

The background of the slide features a repeating pattern of overlapping, light gray spheres. Each sphere is slightly offset from the others, creating a three-dimensional effect. The spheres are arranged in a grid-like fashion, with some appearing in front of others, suggesting a lattice structure. The overall color palette is monochromatic, using shades of gray and white.

# Vom Biegen und Brechen

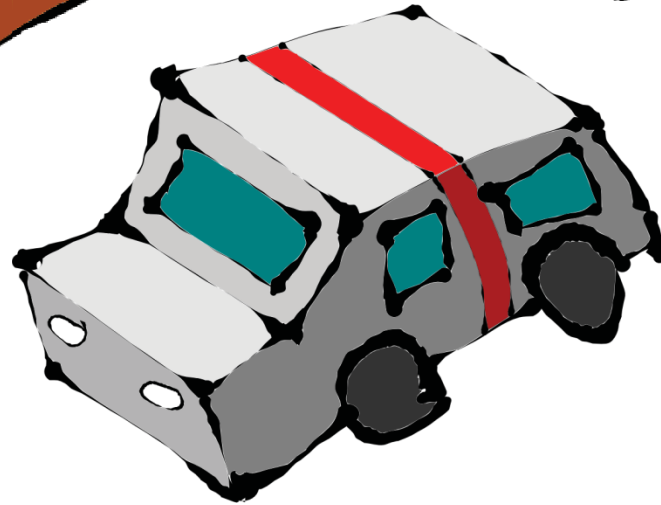
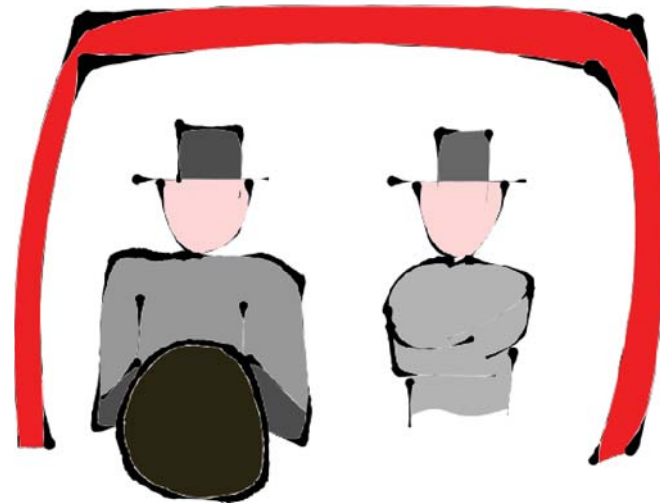
## Wie Zink Stahl bricht

Klaus-Dieter Bauer

Zentrum für Oberflächen- und Nanoanalytik

Johannes Kepler Universität Linz

# Motivation aus der Industrie

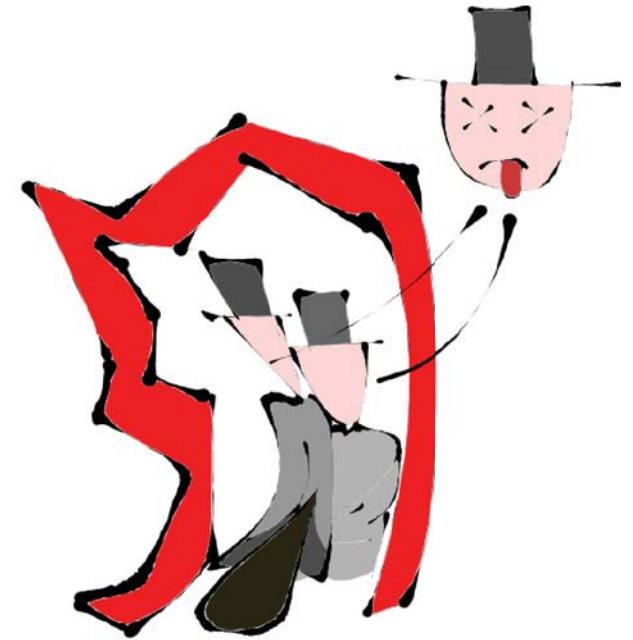


# Die Motivation aus der Industrie



# Harter Stahl?

- Stahl = Eisen + Kohlenstoff
- Mehr Kohlenstoff  $\Rightarrow$  härter
- **Aber auch SPRÖDER!**



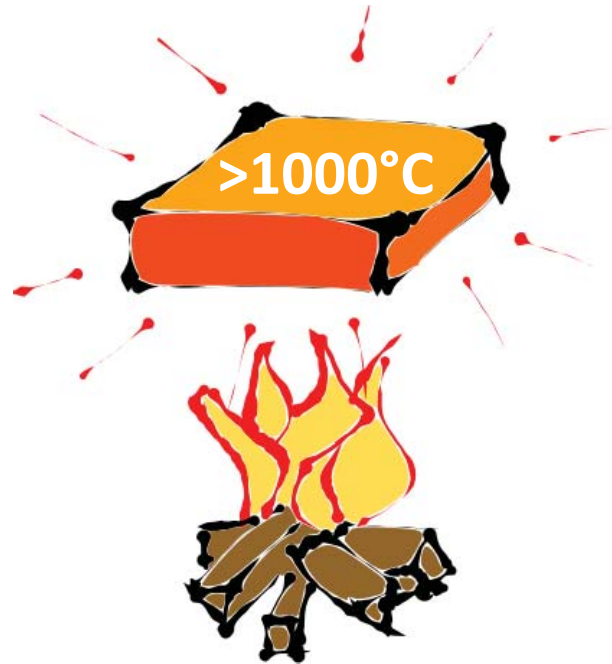
# Martensit!

