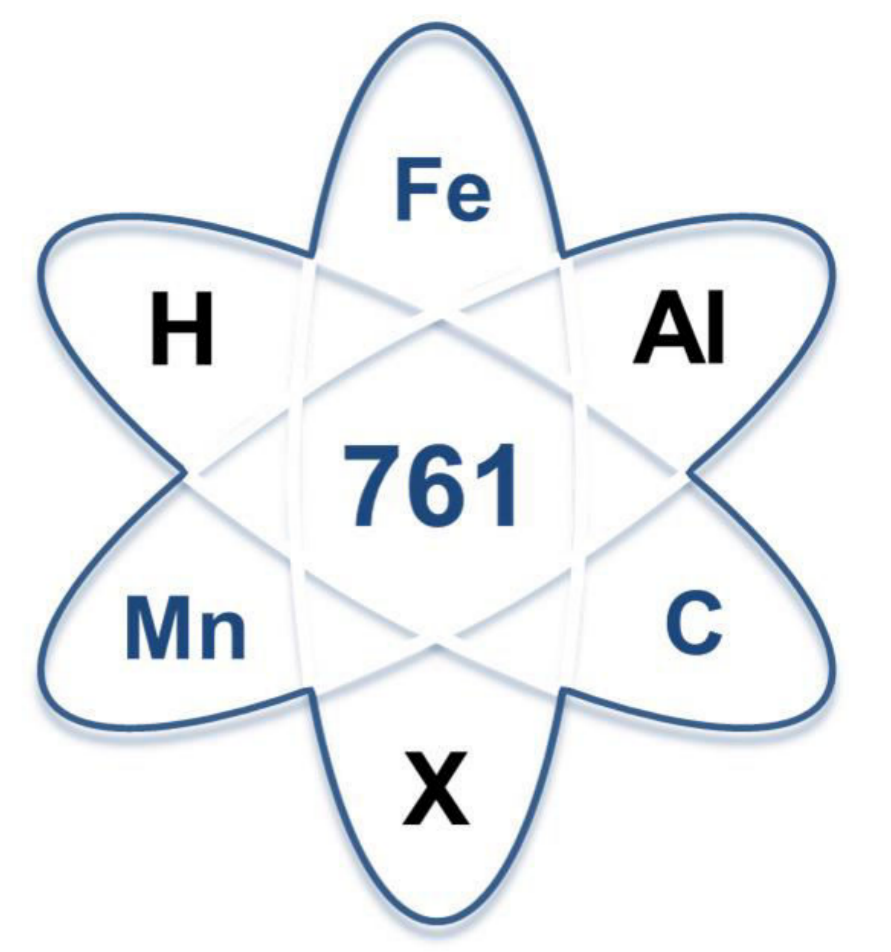


A9 *Ab initio* Wasserstoffversprödung

Ab initio basierte Mesoskalensimulation der Wasserstoffversprödung



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

Ergebnisse 2.Phase

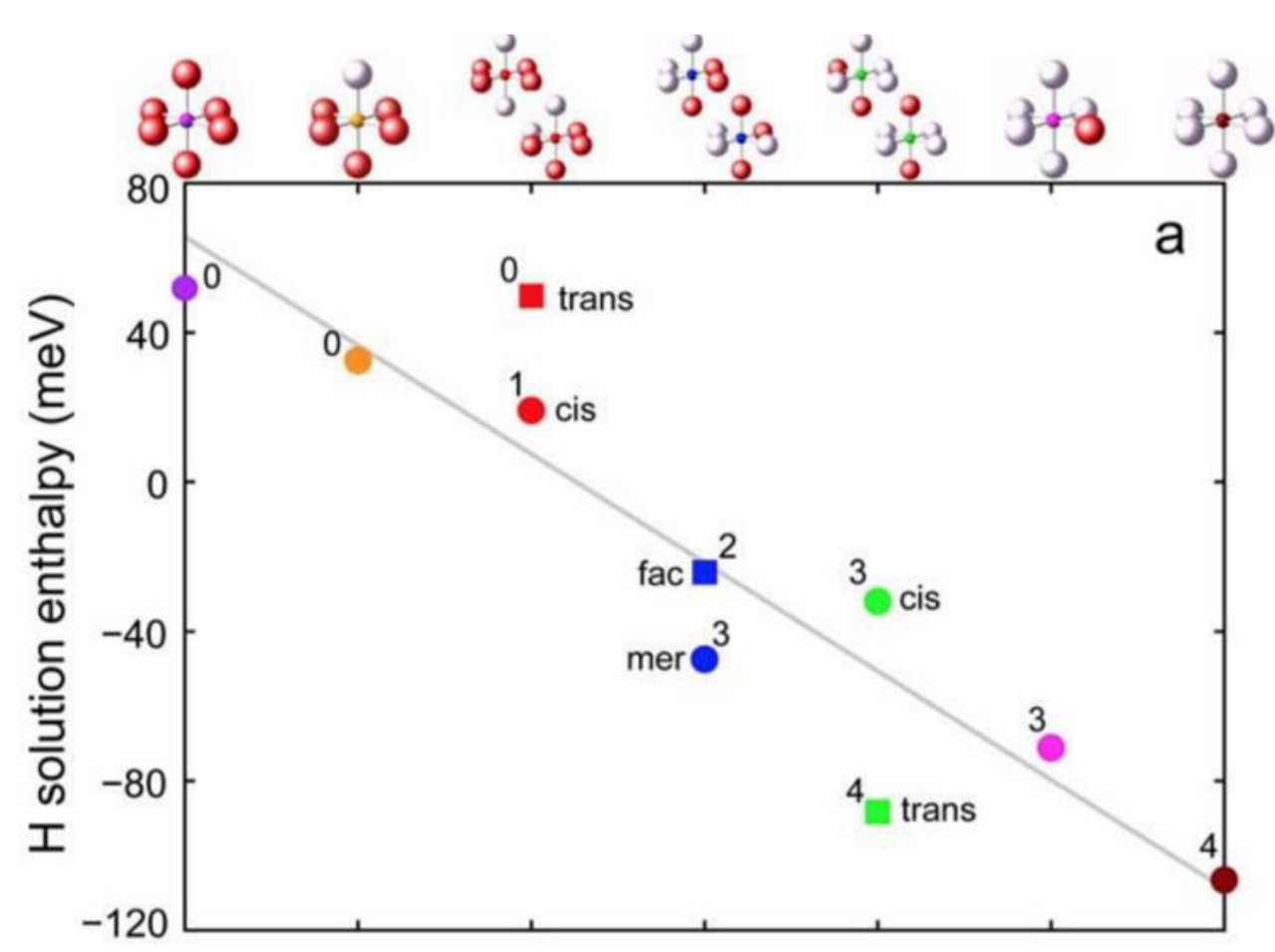
Motivation

Wasserstoffversprödung ist ein Problem vieler hochfester Stähle. Neben experimentellen Untersuchungen sind theoretische Vorgehensweisen und Simulationen unerlässlich, um die verschiedenen ineinandergreifenden Aspekte auf allen Skalen erfassen zu können. Hier werden Aspekte auf der atomaren Skala, die mittels *ab initio* quantifiziert werden, konsequent an die Kontinuumsebene gekoppelt, um den Einfluss von Wasserstoff auch auf mesoskopischen und makroskopischen Skalen verstehen zu können.

Methoden

- Ab initio Simulationen
- Molekulardynamik und Monte-Carlo mit Embedded Atom Potentials
- Phasefeldmethoden und Cahn-Hilliard-Modelle
- Greensfunktionsmethoden
- Finite Elemente
- Elastizitätstheorie
- Analytische Methoden

