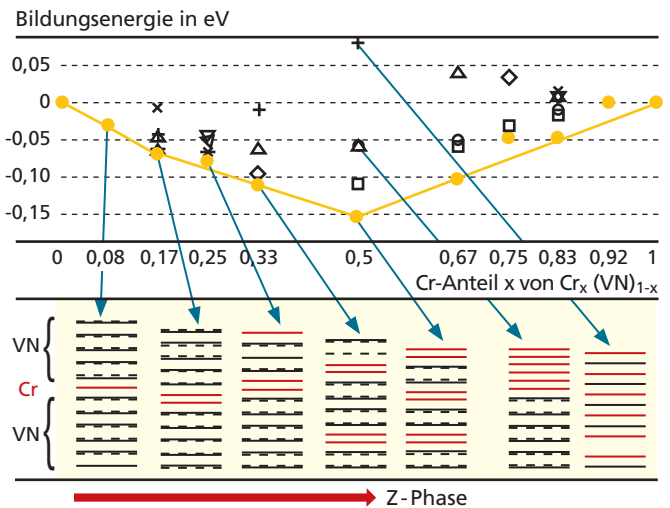


NITRIDAUSSCHIEDUNGEN UND WASSERSTOFFATOME IN STÄHLEN BEHERRSCHEN

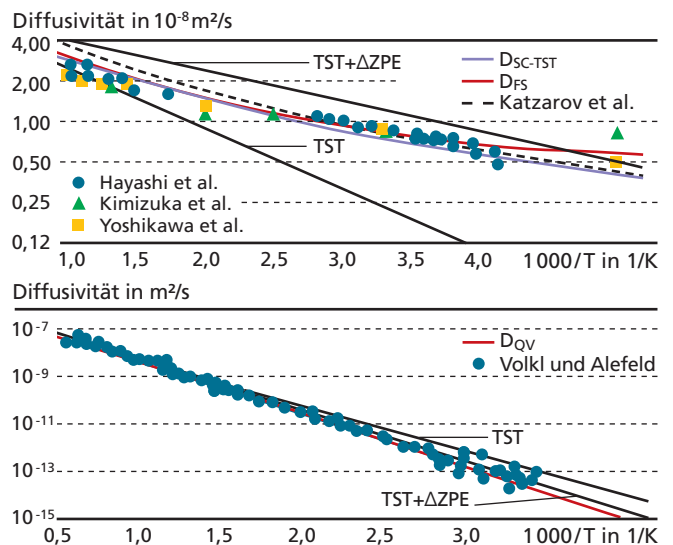
Um zukünftig noch energie- und ressourceneffizientere Produkte an den Markt bringen zu können, sind Unternehmen auf neue Konstruktionswerkstoffe mit ausreichenden Stabilitätsreserven hinsichtlich steigender thermo- und chemomechanischer Belastungen angewiesen. Wir stellen uns die materialwissenschaftliche Aufgabe, durch Computersimulationen mit quantentheoretischen Berechnungsmethoden (Dichtefunktionaltheorie) die Wanderung von Fremdatomen und die Bildung von Fremdphasen in Stahlwerkstoffen sowie deren Einflüsse auf die Werkstoffeigenschaften aufzuklären. Damit unterstützen wir unsere Kunden, Werkstoffe hinsichtlich gewünschter Eigenschaften zielgerichtet zu optimieren und Vorhersagen für alternative Materialsysteme mit guten Zieleigenschaften zu machen.

