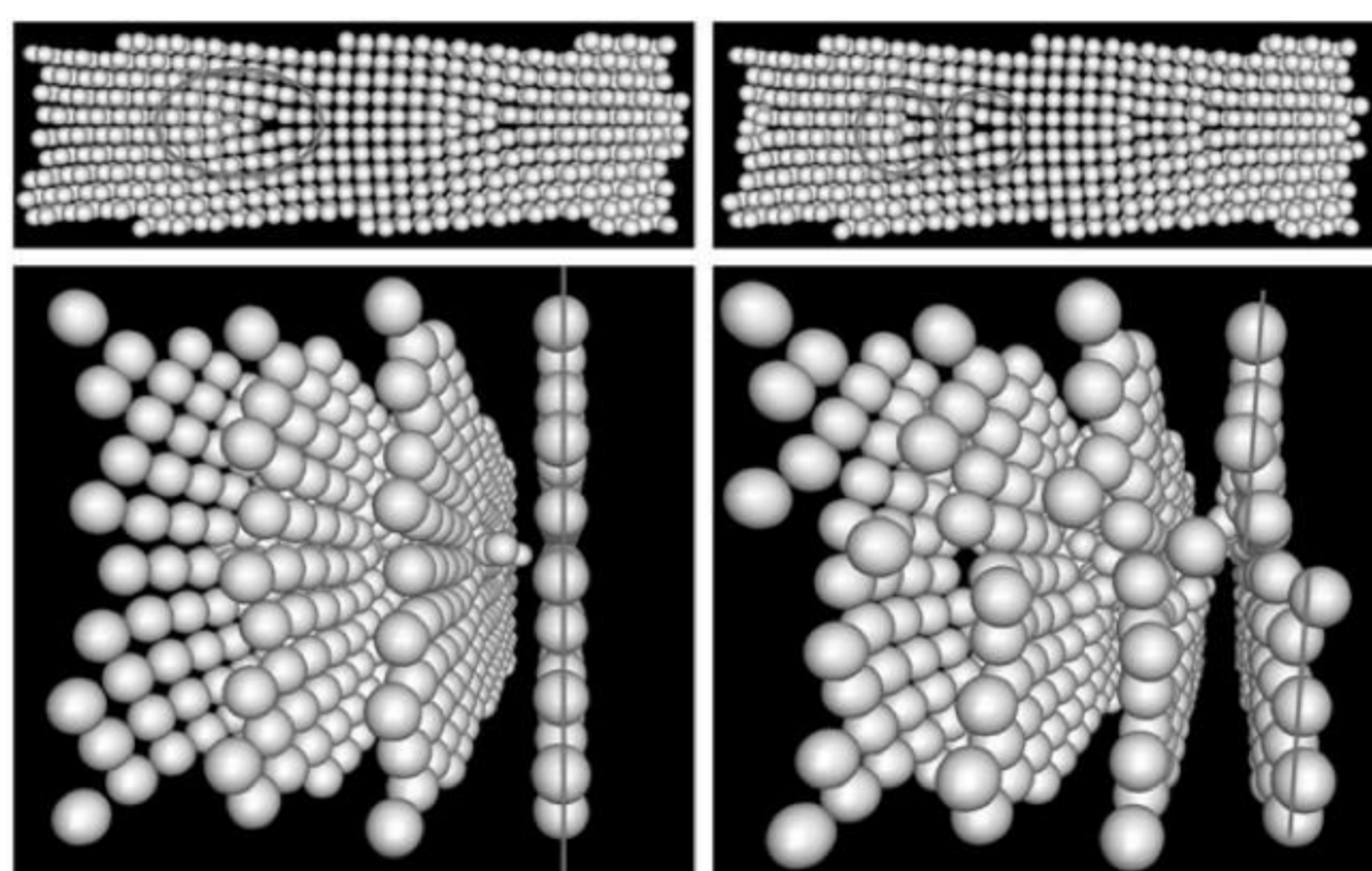
Skalenübergreifende Beschreibung von Schmelzprozessen entlang einer Kleinwinkelkorngrenze in einem überhitzten Kristall. Auf der größten Skala (links) erscheint die sich nach links ausbreitende Schmelzphase mit einer parabolischen Form, in Analogie zur dendritischen Erstarrung. Die Vergrößerung des Spitzenausschnitts um den Tripelpunkt zeigt im mittleren Bild die Ausbildung eines mesoskopischen Kontaktwinkels an der Spitze. Auf der Nanometerskala (rechts) sind die Grenzflächen durch die Wechselwirkung gekrümmt. Dieser Effekt hat deutlichen Einfluss auf die Kinetik des Schmelzprozesses und führt zu einer signifikanten Änderung der Frontgeschwindigkeit.