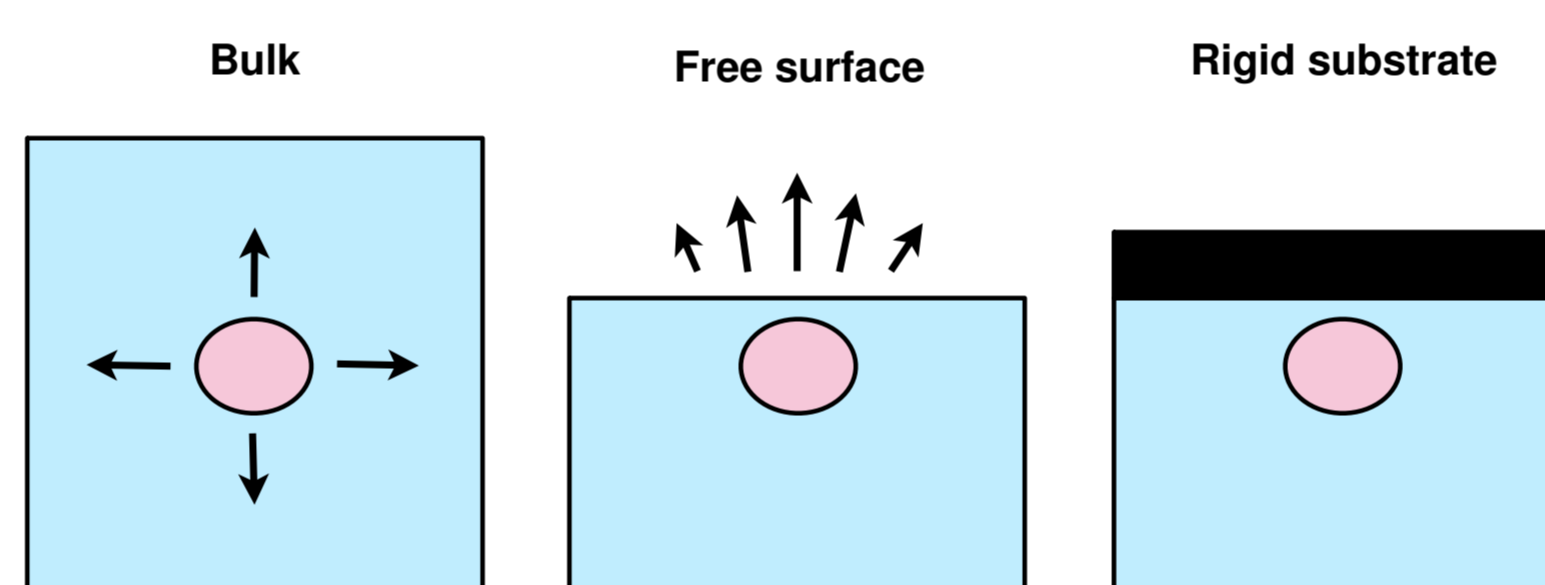
H in Hoch Mangan Stählen



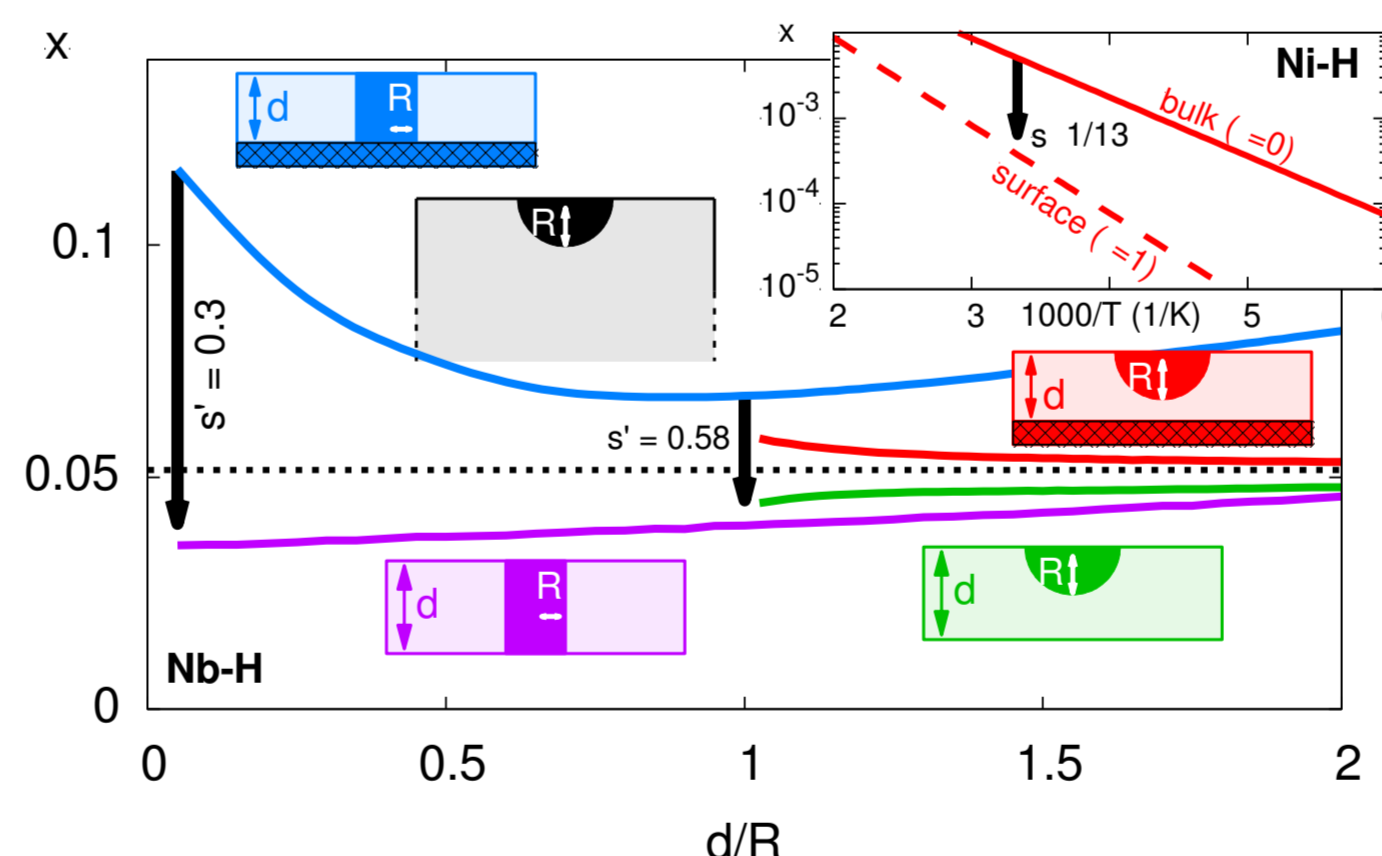
Wasserstoff lagert sich bevorzugt in Mangan-reichen Umgebungen an; dieser mit *ab initio* Methoden vorhergesagte Effekt ist in erster Linie auf elastisch-volumetrische Effekte zurückzuführen.

