

## MM 18: Mechanical Properties IV

Time: Tuesday 12:00–13:00

Location: IFW D

MM 18.1 Tue 12:00 IFW D

**Vergleich der Erholungskinetik aus Doppelzug- und Spannungsrelaxationsversuchen** — ●VOLKER MOHLES, SHEILA BHAUMIK und GÜNTER GOTSTEIN — Institut für Metallkunde und Metallphysik, RWTH Aachen

Während der Erholung verformter Metalle finden Annihilation und Umordnungsprozesse von Versetzungen statt. Beides reduziert die Härte des Materials leicht; vor allem entscheiden diese Prozesse jedoch darüber, ob und wann das Material rekristallisiert und dabei erheblich weicher wird. Daher ist die Kinetik der Erholung von erheblicher technischer Bedeutung. Zur experimentellen Ermittlung dieser Kinetik sind diverse Versuchsführungen möglich; drei davon werden in diesem Beitrag anhand der kommerziellen Aluminiumlegierung AA3103 verglichen: Doppelzugversuche mit einer Erholungsphase unter Last (DTL), Doppelzugversuche mit Erholungsphase ohne Last (DTU), und Spannungsrelaxationsversuche (SR). DTL und DTU entsprechen unterschiedlichen Erholungsphasen in der Produktion von z.B. Blechen. Die SR sind eine Möglichkeit, die Erholungskinetik zu messen; sie sind experimentell unaufwendiger als DTL und DTU, aber auch empfindlicher und schwerer auszuwerten. Dies liegt daran, dass die Verformung während der Relaxationsphase in geringem Maße fortschreitet und dabei die Relaxationskurve stark beeinflusst. Kleine Störungen bewirken dabei große Auswirkungen auf die Erholungsdaten. Es wird gezeigt, dass SR bei geeigneter Versuchsführung und Auswertung dennoch als preisgünstiger Ersatz für DTL dienen können. Auch für DTU kann zumindest eine gute Approximation ermittelt werden.

MM 18.2 Tue 12:15 IFW D

**Influence of Cu atoms on the mobility of dislocations in Cu-doped Al - an atomistic study.** — ●THOMAS GNIELKA<sup>1</sup>, PIM SCHRAVENDIJK<sup>2</sup>, CHRISTIAN ELSÄSSER<sup>2</sup>, and PETER GUMBSCH<sup>1,2</sup> — <sup>1</sup>Universität Karlsruhe (TH), Kaiserstr. 12, 76131 Karlsruhe — <sup>2</sup>Fraunhofer IWM, Wöhlerstr. 11, 79108 Freiburg

The influence of substitutional Cu atoms on the mobility of edge dislocations in Cu-doped Al was investigated by means of molecular dynamics simulations with central-force many-body potentials for interatomic interactions in the binary Al-Cu system. For a random distribution of Cu atoms in a low concentration range (up to 0.4% Cu) the damping coefficient and the critical shear stress for the motion of straight dislocations was analyzed.

Furthermore the interaction of edge dislocations with a  $\Sigma 3$  (111) [1-10] symmetrical tilt grain boundary was studied. Up to an applied strain of 1% no propagation of the dislocations across the boundary was achieved. The underlying structural mechanism will be discussed.

MM 18.3 Tue 12:30 IFW D

**Temperature dependence of the stacking fault energy in FeMn alloys: An ab-initio study** — ●ANDREI REYES-HUAMANTINCO<sup>1</sup>, PETER PUSCHNIG<sup>1</sup>, LEVENTE VITOS<sup>2</sup>, ANDREI RUBAN<sup>2</sup>, and CLAUDIA AMBROSCH-DRAXL<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Chair of Atomistic Modelling and Design of Materials, Department of Materials Physics, University of Leoben, Leoben, Austria — <sup>2</sup>Applied Material Physics, Department of Materials Science and Engineering, Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden

The stacking fault energy in Fe-based austenitic alloys (e.g. steels) is an important microscopic parameter that determines the mechanical hardness of the material. Within the axial interaction model it is possible to estimate the stacking fault energy in an fcc crystal from the free energies of the hcp, dhcp (double hcp) and fcc lattices. The vibrational, electronic and magnetic entropy contributions to the free energy have been assessed theoretically, with emphasis on the correct description of the magnetic entropy, in substitutional FeMn binary alloys. Density-functional theory (DFT), the exact muffin-tin orbitals (EMTO) method and the coherent potential approximation (CPA) have been used to calculate the stacking fault energy in random alloys, where simultaneous chemical and magnetic disorder is present. From the analysis of the stacking fault energies as a function of temperature, it is possible to identify the temperatures and Mn concentrations at which the austenitic (fcc) or else the hcp phase is stabilized. The specific role of the disordered local magnetic moments on the stability of FeMn austenitic alloys has been investigated.

MM 18.4 Tue 12:45 IFW D

**Simulation der Anfangsstadien der Materialermüdung durch ein granulares Modell** — ●JUDITH FINGERHUTH<sup>1</sup>, MATZ HAAKS<sup>1</sup>, GUNTER SCHÜTZ<sup>2</sup> und KARL MAIER<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Helmholtz-Institut für Strahlen- und Kernphysik, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn, Nußallee 14-16, D-53115 Bonn — <sup>2</sup>Institut für Festkörperforschung, Forschungszentrum Jülich, D-52425 Jülich

Basierend auf der Idee des zellulären Automaten werden die ersten Phasen der Ermüdung eines Metalls vor der Initiierung von Mikrorissen mit einem mesoskopischen Modell simuliert. Der Kristall wird dabei als regelmäßige Anordnung von Kristallkörnern betrachtet, deren komplexe, individuelle Eigenschaften durch die skalaren Parameter Korngröße, Orientierung und Schädigung (mittlere Versetzungsdichte pro Korn) repräsentiert werden. Die Schädigung eines Kornes wird aus der effektiven Schubspannung im aktiven Gleitsystem, zusammengesetzt aus der äußeren Verformung, Verformung der Nachbarkörner und Beiträgen der Versetzungen, berechnet. In einer eindimensionalen Implementierung wurde das Verhalten von Nickel im einachsigen Zug-Druck-Versuch teilweise wiedergegeben. Es werden nun die Ergebnisse einer realistischeren 2D-Implementierung vorgestellt.