

## MM 17 Phasenumwandlung II

Zeit: Samstag 11:00–12:15

Raum: TU H1058

MM 17.1 Sa 11:00 TU H1058

**Ausscheidungen in Al-Cu und Al-Ag: Strukturbestimmung mit ab-initio Rechnungen** — ●MICHAEL RÖBEL und TORSTEN E.M. STAAB — Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik der Rheinischen Friedrich-Wilhelms Universität Bonn, Nußallee 14-16, D-53115 Bonn, Germany

Aluminium ist als moderner Werkstoff aus dem Leichtbau nicht mehr wegzudenken. Seine Werkstoffeigenschaften werden maßgeblich durch Ausscheidungen von Legierungselementen beeinflusst. Um einen tieferen Einblick in den strukturellen Aufbau der einzelnen ausgeschiedenen Phasen zu gewinnen, wurden ab-initio Rechnungen mit SIESTA durchgeführt. Die Berechnungen wurden gemäß der Ausscheidungssequenz von Al-Cu Legierungen an Guinier-Preston Zonen I und II, der  $\Theta'$ -Phase und der stabilen  $\Theta$ -Phase des überalterten Werkstoffes vorgenommen. Im Vergleich zu Al-Ag zeigt sich der Einfluss der Gitterkonstanten des Legierungselementes relativ zu der des Wirtsgitters auf den Formfaktor der Ausscheidung. Mit den relaxierten Atomkoordinaten lassen sich experimentelle Parameter wie die Positronenlebensdauer berechnen. Dies ermöglicht eine bessere Interpretation von Messungen.

MM 17.2 Sa 11:15 TU H1058

**Untersuchungen zur inneren Oxidation in Ni-Zr-Y-Legierungen** — ●BÄRBEL KLOSS, UWE GLATZEL und RAINER VÖLKL — Universität Bayreuth, Lehrstuhl Metallische Werkstoffe, Ludwig-Thoma-Str. 36b, 95440 Bayreuth

Nickellegierungen mit geringen Zusätzen an Zr und Y wurden bei 1000°C unter geringem Sauerstoffpartialdruck wärmebehandelt. Unter den gegebenen Versuchsbedingungen fand eine innere Oxidation statt. Von besonderem Interesse waren die Morphologie und Struktur der gebildeten Oxidteilchen sowie die Kinetik der Oxidationsprozesse, die experimentell bestimmt und mit theoretisch ermittelten Werten verglichen wurde. Die Oxidationsgeschwindigkeit von binären Ni-Zr-Legierungen stimmt mit der Theorie überein. Ternäre Ni-Zr-Y-Legierungen zeigen hingegen einen um mehrere Größenordnungen schnelleren Oxidationsverlauf als theoretisch vorausgesagt. Bereits geringe Zusätze an Y wirken beschleunigend auf die Oxidationskinetik. Dieses Phänomen ist nicht mehr mit der allgemeinen Theorie zur inneren Oxidation zu erklären, sondern beruht auf der Verbesserung der Sauerstoffleitfähigkeit des gebildeten Zirkonoxids durch die Zugabe von Y. Weitere Untersuchungen erfolgten bei höheren Wärmebehandlungstemperaturen (1100°C, 1200°C). Dabei wird bei 1200°C ein anderer Oxidationsmechanismus als bei 1000°C beobachtet.

MM 17.3 Sa 11:30 TU H1058

**Determination of Atomic Interaction Parameters from X-Ray Diffuse Scattering in the Binary Alloy System Ni-Pd** — ●MARKUS MEZGER<sup>1,2</sup>, HARALD REICHERT<sup>1</sup>, and HELMUT DOSCH<sup>1,2</sup> — <sup>1</sup>Max-Planck-Institut für Metallforschung, Heisenbergstr. 3, D-70569 Stuttgart — <sup>2</sup>Universität Stuttgart, Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Pfaffenwaldring 57, D-70550 Stuttgart

Macroscopic properties of alloys, such as the elastic constants, are determined by the atomic interaction potential between the different alloy components. These parameters are encoded in the diffuse scattering caused by configurational short range order (SRO) and lattice distortions in the disordered phase. For the Ni-Pd alloy system we present a method to obtain the interaction parameters directly from X-ray diffuse scattering. In order to collect the experimental data in-situ measurements on macroscopic Ni<sub>55</sub>Pd<sub>45</sub> and Ni<sub>25</sub>Pd<sub>75</sub> single crystals were performed in the temperature range from 20 °C up to 900 °C. For the data analysis a formalism based on the spherical model and the Kanzaki-force concept has been used within a simulated annealing algorithm.

MM 17.4 Sa 11:45 TU H1058

**Solitons and the  $\omega$ -phase in Bcc Crystals** — ●JOHANNES ROTH — Institut für Theoretische und Angewandte Physik, Universität Stuttgart

Molecular dynamics simulations have been applied to generate shock waves in bcc crystals. The interaction between the atoms has been modelled by the Dzugutov potential[1]. If the shock front is slower than the speed of sound a transition to the hexagonal  $\omega$ -phase[2] is observed with a kink as phase boundary. If the shock front velocity becomes faster than the speed of sound the  $\omega$ -phase is replaced by solitons, and we can

show that both phenomena are closely related. The origin of the  $\omega$ -phase and its stability will be discussed. The interaction of the solitons has been studied and the collision property has been demonstrated. For the original Dzugutov potential the solitons decay through transversal fluctuations. We describe how the potential has to be modified to suppress this instability.

[1] M. Dzugutov, J. Non-Cryst. Sol. **131** (1991) 62[2] S.K. Sikka, Y.K. Vohra, R. Chidambaram, Prog. Mat. Sci. **27** (1982) 245

MM 17.5 Sa 12:00 TU H1058

**Structural Phase Transition in Tb<sub>5</sub>(Si<sub>0.6</sub>Ge<sub>0.4</sub>)<sub>4</sub> at Low Temperature** — ●ANDREAS KUPSCH<sup>1,2</sup>, ALEXANDR LEVIN<sup>1</sup>, DIRK C. MEYER<sup>1</sup>, and PETER PAUFLER<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Institut für Strukturphysik, TU Dresden, 01062 Dresden — <sup>2</sup>BAM, VIII.32, 12200 Berlin

The occurrence of the giant magnetocaloric effect (MCE) has been measured with various rare earth- Si/Ge compounds. The magnetic phase transition from the high temperature paramagnetic to the low temperature ferromagnetic phase is accompanied by a structural phase transition. We report on crystallographic details of a transition measured with powdered Tb<sub>5</sub>(Si<sub>0.6</sub>Ge<sub>0.4</sub>)<sub>4</sub> at low temperatures (150 and 130 K), for which the MCE was observed at T<sub>c</sub> = 150 K. The pseudo-binary compound is monoclinic at room temperature (P1121/a). Changes of reflection intensities and positions in the diffraction patterns indicate a structural phase transition between 150 K and 100 K, where the compound orders in an orthorhombic structure (Pnma). Split-up crystallographic sites of the monoclinic unit cell degenerate to sites of higher symmetry in the orthorhombic structure. It turned out that both phases coexist at the selected temperatures but the phase content changes significantly. As already reported for Gd<sub>5</sub>Si<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub> the key feature of the structural phase transition is a shear movement of pairs of flat atomic units along the crystallographic a direction by 0.84 Å and tremendous changes of selected (Si/Ge)-(Si/Ge) distances up to 0.95 Å.