Skalenübergreifende Modellierung der Hydridbildung

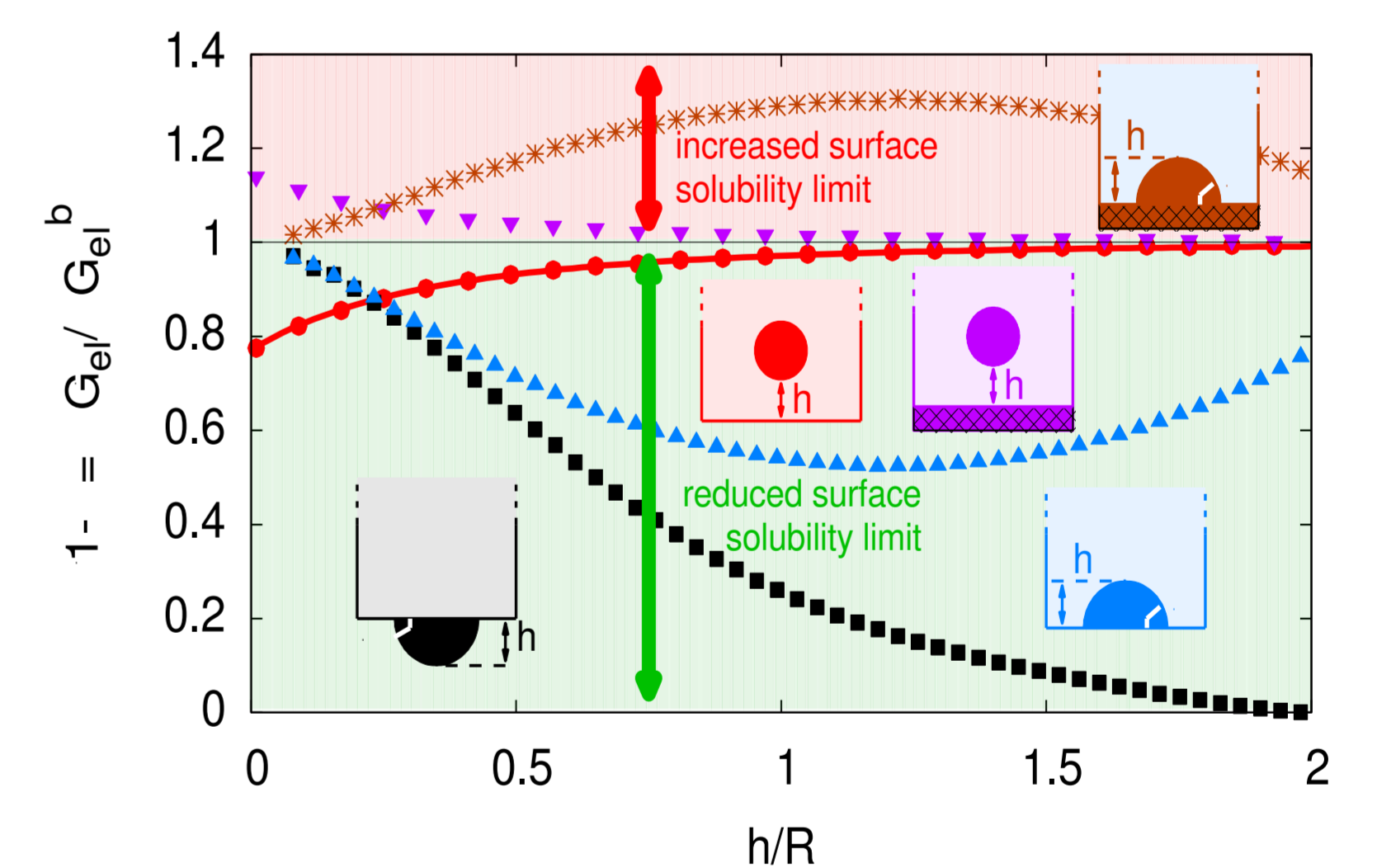
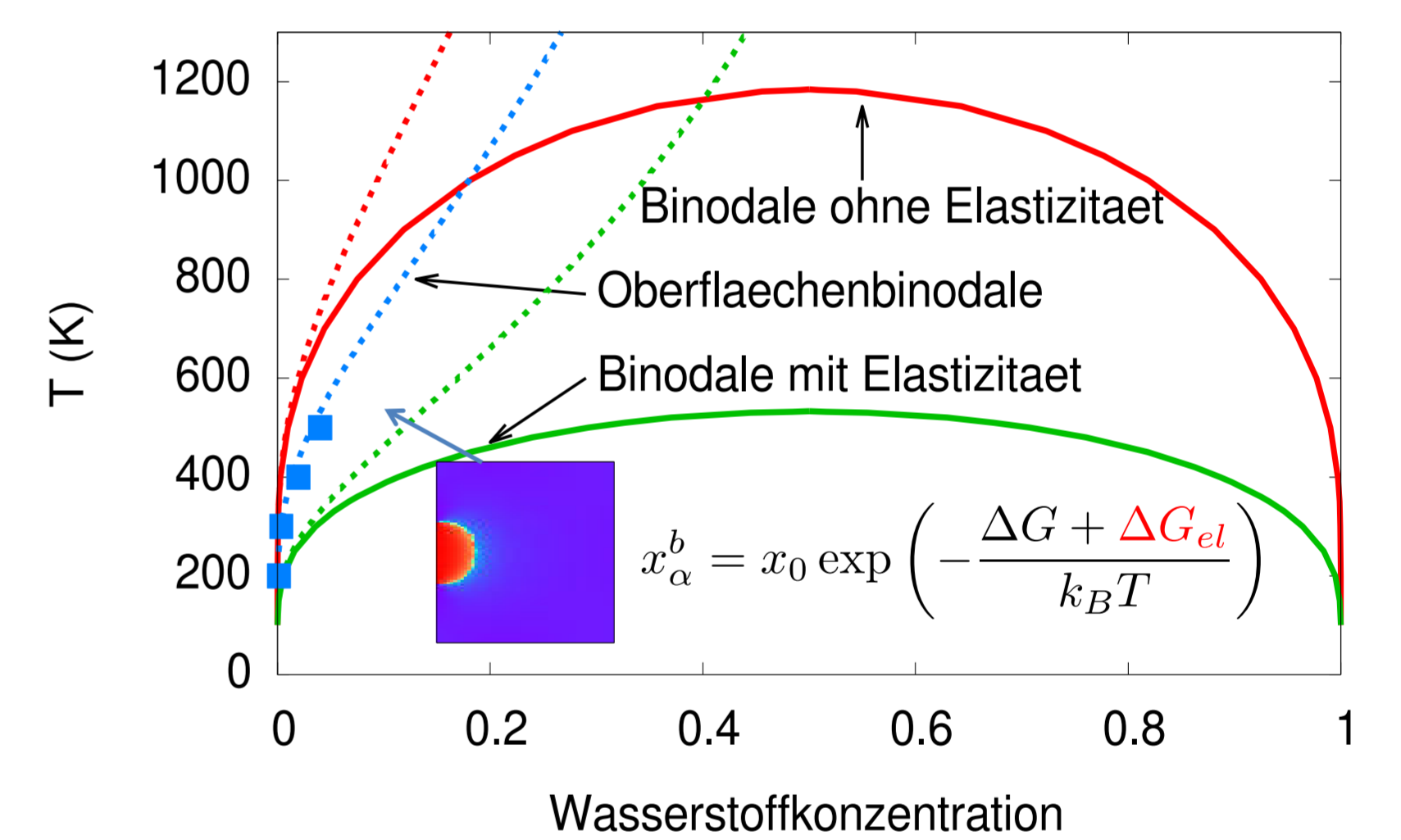
- Phasenseparation in hydridbildenden Systemen wird stark durch elastische Effekte beeinflusst.
- In der Nähe von freien Oberflächen können Verspannungen partiell relaxieren. Dadurch ergeben sich dort drastisch andere Phasendiagramme.