Z-Phasen und kriechfeste Stähle für Hochtemperatur-Kraftwerke

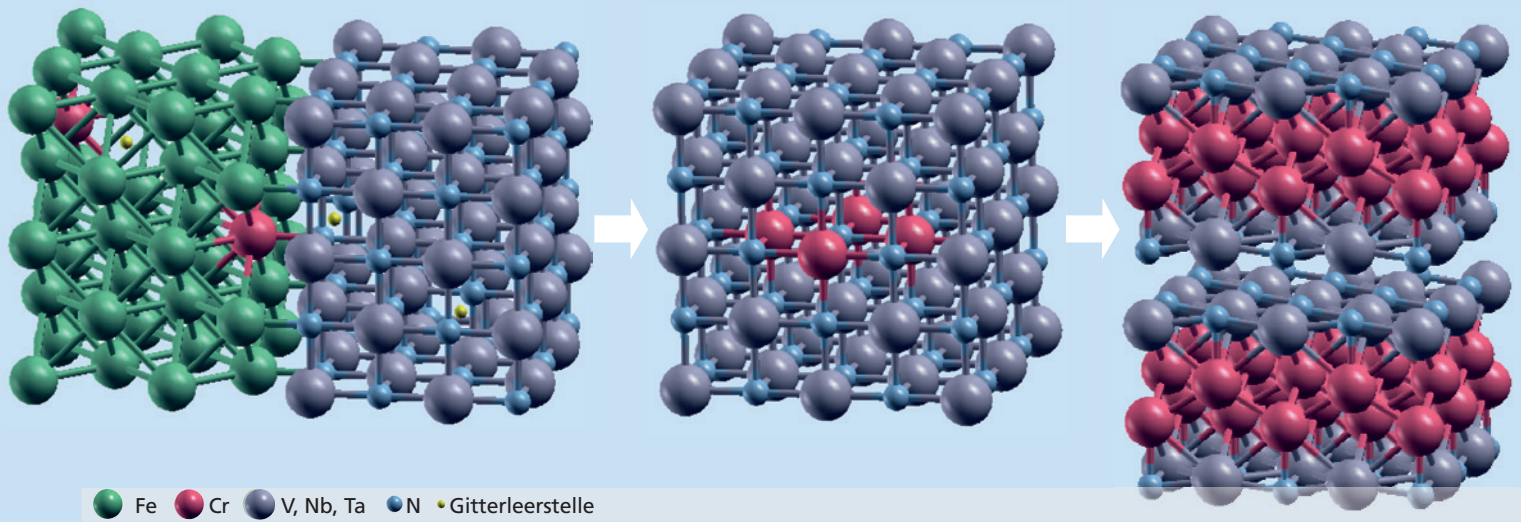
Um die Energieeffizienz konventioneller Stromkraftwerke zu maximieren und den Verbrauch an fossilen Brennstoffen zu minimieren, bedarf es einer möglichst hohen Dampftemperatur. Dies stellt sehr hohe Anforderungen an die für Rohrleitungen verwendeten Stähle hinsichtlich ihrer Langzeitstabilität und Korrosionsfestigkeit. Um die Betriebstemperatur von bisher 610 °C auf zukünftig 670 °C steigern zu können, sind ferritisch-martensitische Stähle mit einem Chromgehalt von etwa 12 Prozent vorgesehen, deren Kriechfestigkeit auf kleinen, in der Eisenmatrix fein verteilten Metallnitridpartikeln beruht. Ein bisher ungelöstes Problem dabei sind große Ausscheidungsteilchen der sogenannten Z-Phasen, die sich im Langzeitbetrieb bei hohen Temperaturen aus den Metallnitridpartikeln und Chrom im Stahlgefüge bilden. Diese setzen die Kriechfestigkeit des Stahls herab und führen schließlich zum Versagen sicherheitsrelevanter Bauteile.



1 *Bildungsenergie unterschiedlicher Folgen aus Vanadiumnitrid- und Chrom-Schichten (oben), die Bildungsschritte der Z-Phasen aufzeigen (unten).*



2 *Temperaturabhängigkeit der Diffusivität von H in Fe (oben) und Ni (unten) (Di Stefano et al., Phys. Rev. B 92 (2015) 224301); lila und rote Linien: unsere Ergebnisse.*



Bildung der Z-Phasen-Ausscheidungen: Einzelne Cr-Atome aus der Fe-Matrix diffundieren in Metallnitridpartikel hinein (links), bilden flache Cluster (Mitte) und diese wachsen zu periodischen Schichten (rechts).

