

Klein, aber bedeutend: Wie Verunreinigungen Ausscheidungen an den Korngrenzen beeinflussen

MPIE-Team veröffentlicht neueste Erkenntnisse in der Fachzeitschrift Nature Communications

Eisen (Fe) ist seit Jahrtausenden bekannt und wird seit der Eisenzeit verarbeitet. Trotzdem wissen wir bis jetzt nur sehr wenig über die lokale Chemie an den Grenzflächen, die verschiedene Kristallite trennen, sogenannte Korngrenzen. Darüber hinaus ist die Wechselwirkung zwischen verschiedenen im Material gelösten Elementen nach wie vor ein Rätsel. Was passiert, wenn zwei oder mehr Elemente an die Korngrenze diffundieren und sich dort absetzen? Wie interagieren sie miteinander und wie beeinflussen sie die Eigenschaften der Grenzflächen? Ali Ahmadian ist Wissenschaftler in der Abteilung „Struktur und Nano-/Mikromechanik von Materialien“, die von Prof. Dehm am Max-Planck-Institut für Eisenforschung (MPIE) geleitet wird. Er und seine Kolleg*innen analysierten die Prozesse der Ko-Segregations-Effekte in bcc-Eisenkorngrenzen. Sie konzentrierten sich dabei auf die Auswirkungen von Kohlenstoff und Bor, die als typische Verunreinigungen in fast allen technologisch relevanten Materialien vorkommen. Ihre neuesten Ergebnisse wurden in der Fachzeitschrift Nature Communications veröffentlicht.

Korngrenzen könnten durch Verunreinigungen versagen

Das Forscherteam kombinierte Rastertransmissionselektronenmikroskopie, energiedispersive Spektroskopie und Atomsondentomografie, um die atomare Struktur und lokale Zusammensetzung der $\Sigma 5$ (310) [001]-Korngrenze zu beobachten. Sie kombinierten ihre experimentellen Beobachtungen mit Berechnungen auf Basis der Dichtefunktionaltheorie, die von Kolleg*innen am Materials Center Leoben (Österreich) durchgeführt wurden, um die zugrundeliegenden Ausscheidungsmechanismen zu klären. „Wir fanden heraus, dass sich die Atome regelmäßig rautenförmig an der Korngrenze anordnen. Überraschenderweise deuten unsere Experimente zur Zusammensetzung der Korngrenze darauf hin, dass Aluminium nicht angereichert, sondern vermindert wird - ganz im Gegensatz zu Ergebnissen früherer theoretischer Studien“, erklärt Ahmadian. Das Team beobachtete und simulierte, wie sich Kohlenstoff- und Borverunreinigungen an der Korngrenze ablagerten und Aluminium abstießen. „Unsere Ergebnisse könnten erklären, warum Korngrenzen in bestimmten Werkstoffen versagen. Und auch wie sich die Ausscheidung schädlicher Elemente abmildern lässt, um Materialversagen zu verhindern. Mit unseren Modellierungswerkzeugen könnten wir in Zukunft sogar Vorhersagen über die Segregation von Korngrenzen und die Grenzflächeneigenschaften treffen, um die Materialentwicklung zu steuern. Dies ist für die Entwicklung von Hochleistungswerkstoffen absolut notwendig.“, sagt Dr. Christian Liebscher, Leiter der Gruppe „Advanced Transmission Electron Microscopy“, in der Ahmadian arbeitet.

Zukünftige Forschung an Zinkverunreinigungen

Die MPIE-Wissenschaftler*innen und ihre Kolleg*innen wollen ihre Ergebnisse nun auf komplexere Materialsysteme anwenden. Ein besonderer Schwerpunkt liegt dabei auf Zink, das für Flüssigmetallversprödung verantwortlich ist, die in vielen Eisenbasislegierungen und Stählen zu katastrophalem Materialversagen führt. Das Ziel ist es, Legierungs- oder Verarbeitungskonzepte zu finden, die die Wirkung von Zink auf Korngrenzen abschwächen.

Die Forschung wurde zum Teil von der Österreichischen Gesellschaft für Forschungsförderung und den österreichischen Bundesländern Steiermark, Oberösterreich und Tirol finanziert.