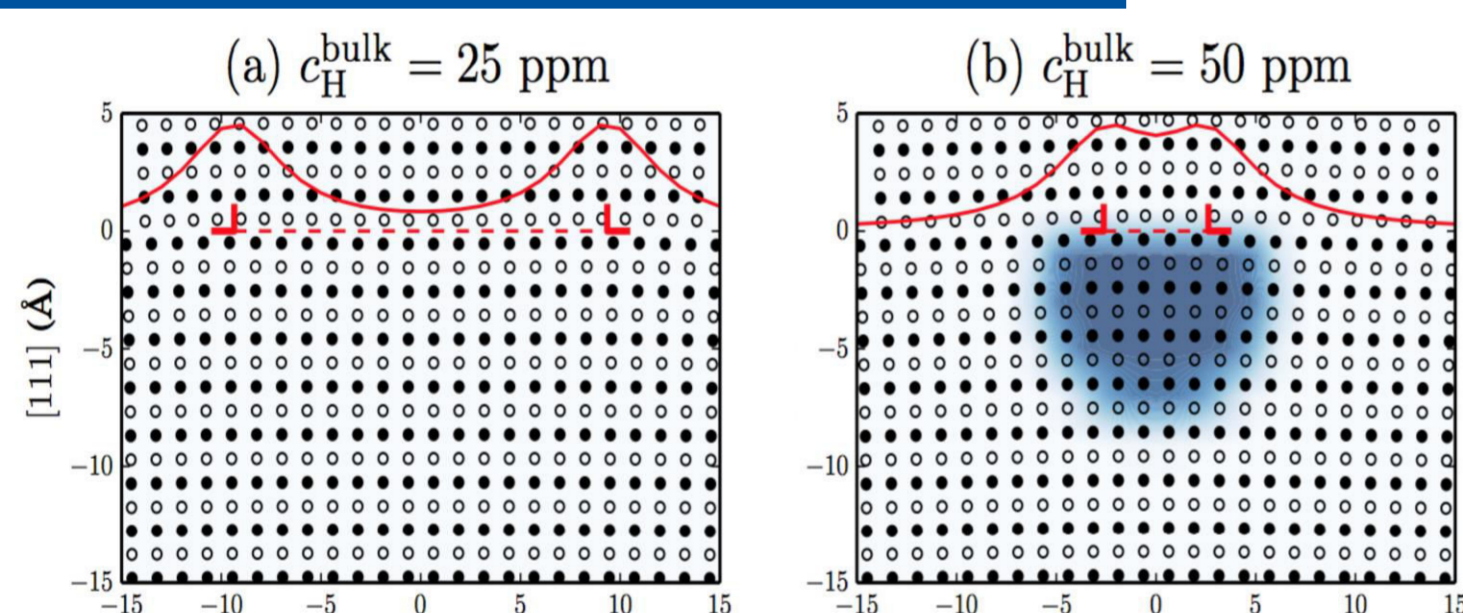
- Kopplung von *ab initio* Rechnungen mit mesoskaligen Methoden zur Vorhersage von Solvuslinien im Volumen und an Oberflächen
- Übereinstimmung mit Dünnschichtexperimenten