- Sehr Hart
- Nicht spröde

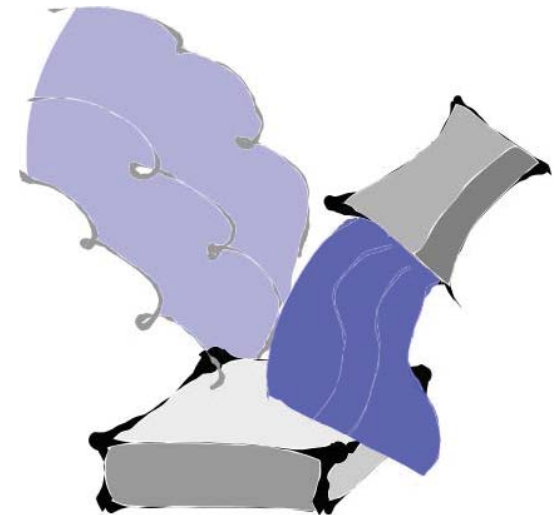
1. Aufheizen

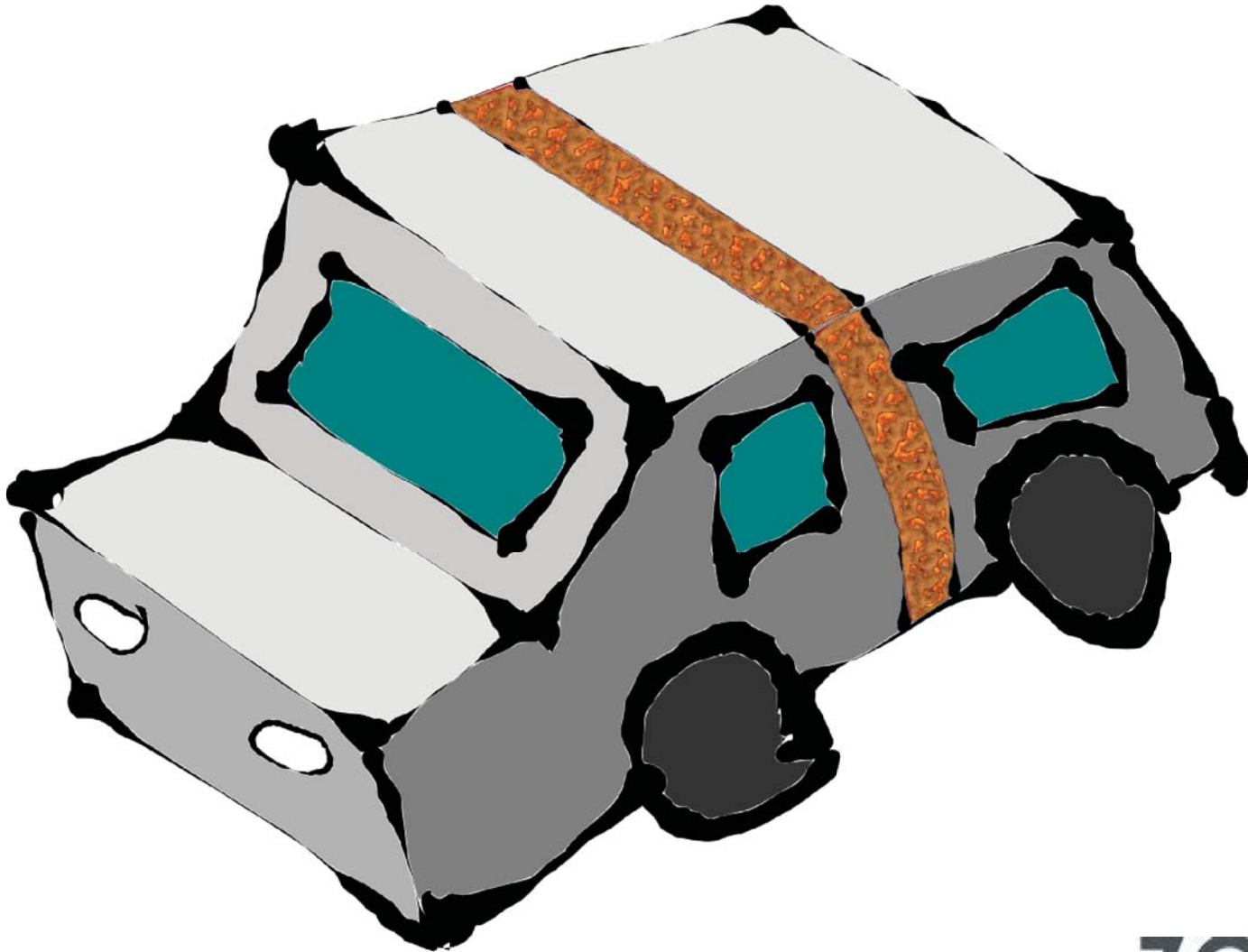


2. Ausglühen



3. Abschrecken

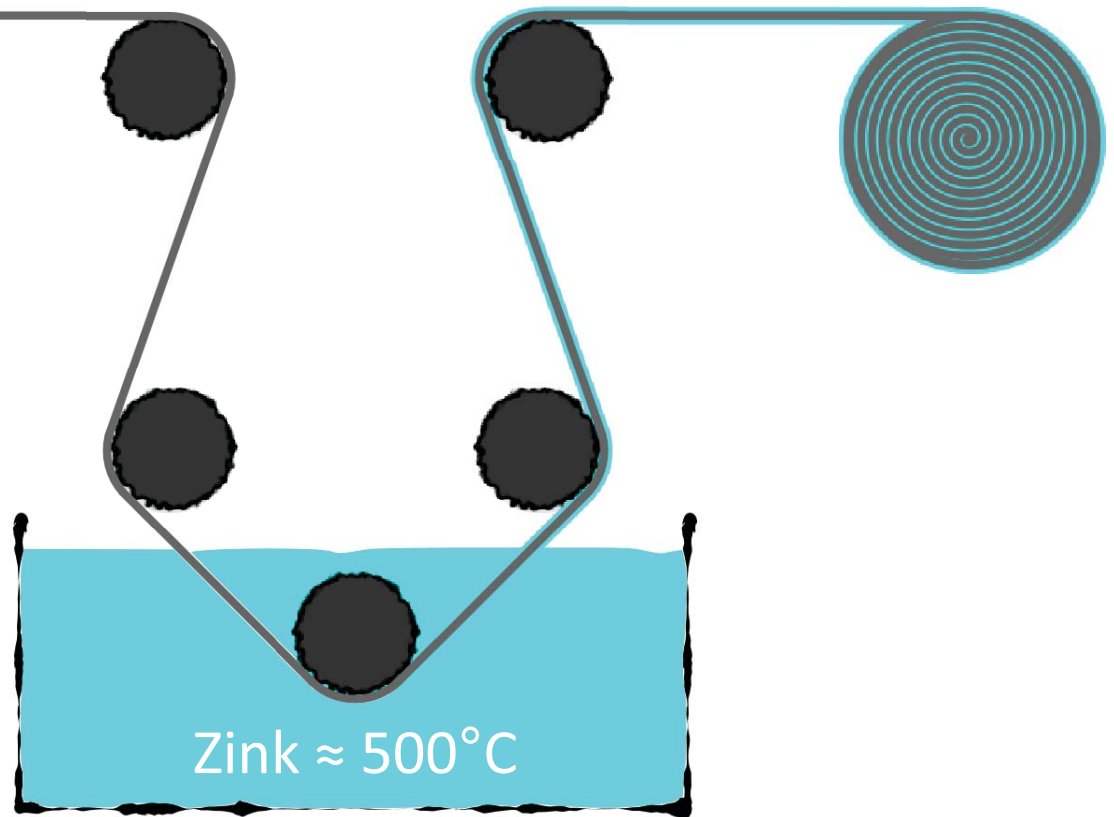




ZONA 

# Galvanisierung!

- Beschichtung mit Zink
- Stahlband wird durch geschmolzenes Zink gezogen.
- Chemischer Rostschutz



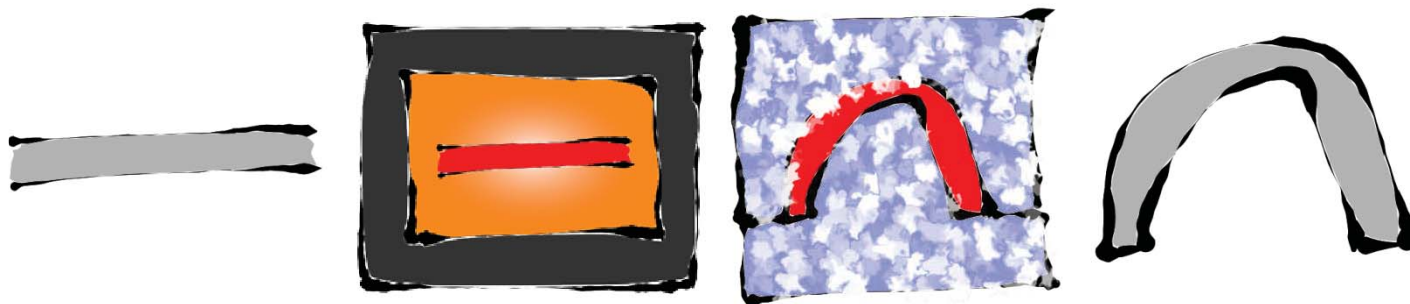


# Effizienter zum Martensit

## Kaltumformung



## Warmumformung





A black and white photograph of a snowy mountain slope. On the left side, a series of dark silhouettes of people are visible, appearing to be standing or walking along the edge of the snow. The central and right portions of the image are dominated by a bright, textured snow surface. On the far right, a dark, curved shape, possibly a shadow or a part of a structure, is visible. The overall scene is high-contrast and minimalist.

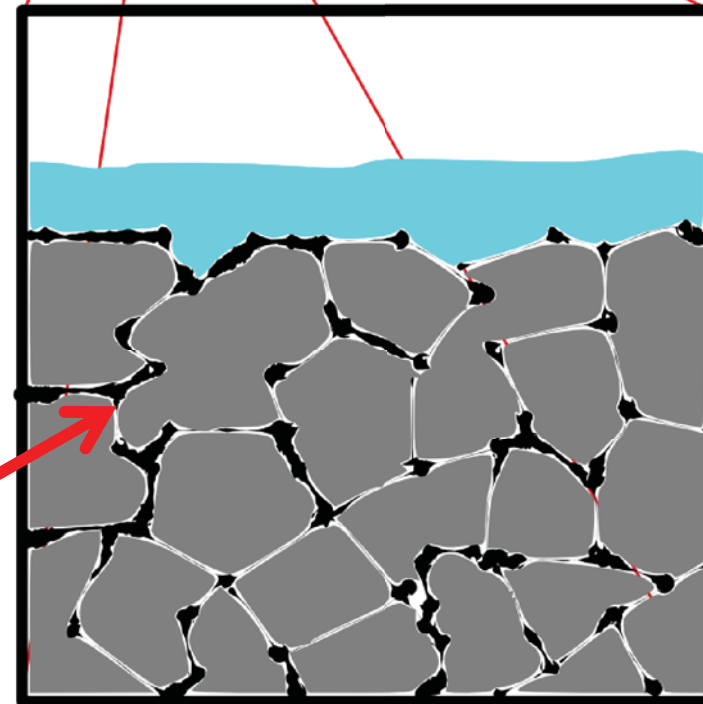
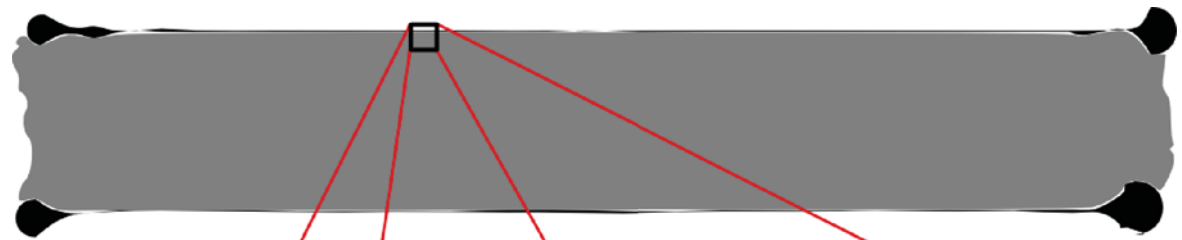
Geht nicht auf.

Grafik: voestalpine

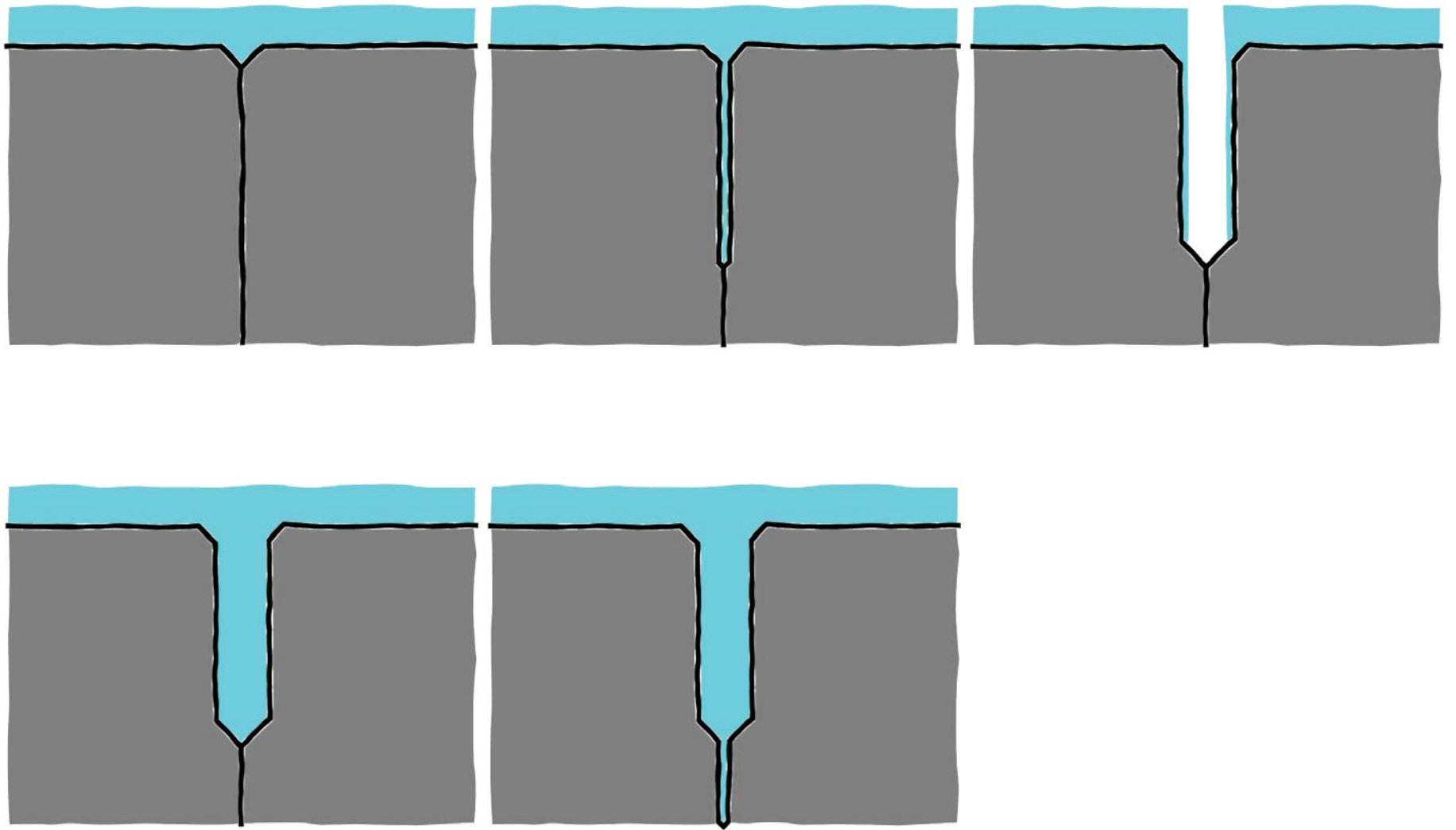
Flüssiges Zink macht also Stahl brüchig...