### Methoden

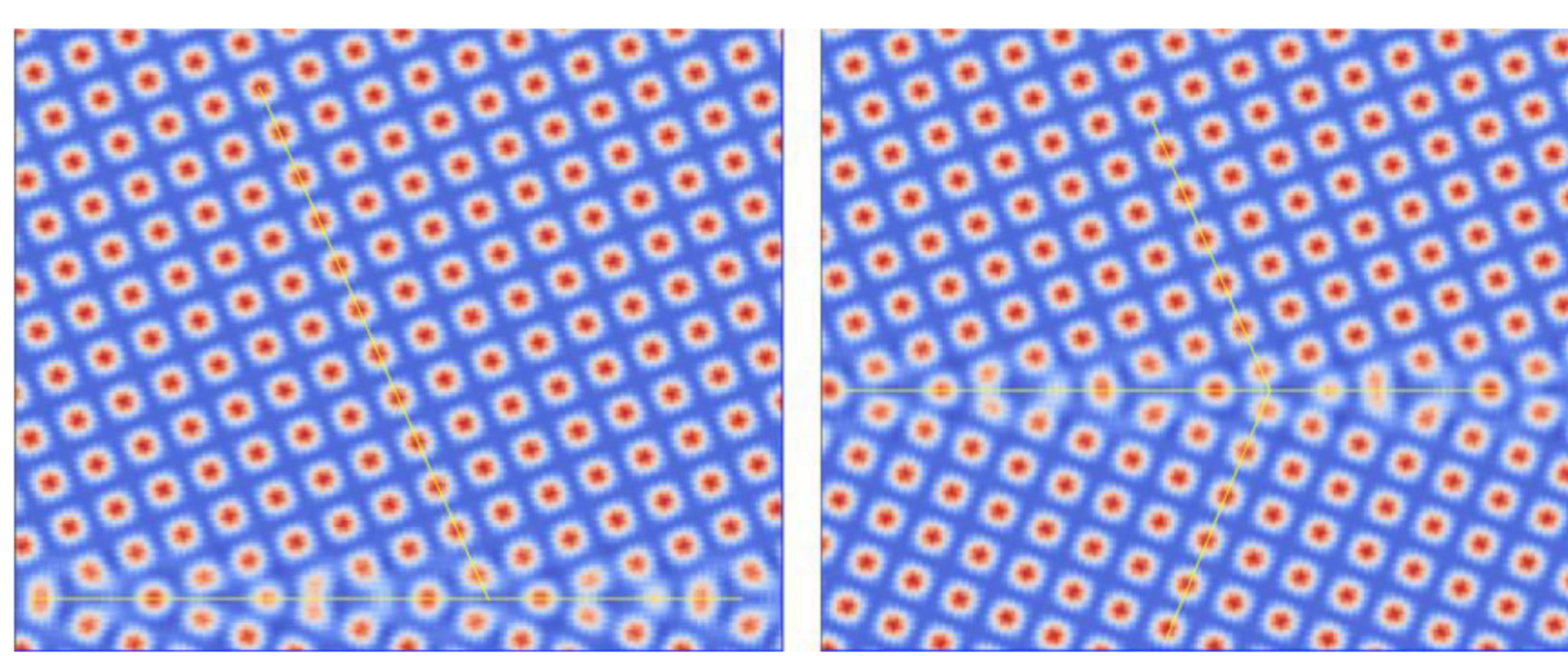
- Sharp Interface Methoden
- Phasenfeldsimulationen
- Amplitudengleichungsmodelle
- Phase Field Crystal
- Asymptotische Analysen

### Plastizität → A10, C6

### Versetzungsdynamik



Amplitudengleichungssimulation zur Versetzungsstruktur an (100) Korngrenzen. Oberhalb von etwa 90% der Schmelztemperatur haben die Versetzungen einen reinen Stufencharakter, unterhalb spalten sie in Partialversetzungen mit alternierendem Schraubenanteil auf.