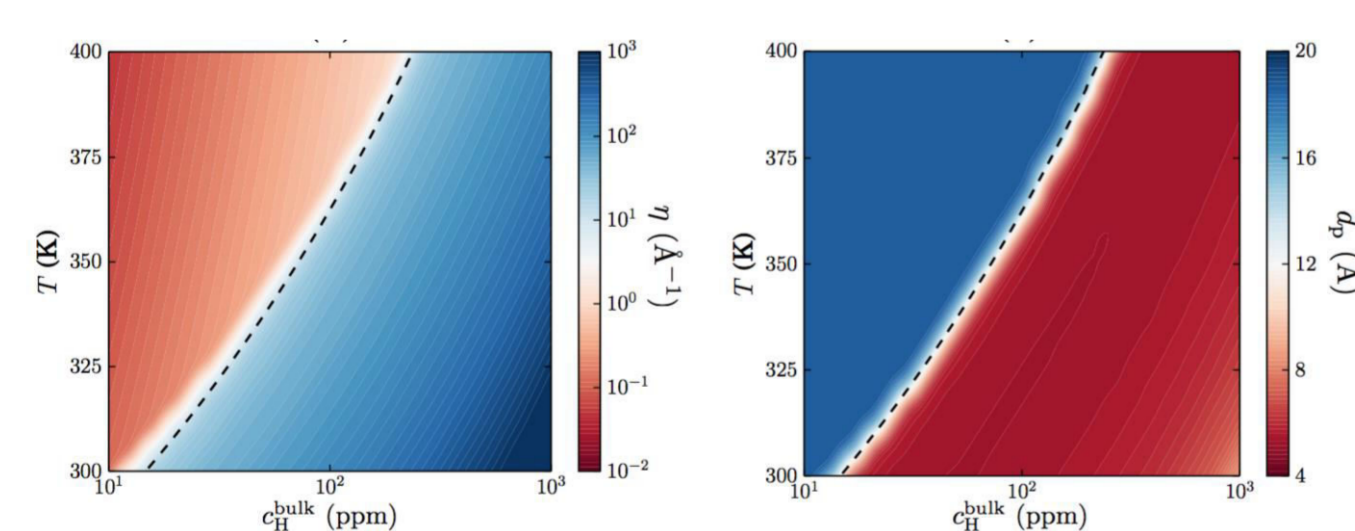
- Löslichkeitsgrenze für Wasserstoff in fcc-Eisen an freien Oberflächen um zwei Größenordnungen reduziert



