

MM4 Thermodynamische Simulation von Phasenstabilität und -zusammensetzungen mittels ThermoCalc und Dictra unterstützt durch ab-initio Berechnungen

Prof. Dr. Uwe Glatzel, Dr. Rainer Völkl, Metallische Werkstoffe, Universität Bayreuth

Die Berechnung mittels ab-initio Verfahren beinhaltet ein großes Potential zur Bestimmung von physikalischen Eigenschaften, wie Bildungsenthalpien, Elektronendichten und Gitterparameter für schwer zugängliche Legierungssysteme und intermetallische Phasen. Verifiziert durch experimentelle Untersuchungen soll es durch die ab-initio Berechnungsmethodik ermöglicht werden aussagekräftige Materialmodelle mittels der Programme ThermoCalc und Dictra zu erhalten.

Die experimentellen Untersuchungen beinhalten im Wesentlichen die Bestimmung von Phasenanteilen, -zusammensetzung und Phasenumwandlungstemperaturen. Hierfür sollen DSC-, EDX- sowie GDOES-Messungen durchgeführt werden. Ein weiteres Augenmerk liegt auch auf der Untersuchung von Oxidations- sowie Oberflächeneffekten und deren Auswirkung auf die Struktur des Bulkmaterials und damit auf das mechanische Verhalten. Durch die gewonnenen Daten soll es ermöglicht werden den Einfluss von definierten Legierungselementen auf das Oxidationsverhalten vorhersagen zu können. Vorwiegend werden Nickel- und Platinbasis-Legierungen untersucht, aber auch andere Mehrphasensysteme des Graduiertenkollegs.