

Schwerpunktprogramm „Strukturgradienten in Kristallen“ (SPP 1056)

Nanoskalige Modellierung des mechanischen Verhaltens von Kristallen mit Strukturgradienten: Atomistische Simulationen von Nickelbasis-Superlegierungen

Projektbeginn: 01.01.2004

Projektende: 31.05.2005

Ziele:

Ziel dieses Projektes war die molekulardynamische Untersuchung des mechanischen Verhaltens von γ' -gehärteten Nickelbasis-Superlegierungen, insbesondere der Versetzungsbewegung und Versetzungswechselwirkung mit γ' -Ausscheidungen.

Ergebnisse:

1. Festigkeit von γ' -gehärtetem Nickel

Bei Zugbelastung von Ni-Systemen mit kubischen Ni_3Al -Ausscheidungen treten bei einer Dehnung von etwa 9 % Defekte in der Form von lokalisierten Stapelfehlern auf. Diese entstehen in den Kanälen zwischen den γ' -Ausscheidungen und breiten sich bei höherer Belastung in die Ausscheidungen aus.

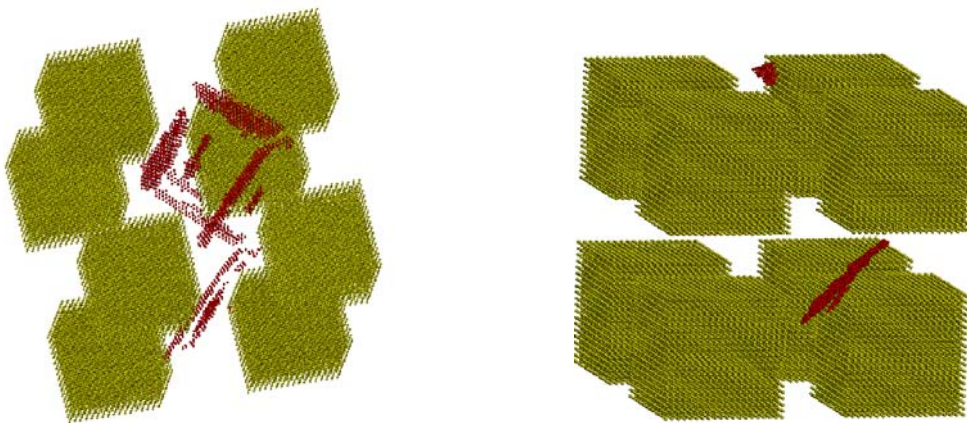


Abbildung 1: Kubische Ni_3Al -Ausscheidungen in Ni unter Zugbelastung. Die gelben Atome stellen die Al-Atome dar, die roten Atome sind Atome der Stapelfehler. Ni-Atome sind nicht dargestellt.

2. Wechselwirkung von Versetzungen mit Ausscheidungen

Es wurde die Wechselwirkung von Superversetzungen mit kleinen kugelförmigen Ni_3Al -Ausscheidungen untersucht. $a\langle 110 \rangle$ -Superversetzungen in Ni_3Al dissoziieren in Ni in zwei $a/2\langle 110 \rangle$ -Versetzungen (D1 und D2), welche jeweils in zwei SHOCKLEY-Partialversetzungen (P1, P2, P3, P4) mit zwischenliegenden Stapelfehlern dissoziieren. Es wurden die

kritische Schubspannungen für alle Partialversetzungen in Abhängigkeit von der Größe und dem Abstand der Ausscheidungen bestimmt.