Nanohydridbildung

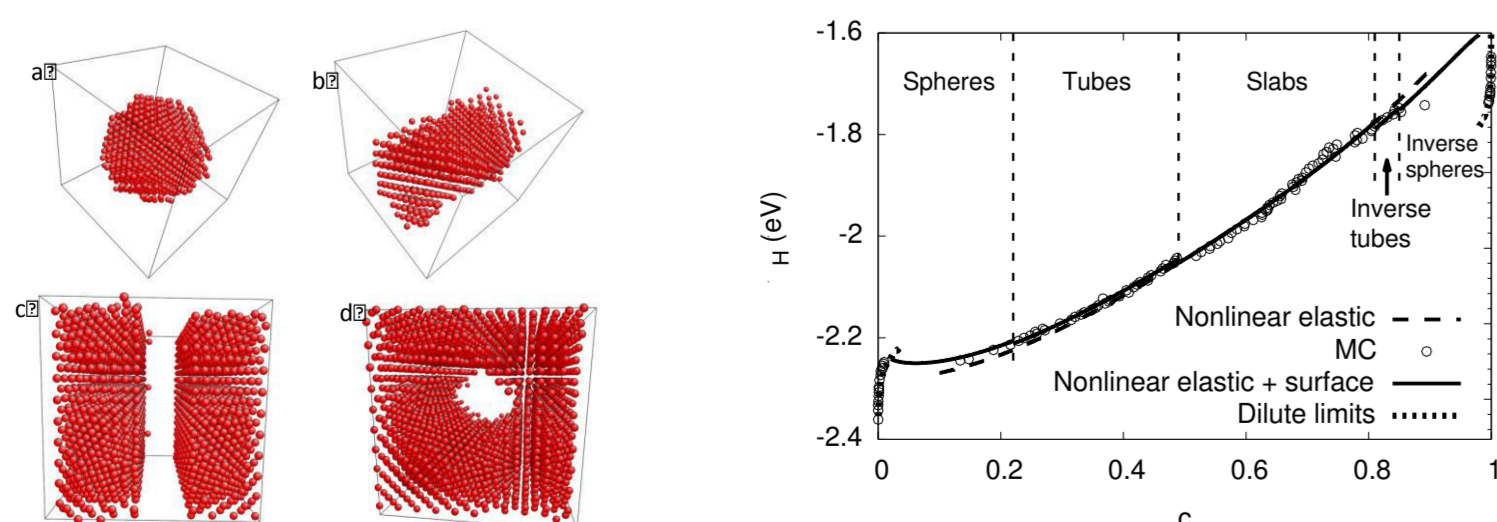


Nanohydridbildung an Stufenversetzungen bei 300K.



Temperatur-Wasserstoffkonzentrations-Phasendiagramm von Nanohydriden für (a) den Wasserstoffüberschuss und (b) Partialversetzungsabstand.

Multiskalenmodellierung



Monte-Carlo-Simulation und quantitative Kontinuumbeschreibung der Hydridbildung in Ni.

Impact

- Skalen- und projektübergreifende Beschreibung von Wasserstoff → A1, A2, A7, C6
- (Nano-)Hydridbildung und Wasserstoffanreicherungen an Versetzungen und Oberflächen kann Wasserstoffversprödung im Sinne von HELP und HEDE auslösen und verstärken.
- Generische Vorhersage von Oberflächenphasendiagrammen.

► J. v. Appen, R. Dronskowski, A. Chakrabarty, T. Hickel, R. Spatschek, J. Neugebauer: J. Comp. Chem. 35 (2014) 2239.
► T. Hickel, R. Nazarov, E.J. McEnery, G. Leyson, B. Grabowski, J. Neugebauer: JOM 66 (2014) 1399.

