

23. März 2015

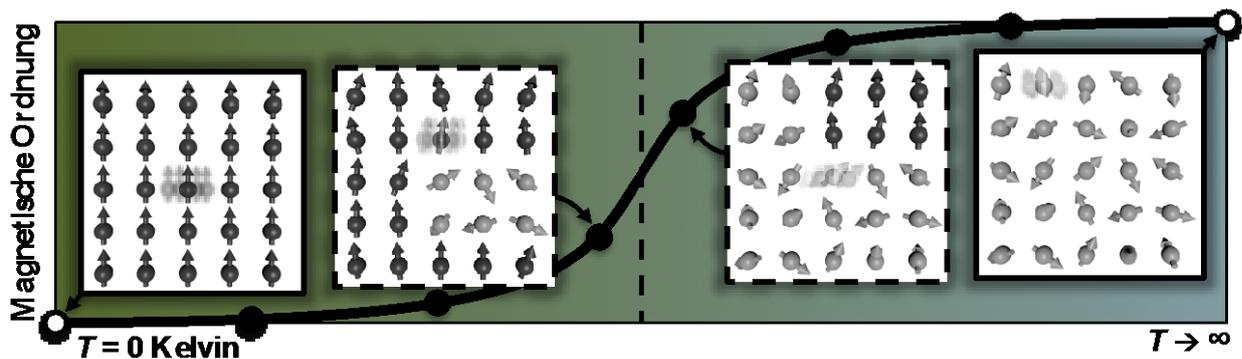
## Pressemeldung

### Symphonie im Stahl

Duett atomarer und magnetischer Resonanzen macht Stähle bei hohen Temperaturen stabil

Was macht Eisen bei hohen Temperaturen stabil? Seit langem beschäftigen sich Materialwissenschaftler mit dieser Frage, die sowohl für die Stahlherstellung als auch dessen Verarbeitung von immenser Relevanz ist. Nun gelang es Forschern der Abteilung Computergestütztes Materialdesign am Düsseldorfer Max-Planck-Institut für Eisenforschung (MPIE) in Zusammenarbeit mit Kollegen vom California Institute of Technology (Caltech) mit völlig neuen theoretischen Ansätzen und aufwendigen experimentellen Untersuchungen dieser Frage auf den Grund zu gehen.

Eisen gehört zu den kristallinen Materialien, das heißt die Eisenatome sind in einem Gitter angeordnet und weisen eine bestimmte Struktur auf. Mit zunehmender Temperatur beginnen die Atome um ihre Plätze im Gitter mehr und mehr zu schwingen, ähnlich den Saiten einer Geige, die stärker gestrichen oder gezupft werden - Wissenschaftler sprechen hier von Gitterschwingungen. Bei Stählen, die überwiegend aus magnetischen Eisenatomen bestehen, existieren neben diesen atomaren Schwingungen auch magnetische Anregungen. Hierfür kann man sich jedes Eisenatom als kleinen Magneten vorstellen, der bei hohen Temperaturen seine Ausrichtung umdreht und ähnlich wie das Schließen von Flötenventilen durch den neuen Zustand für ganz eigene ‚Klänge‘ in einem solchen Duett sorgt.



Atomare Schwingungen und magnetische Anregungen beeinflussen die Stabilität von Stählen bei hohen Temperaturen. Dabei kann man sich die Eisenatome (im Bild als Kugeln dargestellt) als kleine Magneten vorstellen, die bei zunehmender Temperatur ihre Ausrichtung umdrehen (graue Pfeile). Die neu entwickelte Methode erlaubt erstmals die Berechnung des gegenseitigen Einflusses von atomaren Schwingungen und magnetischen Anregungen über den kompletten Temperaturbereich zu berechnen.

Bild: Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH

Seit langer Zeit wird vermutet, dass die Stabilität von Eisen bei hohen Temperaturen durch eine Kopplung der atomaren Schwingungen und magnetischen Anregungen realisiert wird. Auch in einem Orchester spielen Streicher und Bläser nicht unabhängig



voneinander, sondern suchen ganz gezielt Resonanzen und Harmonien. Bisher war es aber weder experimentell noch theoretisch möglich, solchen atomaren Symphonien ‚zuzuhören‘. Eine am MPIE neu entwickelte Methode, die Konzepte aus verschiedensten Zweigen der theoretischen Physik miteinander verbindet, erlaubt es den Forschern nun erstmals den gegenseitigen Einfluss der beiden atomaren Symphoniker über den kompletten Temperaturbereich zu bestimmen. „Es wurde schon seit einiger Zeit spekuliert, dass die strukturelle Stabilität von Eisen eng verknüpft ist mit einer Wechselwirkung zwischen den magnetischen Anregungen und der atomaren Bewegung. Es freut uns sehr, dass wir nun diese Kopplung beschreiben können und darüber hinaus unsere theoretischen Vorhersagen auch mit den Messungen unserer experimentellen Kollegen vom Caltech übereinstimmen.“, so Fritz Körmann, Wissenschaftler am MPIE. Dabei zeigte sich dieser, in der Physik als Magnon-Phonon-Wechselwirkung bezeichneter Einfluss, als unerwartet stark und entscheidend für die Stabilität von Stählen bei mehreren 100 °C.