... aber wie?

# Stahl besteht aus Körnern



Korngrenze



# Modelle

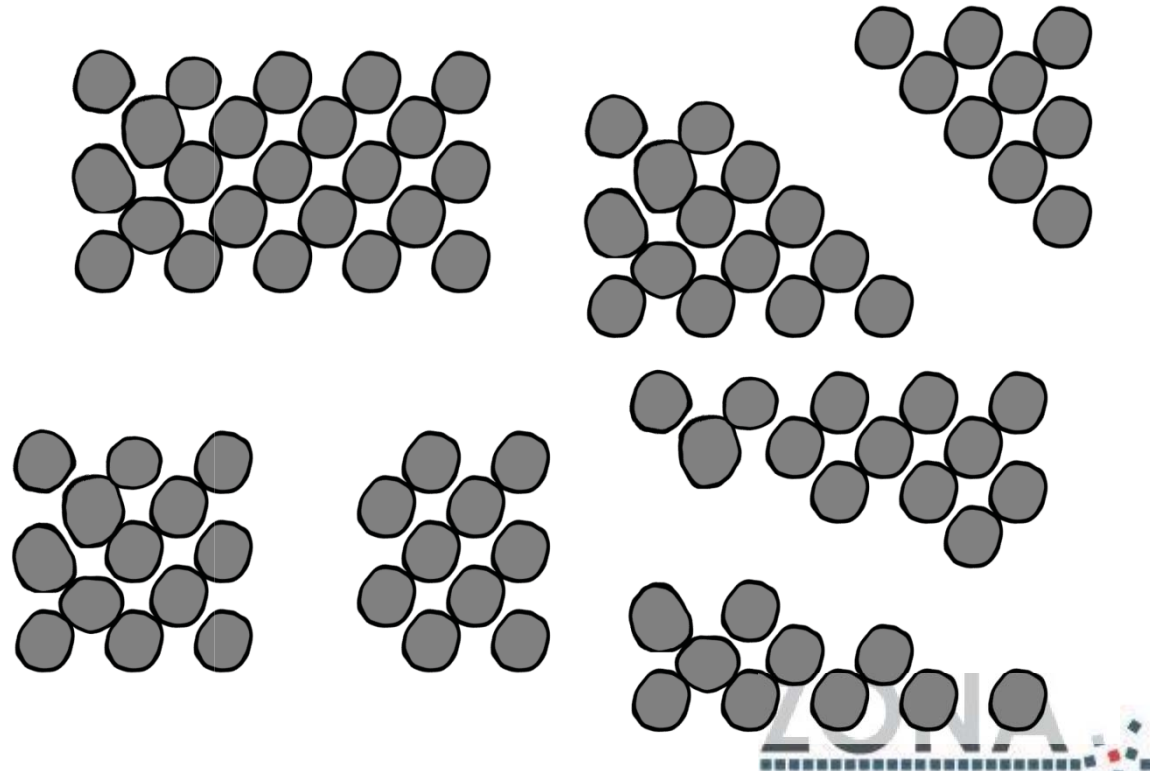
## Griffith-Modell

“Wieviel Energie kostet es, einen Riss um eine Fläche  $A$  zu erweitern?”

- $\gamma$  ... “Oberflächenenergie”

- Niedrigeres  $\gamma$  heißt “spröder”

- $\gamma < 0$   
bricht von allein



# Modelle

Nicholas, Old

1. Korngrenzen vor Bruch
2. Flüssiges Metall nach Bruch

Verallgemeinert:  
Grenzflächenenergien

$\gamma_{FV}$  ... "Fest zu Vacuum"

$\gamma_{FF}$  ... "Fest zu Flüssig"

$\gamma_{KG}$  ... "Korngrenze"

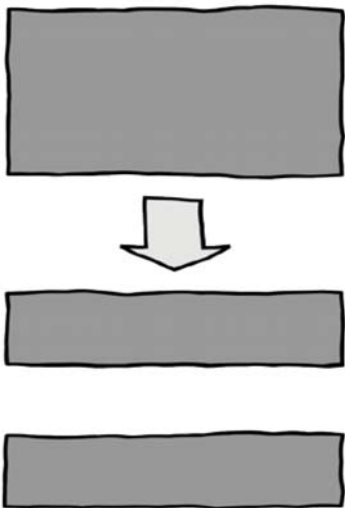
Griffith:

$$\gamma = \gamma_{FV}$$

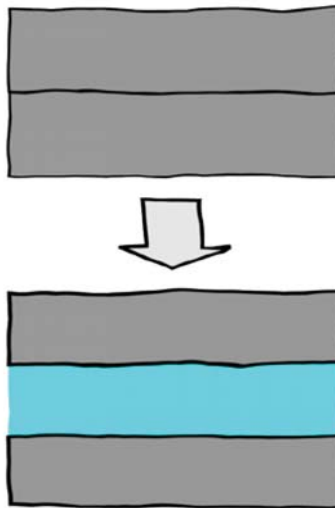
Nicholas, Old:

$$\gamma = \gamma_{FF} - \frac{1}{2} \gamma_{KG}$$

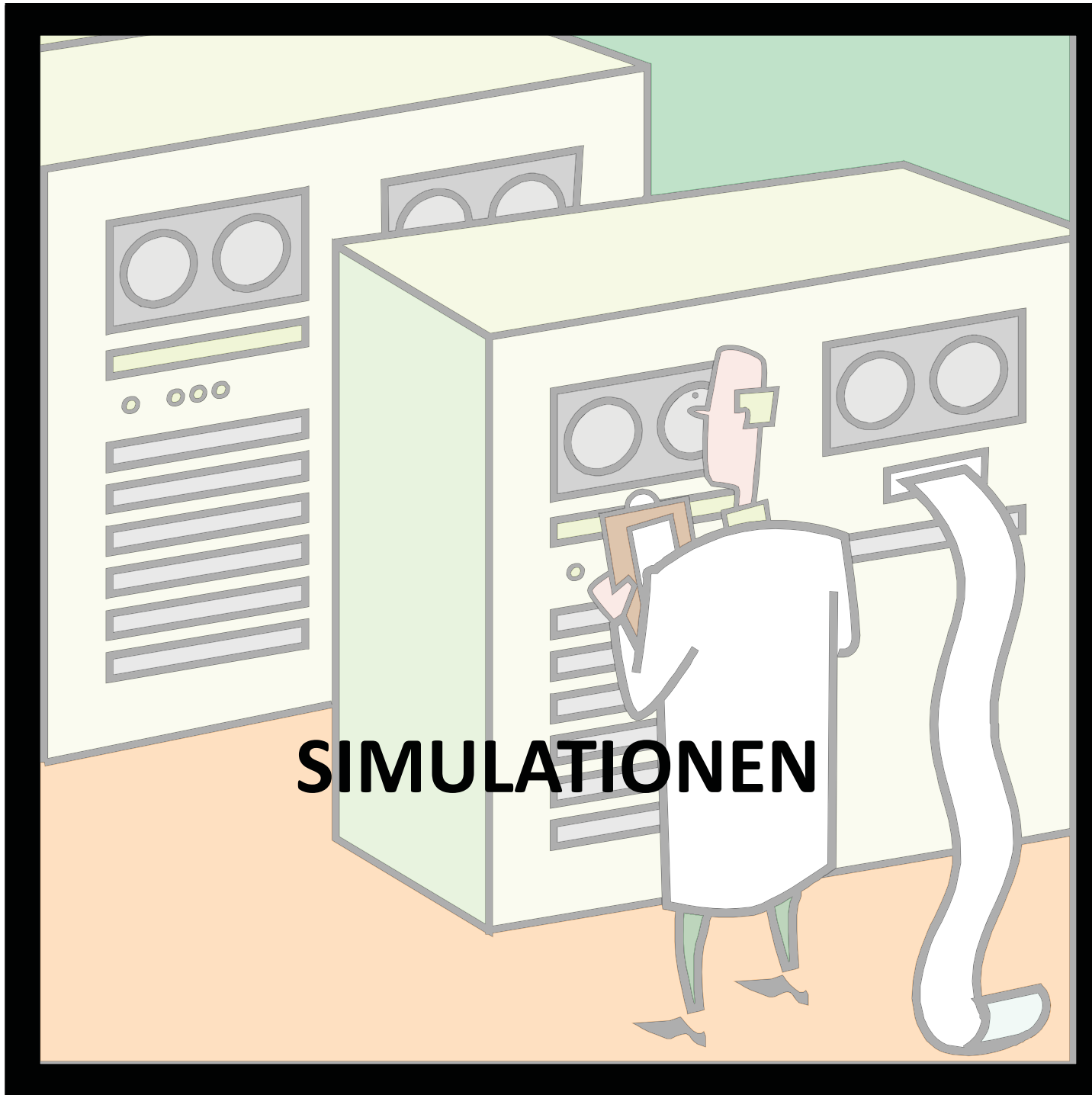
Griffith



Nicholas, Old



Quelle: M.G. Nicholas and C.F. Old. Review Liquid metal embrittlement. Journal of Materials Science, 14(1) 1979.