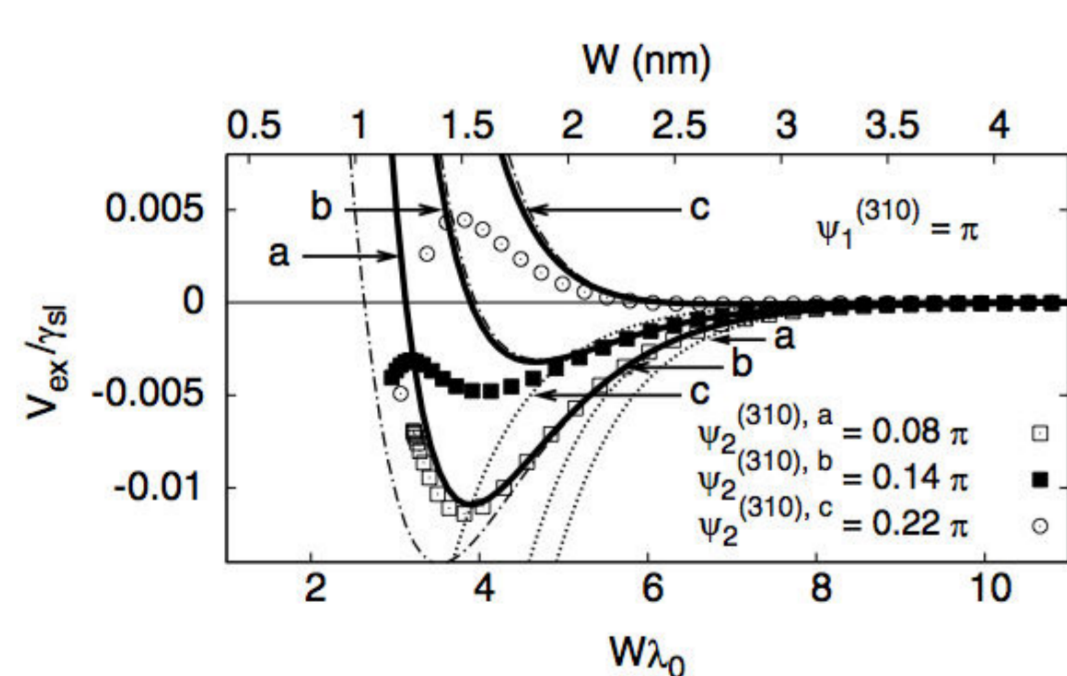
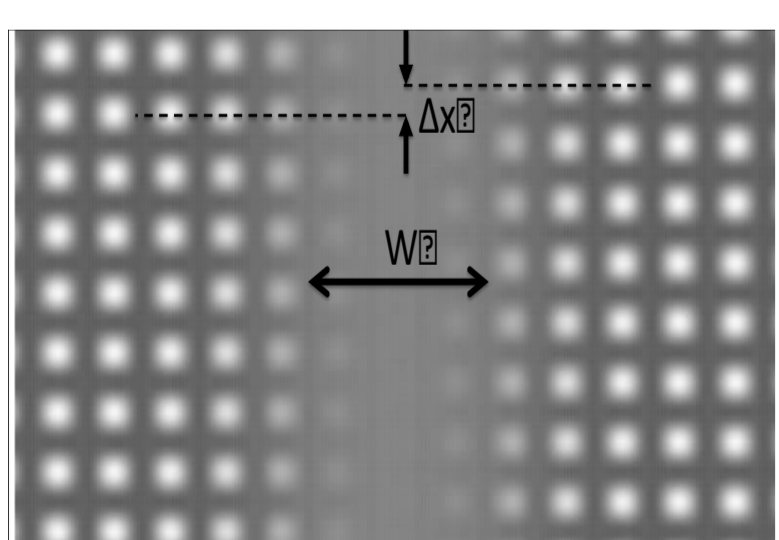
Amplitudengleichungssimulation gekoppelter Bewegung von Korngrenzen in bcc-Eisen, die einer Scherbelastung ausgesetzt sind. Dadurch ergibt sich eine Normalenbewegung der Korngrenze als Mechanismus der plastischen Relaxation. Die Migrationsgeschwindigkeit stimmt mit dem geometrischen Modell von Cahn und Taylor für die verschiedenen Kopplungsmoden überein.

