

MM 16 Phasenumwandlung I

Zeit: Samstag 09:15–10:45

Raum: TU H1058

MM 16.1 Sa 09:15 TU H1058

In-situ observation of Short Range Order and Precipitation Processes in Ti-V by High Energy X-Ray Diffraction — ●INGO RAMSTEINER, ANDREAS SCHÖPS, HARALD REICHERT, and HELMUT DOSCH — Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart

Phase transformations, especially precipitation processes, are a key factor in alloy design. Therefore, they are of major interest in materials science. Understanding these processes in the framework of statistical thermodynamics requires knowledge about the atomic interaction potentials between the alloy constituents. Experimentally, these parameters can be accessed via the diffuse scattering caused by the configurational short range order (SRO) and lattice distortions. With the high energy monochromatic Laue technique we present a tool to study both phenomena simultaneously in situ in the bulk of a macroscopic single crystal. Recording the scattered intensity with a 2D detector reveals distinct precipitate Bragg peaks embedded into the diffuse scattering of the matrix.

We present an in situ case study of bcc Ti-V. Apart from the SRO, growth and dissolution of two different types of precipitates are observed, depending on the anneal temperature. HRTEM experiments have been conducted to complement and verify our results.

MM 16.2 Sa 09:30 TU H1058

Die oberflächennahe Mikrostruktur von Pt-Rh — ●CH. STEINER¹, M.M.I.P. VAN DER KLIS¹, B. SCHÖNFELD¹, G. KOSTORZ¹, B. PATTERSON² und P. WILLMOTT² — ¹ETH Zürich, Institut für Angewandte Physik, CH-8093 Zürich, Schweiz — ²Paul Scherrer Institut, Swiss Light Source, CH-5232 Villigen PSI, Schweiz

Mit Synchrotronstrahlung unter streifendem Einfall wurde die diffuse Streuung an einer (110)-Oberfläche von Pt-47 at.% Rh gemessen. Die Probe befand sich in einer UHV-Umgebung bei 1000 K. Nach Abtrennung von thermisch diffuser Streuung und Compton-Streuung wurde der elastische Anteil in Nahordnungsstreuung und lineare Verzerrungsstreuung separiert. Wie bei einer früher durchgeführten Volumenmessung an Pt-47 at.% Rh zeigt die Nahordnungsstreuung auch nahe der Oberfläche ein Vorliegen lokaler Ordnung an. Die Asymmetrie in der Verzerrungsstreuung, zuvor deutlich in der Nähe der Bragg-Reflexe zu erkennen, ist jetzt weniger stark ausgeprägt. Im Unterschied zu Untersuchungen in der Literatur, die bei Zimmertemperatur an einer Pt-50 at.% Rh(110)-Oberfläche durchgeführt worden waren, wurde keine Rekonstruktion gefunden.

MM 16.3 Sa 09:45 TU H1058

Leerstellenpfad und Ordnungskinetik — ●DAVID REITH¹, WOLFGANG PÜSCHL¹, WOLFGANG PFEILER¹ und FERDINAND HAIDER² — ¹Inst. f. Materialphysik, Universität Wien — ²Inst. f. Physik, Universität Augsburg

Mit einem Wartezeit-Monte-Carlo Algorithmus wurde die Bewegung von Leerstellen in Intermetallischen Verbindungen vom Typ L1₂ und B2 im geordneten und ungeordneten Zustand untersucht. Die Zeit, die benötigt wird, um einen vorgegebenen Anteil (z.B. 90%) der Gitterplätze in der Rechenzelle mindestens einmal zu besuchen, ergibt sich als proportional zur Größe der Rechenzelle und damit indirekt proportional zur Leerstellendichte. Die fast vollständige Überdeckung der Rechenzelle mit Leerstellenbesuchen stellt die Voraussetzung dafür dar, dass ein Phasenübergang homogen und nicht nur in einzelnen Wanderungsbereichen der Leerstelle abläuft. Aus den rechnerisch ermittelten Proportionalitätsfaktoren kann eine Beziehung für den Zeitpunkt des Überganges von heterogenem zu homogenem Verhalten in Abhängigkeit von Leerstellenkonzentration und Wanderungsenthalpie aufgestellt und graphisch dargestellt werden. Dieses ist besser begründet als ein früher von uns verwendeter Ansatz, bei dem die mittleren quadratischen Wanderungsdistanzen herangezogen wurden (Intermetallics 11 (2003) 161).