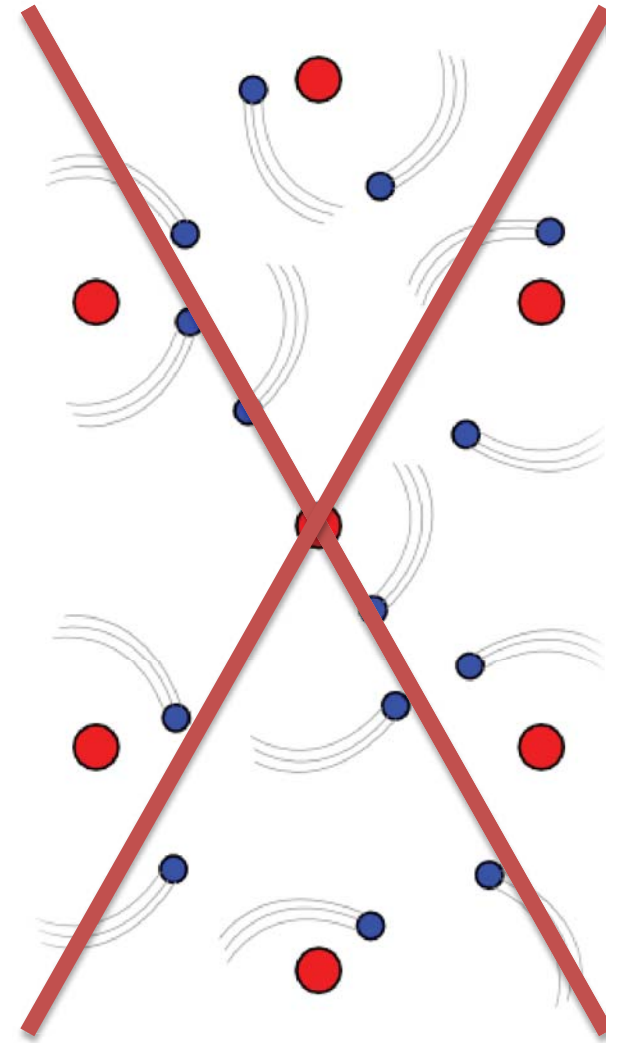


**SIMULATIONEN**



# Festkörper in Computersimulationen

- Gitter aus positiv geladenen **Atomrümpfen**
- Negative geladene **Elektronen**  
halten die Kerne zusammen
- **Quantenmechanische** Beschreibung  
notwendig für brauchbare Resultate
- $\Rightarrow$  Wellenfunktionen!  
$$\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)$$
- **Zu große Datenmenge!**  
“Genäherte Beschreibung eines Lithiumatoms  
würde mehr Speicherplatz brauchen als würde  
man die Welt mit Festplatten füllen.”



# Festkörper in Computersimulationen

- Methode:  
**DichteFunktionalTheorie (DFT)**
- In vielen Fällen reicht die  
**Elektronendichte**  
 $n(x, y, z)$  statt  $\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_N, y_N, z_N)$
- Liefert nicht nur Energien, auch  
elektronische Struktur.

## Hohenberg-Kohn Theoreme

Das äußere Potential  $V$  und die Grundzustandselektronendichte  $n_0$  lassen sich einander eindeutig zuordnen, d.h.

$$n_0 = n_0[V], V = V[n_0]$$

Zudem existiert das "Energiefunktional"  $E_V[n]$  das für  $n_0$  minimal wird wobei

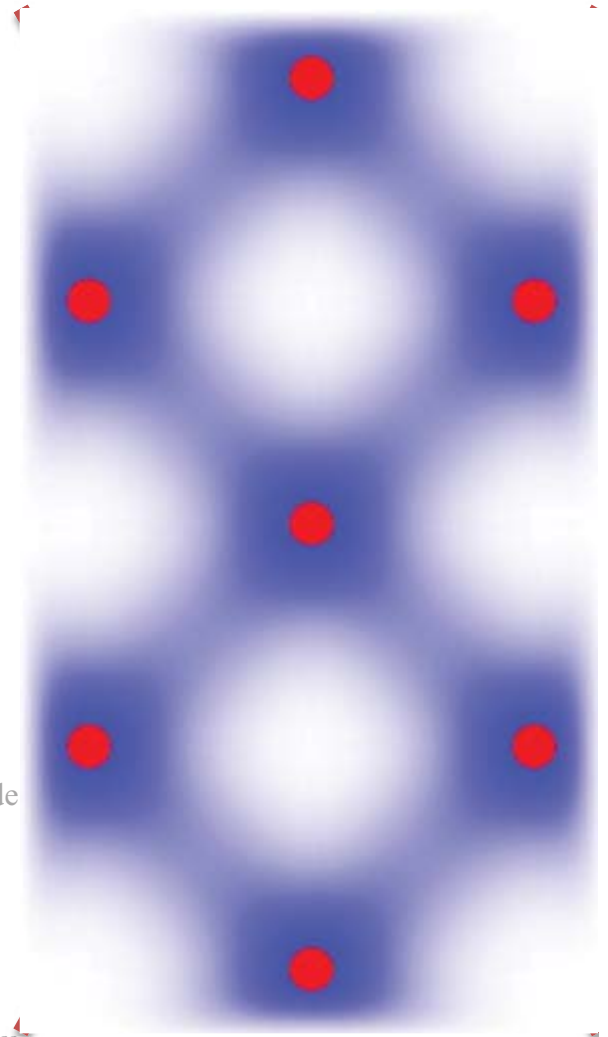
$$E_V[n_0] = E_0$$

$E_0$  ist dabei die Grundzustandsenergie.

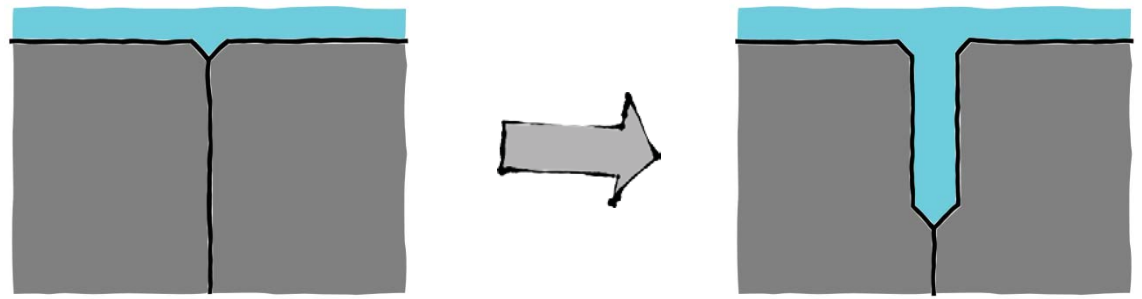
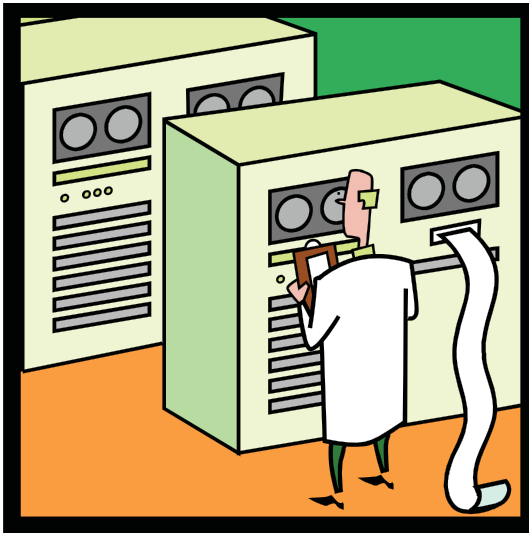
Daraus folgt aber auch, dass man aus der Grundzustandselektronendichte theoretisch *alle* Grundzustandseigenschaften bestimmen kann, sofern man eine explizite Form der Funktional

$$\text{Eigenschaft} = \text{Eigenschaft}[n_0]$$

findet oder zumindest nähern kann.