Die theoretischen Vorhersagen der Wissenschaftler am MPIE wurden durch ein Team von Caltech-Wissenschaftlern experimentell untermauert. Hierfür wurden am renommierten Argonne National Laboratory in den USA Röntgenstrahlexperimente durchgeführt und detailliert ausgewertet. Das Ergebnis beeindruckte auch Brent Fultz, Leiter der experimentellen Studie und Professor für Materialwissenschaften und angewandte Physik am Caltech: „Typischerweise nehmen wir an, dass die Wechselwirkung zweier unabhängiger Prozesse klein ist. Die detaillierte Analyse der Messungen zur Bestimmung der interatomaren Kräfte zeigt uns wie stark die Gitterschwingungen durch den Magnetismus beeinflusst werden. Dies wurde sogar noch beeindruckender durch die Computersimulationen gezeigt, bei denen es möglich ist die Wechselwirkung an- und auszuschalten.“

Die neuen Einblicke in die Wechselwirkungen und die thermodynamische Stabilität von Eisen bilden eine Grundlage für die systematische Weiterentwicklung und das Design neuer Hochtemperatur-Stähle. Die Tatsache, dass wir nun in der Lage sind die fundamentalen Mechanismen zu entschlüsseln, die für die Stahlentwicklung so wichtige thermodynamische Phasendiagramme von Eisen verantwortlich sind, ist der systematischen Entwicklung neuer computergestützter Methoden von Fritz, Tilmann und Blazej<sup>1</sup> in den letzten Jahren zu verdanken.“, sagt Jörg Neugebauer, Direktor am Max-Planck-Institut für Eisenforschung. „Nur durch die Kombination verschiedener wissenschaftlicher Ansätze zum Beispiel aus der Quantenmechanik, der statistischen Mechanik und der Thermodynamik, und durch den Einsatz leistungsstarker Supercomputer wurde es möglich, die komplexen und bisher nicht verstandenen dynamischen Phänomene in einem der technologisch bedeutsamsten strukturellen Materialien zu verstehen.“

Im Fokus der Wissenschaftler sind momentan Eisen-Mangan-Stähle, wie zum Beispiel TRIP-Stähle (TRIP steht für Transformation Induced Plasticity), welche sich durch

---

<sup>1</sup> Gemeint sind Fritz Körmann, Tilmann Hickel und Blazej Grabowski, allesamt Wissenschaftler in der Abteilung ‚Computergestütztes Materialdesign‘ am MPIE und Autoren der Originalveröffentlichung.



ihre hohe Festigkeit bei gleichzeitig guter Verformbarkeit auszeichnen. Dafür werden die theoretischen Konzepte am MPIE jetzt derart verallgemeinert, dass Materialien mit verschiedensten Legierungskomponenten behandelt werden können. Denn ähnlich wie ein Orchester nicht nur aus Geigen und Trompeten besteht, lebt auch ein Stahl vom Zusammenspiel verschiedenster Elemente. Es steckt also noch viel Musik in diesem Material.

Originalveröffentlichung:

F. Körmann, B. Grabowski, B. Dutta, T. Hickel, L. Mauger, B. Fultz, and J. Neugebauer "Temperature dependent magnon-phonon coupling in bcc Fe from theory and experiment," Phys. Rev. Lett. 113, 165503 (2014).

Autoren der Pressemeldung: Fritz Körmann, Tilmann Hickel & Yasmin Ahmed Salem

Am MPIE wird moderne Materialforschung auf dem Gebiet von Eisen, Stahl und verwandten Werkstoffen betrieben. Ein Ziel der Untersuchungen ist ein verbessertes Verständnis der komplexen physikalischen Prozesse und chemischen Reaktionen dieser Werkstoffe. Außerdem werden neue Hochleistungswerkstoffe mit ausgezeichneten physikalischen und mechanischen Eigenschaften für den Einsatz als high-tech Struktur- und Funktionsbauteile entwickelt. Auf diese Weise verbinden sich erkenntnisorientierte Grundlagenforschung mit innovativen, anwendungsrelevanten Entwicklungen und Prozesstechnologien. Das MPIE wird zu gleichen Teilen von der Max-Planck-Gesellschaft und dem Stahlinstitut VDEh finanziert.

**Kontakt:**

Yasmin Ahmed Salem, M.A.  
Referentin für Presse- und Öffentlichkeitsarbeit  
E-Mail: [y.ahmedsalem@mpie.de](mailto:y.ahmedsalem@mpie.de)  
Tel.: +49 (0) 211 6792 722  
[www.mpie.de](http://www.mpie.de)