MM 16.4 Sa 10:00 TU H1058

Influence of Twin Grain Boundaries on Texture Evolution during α - γ -Phase Transformation in Microalloyed Steels — ●INGO LISCHESKI und GÜNTER GOTTSCHALK — Institut für Metallkunde und Metallphysik, RWTH Aachen, D-52056 Aachen, Germany

The partial ferrite to austenite phase transformation in microalloyed steel was studied, with a special focus on the influence of twinning on the texture evolution. During the diffusion controlled phase transformation a texture memory effect takes place. This effect is explained by different

orientation relationship models. The present models are not capable of quantitatively predicting the texture changes during phase transformation. Various mechanisms known that cause a texture change. This study demonstrates the influence of twin formation on the transformation texture.

Samples of a microalloyed steel were wrapped in a CrNi-18/9 steel foil and annealed at a low transformation temperature. Nickel is believed to diffuse from the steel wrapping into the sample, and to stabilize the austenite and retain it on cooling to ambient temperature. This allows us to measure locally by EBSD the orientation of the ferrite prior to transformation and at the same location the orientation of the austenite subsequent to transformation. The measurements were conducted in a high resolution FEG-SEM.

The study demonstrates an influence of twin grain boundaries on the development of transformation textures. Mainly $\Sigma 3$ und $\Sigma 9$ twin grain boundaries in the austenite phase are observed. The twin grain boundaries are not randomly distributed over the whole microstructure.

MM 16.5 Sa 10:15 TU H1058

Ab initio based free energy surfaces: A powerful tool to derive temperature dependent thermodynamic and kinetic parameters — ●BLAZEJ GRABOWSKI — Uni Paderborn

Blazej Grabowski, Sixten Boeck, Jörg Neugebauer Uni Paderborn MPI für Eisenforschung Düsseldorf

Many metals and alloys exhibit a complex pressure and temperature dependent phase diagram. The common approaches to theoretically predict these diagrams are based on empirical interpolation schemes in connection with experimental input data. The ab initio calculation of free energy surfaces as function of relevant reaction coordinates (e.g. lattice constant, c/a ratio) provides a direct tool to identify stable and metastable equilibrium configurations, reaction barriers and reaction paths by fully including temperature effects. In order to test the applicability and accuracy of this approach we have implemented an efficient scheme in our plane wave pseudopotential code (SFHingX) to calculate free energy surfaces employing the quasi harmonic approximation. The method has been applied to map the free energy surface of several metals (Al, Fe). The results are compared with experiment.

MM 16.6 Sa 10:30 TU H1058

Interface thermodynamics of multi-layered systems — ●FERDINAND SOMMER — MPI for Metals Research, Stuttgart

The basic objective is to understand the formation and stability of the interface(s) and the interface phases (amorphous or crystalline) that are developed between thin metallic layers in contact. The driving force for the formation of interface phases of multilayered systems has been evaluated. Surface and interface energies and the enthalpy of formation of interface phases have been analysed on the basis of the Miedema model⁽¹⁾. The entropy contributions are derived from a model developed for the excess entropy of solutions⁽²⁾. Some results are compared with experimental data.

(1) F. R. de Boer, R. Boom, W. C. M. Mattens and A. K. Niessen, in Cohesion in Metals: Transition Metal Alloys, North Holland, Amsterdam (1988)

(2) F. Sommer, R.N. Singh and V. Witusiewicz, J. Alloys Comp. 325 (2001) 118