

Einblicke aus ab-initio Elektronenstruktur-Rechnungen in das Zusammenspiel von atomarer Korngrenzenstruktur, lokaler Spannung und Wasserstoffpartialdruck bei der Wasserstoff-verstärkten Dekohäsion von Grenzflächen in Metallen

R. Janisch

ICAMS, Ruhr-Universität Bochum, 44780 Bochum

Die Wechselwirkung von Wasserstoff mit Korngrenzen und anderen Defekten, und damit die Verteilung von Wasserstoff an diesen Elementen der Mikrostruktur, hängt nicht nur von der Struktur der Defekte ab, sondern auch vom chemischen Potential des Wasserstoffs und der lokalen Spannung in der Mikrostruktur. Elektronenstruktur-Rechnungen der Dichtefunktionaltheorie (DFT), sogenannte ab-initio oder „First Principles“ Rechnungen, eignen sich besonders gut dazu, solche Zusammenhänge quantitativ zu erfassen und gleichzeitig die zugrundeliegenden Mechanismen auf atomarer und elektronischer Ebene zu durchleuchten. Gleichzeitig sind diese Rechnungen aber auch Einschränkungen in Bezug auf die Systemgröße unterworfen, so dass man stets vor der Herausforderung steht, von wenigen Spezialfällen auf das allgemeine Verhalten von Wasserstoff in einer Mikrostruktur zu schließen. Beide Aspekte werden im Vortrag am Beispiel der Wasserstoffsegregation an Korngrenzen und der Wasserstoff-verstärkten Dekohäsion dieser Grenzflächen in ferritischen Stählen demonstriert und diskutiert.

Die DFT Ergebnisse für zwei repräsentative Korngrenzen zeigen, dass bei niedrigen Konzentrationen die bevorzugten Spaltebenen im Einkristall zunächst deutlich empfindlicher auf eine Änderung der Wasserstoffkonzentration reagieren als die Grenzflächen [1]. Ab einer kritischen Konzentration beobachtet man jedoch eine signifikante Reduktion der Korngrenzenkohäsion, welche wiederum für unterschiedliche Strukturen unterschiedlich stark ausgeprägt ist – die betrachtete $\Sigma 5$ Korngrenze mit einer vergleichsweise offenen Struktur bindet H deutlich stärker und wird gleichzeitig stärker geschwächt als eine dichtgepackte $\Sigma 3$ Korngrenze [2]. Interessant ist dabei vor allem die Tatsache, dass sich durch mechanische Belastung die relative Bindungsenergie von Wasserstoff an den Grenzflächen umkehrt, dass also bestimmte Spannungszustände eine Umverteilung von Wasserstoff an die resistenteren $\Sigma 3$ Korngrenze führen können. Die beobachteten Trends können weiterhin durch die Zugabe von Legierungselementen (V, Cr, Mn) beeinflusst werden [2][3].

Literatur:

- [1] Hydrogen Embrittlement at Cleavage Planes and Grain Boundaries in Bcc Iron—Revisiting the First-Principles Cohesive Zone Model; Abril Azócar Guzmán, Jeongwook Jeon, Alexander Hartmaier and Rebecca Janisch. *Materials* **13**, 5785 (2020); doi:10.3390/ma13245785 .
- [2] Effects of mechanical stress, chemical potential, and coverage on hydrogen solubility during hydrogen-enhanced decohesion of ferritic steel grain boundaries: A first-principles study; Abril Azócar Guzmán and Rebecca Janisch. *Phys. Rev. Materials* **8**, 073601 (2024); doi:10.1103/PhysRevMaterials.8.073601 .
- [3] Ab Initio Study of the Combined Effects of Alloying Elements and H on Grain Boundary Cohesion in Ferritic Steels; Aparna P. A. Subramanyam, Abril Azócar Guzmán, Smobin Vincent, Alexander Hartmaier and Rebecca Janisch. *Metals* **9**, 291 (2019); doi:10.3390/met9030291 .