Ein grundlegendes Verständnis der atomaren Prozesse der Z-Phasen-Entstehung und eine detaillierte Kenntnis der strukturellen, thermodynamischen und kinetischen Eigenschaften aller daran beteiligten Elemente und Phasen sind notwendig, um durch Anpassen der Legierungszusammensetzung und Wärmebehandlungsmethoden die Mikrostruktur gezielt beeinflussen zu können. Dies ermöglicht, die Z-Phasen ebenfalls als kleine, im Gefüge fein verteilte Partikel zu nutzen, um den neuentwickelten Stahl bei höheren Temperaturen nicht nur korrosionsfester, sondern auch kriechfester zu machen. Wir untersuchen die Mechanismen der Z-Phasen-Bildung auf atomarer Skala mithilfe der Simulationsmethoden der Dichtefunktionaltheorie. Strukturmodelle der Ausgangs-, Zwischen- und Endphasen (Abbildung oben rechts) werden benutzt, um die Diffusionsprozesse bei der Z-Phasen-Bildung zu modellieren und zu analysieren.

Unsere Resultate unterstützen ein Z-Phasen-Ausscheidungsszenario, in welchem zunächst einzelne Cr-Atome über Metallleerstellen aus der Eisenmatrix in die Nitridpartikel hinein diffundieren und darin kleine schichtförmige Cluster bilden. Diese wirken als Keime für das Wachstum ausgedehnter Chromschichten, welche die Umwandlung der Metallnitridpartikel in Z-Phasen-Partikel über Zwischenschritte unterschiedlicher Schichtfolgen vorantreiben (Abbildung 1).

Unsere im Rahmen des EU-Projekts »Z-ultra« entwickelten Vorstellungen und erzielten Ergebnisse fließen in die industrielle Entwicklung eines neuartigen, Z-Phasen-gefestigten Stahls mit 12 Prozent Chromgehalt ein, der es ermöglichen soll, Hochtemperatur-Kraftwerke zukünftig sowohl energie- und ressourceneffizienter als auch hochtemperaturstabiler zu betreiben (www.z-ultra.eu).

Wasserstoff und bruchfeste Stähle für Automobile

Um moderne, effiziente Automobile mit geringerem Gewicht zu konstruieren, werden für viele Bauteile hochfeste Stähle verwendet, die mit deutlich geringeren Blechdicken mechanisch genauso stabil bleiben wie konventionelle Stahlwerkstoffe. Sowohl bei der Herstellung der dünnen, hochfesten Stahlbleche als auch im Einsatz des Fahrzeugs ergibt sich das Problem, dass Wasserstoff aus der Umgebung durch die Oberfläche in das Metall eindringen und im Innern recht schnell diffundieren kann. Dieser atomare Wasserstoff bewirkt hohe lokale mechanische Spannungen und führt damit zu verschiedenartigen Schädigungsprozessen, die für hochfeste Stähle wegen der geringeren Blechdicken viel kritischer als für konventionelle Stähle werden können. Im Rahmen des EU-Projekts »MultiHy« (www.multihy.eu) haben wir die Diffusion und Reaktion von Wasserstoff in Eisen und Nickel sowie an Korngrenzen und Ausscheidungen auf mikroskopischer Skala untersucht. Abbildung 2 zeigt einen Vergleich der Diffusion von Wasserstoff in kubisch-raumzentriertem Eisen (Ferrit) und kubisch-flächenzentriertem Nickel (Austenit): Für H in Ni ist eine klassische Beschreibung der Diffusion als thermisch aktivierter Prozess eine gute Näherung. Für H in Fe dagegen ist der Diffusionsprozess komplizierter und eine Berücksichtigung quantenmechanischer Effekte wichtig. Mit unseren Materialmodellen und Simulationsmethoden können wir Firmen helfen, mechanische Eigenschaften von Stählen auch hinsichtlich der Empfindlichkeit gegenüber Wasserstoff zu verbessern sowie neuartige Werkstoffe zu entwickeln.

Dr. Daniel Urban, Prof. Dr. Christian Elsässer