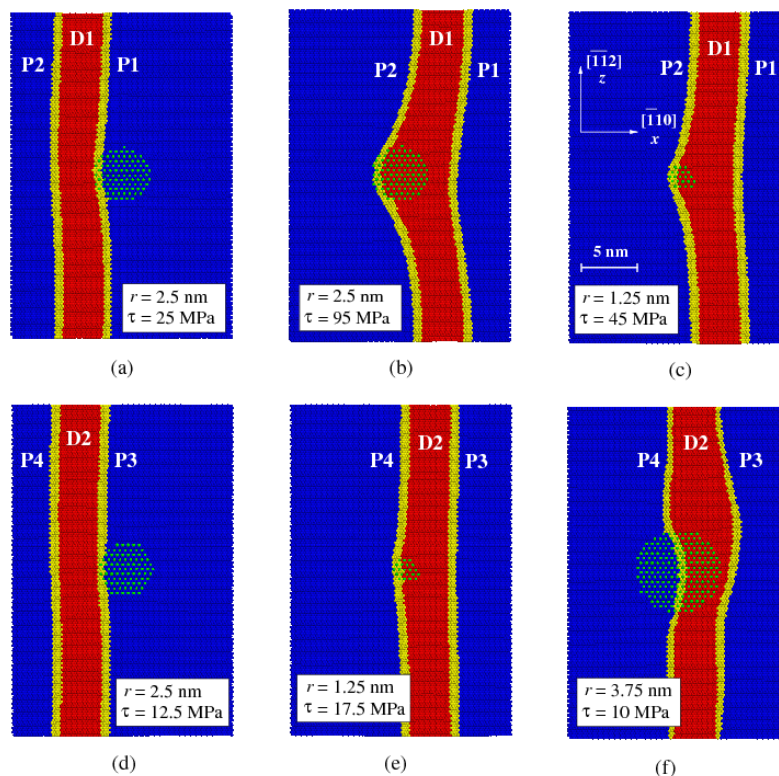


Abbildung 2: Atome in der Gleitebene für γ/γ' -Systeme mit Abstand $L=30$ nm der kugelförmigen Ausscheidungen: Al-Atome sind grün dargestellt, Atome der Stapelfehler rot und Atome der Partialversetzungen gelb. (a) Die erste Versetzung D1 berührt die Ausscheidung, (b, c) die erste Versetzung D1 wird von der Ausscheidung festgehalten. (d) Die zweite Versetzung D2 berührt die abgesicherte Ausscheidung, (e) die zweite Versetzung D2 wird von der abgesicherten Ausscheidung festgehalten. (f) Die zweite Versetzung D2 bewegt sich durch die gesicherte Ausscheidung.

Die kritische Schubspannung wird von der Partialversetzung P2 bestimmt, die in der Ausscheidung durch Abscheren eine Antiphasengrenze erzeugt.

3. Struktur von Versetzungen

Im Experiment wird beobachtet, dass sich in γ' -Ausscheidung durch Klettern hineinbewegende $a[100]$ -Versetzungen entlang der $\langle 011 \rangle$ -Richtungen ausrichten. Als Ursache wurde eine Dissoziation der Versetzung in eine ausgedehnte Struktur mit der Bildung einer Sperre (Lock), die für $\langle 011 \rangle$ -Richtungen die geringste Energie besitzt, vermutet. Dieses Verhalten wurde durch Simulationen überprüft. Dabei wurden drei Versetzungsstrukturen gefunden, die in Abbildung 3 dargestellt sind. Die Dissoziationsstruktur in Abb. 3(a) entspricht dem bekannten HIRTH-Lock. Es wurden darüber hinaus zwei weitere stabile Strukturen gefunden: Eine seitlich geöffnete Aufspaltung, die der Dissoziation in zwei $a/2\langle 110 \rangle$ -Versetzungen entspricht, und die durch einen schmalen Antiphasengrenzenstreifen zusammengehalten werden (Abb. 3(b)) sowie eine verzahnte Form von zwei $a/2\langle 110 \rangle$ -Versetzungen (Abb. 3(c)). Für Linienrichtungen, die leicht gegen die $[011]$ -Richtung geneigt sind, enthalten die Versetzungsstrukturen Jogs (Abb. 3(c-f)).

Von den drei Versetzungsstrukturen besitzt der HIRTH-Lock die geringste Energie. Die seitlich geöffnete Struktur (Abb. 3 (b) und (e)) besitzt eine höhere Energie. Die verzahnte Struktur (Abb. 3(c) und (f)) besitzt die höchste Energie.