Originalveröffentlichung:

A. Ahmadian, D. Schreiber, X. Zhou, B. Gault, C.H. Liebscher, L. Romaner, G. Dehm: Aluminum depletion induced by co-segregation of carbon and boron in a bcc-iron grain boundary. In: Nature Communications 12 (2021) 6008.

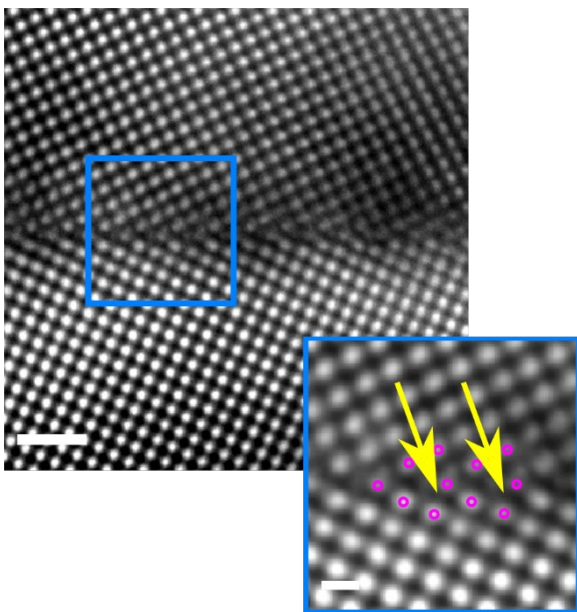


Abb. 1: Die Aufnahme zeigt die strukturelle Anordnung der Atome an der $\Sigma 5$ (310) [001]-Korngrenze. Bild entnommen aus Nature Communications 12 (2021) 6008.

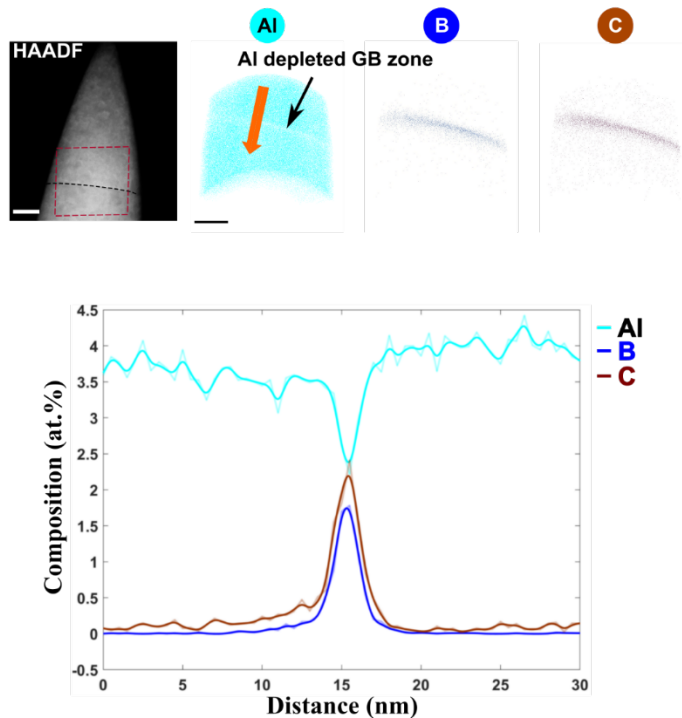


Abb. 2: Korrelative Messung mittels Atomsondentomographie und Transmissionselektronenmikroskopie zeigt eine Anreicherung von Bor (B) und Kohlenstoff (C), aber eine Verarmung von Aluminium (Al) an der Korngrenze. Diese Ergebnisse stehen im Widerspruch zu vorherigen theoretischen Studien, welche eine Anreicherung von Al vorhersagten. Bild entnommen aus Nature Communications 12 (2021) 6008.

Mit einem internationalen Team betreibt das Max-Planck-Institut für Eisenforschung modernste grundlagenorientierte Materialforschung für die Themengebiete Mobilität, Energie, Infrastruktur, Medizin und Digitalisierung. Im Fokus stehen nanostrukturierte metallische Materialien sowie Halbleiter, die bis auf ihre atomare und elektrische Ebene analysiert werden. Hierdurch ist es möglich neue, maßgeschneiderte Werkstoffe zu entwickeln.

Mehr Neuigkeiten aus dem MPIE gibt es bei [LinkedIn](#), [Twitter](#) und [YouTube](#).

Kontakt:

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