- C. Hüter, J. Neugebauer, G. Boussinot, B. Svendsen, U. Prahl, R. Spatschek, submitted for publication.

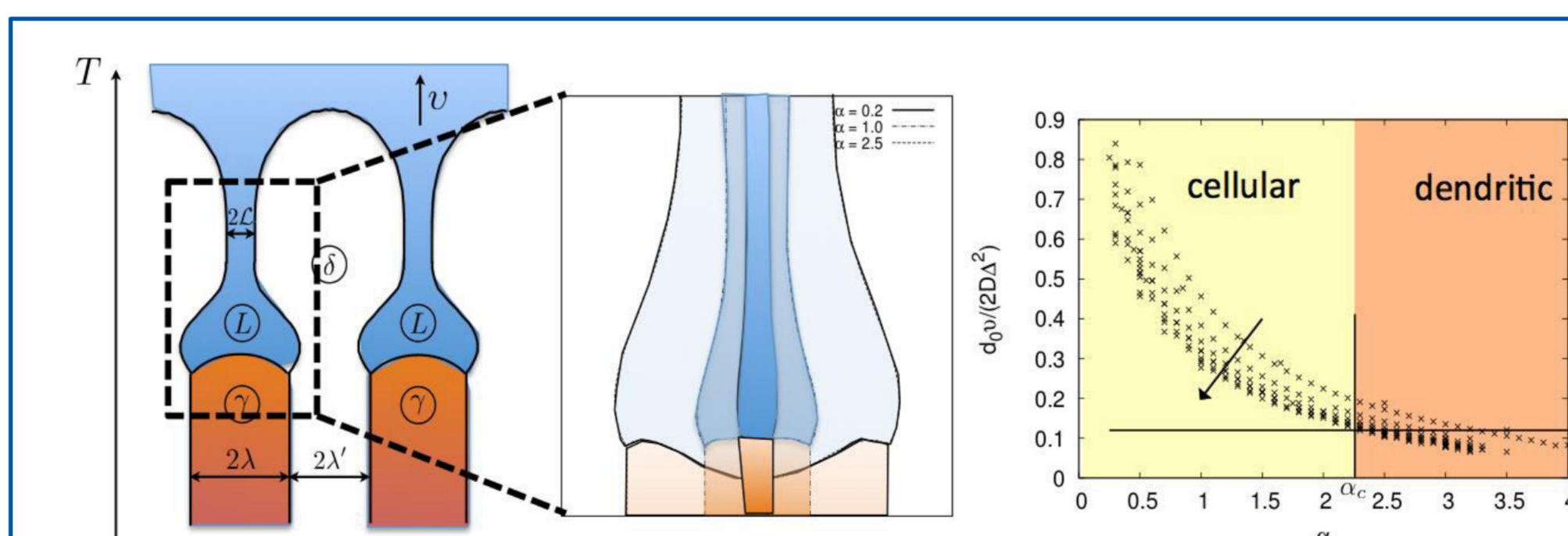
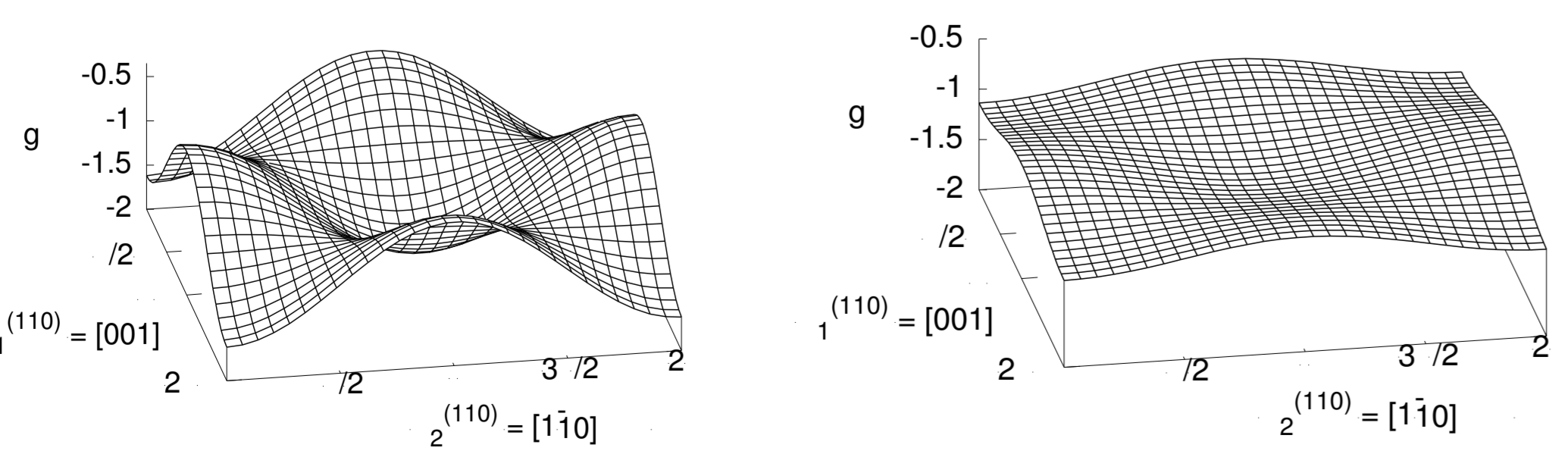
### γ-Oberflächen