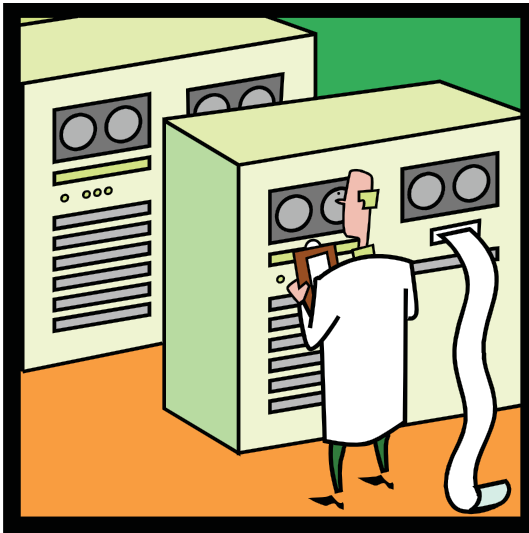
# Nicholas, Old angewandt



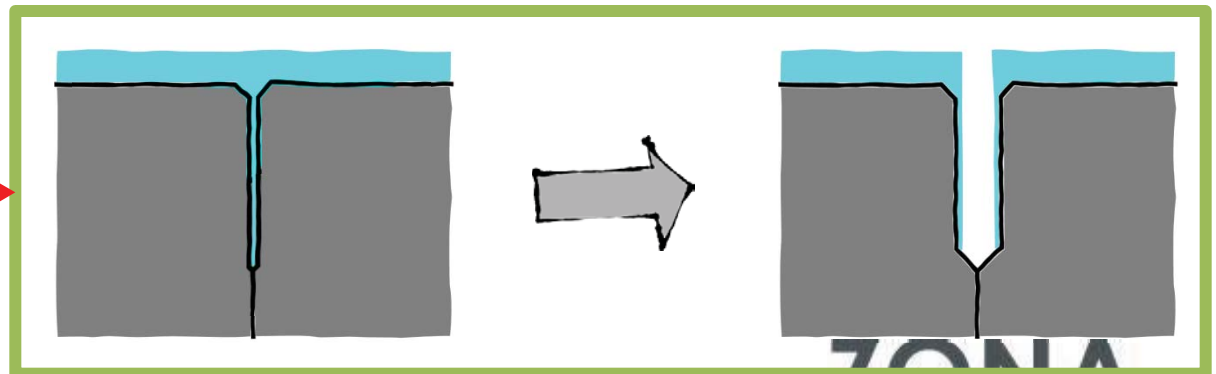
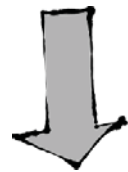
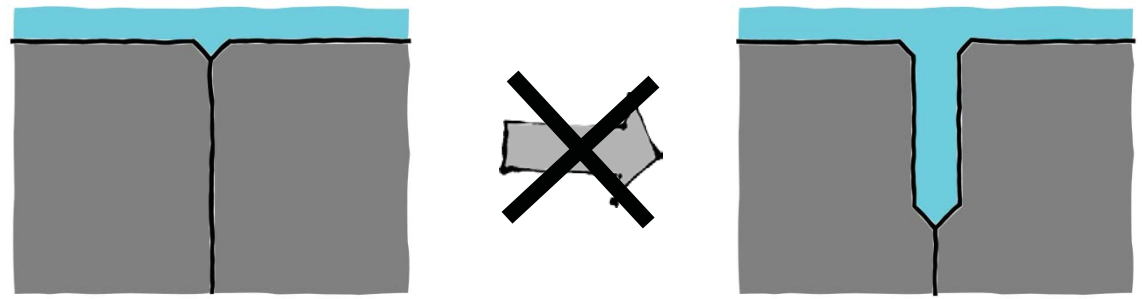
- $\gamma < 0$
- Von alleine
- Ohne Biegen
- Zink müsste Stahl zersetzen.

**WIDERSPRICHT EXPERIMENT**

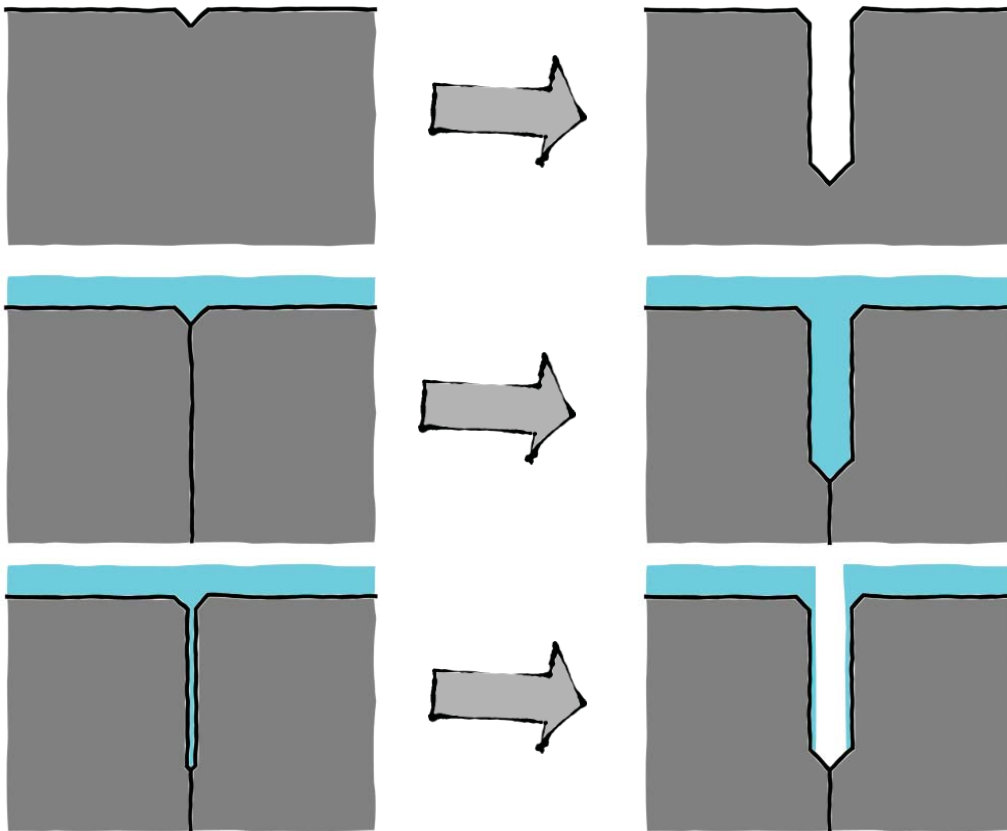
# Modifikation



- Braucht Energie
- d.h. Biegen



# Das modifizierte Modell im Vergleich



Griffith:

$$\gamma = \gamma_{FV}$$

Nicholas, Old:

$$\gamma = \gamma_{FF} - \frac{1}{2} \gamma_{KG}$$

**Unser Modell:**

$$\gamma = \gamma_{FV}(\Theta/2) - \frac{1}{2} \gamma_{KG}(\Theta)$$

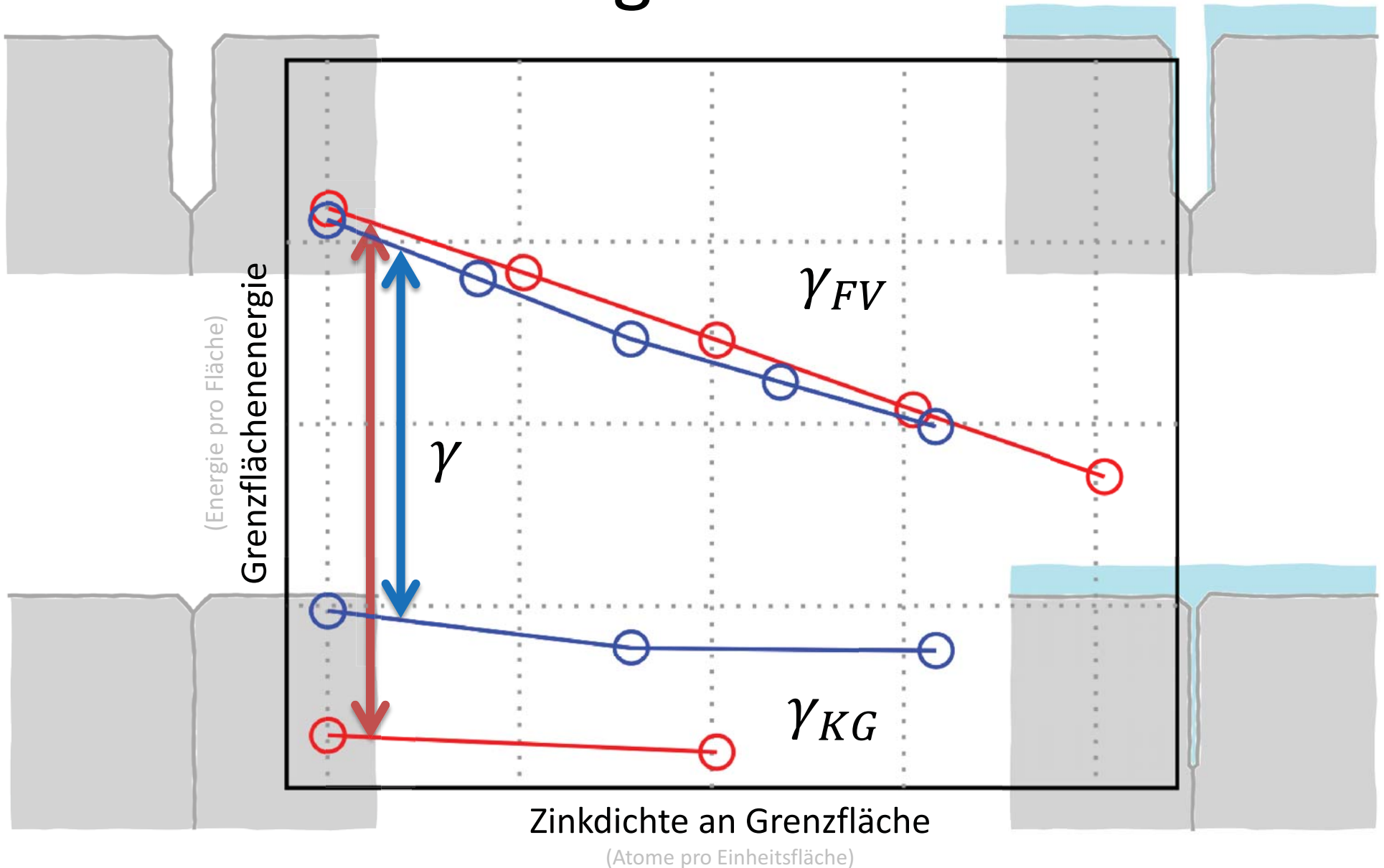
wobei  $\Theta$  ... Dichte der Zinkbenetzung

$\gamma_{FV}$  ... "Fest zu Vacuum"

$\gamma_{FF}$  ... "Fest zu Flüssig"

$\gamma_{KG}$  ... "Korngrenze"

# Schwächungsmechanismus



# Zusammenfassung

1. Die alten Modelle sind auf verzinkten Stahl nicht direkt anwendbar...
2. ... also **erweitern wir das Modell**.
3. Mit unserem Modell können wir **experimentelle Vermutung untermauern**...
4. ... und zeigen, dass **schon wenig Zink** an der Korngrenze zu einer **deutlichen Schwächung** führt.
5. Das **verbesserte Verständnis** des Problems hilft bei der Suche nach einer Lösung – damit die Autos trotz Preisdruck sicher bleiben. (fortlaufende Forschung)

**voestalpine**

EINEN SCHRITT VORAUSS.