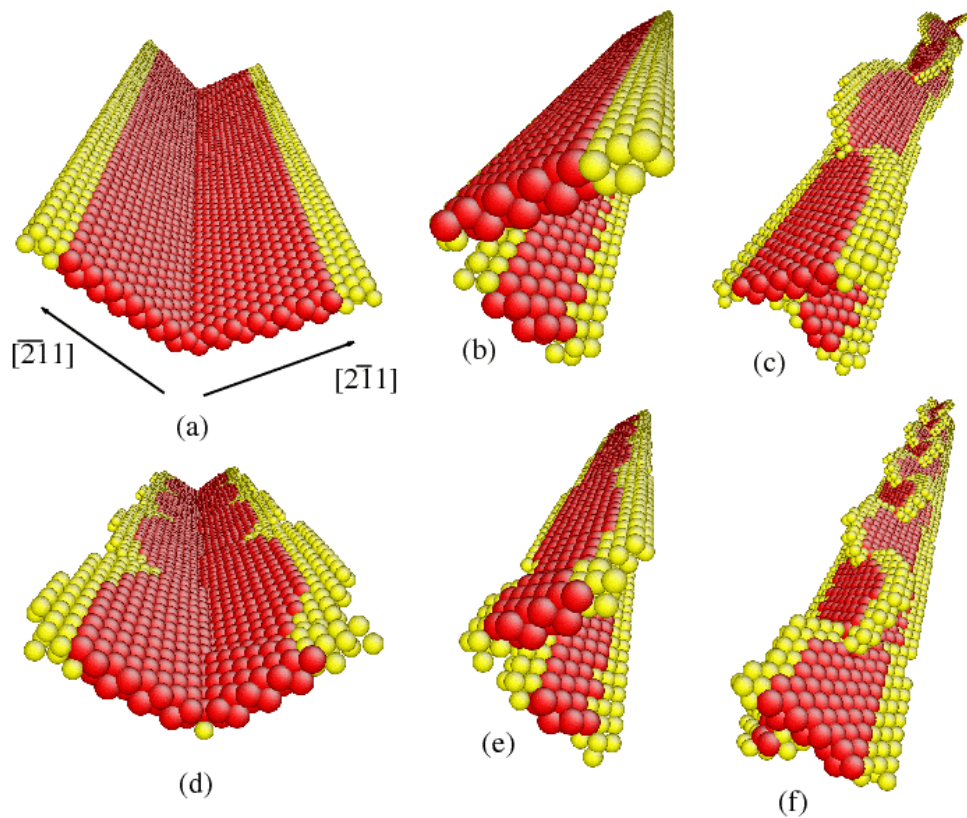


Abbildung 3: Verschiedene Formen der Dissoziation von $a[100]$ -Versetzungen in Ni_3Al . Rote Atome sind Atome in Stapelfehlern und gelbe Atome sind Atome in Partialversetzungen. (a, b) Linienrichtung $[011]$, (c) Linienrichtung $[0,30,29]$, (d, e) Linienrichtung $[0,10,9]$, (f) Linienrichtung $[0,11,10]$.

Liste der Publikationen aus diesem Projekt:

C. Kohler, P. Kizler, and S. Schmauder, "Atomistic Simulation of the Pinning of Edge Dislocations in Ni by Ni_3Al Precipitates", *Materials Science and Engineering A* **400-401** (2005) 481-484

C. Kohler, T. Link, and A. Epishin, "Dissociation of $a\langle 100 \rangle$ edge superdislocations in the γ' phase of nickel-base superalloys", *Philosophical Magazine* **86** (2006) 5103-5121

Ansprechpartner:

Dr. Christopher Kohler
 Tel.: +49 / 711 685 63087
 Fax: +49 / 711 685 62635
 E-Mail: christopher.kohler@mpa.uni-stuttgart.de