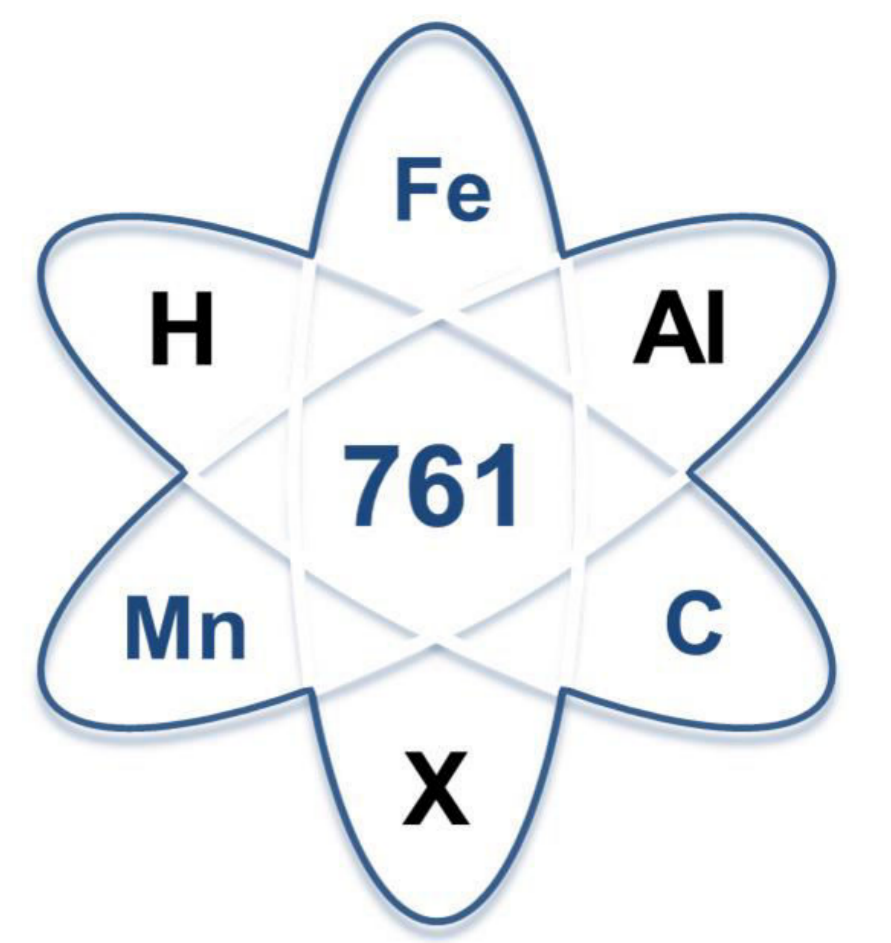


# A9 Ab initio Wasserstoffversprödung

Ab initio basierte Mesoskalensimulation der Wasserstoffversprödung



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

## Ziele 3.Phase

### Inhalt

- Skalenübergreifende Beschreibung der Versagensmechanismen bei der Wasserstoffversprödung
- Berücksichtigung externer Verspannungen + Legierungen
- Entwicklung eines *ab initio* motivierten Verständnisses der Schädigung auf Mikrorissebene, als Input für makroskopische Versagensmodellierung → **A7, C6**

### Methoden

- Dichtefunktionaltheorie
- Molekulardynamik + Monte-Carlo
- Elastizitätstheorie
- Phasenfeld + Cahn-Hilliard-Modelle
- Greensfunktionsmethoden
- Thermodynamik

#### 1.1 Geometrische Einflüsse

- Rolle von gekrümmten Oberflächen.
- Wo findet bevorzugt Hydridbildung und Wasserstoffanreicherung statt?

