

Atomistische Simulation der Mischkristallverfestigung in Eisen

Projektbeginn: 01.05.2005

Projektende: 30.04.2008

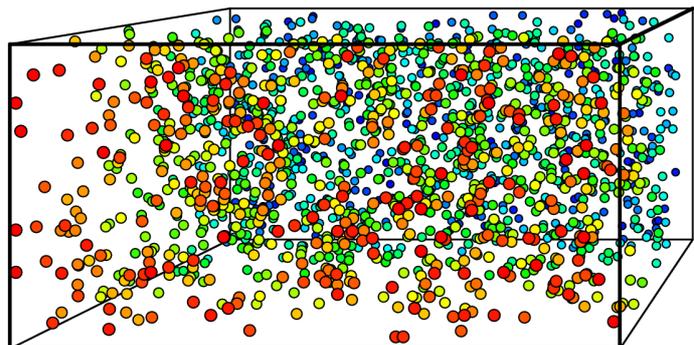
Ziel

Ziel des Vorhabens war einerseits die Aufklärung der grundlegenden atomaren Mechanismen, die die Festigkeitssteigerung durch Mischkristallbildung bewirken. Andererseits sollte damit die anwendungsrelevante Vorhersage der mechanischen Eigenschaften von Eisen für bestimmte chemische Zusammensetzungen der Mischkristalle im Hinblick auf neue Werkstoffentwicklungen erreicht werden.

Vorgehensweise

Die Mischkristallbildung, d. h. die Zulegierung geringer Mengen an gelösten Fremd- atomen, ist einer der wichtigsten Mechanismen der Festigkeitssteigerung in Eisen. Das Forschungsvorhaben hat die atomistische Modellierung der Mischkristallverfestigung in Eisen mit Hilfe klassischer Molekulardynamik-Simulationen zum Gegenstand. Es werden sowohl Mischkristalle mit Zwischengitteratomen (Kohlenstoff, Stickstoff) als auch Mischkristalle mit Substitutionsatomen (z. B. Nickel, Chrom, Kupfer oder Phosphor) untersucht. Die Behinderung der Versetzungsbewegung durch Fremd- atome und damit die Erhöhung der Festigkeit wurde für verschiedene Verteilungen von Fremdatomen in Abhängigkeit von der Temperatur simuliert. Weiter wurde der Einfluss von Fremdatomen auf den Übergang von spröden zum duktilen Verhalten von Eisen bei steigender Temperatur untersucht.

Statistische Verteilung
von Substitutionsatomen
in einem Eisenkristall



Danksagung

Die Untersuchungen werden von der Deutschen Forschungsgemeinschaft unter Schm-746/53-2 gefördert. Für die finanzielle Unterstützung sei gedankt.

Ansprechpartner

Prof. Dr. S. Schmauder

Tel.: +49 / 711 685-62556

Fax: +49 / 711 685-62635

E-mail: siegfried.schmauder@mpa.uni-stuttgart.de