Stapelfehlerenergien → A2

- Verallgemeinerte Stapelfehlerenergien im Hochtemperaturbereich



Bildung eines Schmelzfilms zwischen zwei Körnern, die einer lateralen Translation ausgesetzt sind. Die Temperatur ist hierbei sehr nah am Schmelzpunkt. Die resultierenden γ-Oberflächen lassen sich dabei auch analytisch berechnen, was zu einer erheblichen Reduktion des numerischen Aufwands führt.



Links: Bildung zellulärer Strukturen bei der gerichteten Erstarrung. Im mittleren Bild ist eine Vergrößerung des Bereichs der peritektischen Umwandlung gezeigt, hier für verschiedene Lamellenbreiten. Wird der laterale Abstand der δ-Phasen zu groß, ändert sich die Krümmung der Grenzfläche zwischen Restschmelze und γ-Phase. Dann ist dendritisches Wachstum kinetisch bevorzugt (rechts).

### Peritektische Erstarrung

Erstarrung & Phasenfeldsimulationen → A8, B1

- Rolle von Symmetrien und Kristallographie für verallgemeinerte Stapelfehlerenergien → A2, A10
- Mechanismen plastischer Deformation → A7, A10
- Mikrostrukturbildung bei Erstarrungsprozessen → A8, B1

### Impact

- R. Spatschek, A. Adland, A. Karma: Phys. Rev. B 87 (2013), 024109.
- C. Hüter, F. Twiste, E. A. Brener, J. Neugebauer, R. Spatschek: Phys. Rev. B 89 (2014), 224104
- V. Bhogireddy, C. Hüter, J. Neugebauer, I. Steinbach, A. Karma, R. Spatschek: Phys. Rev. E. 90 (2014), 012401.
- C. Hüter, C.-D. Nguyen, R. Spatschek, J. Neugebauer: Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 22, (2014), 034001.
- G. Boussinot, C. Hüter, R. Spatschek, E. A. Brener: Acta Mat. 75 (2014), 212.