Max-Planck-Institut

für Eisenforschung GmbH

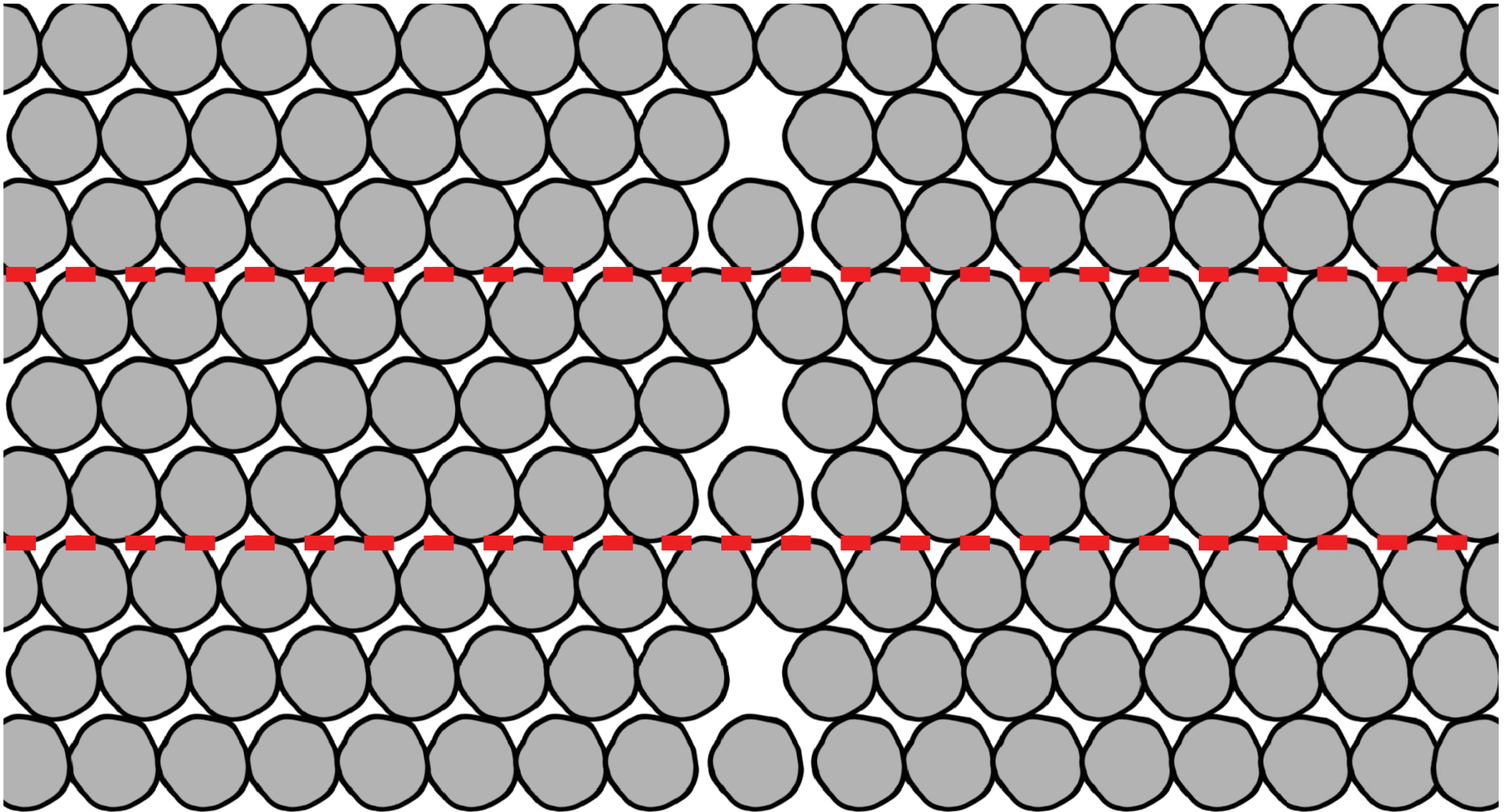


ZONA

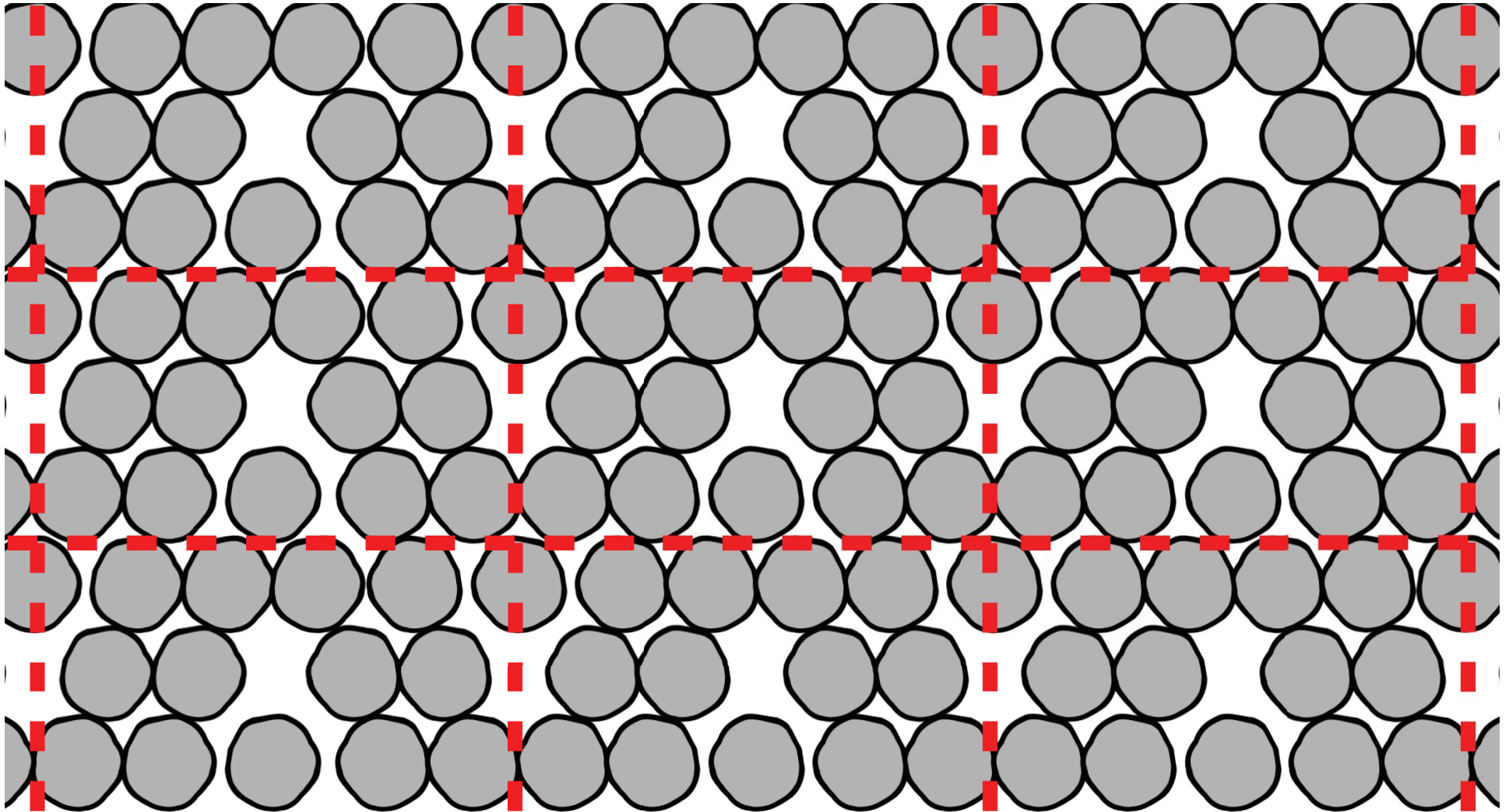


# ZUSATZ-FOLIEN

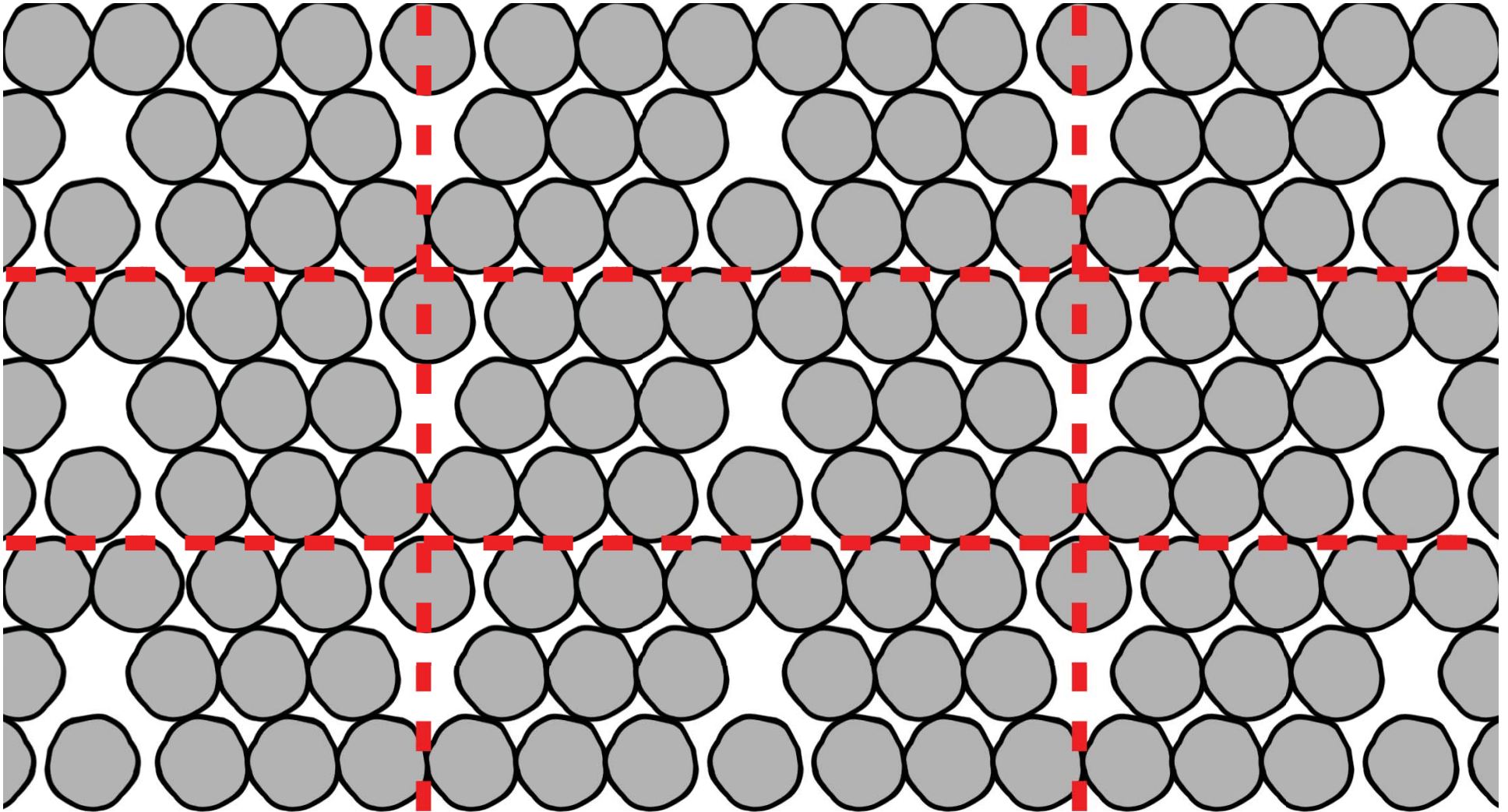
Zu groß  $\rightarrow$  Bequem unendlich