#### 2.1 Wasserstoff-Diffusionskoeffizienten

- Kinetisches Monte-Carlo
- Legierungszusammen-setzung
- Lokale Verzerrung

#### 1.2 Mechanische Belastungen

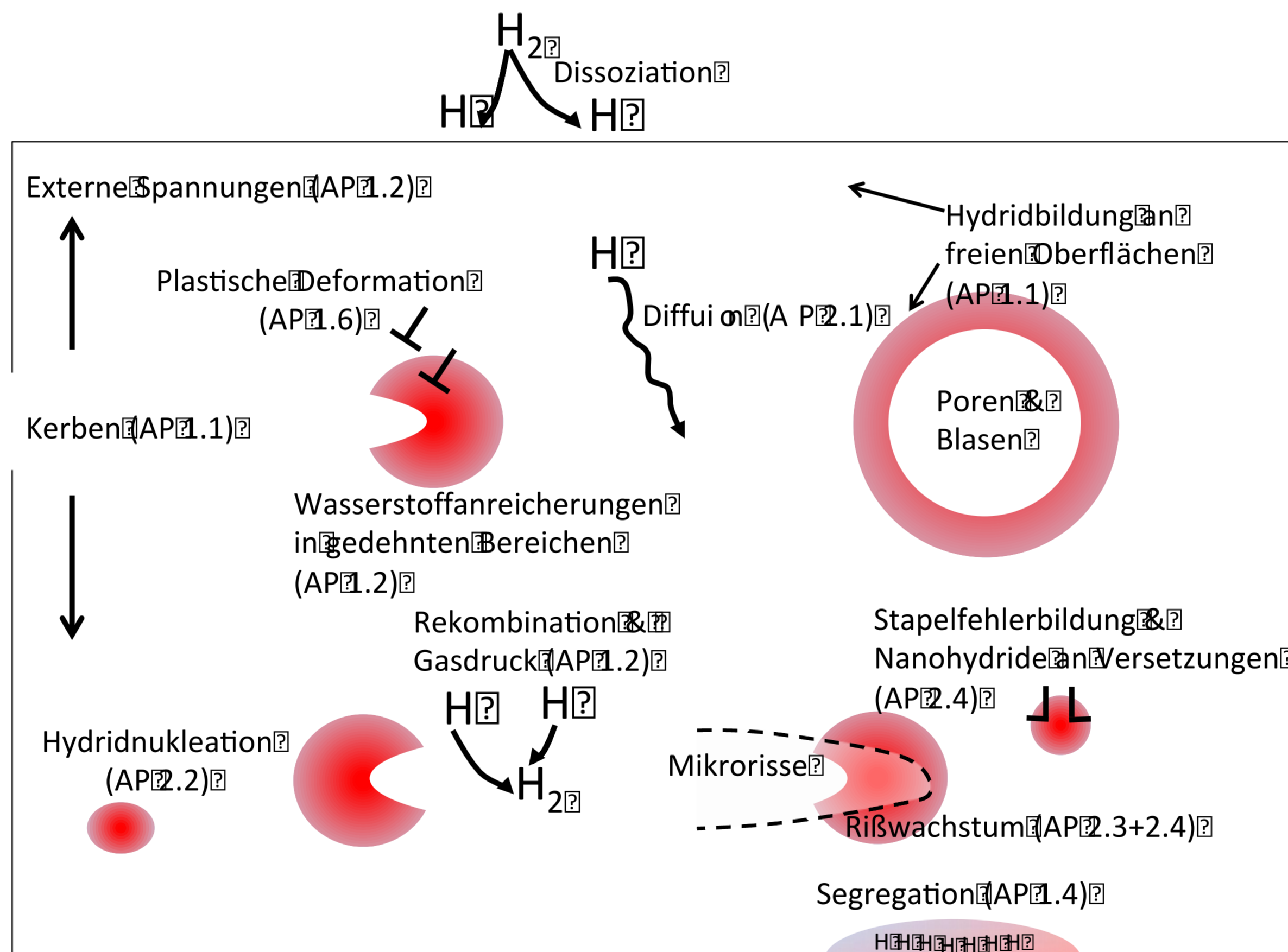
- Risse, Versetzungen, Poren
- Wasserstoff-Rekombination

#### 2.2 Nukleation

- Kinetisches Monte-Carlo
- Parametrisierung des Langevin-Rauschens
- Phasenfeldmodell der Hydridbildung mit Nukleation

#### 1.3 Materialeigenschaften

- Konzentrationsabhängige elastische Konstanten
- Anisotropie



#### 2.3 Kinetik der Wasserstoffanreicherung

- Duktil-Spröd-Übergang an wachsenden Rissen
- Dynamik der Rissausbreitung als Funktion der lokalen Wasserstoffkonzentration

#### 1.4 Oberflächeneffekte

- T=0-Grenzflächenenergien
- Griffithschwelle
- Kritische Radien

#### 2.4 Schädigung

- Zusammenspiel HELP – HEDE – Hydridbildung
- Ab initio motiviertes Bild der Schädigung auf Mikrorissebene

#### 1.5 Legierungen

- Fe-Mn-H
- Fe-Mn-Al-H: Oxidfilmbildung

#### 1.6 Plastizität + Inkohärenz

- Wie ändern sich die Vorhersagen für die Nukleation im Volumen und an Oberflächen, wenn plastische Relaxation und Inkohärenz berücksichtigt werden?

### Ziele/Impact

- Was ist die Ursache der Wasserstoffversprödung auf den verschiedenen Längenskalen?
- Wie spielen die verschiedenen Mechanismen zusammen?
- Was ist die Rolle von Aluminium?
- Warum verzögerte Rissbildung?
- Wie läßt sich Wasserstoffversprödung verhindern?

### Input

- H im Gitter, kohärente Grenzflächen → **A1**
- Legierungen, endliche Temperaturen, Magnetismus → **A2**
- Plastizität → **A7, A10**
- FeMn-Stähle, Karbide + Wasserstoff, Hydride → **T4**

### Output

- Phasenfeld + Mechanik → **A5**
- Peritektische Erstarrung, Phasenfeld-Rissbildung → **A8**
- Amplitudengleichungsmodelle zur Plastizität → **A10**
- Wasserstoff-Diffusionskonstante, Mikroskopische Schädigung durch H → **C6**
- Hydride/Karbide → **T4**