Zu groß  $\rightarrow$  Bequem unendlich

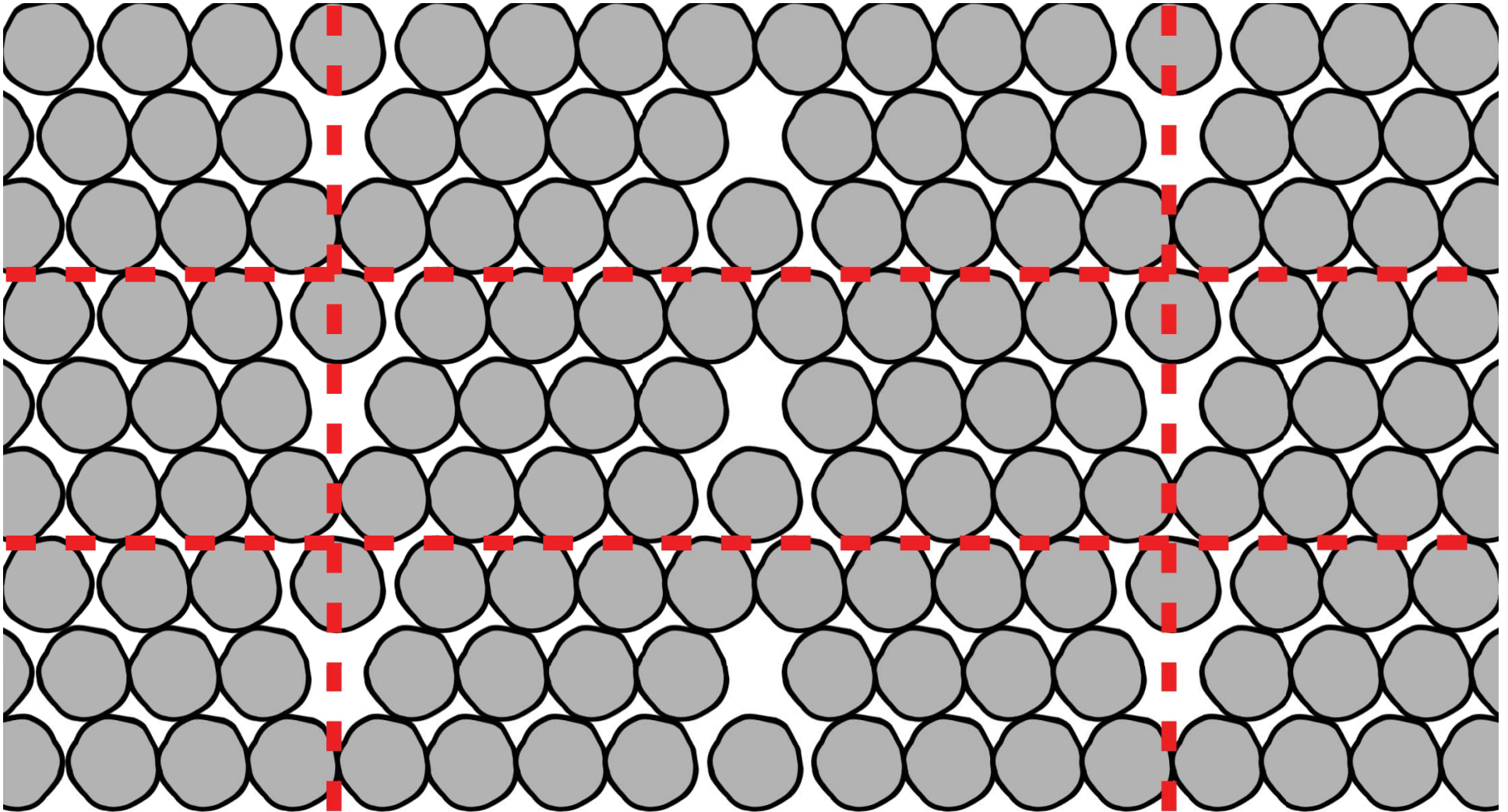


Zu groß  $\rightarrow$  Bequem unendlich

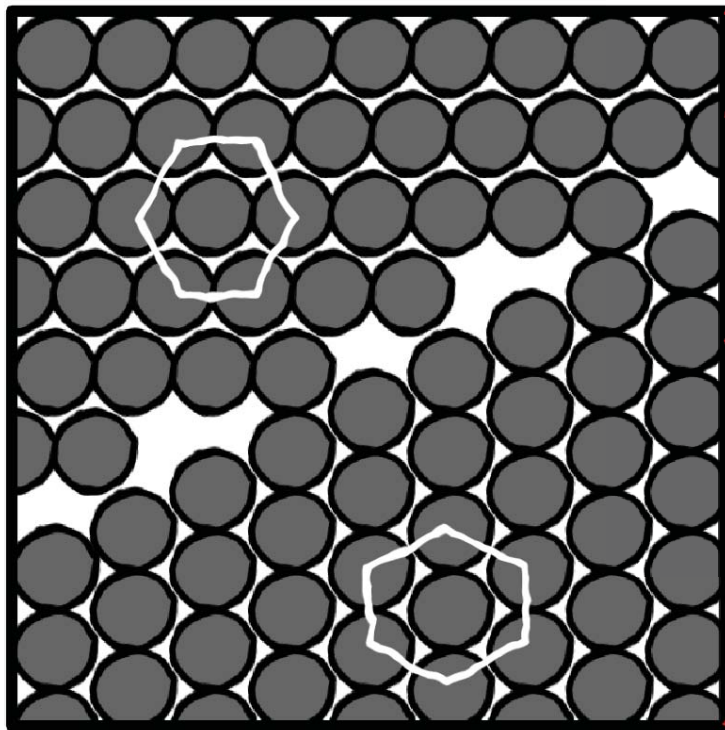
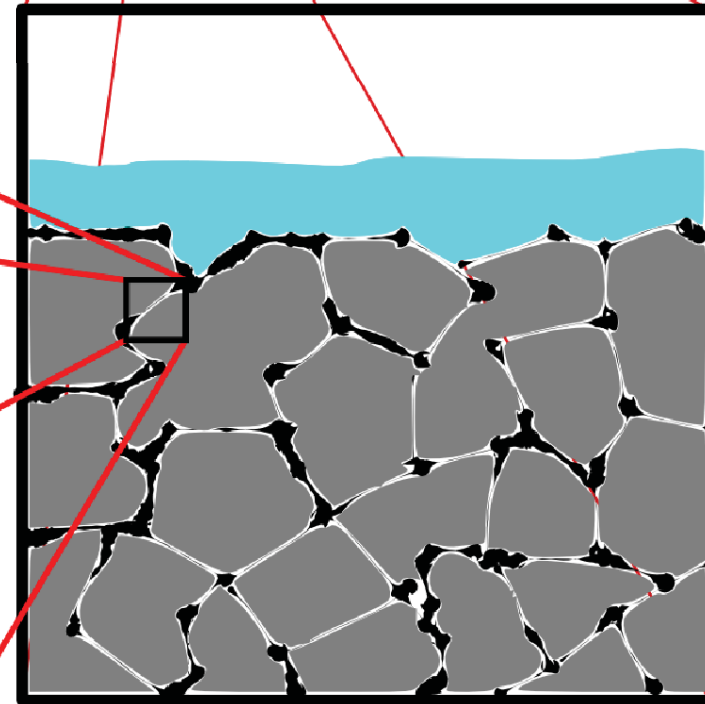
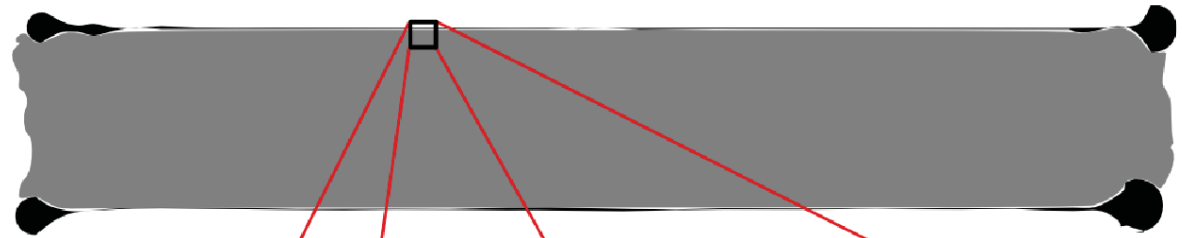




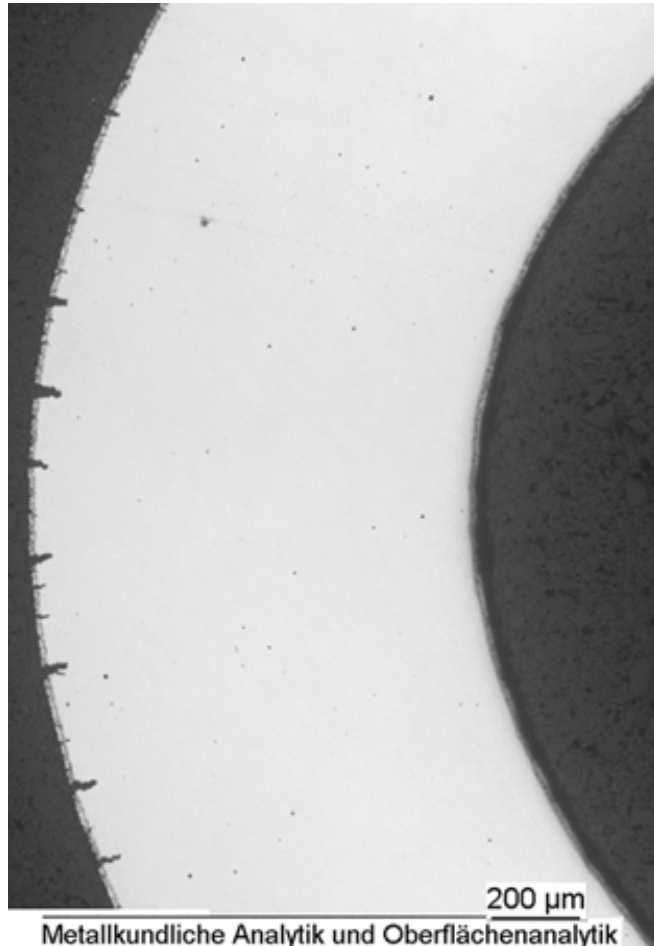
Zu groß  $\rightarrow$  Bequem unendlich



# Stahl besteht aus Körnern

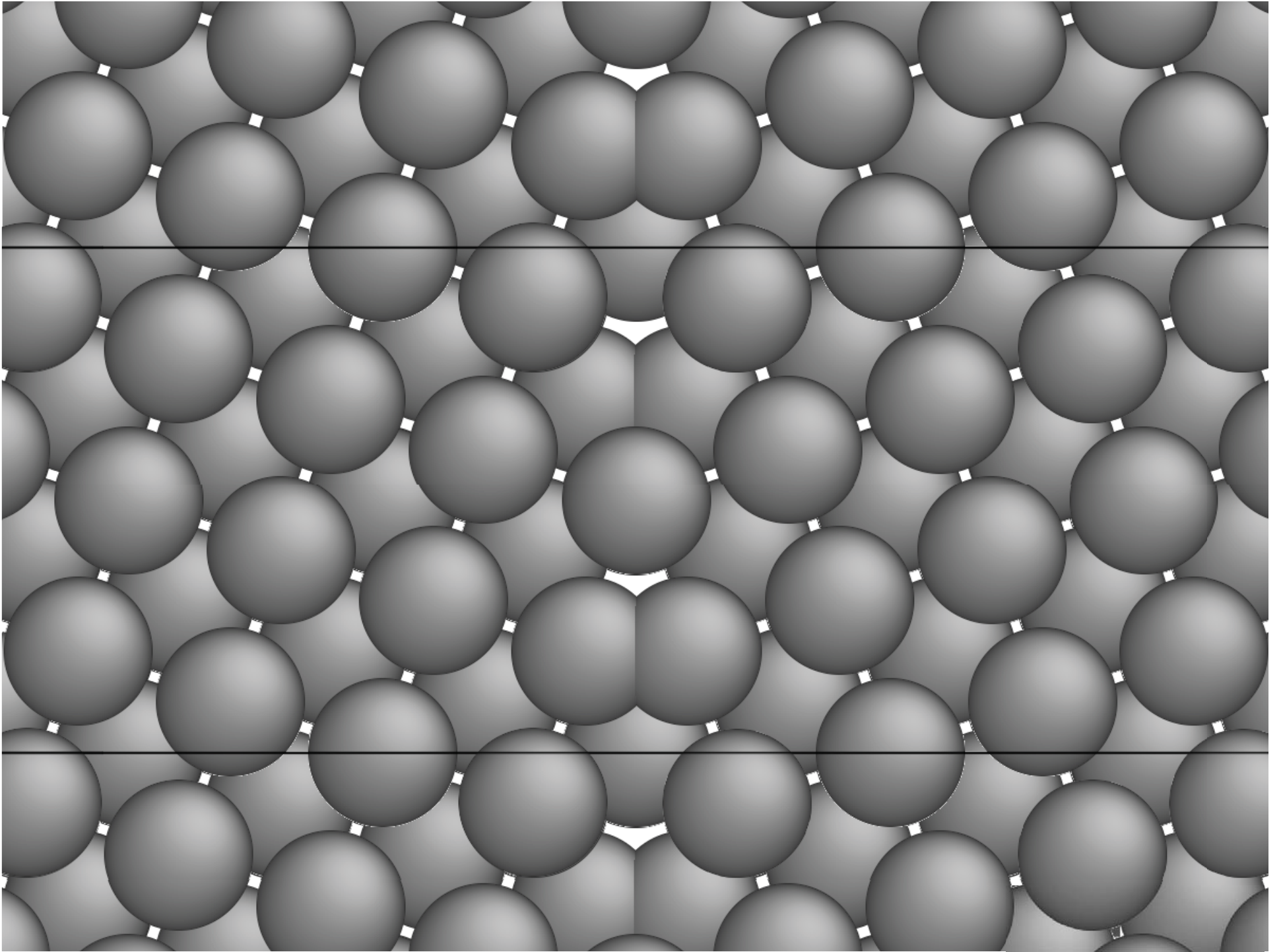


# Ursache: Versprödung durch flüssiges Zink



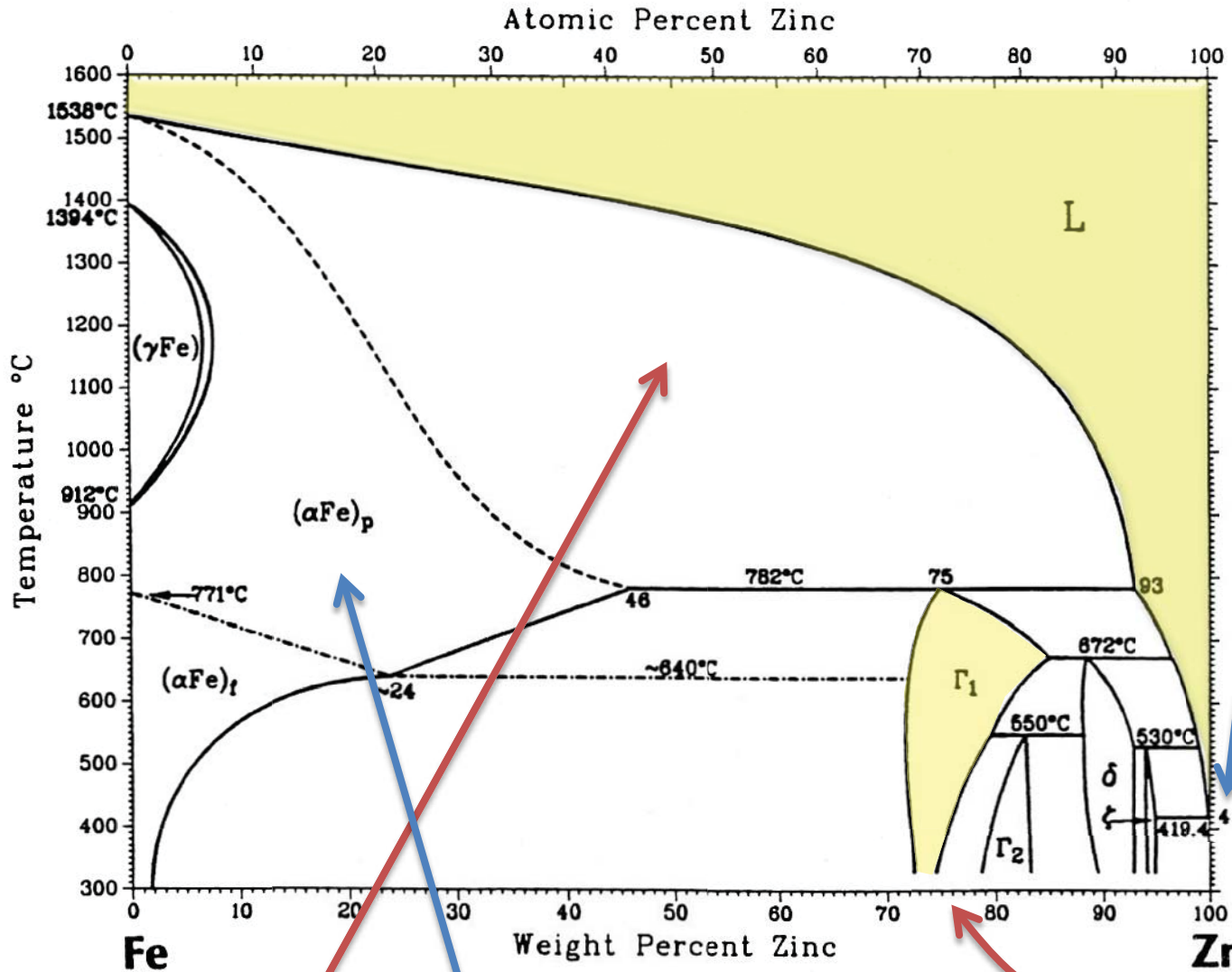
- Effekt tritt auf wenn man bei  $> 800^{\circ}\text{C}$  verformt.
- Ab  $800^{\circ}\text{C}$  Umformtemperatur ist Zinkschicht flüssig.
- “Liquid Metal Embrittlement”  
Versprödung durch flüssiges Metall





## Das Eisen-Zink-Phasendiagramm

# Warum $\approx 800^\circ\text{C}$ ?



Graphic from:  
**The metallurgy of zinc-coated steel**  
 Progress in Materials Science  
 Volume 45, Issue 3, June 2000, Pages  
 191–271

Cannot be included for distribution on  
 homepage! See for copy-right info:  
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0079642598000061>

Zink schon ab  $\approx 400^\circ\text{C}$   
 flüssig.

Bis  $\approx 800^\circ\text{C}$  bildet es  
 bei der  
 Austenitisierung feste  
 zinkreiche Legierung  
 mit Eisen und liegt  
 daher bei Verformung  
 nicht flüssig vor.

Es gibt bei  $> 800^\circ\text{C}$  nur zink- lastige und eisenlastige Legierungen,  
keine dazwischen. Um eisenlastige zu bilden fehlt die Zeit.